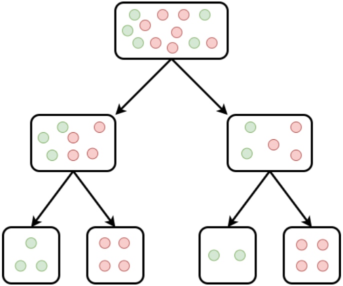
Решающие деревья

Виктор Китов

victorkitov.github.io

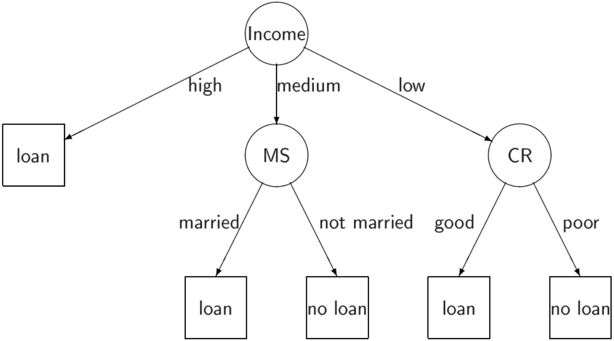


Курс поддержан фондом 'Интеллект'

Победитель конкурса VK среди курсов по IT

Содержание

Пример решающего дерева



Определение решающего дерева

- Прогнозы строятся деревом T.
- Для каждого внутреннего узла t задана функция ветвления $Q_t(x)$.
- Для каждого ребра 1,...K_t ассоциирован набор множеств $S_t(1), ...S_t(K_t)$.
  - $Q_t(x) \in S_t(i) =>$ спуститься в узел i.
  - $\bigcup_k S_t(k) = range[Q_t(\cdot)]$
  - $S_t(i) \cap S_t(j) = \emptyset \ \forall i \neq j$

Построение прогноза

- множество вершин разделяется на:
  - внутренние вершины $int(T)$, каждая имеет ≥ 2 потомков
  - терминальные вершины $terminal(T)$, которые не имеют дочерних, а ассоциированы с прогнозами.

Построение прогноза

- множество вершин разделяется на:
  - внутренние вершины $int(T)$, каждая имеет ≥ 2 потомков
  - терминальные вершины $terminal(T)$, которые не имеют дочерних, а ассоциированы с прогнозами.
- Прогноз для дерева T:
  - $t = root(T)$
  - пока t - не терминальная вершина:
    - рассчитать $Q_t(x)$
    - определить j такой, что $Q_t(x) \in S_t(j)$
    - спуститься в j-ую дочернюю вершину $t := t_j$
  - вернуть прогноз, ассоциированный с листом t.

Спецификация решающего дерева

Спецификация решающего дерева:

- функции ветвления $Q_t(x)$ $\forall t \in IntNodes$
- в каждом внутреннем узле t:
    - число дочерних вершин: K_t
    - разбиение: $S_t(1), ...S_t(K_t)$
- прогноз в каждом листе дерева

Спецификация решающего дерева

Спецификация решающего дерева:

- функции ветвления $Q_t(x)\ \forall t \in IntNodes$
- в каждом внутреннем узле t:
    - число дочерних вершин: K_t
    - разбиение: $S_t(1), ...S_t(K_t)$
- прогноз в каждом листе дерева

Спецификация обучения:

- критерий остановки
    - когда узел становится терминальным при построении top-down

Содержание

Возможные правила спуска (предикаты)

- $S_t(1) = \{x^{i(t)} \le h_t\}$, $S_t(2) = \{x^{i(t)} > h_t\}$
- $Q_t(x) = x^{i(t)}$, где $S_t(j) = v_j$, $v_1, ...v_K = unique(x^{i(t)})$.
- $S_t(j) = \{h_j < x^{i(t)} \le h_{j+1}\}$ для набора порогов $h_1, h_2, ...h_{K_t+1}$.
- $S_t(1) = \{x : \langle x, w \rangle \le h\}, \quad S_t(2) = \{x : \langle x, w \rangle > h\}$
- $S_t(1) = \{x : \|x\| \le h\}, \quad S_t(2) = \{x : \|x\| > h\}$
- и т.д.

