Решающие деревья

Виктор Владимирович Китов

МГУ им.Ломоносова, ф-т ВМиК, кафедра ММП.

I семестр 2015 г.

Алгоритм ID3

ПАРАМЕТРЫ:
Z—подмножество обучающих объектов $(x_1, y_1), ...(x_n, y_n)$
F—множество рассматриваемых признаков

ФУНКЦИЯ ID3(Z,F):
создать вершину дерева root
если все $y_i \in Z$ принадлежат одному классу c_k:
вернуть root в качестве листа с классом c_k
если $F =$:
вернуть root в качестве листа с классом c_j,
где c_j—самый частый класс среди Y.
иначе:
$f^* = \arg\max_f InformationGain_{f \in F}(Z, f)$
соотнести вершине *root* признак f^*
для каждого значения v_i признака f^*:
создать исходящую ветвь $edge(v_i)$, которой
сопоставлено значение v_i
взять подмножества $Z(v_i) = \{Z_k,$ где k такие, что $f_k^* = v_i\}$
если $Z(v_i) = \emptyset$, то
ветви $edge(v_i)$ соотнести лист с классом,
равным самому частому классу в Z.
иначе:
сопоставить ребру $e(v_i)$ вершину $ID3(Z(v_i), F - \{f^*\})$

Table of Contents

Алгоритм MARS

- MARS-multivariate adaptive regression splines
- MARS-торговая марка, эквивалентное «свободное» название - earth
- Существуют бесплатные реализации алгоритма в python, R, matlab.
- J.H. Friedman Multivariate adaptive regression splines. The Annals of Statistics, 19 (1991), pp. 1–141.

Мотивация

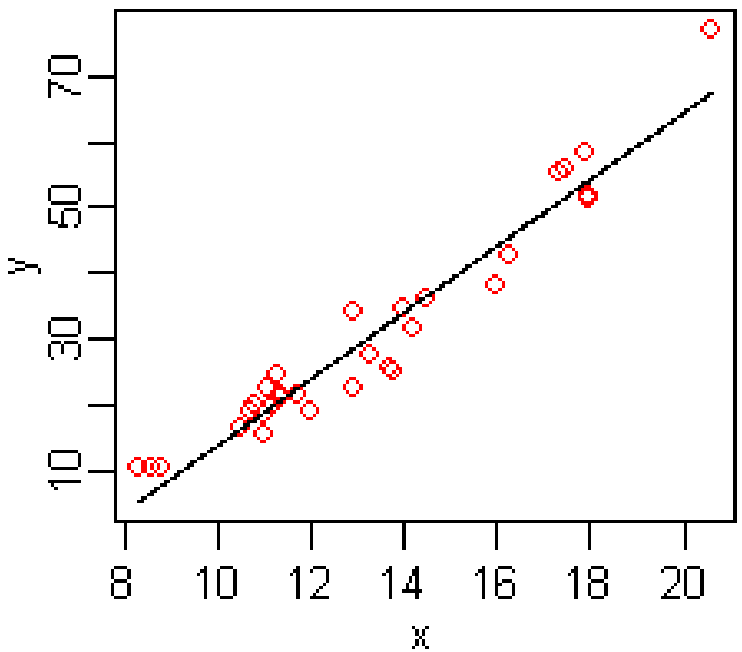
- Цель: в многомерном признаковом пространстве строить регрессию «не слишком сложной» непрерывной функцией
- Алгоритм CART:
  - отбирает признаки, применим в многомерном пространстве
  - аппроксимирует кусочно-постоянными функциями

