

### Артем Груздев

# Прогнозное моделирование в R и Python

Модуль 1. Введение в метод деревьев решений



Москва — 2017

### СОДЕРЖАНИЕ

Модуль 1 Введение в метод деревьев решений	3
Лекция 1.1. Описание метода деревьев решений	
Лекция 1.2. Краткий обзор методов деревьев решений CHAID и CART	
Лекция 1.3. Преимущества и недостатки деревьев решений	
Лекция 1.4. Задачи, выполняемые с помощью деревьев решений	

#### Модуль 1 Введение в метод деревьев решений

#### Лекция 1.1. Описание метода деревьев решений

Как и регрессионный анализ, деревья решений являются методом взаимосвязи изучения статистической между олной зависимой переменной (предикторными) несколькими независимыми переменными. При зависимой переменной понимается ЭТОМ ПОД «поведение» которой мы хотим переменная, предсказать, предикторами подразумеваются переменные, которые помогают нам это сделать. Базовое отличие метода деревьев решений от регрессионного анализа заключается в том, что взаимосвязь между значением зависимой переменной и значениями независимых переменных представлена не в виде общего прогнозного уравнения, а в виде древовидной структуры, которую получают с помощью иерархической сегментации данных. Берется весь обучающий набор данных, называемый корневым узлом, и разбивается на два или более узлов (сегментов) так, чтобы наблюдения, попавшие в разные узлы, максимально отличались друг от друга по зависимой переменной (например, выделяем два узла с наибольшим и наименьшим процентом «плохих» заемщиков). В роли правил разбиения, максимизирующих эти различия, выступают значения независимых переменных (пол, возраст, доход и др.). Качество разбиения оценивается статистических критериев. Обычно оценка разбиения происходит в два этапа. На первом этапе по каждому предиктору осуществляется наилучшее правило разбиения, а на втором этапе из наилучших правил, найденных по каждому предиктору на первом этапе, выбирается самое лучшее. Правила отмечаются на ветвях – линиях, которые соединяют разбиваемый узел с узлами, полученными в результате разбиения. Для каждого узла вычисляются вероятности в процентных долей категорий зависимой переменной зависимая переменная является категориальной) или средние значения переменной (если зависимая переменная количественной). В результате выносится решение – спрогнозированная категория зависимой переменной (если зависимая переменная является категориальной) или спрогнозированное среднее значение зависимой переменной (если зависимая переменная является количественной).

\_

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Поэтому зависимую переменную еще называют объясняемой переменной, а предикторы – объясняющими переменными. Кроме того, в качестве синонима «зависимая переменная» могут использоваться термины «целевая переменная», «результирующая переменная», «отклик», «выходная переменная». Предикторы еще называют факторами, входными переменными.

Аналогичным образом, каждый узел, получившийся в результате разбиения корневого узла, разбивается дальше на узлы, т.е. узлы внутри узла, и т.д. Этот процесс продолжается до тех пор, пока есть возможность разбиения на узлы. Данный процесс сегментации называется рекурсивным разделением. Получившаяся иерархическая структура, характеризующая взаимосвязь между значением зависимой переменной и значениями независимых переменных, называется деревом.

Иногда для обозначения разбиваемого узла применяется термин родительский узел. Новые узлы, получившиеся в результате разбиения, узлами (или узлами-потомками). называются дочерними разбивается впоследствии дочерний узел сам. родительским узлом. Окончательные узлы, которые в дальнейшем не называются терминальными узлами дерева. Их еще называют листьями, потому что в них рост дерева останавливается. Лист представляет собой наилучшее окончательное решение, выдаваемое Здесь определяем группы клиентов, обладающие деревом. МЫ желаемыми характеристиками (например, тех, кто погасит кредит или откликнется на наше маркетинговое предложение).

