Машинное обучение

Лекция 4

Решающие деревья (decision tree, DT)

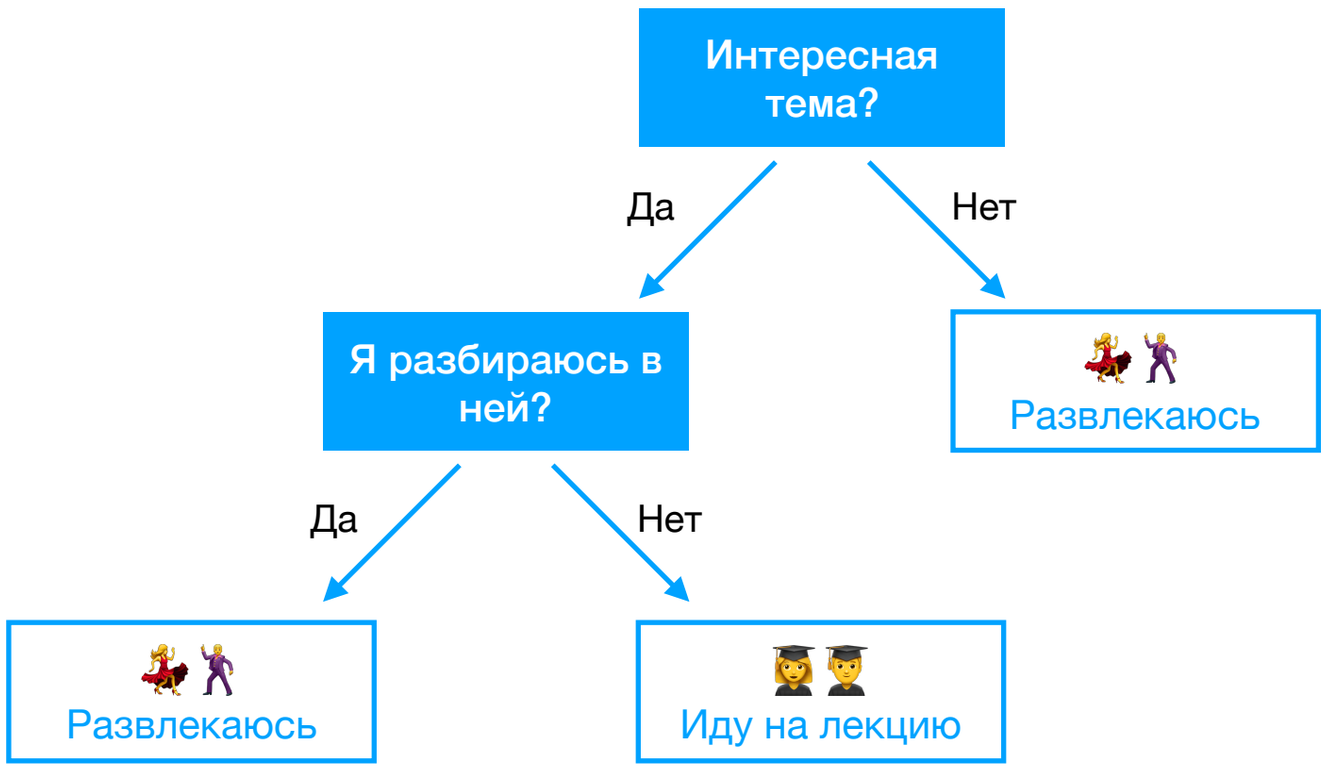
Власов Кирилл Вячеславович

2018

Деревья принятия решений

Логический алгоритм классификации, основанный на поиске конъюнктивных закономерностей.

Пойду ли я на МО сегодня?

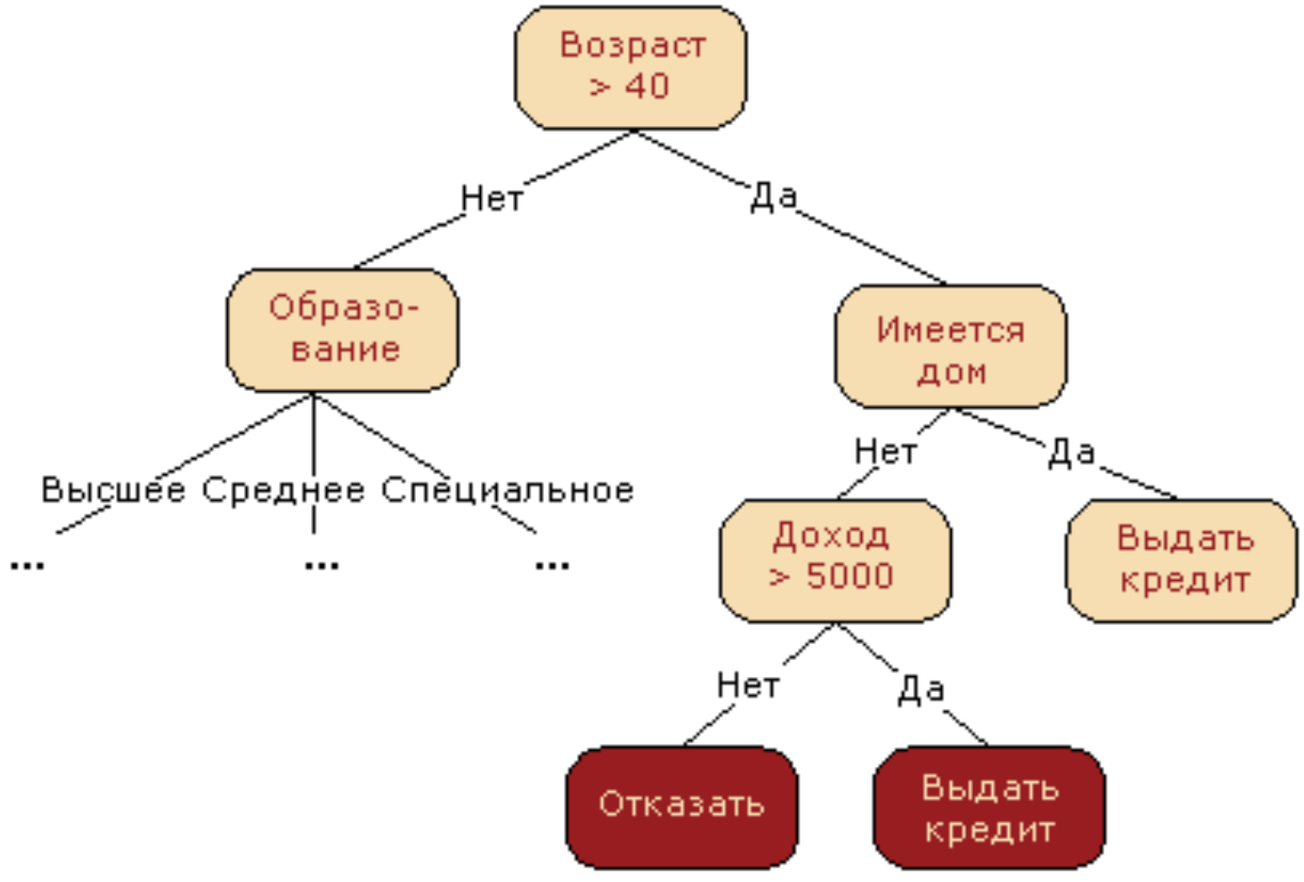


Деревья принятия решений

Дерево решений служит обобщением опыта экспертов, средством передачи знаний будущим сотрудникам или моделью бизнес-процесса компании.

Решение о выдаче кредита заемщику принималось на основе некоторых интуитивно (или по опыту) выведенных правил, которые можно представить в виде дерева решений.

Пример: Кредитный скоринг



Игра «20 вопросов»

Пример построения дерева

Энтропия Шеннона

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Прирост информации

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

энтропия соответствует степени хаоса в системе. Чем выше энтропия, тем менее упорядочена система и наоборот.

