

# Основы машинного обучения

Лекция 13

Бэггинг и случайные леса

Евгений Соколов

[esokolov@hse.ru](mailto:esokolov@hse.ru)

НИУ ВШЭ, 2022

Неустойчивость деревьев

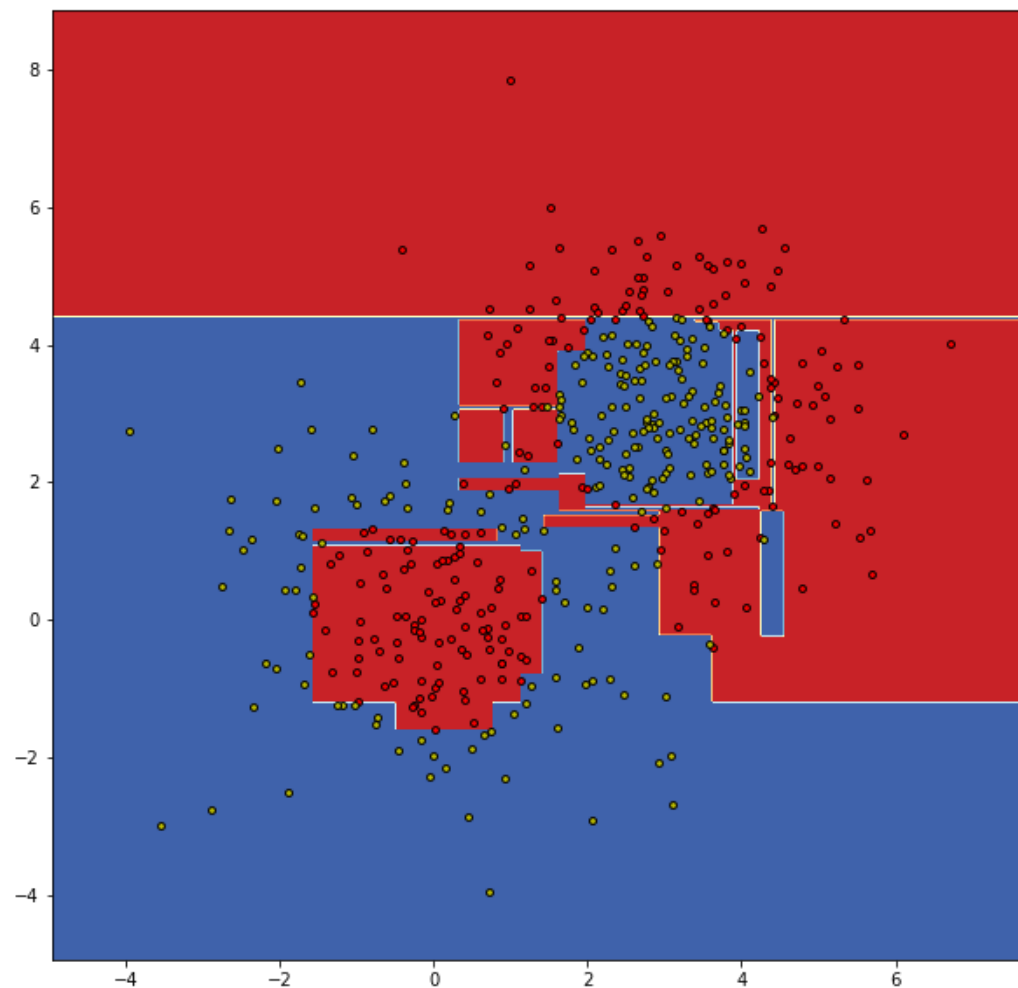
# Устойчивость моделей

- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$  — обучающая выборка
- Обучаем модель  $a(x)$
- Ожидаем, что модель устойчивая
- То есть не сильно меняется при небольших изменениях в  $X$
- $\tilde{X}$  — случайная подвыборка, примерно 90% исходной

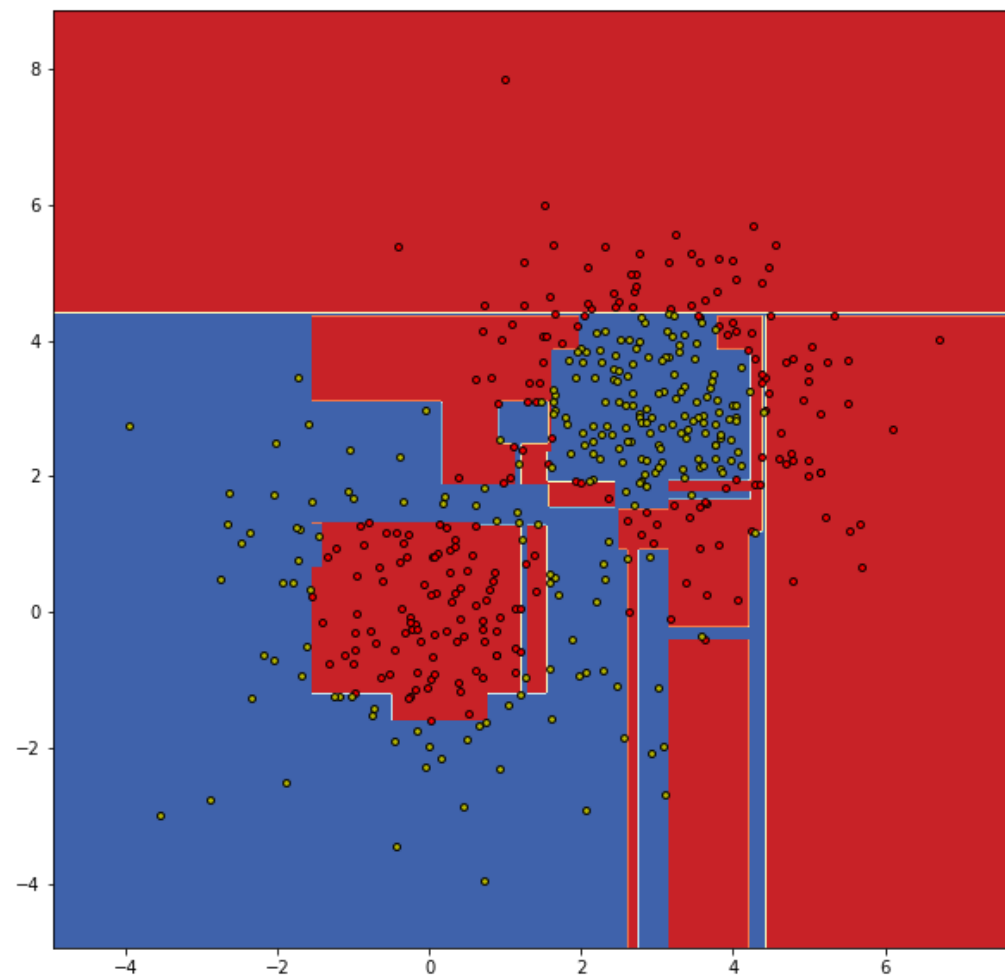
# Устойчивость моделей

- $\tilde{X}$  — случайная подвыборка, примерно 90% исходной
- Что будет происходить с деревьями на разных подвыборках?

