

### Артем Груздев

# Прогнозное моделирование в R и Python

Модуль 4. Введение в метод случайного леса



Москва — 2017

### СОДЕРЖАНИЕ

Модуль 4 Введение в метод случайного леса	3
Лекция 4.1. Описание метода случайного леса	
Лекция 4.2. Оценка качества модели	9
Лекция 4.3. Настройка параметров случайного леса	13
Лекция 4.4. Важность предикторов	19
4.4.1. Важность предиктора на основе усредненного уменьшения неоднородности	19
4.4.2. Важность предиктора на основе усредненного уменьшения правильности	
Лекция 4.5. Графики частной зависимости	21
Лекция 4.6. Матрица близостей	24
Лекция 4.7. Обработка пропущенных значений	25
Лекция 4.8. Обнаружение выбросов	26
Лекция 4.9. Преимущества и недостатки случайного леса	27

### Модуль 4 Введение в метод случайного леса

### Лекция 4.1. Описание метода случайного леса

Как уже отмечалось, основным недостатком деревьев решений является их склонность к переобучению и нестабильность результатов, когда небольшие изменения в наборе данных могут приводить к построению совершенно другого дерева (особенно это актуально для метода CART). Случайный лес стал одним из способов решения этой проблемы. По сути случайный лес – это набор деревьев решений, где каждое дерево немного отличается от остальных. Идея случайного леса заключается в том, что каждое дерево может довольно хорошо прогнозировать, но скорее всего переобучается на определенной части данных. Если мы построим много деревьев, которые хорошо работают и переобучаются с разной степенью, мы можем уменьшить переобучение путем усреднения их результатов. Для реализации вышеизложенной стратегии нам нужно построить большое количество деревьев решений, то есть ансамбль деревьев. Каждое должно приемлемом прогнозировать дерево на уровне зависимую переменную и должно отличаться от других деревьев (условие декоррелированности деревьев). Для этого построения деревьев вносим случайность, которая и должна обеспечить уникальность каждого дерева (отсюда случайный лес и получил свое название). Для получения рандомизированных деревьев в случайном лесе последовательно применяются две техники: сначала случайным образом отбираем наблюдения, которые будут использоваться для построения дерева, а затем для каждого узла дерева осуществляем случайный отбор фиксированного количества предикторов для поиска наилучшего расщепления.

Чтобы построить случайный лес, сначала необходимо определиться с количеством деревьев. Допустим, мы хотим построить ансамбль из 5 деревьев. Для построения каждого дерева мы сначала сформируем бутстреп-выборку (bootstrap sample) наших данных. То есть из набора данных объемом п наблюдений мы случайным образом выбираем наблюдение с возвращением п раз (поскольку отбор с возвращением, то одно и то же наблюдение может быть выбрано несколько раз). Мы получаем выборку, которая имеет такой же размер, что и исходный набор данных, однако некоторые наблюдения будут отсутствовать в нем (примерно 37% наблюдений исходного набора), а некоторые попадут в него несколько раз.

Чтобы проиллюстрировать это, предположим, что мы хотим создать бутстреп-выборку для списка из 10 наблюдений ['1', '2', '3', '4', '5', '6', '7', '8', '9', '10']. Возможная бутстреп-выборка может выглядеть как ['10', '9', '7', '8', '1', '3', '9', '10', '10', '7']. Другой возможной бутстреп-выборкой

может быть ['4', '8', '5', '8', '3', '9', '2', '6', '1', '6']. В нашем случае нам нужно построить 5 деревьев, поэтому будет сформировано 5 бутстреп-выборок. Наглядно механизм бутстрепа показан на рисунке 4.1.



Рис. 4.1 Механизм работы бутстрепа

На основе каждой сформированной бутстреп-выборки строится полное бинарное дерево решений<sup>1</sup>, то есть разбиения узлов будут продолжаться пока не будет достигнуто минимальное до тех пор, количество наблюдений терминальных узлах (изначально качестве минимального количества наблюдений в терминальном узле Лео Брейман, один из авторов случайного леса, предложил для дерева классификации брать значение 1, а для дерева регрессии – значение 5). Однако алгоритм, который был описан для полного бинарного дерева решений (смотрите главу 3), теперь немного изменен. Вместо поиска наилучшей точки расщепления по каждому предиктору, алгоритм для разбиения узла случайным образом отбирает подмножество предикторов и затем находит наилучшую точку расщепления среди наилучших точек, найденных по каждому из случайно отобранных предикторов. Для выбора наилучшей точки разбиения используется уже знакомый вам критерий уменьшения неоднородности (для количественной зависимой переменной используется сумма квадратов остатков ИЛИ

-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> В оригинальном подходе Лео Бреймана и в большинстве пакетов используется дерево решений CART, однако существуют реализации, где в качестве деревьев ансамбля используются деревья QUEST, деревья C4.5.

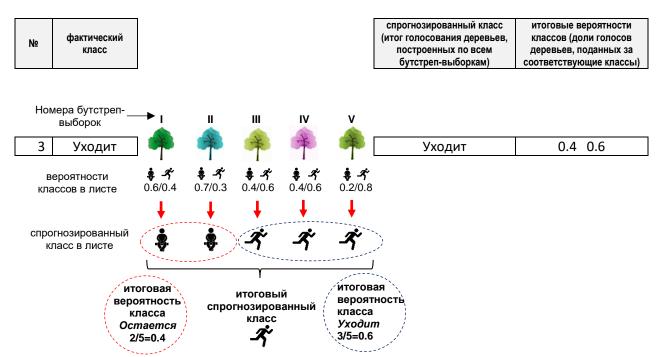
среднеквадратичная ошибка, а для категориальной зависимой переменной — мера Джини). Отбор подмножества предикторов повторяется отдельно для каждого узла, поэтому в каждом узле дерева может быть принято решение с использованием «своего» подмножества предикторов.

Необходимо отметить, что идея случайного отбора определенного количества предикторов в каждом узле дерева появилась не сразу. Сначала Лео Брейман в 1996 году предложил метод бэггинга или бутстреп-агрегирования, когда на основе исходного набора данных мы генерируем бутстреп-выборки, по ним строим полные бинарные деревья и затем агрегирум их результаты путем голосования или простого усреднения. Бэггинг стал предшественником случайного леса. Примерно в это же время Тин Кам Хо предложил идею ансамбля деревьев, построенных с помощью случайных подпространств признаков. Томас Диттерих в 2000 году предложил улучшить бэггинг дополнительной рандомизацией. Его подход заключался в том, чтобы ранжировать 20 наилучших вариантов разбиений по каждому узлу и случайным образом выбирать один вариант. Используя моделирование на синтетических и реальных наборах данных, он доказал, что дополнительная рандомизация улучшает качество работы бэггинга. Однако именно Лео Брейман и Адель Катлер предложили случайный отбор предикторов для поиска наилучшего расщепления каждого узла.

