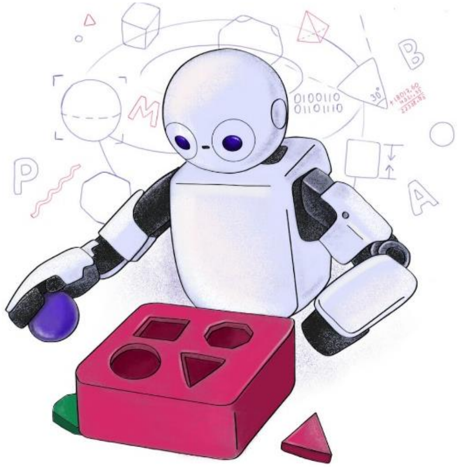
TP555 - Inteligência Artificial e Machine Learning:

Árvores de Decisão



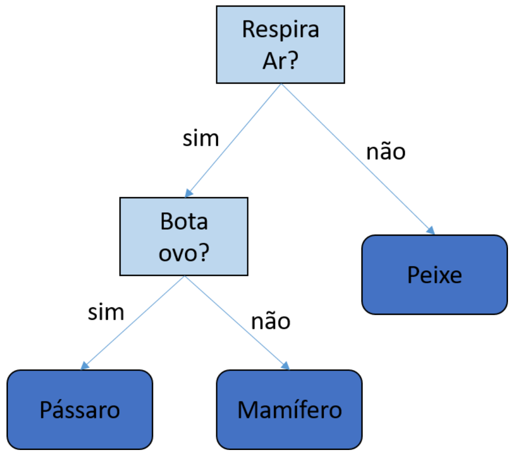
Inatel

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

Árvores de decisão

- Assim como o algoritmo 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***.
    - **Não-paramétrico**: modelo não tem um número fixo de parâmetros, como por exemplo, modelos de regressão linear e logística. Modelo é construído apenas com base nos dados observados e o número de parâmetros tende a crescer com ele (e.g., tamanho da árvore).
    - **Não-linear**: sua fronteira de decisão no espaço de atributos é uma função não-linear, i.e., exemplos não são separados por um ***hiperplano***.
- O objetivo é criar um modelo que prediz o valor de uma variável de saída (e.g., 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.

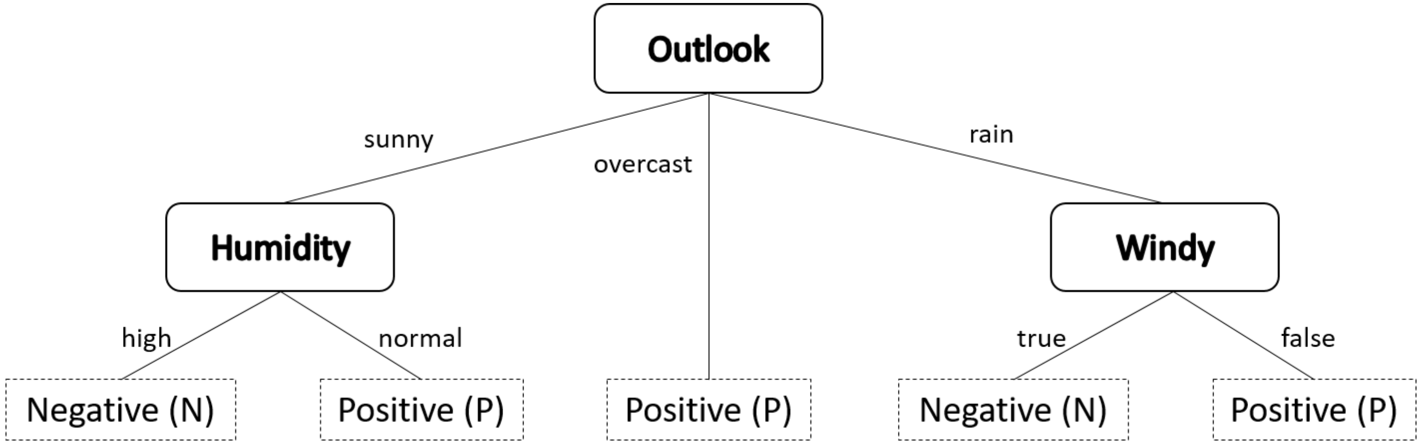
Árvores de decisão



- 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, 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/valor.
- ***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 climáticos diversos para estimar se eles jogarão ou não.
- Cada nó da árvore atua como um ***caso de teste*** para algum atributo, e cada extremidade de um nó, ou seja, uma folha, corresponde a possível classe do exemplo de teste.
- 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 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/regressão e selecionar a mais simples (utilizando a regra da Navalha de Occam). Entretanto, essa abordagem, pode ser computacionalmente muito custosa.
- Existem vários métodos para se induzir árvores: ID3, C4.5, C5.0 e CART.
- Um dos métodos de indução de árvores de decisão mais utilizados é o ***método ID3*** (Iterative Dichotomiser 3).
    - Dicotomização significa dividir-se em duas classes completamente opostas (e.g., exemplos positivos e negativos).
- O ***método ID3***, que discutiremos a seguir, é uma abordagem que ***não garante*** a obtenção da menor árvore possível, mas busca obter árvores apropriadas num intervalo de tempo relativamente curto.
- A metodologia do ***método ID3*** se baseia na ***teoria da informação*** para selecionar o atributo de cada nó da árvore.

O processo de indução de uma árvore de decisão

- A ideia do ***método ID3*** 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 os ***nós 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***.
- A seguir, veremos alguns conceitos úteis para que possamos usar o ***método ID3***.

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 quantidade de ***incerteza*** ou ***aleatoriedade*** de uma variável aleatória (i.e., um conjunto de dados). Portanto, a aquisição de informação corresponde a uma redução na ***entropia***.
- **Exemplo**: 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.

