Искусственный интеллект в науках о Земле

Михаил Криницкий

к.т.н.,
зав. Лабораторией машинного обучения в науках о Земле МФТИ
с.н.с. Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Непараметрические методы машинного обучения

Михаил Криницкий

к.т.н., с.н.с.
Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Лаборатория взаимодействия океана и атмосферы и мониторинга климатических изменений (ЛВОАМКИ)

Деревья решений

ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

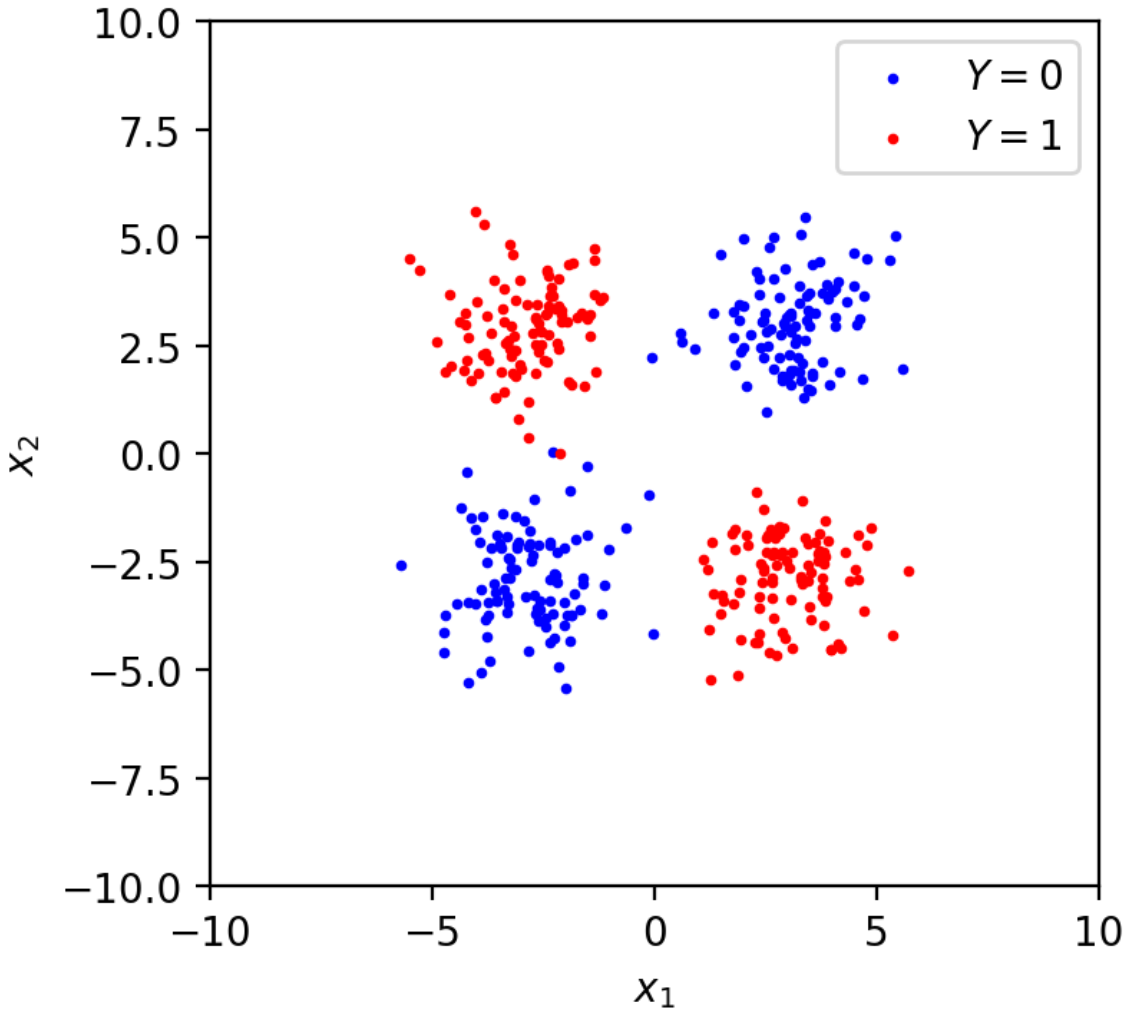
В качестве упрощенного примера рассмотрим задачу бинарной классификации, в которой объекты описываются двумерными векторами:

$$X \in \mathbb{R}^2$$
$$Y \in \{0, 1\}$$

Легко обнаружить, что линейные модели не смогут хорошо решить представленную задачу.

Варианты решения в рамках известных моделей:

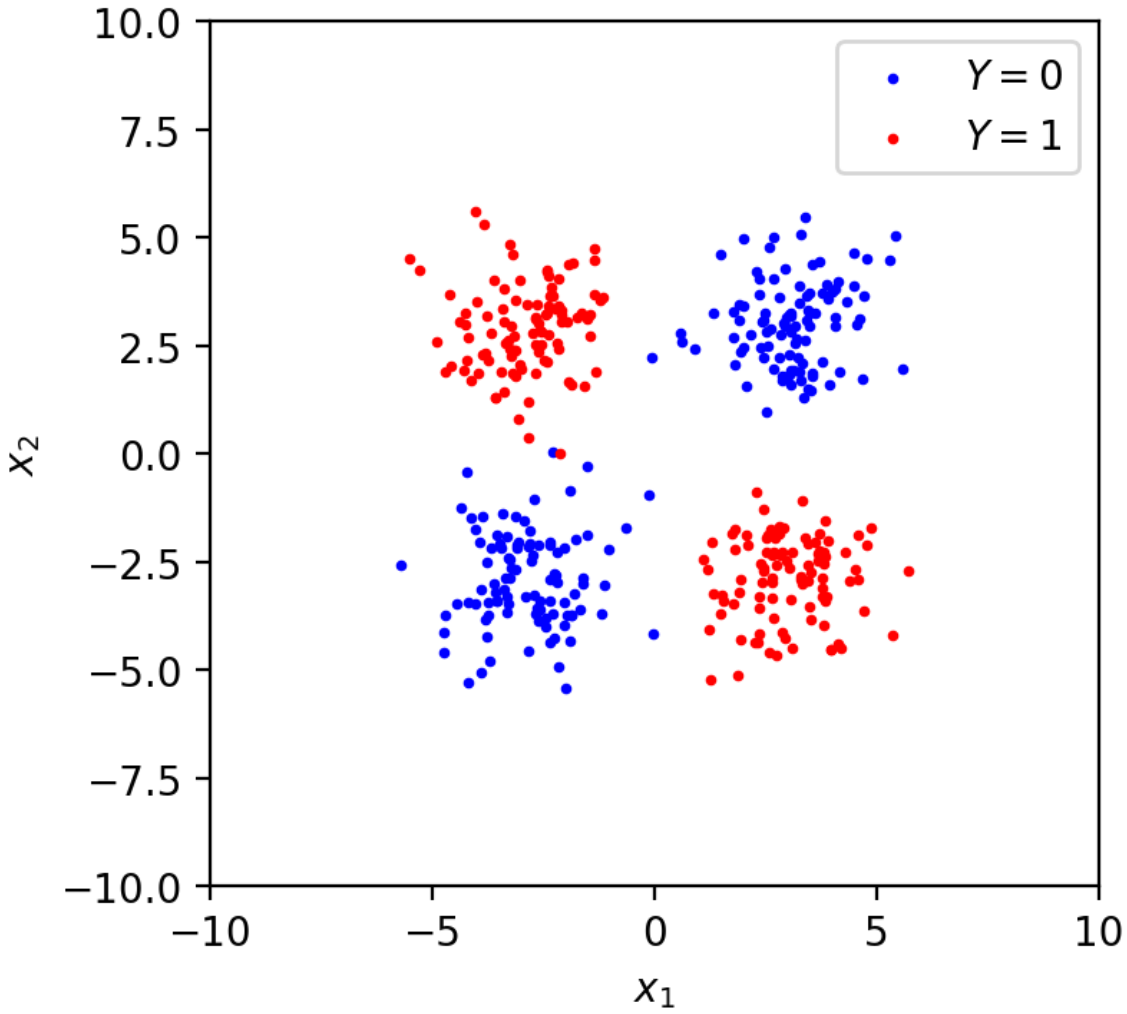
- GLM, GAM при условии расширения признакового пространства («вручную», согласно соображениям исследователя);
- SVM с применением kernel trick, виртуально расширяющим признаковое пространство;
- Искусственные нейронные сети



ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

Варианты решения в рамках известных моделей:

- GLM, GAM при условии расширения признакового пространства («вручную», согласно соображениям исследователя);
  - В случае сложных данных с признаковым описанием высокой размерности решения исследователя могут быть субоптимальными;
  - GLM и GAM – модели со слабой выразительной способностью; в случае данных с повышенной сложностью этой выразительной способности может не хватать даже на новом пространстве признаков;
  - порождение «подходящих» признаков может оказаться непосильной задачей для исследователя;
- SVM с применением kernel trick, виртуально расширяющим признаковое пространство;
  - подбор ядра для хорошего решения задачи – искусство, задача может быть решена субоптимально при условии неверно выбранного ядра;
  - на больших выборках данных обучение SVM с ядром может занимать существенное время (см. лекцию 17); SVM может демонстрировать субоптимальное решение на шумных данных с пересекающимися классами, особенно при неверном подборе гиперпараметров метода;
- Искусственные нейронные сети
  - может быть слишком выразительным решением; оптимизация соотношения выразительной способности и сложности данных – искусство, на настоящий момент не автоматизируется;
  - существенные вычислительные затраты



