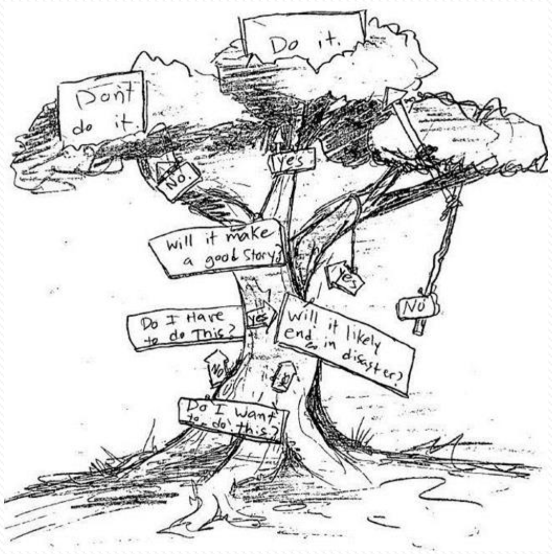
第三章：决策树
Ch3: Decision Tree

什么是决策树?



场景:

选专业、选大学、找工作、找对象、日常决定…

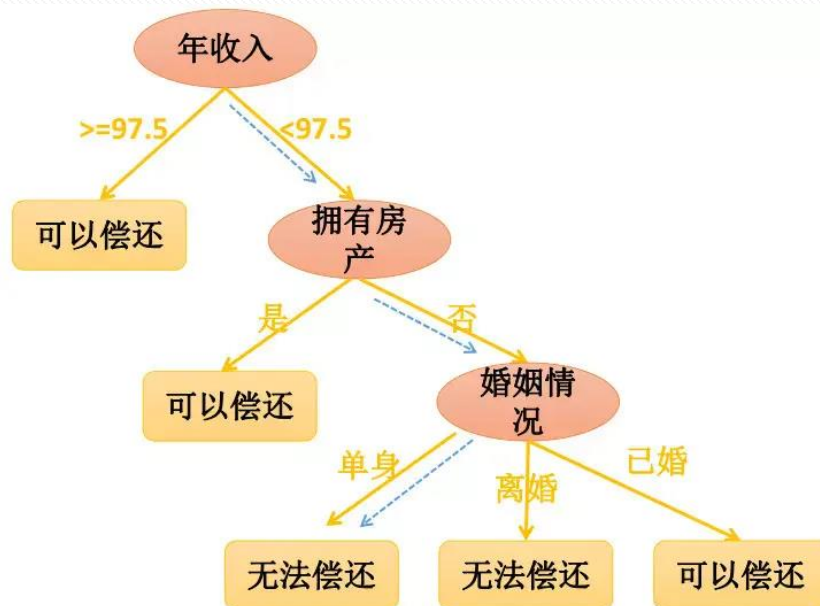
决策树是用于决策制定的**最简单**却**高效**的**分类**和**预测**的可视化工具的一种。

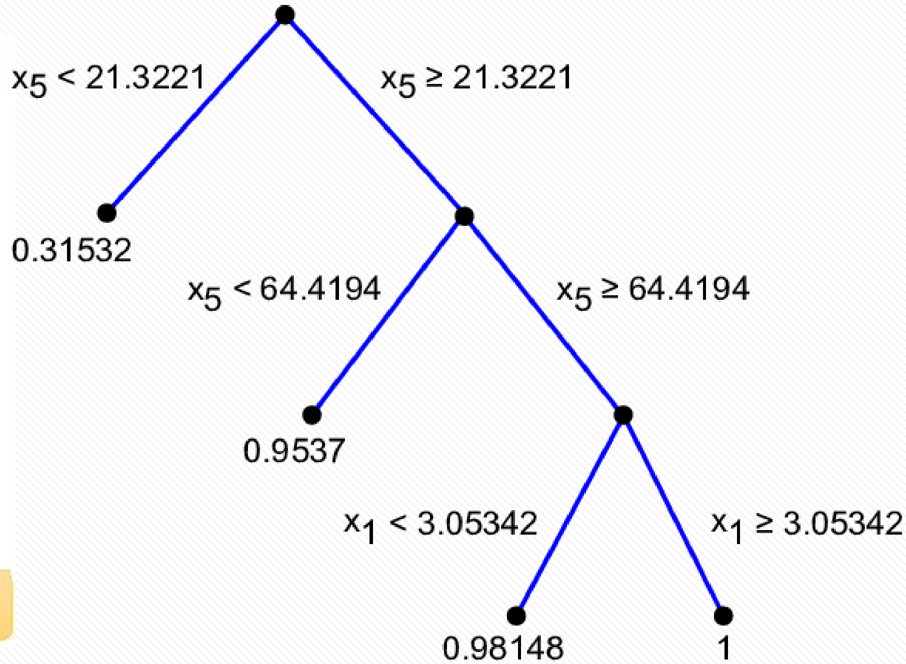
A decision tree is one of the simplest yet highly effective classification and prediction visual tools used for decision making.

To be or not to be. It is a decision!

