

Введение в анализ данных

Лекция 8

Решающие деревья

Евгений Соколов

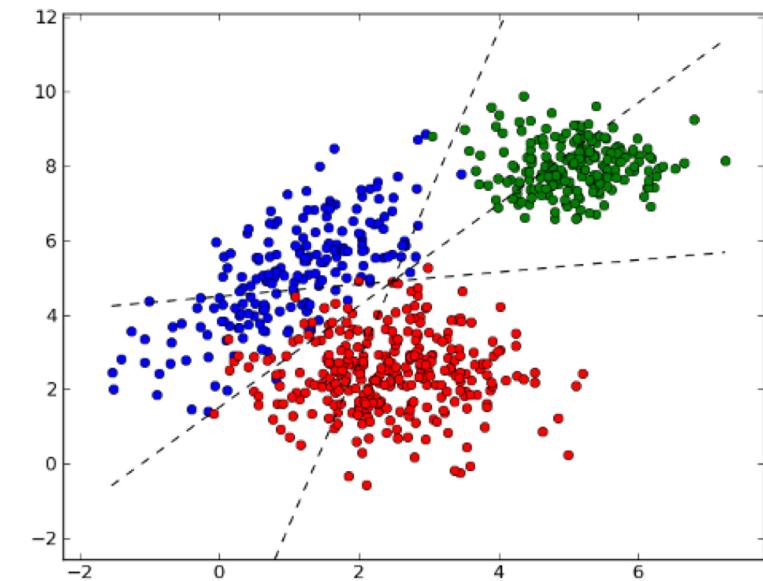
esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2019

Многоклассовые задачи

Многоклассовая классификация

- $\mathbb{Y} = \{1, 2, \dots, K\}$



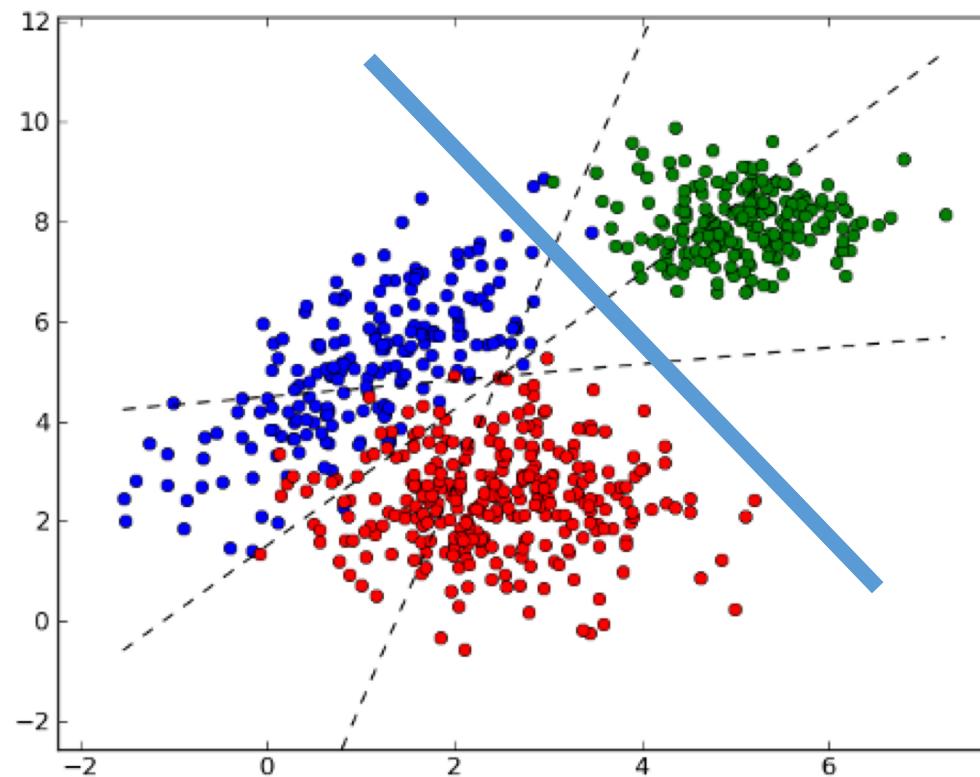
Бинарная классификация

$$a(x) = \text{sign} \langle w, x \rangle$$

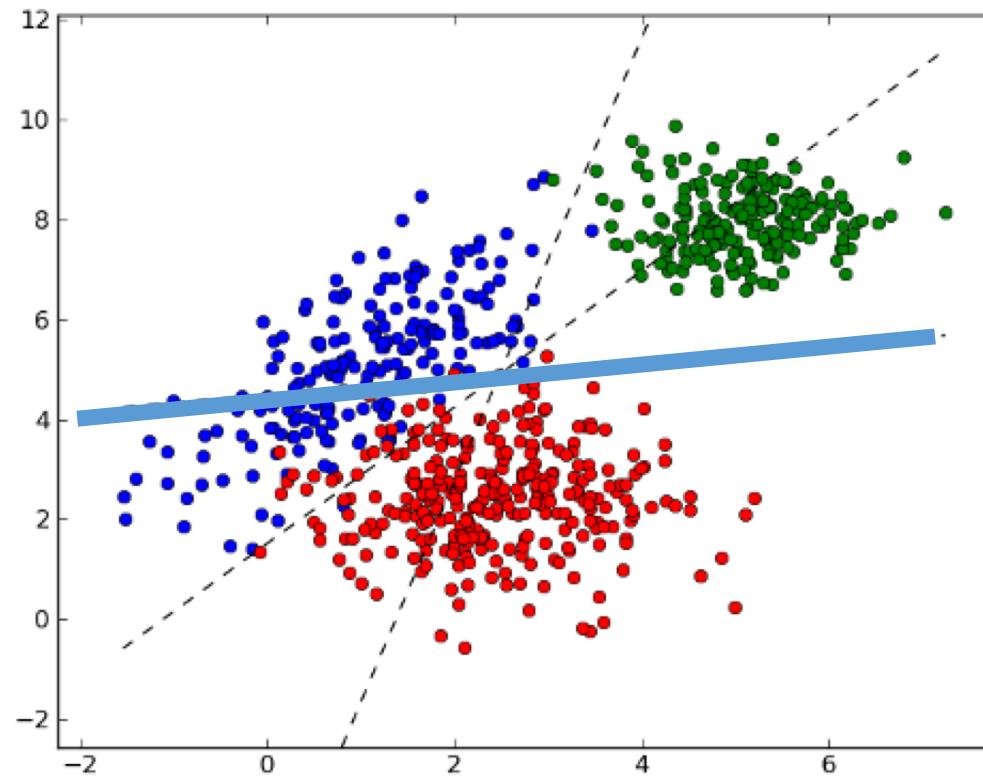
One-vs-all

- Способ сведения многоклассовой задачи к набору бинарных классификаций
- Обучаем свой классификатор для каждого класса
- Задача: отделение класса от всех остальных

One-vs-all



One-vs-all



One-vs-all

- K задач бинарной классификации

- k -я задача:

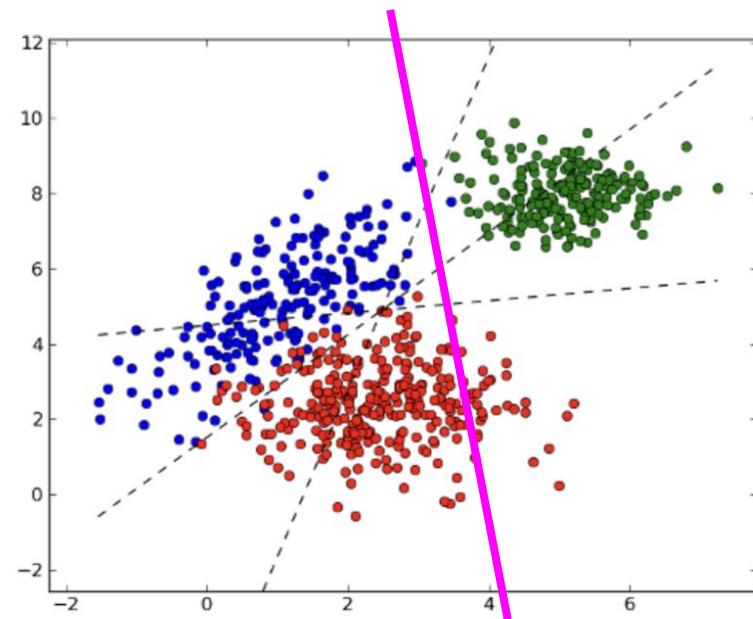
- $X = (x_i, [y_i = k])_{i=1}^\ell$

- Классификатор $a_k(x) = \text{sign} \langle w_k, x \rangle$

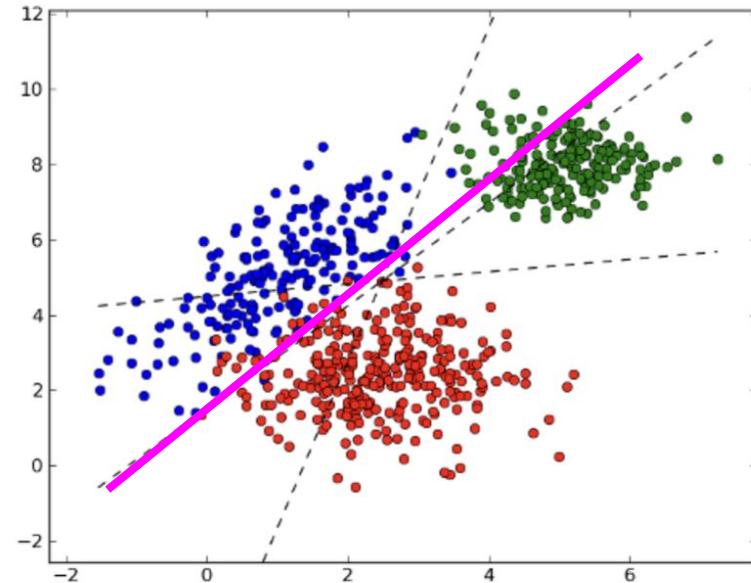
- Алгоритм:

$$a(x) = \arg \max_{k \in \{1, \dots, K\}} \langle w_k, x \rangle$$

All-vs-All



All-vs-All



All-vs-All

- C_k^2 задач бинарной классификации
- i -ая задача:

$$X_{ij} = \{(x_n, y_n) \in X \mid [y_n = i] = 1 \text{ или } [y_n = j] = 1\}.$$

$$a(x) = \arg \max_{k \in \{1, \dots, K\}} \sum_{i=1}^K \sum_{j \neq i} [a_{ij}(x) = k].$$

Решающие деревья

Линейные модели

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^d w_j x^j$$

- Веса можно интерпретировать, если признаки масштабированы

Пример

- Предсказание стоимости квартиры
- Признаки: площадь, этаж, число комнат

$$a(x) = 10 * (\text{площадь}) + 1.1 * (\text{этаж}) + 20 * (\text{число комнат})$$

Пример

- Зависимость от этажа вряд ли линейная
- Квадратичные признаки:

$$\begin{aligned}a(x) \\= 10 * (\text{площадь}) + 1.1 * (\text{этаж}) + 20 * (\text{число комнат}) - 0.2 * (\text{этаж})^2 + 0.5 * (\text{площадь} * \text{число комнат}) + \dots\end{aligned}$$

Пример

- С кубическими признаками будет ещё лучше
- Как интерпретировать признак этаж * (число комнат)²?
- Всего таких признаков 20

Пример

- Можно бинаризовать признаки: $[x^j > t]$
- (этаж > 1), (этаж > 2), ..., (этаж > 30)
- Признаков будет на порядки больше
- Легче интерпретировать:
– 2[этаж > 3][площадь < 40][число комнат < 3]
- Можно использовать L_1 -регуляризацию

Логические правила

[этаж > 3][площадь < 40][число комнат < 3]

- Легко объяснить заказчику (если ≤ 5 условий)
- Позволяют извлекать знания из данных
- Не факт, что оптимальны с точки зрения качества

Медицинская диагностика

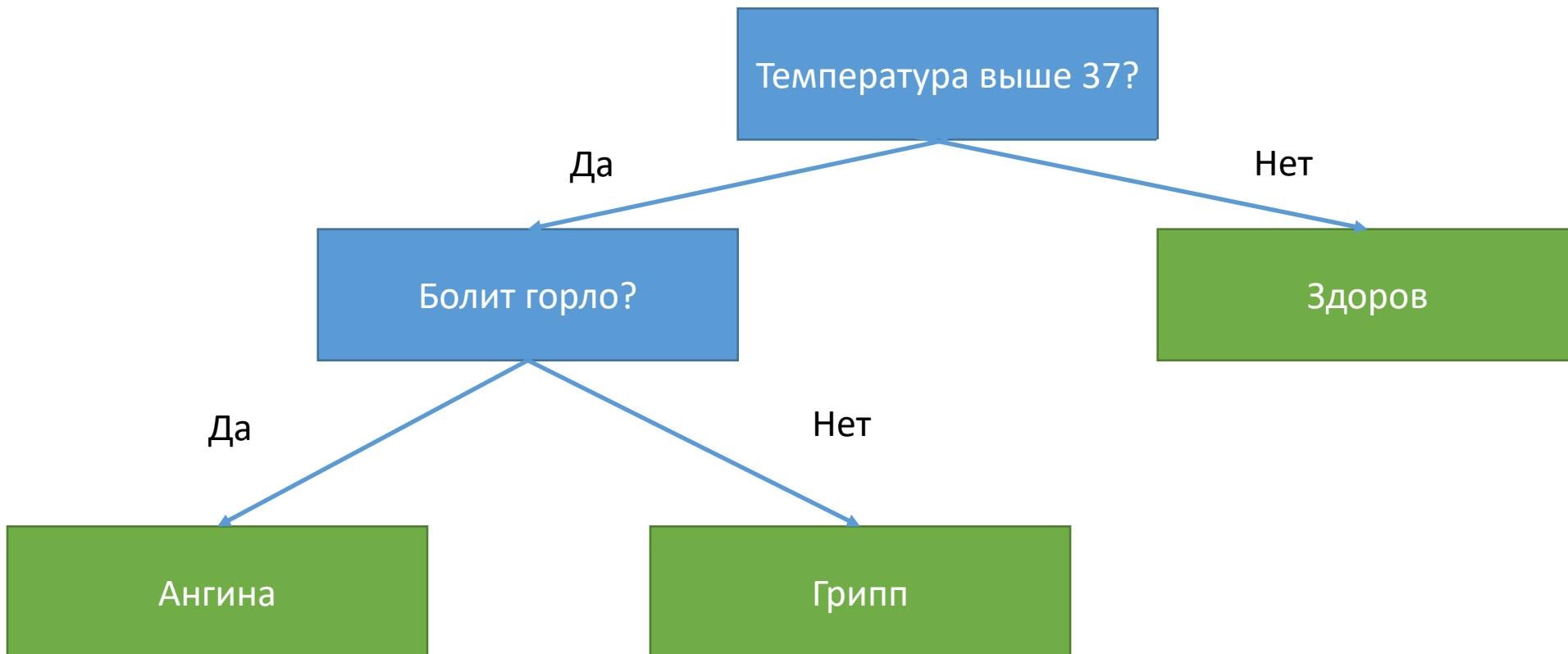
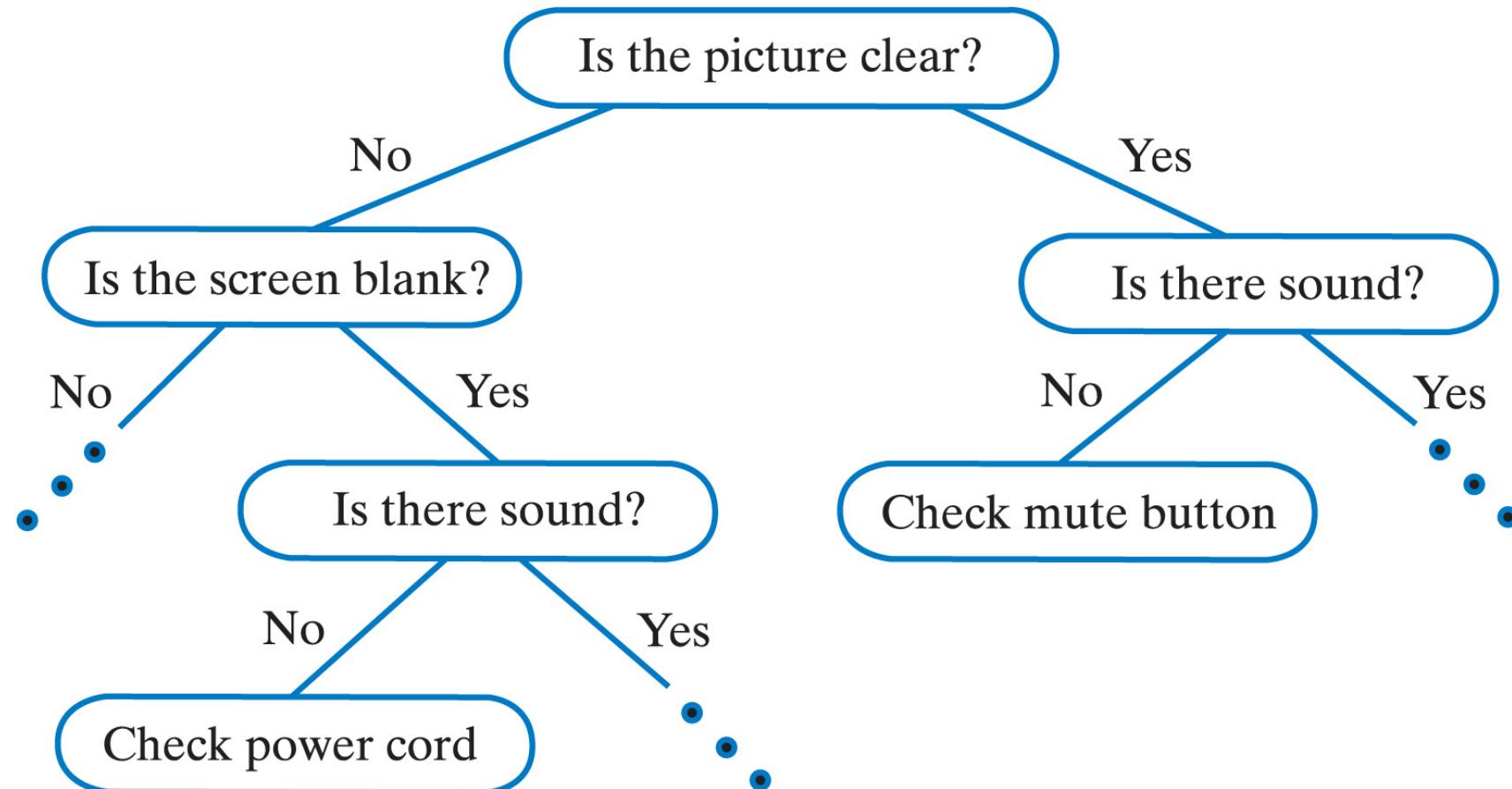
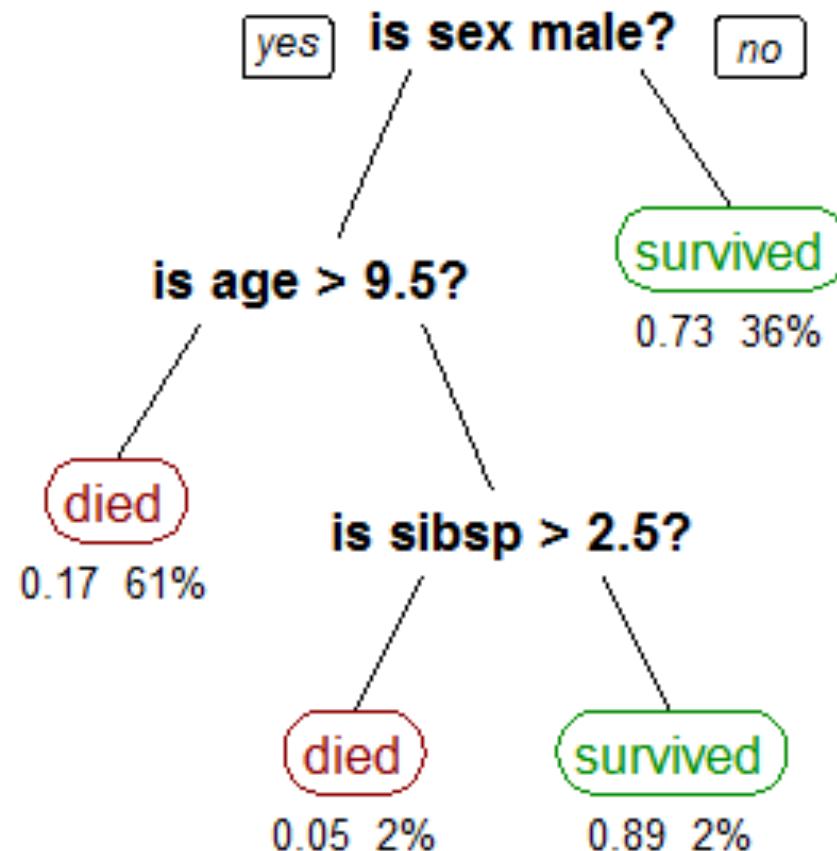