Ganho de informação e entropia

- 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

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

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 objetivo*** (i.e., o rótulo ou saída desejada) para todo o conjunto de treinamento é dada por

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

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

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

- 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 *N* é $n/(p+n)$ ou $1-(p/(p+n))$.

Aprendizado de uma árvore de decisão

- 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 d subconjuntos: $E_1, \dots, E_d$. Cada subconjunto E_i possui p_i exemplos da classe positiva, *P*, e n_i exemplos da classe negativa, *N*.
- Um exemplo escolhido aleatoriamente do conjunto de treinamento tem o *i*-ésimo valor para o atributo x_k com probabilidade $(p_i + n_i)/(p + n)$. Assim, a ***entropia*** restante esperada 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 total*** do conjunto de treinamento, 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 maximizar o ***ganho de informação*** e, então, usar o procedimento recursivamente para cada um dos subconjuntos $E_1, \dots, E_d$. Ou seja, escolhe-se o atributo que gera a primeira ramificação e, então, se repete o processo para construir o restante da árvore.
- O **método ID3** pode ser resumido através da seguinte sequência de passos:
  a) Cálculo da ***entropia*** do objetivo para o conjunto de treinamento ***corrente***.
     - **OBS**.: o conjunto é alterado a cada nova iteração do método ID3 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) 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 de treinamento** 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 a seguir.

Características do método ID3

- O ID3 usa uma abordagem gananciosa (do Inglês, *greedy*), por isso não garante uma solução ideal, podendo ficar preso em mínimos locais.
- O ID3 pode sobreajustar aos dados de treinamento
  - Para evitar o sobreajuste, árvores de decisão menores devem ser preferidas ao invés das maiores.
- Esse método geralmente produz árvores pequenas, mas nem sempre produz a menor árvore possível.
- O ID3 é mais difícil de usar com dados contínuos. Se os valores de qualquer atributo específico forem contínuos, haverá muito mais lugares para dividir os dados nesse 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 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, porém classes diferentes, precisará ser reconsiderado, pois 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***.

Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- 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 $(\boldsymbol{x}_i, d_i)$, onde $\boldsymbol{x}_i$ 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, frio, normal, ausente}.

Exemplo de Árvore de Decisão com 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

Exemplo de Árvore de Decisão com 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 raíz: o ***ganho de informação*** de cada atributo é calculado como

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

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

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

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

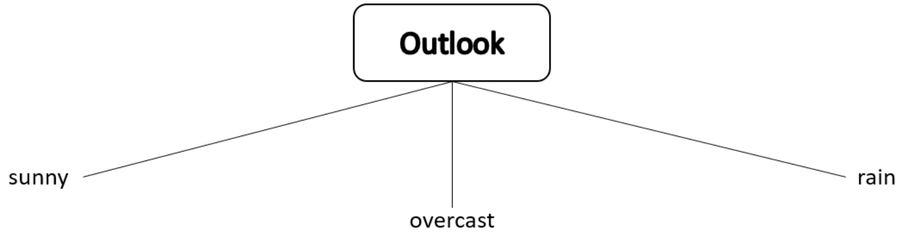
$$Gain(\textbf{outlook}) = 0.9403 - \left[\frac{5}{14}H\left(\frac{2}{5}\right) + \frac{4}{14}H(1) + \frac{5}{14}H\left(\frac{3}{5}\right)\right] = \boxed{0.247}$$

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

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

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

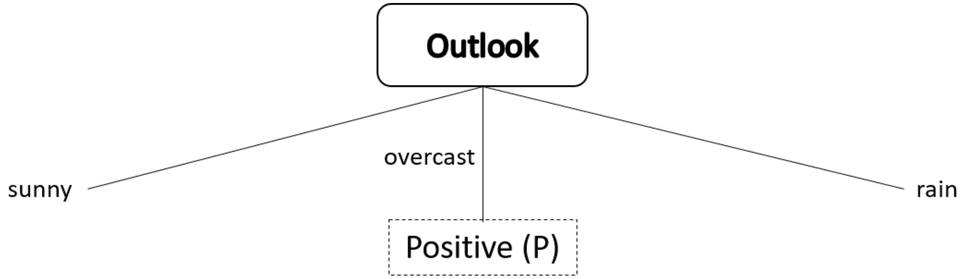
O ***ganho de informação*** é maximizado com o atributo ***outlook***, que é, portanto, escolhido como o nó raíz da árvore.



Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Agora, precisamos testar o conjunto de treinamento para ***subconjuntos*** específicos do atributo do ***Outlook***, ou seja, para cada um de seus possíveis valores (overcast, sunny e rain).
- 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.
- 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



Exemplo de Árvore de Decisão com 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

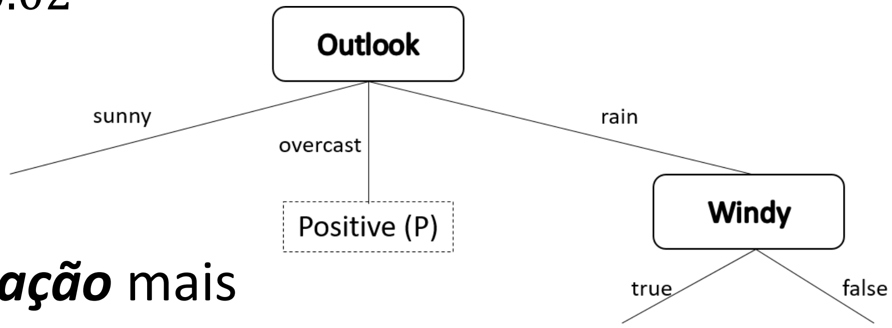
Outlook=rain		**Jogar?**		
		P	N	
Windy	true	0	2	2
	false	3	0	3
				5

Entropia para o subconjunto dado por **Outlook=rain**: $H(y \mid \mathbf{Outlook = rain}) = 0.971$

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

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

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



- 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**.

