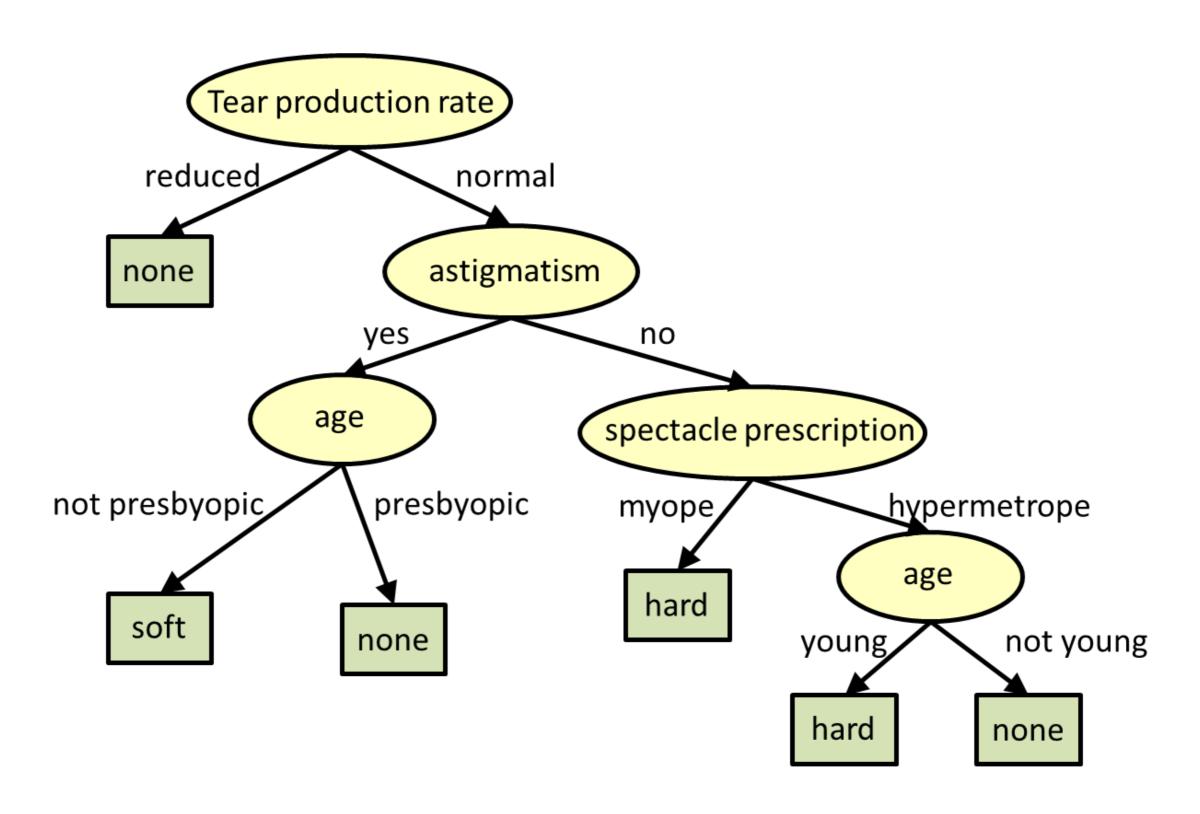
Деревья решений



How to win a Kaggle competition?



Anthony Goldbloom

"According to Anthony, in the history of Kaggle competitions, there are only two Machine Learning approaches that win competitions:

Handcrafted & Neural Networks."

Владимир Гулин. Презентации для Техносферы

Где побеждают ансамбли деревьев решений?

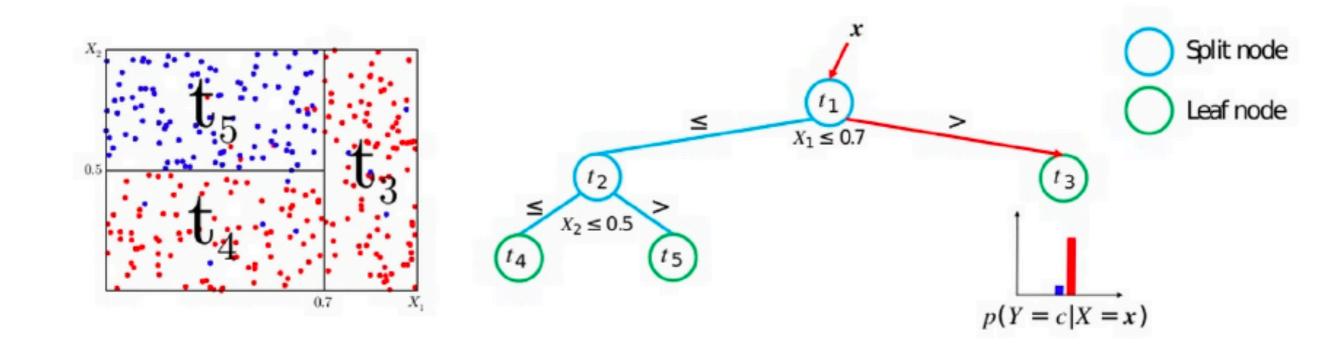
- Recomendation systems (Netflix Prize 2009)
- Learning to rank (Yahoo Learning to rank challenge 2010)
- Crowdflower Search Results Relevance (2015)
- Avito Context Ad Clicks (2015)
- Везде :)



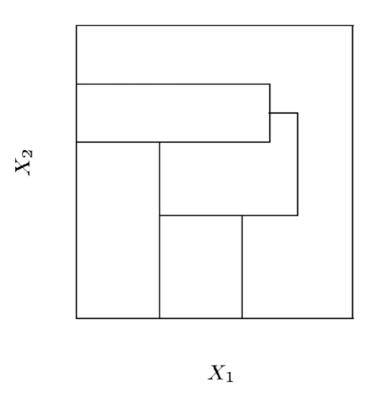
"As long as Kaggle has been around, Anthony says, it has almost always been ensembles of decision trees that have won competitions."

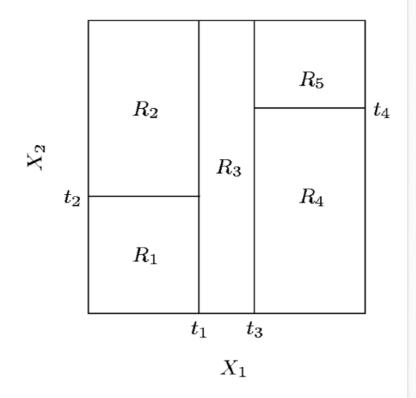
Деревья решений

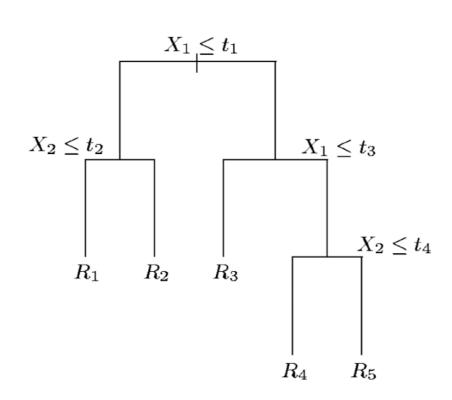
Деревья решений (принцип работы)

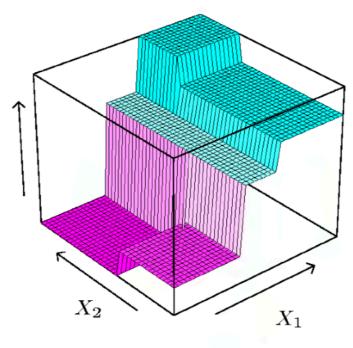


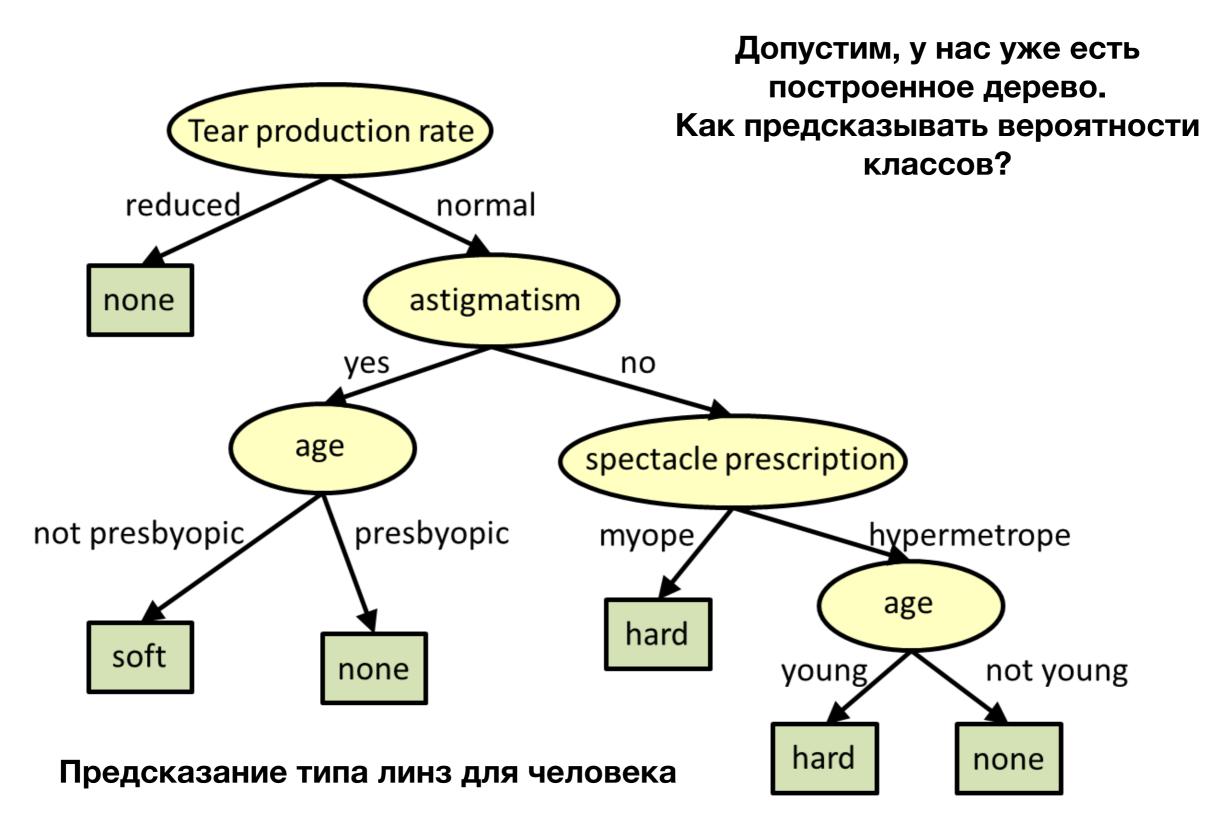
Разбиение пространства











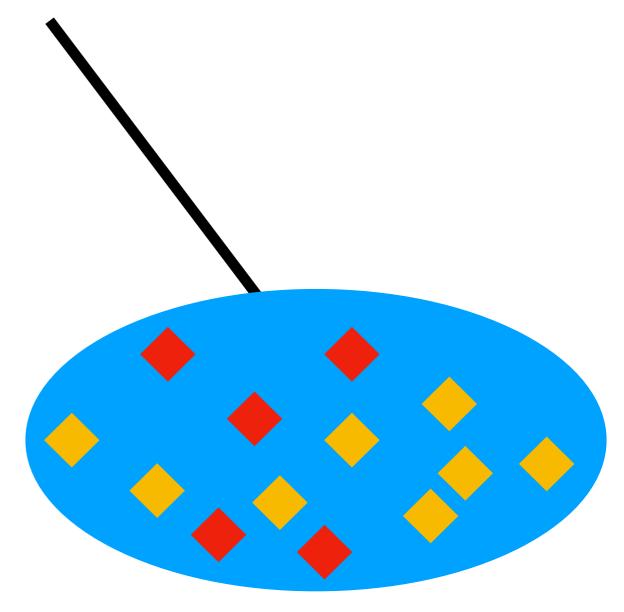
https://www.cs.cmu.edu/~bhiksha/courses/10-601/decisiontrees/

- объекты 1го класса из обучения



- объекты 2го класса из обучения

Предсказываем вероятность - как ее оценить?



