Логические алгоритмы классификации

Воронцов Константин Вячеславович
vokov@forecsys.ru
http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

Видеолекции: http://shad.yandex.ru/lectures

ШАД Яндекс • 27 февраля 2018

Содержание

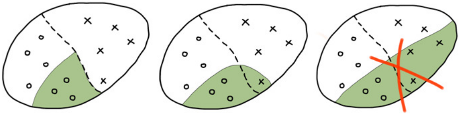
Логическая закономерность

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \subset X \times Y$ — обучающая выборка, $y_i = y(x_i)$.

Логическая закономерность (правило, rule) — это предикат $R\colon X \to \{0,1\}$, удовлетворяющий двум требованиям:

1. *интерпретируемость*:
   1) R записывается на естественном языке;
   2) R зависит от небольшого числа признаков (1–7);
2. *информативность* относительно одного из классов $c \in Y$:
   $p_c(R) = \#\bigl\{x_i\colon R(x_i){=}1 \text{ и } y_i{=}c\bigr\} \to \max;$
   $n_c(R) = \#\bigl\{x_i\colon R(x_i){=}1 \text{ и } y_i{\neq}c\bigr\} \to \min;$

Если $R(x) = 1$, то говорят «R выделяет x» (R covers x).



Требование интерпретируемости

1) $R(x)$ записывается на естественном языке;
2) $R(x)$ зависит от небольшого числа признаков (1–7);

Пример (из области медицины)

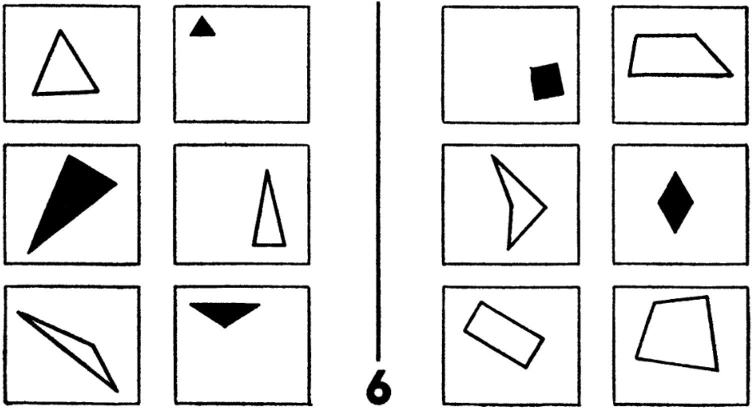
Если *«возраст > 60»* ***и*** *«пациент ранее перенёс инфаркт»,*
то *операцию не делать, риск отрицательного исхода 60%.*

Пример (из области кредитного скоринга)

Если *«в анкете указан домашний телефон»*
и *«зарплата $>$ \$2000»* ***и*** *«сумма кредита $<$ \$5000»*
то *кредит можно выдать, риск дефолта 5%.*

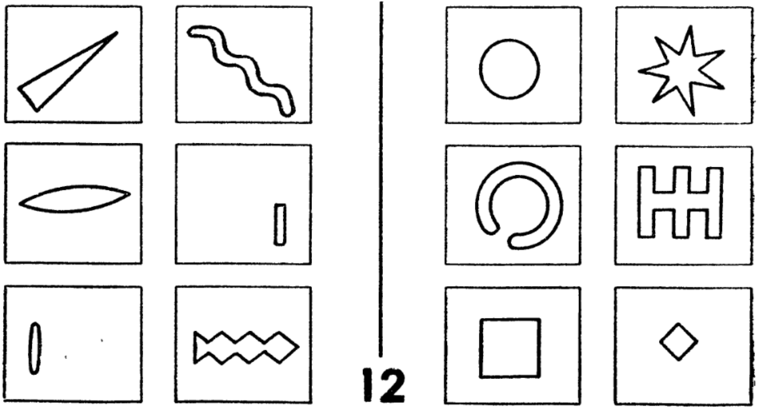
Тесты М. М. Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Интерпретируемость: простой вид правила, мало признаков.
Информативность: много своих ($\max p$), мало чужих ($\min n$).



Тесты М. М. Бонгарда [Проблема узнавания, 1967]

Интерпретируемость: простой вид правила, мало признаков.
Информативность: много своих ($\max p$), мало чужих ($\min n$).



