Решающие деревья

Виктор Владимирович Китов

МГУ им.Ломоносова, ф-т ВМиК, кафедра ММП.

I семестр 2015 г.

Определение решающего дерева

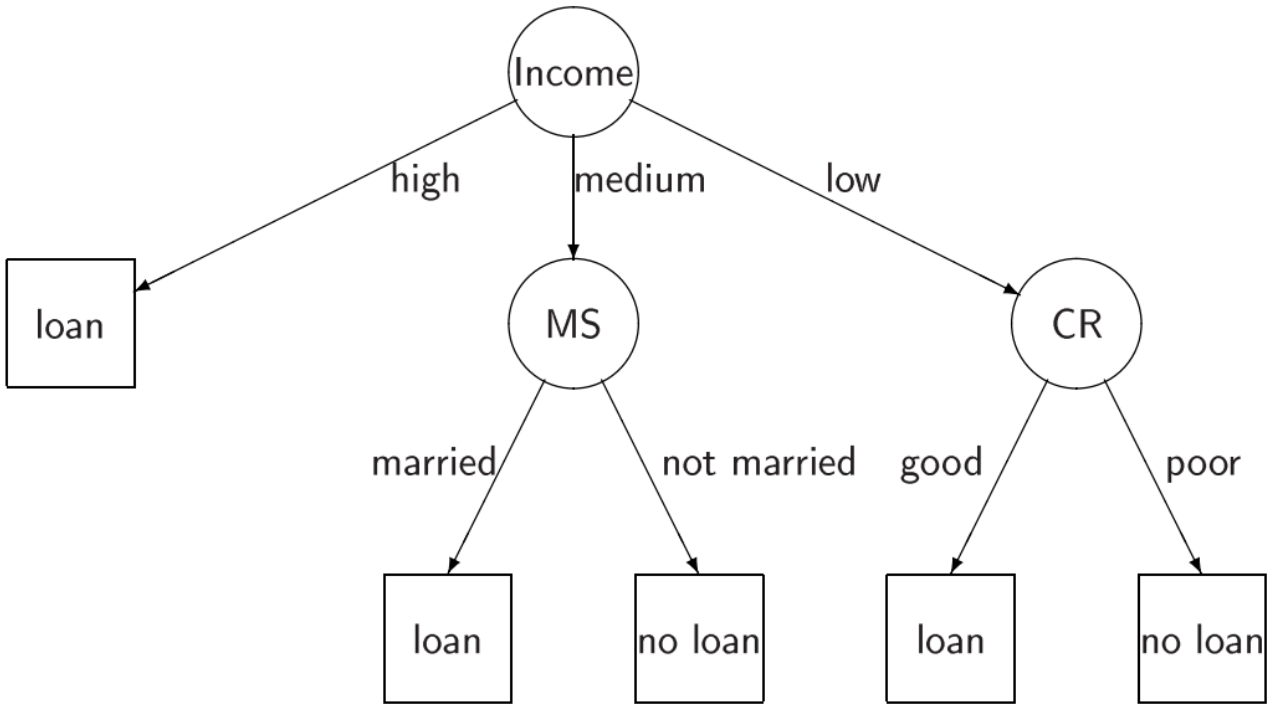
- Прогнозирование осуществляется деревом T:
  - направленный граф
  - без циклов
  - с одной корневой вершиной

Определение решающего дерева

- каждому узлу t соответствуют функции от признаков $Q_t(x^1, x^2, ...x^D)$
  - чаще всего проверяется значение отдельного признака $Q_t(x^1, x^2, ...x^D) = x^{i(t)}$
- исходящим ребрам $r_1(t), ...r_{K(t)}(t)$ соответствуют области значений $S_1(t), ...S_{K(t)}(t)$ для $Q_t(x^1, ...x^D)$, такие что:
  - $S_1(t), ...S_{K(t)}$ покрывают все множество значений Q_t и $S_i \cap S_j = \emptyset \ \forall i \neq j,\ i, j \in \{r_1(t), ...r_{K(t)}(t)\}$.
  - чаще всего $K(t) = 2$, $S_1 = \{x^{i(t)} \leq threshold(t)\}$, $S_2 = \{x^{i(t)} > threshold(t)\}$.
  - варианты: $S_i = \{l_i < x \leq h_i\}$ либо $S = \{v_k\}$, где $\{v_1, v_2, ...\}$-множество уникальных значений $x^{i(t)}$.

