Лекция 8
Решающие деревья.

Макаренко В.А., Габдуллин Р.А.

МГУ им. М.В. Ломоносова

3 марта 2023

Решающее дерево

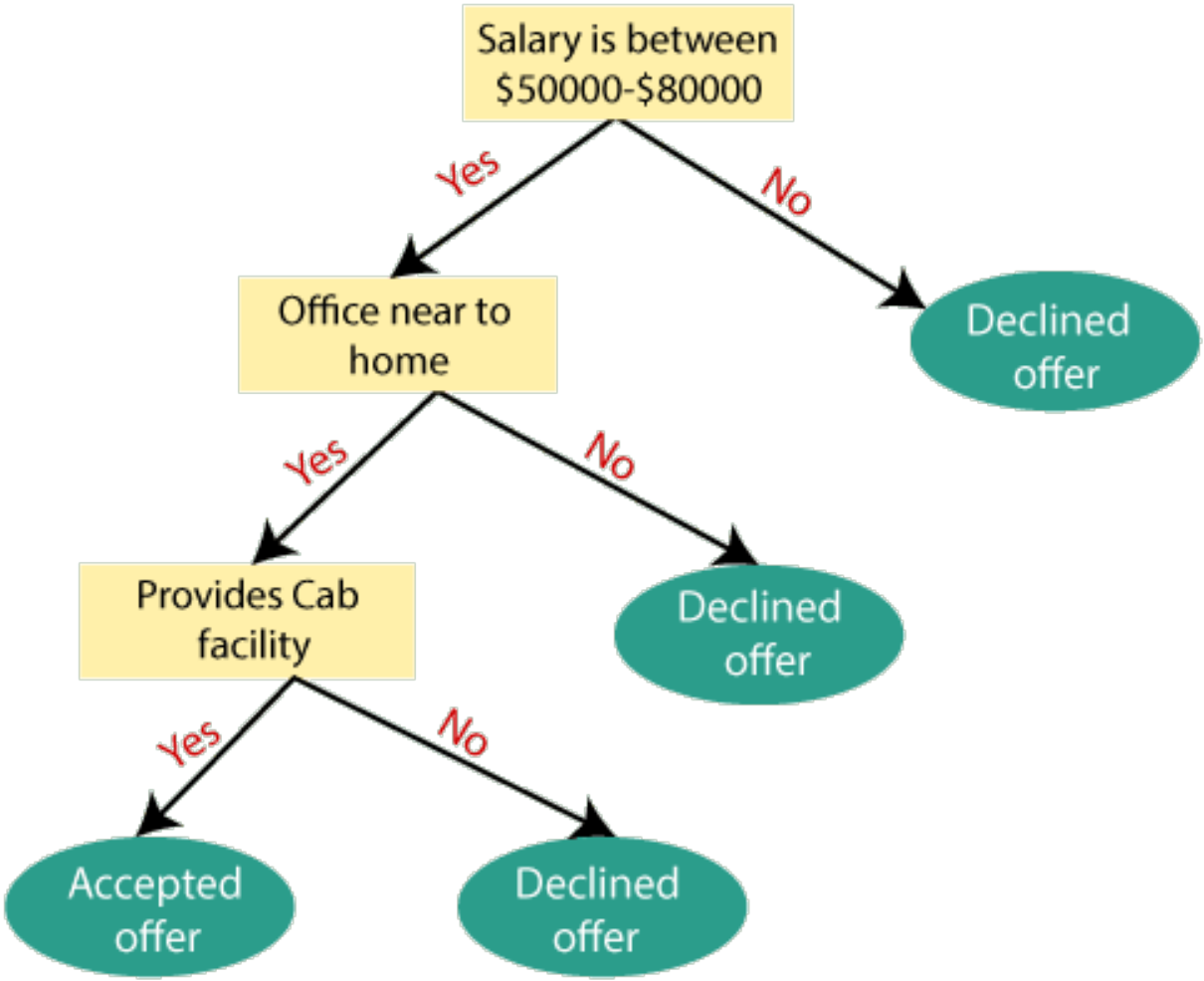


Рис.: Источник: mygreatlearning.com

Решающее дерево

Пусть X – выборка объектов, которые описываются p признаками:

$$X = (X_1, \ldots, X_\ell), \quad X_k \in \mathbb{R}^p.$$

Решающее дерево – бинарное дерево, в котором

- каждой внутренней вершине v приписана функция (предикат) $\beta_v : \mathbb{R}^p \to \{0, 1\}$.
- каждой листовой вершине приписан прогноз.

