

Машинное обучение в экономике

Деревья

Потанин Богдан Станиславович

доцент, кандидат экономических наук

2024–2025

- Методы классификации и регрессионного анализа:
 - Решающее дерево.
 - Регрессионное дерево.
 - Случайный лес.
- Базовые понятия:
 - Энтропия, выборочная энтропия и средняя энтропия.
 - Регрессионный анализ.
 - Соотношение сложности модели с дисперсией и смещением оценок, декомпозиция среднеквадратической ошибки прогноза.
 - Стрижка деревьев (pruning).
 - Бутстрап.
 - Ансамбли.
 - Бэггинг как пример ансамблевого метода.
 - Ранжирование информативности признаков с помощью случайного леса.

Интуиция

Игра в угадывание персонажа

- **Правила игры** – первый игрок загадывает персонажа, а второй игрок пытается его отгадать, задавая вопросы, на которые можно ответить либо да, либо нет.
- **Цель игры** – отгадать персонажа с использованием минимального числа вопросов.
- Для достижения цели игрок пытается каждый раз задать наиболее **информативный** из возможных вопросов.
- Например, первый вопрос скорее всего будет о поле персонажа или о том, существует ли он в реальности, поскольку ответы на эти вопросы гарантированно позволяют существенно сузить область поиска.
- То, насколько удачным будет очередной вопрос, зависит от ответов на предыдущие вопросы. Например, вопрос о том, умел ли персонаж летать, будет удачным, если из ответов на предыдущие вопросы мы знаем, что загаданный персонаж был животным, и неудачным, если известно, что персонаж был древнегреческим философом.
- Прогнозирование значения целевой переменной можно также рассмотреть как подобную игру, в которой вместо вопросов мы проверяем значения признаков.

Мера неопределенности распределения (impurity measure)

Бинарная переменная

- Рассмотрим бернуллиевскую случайную величину $X \sim \text{Ber}(p)$, где $p \in (0, 1)$.
- Если p близко к 1 или к 0, то случайная величина X будет, как правило, принимать одно и то же значение. То есть мера неопределенности в ее распределении будет низкой.
- Чем ближе p к 0.5, тем сложнее спрогнозировать значение X , а значит мера неопределенности распределения возрастает.
- Функцию, измеряющую меру неопределенности в соответствии с изложенной выше интуицией, можно записать, например, как $\min(p, 1 - p)$ или $\text{Var}(X) = p(1 - p)$.
- Например, мера неопределенности распределения $X \sim \text{Ber}(0.6)$ выше, чем у распределения $Y \sim \text{Ber}(0.2)$, поскольку $\min(0.6, 1 - 0.6) = 0.4$ и $\min(0.2, 1 - 0.2) = 0.2$. По аналогии $0.6(1 - 0.6) = 0.24 > 0.16 = 0.2(1 - 0.2)$.
- **Вопрос** – как обобщить идею неопределенности на случай, когда случайная величина X может принимать несколько значений?

Мера неопределенности распределения (impurity measure)

Энтропия

- Рассмотрим дискретную случайную величину X .
- Чем с меньшей вероятностью X принимает то или иное значение, тем более неожиданным считается его возникновение.
- Определим меру неожиданности значения $x \in \text{supp}(X)$ как $g(P(X = x))$, где $g(\cdot)$ – строго убывающая функция. Обычно полагают $g(P(X = x)) = -\log_2(P(X = x))$.
- **Энтропия** отражает **меру неопределенности** в распределении случайной величины как ожидаемую неожиданность значения, принимаемого случайной величиной:

$$H(X) = E(-\log_2(P(X))) = - \sum_{x \in \text{supp}(X)} P(X = x) \log_2(P(X = x))$$

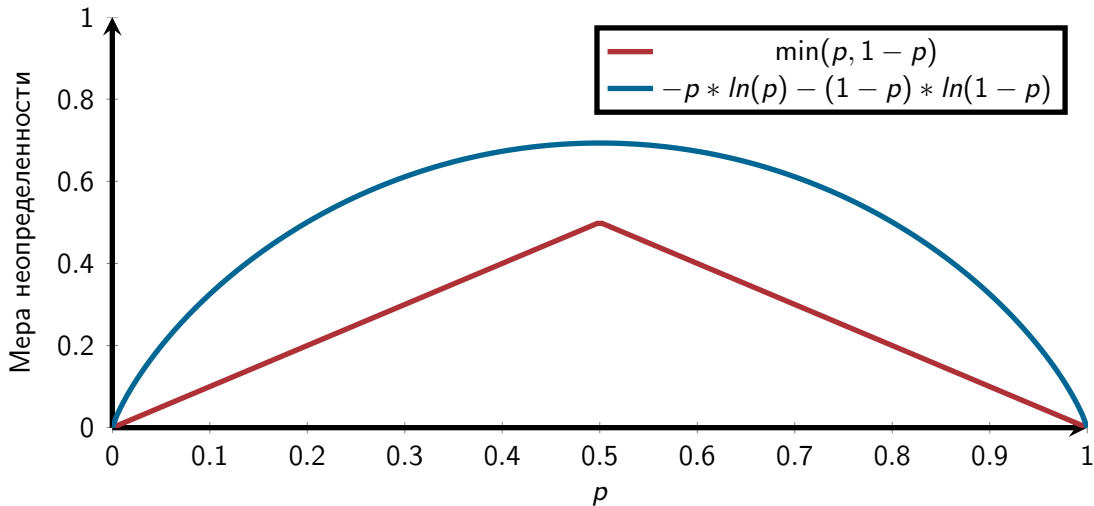
Пример:

