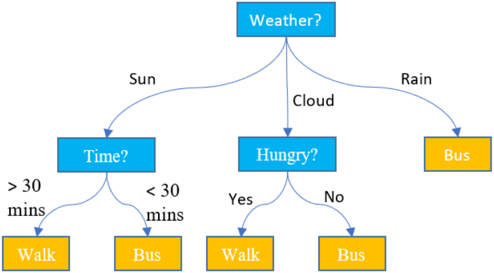
Решающие деревья

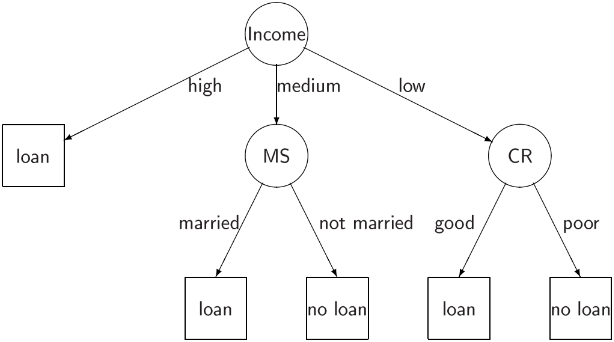
Виктор Китов

v.v.kitov@yandex.ru



Содержание

Пример решающего дерева



Определение решающего дерева

- Прогнозы строятся деревом T.
- Для каждого внутреннего узла t задана функция ветвления $Q_t(x)$.
- Для каждого ребра 1,...K_t ассоциирован набор множеств $S_t(1), ...S_t(K_t)$.
  - $Q_t(x) \in S_t(i) => $ спуститься в узел i.
  - $\bigcup_k S_t(k) = range[Q_t(\cdot)]$
  - $S_t(i) \cap S_t(j) = \emptyset \; \forall i \neq j$

Построение прогноза

- множество вершин разделяется на:
    - внутренние вершины $int(T)$, каждая имеет ≥ 2 потомков
    - терминальные вершины $terminal(T)$, которые не имеют дочерних, а ассоциированы с прогнозами.

Построение прогноза

- множество вершин разделяется на:
    - внутренние вершины $int(T)$, каждая имеет ≥ 2 потомков
    - терминальные вершины $terminal(T)$, которые не имеют дочерних, а ассоциированы с прогнозами.
- Прогноз для дерева T:
    - $t = root(T)$
    - пока t - не терминальная вершина:
        - рассчитать $Q_t(x)$
        - определить j такой, что $Q_t(x) \in S_t(j)$
        - спуститься в j-ую дочернюю вершину: $t = \tilde{t}_j$
    - вернуть прогноз, ассоциированный с листом t.

Спецификация решающего дерева

Для спецификации решающего дерева нужно определить:

- функции ветвления для каждого внутреннего узла $Q_t(x)$
- в каждом внутреннем узле: K_t и $S_t(1), ...S_t(K_t)$
- критерий остановки
  - когда узел становится терминальным при построении дерева
- прогноз для каждого листа дерева.

Содержание

Возможные правила спуска (предикаты)

- $Q_t(x) = x^{i(t)}$, где $S_t(j) = v_j$, $v_1, ...v_K$ - уникальные значения $x^{i(t)}$.
- $S_t(1) = \{x^{i(t)} \le h_t\}$, $S_t(2) = \{x^{i(t)} > h_t\}$
- $S_t(j) = \{h_j < x^{i(t)} \le h_{j+1}\}$ для набора порогов $h_1, h_2, ...h_{K_t+1}$.
- $S_t(1) = \{x : \langle x, v\rangle \le 0\}, \quad S_t(2) = \{x : \langle x, v\rangle > 0\}$
- $S_t(1) = \{x : \|x\| \le h\}, \quad S_t(2) = \{x : \|x\| > h\}$
- и т.д.

