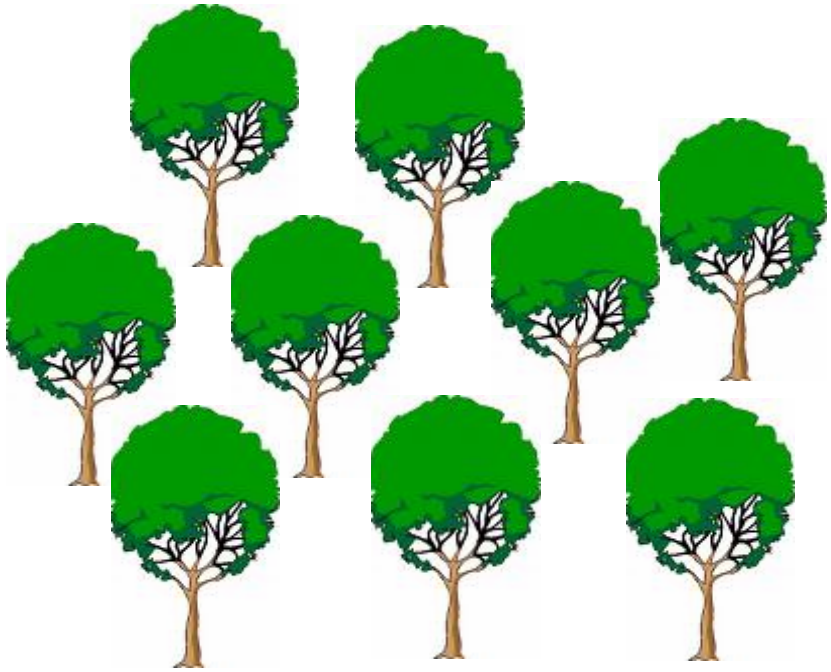
Pokročilé neparametrické metody

Klára Komprdová

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ



Klasifikační a regresní lesy

Klasifikační a regresní lesy

Klasifikační les

- Klasifikační les je klasifikační model vytvořený kombinací určitého počtu klasifikačních stromů.
- Každý strom přiřazuje hodnotě vektoru prediktorů nějakou třídu.
- Výsledná klasifikace je dána hlasováním nebo jako průměr pravděpodobnosti (zastoupení kategorie v terminálním uzlu)

Regresní les

- Je tvořen několika regresními stromy.
- Výsledná regresní funkce je definována jako vážený průměr regresních funkcí několika stromů.

Metody vytváření lesů

- Random forests (L. Breiman, 2001)
- Bagging – bootstrap aggregating (L. Breiman, 1996)
- Boosting (Y.Freund & R. E. Schapire, 1997)

Do lesa není vidět !

Rozhodovací lesy

- James Surowiecki, 2004

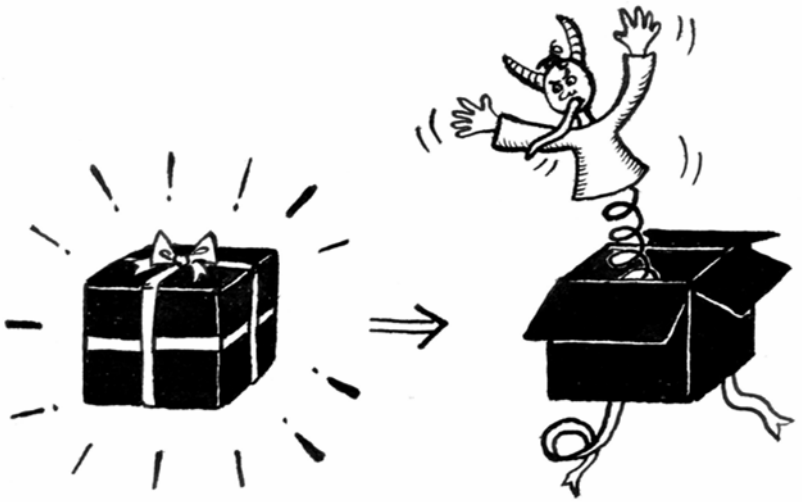
„skupinový úsudek je daleko inteligentnější a přesnější než úsudek jednotlivce, v případech, kdy jde o hodnocení faktů“

- každý příslušník davu musí činit svůj úsudek na základě vlastních, nezávislých informací
- Výsledek je dán hlasováním
- Stromy nejsou nezávislé

Random Forests pro regresi a klasifikaci

“ looking inside the black box is necessary“

Leo Breiman



Použití RF

- ☺ měření významnosti proměnných
- ☺ efekt proměnných na predikci
- ☺ shlukování
- ☺ detekce odlehlých hodnot
- ☺ klasifikace
- ☺ predikce

Random Forests I.

- Náhodný les se skládá ze souboru stromů $T_1,...,T_N$, jejichž klasifikační nebo regresní funkce lze vyjádřit jako

$$h(X, \Theta_1),...,h(X, \Theta_N),$$

- kde h je funkce, X je prediktor a $\Theta_1,...,\Theta_N$ jsou nezávislé stejně rozdělené náhodné vektory.

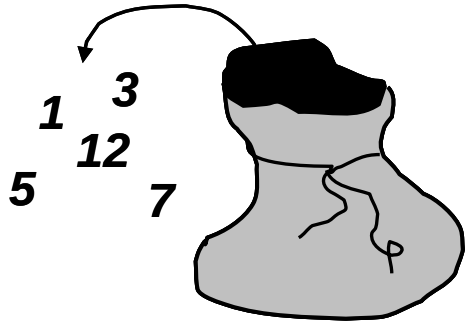
- Pro metodu Random Forests se používají binární stromy typu CART.

- Podobně jako při tvorbě jednotlivých stromů se i zde používá rozdělení na testovací a trénovací soubor.

bootstrapové výběry

- Trénovací soubory pro jednotlivé stromy T_i jsou tzv. **bootstrapové výběry** z datového souboru L.

- Bootstrapové výběry jsou náhodnými **výběry s opakováním** o velikosti n.



- Takovýto výběr nesnižuje postupně velikost množiny původních pozorování → lze rozdělit i velmi malé soubory na velký počet trénovacích a testovacích souborů.

bootstrapové výběry

- jednotlivé bootstrapové výběry nejsou nezávislé jako například u krosvalidace → do bootstrapového výběru jsou některá pozorování vybrána opakovaně a některá naopak vůbec.

- počet pozorování, která se do bootstrapového výběru nedostanou je přibližně 37%

- pozorování, která jsou v *i*-tém bootstrapovém výběru L_i, se použijí při tvorbě stromu T_i → trénovací soubor

- pozorování, která se do toho výběru nedostala jsou použita k odhadu jeho chyby → testovací soubor

- odhady chyby na testovacím souboru se nazývají *oob* (*out-of-bag, out of bootstrap sample)* odhady

- celkový počet *oob* pozorování tvoří 1/3 datového souboru

Přiřazení hodnoty v RF

- Klasifikace $\hat{C}_{rf} = vetsinove\ \_\ hlasovani\ \{\hat{C}_i(x)\}_1^N$
  - kde $\hat{C}_i(x)$ je výsledek klasifikace *i*-tého stromu
- Regrese $\hat{f}_{rf}(x) = \frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^{N} T_i(x)\right)$
  - predikce je průměrem ze všech stromů
- náhodný les zvyšuje přesnost (snižuje zkreslení) → pěstováním se velkých stromů, které se neprořezávají → cílem je snížit chybu celého lesa nikoli jednotlivého stromu
- zároveň udržuje „rozumnou“ varianci kombinováním výsledků jednotlivých stromů (většinové hlasování/průměrování)

Stromy nejsou nezávislé – co s tím?

- Jak zajistit také nízkou korelaci mezi jednotlivými stromy ?
- Pokud tvoříme výběry s opakováním, které nejsou navzájem nezávislé, budou výsledné stromy korelované → může vést k nadhodnoceným výsledkům klasifikace či predikce!
- Snížení korelace mezi stromy se dosáhne náhodným výběrem pouze určitého počtu prediktorů.
- Pro každý strom se tak nejlepší větvení pro daný uzel hledá pouze z m prediktorů $X_1,..,X_M$.
- Random Forets používá jak náhodný výběr pozorování, tak náhodný výběr prediktorů.