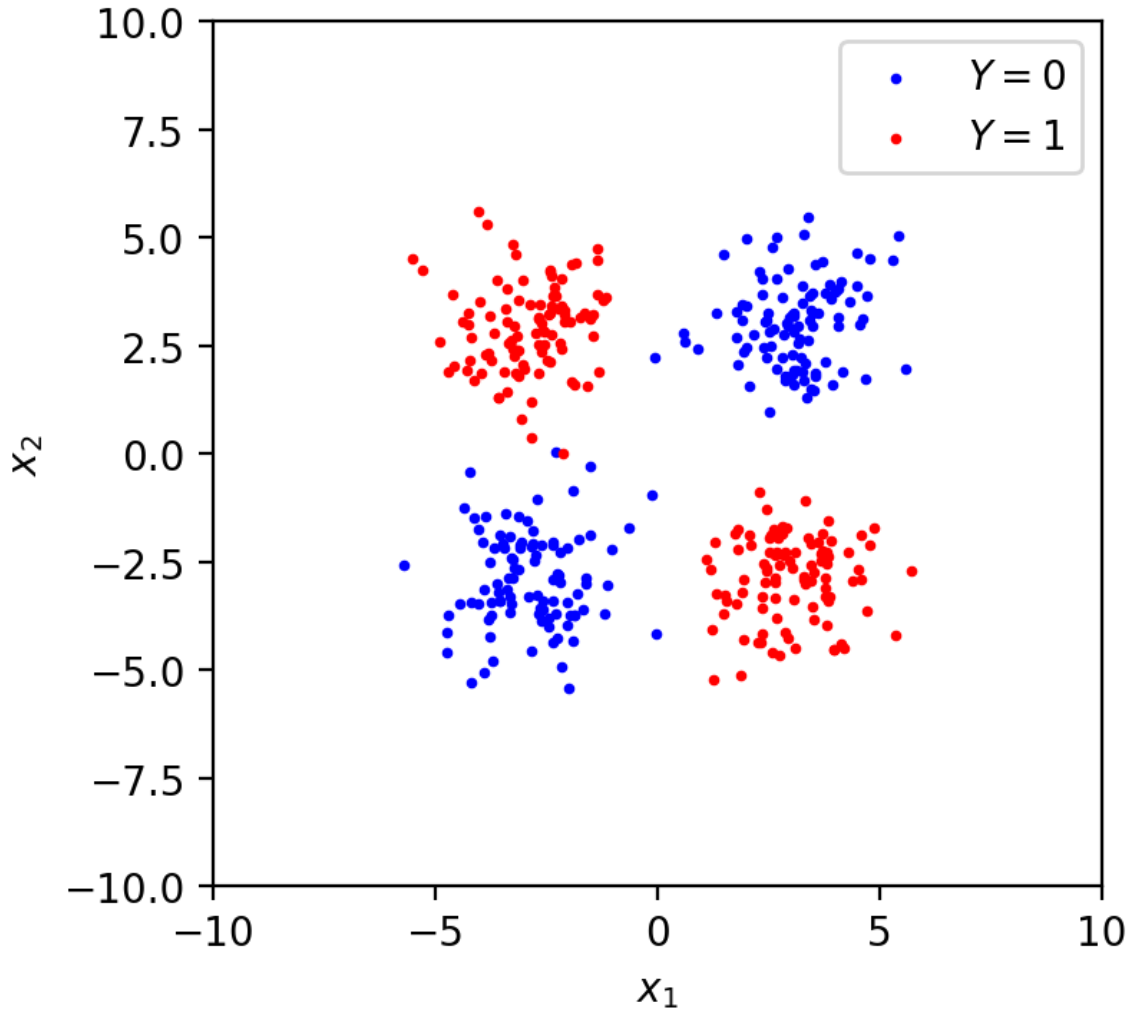
Альтернатива - деревья решений (Decision Trees, DT)

Идея:

- строить разделяющую поверхность максимально просто, понятно и инетрпретируемо;
- имитировать процесс принятия решений в сценарии «вопрос-решение».

- Пусть эта поверхность будет линейна. Даже пусть она будет кусочно-постоянна

Кусочно-постоянная разделяющая поверхность составляется из участков гиперплоскостей, каждая из которых разделяет пространство примеров только по одному из признаков.



DT в режиме исполнения

Формализация в рекурсивной записи:

- пусть R_p^l (”parent” sample) - выборка тестовых примеров $\{x_i, y_i\}_p^l$ на очередном l-том этапе ветвления;
- по определенному условию $[x^{(j)} \geq t^{(l)}]$ на j_l -й признак производится деление выборки на R_{c1} и R_{c2} (“child” samples):

$$R_{c1}^l = \{X | x^{(j_l)} < t^{(l)}, x \in R_p^l\}$$
$$R_{c2}^l = \{X | x^{(j_l)} \geq t^{(l)}, x \in R_p^l\}$$

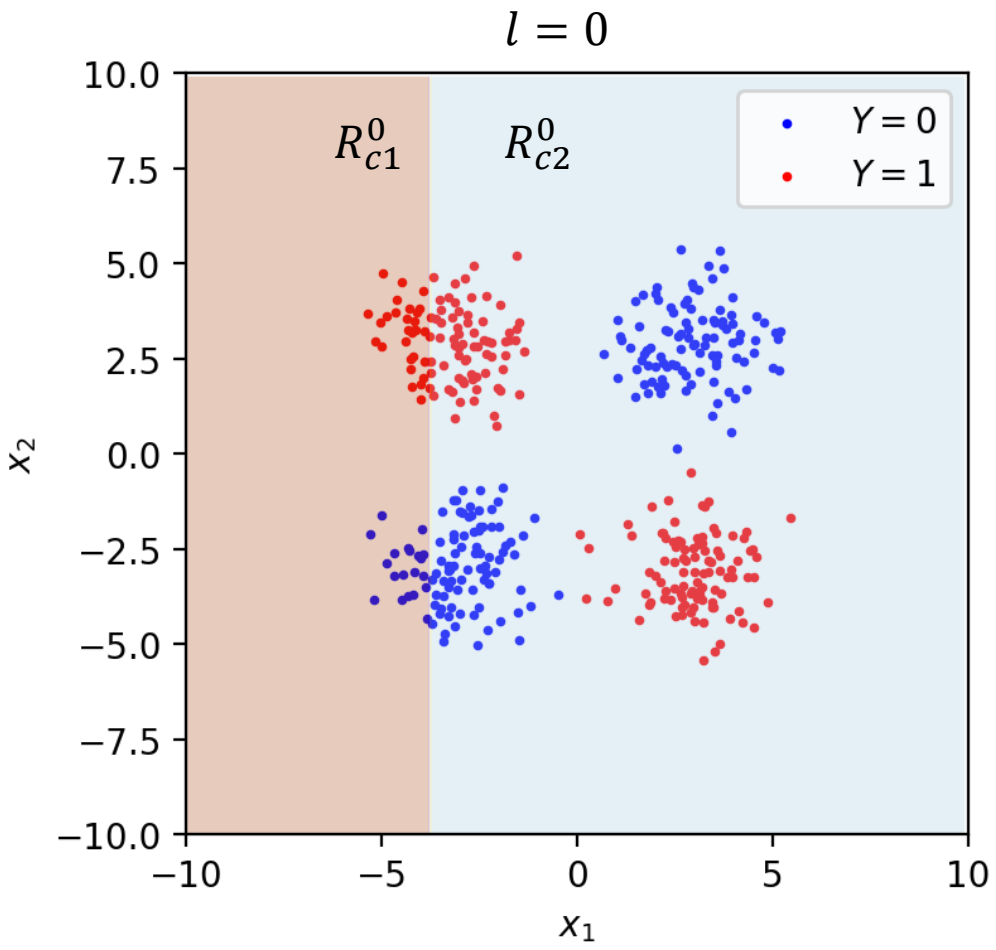
NOTE: деление применяется только к тому подмножеству примеров, которое содержится в «родительской» выборке R_p. Из этого следует, например, что каждый пример окажется в одной из выборок R_{c1} или R_{c2} и только одной из них.

- если на этом этапе деление останавливается, множества примеров в R_{c1}^l и в R_{c2}^l называют «**листьями**» (“**leafs**”)

NOTE: в экстремальном случае построения на этапе обучения дерева «до конца» в каждом листе содержится только один элемент.

- после l-го деления каждая из выборок R_{c1}^l, R_{c2}^l становится «родительской» для очередного ветвления; процедура разделения повторяется для вновь образованных R_p^{l+1}.

- <u>классификация</u>: элементам в «листьях» присваивается (взвешенный) majority-класс (определяется на этапе обучения как класс, имеющий численное преимущество в этом листе)
- <u>регрессия</u>: элементам в «листьях» присваивается (взвешенное) среднее значение, определяемое на этапе обучения



На рисунке: деление выборки всех примеров R_p^0 на R_{c1}^0, R_{c2}^0. Внимание: на рисунке – тестовая выборка, правила деления (номер признака j_l и пороговое значение $t^{(l)}$) были определены во время обучения.

DT в режиме исполнения

Вычисление целевой переменной $\hat{y}$ для объектов в листе

- (!!!) Все объекты листа будут иметь одно и то же значение целевой переменной

Классификация:

$$\widehat{c_R} = \underset{c \in \mathbb{Y}}{\operatorname{argmax}}\, p_c^{(R)}$$

Регрессия:

$$\hat{y}(R) = \frac{1}{\sum_{i=1}^{|R|} w_i} * \sum_{i=1}^{|R|} w_i * y_i^{(train,R)}$$

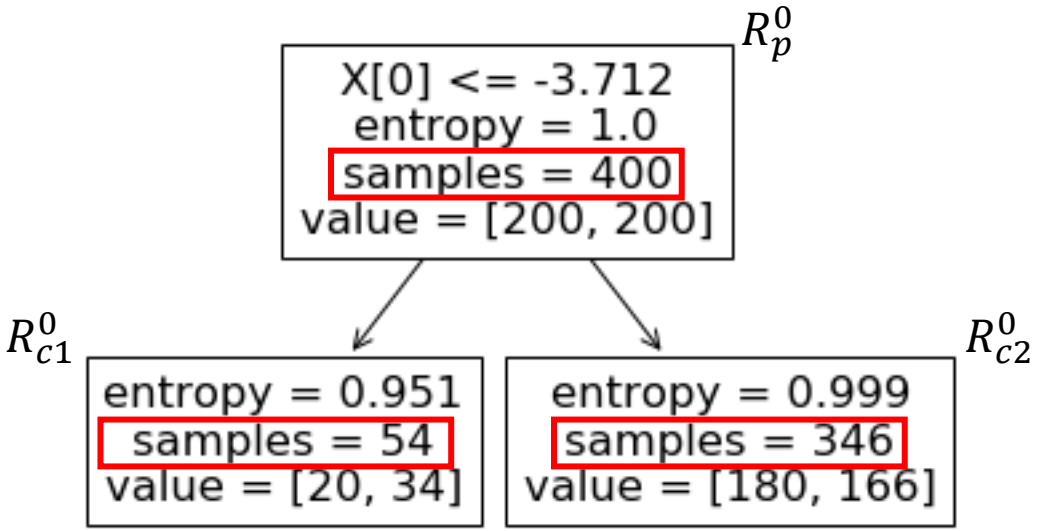
$\boldsymbol{p_c^{(R)}}$ - доля **обучающих** примеров класса $\boldsymbol{c}$ в листе R
(может вычисляться с учетом весов примеров $\{w_i\}$)

