

Введение в анализ данных

Лекция 9

Решающие деревья

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2020

Как делать нелинейные модели

Предсказание стоимости квартиры

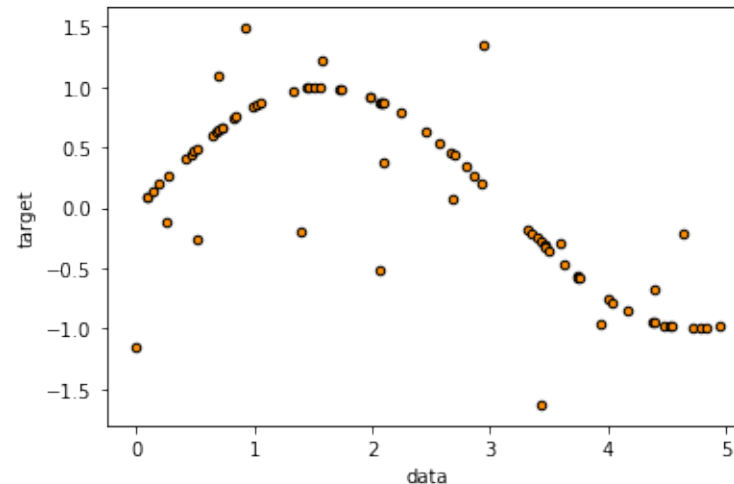
- Признаки: площадь, этаж, расстояние до метро и т.д.
- Целевая переменная: рыночная стоимость квартиры

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж}) \\ + w_3 * (\text{расстояние до метро}) + \dots$$

- Вряд ли признаки линейно связаны с целевой переменной



Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж}) \\ + w_3 * (\text{расстояние до метро}) + \dots$$

- Вряд ли признаки не связаны между собой

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$\begin{aligned} a(x) = & w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж}) \\ & + w_3 * (\text{расстояние до метро}) + w_4 * (\text{площадь})^2 \\ & + w_5 * (\text{этаж})^2 + w_6 * (\text{расстояние до метро})^2 \\ & + w_7 * (\text{площадь}) * (\text{этаж}) + \dots \end{aligned}$$

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$\begin{aligned} a(x) = & w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж}) \\ & + w_3 * (\text{расстояние до метро}) + w_4 * (\text{площадь})^2 \\ & + w_5 * (\text{этаж})^2 + w_6 * (\text{расстояние до метро})^2 \\ & + w_7 * (\text{площадь}) * (\text{этаж}) + \dots \end{aligned}$$

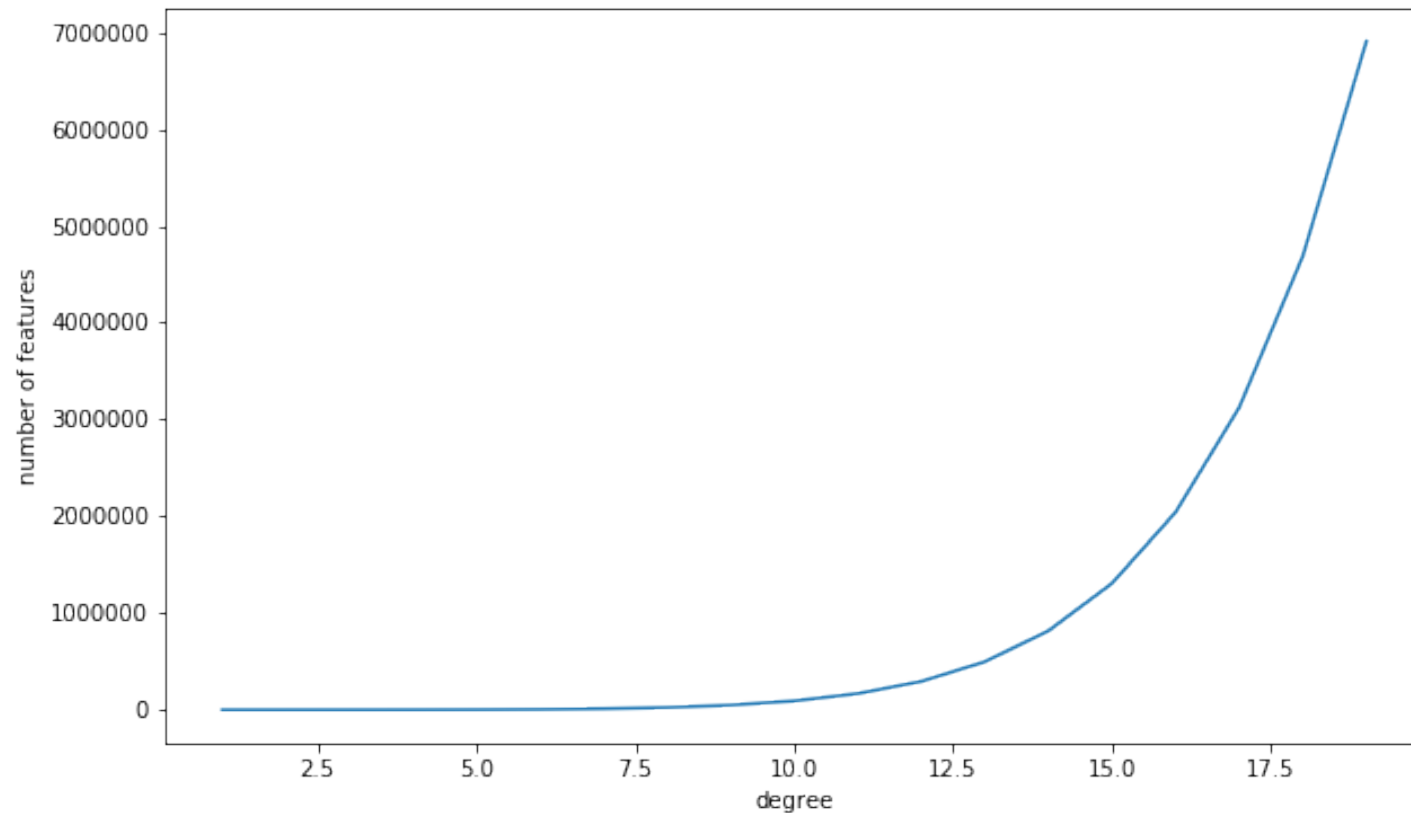
- Может быть сложно интерпретировать модель
- Что такое $(\text{расстояние до метро}) * (\text{этаж})^2$?

Предсказание стоимости квартиры

- Допустим, изначально имеем 10 признаков
- Полиномиальных степени 2: 55
- Полиномиальных степени 3: 220
- Полиномиальных степени 4: 715

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:



Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$a(x) = w_0 + w_1 * [30 < \text{площадь} < 50]$$

$$+ w_2 * [50 < \text{площадь} < 80] + \dots$$

$$+ w_{20} * [2 < \text{этаж} < 5] + \dots$$

$$+ w_{100} * [30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5] + \dots$$

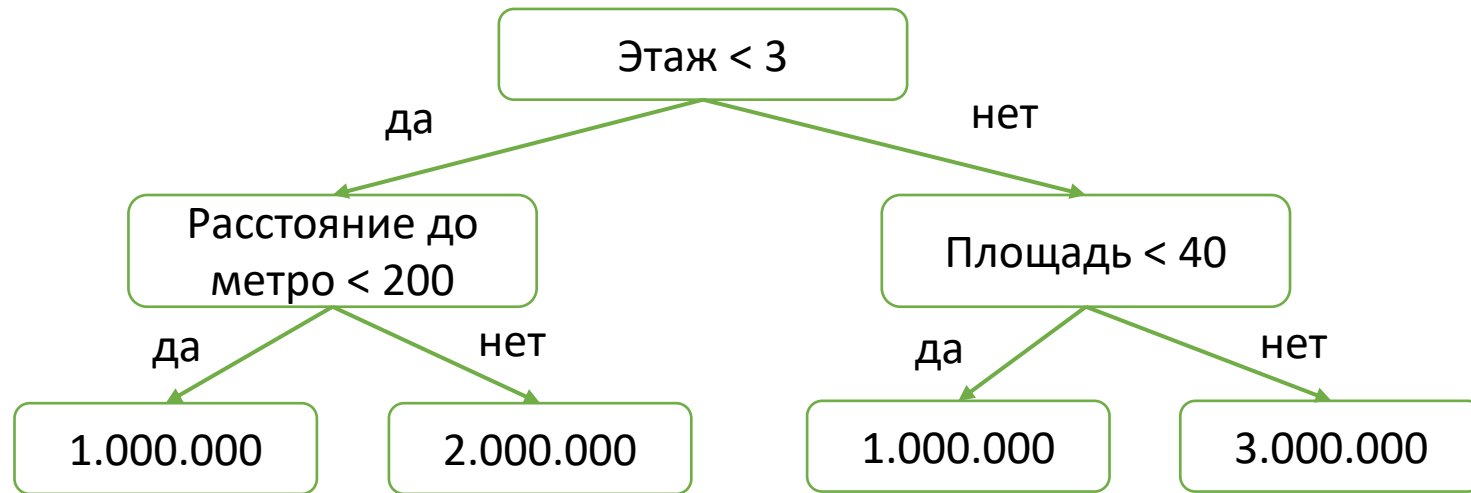
- Признаки интерпретируются куда лучше: $[30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5][100 < \text{расстояние до метро} < 500]$
- Но их станет ещё больше!

Решающие деревья

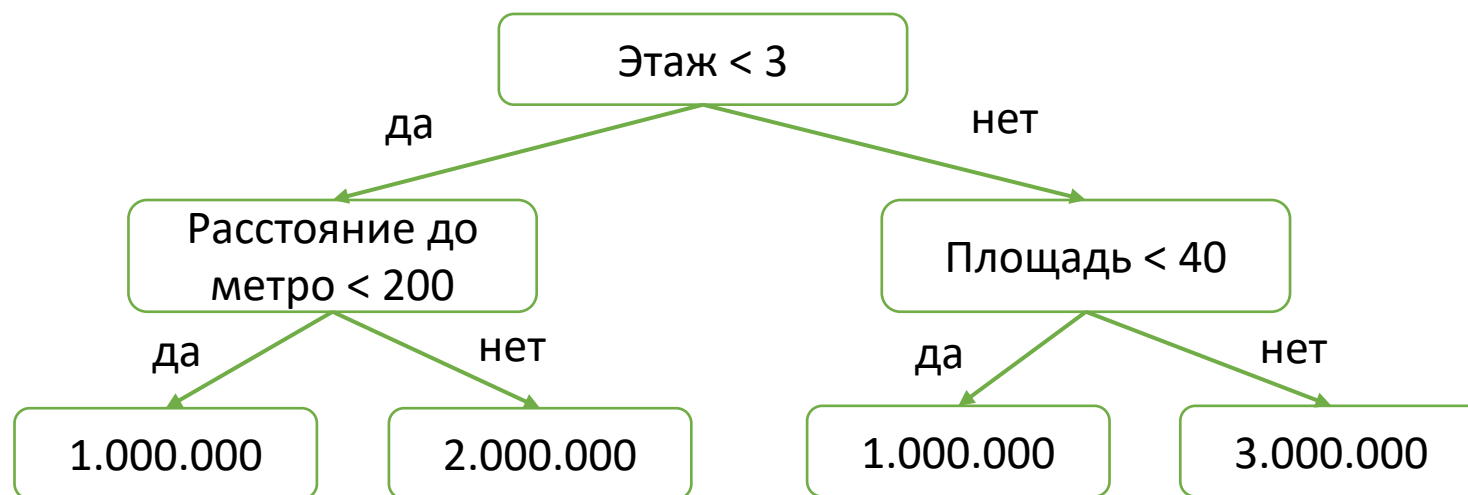
Логические правила

- $[30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5][500 < \text{расстояние до метро} < 1000]$
- Легко объяснить, как работают
- Находят нелинейные закономерности
- Нужно как-то искать хорошие логические правила
- Нужно уметь составлять модели из логических правил

Решающее дерево

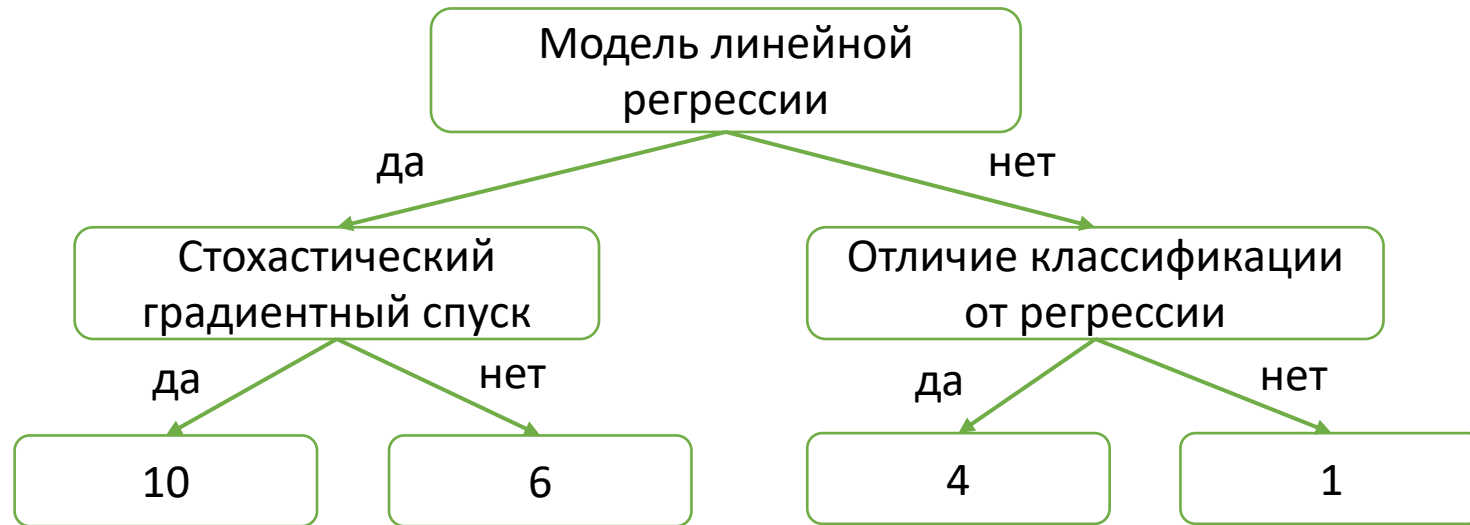


Решающее дерево

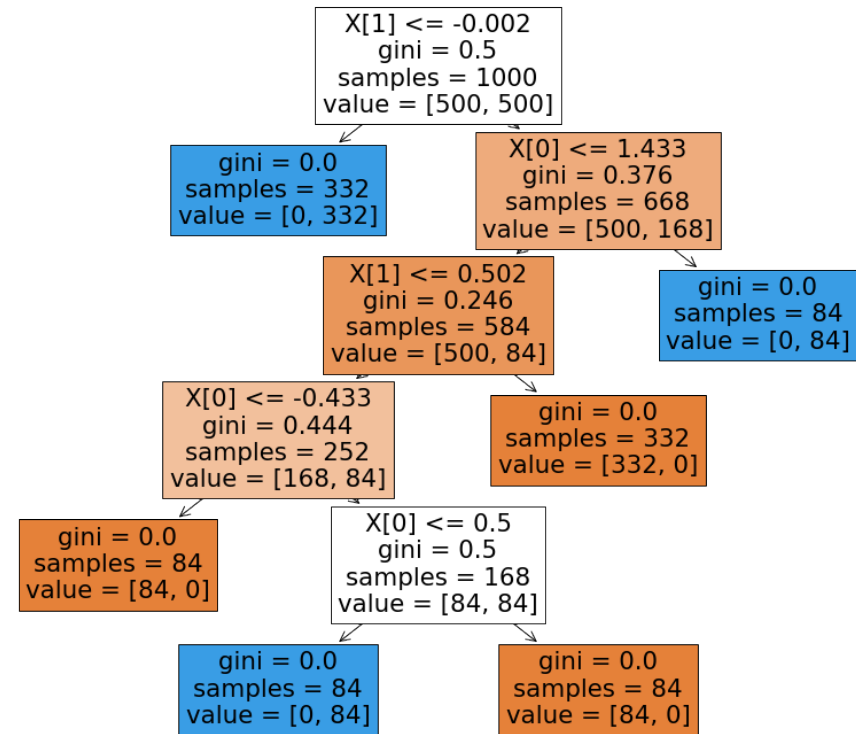
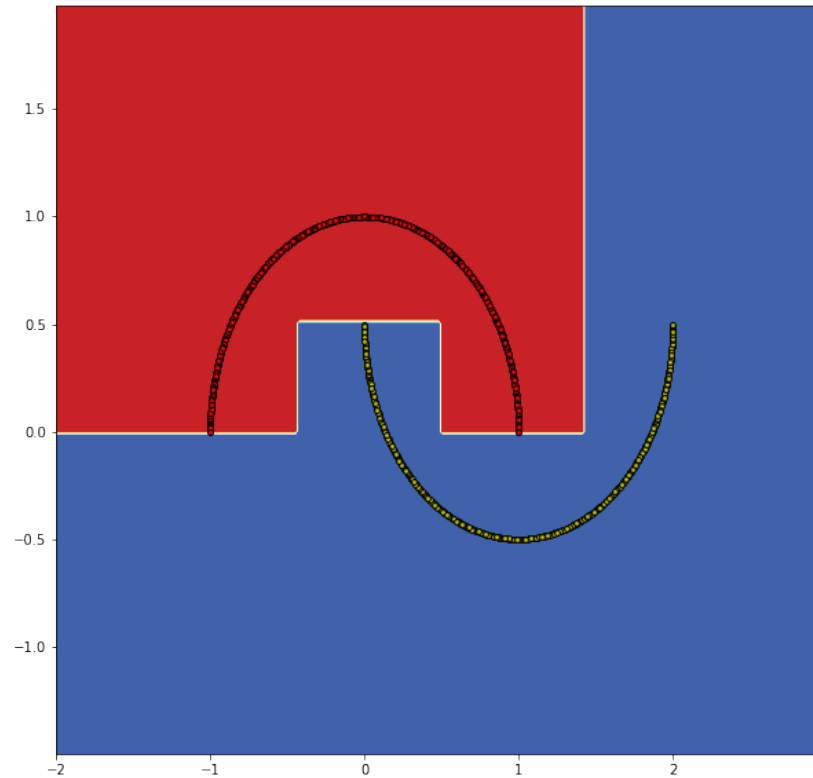


- Внутренние вершины: предикаты $[x_j < t]$
- Листья: прогнозы $s \in \mathbb{Y}$