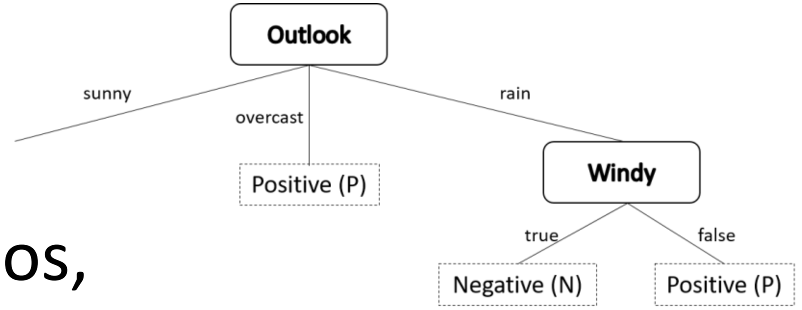
Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Se analisarmos a tabela com ***Outlook = rain*** e **windy = false** percebemos que a decisão será sempre pela classe Positiva (*P*). A entropia H(S|Outlook = rain, windy = 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(S|Outlook = rain, windy = false) = 0.

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***.

Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Quando ***Outlook = sunny***

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

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

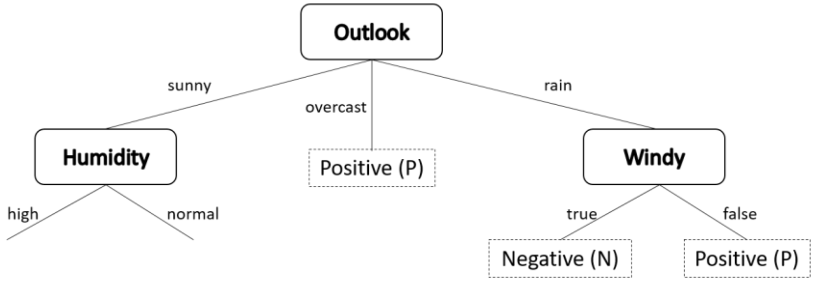
Outlook=sunny		Jogar? P	Jogar? N	
Windy	true	1	1	2
	false	1	2	3
				5

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

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

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

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



- 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***.

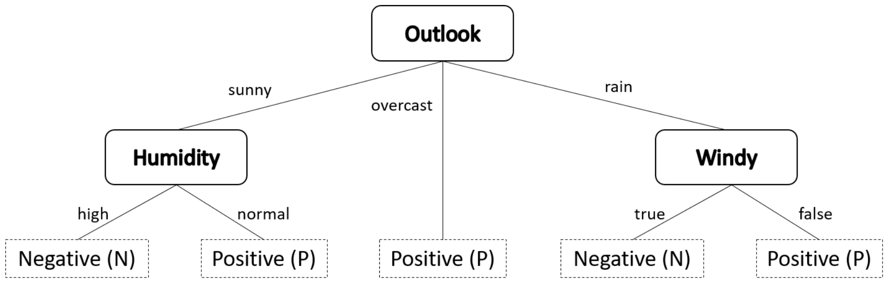
Exemplo de Árvore de Decisão com método ID3

- Após analisarmos a tabela com ***Outlook = sunny*** e ***humidity = normal*** percebemos que a decisão será sempre pela classe Positiva (*P*). A entropia H(S|Outlook = sunny, humidity = normal) = 0.

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

- Além disso, a decisão sempre será pela classe Negativa (*N*) se ***Outlook = sunny*** e ***humidity = high***. A entropia H(S|Outlook = sunny, humidity = 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 por ela para classificar novos exemplos.

Exercício

- Lista de Exercícios #7
  - Exercício #1 (Árvores de Decisão)

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

Para evitar overfitting, existem duas maneiras:
1. paramos de dividir a árvore em algum ponto;
2. geramos primeiro uma árvore completa e, em seguida, eliminamos alguns ramos.

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 criar ***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 (PCA), que rotaciona e dimensiona linearmente a matriz de atributos.
- 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***.

Considerações

- Se não for restringida, a estrutura de uma ***árvore de decisão*** se adaptará aos dados de treinamento, ajustando-se muito bem e, provavelmente, se ***sobreajustando*** a eles.
  - Esse modelo é frequentemente chamado de modelo **não-paramétrico**, não porque não tenha nenhum parâmetro (geralmente tem muitos), mas porque o número de parâmetros não é determinado antes do treinamento, de modo que a estrutura do modelo é livre para se adaptar aos dados.
  - Para evitar o sobreajuste do modelo aos dados de treinamento, nós precisamos restringir (pode ser visto como uma forma de regularização) a liberdade da árvore de decisão durante o treinamento.
  - 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
- ***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

```python
# Import all necessary libraries.
import numpy as np
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.metrics import accuracy_score

# Define the number of examples.
N = 1000
# Create the dataset.
x, y = make_circles(n_samples=N, random_state=42, noise=0.1, factor=0.2)

# Split array into random train and test subsets.
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, random_state=23, test_size=0.2)

# Instantiate classifier.
clf = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy')

# Fit the classifier on the training features and labels.
clf.fit(x_train, y_train)

# Use the trained classifier to predict labels for the test features.
y_pred = clf.predict(x_test)

# Calculate and return the accuracy on the test data
accuracy = accuracy_score(y_test, y_pred)
```

Importa a classe DecisionTreeClassifier.

Cria duas classes concêntricas com a função ***make_circles***.

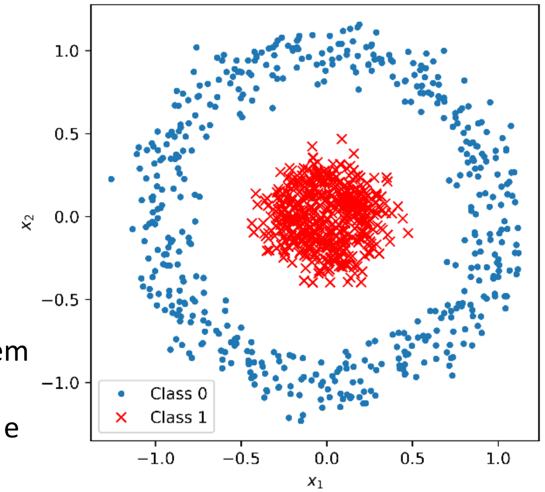
Divide o conjunto em subconjuntos de treinamento (80%) e teste (20%).