Обучение логических классификаторов

Основные шаги *индукции правил* (rule induction):

1. Выбор семейства правил для поиска закономерностей
2. Порождение правил (rule generation)
3. Отбор правил-закономерностей (rule selection)
4. Построение классификатора из правил как из признаков, пример: *взвешенное голосование* (weighted voting) правил

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{j=1}^{n_y} w_{yj} R_{yj}(x)$$

Двойственная трактовка понятия «*закономерности*» $R(x)$:

- высокоинформативный интерпретируемый признак
- одноклассовый классификатор с отказами

Часто используемые виды закономерностей

1. Пороговое условие (решающий пень, decision stump):

$$R(x) = \bigl[f_j(x) \leqslant a_j\bigr] \text{ или } \bigl[a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j\bigr].$$

2. *Конъюнкция* пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \bigl[a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j\bigr].$$

3. *Синдром* — выполнение не менее d условий из $|J|$, (при $d = |J|$ это конъюнкция, при $d = 1$ — дизъюнкция):

$$R(x) = \Biggl[\sum_{j \in J} \bigl[a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j\bigr] \geqslant d\Biggr],$$

Параметры J, a_j, b_j, d настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации *критерия информативности*.

Часто используемые виды закономерностей

4. *Полуплоскость* — линейная пороговая функция:

$$R(x) = \Bigl[\sum_{j\in J} w_j f_j(x) \geqslant w_0\Bigr].$$

5. *Шар* — пороговая функция близости:

$$R(x) = \bigl[\rho(x, x_0) \leqslant w_0\bigr],$$

АВО — алгоритмы вычисления оценок [Ю. И. Журавлёв, 1971]:

$$\rho(x, x_0) = \max_{j\in J} w_j \bigl|f_j(x) - f_j(x_0)\bigr|.$$

SCM — машины покрывающих множеств [M. Marchand, 2001]:

$$\rho(x, x_0) = \sum_{j\in J} w_j \bigl|f_j(x) - f_j(x_0)\bigr|^{\gamma}.$$

Параметры J, w_j, w_0, x_0 настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации *критерия информативности*.

Проблема оценивания информативности

Проблема: надо сравнивать закономерности R.
Как свернуть два критерия в один критерий информативности?

$$\begin{cases} p(R) \to \max \\ n(R) \to \min \end{cases} \quad \overset{?}{\Longrightarrow} \quad I(p,n) \to \max$$

Очевидные, но не всегда адекватные свёртки:

- $I(p,n) = \dfrac{p}{p+n} \to \max$ (precision);
- $I(p,n) = p - n \to \max$ (accuracy);
- $I(p,n) = p - Cn \to \max$ (linear cost accuracy);
- $I(p,n) = p/P - n/N \to \max$ (relative accuracy);
  где $P = \#\{x_i\colon y_i{=}c\}$, $N = \#\{x_i\colon y_i{\neq}c\}$.

J.Fürnkranz, P.Flach. ROC 'n' rule learning – towards a better understanding of covering algorithms // Machine Learning, 2005.

Нетривиальность проблемы свёртки двух критериев

Пример:

при $P = 200$, $N = 100$ и различных p и n.

Простые эвристики не всегда адекватны:

p	n	$p-n$	$p-5n$	$\frac{p}{P}-\frac{n}{N}$	$\frac{p}{n+1}$	IStat$\cdot\ell$	IGain$\cdot\ell$	$\sqrt{p}-\sqrt{n}$
50	0	**50**	50	0.25	50	22.65	23.70	7.07
100	50	**50**	−150	0	1.96	2.33	1.98	2.93
50	9	41	**5**	0.16	**5**	7.87	7.94	4.07
5	0	5	**5**	0.03	**5**	2.04	3.04	2.24
100	0	**100**	100	**0.5**	100	52.18	53.32	10.0
140	20	**120**	40	**0.5**	6.67	37.09	37.03	7.36

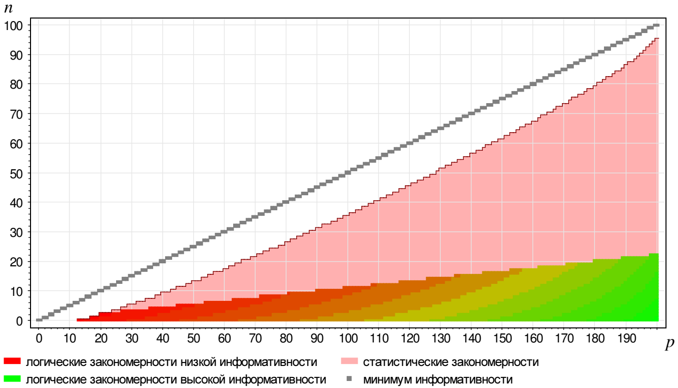
Часто используемые критерии информативности

