

732G57 Maskininlärning för statistiker

Föreläsning 5

Josef Wilzén

IDA, Linköping University, Sweden

- Linjära och icke-linjära modeller
- Trädmodeller
- Metoder för besultsträd
- Regularisering

Linjär regression till icke-linjär?

Förklarande variabler $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_p)$ och respons y .

Modellerear som $y = \mathbf{X}\beta$.

Ett sätt att hantera icke-linjära samband är att transformera \mathbb{X} .

Till exempel:

- Polynomregression
- Andra funktioner
- Interaktioner
- Stegfunktioner
- Diskretisering

Svårt att veta vilka transformationer man ska göra, svårt att transformera komplexa datastrukturer.

Icke-linjära modeller

Maskininlärning har gett oss många olika metoder för att anpassa mer generella icke-linjära modeller.

Målet är att hitta "automatiska" transformationer av de förklarande variablerna.

Ska kunna hantera många variabler av olika typer.

Exempel:

- Splines
- Local regression
- Generalized additive models
- K-närmaste grannar
- Trädmodeller
- Neurala nätverk
- Support vector machines

Idé: Dela upp variabelrummet i icke överlappande regioner (rektanglar), alla observationer i samma region har samma anpassade värde.

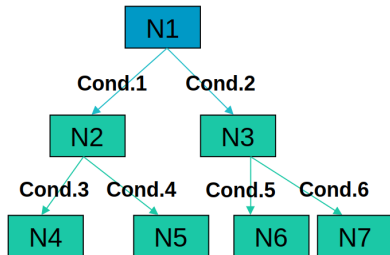
Reglerna för att hitta en specifik region kan beskrivas i en trädstruktur (binärt träd) → kallas för trädmodeller.

Skattning inom ett område sker oftast genom medelvärde eller typvärde.

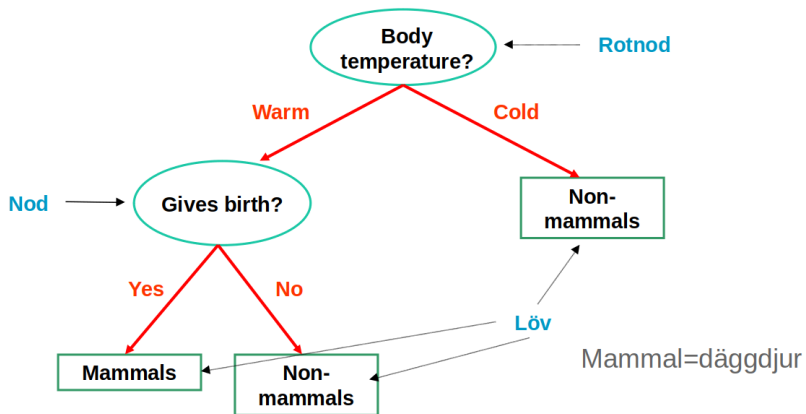
Hur delar vi upp variabelrummet på ett bra sätt?

Ett träd består av:

- Rotnod (N1)
- Noder (N*)
- Löv/slutnoder (N4-N7)
- Regler (Cond.1-Cond.6)
- Varje löv har ett tilldelat klassvärde



Beslutsträd Exempel



Att bygga ett träd

Hunt's algorithm

1. Givet en nuvarande datamängd $D_t = \{(X_i, Y_i), i = 1, \dots, n\}$ för den aktuella noden t .
2. Om alla Y_i är lika, markera t som ett löv och ge värdet Y_i .
3. Annars, använd en **testregel** för att dela upp D_t i flera delar D_{t_1}, \dots, D_{t_k} och kör algoritmen (steg 1) för alla dessa noder.

Denna approach kallas för *recursive binary splitting*.

