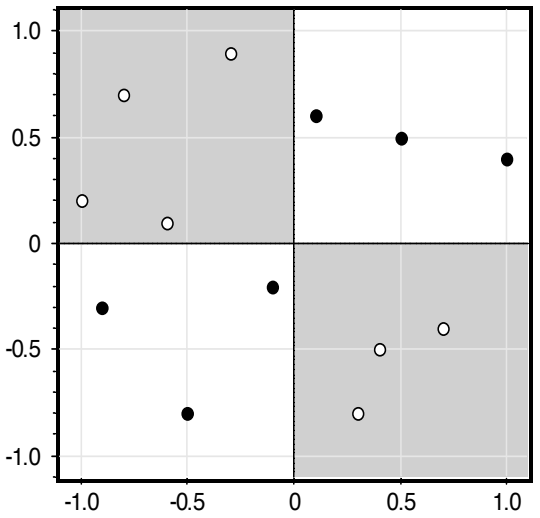
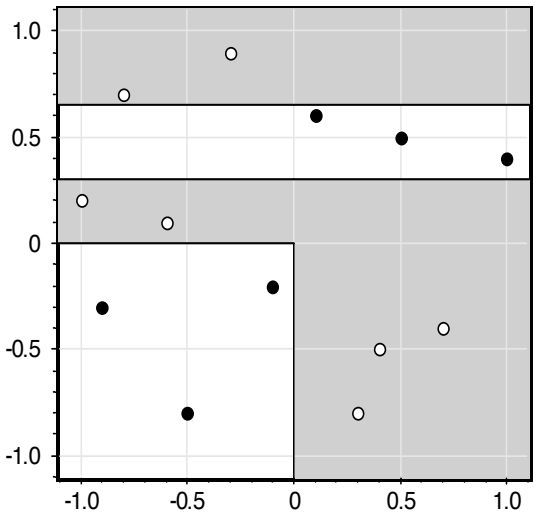
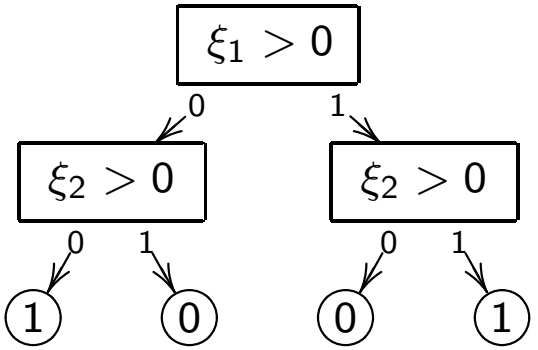
Жадный ID3 переусложняет структуру дерева

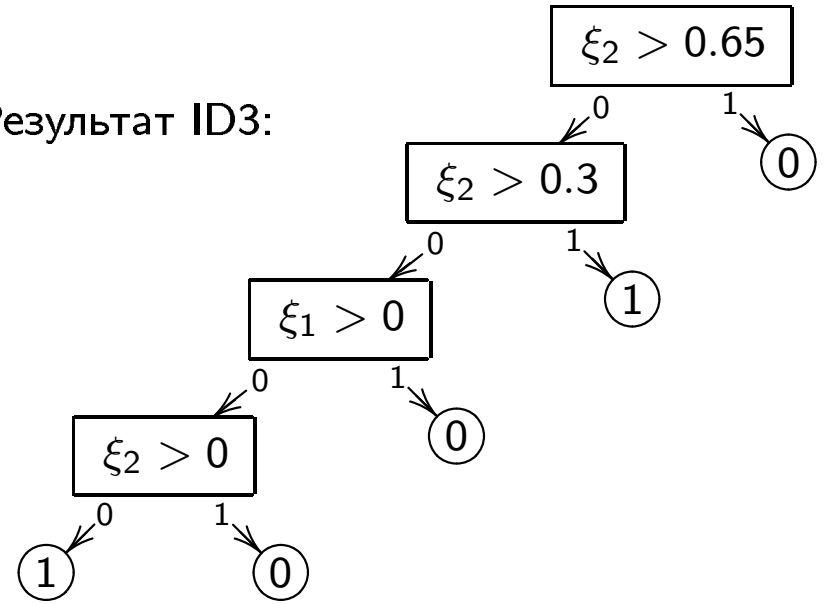




Оптимальное дерево для задачи XOR:



Результат ID3:



Усечение дерева (pruning). Алгоритм C4.5

X^k — независимая контрольная выборка, $k \approx 0.5\ell$.

1: **для всех** $v \in V_{\text{внутр}}$
2: $S_v :=$ подмножество объектов X^k, дошедших до v;
3: **если** $S_v = \varnothing$ **то**
4: **вернуть** новый лист v, $c_v :=$ Мажоритарный класс(U);
5: число ошибок при классификации S_v четырьмя способами:
$r(v)$ — поддеревом, растущим из вершины v;
$r_L(v)$ — поддеревом левой дочерней вершины L_v;
$r_R(v)$ — поддеревом правой дочерней вершины R_v;
$r_c(v)$ — к классу $c \in Y$.
6: в зависимости от того, какое из них минимально:
сохранить поддерево v;
заменить поддерево v поддеревом L_v;
заменить поддерево v поддеревом R_v;
заменить поддерево v листом, $c_v := \arg\min\limits_{c \in Y} r_c(v)$.

CART: деревья регрессии и классификации

Обобщение на случай регрессии: $Y = \mathbb{R}$, $c_v \in \mathbb{R}$

Пусть U_v — множество объектов x_i, дошедших до вершины v

Значения в терминальных вершинах — МНК-решение:

$$c_v := \hat{y}(U_v) = \frac{1}{|U_v|} \sum_{x_i \in U_v} y_i$$

Критерий информативности — среднеквадратичная ошибка

$$I(\beta, U_v) = \sum_{x_i \in U_v} \big(\hat{y}_i(\beta) - y_i\big)^2,$$

где $\hat{y}_i(\beta) = \beta(x_i)\hat{y}(U_{v1}) + \big(1 - \beta(x_i)\big)\hat{y}(U_{v0})$
— прогноз после ветвления β и разбиения $U_v = U_{v0} \sqcup U_{v1}$

CART: критерий Minimal Cost-Complexity Pruning

Среднеквадратичная ошибка со штрафом за сложность дерева

$$C_\alpha = \sum_{x_i=1}^{\ell} \left(\hat{y}_i - y_i\right)^2 + \alpha |V_{\text{лист}}| \to \min$$

При увеличении α дерево последовательно упрощается.
Причём последовательность вложенных деревьев единственна.

Из этой последовательности выбирается дерево с минимальной ошибкой на тестовой выборке (Hold-Out).

Для случая классификации используется аналогичная стратегия усечения, с критерием Джини.

Резюме

- Преимущества решающих деревьев:
  - интерпретируемость,
  - допускаются разнотипные данные,
  - возможность обхода пропусков;
- Недостатки решающих деревьев:
  - переобучение,
  - фрагментация,
  - неустойчивость к шуму, составу выборки, критерию;
- Способы устранения этих недостатков:
  - редукция,
  - композиции (леса) деревьев.