Случайные леса Александр Дьяконов 07 декабря 2020 года

План

Об универсальности метода Случайный лес (RF) Параметры метода Важность признаков ExtraTrees Приложения

Универсальные методы

метод	классификация	регрессия	кластеризация	выбросы
Основанные на близости (~kNN)	+	+	+	+
проблема перебора				
настройки параметров				
– выбора метрики				
SVM	+	+	_	+
– узкая группа задач			Формально	
– нужны однородные признаки в			[Winters-Hilt,	
одной шкале			2007]	
Случайные леса			+/-	
– плохо работает	+	+	можно	+
с линейными			построить	
закономерностями			метрику	
Нейронные сети	+	+	+/ -	+
 нужна большая выборка 				

Нет полностью универсальных методов! Всё идёт от задачи...

Случайные леса

+ наиболее универсальный

(~75% задач машинного обучения)

+ все типы задач

(классификация, регрессия, кластеризация, аномалии)

+ настраивается «сразу под все функционалы»

(или можно преобразовать – не всегда надо)

+ нечувствителен к монотонным преобразованиям признаков

не совсем так! только к линейному масштабированию

+ легко реализуется

Случайный лес (Random Forest)

- специальный метод ансамблирования

= бэггинг + специальное построение деревьев (подмножество признаков при расщеплении)

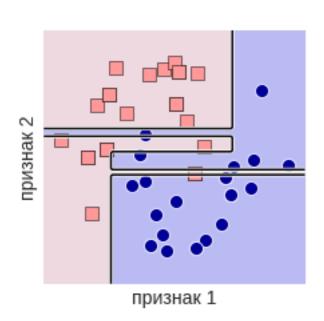
Качество одного дерева очень низкое!

$$\frac{1}{N_{\text{tree}}} \left(\frac{1}{N_{\text{tree}}} + \frac{1}{N_{\text{tree}}} + \dots + \frac{1}{N_{\text{tree}}} \right)$$

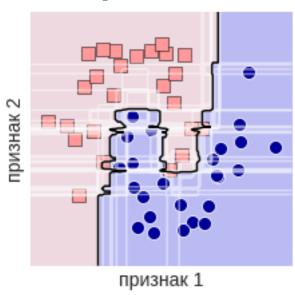


Лео Брейман, 1928 – 2005

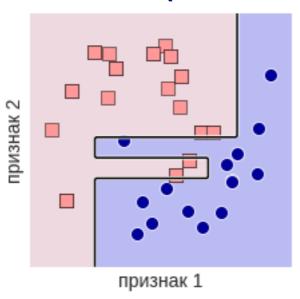
Случайный лес (Random Forest)



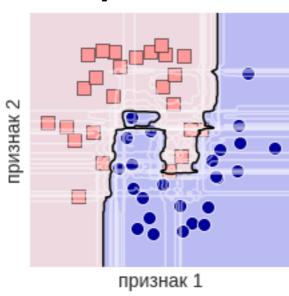
дерево № 1



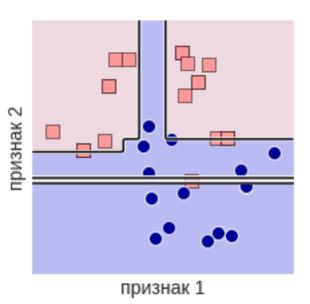
RF, число деревьев=10

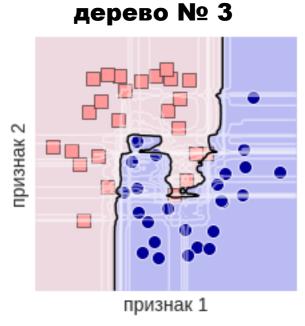


дерево № 2



RF, число деревьев=100





RF, число деревьев=1000

Построение случайного леса

- 1. Выбирается подвыборка samplesize (м.б. с повторением) на ней строится дерево
- 2. Строим дерево
 - 2.1. Для построения каждого расщепления просматриваем mtry / max_features случайных признаков
 - 2.2. Как правило, дерево строится до исчерпания выборки (без прунинга)

Ответ леса:

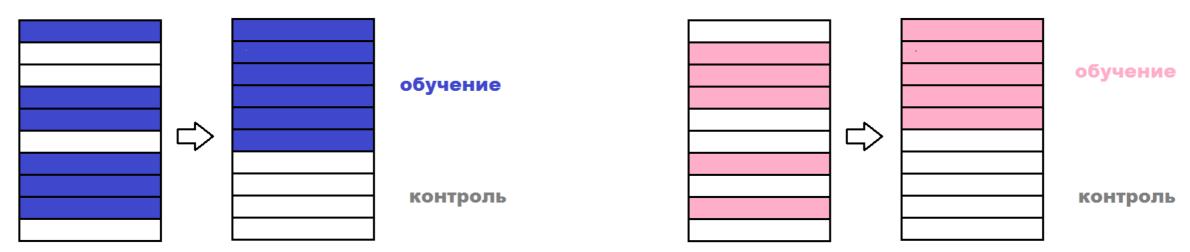
```
по большинству (в задачах классификации), среднее арифметическое (в задачах регрессии)
```

```
Автоматически: рейтинг признаков – importance (model) / .feature_importances_
```

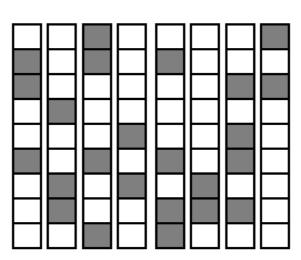
Автоматически: уверенность в ответе – дисперсия ответов деревьев

7 декабря 2020 6 слайд из 70

Бэггинг и ООВ (out of bag)



Выбор объектов для обучения (с помощью бутстрепа), остальные – локальный контроль...



Ответы разных деревьев – можно усреднить и вычислить качество

7 декабря 2020 7 слайд из 70

Вспомним реализацию решающего дерева

sklearn.tree import DecisionTreeClassifier

criterion	критерий расщепления «gini» / «entropy»	
splitter	разбиение «best» / «random»	
max_depth	допустимая глубина	
min_samples_split	минимальная выборка для разбиения	
min_samples_leaf	минимальная мощность листа	
min_weight_fraction_leaf	аналогично с весом	
max_features	число признаков, которые смотрим для нахождения	
	разбиения	
random_state	инициализация генератора случайных чисел	
max_leaf_nodes	допустимое число листьев	
min_impurity_decrease	порог «зашумлённости» для разбиения	
min_impurity_split	t порог «зашумлённости» для останова	
class_weight	веса классов («balanced» или словарь, список словарей)	

Теперь – случайный лес

sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

n_estimators=100	число деревьев	
criterion = 'gini'	критерий расщепления «gini» / «entropy»	
splitter	разбиение «best» / «random»	
max_depth =None	допустимая глубина	
min_samples_split=2	минимальная выборка для разбиения	
min_samples_leaf =1	минимальная мощность листа	
min_weight_fraction_leaf=0.0	аналогично с весом	
max_features='auto'	число признаков, которые смотрим для нахождения	
	разбиения	
max_leaf_nodes=None	допустимое число листьев	
min_impurity_decrease=0.0	порог изменения «зашумлённости» для разбиения	
min_impurity_split=None	порог «зашумлённости» для останова	
class_weight	веса классов («balanced» или словарь, список словарей)	
bootstrap=True	делать ли бутстреп	
oob_score	вычислять ли ООВ-ошибку	
warm_start	использовать ли существующий лес, чтобы его дополнить или	
	учить заново	

n_jobs, random_state, verbose

Особенности

Изменение impurity – порог на

$$\frac{|R|}{m}\left(H(R) - \frac{|R_{\text{left}}|}{|R|}H(R_{\text{left}}) - \frac{|R_{\text{right}}|}{|R|}H(R_{\text{right}})\right)$$

Параметры случайного леса

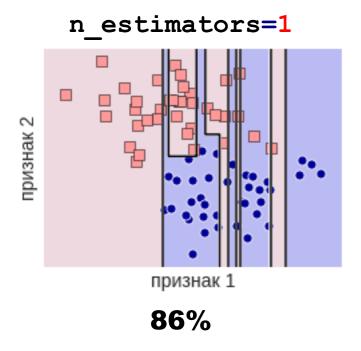
```
class sklearn.ensemble.RandomForestClassifier
              (n estimators=10,
              criterion='gini',
               max depth=None,
            min samples split=2,
             min samples leaf=1,
        min weight fraction leaf=0.0,
            max features='auto',
            max leaf nodes=None,
               bootstrap=True,
              oob score=False,
                  n jobs=1,
             random state=None,
                 verbose=0,
              warm start=False,
             class weight=None)
```

