Основы машинного обучения

Лекция 13

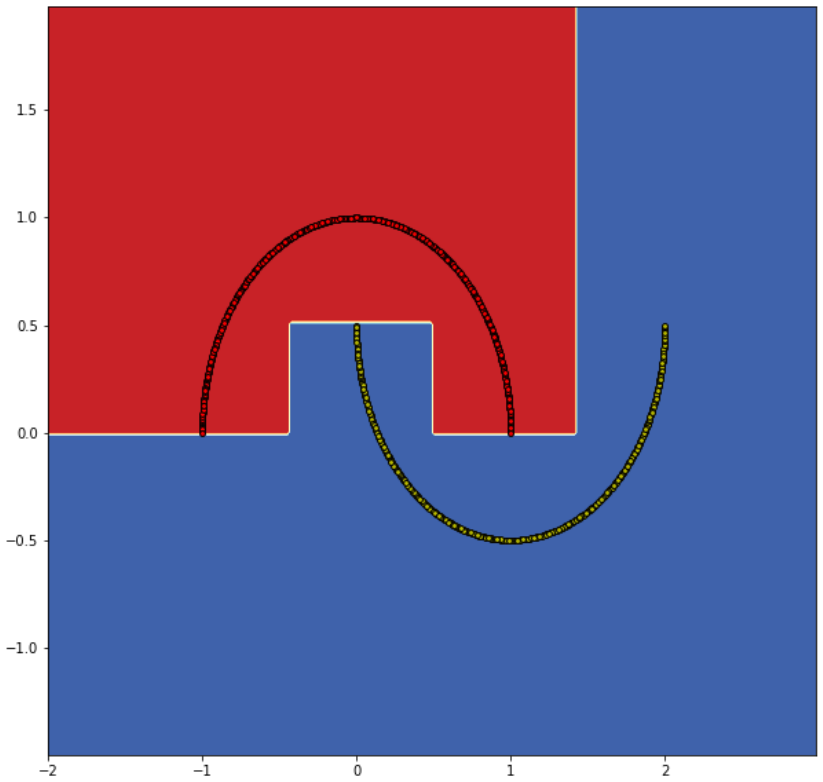
Решающие деревья. Композиции моделей.

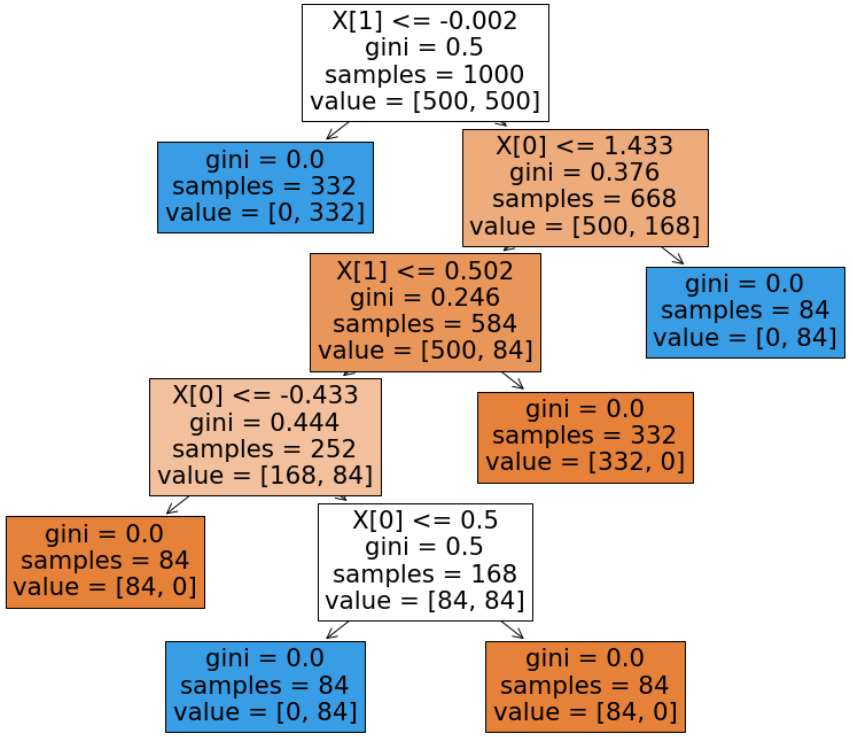
Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2023

Решающее дерево

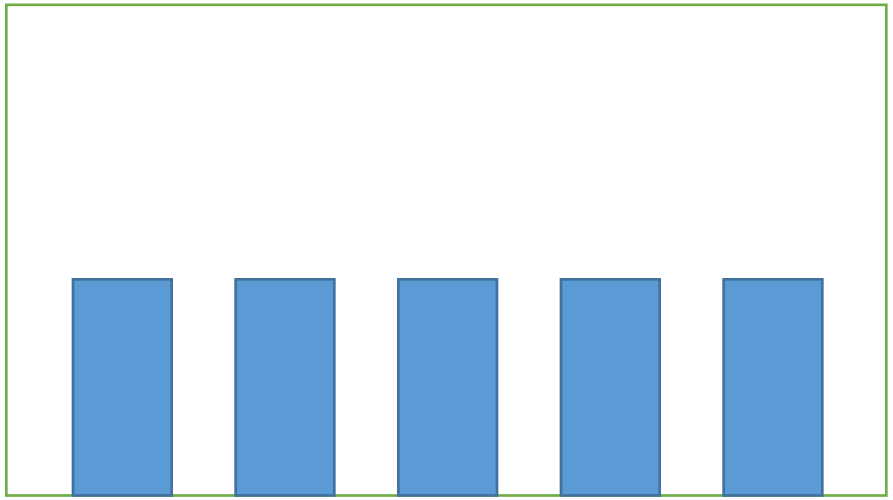




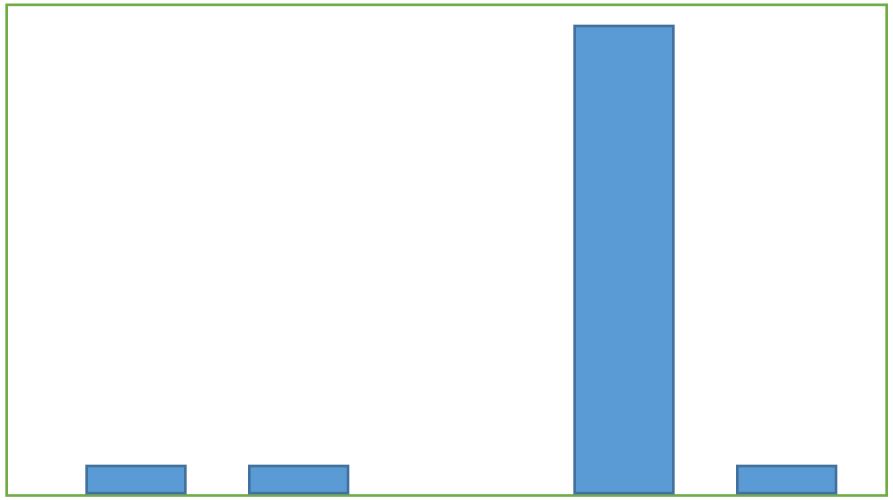
Как выбирать предикаты

Энтропия

- Мера неопределённости распределения



Высокая энтропия



Низкая энтропия

Энтропия

- Дискретное распределение
- Принимает n значений с вероятностями $p_1, \ldots, p_n$
- Энтропия:

$$H(p_1, \ldots, p_n) = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i$$

Энтропия

$$H(p_1, \ldots, p_K) = -\sum_{i=1}^{K} p_i \log_2 p_i$$

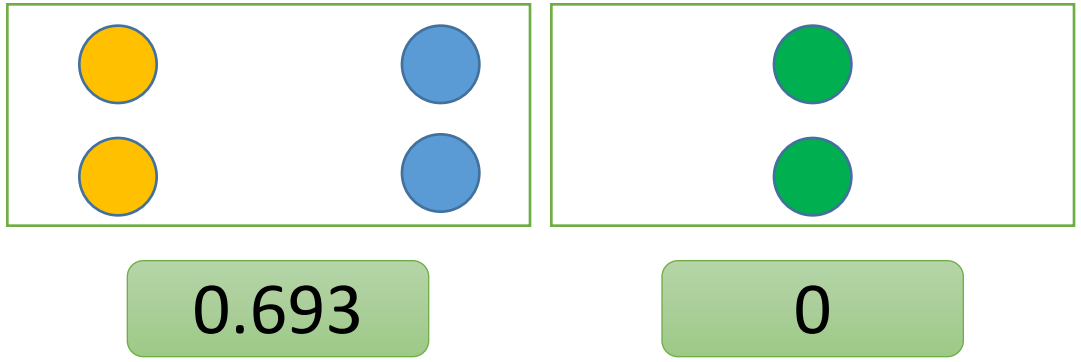
- Характеристика «хаотичности» вершины
- **Impurity**

Критерий Джини

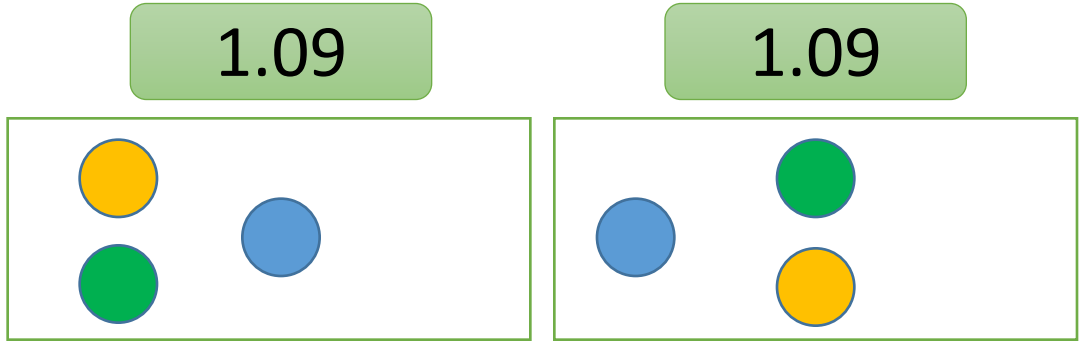
$$H(p_1, \dots, p_K) = \sum_{i=1}^{K} p_i \, (1 - p_i)$$

- Вероятность ошибки случайного классификатора, который выдаёт класс k с вероятностью p_k
- Примерно пропорционально количеству пар объектов, относящихся к разным классам

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

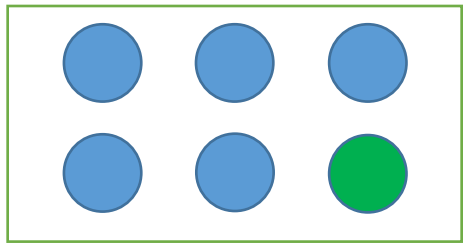
Критерий информативности

$$Q(R, j, t) = H(R) - \frac{|R_\ell|}{|R|} H(R_\ell) - \frac{|R_r|}{|R|} H(R_r) \to \max_{j,t}$$

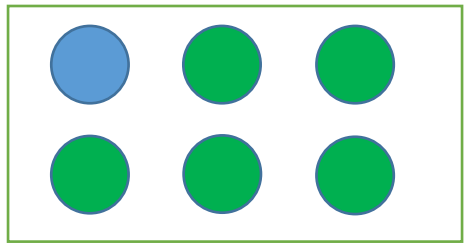
- Или так:

$$Q(R, j, t) = \frac{|R_\ell|}{|R|} H(R_\ell) + \frac{|R_r|}{|R|} H(R_r) \to \min_{j,t}$$

Как сравнить разбиения?

