
决策树

陈飞宇

fchen@cqu.edu.cn

办公室：软件学院529

程序员的直觉 (The intuition of Programmer)

- 数据集:

学号	数学	英语	语文	录取
1	A	C	B	Yes
2	A	B	B	Yes
3	A	B	C	No
4	B	B	B	Yes
5	B	C	B	No
6	C	C	B	No
7	C	A	A	Yes

程序员的直觉 (The intuition of Programmer)

- 验证集:

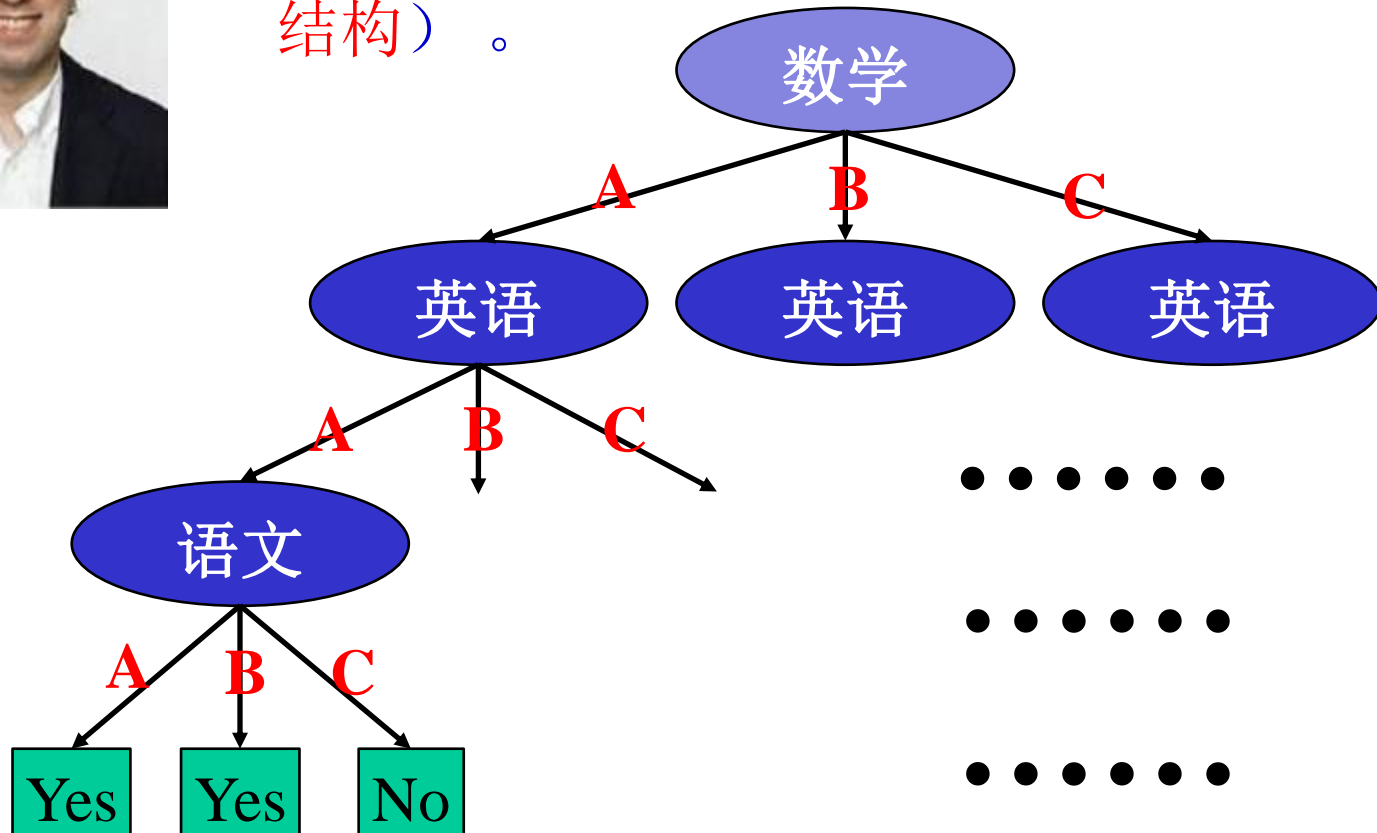
学号	数学	英语	语文	录取
8	A	A	A	?
9	B	B	C	?
10	C	B	B	?
11	B	C	A	?
12	C	C	A	?
13	B	B	A	?

