

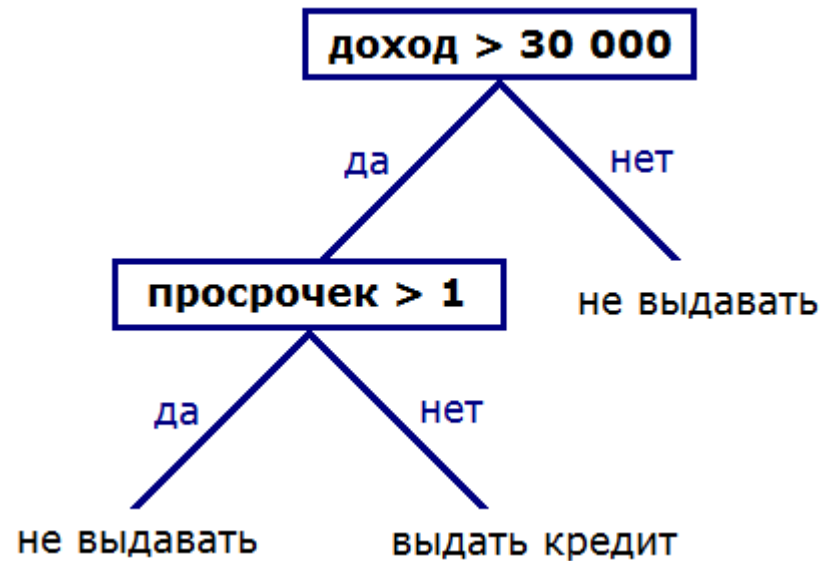
«Машинное обучение»

Решающие деревья

Александр Дьяконов



Решающее дерево (Decision Tree)



лист или терминальная вершина (leaf / terminal node)

← метка (вероятности меток)

внутренняя вершина(internal node)

← ветвление, предикат (признак, порог)

дуга ← значение предиката

CART = Classification and Regression Trees

бинарные деревья (binary trees) – каждая вершина имеет двух потомков
дальше, в основном, рассматриваем их

Какие бывают предикаты / ветвления в бинарных деревьях

Предикат может быть любым...

проблема в построении оптимального дерева для конкретного предиката

**Для вещественного признака
обычно**

$$P(x | i, \theta) = I[f_i(x) \leq \theta]$$

**Для категориального признака
обычно**

$$P(x | i, C) = I[f_i(x) \in C]$$

«косые деревья»

oblique decision trees /

binary space partition trees (BSP trees)

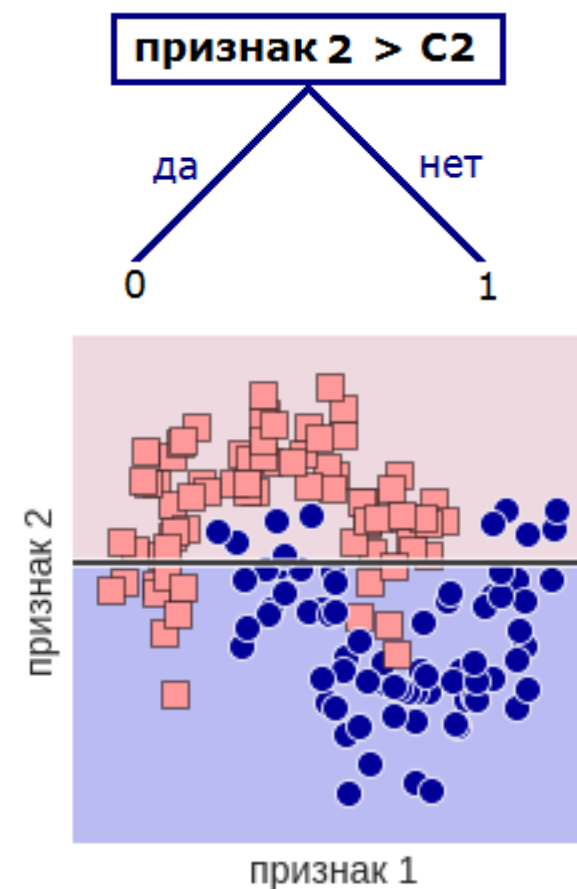
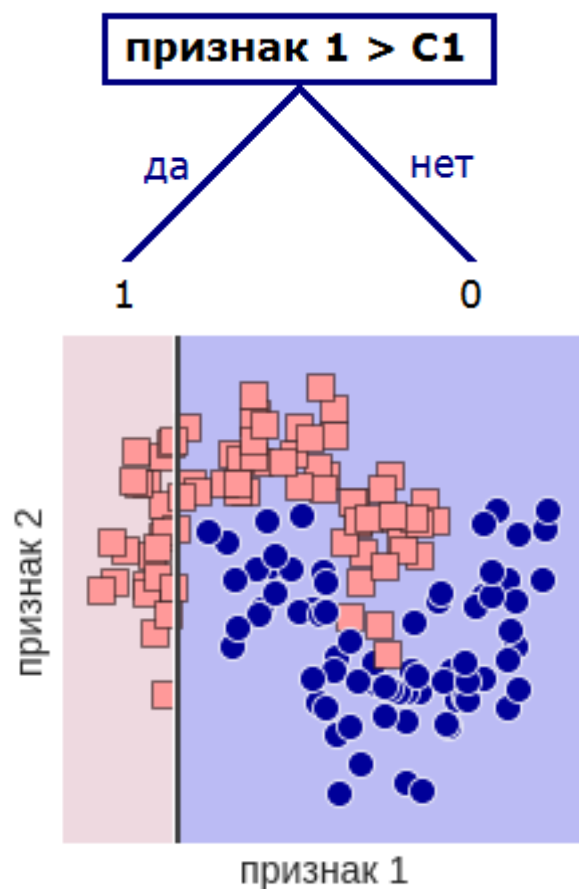
$$P(x | \{w_i\}_i, \theta) = I\left[\sum_i w_i f_i(x) \leq \theta\right]$$

«сферические деревья»
sphere trees

$$P(x | \{z_i\}_i, \theta) = I\left[\sum_i (f_i(x) - z_i)^2 \leq \theta^2\right]$$

Разбиение на области

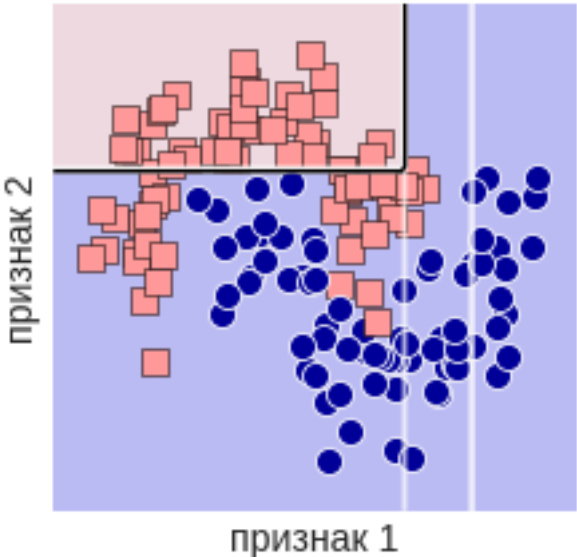
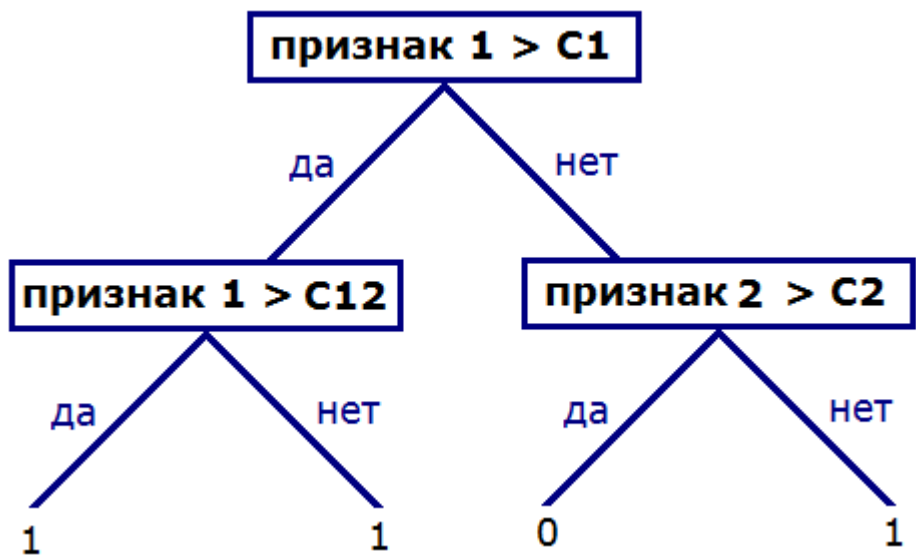
**Расщепление по переменной (splitting) \Rightarrow
разбиение (stratifying / segmenting) на области (регионы)**



