ТЕХНОСФЕРА

Лекция 7

Решающие деревья

Чепарухин Сергей
Data Scientist@Mail.Ru

Содержание

1. Знакомимся с решающими деревьями
2. Учимся их строить
3. Разбираем задачу оттока клиентов

Деревья решений

Пример

Вы приходите в банк за кредитом, подаете анкету со всеми необходимыми документами
Сотрудник банка проверяет вашу анкету:
1. Если возраст меньше 18, то отказываем, иначе шаг 2.
2. Если стаж больше года - дать кредит, иначе - шаг 3.
3. Если зарплата меньше 30 тысяч рублей, то отказать, иначе шаг 4.
4. Если есть другие кредиты, то отказываем, иначе выдаем.

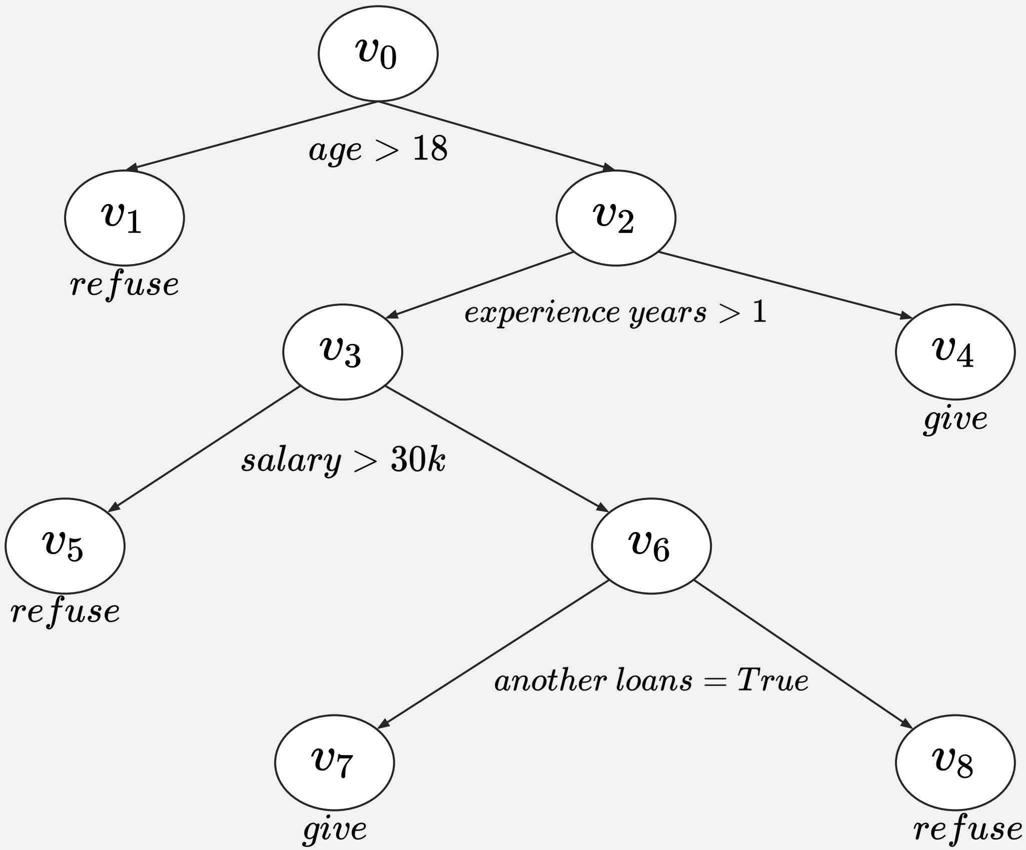
Определение бинарного решающего дерева

Рассмотрим бинарное дерево, в котором:

- каждой внутренней вершине v приписана функция $\beta_v : \mathbb{X} \to \{0, 1\}$;
- каждой терминальной(листовой) вершине v приписана метка класса $c_v \in Y$.

Процесс предсказания - обход дерева из вершины v_0 до терминальных вершин с последовательным вычислением соответствующих функций β_v

Дерево из примера



Варианты разделяющих функций

Что можно взять в качестве $\beta_v : \mathbb{X} \to \{0, 1\};$:

- одномерные предикаты(пороговая функция)
- многомерные предикаты:
  - линейные $\beta_v(x) = [\langle w, x \rangle]$
  - метрические $\beta_v(x) = [\rho(x, x_0) < s]$, где точка x_0 - любая точка признакового пространства

Как строить деревья

Конкретный алгоритм построения задается:

1. видом предикатов;
2. критерием информативности $Q(X, \beta_v)$;
3. критерием останова;
4. методом обработки пропущенных значений

Критерии информативности для классификации

Определим общее число объектов, пришедших в вершину v_m как R_{v_m}. $p_{v_m k}$ - это доля класса c_k в вершине v_m.

