ЗАДАЧА КЛАССИФИКАЦИИ

Деревья решений,
случайный лес,
градиентный бустинг

Бинарный линейный классификатор

Дана обучающая выборка

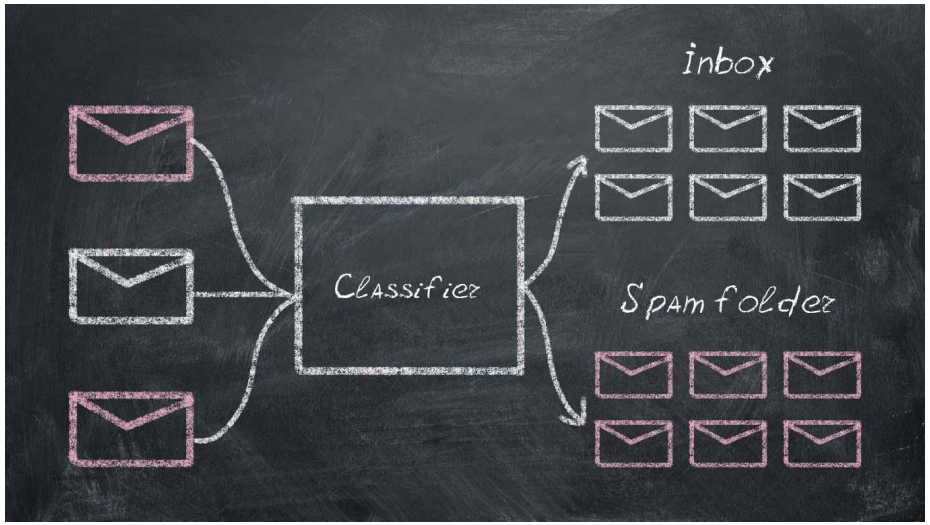
$$X_N=\{(\mathbf{x}_1,y_1),\ldots,(\mathbf{x}_N,y_N)\},\quad \mathbf{x}_i\in \mathbf{R}^P,\ y_i\in\{-1,+1\}$$

Цель: каждый новый входной вектор x отнести к одному их двух классов – положительному «+1» или отрицательному «+1»

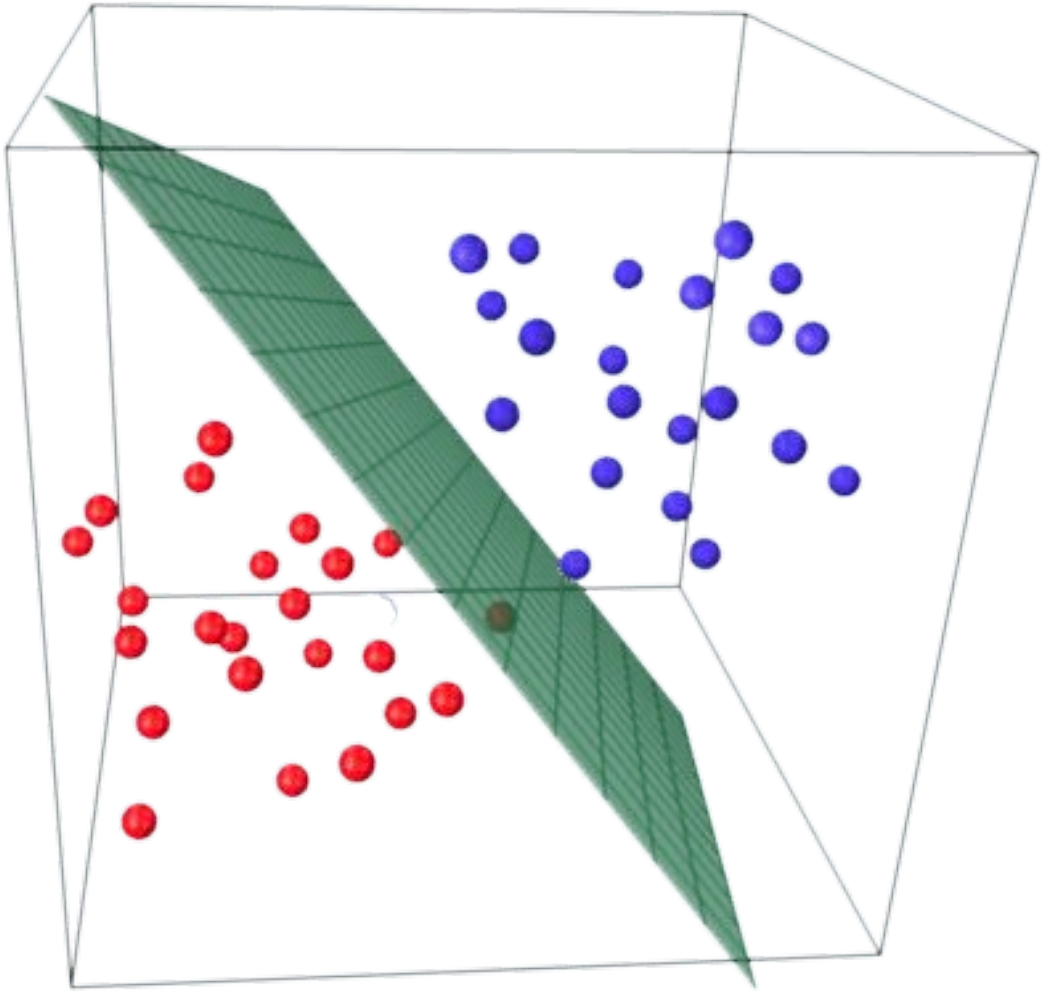
Примеры задач Data mining

- **классификация** – отнесение объекта к одной из категорий (классов) на основании его признаков
- **регрессия** – прогнозирование значения непрерывного количественного признака объекта на основании прочих его признаков
- **кластеризация** – разбиение множества объектов на группы на основании признаков этих объектов так, чтобы внутри групп объекты были похожи между собой сильнее, чем вне одной группы

