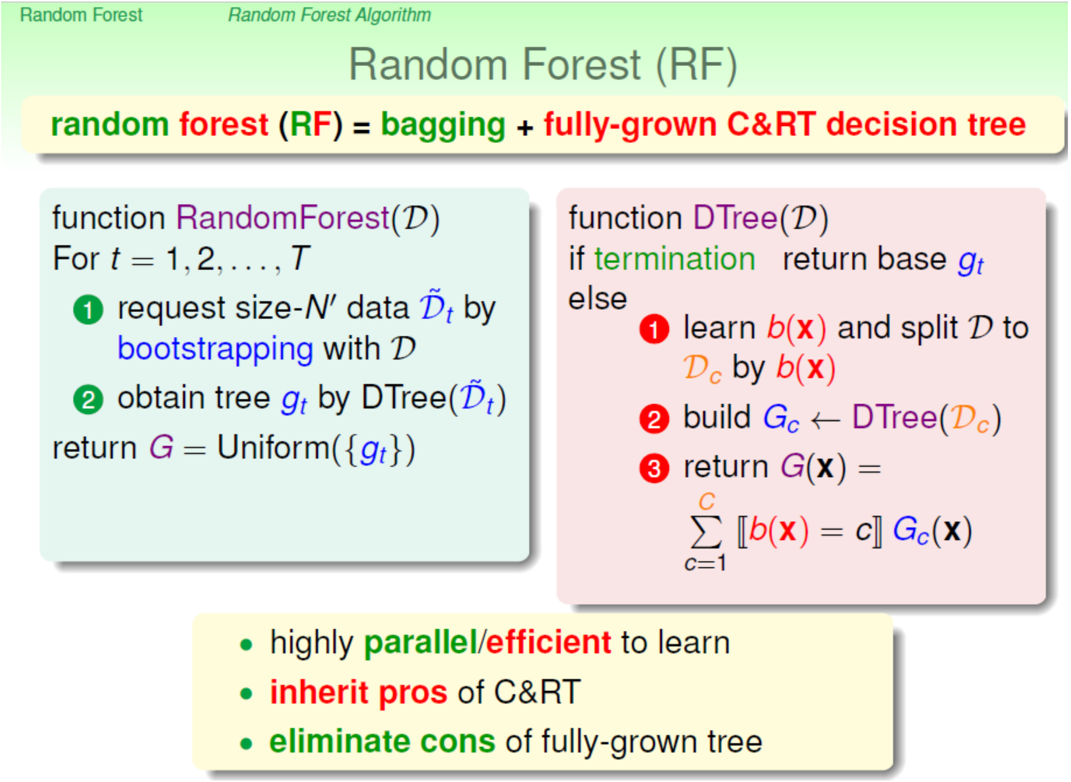
Random Forest

一、Random Forest Algorithm

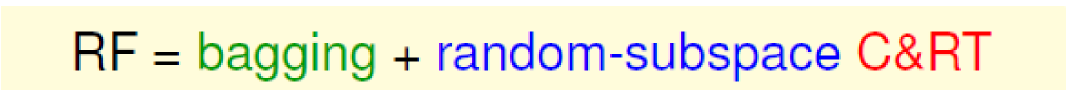
1. 想到tree就会想到森林，我们试图用aggregation of aggregation来提高算法的效果。



对比一下，由于数据量有限，我们使用boostrap来随机取样得到N'大小的样本然后学习出一颗decision tree然后再对每一棵树做uniform vote，bagging然后就得到了最后的G

注意我们这里用的是 **fully grown**的tree而不是通过剪枝得到的树，实际上加入剪枝操作会效果更好，这里我们就考虑randomness这一点上我们可以改善多个树的作用

