9 Decision Tree 决策树

数据纯度越高，不确定度越低，信息熵越小

热力学两个基本定理是整个宇宙的基本规律：1. 宇宙能量守恒；2. 宇宙的熵不断增大。

The fundamental laws of the universe which correspond to the two fundamental theorems of the mechanical theory of heat.

1. The energy of the universe is constant.

2. The entropy of the universe tends to a maximum.

—— 鲁道夫·克劳修斯 (Rudolf Clausius) | 德国物理学家 | 1822 ~ 1888

- ◀ `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线线图
- ◀ `matplotlib.pyplot.contourf()` 绘制填充等高线图
- ◀ `numpy.meshgrid()` 创建网格化数据
- ◀ `seaborn.scatterplot()` 绘制散点图
- ◀ `sklearn.datasets.load_iris()` 加载鸢尾花数据集
- ◀ `sklearn.tree.DecisionTreeClassifier` 决策树分类函数
- ◀ `sklearn.tree.plot_tree` 绘制决策树树形

9.1 决策树：可以分类，也可以回归

决策树结构

决策树 (decision tree) 类似《数学要素》第 20 章介绍的**二叉树** (binomial tree)。如图 1 所示，决策树结构主要由**结点** (node) 和**子树** (branch) 构成；结点又分为**根结点** (root node)、**内部结点** (internal node) 和**叶结点** (leaf node)。其中，内部节点又叫**母节点** (parent node)，叶节点又叫**子节点** (child node)。

每一个根节点和内部结点可以生长出一层二叉树，其中包括**左子树** (left branch) 和**右子树** (right branch)；构造子树的过程也是将结点数据划分为两个子集的过程。

图 1 所示树形结构有 4 个叶节点。请大家格外注意叶节点数目；决策树算法可以输入**最大叶节点数量** (maximum leaf nodes)，控制决策树大小，也称**剪枝** (pruning)。

此外，**深度** (depth) 也可以控制树形大小，所谓深度就是二叉树的层数。比如，图 1 二叉树有两层，所以深度为 2。深度也是决策树函数用户输入量之一。

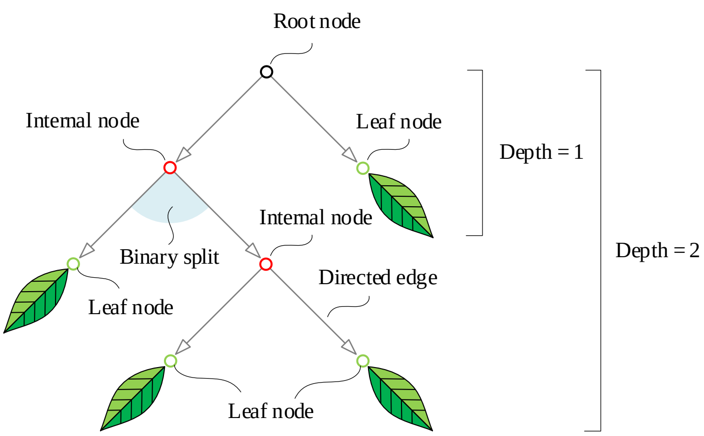


图 1. 决策树树形结构

如何用决策树分类

下面展开讲解决策树如何分类。

图 2 展示的决策树第一步划分：样本数据中 $x_1 \geq a$，被划分到右子树；样本数据中 $x_1 < a$，被划分到左子树。经过第一步二叉树划分，原始数据被划分为 A 和 B 两个区域。A 区域以红色 ● (C_1) 为主，B 区域以蓝色 ● (C_2) 为主。

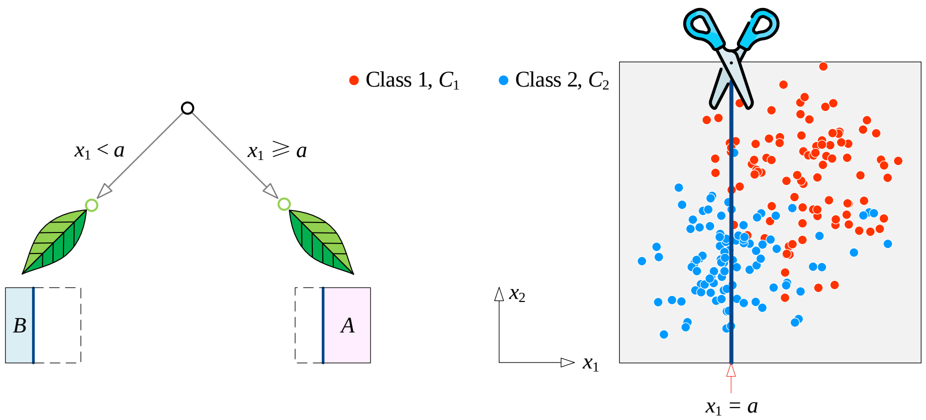


图 2. 决策树第一步划分

图 3 所示为图 2 右子树内部结点生长出一个新的二叉树。样本数据中 $x_2 \geq b$，被划分到右子树；样本数据中 $x_2 < b$，被划分到左子树。经过第二步二叉树划分，A 被划分为 C 和 D 两个区域。C 区域以红色 ● (C_1) 为主，D 区域以蓝色 ● (C_2) 为主。

