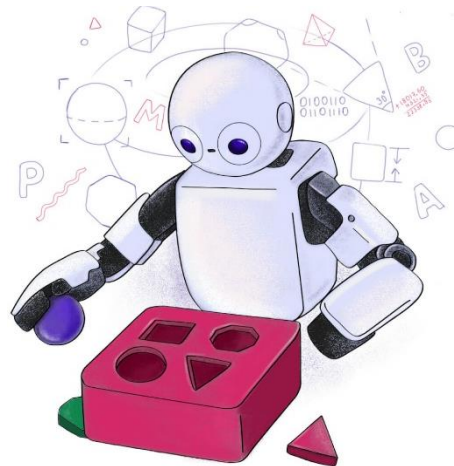


# TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning: *Árvores de Decisão*

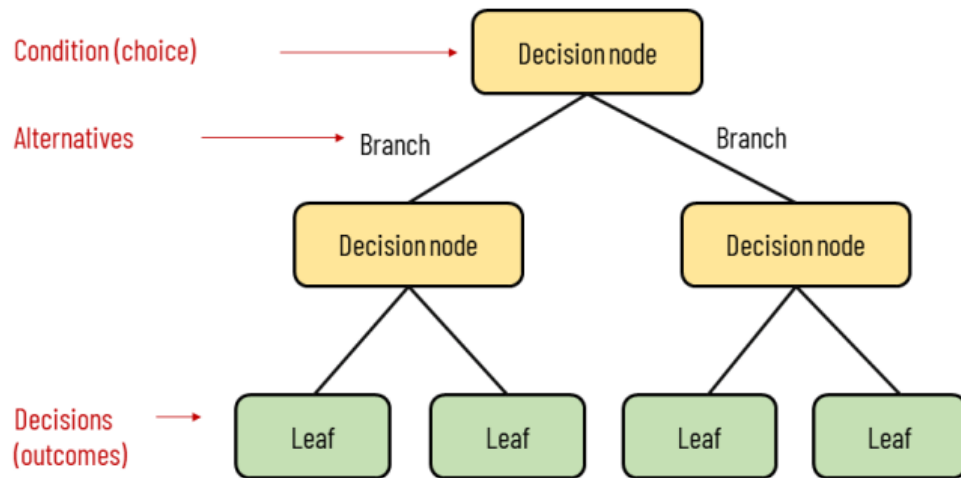


***Inatel***

Felipe Augusto Pereira de Figueiredo  
felipe.figueiredo@inatel.br

# Árvores de decisão

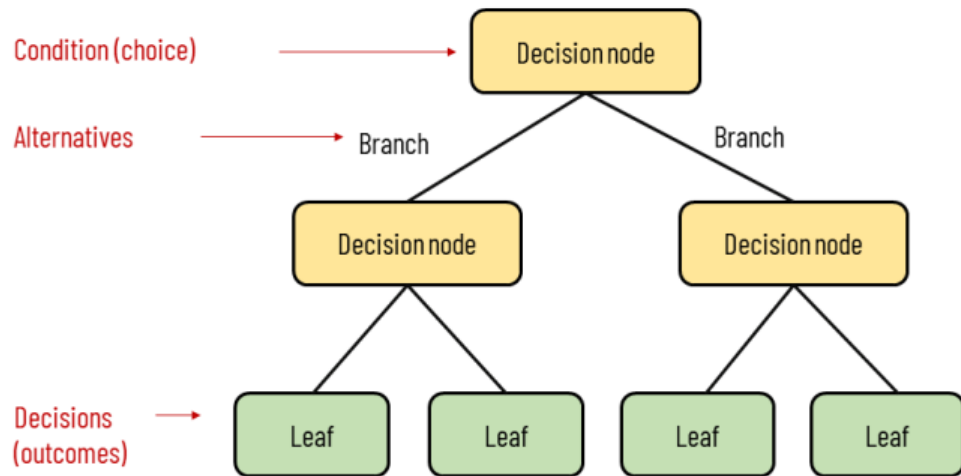
## Elements of a decision tree



- Assim como o k-NN, uma **árvore de decisão** (do inglês, **decision trees**), é um algoritmo de **aprendizado supervisionado não-paramétrico** e **não-linear** que pode ser utilizado tanto para **classificação** quanto para **regressão**.
- Podem ser interpretadas como uma **estrutura de controle de fluxo**.

# Árvores de decisão

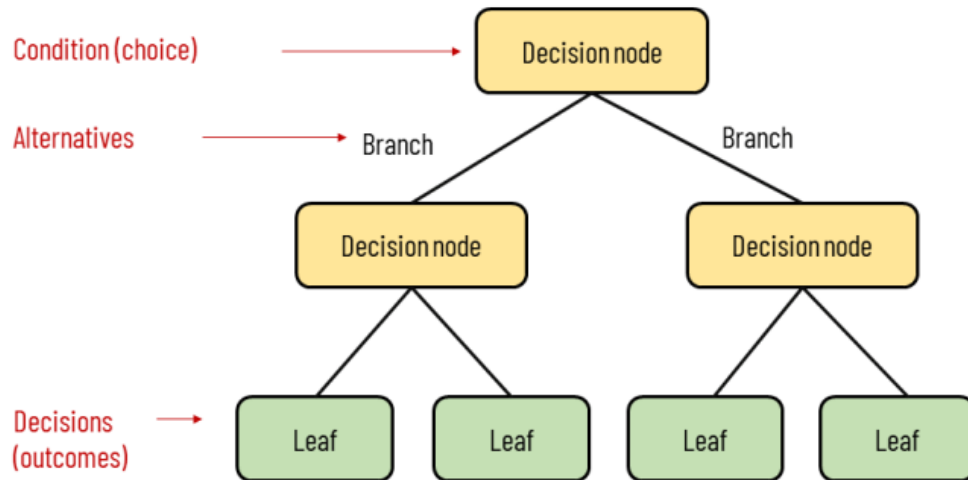
## Elements of a decision tree



- **Não-paramétrico:** elas *não fazem suposições sobre a distribuição* dos dados ou *sobre a forma da função* que estão tentando aprender.
- **Não definem um número fixo de parâmetros** como em modelos lineares, que têm um número fixo de pesos.
- Em vez de definir um número fixo de parâmetros, as **árvores de decisão ajustam sua complexidade à medida que crescem**, dependendo da estrutura dos dados.

# Árvores de decisão

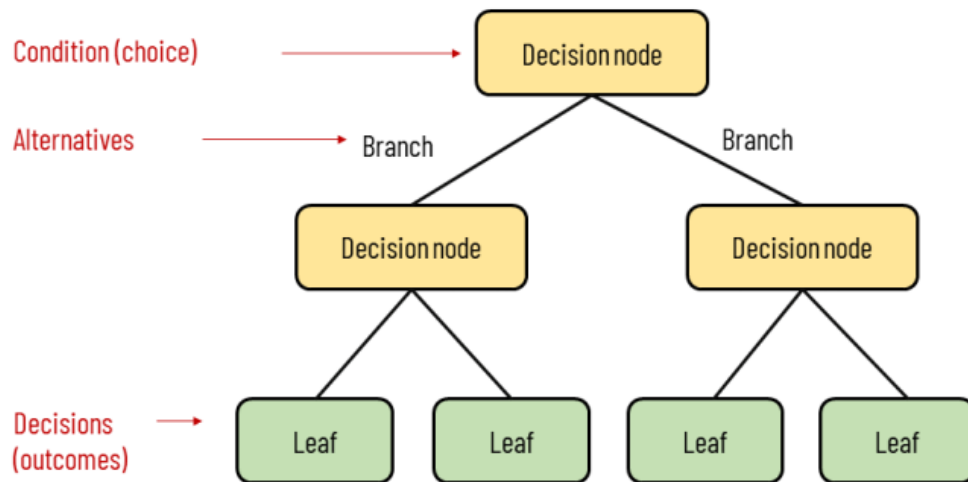
## Elements of a decision tree



- Ou seja, os **parâmetros são criados durante o treinamento para explicar os dados.**
- O **modelo é construído apenas com base nos dados observados**
- O **tamanho da árvore**, i.e., o número de parâmetros, **tende a crescer com a base de dados.**

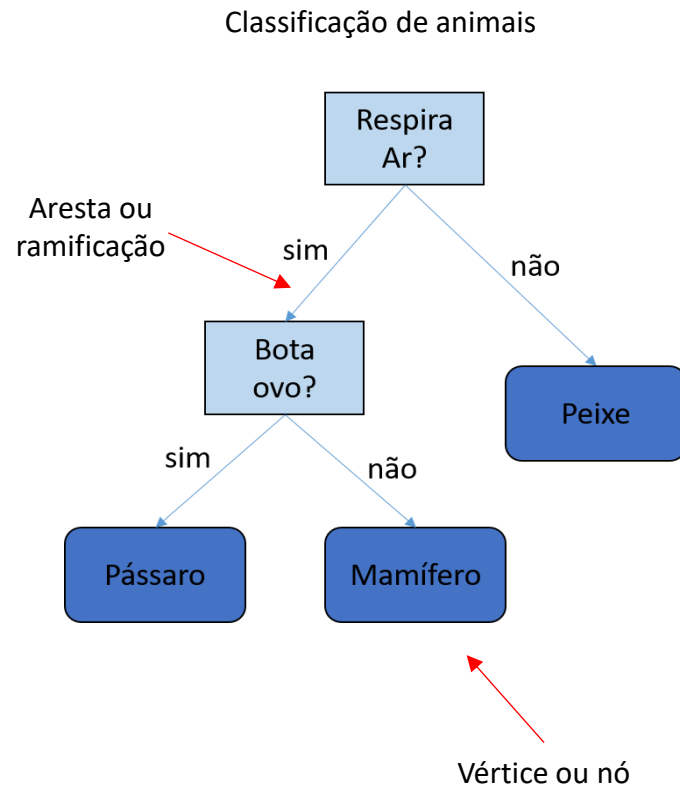
# Árvores de decisão

## Elements of a decision tree



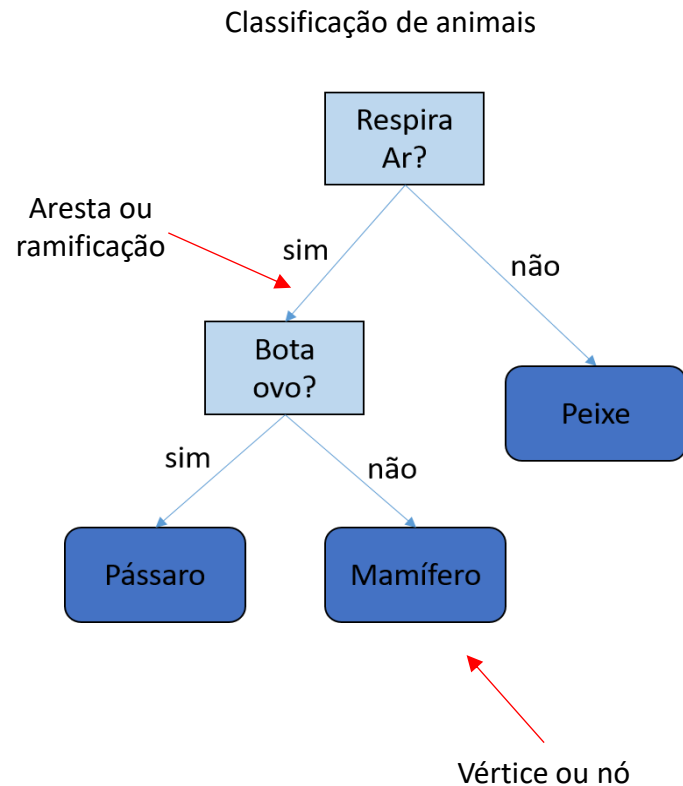
- Esse modelo é ***não-paramétrico***, não porque não tenha nenhum parâmetro, mas porque o ***número de parâmetros não é determinado antes do treinamento***, de modo que a árvore é livre para se adaptar aos dados de treinamento.
- ***Não-linear***: funções hipótese e discriminante são ***funções não-lineares***, i.e., os dados não são aproximados ou separados por um ***hiperplano***.

