Введение в АД

Лекция 6

Список основных обозначений

$X = (X_1, ..., X_n)$ — случайная выборка

$x = (x_1, ..., x_n)$ — неслучайная выборка

$i \in \{1, ..., n\}$ — индексация элементов выборки

$j \in \{1, ..., d\}$ — индексация размерностей $x \in \mathbb{R}^d$ (признаков)

$k \in \{1, ..., K\}$ — обозначения классов

x_i — объект выборки

x_j — значение j-го признака объекта x

x_{ij} — значение j-го признака объекта x_i

$\mathcal{I}$ — множество индексов элементов выборки

$X_{\mathcal{I}}$ — подвыборка с индексами $\mathcal{I}$

Решающие деревья

Свойства линейной регрессии

- Легко обучается с помощью градиентного спуска
- Легко интерпретируема
- Востанавливает только простые зависимости

  мало степеней свободы:

  обычно число параметров $\approx$ количество признаков
- Не всегда отражает то, как люди принимают решения.

  Иногда не логично расставлять коэффициенты перед признаками.

Как люди принимают решения?

Решающие деревья

Регрессионное дерево

Идея построения бинарного дерева по выборке $(x_1, Y_1), \dots, (x_n, Y_n)$.

- **Начало:** один лист с меткой $\overline{Y}$, к нему относятся все объекты.
- **Деление листа**

  Пусть $\mathcal{I}_{leaf}$ — индексы объектов в текущем листе.

  Делим лист на два с подмн-вами индексов $\mathcal{I}_\ell \sqcup \mathcal{I}_r = \mathcal{I}_{leaf}$.

  - **Правило деления**

    $x_j < t \Rightarrow$ объект x попадает в ℓ, иначе в r.

  - **Принцип деления:** наилучшее приближение двумя константами

Правило $$\sum_{i \in \mathcal{I}_\ell} (Y_i - y_\ell)^2 + \sum_{i \in \mathcal{I}_r} (Y_i - y_r)^2 \longrightarrow \min_{\mathcal{I}_\ell, \mathcal{I}_r}$$

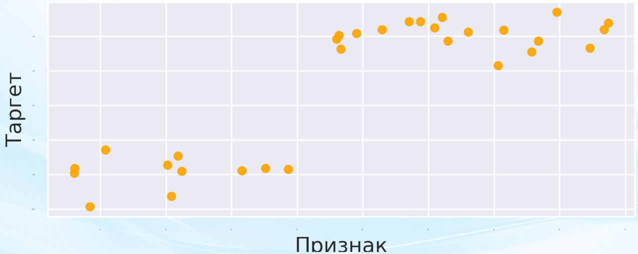
Метки в новых листах $$y_\ell = \frac{1}{|\mathcal{I}_\ell|} \sum_{i \in \mathcal{I}_\ell} Y_i, \qquad y_r = \frac{1}{|\mathcal{I}_r|} \sum_{i \in \mathcal{I}_r} Y_i$$

Регрессионное дерево

Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

Пример 1:

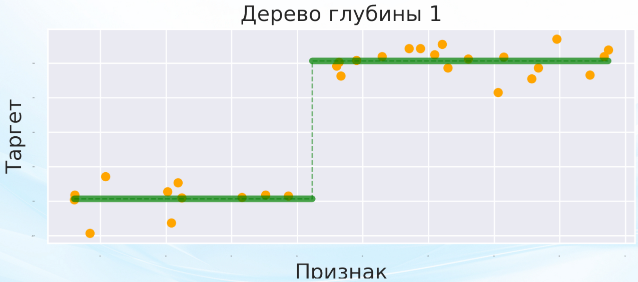


Регрессионное дерево

Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

Пример 1:



Регрессионное дерево

Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

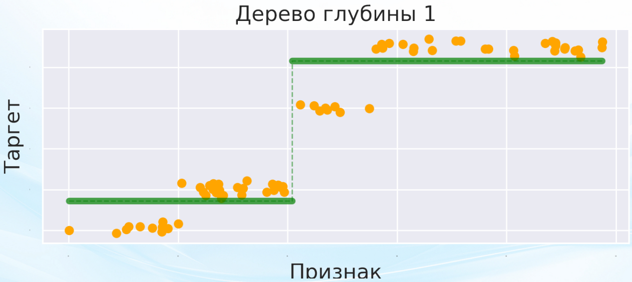
Пример 2:

Регрессионное дерево

Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

Пример 2:

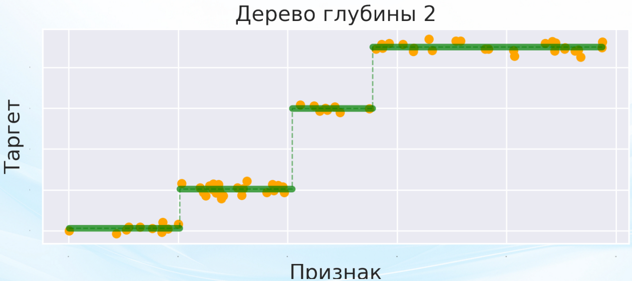


Регрессионное дерево

Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

Пример 2:

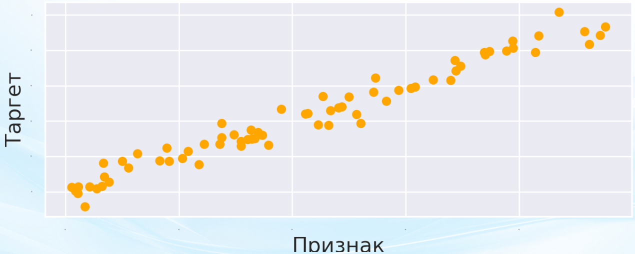


Регрессионное дерево

Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

Пример 3:

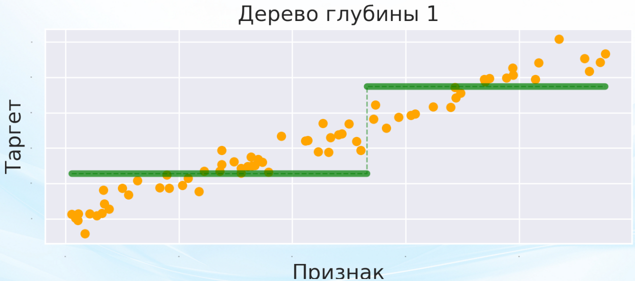


Регрессионное дерево

Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

Пример 3:

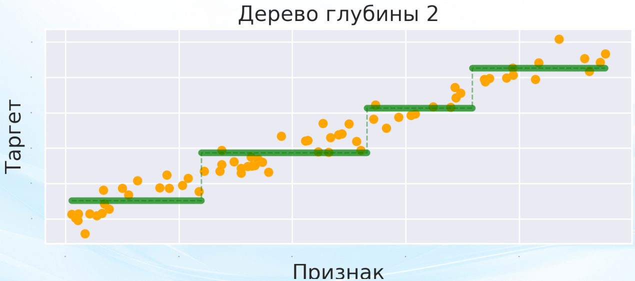


Регрессионное дерево

Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

Пример 3:

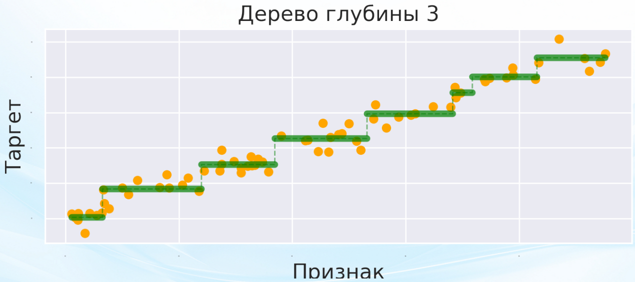


Регрессионное дерево

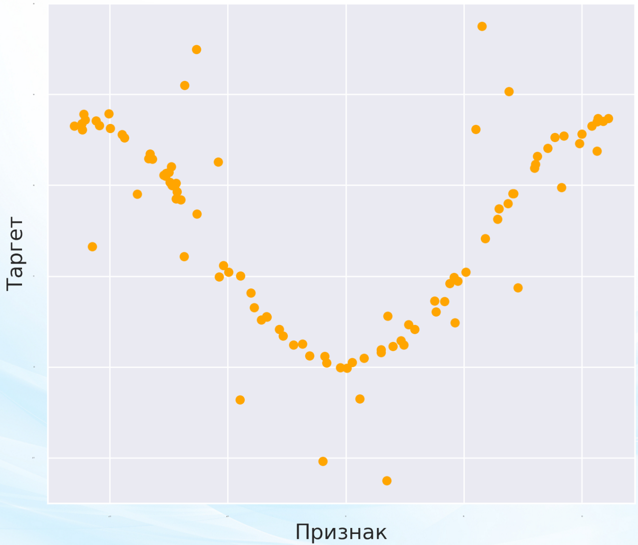
Оценка отклика — метка листа, в который попадет объект.

