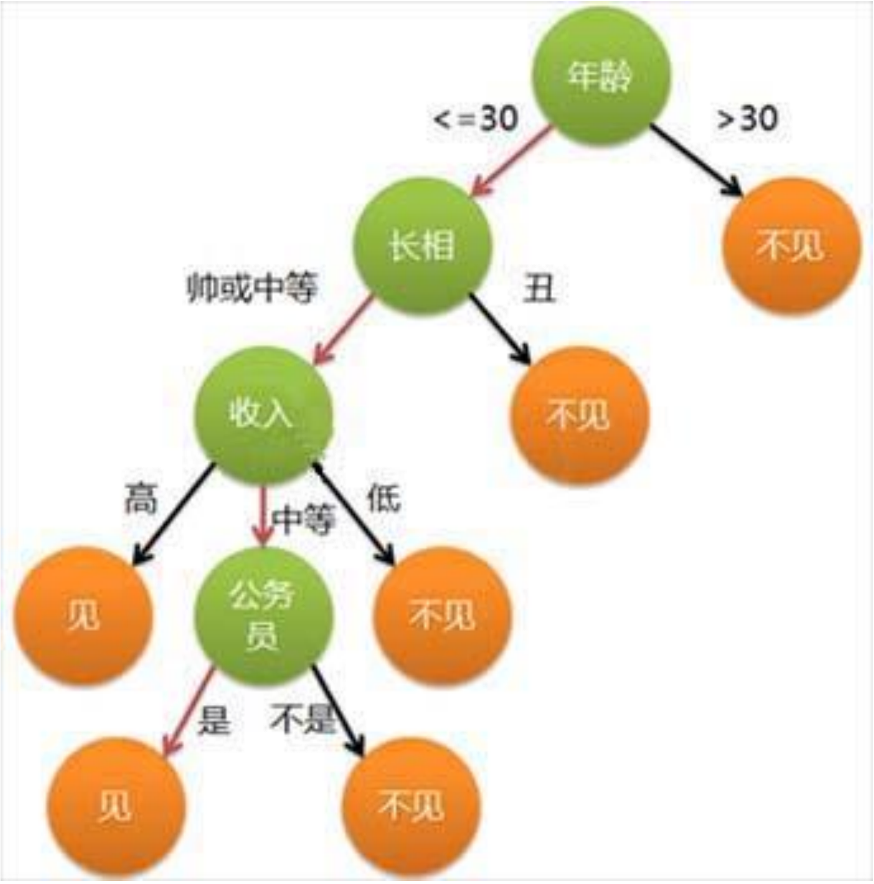
决策树 decision tree

- 什么是决策树
- 输入：学习集
- 输出：分类规则（决策树）

  输出没有公式或判别函数，只是树

决策树善于处理离散型数据，最好提前把连续性变量变为离散型变量



决策树算法概述

- 70年代后期至80年代初期，Quinlan开发了ID3算法（迭代的二分器）
- Quinlan改进了ID3算法，称为C4.5算法
- 1984年，多位统计学家在著名的《Classification and regression tree》书里提出了CART算法
- ID3和CART几乎同期出现，引起了研究决策树算法的旋风，至今已经有多种算法被提出