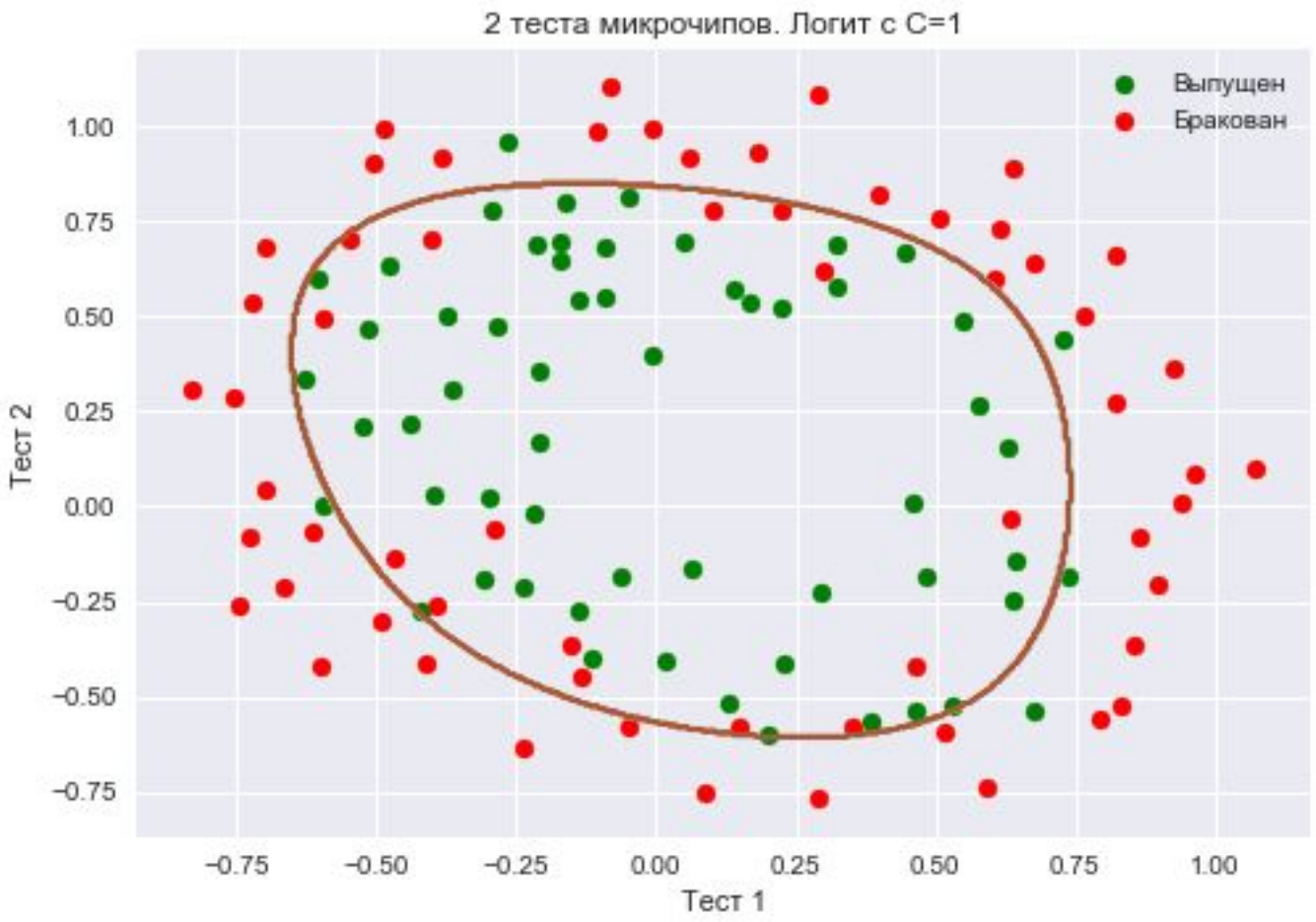
Задачи классификации и регрессии – это задачи обучения с учителем.



Линейная модель классификации



Пример нелинейного разделения классов



Confusion matrix (матрица ошибок классификации)

	$y = 1$	$y = -1$
$\hat{y} = 1$	True Positive (TP)	False Positive (FP)
$\hat{y} = -1$	False Negative (FN)	True Negative (TN)

Здесь $\hat{y}$ — это ответ алгоритма на объекте, а y — истинная метка класса на этом объекте.

Таким образом, ошибки классификации бывают двух видов: False Negative (FN) и False Positive (FP).

Метрики качества классификации

- Доля правильных ответов: $accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$

Малоинформативна в задачах с неравными классами.

<u>Пример</u>. Допустим, мы хотим оценить работу спам-фильтра почты. У нас есть 100 не-спам писем, 90 из которых наш классификатор определил верно, и 10 спам-писем, 5 из которых классификатор также определил верно. Предположим, класс1- спам, а класс -1 -не спам

$$accuracy = \frac{5 + 90}{5 + 90 + 10 + 5} = 0.864$$

Если мы просто будем предсказывать все письма как не-спам, то получим более высокую accuracy

$$accuracy = \frac{0 + 100}{0 + 100 + 0 + 10} = 0.909$$

	Спам	Не спам
Предсказан спам	5	10
Предсказан не спам	5	90

Метрики качества классификации

- precision (точность) и recall (полнота).

$$precision = \frac{TP}{TP + FP} \qquad recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

