

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Δένδρα Αποφάσεων (Decision Trees)

**Αλγόριθμοι Διαμόρφωσης CART (Classification And
Regression Trees), Gini Index
Random Forests**

Αλγόριθμοι Bagging (*Bootstrap & aggregating*)

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

maglaris@netmode.ntua.gr

www.netmode.ntua.gr

Αίθουσα 002, Νέα Κτίρια ΣΗΜΜΥ

Τρίτη 23/5/2023

Δένδρα Αποφάσεων

James Gareth, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani, “An Introduction to Statistical Learning”, Springer 2013 https://hastie.su.domains/ISLR2/ISLRv2_website.pdf (Ch. 8)

- Το δένδρο διαμορφώνεται συνήθως με αρχική ένταξη των παραδειγμάτων σε διακριτές κατηγορίες τιμών (*categorical value ranges*) των χαρακτηριστικών τους (*features, attributes*)
- Από ένα δείγμα μάθησης (*training sample*) $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}(1), d(1)), \dots, (\mathbf{x}(N), d(N))\}$ παραδειγμάτων εισόδου (*predictor variables*) $\mathbf{x}(i)$ με γνωστά *labels* $d(i)$, δημιουργείται δένδρο αποφάσεων (*Decision Tree*) $\mathbf{x}(i) \rightarrow y(i) \approx d(i)$ με αλγόριθμο *supervised learning*
- Νέα παραδείγματα εισόδου (από το *test sample*) αποφασίζουν για την πιθανότερη $\mathbf{x}(i) \rightarrow y(i)$, θεωρώντας πως ακολουθούν στατιστικές ιδιότητες του δείγματος μάθησης

Ορίζονται δύο τύποι *Decision Trees*:

(1) Classification Trees (Δένδρα Ταξινόμησης) όταν η απόφαση $y(i)$ είναι διακριτή, συνήθως δυαδική ($\mathcal{C}_1 = \text{yes}$, $\mathcal{C}_2 = \text{no}$) ή $y(i) \in \{0,1\}$

(2) Regression Trees (Δένδρα Παλινδρόμησης) όταν η $y(i)$ είναι συνεχής

- **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 *μη παραμετρική* υλοποίηση με πολυπληθή δείγματα, κατάταξη χαρακτηριστικών και ταξινόμηση με λογική παρόμοια με ανθρώπινη λειτουργία...
- **Βασικά μειονεκτήματα:** Ανάγκη για *labeled training datasets*, 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

Διαμόρφωση Δένδρων Αποφάσεων με Supervised Learning

Μέθοδος CART - Classification And Regression Trees (**Leo Breiman, 1984**)

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

Η δενδρική δομή διαμορφώνεται με βάση τα **χαρακτηριστικά** (**features, attributes**) δειγματικών στοιχείων (παραδειγμάτων) μάθησης, κωδικοποιημένα σε τιμές $x_j(i)$ (predictor value) **διανυσμάτων εισόδου** $x(i)$. Ορίζω πρόσθετο **χαρακτηριστικό εξόδου** $y(i)$ με **τιμή στόχου** (**target value**). Για τα **labeled** παραδείγματα μάθησης θέλουμε $y(i) \approx d(i)$

- Ξεκινώ από τον κόμβο **ρίζα** (**Root Node**, $m = 0$) που εμπεριέχει όλα τα παραδείγματα $x(i)$ του δείγματος μάθησης $\mathcal{D}$ με τα χαρακτηριστικά εισόδου $x_j(i)$ και εξόδου $y(i)$. Διαχωρίζω το σύνολο παραδειγμάτων σε 2 υποσύνολα (υπο-δένδρα) με βάση την **κατηγοριοποίηση** κάποιου χαρακτηριστικού εισόδου (**attribute**) 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 Αλγορίθμου Διαμόρφωσης Δένδρου CART:

- (1) Για **classification trees** στόχος είναι η ένταξη στα τελικά φύλλα του δένδρου των παραδειγμάτων μάθησης με ενιαία απόκριση $y(i)$ 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