Более адекватные, но менее очевидные свёртки:

- энтропийный критерий прироста информации:
  $$\mathrm{IGain}(p,n) = h\left(\tfrac{P}{\ell}\right) - \tfrac{p+n}{\ell} h\left(\tfrac{p}{p+n}\right) - \tfrac{\ell-p-n}{\ell} h\left(\tfrac{P-p}{\ell-p-n}\right) \to \max,$$
  где $h(q) = -q\log_2 q - (1-q)\log_2(1-q)$
- критерий Джини (Gini impurity):
  $\mathrm{IGini}(p,n) = \mathrm{IGain}(p,n)$ при $h(q) = 4q(1-q)$
- точный статистический тест Фишера (Fisher's Exact Test):
  $$\mathrm{IStat}(p,n) = -\tfrac{1}{\ell}\log_2 \frac{C_P^p C_N^n}{C_{P+N}^{p+n}} \to \max$$
- критерий бустинга:
  $\sqrt{p} - \sqrt{n} \to \max$
- нормированный критерий бустинга:
  $\sqrt{p/P} - \sqrt{n/N} \to \max$

Где находятся закономерности в (p, n)-плоскости

Логические закономерности: $\frac{n}{p+n} \leqslant 0.1$, $\frac{p}{P+N} \geqslant 0.05$.
Статистические закономерности: $\mathrm{IStat}(p, n) \geqslant 3$.



$P = 200$
$N = 100$

Вывод: неслучайность — ещё не значит закономерность.

Мета-эвристики для поиска информативных закономерностей

Вход: выборка X^ℓ;
Выход: множество закономерностей Z;

1: начальное множество правил Z;
2: **повторять**
3: $Z' :=$ множество *локальных модификаций* правил $R \in Z$;
4: удалить слишком похожие правила из $Z \cup Z'$;
5: $Z :=$ наиболее *информативные* правила из $Z \cup Z'$;
6: **пока** правила продолжают улучшаться
7: **вернуть** Z.

Частные случаи:
— стохастический локальный поиск (stochastic local search)
— генетические (эволюционные) алгоритмы
— поиск в ширину
— поиск в глубину (метод ветвей и границ)

Локальные модификации правил

Пример. Семейство конъюнкций пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \bigl[a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j\bigr].$$

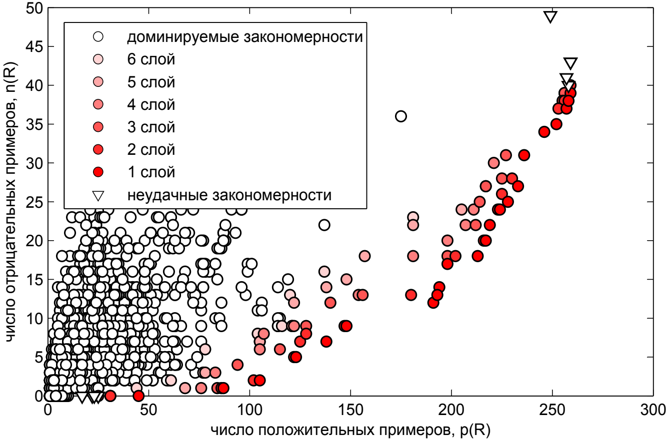
Локальные модификации конъюнктивного правила:

- варьирование одного из порогов a_j и b_j
- варьирование обоих порогов a_j, b_j одновременно
- добавление признака f_j в J с варьированием порогов a_j, b_j
- удаление признака f_j из J

При удалении признака (pruning) информативность обычно оценивается по контрольной выборке (hold-out)

Отбор закономерностей по информативности в (p, n)-плоскости

Парето-фронт — множество неулучшаемых закономерностей (точка неулучшаема, если правее и ниже неё точек нет)



UCI:german

Композиции закономерностей

Взвешенное голосование (линейный классификатор с весами w_{yt}):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{t=1}^{T_y} w_{yt} R_{yt}(x)$$

Простое голосование (комитет большинства)

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \frac{1}{T_y} \sum_{t=1}^{n_y} R_{yt}(x)$$

Решающий список (комитет старшинства), $c_t \in Y$:

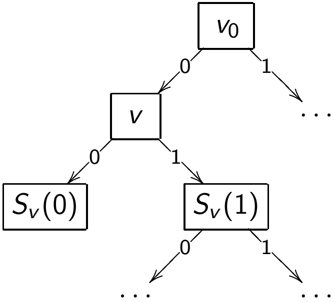
$$\begin{tikzcd} x \arrow[r] & \boxed{R_1(x)} \arrow[r, "0"] \arrow[d, "1"] & \cdots \arrow[r, "0"] & \boxed{R_T(x)} \arrow[r, "0"] \arrow[d, "1"] & c_0 \\ & c_1 & & c_T & \end{tikzcd}$$

