# Логические методы классификации

Воронцов Константин Вячеславович vokov@forecsys.ru http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

Этот курс доступен на странице вики-ресурса http://www.MachineLearning.ru/wiki «Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

МФТИ • 30 октября 2021

#### Содержание

- 🕕 Индукция правил
  - Понятие закономерности
  - Алгоритмы поиска закономерностей
  - Критерии информативности
- Решающие деревья
  - Жадный метод обучения решающего дерева
  - Усечение дерева (pruning)
  - CART: деревья регрессии и классификации
- 3 Решающие списки и таблицы
  - Решающие списки
  - Решающие таблицы
  - Бинаризация признаков

#### Логические закономерности в задачах классификации

$$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \subset X imes Y$$
 — обучающая выборка,  $y_i = y(x_i)$ .

*Логическая закономерность* (правило, rule) — это предикат  $R: X \to \{0,1\}$ , удовлетворяющий двум требованиям:

- интерпретируемость:
  - 1) R записывается на естественном языке;
  - 2) R зависит от небольшого числа признаков (1-7);
- $oldsymbol{arrho}$  информативность относительно одного из классов  $y\in Y$ :  $p_y(R) = \#\{x_i : R(x_i) = 1 \text{ u } y_i = y\} \to \max;$

$$n_y(R) = \#\{x_i \colon R(x_i) = 1 \text{ if } y_i \neq y\} \to \min;$$

$$n_y(K) = \#\{x_i : K(x_i) = 1 \text{ if } y_i \neq y\} \rightarrow \min$$

$$\frac{p_y(R)}{P_y} \gg \frac{n_y(R)}{N_y}$$

$$P_y$$

$$N_y = \ell - P_y$$

Если R(x) = 1, то говорят «R выделяет x» (R covers x).

# Требование интерпретируемости

- 1) R(x) записывается на естественном языке;
- 2) R(x) зависит от небольшого числа признаков (1-7);

#### Пример (из области медицины)

**Если** «возраст > 60» и «пациент ранее перенёс инфаркт», то операцию не делать, риск отрицательного исхода 60%

# Пример (из области кредитного скоринга)

Если «в анкете указан домашний телефон» и «зарплата > \$2000» и «сумма кредита < \$5000» то кредит можно выдать, риск дефолта 5%

Замечание. *Риск* — частотная оценка вероятности класса, вычисляемая, как правило, по отложенной контрольной выборке

#### Обучение логических классификаторов

Алгоритмов индукции правил (rule induction) очень много!

#### Четыре основных шага их построения:

- 💵 Выбор семейства правил для поиска закономерностей
- ② Выбор алгоритма порождения правил (rule generation)
- 3 Выбор критерия информативности (rule selection)
- Построение классификатора из правил как из признаков, например, линейного классификатора (weighted voting):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{j=1}^{n_y} w_{yj} R_{yj}(x)$$

Две трактовки понятия «логическая закономерность» R(x):

- высокоинформативный интерпретируемый признак
- одноклассовый классификатор с отказами

#### Шаг 1. Часто используемые семейства правил

• Пороговое условие (решающий пень, decision stump):

$$R(x) = \left[ f_j(x) \leqslant rac{oldsymbol{a}_j}{oldsymbol{a}_j} 
ight]$$
 или  $\left[ rac{oldsymbol{a}_j}{oldsymbol{b}_j} \leqslant f_j(x) \leqslant rac{oldsymbol{b}_j}{oldsymbol{b}_j} 
ight].$ 

Конъюнкция пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \left[ a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j \right].$$

• Синдром — выполнение не менее d условий из |J|, (при d=|J| это конъюнкция, при d=1 — дизъюнкция):

$$R(x) = \left[\sum_{i \in J} \left[ a_j \leqslant f_j(x) \leqslant b_j \right] \geqslant d \right],$$

Параметры  $J, a_j, b_j, d$  настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации *критерия информативности*.

#### Шаг 1. Часто используемые семейства правил

• Полуплоскость — линейная пороговая функция:

$$R(x) = \left[\sum_{j \in J} w_j f_j(x) \geqslant w_0\right]$$

• Шар — пороговая функция близости:

$$R(x) = \left[ \rho(x, \mathbf{x_0}) \leqslant \mathbf{w_0} \right]$$

АВО — алгоритмы вычисления оценок [Ю. И. Журавлёв, 1971]:

$$\rho(x, x_0) = \max_{i \in J} \mathbf{w}_i |f_i(x) - f_i(x_0)|$$

SCM — машины покрывающих множеств [М. Marchand, 2001]:

$$\rho(x,x_0) = \sum_{j \in J} \mathbf{w}_j |f_j(x) - f_j(x_0)|^{\gamma}$$

Параметры  $J, w_j, w_0, x_0$  настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации выбранного *критерия информативности*.