Διαμόρφωση Classification Trees Δυναμικής 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 (**attribute**) στοιχείου εισόδου, κωδικοποιημένο στις διαστάσεις (**predictor variables**) του διανύσματος $\mathbf{x}(i) \in R_m$. Η αναλογία των αποκρίσεων (**target values**) $y(i)$ 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 $k(m) = \operatorname{argmax}_k \hat{p}_{mk}$ που καθορίζει τη ταξινόμηση των $\mathbf{x}(i) \in R_m$. Η κάθε διαφορετική ταξινόμηση θεωρείται παραφωνία (**ακαθαρσία**, **impurity**). Μέτρο διαμόρφωσης υπο-δένδρων ορίζεται ο **Gini Index** ως $1 - \sum_k \hat{p}_{mk}^2$
- Το χαρακτηριστικό εισόδου (**attribute**) για επόμενο διαχωρισμό σε υπο-δένδρα προκύπτει από σύγκριση των εναλλακτικών και επιλογή της **ελάχιστης** τιμής του **Gini Index** για τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά
- Για 2 κλάσεις ($\mathcal{C}_1$ και $\mathcal{C}_2$) ο **Gini Index** ορίζεται ως $GI(p) = 2p(1-p) = 1 - (1-p)^2 - p^2$ όπου p η αναλογία ασύμβατης (λάθος) 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 συμβατότητας**, $p = 0$ ή $p = 1$ και $GI(p) = 0$ (**ελαχίστη τιμή**). Η **μέγιστη ασυμβατότητα** $p = 0.5$ δίνει τη **μέγιστη τιμή** $GI(p) = 0.5$

Σημείωση: Άλλο μέτρο επιλογής χαρακτηριστικού αφορά στη ελαχιστοποίηση του **Δείκτη Εντροπίας**: $-p \log_2(p) - (1-p) \log_2(1-p)$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

<https://dataaspirant.com/how-decision-tree-algorithm-works/>

Το δείγμα μάθησης (*training sample*) αποτελείται από 16 στοιχεία (*records*) με 4 αριθμητικά συνεχή χαρακτηριστικά εισόδου (*attribute values, predictors*) A, B, C, D και γνωστή δυαδική έξοδο (*label, target*):

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

Επιλέγεται *αυθαίρετα* κατηγοριοποίηση των *attributes* σε 2 κατηγορίες ανάλογα με το ύψος της τιμής τους:

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

Gini Index GI , Attribute A

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

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

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

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

$A < 5.0$ & E positive: 3/4

$A < 5.0$ & E negative: 1/4

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

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

	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

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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

<https://dataaspirant.com/how-decision-tree-algorithm-works/>

Gini Index GI , Attribute B

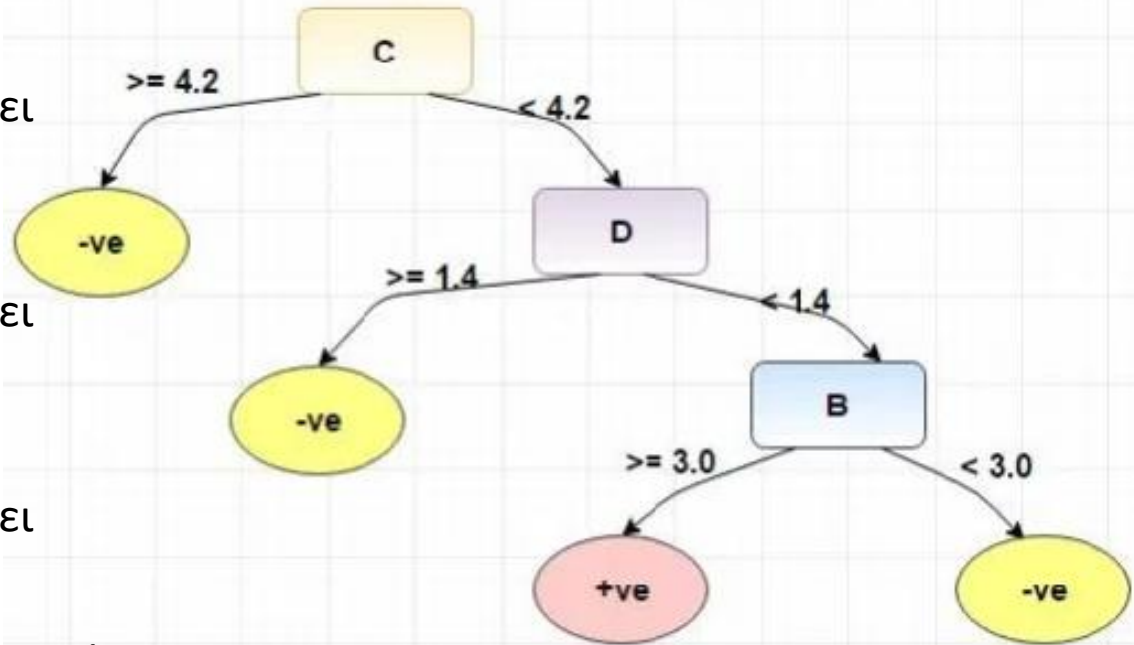
Όπως και για το **Attribute A** προκύπτει
 $GI(B) = 0.3345$