Схема диалога с клиентом

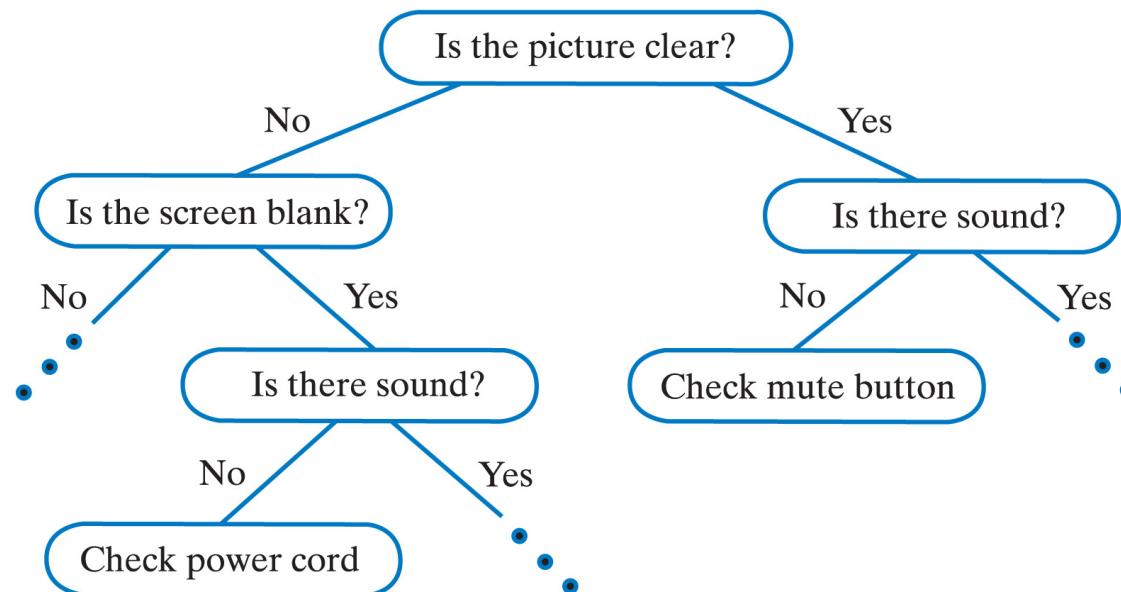


Пассажиры Титаника



Решающее дерево

- Бинарное дерево
- В каждой внутренней вершине записано условие
- В каждом листе записан прогноз (решение)



Условия

- Самые популярные варианты:

$$[x^j \leq t] \quad \text{и} \quad [x^j = t]$$

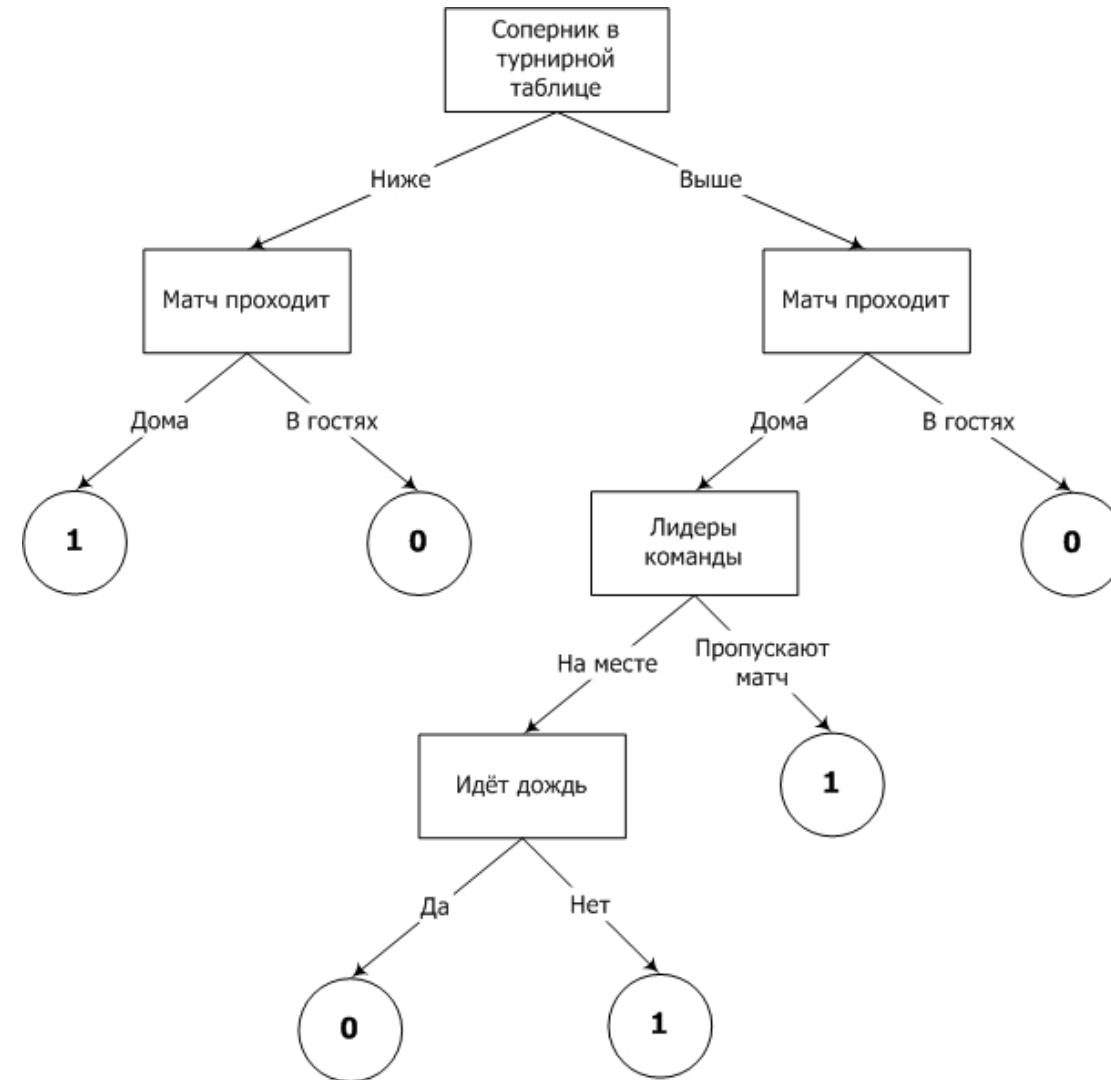
Примеры:

- [этаж = 5]
- [площадь ≤ 30]

Прогноз в листе

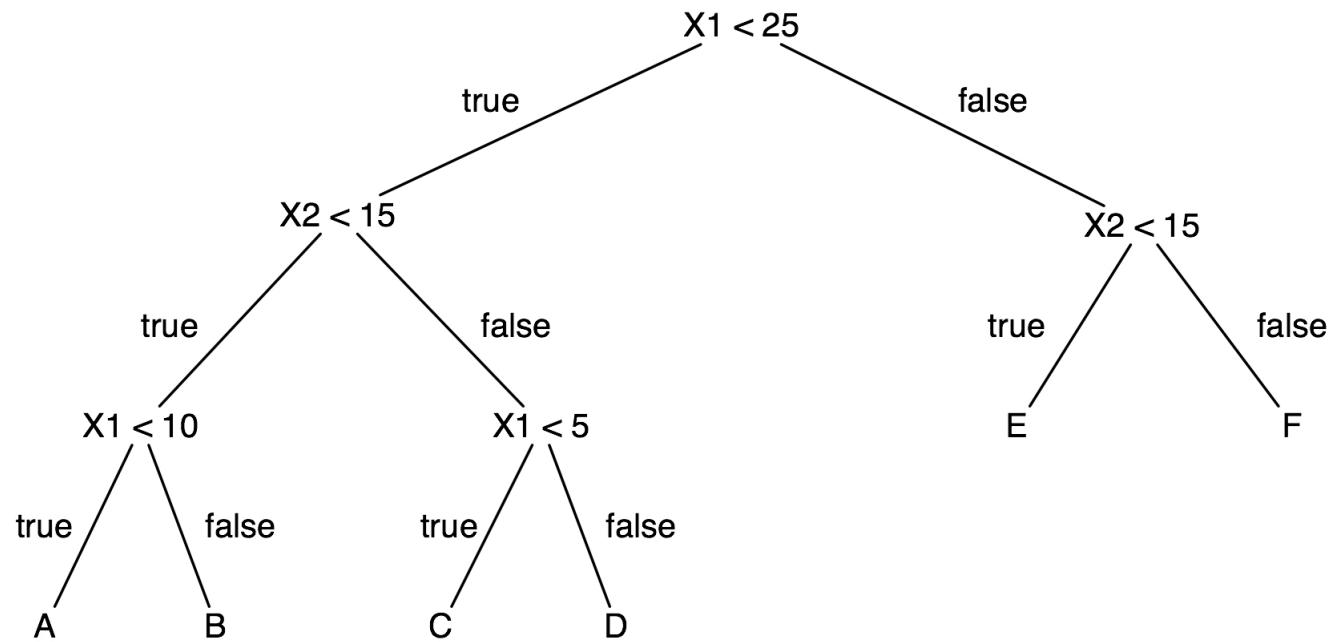
- Регрессия:
 - Вещественное число
- Классификация:
 - Класс
 - Вероятности классов

Исход футбольного матча

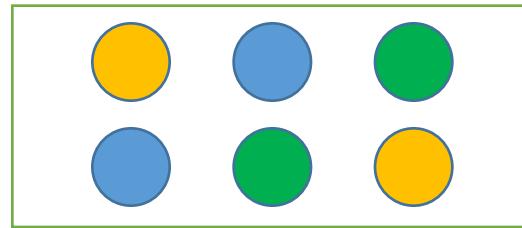


Жадное построение

- Растим дерево от корня к листьям

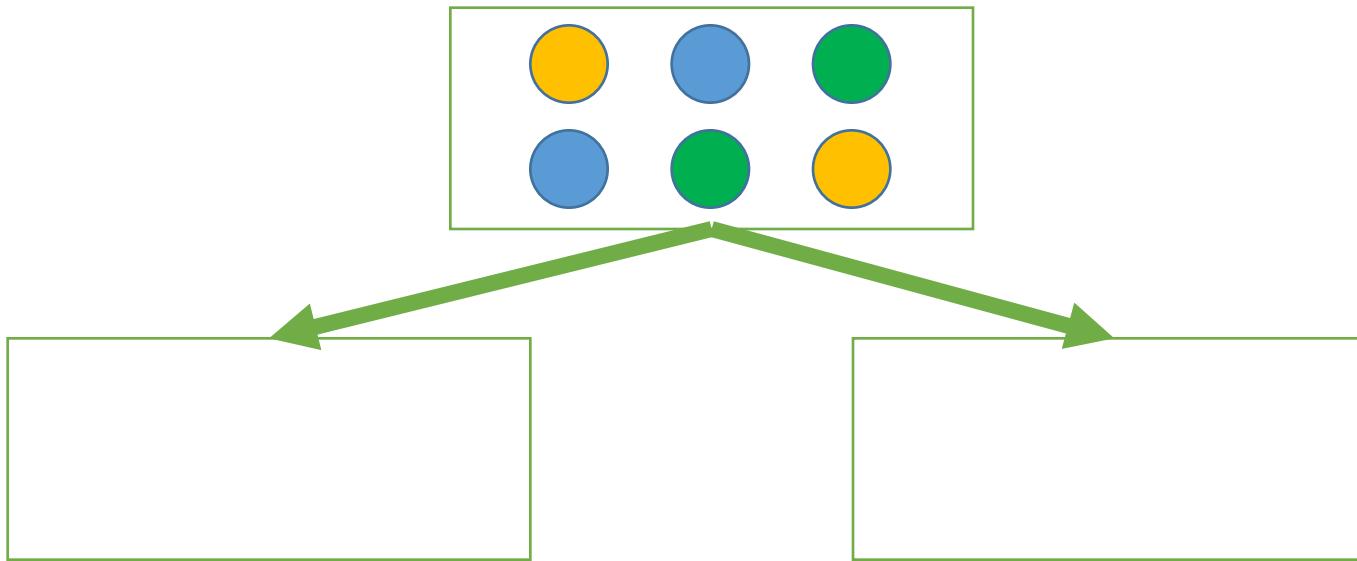


Жадное построение

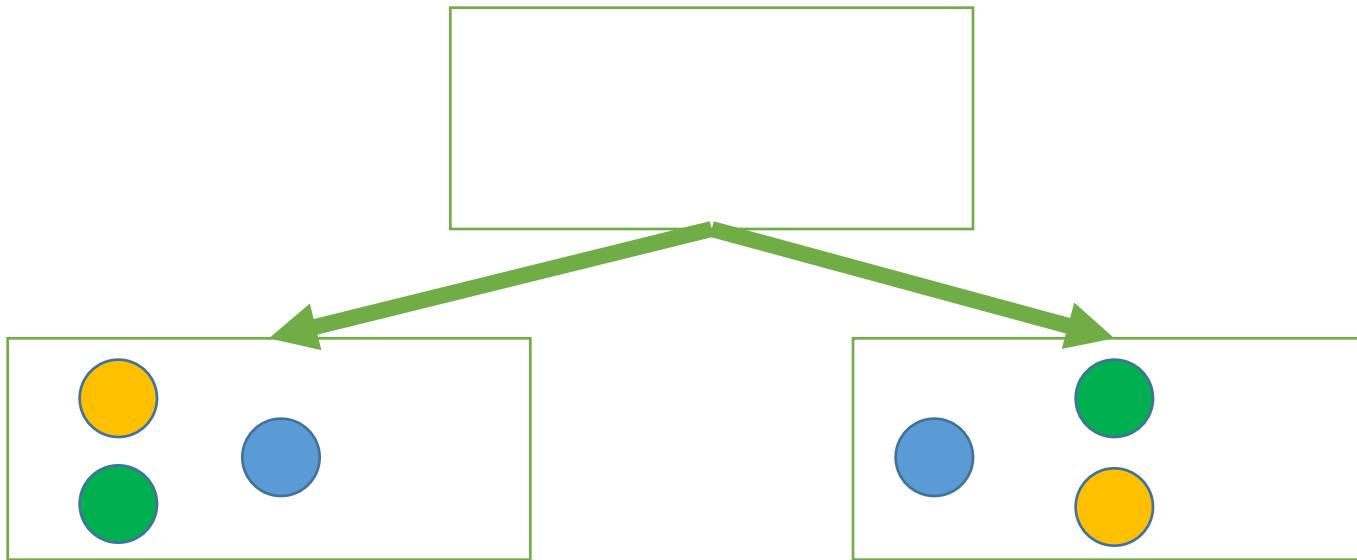


- Как разбить вершину?