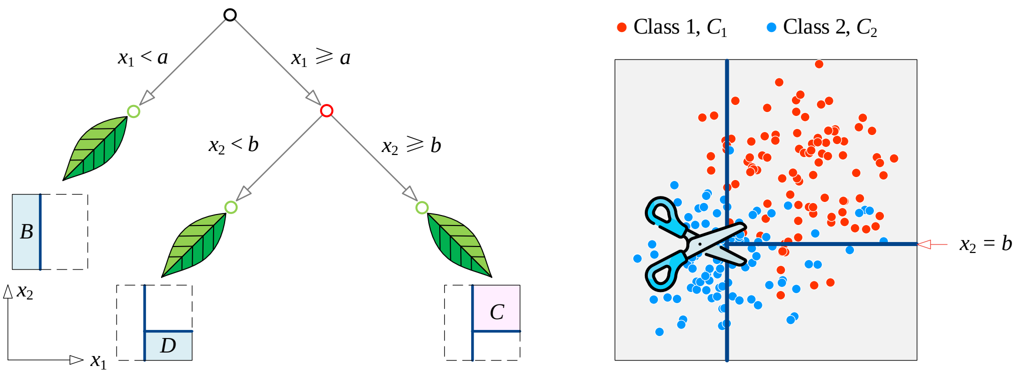


图 3. 决策树第二步划分

决策树分类算法有自己独特的优势。决策树的每个节点可以生长成一颗二叉树，这种基于某一特征的二分法很容易解释。此外，得到的决策树很方便可视化，本章后续将介绍如何可视化决策树树形结构。

如老子所言，“一生二，二生三，三生万物”，根据数据的复杂程度，决策树树形可以不断生长。数据结构越复杂，对应树形结构也就越复杂。但是，过于复杂的树形会导致过度拟合，模型泛化能力变弱。这种情况需要控制叶节点数量或者最大深度来控制树形规模，从而避免过度拟合。

有读者可能会问，依据什么标准选择划分的位置呢？比如图 2 中，a 应该选在什么位置？图 3 中的 b 又该选择什么位置？这就是下几节要回答的问题。

9.2 信息熵：不确定性度量

为了解决在决策树在哪划分节点的问题，需要介绍几个新概念：**信息熵** (information entropy)、**信息增益** (information gain) 和**基尼指数** (Gini index)。本节首先介绍信息熵。

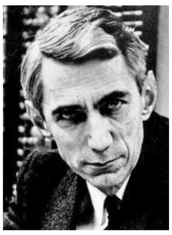
熵

熵 (entropy) 是物理系统混乱程度的度量。系统越混乱，熵越大；系统越有序，熵越小。熵这个概念起源热力学。1854 年，德国物理学家**鲁道夫 · 克劳修斯** (Rudolf Clausius) 引入熵这一概念。

维纳过程 (Wiener process) 的提出者——**诺伯特 · 维纳** (Norbert Wiener)，认为随着熵的增加，宇宙以及宇宙中所有封闭系统都会自然地退化，并失去其独特性。

信息熵

在**信息论** (information theory) 中，信息的作用是降低不确定性。**信息熵** (information entropy) 可以用来表示随机变量的不确定性度量。信息熵越大，不确定性越大。1948 年，**香农** (Claude Shannon) 提出信息熵这一概念，因此信息熵也常被称作**香农熵** (Shannon entropy)。



克劳德·香农 (Claude Shannon)
美国数学家、工程师、密码学家 | 1916 ~ 2001
信息论创始人。丛书关键词：● 信息熵 ● 信息增益

样本数据集合 Ω 的信息熵定义为：

$$\operatorname{Ent}(\Omega) = -\sum_{k=1}^{n} p_k \log_2 p_k \tag{1}$$

其中，p_k 为 Ω 中第 k 类样本所占比例，即概率值。由于 $\log_2 0$ 不存在，特别指定 $0 \times \log_2 0 = 0$。

举个例子

当样本数据集合 Ω 只有两类 $K = 2$，类别序数 $k = 1, 2$。

令

$$p_1 = p, \quad p_2 = 1 - p \tag{2}$$

其中，p 取值范围 [0, 1]。

这种情况下，Ω 的信息熵 Ent(Ω) 为：

$$\begin{aligned}\operatorname{Ent}(\Omega) &= -\sum_{k=1}^{2} p_k \log_2 p_k = -\left(p_1 \log_2 p_1 + p_2 \log_2 p_2\right) \\ &= -p \log_2 p - (1-p)\log_2 (1-p)\end{aligned} \tag{3}$$

其中，$p_1 = p$，$p_2 = 1 - p$。

观察 (3)，可以发现 Ent(Ω) 是以 p 为变量的函数。

图 6 告诉我们，在 A 和 C 点，当样本只属于某一特定类别时 ($p = 0$ 或 $p = 1$)，也就是数据纯度最高，不确定性最低，信息熵 Ent(Ω) 最小。

