

#### План

Об универсальности метода Случайный лес (RF) Параметры метода Важность признаков ExtraTrees Приложения

## Универсальные методы

метод	классификация	регрессия	кластеризация	выбросы
Основанные на близости (~kNN)	+	+	+	+
<ul><li>проблема перебора</li></ul>				
<ul><li>настройки параметров</li></ul>				
– выбора метрики				
SVM	+	+	_	+
– узкая группа задач			Формально	
<ul> <li>нужны однородные признаки в</li> </ul>			[Winters-Hilt,	
одной шкале			2007]	
Случайные леса			+/-	
– плохо работает	+	+	можно	+
с линейными			построить	
закономерностями			метрику	
Нейронные сети	+	+	+/ -	+
<ul> <li>нужна большая выборка</li> </ul>				

Нет полностью универсальных методов! Всё идёт от задачи...

## Случайные леса

+ наиболее универсальный

(~75% задач машинного обучения)

+ все типы задач

(классификация, регрессия, кластеризация, аномалии)

+ настраивается «сразу под все функционалы»

(или можно преобразовать – не всегда надо)

+ нечувствителен к монотонным преобразованиям признаков не совсем так! только к линейному масштабированию

+ легко реализуется

## Случайный лес (Random Forest)

- специальный метод ансамблирования

= бэггинг + специальное построение деревьев (подмножество признаков при расщеплении)

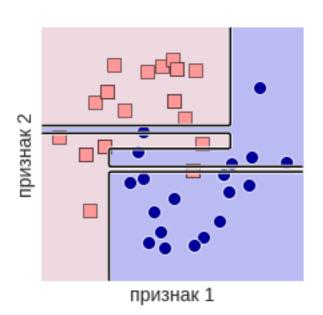
Качество одного дерева очень низкое!

$$\frac{1}{N_{\text{tree}}} \left( \frac{1}{N_{\text{tree}}} + \frac{1}{N_{\text{tree}}} + \dots + \frac{1}{N_{\text{tree}}} \right)$$

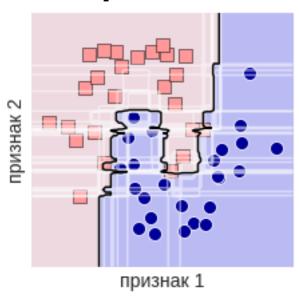


**Лео Брейман, 1928 – 2005** 

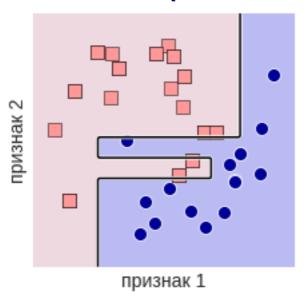
## Случайный лес (Random Forest)



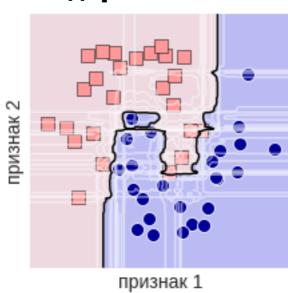
дерево № 1



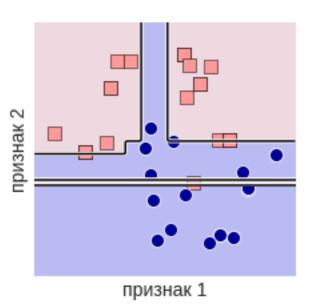
RF, число деревьев=10



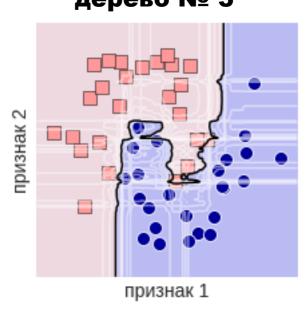
дерево № 2



RF, число деревьев=100



дерево № 3



RF, число деревьев=1000

#### Построение случайного леса

- 1. Выбирается подвыборка samplesize (м.б. с повторением) на ней строится дерево
- 2. Строим дерево
  - 2.1. Для построения каждого расщепления просматриваем mtry / max\_features случайных признаков
  - 2.2. Как правило, дерево строится до исчерпания выборки (без прунинга)

#### Ответ леса:

```
по большинству (в задачах классификации), среднее арифметическое (в задачах регрессии)
```

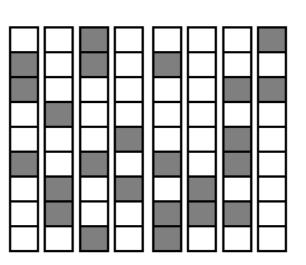
```
Автоматически: рейтинг признаков — importance (model) / .feature_importances_
```

Автоматически: уверенность в ответе – дисперсия ответов деревьев

## Бэггинг и ООВ (out of bag)



Выбор объектов для обучения (с помощью бутстрепа), остальные – локальный контроль...



Ответы разных деревьев – можно усреднить и вычислить качество

## Вспомним реализацию решающего дерева

sklearn.tree import DecisionTreeClassifier

criterion	критерий расщепления «gini» / «entropy»	
splitter	разбиение «best» / «random»	
max_depth	допустимая глубина	
min_samples_split	минимальная выборка для разбиения	
min_samples_leaf	минимальная мощность листа	
min_weight_fraction_leaf	аналогично с весом	
max_features	число признаков, которые смотрим для нахождения	
	разбиения	
random_state	инициализация генератора случайных чисел	
max_leaf_nodes	допустимое число листьев	
min_impurity_decrease	порог «зашумлённости» для разбиения	
min_impurity_split	порог «зашумлённости» для останова	
class_weight	веса классов («balanced» или словарь, список словарей)	

## Теперь – случайный лес

sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

n_estimators=100	число деревьев		
criterion = 'gini'	критерий расщепления «gini» / «entropy»		
splitter	разбиение «best» / «random»		
max_depth =None	допустимая глубина		
min_samples_split=2	минимальная выборка для разбиения		
min_samples_leaf =1	минимальная мощность листа		
min_weight_fraction_leaf=0.0	аналогично с весом		
max_features='auto'	число признаков, которые смотрим для нахождения		
	разбиения		
max_leaf_nodes=None	допустимое число листьев		
min_impurity_decrease=0.0	порог изменения «зашумлённости» для разбиения		
min_impurity_split=None	<del>порог «зашумлённости» для останова</del>		
class_weight	веса классов («balanced» или словарь, список словарей)		
bootstrap=True	делать ли бутстреп		
oob_score	вычислять ли ООВ-ошибку		
warm_start	использовать ли существующий лес, чтобы его дополнить или		
	учить заново		

n\_jobs, random\_state, verbose

#### Особенности

#### Изменение impurity – порог на

$$\frac{|R|}{m}\left(H(R) - \frac{|R_{\text{left}}|}{|R|}H(R_{\text{left}}) - \frac{|R_{\text{right}}|}{|R|}H(R_{\text{right}})\right)$$

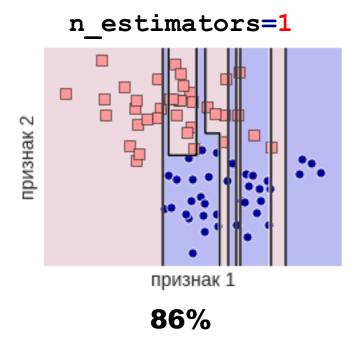
#### Параметры случайного леса

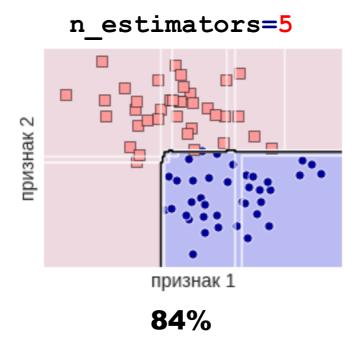
```
class sklearn.ensemble.RandomForestClassifier
              (n estimators=10,
              criterion='gini',
               max depth=None,
            min samples split=2,
             min samples leaf=1,
        min weight fraction leaf=0.0,
            max features='auto',
            max leaf nodes=None,
               bootstrap=True,
              oob score=False,
                  n jobs=1,
             random state=None,
                 verbose=0,
              warm start=False,
             class weight=None)
```