Gini Index GI , Attribute C

Όπως και για το **Attribute A** προκύπτει
 $GI(C) = 0.2$

Gini Index GI , Attribute D

Όπως και για το **Attribute A** προκύπτει
 $GI(D) = 0.273$



- Άρα το **Δένδρο Αποφάσεων** διαμορφώνεται με επιλογή χαρακτηριστικών αντιστρόφως ανάλογα με τις τιμές των GI κατά σειρά: C, D, B
- Το χαρακτηριστικό A με $GI(A) = 0.45825$ δεν επηρεάζει τη διαδικασία διαμόρφωσης υπο-δένδρων

Attribute	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	0.45825	0.3345	0.2	0.273

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>

A Classification Tree

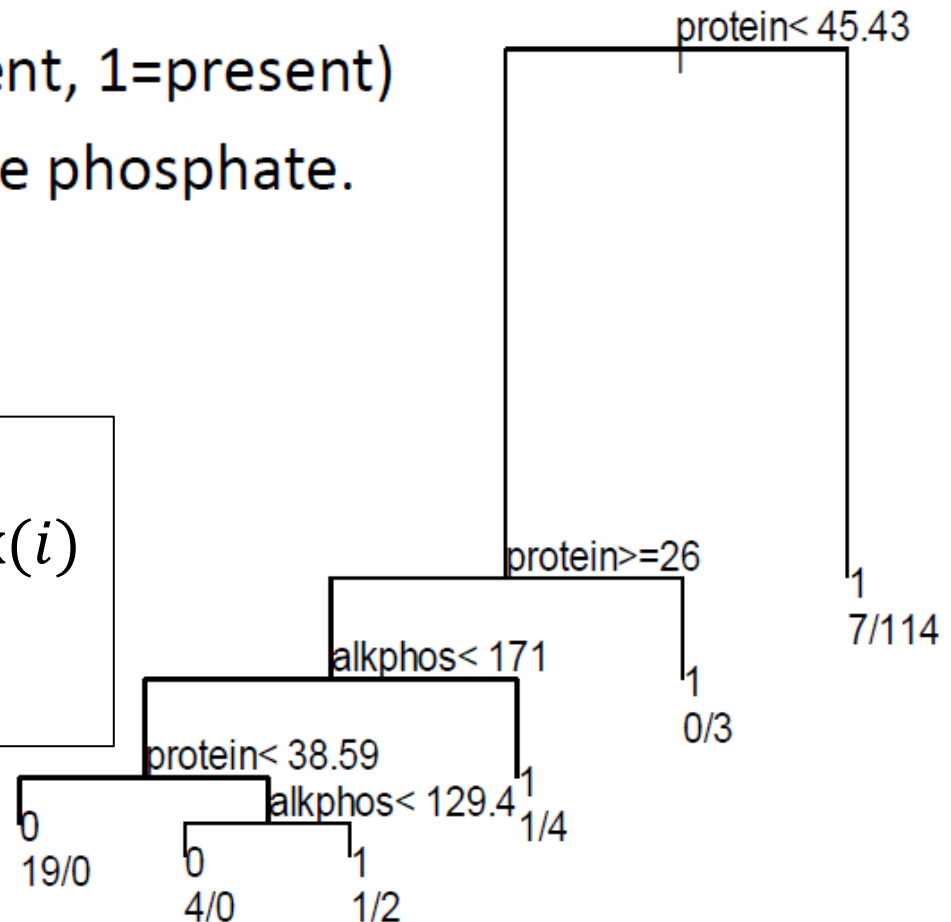
Predict hepatitis (0=absent, 1=present)
using protein and alkaline phosphate.