Случайная величина X принимает значения 1, 5 и 10 с вероятностями 0.5, 0.3 и 0.2 соответственно. Энтропия этой случайной величины равна:

$$H(X) = -(0.5 \times \log_2(0.5) + 0.3 \times \log_2(0.3) + 0.2 \times \log_2(0.2)) \approx 1.49$$

Мера неопределенности распределения (impurity measure)

Визуализация для бинарного случая



Мера неопределенности распределения (impurity measure)

Выборочная энтропия

- Рассмотрим выборку X_1, \dots, X_n из дискретного распределения и ее реализацию x_1, \dots, x_n .
- Введем функцию индикатор и среднее значение индикатора, являющееся оценкой вероятности принятия того или иного значения:

$$I(X_i = x) = \begin{cases} 1, & \text{если } X_i = x \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad \hat{p}_x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(X_i = x)$$

- Обозначим через u_1, \dots, u_m все уникальные (без повторов) реализации x_i , встречающиеся в выборке (то есть $m \leq n$) и определим выборочную энтропию следующим образом:

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^m \hat{p}_{u_i} \log_2 (\hat{p}_{u_i})$$

- При помощи теоремы Слущкого нетрудно показать, что выборочная энтропия \hat{H} является состоятельной оценкой энтропии H .

Мера неопределенности распределения (impurity measure)

Пример расчета выборочной энтропии

- Имеется выборка с реализацией $x_1 = 1$, $x_2 = 5$, $x_3 = 1$, $x_4 = 0$, $x_5 = 5$.
- Оставляя лишь уникальные значения, получаем $u_1 = 0$, $u_2 = 1$, $u_3 = 5$.
- Оценим вероятности:

$$\hat{p}_0 = \frac{1}{5} \left(\underbrace{I(1=0)}_0 + \underbrace{I(5=0)}_0 + \underbrace{I(1=0)}_0 + \underbrace{I(0=0)}_1 + \underbrace{I(5=0)}_0 \right) = \frac{1}{5} = 0.2$$

$$\hat{p}_1 = \frac{1}{5} \left(\underbrace{I(1=1)}_1 + \underbrace{I(5=1)}_0 + \underbrace{I(1=1)}_1 + \underbrace{I(0=1)}_0 + \underbrace{I(5=1)}_0 \right) = \frac{2}{5} = 0.4$$

$$\hat{p}_5 = \frac{1}{5} \left(\underbrace{I(1=5)}_0 + \underbrace{I(5=5)}_1 + \underbrace{I(1=5)}_0 + \underbrace{I(0=5)}_0 + \underbrace{I(5=5)}_1 \right) = \frac{2}{5} = 0.4$$

- Посчитаем выборочную энтропию:

$$\hat{H} = -(0.4 \times \log_2(0.4) + 0.4 \times \log_2(0.4) + 0.2 \times \log_2(0.2)) \approx 1.52$$

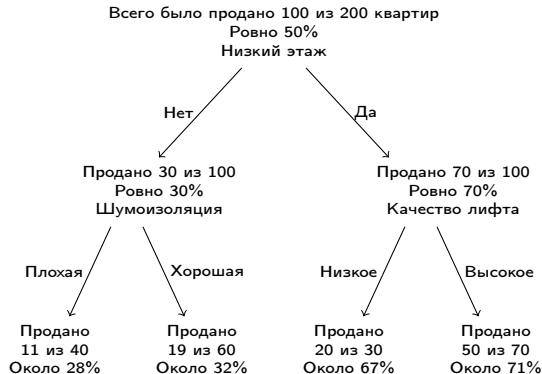
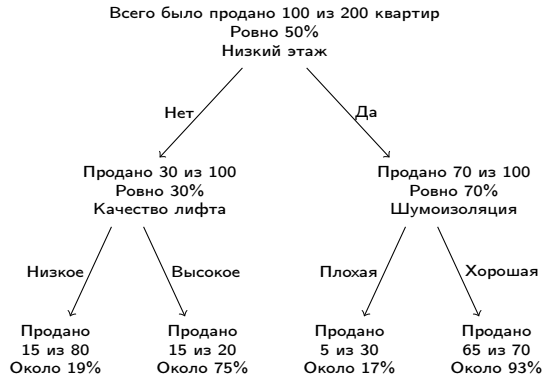
Решающее дерево

