

DecisionTreesMAC0459

November 18, 2020

1 Classificação e regressão usando árvores de decisão

1.0.1 Um classificador, ou regressor, muito fácil de interpretar e implementar é a árvore de decisão (DT - Decision Tree). Neste notebook você vai aprender, ou relembrar, o conceito básico de uma árvore de decisão, como ela é induzida e como aplicá-la.

Em Computação, uma árvore é uma estrutura de dados, ou uma forma de estruturar dados, que tem um nó raiz, galhos e nós folhas, como uma árvore de verdade. A forma de representar uma árvore em Computação é desenhando-a de cabeça para baixo, como ilustrado na figura abaixo, onde apresentamos a estrutura organizacional da universidade. Nela, a reitoria é a raiz e as pró-reitorias são as folhas.

```
[2]: from treelib import Node, Tree

arvore = Tree()
arvore.create_node("Reitoria", "reitor") # nó raiz
arvore.create_node("Pró-reitoria de Graduação", "prg", parent="reitor")
arvore.create_node("Pró-reitoria de Pós-Graduação", "prpg", parent="reitor")
arvore.create_node("Pró-reitoria de Pesquisa", "prp", parent="reitor")
arvore.create_node("Pró-reitoria de Cultura e Extensão Universitária", "prce",
↳ "proceu", parent="reitor")
arvore.show()
```

Reitoria

- Pró-reitoria de Cultura e Extensão Universitária
- Pró-reitoria de Graduação
- Pró-reitoria de Pesquisa
- Pró-reitoria de Pós-Graduação

1.0.2 Árvore binária

Árvore binária é um tipo de árvore em que cada nó, que não é folha, pode ter apenas dois “galhos” para outros nós, ou para folhas. A figura abaixo ilustra uma árvore binária. Uma grande vantagem de armazenar elementos em uma árvore é a rapidez com que elas podem ser buscadas depois. Por exemplo, para procurar pelos mamíferos a partir da raiz, perguntamos na raiz se o vertebrado é de Sangue frio. Se for, seguimos para o nó dos vertebrados de sangue frio. Se não for, seguimos para outro nó (pois há no máximo dois nós), que é o caso. Estando no nó dos vertebrados de sangue

quente, perguntamos se o vertebrado é da classe das Aves e Peixes. Como não é, seguimos para o nó dos mamíferos e pronto.

```
[3]: arvore = Tree()
arvore.create_node("Vertebrados", "vert") # nó raiz
arvore.create_node("Sangue quente", "hotb", parent="vert")
arvore.create_node("Sangue frio", "coldb", parent="vert")
arvore.create_node("Mamíferos", "mamm", parent="hotb")
arvore.create_node("Aves/Peixes", "birdfish", parent="hotb")
arvore.create_node("Anfíbios", "anf", parent="coldb")
arvore.create_node("Répteis", "rept", parent="coldb")
arvore.show()
```

```
Vertebrados
  Sangue frio
    Anfíbios
    Répteis
  Sangue quente
    Aves/Peixes
    Mamíferos
```

1.0.3 Quero saber mais sobre árvores

Caso você queira saber mais sobre essa estrutura de dados, procure nas páginas e aulas do prof. Dr. Paulo Feofiloff:

<https://www.ime.usp.br/~pf/>

Caso você queira saber mais sobre esta biblioteca de árvores do Python, a treelib, a documentação está aqui:

<https://treelib.readthedocs.io/en/latest/>

1.0.4 Árvore de decisão binária

Árvore de decisão binária é uma árvore binária onde cada nó, que não é folha, tem associada uma “pergunta”, ou um valor, sobre um determinado atributo/medida do objeto que queremos classificar. Por exemplo, na árvore binária do exemplo anterior, a primeira pergunta estaria associada ao sangue (o sangue é frio?).

Em outras palavras, usar uma árvore de decisão para classificar um objeto é muito simples, basta percorrermos a árvore da raiz para as folhas, respondendo às perguntas associadas a cada nó interno (ou nó que não é folha) da árvore.