Использование бутстрепа приводит к тому, что деревья решений в случайном лесе строятся на немного отличающихся между собой бутстреп-выборках. Из-за случайного отбора переменных в каждом узле все расщепления в деревьях будут основаны на отличающихся подмножествах предикторов. Вместе эти два механизма приводят к тому, что все деревья в случайном лесе будут отличаться друг от друга. Кроме того, для достижения лучшего качества Лео Брейман предлагал при построении ансамбля варьировать размер терминального узла. Идея была развита Хемантом Ишвараном и Джеймсом Мэлли в рамках метода synthetic random forests или синтетических случайных лесов, а сам метод реализован в пакете R rfsrcSyn. Также для улучшения обобщающей способности Брейман предлагал вместо одномерных расщеплений использовать многомерные расщепления, когда наилучшее разбиение узла определяется не отдельным признаком, а линейными комбинациями признаков. Такую комбинацию можно найти с помощью обычной модели машинного обучения (гребневой регрессии, метода частичных наименьших квадратов, метода опорных векторов и др.). Идея получила развитие в работах Бьерна Менце и Микаэля Кельма, предложивших oblique random случайный метод forest косоугольный лес, сам метод был реализован в пакете R obliqueRF.

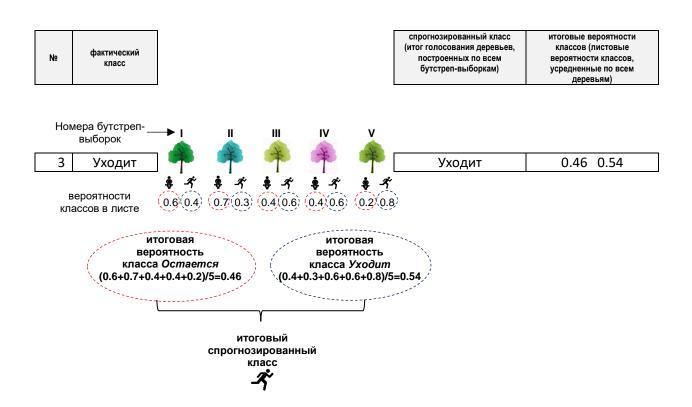
Решая задачу классификации, каждое дерево сначала вычисляет для наблюдения листовые вероятности классов зависимой переменной. Листовая вероятность класса – это доля объектов класса в листе (терминальном узле) дерева, в который попало классифицируемое Каждое наблюдение. дерево голосует за наибольшей класс вероятностью в листе. В итоге побеждает который класс. за проголосовало большинство деревьев.

Данный подход реализован в оригинальном программном коде Лео Бреймана и Адель Катлер, на базе которого написан пакет R randomForest. Для каждого дерева фиксируется только «победивший класс», листовые вероятности классов, полученные для отдельного дерева, отбрасываются и в дальнейших расчетах не участвуют. Поэтому в пакете randomForest итоговая вероятность класса для наблюдения — это доля голосов деревьев, поданных за данный класс.



**Рис. 4.2** Получение прогнозов для задачи классификации (оригинальный подход «усреднение прогнозов», реализован в пакете R randomForest)

библиотеке В питоновской scikit-learn моделей ДЛЯ RandomForestClassifier и RandomForestRegressor используется другой подход. Каждое дерево вычисляет для наблюдения листовые вероятности классов. Эти листовые вероятности усредняются по всем деревьям и наибольшей прогнозируется класс  $\mathbf{c}$ усредненной листовой вероятностью. При таком подходе итоговая вероятность класса – это листовая вероятность класса, усредненная по всем деревьям.



**Рис. 4.3** Получение прогнозов для задачи классификации (оригинальный подход «усреднение листовых вероятностей», реализован в классе RandomForestClassifier питоновской библиотеки scikit-learn)

Решая задачу регрессии, каждое дерево прогнозирует для наблюдения среднее значение зависимой переменной в листе (терминальном узле), в который это наблюдение попало, и затем происходит усреднение полученных средних значений по всем деревьям.

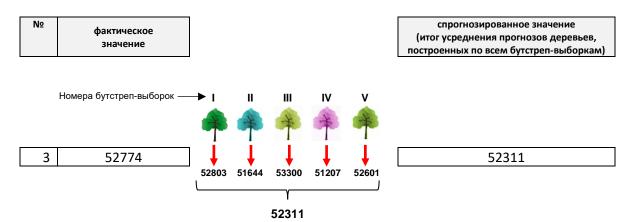


Рис. 4.4 Получение прогнозов для задачи регрессии

В итоге математически алгоритм случайного леса можно описать следующим образом:

- 1. Для b = 1, 2... B (где B -количество деревьев в ансамбле):
  - (a) извлечь бутстреп-выборку S размера N из обучающих данных;
  - (b) по бутстреп-выборке S построить полное дерево  $T_b$ , рекурсивно повторяя следующие шаги для каждого терминального узла, пока не будет достигнуто минимальное количество наблюдений в нем (для классификации одно наблюдение, для регрессии 5 наблюдений):
    - і. из первоначального набора M предикторов случайно выбрать m предикторов;
    - ii. из *m* предикторов выбрать предиктор, который обеспечивает наилучшее расщепление;
    - ііі. расщепить узел на два узла-потомка.
- 2. В результате получаем ансамбль деревьев решений  $\{T_b\}_{b=1}^{B}$
- 3. Предсказание новых наблюдений осуществлять следующим образом:

ДЛЯ регрессии: 
$$\hat{f}_{rf}^{B}(x) = \frac{1}{R} \sum_{b=1}^{B} T_{b}(x)$$
;

для классификации: пусть  $\hat{C}_b(x)$ - класс, спрогнозированный деревом решений  $T_b$ , то есть  $T_b(x) = \hat{C}_b(x)$ ; тогда  $\hat{C}_f^B(x)$  - это класс, наиболее часто встречающийся в множестве  $\left\{\hat{C}_b(x)\right\}_{b=1}^B$ 

#### Лекция 4.2. Оценка качества модели

Качество модели случайного леса может быть оценено обычным способом и с помощью метода ООВ. В рамках обычного способа мы берем каждое наблюдение и для прогноза используем все бутстрепвыборки, затем для задачи классификации подсчитываем количество неправильно классифицированных наблюдений, взятое от общего количества наблюдений, а для задачи регрессии подсчитываем сумму квадратов остатков, усредненную по всем наблюдениям. Как уже говорилось, каждая бутстреп-выборка не содержит примерно 37% наблюдений исходной обучающей выборки. Поэтому в рамках метода ООВ мы берем каждое наблюдение и для прогноза используем бутстрепвыборки, которые не содержат данное наблюдение (т.е. наблюдение «выпало» из выборки и данную выборку для этого наблюдения можно назвать out-of-bag выборкой, отсюда и название метода), а затем количество неправильно подсчитываем классифицированных наблюдений, взятое от общего количества наблюдений, или сумму квадратов остатков, усредненную по всем наблюдениям. Метод ООВ используется только для оценки качества модели на обучающей выборке. К каждому наблюдению контрольной выборки мы просто применяем правила классификации/ прогнозирования, сформулированные каждым деревом леса в ходе обучения. Затем осуществляем голосование или усреднение и на основе полученных прогнозов обычным способом вычисляем метрику качества.