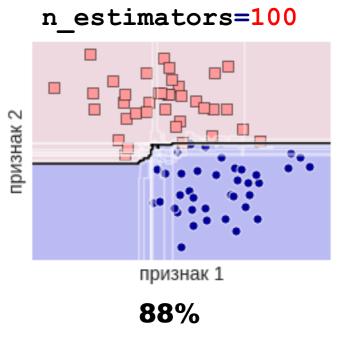
```
{randomForest} randomForest(
        x, y, xtest, ytest,
             ntree=500,
      mtry=if (!is.null(y) &&
           !is.factor(y))
   \max(floor(ncol(x)/3), 1) else
       floor(sqrt(ncol(x))),
           replace=TRUE,
           classwt=NULL,
              cutoff,
              strata,
sampsize = if (replace) nrow(x) else
       ceiling(.632*nrow(x)),
   nodesize = if (!is.null(y) &&
      !is.factor(y)) 5 else 1,
          maxnodes = NULL,
 importance=FALSE, localImp=FALSE,
              nPerm=1,
  proximity, oob.prox=proximity)
```

## «Случайный лес»

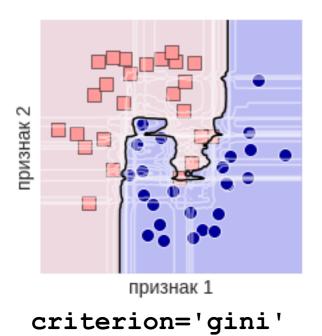
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
rf = RandomForestClassifier(n\_estimators=1)
rf.fit(X\_train, y\_train)

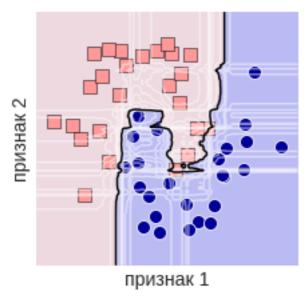






## Различные критерии расщепления





criterion='entropy'

#### в модельных задачах «на глаз» разницы не видно

в авторском коде был реализован Джини...

## Hастройка параметров: размер подвыборки sampsize

1. Определиться с типом выбора

с возвратом / без возврата

2. Настройка по объёму

- не в первую очередь

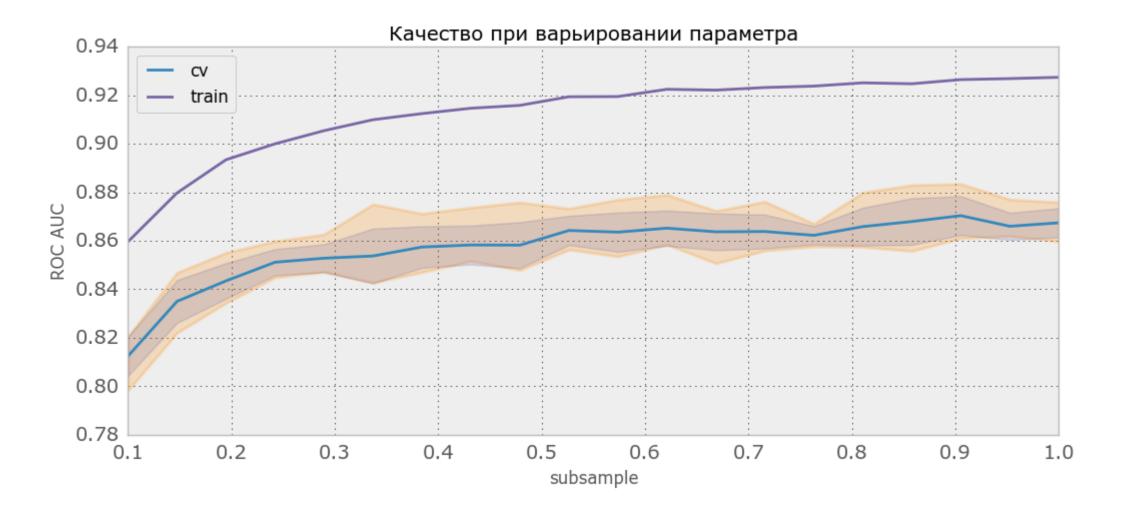
Часто «нужны все объекты»

Чем больше – тем однотипнее деревья

Что из этого следует?

Этого параметра нет в sklearn-реализации

## Hастройка параметров: размер подвыборки sampsize (СберБанк)



Всю выборку надо использовать по максимуму!

Hастройка параметров: число признаков mtry / max\_features

Самый серьёзный параметр

По умолчанию часто:  $\sqrt{n}$  – классификация n/3 – регрессия

Зависимость унимодальная Настраивается в первую очередь

Зависит от числа шумовых признаков Надо перенастраивать при добавлении новых признаков

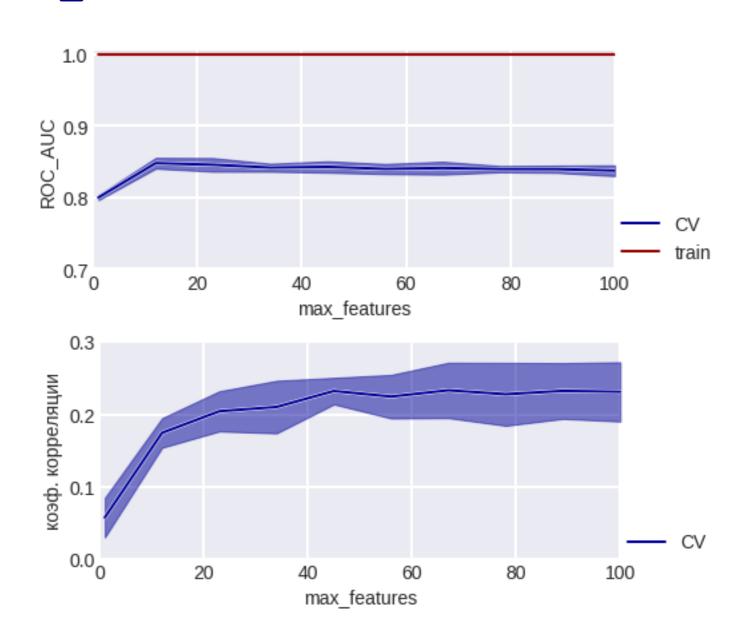
**Чем больше – тем однотипнее деревья. Чем больше – тем медленнее настройка!** 

Kaggle: часто суммируют алгоритмы с разными mtry.

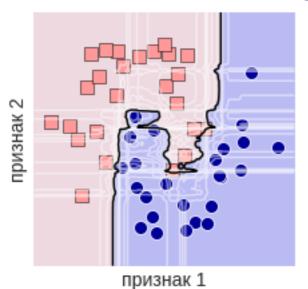
## Hacтройка mtry / max\_features (СберБанк)

**Качество от числа признаков, как** правило, унимодально

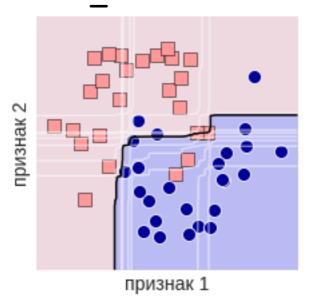
**Коэффициент корреляции между ответами деревьев леса** 



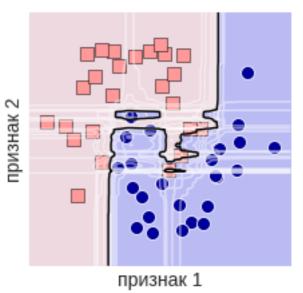
## Геометрия mtry / max features что можно сказать?