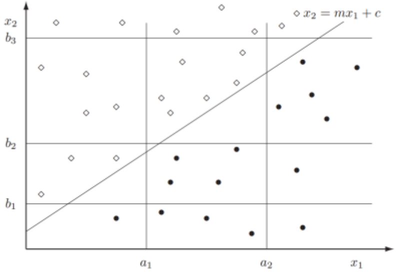
Самые популярные алгоритмы решающих деревьев

- CART (classification and regression trees)
  - реализован в scikit-learn
- C4.5

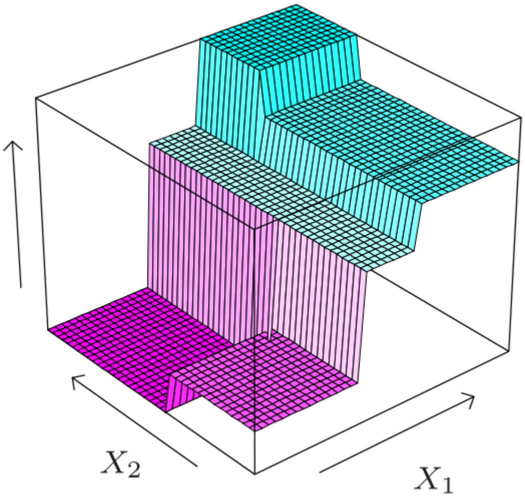
Правила спуска для CART

- рассматривается единственный признак:
$$Q_t(x) = x^{i(t)}$$
- бинарные разбиения:
$$K_t = 2$$
- спуск основан предикатах=сравнении с порогом h_t:
$$S_1 = \{x^{i(t)} \leq h_t\},\ S_2 = \{x^{i(t)} > h_t\}$$
- достаточно выбрать порог из уникальных значений признака $x^{i(t)}$
    - применимо только для вещественных, порядковых и бинарных признаков
    - категориальные признаки: преобразуем в бинарные (one-hot) или вещественные (mean-value кодирование).

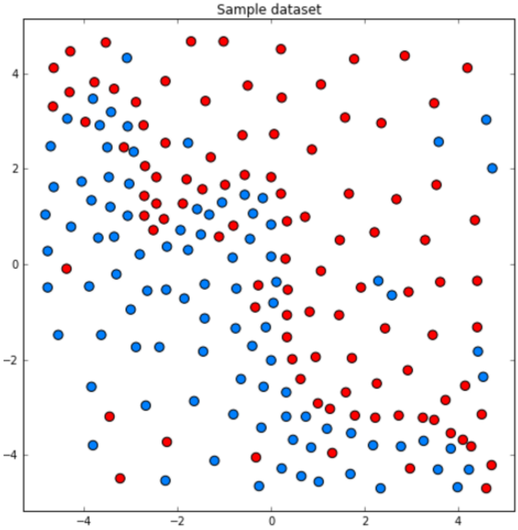
Аппроксимация наклонных границ требует много разбиений



