

Машинное обучение

Лекция 4. Решающие деревья и ансамбли



Напоминание: часто используемые методы

- Линейные модели
- Решающие деревья
- Ансамбли решающих деревьев

Обсуждаем сегодня: деревья и ансамбли

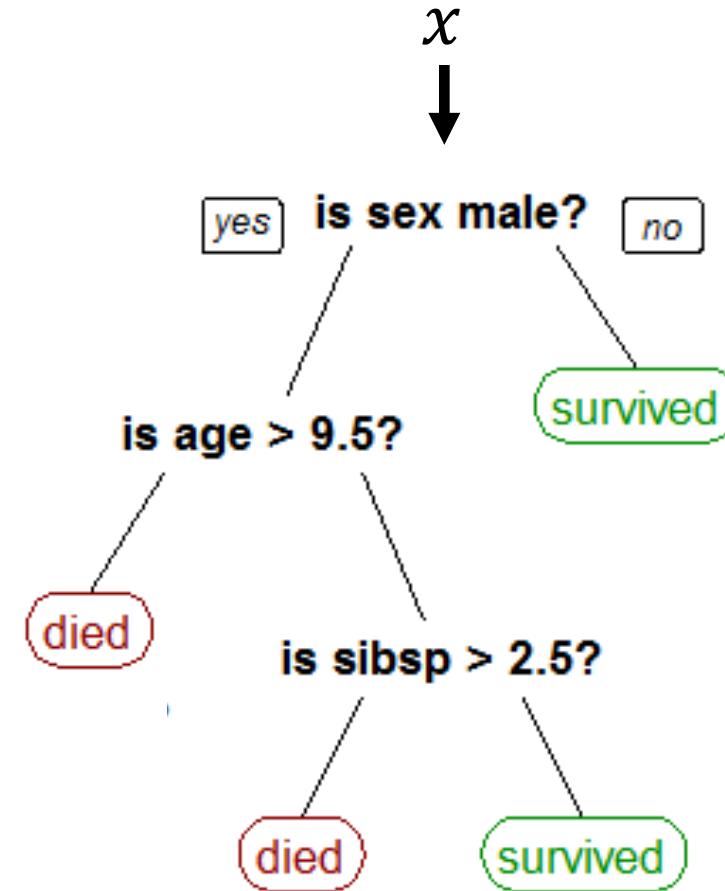
- I. Решающие деревья
- II. Ансамбли деревьев
- III. Общие идеи построения ансамблей

I. Решающие деревья

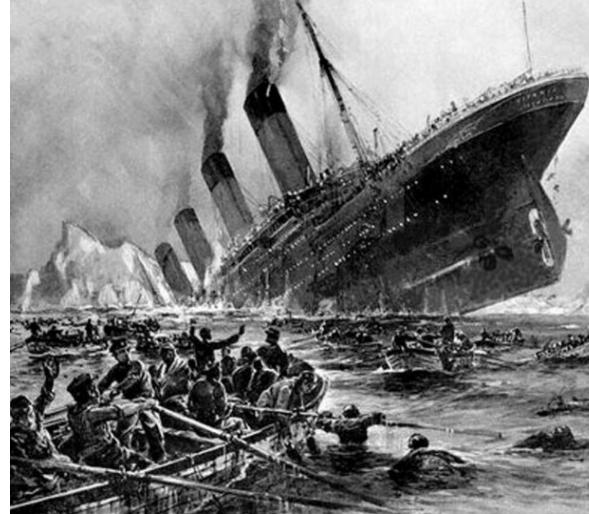
План

1. Что такое решающие деревья
2. Решающие деревья в классификации и регрессии
3. Как строить решающие деревья
4. Дополнительные темы

Решающее дерево



Датасет



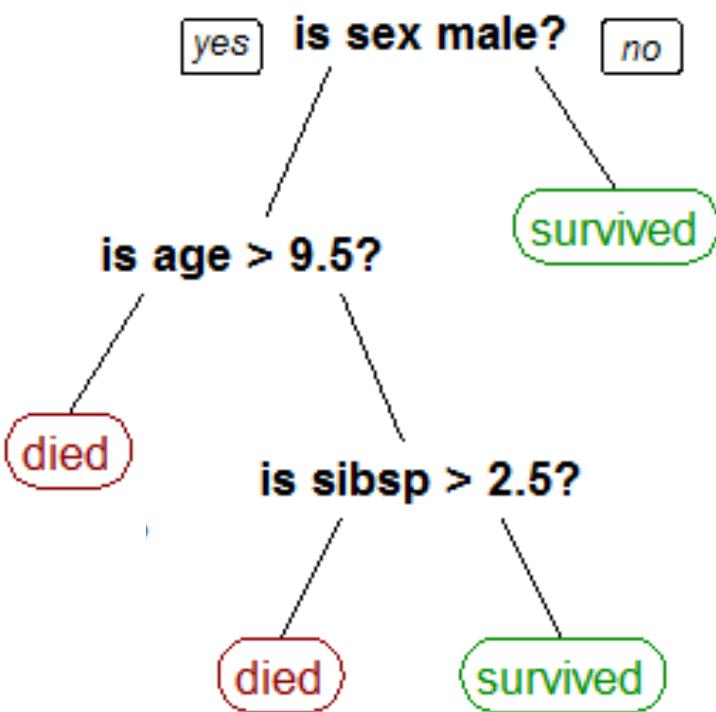
«Titanic Dataset» - список пассажиров Титаника, для которых даны возраст, пол, количество членов семьи на борту и другие признаки.

Целевые значения: выжил пассажир или нет
(задача классификации)

Решающее дерево

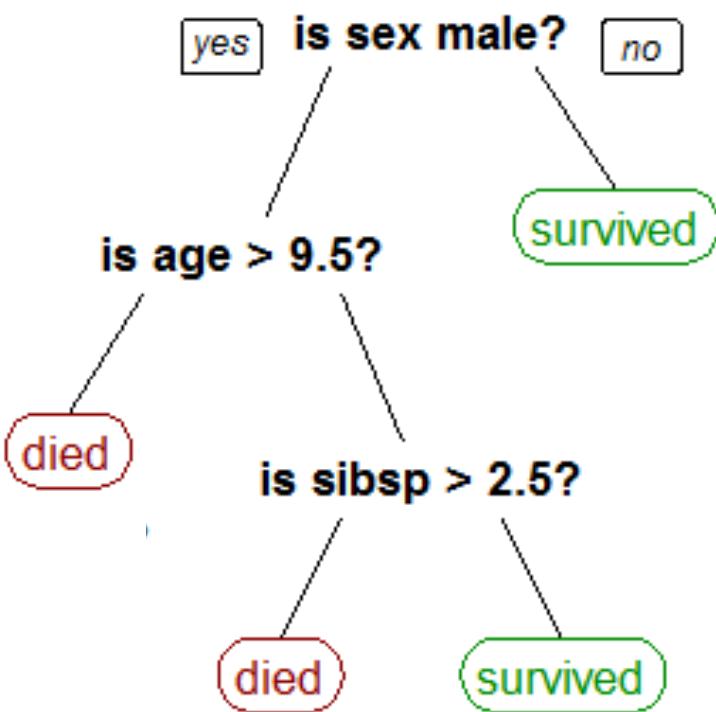
$$x = (9, \text{ male}, 3)$$

↓



Решающее дерево

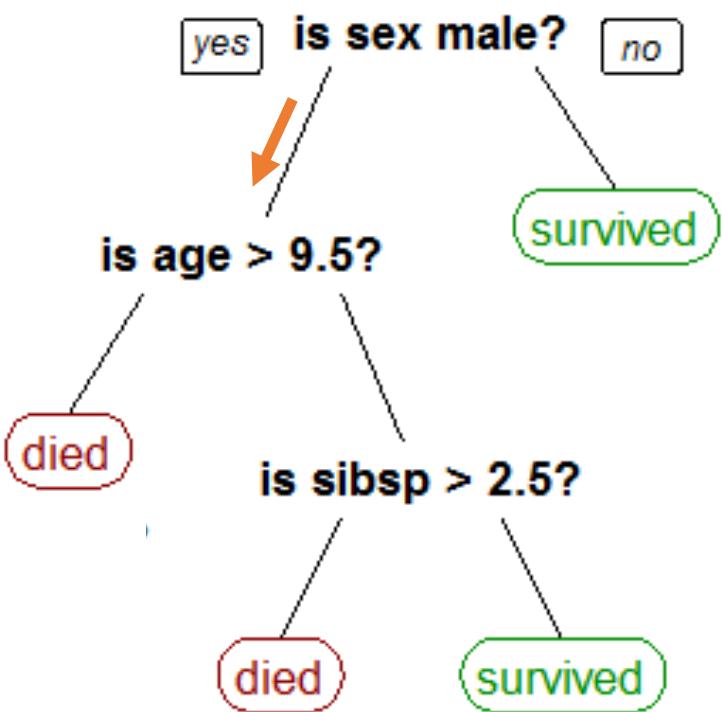
$$x = (9, \underset{\text{age}}{\text{male}}, \underset{\text{sex}}{3}, \underset{\text{sibsp}}{3})$$