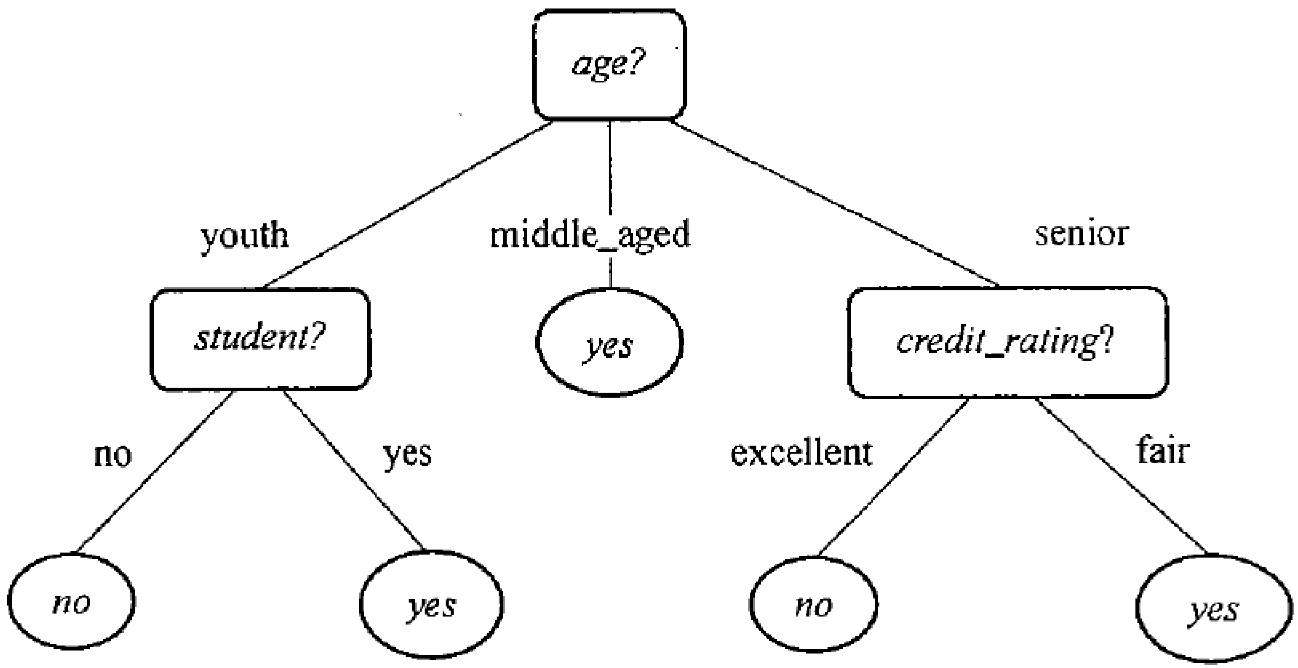
决策树涉及到剪枝问题，而随机森林没有这个问题

例子：训练数据

表 8.1　AllElectronics 顾客数据库标记类的训练元组

RID	*age*	*income*	*student*	*credit_rating*	*Class: buys_computer*
1	youth	high	no	fair	no
2	youth	high	no	excellent	no
3	middle_aged	high	no	fair	yes
4	senior	medium	no	fair	yes
5	senior	low	yes	fair	yes
6	senior	low	yes	excellent	no
7	middle_aged	low	yes	excellent	yes
8	youth	medium	no	fair	no
9	youth	low	yes	fair	yes
10	senior	medium	yes	fair	yes
11	youth	medium	yes	excellent	yes
12	middle_aged	medium	no	excellent	yes
13	middle_aged	high	yes	fair	yes
14	senior	medium	no	excellent	no

例子：期待输出的结果


age?
youth
middle_aged
senior
student?
yes
credit_rating?
no
yes
excellent
fair
no
yes
no
yes

算法的核心问题

- 该按什么样的次序来选择变量（属性）？ 依据为:计算信息增益
- 最佳分离点（连续的情形）在哪儿？

先将D中元素按照特征属性排序，则每两个相邻元素的中间点可以看做潜在分裂点，从第一个潜在分裂点开始，分裂D并计算两个集合的期望信息，具有最小期望信息的点称为这个属性的最佳分裂点，其信息期望作为此属性的信息期望。

ID3算法

- 信息增益计算

$$Info(D) = -\sum_{i=1}^{m} p_i \log_2(p_i)$$

$$Info_A(D) = \sum_{j=1}^{v} \frac{|D_j|}{|D|} \times Info(D_j)$$

$$Gain(A) = Info(D) - Info_A(D)$$

某一变量的信息增益 = 总体样本的期望信息 - 按照某一变量分类下的期望信息

信息增益也可以理解为熵，即表示一类东西的有序程度。越有序，熵越高

例子：信息增益计算

总体样本的期望信息

$$Info(D) = -\frac{9}{14}\log_2\frac{9}{14} - \frac{5}{14}\log_2\frac{5}{14} = 0.940 \text{ 位}$$