Определение решающего дерева

- множество вершин делится на:
  - внутренние вершины $int(T)$, каждая из которых имеет ≥ 2 дочерних вершины
  - внешние вершины $terminal(T)$, которые не содержат потомков, но которым сопоставлены прогнозные значения.



Процесс прогнозирования

- Каждому листу сопоставлен прогноз некоторой константой:
  - классификация: номер класса
  - регрессия: значение.
- Процесс прогнозирования для дерева T:
  - $t = root(T)$
  - пока t не является листом:
    - рассчитать $Q_t(x)$
    - определить номер множества j, среди $S_1(t), ...S_{K(t)}(t)$, куда попадет $Q_t(x)$: $Q_t(x) \in S_j(t)$
    - перейти по ребру $r_j(t)$ к $j-$му потомку t: $t = (j\text{-й потомок t})$.
  - вернуть прогноз, сопоставленный листу t.

Спецификация решающего дерева

- Определить решающее правило: $Q_t(x)$, $K(t)$ и $S_1(t), \ldots S_{K(t)}(t)$.
- Определить критерий останова (когда делаем вершину листом дерева).
- Определить сопоставление прогнозов каждому листу.

Алгоритм ID3

ПАРАМЕТРЫ:
    Z—подмножество обучающих объектов $(x_1, y_1), ...(x_n, y_n)$
    F—множество рассматриваемых признаков

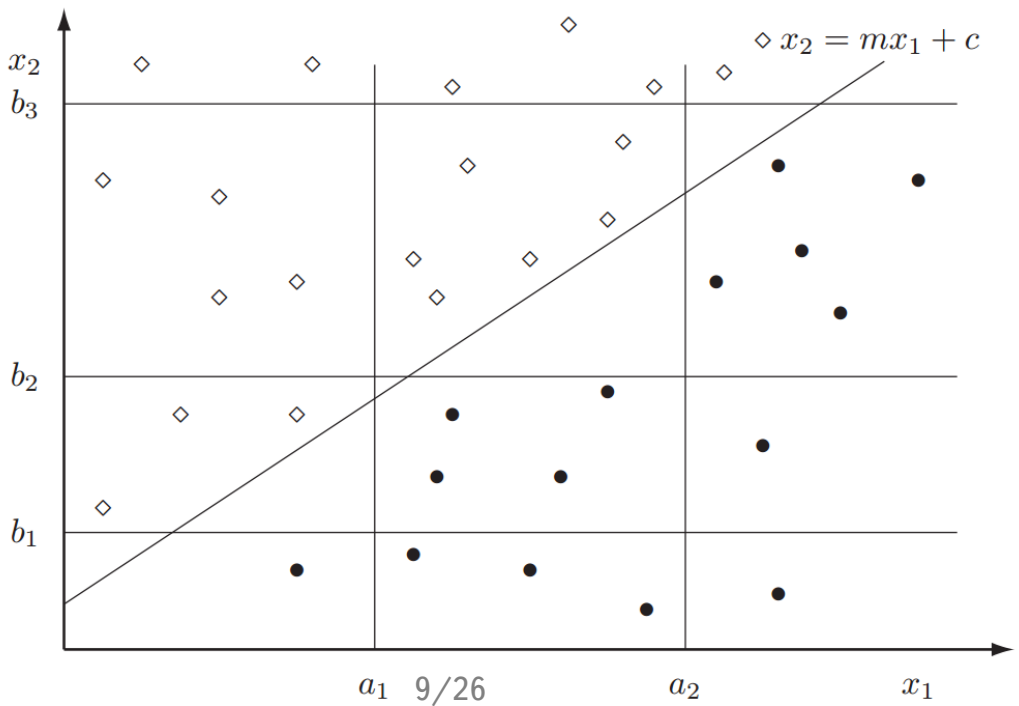
ФУНКЦИЯ ID3(Z,F):
    создать вершину дерева root
    если все $y_i \in Z$ принадлежат одному классу c_k:
        вернуть root в качестве листа с классом c_k
    если $F = \emptyset$:
        вернуть root в качестве листа с классом c_j,
            где c_j—самый частый класс среди Y.
    иначе:
        $f^* = \arg\max_f InformationGain_{f \in F}(Z, f)$
        соотнести вершине *root* признак f^*
        для каждого значения v_i признака f^*:
            создать исходящую ветвь $edge(v_i)$, которой
            сопоставлено значение v_i
            взять подмножества $Z(v_i) = \{Z_k,$ где k такие, что $f_k^* = v_i\}$
            если $Z(v_i) = \emptyset$, то
                ветви $edge(v_i)$ соотнести лист с классом,
                равным самому частому классу в Z.
            иначе:
                сопоставить ребру $e(v_i)$ вершину $ID3(Z(v_i), F - \{f^*\})$