决策树模型

决策树：分类决策树和**回归**决策树





分类决策树

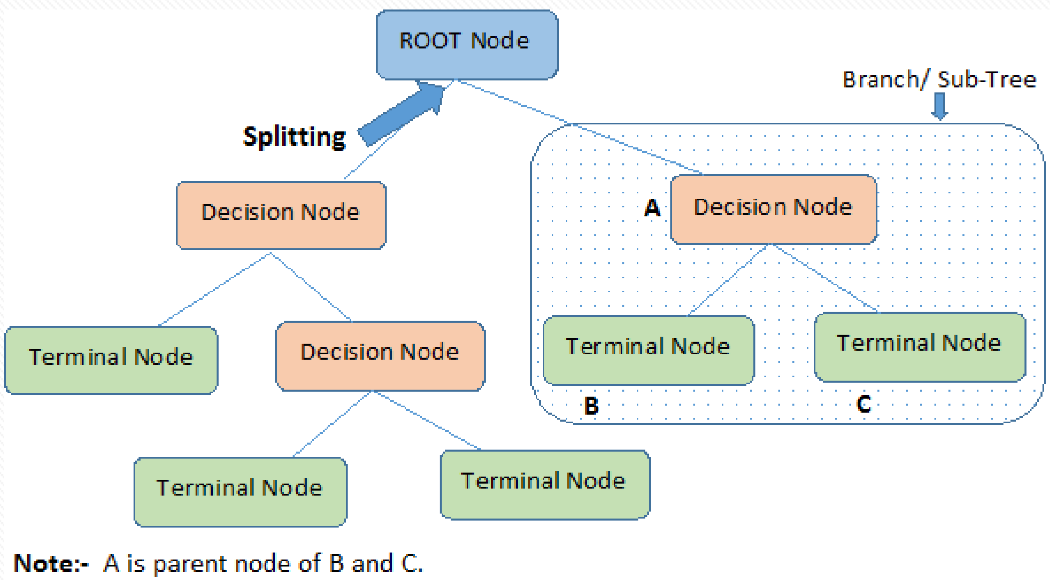
回归决策树

决策树模型

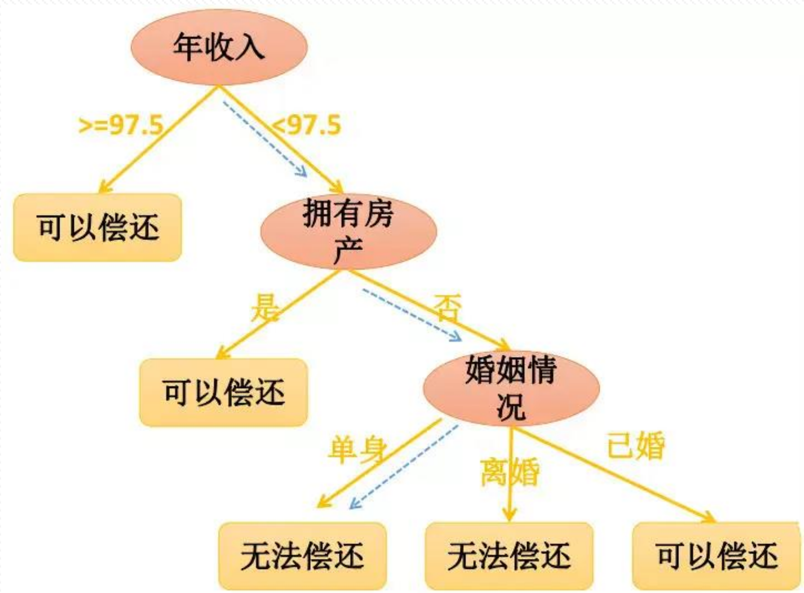
分类决策树

是一种描述对实例进行分类的**树形结构**，由**结点**(node)和**有向边**(directed edge)组成。

- *每个“**内部节点**”对应某个属性上的“测试”*
- *每个**分支**对应于测试的一种可能结果（即该属性的某个取值）*
- *每个“**叶节点**”对应于一个“预测结果”*



基本概念



具体例子

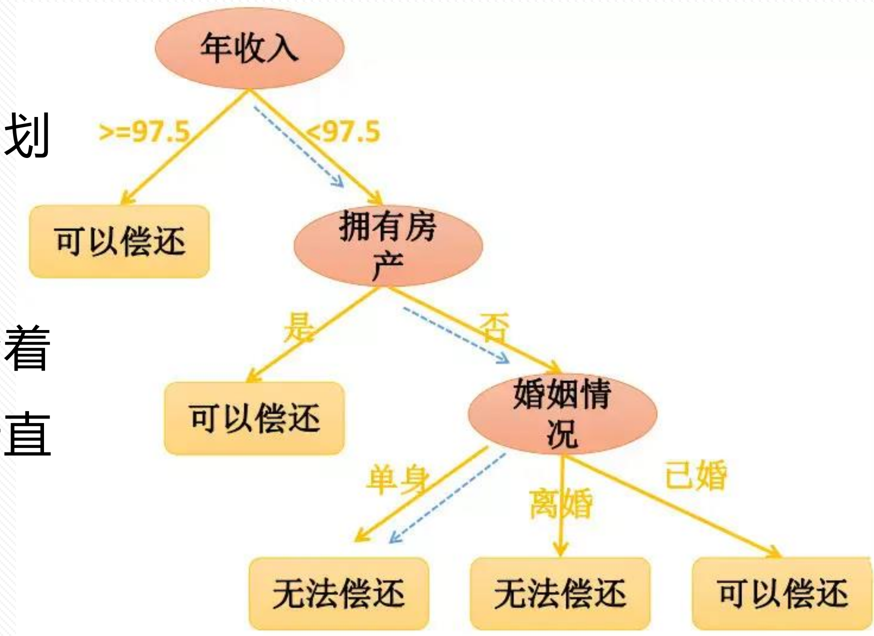
决策树模型

分类决策树

学习过程：通过训练样本的分析来确定“划分属性”

预测过程：将测试示例从根节点开始，沿着划分属性所构成的“判定测试序列”下行直到叶节点

互斥且完备：每一个实例都被一条路径或一条规则所覆盖，而且只被一条规则所覆盖



银行贷款审批决策树

决策树模型

假设给定训练、数据集

$$D=\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots,(x_N,y_N)\}$$

其中， $xi=\left(x_i^{(1)},x_i^{(2)},\dots,x_i^{(n)}\right)^T$ 为输入实例（特征向量）， n 为特征个数 $y_i\in\{1,2,\dots,K\}$ 为类标记， $i=1,2,\dots,N$，为样本容量。决策树学习的目标是根据给一定的训练数据集构建 一个决策树模型，使它能够对实例进行正确的分类。

