Решающие деревья. Random Forest. Бустинг.

Санкт-Петербургский государственный университет
Кафедра статистического моделирования

Санкт-Петербург, 2025

Решающие деревья

Решающее дерево — это бинарное дерево, где

- во всех внутренних вершинах v задан некоторый предикат $\beta_v : \mathbf{X} \to 0{,}1$,
- в каждой листовой вершине v задан прогноз $c_v \in \mathbf{Y}$ (для классификации возможно: $c_v \in \mathbb{R}_+^{\mathbb{K}}$, $\sum_{k=1}^{K} c_{v_k} = 1$ — вектор вероятностей принадлежности к классу).

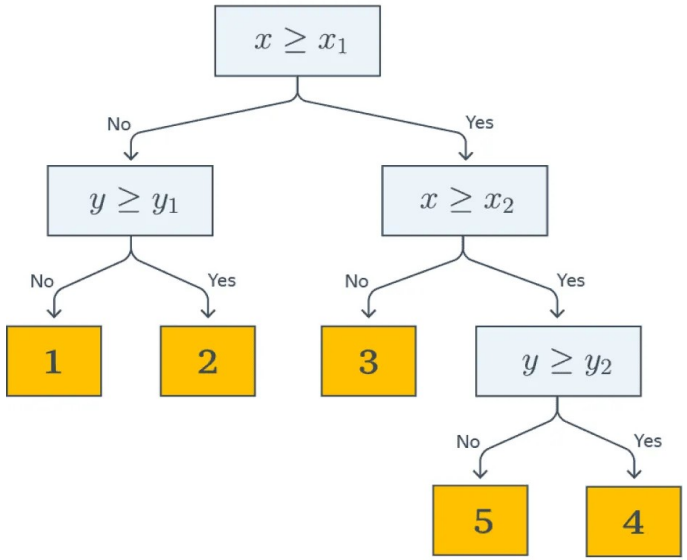


Рис.: Решающее бинарное дерево

Постановка задачи

Решающие деревья можно применять как для задач регрессии, так и для задач классификации.

Пусть $\mathbf{X}$ — множество объектов, $\mathbf{Y}$ — множество ответов, $y : \mathbf{X} \to \mathbf{Y}$ — некоторая зависимость.

Есть обучающая выборка $\mathbf{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$, где x_i — входные данные, y_i — известные ответы.

- $y_i \in \{1, \ldots, K\} \Rightarrow$ задача классификации.
- $y_i \in \mathbb{R} \Rightarrow$ задача регрессии.

Решающие деревья в задаче регрессии

Пусть $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ — матрица данных (где p — признаки, n — наблюдения), $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^n$ — отклик.

Идея: разбиение совокупности всех возможных значений $\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_p$ на J непересекающихся областей $R_1, \ldots, R_J$.

Предсказание для объекта x:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{J} c_j \mathbf{1}(x \in R_j).$$

Многомерные прямоугольники $R_1, \ldots, R_J$ выбираем так, чтобы минимизировать сумму квадратов остатков:

$$RSS = \sum_{j=1}^{J} \sum_{i \in \mathbf{R}_j} (y_i - f(x_i))^2 \to \min_{R_1, \ldots, R_J}.$$

Тогда

$$\hat{c}_j = \frac{1}{|R_j|} \sum_{x_i \in R_j} y_i.$$

Решающие деревья в задаче регрессии

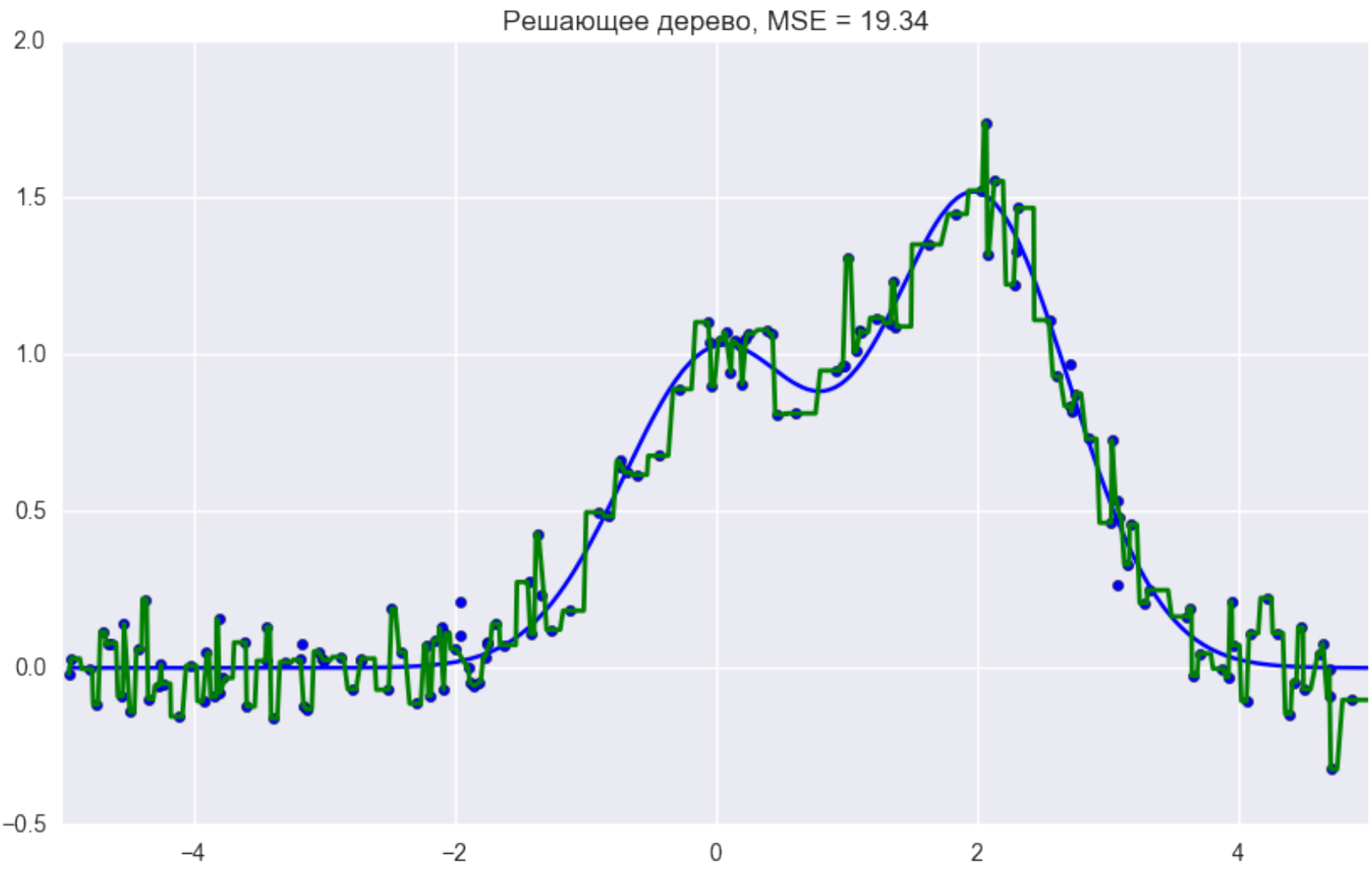


Рис.: Плохо обобщает закономерность и более склонна к переобучению

Решающие деревья в задаче классификации

В задаче классификации $R_1, \ldots, R_J$ минимизируется число ошибок классификации

$$M(j) = 1 - \max_k(\hat{p}_{jk}),$$

где $\hat{p}_{jk}$ — доля объектов обучающей выборки класса k попавших в R_j.

