决策树算法之ID3与C4.5的理解与实现

github：代码实现
本文算法均使用python3实现

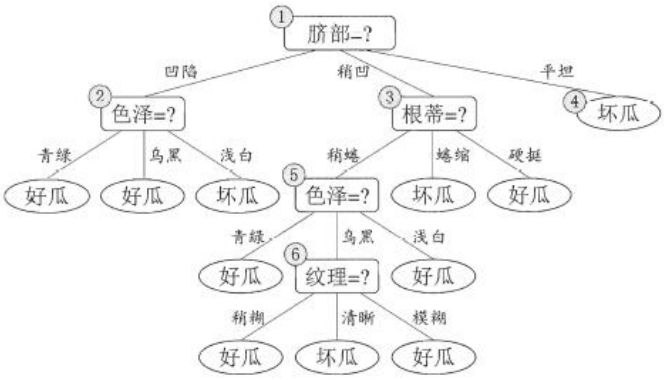
---

1. 决策树

决策树（decision tree）是一种基本的分类与回归方法（本文主要是描述分类方法），是基于树结构进行决策的，可以将其认为是if-then规则的集合。一般的，一棵决策树包含**一个根节点**、**若干内部节点**和**若干叶节点**。其中根节点包含所有样本点，内部节点作为划分节点（属性测试），叶节点对应于决策结果。

用决策树进行分类，是**从根节点开始**，对实例的某一特征进行测试，根据测试结果，将实例分配到其子节点，若该子节点仍为划分节点，则继续进行判断与分配，直至将实例分到叶节点的类中。

若对以上描述不太明白，可以结合以下图进行理解。



根据以上决策树，现在给你一个实例：{色泽：青绿，根蒂：稍蜷，敲声：清脆，纹理：清晰，脐部：稍凹，触感：光滑}，来判断该瓜是否是好瓜。其过程是：脐部（稍凹）-->根蒂（稍蜷）-->色泽（青绿）-->好瓜。

以上是由决策树来进行分类的过程。而决策树的学习（构建）通常是一个递归地选择最优特征的过程。那么构建决策树时如何**选择特征作为划分点**（即选择哪个特征作为根节点或者选择哪个特征作为非叶子节点）？当训练数据量大、特征数量较多时构建的**决策树可能很庞大**，这样的决策树用来分类是否好？

由这些问题我们可以知道，构建决策树的三个要点：
（1）特征选择
（2）决策树的生成
（3）决策树修剪

---

2. ID3算法

基于**ID3算法**的决策树构建，其**选择特征**的准则是信息增益。信息增益（information gain）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。也就是说，信息增益越大，通过特征 X，就越能够准确地将样本进行分类；信息增益越小，越无法准确进行分类。

在介绍信息增益之前，我们需要先对熵进行一下讲解。

2.1 熵（Entropy）

熵是度量样本集合纯度最常用的一种指标，它是信息的期望值。我们首先了解一下什么是信息。由《机器学习实战》中定义：

> 如果待分类的事务可能划分在多个分类之中，则符号（特征） k 的信息定义为：
>
> $$l(k) = -\log_2 p(k)$$
>
> 其中 $p(k)$ 为选择该分类的概率。

而熵计算的是所有类别所有可能值包含的信息期望值，其公式为：

$$Ent(D) = -\sum_{k=1}^{N} p(k)\log_2 p(k)$$

其中 N 为类别个数。

现在我们使用例子，来理解熵的计算：

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

（1）对于最终分类（是否为好瓜），计算其信息熵：

由上表可看出，一共有17个样本，属于好瓜的有8个样本，坏瓜的有9个样本，因此其熵为：

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

（2）对于特征“色泽”，计算其信息熵：

由于特征“色泽”取值有：{青绿，乌黑，浅白}。若使用该属性对 D 进行划分，可得到3个子集，分别记为： D_1 （色泽=青绿）， D_2 （色泽=乌黑）， D_3 （色泽=浅白）。