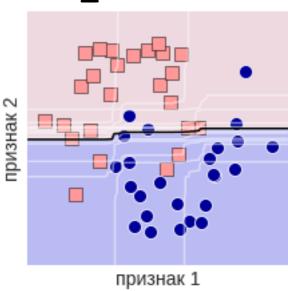
max features=1



max\_depth=1, max\_features=1

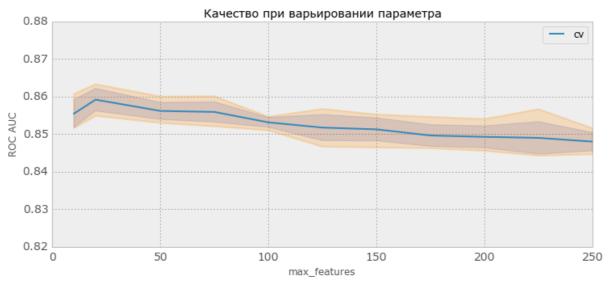


max features=2

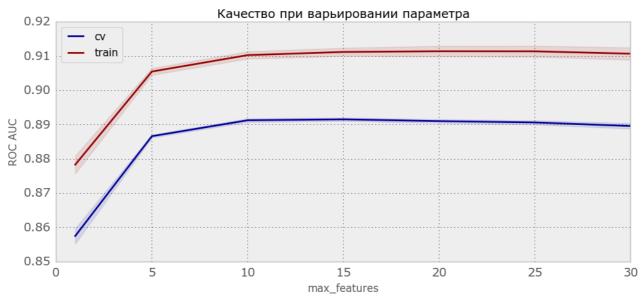


max\_depth=1, max\_features=2

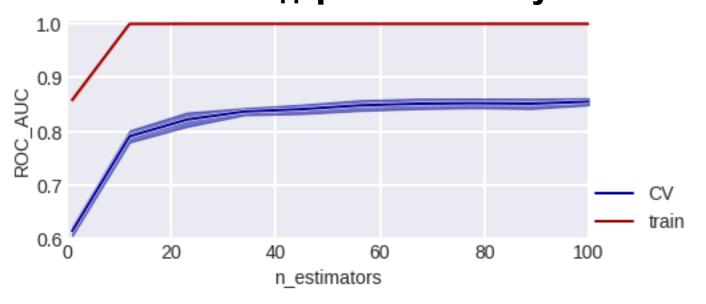
## Hастройка mtry / max\_features



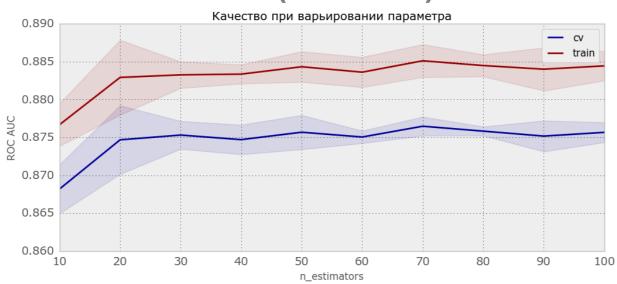
## (ed Бозон) в задаче ~ 33 признака



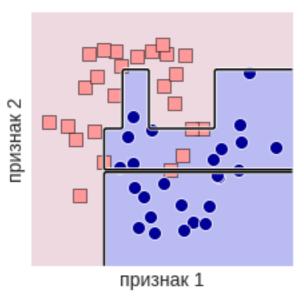
# Hастройка параметров ntree / n\_estimators (СберБанк) Чем больше деревьев – тем лучше!



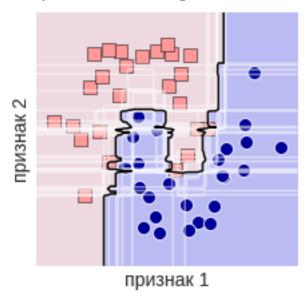
## (ed Бозон)



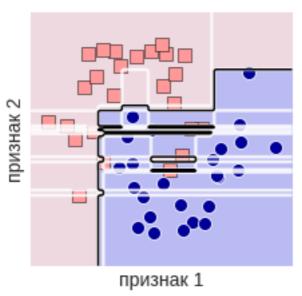
## Hастройка параметров ntree / n estimators



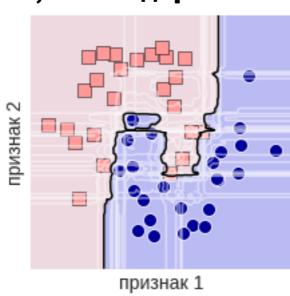
RF, число деревьев=1



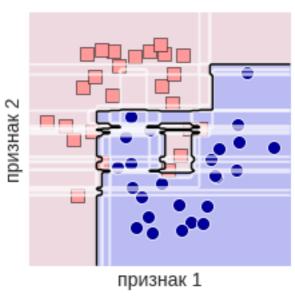
RF, число деревьев=10



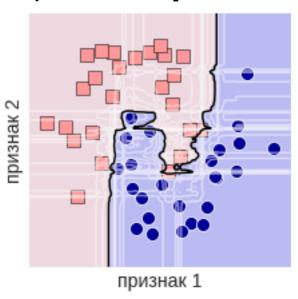
RF, число деревьев=3



RF, число деревьев=100



RF, число деревьев=5



RF, число деревьев=1000

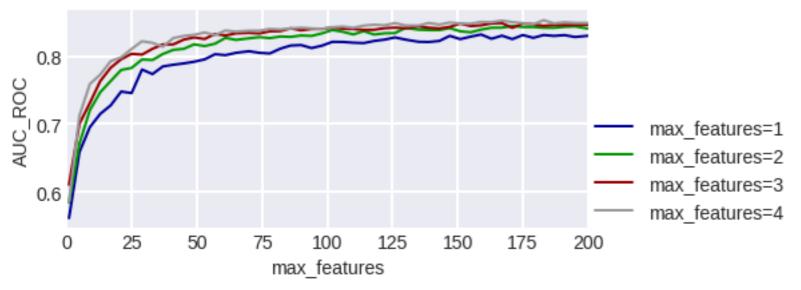
## Hастройка параметров ntree / n\_estimators (СберБанк)

Чем больше – тем лучше!

#### Проблемы:

- как использовать при настройке параметров очень большое число деревьев
- что делать, если не помещаются в память... (например, в R) можно строить по одному, получать ответ на тесте, не хранить в памяти

## Совет по числу деревьев: область устойчивости функционала

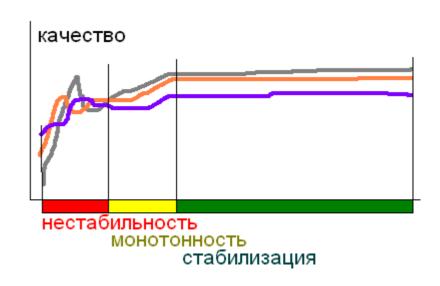


#### **Неверная подпись – n\_estimators**

#### Аналогично в подобных ситуациях:



## Обычно три зоны...



# **AUC в зависимости от объёма** контрольной выборки

Иногда причины некорректности: алгоритм выдаёт похожие (совпадающие) оценки (AUC вычисляется в среднем/худшем случае)

## Настройка параметров: ограничения в листьях

число объектов в листе, число объектов для расщепления, максимальная глубина дерева

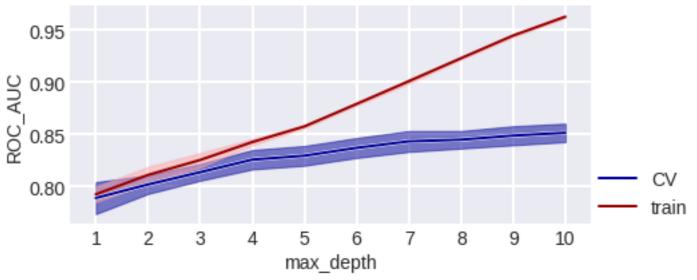
От параметров существенно зависит скорость построения леса

Оптимальные значения, как правило, – несколько объектов в листе.

Настраиваются не в первую очередь

В классическом случайном лесе деревья строятся до исчерпания выборки...