Обратите внимание, если вы прогнозируете вероятность значения категориальной зависимой переменной по соответствующим значениям предикторов, дерево решений называют деревом классификации (рис. 1.1). Например, дерево классификации строится для вычисления вероятности отклика у заемщика (на основе спрогнозированной вероятности мы относим его к неоткликнувшемуся – к классу 0 или к откликнувшемуся – классу 1). Если дерево решений используется для чтобы спрогнозировать среднее значение количественной зависимой переменной по соответствующим значениям предикторов, его называют деревом регрессии (рис. 1.2). Например, дерево регрессии строится, чтобы вычислить средний размер вклада у клиента.

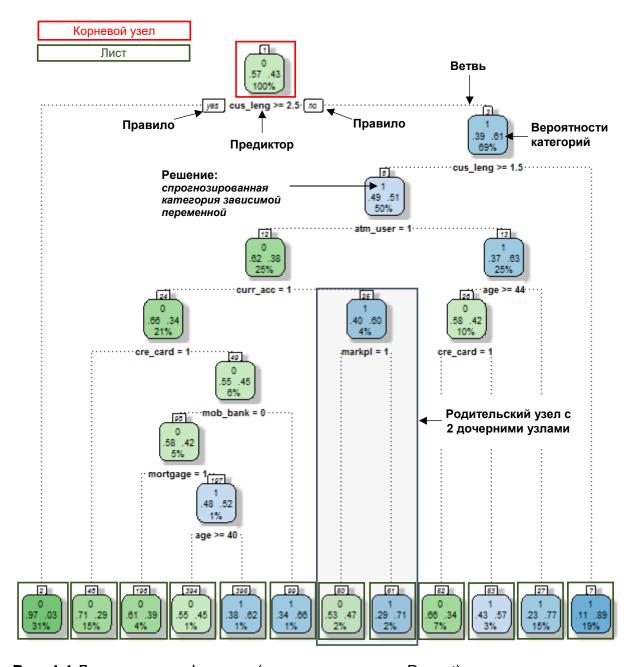


Рис. 1.1 Дерево классификации (на примере пакета R rpart)

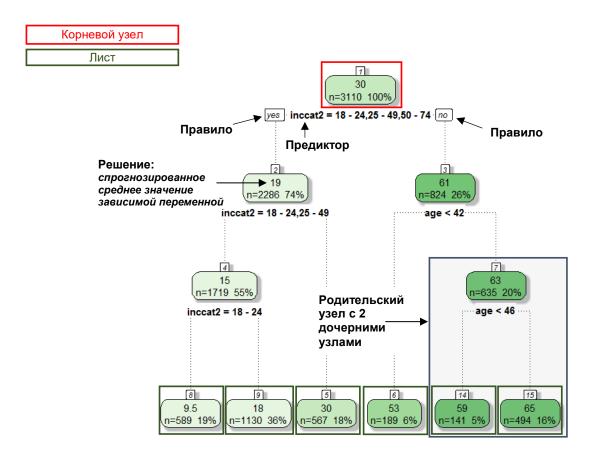


Рис. 1.2 Дерево регрессии (на примере пакета R rpart)

Если визуализировать работу алгоритма дерева решений, то мы увидим, что алгоритм последовательно разбивает данные на прямоугольники, параллельные осям координат. Проиллюстрируем это на примере бинарного дерева решений, то есть когда узел-родитель может иметь только два узла-потомка.

У нас есть набор данных, предикторами являются переменные *Возраст* и *Доход*, категориальная зависимая переменная — *Статус клиента*. Первое разбиение набора данных происходит по предиктору *Возраст*. Затем узел с определением ≤ 30 разбивается по предиктору *Доход*.

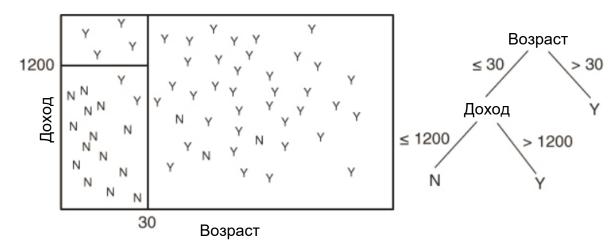


Рис. 1.3 Границы принятия решения для дерева классификации

Обратите внимание, что в зависимости от шкалы (уровня измерения) зависимой переменной и независимых переменных деревья решений применяют различные критерии для отбора предикторов и разбиения узлов. Поэтому важно задать правильную шкалу переменной. В R переменные могут иметь три типа шкалы: количественную, порядковую и номинальную. Подготовку данных в Python мы будем выполнять с помощью библиотеки pandas, в ней переменные могут иметь два типа шкалы: количественную и категориальную.