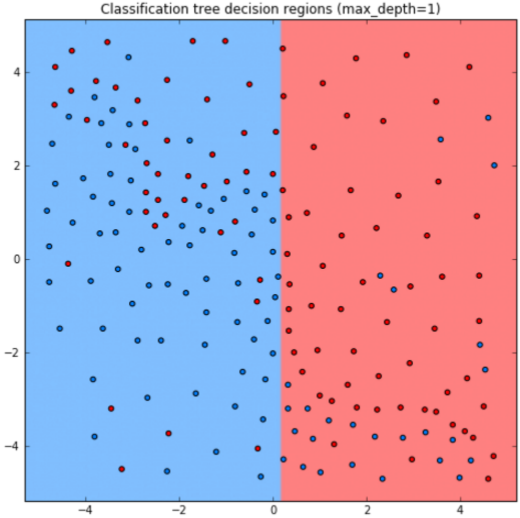
Кусочно-постоянные прогнозы CART



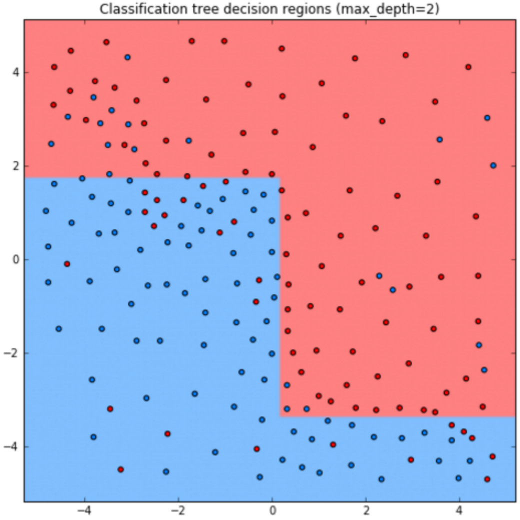
Пример обучающей выборки



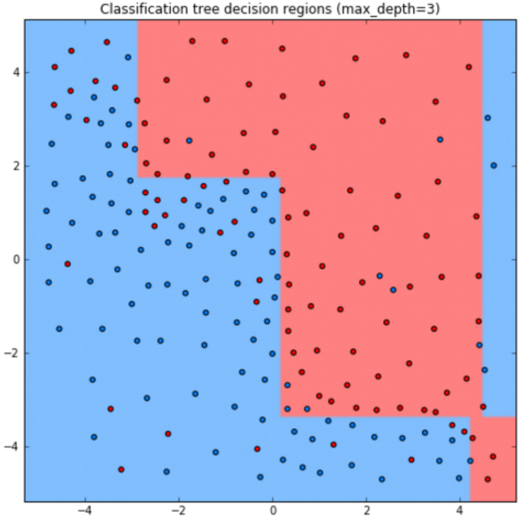
Разбиение на классы (глубина=1)



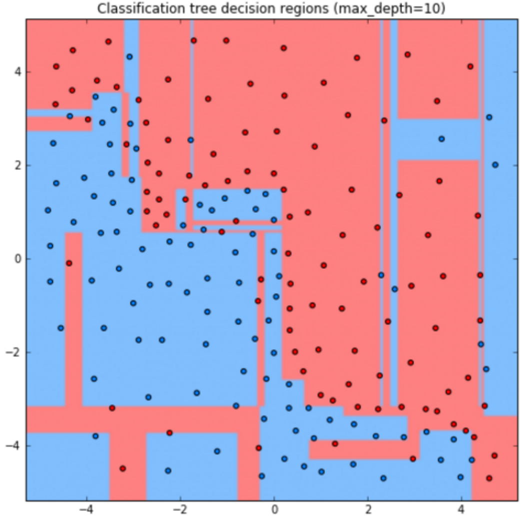
Разбиение на классы (глубина=2)



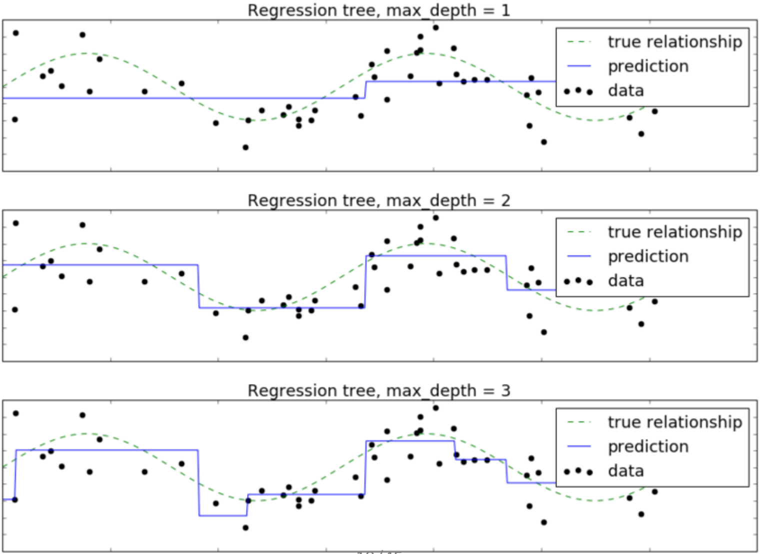
Разбиение на классы (глубина=3)



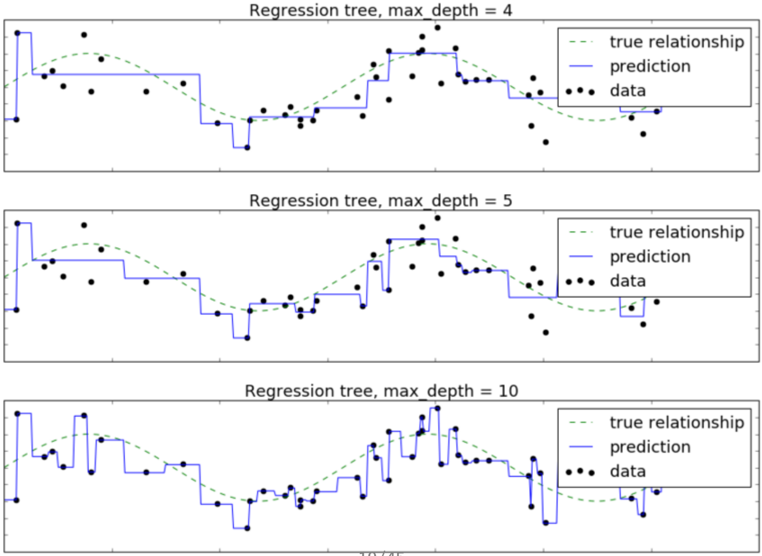
Разбиение на классы (глубина=10)



