### Случайный лес.

Цель этого ноутбука - знакомство со случайными лесами, с их параметрами и свойствами. В ноутбуке будут рассмотрены примеры применения случайного леса для решения задач классификации и регрессии.

#### In [1]:

```
1
   import copy
   import numpy as np
   from matplotlib import pyplot as plt
   import scipy.stats
   import seaborn as sns
5
6 from tqdm import tqdm notebook
7 from sklearn import datasets
8 from sklearn.metrics import accuracy score, r2 score
9 from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor
10 from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier, RandomForestRegressor
   from sklearn.metrics import mean squared error
11
   from sklearn.model selection import train test split
12
13 from sklearn.model selection import GridSearchCV
   import pandas as pd
14
   import warnings
15
16
17
   warnings.simplefilter("ignore", DeprecationWarning)
18
   sns.set(context='poster')
19 %matplotlib inline
```

#### Основные параметры

#### Реализации: RandomForestClassifier, RandomForestRegressor

Набор гиперпараметров случайного леса очень похож на набор гиперпараметров решающего дерева. Основным отличием является наличие у случайного леса параметра n\_estimators, задающего количество решающих деревьев, используемых для получения предсказаний. Это основной гиперпараметр для случайного леса.

Напомним главные гиперпараметры решающего дерева, которые также имеются у случайного леса.

- 1) criterion -- критерий информативности, по которому происходит разбиение вершины дерева.
- 2) max depth -- ограничение на глубину каждого дерева в лесе.
- 3) min\_samples\_split -- минимальное количество элементов обучающей выборки в вершине дерева, чтобы её можно было разбивать.
- 4) min\_samples\_leaf -- минимальное количество элементов обучающей выборке в листовой вершине.
- 5) splitter -- способ разбиения вершины каждого решающего дерева. Есть 2 возможных варианта: best и random. В первом случае рассматриваются все возможные способы разбить вершину дерева на две и берётся тот из них, значение критерия для которого оптимально. При splitter=random берётся несколько случайных возможных разбиений и среди них выбирается то, значение критерия для которого оптимально.

- 6) max\_features -- максимальное количество признаков, которые могут быть перебраны при разбиении вершины дерева. Перед каждым разбиением дерева генерируется выборка из min(k, max\_features) случайных признаков (k количество признаков в датасете) и только эти признаки рассматриваются как разделяющие.
- 7) min\_impurity\_split -- минимальное значение критерия неопределенности (impurity) для выборки, попавшей в вершину, чтобы эту выборку можно было разбивать.

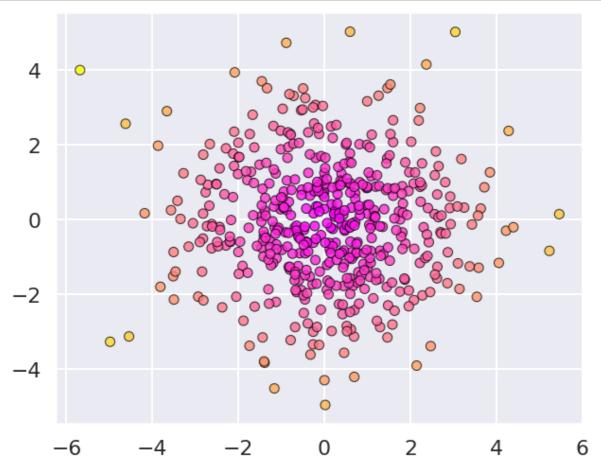
О других гиперпараметрах случайного леса можно почитать в документации:

https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestClassifier.html (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestClassifier.html).

# Решение задачи регрессии с помощью Random Forest

Сгенерируем выборку из многомерного нормального распределения и в качестве целевой функции возьмем расстояние от точки до центра координат.