# Шаг 2. Мета-эвристики для поиска информативных правил

```
Вход: обучающая выборка X^{\ell};
Выход: множество закономерностей Z;
инициализировать начальное множество правил Z;
повторять
Z' := \text{ множество } \text{ локальных модификаций } \text{ правил из } Z;
удалить слишком похожие правила из Z \cup Z';
Z := \text{ наиболее } \text{ информативные } \text{ правила из } Z \cup Z';
пока правила продолжают улучшаться;}
вернуть Z;
```

#### Частные случаи:

- стохастический локальный поиск (stochastic local search)
- генетические (эволюционные) алгоритмы
- усечённый поиск в ширину (beam search)
- поиск в глубину (метод ветвей и границ)

# Шаг 2. Локальные модификации правил

Пример. Семейство конъюнкций пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \left[ \frac{a_j}{s} \leqslant f_j(x) \leqslant \frac{b_j}{s} \right].$$

*Локальные модификации* конъюнктивного правила:

- варьирование одного из порогов *а<sub>j</sub>* и *b<sub>j</sub>*
- варьирование обоих порогов  $a_i$ ,  $b_i$  одновременно
- ullet добавление признака  $f_j$  в J с варьированием порогов  $a_j$ ,  $b_j$
- ullet удаление признака  $f_i$  из J

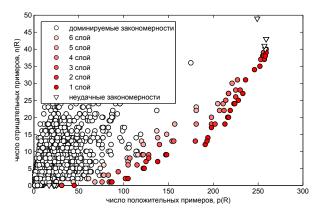
При удалении признака (pruning) информативность обычно оценивается по контрольной выборке (hold-out)

Вообще, для оптимизации множества J подходят те же методы, что и для отбора признаков (feature selection)

#### Шаг 3. Двухкритериальный отбор закономерностей

Два критерия:  $p(R) o \max$ ,  $n(R) o \min$ 

Парето-фронт — множество неулучшаемых закономерностей (точка неулучшаема, если правее и ниже неё точек нет)



UCI:german

#### Шаг 3. Логические и статистические закономерности

Предикат R(x) — логическая закономерность класса  $y \in Y$ :

Precision 
$$= \frac{p_y(R)}{p_y(R) + n_y(R)} \geqslant \pi_0$$
 Recall  $= \frac{p_y(R)}{P_y} \geqslant \rho_0$ 

Если  $n_y(R)=0$ , то R- непротиворечивая закономерность

Предикат R(x) — статистическая закономерность класса  $y \in Y$ :

$$\mathsf{IStat}\big(p_y(R), n_y(R)\big) \geqslant \sigma_0$$

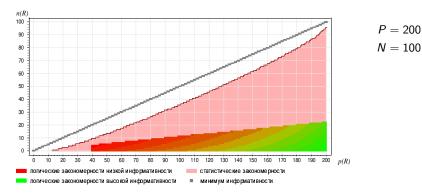
IStat — минус-log вероятности реализации (p, n) при условии нулевой гипотезы, что y(x) и R(x) — независимые случайные величины (точный тест Фишера, Fisher's Exact Test):

$$\mathsf{IStat}(p,n) = -\frac{1}{\ell} \log_2 \frac{C_p^p C_N^n}{C_{p+N}^{p+n}} \ o \ \mathsf{max},$$

где 
$$P=\#\big\{x_i\colon y_i{=}y\big\},\ \ N=\#\big\{x_i\colon y_i{\neq}y\big\},\ \ C_N^n=rac{N!}{n!(N-n)!}$$

# Шаг 3. Критерии поиска закономерностей в плоскости (p, n)

Логические закономерности: Precision  $\geqslant 0.9$ , Recall  $\geqslant 0.2$  Статистические закономерности: IStat  $\geqslant 3$ 



- статистический критерий удобнее для поиска правил
- логический критерий для финального отбора правил