Наиболее распространенное решающее правило

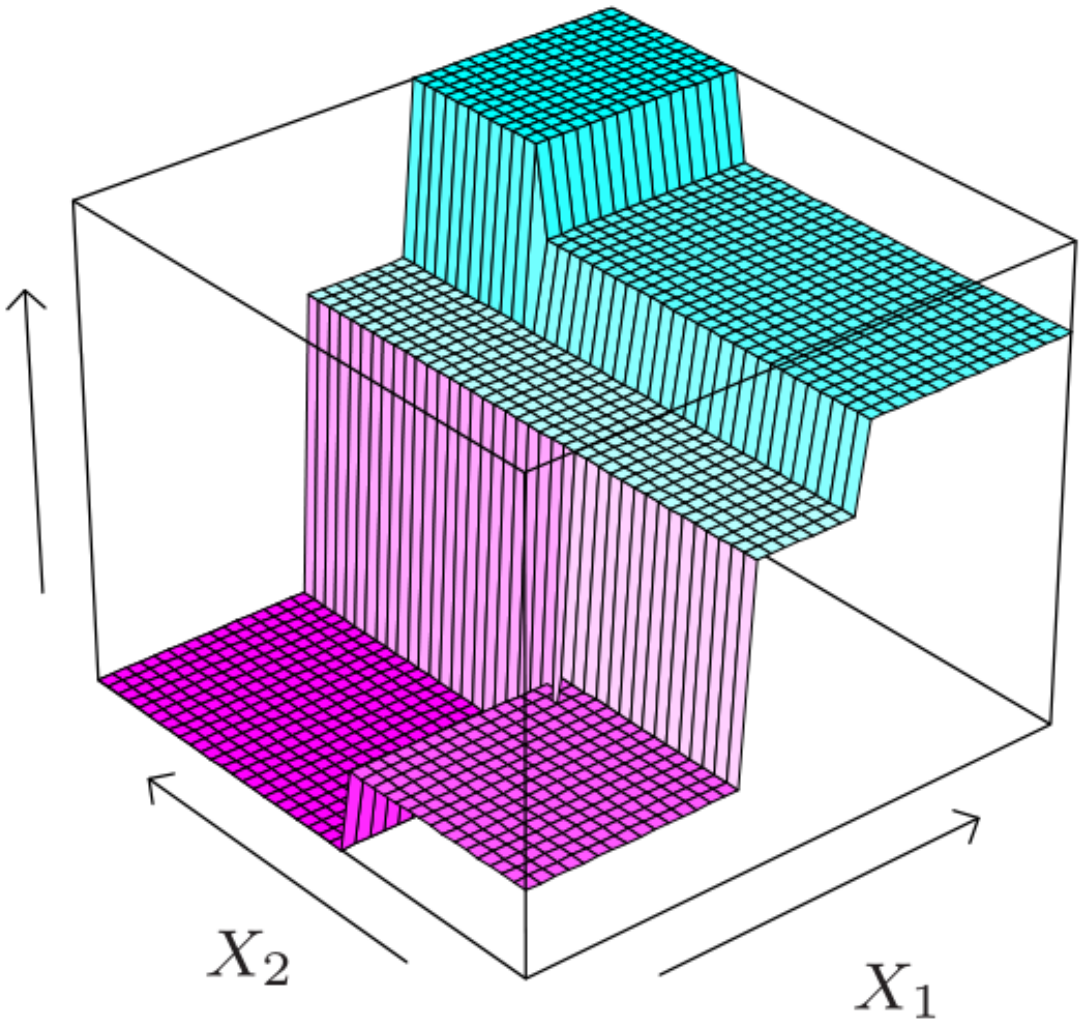
- Чаще всего:
  - в качестве Q_t берут $Q_t(x) = x^{i(t)}$
  - $K(t) = 2 \forall t \in int(T)$, где $int(T)$ - множество внутренних вершин дерева.
  - $S_1(t) = \{x^{i(t)} \leq threshold(t)\}$, $S_2(t) = \{x^{i(t)} > threshold(t)\}$
    - $threshold(t) \in \{x_1^{i(t)}, x_2^{i(t)}, ...x_N^{i(t)}\}$
    - применимо только для вещественных, порядковых и бинарных признаков
    - в случае дискретных признаков - их необходимо преобразовать в бинарные через one-hot-encoding.