#### In [2]:

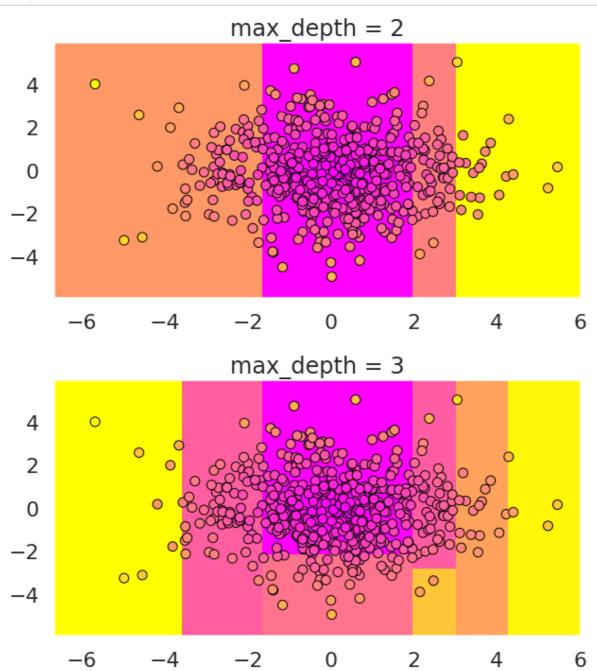


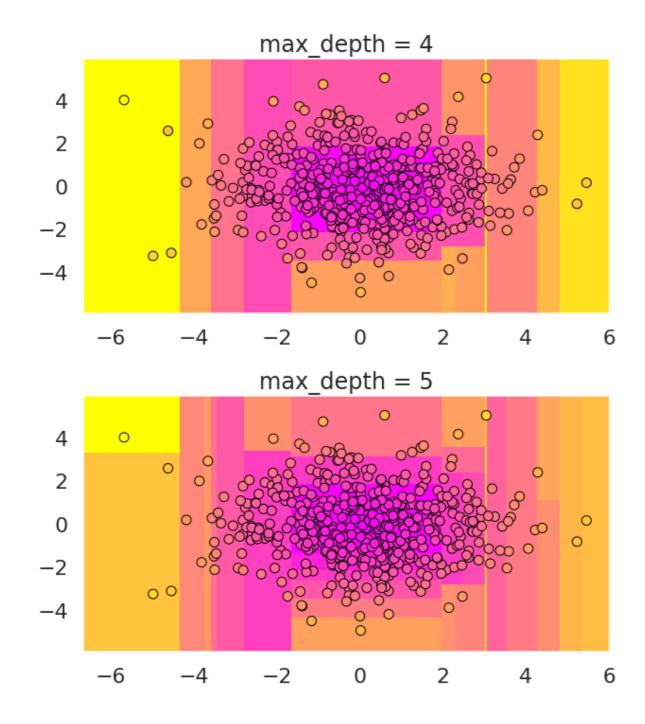
```
def generate grid(sample, border=1, step=0.05):
 1
2
        ''' Создает сетку на основе выборки для раскраски пространства '''
3
4
        return np.meshgrid(np.arange(min(sample[:, 0]) - border,
5
                                     max(sample[:, 1]) + border,
6
                                     step),
7
                           np.arange(min(sample[:, 1]) - border,
8
                                     max(sample[:, 1]) + border,
9
                                     step))
10
11
   def create picture(X train, y train, model, border=1, step=0.05,
12
13
                       cmap='spring', alpha=1, create_new_figure=True,
14
                       figsize=(10, 5), s=100, linewidths=1, points=True):
15
16
        Раскрашивает пространство в соответствии с предсказаниями
17
       случайного леса/решающего дерева
18
19
       Параметры.
20
        1) X_train - данные обучающей выборки,
21
        2) y train - метки обучающей выборки,
22
        3) model - визуализируемая модель,
23
        4) border - размер границы между областями пространства,
24
           полученными моделью,
25
        5) step - точность сетки пространства,
26
        6) стар - цветовая схема,
27
        7) aplha - прозрачность точек обучающей выборки,
28
        8) create new figure - флаг, определяющий создавать ли
29
           новую фигуру,
30
        9) figsize - размер создаваемой фигуры,
31
        10) s - размер точек обучающей выборки,
        11) linewidths - размер границы каждой точки,
32
33
        12) point - флаг, определяющий, отображать ли точки
34
           обучающей выборки на графике.
35
36
37
       # Создание сетки
38
        grid = generate_grid(X_train, border, step)
39
        # Выворачивание сетки для применения модели
40
        grid ravel = np.c [grid[0].ravel(), grid[1].ravel(0)]
41
42
       # Предсказание значений для сетки
43
        grid predicted ravel = model.predict(grid ravel)
       grid_predicted = grid_predicted_ravel.reshape(grid[0].shape) # Подгоняем р
44
45
46
        # Построение фигуры
47
48
        if create new figure:
49
            plt.figure(figsize=figsize)
50
51
        plt.pcolormesh(grid[0], grid[1], grid_predicted, cmap=cmap)
52
        if points:
53
            plt.scatter(
54
                X train[:, 0], X train[:, 1], c=y train, s=s,
55
                alpha=alpha, cmap=cmap, linewidths=linewidths, edgecolors='black'
56
57
        plt.xlim((min(grid_ravel[:, 0]), max(grid_ravel[:, 0])))
58
        plt.ylim((min(grid ravel[:, 1]), max(grid ravel[:, 1])))
59
        plt.title('max depth = ' + str(model.get params()['max depth']))
```