Testregler:

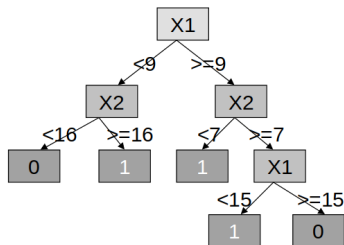
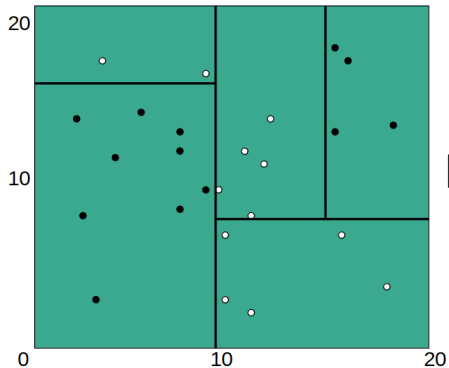
Binära attribut Binär uppdelning

Nominala attribut Binär eller mångfaldig uppdelning

Ordinala attribut Uppdelning som bevarar attributsföljden

Intervall attribut Uppdelning till icke-överlappande intervall

Att bygga ett träd - Exempel



Sammanfattning:

- Idé: Dela upp observationerna för att separera klasser.
- Uppdelningen sker genom att jämföra testregler.
- För att avsluta processen:
 - Dela upp tills alla observationer har samma klass
 - Alt 1. Dela upp tills alla attribut är lika.
 - Alt 2. Bestäm en regel för tidigt avslut.

Classification and Regression Trees (CART).

I grunden Hunt's algoritim.

Stöd för kontinuerliga och diskreta utfall.

Optimering för att välja bästa splitten.

Att försöka minimera RSS över alla möjliga partitioneringar och funktionsvärden är orimligt.

Istället kör vi med en girig algoritm, där vi vill hitta bästa variabeln x_j och uppdelning s genom att lösa följande problem:

$$\min_{j,s} \left[\min_{c_1} \sum_{x_i \in R_1(j,s)} (y_i - c_1)^2 + \min_{c_2} \sum_{x_i \in R_2(j,s)} (y_i - c_2)^2 \right],$$
$$R_1(j,s) = \{x \mid x_j < s\} \quad R_2(j,s) = \{x \mid x_j \geq s\},$$

c_1 och c_2 skattas oftast som medelvärdet av respektive region.

Finns effektiva algoritmer för att söka igenom bästa splittpunkten s för alla förklarande variabler.

CART - Regressionsträd

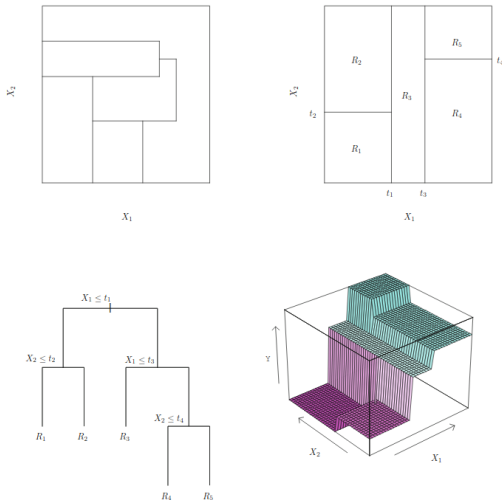


FIGURE 8.3. Top Left: A partition of two-dimensional feature space that could not result from recursive binary splitting. Top Right: The output of recursive binary splitting on a two-dimensional example. Bottom Left: A tree corresponding to the partition in the top right panel. Bottom Right: A perspective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

När det kommer till klassificering behöver vi ett nytt mått för att utvärdera om en regel är bra eller dålig.

Låt $p_{m,k} = \frac{1}{s} \sum_{i: x_i \in R_m} \mathbb{I}_{y_i=k}$ vara proportionen av träningsdata i region m som tillhör klass k .