Анализ решающего правила

- Преимущества:
  - простота
  - интерпретируемость
- Недостатки
  - много узлов может потребоваться, если разделяющая кривая не параллельна осям координат:

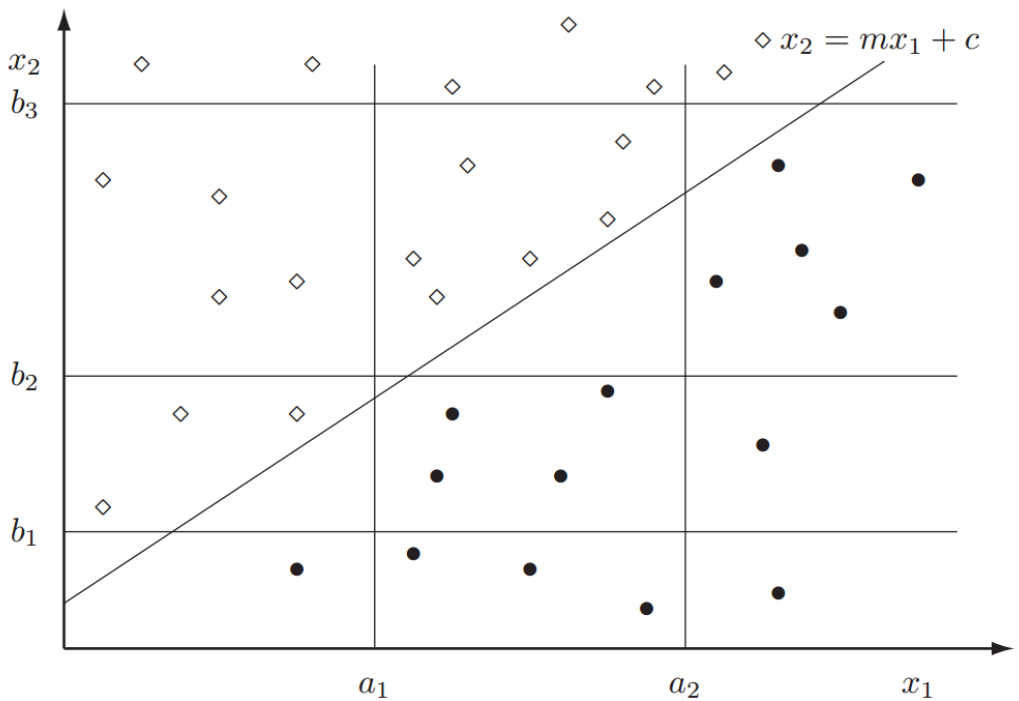


Кусочно-постоянное решение



Более общие решающие правила

- Вместо отдельного признака, $Q(x)$ может быть линейной $Q_t(x) =< a_t, x >$ или нелинейной функцией.
  - тоже кусочно-постоянное решение, но с др. границами
  - менее интерпретируемое решение
  - зато может оказаться значительно меньше вершин!