#### <u>Шаг 3. Зоо</u>парк критериев информативности

#### Очевидные, но не адекватные критерии:

- $I(p, n) = \frac{p}{p+n} \to \max$  (precision);
- $I(p, n) = p n \rightarrow \max$  (accuracy);
- $I(p, n) = p/P n/N \rightarrow \max$  (relative accuracy);

#### Адекватные, но не очевидные критерии:

• энтропийный критерий прироста информации:

$$\mathsf{IGain}(p,n) = hig(rac{P}{\ell}ig) - rac{p+n}{\ell} hig(rac{p}{p+n}ig) - rac{\ell-p-n}{\ell} hig(rac{P-p}{\ell-p-n}ig) o \mathsf{max},$$
 где  $h(q) = -q\log_2 q - (1-q)\log_2 (1-q)$ 

- критерий Джини (Gini impurity):  $\mathsf{IGini}(p,n) = \mathsf{IGain}(p,n)$  при h(q) = 4q(1-q)
- критерий бустинга и его нормированный вариант:  $\sqrt{p} - \sqrt{n} \rightarrow \max, \qquad \sqrt{p/P} - \sqrt{n/N} \rightarrow \max$

J. Fürnkranz, P. Flach. ROC'n'rule learning – towards a better understanding of covering algorithms // Machine Learning, 2005.

#### Шаг 3. Нетривиальность проблемы свёртки двух критериев

**Пример:** в каждой паре правил первое гораздо лучше второго, однако простые эвристики не различают их по качеству (при  $P=200,\ N=100$ ).

р	n	p-n	p-5n	$\frac{p}{P} - \frac{n}{N}$	$\frac{p}{n+1}$	$IStat{\cdot}\ell$	$IGain{\cdot}\ell$	$\sqrt{p}$ - $\sqrt{n}$
50	0	50	50	0.25	50	22.65	23.70	7.07
100	50	50	-150	0	1.96	2.33	1.98	2.93
50	9	41	5	0.16	5	7.87	7.94	4.07
5	0	5	5	0.03	5	2.04	3.04	2.24
100	0	100	100	0.5	100	52.18	53.32	10.0
140	20	120	40	0.5	6.67	37.09	37.03	7.36

**Замечание**. Критерии IStat и IGain асимптотически эквивалентны: IStat(p,n) oIGain(p,n) при  $\ell o \infty$ 

#### Шаг 4. Построение классификатора из закономерностей

Взвешенное голосование (линейный классификатор с весами  $w_{yt}$  и, возможно, с регуляризацией для отбора признаков):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{t=1}^{T_y} w_{yt} R_{yt}(x)$$

Простое голосование (комитет большинства):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \frac{1}{T_y} \sum_{t=1}^{T_y} R_{yt}(x)$$

Решающий список (комитет старшинства),  $c_0, c_1, \ldots, c_T \in Y$ :

$$x \longrightarrow \boxed{R_1(x)} \xrightarrow{0} \cdots \xrightarrow{0} \boxed{R_T(x)} \xrightarrow{0} c_0$$

$$\downarrow^1 \qquad \qquad \downarrow^1$$

$$\downarrow^1 \qquad \qquad \downarrow^1$$

$$\downarrow^1 \qquad \qquad \downarrow^1$$

$$\downarrow^1 \qquad \qquad \downarrow^1$$

# Определение решающего дерева (Decision Tree)

Решающее дерево — алгоритм классификации a(x), задающийся деревом (связным ациклическим графом) с корнем  $v_0 \in V$  и множеством вершин  $V = V_{\text{внутр}} \sqcup V_{\text{лист}}$ ;

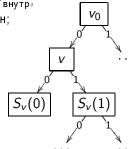
 $f_v: X \to D_v$  — дискретный признак,  $\forall v \in V_{\text{внутр}};$   $S_v: D_v \to V$  — множество дочерних вершин;  $y_v \in Y$  — метка класса,  $\forall v \in V_{\text{пист}};$ 

 $v := v_0;$ пока  $(v \in V_{ exttt{BHYTP}})$ :  $v := \mathcal{S}_v(f_v(x));$ 

вернуть  $a(x) = y_v$ ;

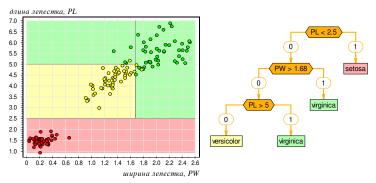
Чаще всего используются бинарные признаки вида  $f_{v}(x) = [f_{i}(x) \geqslant a_{i}]$ 

Если  $D_{
m v}\equiv\{0,1\}$ , то решающее дерево называется бинарным



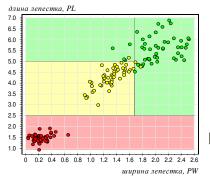
#### Пример решающего дерева

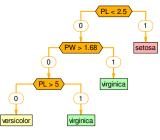
Задача Фишера о классификации цветков ириса на 3 класса, в выборке по 50 объектов каждого класса, 4 признака.