Определение решающего дерева (Decision Tree)

Решающее дерево — алгоритм классификации $a(x)$, задающийся *деревом* (связным ациклическим графом):

1) $V = V_{\text{внутр}} \sqcup V_{\text{лист}}$, $v_0 \in V$ — корень дерева;
2) $v \in V_{\text{внутр}}$: функции $f_v\colon X \to D_v$ и $S_v\colon D_v \to V$, $|D_v| < \infty$;
3) $v \in V_{\text{лист}}$: метка класса $y_v \in Y$.

$v := v_0$;
пока $v \in V_{\text{внутр}}$
    $v := S_v(f_v(x))$;
вернуть y_v;

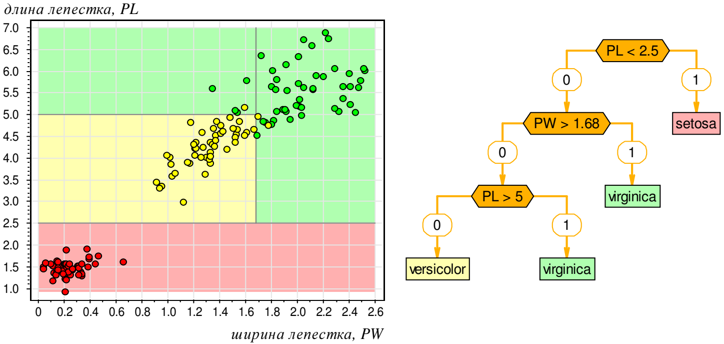


Частный случай: $D_v \equiv \{0, 1\}$
— бинарное решающее дерево

Пример: $f_v(x) = \big[f_j(x) \geqslant a_j\big]$

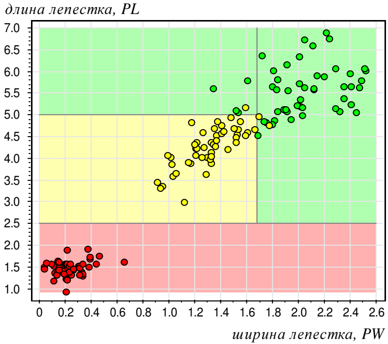
Пример решающего дерева

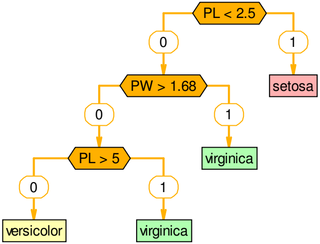
Задача Фишера о классификации цветков ириса на 3 класса, в выборке по 50 объектов каждого класса, 4 признака.



На графике: в осях двух самых информативных признаков (из 4) два класса разделились без ошибок, на третьем 3 ошибки.

Решающее дерево → покрывающий набор конъюнкций





setosa	$r_1(x) = [PL \leqslant 2.5]$
virginica	$r_2(x) = [PL > 2.5] \wedge [PW > 1.68]$
virginica	$r_3(x) = [PL > 5] \wedge [PW \leqslant 1.68]$
versicolor	$r_4(x) = [PL > 2.5] \wedge [PL \leqslant 5] \wedge [PW < 1.68]$

Обучение решающего дерева: стратегия «разделяй и властвуй»

$v_0 := \text{TreeGrowing}\ (X^\ell)$;

ФУНКЦИЯ TreeGrowing $(U \subseteq X^\ell) \mapsto$ корень дерева v;
если StopCriterion (U) **то**
  вернуть новый лист v, взяв $y_v := \text{Major}\,(U)$;
найти признак, наиболее выгодный для ветвления дерева:
$f_v := \arg\max\limits_{f \in F} \text{Gain}\,(f, U)$;
если Gain $(f_v, U) < G_0$ **то**
  вернуть новый лист v, взяв $y_v := \text{Major}\,(U)$;
создать новую внутреннюю вершину v с функцией f_v;
для всех $k \in D_v$
  $U_k := \bigl\{x \in U\colon f_v(x) = k\bigr\},\ \ S_v(k) := \text{TreeGrowing}\ (U_k)$,
вернуть v;

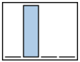
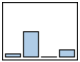
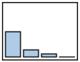
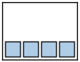
Мажоритарное правило: $\text{Major}\,(U) := \arg\max\limits_{y \in Y} P(y|U)$.

