Базовые модели машинного обучения: деревья решений

Никольская Анастасия Николаевна
Першин Антон Юрьевич, Ph.D.

Программа «Большие данные и распределенная цифровая платформа»
Санкт-Петербургский государственный университет

Практика по дисциплине «Технологии ИИ»
8 апреля 2023 г.

Введение

→ Дерево решений — это метод представления решающих правил в иерархической структуре, состоящей из элементов двух типов — узлов и листьев.

→ В узлах находятся решающие правила.

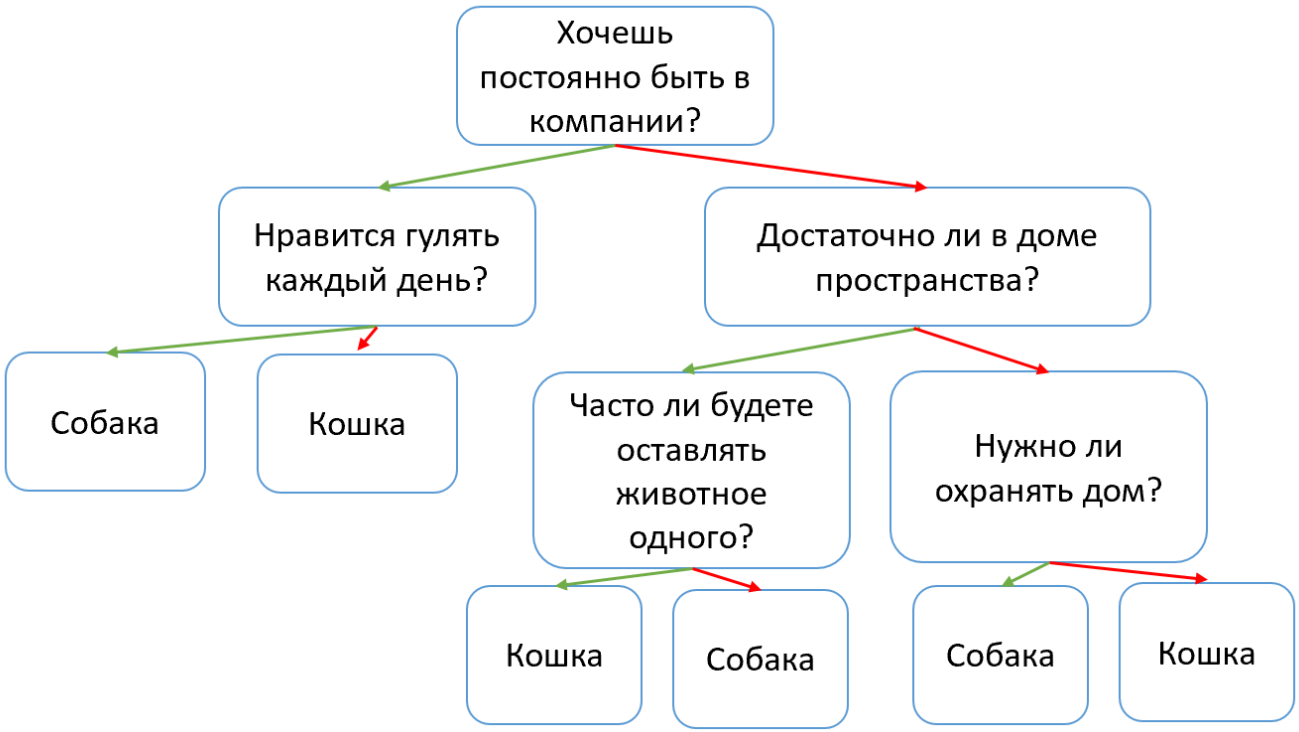
→ В простейшем случае, в результате проверки правила, множество примеров, попавших в узел, разбивается на два подмножества.

→ К каждому подмножеству вновь применяется некоторое правило, и процедура рекурсивно повторяется, пока не будет достигнуто некоторое условие остановки алгоритма.