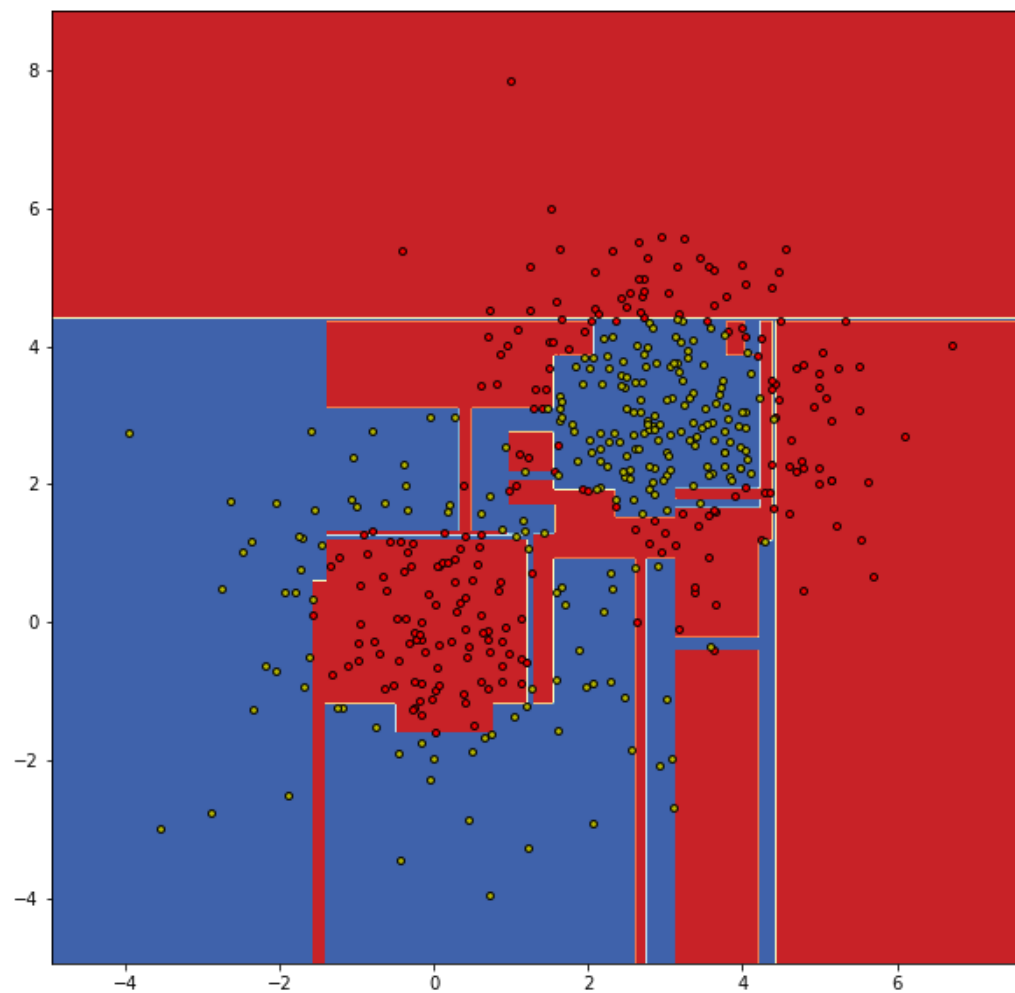
# Обучение на подвыборках



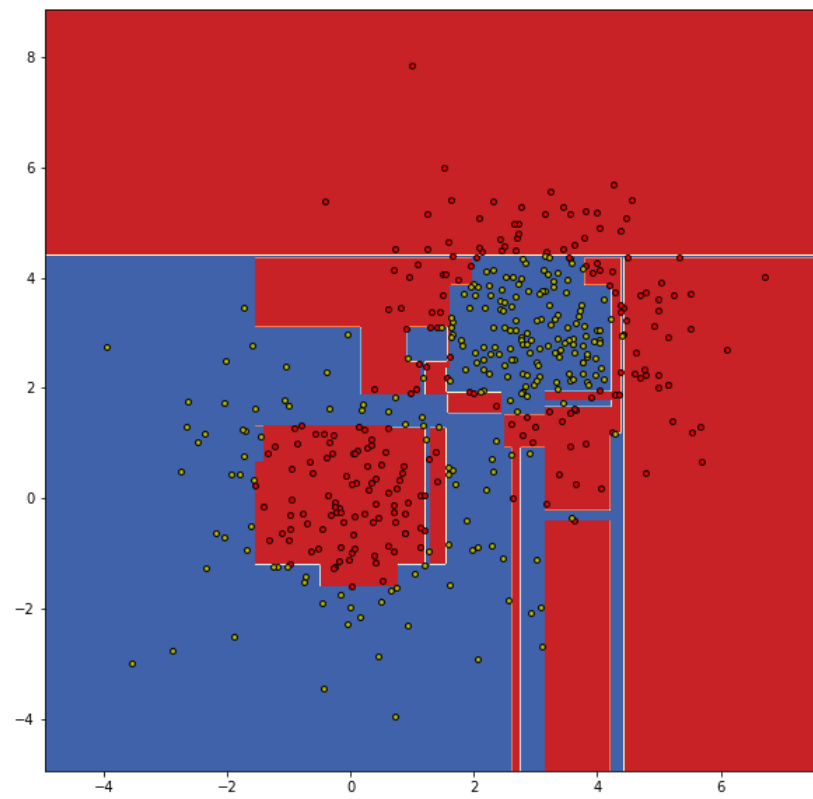
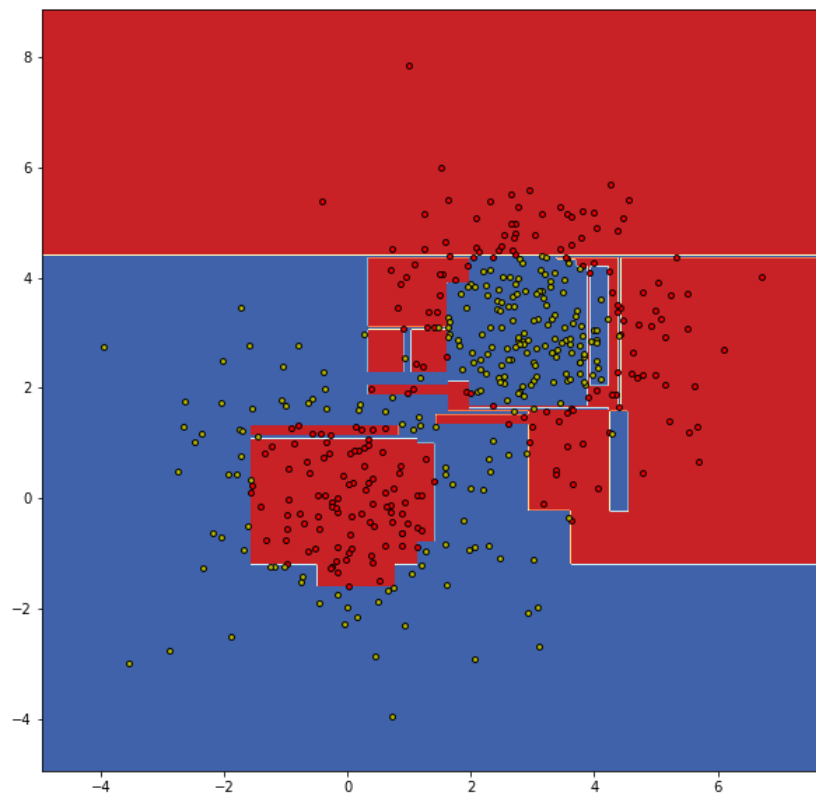
# Обучение на подвыборках



