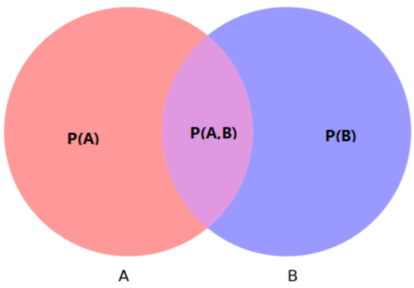
文章目录

数学基础

概率公式



这里用 Venn 图来表示事件A 与事件 B 的关系，$P(A)$ 与 $P(B)$ 分别表示它们各自发生的概率，其中它们的交叠区域用 $P(A,B)$ 表示 A 和 B 共同发生的概率。 基于上面的表示，可以给出**条件概率**的公式：

$$P(A|B)=\frac{P(A,B)}{P(B)} \tag{1}$$

条件概率公式（1）表示，在事件 B 发生的条件下，事件 A 发生的概率，结合上面的 Venn 图不难理解这个公式，将（1）转换一下并推广，可以得到全概率公式，事件组$\{B_i\}$ 是样本空间的一个划分：

$$P(A)=\sum_{i=1}^{n}P(B_i)P(A|B_i) \tag{2}$$

所以根据条件概率的公式和全概率公式，可以得到贝叶斯公式：

$$P(B_i|A) = \frac{P(AB_i)}{P(A)} = \frac{P(B_i)P(A|B_i)}{\sum P(B_i)P(A|B_i)}$$

(3)

贝叶斯公式是建立在条件概率的基础上，寻找事情发生的原因。

先验概率与后验概率

以事件A为例，在上面提到的全概率公式 $P(A)$ 就称为先验概率（Prior probability），即在事件 B 发生之间我们对事件 A 的概率有一个判断。 $P(A|B)$ 称为后验概率（Posterior probability），即在事件 B 发生以后我们对事件 A 的发生概率有了一个新的估计。

假如在编号为 1，2 盒子里各有 10 个球， A 中有 4红，6白，B 中有 2红，8白。现从它们之中随机取一个球是红色的球，问这个球从编号 1 盒子中取得概率是多少?

设取出红球的事件为 B，从编号 1 盒子中抽球的事件为 A，所以从 A 盒子中取出一个球并且 是红球的概率可以表示为$P(B|A)$:

$$P(B) = 6/20\text{，}P(A) = 10/20, P(B|A) = 4/10$$

根据贝叶斯公式可以得到:

$$P(A|B) = \frac{P(A)P(B|A)}{P(B)} = \frac{(10/20)*(4*10)}{6/20} = \frac{2}{3}$$

可以看到在事件 B 发生之间从 A 盒子中取球的先验概率为 $\frac{1}{2}$，当事件 B 发生以后 A 的后验概率就变成了 $\frac{2}{3}$ 。

信息熵

信息本身是一个很抽象的概念，但是信息论之父香农在 1948 年的论文中借鉴了热力学中“熵(entropie)”的概念，提出了信息熵。在热力学中，熵是表示体系的混乱程度，体系越混乱，熵就越大。对应到信息论中，熵（信息熵）表示信息量的多少（不确定程度） ,熵越大，不确定性就越大，而不确定性大，代表事情发生的概率小，所以不确定性是概率的减函数。
我们知道，当事件A与事件B相对独立的时候，事件A,B 一起发生的概率为: $P(A,B) = P(A)P(B)$
而对于两个独立事件的不确定性应该满足可加性，设不确定性函数 $f(x)$ 为: $f(A,B) = f(A) + f(B)$
首先将两个数相乘转换称两个数相加的关系，很显然，我们可以借助对数函数的性质，又因为两个是负相关，所以前面再加一个负号，这样我们就可以得到不确定性的计算表达式:

$$f(p) = log\frac{1}{p} = -logp$$

(4)

上面的式子是单个事件的不确定性，由 n 个事件共同组成的样本空间 U 的不确定性应当为单个事件的统计平均值 E，这就是信息熵，可以得到它的数学表达式为:

$$H(U) = E[-logp] = -\sum_{i=1}^{n} p_i logp_i$$

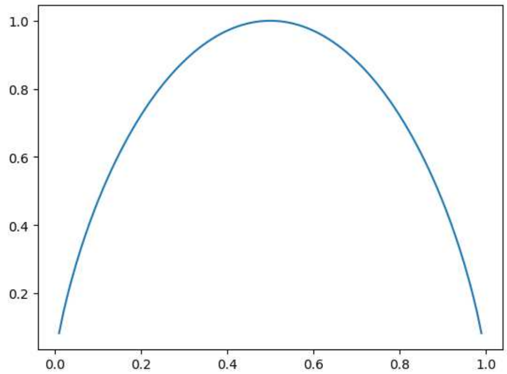
(5)