CART для задачи регрессии (малая глубина)



CART для задачи регрессии (большая глубина)



Анализ критерия ветвления CART

Преимущества:

- простота, интерпретируемость
- вычислительная простота прогнозирования
- работает для признаков разной природы
  - обрабатывает вещественные, упорядоченные и бинарные признаки
  - прогноз инвариантен к монотонным преобразованиям признака для $Q_t(x) = x^{i(t)}$:

$$x^{i(t)} \le h \Leftrightarrow f\left(x^{i(t)}\right) \le f(h) \ \forall \uparrow f(\cdot)$$

Недостатки:

- константные прогнозы в листьях=>дерево не способно экстраполировать закономерность в данных за пределы объектов обучающей выборки
  - можно в листах ассоциировать $\widehat{y} = f_t(x)$, а не константу $\widehat{y}_t$.
- много вершин может потребоваться для описания наклонных границ к осям

Содержание

Определение критерия ветвления

- Функция неопределенности отклика (критерий информативности, impurity function) $\phi(t)$ измеряет степень неоднозначности y для объектов в узле t.

$$\Delta\phi(t) = \phi(t) - \phi(t_L)\frac{N(t_L)}{N(t)} - \phi(t_R)\frac{N(t_R)}{N(t)} \quad \text{качество разбиения } t$$

- Оптимизация CART (регрессия, классификация): выбрать признак x_i и порог h, максимизирующие $\Delta\phi(t)$:

$$\widehat{i}_t, \widehat{h}_t = \arg\max_{i,h} \Delta\phi(t)$$

- Критерий ветвления CART: из узла t перейти в:

$$\begin{cases} \text{левого потомка } t_L, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} \le \widehat{h}_t \\ \text{правого потомка } t_R, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} > \widehat{h}_t \end{cases}$$

Функция информативности

- Регрессия:
  - пусть $I = \{i_1, ... i_K\}$ - множество индексов объектов узла t. Можно определить $\phi(t)$ как

$$\phi(t) = \arg\min_{\widehat{y}} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} (y_i - \widehat{y})^2 = \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} (y_i - mean)^2$$

$$\phi(t) = \arg\min_{\widehat{y}} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} |y_i - \widehat{y}| = \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} |y_i - med|,$$

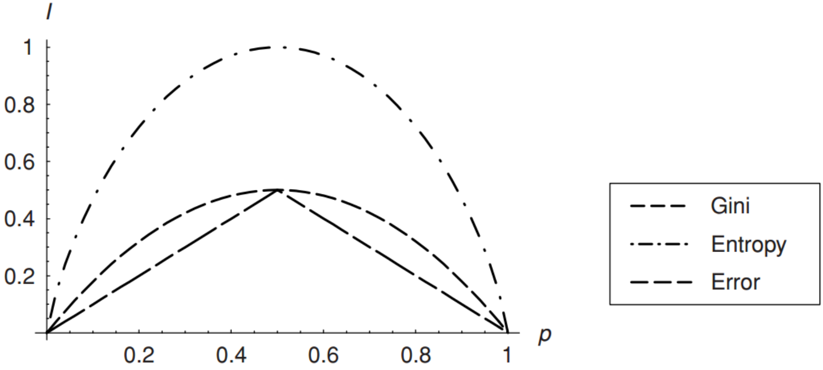
где $mean = \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} y_i$, $med = \text{median}\{y_i\}_{i \in I_t}$

Функции информативности для классификации

- Для классификации: пусть $p_1, ...p_C$ - вероятности классов в узле t.
- Функция информативности $\phi(t) = \phi(p_1, p_2, ...p_C)$ должна удовлетворять:
    - ϕ определена для $p_j \geq 0$ и $\sum_j p_j = 1$.
    - ϕ достигает максимума при $p_j = 1/C,\ k = 1, 2, ...C$.
    - ϕ достигает минимума при $\exists j:\ p_j = 1,\ p_i = 0\ \forall i \neq j$.
    - ϕ симметрична относительно $p_1, p_2, ...p_C$.