Критерий останова

- Противоречие: смещение/дисперсия
  - наиболее разросшиеся деревья - переобучение
  - слишком простые - недообучение
- Подходы к остановке
  - основанные на правиле: сравниваем критерий с порогом
  - строим до самого низа, а потом обрезаем лишнее (pruning)

Правиловый подход к остановке

- Делаем вершину листом, если критерий больше или меньше порога.
- Варианты критерия:
  - глубина дерева
  - количество наблюдений в вершине
  - минимальное количество наблюдений в одной из дочерних вершин
  - разделимость классов
  - изменение разделимости классов после дробления

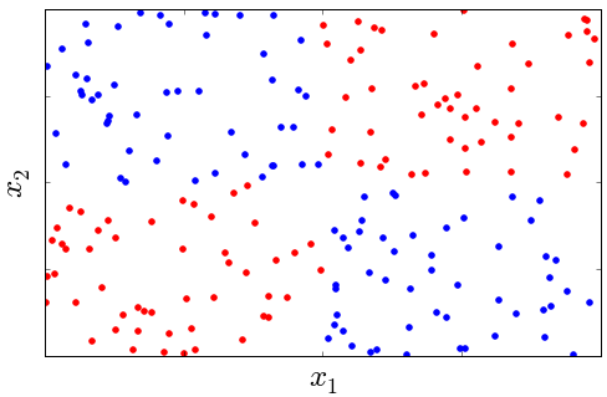
Обсуждение правиловых подходов

Преимущества:

- простота
- эффективность

Недостатки:

- требует спецификации порога
- субоптимальна: последующие дробления могут оказаться лучше, но процесс построения дерева до них не дойдет
  - пример субоптимальности правил (основанных на разделимости классов):



Функция смешанности классов

- Пусть $u(t)$-область точек, которые попадают в узел t. Вероятности классов в узле t:

$$p(\omega_j|x \in u(t)) = p(\omega_j|t) \approx \frac{N_j(t)}{N(t)}$$

где $N(t)$-число наблюдений в t, а $N_j(t)$-число наблюдений класса ω_j в t.

- Функция смешанности (impurity function):

$$I(t) = \phi(p(\omega_1|t), ...p(\omega_C|t))$$

- $\phi(q_1, q_2, ...q_C)$ определена для $q_j \geq 0$ и $\sum_j q_j = 1$.
- ϕ достигает максимума при $q_j = 1/C$ для всех j.
- ϕ достигает минимума, когда $\exists j : q_j = 1, q_i = 0$ для всех $i \neq j$.
- ϕ симметричная функция от $q_1, q_2, ...q_C$.

Типичные функции смешанности классов

- Критерий Джини
  - вероятность сделать ошибку, сопоставляя класс случайно с вероятностями $[p(\omega_1|t), ...p(\omega_C|t)]$

$$I(t) = \sum_i p(\omega_i|t)(1 - p(\omega_i|t)) = 1 - \sum_i [p(\omega_i|t)]^2$$