Пример построения дерева

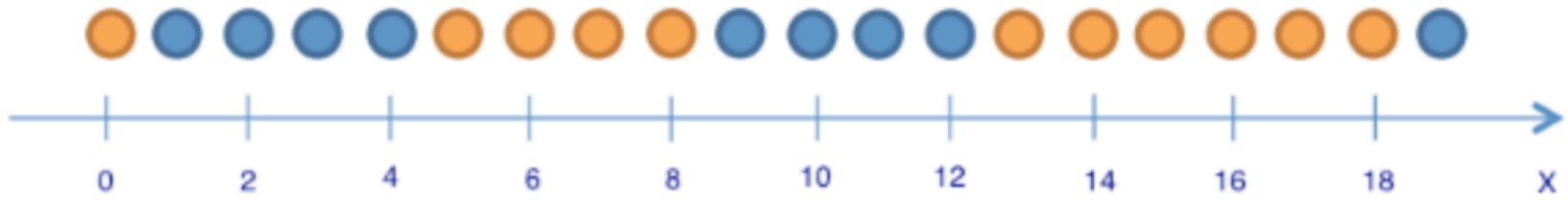
Энтропия Шеннона

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Прирост информации

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

энтропия соответствует степени хаоса в системе. Чем выше энтропия, тем менее упорядочена система и наоборот.



Пример построения дерева

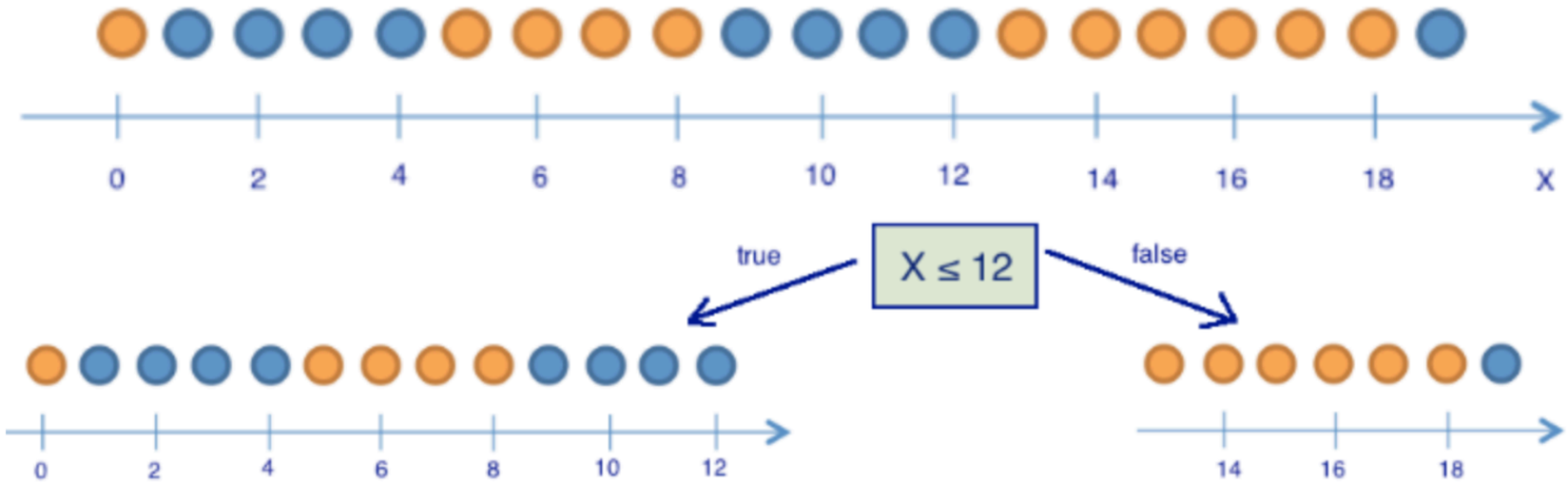
Энтропия Шеннона

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Прирост информации

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

энтропия соответствует степени хаоса в системе. Чем выше энтропия, тем менее упорядочена система и наоборот.



Пример построения дерева

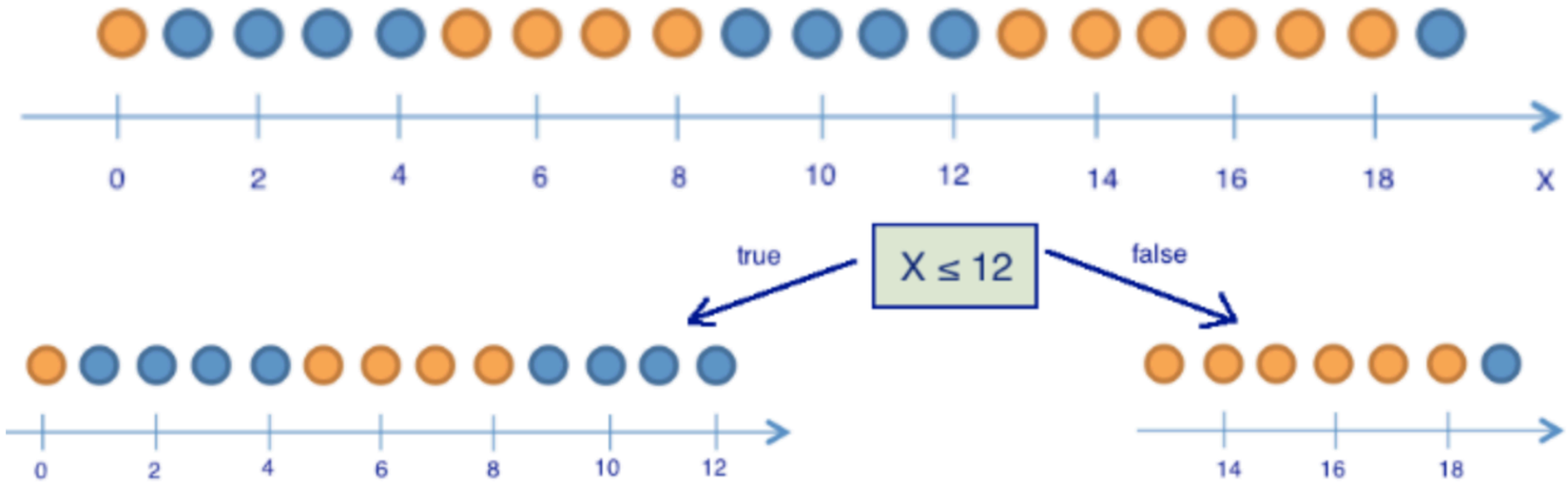
Энтропия Шеннона

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Прирост информации

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

энтропия соответствует степени хаоса в системе. Чем выше энтропия, тем менее упорядочена система и наоборот.



$$S_0 = -\frac{9}{20}\log_2\frac{9}{20} - \frac{11}{20}\log_2\frac{11}{20} \approx 1$$