**На графике:** в осях двух самых информативных признаков (из 4) два класса разделились без ошибок, на третьем 3 ошибки.

#### Решающее дерево → покрывающий набор конъюнкций





setosa virginica

virginica versicolor

$$r_1(x) = [PL \leqslant 2.5]$$

$$r_2(x) = [PL > 2.5] \wedge [PW > 1.68]$$

$$r_3(x) = [PL > 5] \wedge [PW \leqslant 1.68]$$

$$r_4(x) = \lceil PL > 2.5 \rceil \land \lceil PL \leqslant 5 \rceil \land \lceil PW < 1.68 \rceil$$

# Обучение решающего дерева: ID3 (Iterative Dichotomiser)

```
v_0 := \mathsf{TreeGrowing}\; (X^\ell) - \mathsf{ф}ункция рекурсивно вызывает себя
```

```
TreeGrowing (Вход: U \subseteq X^{\ell}) \mapsto Выход: корень дерева v; f_{v} := \arg\max_{f \in \mathcal{F}} \operatorname{Gain}(f, U) — критерий ветвления дерева; если \operatorname{Gain}(f_{v}, U) < G_{0} то \sqsubseteq создать новый лист v; y_{v} := \operatorname{Major}(U); вернуть v; создать новую внутреннюю вершину v с функцией f_{v}; для всех k \in D_{v} \bigsqcup_{U_{k} := \{x \in U : f_{v}(x) = k\}; \\ S_{v}(k) := \operatorname{TreeGrowing}(U_{k}); вернуть v;
```

```
Мажоритарное правило: Major (U) := \arg\max_{y \in Y} P(y|U).
```

John Ross Quinlan. Induction of Decision Trees // Machine Learning, 1986.

#### Неопределённость распределения по классам в вершине

Частотная оценка вероятности класса y по выборке U:

$$p_y \equiv P(y|U) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} [y_i = y]$$

 $\Phi(U)$  — мера неопределённости (impurity) распределения  $p_y$ :

- 1) минимальна и равна нулю, когда  $ho_y \in \{0,1\}$ ,
- 2) максимальна, когда  $p_y = \frac{1}{|Y|}$  для всех  $y \in Y$ ,
- 3) симметрична: не зависит от перенумерации классов.

$$\Phi(U) = \sum_{y \in Y} \rho_y \mathscr{L}(\rho_y) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} \mathscr{L}(P(y_i|U)) \to \min,$$

где  $\mathscr{L}(p)$  убывает и  $\mathscr{L}(1)=0$ , например:  $-\log p$ , 1-p,  $1-p^2$ 

#### Критерий ветвления

Неопределённость распределений  $P(y_i|U_k)$  после ветвления по признаку  $f_v$  и разбиения U на  $U_k = \{x \in U \colon f_v(x) = k\}$ :

$$\Phi(U_1, \dots, U_{|D_v|}) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} \mathcal{L}(P(y_i | \mathbf{U}_{f(x_i)})) =$$

$$= \frac{1}{|U|} \sum_{k \in D_v} \sum_{x_i \in U_k} \mathcal{L}(P(y_i | U_k)) = \sum_{k \in D_v} \frac{|U_k|}{|U|} \Phi(U_k)$$

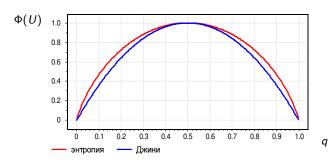
Выигрыш от ветвления вершины v:

$$\begin{aligned} \mathsf{Gain}\left(f,U\right) &= \Phi(U) - \Phi(U_1,\ldots,U_{|D_v|}) = \\ &= \Phi(U) - \sum_{k \in D_v} \frac{|U_k|}{|U|} \, \Phi(U_k) \to \max_{f \in F} \end{aligned}$$

# Критерий Джини и энтропийный критерий

Два класса, 
$$Y=\{0,1\}$$
,  $P(y|U)=\left\{egin{array}{l} q, & y=1 \\ 1-q, & y=0 \end{array}
ight.$ 

- ullet Если  $\mathscr{L}(p) = -\log_2 p$ , то  $\Phi(U) = -q\log_2 q (1-q)\log_2(1-q)$  энтропия выборки.
- ullet Если  $\mathscr{L}(p)=2(1-p)$ , то  $\Phi(U)=4q(1-q)$  неопределённость Джини (Gini impurity).