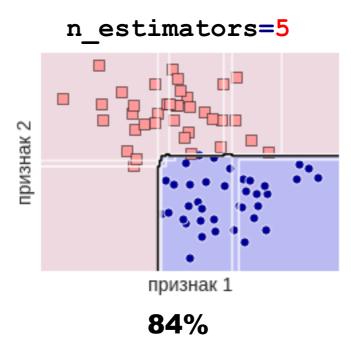
```
{randomForest} randomForest(
        x, y, xtest, ytest,
             ntree=500,
      mtry=if (!is.null(y) &&
           !is.factor(y))
   \max(floor(ncol(x)/3), 1) else
       floor(sqrt(ncol(x))),
           replace=TRUE,
           classwt=NULL,
              cutoff,
              strata,
sampsize = if (replace) nrow(x) else
       ceiling(.632*nrow(x)),
   nodesize = if (!is.null(y) &&
      !is.factor(y)) 5 else 1,
          maxnodes = NULL,
 importance=FALSE, localImp=FALSE,
              nPerm=1,
  proximity, oob.prox=proximity)
```

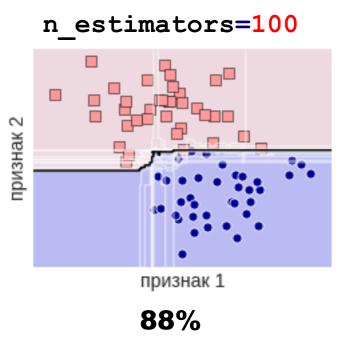
7 декабря 2020 11 слайд из 70

«Случайный лес»

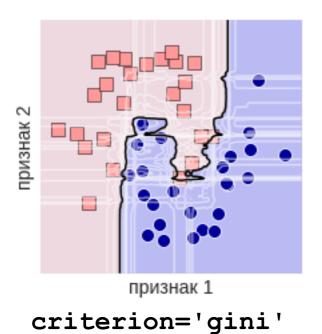
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
rf = RandomForestClassifier(n_estimators=1)
rf.fit(X_train, y_train)

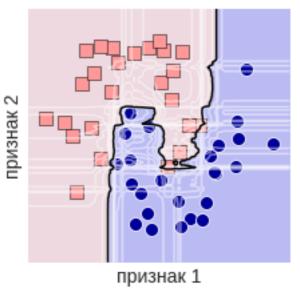






Различные критерии расщепления





criterion='entropy'

в модельных задачах «на глаз» разницы не видно

в авторском коде был реализован Джини...

Hастройка параметров: размер подвыборки sampsize

- 1. Определиться с типом выбора
 - с возвратом / без возврата
 - 2. Настройка по объёму
 - не в первую очередь

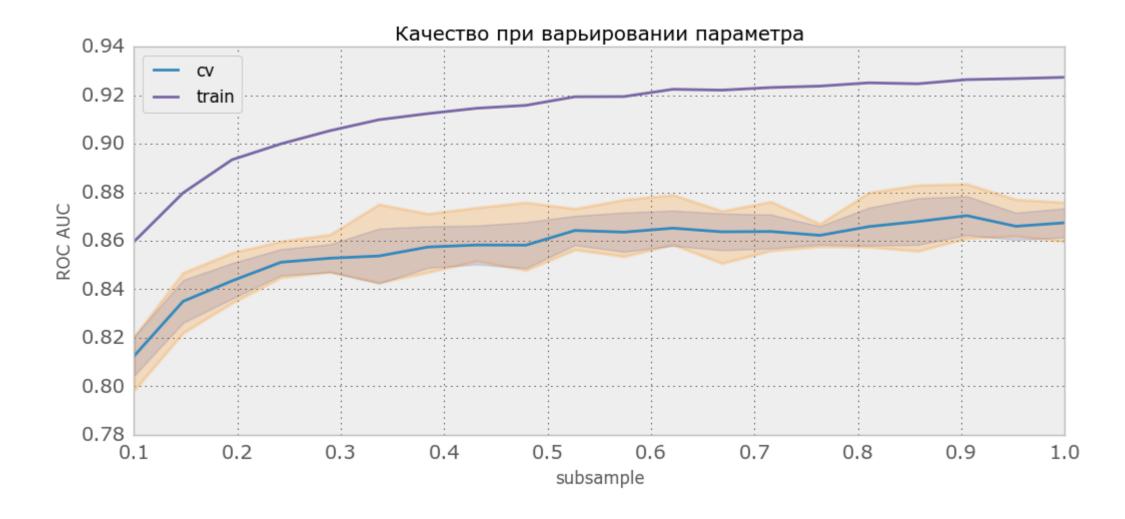
Часто «нужны все объекты»

Чем больше – тем однотипнее деревья

Что из этого следует?

Этого параметра нет в sklearn-реализации

Hастройка параметров: размер подвыборки sampsize (СберБанк)



Всю выборку надо использовать по максимуму!

7 декабря 2020 15 слайд из 70

Hастройка параметров: число признаков mtry / max_features

Самый серьёзный параметр

По умолчанию часто: \sqrt{n} – классификация n/3 – регрессия

Зависимость унимодальная Настраивается в первую очередь

Зависит от числа шумовых признаков Надо перенастраивать при добавлении новых признаков

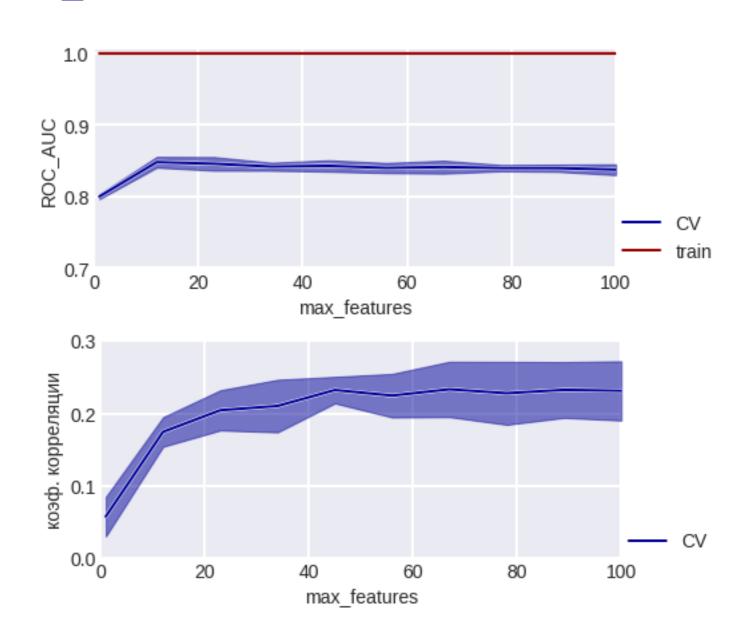
Чем больше – тем однотипнее деревья. Чем больше – тем медленнее настройка!

Kaggle: часто суммируют алгоритмы с разными mtry.

Hастройка mtry / max_features (СберБанк)

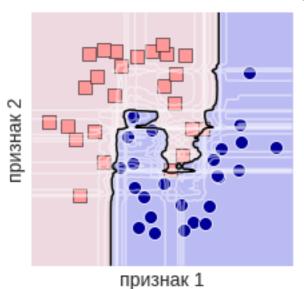
Качество от числа признаков, как правило, унимодально

Коэффициент корреляции между ответами деревьев леса

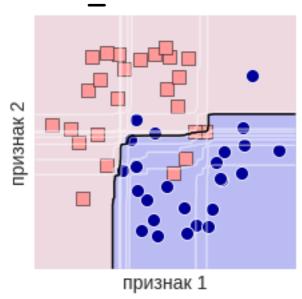


7 декабря 2020 17 слайд из 70

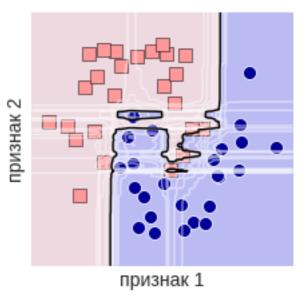
Геометрия mtry / max features что можно сказать?