“Yes” goes left.

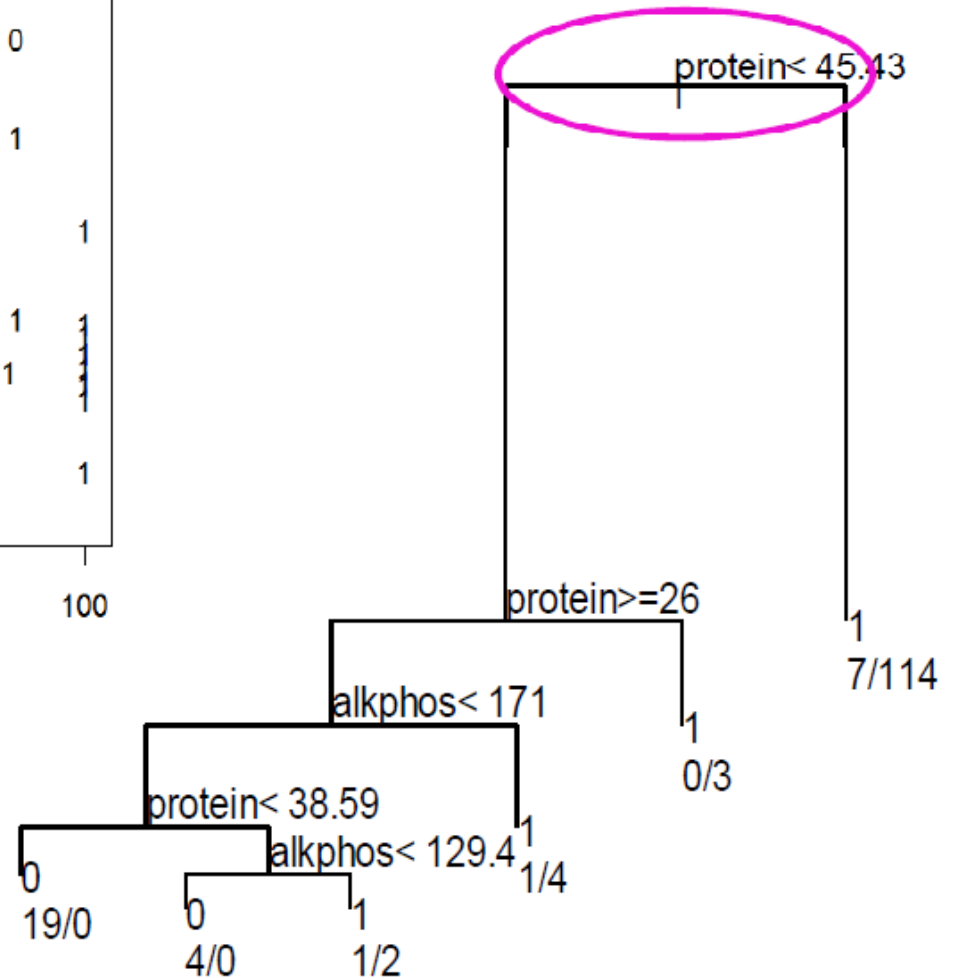
Training Sample

155 Labeled Sample Elements: $\mathbf{x}(i)$

- 123 present: $d(i) = 1$