– это, кстати, «решающие пни» (decision stumps)

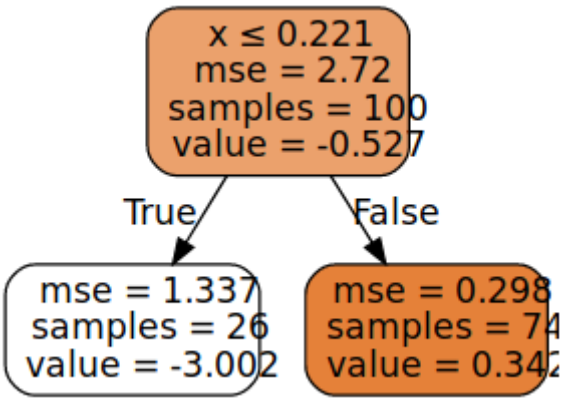
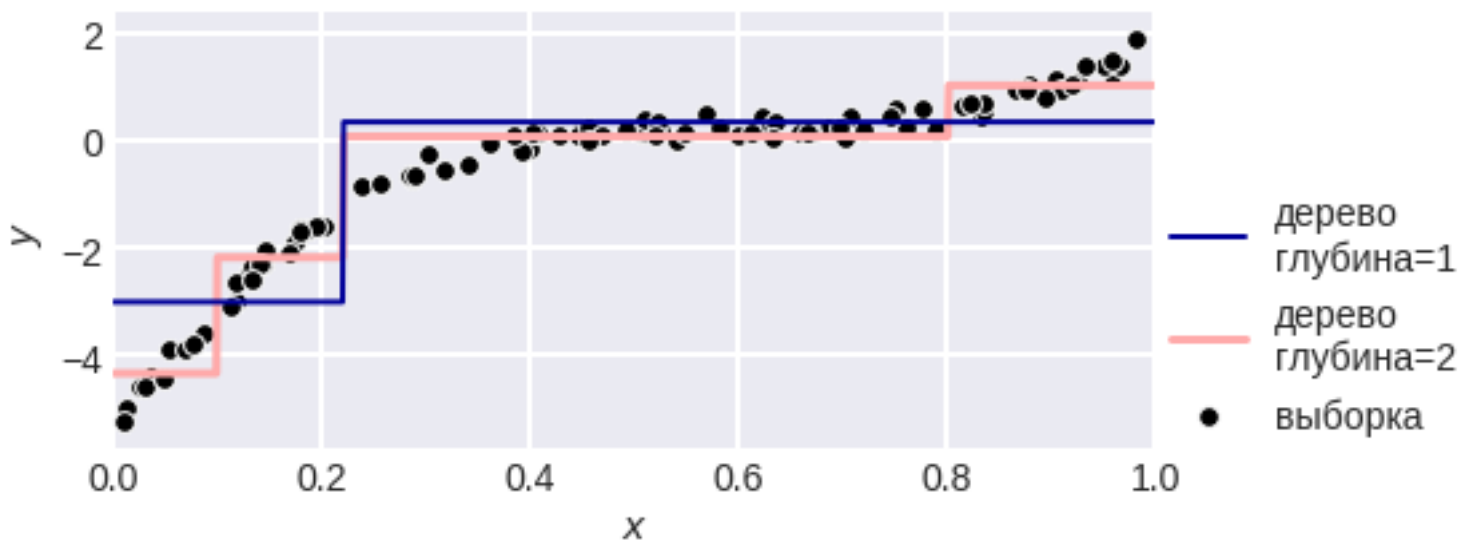
Решающее дерево как функция – кусочно-постоянная

$$a(x) = \sum_j a_{R_j} I[x \in R_j]$$
$$\bigcup_j R_j = \mathbb{X}$$
$$R_i \cap R_j = \emptyset \quad \forall i \neq j$$

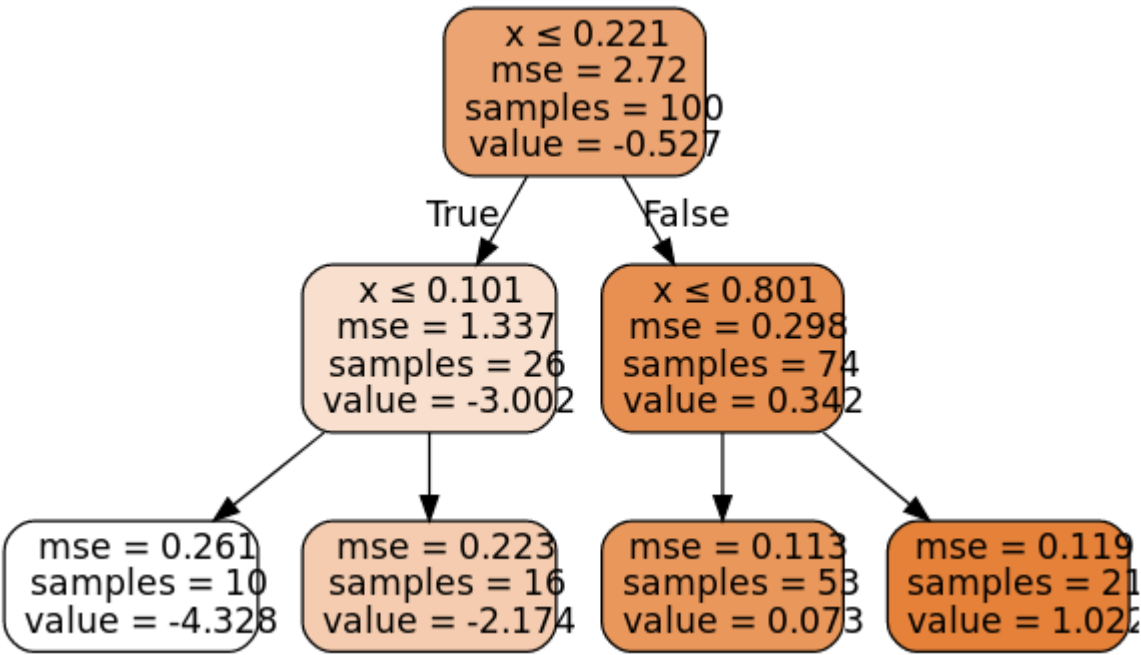


в соседних регионах метки могут быть одинаковые

Решающее дерево в задаче регрессии



$$y = -3.002I[x \leq 0.221] + 0.342I[x > 0.221]$$



Построение дерева: общая задача

**В идеале в задаче регрессии с MSE
нужно решить такую задачу минимизации:**

$$\sum_i \sum_j I[x_i \in R_j] (y_i - a_{R_j})^2 \rightarrow \min,$$

– Residual Sum of Squares (RSS)

минимизация по всем разбиениям на области $\{R_j\}$

и по всем выборам a_{R_j}

**Трудоёмко \Rightarrow строим дерево «по уровням»,
последовательно минимизируя RSS
(top-down greedy approach)**

Построение дерева: сверху-вниз

**Стартуя от дерева, состоящего из одной вершины,
можно проводить расщепления выбирая признак и порог так,
чтобы минимизировать RSS**