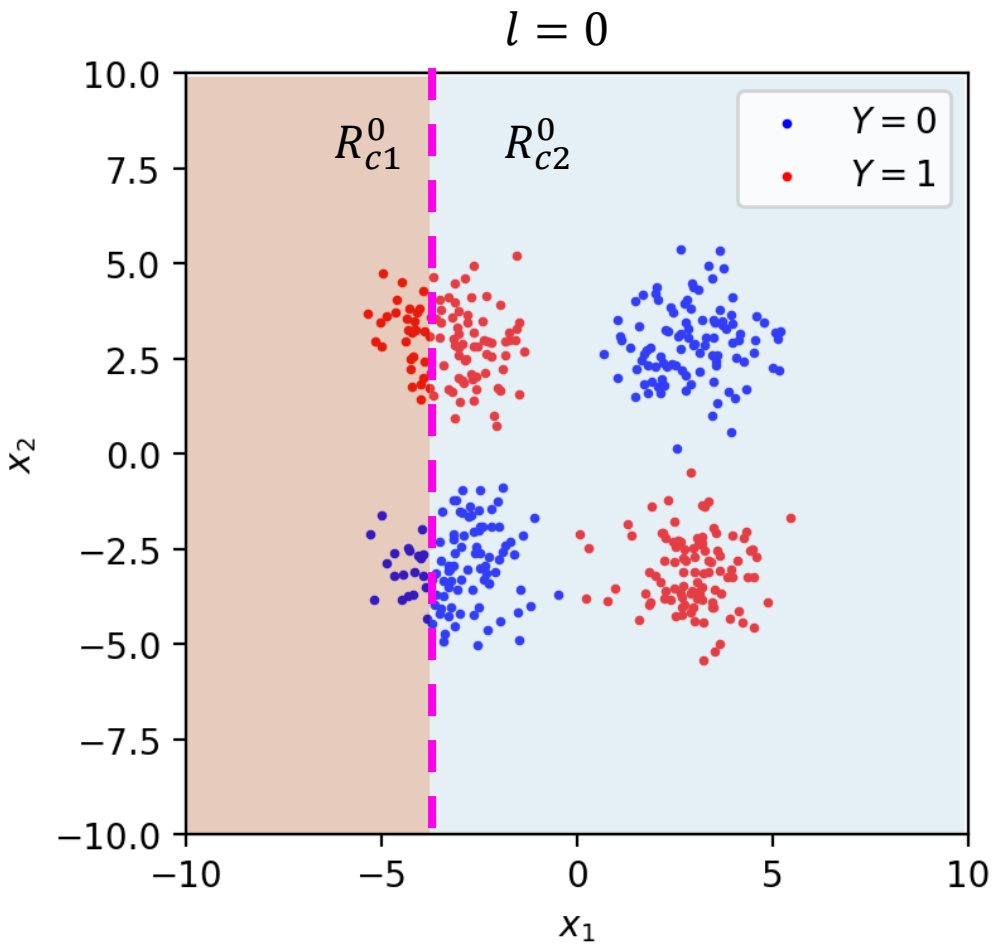
$\boldsymbol{p_c^{(R)}}$ вычисляется на этапе обучения

$$p_c^{(R)} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{|R|} w_i} * \sum_{i=1}^{|R|} w_i * [y_i^{(train,R)} == c]$$

DT в режиме исполнения

Схема ветвления на первом уровне ($l = 0$)

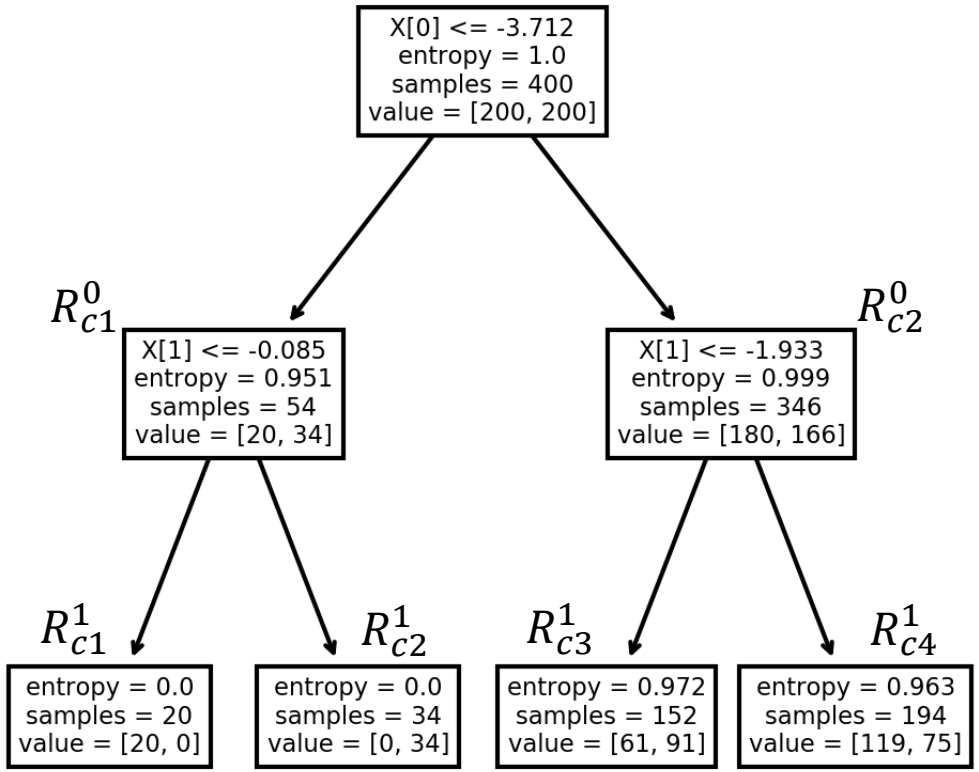


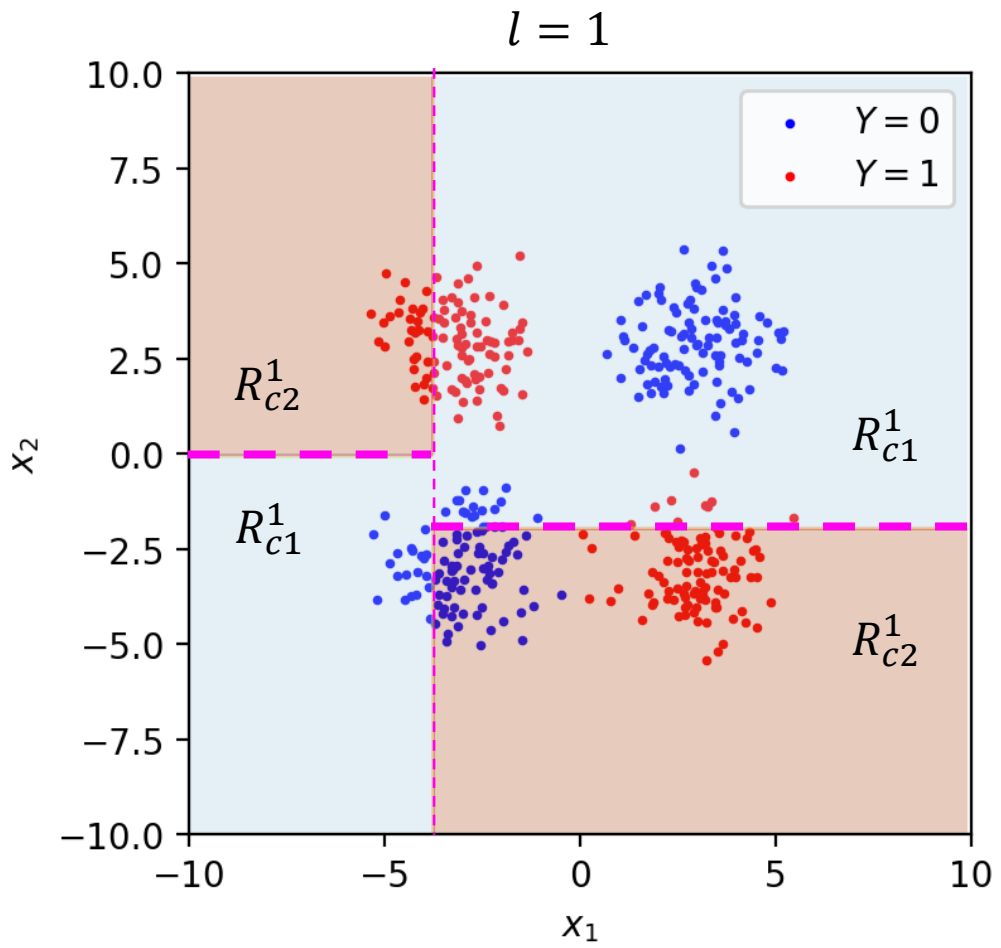


На рисунке: деление выборки всех примеров R_p^0 на R_{c1}^0, R_{c2}^0. Внимание: на рисунке – тестовая выборка, правила деления (номер признака j_l и пороговое значение $t^{(l)}$) были определены во время обучения.

