

机器学习讨论班

2018年暑期



7. 决策树

郭雪纯



介绍内容

- 模型介绍
- 划分选择和决策树的生成
- 剪枝处理
- 连续与缺失值
- 多变量决策树
- 实验



假设空间与决策树

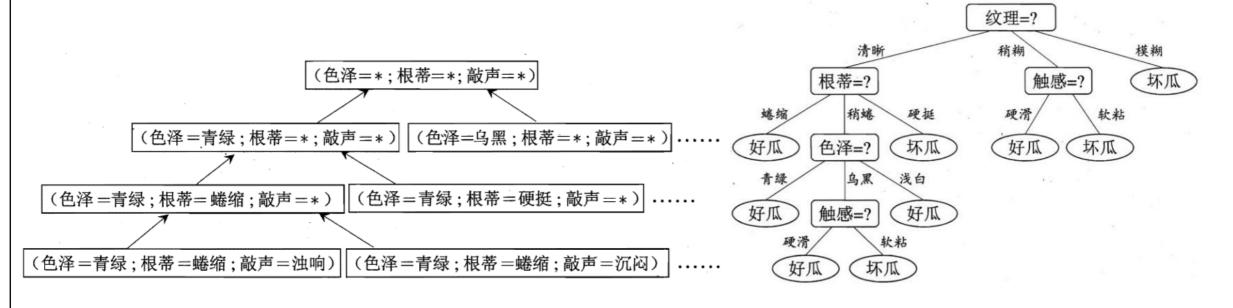


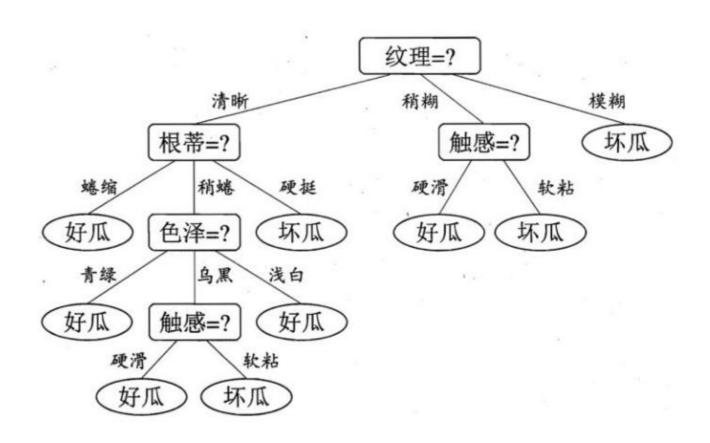
图1: 西瓜问题的假设空间

图2: 决策树举例



决策树

- ■基于树结构来进行决策
- 决策过程最终对应了判定结果
- ■遵循分而治之策略



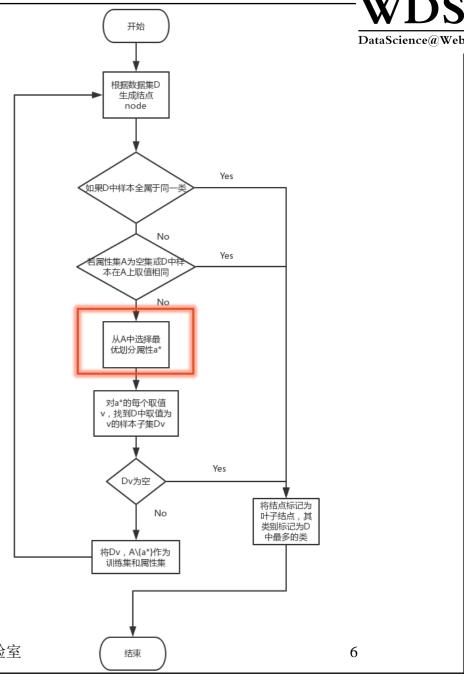
决策树基本学习算法

训练集
$$D = \{(x_1, y_1), \{x_2, y_2\}, ..., \{x_m, y_m\}\}$$

属性集 $A = \{a_1, a_2, ..., a_d\}$

递归过程中返回情形

- 1. 当前结点包含的样本全属于同一类别
- 2. 当前属性集为空或所有样本在所有属性上取值相同
- 3. 当前结点包含的样本集合为空





特征选择问题

特征选择在于选取对训练数据<mark>具有分类能力的</mark>特征 如果利用一个特征进行分类的结果与<mark>随机分类</mark>的结果没有 很大差别则称这个特征是没有分类能力的