其中 D_1 包含样本 $1,4,6,10,13,17$,其中类别为好瓜的比例为 $p_1 = \frac{3}{6}$ ，坏瓜的比例为 $p_2 = \frac{3}{6}$ ； D_2 包含样本 $2,3,7,8,9,15$,其中类别为好瓜的比例 $p_1 = \frac{4}{6}$ ，坏瓜的比例为 $p_2 = \frac{2}{6}$ ； D_3 包含样本 $5,11,12,14,16$,其中类别为好瓜的比例 $p_1 = \frac{1}{5}$ ，坏瓜的比例为 $p_2 = \frac{4}{5}$,因此其三个分支点的信息熵为：

$$Ent(D_1) = -(\frac{3}{6}\log_2\frac{3}{6} + \frac{3}{6}\log_2\frac{3}{6}) = 1.000$$

$$Ent(D_2) = -(\frac{4}{6}\log_2\frac{4}{6} + \frac{2}{6}\log_2\frac{2}{6}) = 0.918$$

$$Ent(D_3) = -(\frac{1}{5}\log_2\frac{1}{5} + \frac{4}{5}\log_2\frac{4}{5}) = 0.722$$

2.2 信息增益（information gain）

信息增益，由《统计学习方法》中定义：

特征 a 对训练数据集 D 的信息增益 $Gain(D,a)$,定义为集合 D 的经验熵（即为熵）与特征 a 给定条件下的经验条件熵 $Ent(D|a)$ 之差，即：

$$Gain(D,a) = Ent(D) - Ent(D|a)$$

其中特征 a 将数据集划分为： $D_1, D_2, \ldots, D_v$,而经验条件熵为：

$$Ent(D|a) = \sum_{i=1}^{v} \frac{|D_i|}{|D|} Ent(D_i)$$

我们根据例子对其进行理解：

对于特征“色泽”，我们计算其信息增益，由2.1中，集合 D 的熵为： $Ent(D) = 0.998$ ，对于特征“色泽”的三个分支点的熵为： $Ent(D_1) = 1.000$，$Ent(D_2) = 0.918$，$Ent(D_3) = 0.722$，则“色泽”特征的信息增益为：

$$Gain(D, \text{色泽}) = Ent(D) - \sum_{i=1}^{3} \frac{|D_i|}{|D|} Ent(D_i) = 0.998$$
$$- (\frac{6}{17} \times 1.000 + \frac{6}{17} \times 0.918 + \frac{5}{17} \times 0.722) = 0.109$$

2.3 算法步骤

ID3算法递归地构建决策树，从根节点开始，对所有特征计算信息增益，选择信息增益最大的特征作为节点的特征，由该特征的不同取值建立子节点；再对子节点递归地调用以上方法构建决策树；知道所有特征的信息增益均很小或者没有特征可以选择为止。最后得到一个决策树。

在算法中（C4.5也是），有三种情形导致递归返回：

（1）当前节点包含的样本全属于同一类别，无需划分。

（2）当前属性集为空，或是所有样本在所有属性上取值相同，无法划分。（此时将所含样本最多的类别设置为该叶子节点类别）

（3）当前节点包含的样本集合为空，不能划分。（将其父节点中样本最多的类别设置为该叶子节点的类别）

输入：训练数据集 D ,特征集 A , 阈值 ϵ ;
过程：函数 $TreeGenerate(D, A)$.
1：计算节点信息增益 $Gain(D,a)$:
2：　　节点a的熵： $Ent(D,a)$
3：　　节点D的熵： $Ent(D)$
4：　　节点信息增益： $Gain(D,a) = Ent(D) - Ent(D,a)$
5：生成节点node:
6：**if** D 中样本全属于同一类别 C **then**
7：　　将node标记为 C 类叶节点；**return**
8：**end if**
9：**if** $A = \emptyset$ **OR** D 中样本在 A 上取值相同**then**
10：　　将node标记为叶节点，期类别标记为 D 中样本数最多的类；**return**
11：**end if**
12：按照节点信息增益，从 A 中选择最优划分属性 a_*
13：**for** a_* 中的每一个值 a_*^i **do**
14：　　为node生成一个分支；令 D_i 表示 D 中在 a_* 上取值为 a_*^i 的样本子集；
15：　　**if** D_i 为空，**then**
16：　　　　将分支节点标记为叶节点，其类别标记为 D 中样本最多的类；**return**
17：　　**else**
18：　　　　以 $TreeGenerate(D_i, A/a_*)$ 为分支节点
19：　　**end if**
20：**end for**
输出：以node为根节点的一棵决策树