Por outro lado, induzir (que é a palavra que usasse para a tarefa de construir uma árvore binária é o problema real que os algoritmos de aprendizado de máquina precisam resolver.

Para ilustrar um algoritmo de indução de árvores de decisão, vamos primeiramente apresentar o conjunto de dados que vamos usar.

Começamos apresentando um conjunto de dados (dataset) muito conhecido da comunidade, o IRIS.

```
[5]: import os
import pydotplus

from sklearn.datasets import load_iris
from IPython.display import Image
```

IRIS é um dataset com 150 medidas de comprimento e largura de pétalas (petal) e sépalas (sepal). A sépala é um tipo de folha que protege a pétala. A figura abaixo mostra um exemplo de uma flor do tipo iris virgínica (fonte: Wikipedia).

```
[6]: from IPython.display import Image
from IPython.core.display import HTML
Image(url= "https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/f/f8/
↳Iris_virginica_2.jpg/240px-Iris_virginica_2.jpg")
```

```
[6]: <IPython.core.display.Image object>
```

A figura abaixo mostra um exemplo de uma flor do tipo iris setosa (fonte: Wikipedia).

```
[7]: Image(url= "https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/5/56/
↳Kosaciec_szczecinkowaty_Iris_setosa.jpg/
↳180px-Kosaciec_szczecinkowaty_Iris_setosa.jpg")
```

```
[7]: <IPython.core.display.Image object>
```

A figura abaixo mostra um exemplo de uma flor do tipo iris versicolor (fonte: Wikipedia).

```
[8]: Image(url= "https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/2/27/
↳Blue_Flag%2C_Ottawa.jpg/240px-Blue_Flag%2C_Ottawa.jpg")
```

```
[8]: <IPython.core.display.Image object>
```

A figura abaixo mostra a diferença entre a sépala e a pétala em uma flor (fonte: Wikipedia). Note que, na flor iris, a sépala é, em geral, maior que a pétala e parece-se muito com uma pétala.

```
[9]: Image(url= "https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/7/78/
↳Petal-sepal.jpg/226px-Petal-sepal.jpg")
```

```
[9]: <IPython.core.display.Image object>
```

```
[22]: # O conjunto iris pode facilmente ser carregado usando o seguinte comando.

iris = load_iris()
```

```
[11]: # Estes são as primeiras dez linhas da matriz de dados de quatro colunas do
↳iris.

print(iris.data[1:10])
```

```
[[4.9 3.  1.4 0.2]
 [4.7 3.2 1.3 0.2]
 [4.6 3.1 1.5 0.2]
 [5.  3.6 1.4 0.2]
 [5.4 3.9 1.7 0.4]
 [4.6 3.4 1.4 0.3]
 [5.  3.4 1.5 0.2]
 [4.4 2.9 1.4 0.2]
 [4.9 3.1 1.5 0.1]]
```

```
[12]: # Estes são as primeiras dez linhas da matriz de rótulos do iris.
```

```
print(iris.target[1:10])
```

```
[0 0 0 0 0 0 0 0 0]
```

```
[13]: # Estes são os nomes dos rótulos (que são os nomes dos tipos das flores).
```

```
print(iris.target_names)
```

```
['setosa' 'versicolor' 'virginica']
```

```
[14]: # Estes são os nomes dos atributos (e as respectivas unidades de medida) de
      ↪ cada uma das colunas do iris.
```

```
print(iris.feature_names)
```

```
['sepal length (cm)', 'sepal width (cm)', 'petal length (cm)', 'petal width
(cm)']
```

Para facilitar a explicação, de um algoritmo de indução de árvores de decisão, vamos começar com o problema de separar apenas duas classes de iris, setosa e versicolor. Para isso, vamos tomar apenas os valores do conjunto de dados cujos targets são 0 e 1.

```
[15]: # Criamos um conjunto X com apenas as linhas correspondentes às classes setosa
      # e versicolor e um conjunto Y com os respectivos rótulos.
```

```
X = iris.data[(iris.target==0)|(iris.target==1),:]
```

```
Y = iris.target[(iris.target==0)|(iris.target==1)]
```

```
# Vamos fazer um gráfico do comprimento vs largura das pétalas
```

```
import matplotlib as mpl
```

