Deep Learning School

# Решающие деревья и композиции алгоритмов

# План лекции

- Решающие деревья
  - устройство дерева
  - анализ
- Композиции алгоритмов
  - бэггинг
  - стекинг
  - бустинг
- Градиентный бустинг
  - алгоритм обучения
  - преимущества и недостатки

# Решающие деревья

# Алгоритмы машинного обучения

- Алгоритм ближайших соседей
- Линейные алгоритмы

В жизни мы принимаем решения не так!

# Примеры решающих правил

- Если в анкете указан домашний телефон и зарплата клиента $>$ \$1000 и размер кредита $<$ \$3000, то кредит выдать
- Если возраст пациента $>$ 60 и пациент ранее перенёс инфаркт, то операцию не делать

# Логические алгоритмы

Логический алгоритм — алгоритм, использующий логические закономерности в данных.

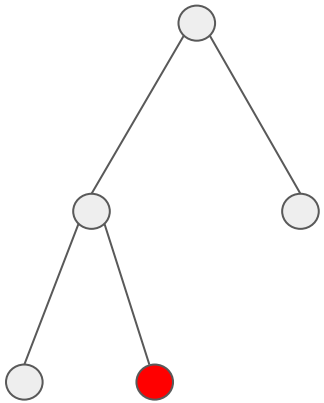
# Решающие деревья

- В каждой вершине дерева находится вопрос
- В зависимости от ответа на вопрос, алгоритм направляется в нужную ветвь дерева
- Листы дерева соответствуют решению алгоритма

# Решающие деревья

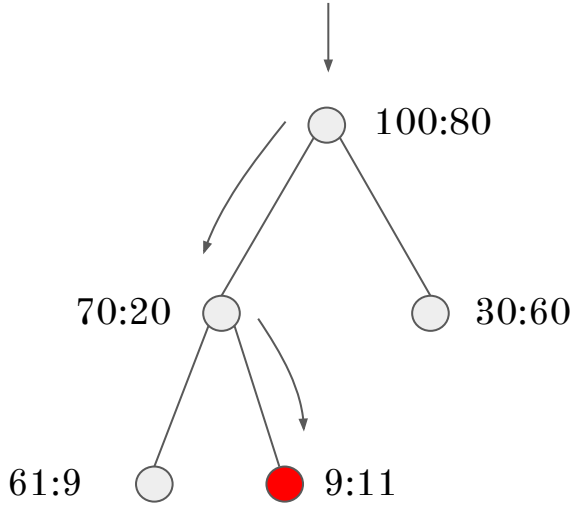
# Обучение решающего дерева

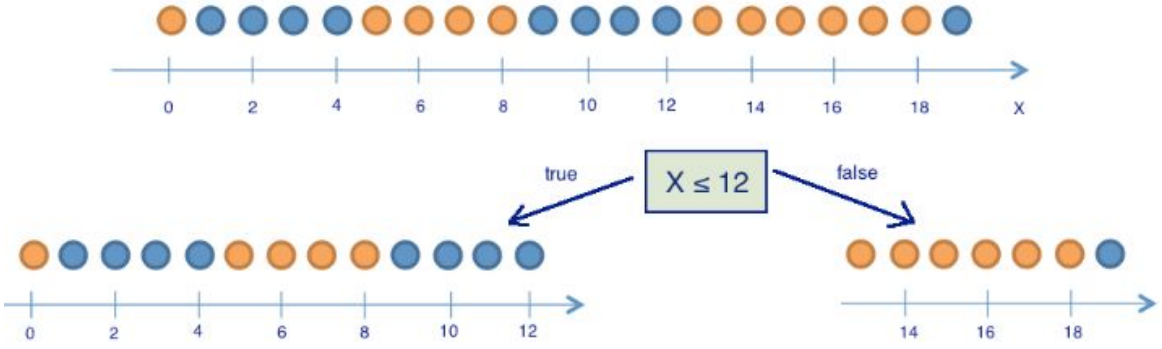
- Находимся в красной вершине



# Обучение решающего дерева

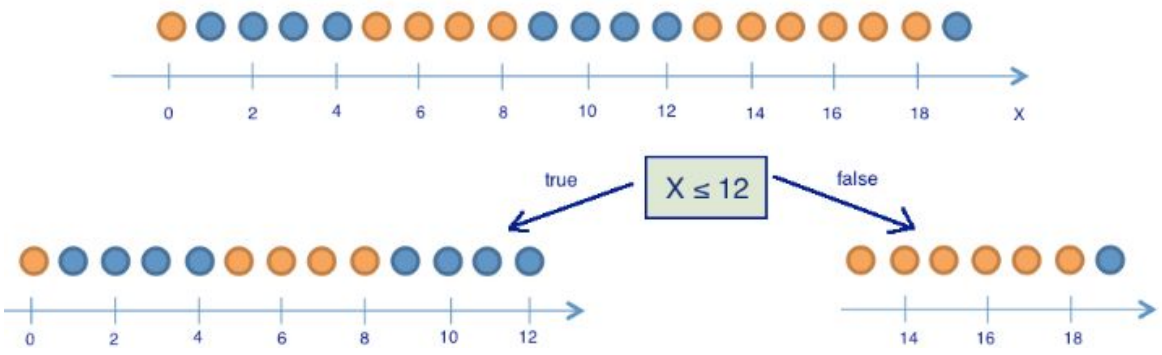
- Находимся в красной вершине
- До красной вершины дошла часть объектов обучающей выборки