---

3. C4.5算法

实际上，信息增益准则对可取值书目较多的属性有所偏好，例如如果将前面表格中的第一列ID也作为特征的话，它的信息增益将达到最大值，而这样做显然不对，会造成过拟合。为了减少这种偏好可能带来的不利影响，C4.5算法中将采用信息增益比来进行特征的选择。信息增益比准则对可取值数目较少的属性有所偏好。接下来，我们首先对信息增益比进行介绍。

3.1 信息增益比（增益率）

信息增益比的定义为：

$$Gain\_ratio(D,a)=\frac{Gain(D,a)}{IV(a)}$$

，

其中：

$$IV(a)=-\sum_{i=1}^{v}\frac{|D_i|}{|D|}\log_2\frac{|D_i|}{|D|}$$

我们根据例子对其进行理解：

对于特征“色泽”，我们计算其信息增益比，由2.2计算得 $Gain(D,\text{色泽})=0.109$，而

$$IV(\text{色泽})=-(\frac{6}{17}\times\log_2\frac{6}{17}+\frac{6}{17}\times\log_2\frac{6}{17}+\frac{5}{17}\times\log_2\frac{5}{17})=1.580$$

则 $Gain\_ratio(D,\text{色泽})=\frac{0.109}{1.580}=0.069$。

3.2 算法步骤

C4.5算法同ID3算法过程相似，仅在选择特征时，使用信息增益比作为特征选择准则。

输入：训练数据集 D ,特征集 A , 阈值 ϵ ;
过程：函数 $TreeGenerate(D,A)$.
1：计算节点信息增益比 $Gain_ratio(D,a)$:
2：　　节点a的熵： $Ent(D,a)$
3：　　节点D的熵： $Ent(D)$
4：　　节点信息增益： $Gain(D,a)=Ent(D)-Ent(D,a)$
5：　　节点固定值： $IV(a)$
6：　　节点信息增益比： $Gain_ratio(D,a)=\frac{Gain(D,a)}{IV(a)}$
7：生成节点node:
8：**if** D 中样本全属于同一类别 C **then**
9：　　将node标记为 C 类叶节点；**return**
10：**end if**
11：**if** $A=\emptyset$ **OR** D 中样本在 A 上取值相同**then**
12：　　将node标记为叶节点，期类别标记为 D 中样本数最多的类；**return**
13：**end if**
14：按照节点信息增益，从 A 中选择最优划分属性 a_*
15：**for** a_* 中的每一个值 a_*^i **do**
16：　　为node生成一个分支；令 D_i 表示 D 中在 a_* 上取值为 a_*^i 的样本子集；
17：　　**if** D_i 为空，**then**
18：　　　　将分支节点标记为叶节点，其类别标记为 D 中样本最多的类；**return**
19：　　**else**
20：　　　　以 $TreeGenerate(D_i,A/a_*)$ 为分支节点
21：　　**end if**
22：**end for**
输出：以node为根节点的一棵决策树

---

4. 剪枝处理

针对于在第1部分提到的最后一个问题：当训练数据量大、特征数量较多时构建的**决策树可能很庞大**，这样的决策树用来分类是否好？答案是否定的。决策树是依据训练集进行构建的，当决策树过于庞大时，可能对训练集依赖过多，也就是对训练数据**过度拟合**。从训练数据集上看，拟合效果很好，但对于测试数据集或者新的实例来说，并不一定能够准确预测出其结果。因此，对于决策树的构建还需要最后一步----即决策树的修剪。