Основная идея

- **Проблема** – при использовании большого числа признаков возникает фрагментация данных, из-за которой оценки условных вероятностей могут обладать большой дисперсией, поскольку рассчитываются по малому числу наблюдений.
- **Решение** – рассматривать комбинацию не всех, а лишь наиболее информативных признаков.
- **Идея** – при некоторых значениях одних признаков, другие признаки могут быть более или менее информативны. Например, в задаче прогнозирования факта **продажи квартиры** за месяц, если нам известно, что квартира расположена **на низком этаже**, наличие **лифта** (при прочих равных важных характеристиках, таких как стоимость, площадь и качество района) вряд ли будет оказывать существенное влияние на то, как быстро будет продана соответствующая квартира.
- **Применение** – при оценивании условных вероятностей используем не все признаки, а поочередно отбираем наиболее информативные из них в зависимости от значений уже отобранных признаков.
- Например, если мы посчитали информативным разбить квартиры на те, что находятся на высоких и низких этажах, то далее квартиры на низких этажах можно разделить в зависимости от качества шумоизоляции, а квартиры, расположенные на высоких этажах – в зависимости от качества лифта.

Решающее дерево

Визуализация примера с квартирами в форме дерева решений



Вывод – левое дерево гораздо в большей степени снижает неопределенность в распределении продаж, чем правое.

Решающее дерево

Первый шаг алгоритма построения решающего дерева

- Через Y обозначим n -мерный вектор значений целевой переменной (target), а через X – матрицу признаков (features) размерности $n \times m$, где m – число признаков, а n – число наблюдений.
- Через X_{i*} будем обозначать i -ю строку матрицы признаков (наблюдение), а через X_{*j} обозначим j -й столбец (признак).
- Через $Y|X_{*j} = k$ обозначим подвектор значений целевой переменной, включающий все наблюдения i такие, что $X_{ij} = k$. Для простоты рассмотрим случай $k \in \{0, 1\}$, когда все признаки бинарные.
- Через n обозначим число наблюдений, то есть элементов вектора Y или строк матрицы X , а через n_j – количество 1 у признака X_{*j} , то есть число наблюдений в векторе $Y|X_{*j} = 1$.
- Определим **среднюю энтропию** (не то же самое, что условная) как:

$$\hat{H}(Y, X_{*j}) = \frac{n_j}{n} \hat{H}(Y|X_{*j} = 1) + \frac{n - n_j}{n} \hat{H}(Y|X_{*j} = 0)$$

Обозначение $\hat{H}(Y|X_{*i} = k)$ не эквивалентно условной энтропии, а лишь говорит о том, что выборочная энтропия считается по таким Y , что $X_{*j} = k$.

- На первом шаге выбираем признак, обеспечивающий наименьшую среднюю энтропию:

$$j = \underset{t \in \{1, \dots, m\}}{\operatorname{argmin}} \hat{H}(Y, X_{*t})$$

Пример

Кредитный скоринг

	Дефолт	Работа	Брак	Образование
Клиент 1	1	0	1	1
Клиент 2	1	1	1	1
Клиент 3	1	0	0	0
Клиент 4	1	1	0	0
Клиент 5	1	0	0	0
Клиент 6	0	1	1	0
Клиент 7	0	0	1	0
Клиент 8	0	1	0	0
Клиент 9	0	0	1	1
Клиент 10	0	1	1	0

- Дефолт – факт дефолта по кредиту (1 – наступил дефолт, 0 – не наступил дефолт).
- Работа – статус на рынке труда (1 – работает, 0 – не работает)
- Образование – наличие высшего образования (1 – есть, 0 – нет)
- Брак – брачный статус (1 – в браке, 0 – не в браке).

Пример

Первый вопрос

Таблица: Распределение целевой переменной в зависимости от признаков

	Всего	Дефолт = 1	Доля дефолтов	Энтропия	Средняя энтропия
Работа = 1	5	2	2/5	0.971	0.971
Работа = 0	5	3	3/5	0.971	0.971
Брак = 1	6	2	2/6	0.918	0.875
Брак = 0	4	3	3/4	0.811	0.875
Образование = 1	3	2	2/3	0.918	0.965
Образование = 0	7	3	3/7	0.985	0.965

Пример расчета средней энтропии для брака:

$$\hat{H}(\text{Дефолт}|\text{Брак} = 1) = - ((2/6) * \log_2(2/6) + (4/6) * \log_2(4/6)) \approx 0.918$$

$$\hat{H}(\text{Дефолт}|\text{Брак} = 0) = - ((3/4) * \log_2(3/4) + (1/4) * \log_2(1/4)) \approx 0.811$$

$$\hat{H}(\text{Дефолт}, \text{Брак}) = (6/10) * 0.918 + (4/10) * 0.811 \approx 0.875$$

Вывод – на первом шаге выбираем **Брак**, поскольку он обладает наименьшей средней энтропией.

