# Методы машинного обучения. Логические методы классификации

Воронцов Константин Вячеславович www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov вопросы к лектору: voron@forecsys.ru

материалы курса: github.com/MSU-ML-COURSE/ML-COURSE-23-24 орг.вопросы по курсу: ml.cmc@mail.ru

ВМК МГУ • 21 ноября 2023

### Содержание

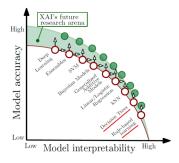
- Решающие деревья
  - Обучение решающих деревьев
  - Усечение дерева (pruning)
  - CART: деревья регрессии и классификации
- ② Индукция правил
  - Понятие закономерности
  - Алгоритмы поиска закономерностей
  - Критерии информативности
- 3 Решающие списки и таблицы
  - Решающие списки
  - Решающие таблицы
  - Бинаризация признаков

# Интерпретируемость (XAI, eXplainable Artificial Intelligence)

Обучающая выборка  $X^\ell=(x_i,y_i)_{i=1}^\ell,\ y_i\in Y$  — метки классов

- Interpretability
  - пассивная интерпретируемость внутреннего строения модели или предсказания на объекте
- Understandability, Transparency

   понятность, самоочевидность,
   прозрачность строения модели



- Explainability активная генерация объяснений на объекте как дополнительных выходных данных модели
- Comprehensibility возможность представить выученные закономерности в виде понятного людям знания

"Do you want an interpretable model, or the one that works?" [Yann LeCun, NIPS'17]

V.Belle, I.Papantonis. Principles and practice of explainable machine learning. 2020

# Определение решающего дерева (Decision Tree)

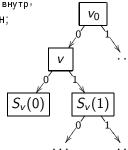
Решающее дерево — алгоритм классификации a(x), задающийся деревом (связным ациклическим графом) с корнем  $v_0 \in V$  и множеством вершин  $V = V_{\text{внутр}} \sqcup V_{\text{лист}}$ ;

 $f_v: X \to D_v$  — дискретный признак,  $\forall v \in V_{\text{внутр}};$   $S_v: D_v \to V$  — множество дочерних вершин;  $y_v \in Y$  — метка класса,  $\forall v \in V_{\text{пист}};$ 

 $v := v_0;$  пока  $(v \in V_{\mathtt{внутр}}): v := S_v(f_v(x));$  вернуть  $a(x) := y_v;$ 

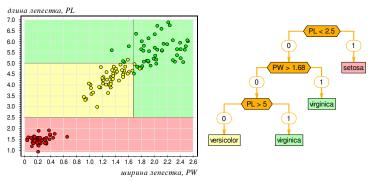
Чаще всего используются бинарные признаки вида  $f_{V}(x) = \lceil f_{i}(x) \geqslant rac{a}{a} 
ceil$ 

Если  $D_{
m v}\equiv\{0,1\}$ , то решающее дерево называется бинарным



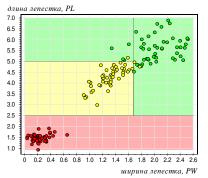
#### Пример решающего дерева

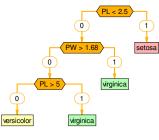
Задача Фишера о классификации цветков ириса на 3 класса, в выборке по 50 объектов каждого класса, 4 признака.



**На графике:** в осях двух самых информативных признаков (из 4) два класса разделились без ошибок, на третьем 3 ошибки.

### Решающее дерево $\rightarrow$ покрывающий набор конъюнкций





setosa virginica

virginica versicolor

$$r_1(x) = [PL \leqslant 2.5]$$

$$r_2(x) = [PL > 2.5] \wedge [PW > 1.68]$$

$$r_3(x) = [PL > 5] \wedge [PW \leqslant 1.68]$$

$$r_4(x) = \lceil PL > 2.5 \rceil \land \lceil PL \leqslant 5 \rceil \land \lceil PW < 1.68 \rceil$$

# Обучение решающего дерева: ID3 (Iterative Dichotomiser)

```
v_0 := \mathsf{TreeGrowing}\; (X^\ell) - \mathsf{ф}ункция рекурсивно вызывает себя
```

Мажоритарное правило: Major  $(U) := \arg\max_{y \in Y} P(y|U)$ .

