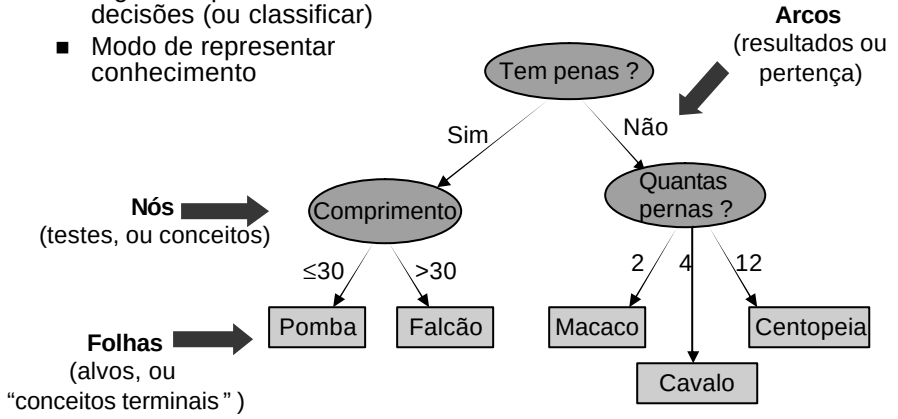
Arvores de decisão

Victor Lobo

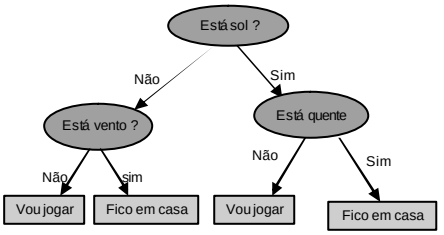
O que é uma árvore de decisão ?

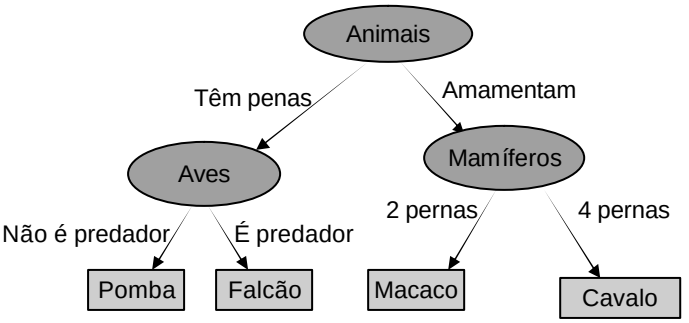
- Algorítmo para tomar decisões (ou classificar)
- Modo de representar conhecimento



Outras árvores

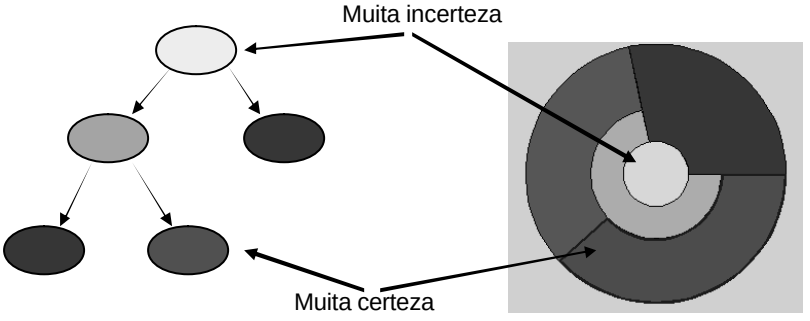
- Sempre “divide and conquer” !





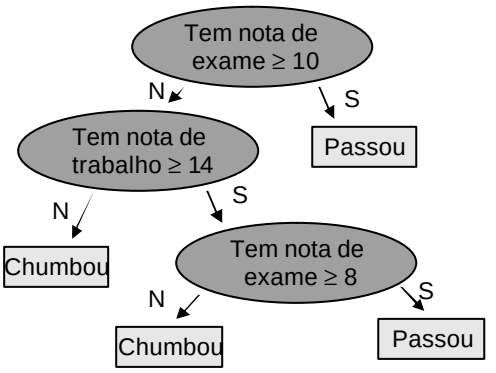
Outra maneira de ver árvores

- Vista de cima...
  - Permite ver também o número de dados abrangidos, e o poder discriminante da pergunta