在 B 点，两类样本数据各占一半 ($p = 0.5$)，这时数据纯度最低，不确定性最高，信息熵 Ent(D) 最大。

从 A 到 B，信息熵不断增大；从 B 到 C，信息熵不断减小。

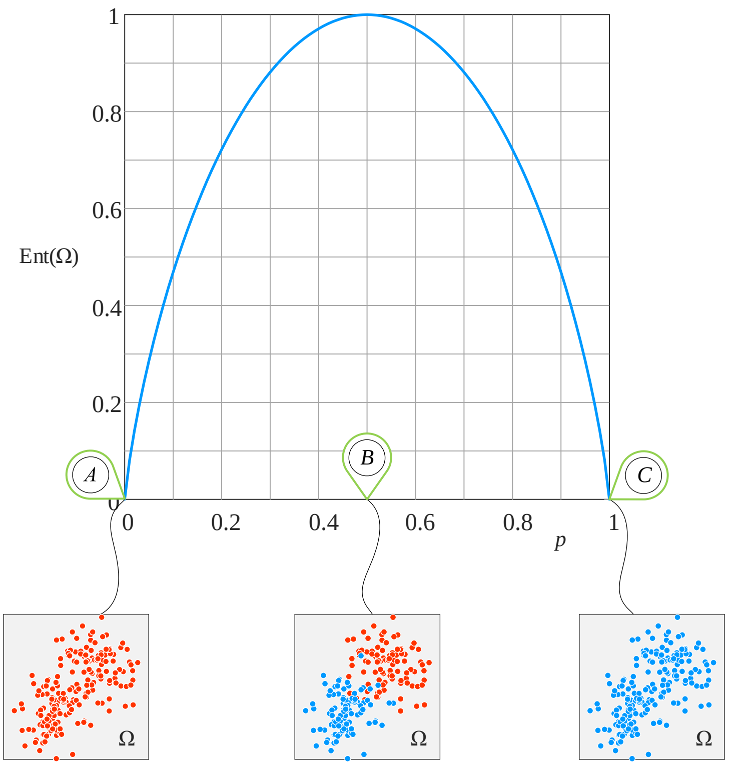


图 4. 信息熵 Ent(Ω) 随 p 变化趋势

K 类标签

如果样本数据集合 Ω 分为 K 类时，即 $\Omega = \{C_1, C_2, ..., C_K\}$，各类标签样本数量之和等于 Ω 中所有样本总数，即下式：

$$\sum_{k=1}^{K} \text{count}\left(C_k\right) = \text{count}\left(\Omega\right) \tag{4}$$

其中，$\text{count}(C_k)$ 计算 C_k 类样本数量。

C_k 类样本概率 p_k 可以通过下式计算获得：

$$p_k = \frac{\text{count}\left(C_k\right)}{\text{count}\left(\Omega\right)} \tag{5}$$

将 (5) 代入 (1)，得到样本数据集合 Ω 的信息熵为：

$$\text{Ent}\left(\Omega\right) = -\sum_{k=1}^{K} p_k \log_2 p_k = -\sum_{k=1}^{K}\left\{\frac{\text{count}\left(C_k\right)}{\text{count}\left(\Omega\right)} \log_2\left(\frac{\text{count}\left(C_k\right)}{\text{count}\left(\Omega\right)}\right)\right\} \tag{6}$$

9.3 信息增益：通过划分，提高确定度

假设存在某个特征 a 将 Ω 划分为 m 个子集，即：

$$\Omega = \left\{\Omega_1, \Omega_2, ..., \Omega_m\right\} \tag{7}$$

而子集 Ω_j ($j = 1, 2, ..., m$) 中属于 C_k 类样本集合为 $\Omega_{j,k}$：

$$\Omega_{j,k} = \Omega_j \cap C_k \tag{8}$$

类别 C_k 元素在 Ω_j 中占比为：

$$p_{j,k} = \frac{\text{count}\left(\Omega_{j,k}\right)}{\text{count}\left(\Omega_j\right)} \tag{9}$$

计算子集 Ω_j 信息熵：

$$\text{Ent}\left(\Omega_j\right) = -\sum_{k=1}^{K}\left\{\frac{\text{count}\left(\Omega_{j,k}\right)}{\text{count}\left(\Omega_j\right)} \log_2\left(\frac{\text{count}\left(\Omega_{j,k}\right)}{\text{count}\left(\Omega_j\right)}\right)\right\} \tag{10}$$

而经过特征 a 划分后的集合 Ω 的信息熵为，m 个子集 Ω_j 信息熵的加权和：

$$\underbrace{\text{Ent}\left(\Omega | a\right)}_{\substack{\text{Weighted sum of} \\ \text{entropy after split}}} = \sum_{j=1}^{m}\left\{\frac{\text{count}\left(\Omega_j\right)}{\text{count}\left(\Omega\right)} \text{Ent}\left(\Omega_j\right)\right\} \tag{11}$$

将 (10) 代入 (11)，得到：

$$\operatorname{Ent}\left(\Omega|a\right) = -\sum_{j=1}^{m}\left\{\frac{\operatorname{count}\left(\Omega_j\right)}{\operatorname{count}\left(\Omega\right)}\sum_{k=1}^{K}\left\{\frac{\operatorname{count}\left(\Omega_{j,k}\right)}{\operatorname{count}\left(\Omega_j\right)}\log_2\left(\frac{\operatorname{count}\left(\Omega_{j,k}\right)}{\operatorname{count}\left(\Omega_j\right)}\right)\right\}\right\} \tag{12}$$

经过特征 a 划分后的 Ω 信息熵减小，确定度提高。

举个例子

图 5 所示数据集 Ω 有两个标签，C_1 和 C_2。特征 a 将数据集 Ω 划分为 2 个子集——Ω_1、Ω_2。根据 (9) 类别 C_1 元素在 Ω_1 中占比为：

$$p_{1,1} = \frac{\operatorname{count}\left(\Omega_{1,1}\right)}{\operatorname{count}\left(\Omega_1\right)} \tag{13}$$