DT в режиме исполнения

Схема ветвления на втором уровне ($l = 1$)

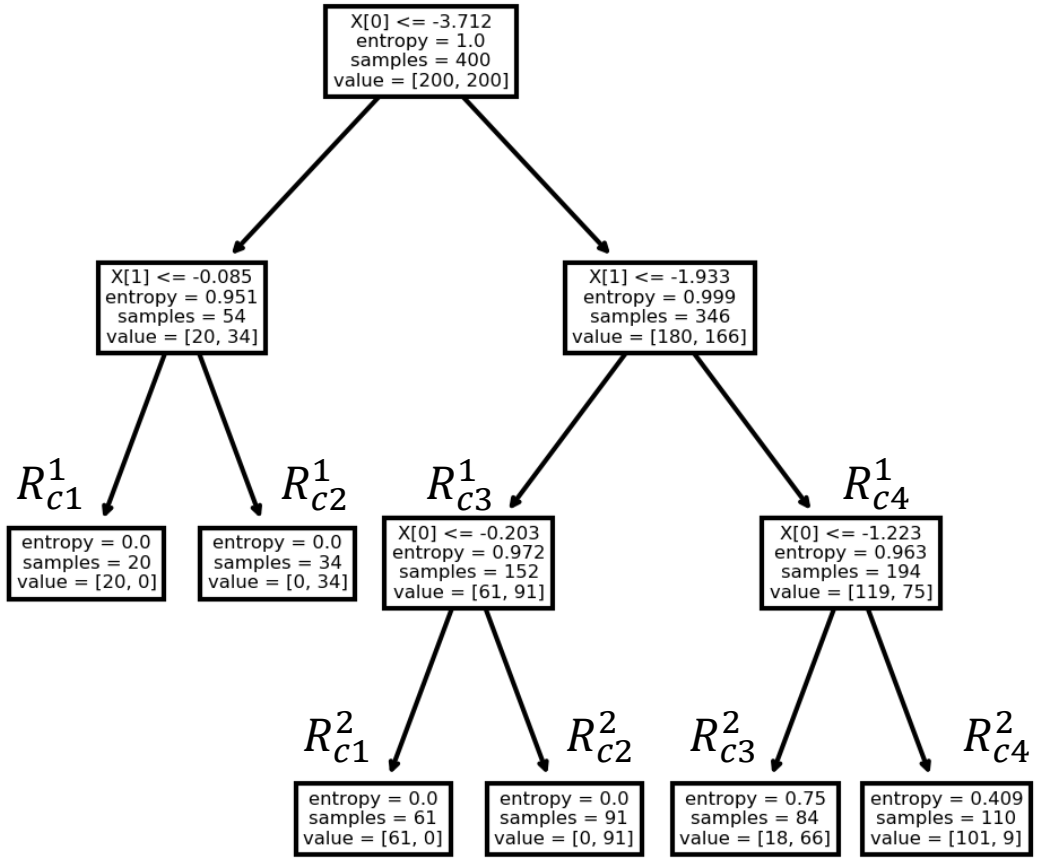


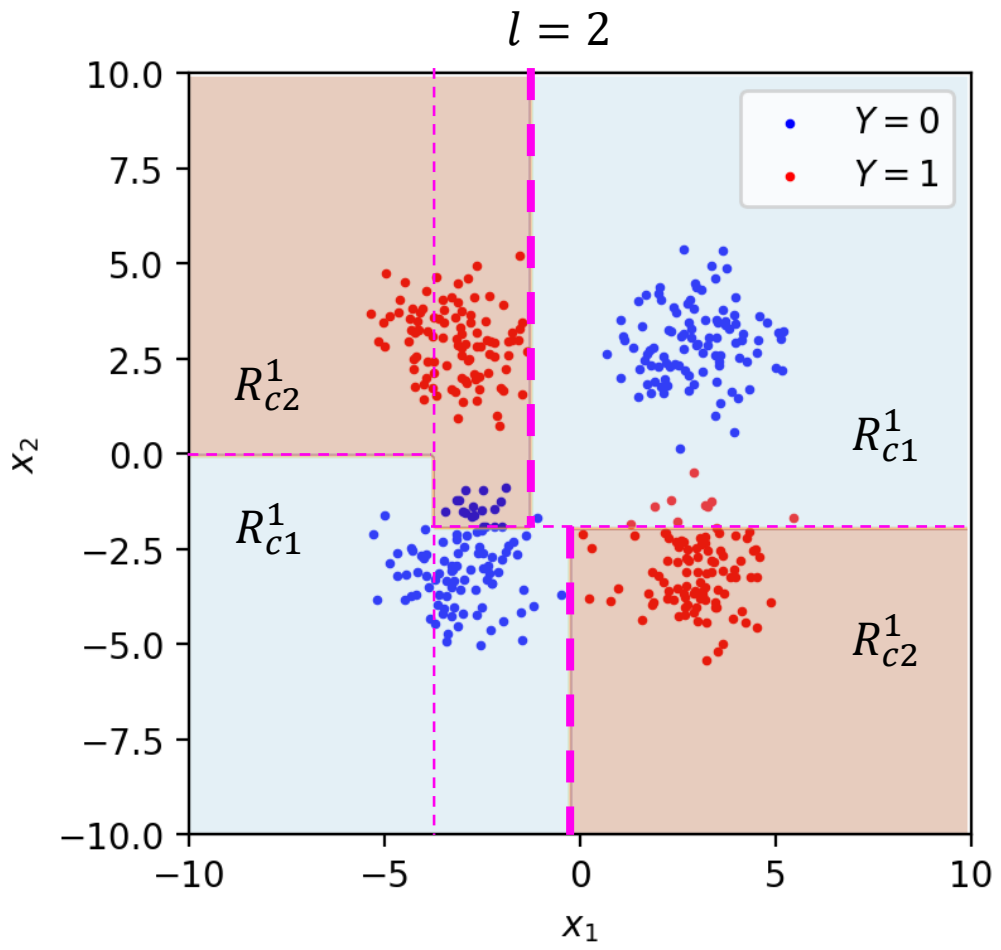


На рисунке: деление выборки всех примеров R^0_p на второй итерации ветвления. Внимание: на рисунке – тестовая выборка, правила деления (номер признака j_l и пороговое значение $t^{(l)}$) были определены во время обучения.

DT в режиме исполнения

Схема ветвления на третьем уровне ($l = 2$)





На рисунке: деление выборки всех примеров R_p^0 на третьей итерации ветвления. Внимание: на рисунке – тестовая выборка, правила деления (номер признака j_l и пороговое значение $t^{(l)}$) были определены во время обучения.

DT в режиме обучения

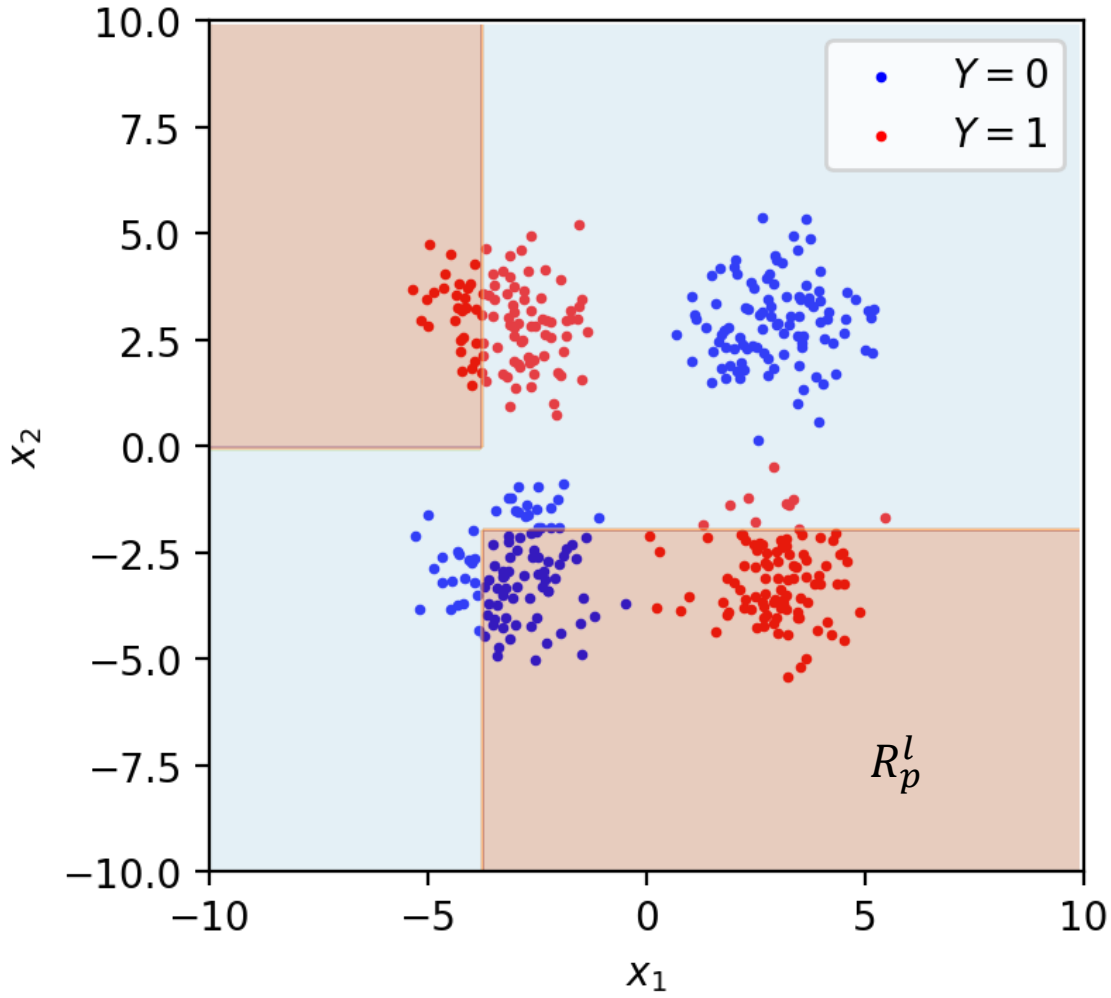
“Обучение деревьев” by Alexander Gavrikov

DT в режиме обучения

На рисунке – результат после l-го ветвления **тренировочной** выборки.

Цель: осуществить деление подвыборки тренировочных примеров R_p^l.