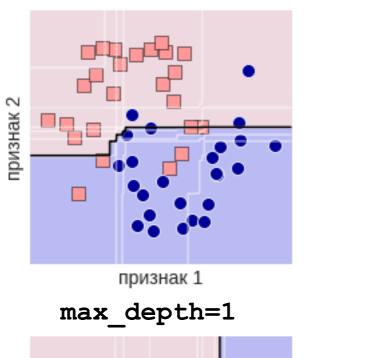
## Глубина дерева: max depth (СберБанк)

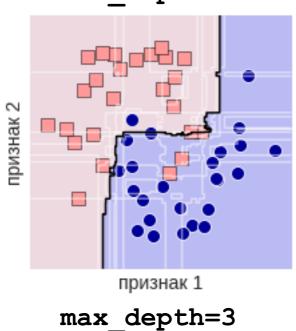


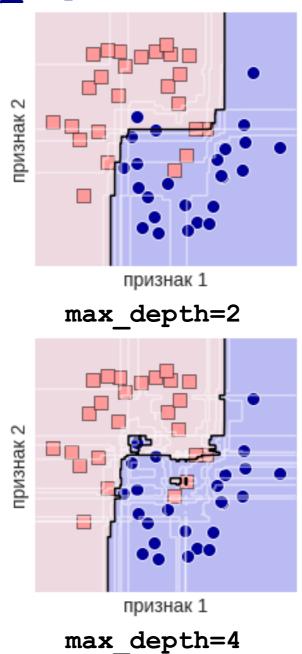


Как правило, чем больше, тем лучше!

## Глубина дерева: max\_depth





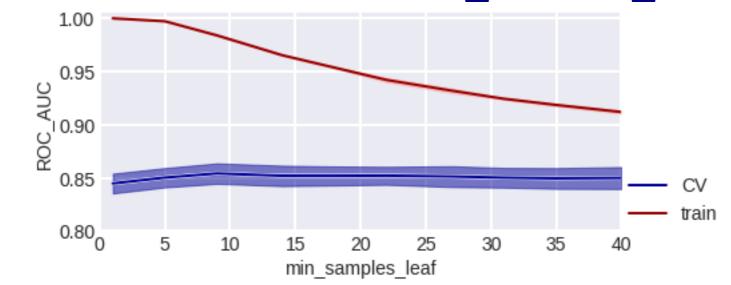


## Глубина дерева: max\_depth

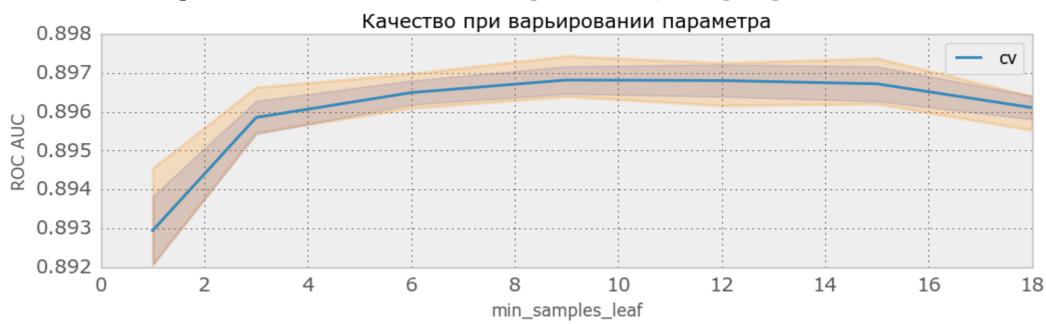
## Неглубокие деревья:

- в задачах с выбросами
- когда много объектов (деревья большие и долго строятся)
- настройка некоторых других (каких?) параметров не имеет смысла

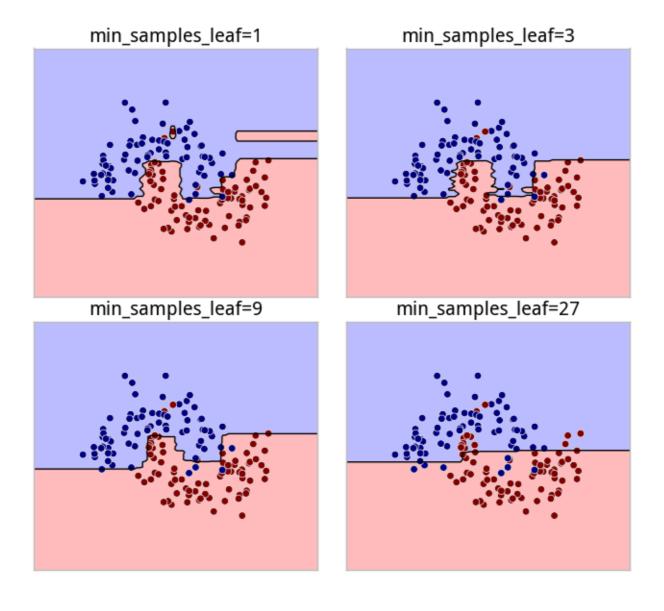
RandomForestClassifier: min\_samples\_leaf



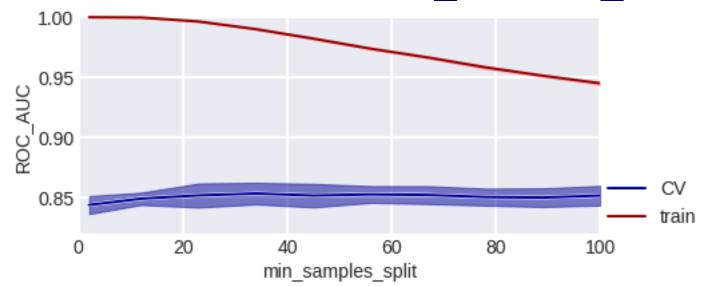
## умолчание: 1 - классификация, 5 - регрессия

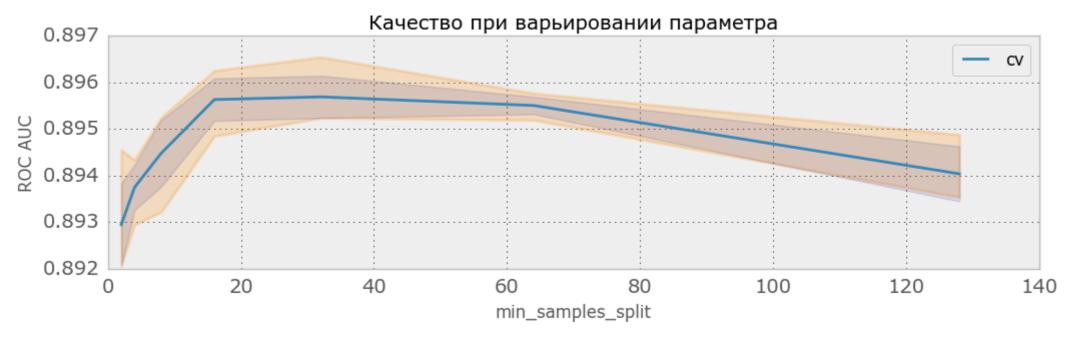


## RandomForestClassifier: min samples leaf

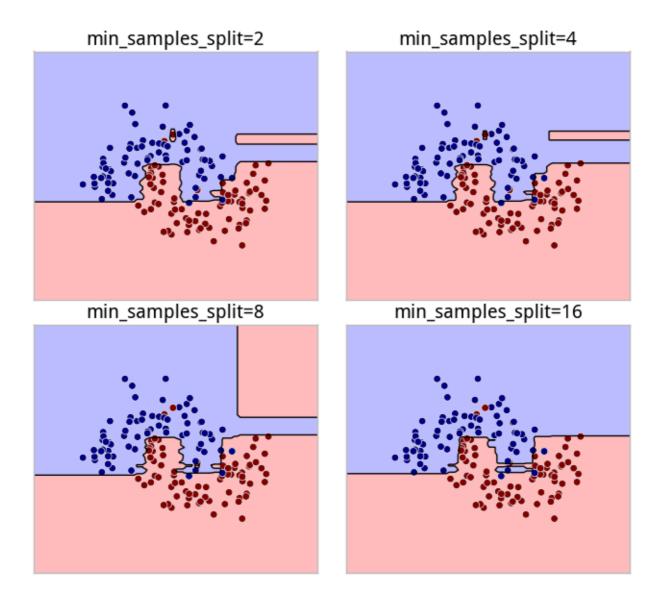


## RandomForestClassifier: min\_samples\_split





## RandomForestClassifier: min\_samples\_split



## Важности признаков в RF

отдельная тема

#### Проблемы RF

## Может долго считаться... Вместо CV – разбиение на обучение и контроль (hold out)

sklearn: не забывать n jobs

#### Какие тонкости?

ответ ~ ответ на LB не потерять важные части обучения (сохранение пропорции классов, представительности признаков и т.п.) размер контроля = область устойчивости функционала

## **Proximity**

при построении деревьев можно много чего считать...