Рассмотрим процесс оценки качества модели с помощью метода ООВ наглядно (рис. 4.5). Допустим, у нас есть исходный набор из 10 наблюдений, на его основе мы сгенерировали 5 бутстреп-выборок. Для каждого наблюдения мы должны зафиксировать бутстреп-выборки, в которых оно отсутствует. Например, на рис. 4.5 видно, что наблюдение 4 отсутствует в бутстреп-выборках I, III, IV и V. Эти выборки будут для наблюдения 4 out-of-bag выборками. Для классификации или вынесения прогноза по наблюдению 4 нас как раз будут интересовать голоса или прогнозы деревьев, построенных по этим четырем out-of-bag выборкам.

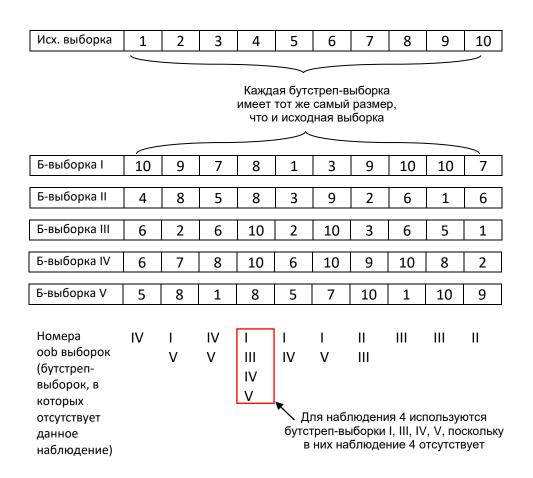


Рис. 4.5 Out-of-bag выборки для оценки качества модели

Возьмем задачу классификации (рис. 4.6). Допустим, необходимо отнести наблюдение 4 к тому или иному классу зависимой переменной Статус клиента [status]. Фактически оно принадлежит классу Уходит. Для оценки качества модели используются только те деревья решений, которые строились по бутстреп-выборкам, не содержащим наблюдение 4, и затем проводится голосование деревьев. Наблюдение 4, фактически принадлежащее классу *Уходит*, отсутствует в 4 бутстреп-выборках: I, III, IV, V. В голосовании участвуют 4 дерева, построенных по этим 4 бутстреп-выборкам. Деревья проголосовали в следующем порядке: Остается, Остается и Уходит. В результате побеждает класс Остается. Случайный лес ошибочно относит наблюдение 4 к классу Остается. В итоге МЫ подсчитываем количество таких неверно наблюдений, классифицированных делим на общее количество наблюдений и получаем оценку качества случайного классификации. Ее еще называют ошибкой классификации по методу ООВ или ООВ ошибкой для классификации.

$$ER^{OOB} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} 1(\hat{Y}^{OOB}(X_i) \neq Y_i)$$

где:

 $Y_i$  — фактическое значение зависимой переменной;  $\hat{Y}^{oob}(X_i)$  — расчетное значение зависимой переменной (результат голосования деревьев, построенных по выборкам, не содержащим  $X_i$  )

Nº	номера out-of-bag выборок, участвующих в голосовании	фактическое значение	спрогнозированное значение (итог голосования деревьев, построенных по out-bag выборкам)	результат классификации
1	IV	Остается	Остается	ВЕРНО
2	I, V	Уходит	Уходит	ВЕРНО
3	IV, V	Уходит	Уходит	ВЕРНО
4	I, III, IV, V	Уходит	Остается	НЕВЕРНО
5	I, IV	Остается	Остается	ВЕРНО
6	I, V	Уходит	Уходит	ВЕРНО
7	11, 111	Уходит	Уходит	ВЕРНО
8	III	Остается	Уходит	НЕВЕРНО
9	III	Остается	Остается	ВЕРНО
10	II	Уходит	Уходит	ВЕРНО

количество неверных ответов=2

Ошибка классификации = количество неверно классифицированных наблюдений/общее количество наблюдений = 2/10=0,2

Рис. 4.6 Вычисление ООВ ошибки для задачи классификации

Теперь возьмем задачу регрессии (рис. 4.7). Допустим, необходимо спрогнозировать значение зависимой переменной *Оценка дохода* [income] для наблюдения 4. Для оценки качества модели используются только те деревья решений, которые строились по бутстреп-выборкам, не содержащим наблюдение 4, и затем проводится усреднение прогнозов, выданных деревьями.

Наблюдение 4, имеющее фактическое значение 45304, отсутствует в 4 бутстреп-выборках: I, III, IV, V. Таким образом, в усреднении участвуют 4 дерева, построенных по этим 4 бутстреп-выборкам. Деревья прогнозируют следующие значения: 44470, 45112, 46790 и 47230. На этот раз нас интересует квадрат остатка — разницы между фактическим значением зависимой переменной 45304 и ее спрогнозированным значением 45901 (результатом усреднения прогнозов, вычисленных деревьями). В итоге по каждому наблюдению вычисляем квадрат остатка, суммируем и полученную сумму квадратов остатков делим на общее количество наблюдений. Сумма квадратов остатков, поделенная на общее количество наблюдений, становится оценкой качества случайного леса

для регрессии. Ее еще называют среднеквадратичной ошибкой по методу OOB или OOB ошибкой для регрессии.

$$MSE^{OOB} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}^{OOB}(X_i) - Y_i)^2$$

где:

 $Y_{i}$  – фактическое значение зависимой переменной;

 $\hat{Y}^{OOB}(X_i)$  — расчетное значение зависимой переменной (результат усреднения прогнозов деревьев, построенных по выборкам, не содержащим  $X_i$ )

Наглядно процесс вычисления среднеквадратичной ошибки по методу OOB показан на рисунке 4.7.

