Tema 06

Árvores de Decisão /

Random Forests

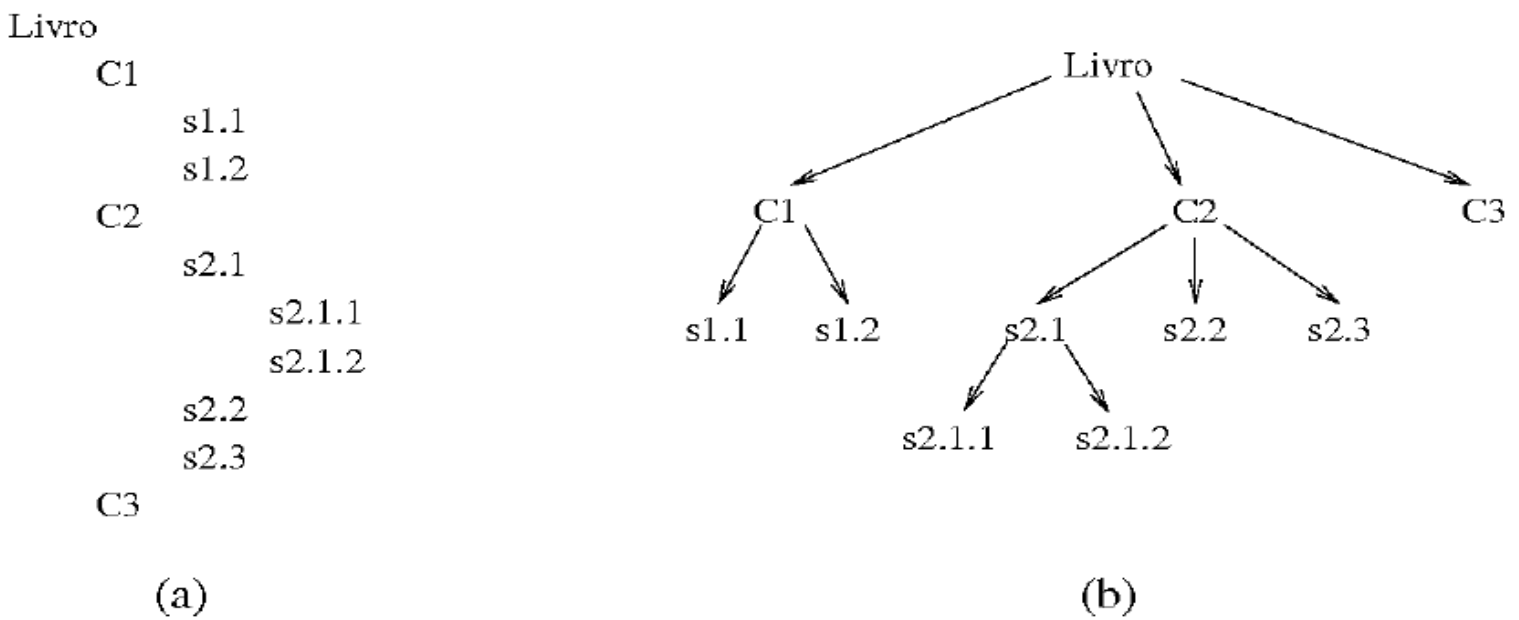
Professora:
Ariane Machado Lima

Vídeo 1

Definição de Árvores de Decisão

Terminologia Básica de Árvores

- Nós, raiz, pai, filhos, arestas
- Subárvore
- Caminho, ancestral/descendente
- Folhas/nós terminais, nós internos/não-terminais



Exemplo: Sumário de um livro (a) e sua respectiva representação como uma árvore (b)

Ávore de Decisão - Definição

Uma *Árvore de Decisão* é:

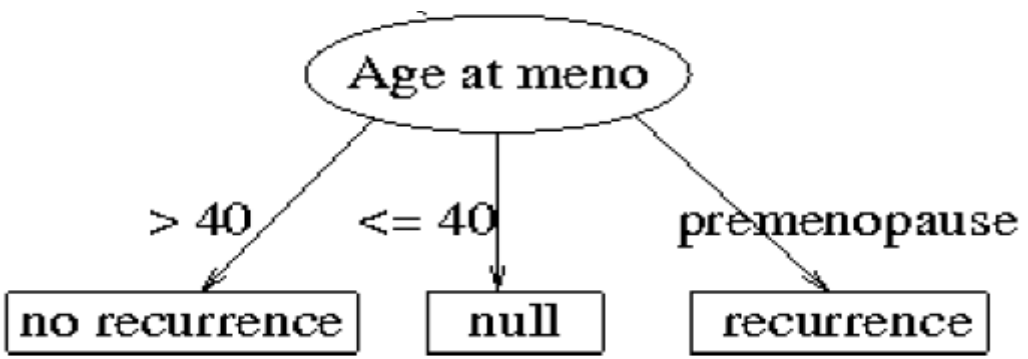
- um nó folha (ou nó resposta) que contém o nome de uma classe ou o símbolo *nulo* (*nulo* indica que não é possível atribuir nenhuma classe ao nó por não haver nenhum exemplo que corresponda a esse nó); ou

no recurrence

Ávore de Decisão - Definição

Uma *Árvore de Decisão* é:

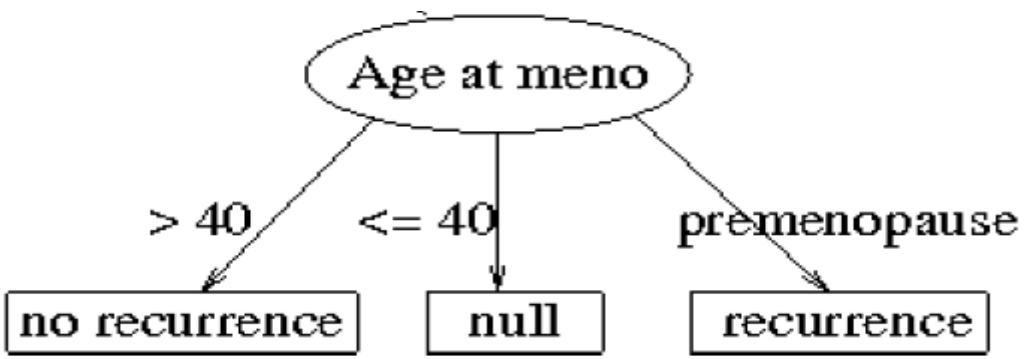
- um nó folha (ou nó resposta) que contém o nome de uma classe ou o símbolo *nulo* (*nulo* indica que não é possível atribuir nenhuma classe ao nó por não haver nenhum exemplo que corresponda a esse nó); ou
- um nó interno (ou nó de decisão) que contém o nome de um atributo; para cada possível valor do atributo, corresponde um ramo para uma outra árvore de decisão.



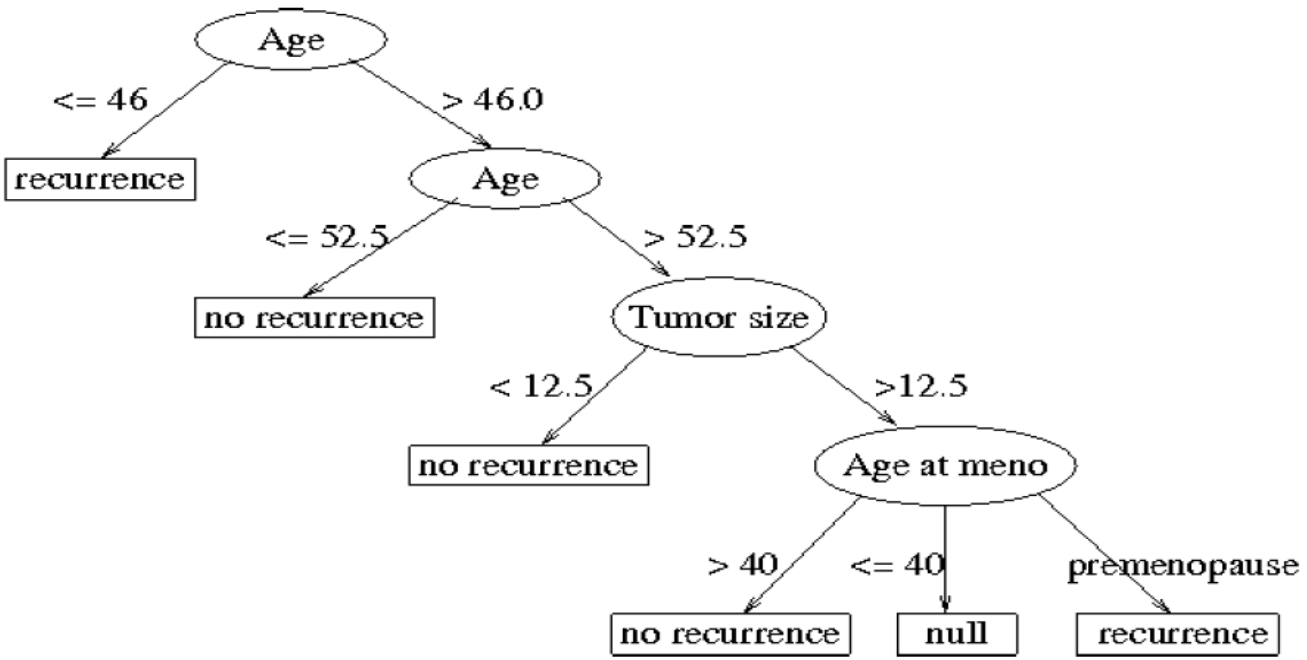
Ávore de Decisão - Definição

Uma árvore de decisão possui a seguinte estrutura típica:

- Nós internos são rotulados com atributos;
- Folhas são rotuladas com classes;
- Ramos são rotulados com valores (atributos categóricos) ou com intervalos (atributos numéricos).