На практике чаще используют две других метрики:

- $G(j) = \sum_{k=1}^{K} \hat{p}_{jk}(1 - \hat{p}_{jk})$ — индекс Джини,
- $CI(j) = -\sum_{k=1}^{K} \hat{p}_{jk} \log \hat{p}_{jk}$ — коэффициент перекрестной энтропии.

Предсказание для объекта x:

$$f(x) = \operatorname*{argmax}_{k \in \mathbf{Y}} \hat{p}_{jk}.$$

Решающие деревья в задаче классификации

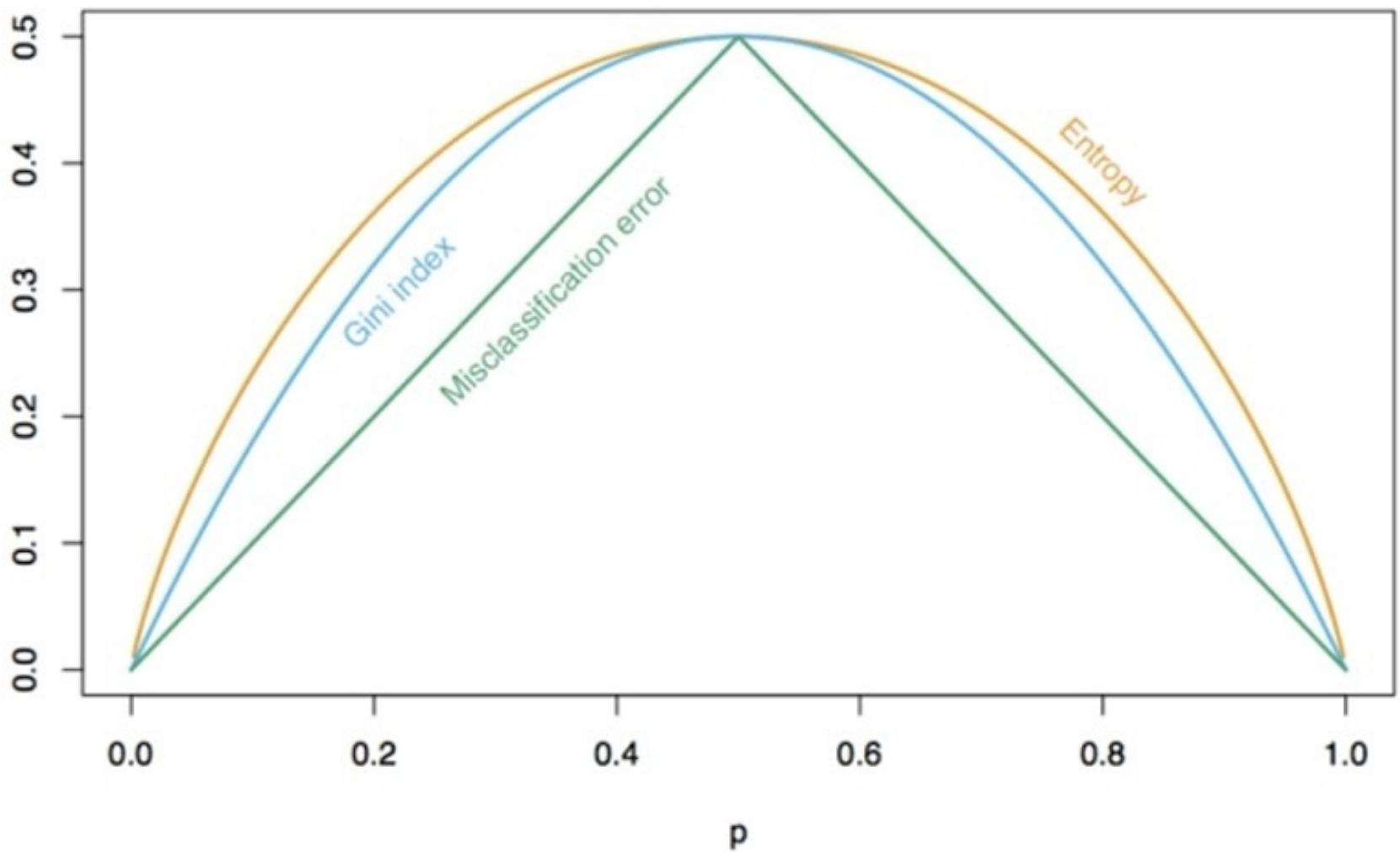


Рис.: Информационные индексы M, G, CI в случае двух классов

Решающие деревья в задаче классификации

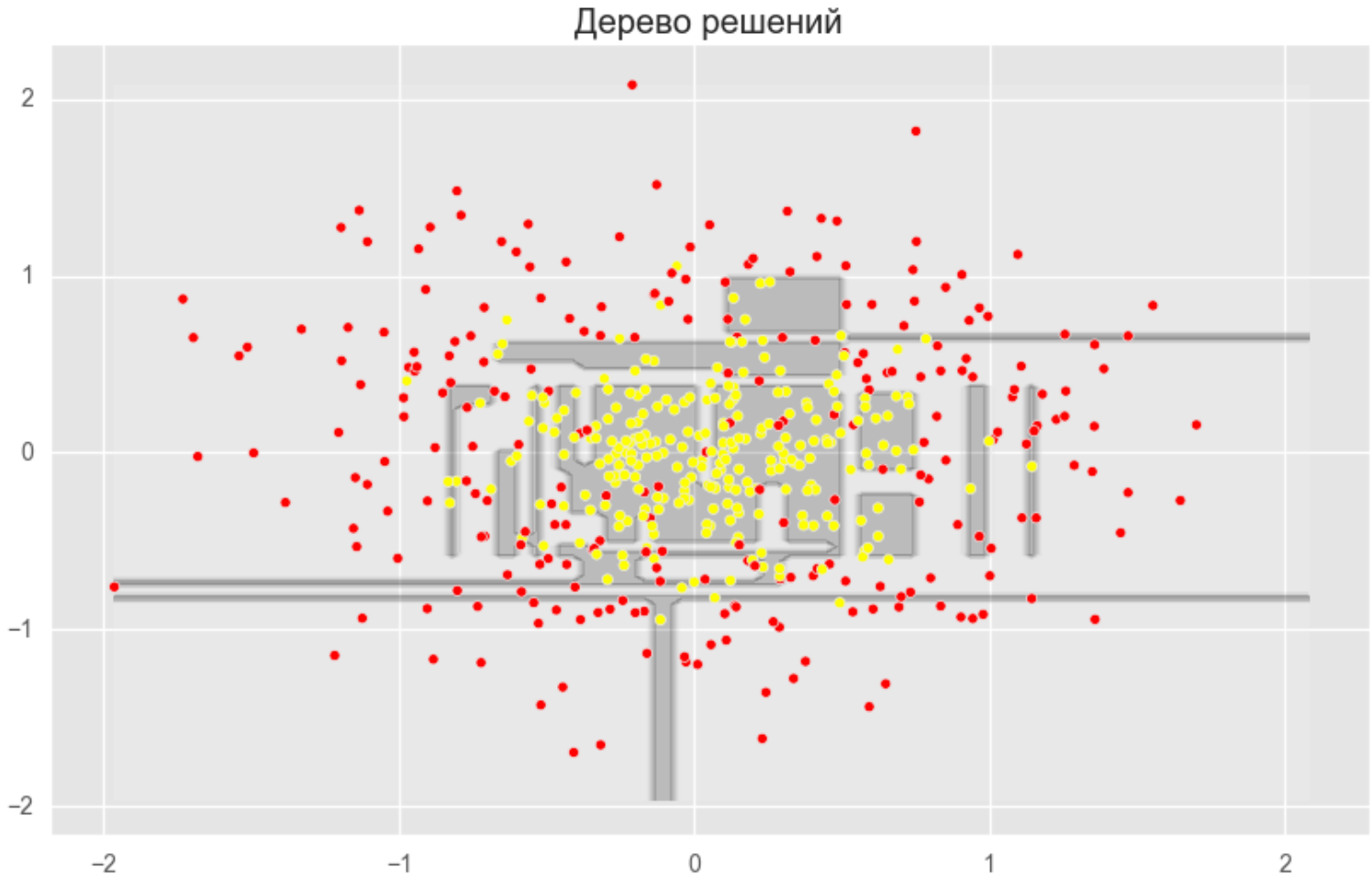


Рис.: Разделяющая граница дерева решений очень рваная и на ней много острых углов, что говорит о переобучении и слабой обобщающей способности

Жадный алгоритм построения решающего дерева

Нахождение оптимального дерева — это NP-полная задача. Пусть X — исходное множество обучающей выборки, а X_m — множество объектов, попавших в текущий лист (в самом начале $X_m = X$). Тогда жадный алгоритм можно верхнеуровнево описать следующим образом:

1. Создаём вершину v;
2. Если выполнен критерий остановки $\mathrm{Stop}(X_m)$, то останавливаемся, объявляем эту вершину листом и ставим ей в соответствие ответ $\mathrm{Ans}(X_m)$, после чего возвращаем её;
3. Иначе: находим предикат $B_{j,t}$ (сплит), который определит наилучшее разбиение текущего множества объектов X_m на две подвыборки X_l и X_r, максимизируя критерий ветвления $\mathrm{Branch}(X_m, j, t)$;
4. Для X_l и X_r рекурсивно повторим процедуру.

На выходе получаем дерево, в каждом из листов которого содержится по крайней мере один объект исходной выборки.

Значение листа

$\mathrm{Ans}(X_m)$ вычисляет ответ для листа по попавшим в него объектам из обучающей выборки. Может быть:

1. в случае задачи классификации — меткой самого частого класса или оценкой дискретного распределения вероятностей классов для объектов, попавших в этот лист;