Популярные алгоритмы решающих деревьев

- CART (classification and regression trees)
    - реализован в scikit-learn
- C4.5

Правила спуска для CART

- рассматривается единственный признак:

$$Q_t(x) = x^{i(t)}$$

- бинарные разбиения:

$$K_t = 2$$

- спуск основан предикатах=сравнении с порогом h_t:

$$S_1 = \{x^{i(t)} \le h_t\},\ S_2 = \{x^{i(t)} > h_t\}$$

- достаточно выбрать порог из уникальных значений признака $x^{i(t)}$
    - применимо для вещественных, порядковых и бинарных признаков
    - категориальные признаки:

Правила спуска для CART

- рассматривается единственный признак:

$$Q_t(x) = x^{i(t)}$$

- бинарные разбиения:

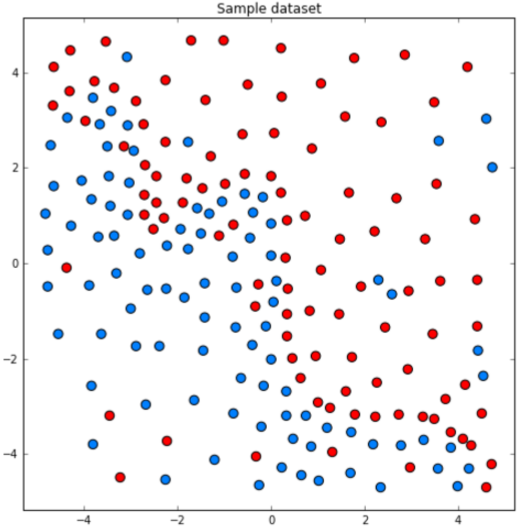
$$K_t = 2$$

- спуск основан предикатах=сравнении с порогом h_t:

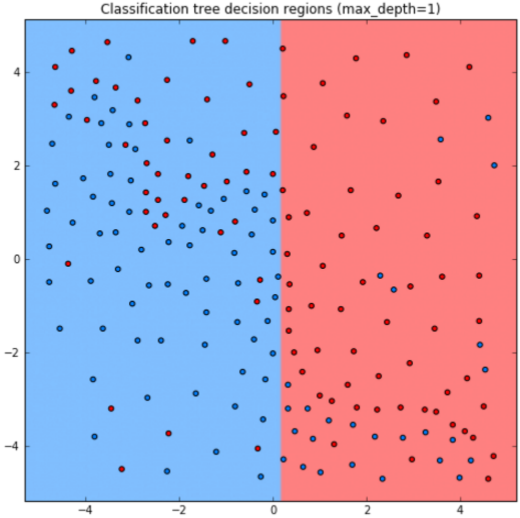
$$S_1 = \{x^{i(t)} \leq h_t\},\ S_2 = \{x^{i(t)} > h_t\}$$

- достаточно выбрать порог из уникальных значений признака $x^{i(t)}$
    - применимо для вещественных, порядковых и бинарных признаков
    - категориальные признаки: one-hot, кодирование средним, частотное кодирование.

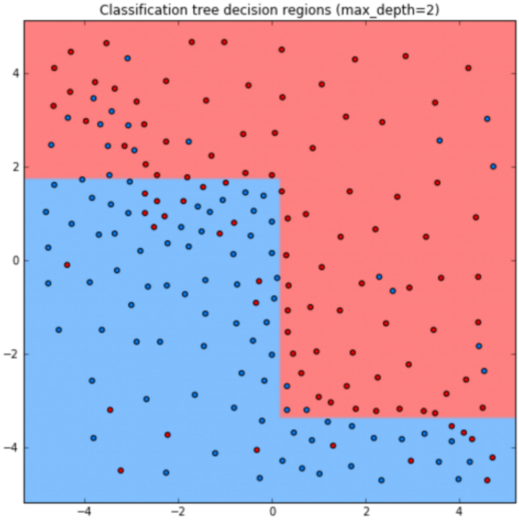
Пример обучающей выборки



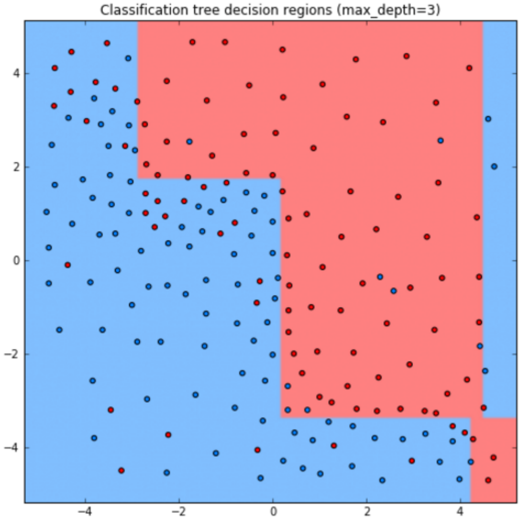
Разбиение на классы (глубина=1)



