Föreläsning 3 - Trädmodeller

Josef Wilzen

2020-08-17

Outline

Introduktion

- Denna vecka:
  - Trädmodeller
  - Naive Bayes, k närmaste grannar, ensemblemetoder
- Nästa vecka: Neurala nätverk

Övervakad inlärning - Klassificering

- Målet är att dela upp objekt i ett antal förutbestämda klasser
- Ex:
  - Upptäcka spam-mail baserat på texten i mailen
  - Klassificera god- eller elakartad tumör baserat på medicinska bilder

Exempeldata

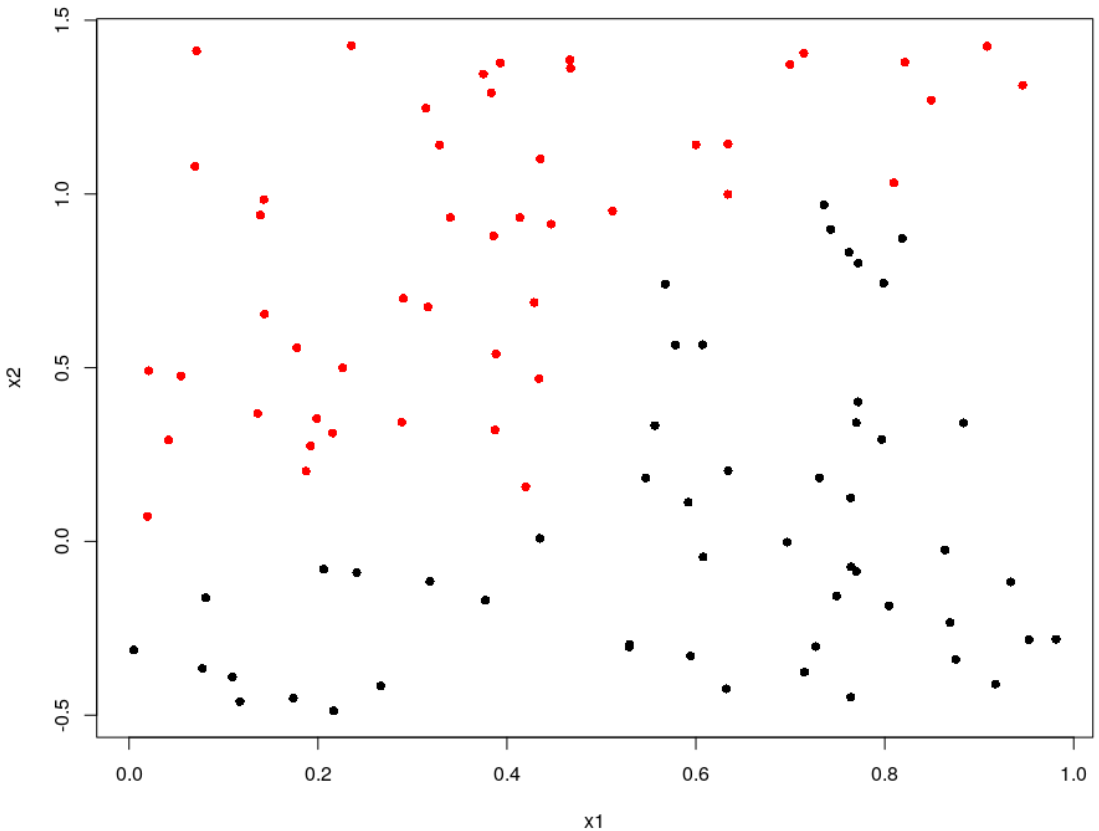
Klassificerarens uppgift är att anpassa en målfunktion f (att bygga upp en modell f) som kartlägger varje attributmängd x till en av förbestämda klasser y

ID	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	y
Name	Body temperature	Skin cover	Gives birth	Aquatic creature	Aerial creature	Has legs	Hibernates	Class label
human	warm-blooded	hair	yes	no	no	yes	no	mammal
python	cold-blooded	scales	no	no	no	no	yes	non-mammal
salmon	cold-blooded	scales	no	yes	no	no	no	non-mammal
whale	warm-blooded	hair	yes	yes	no	no	no	mammal
frog	cold-blooded	none	no	semi	no	yes	yes	non-mammal
komodo	cold-blooded	scales	no	no	no	yes	no	non-mammal
bat	warm-blooded	hair	yes	no	yes	yes	yes	mammal
pigeon	warm-blooded	feathers	no	no	yes	yes	no	non-mammal
cat	warm-blooded	fur	yes	no	no	yes	no	mammal
shark	cold-blooded	scales	yes	yes	no	no	no	non-mammal
turtle	cold-blooded	scales	no	semi	no	yes	no	non-mammal
penguin	warm-blooded	feathers	no	semi	no	yes	no	non-mammal
porcupine	warm-blooded	quills	yes	no	no	yes	yes	mammal
eel	cold-blooded	scales	no	yes	no	no	no	non-mammal
salamander	cold-blooded	none	no	semi	no	yes	yes	non-mammal