Лист дерева, тут нам надо сделать константное предсказание

Оценка доли в популяции

$$\hat{p} = \frac{n}{N}$$

$$E(\hat{p}) = p$$

$$sd(\hat{p}) = \frac{\sqrt{p \cdot (1-p)}}{\sqrt{N}}$$

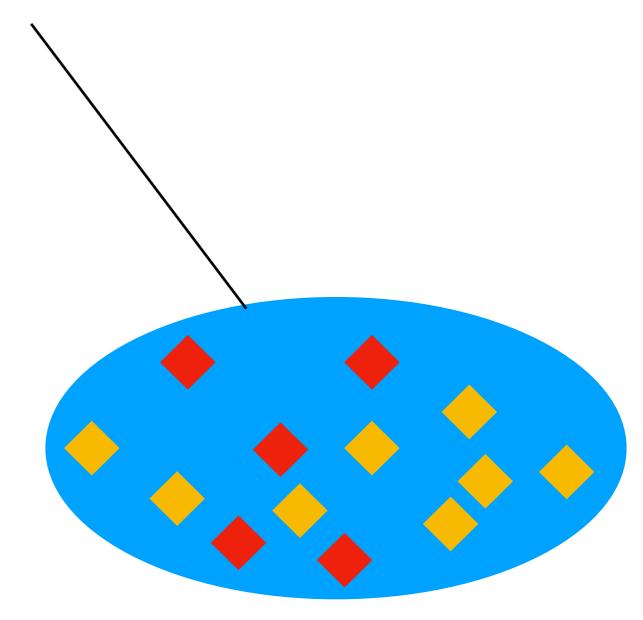
- объекты 1го класса



- объекты 2го класса

Предсказываем вероятность - как ее оценить?

Просто доля класса



Лист дерева, тут нам надо сделать константное предсказание

Как строить дерево?

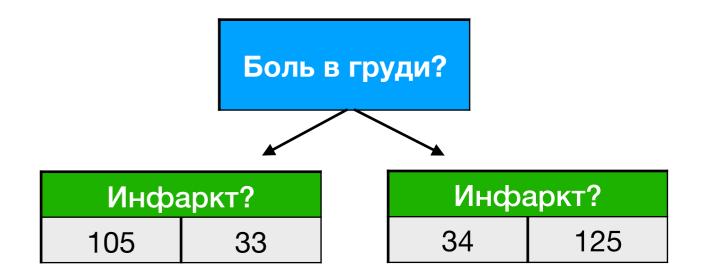
Боль в груди	Хорошо циркули рует кровь	Есть атероск лероз	Инфаркт
Нет	Нет	Нет	Нет
Да	Да	Да	Да
Да	Да	Нет	Нет
Да	Нет	Да	Да
	•••	•••	•••

Боль в груди	Хорошо циркули рует кровь	Есть атероск лероз	Инфаркт
Нет	Нет	Нет	Нет
Да	Да	Да	Да
Да	Да	Нет	Нет
Да	Нет	Да	Да
•••	•••	•••	

Как строить дерево?

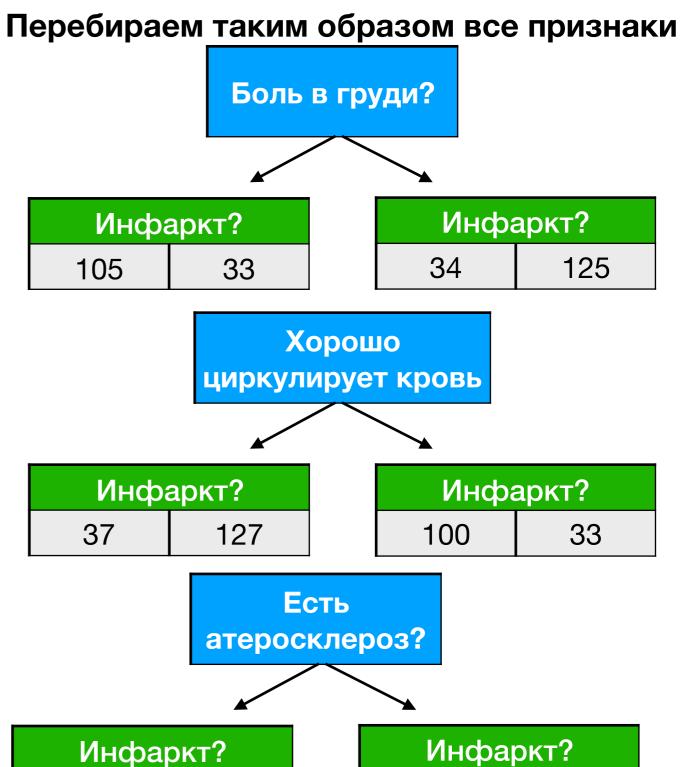
Попробуем построить дерево с двумя листьями,

корень - признак - есть или нет боль в груди?



Боль в груди	Хорошо циркули рует кровь	Есть атероск лероз	Инфаркт
Нет	Нет	Нет	Нет
Да	Да	Да	Да
Да	Да	Нет	Нет
Да	Нет	Да	Да
		•••	•••

Как строить дерево? вем таким образом все



45

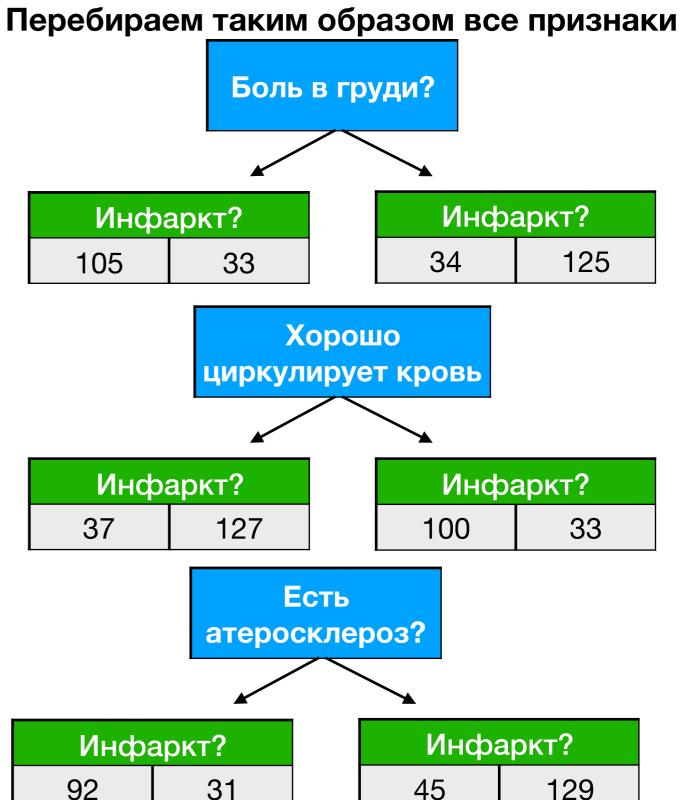
129

31

92

Как строить дерево?

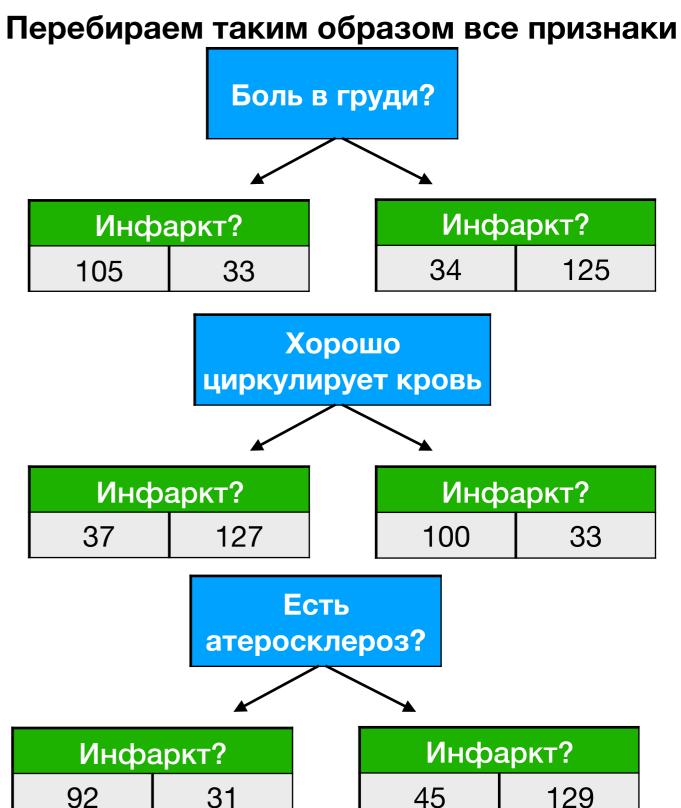
Как выбрать одно из деревьев?



Как строить дерево?

Как выбрать одно из деревьев?

По качеству разбиения



Ошибка классификации - какую долю объектов неправильно классифицируем

$$\frac{1}{N} \sum_{i \in train} I(y_i! = \hat{y}_i)$$

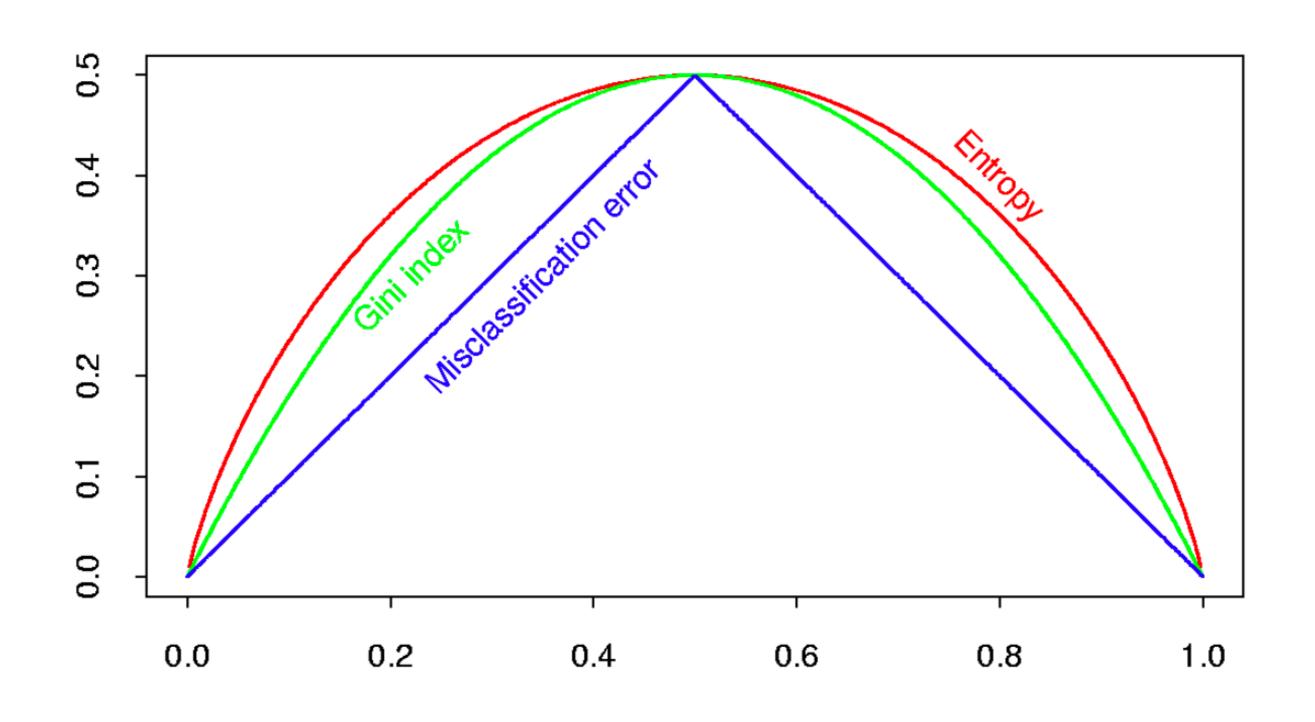
Gini-index - математическое ожидание ошибки классификации, если мы относим объект к классу с вероятностью, равной вероятности этого класса.