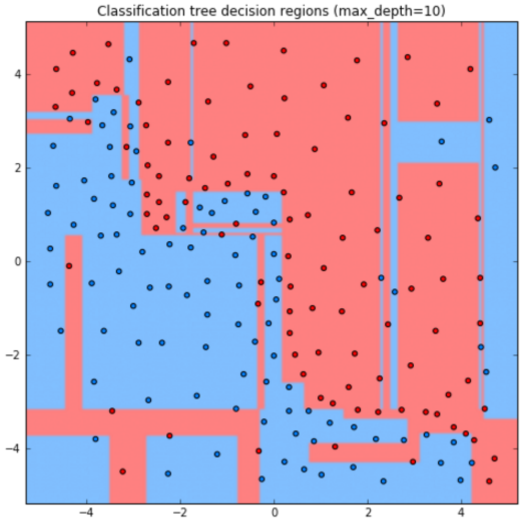
Разбиение на классы (глубина=2)



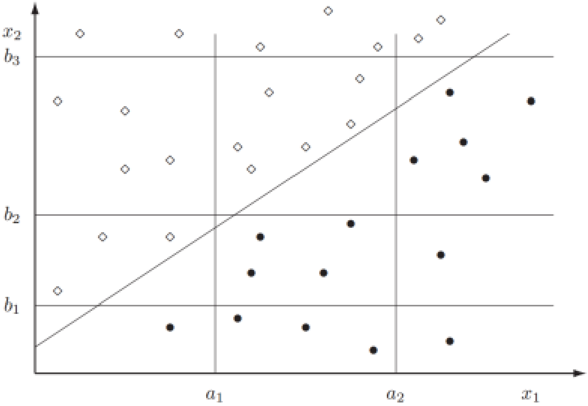
Разбиение на классы (глубина=3)



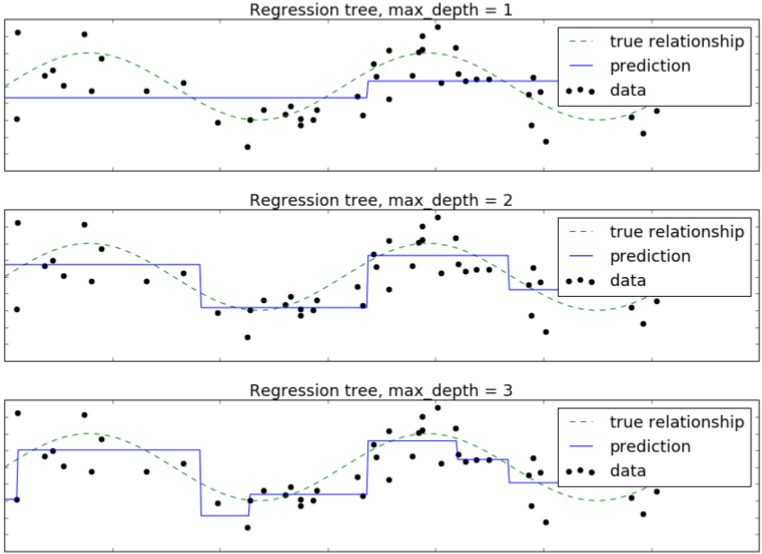
Разбиение на классы (глубина=10)