John Ross Quinlan. Induction of Decision Trees // Machine Learning, 1986.

### Неопределённость распределения по классам в вершине

$$p_{y} = rac{1}{|U|} \sum\limits_{x_{i} \in U} [y_{i} = y]$$
 — частотная оценка вероятности  $P(y|U)$ 

 $\Phi(U)$  — мера неопределённости (impurity) распределения  $p_y$ :

- 1) минимальна и равна нулю, когда  $p_y \in \{0,1\}$ ,
- 2) максимальна, когда  $p_y$  равномерное распределение,
- 3) симметрична: не зависит от перенумерации классов.

$$\Phi(U)$$
 — матожидание убывающей функции потерь  $\mathscr{L}(p_{y})$ :

$$\Phi(U) = \sum_{y \in Y} p_y \mathscr{L}(p_y) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} \mathscr{L}(P(y_i|U)) \rightarrow \min$$

При  $p_y=1$  потеря минимальна и равна нулю,  $\mathcal{L}(1)=0$  Подходящие функции потерь:  $\mathcal{L}(p)=-\log p,\ 1-p,\ 1-p^2$ 

#### Критерий ветвления

Признак f разбивает U на подвыборки  $U_k = \{x \in U \colon f(x) = k\}$ 

Знание признака f меняет неопределённость, так как вместо распределений P(y|U) теперь известны  $P(y|U_k)$ :

$$\Phi(U|f) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} \mathcal{L}(P(y_i|U_{f(x_i)})) =$$

$$= \frac{1}{|U|} \sum_{k} \sum_{x_i \in U_k} \mathcal{L}(P(y_i|U_k)) = \sum_{k} \frac{|U_k|}{|U|} \Phi(U_k)$$

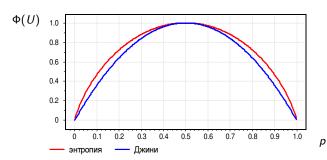
Выигрыш от ветвления в вершине  $\nu$  по признаку f:

$$\begin{aligned} \mathsf{Gain}\left(f,U\right) &= \Phi(U) - \Phi(U|f) = \\ &= \Phi(U) - \sum_{k} \frac{|U_k|}{|U|} \Phi(U_k) \to \max_{f \in F} \end{aligned}$$

# Критерий Джини и энтропийный критерий

Два класса, 
$$Y=\{0,1\}$$
,  $P(y|U)=\left\{egin{array}{l} p, & y=1 \ 1-p, & y=0 \end{array}
ight.$ 

- Если  $\mathscr{L}(p) = -\log_2 p$ , то  $\Phi(U) = -p\log_2 p (1-p)\log_2(1-p)$  энтропия выборки.
- Если  $\mathcal{L}(p) = 2(1-p)$ , то  $\Phi(U) = 4p(1-p)$  неопределённость Джини (Gini impurity).



# Обработка пропущенных значений

#### На стадии обучения:

- ullet  $f(x_i)$  не определено  $\Rightarrow x_i$  исключается из U для  $\mathsf{Gain}\,(f,U)$
- ullet  $oldsymbol{q}_{vk} = rac{|U_k|}{|U|}$  оценка вероятности k-й ветви,  $v \in V_{ exttt{BHYTP}}$
- $m{P}(y|x,v)=rac{1}{|U|}\sum_{x_i\in U}[y_i=y]$  для всех  $v\in V_{ exttt{лист}}$