Пример построения дерева

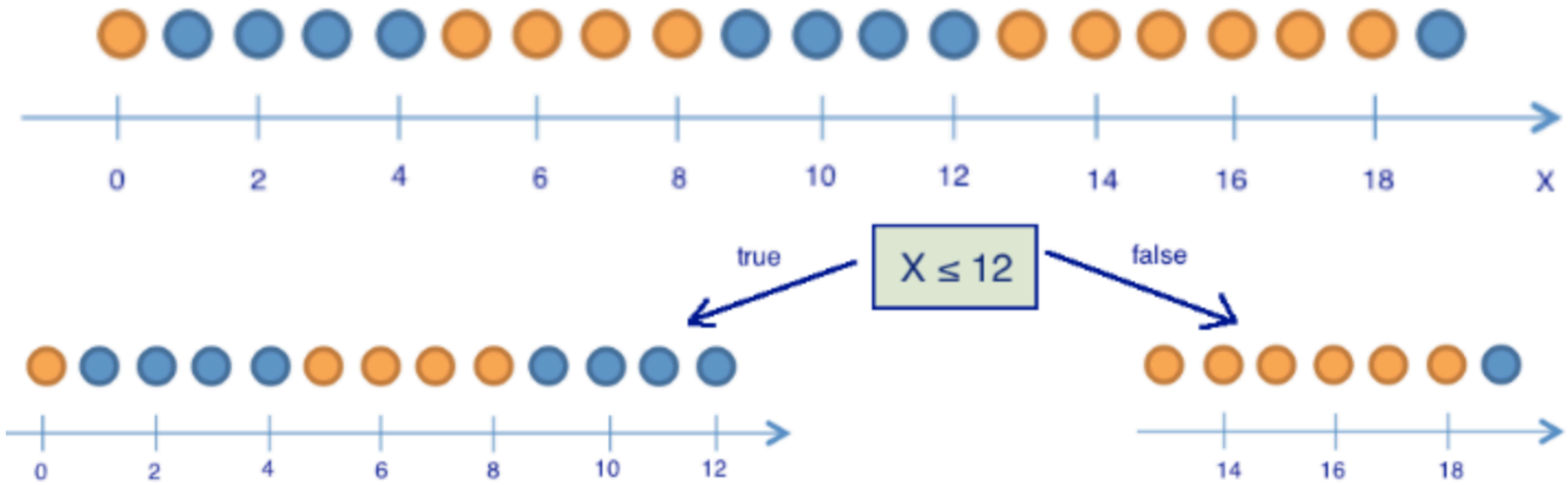
Энтропия Шеннона

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Прирост информации

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

энтропия соответствует степени хаоса в системе. Чем выше энтропия, тем менее упорядочена система и наоборот.



$$S_0 = -\frac{9}{20}\log_2\frac{9}{20} - \frac{11}{20}\log_2\frac{11}{20} \approx 1$$

$$S_1 = -\frac{5}{13}\log_2\frac{5}{13} - \frac{8}{13}\log_2\frac{8}{13} \approx 0{,}96$$

Пример построения дерева

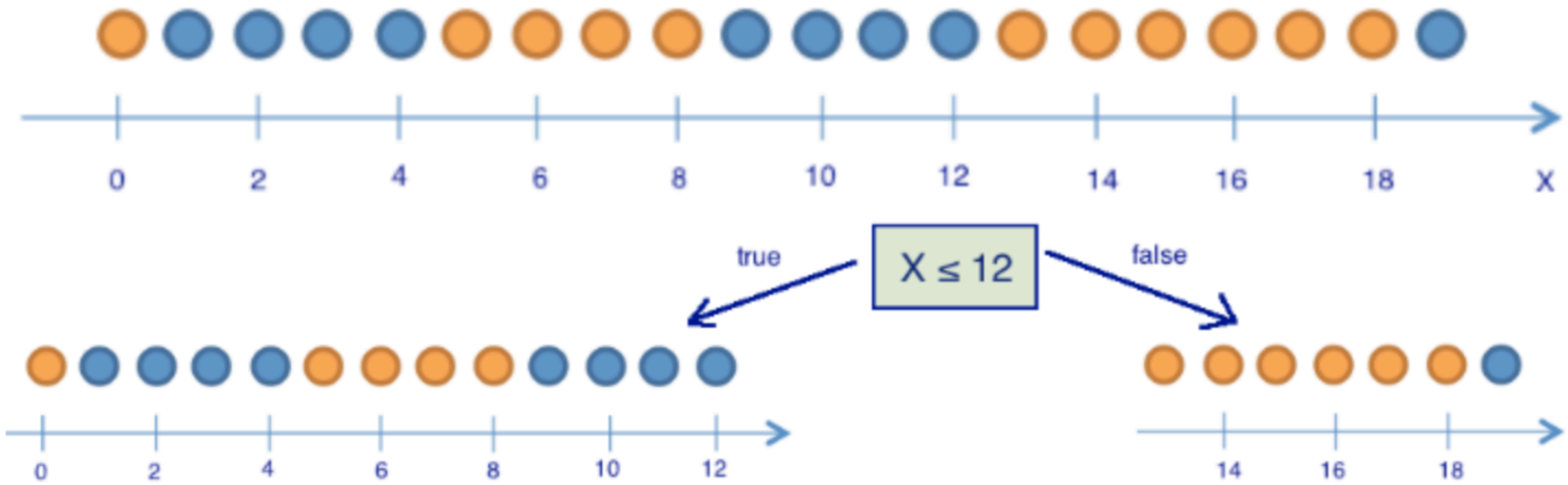
Энтропия Шеннона

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Прирост информации

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

энтропия соответствует степени хаоса в системе. Чем выше энтропия, тем менее упорядочена система и наоборот.



$$S_0 = -\frac{9}{20}\log_2\frac{9}{20} - \frac{11}{20}\log_2\frac{11}{20} \approx 1$$

$$S_1 = -\frac{5}{13}\log_2\frac{5}{13} - \frac{8}{13}\log_2\frac{8}{13} \approx 0{,}96$$

$$S_2 = -\frac{6}{7}\log_2\frac{6}{7} - \frac{1}{7}\log_2\frac{1}{7} \approx 0{,}6$$

Пример построения дерева

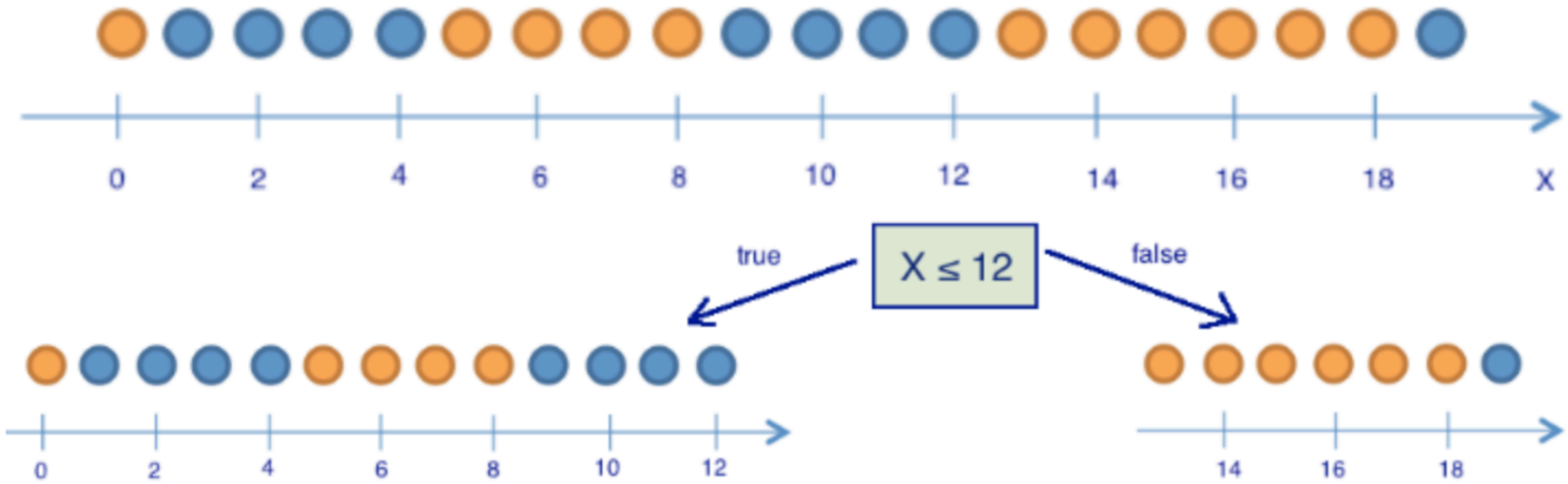
Энтропия Шеннона

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Прирост информации

$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

энтропия соответствует степени хаоса в системе. Чем выше энтропия, тем менее упорядочена система и наоборот.



