Решающие деревья

Елена Захарова

Слайды Евгения Соколова

НИУ ВШЭ, 2020

Линейные модели

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{d} w_j x^j$$

- Веса можно интерпретировать, если признаки масштабированы

Пример

- Предсказание стоимости квартиры
- Признаки: площадь, этаж, число комнат

$$a(x) = 10 * (\text{площадь}) + 1.1 * (\text{этаж}) + 20 * (\text{число комнат})$$

Пример

- Зависимость от этажа вряд ли линейная
- Квадратичные признаки:

$$a(x) = 10 * (\text{площадь}) + 1.1 * (\text{этаж}) + 20 * (\text{число комнат}) - 0.2 * (\text{этаж})^2 + 0.5 * (\text{площадь} \ * \text{число комнат}) + \cdots$$

Пример

- С кубическими признаками будет ещё лучше
- Как интерпретировать признак $\text{этаж} * (\text{число комнат})^{\mathbf{2}}$?
- Всего таких признаков 20

Пример

- Можно бинаризовать признаки: $[x^j > t]$
- $(\text{этаж} > 1), (\text{этаж} > 2), \dots, (\text{этаж} > 30)$
- Признаков будет на порядки больше
- Легче интерпретировать:
$$-2[\text{этаж} > 3][\text{площадь} < 40][\text{число комнат} < 3]$$

- Можно использовать L_1-регуляризацию

Логические правила

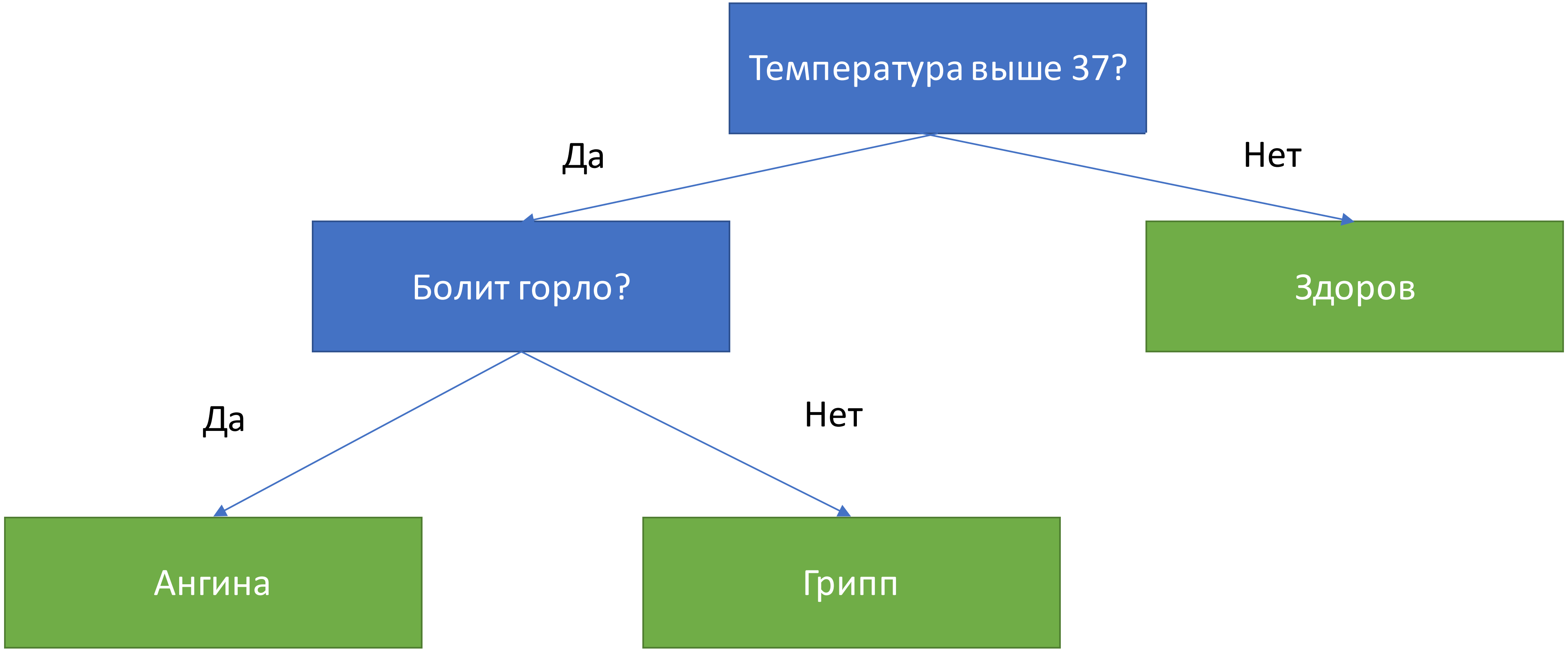
$$[\text{этаж} > 3][\text{площадь} < 40][\text{число комнат} < 3]$$

- Легко объяснить заказчику (если ≤ 5 условий)
- Позволяют извлекать знания из данных
- Не факт, что оптимальны с точки зрения качества

Логические правила

- Как строить?
- Линейные модели
- Перебор, жадное наращивание
- Решающие деревья

Медицинская диагностика



Принятие решений

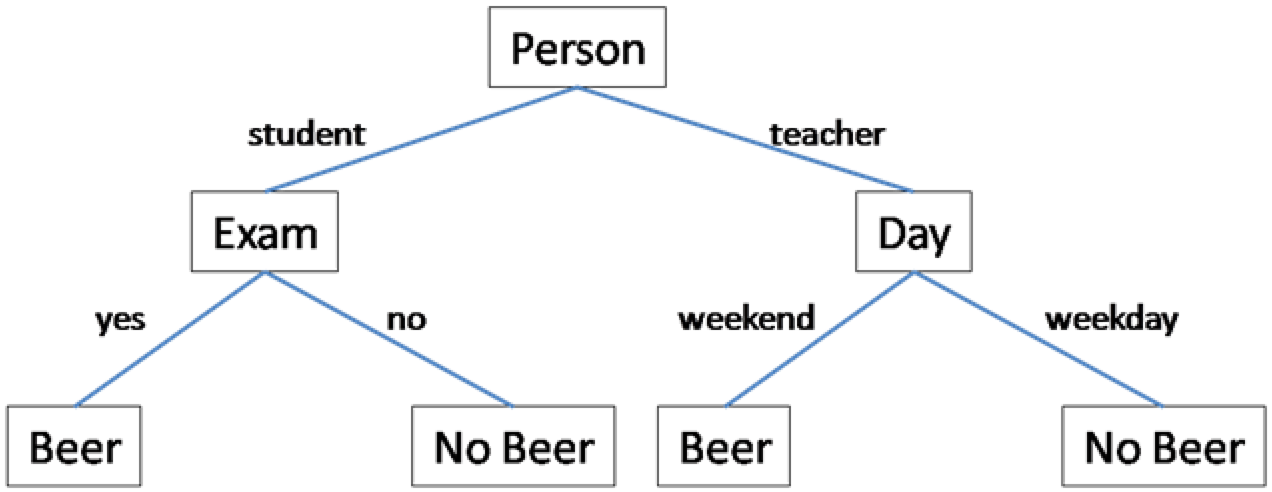
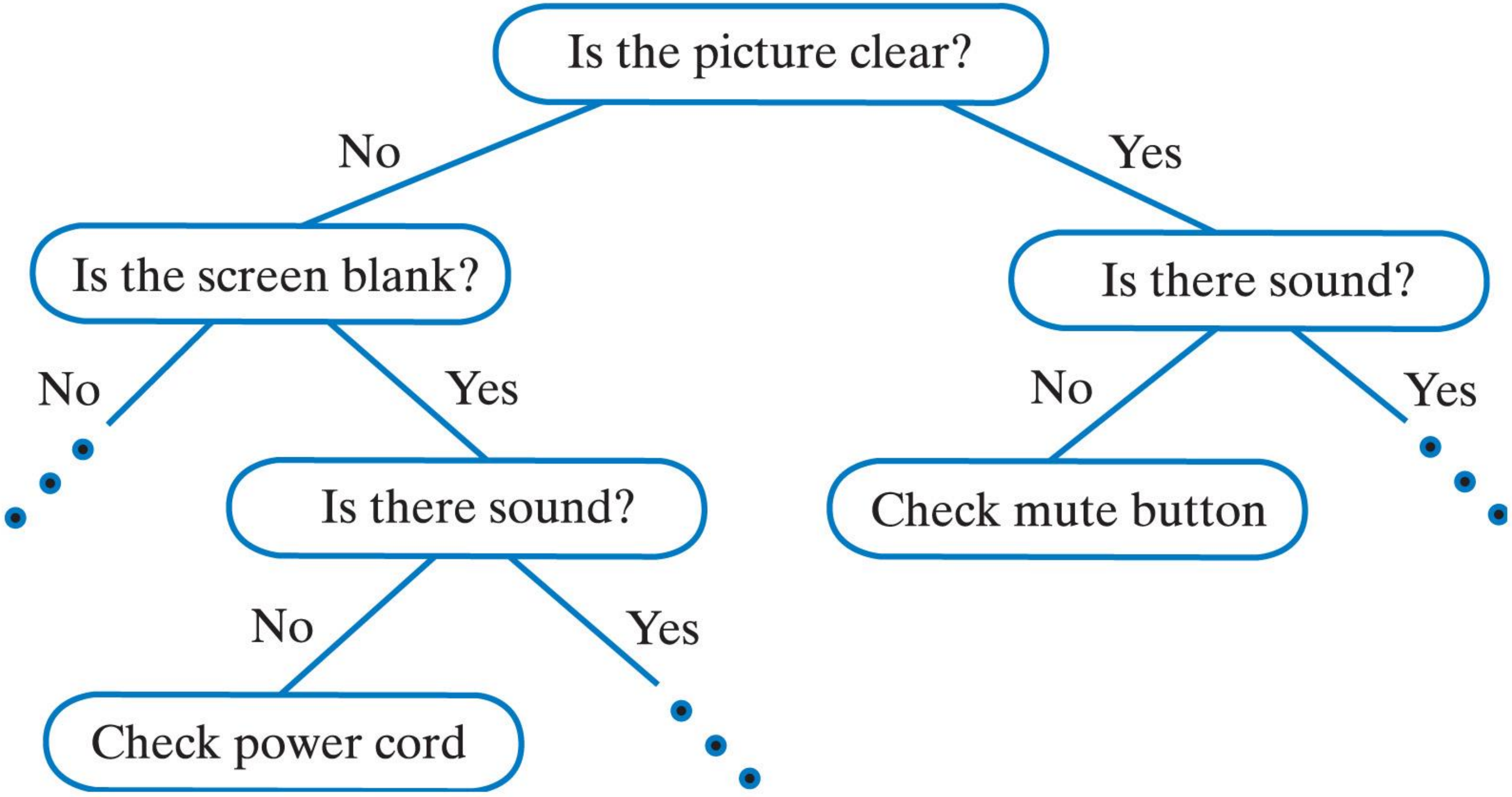
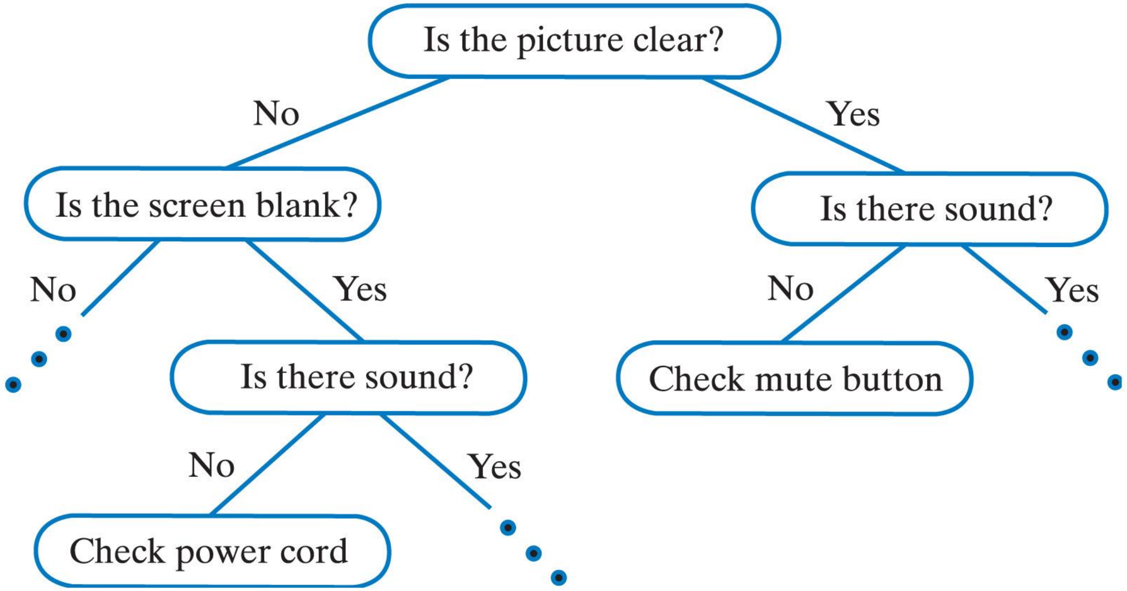


Схема диалога с клиентом



Решающее дерево

- Бинарное дерево (**ровно 2** дочерних узла)
- В каждой внутренней вершине записано условие
- В каждом листе записан прогноз (решение)



Условия

- Самые популярные варианты:

$$[x^j \leq t] \quad \text{и} \quad [x^j = t]$$

Примеры:

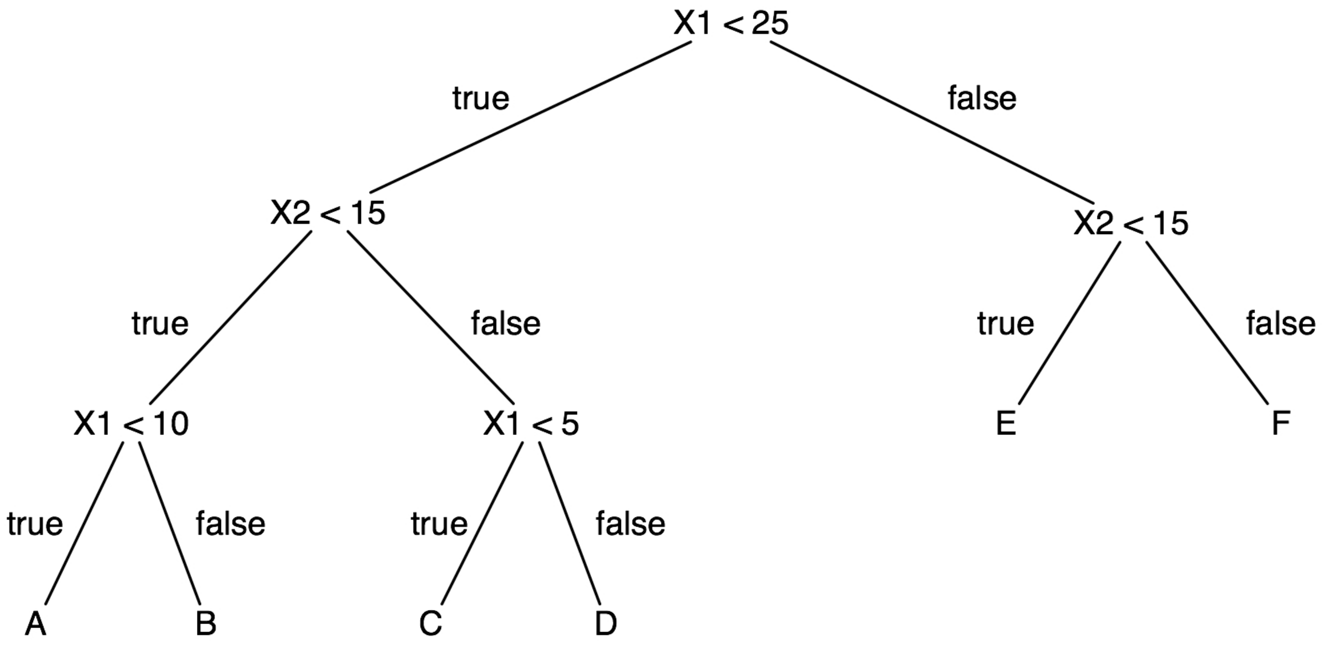
- $[\text{этаж} = 5]$
- $[\text{площадь} \leq 30]$

Прогноз в листе

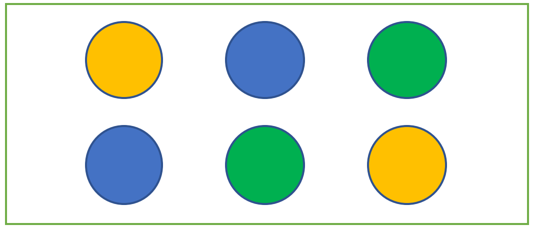
- Регрессия:
  - Вещественное число
- Классификация:
  - Класс
  - Вероятности классов

Жадное построение

- Как првило используется жадный алгоритм построения
- Растим дерево от корня к листьям