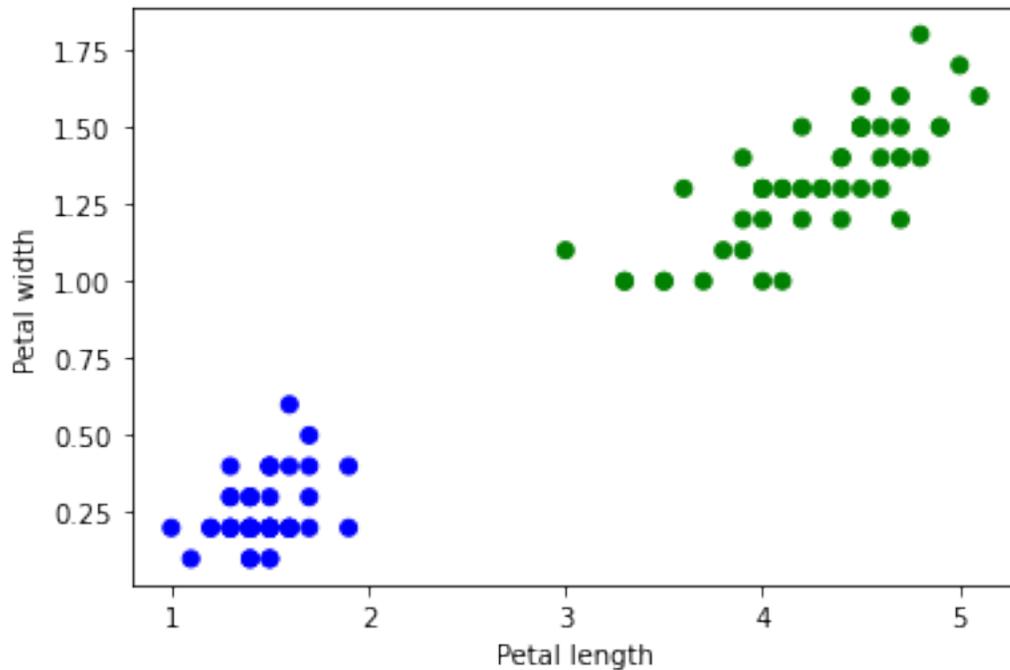
```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
colors = ['blue', 'green']
```

```
plt.scatter(X[:,2], X[:,3], c=Y, cmap=mpl.colors.ListedColormap(colors))
```

```
plt.xlabel('Petal length')
```

```
plt.ylabel('Petal width')
plt.show()
```



É fácil ver que basta olhar para o comprimento da pétala para separar as duas classes com apenas uma pergunta que poderia ser (escolheremos um valor arbitrário para o comprimento da pétala):
If $X[i,2] > 2.5$: classe = 0 else: classe = 1

Uma outra forma seria examinar a largura da pétala e escolher o valor, digamos 0.75:

Em ambos os casos temos uma forma heurística de induzir uma árvore de decisão e que resultam em uma árvore com apenas um nó raiz e nesse nó temos uma pergunta sobre apenas uma característica que é o comprimento, ou a largura, da pétala. Todos os dados do conjunto seriam separados perfeitamente em dois nós folha.

A forma heurística não é interessante e precisamos de uma outra estratégia que induza a árvore sem necessidade de auxílio humano, ou gráfico.

Algoritmo para indução de uma árvore de decisão binária Existem muitas formas de induzir uma árvore de decisão e a forma mais intuitiva é um algoritmo recursivo que, a cada nó, que não um nó folha, particiona (em duas partes/subconjuntos) o conjunto de treinamento de acordo com algum critério que minimiza a impureza de cada subconjunto.