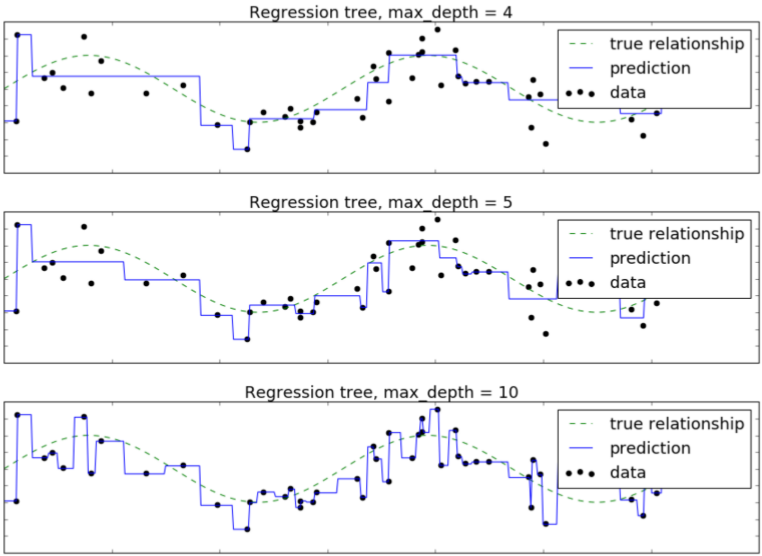
Проблемы с аппроксимацией наклонных границ



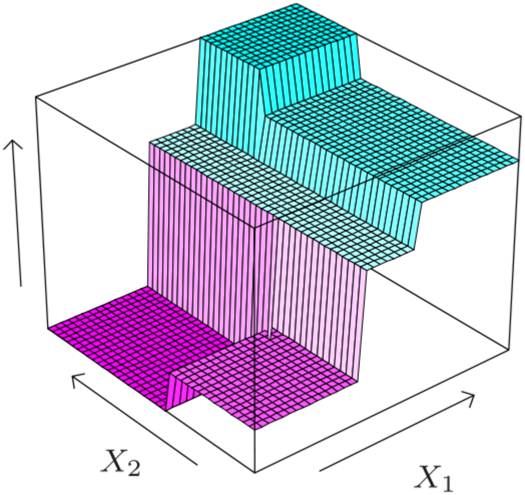
CART для задачи регрессии (малая глубина)



CART для задачи регрессии (большая глубина)



Кусочно-постоянные прогнозы CART



Анализ критерия ветвления CART

Преимущества:

- интерпретируемость (визуализация)
- вычислительная простота прогнозирования
- отбор признаков
- работает для признаков разной природы
  - обрабатывает вещественные, упорядоченные и бинарные признаки
  - прогноз инвариантен к монотонным преобразованиям признака для $Q_t(x) = x^{i(t)}$:

$$x^{i(t)} \le h \Leftrightarrow f\left(x^{i(t)}\right) \le f(h) \;\; \forall \uparrow f(\cdot)$$

Недостатки:

- константные прогнозы в листьях
  - можно в листах ассоциировать $\widehat{y} = f_t(x)$, а не константу $\widehat{y}_t$.
- много вершин - для описания наклонных границ к осям

Содержание

Определение критерия ветвления

- Из узла t перейти в: $\begin{cases} \text{левого потомка } t_L, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} \le \widehat{h}_t \\ \text{правого потомка } t_R, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} > \widehat{h}_t \end{cases}$

Определение критерия ветвления

- Из узла t перейти в: $\begin{cases} \text{левого потомка } t_L, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} \le \widehat{h}_t \\ \text{правого потомка } t_R, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} > \widehat{h}_t \end{cases}$
- Определим $\phi(t)$ - ф-цию неопределенности (критерий информативности, impurity function)
  - измеряет степень неоднозначности y для объектов в узле t.

Определение критерия ветвления

- Из узла t перейти в: $\begin{cases} \text{левого потомка } t_L, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} \le \widehat{h}_t \\ \text{правого потомка } t_R, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} > \widehat{h}_t \end{cases}$
- Определим $\phi(t)$ - ф-цию неопределенности (критерий информативности, impurity function)
  - измеряет степень неоднозначности y для объектов в узле t.
- Качество разбиения t:

$$\Delta\phi(t) = \phi(t) - \phi(t_L)\frac{N(t_L)}{N(t)} - \phi(t_R)\frac{N(t_R)}{N(t)}$$

Определение критерия ветвления

- Из узла t перейти в: $\begin{cases} \text{левого потомка } t_L, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} \le \widehat{h}_t \\ \text{правого потомка } t_R, & \text{если } x^{\widehat{i}_t} > \widehat{h}_t \end{cases}$
- Определим $\phi(t)$ - ф-цию неопределенности (критерий информативности, impurity function)
  - измеряет степень неоднозначности y для объектов в узле t.
- Качество разбиения t:

$$\Delta\phi(t) = \phi(t) - \phi(t_L)\frac{N(t_L)}{N(t)} - \phi(t_R)\frac{N(t_R)}{N(t)}$$