$$S_0 = -\frac{9}{20}\log_2\frac{9}{20} - \frac{11}{20}\log_2\frac{11}{20} \approx 1$$

$$S_1 = -\frac{5}{13}\log_2\frac{5}{13} - \frac{8}{13}\log_2\frac{8}{13} \approx 0{,}96$$

$$S_2 = -\frac{6}{7}\log_2\frac{6}{7} - \frac{1}{7}\log_2\frac{1}{7} \approx 0{,}6$$

$$IG(x \le 12) = S_0 - \frac{13}{20} \times S_i - \frac{7}{20} \times S_2 \approx 0{,}16$$

Критерии разбиения

$$S = -\sum_{i}^{N} p_i log_2(p_i)$$

Энтропийный критерий (Entropy criteria)

$$S = 1 - \sum_{k=1}^{n} (p_k)^2$$

Неопределенность Джини (Gini impurity)

$$S = 1 - \max_{k} p_k$$

Ошибка классификации (misclassification error):

Прирост информации

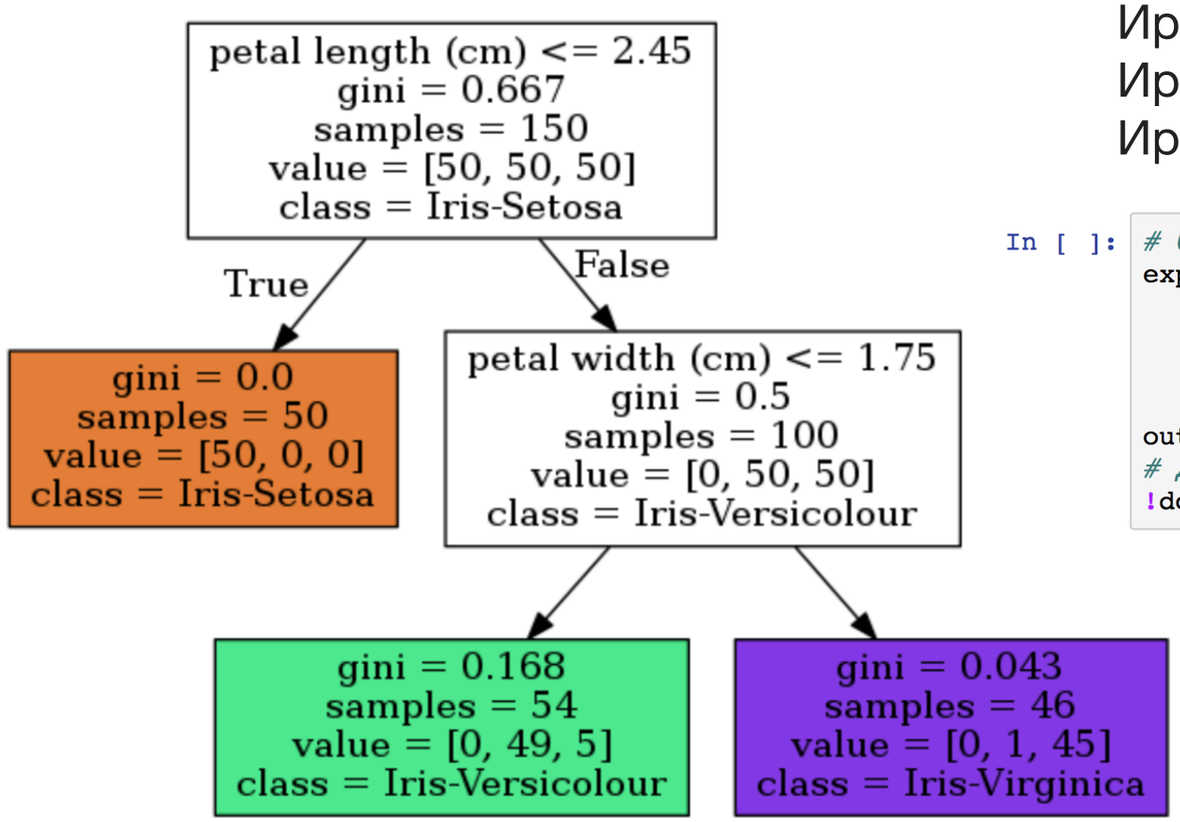
$$IG(Q) = S_0 - \sum_{i}^{q} \frac{N_1}{N} S_i$$

Деревья принятия решений

`sklearn.datasets`.load_iris

`sklearn.tree`.DecisionTreeClassifier

`sklearn.tree`.export_graphviz



Классы:

Ирис щетинистый (Iris setosa)
Ирис виргинский (Iris virginica)
Ирис разноцветный (Iris versicolor)

In [ ]:
```
# Отрисуем дерево
export_graphviz(tree, feature_names=load_iris()['feature_names'],
                      class_names=['Iris-Setosa',
                                   'Iris-Versicolour',
                                   'Iris-Virginica'],
                      |
out_file='iris_tree.dot', filled=True)
# для этого понадобится библиотека pydot (pip install pydot)
!dot -Tpng 'iris_tree.dot' -o 'iris_tree.png'
```

Признаки:

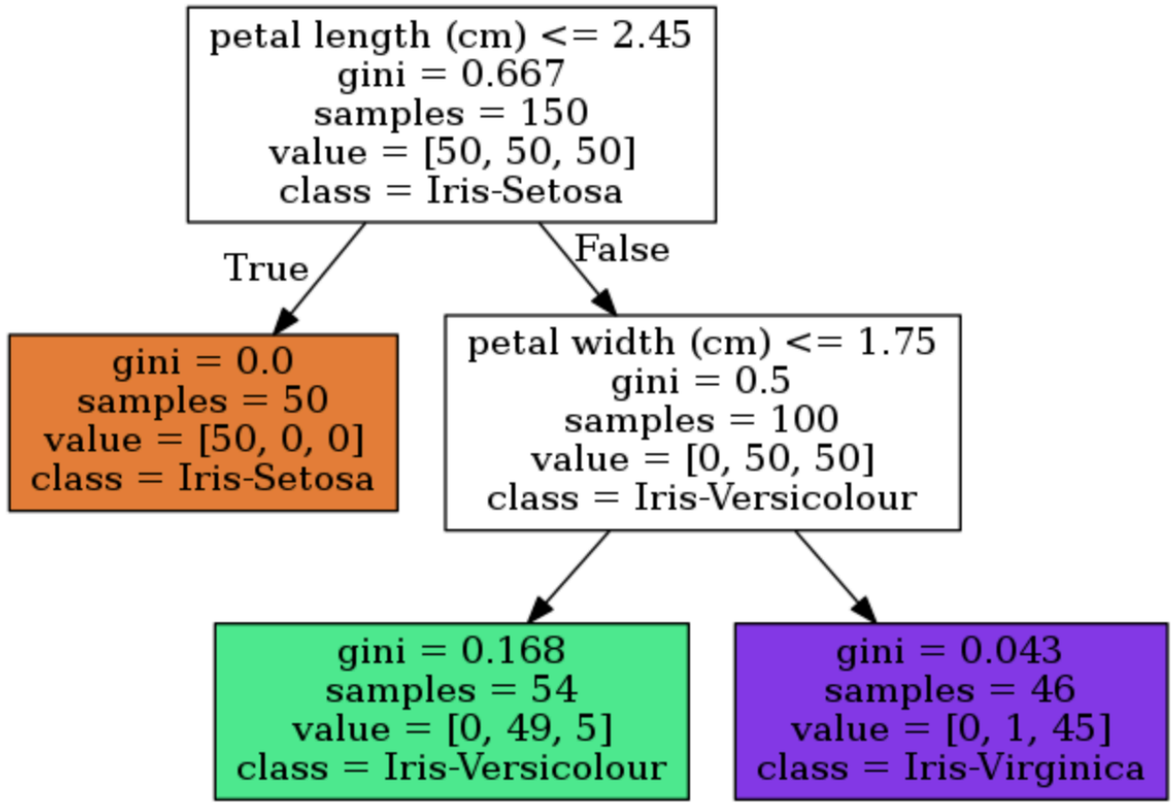
длина чашелистика (см)
ширина чашелистика (см)
длина лепестка (см)
ширина лепестка (см)