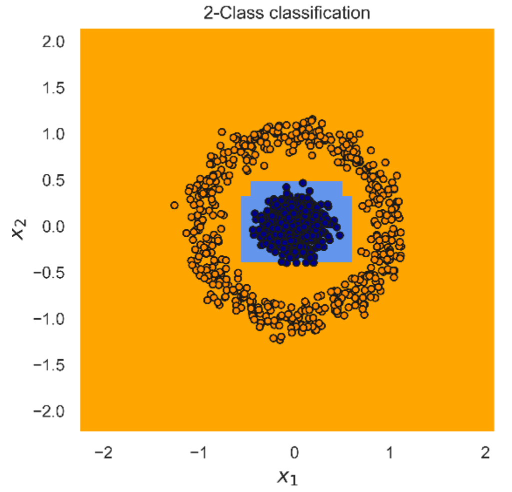
Instancia classificador.
Não suporta atributos categóricos, apenas contínuos

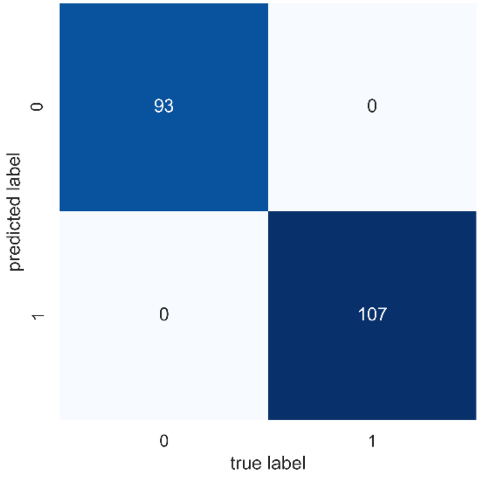
Treina o classificador.

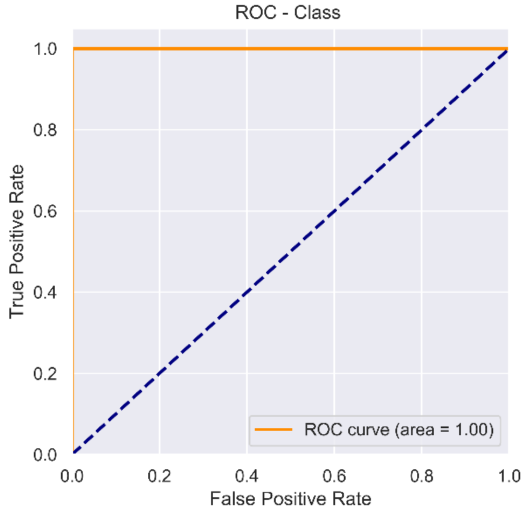
Realiza predição com conjunto de testes.

Calcula a performance do classificador no conjunto de teste.









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

```python
# Import the necessary modules and libraries.
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor
from sklearn.metrics import mean_squared_error
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.datasets import make_regression

# Create datase.
X, y = make_regression(n_samples=1000, n_features=1, n_informative=1, random_state=42, noise=5)

# Split the dataset.
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)

# Set parameters for grid-search.
param_grid = [{'max_depth': [1, 2, 3, 4, 5, 6, None], 'min_samples_leaf': [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]}]

# Instantiate DT class.
reg = DecisionTreeRegressor(random_state=42)
grid_search = GridSearchCV(reg, param_grid, cv=5, verbose=3, n_jobs=-1)

# Find best hyperparameters.
grid_search.fit(X_train, y_train)

# Print best parameters.
print(grid_search.best_params_)

# Predicting with test set.
y_pred = grid_search.predict(X_test)

# Calculate MSE.
mse = mean_squared_error(y_test, y_pred)
```

Importa a classe DecisionTreeRegressor.

Cria dados para a regressão com a função make_regression.

Divide o conjunto em subconjuntos de treinamento (80%) e teste (20%).

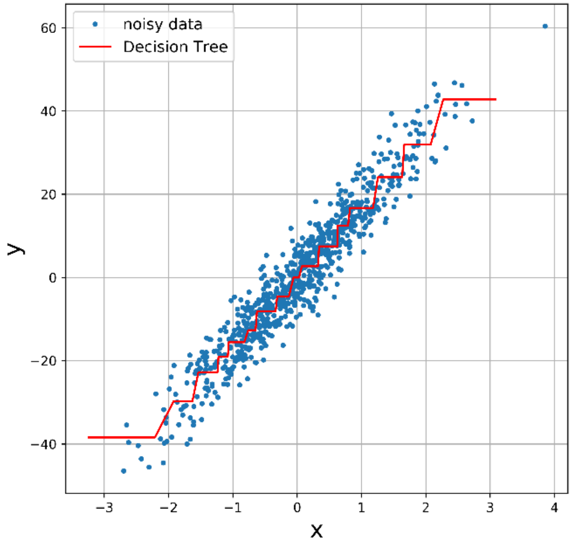
Lista de valores a serem testados.

Executa o grid search.