Т.е. строится кусочно-постоянная функция.

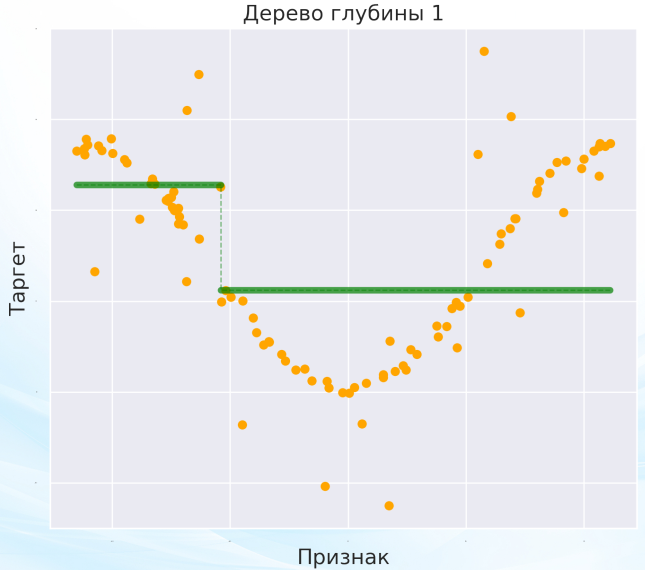
Пример 3:



