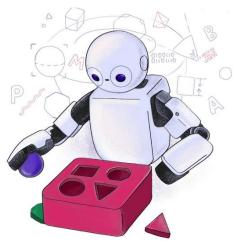
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning: **Árvores de Decisão**



Felipe Augusto Pereira de Figueiredo

Árvores de decisão

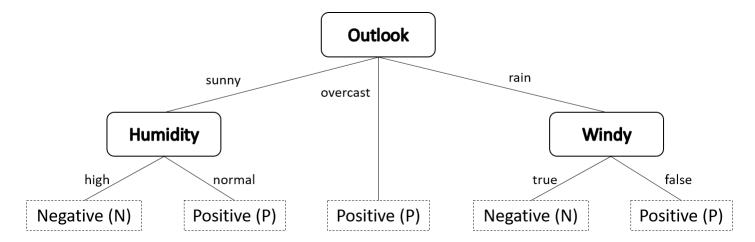
- Assim como o algoritmo k-NN, uma árvore de decisão (do inglês, decision trees), é um algoritmo de aprendizado supervisionado nãoparamétrico e não-linear que pode ser utilizado tanto para classificação quanto para regressão.
- O objetivo é criar um modelo que prediz o valor de uma variável de saída (ou seja, uma classe), aprendendo regras simples de decisão inferidas a partir dos atributos do conjunto de treinamento.
- As árvores de decisão são os componentes fundamentais das florestas aleatórias (do inglês, random forests) que estão entre os mais poderosos algoritmos de aprendizado de máquina disponíveis atualmente.

Árvores de decisão

- Formalmente, uma árvore é um *grafo não-direcionado* no qual dois vértices quaisquer se conectam por um único caminho (ou seja, um *grafo acíclico não-direcionado*) [Wikipedia, 2019].
- Trata-se de uma estrutura de dados muito importante para as áreas de computação, de aprendizado de máquina, tomada de decisão e teoria de jogos.
- A árvore possui um nó raiz, do qual parte o processo de decisão. Nesse processo, valores distintos de atributos geram arestas (i.e., ramificações) e, quando se chega a um nó folha, ocorre uma atribuição de classe.
- **Árvores de decisão** são modelos de **caixa branca**, ou seja, é possível entender e explicar facilmente como o modelo realiza a classificação de exemplos baseando-se nos atributos, sendo o oposto dos modelos de **caixa preta**, onde os resultados são difíceis de interpretar e não é fácil entender como os diferentes atributos interagem entre si para gerar a saída (e.g., redes neurais artificiais).

Árvores de decisão

- Na figura abaixo temos um exemplo baseado num conjunto de dados sobre se jogadores irão jogar tênis ou não. Nesse conjunto, analisam-se atributos diversos para estimar se eles jogarão ou não.
- Na figura, cada atributo (i.e., Clima, Humidade e Vento), leva a uma resposta e, para cada nó folha, atinge-se uma decisão sobre jogar ou não.
- O uso da árvore para classificar padrões é relativamente direto, mas é preciso responder uma questão crucial: como induzir uma árvore de decisão a partir de dados de treinamento?



O processo de indução de uma árvore de decisão

- Uma primeira abordagem para induzir uma árvore poderia ser construir, de maneira exaustiva, todas as árvores capazes de resolver o problema de classificação e selecionar a mais simples (Navalha de Occam). Entretanto, essa abordagem, pode ser computacionalmente muito custosa.
- O *método ID3* (Iterative Dichotomiser 3), que discutiremos a seguir, é uma abordagem que não garante a obtenção da menor árvore, mas busca obter árvores apropriadas num período de tempo relativamente curto.
- O método ID3 é um dos métodos de indução de árvores de decisão mais utilizados.
- A metodologia do método ID3 se baseia na teoria da informação para selecionar o atributo de cada nó.
- A ideia é escolher o atributo que for o mais longe possível em fornecer uma classificação exata dos exemplos. Um atributo perfeito (ou seja, muito bom) divide os exemplos em conjuntos (ou classes), cada um dos quais contendo todos exemplos positivos ou negativos do conjunto e, que portanto, serão folhas da árvore de decisão.
- Tudo o que precisamos, então, é uma medida formal de atributo "razoavelmente bom" ou "realmente inútil".
- O *método ID3* utiliza a noção de *ganho de informação*, o qual é definido em termos da *entropia*, que é uma quantidade fundamental em *teoria da informação*.