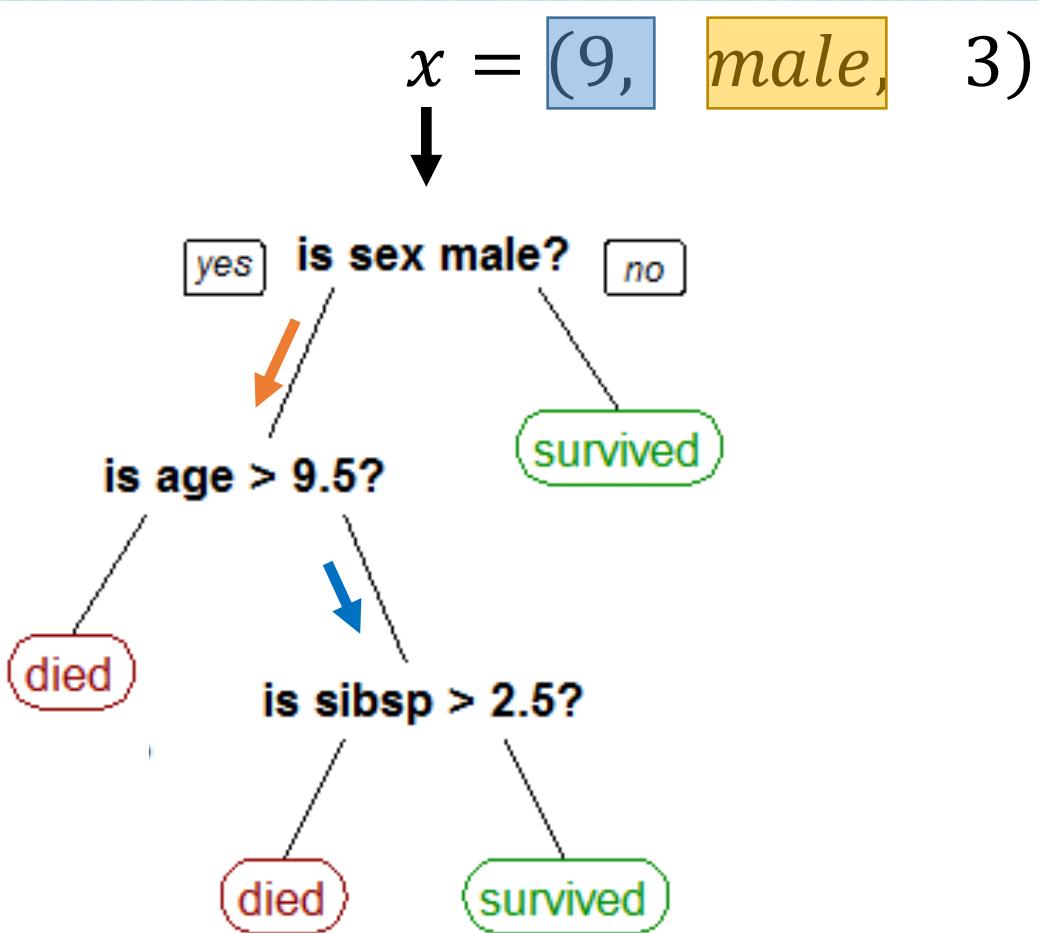
Решающее дерево

$$x = (9, \text{male}, 3)$$

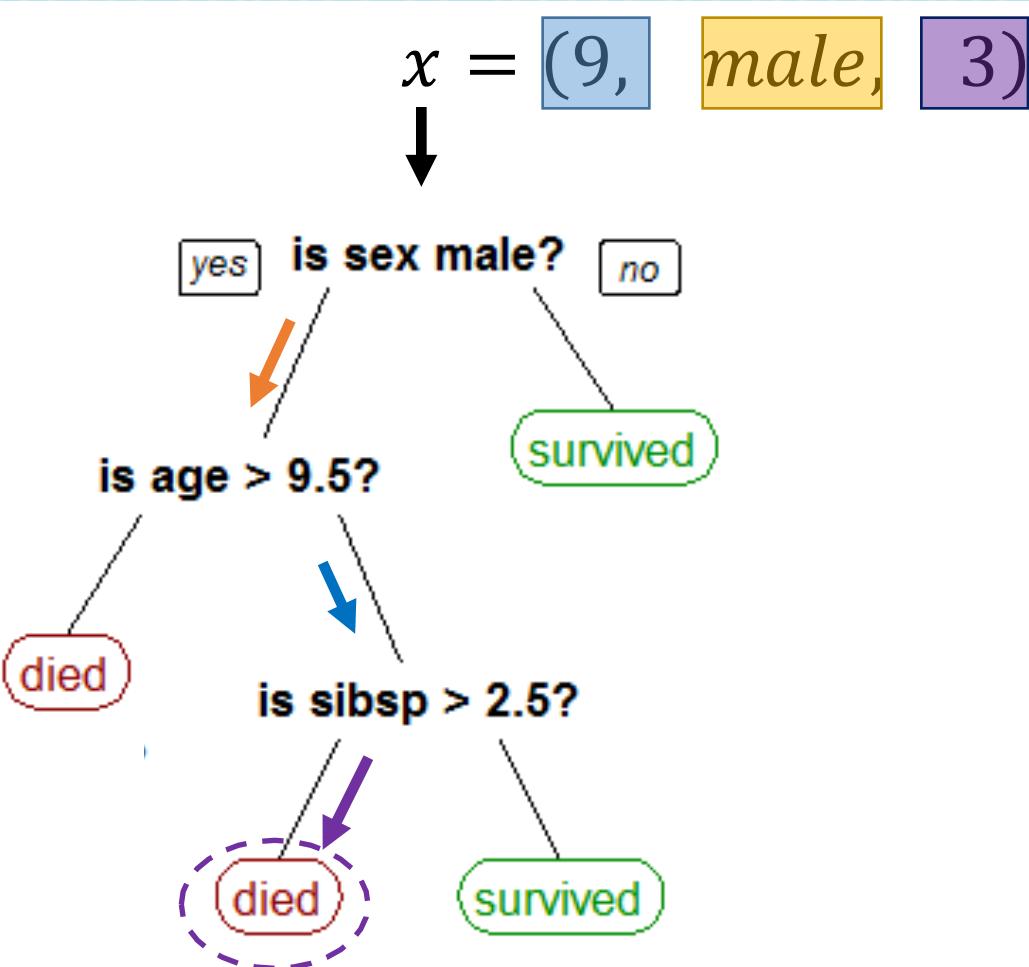
↓



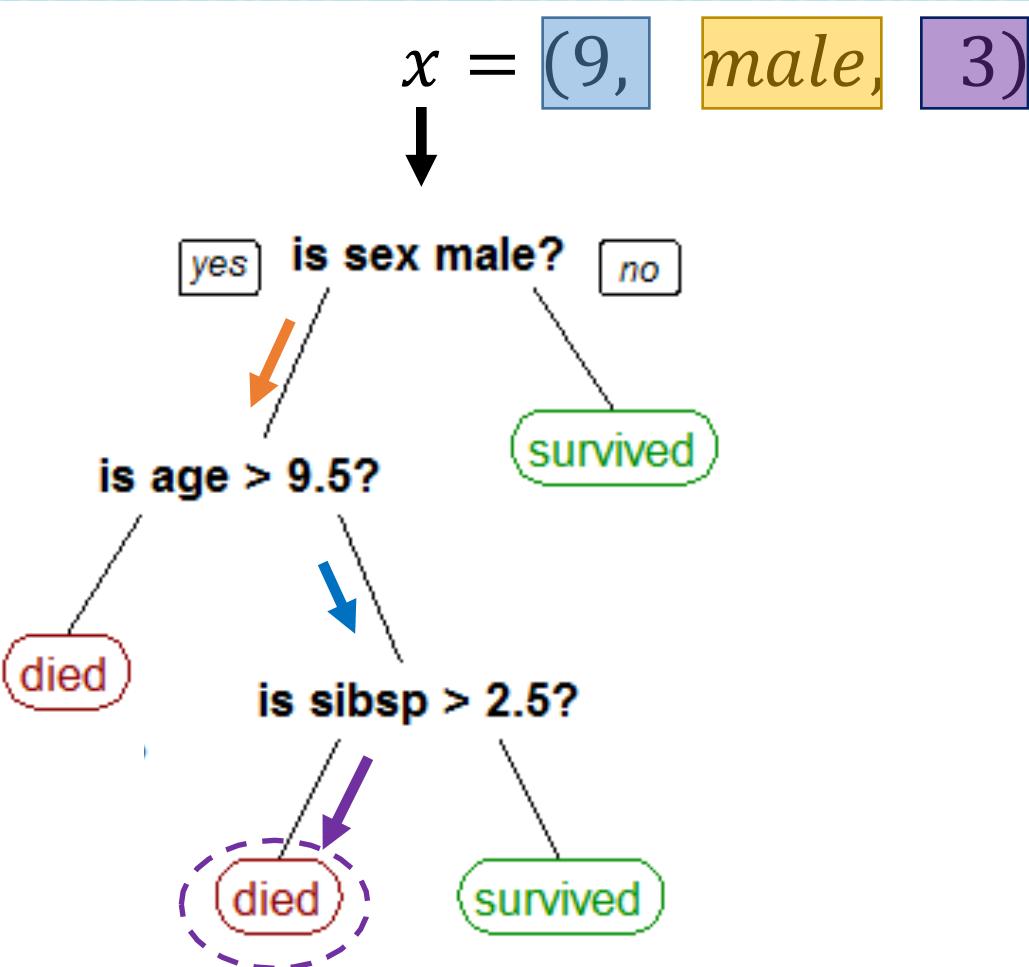
Решающее дерево



Решающее дерево

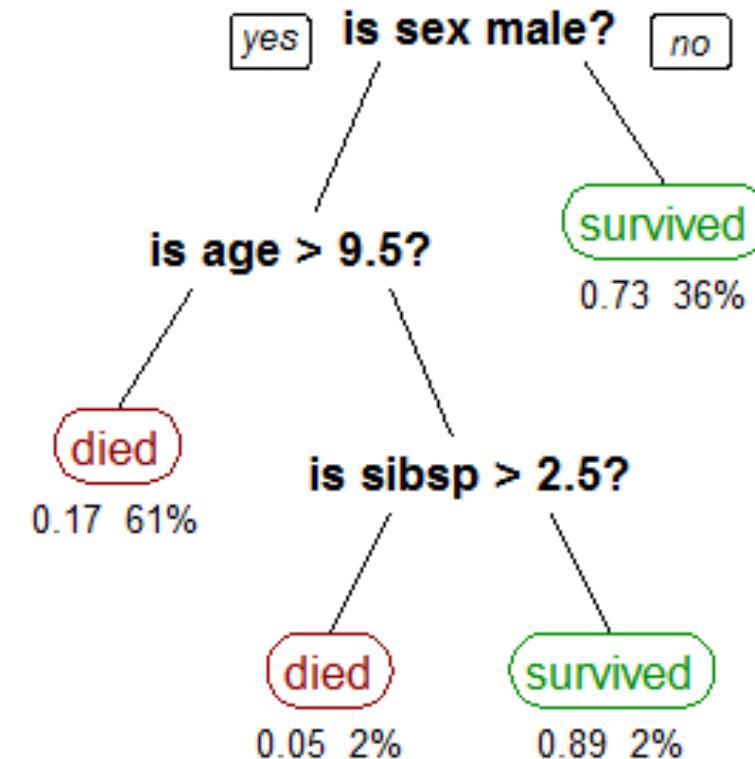


Решающее дерево

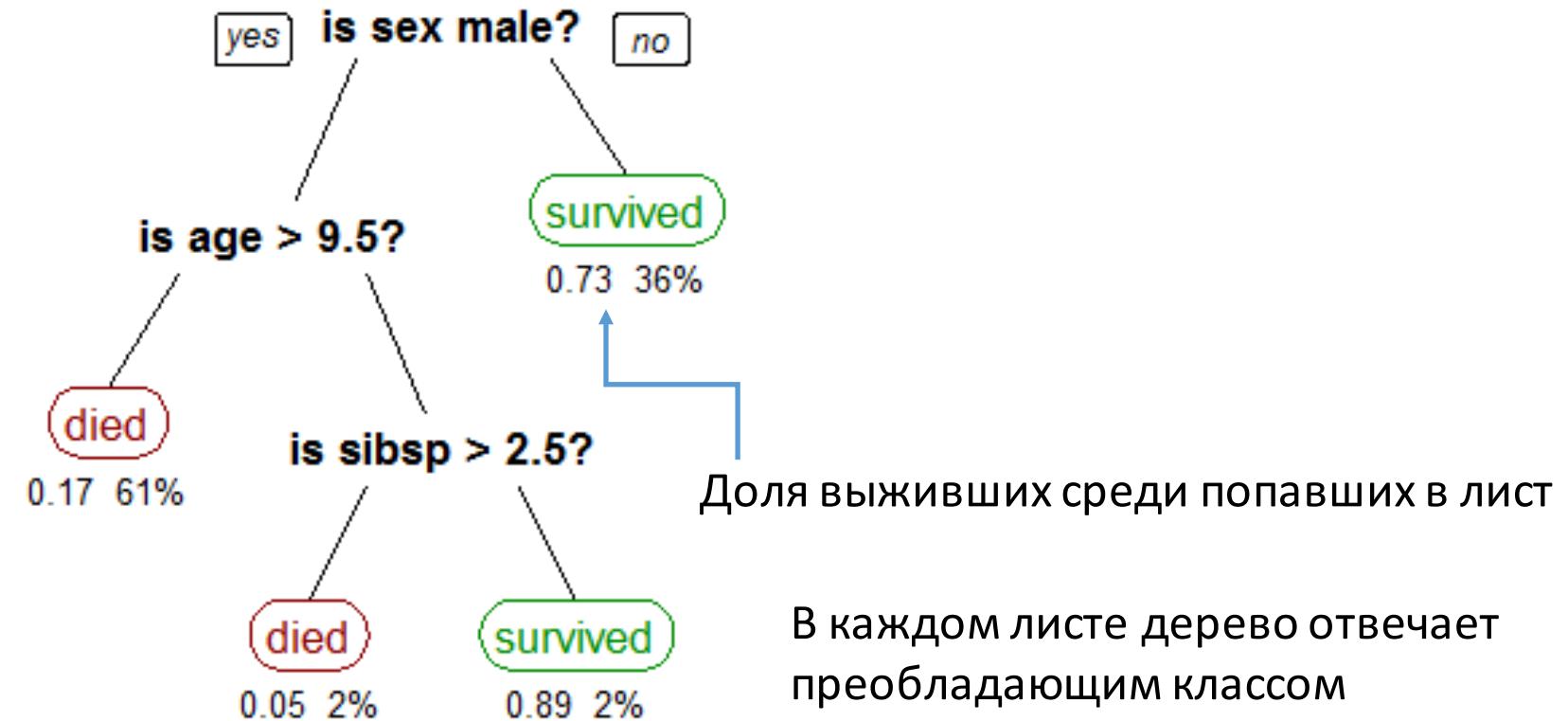


$y = \text{died}$

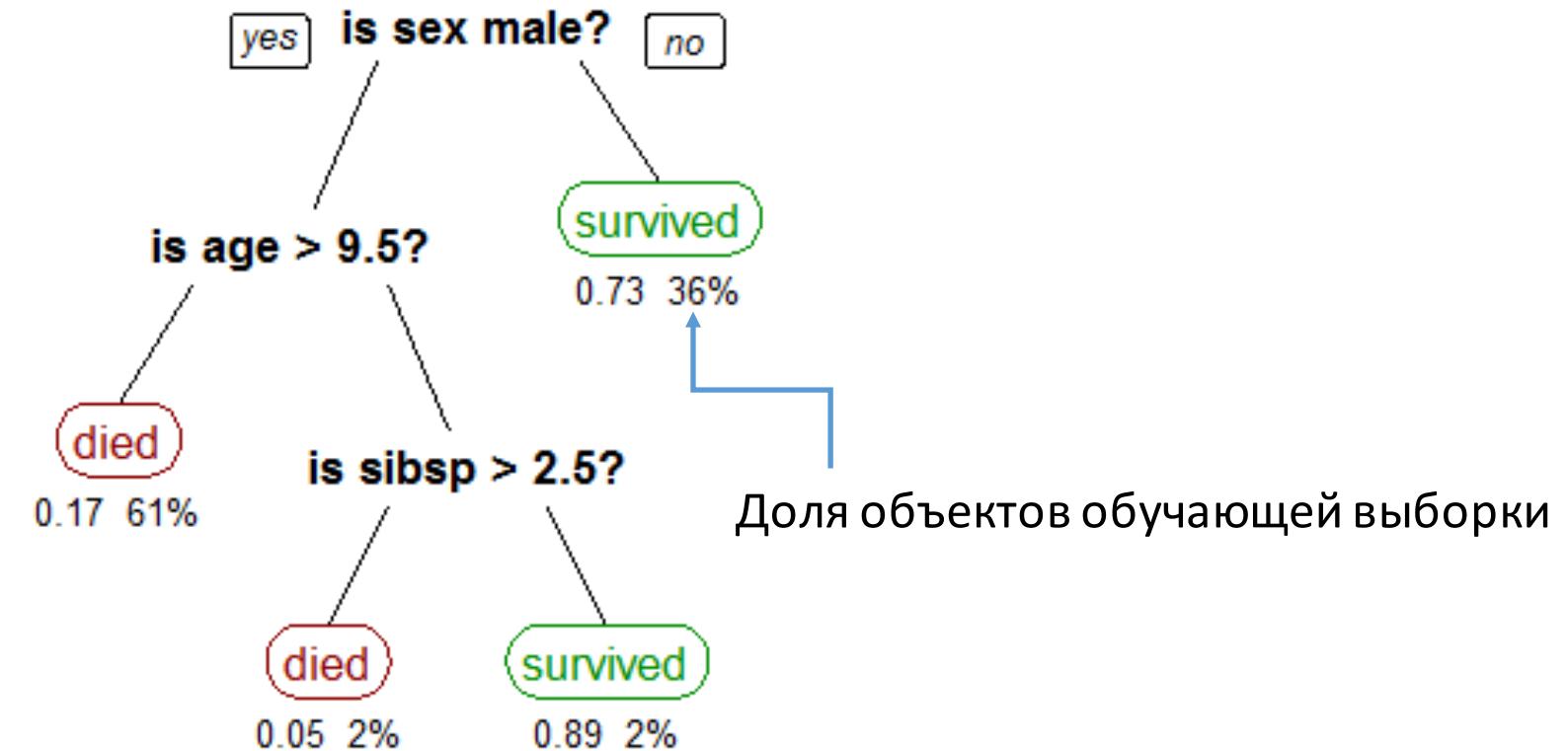
Решающее дерево: классификация



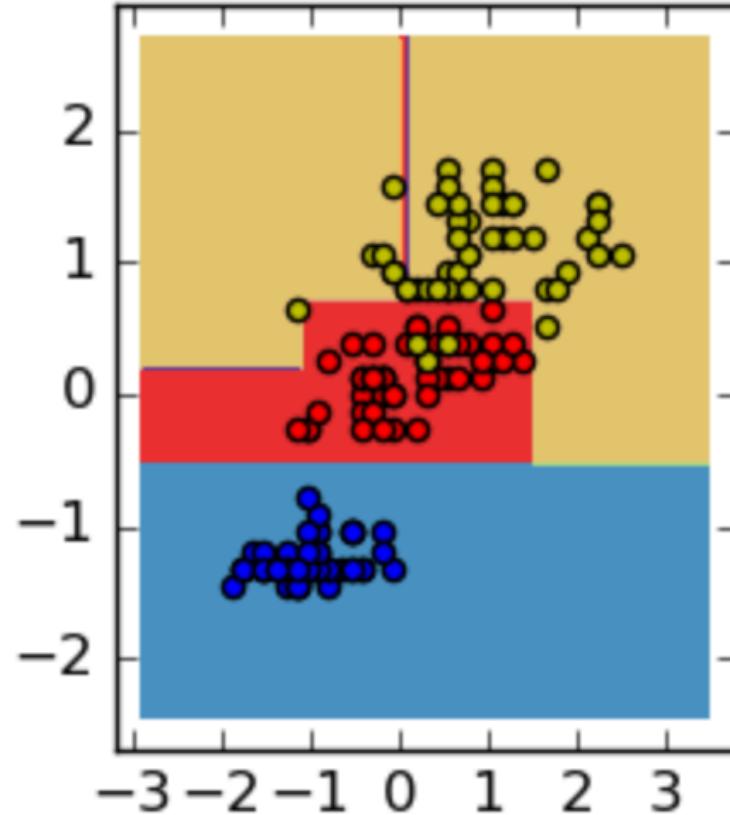
Решающее дерево: классификация



Решающее дерево: классификация

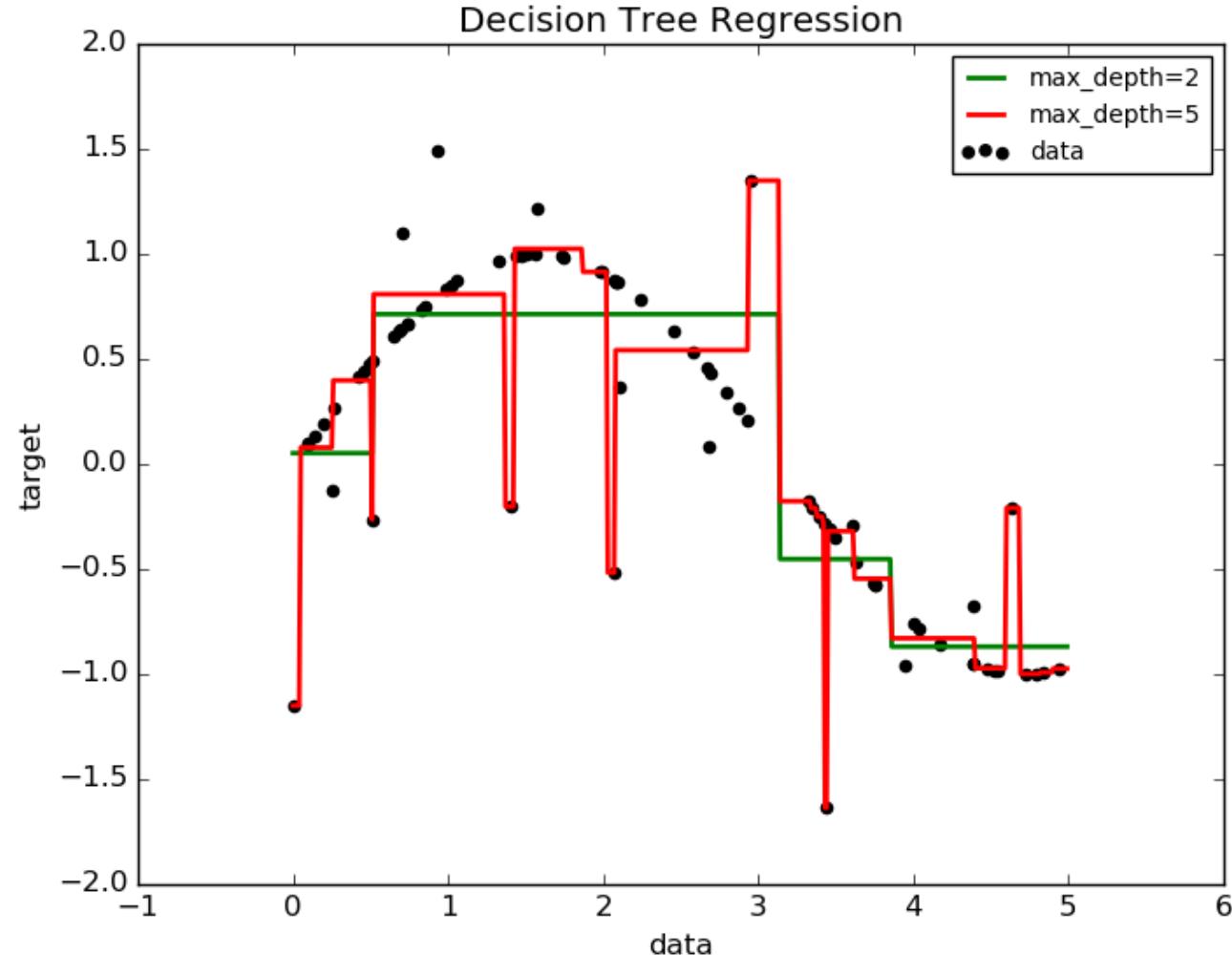


Решающее дерево: классификация



Пример: 3 класса и 2 признака

Решающее дерево: регрессия



Пример: восстановление зависимости у от х с помощью решающих деревьев глубины 2 и глубины 5