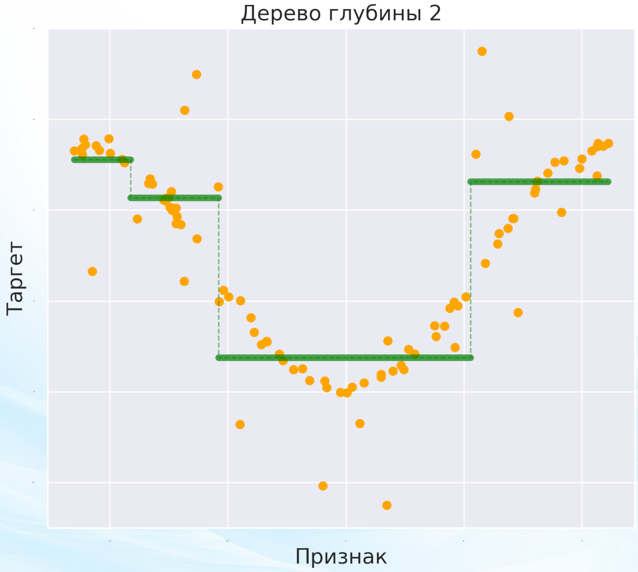
Регрессионное дерево и выбросы



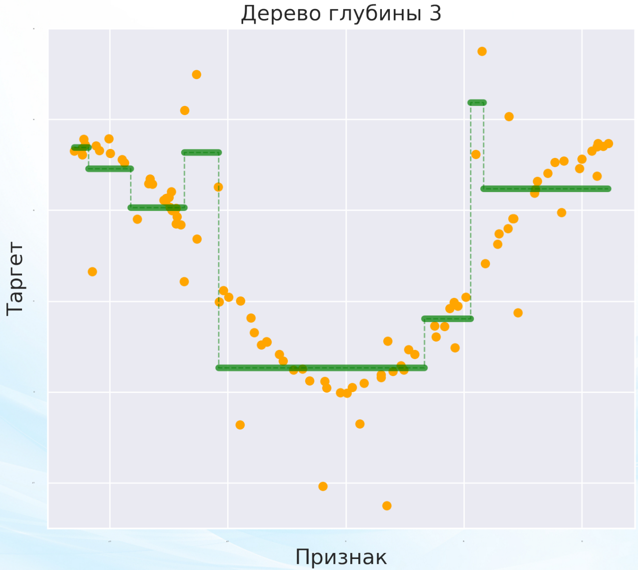
Регрессионное дерево и выбросы



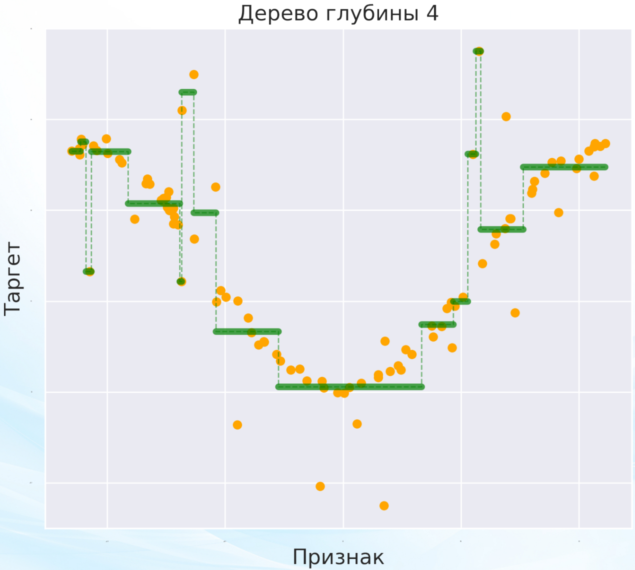
Регрессионное дерево и выбросы



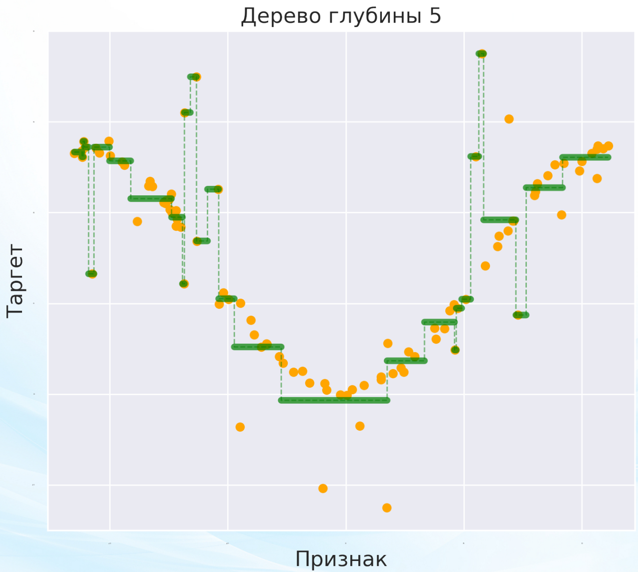
Регрессионное дерево и выбросы



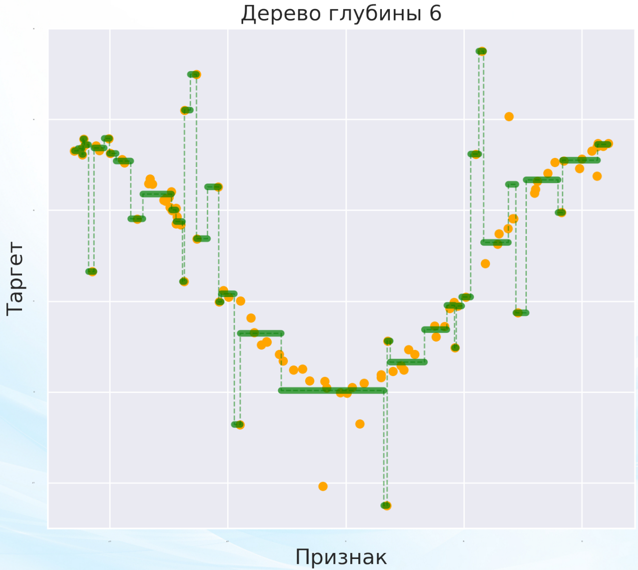
Регрессионное дерево и выбросы



Регрессионное дерево и выбросы



Регрессионное дерево и выбросы



Общий случай

Решающее дерево:

- Бинарное дерево.
- В каждой вершине записано некоторое условие.
- В зависимости от условия идем в правую или левую вершину.
- В листьях дерева — предсказания.

Замечание: Существуют и не бинарные решающие деревья, однако в основном используются именно бинарные

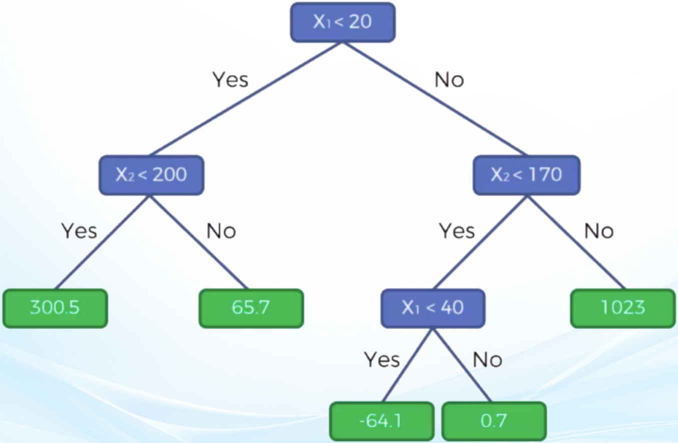
Условия в вершинах

Самый популярный подход — правила вида $I\{x_j < t\}$.