Количественная шкала содержит информацию о расстояниях между уровнями переменной, порядке уровней и количестве объектов в уровнях. Пример предиктора с количественной шкалой — переменная Возраст. Например, мы знаем, что расстояние между 25 и 30 в два раза меньше, чем расстояние между 30 и 40, 30-летний на 5 лет старше 25-летнего. Мы можем упорядочить уровни по нарастанию или убыванию интенсивности определенного признака (например, по увеличению возраста): после 25 следует 30 и 30-летний старше 25-летнего. Наконец, мы можем сказать, сколько в выборке человек с тем или иным уровнем (значением) возраста.

В R количественным переменным соответствуют векторы типа numeric (когда значения представлены в виде чисел с плавающей точкой, например, доход клиента составляет 36500.60 рублей) и векторы типа integer (когда значения представлены в виде целых чисел, например, доход клиента составляет 36000 рублей). В питоновской библиотеке pandas количественным переменным будут соответствовать переменные типа float (аналог векторов типа numeric в R) и переменные типа int (аналог векторов типа integer в R).

Порядковая шкала содержит информацию о порядке уровней и количестве объектов в уровнях. Пример предиктора с порядковой шкалой – переменная *Доход*, разбитая на уровни *низкий*, *средний*, *высокий*. Здесь уже нельзя сказать, что расстояние между уровнями

низкий и средний больше или меньше в определенное количество раз расстояния между уровнями средний и высокий. Мы не можем утверждать, что человек со средним доходом на *п*-ное количество единиц богаче, чем человек с низким доходом. Однако можно упорядочить уровни по нарастанию или убыванию интенсивности определенного признака: сначала следует уровень низкий, затем уровень средний и потом уровень *высокий*. Респонденты, относящиеся к уровню *средний*, обладают меньшим доходом сравнению респондентами, ПО относящимися к уровню высокий, то есть демонстрируют меньшую интенсивность признака. Также мы можем сказать, сколько в выборке человек с тем или иным уровнем дохода.

В R порядковым переменным соответствуют векторы типа ordered factor (наборы упорядоченных числовых кодов, предназначенных для хранения строковых значений). В питоновской библиотеке pandas для порядковой переменной не предусмотрено отдельного типа, поэтому такие переменные представляют как переменные типа int или переменные типа object.

Номинальная шкала содержит только информацию о количестве объектов в уровнях. Пример предиктора с номинальной шкалой – переменная *Регион*, который имеет уровни *Алтайский край*, *Новосибирская область*, *Красноярский край*, *Кемеровская область*. Мы ничего не можем сказать о расстояниях между уровнями, о порядке уровней. Мы можем лишь судить о количестве респондентов, проживающих в каждом регионе.

В R номинальным переменным соответствуют векторы типа factor (наборы неупорядоченных числовых кодов, предназначенных для хранения строковых значений). В библиотеке pandas номинальным переменным будут соответствовать переменные типа object. Кроме того в R номинальные переменные можно представить в виде векторов типа character, у которого каждый элемент является строкой. В библиотеке pandas для этого можно использовать тип str.

ТИП ПЕРЕМЕННОЙ	Количественная	Порядковая	Номинальная
Пример переменной	Количество лет, потраченных на образование (от 0 до 20 лет)	Уровень образования (начальное, среднее, высшее)	Образовательный статус (нет образования/ есть образование)
Информация о расстоянии между уровнями	Есть	Нет	Нет
Информация о порядке уровней	Есть	Есть	Нет
Информация о количестве наблюдений в уровнях	Есть	Есть	Есть
Соответствующий тип данных в R	integer numeric	ordered factor	factor character
Соответствующий тип данных в питоновской библиотеке pandas	int float	представляют как object или как int	object str

Рис. 1.4 Три типа шкалы

#### Лекция 1.2. Краткий обзор методов деревьев решений СНАІО и CART

В настоящее время наиболее распространенными методами деревьев решений являются CHAID и CART.