Деревья принятия решений

`sklearn.datasets`.load_iris

`sklearn.tree`.DecisionTreeClassifier

`sklearn.tree`.export_graphviz



Неопределенность Джини (Gini impurity):

$$G_i = 1 - \sum_{k=1}^{n} (p_{ik})^2$$

$$G_{split} = \frac{L}{N} \times G_L + \frac{R}{N} \times G_R \rightarrow min$$

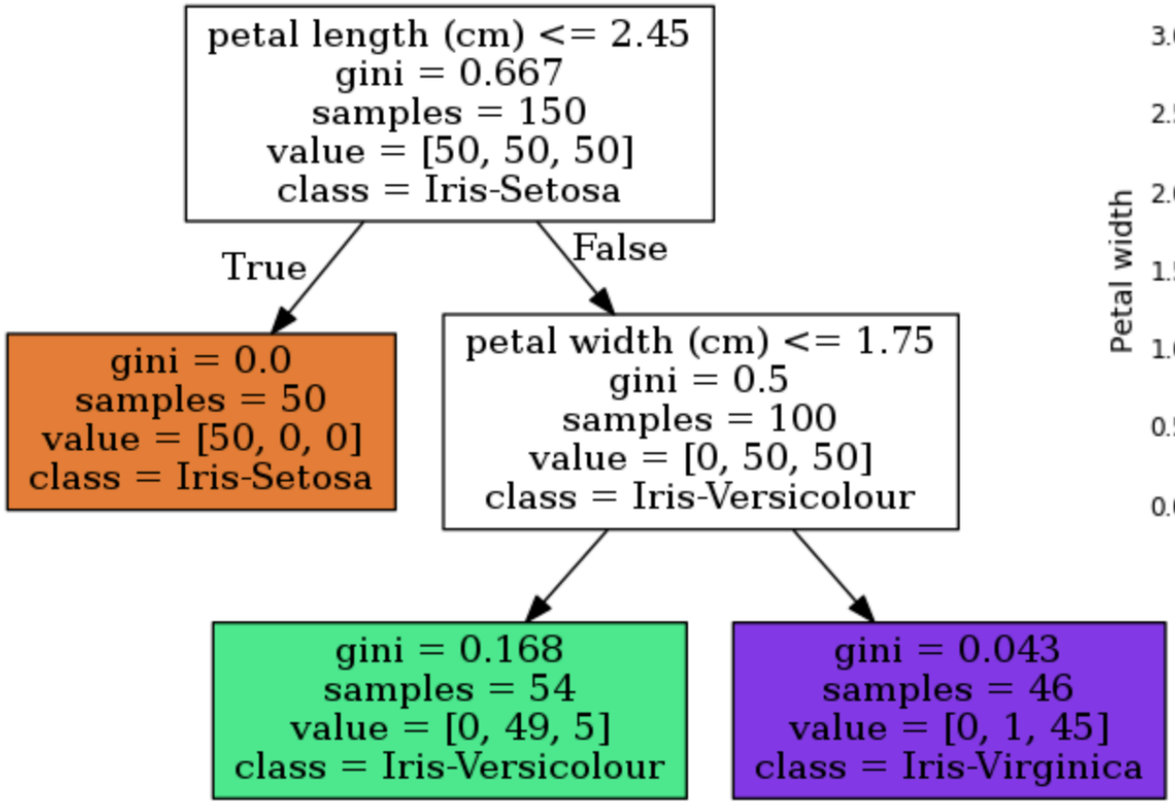
L - Количество элементов в левой ветке
R -Количество элементов в правой ветке
N - Количество элементов в узле