- Ошибка классификации:

$$F_E(R_{v_m}) = 1 - \max_k p_{v_m k} \qquad Q_E(R_{v_m}, \beta) = F_E(R_{v_m}) - \frac{N_{v_l}}{N_{v_m}} F_E(R_{v_l}) - \frac{N_{v_r}}{N_{v_m}} F_E(R_{v_r})$$

- Индекс Джини(Gini):

$$F_G(R_{v_m}) = 1 - \sum_k (p_{v_m k})^2 = \sum_{k' \neq k} p_{v_m k'} p_{v_m k}$$

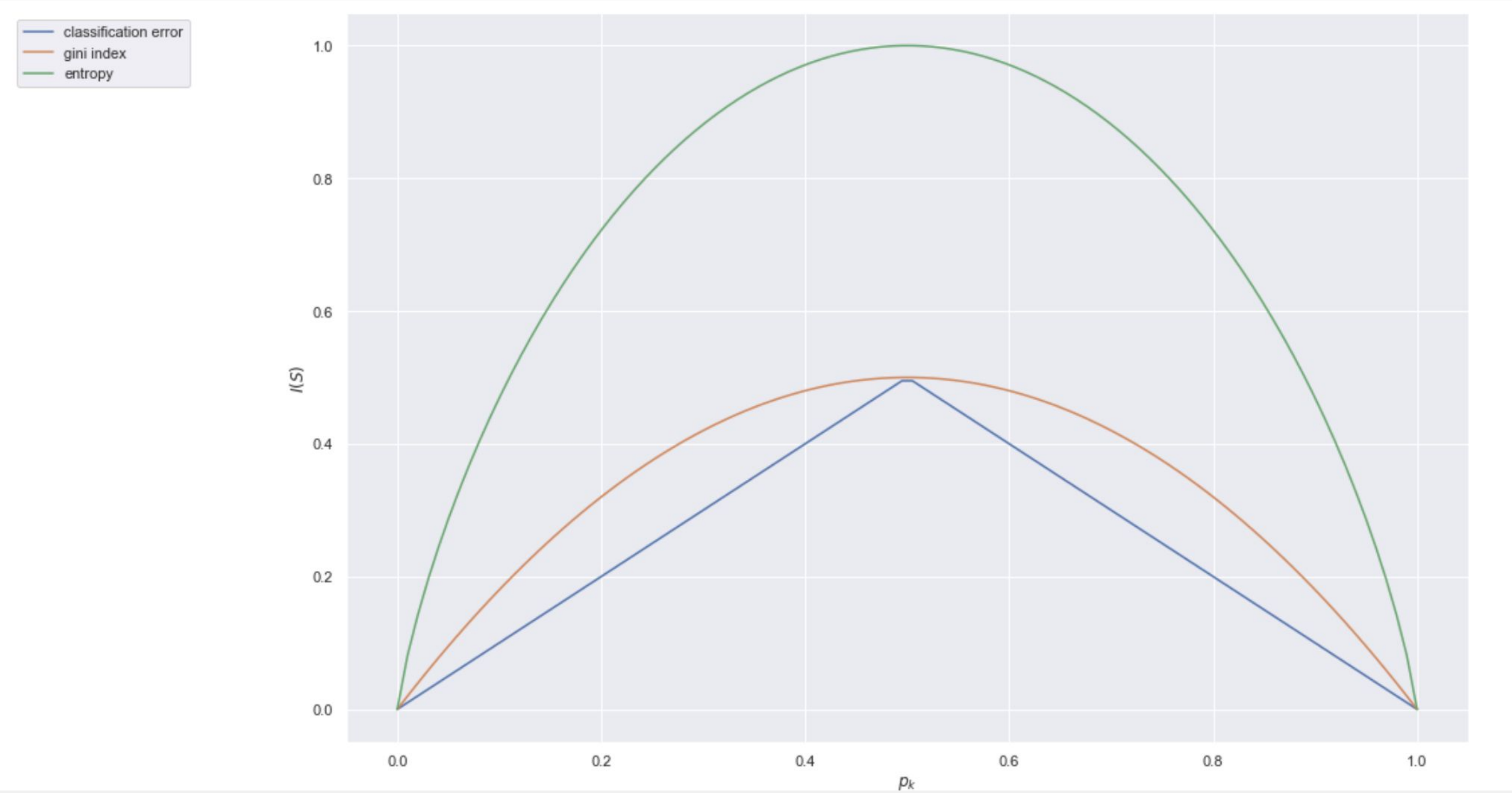
$$Q_G(R_{v_m}, \beta) = F_G(R_{v_m}) - \frac{N_{v_l}}{N_{v_m}} F_G(R_{v_l}) - \frac{N_{v_r}}{N_{v_m}} F_G(R_{v_r})$$