# Обучение на подвыборках



# Обучение на подвыборках



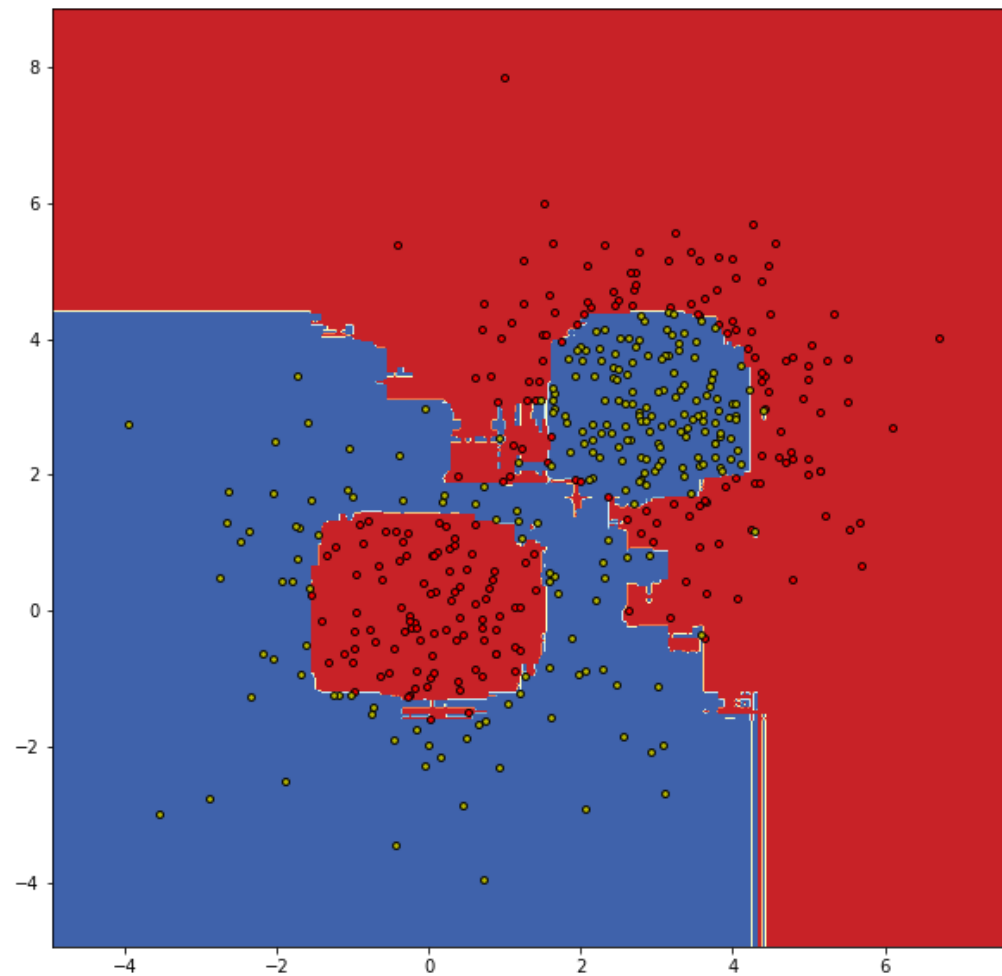


# Композиция моделей

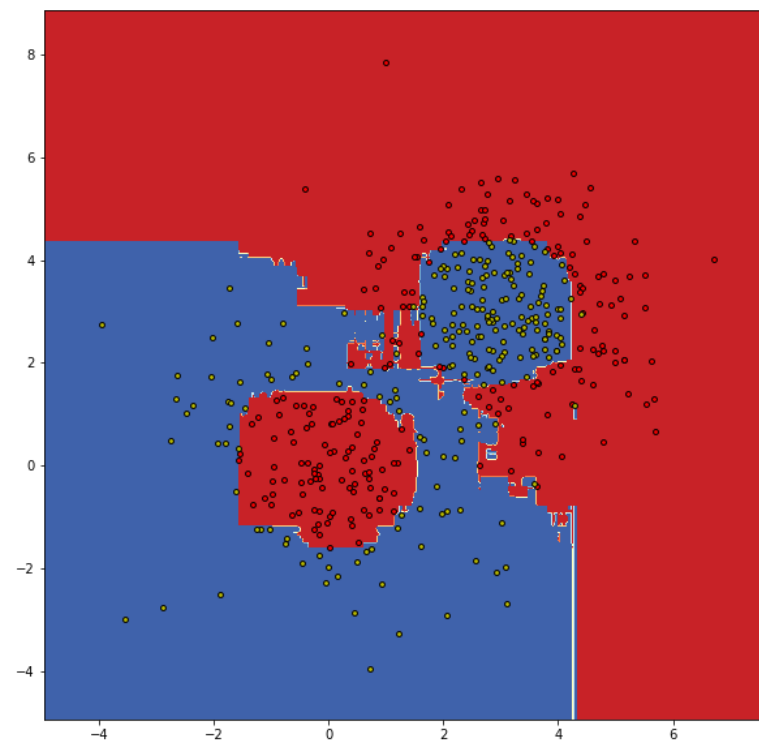
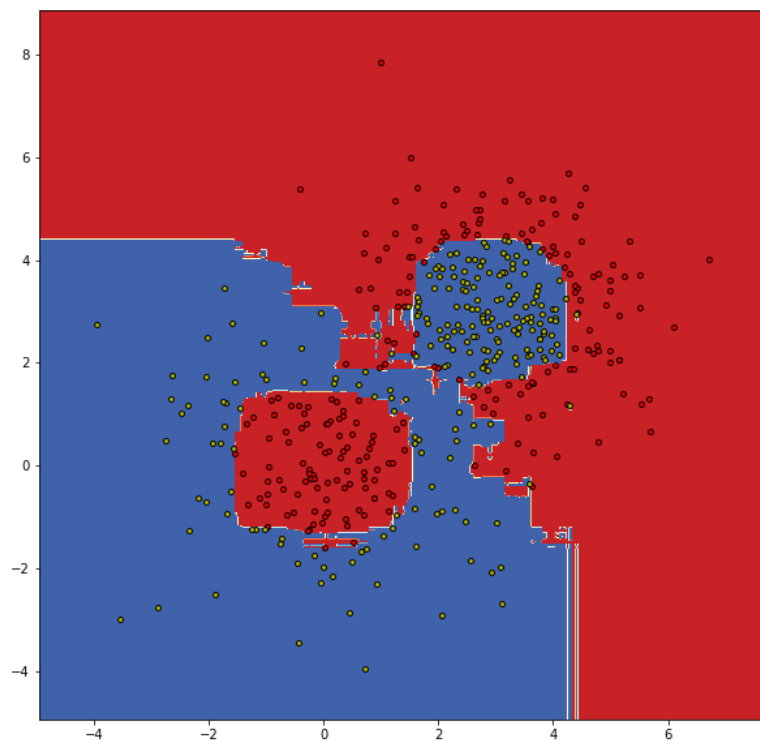
- У нас получилось  $N$  деревьев:  $b_1(x), \dots, b_N(x)$
- Объединим их через голосование большинством (majority vote):

$$a(x) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{n=1}^N [b_n(x) = y]$$