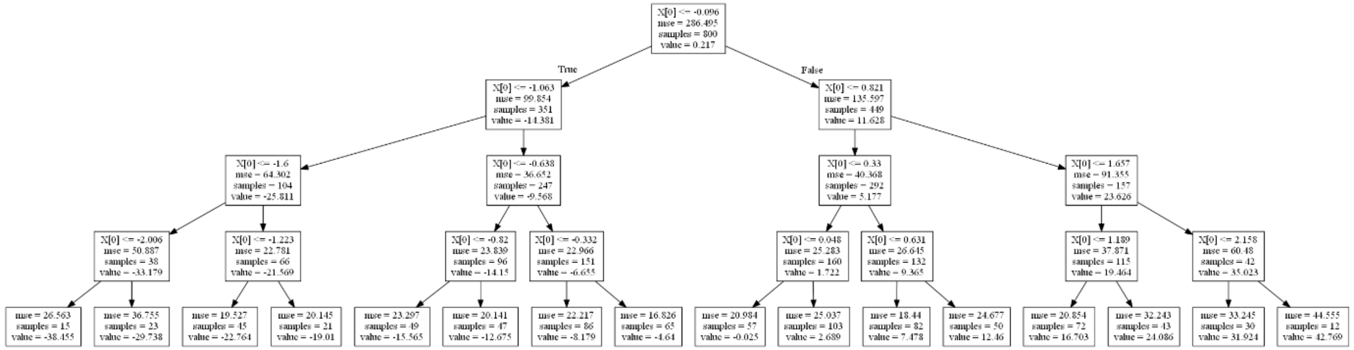
Imprime os valores ótimos dos hiperparâmetros.

Realiza predição com conjunto de testes.

Calcula a performance com conjunto de teste.



Exemplo: DTMakeRegression.ipynb

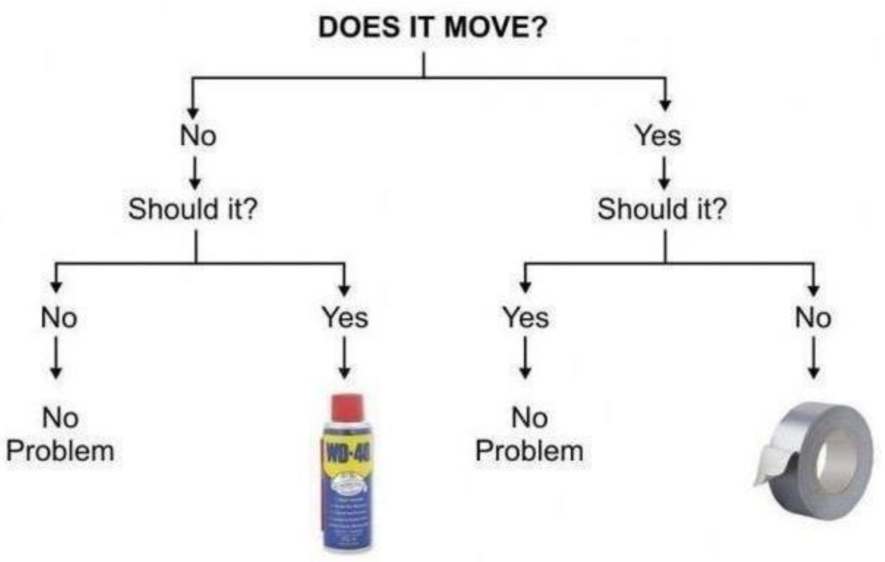


Exemplo de ***regressão*** utilizando ***GridSearch*** para encontrar os valores ótimos para os hiperparâmetros 'max_depth' e 'min_samples_leaf'. As figuras acima mostram os dados ruidosos, a curva de regressão e a árvore de decisão do regressor.

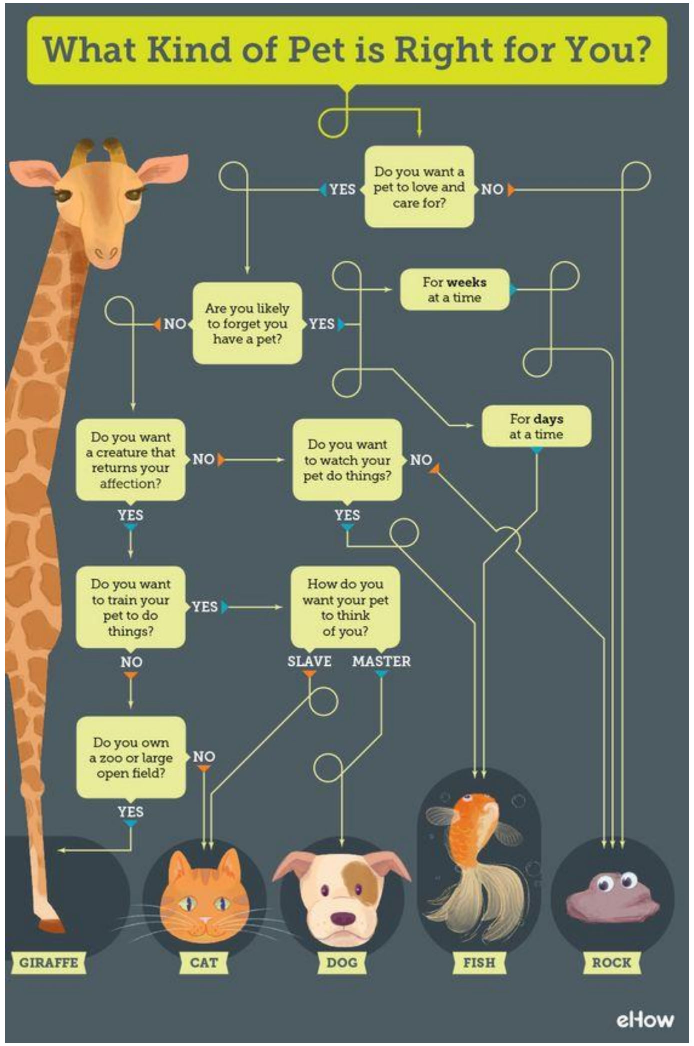
Avisos

- Exemplos já estão disponíveis no site.
- Listas #7 e de revisão para prova #2 já estão disponíveis.
- Estudo dirigido sobre ***florestas aleatórias*** (Lista #8) e ***k-Means*** (Lista #9) na próxima semana.