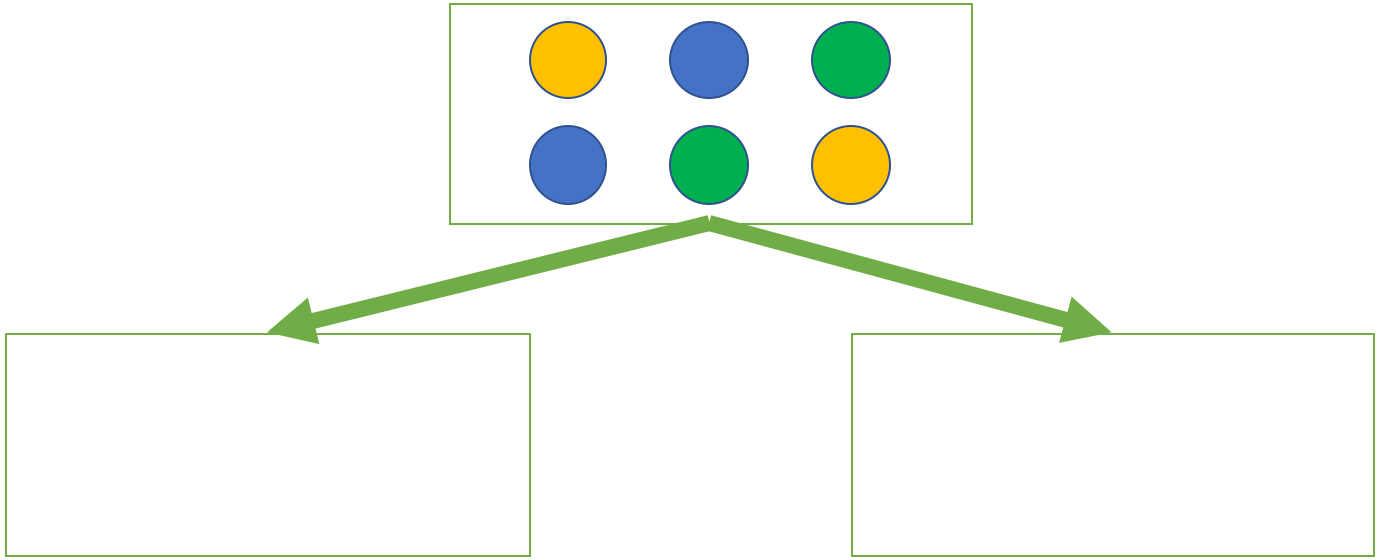


Жадное построение

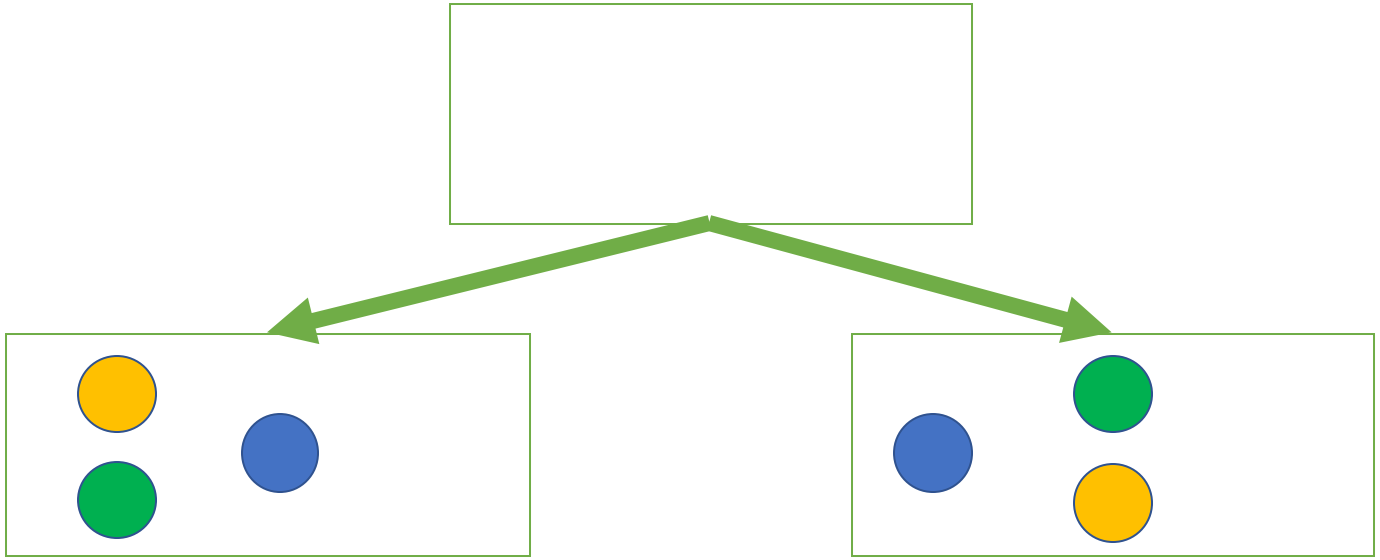


- Как разбить вершину?

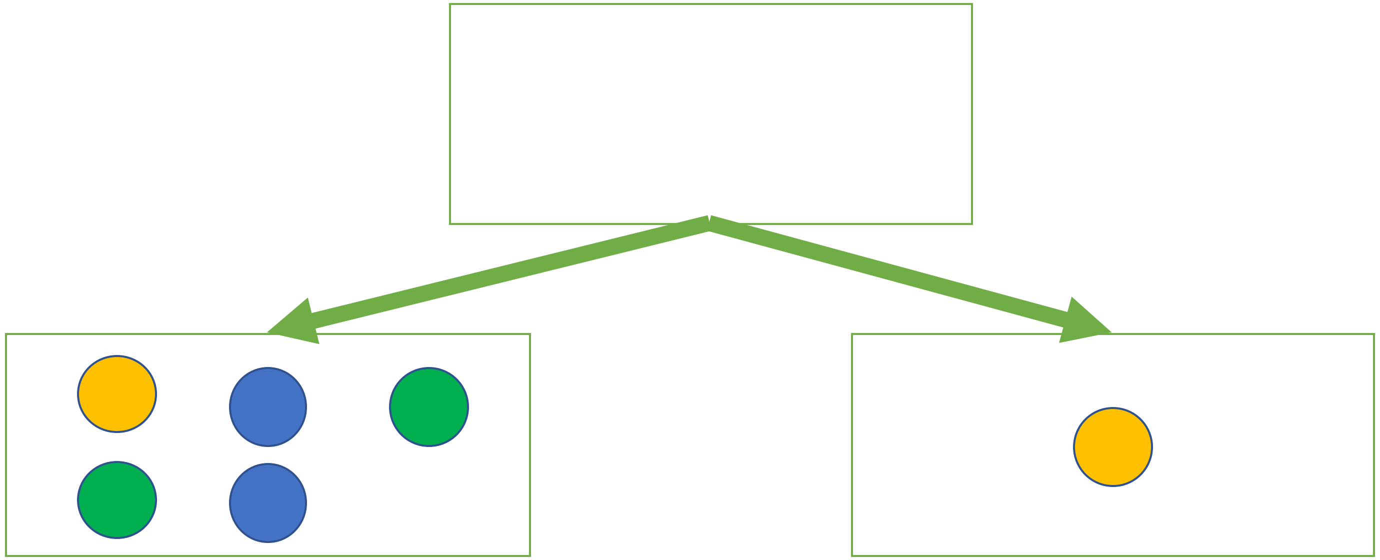
Жадное построение



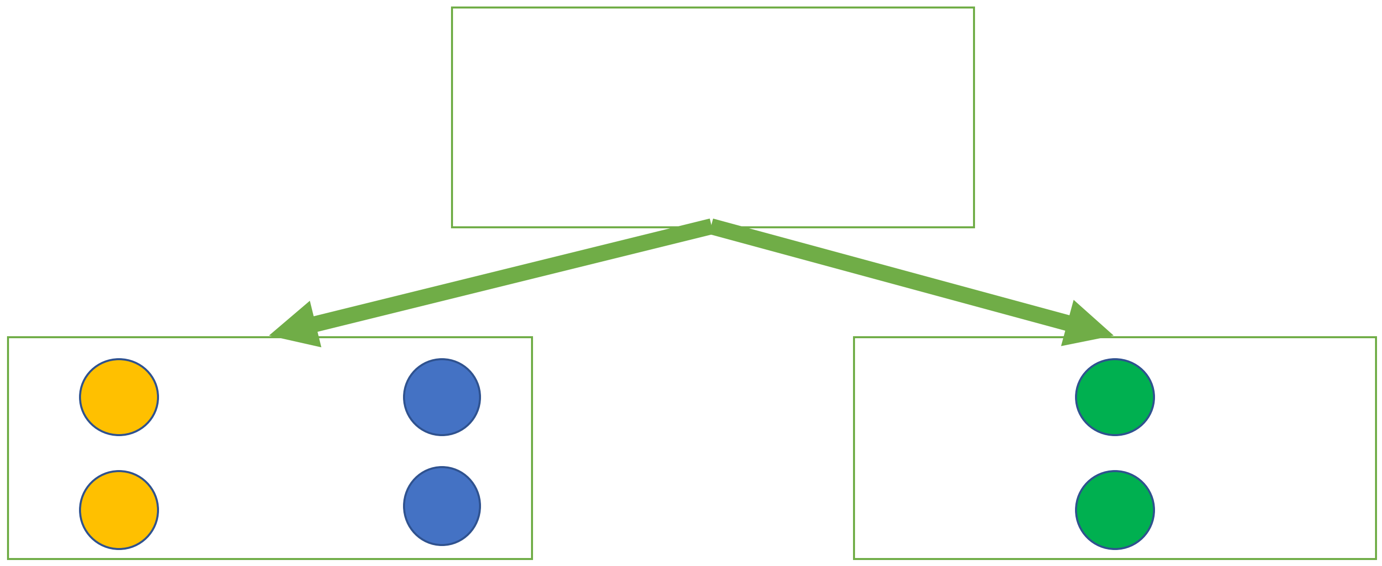
Жадное построение



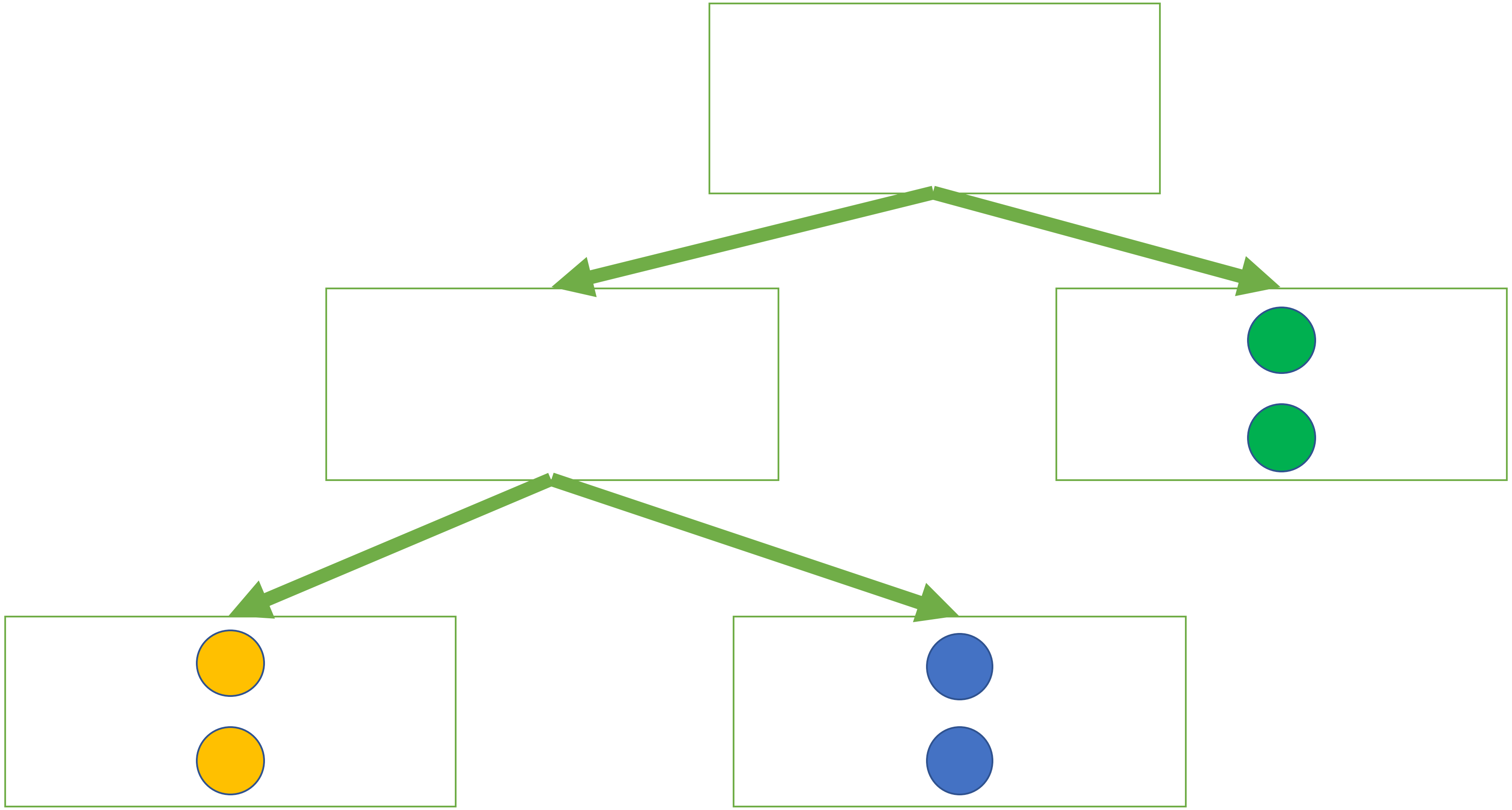
Жадное построение



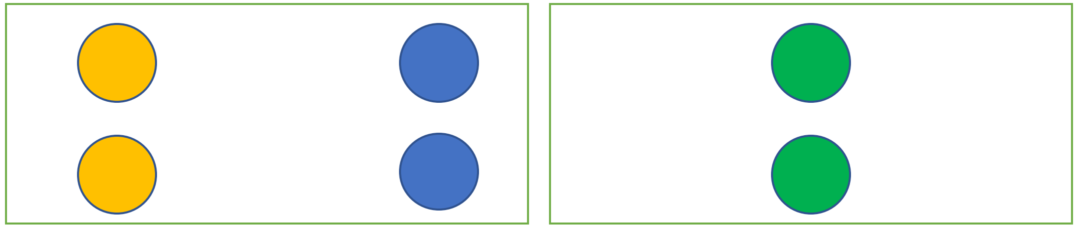
Жадное построение



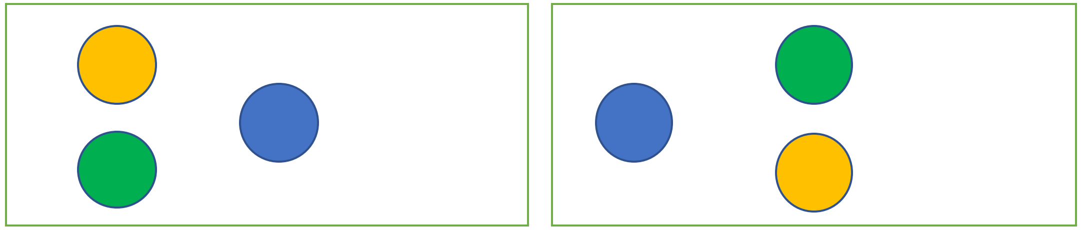
Жадное построение



Как сравнить разбиения?