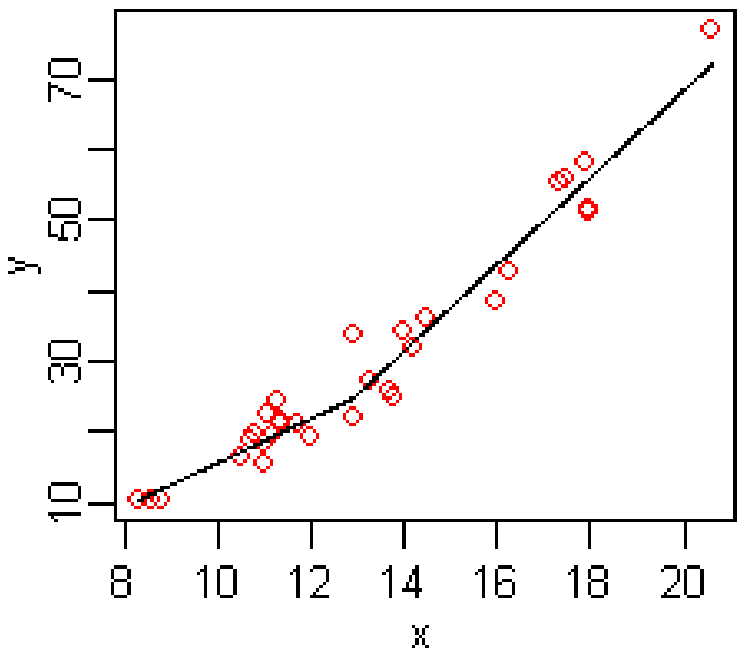
    => для непрерывной функции может потребоваться много листьев, описывающих «ступени»

Пример с одним признаком

$$y = a_0 + a_1 x$$

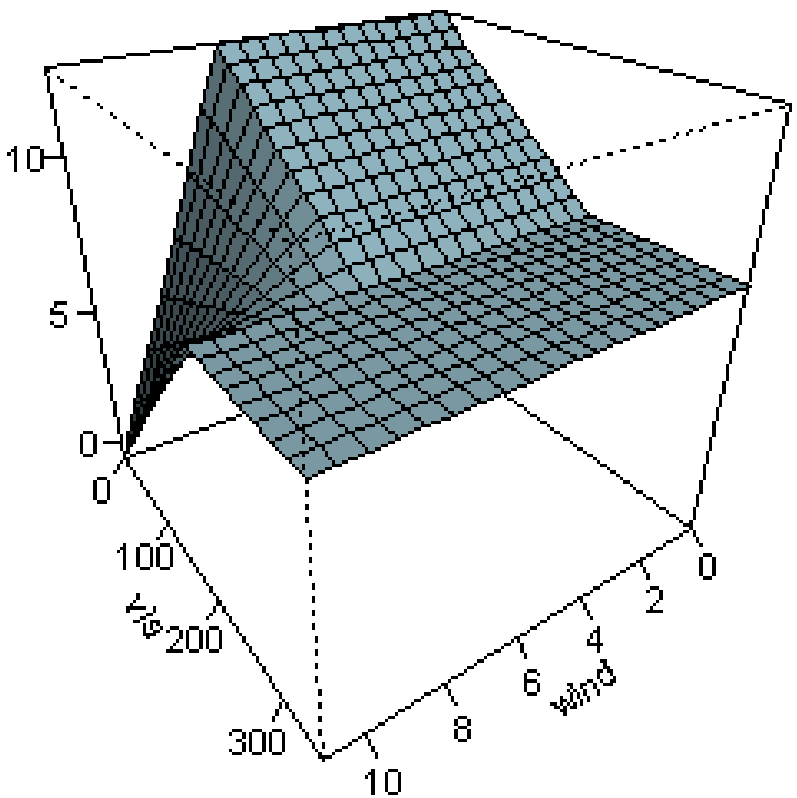
$$y = a_0 + a_1[x - b_1]_+ + a_2[b_1 - x]_+$$





Пример с многими признаками

$$y = a_0 + a_1[x_1 - b_1]_+ + a_2[x_1 - b_2]_+ + a_3[x_2 - b_3] + a_4[x_3 - b_4]_+[x_4 - b_5]_+$$



Модель

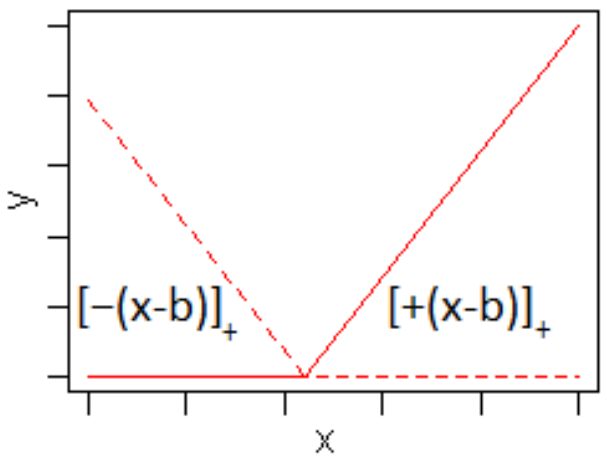
Прогнозирующая функция:

$$\widehat{y} = \sum_{k=1}^{K} a_k R_k(x, \mathbf{b}^k, \mathbf{s}^k, \mathbf{i}^k)$$