# Композиция моделей



# Композиция моделей



Композиции моделей

# Общий вид: классификация

- $b_1(x), \dots, b_N(x)$  — базовые модели
- Каждая хотя бы немного лучше случайного угадывания
- Композиция: голосование по большинству (majority vote)

$$a_N(x) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{n=1}^N [b_n(x) = y]$$

# Общий вид: регрессия

- $b_1(x), \dots, b_N(x)$  — базовые модели
- Каждая хотя бы немного лучше случайного угадывания
- Композиция: усреднение

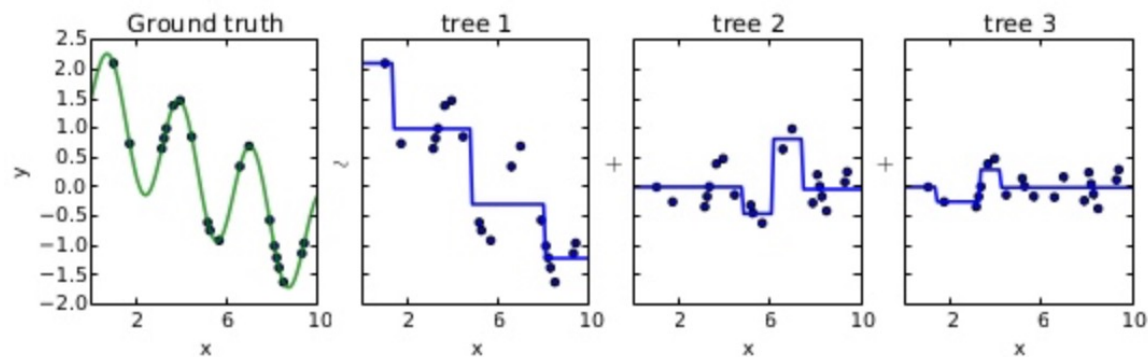
$$a_N(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N b_n(x)$$

# Базовые модели

- $b_1(x), \dots, b_N(x)$  — базовые модели
- Как на одной выборке построить  $N$  различных моделей?
- Вариант 1: обучить их независимо на разных подвыборках
- Вариант 2: обучать последовательно для корректировки ошибок

# Бустинг

- Каждая следующая модель исправляет ошибки предыдущих
- Например, градиентный бустинг





# Бэггинг

- Bagging (bootstrap aggregating)
- Базовые модели обучаются независимо
- Каждый обучается на подмножестве обучающей выборки
- Подмножество выбирается с помощью бутстрапа

# Бутстрап

- Выборка с возвращением
- Берём  $\ell$  элементов из  $X$
- Пример:  $\{x_1, x_2, x_3, x_4\} \rightarrow \{x_1, x_2, x_2, x_4\}$
- В подвыборке будет  $\ell$  объектов, из них около 63.2% уникальных
- Если объект входит в выборку несколько раз, то мы как бы повышаем его вес

# Случайные подпространства

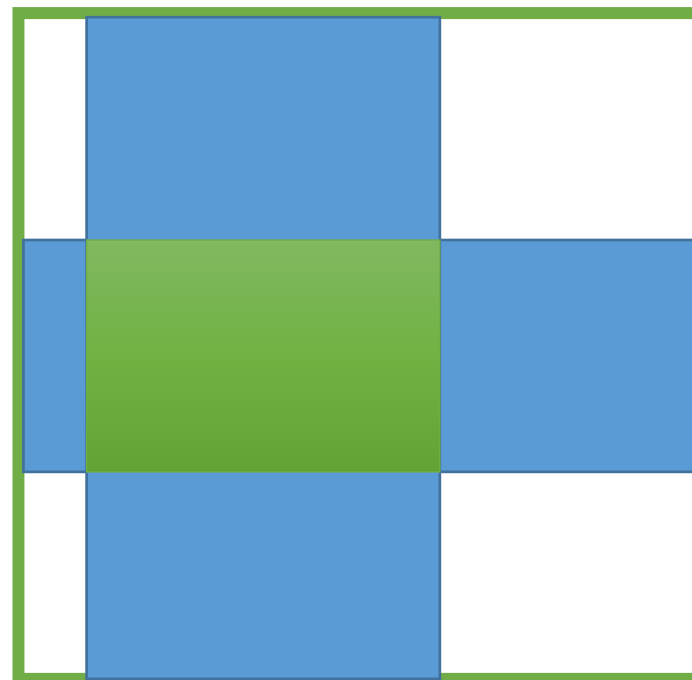
- Выбираем случайное подмножество признаков
- Обучаем модель только на них

# Случайные подпространства

- Выбираем случайное подмножество признаков
- Обучаем модель только на них
- Может быть плохо, если имеются важные признаки, без которых невозможно построить разумную модель

# Виды рандомизации

- Бэггинг: случайная подвыборка
- Случайные подпространства: случайное подмножество признаков



# Резюме

- Будем объединять модели в композиции через усреднение или голосование большинством
- Бэггинг — композиция моделей, обученных независимо на случайных подмножествах объектов
- Можно ещё рандомизировать по признакам
- Как лучше всего?

Смещение и разброс моделей

# Разложение ошибки на смещение и разброс

$$\begin{aligned} L(\mu) = & \underbrace{\mathbb{E}_{x,y} \left[ (y - \mathbb{E}[y | x])^2 \right]}_{\text{шум}} + \\ & + \underbrace{\mathbb{E}_x \left[ (\mathbb{E}_X [\mu(X)] - \mathbb{E}[y | x])^2 \right]}_{\text{смещение}} + \underbrace{\mathbb{E}_x \left[ \mathbb{E}_X \left[ (\mu(X) - \mathbb{E}_X [\mu(X)])^2 \right] \right]}_{\text{разброс}} \end{aligned}$$

- Разберём на уровне идеи



# Разложение ошибки на смещение и разброс

- Ошибка модели складывается из трёх компонент
- Шум (noise) — характеристика сложности и противоречивости данных