Extracção de regras (a partir de árvores)

- Cada arco
  - acrescenta uma conjunção
- Cada folha "repetida"
  - acrescenta uma disjunção



Passou $\Leftrightarrow$ (Exame $\geq$ 10) $\vee$ ((Exame < 10) $\wedge$(Trabalho $\geq$ 14) $\wedge$ (Exame $\geq$ 8))

Chumbou $\Leftrightarrow$ ((Exame<10) $\wedge$ (Trabalho<14)) $\vee$
((Exame < 10) $\wedge$(Trabalho $\geq$14) $\wedge$ (Exame < 8))

Vantagens das árvores (1)

Importantíssimo !
A razão !

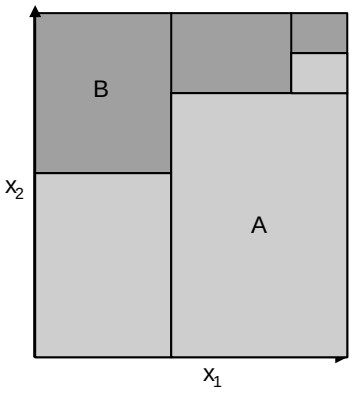
- Interpretação
  - Percebe-se a razão da decisão
- Facilidade em lidar com diversos tipos de informação
  - Real, nominal, ordinal, etc
  - Não é necessário definir "importância relativa"
- Insensível a factores de escala

Vantagens das árvores (2)

- Escolha automática dos atributos mais relevantes em cada caso
  - Atributos mais relevantes aparecem mais acima na árvore
- Adaptável também a problemas de regressão
  - Modelos locais lineares como folhas

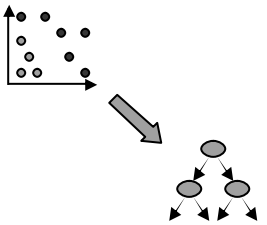
Desvantagens de árvores

- Fronteiras lineares e perpendiculares aos eixos (CART & Cia.)
- Sensibilidade a pequenas perturbações no conjunto de treino (geram redes muito diferentes)



Indução de árvores de decisão

- A partir de um conjunto de treino, construir uma árvore
- Problemas:
  - Que pergunta fazer ?
    - Que variável interrogar ?
    - Qual o valor de corte ?
    - Qual o nó a "partir" ?
  - Quantos ramos pôr em cada nó ?
  - Quando parar ?



Algoritmo básico de indução de árvores de decisão

- Em cada nível divide o conjunto de exemplos em partições alternativas.
  - Utilizando uma medida da *QUALIDADE* da partição selecciona a melhor partição.
- Para a partição seleccionada, volta a repetir o processo para cada um dos elementos da partição.
- Parar quando algum critério for atingido

Algoritmos mais usados

- ID3, C4.5 e C5 [Quinlan 86,93]
  - Iterative Dichotomizer 3
- CART[Breiman 84]
  - Classification and regression trees
- CHAID [Hartigan 75]
  - *Chi-Squared Automatic Interaction Detection*
  - Usado pelo SPSS e SAS…
- Muitas (mesmo muitas) outras variantes...
  - Em SAS: possibilidade de seleccionar os diferentes parâmetros para a construção da árvore

Algoritmo DDT (devisive decision tree - Hunt 62)

- Assume-se que existe uma atributo especial a "*Classe*" e que os exemplos foram previamente classificados.
- Cada nó especifica um único atributo, que é usado como teste, designado por atributo mais discriminante.
- N – o nó *N*
- ASET – Atribute Set – Conjunto de atributos
- ISET – Instance Set – Conjunto de exemplos

DDT(N, ASET, ISET)

Se o conjunto *ISET* é vazio **então** o nó terminal *N* é da classe *desconhecida*
senão
Se todas os exemplos de *ISET* são da mesma classe
então o nó terminal *N* tem o nome da classe
senão
Para cada atributo *A* do conjunto de atributos *ASET*
Avalia *A* de acordo com a capacidade de discriminar a classe
Selecciona o atributo *B* que tem o melhor valor discriminante
Para cada valor *V* do melhor atributo *B*
Cria um novo filho *C* do nó *N*
Coloca o par atributo valor *(B, V)* em *C*
Seja *JSET* o conjunto de exemplos de *ISET* com o valor *V* em *B*
Seja *KSET* o conjunto de atributos de *ASET* com *B* removido
DDT(*C, KSET, JSET*)