Um algoritmo recursivo é formado por duas partes importantes: a base e o passo da recursão. A base da recursão é fundamental, senão o algoritmo não pára. O passo da recursão faz as vezes do laço (“loop”) num algoritmo não recursivo.

Para facilitar o entendimento, vamos chamar de X o conjunto de objetos $x \in \mathcal{R}^d$ que desejamos

classificar. A cada $x \in \mathcal{X}$, está associado um rótulo $y \in Y$, $Y \in \mathcal{Z}$.

Vamos denominar por $x_i \in R$ a cada uma das características (medidas) de x na dimensão i . Dessa forma, $x = \{x_1, x_2, \dots, x_d\}$.

Desta forma, dado um conjunto de objetos $X \in R^d$, como no caso do exemplo do iris reduzido a duas classes acima, podemos particionar X em dois subconjuntos:

$$X_R = \{x \in X | x_2 \leq 2.5\} \text{ e } X_L = \{x \in X | x_2 > 2.5\}$$

Neste notebook trataremos apenas das árvores binárias transversais, isto é, cada nó está associado a uma pergunta sobre apenas uma característica.

Medida de impureza Um outro elemento fundamental no algoritmos de indução é a medida de impureza que será usada para decidir que valor será usado como limiar para o particionamento do conjunto. Essa medida tem que refletir, de alguma forma, a mistura de rótulos num determinado subconjunto. O objetivo, então, é achar uma característica x_i e um valor para ser aplicado a x_i que particione o conjunto em dois subconjuntos X_R e X_L , de forma a tornar os subconjuntos mais puros e ter um ganho na medida de impureza. Matematicamente, se denotarmos por I essa medida, queremos otimizá-la de tal forma que:

$$\Delta I(X) = I(X) - P_L I(X_L) - P_R I(X_R) = I(X) - P_L I(X_L) - (1 - P_L) I(X_R)$$

Onde P_L (P_R) é a proporção de elementos de X que estão no conjunto X_L (X_R). Note que $P_R = 1 - P_L$.

Quanto maior o $\Delta I(X)$, melhor o particionamento. Pense sobre isso!

Algoritmo DT em alto nível de abstração entrada: X , # conjunto de dados Y , # conjunto de rótulos I , # medida de impureza

saída: Árvore de decisão

DT(X, Y, I):

cria novo node # nó

if X é puro:

 retorna o node (nó folha) que representa X

else:

 encontre a partição $X = X_L \cup X_R$ que dê o maior ganho de pureza

 node.left = DT(X_L)

 node.right = DT(X_R)

retorna node

A entropia como medida de impureza Antes de demonstrar o algoritmo, vamos apresentar uma medida de impureza e fazer a conta que o algoritmo faria na mão.

Entropia é uma medida cuja história é, por si, muito interessante. No contexto de Teoria da Informação, ela foi inicialmente proposta por Claude Shannon no artigo “A Mathematical Theory of Communication”:

<https://ieeexplore.ieee.org/document/6773024>

Em teoria da informação, há duas atoras importantes: a fonte e a receptora da mensagem. A ideia de Shannon era criar uma medida de informação que refletisse o quão surpreendente era uma mensagem para a receptora. Quanto mais surpreendente, ou menos provável, for a mensagem, mais informação ela carrega. Por outro lado, quanto mais provável for a mensagem, menos surpreendente ela será e menos informação ela carrega. Matematicamente, se denotarmos por H a medida de informação e por p a medida de probabilidade (note que estamos tratando de eventos discretos), matematicamente teríamos:

$$H(m) \propto \frac{1}{p(m)}$$

Uma outra propriedade que Shannon queria dessa medida é que, se a fonte mandasse duas mensagens diferentes, digamos m_1 e m_2 , a medida da informação das duas mensagens conjuntas, isto é, $m_1.m_2$ fosse a soma das medidas de informação m_1 e m_2 . Matematicamente:

$$H(m_1.m_2) \propto H(m_1) + H(m_2)$$

Como é sabido, o logaritmo é o funcional que leva uma função produto a uma função soma, assim, a medida de entropia de um conjunto $M = \{m_1, m_2, \dots, m_n\}$ de mensagens, usualmente denotada por H , é definida como uma média (por isso o produto pela probabilidade) da medida de informação de cada mensagem do conjunto M :

$$H(M) = \sum_{i=1}^n -p(m_i) \log p(m_i)$$

Uma propriedade importante da entropia é que ela é um valor entre 0 e 1.