#### На стадии классификации:

ullet  $a(x) = rg \max_{y \in Y} P(y|x, v_0)$  — наиболее вероятный класс

## если значение $f_{\nu}(x)$ не определено то

средневзвешенное распределение по всем дочерним:

$$P(y|x,v) = \sum_{k \in D_v} q_{vk} P(y|x, S_v(k));$$

#### иначе

$$P(y|x,v) = P(y|x,s)$$
 из дочерней вершины  $s = S_v(f_v(x));$ 

#### Жадная нисходящая стратегия: достоинства и недостатки

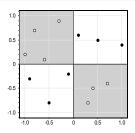
#### Достоинства:

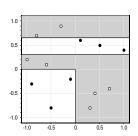
- Интерпретируемость и простота классификации
- ullet Правила  $[f_j(x)<lpha]$  не требуют масштабирования признаков
- Допустимы разнотипные данные и данные с пропусками
- ullet Трудоёмкость линейна по длине выборки  $O(|F|h\ell)$
- Не бывает отказов от классификации

#### Недостатки:

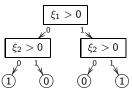
- Жадная стратегия переусложняет структуру дерева, и, как следствие, сильно переобучается
- Фрагментация выборки: чем дальше v от корня, тем меньше статистическая надёжность выбора  $f_v$ ,  $y_v$
- Высокая чувствительность к шуму, к составу выборки, к критерию информативности

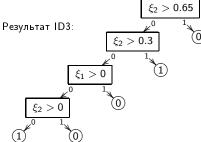
### Жадная стратегия может переусложнять структуру дерева





Оптимальное дерево для задачи ХОР:





# Усечение дерева: стратегии post-pruning

 $X^q$  — независимая контрольная выборка,  $qpprox 0.5\ell$ 

```
для всех v \in V_{\text{внутр}}: X_v^q := \text{подмножество объектов } X^q, дошедших до v; если X_v^q = \varnothing то C создать новый лист V; C0 C1 C2 по минимуму числа ошибок классификации C3 C4 C7 либо сохранить целиком поддерево вершины C8 либо заменить поддерево C9 листом, выбрав класс C9 либо заменить поддерево C9 листом, выбрав класс C9 дочерним C9 либо заменить поддерево C9 листом, выбрав класс C9 дочерево C9 листом C9 листом C9 дочерево C9 дочерево C9 дочерево C9 дочерево C9 листом C9 дочерево C9 дочер
```

#### Стратегии перебора вершин:

- снизу вверх: Minimum Cost Complexity Pruning (MCCP), Reduced Error Pruning (REP), Minimum Error Pruning (MEP)
- сверху вниз: Pessimistic Error Pruning (PEP)

# **CART**: деревья регрессии и классификации

Обобщение на случай *регрессии*:  $Y=\mathbb{R}$ ,  $y_v\in\mathbb{R}$ ,

$$C(a) = \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 \to \min_{a}$$

Пусть U — множество объектов  $x_i$ , дошедших до вершины v Мера неопределённости — среднеквадратичная ошибка

$$\Phi(U) = \min_{y \in Y} \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} (y - y_i)^2$$

Значение  $y_{\nu}$  в терминальной вершине  $\nu$  — МНК-решение:

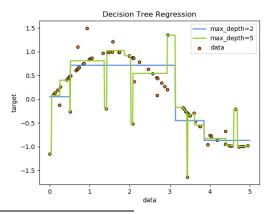
$$y_{\nu} = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} y_i$$

Дерево регрессии a(x) — это кусочно-постоянная функция.

Leo Breiman et al. Classification and regression trees. 1984.

# Пример. Деревья регрессии различной глубины

Чем сложнее дерево (чем больше его глубина), тем выше влияние шумов в данных и выше риск переобучения.



scikit-learn.org/stable/auto\_examples/tree/plot\_tree\_regression.html

# CART: критерий Minimal Cost-Complexity Pruning

Среднеквадратичная ошибка со штрафом за сложность дерева:

$$C_{lpha}(a) = \sum_{i=1}^{\ell} \left(a(x_i) - y_i\right)^2 + lpha |V_{ extsf{nuct}}| 
ightarrow \min_{a}$$

При увеличении lpha дерево последовательно упрощается. Причём последовательность вложенных деревьев единственна.