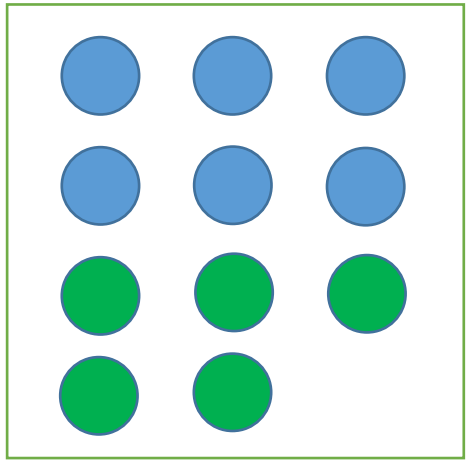


0.65

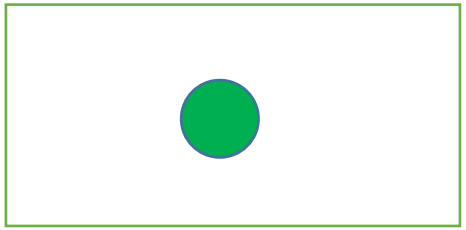


0.65

- $(5/6, 1/6)$ и $(1/6, 5/6)$
- $0.5 * 0.65 + 0.5 * 0.65 = 0.65$



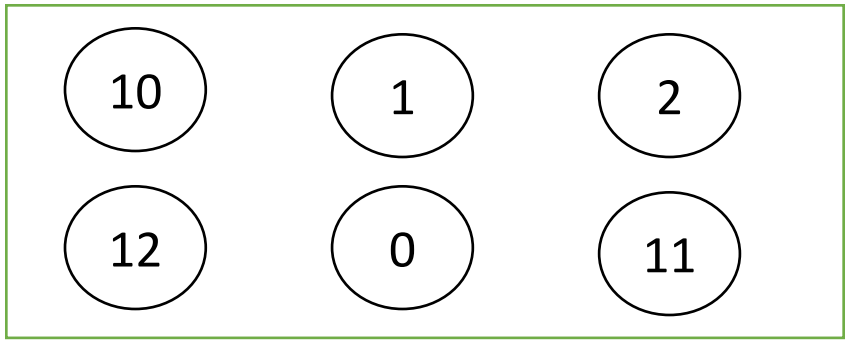
0.994



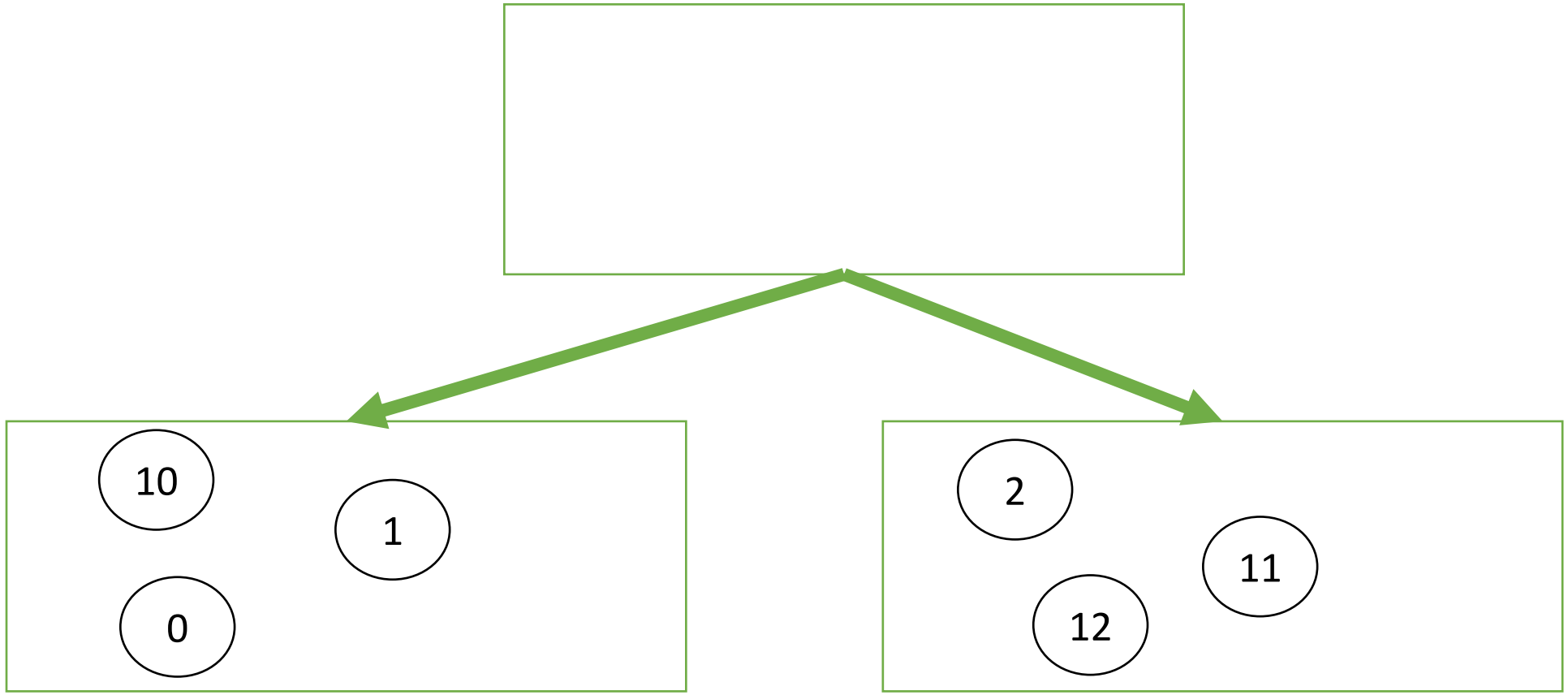
0

- $(6/11, 5/11)$ и $(0, 1)$
- $\frac{11}{12} * 0.994 + \frac{1}{12} * 0 = 0.911$

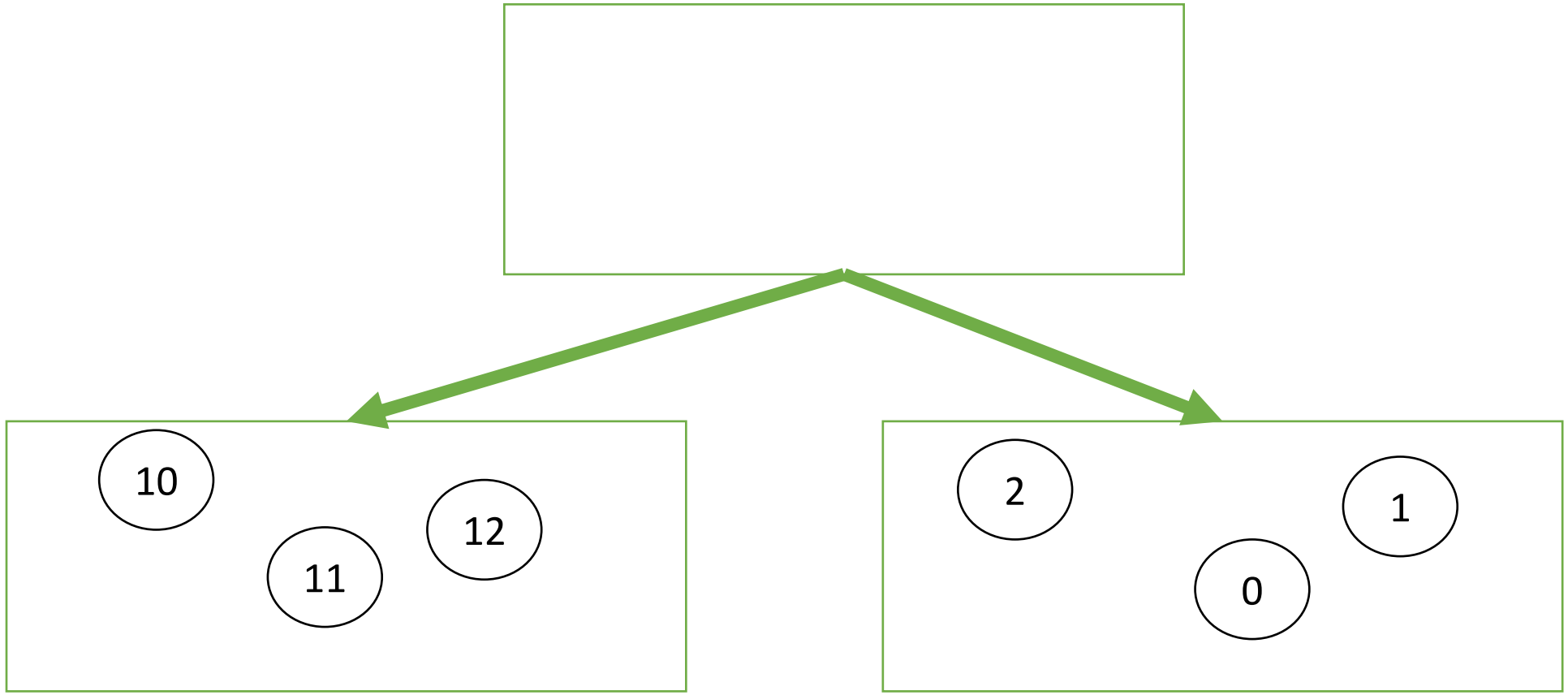
А для регрессии?



А для регрессии?



А для регрессии?



Задача регрессии

$$H(R) = \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i, y_i) \in R} (y_i - y_R)^2$$

$$y_R = \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i, y_i) \in R} y_i$$

- То есть «хаотичность» вершины можно измерять дисперсией ответов в ней

Жадное построение дерева

Как строить дерево?

- Оптимальный вариант: перебрать все возможные деревья, выбрать самое маленькое среди безошибочных
- Слишком долго

Как строить дерево?

- Мы уже умеем выбрать лучший предикат для разбиения вершины
- Будем строить жадно
- Начнём с корня дерева, будем разбивать последовательно, пока не выполнится некоторый критерий останова

Критерий останова

- Ограничить глубину
- Ограничить количество листьев
- Задать минимальное число объектов в вершине
- Задать минимальное уменьшение хаотичности при разбиении
- И так далее

Жадный алгоритм

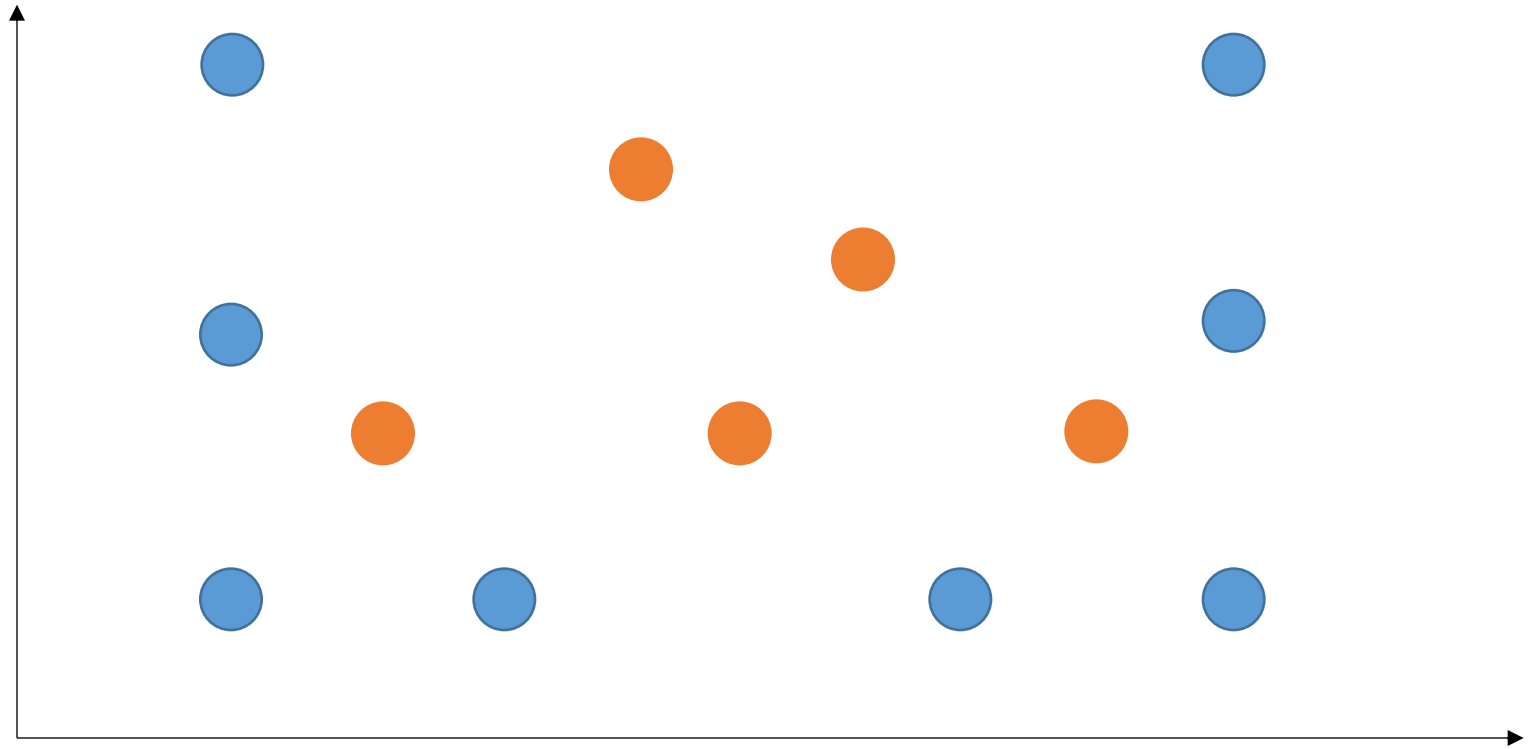
1. Поместить в корень всю выбору: $R_1 = X$
2. Запустить построение из корня: $\mathrm{SplitNode}(1, R_1)$

Жадный алгоритм

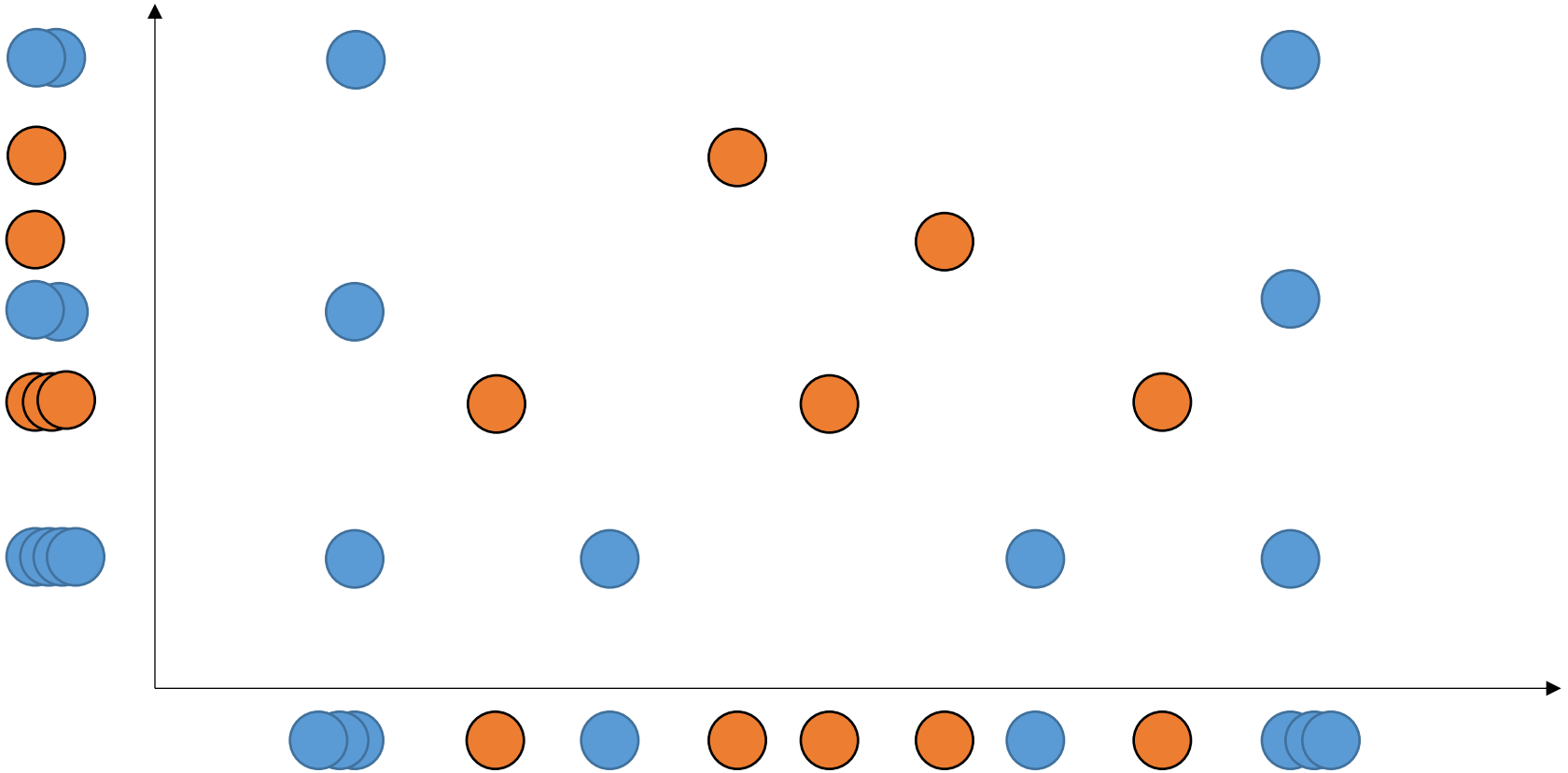
- $\mathrm{SplitNode}(m, R_m)$

1. Если выполнен критерий останова, то выход
2. Ищем лучший предикат: $j, t = \arg\min_{\mathrm{j,t}} Q(R_m, j, t)$
3. Разбиваем с его помощью объекты: $R_\ell = \left\{\{(x, y) \in R_m | \left[x_j < t\right]\right\}$, $R_r = \left\{\{(x, y) \in R_m | \left[x_j \geq t\right]\right\}$
4. Повторяем для дочерних вершин: $\mathrm{SplitNode}(\ell, R_\ell)$ и $\mathrm{SplitNode}(r, R_r)$