随着划分过程的进行,希望分支结点所包含的样本尽可能属于同一类别,即结点纯度(purity)越来越高

信息增益 增益率 基尼系数



信息熵(information entropy)

- 熵的概念源自热物理学,表示分子状态混乱程度的物理量
- 信息熵是由香农提出,把信息中排除冗余后的平均信息量成为"信息熵"
 - □ 不确定性越大,信息量越大,熵越大
 - □ 不确定性越小,信息量越大,熵越小
- 信息熵公式

$$\operatorname{Ent}(D) = -\sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} p_k \log_2 p_k$$

Ent(D)值越小 则D的纯度越高

https://blog.csdn.net/qq280929090/article/details/78135417



信息增益

假定离散属性a有V个可能取值 $\{a^1, a^2, ..., a^V\}$ 第v个分支结点包含了D中所有在属性a上取值为 a^v 的样本,记为 D^v

$$Gain(D, a) = Ent(D) - \sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} Ent(D^v) .$$

不同分支结点包含 样本数不同,给分 支结点赋予<mark>权重</mark>

信息增益越大,使用属性a来进行划分所获得的"纯度提升"越大



ID3决策树学习算法

用信息增益来进行决策树的划分属性选择

$$\operatorname{Gain}(D,a) = \operatorname{Ent}(D) - \sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} \operatorname{Ent}(D^v)$$
.
 $a_* = rg \max_{a \in A} \operatorname{Gain}(D,a)$



表1: 西瓜数据集

编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
1	青绿	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
2	乌黑	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
3	乌黑	蜷缩	浊响	清晰	凹陷。	硬滑	是
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
5	浅白	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹	软粘	是
- 8	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	硬滑	是
9	乌黑	稍蜷	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否
10	青绿	硬挺	清脆	清晰	平坦	软粘	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦	硬滑	否
12	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	软粘	否
13	青绿	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	否
17	青绿	蜷缩	,沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否

$$\operatorname{Ent}(D) = -\sum_{k=1}^{2} p_k \log_2 p_k = -\left(\frac{8}{17} \log_2 \frac{8}{17} + \frac{9}{17} \log_2 \frac{9}{17}\right) = 0.998$$

对于每个属性,计算出信息增益,选择信息增益最大的属性作为当前划分的属性,以色泽举例,分别计算色泽为青绿、乌黑、浅白的分支结点的信息熵

$$\operatorname{Ent}(D^1) = -\left(\frac{3}{6}\log_2\frac{3}{6} + \frac{3}{6}\log_2\frac{3}{6}\right) = 1.000 ,$$

$$\operatorname{Ent}(D^2) = -\left(\frac{4}{6}\log_2\frac{4}{6} + \frac{2}{6}\log_2\frac{2}{6}\right) = 0.918 ,$$

$$\operatorname{Ent}(D^3) = -\left(\frac{1}{5}\log_2\frac{1}{5} + \frac{4}{5}\log_2\frac{4}{5}\right) = 0.722 ,$$



$$\begin{split} \mathrm{Gain}(D, 色泽) &= \mathrm{Ent}(D) - \sum_{v=1}^3 \frac{|D^v|}{|D|} \mathrm{Ent}(D^v) \\ &= 0.998 - \left(\frac{6}{17} \times 1.000 + \frac{6}{17} \times 0.918 + \frac{5}{17} \times 0.722\right) \\ &= 0.109 \; . \end{split}$$

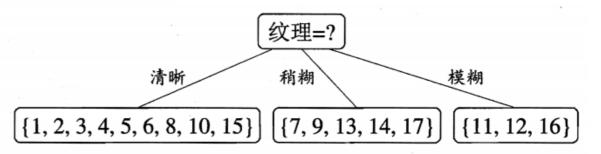
若以编号也作为属性,信息增益达到0.998,产生17个分支,每个分支的纯度达到最大,但是不具有泛化能力

类似的, 我们可计算出其他属性的信息增益:

Gain(D, 根蒂) = 0.143; Gain(D, 敲声) = 0.141;

Gain(D, 纹理) = 0.381; Gain(D, 脐部) = 0.289;

Gain(D, 触感) = 0.006.