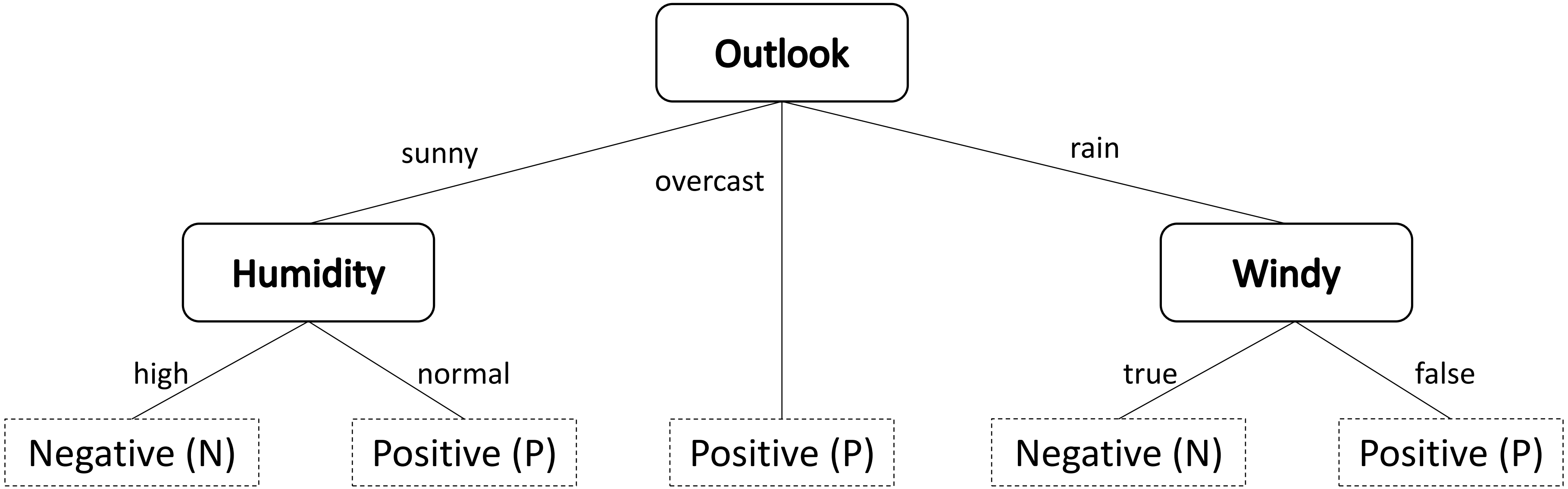
Obrigado!

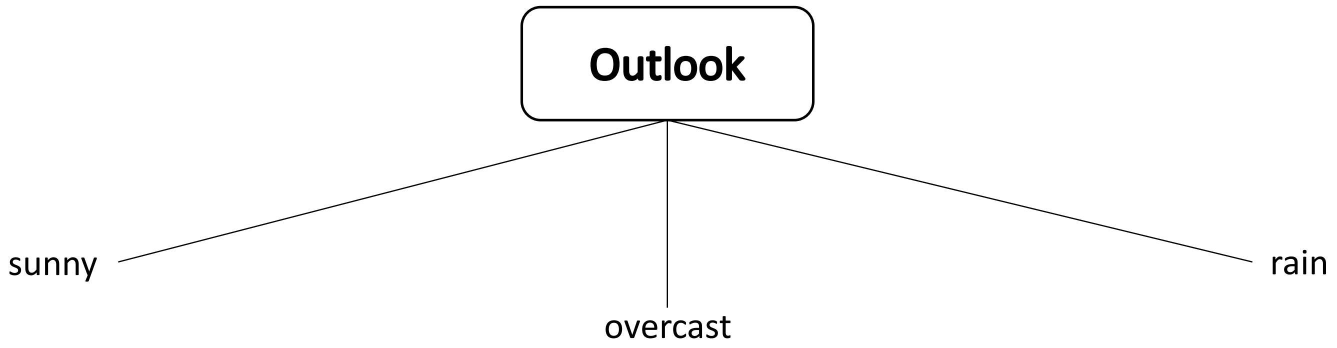

DOES IT MOVE?
No
Yes
Should it?
Should it?
No
Yes
Yes
No
No Problem
WD-40
No Problem

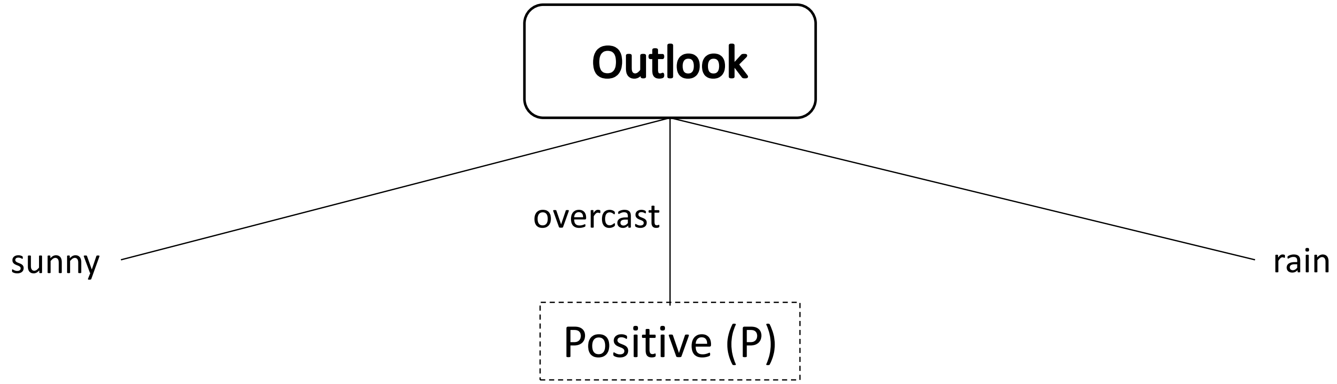

MUST I EXERCISE?
DO I WANT TO GO FOR A JOG?
YES
NO
Did I get enough sleep?
Am I just being lazy?
YES
NO
YES
NO
Am I in sound condition?
Skip it. Do it tomorrow.
Get up. Go.
If you're not sick, go for it.
YES
NO
Rest today.
Do it.