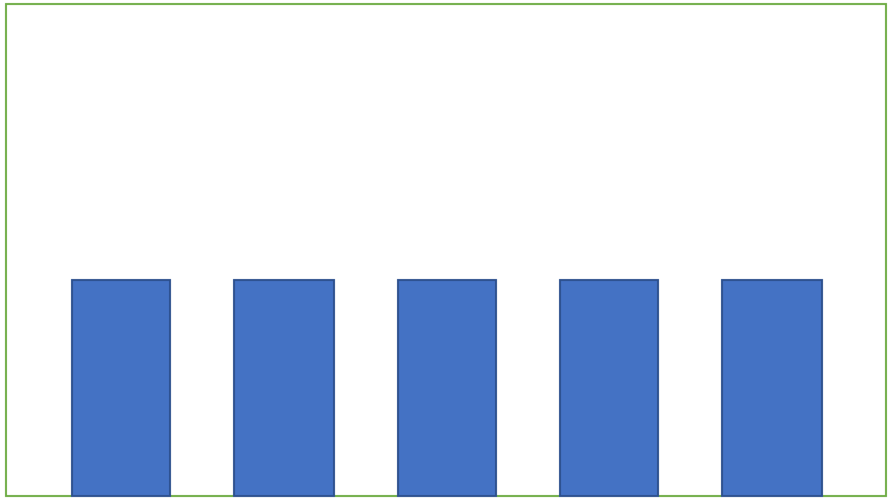


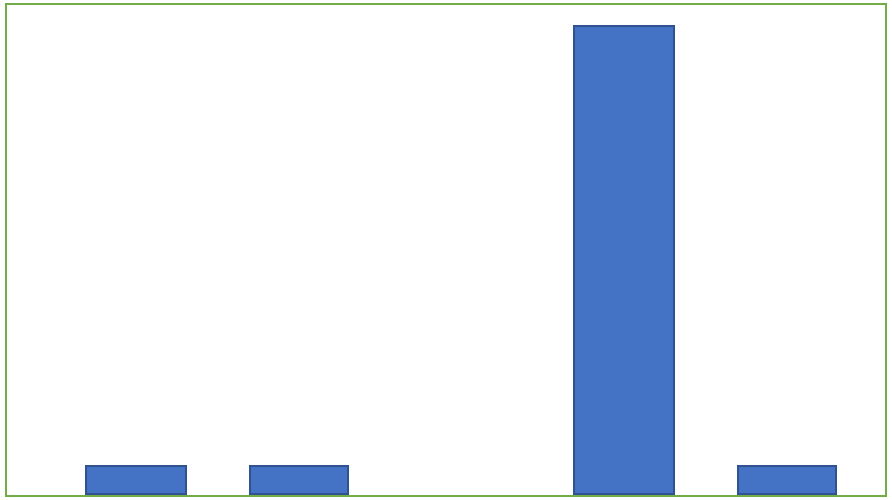
или



Энтропия

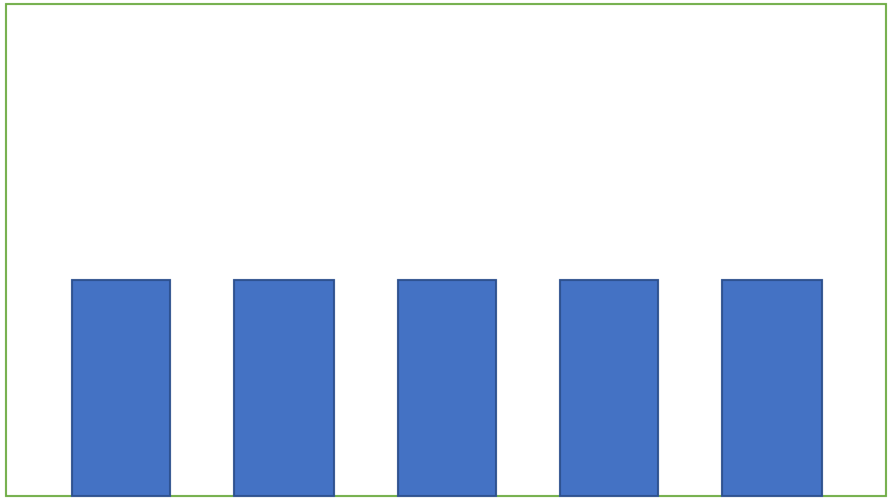
- Мера неопределённости распределения



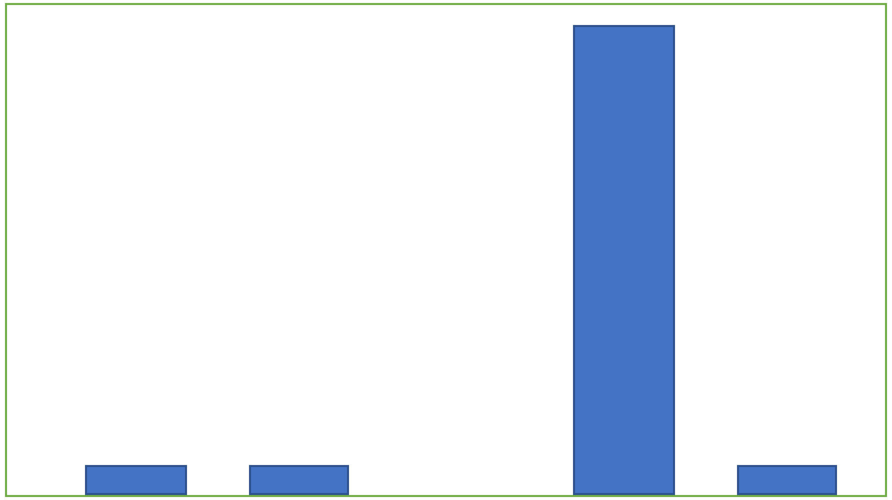


Энтропия

- 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

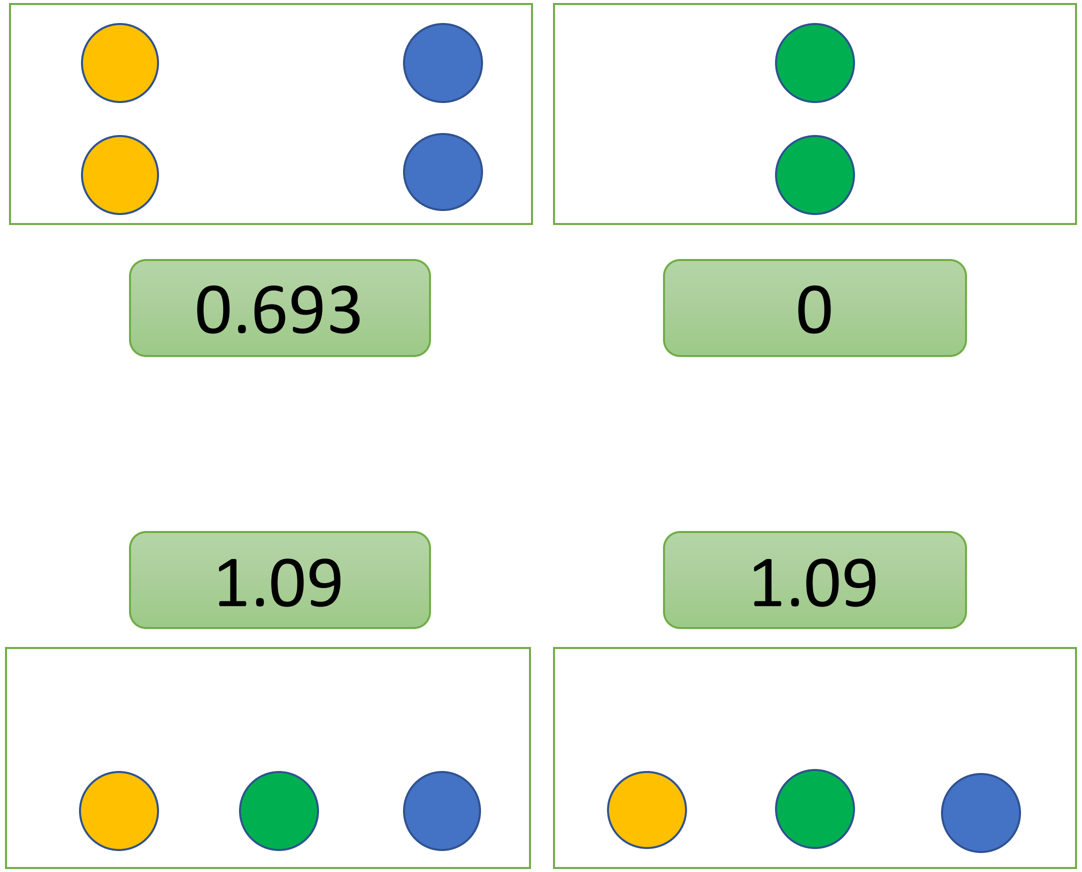
- 5 значений, с вероятностями *(p1, p2, p3, p4, p5)*

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

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

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

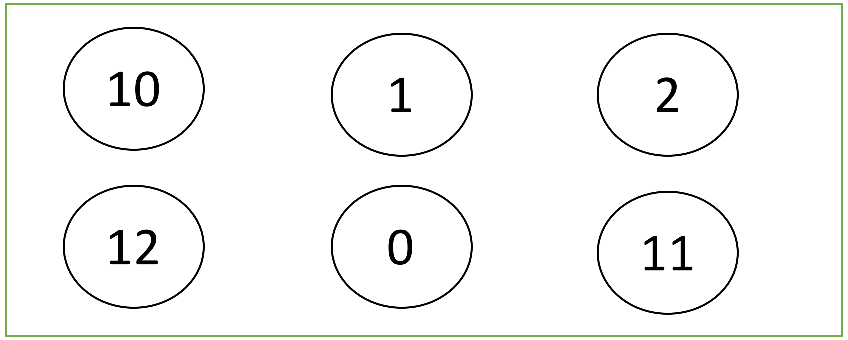
Как сравнить разбиения?



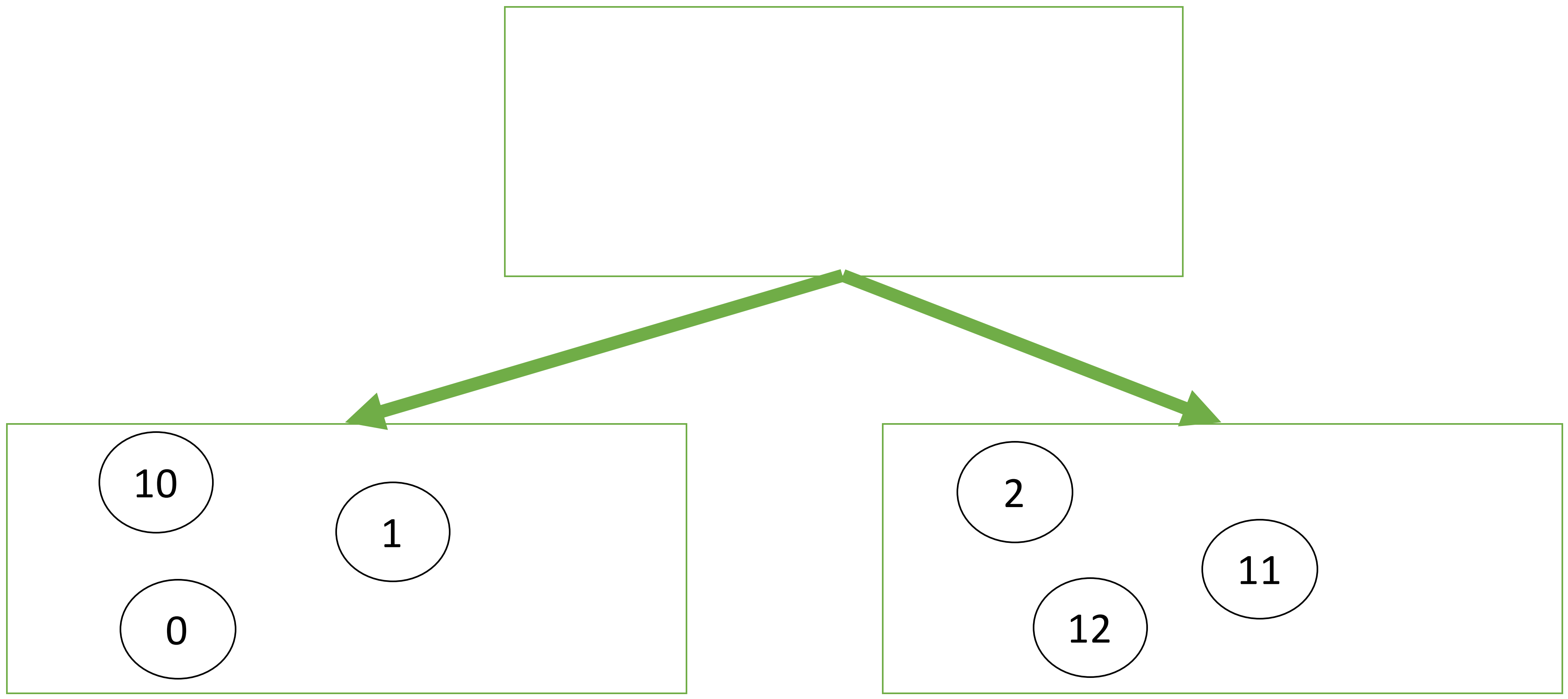
- $(0.5, 0.5, 0)$ и $(0, 0, 1)$
- $H = 0.693 + 0 = 0.693$

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

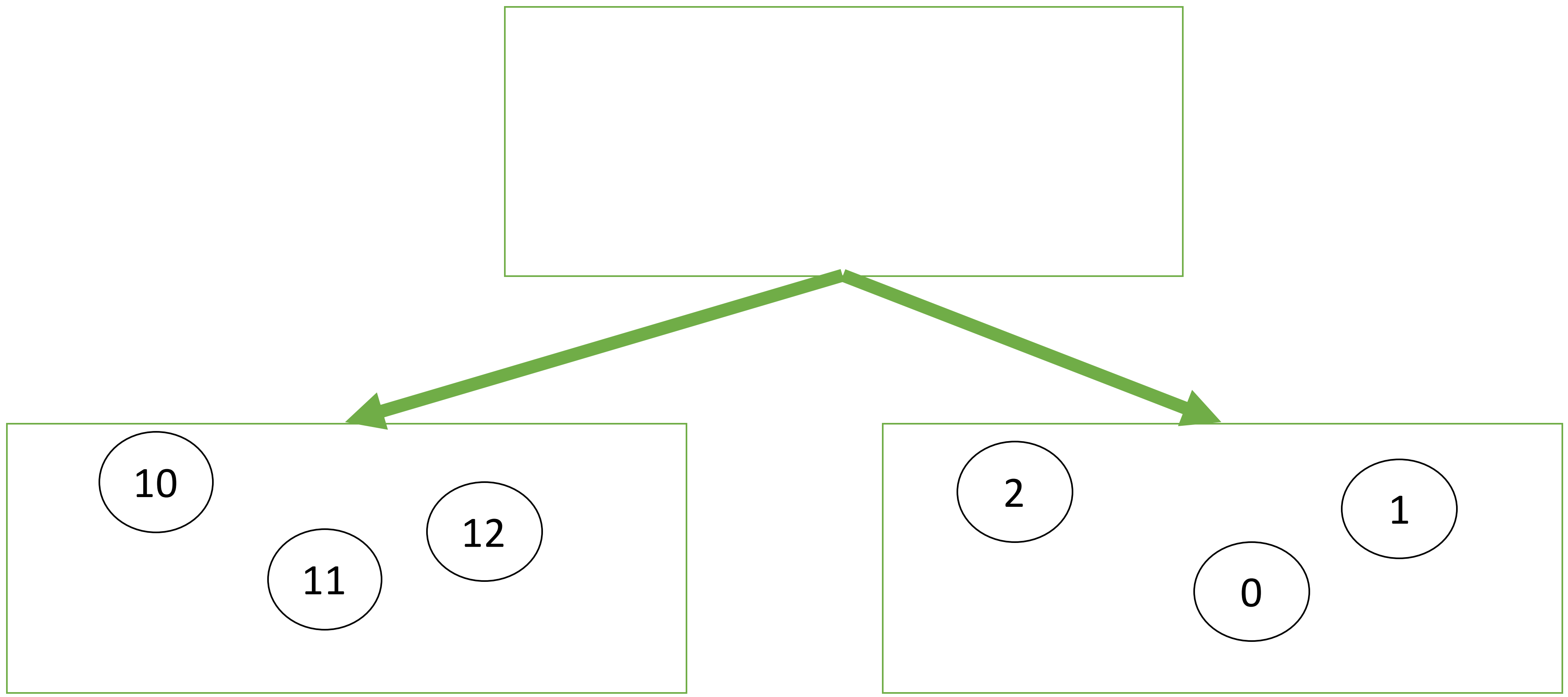
А для регрессии?



А для регрессии?



А для регрессии?



А для регрессии?

- Выбираем разбиение с наименьшей суммарной дисперсией
- Чем меньше дисперсия, тем меньше неопределённости

Поиск разбиения

- Пусть в вершине m оказалась выборка X_m
- $Q(X_m, j, t)$ — критерий ошибки условия $[x^j \leq t]$
- Ищем лучшие параметры j и t перебором:

$$Q(X_m, j, t) \to \max_{j,t}$$

Критерий качества

$$Q(X_m, j, t) = H(X_m) - \frac{|X_l|}{|X_m|} H(X_l) - \frac{|X_r|}{|X_m|} H(X_r)$$

Разброс ответов в левом листе

Разброс ответов в правом листе

Критерий информативности

- $H(X)$
- Зависит от ответов на выборке X
- Чем меньше разброс ответов, тем меньше значение $H(X)$

Регрессия

$$\bar{y}(X) = \frac{1}{|X|}\sum_{i \in X} y_i$$

$$H(X) = \frac{1}{|X|}\sum_{i \in X} \left(y_i - \bar{y}(X)\right)^2$$

Классификация

- Доля объектов класса k в выборке X:

$$p_k = \frac{1}{|X|} \sum_{i \in X} [y_i = k]$$

Энтропийный критерий

$$H(X) = -\sum_{k=1}^{K} p_k \ln p_k$$

- Считаем, что $0 \ln 0 = 0$
- Если $p_1 = 1, p_2 = \cdots = p_K = 0$, то $H(X) = 0$
- Мера отличия распределения классов от вырожденного

Поиск разбиения

- После того, как разбиение найдено:
- Разбиваем X_m на две части:

$$X_l = \{x \in X_m \mid [x^j \leq t]\}$$

$$X_r = \{x \in X_m \mid [x^j > t]\}$$

- Повторяем процедуру для дочерних вершин

Критерий останова

- В какой момент прекращать разбиение вершин?
- В вершине один объект?
- В вершине объекты одного класса?
- Глубина превысила порог?