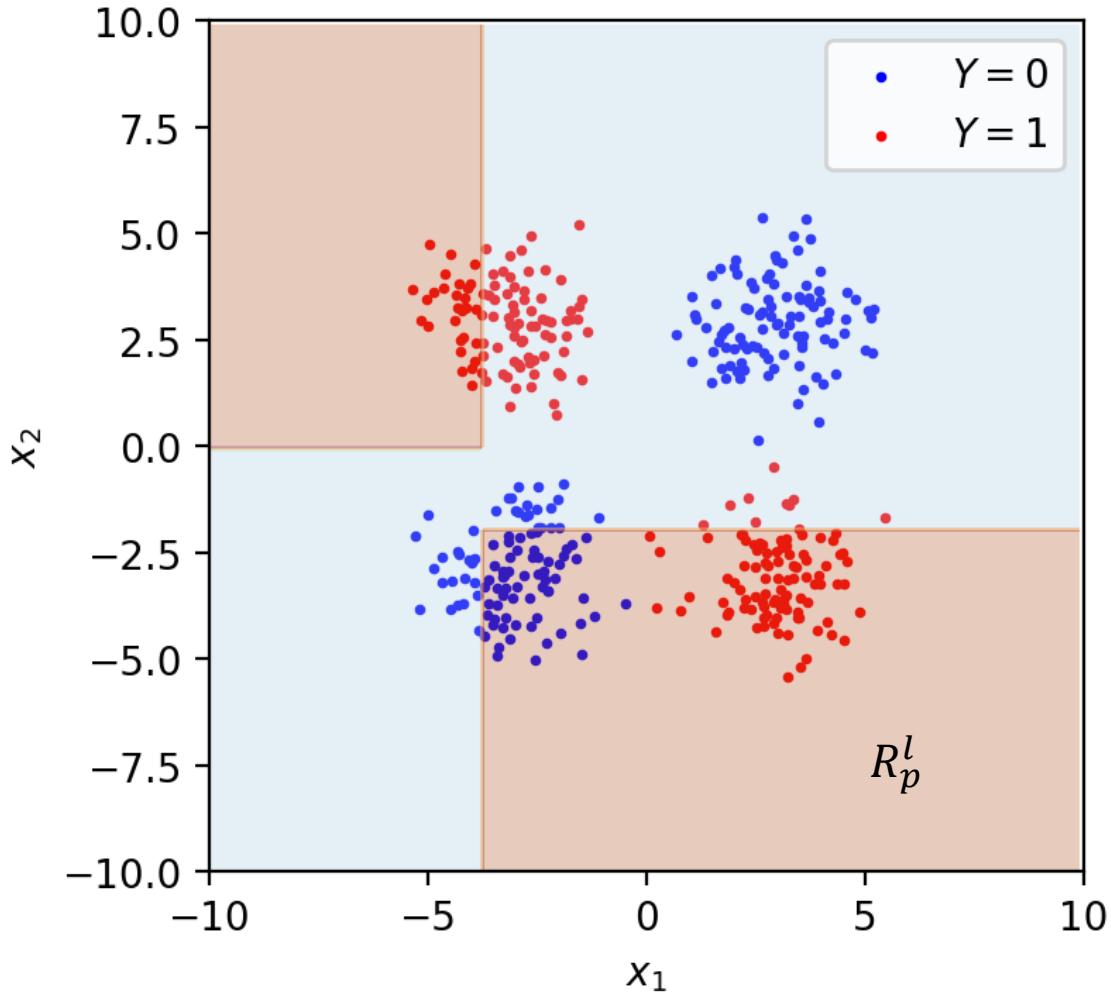
- Если в R_p^l - примеры только одного класса, - нет смысла их делить: в обеих областях после разделения будут присваиваться те же самые метки, что и в R_p^l; в этом случае разделение не производится, в текущей ветке останавливается ветвление.
- Для ветвления $s(j_l, t^{(l)})$ следует выбрать номер признака j_l и пороговое значение $t^{(l)}$, исходя из каких-то соображений. **КАКИХ?**



DT в режиме обучения

На рисунке – результат после l-го ветвления **тренировочной** выборки.
Цель: осуществить деление подвыборки тренировочных примеров R_p^l.

- Для ветвления $\boldsymbol{s(j_l, t^{(l)})}$ следует выбрать **номер признака** $\boldsymbol{j_l}$ и **пороговое значение** $\boldsymbol{t^{(l)}}$, исходя из оптимизации приращения функции потерь. В результате ветвления суммарная функция должна уменьшиться как можно сильнее.



ИДЕЯ функции потерь: это ф-я, которая должна характеризовать качество классификации в листе R. Напомним, что всем примерам, оказавшимся в листе, присваивается одинаковый класс, определяемый голосованием по классам тренировочных примеров в этом листе.

Обозначим: $\boldsymbol{p_c^{(R)}}$ - доля обучающих примеров класса $\boldsymbol{c}$ в листе $\boldsymbol{R}$
Тогда класс, присваиваемый примерам в этом листе на этапе исполнения:

$$\widehat{c_R} = \underset{\mathbb{Y}}{\operatorname{argmax}}\, p_c^{(R)}$$

DT в режиме обучения

ИДЕЯ функции потерь: это ф-я, которая должна характеризовать качество классификации в листе R. Напомним, что всем примерам, оказавшимся в листе, присваивается одинаковый класс, определяемый голосованием по классам тренировочных примеров в этом листе.

Обозначим: $\boldsymbol{p_c^{(R)}}$ - доля обучающих примеров класса $\boldsymbol{c}$ в листе R (может вычисляться с учетом весов примеров $\{w_i\}$)

Тогда класс, присваиваемый примерам в этом листе на этапе исполнения:

$$\widehat{c_R} = \underset{c \in \mathbb{Y}}{\operatorname{argmax}}\, p_c^{(R)}$$

Варианты функции потерь:

- Доля неверно классифицированных обучающих примеров:

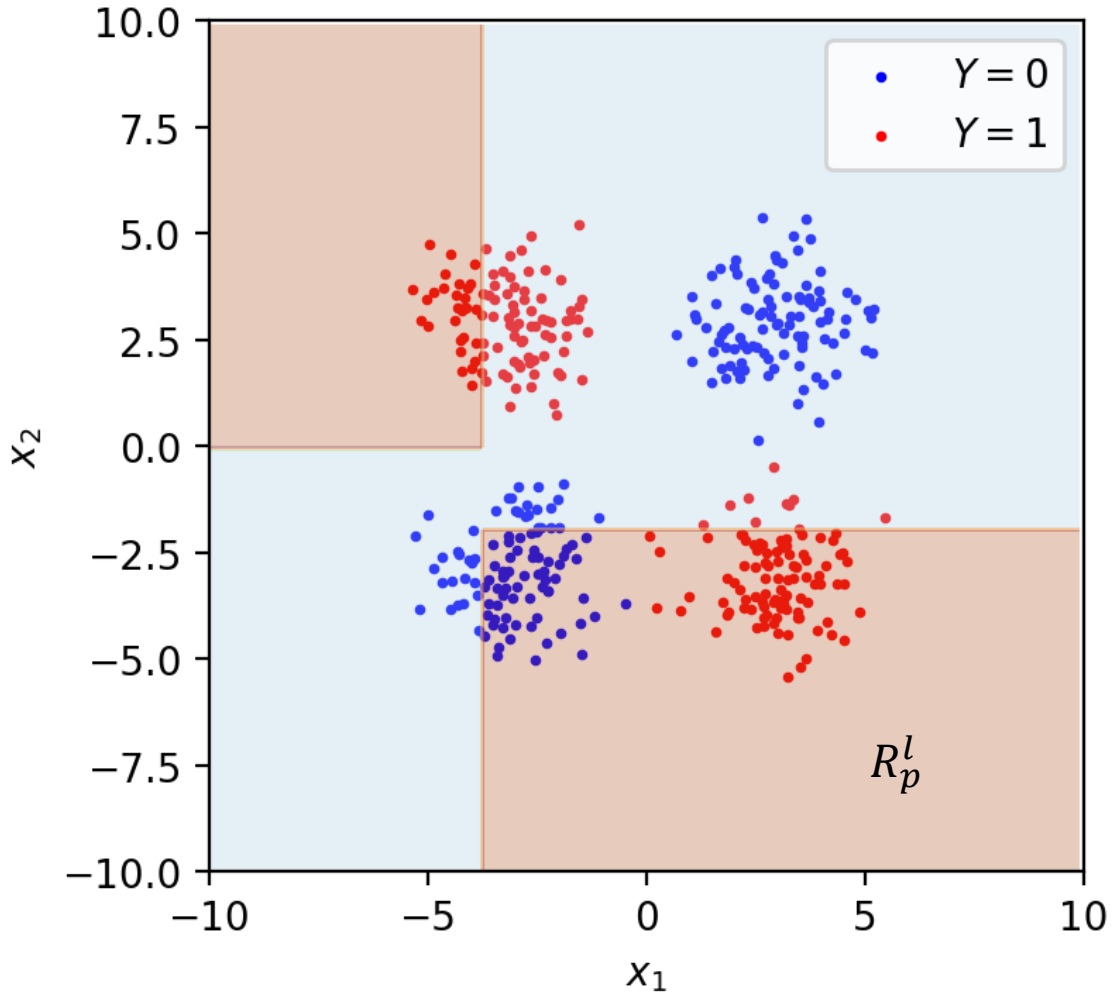
$$\mathcal{L}_{mc} = 1 - \max_{c \in \mathbb{Y}} p_c^{(R)}$$

- Коэффициент Джини (отражает степень непохожести классов в R):

$$\mathcal{L}_{gini} = \sum_{c \in \mathbb{Y}} p_c^{(R)}(1 - p_c^{(R)})$$

- Перекрестная энтропия:

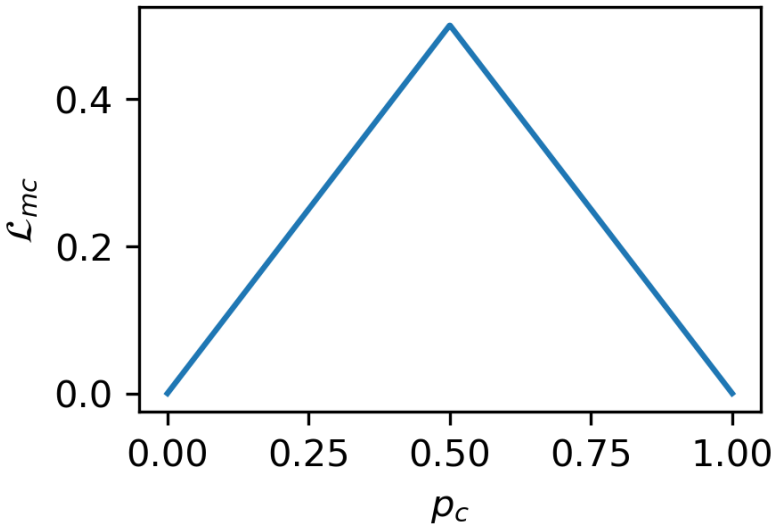
$$\mathcal{L}_{ce} = -\sum_{c \in \mathbb{Y}} p_c^{(R)} \log p_c^{(R)}$$



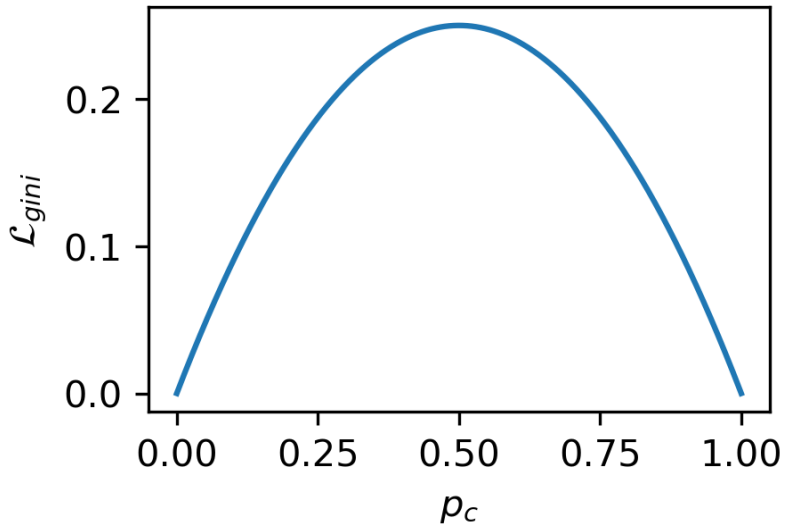
Общее в этих функциях: чем более однородна подвыборка R в смысле классов обучающих примеров, тем меньше значение функции.
Альтернативно: чем больше доля класса, по которому определяется метка для всех примеров из R, тем меньше значение функции.