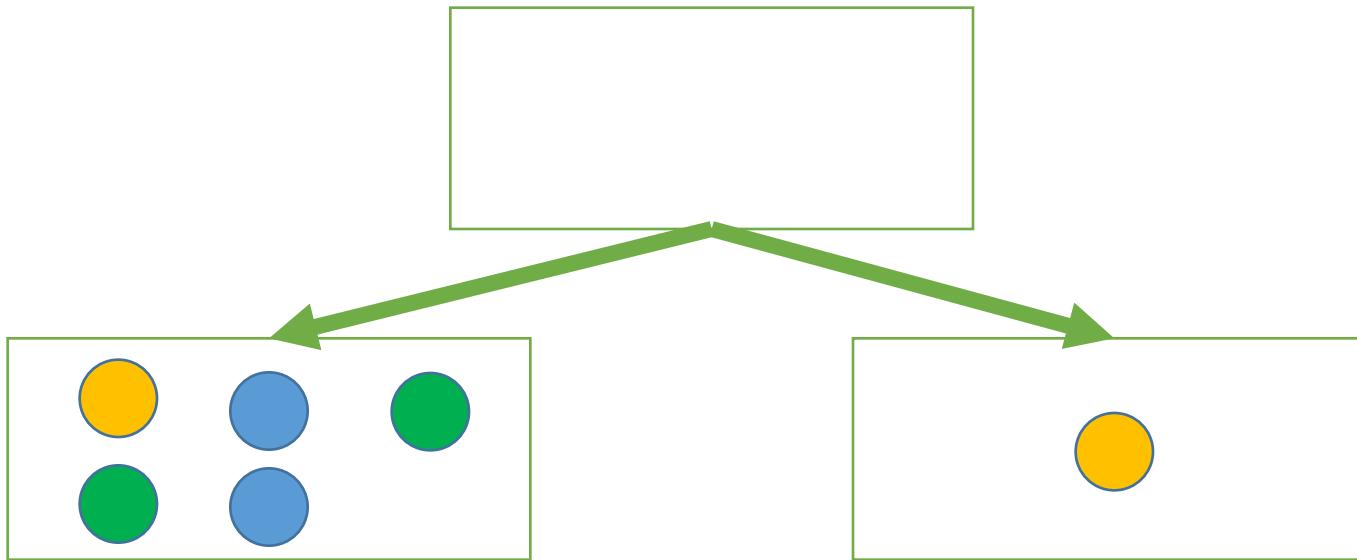
Жадное построение



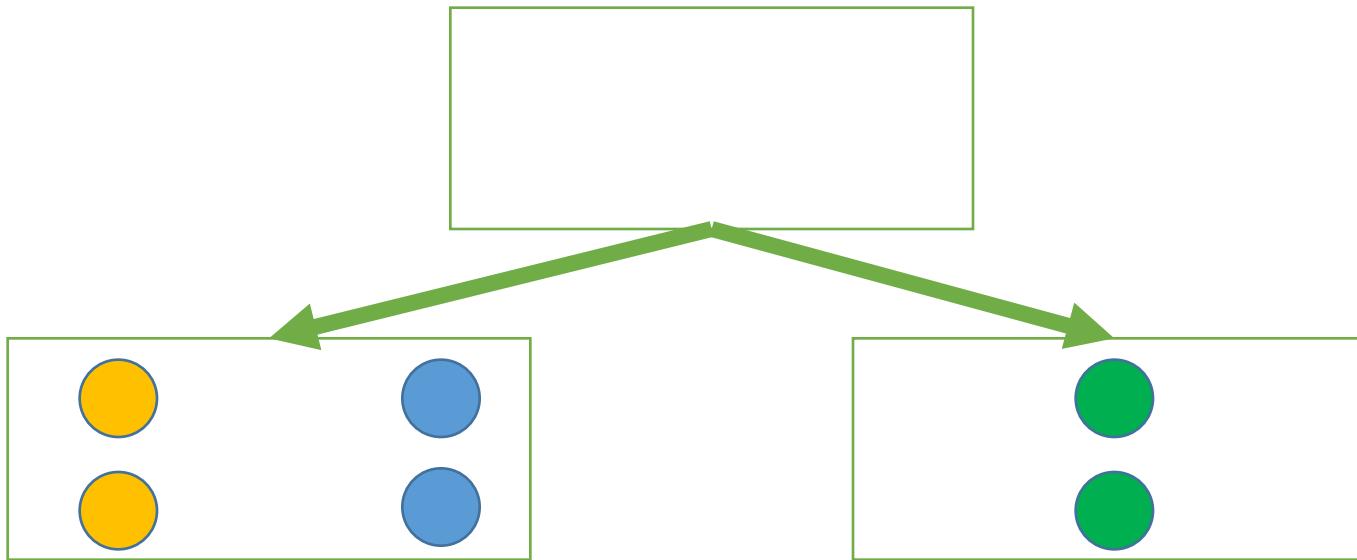
Жадное построение



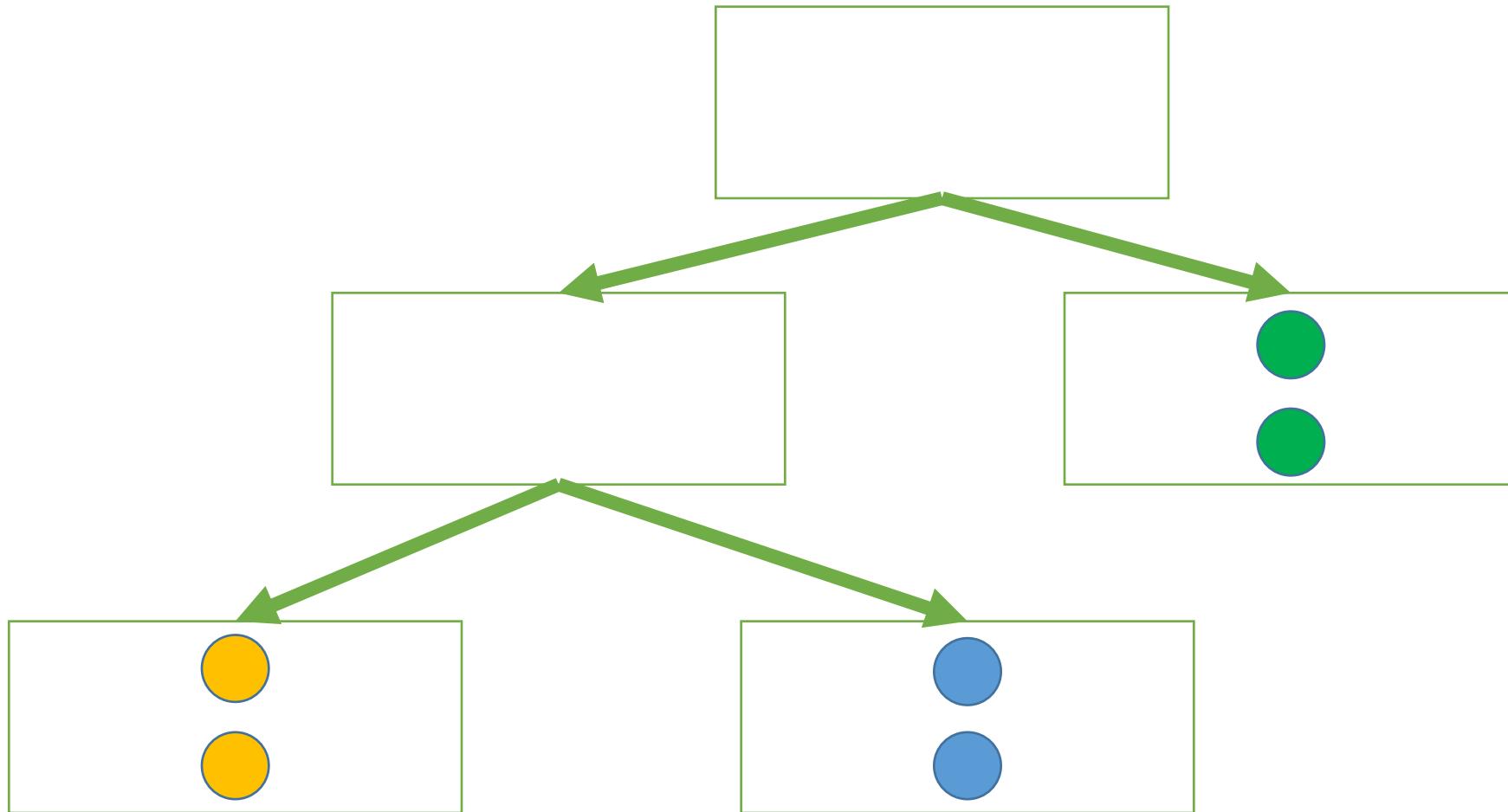
Жадное построение



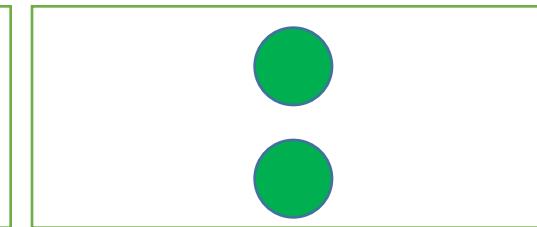
Жадное построение



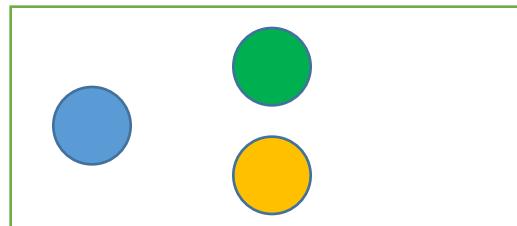
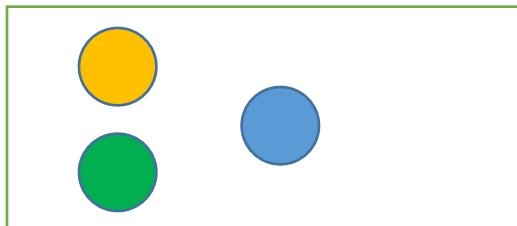
Жадное построение



Как сравнить разбиения?

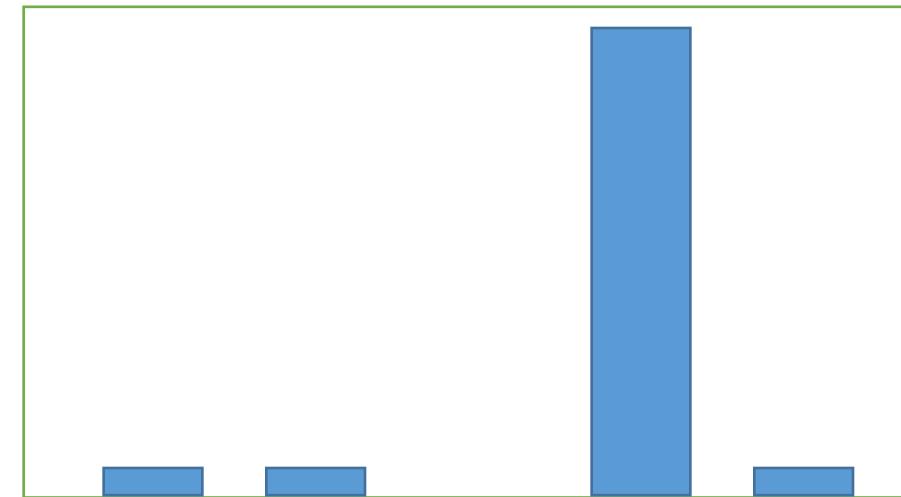
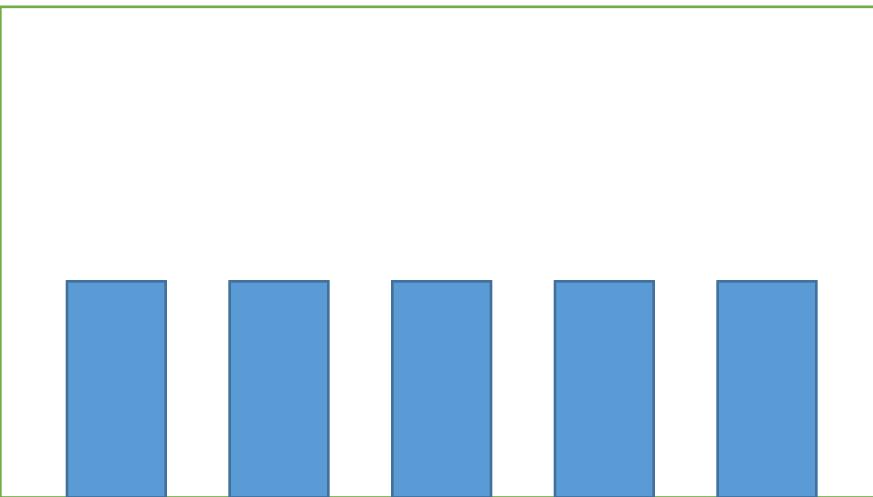


или



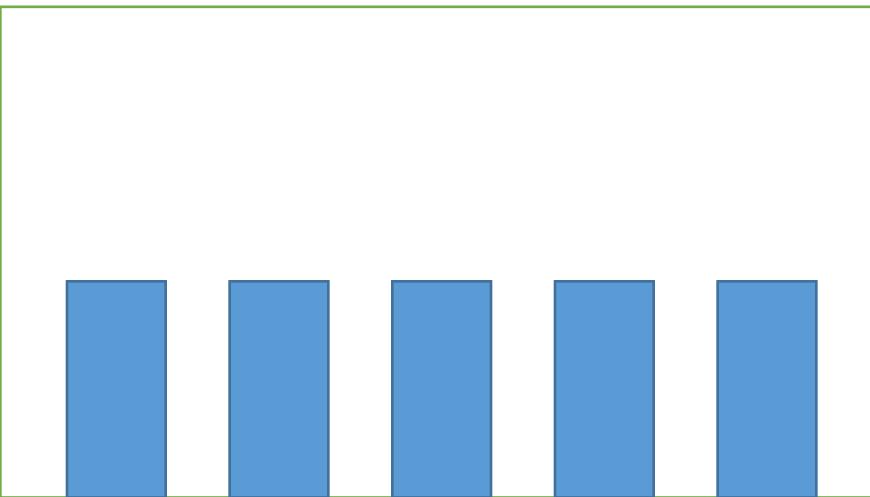
Энтропия

- Мера неопределённости распределения

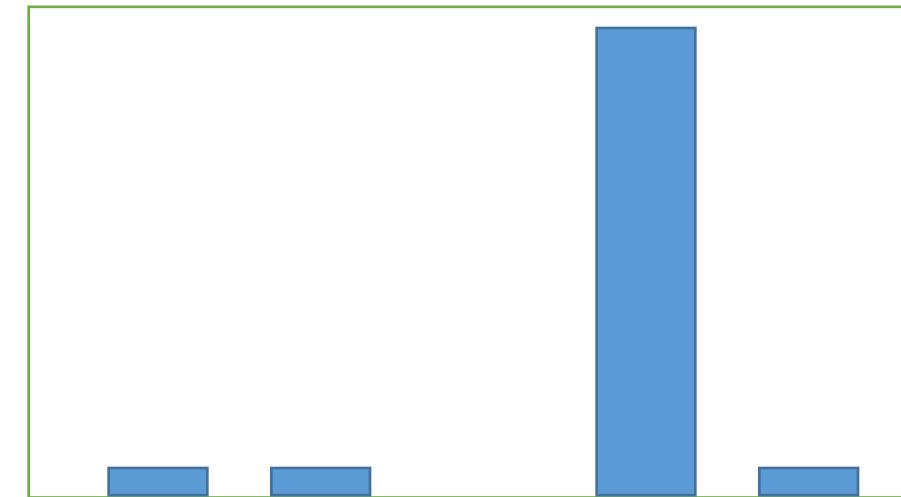


Энтропия

- Мера неопределённости распределения



Высокая энтропия



Низкая энтропия

Энтропия

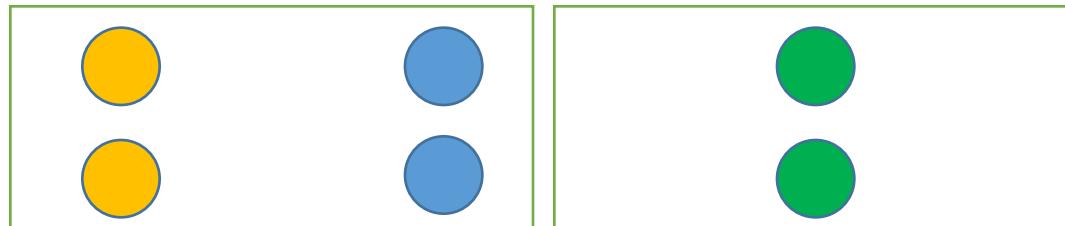
- Дискретное распределение
- Принимает n значений с вероятностями p_1, \dots, p_n
- Энтропия:

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

Энтропия

- $(0.2, 0.2, 0.2, 0.2, 0.2)$
- $H = 1.60944 \dots$
- $(0.9, 0.05, 0.05, 0, 0)$
- $H = 0.394398 \dots$
- $(0, 0, 0, 1, 0)$
- $H = 0$

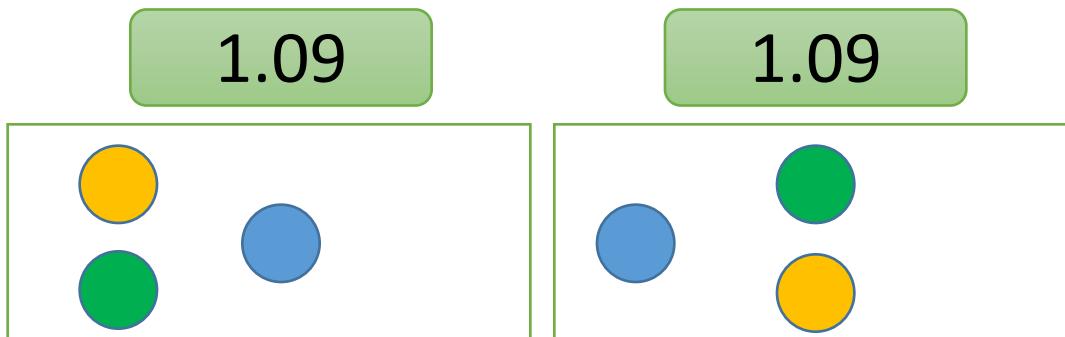
Как сравнить разбиения?



0.693

0

- $(0.5, 0.5, 0)$ и $(0, 0, 1)$
- $H = 0.693 + 0 = 0.693$

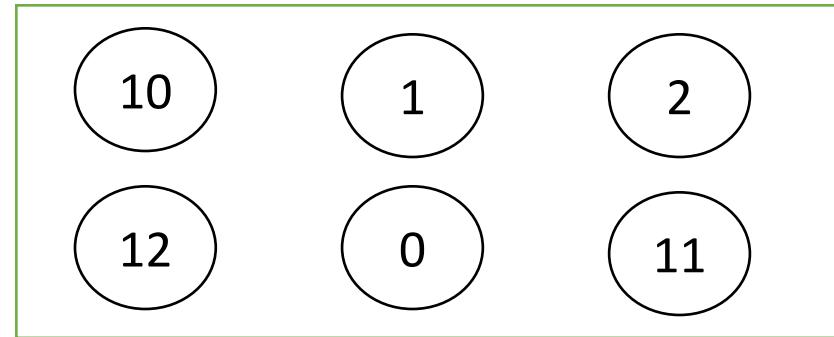


1.09

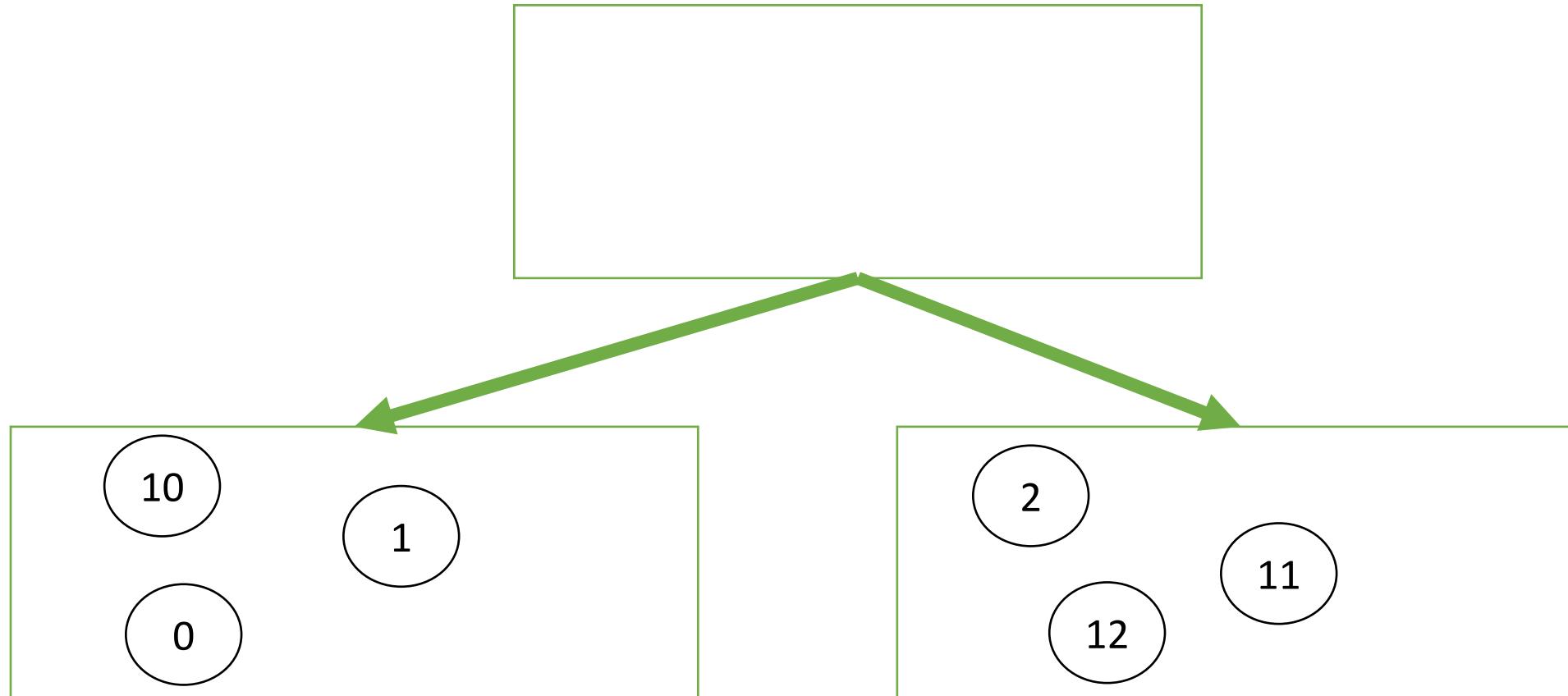
1.09

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

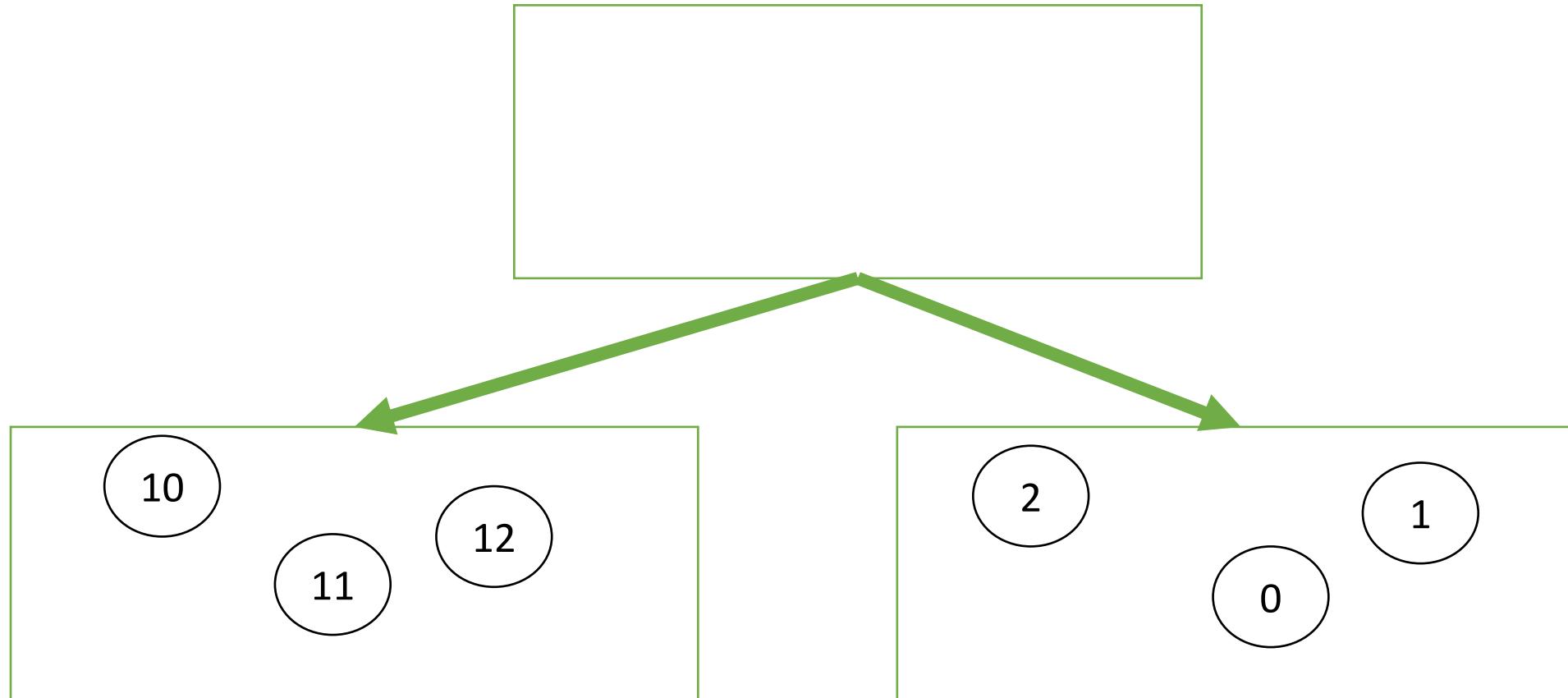
А для регрессии?