Визуализация основных функции информативности

Функции информативности для $y \in \{+1, -1\}$ с $p(y = +1|x) = p$ и $p(y = -1|x) = 1 - p$.



Информативность: классификационная ошибка

- **Классификационная ошибка:** как часто ошибаемся при константном прогнозе?

$$\phi(t) = \min_{\widehat{y}} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \mathbb{I}[y_i \neq \widehat{y}] = \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \mathbb{I}[y_i \neq p^*] = 1 - \widehat{p}_{max}$$

$$\widehat{p}_{max} = \max\left\{\widehat{p}_1, \widehat{p}_2, ..., \widehat{p}_C\right\} - \text{вероятности классов в } t$$

Информативность: критерий Джини

- **Критерий Джини:** оценка Бриера[1]

$$\phi(t) = \min_{p:\sum_c p_c = 1} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \left\| p - p_i^{true} \right\|^2 =$$

$$= \min_{p:\sum_c p_c = 1} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \sum_{c=1}^{C} (p_c - \mathbb{I}[y_i = c])^2 =$$

$$= \sum_{i=1}^{C} \widehat{p}_i (1 - \widehat{p}_i) = 1 - \sum_{i=1}^{C} \widehat{p}_i^2$$

- Это вероятность ошибки при случайном угадывании с вероятностями $p(\widehat{y} = 1) = \widehat{p}_1, ... p(\widehat{y} = C) = \widehat{p}_C$

[1] Докажите финальный вид критерия.

Информативность: энтропия

- **Энтропия:** -логарифм правдоподобия оптимальных вероятностей классов[2]

$$
\begin{aligned}
\phi(t) &= \max_{p:\sum_c p_c=1} \frac{1}{|I_t|}\left(\prod_{i\in I_t}\prod_{c=1}^{C} p_c^{\mathbb{I}[y_i=c]}\right) = \\
&= \max_{p:\sum_c p_c=1} \frac{1}{|I_t|}\left(\sum_{i\in I_t}\sum_{c=1}^{C} \ln p_c^{\mathbb{I}[y_i=c]}\right) = \\
&= \max_{p:\sum_c p_c=1} \frac{1}{|I_t|}\left(\sum_{i\in I_t}\sum_{c=1}^{C} \mathbb{I}[y_i=c]\ln p_c\right) = \\
&= \min_{p:\sum_c p_c=1} -\frac{1}{|I_t|}\left(\sum_{i\in I_t}\sum_{c=1}^{C} \mathbb{I}[y_i=c]\ln p_c\right) = -\sum_{i=1}^{C} \widehat{p}_i \ln \widehat{p}_i
\end{aligned}
$$

[2] Докажите финальный вид критерия.

Комментарии

- Алгоритм $\widehat{i}_t, \widehat{h}_t = \arg\max_{i,h} \Delta\phi(t)$ применяется рекурсивно при построении дерева сверху вниз.
- жадный алгоритм, см. только на 1 шаг вперед (глобально неоптимальный, зато быстрый)
    - можно заглядывать на 2 шага вперед
- Сложность вычисления $\phi(t)$: $O(N)$, $O(N)$ значений порога, D признаков.
- Сложность настройки: $O(N^2 D)$. Как можно её сократить?