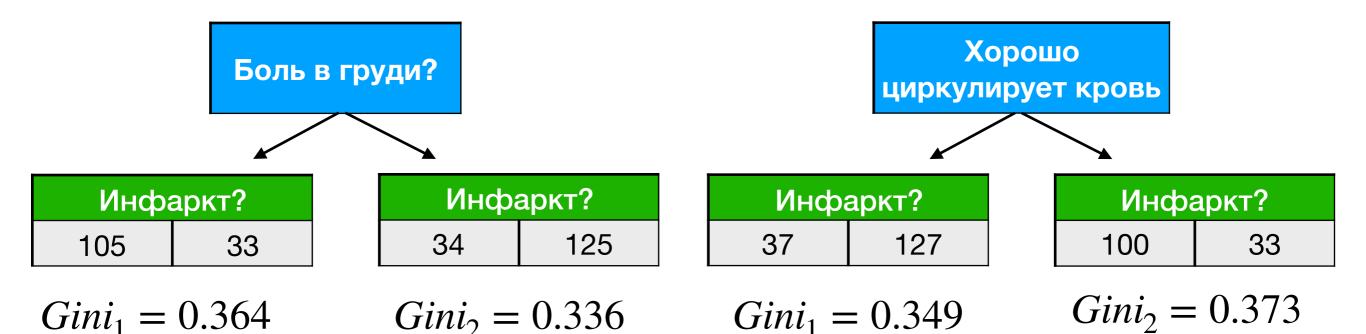
Иначе - если мы возьмем два объекта из данного листа, какова вероятность, что они будут принадлежать к **разным** классам

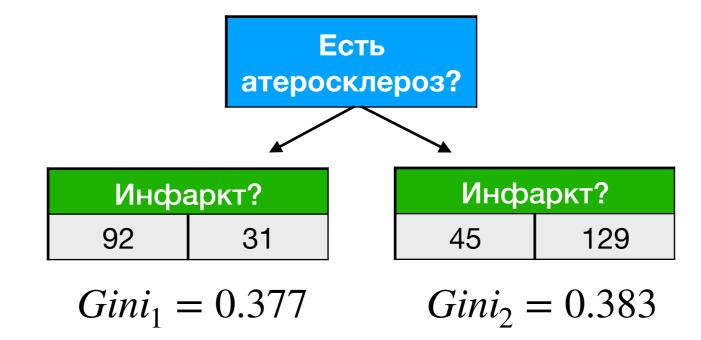
$$\sum_{k \in K} \hat{p}_k (1 - \hat{p}_k) = 1 - \sum_{k \in K} \hat{p}_k^2$$

Кросс-энтропия - сколько информации нам дает то, что лист попал в этот узел. Чем ближе кроссэнтропия к 0 - тем больше информации.

$$\sum_{k \in K} p_k \log p_k$$







И что дальше?

Качество разбиения

$$Impurity_decrease = Gini_0 - (\frac{n_1}{n_1 + n_2}Gini_1 + \frac{n_2}{n_1 + n_2}Gini_2)$$

n1, n2 - число объектов в листьях Gini_0 - чистота исходного узла

$$p = \frac{105 + 33}{105 + 33 + 34 + 125} = 0.880$$
 Доля объектов Окласса до разбиения

$$Gini_0 = 0.498$$



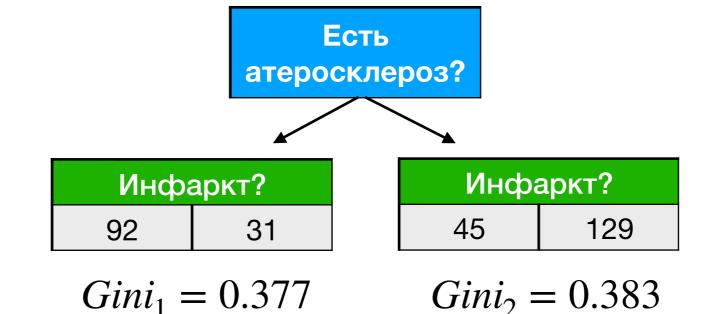
 $Gini_1 = 0.364$

 $Gini_2 = 0.336$

Инфа	Инфаркт?		
37	127		

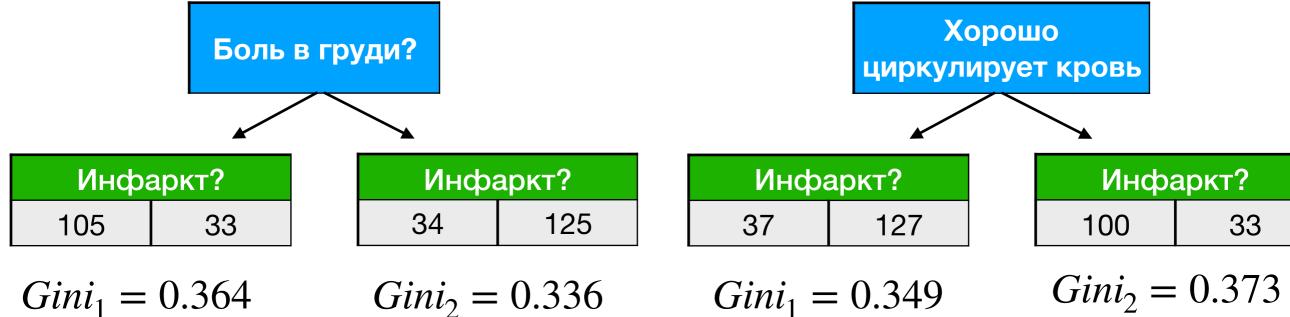
 $Gini_1 = 0.349$

 $Gini_2 = 0.373$



$$p = \frac{105 + 33}{105 + 33 + 34 + 125} = 0.880$$
 Доля объектов Окласса до разбиения

$$Gini_0 = 0.498$$

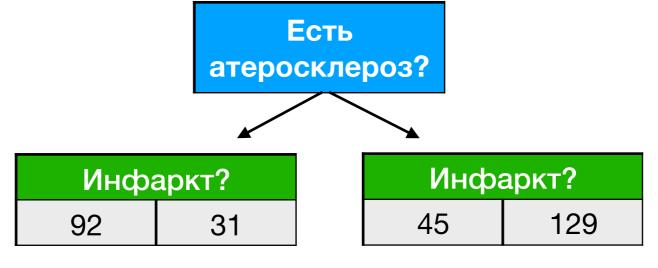


$$Gini_1 = 0.364$$

$$Gini_1 = 0.364$$
 $Gini_2 = 0.336$

 $Impurity_decrease = 0.149$

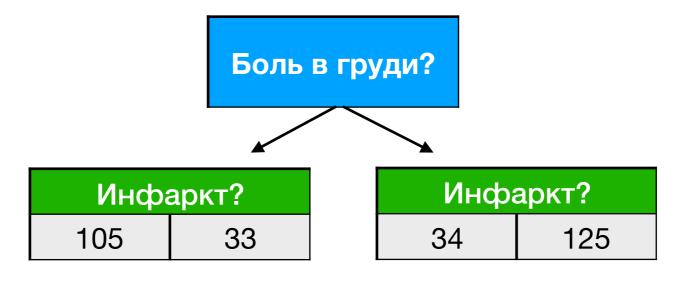
 $Impurity_decrease = 0.138$



$$Gini_1 = 0.377$$
 $Gini_2 = 0.383$ $Impurity_decrease = 0.117$

$$p = \frac{105 + 33}{105 + 33 + 34 + 125} = 0.880$$
 Доля объектов Окласса до разбиения