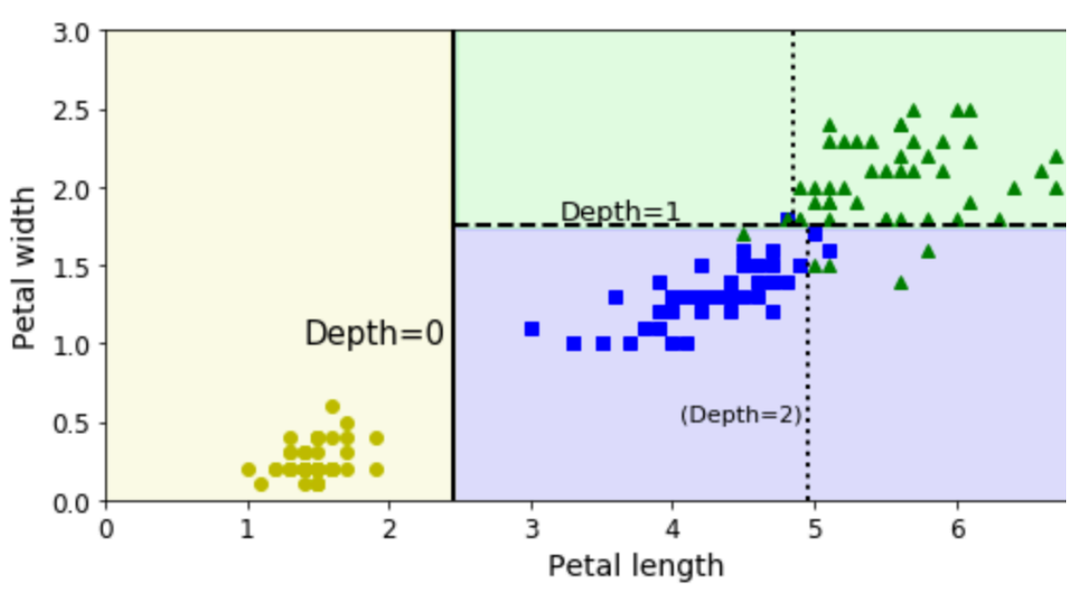
Деревья принятия решений

`sklearn.datasets`.load_iris

`sklearn.tree`.DecisionTreeClassifier

`sklearn.tree`.export_graphviz



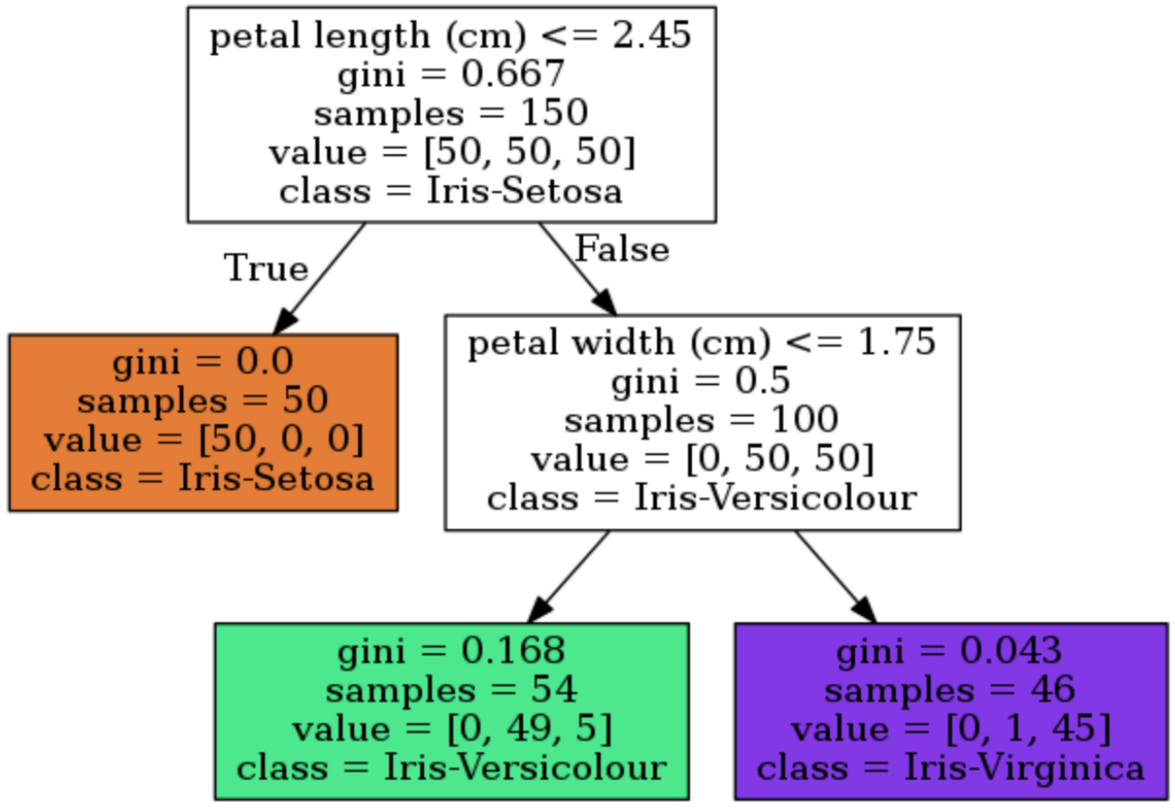


Деревья принятия решений

`sklearn.datasets`.load_iris

`sklearn.tree`.DecisionTreeClassifier

`sklearn.tree`.export_graphviz



tree.predict_proba([2,3,3,1])

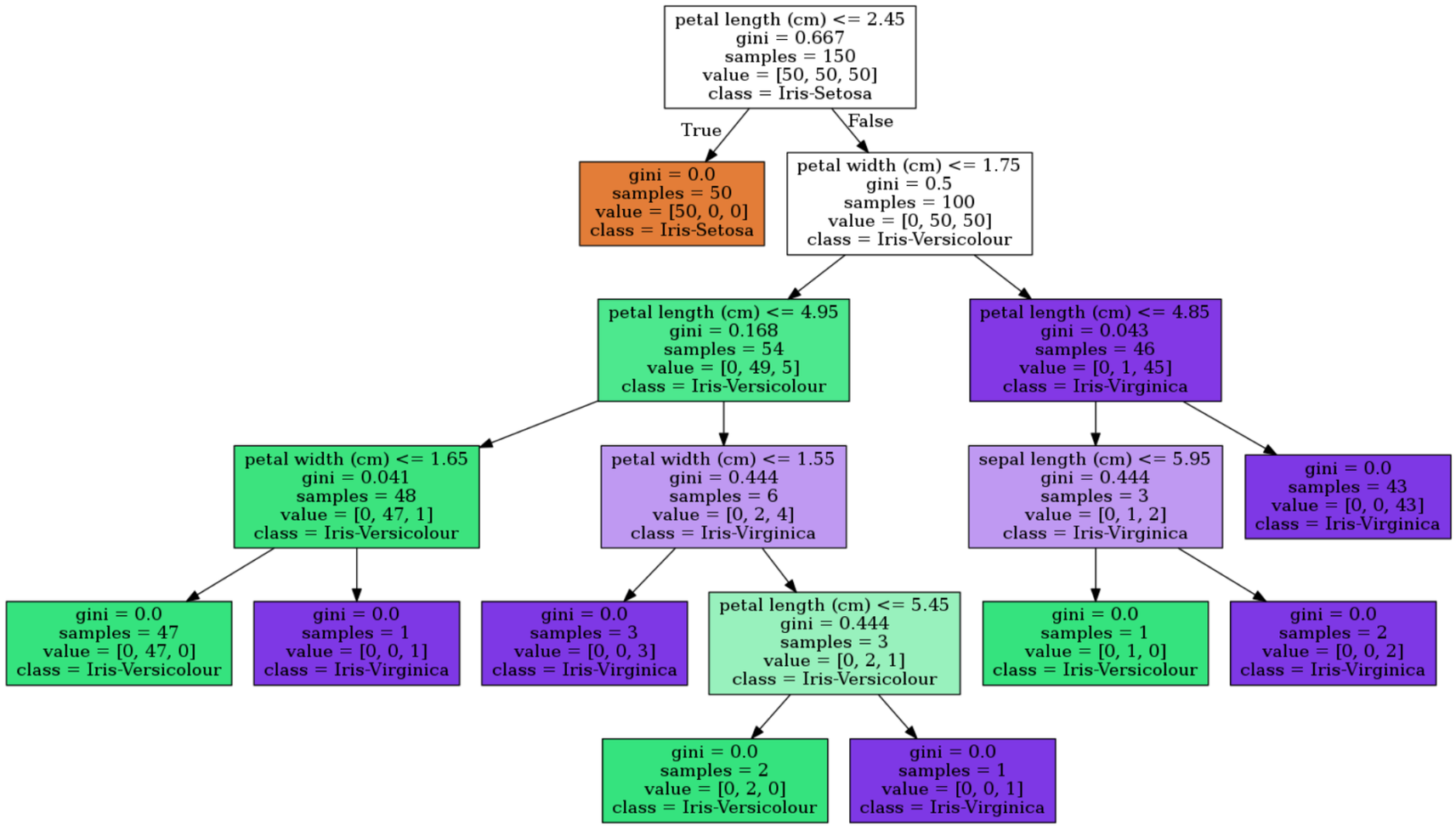
Классы:
Ирис щетинистый (Iris setosa) - 0
Ирис виргинский (Iris virginica) - 0,907
Ирис разноцветный (Iris versicolor - 0,093

$$p_1 = \frac{0}{54} \qquad p_2 = \frac{49}{54} \qquad p_3 = \frac{5}{54}$$

Деревья принятия решений

`sklearn.tree`.DecisionTreeClassifier

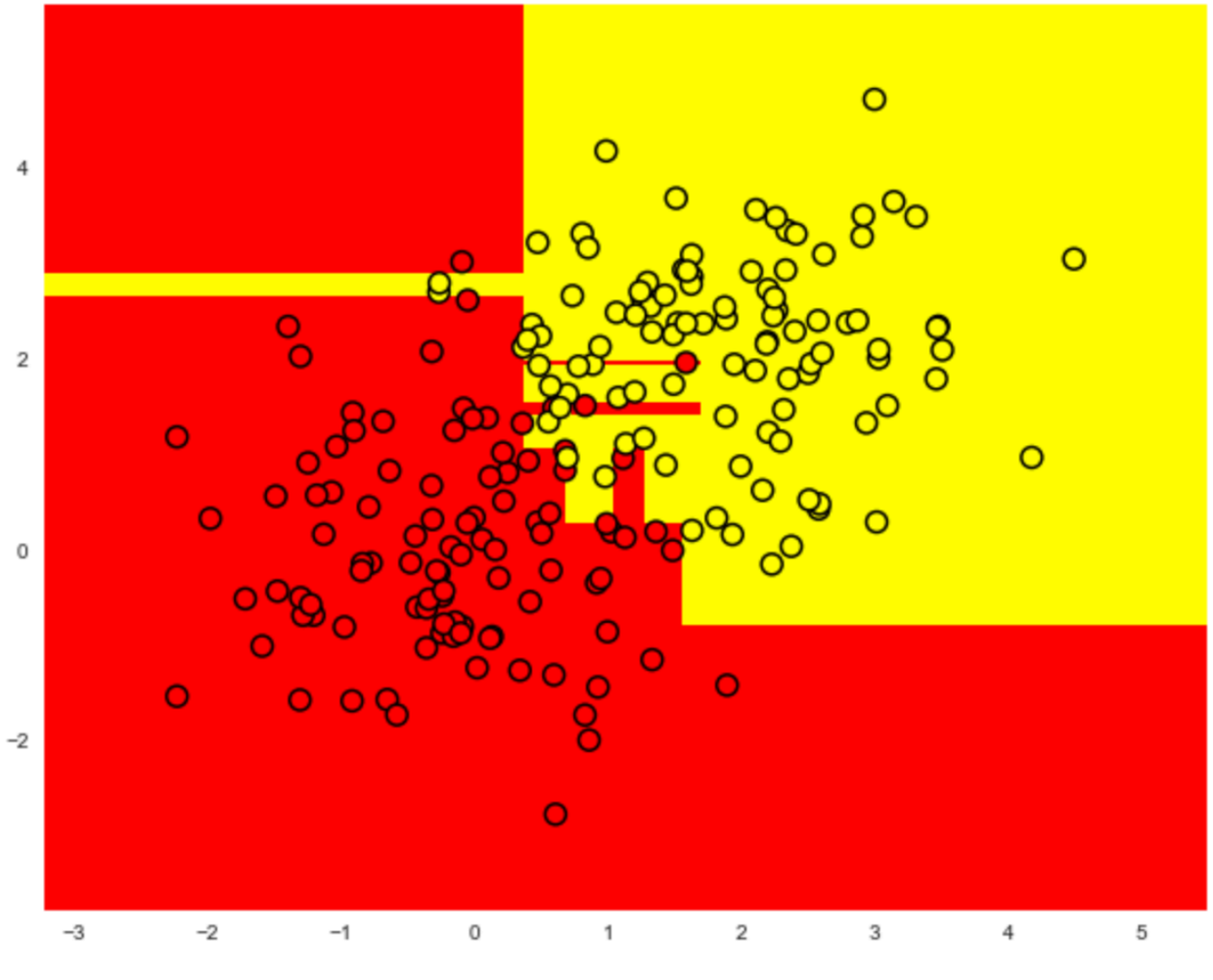
(*criterion='gini'*, *splitter='best'*, *max_depth=None*, *min_samples_split=2*, *min_samples_leaf=1*, *min_weight_fraction_leaf=0.0*, *max_features=None*, *random_state=None*, *max_leaf_nodes=None*, *min_impurity_decrease=0.0*, *min_impurity_split=None*, *class_weight=None*, *presort=False*)