按照age分类下的期望信息

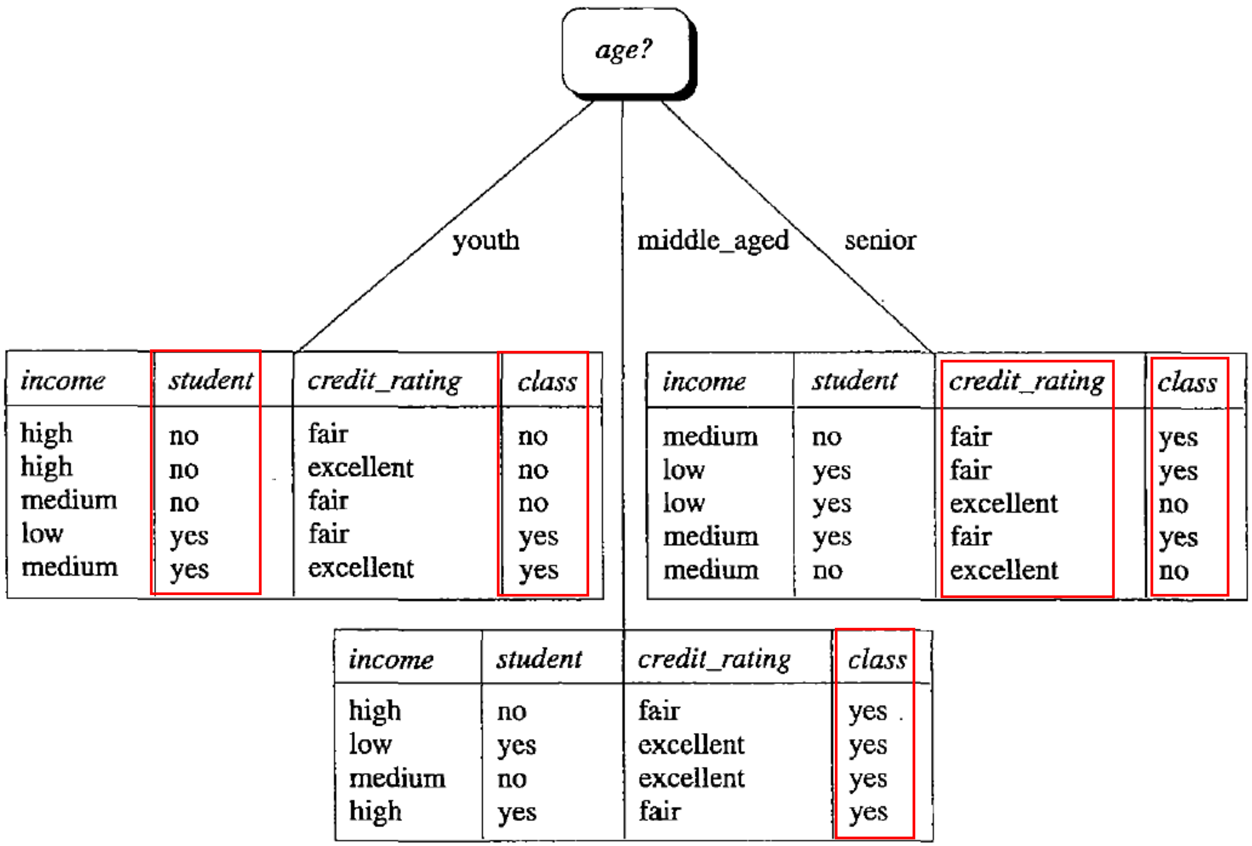
$$Info_{age}(D) = \frac{5}{14}\times\left(-\frac{2}{5}\log_2\frac{2}{5} - \frac{3}{5}\log_2\frac{3}{5}\right) + \frac{4}{14}\times\left(-\frac{4}{4}\log_2\frac{4}{4} - \frac{0}{4}\log_2\frac{0}{4}\right)$$
$$+ \frac{5}{14}\times\left(-\frac{3}{5}\log_2\frac{3}{5} - \frac{2}{5}\log_2\frac{2}{5}\right)$$
$$= 0.694 \text{ 位}$$

$$Gain(age) = Info(D) - Info_{age}(D) = 0.940 - 0.694 = 0.246 \text{ 位}$$

Age属性的信息增益最高，故首先选择这个变量

例子：继续在子树重复挑选变量的步骤

- 已经可以肉眼观察：左侧student，右侧credit_rating，下方直接输出叶子yes



income	*student*	*credit_rating*	*class*
high	no	fair	no
high	no	excellent	no
medium	no	fair	no
low	yes	fair	yes
medium	yes	excellent	yes

income	*student*	*credit_rating*	*class*
medium	no	fair	yes
low	yes	fair	yes
low	yes	excellent	no
medium	yes	fair	yes
medium	no	excellent	no

income	*student*	*credit_rating*	*class*
high	no	fair	yes
low	yes	excellent	yes
medium	no	excellent	yes
high	yes	fair	yes

Yes

连续变量怎样选择分离点？

- 韩家炜书第219页

“但是，如何计算连续值属性的信息增益？”假设属性 A 是连续值的，而不是离散值的。（例如，假定有属性 *age* 的原始值，而不是该属性的离散化版本。）对于这种情况，必须确定 A 的“最佳”**分裂点**，$\boxed{\text{其中分裂点是 } A \text{ 上的阈值。}}$

首先，将 A 的值按递增序排序。典型地，每对相邻值的中点被看做可能的分裂点。这样，给定 A 的 v 个值，则需要计算 $v-1$ 个可能的划分。例如，A 的值 a_i 和 a_{i+1}之间的中点是

$$\frac{a_i + a_{i+1}}{2} \tag{8.4}$$

如果 A 的值已经预先排序，则确定 A 的最佳划分只需要扫描一遍这些值。对于 A 的每个可能分裂点，计算 $Info_A(D)$，其中分区的个数为 2，即（8.2）式中 $v=2$（或 $j=1$，2）。A 具有最小期望信息需求的点选做 A 的分裂点。D_1 是满足 $A \leqslant split\_poin$ 的元组集合，而 D_2 是满足

也就是信息增益最大的点为分裂点

A>split_point的元组集合

例子

■ 用SNS社区中不真实账号检测的例子说明如何使用ID3算法构造决策树。为了简单起见，我们假设训练集合包含10个元素。其中s、m和l分别表示小、中和大。

日志密度	好友密度	是否使用真实头像	账号是否真实
s	s	no	no
s	l	yes	yes
l	m	yes	yes
m	m	yes	yes
l	m	yes	yes
m	l	no	yes
m	s	no	no
l	m	no	yes
m	s	no	yes
s	s	yes	no