子集 Ω_1 信息熵为：

$$\operatorname{Ent}\left(\Omega_1\right) = -\frac{\operatorname{count}\left(\Omega_{1,1}\right)}{\operatorname{count}\left(\Omega_1\right)}\log_2\left(\frac{\operatorname{count}\left(\Omega_{1,1}\right)}{\operatorname{count}\left(\Omega_1\right)}\right) - \frac{\operatorname{count}\left(\Omega_{1,2}\right)}{\operatorname{count}\left(\Omega_1\right)}\log_2\left(\frac{\operatorname{count}\left(\Omega_{1,2}\right)}{\operatorname{count}\left(\Omega_1\right)}\right) \tag{14}$$

同理，可以计算得到 Ω_2 子集信息熵。

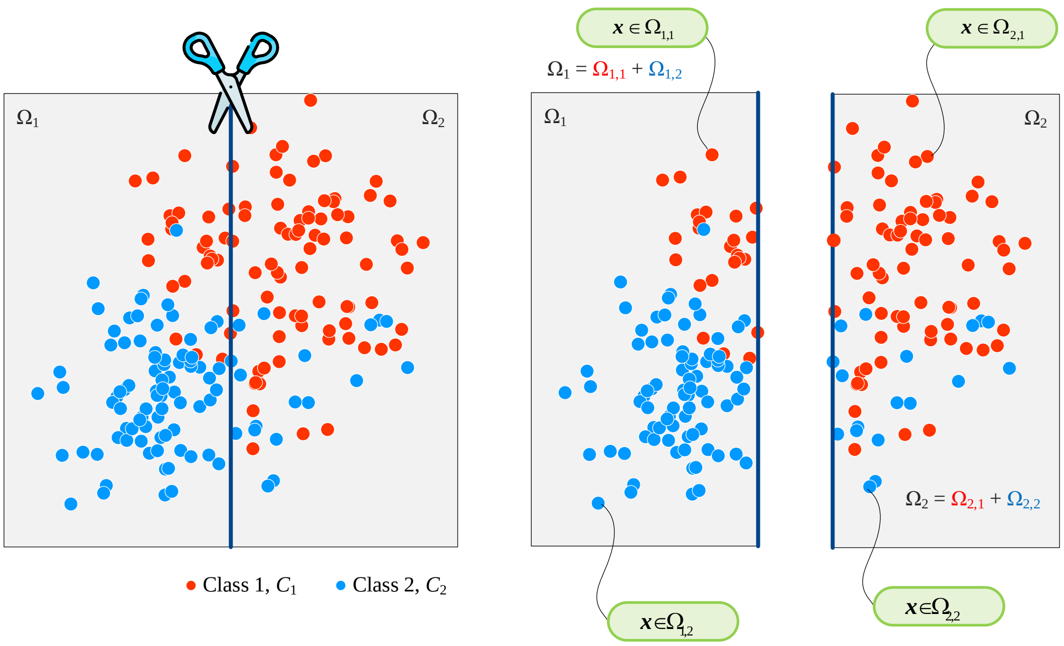


图 5. 数据集 Ω 划分为 2 个子集

信息增益

信息增益 (information gain) 量化划分前后信息熵变化：

$$\mathrm{Gain}(D,a)=\underbrace{\mathrm{Ent}(D)}_{\text{Entropy before split}}-\underbrace{\mathrm{Ent}(D|a)}_{\text{Weighted sum of entropy after split}} \tag{15}$$

最佳划分 a 位置对应最大化信息增益：

$$\arg\max_{a}\mathrm{Gain}(D,a) \tag{16}$$

9.4 基尼指数：指数越大，不确定性越高

类似信息熵，**基尼指数** (Gini index) 也可以用来表征样本数据集合 Ω 纯度。注意，这个基尼指数不同于衡量国家或地区收入差距的基尼指数。

基尼指数 Gini(Ω) 定义如下：

$$\mathrm{Gini}(\Omega)=\sum_{i=1}^{n}p_i(1-p_i)=\sum_{i=1}^{n}p_i-\sum_{i=1}^{n}p_i^2=1-\sum_{i=1}^{n}p_i^2 \tag{17}$$

类似上节，当样本数据集合 Ω 只有两类 $K = 2$。这种情况下，$p_1 = p$，$p_2 = 1 - p$。Ω 的信息熵 Gini(Ω) 为。

$$\begin{aligned}\mathrm{Ent}(D)&=1-\sum_{i=1}^{n}p_i^2=1-p_1^2-p_2^2\\&=1-p^2-(1-p)^2=-2p^2+2p\end{aligned} \tag{18}$$

如图 6 (a) 所示，Gini(Ω) 越大，不确定性越高，数据纯度越低。Gini(Ω) 最大值为 1/2，对应图中 $p = 0.5$，也就是两类标签样本数据各占一半。图 6 (b) 比较 2 × Gini(Ω) 和 Ent(Ω) 两图形关系。