2. в случае задачи регрессии — средним, медианой или другой статистикой;
3. простой моделью. К примеру, листы в дереве, задающем регрессию, могут быть линейными функциями или синусоидами, обученными на данных, попавших в лист.

Критерии остановки

Критерий остановки $\mathrm{Stop}(X_m)$ — функция, которая решает, нужно ли продолжать ветвление или пора остановиться.

- Ограничение максимальной глубины дерева.
- Ограничение минимального числа объектов в листе.
- Ограничение максимального количества листьев в дереве.
- Остановка в случае, если все объекты в листе относятся к одному классу.
- Остановка в случае, если изменение метрики меньше порога.

Замечание

Для очень глубоких деревьев имеем переобучение.

Критерий ветвления

$\mathrm{Branch}(X_m, \text{feature}, \text{value})$ — функция, измеряющая, насколько улучшится финальная метрика дерева при предлагаемом сплите.

Пусть $L(y_i, c)$ — функция потерь, c — константное предсказание. Информативность узла (хотим минимизировать):

$$H(X_m) = \frac{1}{|X_m|} \sum_{(x_i, y_i) \in X_m} L(y_i, c).$$

Если разделить на два узла:

$$\frac{1}{|X_m|} \left(\sum_{(x_i, y_i) \in X_l} L(y_i, c_l) + \sum_{(x_i, y_i) \in X_r} L(y_i, c) \right) =$$

$$= \frac{|X_l|}{|X_m|} H(X_l) + \frac{|X_r|}{|X_m|} H(X_r).$$

Критерий ветвления

Тогда критерий ветвления:

$$\mathrm{Branch}(X_m, j, t) = |X_m| \cdot H(X_m) - |X_l| \cdot H(X_l) - |X_r| \cdot H(X_r).$$

Чем больше изменение метрики, тем лучше.

- MSE: $L(y_i, c) = (y_i - c)^2$, $H(X_m) = \sum\limits_{(x_i, y_i) \in X_m} \frac{(y_i - \overline{y})^2}{|X_m|}$;
- MAE: $L(y_i, c) = |y_i - c|$,
  $H(X_m) = \sum\limits_{(x_i, y_i) \in X_m} \frac{|y_i - \mathrm{MEDIAN}(Y_m)|}{|X_m|}$;
- Для классификации можно рассматривать: misclassification error ($H(X_m) = 1 - \max p_i$, p_i — доля класса i), энтропию ($H(X_m) = -\sum_{k=1}^{K} p_k \log p_k$) или критерий Джини ($H(X_m) = \sum_{k=1}^{K} p_k(1 - p_k)$).