启发式规则: 先从候选划分

属性中找出信息增益高于平

均水平的属性,再从其中选

C4.5决策树学习算法

用增益率来进行决策树的划分属性选择

 $Gain_ratio(D, a) = \frac{Gain(D, a)}{IV(a)}$ $Gain(D, a) = Ent(D) - \sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} Ent(D^v) .$ $IV(a) = -\sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} \log_2 \frac{|D^v|}{|D|}$

属性a的固有值,即为数据集 D关于特征a的熵。属性a取值 越多,熵值就会越大



基尼指数(Gini index)

Gini(D)反映了从数据集中随机抽取两个两本,其类别不一致的概率。

Gini(D)越小,纯度越高

$$ext{Gini}(D) = \sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} \sum_{k' \neq k} p_k p_{k'}$$

$$= 1 - \sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} p_k^2 \; .$$



CART决策树

- 用基尼指数来进行决策树的划分属性选择, 同时决定改特征的最优二值切分点
- CART假设决策树是二叉树,内部节点取值为"是"和"否"

不同分支结点包含 样本数不同,给分 支结点赋予权重

$$\operatorname{Gini_index}(D, a) = \sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} \operatorname{Gini}(D^v)$$

$$a_* = \underset{a \in A}{\operatorname{arg \, min \, Gini_index}}(D, a).$$



表2: 贷款情况数据集

	类别	信贷情况	有自己的房子	有工作	年龄	ID
_	否	一般	否	杏	青年	1
$Gini(D, A_1 = 1) =$	否	. 好	否	否	青年	2
	是	好	否	是	青年	3
$Gini(D, A_1 = 2) =$	是	一般	是	是	青年	4
$Gini(D, A_1 = 3) =$	否	一般	否	否	青年	5
	否	一般	否	否	中年	6
$Gini(D, A_2 = 1) =$	否	好	否	否	中年	7
$Gini(D, A_3 = 1) =$	是	好	是	是	中年	8
	是	非常好	是	否	中年	9
$Gini(D, A_4 = 1) =$	是	非常好	是	否	中年	10
$Gini(D, A_4 = 2) =$	是	非常好	是	杏	老年	11
	是	好	是	否	老年	12
$Gini(D, A_4 = 3) =$	是	好	否	是	老年	13
	是	非常好	否	是	老年	14
	否	一般	否	否	老年	15

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

$$Gini(D, A_1 = 2) = 0.48$$

$$Gini(D, A_1 = 3) = 0.44$$

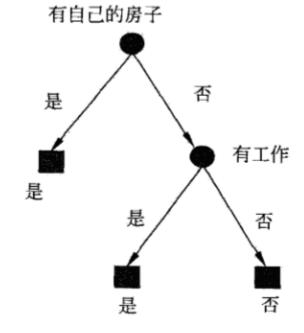
$$Gini(D, A_2 = 1) = 0.32$$

$$Gini(D, A_3 = 1) = 0.27$$

$$Gini(D, A_4 = 1) = 0.36$$

$$Gini(D, A_4 = 2) = 0.47$$

$$Gini(D, A_4 = 3) = 0.32$$





CART回归树

训练集 $D = \{(x_1, y_1), \{x_2, y_2\}, ..., \{x_N, y_N\}\}$ 回归树对应着输入空间的一个划分,以及划分在单元上的输出值假设将输入空间划分为M个单元 $R_1, R_2, ..., R_M$

$$f(x) = \sum_{m=1}^{M} c_m I(x \in R_m)$$

$$\sum_{x_i \in R_m} (y_i - f(x_i))^2$$

$$\hat{c}_m = \text{ave}(y_i \mid x_i \in R_m)$$



31	
	31

2 13 32

3 14 33

4 15 34

5 16 35

6 17 36

7 18 37

8 19 38

9 20 39

10 21 40

特征0		
i	12	31
2	13	32
3	14	33
4	15	34

5 16 35

6 17 36

7 18 37

8 19 38

9 20 39

10 21 40

通过特征0,特征切分点为3,把数据集分为两个部分



CART回归树

CART回归最重要的就是寻找最优切分特征和最优切分点

$$R_{1}(j,s) = \{x \mid x^{(j)} \leq s\} \quad \text{fil} \quad R_{2}(j,s) = \{x \mid x^{(j)} > s\}$$