Nº	номера out-of-bag выборок, участвующих в прогнозе	фактическое значение	спрогнозированное значение (результат усреднения прогнозов деревьев, построенных по out-bag выборкам)	квадрат остатка (факт. знач. – спрогн. знач.)²	
1	IV	50451	50037	171396	
2	I, V	52700	52127	328329	
3	IV, V	32704	32028	456976	
4	I, III, IV, V	45304	45901	356409	
5	I, IV	29518	29067	203401	
6	I, V	29508	29029	229441	
7	11, 111	24018	23501	267289	
8	III	26369	26938	323761	
9	III	26109	26905	633616	
10	II	19369	19857	238144	

сумма квадратов остатков=3208762

Среднеквадратичная ошибка = сумма квадратов остатков/общее количество наблюдений = 3208762/10=320876,2

Рис. 4.7 Вычисление OOB ошибки для задачи регрессии

На практике оценка ООВ ошибки достоверна, когда количество деревьев в ансамбле достаточно велико. В ситуации, когда вы используете мало деревьев, то есть мало бутстреп-выборок, высока вероятность того, что наблюдение встретится во всех бутстреп-выборках (иными словами, ни разу не выпадет из бутстреп-выборок) и таким образом для него не будет получена ООВ оценка. Необходимо настраивать качество модели, увеличивая количество деревьев до достаточно большого числа, пока ООВ ошибка не перестанет уменьшаться. Обратите внимание, что вычисление ООВ ошибки не заменяет собой проверку на контрольной выборке. Эксперименты показывают, что ошибка классификации и среднеквадратичная ошибка, вычисленные по методу ООВ, являются более оптимистичными, ошибка классификации чем

среднеквадратичная ошибка, вычисленные на контрольной выборке или усредненные по контрольным блокам перекрестной проверки.

В различных статистических пакетах оценка качества случайного леса может быть вычислена либо с помощью обычного способа, либо с помощью ООВ метода.

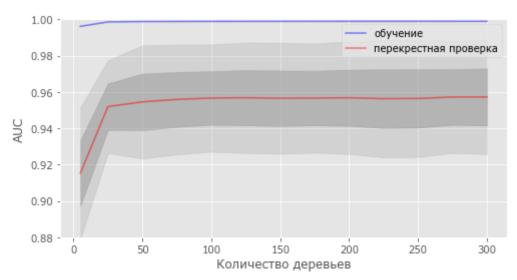
B пакете R randomForest функция print для ансамбля деревьев классификации выводит ошибку классификации по методу ООВ, а для ансамбля деревьев регрессии – среднеквадратичную ошибку и процент объясненной дисперсии, вычисленные по методу ООВ. Функция predict позволяет вычислить вероятности классов и значения переменной двумя способами. При наличии аргумента, залаюшего вероятности классов и значения зависимой обучающую выборку, прогнозируются обычным способом, при пропуске этого аргумента для наблюдений обучающей выборки будут возвращены вероятности классов значения зависимой переменной, И спрогнозированные по методу ООВ.

В библиотеке scikit-learn для экземпляра класса RandomForestClassifier вычисляется обычная правильность, а для экземпляра класса RandomForestRegressor обычный R-квадрат (по умолчанию значение параметра oob\_score равно False). Вероятности классов и значения зависимой переменной вычисляются также обычным способом. Однако если использовать значение параметра oob\_score=True, то в атрибут oob\_score\_ для экземпляра класса RandomForestClassifier будет записана правильность, вычисленная по методу OOB, а для экземпляра класса RandomForestRegressor —  $\mathbb{R}^2$ , вычисленный по методу OOB.

### Лекция 4.3. Настройка параметров случайного леса

Главный параметр случайного леса — это количество деревьев в ансамбле. Как правило, большее количество деревьев практически всегда дает лучший результат (за исключением ситуаций, когда вы работаете с сильно зашумленными данными). Это обусловлено тем, что усреднение результатов по большему количеству деревьев позволит получить более устойчивый ансамбль за счет снижения переобучения. Следует отметить, что если при увеличении числа деревьев происходит значительное уменьшение качества прогноза, то это может говорить о плохом качестве выборки, о присутствии значительного шума. Подобное явление часто наблюдается на небольших выборках. Количество деревьев в ансамбле, необходимое для хорошего качества модели, возрастает с числом предикторов и ростом объема данных. Помните, что с ростом количества деревьев требуется больше памяти и больше времени для обучения.

Наилучший способ определить, сколько деревьев построить, сравнить метрики качества моделей разным количеством (последовательно увеличиваем значение, строим 100, 200, 300, 400, 500 деревьев) на контрольной выборке. Как вариант, можно воспользоваться перекрестной проверкой, здесь смотрим МЫ метрики усредненные на обучающих блоках перекрестной проверки и метрики качества, усредненные по контрольным блокам перекрестной проверки. Обычно по мере увеличения числа деревьев качество модели на обучающей выборке увеличивается (можно добиться даже 100%-ной правильности или значения AUC, равного 1), а на контрольной выборке качество увеличивается и затем стабилизируется на определенном значении.



**Рис. 4.8** График зависимости AUC от количества деревьев, используется перекрестная проверка

Взглянем на рис. 4.8. Анализируя метрики, усредненные по обучающим блокам перекрестной проверки, мы видим, что даже совсем небольшое количество деревьев дает значение AUC, равное 1. Однако рассматривая метрики, усредненные на контрольных блоках перекрестной проверки, мы видим, что качество увеличивается медленнее и стабилизируется примерно на 150 деревьях при значении AUC, равном 0,957.

Как мы уже говорили выше, большее количество деревьев всегда дает лучшее качество, однако вы должны регулировать стоимость улучшения качества с точки зрения вычислительных затрат. Например, мы можем использовать ансамбль из 300 деревьев и получить на контрольной выборке AUC 0.811, затем дополнительно натренировать еще 100 деревьев и получить AUC 0.83, в этом случае идея увеличить количество деревьев имеет смысл, если же дополнительная тренировка 100 деревьев дает в итоге AUC 0.812, то скорее всего стоимость такого улучшения будет сомнительна.

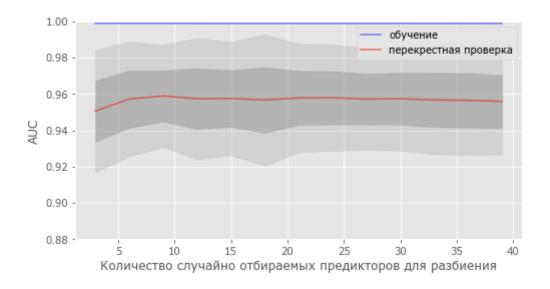
представляющим собой В пакете R randomForest, реализацию случайного классического алгоритма леса, параметр, задающий количество деревьев в ансамбля, называется ntree, в пакете R ranger – быстрой реализации случайного леса, использующей параллельные вычисления, он называется num.trees, в классах RandomForestClassifier и RandomForestRegressor питоновской библиотеки scikit-learn он называется n\_estimators, в версиях библиотеки h2o для R (функция h2o.randomForest) и Python (класс H2ORandomForestEstimator) он называется ntrees.