Ganho de informação e entropia

- Ganho de informação: é uma propriedade estatística que mede o quão bem um determinado atributo separa os exemplos de treinamento de acordo com suas classes. Portanto, construir uma árvore de decisão tem tudo a ver com encontrar um atributo que retorne o maior ganho de informação.
- **Entropia**: é uma medida da *incerteza* de uma variável aleatória. Portanto, a aquisição de informação corresponde a uma redução na *entropia*.
- Uma variável aleatória com apena um único valor (e.g., uma moeda que sempre que jogada cai com cara para cima) não tem nenhuma incerteza associada e, portanto, sua entropia é definida como sendo igual a zero. Isso significa que não se ganha/adquire nenhuma informação nova ao se observar o valor.
- Por outro lado, o resultado de se arremesar uma moeda honesta é igualmente provável de resultar em cara ou coroa, associados aos valores 0 ou 1, respectivamente. Neste caso, esta varíavel tem 1 bit de entropia, significando que se necessita de 1 bit para representar os 2 possíveis resultados.
- Dessa forma, a variável aleatória que representa o resultado de se rolar um *dado honesto* de 4 lados, tem 2 bits de entropia, pois necessita-se de 2 bits para se representar os 4 possíveis valores.
- Agora imagine um moeda desonesta que tenha uma probabilidade de resultar em cara em 99% dos arremessos. Nesse caso, a entropia deve ser um valor positivo muito próximo de zero, pois a incerteza do resultado é muito baixa.
- Assim, a *entropia* de uma variável aleatória V com valores v_i , onde cada um dos valores tem probabilidade $P(v_i)$, é definida como

$$I(V) = -\sum_{i} P(v_i) \log_2(P(v_i)).$$

Aprendizado de uma árvore de decisão

• Retornando ao problema da indução (ou aprendizado) de *árvores de decisão* nós temos que se um conjunto de treinamento, E, contém p exemplos pertencentes à classe positiva (P) e n exemplos pertencentes à classe negativa (N), então a *entropia* do *atributo objetivo* (i.e., o rótulo ou saída desejada) para todo o conjunto de treinamento é dada por

$$H(Goal) = B\left(\frac{p}{p+n}\right) = -\left[\frac{p}{p+n}\log_2\left(\frac{p}{p+n}\right) + \left(1 - \frac{p}{p+n}\right)\log_2\left(1 - \frac{p}{p+n}\right)\right].$$

- Portanto, qualquer árvore de decisão correta para o conjunto de treinamento E classificará exemplos na mesma proporção de ocorrência das classes no conjunto de dados. Assim, a probabilidade de um exemplo ser da classe P é p/(p+n) e a de um exemplo ser da classe P é p/(p+n) ou (1-p/(p+n)).
- Um teste com um único atributo x_k nós dá apenas parte da **entropia** para todo o conjunto, i.e., H(Goal). Nós podemos medir exatamente o quanto cada atributo contribui através do cálculo da **entropia** restante após o teste do atributo.
- Um atributo x_k com d valores distintos divide o conjunto de treinamento E em subconjuntos E_1, \ldots, E_d . Cada subconjunto E_i possui p_i exemplos da classe positiva, P, e n_i exemplos da classe negativa, N. Um exemplo escolhido aleatóriamente do conjunto de treinamento tem o i-ésimo valor para o atributo com probabilidade $(p_i + n_i)/(p + n)$. Assim, a **entropia** restante esperada após o teste do atributo x_k é

Remainder
$$(x_k) = \sum_{i=1}^d \frac{p_i + n_i}{p+n} B\left(\frac{p_i}{p_i + n_i}\right)$$
.