上式中 log 以 2 为底单位为比特(bit)，也可以以 e 为底，这时单位为纳特(nat)。

以二分类问题为例，设事件 A 与 事件 B 发生的概率分别为 p 和 $1-p$，根据信息熵的定义：

$$H(U) = -plogp - (1-p)log(1-p)$$

$H(U)$ 的曲线如下：



可以看到，当 $p = 0.5$ 时，熵取值最大，不确定最大，满足熵的定义。

互信息

由上面的概率公式变换一下，可以得到：

$$P(A,B) = P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A)$$

根据不确定函数对于概率的关系可得熵有如下关系：

$$H(A,B) = H(A|B) + H(B) = H(B|A) + H(A) \tag{6}$$

因此，由公式（6）可以得到：

$$I(A;B) = H(A) - H(A|B) = H(B) - H(B|A) \tag{7}$$

这个差就叫做 A 和 B 的互信息，我们记作 $I(A;B)$ ，按照熵的定义，互信息的展开式为：
$I\left(A;B\right) = H\left(A\right) - H\left(A|B\right)$
$= H\left(A\right) + H\left(B\right) - H\left(A,B\right)$
$= -\sum_x p(x)logp(x) - \sum_y p(y)logp(y) + \sum_{x,y} p(x,y)logp(x,y)$
$= \sum_{x,y} p(x,y)log\frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}$

互信息表示的是事件之间在不确定性熵相互影响的程度。

条件熵

由公式（6）可以得到：

$$H(A,B) = H(A|B) + H(B) = H(B|A) + H(A)$$

这里的条件熵就是 $H(A|B)$ 或者是 $H(B|A)$。根据上面的公式可以得到条件熵的表达式为：

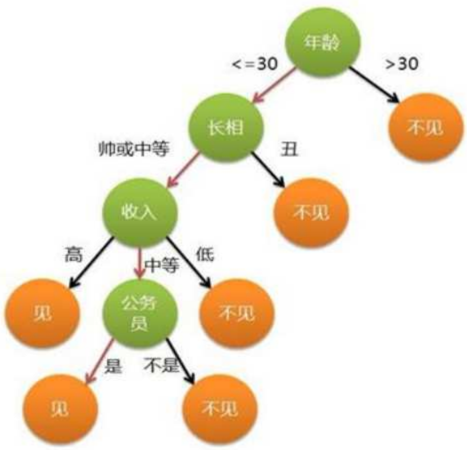
$$H(A|B) = H(A,B) - H(B) \tag{8}$$

即 (A,B) 发生所包含的熵，减去 B 单独发生包含的熵，就是表示在 B 发生的前提下，A 发生时带来的熵。

$H\left(A,B\right)-H\left(B\right)$
$=-\sum_{x,y}p(x,y)logp(x,y)+\sum_{y}p(y)logp(y)$
$=-\sum_{x,y}p(x,y)logp(x,y)+\sum_{y}\left(\sum_{x}p(x,y)\right)logp(y)$
$=-\sum_{x,y}p(x,y)logp(x,y)+\sum_{x,y}p(x,y)logp(y)$
$=-\sum_{x,y}p(x,y)log\frac{p(x,y)}{p(y)}$
$=-\sum_{x,y}p(x,y)logp(x|y)$

再由上面公式进一步推导可得：
$H\left(A,B\right)-H\left(B\right)$
$=-\sum_{x,y}p(x,y)logp(x|y)$
$=-\sum_{x}\sum_{y}p(y)p(x|y)logp(x|y)$
$=\sum_{y}p(y)\left(-\sum_{x}p(x|y)logp(x|y)\right)$
$=\sum_{y}p(y)H(X|Y=y)$

决策树



这里给出一个选择见还是不见相亲对象的决策树示意图，通过对判别标准一个个的进行比较，最终导致两个结果：见 或者 不见。

首先决策树是一种树形结构（不全是二叉树），其中每个内部节点表示在一个属性上的测试，每个分支都代表一个测试输出，每个叶节点都代表一种类别，决策树是以实例为基础的归纳学习。 决策树学习采用的是自顶向下的递归方法，基本思想是以信息熵为度量构造一棵熵值下降最快的树，到叶子节点处的熵为 0，此时每个叶节点中的实例都属于同一类。很显然，决策树属于有监督学习。