Linjära och Icke-linjära modeller

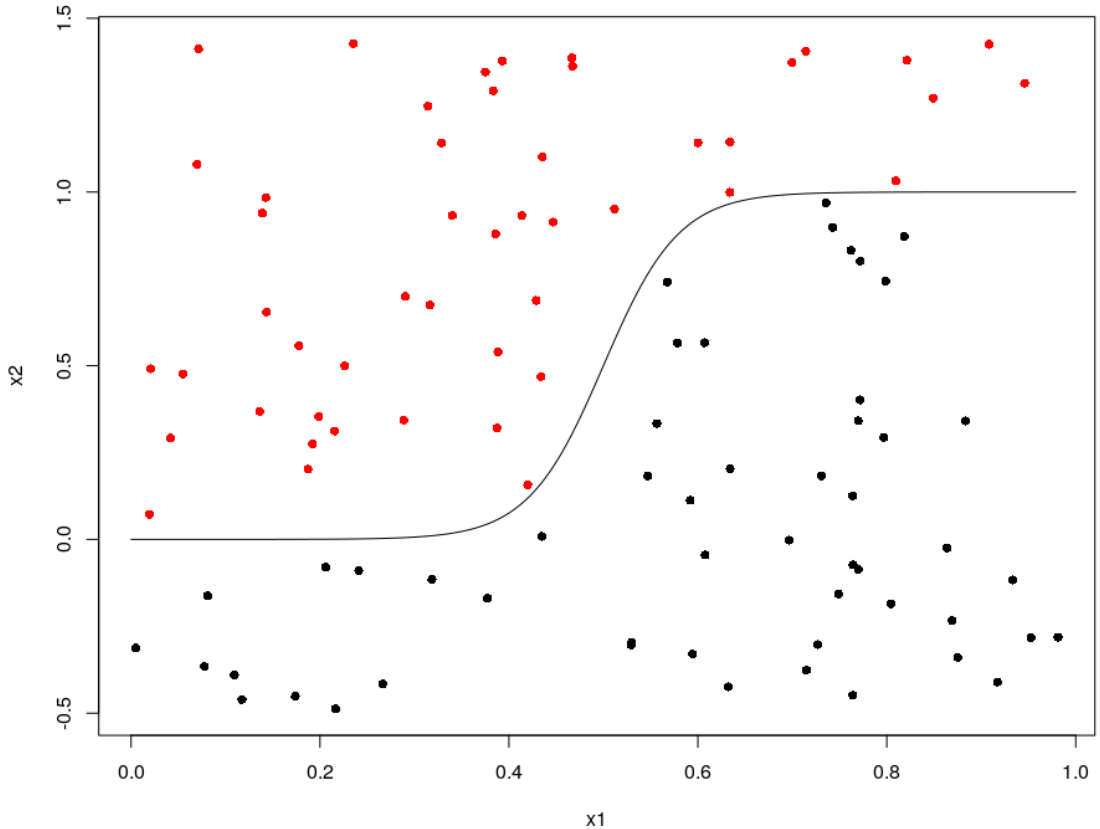
- Klassificering och regression:
- Linjära modeller:
  - Linjär regression
  - (Linjär) logistisk regression
  - Lätta att skatta och tolka
  - Vissa problem går inte att lösa!

Linjära och Icke-linjära modeller



100 obs, två förklarande variabler x_1 och x_2, y är binär

Linjära och Icke-linjära modeller



Beslutsregel:

$$x_2 \cdot (1 + exp(-25 \cdot (x_1 - 0.5))) > 1$$

Linjära och Icke-linjära modeller

Linjär regression:

- givet $X = (x_1, x_2, \ldots, x_p)$, y: $y = X\beta$
- Vi kan transformera variablerna i X
- Polynomregression: $X = \left(x, x^2, x^3, \ldots, x^p\right)$
- Andra exempel: $log\,(x)$, $\sqrt{x}$, $cos\,(x)$, $exp\,(x)$, interaktioner, stegfunktioner, diskretisering, dummy-kodning
- Kallas i maskininlärning för "feature engineering"
  - Svårt att veta transformation vi ska göra för ett givet problem!
  - Svårt med komplexa datastrukturer: text, bilder mm

Linjära och Icke-linjära modeller

Inom maskininlärning:

- Olika metoder för att kunna anpassa mer generella icke-linjära modeller
- Vi vill "automatiskta" transformationer av de förklarande variablerna
  - Som hjälper oss att prediktera y
- Vi vill kunna hantera många variabler, och av olika typ.