Algoritmus tvorby lesa

- Krok1: Vytvoř bootstrapový podsoubor L_i o velikosti N - trénovací soubor.
- Krok2: Vyber náhodně m prediktorů.
- Krok3: Vytvoř strom T_i na bootstrapovém souboru L_i pouze s použitím m náhodně vybraných prediktorů (stejně jak bylo popsáno v metodě CART, hledáme nejlepší rozdělení daného uzlu mezi prediktory na dva dceřiné uzly). Růst stromu se zastaví, až strom dosáhne minimální hodnoty velikosti uzlu.
- Krok 4: Zařaď *oob* pozorování (testovací soubor) vytvořeným stromem a urči výslednou klasifikační třídu (kategorii) nebo predikci všech *oob* pozorování.

Krok 1-4 se opakuje do konečného počtu stromů v lese.

- Spočítej celkový výsledek klasifikace/predikce celého lesa většinovým hlasováním/průměrováním.

Výběr *m* a *ntree*

- je potřeba vybrat správný počet proměnných (*m*) pro náhodný výběr a počet stromů (*ntree*) v lese.
- Určení těchto parametrů je exmerimentální
- otestování parametrů → spuštění RF několikrát s různým nastavením parametrů → snažíme se získat les, který má nejmenší celkovou chybovost.
- Počet stromů *ntree* - po určitém čase začínají stromy konvergovat ke správné hodnotě *oob* odhadu.
- Minimální velikost lesa lze určit jako počet stromů, kdy se chyba *oob* odhadu s přibývajícími stromy již nemění.

Počet prediktorů *p*

Pro náhodné lesy je doporučeno následující nastavení:

- klasifikace - hodnota $m = \sqrt{p}$ a minimální velikost uzlu je jedna;
- regrese - hodnota $m = p/3$ a minimální velikost koncového uzlu je pět

- Výše uvedené hodnoty slouží jako defaultní nastavení ve většině softwarů.

- V praxi však určení počtu prediktorů závisí na řešeném problému a parametr *m* je vhodný zvolit podle výsledků testování modelů s různým nastavením.

- Vybereme takové *m*, při němž má výsledný les nejmenší chybovost.
- Vzhledem k tomu, že stromy nelze přetrénovat, je počet prediktorů nejdůležitější hodnotou, kterou musíme zvolit, neboť počet stromů nás omezuje pouze časově.

Měření významnosti proměnných (*importance*)

- Metoda přínosná u problémů s velkým množstvím prediktorů, které mnohdy obsahují málo informací o závisle proměnné

Náhodné lesy vracejí několik měření významnosti (*importance*) proměnné

- Dva typy měření významnosti z RF:
  - založená na poklesu klasifikační přesnosti (*misclassification rate*), kdy jsou hodnoty prediktoru náhodně permutovány
  - významnost lze také spočítat pomocí Gini indexu.

Významnost - *misclassification rate*

- nejčastější měření *importance*:

měření založené na poklesu klasifikační přesnosti, když hodnoty proměnné v uzlu stromu jsou permutovány náhodně

Procedura se dá popsat následovně:

- vytvoříme bootstrapové výběry
- z M - prediktorů vybereme m_0
- po vytvoření jednotlivých stromů, jsou hodnoty m-té proměnné z OOB (pozorování, která zůstala mimo výběr) vzorku náhodně permutovány

Random forest – *misclassification rate*

- u každého vzorku z OOB výběru je pomocí příslušného klasifikačního stromu zjištěn výsledek klasifikace, opakováno pro $m = 1,..., M$
- Na konci jsou srovnány výsledky pozorování u *m*-tého prediktoru zatíženého šumem (randomizovaného) se správnou klasifikací těchto pozorování.
- Pokles v přesnosti predikce stromu, který nastane po randomizaci pozorování, je zprůměrován přes všechny stromy → hodnoty *MR* (*misclassification rate*) pro každý prediktor, které určují jeho významnost
- Toto měření je často vyjádřeno jako procento a je standardizováno na maximální hodnotu *MR* nejvýznamnějšího prediktoru (nejvýznamnější prediktor *MR* = 100%).
- Popsaný proces se opakuje pro všechny prediktory.

Lokální významnost

- Pro každé pozorování můžeme navíc spočítat **lokální významnost** *m*-tého prediktoru.
- Je zjištěno procento správné klasifikace *n*-tého pozorování do správné kategorie přes všechny stromy, kdy bylo v *oob* výběru a hodnoty prediktoru *X* byly permutovány.
- Tato hodnota je odečtena od procenta správné klasifikace pro *oob* pozorování prediktoru bez randomizace.
- Měření významnosti založené na randomizaci proměnných se objevuje v různých variantách.