2. 我们此处使用的RF算法实际上是取了样本的一个随机的子空间来形成树所以总结出RF的特点如下：



二、Out-Of-Bag (OOB) Estimate

1. 首先回顾一下bagging算法：

Bagging Revisited

Bagging

function Bag($\mathcal{D}$, $\mathcal{A}$)
For $t = 1, 2, \ldots, T$

1. request size-N' data $\tilde{\mathcal{D}}_t$ by bootstrapping with $\mathcal{D}$
2. obtain base g_t by $\mathcal{A}(\tilde{\mathcal{D}}_t)$

return $G = \text{Uniform}(\{g_t\})$

	g_1	g_2	g_3	$\cdots$	g_T
$(\mathbf{x}_1, y_1)$	$\tilde{\mathcal{D}}_1$	$\star$	$\tilde{\mathcal{D}}_3$		$\tilde{\mathcal{D}}_T$
$(\mathbf{x}_2, y_2)$	$\star$	$\star$	$\tilde{\mathcal{D}}_3$		$\tilde{\mathcal{D}}_T$
$(\mathbf{x}_3, y_3)$	$\star$	$\tilde{\mathcal{D}}_2$	$\star$		$\tilde{\mathcal{D}}_T$
$\cdots$					
$(\mathbf{x}_N, y_N)$	$\tilde{\mathcal{D}}_1$	$\tilde{\mathcal{D}}_2$	$\star$		$\star$

$\star$ in t-th column: not used for obtaining g_t
—called **out-of-bag (OOB) examples** of g_t

2. 我们通过随机取样的方法来获得$\widetilde{D_t}$，现在我们考虑没有被选择中的样本，在这里我们称之为**OOB examples**,我们对于$N' = N$情况下OOB的样本概率进行估计，

$$(1 - \frac{1}{N})^N \approx \frac{1}{e} \tag{1}$$

3. 我们对于OOB和Validation做一个比较:

OOB versus Validation

OOB

	g_1	g_2	g_3	$\cdots$	g_T
$(\mathbf{x}_1, y_1)$	$\tilde{\mathcal{D}}_1$	$\star$	$\tilde{\mathcal{D}}_3$		$\tilde{\mathcal{D}}_T$
$(\mathbf{x}_2, y_2)$	$\star$	$\star$	$\tilde{\mathcal{D}}_3$		$\tilde{\mathcal{D}}_T$
$(\mathbf{x}_3, y_3)$	$\star$	$\tilde{\mathcal{D}}_2$	$\star$		$\tilde{\mathcal{D}}_T$
$\cdots$					
$(\mathbf{x}_N, y_N)$	$\tilde{\mathcal{D}}_1$	$\star$	$\star$		$\star$