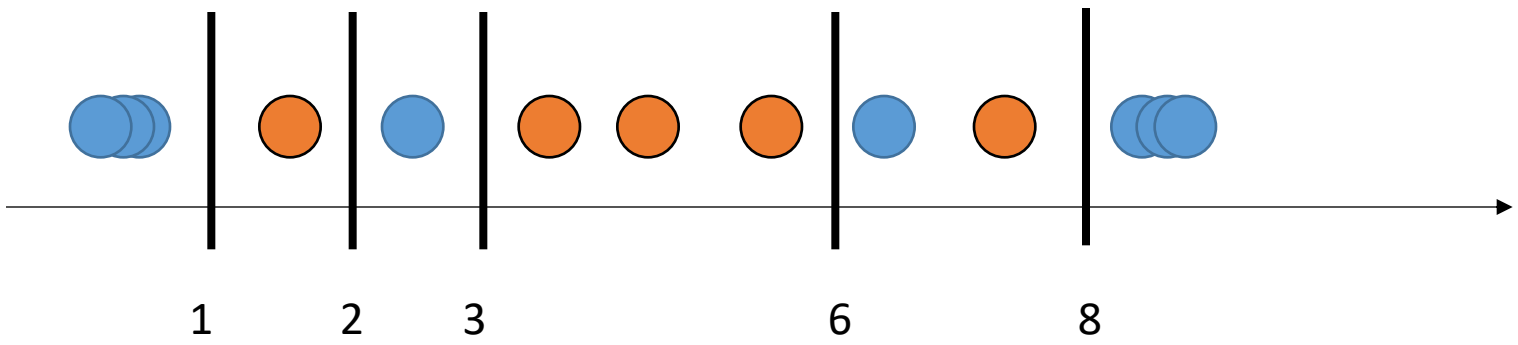
Обучение деревьев



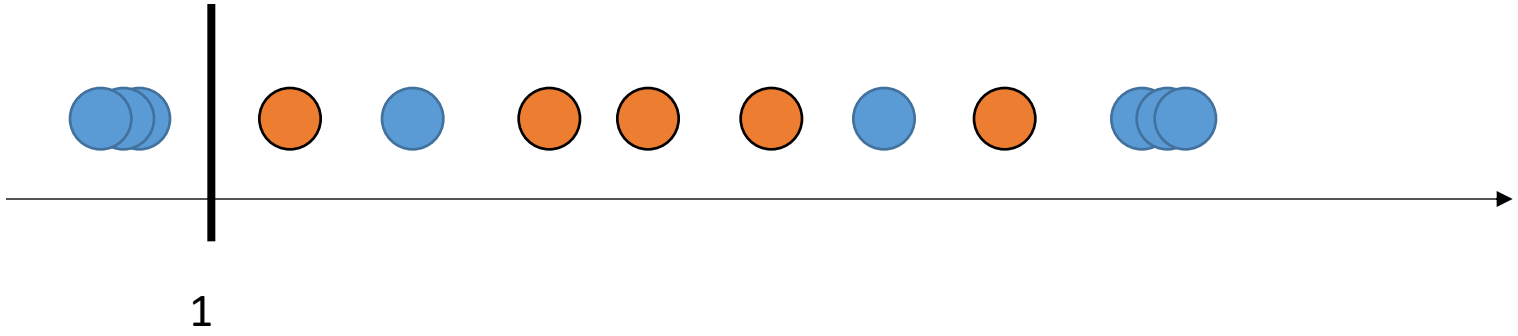
Признаки



Разбиения по признаку 1



Разбиения по признаку 1

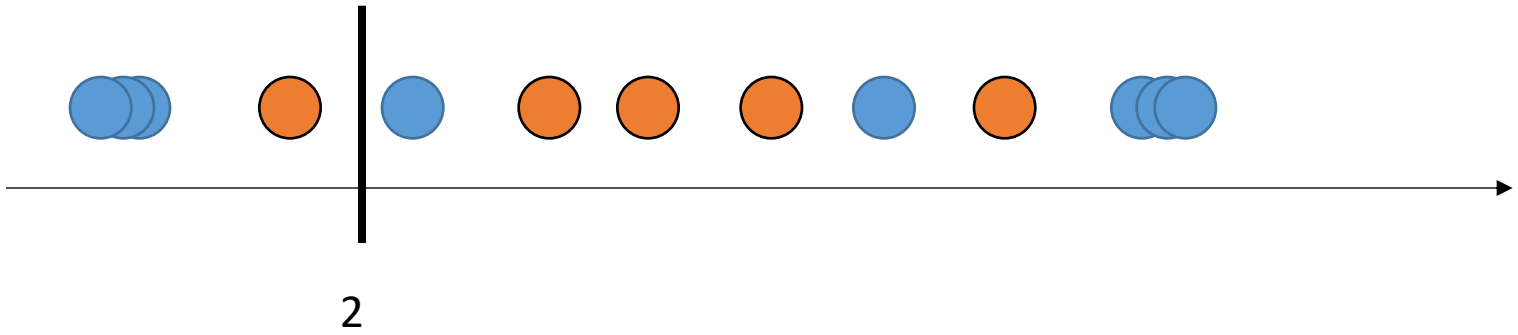


(1, 0)
H(p) = 0

(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

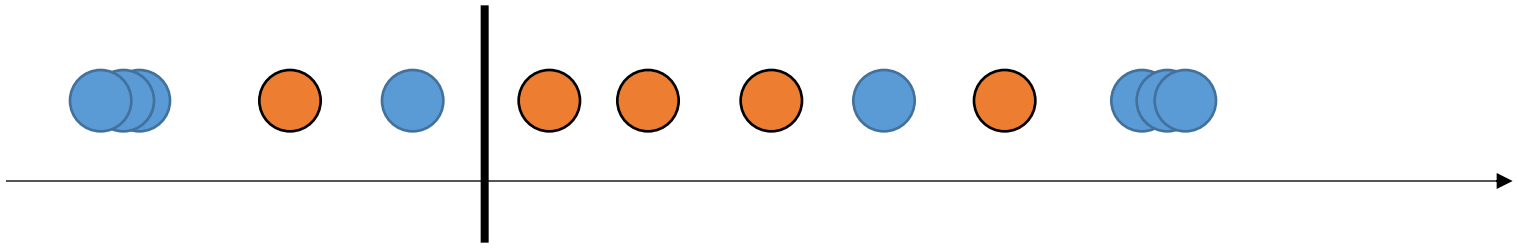


(3/4, 1/4)
H(p) = 0.56

(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

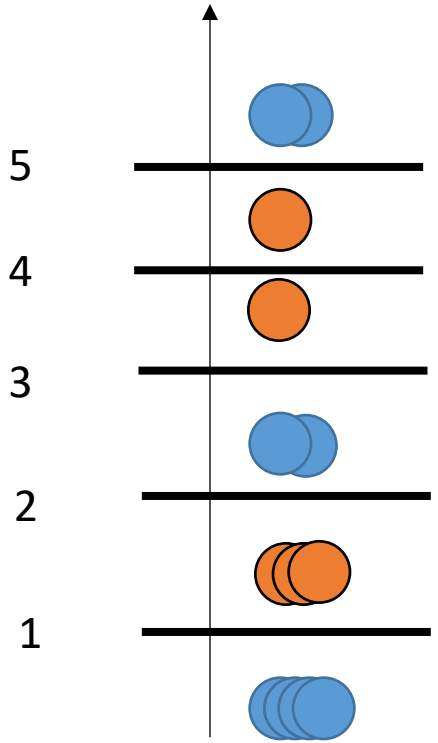


(4/5, 1/5)
H(p) = 0.5

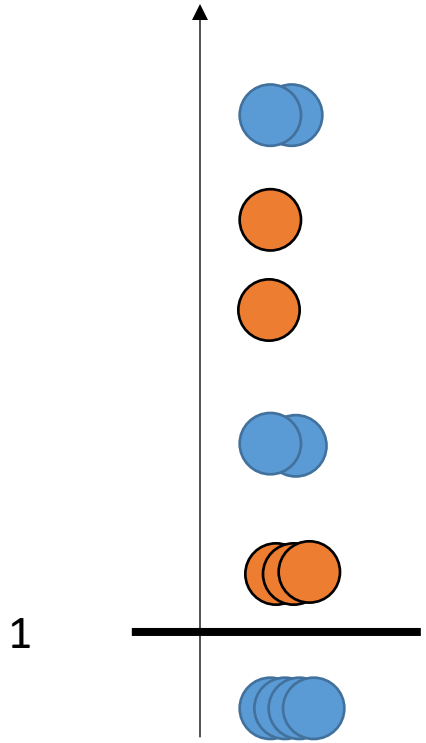
(1/2, 1/2)
H(p) = 0.69

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

Разбиения по признаку 2



Разбиения по признаку 2

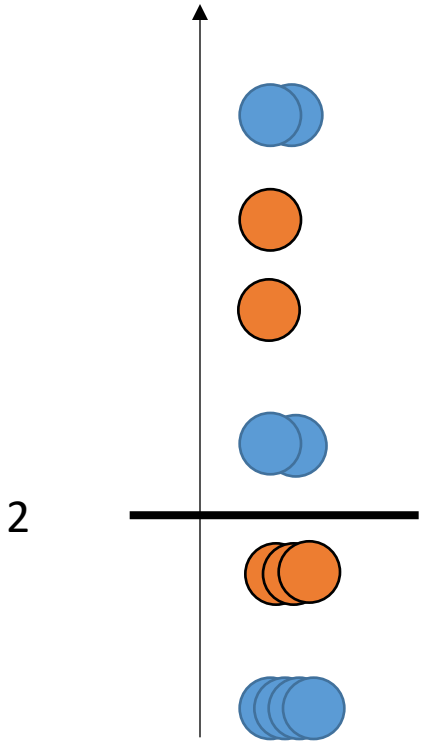


(4/9, 5/9)
H(p) = 0.69

(1, 0)
H(p) = 0

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

Разбиения по признаку 2

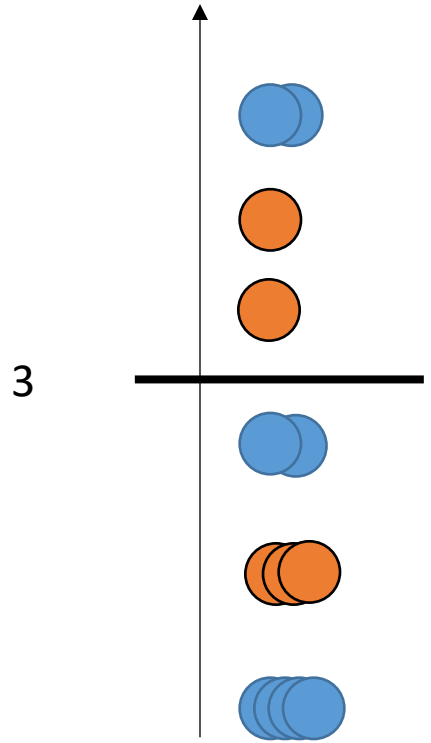


(4/6, 2/6)
H(p) = 0.64

(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

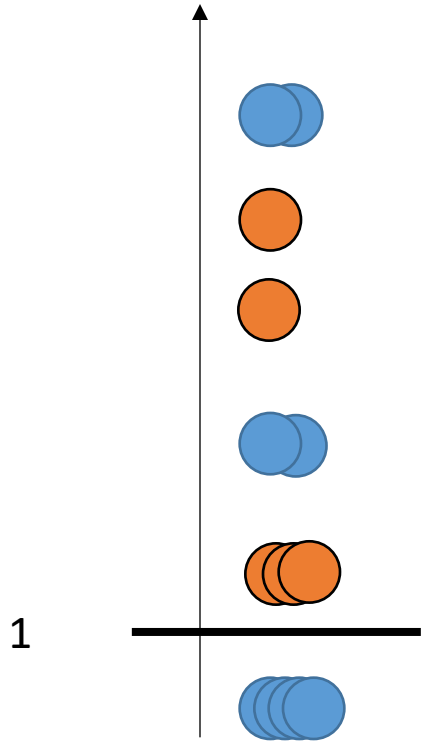


(1/2, 1/2)
H(p) = 0.69

(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



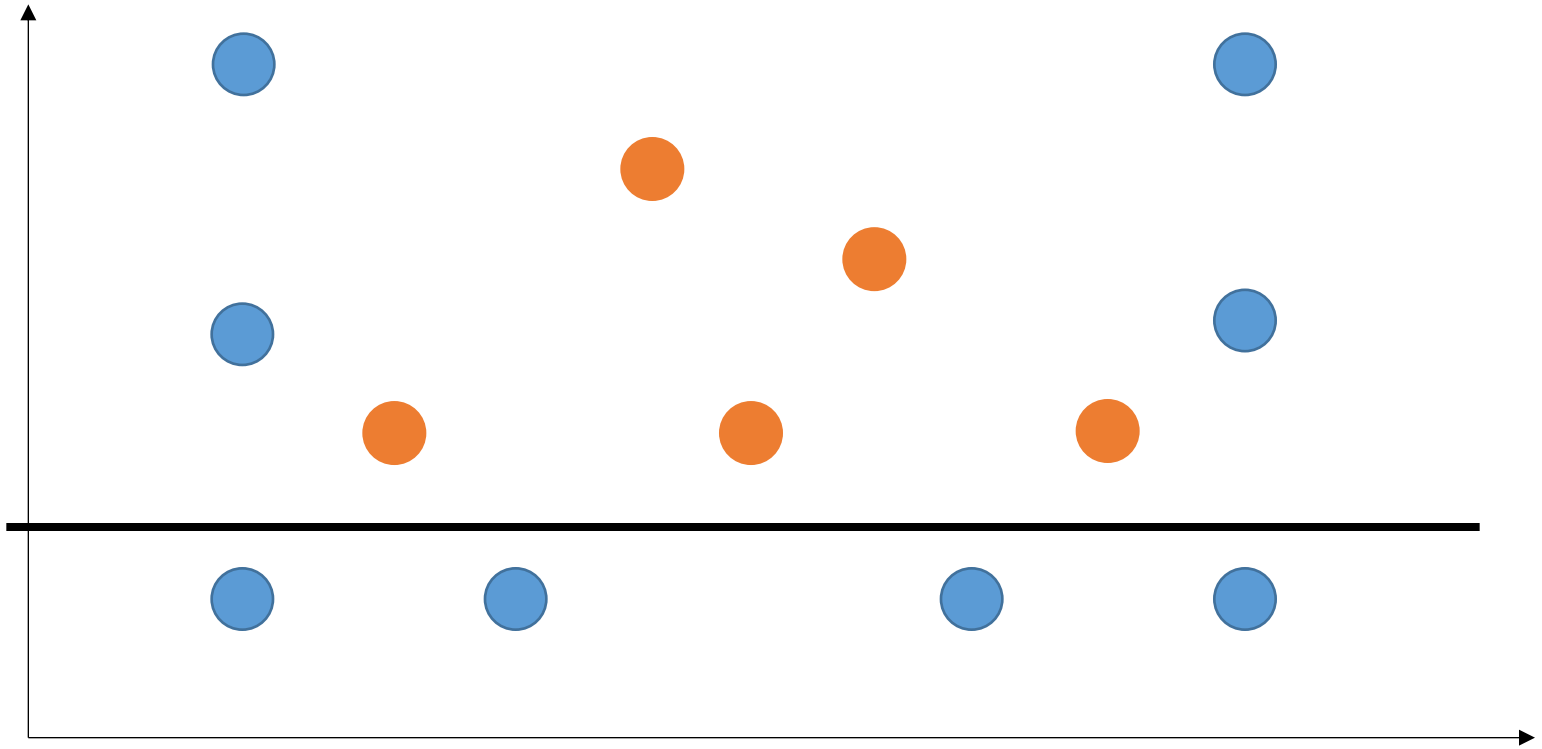
(4/9, 5/9)
H(p) = 0.69

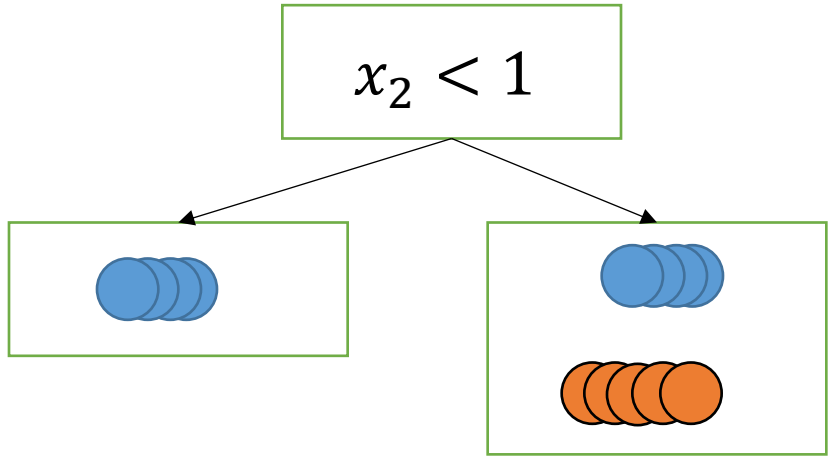
(1, 0)
H(p) = 0

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

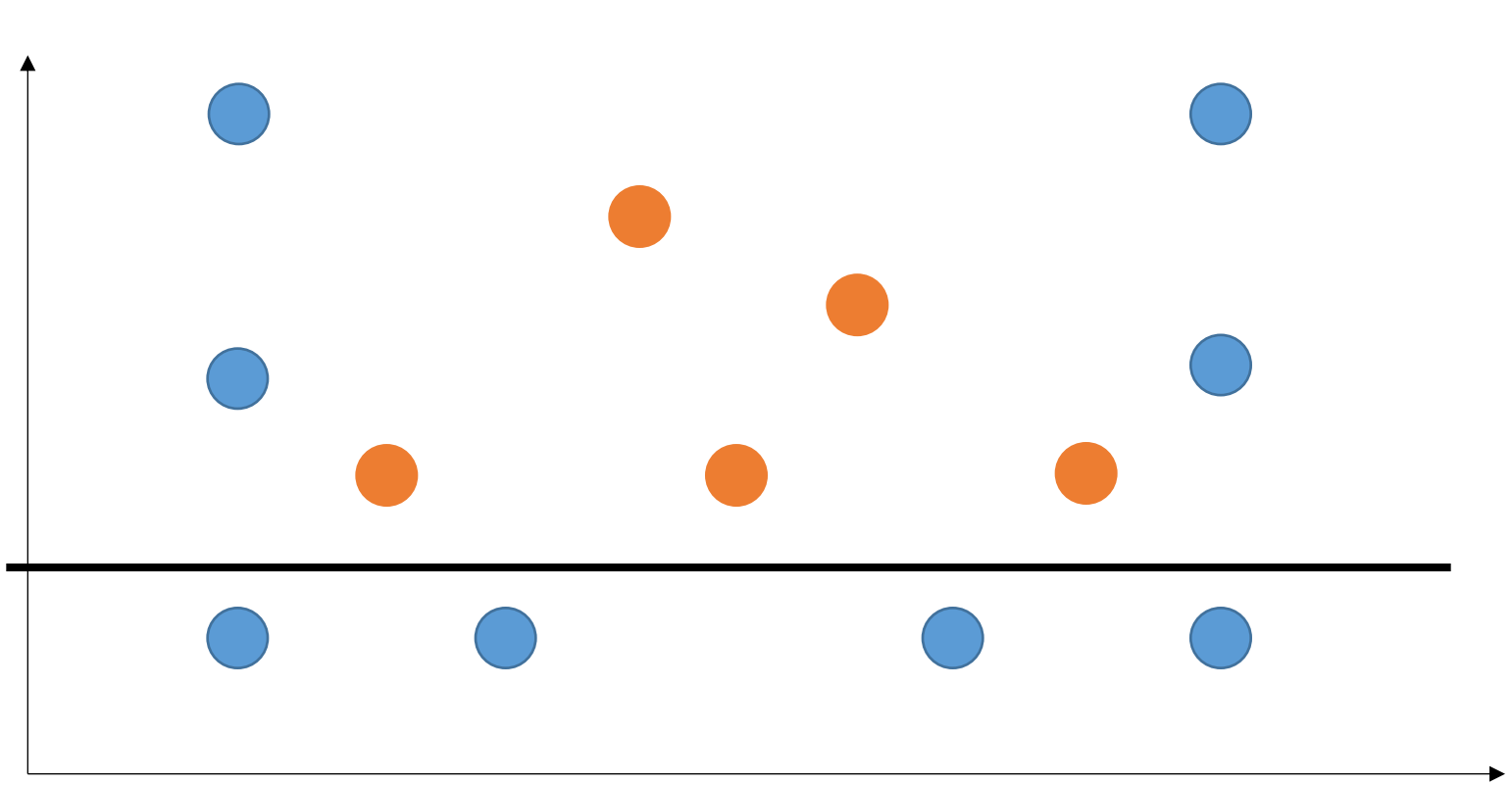
Лучшее разбиение!