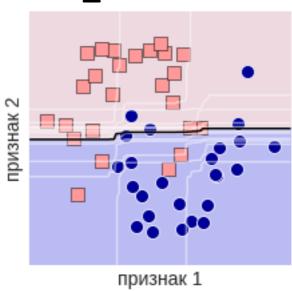
max features=1



max_depth=1, max_features=1



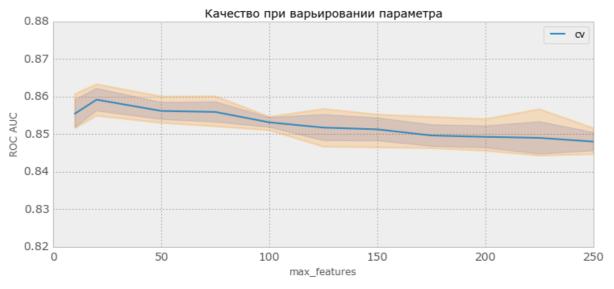
max features=2



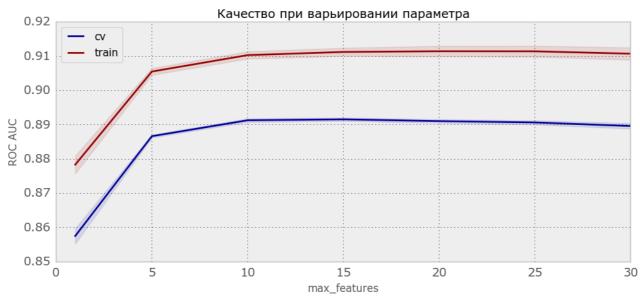
max_depth=1, max_features=2

7 декабря 2020

Hастройка mtry / max_features

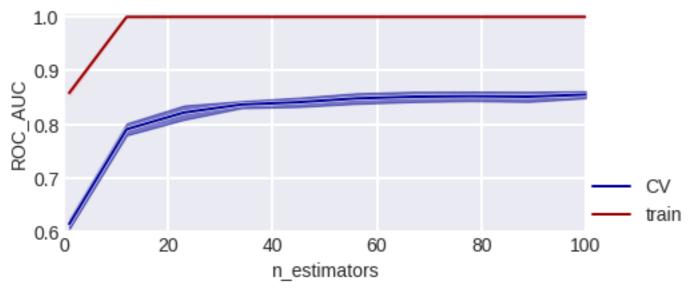


(ed Бозон) в задаче ~ 33 признака

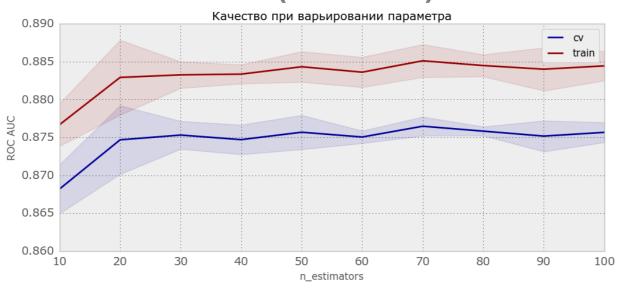


7 декабря 2020 19 слайд из 70

Hастройка параметров ntree / n_estimators (СберБанк) Чем больше деревьев – тем лучше!

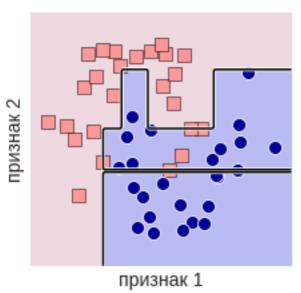


(ed Бозон)

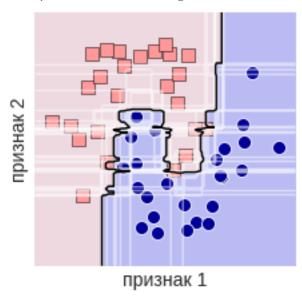


7 декабря 2020 20 слайд из 70

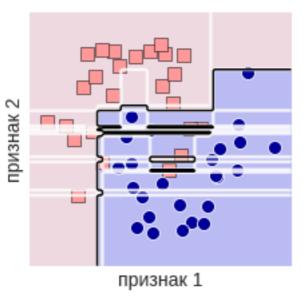
Hастройка параметров ntree / n estimators



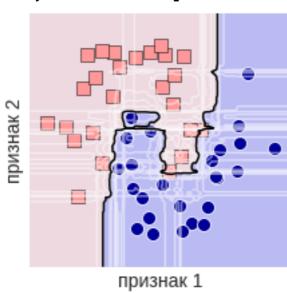
RF, число деревьев=1



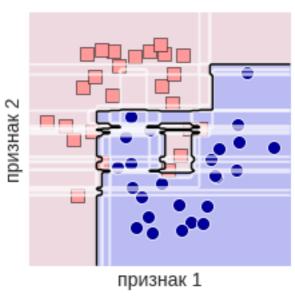
RF, число деревьев=10



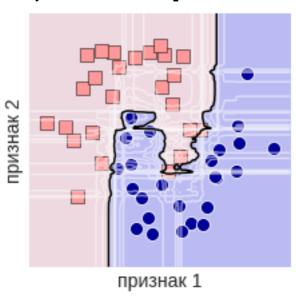
RF, число деревьев=3



RF, число деревьев=100



RF, число деревьев=5



RF, число деревьев=1000

7 декабря 2020

Hастройка параметров ntree / n_estimators (СберБанк)

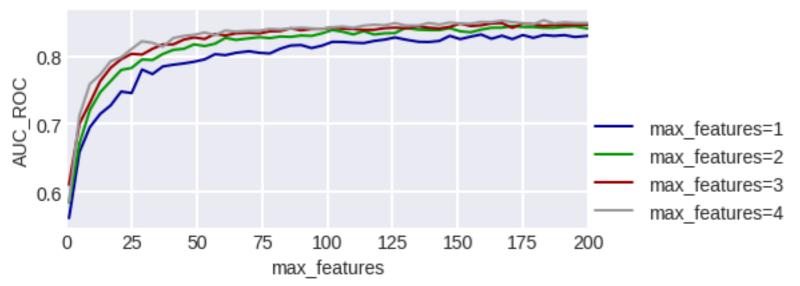
Чем больше – тем лучше!

Проблемы:

- как использовать при настройке параметров очень большое число деревьев
- что делать, если не помещаются в память... (например, в R) можно строить по одному, получать ответ на тесте, не хранить в памяти

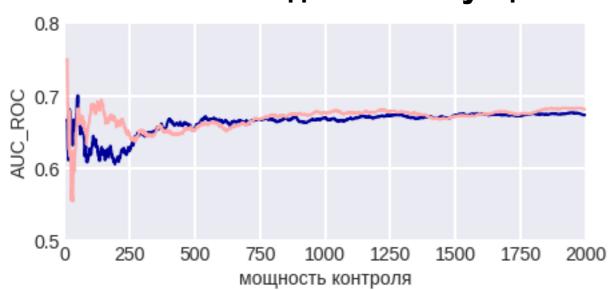
7 декабря 2020 22 слайд из 70

Совет по числу деревьев: область устойчивости функционала

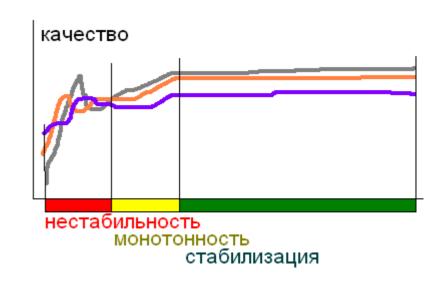


Неверная подпись – n_estimators

Аналогично в подобных ситуациях:



Обычно три зоны...



AUC в зависимости от объёма контрольной выборки

Иногда причины некорректности: алгоритм выдаёт похожие (совпадающие) оценки (AUC вычисляется в среднем/худшем случае)

7 декабря 2020 23 слайд из 70

Настройка параметров: ограничения в листьях

число объектов в листе, число объектов для расщепления, максимальная глубина дерева

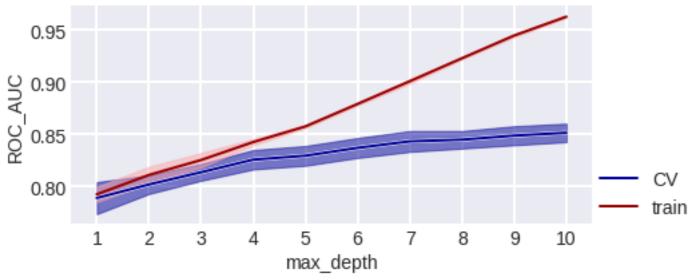
От параметров существенно зависит скорость построения леса

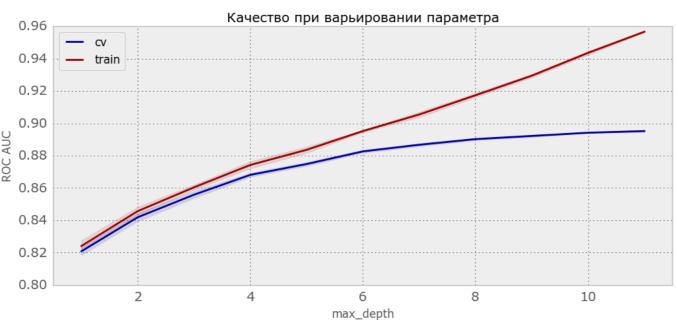
Оптимальные значения, как правило, – несколько объектов в листе.