Определив такое количество деревьев в ансамбле, которое дает приемлемое качество модели на контрольной выборке и обучается за мы задаем количество случайно приемлемое время, предикторов. Лео Брейман называл этот параметр mtry. Поясним, как работает mtry. Количество случайно отбираемых предикторов, равное 1, означает, что при разбиении отбор признаков не будет осуществляться вообще, будет выполнен поиск точек расщепления для одного случайно выбранного признака. Если количество случайно отбираемых предикторов задать равным общему количеству предикторов в наборе данных, это будет обозначать, что в каждом разбиении смогут участвовать все предикторы набора данных, в отбор признаков не будет привнесена случайность (останется лишь случайность, обусловленная бутстрепом). При таком варианте все деревья в случайном лесе будут схожи между собой и качество модели может ухудшится. На практике подбирают значения mtry, которые составляют примерно 20-40% от общего числа предикторов. Эти значения были сформулированы на основе правил Лео Бреймана, приведенных на рис. 4.9.

Количество случайно отбираемых	Для	Для			
предикторов (mtry)	классификации	регрессии			
корень/треть от общего количества	$m = 0.5 \times \sqrt{M}$	$m = 0.5 \times (M/3)$			
предикторов, деленная пополам	$III = 0.5 \times \sqrt{M}$	$m = 0.5 \times (M/3)$			
корень/треть от общего количества		m = M/2			
предикторов	$m = \sqrt{M}$	m = M/3			
удвоенный корень/треть от общего	2 v /M	$m = 2 \times (M/2)$			
количества предикторов	$m=2\times\sqrt{M}$	$m = 2 \times (M/3)$			
общее количество предикторов	m = M				
	m – случайно отбираемое число предикторов, M –				
	общее число предикторов в наборе				
Примечания:					
Полученные значения mtry округляем в меньшую сторону					

**Рис. 4.9** Правила для определения оптимального количества случайно отбираемых предикторов

Если есть несколько переменных с сильной прогнозной силой (прогнозную силу обычно определяют с помощью пермутированной важности, см. раздел 4.1.4 Важность переменных), меньшие значения ту могут дать лучшее качество. Если данные содержат много переменных со слабой прогнозной силой, нужно попробовать большие значения mtry. При построении случайного леса с помощью классов RandomForestClassifier и RandomForestRegressor библиотеки scikit-learn помимо правил Бреймана необходимо попробовать большие значения mtry. По мнению ряда специалистов<sup>2</sup>, на практике варьирование значений mtry не оказывает существенного влияния на качество модели.



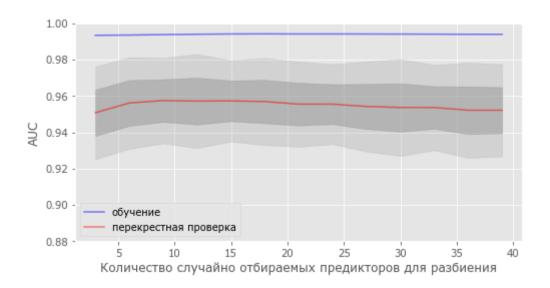
**Рис. 4.10** График зависимости AUC модели из 300 полных деревьев от количества случайно отбираемых предикторов, используется перекрестная проверка

Взглянем на рис. 4.10. Здесь мы строим модели на основе полных деревьев. Видно, что варьирование количества случайно отбираемых предикторов не очень сильно влияет на качество модели.

Обрезка деревьев, как правило, требует корректировки mtry. Посмотрите на рис. 4.11. Здесь мы строим модели, используя обрезку деревьев (оставлено 10 уровней ниже корневого узла). Рассматривая метрики, усредненные на контрольных блоках перекрестной проверки, мы видим, что при увеличении количества случайно отбираемых предикторов качество модели постепенно снижается. Оптимальное качество мы получим, используя от 9 до 15 признаков.

\_

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> D. Richard Cutler, Thomas C. Edwards, Jr., Karen H. Beard, Adele Cutler, Kyle T. Hess, Jacob Gibson, and Joshua J. Lawler. 2007. Random forests for classification in ecology. Ecology 88:2783–2792.

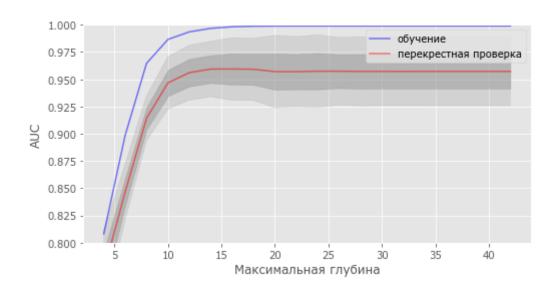


**Рис. 4.11** График зависимости AUC модели из 300 обрезанных деревьев от количества случайно отбираемых предикторов, используется перекрестная проверка

В итоге при фиксированном количестве деревьев необходимо выбрать такое количество случайно отбираемых предикторов, которое дает максимальное качество модели на контрольной выборке.

В пакетах R randomForest и ranger параметр, задающий количество случайно отбираемых предикторов, называется mtry (оригинальное название, предложенное Брейманом), в классах RandomForestClassifier и RandomForestRegressor питоновской библиотеки scikit-learn он называется max\_features, в версиях библиотеки h2o для R (функция h2o.randomForest) и Python (класс H2ORandomForestEstimator) он называется mtries.

Еще один параметр, который стоит учитывать при построении модели случайного леса — это глубина деревьев. Как правило, при увеличении глубины возрастает время обучения, но при этом увеличивается качество модели на обучающей и контрольной выборках.



**Рис. 4.12** График зависимости AUC модели из 300 деревьев от глубины, используется перекрестная проверка

В ряде случаев, например, при работе с зашумленными данными, построение деревьев с максимальной глубиной не дает хорошего качества модели. Это обусловлено тем, что при очень высоких значениях глубины деревья становятся излишне сложными и чувствительными к случайным возмущениям данных и в случае большого количества шумовых объектов рандомизация и усреднение по ансамблю не позволяют скомпенсировать возникшее переобучение. В таких случаях нужно выбрать меньшее значение глубины. Вместе с тем нужно избегать и слишком низкого значения глубины, при котором деревья не смогут в достаточной степени обучиться и возникнет эффект недообучения.

В пакетах R randomForest и ranger данный параметр отсутствует, поэтому максимальную глубину в них регулируют косвенно с помощью варьирования минимального количества наблюдений в терминальном узле (увеличивая количество наблюдений в терминальном узле, снижаем глубину). В пакете R randomForest минимальное количество наблюдений в терминальном узле регулируется параметром nodesize, а в пакете R ranger — параметром min.node.size. В классах RandomForestClassifier и RandomForestRegressor питоновской библиотеки scikit-learn, в версиях библиотеки h2o для R (функция h2o.randomForest) и Python (класс H20RandomForestEstimator) параметр, задающий максимальную глубину, называется max\_depth. Кроме того, в этих инструментах максимальную глубину можно настроить косвенно, изменив количество наблюдений в терминальном узле. Соответствующий параметр классах RandomForestClassifier RandomForestRegressor питоновской библиотеки scikit-learn называется min\_samples\_leaf, в версиях библиотеки h2o для R (функция h2o.randomForest) и Python (класс H2ORandomForestEstimator) он получил название min\_rows.

