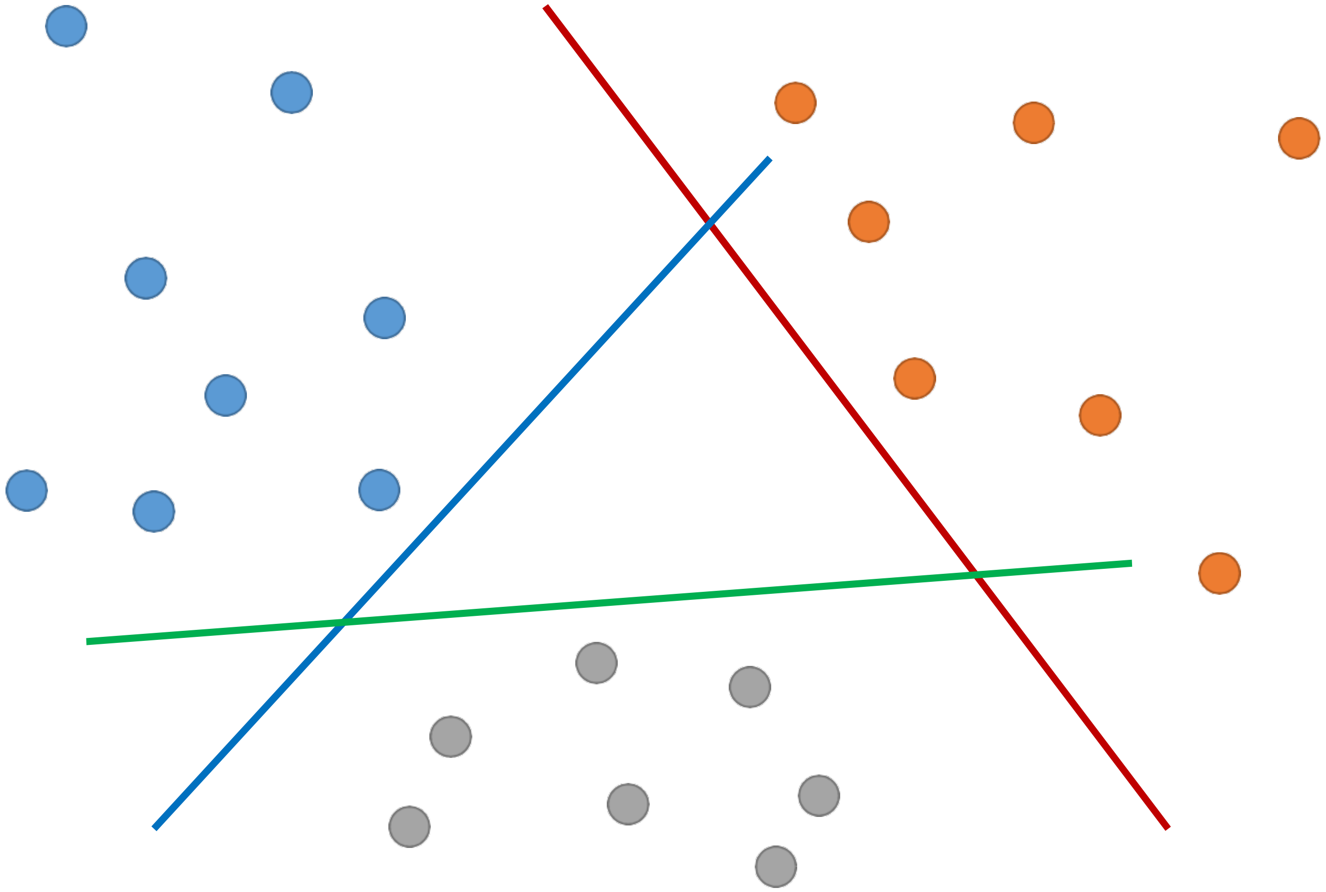
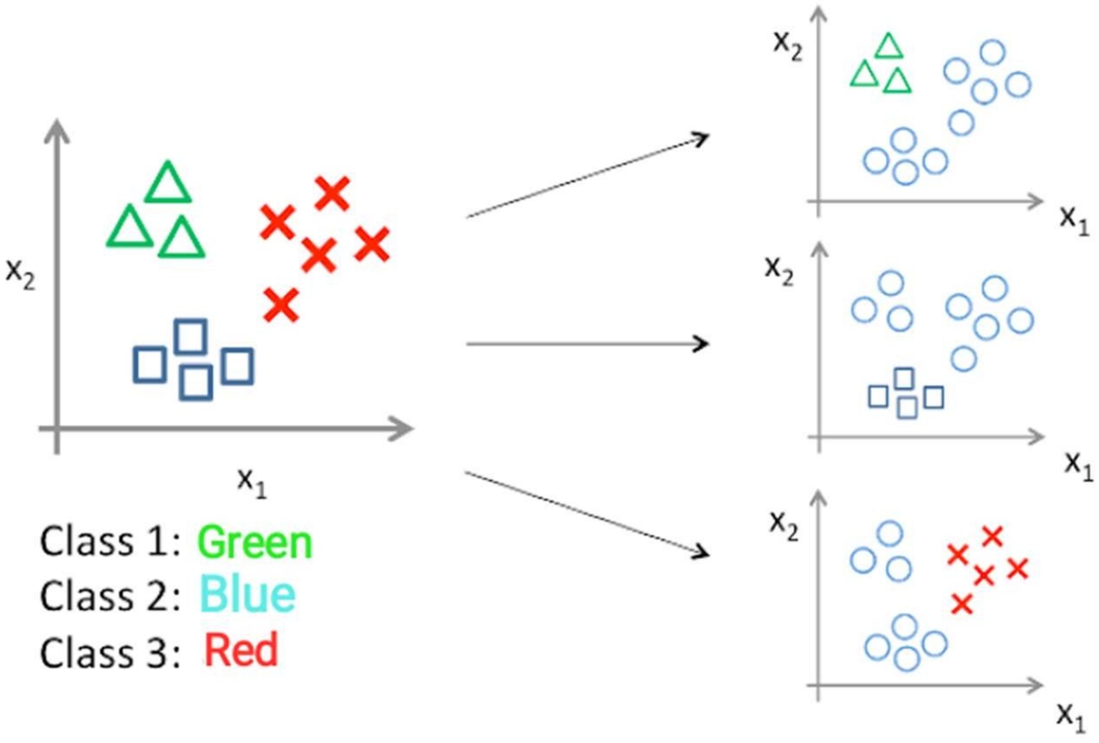
Решающие деревья

Повторение

Многоклассовая классификация

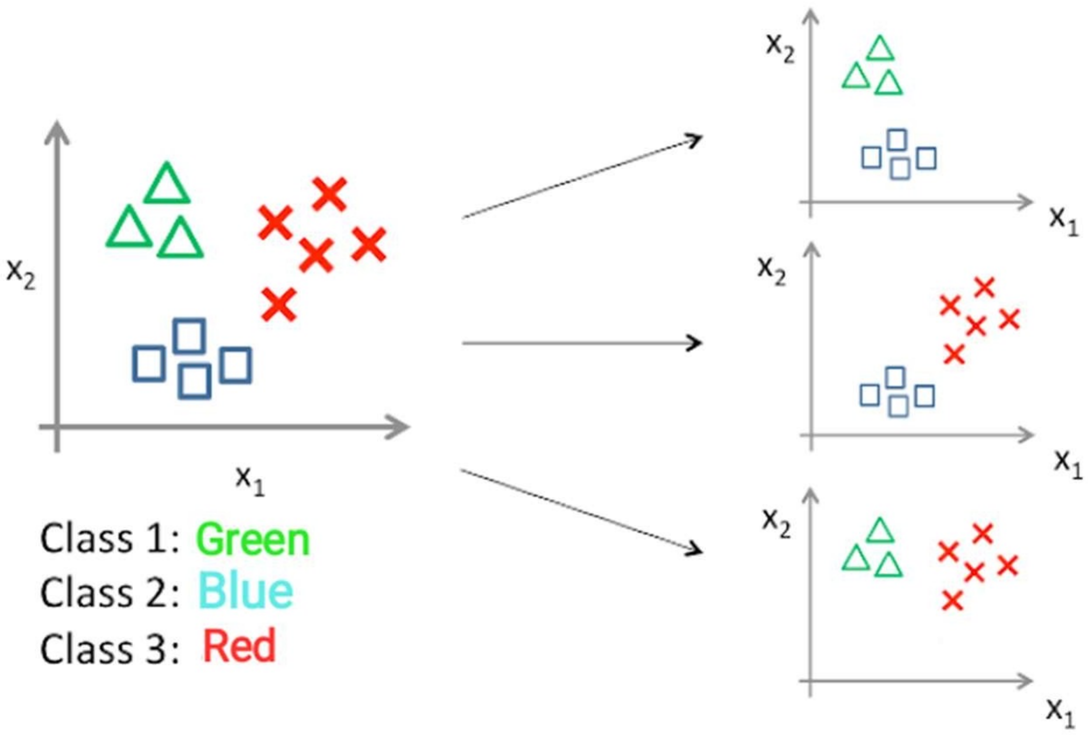


One-vs-All (One-vs-Rest)



https://www.cc.gatech.edu/classes/AY2016/cs4476_fall/results/proj4/html/jnanda3/index.html

All-vs-All (One-vs-One)



Доля ошибок

- Функционал ошибки — доля ошибок (error rate)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Нередко измеряют долю верных ответов (accuracy):

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) = y_i]$$

- Подходит для многоклассового случая!

Общие подходы

Микро-усреднение

Вычисляем $\mathrm{TP_k}, \mathrm{FP_k}, \mathrm{FN_k}, \mathrm{TN_k}$ для каждого класса

Суммируем по всем классам, получаем TP, FP, FN, TN

Подставляем их в формулу для precision/recall/…

$$\mathrm{Precision} = \frac{\sum_k TP_k}{\sum_k TP_k + \sum_k FP_k}$$

Макро-усреднение

Вычисляем нужную метрику для каждого класса (например, $\mathrm{precision}_1, \dots, \mathrm{precision}_K$)

Усредняем по всем классам

$$\mathrm{Precision} = \frac{\sum_k \mathrm{Precision}_k}{K}$$

Label encoding

- Значения признака «район»: $U = \{u_1, \dots, u_m\}$
- Новые признаки вместо x_j: каждая категория заменяется числом от 0 до m-1
- **Label encoding**

One-hot encoding

- Значения признака «район»: $U = \{u_1, \dots, u_m\}$
- Новые признаки вместо x_j: $[x_j = u_1], \dots, [x_j = u_m]$
- **One-hot encoding**

Mean encoding

- Не хотим сильно увеличивать размер выборки только из-за кодирования признаков
- Хотим передать информацию о целевой переменной в данные – это может позволить ускорить обучение
- **Mean encoding (target encoding)**

Mean encoding

- Задача регрессии

- Заменим категориальный признак на числовой:

$$\widetilde{x_{ij}} = \frac{\mathrm{target}(j, x_{ij})}{\mathrm{count}(j, x_{ij})}$$

Mean encoding

- Задача классификации
- Заменим категориальный признак на K числовых:

$$\widetilde{x_{ij}} = \left(\frac{\mathrm{target}_1\left(j, x_{ij}\right)}{\mathrm{count}\left(j, x_{ij}\right)}, \dots, \frac{\mathrm{target}_K\left(j, x_{ij}\right)}{\mathrm{count}\left(j, x_{ij}\right)} \right)$$

Mean encoding

- В отличие от label encoding, где мы кодируем признак случайными категориями, тут намного больше смысла
- Однако, раз мы добавляем информацию о целевой переменной в данные, то можно легко переобучиться

Борьба с переобучением в счётчиках

- Mean encoding позволяет заменить категориальный признак на один числовой
- Могут привести к переобучению
- Можно бороться с ним через добавление шума, априорных значений или кросс-валидацию

Как делать нелинейные модели?

Предсказание стоимости квартиры

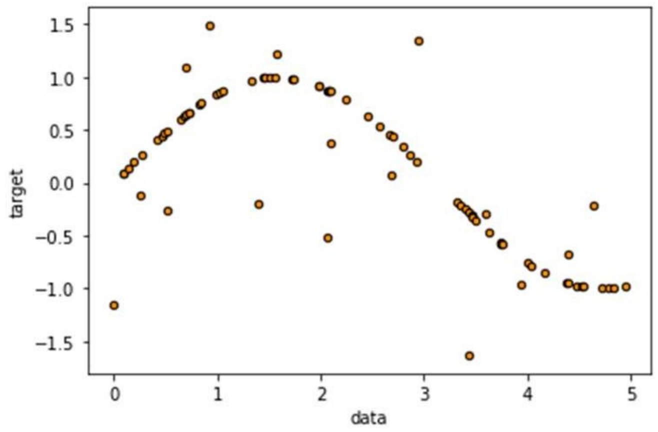
- Признаки: площадь, этаж, расстояние до метро и т.д.
- Целевая переменная: рыночная стоимость квартиры

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро}) + \cdots$$

- Вряд ли признаки линейно связаны с целевой переменной



Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро}) + \cdots$$

- Вряд ли признаки не связаны между собой

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+w_3 * (\text{расстояние до метро}) + w_4 * (\text{площадь})^2$$
$$+w_5 * (\text{этаж})^2 + w_6 * (\text{расстояние до метро})^2$$
$$+w_7 * (\text{площадь}) * (\text{этаж}) + \cdots$$

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+w_3 * (\text{расстояние до метро}) + w_4 * (\text{площадь})^2$$
$$+w_5 * (\text{этаж})^2 + w_6 * (\text{расстояние до метро})^2$$
$$+w_7 * (\text{площадь}) * (\text{этаж}) + \cdots$$

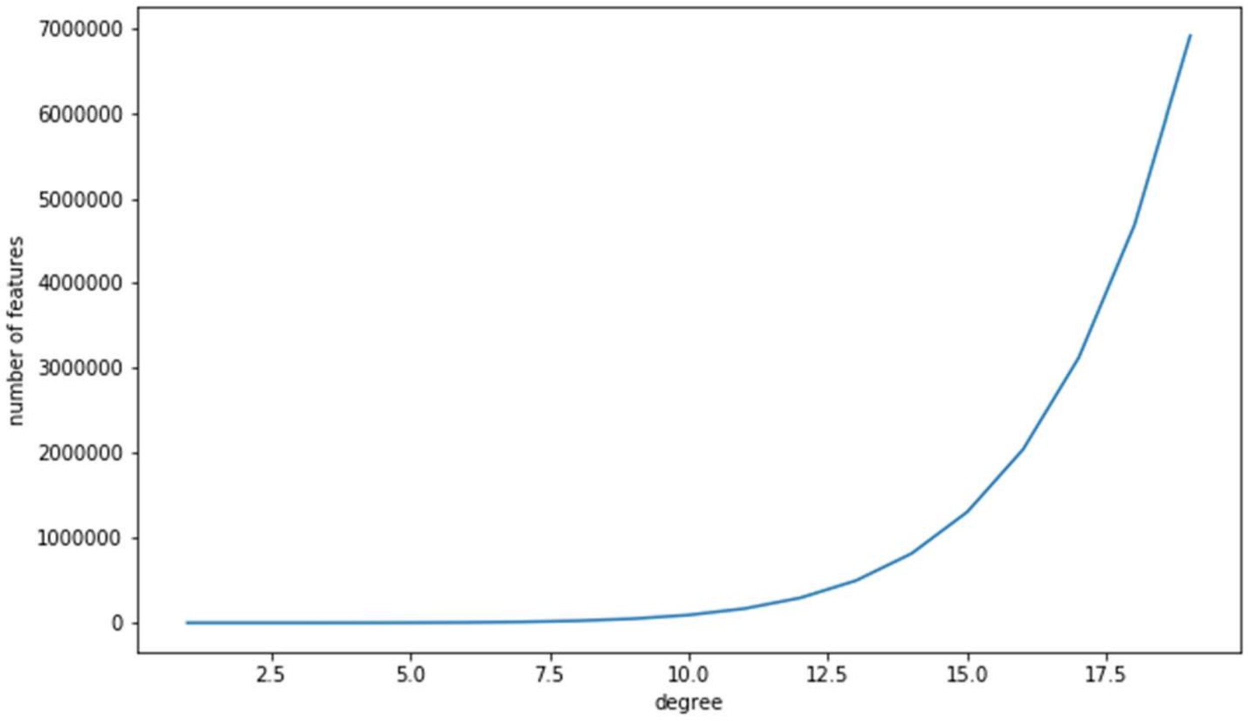
- Может быть сложно интерпретировать модель
- Что такое $(\text{расстояние до метро}) * (\text{этаж})^2$?

Предсказание стоимости квартиры

- Допустим, изначально имеем 10 признаков
- Полиномиальных степени 2: 55
- Полиномиальных степени 3: 220
- Полиномиальных степени 4: 715

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:



Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$a(x) = w_0 + w_1 * [30 < \text{площадь} < 50]$$

$$+w_2 * [50 < \text{площадь} < 80] + \cdots$$

$$+w_{20} * [2 < \text{этаж} < 5] + \cdots$$

$$+w_{100} * [30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5] + \cdots$$

- Признаки интерпретируются куда лучше: $[30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5][100 < \text{расстояние до метро} < 500]$
- Но их станет ещё больше!