Сейчас уточним – что будем оптимизировать

Расщепления производятся пока не выполнятся некоторые критерии останова
(ограничения на глубину дерева,
число объектов обучающей выборки в листьях,
на изменение RSS, **см. дальше**)

Построение дерева: приписывание меток областям

**Заметим, что если зафиксировать область,
то оптимальное значение метки для области
(в смысле минимизации эмпирического риска)**

в задаче регрессии (MSE)

$$a_{R_j} = \frac{1}{|\{x_i : x_i \in R_j\}|} \sum_{x_i \in R_j} y_i$$

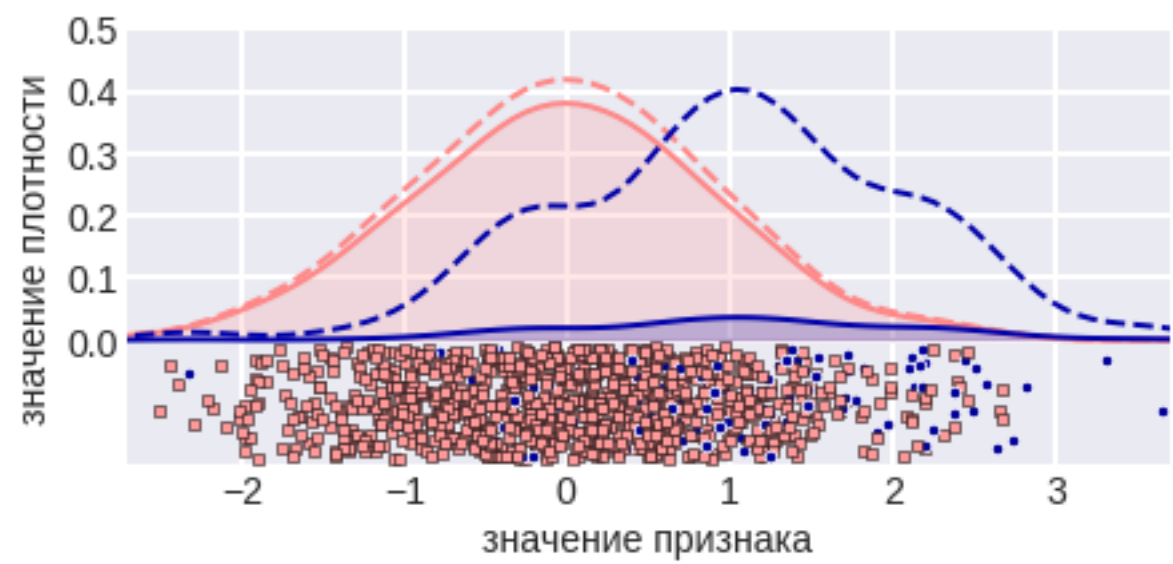
в задаче классификации (точность)

$$a_{R_j} = \text{mode}(\{y_i : x_i \in R_j\})$$

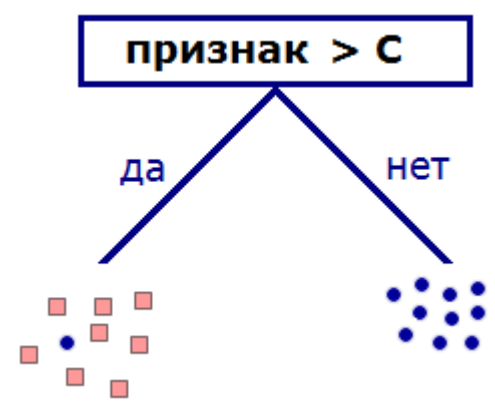
поэтому именно так они и выбираются!

возможно другие значения для специальных функционалов качества

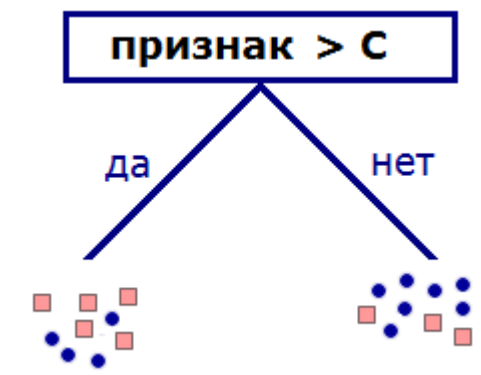
Построение дерева: как делать расщепления
как выбрать порог для расщепления при построении дерева?



«хорошо»:



«плохо»:

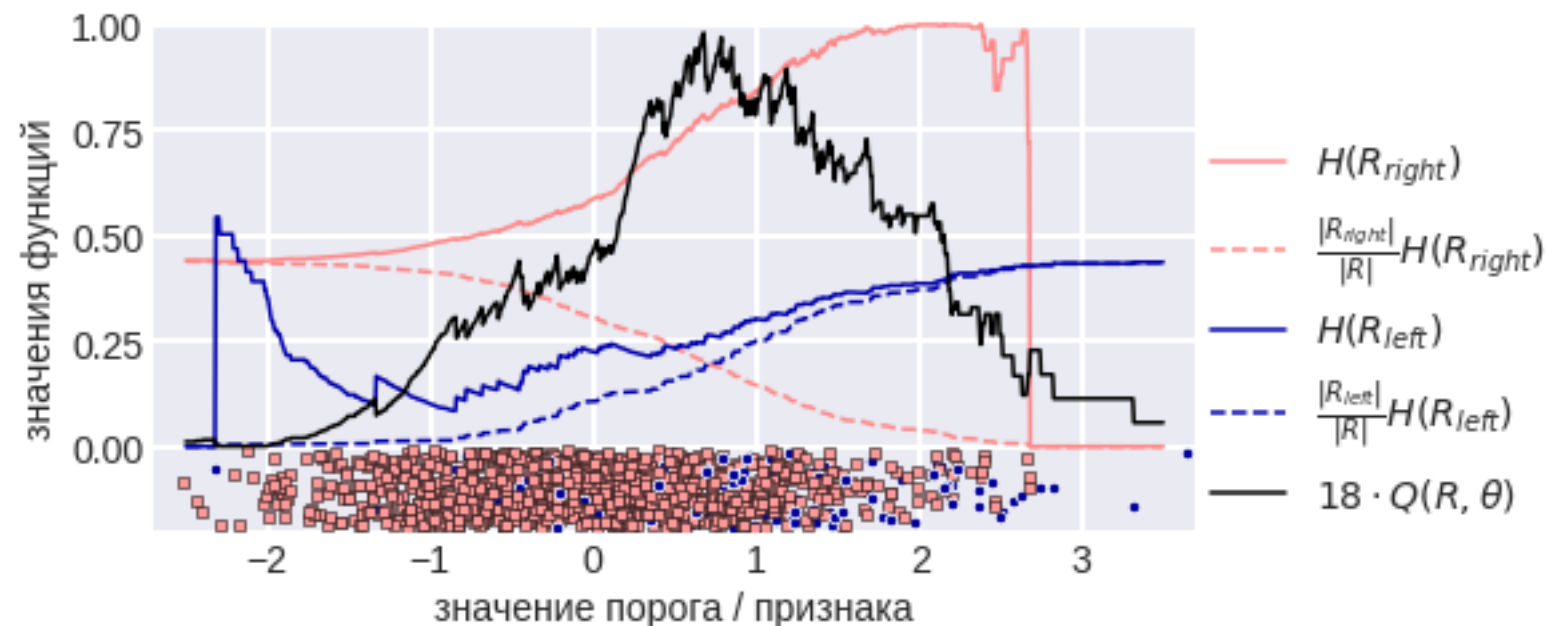


Критерии расщепления в задачах классификации

Идея: ввести меру неоднородности / зашумлённости (impurity) множества $H(R)$

~ насколько в области «почти все объекты одного класса»
при расщеплении области R на R_{left} и R_{right} оптимизировать

$$Q(R, \theta) = H(R) - \frac{|R_{\text{left}}|}{|R|} H(R_{\text{left}}) - \frac{|R_{\text{right}}|}{|R|} H(R_{\text{right}})$$