Из этой последовательности выбирается дерево с минимальной ошибкой на тестовой выборке (Hold-Out).

Для случая классификации используется аналогичная стратегия усечения, с критерием Джини.

### Логические закономерности в задачах классификации

$$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \subset X imes Y$$
 — обучающая выборка,  $y_i = y(x_i)$ .

*Логическая закономерность* (правило, rule) — это предикат  $R: X \to \{0,1\}$ , удовлетворяющий двум требованиям:

- **1** интерпретируемость:
  - 1) R записывается на естественном языке;
  - 2) R зависит от небольшого числа признаков (1-7);
- ② информативность относительно одного из классов  $y \in Y$ :  $p_y(R) = \#\{x_i : R(x_i) = 1 \text{ и } y_i = y\} \to \max;$

$$n_y(R) = \#\{x_i : R(x_i) = 1 \text{ if } y_i \neq y\} \to \min;$$

$$\frac{p_y(R)}{P_y} \gg \frac{n_y(R)}{N_y}$$

$$P_y$$

$$N_y = \ell - P_y$$

Если R(x) = 1, то говорят «R выделяет x» (R covers x).

## Требование интерпретируемости

- 1) R(x) записывается на естественном языке;
- 2) R(x) зависит от небольшого числа признаков (1-7);

### Пример (из области медицины)

**Если** «возраст > 60» и «пациент ранее перенёс инфаркт», то операцию не делать, риск отрицательного исхода 60%

# Пример (из области кредитного скоринга)

Если «в анкете указан домашний телефон» и «зарплата > \$2000» и «сумма кредита < \$5000» то кредит можно выдать, риск дефолта 5%

Замечание. *Риск* — частотная оценка вероятности класса, вычисляемая, как правило, по отложенной контрольной выборке

### Обучение логических классификаторов

Алгоритмов индукции правил (rule induction) очень много!

#### Четыре основных шага их построения:

- 🚺 Выбор семейства правил для поиска закономерностей
- ② Выбор алгоритма порождения правил (rule generation)
- 3 Выбор критерия информативности (rule selection)
- Построение классификатора из правил как из признаков, например, линейного классификатора (weighted voting):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{j=1}^{n_y} w_{yj} R_{yj}(x)$$

Две трактовки понятия «логическая закономерность» R(x):

- высокоинформативный интерпретируемый признак
- одноклассовый классификатор с отказами

## Шаг 1. Часто используемые семейства правил

• Пороговое условие (решающий пень, decision stump):

$$R(x) = \left[ f_j(x) \leqslant rac{oldsymbol{a}_j}{oldsymbol{a}_j} 
ight]$$
 или  $\left[ rac{oldsymbol{a}_j}{oldsymbol{b}_j} \leqslant f_j(x) \leqslant rac{oldsymbol{b}_j}{oldsymbol{b}_j} 
ight].$ 

Конъюнкция пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \left[ a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j \right].$$

• Синдром — выполнение не менее d условий из |J|, (при d=|J| это конъюнкция, при d=1 — дизъюнкция):

$$R(x) = \left[\sum_{i \in J} \left[ a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j \right] \geqslant d \right],$$

Параметры  $J, a_j, b_j, d$  настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации *критерия информативности*.