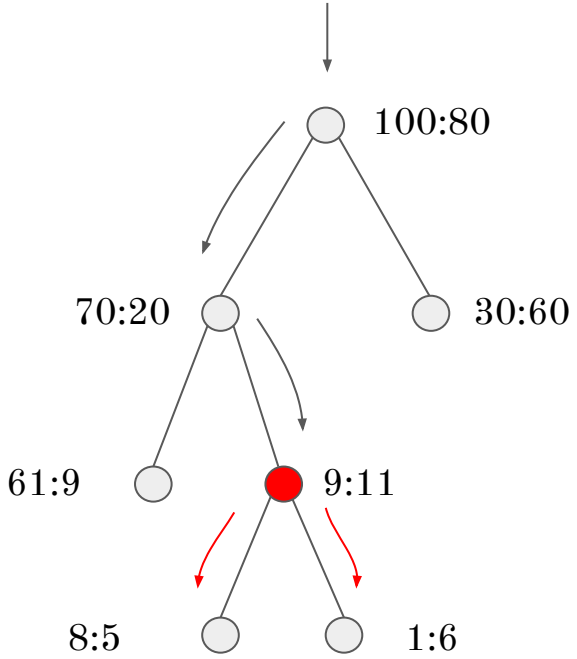


# Обучение решающего дерева

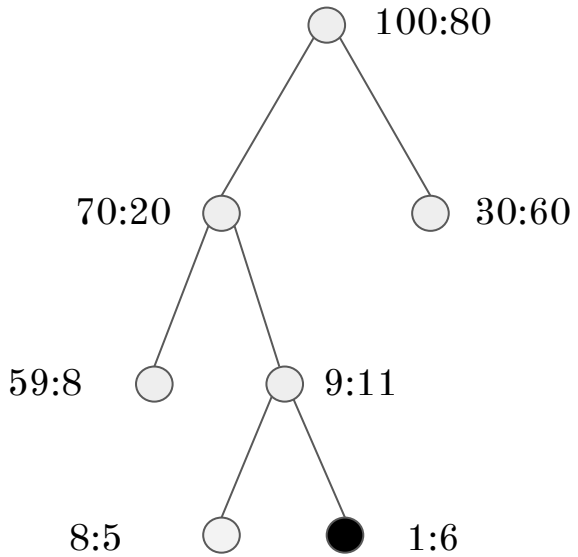
- Находимся в красной вершине
- До красной вершины дошла часть объектов обучающей выборки
- Находим решающее правило так, чтобы объекты, дошедшие до красной вершины, хорошо разделялись по искомым классам



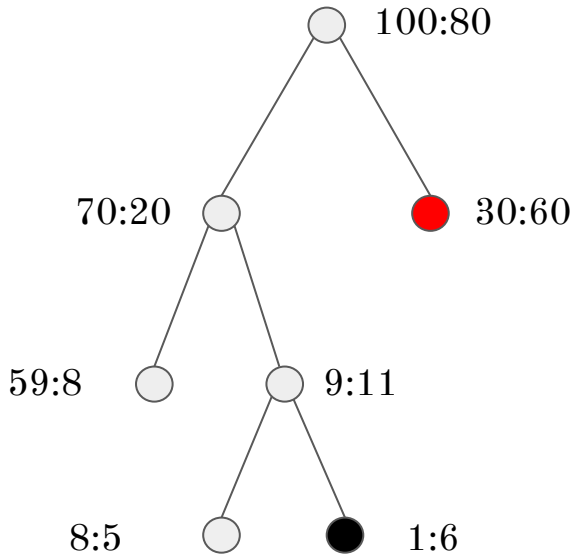
# Обучение решающего дерева

- Находимся в красной вершине
- До красной вершины дошла часть объектов обучающей выборки
- Находим решающее правило так, чтобы объекты, дошедшие до красной вершины, хорошо разделялись по искомым классам
- Одна из нижних вершин стала терминальной



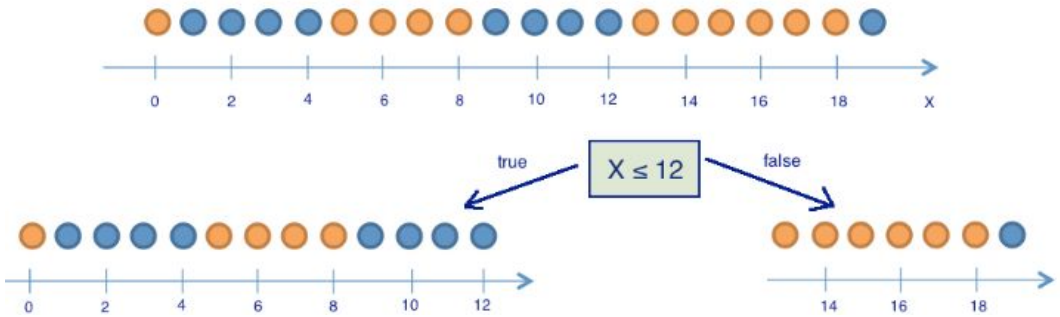
# Обучение решающего дерева

- Находимся в красной вершине
- До красной вершины дошла часть объектов обучающей выборки
- Находим решающее правило так, чтобы объекты, дошедшие до красной вершины, хорошо разделялись по искомым классам
- Одна из нижних вершин стала терминальной
- Повторяем с другой вершиной