信息增益

根据前面数学基础部分的熵与条件熵的概念得到的熵分别为 经验熵 和 经验条件熵。假设特征 A 对训练数据集 D 的信息增益为 $g(D,A)$，而这里的信息增益 $g(D,A)$ 就是指经验熵$H(D)$与经验条件熵$H(D|A)$之差：

$$g(D,A)=H(D)-H(D|A) \tag{9}$$

信息增益表示得知特征 A 的信息使得类 X 的信息的不确定性减少的程度，即为训练集 D 和特征 A 的互信息。

这里用李航博士《统计学习方法》中的例子来帮助理解：

表 5.1 贷款申请样本数据表

ID	年龄	有工作	有自己的房子	信贷情况	类别
1	青年	否	否	一般	否
2	青年	否	否	好	否
3	青年	是	否	好	是
4	青年	是	是	一般	是
5	青年	否	否	一般	否
6	中年	否	否	一般	否
7	中年	否	否	好	否
8	中年	是	是	好	是
9	中年	否	是	非常好	是
10	中年	否	是	非常好	是
11	老年	否	是	非常好	是
12	老年	否	是	好	是
13	老年	是	否	好	是
14	老年	是	否	非常好	是
15	老年	否	否	一般	否

这里将上述表格的信息进行一个归纳总结，总共有 4 个特征，然后每个特征对应最后的类别为 `是/否` ：

特征	分布
A1 年龄	{ 5青年 : [2是 3否] } { 5中年 : [3是 2否] } { 5老年 : [4是 1否] }
A2 工作	{ 10没有工作 : [4是 6否] } { 5有工作 : [5是] }
A3 有房子	{9没有房子 : [3是 6否] } { 6有房子 : [6是] }
A4 信贷	{ 6好 : [4是 2否] } { 5一般 : [1是 4否] } { 4非常好 : [4是] }
类别 D	9 是 6 否

以其中一个归纳举例，{ 5青年 : [2是 3否] } 表示 A1年龄 这个特征中 有 5 个是青年，5个青年中有 2 个批准申请贷款，3个不批准申请贷款，依次类推。

根据上面的定义式：

经验熵 $H(D)$:

$$H(D)=-\frac{9}{15}log_2\frac{9}{15}-\frac{6}{15}log_2\frac{6}{15}=0.971$$

因为其中 类别 D 有 9 个是批准，6个不批准。

条件经验熵 $H(D|A^1)$:

$$H(D|A^1)=\frac{5}{15}H(D_1)+\frac{5}{15}H(D_2)+\frac{5}{15}H(D_3)$$,将参数代入得:

$$H(D|A^1)=\frac{5}{15}\left(-\frac{2}{15}\log_2\frac{2}{5}-\frac{3}{15}\log_2\frac{3}{5}\right)+\frac{5}{15}\left(-\frac{3}{15}\log_2\frac{3}{5}-\frac{2}{15}\log_2\frac{2}{5}\right)+\frac{5}{15}\left(-\frac{4}{15}\log_2\frac{4}{5}-\frac{1}{15}\log_2\frac{1}{5}\right)$$

最后求得 $H(D|A^1)=0.888$ 。
这里得 D_1，D_2，D_3，分别对应 青年，中年，老年，括号里的概率分别对应青年，中年，老年中的 是 和 否 的个数。

依次类推可以计算得到 $H(D|A^2)$， $H(D|A^3)$，$H(D|A^4)$。

信息增益 $g(D,A^1)$:

根据定义式可得:
$g(D,A^1)=H(D)-H(D|A^1)=0.971-0.888=0.083$

同理可得:
$g(D,A^2)=H(D)-H(D|A^2)=0.971-0.647=0.324$
$g(D,A^3)=H(D)-H(D|A^3)=0.971-0.551=0.420$
$g(D,A^4)=H(D)-H(D|A^4)=0.971-0.608=0.363$

信息增益率

知道信息增益的概念后，这里直接给出信息增益率的定义式:

$$g_r(D,A)=\frac{g(D,A)}{H(A)}$$

继续上面的例子:
特征 A^1 中有 5 个青年，5个中年，5个老年，A^2 中 10 个没有工作，5个有工作，同理A^3,A^4 可得:

$$H(A^1)=-\frac{5}{15}log_2\frac{5}{15}-\frac{5}{15}log_2\frac{5}{15}-\frac{5}{15}log_2\frac{5}{15}=1.585$$
$$H(A^2)=-\frac{10}{15}log_2\frac{10}{15}-\frac{5}{15}log_2\frac{5}{15}=0.918$$
$$H(A^3)=-\frac{9}{15}log_2\frac{9}{15}-\frac{6}{15}log_2\frac{6}{15}=0.971$$
$$H(A^4)=-\frac{6}{15}log_2\frac{6}{15}-\frac{5}{15}log_2\frac{5}{15}-\frac{4}{15}log_2\frac{4}{15}=1.565$$

所以上面的信息增益为:

$$g_r(D,A^1)=\frac{0.083}{1.585}=0.052$$
$$g_r(D,A^2)=\frac{0.324}{0.918}=0.353$$
$$g_r(D,A^3)=\frac{0.420}{0.971}=0.432$$
$$g_r(D,A^4)=\frac{0.363}{1.565}=0.232$$