Стрижка деревьев(pruning tree)

- **Проблема**: переобучение — небольшое смещение, но большая дисперсия.
- **Решение**: объединяя некоторые R_j можем уменьшить дисперсию за счет небольшого увеличения смещения.
- Выращиваем дерево только до тех пор, пока уменьшение функции потерь из-за разбиения превышает некоторый (высокий) порог.
- Однако можно пропустить хорошее разбиение, остановившись слишком рано. Поэтому можно выращивать большие деревья T_0, а затем обрезать его для получения поддерева.

Cost-complexity pruning

- Получим большое дерево T_0 и обрежем его в узле t, получив поддерево $T^t \subset T_0$.
- Рассмотрим последовательность деревьев проиндексированных положительным параметром α. Каждому α соответствует поддерево $T \subset T_0$, минимизирующее критерий

$$Q_\alpha(T) = Q(T) + \alpha|l(T)|,$$

где $Q(T)$ — разница между прогнозируемым и фактическим выходом модели на этапе её обучения, $\alpha \geq 0$, $|l(T)|$ — число листьев в поддереве T.

- Выберем α с помощью кросс-валидации и возьмем соответствующее поддерево.

Преимущества и недостатки решающих деревьев

Преимущества:

- Простота интерпретации.
- Простота визуализации.
- Пригодность и для задач регрессии, и для задач классификации.
- Возможность работы с пропусками в данных.
- Возможность работы с категориальными значениями.

Недостатки:

- Метод является неустойчивым и склонным к переобучению.

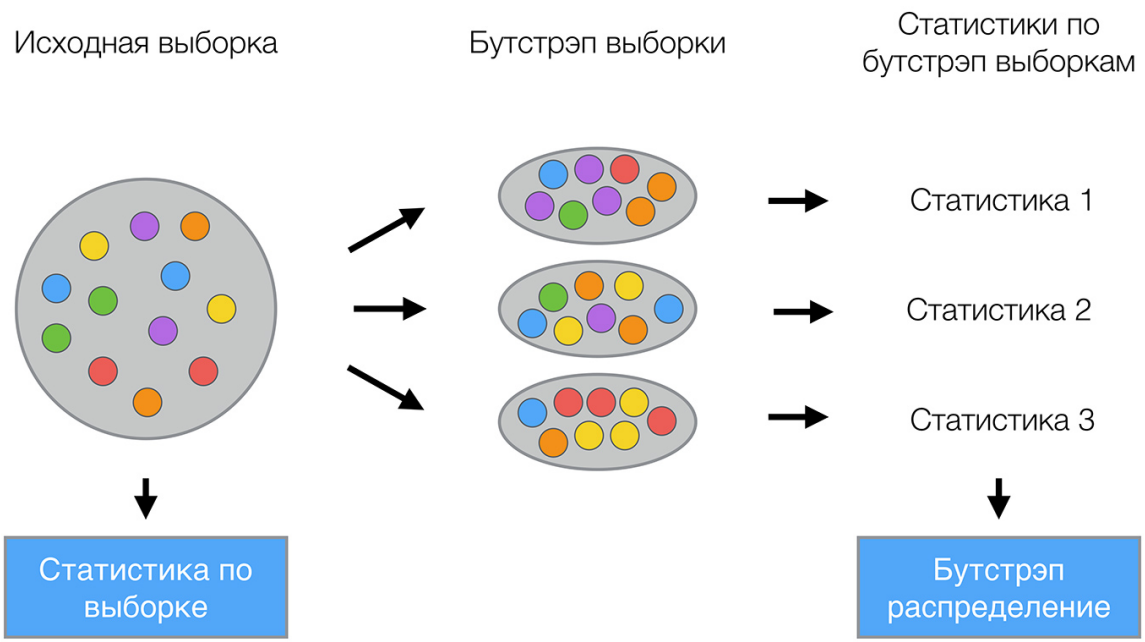
Замечание

Агрегирования множества деревьев решений такими способами, как bagging, random forest и boosting, позволяет значительно улучшить качество предсказания.

Bootstrap

Метод бутстрэпа заключается в следующем:

- Дана выборка $\mathbf{X}$ размера M.
- Равномерно возьмем из выборки M объектов с возвращением (из-за возвращения среди них окажутся повторы), обозначим новую выборку через $\mathbf{X}_1$.
- Повторив N раз, сгенерируем N подвыборок $\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_N$.



Пример построения композиции алгоритмов.

- Дана конечная выборка $\mathbf{X} = (x_i, y_i)$ с вещественными ответами.
- Равномерно возьмем из выборки l объектов с возвращением (из-за возвращения среди них окажутся повторы), обозначим новую выборку через $\mathbf{X}_1$.
- Повторив N раз, сгенерируем N подвыборок $\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_N$.
- Обучим по каждой из них линейную модель регрессии, получив базовые алгоритмы $b_1(x), \ldots, b_N(x)$.
- Пусть $\exists$ модель $y(x) = \sum \beta_i x_i + \varepsilon_i$ и $p(x)$ — распределение $\mathbf{X}$.
- **Ошибка каждой функции регрессии**: $\varepsilon_j(x) = b_j(x) - y(x), \;\; j = 1, \ldots, \; N.$
- **Матожидание среднеквадратичной ошибки**: $\mathbf{E}_x (b_j(x) - y(x))^2 = \mathbf{E}_x \varepsilon_j^2(x).$

Среднеквадратичная ошибка

Средняя ошибка построенных функций регрессии:

$$\mathbf{E}_1 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\mathbf{E}_x\varepsilon_j^2(x).$$

Пусть ошибки несмещены и некоррелированы:

$$\mathbf{E}_x\varepsilon_j(x) = 0, \quad \mathbf{E}_x\varepsilon_j(x)\varepsilon_j(x) = 0, \quad i \neq j.$$

Построим теперь новую функцию регрессии, которая будет усреднять ответы построенных нами функций:

$$\alpha(x) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} b_j(x).$$

Тогда

$$E_N = \mathbf{E}_x\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} b_j(x) - y(x)\right)^2 = \mathbf{E}_x\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\varepsilon_j(x)\right)^2 =$$

$$= \frac{1}{N^2}\mathbf{E}_x \left(\sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j^2(x) + \sum_{i \neq j} \varepsilon_i(x)\varepsilon_j(x) \right) = \frac{1}{N} E_1.$$

Таким образом, усреднение ответов позволило уменьшить средний квадрат ошибки в N раз (при этом смещение остаётся тем же).

