Лекция 6. Деревья решений

Основы интеллектуального анализа данных

Полузёров Т. Д.

БГУ ФПМИ

Пример дерева решений

Компоненты бинарного дерева

Дерево состоит из 2-х типов вершин:

- **Внутренняя** вершина v хранит в себе предикат $b_v : \mathbb{X} \to \{0, 1\}$
- **Листовая вершина** v хранит выходное значение $c_v \in \mathbb{Y}$

Любая внутренняя вершина имеет ровно двух потомков.
Любая листовая вершина не имеет потомков.

Глубина дерева h — длина наибольшего маршрута от корня до листа.

Алгоритм работы дерева

Алгоритм $a(x)$ работает по схеме:

1. Стартуем из корня
2. Вычисляем предикат в текущей вершине
3. Если $b_v = 1$ - шагаем в право, $b_v = 0$ - в лево
4. Пока не дошли до листовой вершины, повторяем с шага 2
5. Возвращаем значение в листе c_v

Голосование конъюнкций

Объект x доходит до листовой вершины v тогда и только тогда, когда выполняется конъюнкция $K_v(x)$ всех предикатов на пути от корня до v.

T — множество листовых вершин.
$A_v = \{x \in X | K_v(x) = 1), v \in T\}$ — множества выделяемые конъюнкциями. Причем эти множества не пересекаются, а в объединении совпадают с X.

Решающее дерево как алгоритм классификации:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{v \in T} [c_v = y] K_v(x)$$

причем при любом x только одно слагаемое равно единице.

Предикаты

Предикат - любая решащая функция $b : \mathbb{X} \to \{0, 1\}$

- Пороговая функция $b(x) = [x_i > t]$
- Линейный $b(x) = [\langle x, \omega \rangle > t]$
- Метрический $b(x) = [\rho(x, x_v) > t]$, где x_v - некоторый объект выборки

Но выбор сложных предикатов - излишен. Поэтому используются $b(x) = [x_i > t]$

Свойства дерева

После определения дерева видно несколько свойств:

- Дерево есть набор из $|T|$ конъюнкий, непересекающихся и покрывающих все пространство X.
- Алгоритм $a(x)$ — кусочно постоянная функция.Градиентные методы не применимы.
- Дерево способно полностью выучить обучающую выборку. В этом случае низкая обобщающая способность.

Решающий пень

Пусть имеется размеченная выборка
$X = (x_1, \dots x_\ell), x_i \in \mathbb{R}^n, Y = (y_1, ..., y_\ell)$.

Необходимо минимизировать функцию качества $L(X)$.
Используя предикат $b(x_i|j, t) = [x_i^j > t], j = 1, \dots, n$
хотим разбить $X = X_L \cup X_R$, чтобы
$L(X) > L(X_L) + L(X_R)$

И даже

$$j^*, t^* = \arg\min L(X_L) + L(X_R)$$

Сложность построения

Для вычисления предиката $b(x)$ по выборке необходимо $O(\ell)$.
А для перебора всевозможных пар (j, t) потребуется $O(\ell n)$.
И итоговая сложность построения пня есть $O(\ell^2 n)$.

Если строить дерево произвольной глубины на котором достигается минимум на тестовой выборке — задача становится NP-полной. Поэтому разрешим себе строить не оптимальные, но хорошие деревья.

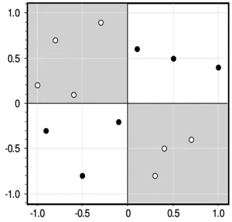
Жадный алгоритм

Очевидной идеей есть строить дерево рекурсивно, как для случая решающего пня.

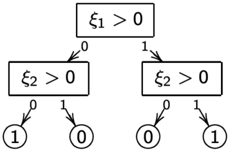
Алгоритм :
На входе имеется выборка X_m

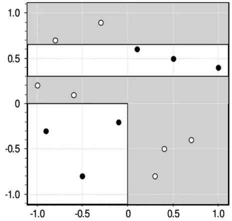
1. Создать вершину v
2. Если выполнен критерий остановки $Stop(X_m)$ — делаем v листом и приписываем ответ $Ans(X_m)$
3. Иначе, перебираем предикаты и находим (i^*, j^*) который производит разбиение $X = X_L \cup X_R$ максимизируя критерий ветвления $Branch(X_m, i, j)$
4. Вызвать рекурсивно для X_L и X_R эту процедуру

Неоптимальность жадного алгоритма

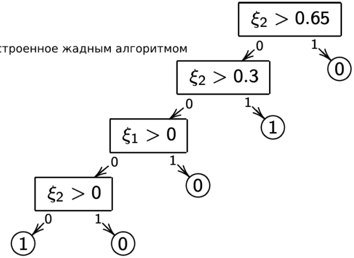


Оптимальное дерево





Дерево,построенное жадным алгоритмом



Листовые вершины

Пусть выполен критерий остановки и необходимо выбрать ответ для данного листа $Ans(X_m)$.

Можно выбирать из следующих соображений:

- Классификации — метка наиболее частого класса, или можно оценить вероятности классов по частотам.
- Регрессия — среднее, медиана или другая статистика.
- Простая модель, например для объктов дошедших до текущего листа выдавать ответ модели, обученной на соответсвующей подвыборке.

Критерий остановки

В качестве критерия остановки можно взять:

- Объекты в вершине принадлежат одному классу или достаточно однородны
- Объектов в вершине слишком мало
- Неудается подобрать удачное разбиение $X = X_L \cup X_R$

Критерий ветвления

Как определить оптимальное разбиение здесь и сейчас? Имеем на вход подвыборку X_m
Пусть задача функция ошибки $L(y, c)$

Если текущую вершину сделать листовой и подобрать c, то достиигнем минимальной средней ошибки

$$H(X_m) = \min_{c \in Y} \frac{1}{|X_m|} \sum_{i=1}^{m} L(y_i, c)$$

Величину H называют **информативностью** (impurity).

После разбиения

Быть может сможем разбить $X_m = X_L \cup X_R$ используя предикат b и решить в каждой новой вершине задачу отдельно.

Средняя ошибка после разбиения

$$\frac{1}{|X_m|}\left(\sum_{x \in X_L} L(y_i, c_L) + \sum_{x \in X_R} L(y_i, c_R)\right) =$$

$$= \frac{|X_L|}{|X_m|} H(X_L) + \frac{|X_R|}{|X_m|} H(X_R)$$

Прирост информативности

Рассмотрим разность информативности до разбиения и после

$$IGain(b, X_m) = H(X_m) - \frac{|X_L|}{|X_m|}H(X_L) + \frac{|X_R|}{|X_m|}H(X_R)$$

Если значение велико, значит нам выгодно произвести такое разбиение. Кроме того, чем больше — тем лучше.

Предикат b при котором достигается наибольшее значение $IGain$ и выбирается для текущей вершины.

Энтропия

Энтропия — мера неопределенности распеделения

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

- Энтропия равна нулю у тривиальной случайной величине (принимает одно значение)
- Наибольшее значение энетропии у равномерного распределения.

Критерий Джини

Также используется критерий Джини.

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

$H(X_m)$ равно математическому ожиданию числа неправильно классифицированных объектов в случае, если мы будем приписывать им случайные метки из дискретного распределения, заданного вероятностями $(p_1, \ldots, p_k)$