基尼系数

对于分类问题，假设有 K 类，属于第 k 类的概率为 p_k，则概率分布的基尼系数为：

$$Gini(p) = \sum_{k=1}^{K} p_k(1-p_k) = 1 - \sum_{k=1}^{K} p_k^2$$

如果样本集合 D 根据特征 A 是否取某一个值 a 被分割成 D_1,D_2 两部分，则在特征 A 的条件下，集合 D 的基尼系数定义为：

$$Gini(D,A) = \frac{|D_1|}{D}Gini(D_1) + \frac{|D_2|}{D}Gini(D_2)$$

基尼指数 $Gini(D)$ 表示集合 D 的不确定性，$Gini(D,A)$ 表示经 $A=a$ 分割后集合 D 的不确定性。基尼指数值越大，样本集合的不确定性就越大，与熵相似。

以上述题目为例，年龄特征 A^1： 青年，中年，老年 会分别划分为：

> Gini(D,A^1 = 1) 对应 D_1 = 青年，D_2 = 中年，老年
> Gini(D,A^1 = 2) 对应 D_1 = 中年，D_2 = 青年，老年
> Gini(D,A^1 = 3) 对应 D_1 = 老年，D_2 = 青年，中年

依次类推。 $|D_i|$ 指对应类别的样本总数，$|D|$ 表示集合总样本数。

$$H(D|A^1) = \frac{5}{15}\left(2\times\frac{2}{5}\times\left(1-\frac{2}{5}\right)\right) + \frac{10}{15}\left(2\times\frac{7}{10}\times\left(1-\frac{7}{10}\right)\right) = 0.44$$

依次类推：

> $Gini(D,A^1)$
> $Gini(D,A^1=1)=0.44$ #青年
> $Gini(D,A^1=2)=0.48$ #中年
> $Gini(D,A^1=3)=0.44$ #老年

> $Gini(D,A^2)$
> $Gini(D,A^2=1)=0.32$

> $Gini(D,A^3)$
> $Gini(D,A^3=1)=0.27$ # 所有基尼指数中的最小值

> $Gini(D,A^4)$
> $Gini(D,A^4=1)=0.36$
> $Gini(D,A^4=2)=0.47$
> $Gini(D,A^4=3)=0.32$

基尼指数主要是用来选择 **最优特征** 和 **最优切分点** 的。

决策树生成

经过上面一些概念的讲解，下面3种决策树生成树生成算法就不难理解了，主要来看一下他们的区别：

- **ID3**：使用信息增益（互信息）$g(D,A)$来进行特征选择 （信息增益最大化）

- **C4.5**：使用的是信息增益率 $g_r(D,A)$ 来进行特征选择（信息增益率最大化）
- **CART**：使用基尼指数 $Gini(D,A)$ 来进行特征选择（基尼指数最小化），上面 $Gini(D,A^3=1)=0.27$ 是最小的，所以 A^3 是最佳分割特征，$A^3=1$ 是最佳分割点

决策树剪枝

在 ID3 算法中是没有剪枝操作的，所以这种方法容易出现过拟合，在 C4.5 中加入了剪枝操作，主要是在决策树学习的损失函数中加入了**叶节点个数**的考虑，将其作为惩罚项，自下而上递归地将叶节点回缩以后计算损失函数，损失函数值变小，则删除当前节点。

CART 是指分类与回归树，其首先从生成算法生成的树底端不断剪枝，直到根节点，形成一个子树序列，然后通过验证法计算每一个子树的损失函数，从中选择最优的子树。

Bagging 与随机森林

Bagging

Bootstraping 方法又称自助法，是有放回的抽样方法，基于这种方法我们将介绍 Bagging 方法的思路：

- 从样本集中有放回的重采样，每次选出 n 个样本
- 在所有属性上，对这 n 个样本建立分类器（ID3,C4.5,CART,SVM,Logistic 回归等）
- 重复以上两步 m 次，获得 m 个分类器
- 将数据放在这 m 个分类器上，最后根据这 m 个分类器的投票结果，决定数据属于哪一类

随机森林

而 随机森林方法是在 bagging 方法上做了修改：

- 从样本集中有放回的重采样，每次选出 n 个样本
- 从所有属性中随机选择 k 个属性，选择最佳分割作为节点建立 CART 决策树
- 重复以上两步 m 次，获得 m 个 CART 决策树
- 这 m 个 CART 决策树形成随机森林，通过投票，决定数据属于哪一类

因为随机森林在选取的时候充满随机性，所以基本是不可复线的，即同样的参数下跑的分类结果可能存在略微差异，但大体相似。

参考文献：
https://baike.baidu.com/item/信息熵/7302318
https://blog.csdn.net/weixin_34370347/article/details/87143933