Меры impurity (неоднородности / зашумлённости) в задачах классификации

Пусть есть область R
в ней доли объектов всех классов: p_1, \dots, p_l

Missclassification criteria

$$H(R) = 1 - p_{\max}$$

энтропийный

$$H(R) = - \sum_j p_j \log_2 p_j$$

Джини

$$H(R) = \sum_j p_j (1 - p_j) = 1 - \sum_j p_j^2$$

**Мера неоднородности (impurity) минимальна (=0)
только если все объекты принадлежат одному классу**

Критерии расщепления: частный случай двух классов

Пусть есть область R
в ней доли объектов всех классов: $p_1 = p, p_2 = 1 - p$

Missclassification criteria

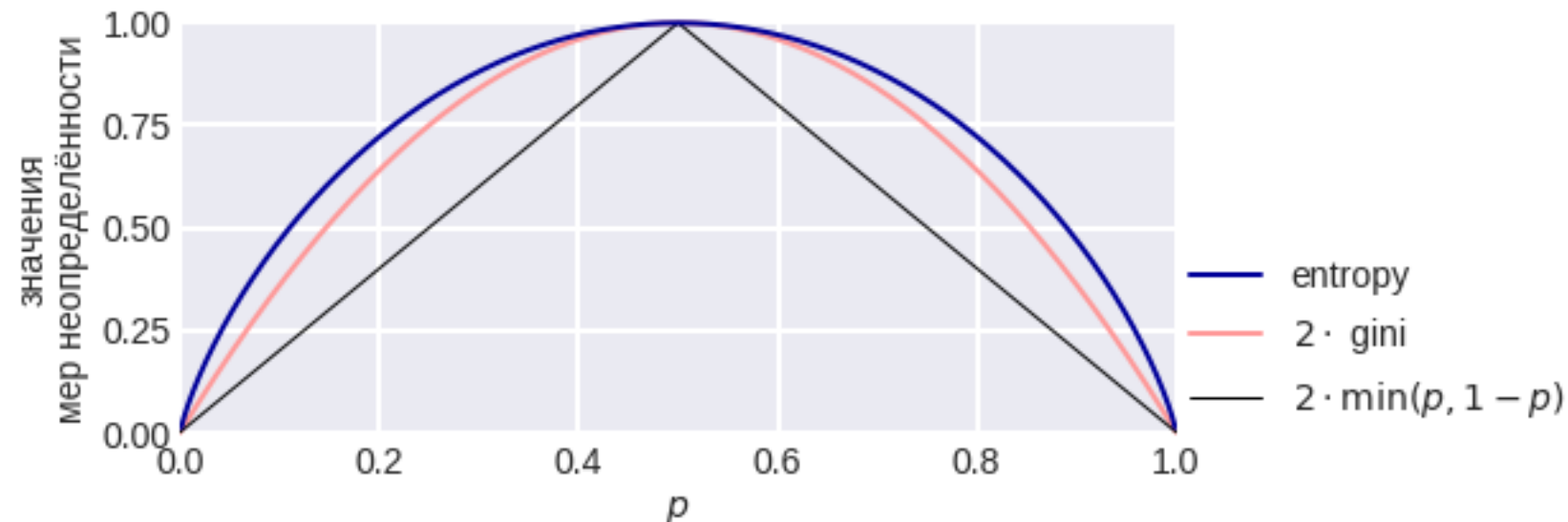
$$H(R) = \min[p, 1 - p]$$

энтропийный

$$H(R) = -p \log_2 p - (1 - p) \log_2 (1 - p)$$

Джини

$$H(R) = 2p(1 - p) = 1 - p^2 - (1 - p)^2$$



Критерии расщепления

4. AUC_ROC: будет в разделе «метрики качества»

$$Q(R, \theta) = \left| \frac{|R_{\text{right}} \cap K_0|}{|K_0|} - \frac{|R_{\text{right}} \cap K_1|}{|K_1|} \right| =$$

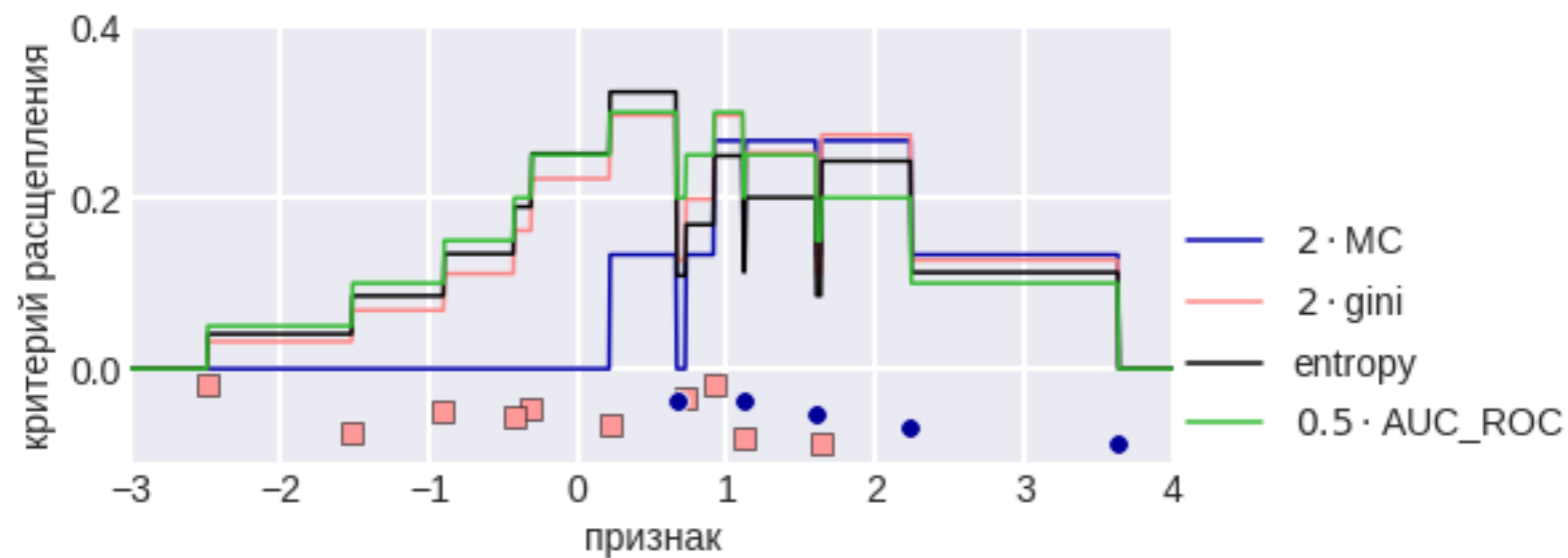
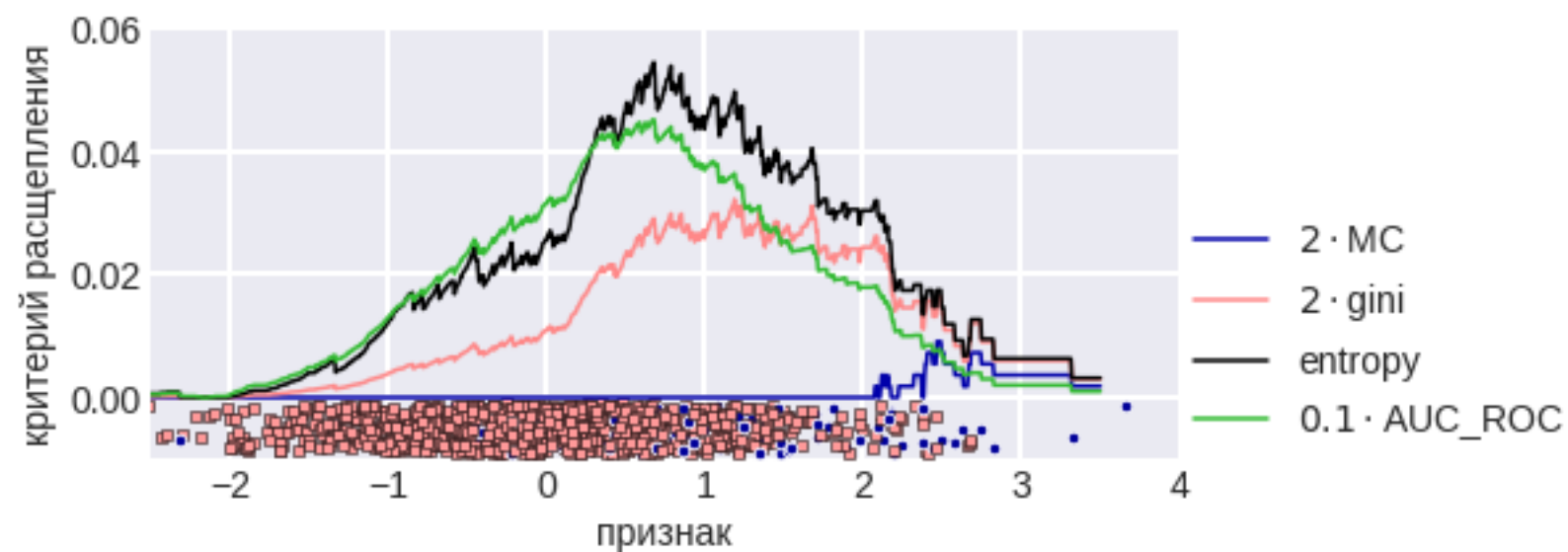
$$= \left| \frac{|R_{\text{left}} \cap K_0|}{|K_0|} - \frac{|R_{\text{left}} \cap K_1|}{|K_1|} \right|$$