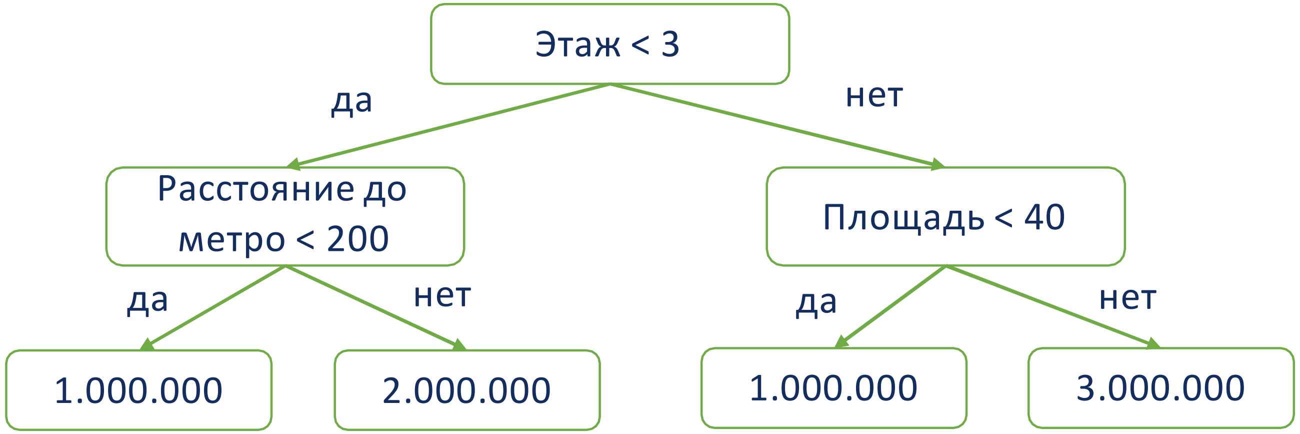
Решающие деревья

Логические правила

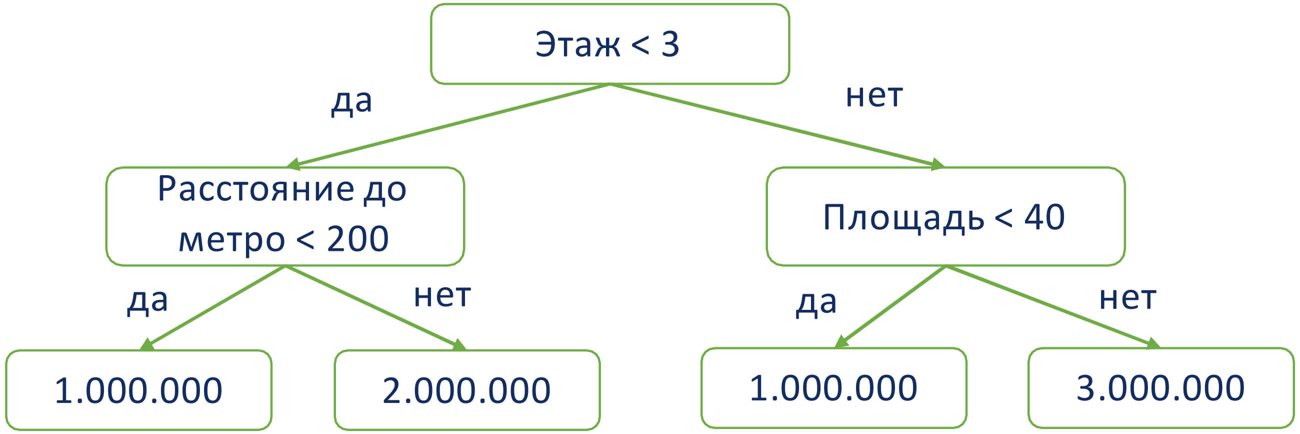
- $[30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5][500 < \text{расстояние до метро} < 1000]$
- Легко объяснить, как работают
- Находят нелинейные закономерности

- Нужно как-то искать хорошие логические правила
- Нужно уметь составлять модели из логических правил

Решающее дерево

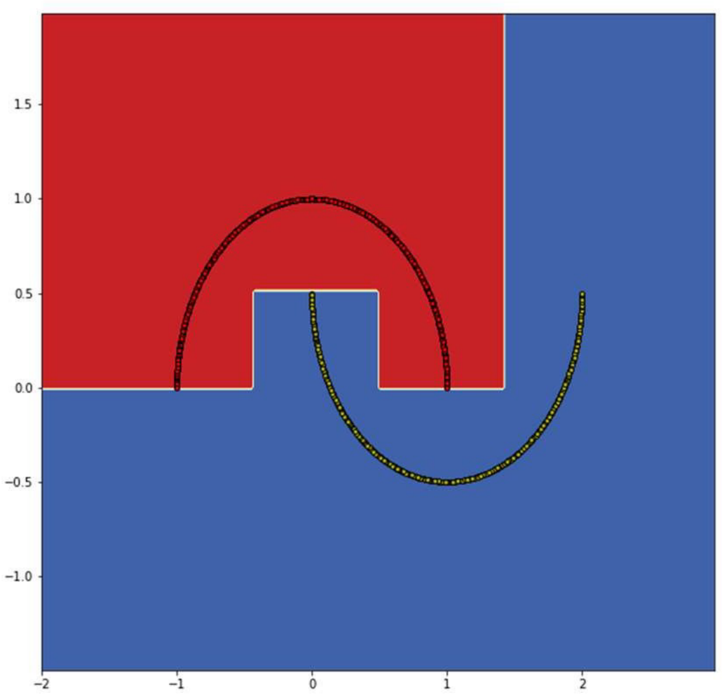


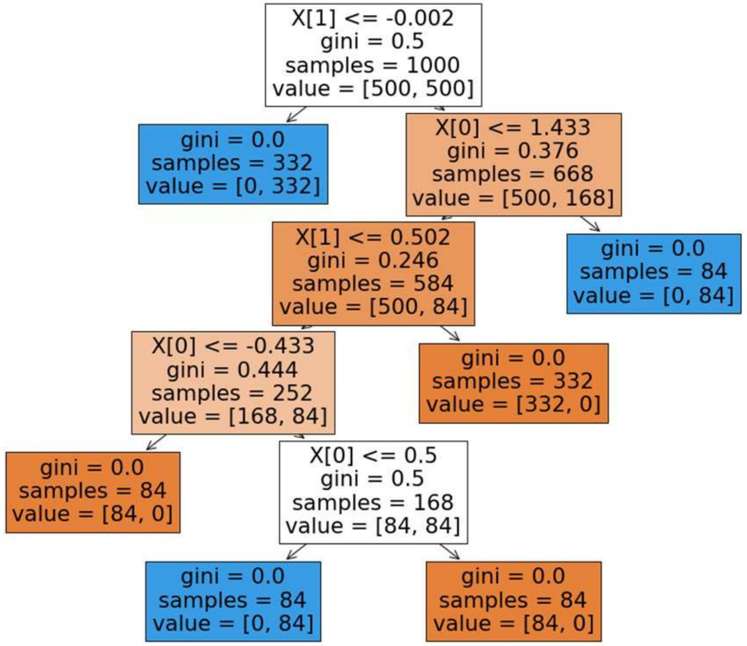
Решающее дерево



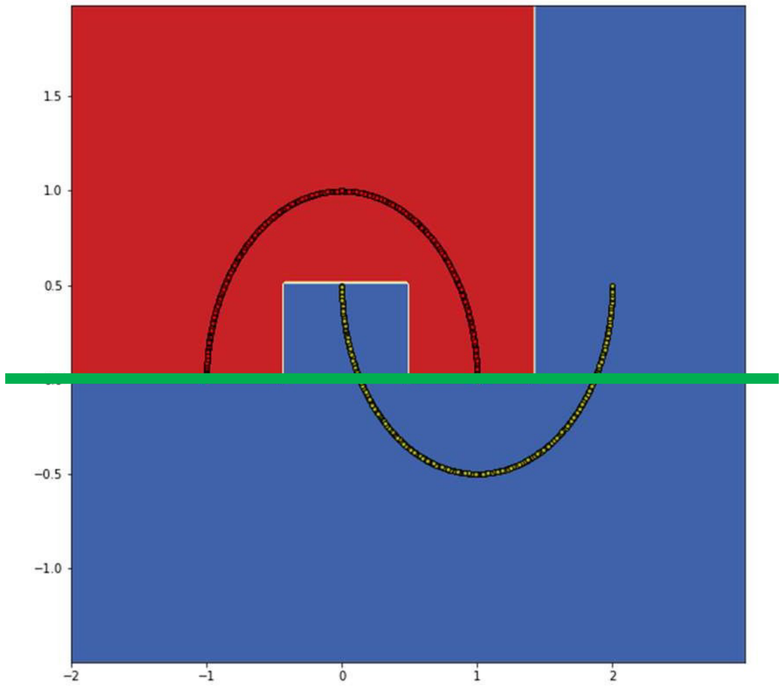
- Внутренние вершины: предикаты $[x_j < t]$
- Листья: прогнозы $c \in \mathbb{Y}$