Оптимальные значения порога t и признака x_j

подбираются по некоторому критерию.

Пример



X1 < 20
Yes
No
X2 < 200
X2 < 170
Yes
No
Yes
No
300.5
65.7
X1 < 40
1023
Yes
No
-64.1
0.7

Пример


Классификация котиков
Есть шерсть?
нет
да
Рост > 20?
нет
да
Сфинкс
Манчкин
Саванна
котик
порода
рост
шерсть
Саванна
50 см
да

Переобучение

Утверждение

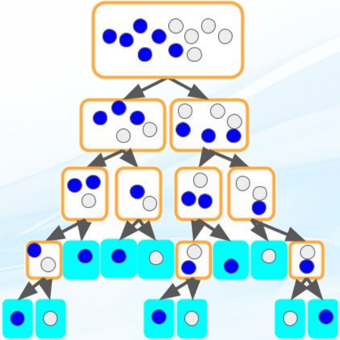
Для любой обучающей выборки можно построить решающее дерево с нулевой ошибкой на обучении.

Доказательство:

Построим решающее дерево, в котором каждый лист содержит только один объект.

Метка в листе определятся только этим одним объектом.

$\Rightarrow$ предсказание для обучающей выборки не содержит ошибок.



Построение дерева

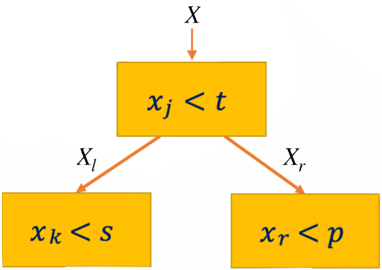
Как строится дерево?

Пусть X — обучающая выборка.

Деление

Найдем правило $I\{x_j < t\}$,
оптимальное по некоторому критерию.

Данное правило разобъет X
на две части: X_ℓ и X_r.



Итерации

Процедура выполняется рекурсивно для двух дочерних вершин
с обучающими выборками X_ℓ и X_r соответственно.

Если выполнен некий критерий остановки,
то не делим текущую вершину.

Выбор разбиения

Пусть в вершине m оказалась выборка X_m.

Пусть $Q(X_m, j, t)$ — критерий ошибки условия $I\{x_j < t\}$.

Оптимизируем его **перебором** по всем возможным признакам j,

для каждого признака по всем возможным его порогам t:

$$Q(X_m, j, t) \longrightarrow \min_{j,t}$$

Критерий информативности (impurity)

$$Q(X_m, j, t) = \frac{|X_\ell|}{|X_m|} \cdot H(X_\ell) + \frac{|X_r|}{|X_m|} \cdot H(X_r)$$

Оценивает величину разброса таргета в вершине.

Хорошее разбиение: после него больше уверены в ответе в вершине.
Т.е. хотим разбить вершину на две так, чтобы полученные две вершины были более однородны по таргетам.

Выбор разбиения

$$Q(X_m, j, t) = \frac{|X_\ell|}{|X_m|} \cdot H(X_\ell) + \frac{|X_r|}{|X_m|} \cdot H(X_r)$$

$H(X_\ell)$ и $H(X_r)$ нормируются на доли объектов, которые идут вправо и влево.

Зачем это нужно?

Пусть $|X_m| = 1000$, $|X_\ell| = 990$, $|X_r| = 10$

В X_ℓ все объекты имеют один класс $\Rightarrow H(X_\ell)$ маленький.

X_r содержит объекты всех возможных классов $\Rightarrow H(X_r)$ большой.

Не так страшно, что X_r получилось плохим, главное, что 990 попали в правильную вершину.

Критерий информативности

Неформальное отпределение

- $H(X)$ зависит от меток в выборке X
- Показывает разброс ответов в X
- Чем меньше разброс ответов в X, тем меньше $H(X)$

Для регрессии

Как показать разброс ответов для задачи регрессии?

Возьмем выборочную дисперсию ответов в качестве $H(X)$:

$$H(X) = \frac{1}{|\mathcal{I}|} \sum_{i \in \mathcal{I}} (Y_i - \overline{Y})^2,$$

где $\mathcal{I}$ — мн-во индексов, соотв. подвыборке X, а $\overline{Y} = \frac{1}{|\mathcal{I}|} \sum_{i \in \mathcal{I}} Y_i$.