Ávore de Decisão - Exemplo

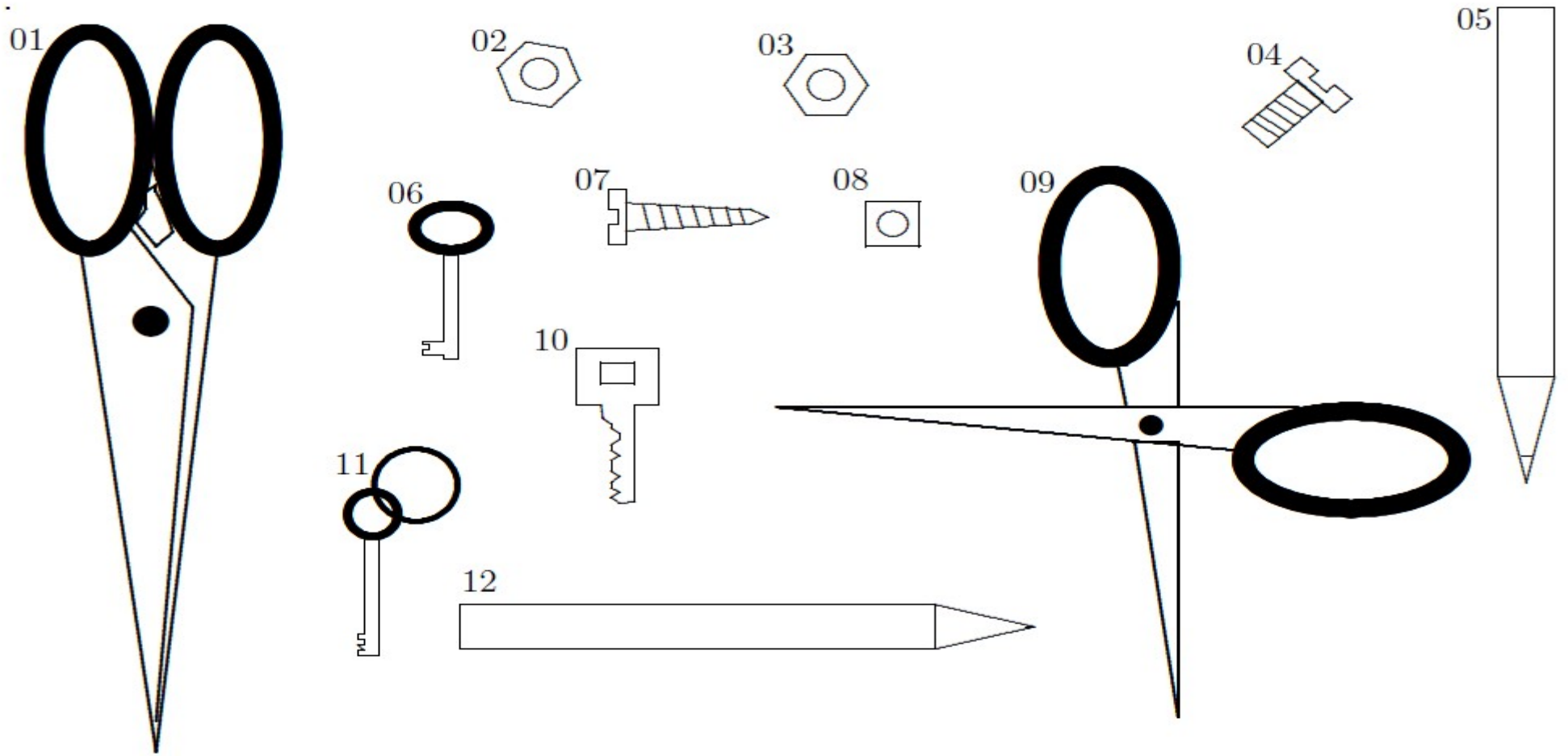


Exemplo: Predição de recorrência de câncer de mama

Exemplo de construção da árvore

- Queremos construir uma árvore para classificar imagens de objetos nas classes: porca, parafuso, tesoura, chave, caneta
- Atributos considerados:
  - Tamanho: pequeno, grande
  - Formato: longo, compacto, outro
  - Orifícios: 0, 1, 2, 3, muitos

Exemplo de construção da árvore – amostra de treinamento



Exemplo de construção da árvore – amostra de treinamento

Objeto No.	TAMANHO	FORMATO	ORIFICIOS	CLASSE
01	grande	longo	2	tesoura
02	pequeno	compacto	1	porca
03	pequeno	compacto	1	porca
04	pequeno	longo	0	parafuso
05	grande	longo	0	caneta
06	pequeno	longo	1	chave
07	pequeno	longo	0	parafuso
08	pequeno	compacto	1	porca
09	grande	longo	2	tesoura
10	pequeno	longo	1	chave
11	pequeno	longo	2	chave
12	grande	longo	0	caneta

Processo de construção da árvore (informal)

Processo de construção da árvore (informal)

- Árvore com um nó, todos os exemplos associados a ele
- São todos os exemplo da mesma classe?
  - Sim: páre
  - Não:

Processo de construção da árvore (informal)

- Árvore com um nó, todos os exemplos associados a ele
- São todos os exemplo da mesma classe?
  - Sim: páre
  - Não: subdivida os exemplos de acordo com um atributo (filhos da raiz)

Processo de construção da árvore (informal)

- Árvore com um nó, todos os exemplos associados a ele
- São todos os exemplo da mesma classe?
  - Sim: páre
  - Não: subdivida os exemplos de acordo com um atributo (filhos da raiz)
    - Para cada nó criado:

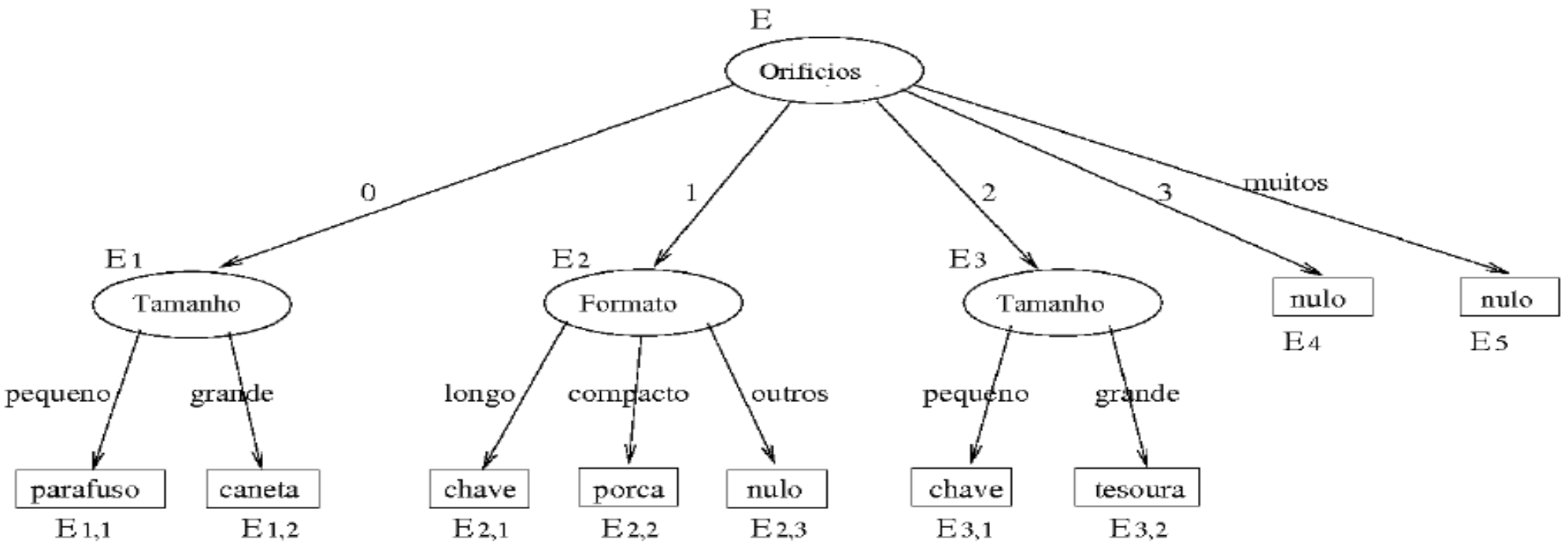
Processo de construção da árvore (informal)

- Árvore com um nó, todos os exemplos associados a ele
- São todos os exemplo da mesma classe?
  - Sim: páre
  - Não: subdivida os exemplos de acordo com um atributo (filhos da raiz)
    - Para cada nó criado: são todos os exemplos da mesma classe?
      - Sim: páre
      - Não: subdivida os exemplos de acordo com outro atributo....

Vamos tentar construir?

Objeto No.	TAMANHO	FORMATO	ORIFICIOS	CLASSE
01	grande	longo	2	tesoura
02	pequeno	compacto	1	porca
03	pequeno	compacto	1	porca
04	pequeno	longo	0	parafuso
05	grande	longo	0	caneta
06	pequeno	longo	1	chave
07	pequeno	longo	0	parafuso
08	pequeno	compacto	1	porca
09	grande	longo	2	tesoura
10	pequeno	longo	1	chave
11	pequeno	longo	2	chave
12	grande	longo	0	caneta

Possível árvore



Funcionamento (classificação)

- Classificando um novo objeto:

(tamanho = grande, formato = longo, orifícios = 0)

Problemas?

Problemas?

- Várias árvores podem ser criadas dependendo da ordem de escolha dos atributos
  - Solução:
-
  -

Problemas?

- Várias árvores podem ser criadas dependendo da ordem de escolha dos atributos
  - Solução: utilizar uma função de escolha do próximo atributo (por exemplo, que melhor divide os exemplos)
-
  -

Problemas?

- Várias árvores podem ser criadas dependendo da ordem de escolha dos atributos
  - Solução: utilizar uma função de escolha do próximo atributo (por exemplo, que melhor divide os exemplos)
- A árvore pode ter muitos nós, alguns deles com poucos ou nenhum objeto
  -

Problemas?

- Várias árvores podem ser criadas dependendo da ordem de escolha dos atributos
  - Solução: utilizar uma função de escolha do próximo atributo (por exemplo, que melhor divide os exemplos)
- A árvore pode ter muitos nós, alguns deles com poucos ou nenhum objeto
  - Solução: realizar podas na árvore ao final do treinamento

Fim do vídeo 1

Definição de Árvores de Decisão

Vídeo 2

Treinamento de Árvores de Decisão

Ideia do algoritmo de construção

- Expansão da árvore, através de sucessivas partições do conjunto de treinamento, até que a condição de parada seja satisfeita;
- Eliminação de algumas partes inferiores (*poda*) da árvore, através de reagrupamentos dos sub-conjuntos da partição.

Dados um conjunto de aprendizado E (dataset de treinamento)
uma condição de parada $P(E)$
uma função de avaliação $score(E, atributo)$ (avaliação do atributo)
uma função de classificação $classe(t)$ (retorna a classe associada ao nó t)
uma função de categorização $categ(E, atributo)$ (para dividir em intervalos)

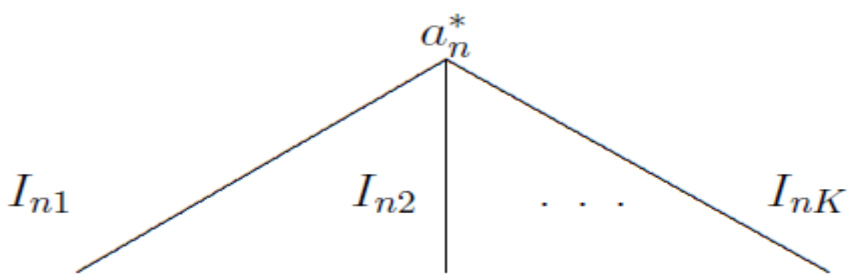
Se o conjunto E satisfaz a condição de parada $P(E)$,

então a árvore resultante é um único nó t rotulado conforme
a regra $classe(t)$

caso contrário

1. para cada atributo a_i, calcule a função $score(E, a_i)$;
   selecione o atributo $a_n^* = \arg\max score(E, a_i)$

2. sejam $I_n1, I_{n2}, \ldots, I_{nK}$ os intervalos gerados segundo $categ(E, a_n^*)$;
   crie o nó e os ramos



Dados um conjunto de aprendizado E
uma condição de parada $P(E)$
uma função de avaliação $score(E, atributo)$
uma função de classificação $classe(t)$
uma função de categorização $categ(E, atributo)$

Se o conjunto E satisfaz a condição de parada $P(E)$,

então a árvore resultante é um único nó t rotulado conforme a regra $classe(t)$

caso contrário

1. para cada atributo a_i, calcule a função $score(E, a_i)$;
   selecione o atributo $a_n^* = \arg\max score(E, a_i)$
2. sejam $I_n1, I_{n2}, \ldots, I_{nK}$ os intervalos gerados segundo $categ(E, a_n^*)$;
   crie o nó e os ramos
3. particione E em K sub-conjuntos $E_1, E_2, \ldots, E_K$ segundo os intervalos (ou valores) de a_n na árvore de decisão
4. aplique o algoritmo recursivamente para cada um dos subconjuntos E_i
5. após a expansão da árvore ter terminado, ajuste seu tamanho, eliminando alguns ramos T_t se necessário.