决策树的修剪，也就是剪枝操作，主要分为两种：

（1）**预剪枝（Pre-Pruning）**

（2）**后剪枝（Post-Pruning）**

接下来我们将详细地介绍这两种剪枝方法。

4.1 预剪枝（Pre-Pruning）

预剪枝是指在决策树**生成过程**中，对每个节点在划分前先进行估计，若当前节点的划分不能带来决策树泛化性能的提升，则停止划分并将当前节点标记为叶节点。

我们使用例子进一步理解预剪枝的过程：

将本文开始的西瓜数据集表划分成两部分，一部分作为训练集用来构建决策树，一部分作为验证集用来进行决策树的剪枝。具体划分见下图：

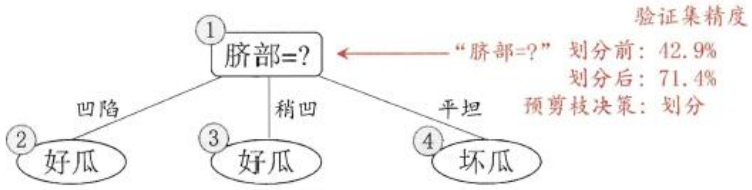
训练集

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	否

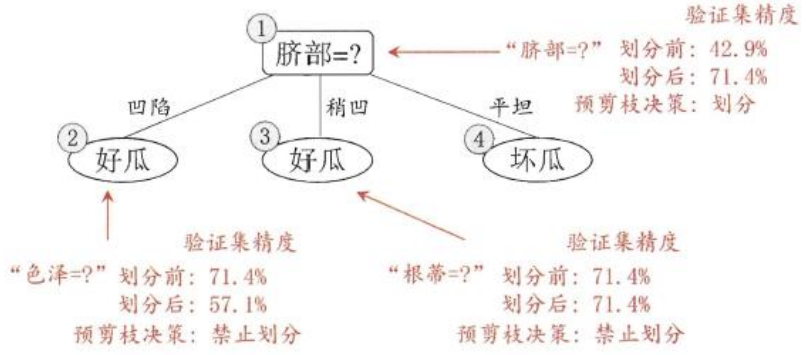
验证集

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

使用**ID3算法**进行决策树的构建，即使用**信息增益**进行特征的选择。首先选择特征“脐部”作为决策树根节点，如何判断该节点是否需要剪枝，需要对剪枝前后验证集精度进行比较。由“脐部”这个特征将产生三个分支“凹陷”、“稍凹”、“平坦”，并认定其分支结果（可采用多数表决法，当分类数量相当时，任选一类即可），如下图：



查看**验证集**，若将“脐部”看做节点，并将其标记为“好瓜”，那么划分前的精度为：$\frac{3}{7}=0.429$。符合“脐部”=“凹陷”的样本有：$4,5,13$，其中正样本（是好瓜）为 $4,5$，**正样本**个数为2，按照上图预测正确数为2；同理“脐部”=“稍凹”的样本中**正样本**个数为1，预测正确数为1；“脐部”=“平坦”的样本中**负样本**个数为2，预测正确个数为2。因此使用“脐部”这个特征进行划分，划分后的精度为：$\frac{5}{7}=0.714$。由于预测后精度大于预测前精度，因此不对“脐部”进行剪枝，即将其作为划分点进行划分。



同理我们“色泽”以及“根蒂”特征进行划分前后精度的计算。对于“色泽”，划分后的精度为 0.571，而划分前为 0.714，划分使得结果变差，因此不以该特征进行划分，即将该节点记为叶子节点并标记为“好瓜”；同理“根蒂”特征划分前后的精度都为 0.714，效果并未提升，因此也不将该特征进行划分，而是将其作为叶子节点并标