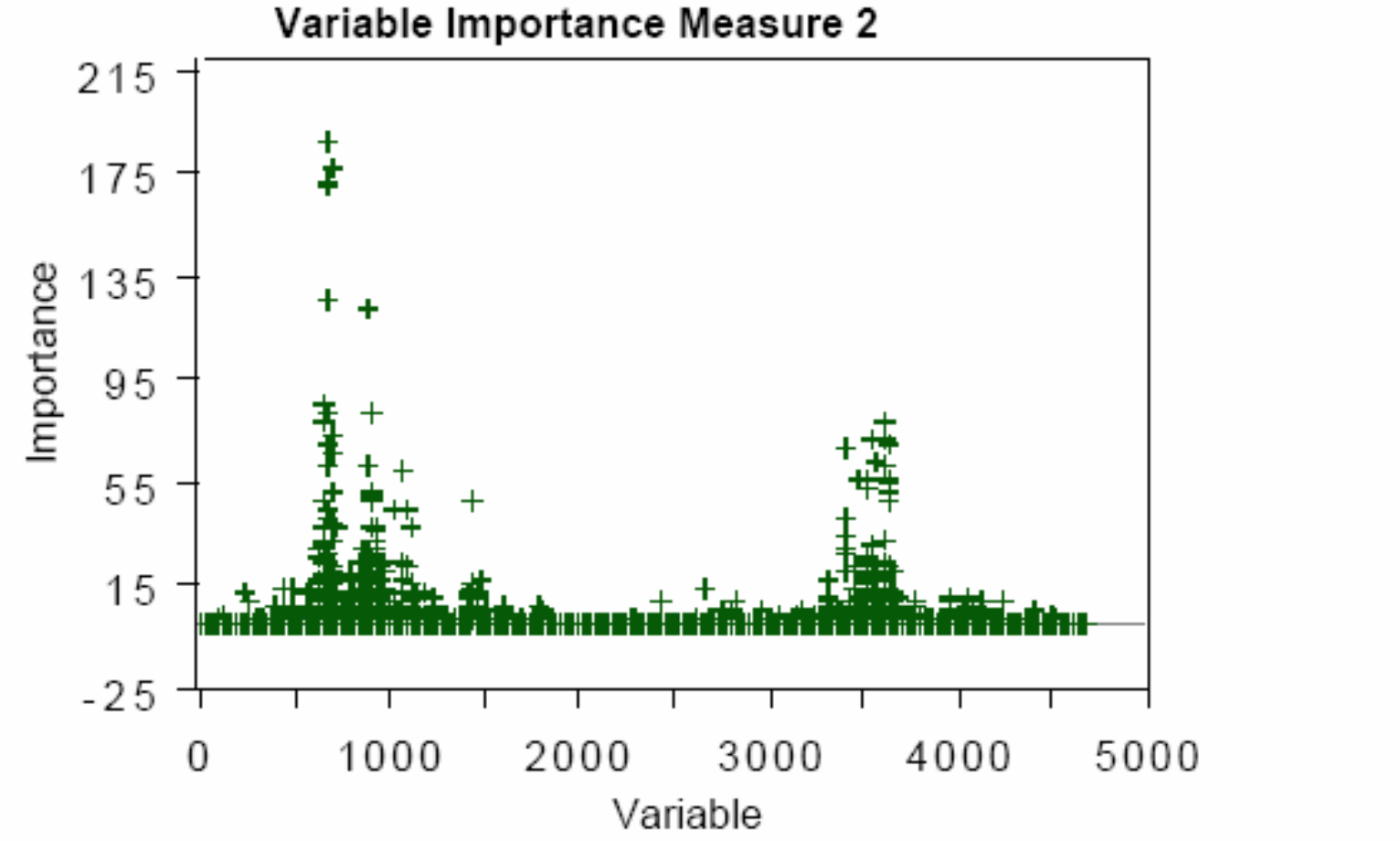
Významnost založená na Gini indexu

- Při rozdělení uzlu na dva dceřiné uzly prediktorem, ke kterému je použit Gini index, dochází k poklesu tohoto indexu.
- Součet poklesu v *GI* v jednotlivých stromech pro každý prediktor udává jeho významnost.
- hledáme optimální sadu prediktorů - máme tuto informaci z významnosti proměnných?
- Sada významných proměnných nemusí být počet proměnných použitých (či nutných) pro klasifikaci/predikci, je však sadou maximální.
- Ke zjištění nejmenší možné sady parametrů při zachování celkové přesnosti lesa je nutné testovat různé kombinace proměnných.
- Můžeme dojít k více modelům o stejné přesnosti, ovšem s jinou kombinací proměnných.
- V případě velkého počtu proměnných je les na začátku spuštěn jednou se všemi proměnnými a potom znovu s použitím pouze významných proměnných, čímž se výrazně šetří čas při testování optimálního lesa.

Příklad I - genetika

- RF byl použit na microarray datový soubor, celkem 81 pacientů (s leukémií) bylo rozděleno do tří tříd.
- Prediktory - 4682 genů bez jakéhokoli předešlého výběru.
- Chybovost výsledného lesa byla nízká (1.2%).
- Cílem nebyla pouze predikce nových pacientů do těchto tří skupin, ale rovněž zjištění, které geny byly pro rozdělení nejvýznamnější

Příklad I - genetika



Příklad II: Kriminalistika

- Studie různých typů klasifikací skla byla motivována vyšetřováním trestných činů. Sklo z místa činu může být použito jako důkaz...jestliže je správně identifikováno!
- Datový soubor obsahuje 214 vzorků šesti druhů různého skla a devět prediktorů – různé chemické parametry skla.
- typy skla: (class)
  - -- A okenní sklo (z domu)1
  - -- B okenní sklo (z domu)2
  - -- C okenní sklo (z auta)1
  - -- D okenní sklo (z auta)2
  - -- E obalové sklo
  - -- F sklo z nádobí
  - -- G reflektorové sklo

- Prediktory: index lomu (RI), Na, Mg, Al, Si, K, Ca, Ba, Fe

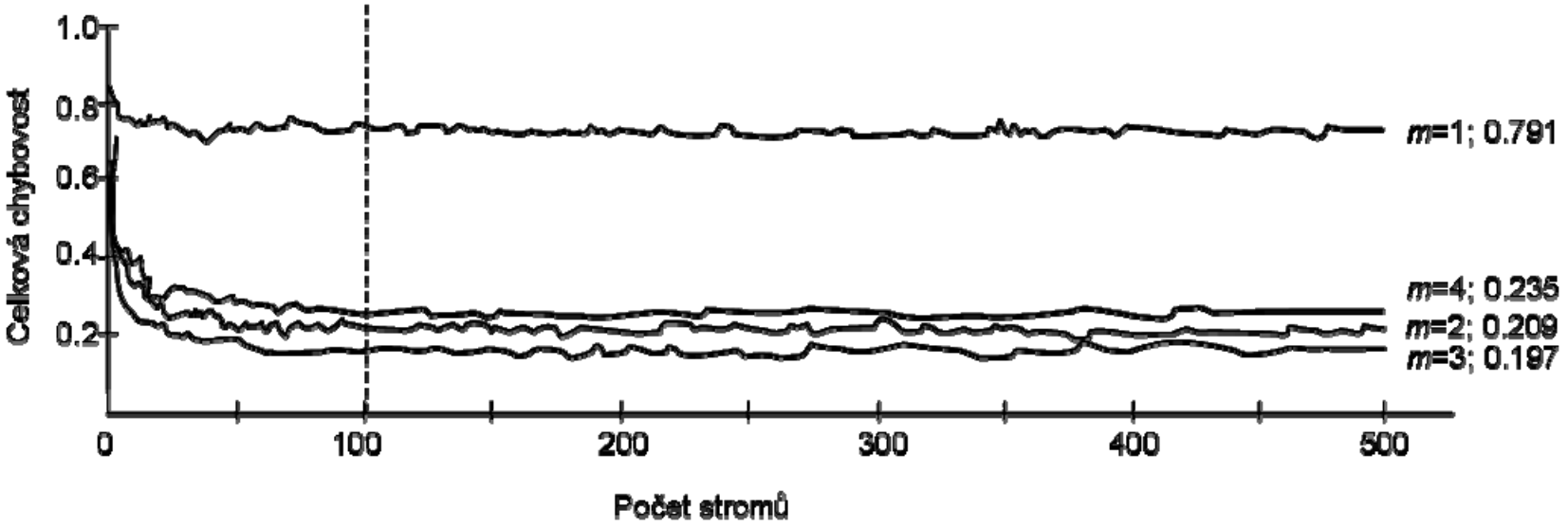
Příklad II: Parametry, které je potřeba testovat

- *ntree* – počet stromů v lese
- *mtry* – počet (náhodně) vybraných prediktorů
- nnode – počet vzorků v terminálním uzlu
- % vzorků pro testování (OOB výběr)

Výsledky testovací chyby pro různé *mtry*

mtry = 1	OOB error = 23.36%
mtry = 2	OOB error = 25.56%
mtry = 3	OOB error = 21.3%
mtry = 4	OOB error = 22.9%
mtry = 5	OOB error = 23.36%
mtry = 6	OOB error = 26.17%
mtry = 7	OOB error = 23.36%
mtry = 8	OOB error = 23.36%