60   61   if create_new_figure: 62   plt.show()
---

Визуализация предсказания решающими деревьями с различным значением максимальной глубины

```
In [4]:
```





## Визуализация предсказаний случайного леса

Обучим случайный лес на 35 деревьев (для удобства визуализации)

#### In [5]:

```
n_estimators = 35
model = RandomForestRegressor(n_estimators=n_estimators)
model.fit(X_train, y_train)
```

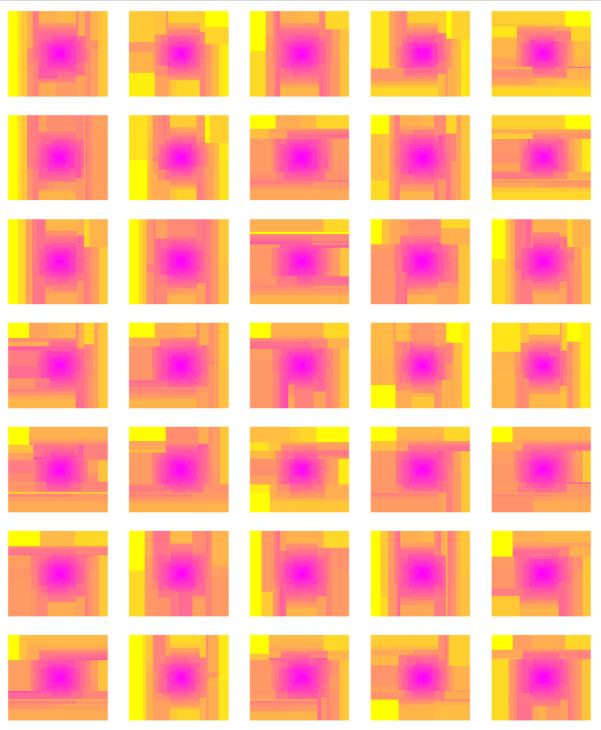
#### Out[5]:

```
RandomForestRegressor(bootstrap=True, criterion='mse', max_depth=None, max_features='auto', max_leaf_nodes=None, min_impurity_decrease=0.0, min_impurity_split=None,

min_samples_leaf=1, min_samples_split=2, min_weight_fraction_leaf=0.0, n_estimators=35, n_jobs=None, oob_score=False, random_state=None, verbose=0, warm start=False)
```

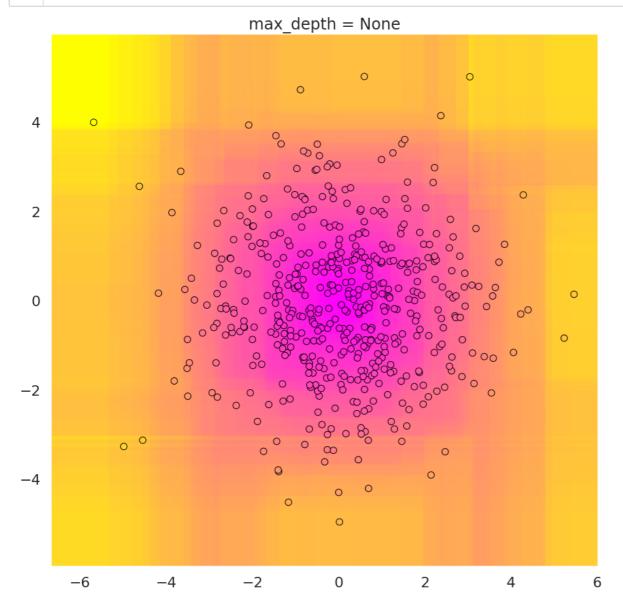
Визуализация предсказания по каждому из деревьев по отдельности. Они все такие разные и такие переобученные...