В каждом листе дерево отвечает некоторой константой

Рекурсивное построение

Строим разбиение
выборки по значению
одного из признаков

$$x^{(j)} < t$$

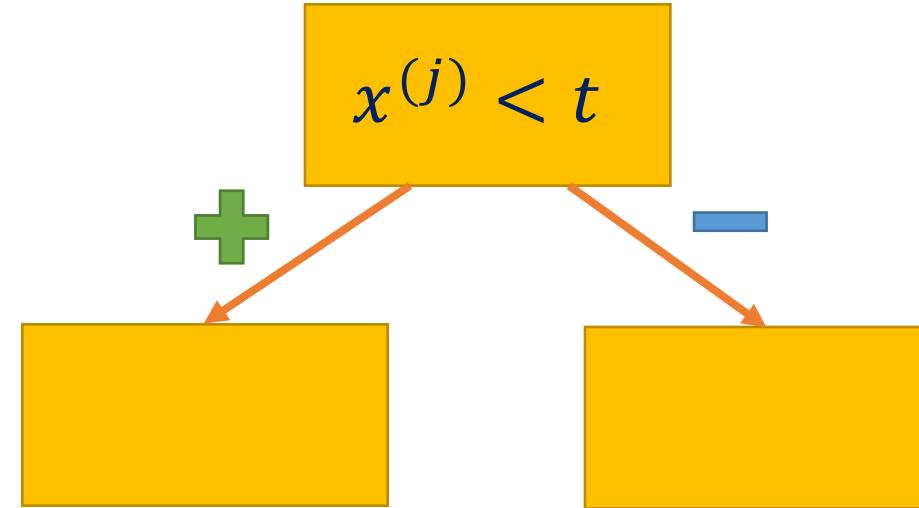
Рекурсивное построение

Строим разбиение
выборки по значению
одного из признаков

$$x^{(j)} < t$$

Фактически нужно
только выбрать j и t
наилучшим образом

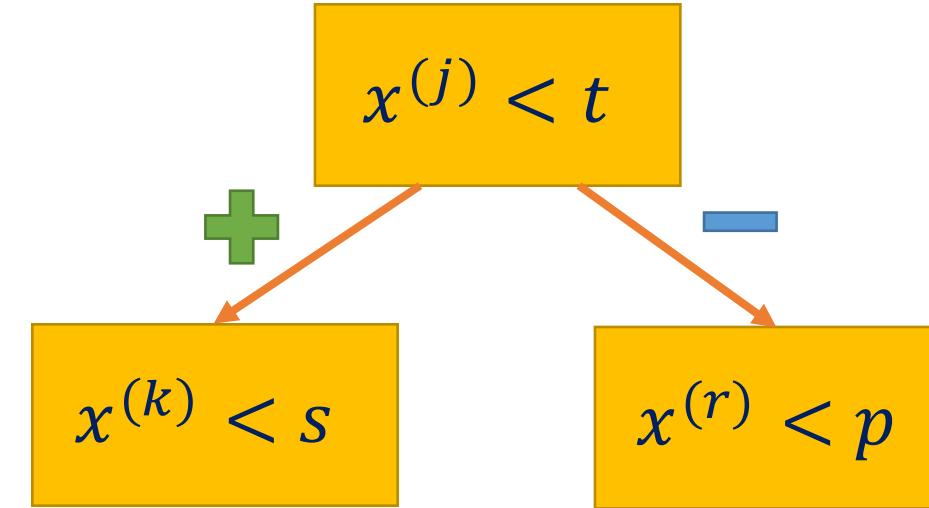
Рекурсивное построение



Выборка делится
по этому условию
на две части

Рекурсивное построение

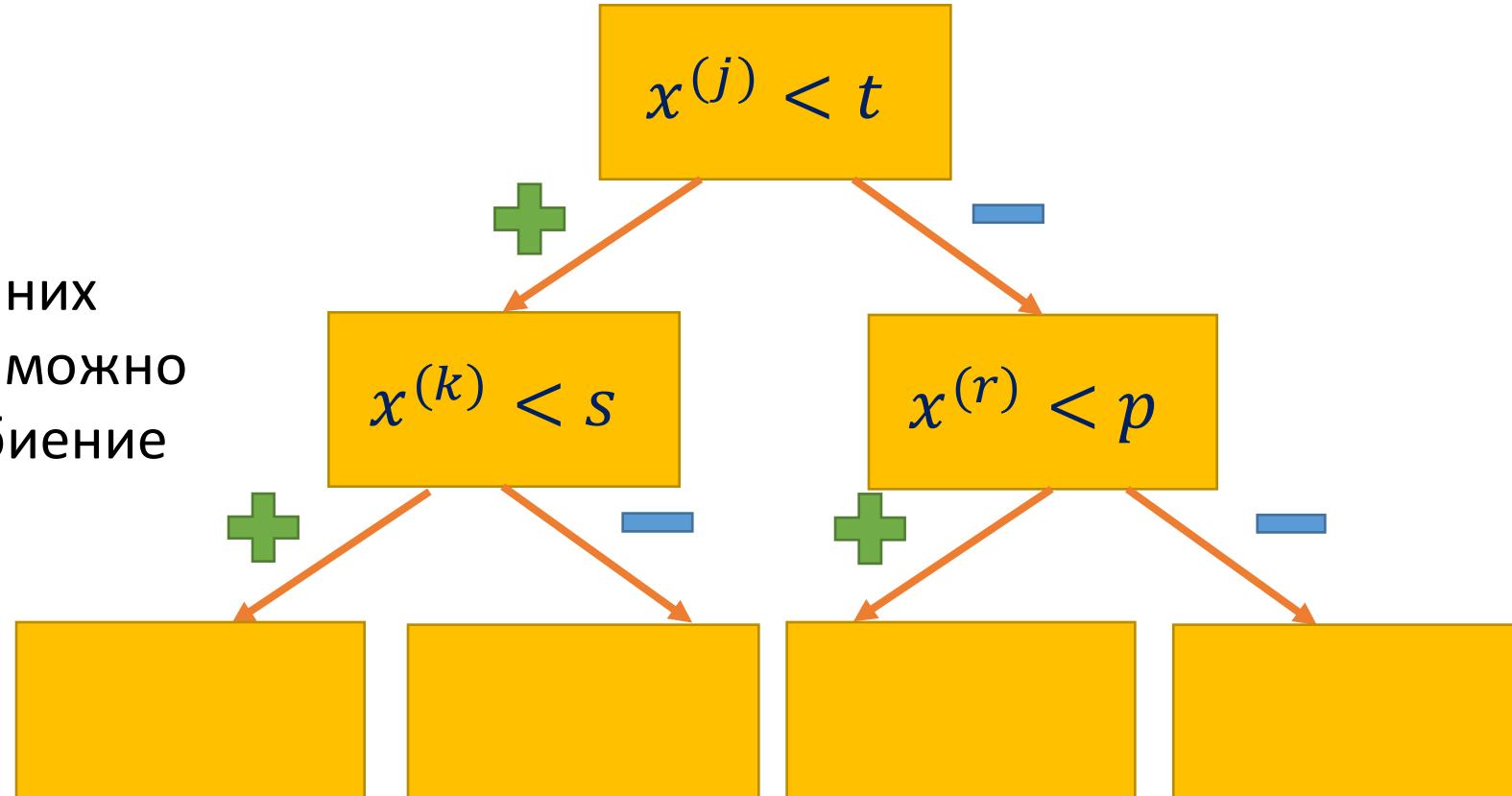
В каждой из них
теперь тоже можно
сделать разбиение



Выборка делится
по этому условию
на две части

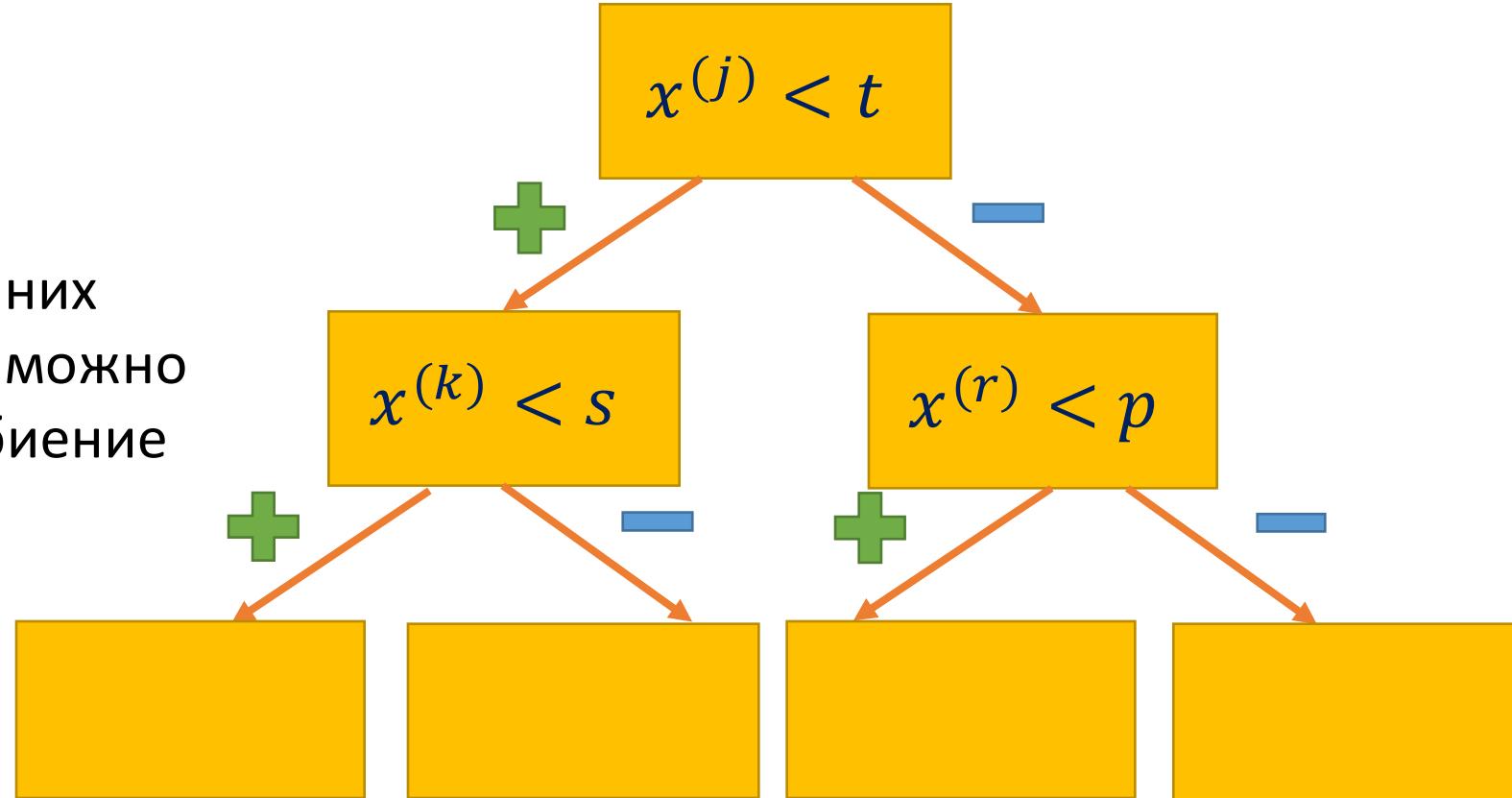
Рекурсивное построение

В каждой из них
теперь тоже можно
сделать разбиение



Рекурсивное построение

В каждой из них
теперь тоже можно
сделать разбиение



Процесс можно продолжать в тех узлах, в
которые попадает достаточно много объектов

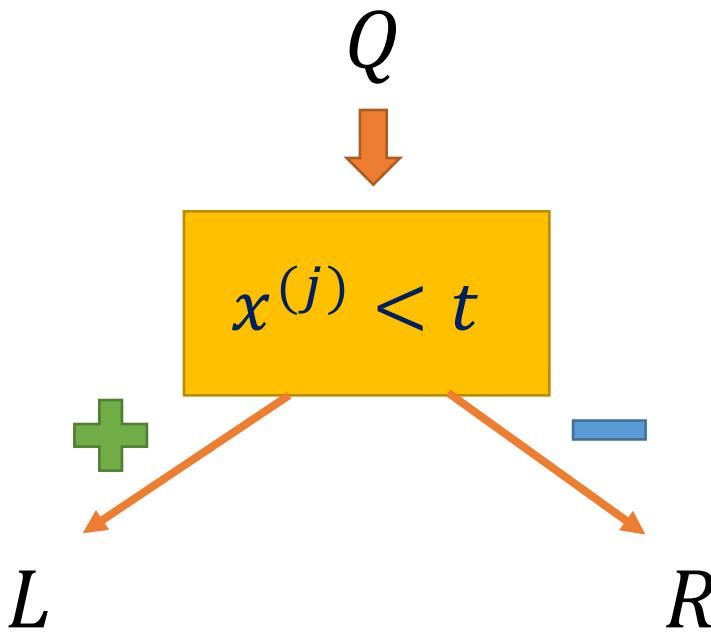
Выбор разбиения

Q

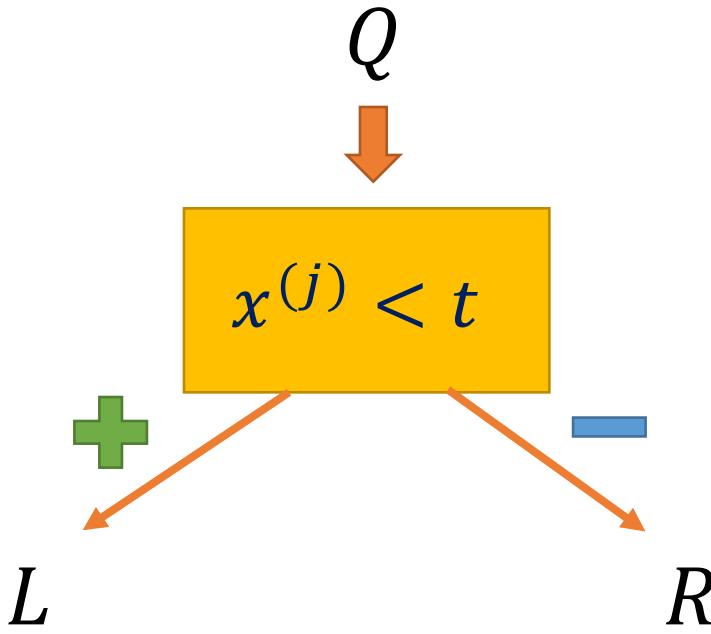


$$x^{(j)} < t$$

Выбор разбиения

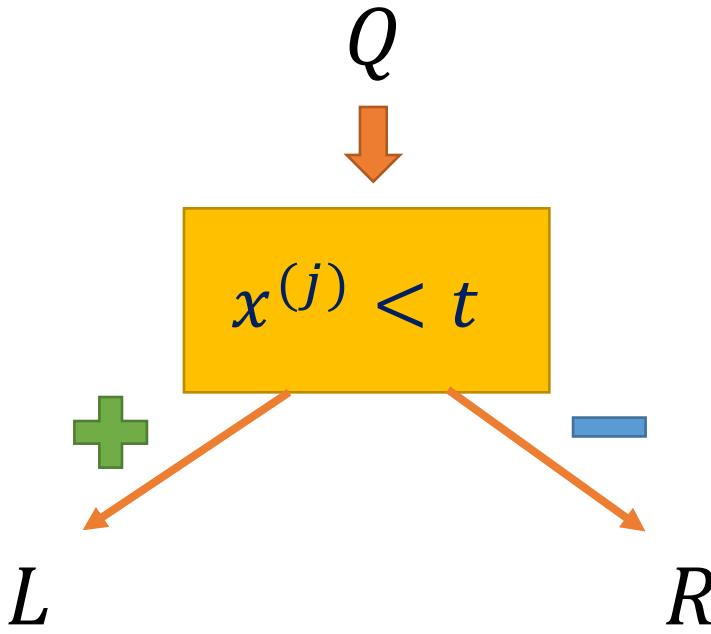


Выбор разбиения



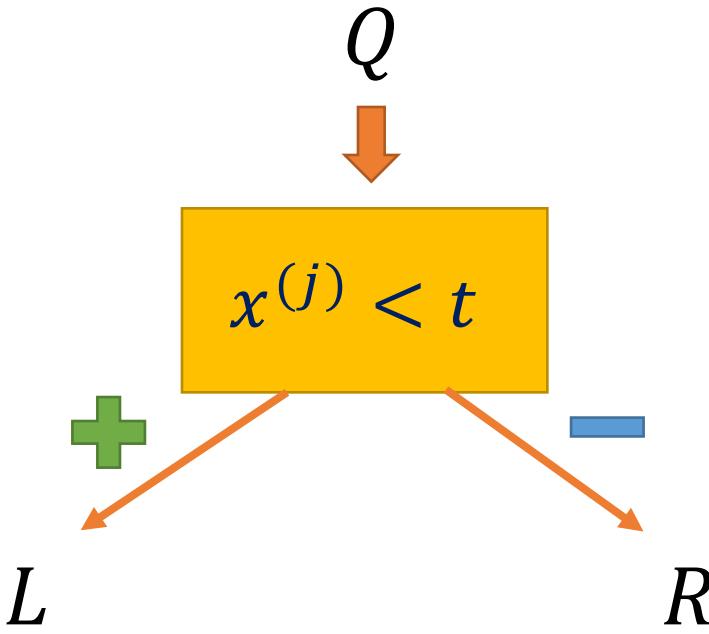
$$G(j, t) = \frac{|L|}{|Q|} H(L) + \frac{|R|}{|Q|} H(R)$$