Exemplo usando os dados Vamos fazer a conta da entropia para três valores de largura de pétala e três de comprimento de pétala.

Para a largura da pétala, vamos escolher arbitrariamente os valores 0.4, 0.8 e 1.2.

```
[23]: from math import log2

print(X[:,3])

# Entropia do conjunto X[:,3]
H = -50/100 * log2(50/100) - 50/100 * log2(50/100)
print("Entropia do conjunto X[:,3] =", H)

# Vamos particionar X[:,3] em 0.4 :
index04 = (X[:,3]<=0.4)
print(index04)
nSetosa04 = sum(Y[index04]==0)
nO4R = sum(index04)
nVersicolor04 = sum(Y[~index04])
nO4L = sum(~index04)

print(Y[index04])
print(Y[~index04])
print("Número de flores iris setosa com largura de pétala menor, ou igual a 0.4,
↪=", nSetosa04)
```


Número de flores iris setosa com largura de pétala menor, ou igual a 1.2 = 50
Número de flores com largura de pétala menor, ou igual a 1.2 = 65
Número de flores iris versicolor com largura de pétala maior que 1.2= 35
Número de flores com largura de pétala maior que 1.2 = 35
H12R = 0.7793498372920851
H12L = -0.0
DeltaH12 = 0.49342260576014474

Desta maneira, comparando os três deltas, o melhor particionamento dentre esses três seria o 0.8.

Exercício, faça o mesmo para o comprimento da pétala. Para isso, escolha “Insert” no menu e “Insert Cell Bellow”. Depois, copie o conteúdo da célula anterior na célula criada e refaça as contas para o valor do comprimento da pétala.

1.0.5 Vamos agora usar o pacote sklearn e a classe tree para fazer o mesmo problema.

```
[27]: # Importa a classe tree
from sklearn import tree
from sklearn.metrics import accuracy_score

# Cria um objeto decision tree com a medida de impuridade entropy
clf = tree.DecisionTreeClassifier("entropy")

# Ajusta o classificador sobre o conjunto de dados rotulados
clf.fit(X, Y)

# Calcula o erro do classificador nos dados de treinamento
Ypredicted = clf.predict(X)

print("Acurácia =", accuracy_score(Y, Ypredicted)*100, " por cento, como esperado.")

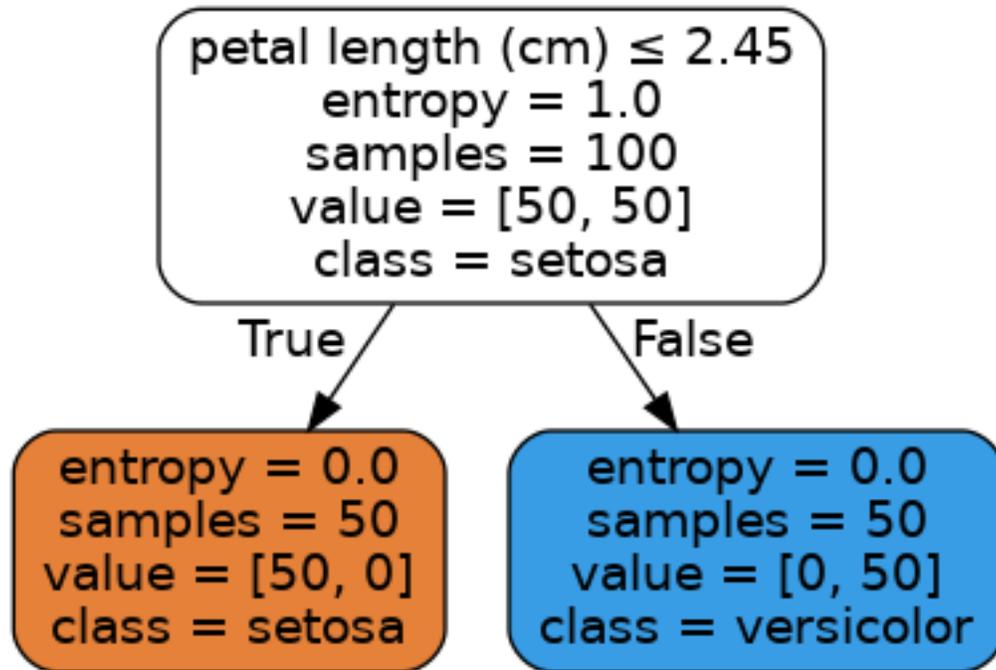
# Apresenta a árvore
# Código copiado de um exemplo da biblioteca

dot_data = tree.export_graphviz(clf, out_file=None,
                                feature_names=iris.feature_names,
                                class_names=iris.target_names,
                                filled=True, rounded=True,
                                special_characters=True)
graph = pydotplus.graph_from_dot_data(dot_data)
Image(graph.create_png())
```

```
/usr/local/anaconda3/lib/python3.8/site-packages/sklearn/utils/validation.py:67:
FutureWarning: Pass criterion=entropy as keyword args. From version 0.25 passing
these as positional arguments will result in an error
  warnings.warn("Pass {} as keyword args. From version 0.25 "
```