А для регрессии?



А для регрессии?



А для регрессии?

- Выбираем разбиение с наименьшей суммарной дисперсией
- Чем меньше дисперсия, тем меньше неопределённости

Поиск разбиения

- Пусть в вершине m оказалась выборка X_m
- $Q(X_m, j, t)$ — критерий ошибки условия $[x^j \leq t]$
- Ищем лучшие параметры j и t перебором:

$$Q(X_m, j, t) \rightarrow \max_{j,t}$$

Критерий качества

$$Q(X_m, j, t) = H(X_m) - \frac{|X_l|}{|X_m|} H(X_l) - \frac{|X_r|}{|X_m|} H(X_r)$$

Разброс ответов в левом
листе

Разброс ответов в правом
листе

Критерий информативности

- $H(X)$
- Зависит от ответов на выборке X
- Чем меньше разброс ответов, тем меньше значение $H(X)$

Регрессия

$$\bar{y}(X) = \frac{1}{|X|} \sum_{i \in X} y_i$$

$$H(X) = \frac{1}{|X|} \sum_{i \in X} (y_i - \bar{y}(X))^2$$

Классификация

- Доля объектов класса k в выборке X :

$$p_k = \frac{1}{|X|} \sum_{i \in X} [y_i = k]$$

Энтропийный критерий

$$H(X) = - \sum_{k=1}^K p_k \ln p_k$$

- Считаем, что $0 \ln 0 = 0$
- Если $p_1 = 1, p_2 = \dots = p_K = 0$, то $H(X) = 0$
- Мера отличия распределения классов от вырожденного

Поиск разбиения

- После того, как разбиение найдено:
- Разбиваем X_m на две части:

$$X_l = \{x \in X_m \mid [x^j \leq t]\}$$

$$X_r = \{x \in X_m \mid [x^j > t]\}$$

- Повторяем процедуру для дочерних вершин

Критерий останова

- В какой момент прекращать разбиение вершин?
- В вершине один объекты?
- В вершине объекты одного класса?
- Глубина превысила порог?

Ответ в листе

- Допустим, решили сделать вершину m листом
- Какой прогноз выбрать?
- Регрессия:

$$a_m = \frac{1}{|X_m|} \sum_{i \in X_m} y_i$$

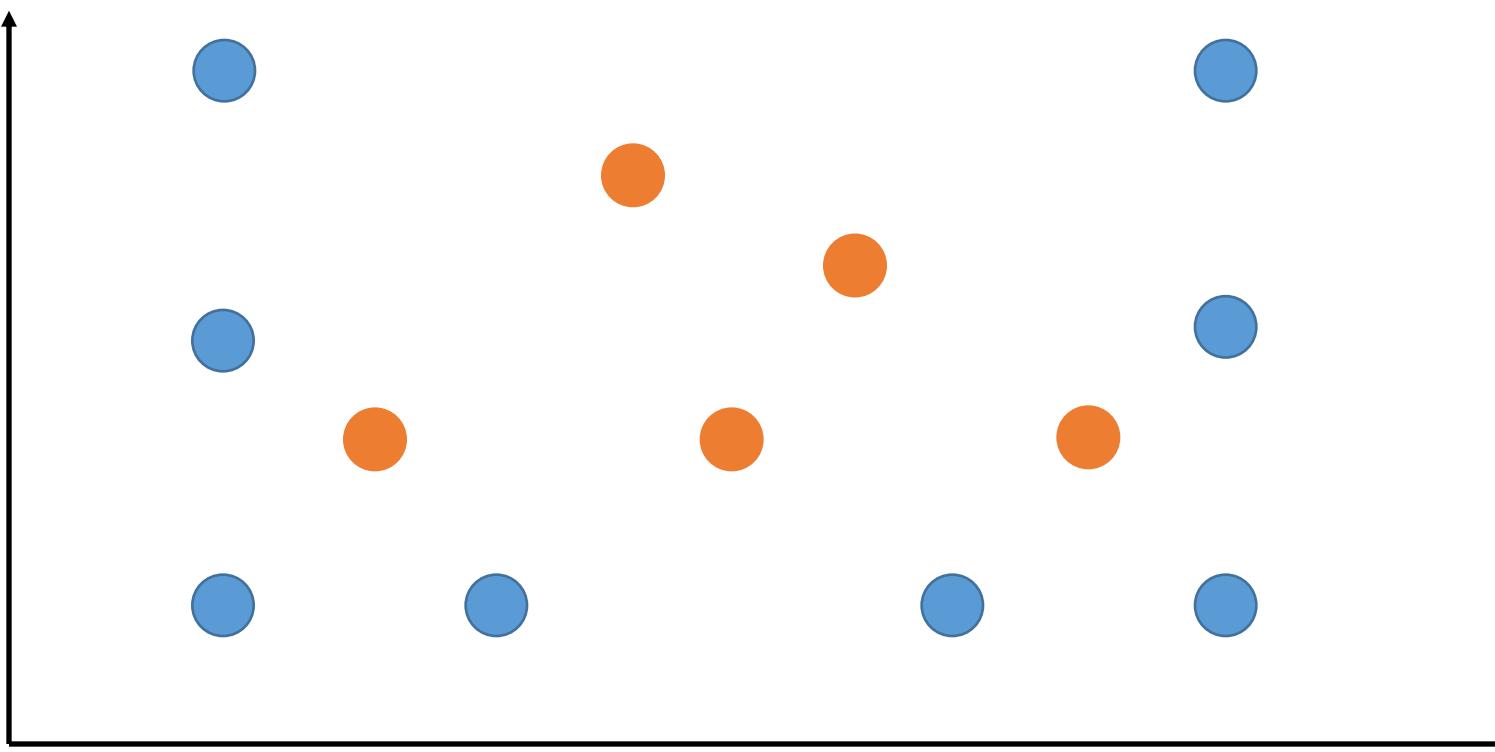
- Классификация:

$$a_m = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i \in X_m} [y_i = y]$$

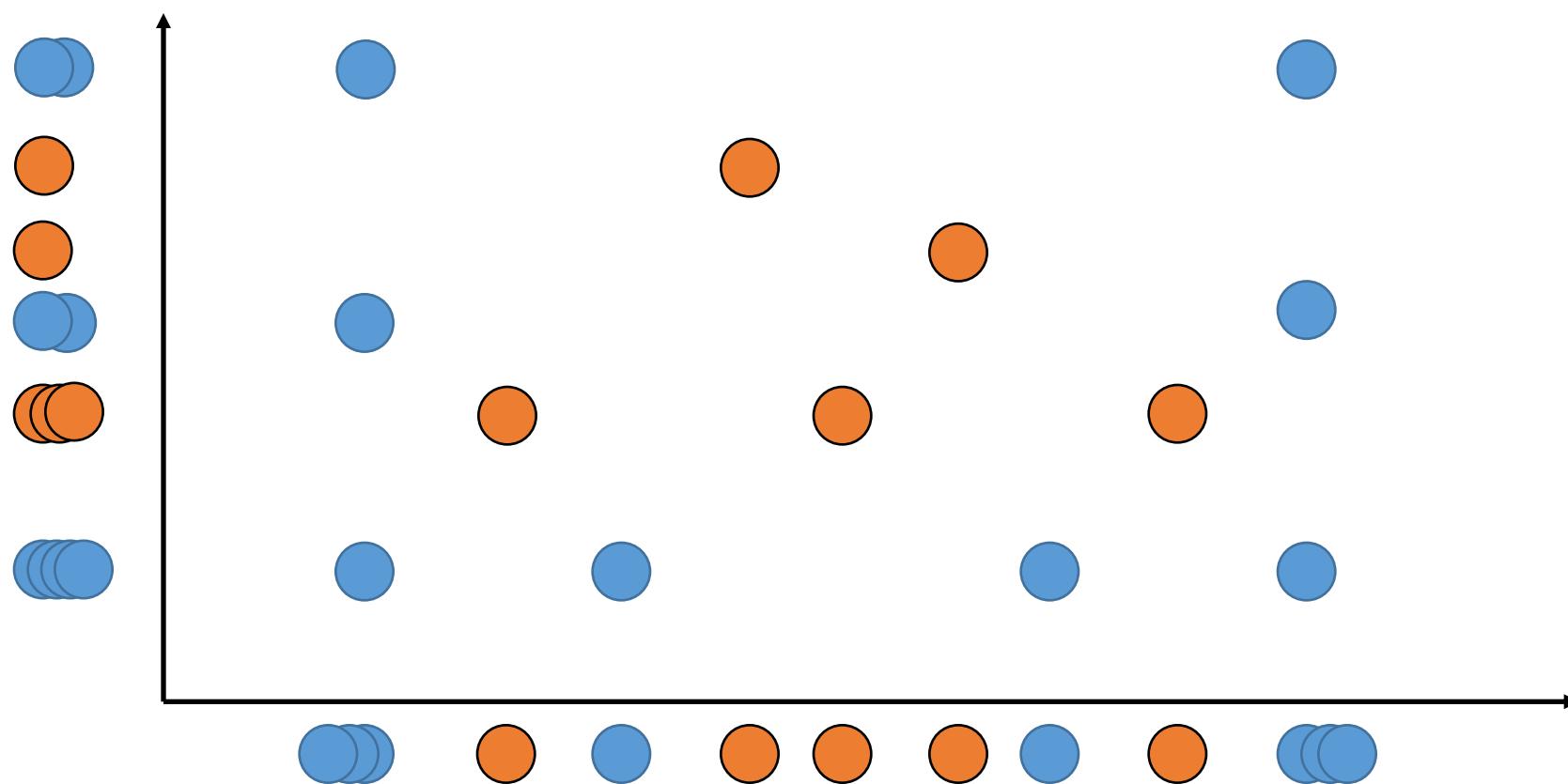
Жадный алгоритм построения дерева

1. Поместить в корень всю выборку: $X_1 = X$
2. Начать построение с корня: $m = 1$
3. Если выполнен критерий останова для вершины m , то выход
4. Найти лучшее разбиение $[x^j \leq t]$ для вершины m
5. Разбить вершину m на дочерние вершины l и r
6. Повторить шаги 3-6 для дочерних вершин l и r