# Árvores de decisão



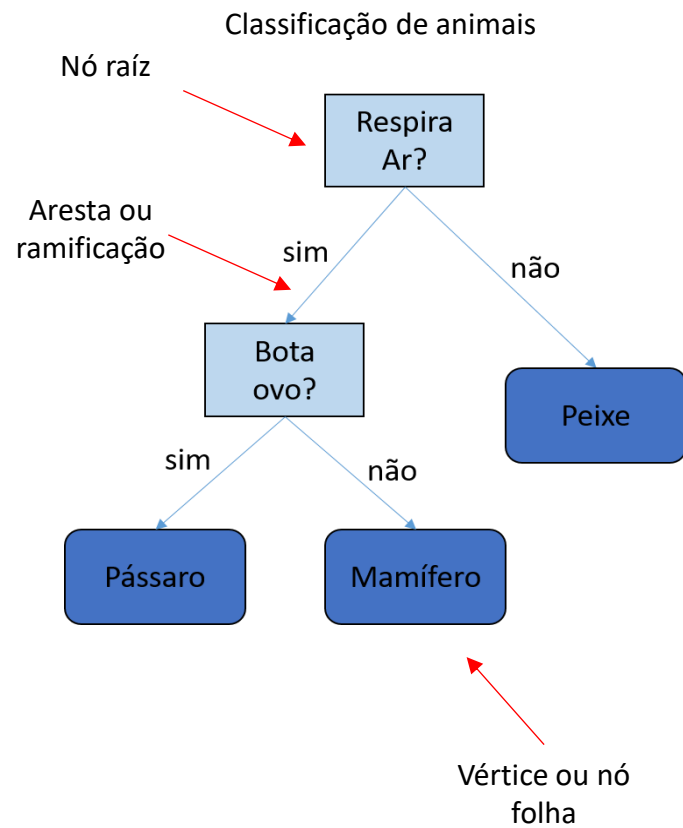
- O objetivo é criar um modelo que realize previsões aprendendo **regras simples de decisão inferidas** a partir dos **atributos do conjunto de treinamento**.
- As **árvores de decisão** são os componentes fundamentais das **florestas aleatórias** (do inglês, **random forests**) que estão entre os **algoritmos mais poderosos 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].
  - Um ciclo é um caminho em que o primeiro e o último vértice coincidem.
- Por exemplo, o vértice “Pássaro” só se conecta com o vértice “Mamífero” através do vértice “Bota ovo?” e não existe um caminho que termine no mesmo vértice de início.

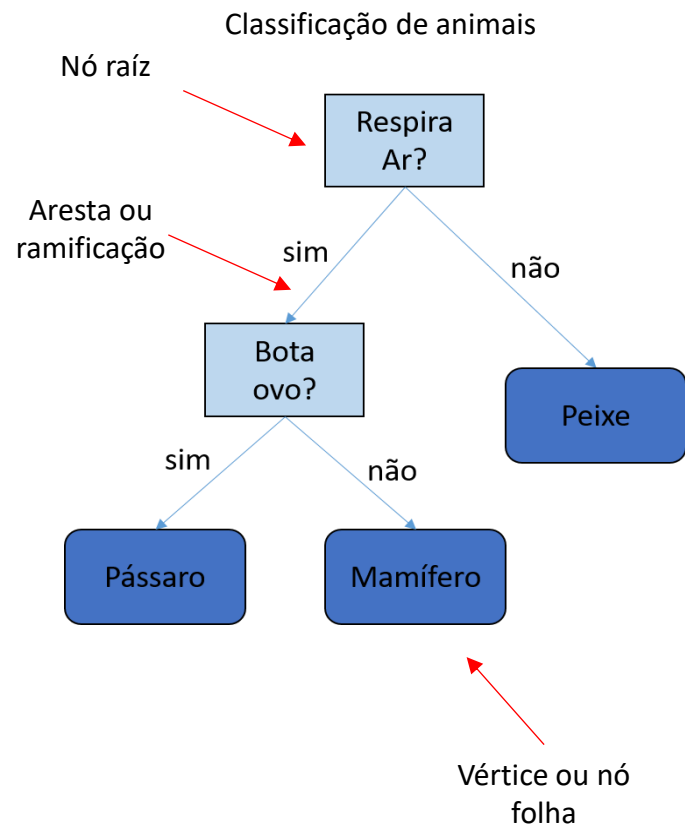
# Árvores de decisão



- A árvore possui um ***nó raiz***, do qual ***parte o processo de decisão***.
- Nesse processo, ***valores distintos dos atributos geram arestas*** (i.e., ***ramificações***) e, quando se chega a um ***nó folha***, ocorre uma ***atribuição de uma classe ou valor***.



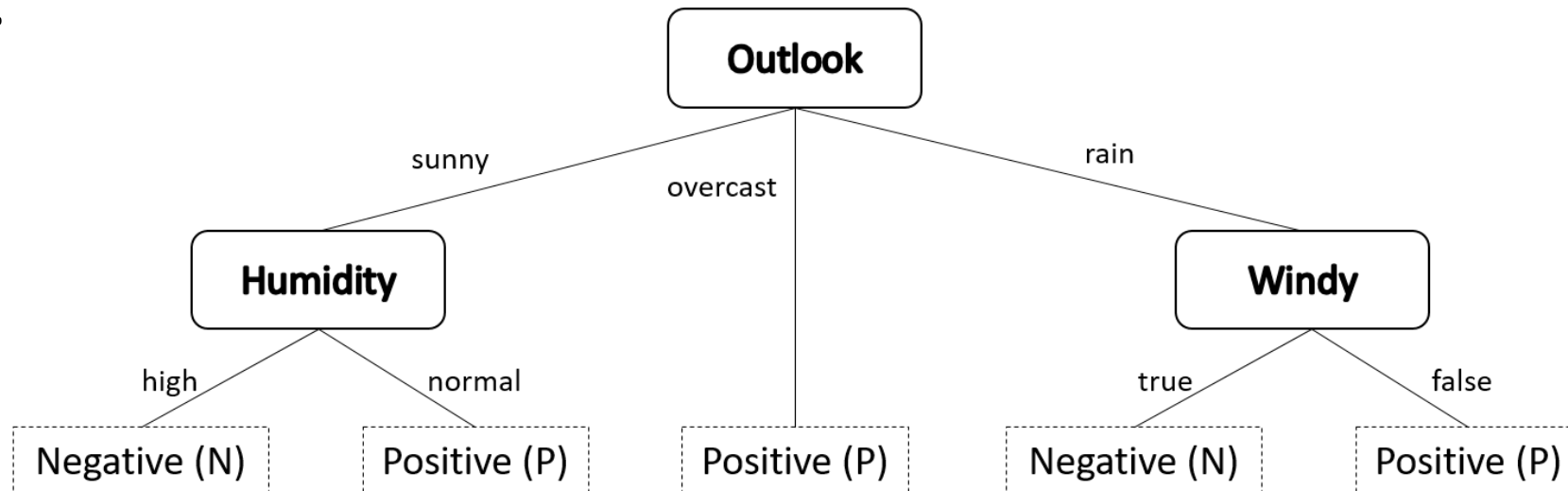
# Árvores de decisão



- **Árvores de decisão** são modelos de **caixa branca**, ou seja, é possível entender e **explicar facilmente como o modelo realiza a classificação ou regressão** baseando-se nos atributos.
- Elas são 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).

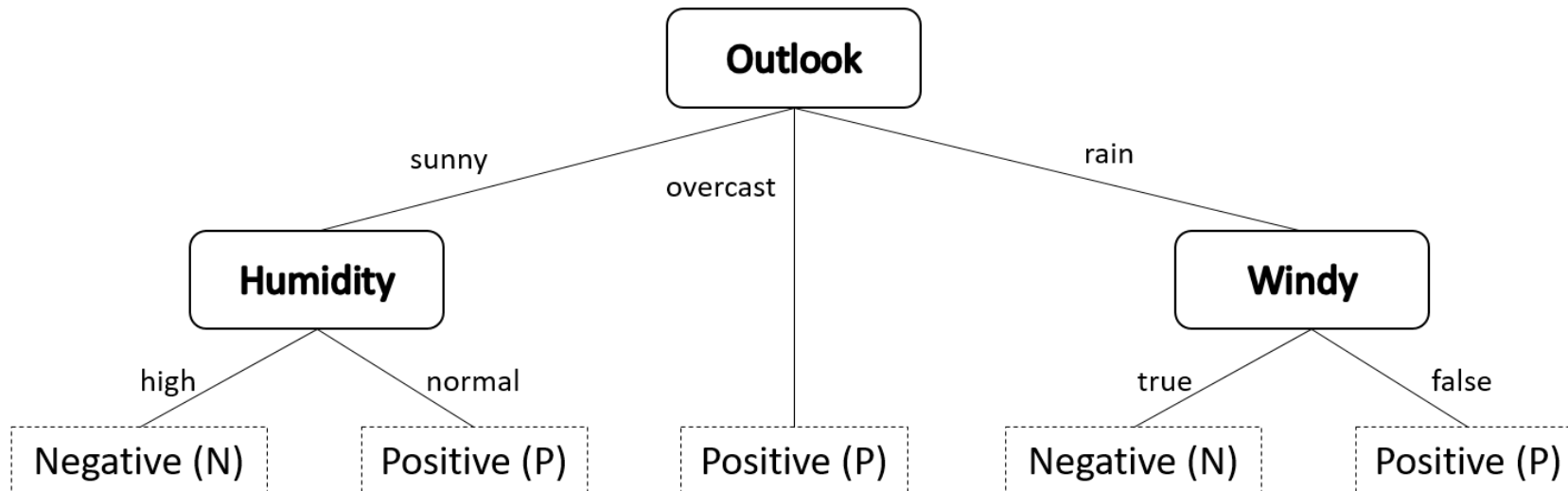
# Árvores de decisão

- A figura abaixo mostra uma árvore de decisão criada a partir de informações se jogadores jogarão tênis ou não dependendo dos valores dos atributos ***Clima, Humidade e Vento***.
- Cada ***nó da árvore atua como um caso de teste*** para algum atributo, e cada extremidade, ou seja, uma terminação ou folha, corresponde a uma classe.



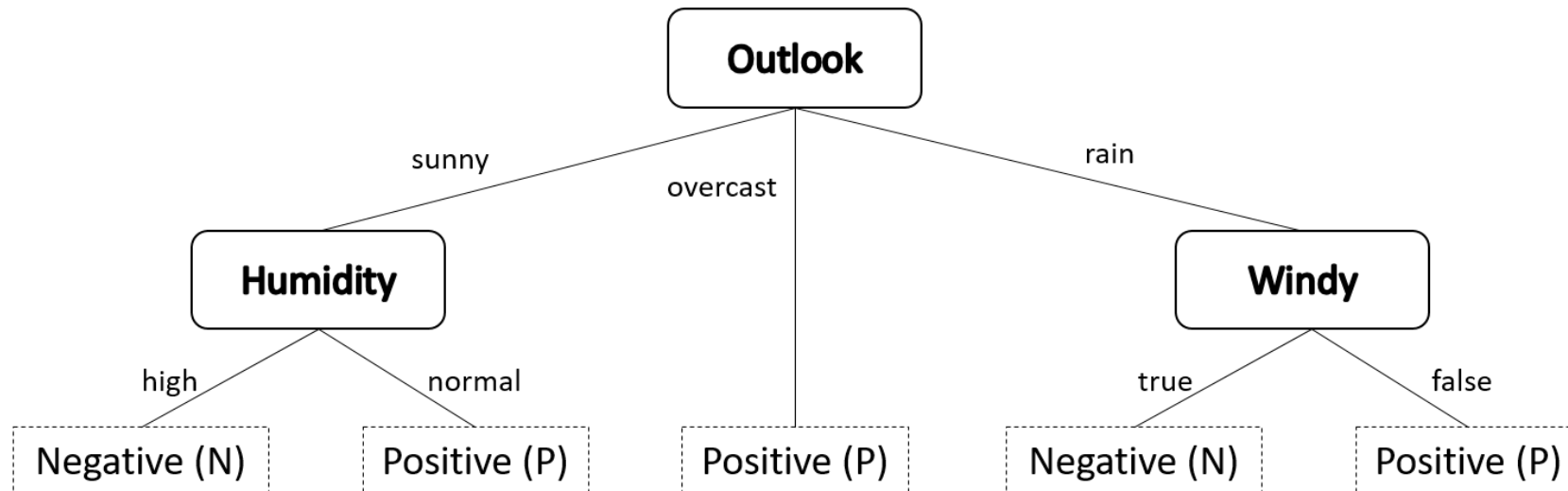
# Árvores de decisão

- Na figura, cada atributo leva a uma ramificação até que se atinja um nó folha, onde decide-se sobre jogar ou não.
- O *uso da árvore para classificar padrões é direto*, mas é preciso responder uma questão crucial: *como induzir uma árvore de decisão a partir dos 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** da classificação ou regressão e **selecionar a mais simples** (menos complexa) utilizando a **regra da Navalha de Occam**.
- Entretanto, essa abordagem pode ser computacionalmente muito custosa.

