ε.δε.μ²
ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ & ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων (Decision Trees)

Αλγόριθμοι Διαμόρφωσης CART (*C*lassification *A*nd *R*egression *T*rees), Gini Index

Random Forests

Αλγόριθμοι Bagging (*B*ootstrap & *agg*regating)

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

maglaris@netmode.ntua.gr

www.netmode.ntua.gr

Video Conference μέσω Cisco Webex

Πέμπτη 4/6/2020

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων

Decision Tree Supervised Learning (1/3)

James Gareth, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani, "**An Introduction to Statistical Learning**", Springer 2013 https://www-bcf.usc.edu/~gareth/ISL/ISLR%20First%20Printing.pdf (Ch. 8)

Από ένα **δείγμα μάθησης** *labeled* **παραδειγμάτων εισόδου** (***predictor variables***) και **αποκρίσεων εξόδου** (***response variable***) $\boldsymbol{\mathcal{D}} = \{\mathbf{x}(i), d(i) = \mathrm{y}(i)\}, i = 1,2, \dots, N$ δημιουργείται **δένδρο αποφάσεων** (***Decision Tree***) με βάση τα χαρακτηριστικά και τη γνωστή απόκριση του δείγματος μάθησης (*training sample*). Νέα παραδείγματα εισόδου (από το *test sample*) αποφασίζουν για την πιθανότερη $\mathbf{x}(i) \rightarrow \mathrm{y}(i)$ με δενδρική αναζήτηση χαρακτηριστικών, θεωρώντας πως ακολουθούν τις στατιστικές ιδιότητες του δείγματος μάθησης

- Ορίζονται δύο τύποι *Decision Trees*: (1) ***Classification Trees*** (**Δένδρα Ταξινόμησης**) όταν η απόφαση $\mathrm{y}(i)$ είναι διακριτή, συνήθως δυαδική ($C_0 =$ ***yes***, $C_1 =$ ***no***) ή $\mathrm{y}(i) \in \{0,1\}$ και (2) ***Regression Trees*** (**Δένδρα Παλινδρόμησης**) όταν η $\mathrm{y}(i)$ είναι συνεχής (εκτίμηση παραμέτρου)
- **Εφαρμογές**: Αναγνώριση προτύπων, επεξεργασία - ταξινόμηση - αναζήτηση κειμένων και εικόνων, περιβαλλοντολογικές αναλύσεις, βιοϊατρικές προβλέψεις, ιατρικές διαγνώσεις, μηχανές αναζήτησης, διαγνώσεις/χαρακτηρισμός/ αντιμετώπιση κυβερνο-επιθέσεων (π.χ. DNS attacks, antivirus, anti-spamming…)
- **Βασικά πλεονεκτήματα**: Εύκολη υλοποίηση, ταχεία σύγκλιση, απόκριση σε πολυπληθή πολυδιάστατα δείγματα, αυτόματη κατάταξη - απλοποίηση χαρακτηριστικών δείγματος…
- **Βασικά μειονεκτήματα**: Προβλήματα ακρίβειας, αστάθεια σε μικρές μεταβολές των χαρακτηριστικών εισόδου, overfitting…

Αντιμετώπιση προβλημάτων με συνδυασμό πολλαπλών decision trees (**Random Forests**)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων
Decision Tree Supervised Learning (2/3)

James Gareth, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani, "**An Introduction to Statistical Learning**", Springer 2013 https://www-bcf.usc.edu/~gareth/ISL/ISLR%20First%20Printing.pdf (Ch. 8)

Μέθοδος Διαμόρφωσης CART - *C*lassification *A*nd *R*egression *T*rees (*Leo Breiman,* 1984)

https://civil.colorado.edu/~balajir/CVEN6833/lectures/cluster_lecture-2.pdf

Η δενδρική δομή διαμορφώνεται με βάση τα **χαρακτηριστικά εισόδου** (***input features***) $x_j(i)$ των διανυσματικών παραδειγμάτων $\mathbf{x}(i)$. Ορίζω πρόσθετο **χαρακτηριστικό εξόδου** $\mathrm{y}(i)$ σαν **χαρακτηριστικό στόχου** (***target feature***). Για τα *labeled* παραδείγματα μάθησης $\mathrm{y}(i) = d(i)$

- Ξεκινώ από τον κόμβο **ρίζα** (***Root Node***, $m = 0$) που εμπεριέχει όλα τα παραδείγματα $\mathbf{x}(i)$ του δείγματος μάθησης $\mathcal{D}$ με τα χαρακτηριστικά εισόδου $x_j(i)$ και εξόδου $\mathrm{y}(i)$. Διαχωρίζω το σύνολο παραδειγμάτων σε 2 υποσύνολα (υπο-δένδρα) με βάση την **κατηγοριοποίηση** κάποιου χαρακτηριστικού εισόδου (***input feature***) σε περιοχές ορισμένου εύρους (*range*)
- Συνεχίζω τον διαχωρισμό σε 2 υπο-δένδρα στον κόμβο m μέχρι την διαμόρφωση τελικών φύλλων συμμετοχής όλων των παραδειγμάτων μάθησης

Τελικός στόχος διαχωρισμού:

(1) Για *classification trees* στόχος είναι η ένταξη στα τελικά φύλλα του δένδρου των παραδειγμάτων μάθησης με ενιαία απόκριση $\mathrm{y}(i)$ κατά μεγάλη πλειοψηφία