DT в режиме обучения

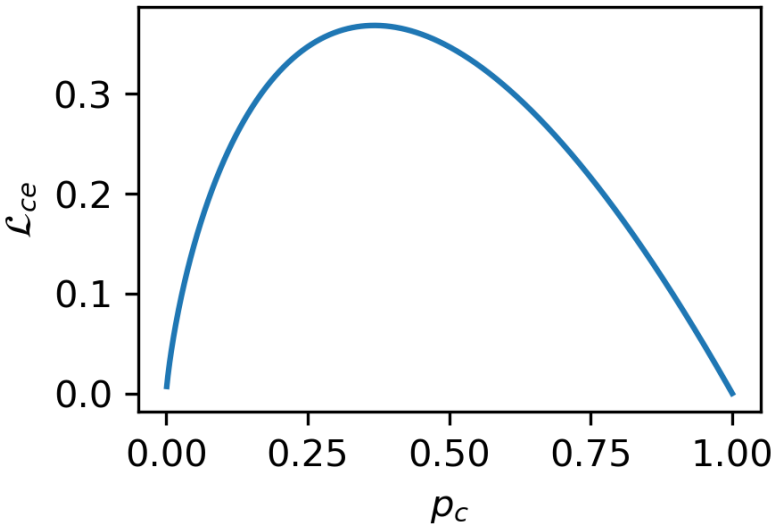
$$\mathcal{L}_{mc} = 1 - \max_{c \in \mathbb{Y}} p_c^{(R)}$$



$$\mathcal{L}_{gini} = \sum_{c \in \mathbb{Y}} p_c^{(R)}(1 - p_c^{(R)})$$



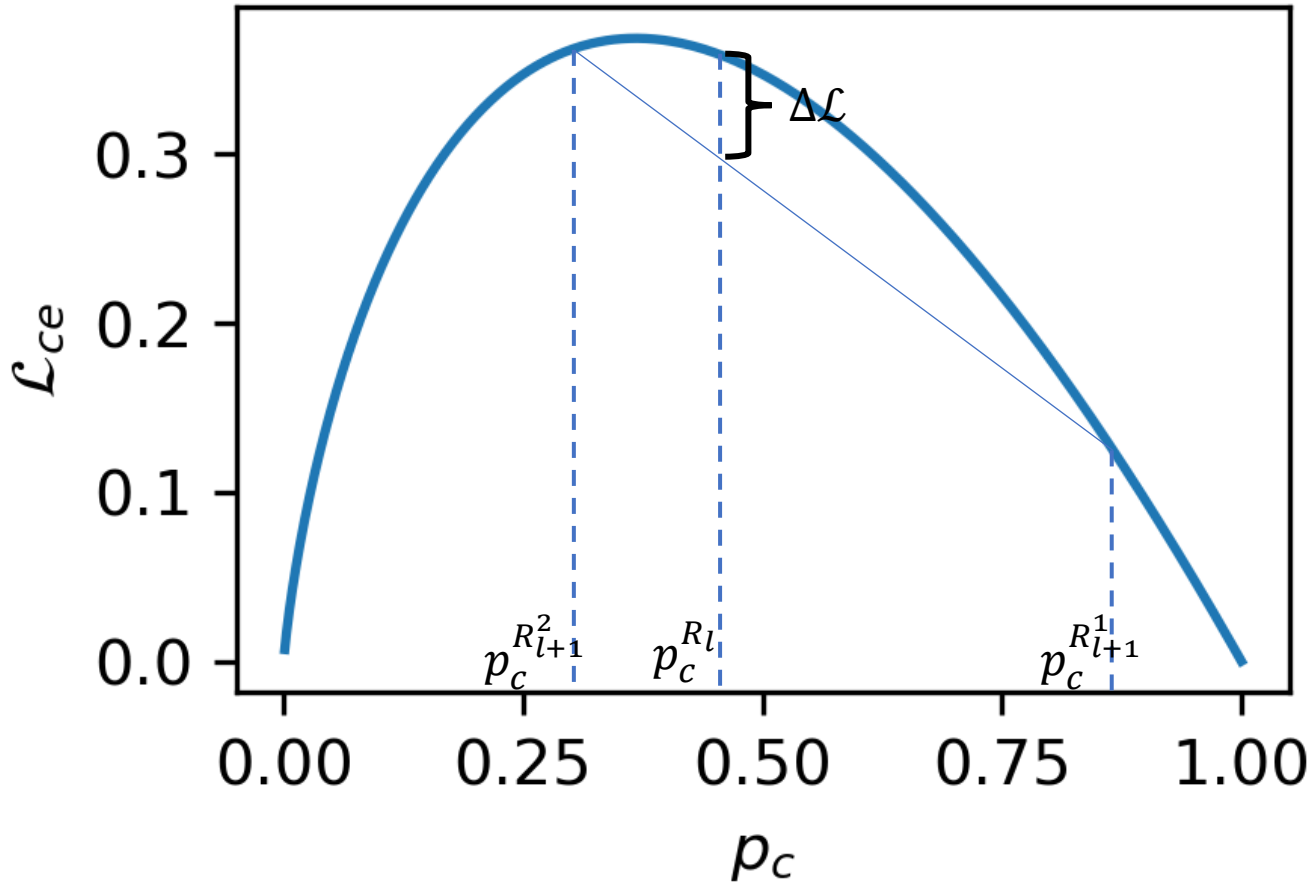
$$\mathcal{L}_{ce} = -\sum_{c \in \mathbb{Y}} p_c^{(R)} \log p_c^{(R)}$$



DT в режиме обучения

Разделение обучающей подвыборки R_p^l приводит к тому, что суммарная функция потерь снижается на величину $\Delta\mathcal{L}$.

$$\mathcal{L}_{ce} = -\sum_{c\in\mathbb{Y}} p_c^{(R)} \log p_c^{(R)}$$

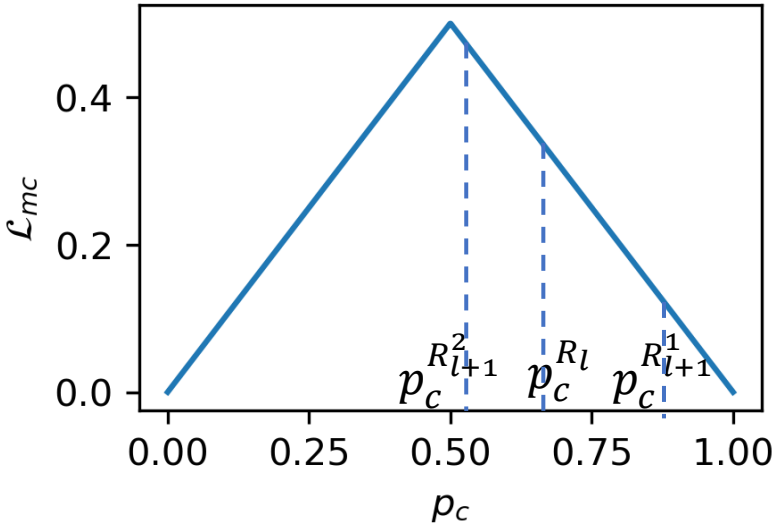


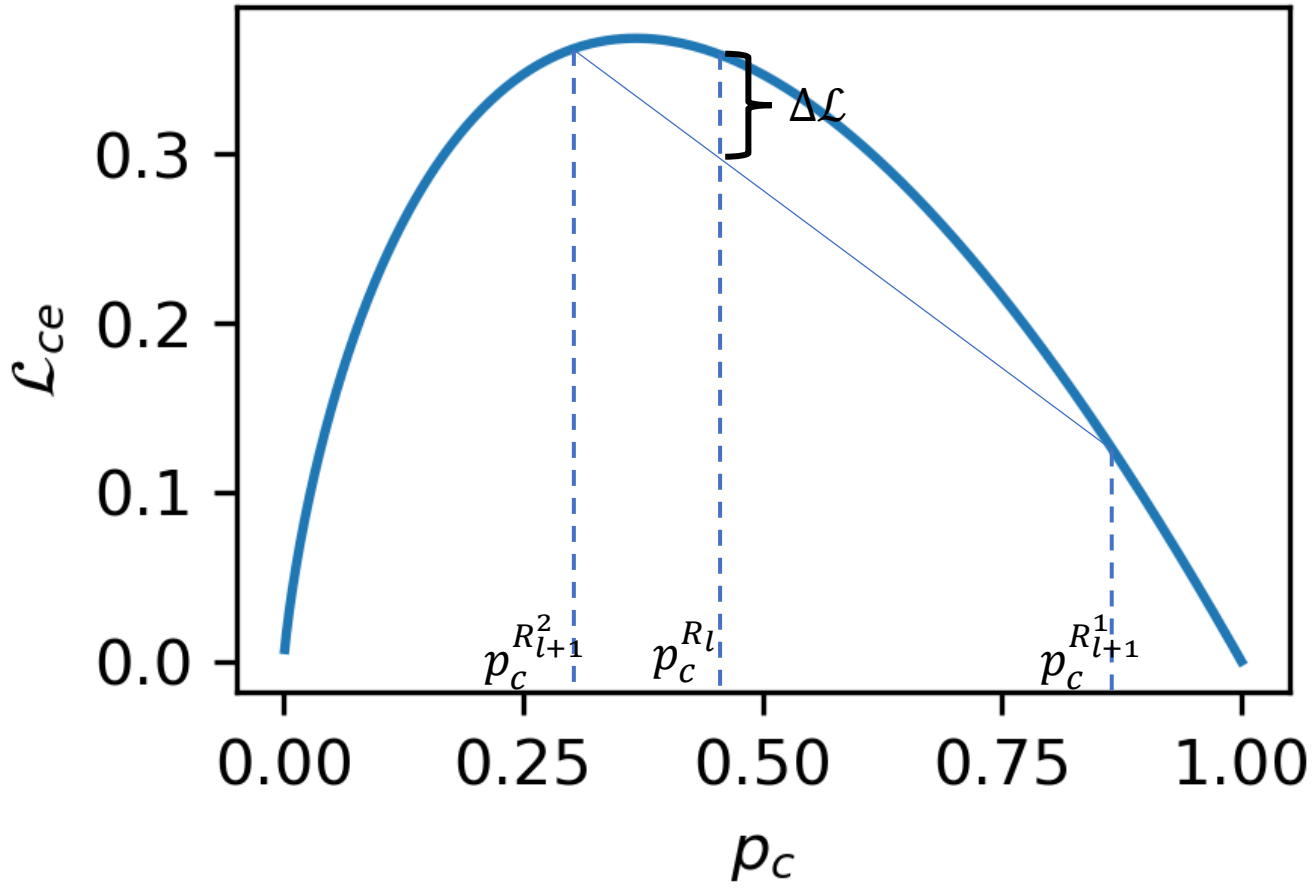
DT в режиме обучения

Разделение обучающей подвыборки R_p^l приводит к тому, что суммарная функция потерь снижается на величину $\Delta\mathcal{L}$.