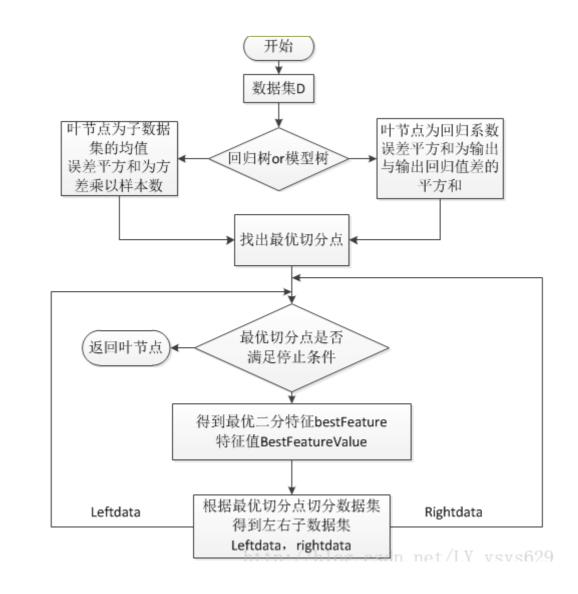
$$\min_{j,s} \left[\min_{c_{1}} \sum_{x_{i} \in R_{1}(j,s)} (y_{i} - c_{1})^{2} + \min_{c_{2}} \sum_{x_{i} \in R_{2}(j,s)} (y_{i} - c_{2})^{2} \right]$$

$$\hat{c}_{1} = \operatorname{ave}(y_{i} \mid x_{i} \in R_{1}(j,s)) \quad \text{fil} \quad \hat{c}_{2} = \operatorname{ave}(y_{i} \mid x_{i} \in R_{2}(j,s))$$

启发式规则:选择第j个变量 $x^{(j)}$ 和它的取值s,作为切分变量和切分点



- 对复杂的关系建模,一种可行的方式是使用树来对预测值分段,包括分段常数或分段直线。
- 若叶节点使用的模型是分段常数则称为回归树,若叶节点使用的模型是树型是线性回归方程,则称为模型树





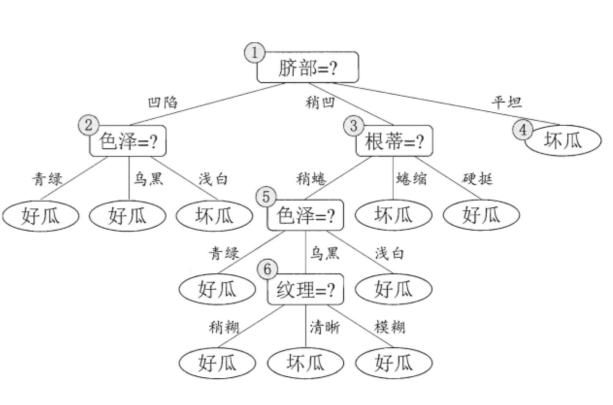
剪枝处理 (pruning)

- 决策树学习算法对付"过拟合"重要手段
 - □ 预剪枝 (prepruning) 在决策树生成过程中,对每个结点划分前后进行估计
 - □ 后剪枝(postpruning)在生成一颗完整的决策树之后, 自底向上对非叶子结点进行考察