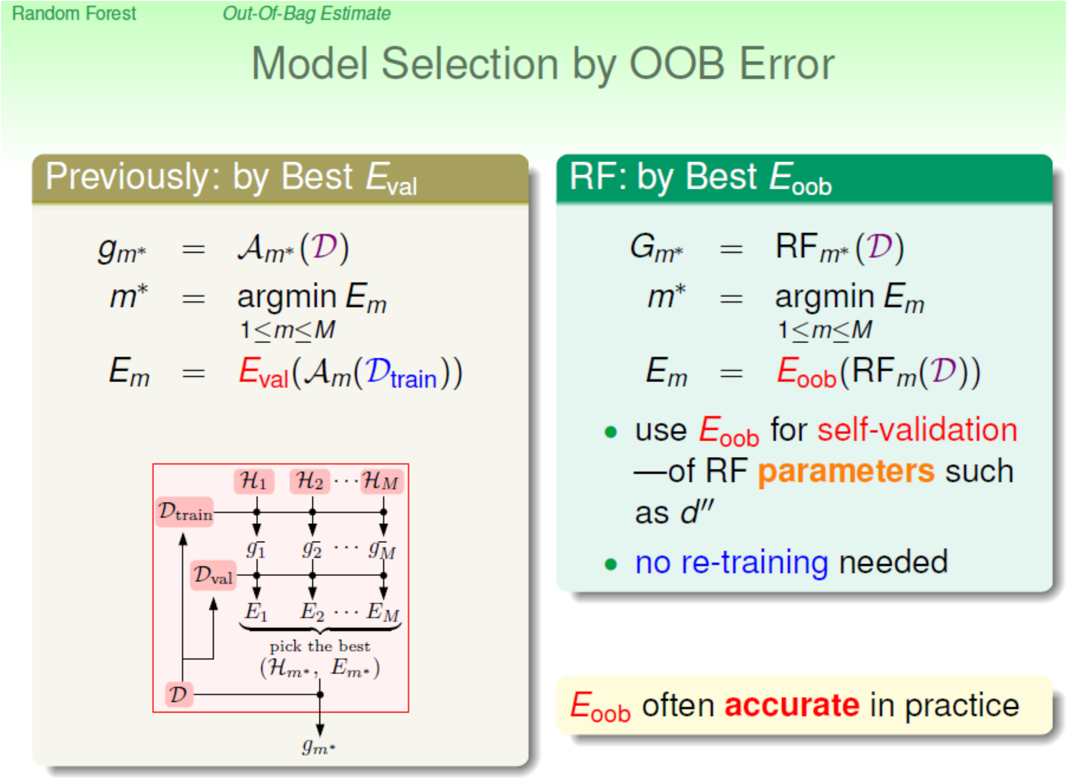
Validation

g_1^-	g_2^-	$\cdots$	g_M^-
$\mathcal{D}_{\text{train}}$	$\mathcal{D}_{\text{train}}$		$\mathcal{D}_{\text{train}}$
$\mathcal{D}_{\text{val}}$	$\mathcal{D}_{\text{val}}$		$\mathcal{D}_{\text{val}}$
$\mathcal{D}_{\text{val}}$	$\mathcal{D}_{\text{val}}$		$\mathcal{D}_{\text{val}}$
$\mathcal{D}_{\text{train}}$	$\mathcal{D}_{\text{train}}$		$\mathcal{D}_{\text{train}}$

- $\star$ like $\mathcal{D}_{\text{val}}$: ‘enough’ random examples unused during training
- use $\star$ to validate g_t? easy, but **rarely needed**
- use $\star$ to validate G? $E_{\text{oob}}(G) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \text{err}(y_n, G_n^-(\mathbf{x}_n))$, with G_n^- contains only trees that $\mathbf{x}_n$ is OOB of, such as $G_N^-(\mathbf{x}) = \text{average}(g_2, g_3, g_T)$