信息增益

- 设L、F、H和R表示日志密度、好友密度、是否使用真实头像和账号是否真实，下面计算各属性的信息增益。

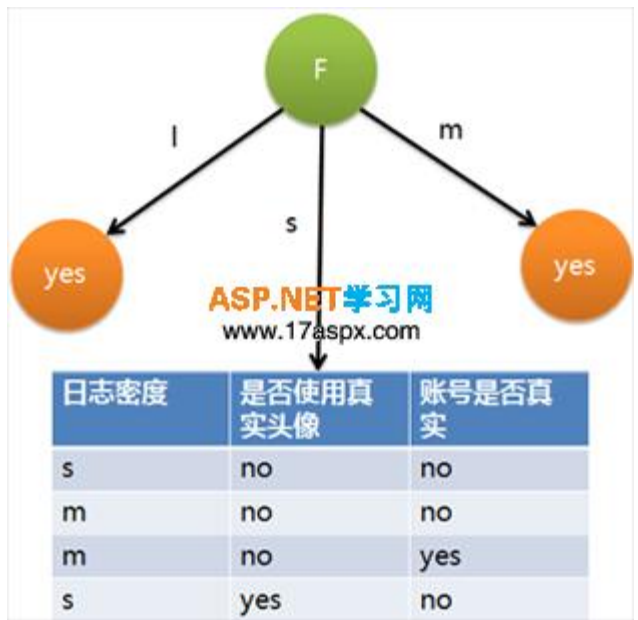
$$info(D) = -0.7log_2 0.7 - 0.3log_2 0.3 = 0.7 * 0.51 + 0.3 * 1.74 = 0.879$$

$$info_L(D) = 0.3 * (-\frac{0}{3}log_2\frac{0}{3} - \frac{3}{3}log_2\frac{3}{3}) + 0.4 * (-\frac{1}{4}log_2\frac{1}{4} - \frac{3}{4}log_2\frac{3}{4}) + 0.3 * (-\frac{1}{3}log_2\frac{1}{3} - \frac{2}{3}log_2\frac{2}{3}) = 0 + 0.326 + 0.277 = 0.603$$

$$gain(L) = 0.879 - 0.603 = 0.276$$

根据信息增益选择分裂属性

- 因此日志密度的信息增益是0.276。用同样方法得到H和F的信息增益分别为0.033和0.553。因为F具有最大的信息增益，所以第一次分裂选择F为分裂属性，分裂后的结果如下图表示：



日志密度	是否使用真实头像	账号是否真实
s	no	no
m	no	no
m	no	yes
s	yes	no

递归+分而治之

- 在上图的基础上，再递归使用这个方法计算子节点的分裂属性，最终就可以得到整个决策树。
- 这个方法称为ID3算法，还有其它的算法也可以产生决策树
- 对于特征属性为**连续值**，可以如此使用ID3算法：先将D中元素按照特征属性排序，则每两个相邻元素的中间点可以看做潜在分裂点，从第一个潜在分裂点开始，分裂D并计算两个集合的期望信息，具有最小期望信息的点称为这个属性的最佳分裂点，其信息期望作为此属性的信息期望。

C4.5算法

ID3算法利用信息增益，其缺点为

- 信息增益的方法倾向于首先选择因子数较多的变量
- 信息增益的改进：增益率

$$SplitInfo_A(D) = -\sum_{j=1}^{v} \frac{|D_j|}{|D|} \times \log_2\left(\frac{|D_j|}{|D|}\right)$$

这一项是用来平衡因子数量的

$$GrianRate(A) = \frac{Grain(A)}{SplitInfo_A(D)}$$

例子

- 重新计算前例

例 8.2 属性 *income* 的增益率的计算。属性 *income* 的测试将表 8.1 中的数据划分成 3 个分区，即 *low*、*medium* 和 *high*，分别包含 4、6 和 4 个元组。为了计算 *income* 的增益率，首先使用（8.5）式得到

$$SplitInfo_A(D) = -\frac{4}{14}\times\log_2\frac{4}{14} - \frac{6}{14}\times\log_2\frac{6}{14} - \frac{4}{14}\times\log_2\frac{4}{14} = 1.557$$