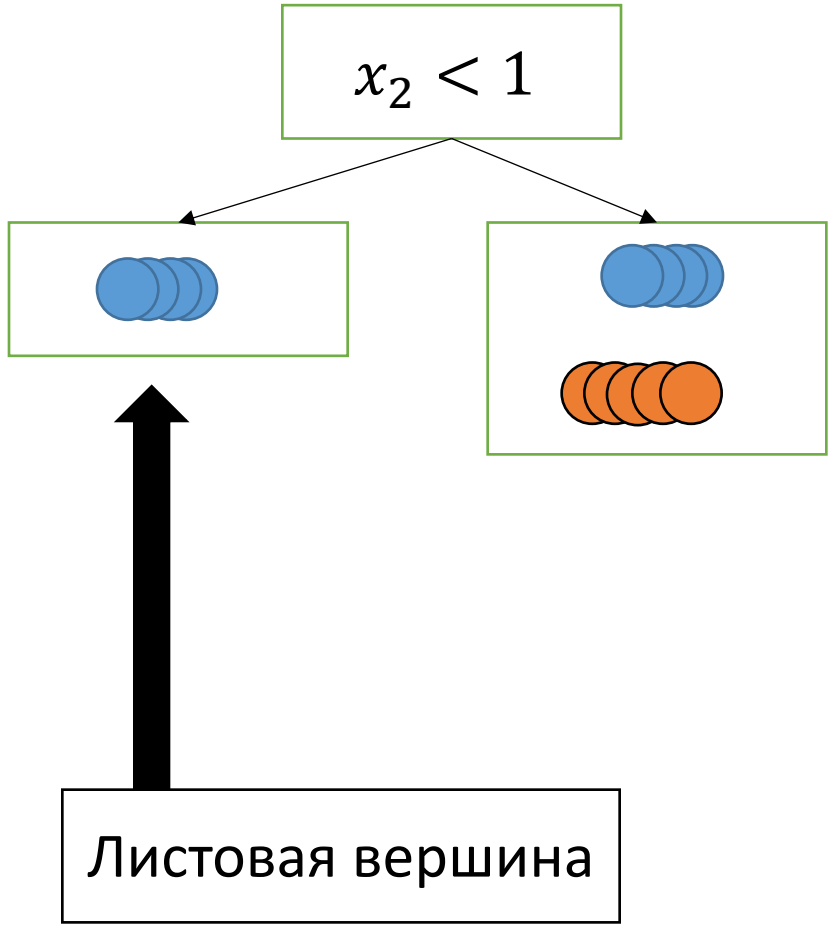
Обучение деревьев



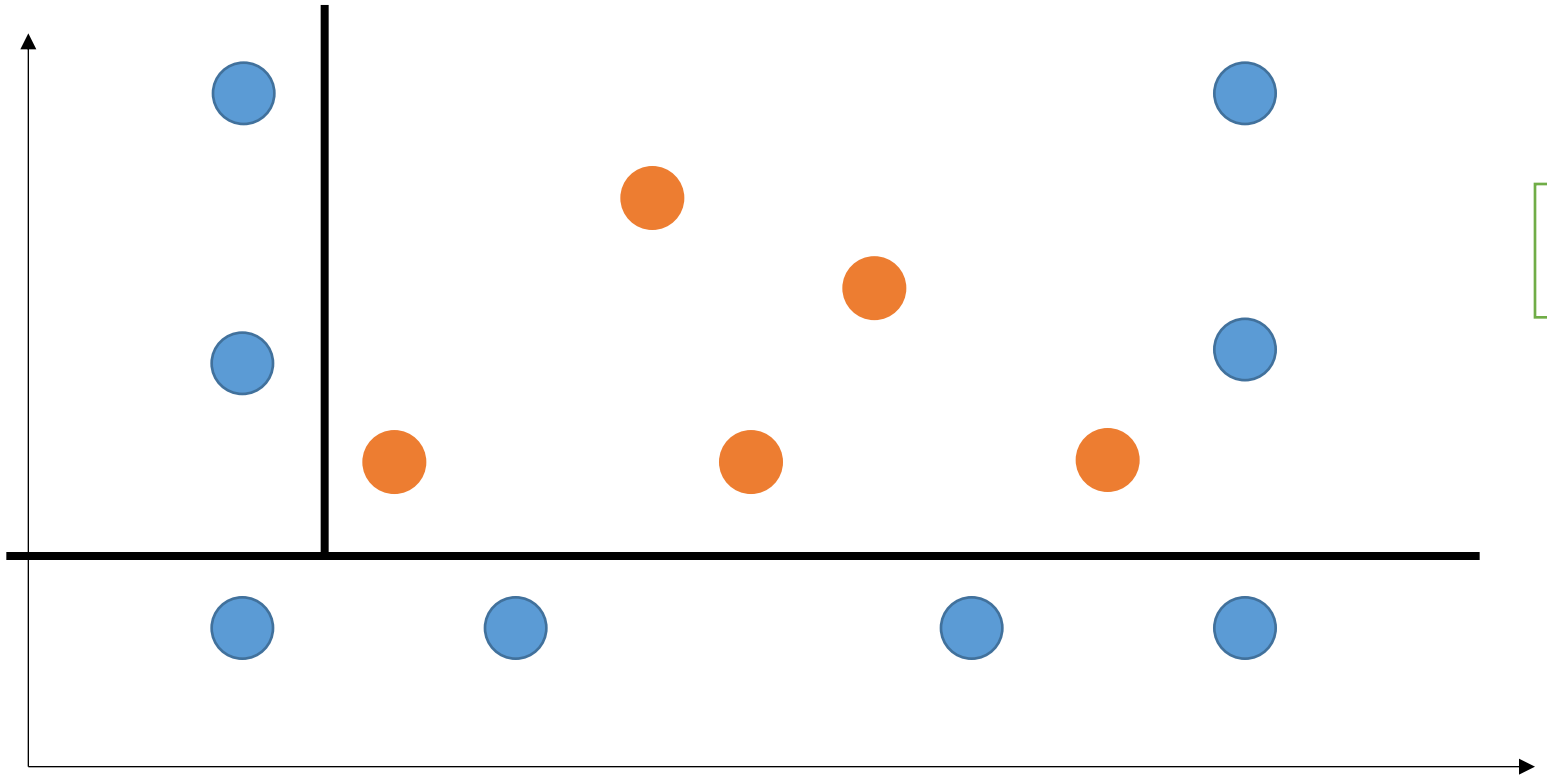


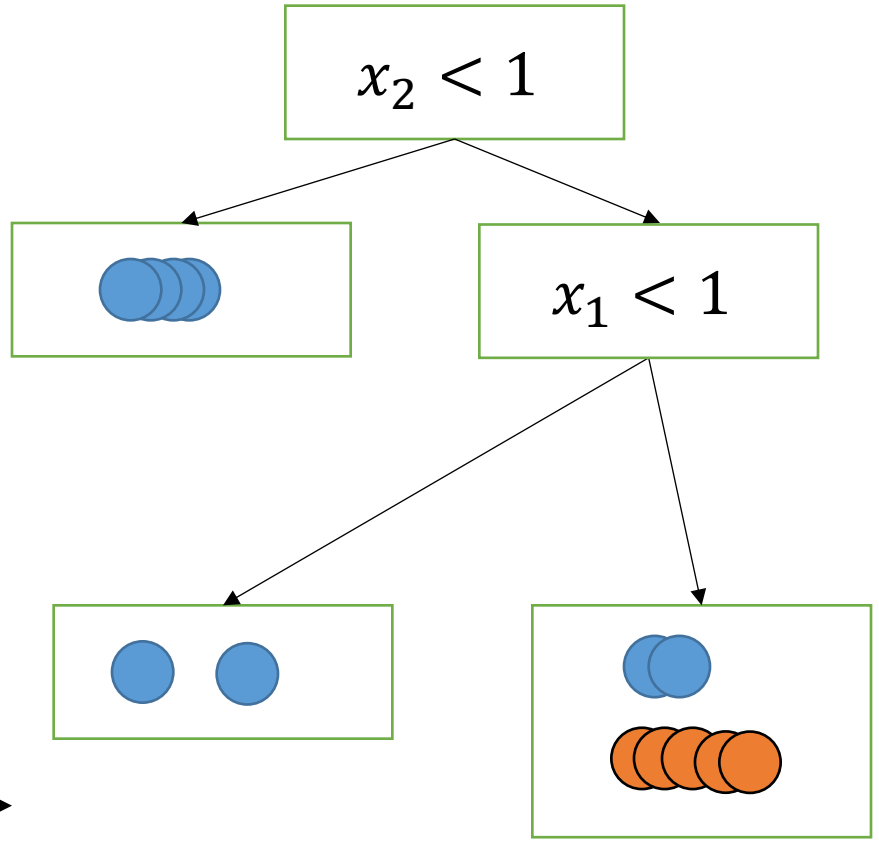
Обучение деревьев



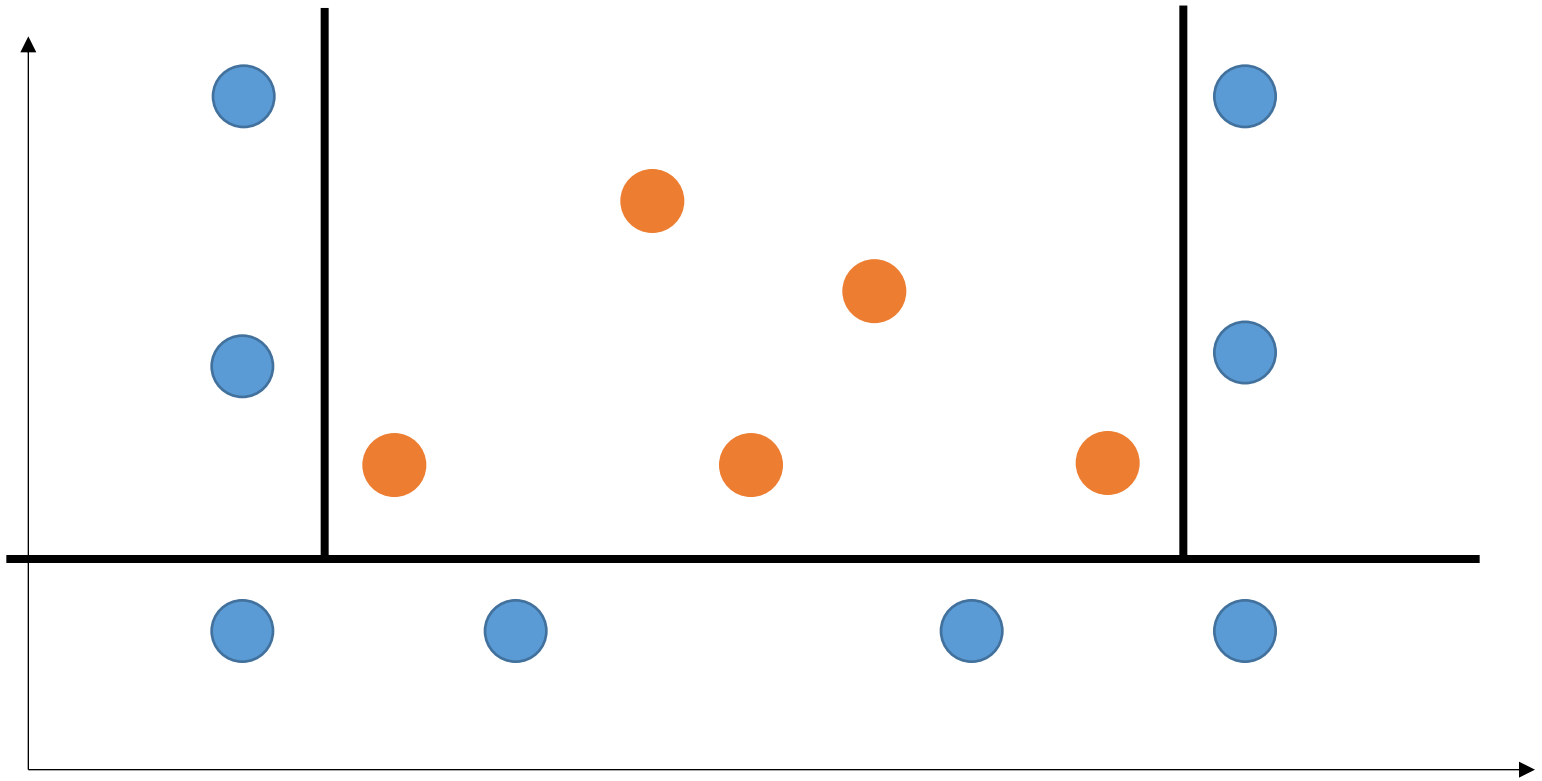


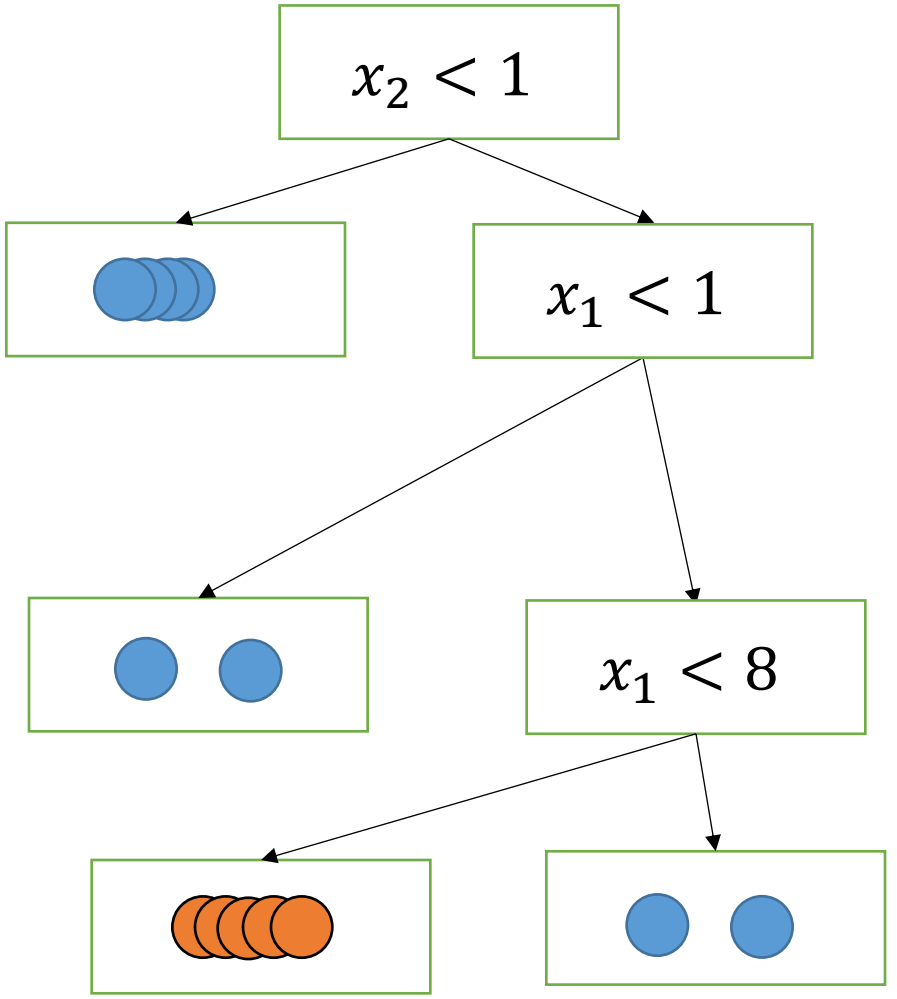
Обучение деревьев





Обучение деревьев





Резюме

- Решающие деревья позволяют строить сложные модели, но есть риск переобучения
- Деревья строятся жадно, на каждом шаге вершина разбивается на две с помощью лучшего из предиктов
- Алгоритм довольно сложный и требует перебора всех предикатов на каждом шаге

Неустойчивость деревьев

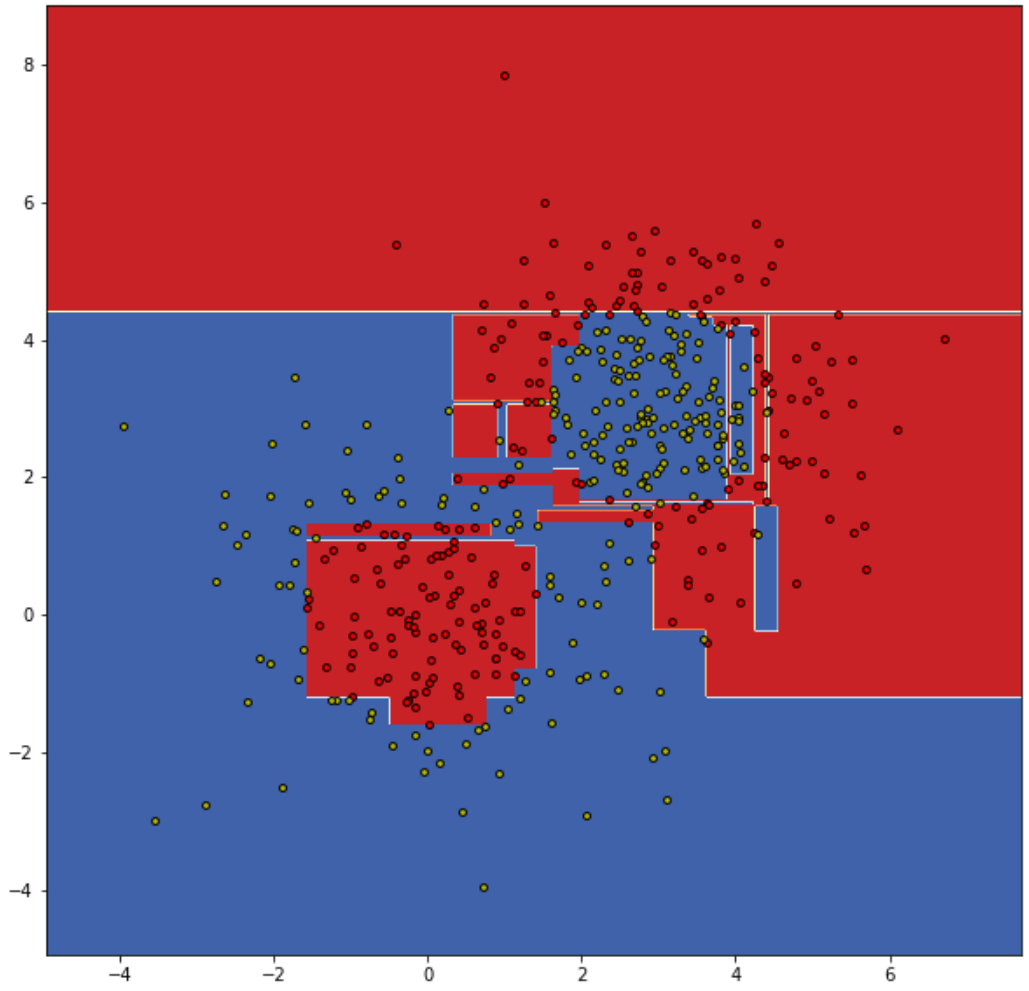
Устойчивость моделей

- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$ — обучающая выборка
- Обучаем модель $a(x)$
- Ожидаем, что модель устойчивая
- То есть не сильно меняется при небольших изменениях в X
- $\tilde{X}$ — случайная подвыборка, примерно 90% исходной

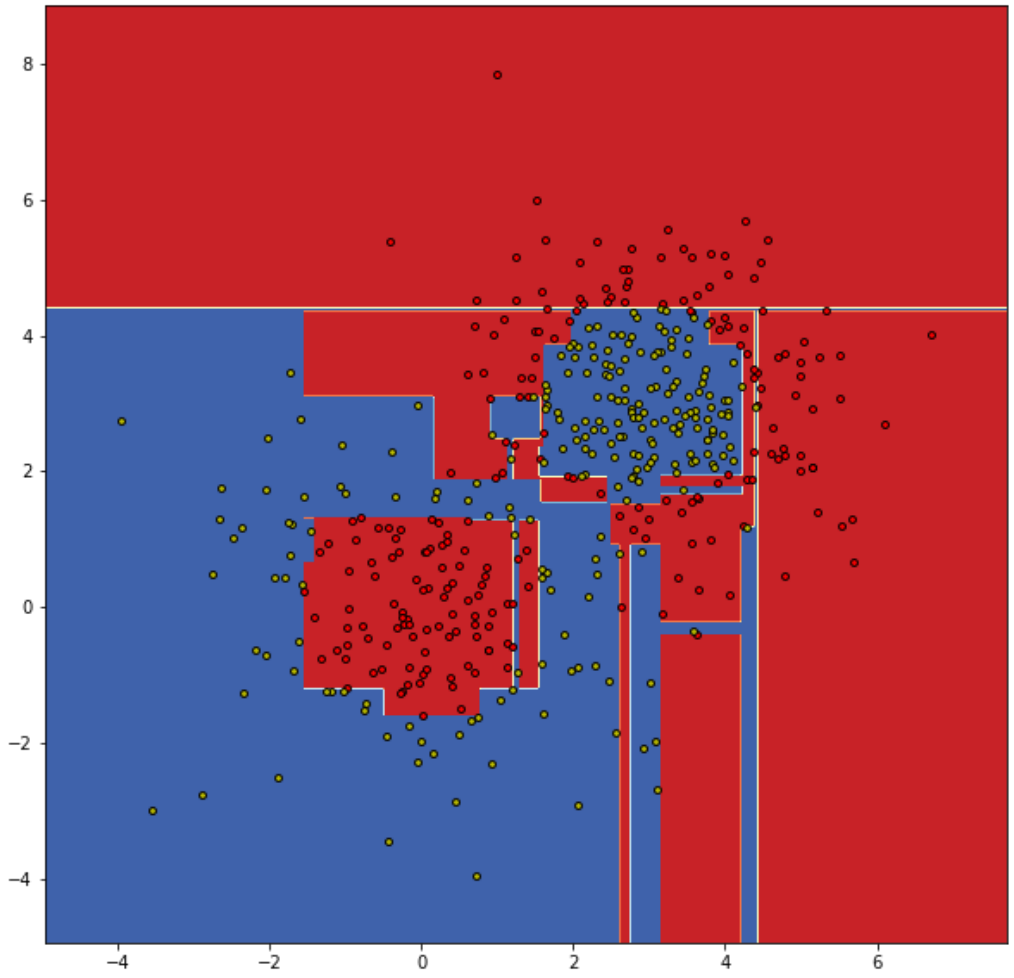
Устойчивость моделей

- $\tilde{X}$ — случайная подвыборка, примерно 90% исходной
- Что будет происходить с деревьями на разных подвыборках?