Критерий информативности: задача классификации

Пусть решаем задачу классификации на K классов.

$p_k = \frac{1}{|\mathcal{I}|} \sum\limits_{i \in \mathcal{I}} I\{Y_i = k\}$ — доля объектов в классе k в $X_{\mathcal{I}}$.

Энтропийный критерий

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

Мера отличия распределения классов от вырожденного.

Считаем, что $0 \ln 0 = 0$

Критерий Джини

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

Вероятность ошибки случайного классификатора, который выдает ответы пропрорционально p_k.

Свойства:

- $H(X) \geqslant 0$
- При $p_1 = 1, p_2 = 0, \ldots, p_K = 0$ выполнено $H(X) = 0$

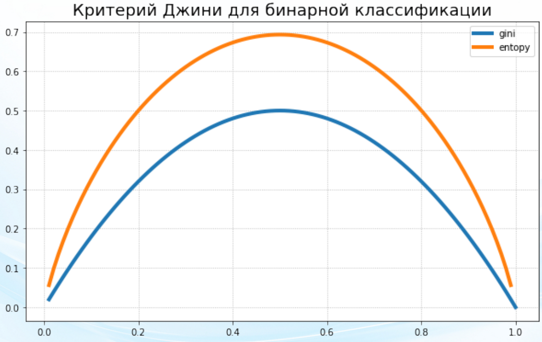
Критерий информативности: задача классификации

Энтропийный критерий

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

Критерий Джини

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



Вероятность p_1

Критерий остановки

Критерий останова

Как понять, разбивать ли вершину далее или сделать ее листовой?

- **Все объекты в вершине одного класса**

  Если выборка сложная, то сработает только когда в вершине осталось 1-2 объекта.

- **В вершину попало $\leqslant k$ объектов.**

  k — гиперпараметр. Нужно выбирать таким, чтобы по k объектам в листе можно было построить надежный прогноз.

- **Глубина дерева превысила порог.**

  Грубый критерий, не зависит ни от распределения классов, ни от числа объектов.

  Хорошо работает в композициях, где много моделей объединяются в одну сложную модель.

Критерий останова

Как понять, разбивать ли вершину далее или сделать ее листовой?

- **Число листьев в дереве превысило порог.**
- **Функционал ошибки при делении не уменьшился.**
  Если лучшее из разбиений приводит к росту функционала ошибки, не разбиваем эту вершину.
- **Функционал ошибки при делении уменьшился на** $< s\%$**.**
  Если лучшее из разбиений не уменьшает функционал на $s\%$, не разбиваем эту вершину.

Метки в листьях

Ответ в листе

Какое предсказание выдавать для объекта, попавшего в лист?

- Классификация:
  1. Самый популярный класс в листе:
  $$\widehat{y} = \arg\max_k \sum_{i \in \mathcal{I}_{leaf}} I\{Y_i = k\}$$
  2. Оценки вероятности классов $\widehat{p} = (\widehat{p}_1, ..., \widehat{p}_K)$, где
  $$\widehat{p}_k = \frac{1}{|\mathcal{I}_{leaf}|} \sum_{i \in \mathcal{I}_{leaf}} I\{Y_i = k\}$$
- Регрессия с критерием MSE:
$$\widehat{y} = \frac{1}{|\mathcal{I}_{leaf}|} \sum_{i \in \mathcal{I}_{leaf}} Y_i$$

Почему это оптимально? Узнаем в статистике!

Случайные леса

Решающее дерево

Один в поле не воин...

Лес

Нужны разные деревья

"Танцующий лес", нац. парк Куршская коса, Калининградская обл.

Метод Random Forest

Композиция вида $F = \frac{1}{B}\sum\limits_{b=1}^{B} f_b$ из B деревьев,

где f_b — дерево, обученное на случайной выборке, причем при обучении в каждом узле дерева использовался RSM — случайное подпространство признаков.

Деревья строятся максимальной глубины, сильно переобученные.

Случайная выборка: упорядоченный выбор с возвращением.

Рекомендуемые размерности подпр-ств в RSM:

- для задач регрессии размерность $\sim d/3$;
- для задач классификации размерность $\sim \sqrt{d}$.

Метод Random Forest

Преимущества:

- не требует сложных экспериментов по настройке параметров;
- в среднем не переобучается с увеличением количества деревьев;
- работает с признаками разной природы;
- возможность распараллеливания.

Недостатки:

- плохо обрабатывает линейные зависимости;
- долго работает на больших данных.


ВСЁ!