$$Gini_0 = 0.498$$

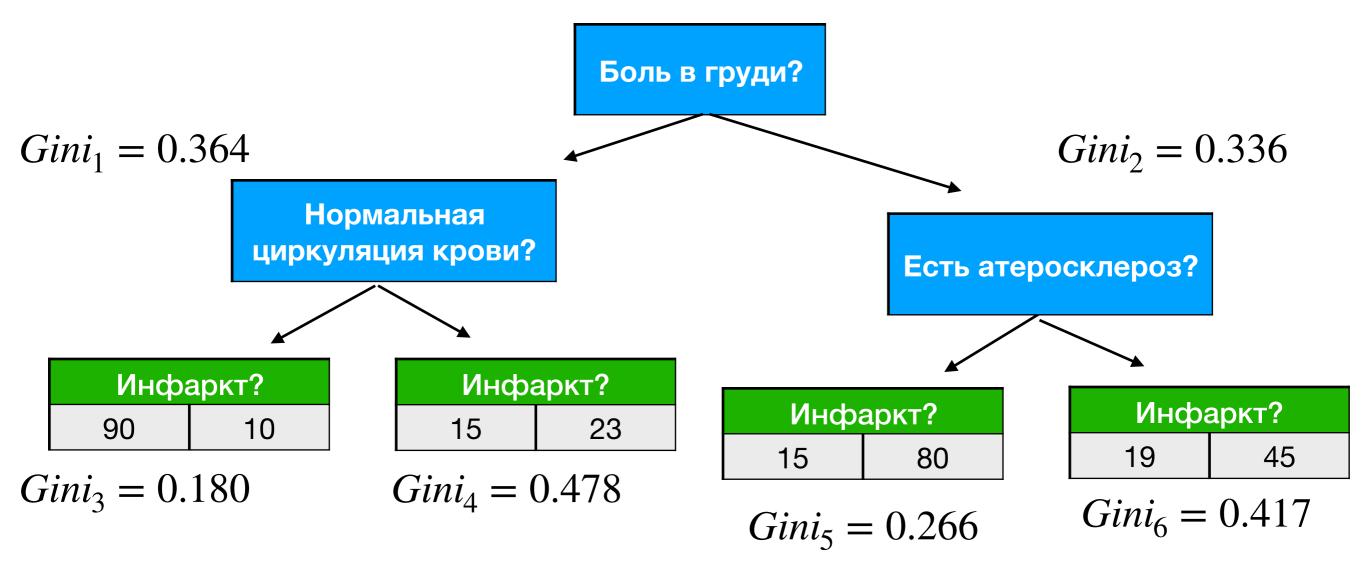


$$Gini_1 = 0.364$$

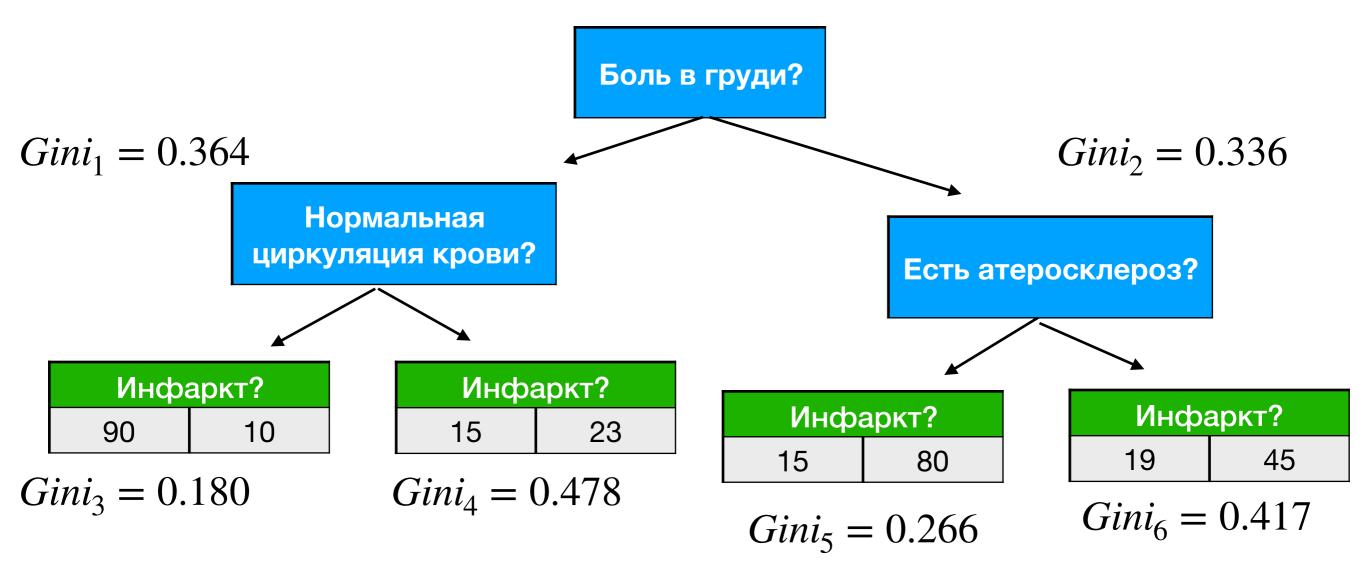
$$Gini_1 = 0.364$$
 $Gini_2 = 0.336$

 $Impurity_decrease = 0.149$

Выбираем это разбиение как приводящее к наибольшему уменьшению impurity

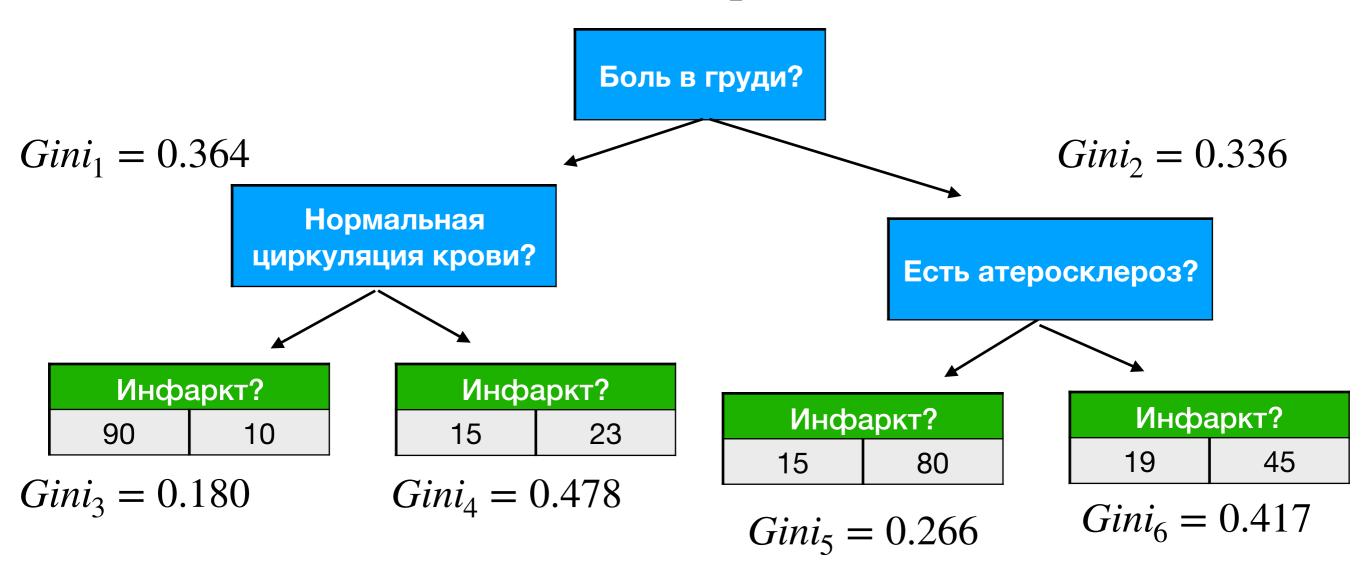


Выбираем новый порог для разбиения. Для каждого узла свой, могут получиться одинаковые, могут - нет



Выбираем новый порог для разбиения. Для каждого узла свой, могут получиться одинаковые, могут - нет

Может ли на каком-то этапе разбиение привести к ухудшению impurity?



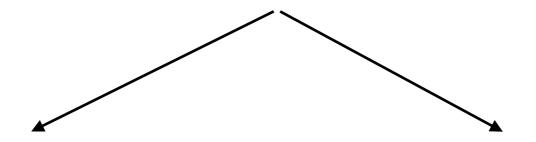
Может ли на каком-то этапе разбиение привести к ухудшению impurity?

Да

Может ли на каком-то этапе разбиение привести к ухудшению impurity?

Да

Что делать в таком случае?



сказать, что этот узел теперь лист, ничего с ним не делаем (early stoping). Иногда даже ставят порог, что если уменьшение impurity меньше порога, то не разбивать узел.

Все равно бьем, в надежде, что следующие сплиты будут лучше

Как работать с вещественными переменными?

	:	Давле ние	Инфа ркт
	•••	170	Да
		134	Да
		50	Нет
		100	Да
•••	•••		

Сортируем по переменной

	:	Давле ние	Инфа ркт
	•••	50	Нет
•••	•••	134	Да
	•••	•••	•••
•••	•••	170	Да
•••	•••	•••	

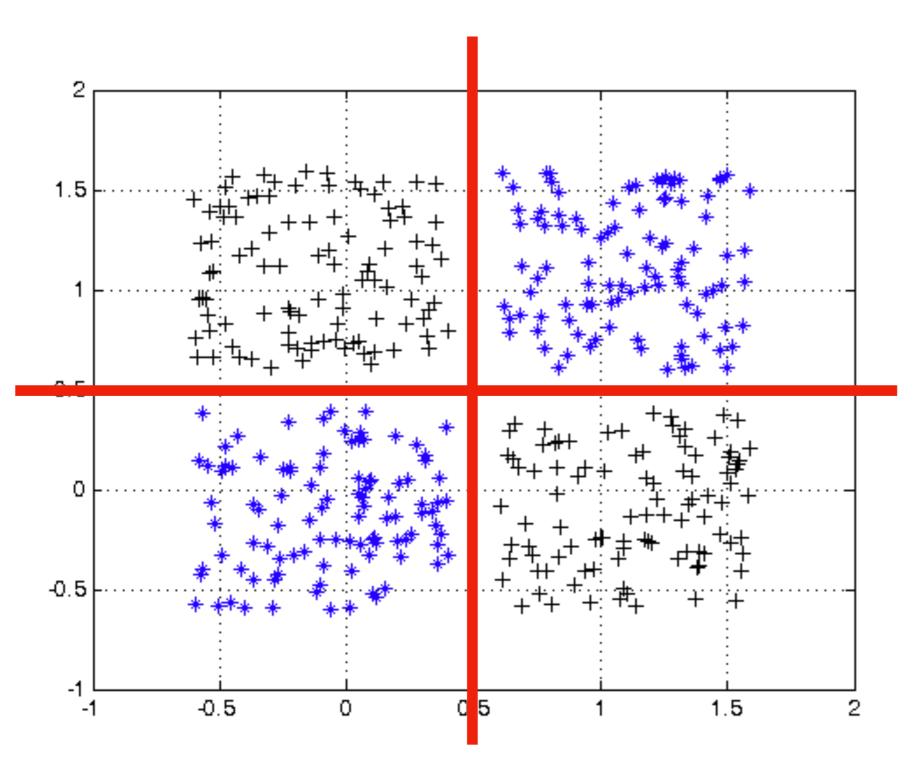
Как работать с вещественными переменными?

			Давле ние	Инфа ркт
•			50	Нет
			134	Да
	•••			
	•••	•••	170	Да
	•••			

Для каждого возможного порога делаем разбиение и считаем impurity

Почему early stopping может быть плох?

Почему early stopping может быть плох?



Одной прямой все не разделить. Любое разбиение не улучшает ситуацию Нужно минимум две!

Регрессия



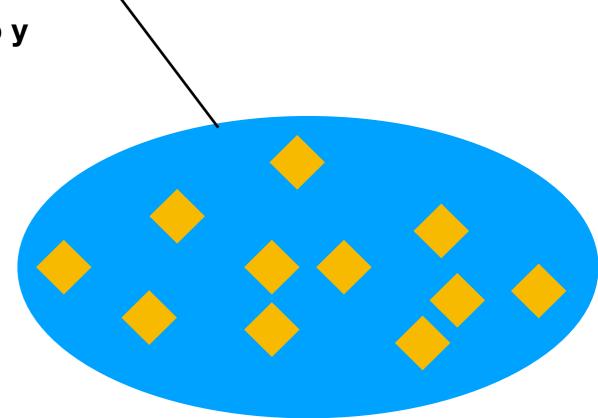
Лист дерева, тут нам надо сделать константное предсказание

Регрессия

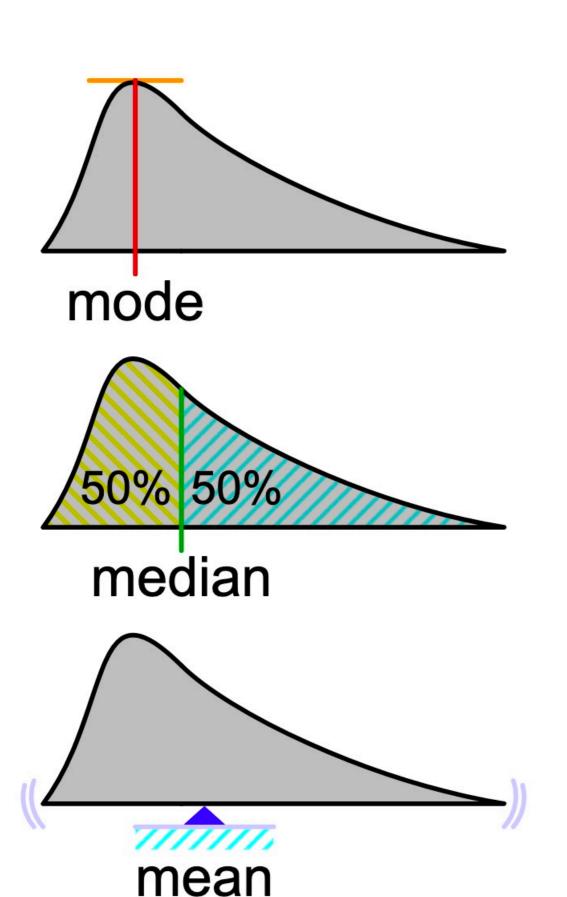


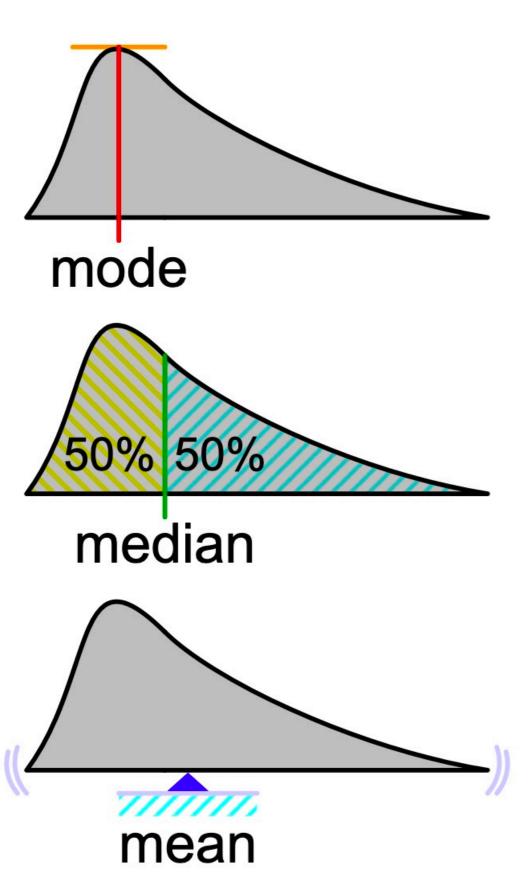
- наши объекты, для каждого известно у

Какое число предсказать?

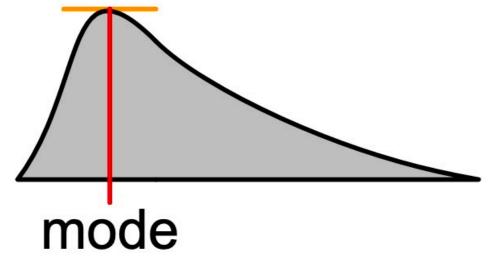


Лист дерева, тут нам надо сделать константное предсказание



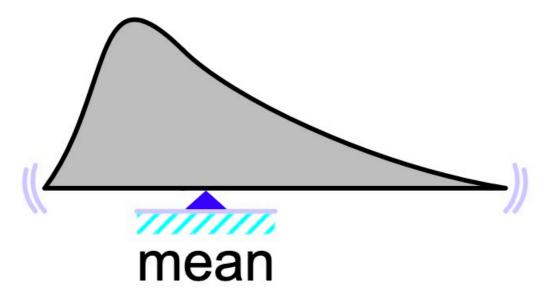


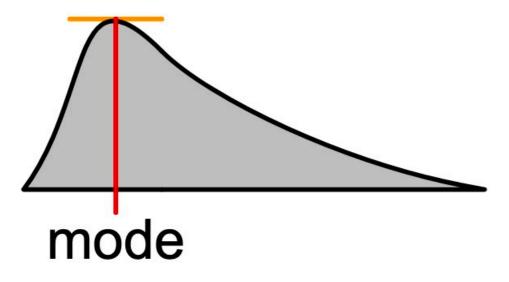
Считаем число совпавших с реальным значением предсказаний



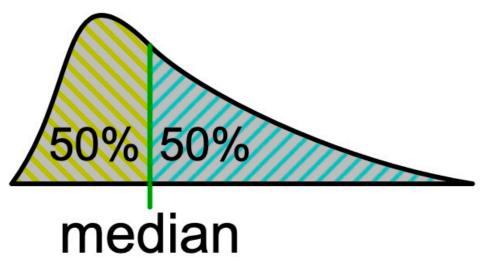
Считаем число совпавших с реальным значением предсказаний

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i} |y_i - \hat{y}_i|$$

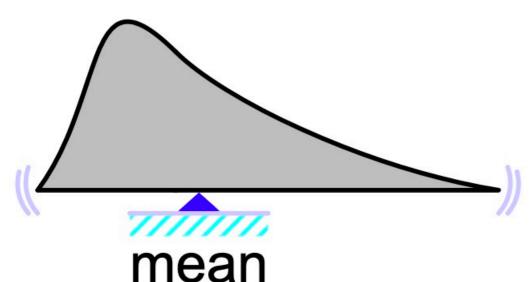




Считаем число совпавших с реальным значением предсказаний



$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i} |y_i - \hat{y}_i|$$



$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

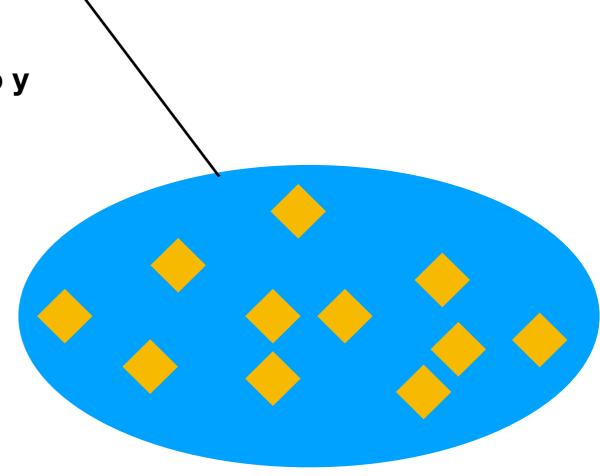
Регрессия

- наши объекты, для каждого известно у

Какое число предсказать?