**Чем чаще 2 объекта попадают в один лист,** тем они ближе...

Какую метрику можно придумать?

#### **Extreme Random Trees (ExtraTrees)**

- нет бутстрепа (используем всю выборку)
- генерируем несколько пар (признак, порог)
- выбираем оптимальную для разбиения пару
- также есть параметр «число признаков для просмотра»

- ET быстрее RF
- ET чуть хуже RF, когда много шумных признаков

#### Ансамбли на базе RF

## Синтетический случайный лес (Synthetic RF) – стекинг лесов с разным nodesize

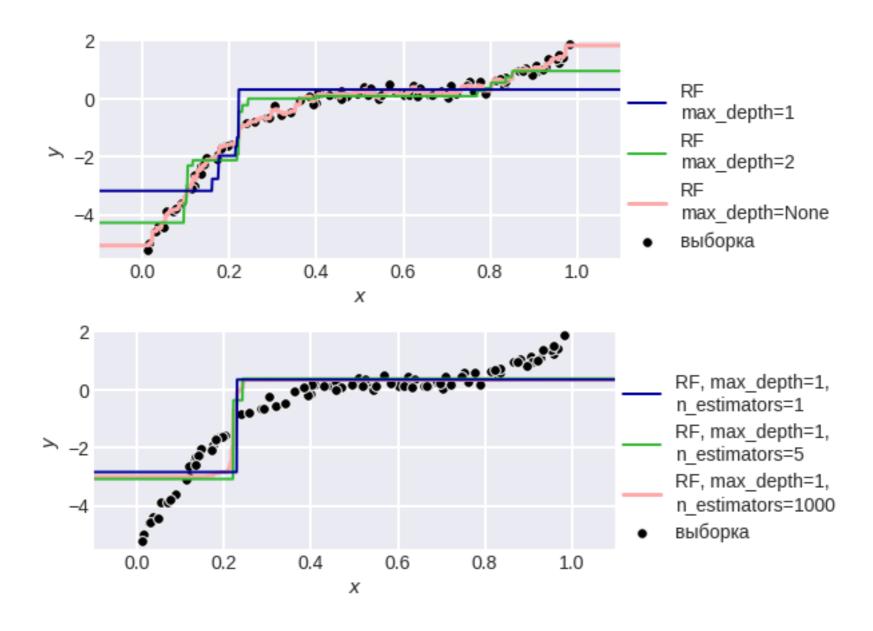
## **Algorithm 1** Synthetic Random Forests (SRF)

- 1: Choose a set of candidate nodesize values  $\mathcal{N} = \{n_1, n_2, \dots, n_D\}$ .
- 2: Fit a RF with  $nodesize = n_j$  for j = 1, ..., D. Use the same ntree and mtry value for each forest. Denote the resulting forests by RF<sub>1</sub>, ..., RF<sub>D</sub>.
- 3: Calculate the predicted value for each random forest  $RF_j$ , j = 1, ..., D. We call the predicted value the synthetic feature.
- 4: Fit a RF using for features both the newly created synthetic features and the original *p* features (using the same *ntree* and *mtry* value as before). We call this the synthetic RF.

## чтобы не переобучаться используется ООВ-прогноз

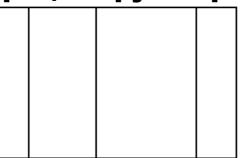
Ishwaran H, Malley JD. «Synthetic learning machines». BioData Min. 2014;7(1):28 // https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4279689/pdf/13040\_2014\_Article\_28.pdf

#### Когда плохи методы, основанные на деревьях...

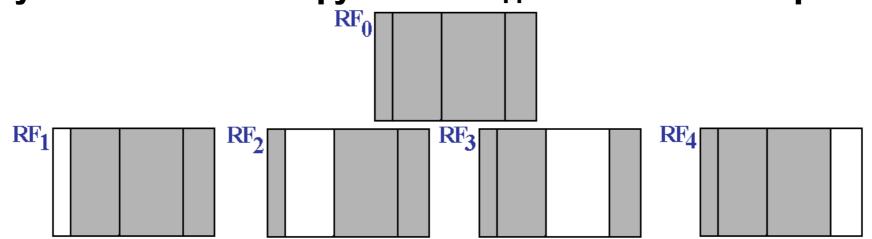


## Приложения RF: Biological Response

1. Генерация групп признаков



2. Обучение RF на всех группах и на данных без некоторых групп



3. Комбинация полученных алгоритмов

Одна из технологий решения задач!

#### Приложения RF: Реальная задача (Photo)

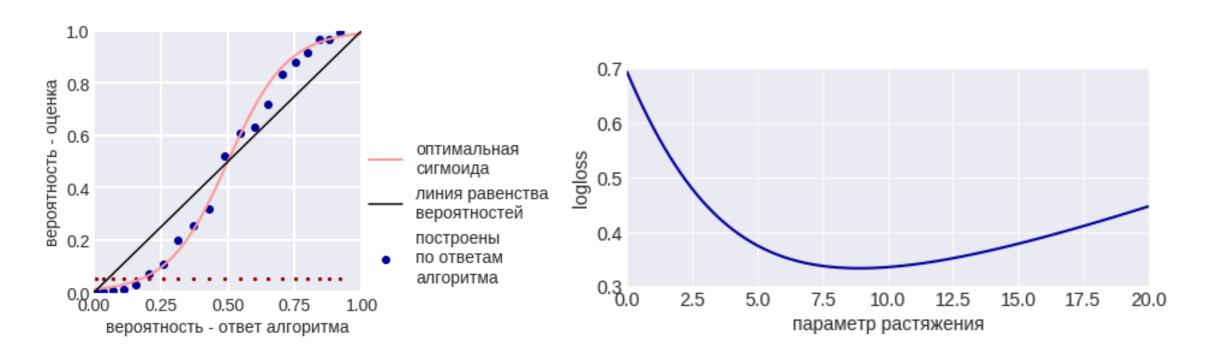
#### поиск решения в таком виде

$$\sqrt{c_1 \cdot (\text{rf}_1)^2 + \ldots + c_{24} \cdot (\text{rf}_{24})^2 + c_{25} (\text{knn})^2}$$
,

где разные RF настроены на разных признаковых пространствах

Очень хорошо смешивать разнотипные алгоритмы!