(2) Για *regression trees* στόχος είναι να ενταχθούν στα φύλλα του δένδρου ομάδες παραδειγμάτων μάθησης με μικρές αποκλίσεις εξόδου από μέσο όρο αποκρίσεων (π.χ. ελάχιστης τετραγωνικής απόκλισης ή με κριτήριο greedy)

(3) Συνήθως απαιτείται απλοποίηση του τελικού δένδρου με κλάδεμα (*pruning*) κλαδιών μικρής πιθανότητας συμμετοχής ενός στοιχείου μάθησης για αποφυγή *overfitting*

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων

Decision Tree Supervised Learning (3/3)

James Gareth, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani, "**An Introduction to Statistical Learning**", Springer 2013 https://www-bcf.usc.edu/~gareth/ISL/ISLR%20First%20Printing.pdf (*Ch. 8*)

Διαμόρφωση Classification Trees Δυαδικής Εξόδου $y(i) \in \{0,1\}$

Έστω ότι ο κόμβος m του δένδρου αποτελεί υπο-δένδρο για περιοχή (*region*) R_m όπως ορίζεται από το εύρος (*range*) τιμών ενός χαρακτηριστικού στοιχείου εισόδου (*predictor feature*) $\mathbf{x}(i) \in R_m$. Η αναλογία των αποκρίσεων (*target feature*) στοιχείων εισόδου $\mathbf{x}(i) \rightarrow (y(i) = k)$ στα N_m στοιχεία του m είναι

$$\hat{p}_{mk} \triangleq \frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{x}(i) \in R_m} I(y\,(i) = k)$$

- Η **πλειοψηφία** ταξινομήσεων του κόμβου m γίνονται στη κλάση $k(m) = \text{argmax}_k \hat{p}_{mk}$ που καθορίζει τη ταξινόμηση όλων των $\mathbf{x}(i) \in R_m$. Η κάθε διαφορετική ταξινόμηση θεωρείται παραφωνία (**ακαθαρσία**, *impurity*)
- Για 2 κλάσεις (C_0 και C_1) μέτρο **ακαθαρσίας** (*impurity*) ορίζεται ο **συντελεστής ανισότητας** ***Gini Index***: $GI(p) = 2p(1-p) = 1 - (1-p)^2 - p^2$ όπου p η αναλογία παραφωνιών ταξινόμησης δειγματικού σημείου μάθησης $\{\mathbf{x}(i), d(i) = 0\}$ του υπο-δένδρου m σε έξοδο $y(i) = 1 \neq d(i)$. Σε περίπτωση απόλυτης ομοφωνίας, $p = 0$ ή $p = 1$ και $GI(p) = 0$. Η απόλυτη ανισότητα, $p = 0.5$ δίνει τη μέγιστη τιμή $GI(p) = 0.5$
- Το χαρακτηριστικό εισόδου (*predictor feature*) για επόμενο διαχωρισμό σε υπο-δένδρα προκύπτει από σύγκριση των εναλλακτικών και επιλογή της **ελάχιστης** τιμής του ***Gini Index***
  Σημείωση: Παρόμοιο μέτρο επιλογής χαρακτηριστικού αφορά στη ελαχιστοποίηση του **Δείκτη Εντροπίας** : $-p\log(p) - (1-p)\log(1-p)$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων

Βασισμένο στο https://dataaspirant.com/2017/01/30/how-decision-tree-algorithm-works/

Παράδειγμα Διαμόρφωσης Δένδρου Ταξινόμησης με Χρήση του Gini Index (1/2)

Το δείγμα μάθησης (***learning sample***) αποτελείται από 16 στοιχεία (***records***) με 4 αριθμητικά **χαρακτηριστικά εισόδου** (***predictor features***) A, B, C, D και γνωστή δυαδική **έξοδο** (***label***, ***target***):

$$E \in \{\text{positive}, \text{negative}\}$$

Επιλέγεται αυθαίρετα τρόπος **κατηγοριοποίησης** των ***predictor features*** :

A	B	C	D
≥ 5.0	≥ 3.0	≥ 4.2	≥ 1.4
< 5.0	< 3.0	< 4.2	< 1.4

	A	B	C	D	E
1	4.8	3.4	1.9	0.2	positive
2	5	3	1.6	0.2	positive
3	5	3.4	1.6	0.4	positive
4	5.2	3.5	1.5	0.2	positive
5	5.2	3.4	1.4	0.2	positive
6	4.7	3.2	1.6	0.2	positive
7	4.8	3.1	1.6	0.2	positive
8	5.4	3.4	1.5	0.4	positive
9	7	3.2	4.7	1.4	negative
10	6.4	3.2	4.5	1.5	negative
11	6.9	3.1	4.9	1.5	negative
12	5.5	2.3	4	1.3	negative
13	6.5	2.8	4.6	1.5	negative
14	5.7	2.8	4.5	1.3	negative
15	6.3	3.3	4.7	1.6	negative
16	4.9	2.4	3.3	1	negative