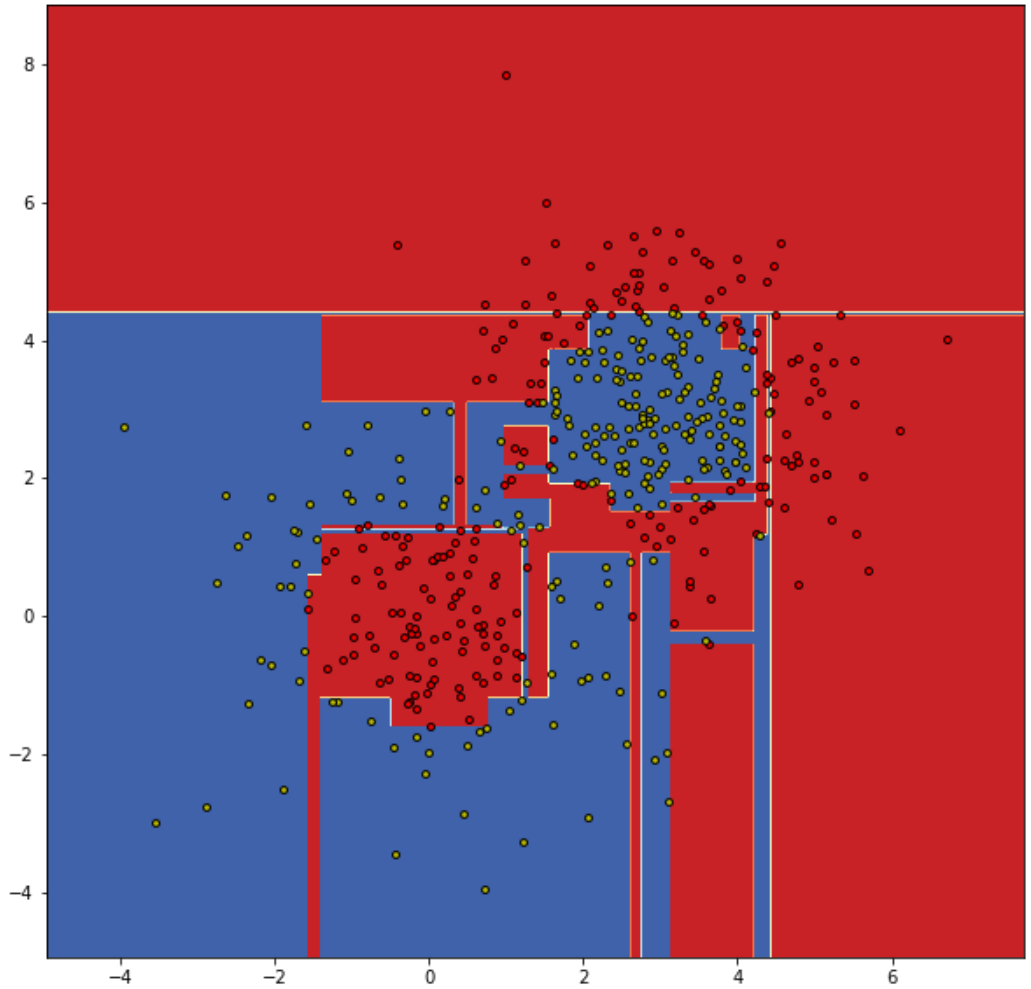
Обучение на подвыборках



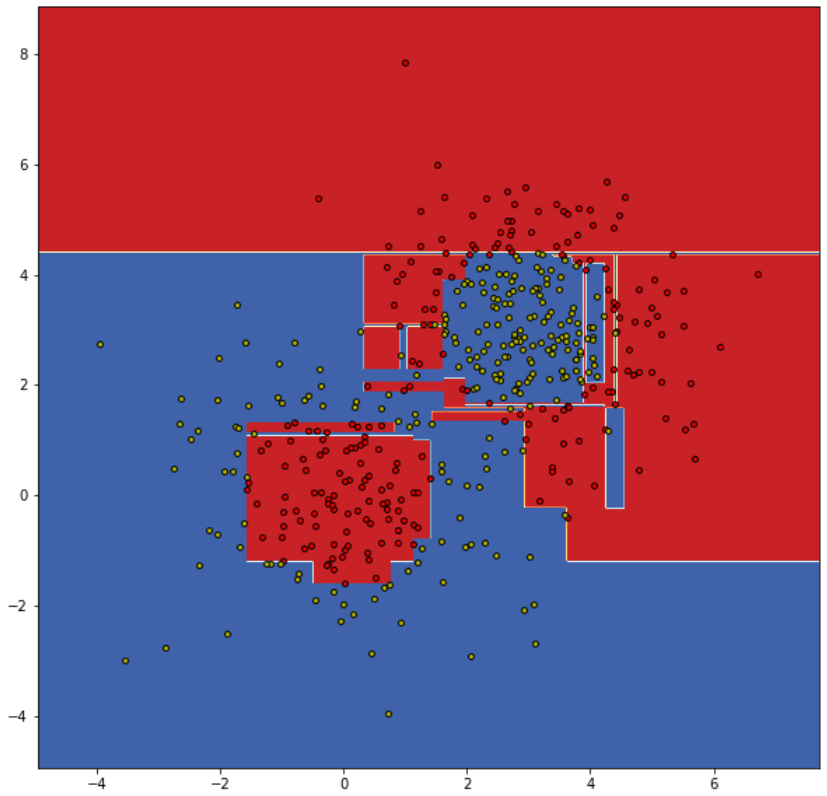
Обучение на подвыборках

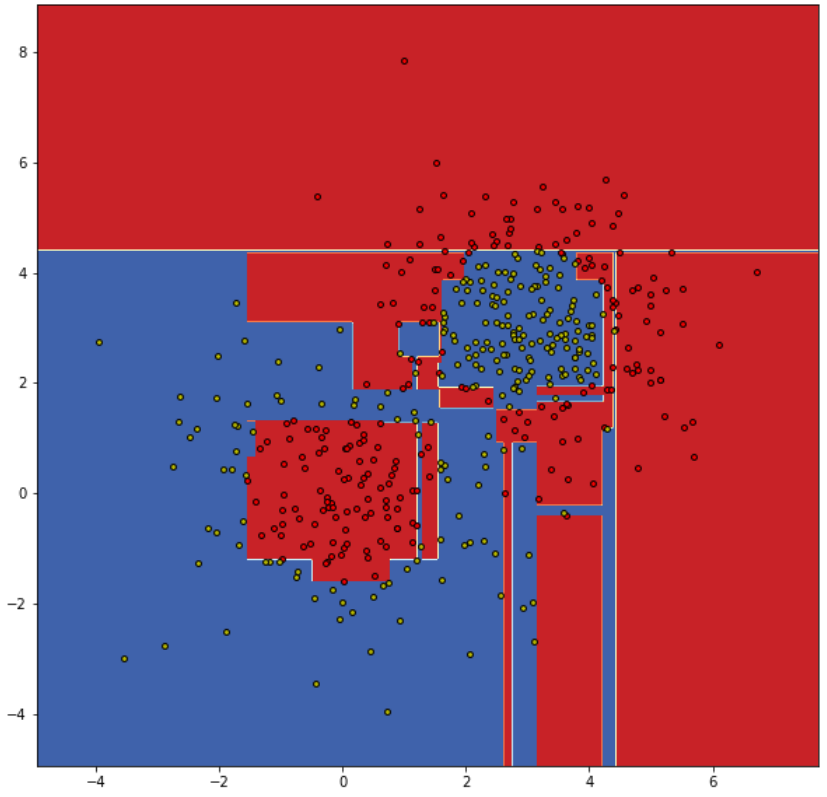


Обучение на подвыборках



Обучение на подвыборках



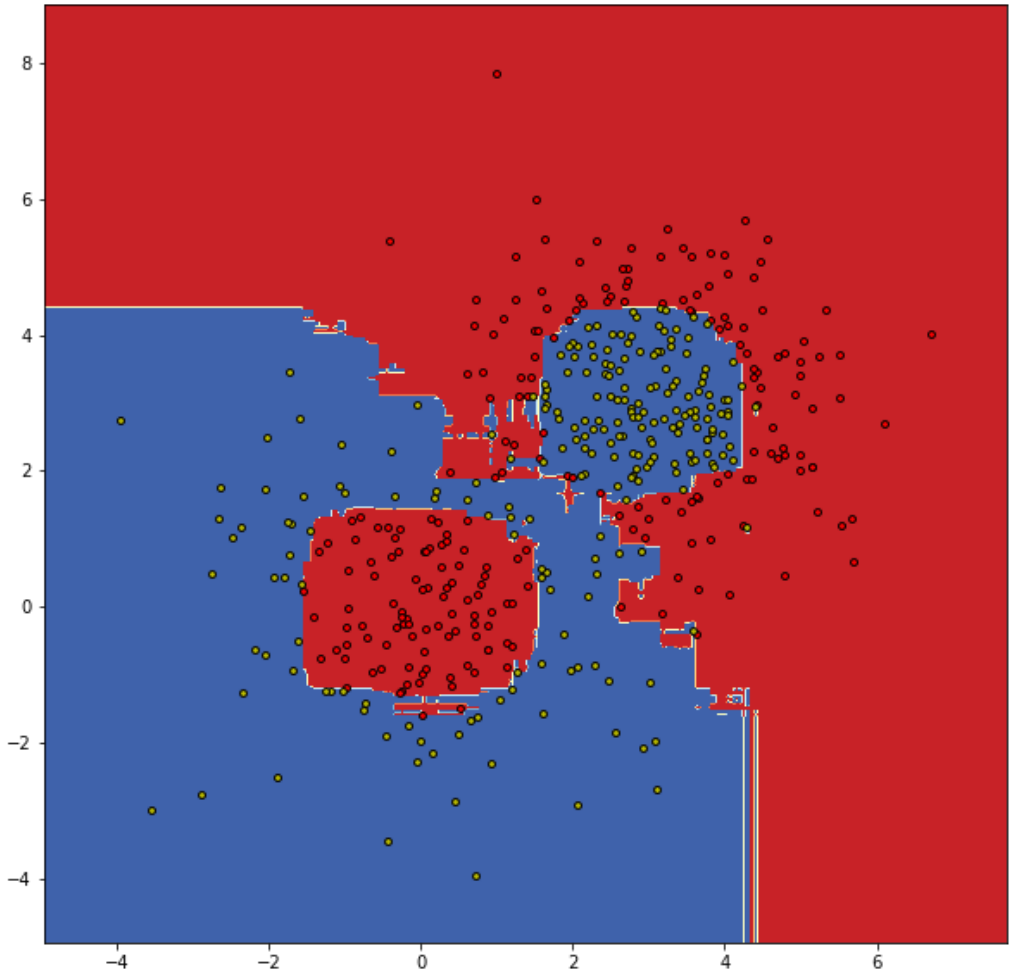


Композиция моделей

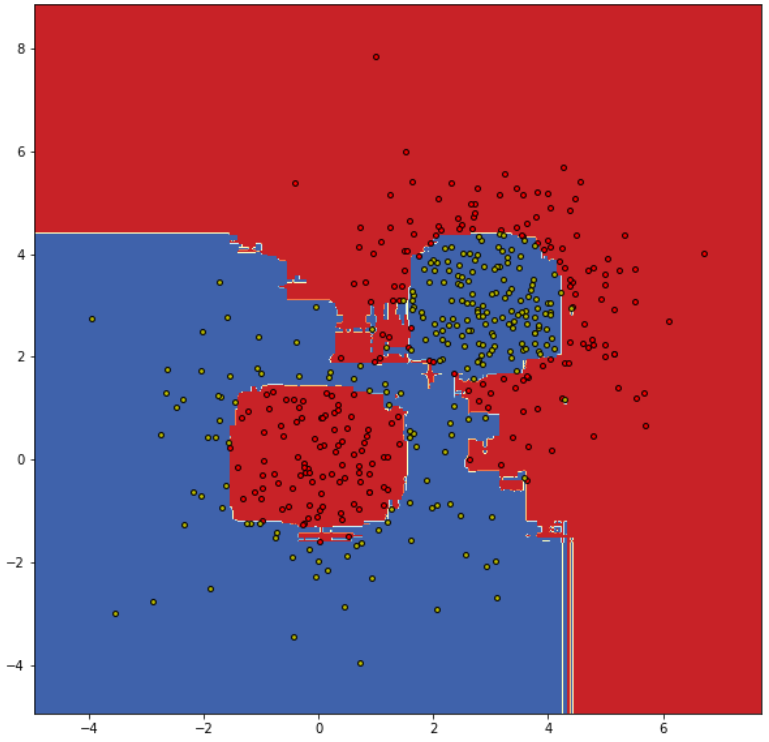
- У нас получилось N деревьев: $b_1(x), \ldots, b_N(x)$
- Объединим их через голосование большинством (majority vote):

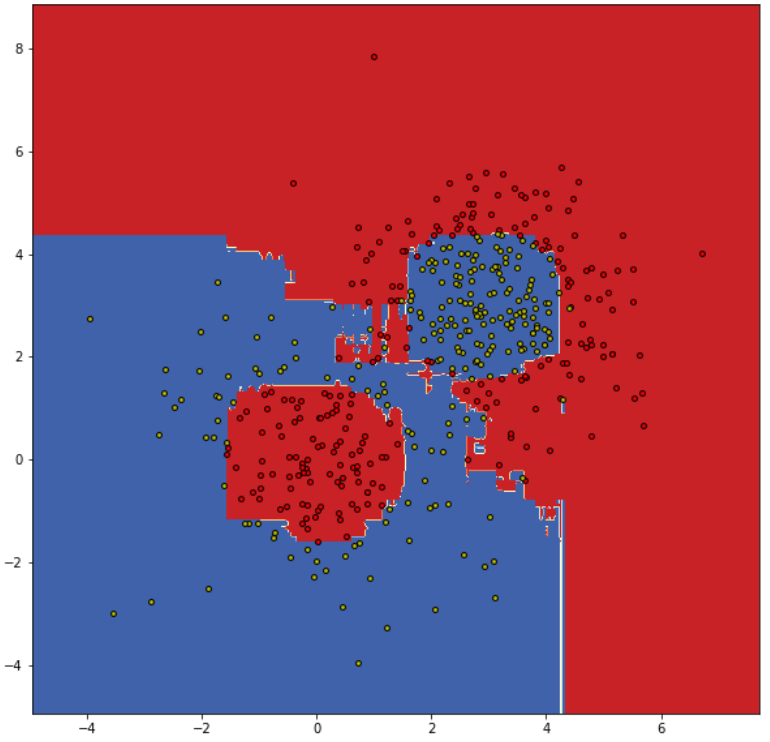
$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{n=1}^{N} [b_n(x) = y]$$

Композиция моделей



Композиция моделей

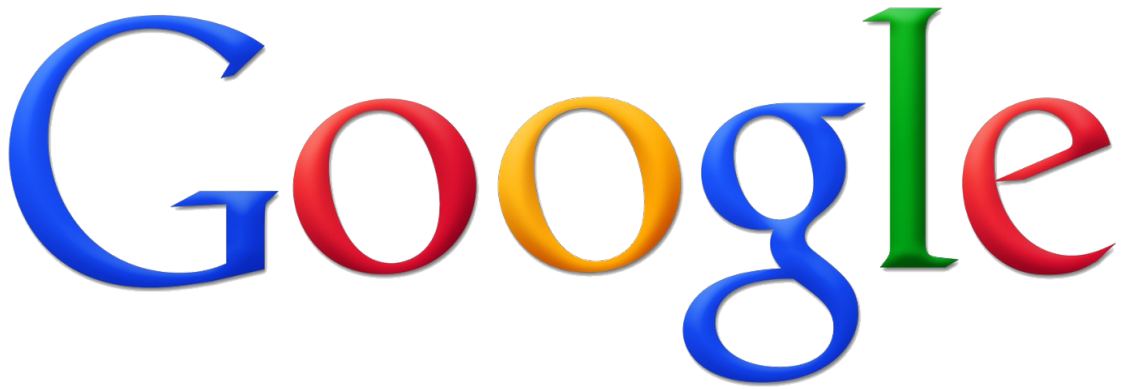




Голосование по большинству и усреднение

Majority vote

- Какой из двух логотипов более старый?



Majority vote

- Как выглядит корпус Вышки в Перми?

Majority vote

- Покоординатный спуск — это метод оптимизации 1-го или 2-го порядка?

Majority vote

- Дано: N базовых алгоритмов $b_1(x), \ldots, b_N(x)$
- Композиция: класс, за который проголосовало больше всего базовых алгоритмов

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{n=1}^{N} [b_n(x) = y]$$

Усреднение наблюдений

- Наблюдение: усреднение результатов повышает их точность
- Измерение артериального давления
- Измерение скорости света
- Усреднение соседних пикселей изображения

Усреднение наблюдений

- Сколько лет факультету компьютерных наук?

Усреднение наблюдений

- Сколько метров в 1 сажени?

Усреднение наблюдений

- Сколько лет лектору?

Усреднение наблюдений

- Сколько всего стран в мире?

Композиции моделей

Общий вид: классификация

- $b_1(x), \ldots, b_N(x)$ — базовые модели
- Каждая хотя бы немного лучше случайного угадывания
- Композиция: голосование по большинству (majority vote)

$$a_N(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{n=1}^{N} [b_n(x) = y]$$

Общий вид: регрессия

- $b_1(x), \ldots, b_N(x)$ — базовые модели
- Каждая хотя бы немного лучше случайного угадывания
- Композиция: усреднение

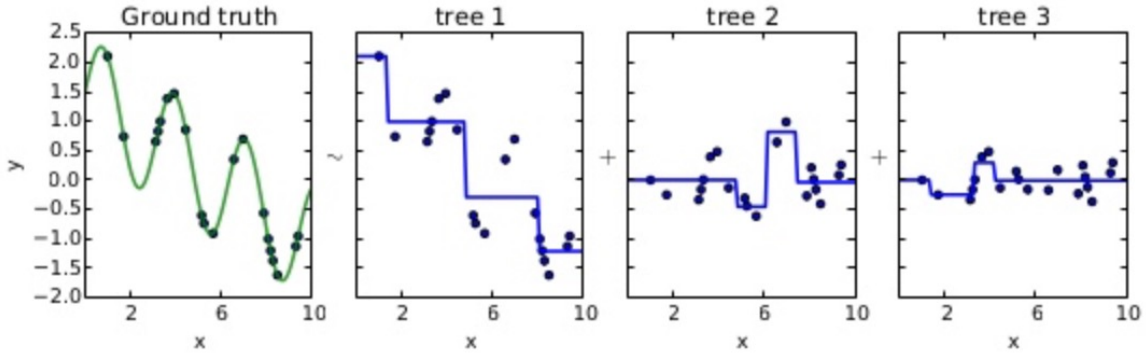
$$a_N(x) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} b_n(x)$$

Базовые модели

- $b_1(x), \ldots, b_N(x)$ — базовые модели
- Как на одной выборке построить N различных моделей?
- Вариант 1: обучить их независимо на разных подвыборках
- Вариант 2: обучать последовательно для корректировки ошибок

Бустинг

- Каждая следующая модель исправляет ошибки предыдущих
- Например, градиентный бустинг



Бэггинг

- Bagging (bootstrap aggregating)
- Базовые модели обучаются независимо
- Каждый обучается на подмножестве обучающей выборки
- Подмножество выбирается с помощью бутстрапа

Бутстрап

- Выборка с возвращением
- Берём ℓ элементов из X
- Пример: $\{x_1, x_2, x_3, x_4\} \to \{x_1, x_2, x_2, x_4\}$
- В подвыборке будет ℓ объектов, из них около 63.2% уникальных
- Если объект входит в выборку несколько раз, то мы как бы повышаем его вес

Случайные подпространства

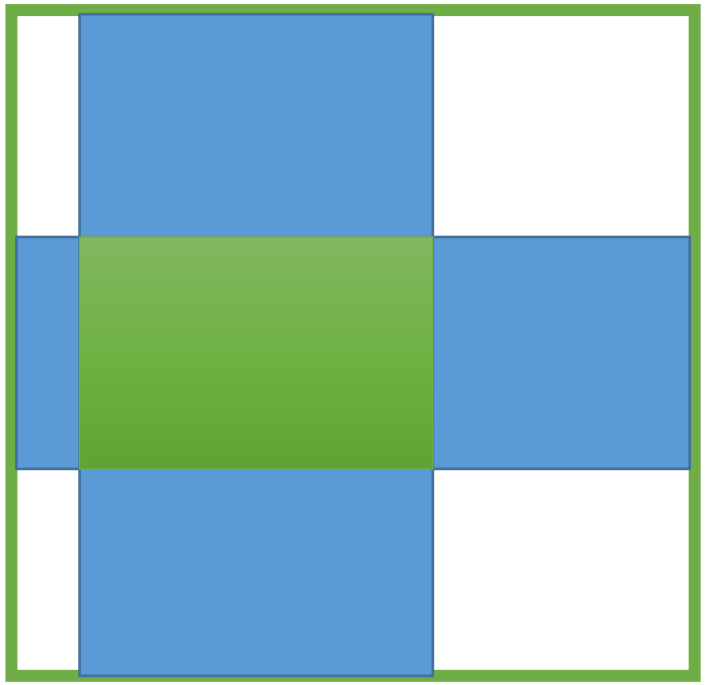
- Выбираем случайное подмножество признаков
- Обучаем модель только на них

Случайные подпространства

- Выбираем случайное подмножество признаков
- Обучаем модель только на них
- Может быть плохо, если имеются важные признаки, без которых невозможно построить разумную модель

Виды рандомизации

- Бэггинг: случайная подвыборка
- Случайные подпространства: случайное подмножество признаков



Резюме

- Будем объединять модели в композиции через усреднение или голосование большинством
- Бэггинг — композиция моделей, обученных независимо на случайных подмножествах объектов
- Можно ещё рандомизировать по признакам
- Как лучше всего?