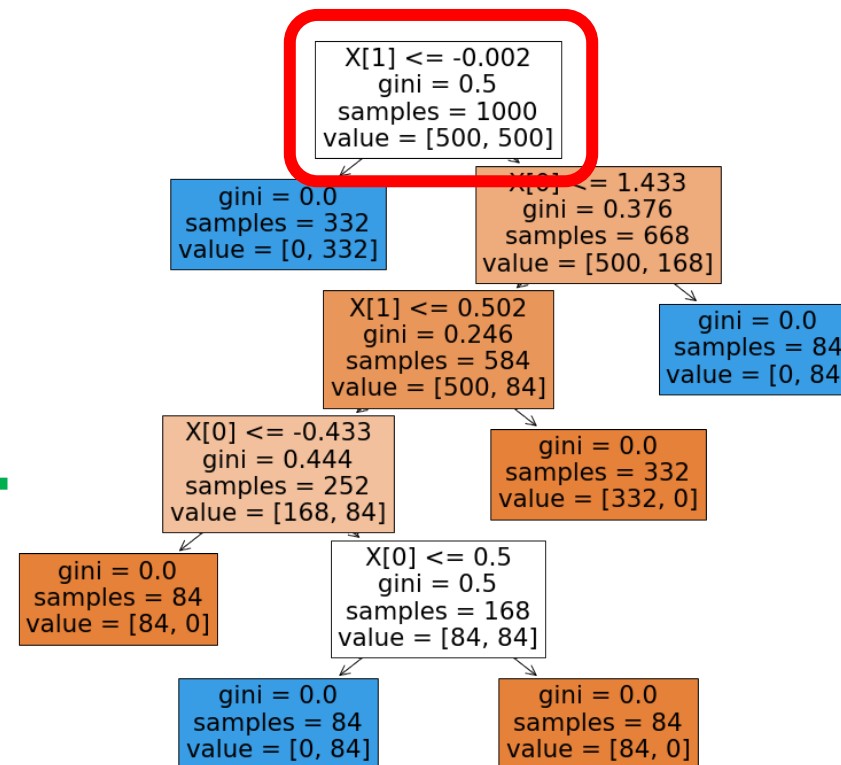
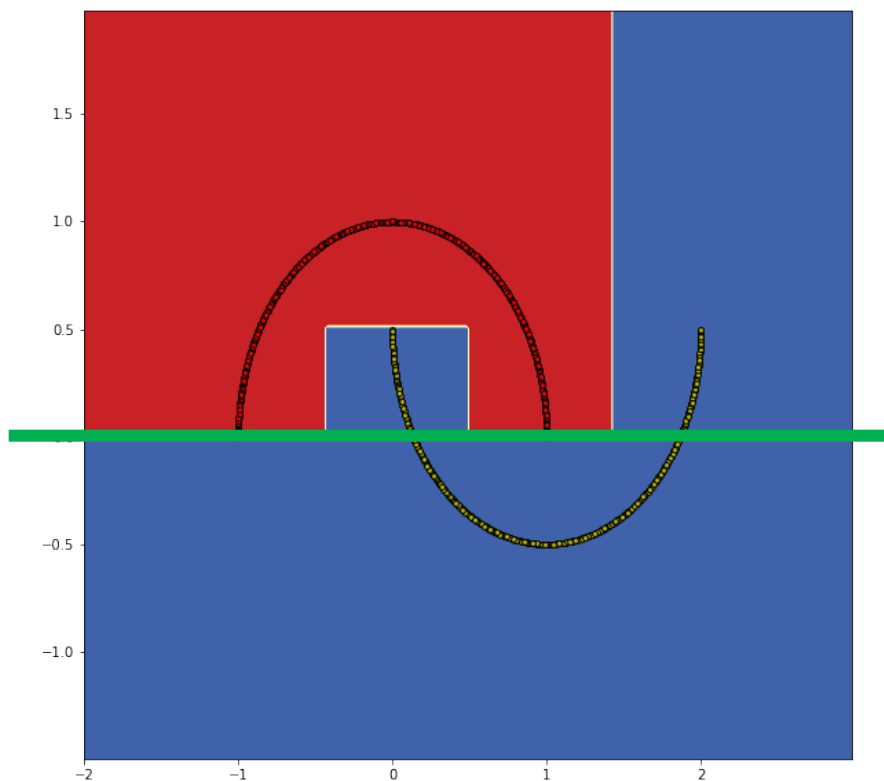
Решающее дерево



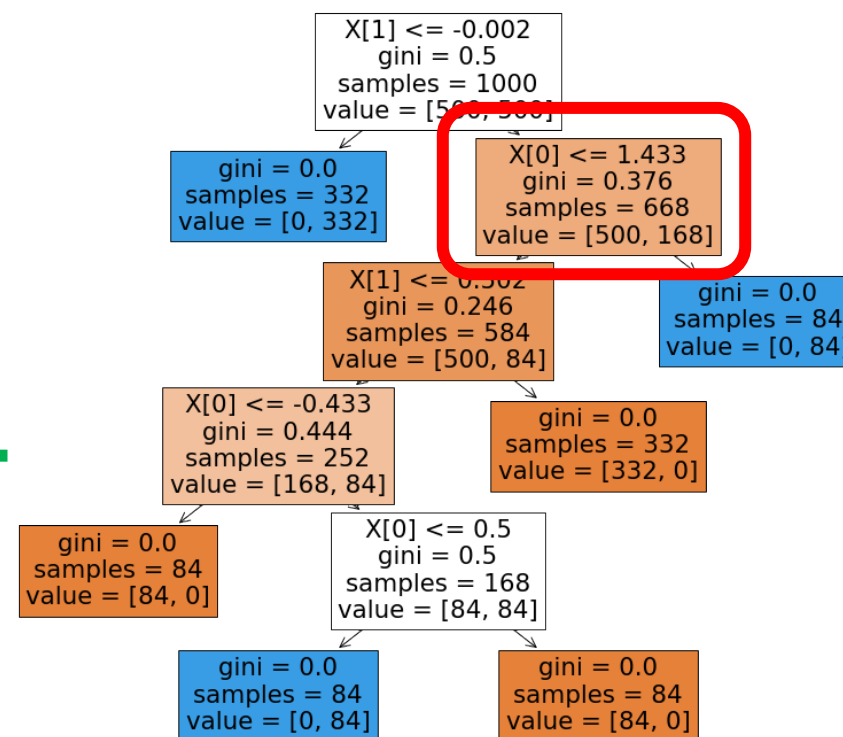
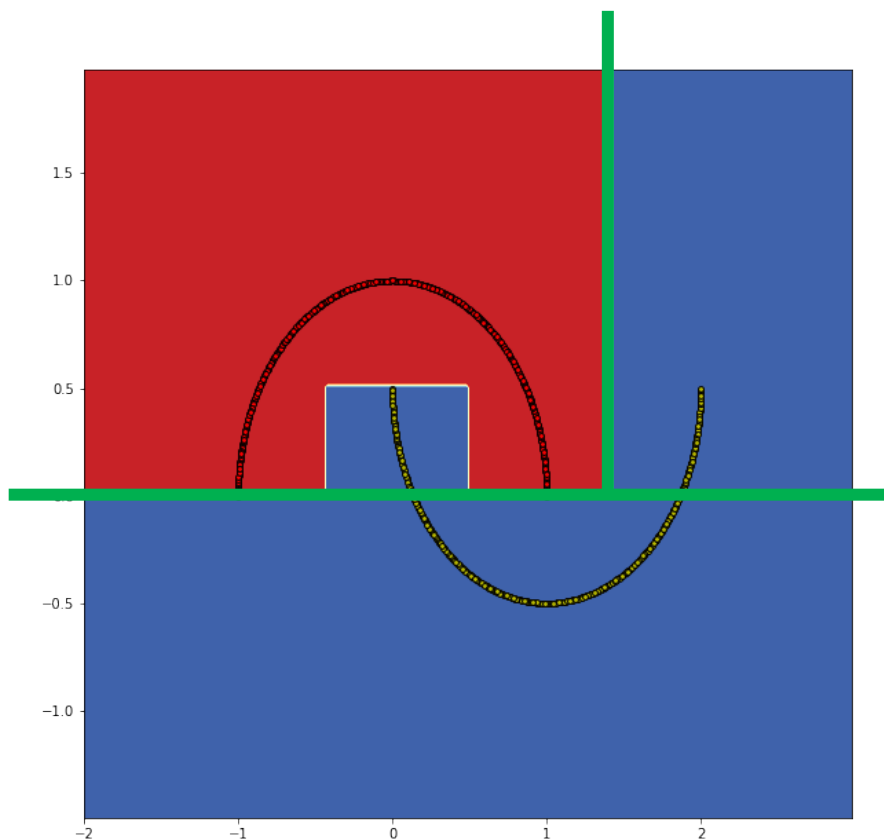
Решающее дерево



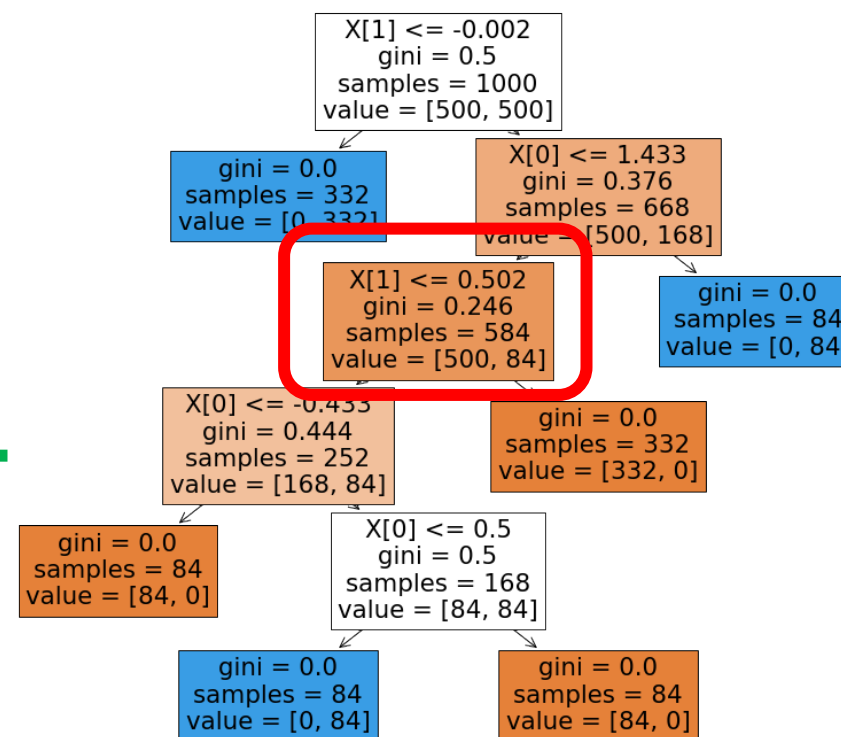
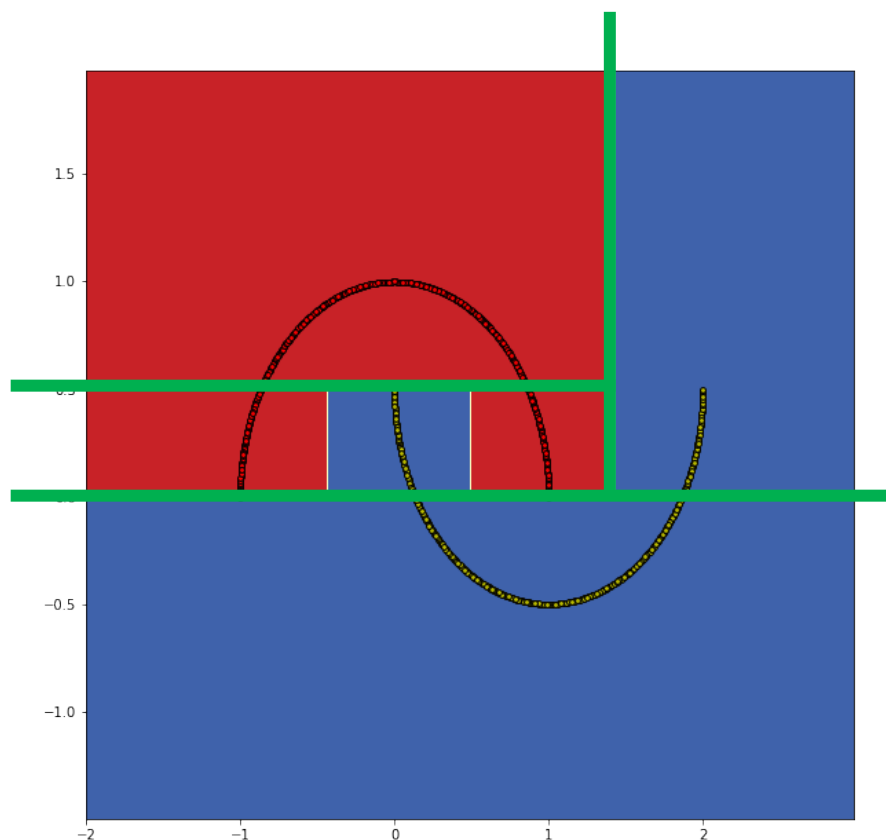
Решающее дерево



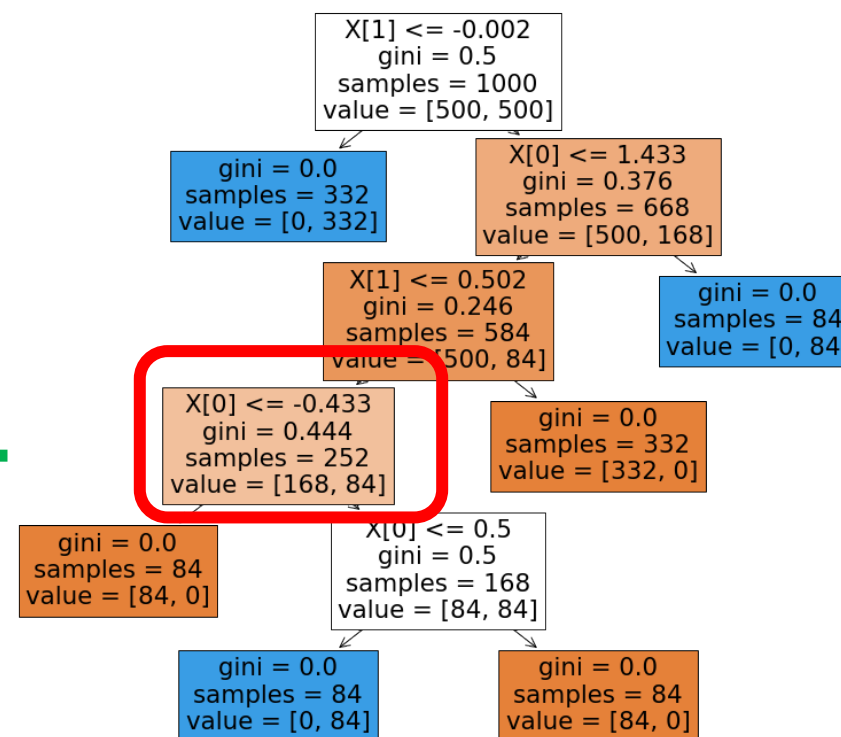
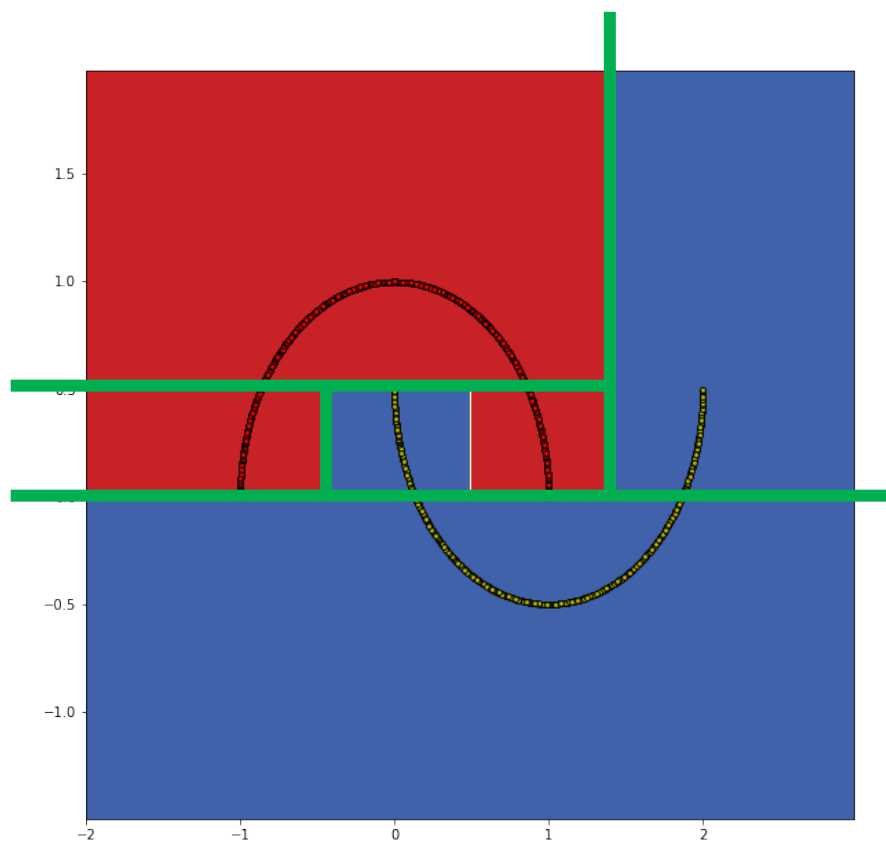
Решающее дерево



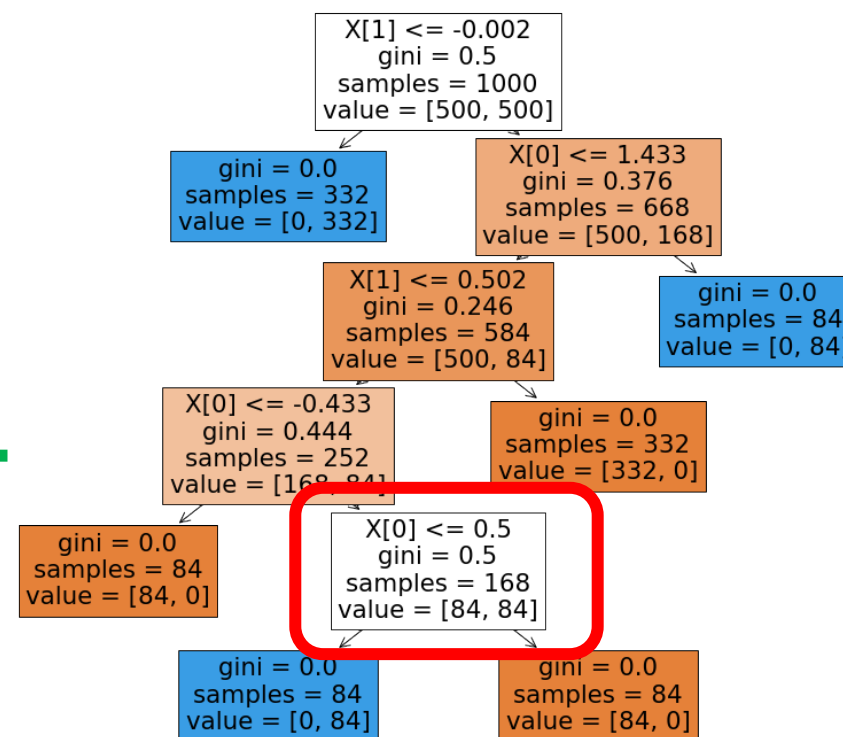
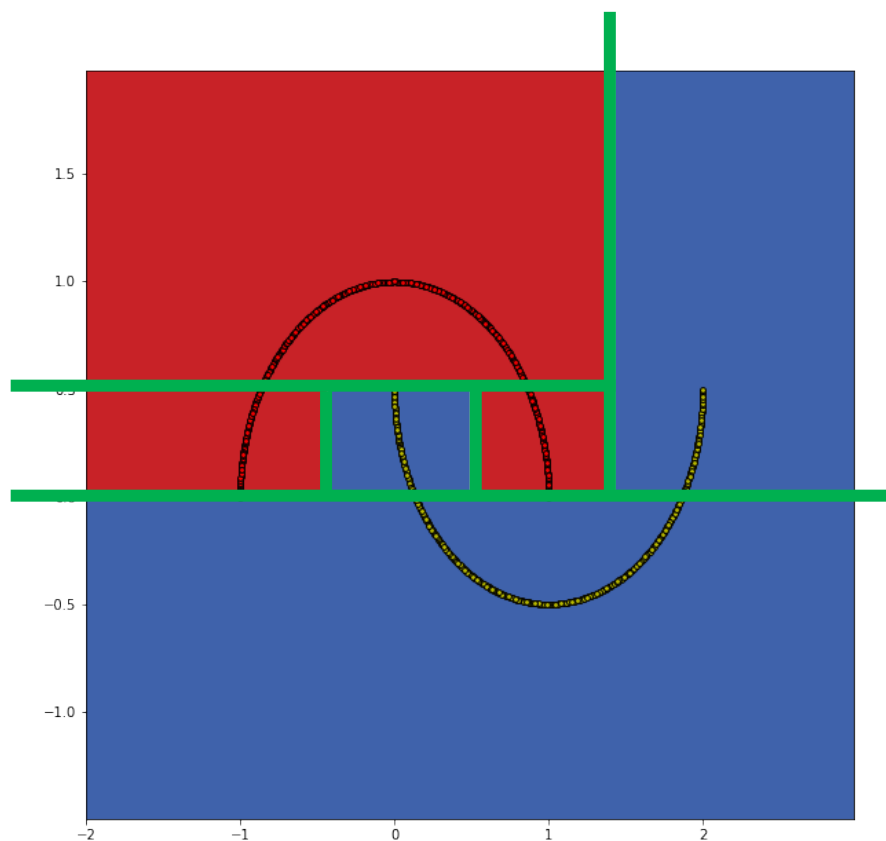
Решающее дерево