• O $\it ganho de informação$ com o atributo $\it x_k$ é a redução na $\it entropia$ total do conjunto de treinamento, que é dada por

$$Gain(x_k) = B\left(\frac{p}{p+n}\right) - Remainder(x_k).$$

Método ID3

- A ideia por trás do *método ID3* é maximizar o *ganho de informação* e então usar o procedimento recursivamente para os subconjuntos E_1, \ldots, E_d . Ou seja, escolhe-se o atributo que gera a primeira ramificação e, então, se repete o processo para construir as subárvores.
- O processo por trás do método ID3 pode ser resumido através da seguinte sequência de passos:
 - a) Cálculo da *entropia* do objetivo para todo o conjunto de treinamento.
 - b) Cálculo do *ganho de informação* de cada atributo x_k , k=1,...,K do conjunto de treinamento E.
 - c) Particionamento do conjunto E em subconjuntos E_1, \dots, E_d usando o atributo x_k para o qual o **ganho de informação** resultante após a divisão é maximizado.
 - d) Criação de um nó da árvore de decisão contendo o atributo que maximizou o *ganho de informação*.
 - e) Repetir os itens b) até d) em subconjuntos usando os atributos restantes. Esse processo continua até que a árvore classifique perfeitamente os exemplos de treinamento ou até que todos os atributos tenham sido utilizados.
- O ID3 segue a regra: um ramo com uma entropia igual a zero é uma folha e um ramo com entropia maior do que zero precisa de partição adicional.
- O método ID3 será exemplificado através do exemplo apresentado à seguir.

Observações

- Além do ganho de informação, existem outras métricas que podem ser usadas para definir as partições. Uma possibilidade é usar métricas de distância/divergência, como o índice de Gini.
- Caso haja exemplos ruidosos, ou seja, exemplos que não são totalmente "consistentes", passa a ser necessária uma análise estatística mais ampla, incluindo, por exemplo, testes de hipóteses.
- Outro ponto importante é, se for o caso, deve-se buscar metodologias para se lidar com atributos faltantes.
- O conjunto de treinamento é a base para definirmos a árvore de decisão. Um conjunto que contenha inconsistências, como, por exemplo, dois exemplos com os mesmos atributos e classes diferentes, precisará ser reconsiderado (os atributos podem não ser suficientes, por exemplo, precisando de mais atributos).
- Um problema muito comum das *árvores de decisão*, especialmente quando se tem um número muito grande de atributos, é o *sobreajuste*. Existem duas formas para se minimizar este problema:
 - Podar as árvores de decisão (tree prunning).
 - Ou utilizar *florestas aleatórias*.

- Neste exemplo, vamos construir uma árvore de decisão para predizer se jogadores irão ou não praticar um determinado esporte baseado em algumas condições meteorológicas.
- Vamos considerar um conjunto de dados da forma (x_i, d_i) , onde x_i é um vetor de atributos e d_i é um rótulo. Nesse conjunto de dados, cada entrada diz respeito à condição meteorológica de um dia. Os atributos são todos categóricos:
 - **Tempo**: {ensolarado, nublado, chuvoso}
 - **Temperatura**: {frio, agradável, quente}
 - Umidade: {alta, normal}
 - Vento: {presente, ausente}
- Os rótulos são apenas 2: 'positivo' (P), ou seja, jogar, e 'negativo' (N), ou seja, não jogar, denotando um problema genérico de duas classes.
- Um exemplo de condição meteorológica de um dia poderia ser descrito por: {nublado, dia frio, normal, ausente}.

• O conjunto de treinamento do exemplo é dado pela tabela abaixo.

| Day | Outlook | Temperature | Humidity | Windy | Class (y) |
|-----|----------|-------------|----------|-------|--------------|
| 1 | sunny | hot | high | false | N |
| 2 | sunny | hot | high | true | N |
| 3 | overcast | hot | high | false | Р |
| 4 | rain | mild | high | false | Р |
| 5 | rain | cool | normal | false | Р |
| 6 | rain | cool | normal | true | N |
| 7 | overcast | cool | normal | true | Р |
| 8 | sunny | mild | high | false | N |
| 9 | sunny | cool | normal | false | Р |
| 10 | rain | mild | normal | false | Р |
| 11 | sunny | mild | normal | true | Р |
| 12 | overcast | mild | high | true | Р |
| 13 | overcast | hot | normal | false | Р |
| 14 | rain | mild | high | true | N |

• A *entropia* do objetivo, i.e., y, para todo o conjunto de treinamento é

$$H(y) = -\left[\frac{9}{14}\log_2\left(\frac{9}{14}\right) + \left(1 - \frac{9}{14}\right)\log_2\left(1 - \frac{9}{14}\right)\right] = 0.9403.$$