Ответ в листе

- Допустим, решили сделать вершину m листом
- Какой прогноз выбрать?
- Регрессия:

$$a_m = \frac{1}{|X_m|} \sum_{i \in X_m} y_i$$

- среднее арифметическое

- Классификация:

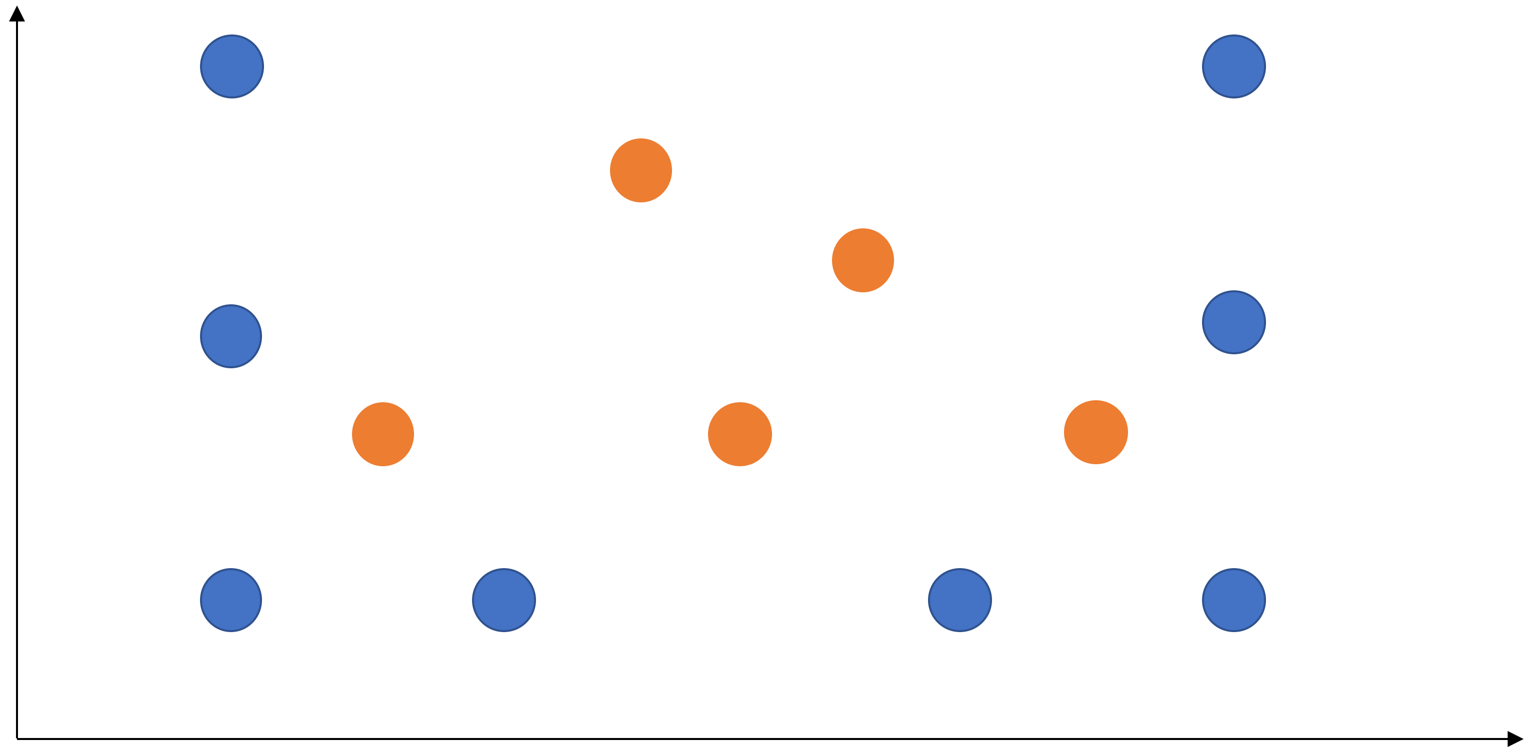
$$a_m = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i \in X_m} [y_i = y]$$

- наиболее частый класс

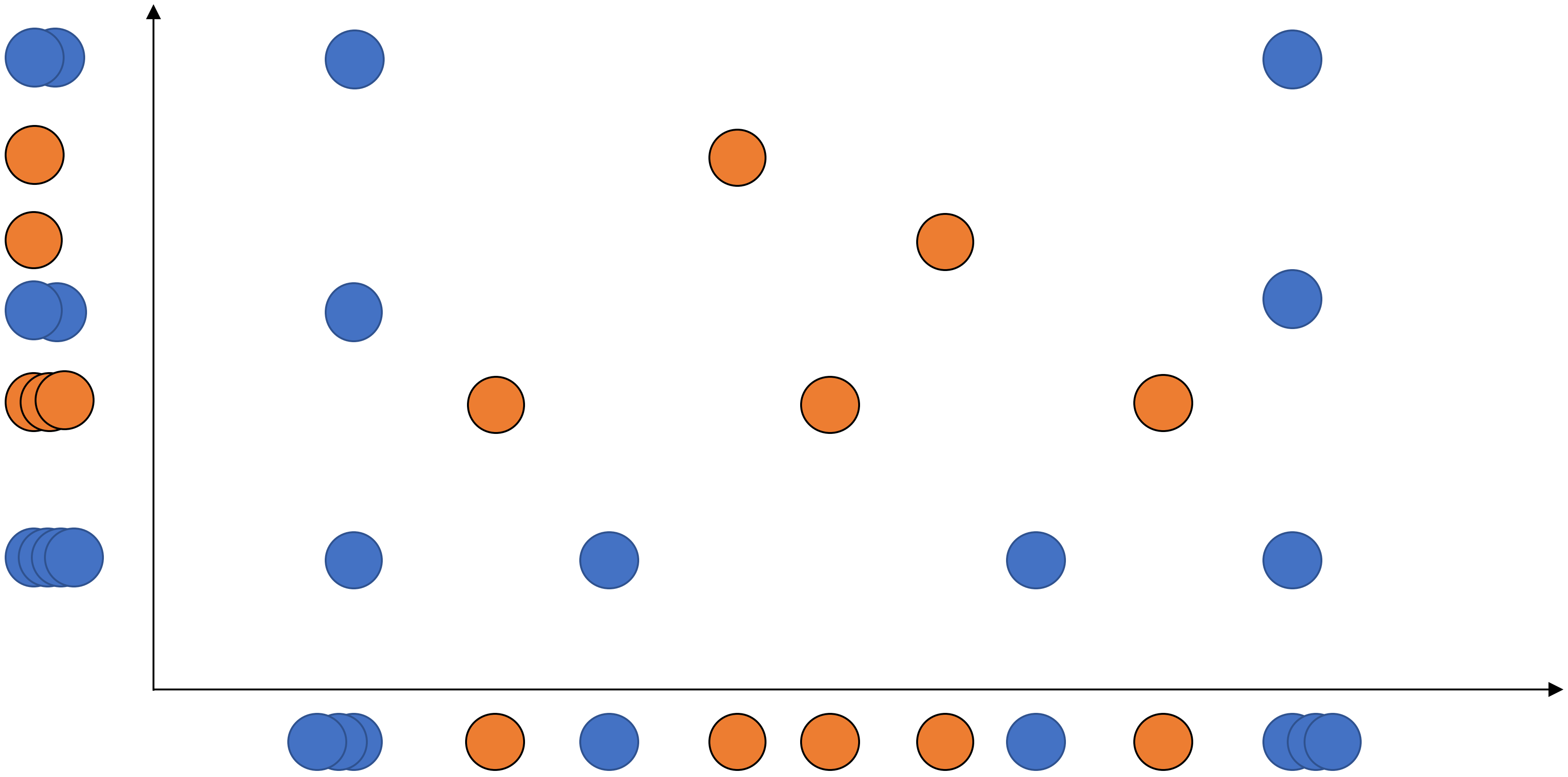
Жадный алгоритм построения дерева

1. Поместить в корень всю выборку: $X_1 = X$
2. Начать построение с корня: $m = 1$
3. Если выполнен критерий останова для вершины m, то выход
4. Найти лучшее разбиение $[x^j \leq t]$ для вершины m
5. Разбить вершину m на дочерние вершины l и r
6. Повторить шаги 3-6 для дочерних вершин l и r