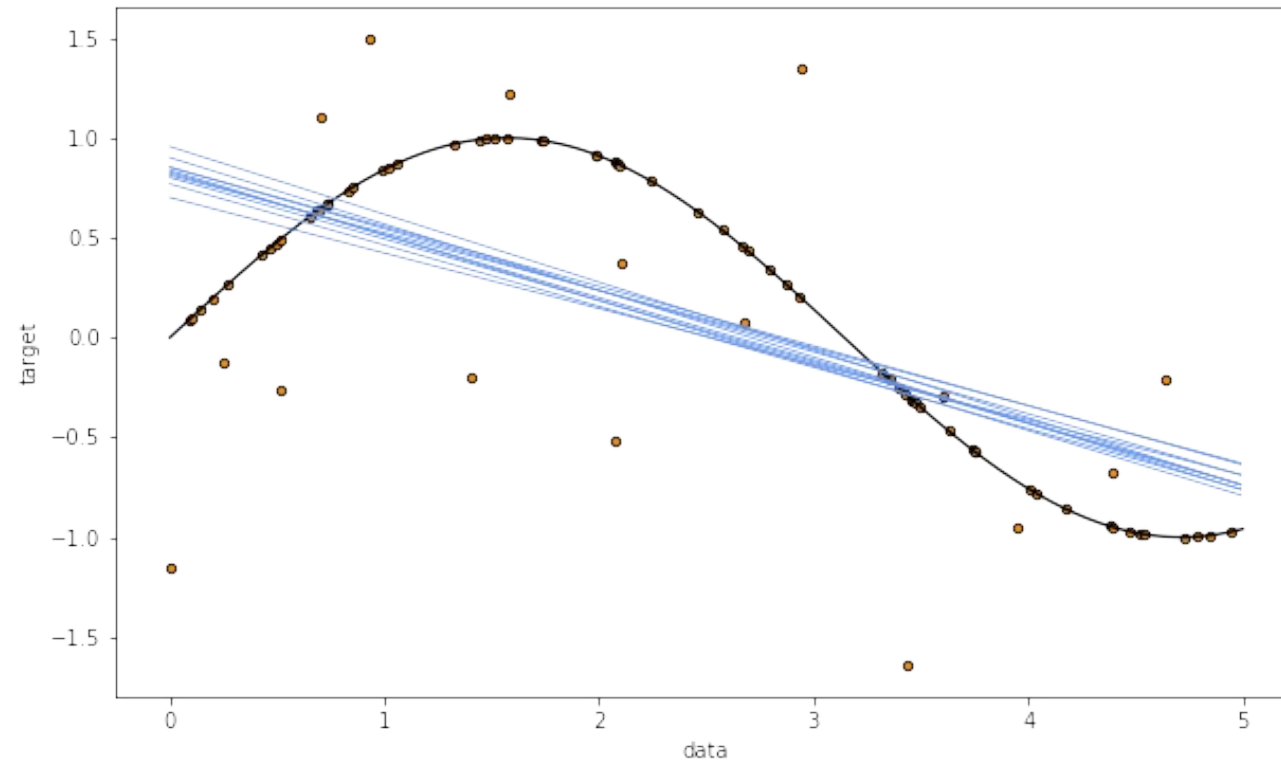
# Разложение ошибки на смещение и разброс

- Ошибка модели складывается из трёх компонент
- Шум (noise) — характеристика сложности и противоречивости данных
- Смещение (bias) — способность модели приблизить лучшую среди всех возможных моделей

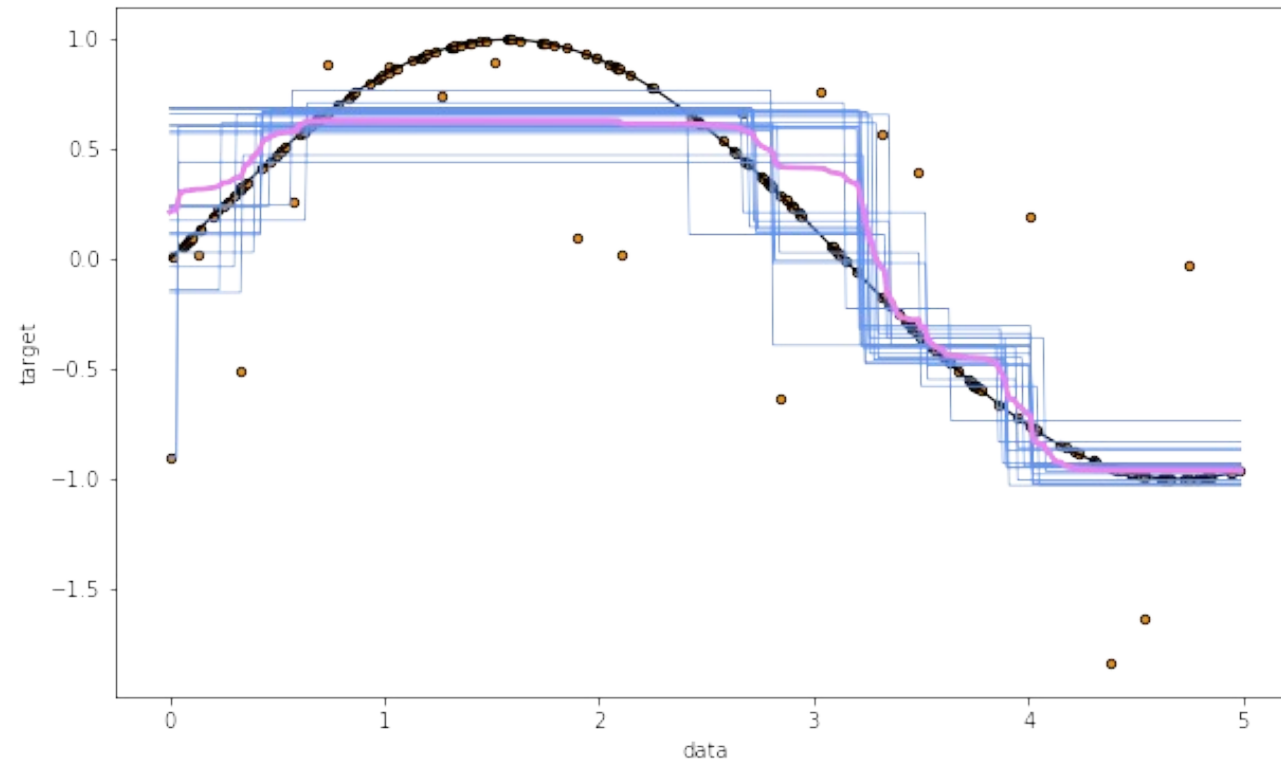
# Разложение ошибки на смещение и разброс

- Ошибка модели складывается из трёх компонент
- Шум (noise) — характеристика сложности и противоречивости данных
- Смещение (bias) — способность модели приблизить лучшую среди всех возможных моделей
- Разброс (variance) — устойчивость модели к изменениям в обучающей выборке