Pesquisa

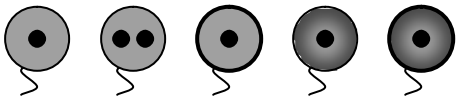
- É uma pesquisa "gulosa".
- Não tem "backtracking".
- Pode ficar presa num mínimo local.

O "bias" desta aproximação indutiva é que as árvores mais pequenas são preferíveis às árvores grandes.

(Occam´s razor: prefere a hipótese mais simples que justifica os dados - 1320)

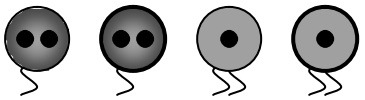
Exemplo (Análise de células [Langley 96])

Lethargia



Burpoma

Saudável



Forma tabelar

# Núcleos	# Caudas	Cor	Membrana	Classe
1	1	Clara	Fina	Lethargia
2	1	Clara	Fina	Lethargia
1	1	Clara	Grossa	Lethargia
1	1	Escura	Fina	Lethargia
1	1	Escura	Grossa	Lethargia
2	2	Clara	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Grossa	Burpoma
2	1	Escura	Fina	Saudável
2	1	Escura	Grossa	Saudável
1	2	Clara	Fina	Saudável
1	2	Clara	Grossa	Saudável

Métrica de qualidade

- Seja a medida de discriminação do atributo

$$f(A) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{|A|} C_i$$

em que n é o número total de exemplos e C_i é o número de exemplos correctamente classificados pela classe mais frequente.

É uma medida da "dominância" ou "pureza"

Tabelas

Se fizermos a partição pelo nº de núcleos...

# núcleos	1	2
Lethargia	4	1
Burpoma	0	3
Saudável	2	2

Poder discriminante:

(4 + 3) / 12 = 0.58

# Núcleos	# Caudas	Cor	Membrana	Classe
1	1	Clara	Fina	Lethargia
2	1	Clara	Fina	Lethargia
1	1	Clara	Grossa	Lethargia
1	1	Escura	Fina	Lethargia
1	1	Escura	Grossa	Lethargia
2	2	Clara	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Grossa	Burpoma
2	1	Escura	Fina	Saudável
2	1	Escura	Grossa	Saudável
1	2	Clara	Fina	Saudável
1	2	Clara	Grossa	Saudável

Tabelas

Se fizermos a partição pelo nº de caudas...

# caudas	1	2
Lethargia	5	0
Burpoma	0	3
Saudável	2	2

Poder discriminante:

(5 + 3) / 12 = 0.67

# Núcleos	# Caudas	Cor	Membrana	Classe
1	1	Clara	Fina	Lethargia
2	1	Clara	Fina	Lethargia
1	1	Clara	Grossa	Lethargia
1	1	Escura	Fina	Lethargia
1	1	Escura	Grossa	Lethargia
2	2	Clara	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Grossa	Burpoma
2	1	Escura	Fina	Saudável
2	1	Escura	Grossa	Saudável
1	2	Clara	Fina	Saudável
1	2	Clara	Grossa	Saudável

Tabelas

Se fizermos a partição peça côr ...

Cor	Clara	Escura
Lethargia	3	2
Burpoma	1	2
Saudável	2	2

Poder discriminante:

(3 + 2) / 12 = 0.41

# Núcleos	# Caudas	Cor	Membrana	Classe
1	1	Clara	Fina	Lethargia
2	1	Clara	Fina	Lethargia
1	1	Clara	Grossa	Lethargia
1	1	Escura	Fina	Lethargia
1	1	Escura	Grossa	Lethargia
2	2	Clara	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Grossa	Burpoma
2	1	Escura	Fina	Saudável
2	1	Escura	Grossa	Saudável
1	2	Clara	Fina	Saudável
1	2	Clara	Grossa	Saudável

Tabelas

Se fizermos a partição pelo tipo de membrana...