Регуляризация деревьев

`sklearn.tree`.DecisionTreeClassifier

(*criterion='gini', splitter='best', max_depth=None, min_samples_split=2, min_samples_leaf=1, min_weight_fraction_leaf=0.0, max_features=None, random_state=None, max_leaf_nodes=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None, class_weight=None, presort=False*)



max_depth - глубина дерева

min_samples_split - Минимальное количество объектов, прежде чем можно сделать разделение

min_samples_leaf - Минимальное кол-во объектов в листовом узле

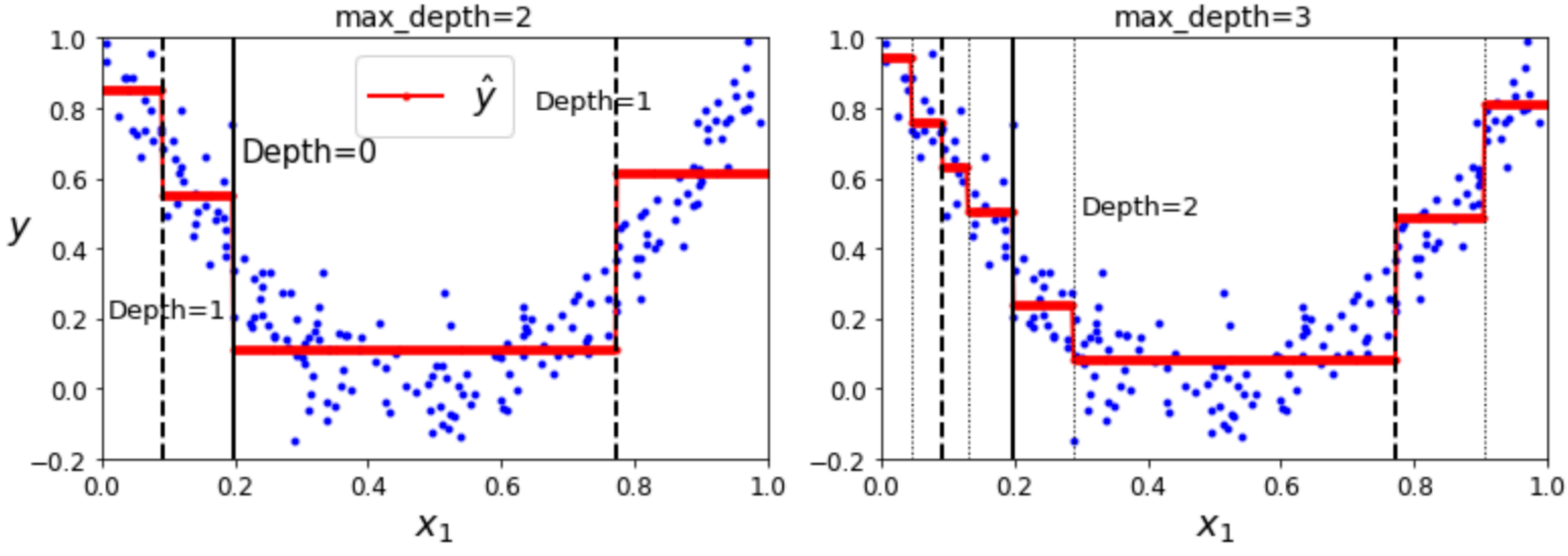
max_leaf_nodes - Максимальное количество листовых узлов

Семинар Евгения Соколова

Деревья решений для задачи регрессии

`sklearn.tree`.DecisionTreeRegressor

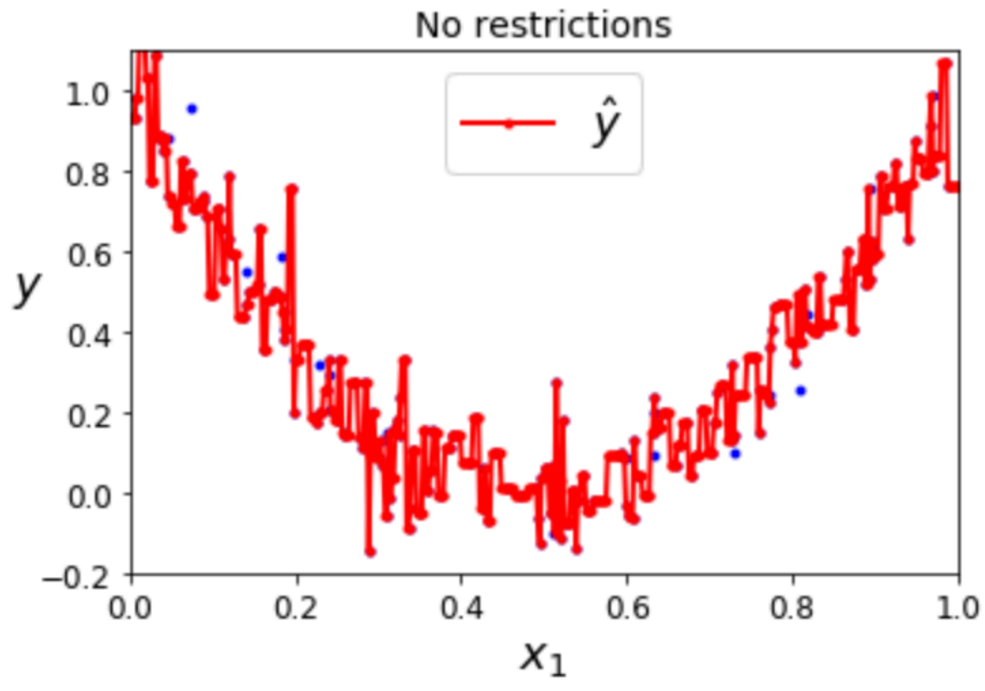
(criterion='mse', splitter='best', max_depth=None, min_samples_split=2, min_samples_leaf=1, min_weight_fraction_leaf=0.0, max_features=None, random_state=None, max_leaf_nodes=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None, presort=False)