# Обработка пропущенных значений

#### На стадии обучения:

- ullet  $f_{v}(x_{i})$  не определено  $\Rightarrow x_{i}$  исключается из U для  $\mathsf{Gain}\left(f_{v},U
  ight)$
- ullet  $oldsymbol{q}_{vk} = rac{|U_k|}{|U|}$  оценка вероятности k-й ветви,  $v \in V_{ exttt{BHYTP}}$
- $m{P}(y|x,v)=rac{1}{|U|}\sum_{x_i\in U}[y_i=y]$  для всех  $v\in V_{ exttt{лист}}$

#### На стадии классификации:

ullet  $a(x) = rg \max_{y \in Y} P(y|x, v_0)$  — наиболее вероятный класс

# если значение $f_{\nu}(x)$ не определено то

средневзвешенное распределение по всем дочерним:

$$P(y|x,v) = \sum_{k \in D_v} \frac{q_{vk}}{q_{vk}} P(y|x, S_v(k));$$

#### иначе

$$P(y|x,v) = P(y|x,s)$$
 из дочерней вершины  $s = S_v(f_v(x));$ 

#### Жадная нисходящая стратегия: достоинства и недостатки

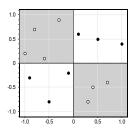
#### Достоинства:

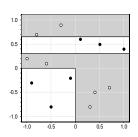
- Интерпретируемость и простота классификации.
- ullet Правила  $[f_j(x)<lpha]$  не требуют масштабирования признаков.
- Допустимы разнотипные данные и данные с пропусками.
- ullet Трудоёмкость линейна по длине выборки  $O(|F|h\ell)$ .
- Не бывает отказов от классификации.

#### Недостатки:

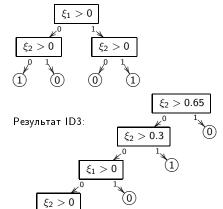
- Жадная стратегия переусложняет структуру дерева, и, как следствие, сильно переобучается.
- Фрагментация выборки: чем дальше v от корня, тем меньше статистическая надёжность выбора  $f_v$ ,  $y_v$ .
- Высокая чувствительность к шуму, к составу выборки, к критерию информативности.

# Жадная стратегия переусложняет структуру дерева





Оптимальное дерево для задачи ХОР:



# Усечение дерева: стратегии post-pruning

 $X^q$  — независимая контрольная выборка,  $q pprox 0.5 \ell$ 

```
для всех v \in V_{\text{внутр}}: X_v^q := \text{подмножество объектов } X^q, дошедших до v; если X_v^q = \varnothing то C создать новый лист V; C0 C1 C2 по минимуму числа ошибок классификации C3 C4 C7 либо сохранить целиком поддерево вершины C8 либо заменить поддерево C9 листом, выбрав класс C9 либо заменить поддерево C9 листом, выбрав класс C9 дочерним C9 либо заменить поддерево C9 листом, выбрав класс C9 дочерним C9 года стана C9
```

#### Стратегии перебора вершин:

- снизу вверх: Minimum Cost Complexity Pruning (MCCP), Reduced Error Pruning (REP), Minimum Error Pruning (MEP)
- сверху вниз: Pessimistic Error Pruning (PEP)

#### **CART**: деревья регрессии и классификации

Обобщение на случай регрессии:  $Y = \mathbb{R}$ ,  $y_v \in \mathbb{R}$ ,

$$C(a) = \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 \to \min_{a}$$

Пусть U — множество объектов  $x_i$ , дошедших до вершины v Мера неопределённости — среднеквадратичная ошибка

$$\Phi(U) = \min_{y \in Y} \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} (y - y_i)^2$$

Значение  $y_{\nu}$  в терминальной вершине  $\nu$  — МНК-решение:

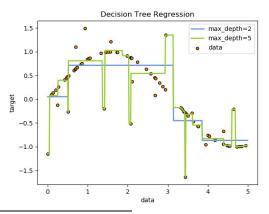
$$y_{v} = \frac{1}{|U|} \sum_{x_{i} \in U} y_{i}$$

Дерево регрессии a(x) — это кусочно-постоянная функция.