程序员的直觉

- 一般程序员：

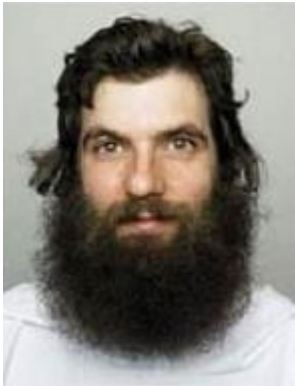


» 绘制程序流程图，然后利用if else或switch case语句进行分支结构的程序实现（树形结构）。

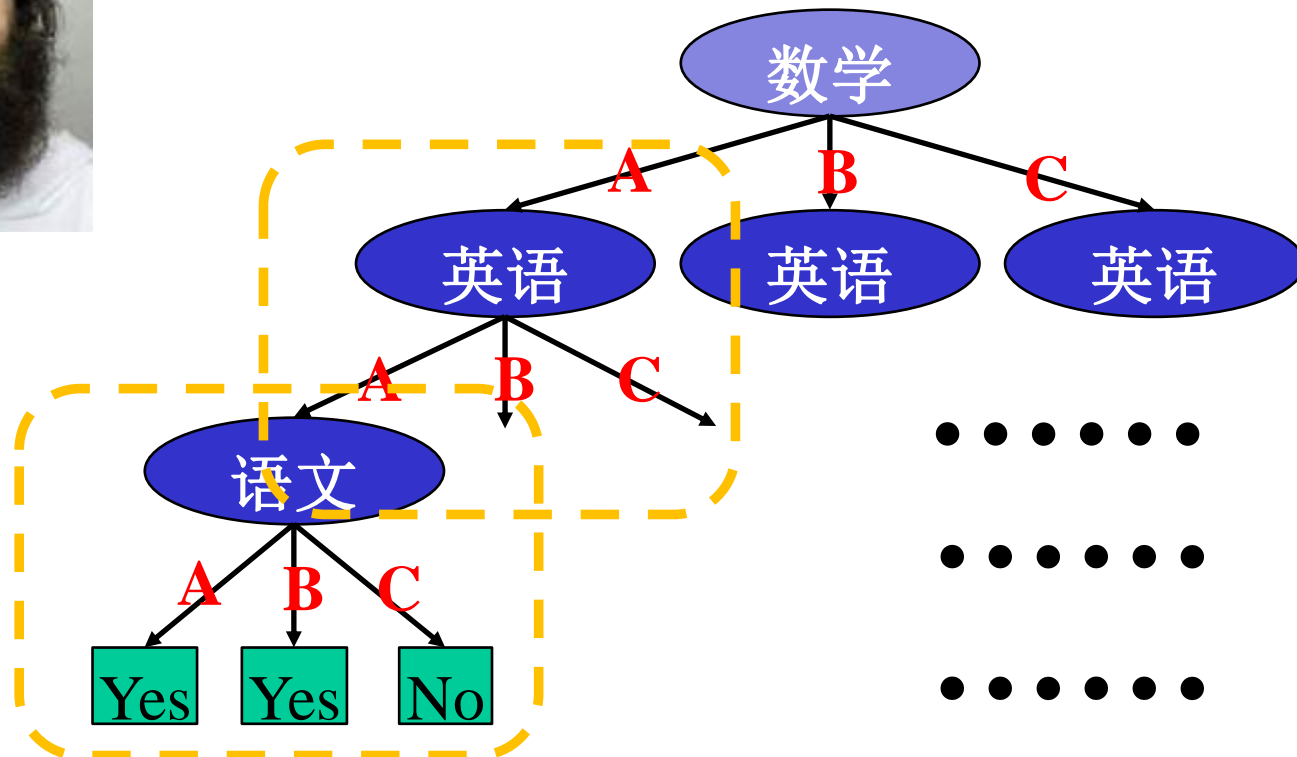


程序员的直觉

- 资深程序员：



— 发现规律，采用‘分而治之’思想，利用递归进行求解。

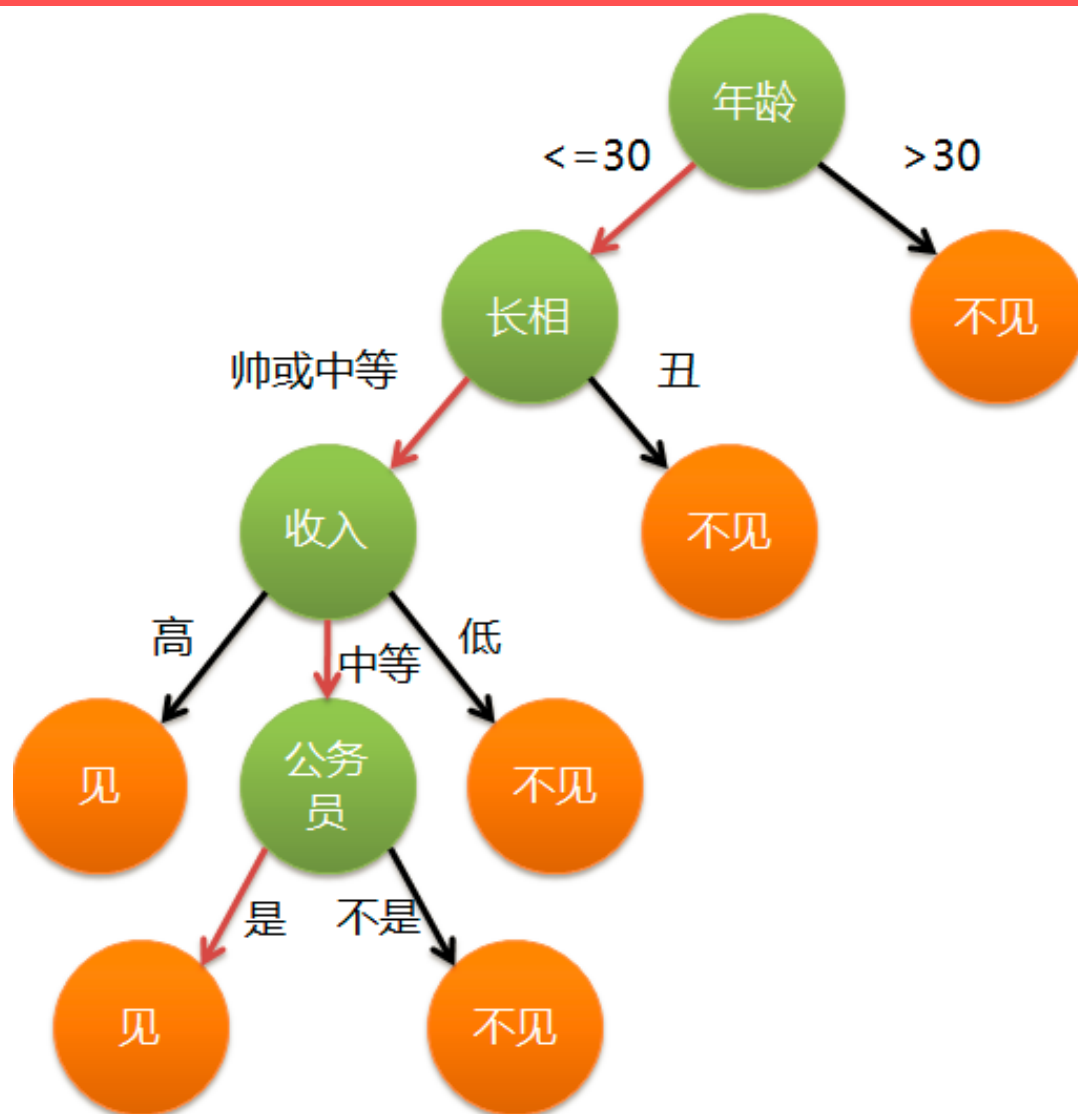


决策树-生活例子

- 相亲——母女对话：
 - 女儿：多大年纪了？
 - 母亲：26。
 - 女儿：长的帅不帅？
 - 母亲：挺帅的。
 - 女儿：收入高不？
 - 母亲：不算很高，中等情况。
 - 女儿：是公务员不？
 - 母亲：是，在税务局上班呢。
 - 女儿：那好，我去见见。

此例子纯属虚构，不代表广大女性同胞的择偶标准。
如有雷同纯属巧合。

决策树



决策树（Decision Tree）

- 决策树（decision tree）：构建一个基于属性的树形分类器。
 - 每个非叶节点表示一个特征属性上的测试（分割），
 - 每个分支代表这个特征属性在某个值域上的输出，
 - 每个叶节点存放一个类别。
- 使用决策树进行决策的过程就是从根节点开始，测试待分类项中相应的特征属性，并按照其值选择输出分支，直到到达叶子节点，将叶子节点存放的类别作为决策结果。

决策树

- 决策树构建：分治法思想（递归）
 - 对于当前结点返回递归条件：
 - ① 当前结点样本均属于同一类别，无需划分。
 - ② 当前属性集为空。
 - ③ 所有样本在当前属性集上取值相同，无法划分。
 - ④ 当前结点包含的样本集合为空，不能划分。

决策树

- 递归结束条件

- 当前结点样本均属于同一类别，无需划分。

- Example: 下一个要划分的属性为属性1

编号	属性1	类别
1	A	P
2	A	P
3	B	P
4	C	P

决策树

- 递归结束条件

- 2. 当前属性集为空。

- **Example:** 属性1(B)→属性2(A)→属性3(A) 走完该路径已经无属性往下分。

编号1	属性1	属性2	属性3	类别
1	A	C	A	P
2	B	A	A	P
3	B	B	B	N
4	C	C	B	N

决策树

- 递归结束条件

3.所有样本在当前属性集上取值相同，无法划分。

- **Example:** 属性1 B分支下，样本子集中所有样本属性值完全一样，再往下划分就没有意义了。

编号1	属性1	属性2	属性3	类别
1	A	B	A	P
2	B	B	A	P
3	B	B	A	N
4	C	C	B	N

决策树

- 递归结束条件

4.当前结点包含的样本集合为空，不能划分。

- **Example:** 属性1 B分支中 属性2 A分支下，唯一的属性——属性3，只有在值为A，其余情况样本集合为空。

编号1	属性1	属性2	属性3	类别
1	A	C	A	P
2	B	A	A	P
3	B	B	B	N
4	C	C	B	N

输入： 训练样本集 $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$;
属性集 $A = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$

函数 $TreeGenerate(D, A)$:

1. 生成节点node
2. **if** D 中样本全属于同一类别 C :
3. 将node标记为 C 类叶节点; **return**;
4. **end if**
5. **if** 属性集 A 为空或者 D 的所有属性值均一样:
6. 将node标记为最多类; **return**;
7. **end if**
8. 从 A 中选取最佳划分属性 a_* ;
9. **for** a_*^v in a_* :
10. 为node生成一个分支, 令 D_v 表示 D 中在 a_* 属性值为 a_*^v 的样本子集;
11. **if** D_v 为空:
12. 将分支结点标记为叶结点, 其类别标签为 D 中样本最多的类; **return**;
13. **else**:
14. 以 $TreeGenerate(D_v, A \setminus \{a_*\})$ 为分支结点;
15. **end if**
16. **end for**

决策树的核心

- 如何选取最佳划分属性：
 - 极端例子：

编号	属性1	属性2	属性3	标签
1	是	是	是	正
2	否	是	否	负
3	否	是	是	正
4	是	是	否	负
5	是	否	是	正
6	是	否	否	负
7	否	否	是	正

决策树的核心

- 定义最佳划分属性：
 - 经过属性划分后，不同类样本被更好的分离。
 - 理想情况：划分后样本被完美分类。即每个分支的样本都属性同一类。
 - 实际情况：不可能完美划分！尽量使得每个分支某一类样本比例尽量高！即尽量提高划分后子集的纯度（purity）。
- 最佳划分属性目标：
 - 提升划分后子集的纯度
 - 降低划分后子集的不纯度

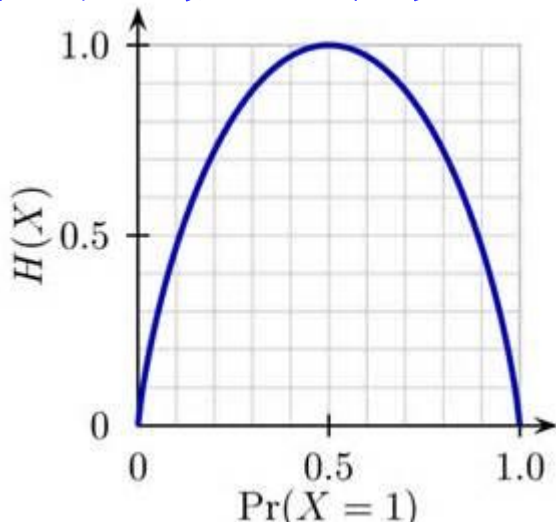
信息熵（Information Entropy）

信息熵（Information Entropy）：

$$\text{Ent}(D) = - \sum_{k=1}^m p_k \log_2 p_k$$

其中 p_k 是集合 D 中第 k 类样本所占的比例。

信息熵越小，信息量越大，不确定性越小，样本纯度越高。



明天是星期二。

明天会下雨。

信息增益 (Information Gain)

假设属性 a 有 V 可能取值 $\{a^1, a^2, \dots, a^V\}$, a^v 对应划分后的数据子集为 D^v .