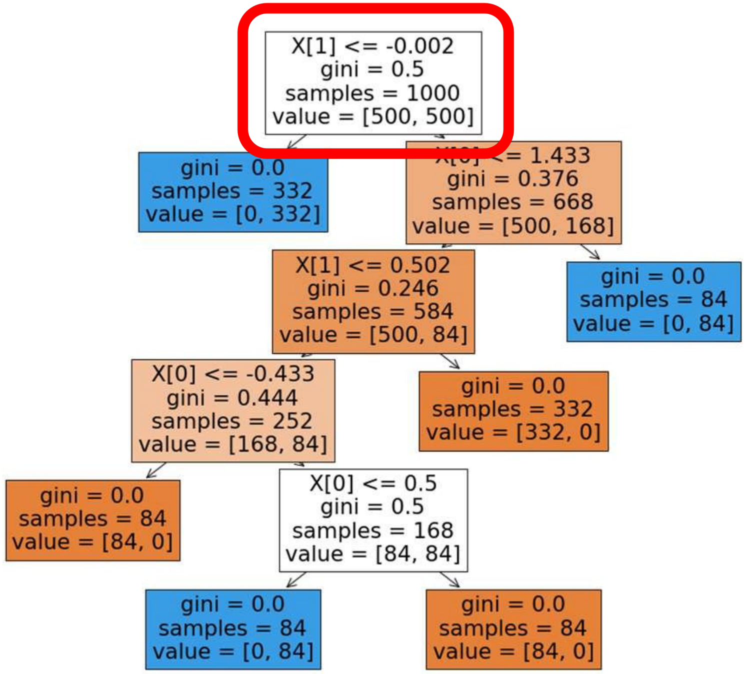
Решающее дерево



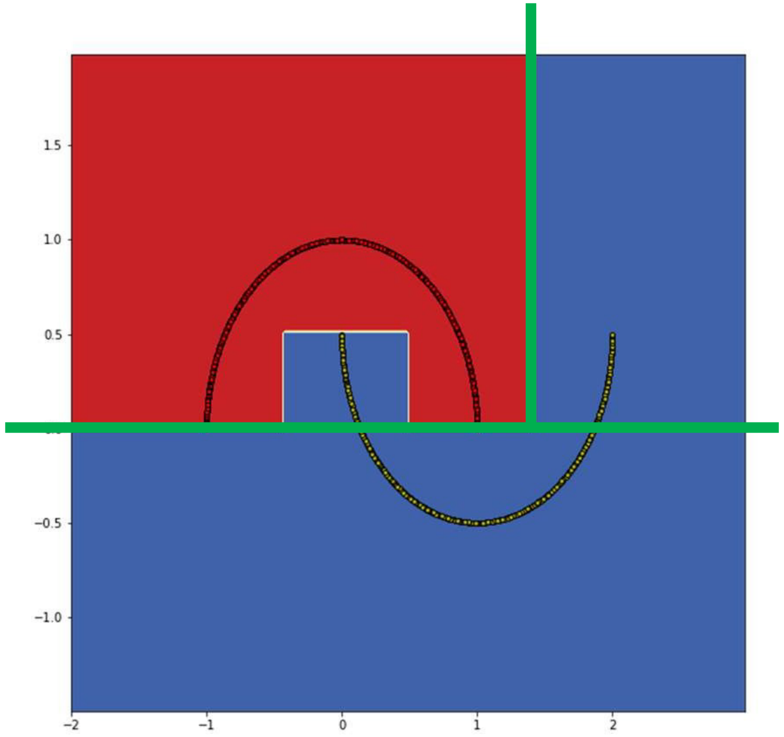


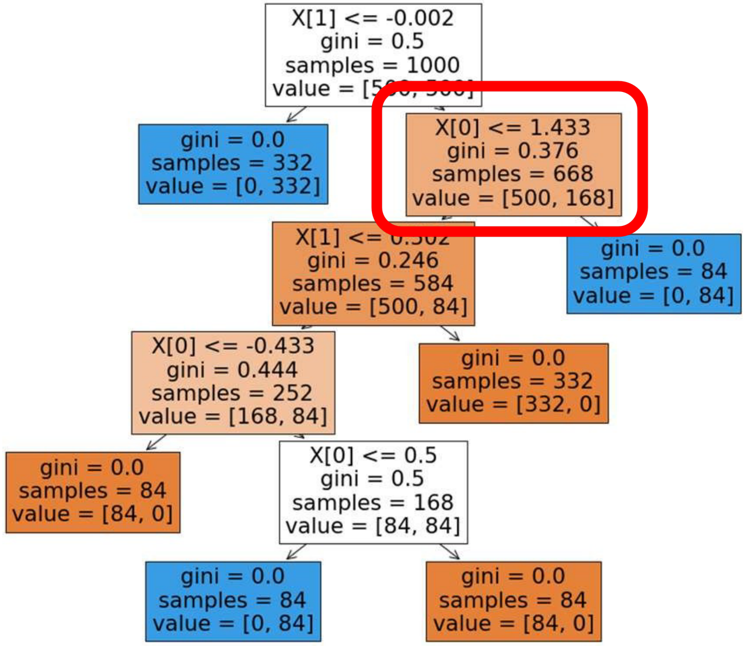
Решающее дерево



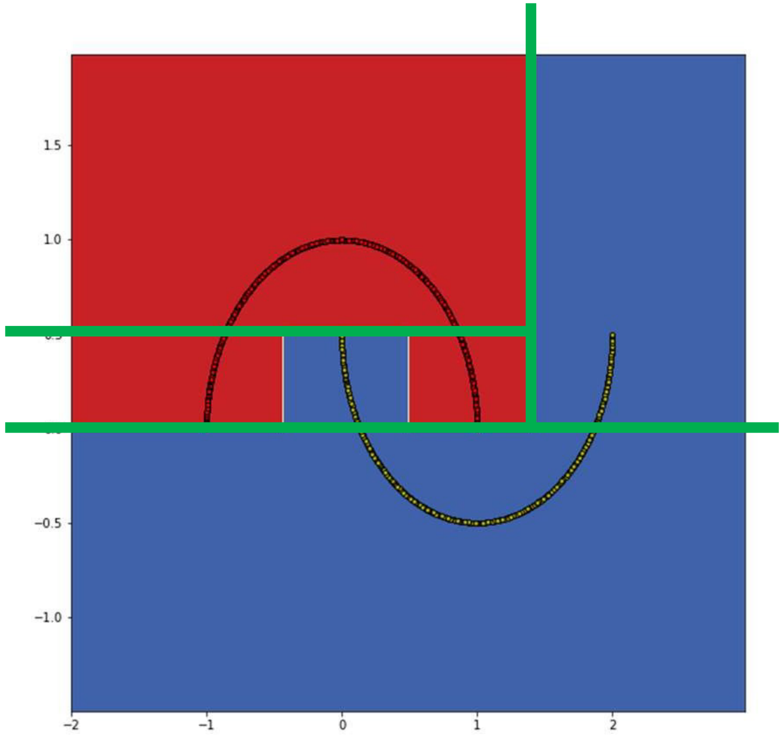


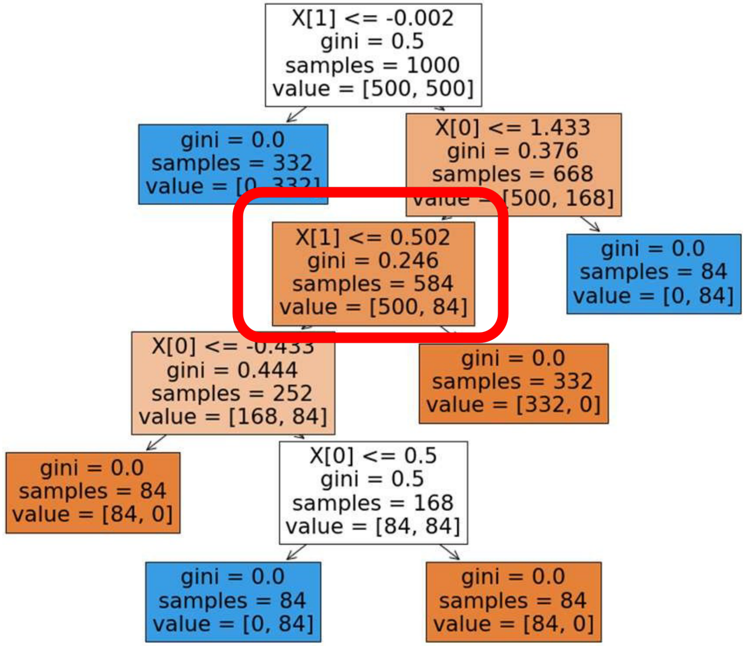
Решающее дерево



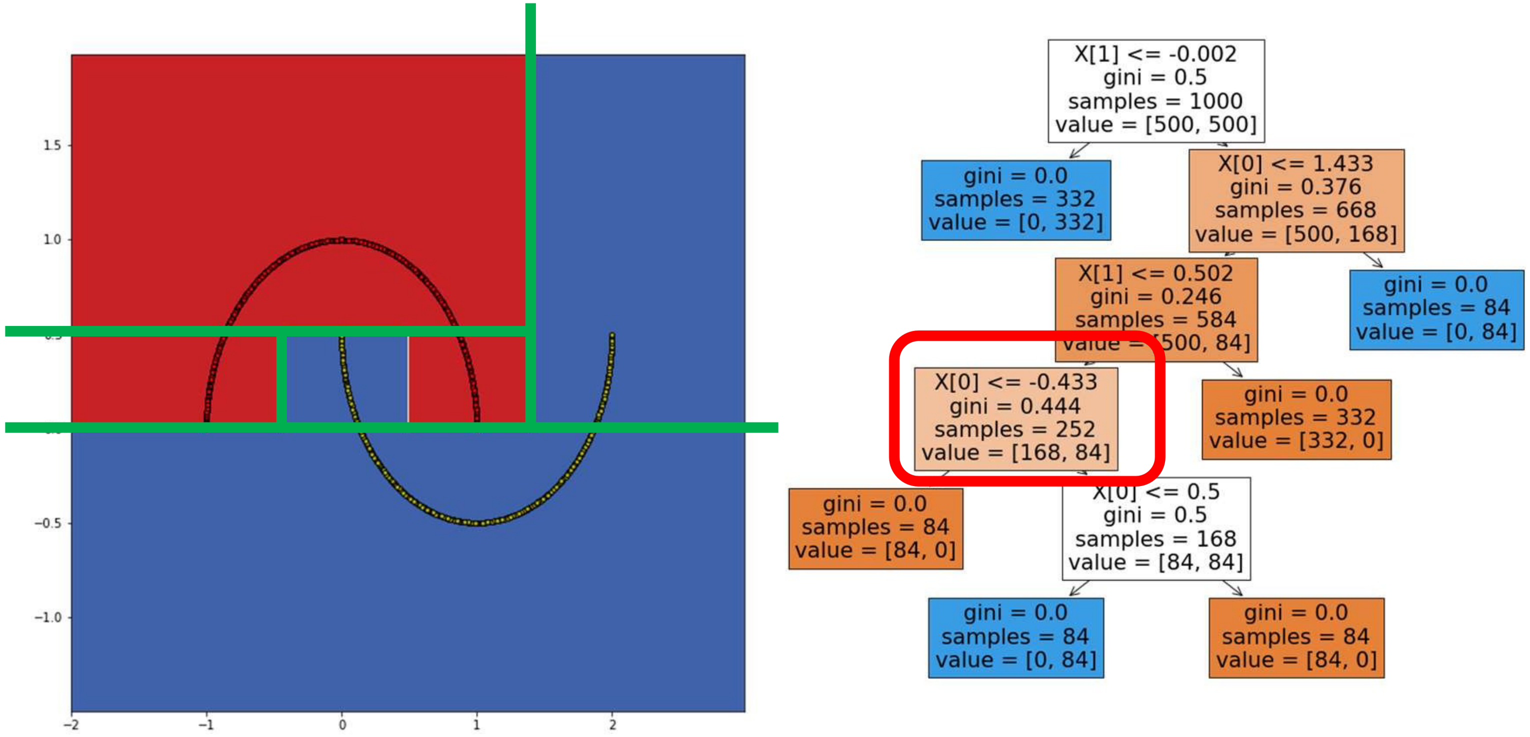


Решающее дерево

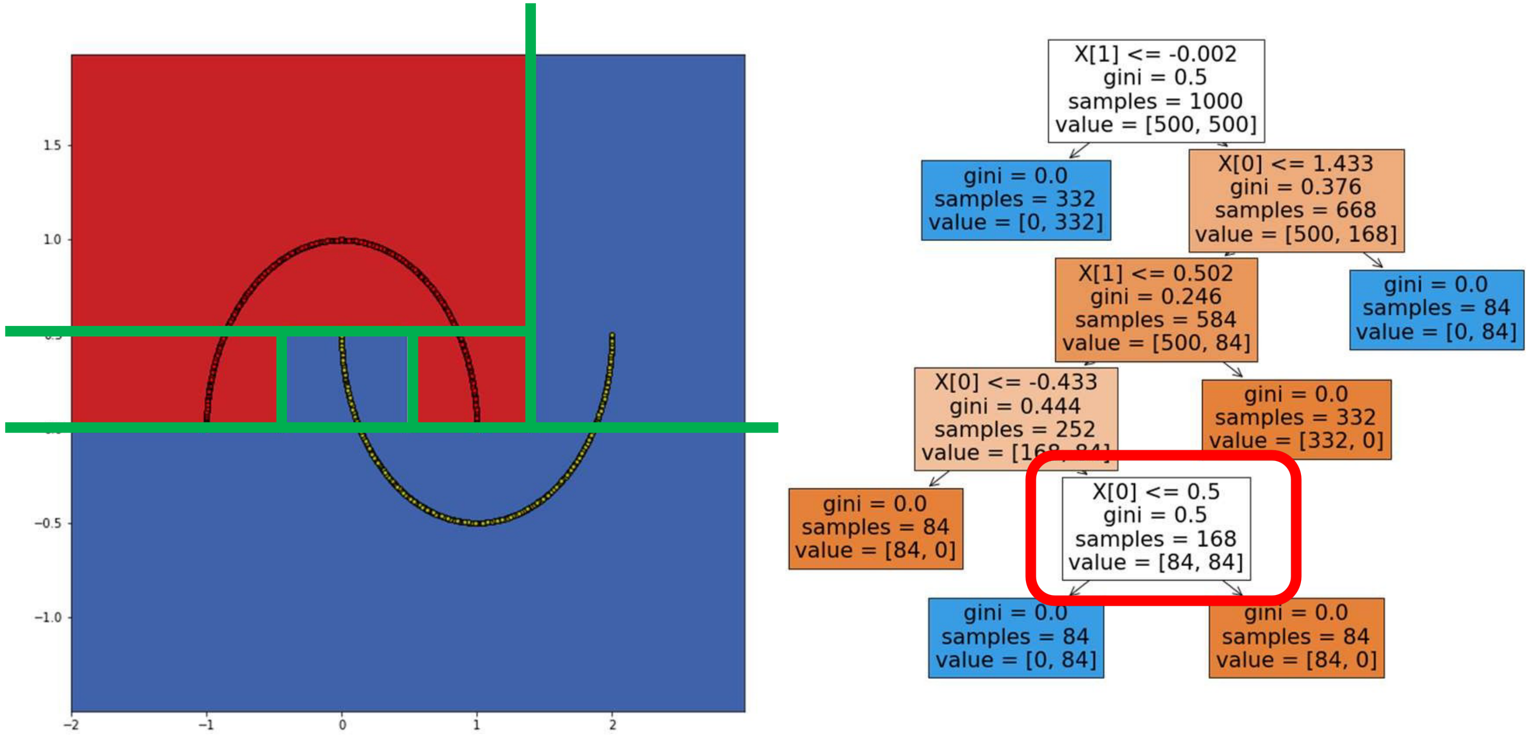




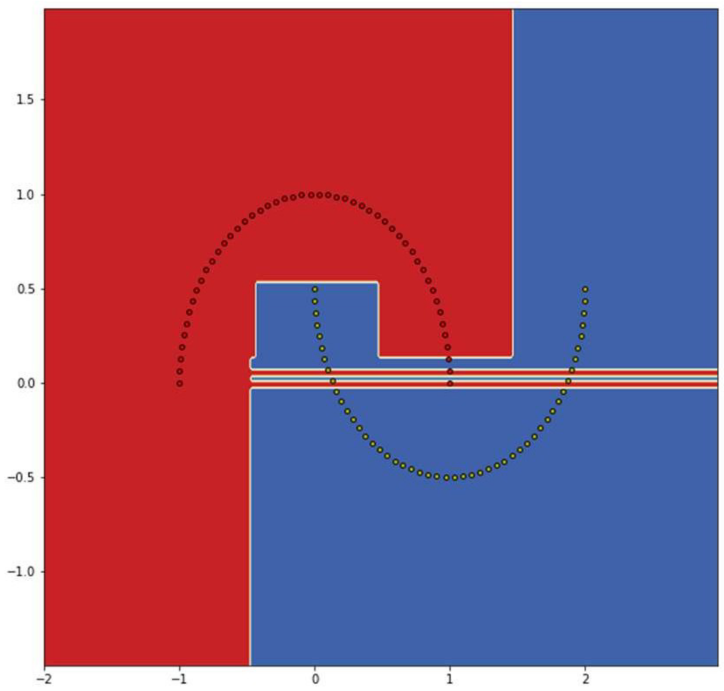
Решающее дерево

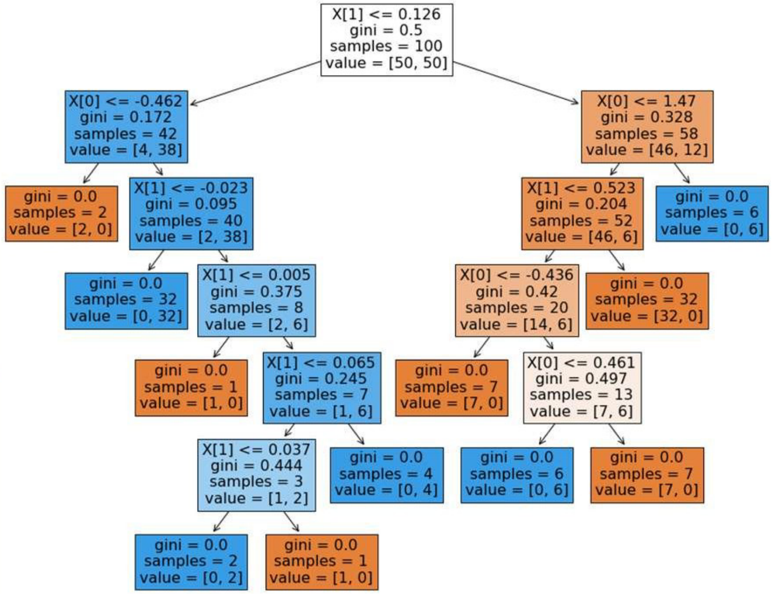


Решающее дерево



Решающее дерево

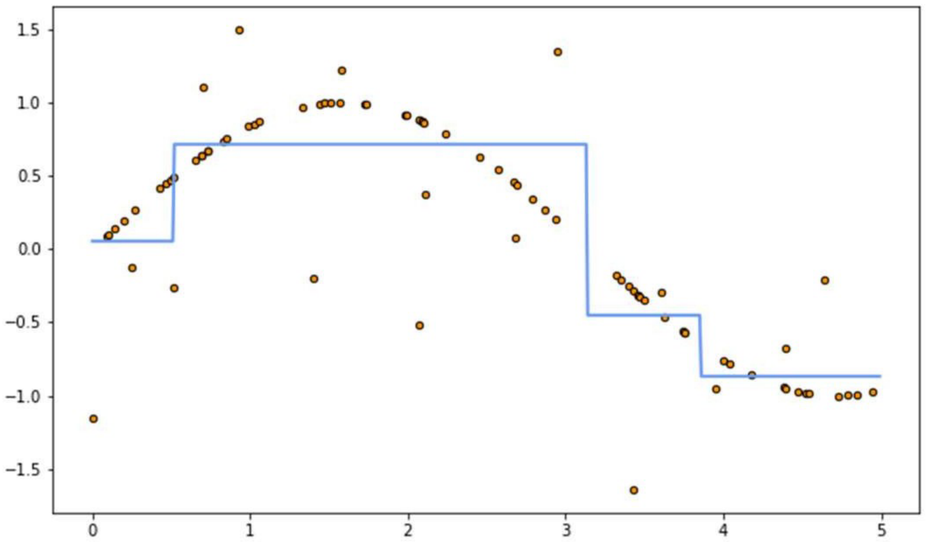


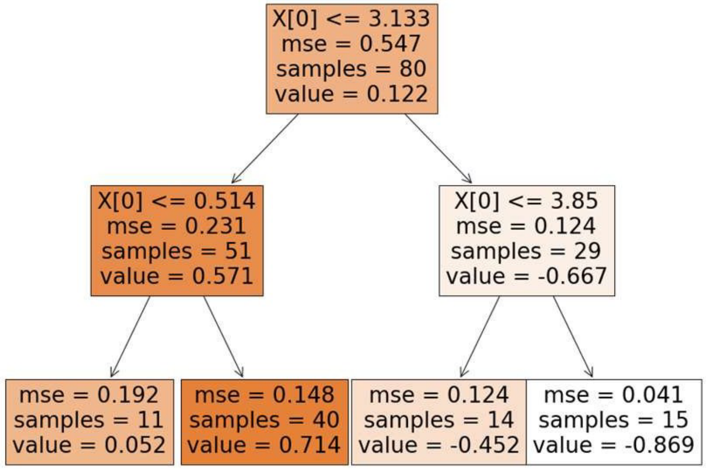


Сложность дерева

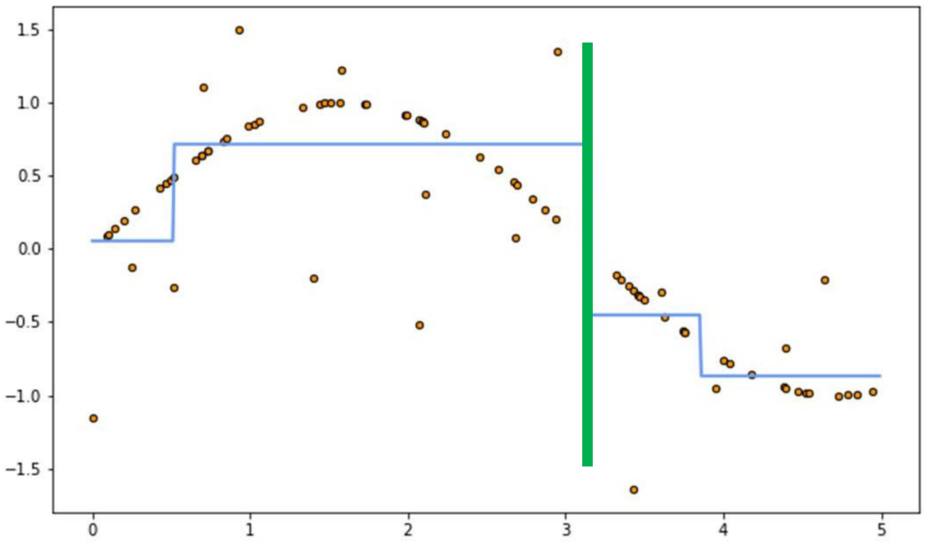
- Решающее дерево можно строить до тех пор, пока каждый лист не будет соответствовать ровно одному объекту
- Деревом можно идеально разделить любую выборку!
- Если только нет объектов с одинаковыми признаками, но разными ответами