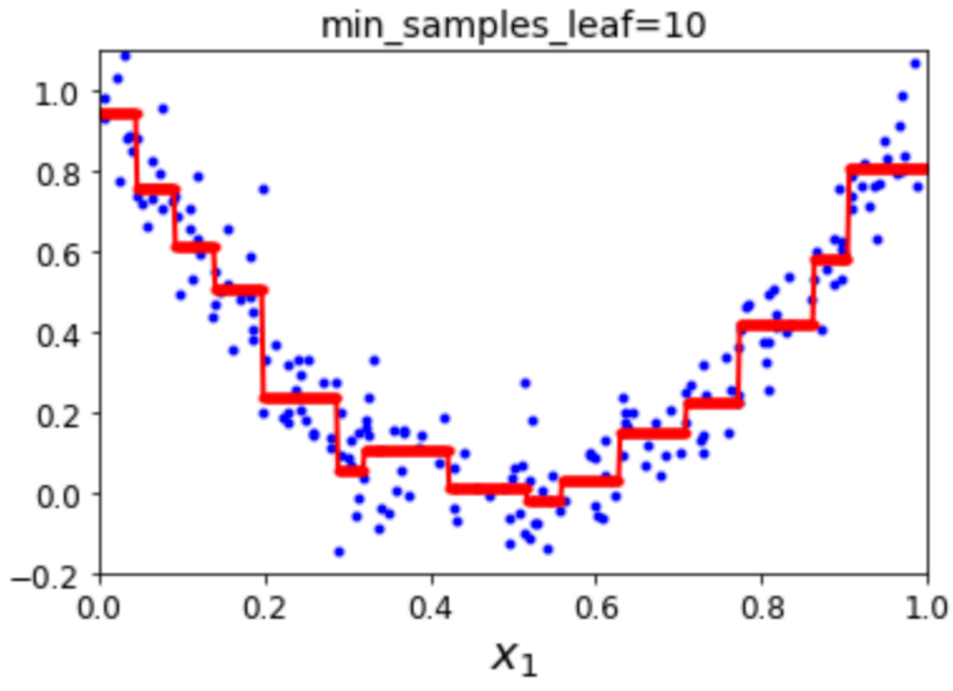


Деревья решений для задачи регрессии

`sklearn.tree`.DecisionTreeRegressor

(criterion='mse', splitter='best', max_depth=None, min_samples_split=2, min_samples_leaf=1, min_weight_fraction_leaf=0.0, max_features=None, random_state=None, max_leaf_nodes=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None, presort=False)





Какой ответ деревьев в регрессии?

Какая стратегия поведения в листьях регрессионного дерева приводит к меньшему матожиданию ошибки по MSE: отвечать средним значением таргета на объектах обучающей выборки, попавших в лист, или отвечать таргетом для случайного объекта из листа (считая все объекты равновероятными)?

Какой ответ деревьев в регрессии?

Какая стратегия поведения в листьях регрессионного дерева приводит к меньшему матожиданию ошибки по MSE: отвечать средним значением таргета на объектах обучающей выборки, попавших в лист, или отвечать таргетом для случайного объекта из листа (считая все объекты равновероятными)?

- $\hat{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i$

$$\mathsf{E}(y - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i)^2 = \mathsf{E}y^2 + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i\right)^2 - 2\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i\right)\mathsf{E}y$$

- $\hat{y} = X$, где $X \sim U(c)$

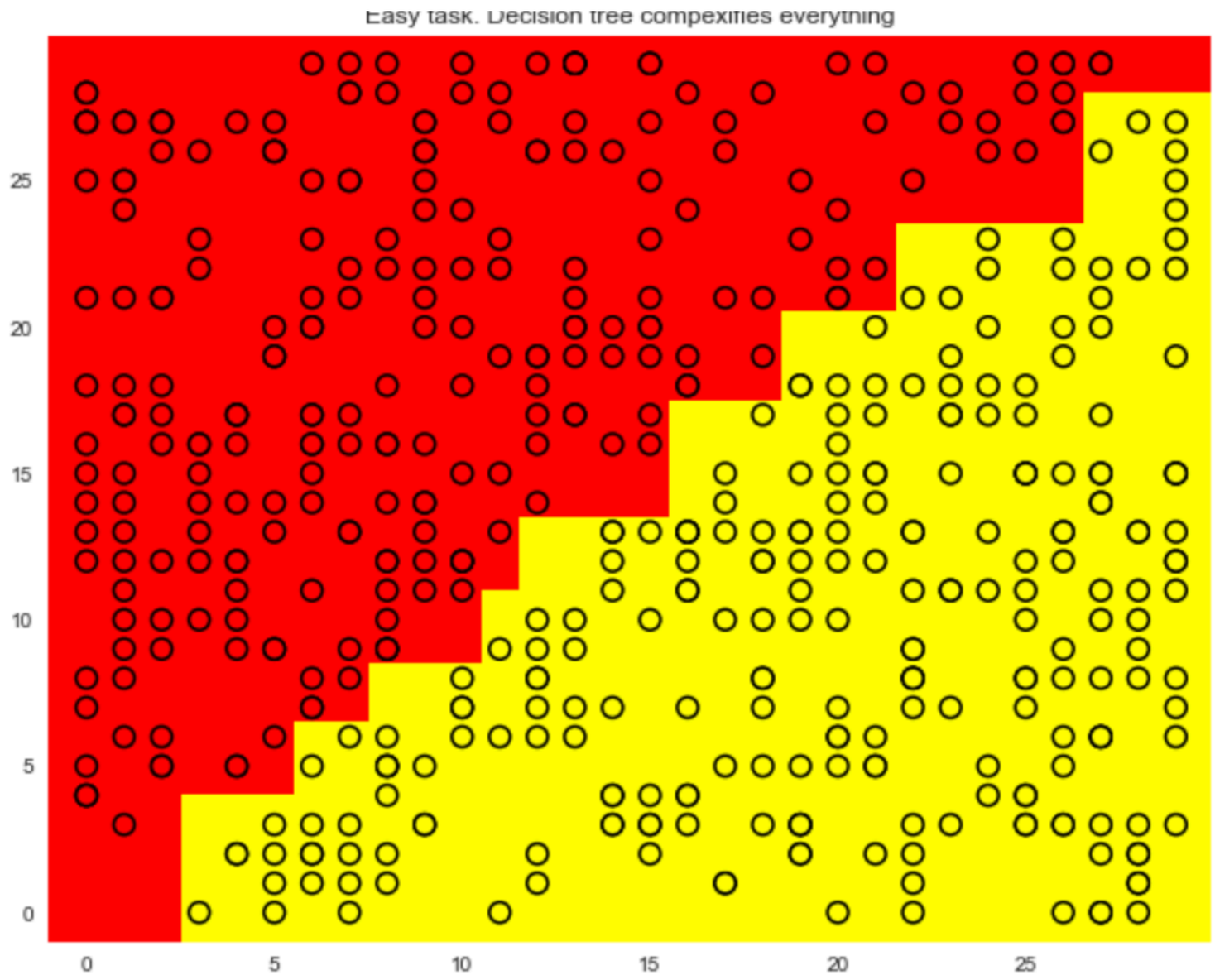
$$\mathsf{E}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y - c_i)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathsf{E}(y - c_i)^2 = \mathsf{E}y^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i^2 - \frac{2}{n}\mathsf{E}y\sum_{i=1}^{n} c_i$$

Тогда выпишем их разность:

$$\mathsf{E}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y - c_i)^2 - \mathsf{E}(y - \bar{c})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i^2 - \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} c_i\right)^2 \geq 0 \text{ (По неравенсту Коши-Буняковского)}$$

Получили, что мат. ожидание ошибки для первого поведения меньше, чем для второго.

Сложные случаи для деревьев



Ссылки на дополнительные материалы

Открытый курс машинного обучения: Тема 3

Семинар Евгения Соколова