5. Twoing

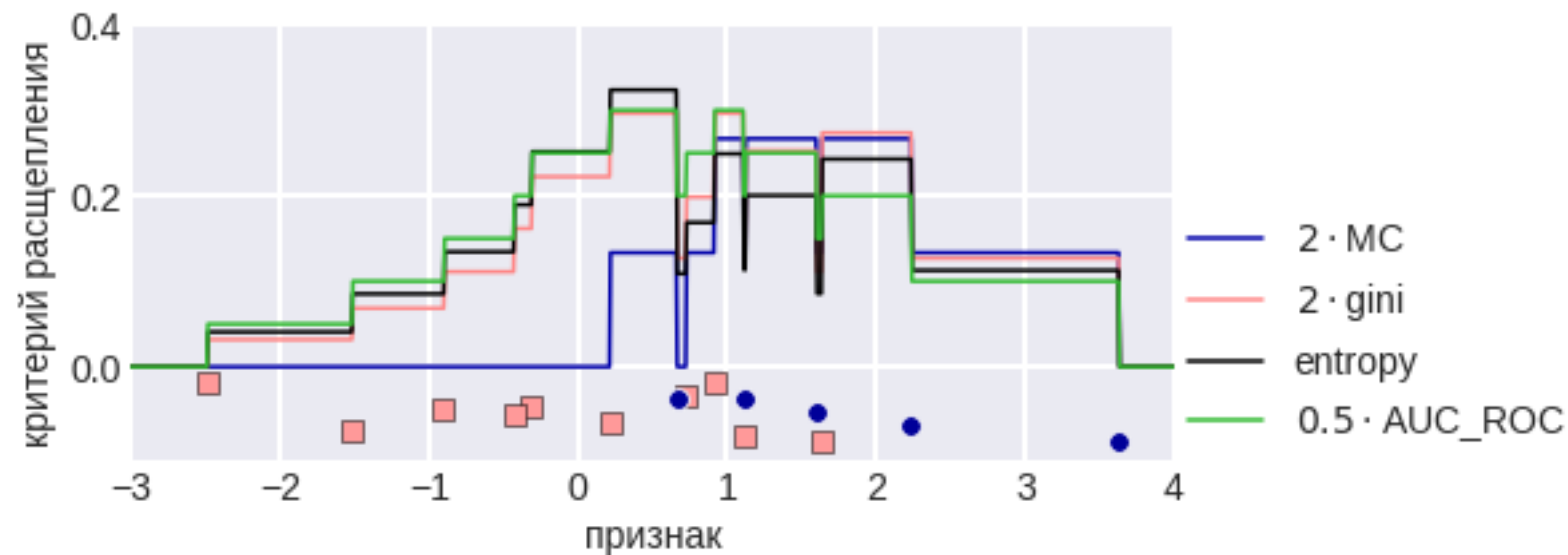
$$Q(R, \theta) = \frac{1}{4} \frac{|R_{\text{left}}|}{|R|} \frac{|R_{\text{right}}|}{|R|} \left(\sum_{j=1}^l |p_j(R_{\text{left}}) - p_j(R_{\text{right}})| \right)^2$$

Для двух классов ~ Джини

Критерии расщепления: частный случай двух классов



Энтропия – мера неопределённости распределения



При пороге $\theta = 1$

$$\frac{|R_{\text{left}}|}{|R|} = \frac{9}{15}$$

$$\frac{|R_{\text{right}}|}{|R|} = \frac{6}{15}$$

$$H(R) = -(5/15)\log_2(5/15) - (10/15)\log_2(10/15) \approx 0.918$$

$$H(R_{\text{left}}) = -(1/9)\log_2(1/9) - (8/9)\log_2(8/9) \approx 0.503$$

$$H(R_{\text{right}}) = -(4/6)\log_2(4/6) - (2/6)\log_2(2/6) \approx 0.918$$

$$Q(R, \theta) \approx 0.918 - \frac{9}{15}0.503 - \frac{6}{15}0.918 \approx 0.249$$

Обоснование энтропийного критерия расщепления

| | облачно | ясно |
|-------|---------|------|
| дождь | 3 | 1 |
| сухо | 1 | 5 |

 $X = \{\text{дождь, сухо}\}$
 $Y = \{\text{облачно, ясно}\}$

Совместная энтропия

$$\begin{aligned}
 H(X, Y) &= - \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x, y) \log_2 p(x, y) = \\
 &= - \frac{3}{10} \log_2 \frac{3}{10} - \frac{1}{10} \log_2 \frac{1}{10} - \frac{1}{10} \log_2 \frac{1}{10} - \frac{5}{10} \log_2 \frac{5}{10}
 \end{aligned}$$

Энтропия при условии знаем, что дождь

$$\begin{aligned}
 H(Y \mid X = x) &= - \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(y \mid x) \log_2 p(y \mid x) = \\
 &= - \frac{3}{4} \log_2 \frac{3}{4} - \frac{1}{4} \log_2 \frac{1}{4}
 \end{aligned}$$

Обоснование энтропийного критерия расщепления

| | облачно | ясно |
|-------|---------|------|
| дождь | 3 | 1 |
| сухо | 1 | 5 |

 $X = \{\text{дождь, сухо}\}$ $Y = \{\text{облачно, ясно}\}$

Ожидаемая условная энтропия

$$H(Y | X) = \sum_{x \in X} p(x) H(Y | X = x)$$

Энтропия при условии, что знаем X

Information Gain / Mutial Information

$$IG(Y | X) = H(Y) - H(Y | X)$$

Насколько знание X уменьшило неопределённость

Как раз это и считаем!

$$Q(R, \theta) = H(R) - \frac{|R_{\text{left}}|}{|R|} H(R_{\text{left}}) - \frac{|R_{\text{right}}|}{|R|} H(R_{\text{right}})$$

Критерии расщепления: тонкости

при выборе расщепления мы выбираем порог

- достаточно рассматривать только «средние точки»
- достаточно рассматривать только «границы регионов»

но в чём тут подвох?

