CART分类回归树

河北师范大学软件学院
Software College of Hebei Normal University

1. CART算法简介
2. CART解决分类问题
3. CART分类预测
4. CART建立回归树与预测
5. CART递归调整与封装

1.1 CART算法

CART(Classification and Regression Tree)
是L.Breiman(布雷曼)等人在1984年提出的决策树算法

能解决的**分类和回归问题**

分类问题：Gini系数

回归问题：最小均方误差、最小绝对误差(设定阈值)

CART可以处理**连续和离散的特征**

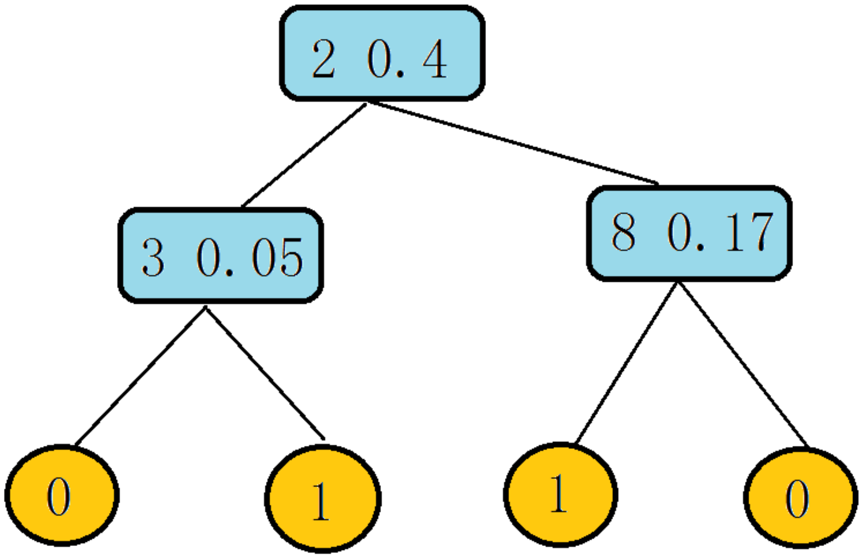
每次决策采用二分方法将样本集分为两个子集

因此所得的树结构是二叉树

验证剪枝：用独立的验证数据集对训练集生长的树进行剪枝

1.2 CART树结构

二叉树(连续性变量)



二叉树：每个决策点只有两个分支。

每个决策点是**特征**与**分割值**，叶子节点表示一种分类或者一个预测值。

也就是每个决策点不仅要**确定选取哪个特征**，与此同时还要**确定“二分值”**

2.1 基尼系数

1984年，Breiman博士提出基尼系数，用来在决策树的生成中度量**样本的不确定性程度**。

假设样本集有m个分类，样本点属于第i类的概率 p_i，定义该概率分布的基尼系数为：

$$\text{Gini}(p)=\sum_{i=1}^{m}p_i(1-p_i)=1-\sum_{i=1}^{m}p_i^{\;2}$$

对于给定的样本集D（标签有m种不同情况），设共有N个样本，且属于第i种标签的样本有 n_i 个，则该样本集的基尼系数为：

$$\text{Gini}(D)=\sum_{i=1}^{m}\frac{n_i}{N}\left(1-\frac{n_i}{N}\right)=1-\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{n_i}{N}\right)^2$$

2. 1 基尼系数:(以二分类为例)