Icke-linjära modeller

Exempel:

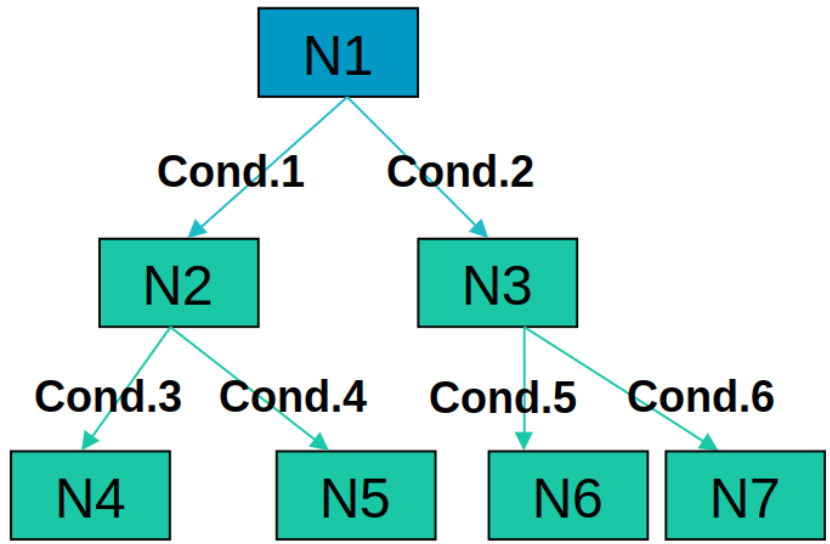
- Trädmodeller
- Neurala nätverk
- Splines
- Local regression
- Generlized additive models (GAM)
- Support vector machines
- K-närmaste grannar

Trädmodeller

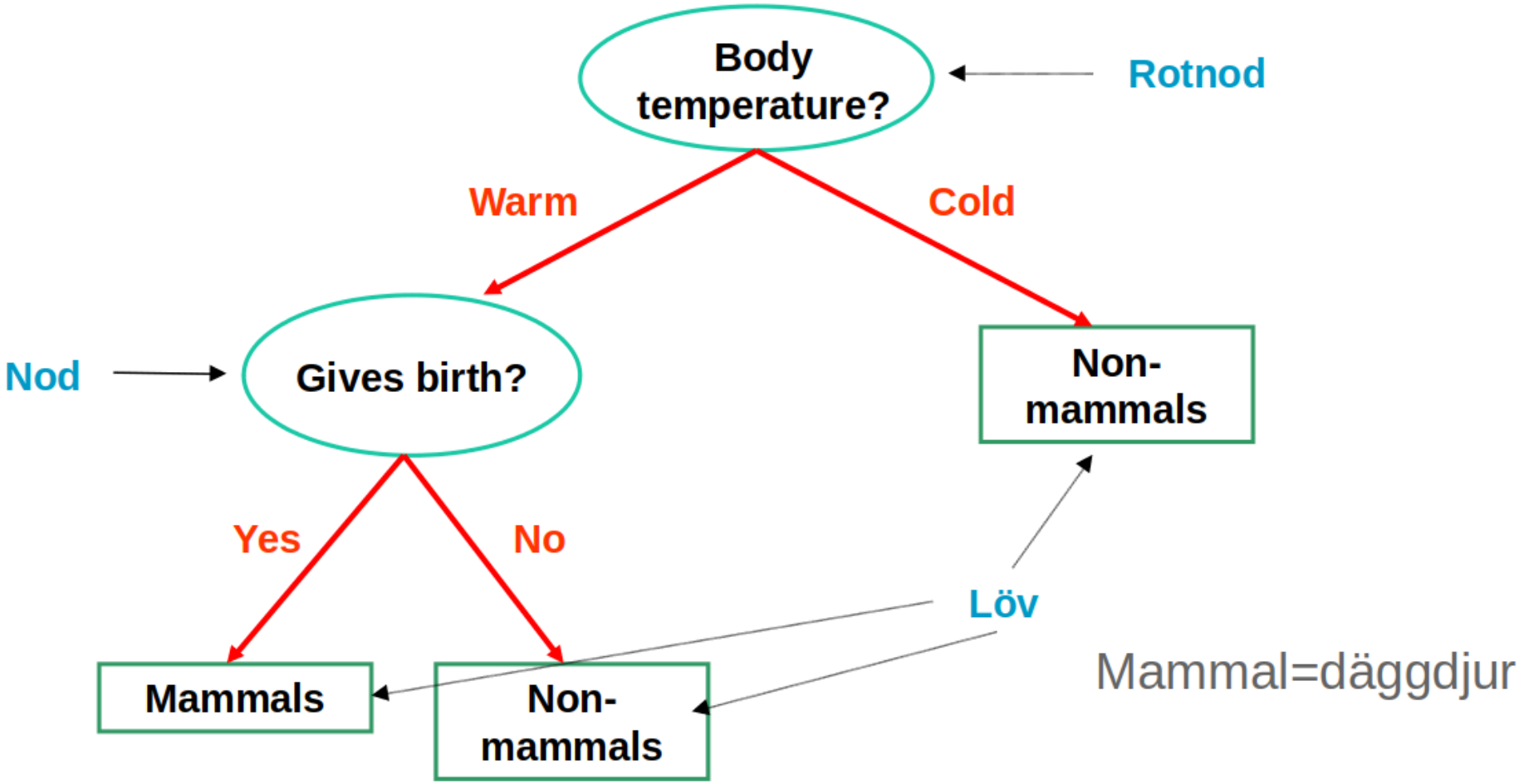
- Modellen defineras som ett träd (datorstruktur), ofta binärt
- Icke-parametrisk metod
- Två steg:
  1. Dela upp variabelrummet i icke överlappade regioner $\{R_1, R_2, R_3, \ldots, R_J\}$: axelparallella rektanglar
  2. Alla obs i en regioner har samma anpassade värde
- Både regression och klassificering
- Hur ska vi dela upp? Vilktiga principer:
  - recursive binary splitting
  - top-down, greedy