Leo Breiman et al. Classification and regression trees. 1984.

# Пример. Деревья регрессии различной глубины

Чем сложнее дерево (чем больше его глубина), тем выше влияние шумов в данных и выше риск переобучения.



scikit-learn.org/stable/auto\_examples/tree/plot\_tree\_regression.html

# CART: критерий Minimal Cost-Complexity Pruning

Среднеквадратичная ошибка со штрафом за сложность дерева:

$$C_{lpha}(a) = \sum_{i=1}^{\ell} ig(a(x_i) - y_iig)^2 + lpha |V_{ extsf{JNCT}}| 
ightarrow \min_{a}$$

При увеличении lpha дерево последовательно упрощается. Причём последовательность вложенных деревьев единственна.

Из этой последовательности выбирается дерево с минимальной ошибкой на тестовой выборке (Hold-Out).

Для случая классификации используется аналогичная стратегия усечения, с критерием Джини.

#### Определение решающего списка (Decision List, DL)

DL — это алгоритм классификации  $a: X \to Y$ , задаваемый закономерностями  $R_1(x), \dots, R_T(x)$  классов  $c_1, \dots, c_T \in Y$ :

$$x \longrightarrow \boxed{R_1(x)} \xrightarrow{0} \cdots \xrightarrow{0} \boxed{R_T(x)} \xrightarrow{0} c_0$$

$$\downarrow^1 \qquad \qquad \downarrow^1 \qquad$$

Это способ представления знаний в виде *системы продукций* — последовательности правил «**если**-условие **то**-решение»

для всех 
$$t=1,\ldots,T$$
  $\sqsubseteq$  если  $R_t(x)=1$  то вернуть  $c_t$ ; вернуть  $c_0$  (отказ от классификации объекта  $x$ );

$$E(R_t,X^\ell)=rac{n_{c_t}(R_t)}{n_{c_t}(R_t)+p_{c_t}(R_t)} o ext{min} \quad -$$
 доля ошибок  $R_t$  на  $X^\ell$ 

#### Жадный алгоритм построения решающего списка

```
Вход: выборка X^{\ell}; параметры: T_{\text{max}}, I_{\text{min}}, E_{\text{max}}, \ell_0;
Выход: решающий список \{R_t, c_t\}_{t=1}^T;
U:=X^{\ell}:
для всех t := 1, ..., T_{max}
    выбрать класс c_t;
    поиск правила R_t по максимуму информативности:
    R_t := rg \max_{R} I(R,U) при ограничении E(R,U) \leqslant E_{	ext{max}};
    если I(R_t, U) < I_{\min} то выход;
    U := \{x \in U : R_t(x) = 0\} — не покрытые правилом R_t;
    если |U| \leqslant \ell_0 то выход;
```

#### Замечания к алгоритму построения решающего списка

- ullet Стратегии выбора класса  $c_t$ :
  - 1) все классы по очереди
  - 2) на каждом шаге определяется оптимальный класс
- Параметр  $E_{\text{max}}$  управляет сложностью списка:  $E_{\text{max}} \downarrow \Rightarrow p(R_t) \downarrow, T \uparrow$
- Преимущества:
  - интерпретируемость модели и классификаций
  - простой обход проблемы пропусков в данных
- Недостаток: низкое качество классификации
- Другие названия:

комитет с логикой старшинства (Majority Committee) голосование по старшинству (Majority Voting) машина покрывающих множеств (Set Covering Machine, SCM)

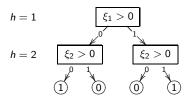
# Небрежные решающие деревья (Oblivious Decision Tree, ODT)

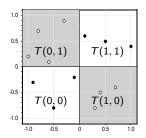
**Решающая таблица:** дерево глубины H,  $D_v = \{0,1\}$ ; для всех узлов уровня h условие ветвления  $f_h(x)$  одинаково; на уровне h ровно  $2^{h-1}$  вершин; X делится на  $2^H$  ячеек.