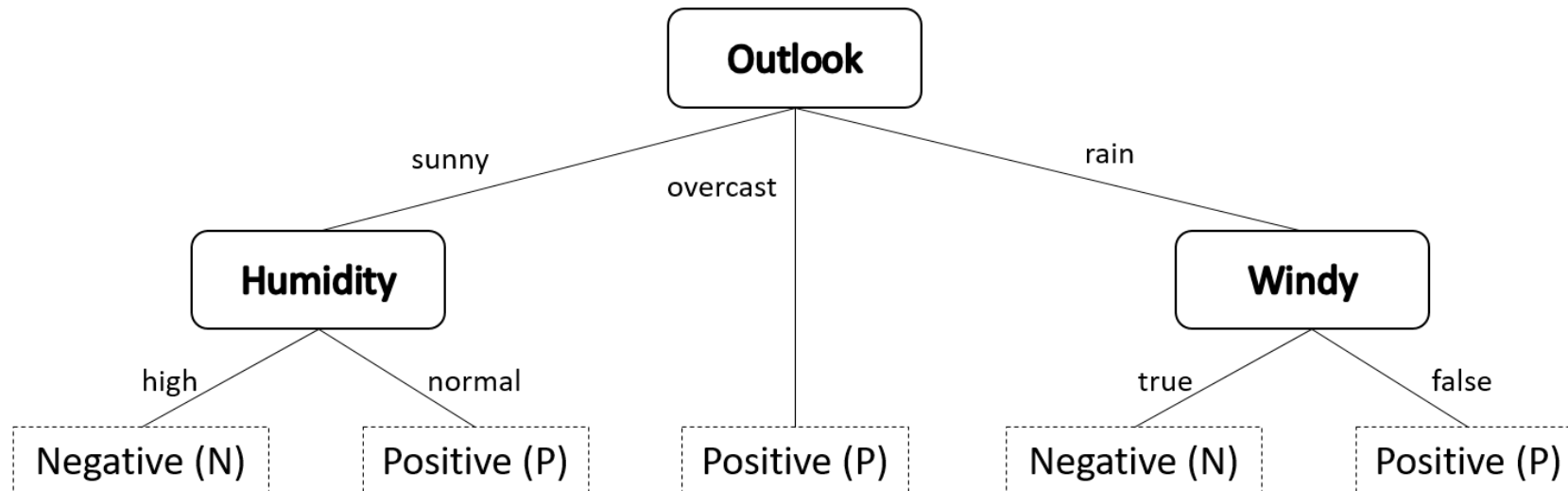


# O processo de indução de uma árvore de decisão

- Encontrar uma árvore de decisão ótima é um problema *tempo polinomial não-determinístico completo* (NP-completo).
- São problemas:
  - Cujas soluções podem ser verificadas em tempo polinomial.
    - Um algoritmo roda em tempo polinomial se o tempo necessário para resolver um problema de tamanho  $n$  é limitado por uma função polinomial de  $n$ .
    - Por exemplo, a inversa de uma matriz  $n \times n$  pode ser calculada em  $n^3$ .
  - Não se sabe se existe um algoritmo eficiente (polinomial) para **resolver** o problema.
- Exemplos incluem problemas clássicos como a Satisfatibilidade Booleana, Caixeiro Viajante e o Caminho Hamiltoniano.

# O processo de indução de uma árvore de decisão

- Como a indução de árvores são problemas NP-completos, em geral, usa-se ***abordagens heurísticas*** para induzir árvores de decisão.
- Dentre os mais conhecidos podemos citar: **ID3**, C4.5, C5.0 e **CART (scikit-learn)**.



# O processo de indução de uma árvore de decisão

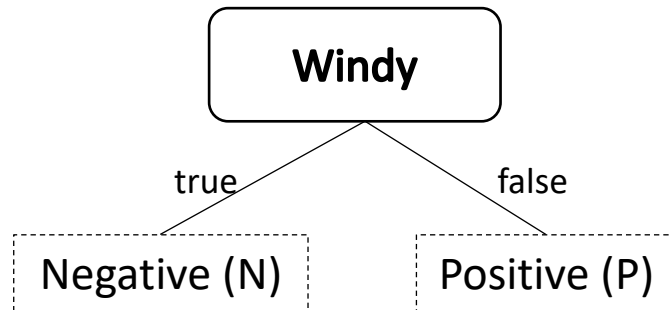
- Um dos métodos *heurísticos* de indução de árvores de decisão mais utilizados é o **ID3** (do inglês, *Iterative Dichotomiser 3*).
  - *Heurística*: estratégia prática para encontrar uma solução rápida e aproximada.
  - *Dicotomização iterativa* significa *dividir-se repetidamente os atributos em duas ou mais classes* a cada iteração (ou passo).
- O **método ID3** é uma abordagem que *não garante* a obtenção da *menor árvore possível*, mas busca obter *árvores apropriadas num intervalo de tempo relativamente curto*.

# O processo de indução de uma árvore de decisão

- Ele usa uma **estratégia gananciosa top-down**.
- Ou seja, a árvore é **criada de cima para baixo** e um **nó é escolhido** selecionando-se o **atributo que melhor divide o conjunto de dados naquele momento**.
- Mas como se decide qual é o melhor atributo?
- Qual é a métrica usada?
- O **método ID3** se baseia na **teoria da informação** para selecionar o melhor atributo de cada nó da árvore.

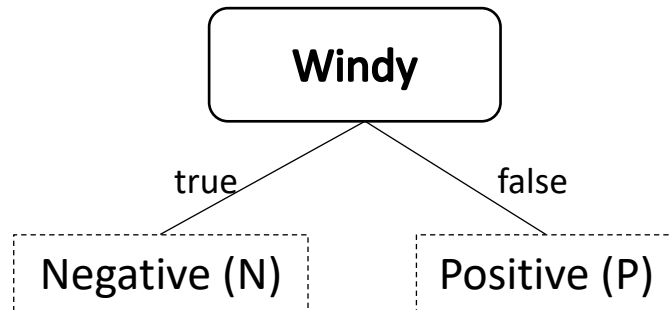


# O processo de indução de uma árvore de decisão



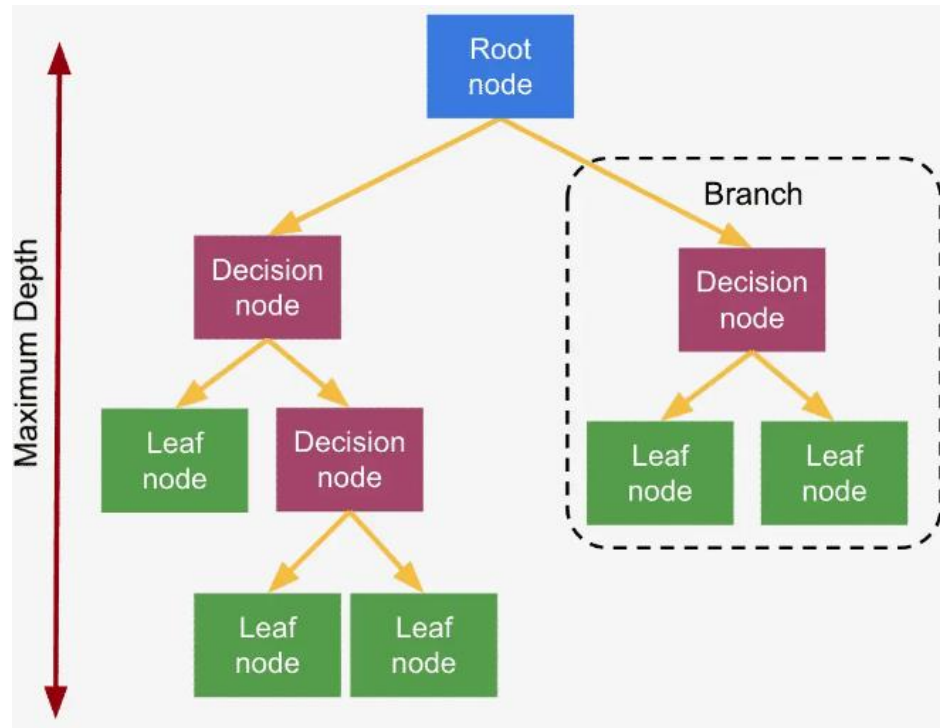
- A ideia do **método ID3** é escolher como **nó** o **atributo que for o mais longe possível em dividir os exemplos**.
- Um **atributo perfeito** divide perfeitamente todos os exemplos em grupos (ou classes).
- Ou seja, é o atributo que consegue **explicar perfeitamente o conjunto de dados**.
- Por exemplo, o atributo **Windy** divide os exemplos perfeitamente em duas classes.

# O processo de indução de uma árvore de decisão



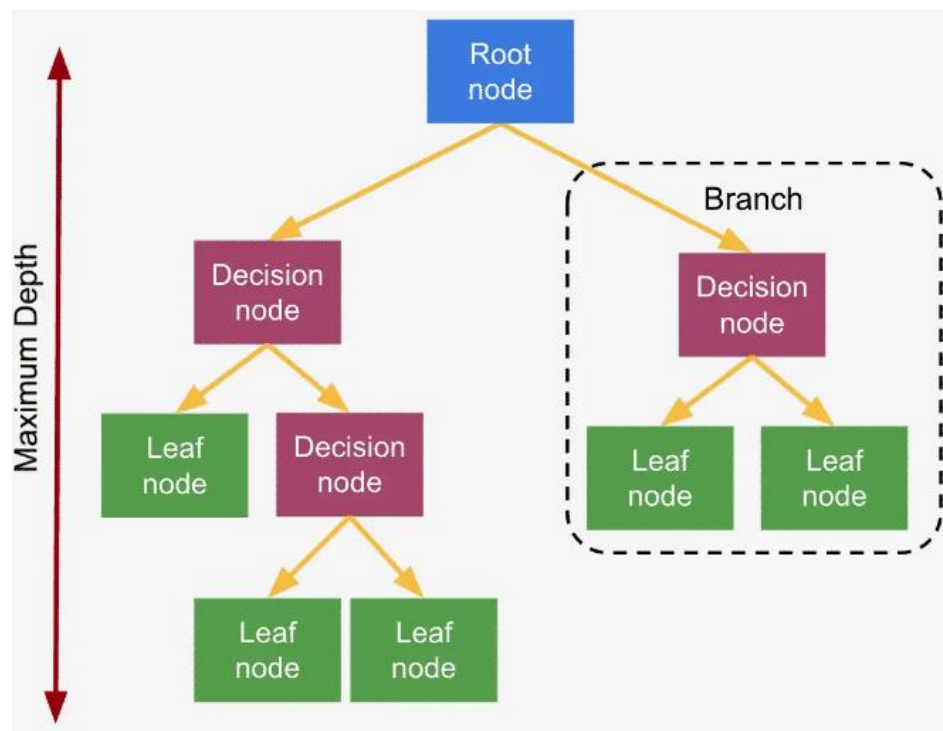
- Então, tudo o que precisamos é uma medida formal de **atributo razoavelmente bom** ou **realmente inútil**.
- O **método ID3** utiliza a noção de **ganho de informação**, o qual é **definido em termos da entropia**, que é uma quantidade fundamental em **teoria da informação**.
- A seguir, veremos alguns conceitos úteis para que possamos usar o **método ID3** para inferir árvores de decisão.