Комментарии

- Алгоритм $\widehat{i_t}, \widehat{h_t} = \arg\max_{i,h} \Delta\phi(t)$ применяется рекурсивно при построении дерева сверху вниз.
- жадный алгоритм, см. только на 1 шаг вперед (глобально неоптимальный, зато быстрый)
    - можно заглядывать на 2 шага вперед
- Сложность вычисления $\phi(t)$: $O(N)$, $O(N)$ значений порога, D признаков.
- Сложность настройки: $O(N^2 D)$. Как можно её сократить?
    - экономный пересчет $\phi(t)$
        - при смещении порога 1 объект меняет вершину
    - дискретизация признака
        - квантили: 0.1, 0.2, ... 0.9

Содержание

Оптимальный прогноз в листьях: регрессия

- Определим $I_t = \{i : x_i \in \text{узлу } t\}$
- Регрессия:

$$\widehat{y} = \arg\min_f \sum_{i: x_i \in t} \mathcal{L}\left(f - y_i\right)$$

- Например[3]

$$\mathcal{L}(u) = u^2 : \widehat{y} = \text{mean}_{i: x_i \in t}\{y_i\}$$
$$\mathcal{L}(u) = |u| : \widehat{y} = \text{median}_{i: x_i \in t}\{y_i\}$$

[3] Докажите оптимальность среднего и медианы для соответствующих ф-ций потерь.

Оптимальный прогноз в листьях: классификация

В практических задачах классификации типы ошибок приводят к разным штрафам.

- например, при определении болен пациент или здоров.

Определим матрицу штрафов[4] $\Lambda \in \mathbb{R}^{CxC}$, где
$\lambda_{ij} = \text{cost}\left(\widehat{y} = j | y = i\right)$:

		прогноз		
		$\widehat{y} = 1$	$\cdots$	$\widehat{y} = C$
	$y = 1$	λ_{11}	$\cdots$	λ_{1C}
факт	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
	$y = C$	λ_{C1}	$\cdots$	λ_{CC}

[4] Как эта матрица будет выглядеть в случае единичных потерь за любой тип ошибки?

Оптимальный прогноз в листьях: классификация

В случае общих потерь $\lambda_{ij} = \text{cost}\left(\widehat{y} = j | y = i\right)$

$$\widehat{y} = \arg\min_j \sum_{i \in I_t} \lambda_{y(i),j} = \arg\min_j N_t \sum_{c=1}^{C} p_c \lambda_{cj}$$

В случае $\lambda_{ij} = \lambda \mathbb{I}[i \neq j]$:

$$\widehat{y} = \arg\min_j N_t \sum_{c=1}^{C} p_c \lambda \mathbb{I}[i \neq j] = \arg\min \sum_{c \neq j} p_c$$
$$= \arg\min_j \left(1 - p_j\right) = \arg\max_j p_j$$

Содержание

Критерий остановки

- Сложность модели должна соответствовать сложности данных:
    - слишком глубокие деревья -> переобучение
        - в крайнем случае: 1 лист содержит 1 объект, нет обобщающей способности.
    - слишком мелкие деревья -> недообучение
- Необходимо выбрать оптимальную глубину при построении дерева.
- Подходы к остановке построения:
    - основанные на правилах
    - обрезка деревьев (pruning)

5. Критерий остановки
   - Остановка, основанная на правилах
   - Алгоритм обрезки в CART

Остановка, основанная на правилах

- Остановка, когда критерий больше порога.
- Варианты критерия:
  - глубина дерева
  - #объектов в узле
  - минимальное #объектов в дочерних узлах после разбиения
  - значение информативности $\phi(x)$
  - изменение информативности $\Delta\phi(x)$ после разбиения

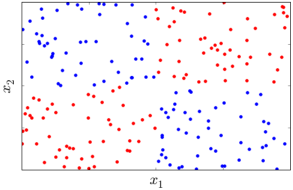
Анализ подхода

Преимущества:

- простота
- интерпретируемость

Недостатки:

- нужно подбирать порог
- изменение информативности $\Delta\phi(x)$ неоптимально: последующие разбиения могут привести к большему $\Delta\phi(x)$:



5. Критерий остановки
   - Остановка, основанная на правилах
   - Алгоритм обрезки в CART

Алгоритм обрезки в CART

- Дерево строится до самого низа.
- Простой подход - обрезать снизу вверх по валидации.
- Алгоритм обрезки CART:
- Определим:
    - T_t поддерево с корнем t
    - $\tilde{T}, \tilde{T}_t$ - множество листьев T и T_t
    - $R(T)$ - мера ошибок дерева T (#ошибок классификации / сумма квадратов ошибок)
    - $R_\alpha(T)$ - со штрафом за сложность ($+\alpha$ за лист).