Acurácia = 100.0 por cento, como esperado.

[27]:



```
[28]: # Vamos fazer o mesmo para o conjunto todo do Iris. Note como a árvore fica
      ↪ mais profunda
      # por conta da mistura de classes.

X = iris.data
Y = iris.target

# Cria um objeto decision tree com a medida de impuridade entropy
clfAll = tree.DecisionTreeClassifier("entropy")

# Ajusta o classificador sobre o conjunto de dados rotulados
clfAll.fit(X, Y)

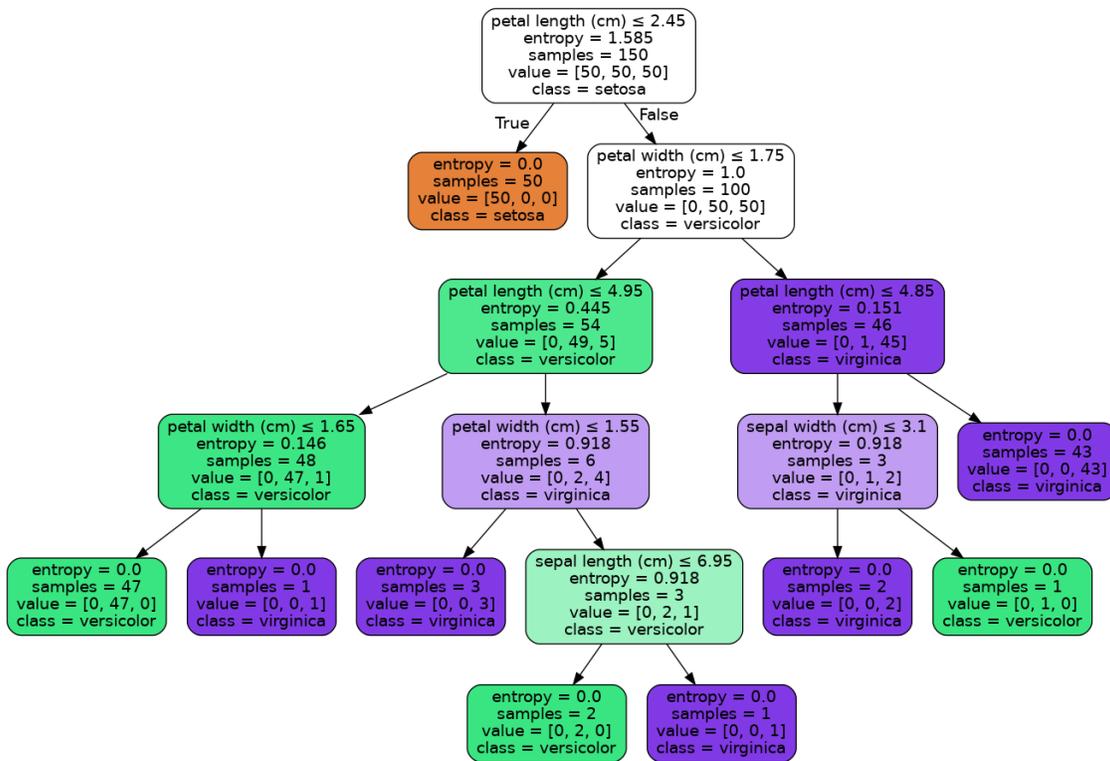
# Apresenta a árvore
# Código copiado de um exemplo da biblioteca

dot_data = tree.export_graphviz(clfAll, out_file=None,
                                feature_names=iris.feature_names,
                                class_names=iris.target_names,
                                filled=True, rounded=True,
                                special_characters=True)
graph = pydotplus.graph_from_dot_data(dot_data)
Image(graph.create_png())
```