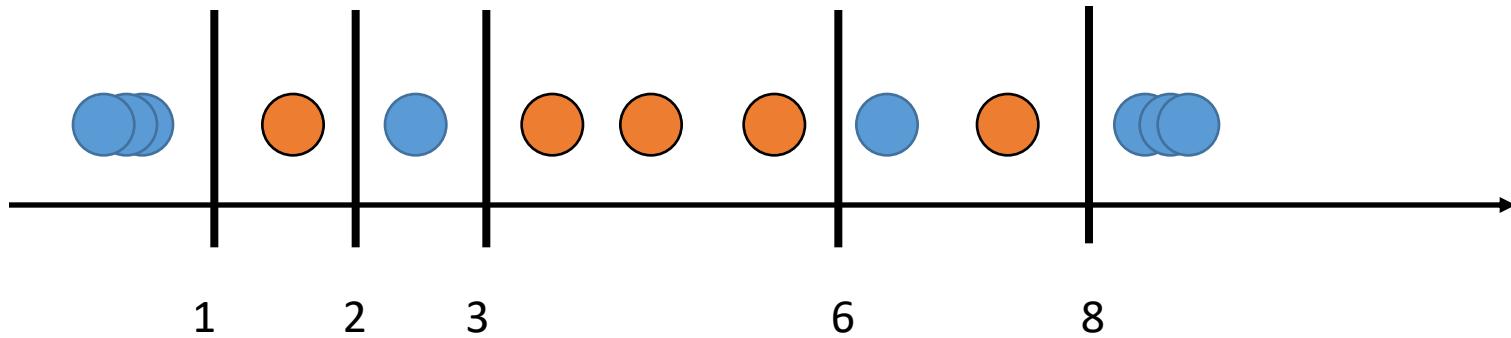
Обучение деревьев



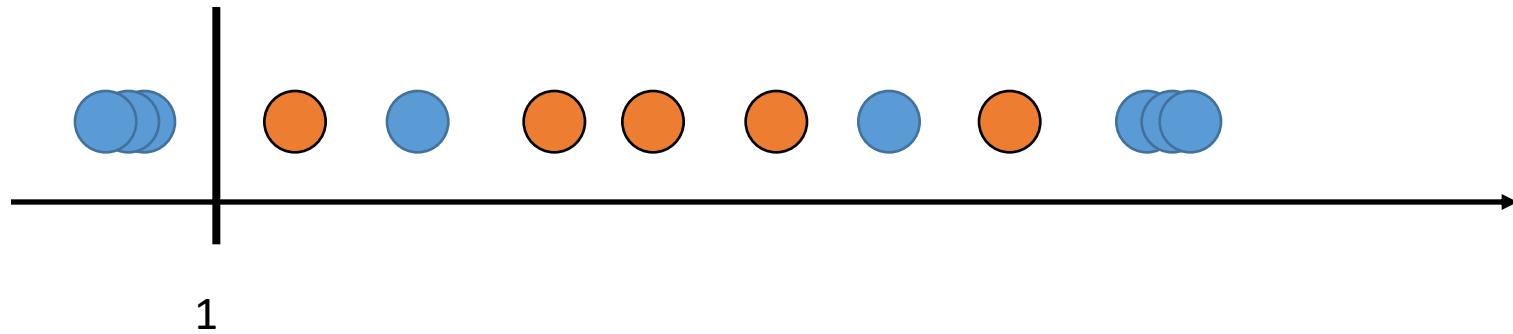
Признаки



Разбиения по признаку 1



Разбиения по признаку 1

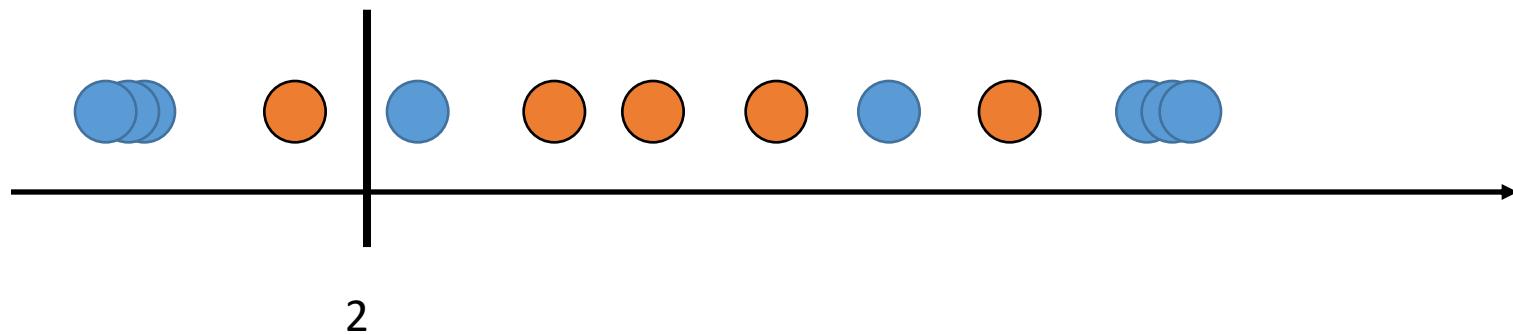


$$(1, 0)$$
$$H(p) = 0$$

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

$$\frac{3}{13}H(p_l) + \frac{10}{13}H(p_r) = 0.53$$

Разбиения по признаку 1

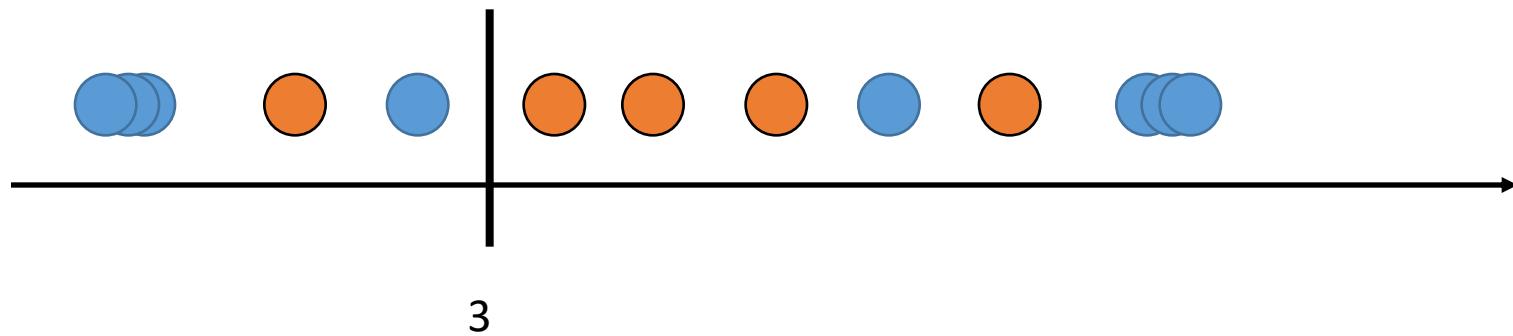


$$(3/4, 1/4)$$
$$H(p) = 0.56$$

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

$$\frac{4}{13}H(p_l) + \frac{9}{13}H(p_r) = 0.65$$

Разбиения по признаку 1

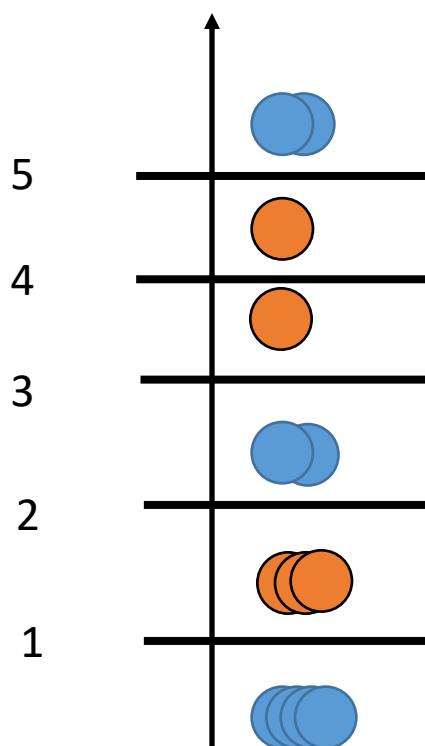


$$(4/5, 1/5)$$
$$H(p) = 0.5$$

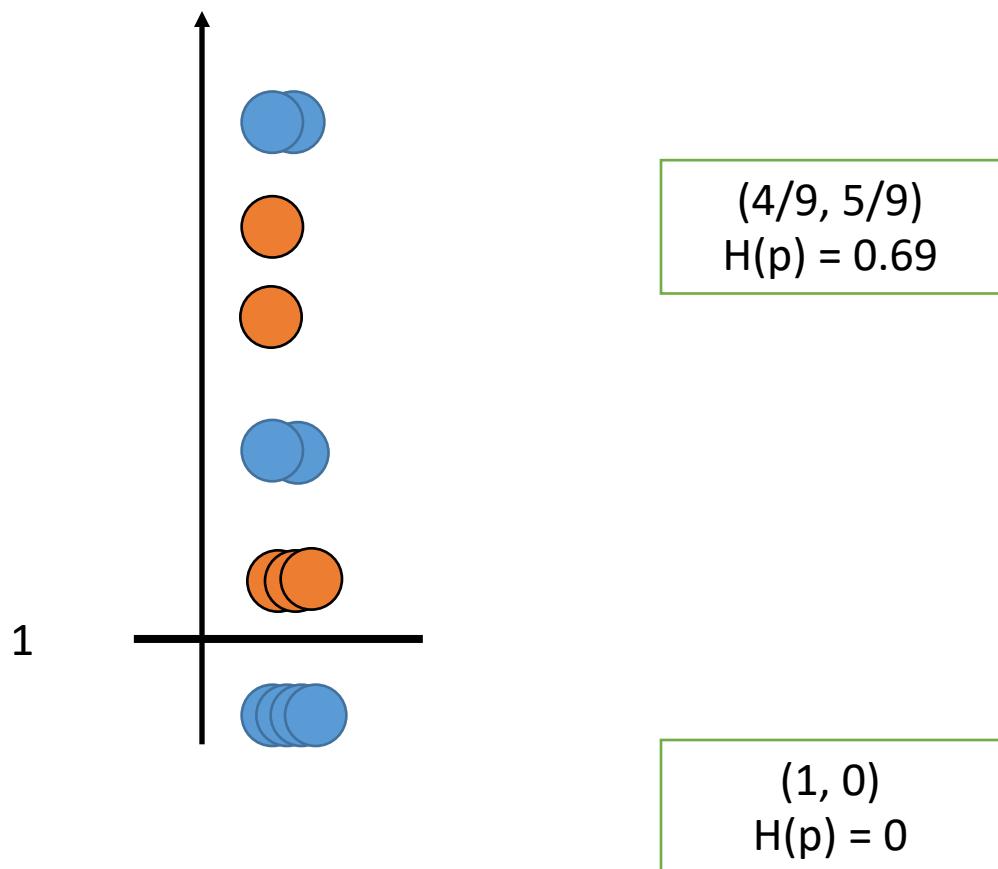
$$(1/2, 1/2)$$
$$H(p) = 0.69$$

$$\frac{5}{13}H(p_l) + \frac{8}{13}H(p_r) = 0.62$$

Разбиения по признаку 2

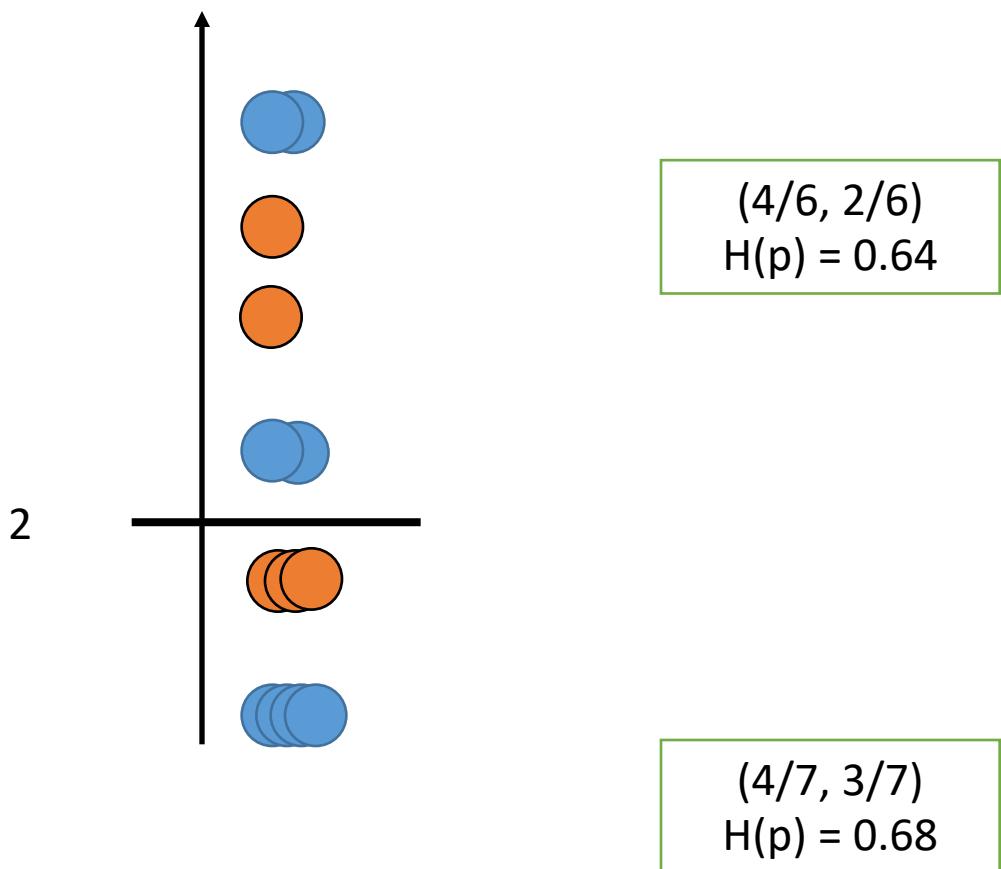


Разбиения по признаку 2



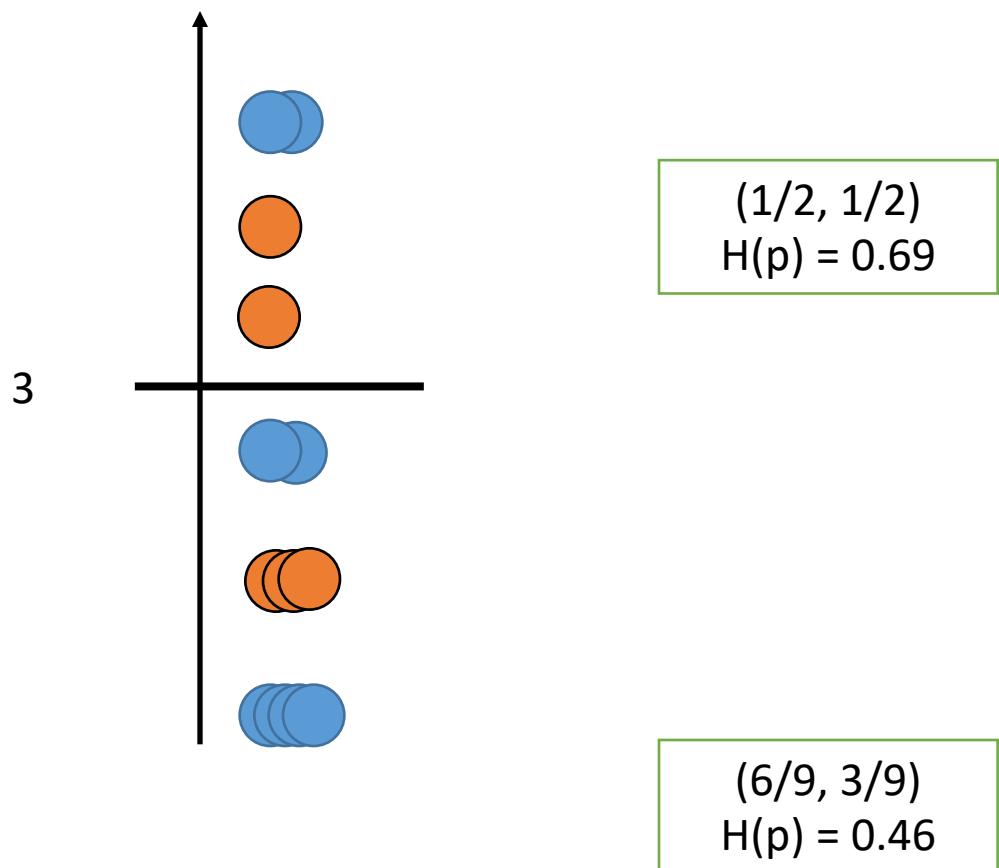
$$\frac{4}{13}H(p_l) + \frac{9}{13}H(p_r) = 0.47$$

Разбиения по признаку 2



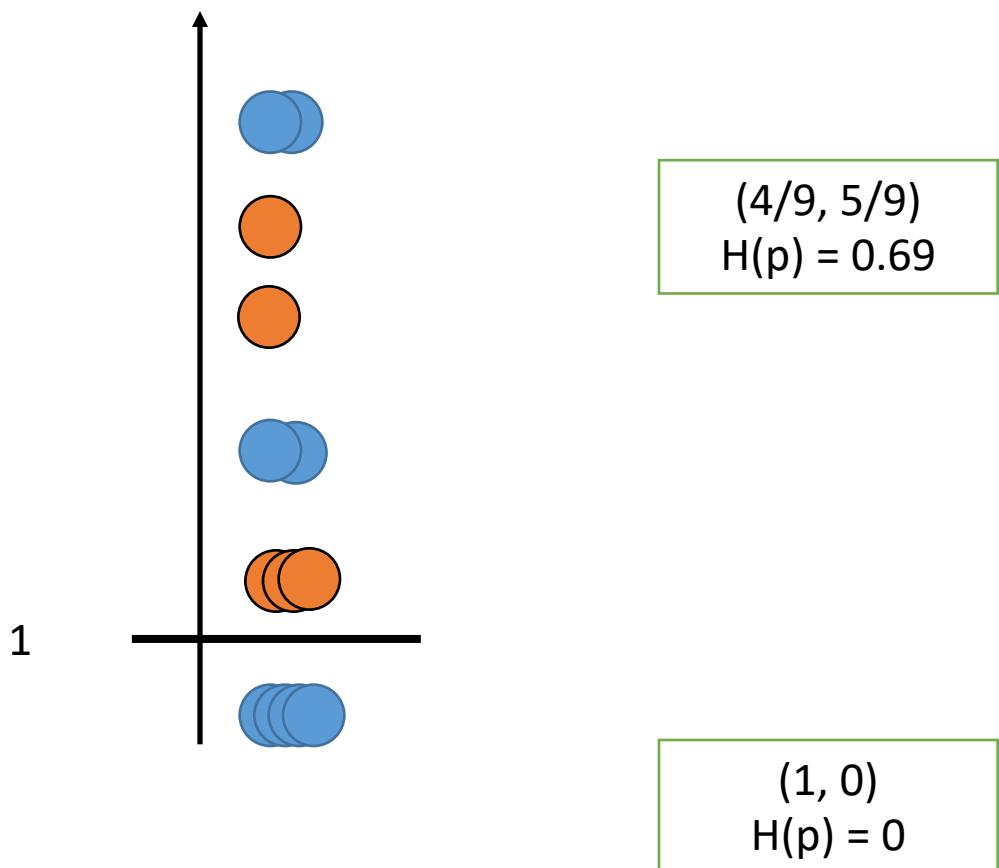
$$\frac{7}{13}H(p_l) + \frac{6}{13}H(p_r) = 0.66$$

Разбиения по признаку 2



$$\frac{9}{13}H(p_l) + \frac{4}{13}H(p_r) = 0.53$$

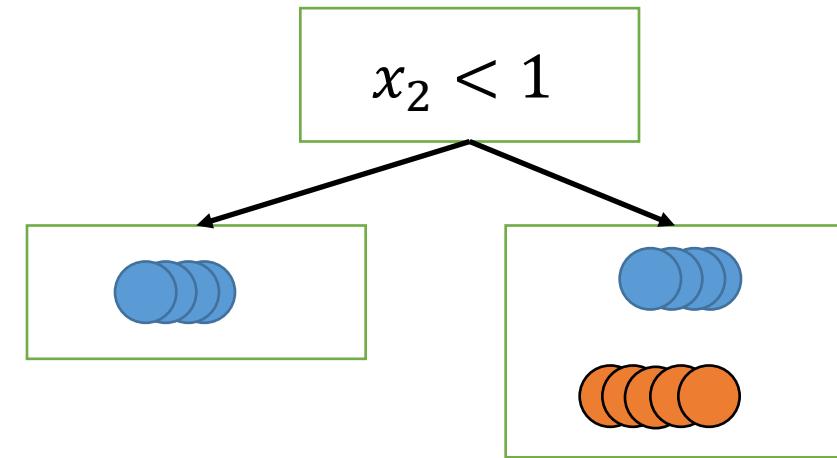
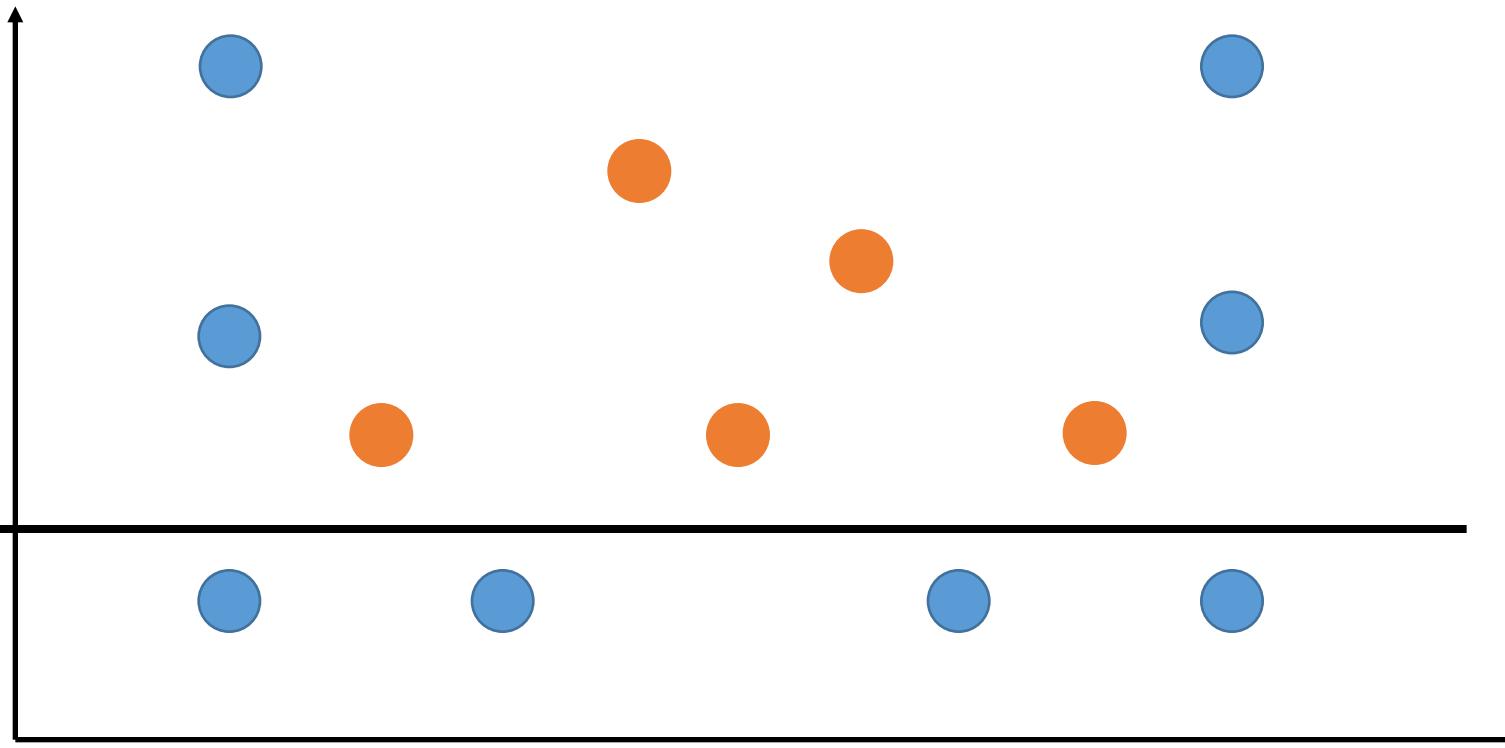
Разбиения по признаку 2



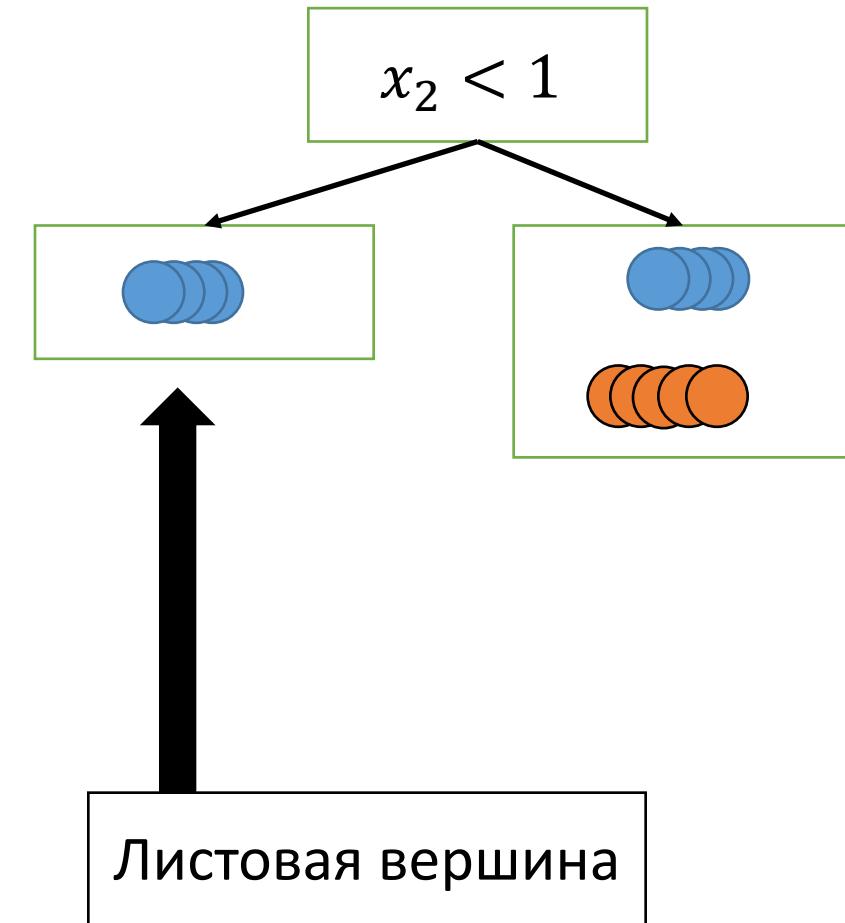
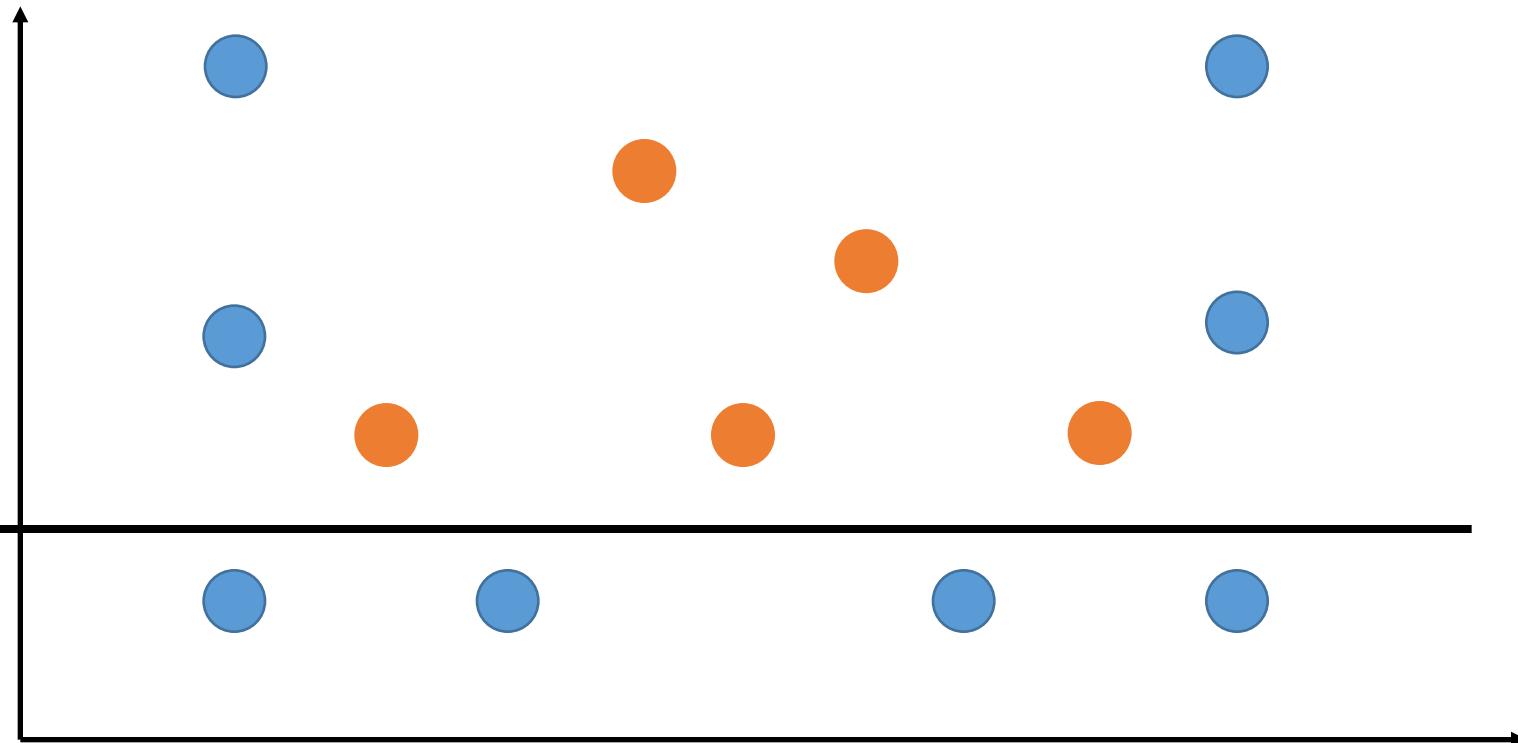
$$\frac{4}{13}H(p_l) + \frac{9}{13}H(p_r) = 0.47$$

Лучшее разбиение!