Выбор разбиения



$$G(j, t) = \frac{|L|}{|Q|} H(L) + \frac{|R|}{|Q|} H(R) \rightarrow \min_{j,t}$$

Выбор разбиения



$$G(j, t) = \frac{|L|}{|Q|} H(L) + \frac{|R|}{|Q|} H(R) \rightarrow \min_{j,t}$$

$H(R)$ - мера «неоднородности» множества R

Критерии построения разбиений

$H(R)$ – мера «неоднородности» множества R

Критерии построения разбиений

$H(R)$ – мера «неоднородности» множества R

Пусть мы решаем задачу классификации на 2 класса,
 p_0, p_1 – доли объектов классов 0 и 1 в R

1) Misclassification criteria: $H(R) = 1 - \max\{p_0, p_1\}$

2) Entropy criteria: $H(R) = -p_0 \ln p_0 - p_1 \ln p_1$

3) Gini criteria: $H(R) = 1 - p_0^2 - p_1^2 = 2p_0p_1$

Критерии построения разбиений

$H(R)$ – мера «неоднородности» множества R

Пусть мы решаем задачу классификации на K классов,
 p_1, \dots, p_K – доли объектов классов 1, ..., K в R

1) Misclassification criteria: $H(R) = 1 - p_{max}$

2) Entropy criteria:

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

3) Gini criteria:

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

Критерии построения разбиений

$H(R)$ – мера «неоднородности» множества R

Чтобы решать задачу регрессии, достаточно взять среднеквадратичную ошибку в качестве $H(R)$:

$$H(R) = \frac{1}{|R|} \sum_{x_i \in R} (y_i - \bar{y})^2$$

Критерии построения разбиений

$H(R)$ – мера «неоднородности» множества R

Чтобы решать задачу регрессии, достаточно взять среднеквадратичную ошибку в качестве $H(R)$:

$$H(R) = \frac{1}{|R|} \sum_{x_i \in R} (y_i - \bar{y})^2$$

$$\bar{y} = \frac{1}{|R|} \sum_{x_i \in R} y_i$$

Pruning

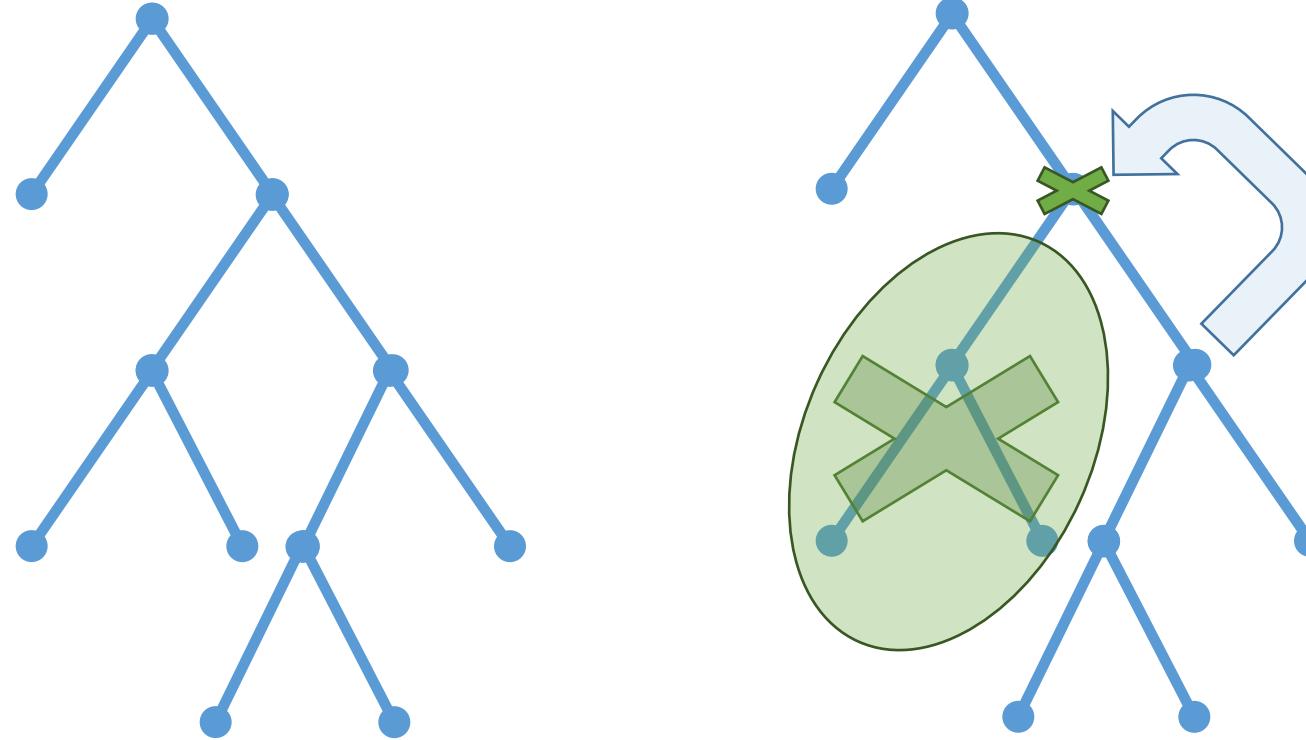
Pre-prunning:

- Ограничеваем рост дерева до того как оно построено
- Если в какой-то момент информативность признаков в разбиении меньше порога – не разбиваем вершину

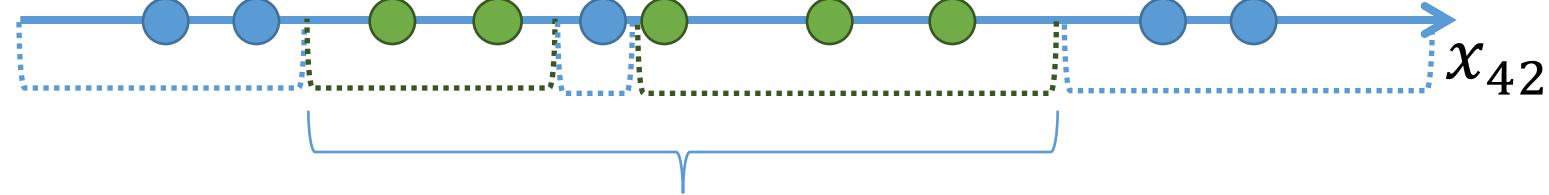
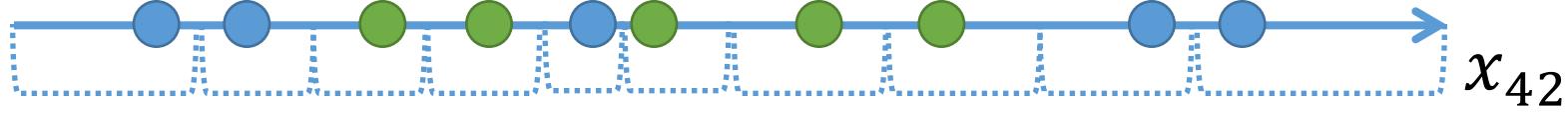
Post-prunning:

- Упрощаем дерево после того как дерево построено

Post-pruning



Бинаризация



Вариации алгоритма построения

- C4.5
- C5.0
- CART

Итог

1. Что такое решающие деревья
2. Решающие деревья в классификации и регрессии
3. Как строить решающие деревья
4. Дополнительные темы

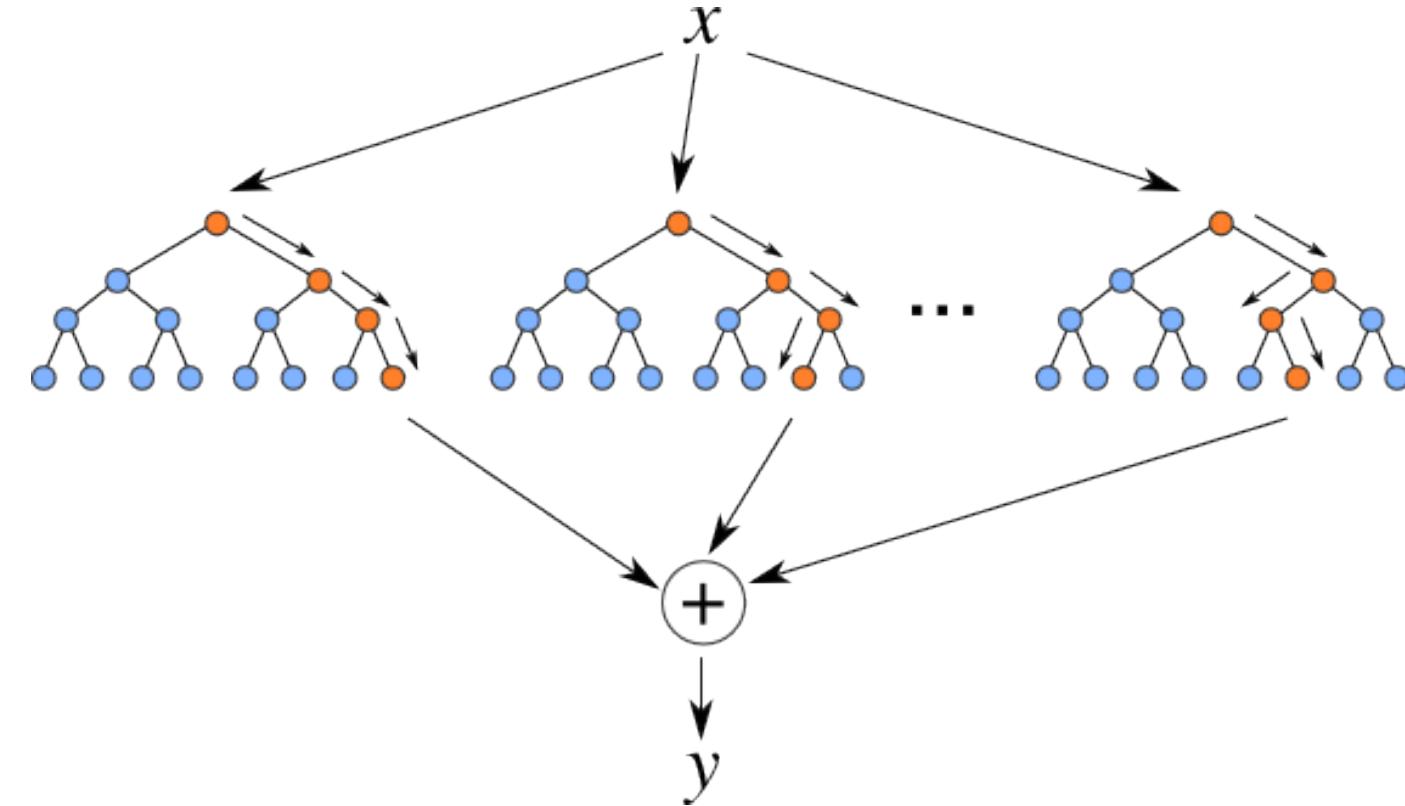
II. Ансамбли решающих деревьев

План

1. Random Forest
2. Идея Gradient Boosted Decision Trees (GBDT)
3. Библиотеки
4. Подробное обсуждение GBDT

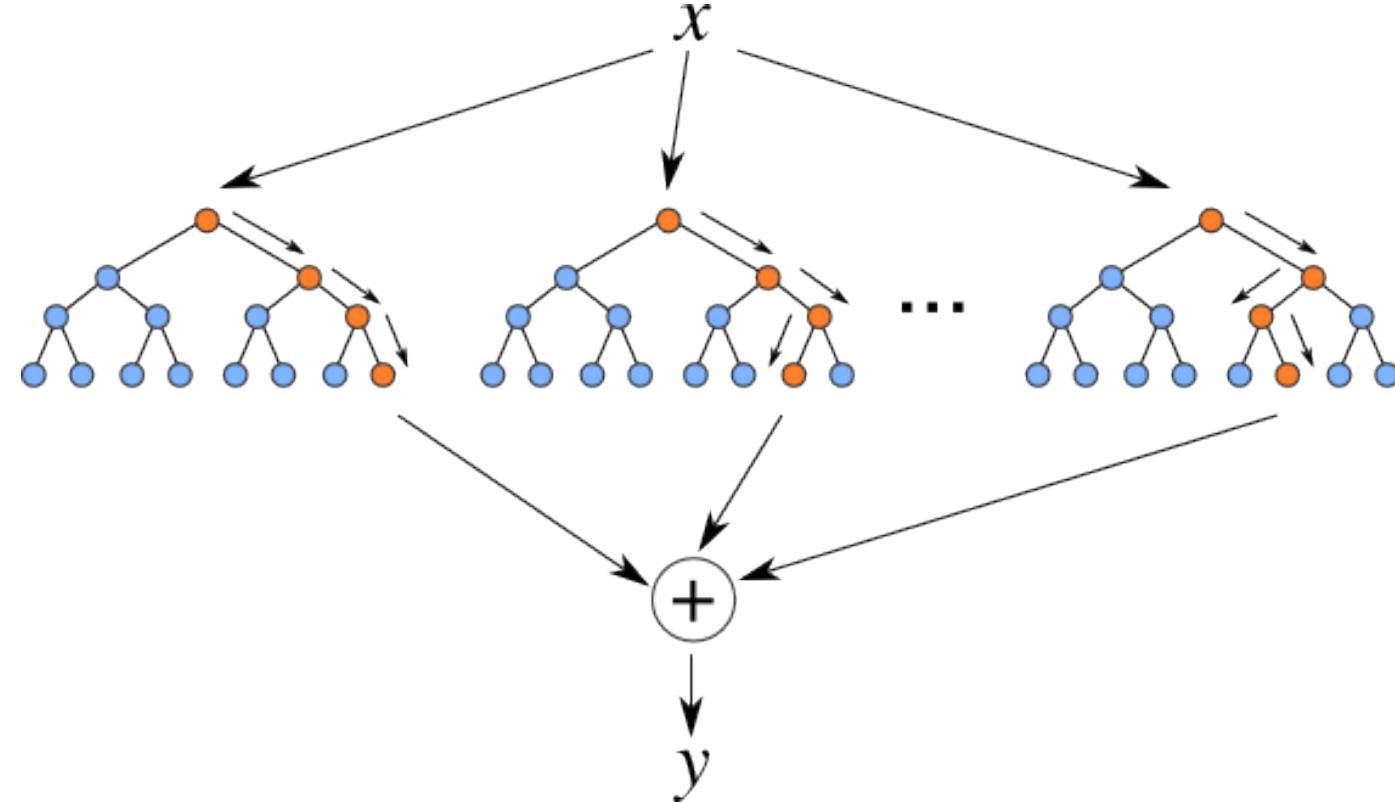
Random Forest

1. Генерируем M выборок на основе имеющейся



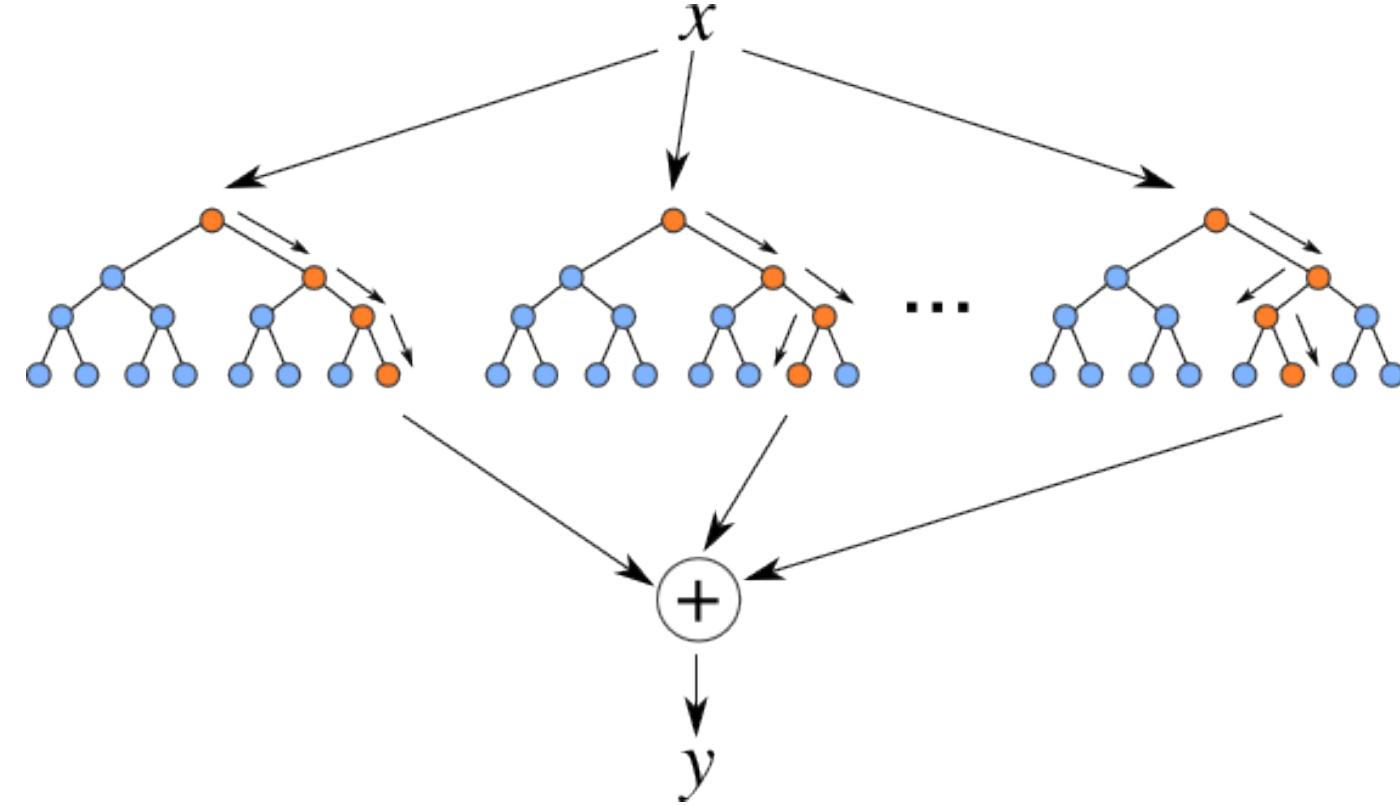
Random Forest

1. Генерируем M выборок на основе имеющейся
2. Строим на них деревья с randomизированными разбиениями в узлах: выбираем k случайных признаков и ищем наиболее информативное разбиение по ним