/usr/local/anaconda3/lib/python3.8/site-packages/sklearn/utils/validation.py:67:

FutureWarning: Pass criterion=entropy as keyword args. From version 0.25 passing these as positional arguments will result in an error
 warnings.warn("Pass {} as keyword args. From version 0.25 "

[28]:



[30]:

```

# Vamos refazer o mesmo exemplo anterior, mas agora vamos limitar
# a profundidade da árvore e calcular o erro nos dados de treinamento.
# Esta é uma forma usual para regularizar o problema da indução da árvore.

X = iris.data
Y = iris.target

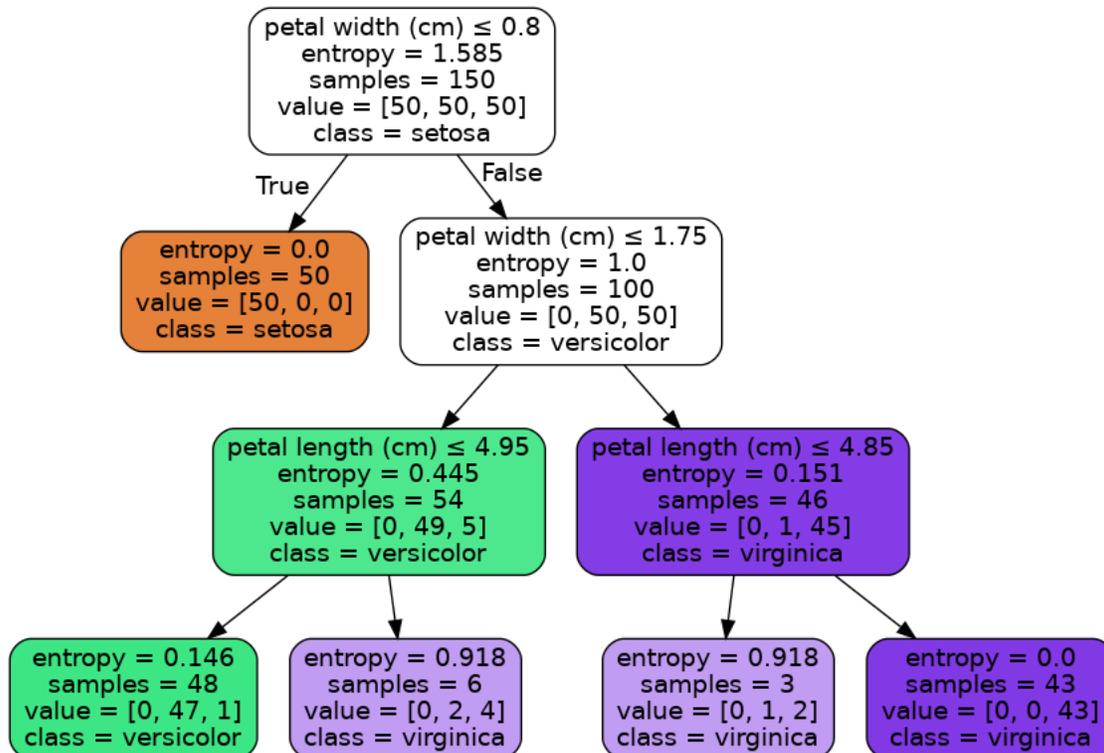
# Cria um objeto decision tree com a medida de impuridade entropy
clfAll = tree.DecisionTreeClassifier("entropy",max_depth=3)

# Ajusta o classificador sobre o conjunto de dados rotulados
clfAll.fit(X, Y)

# Calcula o erro do classificador nos dados de treinamento
Ypredicted = clfAll.predict(X)

print(Y,Ypredicted)