决策树学习算法

- 特征选择（信息增益）
- 决策树生成（ID3、C4.5）
- 决策树剪枝 （CART）

特征选择

概念1：信息量（Information Quantity ）

事件1：德国队获得世界杯冠军
事件2：中国队获得世界杯冠军

信息量的大小和事件发生的概率成反比

信息奠基人香农（Shannon，1948）认为“信息是用来消除随机不确定性的东西”，也就是说衡量信息量大小就看这个信息消除不确定性的程度。事件E的信息量表达式为：

$$I(E)=-\log_2(p(E))$$

概念2：信息熵（ Entropy ）

C.E. Shannon (1948). A Mathematical Theory of Communication

信息量度量的是一个具体事件发生所带来的信息，而熵则是在结果出来之前对可能产生的信息量的期望——考虑该随机变量的所有可能取值，即所有可能发生事件所带来的信息量的期望。**是随机变量不确定性的度量。**

设X是一个取有限个值的离散随机变量，其概率分布为：

$$P(X=x_i)=p_i\,,\quad i=1,2,\cdots,n$$

随机变量X的熵定义为：

$$H(X)=-\sum_{i=1}^{n}p_i\log p_i \qquad H(p)=-\sum_{i=1}^{n}p_i\log p_i$$

只与X分布有关

特征选择

举例：抛硬币

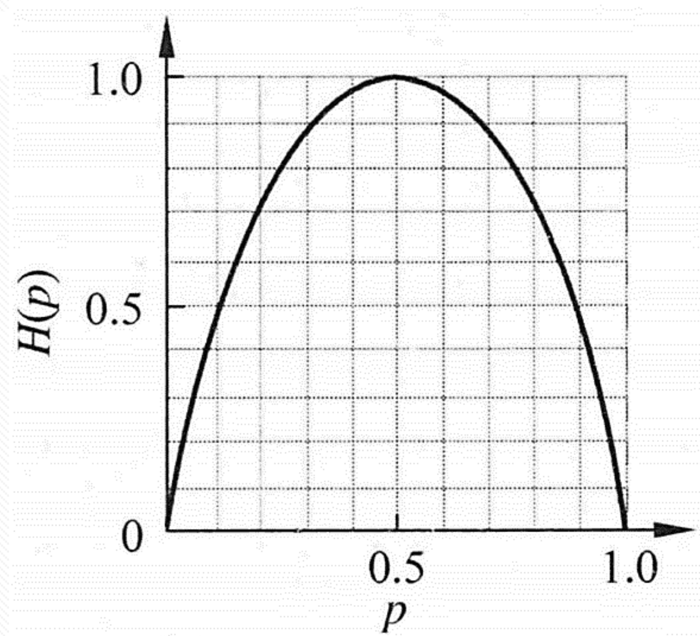
随机变量X为1, 0分布：

熵：$P(X=1)=p$，　$P(X=0)=1-p$，　$0 \leqslant p \leqslant$

$$H(p)=-p\log_2 p-(1-p)\log_2(1-p)$$

- 当 p = 0 或者 p= 1， H(p) = 0，随机变量完全没有不确定性；
- 当 p = 0.5，H(p) = 1，随机变量不确定性最大。

约定：0log0=0



伯努利分布时熵与概率的关系

可以证明： $0 \leqslant H(p) \leqslant \log n$

特征选择

概念3：条件熵（Conditional Entropy）

设有随机变量(X,Y)，其联合概率分布为：

$$P(X=x_i, Y=y_j)=p_{ij}\ , \quad i=1,2,\cdots,n\ ; \quad j=1,2,\cdots,m$$

条件熵H(Y|X)：表示在已知随机变量X的条件下随机变量Y的不确定性，定义为X给定条件下Y的条件概率分布的熵对X的数学期望：

$$H(Y|X)=\sum_{i=1}^{n} p_i H(Y|X=x_i)$$

or

$$\begin{aligned} H(Y|X) &= \sum_{x\in X} p(x) H(Y|X=x) \\ &= -\sum_{x\in X} p(x) \sum_{y\in Y} p(y|x)\log p(y|x) \\ &= -\sum_{x\in X}\sum_{y\in Y} p(x,y)\log p(y|x) \end{aligned}$$

当熵和条件熵中的概率由**数据估计**（特别是极大似然估计）得到时，所对应的熵与条件熵分别称为**经验熵**（empirical entropy）和**经验条件熵**（empirical conditional entropy）

特征选择

概念4：信息增益（Information Gain ）

定义5.2 (信息增益)：特征A对训练数据集D的信息增益，$g(D, A)$，定义为集合D的经验熵$H(D)$与特征A给定条件下D的经验条件熵$H(D|A)$之差，即，

$$g(D, A)=H(D)-H(D|A)$$

信息增益表示得知特征X的信息而使得类Y的信息的**不确定性减少**的程度

一般地，熵$H(Y)$与条件熵$H(Y|X)$之差称为**互信息**（mutual information)

决策树学习中的**信息增益**等价于训练数据集中**类与特征的互信息**

信息增益的算法

- 设训练数据集为D，$|D|$表示其样本容量，即样本个数
- 设有k个类C_k, $k = 1,2$，…，k，$|C_k|$为属于类C_k的样本个数
- 特征A有n个不同取值$\{a_1,a_2 \ldots a_n\}$根据特征A取值将D划分为n个子集$D_1 \ldots D_n$，$|D_i|$为D_i样本个数，记子集D_i中属于类C_k的样本集合为D_{ik}，$|D_{ik}|$为D_{ik}的样本个数

输入： 训练数据集D和特征A；

输出： 特征A对训练数据集D的信息增益$g(D, A)$

1）计算数据集D的经验熵$H(D)$

$$H(D) = -\sum_{k=1}^{K} \frac{|C_k|}{|D|} \log_2 \frac{|C_k|}{|D|}$$

2）计算特征A对数据集D的经验条件熵$H(D|A)$

$$H(D|A) = \sum_{i=1}^{n} \frac{|D_i|}{|D|} H(D_i) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{|D_i|}{|D|} \sum_{k=1}^{K} \frac{|D_{ik}|}{|D_i|} \log_2 \frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