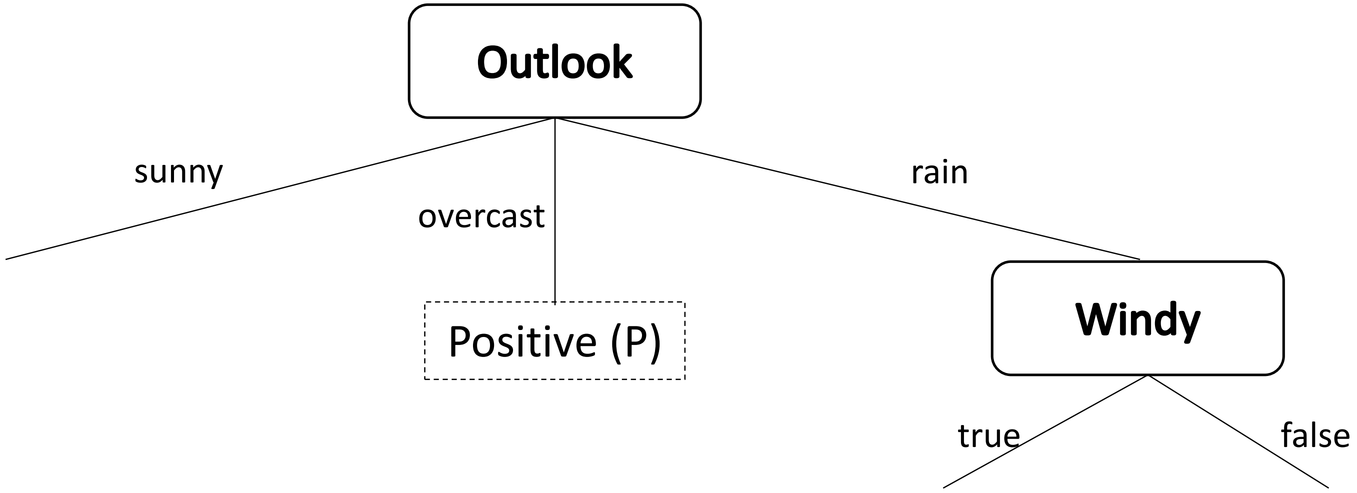

What Kind of Pet is Right for You?
Do you want a pet to love and care for?
YES
NO
Are you likely to forget you have a pet?
NO
YES
For weeks at a time
For days at a time
Do you want a creature that returns your affection?
NO
Do you want to watch your pet do things?
NO
YES
YES
Do you want to train your pet to do things?
YES
How do you want your pet to think of you?
NO
SLAVE
MASTER
Do you own a zoo or large open field?
NO
YES
GIRAFFE
CAT
DOG
FISH
ROCK
eHow

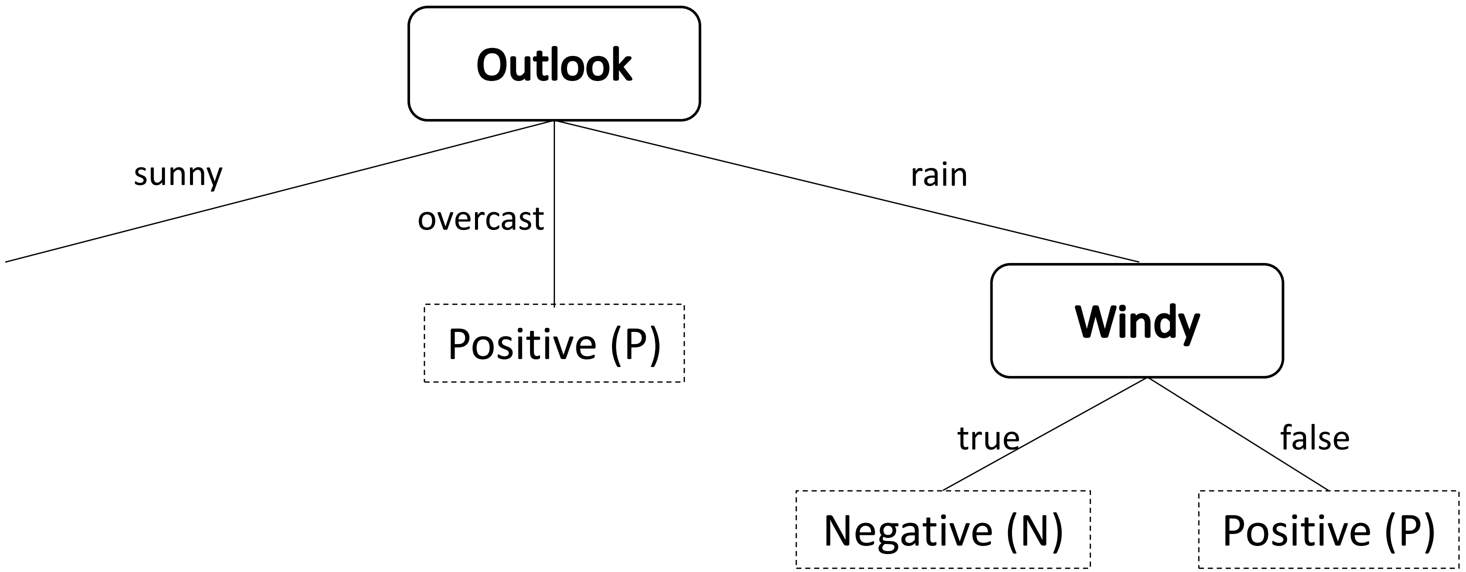
Figuras


Outlook
sunny
overcast
rain
Humidity
Windy
high
normal
true
false
Negative (N)
Positive (P)
Positive (P)
Negative (N)
Positive (P)