• Encontrando o nó raíz: o *ganho de informação* de cada atributo é calculado como

| | | Jogar? | | |
|---------|----------|--------|---|---|
| | | Р | N | |
| Outlook | sunny | 2 | 3 | 5 |
| | overcast | 4 | 0 | 4 |
| | rain | 3 | 2 | 5 |
| | 14 | | | |

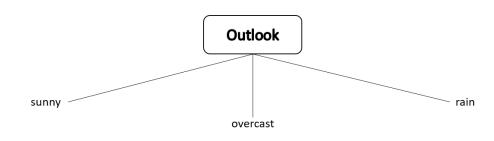
| | | Jog | Jogar? | |
|-------------|------|-----|--------|----|
| | | Р | N | |
| Temperature | hot | 2 | 2 | 4 |
| | mild | 4 | 2 | 6 |
| | cool | 3 | 1 | 4 |
| | | | | 14 |

| | | Jogar? | | |
|----------|--------|--------|---|----|
| | | Р | N | |
| Humidity | high | 3 | 4 | 7 |
| | normal | 6 | 1 | 7 |
| | | | | 14 |

| | | Jog | Jogar? | |
|----------|-------|-----|--------|---|
| | | Р | Ν | |
| \A/imals | true | 3 | 3 | 6 |
| Windy | false | 6 | 2 | 8 |
| | | | | |

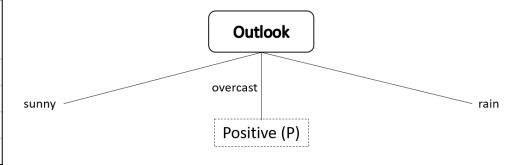
 $Gain(\textbf{outlook}) = 0.9403 - \left[\frac{5}{14}H\left(\frac{2}{5}\right) + \frac{4}{14}H(1) + \frac{5}{14}H\left(\frac{3}{5}\right)\right] = 0.247$ $Gain(\textbf{temperature}) = 0.9403 - \left[\frac{4}{14}H\left(\frac{2}{4}\right) + \frac{6}{14}H\left(\frac{4}{6}\right) + \frac{4}{14}H\left(\frac{3}{4}\right)\right] = 0.029$ $Gain(\textbf{humidity}) = 0.9403 - \left[\frac{7}{14}H\left(\frac{3}{7}\right) + \frac{7}{14}H\left(\frac{6}{7}\right)\right] = 0.1518$ $Gain(\textbf{windy}) = 0.9403 - \left[\frac{6}{14}H\left(\frac{3}{6}\right) + \frac{8}{14}H\left(\frac{6}{8}\right)\right] = 0.04813$

O *ganho de informação* é maximizado com o atributo *outlook*, que é, portanto, escolhido como o nó raíz da árvore.



- Agora, precisamos testar o conjunto de treinamento para subconjuntos específicos do atributo do *Outlook*.
- Quando Outlook = overcast, vemos na tabela abaixo que os valores dos outros atributos não importam, sendo a classe escolhida sempre a Positiva (P), ou seja, a decisão será sempre pela classe Positiva se o tempo estiver nublado.
- Portanto, encontramos a folha deste ramo.

| Day | Attributes | | | | |
|-----|------------|-----------------------------|--------|-------|-----|
| Day | Outlook | utlook Temperature Humidity | | Windy | (y) |
| 3 | overcast | hot | high | false | Р |
| 7 | overcast | cool | normal | true | Р |
| 12 | overcast | mild | high | true | Р |
| 13 | overcast | hot | normal | false | Р |



• Quando Outlook = rain

| Outlook= | Jog | Jogar? | | |
|-------------|--------|--------|---|---|
| Outlook- | ·rairi | Р | N | |
| Temperature | hot | 0 | 0 | 0 |
| | mild | 2 | 1 | 3 |
| | cool | 1 | 1 | 2 |
| | | | | 5 |

| Outlook | Jogar? | | | |
|----------|--------|---|---|---|
| Outlook= | P N | | | |
| Humidity | high | 1 | 1 | 2 |
| | normal | 2 | 1 | 3 |
| | | | | 5 |

| Outlook | Outlook=rain Jogar? P N | | | |
|-------------|-------------------------|---|---|---|
| Outlook: | | | | |
| \A/: m als. | true | 0 | 2 | 2 |
| Windy | false | 3 | _ | 3 |
| | | | | 5 |