Пример

Визуализация первого шага алгоритма построения решающего дерева

Брак (корень / root)

0

1

Лист / Leaf

	Дефолт	Работа	Образование
Клиент 3	1	0	0
Клиент 4	1	1	0
Клиент 5	1	0	0
Клиент 8	0	1	0

Энтропия 0.811; Доля дефолтов 3/4

Лист / Leaf

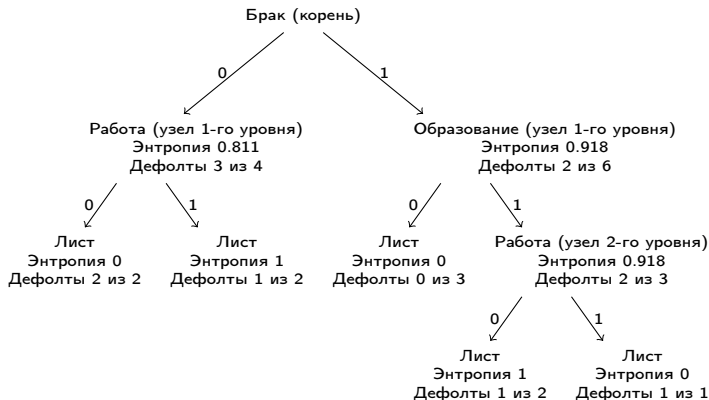
	Дефолт	Работа	Образование
Клиент 1	1	0	1
Клиент 2	1	1	1
Клиент 6	0	1	0
Клиент 7	0	0	0
Клиент 9	0	0	1
Клиент 10	0	1	0

Энтропия 0.918; Доля дефолтов 2/6

- Далее каждое из образовавшихся разбиений независимо друг от друга разделяется по одному из признаков по аналогии с тем, как это происходило на первом шаге.
- Процесс продолжается до тех пор, пока общая энтропия после разбиения не окажется больше, чем до разбиения.

Пример

Визуализация решающего дерева и оценивание вероятностей



В задаче кредитного скоринга вероятность дефолта индивида оценивается как доля дефолтов в листе, в которой попал индивид. Например, вероятность дефолта для женатого безработного индивида с высшим образованием составит $1/2$, а у холостого безработного $2/2 = 1$.

Решающее дерево

Непрерывные, порядковые и категориальные признаки

- Если признак X_{*j} измерен в непрерывной или порядковой шкале, то его перекодируют в бинарную $I(X_{*j} \geq q)$, используя пороговое значение q .
- Для простоты обозначений рассмотрим первый шаг (на остальных по аналогии).
- Подбирается $q \in ((X_{1j} + X_{2j}) / 2, \dots, (X_{(n-1)j} + X_{nj}) / 2)$, минимизирующее среднюю энтропию:

$$\hat{H}(Y, X_{*j}) = \frac{n_j}{n} \hat{H}(Y | I(X_{*j} \geq q) = 1) + \frac{n - n_j}{n} \hat{H}(Y | I(X_{*j} \geq q) = 0)$$

- Узел формируется по критерию $I(X_{*j} \geq q)$, если минимизированная по q средняя энтропия X_{*j} меньше, чем у других признаков.
- Например, узел может разветвляться для людей с доходом неменьше 50 тысяч рублей и меньше 50 тысяч рублей.
- В отличие от бинарных переменных, один и тот же порядковый или непрерывный признак может возникать несколько раз в различных узлах, но с разными значениями q .
- Например, тех, кто зарабатывает не больше 50 тысяч рублей, в очередном узле можно разбить на тех, кто зарабатывает до 30 тысяч рублей и от 30 до 50 тысяч рублей.
- Категориальные признаки обычно превращают в дамми-переменные, предварительно объединяя схожие категории.

Регрессионный анализ

Основная идея

- Ранее мы рассматривали лишь задачу классификации, то есть прогнозирования значения категориальных целевых переменных. Однако, в машинном обучении также популярен **регрессионный анализ**, под которым понимается прогнозирование целевых переменных, измеряемых в непрерывной шкале: прибыль, расходы, число привлеченных клиентов за рассматриваемый период и т. д.
- В классификационной задаче для получения прогноза сперва, как правило, оценивается условная вероятность $P(Y_i|X_i)$. Затем прогноз строится как функция от оценки этой вероятности, например, в виде $\hat{Y}_i = I(\hat{P}(Y_i = 1|X_i) \geq 0.5)$.
- По аналогии в регрессионном анализе в качестве прогноза Y_i обычно используется оценка условного математического ожидания $E(Y_i|X_i)$, то есть $\hat{Y}_i = \hat{E}(Y_i|X_i)$.