假设: $x \in \{\alpha_1, \alpha_2\}$

两种情况对应的概率为: $p = \{p_1, p_2\}$

$p_1=0.5, p_2=0.5$

$$Gini = (p_1(1-p_1) + p_2(1-p_2))$$
$$= (0.5\times0.5 + 0.5\times0.5) = 0.5$$

$p_1=0.2, p_2=0.8$

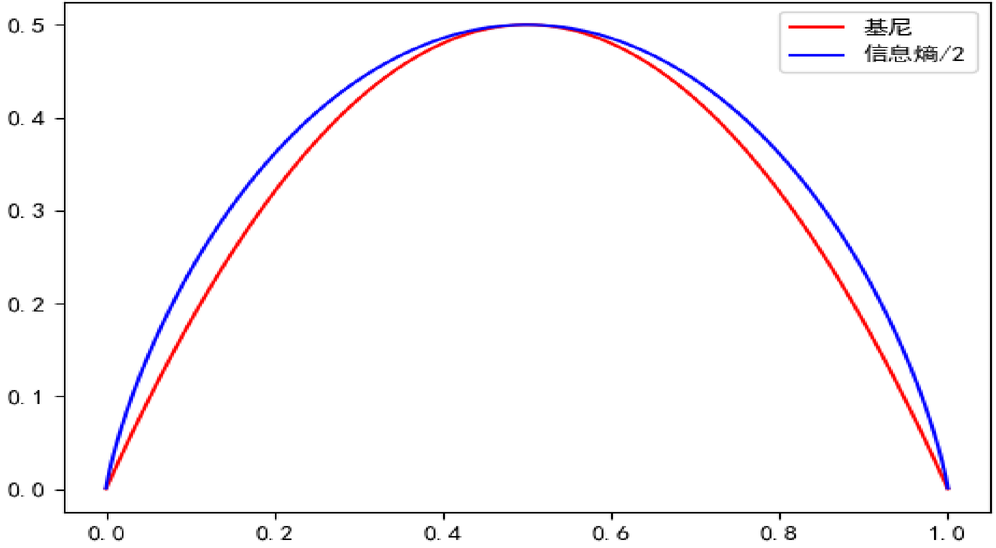
$$Gini = 1-(p_1{}^2 + p_2{}^2)$$
$$= 1-(0.2^2 + 0.8^2) = 0.32$$

$p_1=0, p_2=1$

$$Gini = (p_1(1-p_1) + p_2(1-p_2))$$
$$= (0\times1 + 1\times0) = 0$$

2.2 基尼系数与熵的关系

以二分类为例，可以发现当其中某一类的概率越大时，基尼系数越小，也就是，分布**数据分布越不纯净，基尼系数越大**；当数据符合均匀分布时，基尼系数取到最大值



利用基尼系数能够将数据集划分为**较为均衡的两部分**

2.3 样本集的基尼系数

$$D=\left[\begin{array}{ccc|c} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 3 \end{array}\right]$$

有三个标签：分别是1，2，3
出现次数分别是　　1，2，1

由于此时并不知道总体的真实分布，只能将样本中标签的频率作为真实概率的估计。即：

$$p(y=1)=\frac{1}{4}, p(y=2)=\frac{1}{2}, p(y=3)=\frac{1}{4}$$

$$gini(D)=1-\left(\left(\frac{1}{4}\right)^2+\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(\frac{1}{4}\right)^2\right)=0.625$$

2.4 条件基尼系数

连续型特征的条件基尼系数

按特征 x^i，二分标准 v 划分后得到的条件基尼指数

$$\mathrm{Gini}(D|(x^i,v)) = \frac{|D|x^i<v|}{|D|}Gini(D|x^i<v)+\frac{|D|x^i\geq v|}{|D|}Gini(D|x^i\geq v)$$

按**第一个**特征，二分标准 **2** 划分后得到的条件基尼指数

$$\mathrm{D}=\left[\begin{array}{ccc|c} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 3 \end{array}\right]$$

$$(\mathrm{D}|\mathrm{x}^1<2)=\left[\begin{array}{ccc|c} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 2 \end{array}\right]$$

$$(\mathrm{D}|\mathrm{x}^1\geq 2)=\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 2 & 3 \end{array}\right]$$

2.4 条件基尼系数

$$Gini(D|(x^1,2))=(\frac{3}{4}\times \mathrm{Gini}(D|x^1<2)+\frac{1}{4}\times Gini(D\,|\,x^1\geq 2))$$

$$=0.75\times(\frac{1}{3}\times(1-\frac{1}{3})+\frac{2}{3}\times(1-\frac{2}{3}))+0.25\times(0)$$

$$=0.333$$

CART选择决策点选择时，摒弃了增益的方法，直接比较条件基尼系数，

条件基尼系数**越小的(特征，二分标准)，**不纯度降低越多

优点：减少变量

条件基尼系数的计算可以直接传入左右子数据集

2.5 离散特征的条件基尼系数

按特征 x^i(离散特征), 二分标准 α划分后得到的条件基尼系数

$$\text{Gini}(D|(x^i,\alpha)) = \frac{|D|x^i=\alpha|}{|D|}Gini(D|x^i=\alpha) + \frac{|D|x^i\neq\alpha|}{|D|}Gini(D|x^i\neq\alpha)$$

可以将离散特征的二分方法表示成和连续特征相同的形式:
对离散特征进行one-hot编码

假设样本集第 i 个特征 x^i 有三种取值 $\{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3\}$