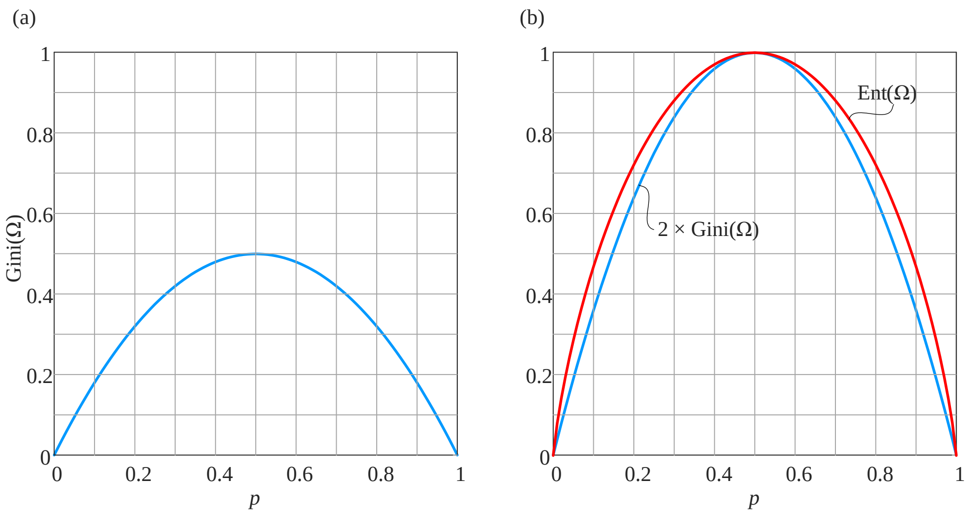


图 6. 比较信息熵和 Gini 指数图像

Scikit-learn 中决策树分类函数 `DecisionTreeClassifier`，就是默认采用 Gini 指数最大化作为分割依据。

9.5 最大叶节点：影响决策边界

本节利用决策树算法分类鸢尾花样本数据，并着重展示最大叶节点数分类影响。Scikit-learn 工具包决策树分类函数为 `sklearn.tree.DecisionTreeClassifier`；该函数可以用最大叶节点数 `max_leaf_nodes` 控制决策树树形大小。

同时，本节和下一节利用 `sklearn.tree.plot_tree` 绘制决策树。

最大叶节点数为 2

图 7 所示为当最大叶节点数 L 为 $L = 2$ 时，鸢尾花数据分类情况。图 7 (a) 所示，根据花萼长度 x_1 这一特征，特征平面被划分为两个区域——A 和 B。

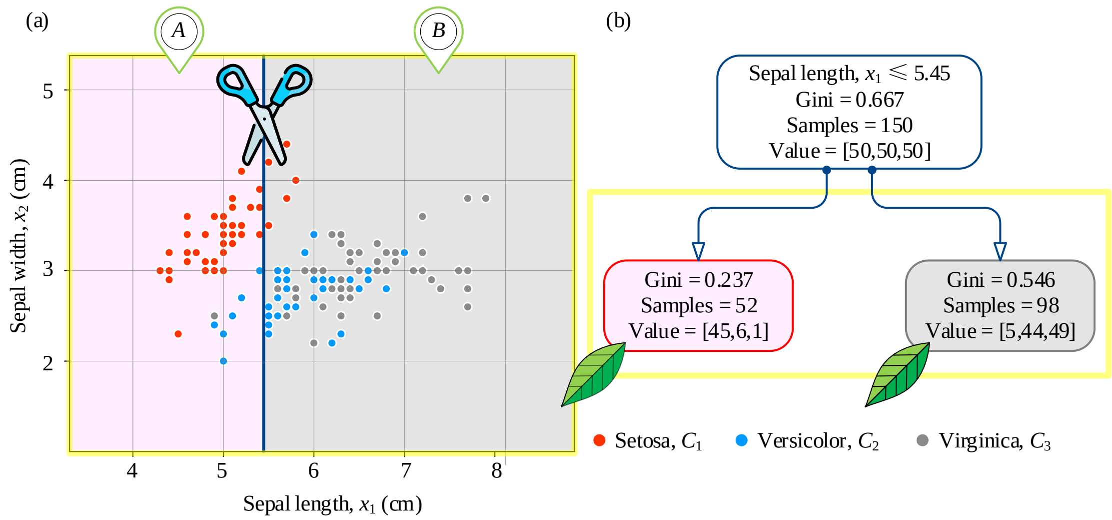


图 7. 最大叶节点数量为 2，（画出百分比，饼图）

图 7 (b) 树形图有大量重要信息。150 个样本数据 Gini 指数为 0.667。根绝 Gini 指数最大化原则，找到划分花萼长度 x_1 最佳位置为，$x_1 = 5.45$。$x_1 \leqslant 5.45$ 为区域 A；$x_1 > 5.45$ 为区域 B。

区域 A 中，样本数据 为 52；其中，● $(C_1, y = 0)$ 为 45 个，● $(C_2, y = 1)$ 为 6 个，● $(C_3, y = 2)$ 为 1 个。显然，区域 A 预测分类为 C_1。区域 A 的 Gini 指数为 0.237。

区域 B 中，样本数据 为 98；其中，● $(C_1, y = 0)$ 为 5 个，● $(C_2, y = 1)$ 为 44 个，● $(C_3, y = 2)$ 为 49 个。显然，区域 A 预测分类为 C_3。区域 B 的 Gini 指数为 0.546。

根据 (11)，可以计算得到特征 x_1 划分后信息熵：

$$\underbrace{\mathrm{Ent}\left(\Omega \middle| x_1 = 5.45\right)}_{\text{Weighted sum of entropy after split}} = \frac{52}{150} \times 0.237 + \frac{98}{150} \times 0.546 = 0.4389 \tag{19}$$

根据 (15) 信息增益为：

$$\mathrm{Gain}\left(D, a\right) = \underbrace{\mathrm{Ent}\left(D\right)}_{\text{Entropy before split}} - \underbrace{\mathrm{Ent}\left(\Omega \middle| x_1 = 5.45\right)}_{\text{Weighted sum of entropy after split}} = 0.667 - 0.4389 = 0.228 \tag{20}$$