Регрессионный анализ

Регрессионное дерево

- Если целевая переменная является непрерывной (прибыль, объем продаж и т. д.), то по аналогии с решающим деревом можно построить **регрессионное дерево**.
- **Основная идея** – в случае с непрерывными переменными меру неопределенности естественно измерять как дисперсию. Поэтому, вместо средней энтропии обычно минимизируется средняя дисперсия после разбиения.
- Например, если все признаки бинарные, то на первом шаге в качестве признака X_{*j} , использующегося для разбиения, будет выбран тот, что минимизирует **средневзвешенную дисперсию**:

$$\widehat{Var}(Y, X_{*j}) = \frac{n_j}{n} \widehat{Var}(Y|X_{*j} = 1) + \frac{n - n_j}{n} \widehat{Var}(Y|X_{*j} = 0) =$$
$$= \frac{1}{n} \left(\sum_{i: X_{ji}=1} (Y_i - \bar{Y}_{j1})^2 + \sum_{i: X_{ji}=0} (Y_i - \bar{Y}_{j0})^2 \right), \text{ где } \bar{Y}_{j1} = \frac{1}{n_j} \sum_{i: X_{ji}=1} Y_i \text{ и } \bar{Y}_{j0} = \frac{1}{n - n_j} \sum_{i: X_{ji}=0} Y_i$$

Где n_j – число наблюдений таких, что $X_{ji} = 1$, а \bar{Y}_{j0} и \bar{Y}_{j1} – выборочные средние, посчитанные по таким Y_i , что $X_{ji} = 0$ и $X_{ji} = 1$ соответственно.

- В качестве **прогноза** целевой переменной $\hat{E}(Y_i|X_i)$, как правило, используется обычное **выборочное среднее** значение этой переменной в листе.

Регрессионный анализ

Метод ближайших соседей для регрессии

- Метод ближайших соседей можно также применять в задаче регрессионного анализа.
- Прогноз $\hat{E}(Y_i|X_i)$ обычно оценивается как среднее значение целевой переменной Y_i ближайших соседей.
- Рассмотрим выборку $X_1 = (0, 1)$, $X_2 = (1, 2)$, $X_3 = (0, 6)$, $X_4 = (2, 2)$, $Y = (5, 1, 7, 12)$ и найдем $k = 3$ ближайших соседа для $x = (1, 3)$ с помощью дистанции Манхэттен:

$$\begin{aligned}d(x, X_1) &= |1 - 0| + |3 - 1| = 3 & d(x, X_2) &= |1 - 1| + |3 - 2| = 1 \\d(x, X_3) &= |1 - 0| + |3 - 6| = 4 & d(x, X_4) &= |1 - 2| + |3 - 2| = 2\end{aligned}$$

- Ближайшими соседями x являются X_1, X_2 и X_4 .
- Поскольку $Y_1 = 5$, $Y_2 = 1$ и $Y_4 = 12$, то $\hat{E}(Y_i|X_i = x) = \frac{18}{3} = 6$.

- Оценить качество регрессионной модели можно с помощью следующих метрик:

$$\begin{aligned} \text{MSE} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2 & \text{RMSE} &= \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2} = \sqrt{\text{MSE}} \\ \text{MAE} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\hat{Y}_i - Y_i| & \text{MAPE} &= \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{\hat{Y}_i - Y_i}{Y_i} \right| \end{aligned}$$

- Чем меньше значения данных метрик, тем лучше прогнозы модели.
- Метрики RMSE и MSE предпочтительны в сравнении с MAE в случаях, когда большие отклонения прогнозных значений от истинных должны штрафроваться заметно сильнее, чем малые.
- Метрика MAPE крайне удобна в плане интерпретации, поскольку показывает, насколько процентов модель в среднем ошибается. Однако, эта метрика плохо работает при наличии в выборке Y_i , близких к нулю, поскольку в таких случаях процентные отклонения могут оказаться чрезвычайно велики даже при очень малых по абсолютной величине отклонениях.