3）计算信息增益

$$g(D, A) = H(D) - H(D|A)$$

→ 信息**增益最大**的特征为**最优特征**

信息增益比

以**信息增益**作为划分训练数据集的特征，存在**偏向于选择取值较多的特征**的问题

使用**信息增益比**可以对这一问题进行校正

概念5：信息增益比（Information Gain Ratio）：特征*A*对训练数据集*D*的信息增益比定义为信息增益与训练数据集*D*关于特征*A*的值的熵之比

$$g_R(D, A) = \frac{g(D, A)}{H_A(D)}$$

where $H_A(D) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{|D_i|}{|D|} \log_2 \frac{|D_i|}{|D|}$

n 是特征 A 取值的个数

2.2.2 Gain ratio criterion

For some years the selection of a test in ID3 was made on the basis of the gain criterion. Although it gave quite good results, this criterion has a serious deficiency—it has a strong bias in favor of tests with many outcomes. We can see this by considering a hypothetical medical diagnosis task in which one of the attributes contains a patient identification. Since every such identification is intended to be unique, partitioning any set of training cases on the values of this attribute will lead to a large number of subsets, each containing just one case. Since all of these one-case subsets necessarily contain cases of a single class, $info_X(T) = 0$, so information gain from using this attribute to partition the set of training cases is maximal. From the point of view of prediction, however, such a division is quite useless.

The bias inherent in the gain criterion can be rectified by a kind of normalization in which the apparent gain attributable to tests with many outcomes is adjusted. Consider the information content of a message pertaining to a case that indicates not the class to which the case belongs, but the outcome of the test. By analogy with the definition of $info(S)$, we have

$$split\ info(X) = -\sum^{n} \frac{|T_i|}{|T|} \times \log_2 \left(\frac{|T_i|}{|T|}\right)$$

Quinlan, J. R. C4.5: Programs for Machine Learning. Morgan Kaufmann Publishers, 1993.

决策树ID3算法

- ID3算法是一种经典的决策树学习算法，由Quinlan于1979年提出
- ID3算法主要针对**属性选择问题**，是最具影响和最为典型的决策树学习算法

输入： 训练数据集D，特征集A，阈值ε;

输出： 决策树T

1）若D中所有实例属于同类C_k，则T为单结点树，将类C_k作为该节点类标记，返回T;

2）若$A=\varnothing$，则T为单结点树，并将D中实例数最大类C_k作为该节点的类标记，返回T;

3）否则，计算A中各特征对D的**信息增益**，选择信息增益最大的特征A_g;

4）如果A_g的**信息增益**小于阈值ε，则T为单节点树，并将D中实例数最大的类C_k作为该节点的类标记，返回T;

5）否则，对A_g的每种可能值a_i，依$A_g=a_i$将D分割为若干非空子集D_i，将D_i中实例数最大的类作为标记，构建子结点，由结点及其子树构成树T，返回T;

6）对子节点i，以D_i为训练集，以$A-\{A_g\}$为特征集，递归调用1~5，得到子树T_i，返回T_i

决策树C4.5算法

- C4.5算法和ID3算法类似，C4.5由J. Ross Quinlan在ID3的基础上提出；
- C4.5算法用信息增益比来选择特征。

输入： 训练数据集D，特征集A，阈值ε；

输出： 决策树T

1）若D中所有实例属于同类C_k，则T为单结点树，将类C_k作为该节点类标记，返回T；

2）若$A=\varnothing$，则T为单结点树，并将D中实例数最大类C_k作为该节点的类标记，返回T；

3）否则，计算A中各特征对D的**信息增益比**，选择**信息增益比**最大的特征A_g；

4）如果A_g的**信息增益比**小于阈值ε，则T为单节点树，并将D中实例数最大的类C_k作为该节点的类标记，返回T；

5）否则，对A_g的每种可能值a_i，依$A_g=a_i$将D分割为若干非空子集D_i，将D_i中实例数最大的类作为标记，构建子结点，由结点及其子树构成树T，返回T；

6）对子节点i，以D_i为训练集，以$A-\{A_g\}$为特征集，递归调用1~5，得到子树T_i，返回T_i

决策树ID3算法实例

某公司收集了右表数据，那么对于任意给定的潜在客户（测试样例），你能预测这位客户 “买”还是“不买”计算机?

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机?
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第1步计算数据集的熵

决策属性“买计算机？”
该属性分两类：买/不买

$|C_1|=641$ (买)
$|C_2|= 383$ (不买)
$|D|=|C_1|+|C_2|=1024$

$P_1=641/1024=0.6260$
$P_2=383/1024=0.3740$

$H(D)=-P_1Log_2P_1-P_2Log_2P_2$
$=-(P_1Log_2P_1+P_2Log_2P_2)$
$=0.9537$

$$H(D) = -\sum_{k=1}^{K} \frac{|C_k|}{|D|} \log_2 \frac{|C_k|}{|D|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

然后计算条件属性的信息增益

条件属性共有4个：
年龄、收入、学生、信誉，
分别计算不同属性的信息增益。

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第2-1步计算年龄的信息增益

年龄共分三个组：

青年、中年、老年

青年买与不买比例为128/256

$|D_{11}|$(买)=128
$|D_{12}|$(不买)= 256
$|D_1|$=384

P_1=128/384
P_2=256/384

$$H(D_1)=-P_1Log_2P_1-P_2Log_2P_2$$
$$=-(P_1Log_2P_1+P_2Log_2P_2)$$
$$=0.9183$$

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\boxed{\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第2-2步计算年龄的信息增益

年龄共分三个组：
青年、中年、老年
中年买与不买比例为256/0

$|D_{21}|$(买)=256
$|D_{22}|$(不买)= 0
$|D_2|$=256

$P_1=256/256$
$P_2=0/256$

$H(D_2)=-P_1Log_2P_1-P_2Log_2P_2$
$=-(P_1Log_2P_1+P_2Log_2P_2)$
$=0$

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第2-3步计算年龄的信息增益

年龄共分三个组：

青年、中年、老年

老年买与不买比例为257/127

|D31|(买)=257
|D32|（不买）=127
|D3|=384

P1=257/384
P2=127/384

$H(D3)=-P1Log_2P1-P2Log_2P2$
$=-(P1Log_2P1+P2Log_2P2)$
$=0.9157$

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第2-4步计算年龄的信息增益

年龄共分三个组:

青年、中年、老年

所占比例

青年组 384/1024=0.375

中年组 256/1024=0.25

老年组 384/1024=0.375

计算年龄的平均信息期望（经验条件熵）

E（年龄）=0.375*0.9183+

0.25*0+

0.375*0.9157

=0.6877

G（年龄信息增益）

=0.9537-0.6877

=0.2660 (1)

$$H(D\mid A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第3-1步计算收入的信息增益

收入共分三个组：
高、中、低

高收入买与不买比例为160/128

$|D_{11}|$(买)=160
$|D_{12}|$(不买)= 128
$|D_1|$=288

P_1=160/288
P_2=128/288

$H(D_1)=-P_1Log_2P_1-P_2Log_2P_2$
$=-(P_1Log_2P_1+P_2Log_2P_2)$
=0.9911

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\boxed{\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第3-2步计算收入的信息增益

收入共分三个组：
高、中、低

中收入买与不买比例为289/191

$|D_{21}|$(买)=289
$|D_{22}|$(不买)= 191
$|D_2|$=480

P_1=289/480
P_2=191/480

$H(D_2)=-P_1Log_2P_1-P_2Log_2P_2$
$=-(P_1Log_2P_1+P_2Log_2P_2)$
$=0.9697$

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第3-3步计算收入的信息增益

收入共分三个组:

高、中、低

低收入买与不买比例为192/64

$|D_{31}|$(买)=192
$|D_{32}|$(不买)= 64
$|D_3|$=256

P_1=192/256
P_2=64/256

$$H(D_3)=-P_1Log_2P_1-P_2Log_2P_2$$
$$=-(P_1Log_2P_1+P_2Log_2P_2)$$
$$=0.8113$$

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第3-4步计算收入的信息增益

收入共分三个组：
高、中、低
所占比例
高收入组 288/1024=0.281
中收入组 480/1024=0.469
低收入组 256/1024=0.250

计算收入的平均信息期望（经验条件熵）
E（收入）=0.281* 0.9911+
0.469* 0.9697+
0.250* 0.8113
=0.9361
G（收入信息增益）
=0.9537-0.9361
=0.0176 (2)

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第4步计算学生的信息增益

学生共分二个组：

学生、非学生

E（学生）=0.7811

G（学生） =0.9537-0.7811

=0.1726 （3）

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第5步计算信誉的信息增益

信誉分二个组:
良好，优秀
E（信誉）= 0.9048
G（信誉） =0.9537-0.9048
=0.0453 （4）

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机?
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

第6步确定最优的特征

年龄信息增益=0.9537-0.6877
=0.2660 (1)

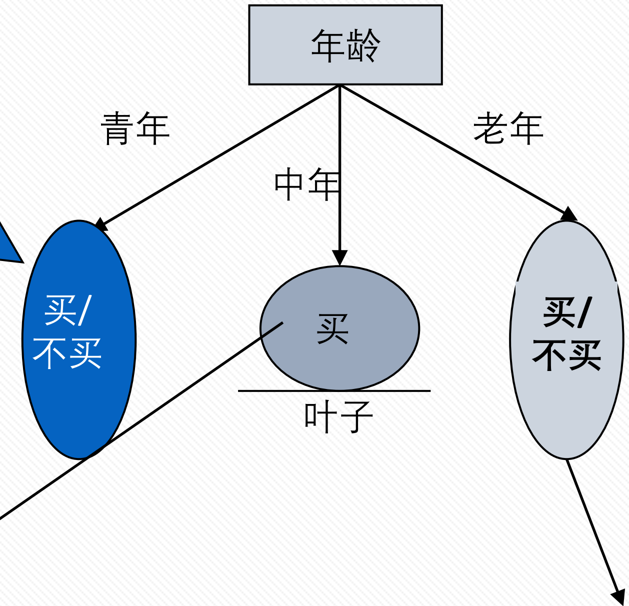
收入信息增益=0.9537-0.9361
=0.0176 (2)

年龄信息增益=0.9537-0.7811
=0.1726 (3)

信誉信息增益=0.9537-0.9048
=0.0453 (4)

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机?
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
64	青	中	是	优	买



计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机?
128	中	高	否	良	买
64	中	低	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机?
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
132	老	中	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
64	青	中	是	优	买

以青年组子集为训练集，以*A*-{年龄}为特征集，开始递归

第1步计算决策属性的信息增益

青年买与不买比例为128/256

|*C*1|(买)=128
|*C*2|（不买）= 256
|D|=384

P1=128/384=0.3333
P2=256/384=0.6666

H(D)=-P1Log2P1-P2Log2P2
$=(0.3333Log_2 0.3333+0.6666Log_2 0.6666)$
=0.9183

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
64	青	中	是	优	买

第2步计算收入属性的信息增益

收入分

高、中、低三个组:

$H(D1)=0$

比例: 128/384=0.3333

$H(D2)=0.9183$

比例: 192/384=0.5

$H(D3)=0$

比例: 64/384=0.1667

平均信息期望（加权总和）：

E(收入) = 0.3333 * 0 + 0.5 * 0.9183 + 0.1667 * 0 = 0.4592

Gain(收入) = H（D）- E(收入)=**0.9183** - 0.4592 = 0.4591

注意

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
64	青	中	是	优	买

第3步计算学生属性的信息增益

学生分

否、是两个组：

H(D1)=0

比例: 256/384=0.6666

H(D2)=0

比例: 128/384=0.3333

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

平均信息期望（加权总和）：

E(学生) = 0.6666 * 0 + 0.3333 * 0

Gain(学生) = H（D） - E(学生)=**0.9183** – 0=0.9183

注意

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
64	青	中	是	优	买

第4步计算信誉属性的信息增益

学生分：

良、优两个组：

H(D1)=0.8113
比例:
256/384=0.6666

H(D2)=1
比例:
128/384=0.3333

平均信息期望（加权总和）：

E(信誉) = 0.6666 * 0.8113 + 0.3333 * 1= 0.8741

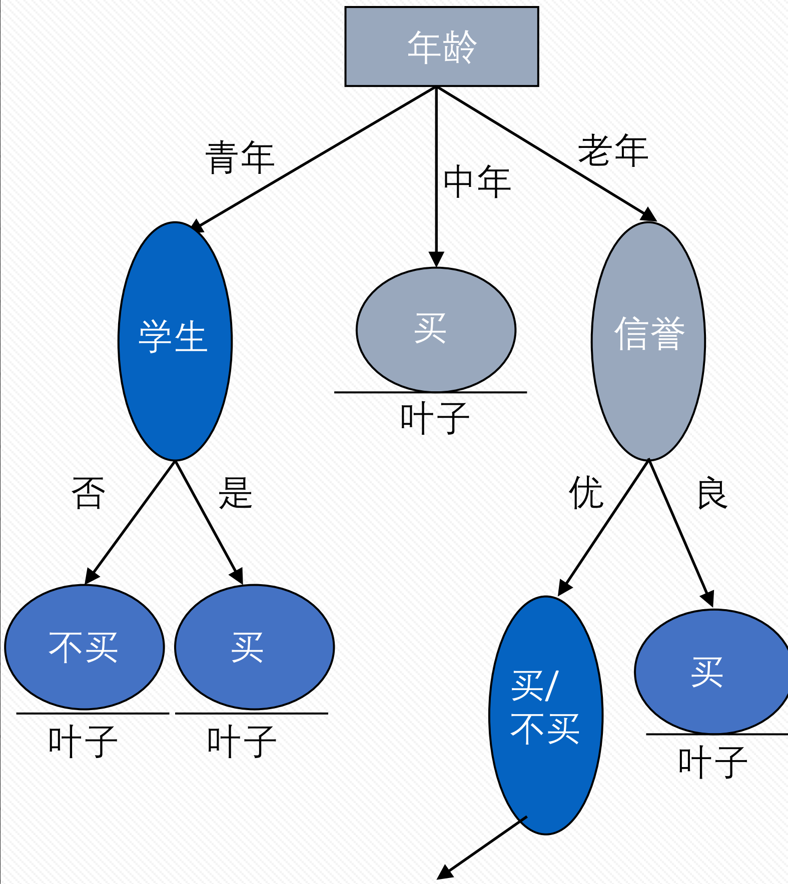
Gain(信誉) = H（D） - E(信誉)=**0.9183** - 0.8741=0.044

注意

$$H(D|A)=\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}H(D_i)=-\sum_{i=1}^{n}\frac{|D_i|}{|D|}\sum_{k=1}^{K}\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}\log_2\frac{|D_{ik}|}{|D_i|}$$

决策树ID3算法实例

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机？
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
132	老	中	是	良	买
64	青	中	是	优	买
32	中	中	否	优	买
32	中	高	是	良	买
63	老	中	否	优	不买
1	老	中	否	优	买



决策树ID3算法-实际使用

原始表:

姓名	年龄	收入	学生	信誉	电话	地址	邮编	买计算机
张三	23	4000	是	良	281-322-0328	2714 Ave. M	77388	买
李四	34	2800	否	优	713-239-7830	5606 Holly Cr	78766	买
王二	70	1900	否	优	281-242-3222	2000 Bell Blvd.	70244	不买
赵五	18	900	是	良	281-550-0544	100 Main Street	70244	买
刘兰	34	2500	否	优	713-239-7430	606 Holly Ct	78566	买
杨俊	27	8900	否	优	281-355-7990	233 Rice Blvd.	70388	不买
张毅	38	9500	否	优	281-556-0544	399 Sugar Rd.	78244	买

- **数据清理：** 删除/减少噪音，补填空缺值
- **数据转化：**
  - 数据标准化(normalization)/归一化
  - 数据归纳，例如：年龄归纳为老、中、青三类
  - 控制每个属性的可能值不超过七种（最好不超过五种）
- **相关性分析：**
  - 对于与问题无关的属性：删
  - 对于属性的可能值大于七种又不能归纳的属性：删

决策树ID3算法-实际使用

整理后的数据表:

计数	年龄	收入	学生	信誉	归类：买计算机?
64	青	高	否	良	不买
64	青	高	否	优	不买
128	中	高	否	良	买
60	老	中	否	良	买
64	老	低	是	良	买
64	老	低	是	优	不买
64	中	低	是	优	买
128	青	中	否	良	不买
64	青	低	是	良	买
。。。					

决策树剪枝

剪枝： 学习时过多地考虑如何提高对训练数据的正确分类，从而构建出过于复杂的决策树，造成**过拟合**现象（训练误差低，泛化误差高，称为过度拟合）。解决办法是考虑决策树的复杂度，对已生成的树进行简化，这一过程称为剪枝（pruning）。具体地，从树上裁掉一些子树或叶结点，并将其根结点或父结点作为新的叶结点，从而简化分类树模型

决策树的剪枝往往通过**极小化**决策树整体的**损失函数**来实现

决策树的损失函数：设树T的叶结点个数为$|T|$，t是树T的叶结点，该叶结点有N_t个样本点，其中k类的样本点有N_{tk}个，$H_t(T)$为叶结点上的经验熵，则损失函数为：

$$C_\alpha(T) = C(T) + \alpha\boxed{|T|}$$

模型复杂度

$$\boxed{C(T)} = \sum_{t=1}^{|T|} N_t H_t(T) = \sum_{t=1}^{|T|} N_t\left[-\sum_{k=1}^{K} \frac{N_{tk}}{N_t}\log\frac{N_{tk}}{N_t}\right]$$

训练误差

$$= -\sum_{t=1}^{|T|}\sum_{k=1}^{K} N_{tk}\log\frac{N_{tk}}{N_t}$$

$\alpha \geqslant 0$

决策树生成只考虑了通过提高信息增益（或信息增益比）对训练数据进行更好的拟合。而“决策树剪枝”通过优化损失函数，还考虑了减小模型复杂度。“决策树**生成**”学习**局部**的模型，而“决策树**剪枝**”学习**整体**的模型