```

Exercício: Experimente refazer o exercício, agora limitando o número de folhas. Para isso, escolha “Insert” no menu e “Insert Cell Bellow”. Depois, copie o conteúdo da célula anterior na célula criada e troque `max_depth`, por `max_leaf_nodes`.

Visualizando as superfícies de decisão No exemplo abaixo, o notebook apresenta as superfícies de decisão encontradas pelo classificador, induzindo-o par a par de características e, depois, classificando pontos do espaço (2D) formado pelo par escolhido. A escolha dos pontos a serem classificados é feita usando o método `meshgrid` do `numpy`, que gera um conjunto de pontos no plano, que não necessariamente correspondem a um objeto real, e classifica-o. Esse mapa de pontos é, então, pintado para a visualização das regiões onde um objeto com aqueles valores de características seria classificado.

```
[31]: # PRECISA ACERTAR A VISUALIZAÇÃO DESTES GRÁFICOS QUE A SEPARAÇÃO NÃO FICOU BOA

import numpy as np

n_classes = 3
plot_colors = "bry"
plot_step = 0.02

# Induz o classificador para cada par de características.
```

```

for pairidx, pair in enumerate([[0, 1], [0, 2], [0, 3],
                                [1, 2], [1, 3], [2, 3]]):

    # X agora é um conjunto com apenas as características do par.
    X = iris.data[:, pair]
    Y = iris.target

    # Induz o classificador com X e Y como dados e rótulos.
    clf = tree.DecisionTreeClassifier().fit(X, Y)

    # Plot the decision boundary
    plt.subplot(2, 3, pairidx + 1)

    x_min, x_max = X[:, 0].min() - 1, X[:, 0].max() + 1
    y_min, y_max = X[:, 1].min() - 1, X[:, 1].max() + 1
    xx, yy = np.meshgrid(np.arange(x_min, x_max, plot_step),
                          np.arange(y_min, y_max, plot_step))

    # Classifica os pontos da grade gerada e apresenta-os no gráfico
    Z = clf.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
    Z = Z.reshape(xx.shape)
    cs = plt.contourf(xx, yy, Z, cmap=plt.cm.Paired)

    # Escolhe o lugar da figura onde vai ficar o gráfico
    plt.xlabel(iris.feature_names[pair[0]])
    plt.ylabel(iris.feature_names[pair[1]])
    plt.axis("tight")

    # Coloca os pontos de treinamento no gráfico
    for i, color in zip(range(n_classes), plot_colors):
        idx = np.where(Y == i)
        plt.scatter(X[idx, 0], X[idx, 1], c=color, label=iris.target_names[i],
                    cmap=plt.cm.Paired)
    plt.axis("tight")

plt.suptitle("Decision surface of a decision tree using paired features")
plt.legend()
plt.show()

```

Decision surface of a decision tree using paired features