# Ganho de informação



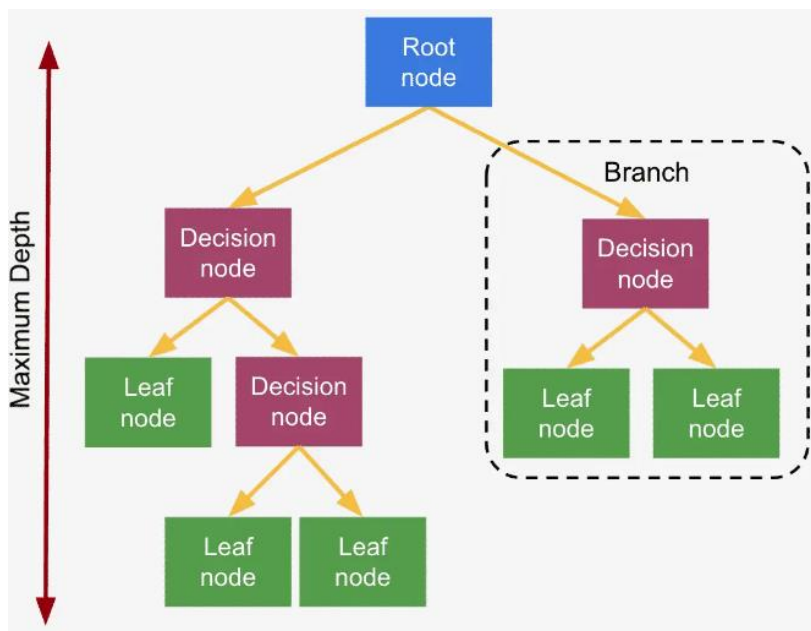
- É uma *propriedade estatística* que *mede o quão bem um determinado atributo separa os exemplos* de treinamento de acordo com suas classes.
- Portanto, construir uma **árvore de decisão** tem tudo a ver com encontrar, a cada momento (i.e., a cada nó), um **atributo** que retorne o maior **ganho de informação**.

# Entropia



- É uma medida da **quantidade de incerteza ou aleatoriedade** de uma variável aleatória (i.e., um conjunto de dados).
- Portanto, **um ganho de informação** corresponde a uma **redução na entropia**.
- Quando **ganhamos informação** sobre o conjunto, a **incerteza diminui**.
- O ganho é o quanto conseguimos explicar do conjunto com aquele atributo.

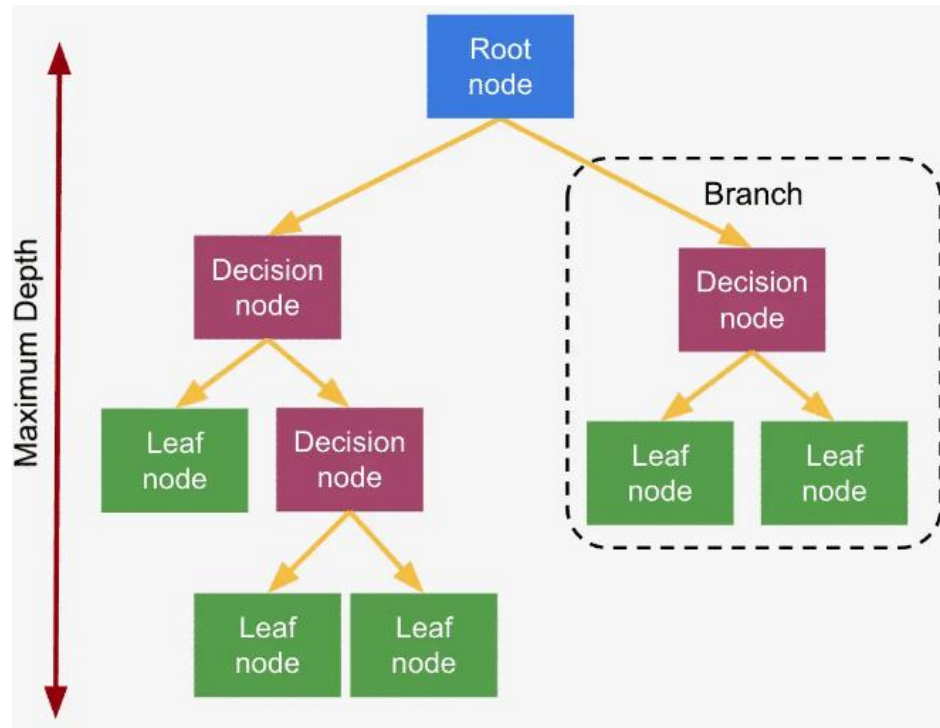
# Entropia



- O **ganho de informação** nos dá a **diferença entre a entropia antes e após a divisão do conjunto de dados** com base nos valores de um determinado atributo.
- Assim, podemos escrever que o **ganho de informação** é dado por

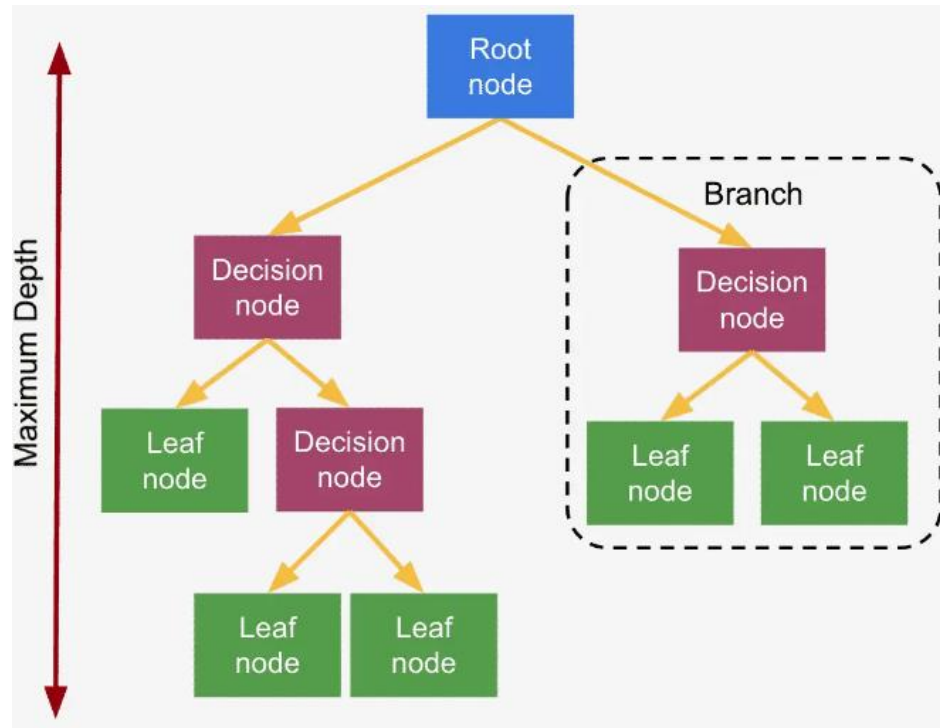
$$Gain = entropiaAntesDaDivisão - entropiaApósADivisão$$

# Exemplo de entropia



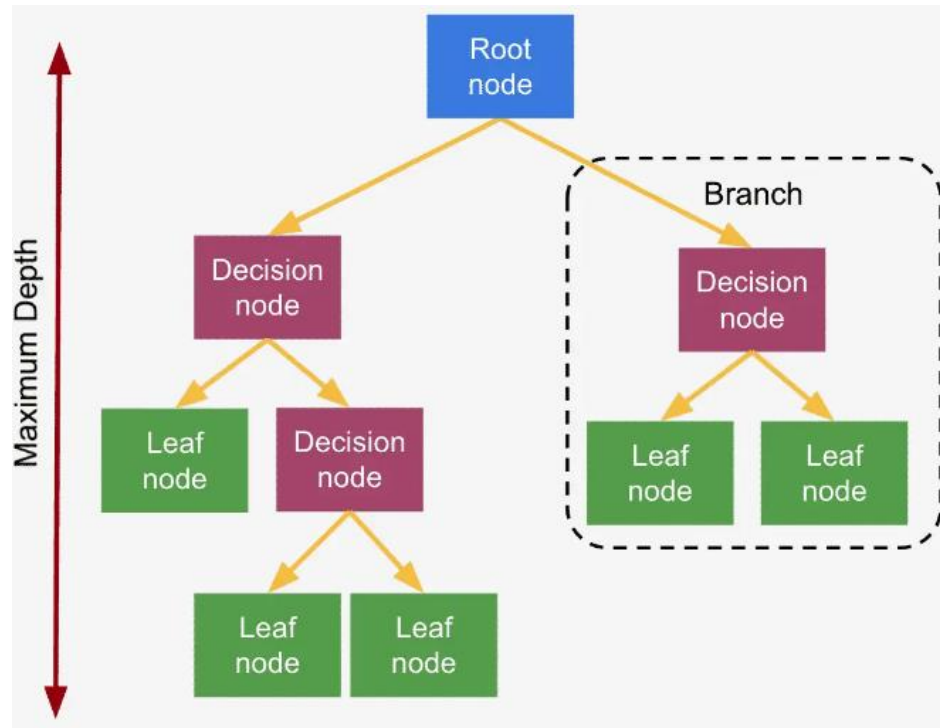
- Uma variável com apenas um único valor (e.g., o arremesso de uma moeda com ***cara*** em ambos os lados) não tem nenhuma ***incerteza*** associada
- Portanto, sua ***entropia é igual a zero***.
- Isso significa que ***não se ganha nenhuma informação nova ao se observar o valor***.

# Exemplo de entropia



- Por outro lado, o resultado de se arremessar uma ***moeda honesta*** é igualmente provável de resultar em ***cara*** ou ***coroa***, os quais são associados aos valores 0 ou 1, respectivamente.
- Neste caso, esta variável tem ***1 bit de entropia***, significando que se necessita de 1 bit para representar os 2 possíveis resultados.

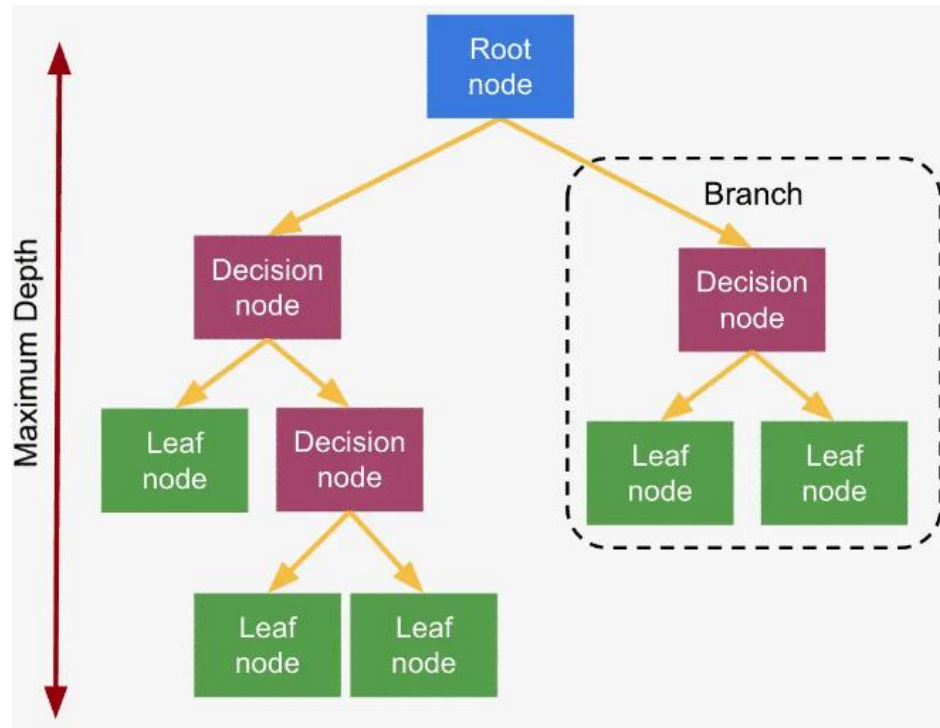
# Exemplo de entropia



- 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 imaginem 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.