# Шаг 1. Часто используемые семейства правил

• Полуплоскость — линейная пороговая функция:

$$R(x) = \left[\sum_{j \in J} w_j f_j(x) \geqslant w_0\right]$$

• *Шар* — пороговая функция близости:

$$R(x) = \left[ \rho(x, \mathbf{x_0}) \leqslant \mathbf{w_0} \right]$$

АВО — алгоритмы вычисления оценок [Ю. И. Журавлёв, 1971]:

$$\rho(x, x_0) = \max_{i \in J} \mathbf{w}_i |f_i(x) - f_i(x_0)|$$

SCM — машины покрывающих множеств [М. Marchand, 2001]:

$$\rho(x,x_0) = \sum_{j \in J} \mathbf{w}_j |f_j(x) - f_j(x_0)|^{\gamma}$$

Параметры  $J, w_j, w_0, x_0$  настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации выбранного *критерия информативности*.

# Шаг 2. Мета-эвристики для поиска информативных правил

```
Вход: обучающая выборка X^{\ell};
Выход: множество закономерностей Z;
инициализировать начальное множество правил Z;
повторять
Z' := \text{ множество } \text{ локальных модификаций } \text{ правил из } Z;
удалить слишком похожие правила из Z \cup Z';
Z := \text{ наиболее } \text{ информативные } \text{ правила из } Z \cup Z';
пока правила продолжают улучшаться;
вернуть Z;
```

Частные случаи (см. лекцию про методы отбора признаков):

- стохастический локальный поиск (stochastic local search)
- генетические (эволюционные) алгоритмы
- усечённый поиск в ширину (beam search)
- поиск в глубину (метод ветвей и границ)

# Шаг 2. Локальные модификации правил

Пример. Семейство конъюнкций пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \left[ \frac{a_j}{s} \leqslant f_j(x) \leqslant \frac{b_j}{s} \right].$$

*Локальные модификации* конъюнктивного правила:

- варьирование одного из порогов *а<sub>j</sub>* и *b<sub>j</sub>*
- варьирование обоих порогов  $a_i$ ,  $b_i$  одновременно
- ullet добавление признака  $f_j$  в J с варьированием порогов  $a_j$ ,  $b_j$
- ullet удаление признака  $f_i$  из J

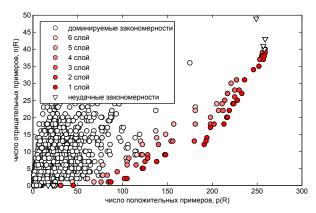
При удалении признака (pruning) информативность обычно оценивается по контрольной выборке (hold-out)

Вообще, для оптимизации множества J подходят те же методы, что и для отбора признаков (feature selection)

### Шаг 3. Двухкритериальный отбор закономерностей

Два критерия:  $p(R) \to \max$ ,  $n(R) \to \min$ 

Парето-фронт — множество неулучшаемых закономерностей (точка неулучшаема, если правее и ниже неё точек нет)



UCI:german

#### Шаг 3. Логические и статистические закономерности

Предикат R(x) — логическая закономерность класса  $y \in Y$ :

$$\mathsf{Precision} = \frac{p_y(R)}{p_y(R) + n_y(R)} \geqslant \pi_0 \qquad \mathsf{Recall} = \frac{p_y(R)}{P_y} \geqslant \rho_0$$

Если  $n_y(R)=0$ , то R- непротиворечивая закономерность

Предикат R(x) — статистическая закономерность класса  $y \in Y$ :

$$\mathsf{IStat}\big(p_y(R), n_y(R)\big) \geqslant \sigma_0$$

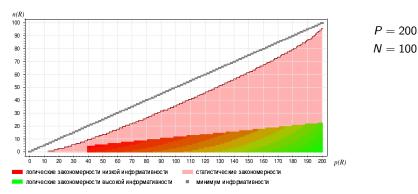
IStat — минус-log вероятности реализации (p, n) при условии нулевой гипотезы, что y(x) и R(x) — независимые случайные величины (точный тест Фишера, Fisher's Exact Test):

$$\mathsf{IStat}(p,n) = -rac{1}{\ell} \log_2 rac{C_p^p C_N^n}{C_{p+N}^{p+n}} \ o \ \mathsf{max},$$

где 
$$P=\#\{x_i\colon y_i{=}y\},\ \ N=\#\{x_i\colon y_i{\neq}y\},\ \ C_N^n=\frac{N!}{n!(N-n)!}$$