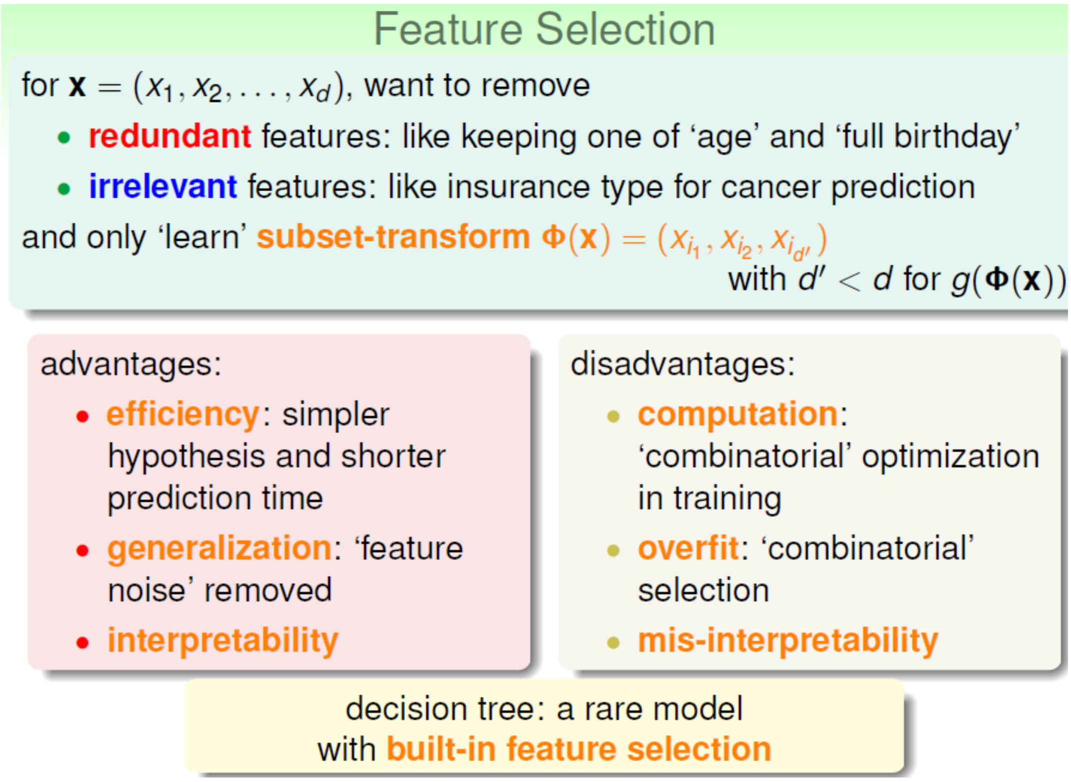
E_{oob}: self-validation of bagging/RF

4. 我们可以通过衡量E_{oob}来衡量RF的效果，这种可以看作是RF的一个**self-validation**的优势！因此我们也可以利用E_{oob}来选择模型，一般情况下它甚至比一般的validation效果要好



三、Feature Selection

1. decision tree是一个具有内在特征选择机制的模型，这在大部分模型当中是很少出现的：



可以达到摒弃不相关和多余特征的效果，类似于一种降维的方法

2. 总结一下决策树的优劣：

- 优势：
  - 高效：用简单的假设构成的预测
  - 泛化能力：摒弃了特征的噪声（不相关和多余的特征）
  - 可解释性：符合人类决策
- 劣势：

- 计算力：训练过程时间长
- 过拟合：特征选择过多
- 解释性差：理论基础不坚固

3. **特征选择机制：重要性原则**，适用于**线性模型**，权重的大小代表着重要性

Feature Selection by Importance

idea: if possible to calculate

$$\text{importance}(i) \text{ for } i = 1, 2, \ldots, d$$

then can select $i_1, i_2, \ldots, i_{d'}$ of top-d' importance

importance by linear model

$$\text{score} = \mathbf{w}^T\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{d} w_i x_i$$

- intuitive estimate: $\text{importance}(i) = |w_i|$ with some 'good' **w**
- getting 'good' **w**: learned from data
- non-linear models? often **much harder**

4. **特征选择机制：全排列测试**，适用于**非线性模型**，去掉此特征后，表现的衰弱程度作为评判重要性的原则！

Feature Importance by Permutation Test

idea: random test
—if feature i needed, 'random' values of $x_{n,i}$ degrades performance

- which random values?
  - uniform, Gaussian, . . .: $P(x_i)$ changed
  - bootstrap, **permutation** (of $\{x_{n,i}\}_{n=1}^{N}$): $P(x_i)$ approximately remained
- **permutation** test:

$$\text{importance}(i) = \text{performance}(\mathcal{D}) - \text{performance}(\mathcal{D}^{(p)})$$

with $\mathcal{D}^{(p)}$ is $\mathcal{D}$ with $\{x_{n,i}\}$ replaced by permuted $\{x_{n,i}\}_{n=1}^{N}$

permutation test: a general statistical tool for arbitrary non-linear models like RF

5. 在原始的随机森林模型中我们采用的特征重要性度量方法：

   我们结合permutation作为重要性度量，利用OOB-Validation作为Error度量

四、Random Forest in Action

需要足够多的树来保证稳定性！