Настраиваются не в первую очередь

В классическом случайном лесе деревья строятся до исчерпания выборки...

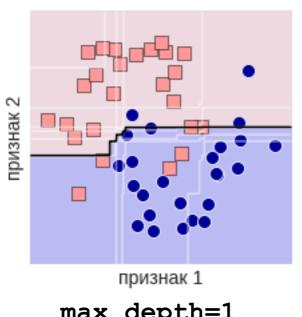
Глубина дерева: max_depth (СберБанк)



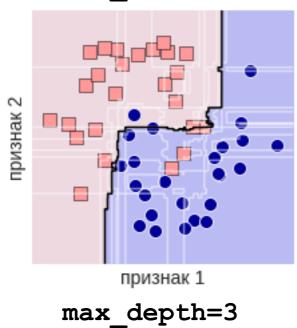


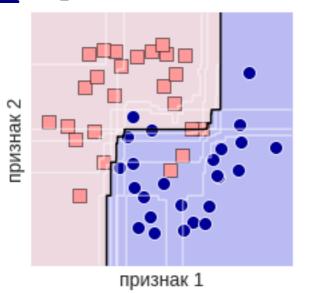
Как правило, чем больше, тем лучше!

Глубина дерева: max depth

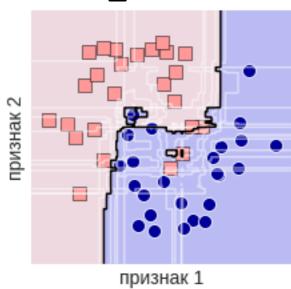








max_depth=2



max_depth=4

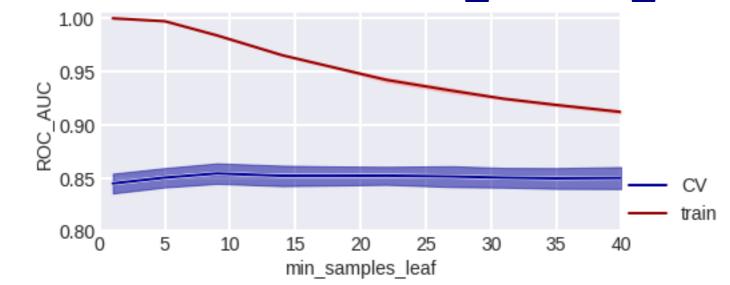
Глубина дерева: max depth

Неглубокие деревья:

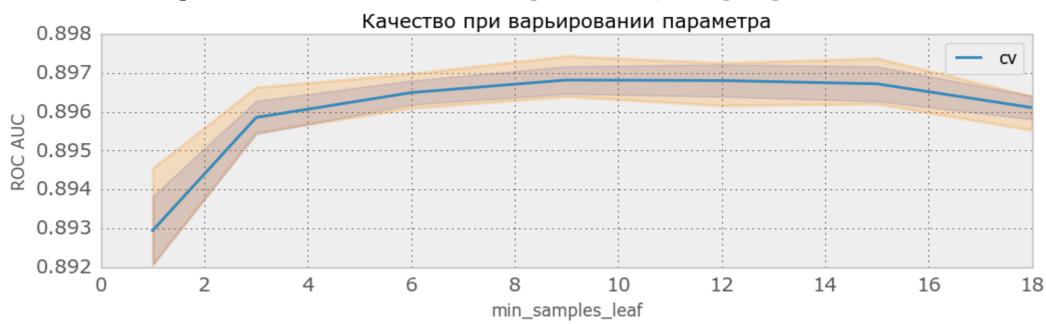
- в задачах с выбросами
- когда много объектов (деревья большие и долго строятся)
- настройка некоторых других (каких?) параметров не имеет смысла

7 декабря 2020 27 слайд из 70

RandomForestClassifier: min_samples_leaf

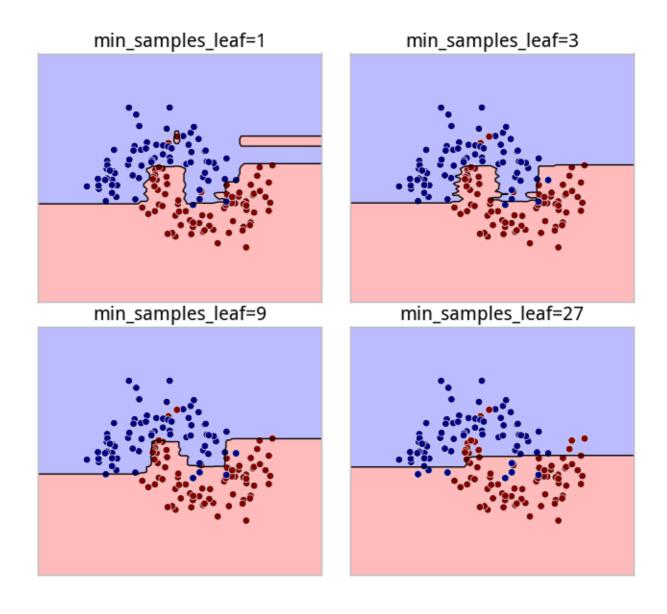


умолчание: 1 - классификация, 5 - регрессия



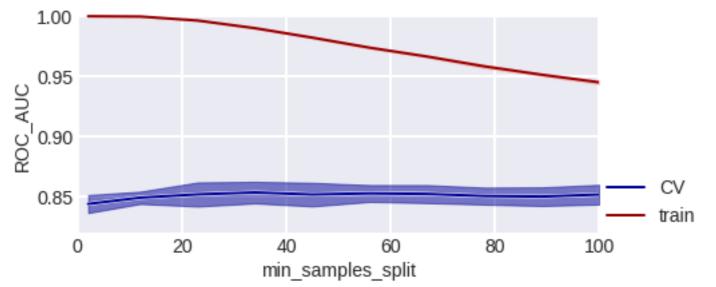
7 декабря 2020 28 слайд из 70

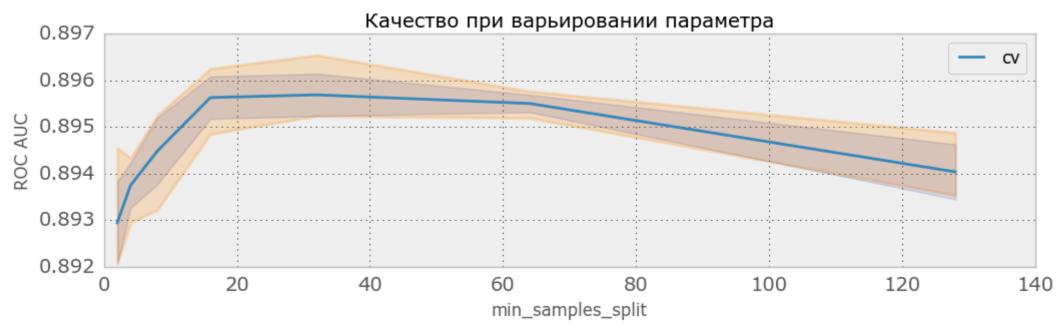
RandomForestClassifier: min samples leaf



7 декабря 2020 29 слайд из 70

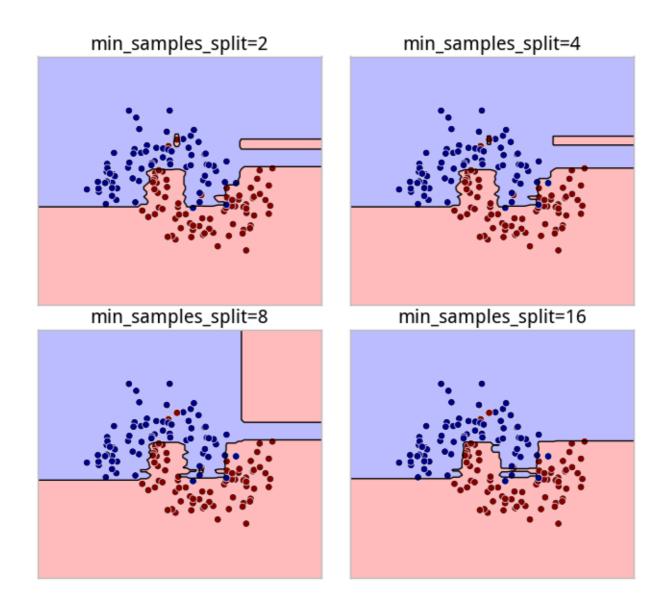
RandomForestClassifier: min_samples_split





7 декабря 2020 ______ 30 слайд из 70

RandomForestClassifier: min_samples_split



7 декабря 2020 31 слайд из 70

Важности признаков в RF

отдельная тема

Проблемы RF

Может долго считаться... Вместо CV – разбиение на обучение и контроль (hold out)

sklearn: не забывать n jobs

Какие тонкости?