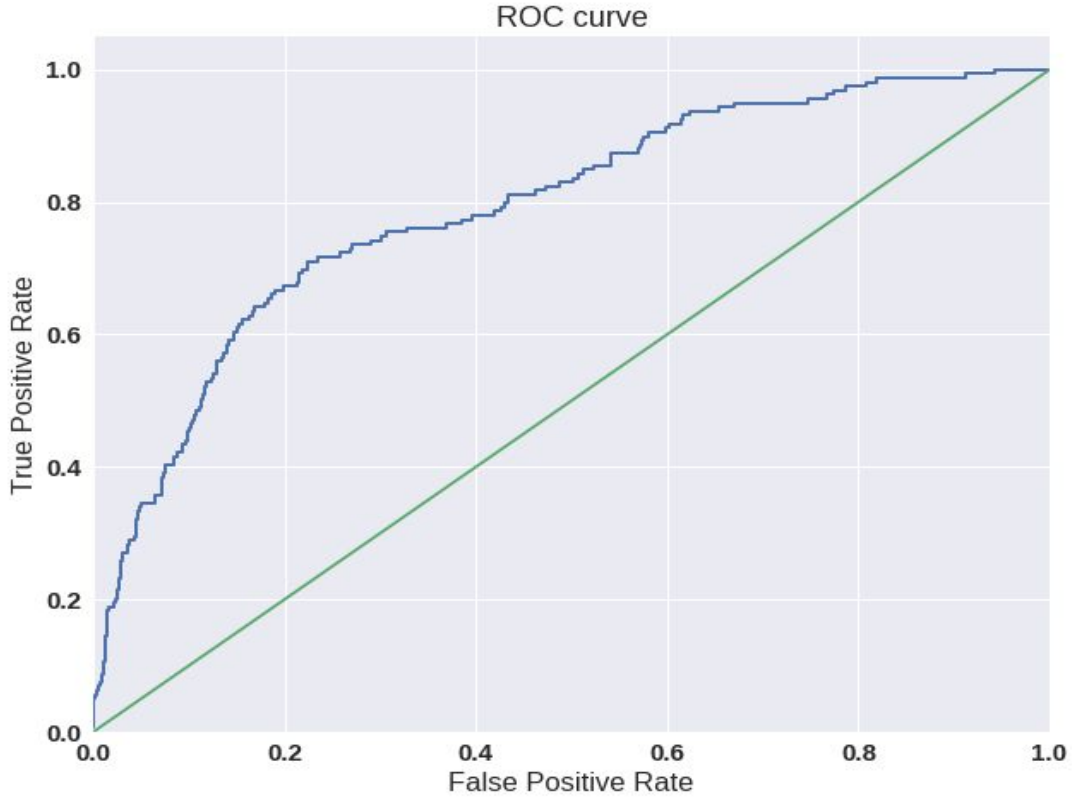
Precision показывает долю объектов, названных классификатором положительными и при этом действительно являющимися положительными, а recall показывает, какую долю объектов положительного класса из всех объектов положительного класса нашел алгоритм.

Precision не позволяет записывать все объекты в один класс, так как в этом случае растет значение FP. Recall демонстрирует способность алгоритма обнаруживать данный класс вообще, а precision — способность отличать этот класс от других классов.

AUC-ROC –площадь под кривой ошибок

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN} \qquad FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$

TPR - это полнота, а FPR показывает, какую долю из объектов отрицательного класса алгоритм предсказал неверно.



Кривая ошибок или **ROC-кривая** – графическая характеристика качества бинарного классификатора, зависимость доли верных положительных классификаций от доли ложных положительных классификаций при варьировании порога решающего правила.

AUC-ROC –площадь под кривой ошибок

В идеальном случае, когда классификатор не делает ошибок (FPR = 0, TPR = 1), площадь под кривой, равна 1; в противном случае, когда классификатор случайно выдает вероятности классов, AUC-ROC = 0.5. Каждая точка на графике соответствует выбору некоторого порога вероятности, разделяющего положительный и отрицательный класс.

Площадь под кривой в данном случае показывает качество алгоритма (больше — лучше), кроме этого, важной является крутизна самой кривой — мы хотим максимизировать TPR, минимизируя FPR, а значит, наша кривая в идеале должна стремиться к точке (0,1).

Критерий AUC-ROC устойчив к несбалансированным классам и может быть интерпретирован как вероятность того, что случайно выбранный положительный объект будет иметь более высокую вероятность быть положительно определенным данным классификатором, чем случайно выбранный отрицательный объект.