# Шаг 3. Критерии поиска закономерностей в плоскости (p, n)

Логические закономерности: Precision  $\geqslant 0.9$ , Recall  $\geqslant 0.2$  Статистические закономерности: IStat  $\geqslant 3$ 



- статистический критерий удобнее для поиска правил
- логический критерий для финального отбора правил

# <u>Шаг 3. Зоо</u>парк критериев информативности

#### Очевидные, но не вполне адекватные критерии:

- $I(p, n) = \frac{p}{p+n} \to \max$  (precision)
- $I(p, n) = p/P \rightarrow \max$  (recall)
- $I(p, n) = p/P n/N \rightarrow \max$  (relative accuracy)

#### Адекватные, но не очевидные критерии:

• энтропийный критерий прироста информации:

$$\mathsf{IGain}(p,n) = hig(rac{P}{\ell}ig) - rac{p+n}{\ell} hig(rac{p}{p+n}ig) - rac{\ell-p-n}{\ell} hig(rac{P-p}{\ell-p-n}ig) o \mathsf{max}$$
 где  $h(q) = -q\log_2 q - (1-q)\log_2 (1-q)$ 

- критерий Джини (Gini impurity):  $\mathsf{IGain}(p,n)$  при h(q) = 4q(1-q)
- критерий бустинга и его нормированный вариант:  $\sqrt{p} - \sqrt{n} \rightarrow \max, \qquad \sqrt{p/P} - \sqrt{n/N} \rightarrow \max$

J. Fürnkranz, P. Flach. ROC'n'rule learning – towards a better understanding of covering algorithms // Machine Learning, 2005.

### Шаг 3. Нетривиальность проблемы свёртки двух критериев

**Пример:** в каждой паре правил первое гораздо лучше второго, однако простые эвристики не различают их по качеству (при  $P=200,\ N=100$ ).

| р   | n  | p-n | p-5n | $\frac{p}{P} - \frac{n}{N}$ | $\frac{p}{n+1}$ | $IStat{\cdot}\ell$ | $IGain{\cdot}\ell$ | $\sqrt{p}$ - $\sqrt{n}$ |
|-----|----|-----|------|-----------------------------|-----------------|--------------------|--------------------|-------------------------|
| 50  | 0  | 50  | 50   | 0.25                        | 50              | 22.65              | 23.70              | 7.07                    |
| 100 | 50 | 50  | -150 | 0                           | 1.96            | 2.33               | 1.98               | 2.93                    |
| 50  | 9  | 41  | 5    | 0.16                        | 5               | 7.87               | 7.94               | 4.07                    |
| 5   | 0  | 5   | 5    | 0.03                        | 5               | 2.04               | 3.04               | 2.24                    |
| 100 | 0  | 100 | 100  | 0.5                         | 100             | 52.18              | 53.32              | 10.0                    |
| 140 | 20 | 120 | 40   | 0.5                         | 6.67            | 37.09              | 37.03              | 7.36                    |

**Замечание**. Критерии IStat и IGain асимптотически эквивалентны: IStat(p,n) oIGain(p,n) при  $\ell o \infty$ 

### Шаг 4. Построение классификатора из закономерностей

Взвешенное голосование (линейный классификатор с весами  $w_{yt}$  и, возможно, с регуляризацией для отбора признаков):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{t=1}^{T_y} w_{yt} R_{yt}(x)$$

Простое голосование (комитет большинства):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \frac{1}{T_y} \sum_{t=1}^{T_y} R_{yt}(x)$$

Решающий список (комитет старшинства),  $c_0, c_1, \ldots, c_T \in Y$ :

$$x \xrightarrow{R_1(x)} \xrightarrow{0} \cdots \xrightarrow{0} \xrightarrow{R_T(x)} \xrightarrow{0} c_0$$

$$\downarrow^1 \qquad \qquad \downarrow^1 \qquad \downarrow^1 \qquad \qquad \downarrow$$