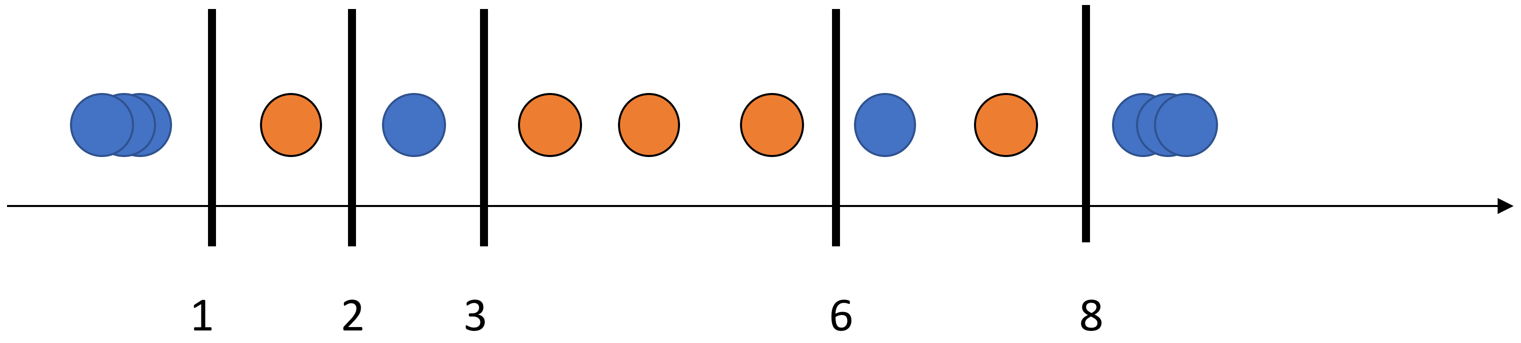
Обучение деревьев



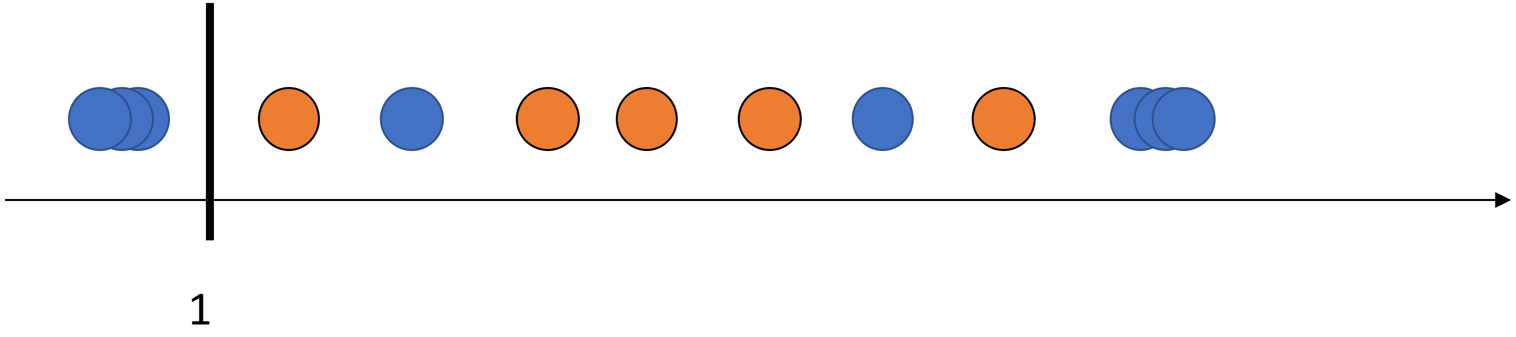
Признаки



Разбиения по признаку 1



Разбиения по признаку 1

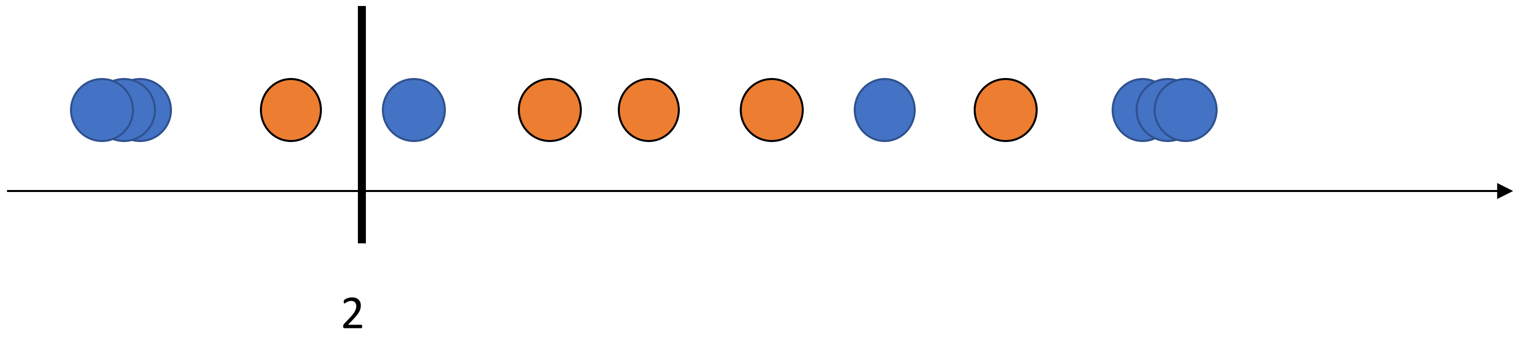


(1, 0)
H(p) = 0

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

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

Разбиения по признаку 1

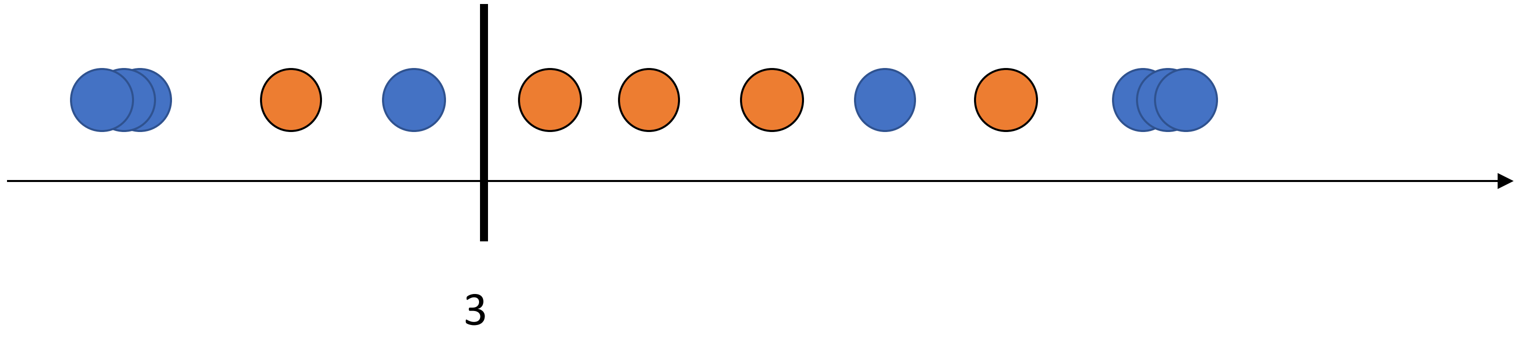


(3/4, 1/4)
H(p) = 0.56

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

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

Разбиения по признаку 1

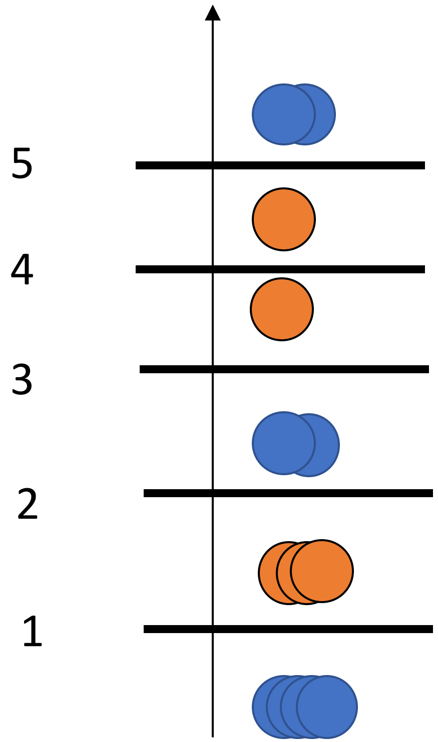


(4/5, 1/5)
H(p) = 0.5

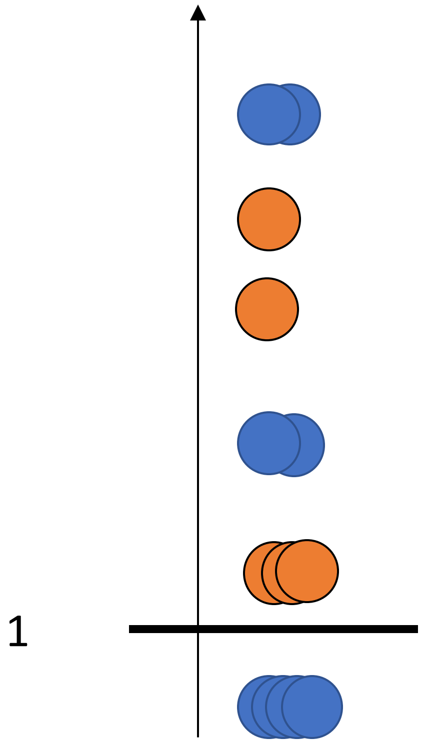
(1/2, 1/2)
H(p) = 0.69

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

Разбиения по признаку 2



Разбиения по признаку 2

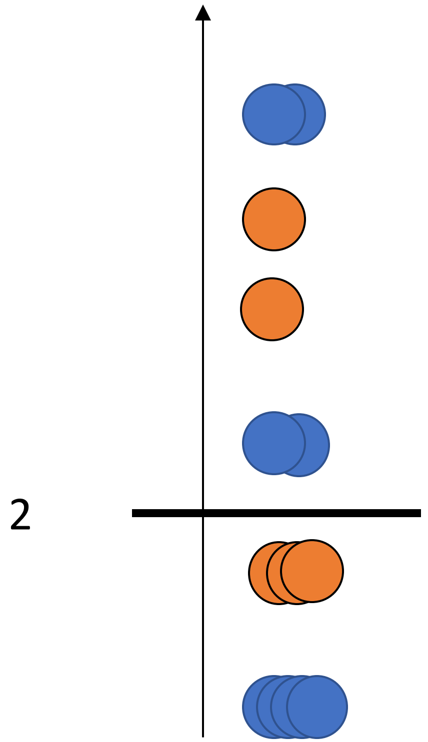


(4/9, 5/9)
H(p) = 0.69

(1, 0)
H(p) = 0

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

Разбиения по признаку 2

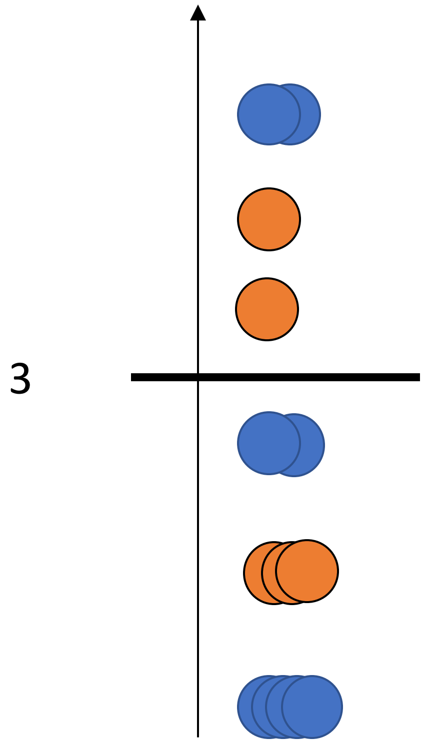


(4/6, 2/6)
H(p) = 0.64

(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

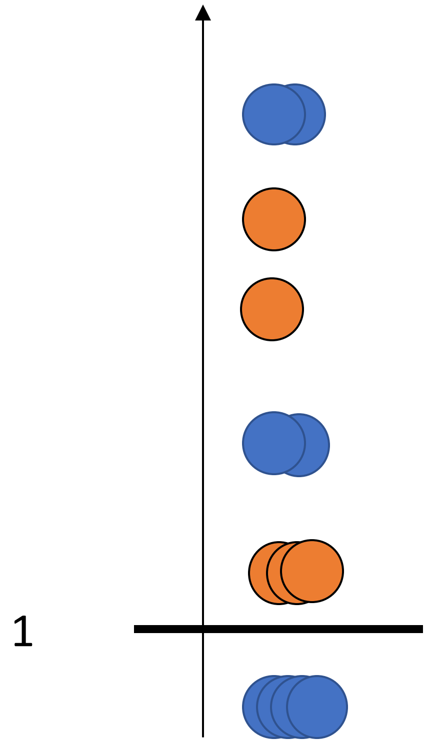


(1/2, 1/2)
H(p) = 0.69

(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



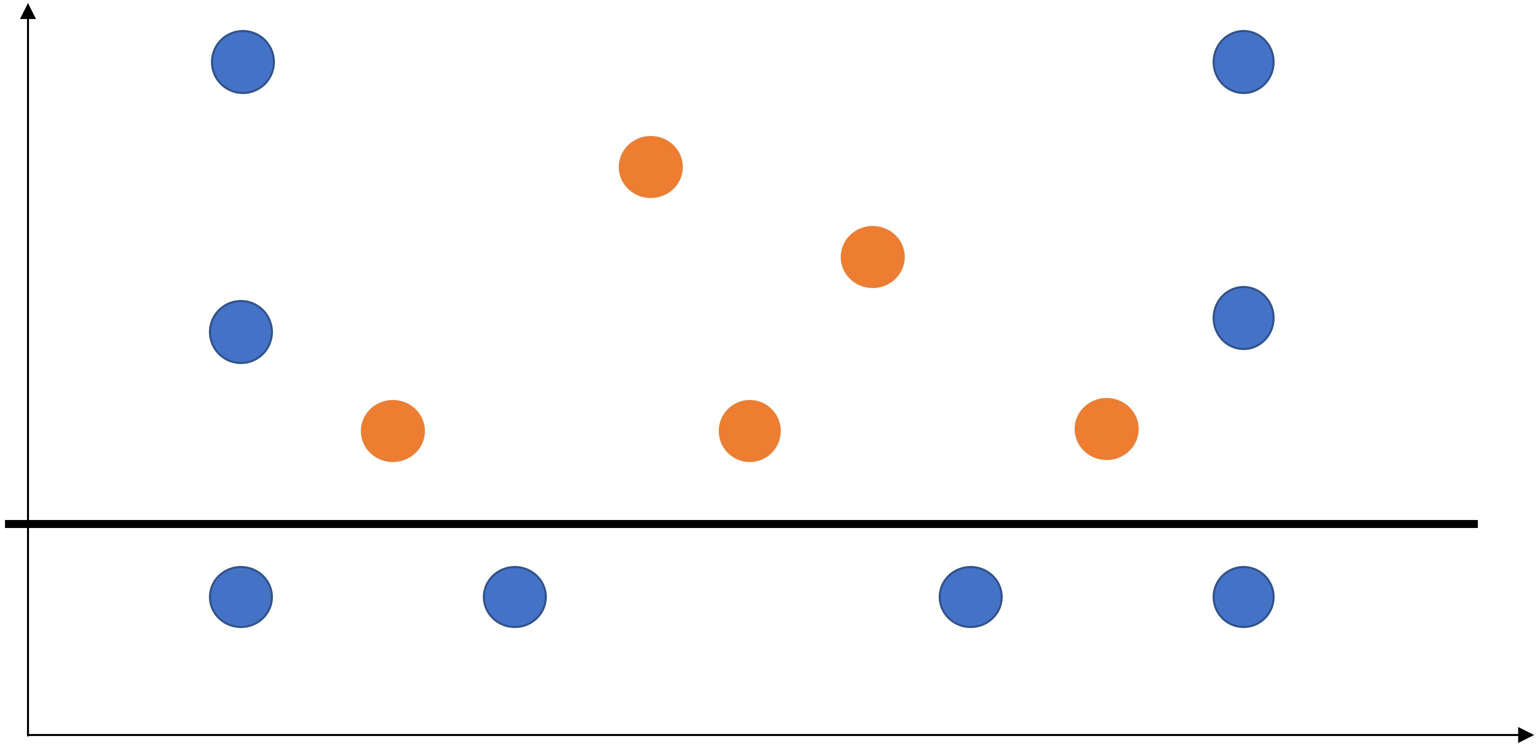
(4/9, 5/9)
H(p) = 0.69

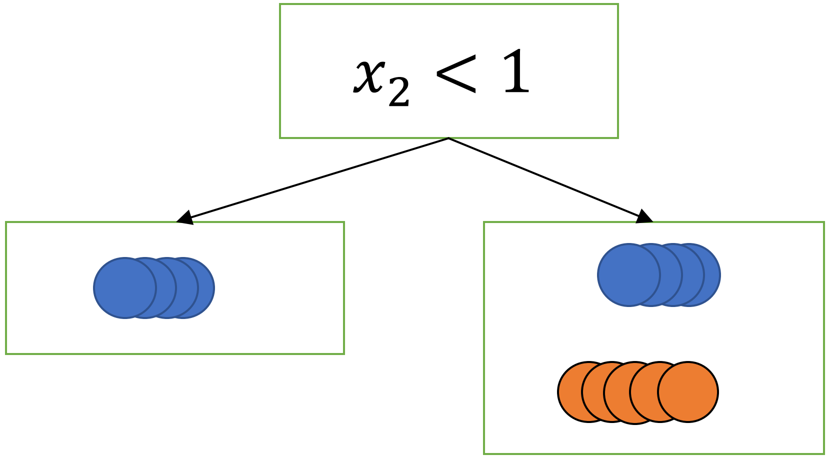
(1, 0)
H(p) = 0

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

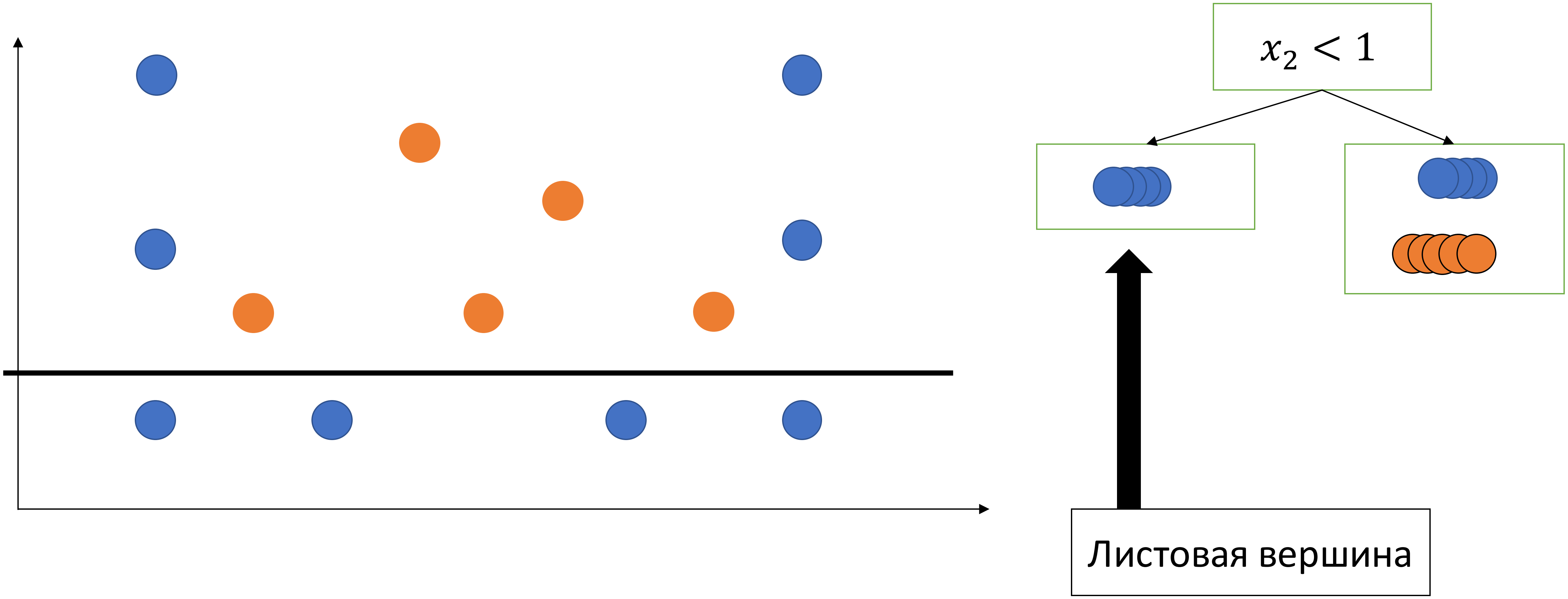
Лучшее разбиение!