#### In [6]:



Усредненное предсказание

1 create\_picture(X\_train, y\_train, model, figsize=(15, 15))



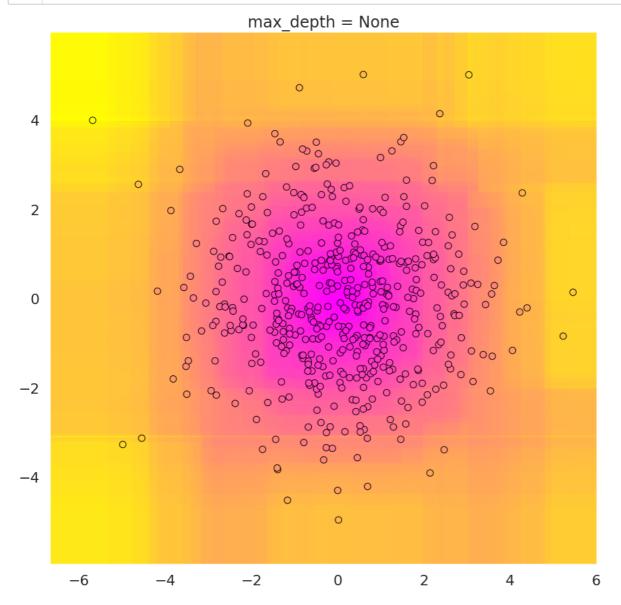
То же самое с 100 деревьями

#### In [8]:

```
n_estimators = 100
model = RandomForestRegressor(n_estimators=n_estimators)
model.fit(X_train, y_train)
```

#### Out[8]:

```
1 create_picture(X_train, y_train, model, figsize=(15, 15))
```



## Зависимость качества предсказаний леса от n\_estimators

Создадим тестовую выборку

#### In [10]:

```
1  X_test = scipy.stats.multivariate_normal.rvs(
2    size=1000, mean=[0, 0], cov=[[3, 0], [0, 3]]
3  )
4  y_test = (X_test[:, 0] ** 2 + X_test[:, 1] ** 2) ** 0.5
```

#### In [11]:

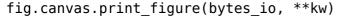
```
def cum_metric(model, metric, x_test, y_test):
2
3
        Считает значение метрики в зависимости от количества деревьев в модели
4
5
       Параметры.
6
        1) model - модель случайного леса,
7
        2) metric - вычисляемая метрика,
8
        3) x_test - данные тестовой выборки,
        4) y_test - метки тестовой выборки.
9
10
11
12
        predictions by estimators = [est.predict(x test) for est in model.estimator
13
        cumpred = np.array(predictions by estimators).cumsum(axis=0) \
14
                  / (np.arange(len(predictions by estimators)) + 1)[:, np.newaxis]
15
        cumacc = [metric(y test, pred) for pred in cumpred]
16
        return np.array(cumacc)
```

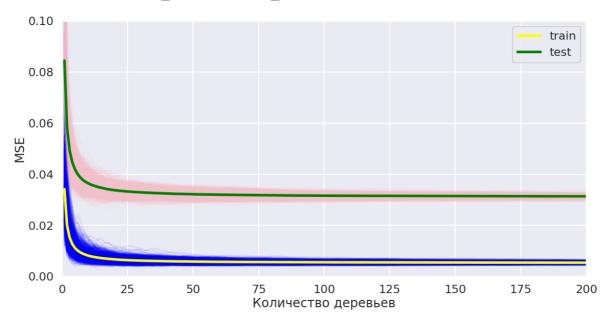
Визуализируем значение метрики MSE в зависимости от количества деревьев в модели. Поскольку каждая модель является случайной, **проведем обучение 1000 раз** и усредним значения метрики. На графике также нарисуем полупрозрачными кривыми зависимость MSE от количества деревьев для каждой модели.