Мера неопределённости распределения

Частотная оценка вероятности класса y в вершине $v \in V_{\text{внутр}}$:

$$p_y \equiv P(y|x \in U) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} [y_i = y], \quad \forall x \in U$$

$\Phi(U)$ — мера *неопределённости* (impurity) распределения p_y:

$\Phi\Big($  $\Big) < \Phi\Big($  $\Big) = \Phi\Big($  $\Big) < \Phi\Big($  $\Big)$

1) минимальна, когда $p_y \in \{0, 1\}$,
2) максимальна, когда $p_y = \frac{1}{|Y|}$ для всех $y \in Y$,
3) симметрична: не зависит от перенумерации классов.

$$\Phi(U) = \sum_{y \in Y} p_y \mathscr{L}(p_y) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} \mathscr{L}\big(P(y_i|x_i \in U)\big) \to \min,$$

где $\mathscr{L}(p)$ убывает и $\mathscr{L}(1) = 0$, например: $-\log p$, $1-p$, $1-p^2$

Критерий ветвления

Неопределённость распределения $P(y_i|x_i \in U_{f(x_i)})$, после ветвления вершины v по признаку f и разбиения $U = \bigsqcup\limits_{k\in D_v} U_k$:

$$\Phi(U_1,\dots,U_{|D_v|}) = \frac{1}{|U|}\sum_{k\in D_v}\sum_{x_i\in U_k}\mathscr{L}\bigl(P(y_i|x_i\in U_k)\bigr) = \\ = \sum_{k\in D_v}\frac{|U_k|}{|U|}\Phi(U_k)$$

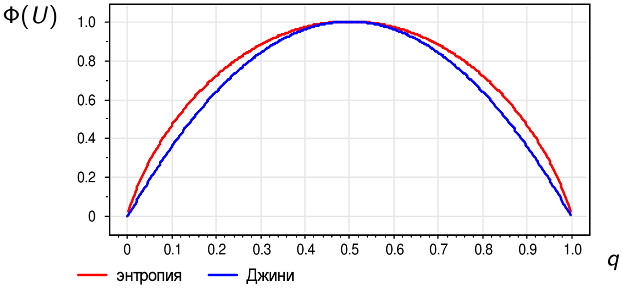
Выигрыш от ветвления вершины v:

$$\text{Gain}\,(f,U) = \Phi(U) - \Phi(U_1,\dots,U_{|D_v|}) = \\ = \Phi(U) - \sum_{k\in D_v}\frac{|U_k|}{|U|}\Phi(U_k) \to \max_{f\in F}$$

Критерий Джини и энтропийный критерий

Два класса, $Y = \{0, 1\}$, $P(y|x \in U) = \begin{cases} q, & y=1 \\ 1-q, & y=0 \end{cases}$

- Если $\mathscr{L}(p) = -\log_2 p$, то
  $\Phi(U) = -q \log_2 q - (1-q) \log_2 (1-q)$ — *энтропия* выборки.
- Если $\mathscr{L}(p) = 2(1-p)$, то
  $\Phi(U) = 4q(1-q)$ — *неопределённость Джини* (Gini impurity).



Обработка пропущенных значений

На стадии обучения:

- $f_v(x_i)$ не определено $\Rightarrow$ x_i исключается из U для Gain (f_v, U)
- $q_{vk} = \frac{|U_k|}{|U|}$ — оценка вероятности k-й ветви, $v \in V_{\text{внутр}}$
- $P(y|x, v) = \frac{1}{|U|} \sum\limits_{x_i \in U} [y_i = y]$ для всех $v \in V_{\text{лист}}$

На стадии классификации:

- $f_v(x)$ определено $\Rightarrow$ из дочерней $s = S_v(f_v(x))$ взять
  $P(y|x, v) = P(y|x, s)$.
- $f_v(x)$ не определено $\Rightarrow$ *пропорциональное распределение*:
  $P(y|x, v) = \sum\limits_{k \in D_v} q_{vk} P(y|x, S_v(k))$.
- Окончательное решение — наиболее вероятный класс:
  $a(x) = \arg\max\limits_{y \in Y} P(y|x, v_0)$.

Жадная нисходящая стратегия: достоинства и недостатки

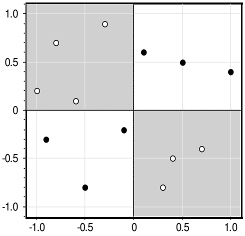
Достоинства:

- Интерпретируемость и простота классификации.
- Гибкость: можно варьировать множество F.
- Допустимы разнотипные данные и данные с пропусками.
- Трудоёмкость линейна по длине выборки $O(|F|h\ell)$.
- Не бывает отказов от классификации.