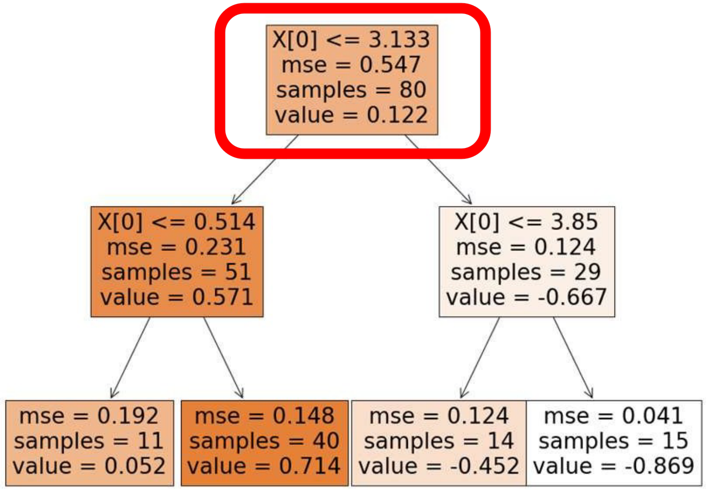
Решающее дерево для регрессии



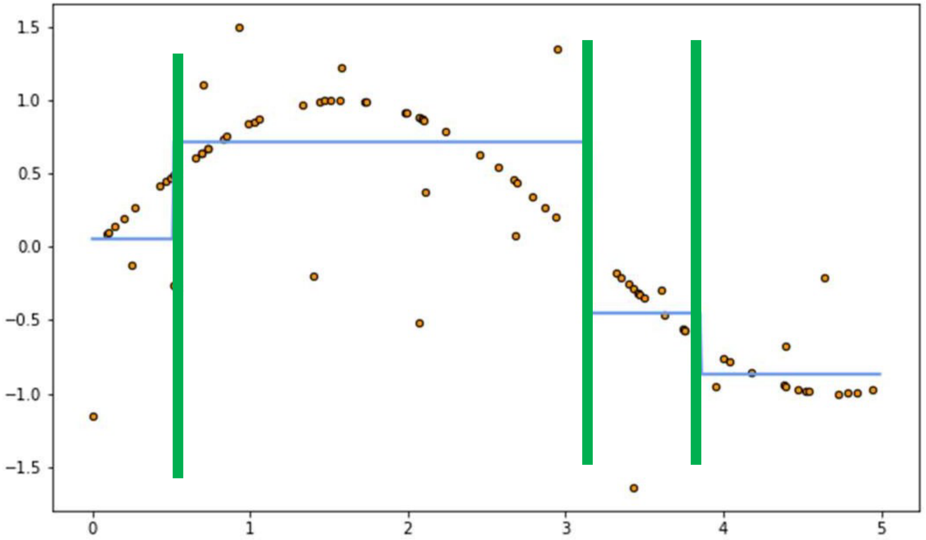


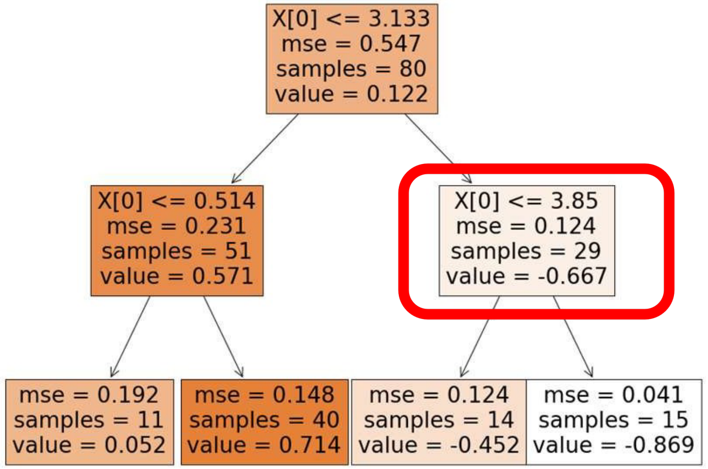
Решающее дерево для регрессии



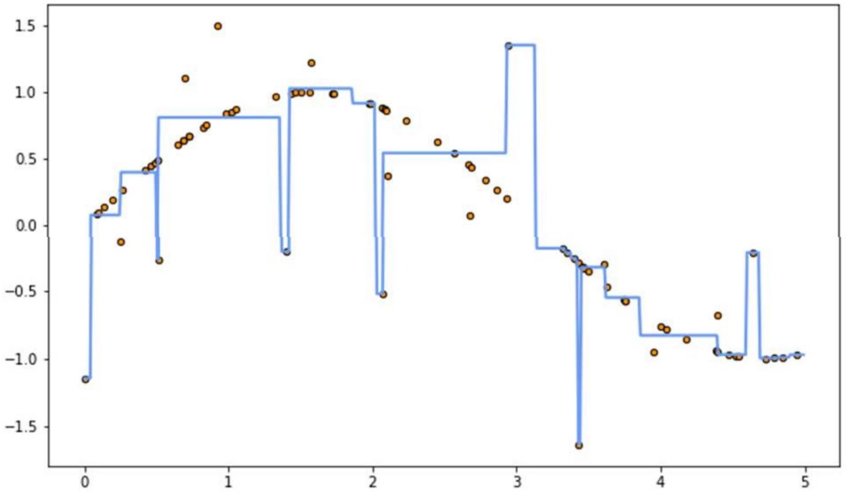


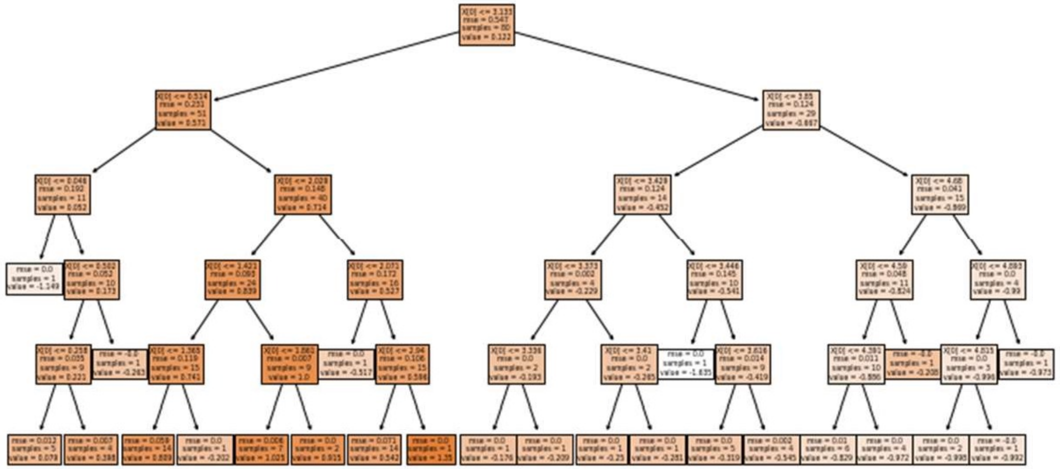
Решающее дерево для регрессии



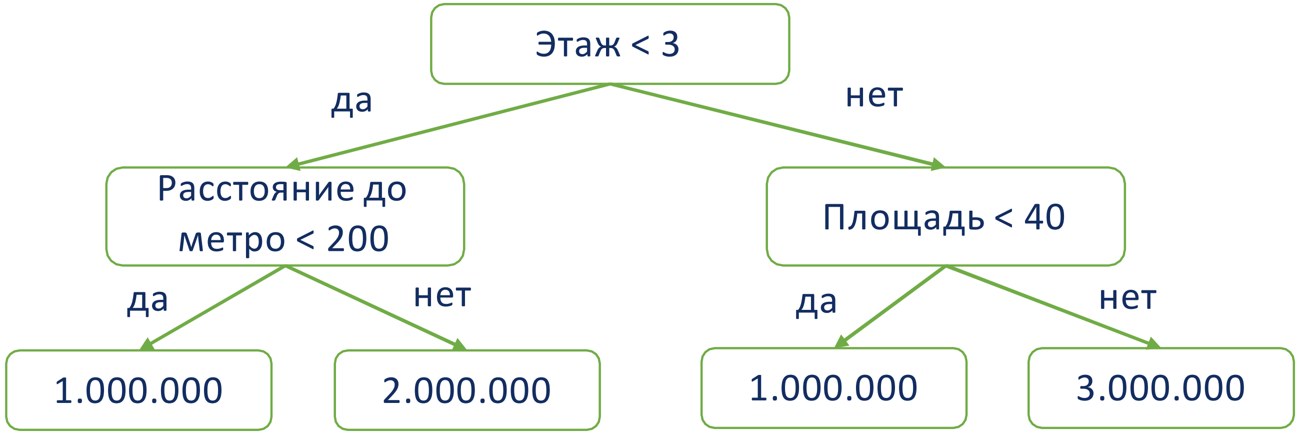


Решающее дерево для регрессии





Решающее дерево



- Внутренние вершины: предикаты $[x_j < t]$
- Листья: прогнозы $c \in \mathbb{Y}$

Предикаты

- Порог на признак $[x_j < t]$ — не единственный вариант
- Предикат с линейной моделью: $[\langle w, x \rangle < t]$
- Предикат с метрикой: $[\rho(x, x_0) < t]$
- И много других вариантов
- Но даже с простейшим предикатом можно строить очень сложные модели

Прогнозы в листьях

- Наш выбор: константные прогнозы $c_v \in \mathbb{Y}$
- Регрессия:

$$c_v = \frac{1}{|R_v|} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} y_i$$

- Классификация:

$$c_v = \arg\max_{k \in \mathbb{Y}} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} [y_i = k]$$

Прогнозы в листьях

- Наш выбор: константные прогнозы $c_v \in \mathbb{Y}$
- Классификация и вероятности классов:

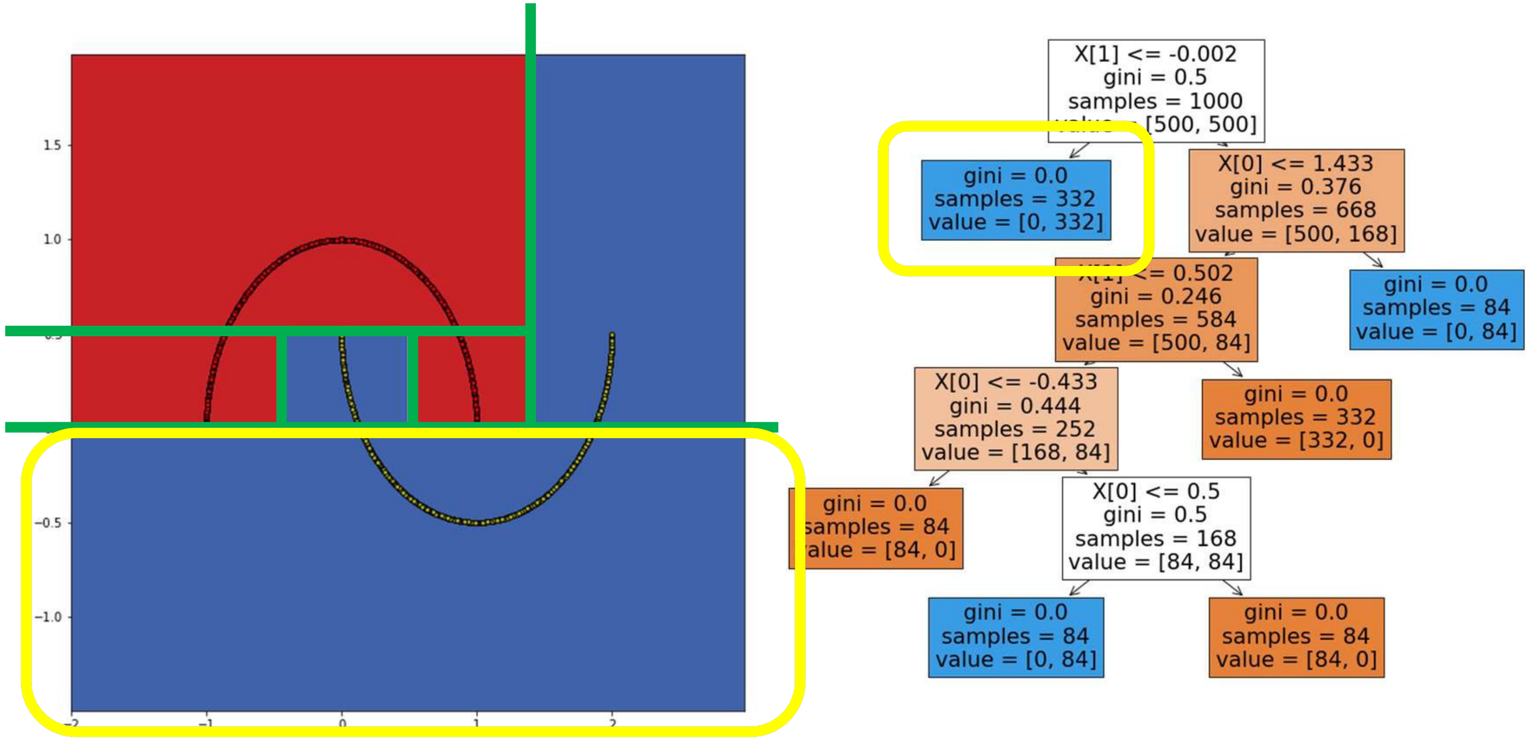
$$c_{vk} = \frac{1}{|R_v|} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} [y_i = k]$$

Прогнозы в листьях

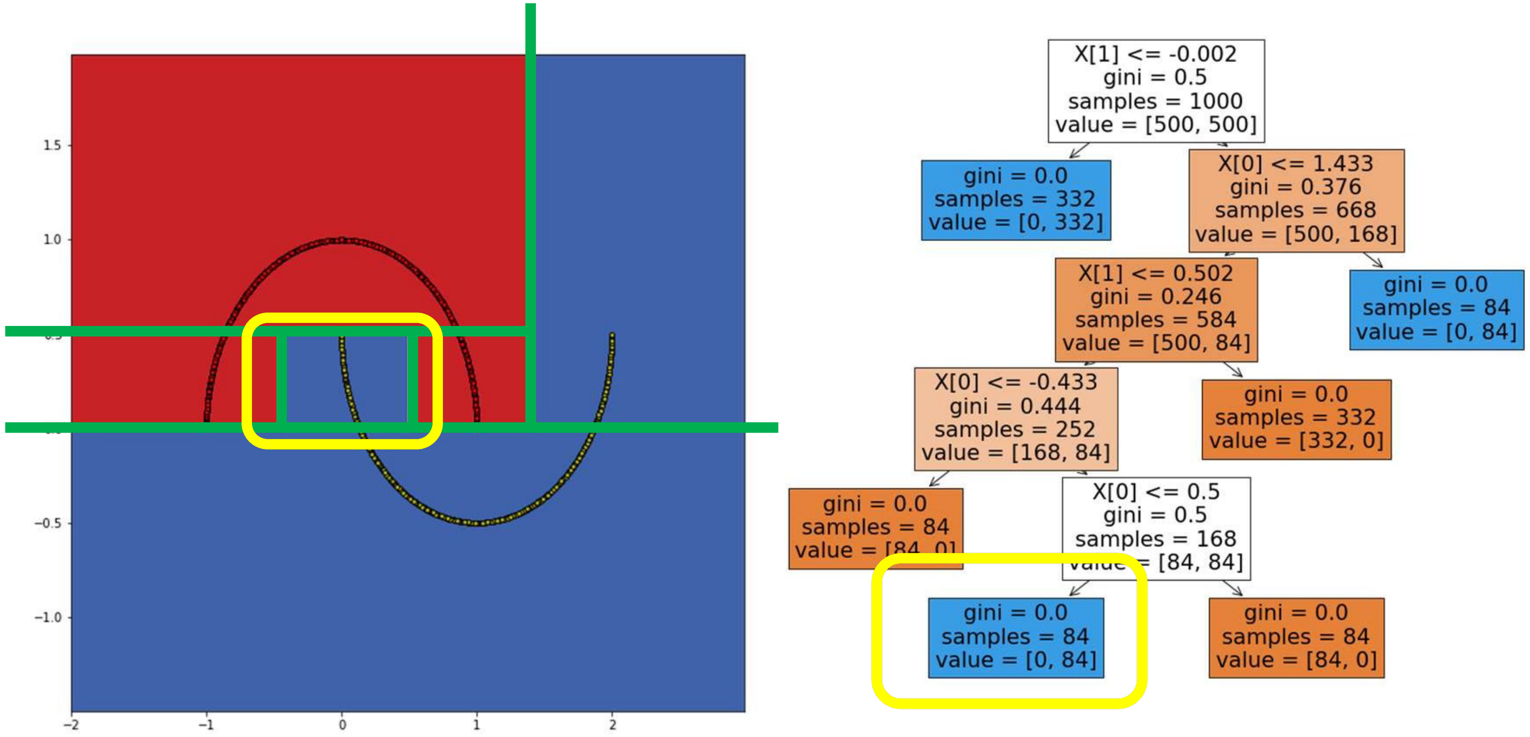
- Можно усложнять листья
- Например:

$$c_v(x) = \langle w_v, x \rangle$$

Решающее дерево



Решающее дерево



Формула для дерева

- Дерево разбивает признаковое пространство на области $R_1, \dots, R_J$
- Каждая область R_j соответствует листу
- В области R_j прогноз c_j константный

$$a(x) = \sum_{j=1}^{J} c_j \, [x \in R_j]$$

Формула для дерева

$$a(x) = \sum_{j=1}^{J} c_j \left[x \in R_j\right]$$

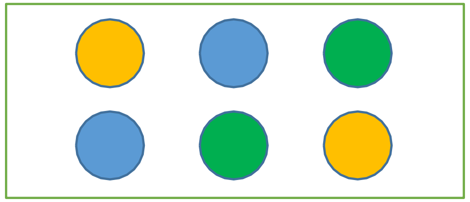
- Решающее дерево находит хорошие новые признаки
- Над этими признаками подбирает линейную модель

Как выбирать предикаты?