Random Forest

1. Генерируем M выборок на основе имеющейся
2. Строим на них деревья с randomизированными разбиениями в узлах: выбираем k случайных признаков и ищем наиболее информативное разбиение по ним
3. При прогнозе усредняем ответ всех деревьев

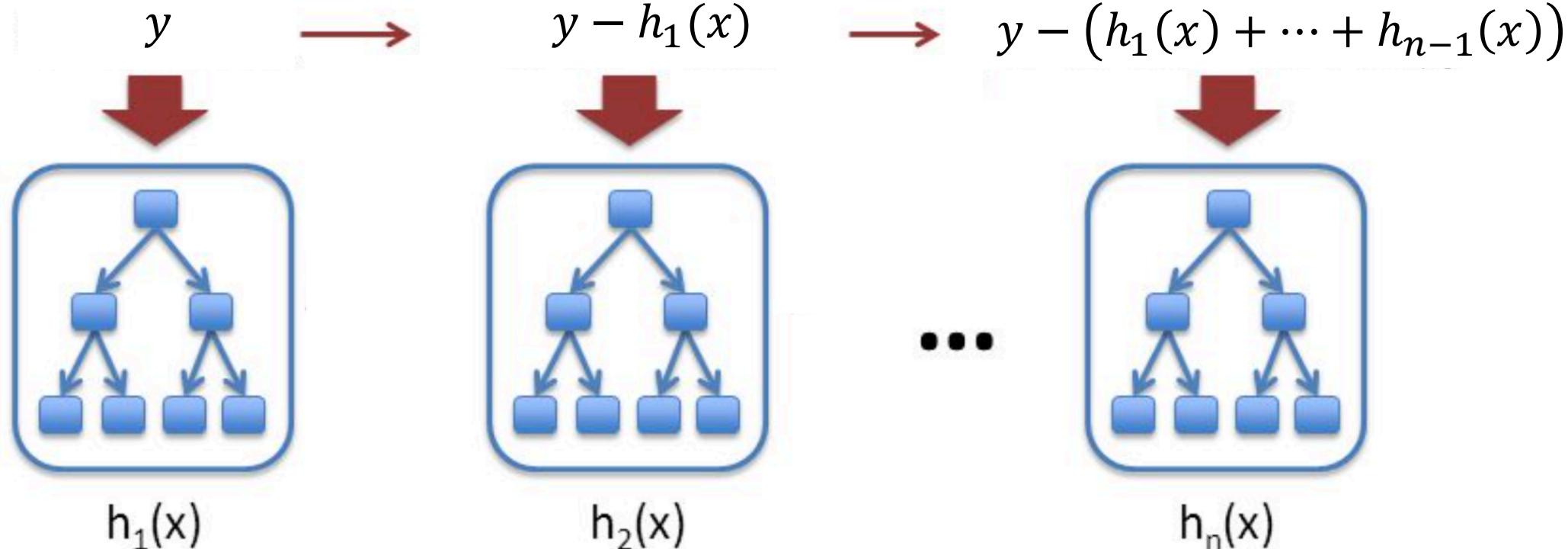


Идея Gradient Boosted Decision Trees (GBDT)

$$h(x) = h_1(x) + \dots + h_n(x)$$

Идея Gradient Boosted Decision Trees (GBDT)

$$h(x) = h_1(x) + \dots + h_n(x)$$

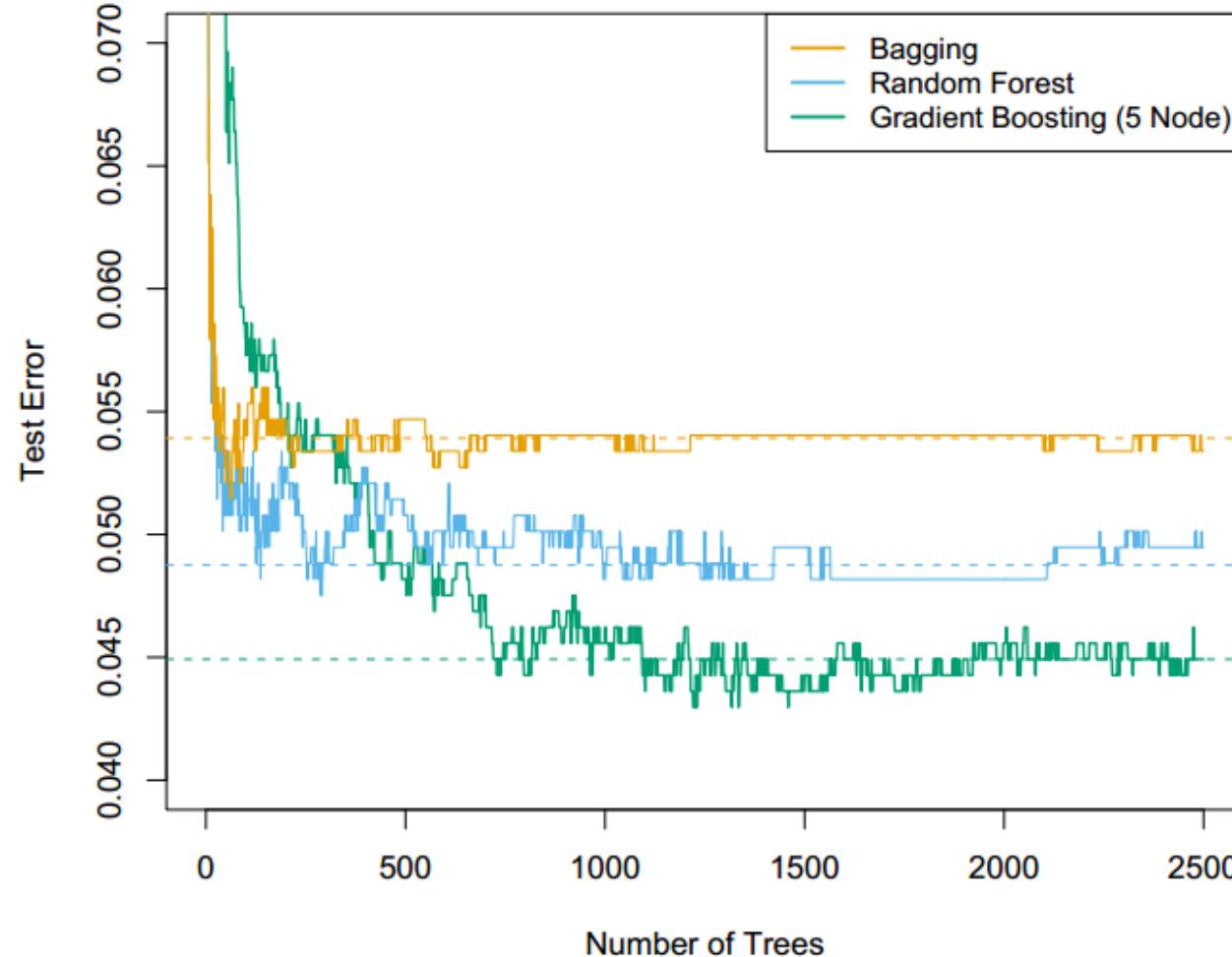


Gradient Boosted Decision Trees

- Каждое новое дерево $h_k(x)$ обучаем на ответы $y_i - h_i$
 h_i - прогноз всей композиции на i -том объекте на предыдущей итерации
- Коэффициент α_k перед новым деревом подбираем с помощью численной оптимизации ошибки

GBDT и RF

Spam Data

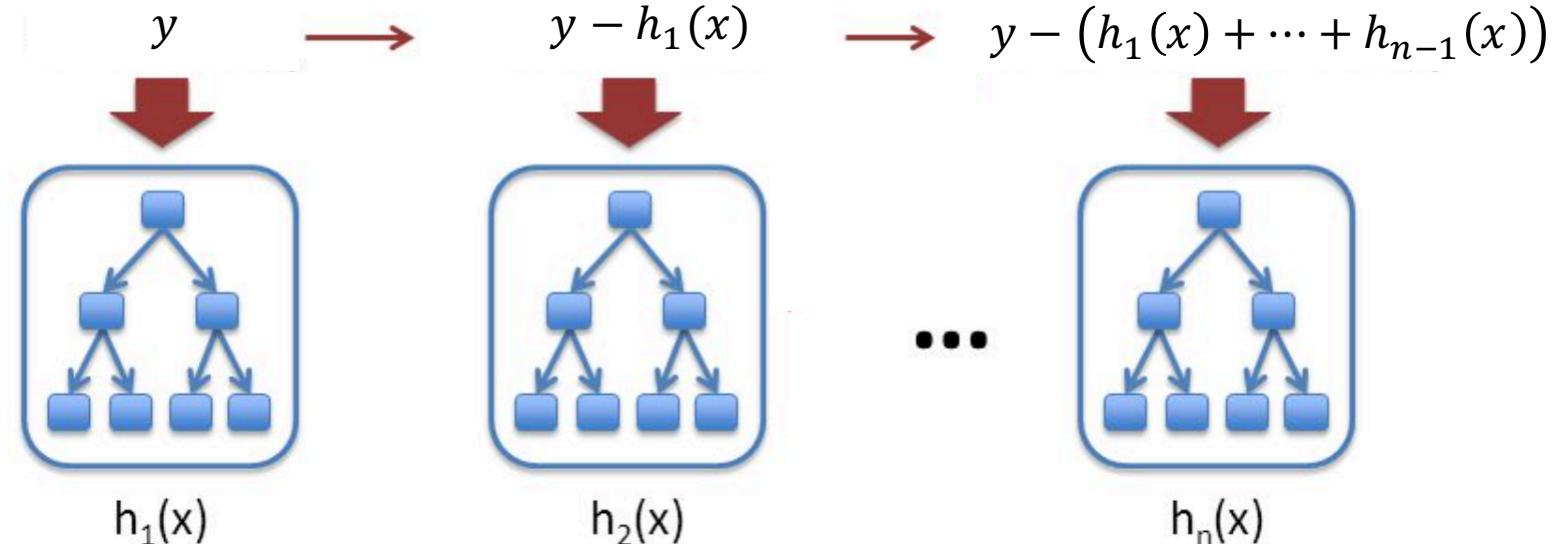


Библиотеки

- Scikit-learn:
 - `sklearn.ensemble.RandomForestClassifier`
 - `sklearn.ensemble.RandomForestRegressor`
- XGBoost
- LightGBM

Идея Gradient Boosted Decision Trees

$$a_n(x) = h_1(x) + \cdots + h_n(x)$$



Аналогия с численной оптимизацией

Нам нужно минимизировать ошибку:

$$Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^l (\hat{y}_i - y_i)^2 \rightarrow \min \quad \hat{y}_i = a(x_i)$$

Аналогия с численной оптимизацией

Нам нужно минимизировать ошибку:

$$Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^l (\hat{y}_i - y_i)^2 \rightarrow \min \quad \hat{y}_i = a(x_i)$$

Если бы мы подбирали ответы \hat{y} итеративно, можно было бы это делать градиентным спуском

Аналогия с численной оптимизацией

Нам нужно минимизировать ошибку:

$$Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^l (\hat{y}_i - y_i)^2 \rightarrow \min \quad \hat{y}_i = a(x_i)$$

Если бы мы подбирали ответы \hat{y} итеративно, можно было бы это делать градиентным спуском

Но нам нужно подобрать не ответы, а функцию $a(x)$

Градиентный бустинг и градиент

В бустинге

$$a(x) = \sum_{t=1}^T \beta_t h_t(x)$$

Идея: будем каждый следующий алгоритм выбирать так, чтобы он приближал антиградиент ошибки

$$h_t(x) \approx -\frac{\partial Q(\hat{y}, y)}{\partial \hat{y}}$$

Градиентный бустинг и градиент

Если $h_t(x) \approx -\frac{\partial Q(\hat{y}, y)}{\partial \hat{y}}$ и $Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^l (\hat{y}_i - y_i)^2$

$$h_t(x_i) \approx -\frac{\partial Q(\hat{y}_i, y_i)}{\partial \hat{y}_i} = -2(\hat{y}_i - y_i) \propto y_i - \hat{y}_i$$

GBM с квадратичными потерями

1. Обучаем первый базовый алгоритм h_1 , $\beta_1 = 1$
2. Повторяем в цикле по t от 2 до T :

обучаем h_t на ответы $y_i - a_{t-1}(x_i)$

выбираем β_t

GBM с квадратичными потерями

1. Обучаем первый базовый алгоритм h_1 , $\beta_1 = 1$
2. Повторяем в цикле по t от 2 до T :

обучаем h_t на ответы $y_i - a_{t-1}(x_i)$

выбираем β_t

Стратегии выбора β_t :

- всегда равен небольшой константе
- как в методе наискорейшего спуска
- уменьшая с ростом t

GBM с произвольными потерями

1. Обучаем первый базовый алгоритм h_1 , $\beta_1 = 1$
2. Повторяем в цикле по t от 2 до T :

обучаем h_t на $-\frac{\partial Q(\hat{y}_i, y_i)}{\partial \hat{y}_i} = -\frac{\partial L(\hat{y}_i, y_i)}{\partial \hat{y}_i}$

выбираем β_t

$$\text{Здесь } Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^l L(\hat{y}_i, y_i) \quad \hat{y}_i = a_{t-1}(x_i)$$

GBM в наиболее общем виде

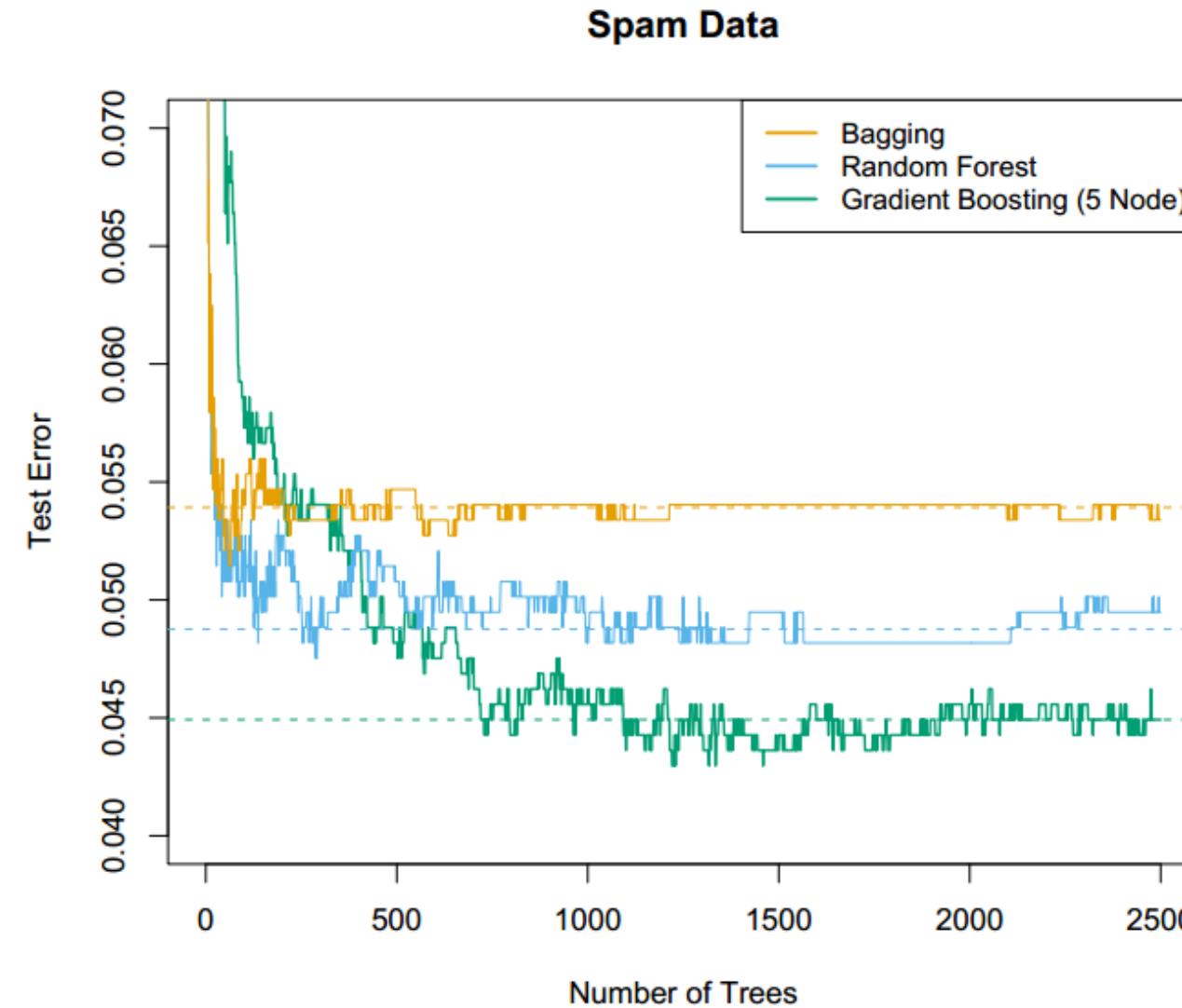
1. Обучаем первый базовый алгоритм h_1 , $\beta_1 = 1$
2. Повторяем в цикле по t от 2 до T :

$$h_t = \operatorname{argmin}_h \sum_{i=1}^l \tilde{L} \left(h(x_i), -\frac{\partial L(\hat{y}_i, y_i)}{\partial \hat{y}_i} \right)$$