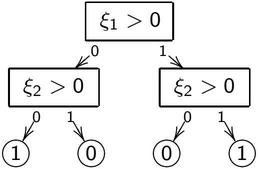
Недостатки:

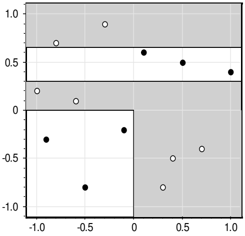
- Жадная стратегия переусложняет структуру дерева, и, как следствие, сильно переобучается.
- Фрагментация выборки: чем дальше v от корня, тем меньше статистическая надёжность выбора f_v, y_v.
- Высокая чувствительность к шуму, к составу выборки, к критерию информативности.

Жадная стратегия переусложняет структуру дерева

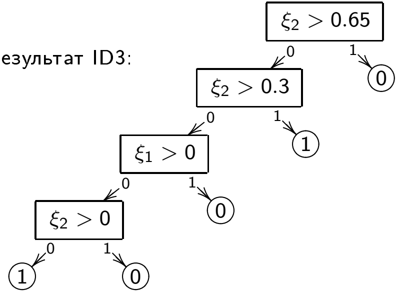


Оптимальное дерево для задачи XOR:





Результат ID3:



Усечение дерева (pruning)

X^q — независимая контрольная выборка, $q \approx 0.5\ell$.

1: **для всех** $v \in V_{\text{внутр}}$
2: $\quad X^q_v :=$ подмножество объектов X^q, дошедших до v;
3: $\quad$ **если** $X^q_v = \varnothing$ **то**
4: $\quad\quad$ **вернуть** новый лист v, $y_v := \text{Major}(U)$;
5: $\quad$ число ошибок при классификации X^q_v разными способами:
$\quad\quad$ $\text{Err}(v)$ — поддеревом, растущим из вершины v;
$\quad\quad$ $\text{Err}_k(v)$ — дочерним поддеревом $S_v(k)$, $k \in D_v$;
$\quad\quad$ $\text{Err}_c(v)$ — классом $c \in Y$.
6: $\quad$ в зависимости от того, какое из них минимально:
$\quad\quad$ сохранить поддерево v;
$\quad\quad$ заменить поддерево v дочерним $S_v(k)$;
$\quad\quad$ заменить поддерево v листом, $y_v := \arg\min\limits_{c \in Y} \text{Err}_c(v)$.

CART: деревья регрессии и классификации

Обобщение на случай *регрессии*: $Y = \mathbb{R}$, $y_v \in \mathbb{R}$.

U — множество объектов x_i, дошедших до вершины v

Мера неопределённости — среднеквадратичная ошибка

$$\Phi(U) = \min_{y \in Y} \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} (y - y_i)^2$$

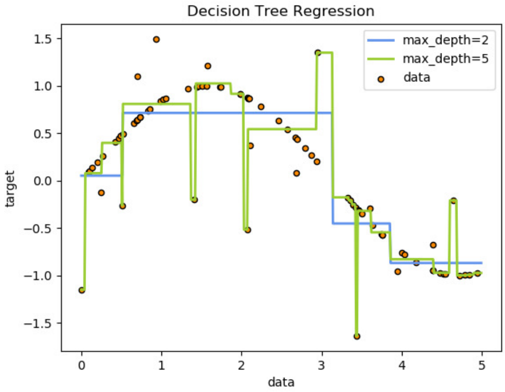
Значение y_v в терминальной вершине v — МНК-решение:

$$y_v = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} y_i$$

Дерево регрессии $a(x)$ — это кусочно-постоянная функция.

Пример. Деревья регрессии различной глубины

Чем сложнее дерево (чем больше его глубина), тем выше влияние шумов в данных и риск переобучения.



scikit-learn.org/stable/auto_examples/tree/plot_tree_regression.html

CART: критерий Minimal Cost-Complexity Pruning

Среднеквадратичная ошибка со штрафом за сложность дерева

$$C_\alpha = \sum_{i=1}^{\ell} \bigl(a(x_i) - y_i\bigr)^2 + \alpha |V_{\text{лист}}| \to \min$$

При увеличении α дерево последовательно упрощается.
Причём последовательность вложенных деревьев единственна.

Из этой последовательности выбирается дерево с минимальной ошибкой на тестовой выборке (Hold-Out).

Для случая классификации используется аналогичная стратегия усечения, с критерием Джини.