ответ ~ ответ на LB не потерять важные части обучения (сохранение пропорции классов, представительности признаков и т.п.) размер контроля = область устойчивости функционала

7 декабря 2020 33 слайд из 70

Proximity

при построении деревьев можно много чего считать...

Чем чаще 2 объекта попадают в один лист, тем они ближе...

Какую метрику можно придумать?

7 декабря 2020 34 слайд из 70

Extreme Random Trees (ExtraTrees)

- нет бутстрепа (используем всю выборку)
- генерируем несколько пар (признак, порог)
- выбираем оптимальную для разбиения пару
- также есть параметр «число признаков для просмотра»

- ET быстрее RF
- ET чуть хуже RF, когда много шумных признаков

7 декабря 2020 35 слайд из 70

Ансамбли на базе RF

Синтетический случайный лес (Synthetic RF) – стекинг лесов с разным nodesize

Algorithm 1 Synthetic Random Forests (SRF)

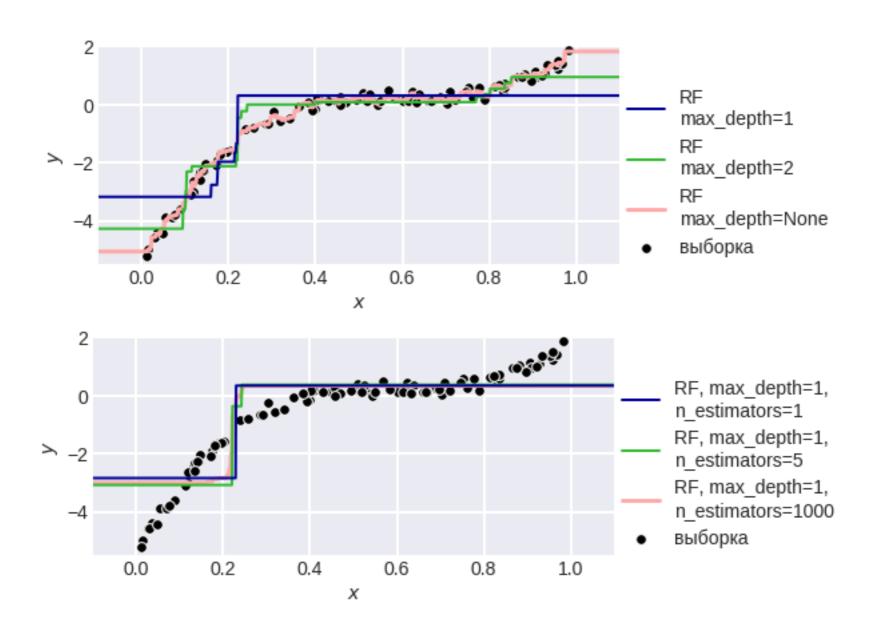
- 1: Choose a set of candidate nodesize values $\mathcal{N} = \{n_1, n_2, \dots, n_D\}$.
- 2: Fit a RF with $nodesize = n_j$ for j = 1, ..., D. Use the same ntree and mtry value for each forest. Denote the resulting forests by RF₁, ..., RF_D.
- 3: Calculate the predicted value for each random forest RF_j , j = 1, ..., D. We call the predicted value the synthetic feature.
- 4: Fit a RF using for features both the newly created synthetic features and the original *p* features (using the same *ntree* and *mtry* value as before). We call this the synthetic RF.

чтобы не переобучаться используется ООВ-прогноз

Ishwaran H, Malley JD. «Synthetic learning machines». BioData Min. 2014;7(1):28 // https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4279689/pdf/13040_2014_Article_28.pdf

7 декабря 2020 36 слайд из 70

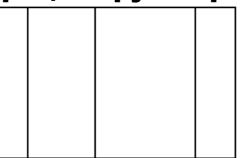
Когда плохи методы, основанные на деревьях...



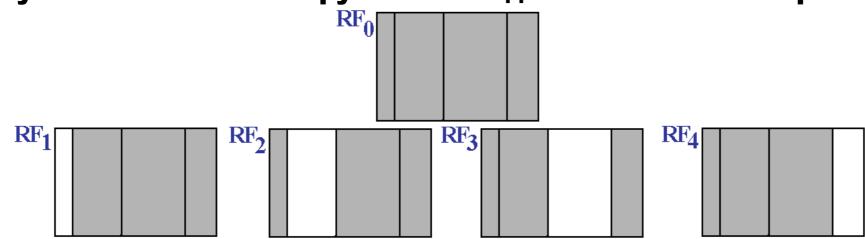
7 декабря 2020 37 слайд из 70

Приложения RF: Biological Response

1. Генерация групп признаков



2. Обучение RF на всех группах и на данных без некоторых групп



3. Комбинация полученных алгоритмов

Одна из технологий решения задач!

Приложения RF: Реальная задача (Photo)

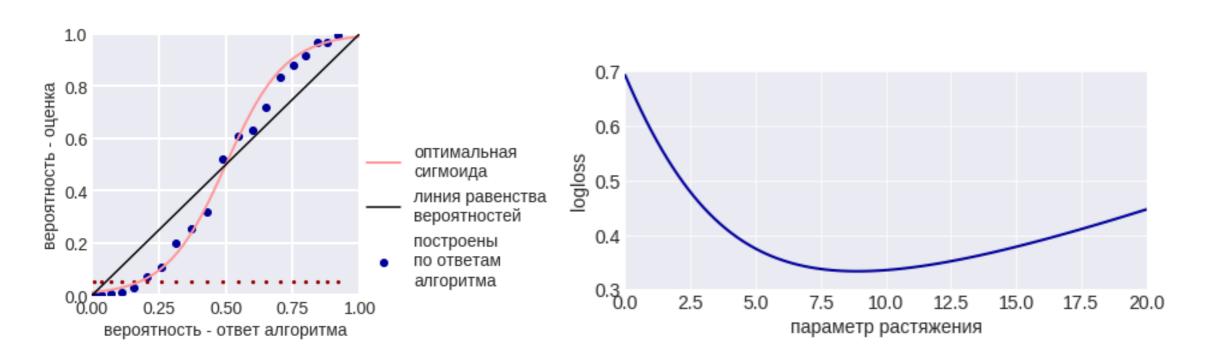
поиск решения в таком виде

$$\sqrt{c_1 \cdot (\text{rf}_1)^2 + \ldots + c_{24} \cdot (\text{rf}_{24})^2 + c_{25} (\text{knn})^2}$$
,

где разные RF настроены на разных признаковых пространствах

Очень хорошо смешивать разнотипные алгоритмы!

Приложения RF: Калибровка RF



7 декабря 2020 40 слайд из 70



Задача Search Results Relevance

row	id	query	product_title	ct_title		relevance
		quoiy	product_title	product_description	relevance	variance
78	230	harleydavidson	Harley-Davidson and Philosophy (Paperback)		4	0.943
120	367	ninja turtle socks	Highpoint Kids' 5PK No Show (Assorted)	He will feel like a superhero in the Teenage Mutant Ninja Turtles 5PK No Show Socks by Highpoint.	4	0.800
607	1955 7	long prom dress	Daniella Collection	This one piece dress has mesh and rhinestone detailing. This dress features long sleeves, a round neckline and a flared hem.	3	0.866
153	472	16 gb memory card	Sandisk 16GB non-HS MSD Flash Drive 3in1 - Black (SDSDQR-016G- T46A)	SanDisk Elevate 16GB non-HS MSD 3in, microSD memory card with USB adapter and SD adapter. Includes RescuePro recovery software. Memory Storage Capacity: 16GB Wired Connectivity: Micro SD Slot Features: Plug and Play Includes: MicroSD Adapter, Adapter, USB Adapter Battery no battery used	4	0.000

Похожа на классическую задачу поиска

7 декабря 2020 41 слайд из 70

Задача Search Results Relevance

Completed • \$20,000 • 1,326 teams



Search Results Relevance

Mon 11 May 2015 - Mon 6 Jul 2015 (2 months ago)