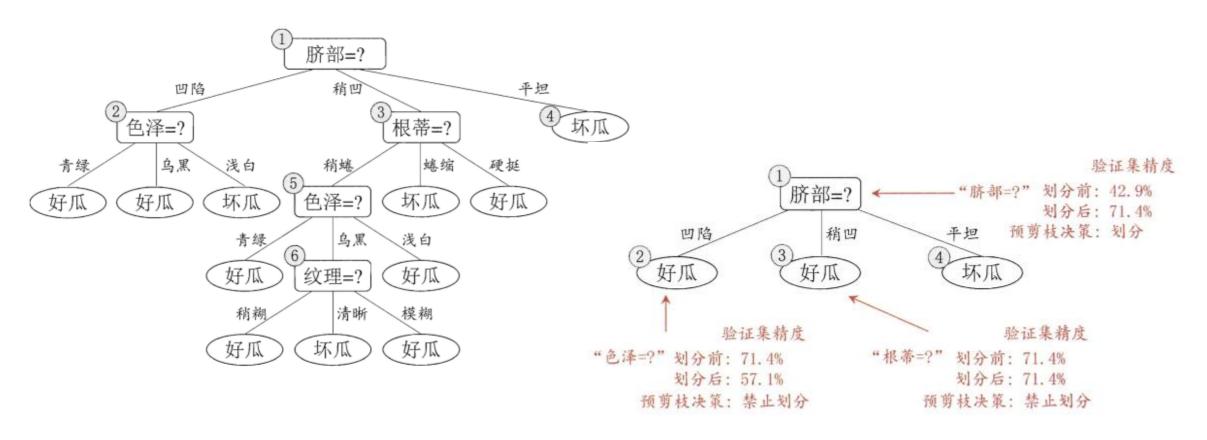
表3: 西瓜数据集

编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
1	青绿	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
2	乌黑	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
3	乌黑	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹 .	软粘	是
10	青绿	硬挺	清脆	清晰	平坦	软粘	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	否
17	青绿	蜷缩	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	
编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
5	浅白	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
8	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	硬滑	是
9	乌黑	稍蜷	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦	硬滑	否
12	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	软粘	否
13	青绿	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	否



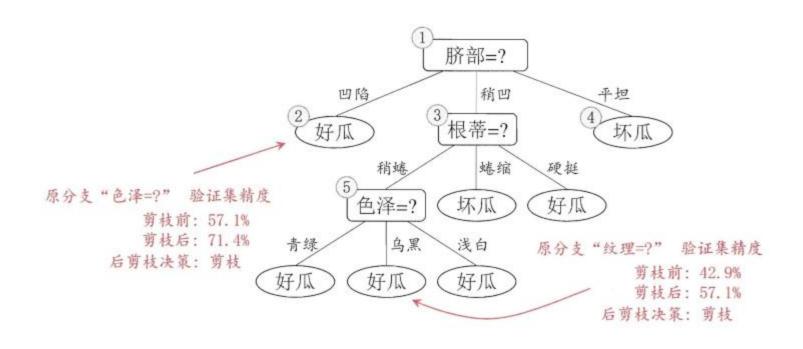


预剪枝 (pruning)





后剪枝 (pruning)





连续值处理

https://wenku.baidu.com/view/0ef3a961bcd126fff7050bba.html

连续属性的可取值不再有限,不能直接根据连续属性的可取值来对结点进行划分,用到连续属性离散化技术——二分法(bi-partition)

给定样本集D和连续属性a,假定a在D上出现了n个不同的取值,将这些值进行排序得到 $\{a^1, a^2, ..., a^n\}$

$$T_a = \left\{ \frac{a^i + a^{i+1}}{2} \mid 1 \leqslant i \leqslant n - 1 \right\}$$

$$Gain(D, a) = \max_{t \in T_a} Gain(D, a, t)$$

$$= \max_{t \in T_a} Ent(D) - \sum_{\lambda \in \{-, +\}} \frac{|D_t^{\lambda}|}{|D|} Ent(D_t^{\lambda})$$

东南大学计算机学院万维网数据科学实验室

在候选集上 找划分点*t*



表4: 包含连续属性的西瓜数据集

编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	密度	含糖率	好瓜
1	青绿	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	0.697	0.460	是
2	乌黑	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	0.774	0.376	是
3	乌黑	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	0.634	0.264	是
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	0.608	0.318	是
5	浅白	蜷缩	浊响	,清晰	凹陷	硬滑	0.556	0.215	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	0.403	0.237	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹	软粘	0.481	0.149	是
, 8	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	硬滑	0.437	0.211	是
9	乌黑	稍蜷	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	0.666	0.091	 否
10	青绿	硬挺	清脆	清晰	平坦	软粘	0.243	0.267	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦	硬滑	0.245	0.057	否
12	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	软粘	0.343	0.099	否
13	青绿	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	0.639	0.161	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	0.657	0.198	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	0.360	0.370	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	0.593	0.042	否
17	青绿	蜷缩	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	0.719	0.103	