Principais elementos do algoritmo

- Regra de parada $P(E)$: é uma condição que o conjunto de treinamento E deve satisfazer para que seu nó correspondente seja considerado um nó terminal.

  Casos mais simples: E é vazio ou quando todos os exemplos incidentes sobre t pertencem à mesma classe.

  Contudo, existem algoritmos que interrompem a expansão do nó sob condições mais complexas. Nesses casos, dizemos que ocorre uma *pré-poda* da árvore de decisão.

- Regra $classe(t)$: função que atribui um rótulo de classe a um nó t.

  Critério mais simples: classificação por maioria.

- Função $score(a_i)$: é utilizada para tentar identificar o atributo mais relevante existente sobre E, isto é, o atributo com maior poder discriminante das classes.

Principais elementos do algoritmo

- Método de categorização de atributos $categ(E, a)$: Atributos numéricos precisam ser "discretizados" em sub-intervalos do tipo

$$\begin{aligned} I_{n1} &=]c_{n0}, c_{n1}] \\ I_{n2} &=]c_{n1}, c_{n2}] \\ &\vdots \\ I_{nK} &=]c_{nK-1}, c_{nK}[\end{aligned}$$

onde $c_{n0}, c_{n1}, \ldots, c_{nK}$ são constantes definidas segundo o critério de categorização $categ(E, a)$. A forma mais simples de discretização é a binarização dos atributos, através de condições do tipo $x_n \leq c?$, onde a constante c é obtida através de testes exaustivos sobre o conjunto de treinamento disponível.

Uma vez que os atributos categóricos também podem ser reduzidos a conjuntos $I_{n1} = \{a_{n1}\}, \ldots, I_{nK} = \{a_{nK}\}$, para simplificar a notação não faremos distinção entre atributos ordenados e categóricos, exceto em casos explícitos.

Principais elementos do algoritmo

- Critério de poda: Após a expansão da árvore, pode ocorrer que os subconjuntos de E correspondentes aos nós folhas sejam muito pequenos e com grande efeito de *overfitting* (ajuste muito preciso aos dados de treinamento, porém com baixa precisão na classificação de novos exemplos).

  É necessário então eliminar-se alguns dos ramos inferiores da árvore, de forma a atenuar o efeito dos ruídos (informações inúteis para a classificação) e de forma a manter na árvore apenas regras com mais alto poder de discriminação das classes.

  Esse processo é denominado *pós-poda* (ou simplesmente *poda*) das árvores.

Vendo mais em detalhes...

- Função classe(t)
- Função score(E, a)
- Poda

Função classe(t)

- Atribui uma classe ao nó t com base nos exemplos que lá “estão”
- Possíveis funções:
  - Critério de minimização do erro esperado
  - Critério de minimização do custo do erro de classificação
  - Rotulação dos nós pelas probabilidades das classes

Função classe(t)

Denotaremos por $p(j|t)$ a probabilidade estimada de um exemplo incidente em t possuir classe j. Por exemplo, $p(j|t)$ pode ser definido como a proporção de exemplos de t que possuem classe j.

Função classe(t): Critério de minimização do erro esperado

O critério mais simples de atribuição é adotar a classe de maior probabilidade estimada no nó, isto é, a classe que maximiza $p(j|t)$. Assim, a probabilidade estimada de um exemplo incidente sobre t ser classificado erroneamente é:

$$\begin{aligned} r(t) &= 1 - \max_j p(j|t) \\ &= \min_j \sum_{i \neq j} p(i|t) \end{aligned} \tag{1}$$

Função classe(t): Critério de minimização do custo do erro de classificação

O *custo de erro* em classificar um objeto pertencente à classe j como sendo de classe i é denotado por $C(i, j)$ e satisfaz

- $C(i, j) \geq 0, i \neq j$;
- $C(i, i) = 0$.

Se um objeto de classe desconhecida incidente sobre um nó t, for classificado com classe i, então o custo esperado do erro na classificação será $\sum_j C(i, j)p(j|t)$. Assim, um critério natural de atribuição é escolher a classe i que minimiza a expressão acima.

$$r(t) = \min_i \sum_j C(i, j)p(j|t).$$

Função classe(t): Critério de minimização do custo do erro de classificação

O *custo de erro* em classificar um objeto pertencente à classe j como sendo de classe i é denotado por $C(i, j)$ e satisfaz

- $C(i, j) \geq 0, i \neq j$;
- $C(i, i) = 0$.

Se um objeto de classe desconhecida incidente sobre um nó t, for classificado com classe i, então o custo esperado do erro na classificação será $\sum_j C(i, j)p(j|t)$. Assim, um critério natural de atribuição é escolher a classe i que minimiza a expressão acima.

$$r(t) = \min_i \sum_j C(i, j)p(j|t).$$

Note que neste critério, e no anterior, eu defino quem é a classe i

Função classe(t): rotulação pelas probabilidades das classes

Árvore probabilística:

$$classe(t) = (p(1|t), p(2|t), \ldots, p(J|t))$$

Custo estimado em se atribuir a um objeto à classe i (estando no nó t):

$$\sum_j C(i,j)p(j|t).$$

Custo estimado de erro no nó t:

$$r(t) = \sum_i p(i|t) \left(\sum_{i \neq j} C(i,j)p(j|t) \right) = \sum_{i,j} C(i,j)p(i|t)p(j|t).$$

Função classe(t): Custo total de erro de classificação da árvore

a depender do critério escolhido

Seja $R(t)$ o custo total de erro no nó t, dado por

$$R(t) = r(t)p(t),$$

onde $p(t)$ é a proporção de exemplos em E que incidem sobre o nó t.

Função classe(t): Custo total de erro de classificação da árvore

a depender do critério escolhido

Seja $R(t)$ o custo total de erro no nó t, dado por

$$R(t) = r(t)p(t),$$

onde $p(t)$ é a proporção de exemplos em E que incidem sobre o nó t.

O *custo total de erros de classificação* da árvore $R(T)$ é dado por

$$R(T) = \sum_{t \in \overline{T}} R(t),$$

onde $\overline{T}$ é o conjunto de folhas de T.

Função score(E,a) – Escolha do atributo ótimo

- Na literatura: *Splitting criterion/rule*
- Função baseada em uma medida de impureza
- Possíveis funções utilizadas como medida de impureza:
  - Entropia
  - Índice Gini

Medida de impureza

Definição 5.1 *Uma* função de impureza *é uma função* ϕ *definida sobre o conjunto de todas as* J*-tuplas de números* $(p_1, p_2, \ldots, p_J)$ *satisfazendo* $p_j \geq 0,\ j = 1, 2, \ldots, J\ \sum_j p_j = 1$ *com as propriedades*

- ϕ *atinge seu máximo somente no ponto* $(\frac{1}{J}, \frac{1}{J}, \ldots, \frac{1}{J})$;
- ϕ *atinge seu mínimo somente nos pontos* $(1, 0, \ldots, 0), (0, 1, 0, \ldots), \ldots, (0, \ldots, 0, 1)$;
- ϕ *é uma função simétrica de* $p_1, p_2, \ldots, p_J$.

As restrições acima retratam as noções intuitivas de impureza: de fato, a impureza de um nó é:

- máxima quando todas as classes estão igualmente presentes no nó
- mínima quando o nó contém apenas uma classe.

Função score(E,a)

Medida de impureza

Definição 5.2 *Dada uma função de impureza ϕ, define-se a medida de impureza de um nó t como*

Medida de impureza

Definição 5.2 *Dada uma função de impureza ϕ, define-se a medida de impureza de um nó t como*

$$imp(t) = \phi(p(1|t), p(2|t), \ldots, p(J|t))$$

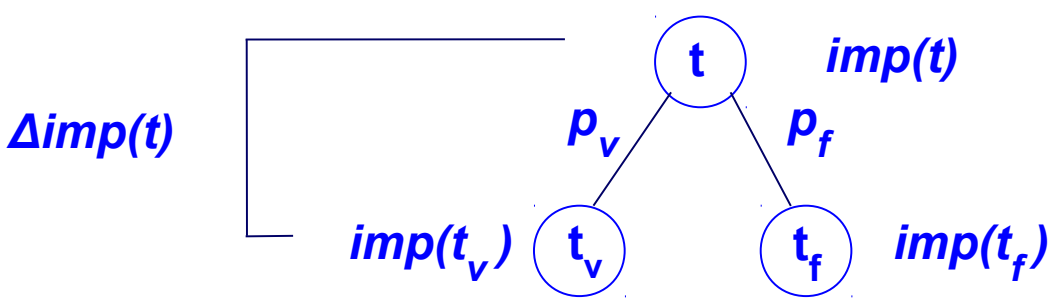
onde $p(j|t)$ é a probabilidade de um objeto incidente sobre o nó t pertencer à classe j.