**CHAID** (расшифровывается как *Chi-square Automatic Interaction Detector* — *Автоматический обнаружитель взаимодействий*) используется процедурой **Деревья классификации** по умолчанию. Он был разработан Гордоном Каасом в 1980 году и представляет собой метод на основе дерева решений, который исследует взаимосвязь между предикторами и зависимой переменной с помощью статистических тестов.

Каждый раз для разбиения узла выбирается предиктор, сильнее всего взаимодействующий с зависимой переменной. Перед этим категории каждого предиктора объединяются, если они не имеют между собой зависимой статистически значимых отличий ПО отношению К переменной, категории, которые дают значимые отличия по зависимой переменной, рассматриваются как отдельные. Зависимая переменная может быть измерена в категориальной шкале. Предикторы могут быть только категориальными переменными (количественные переменные должны быть предварительно преобразованы в категориальные с помощью биннинга).

CHAID позволяет осуществлять многомерные расщепления узлов. Каждый узел при разбиении может иметь более 2 потомков, поэтому CHAID имеет тенденцию выращивать более раскидистые деревья, чем бинарные методы. Вместе с тем из-за жестких статистических критериев

расщепления нередко дерево СНАІО получается нереалистично коротким и тривиальным («грубое» дерево), поэтому требуется тонкая настройка уровней значимости для объединения категорий и разбиения узлов. По сравнению с другими методами СНАІО характеризуется умеренным временем вычислений.

Помимо прочего, метод CHAID обладает собственным способом обработки пропущенных значений. Пропуски рассматриваются как отдельная фактическая категория. В ряде случаев это имеет смысл. Например, отказ отвечать на вопрос о доходе или занятости может оказаться предсказательной категорией для зависимой переменной.

**CART** (расшифровывается как Classification and Regression Tree — Деревья классификации и регрессии) был разработан в 1974-1984 годах профессорами статистики Лео Брейманом (Калифорнийский университет в Беркли), Джеромом Фридманом (Стэнфордский университет), Ричардом Олшеном (Калифорнийский университет в Беркли) и Чарльзом Стоуном (Стэнфордский университет).

Для построения дерева метод CART использует меры неоднородности. Эти меры используют принцип уменьшения неоднородности в узле.

Каждый раз расщепление узла происходит так, чтобы узлы-потомки стали более однородными, чем его узел-родитель. В абсолютно однородном узле все наблюдения имеют одно и то же значение целевой переменной (все объекты принадлежат к одной и той же категории целевой переменной). Такой узел еще называют «чистым» и мы получаем максимально однозначный прогноз.

Зависимая переменная может быть категориальной или количественной переменной. Предикторы могут быть количественными или категориальными переменными.

CART позволяет выполнять только одномерные расщепления узлов. Каждый узел при разбиении может иметь только 2 потомков. Поэтому CART имеет тенденцию выращивать высокие деревья с большим количеством уровней.

Часто деревья CART получаются слишком детализированные, имеют много узлов и ветвей, сложны для интерпретации, при этом усложнение дерева не приводит к повышению прогностической способности дерева. Для упрощения структуры дерева и повышения качества модели в методе CART предусмотрена возможность отсечения ветвей (прунинг). Прунинг позволяет получить дерево «подходящего размера», избежать построения ветвистых, усложненных деревьев и при этом достичь лучшего качества модели.

Для обработки наблюдений, у которых пропущено значение в предикторе, используются суррогаты — другие предикторы, имеющие сильную корреляцию с исходной независимой переменной. Таким

образом, разбиение, задаваемое суррогатом, будет наиболее близко к разбиению, задаваемому исходным предиктором, по которому имеются пропуски. Метод CART требует большее время вычислений по сравнению с другими методами.

Ниже на рис. 1.8 приводится таблица сходств и различий между методами CHAID и CART.