для начала надо отсортировать все значения
есть проблема константных признаков



Критерии расщепления в задачах регрессии

аналогично... но тут «неоднородность» – дисперсия

$$H(R) = \text{var}(\{y_i \mid y_i \in R\})$$

$$Q(R, \theta) = H(R) - \frac{|R_{\text{left}}|}{|R|} H(R_{\text{left}}) - \frac{|R_{\text{right}}|}{|R|} H(R_{\text{right}})$$

Делаем разбиение, которое максимизирует Q

Повторяем процедуру в листьях

Кстати, для бинарной случайной величины $y_i \in \{0,1\}$

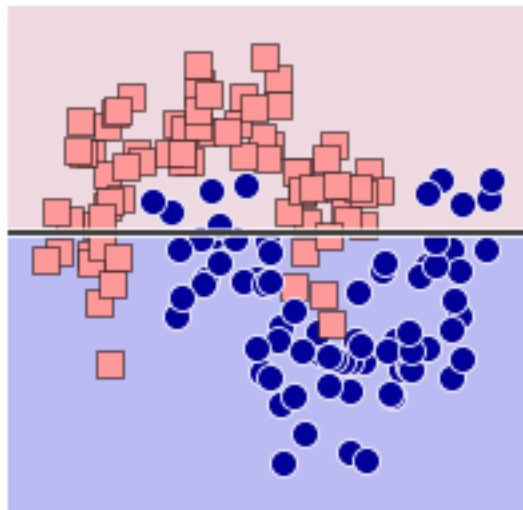
$$p_1 = \bar{p}, p_0 = 1 - \bar{p},$$
$$\text{var}(\{y_i\}) = \bar{p}(1 - \bar{p})$$

т.е. это ~ Джини!

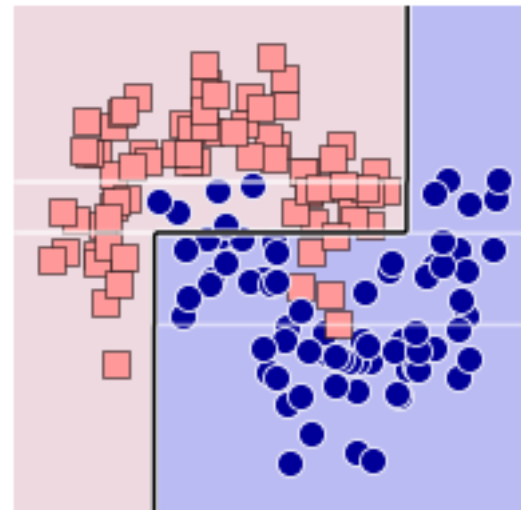
Как долго строить дерево

Критерии останова

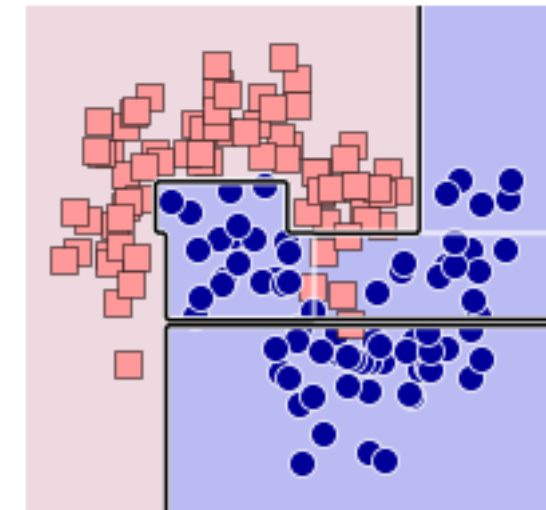
- ограничение на глубину / на число листьев
- ограничение на число объектов в листьях / на число, когда делаем деление
- «естественное ограничение» (все объекты одного класса)
 - обобщение: почти все объекты одного класса
- изменение *impurity*



max_depth=1

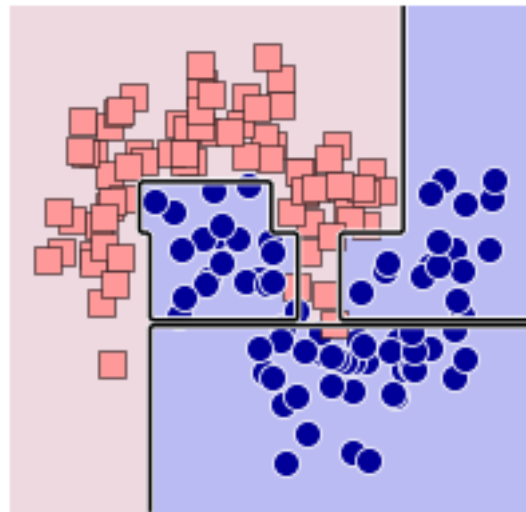


max_depth=3

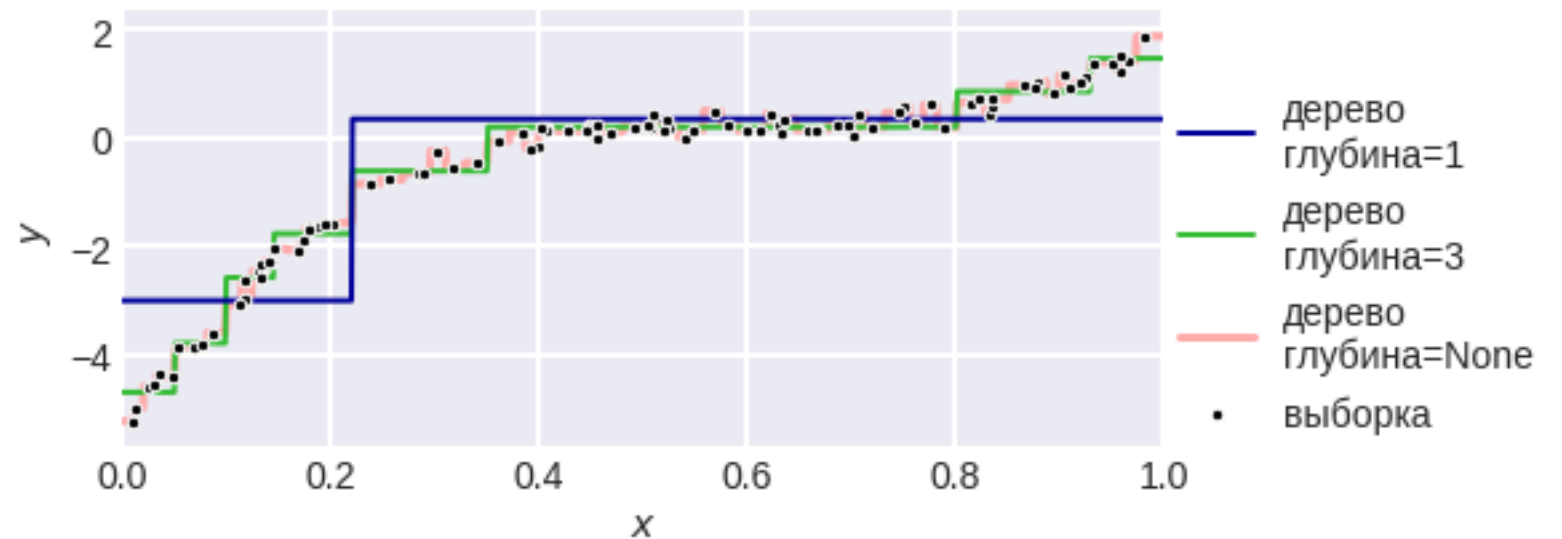


max_depth=5

Минутка кода: «Решающее дерево»



max_depth=None



— дерево
глубина=1
— дерево
глубина=3
— дерево
глубина=None
• выборка

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
```

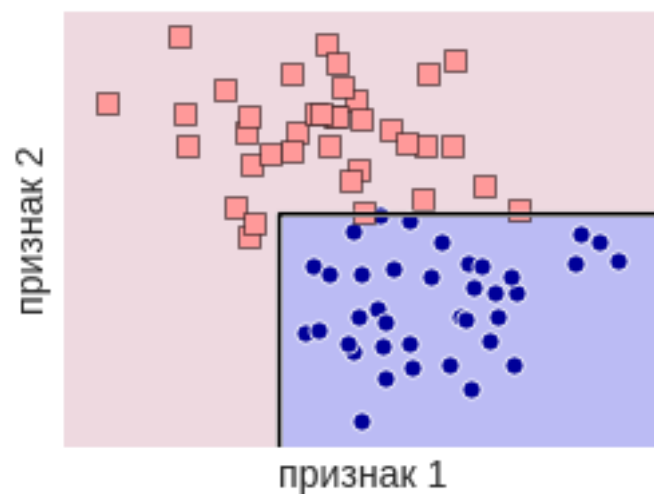
```
model = DecisionTreeClassifier(criterion='gini', splitter='best',  
                              max_depth=None, min_samples_split=2,  
                              min_samples_leaf=1,  
                              min_weight_fraction_leaf=0.0,  
                              max_features=None, random_state=3,  
                              max_leaf_nodes=None,  
                              min_impurity_decrease=0.0,  
                              min_impurity_split=None, class_weight=None,  
                              presort=False)
```