记为“好瓜”。由此，决策树构建完毕。此时的决策树为只有一层的树。

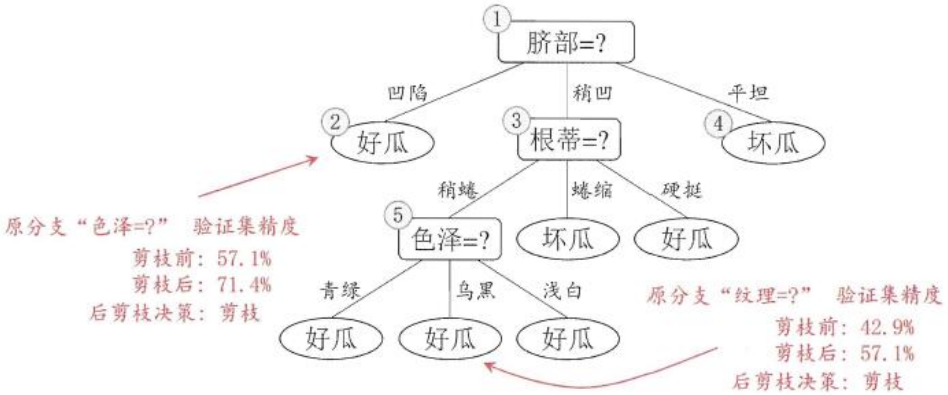
可有由图中看出，该决策树有点过于简单，虽然降低的过拟合的风险，但是由于其基于“贪心”的本质禁止了其它分支的展开，给预剪枝决策树带来了欠拟合的风险。

4.1 后剪枝（Post-Pruning）

后剪枝是指先从训练集生成一棵完整的决策树，然后自底向上地对非叶节点进行考察，若将该节点对应的子树替换为叶节点能带来决策能力的提升，则将该子树替换成叶节点。

我们使用例子进一步理解后剪枝的过程：

同样适用4.1中的划分数据集。针对已建立好的决策树，我们首先对“纹理”特征节点进行处理，判断其是否需要剪枝，见下图。



首先，使用整个决策树对验证集进行预测，并将其预测结果与真实结果进行对比，可得到如下结果（预测结果与真实结果相同，标记为“正确”，否则标记为“不正确”）：

$$\{(4,\text{正确}),(5,\text{不正确}),(8,\text{不正确}),(9,\text{不正确}),(11,\text{正确}),(12,\text{正确}),(13,\text{不正确})\}$$

首先我们判断是否需要对“纹理”进行剪枝：剪枝前精确度由上结果可以得到为 $\frac{3}{7}=0.429$,剪枝后（即将该节点标记为“好瓜”），此时对于样本 $((8,\text{正确}))$，其它样本结果不变，其精度提升到 $\frac{4}{7}=0.571$，因此对该节点进行剪枝。对节点5“色泽”，剪枝前精确度为 0.571，剪枝后仍旧为 0.571，对此我们可以不进行剪枝（但在实际情况下仍旧会需要剪枝）；同理对“根蒂”、节点2“色泽”进行计算，所得结果见上图。由此得到后剪枝决策树。

后剪枝决策树通常比预剪枝决策树保留了更多的分支，一般情况下，后剪枝决策树欠拟合的风险很小，其泛化能力往往优于预剪枝预测数。但由于其是基于创建完决策树之后，再对决策树进行自底向上地剪枝判断，因此训练时间开销会比预剪枝或者不剪枝决策树要大。

引用及参考：

[1]《机器学习》周志华著

[2]《统计学习方法》李航著

[3]《机器学习实战》Peter Harrington著

写在最后：本文参考以上资料进行整合与总结，属于原创，文章中可能出现理解不当的地方，若有所见解或异议可在下方评论，谢谢！

分类: Machine Learning

#1楼 2019-11-20 09:58 **dadadashuaifei**

查看验证集，若将“脐部”看做节点，并将其标记为“好瓜”，那么划分前的精度为：3/7
这里有个小问题，精度写错了

支持(0) 反对(0)

#2楼 [楼主] 2019-11-20 16:41 **LLLiuye**

@ dadadashuaifei
已修改，多谢指正～

支持(0) 反对(0)

刷新评论 刷新页面 返回顶部