Характеристика метода	CHAID	CART
Категориальная зависимая переменная	Да	Да
Количественная зависимая переменная	Нет	Да
Категориальные предикторы	Да	Да
Количественные предикторы	Нет	Да
Тип разбиения	Множественный	Бинарный
Отбор предикторов и разбиение	Статистические тесты	Меры неоднородности
Время вычислений	Умеренное	Большое
Обработка пропущенных значений в предикторах	Да, обрабатываются как отдельная категория	Да, для разбиения используется суррогат

Рис. 1.5 Отличие методов CHAID и CRT

## Лекция 1.3. Преимущества и недостатки деревьев решений

Метод деревьев решений обладает рядом преимуществ. Главное из них — это наглядность представления результатов (в виде иерархической структуры дерева). Деревья решений позволяют работать с большим числом независимых переменных. На вход можно подавать все существующие переменные, алгоритм сам выберет наиболее значимые среди них, и только они будут использованы для построения дерева (автоматический отбор предикторов). Однако при этом для некоторых методов (например, для СНАІD) может потребоваться категоризация количественных предикторов, при которой теряется часть информации переменной.

Деревья решений более эффективны по сравнению с регрессионным анализом в тех случаях, когда взаимосвязи между предикторами и зависимой переменной является нелинейными, переменные имеют несимметричные распределения, наблюдается большое количество коррелирующих между собой переменных, взаимодействия высоких порядков. Если же предпосылки регрессионного анализа выполняются, то логистическая регрессия (когда зависимая переменная является категориальной) или линейная регрессия (когда зависимая переменная

является количественной) могут дать лучший результат. Это обусловлено тем, что деревья пытаются описать линейную связь между переменными путем многократных разбиений по предикторам. CHAID делает это за счет расщепления сразу на несколько категорий, CART пытается уловить эту связь посредством серии бинарных делений и это может быть менее эффективно по сравнению с подбором параметров в регрессионном анализе.

Деревья решений устойчивы к выбросам, поскольку разбиения основаны на количестве наблюдений внутри диапазонов значений, выбранных для расщепления, а не на абсолютных значениях. Например, у нас есть наблюдение со значением 99999, дерево может создать два узла с правилами «<5» и «>5» и отнести наблюдение со значением 99999 в правый узел.

В отличие от регрессионного анализа деревья решений устойчивы к мультиколлинеарности. Мультиколлинеарностью называют наличие сильной корреляции между предикторами (на уровне 0,7 и выше). корреляции Отсутствие сильной между предикторами важнейшей предпосылкой регрессионного анализа. Это обусловлено тем, что основная цель регрессионного анализа состоит в том, чтобы изолировать взаимосвязь между каждым предиктором и зависимой вычислить вклад каждого предиктора в переменной И Регрессионный коэффициент для линейной регрессии показывает изменение значения зависимой переменной, вызванное изменением предиктора на единицу своего измерения, при том, что все остальные предикторы фиксированы. Регрессионный коэффициент логистической регрессии показывает изменение логарифма шанса вызванное изменением предиктора на единицу измерения, при том, что все остальные предикторы фиксированы. Фиксированные значения остальных предикторов имеют решающее значение, когда речь заходит о мультиколлинеарности. Идея состоит в том, что вы можете изменить значение только одного предиктора. Однако, когда предикторы коррелированы, это приведет к тому, что изменения одной переменной будут связаны с изменениями другой. Чем сильнее корреляция, тем сложнее изменить одну переменную, не изменив другую. Регрессионной модели становится труднее оценить взаимосвязь между каждым предиктором и зависимой переменной независимо, потому что предикторы имеют тенденцию изменяться в унисон. В дереве решений каждое разбиение узла использует только один предиктор, при выборе наилучшего предиктора его взаимосвязь с другими предикторами не учитывается и поэтому мультиколлинеарность не является серьезной проблемой.

Перед построением модели необязательно импутировать пропущенные значения, поскольку, как уже говорилось выше, деревья используют собственные процедуры обработки пропусков. Требования, выдвигаемые методом деревьев решений к распределению переменных, не являются строгими.