выбираем β_t

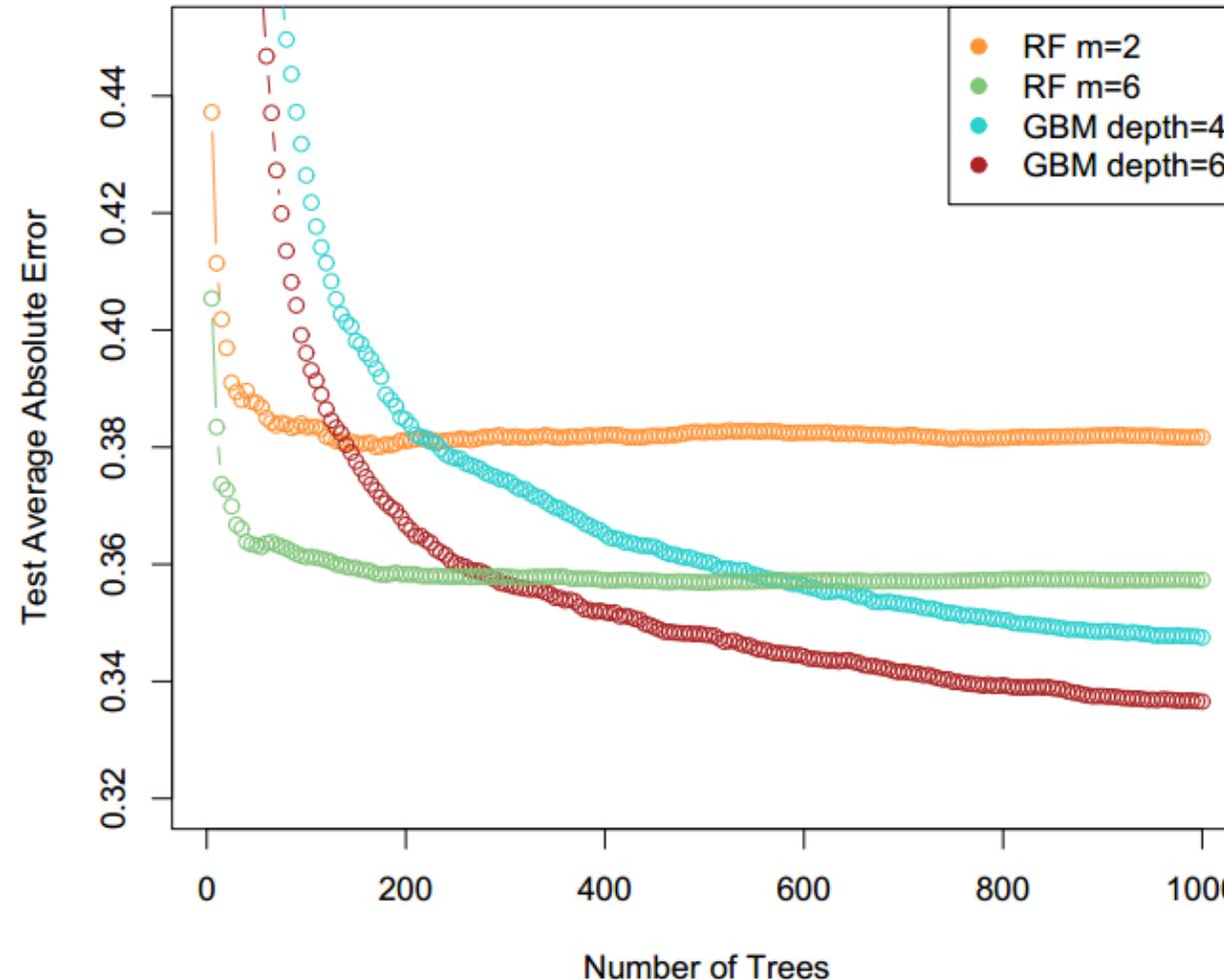
$$\text{Здесь } Q(\hat{y}, y) = \sum_{i=1}^l L(\hat{y}_i, y_i) \quad \hat{y}_i = a_{t-1}(x_i)$$

Bagging, Random Forest, GBDT



GTBM и RF

California Housing Data



Распараллеливание

Вопрос для обсуждения:

Какой из ансамблей деревьев больше подходит для распараллеливания? Как это делать в одном и в другом случае?

Итог

1. Random Forest
2. Gradient Boosted Decision Trees (GBDT)
3. Библиотеки

III. Общие идеи построения ансамблей

Bagging

Bagging = Bootstrap aggregation

Бутстрап

Выборка:

№	X
1	3.4
2	2.9
3	3.7
N	3.1

Бутстреп

Выборка:

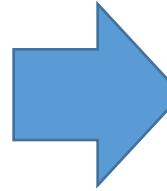
№	X
1	3.4
2	2.9
3	3.7
N	3.1

$$\mathbb{E} X = 3.3 \pm ?$$

Бутстреп

Выборка:

№	X
1	3.4
2	2.9
3	3.7
N	3.1



№	X
3	3.7
1	3.4
2	2.9
2	3.1

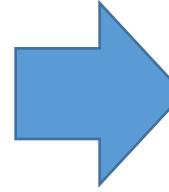
Генерируем новую
(искусственную) выборку,
отбрав в нее объекты из
исходной выборки по
схеме выбора с
возвращением

$$\mathbb{E} X = 3.3 \pm ?$$

Бутстреп

Выборка:

№	X
1	3.4
2	2.9
3	3.7
N	3.1



№	X
3	3.7
1	3.4
2	2.9
2	3.1

№	X
1	3.4
3	3.7
2	2.9
M	3.0

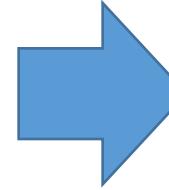
Продолжаем
генерировать
такие выборки

$$\mathbb{E} X = 3.3 \pm ?$$

Бутстреп

Выборка:

№	X
1	3.4
2	2.9
3	3.7
N	3.1



№	X
3	3.7
1	3.4
2	2.9
2	3.1

№	X
1	3.4
3	3.7
2	2.9
M	3.0

...

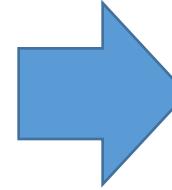
№	X
3	3.7
2	2.9
1	3.4
1	3.4

$$\mathbb{E} X = 3.3 \pm ?$$

Бутстреп

Выборка:

№	X
1	3.4
2	2.9
3	3.7
N	3.1



№	X
3	3.7
1	3.4
2	2.9
2	2.9

№	X
1	3.4
3	3.7
2	2.9
M	3.0

...

№	X
3	3.7
2	2.9
1	3.4
1	3.4

$$\mathbb{E} X = 3.31 \pm ?$$

$$\mathbb{E} X = 3.25$$

$$\mathbb{E} X = 3.27$$

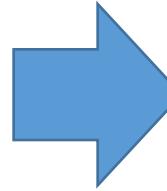
...

$$\mathbb{E} X = 3.39$$

Бутстреп

Выборка:

№	X
1	3.4
2	2.9
3	3.7
N	3.1



№	X
3	3.7
1	3.4
2	2.9
2	2.9

№	X
1	3.4
3	3.7
2	2.9
M	3.0

...

№	X
3	3.7
2	2.9
1	3.4
1	3.4

$$\mathbb{E} X = 3.31 \pm ?$$

$$\mathbb{E} X = 3.25$$

$$\mathbb{E} X = 3.27$$

...

$$\mathbb{E} X = 3.39$$

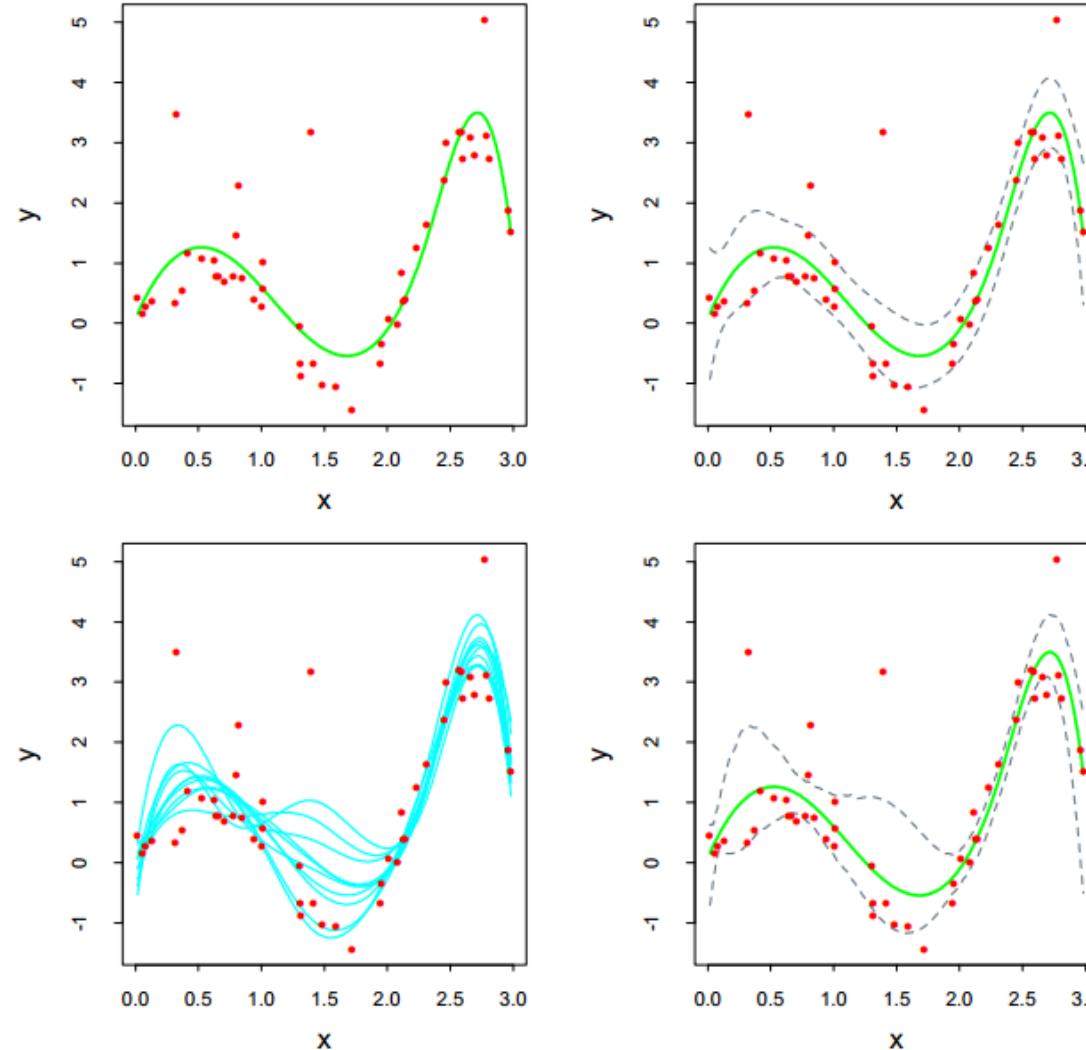
$$\mathbb{E} X = 3.32 \pm 0.06$$

Bagging

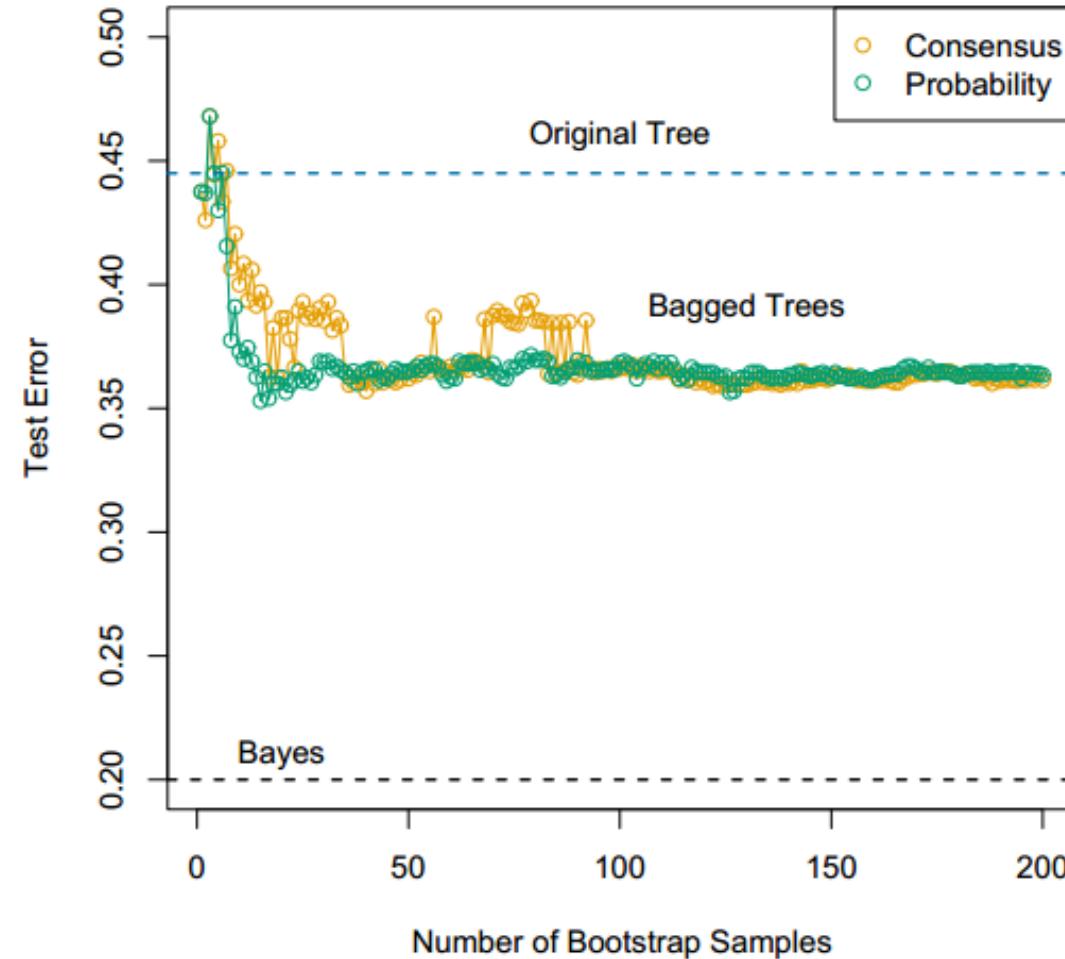
Bagging = Bootstrap aggregation

По схеме выбора с возвращением, генерируем M обучающих выборок такого же размера, обучаем на них модели и усредняем

Bagging



Бэггинг в классификации



Вариации: Pasting, RSM

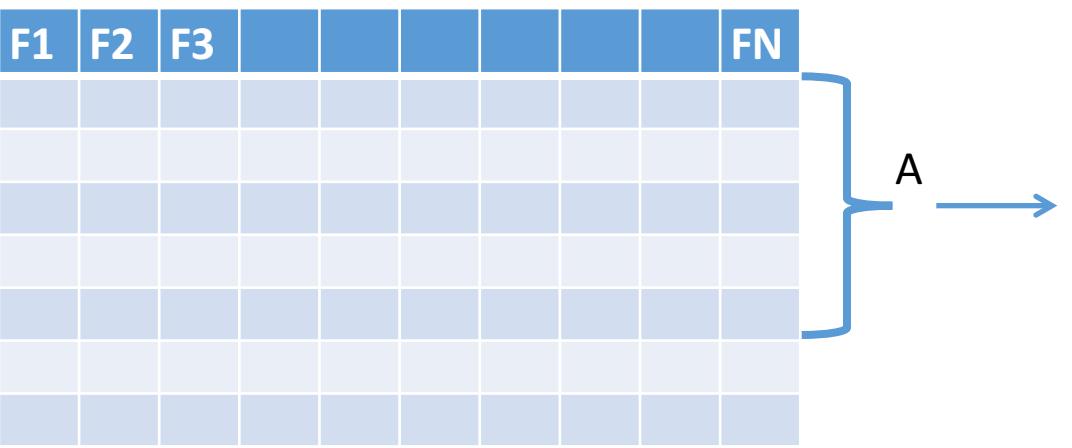
- RSM – Random Subspace Method, выбираем не объекты, а признаки
- Pasting – выбираем объекты без возвращения