Замечание

Рассмотренный пример не очень применим на практике, так как мы предположили, что ошибки некоррелированы, это редко выполняется. Если это предположение неверно, то уменьшение ошибки оказывается не таким значительным.

Bagging

Bagging — метод, который позволяет уменьшить разброс модели. Этот метод обучает некоторое число алгоритмов так, что каждый алгоритм обучается на отдельных выборках, которые получены из исходной с помощью bootstrap.

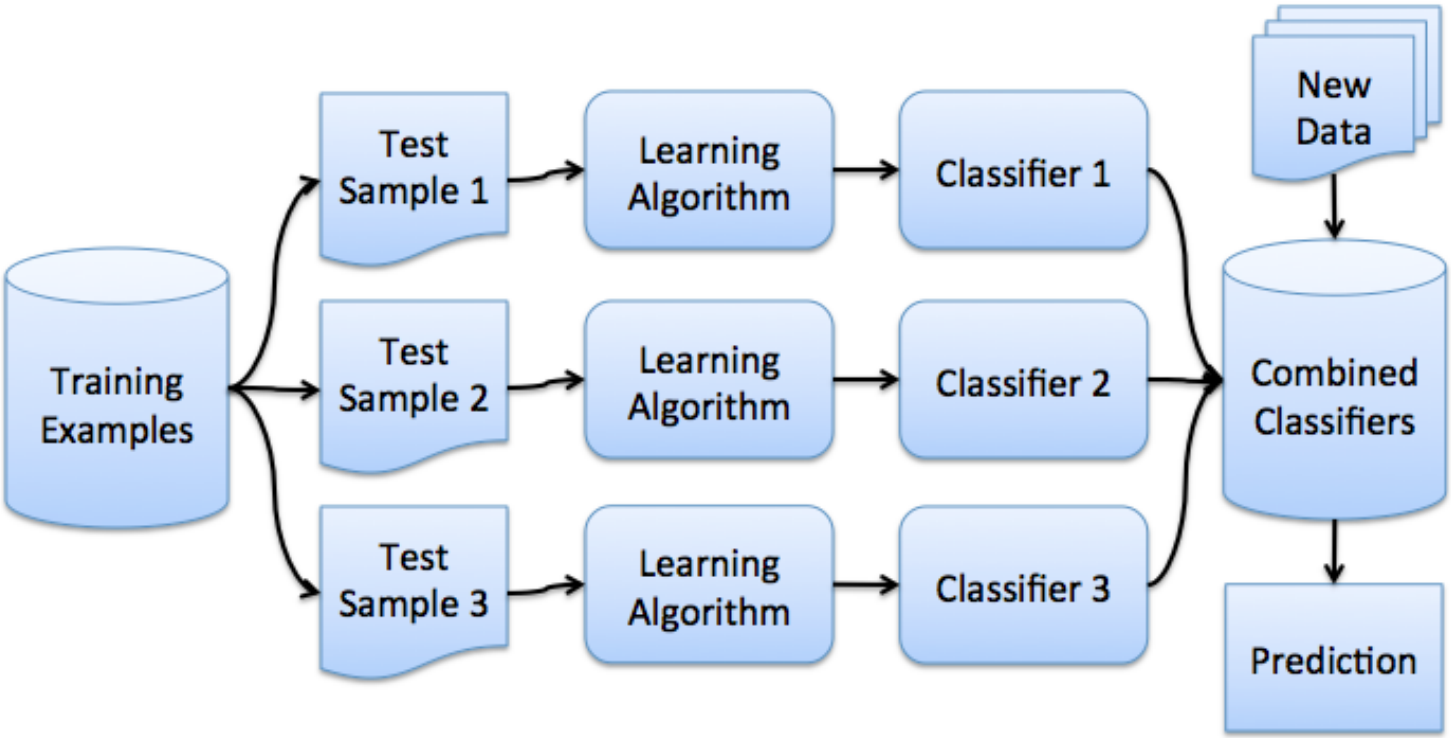


Рис.: Схема реализации bagging

Реализация bagging

Пусть имеется обучающая выборка $\mathbf{X}$.

1. С помощью bootstrap сгенерируем из $\mathbf{X}$ выборки $\mathbf{X}_1, \ldots, \mathbf{X}_N$.
2. На каждой выборке строим решающее дерево $b_n(x)$:
   - дерево строится, пока в каждом листе не окажется не более $n_{\min}$ объектов.
   - при каждом разбиении сначала выбирается m случайных признаков из p, оптимальное разделение ищется только среди них.
3. находим оценку:
   - для задачи регрессии: $\alpha(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} b_n(x)$.
   - для задачи классификации с K классами: записываем класс предсказанный каждым деревом, итоговое предсказание часто встречающийся класс среди предсказаний.