К недостаткам метода деревьев решений можно отнести отсутствие простого общего прогнозного уравнения, выражающего модель (в отличие от регрессионного анализа). В отличие от линейной регрессии дерево решений не умеет экстраполировать или делать прогнозы для наблюдений, лежащих вне диапазона обучающих данных (данных, на которых строится или обучается модель). Например, обучающие данные содержит предиктор х и зависимую переменную у. Диапазон переменной х включает в себя значения от 30 до 70. Если новые данные содержат наблюдение со значением предиктора х, равным 200, дерево выдаст неправильный Впрочем, неспособность прогноз. именно экстраполировать избежать позволяет экстремальных появления значений в случае обработки выбросов.

недостаток заключается в том, деревьям ЧТО решений свойственно переобучение. Речь идет о ситуации, когда дерево в силу гибкости используемого алгоритма получается слишком детализированным, имеют МНОГО **УЗЛОВ** И ветвей, интерпретации, что требует специальной процедуры отсечения ветвей (она называется прунинг). Небольшие изменения в наборе данных могут приводить к построению совершенно другого дерева, потому что в силу иерархичности дерева изменения в верхних узлах ведут к изменениям во всех узлах, расположенных ниже.

Отметим, ОТР В большей степени проблемы переобучения нестабильности относится к методу CART (в CHAID эти проблемы во многом снимаются за счет использования строгих статистических Предпринимая прогностическую критериев). попытки улучшить способность и стабильность метода CART, один из его разработчиков Лео Брейман пришел к идее случайного леса, когда из обучающего набора извлекаются случайные выборки (того же объема, что и исходный обучающий набор) с возвращением, по каждой строится дерево с использованием случайно отобранных предикторов и затем результаты, полученные по каждому дереву, усредняются. Однако при таком подходе теряется главное преимущество деревьев решений простота интерпретации.

Наконец, для методов одиночных деревьев характерна проблема множественных сравнений. Перед расщеплением узла дерево сравнивает различные варианты разбиения, число этих вариантов зависит от числа

уровней предикторов, как правило, происходит смещение выбора в пользу переменных, у которых большее количество уровней.



Рис. 1.6 Преимущества и недостатки деревьев решений

# Лекция 1.4. Задачи, выполняемые с помощью деревьев решений

Прежде всего деревья решений используются в маркетинге для сегментации клиентской базы. Например, деревья позволяют определить, какие демографические группы имеют максимальный показатель отклика. Эту информацию можно использовать, чтобы максимизировать отклик при будущей прямой рассылке.

Кроме того, деревья можно применять для задач прогнозирования и классификации, когда моделируется взаимосвязь между зависимой переменной и предиктором. Здесь необходимо отметить, что в настоящее время дерево решений CART все реже используется для построения самостоятельной прогнозной модели силу вышеописанных недостатков, а построение модели на основе дерева CHAID должно сопровождаться тщательно подготовленными процедурами проверки. Часто дерево решений CHAID используют в ансамбле с логистической регрессией. Например, ансамбли дерева решений логистической регрессии используются в моделях оттока в телекоме, это позволяет поднять качество модели, при этом в отличие от случайного леса и градиентного бустинга такой ансамбль легко интерпретируем.

В банковском скоринге деревья решений используются как вспомогательный инструмент при разработке модели логистической регрессии. Приведем конкретные примеры такого применения дерева.