Medida de impureza

Para todo nó t, suponha que haja uma divisão candidata s que divide t em t_v e t_f, de forma que uma proporção p_v dos exemplos de t vão para t_v e uma proporção p_f dos exemplos de t vão para t_f. O *critério de qualidade da divisão* é definido pelo decréscimo na impureza

$$\Delta imp(s,t) = imp(t) - p_v imp(t_v) - p_f imp(t_f) \ .$$

$s^* =$

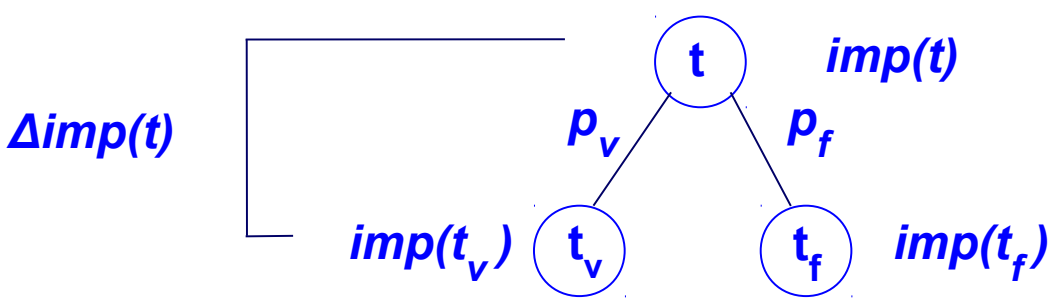


Medida de impureza

Para todo nó t, suponha que haja uma divisão candidata s que divide t em t_v e t_f, de forma que uma proporção p_v dos exemplos de t vão para t_v e uma proporção p_f dos exemplos de t vão para t_f. O *critério de qualidade da divisão* é definido pelo decréscimo na impureza

$$\Delta imp(s,t) = imp(t) - p_v imp(t_v) - p_f imp(t_f) \ .$$

$$s^* = \arg\max_s \Delta imp(s,t).$$



Medida de impureza

Impureza global da árvore I(T) = $\sum_{t \in \overline{T}} I(t) = \sum_{t \in \overline{T}} p(t) imp(t).$

Teorema 5.3 *A impureza global $I(T)$ da árvore será mínima se, a cada nó não terminal t, tivermos escolhido a divisão $s^* = arg\max_s \Delta i(s,t)$.*

imp

Dem. Tome um nó qualquer $t \in \overline{T}$ e, usando uma divisão s, particione o nó em t_v e t_f. A nova árvore T' terá impureza

$$I(T') = \sum_{\overline{T}-\{t\}} I(t) + I(t_v) + I(t_f).$$

O decréscimo global de impureza será

$$I(T) - I(T') = I(t) - I(t_v) - I(t_f).$$

Por depender somente do nó t e da divisão s, o decréscimo global de impureza pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \Delta I(s,t) &= I(t) - I(t_v) - I(t_f) \\ &= p(t)imp(t) - p(t_v)imp(t_v) - p(t_f)imp(t_f) \end{aligned} \quad (3)$$

Definindo as proporções p_v e p_f dos exemplos de t que vão para t_v e t_f, respectivamente, como

$$p_v = p(t_v)/p(t) \ , \quad p_f = p(t_f)/p(t)$$

podemos reescrever a expressão 3 como

$$\begin{aligned} \Delta I(s,t) &= p(t)[imp(t) - p_v imp(t_v) - p_f imp(t_f)] \\ &= p(t)\Delta imp(s,t). \end{aligned}$$

Uma vez que $\Delta I(s,t)$ difere de $\Delta i(s,t)$ apenas pelo fator $p(t)$, a mesma divisão s^* maximiza as duas expressões. Portanto, o critério de seleção da melhor divisão de cada nó pode ser visto como uma seqüência de passos de minimização da impureza global da árvore.

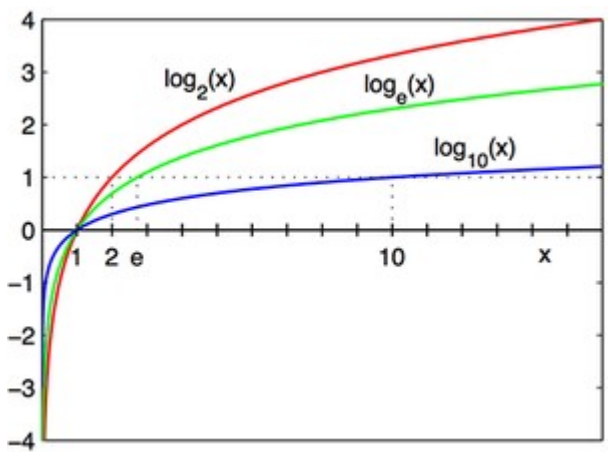
Entropia como medida de impureza

- Medida de incerteza: $\mathcal{E}(p_1, p_2, \ldots, p_J) = -\sum_{i=1}^{J} p_i \log p_i.$

Khinchin (1953) demonstrou que $\mathcal{E}(p_1, p_2, \ldots, p_J)$ possui uma série de propriedades que se pode esperar de uma medida de impureza.

Note que é imediato ver que $\mathcal{E}$ é simétrica e que $\mathcal{E}(p_1, p_2, \ldots, p_J) = 0$ se, e somente se, algum dos números p_i for igual a 1 e todos os demais iguais a 0.

$$\mathcal{E}(p_1, p_2, \ldots, p_J) \leq \mathcal{E}\left(\frac{1}{J}, \frac{1}{J}, \ldots, \frac{1}{J}\right).$$



Entropia como medida de impureza

- Medida de incerteza: $\mathcal{E}(p_1, p_2, \ldots, p_J) = -\sum_{i=1}^{J} p_i \log p_i.$

Khinchin (1953) demonstrou que $\mathcal{E}(p_1, p_2, \ldots, p_J)$ possui uma série de propriedades que se pode esperar de uma medida de impureza.

Note que é imediato ver que $\mathcal{E}$ é simétrica e que $\mathcal{E}(p_1, p_2, \ldots, p_J) = 0$ se, e somente se, algum dos números p_i for igual a 1 e todos os demais iguais a 0.

$$\mathcal{E}(p_1, p_2, \ldots, p_J) \leq \mathcal{E}\left(\frac{1}{J}, \frac{1}{J}, \ldots, \frac{1}{J}\right).$$

$$\Delta imp(s,t) = imp(t) - p_v imp(t_v) - p_f imp(t_f)$$

$$s^* = \arg\max_s \Delta imp(s,t).$$

Função score(E,a)

Índice Gini como medida de impureza

O índice de diversidade Gini possui a forma

$$\mathcal{G}(p_1, p_2, \ldots, p_J) = \sum_{i \neq j} p_i p_j$$

e também pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(p_1, p_2, \ldots, p_J) &= \sum_j p_j \sum_{i \neq j} p_i \\ &= \sum_j p_j (1 - p_j) \\ &= 1 - \sum_j p_j^2 \end{aligned}$$

- Interpretação: erro de classificação:

Ao invés de definir $classe(t)$ com o rótulo da classe majoritária, defina classe(t) como uma função que atribui, para um objeto selecionado aleatoriamente dentro do nó, a classe i com probabilidade $p(i|t)$. A probabilidade deste objeto ser da classe j é $p(j|t)$. Portanto, a probabilidade estimada de erro sob esta regra é o índice de Gini

$$\sum_{i \neq j} p_i p_j .$$

Índice Gini para custos não unitários

$$C(i,i) = 0\ ;\ \ C(i,j) \geq 0,\ i \neq j$$

$$\mathcal{G}(p(1|t), p(2|t), \ldots, p(J|t)) = \sum_{i,j} C(i,j)p(i|t)p(j|t)$$

Compare com o slide 38...

Poda da árvore

- Árvore com muitos níveis: perda de acurácia

  - inserção de atributos com pouco poder preditivo ou altamente correlacionados com outros em níveis superiores (*overfitting*)

  - nós inferiores suscetíveis a ruídos

- Árvore com poucos níveis

  - uso de uma pequena parte da informação disponível (generaliza demais - *underfitting*)

- Problema: encontrar um tamanho ideal

Poda da árvore

- Duas abordagens:

  - pré-poda: regras de parada durante a subdivisão dos nós

  - pós-poda: construção da árvore completa para posterior poda das sub-árvores consideradas não-confiáveis

Pré-poda da árvore

- Exemplos de critérios de parada:

1. Se, para toda divisão s do nó t, $\Delta I(s,t) < \beta$, onde $\beta > 0$ é um parâmetro definido pelo usuário.
2. Se o número de exemplos que incidir sobre t for inferior a um parâmetro n.
3. Se a proporção dos exemplos incidentes no nó em relação ao número total de exemplos em E for inferior a um parâmetro p.
4. Se a estimativa de erro (ou o custo de erro) $r(t)$ naquele nó for menor do que um parâmetro r.

Alguns dos algoritmos que realizam a pré-poda são o REAL (Lauretto (1996)), o Cal5 (Müller & Wysotzki (1994)) , o C4 (Quinlan et al. (1986)) e o Assistant-86 (Cestnik et al. (1987)).

E outros, como ID3 (Quinlan, 1986).
Obs: a implementação do CART no sklearn permite ambos.

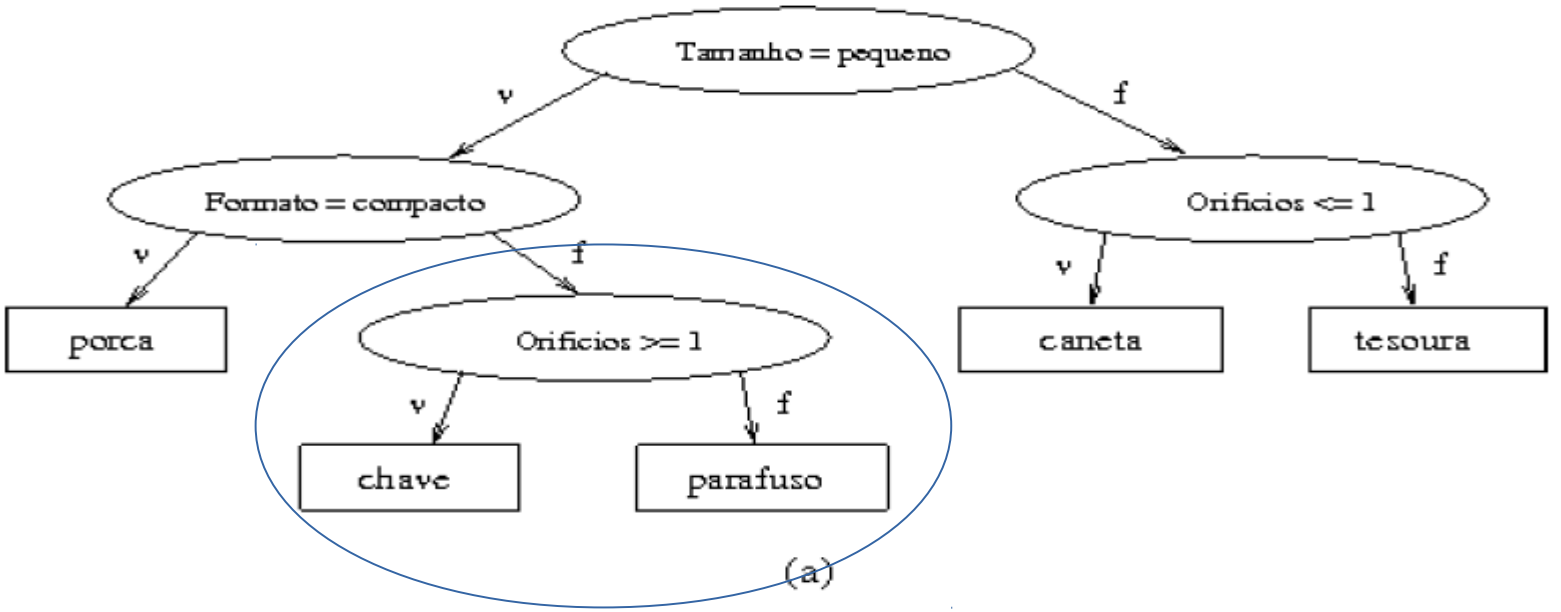
Pós-poda da árvore

Dada uma árvore T e um nó interno $t \in T$, a *pós-poda* (ou simplesmente *poda*) do ramo T_t de T consiste em remover todos os descendentes próprios de t, declarando-o como nó terminal. Rotula-se t conforme a função $classe(t)$ (definida anteriormente). A árvore podada desta forma será denotada por $T - T_t$.