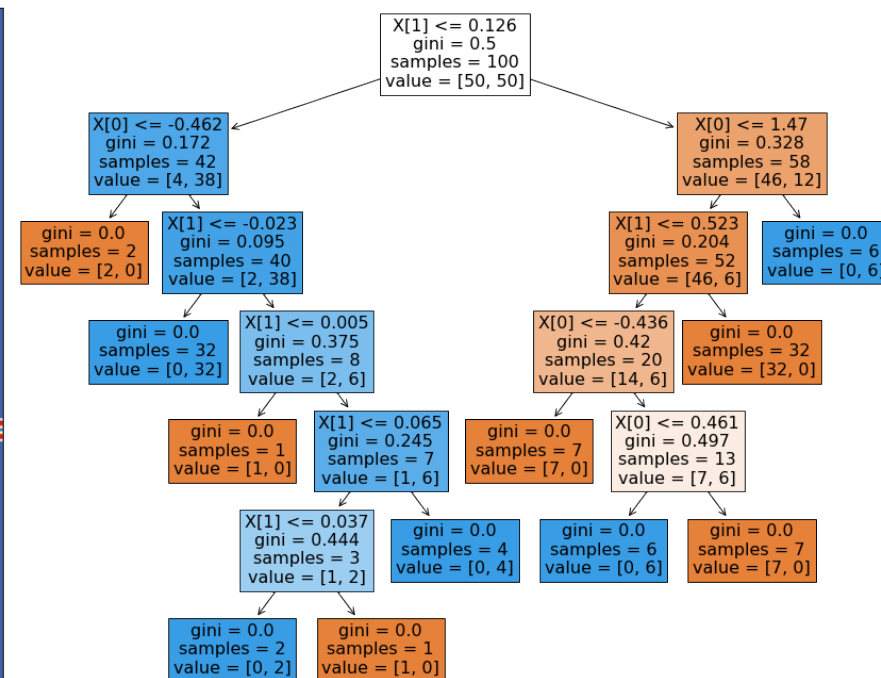
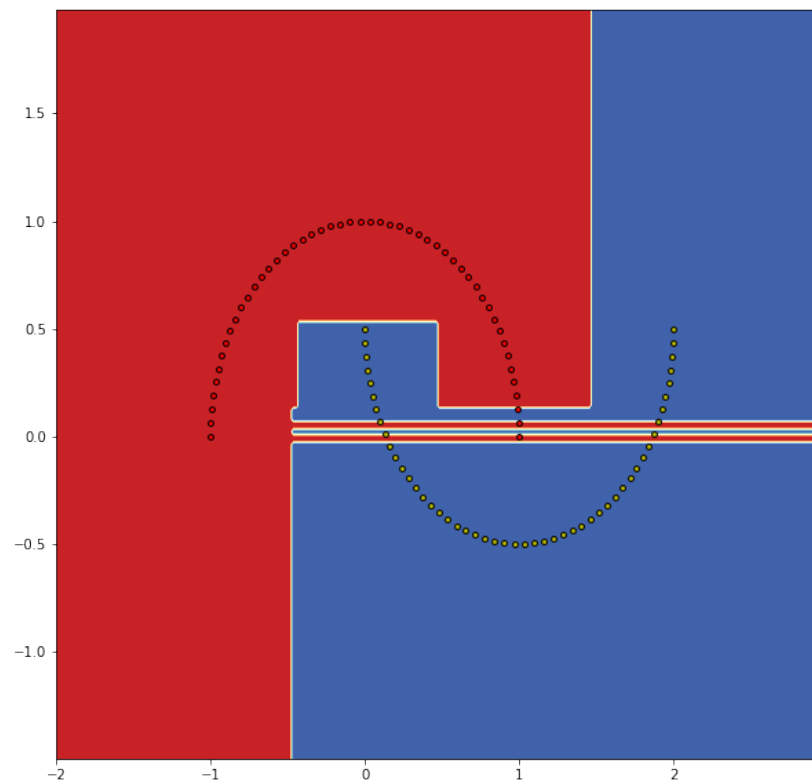
Решающее дерево



Решающее дерево



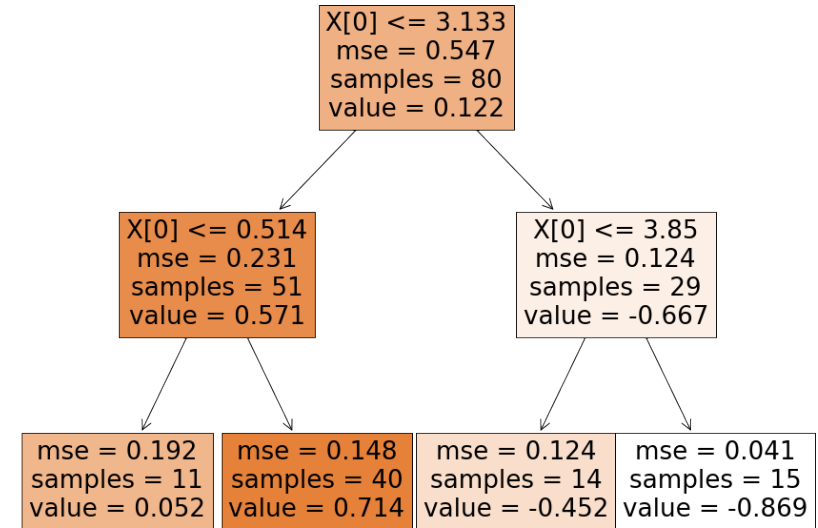
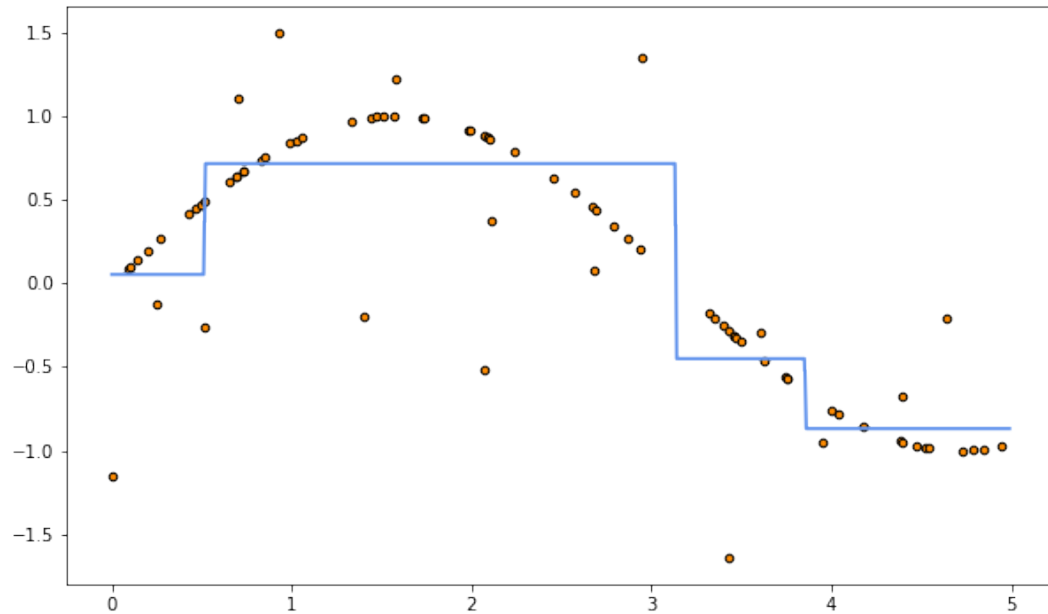
Решающее дерево



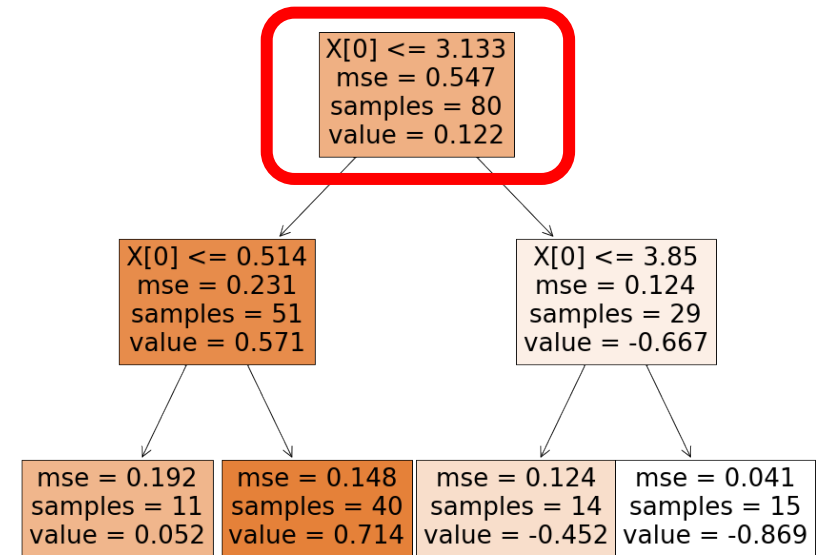
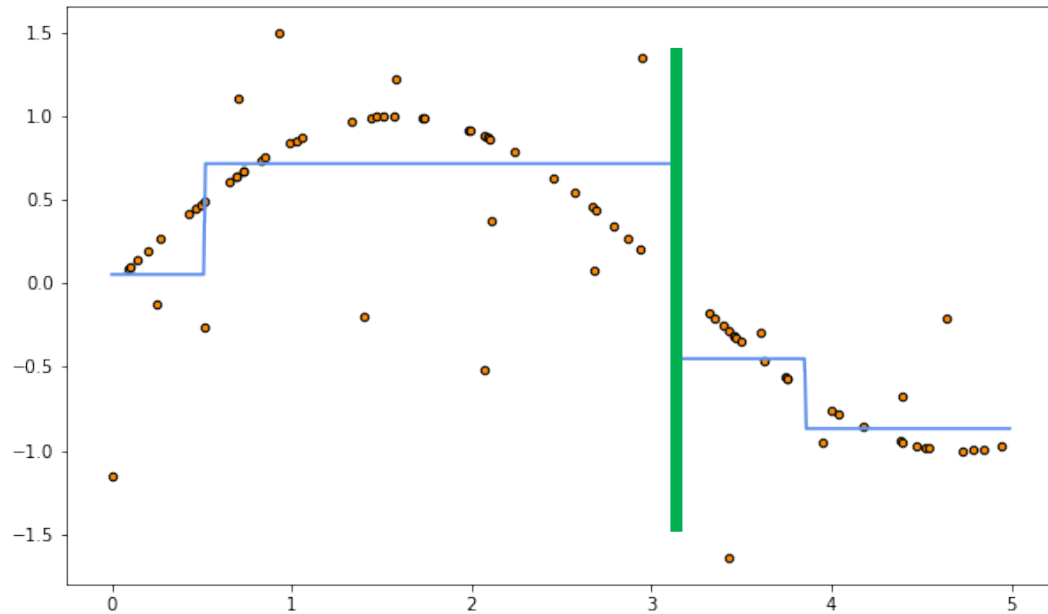
Сложность дерева

- Решающее дерево можно строить до тех пор, пока каждый лист не будет соответствовать ровно одному объекту
- Деревом можно идеально разделить любую выборку!
- Если только нет объектов с одинаковыми признаками, но разными ответами

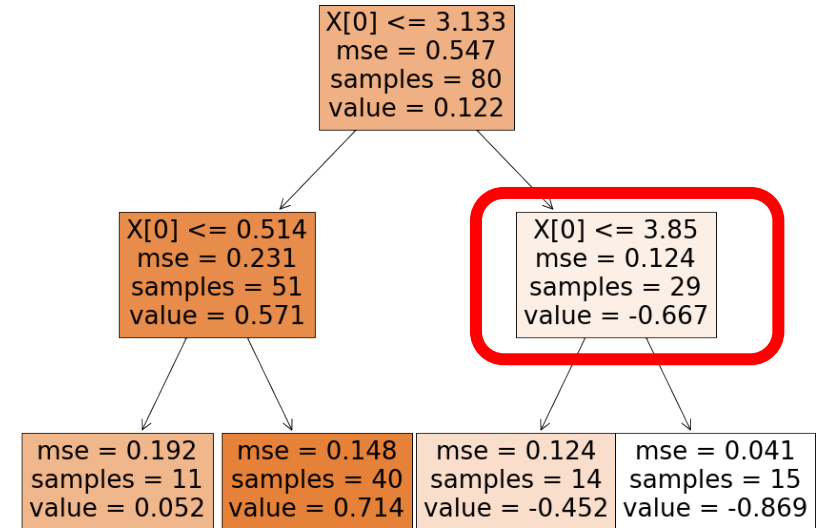
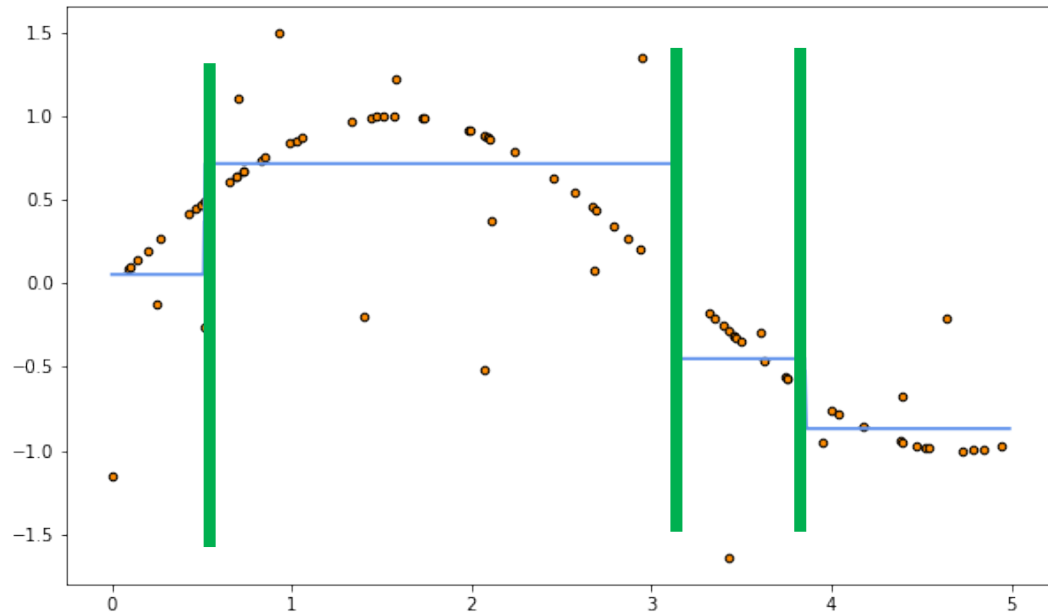
Решающее дерево для регрессии



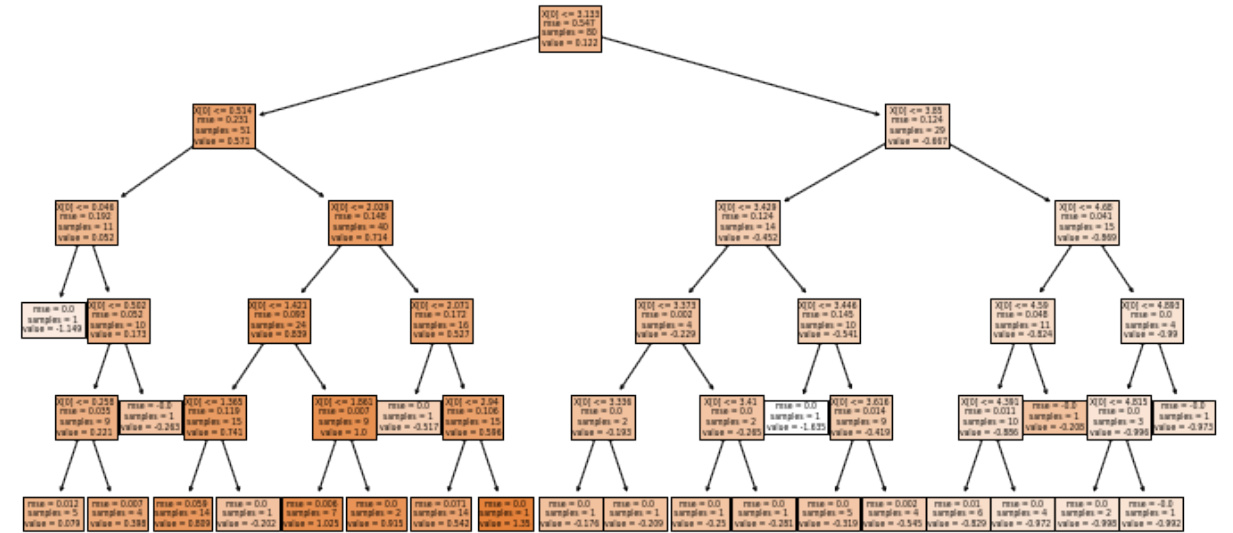
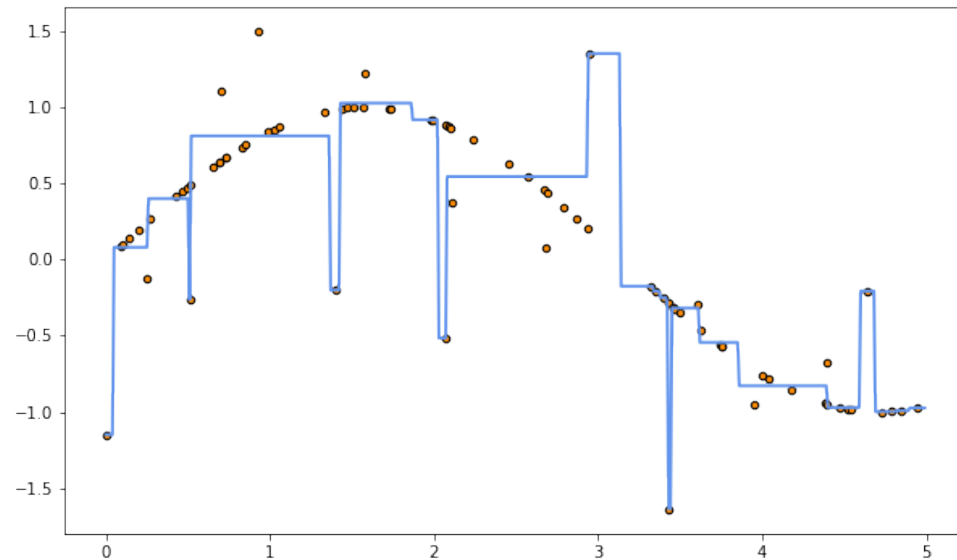
Решающее дерево для регрессии



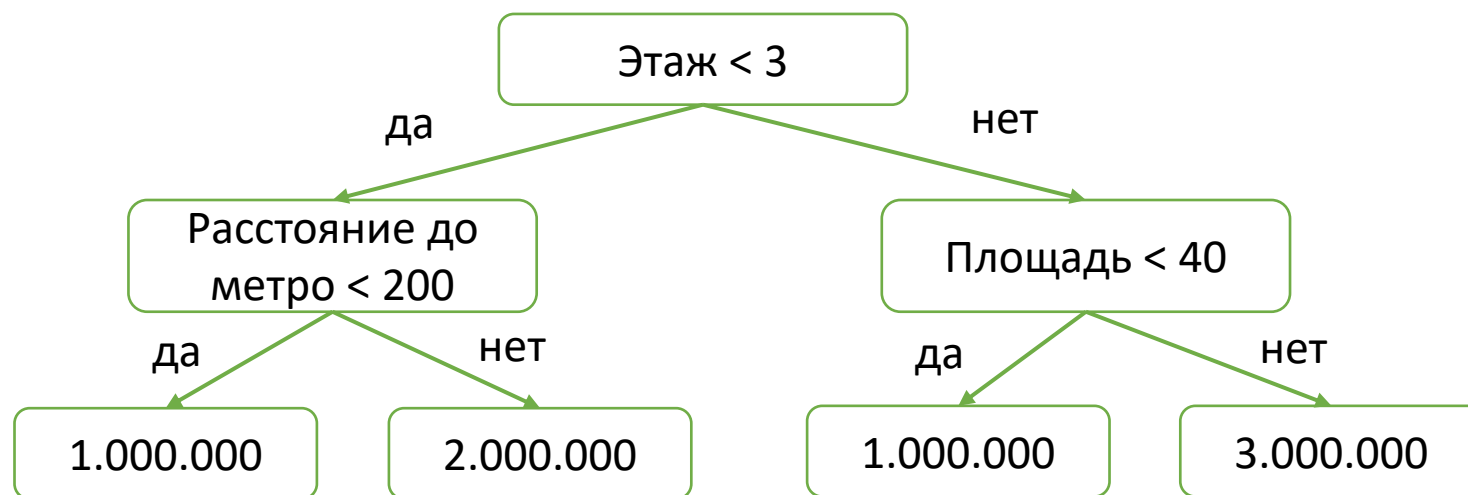
Решающее дерево для регрессии



Решающее дерево для регрессии



Решающее дерево



- Внутренние вершины: предикаты $[x_j < t]$
- Листья: прогнозы $s \in \mathbb{Y}$