	Количество деревьев в ансамбле	Количество случайно Максимальная отбираемых глубина предикторов		Минимальное количество наблюдений в листе	
пакет R randomForest	ntree	mtry	-	nodesize	
пакет R ranger	num.trees	mtry	=	min.node.size	
классы RandomForestClassifier и RandomForestRegressor, библиотека scikit-learn	n_estimators	max_features	max_depth	min_samples_leaf	
библиотека h2o	ntress	mtries	max_depth	min_rows	

Рис. 4.13 Названия параметров случайного леса в пакетах R и Python

случайный использует Поскольку лес рандомизацию, установка различных стартовых значений генератора случайных чисел (или вообще отказ от использования стартового значения) может кардинально изменить построение модели. Существует даже шутка, которую опытные моделеры часто отпускают в адрес новичков: «если не удалось повысить качество модели за счет увеличения количества деревьев и количества отбираемых признаков, попробуй стартовое значение». Чем больше деревьев в лесу, тем более устойчивым он будет к изменению стартового значения. Однако если вы хотите получить результаты, которые потом нужно будет воспроизвести, то важно перед построением модели зафиксировать стартовое значение.

### Лекция 4.4. Важность предикторов

Случайный лес обладает возможностью оценивать важность отдельного предиктора с точки зрения улучшения классификации и прогнозирования. Первая мера важности — это усредненное уменьшение неоднородности, вторая — усредненное уменьшение правильности.

## 4.4.1. Важность предиктора на основе усредненного уменьшения неоднородности

В основе расчета важности переменных лежит критерий уменьшения неоднородности в узлах-потомках дерева.

В деревьях классификации оценивается уменьшение неоднородности распределения категорий зависимой переменной при разбиении родительского узла на узлы-потомки. Как уже говорилось в модуле 3, однородным узлом является тот, в котором все наблюдения относятся к одной и той же категории зависимой переменной, в то время как узел с максимальной неоднородностью содержит равное количество наблюдений во всех категориях зависимой переменной. Для расчета

неоднородности в деревьях классификации используется уже знакомая мера Джини.

В деревьях регрессии под уменьшением неоднородности понимается уменьшение разброса значений зависимой переменной относительно среднего значения при разбиении родительского узла на узлы-потомки. Здесь уже вместо меры Джини используется среднеквадратичная ошибка или девианс – сумма квадратов остатков. Если эти метрики трактовать с точки зрения неоднородности, то абсолютно однородным узлом является узел, в котором все наблюдения имеют одинаковые значения зависимой переменной, в то время как узлом с высоким значением неоднородности количественной зависимой переменной максимально возможного значения неоднородности не существует) является узел, включающий наблюдения с сильно различающимися значениями зависимой переменной. Уменьшение неоднородности еще называют улучшением.

Алгоритм вычисления важности предиктора на основе усредненного уменьшения неоднородности выглядит так:

- 1. Для каждого дерева случайного леса вычисляем сумму уменьшений неоднородности (улучшений) на всех ветвлениях, связанных с данным предиктором.
- 2. Итоговую сумму уменьшений неоднородности, полученную по ансамблю, усредняем путем деления на общее количество деревьев.
- 3. Вышеописанные шаги повторяем для всех остальных предикторов. Наиболее важный предиктор тот, который дает наибольшее усредненное уменьшение неоднородности (для деревьев классификации уменьшение меры Джини, для деревьев регрессии уменьшение суммы квадратов остатков).

Вновь вспоминаем про недостаток важности на основе уменьшения неоднородности. По сути важность складывается из частоты использования переменной в качестве предиктора разбиения, то есть чаще наиболее важными будут переменные, по которым можем быть рассмотрено больше вариантов разбиения и у них больше шансов стать предиктором разбиения. Поэтому наиболее важными переменными чаще будут переменные с большим количеством уникальных значений.

# 4.4.2. Важность предиктора на основе усредненного уменьшения правильности

Алгоритм вычисления важности предиктора на основе усредненного уменьшения правильности выглядит следующим образом:

1. Для каждого дерева случайного леса берем out-of-bag выборку (наблюдения, не попавшие в бутстреп-выборку, по которой строилось

данное дерево) и вычисляем оценку ошибки. Для категориальной зависимой переменной вычисляем правильность, а для количественной зависимой переменной вычисляем среднеквадратичную ошибку.

- 2. В out-of-bag выборке для каждого дерева осуществляем случайную перестановку значений предиктора.
- 3. Вычисляем оценку ошибки в каждой out-of-bag выборке с перестановленными значениями предиктора.
- 4. Сумму разностей между оценкой ошибки в каждой out-of-bag выборке с исходными значениями предиктора и оценкой ошибки в каждой out-of-bag выборке с перестановленными значениями предиктора усредняем по всем деревьям. Получаем сырое значение важности переменной.
- 5. Сырое значение важности переменной нормализуем путем деления на стандартное отклонение разностей. Если стандартное отклонение разностей равно 0, то деление не выполняется.
- 6. Повторяем шаги 2-5 для всех остальных предикторов.

Логическое объяснение алгоритма перестановки состоит в следующем: случайно переставляя значения предиктора, мы разрушаем взаимосвязь зависимой переменной. При использовании перестановленных значений предиктора (вместе с неперестановленными предикторов) значениями остальных ДЛЯ прогнозирования/ out-of-bag данным правильность классификации ПО существенно уменьшается (a среднеквадратичная ошибка существенно увеличивается), если между исходным предиктором и зависимой переменной была взаимосвязь. Поэтому чем больше уменьшение правильности (увеличение среднеквадратичной ошибки), тем важнее предиктор. Важность на основе усредненного уменьшения правильности в результате перестановок еще называют пермутированной важностью. Обратите внимание, наличии высоко коррелированных ОТР при предикторов обе метрики не способны определить релевантные обнаружив предикторы с переменные. Кроме ΤΟΓΟ, небольшими значениями важностей, не спешите их удалять, посмотрите, как они работать, будут если ВКЛЮЧИТЬ дополнительные переменные. Необходимо понимать, что вычисляемая важность показывает, как данный предиктор работает не по отдельности, а в сочетании с другими переменными. Может оказаться, что предиктор, который является маловажным при совместном использовании с одними переменными, в сочетании с другими переменными станет важным.