Beslutsträdets uppbyggnad

- Rotnod (N1)
- Noder (alla N)
- Löv/slutnoder (N4-N7)
- Regler
- Varje löv har ett tilldelat klassvärde baserat på någon röstningsmetod



Exempel

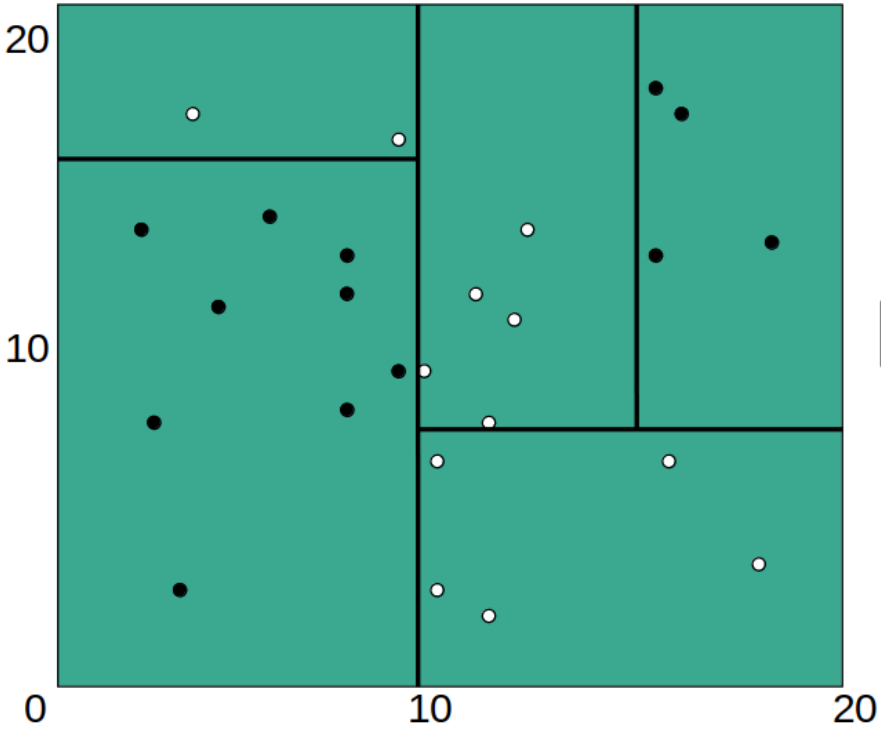

Body temperature?
Rotnod
Warm
Cold
Nod
Gives birth?
Non-mammals
Yes
No
Löv
Mammals
Non-mammals
Mammal=däggdjur