#### In [12]:

```
1
   %time
2
3
   n iterations = 1000
4
   n = 200
5
   scores train = np.zeros((n iterations, n estimators))
   scores test = np.zeros((n iterations, n estimators))
 6
7
   estrimator range = np.arange(n estimators) + 1
8
9
   plt.figure(figsize=(18, 9))
10
   for i in tqdm notebook(range(n iterations), leave=False):
11
12
       rf = RandomForestRegressor(n estimators=n estimators).fit(X train, y train)
13
       scores_train[i] = cum_metric(rf, mean_squared_error, X_train, y_train)
14
       scores test[i] = cum metric(rf, mean squared error, X test, y test)
15
       plt.plot(estrimator_range, scores_train[i], color='blue', alpha=0.07)
       plt.plot(estrimator range, scores test[i], color='pink', alpha=0.07)
16
17
18
   plt.plot(estrimator range, scores train.mean(axis=0),
19
             lw=5, color='yellow', label='train')
20
   plt.plot(estrimator_range, scores_test.mean(axis=0),
21
             lw=5, color='green', label='test')
22
   plt.xlabel('Количество деревьев'), plt.ylabel('MSE')
23
   plt.xlim((0, 200)), plt.ylim((0, 0.1))
24
   plt.legend()
25
   plt.show()
```

/usr/local/lib/python3.7/dist-packages/IPython/core/pylabtools.py:128: UserWarning: Creating legend with loc="best" can be slow with large amounts of data.





CPU times: user 6min 57s, sys: 1.23 s, total: 6min 58s

Wall time: 6min 58s

Как видим, с увеличением количества деревьев в среднем ошибка монотонно убывает как на обучающей выборке, так и на тестовой. Иначе говоря, в среднем случайный лес не переобучается при увеличении количества деревьев. Можно взять миллион деревьев, и плохо от этого скорее всего не

станет. Для конкретной реализации случайности может возникнуть некоторое переобучение, например, если в начале построения композиции попадутся "удачные" деревья, то при последующем добавлении деревьев ошибка может вырасти.

## Зависимость качества предсказаний леса от значений гиперпараметров

Теперь исследуем зависимость качества предсказаний случайного леса от значений гиперпараметров. Рассмотрим датасет diabetes из sklearn. В нём исследуется численная оценка прогрессирования диабета у пациентов на основе таких признаков, как возраст, пол, масса тела, среднее кровяное давление и некоторых других. Для того, чтобы лучше понять, что из себя представляют признаки в этом датасете, можно обратиться к этой странице: <a href="https://www4.stat.ncsu.edu/~boos/var.select/diabetes.html">https://www4.stat.ncsu.edu/~boos/var.select/diabetes.html</a>).

#### In [13]:

```
diabetes = datasets.load_diabetes()
X = diabetes.data
y = diabetes.target
```

#### In [14]:

```
print('data shape:', X.shape)
print('target shape:', y.shape)
```

```
data shape: (442, 10) target shape: (442,)
```

Как и в предыдущих экспериментах, разобьём данные на обучение и тест.

#### In [15]:

```
1 X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, random_state=42)
```

Подберём оптимальные параметры для RandomForestRegressor по сетке.

#### In [16]:

```
tree gridsearch = GridSearchCV(
1
2
       estimator=RandomForestRegressor(random_state=42),
3
       param_grid={
4
           'max_depth': [3, 5, None],
5
           'n estimators': [5, 10, 25, 50],
6
           'min samples leaf': [1, 2, 5],
7
           'min_samples_split': [2, 5]
8
       }
9
  )
```

```
In [17]:
```

