

Логические алгоритмы классификации

Воронцов Константин Вячеславович

vokov@forecsys.ru

<http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov>

Этот курс доступен на странице вики-ресурса

<http://www.MachineLearning.ru/wiki>

«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

Видеолекции: <http://shad.yandex.ru/lectures>

МФТИ • 31 октября 2020

1 Понятия закономерности и информативности

- Понятие закономерности
- Алгоритмы перебора правил для поиска закономерностей
- Критерии информативности

2 Решающие деревья

- Жадный метод обучения решающего дерева
- Усечение дерева (pruning)
- CART: деревья регрессии и классификации

3 Решающие списки, таблицы и леса

- Решающие леса
- Решающие таблицы
- Решающие списки

Логические закономерности в задачах классификации

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell \subset X \times Y$ — обучающая выборка, $y_i = y(x_i)$.

Логическая закономерность (правило, rule) — это предикат $R: X \rightarrow \{0, 1\}$, удовлетворяющий двум требованиям:

1) интерпретируемость:

1) R записывается на естественном языке;

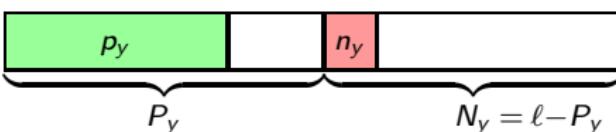
2) R зависит от небольшого числа признаков (1–7);

2) информативность относительно одного из классов $y \in Y$:

$$p_y(R) = \#\{x_i : R(x_i)=1 \text{ и } y_i=y\} \rightarrow \max;$$

$$n_y(R) = \#\{x_i : R(x_i)=1 \text{ и } y_i \neq y\} \rightarrow \min;$$

$$\frac{p_y(R)}{P_y} \gg \frac{n_y(R)}{N_y}$$



Если $R(x) = 1$, то говорят « R выделяет x » (R covers x).

Требование интерпретируемости

- 1) $R(x)$ записывается на естественном языке;
- 2) $R(x)$ зависит от небольшого числа признаков (1–7);

Пример (из области медицины)

Если «возраст > 60» и «пациент ранее перенёс инфаркт»,
то операцию не делать, риск отрицательного исхода 60%.

Пример (из области кредитного scoringа)

Если «в анкете указан домашний телефон»
и «зарплата > \$2000» и «сумма кредита < \$5000»
то кредит можно выдать, риск дефолта 5%.

Обучение логических классификаторов

Алгоритмов индукции правил (rule induction) очень много!

Четыре основных шага их построения:

- ❶ Выбор семейства правил для поиска закономерностей
- ❷ Выбор алгоритма порождения правил (rule generation)
- ❸ Выбор критерия информативности (rule selection)
- ❹ Построение классификатора из правил как из признаков, например, линейного классификатора (weighted voting):

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \sum_{j=1}^{n_y} w_{yj} R_{yj}(x)$$

Две трактовки понятия «логическая закономерность» $R(x)$:

- высокоинформативный интерпретируемый признак
- одноклассовый классификатор с отказами

Шаг 1. Часто используемые семейства правил

- Пороговое условие (решающий пень, decision stump):

$$R(x) = [f_j(x) \leq a_j] \text{ или } [a_j \leq f_j(x) \leq b_j].$$

- Конъюнкция пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} [a_j \leq f_j(x) \leq b_j].$$

- Синдром — выполнение не менее d условий из $|J|$,
(при $d = |J|$ это конъюнкция, при $d = 1$ — дизъюнкция):

$$R(x) = \left[\sum_{j \in J} [a_j \leq f_j(x) \leq b_j] \geq d \right],$$

Параметры J, a_j, b_j, d настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации критерия информативности.

Шаг 1. Часто используемые семейства правил

- Полуплоскость — линейная пороговая функция:

$$R(x) = \left[\sum_{j \in J} w_j f_j(x) \geq w_0 \right]$$

- Шар — пороговая функция близости:

$$R(x) = [\rho(x, x_0) \leq w_0]$$

АВО — алгоритмы вычисления оценок [Ю. И. Журавлёв, 1971]:

$$\rho(x, x_0) = \max_{j \in J} w_j |f_j(x) - f_j(x_0)|$$

SCM — машины покрывающих множеств [M. Marchand, 2001]:

$$\rho(x, x_0) = \sum_{j \in J} w_j |f_j(x) - f_j(x_0)|^\gamma$$

Параметры J, w_j, w_0, x_0 настраиваются по обучающей выборке путём оптимизации выбранного критерия информативности.