最大叶节点数为 3

当最大叶节点数量 L 继续提高到 $L = 3$ 时，图 7 (b) 某一叶节点将会在某一特征基础上继续划分。图 8 所示为 $L = 3$，决策树分类鸢尾花结果。

观察图 8 (a)，可以发现图 7 (a) 中 B 区域沿着 x_1 方向进一步被划分为 C 和 D。划分的位置为 $x_1 = 6.15$。

区域 C 中，样本数据 为 43；其中，● (C_1, $y = 0$) 为 5 个，● (C_2, $y = 1$) 为 28 个，● (C_3, $y = 2$) 为 10 个。显然，区域 C 预测分类为 C_2。区域 C 的 Gini 指数为 0.508。

区域 D 中，样本数据 为 55；其中，● (C_1, $y = 0$) 为 0 个，● (C_2, $y = 1$) 为 16 个，● (C_3, $y = 2$) 为 39 个。显然，区域 A 预测分类为 C_3。区域 D 的 Gini 指数为 0.413。

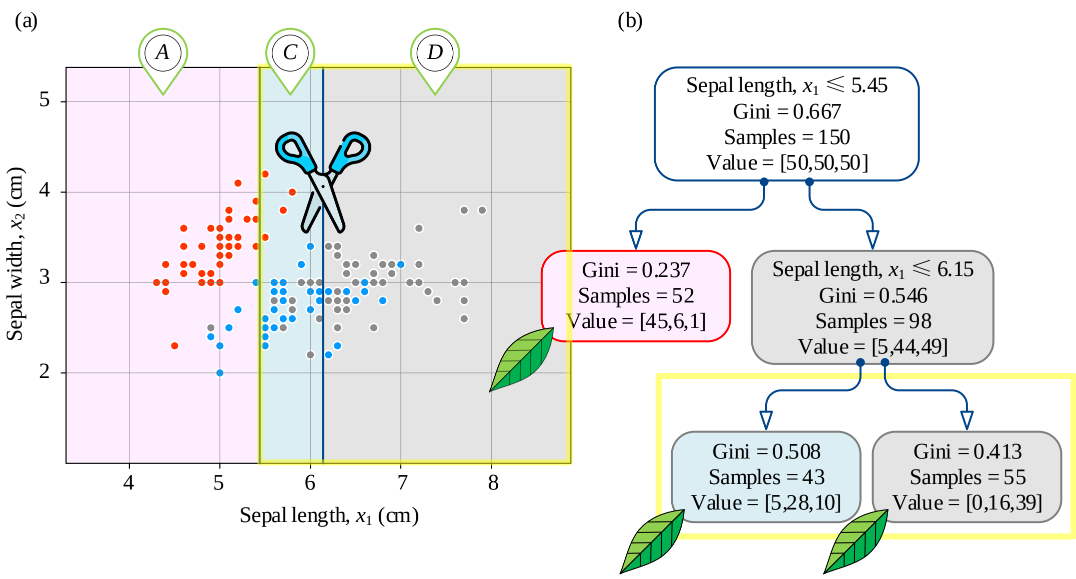


图 8. 最大叶节点数量为 3，（画出百分比，饼图）

最大叶节点数为 4

图 9 所示为最大叶节点数量 $L = 4$ 时，决策树分类结果和树形结构。可以发现图 8 中，A 区沿 x_2 方向被进一步划分为两个区域；其中一个区域 44 个 ● $(C_1, y = 0)$，1 个 ● $(C_2, y = 1)$，Gini 指数进一步降低到 0.043。请读者自行计算 Gini 指数变化。

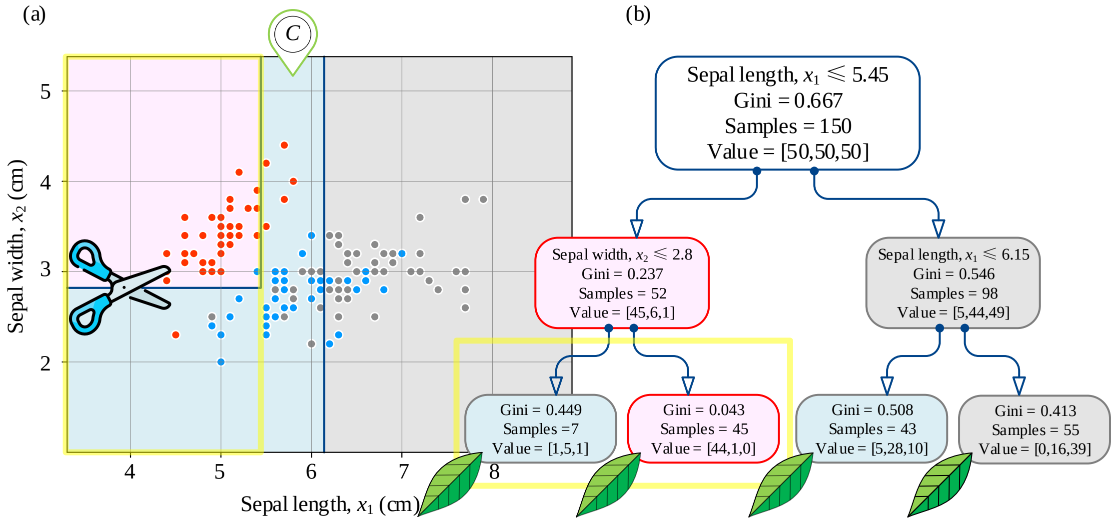


图 9. 最大叶节点数量为 4，（画出百分比，饼图）

最大叶节点数为 5

图 10 所示为最大叶节点数量 $L = 5$ 时，决策树分类结果和树形结构。比较图 10 和图 9，C 区沿 x_2 方向被进一步划分为两个区域，得到的一个区域全部样本数据为 ● $(C_1, y = 0)$；因此，该区域的 Gini 指数为 0，纯度最高。