## Приложения RF: Калибровка RF





## Задача Search Results Relevance

row	id	query	product_title	product_description	median relevance	relevance variance
78	230	harleydavidson	Harley-Davidson and Philosophy (Paperback)		4	0.943
120	367	ninja turtle socks	Highpoint Kids' 5PK No Show (Assorted)	He will feel like a superhero in the Teenage Mutant Ninja Turtles 5PK No Show Socks by Highpoint.	4	0.800
607	1955 7	long prom dress	Daniella Collection	This one piece dress has mesh and rhinestone detailing. This dress features long sleeves, a round neckline and a flared hem.	3	0.866
153	472	16 gb memory card	Sandisk 16GB non-HS MSD Flash Drive 3in1 - Black (SDSDQR-016G- T46A)	SanDisk Elevate 16GB non-HS MSD 3in, microSD memory card with USB adapter and SD adapter. Includes RescuePro recovery software. Memory Storage Capacity: 16GB Wired Connectivity: Micro SD Slot Features: Plug and Play Includes: MicroSD Adapter, Adapter, USB Adapter Battery no battery used	4	0.000

## Похожа на классическую задачу поиска

# Задача Search Results Relevance

Completed • \$20,000 • 1,326 teams



#### **Search Results Relevance**

Mon 11 May 2015 - Mon 6 Jul 2015 (2 months ago)

			_	
#	Team Name ‡ model uploaded * in the money	Score ②	Entries	Last Submission UTC (Best – Last Submission)
1	Chenglong Chen ‡ *	0.72189	160	Mon, 06 Jul 2015 09:53:22
2	Mikhail & Stanislav & Dmitry 📭 ‡ *	0.71871	83	Mon, 06 Jul 2015 22:55:46 (-1.2h)
3	Quartet # ‡ *	0.71861	279	Mon, 06 Jul 2015 17:24:26 (-3.3d)
4	Shize & Shail & Phil 🎩	0.71802	252	Mon, 06 Jul 2015 23:44:14
5	I love Phở Bồ	0.71700	48	Mon, 06 Jul 2015 08:48:29 (-10.5h)
6	Gzs_iceberg	0.71681	122	Mon, 06 Jul 2015 14:27:09 (-9.9d)
7	YDM ♣	0.71374	283	Mon, 06 Jul 2015 16:31:54 (-1.7h)
8	A & A & G 🚣	0.71297	229	Mon, 06 Jul 2015 19:13:28 (-25.6h)
9	ë 🎎	0.71265	96	Sun, 05 Jul 2015 21:50:24 (-5.9d)
10	Alexander D'yakonov (PZAD, Russia)	0.71262	93	Mon, 06 Jul 2015 19:40:28 (-33d)
11	SearchSearch	0.71022	58	Mon, 06 Jul 2015 01:06:18 (-3.9h)
12	woshialex	0.70889	52	Thu, 02 Jul 2015 00:21:23 (-10.1h)
13	Alexander Ryzhkov (PZAD, Russia)	0.70777	64	Mon, 06 Jul 2015 22:57:31

#### Задача

Дан запрос: «16 gb memory card»

Ему соответствует выдача,

элемент выдачи – (название товара, описание)

Sandisk 16GB non-HS MSD Flash Drive 3in1 - Black (SDSDQR-016G-T46A)

SanDisk Elevate 16GB non-HS MSD 3in, microSD memory card with USB adapter and SD adapter. Includes RescuePro recovery software.

Memory Storage Capacity: 16GB Wired Connectivity: Micro SD Slot

**Features: Plug and Play** 

Includes: MicroSD Adapter, Adapter, USB Adapter

**Battery no battery used** 

Паре (запрос, выдача) соответствует релевантность – 1, 2, 3 или 4.

Дана ещё дисперсия релевантностей (т.к. несколько ассесоров оценивало выдачу), но не была использована

Запомним:

релевантность в обучении – медиана релевантностей, которые проставили ассесоры

## **Задача**

## Почему не классическая задача поиска?

обучение	тест			
запрос 1	выдача 1		запрос 1	выдача 4
запрос 1	выдача 2		запрос 1	выдача 5
запрос 1	выдача 3		запрос 2	выдача 4
запрос 2	выдача 1		запрос 2	выдача 5
запрос 2	выдача 2		запрос 2	выдача 6
запрос 2	выдача 3			

Запросы в тесте такие же как и в обучении!

Как это использовать?

#### Задача



Хорошая выдача (для определённого запроса) должна быть похожа на хорошие выдачи (этого запроса)!

# Функционал качества: Quadratic Weighted Kappa

# показывает согласованность порядков, когда ответы "мера релевантности"

_		3 3 3 # правильный ответ 2 3 3 # наш ответ	0.666667
a = 1	1 1 2 2	3 3 3 # наш ответ	1
a = 3	3 3 2 2	1 1 1 # наш ответ	-1

## будет потом

## Метод решения

- 1. Предобработка данных
- 2. Генерация признаков
- 3. Выбор модели / настройка
  - 4. Ансамбли
- 5. Деформация ответов / решающее правило

## Построение очень простой модели!

Удаляем html-теги, схлопываем текст, Sandisk 16GB non-HS MSD Flash удаляем спецсимволы Drive 3in1 - Black (SDSDQR-016G-T46A) sandisk16gbnonhsmsdflashdrive3in1 blacksdsdqr016qt46a Делаем 3-граммы Переходим к модели "мешок слов" san, and, ndi, dis, isk, sk1, k16, 16g, + tf-idf 6qb,qbn ... san 16g 1gb Кстати, для правильного слова "scandisk": sca, can, and, ndi, dis, isk

3-граммы могут победить опечатки.

#### Другие подходы (2е место)

hardisk hard drive
extenal external
soda stream sodastream
fragance fragrance
16 gb 16gb
32 gb 32gb
500 gb 500gb
2 tb 2tb
shoppe shop
refrigirator refrigerator
assassinss assassins
harleydavidson harley davidson
harley-davidson harley davidson

На практике так тоже делают – много ручной разметки.

Здесь для простоты модели не стали

Заметим, что модель становится переобученной. Для новых запросов такого ручного устранения неоднозначностей нет!

#### Другие подходы (1е место)

#### Здесь создан словарь синонимов

child, kid kid
bicycle, bike bike
refrigerator, fridge, freezer fridge
fragrance, perfume, cologne, eau de toilette perfume

Все делали стемминг (мы нет)

#### Признаки

#### Насколько похожи тексты?

#### Точнее: множества

```
san,and,ndi,dis,isk,sk1,k16,16g, 6gb,gbn ...
sca, can, and, ndi, dis, isk
```

# соѕ-мера, мощность пересечения (нормированная)

#### Признаки

соѕ(описание, запрос)

cos(описание, запрос) нормируем на max(описание, запрос) по всем описаниям этого запроса

mean(cos(описание, описание всех товаров этого запроса в обучении: оценка = 4))

оценка товара: на нём max cos(описание, его описание)

описание =

- само описание
  - заголовок
- заголовок + описание

## Признаки

## - это взаимодействия блоков данных!



## Выбор модели

#### Изначально проблема как настраиваться:

- 1. Задача классификации с классами [1, 2, 3, 4]
  - 2. Задача регрессии с метками [1, 2, 3, 4]
  - 3. Задача регрессии с метками [1, 4, 9, 16]
- 4. Задачи классификации/регрессии с метками

#### Выбор модели

#### Изначально проблема как настраиваться:

1. Задача классификации с классами [1, 2, 3, 4]

плохо – нет учёта порядка

2. Задача регрессии с метками [1, 2, 3, 4]

хорошо

3. Задача регрессии с метками [1, 4, 9, 16]

нужны эксперименты

4. Задачи классификации/регрессии с метками

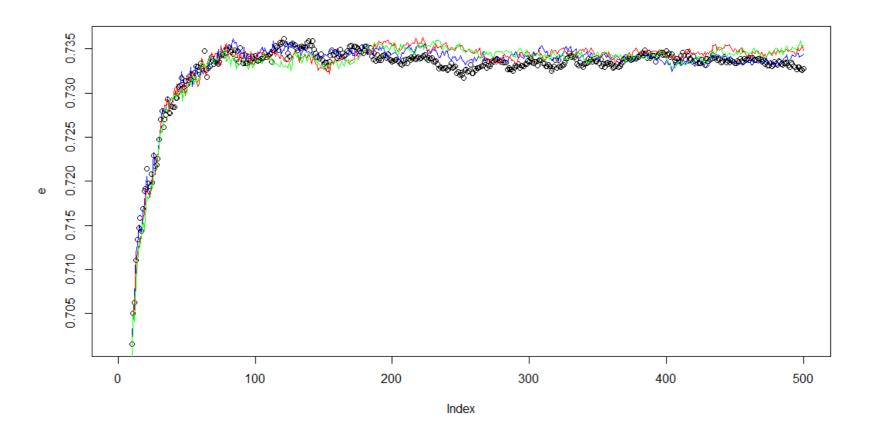
[0, 1, 1, 1]

[0, 0, 1, 1]

[0, 0, 0, 1]

Как потом использовать ответы?