```
model.fit(X, y)
```

Минутка кода: «Решающее дерево»

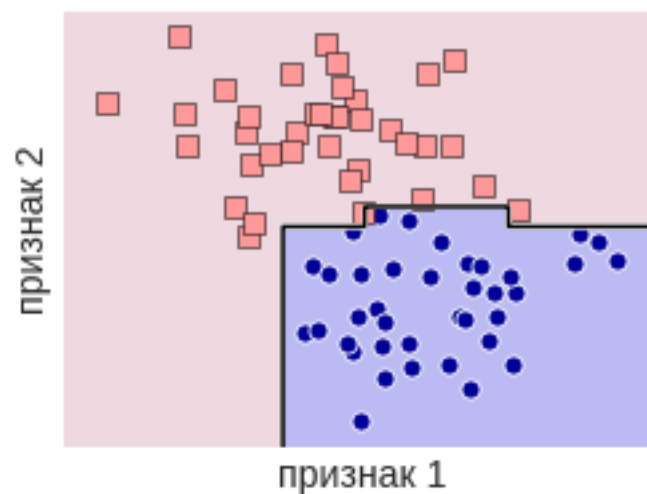
```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier  
tree = DecisionTreeClassifier(max_depth=10)  
tree.fit(X_train, y_train)
```

max_depth=10



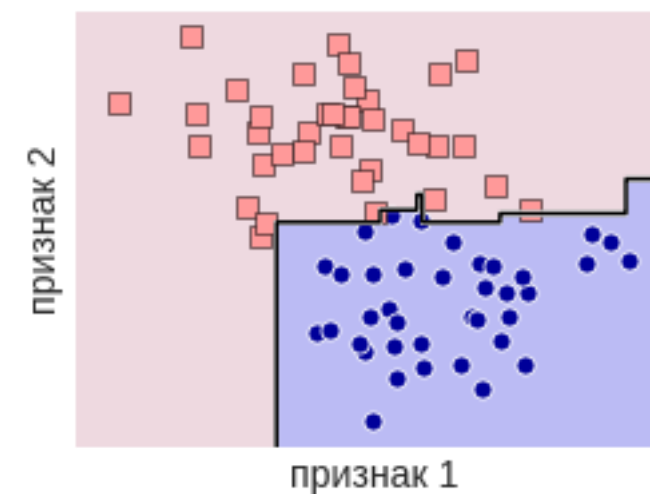
88%

splitter='random'



92%

splitter='random'
max_features=1



92%

Реализация в `scikit-learn`