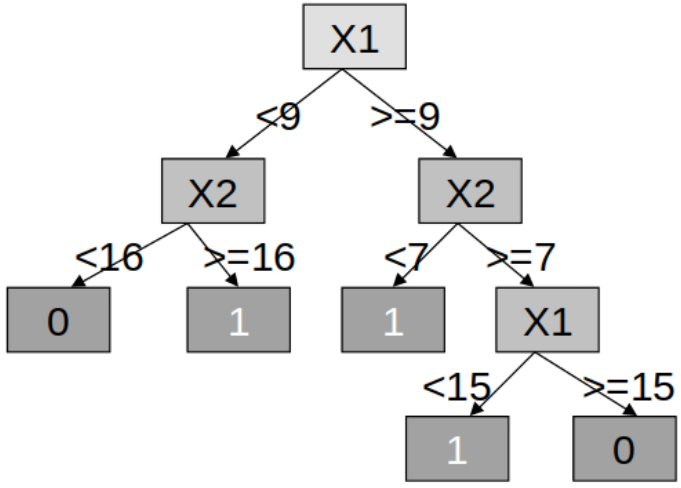
Hur bygger man upp ett beslutsträd?

Hunt's algoritm

- Givet Datamängd $D_t = \{(X_{1i}, \ldots, X_{pi}, Y_i), i = 1 \ldots n\}$, t-akuell nod
- Om alla Y_i är lika, markera t som löv med klassvärde Y_i
- Om inte, använd **testregeln** för att dela upp Dt i Dt1...Dtn, och sedan kör Hunt(Dt1,t1),..., Hunt(Dtn,tn) tills alla noder fått en klass
  - Recursive partioning

Exempel





Hunt's algoritm forts.

- Alternativt avslutskriterium:
  - Alla objekt i en nod har identiska attributvärden
  - Noden deklareras som ett löv med klassvärde av majoriteten
- Olika testregler:
  - Binära attribut –> binär uppdelning
  - Nominala attribut –> binär eller mångfaldig uppdelning
  - Ordinala attribut –> uppdelning som bevarar attributsföljden
  - Interval-attribut –> uppdelning till uteslutande intervall

Sammanfattning av skapandet

- Dela upp observationer för att separera angivna klasser
  - Olika testregler ska jämföras
- Att avsluta processen
  1. Fortsätt dela upp i noder tills alla observationer i löven hör till samma klass, eller har exakt samma attributvärden
  2. Bestäm en regel för tidig avslutning

CART

- CART = Classification and Regression Tree
- Skillnader mellan kontinuerliga och diskreta utfall

CART - Regressionsträd

- Minimera felfunktionen $\sum (y_i - f_i)^2$ är dyrt för alla olika f_i och uppdelningar
- Istället: Leta efter en variabel (x) och en uppdelning (s) som minimerer

$$R_1(j,s) = \{x | x_j \leq s\} \qquad R_2(j,s) = \{x | x_j > s\}$$

$$\min_{j,s} \left[\min_{c_1} \sum_{x_i \in R_{1(j,s)}} (y_i - c_1)^2 + \min_{c_2} \sum_{x_i \in R_{2(j,s)}} (y_i - c_2)^2 \right]$$

c_j skattas ofta som medelvärdet av obs i region R_j.