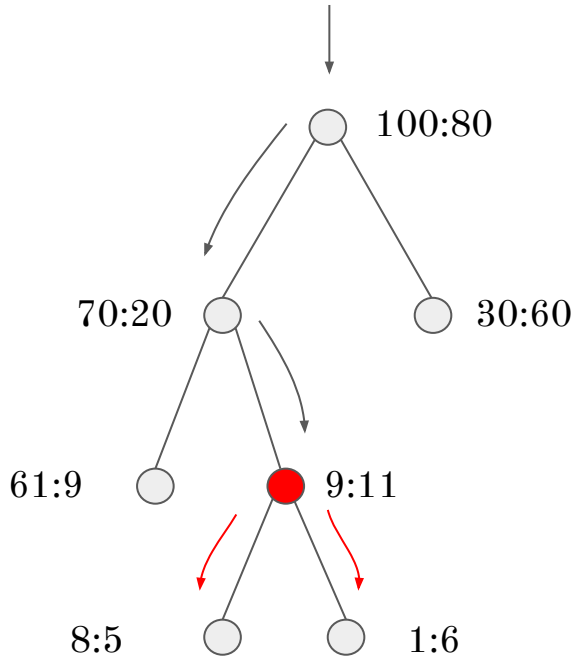
# Как выбрать критерий ветвления?

$$Q = 20, p_Q = \frac{9}{20}$$




$$L = 13, p_L = \frac{8}{13}$$

$$R = 7, p_R = \frac{1}{7}$$




$$\frac{L}{Q} H(p_L) + \frac{R}{Q} H(p_R) \to \min$$

# Как выбрать критерий ветвления?

$$\frac{L}{Q}H(p_L) + \frac{R}{Q}H(p_R) \to \min$$

Возможные функции $H(q)$:

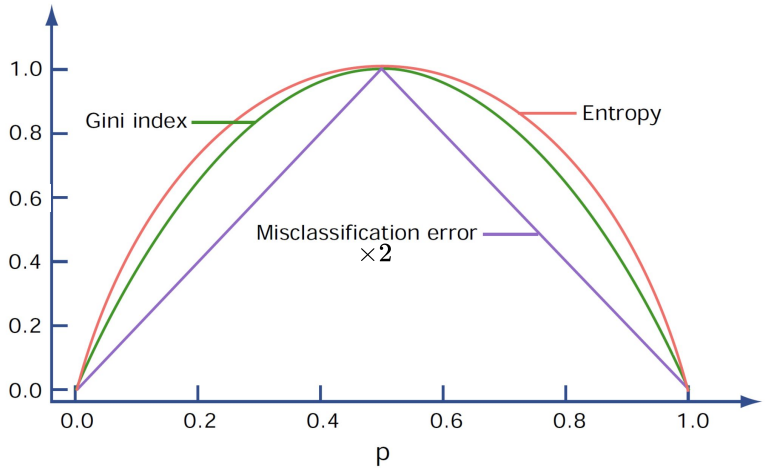
- Энтропия:

  $$H(q) = -q\log q - (1-q)\log(1-q)$$

- Индекс Джини:

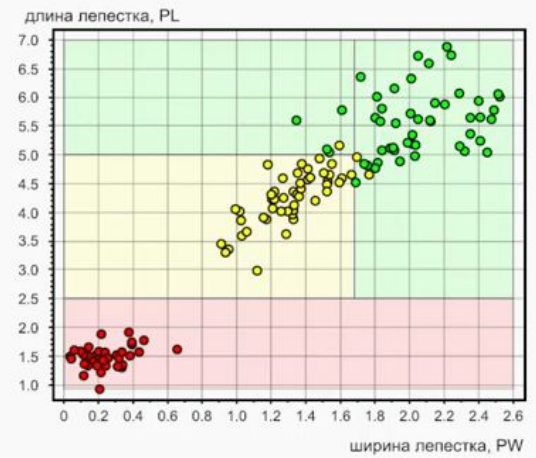
  $$H(q) = 4q(1-q)$$

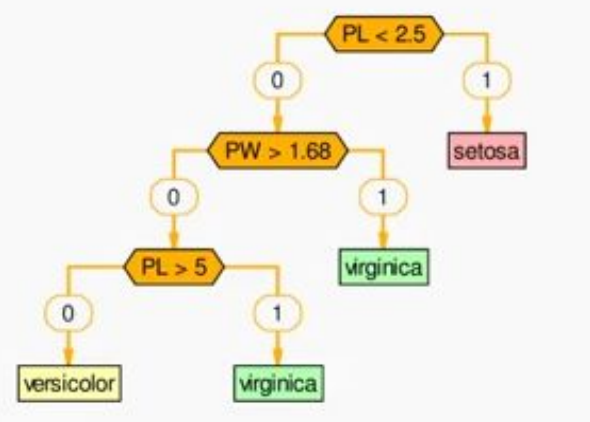
Затем решаем оптимизационную задачу для поиска правила