信息增益 (Information Gain) :

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

$\text{Gain}(D, a)$ 越大, 意味着使用属性来划分所获得的纯度提升越大。

ID3 (Iterative Dichotomiser 3)

ID3算法 (Quinlan, 1986)

基本思想：使用信息增益为准则来选择划分属性

$$a_* = \operatorname{argmax}_{a \in A} \operatorname{Gain}(D, a)$$

$0 \log_2 0 = 0$	$\log_2 3 = 1.5850$	$\log_2 5 = 2.3219$
$\log_2 7 = 2.8074$	$\log_2 11 = 3.4594$	$\log_2 13 = 3.7004$
$\log_2 17 = 4.0875$	$\log_2 19 = 4.2479$	$\log_2 23 = 4.5236$

决策树 (Decision Tree)

Computer Sale 实例

No.	age	income	student	credit	Buyer
1	<30	high	no	fair	no
2	<30	high	no	excellent	no
3	30~40	high	no	fair	yes
4	>40	medium	no	fair	yes
5	>40	low	yes	fair	yes
6	>40	low	yes	excellent	no
7	30~40	low	yes	excellent	yes
8	<30	medium	no	fair	no
9	<30	low	yes	fair	yes
10	>40	medium	yes	fair	yes
11	<30	medium	yes	excellent	yes
12	30~40	medium	no	excellent	yes
13	30~40	high	yes	fair	yes
14	>40	medium	no	excellent	no

ID3（计算信息熵）

No.	Buyer
1	no
2	no
3	yes
4	yes
5	yes
6	no
7	yes
8	no
9	yes
10	yes
11	yes
12	yes
13	yes
14	no

Class 1: Buyer = “yes” $\Rightarrow p_1 = \frac{9}{14}$

Class 2: Buyer = “no” $\Rightarrow p_2 = \frac{5}{14}$

信息熵（Information Entropy）：

$$\text{Ent}(D) = -\sum_{k=1}^m p_k \log_2 p_k$$

$$\text{Ent}(D) = -\left(\frac{9}{14} \log_2 \frac{9}{14} + \frac{5}{14} \log_2 \frac{5}{14}\right) = 0.9403$$

信息熵（属性 age）

No.	age	Buyer
1	<30	no
2	<30	no
3	30~40	yes
4	>40	yes
5	>40	yes
6	>40	no
7	30~40	yes
8	<30	no
9	<30	yes
10	>40	yes
11	<30	yes
12	30~40	yes
13	30~40	yes
14	>40	no

■ Subset 1: < 30. $p_1 = \frac{2}{5}$ $p_2 = \frac{3}{5}$

$$\text{Ent}(D^1) = -\left(\frac{2}{5}\log_2\frac{2}{5} + \frac{3}{5}\log_2\frac{3}{5}\right) = 0.9710$$

■ Subset 2: 30~40. $p_1 = \frac{4}{4}$ $p_2 = \frac{0}{4}$

$$\text{Ent}(D^2) = -\left(\frac{4}{4}\log_2\frac{4}{4} + \frac{0}{4}\log_2\frac{0}{4}\right) = 0$$

■ Subset 3: > 40. $p_1 = \frac{2}{5}$ $p_2 = \frac{3}{5}$

$$\text{Ent}(D^3) = -\left(\frac{2}{5}\log_2\frac{2}{5} + \frac{3}{5}\log_2\frac{3}{5}\right) = 0.9710$$

信息增益（属性age）

No.	age	Buyer
1	<30	no
2	<30	no
3	30~40	yes
4	>40	yes
5	>40	yes
6	>40	no
7	30~40	yes
8	<30	no
9	<30	yes
10	>40	yes
11	<30	yes
12	30~40	yes
13	30~40	yes
14	>40	no

■ Subset 1: $\text{Ent}(D^1) = 0.9710$

■ Subset 2: $\text{Ent}(D^2) = 0$

■ Subset 3: $\text{Ent}(D^3) = 0.9710$

信息增益(Information Gain):

$$\begin{aligned}\text{Gain}(D, a) &= \text{Ent}(D) - \sum_{v=1}^V \frac{|D^v|}{|D|} \text{Ent}(D^v) \\ \text{Gain}(D, \text{age}) &= 0.9403 - \left(\frac{5}{14} \times 0.971 + \frac{4}{14} \times 0 + \frac{5}{14} \times 0.971 \right) \\ &= 0.2467\end{aligned}$$

信息熵（属性 income）

No.	income	Buyer
1	high	no
2	high	no
3	high	yes
4	medium	yes
5	low	yes
6	low	no
7	low	yes
8	medium	no
9	low	yes
10	medium	yes
11	medium	yes
12	medium	yes
13	high	yes
14	medium	no

■ Subset 1: high. $p_1 = \frac{2}{4}$ $p_2 = \frac{2}{4}$

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

■ Subset 2: medium. $p_1 = \frac{4}{6}$ $p_2 = \frac{2}{6}$

$$\text{Ent}(D^2) = - \left(\frac{4}{6} \log_2 \frac{4}{6} + \frac{2}{6} \log_2 \frac{2}{6} \right) = 0.9183$$

■ Subset 3: low. $p_1 = \frac{3}{4}$ $p_2 = \frac{1}{4}$

$$\text{Ent}(D^3) = - \left(\frac{3}{4} \log_2 \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \log_2 \frac{1}{4} \right) = 0.8113$$

信息增益（属性income）

No.	income	Buyer
1	high	no
2	high	no
3	high	yes
4	medium	yes
5	low	yes
6	low	no
7	low	yes
8	medium	no
9	low	yes
10	medium	yes
11	medium	yes
12	medium	yes
13	high	yes
14	medium	no

■ Subset 1: $\text{Ent}(D^1) = 1$

■ Subset 2: $\text{Ent}(D^2) = 0.9183$

■ Subset 3: $\text{Ent}(D^3) = 0.8113$

信息增益(Information Gain):

$\text{Gain}(D, \text{income})$

$$= 0.9403 - \left(\frac{4}{14} \times 1 + \frac{6}{14} \times 0.9183 + \frac{4}{14} \times 0.8113 \right)$$

$$= 0.0291$$

信息增益（属性student）

No.	student	Buyer
1	no	no
2	no	no
3	no	yes
4	no	yes
5	yes	yes
6	yes	no
7	yes	yes
8	no	no
9	yes	yes
10	yes	yes
11	yes	yes
12	no	yes
13	yes	yes
14	no	no

■ Subset 1: yes. $p_1 = \frac{6}{7}$ $p_2 = \frac{1}{7}$

$$\text{Ent}(D^1) = - \left(\frac{1}{7} \log_2 \frac{1}{7} + \frac{6}{7} \log_2 \frac{6}{7} \right) = 0.5917$$

■ Subset 2: no. $p_1 = \frac{3}{7}$ $p_2 = \frac{4}{7}$

$$\text{Ent}(D^2) = - \left(\frac{3}{7} \log_2 \frac{3}{7} + \frac{4}{7} \log_2 \frac{4}{7} \right) = 0.9852$$

信息增益(Information Gain):

$$\begin{aligned} \text{Gain}(D, \text{student}) &= 0.9403 - \left(\frac{7}{14} \times 0.5917 + \frac{7}{14} \times 0.9852 \right) \\ &= 0.1519 \end{aligned}$$