CART - Regressionsträd

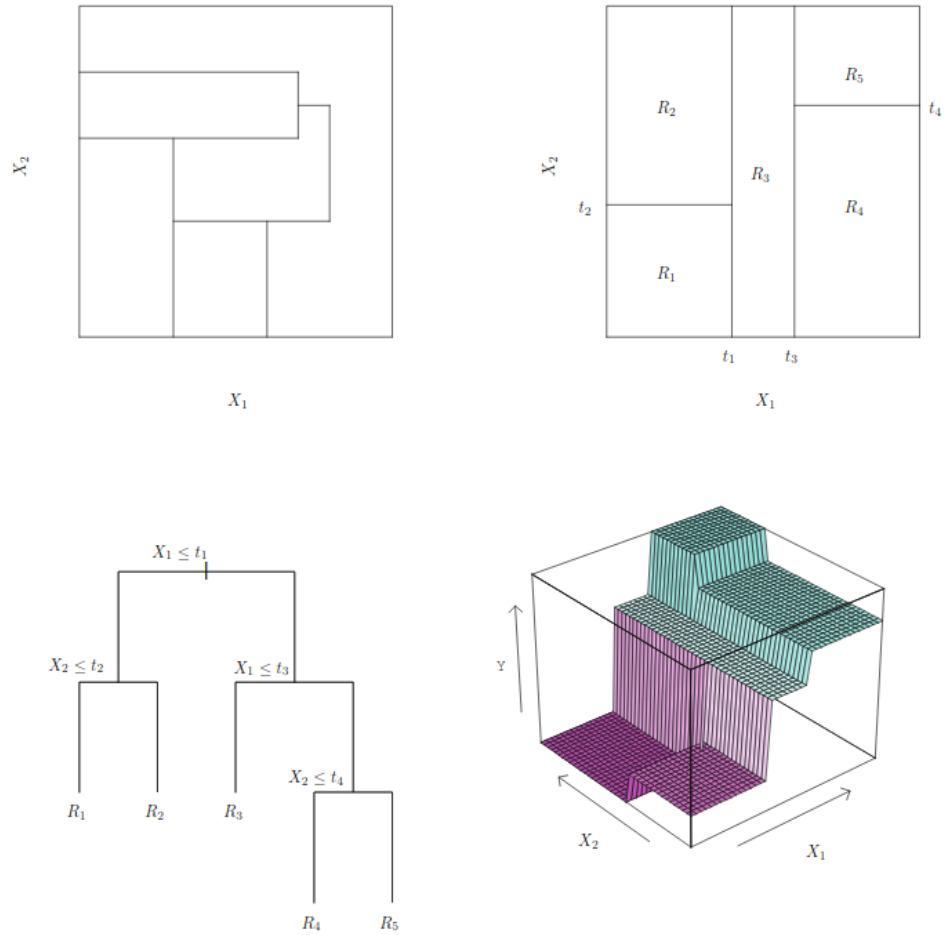


FIGURE 8.3. Top Left: *A partition of two-dimensional feature space that could not result from recursive binary splitting.* Top Right: *The output of recursive binary splitting on a two-dimensional example.* Bottom Left: *A tree corresponding to the partition in the top right panel.* Bottom Right: *A perspective plot of the prediction surface corresponding to that tree.*

Från "An Introduction to Statistical Learning with Applications in R" av Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani

CART - Klassificeringsträd

Vi behöver ett mått för att utvädera om en regel är bra eller inte!
Definiera proportioner:

$$p_k = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^{s} 1_{(y_i = k)}$$

Definiera föroreningsmått:

- Entropy $= \sum_{i=0}^{c-1} p_i \cdot log_2(p_i)$
  - Små värden bra
- Gini $= 1 - \sum_{i=0}^{c-1} p_i^2$
  - Total varians för alla klasser, små värden bra
- Felkvot (misclassification error) $= 1 - max(p_i)$
  - Små värden bra