- Оптимизация CART (регрессия, классификация): выбрать признак x_i и порог h, максимизирующие $\Delta\phi(t)$:

$$\widehat{i}_t, \widehat{h}_t = \arg\max_{i,h} \Delta\phi(t)$$

Функция информативности для регрессии

- пусть $I_t = \{i_1, ...i_K\}$ - множество индексов объектов узла t. Можно определить $\phi(t)$ как

$$\phi(t) = \min_{\widehat{y}} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} (y_i - \widehat{y})^2$$

$$\phi(t) = \min_{\widehat{y}} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} |y_i - \widehat{y}|$$

Функция информативности для регрессии

- пусть $I_t = \{i_1, ...i_K\}$ - множество индексов объектов узла t. Можно определить $\phi(t)$ как

$$\phi(t) = \min_{\widehat{y}} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} (y_i - \widehat{y})^2 = \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} (y_i - \text{mean}_{i \in I_t}(y_i))^2$$

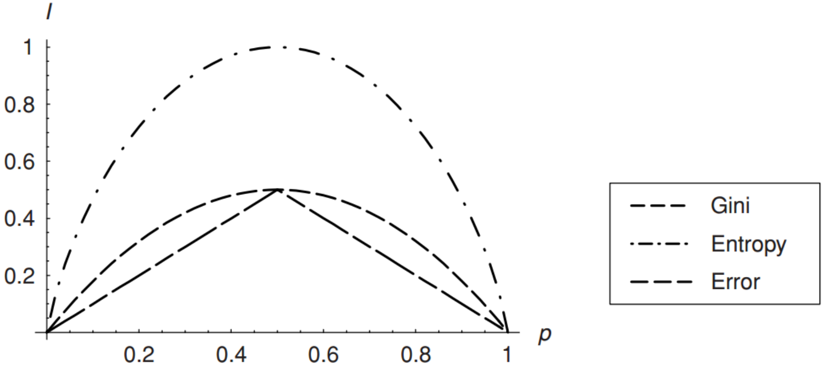
$$\phi(t) = \min_{\widehat{y}} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} |y_i - \widehat{y}| = \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} |y_i - \text{median}_{i \in I_t}(y_i)|,$$

Функции информативности для классификации

- Классификация:
    - $p_1, ...p_C$ - вероятности классов в узле t.
- Функция информативности $\phi(t) = \phi(p_1, p_2, ...p_C)$ должна удовлетворять:
    - ϕ определена для $p_j \geq 0$ и $\sum_j p_j = 1$.
    - ϕ достигает максимума при $p_j = 1/C$, $k = 1, 2, ...C$.
    - ϕ достигает минимума при $\exists j : \; p_j = 1, \; p_i = 0 \; \forall i \neq j$.
    - ϕ симметрична относительно $p_1, p_2, ...p_C$.

Визуализация основных функции информативности

Функции информативности для $y \in \{+1, -1\}$ с $p(y = +1|x) = p$ и $p(y = -1|x) = 1 - p$.



Функция неопределённости: классификационная ошибка

- **Классификационная ошибка:** как часто ошибаемся при константном прогнозе?

$$
\begin{aligned}
\phi(t) &= \min_{\widehat{y}} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \mathbb{I}[y_i \neq \widehat{y}] \\
&= \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \mathbb{I}[y_i \neq y_{most.common}] \\
&= 1 - \widehat{p}_{max}
\end{aligned}
$$

Функция неопределённости: критерий Джини

- **Критерий Джини:** оценка Бриера[1]

$$\phi(t) = \min_{p:\sum_c p_c = 1} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \left\| p - p_i^{true} \right\|^2 =$$

$$= \min_{p:\sum_c p_c = 1} \frac{1}{|I_t|} \sum_{i \in I_t} \sum_{c=1}^{C} \left(p_c - \mathbb{I}[y_i = c] \right)^2 =$$

$$= \sum_{i=1}^{C} \widehat{p}_i (1 - \widehat{p}_i) = 1 - \sum_{i=1}^{C} \widehat{p}_i^2$$

- Это вероятность ошибки при случайном угадывании с вероятностями $p(\widehat{y} = 1) = \widehat{p}_1, ... p(\widehat{y} = C) = \widehat{p}_C$

[1] Докажите оптимальность выборочных оценок вероятностей классов и финальный вид критерия.