Получение предсказания для объекта $x = (x_1, \ldots, x_p)$:

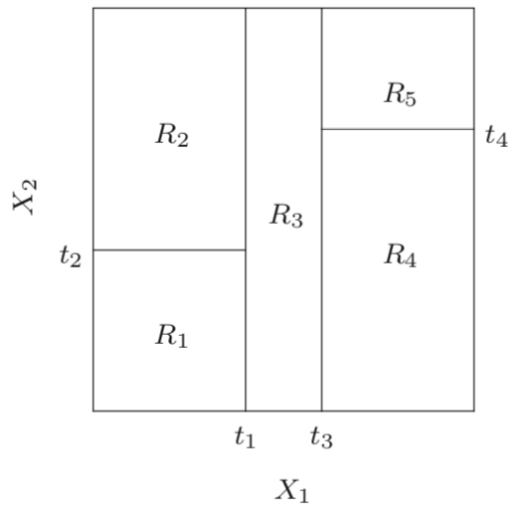
- Стартуем обход дерева с корня v_0.
- Если $\beta_{v_0}(x_1, \ldots, x_p) = 1$, то продолжаем обход левого поддерева, иначе – правого.
- Процесс обхода продолжается до тех пор, пока не будет достигнута листовая вершина.
- Прогноз – значение в листовой вершине.

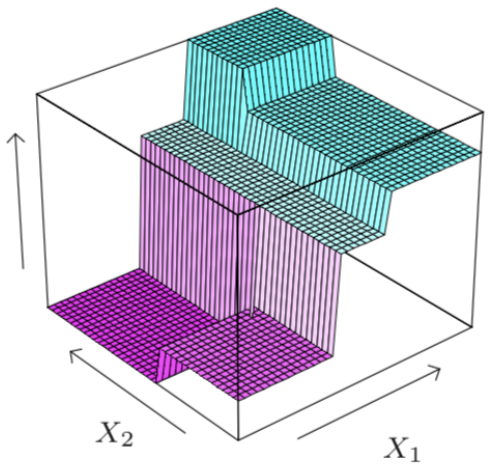
Вид решающего правила

- Дерево разбивает признаковое пространство на конечное число областей $\{R_m,\ 1 \leqslant m \leqslant M\}$.
- В области R_m выдается константное предсказание c_m:

$$a(x) = \sum_{m=1}^{M} c_m [x \in R_m].$$

- Решающее правило – линейная модель с M признаками $[x \in R_m]$ и коэффициентами c_m.





Построение решающего дерева

Вид предикатов:

$$\beta_{j,s}(x) = [x_j \leqslant s], \quad 1 \leqslant j \leqslant p, \quad s \in \mathbb{R}.$$

Жадный алгоритм построения дерева:

- Находим наилучшее разбиение выборки на две части

$$R_1(j,s) = \{x \in X \,|\, x_j \leqslant s\}, \quad R_2(j,s) = \{x \in X \,|\, x_j > s\}$$

  с точки зрения заданного функционала качества разбиения $Q(X, j, s)$.
- Создадим корневую вершину с предикатом $[x_j \leqslant s]$, где j, s – лучшие параметры, найденные на предыдущем шаге.
- Объекты с помощью предиката разобьются на две части.
- Рекурсивно строим левое и правое поддеревья.
- Выходим из рекурсии, если выборка пуста или выполнено условие останова.

Функционал качества разбиения

Пусть

- R_v – объекты, попавшие в вершину, разбиваемую на данном шаге.
- $R_l(j, s)$ – объекты, попадающие в левое поддерево при разбиении.
- $R_r(j, s)$ – объекты, попадающие в правое поддерево при разбиении.

Функционал качества разбиения:

$$Q(R_v, j, s) = H(R_v) - \frac{|R_l|}{|R_v|} \cdot H(R_l) - \frac{|R_r|}{|R_v|} \cdot H(R_r) \to \max$$

где $H(R)$ – критерий информативности (impurity criterion):

$$H(R) = \min_c \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i, y_i) \in R} L(y_i, c),$$

$L(y, c)$ – заданная функция потерь.