# Определение решающего списка (Decision List, DL)

DL — это алгоритм классификации  $a: X \to Y$ , задаваемый закономерностями  $R_1(x), \dots, R_T(x)$  классов  $c_1, \dots, c_T \in Y$ :

$$x \longrightarrow \boxed{R_1(x)} \xrightarrow{0} \cdots \xrightarrow{0} \boxed{R_T(x)} \xrightarrow{0} c_0$$

$$\downarrow^1 \qquad \qquad \downarrow^1 \qquad$$

Это способ представления знаний в виде *системы продукций* — последовательности правил «**если**-условие **то**-решение»

для всех 
$$t=1,\ldots,T$$
  $\sqsubseteq$  если  $R_t(x)=1$  то вернуть  $c_t$ ; вернуть  $c_0$  (отказ от классификации объекта  $x$ );

$$E(R_t,X^\ell)=rac{n_{c_t}(R_t)}{n_{c_t}(R_t)+p_{c_t}(R_t)} o ext{min} \quad -$$
 доля ошибок  $R_t$  на  $X^\ell$ 

# Жадный алгоритм обучения решающего списка

```
Вход: выборка X^{\ell}; параметры: T_{\text{max}}, I_{\text{min}}, E_{\text{max}}, \ell_0;
Выход: решающий список \{R_t, c_t\}_{t=1}^T;
U:=X^{\ell}:
для всех t := 1, ..., T_{max}
    выбрать класс c_t;
    поиск правила R_t по максимуму информативности:
    R_t := rg \max_{R} I(R,U) при ограничении E(R,U) \leqslant E_{	ext{max}};
    если I(R_t, U) < I_{\min} то выход;
    U := \{x \in U : R_t(x) = 0\} — не покрытые правилом R_t;
    если |U| \leqslant \ell_0 то выход;
```

# Замечания к алгоритму построения решающего списка

- ullet Стратегии выбора класса  $c_t$ :
  - 1) все классы по очереди (лучше для интерпретируемости)
  - 2) на каждом шаге определяется оптимальный класс
- Параметр  $E_{\text{max}}$  управляет сложностью списка:  $E_{\text{max}} \downarrow \Rightarrow p(R_t) \downarrow, T \uparrow$
- Преимущества:
  - интерпретируемость модели и классификаций
  - простой обход проблемы пропусков в данных
- Недостаток: низкое качество классификации
- Другие названия:

комитет с логикой старшинства (Majority Committee) голосование по старшинству (Majority Voting) машина покрывающих множеств (Set Covering Machine, SCM)

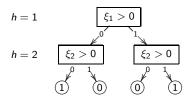
# Небрежные решающие деревья (Oblivious Decision Tree, ODT)

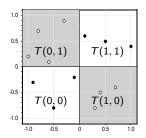
**Решающая таблица:** дерево глубины H,  $D_v = \{0,1\}$ ; для всех узлов уровня h условие ветвления  $f_h(x)$  одинаково; на уровне h ровно  $2^{h-1}$  вершин; X делится на  $2^H$  ячеек.

Классификатор задаётся angle ang

$$a(x) = T(f_1(x), \ldots, f_H(x)).$$

**Пример:** задача XOR, H = 2.





R.Kohavi, C.-H.Li. Oblivious decision trees, graphs, and top-down pruning. 1995.