Предикаты

- Порог на признак $[x_j < t]$ — не единственный вариант
- Предикат с линейной моделью: $[\langle w, x \rangle < t]$
- Предикат с метрикой: $[\rho(x, x_0) < t]$
- И много других вариантов
- Но даже с простейшим предикатом можно строить очень сложные модели

Прогнозы в листьях

- Наш выбор: константные прогнозы $c_v \in \mathbb{Y}$
- Регрессия:

$$c_v = \frac{1}{|R_v|} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} y_i$$

- Классификация:

$$c_v = \arg \max_{k \in \mathbb{Y}} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} [y_i = k]$$

Прогнозы в листьях

- Наш выбор: константные прогнозы $c_v \in \mathbb{Y}$
- Классификация и вероятности классов:

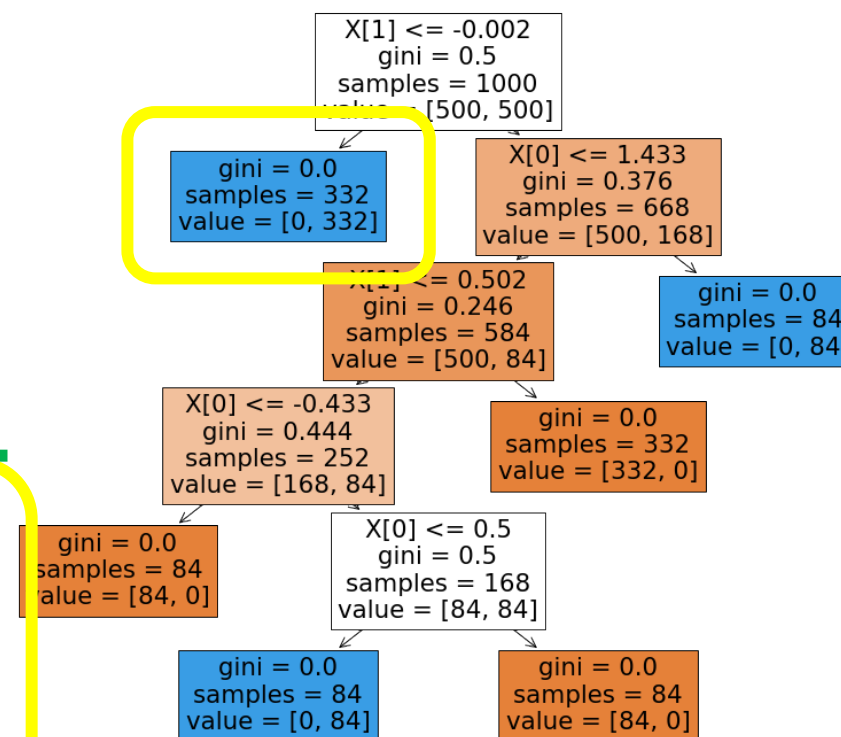
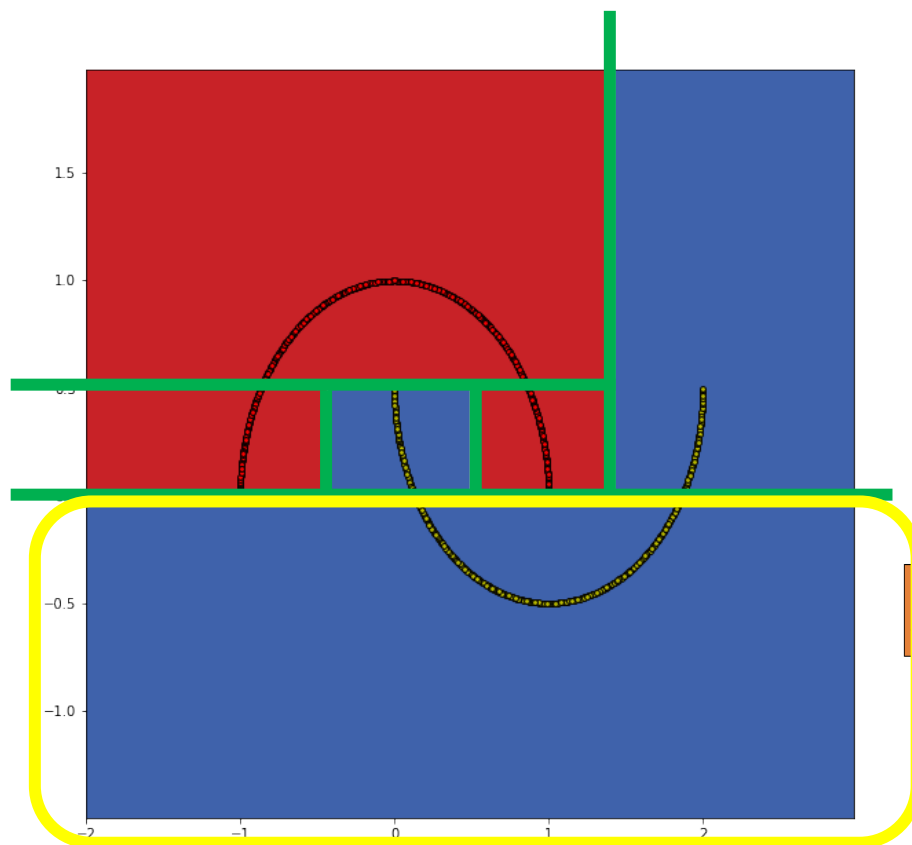
$$c_{vk} = \frac{1}{|R_v|} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} [y_i = k]$$

Прогнозы в листьях

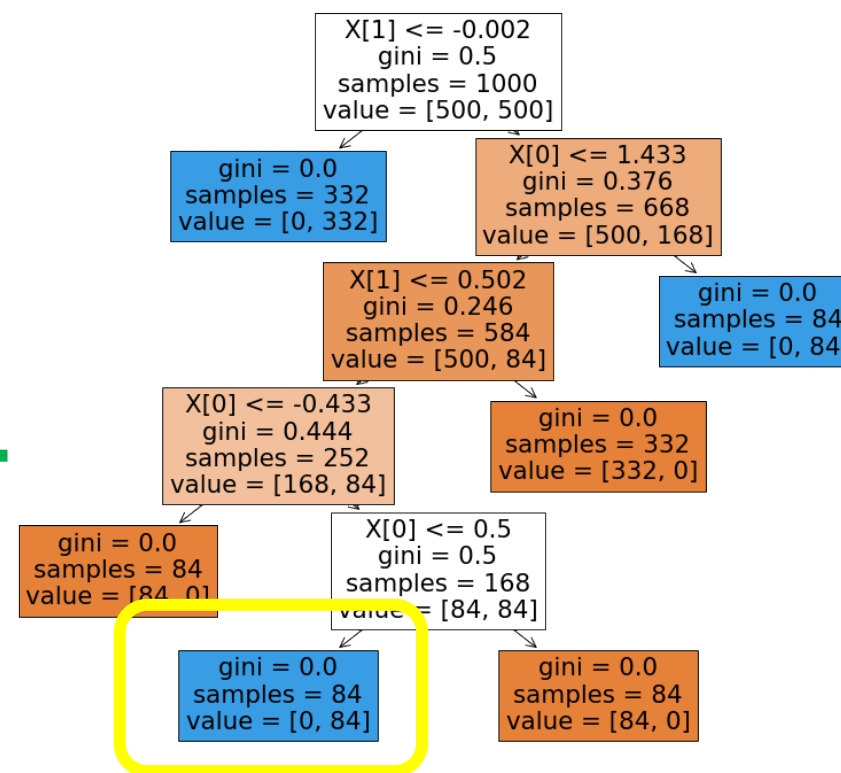
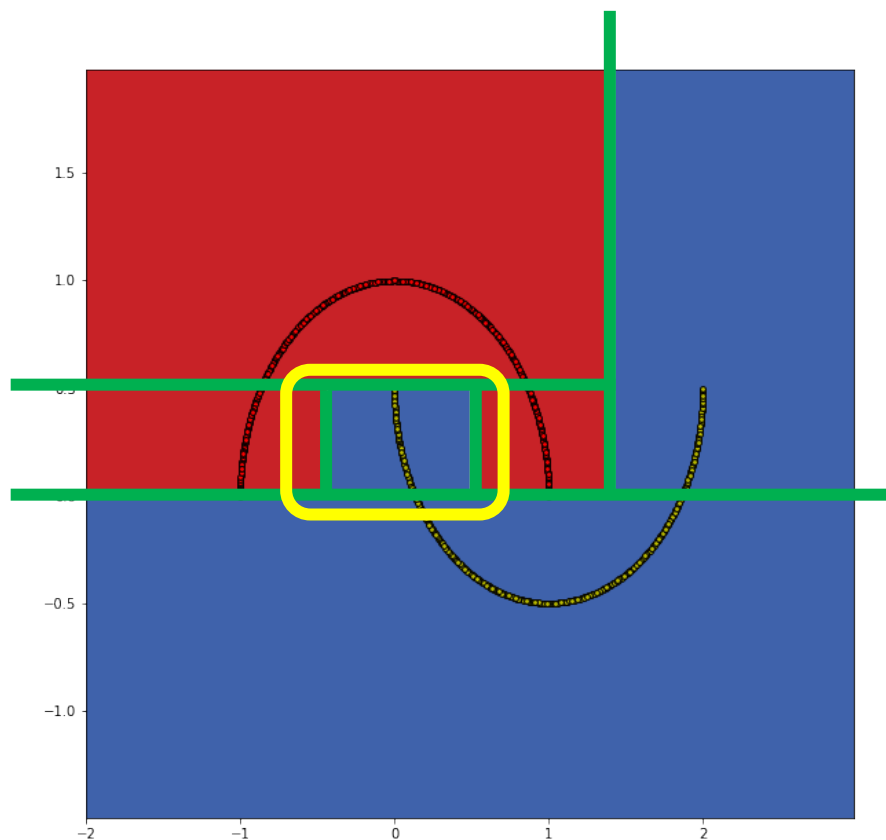
- Можно усложнять листья
- Например:

$$c_v(x) = \langle w_v, x \rangle$$

Решающее дерево



Решающее дерево



Формула для дерева

- Дерево разбивает признаковое пространство на области R_1, \dots, R_J
- Каждая область R_j соответствует листу
- В области R_j прогноз c_j константный

$$a(x) = \sum_{j=1}^J c_j [x \in R_j]$$

Формула для дерева

$$a(x) = \sum_{j=1}^J c_j [x \in R_j]$$

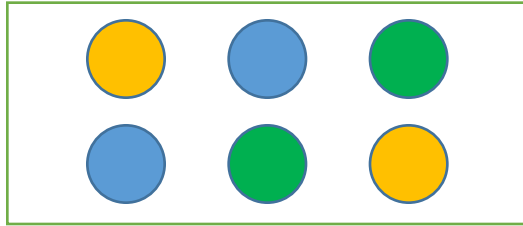
- Решающее дерево находит хорошие новые признаки
- Над этими признаками подбирает линейную модель

Как выбирать предикаты

Жадное построение

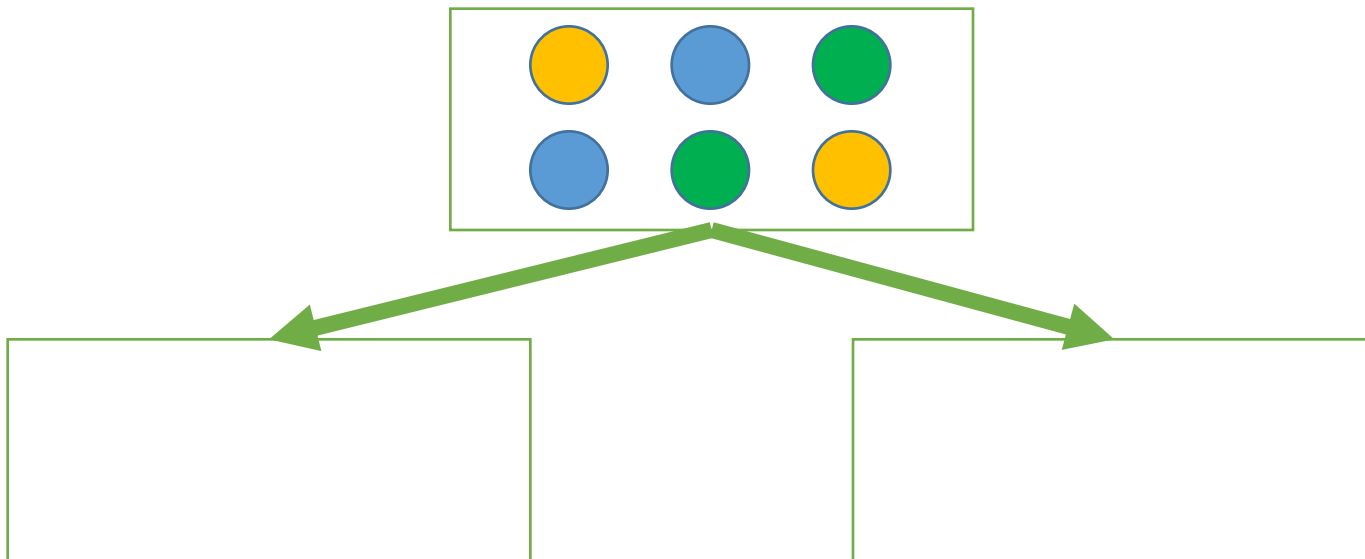
- Разберёмся на примере
- Начнём с задачи классификации

Жадное построение

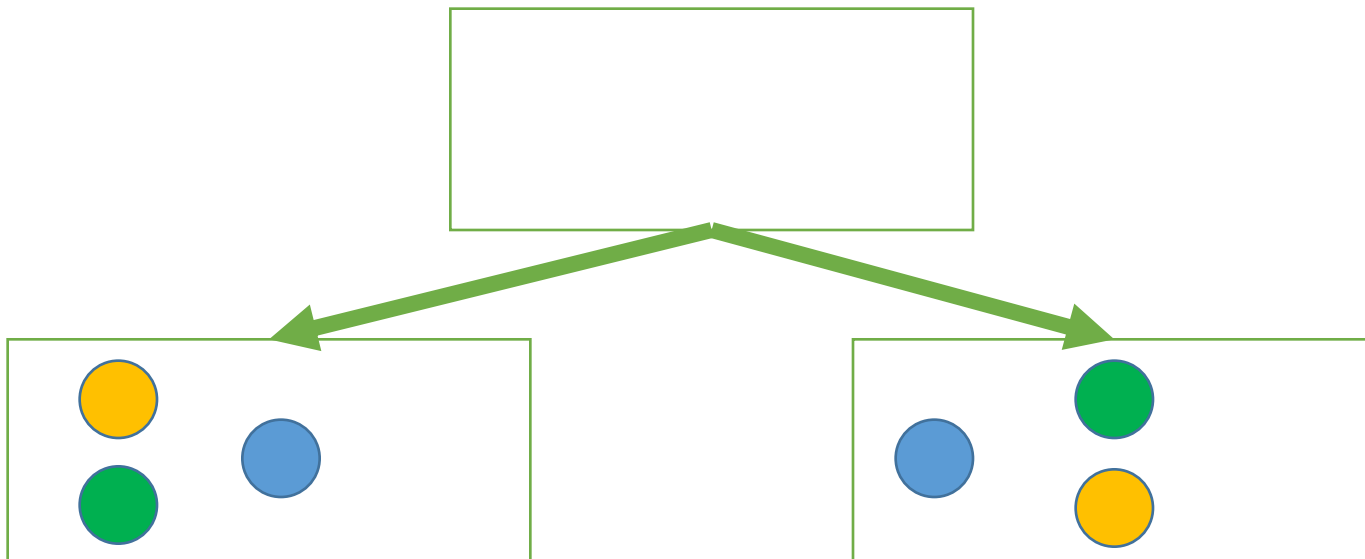


- Как разбить вершину?