#	Team Name ‡ model uploaded * in the money	Score 2	Entries	Last Submission UTC (Best - Last Submission)
1	Chenglong Chen ‡ *	0.72189	160	Mon, 06 Jul 2015 09:53:22
2	Mikhail & Stanislav & Dmitry 🖺 ‡ *	0.71871	83	Mon, 06 Jul 2015 22:55:46 (-1.2h)
3	Quartet # ‡ *	0.71861	279	Mon, 06 Jul 2015 17:24:26 (-3.3d)
4	Shize & Shail & Phil 🎩	0.71802	252	Mon, 06 Jul 2015 23:44:14
5	I love Phở Bồ	0.71700	48	Mon, 06 Jul 2015 08:48:29 (-10.5h)
6	Gzs_iceberg	0.71681	122	Mon, 06 Jul 2015 14:27:09 (-9.9d)
7	YDM ₫	0.71374	283	Mon, 06 Jul 2015 16:31:54 (-1.7h)
8	A & A & G 🚣	0.71297	229	Mon, 06 Jul 2015 19:13:28 (-25.6h)
9	ë 1k	0.71265	96	Sun, 05 Jul 2015 21:50:24 (-5.9d)
10	Alexander D'yakonov (PZAD, Russia)	0.71262	93	Mon, 06 Jul 2015 19:40:28 (-33d)
11	SearchSearch	0.71022	58	Mon, 06 Jul 2015 01:06:18 (-3.9h)
12	woshialex	0.70889	52	Thu, 02 Jul 2015 00:21:23 (-10.1h)
13	Alexander Ryzhkov (PZAD, Russia)	0.70777	64	Mon, 06 Jul 2015 22:57:31

7 декабря 2020 42 слайд из 70

Задача

Дан запрос: «16 gb memory card»

Ему соответствует выдача,

элемент выдачи – (название товара, описание)

Sandisk 16GB non-HS MSD Flash Drive 3in1 - Black (SDSDQR-016G-T46A)

SanDisk Elevate 16GB non-HS MSD 3in, microSD memory card with USB adapter and SD adapter. Includes RescuePro recovery software.

Memory Storage Capacity: 16GB

Wired Connectivity: Micro SD Slot

Features: Plug and Play

Includes: MicroSD Adapter, Adapter, USB Adapter

Battery no battery used

Паре (запрос, выдача) соответствует релевантность – 1, 2, 3 или 4.

Дана ещё дисперсия релевантностей (т.к. несколько ассесоров оценивало выдачу), но не была использована

Запомним:

релевантность в обучении – медиана релевантностей, которые проставили ассесоры

7 декабря 2020 43 слайд из 70

Задача

Почему не классическая задача поиска?

обучение	тест				
запрос 1	выдача 1	запрос 1	выдача 4		
запрос 1	выдача 2	запрос 1	выдача 5		
запрос 1	выдача 3	запрос 2	выдача 4		
запрос 2	выдача 1	запрос 2	выдача 5		
запрос 2	выдача 2	запрос 2	выдача 6		
запрос 2	выдача 3				

Запросы в тесте такие же как и в обучении!

Как это использовать?

Задача



Хорошая выдача (для определённого запроса) должна быть похожа на хорошие выдачи (этого запроса)!

7 декабря 2020 45 слайд из 70

Функционал качества: Quadratic Weighted Kappa

показывает согласованность порядков, когда ответы "мера релевантности"

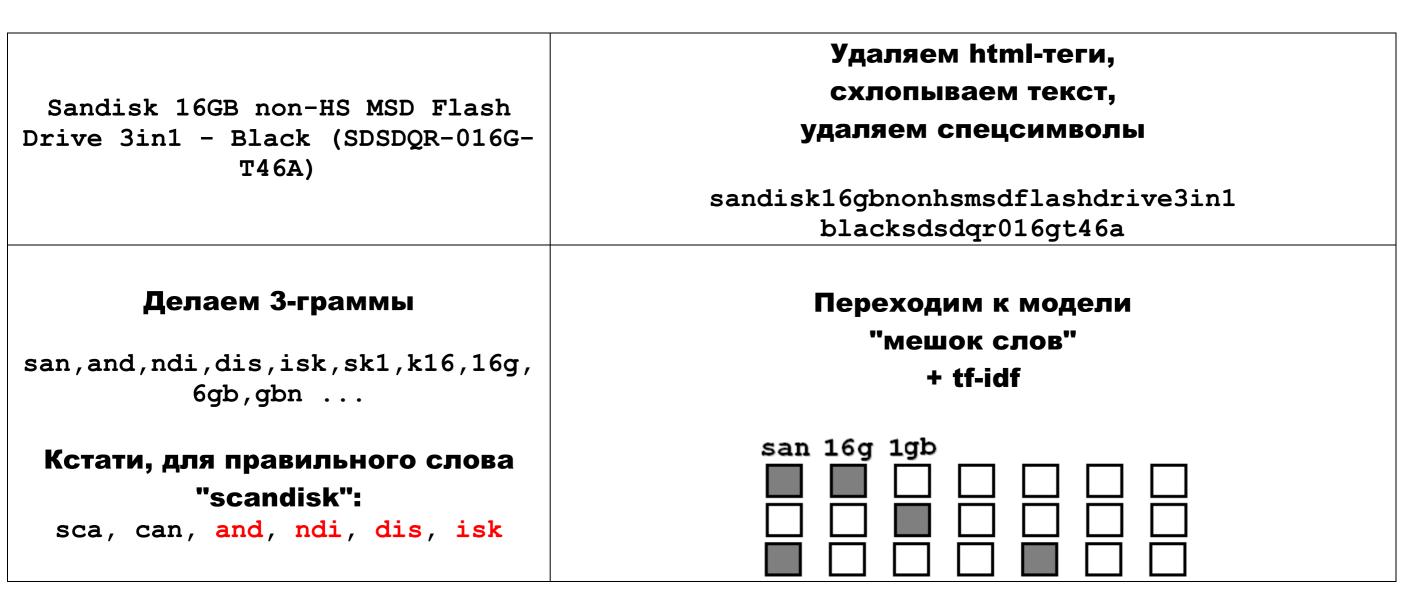
											правильный ответ наш ответ	0.666667
a	=	1	1	1	2	2	3	3	3	#	наш ответ	1
a	=	3	3	3	2	2	1	1	1	#	наш ответ	-1

будет потом

Метод решения

- 1. Предобработка данных
- 2. Генерация признаков
- 3. Выбор модели / настройка
 - 4. Ансамбли
- 5. Деформация ответов / решающее правило

Построение очень простой модели!



3-граммы могут победить опечатки.

7 декабря 2020 48 слайд из 70

Другие подходы (2е место)

hardisk hard drive
extenal external
soda stream sodastream
fragance fragrance
16 gb 16gb
32 gb 32gb
500 gb 500gb
2 tb 2tb
shoppe shop
refrigirator refrigerator
assassinss assassins
harleydavidson harley davidson
harley-davidson harley davidson

На практике так тоже делают – много ручной разметки.

Здесь для простоты модели не стали

Заметим, что модель становится переобученной. Для новых запросов такого ручного устранения неоднозначностей нет!

7 декабря 2020 49 слайд из 70

Другие подходы (1е место)

Здесь создан словарь синонимов

child, kid kid
bicycle, bike bike
refrigerator, fridge, freezer fridge
fragrance, perfume, cologne, eau de toilette perfume

Все делали стемминг (мы нет)

Признаки

Насколько похожи тексты?

Точнее: множества

```
san,and,ndi,dis,isk,sk1,k16,16g, 6gb,gbn ...
sca, can, and, ndi, dis, isk
```

соѕ-мера, мощность пересечения (нормированная)

Признаки

соѕ(описание, запрос)

cos(описание, запрос) нормируем на max(описание, запрос) по всем описаниям этого запроса

mean(cos(описание, описание всех товаров этого запроса в обучении: оценка = 4))

оценка товара: на нём max cos(описание, его описание)

описание =

- само описание
 - заголовок
- заголовок + описание

Признаки

- это взаимодействия блоков данных!