# Cálculo da entropia



- Assim, a **entropia** de uma variável aleatória discreta,  $V$ , com valores  $v_i$ , onde cada um dos valores tem probabilidade  $P(v_i)$ , é definida como

$$H(V) = -\sum_i P(v_i) \log_2(P(v_i)).$$

# Indução de uma árvore de decisão

- Retornando ao problema da indução 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 objetivo** (i.e., o rótulo) para todo o conjunto de treinamento é dada por

$$\begin{aligned} H(\textit{Goal}) &= B\left(\frac{p}{p+n}\right) \\ &= -\left[\frac{p}{p+n}\log_2\left(\frac{p}{p+n}\right) + \left(1 - \frac{p}{p+n}\right)\log_2\left(1 - \frac{p}{p+n}\right)\right], \end{aligned}$$

onde  $B(q)$  é a **entropia de uma variável booleana que é verdadeira com probabilidade igual a  $q$** , ou seja

$$B(q) = -(q\log_2(q) + (1 - q)\log_2(1 - q)).$$

# Indução de uma árvore de decisão

- Um teste em um único atributo,  $x_k$ , pode nos dar **toda ou apenas parte da entropia do objetivo**,  $H(\text{Goal})$ .
- Nós podemos medir exatamente o **quanto cada atributo contribui para a entropia do objetivo** 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  $d$  subconjuntos:  $E_1, \dots, E_d$** .
- Cada subconjunto  $E_i, i \in \{1, \dots, d\}$ , possui  $p_i, i \in \{1, \dots, d\}$ , exemplos da classe positiva,  $P$ , e  $n_i, i \in \{1, \dots, d\}$ , exemplos da classe negativa,  $N$ .

# Indução de uma árvore de decisão

- Um exemplo escolhido aleatoriamente do conjunto de treinamento tem probabilidade igual a  $(p_i + n_i)/(p + n)$  de pertencer ao  $i$ -ésimo subconjunto,  $E_i$ , do atributo  $x_k$ .

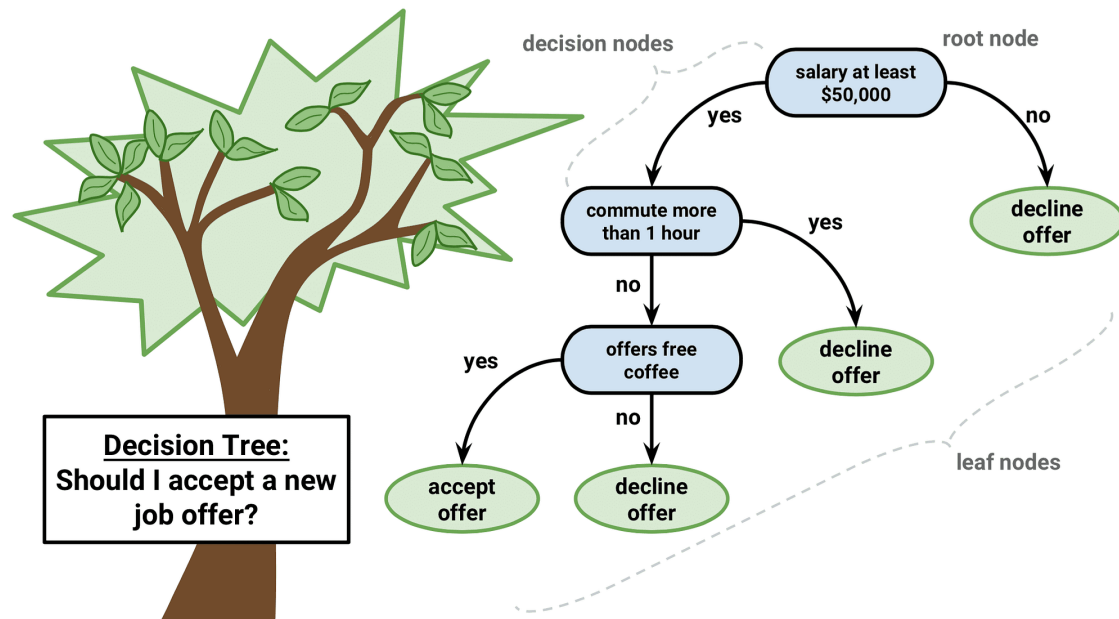
- Assim, a **entropia restante** após o teste do atributo  $x_k$  é dada por

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

- O **ganho de informação** com o atributo  $x_k$  é a **redução na entropia do objetivo**, que é dado por

$$Gain(x_k) = B\left(\frac{p}{p + n}\right) - Remainder(x_k) \geq 0.$$

# Método ID3

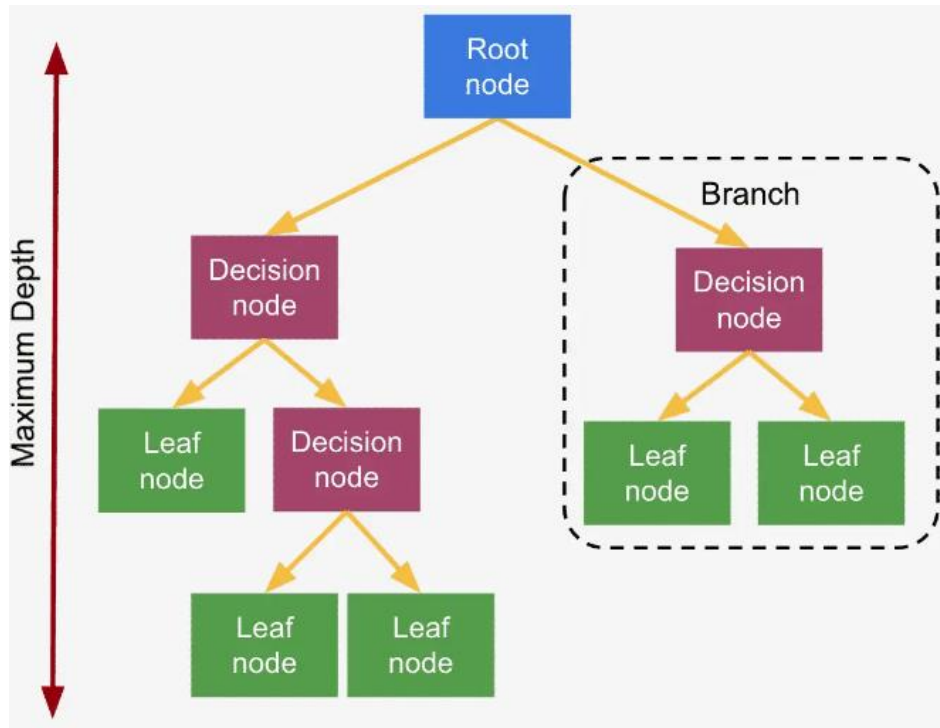


- A ideia por trás do **método ID3** é encontrar o **atributo  $x_k$  que maximiza o ganho de informação** e, então, usar o procedimento **recursivamente com os demais atributos**.
- Ou seja, escolhe-se o atributo que gera a primeira ramificação e, então, se repete o processo usando os demais atributos para construir o restante da árvore.

# Sequência de passos do método ID3

- a) Cálculo da **entropia do objetivo** para o (sub)conjunto de treinamento **corrente**.
  - **OBS.:** o (sub)conjunto é alterado a cada nova iteração do método de acordo com o(s) atributo(s) sendo testado(s).
- b) Cálculo do **ganho de informação** de cada atributo  $x_k, k = 1, \dots, K$  do conjunto de treinamento,  $E$ .
- c) Criação de um nó com o atributo que maximizou o **ganho de informação**.
- d) **Particionamento do (sub)conjunto em subconjuntos** usando o atributo  $x_k$  para o qual o **ganho de informação** resultante após a divisão é maximizado.
- e) Repetir os itens a) até d) em **subconjuntos de treinamento** usando os atributos restantes. Essa sequência **continua até que a árvore classifique perfeitamente todos os exemplos de treinamento** ou **até que todos os atributos tenham sido utilizados**.

# Sequência de passos do método ID3



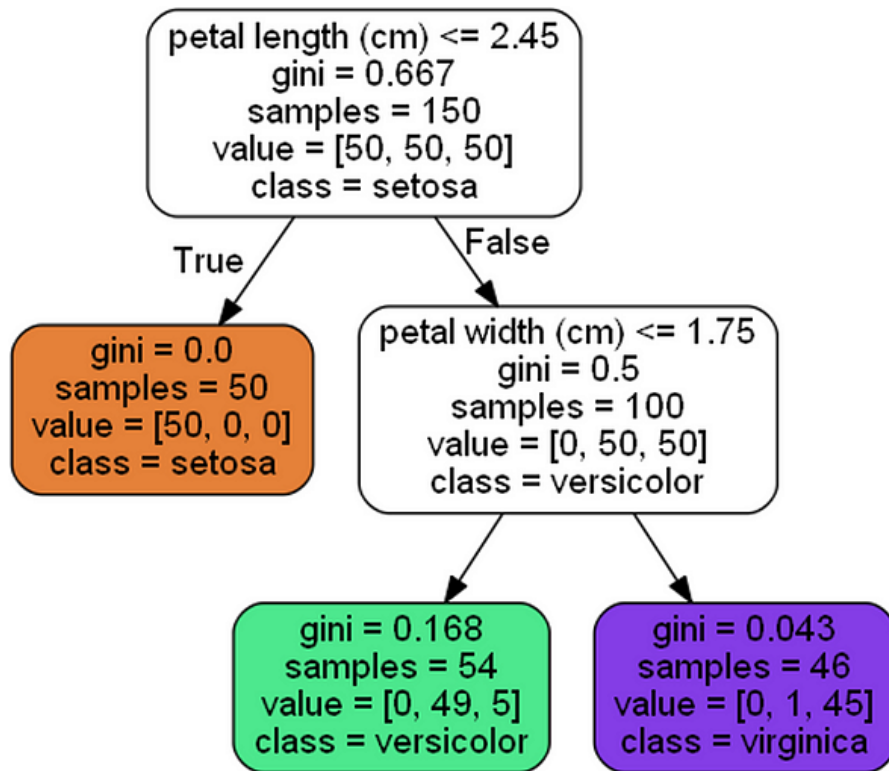
- O **ID3** segue a regra: um **ramo** com uma **entropia igual a zero** é uma **folha** e um **ramo** com **entropia maior do que zero precisa de partição adicional**.
- O **método ID3** será exemplificado através do exemplo apresentado em breve.

# Características do método ID3

- Por usar uma abordagem baseada em uma *heurística gananciosa*, o ID3 *não garante uma solução ideal*.
- Pode sobreajustar aos dados de treinamento
  - Para evitar o sobreajuste, árvores de decisão menores devem ser preferidas ao invés das maiores.
- O método ID3 geralmente produz árvores pequenas, *mas nem sempre produz a menor árvore possível*.
- É mais *difícil de usar com dados contínuos*.
- Se os valores de um atributo forem contínuos, haverá muito mais pontos para se dividir os dados com esse atributo, e a busca pelo melhor valor a ser dividido pode se tornar demorada.