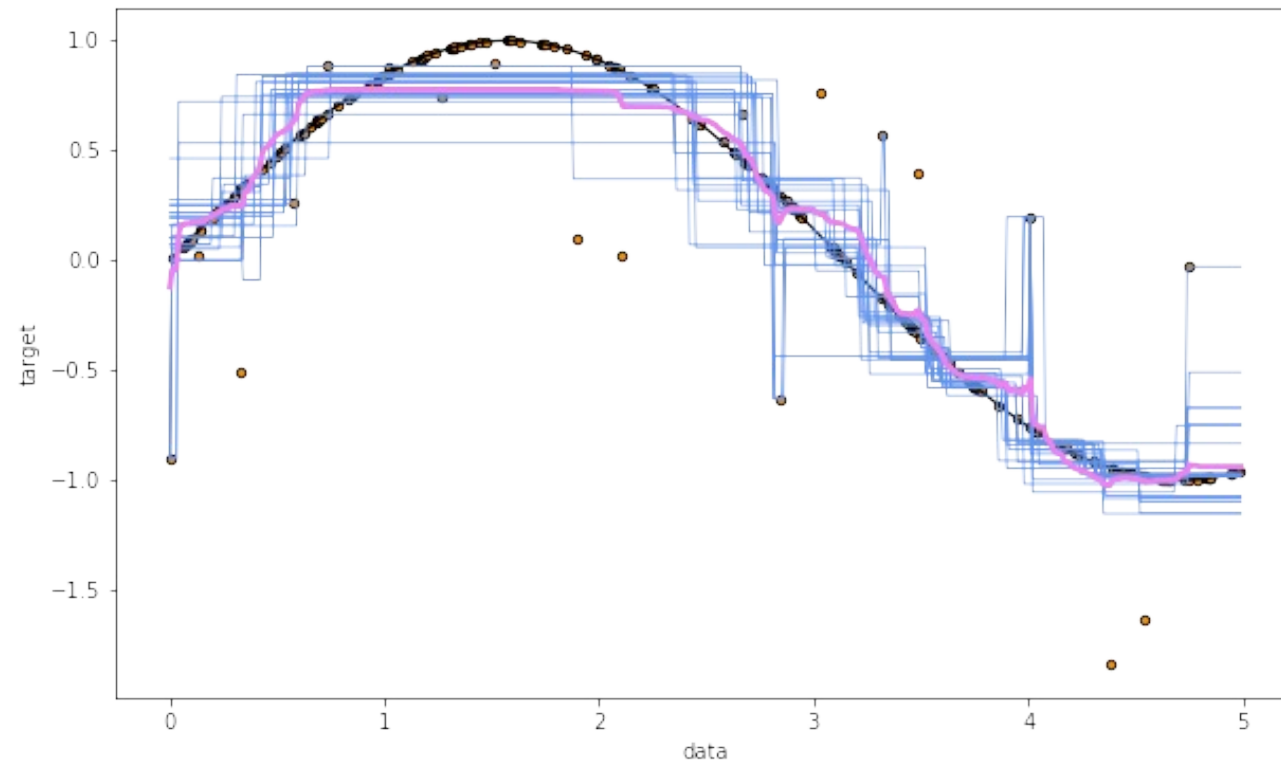
# Смещение и разброс: линейная модель



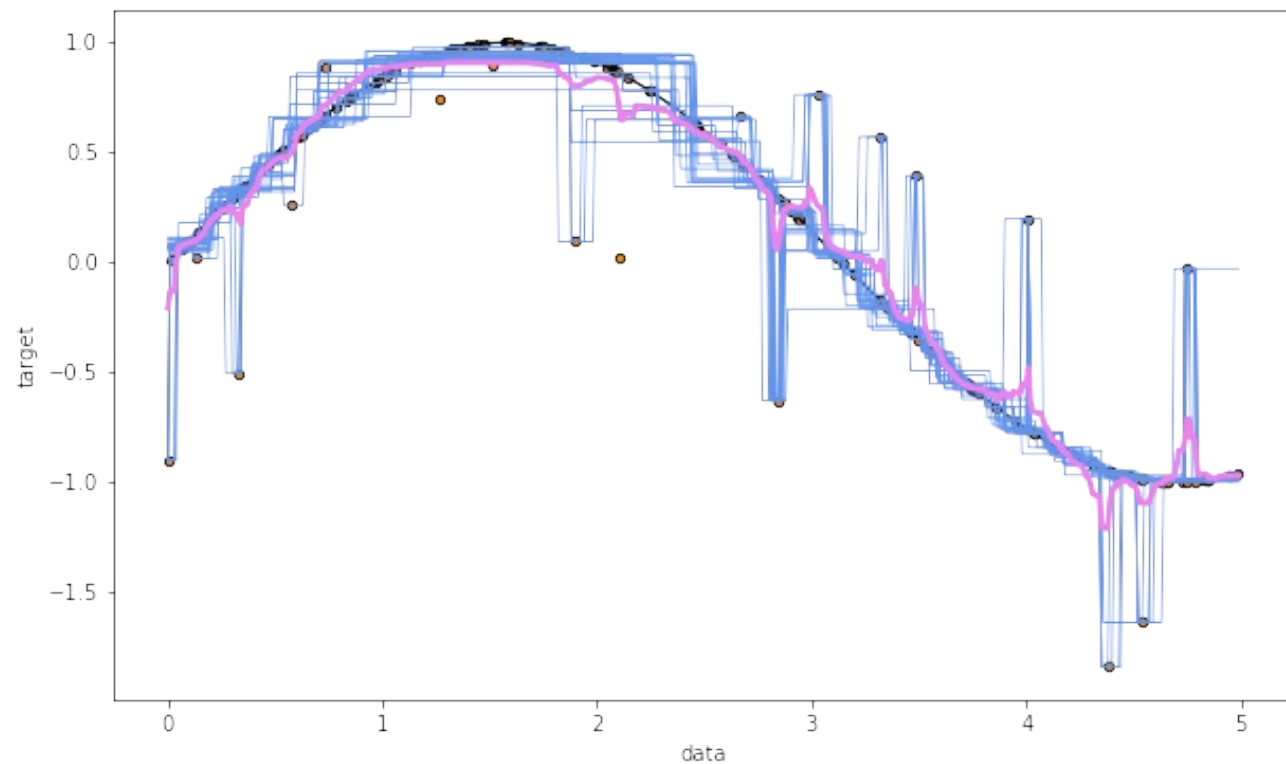
# Смещение и разброс: деревья



# Смещение и разброс: деревья



# Смещение и разброс: деревья



# Бэггинг

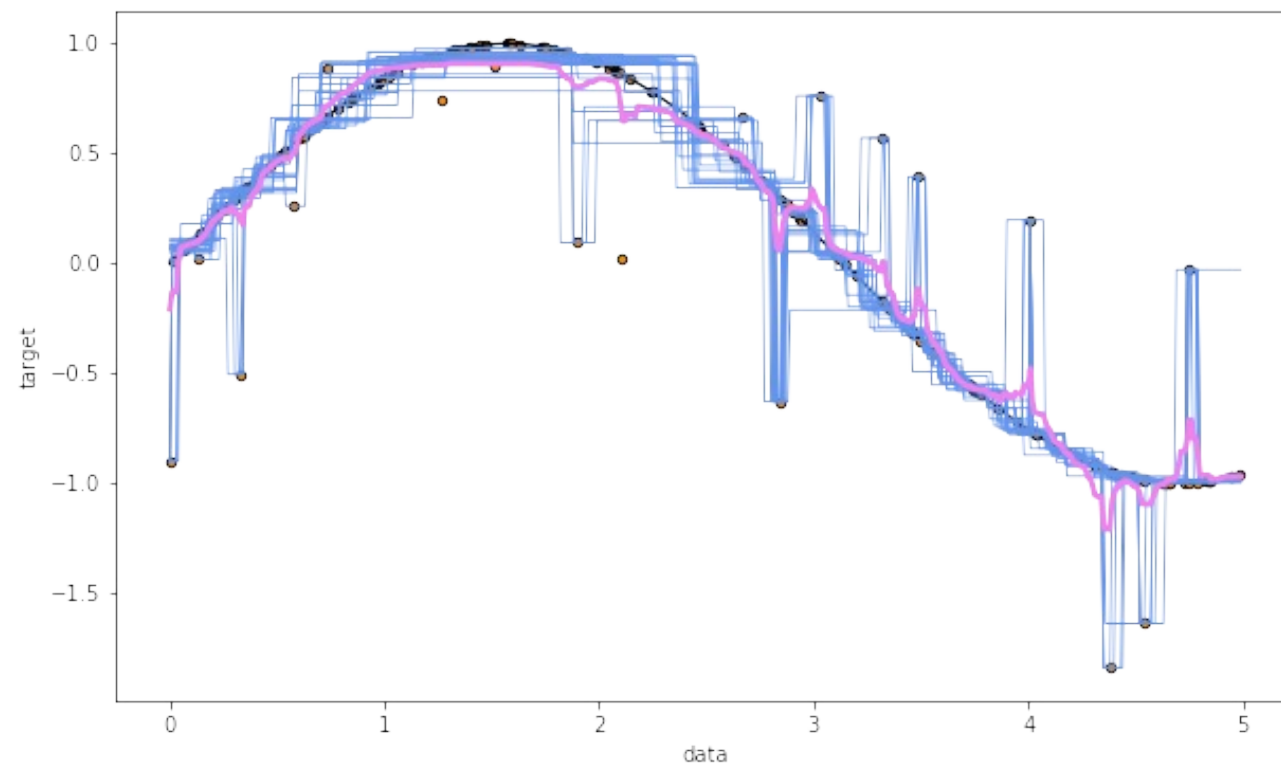
- Смещение  $a_N(x)$  такое же, как у  $b_n(x)$
- Разброс  $a_N(x)$ :

$$\frac{1}{N} (\text{разброс } b_n(x)) + \text{ковариация}(b_n(x), b_m(x))$$

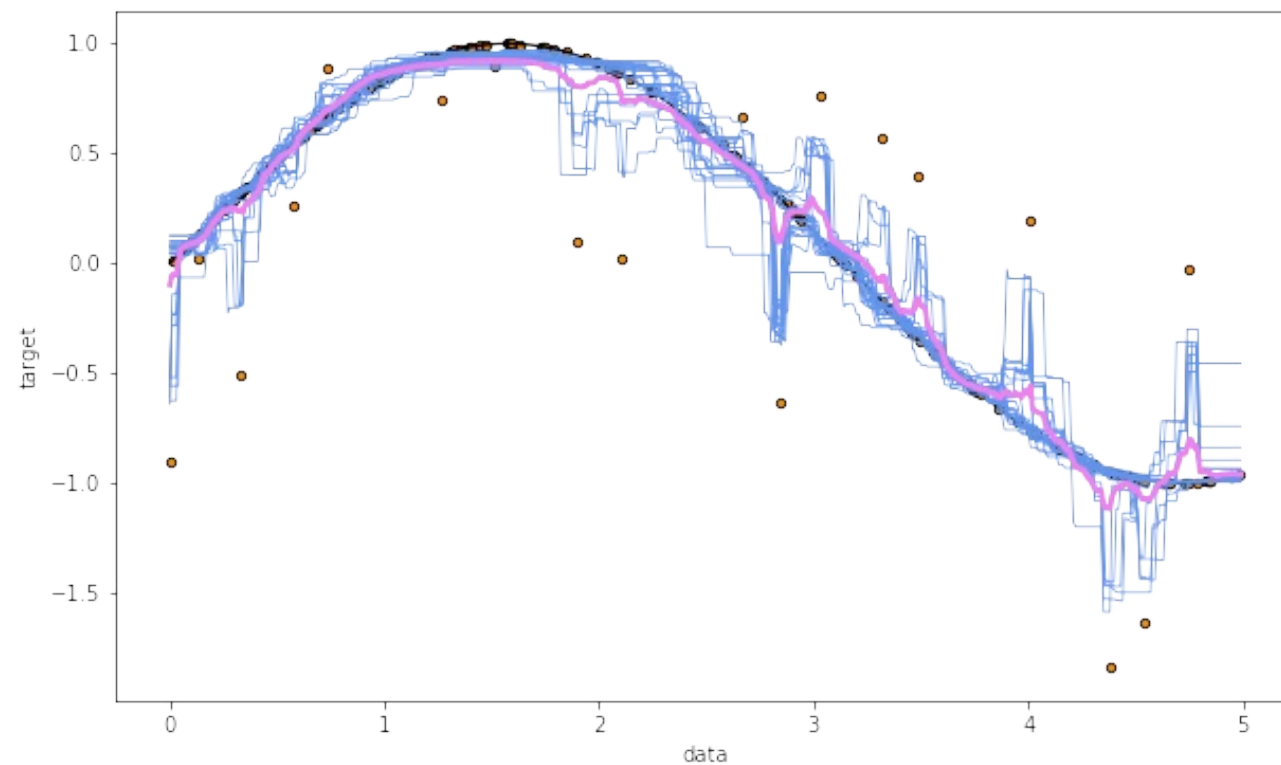
- Если базовые модели независимы, то разброс уменьшается в  $N$  раз!
- Чем более похожи выходы базовых моделей, тем меньше эффект от построения композиции



# Смещение и разброс: деревья



# Смещение и разброс: бэггинг



Случайный лес

# Жадный алгоритм

SplitNode( $m, R_m$ )

1. Если выполнен критерий останова, то выход
2. Ищем лучший предикат:  $j, t = \arg \min_{j, t} Q(R_m, j, t)$
3. Разбиваем с его помощью объекты:  $R_\ell = \{(x, y) \in R_m \mid [x_j < t]\}$ ,  
 $R_r = \{(x, y) \in R_m \mid [x_j \geq t]\}$
4. Повторяем для дочерних вершин: SplitNode( $\ell, R_\ell$ ) и SplitNode( $r, R_r$ )

# Жадный алгоритм

SplitNode( $m, R_m$ )

1. Если выполнен критерий останова, то выход
2. Ищем лучший предикат:  $j, t = \arg \min_{j, t} Q(R_m, j, t)$
3. Разбиваем с его помощью объекты:  $R_\ell = \{(x, y) \in R_m \mid [x_j < t]\}$ ,  
 $R_r = \{(x, y) \in R_m \mid [x_j \geq t]\}$
4. Повторяем для дочерних вершин: SplitNode( $\ell, R_\ell$ ) и SplitNode( $r, R_r$ )