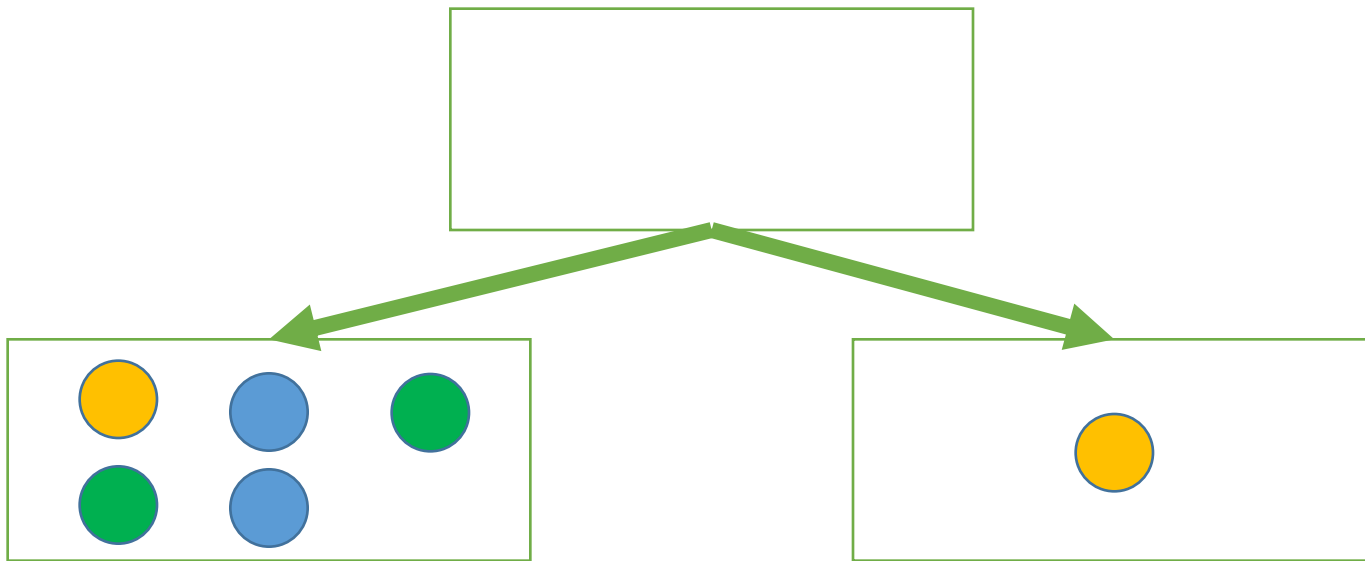
Жадное построение



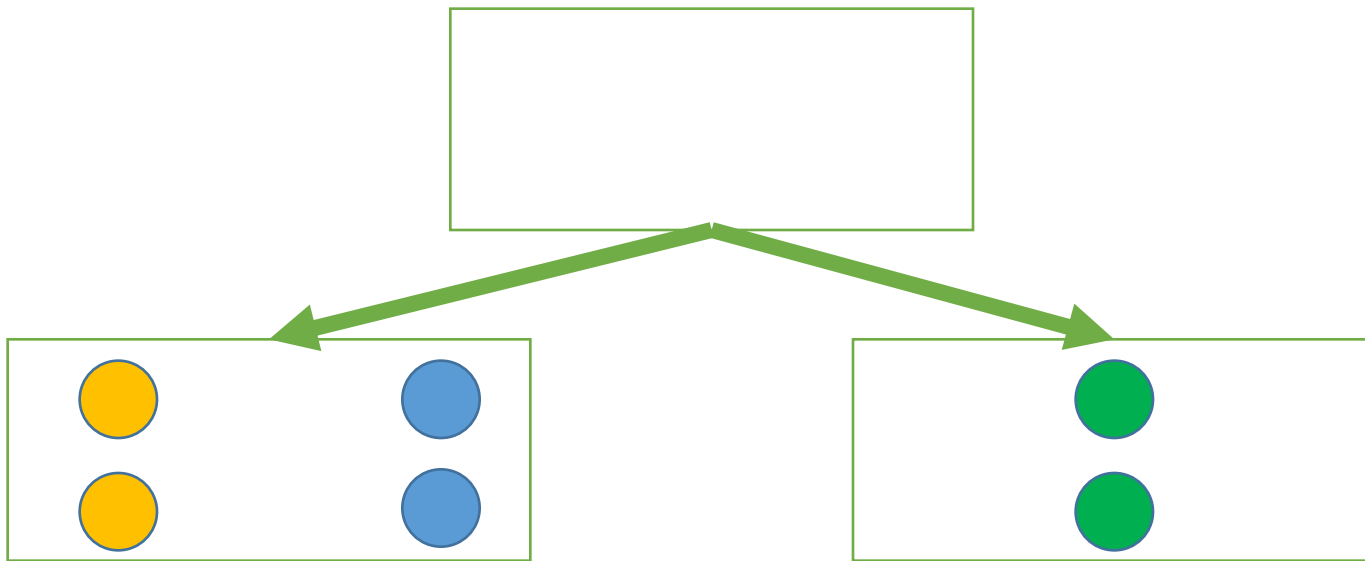
Жадное построение



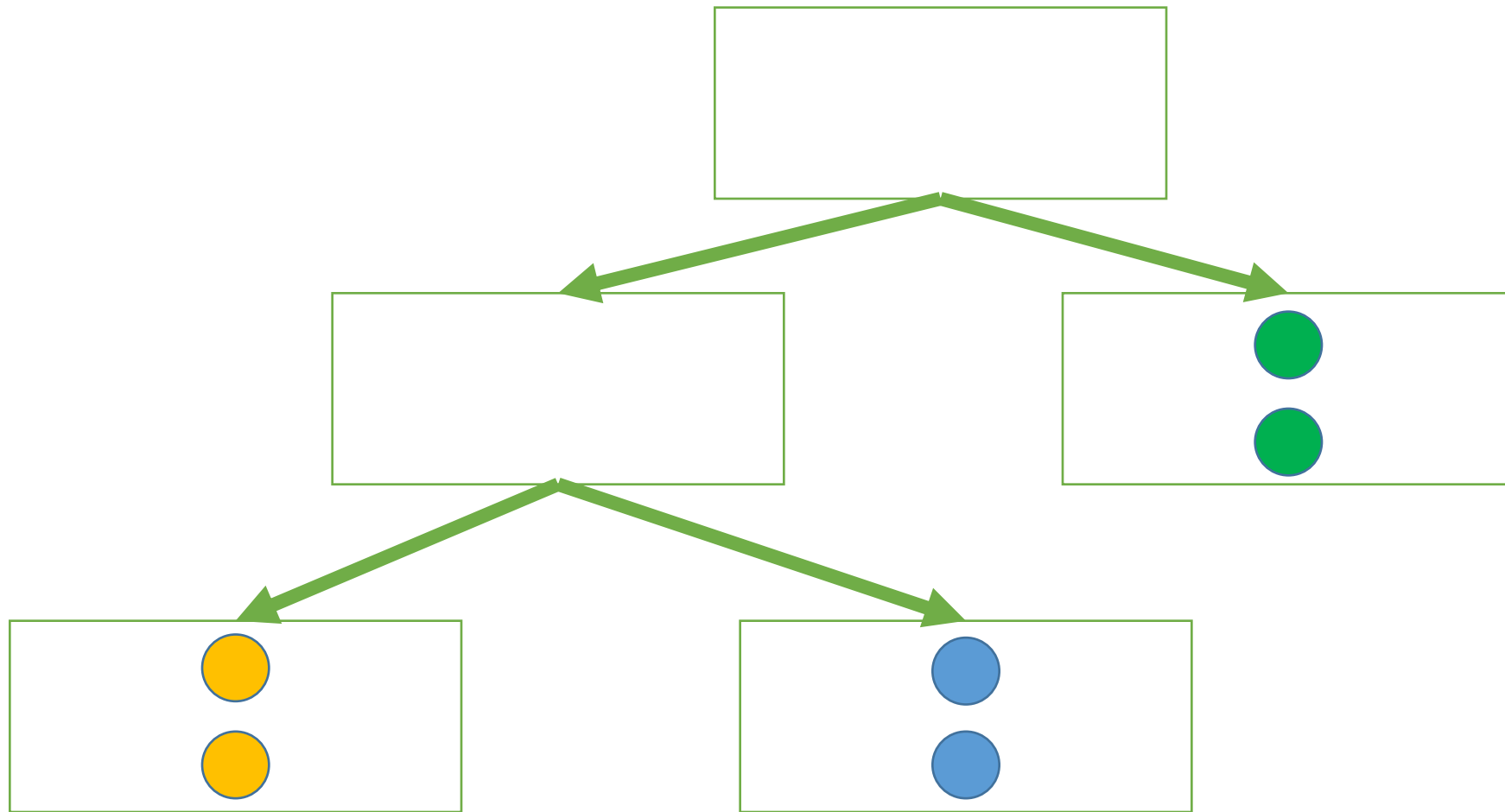
Жадное построение



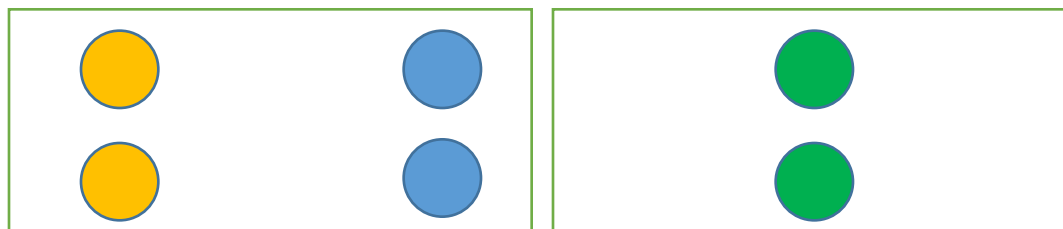
Жадное построение



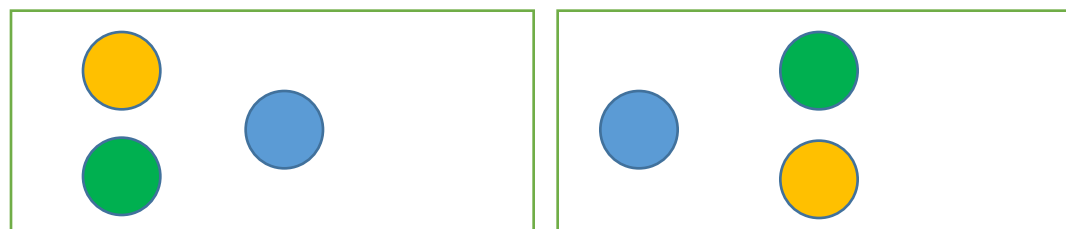
Жадное построение



Как сравнить разбиения?

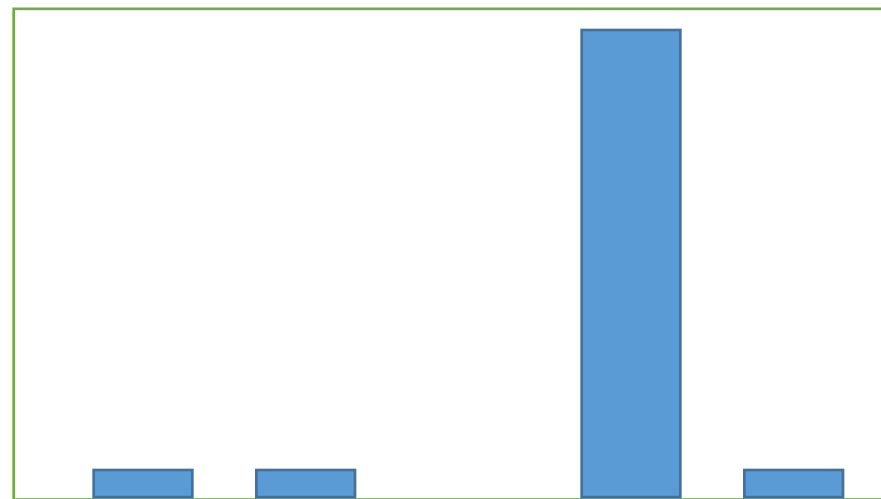
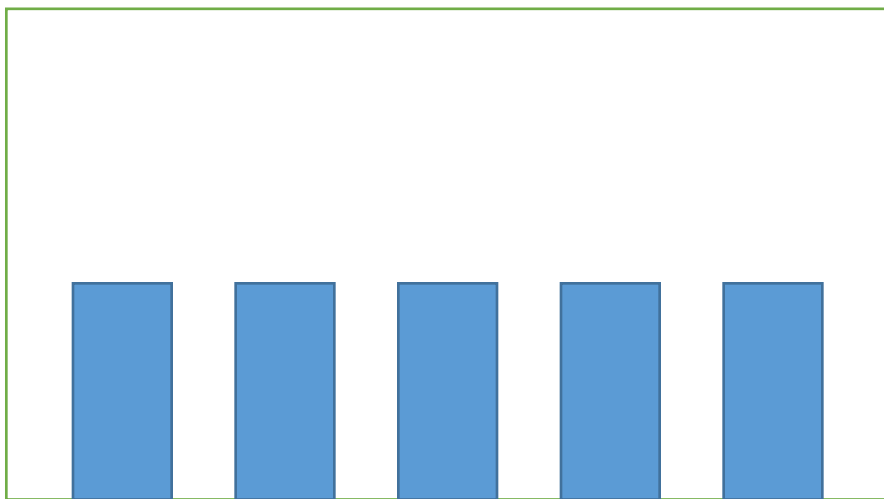


или



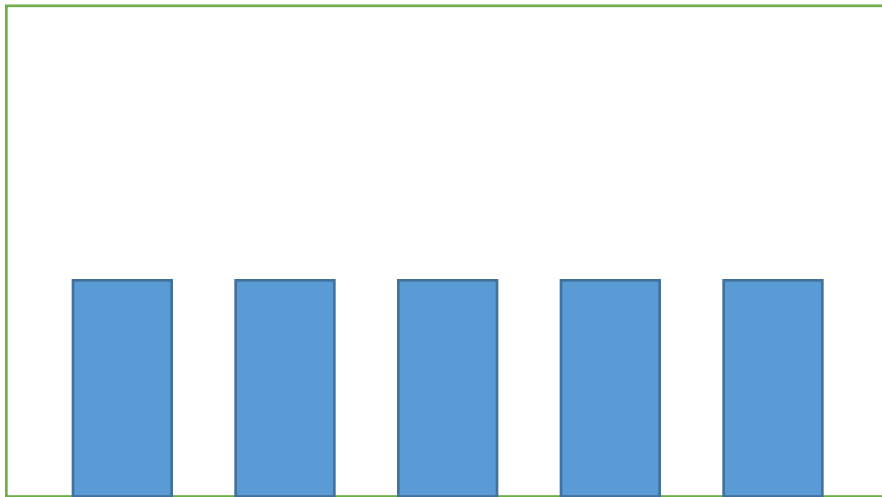
Энтропия

- Мера неопределённости распределения

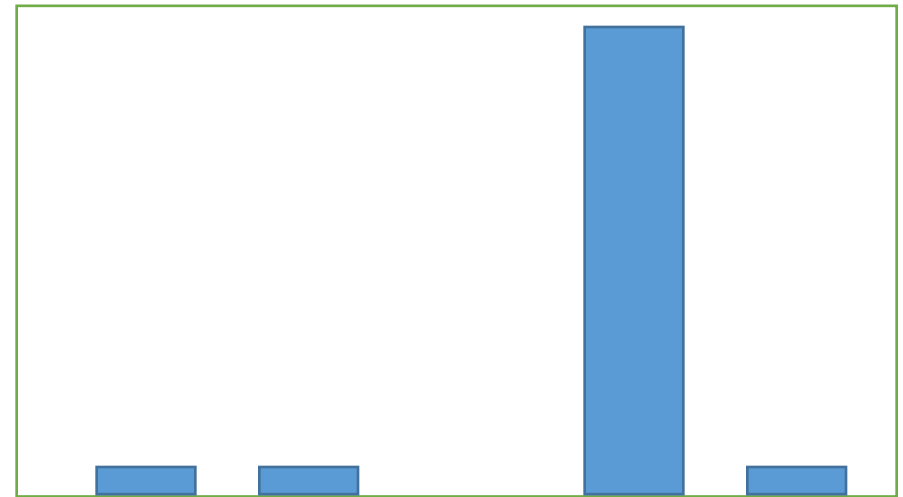


Энтропия

- Мера неопределённости распределения



Высокая энтропия



Низкая энтропия

Энтропия

- Дискретное распределение
- Принимает n значений с вероятностями p_1, \dots, p_n
- Энтропия:

$$H(p_1, \dots, p_n) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i$$

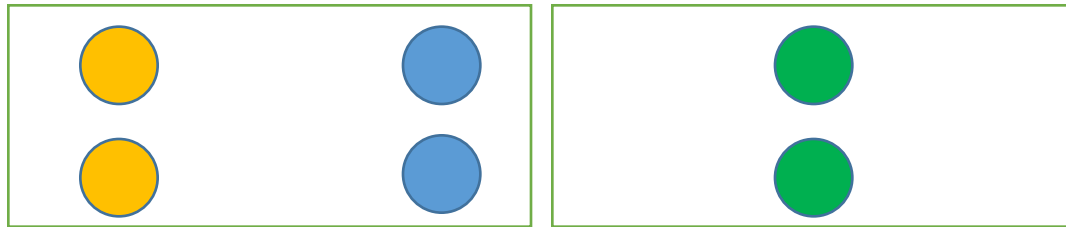
Энтропия

- $(0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2)$
- $H = 1.60944 \dots$

- $(0.9, 0.05, 0.05, 0, 0)$
- $H = 0.394398 \dots$

- $(0, 0, 0, 1, 0)$
- $H = 0$

Как сравнить разбиения?



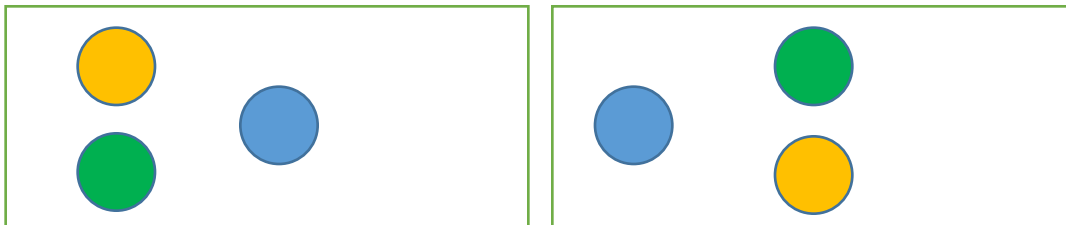
0.693

0

- $(0.5, 0.5, 0)$ и $(0, 0, 1)$
- $H = 0.693 + 0 = 0.693$

1.09

1.09



- $(0.33, 0.33, 0.33)$ и $(0.33, 0.33, 0.33)$
- $H = 1.09 + 1.09 = 2.18$

Энтропия

$$H(p_1, \dots, p_K) = - \sum_{i=1}^K p_i \log_2 p_i$$

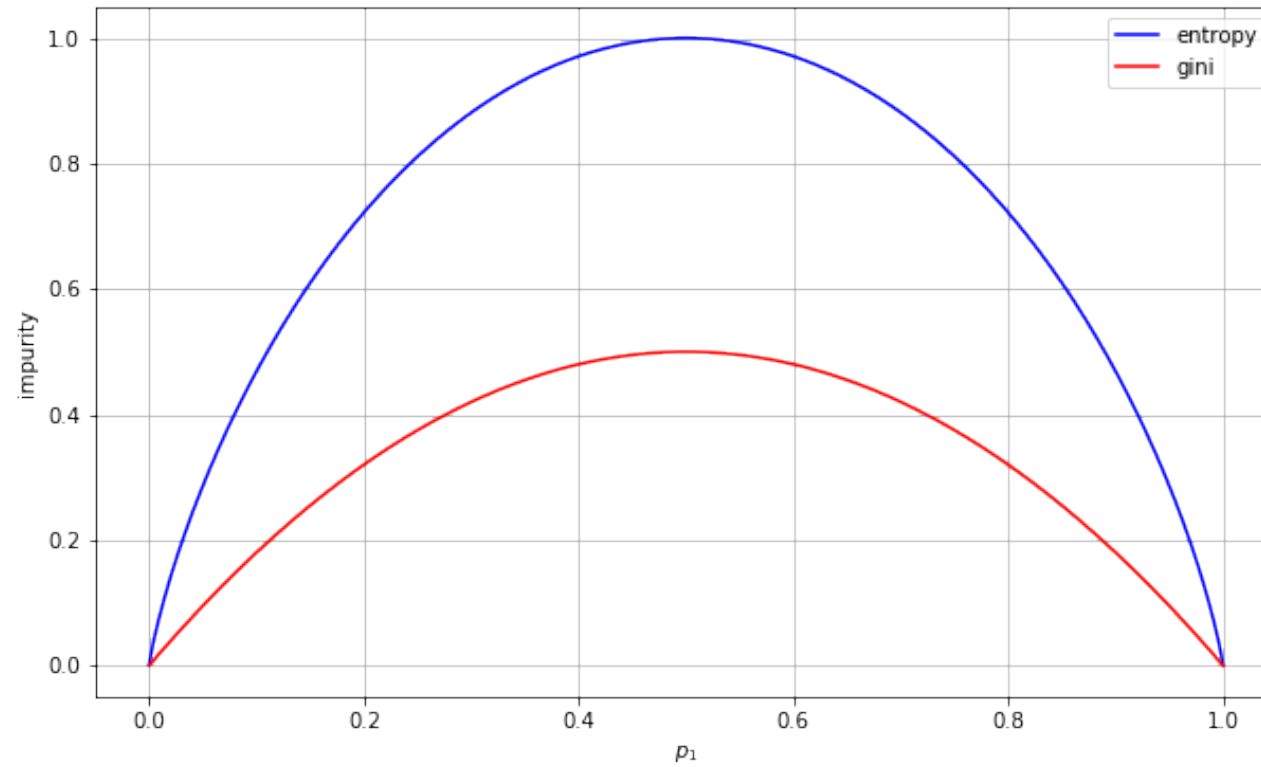
- Характеристика «хаотичности» вершины
- Impurity

Критерий Джини

$$H(p_1, \dots, p_K) = \sum_{i=1}^K p_i (1 - p_i)$$

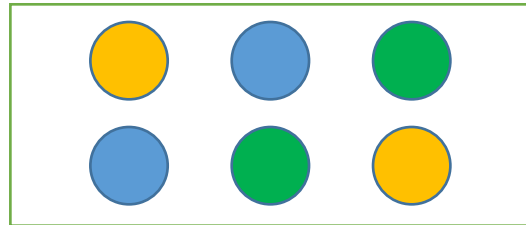
- Вероятность ошибки случайного классификатора, который выдаёт класс k с вероятностью p_k
- Примерно пропорционально количеству пар объектов, относящихся к разным классам

Критерии качества вершины

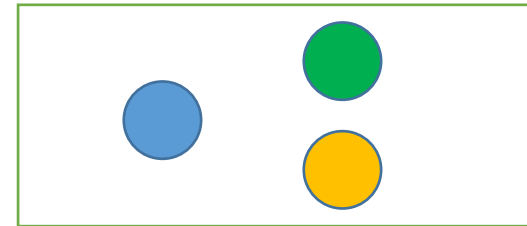
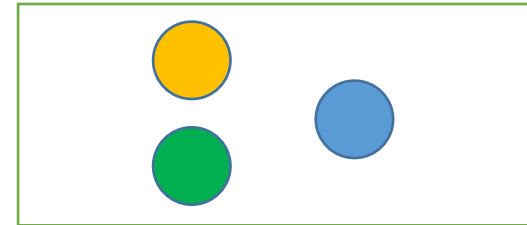


Критерий информативности

- Как понять, какой предикат лучше?
- Сравнить хаотичность в исходной вершине и в двух дочерних!

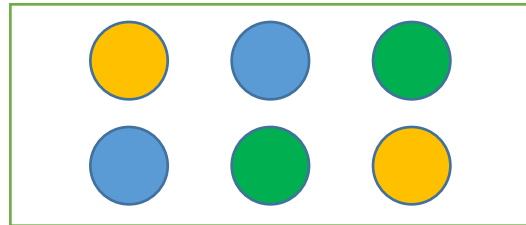


против

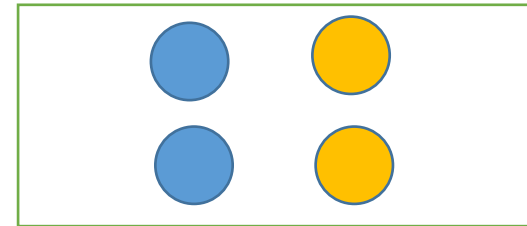
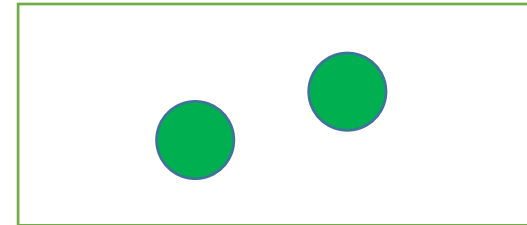


Критерий информативности

- Как понять, какой предикат лучше?
- Сравнить хаотичность в исходной вершине и в двух дочерних!