Gini Index GI, Feature A

$\text{A} \geq 5.0: \ 12/16, \text{A} < 5.0: \ 4/16$

$\text{A} \geq 5.0$ & E positive: $5/12$

$\text{A} \geq 5.0$ & E negative: $7/12$

$GI(5,7) = 1 - (5/12)^2 - (7/12)^2 = 0.486$

$\text{A} < 5.0$ & E positive: $3/4$

$\text{A} < 5.0$ & E negative: $1/4$

$GI(3,1) = 1 - (3/4)^2 - (1/4)^2 = 0.375$

$GI(\text{A}) = 12/16 \times 0.486 + 4/16 \times 0.375 = \mathbf{0.45825}$

Δένδρα Αποφάσεων

Βασισμένο στο https://dataaspirant.com/2017/01/30/how-decision-tree-algorithm-works/

Παράδειγμα Διαμόρφωσης Δένδρου Ταξινόμησης με Χρήση του Gini Index (2/2)

Gini Index GI, Feature B

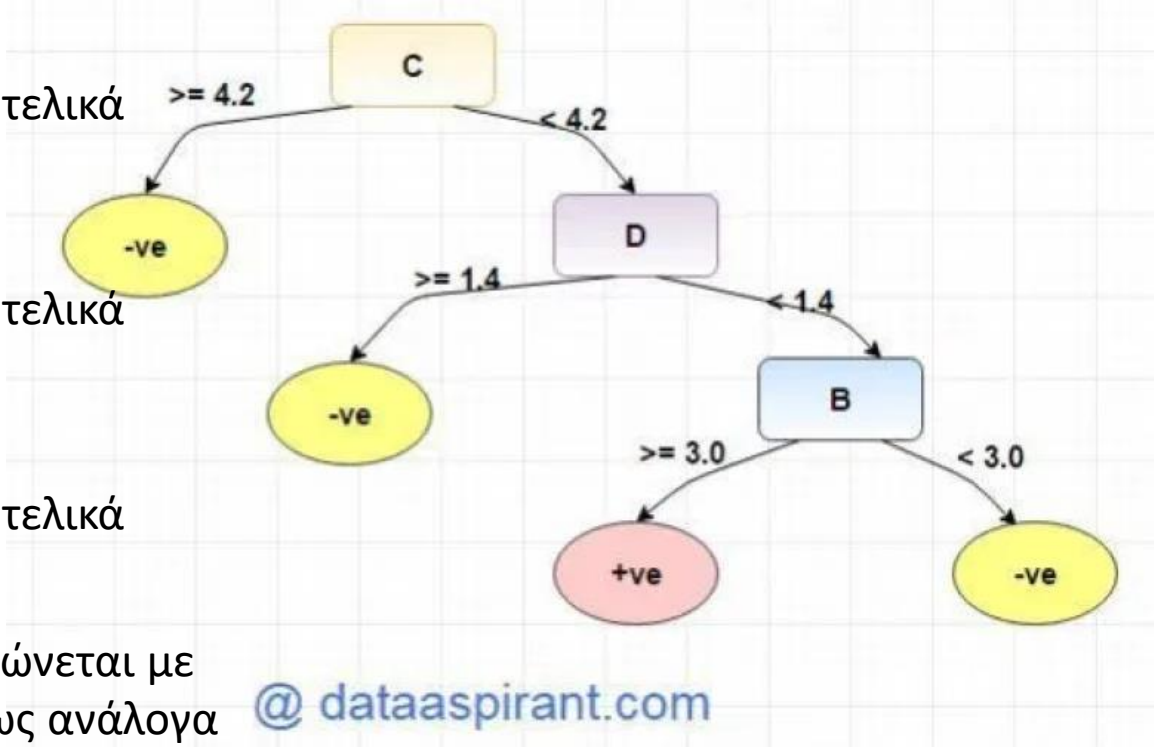
Όπως και για το **Feature** A προκύπτει τελικά $GI(\mathrm{B}) = \mathbf{0.3345}$

Gini Index GI, Feature C

Όπως και για το **Feature** A προκύπτει τελικά $GI(\mathrm{C}) = \mathbf{0.2}$

Gini Index GI, Feature D

Όπως και για το **Feature** A προκύπτει τελικά $GI(\mathrm{D}) = \mathbf{0.273}$



Άρα το **Δένδρο Αποφάσεων** διαμορφώνεται με επιλογή χαρακτηριστικών αντιστρόφως ανάλογα με τις τιμές των GI κατά σειρά: $\mathrm{C}, \mathrm{D}, \mathrm{B}$. Το χαρακτηριστικό A δεν επηρεάζει τη διαδικασία διαμόρφωσης

Feature	A	B	C	D
Lower Value	≥ 5.0	≥ 3.0	≥ 4.2	≥ 1.4
Upper Value	< 5.0	< 3.0	< 4.2	< 1.4
Gini Index	$\mathbf{0.45825}$	$\mathbf{0.3345}$	$\mathbf{0.2}$	$\mathbf{0.273}$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων

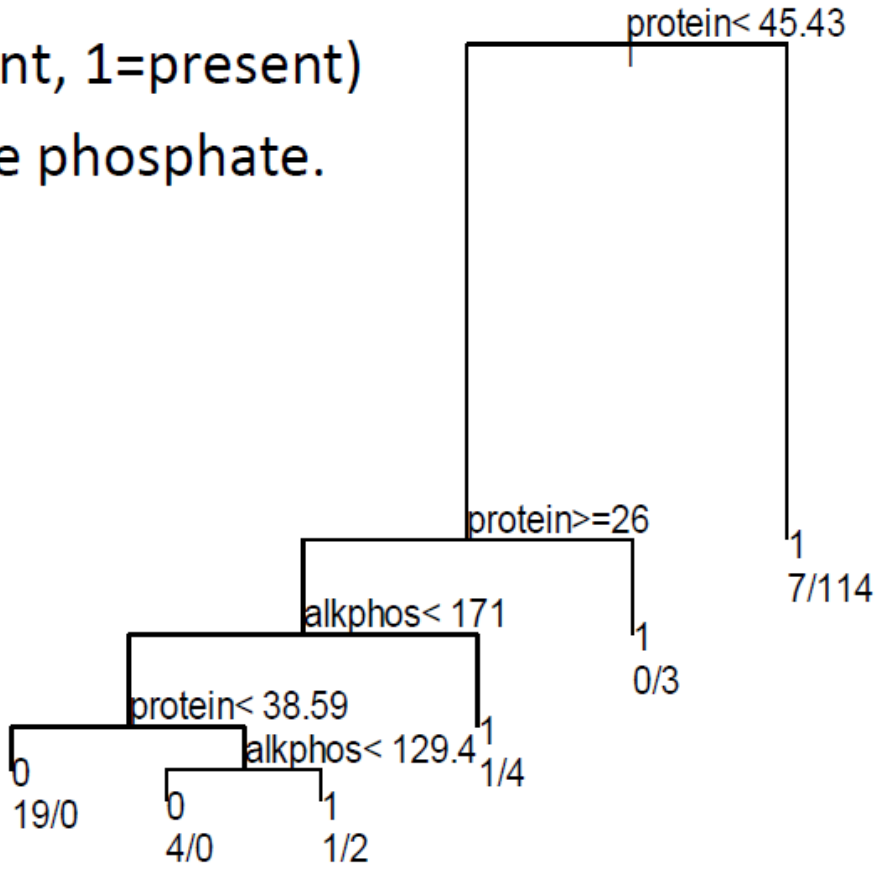
Βασισμένο στη παρουσίαση της ***Adele Cutler*** (Utah State University), "**Random Forests for Regression and Classification**", Ovronnaz, Switzerland, Sep. 2010 https://math.usu.edu/adele/randomforests/ovronnaz.pdf

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (1/5)

A Classification Tree

Predict hepatitis (0=absent, 1=present) using protein and alkaline phosphate.

"Yes" goes left.