- 32 absent: $d(i) = 0$

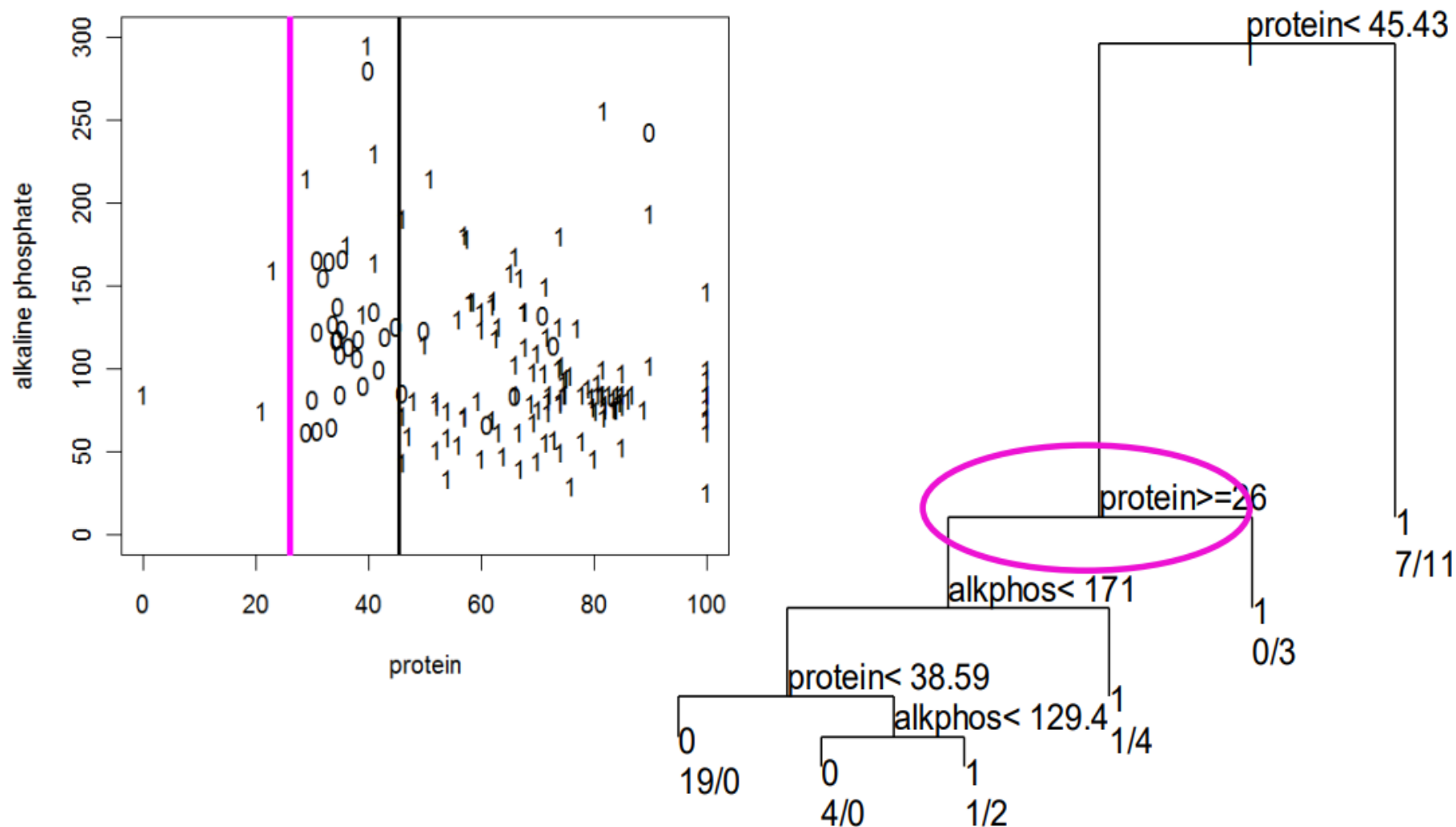


Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (2/6)