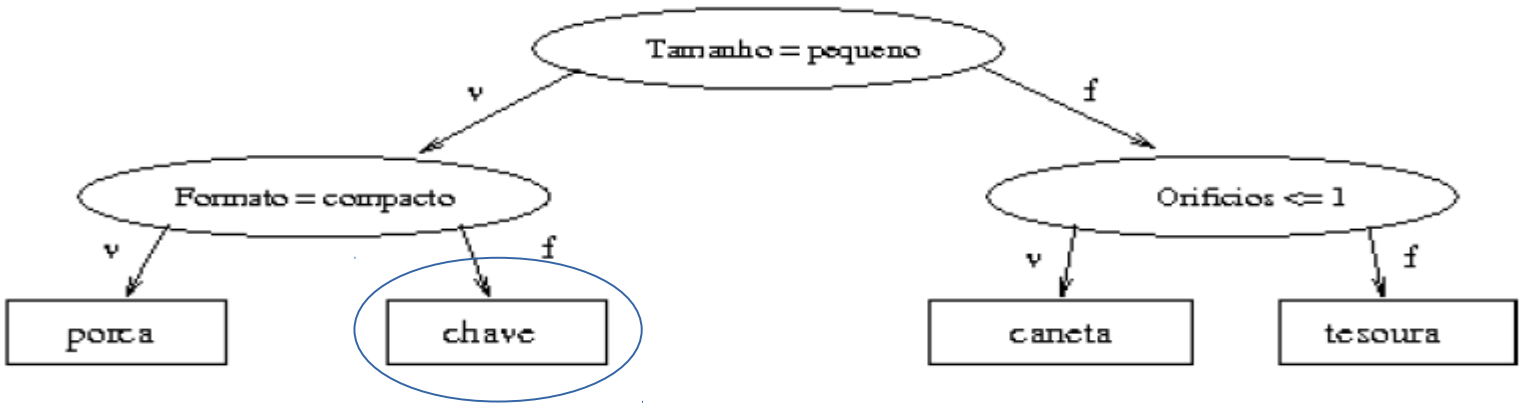
Se T' é obtida de T através de podas sucessivas de ramos, então T' é denominada *sub-árvore podada* de T e é denotada por $T' \preceq T$.

Pós-poda da árvore - Exemplo

original



podada



Poda por custo-complexidade

- Método mais conhecido, implementado no algoritmo CART (árvores binárias) - L. Breiman, J. Friedman, R. Olshen, and C. Stone. Classification and Regression Trees. Wadsworth, Belmont, CA, 1984.
- Dois estágios:

  - Estágio 1: geração de uma sequência de árvores T_0, T_1, …, T_K, onde T_0 é a árvore original, T_{i+1} é obtida a partir de T_i (substituindo uma ou mais subárvores por folhas), e T_K é a árvore contendo apenas uma folha (a raiz original)
  - Estágio 2: seleção da melhor árvore da sequência que minimiza o custo de erro de classificação

Poda por custo-complexidade

- Método mais conhecido, implementado no algoritmo CART (árvores binárias) - L. Breiman, J. Friedman, R. Olshen, and C. Stone. Classification and Regression Trees. Wadsworth, Belmont, CA, 1984.
- Dois estágios:

  - Estágio 1: geração de uma sequência de árvores T_0, T_1, …, T_K, onde T_0 é a árvore original, T_{i+1} é obtida a partir de T_i (substituindo uma ou mais subárvores por folhas), e T_K é a árvore contendo apenas uma folha (a raiz original)
  - Estágio 2: seleção da melhor árvore da sequência que minimiza o custo de erro de classificação

Poda por custo-complexidade - Estágio 1: obtenção das subárvores

- A árvore original (T_0) não precisa ser construída exaustivamente
  - No lugar, T_{max} (suficientemente grande), construída, por exemplo, usando um número mínimo de elementos por folha como critério de parada

- Para uma dada árvore T:
  - Complexidade de T: número de folhas (|F|)
  - R(T) é o custo total de erro de classificação de T (slide 40)
  - α é o parâmetro de complexidade
  - Custo-complexidade: $R_\alpha(T) = R(T) + \alpha |F|$

- Variando α em [0;+∞) eu obtenho sub-árvores de Tmax que minimizam R_α (chamadas T(α))
  - Para valores $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_K$, a árvore T_k é a que minimiza R_α para α em $[\alpha_k;\alpha_{k+1})$

Poda por custo-complexidade - Estágio 1: obtenção das subárvores

- $T_0 = T_{max}$
- $T_1 = T(0)$, ou seja, uma subárvore de T_{max} que minimize $R(T)$ apenas ($\alpha = 0$) ($T_1 = \text{argmin}_T R(T)$)

  - No entanto $R(T_{max}) <= R(T)$, qualquer $T \leq T_{max}$

Proposição 6.1 *Seja T uma árvore binária. Dada uma folha $t \in T$, para qualquer divisão de t em t_v e t_f tem-se*

$$R(t) \geq R(t_v) + R(t_f).$$

- Portanto, T_1 deve ser uma subárvore de T_{max} tal que $R(T_{max}) = R(T)$
- Vamos pegar T_1 como sendo **a menor** subárvore de T_{max} tal que $R(T_{max}) = R(T)$

Poda por custo-complexidade - Estágio 1: obtenção das subárvores

- Para encontrar T_1 :

  - $T = T_{max}$

  - repita:

    para t um nó interno de T, se $R(t) = R(t_v) + R(t_f)$,

    t_v e t_f filhos de t, pode o ramo Tt substituindo-o

    pelo nó t

  até que não seja mais possível fazer podas

Poda por custo-complexidade - Estágio 1: obtenção das subárvores

- Encontrando $T_{k+1} = T(\alpha_{k+1})$ a partir de $T_k = T(\alpha_k)$, onde $\alpha_{k+1} > \alpha_k$:

Lembrando que estamos falando do custo-complexidade:

$T_k = T(\alpha_k) = \text{argmin}_T R_{\alpha k}(T) = R(T) + \alpha_k |F|$

$T_{k+1} = T(\alpha_{k+1}) = \text{argmin}_T R_{\alpha k+1}(T) = R(T) + \alpha_{k+1} |F|$

Poda por custo-complexidade - Estágio 1: obtenção das subárvores

- Encontrando $T_{k+1} = T(\alpha_{k+1})$ a partir de $T_k = T(\alpha_k)$, onde $\alpha_{k+1} > \alpha_k$:

Lembrando que estamos falando do custo-complexidade:

$T_k = T(\alpha_k) = \text{argmin}_T R_{\alpha k}(T) = R(T) + \alpha_k |F|$

$T_{k+1} = T(\alpha_{k+1}) = \text{argmin}_T R_{\alpha k+1}(T) = R(T) + \alpha_{k+1} |F|$

Supondo que eu já calculei T_k

Poda por custo-complexidade - Estágio 1: obtenção das subárvores

- Encontrando $T_{k+1} = T(\alpha_{k+1})$ a partir de $T_k = T(\alpha_k)$, onde $\alpha_{k+1} > \alpha_k$:

Para todo nó interno t de T_k e seu respectivo ramo $T_{k,t}$, defina

$$R_\alpha(t) = R(t) + \alpha \quad (10)$$

$$R_\alpha(T_{k,t}) = R(T_{k,t}) + \alpha|\overline{T_{k,t}}|. \quad (11)$$

Note que $R_{\alpha(}T_{k,t}) < R_{\alpha k}(t)$ para todo nó interno de T_k, pois caso contrário T_k não seria minimal. Suponha agora que α comece a subir de forma contínua. Enquanto $R_\alpha(T_{k,t}) < R_\alpha(t)$ para cada t, teremos ainda $T_k = T(\alpha)$. No instante em que

$$R_\alpha(T_{k,t}) = R_\alpha(t) \quad (12)$$

para algum nó t, teremos então $R_\alpha(T_k) = R_\alpha(T_k - T_{k,t})$ e $T_k - T_{k,t}$ conterá menos folhas do que T_k; logo, $T_k \neq T(\alpha)$. Nesse momento, o ramo $T_{k,t}$ deverá ser podado.

Poda por custo-complexidade - Estágio 1: obtenção das subárvores

As equações 10 e 11 fornecem o valor de α para o qual a igualdade 12 ocorre:

$$\alpha = \frac{R(t) - R(T_{k,t})}{|\overline{T_{k,t}}| - 1}.$$

O ponto crítico α_{k+1} será o menor valor de α para o qual a igualdade 12 pode ocorrer. Ou seja,

$$\alpha_{k+1} = \min_{t \in \overline{T_k}^C} \frac{R(t) - R(T_{k,t})}{|\overline{T_{k,t}}| - 1}$$

onde $\overline{T_k}^C$ é o conjunto de nós internos de T_k.

Poda por custo-complexidade - Estágio 1: obtenção das subárvores

As equações 10 e 11 fornecem o valor de α para o qual a igualdade 12 ocorre:

$$\alpha = \frac{R(t) - R(T_{k,t})}{|\overline{T_{k,t}}| - 1}.$$

O ponto crítico α_{k+1} será o menor valor de α para o qual a igualdade 12 pode ocorrer. Ou seja,

$$\alpha_{k+1} = \min_{t \in \overline{T_k}^C} \frac{R(t) - R(T_{k,t})}{|\overline{T_{k,t}}| - 1}$$

onde $\overline{T_k}^C$ é o conjunto de nós internos de T_k.

Para obter a árvore T_{k+1}, execute o seguinte procedimento: seja t um nó interno de T_k; se $R_{\alpha k+1}(t) = R_{\alpha k+1}(T_{k,t})$, pode o ramo $T_{k,t}$, substituindo-o pelo nó t. Repita este procedimento até que não seja mais possível nenhuma poda. A árvore resultante será T_{k+1}.

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

- Seleção da subárvore com menor custo de erro de classificação
- Problema?

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

- Seleção da subárvore com menor custo de erro de classificação
- Problema?

  Tmax é a de menor custo para a amostra de treinamento utilizada

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

- Seleção da subárvore com menor custo de erro de classificação
- Problema?

  Tmax é a de menor custo para a amostra de treinamento utilizada
- Solução:

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

- Seleção da subárvore com menor custo de erro de classificação
- Problema?

  Tmax é a de menor custo para a amostra de treinamento utilizada
- Solução:

  1) utilizar outra amostra E_A (de teste, ou de poda) para estimar adequadamente esse custo (com exemplos não utilizados na construção da árvore)

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

Seja T_k uma sub-árvore da seqüência. Submeta a árvore T_k ao conjunto de testes E_A, ou seja, utilize T_k para classificar cada uma das instâncias de E_A.