Membrana	Fina	Grossa
Lethargia	3	2
Burpoma	2	1
Saudável	3	1

Poder discriminante:

(3 + 2) / 12 = 0.41

# Núcleos	# Caudas	Cor	Membrana	Classe
1	1	Clara	Fina	Lethargia
2	1	Clara	Fina	Lethargia
1	1	Clara	Grossa	Lethargia
1	1	Escura	Fina	Lethargia
1	1	Escura	Grossa	Lethargia
2	2	Clara	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Fina	Burpoma
2	2	Escura	Grossa	Burpoma
2	1	Escura	Fina	Saudável
2	1	Escura	Grossa	Saudável
1	2	Clara	Fina	Saudável
1	2	Clara	Grossa	Saudável

Tabelas

# núcleos	1	2
Lethargia	4	1
Burpoma	0	3
Saudável	2	2

0.58

Cor	Clara	Escura
Lethargia	3	2
Burpoma	1	2
Saudável	2	2

0.41

# caudas	1	2
Lethargia	5	0
Burpoma	0	3
Saudável	2	2

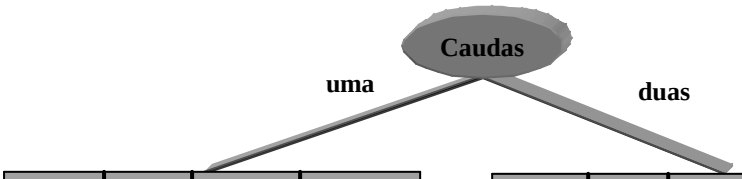
0.67

Membrana	Fina	Grossa
Lethargia	3	2
Burpoma	2	1
Saudável	3	1

0.41

Escolha: # Caudas

A árvore inicial



# Núcleos	Cor	Membrana	Classe
1	Clara	Fina	Lethargia
2	Clara	Fina	Lethargia
1	Clara	Grossa	Lethargia
1	Escura	Fina	Lethargia
1	Escura	Grossa	Lethargia
2	Escura	Fina	Saudável
2	Escura	Grossa	Saudável

# Núcleos	Cor	Membrana	Classe
2	Clara	Fina	Burpoma
2	Escura	Fina	Burpoma
2	Escura	Grossa	Burpoma
1	Clara	Fina	Saudável
1	Clara	Grossa	Saudável

Tabelas sabendo #caudas = 1

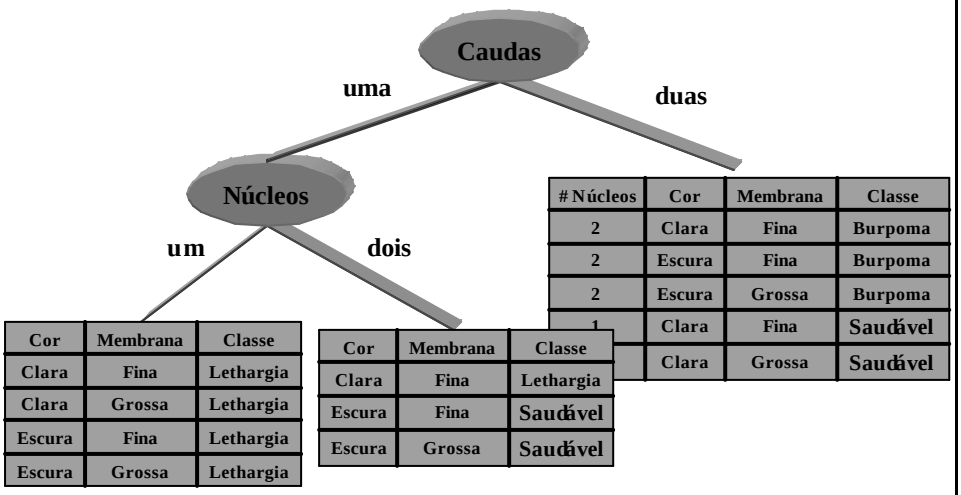
# núcleos	1	2
Lethargia	4	1
Burpoma	0	0
Saudável	0	2