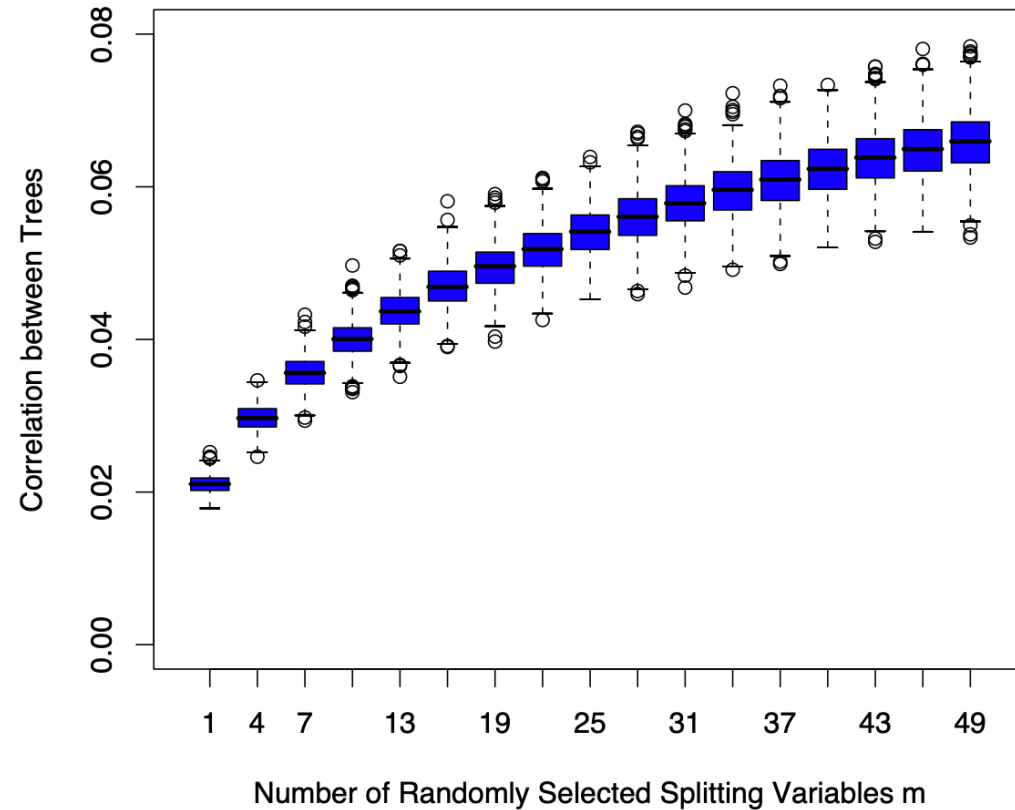
# Выбор предиката

$$j, t = \arg \min_{j, t} Q(R_m, j, t)$$

- Будем искать лучший предикат среди случайного подмножества признаков размера  $q$



# Корреляция между деревьями



Hastie, Tibshirani, Friedman. The Elements of Statistical Learning.

# Корреляция между деревьями

Рекомендации для  $q$ :

- Регрессия:  $q = \frac{d}{3}$
- Классификация:  $q = \sqrt{d}$



# Случайный лес (Random Forest)

Для  $n = 1, \dots, N$ :

1. Сгенерировать выборку  $\tilde{X}$  с помощью бутстрапа
2. Построить решающее дерево  $b_n(x)$  по выборке  $\tilde{X}$
3. Дерево строится, пока в каждом листе не окажется не более  $n_{min}$  объектов
4. Оптимальное разбиение ищется среди  $q$  случайных признаков

# Случайный лес (Random Forest)

Для  $n = 1, \dots, N$ :

1. Сгенерировать выборку  $\tilde{X}$  с помощью бутстрапа
2. Построить решающее дерево  $b_n(x)$  по выборке  $\tilde{X}$
3. Дерево строится, пока в каждом листе не окажется не более  $n_{min}$  объектов
4. Оптимальное разбиение ищется среди  $q$  случайных признаков

Выбираются заново при каждом разбиении!

# Случайный лес (Random Forest)

- Регрессия:

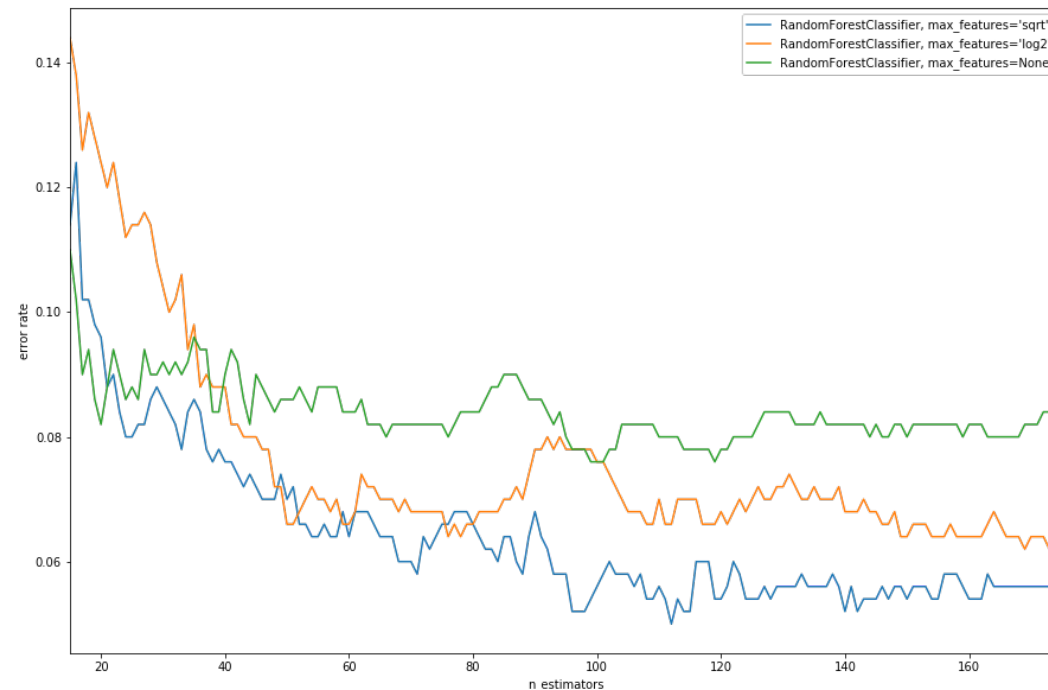
$$a(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N b_n(x)$$

- Классификация:

$$a(x) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{n=1}^N [b_n(x) = y]$$

# Универсальный метод

- Ошибка сначала убывает, а затем выходит на один уровень
- Случайный лес не переобучается при росте  $N$



# Out-of-bag

- Каждое дерево обучается примерно на 63% данных
- Остальные объекты — как бы тестовая выборка для дерева
- $X_n$  — обучающая выборка для  $b_n(x)$
- Можно оценить ошибку на новых данных:

$$Q_{test} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L \left( y_i, \frac{1}{\sum_{n=1}^N [x_i \notin X_n]} \sum_{n=1}^N [x_i \notin X_n] b_n(x_i) \right)$$

# Важность признаков

- Перестановочный метод для проверки важности  $j$ -го признака
- Перемешиваем соответствующий столбец в матрице «объекты-признаки» для тестовой выборки
- Измеряем качество модели
- Чем сильнее оно упало, тем важнее признак

# Резюме

- Случайный лес — метод на основе бэггинга, в котором делается попытка повысить разнообразие деревьев
- Метод практически без гиперпараметров
- Можно оценить обобщающую способность без тестовой выборки