Московский энергетический институт

Кафедра Вычислительных машин систем и сетей

КУРС ПРОБЛЕМЫ ОРГАНИЗАЦИИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Лекция №2 на тему :

«Введение в машинное обучение»

Москва 2018 г.

Задача классификации (обучение с у

Задача восстановления зависимости $y\colon X \to Y$, $|Y| < \infty$
по точкам *обучающей выборки* (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, \ell$.

Дано: векторы $x_i = (x_i^1, \ldots, x_i^n)$ — объекты обучающей выборки,
$y_i = y(x_i)$ — классификации, ответы учителя, $i = 1, \ldots, \ell$:

$$\begin{pmatrix} x_1^1 & \ldots & x_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ x_\ell^1 & \ldots & x_\ell^n \end{pmatrix} \xrightarrow{y^*} \begin{pmatrix} y_1 \\ \ldots \\ y_\ell \end{pmatrix}$$

Найти: функцию $a(x)$, способную классифицировать объекты
произвольной *тестовой выборки* $\tilde{x}_i = (\tilde{x}_i^1, \ldots, \tilde{x}_i^n)$, $i = 1, \ldots, k$:

$$\begin{pmatrix} \tilde{x}_1^1 & \ldots & \tilde{x}_1^n \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \tilde{x}_k^1 & \ldots & \tilde{x}_k^n \end{pmatrix} \xrightarrow{a?} \begin{pmatrix} a(\tilde{x}_1) \\ \ldots \\ a(\tilde{x}_k) \end{pmatrix}$$

Определение бинарного решающего дерева

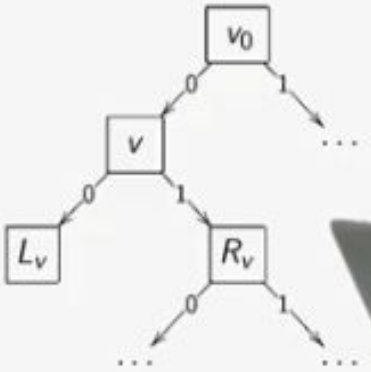
Бинарное решающее дерево — алгоритм классификации $a(x)$, задающийся бинарным деревом:

1) $\forall v \in V_{\text{внутр}} \rightarrow$ предикат $\beta_v : X \to \{0,1\}$, $\beta_v \in \mathscr{B}$,

2) $\forall v \in V_{\text{лист}} \rightarrow$ имя класса $c_v \in Y$,

где $\mathscr{B}$ — множество бинарных признаков или предикатов (например, вида $\beta(x) = [x^j \geqslant \theta_j]$, $x^j \in \mathbb{R}$)

1: $v := v_0$;
2: **пока** $v \in V_{\text{внутр}}$
3: **если** $\beta_v(x) = 1$ **то**
4: переход вправо: $v := R_v$;
5: **иначе**
6: переход влево: $v := L_v$;
7: **вернуть** c_v.



Определение бинарного решающего дерева

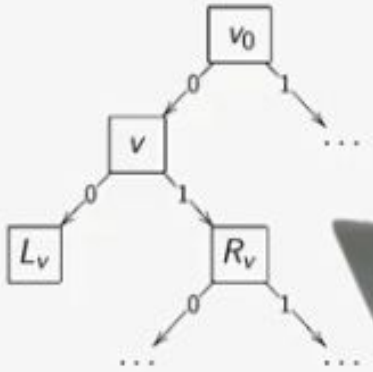
Бинарное решающее дерево — алгоритм классификации $a(x)$, задающийся бинарным деревом:

1) $\forall v \in V_{\text{внутр}} \rightarrow$ предикат $\beta_v : X \rightarrow \{0,1\}$, $\beta_v \in \mathscr{B}$,

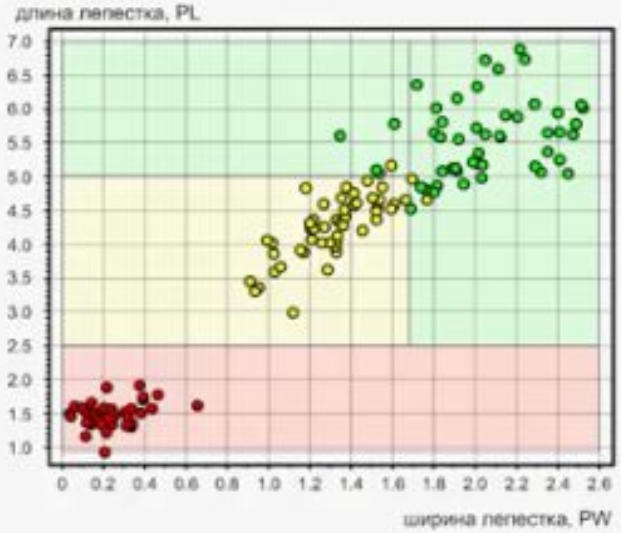
2) $\forall v \in V_{\text{лист}} \rightarrow$ имя класса $c_v \in Y$,