由例 8.1，$Gain(income) = 0.029$。因此，$GainRatio(income) = 0.029/1.557 = 0.019$。 ■

CART算法

rpart包用的就是CART算法

- 使用基尼指数选择变量

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

$$Gini_A(D) = \frac{|D_1|}{|D|}Gini(D_1) + \frac{|D_2|}{|D|}Gini(D_2)$$

$$\Delta Gini(A) = Gini(D) - Gini_A(D)$$

例子

- 韩家炜书第221页

剪枝 解决过拟合问题

C4.5和CART有剪枝，ID3没有剪枝过程

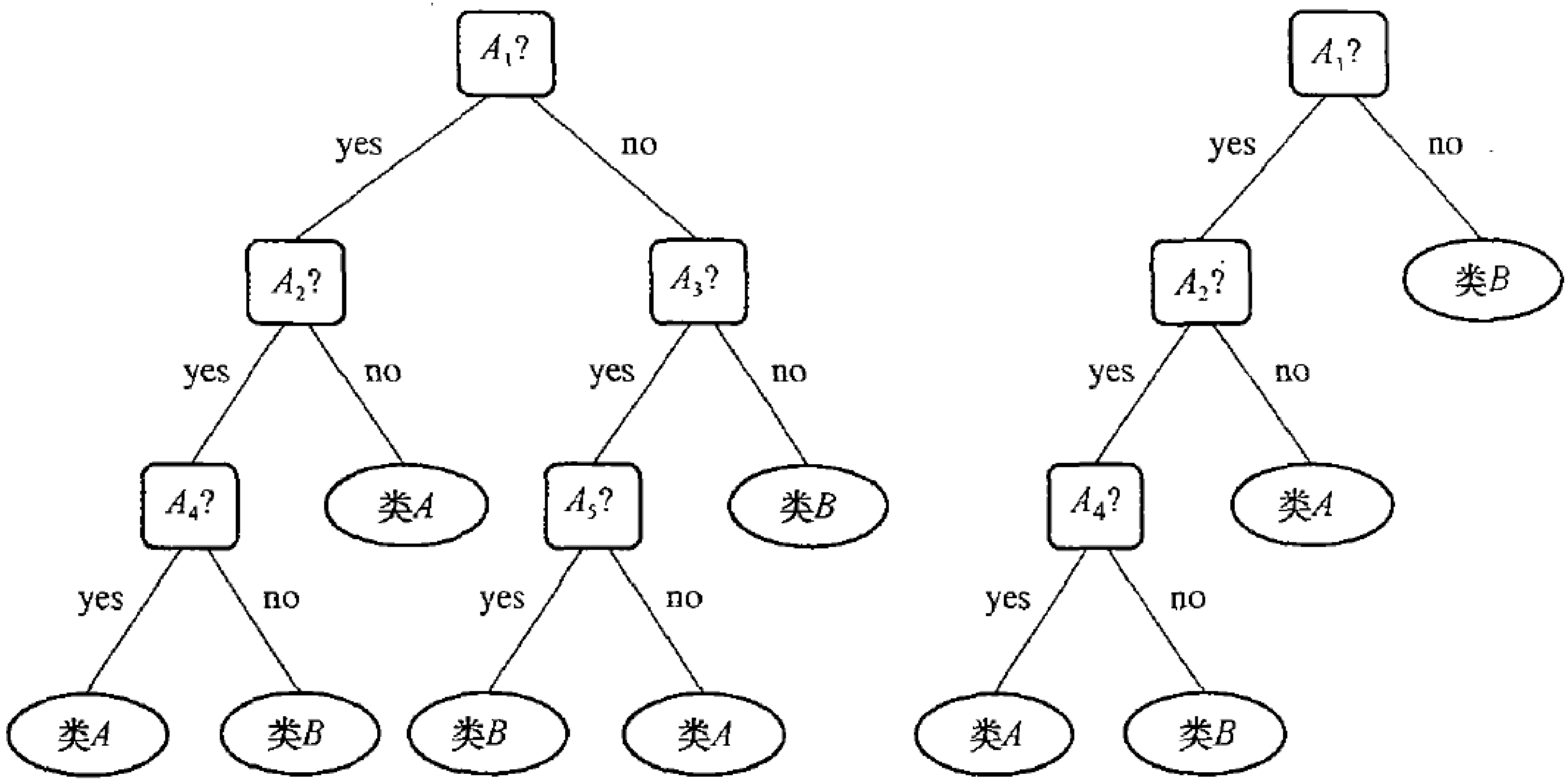


图 8.6　一棵未剪枝的决策树和它剪枝后的版本

CART的剪枝

前剪枝：先选择变量，再构建决策树模型

- 后剪枝：先产生完全的决策树，再进行裁剪。与之相对的做法是前剪枝
- 代价复杂度：叶节点个数（裁减对象）和树的错误率的函数
- 如果剪枝能使代价复杂度下降，则实施之
- 剪枝集

代价复杂度剪枝 C4.5剪枝

- http://blog.csdn.net/tianguokaka/article/details/9018933

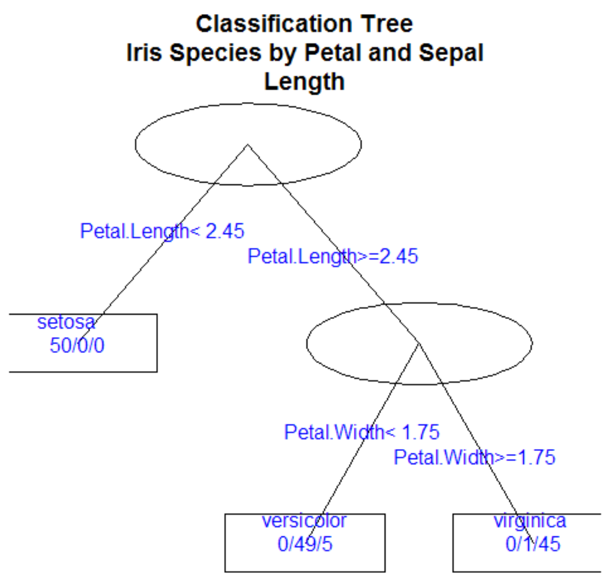
C4.5的悲观剪枝法

- http://blog.csdn.net/zjd950131/article/details/8027081

R语言实现决策树：rpart扩展包

■ 以鸢尾花数据集作为算例说明

```
iris.rp = rpart(Species~., data=iris,
    method="class")
plot(iris.rp, uniform=T, branch=0,
    margin=0.1, main=“ Classification
    Tree\nIris Species by Petal and Sepal
    Length")
text(iris.rp, use.n=T, fancy=T, col="blue")
```