信息增益（属性credit）

No.	credit	Buyer
1	fair	no
2	excellent	no
3	fair	yes
4	fair	yes
5	fair	yes
6	excellent	no
7	excellent	yes
8	fair	no
9	fair	yes
10	fair	yes
11	excellent	yes
12	excellent	yes
13	fair	yes
14	excellent	no

■ Subset 1: fair. $p_1 = \frac{6}{8}$ $p_2 = \frac{2}{8}$

$$\text{Ent}(D^1) = - \left(\frac{6}{8} \log_2 \frac{6}{8} + \frac{2}{8} \log_2 \frac{2}{8} \right) = 0.8113$$

■ Subset 2: excellent. $p_1 = \frac{3}{6}$ $p_2 = \frac{3}{6}$

$$\text{Ent}(D^2) = - \left(\frac{3}{6} \log_2 \frac{3}{6} + \frac{3}{6} \log_2 \frac{3}{6} \right) = 1$$

信息增益(Information Gain):

$$\begin{aligned} \text{Gain}(D, \text{credit}) &= 0.9403 - \left(\frac{8}{14} \times 0.8113 + \frac{6}{14} \times 1 \right) \\ &= 0.0481 \end{aligned}$$

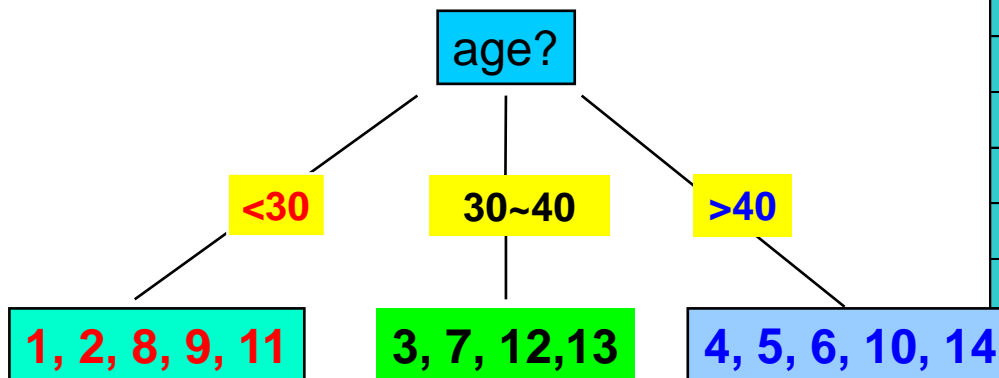
最佳划分属性

$$\text{Gain}(D, \text{age}) = 0.2467$$

$$\text{Gain}(D, \text{income}) = 0.0291$$

$$\text{Gain}(D, \text{student}) = 0.1519$$

$$\text{Gain}(D, \text{credit}) = 0.0481$$



No.	age	Buyer
1	<30	no
2	<30	no
3	30~40	yes
4	>40	yes
5	>40	yes
6	>40	no
7	30~40	yes
8	<30	no
9	<30	yes
10	>40	yes
11	<30	yes
12	30~40	yes
13	30~40	yes
14	>40	no

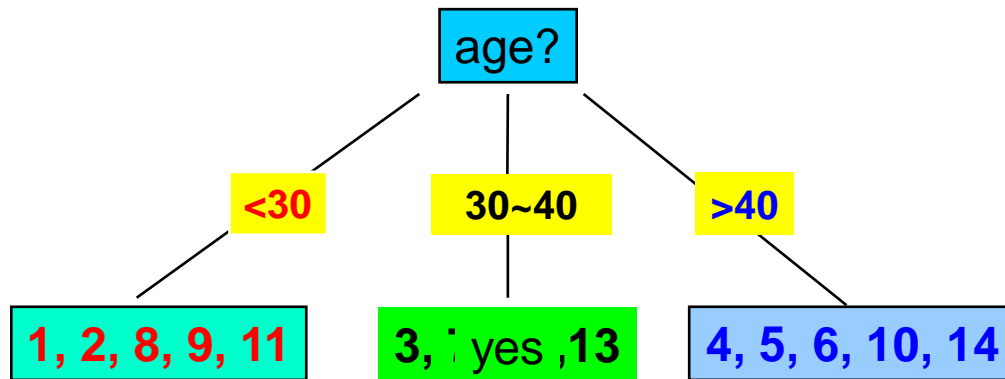
直观理解：纯度

age	Buyer	income	Buyer	student	Buyer	credit	Buyer
<30	no	high	no	no	no	fair	no
<30	no	high	no	no	no	excellent	no
30~40	yes	high	no	no	yes	fair	yes
>40	yes	high	yes	no	yes	fair	yes
>40	yes	medium	yes	yes	yes	excellent	no
>40	no	low	yes	yes	no	excellent	yes
30~40	yes	low	no	yes	yes	fair	yes
<30	no	low	yes	yes	yes	excellent	no
<30	yes	medium	no	no	no	fair	no
>40	yes	low	yes	yes	yes	fair	yes
<30	yes	medium	yes	yes	yes	fair	yes
30~40	yes	medium	yes	no	yes	excellent	yes
30~40	yes	medium	yes	yes	yes	excellent	yes
>40	no	high	yes	no	no	fair	yes
		medium	no			excellent	no



纯度最高

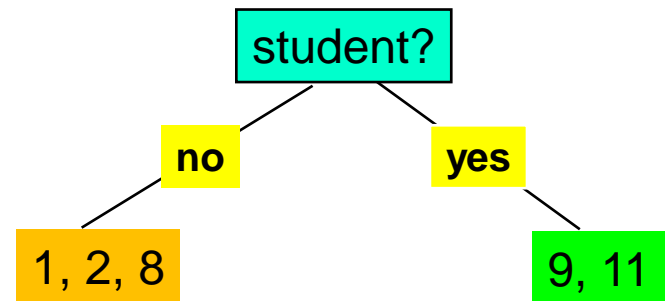
判断递归条件



- <30, 样本仍然有两类, 不符合所有递归返回条件, 仍然可分, 递归继续。
- 30~40, 样本类别均为Yes, 满足递归返回条件1, 设为标签为yes的叶节点。
- >40, 样本仍然有两类, 不符合所有递归返回条件, 仍然可分, 递归继续。

子集 (1, 2, 8, 9, 11)

No.	income	student	credit	Buyer
1	high	no	fair	no
2	high	no	excellent	no
8	medium	no	fair	no
9	low	yes	fair	yes
11	medium	yes	excellent	yes



$$\text{Ent}(D) = 0.9710$$

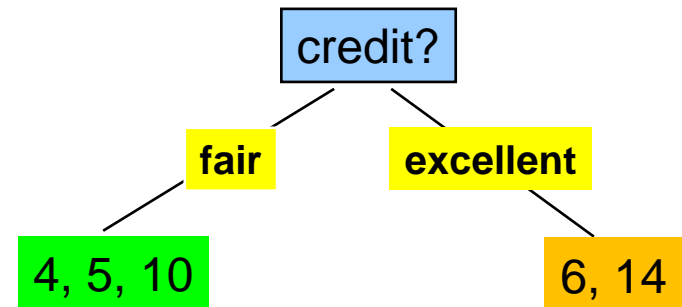
$$\text{Gain}(D, \text{income}) = 0.9710 - 0.4 = 0.5710$$

$$\text{Gain}(D, \text{student}) = 0.9710 - 0 = 0.9710$$

$$\text{Gain}(D, \text{credit}) = 0.9710 - 0.9510 = 0.02$$

子集 (4, 5, 6, 10, 14)

No.	income	student	credit	Buyer
4	medium	no	fair	yes
5	low	yes	fair	yes
6	low	yes	excellent	no
10	medium	yes	fair	yes
14	medium	no	excellent	no

