回顾

- 决策树的递归构建算法基本步骤以及退出条件
- 决策树中每个中间节点代表什么？判定最优划分属性的度量有哪些？
- 决策树分类算法的优点？
- 为什么要剪枝？预剪枝和后剪枝分别是什么？

第四章 分类

4.1 模型评估和性能度量

4.2 k最近邻分类

4.3 决策树

4.4 贝叶斯分类

- 4.4.1 贝叶斯定理
- 4.4.2 朴素贝叶斯分类器
- 4.4.3 贝叶斯网*

4.5 组合分类

4.6 案例：信用违约预测

贝叶斯决策论 (Bayesian decision theory)

概率框架下实施决策的基本理论

给定C个类别，令λ_{ij}表示将第j类样本误分到第i类所产生的损失，则基于后验概率将样本x分到第i类的条件风险为：

$$R(c_i|\boldsymbol{x})=\sum_{j=1}^{C}\lambda_{ij}P(c_j|\boldsymbol{x})$$

$$\lambda_{ij}=\begin{cases}0, & if\ j=i\\ 1, & if\ j\neq i\end{cases}$$

$$R(c_i|\boldsymbol{x})=\sum_{j\neq i}P(c_j|\boldsymbol{x})=1-P(c_i|\boldsymbol{x})$$

贝叶斯判定准则(Bayes decision rule)：

$$h^*(x)=\underset{i=\{1,2,\ldots C\}}{\arg\min}\ R(c_i|\boldsymbol{x})$$

$$h^*(x)=\underset{i=\{1,2,\ldots C\}}{\arg\max}\ P(c_i|\boldsymbol{x})$$

h^* 称为贝叶斯最优分类器(Bayes optimal classifier)

判别式vs. 生成式

问题：后验概率$P(c|\boldsymbol{x})$在现实中通常难以直接获得

目标：基于有限的训练样本 尽可能准确地估计出后验概率

两种基本策略：

判别式(discriminative) 模型

思路：直接对$P(c|\boldsymbol{x})$ 建模。

代表：

- 决策树
- SVM

生成式(generative) 模型

思路：先对联合概率分布$P(\boldsymbol{x}, c)$建模，再由贝叶斯定理获得$P(c|\boldsymbol{x})$。

代表：贝叶斯分类器

贝叶斯定理

$$P(c \mid \boldsymbol{x}) = \frac{P(\boldsymbol{x}, c)}{P(\boldsymbol{x})}$$

Thomas Bayes
(1701?-1761)

根据贝叶斯定理，有

$$P(c \mid \boldsymbol{x}) = \frac{\boxed{P(c)}\,\boxed{P(\boldsymbol{x} \mid c)}}{\boxed{P(\boldsymbol{x})}}$$

先验概率（prior），
样本空间中各类样本所占的比例，可通过各类样本出现的频率估计（大数定律）

证据 (evidence)，
与类别无关

样本相对于类标记的类条件概率 (class-conditional probability), 亦称 似然 (likelihood)

主要困难在于估计似然

朴素贝叶斯分类器(naïve Bayes classifier)

$$P(c \mid \boldsymbol{x}) = \frac{P(c)\,\boxed{P(\boldsymbol{x} \mid c)}}{P(\boldsymbol{x})}$$

$P(\boldsymbol{x}|c) = P(x_1, x_2, \ldots x_d|c)$ ➡ 给定类别下d个属性的联合概率

d 为属性数，x_i 为 $\boldsymbol{x}$ 在第 i 个属性上的取值

主要障碍：所有属性上的联合概率难以从有限训练样本估计获得，存在样本稀疏问题,类似“维度灾难”。

同时满足颜色=浅白、敲声=清脆、根蒂=蜷曲、甜度=高的样本很少

基本思路：假定对于给定的类属性之间相互独立--类条件独立？

$$P(c \mid \boldsymbol{x}) = \frac{P(c)\,P(\boldsymbol{x} \mid c)}{P(\boldsymbol{x})} = \frac{P(c)}{P(\boldsymbol{x})}\prod_{i=1}^{d} P(x_i \mid c)$$

$P(\boldsymbol{x})$对所有类别相同，于是根据以下公式来预测类别

$$h_{nb}(\boldsymbol{x}) = \mathop{\arg\max}_{c \in \mathcal{Y}}\ P(c)\prod_{i=1}^{d} P(x_i \mid c)$$

朴素贝叶斯分类器

- 估计 $P(c)=\frac{|D_c|}{|D|}$，这里D_c代表属于第c个类的样本集
- 对每个属性i估计$P(x_i|c)$：
  - 对离散属性，令D_{c,x_i}表示 D_c 中在第i个属性上取值为x_i 的样本集合，则

$$P(x_i|c)=\frac{|D_{c,x_i}|}{|D_c|}$$

  - 对连续属性，用概率密度函数$p(x_i|c)\sim\mathcal{N}(\mu_{c,i},\sigma_{c,i}^2)$，基于训练集估计参数，即$\mu_{c,i}$和$\sigma_{c,i}^2$ 。

$$p(x_i \mid c)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{c,i}}\exp\left(-\frac{(x_i-\mu_{c,i})^2}{2\sigma_{c,i}^2}\right)$$