用三个特征代替原特征
分别为 $i\_\alpha_1, i\_\alpha_2, i\_\alpha_3$

i	i_α_1	i_α_2	i_α_3
x_2	0	1	0
x_3	0	0	1

2.6 选择最优特征与二分标准

三个函数：创建CART.py

函数：split_data()，condition_gini()， get_split()

利用(特征，二分标准)对样本集进行分割

计算条件基尼系数

获得最优的特征与最优二分标准

决策点过程：

1. 对每个特征，以及可能的二分标准，将数据集分为左右两个子数据集
2. 计算分割的左右子数据集的条件基尼系数，在所有分割情况中，基尼系数最小的特征与二分标准即为最优切分点

2.6 按特征索引和二分标准分割

split_data函数
输入：样本集data , 特征索引index , 二分标准value
输出：左子样本集，右子样本集
注意：与ID3不同，第index个特征，不用删除

对样本集data中的每个样本sample
如果sample中的第index个特征的值小于value：
    将sample放到左子集
否则：
    将sample放到右子集

2.6 基尼系数

1.求基尼系数　2.求条件基尼系数　3.合并

一：样本总体的基尼系数gini：

输入：样本集data

输出：giniScore

找到标签的所有取值情况

对于每种标签，计算在data中出现的频数以及频率

将频率作为该标签的估计概率

利用基尼系数公式，求得giniScore

2.6 基尼系数

```
def gini(data):
    lenData=len(data)
    label_list= [row[-1] for row in data]
    labelSpace=set(label_list)
    giniScore=0.0
    for label in labelSpace:
        pi=label_list.count(label) /lenData
        giniScore+=pi*(1-pi)
    return giniScore
```

2.6 基尼系数函数设计

计算条件基尼系数condition_gini
输入：左子集left，右子集right
输出：conGini
分别对左子集和右子集

计算样本集的giniScore
计算该样本集与总样本集比例
通过累加，计算条件基尼系数conGini

输入的部分可将左右子集放入元组groups中即groups=(left,right)，累加的过程变为循环groups中每个元素

2.6 基尼系数函数设计

```
def condition_gini(groups):
        conGini=0.0
        totalLen=len(groups[0])+len(groups[1])
        for data in groups:
                giniScore=gini(data)
                conGini+=len(data)/totalLen*giniScore
        return conGini
```

2.6 最优特征与最优二分标准

get_split函数

输入：样本集data

输出：index , value , 子样本集groups=[left , right]

#具有两层循环(准备特征个数，b_gini=1)

外层是对**特征索引**进行循环

内层是对**该特征的二分标准**进行循环

对样本集进行划分(调用split_data函数)

并求出基尼系数(调用condition_gini函数)

通过比较得到最优情况(giniScore越小越好)

#将特征空间的每个值作为二分标准

2.6 最优特征与最优二分标准

```
def get_split(data):
        label_list=list(set([d[-1] for d in data]))
        b_gini=999
        b_index, b_value, b_groups = -1, -1, []
        for index in range(len(data[0])-1):
                fea_value=list(set([d[index] for d in data]))
                for value in fea_value:
                        groups=split(data,index,value)
                        gini=condition_gini(groups)
                        if gini<b_gini:
                                b_gini=gini
                                b_index=index; b_value=value;
                                b_groups=groups
        return b_index,b_value,b_groups
```

2.7 例子

```
dataSet=[[1,1,'yes'],
         [1,1,'yes'],
         [1,0,'no'],
         [0,1,'no'],
         [0,1,'no']]
```

求得样本集的最优特征索引和最优“二分标准”

2.8 基尼系数函数的合并

由于摒弃了增益的方式，不需要计算原样本集的基尼系数，只需要计算条件基尼系数，直接求条件基尼系数

输入：元组groups　　输出：conGini

对groups中每个元素data

　　找到data中标签的所有取值情况

　　对于每种标签，

　　　　计算在data中出现的频数以及频率

　　　　用频率与基尼系数公式计算data的giniScore

　　　　计算该样本集与总样本集比例

　　　　通过累加，计算条件基尼系数conGini

2.6 基尼系数

```
gini(groups):
        total=len(groups[0])+len(groups[1])
        gini_score =0
        for data in groups:
                dataLen=len(data)
                labelSpace=set([row[-1] for row in data])
                for value in labelSpace:
                        pi=[d[-1] for d in data].count(value)
                        pi=pi/dataLen
                        gini+=dataLen/total*pi*(1-pi)
        return gini_score
```