- Энтропия
  - мера неопределенности дискретной случайной величины

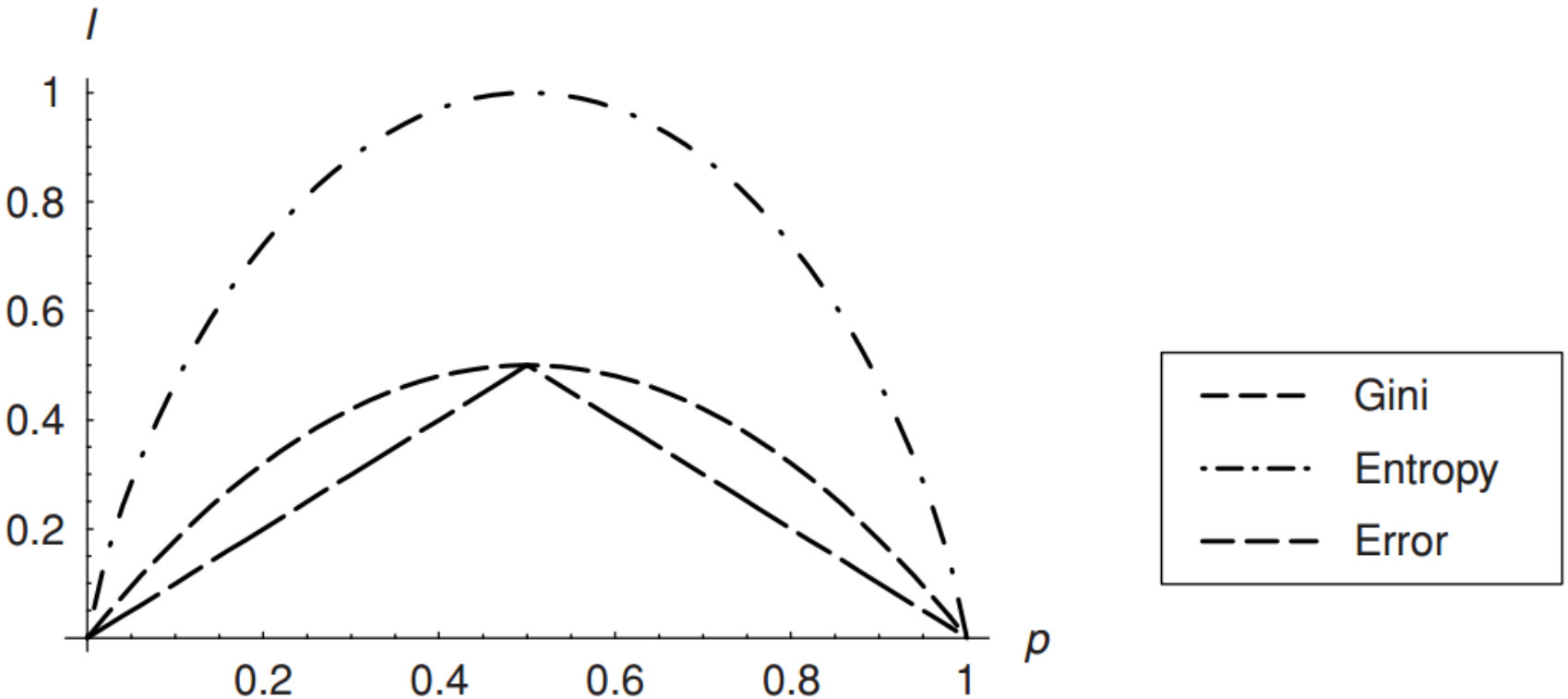
$$I(t) = -\sum_i p(\omega_i|t) \ln p(\omega_i|t)$$

- Ошибка классификации
  - показывает частоту ошибок при классификации самым частым классом

$$I(t) = 1 - \max_i p(\omega_i|t)$$

Типичные функции смешанности классов

Функции смешанности в случае 2х классов:
$p = p(\omega_1|t)$, $1 - p = p(\omega_2|t)$.



Критерий ветвления

- Выбрать правило ветвления, максимизирующее снижение смешанности классов:

$$\Delta I(t) = I(t) - \sum_{i=1}^{S} I(t_i) \frac{N(t_i)}{N(t)}$$

где S - число ветвей, $t_1, ...t_S$ дочерние вершины для t, $N(t)$ - число наблюдений, попадающих в узел в t.

- Если $I(t)$ - энтропия, то $\Delta I(t)$ называется *information gain*.