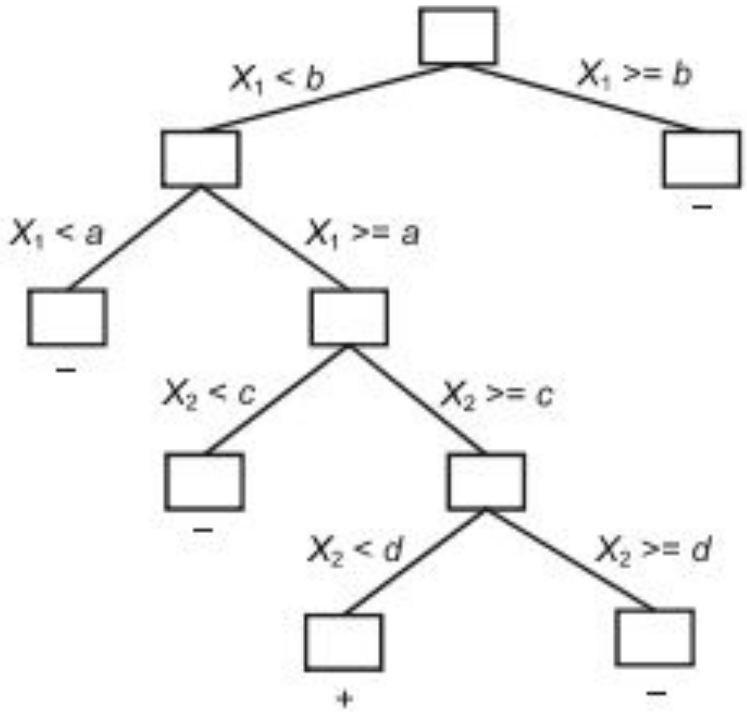
Чувствительность и специфичность

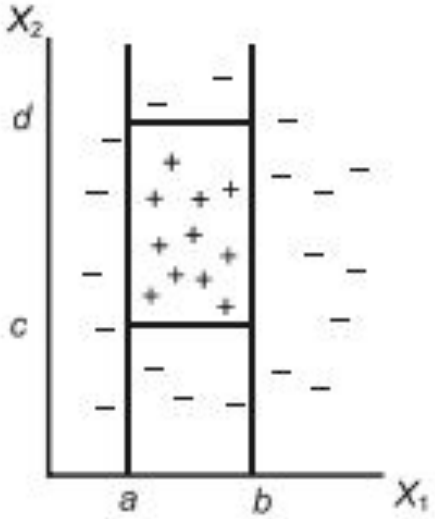
- Наряду с FPR и TPR при оценке качества классификации используют также понятия *чувствительности* и *специфичности*, которые изменяются в интервале [0,1]:
- *чувствительность* алгоритма совпадает с TPR (долей положительных объектов, правильно классифицированных алгоритмом);
- *специфичность* алгоритма определяется как 1-FPR (это доля отрицательных объектов, правильно классифицированных алгоритмом).
- Модель с высокой чувствительностью чаще дает истинный результат при наличии положительного исхода (хорошо обнаруживает положительные примеры). Наоборот, модель с высокой специфичностью чаще дает истинный результат при наличии отрицательного исхода (хорошо обнаруживает отрицательные примеры).

Дерево решений

Деревья решений - это метод, позволяющий предсказывать значения зависимой переменной в зависимости от соответствующих значений одной или нескольких предикторных (независимых) переменных. Применяется в задачах классификации и (реже) регрессии.

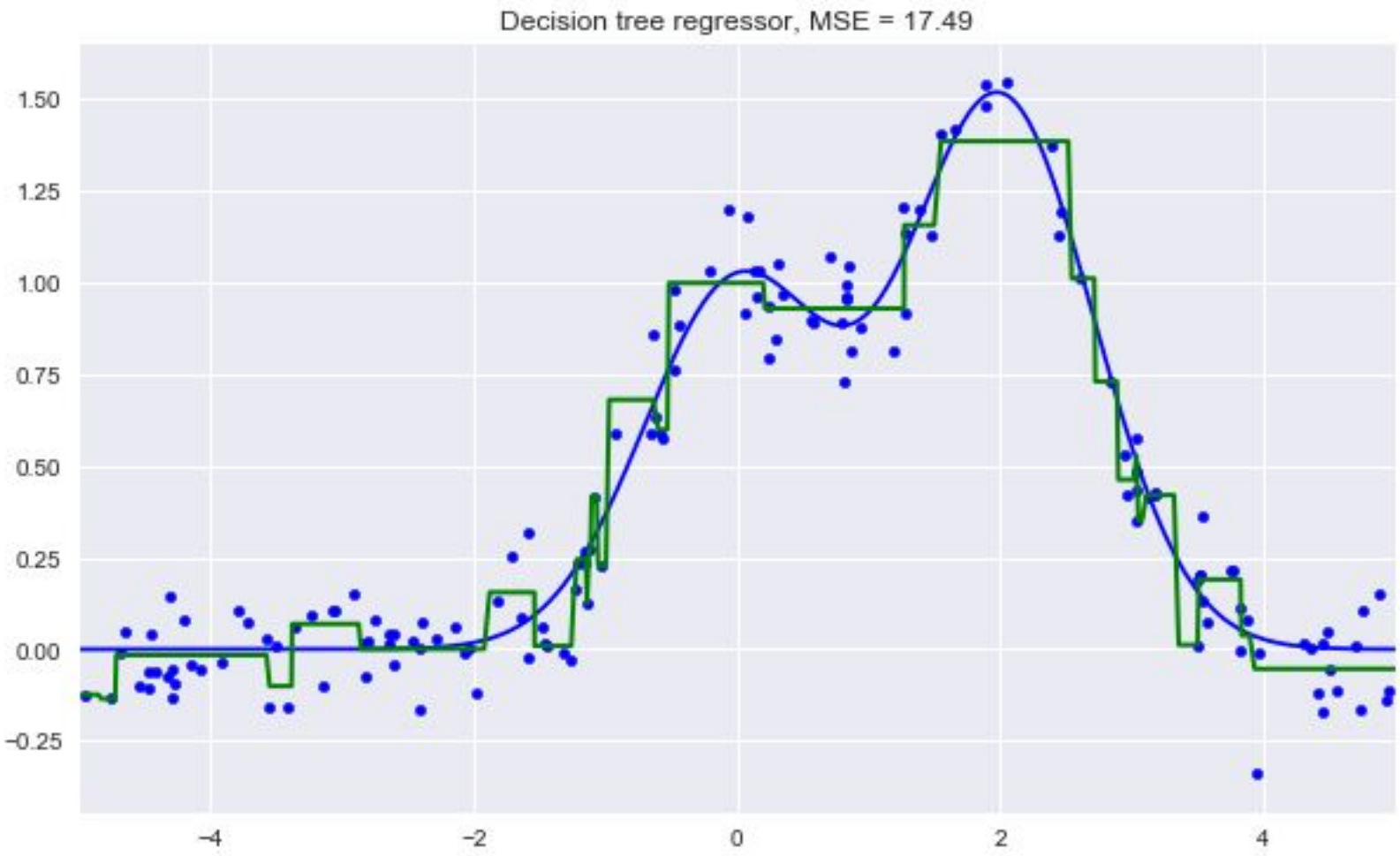
Графическая иллюстрация нелинейного разделения классов





На рисунки приведен пример классификации объектов по двум непрерывным признакам. Объекты, относящиеся к разным классам, отмечены знаками "+" и "–".