# Решающее дерево для Ирисов Фишера

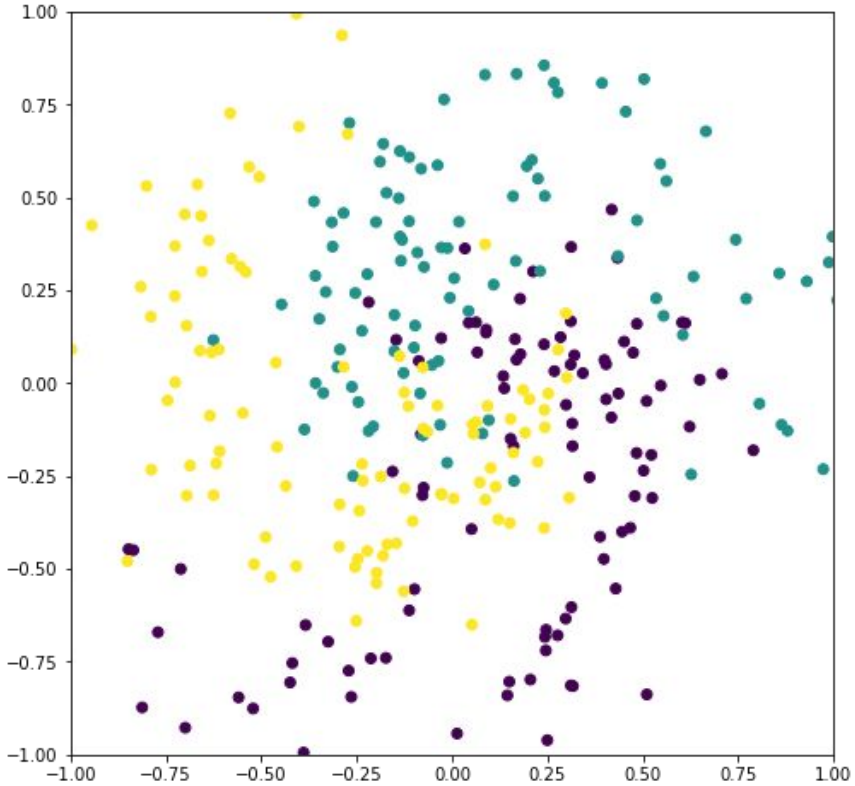
Задача Фишера о классификации ирисов на три класса.
В выборке по 50 объектов каждого класса, у каждого объекта 4 признака



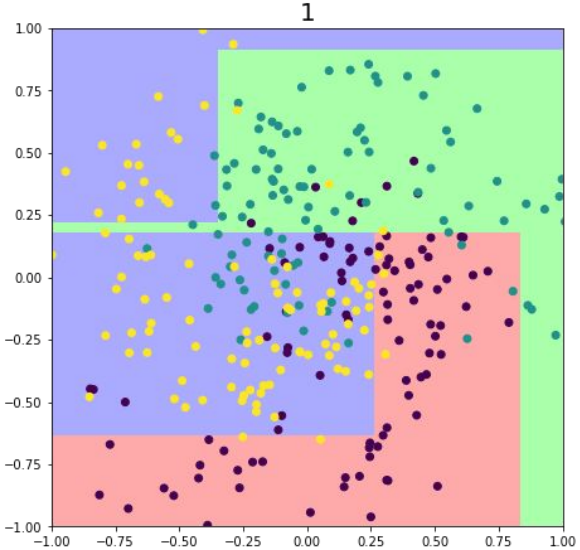




В осях двух самых информативных признаков два класса разделились без ошибок, на третьем — три ошибки.