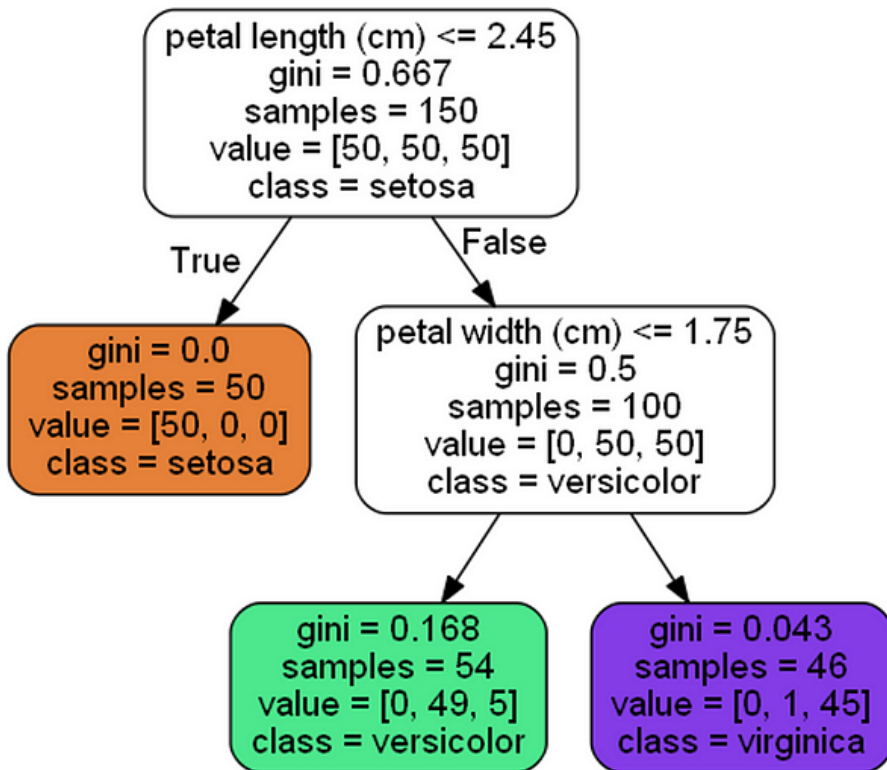


# Observações



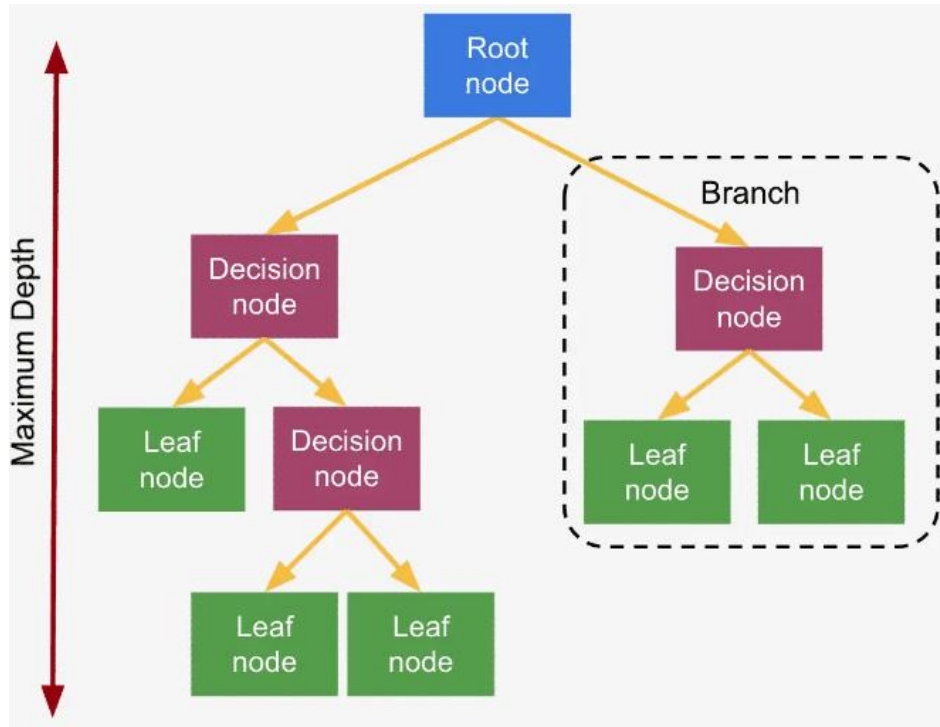
- Além do **ganho de informação**, existem outras métricas que podem ser usadas para indução.
- Uma possibilidade é usar uma **métrica de impureza**, como o **índice de Gini**.
  - Usado no método CART do SciKit-Learn.
- Mede o quão bagunçado (i.e., impuro) é um conjunto de dados.
  - Valor 1: **conjunto puro**, todas as amostras pertencem a uma mesma classe.
  - Valor 0: **conjunto totalmente impuro**, as amostras pertencem a classes diferentes.

# Observações



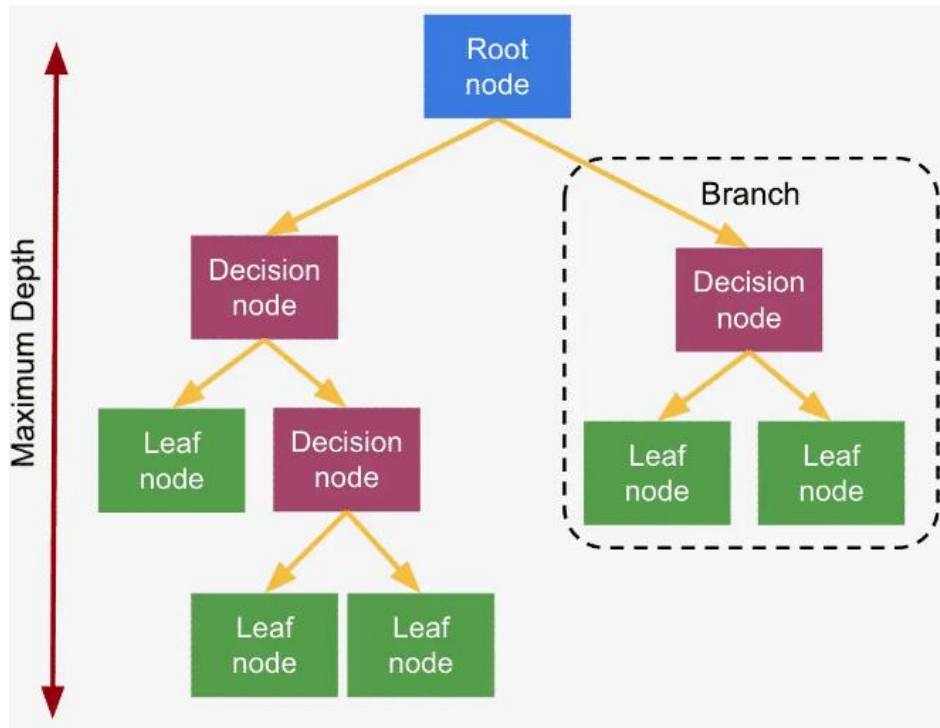
- Outro ponto importante é, se for o caso, deve-se buscar metodologias para se lidar com atributos faltantes.
- Existem várias soluções, como por exemplo:
  - Remover o exemplo.
  - Atribuir ao atributo a média de seus valores.

# Observações



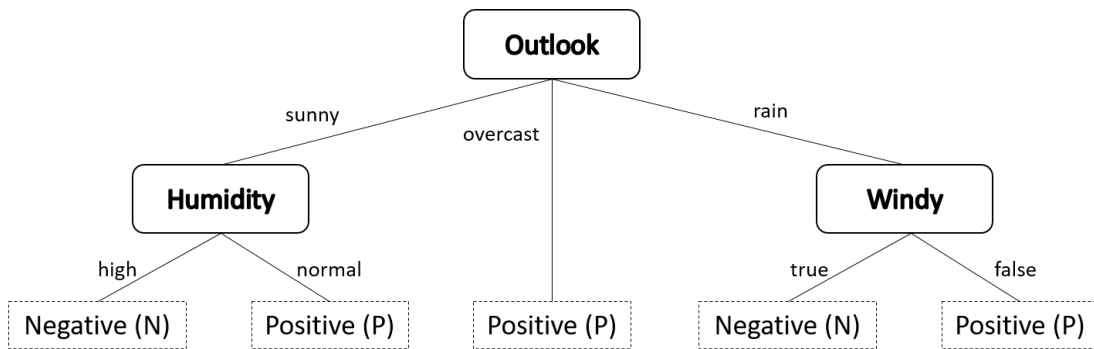
- O conjunto de treinamento é a base para definirmos a ***árvore de decisão***.
- Um conjunto que contenha inconsistências, como, por exemplo, ***dois exemplos com os mesmos valores de atributos, porém classes diferentes***, precisará ser reconsiderado, pois os atributos atuais podem não ser suficientes, por exemplo, ***precisando de mais atributos***.

# Observações



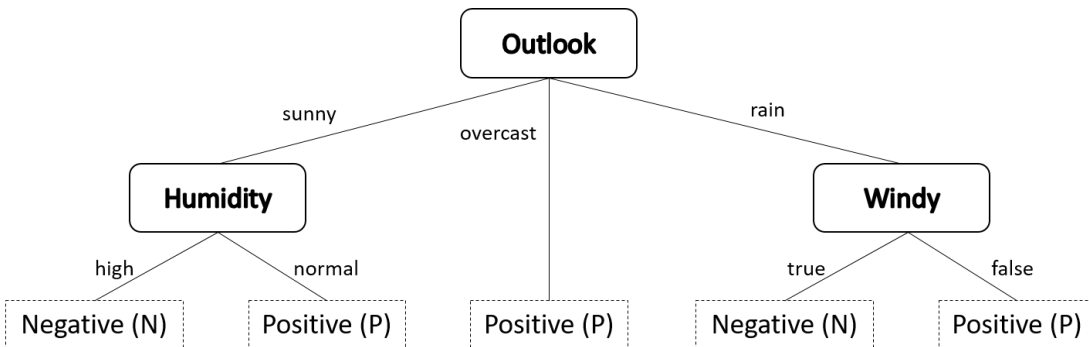
- Um problema muito comum das **árvores de decisão**, especialmente quando se tem um número muito grande de atributos, é o **sobreaajuste (alta variância)**.
- Existem duas formas para se minimizar este problema
  - Podar as árvores de decisão (**tree pruning**).
  - Ou utilizar **florestas aleatórias**.

# Exemplo de indução de uma árvore de decisão com o método ID3



- Vamos construir uma árvore de decisão para **prever 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 correspondente ao vetor de atributos.
- Nesse conjunto, cada entrada diz respeito à condição meteorológica de um dia e se os jogadores jogaram ou não.

# Exemplo de indução de uma árvore de decisão com o método ID3



- Existem ***quatro*** atributos ***categóricos***:
  - **Tempo**: {ensolarado, nublado, chuvoso}
  - **Temperatura**: {frio, agradável, quente}
  - **Umidade**: {alta, normal}
  - **Vento**: {presente, ausente}
- Os rótulos são dois (problema binário): ***positivo*** (*P*), i.e., jogar, e ***negativo*** (*N*), i.e., não jogar.
- Um exemplo de condição meteorológica de um determinado dia poderia ser descrito por:  

{nublado, frio, normal, ausente}

# Indução de uma árvore de decisão com o método ID3

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

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

# Indução de uma árvore de decisão com o método ID3

- 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 raiz: o **ganho de informação** de cada atributo é calculado como

		Jogar?		
		P	N	
Outlook	sunny	2	3	5
	overcast	4	0	4
	rain	3	2	5
				14

		Jogar?		
		P	N	
Temperature	hot	2	2	4
	mild	4	2	6
	cool	3	1	4
				14

		Jogar?		
		P	N	
Humidity	high	3	4	7
	normal	6	1	7
				14

		Jogar?		
		P	N	
Windy	true	3	3	6
	false	6	2	8
				14

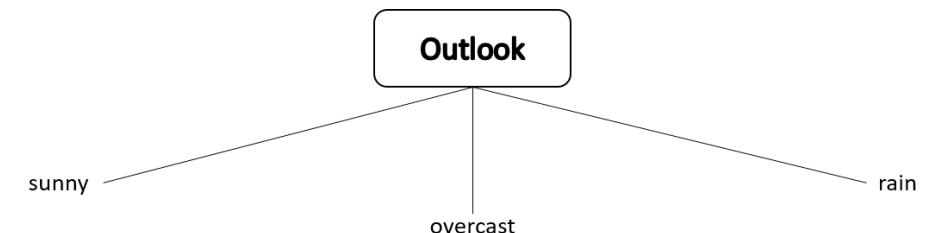
$$Gain(\text{outlook}) = 0.9403 - \left[ \frac{5}{14} B\left(\frac{2}{5}\right) + \frac{4}{14} B(1) + \frac{5}{14} B\left(\frac{3}{5}\right) \right] = 0.247$$

$$Gain(\text{temperature}) = 0.9403 - \left[ \frac{4}{14} B\left(\frac{2}{4}\right) + \frac{6}{14} B\left(\frac{4}{6}\right) + \frac{4}{14} B\left(\frac{3}{4}\right) \right] = 0.029$$

$$Gain(\text{humidity}) = 0.9403 - \left[ \frac{7}{14} B\left(\frac{3}{7}\right) + \frac{7}{14} B\left(\frac{6}{7}\right) \right] = 0.1518$$

$$Gain(\text{windy}) = 0.9403 - \left[ \frac{6}{14} B\left(\frac{3}{6}\right) + \frac{8}{14} B\left(\frac{6}{8}\right) \right] = 0.04813$$

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

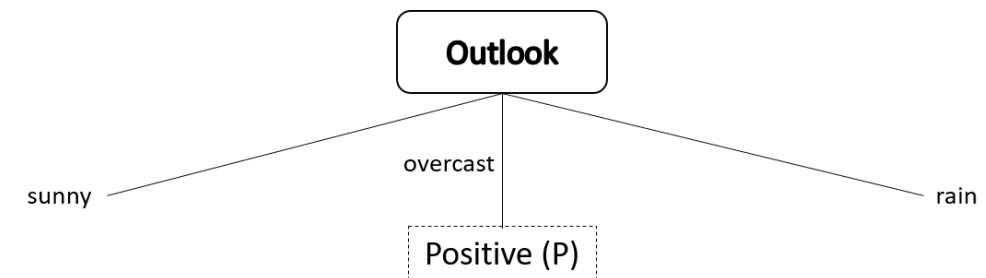




# Indução de uma árvore de decisão com o método ID3

- Agora, criamos **subconjuntos para cada um dos valores** do atributo **Outlook** e refazemos os cálculos do **ganho de informação** para cada um deles.
- Quando **Outlook = overcast**, o subconjunto abaixo mostra 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**.
- A **entropia nessa caso é igual a zero** (pois não há incerteza), indicando uma **folha** da árvore.
- Portanto, encontramos a folha deste ramo.