# Núcleos	Cor	Membrana	Classe
1	Clara	Fina	Lethargia
2	Clara	Fina	Lethargia
1	Clara	Grossa	Lethargia
1	Escura	Fina	Lethargia
1	Escura	Grossa	Lethargia
2	Escura	Fina	Saudável
2	Escura	Grossa	Saudável

Cor	Clara	Escura
Lethargia	3	2
Burpoma	0	0
Saudável	0	2

Membrana	Fina	Grossa
Lethargia	3	2
Burpoma	0	0
Saudável	0	2

A árvore (continuação 1)

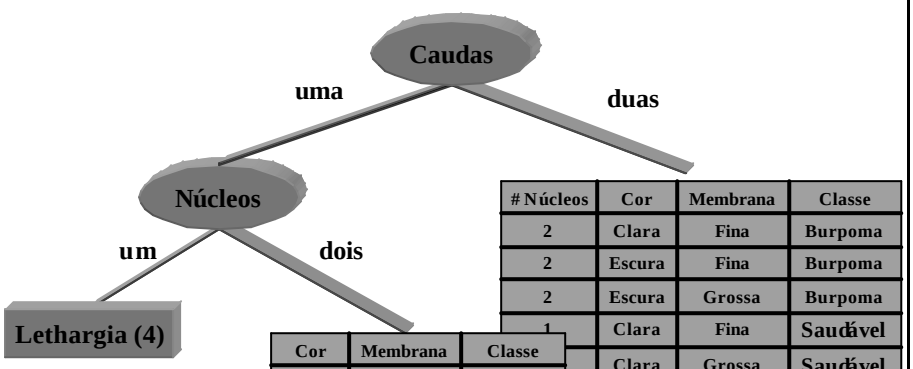


# Núcleos	Cor	Membrana	Classe
2	Clara	Fina	Burpoma
2	Escura	Fina	Burpoma
2	Escura	Grossa	Burpoma
1	Clara	Fina	Saudável
1	Clara	Grossa	Saudável

Cor	Membrana	Classe
Clara	Fina	Lethargia
Clara	Grossa	Lethargia
Escura	Fina	Lethargia
Escura	Grossa	Lethargia

Cor	Membrana	Classe
Clara	Fina	Lethargia
Escura	Fina	Saudável
Escura	Grossa	Saudável

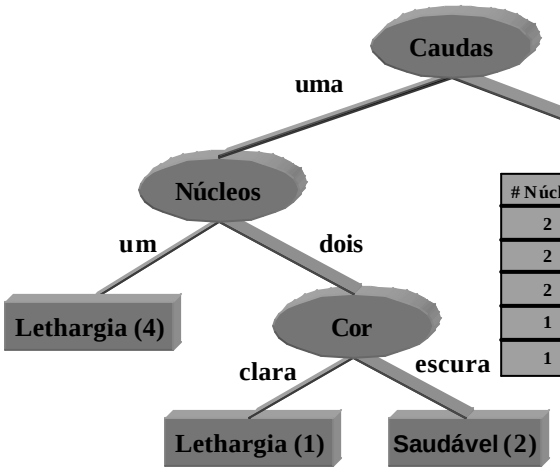
A árvore (continuação 2)



# Núcleos	Cor	Membrana	Classe
2	Clara	Fina	Burpoma
2	Escura	Fina	Burpoma
2	Escura	Grossa	Burpoma
1	Clara	Fina	Saudável
1	Clara	Grossa	Saudável