Rule 1: if Petal.Length>=2.45&Petal.Width<1.75, then it is versicolor(0/49/5)
Rule2: if Petal.Length>=2.45&Petal.Width>=1.75, then it is virginica (0/1/45)
Rule 3: if Petal.Length<2.45, then it is setosa (50/0/0)

怎样评估分类器效能？

- 韩家炜书第237页

度量	公式
准确率、识别率	$\frac{TP+TN}{P+N}$
错误率、误分类率	$\frac{FP+FN}{P+N}$
敏感度、真正例率、召回率	$\frac{TP}{P}$
特效性、真负例率	$\frac{TN}{N}$
精度	$\frac{TP}{TP+FP}$
F、F_1、F分数 精度和召回率的调和均值	$\frac{2\times precision\times recall}{precision+recall}$
F_β，其中β是非负实数	$\frac{(1+\beta^2)\times precision\times recall}{\beta^2\times precision+recall}$

图 8.13　评估度量。注意：某些度量有多个名称。TP，TN，FP，FN，P，N 分别表示真正例、真负例、假正例、假负例、正和负样本数

预测的类

实际的类		yes	no	合计
	yes	TP	FN	P
	no	FP	TN	N
	合计	P'	N'	$P+N$

提升分类器准确率的组合方法

■ 组合方法包括：装袋（bagging），提升（boosting）和随机森林

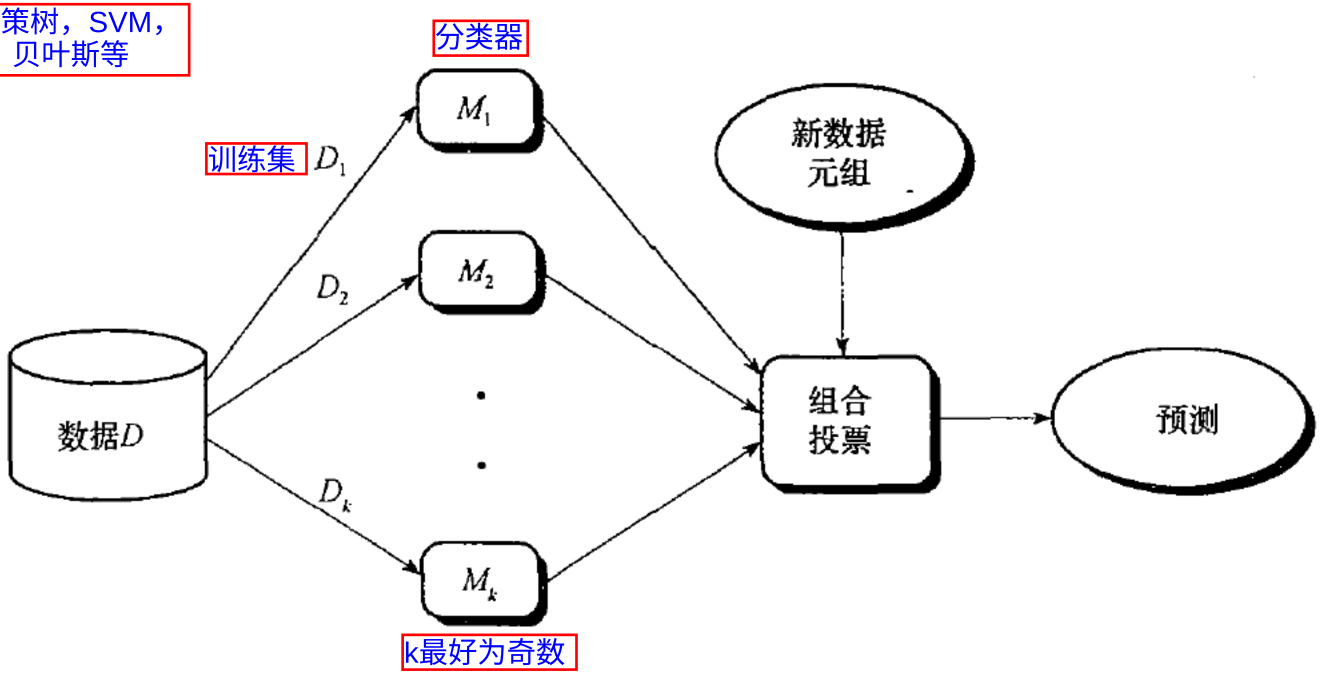
■ 基于学习数据集抽样产生若干训练集

■ 使用训练集产生若干分类器

■ 每个分类器分别进行预测，通过简单选举多数，判定最终所属分类

两个核心问题：
如何抽样？选取什么样的抽样方法？
新学习集如何训练分类器？

分类器可为决策树，SVM，Logistic回归，贝叶斯等



为什么组合方法能提高分类准确率？

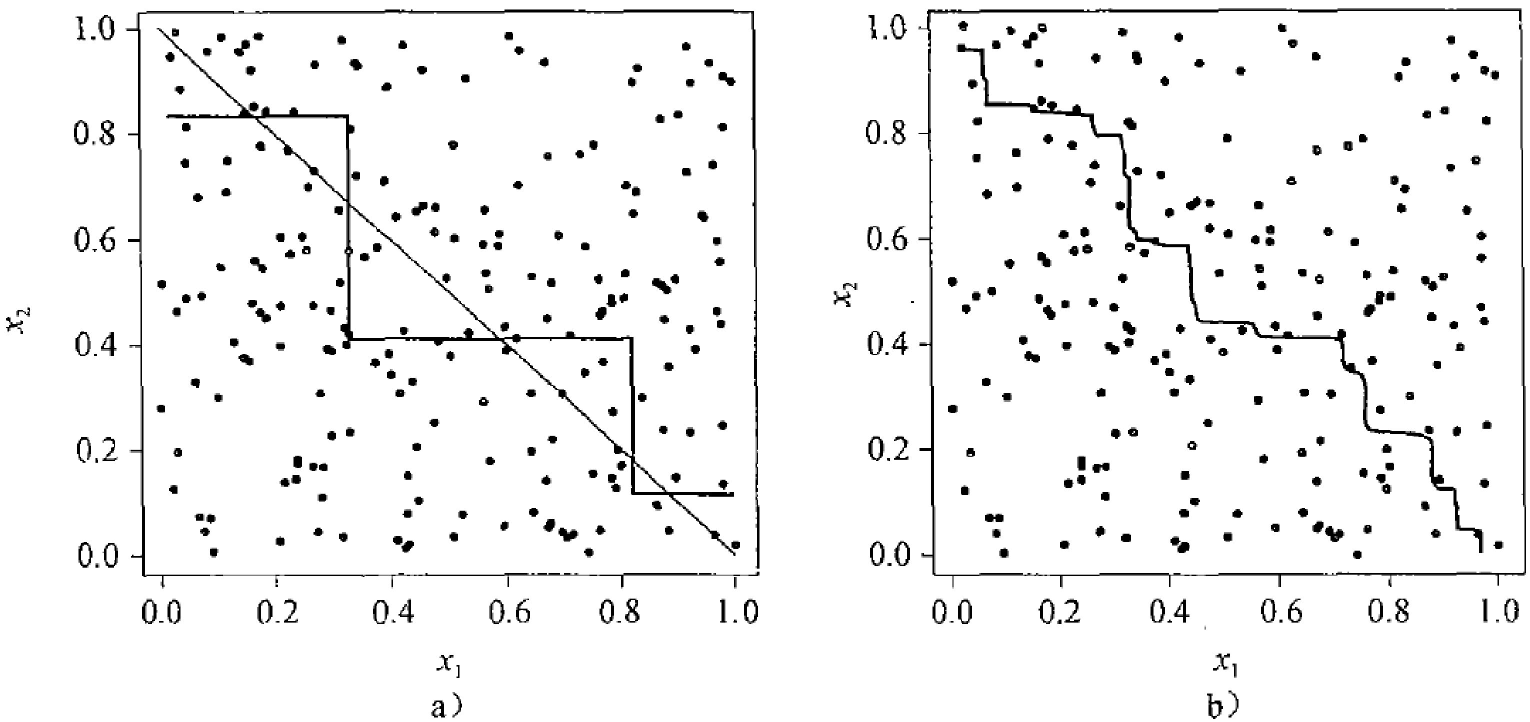


图 8.22　一个线性可分问题（即实际的决策边界是一条直线）的决策边界：a）单棵决策树；b）决策树的组合分类器。决策树努力近似线性边界。组合分类器更接近于真实的边界。取自 Seni 和 Elder[SE10]