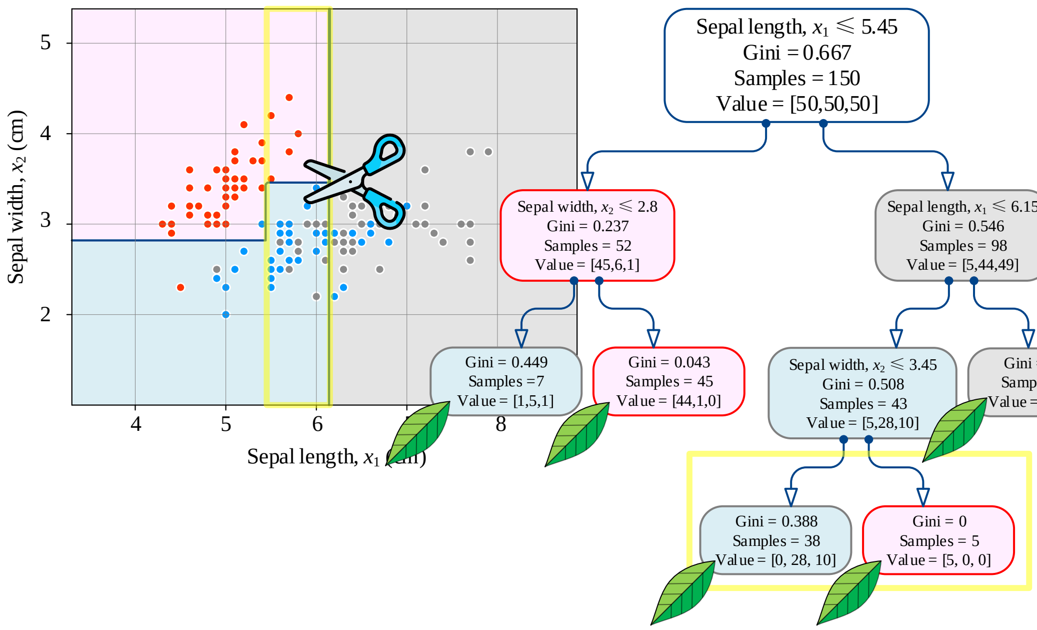


图 10. 最大叶节点数量为 5，（画出百分比，饼图）

下一节提供获得本节图像代码，代码中中最大叶节点数量包括 10、15 和 20 等更大数值。请大家自行设定最大叶节点数量，比较决策边界和树形结构变化。

9.6 最大深度：控制树形大小

类似最大叶节点数量，最大深度从二叉树层数角度控制树形大小。`sklearn.tree.DecisionTreeClassifier` 函数用 `max_depth` 改变最大深度。

图 11 所示为最大深度为 1 时，鸢尾花的分类结果和树形图。可以发现，图 11 和图 7 结果完全一致。图 12 所示为最大深度为 2 时，鸢尾花的分类结果和树形图。可以发现，图 12 和图 9 结果完全一致。

图 13 所示为最大深度为 3 时，鸢尾花分类结果。图 14 所示树形结构有 3 层二叉树。注意，当最大深度不断增大时，如果某一区域样本数据为单一样本；则该区域 Gini 指数为 0，无法进一步划分。图 14 中 8 个叶节点中，有 4 个纯度已经达到最高；