Stacking

Обучающая выборка:

Stacking

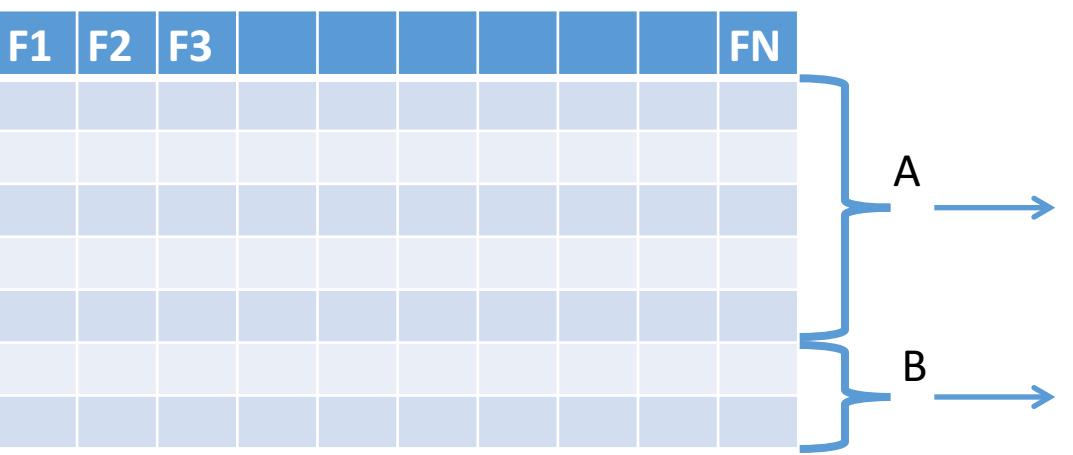
Обучающая выборка:



Обучающая выборка для M
базовых алгоритмов

Stacking

Обучающая выборка:

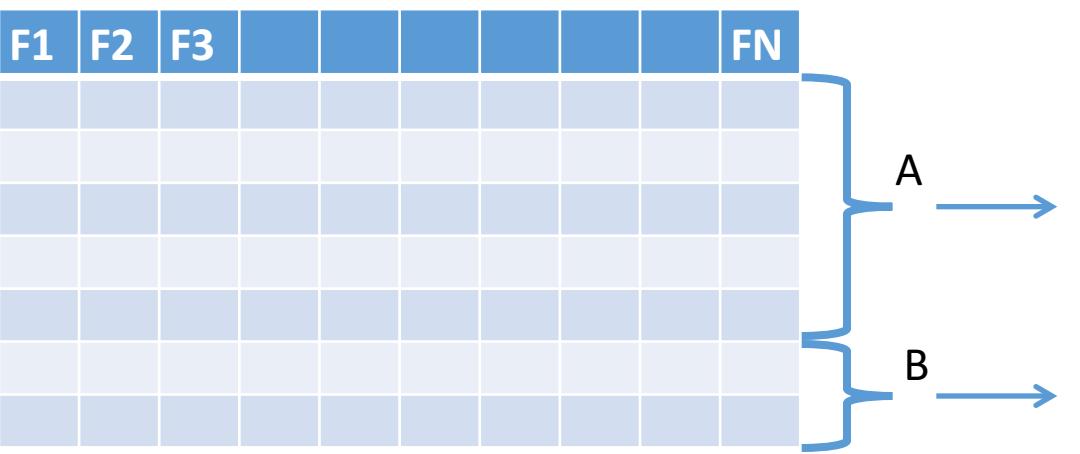


Обучающая выборка для M
базовых алгоритмов

Обучающая выборка для
другой модели

Stacking

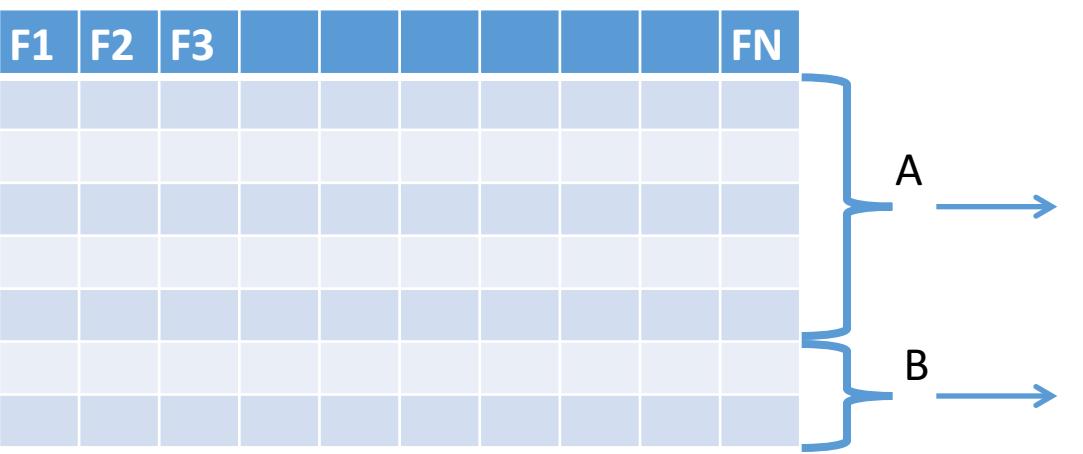
Обучающая выборка:



Обучаем M
базовых
алгоритмов на
выборке А

Stacking

Обучающая выборка:

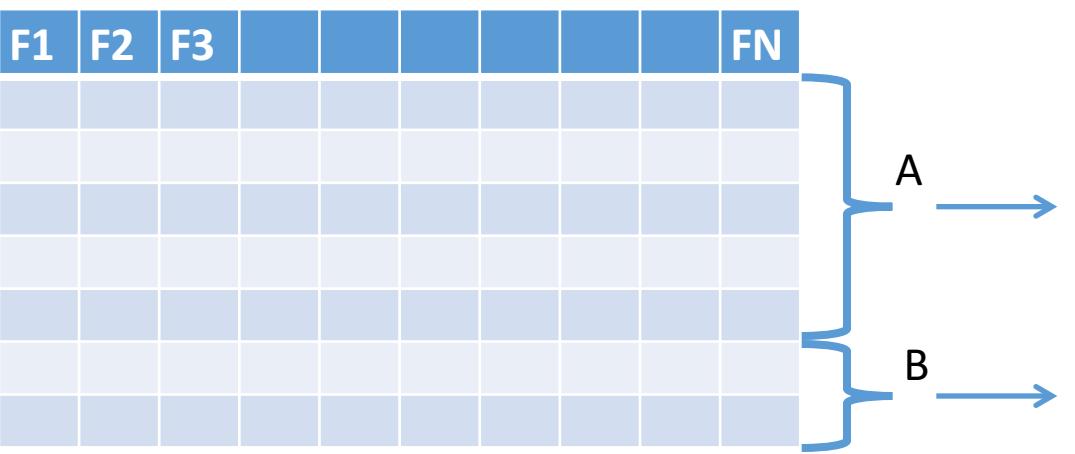


Обучаем M базовых алгоритмов на выборке А

Считаем их прогнозы на выборке В

Stacking

Обучающая выборка:



Обучающая выборка для M
базовых алгоритмов

Обучающая выборка для
другой модели

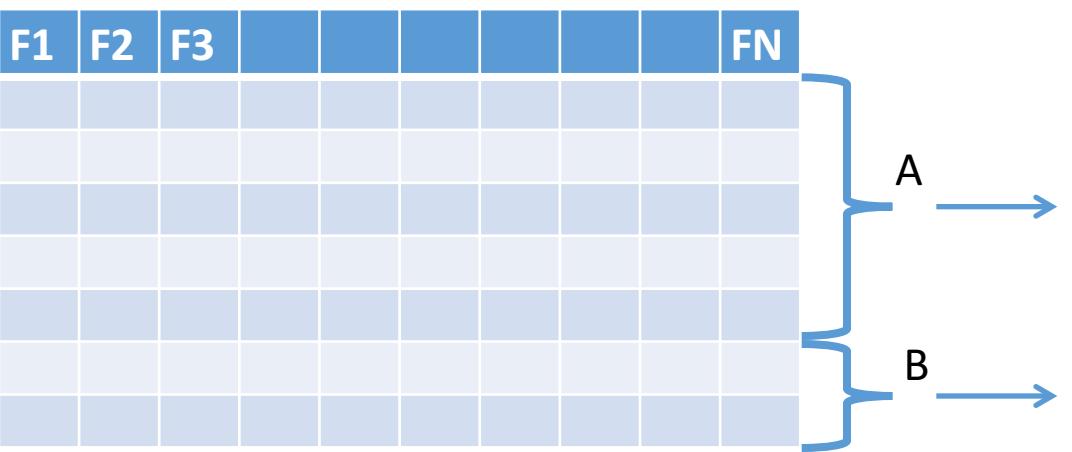
Обучаем M
базовых
алгоритмов на
выборке А

Считаем их
прогнозы на
выборке В

B1	B2		BM

Stacking

Обучающая выборка:



Обучаем M базовых алгоритмов на выборке А

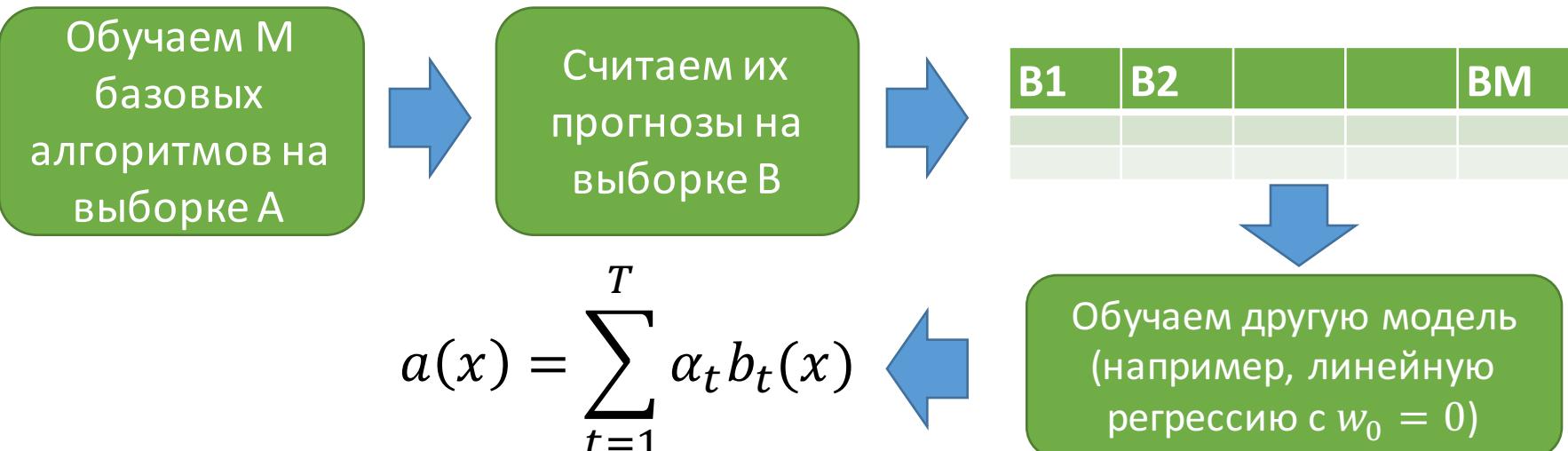
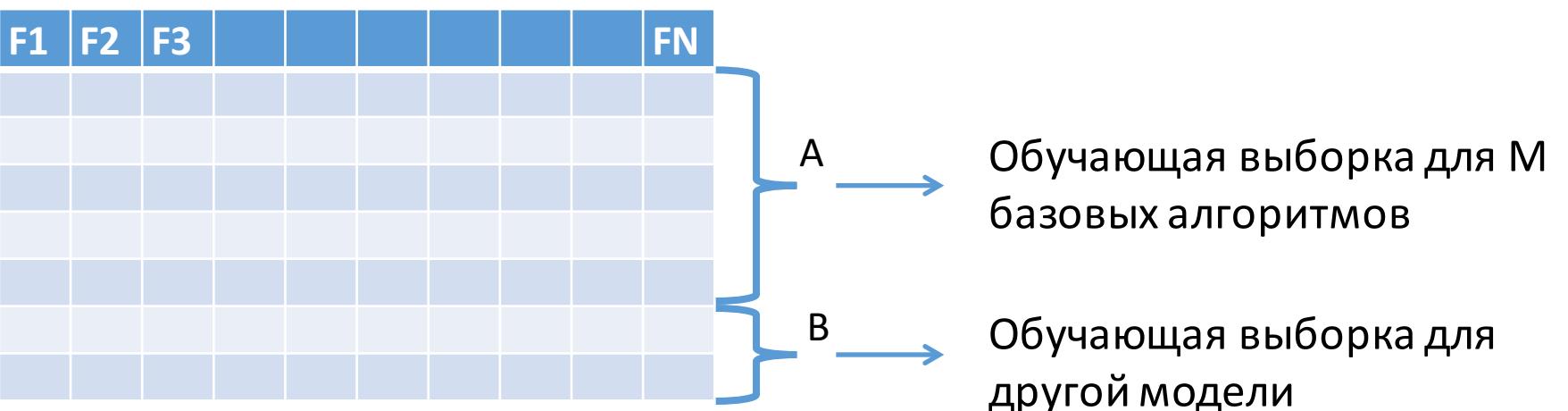
Считаем их прогнозы на выборке В

B1	B2		BM

Обучаем другую модель
(например, линейную
регрессию с $w_0 = 0$)

Stacking

Обучающая выборка:



Blending

Смесь нескольких сильных классификаторов:

$$a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x)$$

+ веса неотрицательны и дают в сумме единицу

Blending

Смесь нескольких сильных классификаторов:

$$a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x)$$

+ веса неотрицательны и дают в сумме единицу

Преимущества и недостатки:

- Очень прост идеально, хорошо работает, логичен

Blending

Смесь нескольких сильных классификаторов:

$$a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x)$$

+ веса неотрицательны и дают в сумме единицу

Преимущества и недостатки:

- Очень прост идеально, хорошо работает, логичен
- Иногда надо перебирать веса или использовать дискретную оптимизацию

Blending

Смесь нескольких сильных классификаторов:

$$a(x) = \sum_{t=1}^T \alpha_t b_t(x)$$

+ веса неотрицательны и дают в сумме единицу

Преимущества и недостатки:

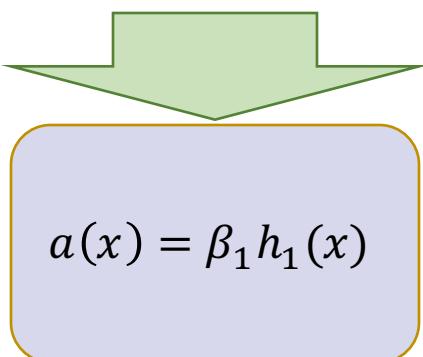
- Очень прост идеально, хорошо работает, логичен
- Иногда надо перебирать веса или использовать дискретную оптимизацию
- Не всегда композиция в виде взвешенной суммы – то, что надо. Иногда нужна более сложная композиция