CART - Klassificeringsträd

Välj uppdelning som maximerar informationsvinst

$$\Delta = I(parent) - \sum_{j=1}^{k} \frac{N(v_j)}{N} I(v_j)$$

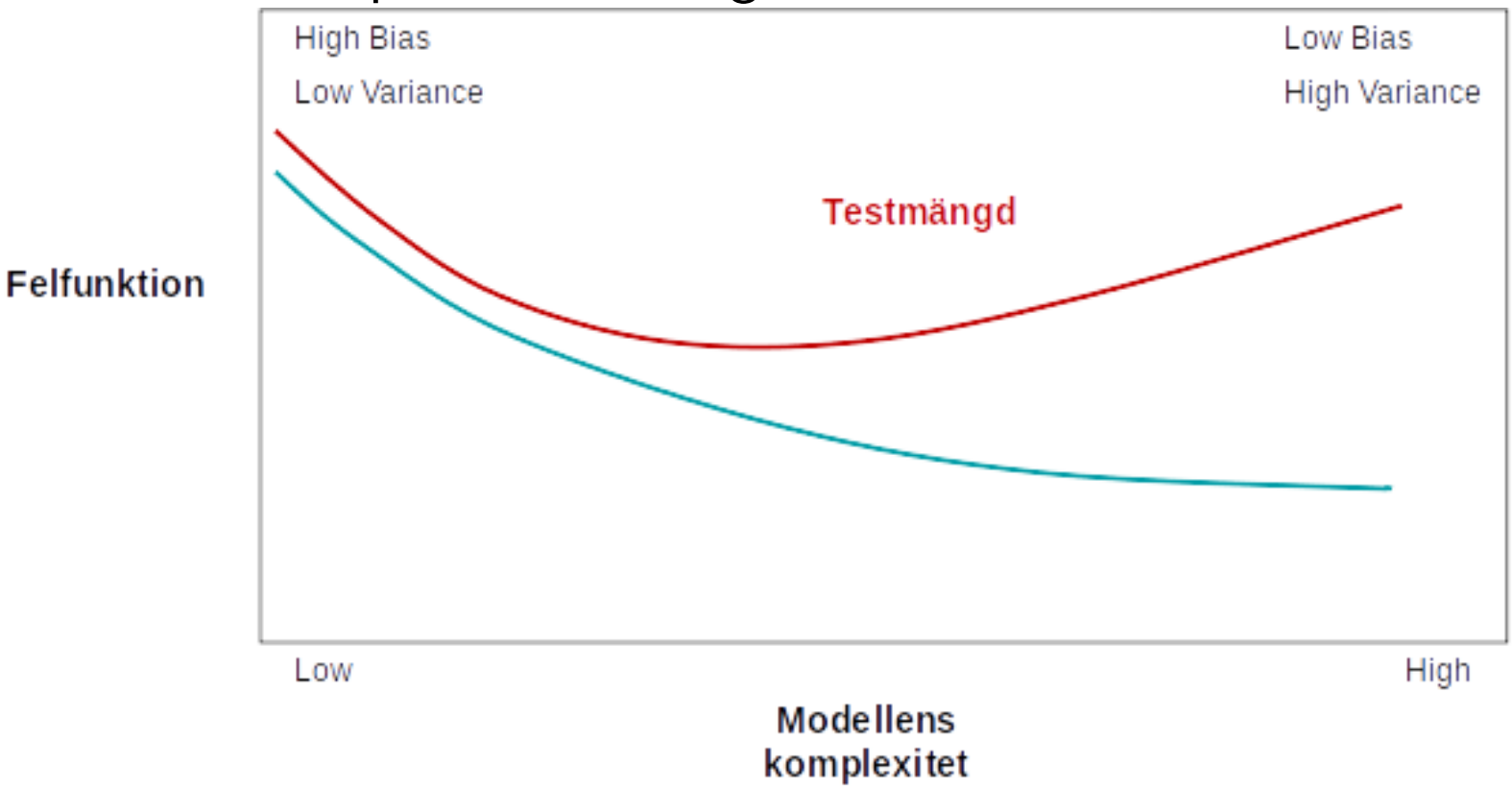
- där $I(\cdot)$ är ett föroreningsmått
- N är antal objekt i föräldranoden
- v_j är barnnod j
- $\frac{N(v_j)}{N}$ relativa vikter för varje barnnod
- $N(v_j)$ är antal objekt

Klassificeringsträd

- Prediktioner görs med majoritetsröstning om det finns blandade klasser i ett löv
- Vi vill att löven i så hög utsträckning ska ha obs med en klass
- Entropy och Gini är bättre föroeringsmått, då ge ger renare löv
  - Används vid träning
- Felkvot använd ofta för att utvärdera modellen på testdata

Regularisering

Trädmodeller överpassar lätt! Hög varians!



Hur motverkas överanpassning?

- Förbeskärning (pre-pruning):
  - Sluta expandera trädet när informationsvinsten är lägre än en vald tröskel
  - Kräv ett visst minsta antal obs i varje löv
  - Problem: Vilken tröskel ska väljas? Hantera liten vinst ett steg $\rightarrow$ stor vinst nästa steg?
- Efterbeskärning (post-pruning):
  - Beskär ett helt utväxt träd $\rightarrow$ ersätt ett delträd med ett löv

Efterbeskärning - Klassificeringsträd

Ett stort träd $\rightarrow$ komplex modell $\rightarrow$ överanpassning

1. Välj ett delträd, T, där $|T|$ är antalet löv i T
2. Minimera

$$C_\alpha(T) = \sum_{v \in Löv\, i\, T} N(v) \cdot I(v) + \alpha |T|$$

- Detta kallas för "cost complexity pruning"
- Använd korsvalidering för att skatta α, välj det värde som ger minst valideringsfel
- Notera: detta är likt idén i lasso

Skatta regressionsträd med cost complexity pruning

Algorithm 8.1 *Building a Regression Tree*

1. Use recursive binary splitting to grow a large tree on the training data, stopping only when each terminal node has fewer than some minimum number of observations.

2. Apply cost complexity pruning to the large tree in order to obtain a sequence of best subtrees, as a function of α.

3. Use K-fold cross-validation to choose α. That is, divide the training observations into K folds. For each $k = 1, \ldots, K$:

   (a) Repeat Steps 1 and 2 on all but the kth fold of the training data.