Обычно нам интересно MSE

Предсказываем среднее



Лист дерева, тут нам надо сделать константное предсказание

Оценка среднего в популяции

$$\hat{\mu} = \frac{\sum_{i} x_{i}}{N}$$

$$E(\hat{\mu}) = \mu$$

$$sd(\hat{\mu}) = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

Разбиение регрессионного дерева

$$R_1(j,s) = \{X | X_j \le s\} \text{ and } R_2(j,s) = \{X | X_j > s\}.$$

Мера качества узла - дисперсия оценки R0. Остальное - так же, как с классификацией

$$\frac{D_{R_1} \cdot N_1 + D_{R_2} \cdot N_2}{N_1 + N_2} < D_{R_0}$$

Как разбивать категориальные признаки?

Как разбивать категориальные признаки?

Всего 2^N возможных разбиений

Как разбивать категориальные признаки?

Всего 2^N возможных разбиений

Оказывается, можно отсортировать категории и проверить N разбиений

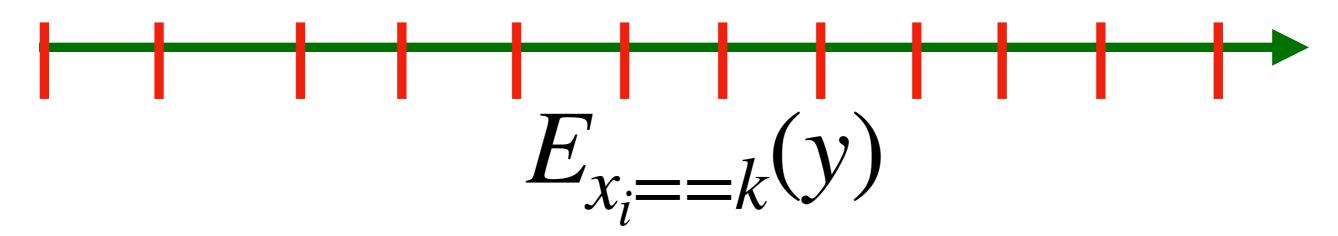


Что по оси?

Как разбивать категориальные признаки?

Всего 2^N возможных разбиений

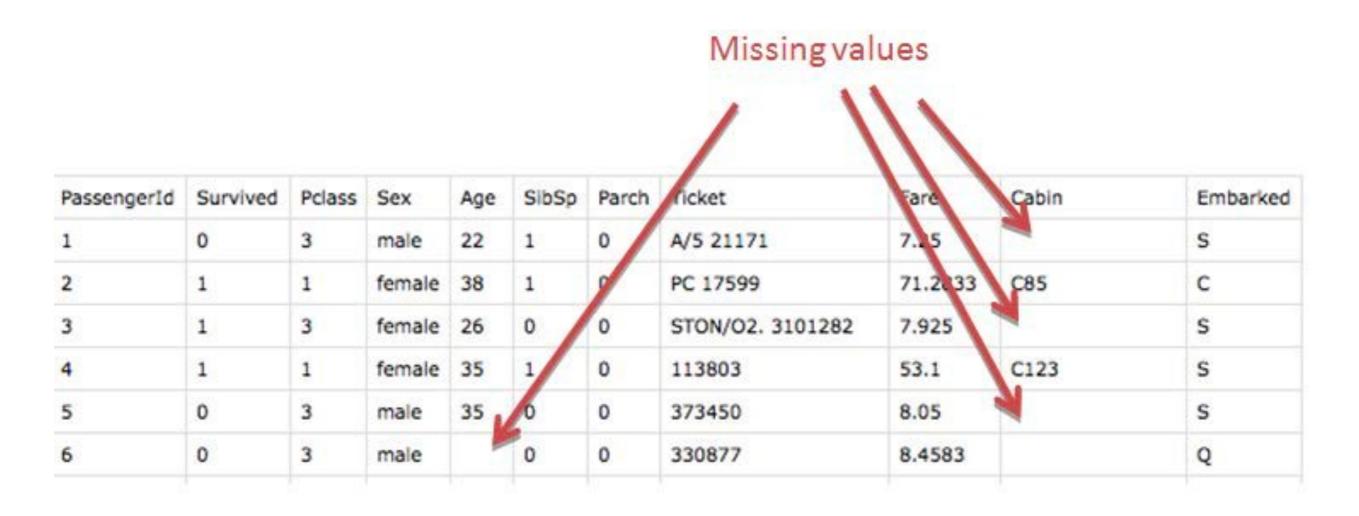
Оказывается, можно отсортировать категории и проверить N разбиений



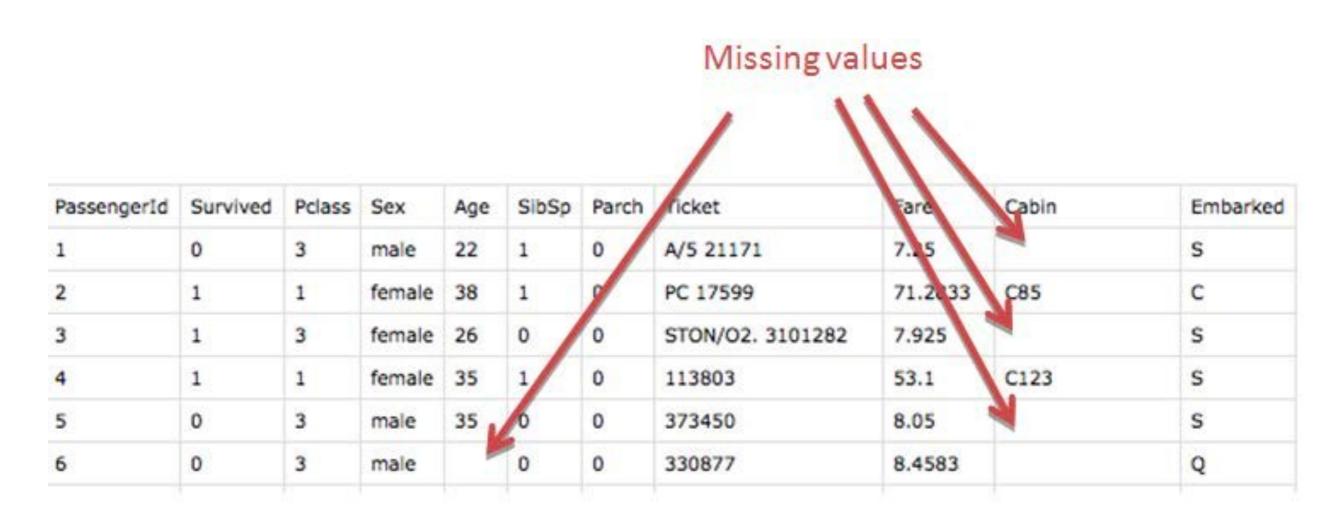
Среднее значение у для объектов, у которых категориальная переменная хі равно данному значению



Как с ними бороться?

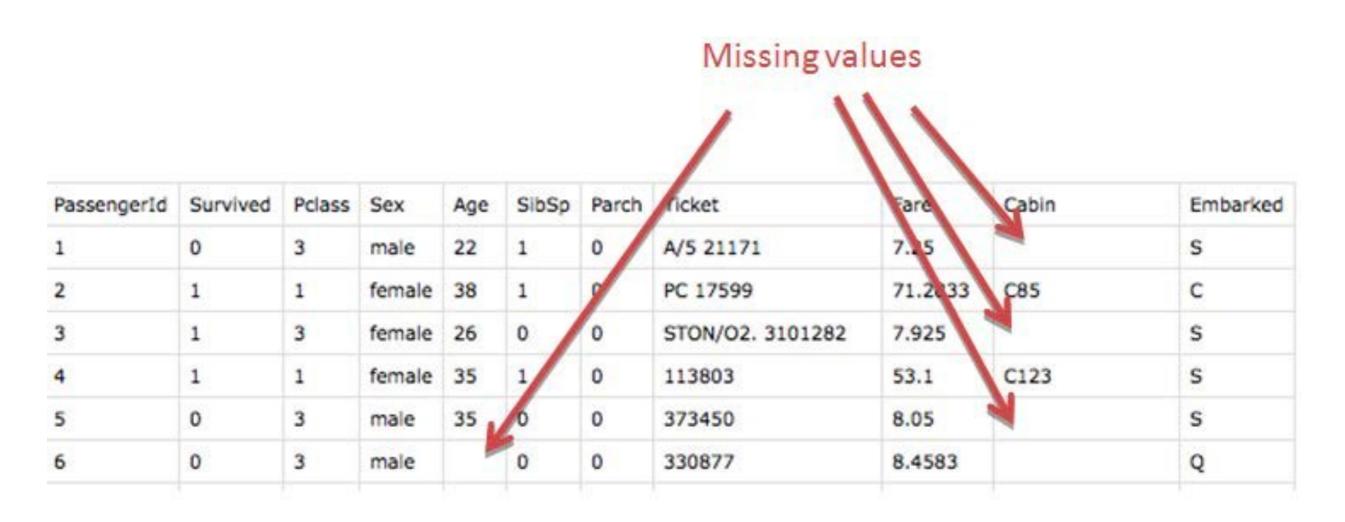


Вариант1: убрать все объекты с пропущенными значениями

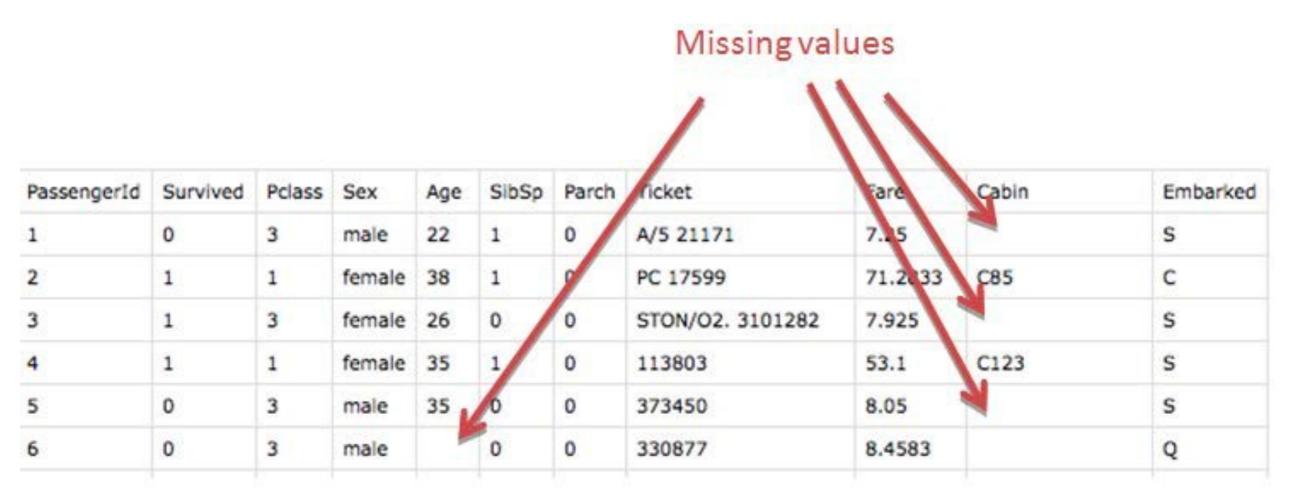


Вариант 1: убрать все объекты с пропущенными значениями

А если данных мало?