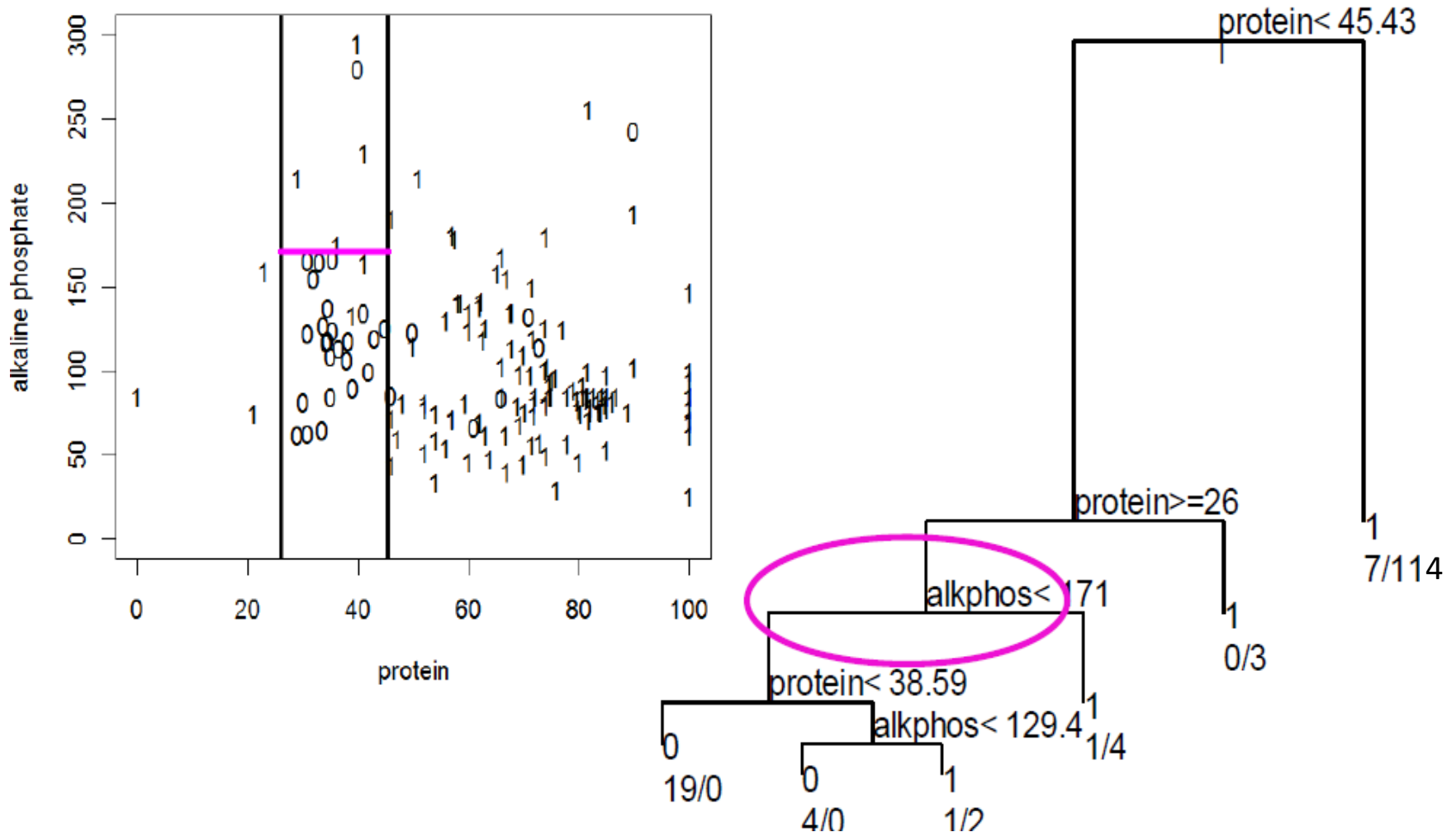
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (3/6)