Жадное построение

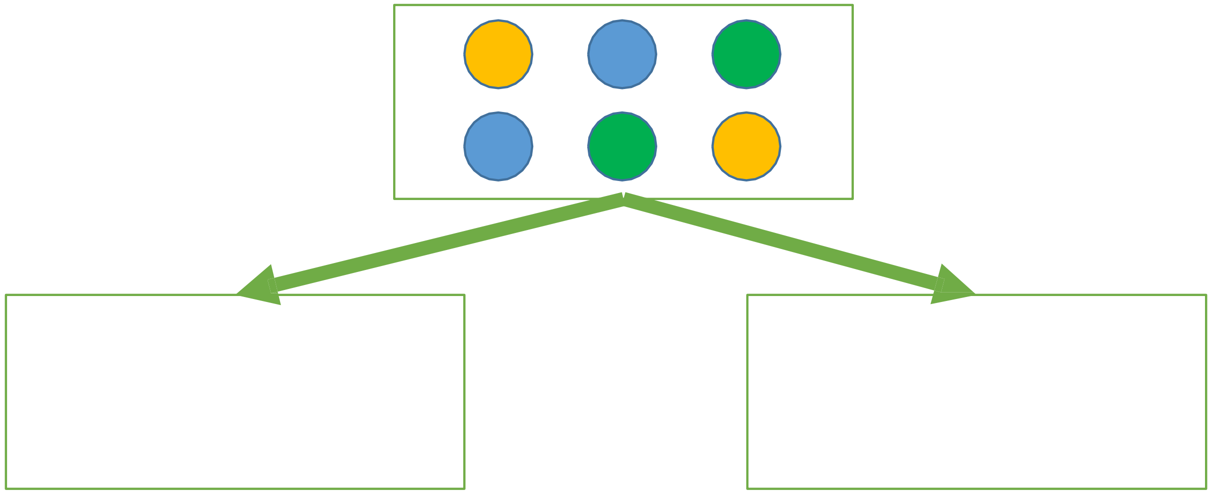
- Разберёмся на примере
- Начнём с задачи классификации

Жадное построение

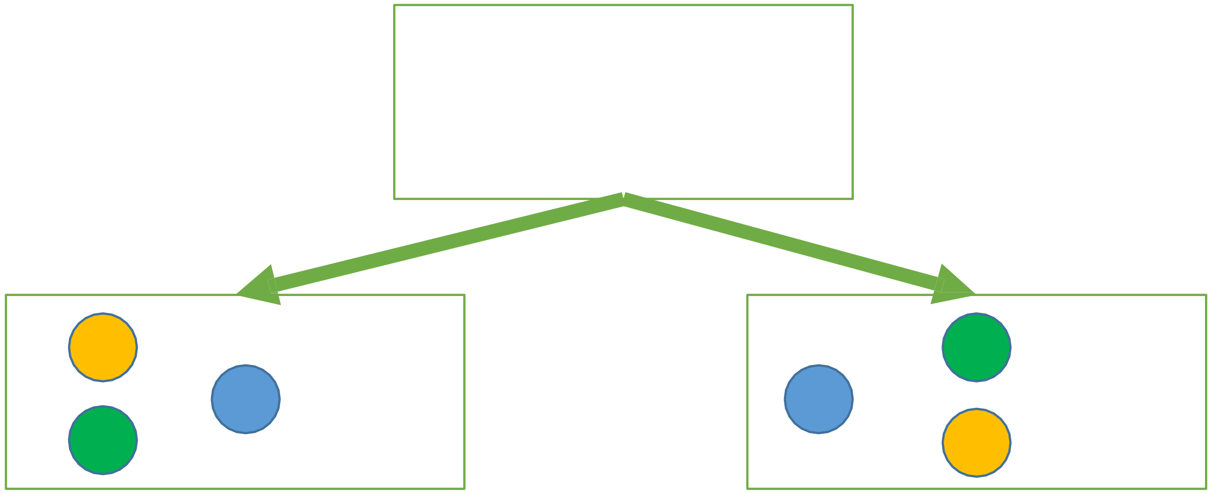


- Как разбить вершину?

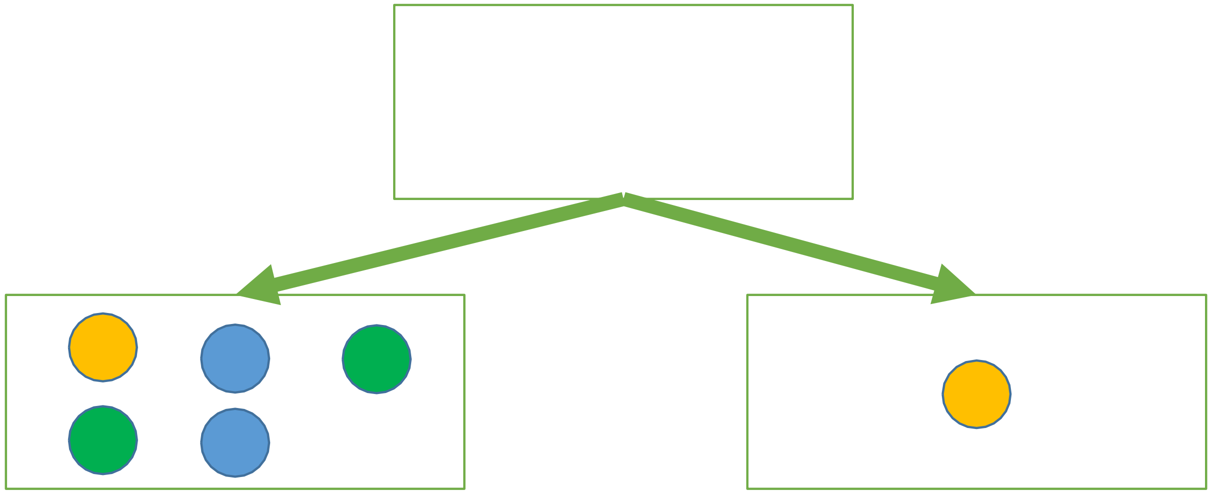
Жадное построение



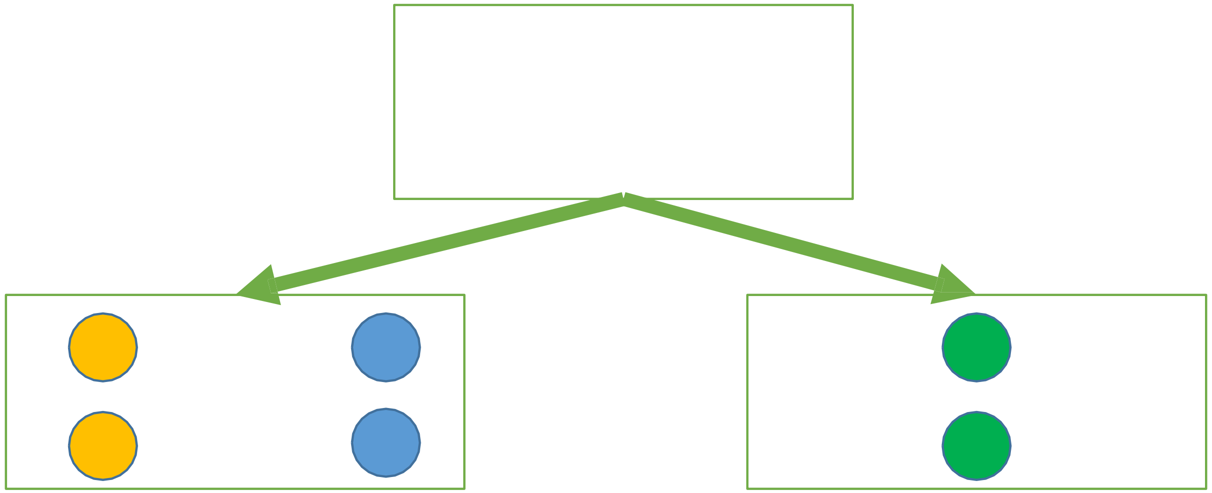
Жадное построение



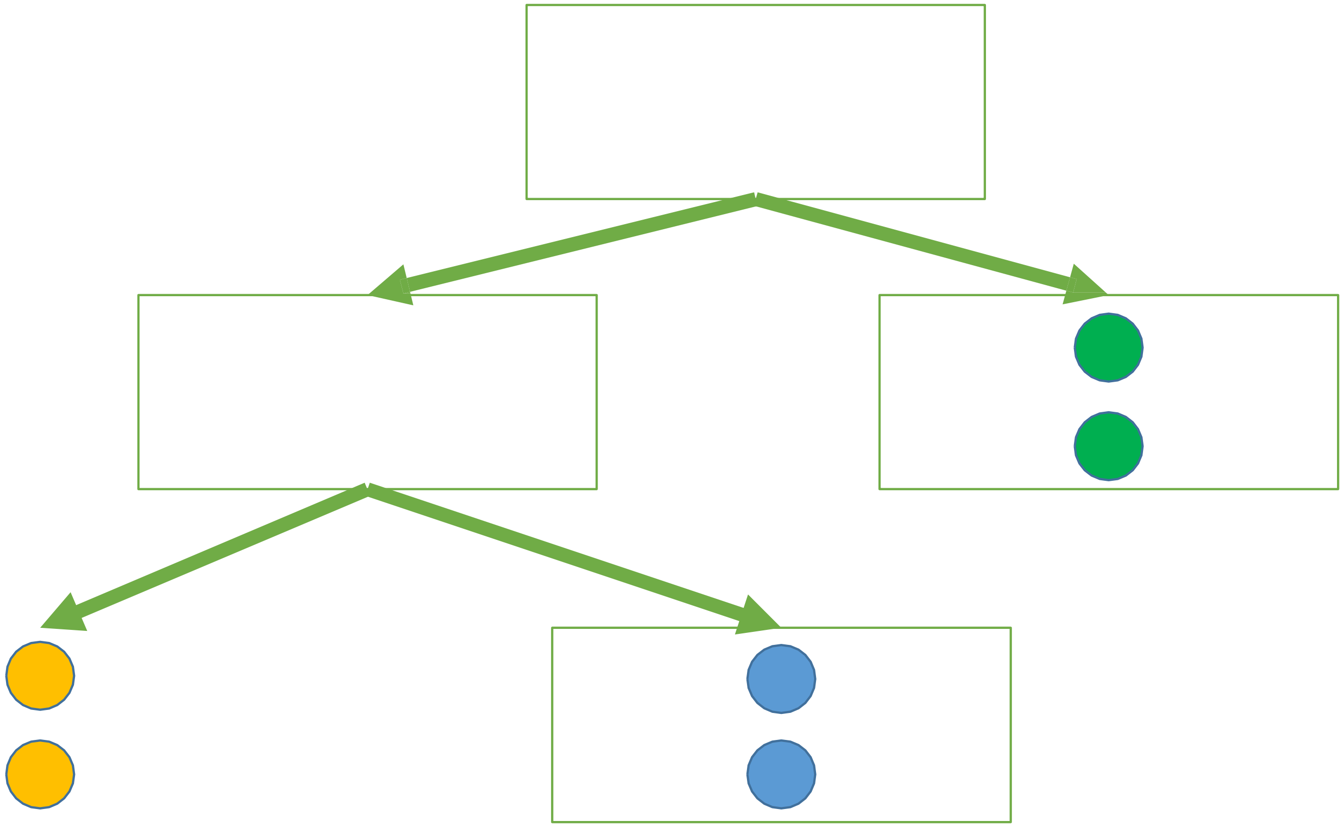
Жадное построение



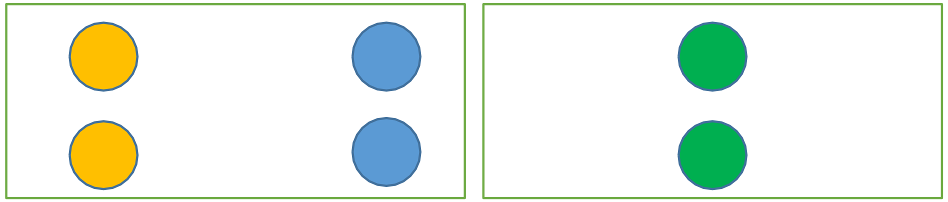
Жадное построение



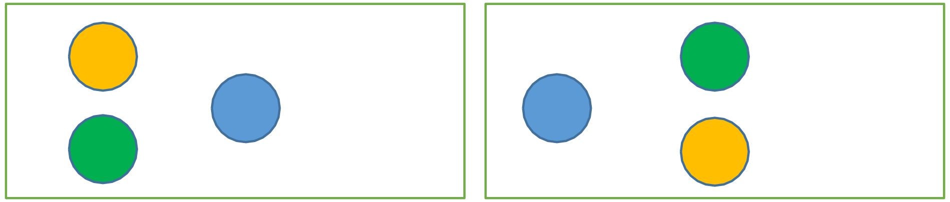
Жадное построение



Как сравнить разбиения?

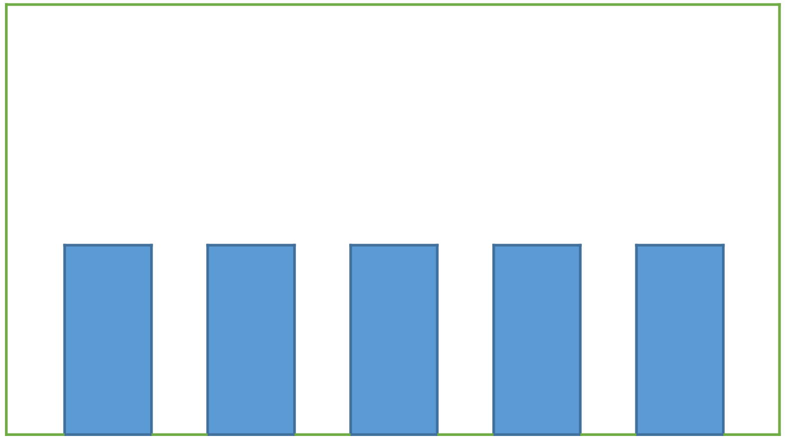


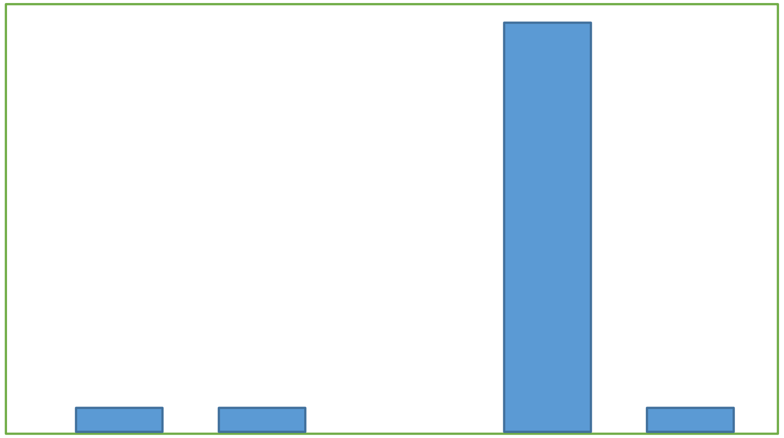
или



Энтропия

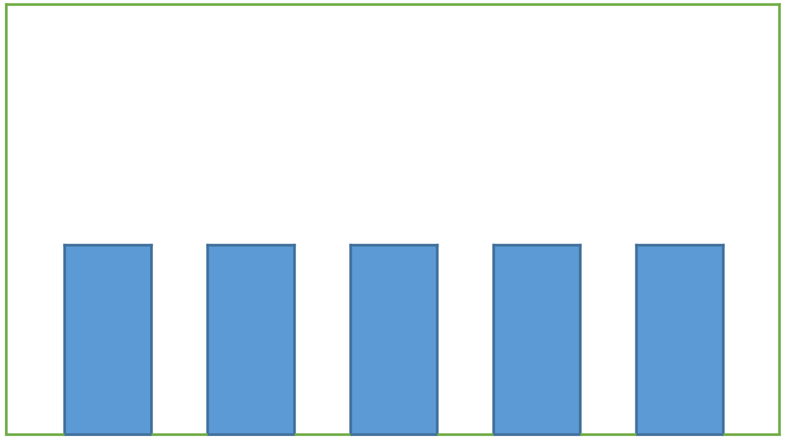
- Мера неопределённости распределения



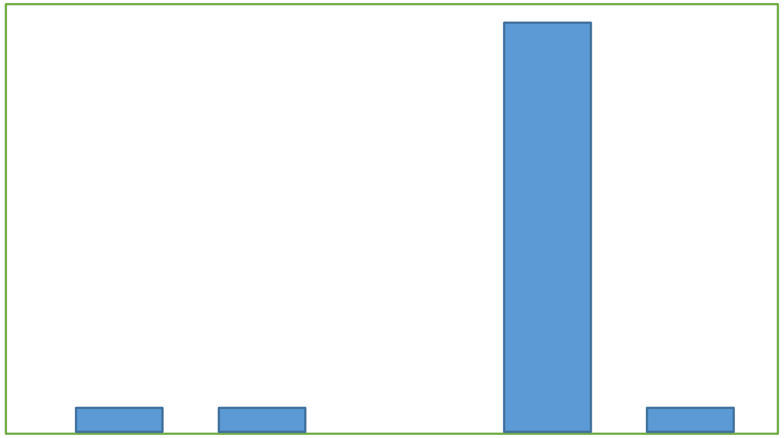


Энтропия

- Мера неопределённости распределения



Высокая энтропия



Низкая энтропия

Энтропия

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

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

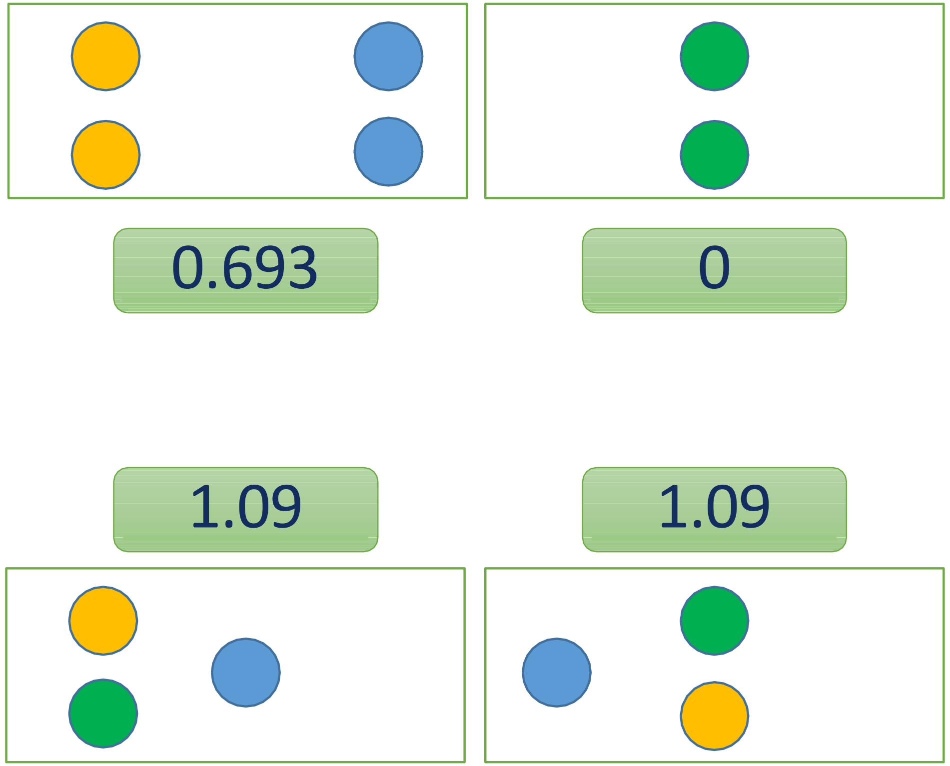
Энтропия

- $(0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2)$
- $H = 1.60944\ldots$