- Энтропийный критерий:

$$F_H(R_{v_m}) = H(p_{v_m}) = -\sum_k p_{v_m k} \log(p_{v_m k})$$

$$Q_H(R_{v_m}, \beta) = F_H(R_{v_m}) - \frac{N_{v_l}}{N_{v_m}} F_H(R_{v_l}) - \frac{N_{v_r}}{N_{v_m}} F_H(R_{v_r})$$

Как выглядят меры неопределенности



Критерии информативности для регрессии

- Дисперсия ответов:

$$F(R_{v_m}) = \frac{1}{N_{vm}} \sum_{x_i \in R_{vm}} \Big(y_i - mean(y_i)\Big)^2$$

- Среднее абсолютное отклонение от медианы:

$$F(R_{v_m}) = \frac{1}{N_{vm}} \sum_{x_i \in R_{vm}} \Big|y_i - median(y_i)\Big|$$

Критерии останова

- Пока не закончится не разделенная выборка
- Ограничение максимальной глубины
- Ограничение минимального числа объектов в вершине
- Ограничение максимального количества терминальных вершин(листьев)
- В листе находятся объекты одного класса
- Ограничение на относительное изменение критерия информативности

Обработка пропущенных значений

1. Удалить объекты/признаки с пропусками
2. Пропуск - отдельное значение
3. Вычисление критерия информативности без учета объектов с пропусками
4. Суррогатные предикаты
5. Заполнение средними значениями/нулями

Как предсказывать

$c = \max_k p_{v_m k}$ - классификация

$p_k = p_{v_m k}$ - если необходима вероятность

$y_k = mean_{v_m}(y_i)$ - регрессия

Обработка категориальных признаков

- Разбиение на все возможные значения категориального признака
- Разбиение значений на два подмножества, подбираем подмножества по критерию информативности
- Подбираем по встречаемости:

$$\frac{1}{N_{vm}(k_{(1)})} \sum_{x_i \in R_{vm}(k_{(1)})} [y_i = +1] \leq \ldots \leq \frac{1}{N_{vm}(k_{(n)})} \sum_{x_i \in R_{vm}(k_{(n)})} [y_i = +1]$$

Если ищем по Джини или энтропийному, эквивалентно разбиению на два подмножества

$$\frac{1}{N_{vm}(k_{(1)})} \sum_{x_i \in R_{vm}(k_{(1)})} y_i \leq \ldots \leq \frac{1}{N_{vm}(k_{(n)})} \sum_{x_i \in R_{vm}(k_{(n)})} y_i$$