#### Лекция 4.5. Графики частной зависимости

Несмотря на то что важность переменных несет ценную информацию, не меньший интерес представляет взаимосвязь предиктора с зависимой переменной. Метод частной зависимости довольно прост, основывается

на прогнозах, получаемых с помощью случайного леса, и позволяет визуализировать взаимосвязь между зависимой переменной и предикторами. Основная идея заключается в том, чтобы изучить взаимосвязь между конкретным предиктором и зависимой переменной при условии, что все остальные предикторы остаются неизменными. Поскольку случайный лес может аппроксимировать практически любую функциональную зависимость между откликом и предиктором, с помощью графика можно обнаружить нелинейные зависимости, не выдвигая предварительных гипотез о характере взаимосвязей. Это особенно ценно, когда у нас отсутствует какая-либо априорная информация о виде распределения данных.

График частной зависимости строится следующим образом.

- 1. Для каждого значения интересующего предиктора создается специальный набор данных, в котором всем наблюдениям присваивается одно и то же значение интересующего предиктора, а все остальные предикторы фиксируются в своих текущих значениях. Например, если предиктор это возраст в годах и есть 40 уникальных значений этой переменной, будет создано 40 специальных наборов данных, по одному для каждого уникального значения возраста. В каждом наборе во всех наблюдениях возраст принимает одно из 40 уникальных значений (например, все наблюдения получают значение возраста 21), независимо от того, так ли это на самом деле или нет. Остальные предикторы фиксируются в своих текущих значениях. Важно понять, что значения остальных предикторов в специальных наборах не меняются и в этом смысле остаются неизменными.
- 2. Затем этот специальный набор, соответствующий конкретному значению интересующего предиктора (например, набор для значения возраста 26), прогоняется через случайный лес и получаем прогноз для каждого наблюдения набора.
- 3. Усредняем эти прогнозы по всем наблюдениям и получаем единый прогноз для набора в целом. Для количественной зависимой переменной таким прогнозом будет усредненное значение зависимой переменной. Для категориальной зависимой переменной прогнозом становится разность между логарифмом доли голосов, поданных деревьями за интересующий класс зависимой переменной, и усредненным логарифмом голосов, поданных деревьями за остальные классы. Он вычисляется по формуле:

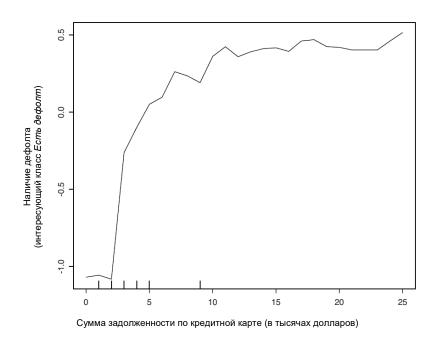
$$f(x) = \log[p_k(x)] - \frac{1}{K} \sum_{j=1}^{K} \log[p_j(x)]$$

где x — предиктор, для которого строится график частной зависимости, K — количество классов, k — интересующий класс и  $p_j$  — доля голосов, поданных за класс j.

- 4. Повторяем шаги 2-3 для остальных значений интересующего предиктора.
- 5. Строим график, по оси абсцисс откладываем значения интересующего предиктора, по оси ординат прогнозы.
- 6. Повторяем вышеописанные шаги для каждого предиктора.

Таким образом, график показывает, как значение интересующей переменной влияет на прогнозы модели при том, что все остальные переменные фиксируются и рассматриваются как константы.

Итак, графики частной зависимости можно построить как для количественной, так и для категориальной зависимой переменной. Однако если в случае с количественной зависимой переменной значения, отложенные по оси *у* — это естественные значения зависимой переменной, то в случае с категориальной зависимой переменной значения отклика, отложенные по вертикальной оси, выглядят необычно и могут легко сбить с толку.



**Рисунок 4.14** График частной зависимости для категориальной зависимой переменной

Допустим, у нас есть предиктор *Сумма задолженности по кредитной карте* (в тысячах долларов) и бинарная зависимая переменная *Наличие дефолта*, которая принимает два значения *Нет дефолта* и *Есть дефолт*. Интересующим классом является класс *Есть дефолт*. Для значения суммы задолженности, равного 1, доля голосов, отданных за класс *Есть* 

дефолт, оказалась равна 0,11. Если доля голосов, поданных за класс Eсть дефолт, равна 0,11, то значение, откладываемое по оси у, будет равно  $\log(0,11)-[\log(0,11)+\log(0,89)]/2=-1,04537$  (используются натуральные логарифмы). Точно такой же подход можно применить, чтобы понять какое значение по оси у будет отложено, если интересующим классом станет класс Hет дефолта. Доля голосов, поданных за класс Hет дефолта, равна 0,89, таким образом, значение, откладываемое по оси у, равно  $\log(0,89)-[\log(0,89)+\log(0,11)]/2=1,04537$ . В случае бинарной классификации график частной зависимости для одного класса зависимой переменной является зеркальным отражением графика частной зависимости для другого класса.

В бинарной классификации вычисления логитов не представляют трудностей. Значение, которое мы вычисляем с помощью вышеприведенного уравнения — это половина обычного логарифма отношения шансов. Поэтому легко получить привычные вероятности. Например, умножаем -1,04537 на 2, экспоненцирование дает нам отношение шансов, равное 0,1236. Теперь умножаем 0,1236 на 0,89 и получаем значение 0,11. Мы вернулись к тому, с чего начали.

### Лекция 4.6. Матрица близостей

Близости — один и наиболее полезных инструментов случайного леса. Близость между двумя наблюдениями — это частота, с которой они оба попадают в один и тот же терминальный узел.

Метод вычисления близостей включает четыре этапа:

- 1. Сначала все близости приравниваются к нулю.
- 2. После того, как дерево построено, оно применяется ко всем наблюдениям (включая обучающую и out-of-bag выборку) и для каждой пары наблюдений вычисляются близости (и так по каждому дереву).
- 3. Если два наблюдения попадают в один и тот же терминальный узел, их близость увеличивается на единицу.
- 4. Оценки близости агрегируются по всем деревьям и нормализуются путем деления на общее количество деревьев.

В итоге получаем квадратную матрицу близостей Nх N. Ниже приведена матрица близостей для первых 9 наблюдений (рисунок 6.8). Значения по главной диагонали (единицы) — это «идеальные» близости наблюдений по отношению к самим себе (выделены серым фоном). Наблюдения, которые «схожи», имеют значения, близкие к 1 (выделены светлозеленым фоном). Наблюдения, которые «непохожи», имеют значения, близкие к 0 (выделены светло-коричневым фоном).