Вариант 2: заполнить пропущенные значения до обучения. Как?



Вариант 2: заполнить пропущенные значения до обучения. Как? а) предполагаем простое распределение для наших данных, заполняем пропуски средним значением, медианой и тд

NA:-----

							Missingval	ues		
							/	11		
PassengerId	Survived	Pclass	Sex	Age	SibSp	Parch	ricket	Fare	Cabin	Embarked
1	0	3	male	22	1	0	A/5 21171	7.15	4	S
2	1	1	female	38	1	9	PC 17599	71.2033	C85	С
3	1	3	female	26	0	0	STON/O2. 3101282	7.925	-	s
4	1	1	female	35	1	0	113803	53.1	C123	s
5	0	3	male	35	6	0	373450	8.05	4	s
6	0	3	male		0	0	330877	8.4583		Q

Вариант 2: заполнить пропущенные значения до обучения. Как?

а) предполагаем простое распределение для наших данных, заполняем пропуски средним значением, медианой и тд

Часто плохо! Мы предполагаем, что пропущенные значения пропущены истинно случайно - факт пропуска не зависит от других переменных и от предсказываемой величины

Missingvalues

			Iviissing values													
PassengerId	Survived	Pclass	Sex	Age	SibSp	Parch	ricket	Fare	Cabin	Embarked						
1	0	3	male	22	1	0	A/5 21171	7.15	4	s						
2	1	1	female	38	1	9	PC 17599	71.2033	C85	С						
3	1	3	female	26	0	0	STON/O2. 3101282	7.925	-	s						
4	1	1	female	35	1	0	113803	53.1	C123	s						
5	0	3	male	35	0	0	373450	8.05	4	s						
6	0	3	male		0	0	330877	8.4583		Q						

Вариант 2: заполнить пропущенные значения до обучения. Как?

б) Учим дополнительные модели машинного обучения. Будут предсказывать нам пропущенные значения

Minning - . . . l. . . .

							Missingval	ues		
							/	11		
PassengerId	Survived	Pclass	Sex	Age	SibSp	Parch	ricket	Fare	Cabin	Embarked
1	0	3	male	22	1	0	A/5 21171	7.15	4	S
2	1	1	female	38	1	9	PC 17599	71.2033	C85	С
3	1	3	female	26	0	0	STON/O2. 3101282	7.925	-	s
4	1	1	female	35	1	0	113803	53.1	C123	s
5	0	3	male	35	6	0	373450	8.05	4	s
6	0	3	male		0	0	330877	8.4583		Q

Вариант 2: заполнить пропущенные значения до обучения. Как?

б) Учим дополнительные модели машинного обучения. Будут предсказывать нам пропущенные значения

А переобучение? А если признаков очень много? А если в каждом объекте что-то да пропущено?

Missing values

								11		
PassengerId	Survived	Pclass	Sex	Age	SibSp	Parch	ricket	Fare	Cabin	Embarked
1	0	3	male	22	1	0	A/5 21171	7.15		S
2	1	1	female	38	1	9	PC 17599	71.2033	C85	С
3	1	3	female	26	0	0	STON/O2. 3101282	7.925		s
4	1	1	female	35	1	0	113803	53.1	C123	s
5	0	3	male	35	0	0	373450	8.05	4	s
6	0	3	male		0	0	330877	8.4583		Q

Вариант 3: использовать алгоритм, который умеет справляться с пропусками

Missingvalues

							Iviissing vai	ucs		
							/	11		
						2 .	/	111		
PassengerId	Survived	Pclass	Sex	Age	SibSp	Parch	ricket	Fare	Cabin	Embarked
1	0	3	male	22	1	0	A/5 21171	7.15		S
2	1	1	female	38	1	9	PC 17599	71.2033	C85	С
3	1	3	female	26	0	0	STON/O2. 3101282	7.925		s
4	1	1	female	35	1	0	113803	53.1	C123	s
5	0	3	male	35	0	0	373450	8.05	4	s
6	0	3	male		0	0	330877	8.4583		Q

Вариант 3: использовать алгоритм, который умеет справляться с пропусками

KNN - можно брать ближайших соседей по известным признакам и на основании них восстанавливать неизвестные

						Missingval	ues		
						/	11		
Survived	Pclass	Sex	Age	SibSp	Parch	ricket	Fare	Cabin	Embarked
0	3	male	22	1	0	A/5 21171	7.15		S
1	1	female	38	1	9	PC 17599	71.2033	C85	С
1	3	female	26	0	0	STON/O2. 3101282	7.925	-	s
1	1	female	35	1	0	113803	53.1	C123	s
0	3	male	35	0	0	373450	8.05	4	s
0	3	male		0	0	330877	8.4583		Q
	0 1 1 1	0 3 1 1 1 3 1 1 0 3	0 3 male 1 1 female 1 3 female 1 1 female 0 3 male	0 3 male 22 1 1 female 38 1 3 female 26 1 1 female 35 0 3 male 35	0 3 male 22 1 1 1 female 38 1 1 3 female 26 0 1 1 female 35 1 0 3 male 35 0	0 3 male 22 1 0 1 1 female 38 1 0 1 3 female 26 0 0 1 1 female 35 1 0 0 3 male 35 0 0	Survived Pclass Sex Age SibSp Parch Ficket 0 3 male 22 1 0 A/5 21171 1 1 female 38 1 0 PC 17599 1 3 female 26 0 0 STON/O2. 3101282 1 1 female 35 1 0 113803 0 3 male 35 0 0 373450	Survived Pclass Sex Age SibSp Parch Ficket Fare 0 3 male 22 1 0 A/5 21171 7.15 1 1 female 38 1 0 PC 17599 71.2033 1 3 female 26 0 0 STON/O2. 3101282 7.925 1 1 female 35 1 0 113803 53.1 0 3 male 35 0 0 373450 8.05	0 3 male 22 1 0 A/5 21171 7.15 1 1 female 38 1 0 PC 17599 71.2033 C85 1 3 female 26 0 0 STON/O2. 3101282 7.925 1 1 female 35 1 0 113803 53.1 C123 0 3 male 35 0 0 373450 8.05

Вариант 3: использовать алгоритм, который умеет справляться с пропусками

KNN - можно брать ближайших соседей по известным признакам и на основании них восстанавливать неизвестные

Дерево решений - два способа

Missingvalues

						iviissing vai	ues					
Survived	Pclass	Sex	Age	SibSp	Parch	ricket	Fare	Cabin	Embarked			
0	3	male	22	1	0	A/5 21171	7.15	4	s			
1	1	female	38	1	9	PC 17599	71.2033	C85	С			
1	3	female	26	0	0	STON/O2. 3101282	7.925	-	s			
1	1	female	35	1	0	113803	53.1	C123	s			
0	3	male	35	0	0	373450	8.05	4	s			
0	3	male		0	0	330877	8.4583		Q			
	0 1 1 1	0 3 1 1 1 3 1 1 0 3	0 3 male 1 1 female 1 3 female 1 1 female 0 3 male	0 3 male 22 1 1 female 38 1 3 female 26 1 1 female 35 0 3 male 35	0 3 male 22 1 1 1 female 38 1 1 3 female 26 0 1 1 female 35 1 0 3 male 35 0	0 3 male 22 1 0 1 1 female 38 1 0 1 3 female 26 0 0 1 1 female 35 1 0 0 3 male 35 0 0	Survived Pclass Sex Age SibSp Parch Ficket 0 3 male 22 1 0 A/5 21171 1 1 female 38 1 0 PC 17599 1 3 female 26 0 0 STON/O2. 3101282 1 1 female 35 1 0 113803 0 3 male 35 0 0 373450	Survived Pclass Sex Age SibSp Parch Ficket Fare 0 3 male 22 1 0 A/5 21171 7.15 1 1 female 38 1 0 PC 17599 71.2033 1 3 female 26 0 0 STON/O2. 3101282 7.925 1 1 female 35 1 0 113803 53.1 0 3 male 35 0 0 373450 8.05	0 3 male 22 1 0 A/5 21171 7.15 1 1 female 38 1 0 PC 17599 71.2033 C85 1 3 female 26 0 0 STON/O2. 3101282 7.925 1 1 female 35 1 0 113803 53.1 C123 0 3 male 35 0 0 373450 8.05			

Вариант 3: использовать алгоритм, который умеет справляться с пропусками

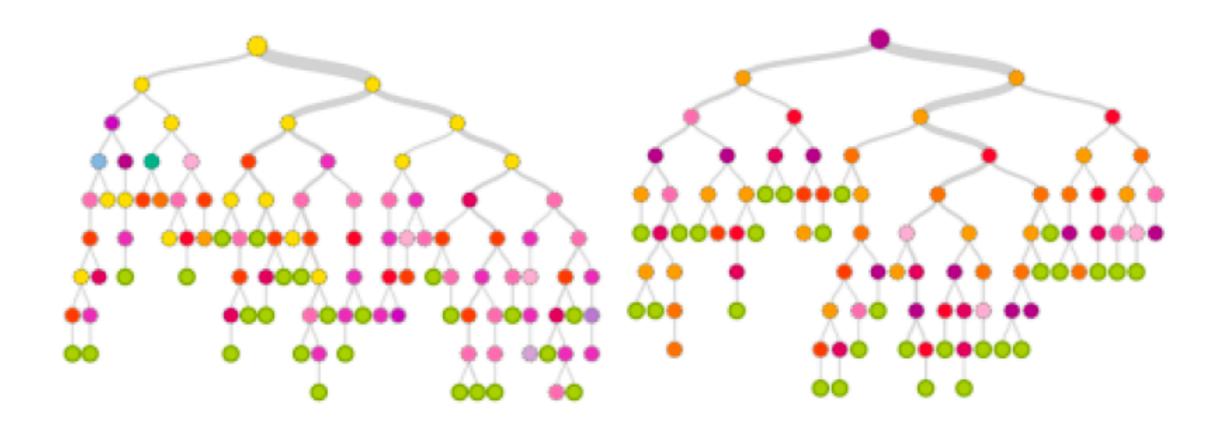
Дерево решений - два способа

1) пропущенное значение - особая категория данных. В дереве в правилах напрямую спрашиваем - а не пропущено ли наше значение



Деревья неустойчивы

 Незначительные изменения в данных приводят к значительным изменениям в топологии дерева



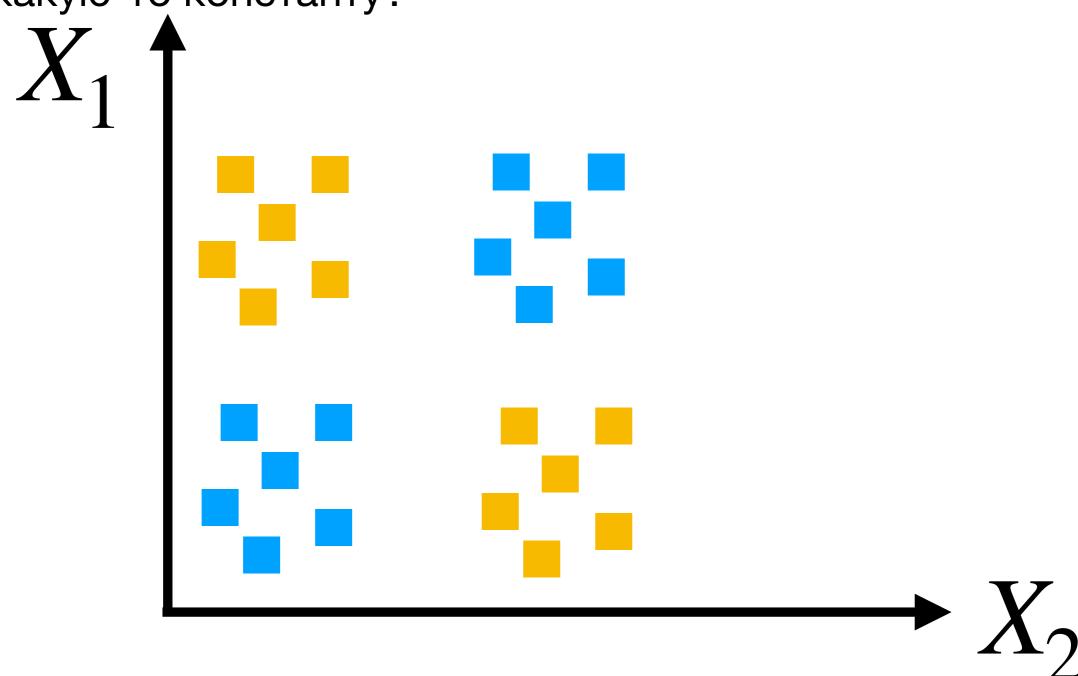
Взято из презентации Гулин В., Техносфера

Как с этим бороться?