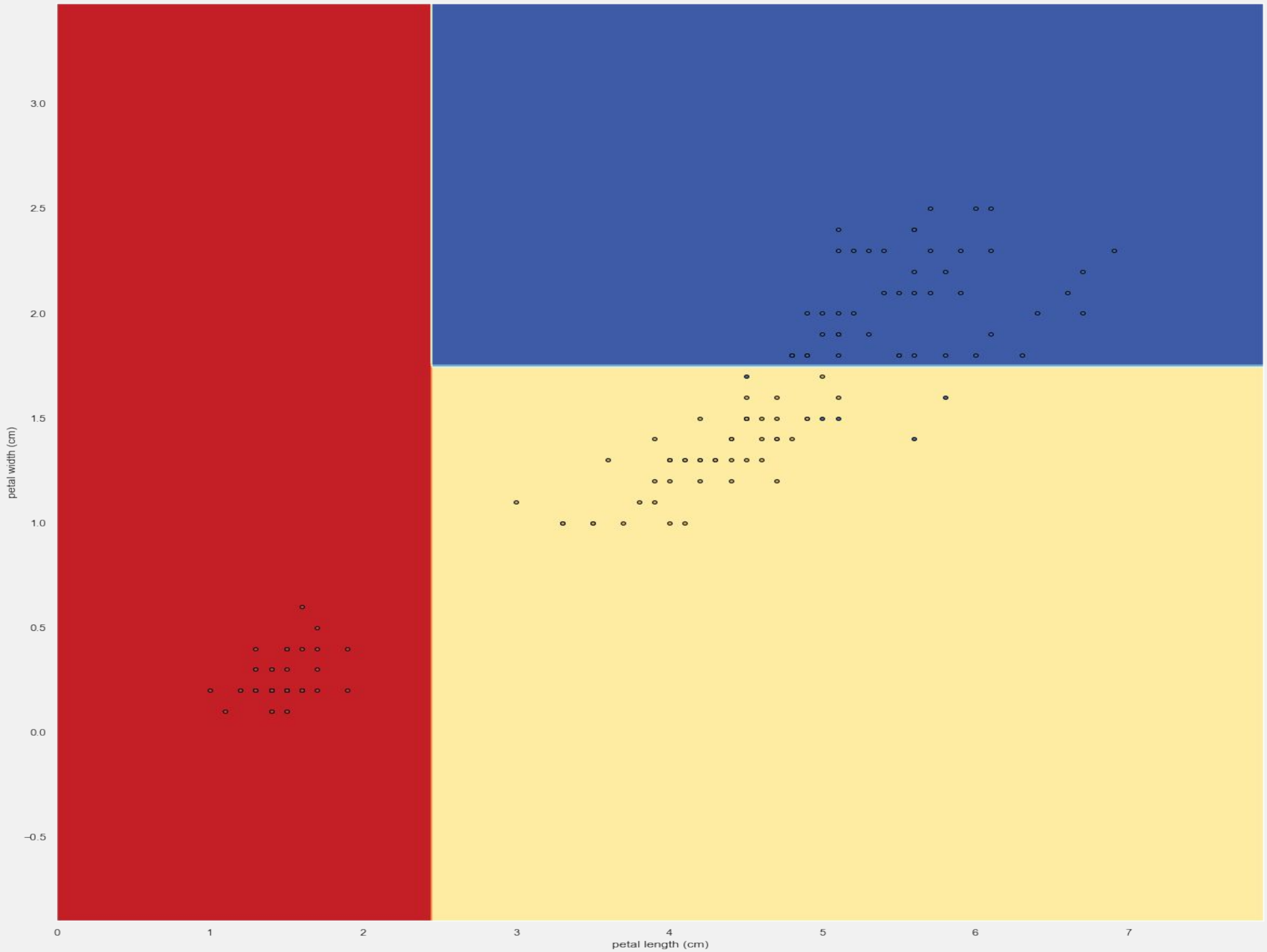
Специальные алгоритмы построения деревьев

- ID 3
  - Использует энтропийный критерий
  - Только категориальные признаки
  - Количество потомков = количеству значений признака
  - Строится до тех пор пока в каждом листе не окажутся объекты одного класса или пока разбиение дает уменьшение критерия
- C 4.5
  - Использует нормированный энтропийный критерий
  - Поддержка вещественных признаков
  - Категориальные как в ID3
  - Критерия останова - ограничение на число объектов в листе
  - При пропуске значения переход по всем потомкам
- CART(реализован в scikit-learn)
  - Использует критерий Джини
  - Поддержка разных типов признаков
  - При пропусках значений строит суррогатные предикаты