Outlook

Positive (P)

overcast

rain

Windy

false

Gain(temperature) = 0.9403 -
$$\left[\frac{0}{5}H\left(\frac{0}{0}\right) + \frac{3}{5}H\left(\frac{2}{3}\right) + \frac{2}{5}H\left(\frac{1}{2}\right)\right] = 0.02$$

Gain(humidity) = 0.9403 - $\left[\frac{2}{5}H\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{3}{5}H\left(\frac{2}{3}\right)\right] = 0.02$
Sunny
Gain(windy) = 0.9403 - $\left[\frac{2}{5}H\left(\frac{0}{2}\right) + \frac{3}{5}H\left(\frac{3}{2}\right)\right] = 0.971$

- Aqui, o atributo *windy* resulta no *ganho de informação* mais alto quando o tempo estiver chuvoso (i.e., *Outlook = rain*).
- Por isso, o atributo *windy* será o nó do 2º nível da árvore, no ramo **rain** de **Outlook**.

sunnv

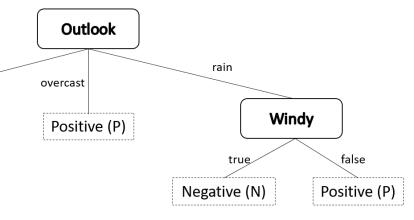
Se analisarmos a tabela com *Outlook = rain* e windy
 = false percebemos que a decisão será sempre pela classe Positiva (*P*).

| Davi | | Attributes | | | | |
|------|---------|-------------|----------|-------|-----|--|
| Day | Outlook | Temperature | Humidity | Windy | (y) | |
| 4 | rain | mild | high | false | Р | |
| 5 | rain | cool | normal | false | Р | |
| 10 | rain | mild | normal | false | Р | |

Além disso, a decisão sempre será pela classe
 Negativa (N) se Outlook = rain e windy = true.

| Day | Attributes | | | | |
|-----|------------|-------------|----------|-------|-----|
| Day | Outlook | Temperature | Humidity | Windy | (y) |
| 6 | rain | cool | normal | true | N |
| 14 | rain | mild | high | true | N |

• Portanto, encontramos as folhas para os dois ramos, *true* e *false* do nó *windy*.



Quando Outlook = sunny

| Outlook=sunny | | Jog | Jogar? | | |
|---------------|------|-----|--------|---|--|
| Outlook-s | unny | P N | | | |
| Temperature | hot | 0 | 2 | 2 | |
| | mild | 1 | 1 | 2 | |
| | cool | 1 | 0 | 1 | |
| | | | | 5 | |

| Jogar | | | ar? | |
|---------------|--------|---|-----|---|
| Outlook=sunny | | Р | Ν | |
| Humidity | high | 0 | 3 | 3 |
| | normal | 2 | 0 | 2 |
| | | | | 5 |

| Outlook=sunny | | Jogar? | | |
|---------------|-------|--------|---|---|
| | | Р | Ν | |
| \ A /: | true | 1 | 1 | 2 |
| Windy | false | 1 | 2 | 3 |
| | | | | 5 |

$$Gain(\textbf{temperature}) = 0.9403 - \left[\frac{2}{5}H\left(\frac{0}{2}\right) + \frac{2}{5}H\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{5}H\left(\frac{1}{1}\right)\right] = 0.570$$

$$Gain(\textbf{humidity}) = 0.9403 - \left[\frac{3}{5}H\left(\frac{0}{3}\right) + \frac{2}{5}H\left(\frac{2}{2}\right)\right] = 0.970$$

$$Humidity$$

$$Gain(\textbf{windy}) = 0.9403 - \left[\frac{2}{5}H\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{3}{5}H\left(\frac{1}{3}\right)\right] = 0.019$$
Humidity

Positive (P)

Negative (N)

Positive (P)

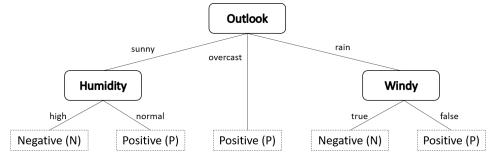
- Aqui, o atributo humidity resulta no ganho de informação mais alto quando o tempo estiver ensolarado (i.e., Outlook = sunny).
- Por isso, o atributo *humidity* será o nó do 2º nível da árvore no ramo *sunny*.