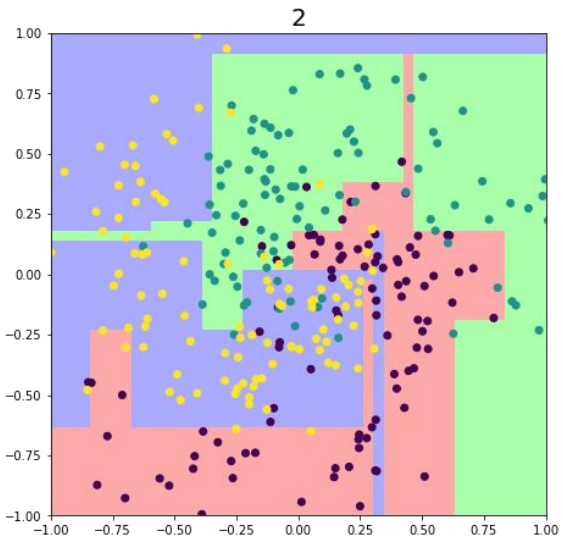
# Недообучение и переобучение



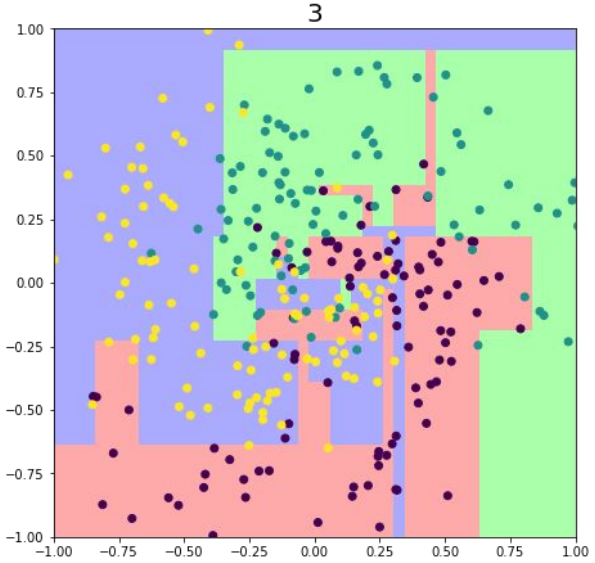
# Недообучение и переобучение




depth = 3




depth = 7



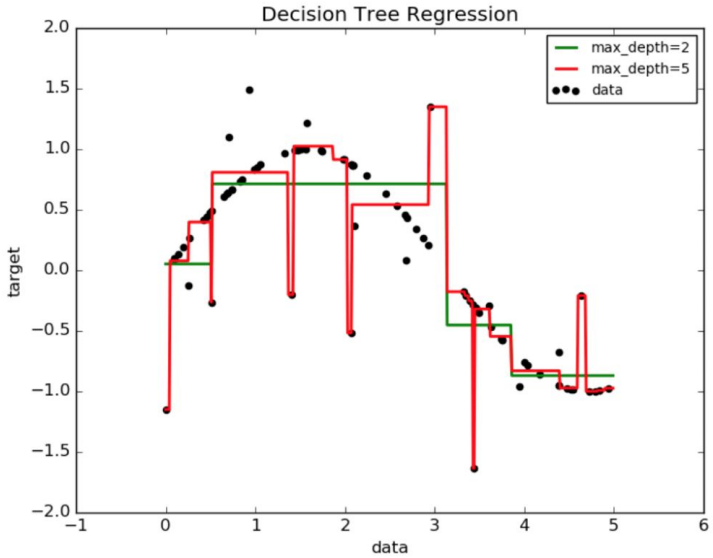

depth = 12

# Параметры решающего дерева

- Критерий ветвления (‘gini’, ‘entropy’)
- Максимальная глубина
- Минимальный размер листа
- Стратегия сплита

# Решающее дерево для регрессии

- В листах дерева вместо классов объектов находятся действительные числа
- Количество ответов решающего дерева ограничено количеством листовых вершин



# Резюме: решающее дерево

Преимущества:

- простая идея и алгоритм обучения
- интерпретируемое
- возможна регуляризация
- обработка пропущенных значений

Недостатки:

- переобучается
- проблемы с регрессией
- сильно меняется в зависимости от параметров

# Композиции алгоритмов

# Алгоритмы машинного обучения

- Метод ближайших соседей
- Линейные алгоритмы
- Решающее дерево

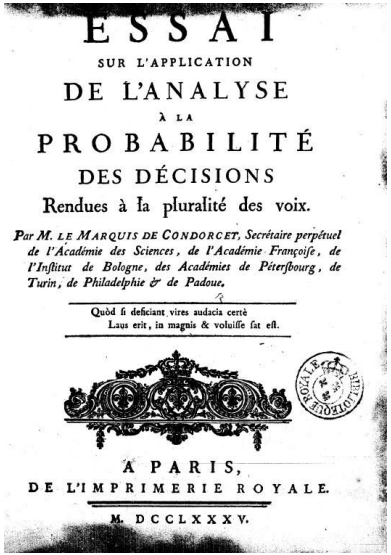
# Алгоритмы машинного обучения

- Метод ближайших соседей
- Линейные алгоритмы
- Решающее дерево

Идея: построение композиции алгоритмов

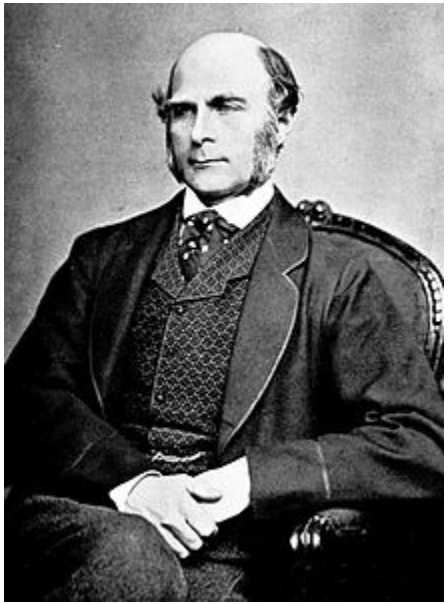
# Принцип Кондорсе

- Если вероятность правильного решения члена жюри больше 0.5, то  вероятность правильного решения присяжных в целом возрастает с увеличением количества членов жюри и стремится к единице.
- Если же вероятность быть правым меньше 0.5, то вероятность принятия правильного решения присяжными монотонно уменьшается и стремится к нулю с увеличением количества присяжных.


ESSAI
SUR L'APPLICATION
DE L'ANALYSE
À LA
PROBABILITÉ
DES DÉCISIONS
Rendues à la pluralité des voix.
Par M. LE MARQUIS DE CONDORCET, Secrétaire perpétuel de l'Académie des Sciences, de l'Académie Françoise, de l'Institut de Bologne, des Académies de Pétersbourg, de Turin, de Philadelphie & de Padoue.
Quòd si deficiant vires audacia certè
Laus erit, in magnis & voluisse sat est.
A PARIS,
DE L'IMPRIMERIE ROYALE.
M. DCCLXXXV.