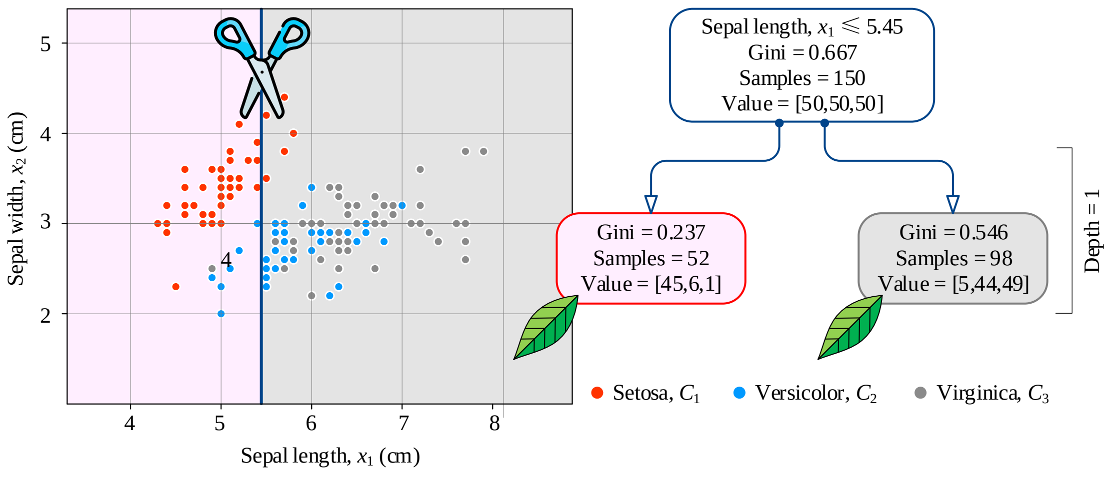


图 11. 最大深度为 1，（画出百分比，饼图）

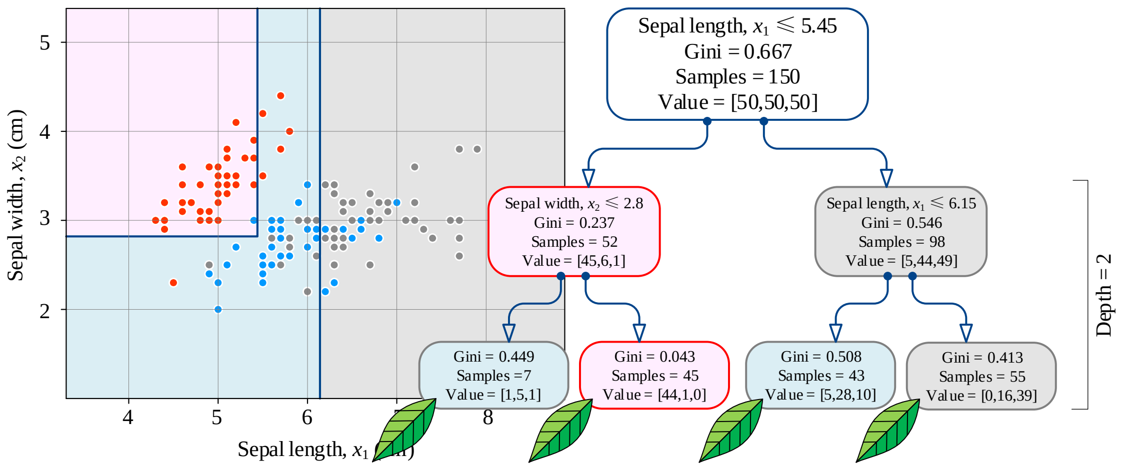


图 12. 最大深度为 2，（画出百分比，饼图）

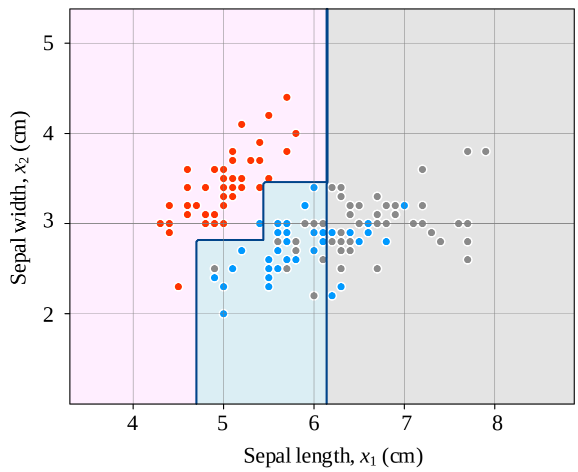


图 13. 最大深度为 3，分类结果

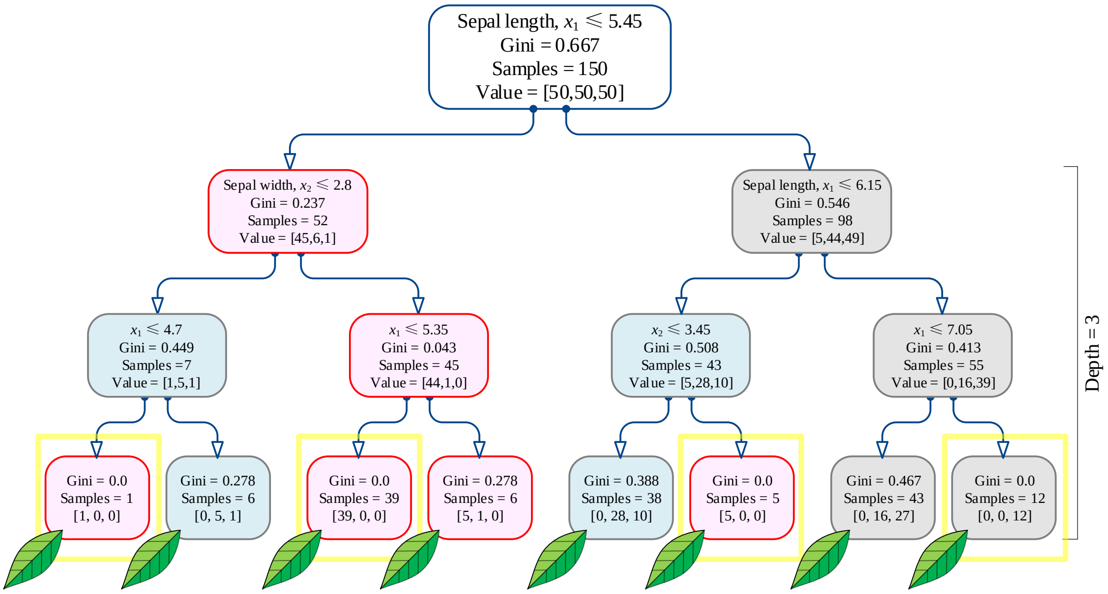


图 14. 最大深度为 3，树形结构，（画出百分比，饼图）

代码 Bk7_Ch09_01.py 利用决策树方法分类鸢尾花数据，并绘制本节和上一节图像。