• Após analisarmos a tabela com *Outlook = sunny* e *humidity = normal* percebemos que a decisão será sempre pela classe Positiva (*P*).

| Day | Attributes | | | | Class |
|-----|------------|-------------|----------|-------|-------|
| | Outlook | Temperature | Humidity | Windy | (y) |
| 9 | sunny | cool | normal | false | Р |
| 11 | sunny | mild | normal | true | Р |

 Além disso, a decisão sempre será pela classe Negativa (N) se Outlook = sunny e humidity = high.

| Day | Attributes | | | | Class |
|-----|------------|-------------|----------|-------|-------|
| | Outlook | Temperature | Humidity | Windy | (y) |
| 1 | sunny | hot | high | false | N |
| 2 | sunny | hot | high | true | N |
| 8 | sunny | mild | high | false | N |



- Portanto, encontramos as folhas para os dois ramos, *normal* e *high* do nó *humidity*.
- Com isso, a construção da árvore de decisão se encerra e podemos usar as regras encontradas por ela para classificar novos exemplos.

Considerações

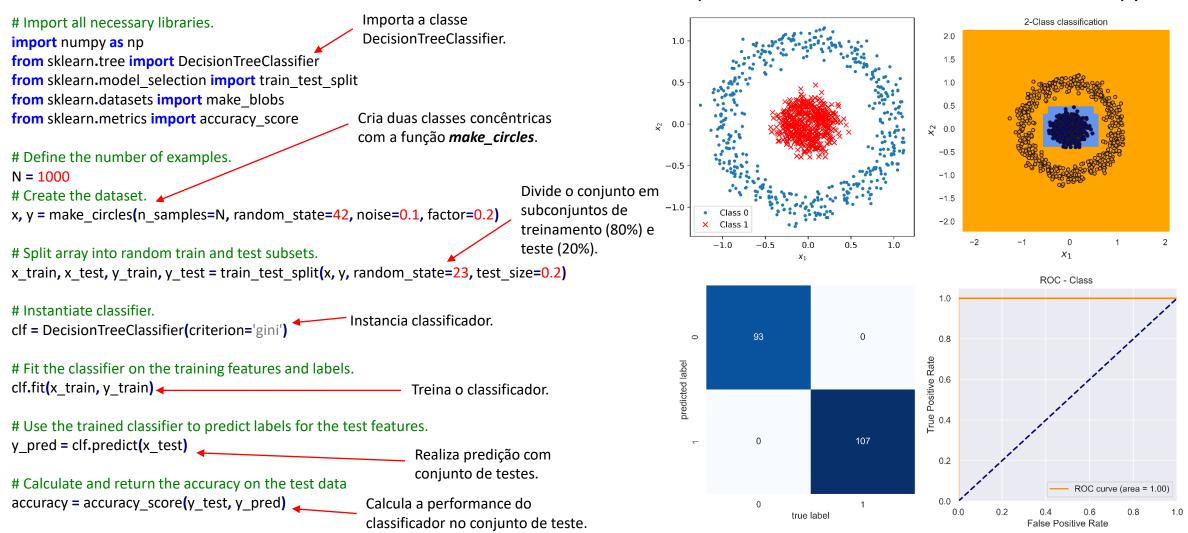
- Uma árvore de decisão transforma os exemplos do conjunto de treinamento em uma sequência de regras que classifica os exemplos de entrada. Portanto, elas são fáceis de serem interpretadas.
- Embora as árvores de decisão sejam poderosos algoritmos de classificação, elas apresentam um longo tempo de treinamento.
- Em casos onde as classes são separadas por *fronteiras de decisão não-lineares*, as *árvores de decisão* apresentam um desempenho de *classificação* superior ao apresentado por *classificadores lineares*.
 - *Exemplo*: DTTwoConcentricClassesClassification.ipynb
- Entretanto, quando as classes não são bem separadas, as árvores são suscetíveis a sobreajustar ao conjunto de treinamento, de modo que a fronteira de decisão linear dos classificadores lineares separe melhor as classes, apresentando melhor desempenho de classificação.
 - *Exemplo*: DTTwoOverlappingClassesClassification.ipynb