принцип Кондорсе, 1784

# Фрэнсис Гальтон



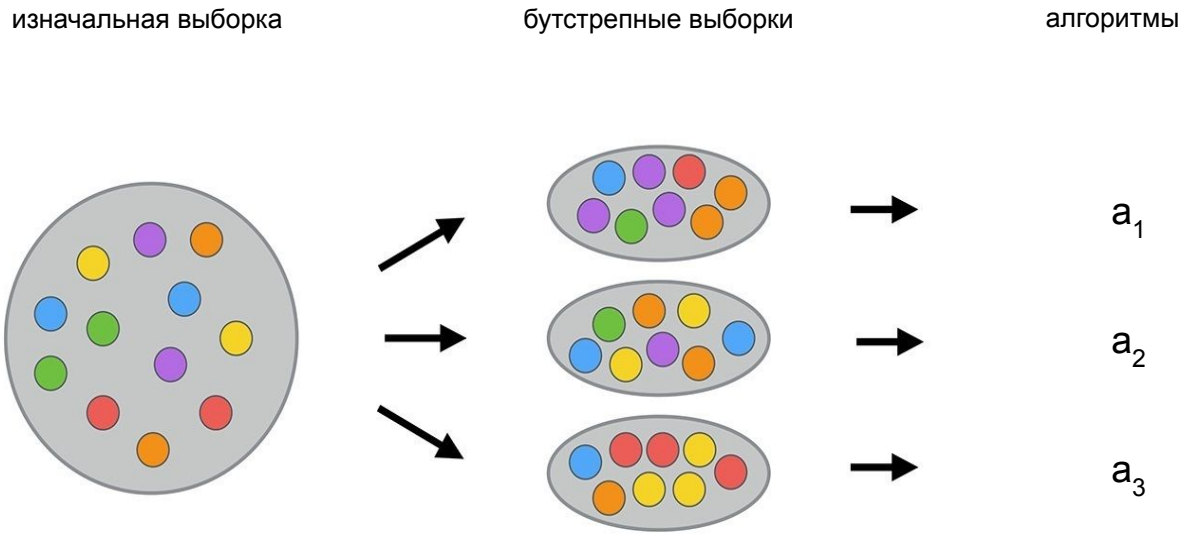
# Эксперимент Гальтона

- Собралось около 800 человек, которые попытались угадать вес быка на ярмарке. Бык весил 1198 фунтов.
- Ни один крестьянин не угадал точный вес быка
- Среднее предсказание оказалось равным 1197 фунтов.

# Метод простого голосования

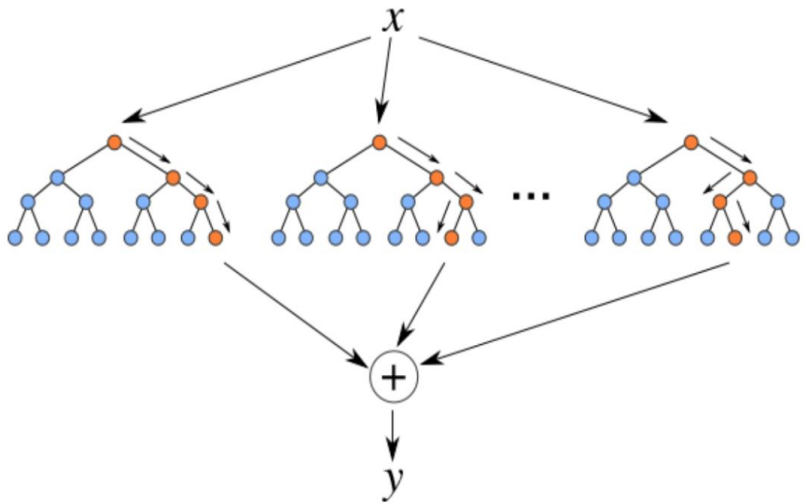
- $a_1, a_2, \ldots, a_n$ — несколько обученных алгортмов
- Классификация: относим $x$ к классу, за который проголосовало *большинство* из $a_1(x), a_2(x), \ldots, a_n(x)$
- Регрессия: ответом является среднее значение $a_1(x), a_2(x), \ldots, a_n(x)$

# Бутстреп


изначальная выборка
бутстрепные выборки
алгоритмы
$a_1$
$a_2$
$a_3$

# Бэггинг

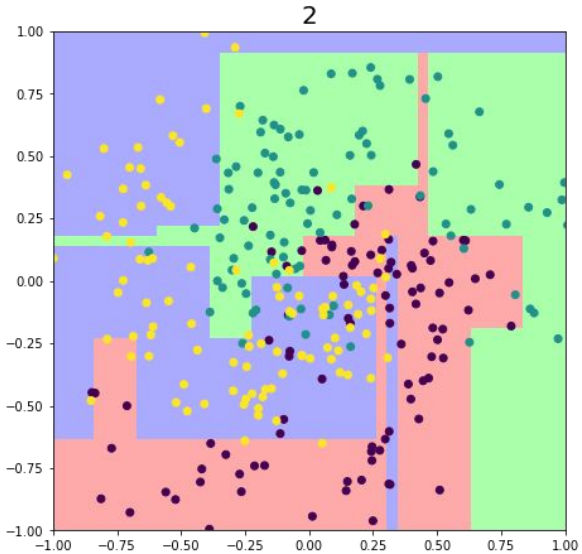
- Бэггинг (bagging: bootstrap aggregation) — принцип построения композиции, основанный на простом голосовании
- 100 деревьев
- Бутстрепная выборка для каждого дерева
- Финальное решение принимается простым голосованием