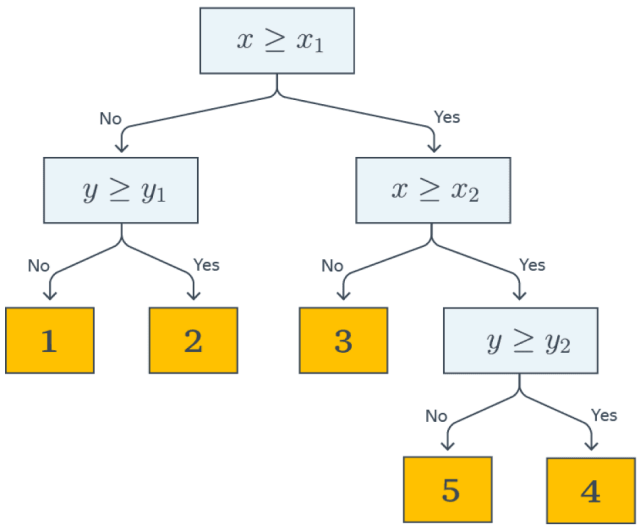
→ В последнем узле проверка и разбиение не производится и он объявляется листом.

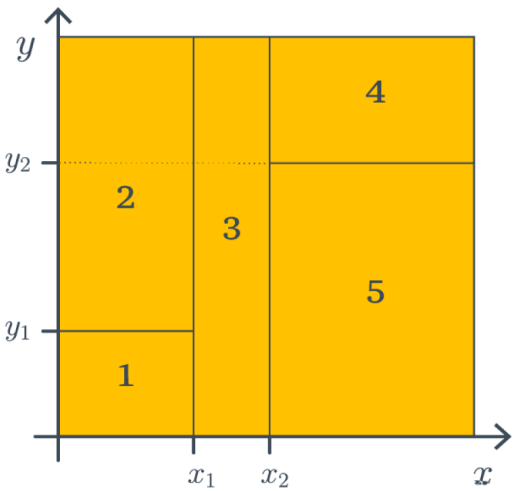
→ Лист определяет решение для каждого попавшего в него примера.

Пример дерева решений



Пример дерева решений (2)





Источник картинки

Определение решающего дерева

Пусть задано бинарное дерево, в котором:

- $\rightarrow$ каждой внутренней вершине v приписан предикат $Split(v)$, каждой листовой вершине приписан прогноз $Ans(v) \in Y$, где Y — область значений целевой переменной
- $\rightarrow$ В ходе предсказания осуществляется проход по этому дереву к некоторому листу. Для каждого примера движение начинается из корня.
- $\rightarrow$ В очередной внутренней вершине проход продолжится вправо, если $Split(v) = 1$, и влево, если $Split(v) = 0$. Проход продолжается до момента, пока не будет достигнут некоторый лист и будет получен $Ans(v)$.

Свойства решающего дерева

Пусть задано бинарное дерево, в котором:

- $\rightarrow$ Выученная функция является кусочно-постоянной (что из этого следует?)
- $\rightarrow$ Дерево решений не может экстраполировать зависимости за границы области значений обучающей выборки
- $\rightarrow$ Дерево решений способно идеально приблизить обучающую выборку и ничего не выучить, если выродится (в каждый лист попадет один пример)

Жадный алгоритм построения дерева

- $\rightarrow$ Создаём вершину v
- $\rightarrow$ Если выполнен критерий остановки $Stop(S_m)$, останавливаемся, объявляем эту вершину листом и присваиваем ей ответ $Ans(S_m)$
- $\rightarrow$ Иначе: находим предикат $Split(S_m)$, обеспечивающий наилучшее разбиение выборки по некоторому критерию.
- $\rightarrow$ Повторяем процедуру для S_{m_i} и S_{m_j} до достижения критерия остановки.
- $\rightarrow$ В разных алгоритмах применяются разные эвристики для “ранней остановки” или “отсечения”, чтобы избежать построения переобученного дерева.

Жадный алгоритм построения дерева (2)

→ $Ans(S_m)$ в случае задачи классификации — метка самого частого класса или оценка дискретного распределения вероятностей классов для объектов, попавших в этот лист; в случае задачи регрессии — среднее, медиана или другая статистика;

→ Критерий остановки — функция, которая решает, нужно ли продолжать ветвление или пора остановиться. Это может быть какое-то тривиальное правило, равенство или близость энтропии нулю или достижение максимального числа итераций.

→ Строгой теории, которая бы связывала оптимальность выбора разных вариантов критериев разбиения и разных метрик классификации и регрессии, в общем случае не существует.