Denote por N^A a cardinalidade do conjunto E_A. Sejam N_j^A o número de instâncias da classe j em E_A e N_{ij}^A o número de instâncias de classe j em E_A que tenham sido classificados por T_k como classe i. Então, a probabilidade estimada de um objeto de classe j ser classificado por T_k como classe i será

$$Q(i|j) = N_{ij}^A / N_j^A.$$

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

Denote por $R(j)$ o custo esperado no erro de classificação dos objetos de classe j. $R(j)$ será dado por

$$R(j) = \sum_{i=1}^{J} C(i,j)Q(i|j)$$

onde $C(i,j)$ é o custo de erro.

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

Denote por $R(j)$ o custo esperado no erro de classificação dos objetos de classe j. $R(j)$ será dado por

$$R(j) = \sum_{i=1}^{J} C(i,j)Q(i|j)$$

onde $C(i,j)$ é o custo de erro.

Finalmente, seja $\pi(j)$ a probabilidade *a priori* de um objeto qualquer de E_A ser de classe j. A estimativa do custo da árvore T_k é dada por,

$$R^C(T_k) = \sum_{j=1}^{J} R(j)\pi(j).$$

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

Denote por $R(j)$ o custo esperado no erro de classificação dos objetos de classe j. $R(j)$ será dado por

$$R(j) = \sum_{i=1}^{J} C(i,j)Q(i|j)$$

onde $C(i,j)$ é o custo de erro.

Finalmente, seja $\pi(j)$ a probabilidade *a priori* de um objeto qualquer de E_A ser de classe j. A estimativa do custo da árvore T_k é dada por,

$$R^C(T_k) = \sum_{j=1}^{J} R(j)\pi(j).$$

Após calculada a estimativa de custo $R^C(T_k)$ para cada sub-árvore T_k da seqüência, pode-se simplesmente escolher a sub-árvore

$$T_k^* = \arg \min_{1 \leq k \leq K} R^C(T_k).$$

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

- Seleção da subárvore com menor custo de erro de classificação
- Problema?

  Tmax é a de menor custo para a amostra de treinamento utilizada
- Solução:

  1) utilizar outra amostra E_A (de teste, ou de poda) para estimar adequadamente esse custo (com exemplos não utilizados na construção da árvore)

  2) menor subárvore com erro dentro de 1 erro padrão dos erros estimados por validação cruzada (regra 1-SE)

Poda por custo-complexidade - Estágio 2: Escolha da melhor subárvore

- CART no Weka: validação cruzada (você informa o k)
- CART no sklearn: você só fornece um α

Fim do vídeo 2

Treinamento de Árvores de Decisão

Vídeo 3

Árvores de Decisão
Outras questões

Missing values

- Muitas formas interessantes de lidar com isso:
  - "missing" como um valor possível do atributo (tanto no treinamento quanto na classificação)
  - Outras abordagens (em 3 fases):
    - Treinamento: na execução da função score(E,a) – escolha do atributo
    - Treinamento: na hora de uma instância escolher um ramo
    - Classificação

Missing values - Treinamento: na execução da função score(E,a) – escolha do atributo

- Ignore instâncias em que a é ausente
- Valor = moda (a nominal), mediana (a ordinal) ou média (a numérica) de todos os valores no nó t
- Valor = moda (a nominal), mediana (a ordinal) ou média (a numérica) de todos os valores no nó t da mesma classe que as instância sendo analisadas
- Utilizar um peso para a baseado na proporção de *missing values*

Missing values - Treinamento: na hora de uma instância escolher um ramo

- Ignore a instância
- Valor = moda (a nominal), mediana (a ordinal) ou média (a numérica) de todos os valores no nó t
- Valor = moda (a nominal), mediana (a ordinal) ou média (a numérica) de todos os valores no nó t da mesma classe que a instância sendo analisada
- Instância segue por todos os ramos
- Instância x vai para o ramo que tem o maior número de instâncias da mesma classe que x

Missing values - Classificação

- Valor = moda (a nominal), mediana (a ordinal) ou média (a numérica) de todos os valores no nó t
- Instância segue por todos os ramos, chegando-se a mais de uma folha (decide-se por votação ou por aquela que maximiza a probabilidade de uma classe)
- Instância x vai para o ramo que tem o maior número de instâncias da mesma classe que x
- Pára o processo no nó t e decide pela classe majoritária

Dados desbalanceados

- Normalmente também um problema
- Alternativas:
  - Tratar no pré-processamento
  - Aumentar o custo das classes minoritárias (problema: quanto)
  - Usar um algoritmo indutor de árvore que lide com isso (ex: DDBT)

“Implementações” de árvores de decisão

- Variação das funções vistas hoje levam a diferentes algoritmos de árvores de decisão
- Exemplos:
  - ID3: bem simples - não lida com atributos numéricos nem missing values, não faz poda, árvore *multiway (*Quinlan, 1986*)*
  - C4.5: evolução do ID3: discretiza dados numéricos, pré-poda *(*Quinlan, 2014*)*
  - CART (Classification And Regression Trees): árvores binárias, poda por custo-complexidade, classificação e regressão (Breiman et al, 1984)
  - REAL: pré-poda, discretiza dados numéricos reais, árvores binárias (Lauretto, 1996)
  - DDBT: REAL para dados desbalanceados (Frizzarini, 2013)
  - Outros ...

Árvores de decisão no sklearn

- Baseado no CART, mas…
- Se usar valores default de parâmetros não faz poda alguma
- Dependendo dos valores faz pré-poda e/ou custo-complexidade
- Poda por custo-complexidade tem que definir o α
- class_weight = balanced para dados desbalanceados
- max_features: nr de features usadas em score(E,a) (default todas)
- Randomicidade inerente

Calibração de parâmetros

- Há vários parâmetros a serem calibrados, mas um dos mais importantes parece ser o max_depth
- Artigos no edisciplinas
- Voltaremos a falar nisso com Random Forests

Seleção de Características

- A seleção de características está embutida no aprendizado da árvore

Características de Árvores de Decisão

- Método supervisionado ou não-supervisionado?
-
-

Características de Árvores de Decisão

- Método supervisionado ou não-supervisionado?

  Supervisionado! Tanto a amostra de treinamento (para construção da árvore) quanto a de teste (para poda da árvore) devem ser rotuladas.

Características de Árvores de Decisão

- Método supervisionado ou não-supervisionado?

  Supervisionado! Tanto a amostra de treinamento (para construção da árvore) quanto a de teste (para poda da árvore) devem ser rotuladas.

- Método paramétrico ou não-paramétrico?

-

Características de Árvores de Decisão

- Método supervisionado ou não-supervisionado?

  Supervisionado! Tanto a amostra de treinamento (para construção da árvore) quanto a de teste (para poda da árvore) devem ser rotuladas.

- Método paramétrico ou não-paramétrico?

  Não-paramétrico! Não é assumida nenhuma família de distribuições para descrever o espaço nem a “cara” do classificador

-

Características de Árvores de Decisão

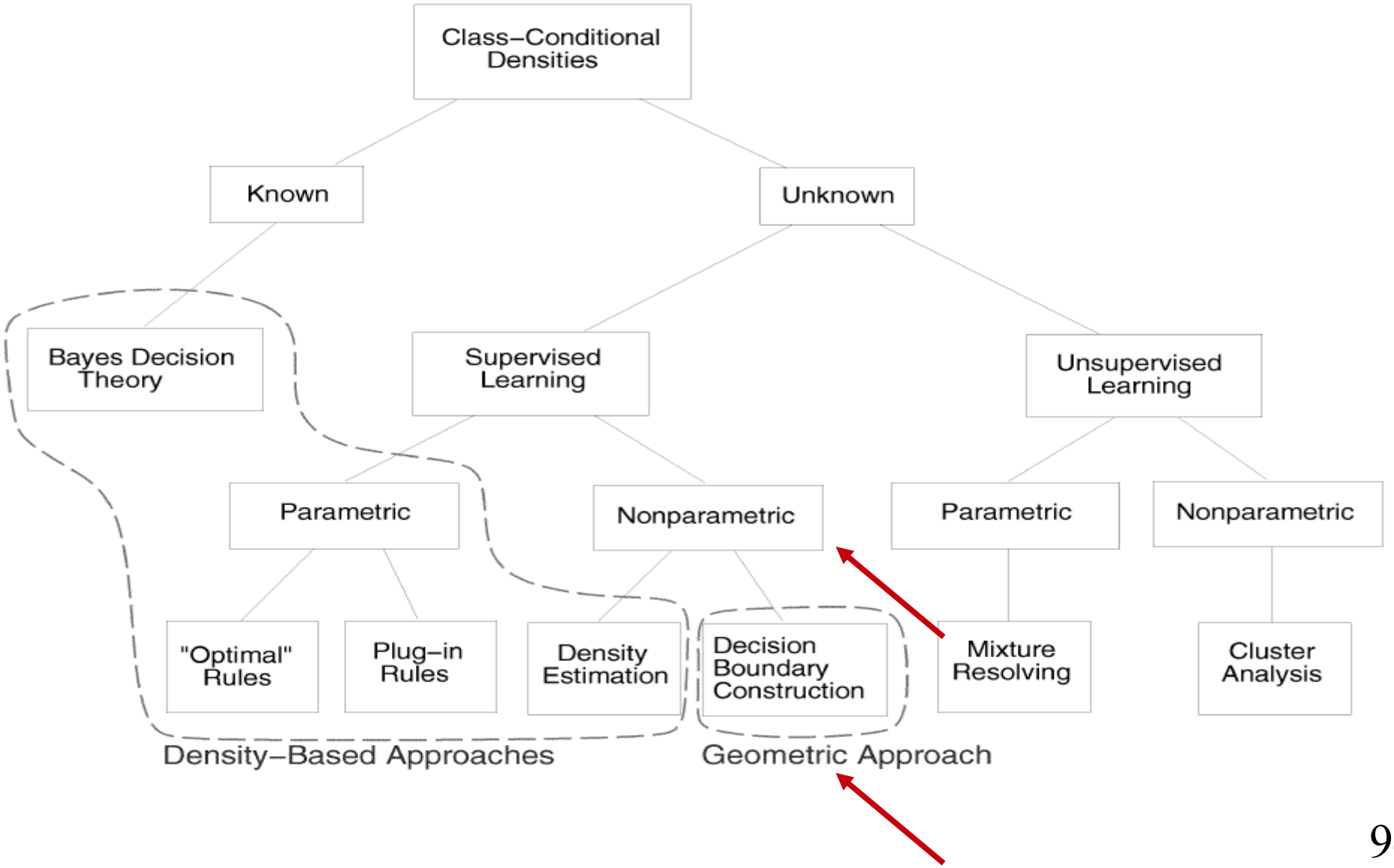
- Método supervisionado ou não-supervisionado?

  Supervisionado! Tanto a amostra de treinamento (para construção da árvore) quanto a de teste (para poda da árvore) devem ser rotuladas.

- Método paramétrico ou não-paramétrico?