```
sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
```

| | |
|---------------------------------------|--|
| <code>criterion</code> | критерий расщепления «gini» / «entropy» |
| <code>splitter</code> | разбиение «best» / «random» |
| <code>max_depth</code> | допустимая глубина |
| <code>min_samples_split</code> | минимальная выборка для разбиения |
| <code>min_samples_leaf</code> | минимальная мощность листа |
| <code>min_weight_fraction_leaf</code> | аналогично с весом |
| <code>max_features</code> | число признаков, которые смотрим для нахождения разбиения |
| <code>random_state</code> | инициализация генератора случайных чисел |
| <code>max_leaf_nodes</code> | допустимое число листьев |
| <code>min_impurity_decrease</code> | порог изменения «зашумлённости» для разбиения |
| <code>min_impurity_split</code> | порог «зашумлённости» для останова |
| <code>class_weight</code> | веса классов («balanced» или словарь, список словарей) |

Особенности

Изменение impurity – порог на

$$\frac{|R|}{m} \left(H(R) - \frac{|R_{\text{left}}|}{|R|} H(R_{\text{left}}) - \frac{|R_{\text{right}}|}{|R|} H(R_{\text{right}}) \right)$$

Overfitting
Pre-pruning
Post-pruning



Проблема переобучения деревьев

**Глубокие деревья склонны к переобучению,
поскольку «затачиваются» на отдельные объекты**

- 1. Прекращают построение достаточно рано
(см. критерии останова, `stopping early`)**

можно на отложенной выборке выбрать точку останова

- 2. Подрезают деревья (`post-pruning`)**

- 3. Используют в ансамблях (например, в случайном лесе)
отдельная тема**

Подрезка (post-pruning)

**Сейчас используется редко – если задачу надо решить деревом
(или ансамблем из нескольких деревьев)**

Раньше...

- **использовали отложенный контроль**
(удаляли листья, если это повышает качество)

- **MDL (Minimum Description Length)**

$$\sum_j \sum_{x_i \in R_j} (y_i - a_{R_j})^2 + \alpha |\{R_j\}| \rightarrow \min$$

**оптимальное значение α находят с помощью скользящего контроля,
потом с этим значением параметра дерево перестраивается по всей выборке**

α регулирует баланс между стремлением обучиться и получить небольшое дерево

Важности признаков

вспомним формулу

$$Q(R, \theta) = H(R) - \frac{|R_{\text{left}}|}{|R|} H(R_{\text{left}}) - \frac{|R_{\text{right}}|}{|R|} H(R_{\text{right}})$$

– это уменьшение неоднородности при выборе такого расщепления!

Идея: чем больше признак уменьшает неоднородность, тем он важнее!

Важность признака = сумма уменьшений неоднородностей с помощью этого признака при построении дерева (иногда умножается на $|R| \sim \text{sklearn}$)

Это только один из способов... (хорошо, что важность учитывается в совокупности)

- коэффициенты в моделях
- OOB-оценки
- корреляции / функциональные зависимости и т.п.

Деревья: проблема пропусков (Missing Values)

- удалить
- заменить (средним)
- рассматривать как отдельную категорию
 - пронести в обе ветви дерева
 - выбрать наиболее подходящую ветвь дерева
 - суррогатные расщепления (Surrogate Splits)

Суррогатные расщепления (Surrogate Splits)

Для объектов, у которых расщепляемая переменная неизвестна подбираем другой сплит, который имитирует изначальный

| A | B | C | Y=target |
|---|---|---|----------|
| 0 | ? | 0 | 0 |
| 1 | 5 | 1 | 0 |
| 2 | ? | 0 | 0 |
| 3 | 8 | 1 | 1 |
| ? | 7 | 1 | 1 |
| ? | 7 | 1 | 1 |

« $A > 2.5$ », но не понятно, в какое поддереве класть последние два объекта « $B > 6$ » на объектах с известными значениями признаков совпадает с исходным, при этом определено для тех объектов, у которых были неизвестны значения признака A.

<https://www.learnbymarketing.com/methods/classification-and-regression-decision-trees-explained/>

Деревья: категориальные признаки

формально при расщеплении должны рассмотреть
все подмножества множества категорий

Реально (в задаче бинарной классификации):

упорядочиваем по вероятности класса 1,

каждая категория → номер по порядку

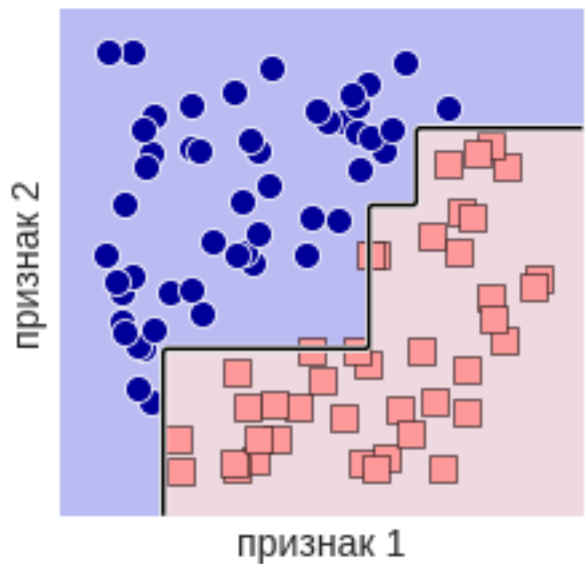
находим для полученного числового признака оптимальное разбиение

переобучение для мелких категорий

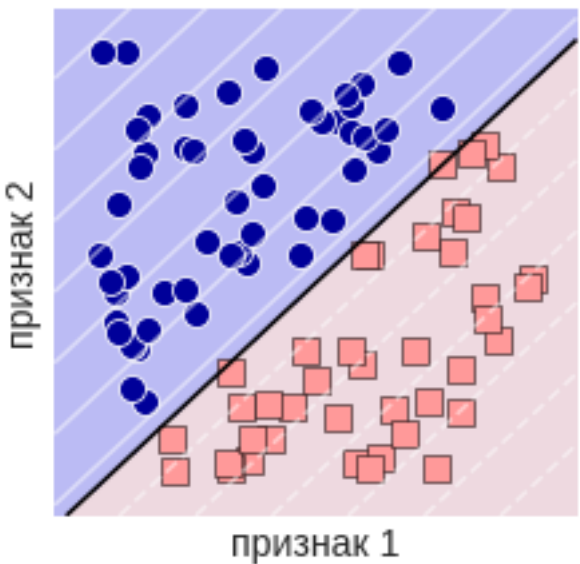
Деревья vs линейные модели

Линейная зависимость

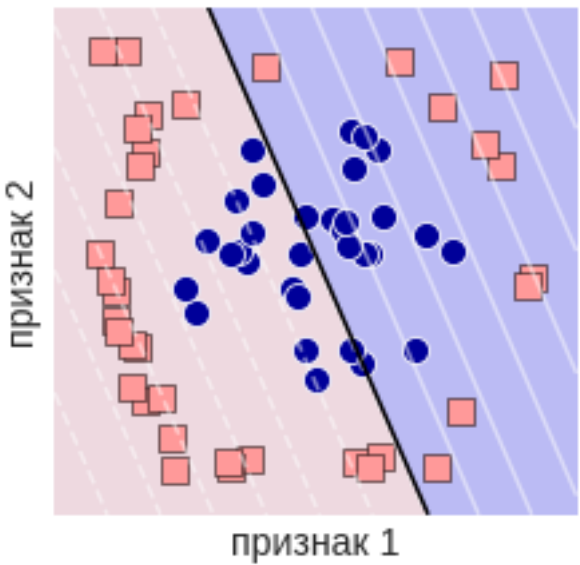
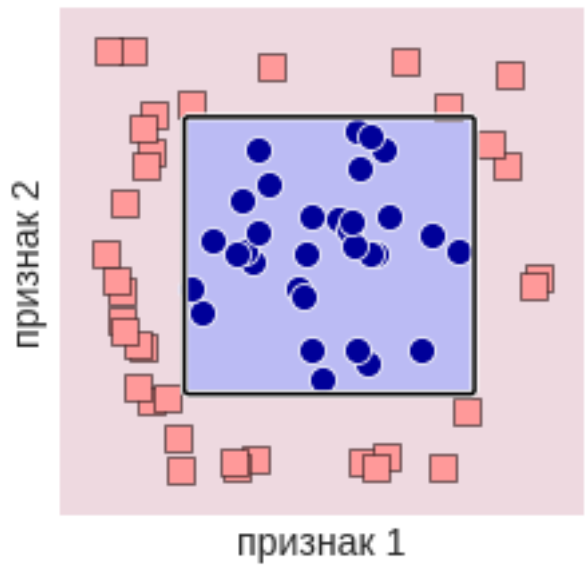
дерево



гиперплоскость



Нелинейная зависимость



Генерация признаков с помощью деревьев

$$a(x) = \sum_j a_{R_j} I[x \in R_j]$$

нелинейный признак

$$f_{\text{new}}(x) = I[x \in R_j]$$

Классические алгоритмы

| | | | | | |
|-------------------------|---|--|---|---|---------------------------------------|
| название | ID3 = Iternative Dichotomizer Quinlan, 1986 | C4.5 Quinlan, 1993 | CART Breiman, Friedman, Stone, Olshen 1974- 84 | CHAID Kass, 1980 | QUEST Loh, Shih, 1997 |
| Критерий расщепления | Information Gain | Gain ratio, Information Gain м.б. небинарное разделение | Gini (Twoing) | Chi-square м.б. небинарное разделение | Chi-square (кат) J-way ANOVA (вещ) |
| Признаки | Категориальные | Вещественные и категориальные | Вещественные и категориальные | | Вещественные и категориальные |
| Целевой признак | Категориальный | Вещественный и категориальный | Вещественный и категориальный | категориальный | категориальный |
| Пропуски | Не поддерживает | + | + | | |
| Подрезка | – | + Error Based prunning | + Cost-complexity prunning | ? | + Post-pruning |
| | Остановка, когда все объекты листа одному классу или information gain <= 0 | Ограничение на число объектов для расщепления | Бинарные деревья | | |

<https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.685.4929&rep=rep1&type=pdf>

Итог: решающие деревья

ВОЗМОЖНОСТИ

- способны обучиться на любой (непротиворечивой) выборке
(при возможности построения неограниченного дерева)
- можно использовать при признаках разных типов (+ пропуски)
 - можно сделать устойчивыми к выбросам
- универсальный метод – для всех типов задач машинного обучения
 - встроенный отбор признаков
 - нелинейный метод!

качество

- не очень высокое качество решения задачи / переобучение
 - хороши в ансамблях **будет в ансамблировании**

Итог: решающие деревья

эффективность / стабильность

- достаточно быстро строятся
- нет ограничений на распределения признаков
- «неустойчивый алгоритм» (меняется при небольшом изменении выборки)
 - плох для больших / изменяющихся данных

понимание, интерпретация и анализ

- просто объяснить неспециалисту
- ближе к человеческой логике принятия решения
 - можно изобразить (на слайде)
- нет красивой аналитической формулы для модели

Итог: решающие деревья

особенности

- не использует геометрию (нет расстояний, неметрический)
 - устойчив к масштабированию
- устойчив к дубликатам признаков, зависимостям в признаках и т.п.
 - автоматическое решение проблемы пропусков
 - неспособен к экстраполяции
 - использует мало признаков!!!

Важно: эвристическое жадное обучение

(т.к. построение оптимального дерева очень сложная – NP-полная – задача)

если категориальные признаки с большим числом категорий – всё сваливается на них...

Литература

Ritschard, G. (2013). CHAID and Earlier Supervised Tree Methods. In J.J. McArdle & G. Ritschard (eds), Contemporary Issues in Exploratory Data Mining in Behavioral Sciences, Routeledge, New York, pages 48–74

https://www.researchgate.net/profile/Gilbert_Ritschard/publication/315476407_CHAID_and_Earlier_Supervised_Tree_Methods/links/58d156a0a6fdcc3fe78521a8/CHAID-and-Earlier-Supervised-Tree-Methods.pdf

«Прогнозное моделирование в IBM SPSS Statistics, R и Python. Деревья решений и случайный лес» вышла в издательстве «ДМК-Пресс»

<https://dmkpress.com/catalog/computer/data/978-5-97060-539-4>