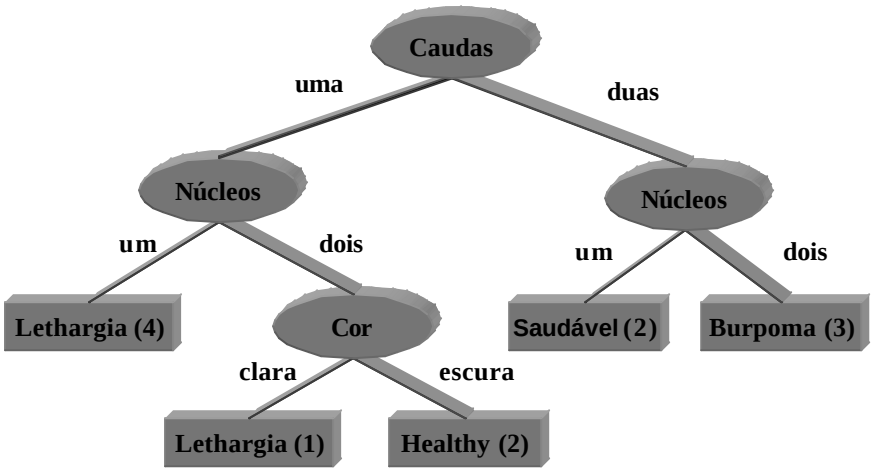
Cor	Membrana	Classe
Clara	Fina	Lethargia
Escura	Fina	Saudável
Escura	Grossa	Saudável

A árvore (continuação 3)

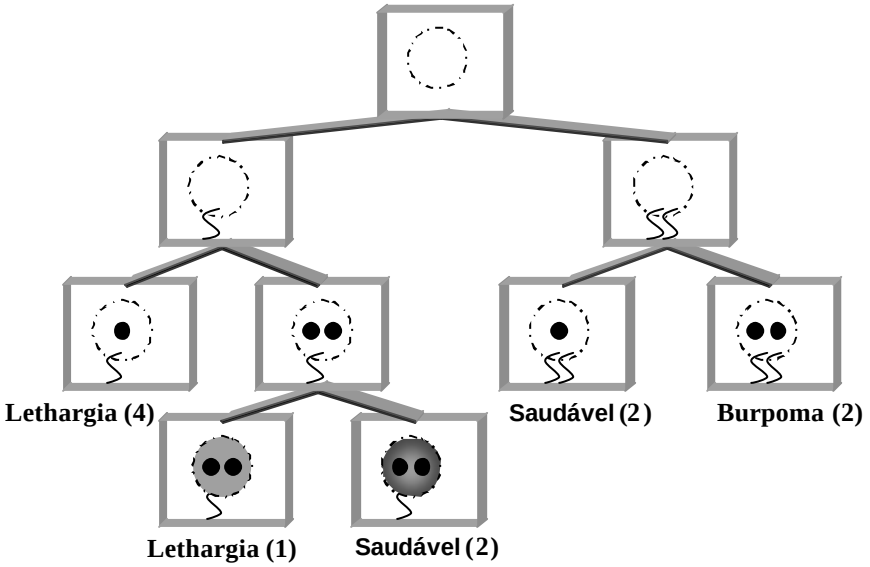


# Núcleos	Cor	Membrana	Classe
2	Clara	Fina	Burpoma
2	Escura	Fina	Burpoma
2	Escura	Grossa	Burpoma
1	Clara	Fina	Saudável
1	Clara	Grossa	Saudável

A árvore final



Outra interpretação



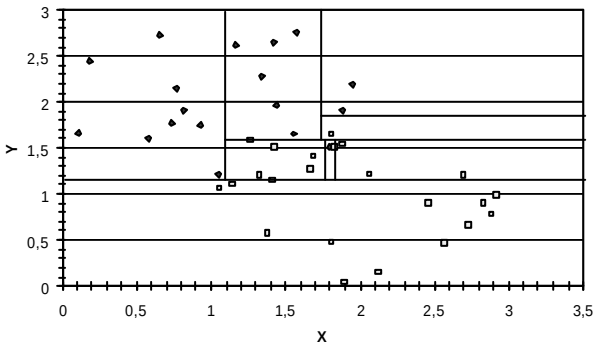
Descrição das três classes

$$(caudas = uma) \wedge (núcleos = um)$$
$$\vee$$
$$(caudas = uma) \wedge (núcleos = dois) \wedge (cor = clara) \rightarrow Lethargia$$