test r2\_score -0.0593

```
1 tree_gridsearch.fit(X_train, y_train)
/usr/local/lib/python3.7/dist-packages/sklearn/model selection/ split.
py:1978: FutureWarning: The default value of cv will change from 3 to
5 in version 0.22. Specify it explicitly to silence this warning.
  warnings.warn(CV WARNING, FutureWarning)
Out[17]:
GridSearchCV(cv='warn', error score='raise-deprecating',
             estimator=RandomForestRegressor(bootstrap=True, criterion
='mse',
                                              max depth=None,
                                              max features='auto',
                                              max leaf nodes=None,
                                              min impurity decrease=0.
0,
                                              min impurity split=None,
                                              min_samples_leaf=1,
                                              min samples split=2,
                                              min weight fraction leaf=
0.0,
                                              n estimators='warn', n jo
bs=None,
                                              oob score=False, random s
tate=42,
                                              verbose=0, warm start=Fal
se),
             iid='warn', n jobs=None,
             param_grid={'max_depth': [3, 5, None],
                          'min_samples_leaf': [1, 2, 5],
                          'min samples split': [2, 5],
                          'n_estimators': [5, 10, 25, 50]},
             pre dispatch='2*n jobs', refit=True, return train score=F
alse,
             scoring=None, verbose=0)
In [18]:
 1 | print(tree_gridsearch.best_params_)
{'max depth': 5, 'min samples leaf': 5, 'min samples split': 2, 'n est
imators': 25}
Посчитаем значение метрики r2-score.
In [19]:
    print('train r2_score {:.4f}'.format(
 2
        r2_score(tree_gridsearch.best_estimator_.predict(X_train), y_train)
 3
    ))
    print('test r2_score {:.4f}'.format(
        r2 score(tree_gridsearch.best_estimator_.predict(X_test), y_test)
 5
 6
    ))
train r2 score 0.3934
```

Теперь попробуем резко увеличить значение min\_samples\_leaf.

#### In [20]:

```
1
   regressor = RandomForestRegressor(random state=42, min samples leaf=20,
2
                                       n estimators=25, max depth=5)
3
   regressor.fit(X train, y train)
5
   print('train r2 score {:.4f}'.format(
6
        r2_score(regressor.predict(X_train), y_train)
7
   ))
8
   print('test r2 score {:.4f}'.format(
9
        r2 score(regressor.predict(X test), y test)
10
   ))
```

```
train r2_score -0.0840 test r2_score -0.0908
```

#### Вывод.

Заметим, что значение r2\_score снизилось как на обучающей, так и на тестовой выборке. Это значит, что модель с таким ограничением на минимальное количество элементов в личтовой вершине недообучена и плохо улавливает закономерности в данных.

Теперь попробуем, наоборот, сделать значение min\_samples\_leaf меньше оптимального.

#### In [21]:

```
regressor = RandomForestRegressor(random state=42, min samples leaf=3,
2
                                      n estimators=25)
3
   regressor.fit(X train, y train)
 4
5
   print('train r2 score {:.4f}'.format(
        r2_score(regressor.predict(X_train), y_train)
6
7
   print('test r2 score {:.4f}'.format(
9
        r2 score(regressor.predict(X test), y test)
10
   ))
```

```
train r2_score 0.6997
test r2_score -0.1002
```

#### Вывод.

Видно, что значение r2\_score на обучающей выборке выросле, а на валидационной - упало. Значит, лес немного переобучился.

## Решение задачи классификации с помощью Random Forest

Теперь проделаем похожие эксперименты для задачи классификации. Возьмём датасет для распознавания латинских букв на изображениях <a href="https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Letter+Recognition">https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Letter+Recognition</a>).

Некотрые из признаков, содержащихся в датасете:

- 1. lettr заглавная буква (принимает значения от A до Z);
- 2. x-box горизонтальная позиция прямоугольника с буквой;
- 3. y-box вертикальная позиция прямоугольника с буквой;
- 4. width ширина прямоугольника;
- 5. high высота прямоугольника;
- 6. onpix количество пикселей, относящихся к цифре;
- 7. x-bar среднее значение х всех пикселей в прямоугольнике;
- 8. y-bar среднее значение у всех пикселей в прямоугольнике;
- 9. x2-bar выборочная дисперсия x;
- 10. y2-bar выборочная дисперсия у;
- 11. xybar корреляция х и у.

#### In [22]:

```
1 letters_df = pd.read_csv('letter-recognition.data', header=None)
2 print('dataset shape:', letters_df.shape)
3 letters_df.head()
```

dataset shape: (20000, 17)

#### Out[22]:

```
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16
 T 2 8 3 5 1
                  8 13 0 6
                               10
                                   8
                                       0
                                          8
                                                8
                             6
                                             0
1 | 5 | 12 | 3 | 7 | 2 | 10
                     5 5 4 13
                                   9
                                       2
                                3
                                          8
                                             4 10
2 D 4 11 6 8 6
                 10
                     6 2 6 10
                                3
                                   7
                                       3
                                          7
                                             3
                     9 4 6
                                       6 10
3 N 7 11 6 6 3
                  5
                             4
                                4 10
                                             2
                                                8
4 G 2 1 3 1 1
                  8
                     6 6 6
                             6
                                5
```

#### In [23]:

```
1 X = letters_df.values[:, 1:]
2 y = letters_df.values[:, 0]
```

### Зависимость точности классификации от значений гиперпараметров

Разобьём данные на обучающую и тестовую выборки.