Příklad II: parametry *ntree* a *m*



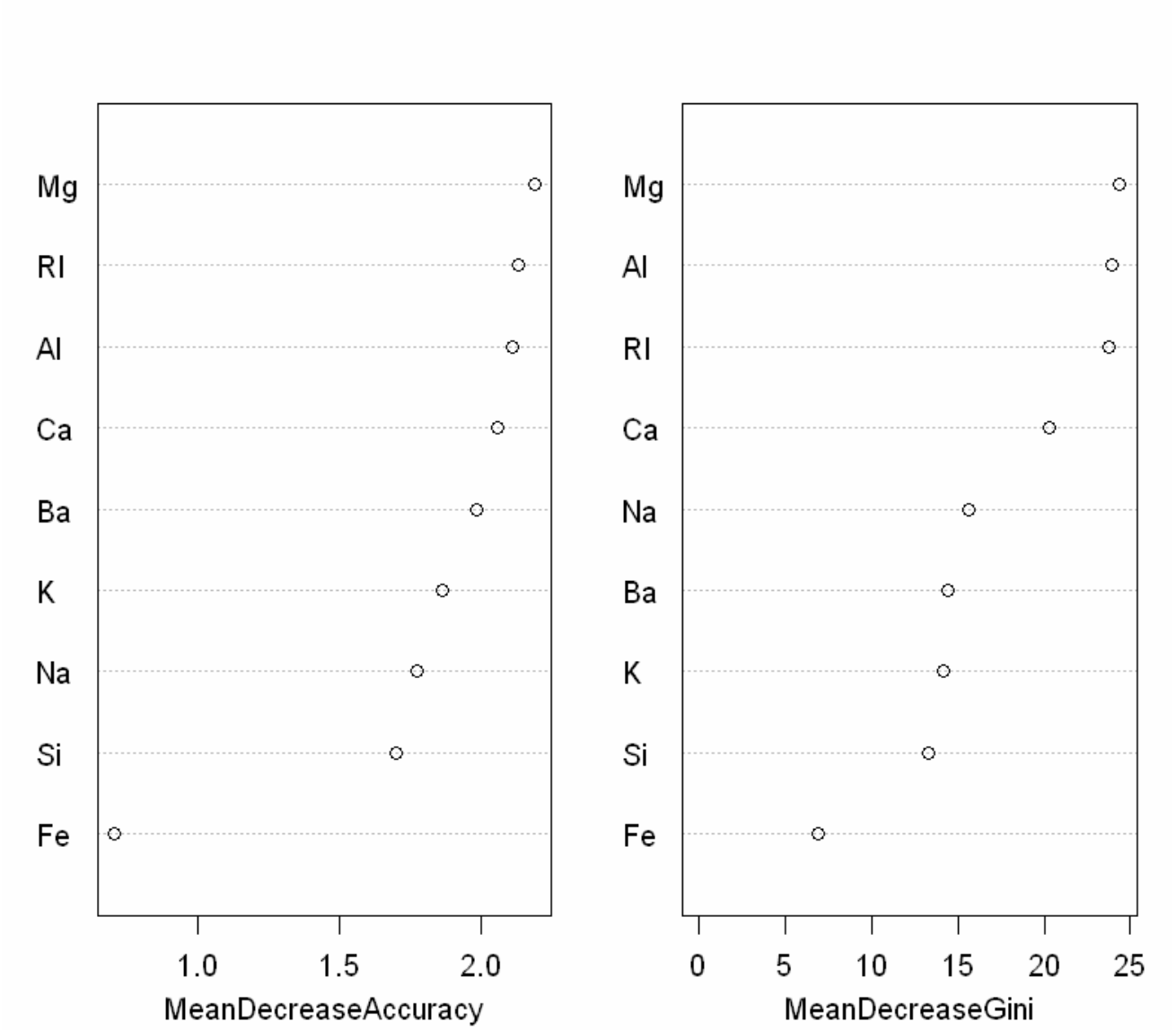
Příklad II: Výsledek klasifikace

- R-project, knihovna randomForest
- randomForest(formula = class ~ ., data = glass, importance = TRUE,proximity = TRUE)
  - Type of random forest: classification
  - Number of trees: 500
  - No. of variables tried at each split: 3
  - OOB estimate of error rate: 21.03%

Confusion matrix:

	A	B	C	E	F	G	class.error	n
A	60	8	2	0	0	0	0.1428571	70
B	10	60	1	3	1	1	0.2105263	76
C	6	4	7	0	0	0	0.5882353	17
E	0	2	0	10	0	1	0.2307692	13
F	0	2	0	0	7	0	0.2222222	9
G	1	3	0	0	0	25	0.1379310	29

Příklad II: Významnost proměnných



Efekt proměnných na predikci I

- Můžeme zjistit které kategorie nebo hodnoty prediktoru jsou významné
- Pro případy z *oob* výběru známe kategorii, do které bylo pozorování zařazeno, zjistíme podíl klasifikace pozorování do jednotlivých kategorií neboli *cpv* (*class proportion vote*)

- příklad pro čtyři kategorie A, B, C, D - pozorování při klasifikaci je ze 100 stromů zařazeno:
  - 10 stromy jako A,
  - 50 stromy jako B
  - 40 stromy jako C
  - žádným stromem jako D

- Hodnoty *cpv* pro jednotlivé kategorie budou:
  - cpv_A=0,1, cpv_B = 0,5, cpv_C = 0,4 a cpv_D = 0.

Efekt proměnných na predikci II

- Pro každou kategorii *j* a každou proměnnou *m* spočítáme pravděpodobnost zařazení každého vzorku do kategorie *j*, kdy je *m*-tá proměnná *X* randomizována.

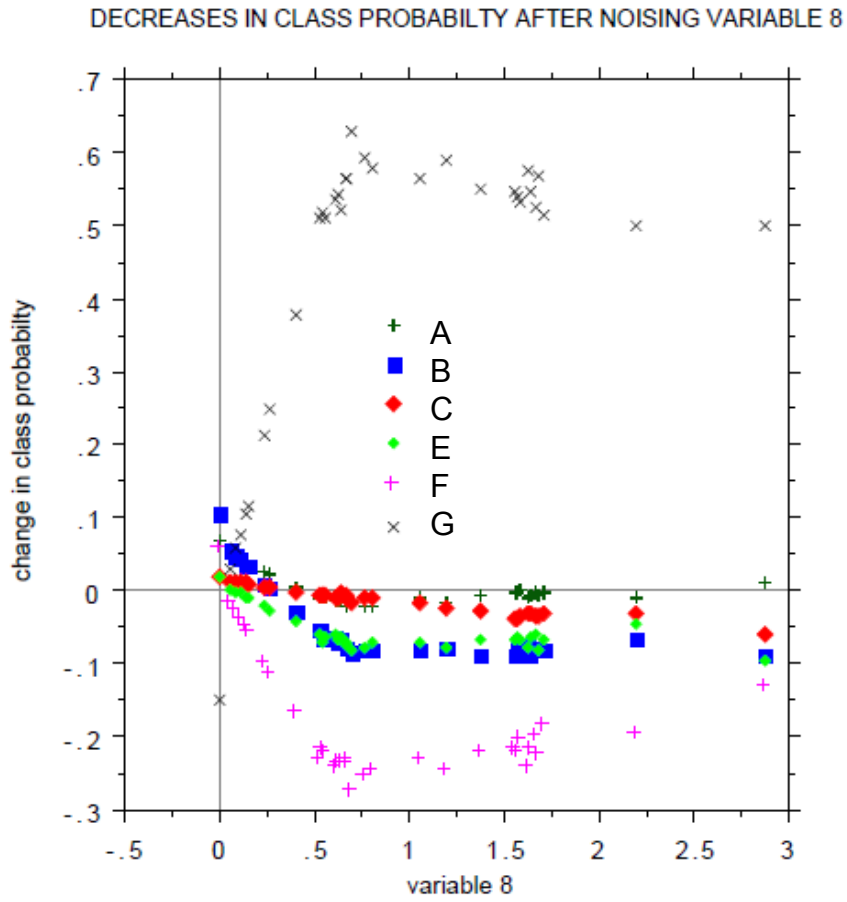
- Rozdíl mezi cpv_{Ran} pro randomizovanou proměnnou a proměnnou bez šumu udává velikost změny pravděpodobnosti zp_{cpv} pro každou kategorii u všech vzorků:

  - $zp_{cpv} = cpv - cpv_{Ran}$

- Myšlenka je tedy stejná jako při určení významnosti proměnné.

- Pokud vyneseme hodnoty této změny do grafu proti hodnotám proměnné, získáme graf efektu proměnné na predikci.