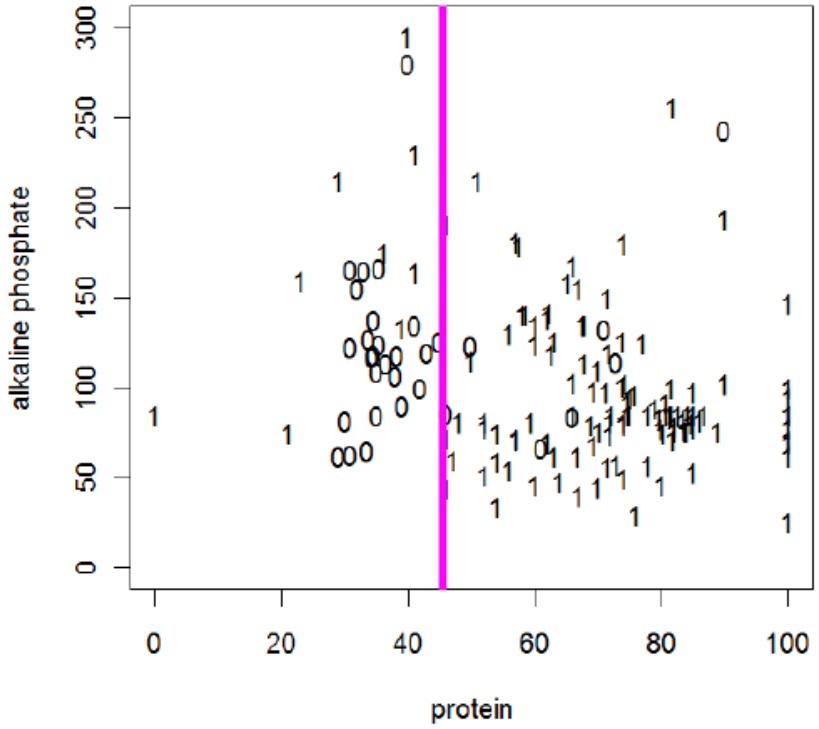


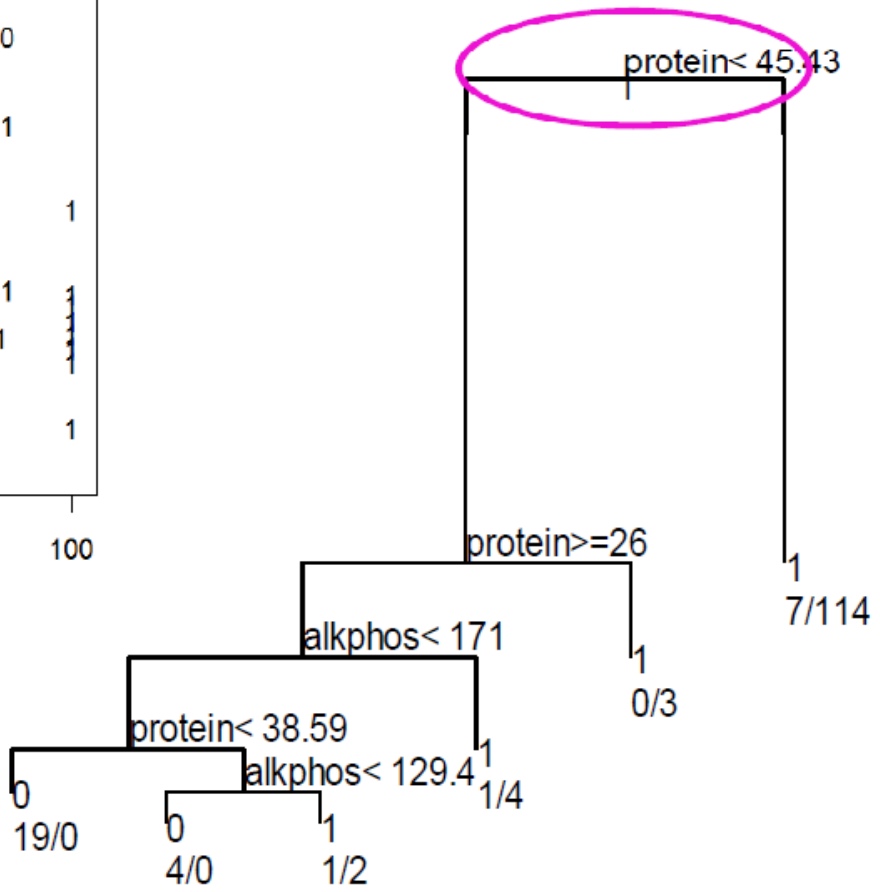
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων

Βασισμένο στη παρουσίαση της ***Adele Cutler*** (Utah State University), "**Random Forests for Regression and Classification**", Ovronnaz, Switzerland, Sep. 2010 https://math.usu.edu/adele/randomforests/ovronnaz.pdf

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (2/5)



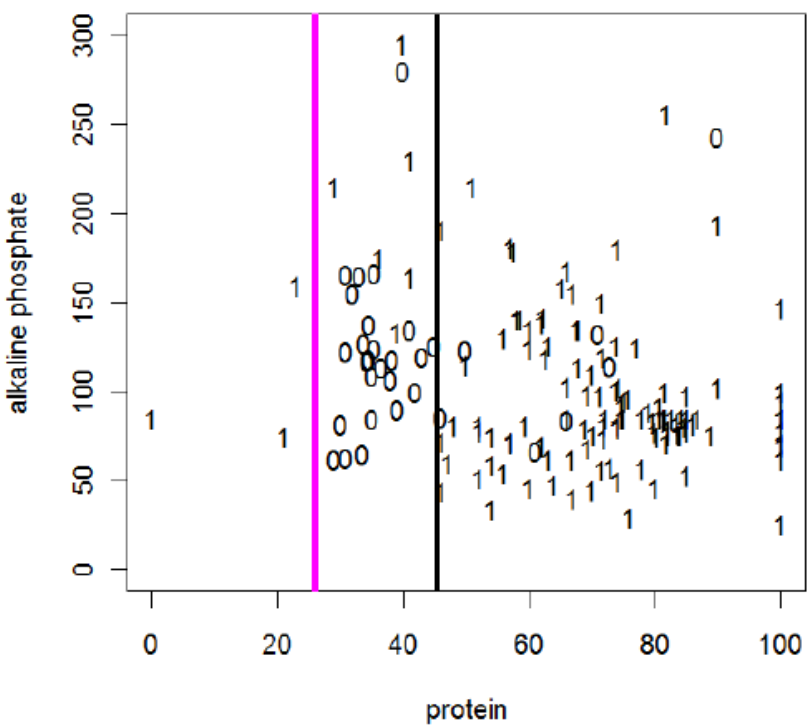


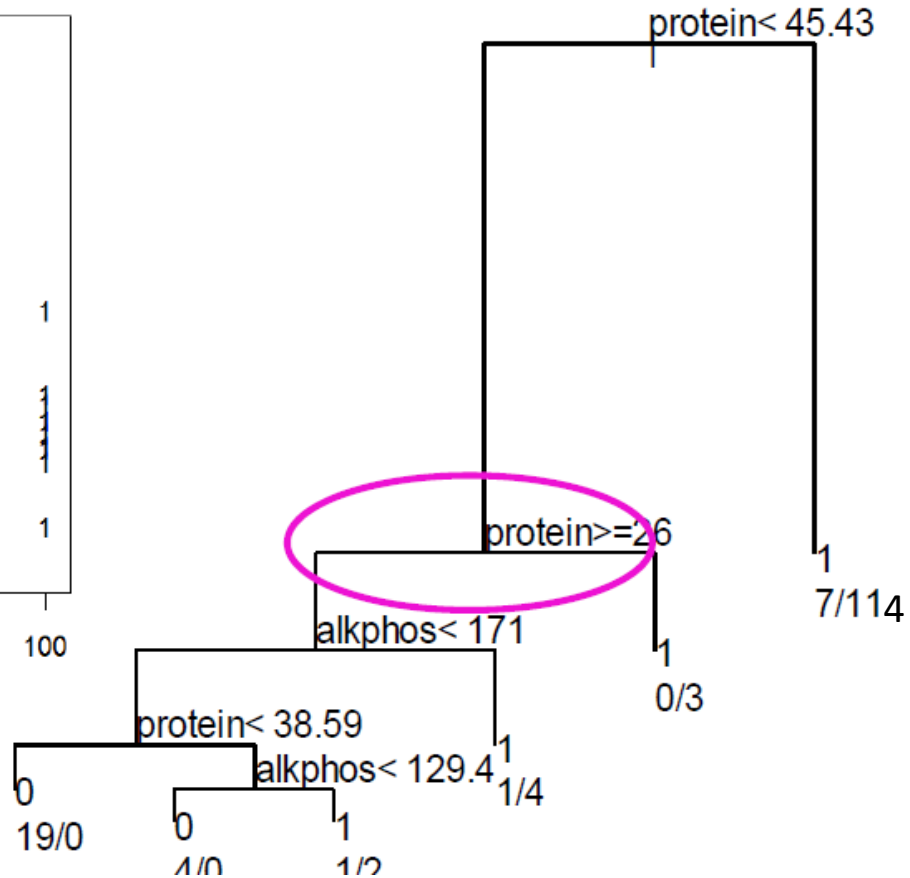
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων

Βασισμένο στη παρουσίαση της ***Adele Cutler*** (Utah State University), "**Random Forests for Regression and Classification**", Ovronnaz, Switzerland, Sep. 2010 https://math.usu.edu/adele/randomforests/ovronnaz.pdf

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (3/5)



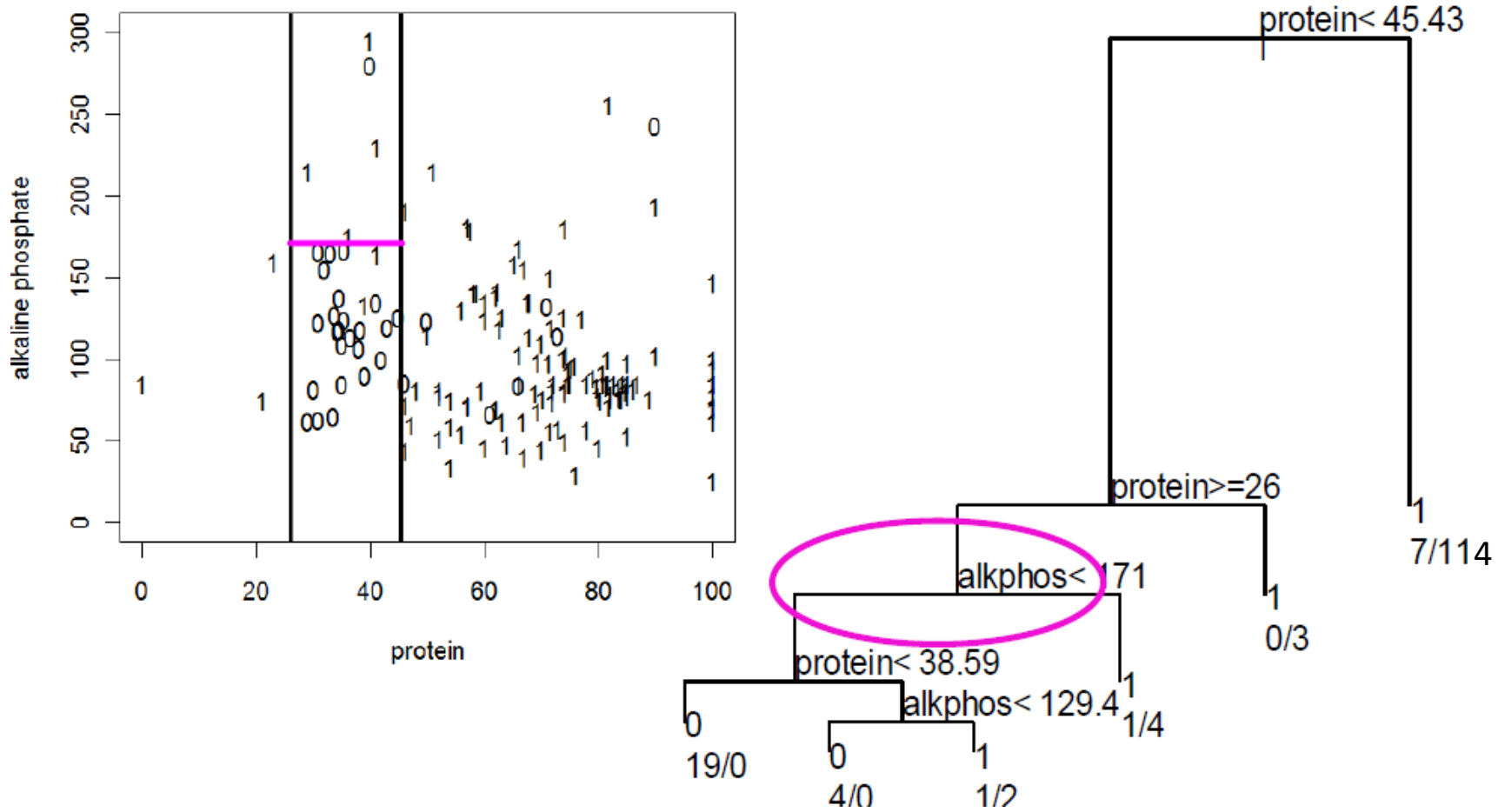


ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων

Βασισμένο στη παρουσίαση της ***Adele Cutler*** (Utah State University), "**Random Forests for Regression and Classification**", Ovronnaz, Switzerland, Sep. 2010 https://math.usu.edu/adele/randomforests/ovronnaz.pdf