Использование деревьев решений в задачах регрессии



Этапы построения дерева решений

- 1. Выбор критерия точности прогноза
- 2. Выбор типа ветвления
- 3. Определение момента прекращения ветвлений
- 4. Определение "подходящих" размеров дерева

Выбор критерия точности прогноза

Accuracy, precision, recall – в задачах классификации

MSE,MAE– в задачах регрессии

Выбор типа ветвления (criterion)

- Есть различные способы выбирать очередной признак для текущего ветвления:
- Алгоритм ID3, где выбор атрибута происходит на основании прироста информации (*Gain*).
- Алгоритм C4.5 (улучшенная версия ID3), где выбор атрибута происходит на основании нормализованного прироста информации (*Gain Ratio*).
- Алгоритм CART где выбор атрибута происходит на основании индекса Джини.

Энтропия

Энтропия Шеннона для системы с s возможными состояниями:

- H= $-\sum_{i=1}^{s} p_i log_2 p_i$

p_i –вероятности нахождения системы в i – м состоянии
В нашем случае:
Предположим, что имеется множество A, состоящее из n элементов, обладающих свойством S, которое может принимать s различных значений, m_i - количество объектов множества A, имеющих i-е значение свойства S. Тогда

$$p_i = \frac{m_i}{n},$$

$$H(A,S) = -\sum_{i=1}^{s} \frac{m_i}{n} \log \frac{m_i}{n}.$$

Прирост информации (ID3)

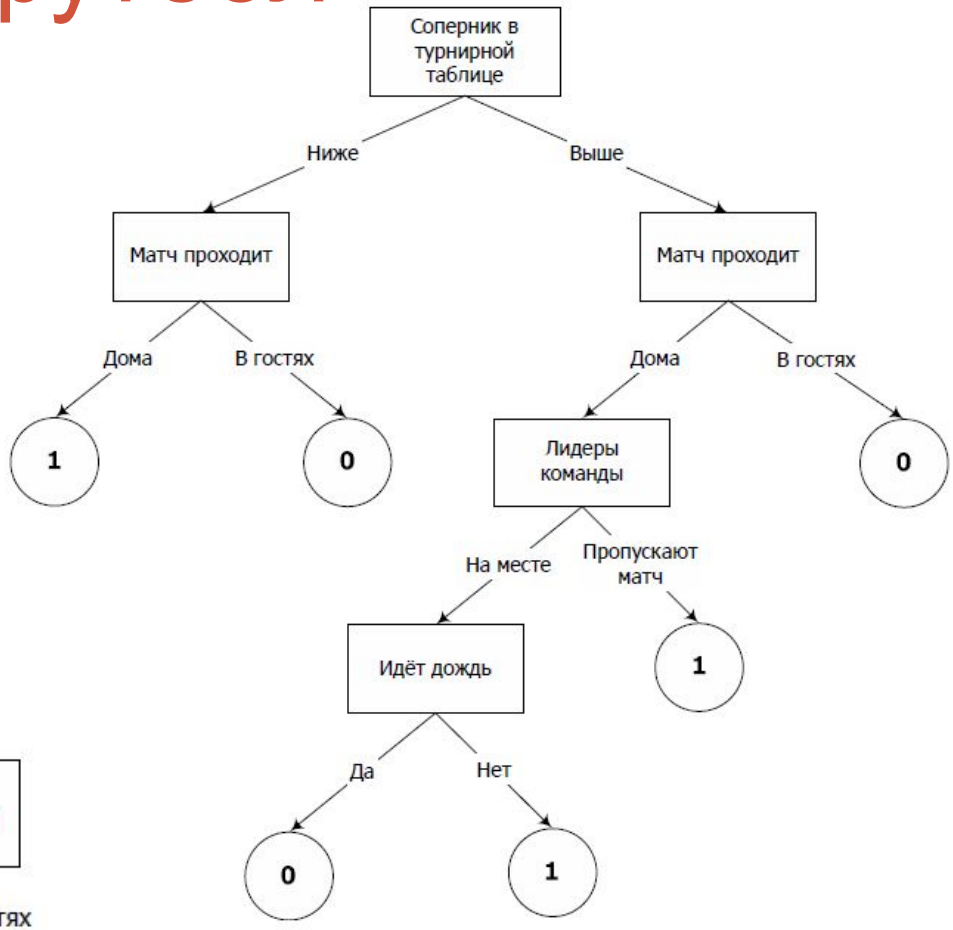
Предположим, что множество A элементов, характеризующихся свойством S, классифицировано посредством атрибута Q, имеющего q возможных значений. Тогда прирост информации (information gain) определяется как

$$\mathrm{Gain}(A, Q) = H(A, S) - \sum_{i=1}^{q} \frac{|A_i|}{|A|} H(A_i, S),$$

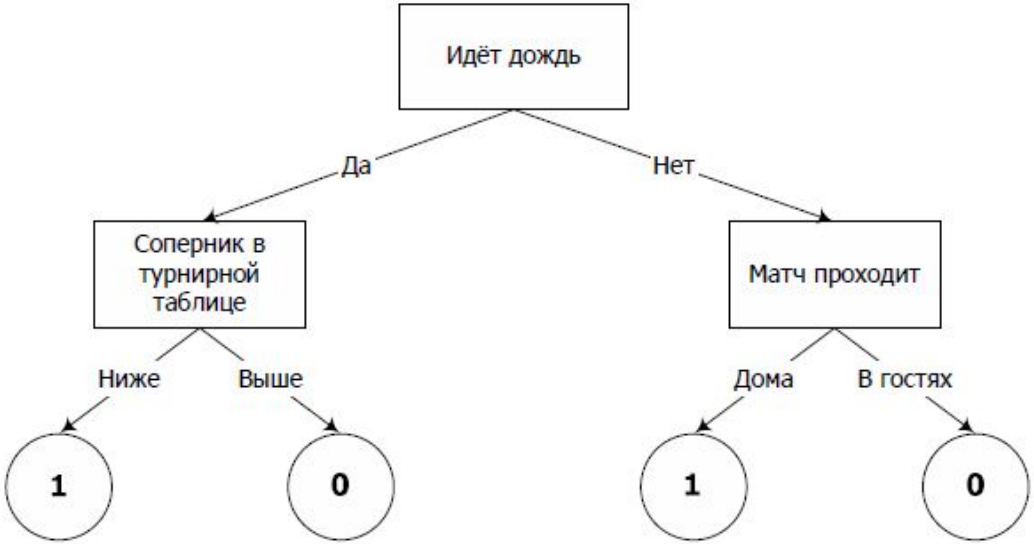
где A_i — множество элементов A, на которых атрибут Q имеет значение i.