#### Настройка модели

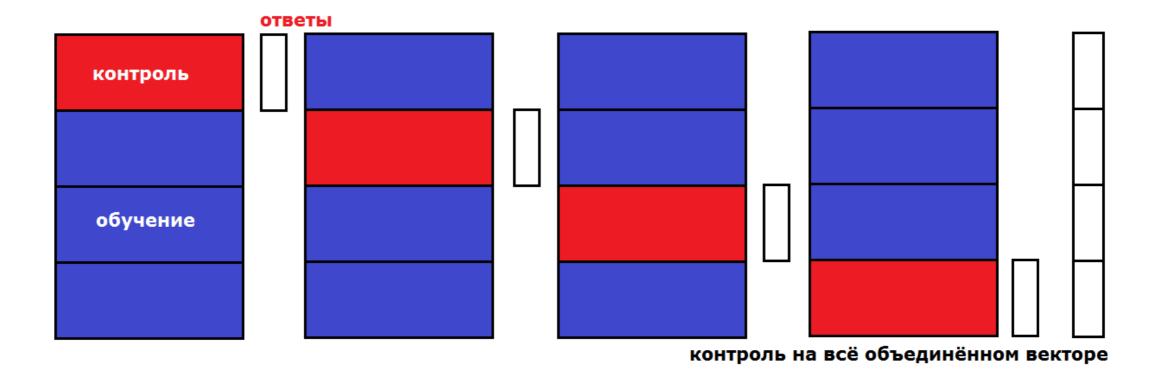


```
model <- randomForest(M1, mr, mtry=40, ntree=200, nodesize=10)
a <- predict(model, M2)
b = pmin(pmax(round(1.45*(a-3.309805)+3.309805),1),4)</pre>
```

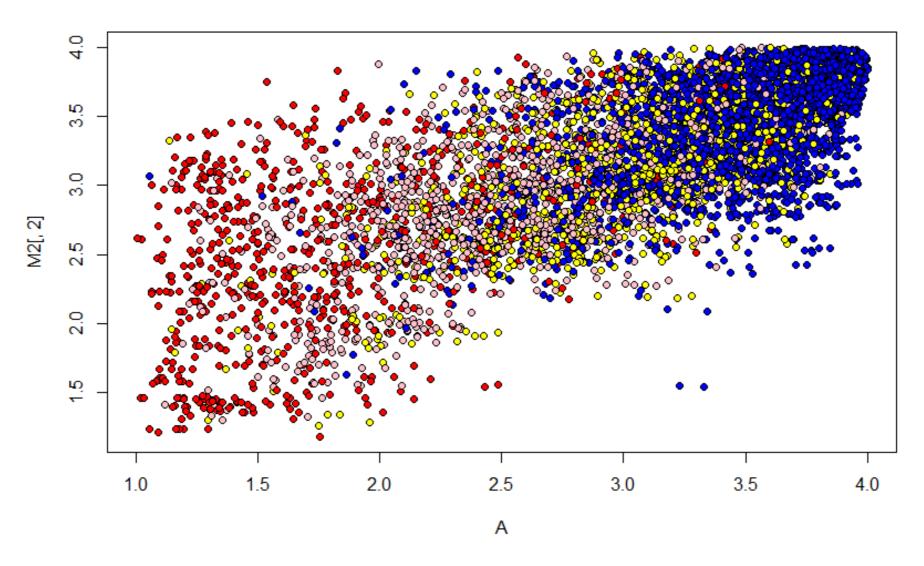
## Использовались случайные леса (даже не было зависимости от параметров!)

# Отладка

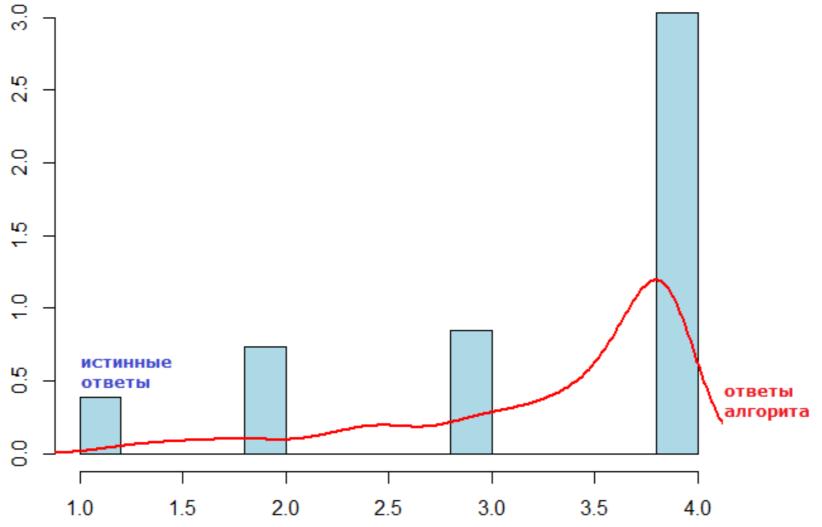
#### k-fold



# Ответы алгоритма

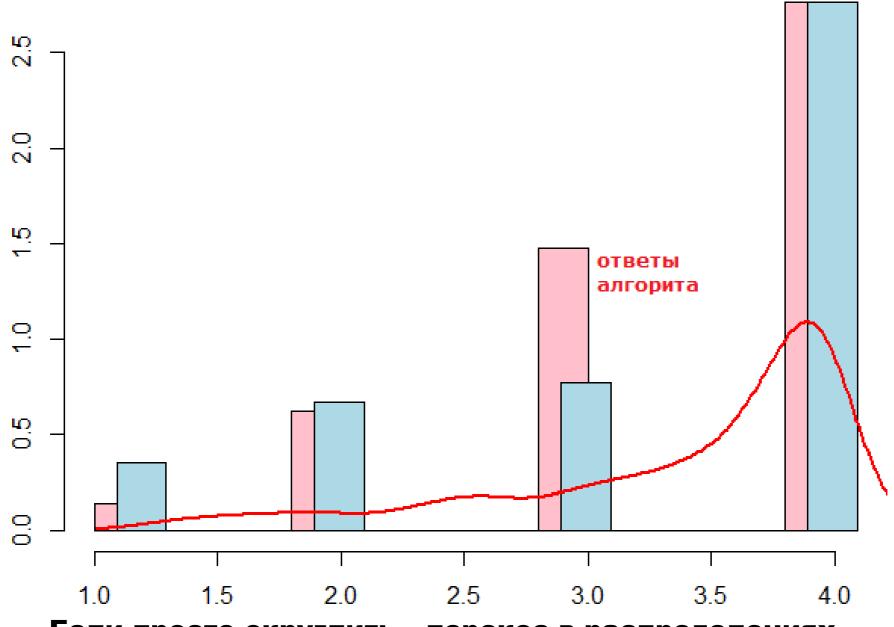


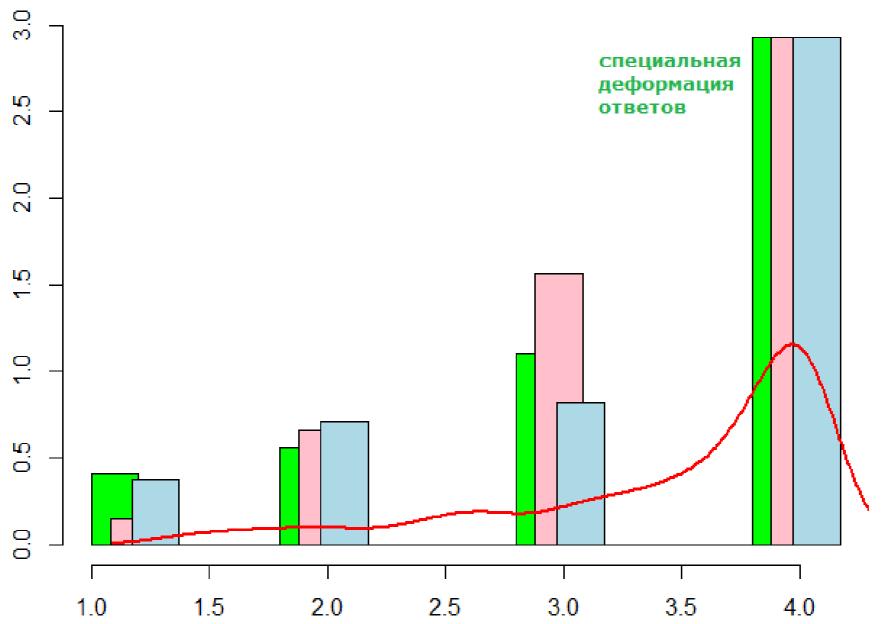
Почему медиана разных алгоритмов лучше усреднения?!