Функция неопределённости: энтропия

- **Энтропия:** -логарифм правдоподобия оптимальных вероятностей классов[2]

$$\phi(t)=\min_{p:\sum_c p_c=1}-\frac{1}{|I_t|}\left(\sum_{i\in I_t}\sum_{c=1}^{C}\ln p_c^{\mathbb{I}[y_i=c]}\right)=$$

$$=\min_{p:\sum_c p_c=1}-\frac{1}{|I_t|}\left(\sum_{i\in I_t}\sum_{c=1}^{C}\mathbb{I}[y_i=c]\ln p_c\right)=-\sum_{i=1}^{C}\widehat{p}_i\ln\widehat{p}_i$$

- Это среднее количество информации$=-\ln p_y$, которое получаем, узнав класс y.

[2] Докажите оптимальность выборочных оценок вероятностей классов и финальный вид критерия.

Комментарии

- Логичнее брать в качестве $\phi(t)$ пользовательскую ф-цию потерь (но может не существовать аналит. решения).
- Алгоритм $\widehat{i}_t, \widehat{h}_t = \arg\max_{i,h} \Delta\phi(t)$ применяется рекурсивно при построении дерева сверху вниз.
    - жадный алгоритм, см. только на 1 шаг вперед (глобально неоптимальный, зато быстрый)
    - можно заглядывать на 2 шага вперед
- Сложность вычисления $\phi(t)$: $O(N)$, $O(N)$ значений порога, D признаков.
- Сложность настройки: $O(N^2 D)$. Как можно её сократить?

Комментарии

- Логичнее брать в качестве $\phi(t)$ пользовательскую ф-цию потерь (но может не существовать аналит. решения).
- Алгоритм $\widehat{i}_t, \widehat{h}_t = \arg\max_{i,h} \Delta\phi(t)$ применяется рекурсивно при построении дерева сверху вниз.
    - жадный алгоритм, см. только на 1 шаг вперед (глобально неоптимальный, зато быстрый)
    - можно заглядывать на 2 шага вперед
- Сложность вычисления $\phi(t)$: $O(N)$, $O(N)$ значений порога, D признаков.
- Сложность настройки: $O(N^2 D)$. Как можно её сократить?
    - экономный пересчет $\phi(t)$
        - при смещении порога 1 объект меняет вершину
    - дискретизация признака
        - квантили: 0.1, 0.2, ... 0.9

Содержание

Оптимальный прогноз в листьях: регрессия

- Регрессия:

$$\widehat{y} = \arg\min_{f} \sum_{i:x_i \in t} \mathcal{L}\left(f - y_i\right)$$

- Например[3]

$$\mathcal{L}(u) = u^2 : \widehat{y} = \text{mean}_{i:x_i \in t}\{y_i\}$$
$$\mathcal{L}(u) = |u| : \widehat{y} = \text{median}_{i:x_i \in t}\{y_i\}$$

[3] Докажите оптимальность среднего и медианы для соответствующих ф-ций потерь.

Оптимальный прогноз в листьях: классификация

В практических задачах классификации типы ошибок приводят к разным штрафам.

- например, при определении болен пациент или здоров.

Определим матрицу штрафов[4] $\Lambda \in \mathbb{R}^{CxC}$, где $\lambda_{ij} = \text{cost}\left(\widehat{y} = j | y = i\right)$:

		прогноз		
		$\widehat{y} = 1$	$\cdots$	$\widehat{y} = C$
	$y = 1$	λ_{11}	$\cdots$	λ_{1C}
факт	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
	$y = C$	λ_{C1}	$\cdots$	λ_{CC}

[4] Как эта матрица будет выглядеть в случае единичных потерь за любой тип ошибки?