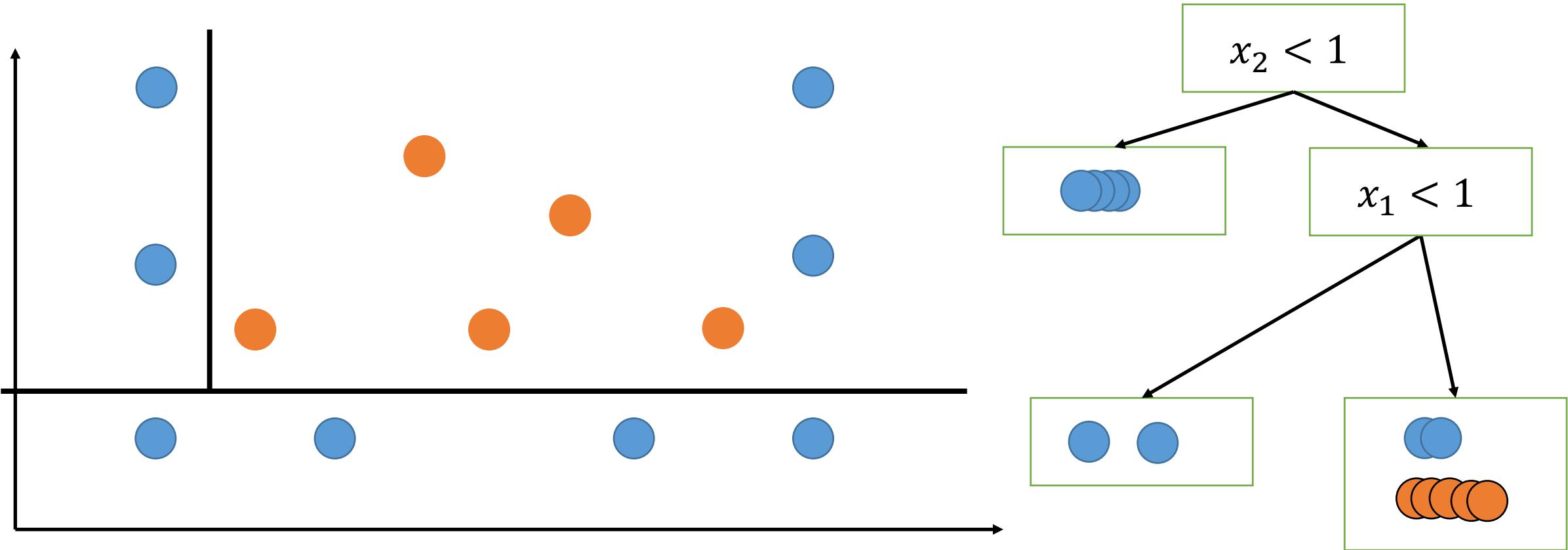
Обучение деревьев



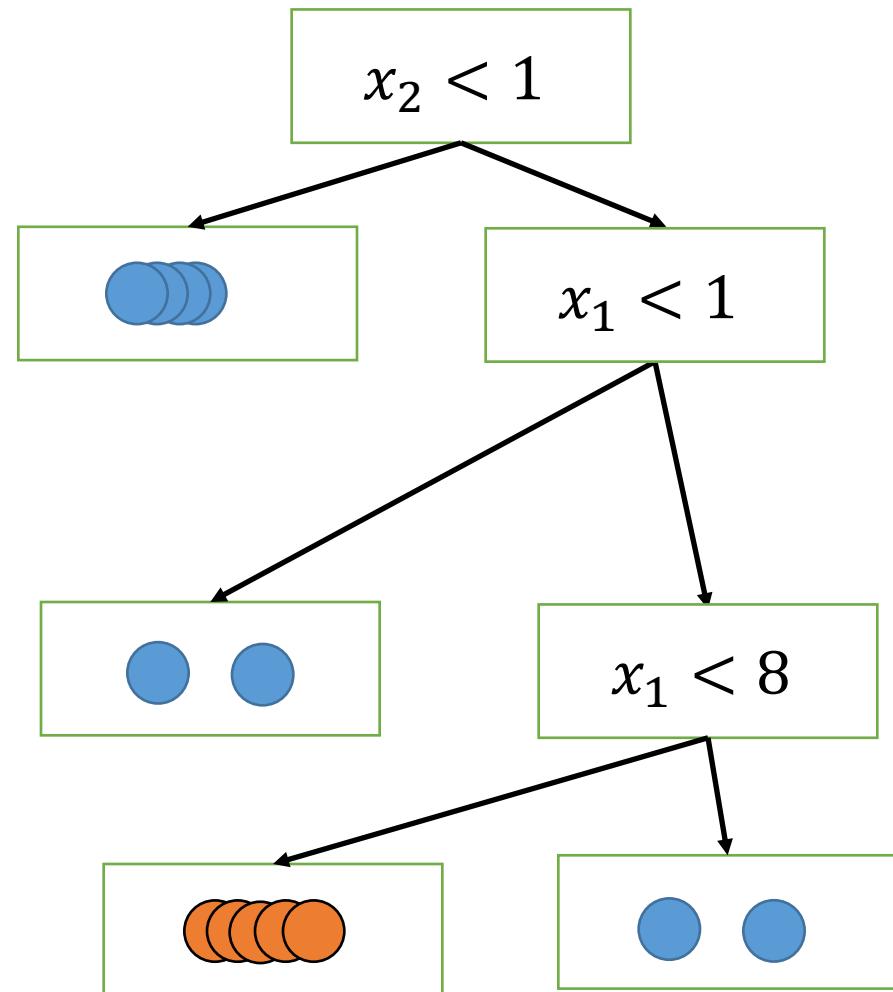
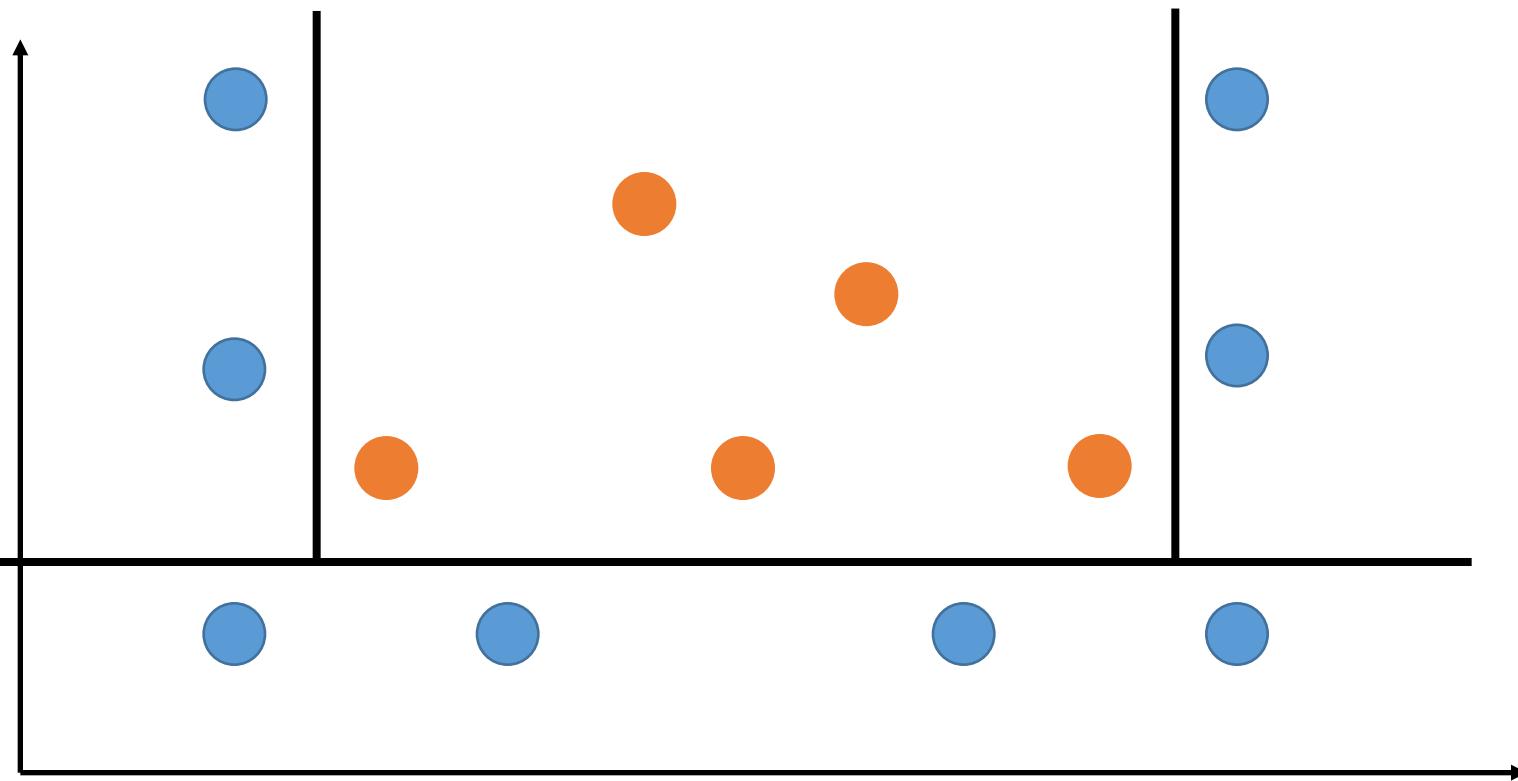
Обучение деревьев