Смещение и разброс моделей

Разложение ошибки на смещение и разброс

$$L(\mu) = \underbrace{\mathbb{E}_{x,y}\left[\left(y - \mathbb{E}[y \mid x]\right)^2\right]}_{\text{шум}} +$$

$$+ \underbrace{\mathbb{E}_x\left[\left(\mathbb{E}_X\left[\mu(X)\right] - \mathbb{E}[y \mid x]\right)^2\right]}_{\text{смещение}} + \underbrace{\mathbb{E}_x\left[\mathbb{E}_X\left[\left(\mu(X) - \mathbb{E}_X\left[\mu(X)\right]\right)^2\right]\right]}_{\text{разброс}}$$

- Разберём на уровне идеи

Разложение ошибки на смещение и разброс

- Ошибка модели складывается из трёх компонент
- Шум (noise) — характеристика сложности и противоречивости данных

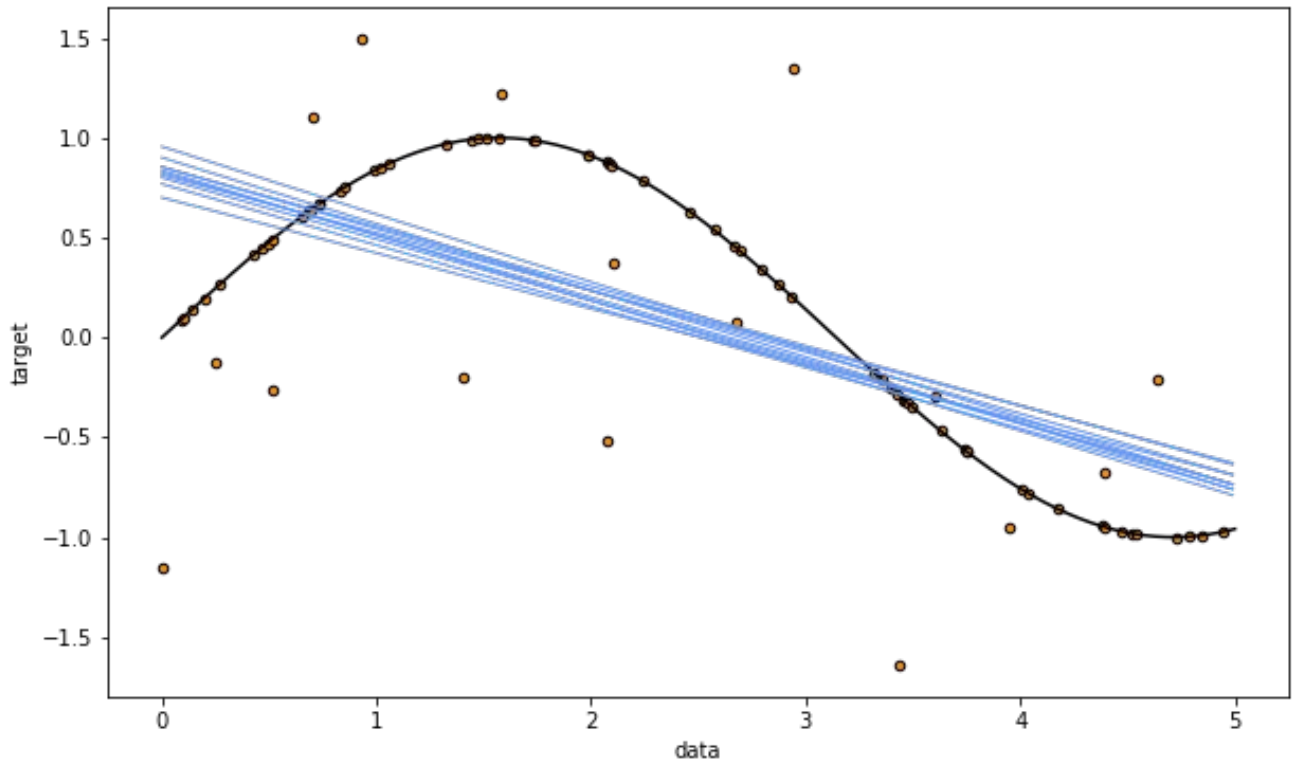
Разложение ошибки на смещение и разброс

- Ошибка модели складывается из трёх компонент
- Шум (noise) — характеристика сложности и противоречивости данных
- Смещение (bias) — способность модели приблизить лучшую среди всех возможных моделей

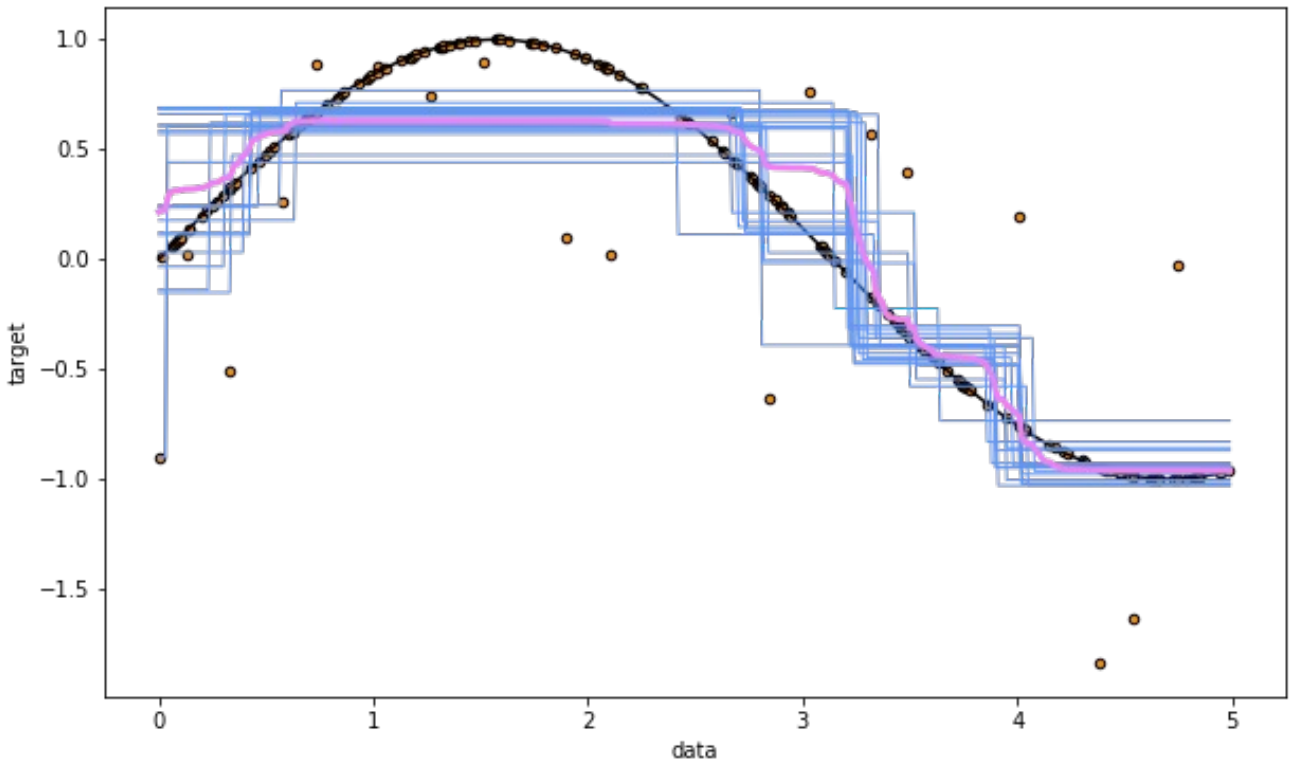
Разложение ошибки на смещение и разброс

- Ошибка модели складывается из трёх компонент
- Шум (noise) — характеристика сложности и противоречивости данных
- Смещение (bias) — способность модели приблизить лучшую среди всех возможных моделей
- Разброс (variance) — устойчивость модели к изменениям в обучающей выборке