7 декабря 2020 53 слайд из 70

Выбор модели

Изначально проблема как настраиваться:

- 1. Задача классификации с классами [1, 2, 3, 4]
 - 2. Задача регрессии с метками [1, 2, 3, 4]
 - 3. Задача регрессии с метками [1, 4, 9, 16]
- 4. Задачи классификации/регрессии с метками

[0, 1, 1, 1]

[0, 0, 1, 1]

[0, 0, 0, 1]

Выбор модели

Изначально проблема как настраиваться:

1. Задача классификации с классами [1, 2, 3, 4]

плохо – нет учёта порядка

2. Задача регрессии с метками [1, 2, 3, 4]

хорошо

3. Задача регрессии с метками [1, 4, 9, 16]

нужны эксперименты

4. Задачи классификации/регрессии с метками

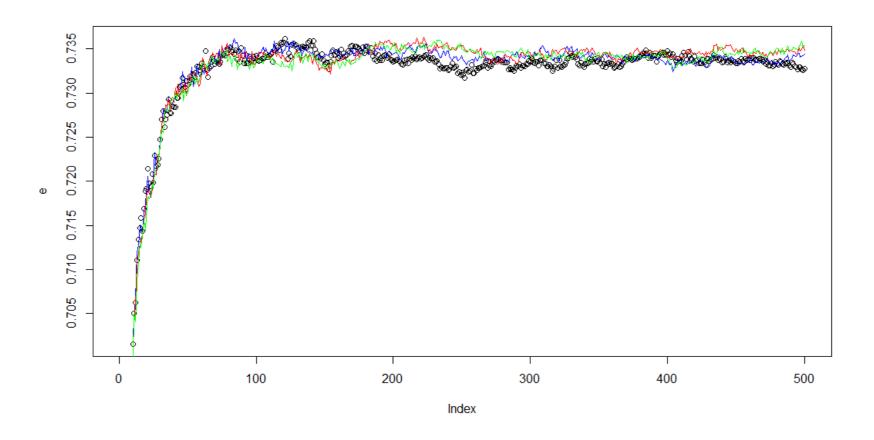
[0, 1, 1, 1]

[0, 0, 1, 1]

[0, 0, 0, 1]

Как потом использовать ответы?

Настройка модели



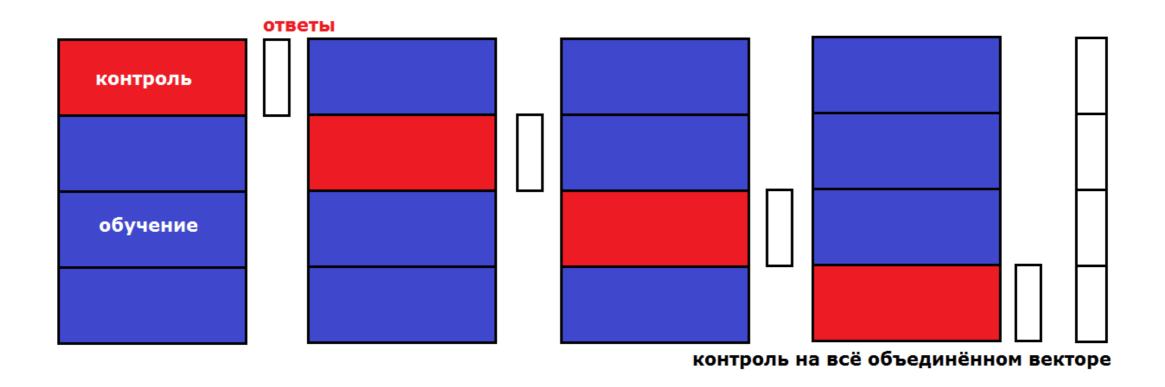
```
model <- randomForest(M1, mr, mtry=40, ntree=200, nodesize=10)
a <- predict(model, M2)
b = pmin(pmax(round(1.45*(a-3.309805)+3.309805),1),4)</pre>
```

Использовались случайные леса (даже не было зависимости от параметров!)

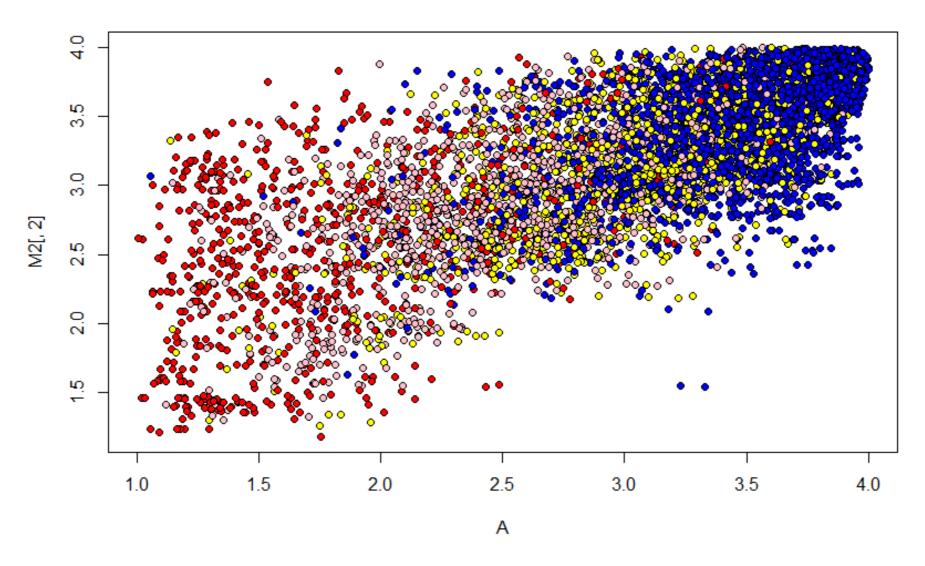
7 декабря 2020 56 слайд из 70

Отладка

k-fold

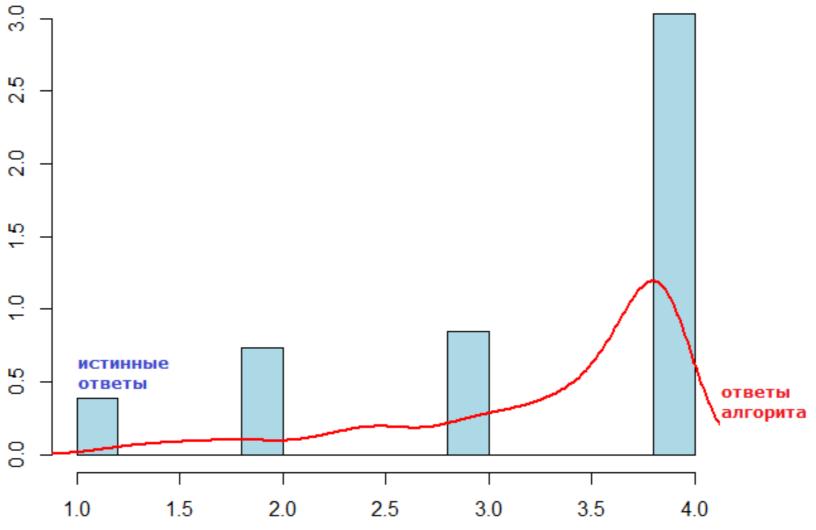


Ответы алгоритма



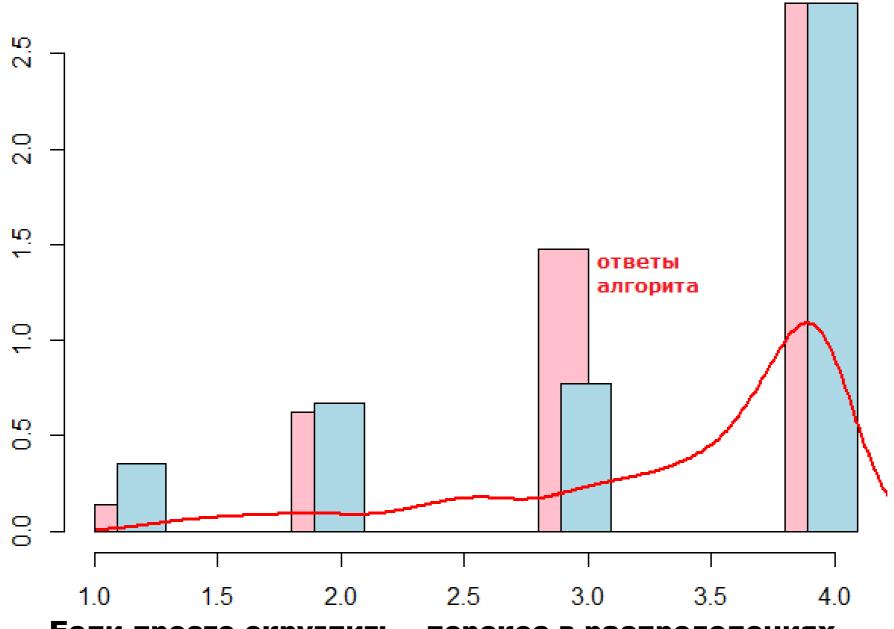
Почему медиана разных алгоритмов лучше усреднения?!