Day	Attributes				Class (y)
	Outlook	Temperature	Humidity	Windy	
3	overcast	hot	high	false	P
7	overcast	cool	normal	true	P
12	overcast	mild	high	true	P
13	overcast	hot	normal	false	P



# Indução de uma árvore de decisão com o método ID3

- Quando **Outlook = rain**

Outlook = rain		Jogar?		
		P	N	
Temperature	hot	0	0	0
	mild	2	1	3
	cool	1	1	2
				5

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

Outlook = rain		Jogar?		
		P	N	
Windy	true	0	2	2
	false	3	0	3
				5

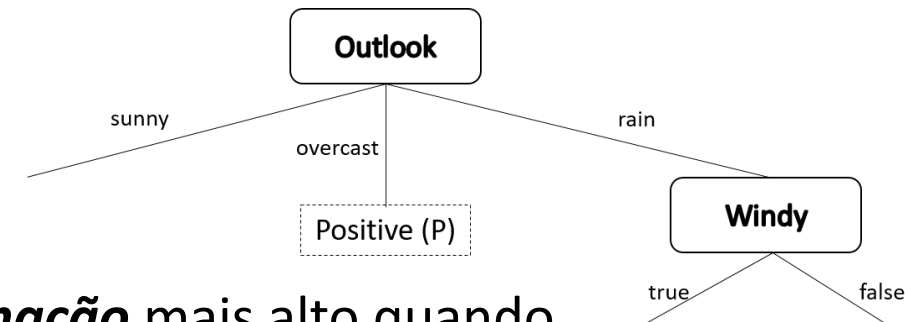
**Entropia do objetivo** para o subconjunto **Outlook = rain**:  $H(y | \text{Outlook} = \text{rain}) = 0.971$

$$\text{Gain}(\text{temperature}) = 0.971 - \left[ \frac{0}{5} B\left(\frac{0}{0}\right) + \frac{3}{5} B\left(\frac{2}{3}\right) + \frac{2}{5} B\left(\frac{1}{2}\right) \right] = 0.02$$

$$\text{Gain}(\text{humidity}) = 0.971 - \left[ \frac{2}{5} B\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{3}{5} B\left(\frac{2}{3}\right) \right] = 0.02$$

$$\text{Gain}(\text{windy}) = 0.971 - \left[ \frac{2}{5} B\left(\frac{0}{2}\right) + \frac{3}{5} B\left(\frac{3}{3}\right) \right] = \boxed{0.971}$$

- Aqui, o atributo **windy** resulta no valor de **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**.



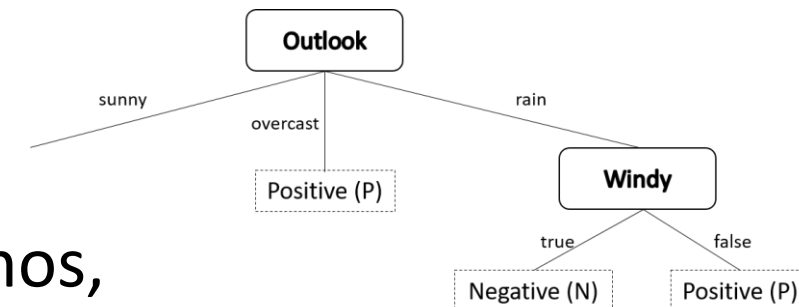
# Indução de uma árvore de decisão com o método ID3

- Se analisarmos o subconjunto onde **Outlook = rain** e **windy = false**, percebemos que a decisão será sempre pela classe **Positiva (P)**. A entropia  $H(y | \text{Outlook} = \text{rain}, \text{windy} = \text{false}) = 0$ .

Day	Attributes				Class (y)
	Outlook	Temperature	Humidity	Windy	
4	rain	mild	high	false	P
5	rain	cool	normal	false	P
10	rain	mild	normal	false	P

- Além disso, a decisão sempre será pela classe Negativa (N) se **Outlook = rain** e **windy = true**. A entropia  $H(y | \text{Outlook} = \text{rain}, \text{windy} = \text{true}) = 1$ .

Day	Attributes				Class (y)
	Outlook	Temperature	Humidity	Windy	
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**.

# Indução de uma árvore de decisão com o método ID3

- Quando **Outlook = sunny**

Outlook = sunny		Jogar?		
		P	N	
Temperature	hot	0	2	2
	mild	1	1	2
	cool	1	0	1
				5

Outlook = sunny		Jogar?		
		P	N	
Humidity	high	0	3	3
	normal	2	0	2
				5

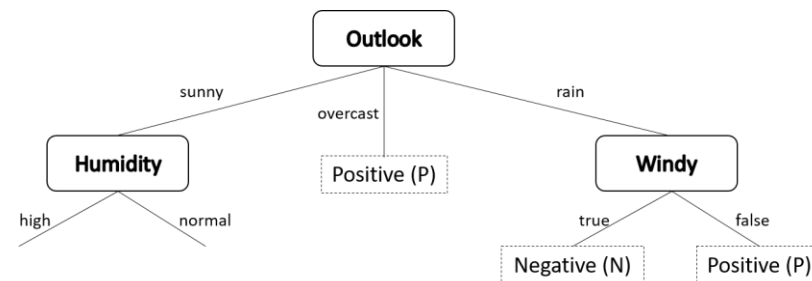
Outlook = sunny		Jogar?		
		P	N	
Windy	true	1	1	2
	false	1	2	3
				5

**Entropia do objetivo** para o subconjunto dado por **Outlook=sunny**:  $H(y \mid \text{Outlook} = \text{sunny}) = 0.971$

$$\text{Gain}(\text{temperature}) = 0.971 - \left[ \frac{2}{5} B\left(\frac{0}{2}\right) + \frac{2}{5} B\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{5} B\left(\frac{1}{1}\right) \right] = 0.570$$

$$\text{Gain}(\text{humidity}) = 0.971 - \left[ \frac{3}{5} B\left(\frac{0}{3}\right) + \frac{2}{5} B\left(\frac{2}{2}\right) \right] = \boxed{0.971}$$

$$\text{Gain}(\text{windy}) = 0.971 - \left[ \frac{2}{5} B\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{3}{5} B\left(\frac{1}{3}\right) \right] = 0.02$$



- 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**.

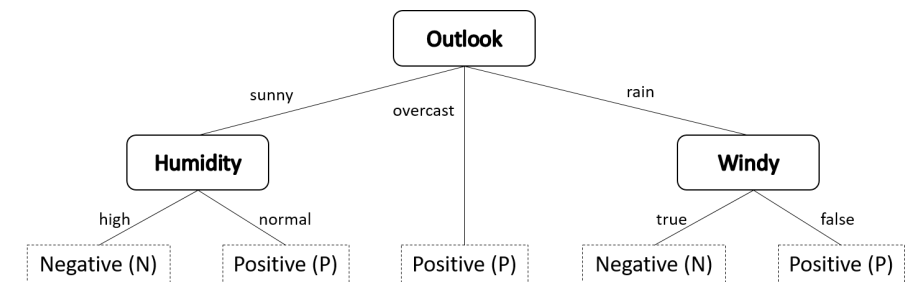
# Indução de uma árvore de decisão com o método ID3

- O decisão sempre será pela classe **Positiva (P)** quando **Outlook = sunny** e **humidity = normal**. A entropia  $H(y | \text{Outlook} = \text{sunny}, \text{humidity} = \text{normal}) = 0$ .

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

- A decisão sempre será pela classe **Negativa (N)** quando **Outlook = sunny** e **humidity = high**. A entropia  $H(y | \text{Outlook} = \text{sunny}, \text{humidity} = \text{high}) = 0$

Day	Attributes				Class (y)
	Outlook	Temperature	Humidity	Windy	
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 para classificar novos exemplos.
- **Algun atributo ficou de fora?** Sim, **Temperature**, indicando que ele não traz informação útil ao problema.

# Para casa

- Façam os exercícios #1, #4 e #6 da lista #7 - Árvores de Decisão.

# Considerações sobre as árvores de decisão

- Embora as **árvores de decisão** sejam poderosos algoritmos de **classificação**, elas apresentam um **longo tempo de treinamento, principalmente quando os atributos são contínuos**.
- Árvores de decisão **precisam de muito pouco pré-processamento dos dados**. Em particular, elas **não necessitam de escalonamento dos atributos**, mas **valores faltantes devem ser tratados de alguma forma**.
- 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 com fronteiras de decisão formadas por hiperplanos**.
  - **Exemplo:** [DTTwoConcentricClassesClassification.ipynb](#)

# Considerações sobre as árvores de decisão

- Quando as *classes não são bem separadas* (i.e., se elas se sobrepõem), *as árvores são suscetíveis a sobreajustar* ao conjunto de treinamento, de modo que a *fronteira de decisão linear* dos *classificadores lineares* separa melhor as classes, apresentando melhor desempenho de *classificação*.
- Para evitar *sobreajuste*, existem duas maneiras:
  1. Limitamos sua profundidade e/ou o número mínimo de amostras necessárias em um nó folha.
  2. Geramos primeiro uma árvore completa e, em seguida, eliminamos alguns ramos (i.e., podamos a árvore).
- **Exemplo:** [DTTTwoOverlappingClassesClassification.ipynb](#)



# Considerações sobre as árvores de decisão

- O **principal problema** das árvores de decisão é que elas são  **muito sensíveis a pequenas variações nos dados de treinamento**  (e.g., rotação).
- Árvores de decisão criam **fronteiras de decisão compostas por trechos perpendiculares aos eixos**, o que as torna **sensíveis à rotação do conjunto de treinamento**.
  - **Exemplo:** [DTSensitivityToTrainingSetRotation.ipynb](#)
- Uma maneira para minimizar esse problema da sensibilidade à rotação é usar a técnica conhecida como **Análise de Componentes Principais (PCA)**, que rotaciona e dimensiona linearmente a matriz de atributos.