Прогноз игры в футбол

Соперник	Играем	Лидеры	Дождь	Победа
Выше	Дома	На месте	Да	Нет
Выше	Дома	На месте	Нет	Да
Выше	Дома	Пропускают	Нет	Да
Ниже	Дома	Пропускают	Нет	Да
Ниже	В гостях	Пропускают	Нет	Нет
Ниже	Дома	Пропускают	Да	Да
Выше	В гостях	На месте	Да	Нет
Ниже	В гостях	На месте	Нет	???



Первый вариант дерева



Второй вариант дерева

Вычисление энтропии и прироста информации

$$H(A, \text{Победа}) = -\frac{4}{7}\log_2\frac{4}{7} - \frac{3}{7}\log_2\frac{3}{7} \approx 0.9852.$$

$$\text{Gain}(A, \text{Соперник}) = H(A, \text{Победа}) - \frac{4}{7}H(A_{\text{выше}}, \text{Победа}) - \frac{3}{7}H(A_{\text{ниже}}, \text{Победа}) \approx$$

$$\approx 0.9852 - \frac{4}{7}\left(-\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2}\right) - \frac{3}{7}\left(-\frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3} - \frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3}\right) \approx 0.0202.$$

$$\text{Gain}(A, \text{Играем}) = H(A, \text{Победа}) - \frac{5}{7}H(A_{\text{дома}}, \text{Победа}) - \frac{2}{7}H(A_{\text{в гостях}}, \text{Победа}) \approx 0.4696.$$

$$\text{Gain}(A, \text{Лидеры}) = H(A, \text{Победа}) - \frac{3}{7}H(A_{\text{на месте}}, \text{Победа}) - \frac{4}{7}H(A_{\text{пропускают}}, \text{Победа}) \approx 0.1281.$$

$$\text{Gain}(A, \text{Дождь}) = H(A, \text{Победа}) - \frac{3}{7}H(A_{\text{да}}, \text{Победа}) - \frac{4}{7}H(A_{\text{нет}}, \text{Победа}) \approx 0.1281.$$

Нормализованный прирост информации (C4.5)

Проблема: прирост информации выбирает атрибуты, у которых

Gain Ratio учитывает не только количество информации, требуемое для записи результата, но и количество информации, требуемое для разделения по текущему атрибуту. Поправка:

$$\mathrm{SplitInfo}(A, Q) = -\sum_{i=1}^{q} \frac{|A_q|}{|A|} \log_2 \frac{|A_q|}{|A|},$$

Сам критерий — максимизация величины

$$\mathrm{GainRatio}(A, Q) = \frac{\mathrm{Gain}(A, Q)}{\mathrm{SplitInfo}(A, Q)}.$$

Индекс Gini (CART)

Для набора тестов A и свойства S, имеющего s значений, этот индекс вычисляется как

$$\mathrm{Gini}(A, S) = 1 - \sum_{i=1}^{s} \left(\frac{|A_i|}{|A|} \right)^2 .$$

Соответственно, для набора тестов A, атрибута Q, имеющего q значений, и целевого свойства S, имеющего s значений, индекс вычисляется следующим образом:

$$\mathrm{Gini}(A, Q, S) = \mathrm{Gini}(A, S) - \sum_{j=1}^{q} \frac{|A_j|}{|A|} \mathrm{Gini}(A_j, S).$$

Правила разбиения (CART)

- 1) Вектор, подаваемый на вход дерева может содержать как порядковые так и категориальные переменные.
- 2) В каждом узле разбиение идет только по *одной переменной*.

2.1) Если переменная числового типа, то в узле формируется правило вида $x_i <= c$. Где c – некоторый порог, который чаще всего выбирается как среднее арифметическое двух соседних *упорядоченных* значений переменной x_i обучающей выборки.

2.2) Если переменная категориального типа, то в узле формируется правило $x_i \in V(x_i)$, где $V(x_i)$ – некоторое непустое подмножество множества значений переменной x_i в обучающей выборке.

Следовательно, для n значений числового атрибута алгоритм сравнивает $n-1$ разбиений, а для категориального $(2^{n-1} – 1)$.