$$\mathcal{L}_{ce} = -\sum_{c\in\mathbb{Y}} p_c^{(R)} \log p_c^{(R)}$$

Заметим, что в случае функции потерь, характеризующей долю неверно классифицированных примеров, снижение суммарной функции потерь может быть нулевым => $\mathcal{L}_{mc}$ - не лучший вариант функции потерь для настройки деревьев решений.





DT в режиме обучения

На рисунке – результат после l-го ветвления **тренировочной** выборки.
Цель: осуществить деление подвыборки тренировочных примеров R_p^l.

- Для ветвления $\boldsymbol{s(j_{l+1}, t^{(l+1)})}$ следует выбрать **номер признака** $\boldsymbol{j_{l+1}}$ и **пороговое значение** $\boldsymbol{t^{(l+1)}}$, исходя из оптимизации приращения функции потерь. В результате ветвления суммарная функция должна уменьшиться как можно сильнее.

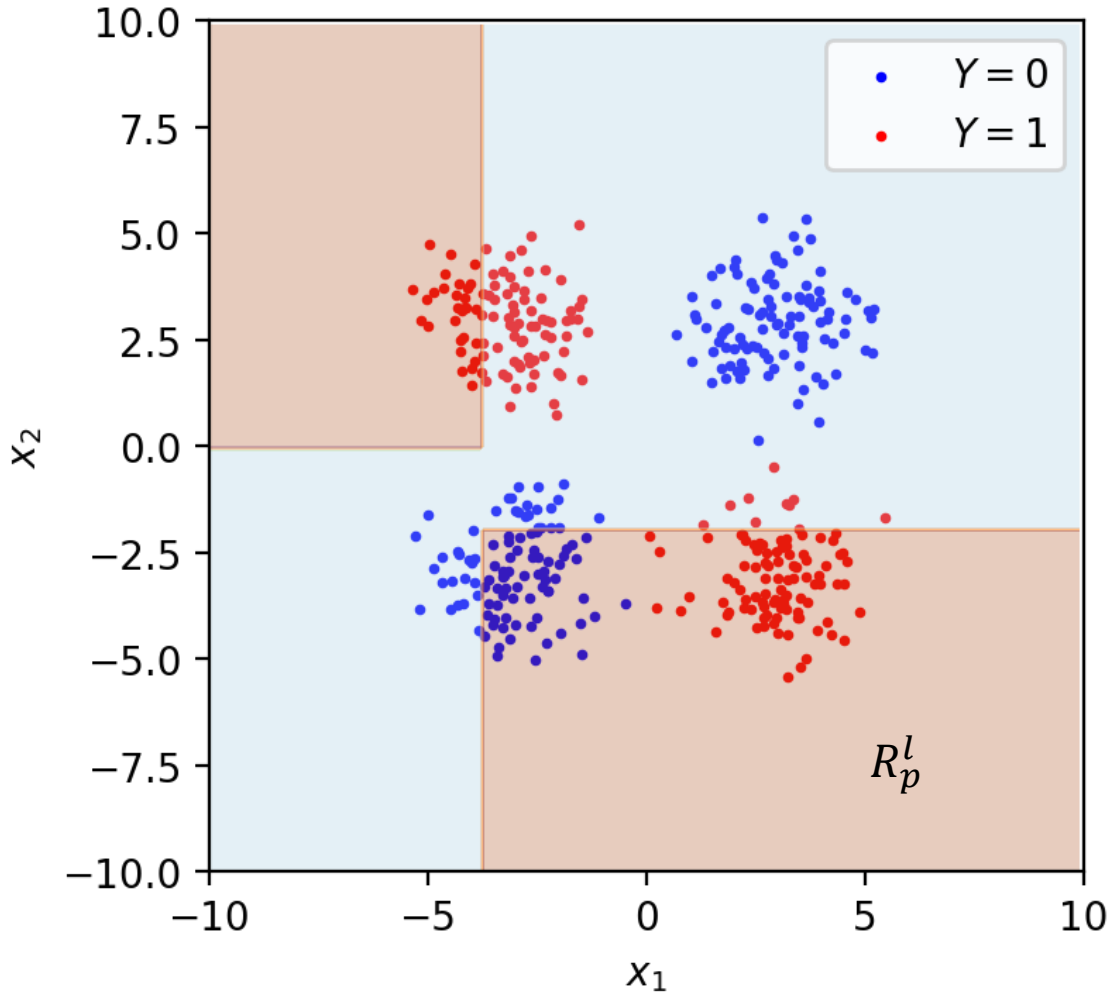
Разделение обучающей подвыборки R_p^l приводит к тому, что суммарная функция потерь снижается на величину $\Delta\mathcal{L}$.

Это означает, что можно искать разделение $l+1$ как решение задачи оптимизации:

$$j_{l+1}, t^{(l+1)} = \underset{\mathrm{j}\in[1\ldots f], t_j\in\mathbb{X}_\mathrm{j}}{\operatorname{argmax}} \Delta\mathcal{L}(R_p^l, R_{c1}^l, R_{c2}^l)$$

- f – количество признаков признакового описания объектов
- пороговое значение t_j ищется среди всех возможных значений j-го признака

это – т.н. «жадный» (greedy) подход: получение локально оптимального решения на каждой итерации.



DT в режиме обучения

Псевдоалгоритм построения дерева решений на основании выборки $R = \{X, Y\}$:

Начальное состояние:

Выборка $R_p^l = R; l = 0$

Выполнять до тех пор, пока не будет удовлетворено условие останова:

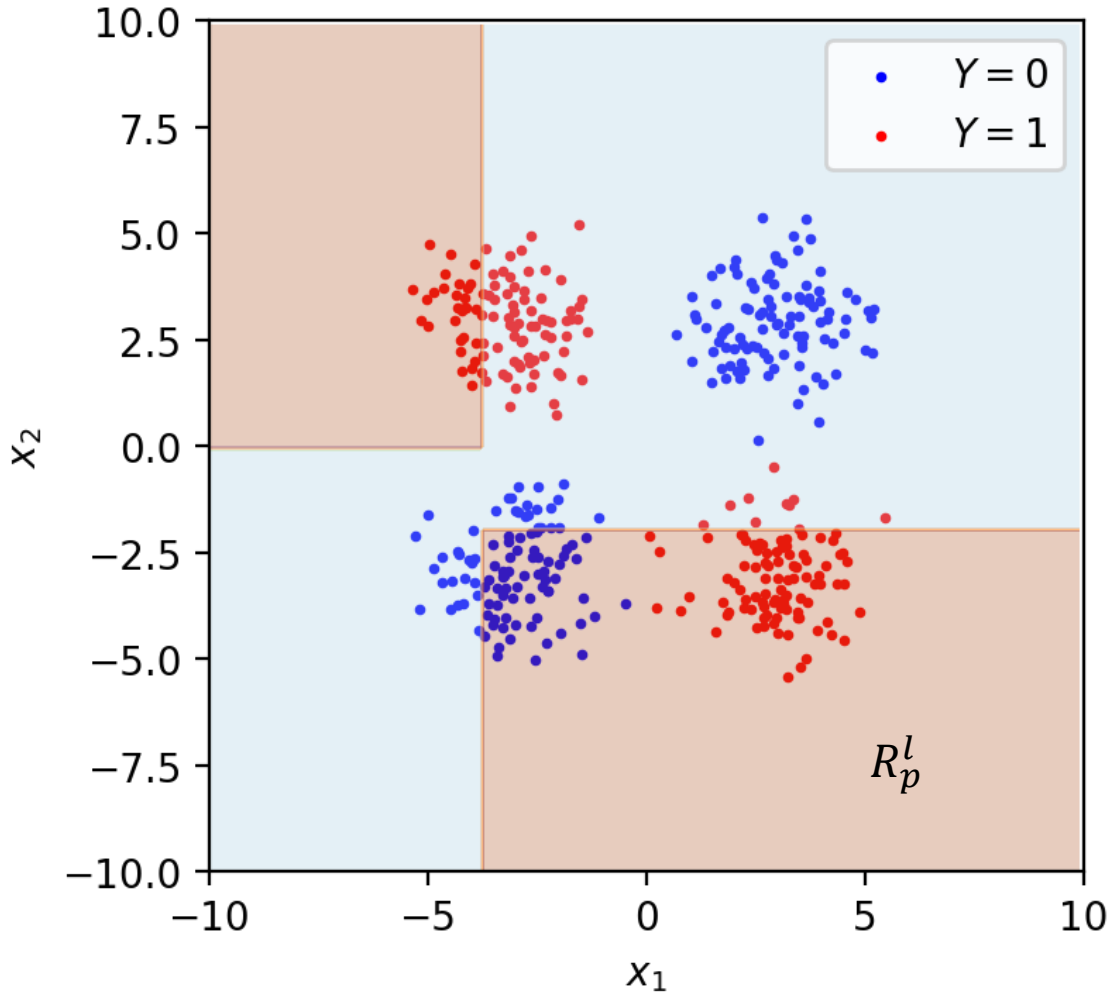
1. метка для присвоения элементам текущего подмножества:

$$\hat{c}\left(R_p^l\right) = \underset{c \in \mathbb{Y}}{\operatorname{argmax}}\, p_c^{(R_p^l)}$$

1. $\mathcal{L} = \mathcal{L}_{ce}\left(R_p^l, \hat{c}\left(R_p^l\right)\right)$
2. если $\mathcal{L} = 0$ – останов в этой ветке дерева (такое может быть, когда в R_p^l - элементы обучающей выборки только одного класса)
3. если $\mathcal{L} > 0$ – поиск признака и порогового значения по этому признаку в рамках оптимизационной задачи:

$$R_{c1}^l = \{X | x^{(j_l)} < t^{(l)}, x \in R_p^l\}$$
$$R_{c2}^l = \{X | x^{(j_l)} \geq t^{(l)}, x \in R_p^l\}$$
$$j_l, t^{(l)} = \underset{j \in [1 \ldots f], t_j \in \mathbb{X}_j}{\operatorname{argmax}} \Delta\mathcal{L}(R_p^l, R_{c1}^l, R_{c2}^l)$$

4. повторять с п.1 для подвыборок R_{c1}^l, R_{c2}^l как «родительских».