Boosting

Бустинг – жадное построение
взвешенной суммы базовых
алгоритмов $h_k(x)$

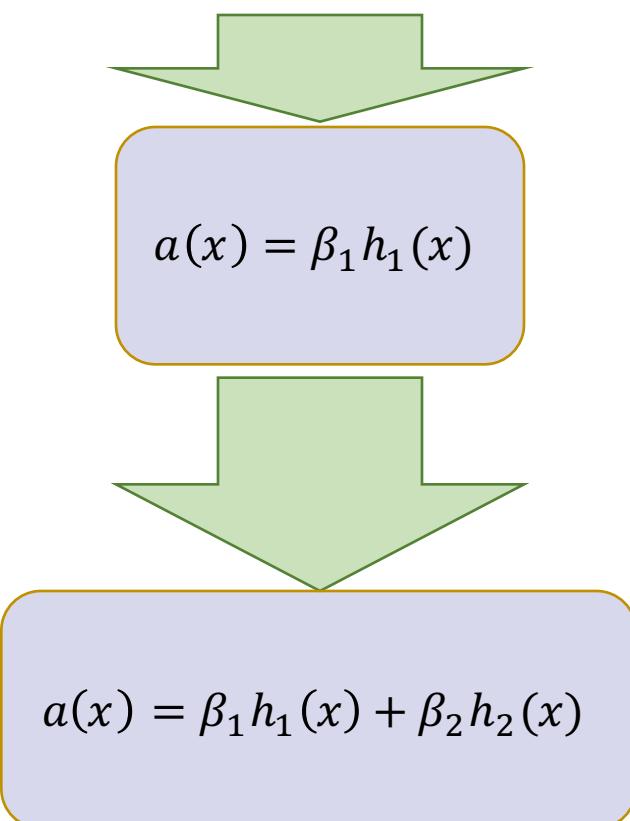
Boosting

Бустинг – жадное построение
взвешенной суммы базовых
алгоритмов $h_k(x)$


$$a(x) = \beta_1 h_1(x)$$

Boosting

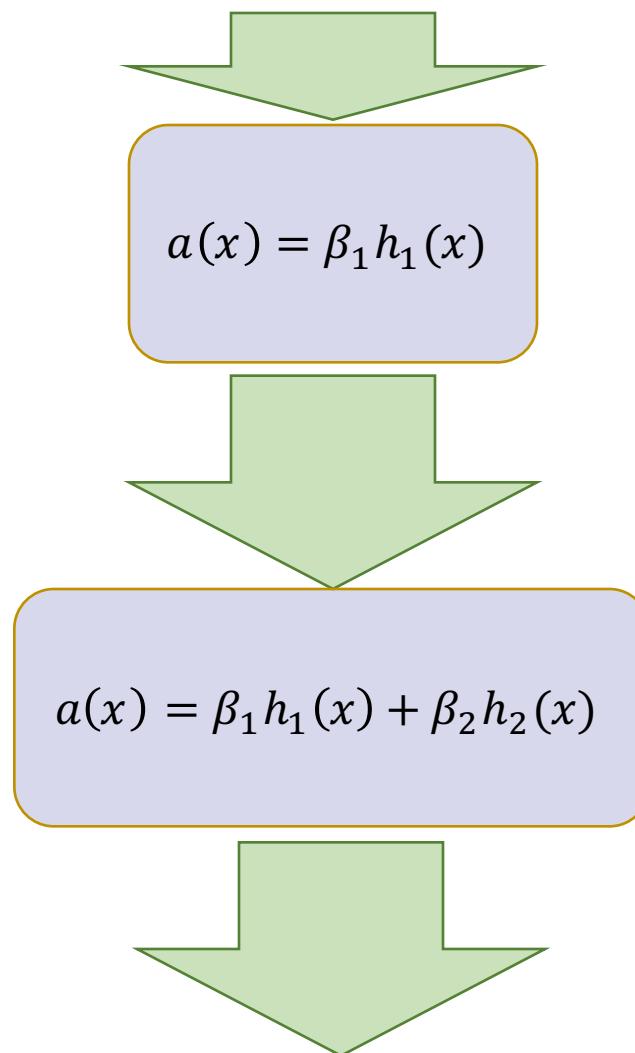
Бустинг – жадное построение
взвешенной суммы базовых
алгоритмов $h_k(x)$



Boosting

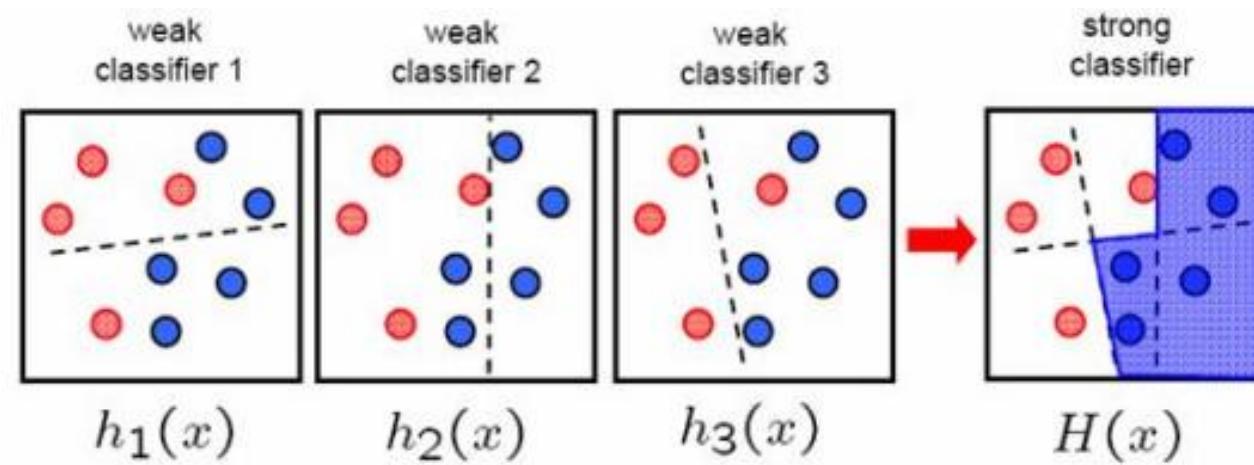
Бустинг – жадное построение
взвешенной суммы базовых
алгоритмов $h_k(x)$

$$a(x) = \sum_{t=1}^T \beta_t h_t(x)$$

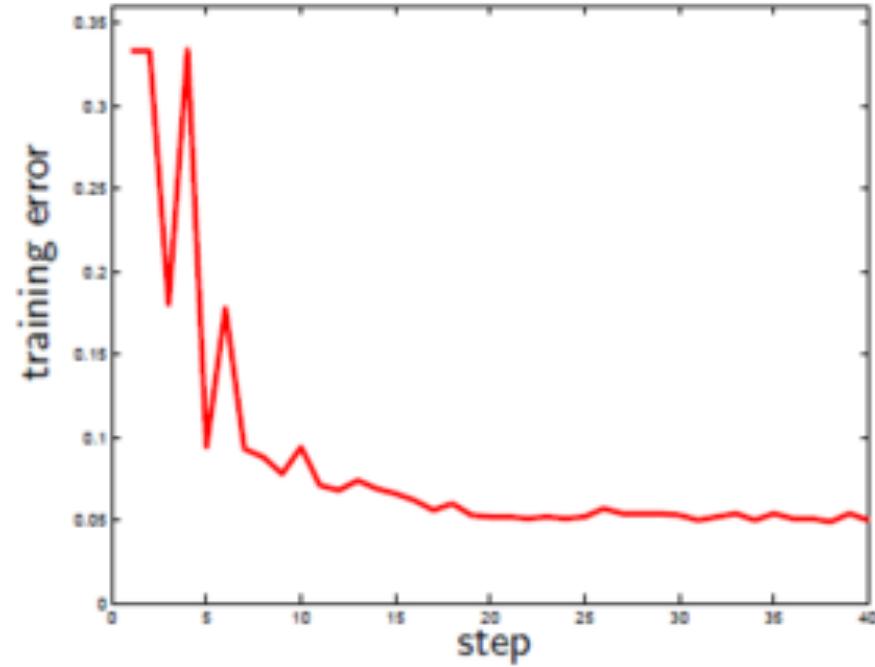
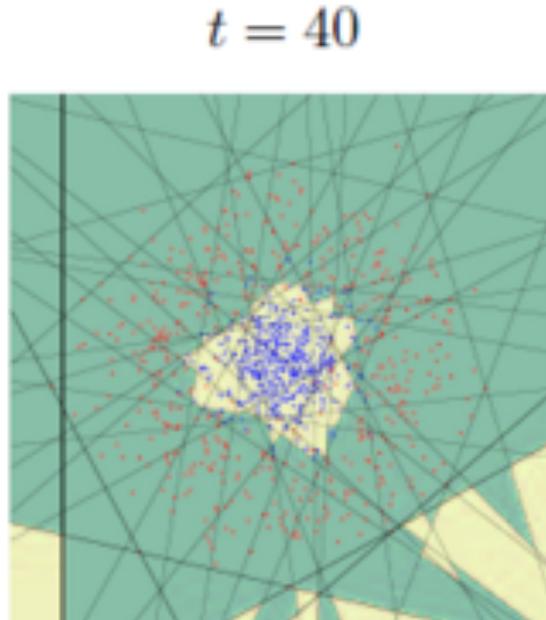


«Слабые» алгоритмы

$h_k(x)$ – как правило, решающие деревья небольшой глубины или линейные модели



Пример: бустинг над линейными классификаторами

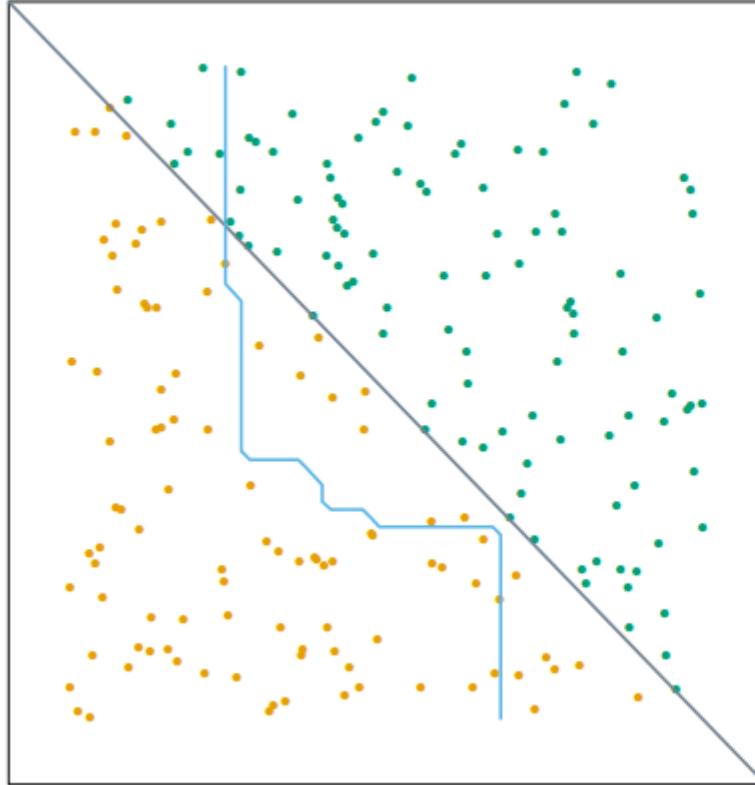


Алгоритмы бустинга

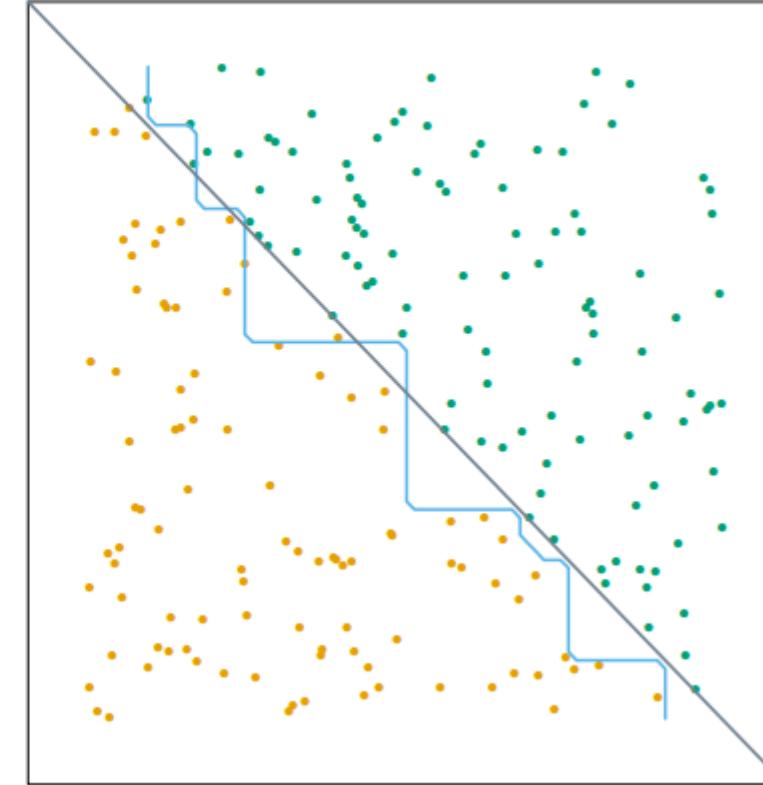
- Основные алгоритмы:
 - Градиентный бустинг
 - Адаптивный бустинг (AdaBoost)
- Вариации AdaBoost:
 - AnyBoost (произвольная функция потерь)
 - BrownBoost
 - GentleBoost
 - LogitBoost
 -

Бэггинг и бустинг

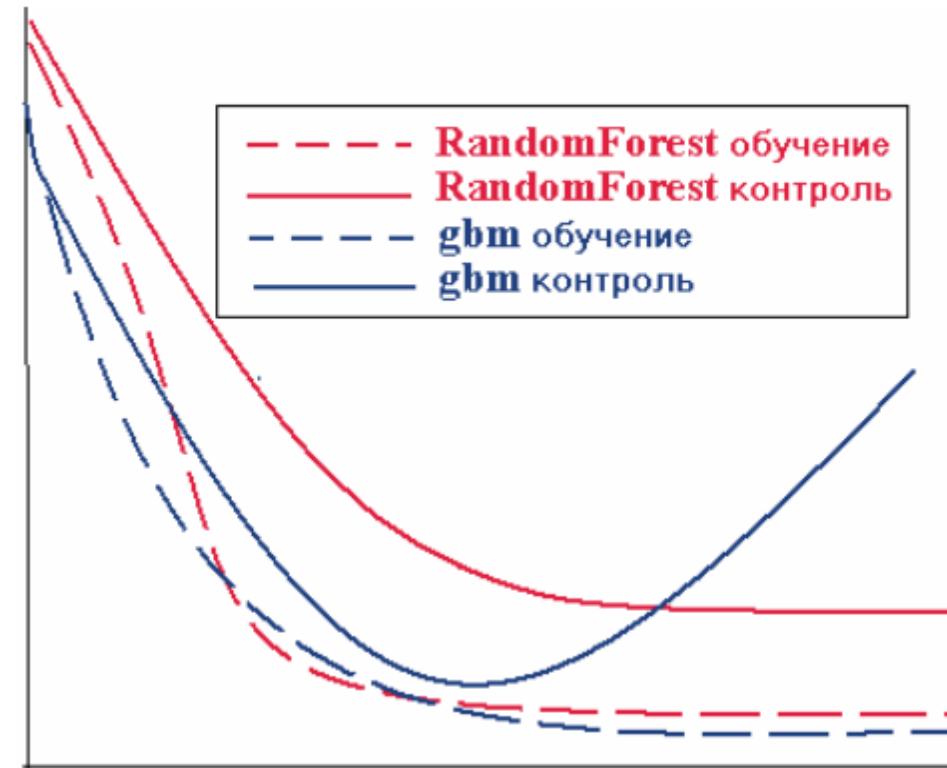
Bagged Decision Rule



Boosted Decision Rule



Бэггинг и бустинг: переобучение



Преимущества и недостатки бустинга

- Позволяет очень точно приблизить восстанавливаемую функцию или разделяющую поверхность классов
- Плохо интерпретируем
- Композиции могут содержать десятки тысяч базовых моделей и долго обучаться
- Переобучение на выбросах при избыточном количестве классификаторов

Резюме

- I. Решающие деревья
- II. Ансамбли деревьев
- III. Общие идеи построения ансамблей

Резюме

- I. Решающие деревья
- II. Ансамбли деревьев
- III. Общие идеи построения ансамблей
 - 1) Bagging (+Pasting & RSM)
 - 2) Stacking
 - 3) Blending
 - 4) Boosting

Спасибо за внимание



info@applieddatascience.ru



https://t.me/joinchat/B10lThC96v0BQCvs_joNew



https://github.com/vkantor/ml2018jan_feb



<https://goo.gl/forms/gqzb0DphPiDoO0ga2>

eXtreme Gradient Boosting (XGBoost)

<https://arxiv.org/pdf/1603.02754.pdf>

eXtreme Gradient Boosting (XGBoost)

$$\sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + b(x_i)) \rightarrow \min_b$$

$$s = \left(- \frac{\partial L}{\partial z} \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)} \right)_{i=1}^{\ell} = -\nabla_s \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a_{N-1}(x_i) + s_i)$$

$$b_N(x) = \arg \min_{b \in \mathcal{A}} \sum_{i=1}^{\ell} (b(x_i) - s_i)^2$$



$$b_N(x) = \arg \min_{b \in \mathcal{A}} \sum_{i=1}^{\ell} \left(b(x_i) - \frac{s_i}{h_i} \right)^2 \quad h_i = \frac{\partial^2 L}{\partial z^2} \Big|_{z=a_{N-1}(x_i)}$$

eXtreme Gradient Boosting (XGBoost)

$$b_N(x) = \arg \min_{b \in \mathcal{A}} \sum_{i=1}^{\ell} \left(b(x_i) - \frac{s_i}{h_i} \right)^2$$

$$b(x) = \sum_{j=1}^J b_j [x \in R_j]$$

$$\sum_{i=1}^{\ell} \left(-s_i b(x_i) + \frac{1}{2} h_i b^2(x_i) \right) + \lambda J + \frac{\mu}{2} \sum_{j=1}^J b_j^2 \rightarrow \min_b$$

$$\sum_{j=1}^J \left\{ \underbrace{\left(- \sum_{i \in R_j} s_i \right) b_j}_{=-S_j} + \frac{1}{2} \underbrace{\left(\mu + \sum_{i \in R_j} h_i \right) b_j^2}_{=H_j} + \lambda \right\}$$

eXtreme Gradient Boosting (XGBoost)

$$b_j = \frac{S_i}{H_j + \mu}$$

$$H(b) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \frac{S_j^2}{H_j + \mu} + \lambda J$$

$$H(b_l) + H(b_r) - H(b) - \lambda \rightarrow \max$$

LightGBM

<https://papers.nips.cc/paper/6907-lightgbm-a-highly-efficient-gradient-boosting-decision-tree>