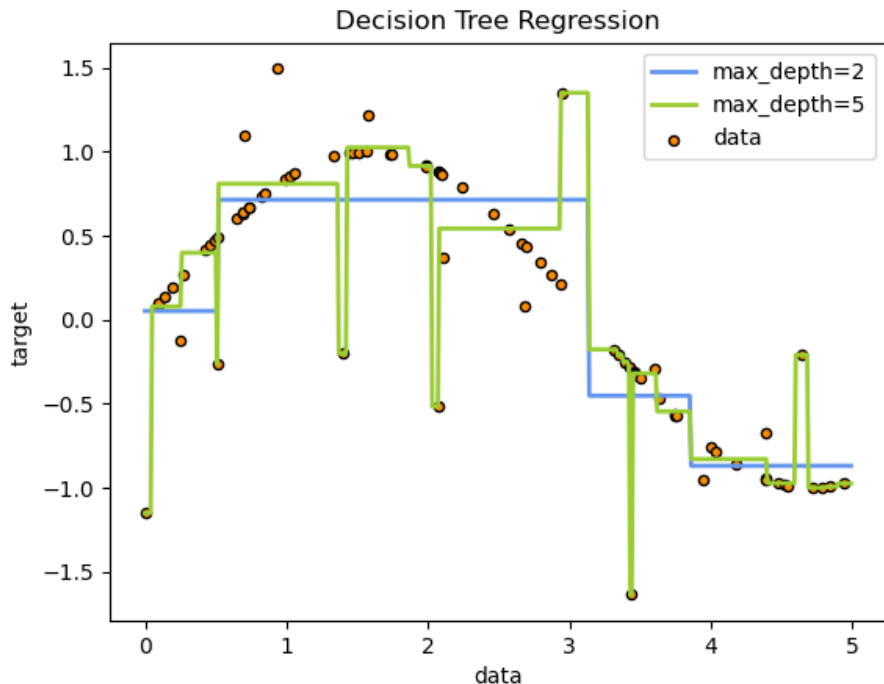
# Considerações sobre as árvores de decisão

- Alguns *algoritmos para inferência de árvores de decisão são estocásticos* (e.g., o CART seleciona aleatoriamente o conjunto de atributos para avaliar em cada nó) e, portanto, *podem gerar árvores completamente diferentes com o mesmo modelo e conjunto de dados, mas sementes aleatórias diferentes*.
  - *Exemplo:* [DTSensitivityToTrainingSetDetails.ipynb](#)
- As *florestas aleatórias* podem limitar essa instabilidade calculando a média ou voto majoritário das previsões feitas por diversas *árvores de decisão*.

# Considerações sobre as árvores de decisão

- Se não for restringida, a **árvore de decisão** se adaptará aos dados de treinamento, ajustando-se muito bem e, provavelmente, se **sobreajustando** a eles.
- Para evitar o **sobreajuste** do modelo, nós precisamos **restringir a liberdade** da árvore de decisão durante o treinamento.
  - Essa restrição pode ser visto como uma forma de **regularização**.
- No Scikit-Learn, a regularização pode ser controlada pelos hiperparâmetros: ***max\_depth***, ***min\_samples\_split***, ***min\_samples\_leaf***, ***min\_weight\_fraction\_leaf***, ***max\_leaf\_nodes*** e ***max\_features***.
- **Exemplo:** [DTRegularizationHyperparameters.ipynb](#)

# Considerações sobre as árvores de decisão



- **Árvores de decisão** também podem ser utilizadas para **regressão**.
  - As **árvores de decisão** também tendem a se **sobreajustar** ao lidar com tarefas de **regressão**.
  - **Exemplo:** [DTNoisyQuadraticDatasetRegression.ipynb](#)
- Predições feitas por **árvores de decisão não são suaves nem contínuas**, mas **aproximações constantes por partes/trechos**, conforme visto na figura ao lado.
- O valor previsto para cada trecho é sempre o **valor médio** dos exemplos **nesse trecho**.

# Avisos

- Nossas duas próximas aulas serão estudos dirigidos sobre ***florestas aleatórias*** (Lista #8) e ***k-Means*** (Lista #9).
- Presença será validada através da entrega das listas.
- Material se encontra no github.

## Material das aulas

---

O material das aulas pode ser encontrado na pasta `slides` e pode ser acessado através dos links abaixo.

1. [Introdução](#)

2. [Regressão Linear](#)

3. [Regressão Não-Linear](#)

4. [Classificação](#)

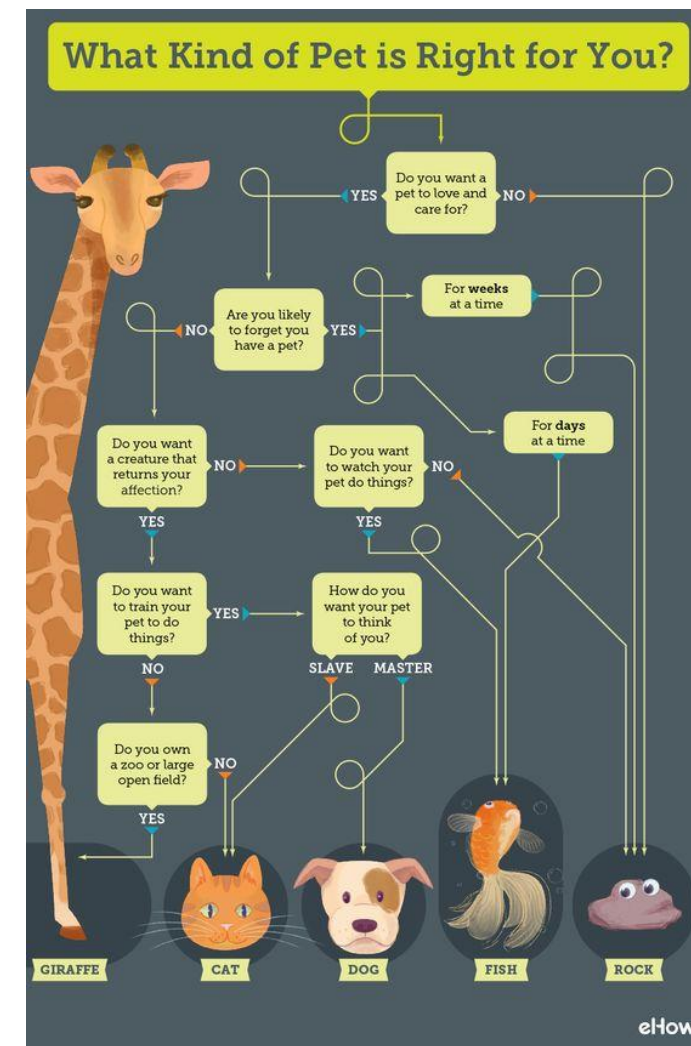
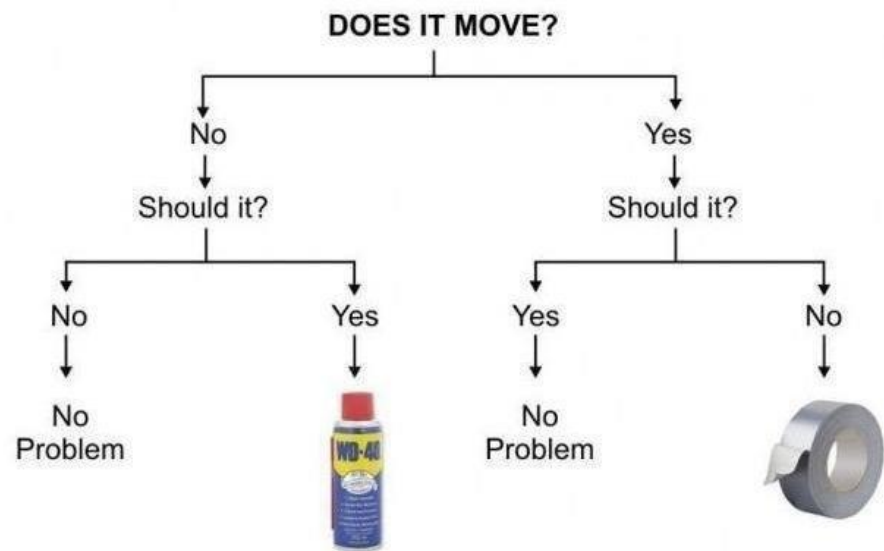
5. [kNN](#)

6. [Decision Trees](#)

→ 7. [Ensemble Learning e Random Forests](#)

→ 8. [k-Means](#)

Obrigado!



# Anexo I: Cálculo da entropia para mais de duas classes



# Cálculo da entropia para mais de duas classes

- Veja a tabela ao lado com os exemplos de treinamento.
- Problema com três classes: 0, 1, e 2. Portanto, o cálculo da entropia terá três termos.
- A **entropia** do objetivo, i.e.,  $y$ , para o conjunto de treinamento é

$$H(y) = - \left[ \frac{2}{4} \log_2 \left( \frac{2}{4} \right) + \left( \frac{1}{4} \right) \log_2 \left( \frac{1}{4} \right) + \left( \frac{1}{4} \right) \log_2 \left( \frac{1}{4} \right) \right] = 1.5$$

- Separando os atributos em tabelas separadas, temos

		Classes (y)			
		0	1	2	
x1	0	1	0	0	1
	1	0	0	1	1
	2	1	1	0	2
					4

		Classes (y)			
		0	1	2	
x2	0	2	0	0	2
	1	0	1	1	2
					4

Atributos		Rótulos
x1	x2	Classe (y)
0	0	0
2	1	1
1	1	2
3	0	0

- O **ganho de informação** de cada atributo é calculado como:

$$Gain(x1) = H(y) - \left\{ \frac{1}{4} H(x1 = 0) + \frac{1}{4} H(x1 = 1) + \frac{2}{4} H(x1 = 2) \right\}$$

$$Gain(x2) = H(y) - \left\{ \frac{2}{4} H(x2 = 0) + \frac{2}{4} H(x2 = 1) \right\}$$

# Cálculo da entropia para mais de duas classes

Como exemplo do cálculo da entropia, vejamos como  $H(x1 = 0)$  deve ser calculado.

$$\begin{aligned}
 H(x1 = 0) &= - \sum_{i=0}^2 p(y = i | x1 = 0) \log_2(p(y = i | x1 = 0)) \\
 &= -[p(y = 0 | x1 = 0) \log_2(p(y = 0 | x1 = 0)) + p(y = 1 | x1 = 0) \log_2(p(y = 1 | x1 = 0)) + \\
 &\quad p(y = 2 | x1 = 0) \log_2(p(y = 2 | x1 = 0))]
 \end{aligned}$$

Assim, os ganhos de informação para  $x1$  e  $x2$  são calculados como

$$\begin{aligned}
 Gain(x1) &= H(y) - \left\{ \frac{1}{4} H(x1 = 0) + \frac{1}{4} H(x1 = 1) + \frac{2}{4} H(x1 = 2) \right\} \\
 &= H(y) - \left\{ \frac{1}{4} \left[ \frac{1}{1} \log_2 \left( \frac{1}{1} \right) \right] + \frac{1}{4} \left[ \frac{1}{1} \log_2 \left( \frac{1}{1} \right) \right] + \frac{2}{4} \left[ \frac{1}{2} \log_2 \left( \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \log_2 \left( \frac{1}{2} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Gain(x2) &= H(y) - \left\{ \frac{2}{4} H(x2 = 0) + \frac{2}{4} H(x2 = 1) \right\} \\
 &= H(y) - \left\{ \frac{2}{4} \left[ \frac{2}{2} \log_2 \left( \frac{2}{2} \right) \right] + \frac{2}{4} \left[ \frac{1}{2} \log_2 \left( \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \log_2 \left( \frac{1}{2} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

**Obs.:**

- $H(0) = 0$
- $H(1) = 0$
- $0 * \log_2(0) = 0$

		Classes (y)			
		0	1	2	
x1	0	1	0	0	1
	1	0	0	1	1
	2	1	1	0	2
					4

		Classes (y)			
		0	1	2	
x2	0	2	0	0	2
	1	0	1	1	2
					4

# Anexo II: Qual a entropia de 0?

# Qual a entropia de 0?

- À primeira vista, pode parecer que  $-x \log_2(x)$  é um valor indeterminado, pois resulta em  $0 \times -\infty$ . Porém, se fizermos uma pequena modificação na equação:

$$H(x) = -x \log_2(x) = -\frac{\log_2(x)}{\frac{1}{x}}.$$

e, na sequência, aplicarmos a regra de L'Hôpital, conseguimos encontrar o valor quando  $x$  se aproxima de zero do lado positivo ( $0_+$ ):

$$\lim_{x \rightarrow 0_+} H(x) = \lim_{x \rightarrow 0_+} -\frac{\frac{1}{x \log_2(2)}}{-\frac{1}{x^2}} = \lim_{x \rightarrow 0_+} \frac{x}{\log_2(2)} = 0.$$

Assim,  $H(x) = 0$ .

Figuras