PříkladII: Pokles v pravděpodobnosti kategorií po randomizaci proměnné Fe



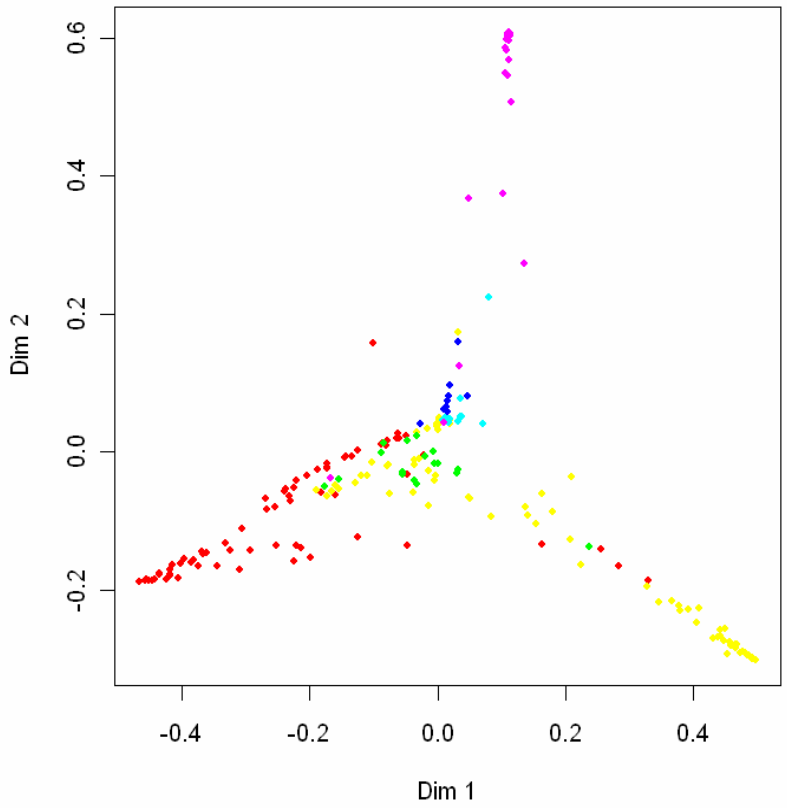
Matice těsnosti (*proximity*)

- neprořezané stromy – konečný počet uzlů obsahuje pouze malý počet vzorků
- všechny vzorky z trénovacího souboru necháme zařadit stromem- jestliže vzorky leží v jednom uzlu, zvýší se *těsnost* (proximity) mezi nimi na jedna; prox(*n*,*k*)
- po proběhnutí procedury podělíme matici *proximities* celkovým počtem stromů → získáme matici těsnosti M_{prox} ={*prox*(*n*, *k)}.*
- Velikost matice je *N*x*N* - je symetrická, pozitivně definitní a nabývá hodnot mezi 0-1 s prvky na diagonále rovnými jedné.
- Můžeme převést na matici vzdáleností $1\text{-}\boldsymbol{M}_{prox}$
- Používá se v různých shlukovacích a ordinačních metodách.
- Nejčastější využití je pro výpočet faktorových os ve vícerozměrném škálování, které umožňuje projekci vzorků do prostoru s méně dimenzemi, přičemž zachovává vzdálenosti mezi objekty.
- užitečné pro vizualizaci výsledků klasifikace nebo k hodnocení překryvu jednotlivých skupin

Překryv kategorií - *proximity a probability heat map*

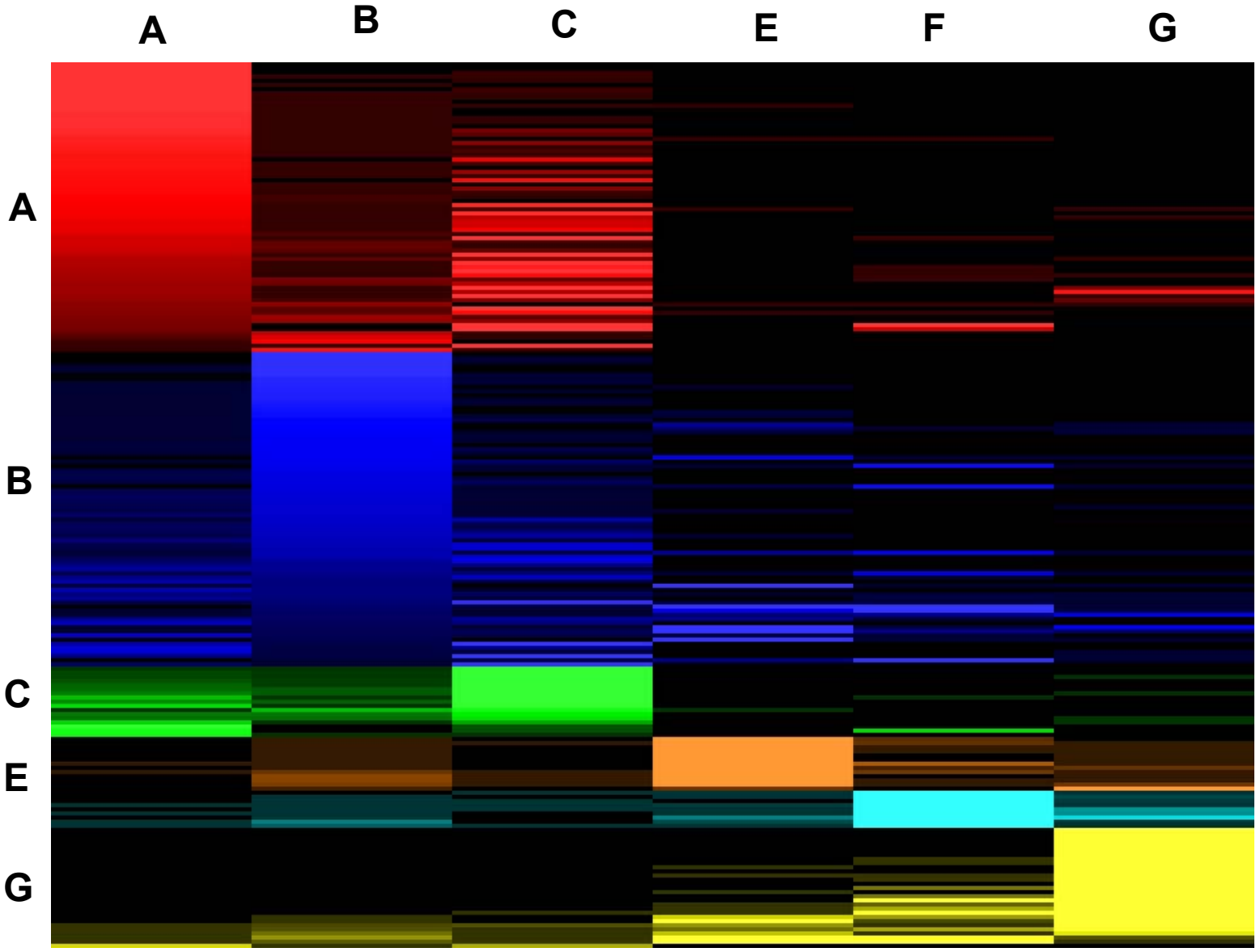
- K určení překryvu jednotlivých kategorií můžeme použít zobrazení mapy těsnosti (*proximity heat map*).
- Intenzita barev v mapě je dána vzrůstající mírou těsností jednotlivých vzorků.
- Stejně lze použít k vytvoření mapy i matici pravděpodobností (*probality heat map*).

Příklad II: Shlukování



- nemetrické mnohorozměrné škálování probíhá na matici těsnosti (proximities)
- matici těsnosti je možné použít pro všechny typy ordinačních a shlukových analýz, neboť má všech vlastnosti matice vzdáleností

Příklad II - Pravděpodobnostní mapa – překryv tříd skla



Prototypy kategorií – pomocí těsnosti

- Dalším příkladem použití měření těsnosti jsou prototypy kategorií.
- Pro každou kategorii *j* najdeme pozorování, u něhož je největší počet pozorování z téže kategorie mezi jeho *k* nejbližšími sousedy, podle měření těsnosti.
- Mezi těmito *k*-pozorováními zjistíme medián a kvartily pro každý prediktor.
- Mediány jsou prototypy dané kategorie a kvartily nám dávají odhad jejich stability.
- Hodnoty jsou standardizovány (odečtením 5. percentilu a podělením rozsahem mezi 5. a 95. percentilem).
- Pro kategoriální proměnné je prototypem kategorie s největší frekvencí.
- Druhý prototyp můžeme získat zopakováním této procedury, ale již bez pozorování, která byla obsažena v prvním prototypu.