Обучение деревьев

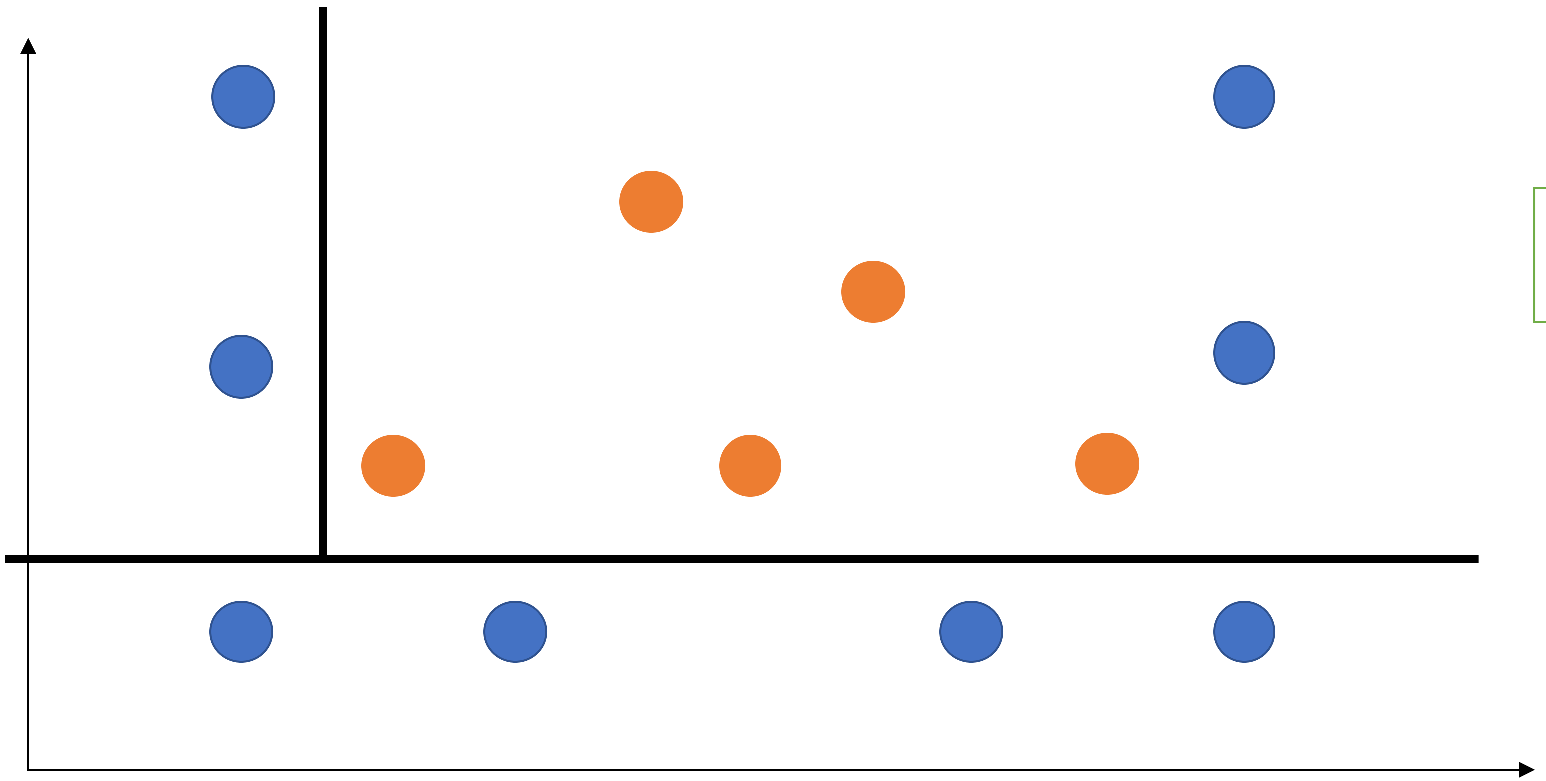


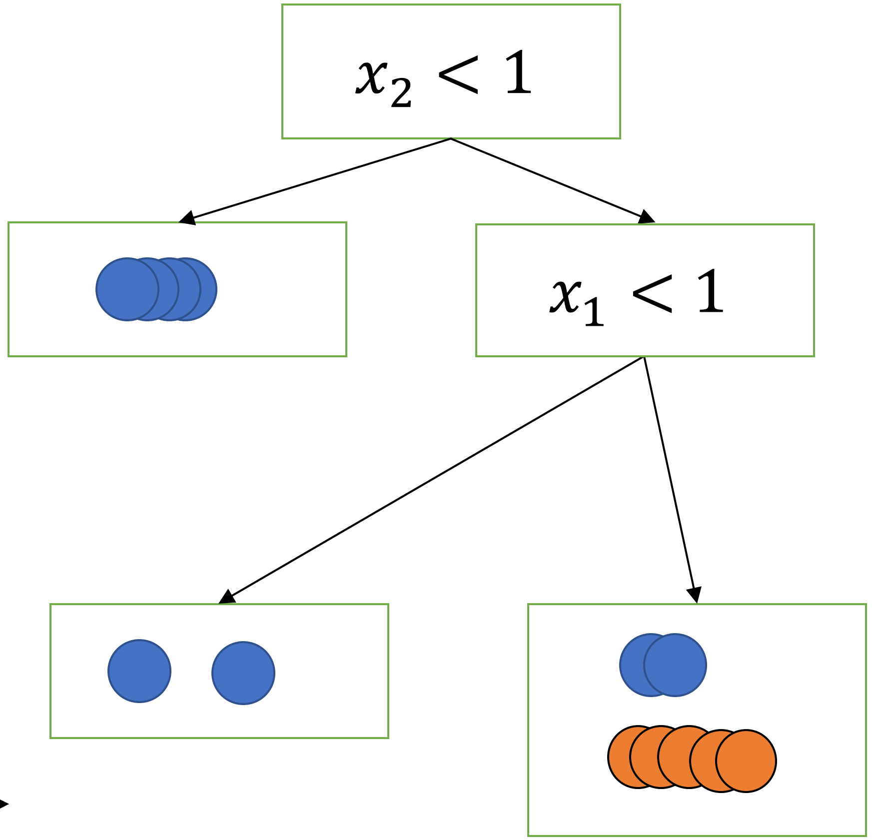


Обучение деревьев

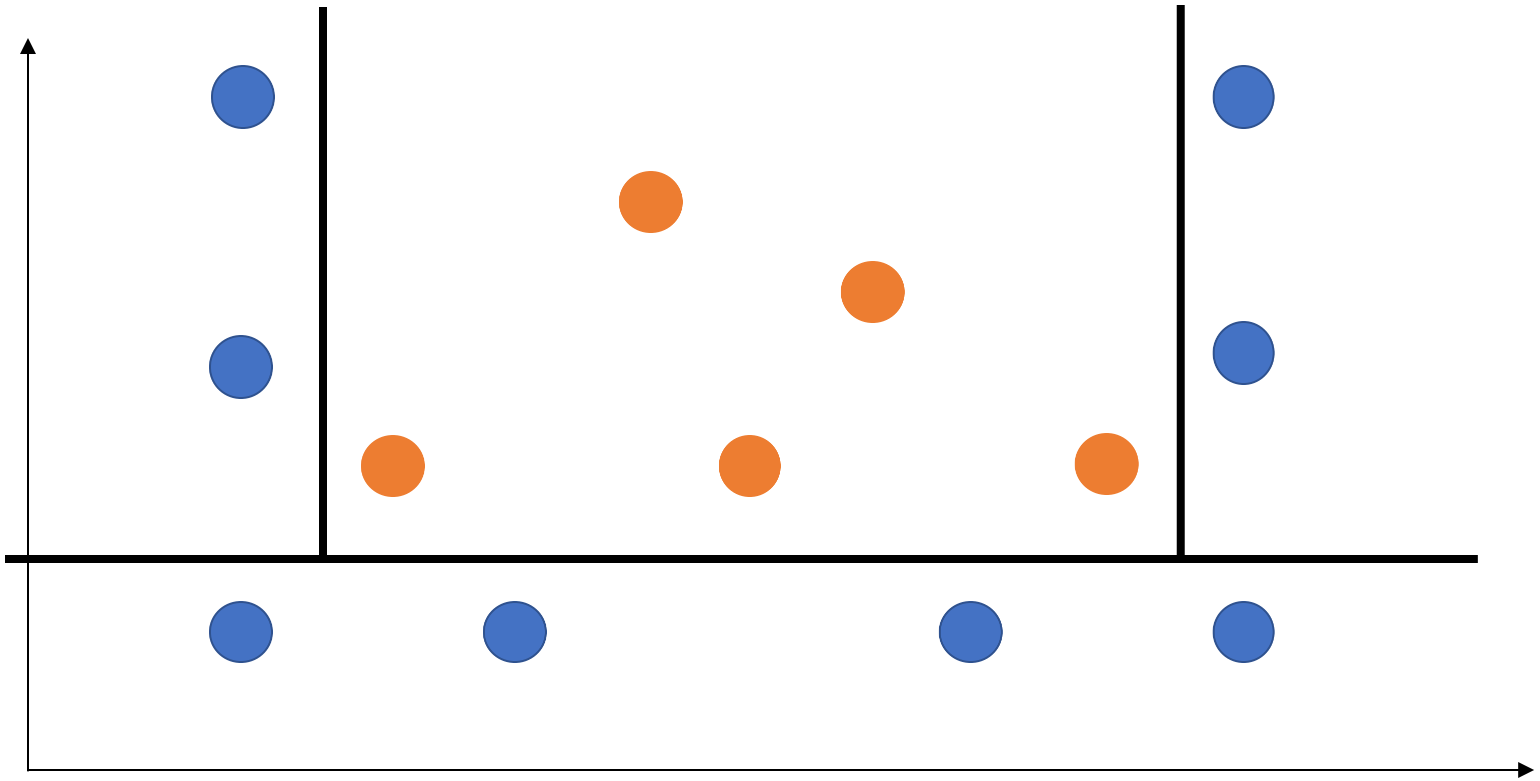


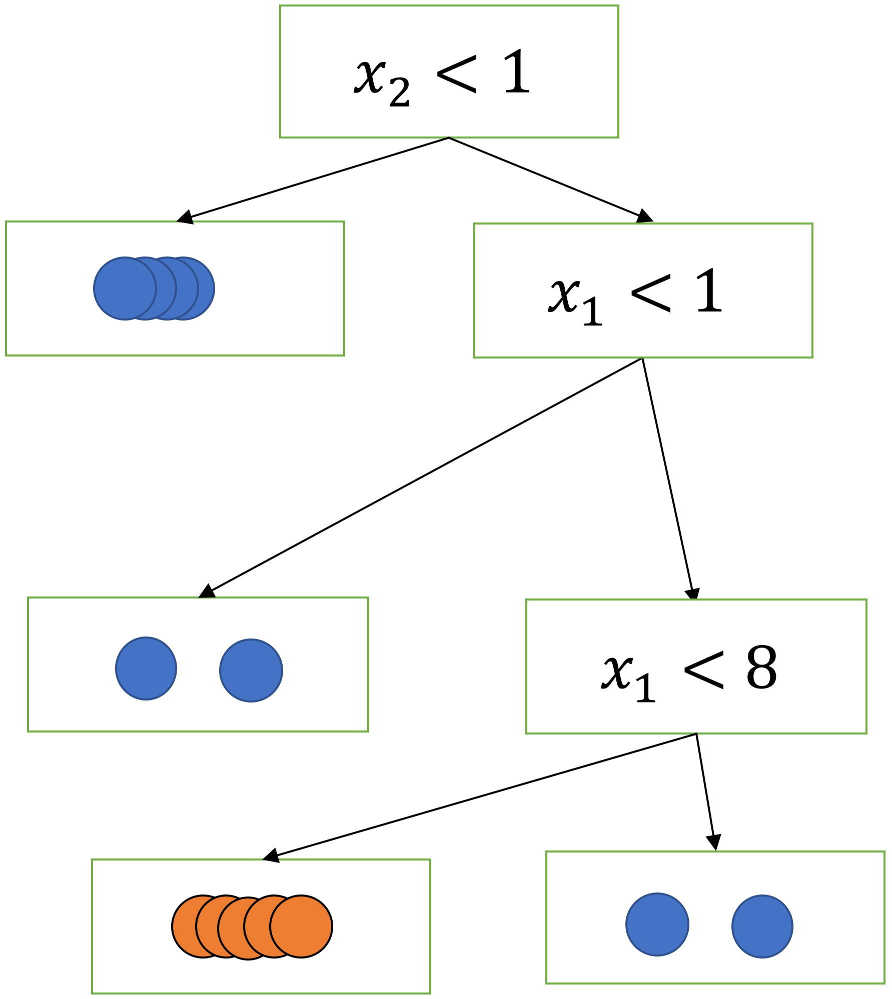
Обучение деревьев





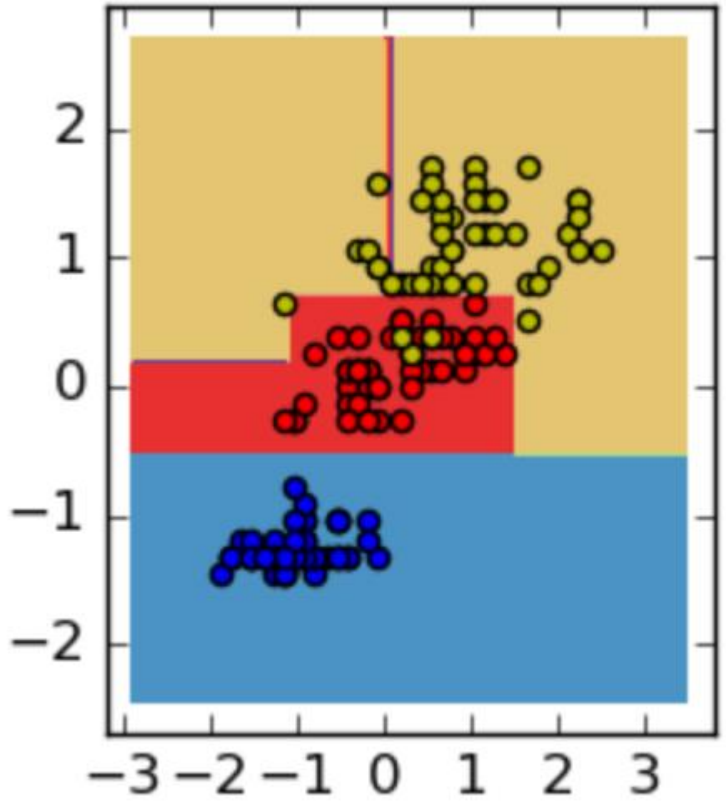
Обучение деревьев



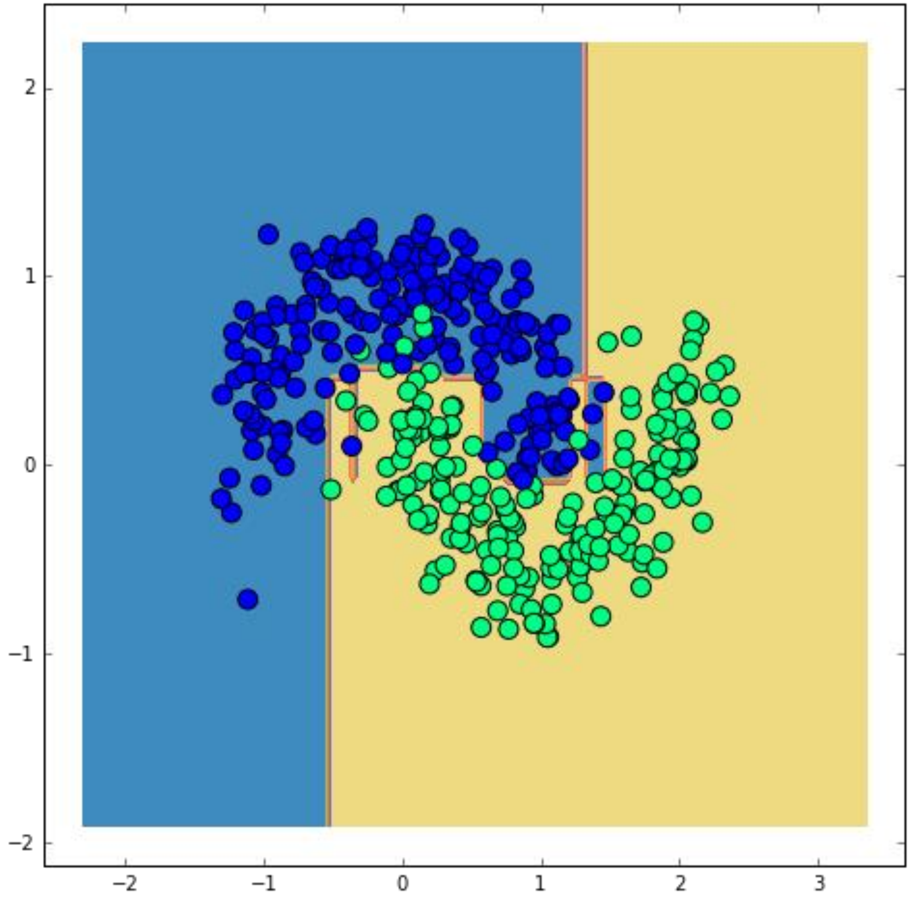


Переобучение деревьев и борьба с ним

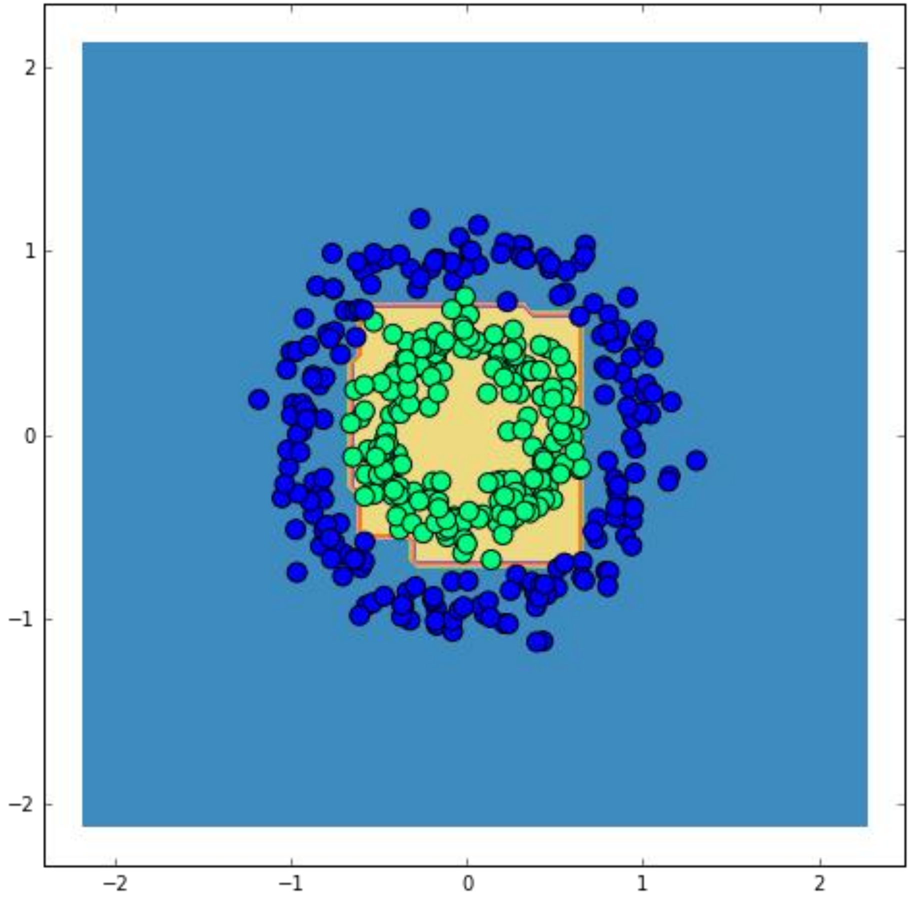
Классификация



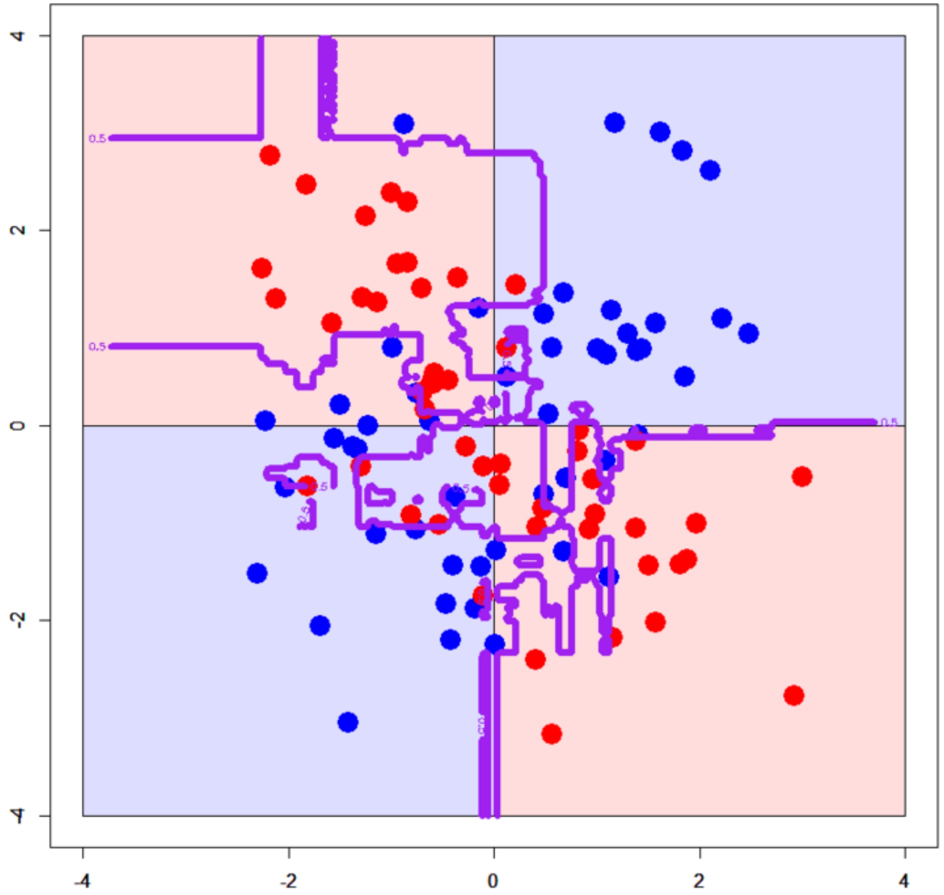
Классификация



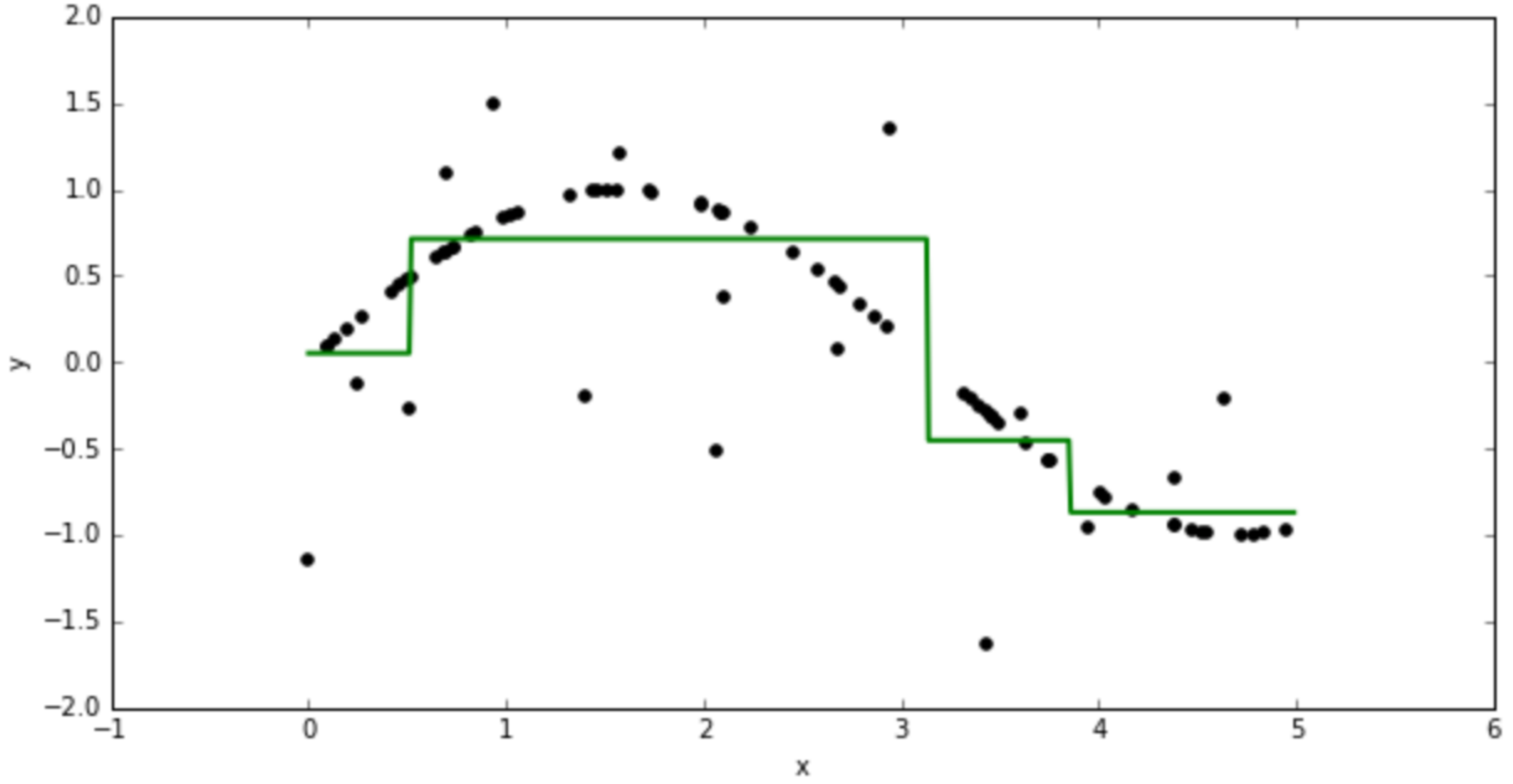
Классификация



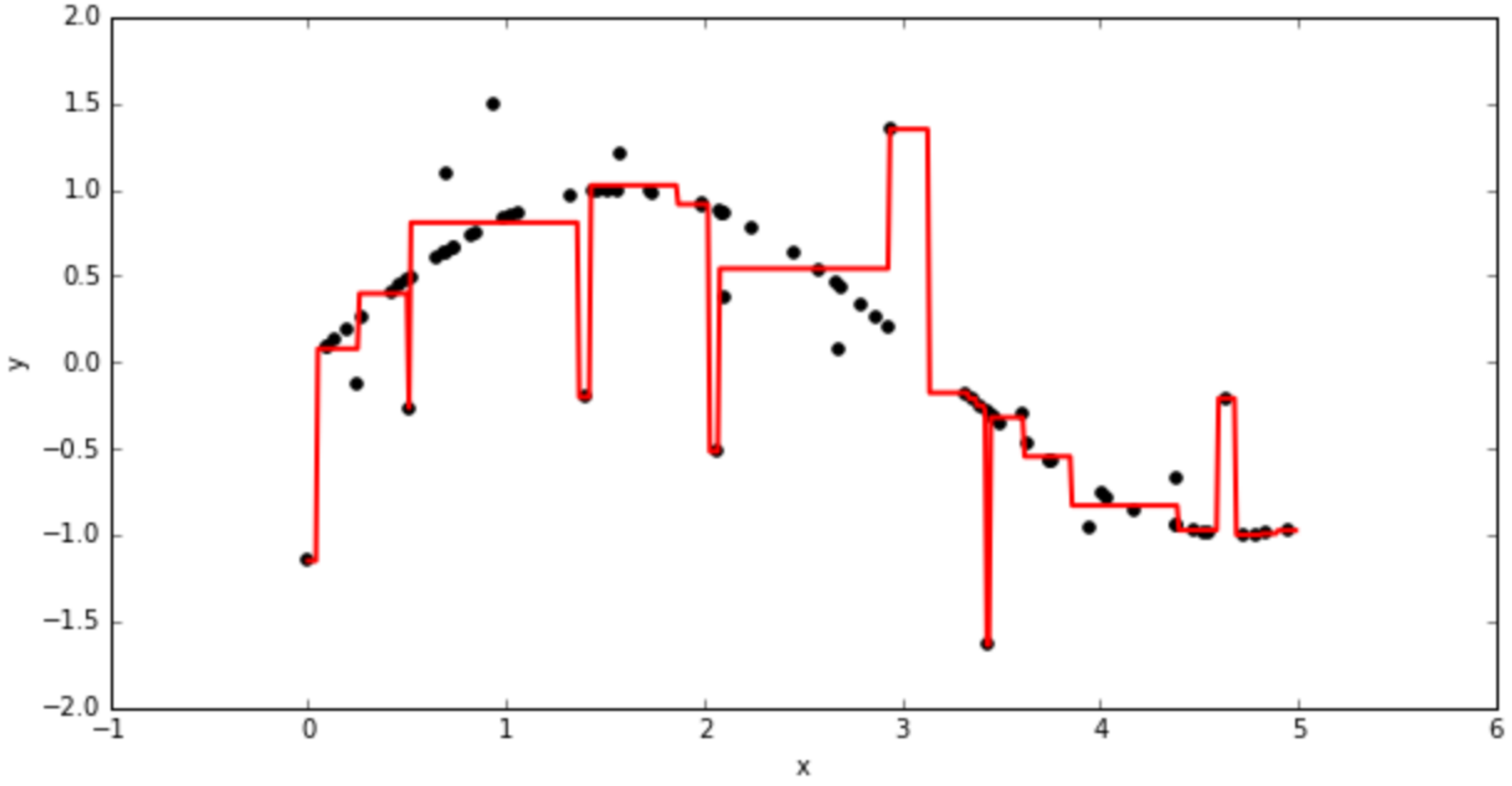
Классификация



Регрессия