Bagging в задаче регрессии

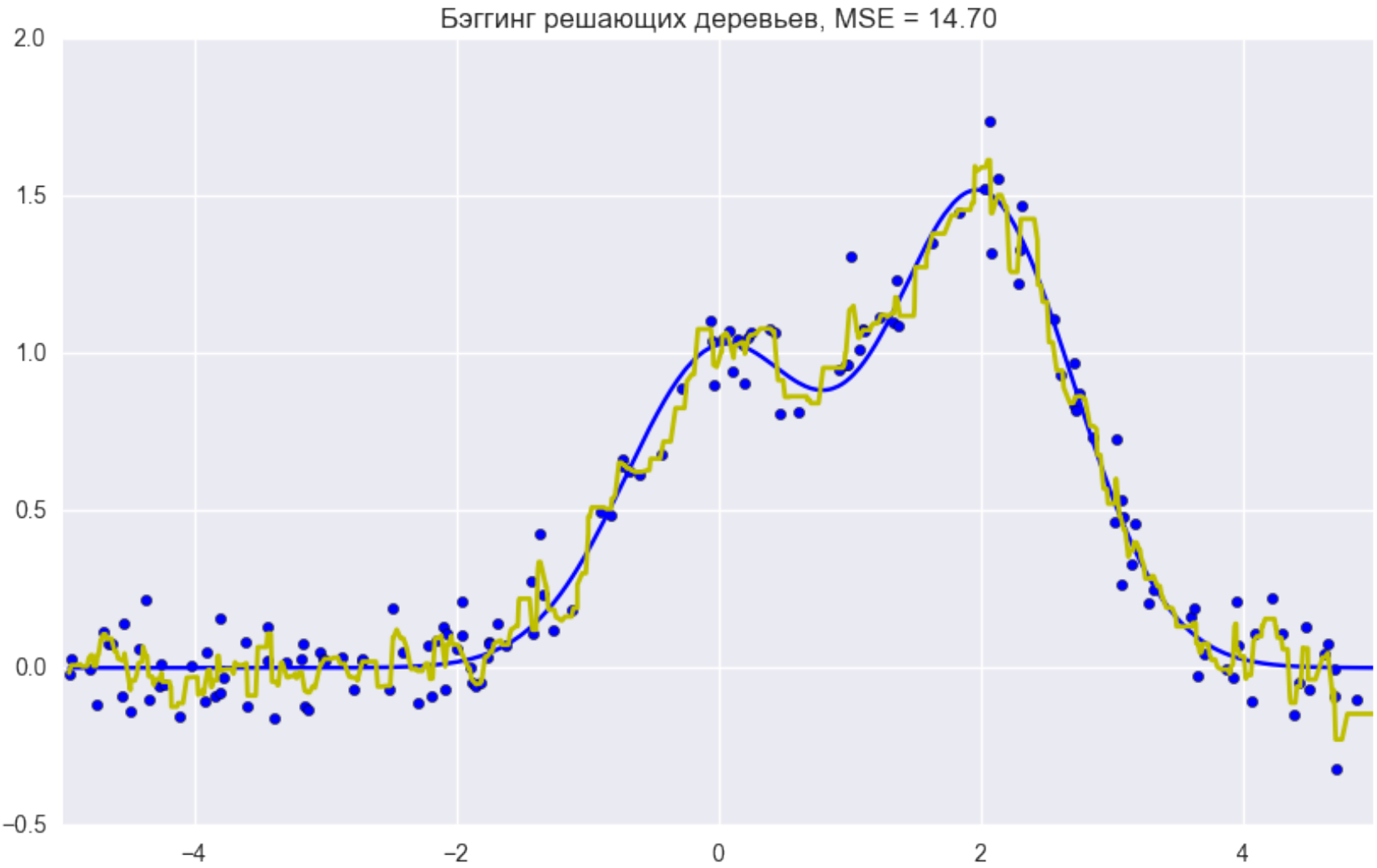


Рис.: Лучше обобщает закономерность и менее склонна к переобучению, чем любое отдельное дерево

Bagging в задаче классификации

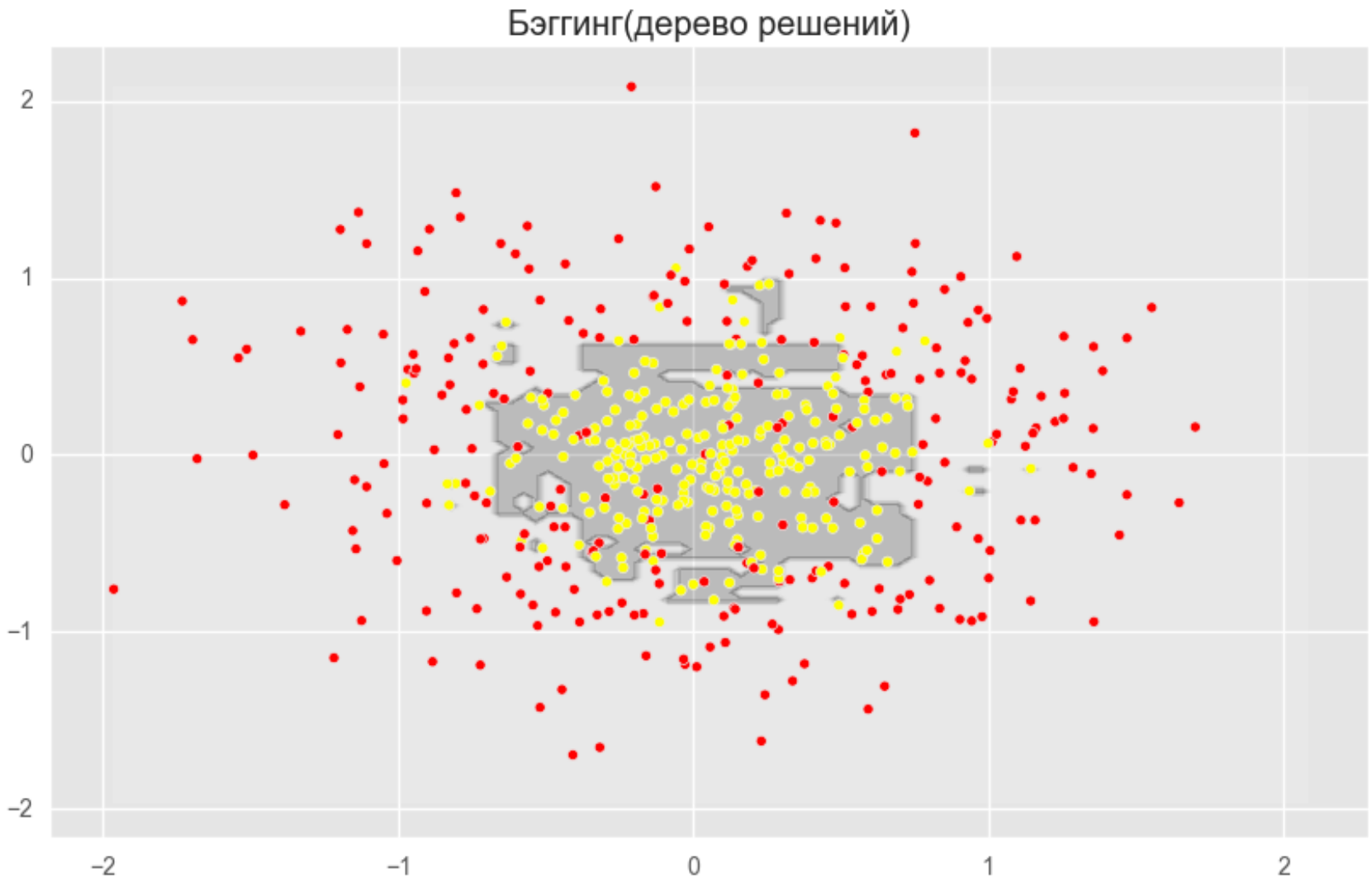


Рис.: Граница сглаженная и практически нет признаков переобучения

Ошибка out-of-bag

- Дерево b_n, обученное с помощью bootstrap, использует в среднем $2/3$ наблюдений.
- Оставшиеся $1/3$ наблюдений, которые не вошли в bootstrap-выборку $\mathbf{X}_n$, являются контрольными для данного дерева.
- Значит, можно для каждого объекта x_i найти деревья, которые были обучены без него, и вычислить по их ответам out-of-bag ошибку:

$$OOB = \sum_{i=1}^{l} L\left(y_i,\ \frac{1}{\sum_{n=1}^{N}[x_i \notin \mathbf{X}_n]} \sum_{n=1}^{N}[x_i \notin \mathbf{X}_n] b_n(x_i)\right),$$

где $L(y,\ z)$ — функция потерь.