В кредитном скоринге использование нескольких скоринговых карт для одного портфеля обеспечивает лучшее дифференцирование риска, чем использование одной скоринговой карты. Это характерно, когда нам приходится работать с разнородной аудиторией, состоящей из различных групп, и одна и та же скоринговая карта не может работать достаточно эффективно для всех. Например, в скоринге кредитных карточек выделяют сегменты «активные клиенты» и «неактивные клиенты», просрочке» «клиенты. не имеющие И Переменные в таких сегментах будут сильно отличаться. Например, для активных кредитных карт утилизация будет сильной переменной, а для неактивных – слабой. И, наоборот, может оказаться, что время неактивности для активных клиентов равно 0, а для неактивных клиентов время неактивности окажется сильной переменной. Для этих целей выполняют сегментацию клиентов. Первый способ сегментации – деление на группы на основе опыта и отраслевых знаний с последующей аналитической проверкой. Второй способ – это сегментация с помощью статистических методов типа кластерного анализа или деревьев решений. При этом по сравнению с кластерным анализом деревья решений обладают преимуществом: они формулируют четкие правила выделения а сами выделенные сегменты статистически отличаются между собой по зависимой переменной. В дальнейшем для собственную каждого ИЗ сегментов ОНЖОМ построить модель логистической разработать скоринговую регрессии, карту Citibank сформулировать кредитные правила. В стандартной практикой делать дерево с двумя-тремя уровнями и в каждом узле подгонять свою модель логистической регрессии. В основе скорингового балла FICO также лежит сегментация на основе деревьев решений. Об эффективности использования сегментации в кредитном скоринге пишет в своей книге «Скоринговые карты для оценки кредитных рисков» известный эксперт по управления рисками Наим Сиддики<sup>2</sup>, а также один из разработчиков алгоритмов скоринга компании FICO Брюс Ходли<sup>3</sup>.

С помощью деревьев решений из большого числа предикторов можно выбрать переменные, полезные для построения модели логистической регрессии). Например, из 100 переменных дерево включило в модель 25 переменных, таким образом, у нас появляется информация о том, какие

 $<sup>^2</sup>$  Наим Сиддики. *Скоринговые карты* для оценки кредитных рисков. М.: Манн, Иванов и Фабер, 2014.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Breiman, L (2001). Statistical modeling: The two cultures.

переменные наверняка можно включить в модель логистической регрессии. Методы CART и случайный лес позволяют вычислить важность переменных, использованных в модели дерева. Мы уже можем ранжировать переменные по степени полезности.

Деревья решений можно использовать для биннинга – перегруппировки категориального предиктора ИЛИ дискретизации количественного предиктора с целью лучшего описания взаимосвязи с зависимой переменной. Например, при построении модели логистической регрессии обнаруживается, ОТР взаимосвязи между количественным предиктором и интересующим событием являются нелинейными. логистической регрессии, несмотря преобразование своего выходного значения (логит-преобразование), все равно моделирует линейные зависимости между предикторами и зависимой переменной. Возьмем пример нелинейной зависимости между стажем работы в банке и внутренним мошенничеством. Допустим, рассчитанный регрессионный коэффициент в уравнении логистической регрессии получился отрицательным. Это значит, что вероятность совершения внутреннего мошенничества с увеличением стажа работы уменьшается. Однако выполнив разбивку переменной с помощью дерева CHAID на категории до 12 месяцев, от 12 до 36 месяцев, от 36 до 60 месяцев и больше 60 месяцев, стало видно, что зависимость между стажем и внутренним мошенничеством нелинейная. Первая (до 12 месяцев) и последняя (больше 60 месяцев) категории склонны к внутреннему мошенничеству, а промежуточные сегменты, наоборот, не склонны к внутреннему мошенничеству. После правильной разбивки переменной, проведенной с помощью дерева, связь между предиктором и зависимой переменной становится больше похожа на реальную.

Нередко приходится работать с переменными, у которых есть редкие категории. Редкие категории являются источником шума или вообще моделирования проблемы (когда наблюдения, вызвать относящиеся к редкой категории, не попадут в обучающую выборку, но встретятся в контрольной). Можно объединить редкую категорию с самой часто встречающейся категорией, но здесь мы поступаем субъективно. Поэтому можно построить дерево СНАІD, которое каждый раз будет брать по две категории и на основе критерия хи-квадрат сравнивать их между собой, отличаются ли они по зависимой переменной или нет, если не отличаются, категории объединяются, в рассматриваются как случае отдельные. воспользоваться полученным набором укрупненных категорий или более крупной еатегорией какой дерево Таким образом, мы уже объединяем объединило редкую категорию.

редкую категорию с более крупной не волюнтаристски, а на основе строгого статистического критерия.