 $T_{\underline{\mathbf{x}}\underline{\mathbf{g}}} = \{0.244, 0.294, 0.351, 0.381, 0.420, 0.459, 0.518, 0.574, 0.600, 0.621, 0.636, 0.648, 0.661, 0.681, 0.708, 0.746\}$

属性"密度"最大信息增益为0.262, 所对应的划分点为0.381

Gain(D, 色泽) = 0.109; Gain(D, 根蒂) = 0.143;

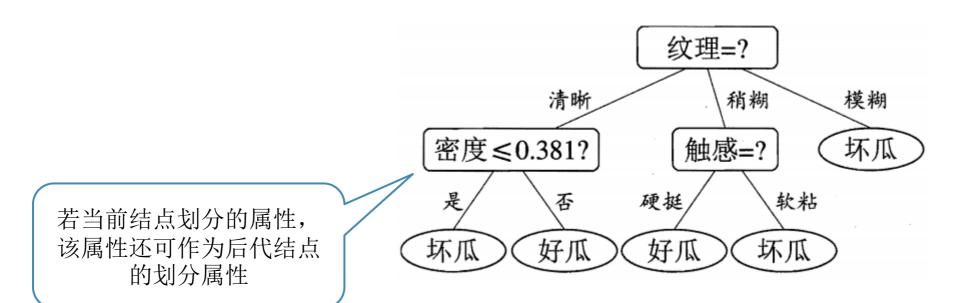
Gain(D, 敬声) = 0.141; Gain(D, 纹理) = 0.381;

 $Gain(D, \mathbb{R}) = 0.289; \quad Gain(D, \mathbb{R}) = 0.006;$

Gain(D, 密度) = 0.262; Gain(D, 含糖率) = 0.349

属性"纹理"被选作根结点划分属性,此后结点划分过程递归进行



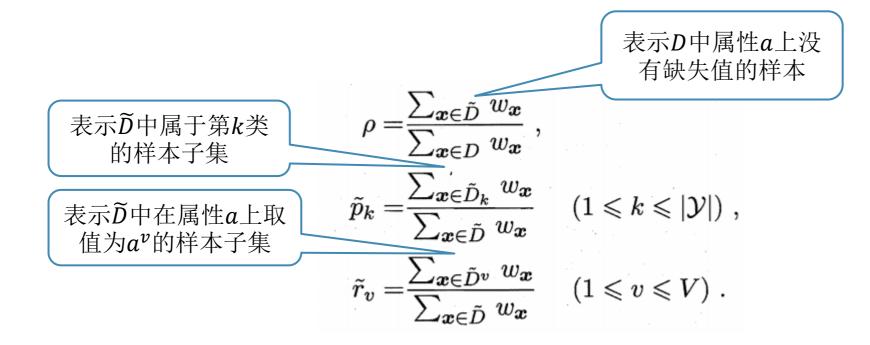




缺失值处理

https://wenku.baidu.com/view/0ef3a961bcd126fff7050bba.html

■ 如何在属性值缺失的情况下进行划分属性选择





- 对于属性a , ρ 表示无缺失值样本所占比例
- \tilde{p}_k 表示无缺失值样本中第k类所占的比例
- \tilde{r}_v 表示无缺失值样本中在属性a上取值为 a^v 的样本子集

$$\begin{aligned} \operatorname{Gain}(D, a) &= \rho \times \operatorname{Gain}(\tilde{D}, a) \\ &= \rho \times \left(\operatorname{Ent}\left(\tilde{D}\right) - \sum_{v=1}^{V} \tilde{r}_{v} \operatorname{Ent}\left(\tilde{D}^{v}\right) \right) \end{aligned}$$

$$\operatorname{Ent}(\tilde{D}) = -\sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} \tilde{p}_k \log_2 \tilde{p}_k .$$