Random forest

Модель **Random Forest** — улучшение бэггинга решающих деревьев. Деревья становятся менее коррелированными благодаря тому, что при построении дерева в каждой вершине признак выбирается из случайного подмножества заданного размера p.

Практическая рекомендация: для классификации — $p = \sqrt{d}$, где d — общее число признаков; для регрессии — $p = d/3$.

Ограничения в построении дерева выбираются так, чтобы деревья получались глубокими — такие деревья имеют низкое смещение.

Количество деревьев может быть определено по графику ошибок от числа деревьев. Также стоит учесть вычислительную сложность, хотя случайный лес хорошо параллелится.

Random forest в задаче регрессии

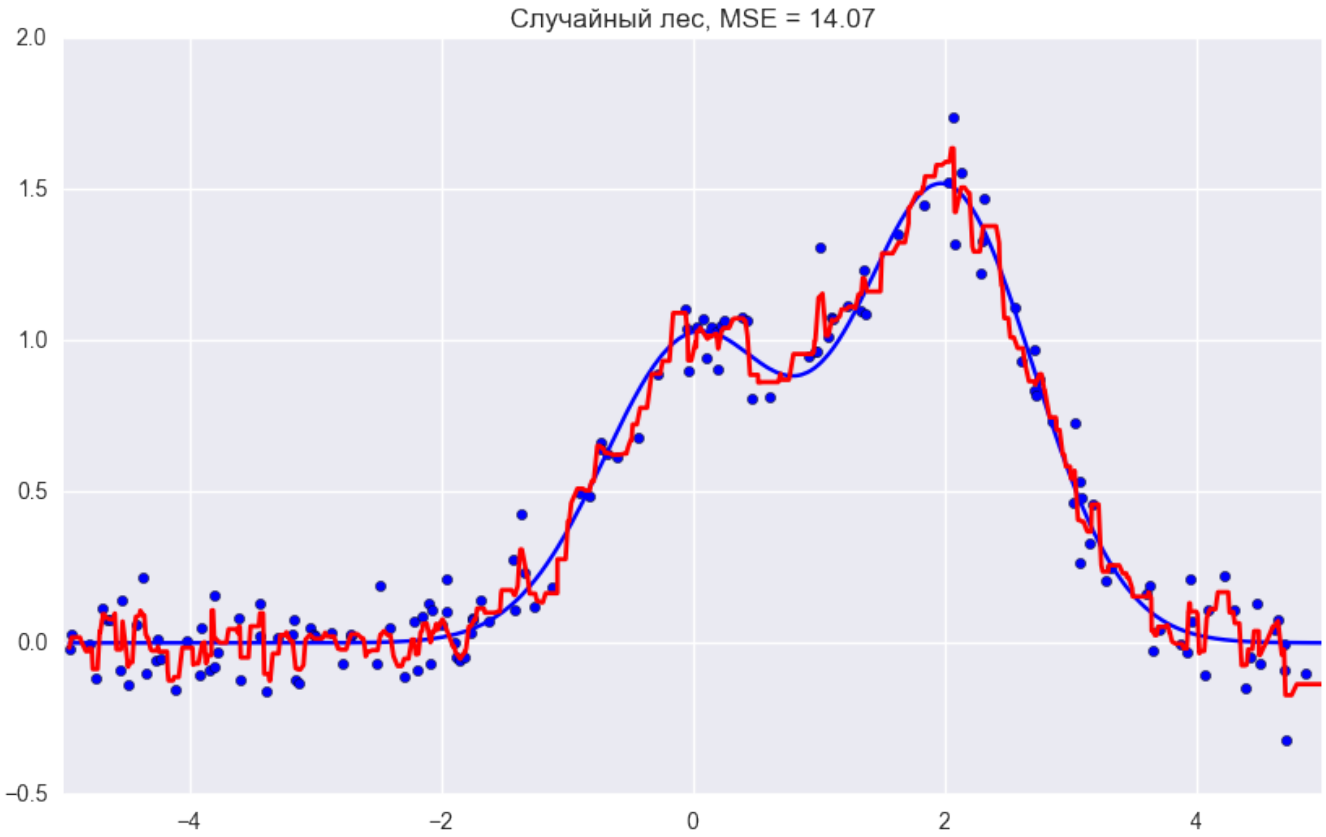


Рис.: Различие случайного леса и бэггинга на деревьях решений заключается в том, что в случайном лесе выбирается случайное подмножество признаков, и лучший признак для разделения узла определяется из подвыборки признаков, в отличие от бэггинга, где все функции рассматриваются для разделения в узле