Kriterier för att välja regioner:

Felkvot $E = 1 - \max_k (p_{m,k})$

Gini index $G = \sum_k p_{m,k}(1 - p_{m,k}) = 1 - \sum_k p_{m,k}^2$

Cross-entropy $D = - \sum_k p_{m,k} \log(p_{m,k})$

Välj nu den uppdelning som maximerar informationsvinsten

$$\Delta = I(\text{förälder}) - I(\text{barn}),$$
$$\Delta = I(\text{förälder}) - \sum_j \frac{N(R_j)}{N} I(R_j),$$

Där

$I(\cdot)$ är ditt valda mått (Felkvot, Gini, Entropy)

N antal objekt i föräldranoden

R_j är barnnod j

$N(R_j)$ antal objekt i barnnod j

Predikationer görs med majoritetsröstning. Vi vill helst att alla observationer i ett löv ska ha samma klass.

Vi stoppar utbyggnaden på samma sätt som i Hunt's algoritm.

Entropy och Gini är bättre mått, de ger renare löv.

Felkvoten används ofta för att utvärdera trädet på testdata.

Trädmodeller överanpassar väldigt lätt. Vilket ger en hög varians på framtida testdata!

Viktiga hyperparametrar:

- Trädets djup
- Minsta antal obs i en lövnod alt. minsta antal obs i en nod för att överväga en split av noden

Två olika sätt:

- Förbeskärning**
- Sluta expandera trädet när informationsvinsten är lägre än en vald tröskel.
 - Kräv ett visst minsta antal obs i varje löv.
- Efterbeskärning**
- Beskär ett helt utväxt träd, ersätt delträd med ett löv.

Använd CART för att ta växa fram ett stort träd T_0 på all träningsdata.

För varje $\alpha \geq 0$ finns ett delträd $T \subset T_0$ som minimerar kostanden

$$C_\alpha(T) = \sum_{R \in \text{Lövn i } T} N(R) \cdot I(R) + \alpha |T|,$$

där $|T|$ är antalet löv i T , $N(R_j)$ antal objekt i lövnod j . $I(\cdot)$ är ditt valda utvärderingsmått

Använd korsvalidering för att skatta α , välj det som ger minst valideringsfel.

Idén är lik LASSO.

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 $k = 1, \dots, K$:
 - (a) Repeat Steps 1 and 2 on all but the k th fold of the training data.
 - (b) Evaluate the mean squared prediction error on the data in the left-out k th 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 .
-

För regression har vi:

Linjär regression

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

Regressionsträd

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

Trädmodell eller linjär modell

För klassificering har vi:

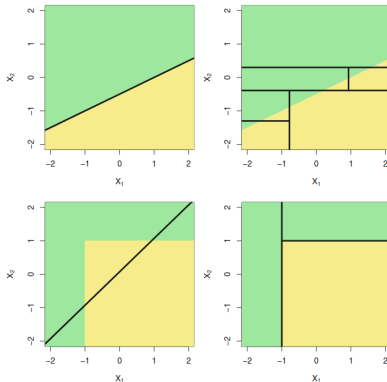


FIGURE 8.7. Top Row: A two-dimensional classification example in which the true decision boundary is linear, and is indicated by the shaded regions. A classical approach that assumes a linear boundary (left) will outperform a decision tree that performs splits parallel to the axes (right). Bottom Row: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

Fördelar:

- Lätta att förstå och tolka
- Klarar av olika responsvariabler
- Kräver inte så mycket datahantering innan
- Funkar på relativt stora dataset
- Icke-parametrisk metod
- Automatisk variabelselektion
- Lär sig variabelinteraktioner automatiskt
- Kan anpassa många olika sorters funktioner

Nackdelar:

- Sämre prediktiv förmåga än vissa andra metoder
- Orubusta: överanpassar lätt
- Omöjligt att hitta det optimala trädet
- Vissa enkla funktioner kräver ett komplext träd

Förbättringar:

- Bagging
- Random forest
- Boosting
- BART: Bayesian Additive Regression Trees