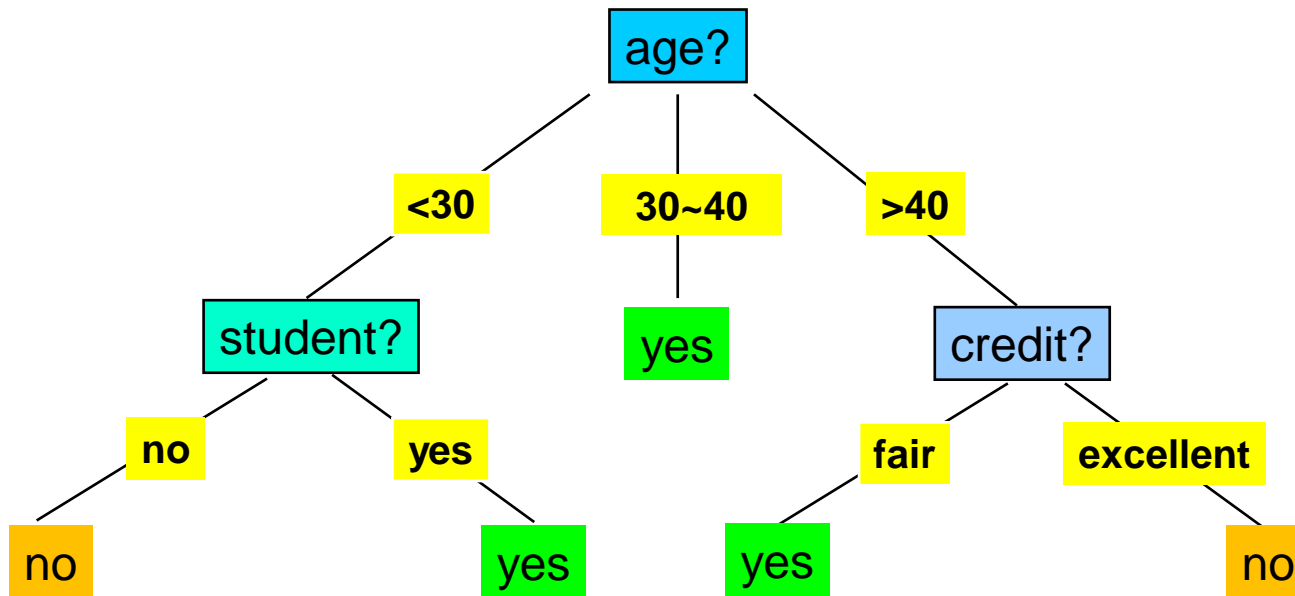


$$\text{Gain}(D, \text{income}) = 0.9710 - 0.9510 = 0.02$$

$$\text{Gain}(D, \text{student}) = 0.9710 - 0.9510 = 0.02$$

$$\text{Gain}(D, \text{credit}) = 0.9710 - 0 = 0.9710$$

信息熵（Information Entropy）



此决策树的最终形式是由数据决定，可能并非完美。比如10岁的小学生，35岁的盲人，50岁的软件学院教授。

例子1

回归开头的例子，动手绘制它的决策树。

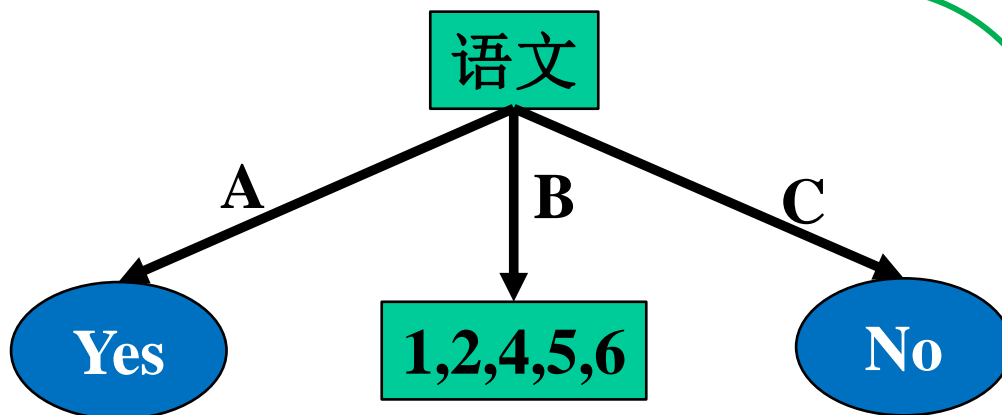
学号	数学	英语	语文	录取
1	A	C	B	Yes
2	A	B	B	Yes
3	A	B	C	No
4	B	B	B	Yes
5	B	C	B	No
6	C	C	B	No
7	C	A	A	Yes