Критерии информативности в задаче регрессии

- Выборочная дисперсия:

$$H(R) = \min_c \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i,y_i)\in R} (y_i - c)^2 = \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i,y_i)\in R} (y_i - \overline{y})^2.$$

- Среднее абсолютное отклонение от медианы:

$$H(R) = \min_c \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i,y_i)\in R} |y_i - c| = \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i,y_i)\in R} |y_i - \text{median}(y)| .$$

Критерии информативности в задаче классификации

- Доля неверно классифицированных объектов:

$$H(R) = \min_c \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i,y_i)\in R} [y_i \neq c] = \frac{1}{R} \sum_{(x_i,y_i)\in R} [y_i \neq y^*] = 1 - p_{y^*},$$

где $p_k = \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i,y_i)} [y_i = k]$, $y^* = \operatorname{argmax} p_k$.

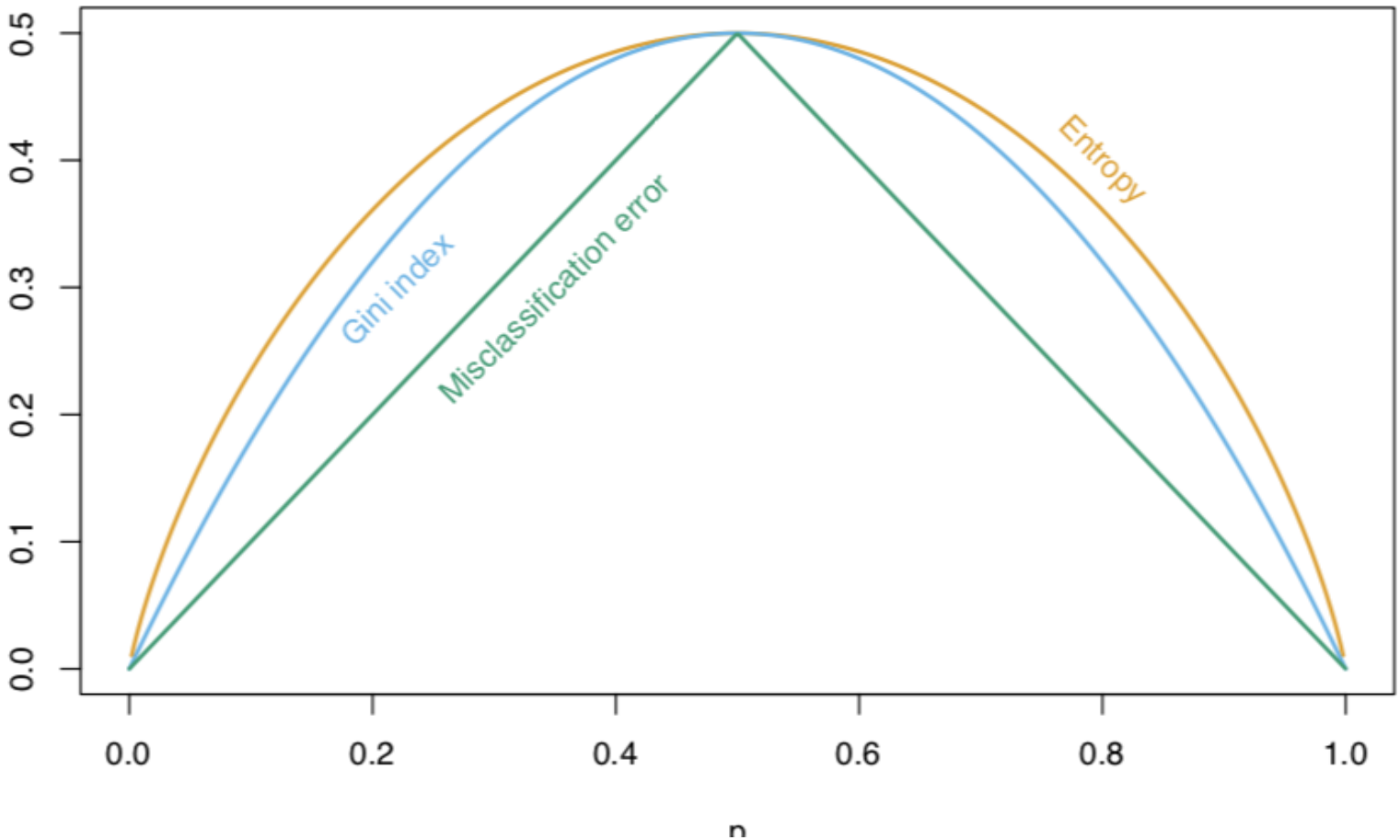
- Критерий Джини:

$$H(R) = \min_{\sum c_k = 1} \frac{1}{|R|} \sum_{(x_i,y_i)\in R} \sum_{k=1}^{K} (c_k - [y_i = k])^2 = 1 - \sum_{k=1}^{K} p_k^2.$$