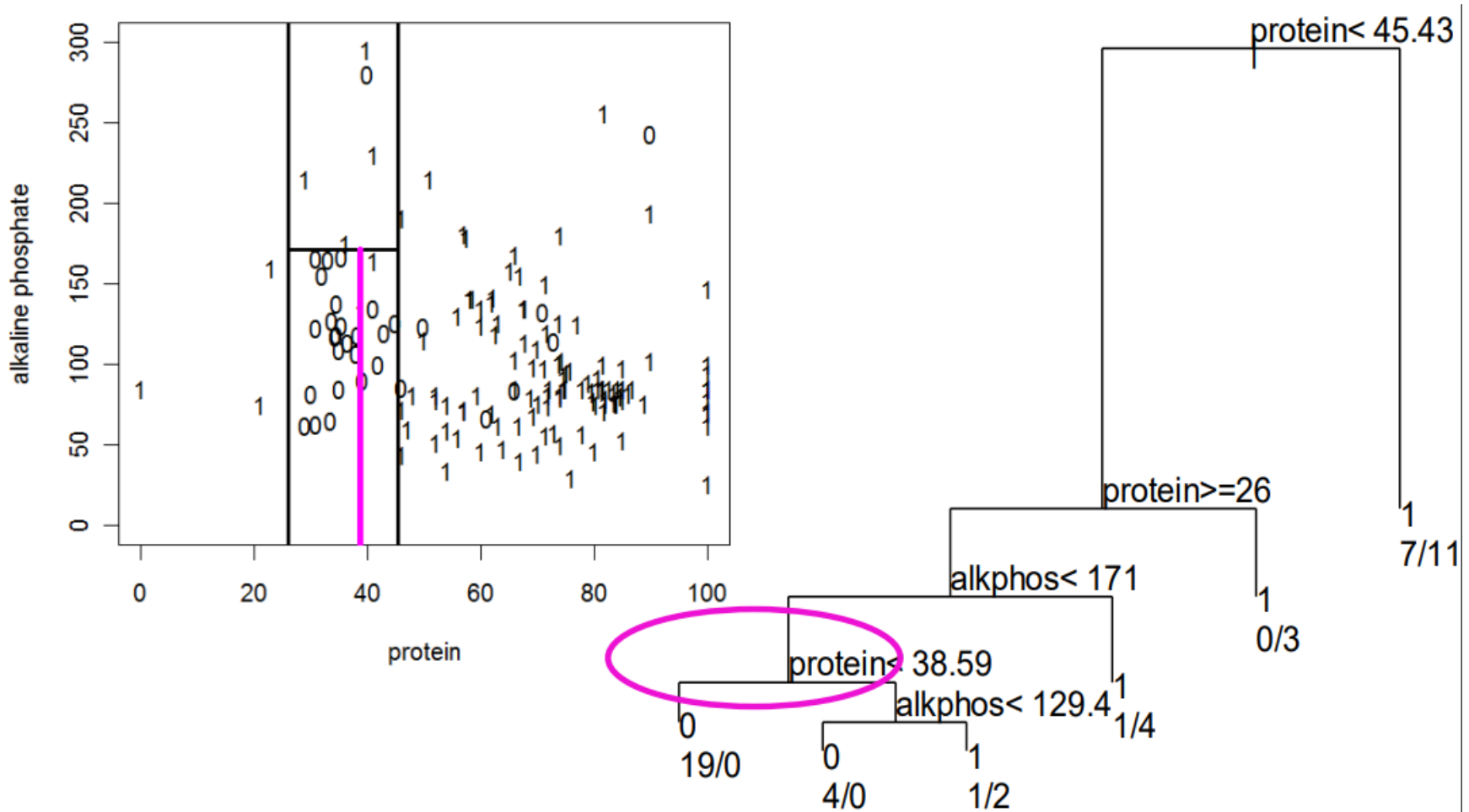
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (4/6)