против



Критерий информативности

- Как понять, какой предикат лучше?
- Сравнить хаотичность в исходной вершине и в двух дочерних!

$$Q(R, j, t) = H(R) - H(R_\ell) - H(R_r) \rightarrow \max_{j, t}$$

Критерий информативности

- Как понять, какой предикат лучше?
- Сравнить хаотичность в исходной вершине и в двух дочерних!

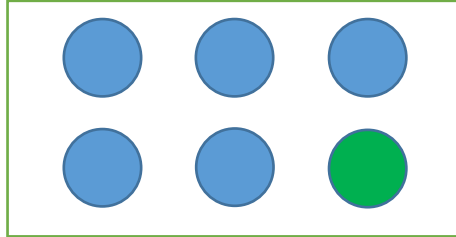
$$Q(R, j, t) = H(R) - H(R_\ell) - H(R_r) \rightarrow \max_{j,t}$$

- Или так:

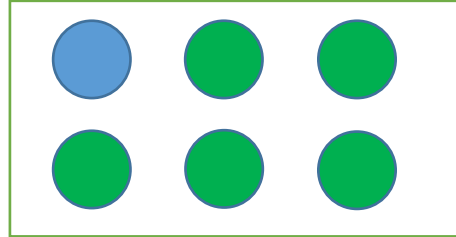
$$Q(R, j, t) = H(R_\ell) + H(R_r) \rightarrow \min_{j,t}$$

- (у этих формул есть проблемы!)

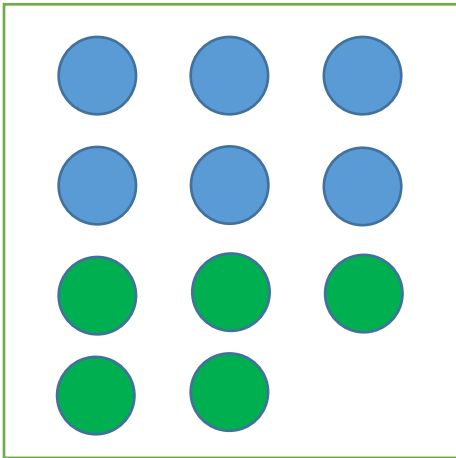
Как сравнить разбиения?



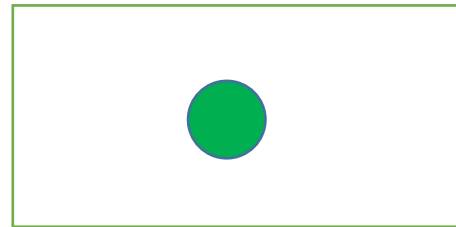
0.65



0.65



0.994



0

- $(5/6, 1/6)$ и $(1/6, 5/6)$
- $0.65 + 0.65 = 1.3$

- $(6/11, 5/11)$ и $(0, 1)$
- $0.994 + 0 = 0.994$

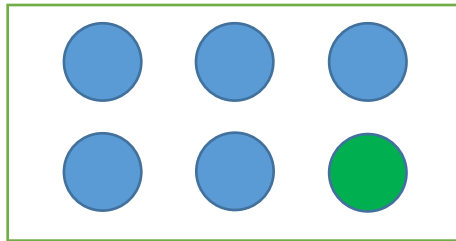
Критерий информативности

$$Q(R, j, t) = H(R) - \frac{|R_\ell|}{|R|} H(R_\ell) - \frac{|R_r|}{|R|} H(R_r) \rightarrow \max_{j,t}$$

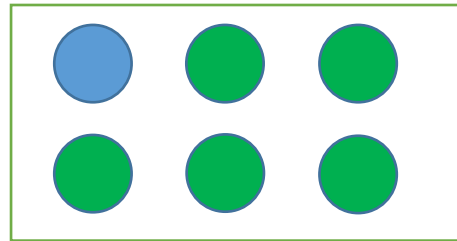
- Или так:

$$Q(R, j, t) = \frac{|R_\ell|}{|R|} H(R_\ell) + \frac{|R_r|}{|R|} H(R_r) \rightarrow \min_{j,t}$$

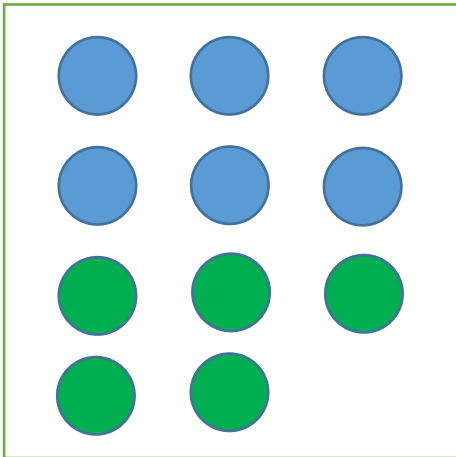
Как сравнить разбиения?



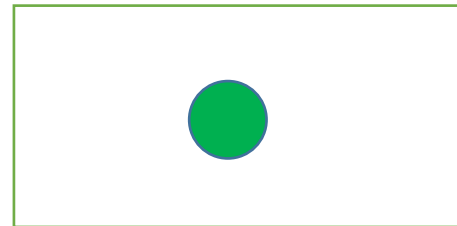
0.65



0.65



0.994



0

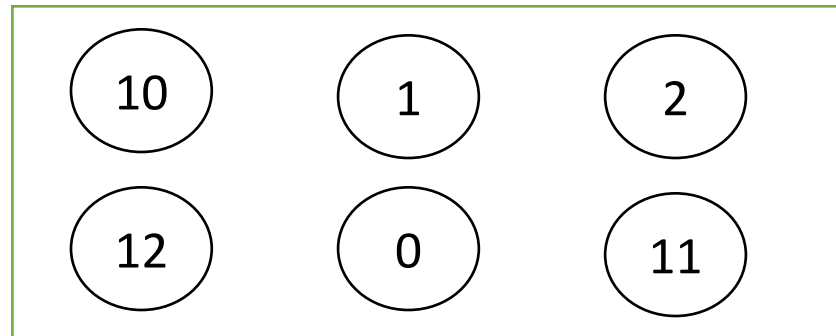
- $(5/6, 1/6)$ и $(1/6, 5/6)$

- $0.5 * 0.65 + 0.5 * 0.65 = 0.65$

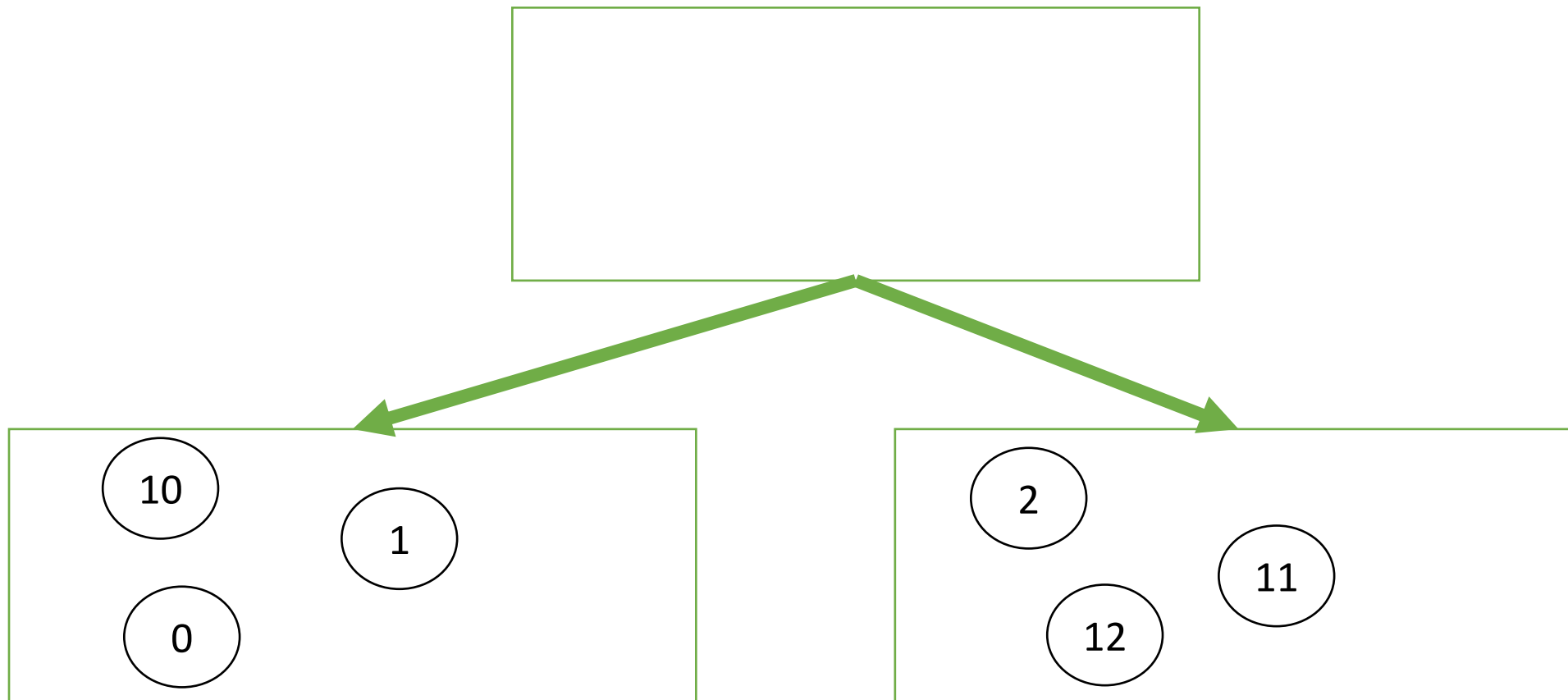
- $(6/11, 5/11)$ и $(0, 1)$

- $\frac{11}{12} * 0.994 + \frac{1}{12} * 0 = 0.911$

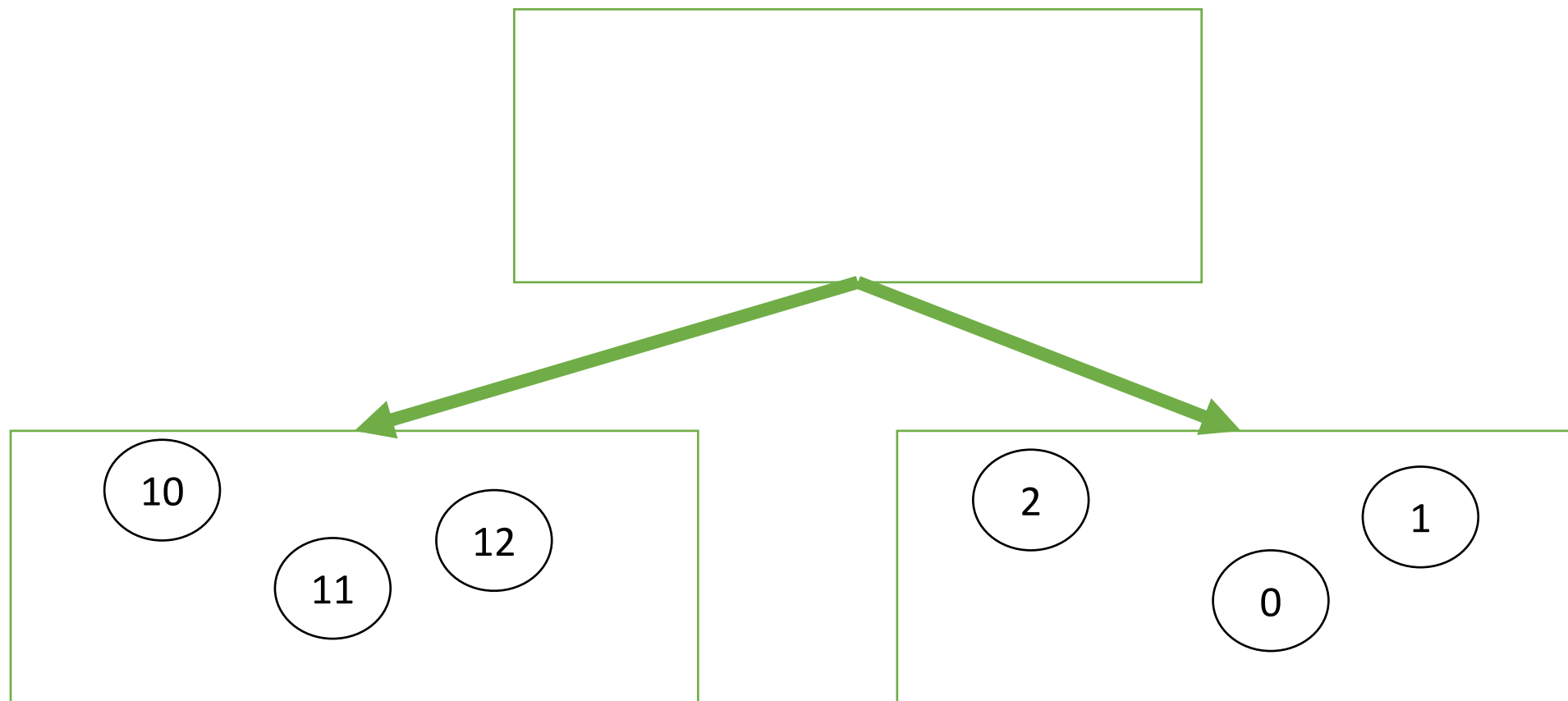
А для регрессии?



А для регрессии?



А для регрессии?



Задача регрессии

$$H(R) = \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i, y_i) \in R} (y_i - y_R)^2$$

$$y_R = \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i, y_i) \in R} y_i$$

- То есть «хаотичность» вершины можно измерять дисперсией ответов в ней

Жадное построение дерева

Как строить дерево?

- Оптимальный вариант: перебрать все возможные деревья, выбрать самое маленькое среди безошибочных
- Слишком долго

Как строить дерево?

- Мы уже умеем выбрать лучший предикат для разбиения вершины
- Будем строить жадно
- Начнём с корня дерева, будем разбивать последовательно, пока не выполнится некоторый критерий останова

Критерий останова

- Ограничить глубину
- Ограничить количество листьев
- Задать минимальное число объектов в вершине
- Задать минимальное уменьшение хаотичности при разбиении
- И так далее

Жадный алгоритм

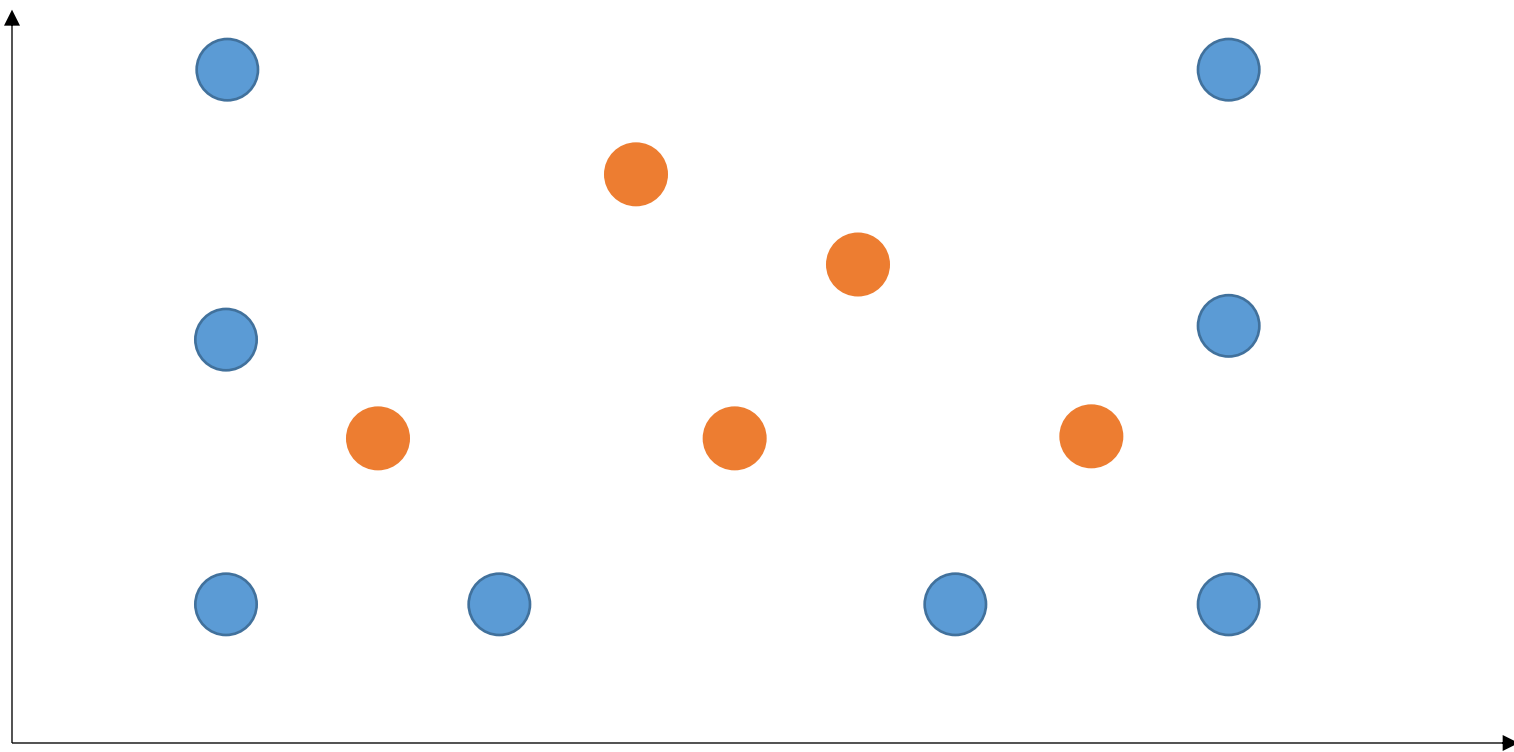
1. Поместить в корень всю выборку: $R_1 = X$
2. Запустить построение из корня: $\text{SplitNode}(1, R_1)$

Жадный алгоритм

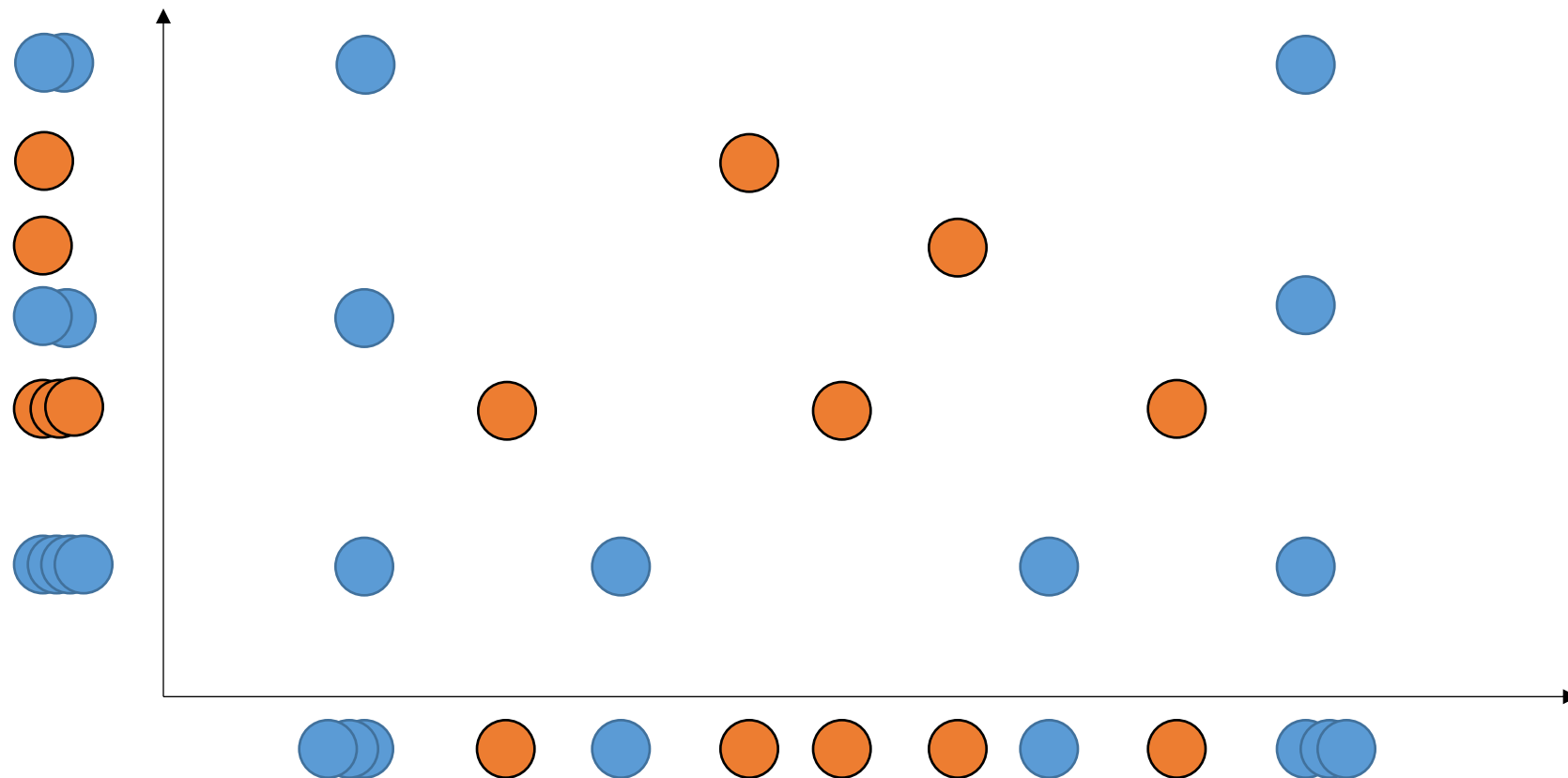
- $\text{SplitNode}(m, R_m)$

1. Если выполнен критерий останова, то выход
2. Ищем лучший предикат: $j, t = \arg \min_{j, t} Q(R_m, j, t)$
3. Разбиваем с его помощью объекты: $R_\ell = \left\{ \{(x, y) \in R_m \mid [x_j < t] \} \right\},$
 $R_r = \left\{ \{(x, y) \in R_m \mid [x_j \geq t] \} \right\}$
4. Повторяем для дочерних вершин: $\text{SplitNode}(\ell, R_\ell)$ и $\text{SplitNode}(r, R_r)$