Шаг 2. Мета-эвристики для поиска информативных правил

Вход: обучающая выборка X^ℓ ;

Выход: множество закономерностей Z ;

инициализировать начальное множество правил Z ;

повторять

$Z' :=$ множество *локальных модификаций* правил из Z ;

удалить слишком похожие правила из $Z \cup Z'$;

$Z :=$ наиболее *информационные* правила из $Z \cup Z'$;

пока правила продолжают улучшаться;

вернуть Z ;

Частные случаи:

- стохастический локальный поиск (stochastic local search)
- генетические (эволюционные) алгоритмы
- усечённый поиск в ширину (beam search)
- поиск в глубину (метод ветвей и границ)

Шаг 2. Локальные модификации правил

Пример. Семейство конъюнкций пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} [a_j \leq f_j(x) \leq b_j].$$

Локальные модификации конъюнктивного правила:

- варьирование одного из порогов a_j и b_j
- варьирование обоих порогов a_j , b_j одновременно
- добавление признака f_j в J с варьированием порогов a_j , b_j
- удаление признака f_j из J

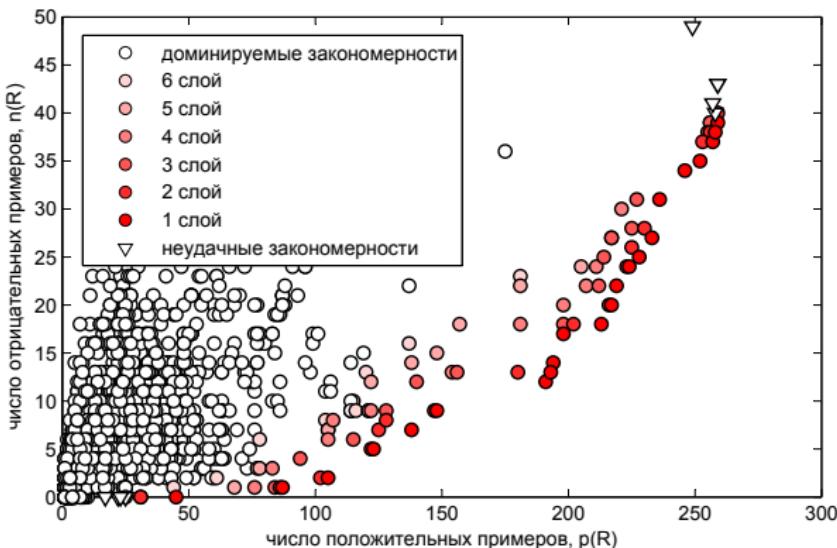
При удалении признака (pruning) информативность обычно оценивается по контрольной выборке (hold-out)

Вообще, для оптимизации множества J подходят те же методы, что и для отбора признаков (feature selection)

Шаг 3. Двухкритериальный отбор закономерностей

Два критерия: $p(R) \rightarrow \max$, $n(R) \rightarrow \min$

Парето-фронт — множество неулучшаемых закономерностей
(точка неулучшаема, если правее и ниже неё точек нет)



UCI:german

Шаг 3. Логические и статистические закономерности

Предикат $R(x)$ — логическая закономерность класса $y \in Y$:

$$\text{Precision} = \frac{p_y(R)}{p_y(R) + n_y(R)} \geq \pi_0 \quad \text{Recall} = \frac{p_y(R)}{P_y} \geq \rho_0$$

Если $n_y(R) = 0$, то R — непротиворечивая закономерность

Предикат $R(x)$ — статистическая закономерность класса $y \in Y$:

$$\text{ISStat}(p_y(R), n_y(R)) \geq \sigma_0$$

ISStat — минус-log вероятности реализации (p, n) при условии нулевой гипотезы, что $y(x)$ и $R(x)$ — независимые случайные величины (точный тест Фишера, Fisher's Exact Test):

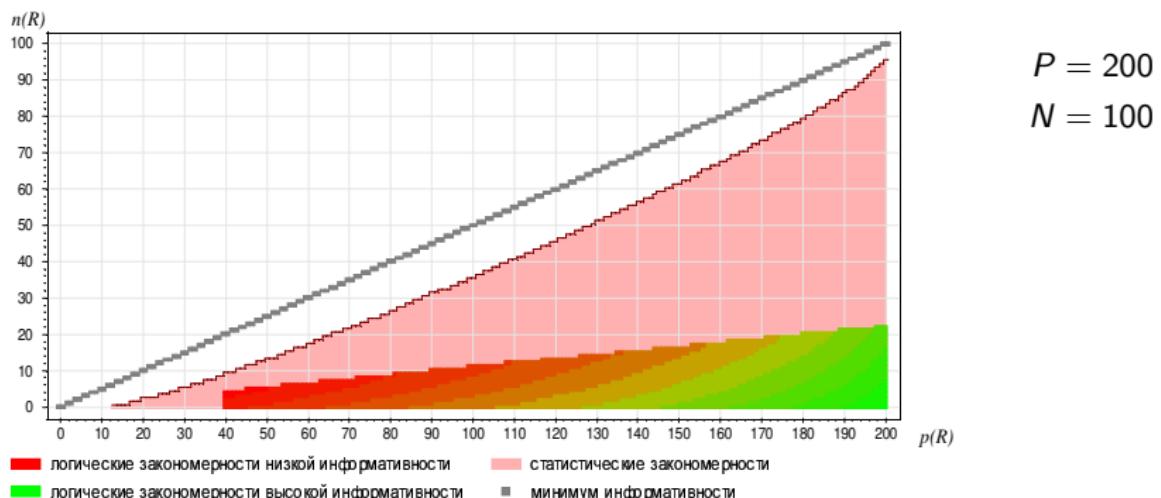
$$\text{ISStat}(p, n) = -\frac{1}{\ell} \log_2 \frac{C_P^p C_N^n}{C_{P+N}^{p+n}} \rightarrow \max,$$