- $(0.9, 0.05, 0.05, 0, 0)$
- $H = 0.394398\ldots$

- $(0, 0, 0, 1, 0)$
- $H = 0$

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

Энтропия

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

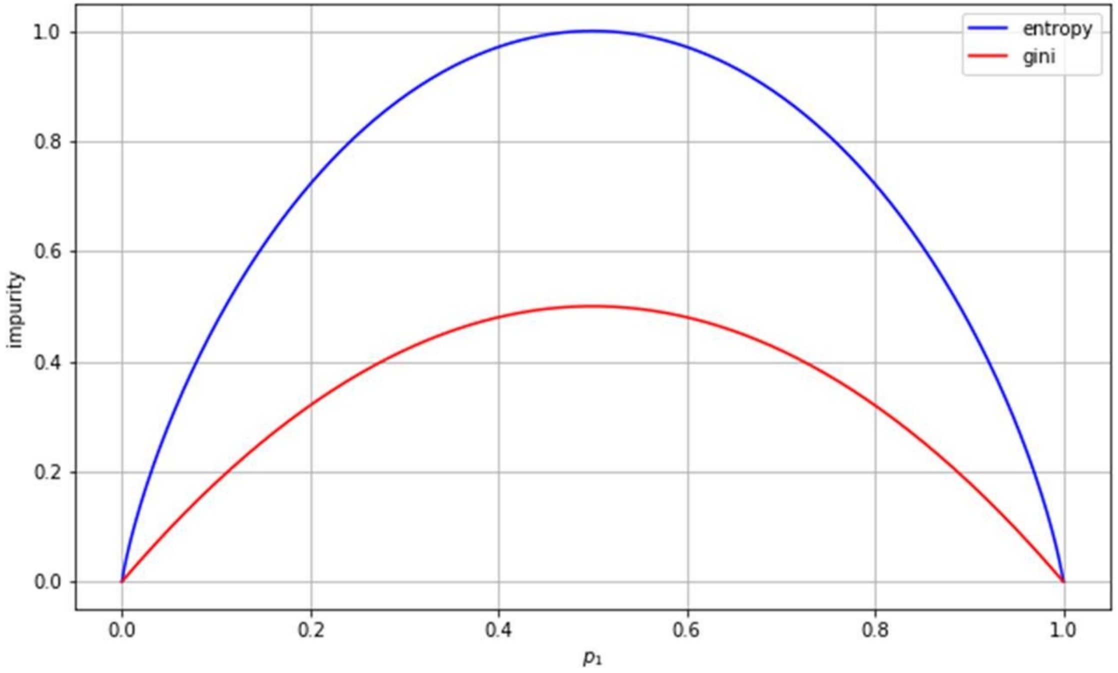
- Характеристика «хаотичности» вершины
- Impurity

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

Критерии качества вершины

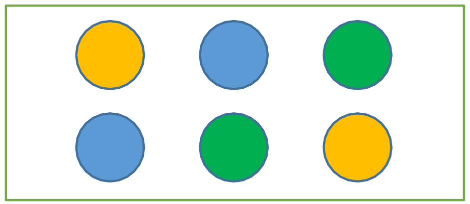


Критерий информативности

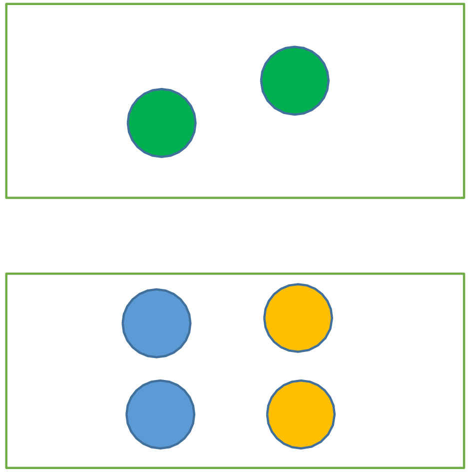
- Как понять, какой предикат лучше?
- Сравнить хаотичность в исходной вершине и в двух дочерних!

Критерий информативности

- Как понять, какой предикат лучше?
- Сравнить хаотичность в исходной вершине и в двух дочерних!



против



Критерий информативности

- Как понять, какой предикат лучше?
- Сравнить хаотичность в исходной вершине и в двух дочерних!

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

Критерий информативности

- Как понять, какой предикат лучше?
- Сравнить хаотичность в исходной вершине и в двух дочерних!

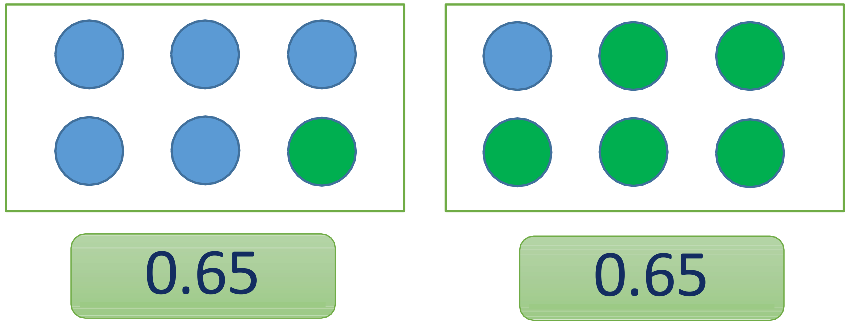
$$Q(R, j, t) = H(R) - H(R_\ell) - H(R_r) \to \max_{j,t}$$

- Или так:

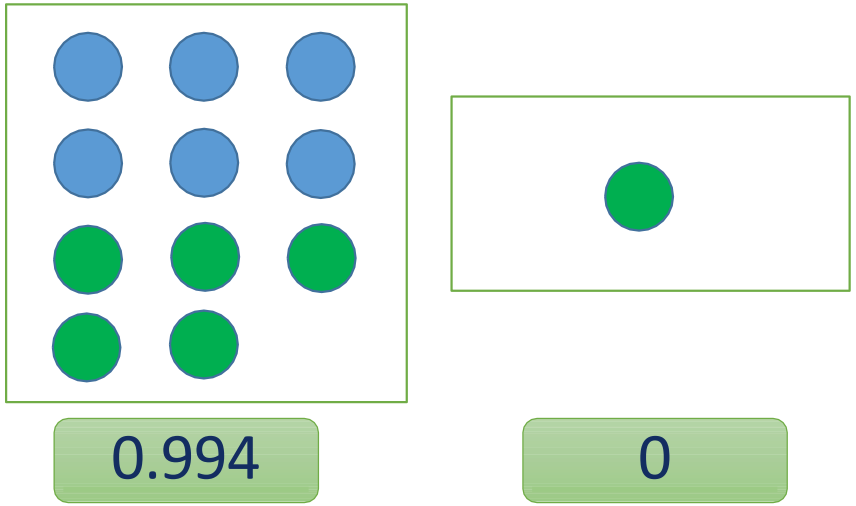
$$Q(R, j, t) = H(R_\ell) + H(R_r) \to \min_{j,t}$$

- (у этих формул есть проблемы!)

Как сравнить разбиения?



- $(5/6, 1/6)$ и $(1/6, 5/6)$
- $0.65 + 0.65 = 1.3$



- $(6/11, 5/11)$ и $(0, 1)$
- $0.994 + 0 = 0.994$

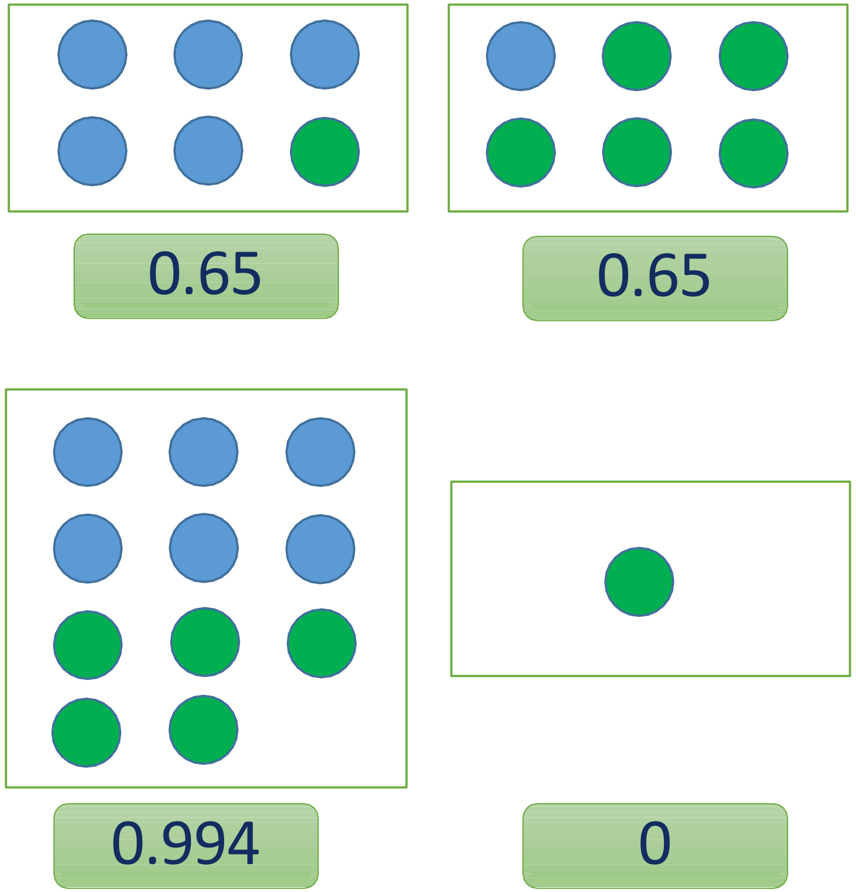
Критерий информативности

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

- 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?

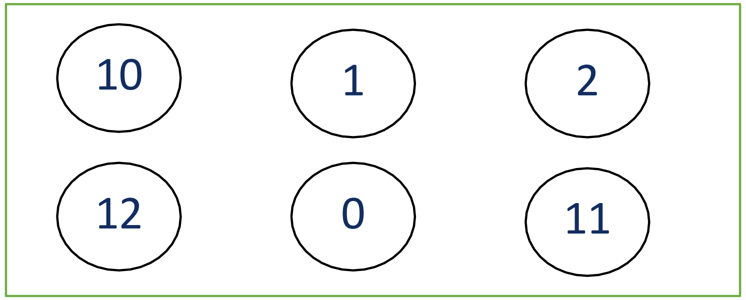


$(5/6, 1/6)$ и $(1/6, 5/6)$

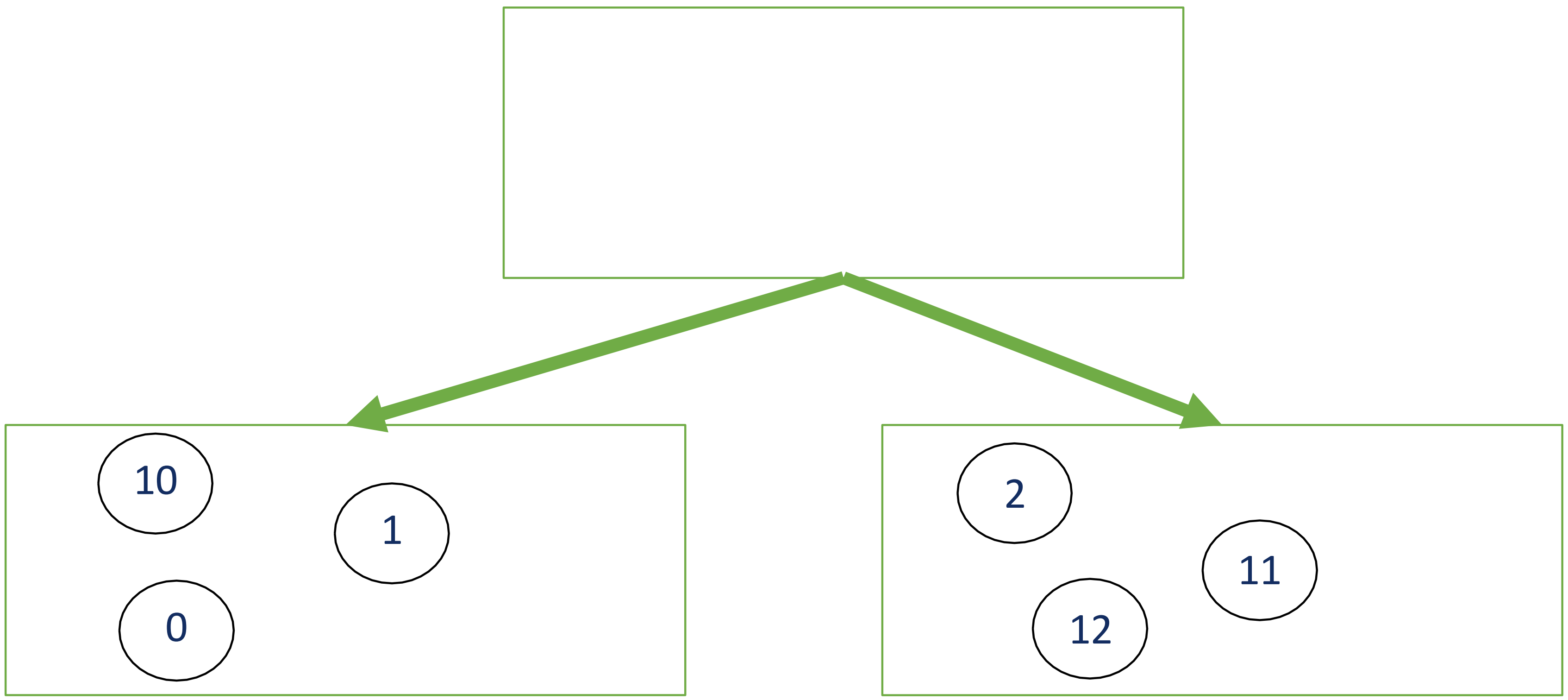
$0.5 * 0.65 + 0.5 * 0.65 = 0.65$

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

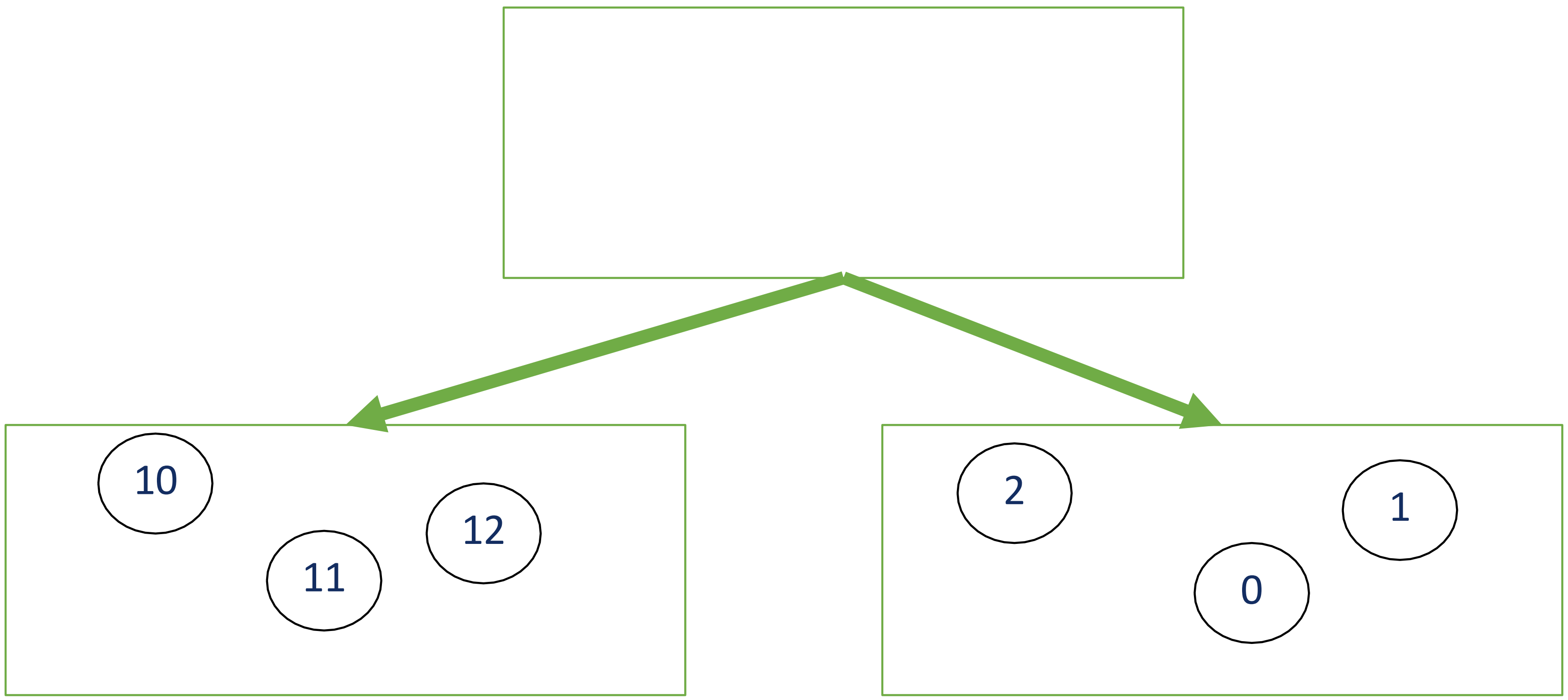
А для регрессии?