第一层

Gain(数学) = 0.0202

Gain(英语) = 0.1981

Gain(语文) = 0.2917

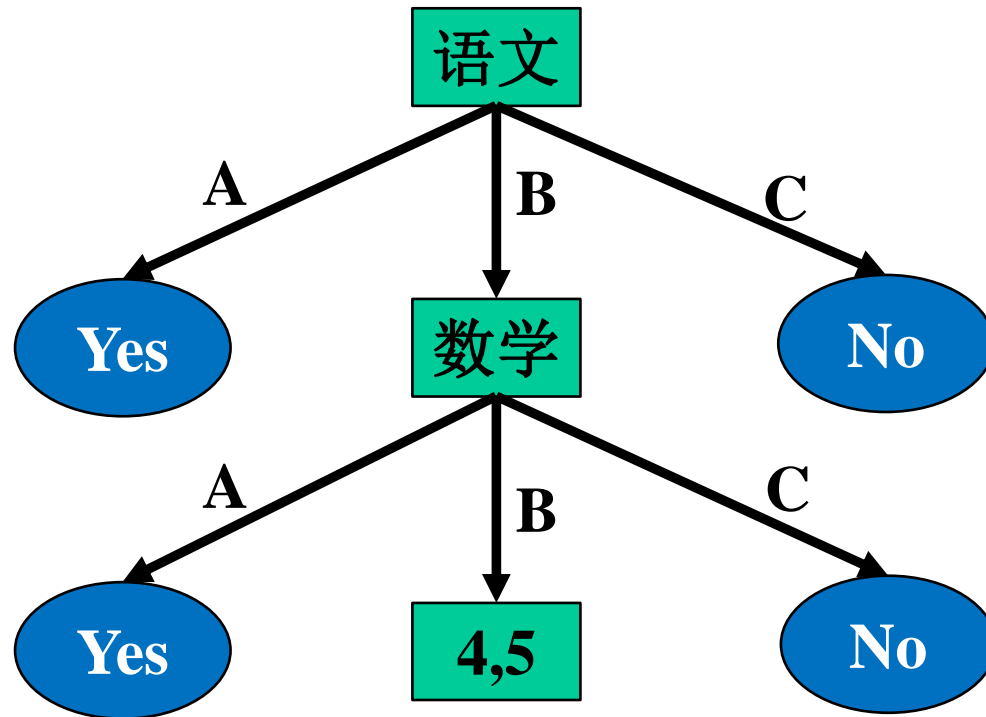


学号	数学	英语	语文	录取
1	A	C	B	Yes
2	A	B	B	Yes
4	B	B	B	Yes
5	B	C	B	No
6	C	C	B	No

第二层

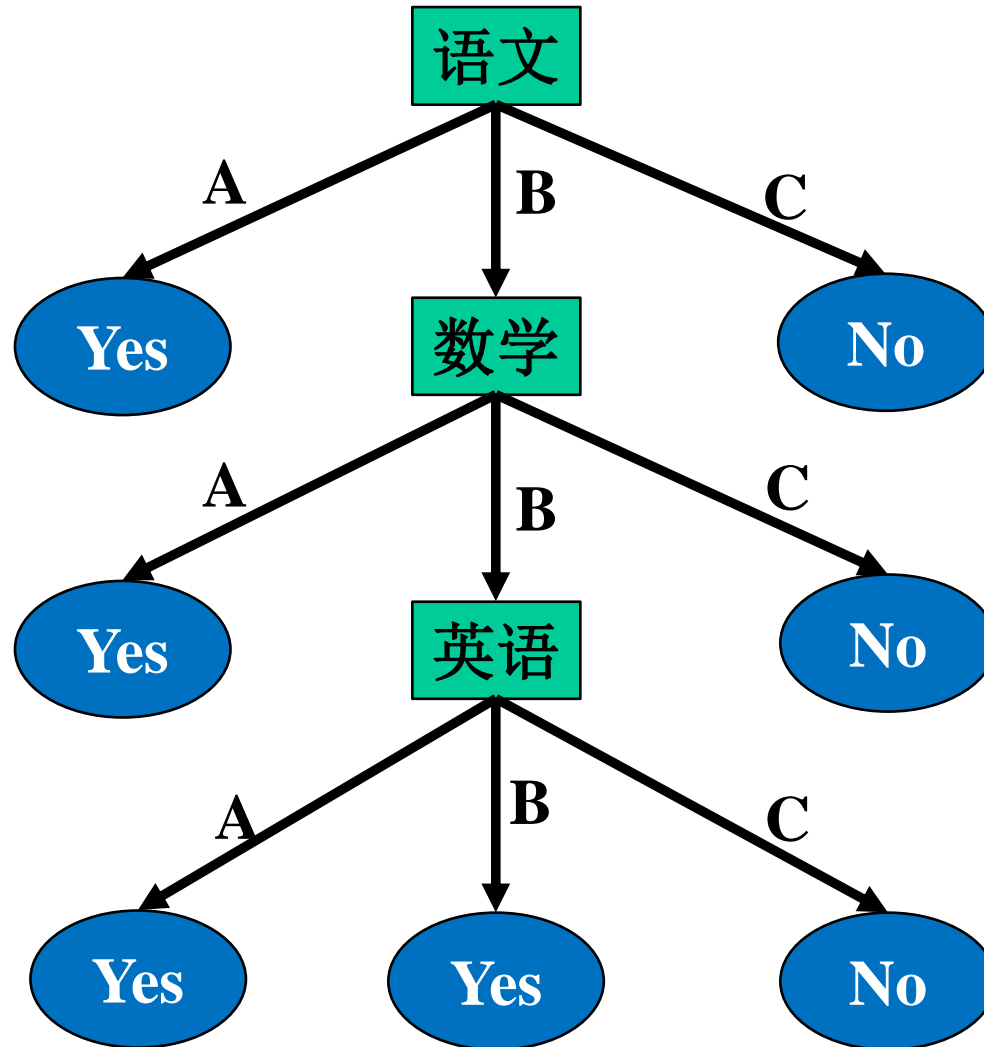
Gain(数学)=0.5710

Gain(英语)=0.4200



学号	数学	英语	语文	录取
4	B	B	B	Yes
5	B	C	B	No

第三层



预测？

学号	数学	英语	语文	录取
8	A	A	A	Yes
9	B	B	C	No
10	C	B	B	No
11	B	C	A	Yes
12	C	C	A	Yes
13	B	B	A	Yes

信息增益 (属性No.?)

No.	Buyer
1	no
2	no
3	yes
4	yes
5	yes
6	no
7	yes
8	no
9	yes
10	yes
11	yes
12	yes
13	yes
14	no

$$\text{Gain}(D, \text{No}) = 0.9403$$

学号	录取
1	Yes
2	Yes
3	No
4	Yes
5	No
6	No
7	Yes

$$\text{Gain}(D, \text{学号}) = 0.9852$$

ID3算法的缺陷

信息增量准则对可取值数目较多的属性有所偏好

。

— 考虑学号为一个属性

① **Gain(数学)=0.0202**

② **Gain(英语)=0.1981**

③ **Gain(语文)=0.2917**

④ **Gain(学号)=0.9852**

— 每个学号因为只有一个样本，纯度都很高！

C4.5算法

判断准则：增益率（Gain Ratio）

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

其中 $IV(a)$ 称为属性 a 的“固有值”（Intrinsic Value）

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

Gain_ratio(数学) = 0.0130

Gain_ratio(英语) = 0.1367

Gain_ratio(语文) = 0.2539

Gain_ratio(学号) = 0.3509

CART算法

CART (Classification And Regression Tree)

判断准则：基尼指数 (Gini Index) :

$$\text{Gini}(D) = \sum_{k=1}^m \sum_{k' \neq k} p_k p_{k'} = 1 - \sum_{k=1}^{|y|} p_k^2$$

基尼值反映了从数据集中随机抽取两个样本，其类别标记不一致的概率。

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

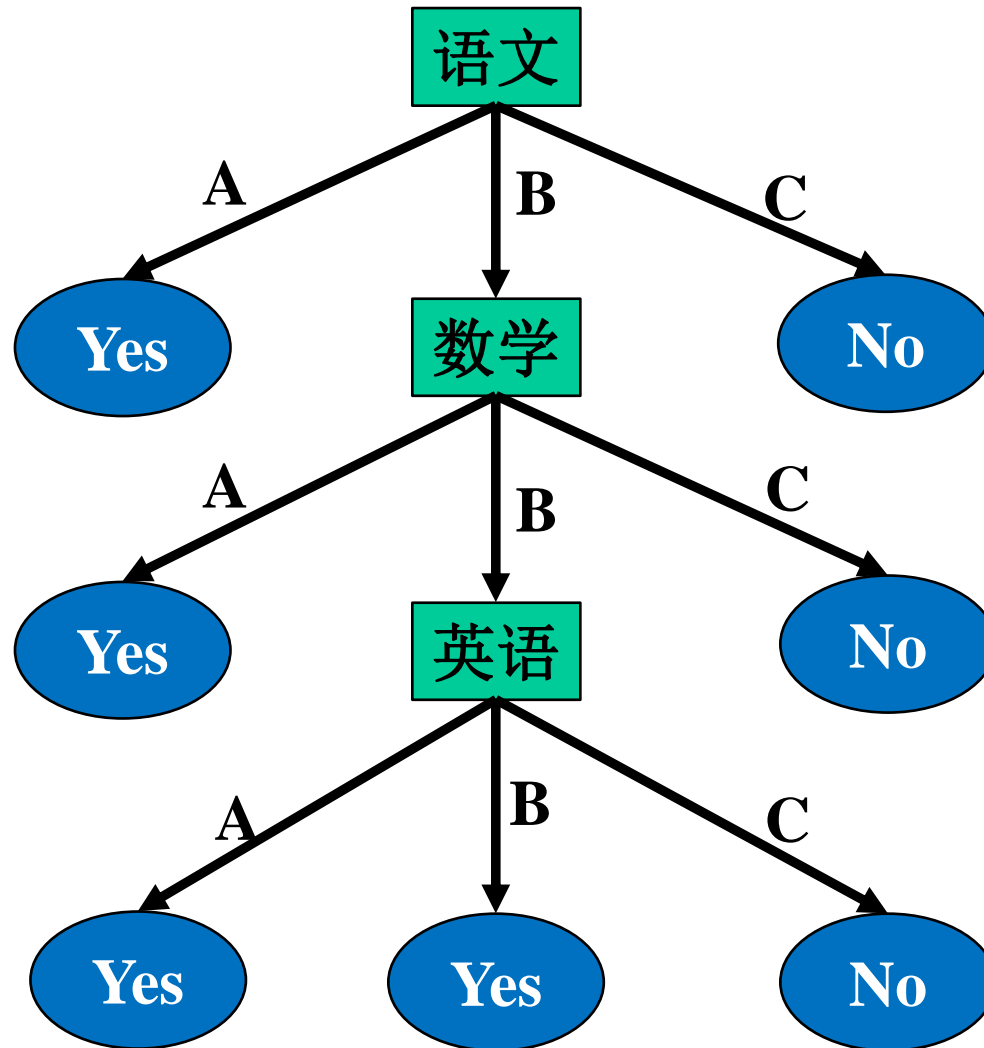
剪枝 (Pruning)

- 剪枝(Pruning)处理——避免训练过拟合。
 - 预剪枝(prepruning)
 - 预剪枝是指在决策树生成过程中，对每个结点在划分前后进行估计，若当前结点划分不能提升决策树泛化性能，则进行裁剪，把结点标记为叶结点。
 - 后剪枝(postpruning)
 - 后剪枝是在生成一颗完整的决策树后，对非叶结点自底向上地对非叶结点进行考察，若将该结点对应的子树被替换为叶节点能提升决策树泛化能力，则进行裁剪。

例子1:数据集

学号	数学	英语	语文	录取
1	A	C	B	Yes
2	A	B	B	Yes
3	A	B	C	No
4	B	B	B	Yes
5	B	C	B	No
6	C	C	B	No
7	C	A	A	Yes