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (4/5)

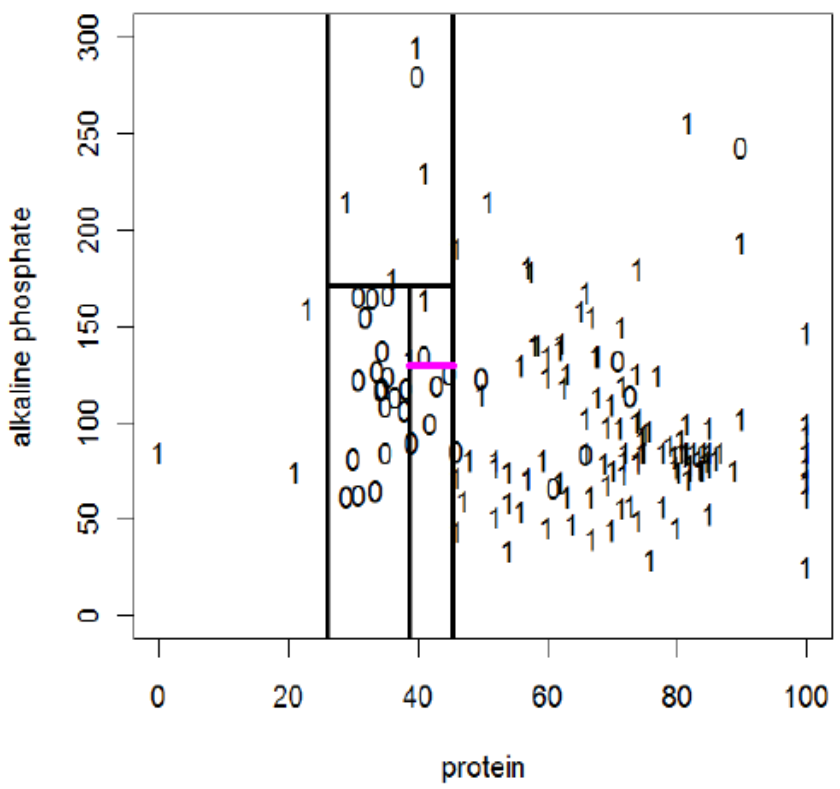


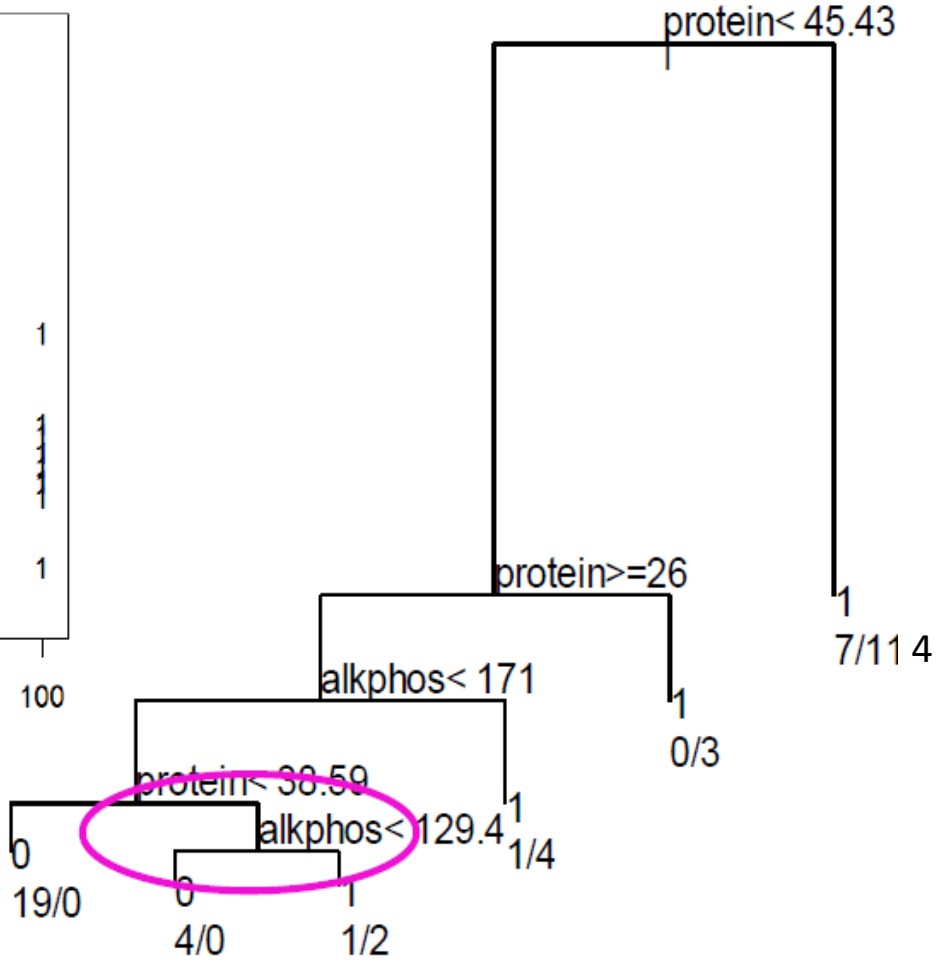
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων

Βασισμένο στη παρουσίαση της ***Adele Cutler*** (Utah State University), "**Random Forests for Regression and Classification**", Ovronnaz, Switzerland, Sep. 2010 https://math.usu.edu/adele/randomforests/ovronnaz.pdf

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (5/5)





Το χαρακτηριστικό $protein$ ορίζει αποκλειστικά τον διαχωρισμό για μεγάλες και μικρές τιμές του

Το χαρακτηριστικό $alkaline\ phosphate$ υπεισέρχεται μόνο για ενδιάμεσες τιμές του $protein$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Random Forests

Leo Breiman, "**Random Forests**", Machine Learning, 45, 5-32, Kluwer Academic Publishers 2001
https://link.springer.com/content/pdf/10.1023/A:1010933404324.pdf
Leo Breiman, "**Bagging Predictors**", Machine Learning, 24, 123-140, Kluwer Academic Publishers 1996
https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/BF00058655.pdf

Διαμόρφωση Random Forests – Bootstrap Aggregating (Bagging)

- Ένα **Random Forest** αποτελείται από πολλά (R) **decision trees** τα οποία αποφασίζουν **ανεξάρτητα** για μια παράμετρο εξόδου $\mathrm{y}(i)$. Η τελική απόφαση προκύπτει από την πλειοψηφία (***aggregation***) των $\mathrm{y}(i)$: *Voting* για *classification*, *averaging* για *regression*
- Η διαδικασία επιβλεπόμενης μάθησης ακολουθεί τον αλγόριθμο ***Bootstrap Aggregating*** (***Bagging***) του *Leo Breiman* (1996)
- Με τυχαίο τρόπο επιλέγουμε R δειγματικά υποσύνολα (***bootstrap samples***) του *labeled* δείγματος μάθησης $\boldsymbol{\mathcal{D}} = \{\mathbf{x}(i), d(i) = \mathrm{y}(i)\}, i = 1,2,\dots,N$. Default επιλογή $R = 500$ αλλά τα αποτελέσματα είναι συνήθως ικανοποιητικά για μικρές τιμές (π.χ. $R = 20$)
- Η επιλογή **παραδειγμάτων** σε υποσύνολα γίνεται με **ανεξάρτητες** τυχαίες κλήσεις και επανατοποθέτηση των επιλογών προηγουμένων κλήσεων (***sampling with replacement***). Ένα παράδειγμα (*observation*) σε ***bootstrap sample*** μπορεί να επιλεγεί πάνω από μια φορά. Τα παραδείγματα του δείγματος που δεν έχουν επιλεγεί σε ένα υποσύνολο αποτελούν *out of bag* (***oob***) *observations* (πολλά ***oob*** οδηγούν σε αδυναμία πρόβλεψης)
- Τα ***bootstrap trees*** διαμορφώνονται σε όλο τους το βάθος με αλγόριθμο τύπου CART αλλά με **μειωμένα χαρακτηριστικά** (***prediction features***) που επιλέγονται **τυχαία** και **ανεξάρτητα** σε κάθε κόμβο των δένδρων

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Random Forests

Αξιολόγηση - Επιδόσεις

- Τρόπος αξιολόγησης **crossvalidation**: Ένα μεγάλο **labeled** δείγμα μπορεί να χωριστεί σε υποσύνολα $\boldsymbol{\mathcal{D}} = \boldsymbol{\mathcal{D}}_1 \cup \boldsymbol{\mathcal{D}}_2 \cup \ldots$ Κάθε $\boldsymbol{\mathcal{D}}_i$ μπορεί εναλλακτικά να θεωρηθεί **test set** και τα γνωστά **labels** των στοιχείων του να συγκριθούν με τις προβλέψεις που προκύπτουν με σύστημα που εκπαιδεύεται με βάση τα υπόλοιπα υποσύνολα σαν **supervised training sets**

- Για τα **Random Forests** (**RF**) η επίδοση μπορεί να αξιολογηθεί από τα σφάλματα προβλέψεων δένδρων αποφάσεων (**RF Predictors**) με *out of bag* (***oob***) *observations*

- Από πολλές αξιολογήσεις προκύπτει πως τα **RF** δεν παρουσιάζουν τυπικά προβλήματα των **Decision Trees**: Έχουν καλές επιδόσεις ακρίβειας προβλέψεων με μικρή διακύμανση (**variance**), δεν έχουν υπερβολική ευαισθησία σε ασταθείς μετρήσεις χαρακτηριστικών των **predictors**, δεν προκαλούν **overfitting**

- Γενικά θεωρούνται πολλά υποσχόμενη λύση για προβλήματα ταξινόμησης, πρόβλεψης και συγκριτικής αξιολόγησης των χαρακτηριστικών (**features**) πολυδιάστατων δειγμάτων. Προαπαιτούν βέβαια την διαθεσιμότητα αξιόπιστων **labeled** δειγμάτων μάθησης για την εφαρμογή μεθόδων **supervised learning**

- Για πολύ μεγάλα datasets οι απαιτήσεις μνήμης – επεξεργασίας των RF οδηγούν σε χρήση εξειδικευμένου H/W (**GPU**) ή λύσεις **cloud**