# Жадный алгоритм обучения ODT

**Вход:** выборка  $X^{\ell}$ ; множество признаков F; глубина дерева H; Выход: признаки  $f_h$ ,  $h=1,\ldots,H$ ; таблица  $T:\{0,1\}^H\to Y$ ;

для всех 
$$h = 1, \ldots, H$$

предикат с максимальным выигрышем определённости:

$$f_h := arg \max_{f \in F} Gain (f_1, \dots, f_{h-1}, f);$$

классификация по мажоритарному правилу:

$$T(\beta) := Major(U_{H\beta});$$

Выигрыш от ветвления на уровне h по всей выборке  $X^\ell$ :

$$\mathsf{Gain}\left(f_1,\ldots,f_h\right) = \Phi(X^\ell) - \sum_{\beta \in \{0,1\}^h} \frac{|U_{h\beta}|}{\ell} \, \Phi(U_{h\beta}),$$

$$U_{h\beta} = \{x_i \in X^{\ell} : f_s(x_i) = \beta_s, \ s = 1..h\}, \ \beta = (\beta_1, \ldots, \beta_h) \in \{0, 1\}^h.$$

### Вспомогательная задача бинаризации вещественного признака

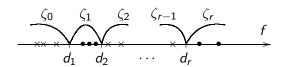
**Ц**ель: сократить перебор предикатов вида  $\left[f(x)\leqslant lpha
ight]$ .

**Дано:** выборка значений вещественного признака  $f(x_i)$ ,  $x_i \in X^{\ell}$ . **Найти:** наилучшее (в каком-то смысле) разбиение области значений признака на относительно небольшое число зон:

$$\zeta_0(x) = [f(x) < d_1];$$

$$\zeta_s(x) = [d_s \le f(x) < d_{s+1}], \qquad s = 1, \dots, r-1;$$

$$\zeta_r(x) = [d_r \le f(x)].$$



# Способы разбиения области значений признака на зоны

- 🚺 Жадная максимизация информативности путём слияний
- Разбиение на равномощные подвыборки
- Разбиение по равномерной сетке «удобных» значений
- Объединение нескольких разбиений

#### Выбор «удобных» пороговых значений

**Задача:** на отрезке [a,b] найти значение  $x^*$  с минимальным числом значащих цифр.

Если таких  $x^*$  несколько, выбрать

$$x^* = \arg\min_{x} \left| \frac{1}{2} (a+b) - x \right|.$$

| <i>a</i> =   | 2,16667 |
|--------------|---------|
|              | 2,19    |
| <i>x</i> * = | 2,2     |
|              | 2,21    |
| (a+b)/2 =    | 2,23889 |
|              | 2,29    |
|              | 2,3     |
|              | 2,31    |
| b =          | 2,31111 |

# Жадный алгоритм слияния зон по критерию информативности

```
Вход: выборка X^{\ell}; класс c \in Y; параметры r и \delta_0;
Выход: D = \{d_1 < \cdots < d_r\} — последовательность порогов;
D:=\varnothing; упорядочить выборку X^{\ell} по возрастанию f(x_i);
для всех i=2,\ldots,\ell
   если f(x_{i-1}) \neq f(x_i) и [y_{i-1} = c] \neq [y_i = c] то
     добавить порог \frac{1}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)) в конец D
повторять
    для всех d_i \in D, i = 1, ..., |D| - 1
    \delta I_i := I(\zeta_{i-1} \vee \zeta_i \vee \zeta_{i+1}) - \max\{I(\zeta_{i-1}), I(\zeta_i), I(\zeta_{i+1})\};
   i := \arg\max \delta I_s;
   если \delta I_i > \delta_0 то
     слить зоны \zeta_{i-1}, \zeta_i, \zeta_{i+1}, удалив d_i и d_{i+1} из D_i;
пока |D| > r + 1:
```

#### Резюме по логическим методам

- Эмпирическая индукция вывод знаний из данных:
  - индукция правил (Rule Induction)
  - решающие деревья, списки, таблицы
- Преимущества логических методов:
  - интерпретируемость
  - возможность обработки разнотипных данных
  - возможность обработки данных с пропусками
- Недостатки логических методов:
  - ограниченное качество классификации
  - решающие деревья неустойчивы, склонны к переобучению
- Способы устранения этих недостатков:
  - редукция по тестовым данным
  - композиции правил, леса деревьев (в следующих лекциях)