где $\mathbf{b}_k, \mathbf{s}_k, \mathbf{i}_k \in \mathbb{R}^P$, $R_k = \prod_{p=1}^{P} [s_p^k (x_{i_p^k} - b_p^k)]_+$,
$s_p^k \in \{-1, +1\} \; \forall p, k$

$$[u]_+ = \begin{cases} u, & u \geq 0 \\ 0 & u < 0 \end{cases}$$

hinge функции



Алгоритм построения

Алгоритм MARS состоит из 2х этапов:

1. наращивание модели
2. упрощение модели

- Обозначим RSS - residual sum of squares

$$RSS = \sum_{n=1}^{N} (\widehat{y}_n - y_n)^2$$

Построение модели-наращивание

НАРАЩИВАНИЕ МОДЕЛИ:
пока $K < K_{max}$ и изменение RSS выше порога:
для каждого $k = 1, 2, ...K$:
для каждого $i = 1, 2, ...D$:
для каждого $b \in dom\{x_i\}$
если k, i, b удовлетворяют ограничениям:
рассчитать уменьшение RSS
при добавлении к модели
$R_{K+1} = R_k[+(x_i - b)]_+$ и $R_{K+2} = R_k[-(x_i - b)]_+$
добавить ту пару слагаемых, которая дает наибольшее уменьшение RSS.
$K \leftarrow K + 2$

Возможные ограничения на модель:

- количество слагаемых $K < K_{max}$
- количество множителей $P < P_{max}$ (обычно $P_{max} = 1, 2$)
- разрешено произведение только некоторых типов признаков

Построение модели-упрощение

```
УПРОЩЕНИЕ МОДЕЛИ:
    пока GCV уменьшается:
        для каждого k = 1, 2, ...K:
            рассчитать уменьшение GCV
        исключить слагаемое R_k, дающее максимальное
        уменьшение GCV.
        K ← K − 1
```

- Добавление слагаемых производилось парами, а исключение производится по одному.
- GCV (generalized cross validation) - критерий, аппроксимирующий LOO-CV:

$$GCV = \frac{RSS}{N(1 - C/N)^2}$$

- RSS - оценка точности, а $C = K + \alpha\frac{K-1}{N}$ - оценка сложности модели, α-параметр, обычно $\alpha \in [2, 5]$.

Комментарии

- Вместо множителей $[s(x_i - b)]_+$ могут использоваться $[s(x_i - b)]_+^q, q > 0$.
  - При $q \to 0$ $[u]_+^q \to \mathbb{I}[u \geq 0]$ и MARS сходится к кусочно-постоянному решению.
  - При $q > 1$: непрерывные производные.
- Для классификации:
  - кодируем класс вектором $\tilde{y} \in \mathbb{R}^C$, где C-число классов, а $\tilde{y}^i = \mathbb{I}[x \in \omega_i]$
  - для $i = 1, 2...C$: оцениваем $g_i(x)$ по $(x_1, \tilde{y}^i), (x_2, \tilde{y}_2^i), ...(x_N, \tilde{y}_N^i)$
  - классификация x: $\widehat{y} = \arg\max_i g_i(x)$

Обсуждение алгоритма

- Преимущества MARS:
  - более гибкий подход, чем линейная модель
  - гибкость можно регулировать, ограничивая K_{max} и P_{max}
  - интерпретируемость
  - возможность одновременного учета непрерывных и дискретных признаков
  - встроенный отбор признаков
  - в отличие от решающих деревьев - аппроксимация кусочно-линейная, а не кусочно-постоянная
- Недостатки MARS:
  - субоптимальность решения, сходимость к лок. оптимуму
  - как следствие:
    - чувствительность к обучающей выборке
    - неустойчивость
  - меньше интерпретируемость, чем у деревьев, т.к. одновременно влияют все слагаемые суммы.