Обучение деревьев

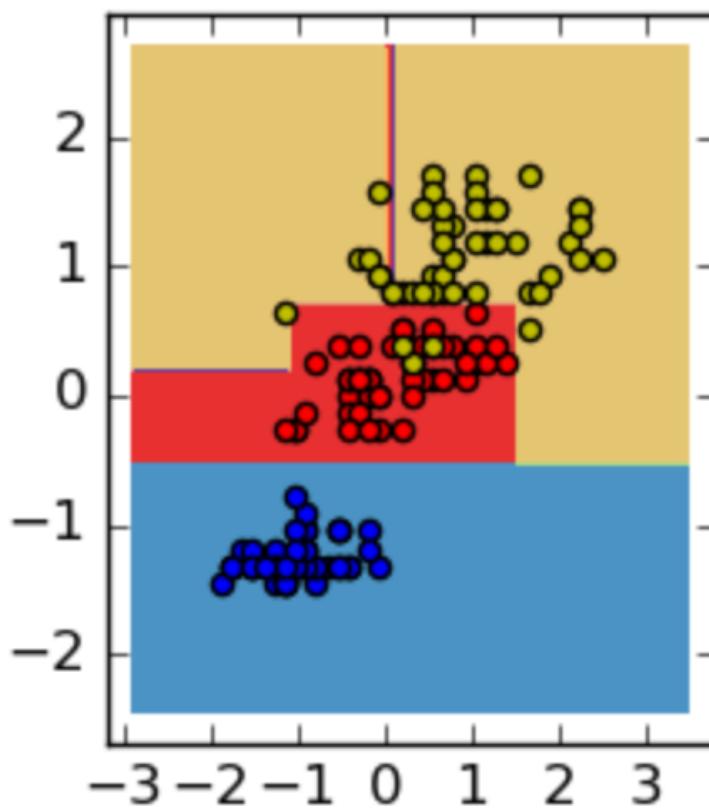


Обучение деревьев

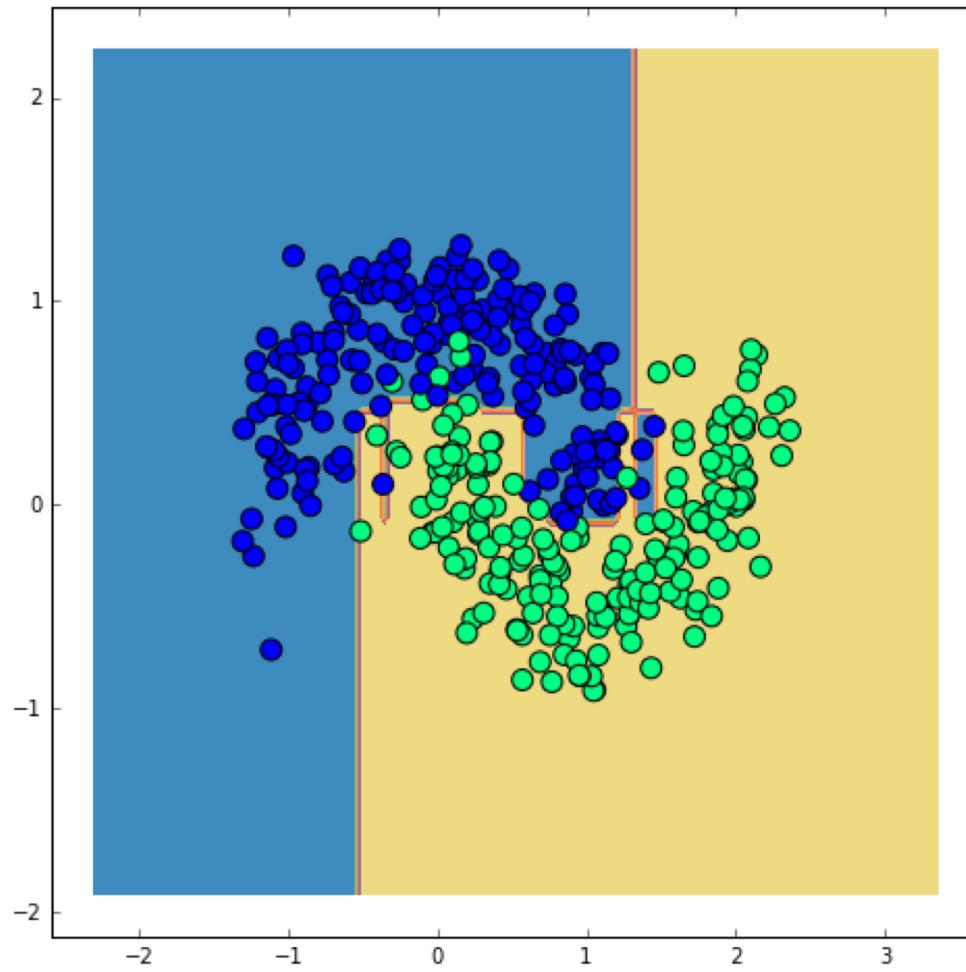


Переобучение деревьев и
борьба с ним

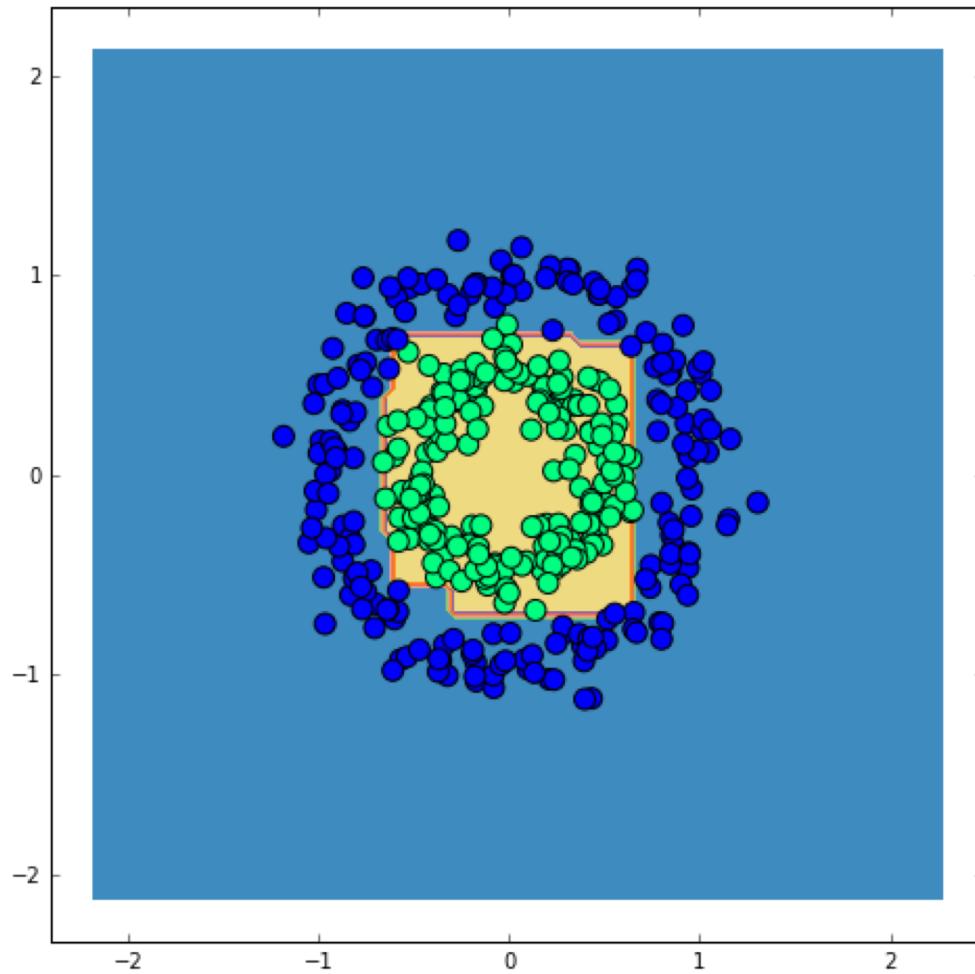
Классификация



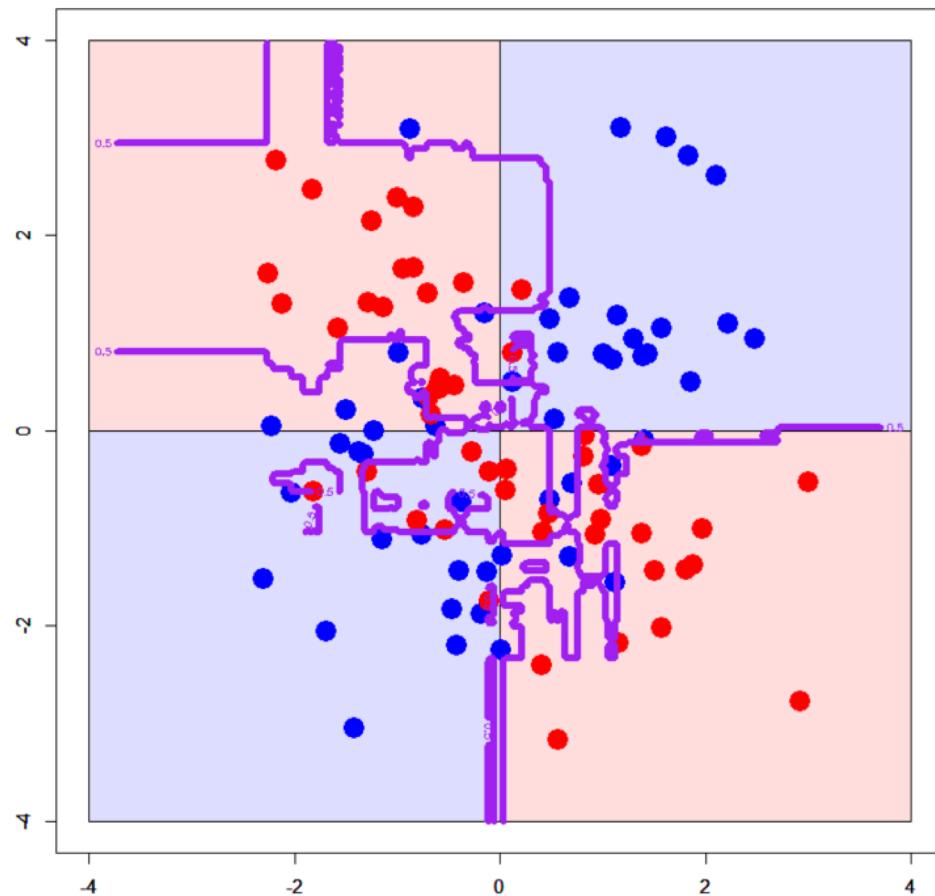
Классификация



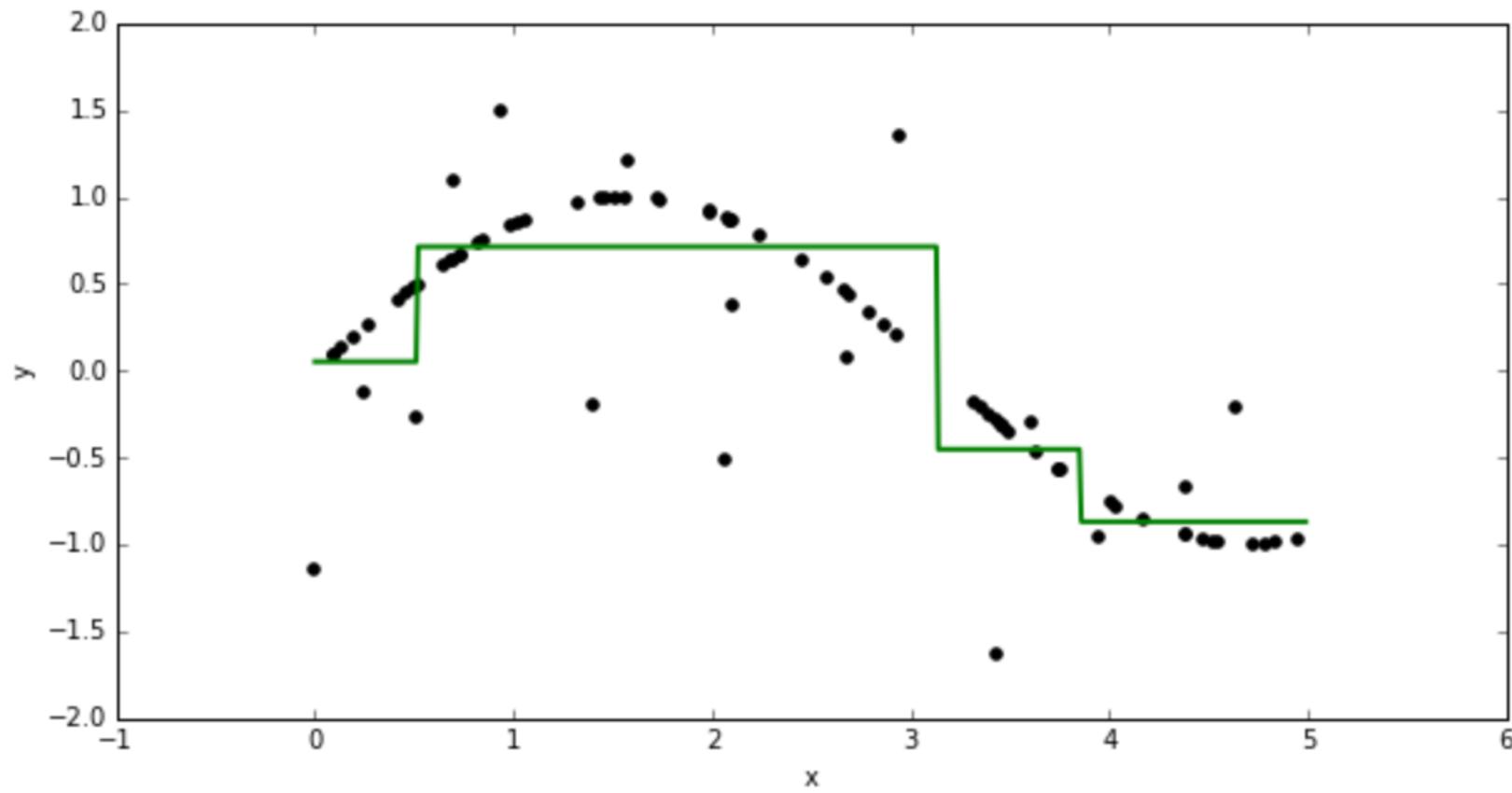
Классификация



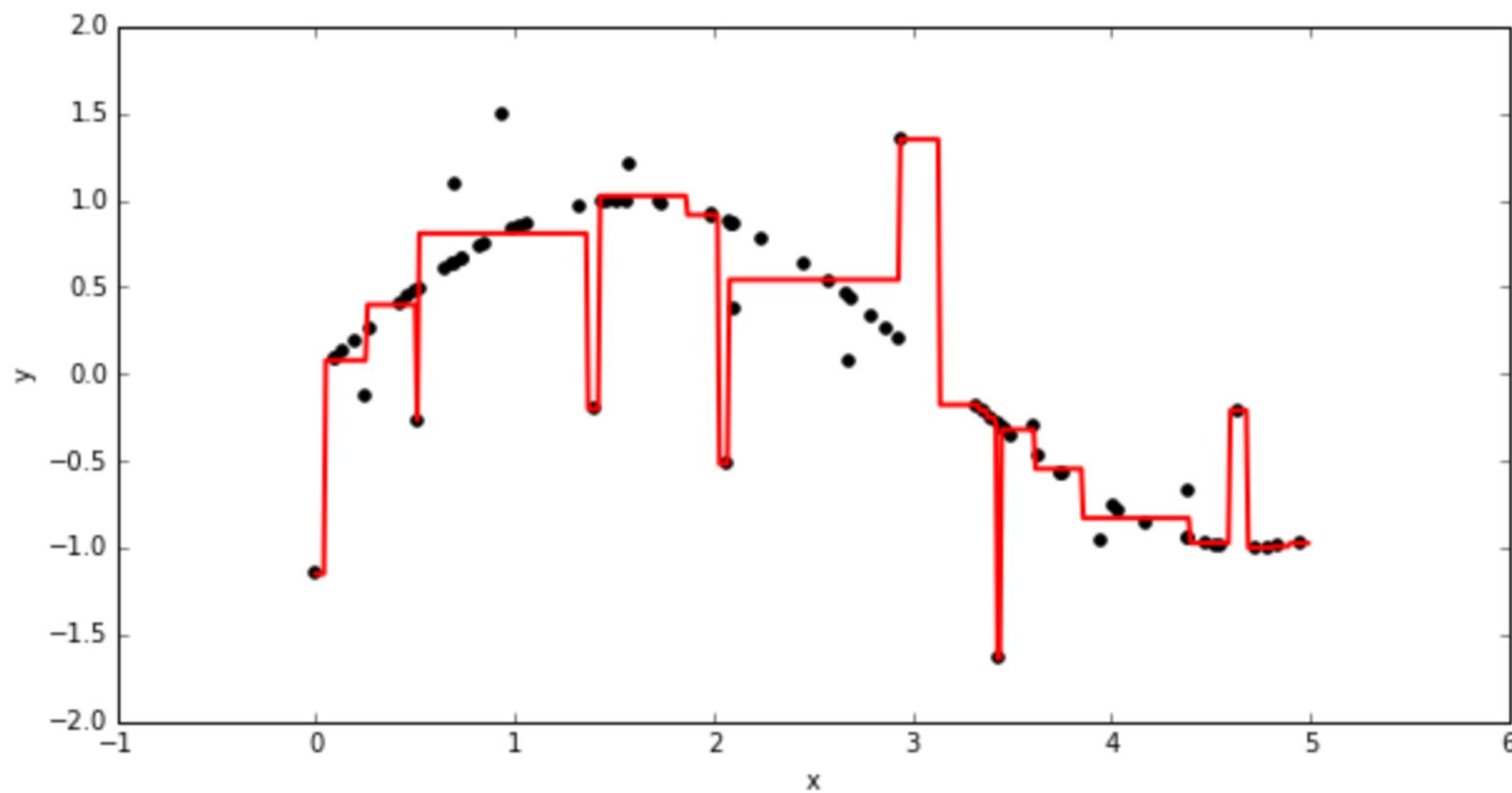
Классификация



Регрессия



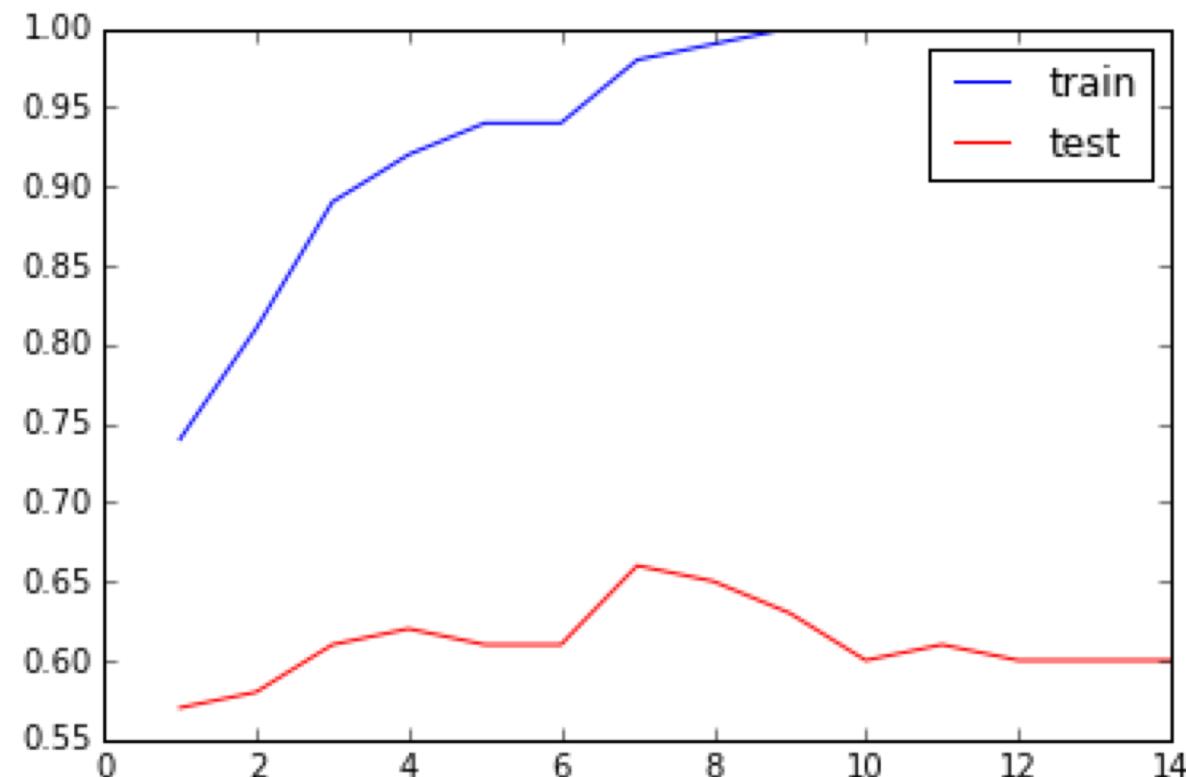
Регрессия



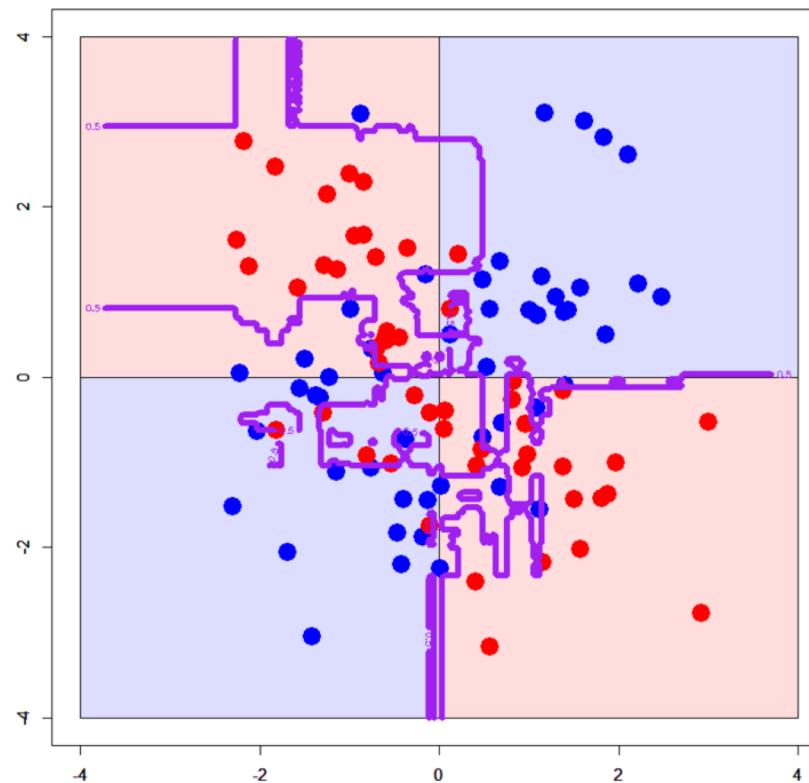
Решающие деревья

- Восстанавливают сложные закономерности
- Могут построить сколь угодно сложную поверхность
- Чем больше глубина — тем сложнее поверхность
- Склонны к переобучению

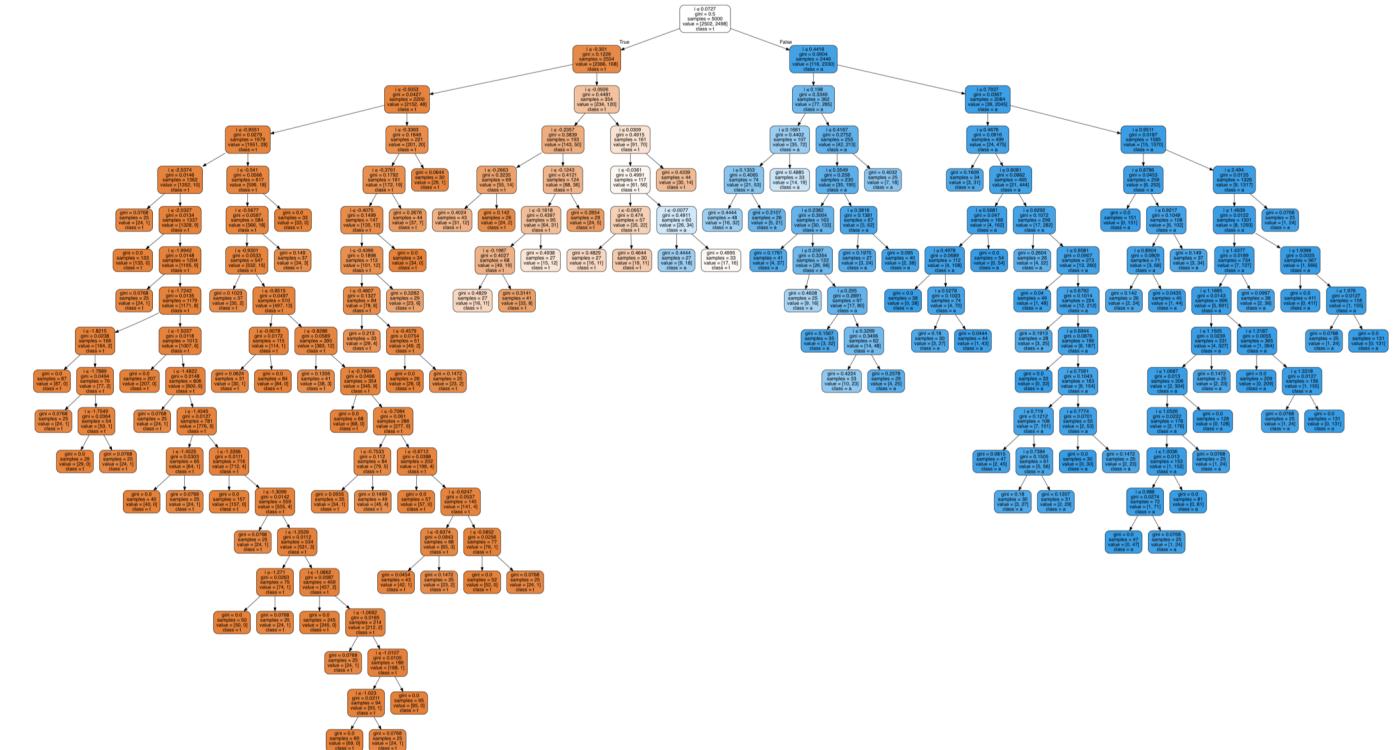
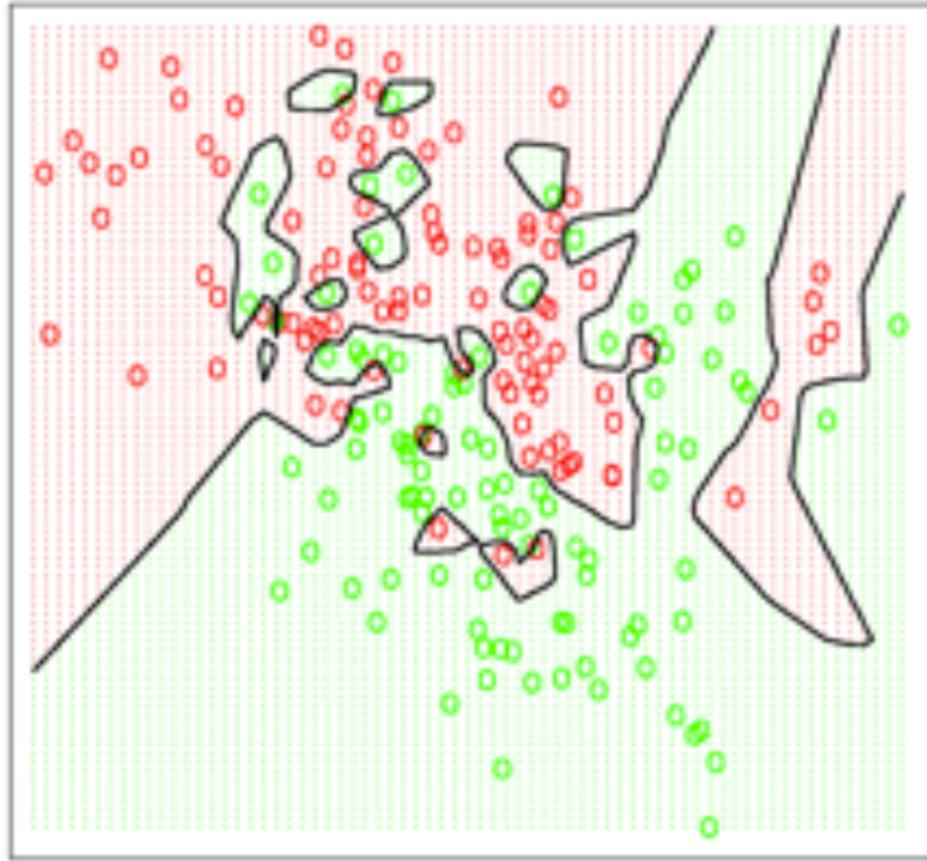
Глубина деревьев