где $P = \#\{x_i : y_i=y\}$, $N = \#\{x_i : y_i \neq y\}$, $C_N^n = \frac{N!}{n!(N-n)!}$

Шаг 3. Критерии поиска закономерностей в плоскости (p, n)

Логические закономерности: $\text{Precision} \geq 0.9$, $\text{Recall} \geq 0.2$

Статистические закономерности: $IStat \geq 3$



- статистический критерий удобнее для поиска правил
- логический критерий — для финального отбора правил

Шаг 3. Зоопарк критериев информативности

Очевидные, но не адекватные критерии:

- $I(p, n) = \frac{p}{p+n} \rightarrow \max$ (precision);
- $I(p, n) = p - n \rightarrow \max$ (accuracy);
- $I(p, n) = p/P - n/N \rightarrow \max$ (relative accuracy);

Адекватные, но не очевидные критерии:

- энтропийный критерий прироста информации:

$$\text{IGain}(p, n) = h\left(\frac{P}{\ell}\right) - \frac{p+n}{\ell}h\left(\frac{p}{p+n}\right) - \frac{\ell-p-n}{\ell}h\left(\frac{P-p}{\ell-p-n}\right) \rightarrow \max,$$

где $h(q) = -q \log_2 q - (1-q) \log_2(1-q)$

- критерий Джини (Gini impurity):

$$\text{IGini}(p, n) = \text{IGain}(p, n) \text{ при } h(q) = 4q(1-q)$$

- критерий бустинга и его нормированный вариант:

$$\sqrt{p} - \sqrt{n} \rightarrow \max, \quad \sqrt{p/P} - \sqrt{n/N} \rightarrow \max$$

J.Fürnkranz, P.Flach. ROC'n'rule learning – towards a better understanding of covering algorithms // Machine Learning, 2005.

Шаг 3. Нетривиальность проблемы свёртки двух критериев

Пример: в каждой паре правил первое гораздо лучше второго, однако простые эвристики не различают их по качеству (при $P = 200$, $N = 100$).

p	n	$p-n$	$p-5n$	$\frac{p}{P} - \frac{n}{N}$	$\frac{p}{n+1}$	IStat· ℓ	IGain· ℓ	$\sqrt{p} - \sqrt{n}$
50	0	50	50	0.25	50	22.65	23.70	7.07
100	50	50	-150	0	1.96	2.33	1.98	2.93
50	9	41	5	0.16	5	7.87	7.94	4.07
5	0	5	5	0.03	5	2.04	3.04	2.24
100	0	100	100	0.5	100	52.18	53.32	10.0
140	20	120	40	0.5	6.67	37.09	37.03	7.36

Замечание. Критерии IStat и IGain асимптотически эквивалентны: $IStat(p, n) \rightarrow IGain(p, n)$ при $\ell \rightarrow \infty$

Шаг 4. Построение классификатора из закономерностей

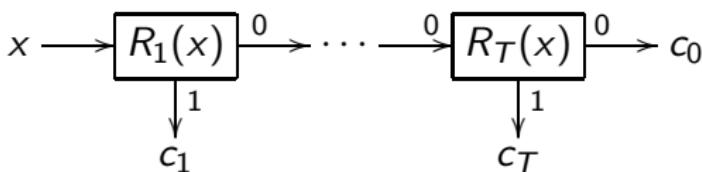
Взвешенное голосование (линейный классификатор с весами w_{yt} и регуляризацией для отбора признаков):

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \sum_{t=1}^{T_y} w_{yt} R_{yt}(x)$$

Простое голосование (комитет большинства)

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \frac{1}{T_y} \sum_{t=1}^{T_y} R_{yt}(x)$$

Решающий список (комитет старшинства), $c_t \in Y$:



Определение решающего дерева (Decision Tree)

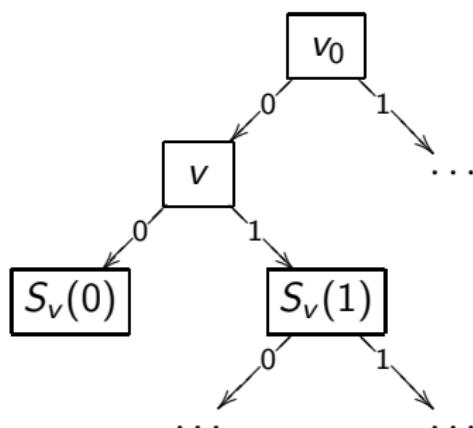
Решающее дерево — алгоритм классификации $a(x)$, задающийся деревом (связным ациклическим графом):