Назначение классов листовым вершинам

- Регрессия:

$$\widehat{y} = \arg\min_{\mu} \sum_{i:\, x_i \in u(t)} (y_i - \mu)^2 = \frac{1}{N_t} \sum_{i:\, x_i \in u(t)} y_i,$$

где $N = |\{x_i : x_i \in u(t)\}|$

  - могут использоваться и др. функции потерь.

- Классификация:
  - Пусть $\lambda(y, \widehat{y})$ - цена сопоставления объекта класса y классу $\widehat{y}$
  - Сопоставление класса с минимальной совокупной ценой

$$\widehat{y} = \arg\min_{y} \sum_{i:\, x_i \in u(t)} \lambda(y_i, y)$$

  - Для $\lambda(y, \widehat{y}) = \mathbb{I}[y \neq \widehat{y}]$ будет сопоставляться наиболее частый класс в подвыборке листа.

Обозначения в методе CART

- Пусть T-дерево, а $\tilde{T}$-множество листовых вершин для T
- Определим $R(t) = \frac{M(t)}{N}$, для $t \in \tilde{T}$.
  - $M(t)$ - количество ошибок на валидационном множестве
  - N-количество элементов на валидационном множестве.
- Определим частоту ошибок на валидационном множестве

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

- и цену дерева T:

$$R_\alpha(T) = \sum_{t \in \tilde{T}} R_\alpha(t) = R(T) + \alpha|\tilde{T}|,$$

- Условие, когда дерево T_t с корнем t имеет такую же цену, как сам корень t:

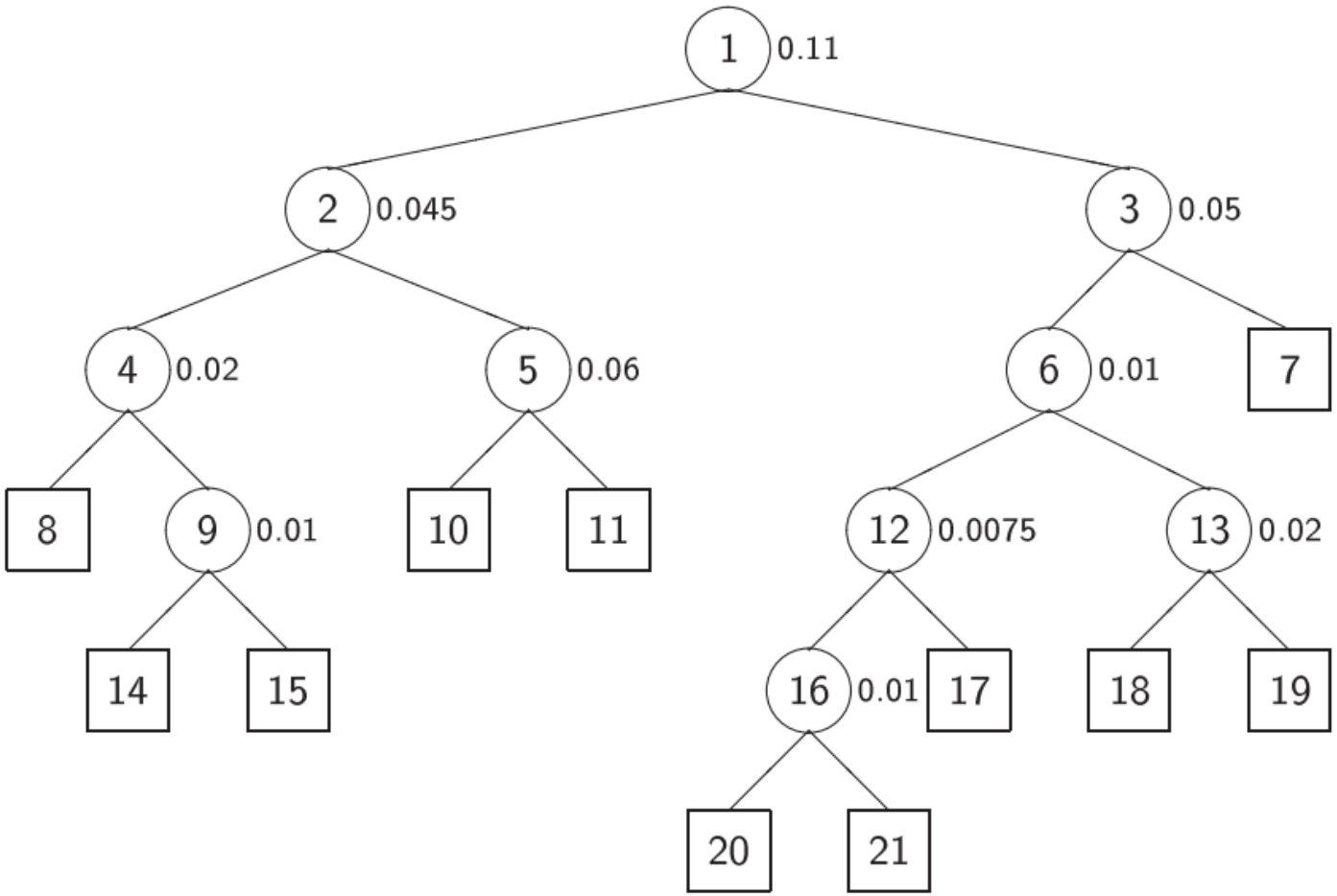
$$R_\alpha(t) = R_\alpha(T_t) \Rightarrow \alpha_t = \frac{R(t) - R(T_t)}{|\tilde{T}_t| - 1}$$