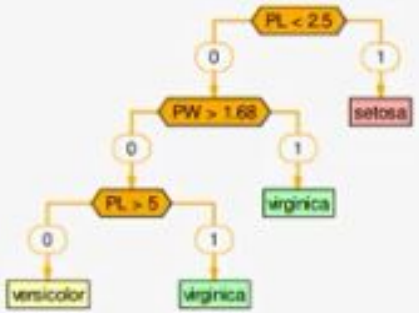
где $\mathscr{B}$ — множество бинарных признаков или предикатов (например, вида $\beta(x) = [x^j \geqslant \theta_j]$, $x^j \in \mathbb{R}$)

```
1: v := v_0;
2: пока v ∈ V_внутр
3:     если β_v(x) = 1 то
4:         переход вправо: v := R_v;
5:     иначе
6:         переход влево: v := L_v;
7: вернуть c_v.
```



Решающее дерево → покрывающий набор конъюнкций





setosa	$r_1(x) = [PL \leqslant 2.5]$
virginica	$r_2(x) = [PL > 2.5] \wedge [PW > 1.68]$
virginica	$r_3(x) = [PL > 5] \wedge [PW \leqslant 1.68]$
versicolor	$r_4(x) = [PL > 2.5] \wedge [PL \leqslant 5] \wedge [PW < 1.68]$

Жадный алгоритм построения дерева ID3

1: **ПРОЦЕДУРА** LearnID3 $(U \subseteq X^\ell)$;
2: **если** все объекты из U лежат в одном классе $c \in Y$ **то**
3: **вернуть** новый лист v, $c_v := c$;
4: найти предикат с максимальной информативностью:
$\beta := \arg\max_{\beta \in \mathscr{B}} I(\beta, U)$;
5: разбить выборку на две части $U = U_0 \sqcup U_1$ по предикату β:
$U_0 := \{x \in U : \beta(x) = 0\}$;
$U_1 := \{x \in U : \beta(x) = 1\}$;
6: **если** $U_0 = \varnothing$ или $U_1 = \varnothing$ **то**
7: **вернуть** новый лист v, $c_v :=$ Мажоритарный класс(U);
8: создать новую внутреннюю вершину v: $\beta_v := \beta$;
построить левое поддерево: $L_v :=$ LearnID3 (U_0);
построить правое поддерево: $R_v :=$ LearnID3 (U_1);
9: **вернуть** v;

Варианты критериев ветвления

1. **Критерий Джини:**

$$I(\beta, X^\ell) = \#\{(x_i, x_j)\colon y_i = y_j \text{ и } \beta(x_i) = \beta(x_j)\}.$$

2. ***D*-критерий В.И.Донского:**

$$I(\beta, X^\ell) = \#\{(x_i, x_j)\colon y_i \neq y_j \text{ и } \beta(x_i) \neq \beta(x_j)\}.$$

3. **Энтропийный критерий:**

$$I(\beta, X^\ell) = \sum_{c \in Y} h\left(\frac{P_c}{\ell}\right) - \frac{p}{\ell} h\left(\frac{p_c}{p}\right) - \frac{\ell - p}{\ell} h\left(\frac{P_c - p_c}{\ell - p}\right),$$

где $h(z) \equiv -z \log_2 z$,
$P_c(X^\ell) = \#\{x_i\colon y_i = c\}$,
$p_c(X^\ell) = \#\{x_i\colon y_i = c \text{ и } \beta(x_i) = 1\}$,
$p(X^\ell) = \#\{x_i\colon \beta(x_i) = 1\}$.

Решающие деревья ID3: достоинства

Достоинства:

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

Недостатки:

- Жадный ID3 переусложняет структуру дерева, и, как следствие, сильно переобучается.
- Фрагментация выборки: чем дальше v от корня, тем меньше статистическая надёжность выбора β_v, c_v.
- Высокая чувствительность к шуму, к составу выборки, к критерию информативности.

Усечение дерева (pruning). Алгоритм C4.5

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

1: **для всех** $v \in V_{\text{внутр}}$
2: $S_v :=$ подмножество объектов X^k, дошедших до v;
3: **если** $S_v = \varnothing$ **то**
4: **вернуть** новый лист v, $c_v :=$ Мажоритарный класс(U);
5: число ошибок при классификации S_v четырьмя способами:
$r(v)$ — поддеревом, растущим из вершины v;
$r_L(v)$ — поддеревом левой дочерней вершины L_v;
$r_R(v)$ — поддеревом правой дочерней вершины R_v;
$r_c(v)$ — к классу $c \in Y$.
6: в зависимости от того, какое из них минимально:
сохранить поддерево v;
заменить поддерево v поддеревом L_v;
заменить поддерево v поддеревом R_v;
заменить поддерево v листом, $c_v := \arg\min_{c \in Y} r_c(v)$.