- 1) $V = V_{\text{внутр}} \sqcup V_{\text{лист}}$, $v_0 \in V$ — корень дерева;
- 2) $v \in V_{\text{внутр}}$: функции $f_v: X \rightarrow D_v$ и $S_v: D_v \rightarrow V$, $|D_v| < \infty$;
- 3) $v \in V_{\text{лист}}$: метка класса $y_v \in Y$.

```
 $v := v_0;$ 
пока  $v \in V_{\text{внутр}}$ 
   $v := S_v(f_v(x));$ 
вернуть  $a(x) = y_v;$ 
```

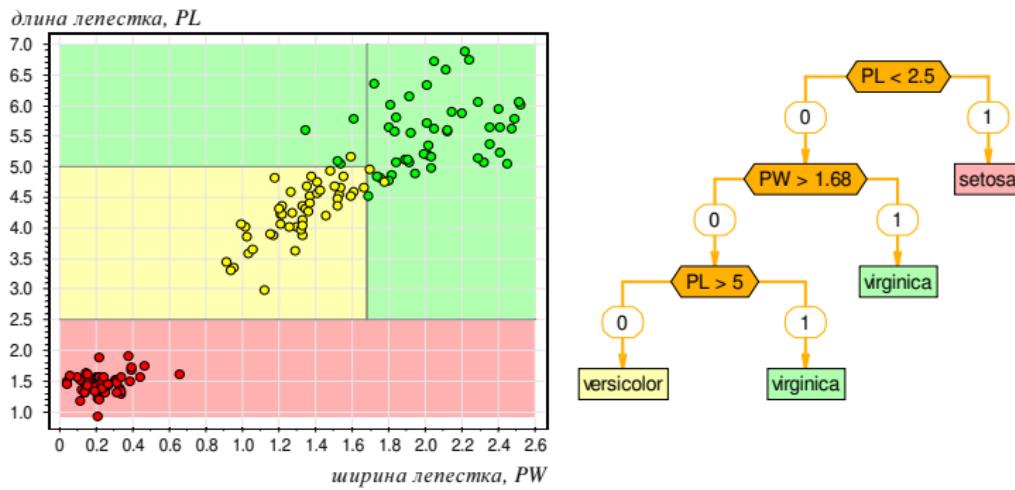
Частный случай: $D_v \equiv \{0, 1\}$
— бинарное решающее дерево

Пример: $f_v(x) = [f_j(x) \geq a_j]$



Пример решающего дерева

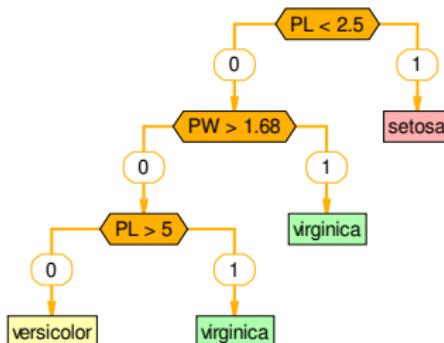
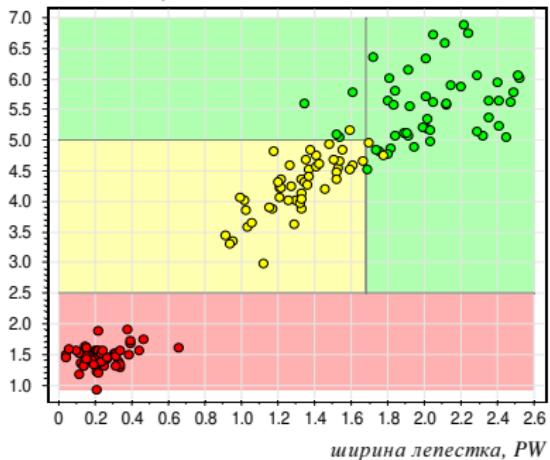
Задача Фишера о классификации цветков ириса на 3 класса, в выборке по 50 объектов каждого класса, 4 признака.



На графике: в осях двух самых информативных признаков (из 4) два класса разделились без ошибок, на третьем 3 ошибки.

Решающее дерево → покрывающий набор конъюнкций

длина лепестка, PL



setosa

$$r_1(x) = [PL \leq 2.5]$$

virginica

$$r_2(x) = [PL > 2.5] \wedge [PW > 1.68]$$

virginica

$$r_3(x) = [PL > 5] \wedge [PW \leq 1.68]$$

versicolor

$$r_4(x) = [PL > 2.5] \wedge [PL \leq 5] \wedge [PW < 1.68]$$

Обучение решающего дерева: ID3 (Iterative Dichotomiser)

$v_0 := \text{TreeGrowing}(X^\ell)$ — функция рекурсивно вызывает себя

TreeGrowing (Вход: $U \subseteq X^\ell$) \mapsto **Выход:** корень дерева v ;

$f_v := \arg \max_{f \in F} \text{Gain}(f, U)$ — критерий ветвления дерева;

если $\text{Gain}(f_v, U) < G_0$ **то**

 └ создать новый лист v ; $y_v := \text{Major}(U)$; **вернуть** v ;

 создать новую внутреннюю вершину v с функцией f_v ;

для всех $k \in D_v$

 └ $U_k := \{x \in U : f_v(x) = k\}$;

 └ $S_v(k) := \text{TreeGrowing}(U_k)$;

вернуть v ;

Мажоритарное правило: $\text{Major}(U) := \arg \max_{y \in Y} P(y|U)$.