Оптимальный прогноз в листьях: классификация

В случае общих потерь $\lambda_{ij} = \text{cost}\left(\widehat{y} = j | y = i\right)$

$$\widehat{y} = \arg\min_j \sum_{i \in I_t} \lambda_{y(i),j} = \arg\min_j \sum_{c=1}^{C} \left(N_t p_c\right) \lambda_{cj}$$

В случае $\lambda_{ij} = \lambda \mathbb{I}[i \neq j]$:

$$\widehat{y} = \arg\min_j N_t \sum_{c=1}^{C} p_c \lambda \mathbb{I}[i \neq j] = \arg\min_j \sum_{c \neq j} p_c$$
$$= \arg\min_j \left(1 - p_j\right) = \arg\max_j p_j$$

Использование CART для регрессии

```
...
from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor
from sklearn.metrics import mean_absolute_error

X_train, X_test, Y_train, Y_test =
    get_demo_regression_data()
# иниц-ция, criterion - функция неопределённости:
model = \
   DecisionTreeRegressor(criterion='absolute_error')
model.fit(X_train, Y_train)    # обучение модели
Y_hat = model.predict(X_test)  # построение прогнозов
print(f'Средний модуль ошибки (MAE): \
{mean_absolute_error(Y_test, Y_hat):.2f}')
```

Больше информации. Полный код.

Использование CART для классификации

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.metrics import accuracy_score
from sklearn.metrics import brier_score_loss

X_train, X_test, Y_train, Y_test =
    get_demo_classification_data()
# иниц-ция, criterion - функция неопределённости:
model = DecisionTreeClassifier(criterion='gini')
model.fit(X_train, Y_train)  # обучение модели
Y_hat = model.predict(X_test) # построение прогнозов
print(f'Точность прогнозов: \
{100*accuracy_score(Y_test, Y_hat):.1f}%')