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

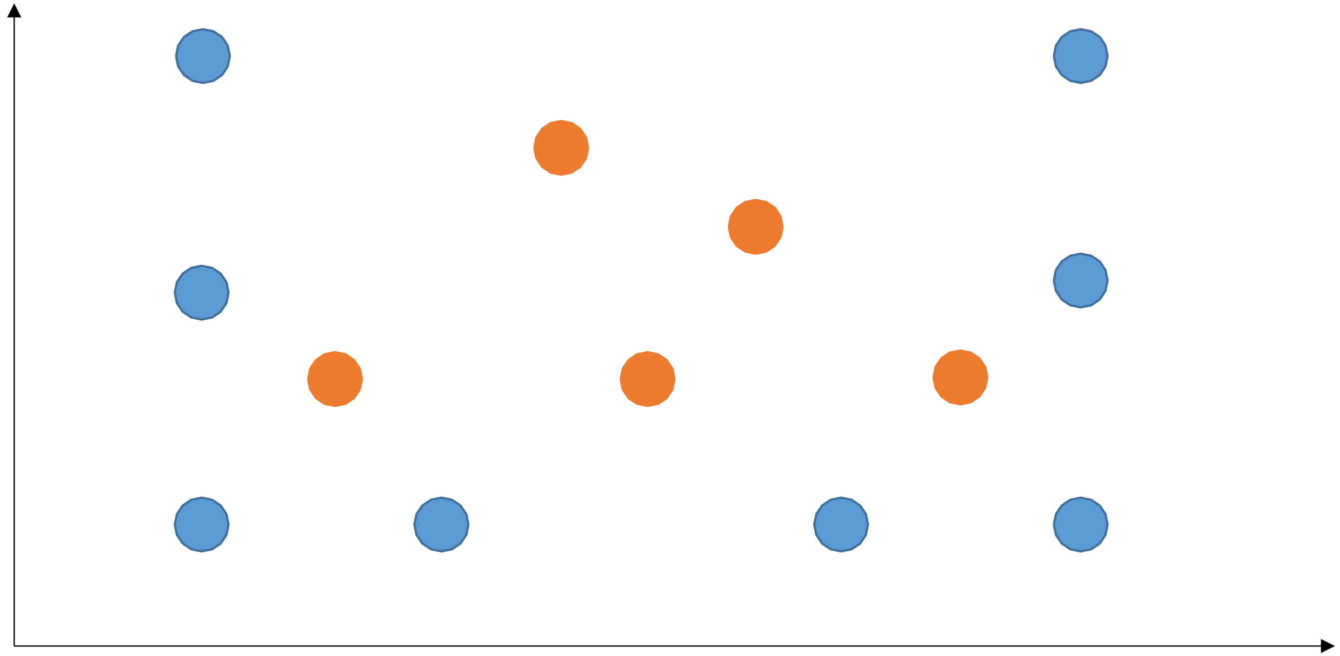
Жадный алгоритм

- Поместить в корень всю выборку: $R_1 = X$
- Запустить построение из корня: SplitNode$(1, R_1)$

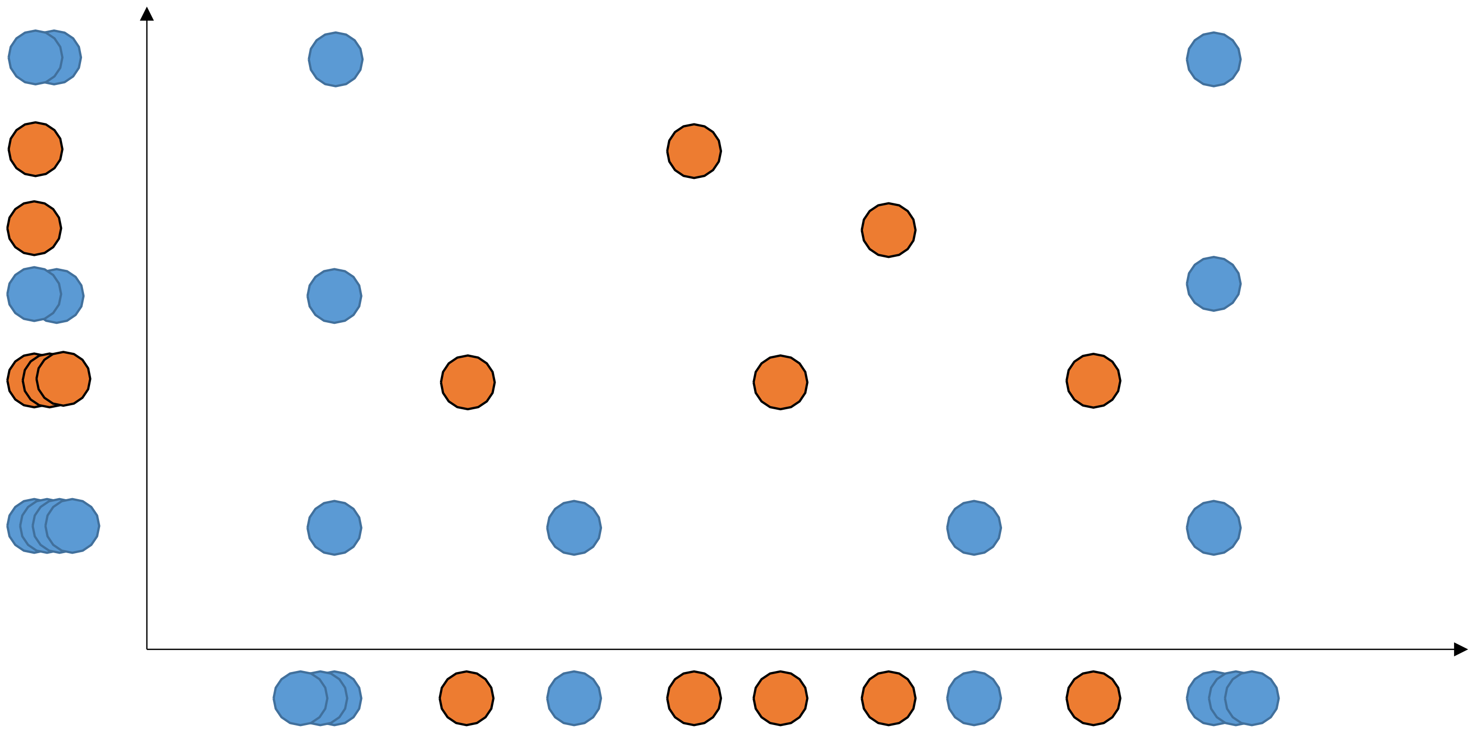
Жадный алгоритм

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

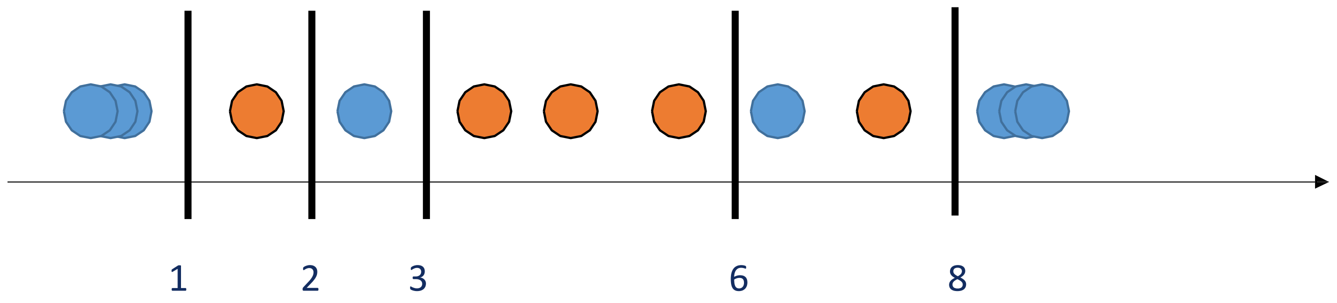
Обучение деревьев



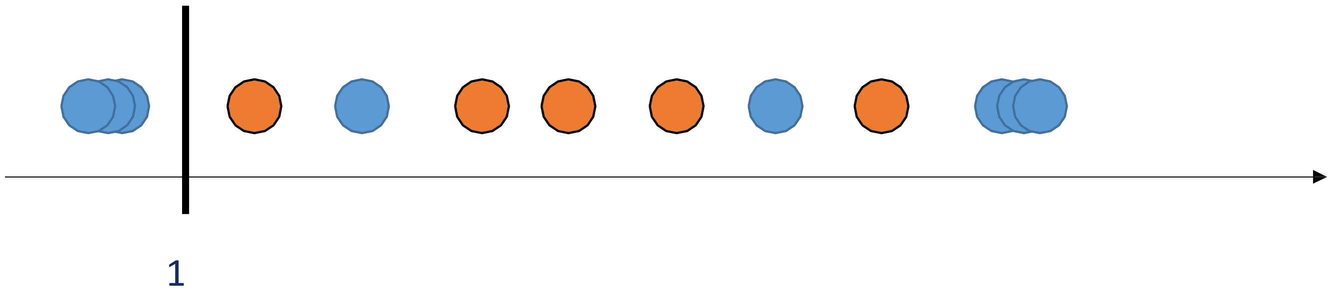
Признаки



Разбиения по признаку 1



Разбиения по признаку 1

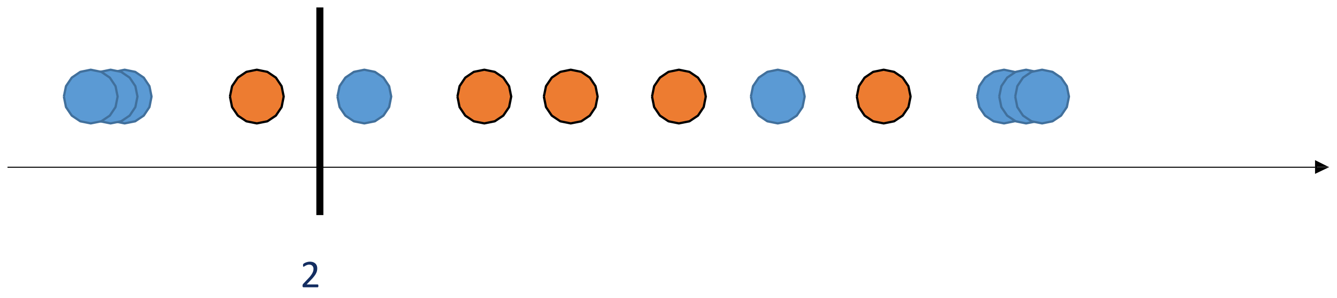


(1, 0)
H(p) = 0

(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

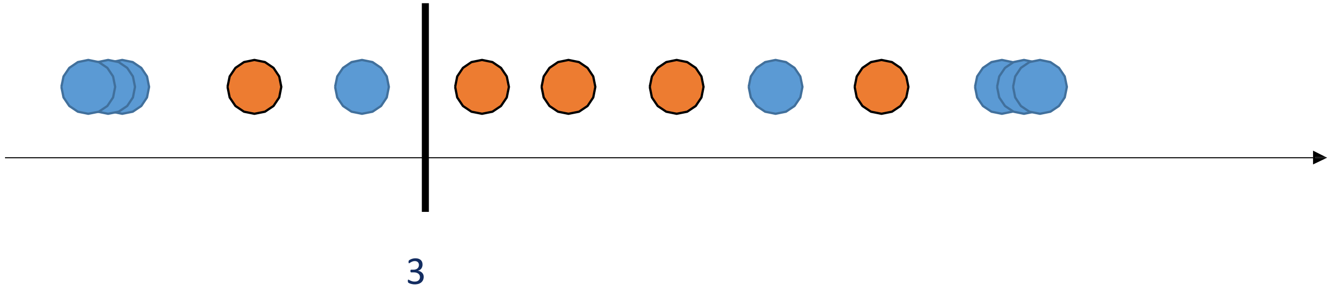


(3/4, 1/4)
H(p) = 0.56

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

$$\frac{4}{13}H(p_{\mathrm{l}}) + \frac{9}{13}H(p_{\mathrm{r}}) = 0.65$$

Разбиения по признаку 1

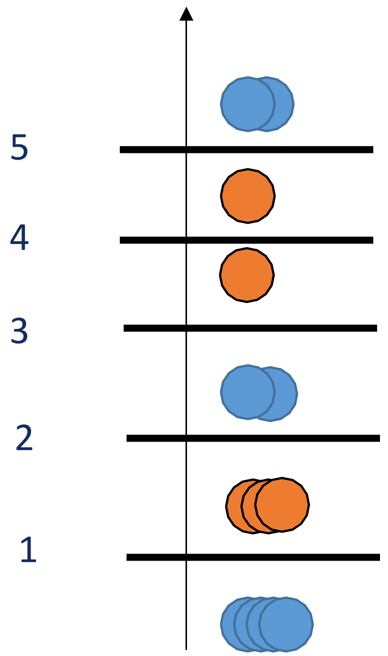


(4/5, 1/5)
H(p) = 0.5

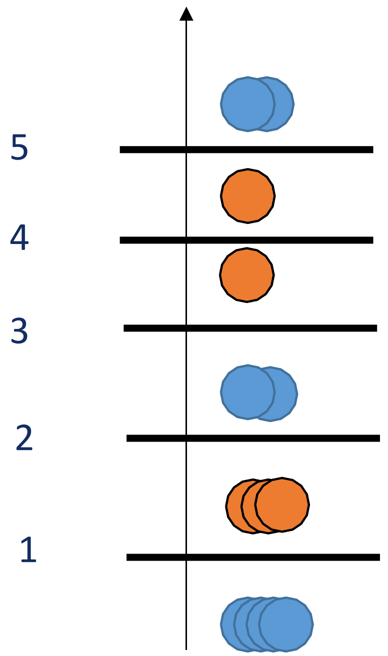
(1/2, 1/2)
H(p) = 0.69

$$\frac{5}{13}H(p_{\mathrm{l}}) + \frac{8}{13}H(p_{\mathrm{r}}) = 0.62$$

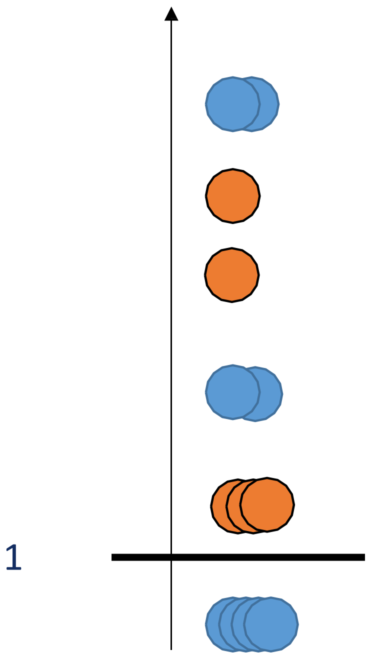
Разбиения по признаку 1



Разбиения по признаку 2



Разбиения по признаку 2

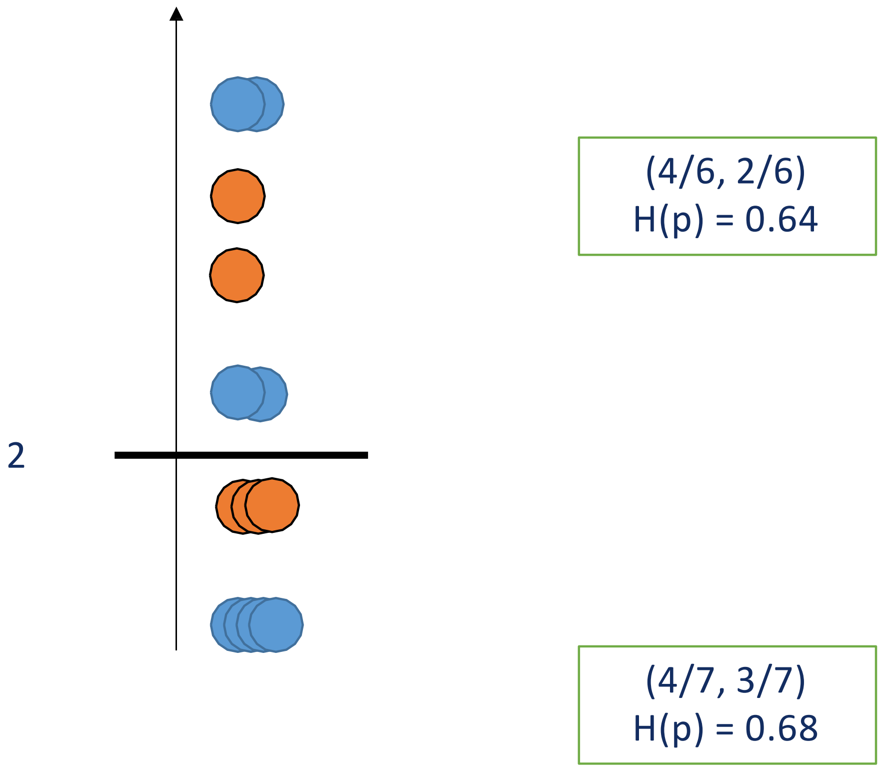


(4/9, 5/9)
H(p) = 0.69

(1, 0)
H(p) = 0

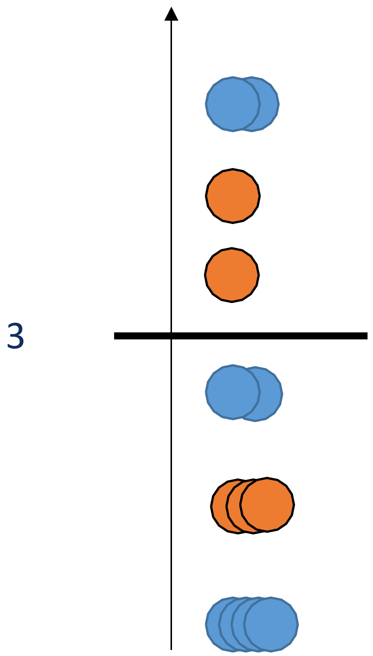
$$\frac{4}{13} H(p_l) + \frac{9}{13} H(p_r) = 0.47$$