Random forest в задаче классификации

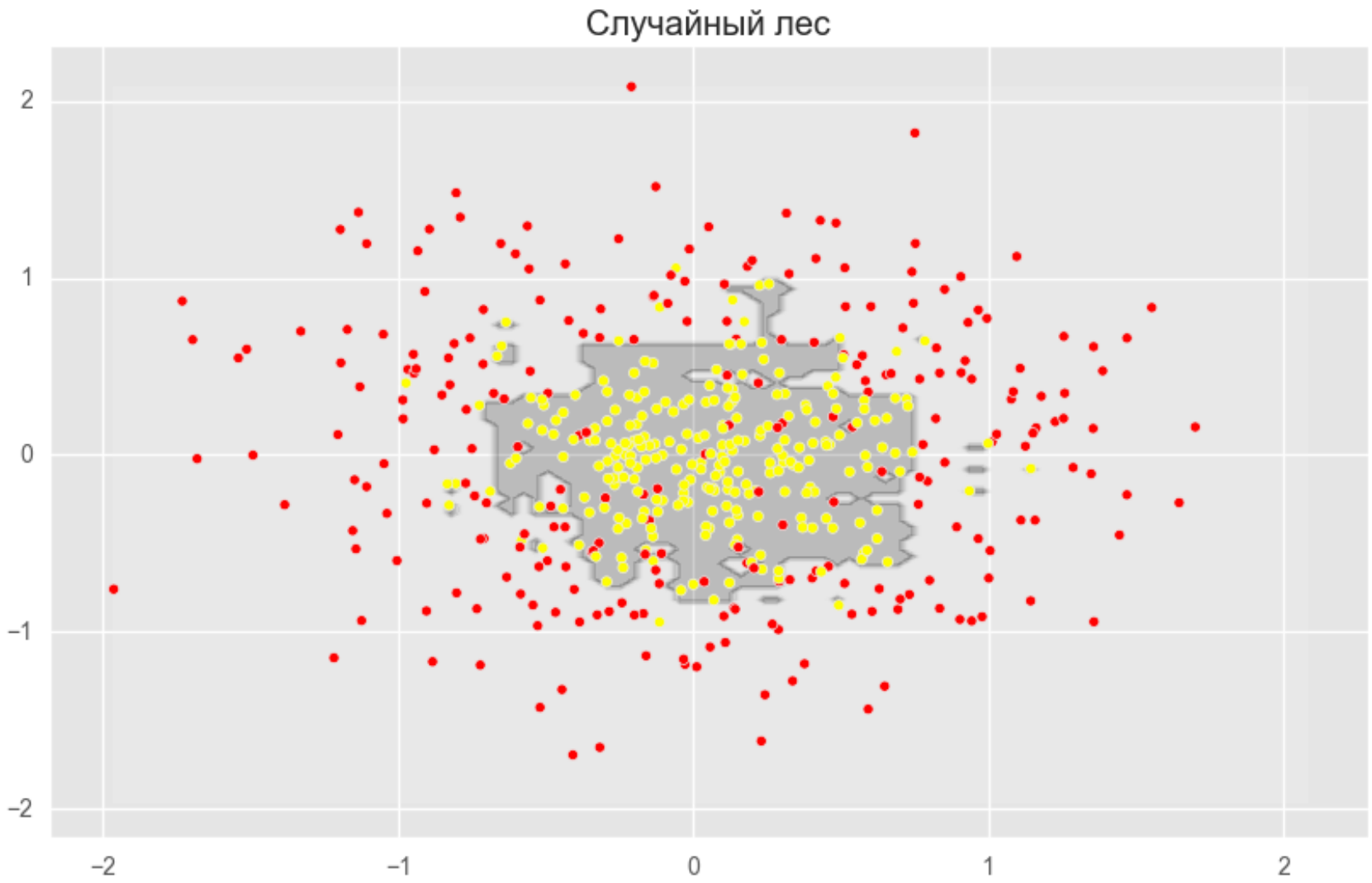


Рис.: Граница сглаженная и практически нет признаков переобучения

Boosting

Boosting — техника последовательного обучения множества слабых базовых моделей для построения более качественной общей модели предсказания. В этом случае используется одно обучающее множество. Первая модель в последовательности обучается предсказывать, а последующие стремятся уменьшить ошибки предсказания предыдущих.

В итоге получаем аддитивную модель как взвешенную последовательность множества базовых.

Рассмотрим в общем виде **Gradient Boosting** для задачи регрессии и **AdaBoost** для задачи классификации.

Gradient Boosting для задачи регрессии

В качестве базовой модели берем дерево решений. Boosting использует комбинацию большого количества деревьев. Деревья строятся последовательно, при этом каждое следующее дерево использует информацию предыдущих деревьев.

Алгоритм:

1. Устанавливаем $b(x) = 0$ и $r_i = y_i$ для всех i на обучающем множестве $(\mathbf{X},\ r)$.
2. Для $n = 1,\ 2,\ \ldots,\ N$ повторяем:
   - Обучаем дерево b_n с d сплитами ($d + 1$ терминальных узлов) на обучающем множестве $(\mathbf{X},\ r)$.
   - Обновляем b: $b(x) \leftarrow b(x) + \lambda b_n(x)$
   - Обновляем остатки: $r_i \leftarrow r_i - \lambda b_n(x_i)$
3. Возвращаем модель:

$$b(x) = \sum_{n=1}^{N} \lambda b_n(x).$$

Gradient Boosting для задачи регрессии: основная идея

Заметим, что мы обучаемся на антиградиент (пусть $\lambda = 1$):

$$r_i = y_i - b(x_i) = -\frac{d}{dz}\frac{1}{2}(z - y_i)^2|_{z=b(x_i)}$$

Идея: предсказание следующего алгоритма должно быть противоположно производной $L(y, z)$ в точке $z = b(x_i)$. Тогда вектор сдвигов совпадает с антиградиентом L.

Таким образом, добавляя новый алгоритм, мы делаем шаг градиентного спуска. А λ является learning rate.

Gradient Boosting для задачи регрессии

Три настраиваемых параметра:

1. Количество деревьев N. При слишком большом значении N может привести к переобучению. Можно использовать кросс-валидацию для выбора N.
2. Параметр регуляризации λ — небольшое положительное число, которое контролирует скорость обучения. При очень малом значении λ необходимо использовать очень большое значение N, чтобы получить приемлимый результат.
3. Количество сплитов d в каждом дереве. Параметр определяет сложность ансамбля.

AdaBoost для задачи классификации

Общая идея:

- Последовательно строим модель на базе слабых классификаторов при этом уменьшаем ошибку классификатора на предыдущем шаге.
- Если на обучающем множестве были случаи неправильной классификации, то для этих наблюдений увеличивается вес.
- Следующий классификатор при обучении использует эти веса, чтобы сделать акцент на случаях, где была ошибка.
- После этого обученный классификатор может сам давать ошибочные классификации, что ведет к изменению весов наблюдений для последующего классификатора.
- Каждый классификатор в последовательности имеет свой вес.
- Таким образом, получаем конечный классификатор как линейную комбинацию последовательно обученных классификаторов.

Алгоритм:

1. Инициализация весов наблюдений $w_i = \frac{1}{n}$ где $i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n$.
2. for $m = 1$ to M:
   - Обучение классификатора $T_m(x)$ на обучающих данных с весами w_i.
   - Вычисление ошибки: $err_m = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i \mathbf{1}(y_i \neq T_m(x_i))}{\sum_{j=1}^{n} w_j}$.
   - Вычисление веса классификатора $G_m(x)$: $\alpha_m = \log\left[\frac{1-err_m}{err_m}\right] + \log(K-1)$, где K — количество классов.
   - Обновление весов $w_i \leftarrow w_i \times \exp(\alpha_m \times \mathbf{1}(y_i \neq T_m(x_i)))$.
   - Нормализация весов w_i.
3. $C(x) = \underset{k}{\operatorname{argmax}} \left\{ \sum_{m=1}^{M} \alpha_m \times \mathbf{1}(T_m(x) = k) \right\}$.

Заключение

В **Random forest**:

- Используются глубокие деревья, так как от базовых алгоритмов требуется низкое смещение.
- Разброс устраняется за счет усреднения ответов различных деревьев.

В **Boosting**:

- Каждый следующий алгоритм понижает ошибку композиции.
- Переобучение при большом количестве базовых моделей.
- Можно понизить смещение моделей, но разброс или останется таким же, или увеличится.
- Используются неглубокие решающие деревья.