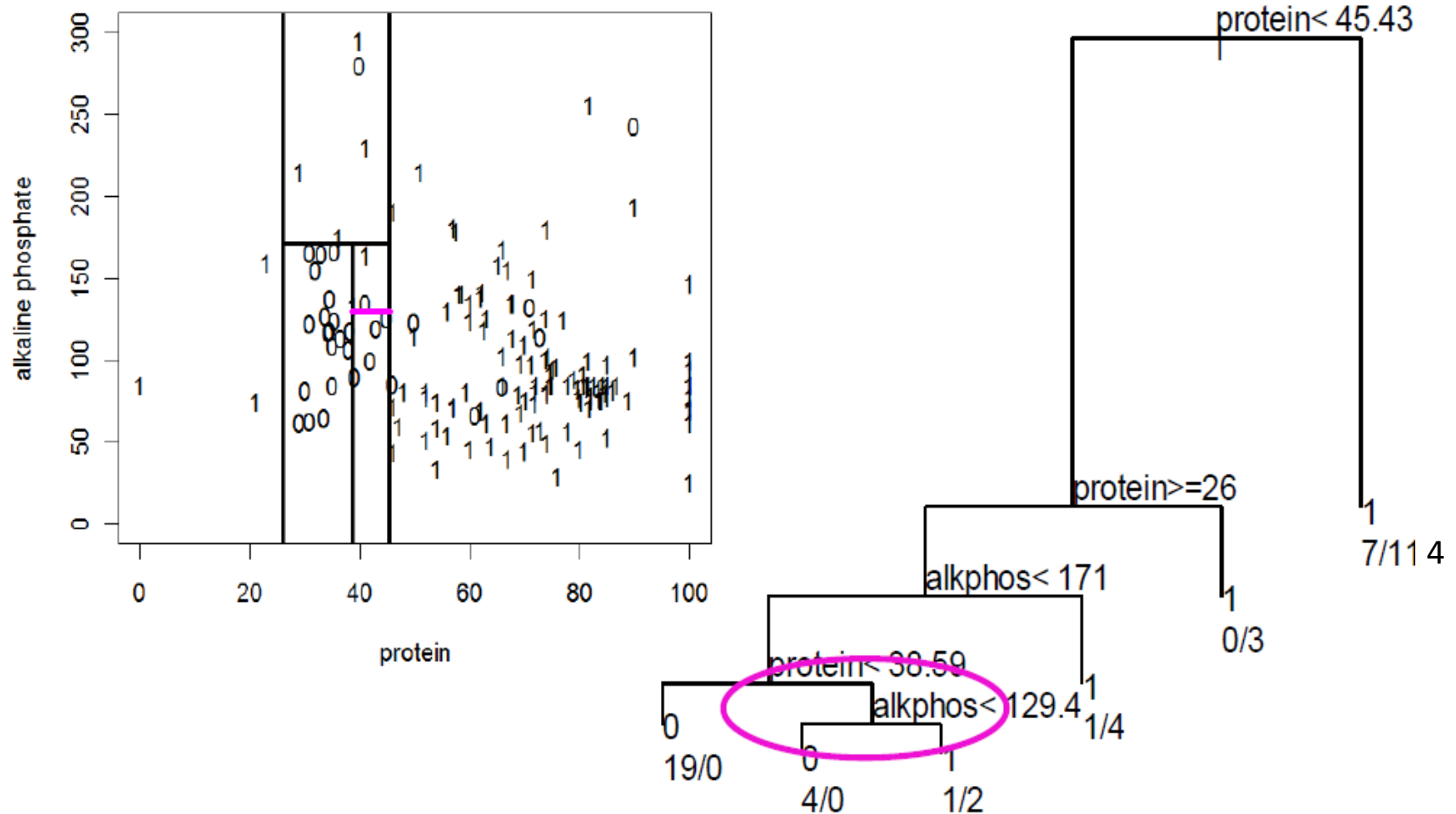
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (5/6)



ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Παράδειγμα: Πρόβλεψη Ηπατίτιδας με Δένδρο Ταξινόμησης (6/6)



Το χαρακτηριστικό *protein* ορίζει αποκλειστικά τον διαχωρισμό για μεγάλες και μικρές τιμές του
Το χαρακτηριστικό *alkaline phosphate* υπεισέρχεται μόνο για ενδιάμεσες τιμές του *protein*

Διαμόρφωση Random Forests – Bootstrap Aggregating (Bagging)

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>

- Ένα **Random Forest** αποτελείται από R **decision trees** τα οποία αποφασίζουν **ανεξάρτητα** για μια παράμετρο εξόδου $y(i)$. Η τελική απόφαση προκύπτει από την πλειοψηφία (**aggregation**) των $y(i)$: **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 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}(1), d(1)), \dots, (\mathbf{x}(N), d(N))\}$. 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 προηγούμενων 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 (Classification And Regression Trees)** αλλά με **μειωμένα χαρακτηριστικά (prediction attributes)** που επιλέγονται **τυχαία** και **ανεξάρτητα** σε κάθε κόμβο των δένδρων

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Αξιολόγηση & Επιδόσεις Random Forests – Αλγορίθμου Bagging

- Τρόπος αξιολόγησης **crossvalidation**: Ένα μεγάλο **labeled** δείγμα μπορεί να χωριστεί σε υποσύνολα $\mathcal{D} = \mathcal{D}_1 \cup \mathcal{D}_2 \cup \dots$. Κάθε $\mathcal{D}_k$ 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 (**attributes**) 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**