Баланс дисперсии и смещения

Условное математическое ожидание

- **Важно** – целевую переменную (в том числе категориальную) можно выразить через случайную ошибку и условное математическое ожидание:

$$\varepsilon_i = Y_i - E(Y_i|X_i) \implies E(\varepsilon_i|X_i) = 0 \text{ и } Y_i = E(Y_i|X_i) + \varepsilon_i$$

- Напомним, что:

$$E(g(X_i)Y_i|X_i) = g(X_i)E(Y_i|X_i) \quad E(E(Y_i|X_i)) = E(Y_i)$$

- Предположим, что для прогноза Y_i мы используем функцию $F(X_i)$.
- **Вопрос** – какая функция $\hat{Y}_i = F(X_i)$ окажется наилучшей с точки зрения минимизации **ожидаемой среднеквадратичной ошибки прогноза**?
- **Ответ** – такой функцией окажется условное математическое ожидание, поскольку:

$$\begin{aligned} E(\text{MSE}|X_i) &= E((Y_i - F(X_i))^2 | X_i) = E([E(Y_i|X_i) - \varepsilon_i - F(X_i)]^2 | X_i) = \\ &= E([E(Y_i|X_i) - F(X_i)]^2) - 2E([E(Y_i|X_i) - F(X_i)] \varepsilon_i) + E(\varepsilon_i^2) = \\ &= \dots + 2E(E([E(Y_i|X_i) - F(X_i)] \varepsilon_i | X_i)) + \dots = \dots + 2E([E(Y_i|X_i) - F(X_i)] \underbrace{E(\varepsilon_i | X_i)}_0) + \dots = \\ &= E([E(Y_i|X_i) - F(X_i)]^2) + E(\varepsilon_i^2) \geq E(\varepsilon_i^2) = E([Y_i - E(Y_i|X_i)]^2) \end{aligned}$$

Баланс дисперсии и смещения

Среднеквадратическая ошибка прогноза

- **Проблема** – на практике мы не знаем $E(Y_i|X_i)$, поэтому вынуждены оценивать его (или другую характеристику распределения, максимизирующую таргетируемый критерий точности прогнозов) на обучающей выборке.
- Рассмотрим функцию $\hat{y} = \hat{y}(x, X, Y)$, которая была оценена на обучающей выборке (X, Y) и используется для прогнозирования целевой переменной $y = E(y|x) + \varepsilon$ с помощью вектора признаков x на тестовой выборке.
- Запишем декомпозицию ожидаемой среднеквадратической ошибки прогноза:

$$E(MSE|x) = E((y - \hat{y})^2 | x) = \underbrace{\text{Var}(\hat{y}|x)}_{\text{дисперсия}} + \underbrace{(E(y|x) - E(\hat{y}|x))^2}_{\text{смещение}} + \underbrace{\text{Var}(\varepsilon|x)}_{\text{шум}}$$

- **Вывод** – мы не можем повлиять на шум (без дополнительных признаков), поэтому необходимо искать модель для прогнозирования, минимизирующую дисперсию и смещение прогноза.
- **Важно** – как правило, чем выше (ниже) сложность модели, тем больше (меньше) дисперсия и меньше (больше) смещение ее прогнозов.
- **Примечание** – схожие разложения возможны и при иных метриках точности, отличных от MSE, а также для категориальных целевых переменных.

Баланс дисперсии и смещения

Проблема переобучения решающих и регрессионных деревьев

- Глубина листа определяется уровнем узла, из которого он выходит.
- **Проблема** – чем глубже расположен лист, используемый для прогнозирования, тем, как правило, меньше смещение прогноза (ведь мы используем информацию о большом количестве признаков), но тем больше дисперсия прогноза (поскольку на большой глубине, обычно, остается мало наблюдений).
- В результате среднеквадратическая ошибка прогнозов, полученных с помощью слишком глубоких листов, может оказаться достаточно высокой.
- Таким образом, решающие и регрессионные деревья с большим (относительно числа наблюдений) количеством признаков (сложные модели) склонны к переобучению, поскольку их прогнозы обладают низким смещением, но высокой дисперсией.
- Проблема переобучения возникает и в деревьях с непрерывными признаками, поскольку каждый из них может использоваться большое число раз.

Баланс дисперсии и смещения

Способы поиска оптимального баланса для решающих и регрессионных деревьев

- Наиболее популярные походы к снижению дисперсии прогнозов деревьев:
 - Установить максимальную **глубину дерева**, то есть запретить формирование узлов более определенного уровня.
 - **Постричь дерево** (pruning), например, заменив узлы на листья в случае, если точность прогнозов из листа на валидационной выборке лучше, чем прогнозов из узла.
 - Воспользоваться **ансамблем** методов, например, применив **случайный лес**.
- **Проблема** – обычно снижение дисперсии сопровождается ростом смещения, из-за чего среднеквадратическая ошибка прогноза может возрасти.
- **Решение** – с помощью кросс-валидации найти оптимальный метод снижения дисперсии.
- Например, с помощью кросс-валидации ориентируясь на RMSE можно подобрать оптимальную глубину регрессионного дерева.
- **Примечание** – решающее дерево без ограничений на глубину совпадает с Байесовским классификатором.

- Идея ансамблей заключается в объединении прогнозов нескольких моделей для получения более точного итогового прогноза.
- Например, итоговый прогноз может быть получен как результат усреднения (необязательно с равными весами) прогнозов нескольких моделей.
- Идея ансамблей схожа с идеей усреднения прогнозов различных экспертов.
- Для построения ансамблей используются различные техники. Наиболее популярными подходами являются **бэггинг** и **бустинг**.