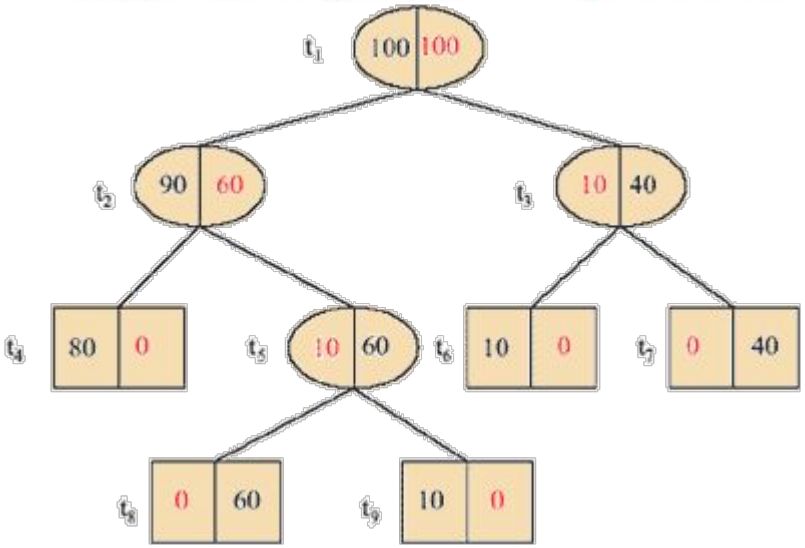
Правила остановки

- **Минимальное число объектов, при котором выполняется расщепление (min_samples_split).** В этом варианте ветвление прекращается, когда все терминальные вершины, содержащие более одного класса, содержат не более чем заданное число объектов (наблюдений).
- **Минимальное число объектов в листьях (min_samples_leaf)**
- **Доля неклассифицированных.** В этом варианте ветвление прекращается, когда все терминальные вершины, содержащие более одного класса, содержат не более чем заданную долю неправильно классифицированных объектов (наблюдений).
- **Максимальная глубина деревьев (max_depth)**

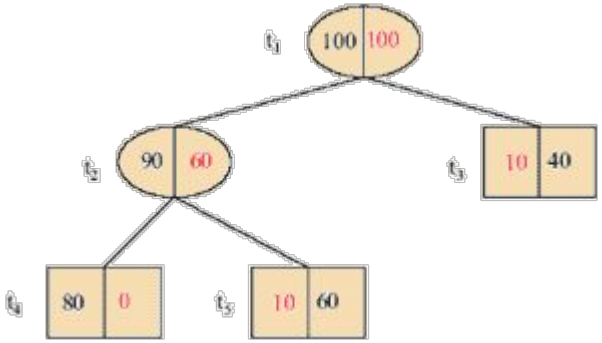
Механизм отсечения дерева (CART)

Обозначим |*T*| – число листов дерева, *R(T)* – ошибка классификации дерева, равная отношению числа неправильно классифицированных примеров к числу примеров в обучающей выборке. Определим $C_\alpha(T)$ – полную стоимость (оценку/показатель затраты-сложность) дерева T как:

$C_\alpha(T) = R(T) + \alpha * |T|$, где |*T*| – число листов (терминальных узлов) дерева, – некоторый параметр, изменяющийся от 0 до + ∞. Полная стоимость дерева состоит из двух компонент – ошибки классификации дерева и штрафа за его сложность.