   (b) Evaluate the mean squared prediction error on the data in the left-out kth fold, as a function of α.

   Average the results for each value of α, and pick α to minimize the average error.

4. Return the subtree from Step 2 that corresponds to the chosen value of α.

Från "An Introduction to Statistical Learning with Applications in R" av Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani

Kommentarer om beslutsträd

Linjär regression:

$$f(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{p} x_i \beta_i$$

Regressionsträd:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{M} c_i 1_{(x \in R_i)}$$

Kommentarer om beslutsträd

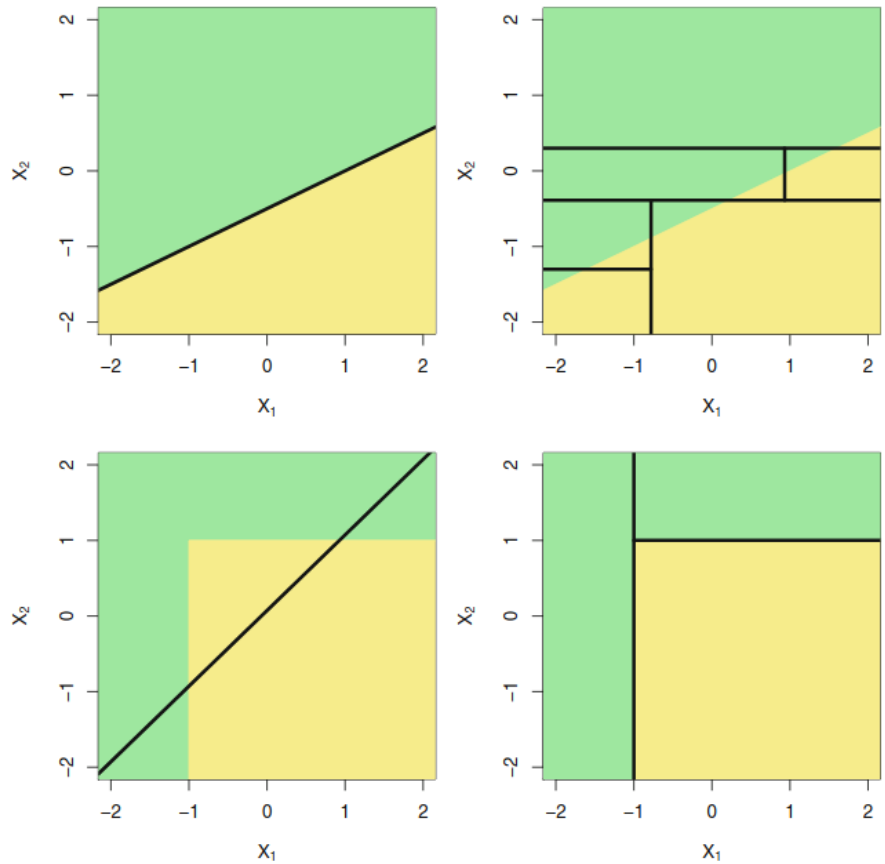


FIGURE 8.7. Top Row: *A two-dimensional classification example in which the true decision boundary is linear, and is indicated by the shaded regions. A classical approach that assumes a linear boundary (left) will outperform a decision tree that performs splits parallel to the axes (right).* Bottom Row: *Here the true decision boundary is non-linear. Here a linear model is unable to capture the true decision boundary (left), whereas a decision tree is successful (right).*

Från "An Introduction to Statistical Learning with Applications in R" av Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani

Kommentarer om beslutsträd

Fördelar:

- Lätta att förstå och tolka
- Klarar av olika responsvariabler
- Kräver inte så mycket datahantering innan
- Funkar på relativt stora dataset
- Icke-parameterisk metod: antal "parametrar" beror på data
- Automatisk variabelselektion
- Kan anpassa många olika sorters funktioner
  - Klarar av olika sorters variabler
  - Starkt korrelerade attribut påverkar inte

Kommentarer om beslutsträd

Nackdelar:

- Sämre prediktiv förmåga än vissa andra metoder
- Orubusta: överanpassar lätt
- Omöjligt att hitta det optimala trädet pga snåla algoritmer
- Vissa enkla funktioner kräver komplext träd: tex en linjär funktion

Kommentarer om beslutsträd

Förbättringar:

- Bagging
- Random forest
- Boosting
- BART: Bayesian Additive Regression Trees
  - Inte denna kurs

Avslut

- Frågor? Kommentarer?
- Kurshemsidan
- Labben