决策树剪枝算法

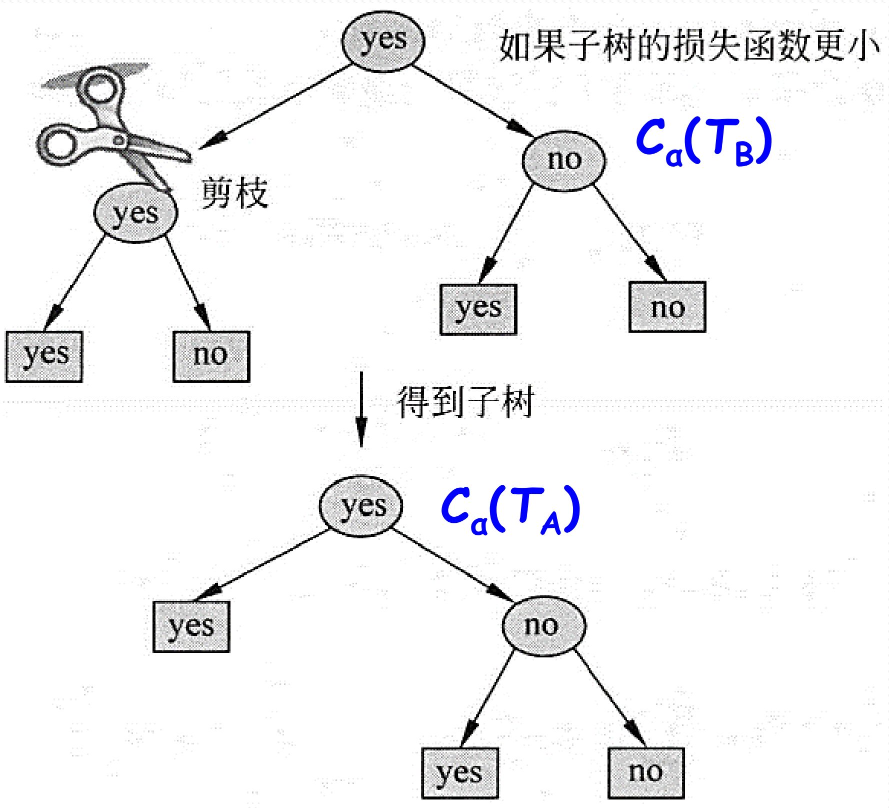
（1）计算每个结点的经验熵

（2）递归地从树的叶结点向上回缩，设一组叶结点回缩到其父结点之前与之后的整体树为T_B与T_A，如果:

$$C_\alpha(T_A) \leqslant C_\alpha(T_B) \qquad C_\alpha(T) = C(T) + \alpha|T|$$

则剪枝，将父结点变成新的叶结点。

（3）返回（2），直至不能继续，得到损失函数最小的子树T_α。



CART算法

Classification And Regression Tree，即**分类回归树算法**，简称**CART算法**，它是决策树的一种实现，是一种二分递归分割技术，把当前样本划分为两个子样本，使得生成的每个非叶子结点都有两个分支，因此CART算法生成的决策树是结构简洁的二叉树。由于CART算法构成的是一个**二叉树**，它在每一步的决策时只能是“是”或者“否”，**即使一个feature有多个取值，也是把数据分为两部分。**

在CART算法中主要分为两个步骤：

（1）将样本递归划分进行建树过程

（2）用验证数据进行剪枝

CART分类树算法使用基尼系数来代替信息增益比，基尼系数代表了模型的不纯度，基尼系数越小，不纯度越低，特征越好。这和信息增益（比）相反。

CART算法

假设K个类别，第k个类别的概率为p_k，概率分布的基尼系数表达式：

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

如果是二分类问题，样本属于1类的概率为p，概率分布的基尼系数表达式为：

$$Gini(p)=2p(1-p)$$

对于样本D，个数为$|D|$，假设K个类别，第k个类别的数量为$|C_k|$，则样本D的基尼系数表达式：

$$Gini(D)=1-\sum_{k=1}^{K}(\frac{|C_k|}{|D|})^2$$

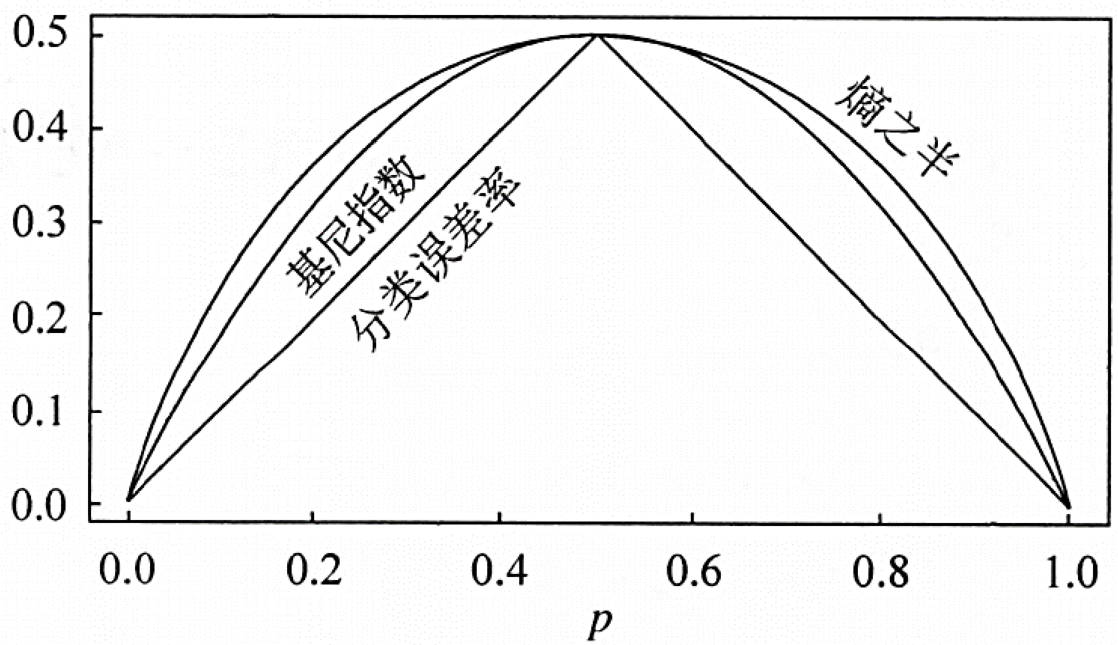
对于样本D，个数为$|D|$，根据特征A的某个值a，把D分成$|D_1|$和$|D_2|$，则在特征A的条件下，样本D的基尼系数表达式为：