根据极大似然估计：

$$\hat{\mu}_{c,i}=\frac{1}{|D_{c,x_i}|}\sum_{x_i\in D_{c,x_i}} x_i\,,$$

$$\hat{\sigma}_{c,i}^2=\frac{1}{|D_{c,x_i}|}\sum_{x_i\in D_{c,x_i}}(x_i-\hat{\mu}_{c,i})(x_i-\hat{\mu}_{c,i})^T$$ 。

- 得到类别

$$h_{nb}(\boldsymbol{x})=\underset{c\in\mathcal{Y}}{\arg\max}\ P(c)\prod_{i=1}^{d}P(x_i \mid c)$$

极大似然估计：先假设数据集服从某种概率分布，再基于训练样例对参数进行估计。
估计结果的准确性严重依赖于所假设的概率分布形式是否符合潜在的真实分布。

例子：朴素贝叶斯分类

编号	色泽	纹理	密度	标签
1	青绿	清晰	0.5	是
2	浅白	清晰	0.3	是
3	青绿	模糊	0.6	否
4	青绿	清晰	0.4	否
5	浅白	模糊	0.4	是
6	浅白	清晰	0.5	是
7	青绿	模糊	0.6	否
8	浅白	清晰	0.3	否

测试样本：

色泽	纹理	密度	标签
青绿	清晰	0.6	?

对每个类别，计算以下两步

第一步：先估计 $P(c)$ 以及 $P(x_i|c)$

第二步：计算$P(\boldsymbol{x},c)=P(c)\prod_i P(x_i|c)$

最后：选择$P(\boldsymbol{x},c)$值最大的类

对类别“是”计算前两步

$$P(c=\text{是})=\frac{4}{8}$$

$$P(\text{色泽}=\text{青绿}|c=\text{是})=\frac{1}{4}$$

$$P(\text{纹理}=\text{清晰}|c=\text{是})=\frac{3}{4}$$

好瓜密度：μ=0.425， σ =0.0957 (无偏)

$$p(0.6|c=\text{是})=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\cdot 0.0957}\exp\left(-\frac{(0.6-0.425)^2}{2\cdot 0.0957^2}\right)=0.7832$$

$$P(c=\text{是})\times P(\text{青绿}|\text{是})\times P(\text{清晰}|\text{是})\times p(0.6|\text{是})=0.0734$$

例子：朴素贝叶斯分类

编号	色泽	纹理	密度	标签
1	青绿	清晰	0.5	是
2	浅白	清晰	0.3	是
3	青绿	模糊	0.6	否
4	青绿	清晰	0.4	否
5	浅白	模糊	0.4	是
6	浅白	清晰	0.5	是
7	青绿	模糊	0.6	否
8	浅白	清晰	0.3	否

色泽	纹理	密度	标签
青绿	清晰	0.6	?

对每个类别，计算以下两步
第一步：先估计 $P(c)$ 以及 $P(x_i|c)$
第二步：计算$P(c)\prod_i P(x_i|c)$
最后：选择$P(c)\prod_i P(x_i|c)$值最大的类

对类别“否”计算前两步

$$P(c=否)=\frac{4}{8}$$

$$P\,(色泽=青绿|c=否)=\frac{3}{4}$$

$$P\,(纹理=清晰|c=否)=\frac{2}{4}$$

坏瓜密度：μ=0.475， σ =0.15 （无偏）

$$p(0.6|c=否)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\cdot 0.15}\exp\left(-\frac{(0.6-0.475)^2}{2\cdot 0.15^2}\right)=1.8794$$

按第二步得到 $P(c=否)\times P(青绿|否)\times P(清晰|否)\times p(0.6|否)=0.3524$

最后：0.3524>0.0734，所以把该样本预测为坏瓜

拉普拉斯修正(Laplacian correction)

若某个属性值在训练集中没有与某个类同时出现过，则直接计算会出现问题，因为概率连乘将“抹去”其他属性提供的信息

例如，若训练集中未出现“敲声=清脆”的好瓜，则模型在遇到“敲声=清脆”的测试样本时……

对$P(c)$ 以及 $P(x_i|c)$分别进行以下修正：

$$\hat{P}(c)=\frac{|D_c|+1}{|D|+C}, \quad \hat{P}(x_i|c)=\frac{\left|D_{c,x_i}\right|+1}{|D|+|\chi_i|},$$

分子加1，分母对应修改使得：$\sum_{c=1}^{C}\hat{P}(c)=1$，$\sum_{x_i\in\chi_i}\hat{P}(x_i|c)$ =1。

其中C表示训练集D 中可能的类别数，χ_i 表示第i 个属性可能的取值集合。

当训练样本数目$|D|$足够大时，修正带来的误差可以忽略。

拉普拉斯修正

编号	色泽	纹理	密度	标签
1	青绿	清晰	0.5	是
2	浅白	清晰	0.3	是
3	青绿	模糊	0.6	否
4	青绿	清晰	0.4	否
5	浅白	模糊	0.4	是
6	浅白	清晰	0.5	是
7	青绿	模糊	0.6	否
8	浅白	清晰	0.3	否

测试样本：

色泽	纹理	密度	标签
青绿	稍糊	0.6	?