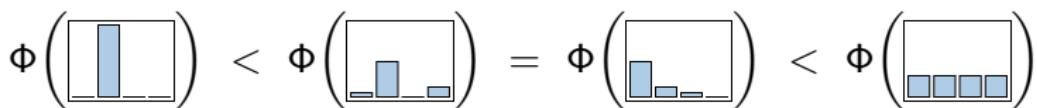
John Ross Quinlan. Induction of Decision Trees // Machine Learning, 1986.

Неопределённость распределения по классам в вершине

Частотная оценка вероятности класса y в вершине $v \in V_{\text{внутр}}$:

$$p_y \equiv P(y|U) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} [y_i = y]$$

$\Phi(U)$ — мера неопределённости (impurity) распределения p_y :



- 1) минимальна и равна нулю, когда $p_y \in \{0, 1\}$,
- 2) максимальна, когда $p_y = \frac{1}{|Y|}$ для всех $y \in Y$,
- 3) симметрична: не зависит от перенумерации классов.

$$\Phi(U) = \sum_{y \in Y} p_y \mathcal{L}(p_y) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} \mathcal{L}(P(y_i|U)) \rightarrow \min,$$

где $\mathcal{L}(p)$ убывает и $\mathcal{L}(1) = 0$, например: $-\log p$, $1-p$, $1-p^2$

Критерий ветвления

Неопределенность распределений $P(y_i|U_k)$ после ветвления по признаку f_v и разбиения U на $U_k = \{x \in U : f_v(x) = k\}$:

$$\begin{aligned}\Phi(U_1, \dots, U_{|D_v|}) &= \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} \mathcal{L}(P(y_i | \textcolor{red}{U}_{f(x_i)})) = \\ &= \frac{1}{|U|} \sum_{k \in D_v} \sum_{x_i \in U_k} \mathcal{L}(P(y_i | U_k)) = \sum_{k \in D_v} \frac{|U_k|}{|U|} \Phi(U_k)\end{aligned}$$

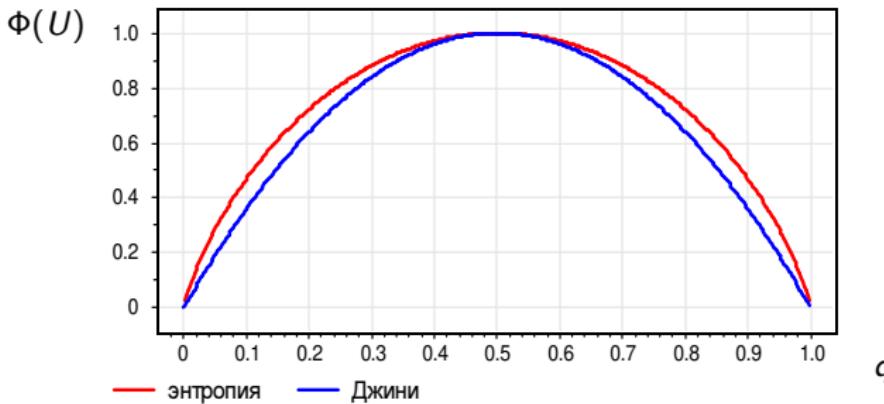
Выигрыш от ветвления вершины v :

$$\begin{aligned}\text{Gain}(f, U) &= \Phi(U) - \Phi(U_1, \dots, U_{|D_v|}) = \\ &= \Phi(U) - \sum_{k \in D_v} \frac{|U_k|}{|U|} \Phi(U_k) \rightarrow \max_{f \in F}\end{aligned}$$

Критерий Джини и энтропийный критерий

Два класса, $Y = \{0, 1\}$, $P(y|U) = \begin{cases} q, & y=1 \\ 1-q, & y=0 \end{cases}$

- Если $\mathcal{L}(p) = -\log_2 p$, то
 $\Phi(U) = -q \log_2 q - (1-q) \log_2(1-q)$ — энтропия выборки.
- Если $\mathcal{L}(p) = 2(1-p)$, то
 $\Phi(U) = 4q(1-q)$ — неопределённость Джини (Gini impurity).



Обработка пропущенных значений

На стадии обучения:

- $f_v(x_i)$ не определено $\Rightarrow x_i$ исключается из U для $\text{Gain}(f_v, U)$
- $q_{vk} = \frac{|U_k|}{|U|}$ — оценка вероятности k -й ветви, $v \in V_{\text{внутр}}$
- $P(y|x, v) = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} [y_i = y]$ для всех $v \in V_{\text{лист}}$

На стадии классификации:

- $f_v(x)$ определено \Rightarrow из дочерней $s = S_v(f_v(x))$ взять $P(y|x, v) = P(y|x, s)$.
- $f_v(x)$ не определено \Rightarrow пропорциональное распределение:
$$P(y|x, v) = \sum_{k \in D_v} q_{vk} P(y|x, S_v(k)).$$
- Окончательное решение — наиболее вероятный класс:
$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} P(y|x, v_0).$$