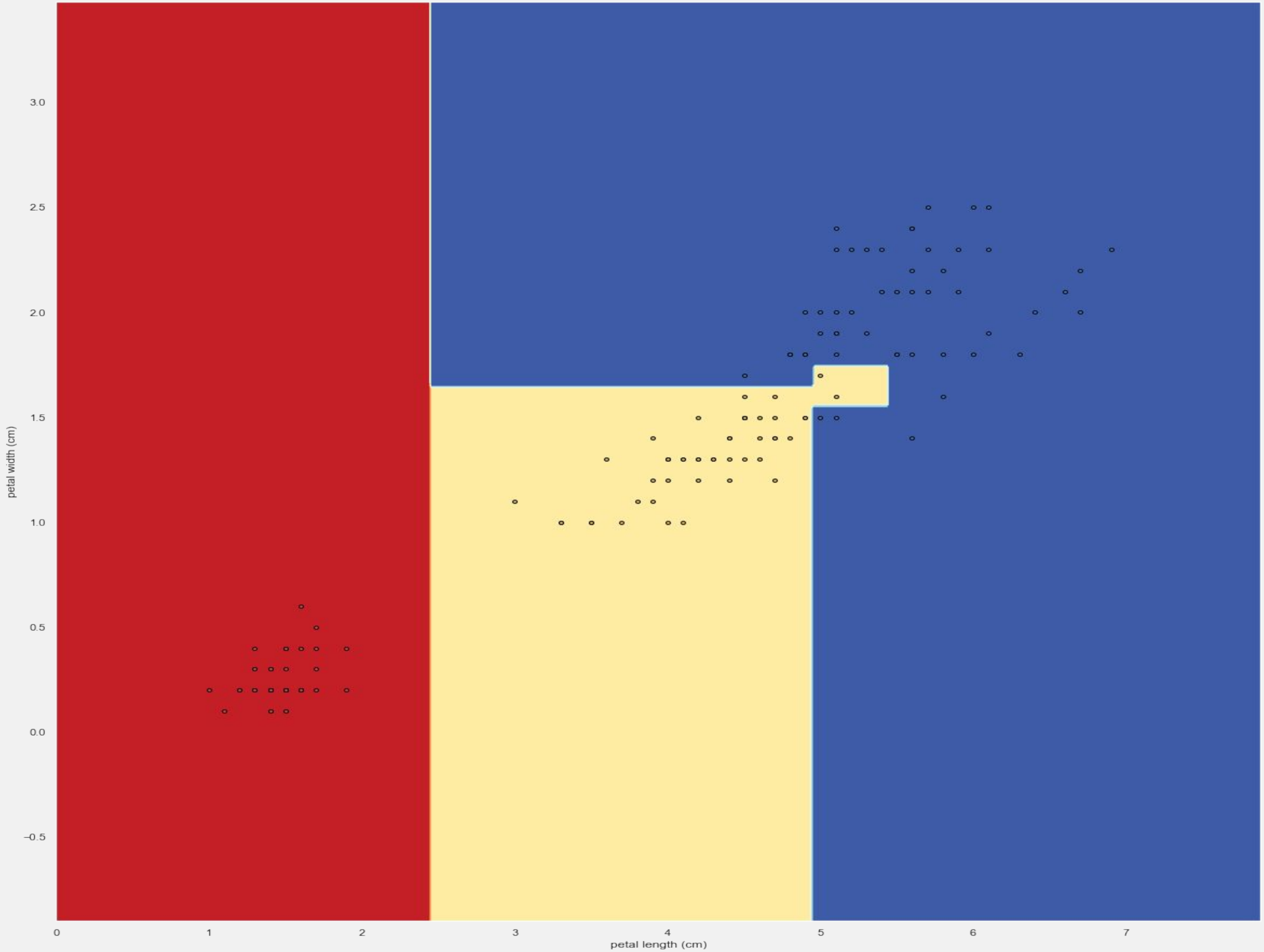
Преимущества и недостатки

- Преимущества
    - Простота построения
    - Интерпретируемость (при небольшой глубине)
    - Требуются минимальная предобработка признаков
    - Встроенный отбор признаков
- Недостатки
    - Склонность к переобучению
    - При добавлении новых объектов надо полностью перестраивать и результат может получится совершенно иным
    - Жадность построения
    - Сложность построения модели в случае разделяющей полосы, не параллельной осям координат