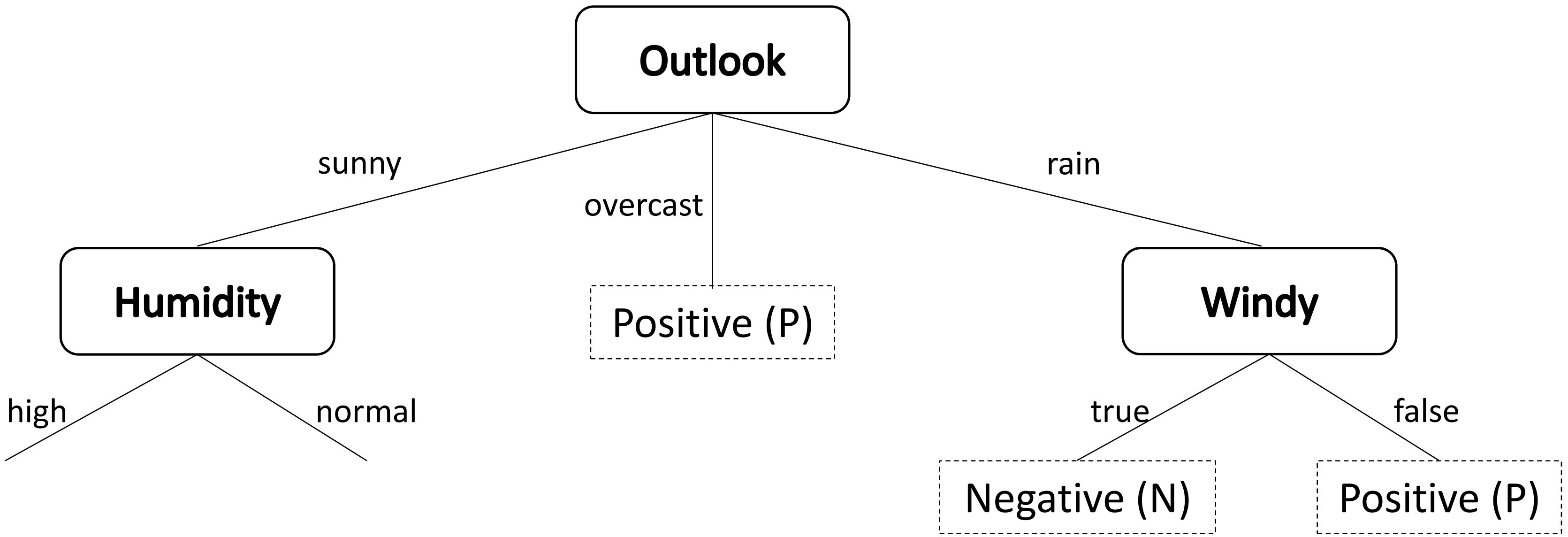

Outlook
sunny
overcast
rain

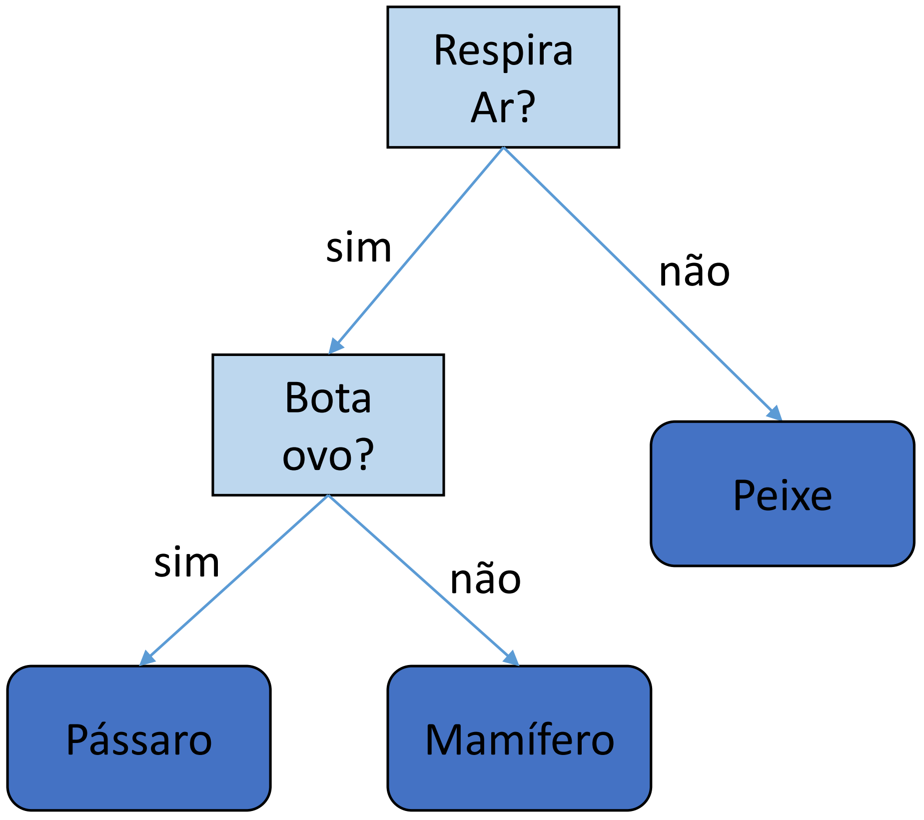

Outlook
overcast
sunny
rain
Positive (P)


Outlook
sunny
overcast
rain
Positive (P)
Windy
true
false



Outlook
sunny
overcast
rain
Positive (P)
Windy
true
false
Negative (N)
Positive (P)


Outlook
sunny
overcast
rain
Humidity
Positive (P)
Windy
high
normal
true
false
Negative (N)
Positive (P)



Respira Ar?
sim
não
Bota ovo?
Peixe
sim
não
Pássaro
Mamífero