Определение решающего списка

Решающий список (Decision List, DL)
— алгоритм классификации $a\colon X \to Y$, который задаётся закономерностями $R_1(x), \ldots, R_T(x)$ классов $c_1, \ldots, c_T \in Y$:

$$\begin{tikzcd}
x \arrow[r] & \boxed{R_1(x)} \arrow[r, "0"] \arrow[d, "1"] & \cdots \arrow[r, "0"] & \boxed{R_T(x)} \arrow[r, "0"] \arrow[d, "1"] & c_0 \\
& c_1 & & c_T &
\end{tikzcd}$$

для всех $t = 1, \ldots, T$
  если $R_t(x) = 1$ **то**
    вернуть c_t;
вернуть c_0 — отказ от классификации объекта x.

$$E(R_t, X^\ell) = \frac{n(R_t)}{n(R_t) + p(R_t)} \to \min \qquad \text{— доля ошибок } R_t \text{ на } X^\ell$$

Жадный алгоритм построения решающего списка

Вход: выборка X^ℓ; семейство правил $\mathscr{R}$;
параметры: $T_{\max}$, $I_{\min}$, $E_{\max}$, ℓ_0;

Выход: решающий список $\{R_t, c_t\}_{t=1}^{T}$;

$U := X^\ell$;

для всех $t := 1, \ldots, T_{\max}$

  выбрать класс c_t;

  максимизация информативности $I(R, U)$ при ограничении на число ошибок $E(R, U)$:

  $$R_t := \mathop{\arg\max}_{R \in \mathscr{R}:\ E(R,U) \leqslant E_{\max}} I(R, U);$$

  если $I(R_t, U) < I_{\min}$ **то выход**;

  оставить объекты, не покрытые правилом R_t:

  $U := \{x \in U : R_t(x) = 0\}$;

  если $|U| \leqslant \ell_0$ **то выход**;

Замечания к алгоритму построения решающего списка

- Параметр $E_{\max}$ управляет сложностью списка:
  $E_{\max}\downarrow \quad\Rightarrow\quad p(R_t)\downarrow,\ T\uparrow$.
- Стратегии выбора класса c_t:
  1) все классы по очереди;
  2) на каждом шаге определяется оптимальный класс.
- Простой обход проблемы пропусков в данных.
- Другие названия:
  комитет с логикой старшинства (Majority Committee)
  голосование по старшинству (Majority Voting)
  машина покрывающих множеств (Set Covering Machine, SCM)
- **Недостаток:** низкое качество классификации

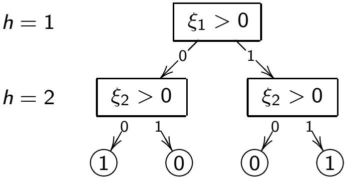
Небрежные решающие деревья (Oblivious Decision Tree, ODT)

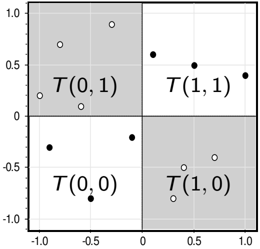
Решение проблемы фрагментации в деревьях:
строится сбалансированное дерево глубины H, $D_v = \{0,1\}$;
для всех узлов уровня h условие ветвления $f_h(x)$ *одинаково*;
на уровне h ровно 2^{h-1} вершин; X делится на 2^H ячеек.

Классификатор задаётся *таблицей решений* $T\colon \{0,1\}^H \to Y$:

$$a(x) = T\bigl(f_1(x), \ldots, f_H(x)\bigr).$$

Пример: задача XOR, $H = 2$.





Алгоритм обучения ODT

Вход: выборка X^ℓ; множество признаков F; глубина дерева H;
Выход: признаки f_h, $h = 1, \dots, H$; таблица $T\colon \{0,1\}^H \to Y$;

1: **для всех** $h = 1, \dots, H$
2: предикат с максимальным выигрышем определённости:
$f_h := \arg\max\limits_{f \in F} \mathrm{Gain}\,(f_1, \dots, f_{h-1}, f)$;
3: классификация по мажоритарному правилу:
$T(\beta) := \mathrm{Major}\,(U_{H\beta})$;

Выигрыш от ветвления на уровне h по всей выборке X^ℓ:

$$\mathrm{Gain}\,(f_1, \dots, f_h) = \Phi(X^\ell) - \sum_{\beta \in \{0,1\}^h} \frac{|U_{h\beta}|}{\ell}\, \Phi(U_{h\beta}),$$

$$U_{h\beta} = \bigl\{x_i \in X^\ell \colon f_s(x_i) = \beta_s,\ s = 1..h\bigr\},\ \ \beta = (\beta_1, \dots, \beta_h) \in \{0,1\}^h.$$