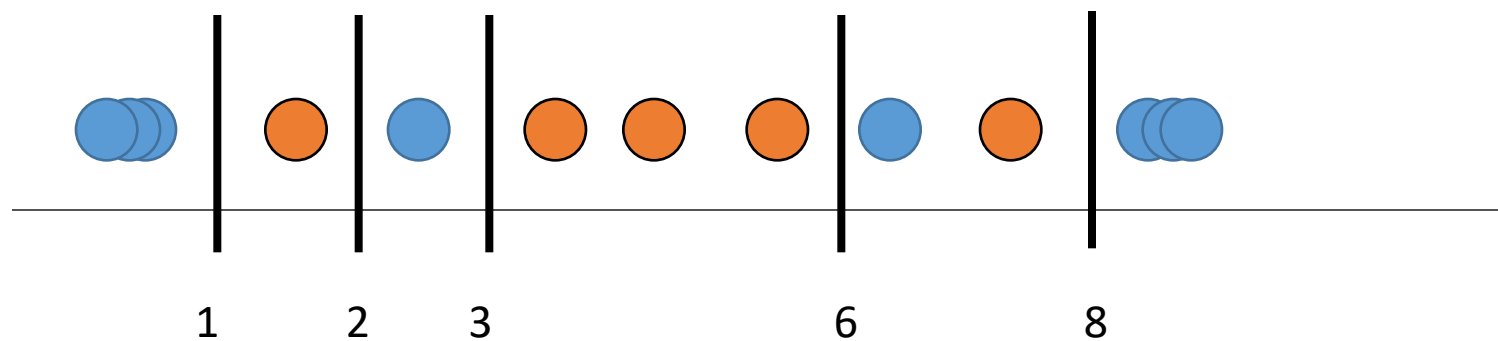
Обучение деревьев



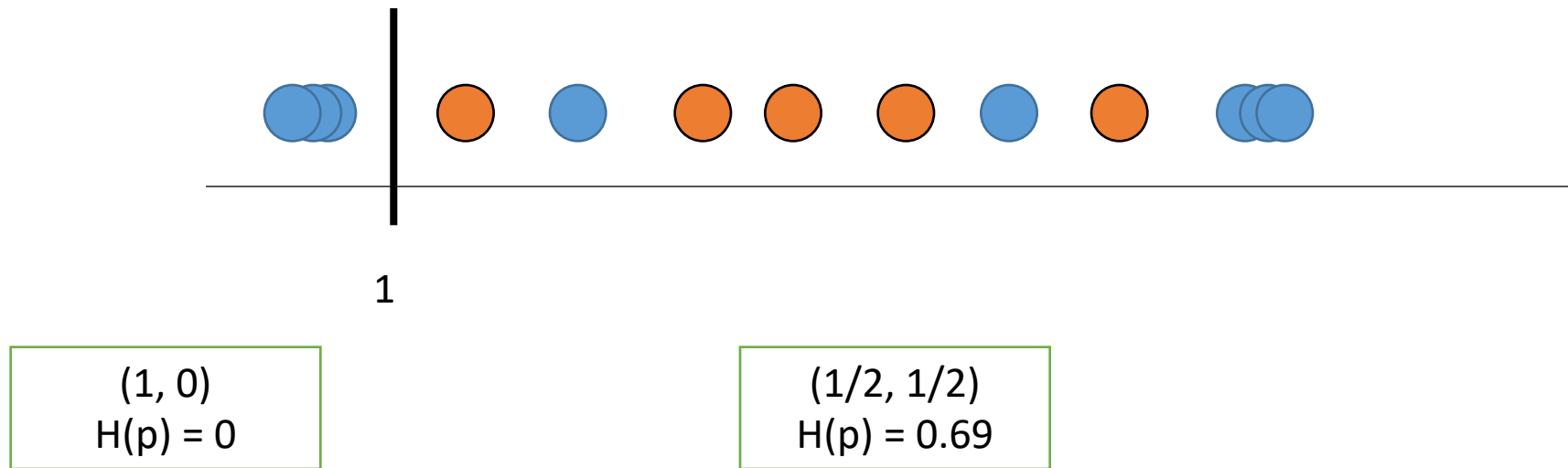
Признаки



Разбиения по признаку 1

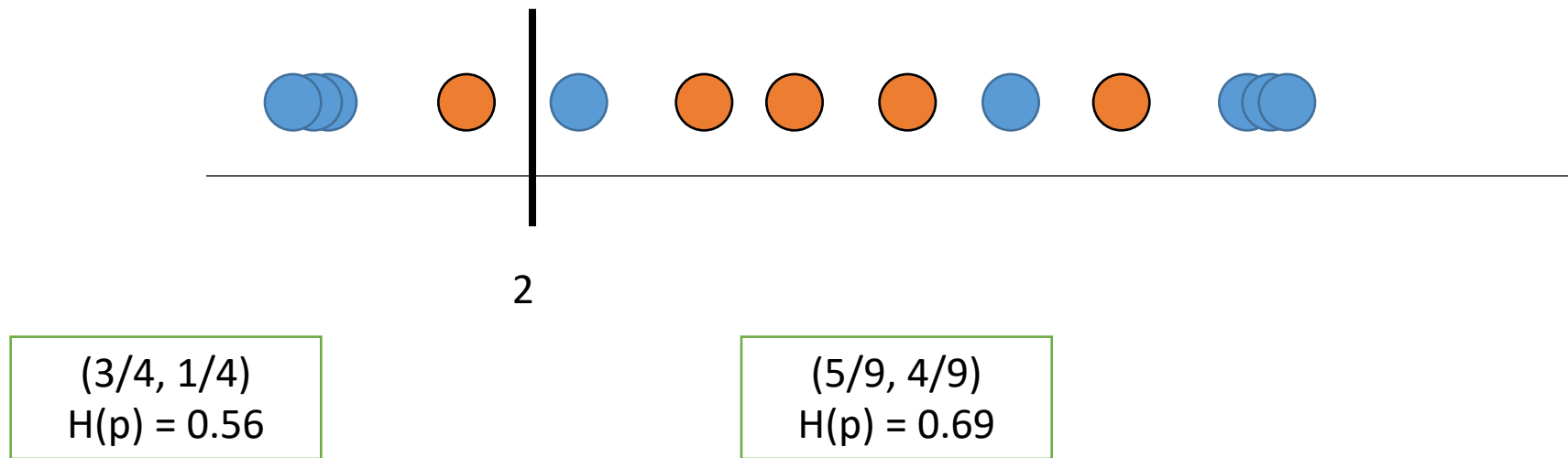


Разбиения по признаку 1



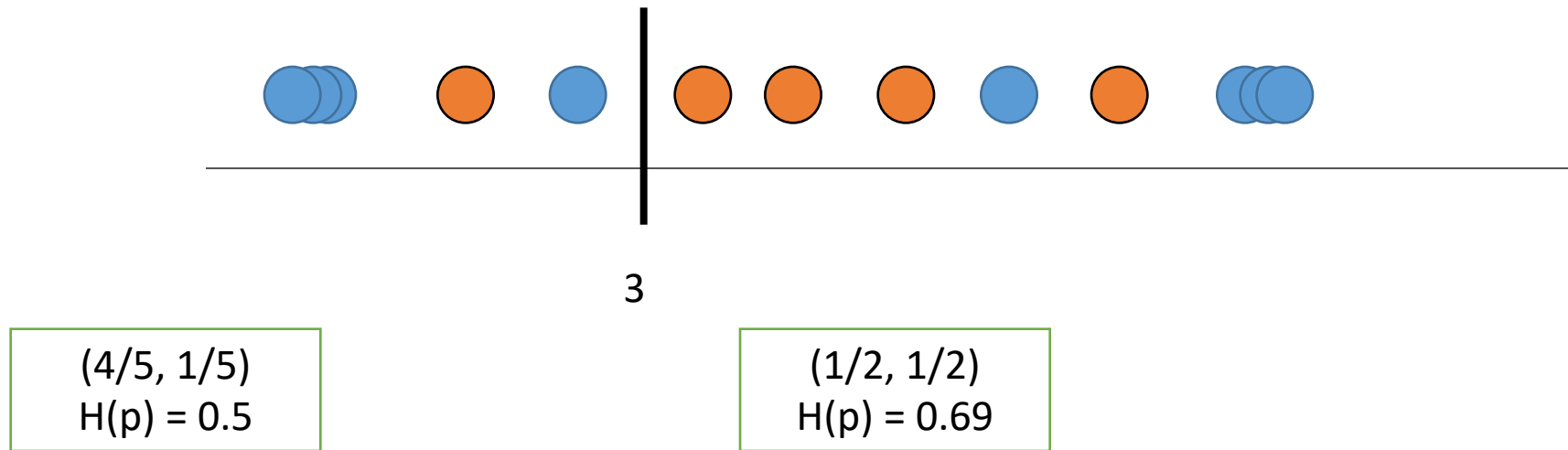
$$\frac{3}{13}H(p_l) + \frac{10}{13}H(p_r) = 0.53$$

Разбиения по признаку 1



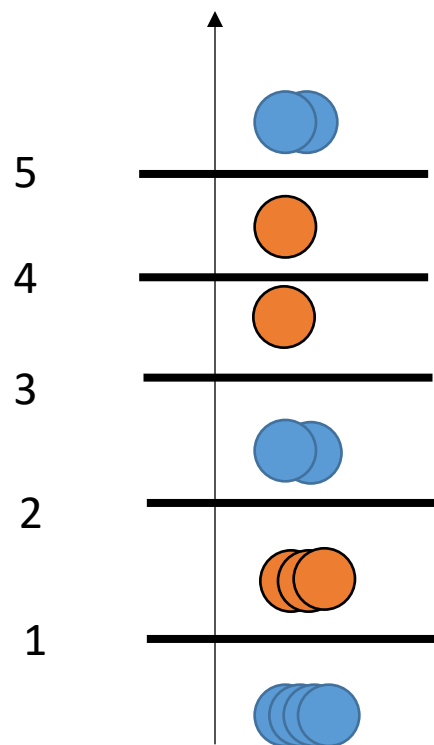
$$\frac{4}{13}H(p_l) + \frac{9}{13}H(p_r) = 0.65$$

Разбиения по признаку 1

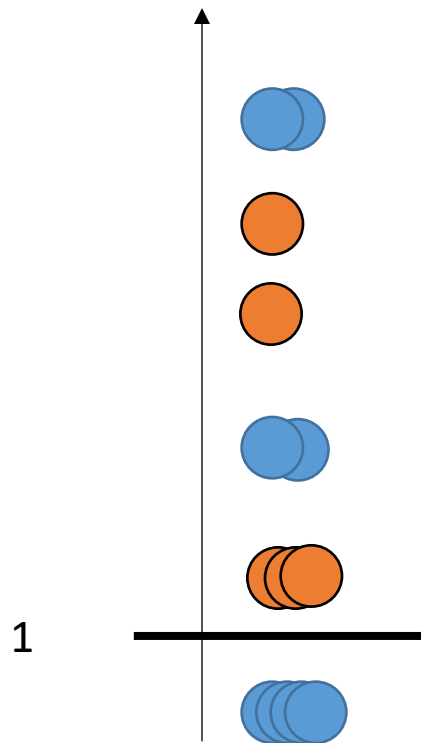


$$\frac{5}{13}H(p_l) + \frac{8}{13}H(p_r) = 0.62$$

Разбиения по признаку 2



Разбиения по признаку 2

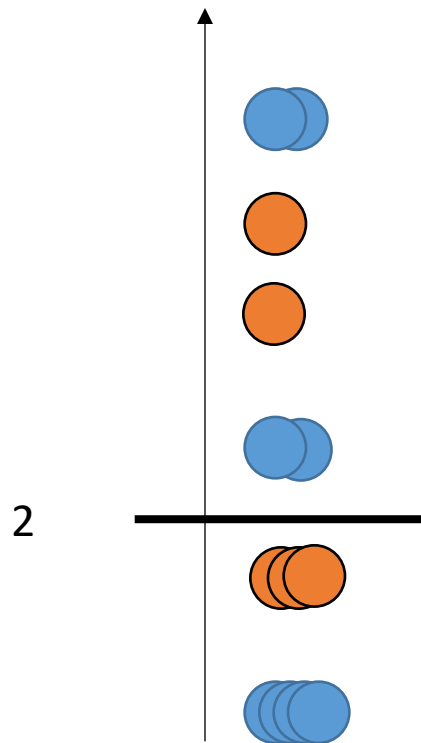


$(4/9, 5/9)$
 $H(p) = 0.69$

$(1, 0)$
 $H(p) = 0$

$$\frac{4}{13}H(p_l) + \frac{9}{13}H(p_r) = 0.47$$

Разбиения по признаку 2

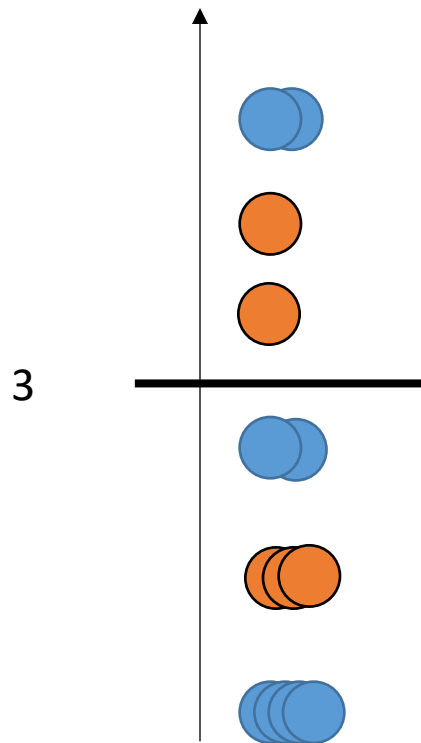


$(4/6, 2/6)$
 $H(p) = 0.64$

$(4/7, 3/7)$
 $H(p) = 0.68$

$$\frac{7}{13}H(p_l) + \frac{6}{13}H(p_r) = 0.66$$

Разбиения по признаку 2

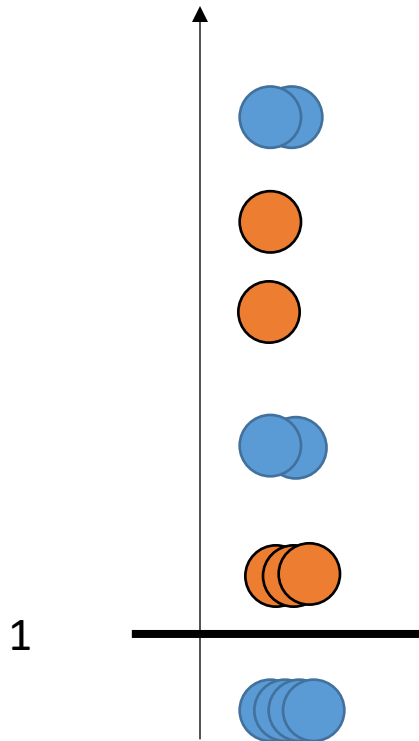


$(1/2, 1/2)$
 $H(p) = 0.69$

$(6/9, 3/9)$
 $H(p) = 0.46$

$$\frac{9}{13}H(p_l) + \frac{4}{13}H(p_r) = 0.53$$

Разбиения по признаку 2



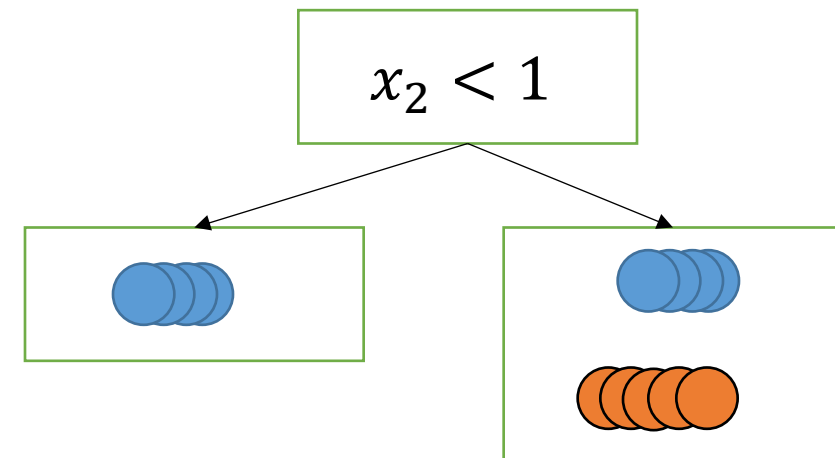
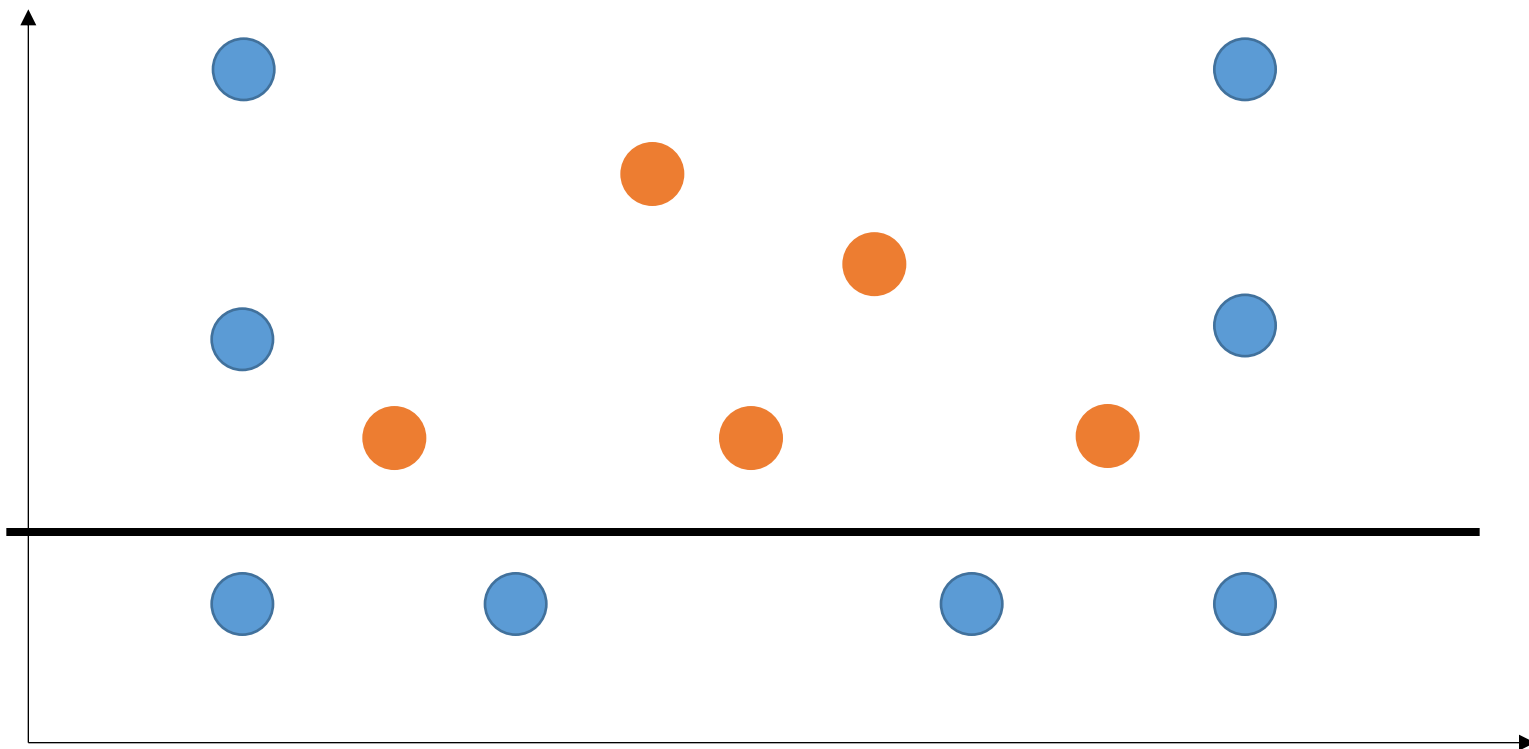
$(4/9, 5/9)$
 $H(p) = 0.69$