Prototypy kategorií – pomocí pravděpodobnosti

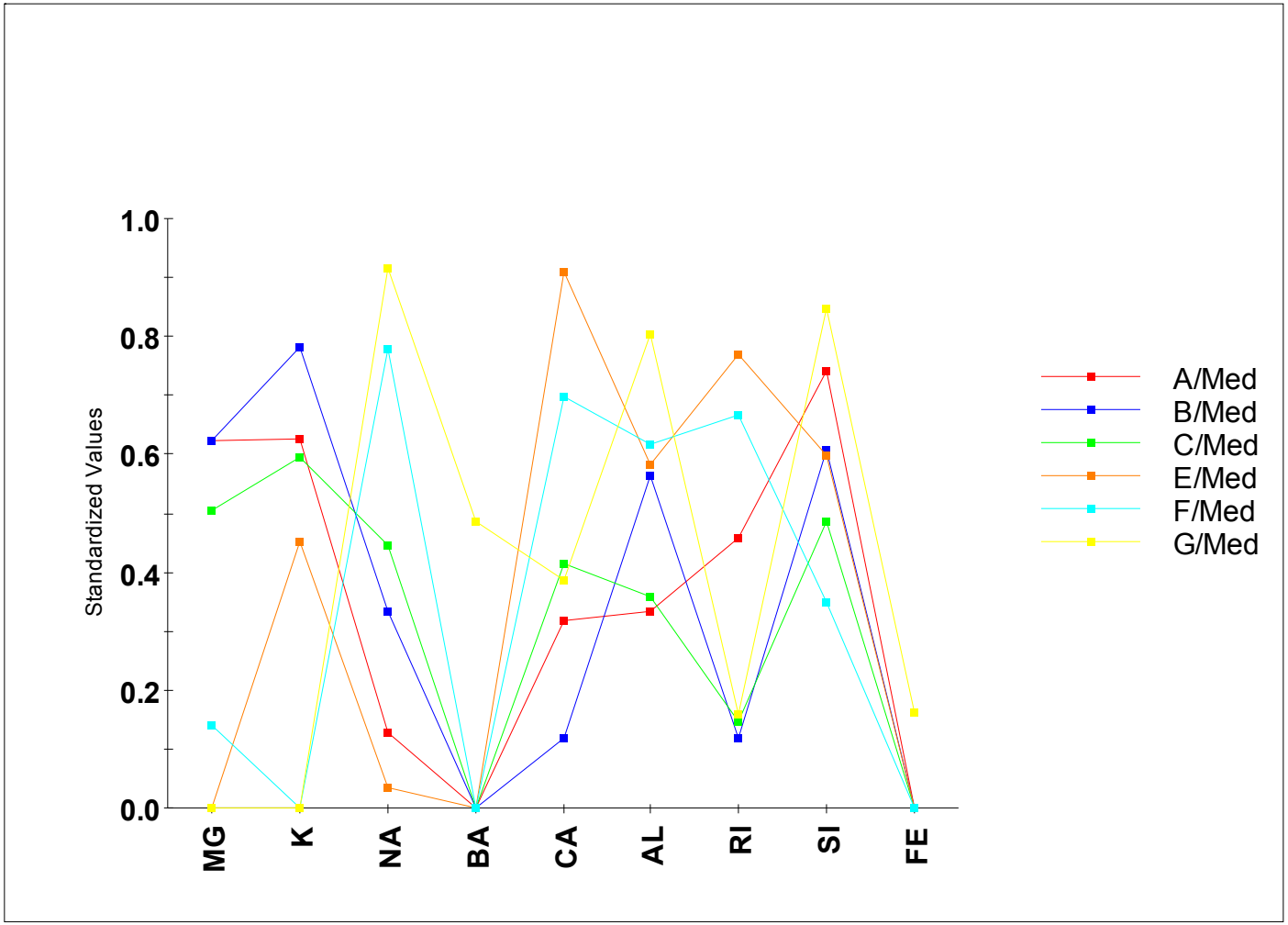
- místo měření těsnosti lze použít také pravděpodobnost zařazení do správné kategorie.

- Zvolíme si hodnotu této pravděpodobnosti například větší než 0,5 (pozorování bylo s více než 50% zařazeno správně) nebo 1 (pozorování bylo všemi stromy klasifikováno do správné kategorie).

- Z pozorování, která mají pravděpodobnost zařazení do správné kategorie větší než zadaná hodnota, můžeme opět spočítat medián a kvartily (v případě spojitého prediktoru) nebo procentuální zastoupení (pro kategoriální prediktor).

- Prototypy tak udávají celkovou představu o tom, jaký vztah mají prediktory ke klasifikaci/predikci a tvoří „jádro“ dané kategorie.

Příklad II –pokračování : Prototypy kategorií



Prediktory jsou seřazeny podle významnosti

Detekce odlehlých hodnot

- vzorky, které mají nejmenší *proximities* ke všem ostatním vzorkům
- definován pouze pro třídu, do které patří
- definujme průměrnou těsnost pozorování *n* od všech pozorování *k* ve stejné kategorii *j* jako:

$$\overline{P}(n) = \sum_{c(k)=j} prox^2(n,k)$$

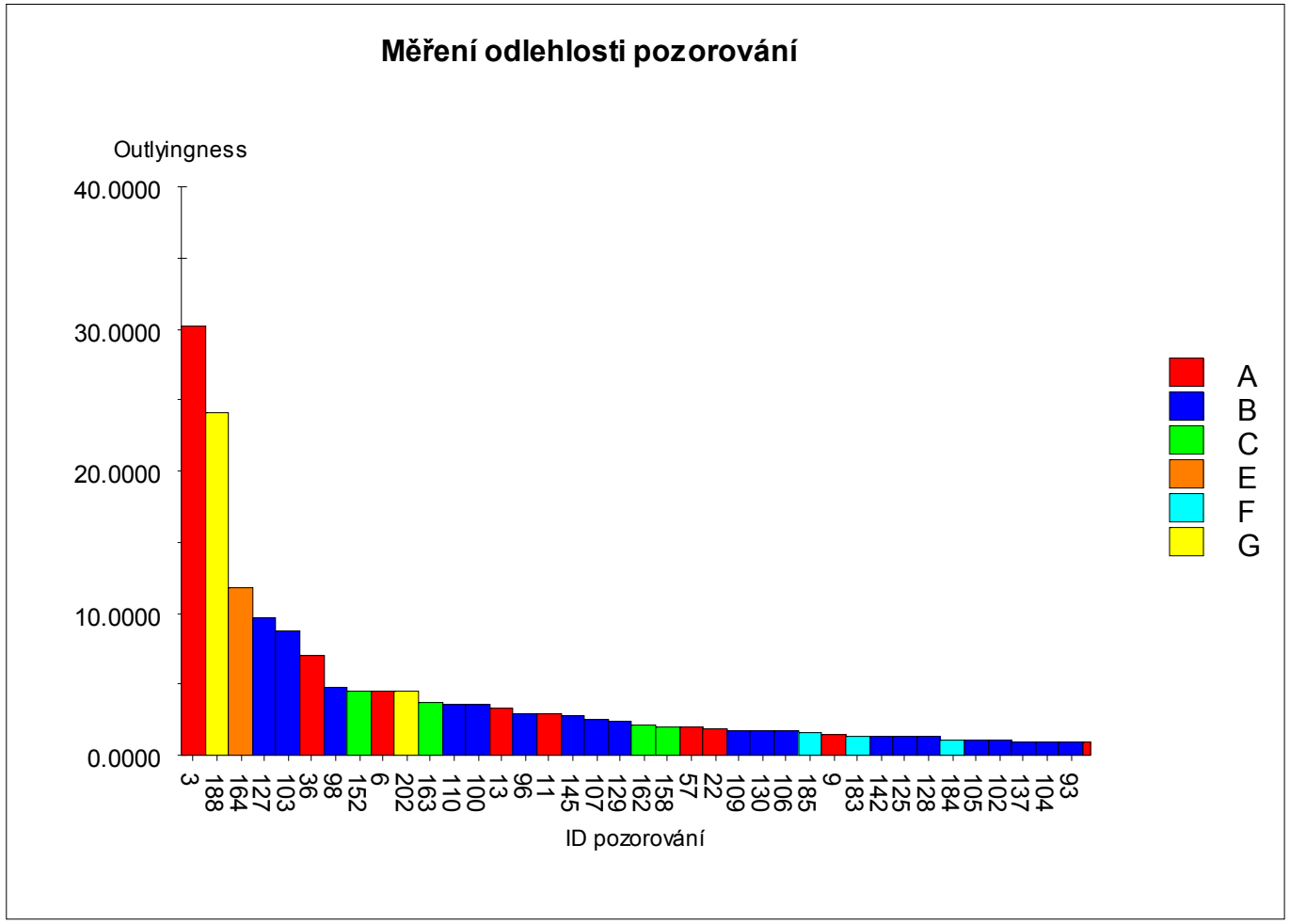
- Míra odlehlosti pro pozorování *n* je definována jako:

$$out(n) = N_j \Big/ \overline{P}(n)$$

kde N_j je počet pozorování v kategorii *j*

- Pro všechna pozorování v dané kategorii spočítáme medián ze všech *out*(*nj*) a jejich absolutní odchylku od mediánu. Odečtením mediánu od hodnoty *out*(*n*) a podělením její absolutní odchylkou získáme finální měření odlehlosti pozorování *n*.
- *out(n)* < 0 jsou převedeny na nulu
- *out(n)* > 10 je považováno za odlehlou hodnotu

Příklad II - Detekce odlehlých hodnot

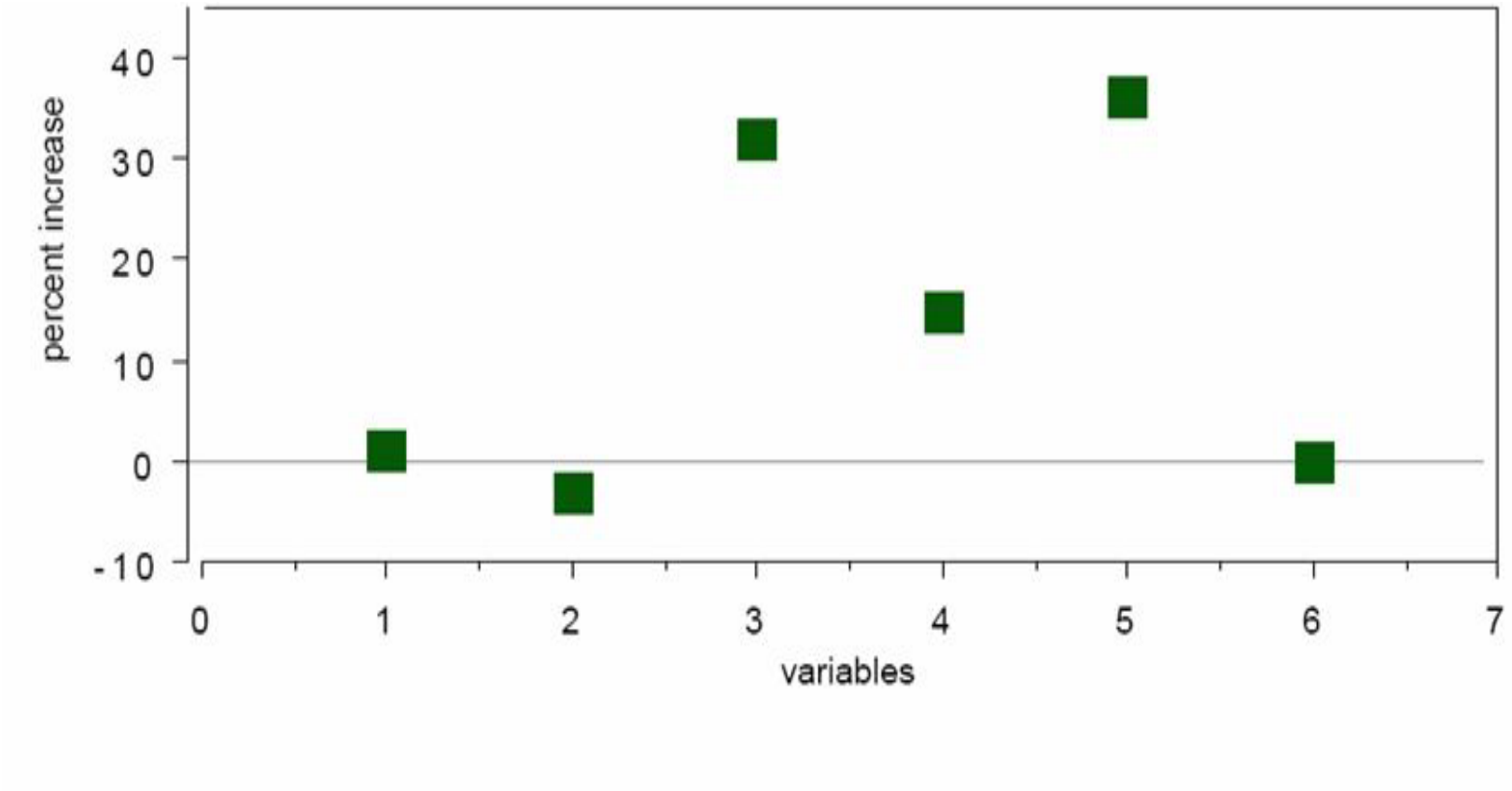


Příklad III: Biomedicína

- Soubor dat se skládá se z šesti proměnných. Prediktory jsou výsledky krevních testů, které mají vztah k fungování jater a poslední proměnnou je spotřeba alkoholu na den. Celkem 345 pacientů, bylo zařazeno do dvou tříd podle závažnosti poruchy funkce jater.