Классификатор задаётся  $an aблицей решений <math>T \colon \{0,1\}^H o Y$ :

$$a(x) = T(f_1(x), \ldots, f_H(x)).$$

**Пример:** задача XOR, H = 2.





R.Kohavi, C.-H.Li. Oblivious decision trees, graphs, and top-down pruning. 1995.

# Алгоритм обучения ODT

**Вход:** выборка  $X^{\ell}$ ; множество признаков F; глубина дерева H; Выход: признаки  $f_h$ ,  $h=1,\ldots,H$ ; таблица  $T:\{0,1\}^H\to Y$ ;

для всех 
$$h = 1, \ldots, H$$

предикат с максимальным выигрышем определённости:

$$f_h := \arg\max_{f \in F} \operatorname{Gain}(f_1, \dots, f_{h-1}, f);$$

классификация по мажоритарному правилу:

$$T(\beta) := Major(U_{H\beta});$$

Выигрыш от ветвления на уровне h по всей выборке  $X^{\ell}$ :

$$\mathsf{Gain}\left(f_1,\ldots,f_h\right) = \Phi(X^\ell) - \sum_{\beta \in \{0,1\}^h} \frac{|U_{h\beta}|}{\ell} \, \Phi(U_{h\beta}),$$

$$U_{h\beta} = \{x_i \in X^{\ell} : f_s(x_i) = \beta_s, \ s = 1..h\}, \ \beta = (\beta_1, \ldots, \beta_h) \in \{0, 1\}^h.$$

#### Вспомогательная задача бинаризации вещественного признака

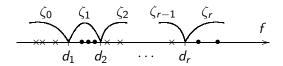
**Ц**ель: сократить перебор предикатов вида  $\lfloor f(x) \leqslant lpha 
floor$ .

**Дано:** выборка значений вещественного признака  $f(x_i)$ ,  $x_i \in X^{\ell}$ . **Найти:** наилучшее (в каком-то смысле) разбиение области значений признака на относительно небольшое число зон:

$$\zeta_0(x) = [f(x) < d_1];$$

$$\zeta_s(x) = [d_s \le f(x) < d_{s+1}], \qquad s = 1, \dots, r-1;$$

$$\zeta_r(x) = [d_r \le f(x)].$$



# Способы разбиения области значений признака на зоны

- 🚺 Жадная максимизация информативности путём слияний
- Разбиение на равномощные подвыборки
- Разбиение по равномерной сетке «удобных» значений
- Объединение нескольких разбиений

#### Повышение «удобства» пороговых значений

Задача: на отрезке [a,b] найти значение  $x^*$  с минимальным числом значащих цифр.

Если таких  $x^*$  несколько, выбрать

$$x^* = \arg\min_{x} \left| \frac{1}{2}(a+b) - x \right|.$$

# Алгоритм разбиения области значений признака на зоны

```
Вход: выборка X^{\ell}; класс c \in Y; параметры r и \delta_0;
Выход: D = \{d_1 < \cdots < d_r\} — последовательность порогов;
D:=\varnothing; упорядочить выборку X^{\ell} по возрастанию f(x_i);
для всех i=2,\ldots,\ell
   если f(x_{i-1}) \neq f(x_i) и [y_{i-1} = c] \neq [y_i = c] то
     добавить порог \frac{1}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)) в конец D
повторять
    для всех d_i \in D, i = 1, ..., |D| - 1
    \delta I_i := I(\zeta_{i-1} \vee \zeta_i \vee \zeta_{i+1}) - \max\{I(\zeta_{i-1}), I(\zeta_i), I(\zeta_{i+1})\};
   i := \arg\max \delta I_s;
   если \delta I_i > \delta_0 то
     слить зоны \zeta_{i-1}, \zeta_i, \zeta_{i+1}, удалив d_i и d_{i+1} из D_i;
пока |D| > r + 1:
```

#### Резюме в конце лекции

- Основные требования к логическим закономерностям:
  - интерпретируемость, информативность, различность.
- Преимущества решающих деревьев:
  - интерпретируемость,
  - допускаются разнотипные данные,
  - возможность обхода пропусков.
- Недостатки решающих деревьев:
  - переобучение,
  - чувствительность к шумам, составу выборки, критерию.
- Способы устранения этих недостатков:
  - редукция,
  - композиции (леса) деревьев (в следующей лекции).
- Упрощённые варианты решающих деревьев:
  - решающие списки для вывода знаний из данных;
  - ODT для построения композиций (Yandex MatrixNet).