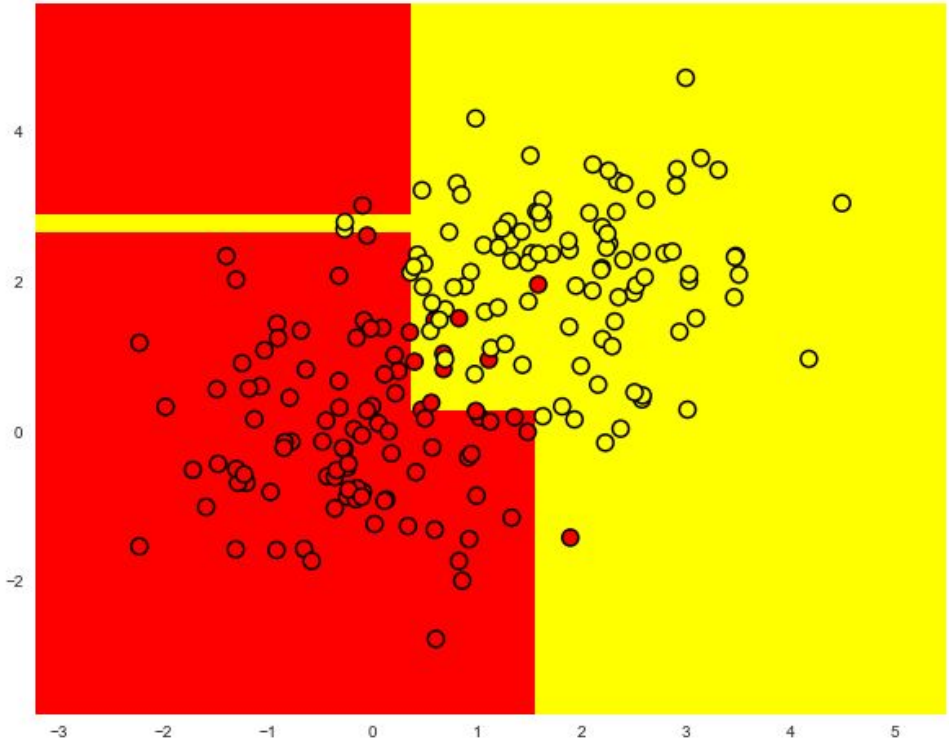


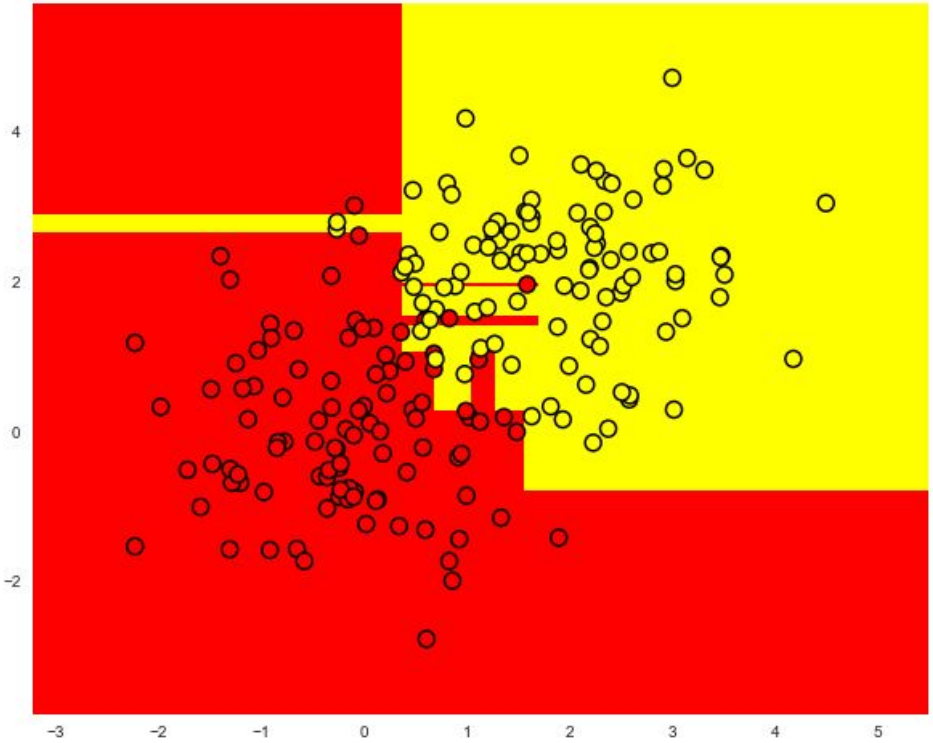
$\alpha_1 = 0,$



$\alpha_2 = 1/20,$

Иллюстрация переобучения

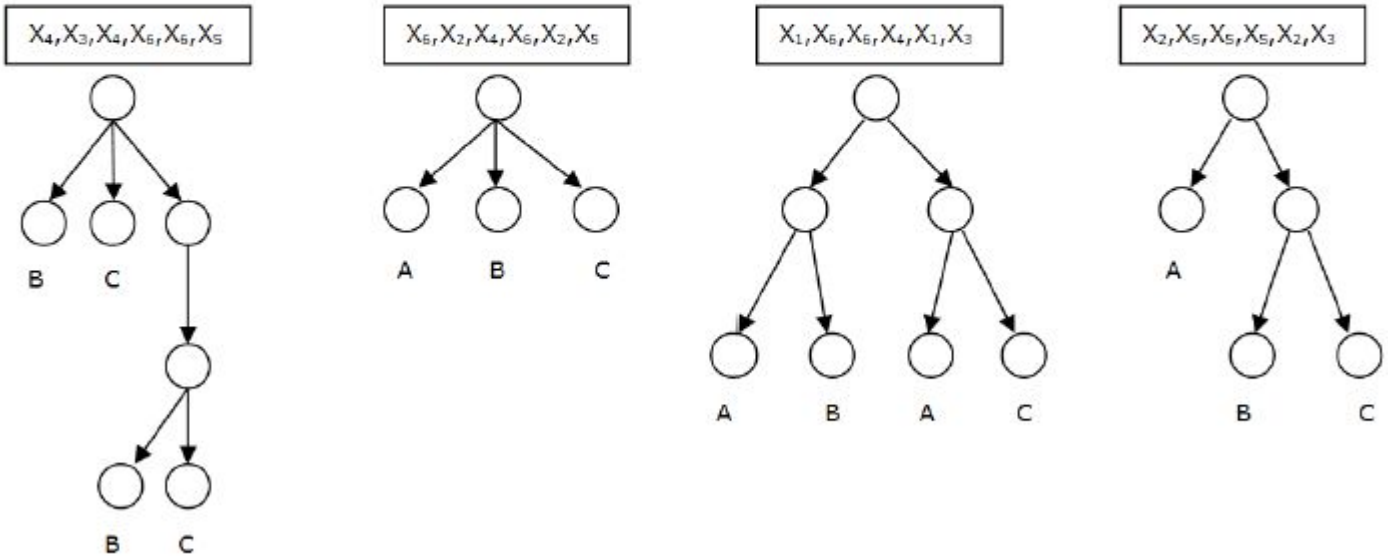




Случайный лес (Random forest)

- Случайный лес — алгоритм машинного обучения, заключающийся в использовании комитета (ансамбля) деревьев решений.

Тренировочный набор:
$\{(X_1, A), (X_2, A), (X_3, B), (X_4, B), (X_5, C), (X_6, C)\}$



Обучение случайного леса

- Пусть обучающая выборка состоит из *N* примеров, размерность пространства признаков равна *M*, и задан параметр *m* (в задачах классификации обычно $m \approx \sqrt{M}$.
- Все деревья комитета строятся независимо друг от друга по следующей процедуре:
- Сгенерируем случайную подвыборку **с повторением** размером *N* из обучающей выборки. (Таким образом, некоторые примеры попадут в неё несколько раз, а в среднем $N\left(1-\frac{1}{N}\right)^N$, т.е. примерно *N*/e примеров не войдут в неё вообще)
- Построим дерево, классифицирующее примеры данной подвыборки, причём в ходе создания очередного узла дерева будем выбирать признак, на основе которого производится разбиение, не из всех *M* признаков, а лишь из *m* случайно выбранных.
- Дерево строится до полного исчерпания подвыборки и не подвергается процедуре отсечения.
- Классификация объектов проводится путём голосования: каждое дерево комитета относит классифицируемый объект к одному из классов, и побеждает класс, за который проголосовало наибольшее число деревьев.
- Оптимальное число деревьев (**n_estimators)** подбирается таким образом, чтобы минимизировать ошибку классификатора на валидационной выборке.

Достоинства и недостатки

- Достоинства:
- Способность эффективно обрабатывать данные с большим числом признаков и классов.
- Нечувствительность к масштабированию значений признаков.
- Одинаково хорошо обрабатываются как непрерывные, так и дискретные признаки. Существуют методы построения деревьев по данным с пропущенными значениями признаков.
- Существуют методы оценивания значимости отдельных признаков в модели.
- Высокая параллелизуемость и масштабируемость.

Недостатки:

Большой размер получающихся моделей.