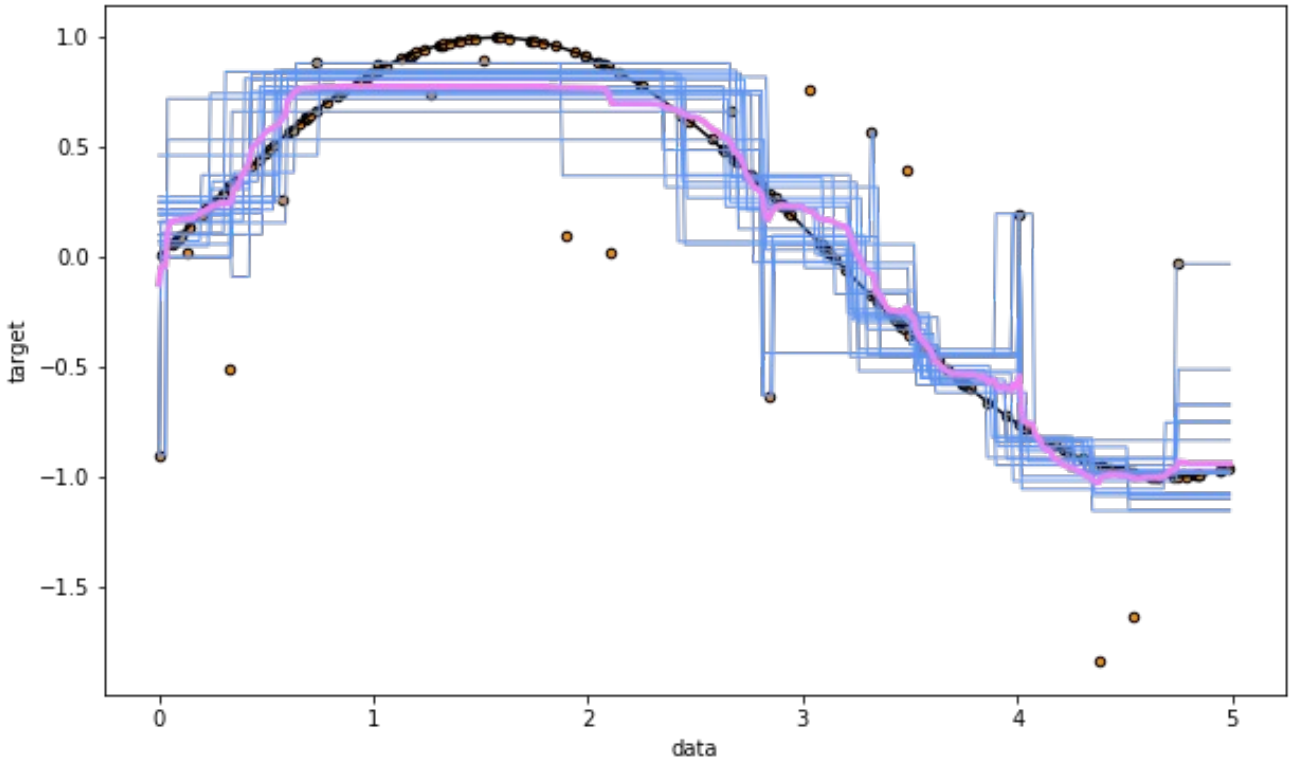
Смещение и разброс: линейная модель



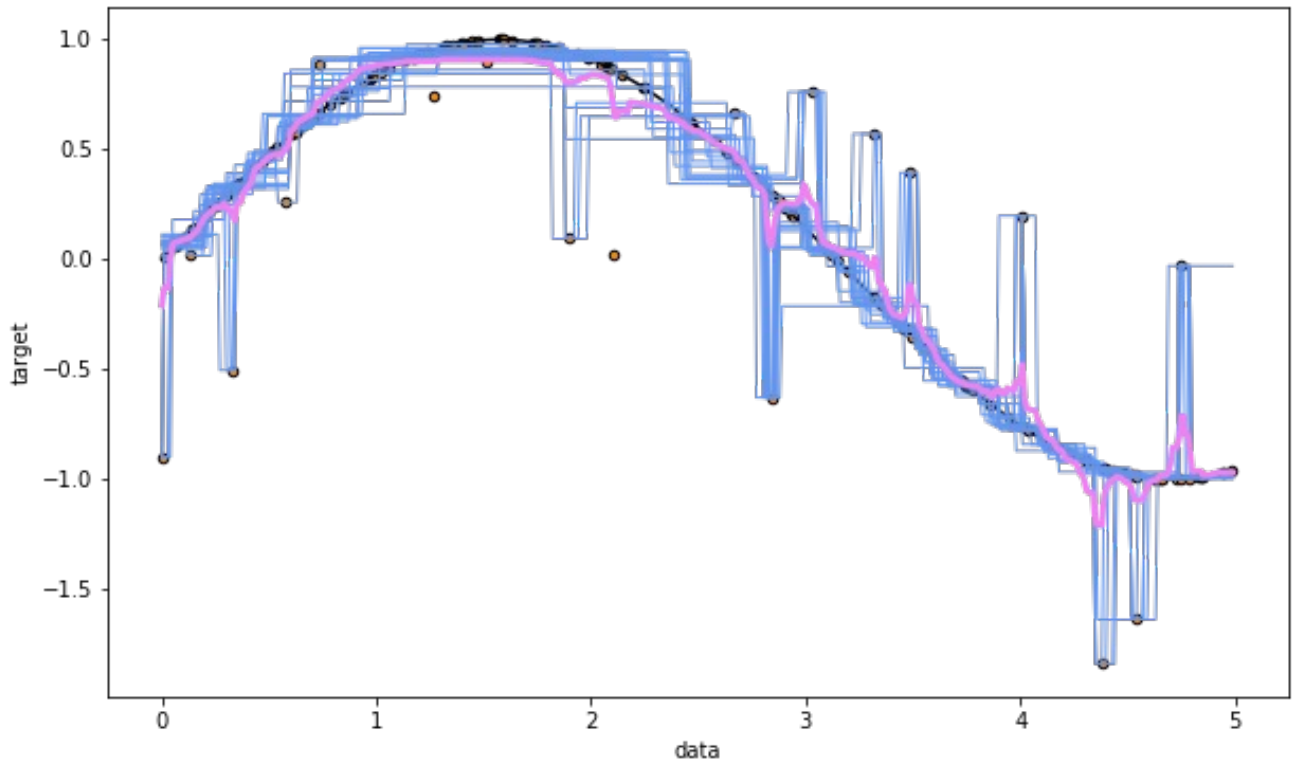
Смещение и разброс: деревья



Смещение и разброс: деревья



Смещение и разброс: деревья



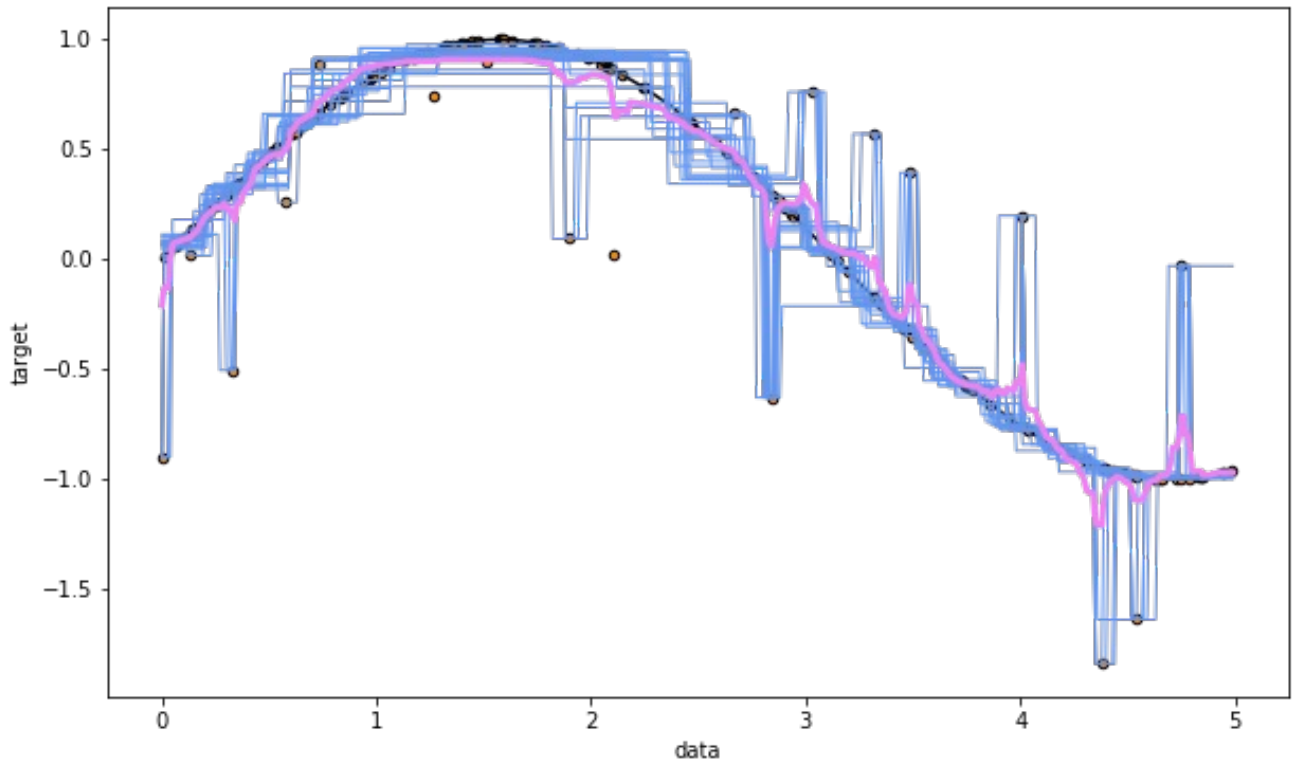
Бэггинг

- Смещение $a_N(x)$ такое же, как у $b_n(x)$
- Разброс $a_N(x)$:

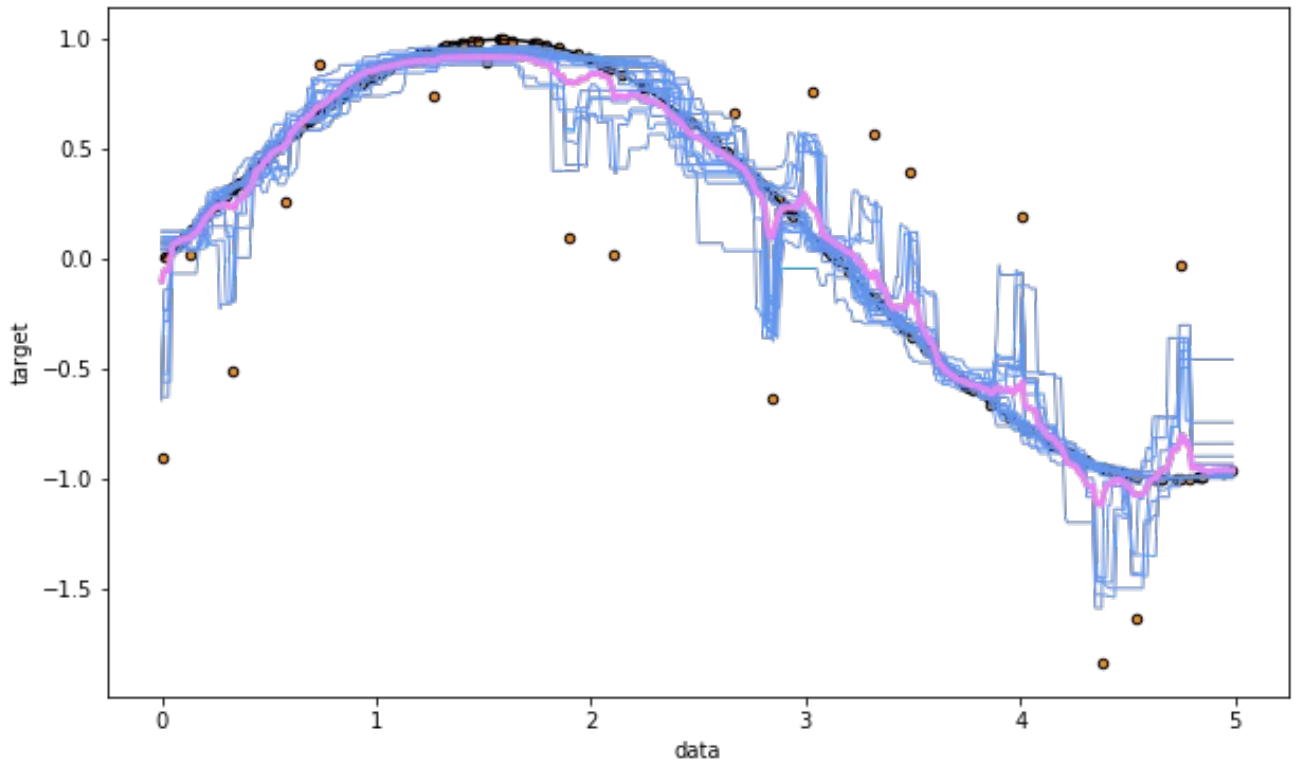
$$\frac{1}{N}\left(\text{разброс } b_n(x)\right) + \text{ковариация}\left(b_n(x), b_m(x)\right)$$

- Если базовые модели независимы, то разброс уменьшается в N раз!
- Чем более похожи выходы базовых моделей, тем меньше эффект от построения композиции

Смещение и разброс: деревья



Смещение и разброс: бэггинг



Случайный лес

Жадный алгоритм

$\mathrm{SplitNode}(m, R_m)$

1. Если выполнен критерий останова, то выход
2. Ищем лучший предикат: $j, t = \arg\min_{\mathrm{j,t}} Q(R_m, j, t)$
3. Разбиваем с его помощью объекты: $R_\ell = \left\{\{(x, y) \in R_m | \left[x_j < t\right]\right\}$, $R_r = \left\{\{(x, y) \in R_m | \left[x_j \geq t\right]\right\}$
4. Повторяем для дочерних вершин: $\mathrm{SplitNode}(\ell, R_\ell)$ и $\mathrm{SplitNode}(r, R_r)$

Жадный алгоритм

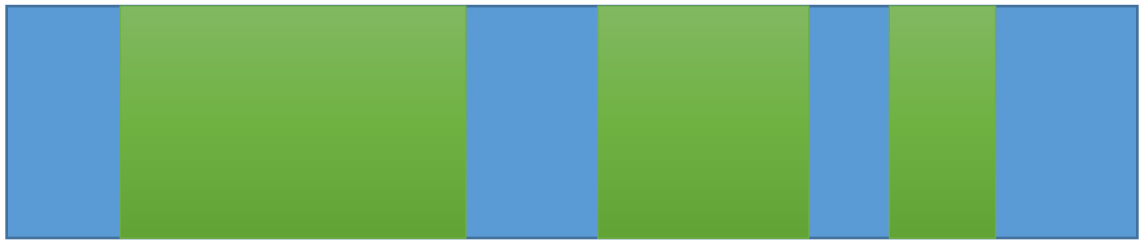
$\mathrm{SplitNode}(m, R_m)$

1. Если выполнен критерий останова, то выход
2. Ищем лучший предикат: $j, t = \arg\min_{\mathrm{j,t}} Q(R_m, j, t)$
3. Разбиваем с его помощью объекты: $R_\ell = \left\{\{(x, y) \in R_m | \left[x_j < t\right]\right\}$, $R_r = \left\{\{(x, y) \in R_m | \left[x_j \geq t\right]\right\}$
4. Повторяем для дочерних вершин: $\mathrm{SplitNode}(\ell, R_\ell)$ и $\mathrm{SplitNode}(r, R_r)$

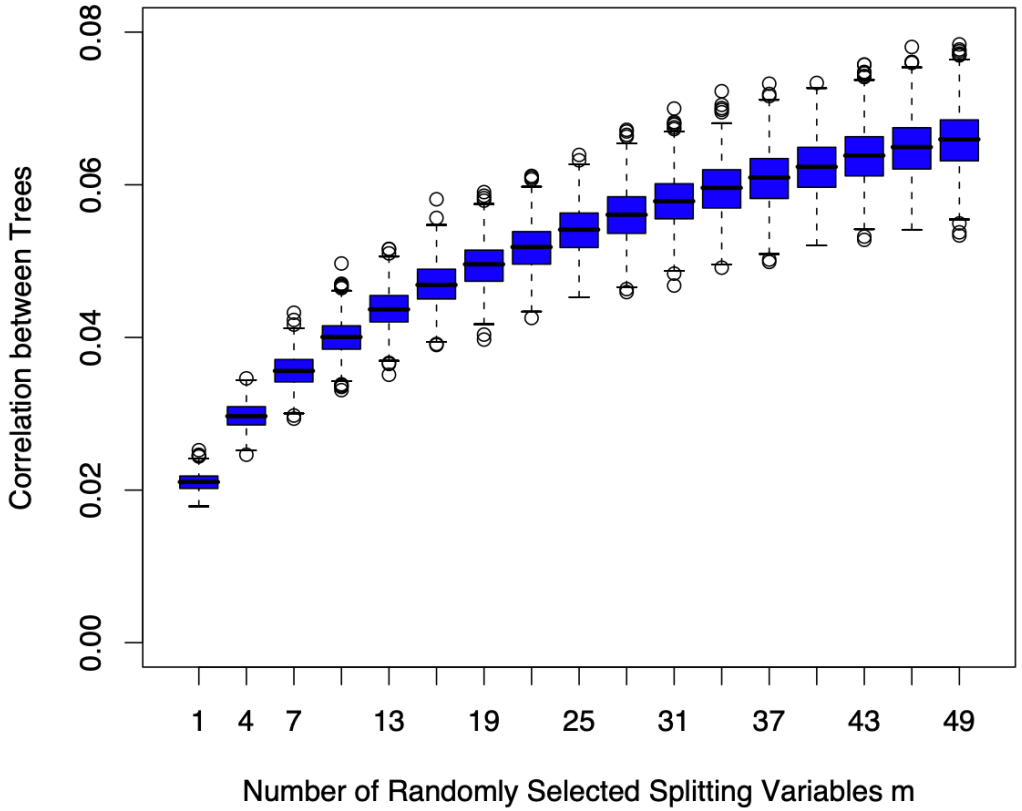
Выбор предиката

$$j, t = \arg\min_{\text{j,t}} Q(R_m, j, t)$$

- Будем искать лучший предикат среди случайного подмножества признаков размера q



Корреляция между деревьями



Hastie, Tibshirani, Friedman. The Elements of Statistical Learning.

Корреляция между деревьями

Рекомендации для q:

- Регрессия: $q = \frac{d}{3}$
- Классификация: $q = \sqrt{d}$

Случайный лес (Random Forest)

Для $n = 1, \dots, N$:

1. Сгенерировать выборку $\tilde{X}$ с помощью бутстрапа
2. Построить решающее дерево $b_n(x)$ по выборке $\tilde{X}$
3. Дерево строится, пока в каждом листе не окажется не более n_{min} объектов
4. Оптимальное разбиение ищется среди q случайных признаков

Случайный лес (Random Forest)

Для $n = 1, \dots, N$:

1. Сгенерировать выборку $\tilde{X}$ с помощью бутстрапа
2. Построить решающее дерево $b_n(x)$ по выборке $\tilde{X}$
3. Дерево строится, пока в каждом листе не окажется не более n_{min} объектов
4. Оптимальное разбиение ищется среди q случайных признаков

Выбираются заново при каждом разбиении!

Случайный лес (Random Forest)

- Регрессия:

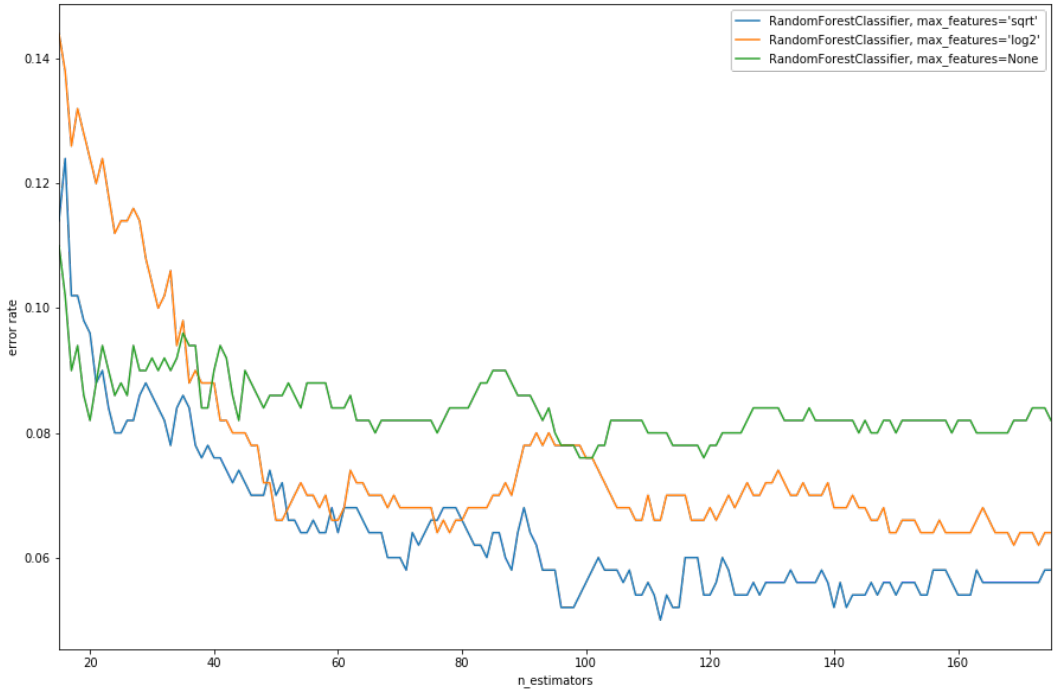
$$a(x) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} b_n(x)$$

- Классификация:

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{n=1}^{N} [b_n(x) = y]$$

Универсальный метод

- Ошибка сначала убывает, а затем выходит на один уровень
- Случайный лес не переобучается при росте N



Out-of-bag

- Каждое дерево обучается примерно на 63% данных
- Остальные объекты — как бы тестовая выборка для дерева
- X_n — обучающая выборка для $b_n(x)$
- Можно оценить ошибку на новых данных:

$$Q_{test} = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} L\left(y_i, \frac{1}{\sum_{n=1}^{N}[x_i \notin X_n]}\sum_{n=1}^{N}[x_i \notin X_n]b_n(x_i)\right)$$

Важность признаков

- Перестановочный метод для проверки важности j-го признака
- Перемешиваем соответствующий столбец в матрице «объекты-признаки» для тестовой выборки
- Измеряем качество модели
- Чем сильнее оно упало, тем важнее признак

Резюме

- Случайный лес — метод на основе бэггинга, в котором делается попытка повысить разнообразие деревьев
- Метод практически без гиперпараметров
- Можно оценить обобщающую способность без тестовой выборки