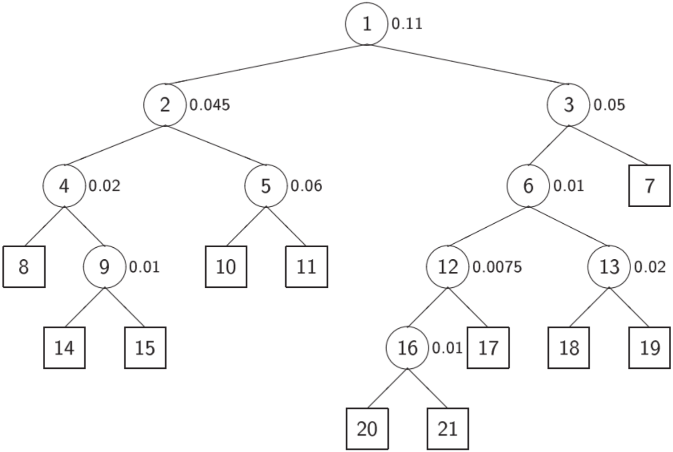
потери за ошибки : $R(T) = \sum_{\tau \in \tilde{T}} R(\tau)$

ошибки и сложность: $R_\alpha(T) = \sum_{\tau \in \tilde{T}} R_\alpha(\tau) = R(T) + \alpha|\tilde{T}|$

- Целесообразность построения T_t вместо t - определим из условия $R_{\alpha_t}(T_t) = R_{\alpha_t}(t)$:

$$R(T_t) + \alpha|\tilde{T}_t| = R(t) + 1 \;\Rightarrow\; \alpha_t = \frac{R(t) - R(T_t)}{|\tilde{T}_t| - 1}$$

Пример вычисления α_t



Алгоритм обрезки

1. Строим дерево T до самого низа (пока в листьях не останутся объекты с одинаковым откликом).
2. Строим систему вложенных поддеревьев $T = T_0 \supset T_1 \supset ... \supset T_{|T|}$ содержащих $|T|$, $|T| - 1$,...1 узлов, повторяя процедуру:
   - заменить T_t с самым малым α_t её корнем t
   - пересчитать α_t для всех предков t.
3. Для деревьев $T_0, T_1, ... T_{|T|}$ рассчитаем их потери на валидации $R(T_0), R(T_1), ... R(T_{|T|})$.
4. Выберем T_i, достигающее минимального штрафа:

$$i = \arg\min_i R(T_i)$$

Обработка пропущенных значений

Если проверяемый признак отсутствует:

- заполнить пропуски:
  - вещественные: средним, медианой
  - категориальные: модой или значением "пропущено"
- Можно предсказывать пропущенные значения по др. признакам (использовано в CART)
- C4.5: спускаемся из t по всем дочерним вершинам $t_1, ...t_S$, потом усредняем прогнозы с весами:

$$N(t_1)/N(t),\ N(t_2)/N(t), ...\ N(t_S)/N(t)$$

Важности признаков в дереве

- Важность признаков в дереве (*clf.feature_importances_*).
  - рассмотрим признак f
  - пусть $T(f)$-множество всех вершин, использующих f в функции ветвления
  - эффективность разбиения в t:

$$\Delta\phi(t) = \phi(t) - \sum_{c \in childen(t)} \frac{N(c)}{N(t)}\phi(c)$$

  - значимость f:

$$\sum_{t \in T(f)} N(t)\Delta\phi(t)$$

- Можно оценивать по разнице качества прогнозов на валидационной выборке (применим для любых методов прогнозирования):
  1. исходной
  2. исходной, где значения j-го признака перемешаны

Свойства решающего дерева CART

- **Преимущества:**
  - вычислительная эффективность прогнозов
  - интерпретируемость (для неглубоких деревьев)
  - встроенный обзор признаков
  - работает для признаков разной природы
    - обрабатывает вещественные, упорядоченные и бинарные признаки
    - прогноз инвариантен к монотонным преобразованиям признака
- **Недостатки:**
  - сравнительно невысокая точность:
    - в силу "жадной настройки" сверху вниз (глобально неоптимальность)
    - ошибки вблизи наклонных границ между классами
    - ранняя остановка по правилу может рано останавливаться
  - отсутствует динамичная подстройка под потоковые данные
  - обобщение за пределы обучающей выборки константой