P_hat = model.predict_proba(X_test)  # вер-ти классов
loss = brier_score_loss(Y_test, P_hat[:,1])
print(f'Мера Бриера ошибки вероятностей: {loss:.2f}')
```

Больше информации. Полный код.

Содержание

Критерий остановки

- Сложность модели должна соответствовать сложности данных:
    - слишком глубокие деревья -> переобучение
        - в крайнем случае: 1 лист содержит 1 объект, нет обобщающей способности.
    - слишком мелкие деревья -> недообучение
- Необходимо выбрать оптимальную глубину при построении дерева.
- Подходы к остановке построения:
    - основанные на правилах
    - обрезка деревьев (pruning)

5 Критерий остановки
- Остановка, основанная на правилах
- Алгоритм обрезки в CART

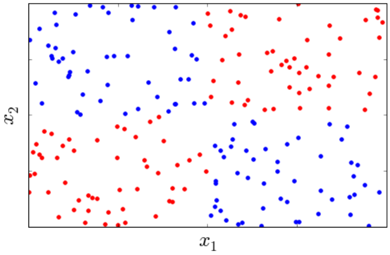
Остановка, основанная на правилах

- Остановка, когда критерий больше порога.
- Варианты критерия:
    - глубина дерева
    - #объектов в узле
    - минимальное #объектов в дочерних узлах после разбиения
    - значение информативности $\phi(t)$
    - изменение информативности $\Delta\phi(t)$ после разбиения

Анализ подхода

Преимущества: простота, интерпретируемость.
Недостатки:

- нужно подбирать порог
- изменение информативности $\Delta\phi(t)$ неоптимально: последующие разбиения могут привести к большему $\Delta\phi(t)$:



5. Критерий остановки
   - Остановка, основанная на правилах
   - Алгоритм обрезки в CART

Обрезка деревьев

Поскольку ранняя остановка по $\Delta\phi(t)$ может давать неоптимальный результат, часто:

1. Дерево строится до самого низа.
2. Потом лишние ветви обрезаются (tree pruning)

Простой подход - обрезать всевозможные деревья по валидации.

- нужно перебирать все поддеревья
- эффективнее использовать направленную обрезку с помощью алгоритма *минимального штрафа за сложность* (minimal cost-complexity pruning)

Алгоритм минимального штрафа за сложность

Алгоритм минимального штрафа за сложность:

- Определим:
  - A_t поддерево с корнем t, $\widetilde{A}_t$ - его листья
  - $R(A_t)$ - мера ошибок дерева A_t (#ошибок классификации / сумма квадратов ошибок)
  - $R_\alpha(T)$ - со штрафом за сложность ($+\alpha$ за лист).

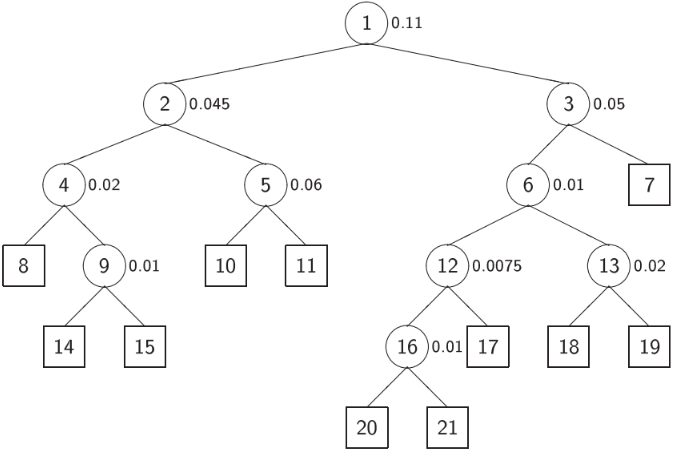
  потери за ошибки : $R(A_t) = \sum_{\tau \in \tilde{A}_t} R(\tau)$

  ошибки и сложность: $R_\alpha(A_t) = R(A_t) + \alpha|\tilde{T}|$

- Целесообразность построения A_t вместо t определим по равновесному α из $R_\alpha(A_t) = R_\alpha(t)$:

$$R(A_t) + \alpha|\tilde{A}_t| = R(t) + \alpha \;\Rightarrow\; \alpha_t = \frac{R(t) - R(A_t)}{|\tilde{A}_t| - 1}$$

Пример вычисления α_t



Алгоритм обрезки

1. Строим дерево T до самого низа (пока в листьях не останутся объекты с одинаковым откликом).
2. Строим систему вложенных поддеревьев $T = T_0 \supset T_1 \supset ... \supset T_{|T|}$ содержащих $|T|, |T| - 1,...1$ узлов, повторяя процедуру:
   - заменить T_t с самым малым α_t её корнем t
   - пересчитать α_t для всех предков t.
3. Выберем T_i, дающее минимальные потери на валидационной выборке.

Обработка пропущенных значений

Если проверяемый признак отсутствует:

- заполнить пропуски:
  - вещественные: средним, медианой
  - категориальные: модой или значением "пропущено"
- Можно предсказывать пропущенные значения по др. признакам (использовано в CART)
- C4.5: спускаемся из t по всем дочерним вершинам $t_1, \ldots t_S$, потом усредняем прогнозы с весами:

$$N(t_1)/N(t),\ N(t_2)/N(t), \ldots N(t_S)/N(t)$$

Важность признаков: mean decrease in impurity

- Важность признаков по изменению критерия информативности (mean decrease in impurity, MDI).

Важность признаков: mean decrease in impurity

- Важность признаков по изменению критерия информативности (mean decrease in impurity, MDI).
    - рассмотрим признак f
    - пусть $T(f)$-множество всех вершин, использующих f в функции ветвления
    - эффективность разбиения в t:

$$\Delta\phi(t) = \phi(t) - \sum_{c \in childen(t)} \frac{N(c)}{N(t)} \phi(c)$$

    - значимость f:

$$\frac{1}{N} \sum_{t \in T(f)} N(t) \Delta\phi(t)$$

- Поощряет признаки с большим количеством уникальных значений.

Важность признаков: mean decrease in impurity

В sklearn:

- важность содержится с *model.feature_importances_*
- недостатки:
  - вычисляется на обучающей выборке
    - если модель переобучается на признаке, важность высока, но вклад в точность прогнозов мал.

Содержание

Преимущества решающих деревьев

- нелинейная модель с гибкой настройкой сложности
- вычислительная эффективность прогнозов
- интерпретируемость (для неглубоких деревьев)
- встроенный обзор признаков
- расчет важности признаков
- инвариантны к масштабу и монотонным преобразованиям признаков
- работают с признаками разной природы
  - бинарные, вещественные, порядковые
  - категориальные->бинарные (one-hot) или вещественные (mean-value encoding)
  - категориальные->порядковые, упорядочив категории по $\overline{y}$ при условии категории

Недостатки решающих деревьев

- нет динамической подстройки под потоковые данные
- сравнительно невысокая точность:
    - границы перпендикулярно осям признаков
    - "жадная" настройка сверху вниз глобально неоптимальна
    - точность повышается композицией решающих деревьев