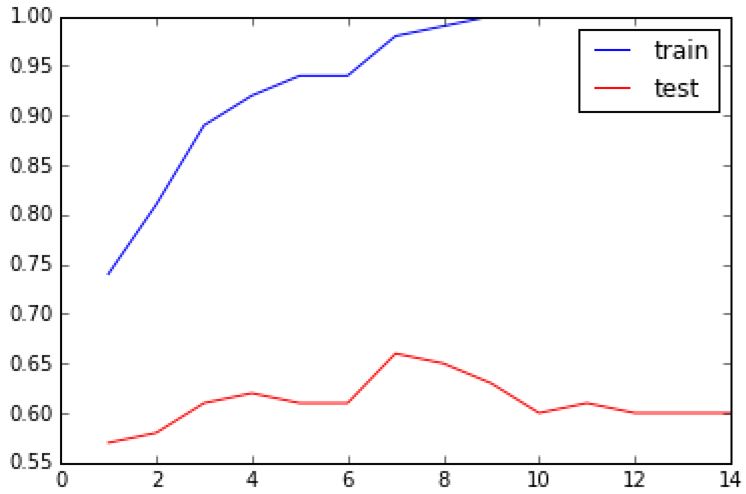
Регрессия



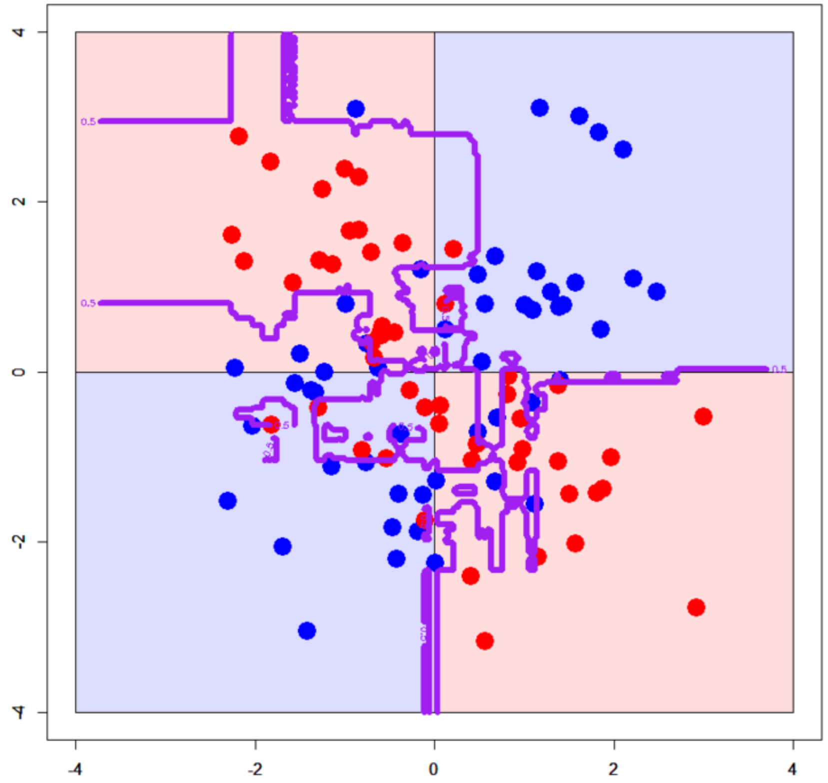
Решающие деревья

- Восстанавливают сложные закономерности
- Могут построить сколь угодно сложную поверхность
- Чем больше глубина — тем сложнее поверхность
- Склонны к переобучению

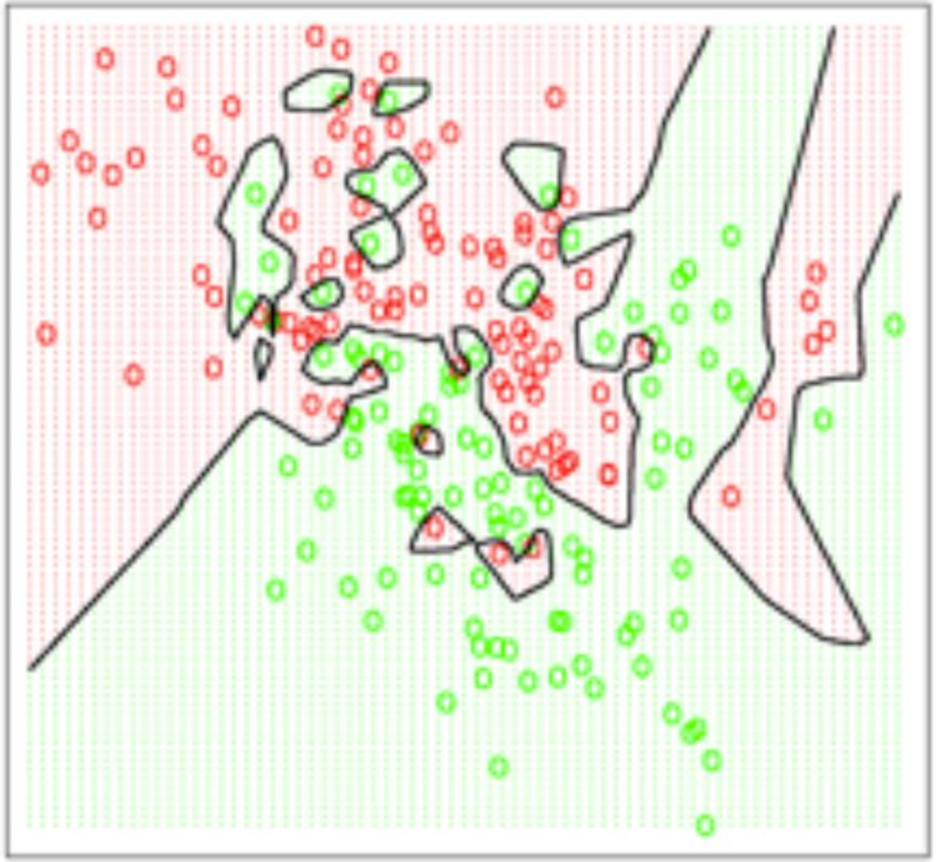
Глубина деревьев

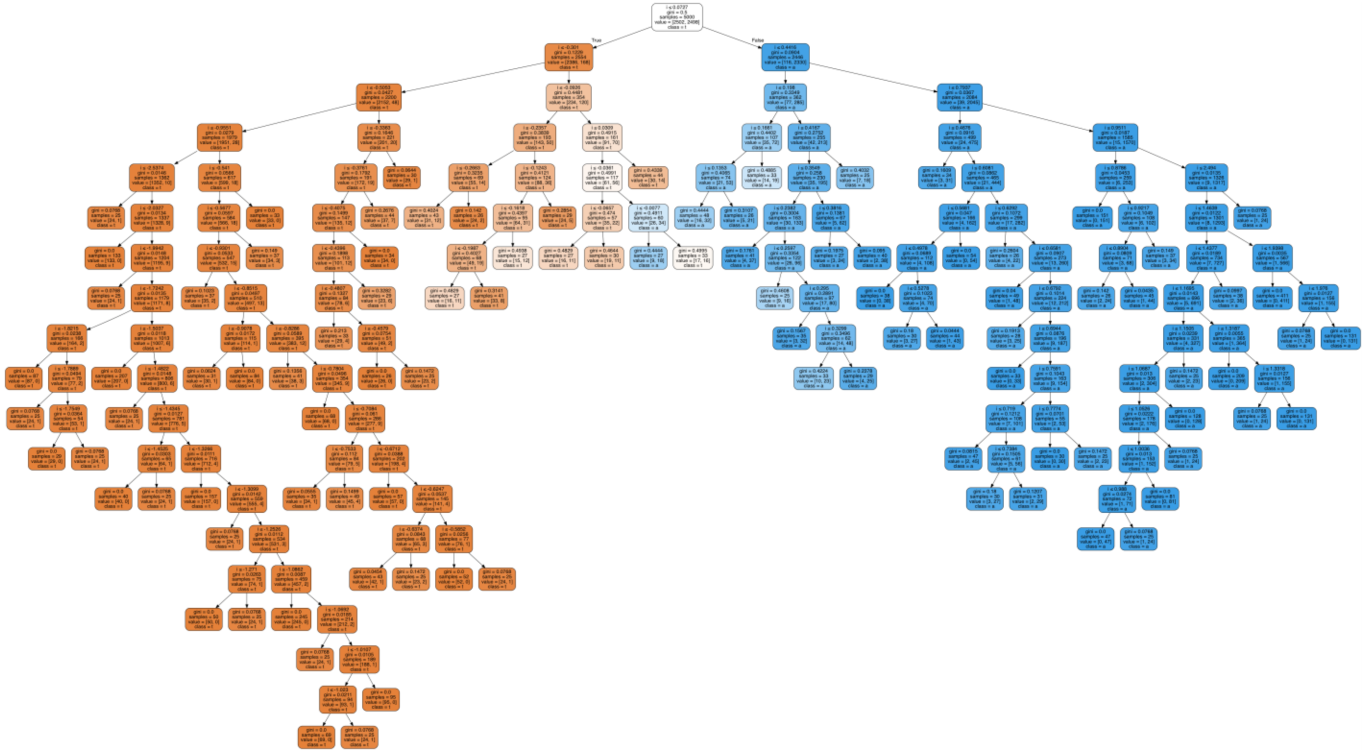


Переобучение деревьев



Переобучение деревьев





Переобучение деревьев

- Дерево может достичь нулевой ошибки на любой выборке
- Как правило, такое дерево окажется переобученным
- Выход — ограничивать глубину или число объектов в листе