缺失值处理

■ 给定划分属性, 若样本在该属性值上的值缺失该如何对样本进行划分

根结点中各样本的 权重初始化为1

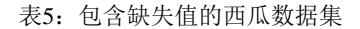
$$\rho = \frac{\sum_{\boldsymbol{x} \in \tilde{D}} w_{\boldsymbol{x}}}{\sum_{\boldsymbol{x} \in D} w_{\boldsymbol{x}}},$$

$$\tilde{p}_k = \frac{\sum_{\boldsymbol{x} \in \tilde{D}_k} w_{\boldsymbol{x}}}{\sum_{\boldsymbol{x} \in \tilde{D}} w_{\boldsymbol{x}}} \quad (1 \leqslant k \leqslant |\mathcal{Y}|),$$

$$\tilde{r}_v = \frac{\sum_{\boldsymbol{x} \in \tilde{D}^v} w_{\boldsymbol{x}}}{\sum_{\boldsymbol{x} \in \tilde{D}} w_{\boldsymbol{x}}} \quad (1 \leqslant v \leqslant V).$$

若样本**x**在划分属性a上取值已知,则可直接划分到其对应的子结点,权值保持不变。

若样本x在划分属性a上取值未知,则将x划分入所有子结点,在对应子结点中调整样本权值为 \tilde{r}_v * ω_x





编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
1	_	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
2	乌黑	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	_	是
3	乌黑	蜷缩	_	清晰	凹陷	硬滑	是
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
5	-	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	_	软粘	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹	软粘	是
8	乌黑	稍蜷	浊响	-	稍凹	硬滑	是
9	乌黑	_	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	——— 否
10	青绿	硬挺	清脆	-	平坦	软粘	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦	-	否
12	浅白	蜷缩	_	模糊	平坦	软粘	否
13	_	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	-	软粘	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	否
17	青绿		沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否



$$\operatorname{Ent}(\tilde{D}) = -\sum_{k=1}^{2} \tilde{p}_k \log_2 \tilde{p}_k$$
$$= -\left(\frac{6}{14} \log_2 \frac{6}{14} + \frac{8}{14} \log_2 \frac{8}{14}\right) = 0.985$$

$$\operatorname{Ent}(\tilde{D}^1) = -\left(\frac{2}{4}\log_2\frac{2}{4} + \frac{2}{4}\log_2\frac{2}{4}\right) = 1.000$$

$$\operatorname{Ent}(\tilde{D}^2) = -\left(\frac{4}{6}\log_2\frac{4}{6} + \frac{2}{6}\log_2\frac{2}{6}\right) = 0.918$$

$$\operatorname{Ent}(\tilde{D}^3) = -\left(\frac{0}{4}\log_2\frac{0}{4} + \frac{4}{4}\log_2\frac{4}{4}\right) = 0.000$$

$$\operatorname{Gain}(\tilde{D},$$
色泽 $) = \operatorname{Ent}(\tilde{D}) - \sum_{v=1}^{3} \tilde{r}_{v} \operatorname{Ent}(\tilde{D}^{v})$

$$= 0.985 - \left(\frac{4}{14} \times 1.000 + \frac{6}{14} \times 0.918 + \frac{4}{14} \times 0.000\right)$$

$$= 0.306$$
.

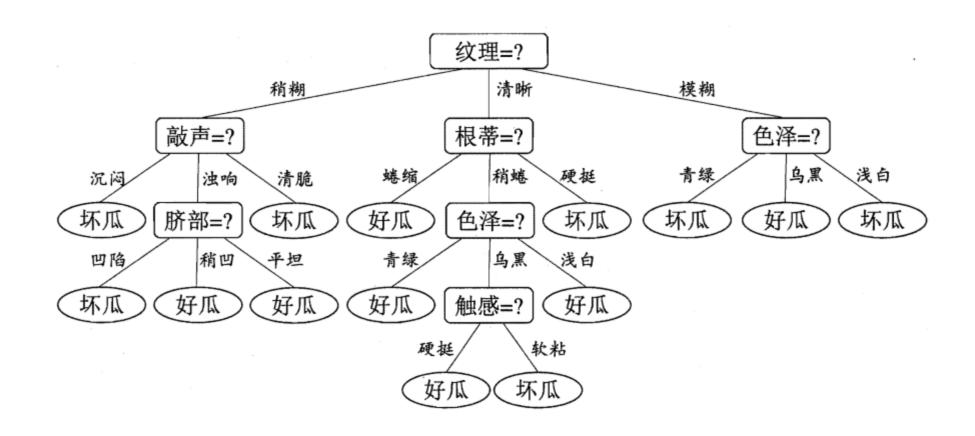
$$\mathrm{Gain}(D,$$
色泽 $)=
ho imes\mathrm{Gain}(ilde{D},$ 色泽 $)=rac{14}{17} imes0.306=0.252$