Можно ли просто запретить разбивать узел, если от этого качество вырастает меньше чем на какую-то константу?

Как с этим бороться?

Можно ли просто запретить разбивать узел, если от этого качество вырастает меньше чем на какую-то константу?



Как с этим бороться?

Можно ли просто запретить разбивать узел, если от этого качество вырастает меньше чем на какую-то константу?

Иногда дереву приходится делать плохое разбиение, чтобы далее сделать хорошее разбиение

Как с этим бороться?

Можно ли ограничить число объектов в листе? Не делаем разбиение, если в результате объектов в листе будет слишком мало

Как с этим бороться?

Можно ли ограничить число объектов в листе? Не делаем разбиение, если в результате объектов в листе будет слишком мало

Можно. Почему?

Как с этим бороться?

Можно ли ограничить число объектов в листе? Не делаем разбиение, если в результате объектов в листе будет слишком мало

Можно. Почему?

Мы оцениваем параметр в подпространстве. Чем объектов, тем больше дисперсия оценки -> больше переобученность модели.

Можно обрезать уже построенное дерево!

 $Tree_score(T, train) = Quality(T, train) + \alpha \cdot Tree_complexity(T)$

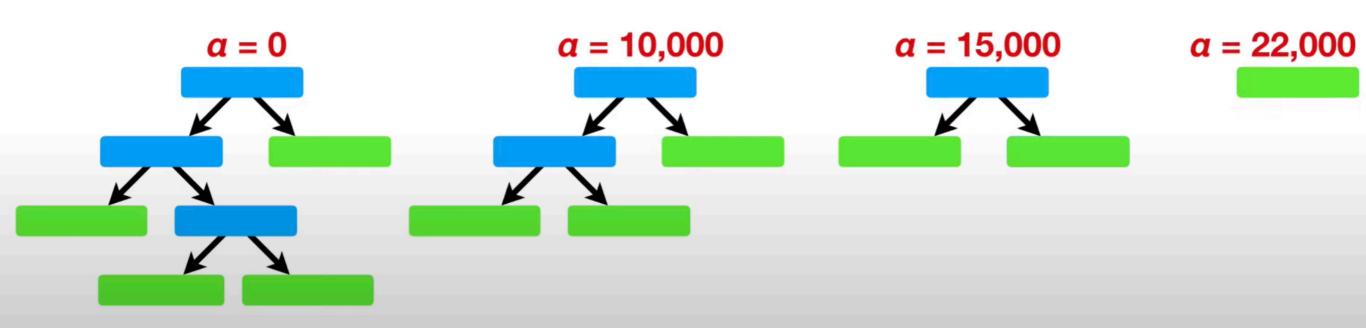
Можно обрезать уже построенное дерево!

$$Tree_score(T, train) = Quality(T, train) + \alpha \cdot Tree_complexity(T)$$

Вводим штраф на очень большие деревья

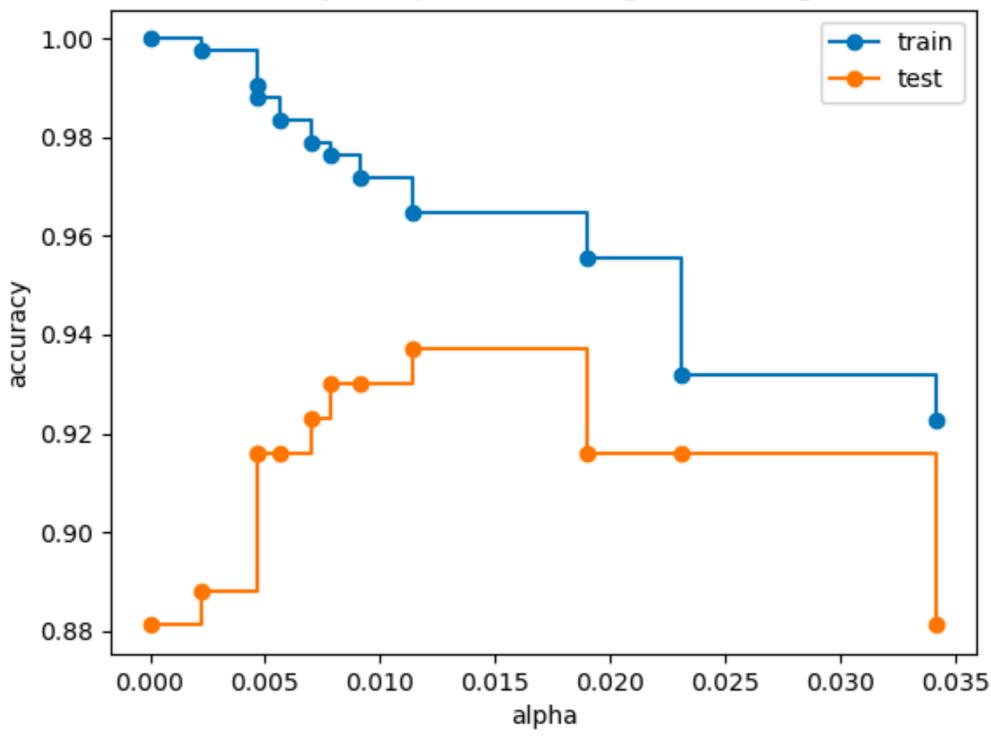
Можно эффективно перебирать все возможные деревья, получаемые прунингом из нашего, отрезая листья у узла с наименьшим весом

$$\alpha_{eff} = \frac{Quality(T) - Quality(T_t)}{T - 1}$$



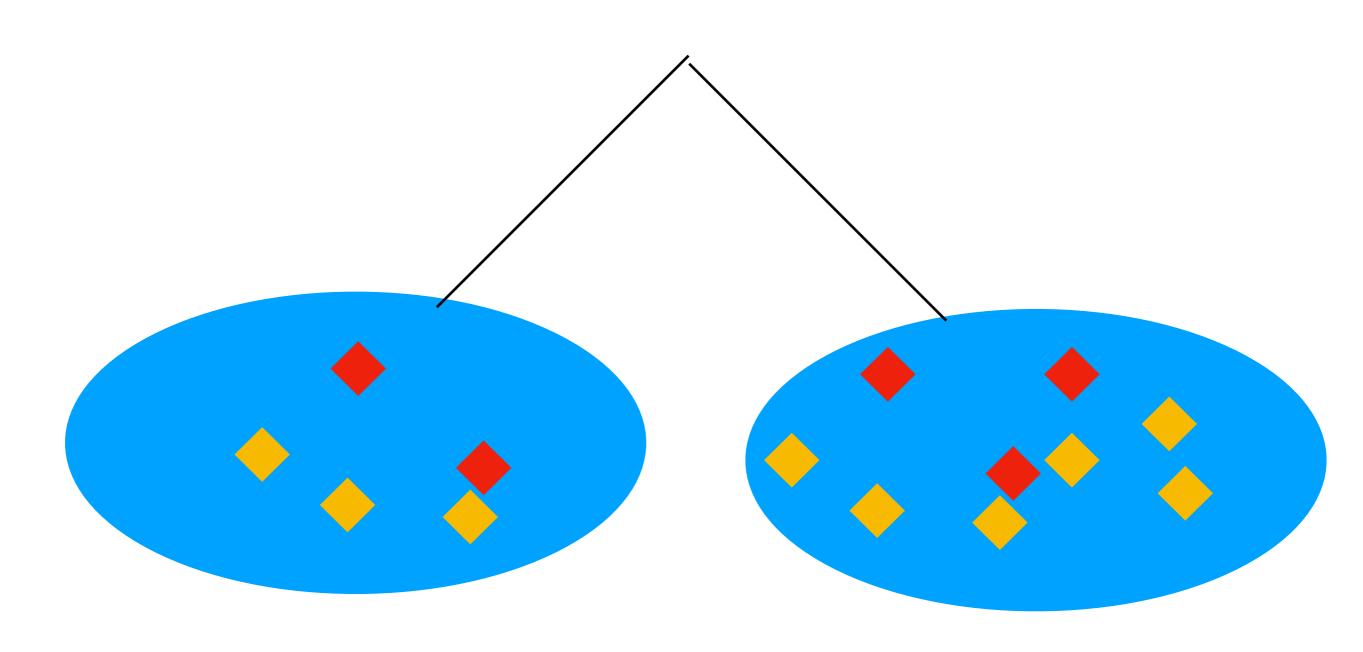
Где подбирать alpha?

Accuracy vs alpha for training and testing sets



https://scikit-learn.org/stable/modules/tree.html#minimal-cost-complexity-pruning

Почему бьем только на 2 узла?



Решение не гладкое!

Можно ли с этим что-то сделать?

Решение не гладкое!

Можно ли с этим что-то сделать?

Строго говоря - нет.

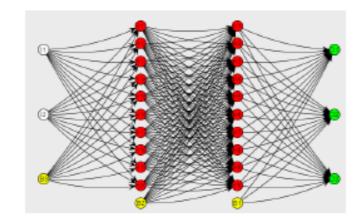
Ho...

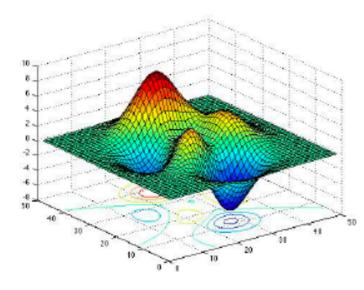
Взгляд с точки зрения функционального анализа

Гладкие функции

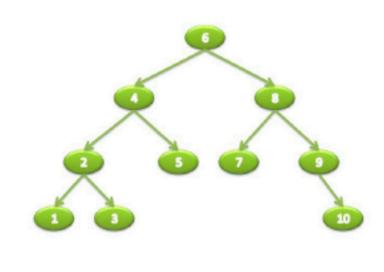
Кусочно-постоянные функции

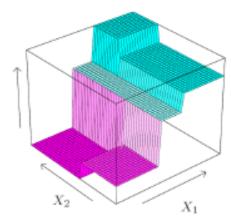
$$h(\mathbf{x}) = \sum \sigma(\dots \sum \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}))$$





$$h(\mathbf{x}) = \sum_{d} c_{d} I\{\mathbf{x} \in R_{d}\}$$





Взято из презентации Гулин В., Техносфера

Теорема об универсальном аппроксиматоре

С помощью нейронной сети с одним скрытым слоем можно аппроксимировать любую непрерывную функцию

С помощью дерева решений можно аппроксимировать любую кусочно-заданную функцию

Сплит по значению линейной комбинации признаков

Вместо такого:

$$X_j < thresh$$

Ищем такое:

$$\sum_{j} a_{j}X_{j} < thresh$$

Сплит по значению линейной комбинации признаков

Вместо такого:

$$X_j < thresh$$

Ищем такое:

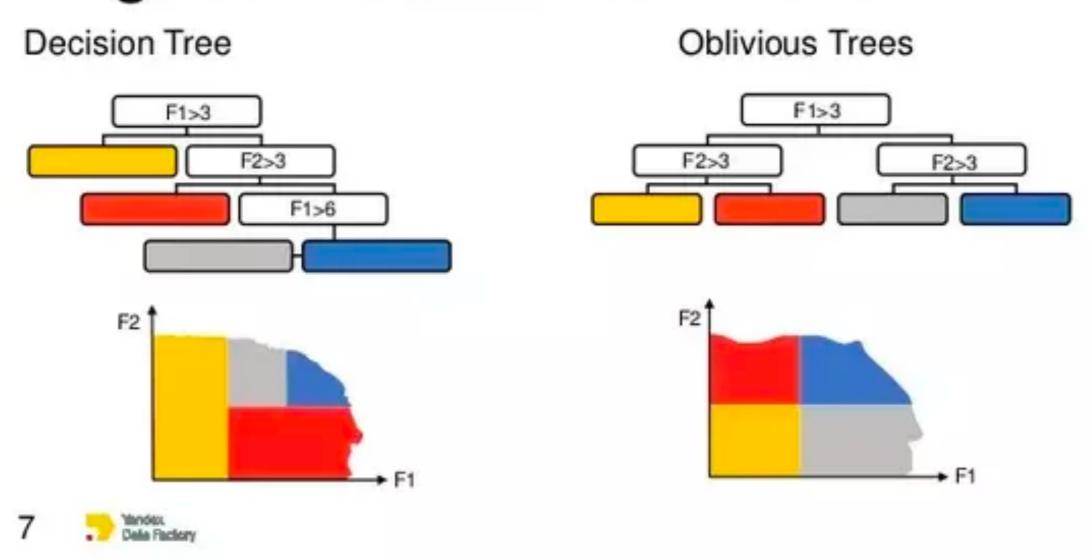
$$\sum_{j} a_{j}X_{j} < thresh$$

Долго считать(

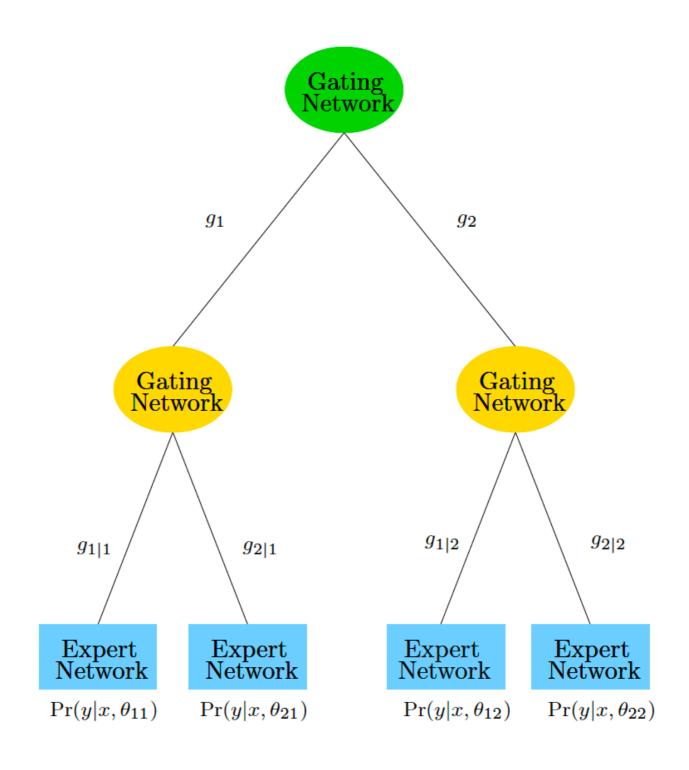
Модификации дерева решений

Oblivious trees

Regular vs oblivious trees



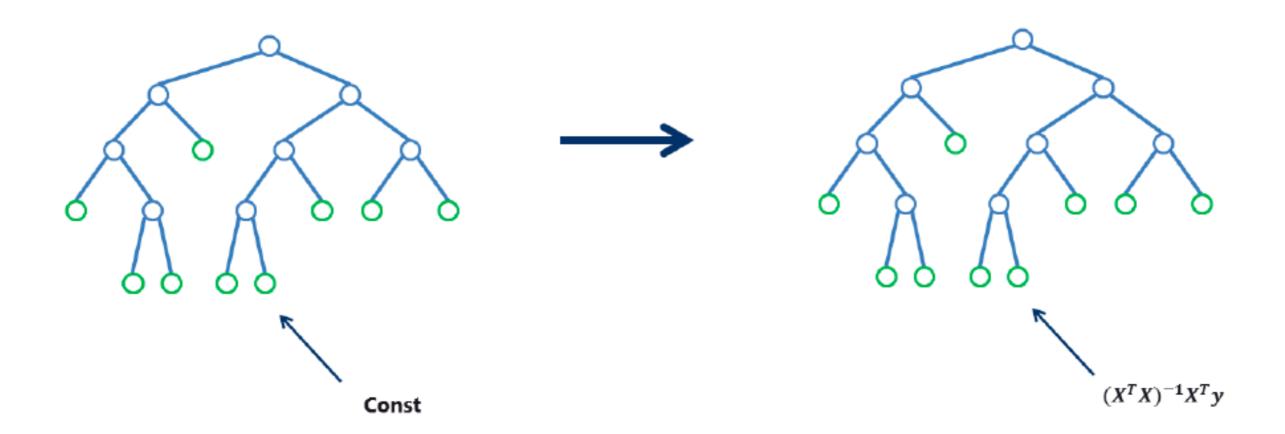
Иерархические смесь экспертов



The elements of statistical learning

Модельные деревья решений (Model decision trees)

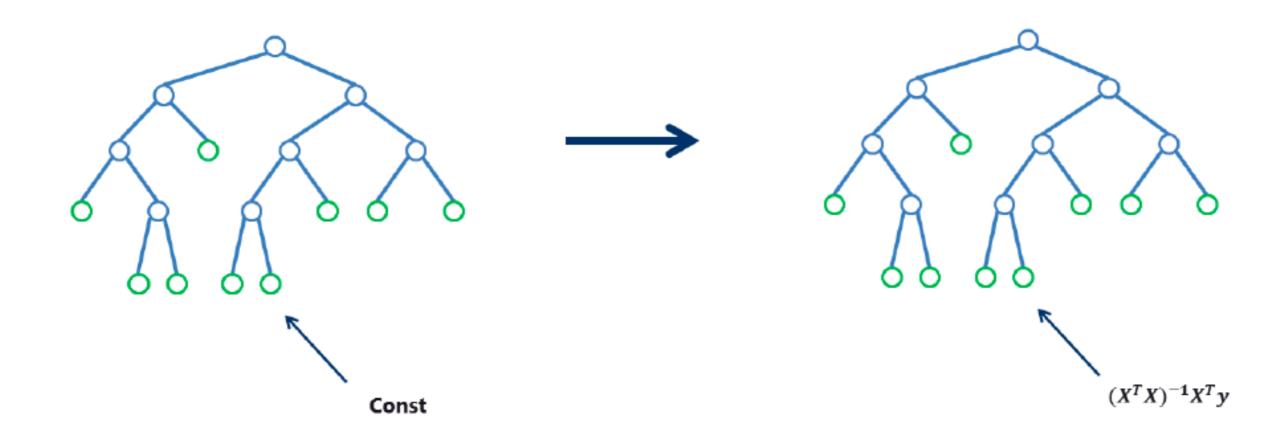
Поместим в листья деревьев какие-нибудь алгоритмы вместо констант



Взято из презентации Гулин В., Техносфера

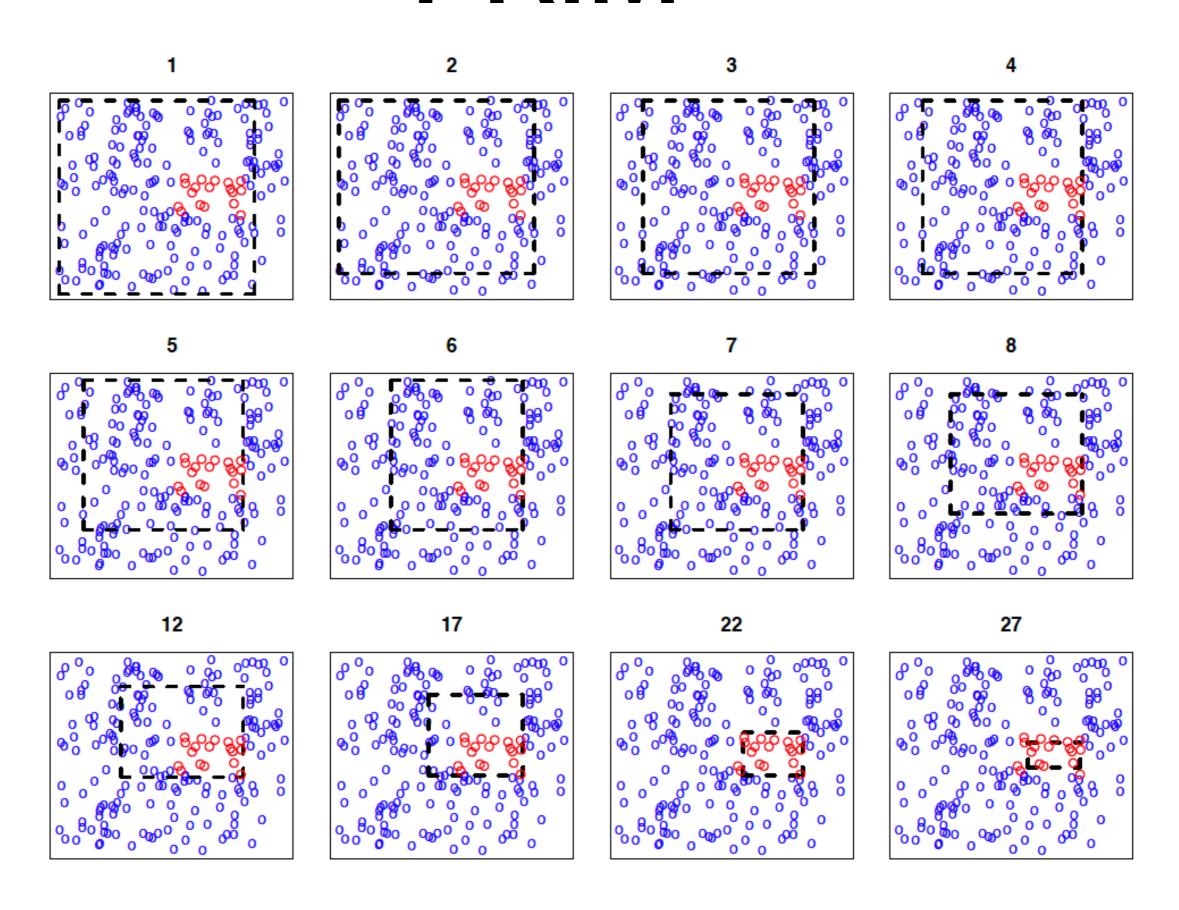
Модельные деревья решений (Model decision trees)

Поместим в листья деревьев какие-нибудь алгоритмы вместо констант

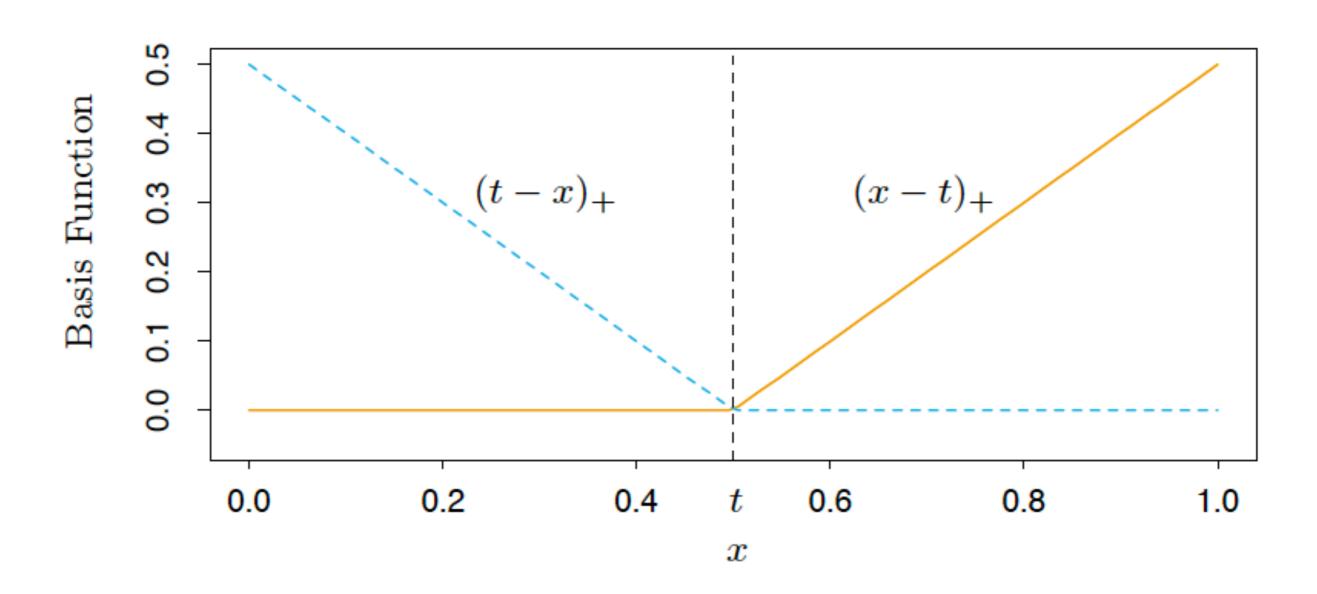


Усложнение - пусть модели не только в листьях. Пусть каждый объект попадает в каждый лист с какой-то вероятностью. Тогда получаем иерархические экспертные модели

PRIM



MARS



MARS