  Não-paramétrico! Não é assumida nenhuma família de distribuições para descrever o espaço nem a “cara” do classificador

- Também considerado não-métrico, por poder trabalhar com atributos nominais (categóricos)


Class–Conditional Densities
Known
Unknown
Bayes Decision Theory
Supervised Learning
Unsupervised Learning
Parametric
Nonparametric
Parametric
Nonparametric
"Optimal" Rules
Plug–in Rules
Density Estimation
Decision Boundary Construction
Mixture Resolving
Cluster Analysis
Density–Based Approaches
Geometric Approach

Algumas da principais vantagens

- Interpretabilidade — Inclusive em relação a Random Forests

  Pode ser convertida em um conjunto de regras
- Lida com atributos numéricos e categóricos
- Já efetua automaticamente seleção de características (selecionador **embutido**)
- Por ser não-paramétrica, não assume nenhuma família de distribuição
- Conseguem lidar com *missing values*

Algumas da principais desvantagens

- Alguns algoritmos só trabalham com atributos discretos (ID3, C4.5)
  - REAL trabalha com números reais
- Funciona bem quando há poucos atributos altamente relevantes, mas pode ter mais dificuldades se houver uma grande complexidade de interações
- **Instável** - tende a ser sensível à amostra de treinamento devido à sua natureza gulosa (ruído)

Fim do vídeo 3

Árvores de Decisão
Outras questões

Vídeo 4

Random Forests

Algumas da principais desvantagens

- Alguns algoritmos só trabalham com atributos discretos (ID3, C4.5)
  - REAL trabalha com números reais
- Funciona bem quando há poucos atributos altamente relevantes, mas pode ter mais dificuldades se houver uma grande complexidade de interações
- **Instável** - tende a ser sensível à amostra de treinamento devido à sua natureza gulosa (ruído)

Alternativas para diminuir a instabilidade

- *Bagging*: várias árvores de decisão (comitê de classificadores - *ensembles*), cada uma treinada por uma amostra *bootstrap* (com reposição) de mesmo tamanho da amostra original (sorteio com reposição da amostra original)

  - classificação: classe mais “votada” pelas árvores

  - demora mais para treinar e classificar, mas o processo é facilmente paralelizável

Alternativas para diminuir a instabilidade

- *Random Forests*: variação de *Bagging* (*ntree* ou *n_estimators* árvores) na qual, no momento em que a árvore é construída, apenas um subconjunto aleatório (de *mtry* ou *max_features* elementos) dos atributos participa da subdivisão de um nó

  - Mais estável que *Bagging*

Random Forests

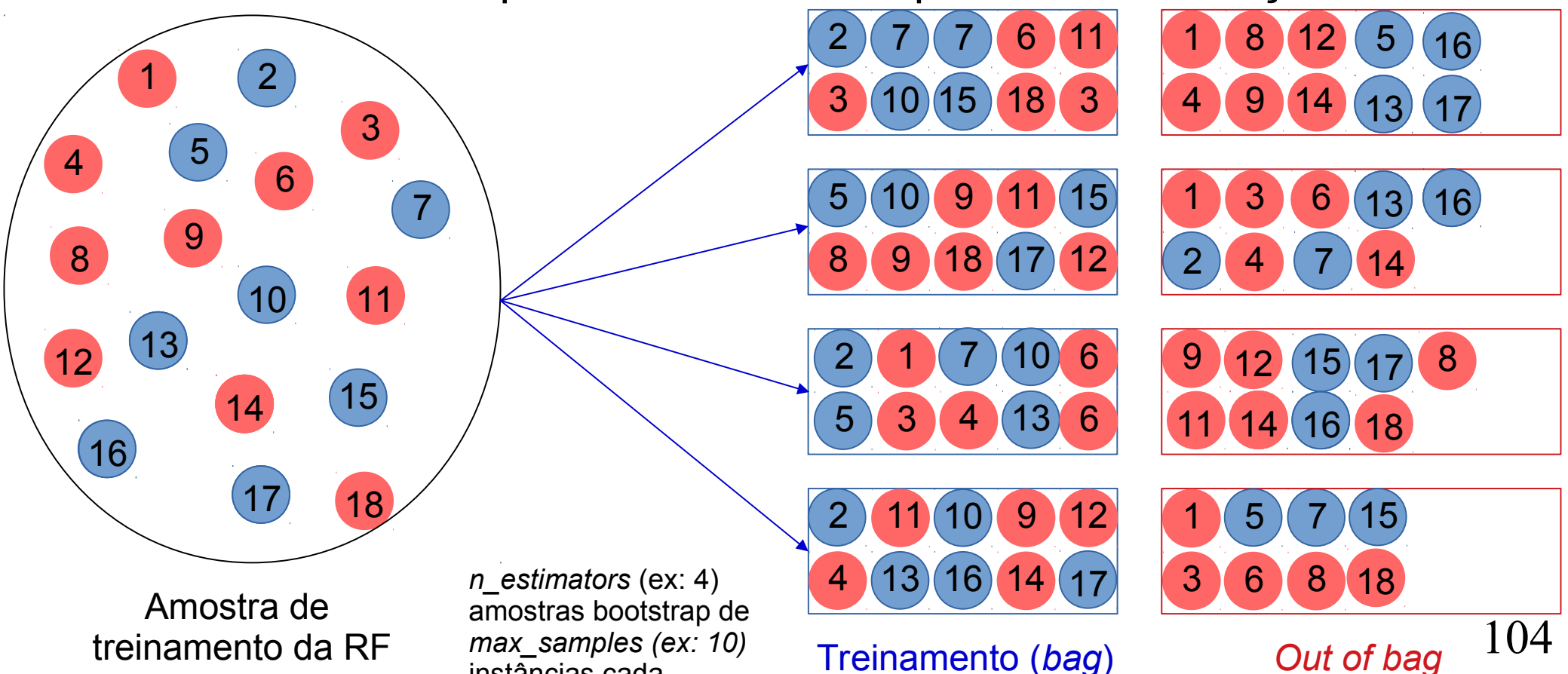
- Cada árvore é construída com um subconjunto aleatório da amostra de treinamento (amostras independentes, mas a partir da mesma distribuição), e usando um subconjunto aleatório de características → baixa correlação entre as árvores
- Baixa correlação entre as árvores + força preditiva de cada árvore → robustez da floresta

Erro estimado e erro *out of bag*

- Erro estimado (holdout, validação cruzada, etc):
  - Treina a Random Forest (RF) com a amostra de treinamento (*n_estimators* árvores)
  - Testa a RF com a amostra de teste (cada instância da amostra de teste é avaliada pelas *n_estimators* árvores e classificada por votação pela maioria)
- Cada árvore dessa floresta, como é construída a partir de um subconjunto (aleatório) de exemplos de treinamento, pode ser testada com os exemplos restantes (*out of bag*)
- O treinamento de uma Random Forest já fornece uma estimativa do erro desse classificador: erro *out of bag*

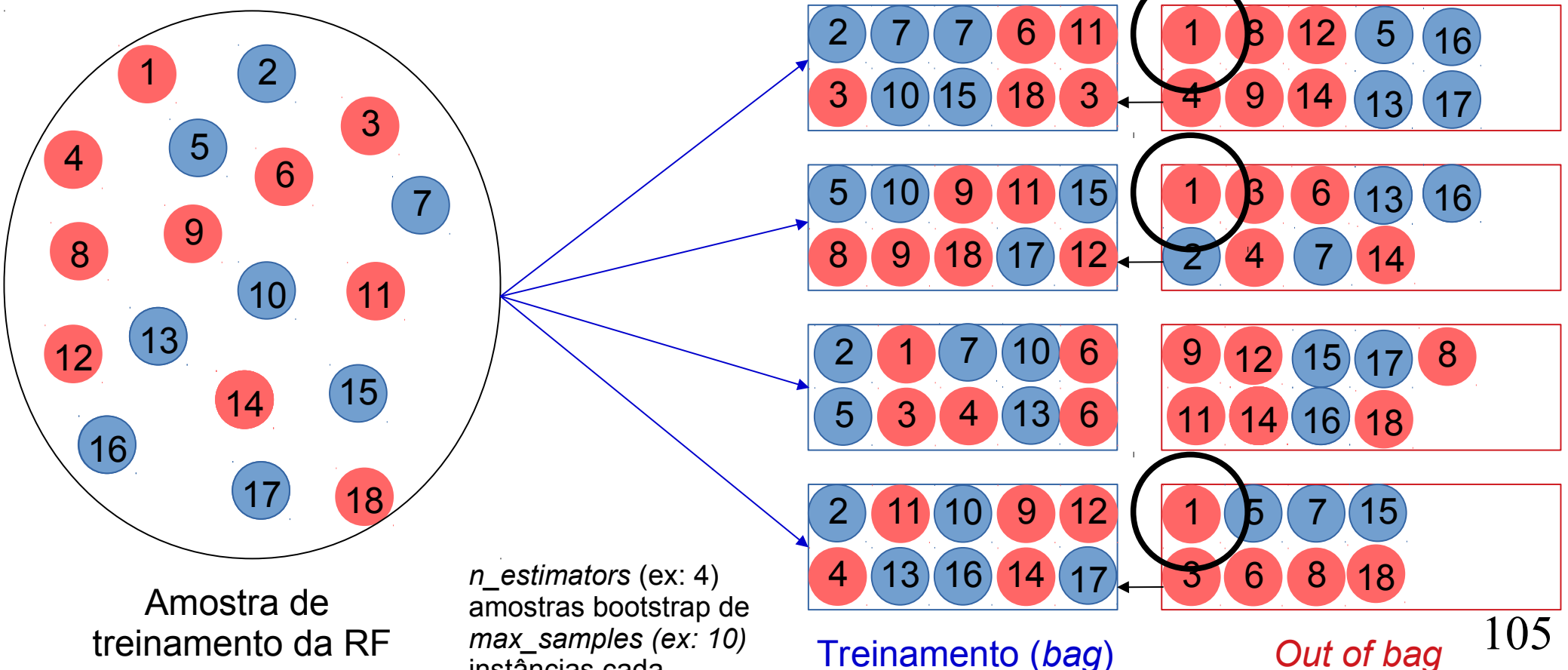
Erro ou score *out of bag*

- **erro *out of bag*** : taxa de erro da amostra de treinamento mas considerando que, para cada instância x, foram utilizadas apenas as árvores de decisão que não utilizaram x para sua construção