#### In [24]:

```
1 X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, random_state=42)
```

Для начала попробуем оценить оптимальное количество решающих деревьев в лесе, взяв значения всех остальных параметров по умолчанию. Построим график зависимости accuracy от n\_estimators на обучающей и на тестовой выборках. В большинстве случаев, значение n\_estimators берут в диапазоне от 10 до 100. Но здесь мы рассмотрим боее широкий набор значений - от 1 до 200.

#### In [25]:

```
def get train and test accuracy(param name, grid, other params dict={}):
2
3
        Функция для оценки точности классификации
4
        для заданных значений параметра param name
5
6
       Параметры:
7
        1) param_name - название параметра, который собираемся варьировать,
8
        2) grid - сетка значений параметра,
9
        3) other params dict - словарь со значениями остальных параметров.
10
11
12
        train acc, test acc = [], []
13
        params dict = copy.copy(other params dict)
14
15
        for param value in grid:
            params dict.update({param name: param value})
16
17
            estimator = RandomForestClassifier(**params dict, random state=42)
18
            estimator.fit(X train, y train)
19
            train acc.append(accuracy score(y train, estimator.predict(X train)))
20
            test_acc.append(accuracy_score(y_test, estimator.predict(X_test)))
21
        return train acc, test acc
```

#### In [26]:

```
def plot dependence(param name, grid=range(2, 20),
2
                        other params dict={}, title=''):
3
4
        Функция для отображения графика зависимости accuracy
5
        от значения параметра с названием param name
6
7
       Параметры:
8
        1) param name - название параметра, который собираемся варьировать,
9
        2) grid - сетка значений параметра,
10
        3) other params dict - словарь со значениями остальных параметров,
11
        4) title - заголовок графика.
12
13
14
        plt.figure(figsize=(12, 6))
15
16
        train acc, test acc = get train and test accuracy(
17
            param_name, grid, other_params_dict
18
        )
19
        plt.plot(grid, train_acc, label='train')
20
21
        plt.plot(grid, test acc, label='test')
22
        plt.legend(fontsize=14)
23
       plt.xlabel(param name)
        plt.ylabel('Accuracy')
24
25
        plt.title(title, fontsize=20)
26
       plt.show()
```

#### In [27]:

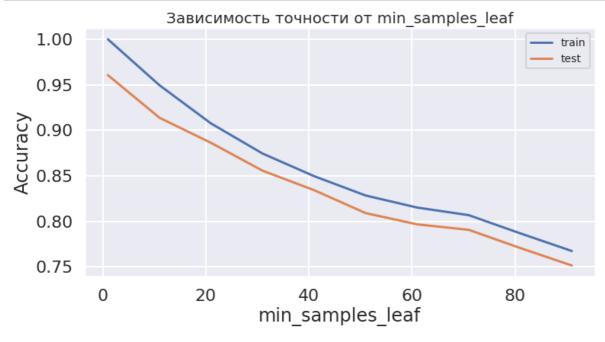
```
plot_dependence(
    'n_estimators', range(1, 200, 20),
    title='Зависимость точности от n_estimators'
)
```



Как можно заметить, при n\_estimators > 75 заметных изменений в ассигасу как на обучающей, так и на тестовой выборке не происходит. В теории, при предположении, что все решающие деревья в лесе независимы между собой, должно получаться, что при увеличении числа случайных решающих деревьев в лесе дисперсия предсказания монотонно снижается, а точность монотонно повышается. Однако из-за того, что на практике решающие деревья попарно скоррелированны, такой эффект наблюдается лишь до некоторого значения n\_estimators, а затем значительных изменений не происходит.

Теперь зафиксируем n\_estimators =75 и будем использовать это значение во всех последующих экспериментах с данным датасетом. Построим график зависимости accuracy от min\_samples\_leaf на обучающей и на тестовой выборках.