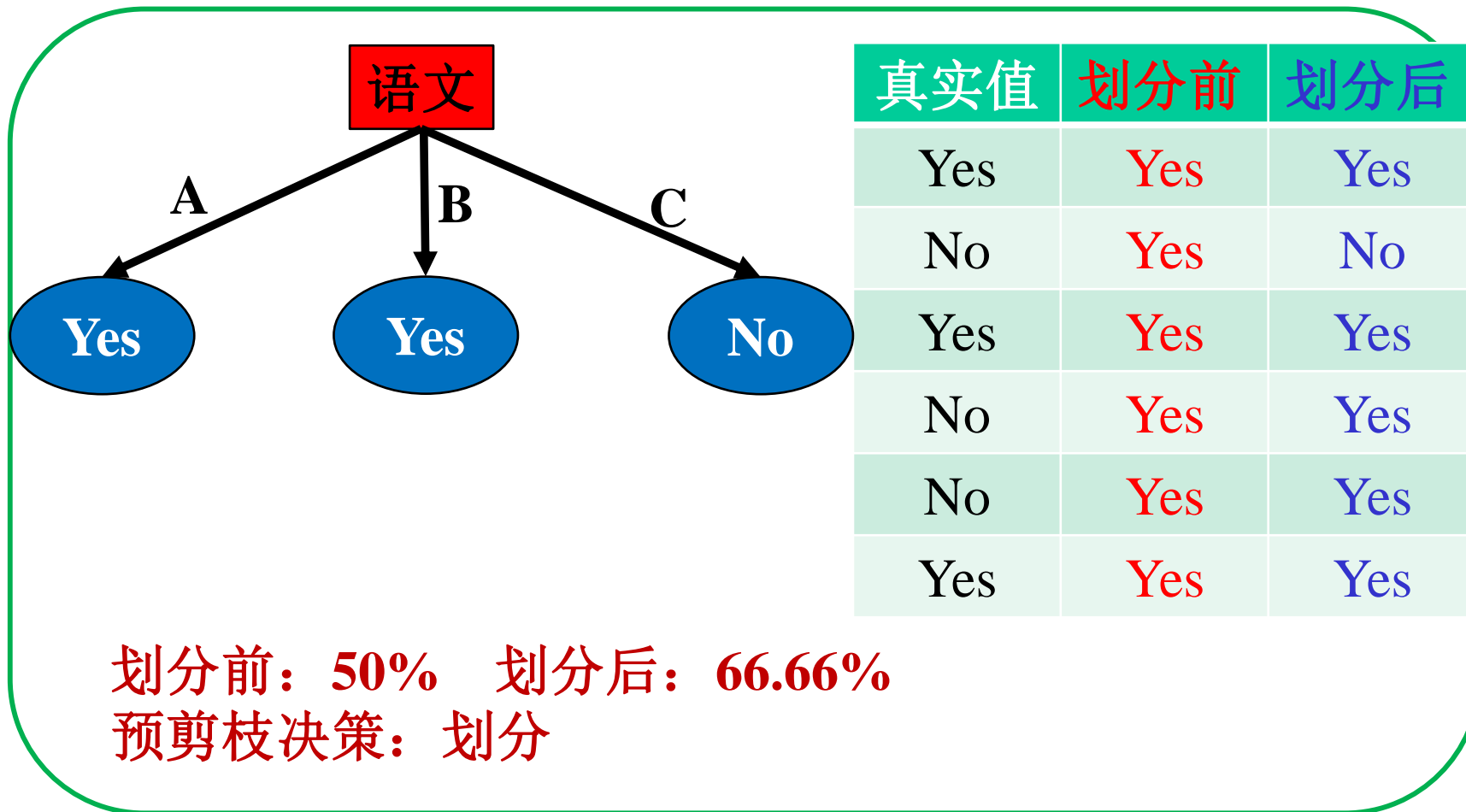
例子1：决策树



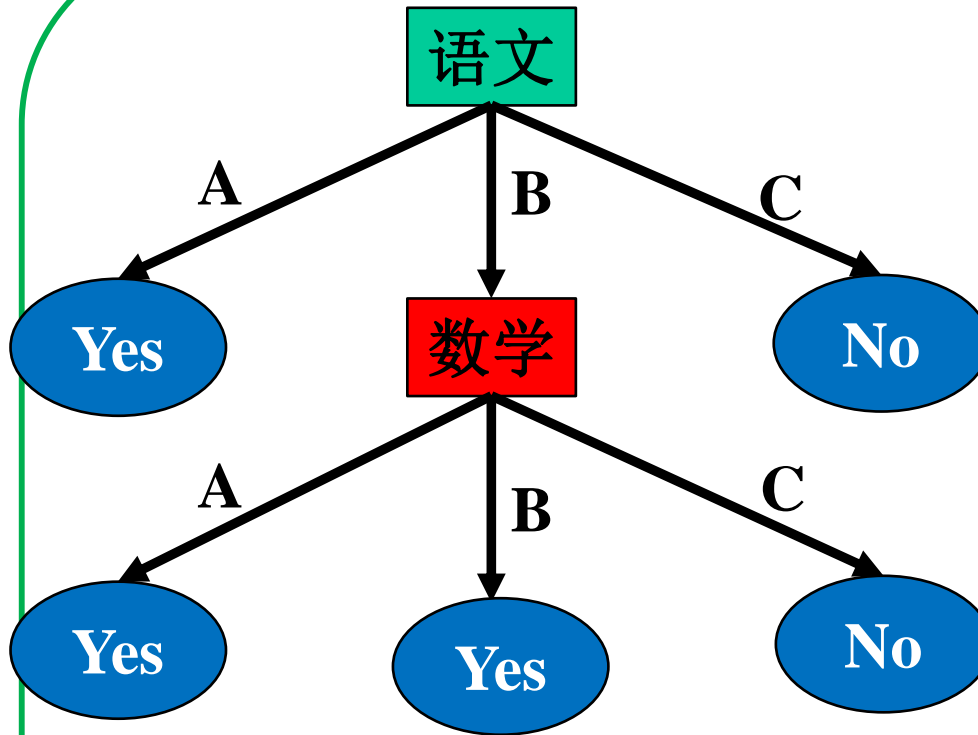
例子1：验证集

学号	数学	英语	语文	录取
8	A	A	A	Yes
9	B	B	C	No
10	C	B	B	Yes
11	B	C	A	No
12	C	C	A	No
13	B	B	A	Yes

预剪枝(Prepruning)



预剪枝 (Prepruning)