$(1, 0)$
 $H(p) = 0$

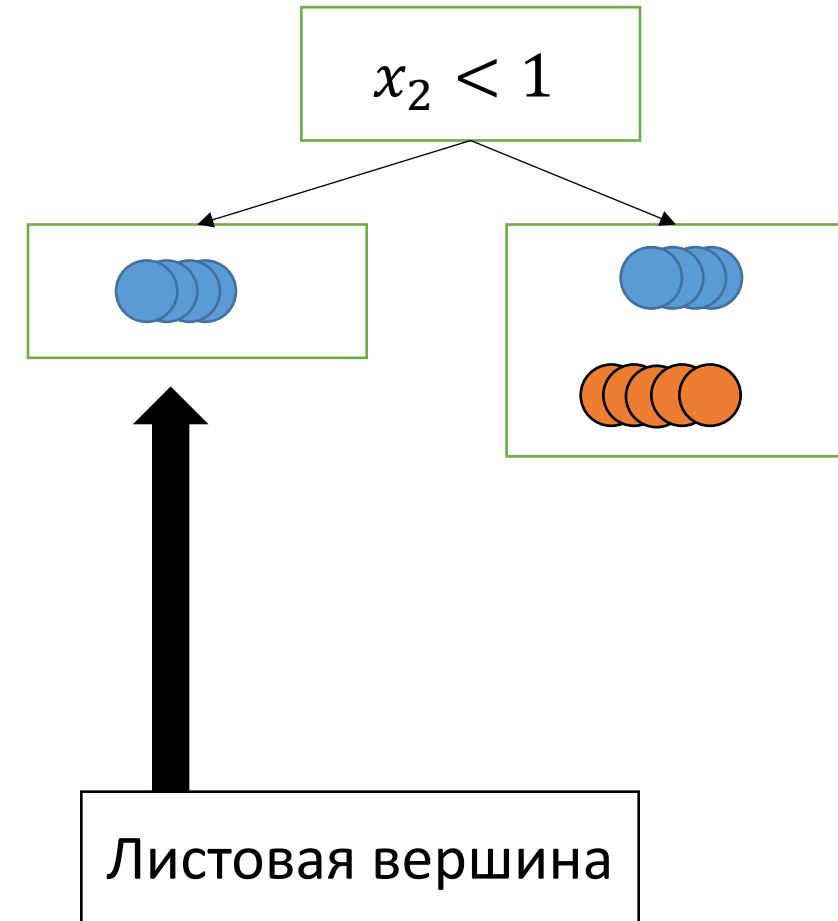
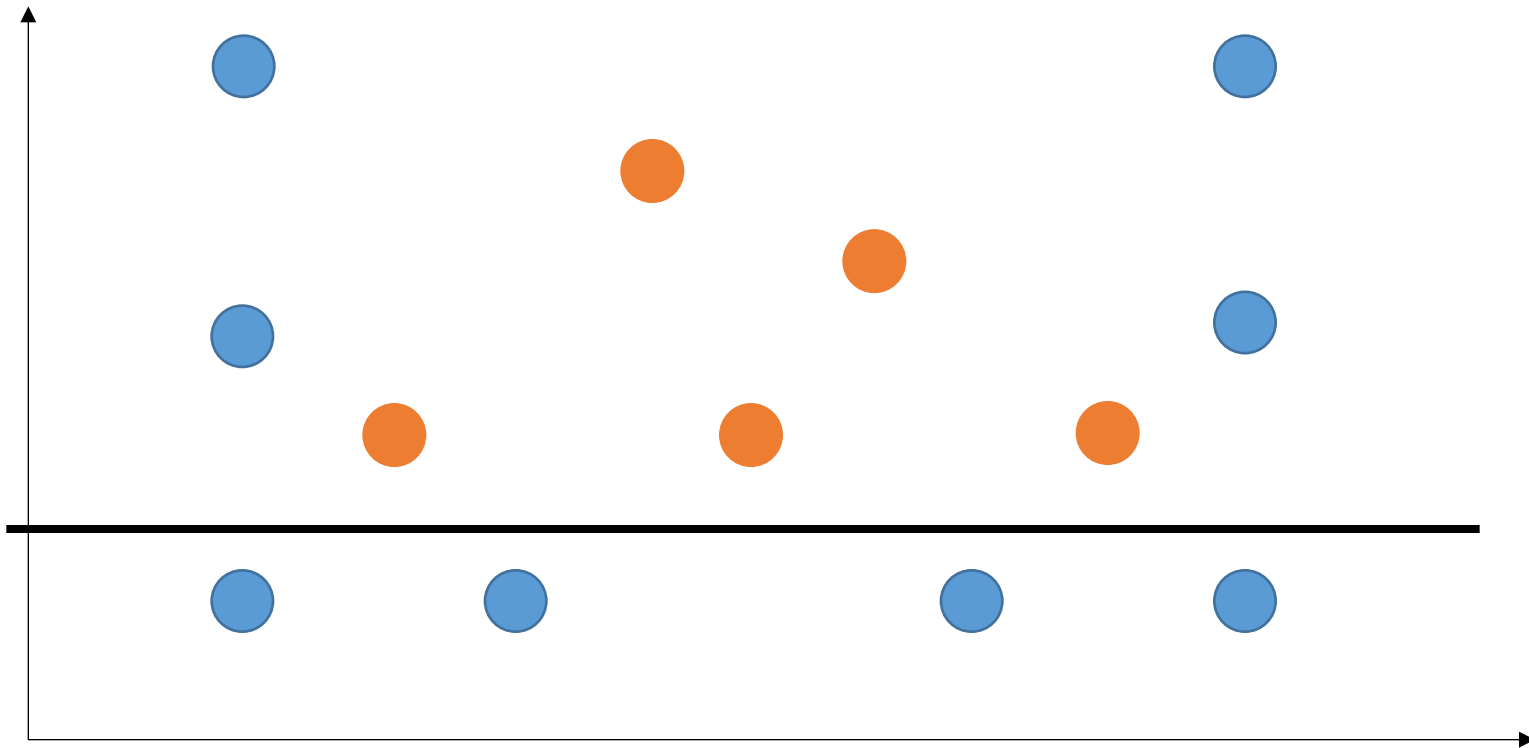
$$\frac{4}{13}H(p_l) + \frac{9}{13}H(p_r) = 0.47$$

Лучшее разбиение!

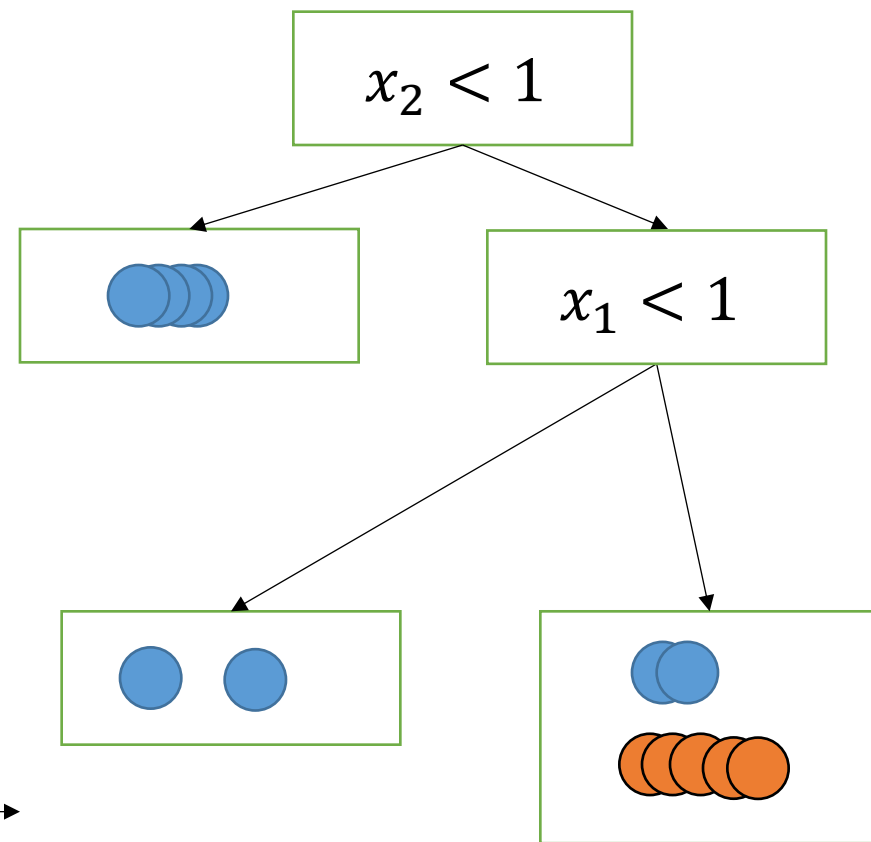
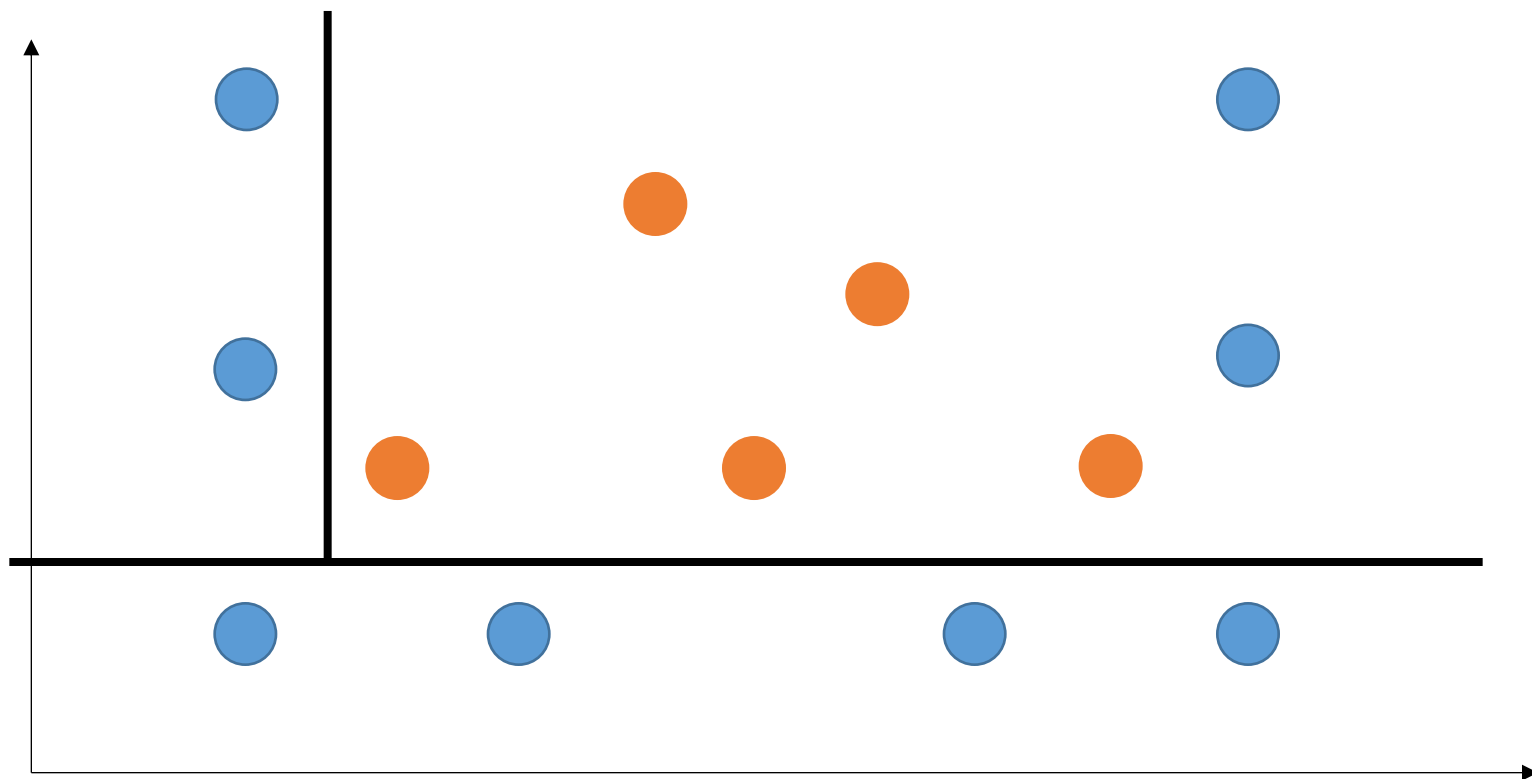
Обучение деревьев



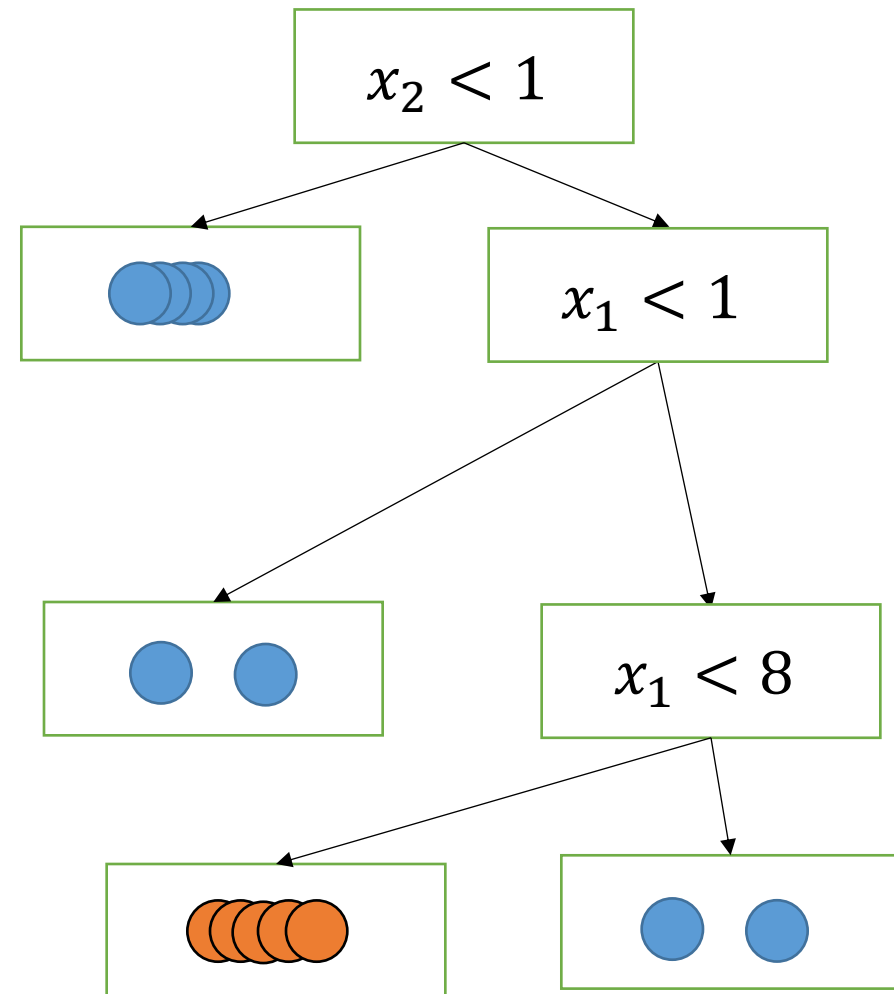
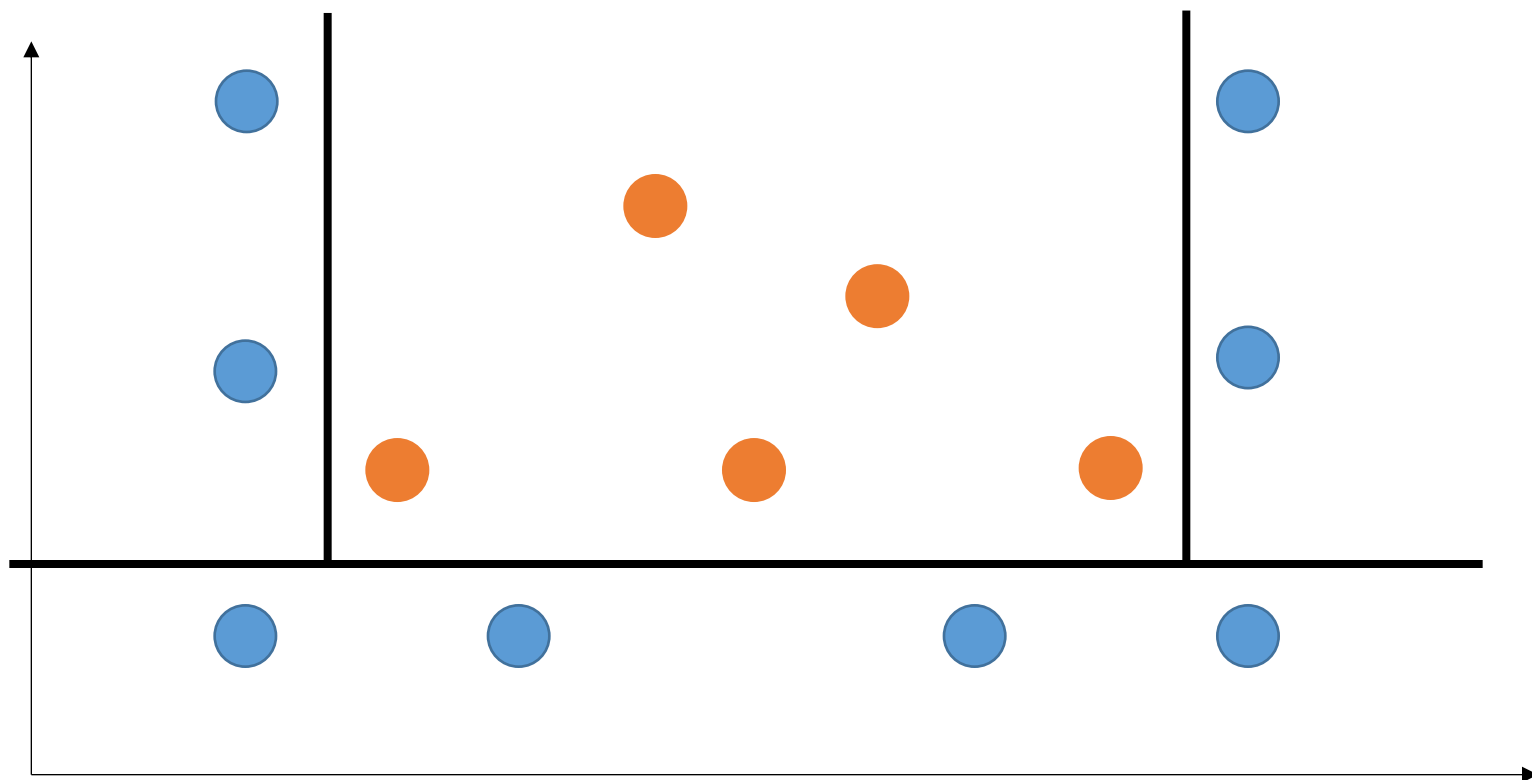
Обучение деревьев



Обучение деревьев



Обучение деревьев



Резюме

- Решающие деревья позволяют строить сложные модели, но есть риск переобучения
- Деревья строятся жадно, на каждом шаге вершина разбивается на две с помощью лучшего из предиктов
- Алгоритм довольно сложный и требует перебора всех предикатов на каждом шаге