Жадная нисходящая стратегия: достоинства и недостатки

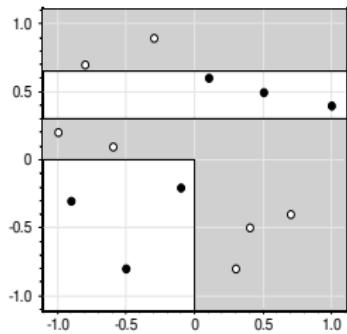
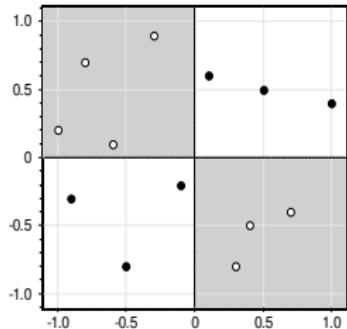
Достоинства:

- Интерпретируемость и простота классификации.
- Гибкость: можно варьировать множество F .
- Допустимы разнотипные данные и данные с пропусками.
- Трудоёмкость линейна по длине выборки $O(|F| h \ell)$.
- Не бывает отказов от классификации.

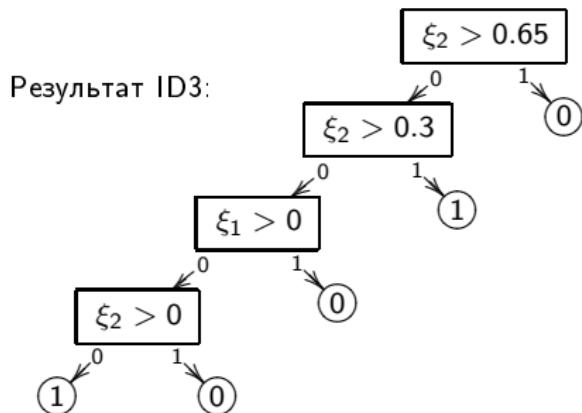
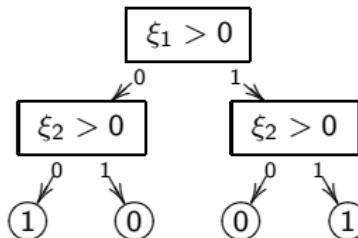
Недостатки:

- Жадная стратегия переусложняет структуру дерева, и, как следствие, сильно переобучается.
- Фрагментация выборки: чем дальше v от корня, тем меньше статистическая надёжность выбора f_v, y_v .
- Высокая чувствительность к шуму, к составу выборки, к критерию информативности.

Жадная стратегия переусложняет структуру дерева



Оптимальное дерево для задачи XOR:



Усечение дерева: стратегии post-pruning

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

для всех $v \in V_{\text{внутр}}$:

X_v^q := подмножество объектов X^q , дошедших до v ;

если $X_v^q = \emptyset$ то

создать новый лист v ; $y_v := \text{Major}(U)$; вернуть v ;

по минимуму числа ошибок классификации $Q(X_v^q)$:

либо сохранить целиком поддерево вершины v ;

либо заменить поддерево v дочерним $S_v(k)$, $k \in D_v$;

либо заменить поддерево v листом, выбрав класс y_v ;

Стратегии перебора вершин:

- снизу вверх: Minimum Cost Complexity Pruning (MCCP), Reduced Error Pruning (REP), Minimum Error Pruning (MEP)
- сверху вниз: Pessimistic Error Pruning (PEP)

CART: деревья регрессии и классификации

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

$$C(a) = \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 \rightarrow \min_a$$

Пусть U — множество объектов x_i , дошедших до вершины v

Мера неопределённости — среднеквадратичная ошибка

$$\Phi(U) = \min_{y \in Y} \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} (y - y_i)^2$$

Значение y_v в терминальной вершине v — МНК-решение:

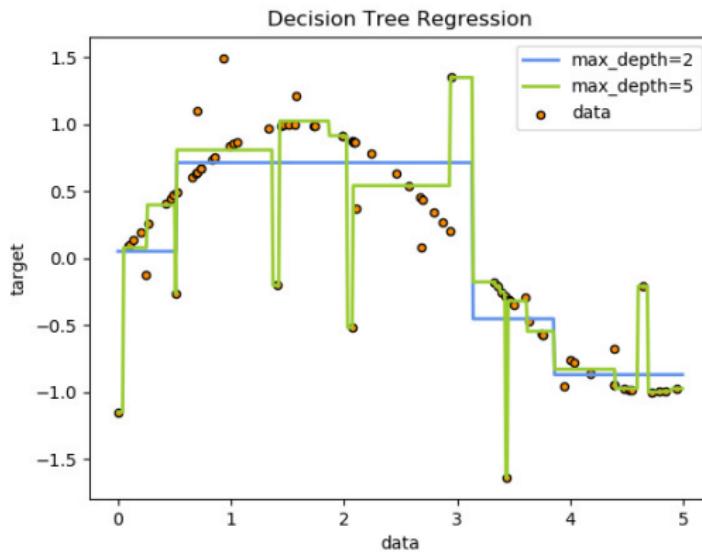
$$y_v = \frac{1}{|U|} \sum_{x_i \in U} y_i$$

Дерево регрессии $a(x)$ — это кусочно-постоянная функция.