Обрезка дерева в методе CART

- строим дерево, пока классы не становятся полностью разделимыми, получаем дерево T.
- строим иерархию вложенных поддеревьев $T_0, T_1, \dots T_K$, повторяя процедуру пока не останемся только с корнем T:
  - заменяем дерево с наименьшим α_t его корнем t
  - пересчитываем $R(T_t)$, $R_\alpha(T_t)$ и α_t для всех предков t.
- Для каждого вложенного дерева $T_0, T_1, \dots T_{|T|}$ вычисляем ф-ции цены $R(T_0), R(T_1), \dots R(T_K)$.
- Выбираем дерево T_i, дающее наименьшую цену

$$i = \arg\min_i R(T_i)$$

Пример


1
0.11
2
0.045
3
0.05
4
0.02
5
0.06
6
0.01
7
8
9
0.01
10
11
12
0.0075
13
0.02
14
15
16
0.01
17
18
19
20
21

Пример

	α_k	$\lvert\tilde{T}^k\rvert$	$R(T^k)$
1	0	11	0.185
2	0.0075	9	0.2
3	0.01	6	0.22
4	0.02	5	0.25
5	0.045	3	0.34
6	0.05	2	0.39
7	0.11	1	0.5

Работа с пропущенными признаками

Если нужный признак отсутствует:

- усреднение прогнозов по каждой ветви с весами $\propto$ числу наблюдений из TS, идущих в каждую ветвь.
- surrogate splits
- заполнение пропущенных значений
  - среднее
  - прогноз по остальным признакам
- отдельная ветвь «значение пропущено».

Важность признаков, рассчитанная по дереву

Важность признака x^d для предсказания y можно считать:

- по доле наблюдений, охватываемых правилом с участием x^d в дереве
- по тому, насколько правила с x^d улучшили разделимость классов
  - с учетом доли охвата правил с участием x^d

Анализ решающих деревьев в целом

- Преимущества решающих деревьев:
  - простота
  - интерпретируемость
  - встроенный отбор признаков
  - работает одновременно с дискретными и непрерывными признаками
  - прогноз инвариантен к монотонным преобразованиям признаков для $Q_t(x) = x^{i(t)}$
    - не нужна нормализация
- Недостатки решающих деревьев:
  - если разделяющая кривая не параллельна осям координат, то может потребоваться много вершин
  - субоптимальность (пример XOR)
  - нет онлайновости - для новых наблюдений требуется полная перестройка всего дерева.