Переобучение деревьев



Переобучение деревьев



Переобучение деревьев

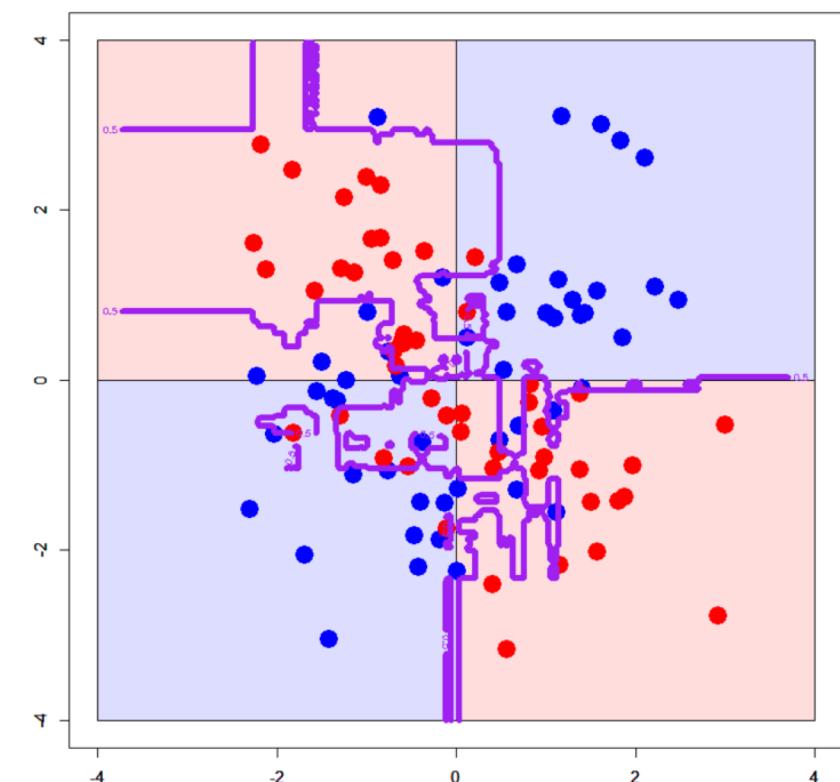
- Дерево может достичь нулевой ошибки на любой выборке
- Как правило, такое дерево окажется переобученным
- Выход — ограничивать глубину или число объектов в листе

Критерий останова

- Как понять, разбивать вершину или делать листовой?
- Способ борьбы с переобучением

Критерий останова

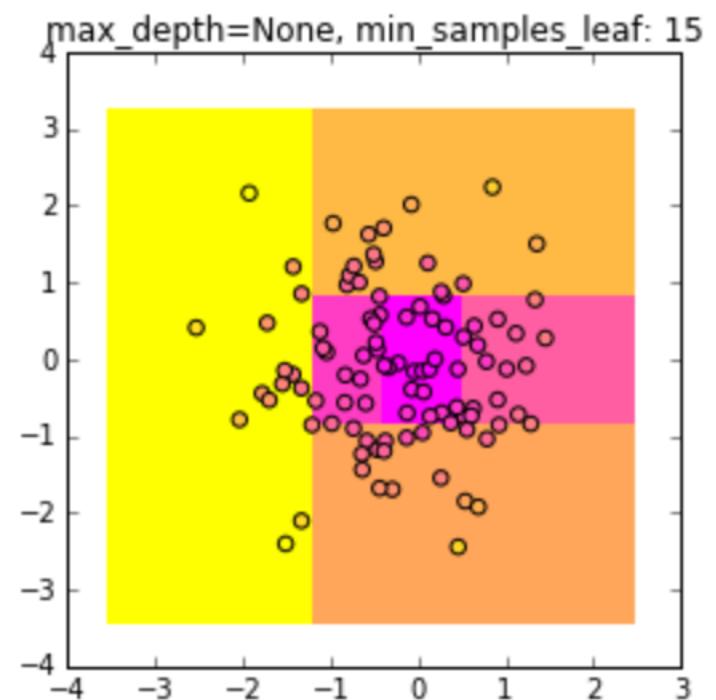
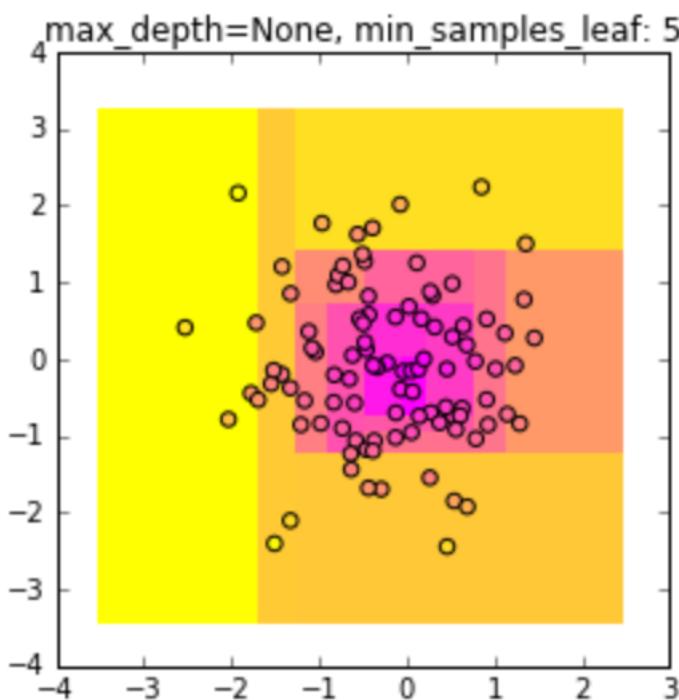
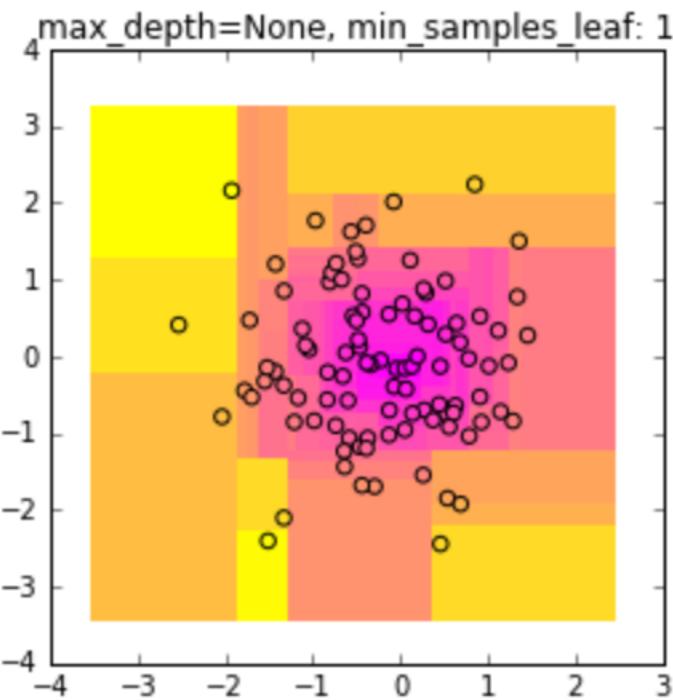
- Все объекты в вершине относятся к одному классу
- Простое условие
- Но приводит к переобучению



Число объектов в листе

- В вершину попало $\leq n$ объектов
- При $n = 1$ получаем максимально переобученные деревья
- n должно быть достаточно, чтобы построить надёжный прогноз
- Рекомендация: $n = 5$

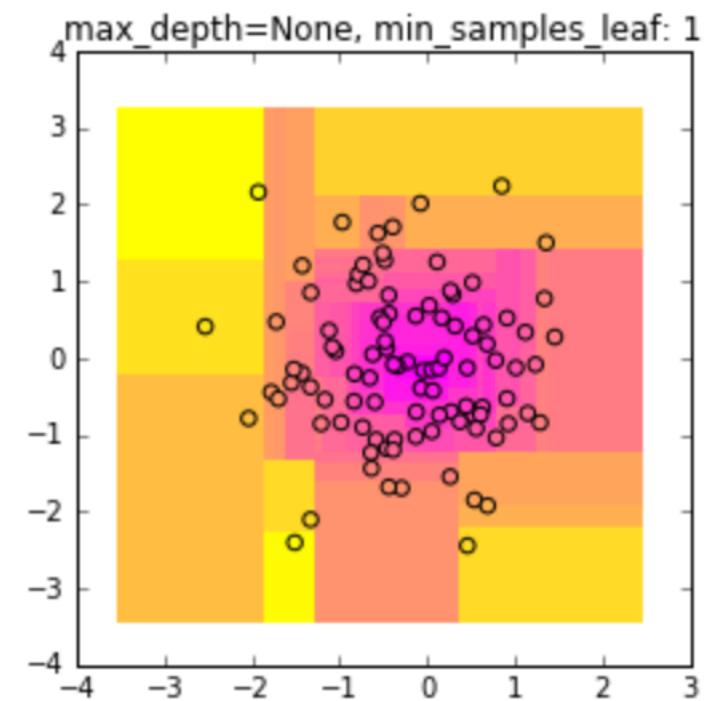
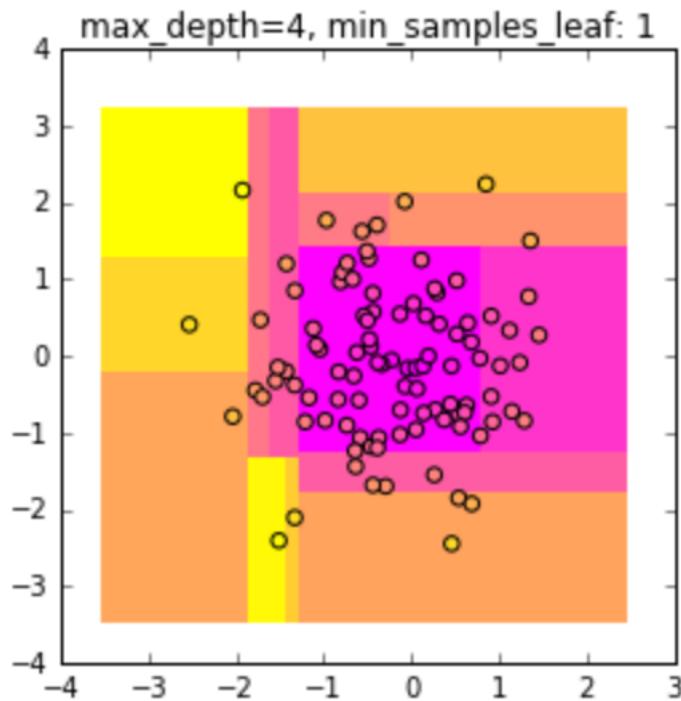
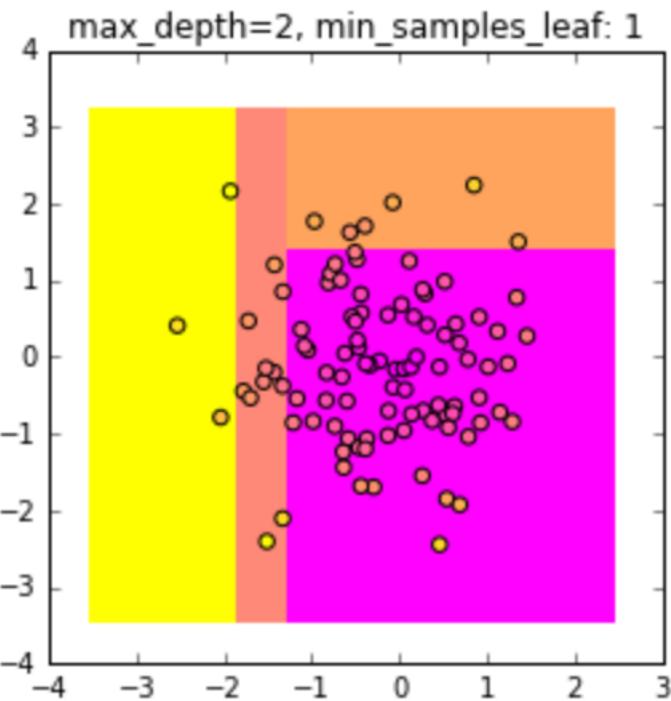
Число объектов в листе



Глубина дерева

- Ограничение на глубину
- Достаточно грубый критерий

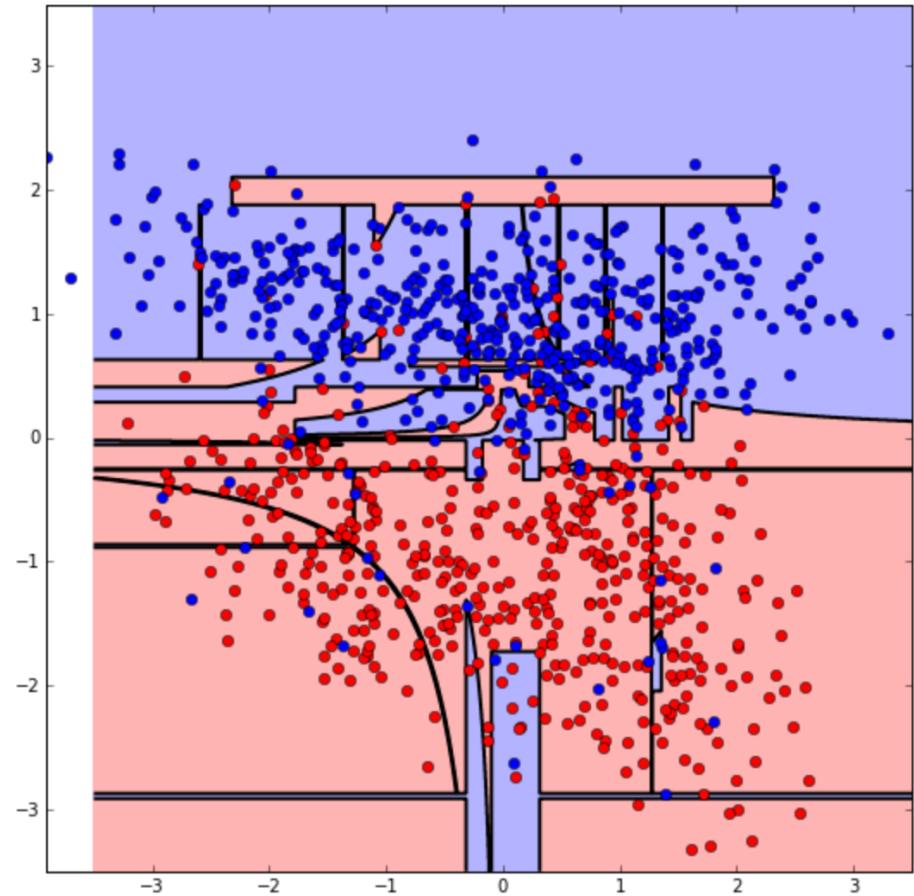
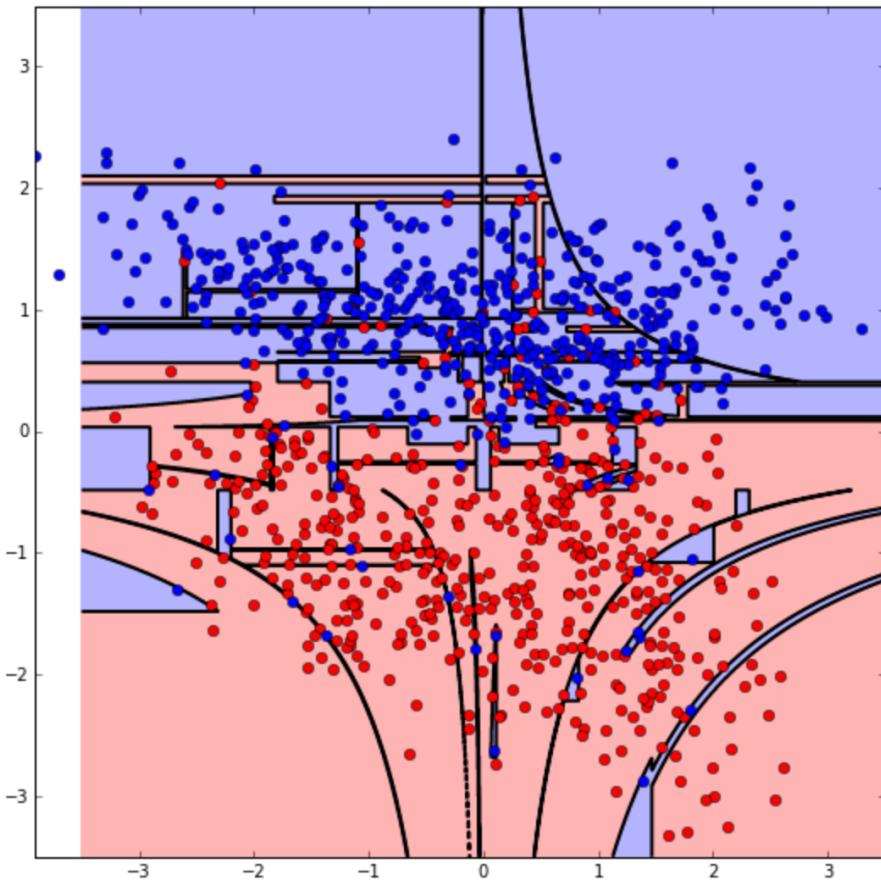
Глубина дерева



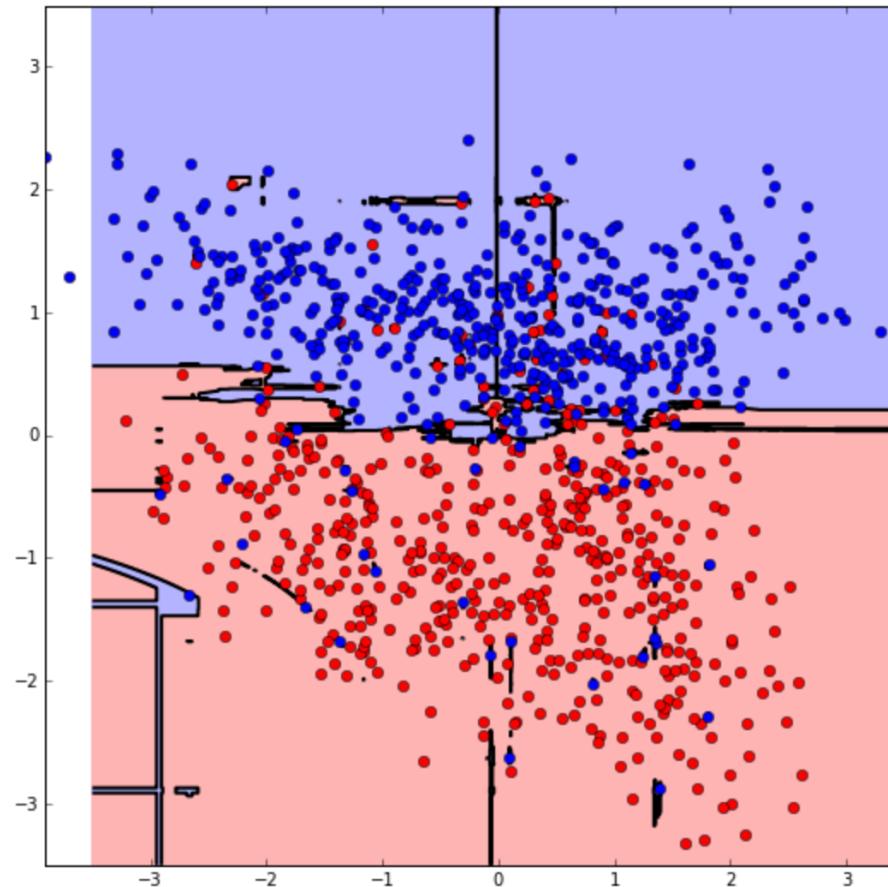
Неустойчивость деревьев

- Структура дерева очень сильно меняется даже при малом изменении выборки
- Пример: обучим два дерева по подвыборкам размером 90% от всего обучения

Неустойчивость деревьев



Усреднение деревьев



Резюме

- Решающее дерево — очень мощная модель
- Обучение эвристическое
- Много тонкостей с переобучением
- Обычно используется в композициях — на следующей лекции