Энтропия

→ Энтропия Шеннона определяется для системы с N возможными состояниями как:

$$H = -\sum_{i=1}^{N} p_i \log_2 p_i, \tag{1}$$

где p_i – вероятности нахождения системы в i-ом состоянии

→ Энтропия может рассматриваться как мера неоднородности подмножества по представленным в нём классам

→ Энтропия максимальна при равномерном распределении классов и равна 0, если подмножество содержит только один класс

Информационный подход к разбиению

→ Лучшим атрибутом разбиения будет тот, который обеспечит максимальное снижение энтропии результирующего подмножества относительно родительского

→ Тогда лучшим критерием будет тот, который обеспечит максимальный прирост информации ($Info = -S$):

$$Gain(A) = Info(S) - Info(S_A) = Info(S) - \sum_{i=1}^{q} \frac{N_i}{N} Info(S_i), \quad (2)$$

где S – множество до разбиения, S_A – разбиение множества по атрибуту A на q групп, $N_i = |S_i|$ и $N = |S|$.

→ Т.о. задача выбора атрибута разбиения в узле заключается в максимизации величины $Gain(A)$

Статистический подход

→ В основе статистического подхода лежит использование неопределенности Джини

→ Он показывает — насколько часто случайно выбранный пример обучающего множества будет распознан неправильно

→ Т.о он показывает расстояние между целевым распределением и распределением предсказаний

→ Неопределенность Джини можно рассчитать по формуле:

$$Gini(Q) = \sum_{i=1,N} p_i(1 - p_i) = 1 - \sum_{i=1,N} {p_i}^2, \qquad (3)$$

где S - множество до разбиения, S_A - разбиение множества по атрибуту A

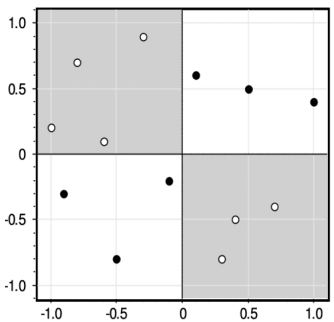
→ Т.о. максимизируется число объектов одного класса, попавших в поддерево

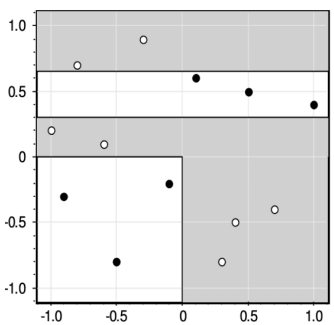
→ Неопределенность Джини и прирост информации работают почти одинаково

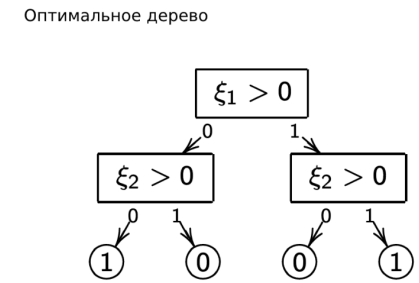
Неоптимальность критериев разбиения

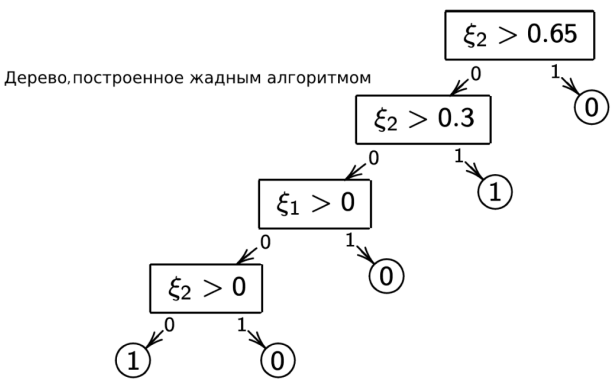
→ Жадный алгоритм не даст оптимального решения задачи XOR.

→ Иногда оптимальное с точки зрения выбранной метрики дерево получается с критерием ветвления, построенным по другой метрике









Источник картинки

Категориальные признаки

- $\rightarrow$ Если признак принимает значения $C \in \{c1...c_m\}$, то простой перебор даст $2^{m-1} - 1$ сплитов
- $\rightarrow$ Перебирать их слишком долго, и часто их пытаются упорядочить
- $\rightarrow$ Для бинарной задачи можно упорядочить категории по доле примеров класса 1 со значением c_i
- $\rightarrow$ Для регрессии - по среднему значению таргета

Регуляризация

Чтобы дерево не переобучалось, ветвление обычно останавливают по одному из следующих критериев:

- $\rightarrow$ Ограничение по максимальной глубине дерева
- $\rightarrow$ Ограничение на минимальное количество объектов в листе
- $\rightarrow$ Ограничение на максимальное количество листьев в дереве
- $\rightarrow$ Требование, чтобы функционал качества при делении текущей подвыборки на две улучшался не менее чем на S процентов