- Procento správně klasifikovaných vzorků z RF bylo 28%

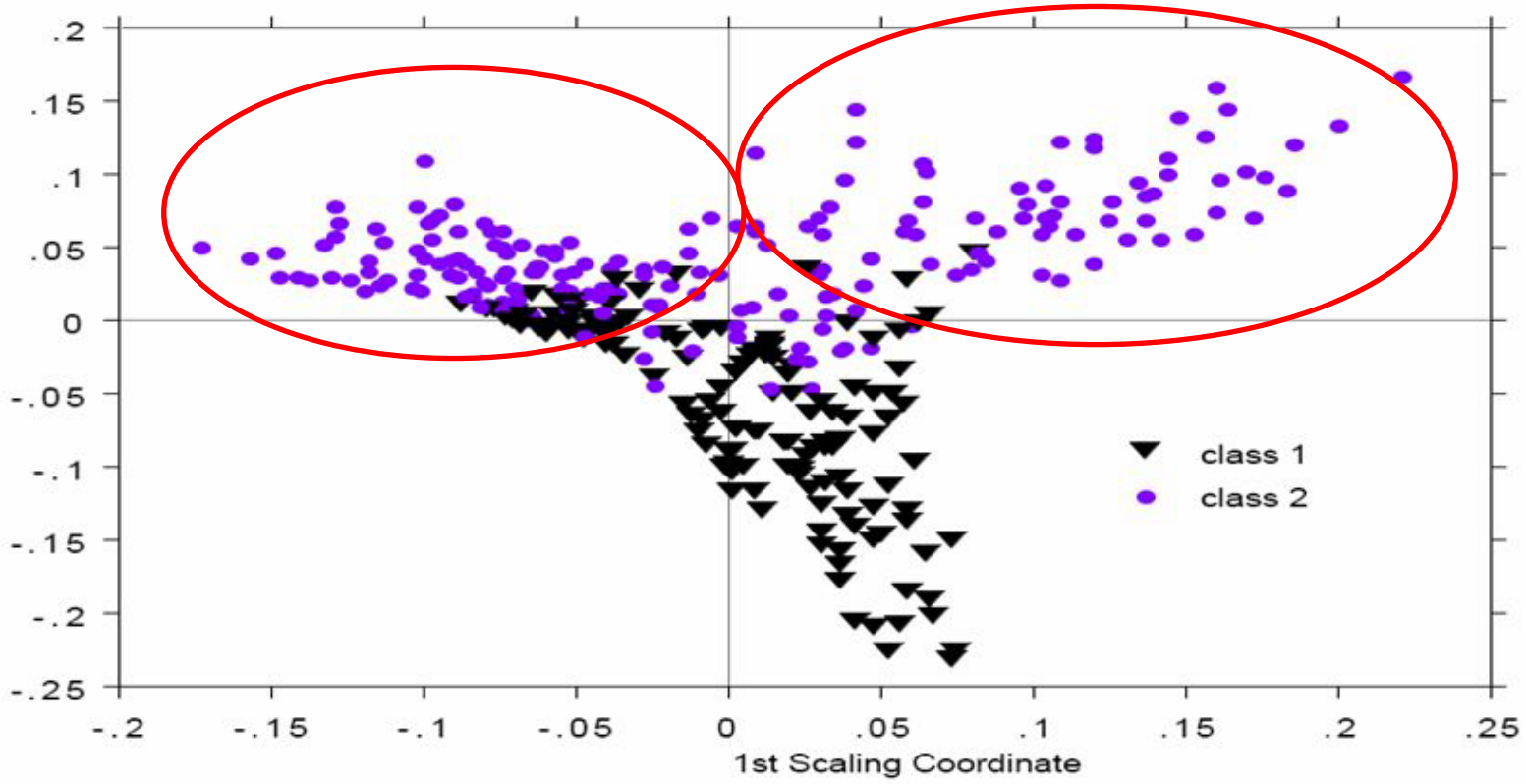
Příklad III: Významnost proměnných



Proměnné 1-5 krevní testy; 6 spotřeba alkoholu na den

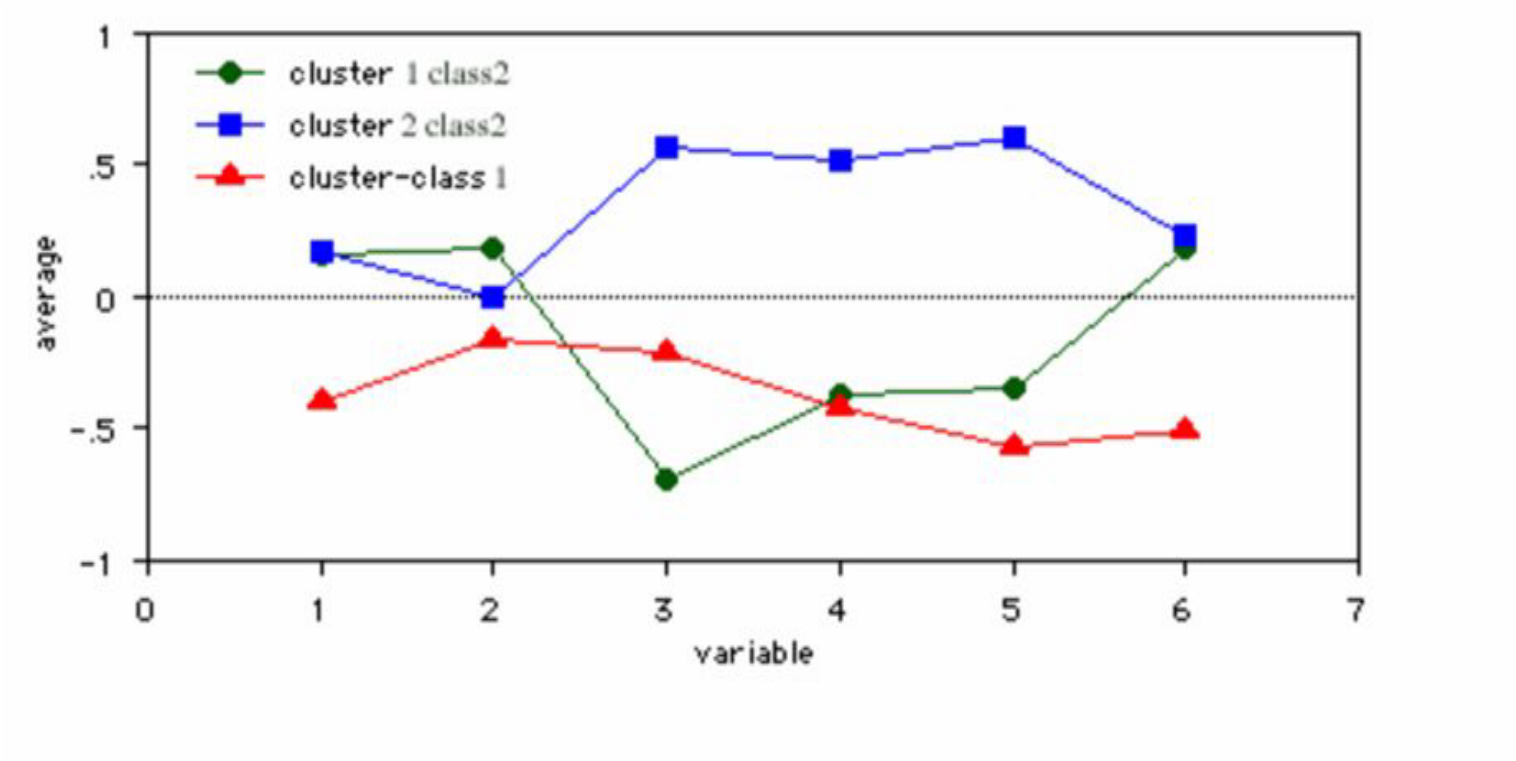
? Alkohol nemá vliv ?

Příklad III: metrické mnohorozměrné škálování – matice těsnosti



Třídu 2 je možné rozdělit na další dvě kategorie

Příklad III: Významnost proměnných na predikci II



Spotřeba alkoholu na den již významný prediktor !

Chybějící hodnoty

- dvě možnosti, jak les provádí náhradu chybějících hodnot

- 1. varianta
  - *Spojitá proměnná* - nahrazení chybějící hodnoty x_n mediánem hodnot *m*-té proměnné v kategorii *j* závisle proměnné
  - *Kategoriální proměnná* - k doplnění je použita hodnota kategorie s nejvyšší frekvencí opět pouze v příslušné kategorii závisle proměnné
  - jednodušší, rychlejší, ale málo přesná

- 2. varianta
  - využití měření těsnosti:
  - *Spojitá proměnná* - chybějící hodnota je nahrazena váženým průměrem pozorování x_k, jejichž hodnoty byly vyplněné → jako váha je použito měření těsnosti $prox(x_i,x_k)$.
  - *Kategoriální proměnná* - chybějící hodnota je nahrazena nejvíce frekventovanou hodnotou, která je opět vážená těsností.

  - Nahrazené hodnoty jsou použity v další iteraci lesa a jsou spočítány nové těsnosti. Tento proces se zastaví, pokud již nedochází k žádnému zlepšení, nebo např. po pěti iteracích (počet iterací je rovněž možné zvolit).

  - Tato varianta je poměrně přesná a vhodná pro datové soubory, které obsahují velké množství chybějících hodnot, nicméně může značně zvýšit výpočetní čas, protože jde o iterativní proces.

Literatura

- Breiman L. (1996) Bagging predictors. Machine Learning 24, pp.123-140.
- Breiman L. (2001) Random forests. Machine Learning 45, pp. 5-32.
- Breiman L. (July 2002), LOOKING INSIDE THE BLACK BOX, Wald II
- Using Random Forest to Learn Imbalanced Data, Chao Chen, Andy Liaw & Leo Breiman, July 2004
- The Elements of. Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. Second Edition. February 2009. T.Hastie, R.Tibshirani, J. Friedman
- Yoav Freund & Robert E. Schapire (1997); A Decision-Theoretic Generalization of On-line Learning and an Application to Boosting, Journal of Computer and System Sciences, 55(1):119-139
- Robert E. Schapire & Yoram Singer (1999); Improved Boosting Algorithms Using Confidence-Rated Predictors, Machine Learning, 37(3):297-336