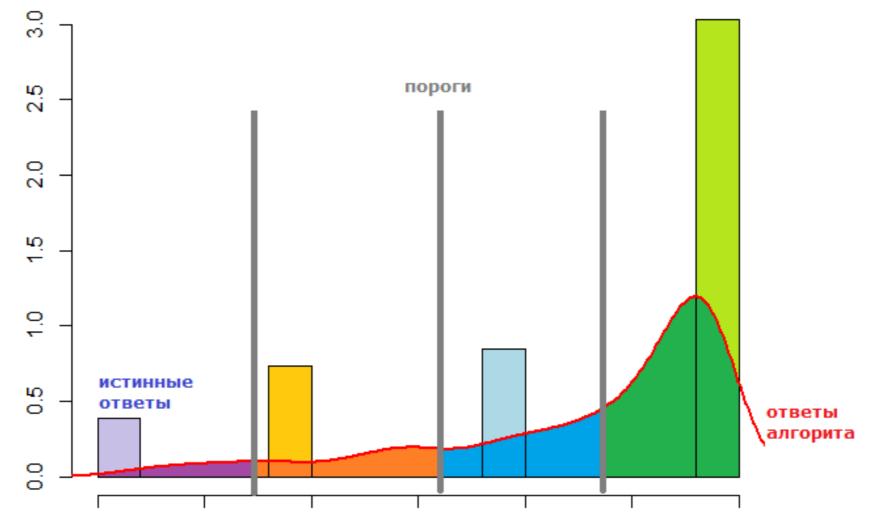
Синий – распределение настоящих ответов Красный – распределение ответов алгоритма

(они вещественные)





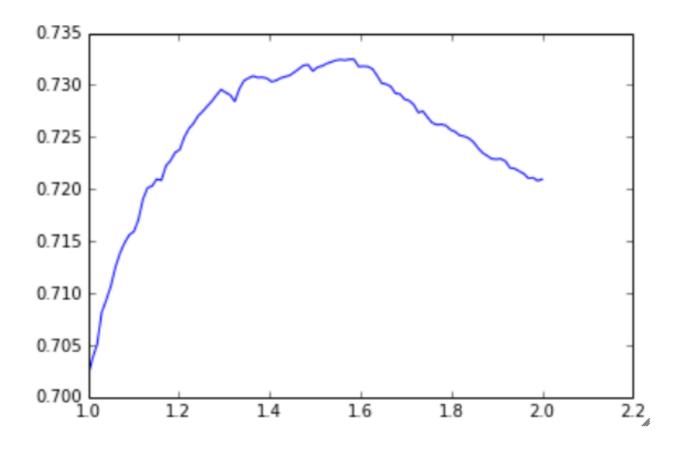
Если использовать специальную деформацию, то распределения выравниваются



В принципе, можно просто выбирать пороги, чтобы

- выровнять распределения
- повысить качество на контроле

Какую из двух стратегий выбрать?



#### Как зависит качество от множителя

pmin(pmax(round(1.45\*(a-3.309805)+3.309805),1),4)

Кстати, 3.309805 - средняя оценка.

## Для справки



Хорошая выдача (рел.3-4) похожа на хорошую выдачу в обучении (3-4). Плохая выдача (1-2) может быть не похожа на плохую выдачу!

#### Для справки

Решающее правило – переводит ответы регрессионных алгоритмов в окончательные.

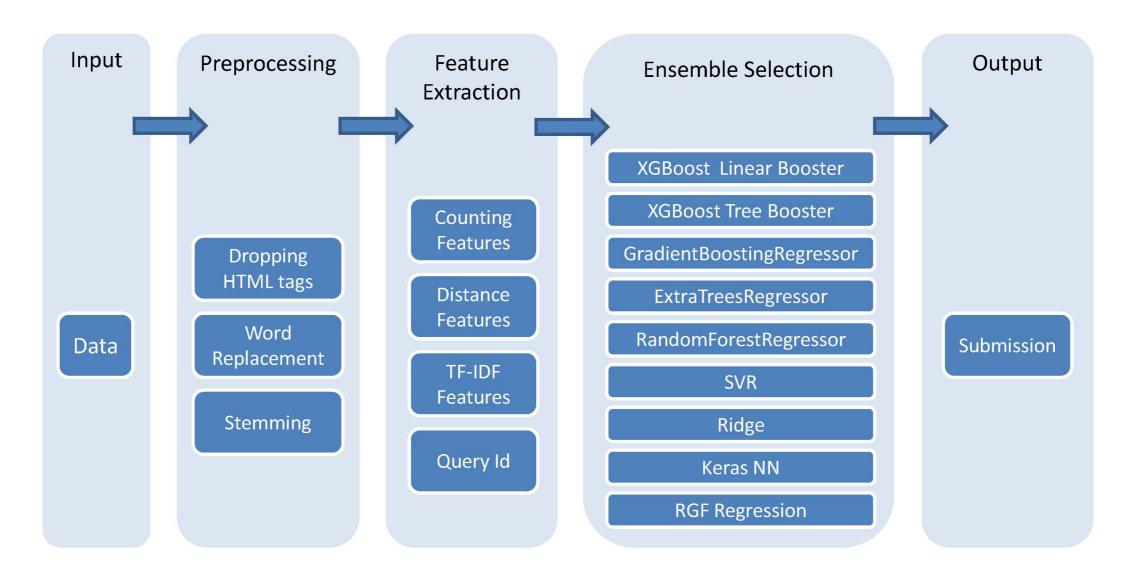
#### Обычно

- простое
- тоже требует настройки
- использует постановку задачи

(непересечение классов, малое число меток у объектов и т.п.)

Это отдельная тема!

## Решение победителя (Chenglong Chen)



https://github.com/ChenglongChen/Kaggle\_CrowdFlower

## Для справки

Полезно посмотреть, на каких объектах модель ошибается

что можно ещё учесть в признаках.

#### Итог

Число признаков (max\_features) – самый важный параметр (унимодальность)

Число базовых алгоритмов (n\_estimators) – чем больше, тем лучше

Глубина (max\_depth) – скорее всего, максимальная

Параметры сложности (min\_samples\_leaf, min\_samples\_split) – чуть подкорректировать (не очень важно)

Подвыборка (samsize) – брать всё (часто и выбора нет)

Важность

много способов ввести важность, особенно с RF, где есть ООВ

#### Литература

A. Liaw, M. Wiener Classification and Regression by randomForest // R News (2002) Vol. 2/3 p. 18.

http://www.bios.unc.edu/~dzeng/BIOS740/randomforest.pdf

И. Генрихов О критериях ветвления, используемых при синтезе решающих деревьев // Машинное обучение и анализ данных, 2014, Т.1, №8, С.988-1017

http://jmlda.org/papers/doc/2014/no8/Genrikhov2014Criteria.pdf