	Α	В	С	D	Е	F	G	Н		J
1	RECORD	X0000001	X0000002	X0000003	X0000004	X0000005	X0000006	X0000007	X0000008	X0000009
2	1	1	0.488	0.198	0.13	0.092	0.12	0.076	0.106	0.026
3	2	0.488	1	0.146	0.11	0.086	0.104	0.074	0.086	0.01
4	3	0.198	0.146	1	0.252	0.1	0.208	0.032	0.062	0.032
5	4	0.13	0.11	0.252	1	0.046	0.194	0.028	0.068	0.038
6	5	0.092	0.086	0.1	0.046	1	0.332	0.076	0.094	0.058
7	6	0.12	0.104	0.208	0.194	0.332	1	0.052	0.08	0.064
8	7	0.076	0.074	0.032	0.028	0.076	0.052	1	0.514	0.04
9	8	0.106	0.086	0.062	0.068	0.094	0.08	0.514	1	0.048
10	9	0.026	0.01	0.032	0.038	0.058	0.064	0.04	0.048	1
11										

Рисунок 4.15 Матрица близостей для первых 9 наблюдений

Необходимо помнить, что с матрицей близостей удобно работать, когда наборы данных невелики. Например, если набор данных превышает более 5000 наблюдений, понадобится более 25 миллионов ячеек данных. Поэтому при обработке больших массивов обычно выводится «сжатая» форма матрицы близостей — для каждого наблюдения записывается лишь M ближайших наблюдений. M обычно меньше 100.

Близости между наблюдениями образуют матрицу сходств, которая симметрична, положительно определена, каждый элемент матрицы принимает значение в интервале от 0 до 1. Матрица сходств может быть использована ДЛЯ выполнения многомерного шкалирования. Классическое многомерное шкалирование – это метод обучения без учителя, задача которого – поиск и интерпретация латентных (ненаблюдаемых) переменных, которые позволяют объяснить сходства между объектами, представленными в виде точек в пространстве низкой размерности. При этом объекты размещаются в пространстве таким образом, чтобы расстояния между точками были максимально близки изначально найденным мерам сходства этих объектов. На выходе мы получаем числовые значения координат по каждому объекту в некоторой новой системе координат, в которой оси соответствуют латентным переменным.

Кроме того, матрица близостей может использоваться для импутации пропущенных значений, обнаружения выбросов.

### Лекция 4.7. Обработка пропушенных значений

В случайном лесе используются два метода импутации пропущенных значений.

В экономичном методе импутации пропущенные значения непрерывных переменных заменяются медианой, а пропущенные значения категориальных переменных – модой.

Оптимальный метод импутации, более затратный по времени, включает четыре этапа:

- 1. Сначала используется экономичный метод для первоначальной импутации пропущенных значений.
- 2. Затем по этому импутированному набору данных выращивается лес деревьев.
- 3. Затем матрица близостей, полученная с помощью леса деревьев, используется для итеративного изменения импутированных значений. Если предиктор является количественным, импутированное значение для наблюдения это взвешенное среднее всех наблюдений с непропущенными значениями, в качестве весов используются близости между данным наблюдением и наблюдением с непропущенным значением. Для категориальных предикторов импутированное значение это наиболее часто встречающееся значение (категория), где частота взвешивается по близости.
- 4. Шаги 2 и 3 повторяются несколько раз до достижения сходимости. Обычно 4-6 итераций достаточно.

Если задана контрольная выборка, алгоритм запускает различные варианты импутации и определяется лучший кандидат-замена для пропущенного значения.

### Лекция 4.8. Обнаружение выбросов

Выбросы можно определить как наблюдения, сильно отличающиеся от основной массы элементов выборки. В случайном лесе выброс — это наблюдение, которое имеет маленькие значения близостей по отношению ко всем остальным наблюдениям. Применительно к категориальным зависимым переменным выбросы определяются внутри категорий зависимой переменной. Таким образом, выброс в конкретной категории зависимой переменной — это наблюдение, у которого маленькие значения близостей по отношению ко всем остальным наблюдениям, принадлежащим к данной категории зависимой переменной. Вычисление показателя выброса происходит следующим образом.

1. Для конкретного наблюдения  $n_c$ , принадлежащей категории c, вычисляем сумму квадратов близостей до всех остальных наблюдений, относящихся к этой же категории. Берем обратную величину суммы квадратов близостей.

$$out_{raw}(n_c) = \frac{1}{\sum_{c} [prox(n_c, k)]^2}$$

Показатель выброса будет большим при малом значении знаменателя. Повторяем ту же самую процедуру для всех остальных наблюдений в

этой категории. Будем считать полученные значения нестандартизированными.

- 2. Вычисляем медиану нестандартизированных значений для категории c и среднее абсолютное отклонение относительно медианы нестандартизированных значений для категории c.
- 3. Вычитаем медиану из каждого нестандартизированного значения и делим на среднее абсолютное отклонение. Таким образом, стандартизируем нестандартизированные значения.

$$out(n_c) = \frac{out_{raw}(n_c) - median(c)}{deviation(c)}$$

4. Значения меньше нуля приравниваются к 0.

Вышеперечисленные шаги повторяем для всех остальных категорий зависимой переменной. Наблюдения со значениями больше 10 рассматриваются в качестве выбросов.

### Лекция 4.9. Преимущества и недостатки случайного леса

Как уже говорилось в самом начале этой главы, использование ансамбля по сравнению с одиночным деревом решений дает более лучшее качество модели за счет усреднения результатов по-разному переобучающихся деревьев. Случайный лес легко настраивается, для получения модели хорошего качества требуется лишь настроить количество деревьев и количество случайно отбираемых переменных для разбиения. Другим безусловным преимуществом метода является тот факт, что случайный лес способен более точно оценить вклад и поведение каждого предиктора, даже когда эффект одного предиктора ослаблен более значимыми предикторами, что характерно для регрессионных моделей. Как и деревья решений, случайный лес не требует процедуры предварительной подготовки данных (в частности, не нужно масштабировать данные). Случайный лес можно легко распараллелить между несколькими ядрами процессора в компьютере. С помощью случайного леса можно решать задачи подготовки данных и отбора переменных, например, определить наиболее важные переменные для включения в модель логистической регрессии или импутировать пропущенные значения.

Вместе с тем случайный лес является моделью «черного ящика», мы не можем сразу взглянуть на несколько сотен деревьев и интерпретировать их. Он не дает непосредственной информации о том, как меняется значение отклика в зависимости от значения того или иного предиктора. Судить о взаимосвязях между предиктором и зависимой переменной

можно лишь по графикам частной зависимости, приняв во внимание ряд ограничений. Случайный лес плохо работает на данных очень высокой размерности, разреженных данных, примером которых являются текстовые данные. Для подобного рода данных линейные модели подходят больше. Как и дерево решений, случайный лес не умеет экстраполировать данные. Случайный лес склонен к переобучению при работе с сильно зашумленными данными. Кроме того, нельзя не отметить большой размер получаемых моделей случайного леса.