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

比较基尼系数和熵模型的表达式，二次运算比对数简单很多。尤其是二分类问题，更加简单。**基尼系数可以做为熵模型的一个近似替代**

CART算法

基尼系数和熵



$Gini(p) = 2p(1-p)$ $H(p) = -p\log_2 p - (1-p)\log_2(1-p)$ $Err = 1\text{-max}(p,\ 1\text{-}p)$

CART树生成算法

输入： 训练数据集D，停止计算条件
输出： CART决策树

从根节点开始，递归对每个结点进行以下操作，构建**二叉树决策树**：

1、设结点数据集为D，对每个特征A，对其每个值a，根据样本点对A=a的测试为是或否，将D分为D1，D2，计算A=a的基尼指数

2、在所有的特征A以及所有可能的切分点a中，选择基尼指数最小的特征和切分点，将数据集分配到两个子结点中

3、对两个子结点递归调用1，2步骤

4、生成CART树

停止计算条件： 节点中样本个数小于预定阈值，样本集的基尼指数少于预定阈值，或者没有更多的特征

CART树生成算法

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

A1=年龄　　青=1，中=2，老=3
A2=有工作　有=1，否=2
A3=有房子　有=1，否=2
A4=信贷　一般=1，好=2，非常好=3

$$Gini(D) = 1 - \sum_{k=1}^{K}\left(\frac{|C_k|}{|D|}\right)^2$$

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

$$\mathrm{Gini}(D, A_1=1) = \frac{5}{15}\left(2\times\frac{2}{5}\times\left(1-\frac{2}{5}\right)\right) + \frac{10}{15}\left(2\times\frac{7}{10}\times\left(1-\frac{7}{10}\right)\right) = 0.44$$

$$\mathrm{Gini}(D, A_1=2) = 0.48$$

$$\mathrm{Gini}(D, A_1=3) = 0.44$$

$$\mathrm{Gini}(D, A_2=1) = 0.32$$

$$\boxed{\mathrm{Gini}(D, A_3=1) = 0.27}$$

$$\mathrm{Gini}(D, A_4=1) = 0.36$$

$$\mathrm{Gini}(D, A_4=2) = 0.47$$

$$\mathrm{Gini}(D, A_4=3) = 0.32$$

A3为最优特征，A3=1为最优切分点，根节点生成两个子节点，一个是叶节点，另一个节点在A1，A2，A4中选择最优特征和切分点。

CART树剪枝算法

CART树剪枝算法2步组成：

1）剪枝，形成子树序列

剪枝过程中，计算子树的损失函数：

$$C_\alpha(T) = C(T) + \alpha|T|$$

其中，T为任意子树，$C(T)$为对训练数据的预测误差，$|T|$为子树的叶结点个数，$\alpha \geq 0$为正则系数，$C_\alpha(T)$为参数α时子树T的整体损失。

对固定的α一定存在损失函数最小的子树，表示为T_α

- 当α大的时候，最优子树T_α偏小
- α=0时，整体树最优
- α趋近无穷大，单结点树最优

CART树剪枝算法

1）剪枝，形成子树序列

剪枝前以t结点为根结点的子树的损失函数是：

$$C_\alpha(T_t) = C(T_t) + \alpha |T_t|$$

剪枝以后以t为单结点树的损失函数是：

$$C_\alpha(t) = C(t) + \alpha$$

当α=0及α充分小，有不等式：

$$C_\alpha(T_t) < C_\alpha(t)$$

当α=0继续增大，$C_\alpha(T_t) = C_\alpha(t)$ ⇒ $g(t) = \dfrac{C(t) - C(T_t)}{|T_t| - 1}$

在T_0中剪去$g(t)$最小的T_t，得到子树T_1，同时将最小的$g(t)$设为α_1，T_1为区间$[\alpha_1, \alpha_2)$的最优子树，如此剪枝下去，直到根节点，不断增加α的值，产生新的区间。

2）交叉验证选取最优子树

在剪枝后子树序列$\{T_0, T_1 \ldots T_n\}$中通过交叉验证选取最优子树T_α，利用独立的验证数据集，测试子树序列中各子树的平方误差或基尼指数，最小的决策树就是最优决策树。

CART树剪枝算法

算法 5.7（CART 剪枝算法）

输入：CART 算法生成的决策树 T_0；

输出：最优决策树 T_α。

（1）设 $k=0$，$T=T_0$。

（2）设 $\alpha=+\infty$。

（3）自下而上地对各内部结点 t 计算 $C(T_t)$，$|T_t|$ 以及

$$g(t)=\frac{C(t)-C(T_t)}{|T_t|-1}$$

$$\alpha=\min(\alpha,g(t))$$

这里，T_t 表示以 t 为根结点的子树，$C(T_t)$ 是对训练数据的预测误差，$|T_t|$ 是 T_t 的叶结点个数。

（4）对 $g(t)=\alpha$ 的内部结点 t 进行剪枝，并对叶结点 t 以多数表决法决定其类，得到树 T。

（5）设 $k=k+1$，$\alpha_k=\alpha$，$T_k=T$。

（6）如果 T_k 不是由根结点及两个叶结点构成的树，则回到步骤 (2)；否则令 $T_k=T_n$。

（7）采用交叉验证法在子树序列 $T_0,T_1,\cdots,T_n$ 中选取最优子树 T_α。 ■

上机试验

上机内容：决策树
时间：5月7日，星期六，5-6节课
地点：T2102

END