Случайный лес (Random Forest)

Голосование деревьев классификации, $Y = \{-1, +1\}$:

$$a(t) = \operatorname{sign} \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x).$$

Голосование деревьев регрессии, $Y = \mathbb{R}$:

$$a(t) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} b_t(x).$$

- каждое дерево $b_t(x)$ обучается по случайной выборке с возвращениями ($1 - 1/e \approx 63.2\%$ объектов)
- в каждой вершине признак выбирается из случайного подмножества $\sqrt{n}$ признаков ($\lfloor n/3 \rfloor$ для регрессии)
- признаки и пороги выбираются по критерию Джини
- усечений (pruning) нет

Разновидности решающих лесов

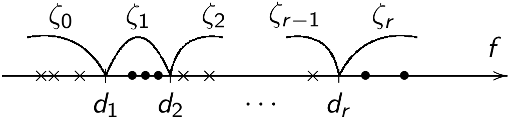
- Случайный лес (Random Forest)
- Использование большого числа простых решающих деревьев в качестве признаков, в любом классификаторе.
- Oblique Random Forest, Rotation Forest
  $f_v(x)$ — линейные комбинации признаков, выбираемые по энтропийному критерию информативности.
- Решающий список из решающих деревьев:
  — при образовании статистически ненадёжного листа этот лист заменяется переходом к следующему дереву;
  — следующее дерево строится по объединению подвыборок, прошедших через ненадёжные листы предыдущего дерева.

Вспомогательная задача бинаризации вещественного признака

Цель: сократить перебор предикатов вида $[\alpha \leqslant f(x) \leqslant \beta]$.

Дано: выборка значений вещественного признака $f(x_i)$, $x_i \in X^\ell$.
Найти: наилучшее (в каком-то смысле) разбиение области значений признака на относительно небольшое число зон:

$$\begin{aligned}
&\zeta_0(x) = [f(x) < d_1];\\
&\zeta_s(x) = [d_s \leqslant f(x) < d_{s+1}], \qquad s = 1, \ldots, r-1;\\
&\zeta_r(x) = [d_r \leqslant f(x)].
\end{aligned}$$



Способы разбиения области значений признака на зоны

1. Жадная максимизация информативности путём слияний
2. Разбиение на равномощные подвыборки
3. Разбиение по равномерной сетке «удобных» значений
4. Объединение нескольких разбиений

Повышение «удобства» пороговых значений

Задача: на отрезке $[a, b]$ найти значение x^* с минимальным числом значащих цифр.
Если таких x^* несколько, выбрать

$$x^* = \arg\min_x \left| \tfrac{1}{2}(a+b) - x \right|.$$

Алгоритм разбиения области значений признака на зоны

Вход: выборка X^ℓ; класс $c \in Y$; параметры r и δ_0.
Выход: $D = \{d_1 < \dots < d_r\}$ — последовательность порогов;

$D := \varnothing$; упорядочить выборку X^ℓ по возрастанию $f(x_i)$;
для всех $i = 2, \dots, \ell$
  если $f(x_{i-1}) \neq f(x_i)$ и $[y_{i-1} = c] \neq [y_i = c]$ **то**
    добавить порог $\frac{1}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i))$ в конец D;
повторять
  для всех $d_i \in D$, $i = 1, \dots, |D| - 1$
    $\delta I_i := I(\zeta_{i-1} \vee \zeta_i \vee \zeta_{i+1}) - \max\{I(\zeta_{i-1}), I(\zeta_i), I(\zeta_{i+1})\}$;
  $i := \arg\max\limits_s \delta I_s$;
  если $\delta I_i > \delta_0$ **то**
    слить зоны ζ_{i-1}, ζ_i, ζ_{i+1}, удалив d_i и d_{i+1} из D;
пока $|D| > r + 1$.

Резюме в конце лекции

- Основные требования к логическим закономерностям:
  - интерпретируемость, информативность, различность.
- Преимущества решающих деревьев:
  - интерпретируемость,
  - допускаются разнотипные данные,
  - возможность обхода пропусков;
- Недостатки решающих деревьев:
  - переобучение,
  - фрагментация,
  - неустойчивость к шуму, составу выборки, критерию;
- Способы устранения этих недостатков:
  - редукция,
  - композиции (леса) деревьев.

Yandex MatrixNet = голосование (градиентный бустинг) над ODT.