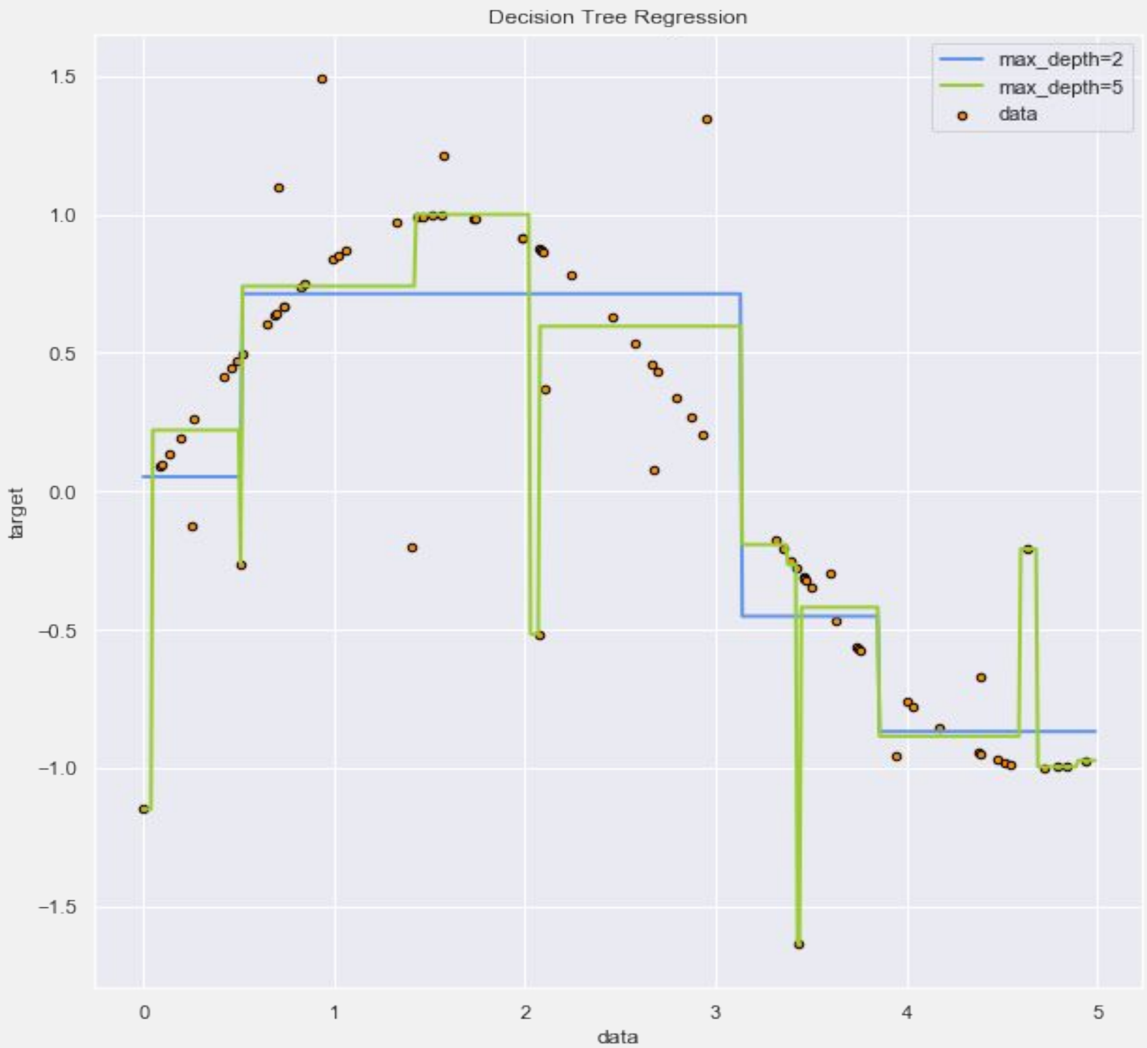
Примеры гиперплоскостей



Примеры гиперплоскостей



Пример построения деревьев для регрессии



Сыграем в угадайку

Задача регрессии:

Какая высота у Эйфелевой башни?

Задача классификации: На какой картинке леопард?

Композиции деревьев. Бэггинг

Деревья переобучаются, поэтому поодиночке их использовать плохо из-за низкой обобщающей способности.
Можно обучить множество разных деревьев и усреднять их ответ!

Бэггинг(Bagging=Bootstrap Aggregating)

- Обучаем N базовых моделей на n объектах
- Каждая модель обучается на своей подвыборке из l объектов, взятых случайно с возвращением(Bootstrap)
- Ответ композиции равен среднему ответу базовых алгоритмов

Random Forest

Строим N деревьев. Каждое дерево строится следующим образом:

1. Генерируем подвыборку $\hat{X}_n$;
2. В каждом узле дерева сперва выбираем m случайных признаков, и ищем оптимальное разбиение только среди них;
3. Дерево строится до тех пор, пока в каждом сплите окажется не более n_{min} объектов

Предсказание осуществляется путем усреднения результатов предсказаний каждого из построенных деревьев.

Extra Trees(Extremely Randomized Trees)

- Все также сэмплируем выборку;
- Не сэмплируем признаки;
- Для каждого признака сэмплируем порог и строим разбиение по нему, без подбора по критерию информативности.

Дополнительные материалы

- Как работают деревья "на пальцах"
- Про визуализацию деревьев решений
- Гайд про энтропию
- Гайд про энтропию 2
- *Hastie T., Tibshirani R., Friedman J.(2009).* The Elements of Statistical Learning. Ch9.2
- Random Forests

ТЕХНОСФЕРА

Спасибо за внимание!

Вопросы?