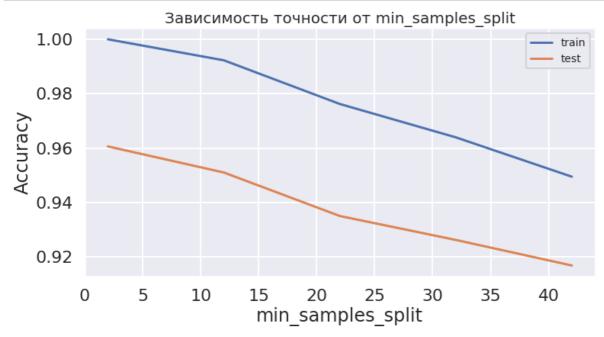
#### In [28]:



#### Вывод.

В целом наблюдается следующая закономерность: с увеличением значения min\_samples\_leaf падает качество и на обучающей и на тестовой выборке. Напомним, что при использовании одного решающего дерева закономерность была иной: до некоторого значения min\_samples\_leaf качество на тестовой выборке повышалось. Такая разница в поведении связана с тем, что при увеличении min\_samples\_leaf понижается дисперсия предсказаний, но повышается их смещенность. Если в одиночном решающем дереве такой способ понижения дисперсии мог приносить положительные результаты, то при использовании случайного леса это теряет смысл.

#### In [29]:



#### Вывод.

При повышении значения min\_samples\_split происходит то же, что и при повышении min samples leaf.

А теперь найдём оптимальный набор гиперпараметров и использованием кросс-валидации. Зададим сетку для подбора параметров и сделаем кросс-валидацию с 5 фолдами (значение по умолчанию).

#### In [30]:

```
1  tree_gridsearch = GridSearchCV(
2    estimator=RandomForestClassifier(),
3    param_grid={
4         'n_estimators': [10, 50, 75, 100], 'max_depth': [2, 5, None],
5         'min_samples_leaf': [1, 2, 5, 10]
6    }
7 )
```

```
In [31]:
```

test accuracy: 0.958

```
1 tree_gridsearch.fit(X_train, y_train)
/usr/local/lib/python3.7/dist-packages/sklearn/model selection/ split.
py:1978: FutureWarning: The default value of cv will change from 3 to
5 in version 0.22. Specify it explicitly to silence this warning.
  warnings.warn(CV WARNING, FutureWarning)
Out[31]:
GridSearchCV(cv='warn', error score='raise-deprecating',
             estimator=RandomForestClassifier(bootstrap=True, class we
ight=None,
                                               criterion='gini', max de
pth=None,
                                               max features='auto',
                                               max leaf nodes=None,
                                               min impurity decrease=0.
0,
                                               min_impurity_split=None,
                                               min samples leaf=1,
                                               min samples split=2,
                                               min weight fraction leaf
=0.0,
                                               n estimators='warn', n j
obs=None,
                                               oob score=False,
                                               random_state=None, verbo
se=0,
                                               warm start=False),
             iid='warn', n jobs=None,
             param grid={'max depth': [2, 5, None],
                          'min samples leaf': [1, 2, 5, 10],
                          'n estimators': [10, 50, 75, 100]},
             pre dispatch='2*n jobs', refit=True, return train score=F
alse,
             scoring=None, verbose=0)
Выведем оптимальные параметры.
In [32]:
   print(tree_gridsearch.best_params_)
{'max depth': None, 'min samples leaf': 1, 'n estimators': 100}
In [33]:
    print('train accuracy:', accuracy_score(tree_gridsearch.best_estimator_.predict
    print('test accuracy:', accuracy_score(tree_gridsearch.best_estimator_.predict(
train accuracy: 1.0
```

Получилось довольно неплохое качество предсказания. Заметим ещё одну особенность подбора оптимальных гиперпараметров для случайного леса. Как вы помните, при использовании решающего дерева было довольно полезно ограничить его максимальную глубину. И, когда мы находили по кроссвалидации оптимальные гиперпараметры для одного решающего дерева, оптимальное значение

max\_depth не превосходило 5. В случае со случайным лесом оптимально вообще не ограничивать глубину решающего дерева, так как в таком случае деревья получаются менее смещёнными, а попарная корреляция между ними становится меньше.