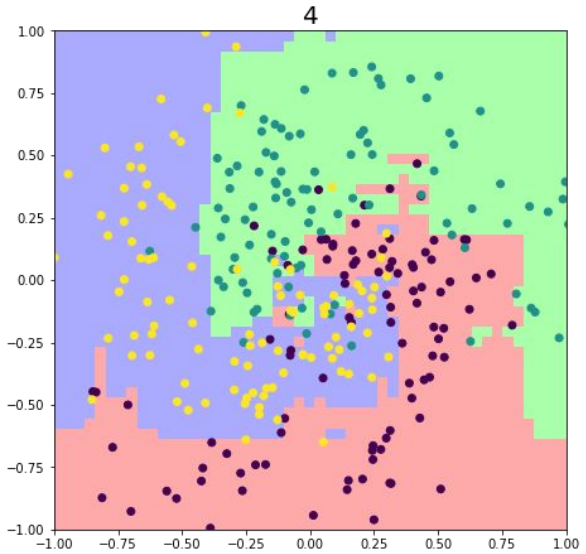


# Случайный лес

Случайный лес — бэггинг над решающими деревьями

# Случайный лес и решающее дерево

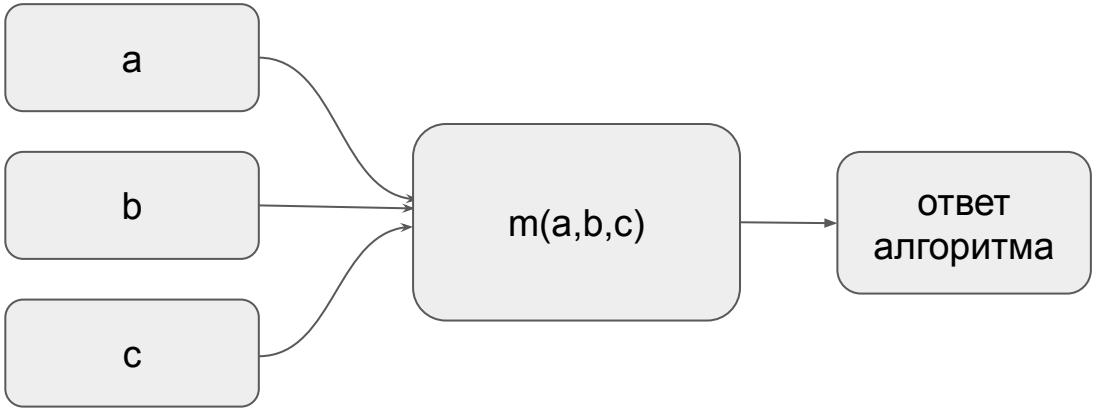


# Недостатки случайного леса

- Слишком долгое и громоздкое вычисление
- В индустрии стараются обойтись без композиций
- Тем не менее, вычисления можно проводить параллельно

# Стекинг



# Бустинг

- Строим алгоритмы последовательно
- Каждый следующий алгоритм компенсирует ошибку всех предыдущих
- Принимаем решение взвешенным голосованием:

$$a(x) = c_1 a_1(x) + c_2 a_2(x) + \ldots + c_n a_n(x)$$

- Сильный метод бустинга — градиентный бустинг над решающими деревьями

# Резюме

- Бэггинг, стекинг и бустинг используют принцип композиции
- Бэггинг принимает решение простым голосованием
- Стекинг обучает метаалгоритм над разноплановыми алгоритмами
- Бустинг строит базовые модели, компенсирующие ошибки предыдущих

# Градиентный бустинг

# Градиентный бустинг

Градиентный бустинг — эффективный способ построения композиции решающих деревьев

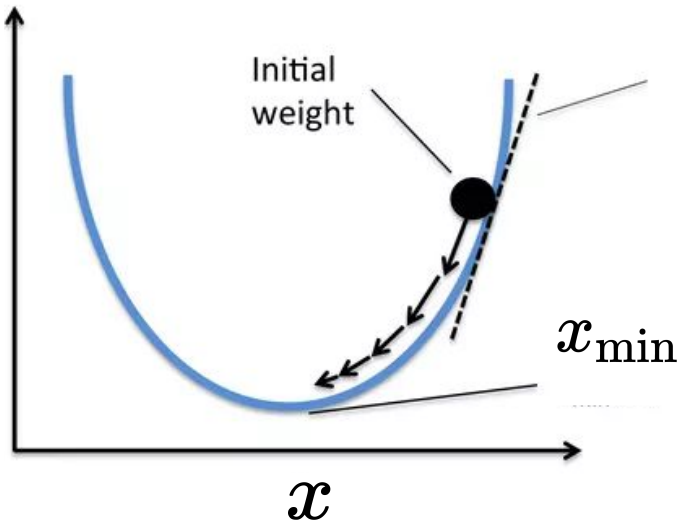
- Деревья строятся последовательно
- Каждое следующее дерево стремится компенсировать ошибку уже построенных
- Решение затем принимается взвешенным голосованием:

$$a(x) = c_1 a_1(x) + c_2 a_2(x) + \ldots + c_n a_n(x)$$

# Напоминание: градиентный спуск

- Минимизируем функцию $f(x)$
- Выбираем $x_0$ — начальное приближение
- Пусть $x_n$ — текущая найденная точка
- Вычисляем градиент (производную) $f'(x_n)$
- Вычисляем следующее приближение:

$$x_{n+1} = x_n - \alpha f'(x_n)$$



# Постановка задачи

Имеем:

- $X = \{x^1, x^2, \ldots, x^\ell\}$ — обучающая выборка
- $y = \{y^1, y^2, \ldots, y^\ell\}$ — целевая переменная (действительное число)

Цель: построить алгоритм $a(x)$, оптимизирующий функцию потерь

$$Q(y, a) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(y^i, a(x^i))$$

Пример: квадратичная функция потерь

$$\mathcal{L}(y, a) = (a - y)^2$$

# Построение композиции

- Пусть уже построены $a_1, a_2, \ldots, a_k$, а также константы $c_1, c_2, \ldots, c_k$
- Хотим построить $a_{k+1}$
- Запишем функцию потерь для одного объекта

$$\mathcal{L}(y^i, a(x^i)) = \mathcal{L}(y^i, \underbrace{c_1 a_1(x^i) + \ldots + c_k a_k(x^i)}_{\text{построено}} + \underbrace{c_{k+1} a_{k+1}(x^i)}_{\text{нужно построить}})$$

$$f(\quad t \quad + \quad \Delta t \quad) \to \min_t$$

$$\Delta t = -\alpha f'(t)$$

$$a_{k+1}(x^i) := -\mathcal{L}'_a(y^i, a)\big|_{a=c_1 a_1(x^i)+\ldots+c_k a_k(x^i)}$$