Бэггинг (bagging / bootstrap aggregation)

Алгоритм реализации

- **Бэггинг** можно представить как двухшаговую процедуру обучения модели с использованием бутстрапированных выборок.
- На **первом шаге** формируются k **бутстрапированных выборок** – изначальная выборка из признаков и целевой переменной (X, Y) превращается в новую выборку $(X^{(b)}, Y^{(b)})$, где $b \in \{1, \dots, k\}$, с таким же числом наблюдений, за счет **выбора с возвращением**, где каждое наблюдение изначальной выборки может с равной вероятностью попасть в новую.
- Если $k = 3$ и изначальная выборка с одним признаком была $x = (1, 2, 3)$, $y = (4, 5, 6)$, то новые (бутстрапированные) выборки, полученные случайным выбором с возвращением, могут иметь вид, например, $X^{(1)} = (2, 1, 1)$, $Y^{(1)} = (5, 4, 4)$, $X^{(2)} = (3, 1, 2)$, $Y^{(2)} = (6, 4, 5)$ и $X^{(3)} = (3, 3, 3)$, $Y^{(3)} = (6, 6, 6)$.
- На **втором шаге** с использованием каждой выборки $(X^{(b)}, Y^{(b)})$ оценивается модель (например, решающее дерево) и в качестве прогноза выбирается значение, спрогнозированное наибольшим числом моделей (например, деревьев).
- Если целевая переменная является непрерывной, то в качестве прогноза можно использовать среднее, посчитанное по прогнозам моделей.

Бэггинг (bagging / bootstrap aggregation)

Почему усреднение повышает точность прогноза?

- Обозначим через $\hat{Y}_i^{(b)}$ прогноз целевой переменной для i -го наблюдения, полученный по b -й модели.
- Поскольку при бэггинге все прогнозы были получены по одной и той же модели, то они одинаково распределены, а значит можем положить $E(\hat{Y}_i^{(b)}) = \mu$, $\text{Var}(\hat{Y}_i^{(b)}) = \sigma^2$ и $\text{Cov}(\hat{Y}_i^{(b_1)}, \hat{Y}_i^{(b_2)}) = \rho\sigma^2$, где ρ – корреляция между различными прогнозами и $b_1 \neq b_2$.
- Смещение прогнозов от усреднения не изменяется, поскольку:

$$E\left(\frac{1}{k} \sum_{b=1}^k \hat{Y}_i^{(b)}\right) = \frac{k\mu}{k} = \mu$$

- Рассмотрим дисперсию усредненного прогноза:

$$\text{Var}\left(\frac{1}{k} \sum_{b=1}^k \hat{Y}_i^{(b)}\right) = \underbrace{\frac{k\sigma^2}{k^2}}_{\text{сумма дисперсий}} + \underbrace{\frac{k(k-1)\rho\sigma^2}{k^2}}_{\text{сумма ковариаций}} = \rho\sigma^2 + \frac{(1-\rho)\sigma^2}{k}$$

При $k \rightarrow \infty$ дисперсия прогноза стремится к $\rho\sigma^2$, то есть не больше σ^2 – дисперсии оценки одного прогноза. То есть дисперсия усредненного прогноза меньше, чем индивидуального.

- **Вывод** – при бэггинге важно снижать корреляцию между прогнозами ρ , чего можно добиться привнося случайность в принцип построения рассматриваемых моделей, например, случайным образом каждый раз отбирая признаки, что, впрочем, может увеличить σ^2 .

Бэггинг (bagging / bootstrap aggregation)

Ошибка неотобранных элементов (out-of-bag error)

- Обозначим через $\hat{y}^{(b)}(x)$ функцию прогнозов b -й модели ансамбля, то есть обученной на $(X^{(b)}, Y^{(b)})$.
- Рассмотрим все модели, которые не были обучены на i -м наблюдении. Обозначим множество индексов этих моделей как O_i , а их количество через n_i . Например, если наблюдение $i = 5$ не попало лишь в выборки $(X^{(3)}, Y^{(3)})$ и $(X^{(7)}, Y^{(7)})$, то $O_5 = \{3, 7\}$ и $n_i = 2$.
- Обозначим через $\hat{y}^{(-i)}(X_i)$ прогноз i -го наблюдения, полученный с использованием лишь тех моделей ансамбля, которые не обучались на i -м наблюдении:

$$\hat{y}^{(-i)}(X_i) = \frac{1}{n_i} \sum_{b \in O_i} \hat{y}^{(b)}(X_i)$$

- Обозначим как Z множество индексов наблюдений, не использовавшихся для обучения по крайней мере одной из моделей ансамбля. Через z обозначим число таких наблюдений и предположим, что $z \geq 1$.
- **Ошибка неотобранных элементов** (OOB error - out-of-bag error) рассчитывается исходя из критерия качества прогноза, например, MSE или MAPE в регрессии, либо ACC в классификации:

$$\text{Регрессия : OOB} = \frac{1}{z} \sum_{i \in Z} \left(\hat{y}^{(-i)}(X_i) - Y_i \right)^2 \quad \text{Классификация : OOB} = 1 - \frac{1}{z} \sum_{i \in Z} I \left(\hat{y}^{(-i)}(X_i) = Y_i \right)$$