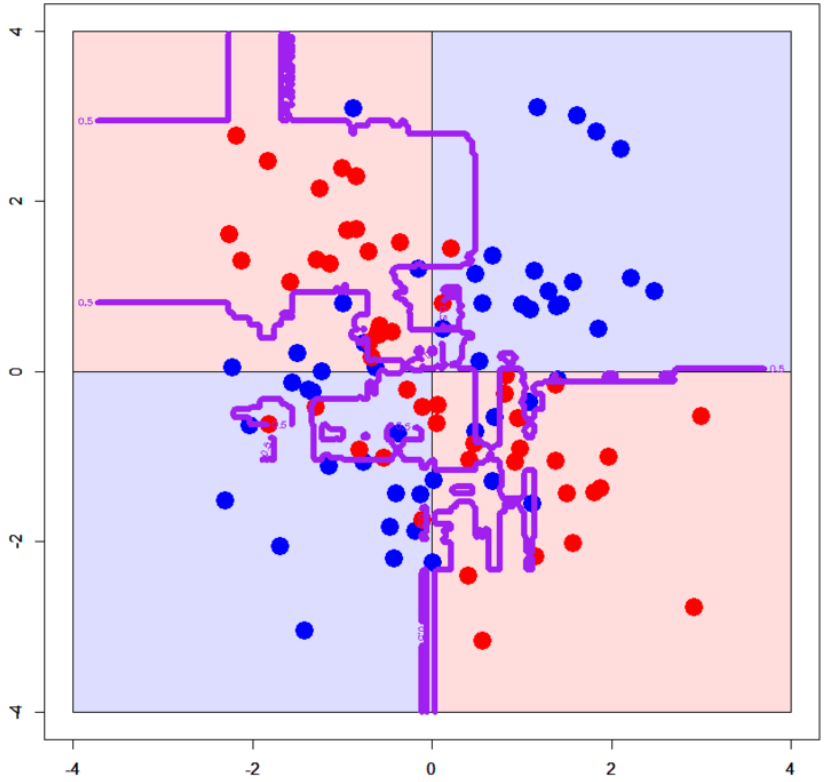
Критерий останова

- Как понять, разбивать вершину или делать листовой?
- Способ борьбы с переобучением

Критерий останова

- Все объекты в вершине относятся к одному классу

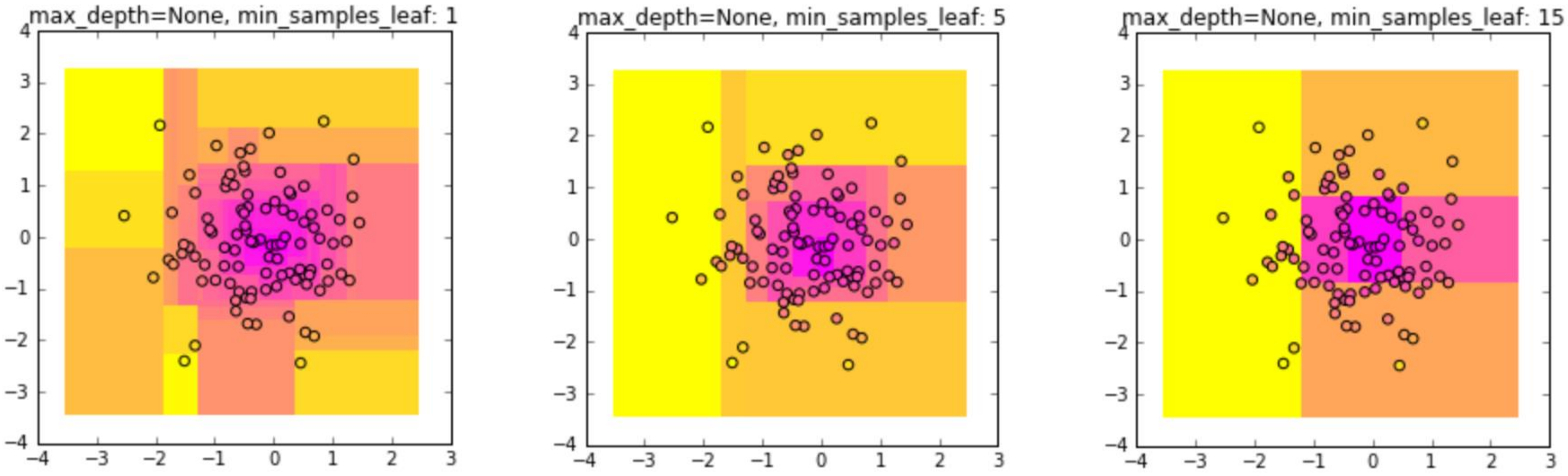
- Простое условие
- Но приводит к переобучению



Число объектов в листе

- В вершину попало $\leq n$ объектов
- При $n = 1$ получаем максимально переобученные деревья
- n должно быть достаточно, чтобы построить надёжный прогноз
- Рекомендация: $n = 5$

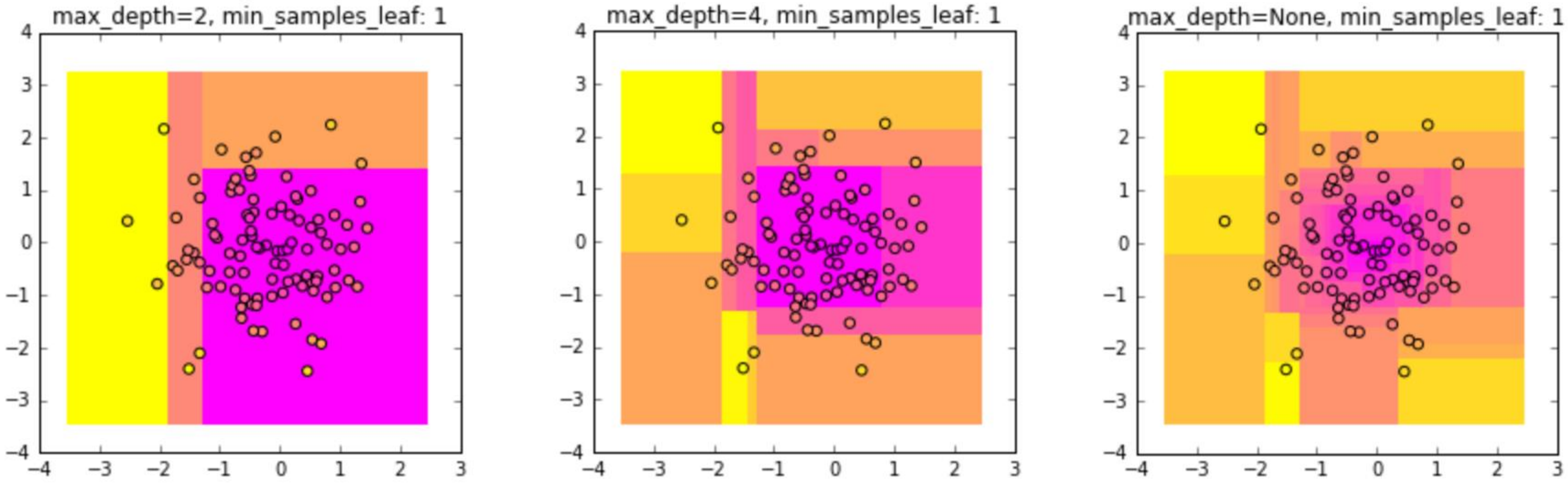
Число объектов в листе



Глубина дерева

- Ограничение на глубину
- Достаточно грубый критерий

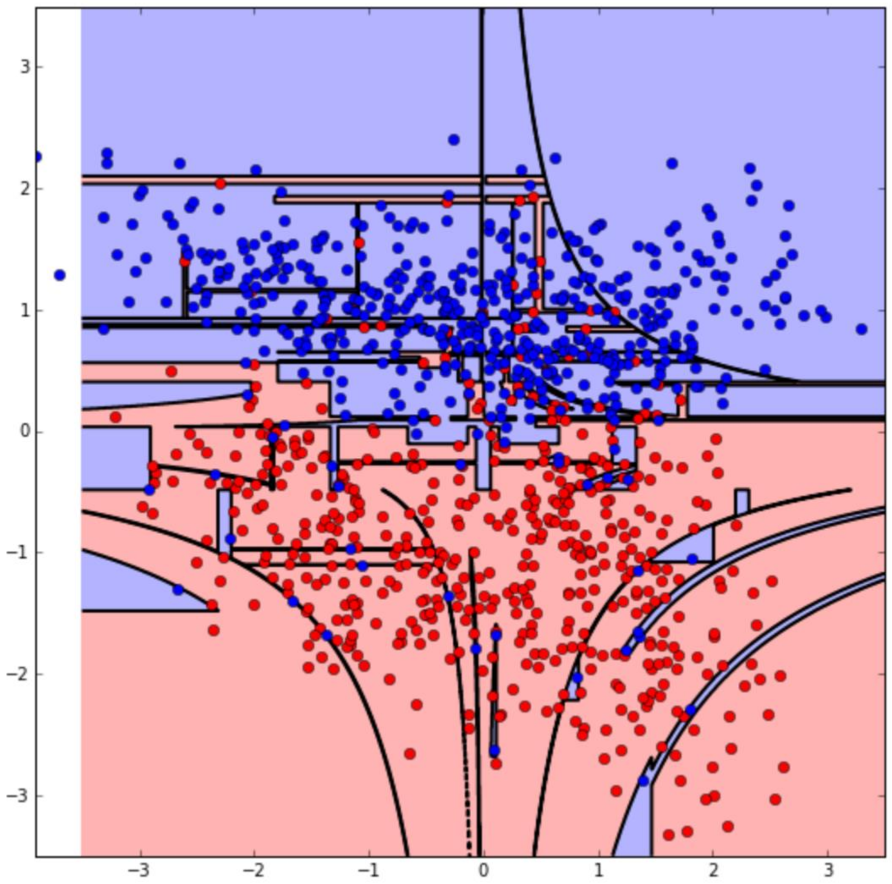
Глубина дерева

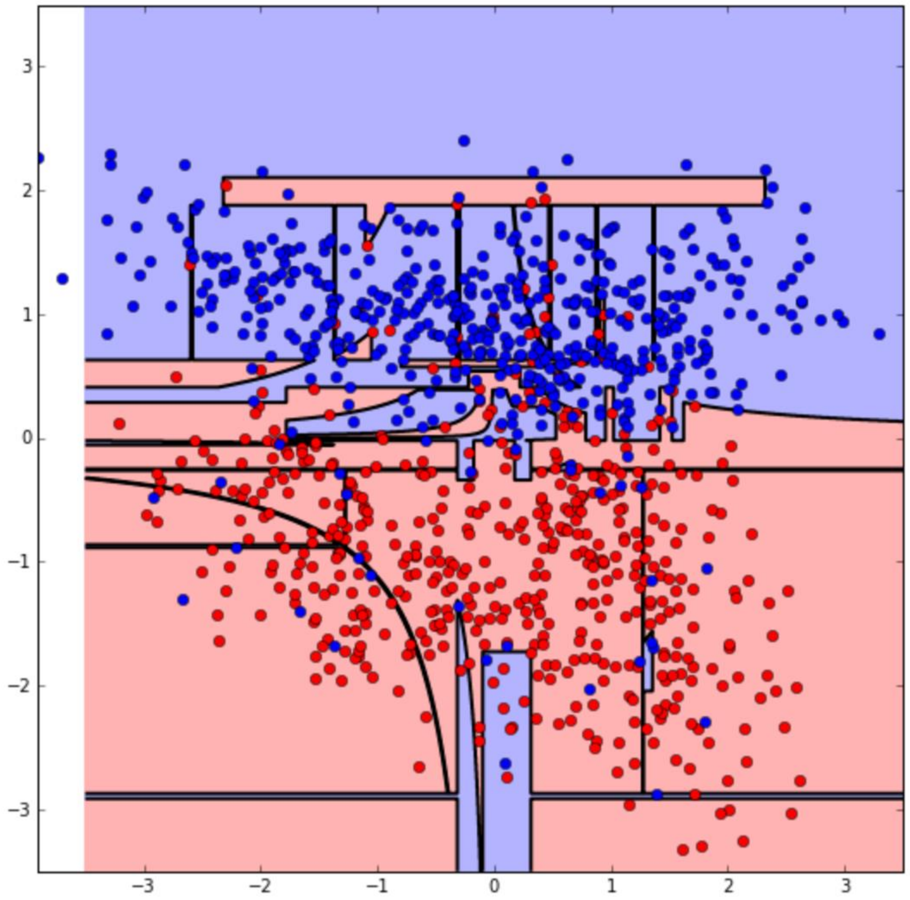


Неустойчивость деревьев

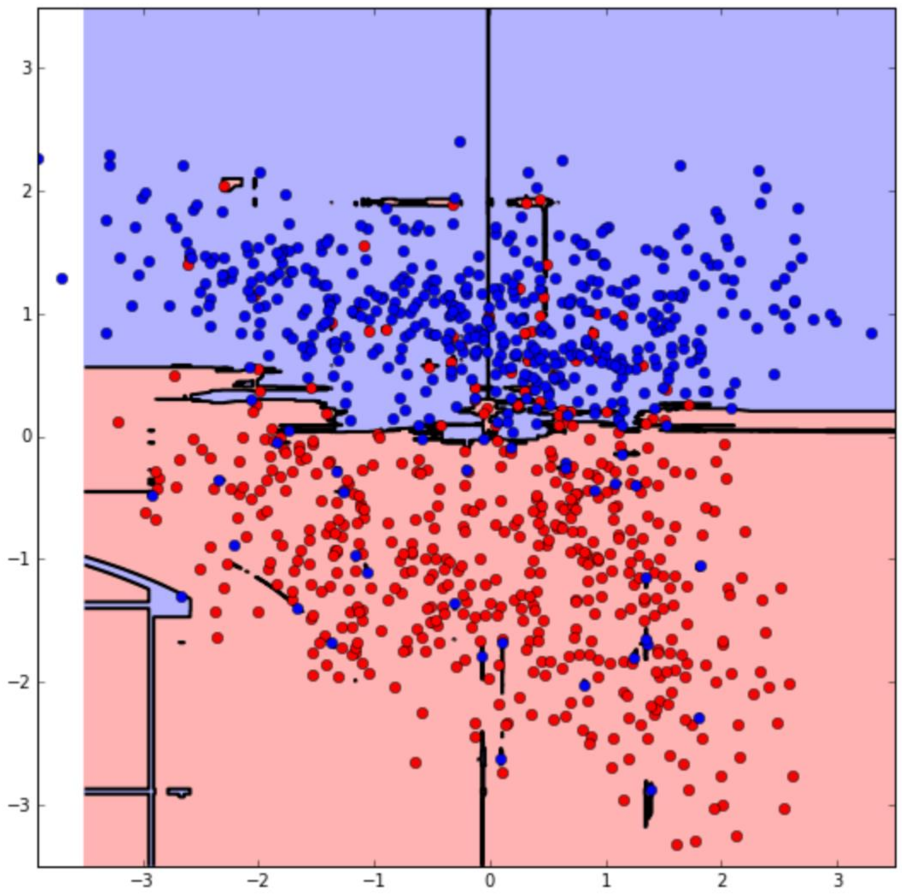
- Структура дерева очень сильно меняется даже при малом изменении выборки
- Пример: обучим два дерева по подвыборкам размером 90% от всего обучения

Неустойчивость деревьев





Усреднение деревьев



Резюме

- Решающее дерево — очень мощная модель
- Обучение эвристическое
- Много тонкостей с переобучением
- Обычно используется в композициях — на (после)следующей лекции