7 декабря 2020 58 слайд из 70



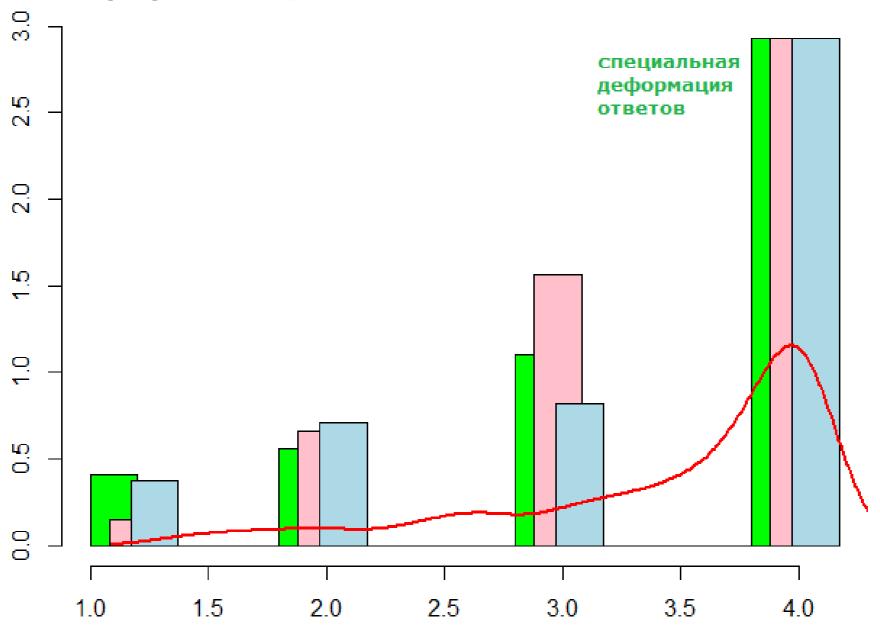
Синий – распределение настоящих ответов Красный – распределение ответов алгоритма

(они вещественные)



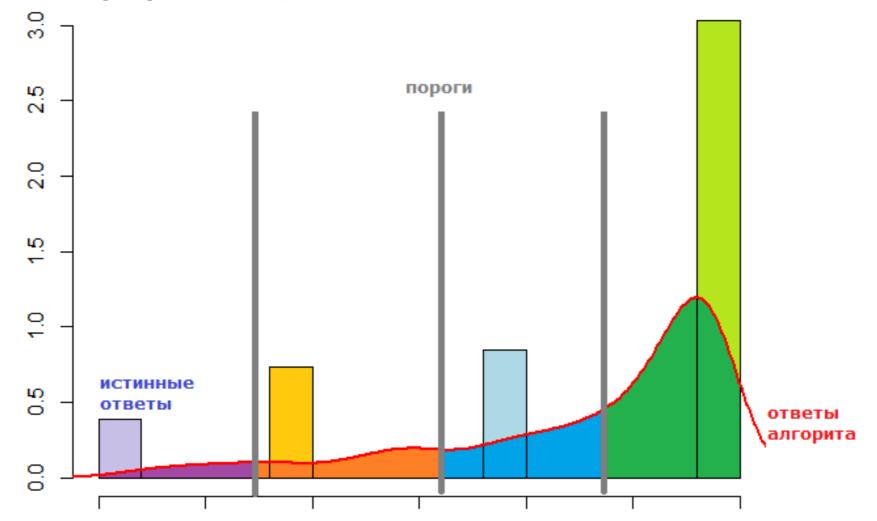
Если просто округлить – перекос в распределениях.

7 декабря 2020 60 слайд из 70



Если использовать специальную деформацию, то распределения выравниваются

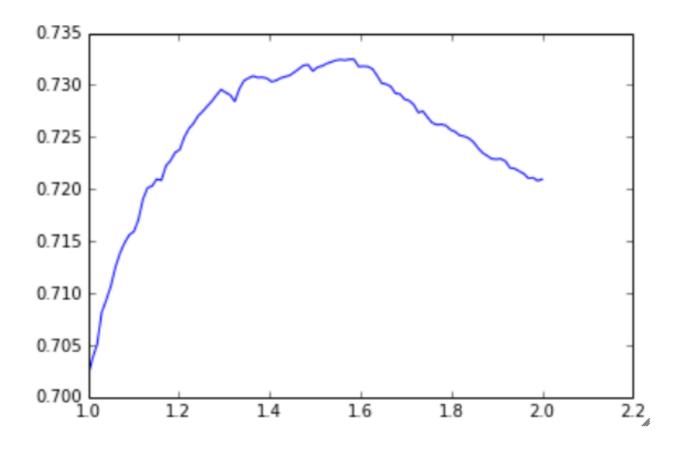
7 декабря 2020 61 слайд из 70



В принципе, можно просто выбирать пороги, чтобы

- выровнять распределения
- повысить качество на контроле

Какую из двух стратегий выбрать?



Как зависит качество от множителя

pmin(pmax(round(1.45*(a-3.309805)+3.309805),1),4)

Кстати, 3.309805 - средняя оценка.

Для справки



Хорошая выдача (рел.3-4) похожа на хорошую выдачу в обучении (3-4). Плохая выдача (1-2) может быть не похожа на плохую выдачу!

7 декабря 2020 64 слайд из 70

Для справки

Решающее правило – переводит ответы регрессионных алгоритмов в окончательные.

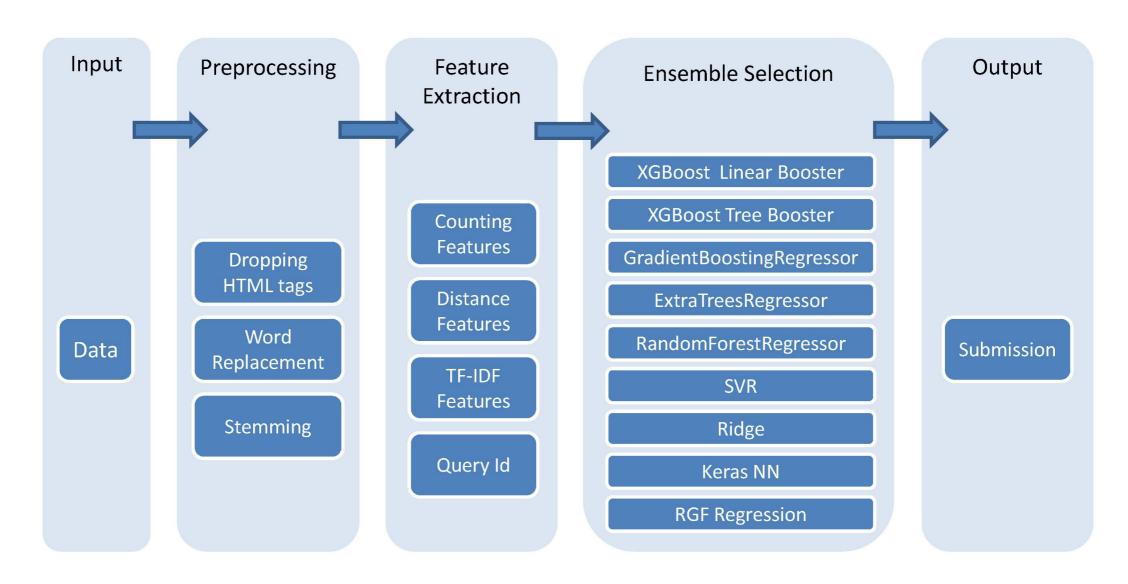
Обычно

- простое
- тоже требует настройки
- использует постановку задачи

(непересечение классов, малое число меток у объектов и т.п.)

Это отдельная тема!

Решение победителя (Chenglong Chen)



https://github.com/ChenglongChen/Kaggle_CrowdFlower

7 декабря 2020 66 слайд из 70

Случайные леса

Для справки

Полезно посмотреть, на каких объектах модель ошибается

- что можно ещё учесть в признаках.

Итог

Число признаков (max_features) – самый важный параметр (унимодальность)

Число базовых алгоритмов (n_estimators) – чем больше, тем лучше

Глубина (max_depth) – скорее всего, максимальная

Параметры сложности (min_samples_leaf, min_samples_split) – чуть подкорректировать (не очень важно)

Подвыборка (samsize) – брать всё (часто и выбора нет)

Важность

много способов ввести важность, особенно с RF, где есть ООВ

7 декабря 2020 68 слайд из 70

Литература

A. Liaw, M. Wiener Classification and Regression by randomForest // R News (2002) Vol. 2/3 p. 18.

http://www.bios.unc.edu/~dzeng/BIOS740/randomforest.pdf

И. Генрихов О критериях ветвления, используемых при синтезе решающих деревьев // Машинное обучение и анализ данных, 2014, Т.1, №8, С.988-1017

http://jmlda.org/papers/doc/2014/no8/Genrikhov2014Criteria.pdf

7 декабря 2020 69 слайд из 70