- Энтропийный критерий:

$$H(R) = \min_{\sum c_k = 1} \left(-\frac{1}{|R|} \sum_{(x_i,y_i)\in R} \sum_{k=1}^{K} [y_i = k] \log c_k \right) = -\sum_{k=1}^{k} p_k \log p_k.$$

Критерии информативности в задаче классификации



Энтропия и log loss

Обозначения:

- K – количество классов.
- $n_1, n_2, \ldots, n_K$ – кол-во наблюдений каждого класса в данной вершине.
- $n = n_1 + n_2 + \ldots + n_K$ – кол-во наблюдений в данной вершине.
- $\hat{p}_k = \frac{n_k}{n}$ – оценка вероятности класса k.

Минимизация log loss:

$$\min_{\substack{p_k \geqslant 0, \\ \sum p_k = 1}} -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} [y_i = k] \log p_k = \min_{\substack{p_k \geqslant 0, \\ \sum p_k = 1}} -\sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} \log p_k =$$

$$= -\sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} \log \frac{n_k}{n} = -\sum_{k=1}^{K} \hat{p}_k \log \hat{p}_k.$$

Таким образом, минимизируя энтропию, мы минимизируем log loss.

Критерии останова

- Ограничение максимальной глубины дерева.
- Ограничение максимального количества листьев в дереве.
- Ограничение максимального числа объектов в дереве.
- Требование, что функционал качества должен увеличиться не некоторое количество процентов.

Стрижка дерева (pruning)

Cost-complexity pruning:

- Строим дерево T_0 максимальной глубины.
- Выбираем поддерево T, минимизирующее следующий функционал:

$$R_\alpha(T) = R(T) + \alpha L(T),$$

где $R(T)$ – эмпирический риск, $L(T)$ – количество листьев в дереве, $\alpha \geqslant 0$.

Обработка пропущенных значений

- Удаление объекта с пропущенными значениями.
- Заполнение пропущенных значений (мода, среднее значение, . . .).
- Создание отдельного значения для пропуска.
- Суррогатные предикаты:
  - Рассматривая признак для разбиения при построении очередной вершины, используем только те наблюдения, у которых значение признака известно.
  - Для данной вершины вместе с выбранным предикатом формируем список суррогатных предикатов – предикаты по другим признаком, которые дают похожие разбиения с выбранным предикатом.
  - Во время предсказания используем суррогатные предикаты, если значение признака пропущено.

Работа с категориальными признаками

Проблема:

- Признак с q значениями можно разбить на две группы $2^{q-1} - 1$ способами (экспоненциальный рост числа вариантов).

Решение для бинарной классификации (критерий Джини или энтропийный критерий):

- Упорядиваем значения признака по доле положительного класса среди объектов с таким значением признака.
- Используем обычные пороговые предикаты.

Решение для регрессии (функция потерь MSE):

- Упорядочиваем значение признака по среднему значению целевой переменной среди объектов с таким значением признака.
- Используем обычные пороговые предикаты.

Методы построения деревьев

- ID3
  - Использует энтропийный критерий.
  - Только категориальные признаки.
  - Строится до тех пор, пока в каждом листе не окажутся объекты одного класса, либо пока разбиение дает уменьшение критерия.
- C4.5
  - Использует нормированный энтропийный критерий.
  - Поддержка вещественных признаков.
  - Критерий останова – ограничение числа объектов в листе.
  - Обработка пропущенных значений осуществляется с помощью метода, который игнорирует объекты с пропущенными значениями при вычислении критерия ветвления, а затем переносит такие объекты в оба поддерева с определенными весами.
- CART
  - Критерий Джини.
  - Стрижка cost-complexity pruning.
  - Обработка пропусков с помощью суррогатных предикторов.

Достоинста и недостатки деревьев решений

Достоинства:

- Интерпретируемость
- Минимальная предобработка признаков.
- Гибкость.

Недостатки:

- Склонность к переобучению.
- Негладкое решение.
- Сложность построения модели в случае разделяющей полосы, не параллельной осям координат.