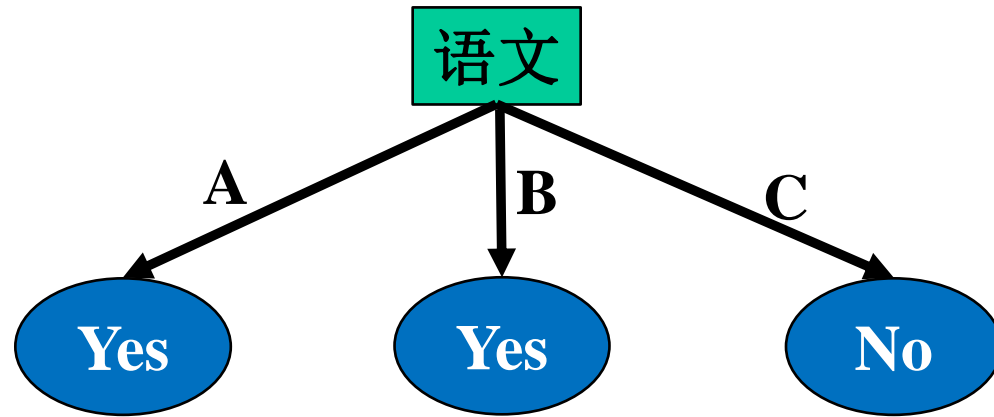


真实值	划分前	划分后
Yes	Yes	Yes
No	No	No
Yes	Yes	No
No	Yes	Yes
No	Yes	Yes
Yes	Yes	Yes

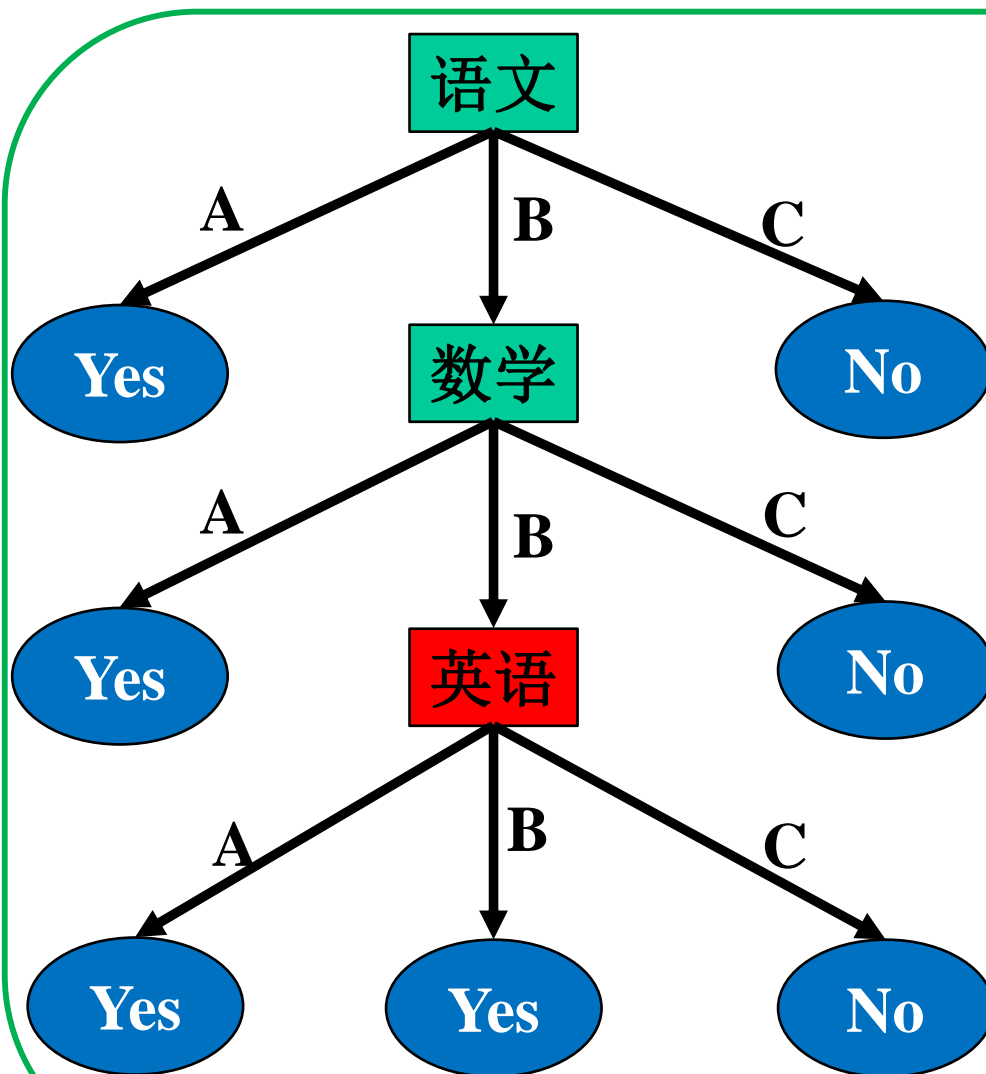
划分前: 66.66% 划分后: 50%
预剪枝决策: 禁止划分

预剪枝结果

决策树桩(decision Stump)



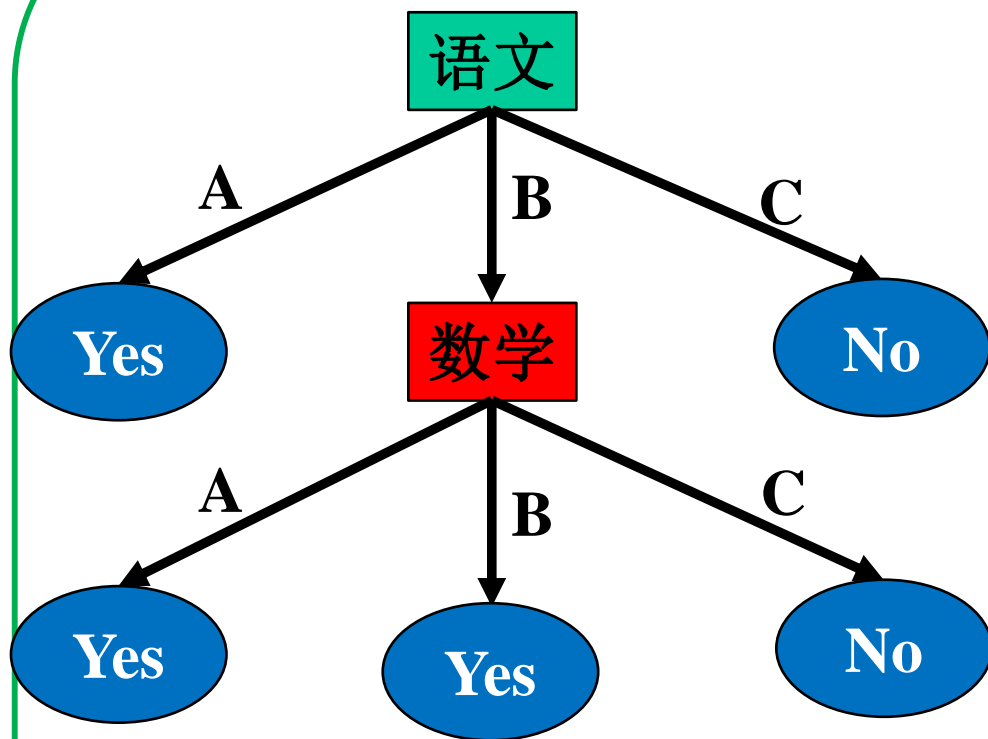
后剪枝 (Postpruning)



真实值	剪枝前	剪枝后
Yes	Yes	Yes
No	No	No
Yes	No	No
No	Yes	Yes
No	Yes	Yes
Yes	Yes	Yes

剪枝前: 50%
剪枝后: 50%
后剪枝决策: 剪枝

后剪枝 (Postpruning)



真实值	剪枝前	剪枝后
Yes	Yes	Yes
No	No	No
Yes	No	Yes
No	Yes	Yes
No	Yes	Yes
Yes	Yes	Yes

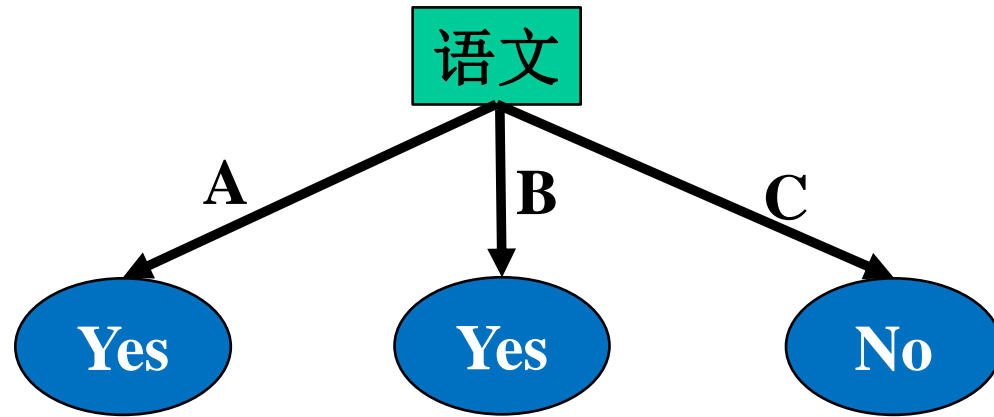
剪枝前: 50%

剪枝后: 66.66 %

后剪枝决策: 剪枝

后剪枝结果

决策树桩(decision Stump)



剪枝策略分析

- 预剪枝:

- 优点: 减少属性划分与测试时间开销。
- 缺点: 可能造成欠拟合。

- 后剪枝:

- 优点: 减少欠拟合风险!
- 缺点: 时间开销大。

连续值处理

动机：利用决策树解决连续属性分类问题。

方法：连续属性离散化（二分法）。

假设连续属性 a 在数据集上出现 n 个不同的取值 $\{a^1, a^2, \dots, a^n\}$ 。

定义候选划分点集合：

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

连续值处理

$$\begin{aligned} & \text{Gain}(D, a) \\ &= \max_{t \in T_a} \text{Ent}(D) - \sum_{\lambda \in \{-, +\}} \frac{|D_t^\lambda|}{|D|} \text{Ent}(D_t^\lambda) \end{aligned}$$

其中 D_t^+ 包含所有在属性a上取值大于t的样本，而 D_t^- 包含所有在属性a上取值小于t的样本。

注意：和离散情况不同，属性a划分完之后还可作为后代结点的划分属性。

决策树总结 I

- 决策树算法的核心是如何确定最佳划分准则。
- 我们学习了三种经典的决策树算法：
ID3算法：信息增益（Gain）
C4.5算法：信息增益率（Gain Ratio）
CART算法：基尼指数（Gini Index）
- 决策树性能的指标：泛化能力

决策树总结 II

- 我们可以对决策树进行剪枝操作，是否剪枝取决于生成的决策树在验证集上的精度
- 预剪枝：在决策树生成过程中进行裁剪
- 后剪枝：在决策树生成之后再行进行裁剪
- 对于连续属性，我们可以用二分法进行离散，再生成决策树。
- 对于缺失值的处理（自学）。