Considerações

- Árvores de decisão precisam de muito pouco pré-processamento dos dados. Em particular, elas não necessitam de escalonamento dos atributos.
- Árvores de decisão adoram fronteiras de decisão ortogonais (observando os exemplos, vocês vão perceber que todas as fronteiras de decisão são perpendiculares a um dos eixos), o que as torna sensíveis à rotação do conjunto de treinamento.
 - *Exemplo*: DTSensitivityToTrainingSetRotation.ipynb
 - Uma maneira para minimizar esse problema é usar a técnica conhecida como Análise de Componentes Principais (do inglês, Principal Component Analysis (PCA)).
- De maneira geral, o principal problema das *árvores de decisão* é que elas são muito sensíveis a pequenas variações nos dados de treinamento. Estas variações nos dados podem gerar árvores completamente diferentes.
 - *Exemplo*: DTSensitivityToTrainingSetDetails.ipynb
 - As florestas aleatórias podem limitar essa instabilidade calculando a média das previsões feitas por diversas árvores de decisão.
- Árvores de decisão também podem ser utilizadas para regressão.
 - Assim como em tarefas de classificação, as árvores de decisão tendem a se sobreajustar ao conjunto de treinamento ao lidar com tarefas de regressão.
 - *Exemplo*: DTNoisyQuadraticDatasetRegression.ipynb

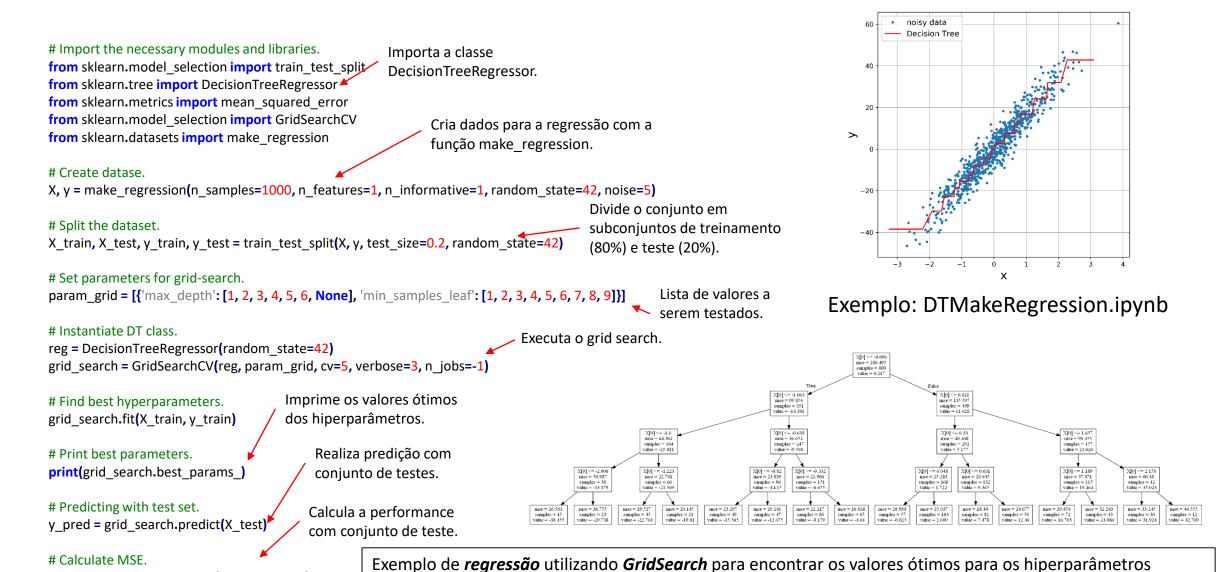
Classificação com árvores de decisão e SciKit-Learn

Exemplo: DTTwoConcentricClassesClassification.ipynb



Exemplo de classificação de 2 classes concêntricas. As figuras mostram a distribuição das classes, fronteira de decisão, matriz de confusão e curva ROC. Conforme podemos ver a classificação do conjunto de testes é perfeita.

Regressão com árvores de decisão e SciKit-Learn



árvore de decisão do regressor.

'max depth' e 'min samples leaf'. As figuras acima mostram os dados ruidosos, a curva de regressão e a

mse = mean_squared_error(y_test, y_pred)

Obrigado!