$$Gain(D, 色泽) = 0.252; Gain(D, 根蒂) = 0.171;$$

$$Gain(D, \tilde{w}) = 0.145; \quad Gain(D, \tilde{y}) = 0.424;$$

$$Gain(D, 脐部) = 0.289; Gain(D, 触感) = 0.006.$$







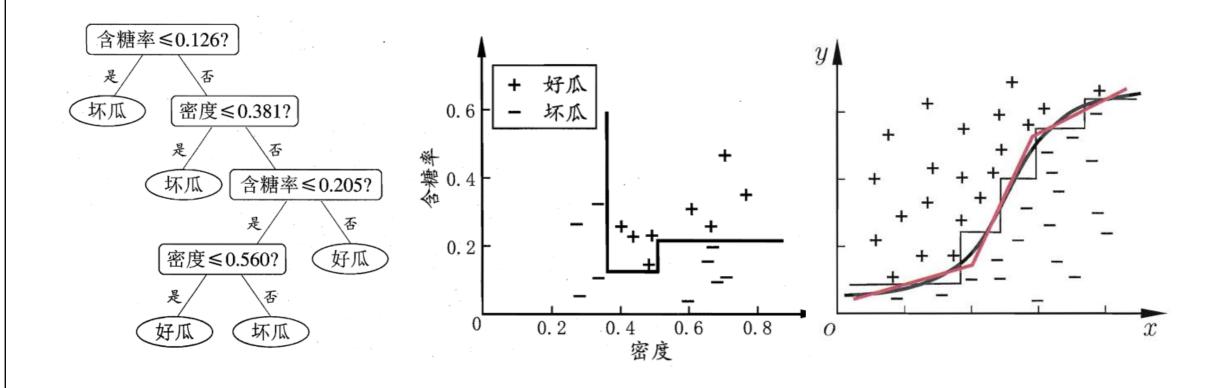
多变量决策树

- 决策树所形成的分类 边界: 轴平行(axisparallel)
- 每一段划分都直接对 应了属性取值,较好 的可解释性

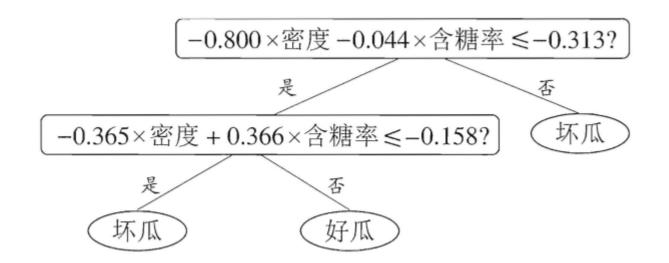
表5: 只包含连续属性的西瓜数据集

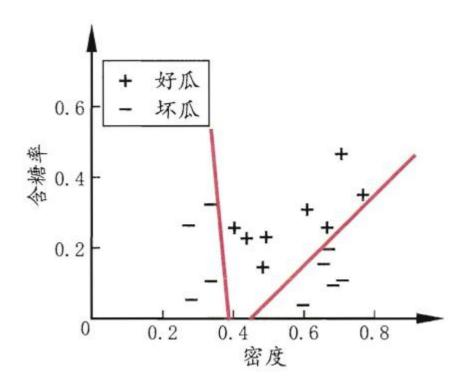
编号	密度	含糖率	好瓜
1	0.697	0.460	是
2	0.774	0.376	是
3	0.634	0.264	是
4	0.608	0.318	是
5	0.556	0.215	是
6	0.403	0.237	是
7	0.481	0.149	是
8	0.437	0.211	是
9	0.666	0.091	否
10	0.243	0.267	否
11	0.245	0.057	否
12	0.343	0.099	否
13	0.639	0.161	否
14	0.657	0.198	否
15	0.360	0.370	否
16	0.593	0.042	否
17	0.719	0.103	













实验

- 使用scikit-learn提供的决策树实验解决分类问题
- http://scikit-learn.org/stable/modules/tree.html



谢谢