Leo Breiman et al. Classification and regression trees. 1984.

Пример. Деревья регрессии различной глубины

Чем сложнее дерево (чем больше его глубина), тем выше влияние шумов в данных и выше риск переобучения.



CART: критерий Minimal Cost-Complexity Pruning

Среднеквадратичная ошибка со штрафом за сложность дерева:

$$C_\alpha(a) = \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2 + \alpha |V_{\text{лист}}| \rightarrow \min_a$$

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.

Случайный лес (Random Forest)

Голосование деревьев классификации, $Y = \{-1, +1\}$:

$$a(t) = \text{sign} \sum_{t=1}^T b_t(x).$$

Голосование деревьев регрессии, $Y = \mathbb{R}$:

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

- каждое дерево $b_t(x)$ обучается по случайной выборке с возвращениями ($1 - 1/e \approx 63.2\%$ объектов)
- в каждой вершине признак выбирается из случайногоподмножества \sqrt{n} признаков ($\lfloor n/3 \rfloor$ для регрессии)
- признаки и пороги выбираются по критерию Джини
- усечений (pruning) нет

Разновидности решающих лесов

- Случайный лес (Random Forest)
- Использование большого числа простых решающих деревьев в качестве признаков, в любом классификаторе.
- Oblique Random Forest, Rotation Forest
 $f_v(x)$ — линейные комбинации признаков, выбираемые по энтропийному критерию информативности.
- Решающий список из решающих деревьев:
 - при образовании статистически ненадёжного листа этот лист заменяется переходом к следующему дереву;
 - следующее дерево строится по объединению подвыборок, прошедших через ненадёжные листы предыдущего дерева.

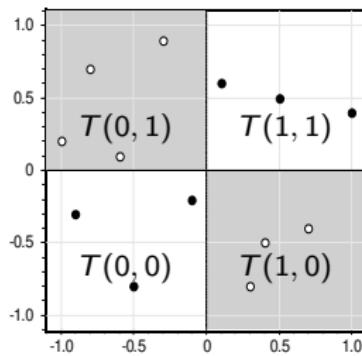
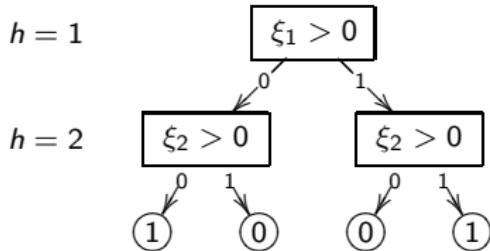
Небрежные решающие деревья (Oblivious Decision Tree, ODT)

Решающая таблица: дерево глубины H , $D_v = \{0, 1\}$;
для всех узлов уровня h условие ветвления $f_h(x)$ **одинаково**;
на уровне h ровно 2^{h-1} вершин; X делится на 2^H ячеек.

Классификатор задаётся *таблицей решений* $T: \{0, 1\}^H \rightarrow Y$:

$$a(x) = T(f_1(x), \dots, f_H(x)).$$

Пример: задача XOR, $H = 2$.



Алгоритм обучения ОДТ

Вход: выборка X^ℓ ; множество признаков F ; глубина дерева H ;

Выход: признаки $f_h, h = 1, \dots, H$; таблица $T: \{0, 1\}^H \rightarrow Y$;

для всех $h = 1, \dots, H$

предикат с максимальным выигрышем определённости:

$$f_h := \arg \max_{f \in F} \text{Gain}(f_1, \dots, f_{h-1}, f);$$

классификация по мажоритарному правилу:

$$T(\beta) := \text{Major}(U_{H\beta});$$

Выигрыш от ветвления на уровне h по всей выборке X^ℓ :

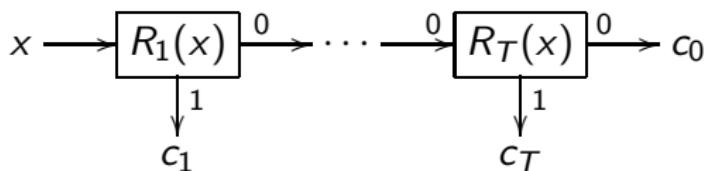
$$\text{Gain}(f_1, \dots, f_h) = \Phi(X^\ell) - \sum_{\beta \in \{0, 1\}^h} \frac{|U_{h\beta}|}{\ell} \Phi(U_{h\beta}),$$

$$U_{h\beta} = \{x_i \in X^\ell : f_s(x_i) = \beta_s, s = 1..h\}, \quad \beta = (\beta_1, \dots, \beta_h) \in \{0, 1\}^h.$$

Определение решающего списка

Решающий список (Decision List, DL)

— алгоритм классификации $a: X \rightarrow Y$, который задаётся закономерностями $R_1(x), \dots, R_T(x)$ классов $c_1, \dots, c_T \in Y$:



для всех $t = 1, \dots, T$

 | если $R_t(x) = 1$ то вернуть c_t ;

вернуть c_0 — отказ от классификации объекта x ;

$$E(R_t, X^\ell) = \frac{n_{c_t}(R_t)}{n_{c_t}(R_t) + p_{c_t}(R_t)} \rightarrow \min \quad \text{— доля ошибок } R_t \text{ на } X^\ell$$

Жадный алгоритм построения решающего списка

Вход: выборка X^ℓ ; параметры: $T_{\max}, I_{\min}, E_{\max}, \ell_0$;

Выход: решающий список $\{R_t, c_t\}_{t=1}^T$;

$U := X^\ell$;

для всех $t := 1, \dots, T_{\max}$

выбрать класс c_t ;

поиск правила R_t по максимуму информативности:

$R_t := \arg \max_R I(R, U)$ при ограничении $E(R, U) \leq E_{\max}$;

если $I(R_t, U) < I_{\min}$ **то выход**;

$U := \{x \in U : R_t(x) = 0\}$ — не покрытые правилом R_t ;

если $|U| \leq \ell_0$ **то выход**;

Замечания к алгоритму построения решающего списка

- Стратегии выбора класса c_t :
 - 1) все классы по очереди
 - 2) на каждом шаге определяется оптимальный класс
- Параметр E_{\max} управляет сложностью списка:
 $E_{\max} \downarrow \Rightarrow p(R_t) \downarrow, T \uparrow$
- Преимущества:
 - хорошая интерпретируемость классификации
 - простой обход проблемы пропусков в данных
- Недостаток: низкое качество классификации
- Другие названия:
 - комитет с логикой старшинства (Majority Committee)
 - голосование по старшинству (Majority Voting)
 - машина покрывающих множеств (Set Covering Machine, SCM)

Вспомогательная задача бинаризации вещественного признака

Цель: сократить перебор предикатов вида $[f(x) \leqslant \alpha]$.

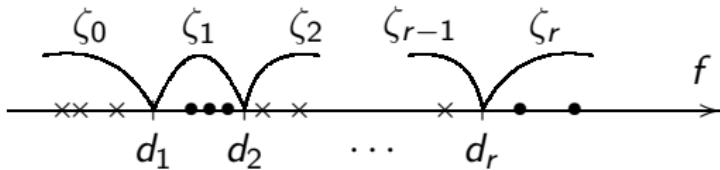
Дано: выборка значений вещественного признака $f(x_i)$, $x_i \in X^\ell$.

Найти: наилучшее (в каком-то смысле) разбиение области значений признака на относительно небольшое число зон:

$$\zeta_0(x) = [f(x) < d_1];$$

$$\zeta_s(x) = [d_s \leqslant f(x) < d_{s+1}], \quad s = 1, \dots, r - 1;$$

$$\zeta_r(x) = [d_r \leqslant f(x)].$$



Способы разбиения области значений признака на зоны

- ① Жадная максимизация информативности путём слияний
- ② Разбиение на равномощные подвыборки
- ③ Разбиение по равномерной сетке «удобных» значений
- ④ Объединение нескольких разбиений

Повышение «удобства» пороговых значений

Задача: на отрезке $[a, b]$ найти значение x^* с минимальным числом значащих цифр.

Если таких x^* несколько, выбрать

$$x^* = \arg \min_x \left| \frac{1}{2}(a + b) - x \right|.$$

Алгоритм разбиения области значений признака на зоны

Вход: выборка X^ℓ ; класс $c \in Y$; параметры r и δ_0 ;

Выход: $D = \{d_1 < \dots < d_r\}$ — последовательность порогов;

$D := \emptyset$; упорядочить выборку X^ℓ по возрастанию $f(x_i)$;

для всех $i = 2, \dots, \ell$

если $f(x_{i-1}) \neq f(x_i)$ и $[y_{i-1} = c] \neq [y_i = c]$ **то**

добавить порог $\frac{1}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i))$ в конец D

повторять

для всех $d_i \in D$, $i = 1, \dots, |D| - 1$

$\delta I_i := I(\zeta_{i-1} \vee \zeta_i \vee \zeta_{i+1}) - \max\{I(\zeta_{i-1}), I(\zeta_i), I(\zeta_{i+1})\}$;

$i := \arg \max_s \delta I_s$;

если $\delta I_i > \delta_0$ **то**

слить зоны ζ_{i-1} , ζ_i , ζ_{i+1} , **удалив** d_i и d_{i+1} из D ;

пока $|D| > r + 1$;

- Основные требования к логическим закономерностям:
 - интерпретируемость, информативность, различность.
- Преимущества решающих деревьев:
 - интерпретируемость,
 - допускаются разнотипные данные,
 - возможность обхода пропусков;
- Недостатки решающих деревьев:
 - переобучение,
 - фрагментация выборки,
 - неустойчивость к шуму, составу выборки, критерию;
- Способы устранения этих недостатков:
 - редукция,
 - композиции (леса) деревьев.
 - Yandex MatrixNet — бустинг над ODT (в следующей лекции)