- **Интуиция** – мы оцениваем качество ансамбля исходя из способностей его моделей прогнозировать наблюдения, на которых они не обучались.
- **Преимущество** – гораздо более быстрый чем кросс-валидация способ оценивания прогностических способностей ансамблей.

Бэггинг (bagging / bootstrap aggregation)

Пример расчета ошибки неотобранных элементов

- В качестве простого примера рассмотрим бэггинг, в котором в качестве базового используется метод одного ближайшего соседа с расстоянием Манхэттен (для регрессии).

X_i	1	2	3	1	2	2	2	3	2	3	3	3	1	1	1	3	3	2
Y_i	2	4	6	2	4	4	4	6	4	6	6	6	2	2	2	6	6	4
Выборка	Исходная			Бутстрап 1			Бутстрап 2			Бутстрап 3			Бутстрап 4			Бутстрап 5		
$\hat{y}(1)$	2			2			4			6			2			4		
$\hat{y}(2)$	4			4			4			6			2			4		
$\hat{y}(3)$	6			4			6			6			2			6		

- Спрогнозируем каждое наблюдение используя лишь не обучавшиеся на нем модели:

$$O_1 = \{2, 3, 5\} \implies \hat{y}^{(-1)}(1) = (4 + 6 + 4)/3 = 14/3$$

$$O_2 = \{3, 4\} \implies \hat{y}^{(-2)}(2) = (6 + 2)/2 = 4$$

$$O_3 = \{1, 4\} \implies \hat{y}^{(-3)}(3) = (4 + 2)/2 = 3$$

- Посчитаем OOB ошибку, руководствуясь MSE:

$$OOB = \frac{(14/3 - 2)^2 + (4 - 4)^2 + (3 - 6)^2}{3} = \frac{145}{27}$$

Случайный лес

Алгоритм построения

- **Случайный лес** это бэггинг, в котором в качестве модели применяется решающее или регрессионное дерево.
- Каждое достаточно глубокое отдельное дерево страдает от проблемы переобучения, но поскольку за счет бэггинга деревья обучаются на различных данных, их усредненный прогноз уже не подвержен этой проблеме, если прогнозы не сильно коррелированы (деревья обученные на различных бутстрапированных выборках обычно достаточно сильно отличаются друг от друга).
- В каждом дереве случайного леса при каждом очередном разбиении узла используются не все признаки, а лишь **часть** из них, выбираемая случайным образом.
- Выбор случайных признаков **снижает корреляцию прогнозов деревьев**, построенных на различных бутстрапированных выборках, и тем самым уменьшает дисперсию итогового прогноза, но может повышать смещение.
- Число случайно выбираемых признаков и глубина деревьев являются гиперпараметрами. Обычно они подбираются на основании кросс-валидации (CV) или ошибки неотобранных элементов (OOB).
- Иногда прогноз получается не за счет усреднения, а с весами, пропорциональными качеству прогнозов соответствующих деревьев, что позволяет снизить негативный эффект наличия малоинформативных признаков на качество прогнозов (tree weighted random forest).

Случайный лес

Ранжирование информативности признаков (подбор оптимальных признаков)

- Случайный лес часто применяют для того, чтобы определить наиболее информативные признаки.
- Существуют различные способы измерения информативности.
- **Перестановочная важность** (permutation importance) – для измерения важности j -го признака можно случайным образом перемешать все его значения в данных. Например, перемешать возраста индивидов в случайном порядке. После этого перестановочная важность рассчитывается как разность в некотором критерии качества прогнозов (удобно ориентироваться на ООВ ошибку) на исходных и перемешанных данных. Чем больше окажется разница, тем более существенным является j -й признак.
- **Важность в снижении неопределенности** (impurity importance) – информативными можно считать те признаки, которые обычно существенно снижают меру неопределенности в деревьях.
- **Проблема 1** – эти методы склонны серьезно переоценивать информативность категориальных переменных, принимающих большое число значений.
- **Проблема 2** – описанные процедуры чувствительны к качеству исходной модели. Поэтому если исходная модель некачественная, то информативные признаки могут быть отобраны некорректно.
- **Применение** – отобранные случайным лесом информативные признаки могут применяться для построения других моделей, например, Байесовских сетей.