Деревья решений в задаче регрессии
Regression trees

Меняются только:

- способ вычисления целевой переменной в листе:

$$\hat{y}(R) = \frac{1}{|R|}\sum_{i=1}^{|R|} y_i$$

- форма функции потерь:

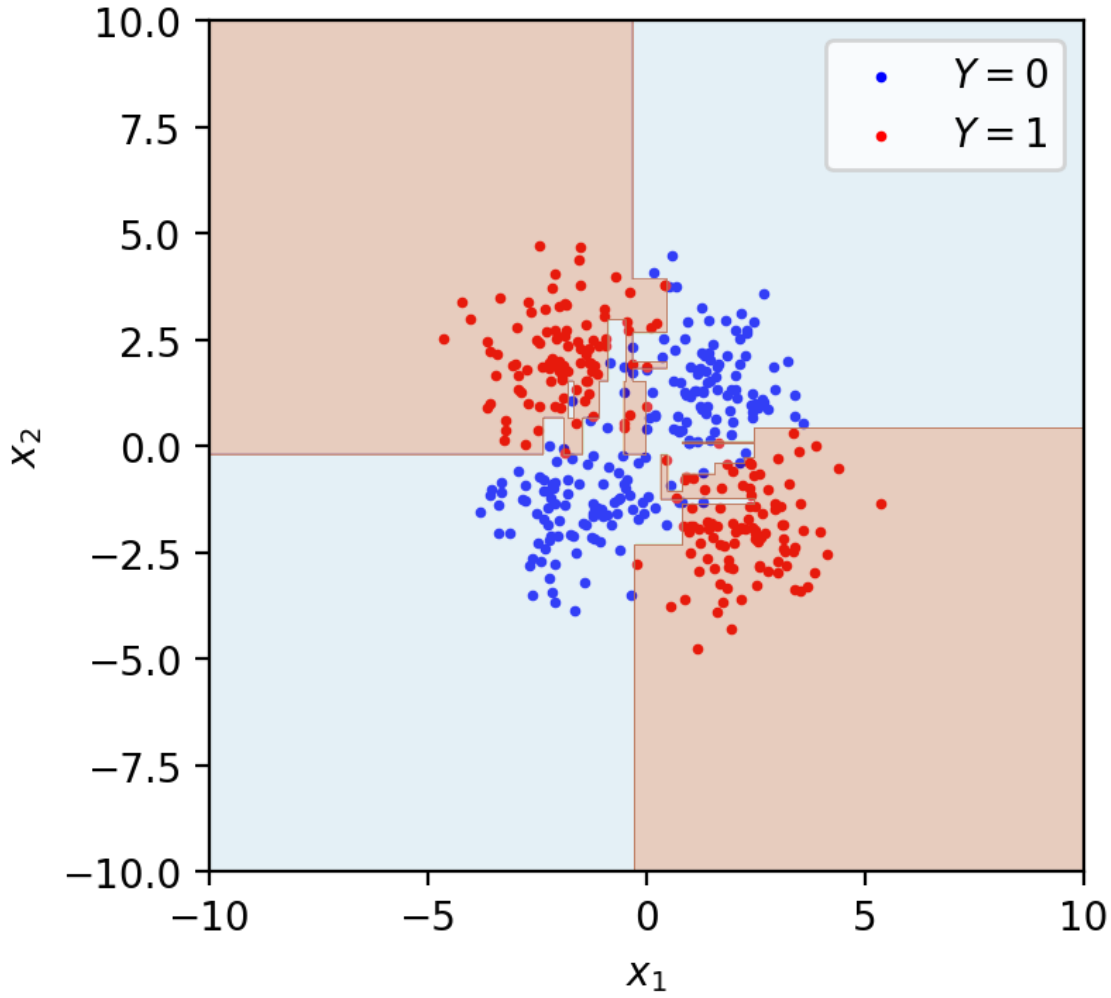
$$\mathcal{L}(R) = MSE(\hat{y}(R), Y_R)$$

Деревья решений

Особенности метода

- алгоритм обучения быстрый и вычислительно недорогой
- в режиме применения метод интерпретируем (можно продемонстрировать последовательность вопросов и соответствующих решений в ветвлениях)
- ДР естественным образом учитывают категориальные признаки: правило ветвления логическое, поэтому для ветвлений можно ставить условие типа совпадения категорий:

$$R_{c1}^{l} = \{X | x^{(j_l)} == t^{(l)}, x \in R_p^l\}$$
$$R_{c2}^{l} = \{X | x^{(j_l)} \neq t^{(l)}, x \in R_p^l\}$$



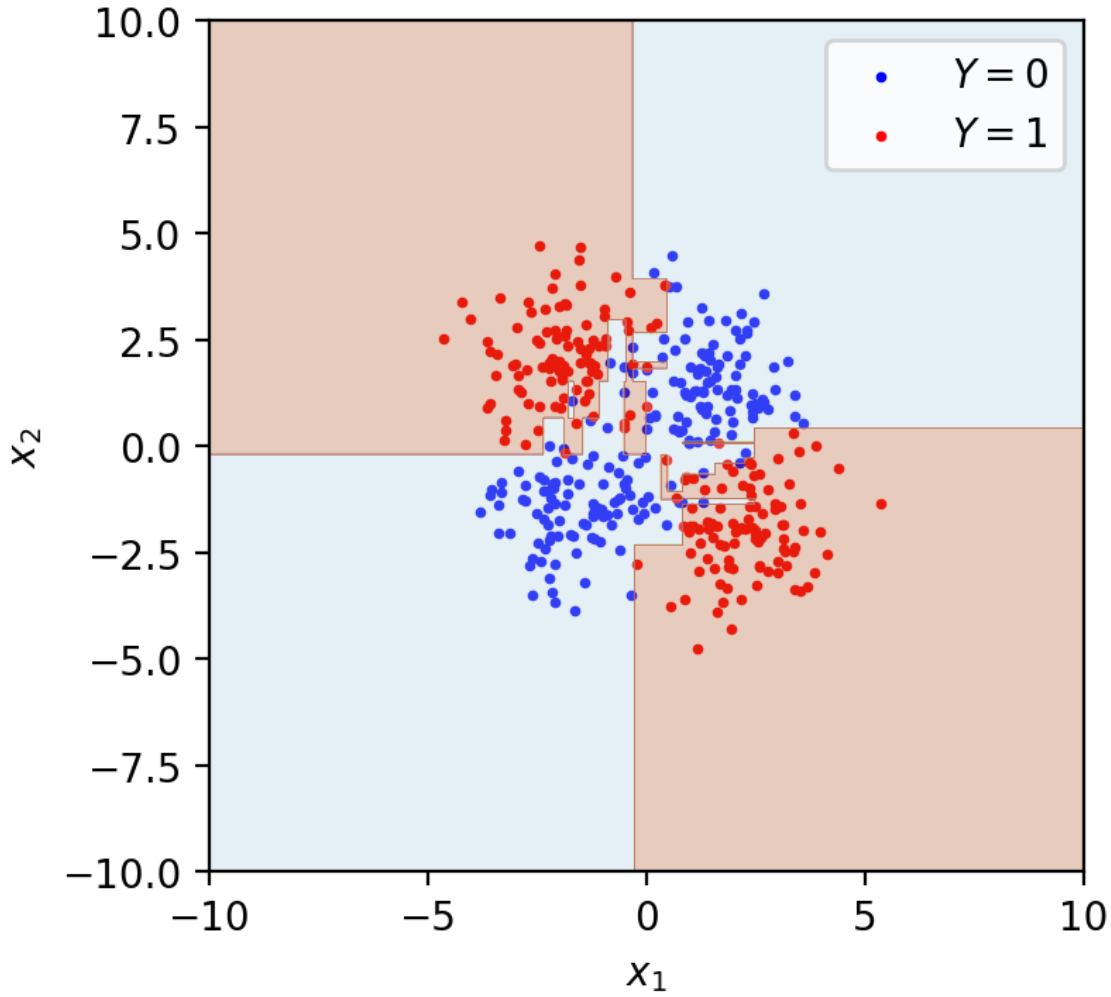
Деревья решений

Особенности метода

- деревья решений **сильно склонны к переобучению**; для борьбы с этим можно применять эвристические способы ограничения выразительной способности во время обучения:
  - ограничивать глубину дерева (max_depth*): если достигнута максимальная глубина, критерий останова ветвления считается выполненным;
  - ограничивать минимальный размер листа (min_samples_leaf*): если количество элементов в очередном листе не превышает этого значения, критерий останова ветвления в этой ветке считается выполненным;
  - ограничивать максимальное количество листьев дерева при его построении (max_leaf_nodes*): если количество листьев достигло определенного предела, обучение всего дерева прекращается;
  - ограничивать минимальное снижение функции потерь при ветвлении (min_impurity_decrease*): если максимально достижимое снижение функции потерь при ветвлении не превышает порогового, критерий останова ветвления в этой ветке считается выполненным

Эти гиперпараметры можно оптимизировать на основании меры качества на валидационной выборке, на выборках OOB в подходе bootstrap или в подходе скользящего контроля.

- альтернативно: ведется полное обучение всего дерева без ограничений, после чего выполняется обрезка (pruning) дерева: оставляются ветвления до определенной глубины (подбирается на основании меры качества на валидационной выборке).



НИКОГДА НЕ ПРИМЕНЯЙТЕ деревья решений как таковые!

* приводятся имена параметров моделей DecisionTreeClassifier и DecisionTreeRegressor пакета scikit-learn