Разбиения по признаку 2



$$\frac{7}{13}H(p_{\mathrm{l}}) + \frac{6}{13}H(p_{\mathrm{r}}) = 0.66$$

Разбиения по признаку 2

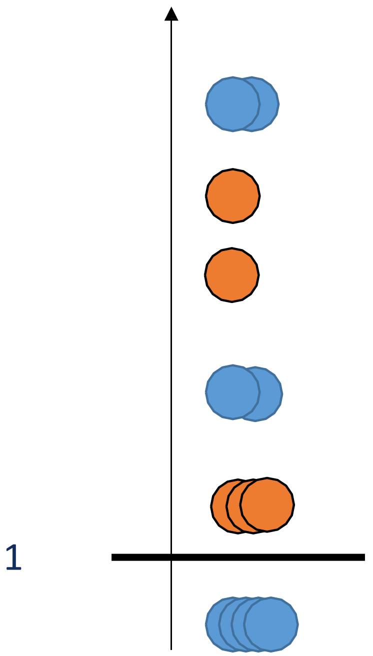


(1/2, 1/2)
H(p) = 0.69

(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



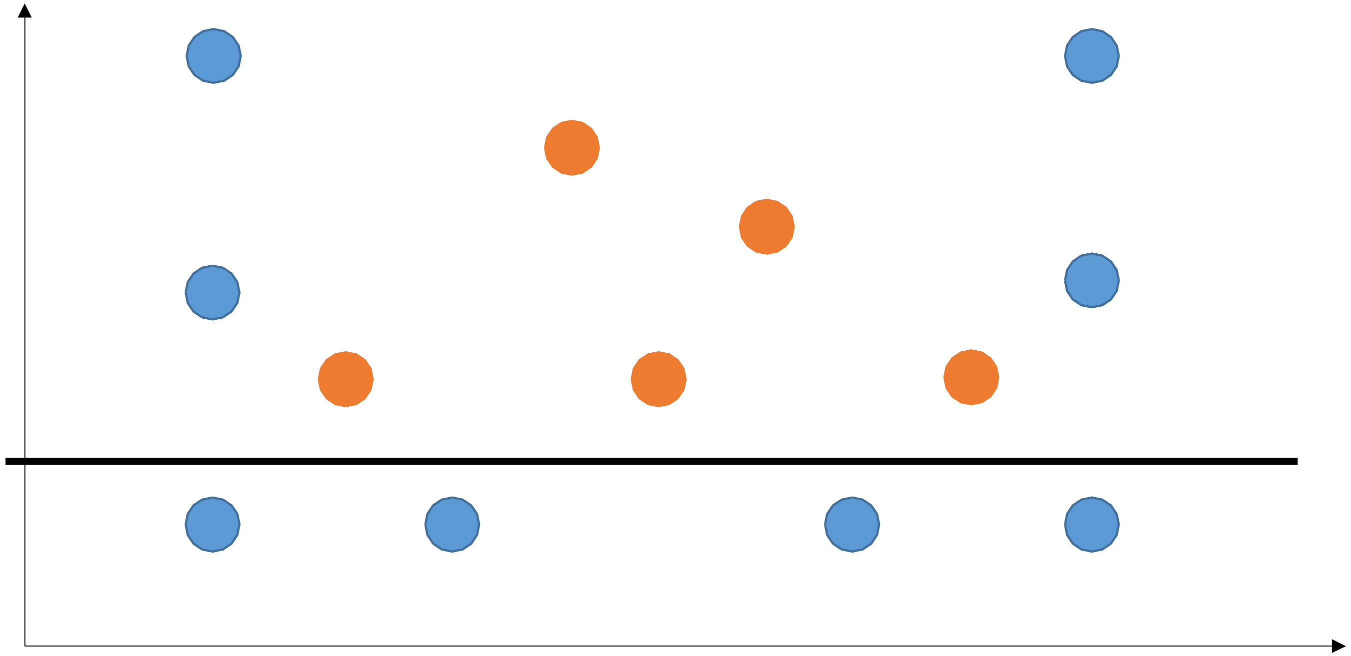
(4/9, 5/9)
H(p) = 0.69

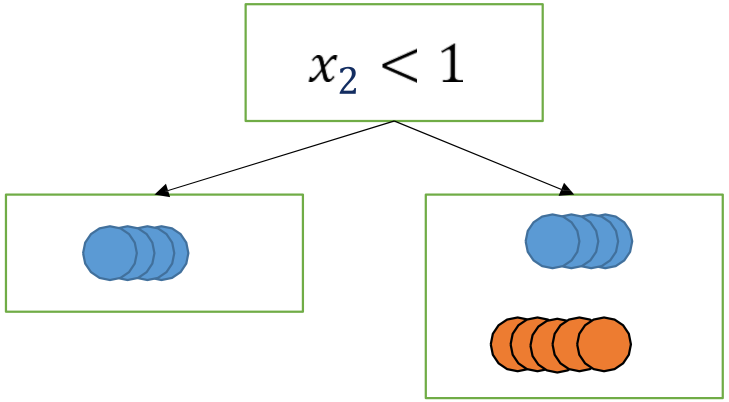
(1, 0)
H(p) = 0

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

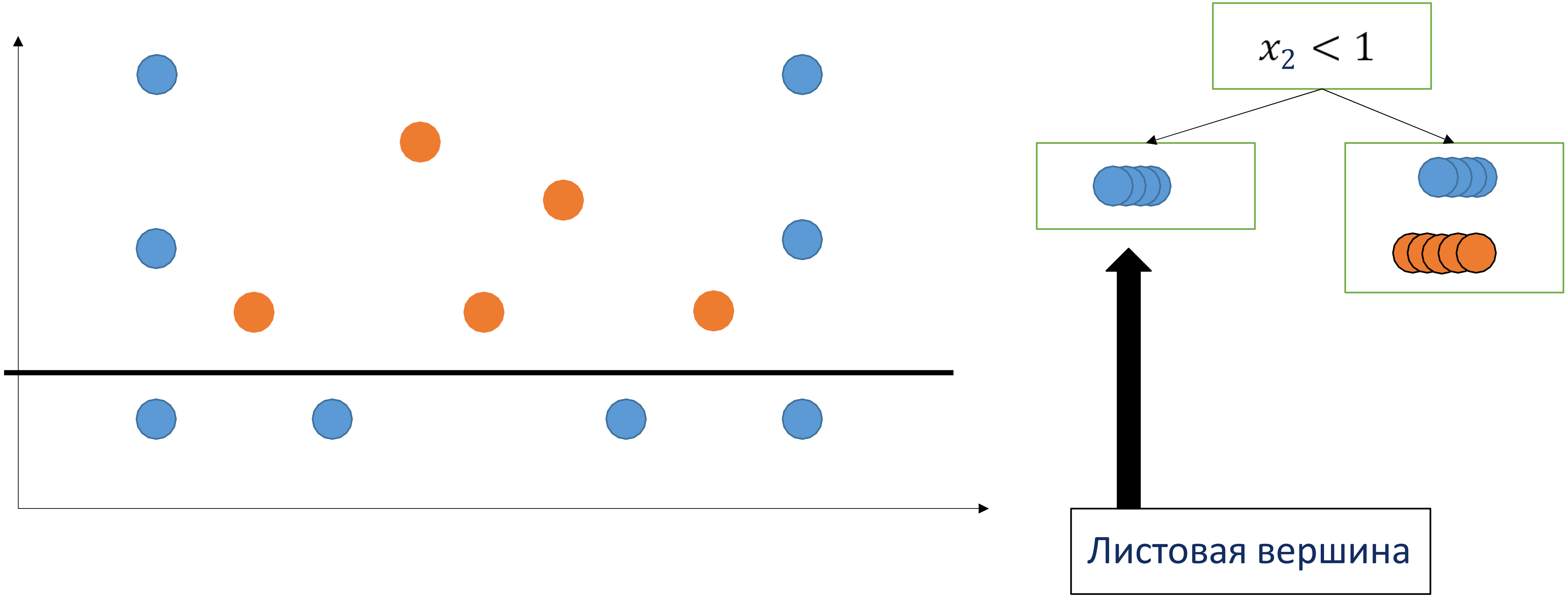
Лучшее разбиение!

Обучение деревьев

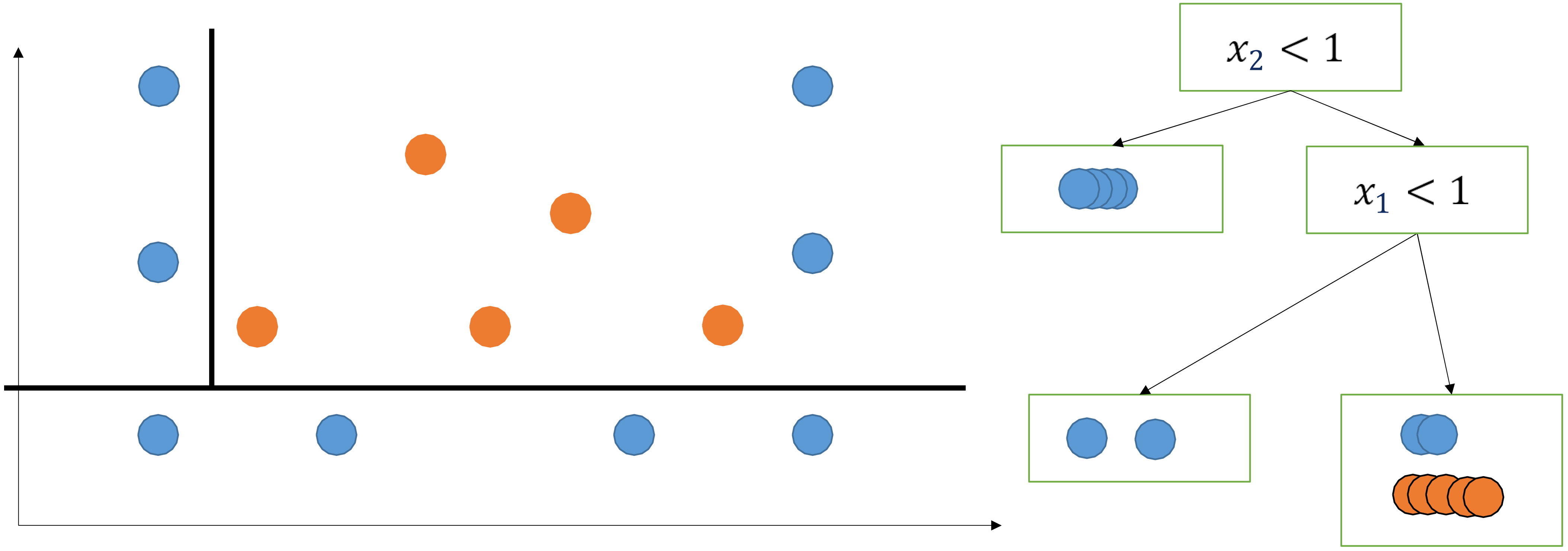




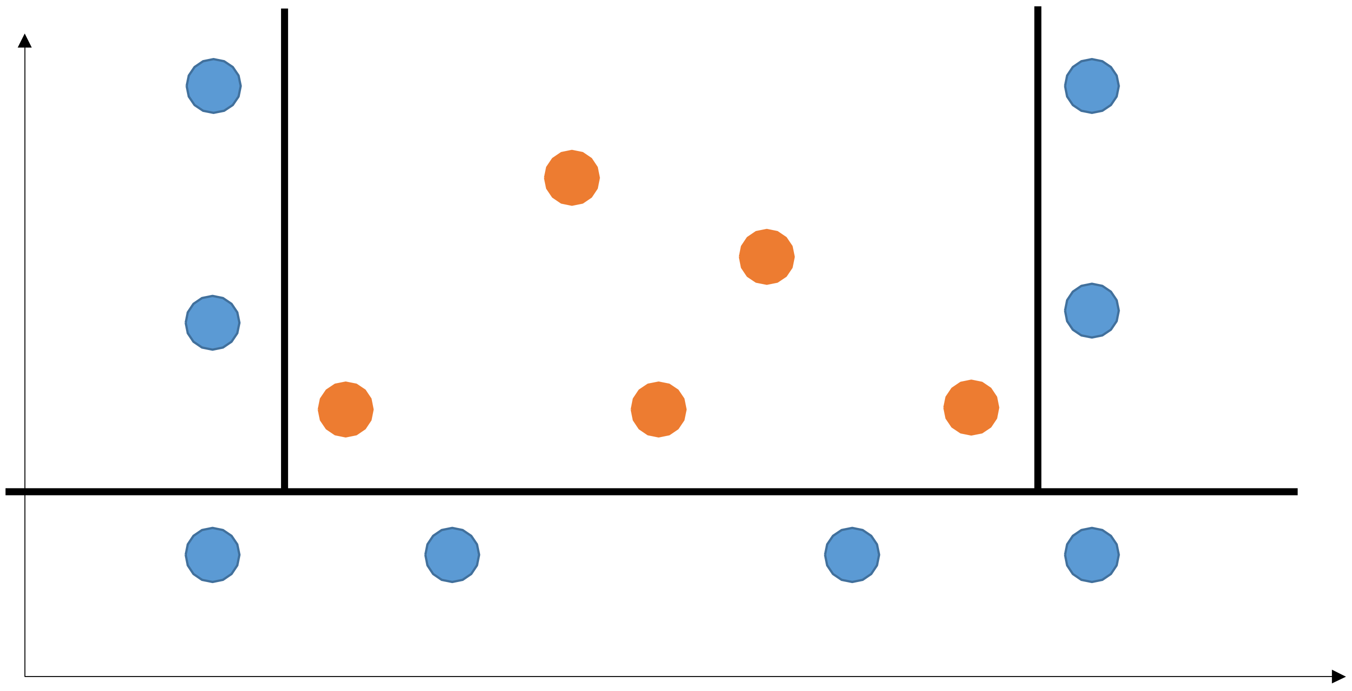
Обучение деревьев

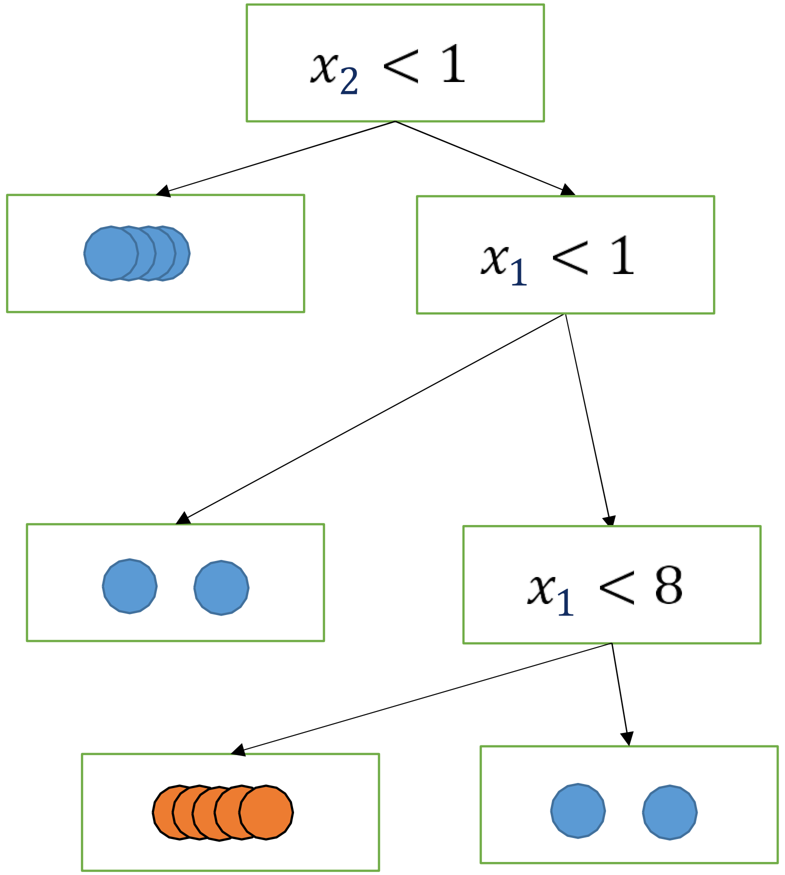


Обучение деревьев



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

Спасибо за внимание!

Ildar Safilo

@Ildar_Saf
irsafilo@gmail.com
https://www.linkedin.com/in/isafilo/