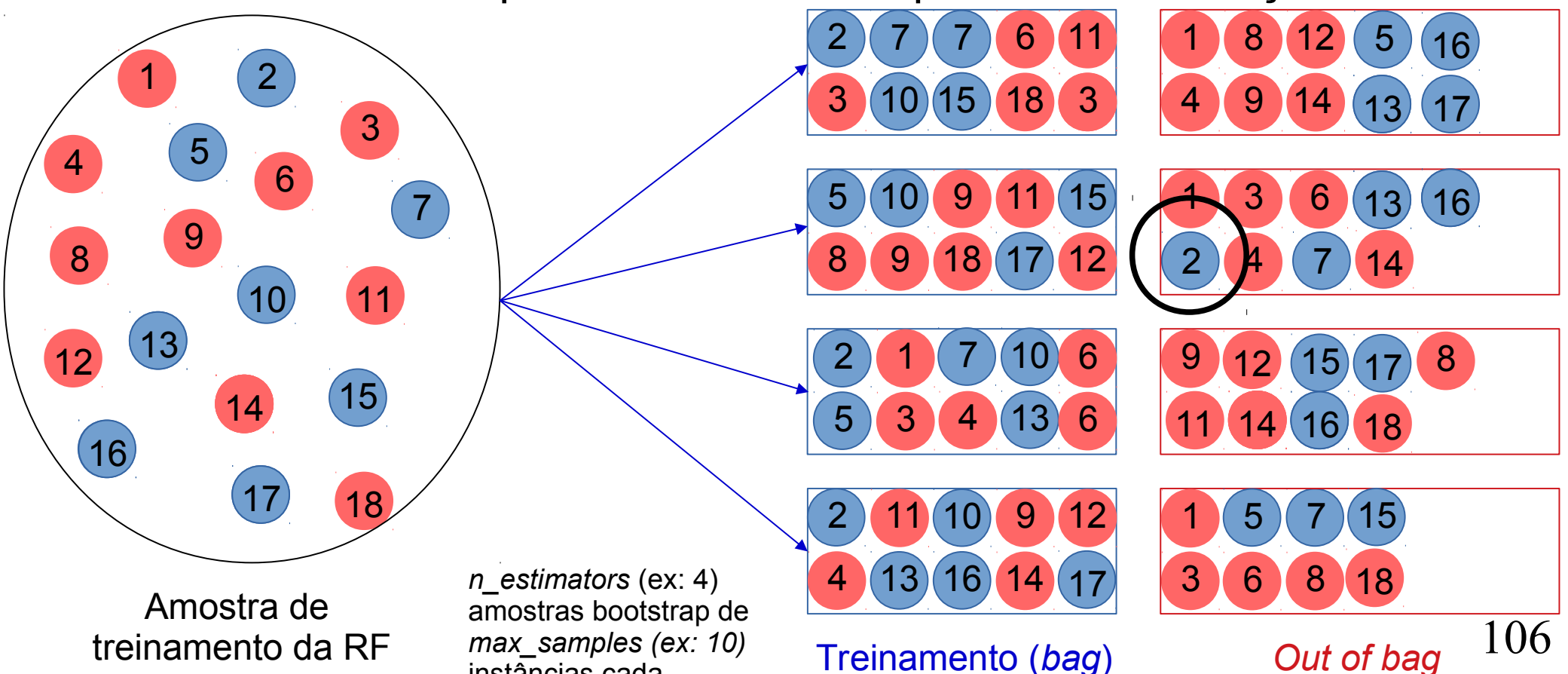
Erro ou score *out of bag*

- **erro *out of bag*** : taxa de erro da amostra de treinamento mas considerando que, para cada instância x, foram utilizadas apenas as árvores de decisão que não utilizaram x para sua construção



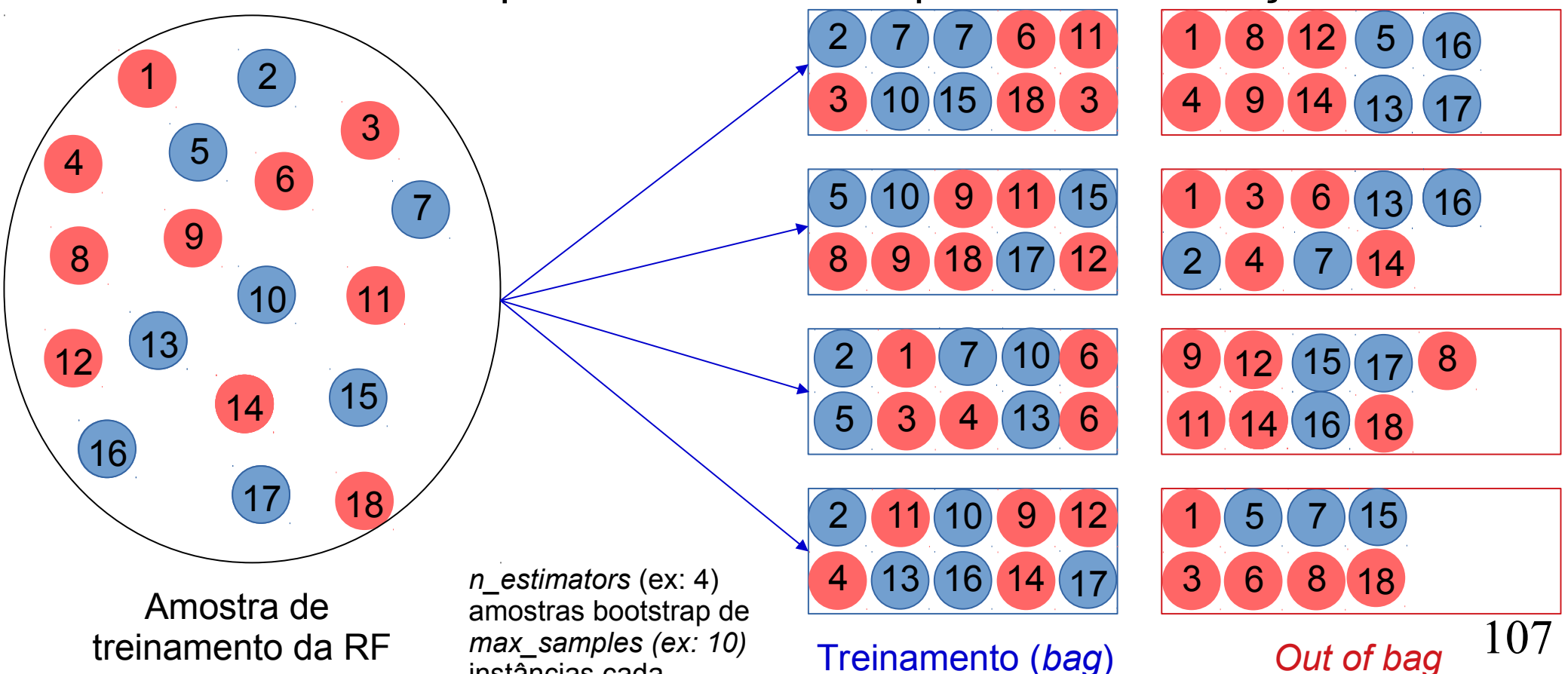
Erro ou score *out of bag*

- **erro *out of bag*** : taxa de erro da amostra de treinamento mas considerando que, para cada instância x, foram utilizadas apenas as árvores de decisão que não utilizaram x para sua construção



Erro ou score *out of bag*

- **erro *out of bag*** : taxa de erro da amostra de treinamento mas considerando que, para cada instância x, foram utilizadas apenas as árvores de decisão que não utilizaram x para sua construção



Erro estimado x erro *out of bag*

- Erro estimado usa todas as árvores, o que torna o cenário mais próximo da realidade
- Porém para a estimativa do erro é necessário dividir a amostra original em treinamento e teste, o que também não corresponde à realidade (principalmente quando a amostra de treinamento for bastante diminuída, por ex validação cruzada com k = 3)
  - Por outro lado, o *out of bag* pode ser calculado utilizando a amostra original inteira
- Erro *out of bag* costuma superestimar o erro, mas o impacto parece não ser tão grande para calibração de parâmetros ;-) (Janitza, 2018)

Importância das variáveis

- Para cada característica: score de importância baseada em *out of bag (OOB)*
- Para cada característica c

  Para cada árvore t

  Permuta os valores de c nos exemplos out of bag de t
  Classifica esses exemplos usando t

  Com base nessas novas classifições calcula OOB_P

  Importância de c = $(OOB_P - OOB) / OOB$

- Viés do tipo de variável (categóricas com poucos valores favorecidas)

Importância das variáveis

- Para cada característica: score de importância baseada em *out of bag (OOB)*
- Para cada característica c

  Para cada árvore t

  Permuta os valores de c nos exemplos out of bag de t
  Classifica esses exemplos usando t

  Com base nessas novas classifições calcula OOB_P

  Importância de c = $(OOB_P - OOB) / OOB$

- Viés do tipo de variável (categóricas com poucos valores favorecidas)

Mas isso é diferente de um selecionador de características do tipo filtro...

Calibração de parâmetros

- Há vários parâmetros a serem calibrados (praticamente os mesmos que os de árvores de decisão) mas um dos mais importantes é o max_features (chute inicial – raiz quadrada do nr de features)
- max_depth é um parâmetro, mas a ideia é que cada árvore seja o mais profunda possível (na verdade, folhas o mais puras possível) e sem poda

Hyperparameters and tuning strategies for random forest

Philipp Probst[1] | Marvin N. Wright[2] | Anne-Laure Boulesteix[1]

WIREs Data Mining Knowl Discov. 2019;9:e1301. wires.wiley.com/dmkd
https://doi.org/10.1002/widm.1301

TABLE 1 Overview of the different hyperparameter of random forest and typical default values. n is the number of observations and p is the number of variables in the dataset

Hyperparameter	Description	Typical default values
mtry	Number of drawn candidate variables in each split	$\sqrt{p}$, $p/3$ for regression
Sample size	Number of observations that are drawn for each tree	n
Replacement	Draw observations with or without replacement	TRUE (with replacement)
Node size	Minimum number of observations in a terminal node	1 for classification, 5 for regression
Number of trees	Number of trees in the forest	500, 1,000
Splitting rule	Splitting criteria in the nodes	Gini impurity, p value, random

Atividade 9

- Semelhante aos anteriores, usando Random Forests
- Parâmetros a serem calibrados:
  - mtry / max_features (o parâmetro mais sensível): raiz (quadrada) de n, n sendo o número de características (testar outros)
  - ntree = 500 (quanto maior melhor, depende do tempo disponível)

Referências

- Notas do Prof. Marcelo Lauretto (edisciplinas)
- CLARK, A.; FOX, C.; LAPPIN, S. The Handbook of Computational Linguistics and Natural Language Processing. Ed. Wiley-Blackwell, 2010. Cap 7
- Quinlan, J. R. “Induction of decision trees,” Machine learning, vol. 1, no. 1, pp. 81–106, 1986
- Quinlan, J. R. C4. 5: programs for machine learning. Elsevier, 2014.
- Breiman, L.; Friedman, J. ;Olshen, R. and Stone, C. Classification and Regression Trees. Chapman & Hall (Wadsworth, Inc.), 1984.
- Lauretto, M. S. Árvores de classificação para escolha de estratégias de operação em mercados de capitais. Dissertação de mestrado, Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo, 1996.
- Frizzarini, C. Algoritmo para indução de árvores de classificação para dados desbalanceados. Dissertação de mestrado, Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo, 2013.
- Janitza, S.; Homung, R. On the overestimation of random forest’s out-of-bag error. PlosOne 18(8):e0201904

Fim do vídeo 4

Random Forests