先估计$P(c)$ 以及 $P(x_i|c)$,

再计算$P(c|x) = P(c)\prod_i P(x_i|c)$

$$P(c = \text{是}) = \frac{4+1}{8+2}$$

类别个数

$$P(\text{纹理} = \text{稍糊}|c = \text{是}) = \frac{0+1}{4+3}$$

纹理取值个数

朴素贝叶斯分类器的使用

- 若对预测速度要求高，且数据集固定

  → 预计算所有概率估值，使用时“查表”

  （先建模，后预测）

- 若数据不断增加

  → 基于现有估值，对新样本涉及的概率估值进行修正

  (增量学习, incremental learning)

- 若数据更替频繁

  → 不进行任何训练，收到预测请求时再估值

  (惰性学习, lazy learning)

前面例子用的是哪种方式？

总结

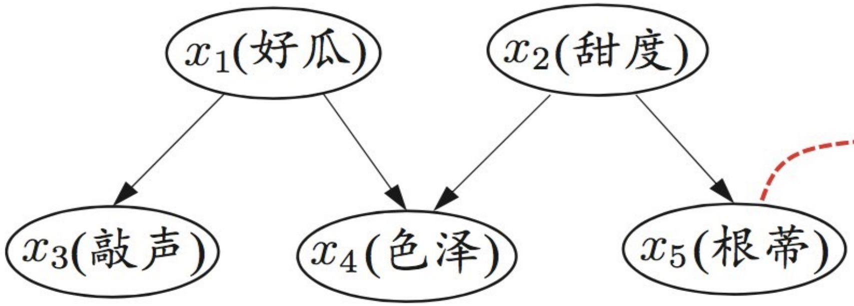
- 分类器的训练可以被认为是在估计后验概率$P(c|\boldsymbol{x})$；
- 贝叶斯分类器利用贝叶斯公式先估计联合概率，而对联合概率估计的关键是求出似然$P(\boldsymbol{x}|c)$；
- 朴素贝叶斯假设：对给定类别属性之间独立，即$P(\boldsymbol{x}|c) = \prod_{i=1}^{d} P(x_i|c)$。

贝叶斯网*（Bayesian network; Bayes network）

亦称“信念网”(brief network)

有向无环图

(Directed Acyclic Graph)



条件概率表

(Conditional Probability Table)

		根蒂	
		硬挺	蜷缩
甜度	高	0.1	0.9
	低	0.7	0.3

贝叶斯网 $B = \langle G, \Theta \rangle$

结构　参数

1985年J. Pearl 命名为贝叶斯网，为了强调：

- 输入信息的主观本质
- 对贝叶斯条件的依赖性
- 因果与证据推理的区别

Judea Pearl

2011 图灵奖

概率图模型(Probabilistic graphical model)

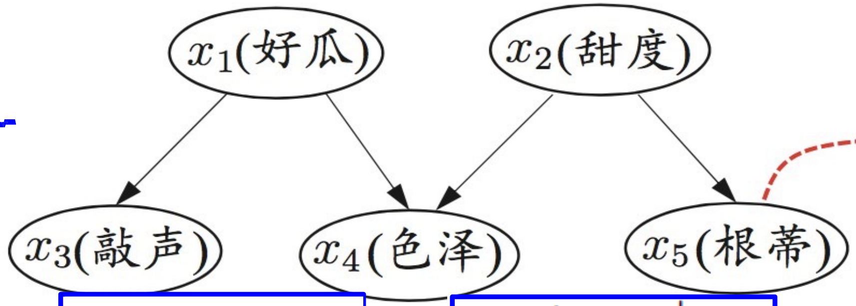
- 有向图模型 → 贝叶斯网
- 无向图模型 → 马尔可夫网

贝叶斯网*（Bayesian network; Bayes network）

亦称"信念网"(brief network)

有向无环图

(Directed Acyclic Graph)



$\boxed{x_3 \perp x_4 \mid x_1}$ $\boxed{x_4 \perp x_5 \mid x_2}$

条件概率表

(Conditional Probability Table)

		根蒂	
		硬挺	蜷缩
甜度	高	0.1	0.9
	低	0.7	0.3

给定父结点集，贝叶斯网假设每个属性与其非后裔属性独立

$$P_B(x_1, x_2, \cdots, x_d) = \prod_{i=1}^{d} P_B(x_i \mid \boxed{\pi_i}) = \prod_{i=1}^{d} \boxed{\theta_{x_i|\pi_i}}$$

父结点集

$$\boxed{P(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = P(x_1)P(x_2)P(x_3 \mid x_1)P(x_4 \mid x_1, x_2)P(x_5 \mid x_2)}$$