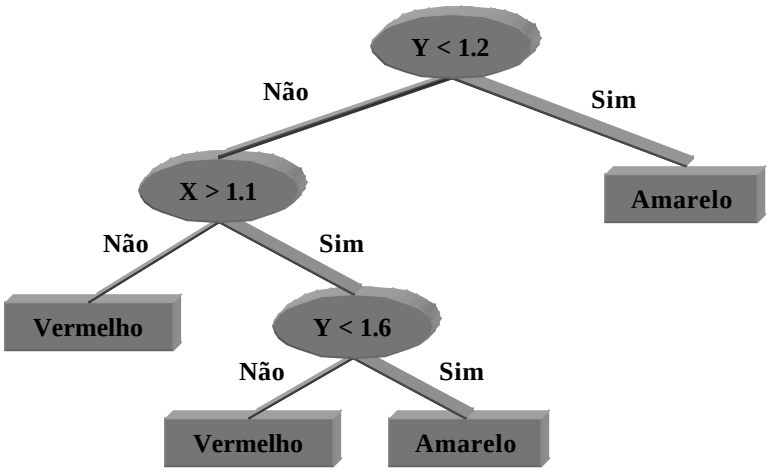
$$(caudas = duas) \wedge (núcleos = um)$$
$$\vee$$
$$(caudas = uma) \wedge (núcleos = 2) \wedge (cor = escura) \rightarrow Saudável$$

$$(caudas = duas) \wedge (núcleos = dois) \rightarrow Burpoma$$

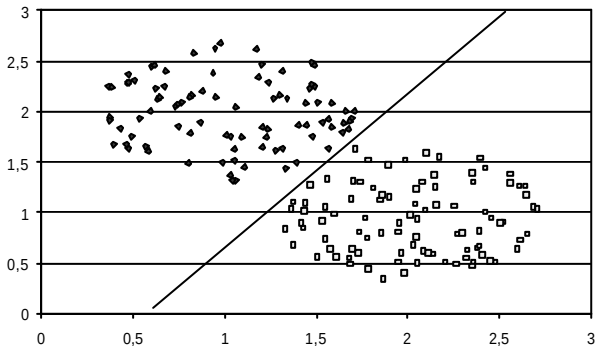
Outro exemplo



A árvore do exemplo anterior

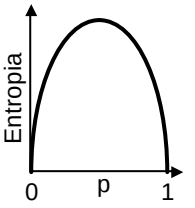


Qual a melhor solução?



Critérios para escolher as partições

- Entropia
  - Ideia base: maximizar a informação
  - Mede a "pureza" de um nó pela entropia que é definida como sendo
    - E = - p $\log_2$(p)
      - onde p é a probabilidade dos exemplos terem uma dada classe
  - Entropia de uma partição:



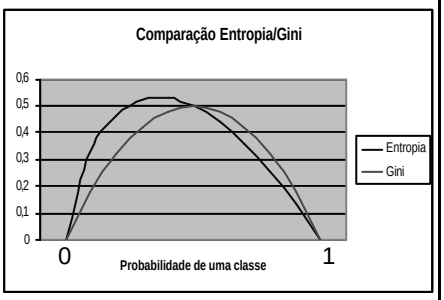
$$Ent(S) = \sum_{i=1}^{\#C} - p_i \log_2(p_i)$$

  - Ganho da escolha do atributo A

$$Ganho(S, A) = Ent(S) - \sum_{v \in Valores(A)} \frac{\#S_v}{\#S} Ent(S_v)$$

Critérios para escolher as partições (2)

- Gini
  - Parecido com a entropia, mas evita o cálculo do logaritmo usando apenas G = p (1-p)
  - No caso mais geral $G=\Sigma p_i$



- χ^2
  - Mede a significância da diferença entre os erros obtidos apenas com o "nó mãe" e com os "nós filhos"

Estratégias para evitar sobreaprendizagem

- Prunning de árvores (pós-prunning)
  - Eliminar as folhas que provocam erros no conjunto de treino
  - Eliminar folhas até que o erro no treino seja semelhante ao erro no teste
- Evitar crescimento demasiado
  - Avaliar significância dos nós
- Fazer backtracking, usar sempre todos os dados, etc, etc…

Bibliografia

- Mitchell, TM: 1997, *Machine Learning*, McGraw-Hill
- Langley, P: 1996, *Elements of Machine Learning*, Morgan and Kaufmann Publishers.
- Breiman, L., J. H. Friedman, R. A. Olsen and C. J. Stone (1984). Classification and Regression Trees, Chapman & Hall, pp 358.