4.树模型对特征重要性进行评估

1. 随机森林 (RF) 简介

随机森林的算法可以用如下几个步骤概括:

- 1) 用有抽样放回的方法(bootstrap)从样本集中选取n个样本作为一个训练集
- 2) 用抽样得到的样本集生成一棵决策树。在生成的每一个结点:
 - 2.1 随机不重复地选择d个特征
- **2.2 利用这d个特征分别对样本集进行划分,找到最佳的划分特征(**可用基尼系数、增益率或者信息增益判别)
- 3) 重复步骤1到步骤2共k次, k即为随机森林中决策树的个数。
- 4) 用训练得到的随机森林对测试样本进行预测,并用票选法决定预测的结果。

2.特征重要性评估

计算每个特征在随机森林中的每颗树上做了多大的贡献,然后取个平均值,最后比一比特征之间 的贡献大小。

好了,那么这个贡献是怎么一个说法呢?通常可以用基尼指数(Gini index)或者袋外数据(OOB)错误率作为评价指标来衡量。

2.1 基于基尼系数

我们将变量重要性评分(variable importance measures)用V IM 来表示,将Gini指数用GI 来表示,假设有J 个特征 X_1 , X_2 , X_3 ,…, X_J ,I 棵决策树,C 个类别,现在要计算出每个特征 X_j 的 Gini指数评分V $IM_j^{(Gini)}$,亦即第j 个特征在RF所有决策树中节点分裂不纯度的平均改变量。

第i棵树节点q的Gini指数的计算公式为

$$\mathrm{GI_q^{(i)}} = \sum_{\mathrm{c}=1}^{|\mathrm{C}|} \sum_{\mathrm{c}'
eq \mathrm{c}} \mathrm{p_{\mathrm{qc}}^{(i)}} \mathrm{p_{\mathrm{qc}'}^{(i)}} = 1 - \sum_{\mathrm{c}=1}^{|\mathrm{C}|} (\mathrm{p_{\mathrm{qc}}^{(i)}})^2$$
 (3-1)

Pqc的含义: 节点q 中类别 c 所占的比例。

$$V\,IM_{jq}^{(Gini)(i)} = GI_q^{(i)} - GI_l^{(i)} - GI_r^{(i)} \eqno(3-2)$$

其中, $\mathrm{GI_{l}^{(i)}}$ 和 $\mathrm{GI_{r}^{(i)}}$ 分别表示分枝后两个新节点的 Gini 指数。

如果,特征 X_j 在决策树i中出现的节点为集合Q,那么 X_j 在第i颗树的重要性为

$$V\operatorname{IM}_{j}^{(\operatorname{Gini})(i)} = \sum_{q \in Q} V\operatorname{IM}_{jq}^{(\operatorname{Gini})(i)} \tag{3-3}$$

假设RF 中共有I颗树,那么

$$VIM_{j}^{(Gini)} = \sum_{i=1}^{I} VIM_{j}^{(Gini)(i)}$$
(3-4)

最后, 把所有求得的重要性评分做一个归一化处理即可。

$$V \operatorname{IM}_{j}^{(\operatorname{Gini})} = \frac{V \operatorname{IM}_{j}^{(\operatorname{Gini})}}{\sum_{j'=1}^{J} V \operatorname{IM}_{j'}^{(\operatorname{Gini})}}$$
(3-5)