# Построение очередного дерева

*Для одного объекта*:

$$a_{k+1}(x^i) := \underbrace{-\mathcal{L}'_a(y^i, a)|_{a=c_1 a_1(x^i)+\ldots+c_k a_k(x^i)}}_{\text{новая целевая переменная}}$$

*Для нескольких объектов*: решаем новую задачу машинного обучения, где $k+1$-ое дерево “настраивается” по направлению *антиградиента функции потерь*

Константа в бустинге выбирается так же, как и в градиентном спуске

# Градиентный бустинг для MSE

Антиградиент функции потерь для MSE:

$$
\begin{aligned}
-\mathcal{L}'_a(y^i, a)\big|_{a=c_1a_1(x^i)+\ldots+c_ka_k(x^i)} &= \\
&= -2(a - y^i)\big|_{a=c_1a_1(x^i)+\ldots+c_ka_k(x^i)} = \\
&= -2(c_1a_1(x^i) + \ldots + c_ka_k(x^i) - y^i)
\end{aligned}
$$

**Вывод.** В случае MSE алгоритм градиентного бустинга настраивается на *разность ответа и текущего приближения*:

$$
\boldsymbol{a_{k+1}(x^i)} = -2(c_1a_1(x^i) + \ldots + c_ka_k(x^i) - y^i)
$$

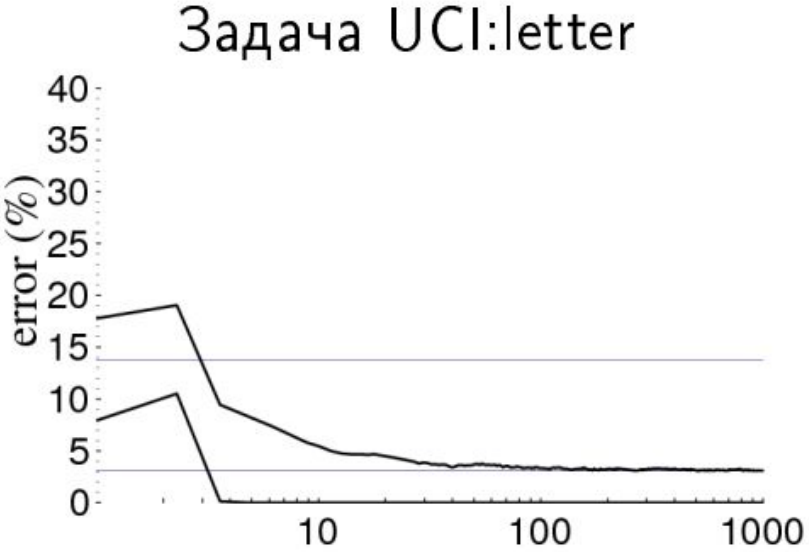
# Градиентный бустинг

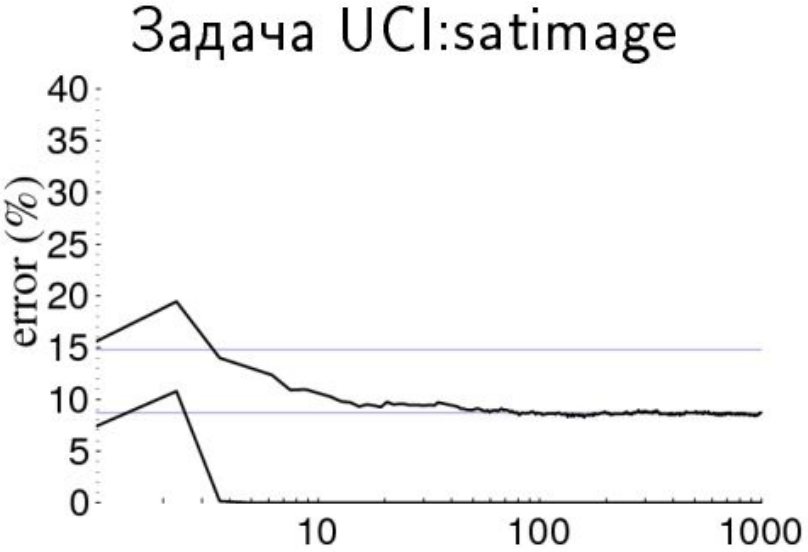
- Базовые алгоритмы должны быть простыми и быстро обучаемыми
- Часто в качестве базовых алгоритмов используются решающие деревья
- Реализации градиентного бустинга над решающими деревьями:



Yandex
CatBoost

# Бустинг: качество от итерации



# Бустинг: преимущества и недостатки

- Преимущества:
  - Позволяет очень точно восстанавливать искомую функцию
  - Почти не переобучается
  - По сравнению со случайным лесом, способен компенсировать систематическую ошибку каждого из базовых алгоритмов, а не накапливает их
  - Работает с произвольной функцией потерь в задаче классификации, регрессии, ранжирования, ...
- Недостатки:
  - Медленный
  - Плохо интерпретируемый
  - Переобучение на выбросах при избыточном количестве алгоритмов
  - Нужна довольно большая обучающая выборка

# The End