组合算法的优势

- 能明显提升判别准确率
- 对误差和噪音更加鲁棒性
- 一定程度抵消过度拟合
- 适合并行化计算

装袋算法 bagging: bootstrap aggregating的缩写

算法：装袋。装袋算法——为学习方案创建组合分类模型,其中每个模型给出等权重预测。

输入：

- D：d个训练元组的集合；
- k：组合分类器中的模型数；
- 一种学习方案（例如,决策树算法、后向传播等）

输出：组合分类器—复合模型M^*。

方法：

（1）**for** i = 1 to k **do** // 创建k个模型

（2）通过对D有放回抽样，创建自助样本D_i；

（3）使用D_i和学习方法导出模型M_i；

（4）**endfor**

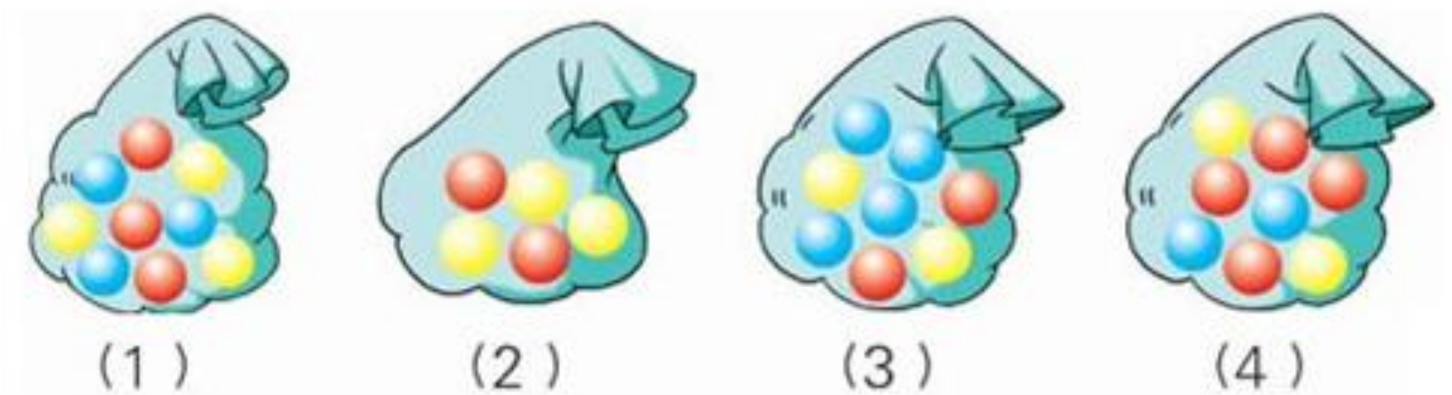
使用组合分类器对元组X分类：

让k个模型都对X分类并返回多数表决；

解释：有放回抽样与自助样本

初始数据集中约有1/3的样本未出现在采样数据集中。

- 有放回抽样
- 自助样本（bootstrap），韩家炜书第241页 有重复抽样



袋装算法的优势

- 准确率明显高于组合中任何单个的分类器
- 对于较大的噪音，表现不至于很差，并且具有鲁棒性
- 不容易过度拟合

提升（boosting）算法思想

其中主要的是AdaBoost（Adaptive Boosting）

- 训练集中的元组被分配权重
- 权重影响抽样，权重越大，越可能被抽取
- 迭代训练若干个分类器，在前一个分类器中被错误分类的元组，会被提高权重，使到它在后面建立的分类器里被更加“关注”
- 最后分类也是由所有分类器一起投票，投票权重取决于分类器的准确率

Adaboost算法

Adaptive Boosting

算法：Adaboost.一种提升算法——创建分类器的组合。每个给出一个加权投票。

输入：

- D：类标记的训练元组集。
- k：轮数（每轮产生一个分类器）。
- 一种分类学习方案。

输出：一个复合模型。

方法：

```
(1)  将D中每个元组的权重初始化为1/d;
(2)  for i = 1 to k do                                  // 对于每一轮
(3)      根据元组的权重从D中有放回抽样,得到D_i;
(4)      使用训练集D_i导出模型M_i;
(5)      计算M_i的错误率error(M_i)（8.34式）
(6)      if error(M_i) > 0.5 then
(7)        转步骤（3）重试;
(8)      endif
(9)      for D_i的每个被正确分类的元组do
(10)       元组的权重乘以error(M_i)/(1-error(M_i));     // 更新权重
(11)     规范化每个元组的权重;
(12)  endfor
```

Adaboost算法

使用组合分类器对元组x分类：

(1)　将每个类的权重初始化为0；

(2)　**for** $i=1$ to k **do**　　// 对于每个分类器

(3)　　$w_i = \log\frac{1-error(M_i)}{error(M_i)}$;　　// 分类器的投票权重

(4)　　$c = M_i(\mathbf{x})$;　　// 从M_i得到$\mathbf{x}$的类预测

(5)　　将w_i加到类c的权重；

(6)　**endfor**

(7)　返回具有最大权重的类；

提升算法的优缺点

- 可以获得比bagging更高的准确率
- 容易过度拟合

Bagging与Boosting的区别：二者的主要区别是取样方式不同。
1.Bagging采用均匀取样，而Boosting根据错误率来取样，因此Boosting的分类精度要优于Bagging;
2.Bagging的训练集的选择是随机的，各轮训练集之间相互独立，而BoostIng的各轮训练集的选择与前面各轮的学习结果有关;
3.Bagging的各个预测函数没有权重，而Boosting是有权重的;
4.Bagging的各个预测函数可以并行生成，而Boosting的各个预测函数只能顺序生成。对于象神经网络这样极为耗时的学习方法。Bagging可通过并行训练节省大量时间开销;
5.bagging和boosting都可以有效地提高分类的准确性。在大多数数据集中，boosting的准确性比bagging高。在有些数据集中，boosting会引起退化--- Overfit。
6. Boosting思想的一种改进型AdaBoost方法在邮件过滤、文本分类方面都有很好的性能。

随机森林（Random Forest）算法

- 由很多决策树分类器组合而成（因而称为“森林”）也可以使用SVM, Logistic回归等其他分类器，不过仍然习惯性地称为随机森林
- 单个的决策树分类器用随机方法构成。首先，学习集是从原训练集中通过有放回抽样得到的自助样本。其次，参与构建该决策树的变量也是随机抽出，参与变量数通常大大小于可用变量数。
- 单个决策树在产生学习集和确定参与变量后，使用CART算法计算，不剪枝
- 最后分类结果取决于各个决策树分类器简单多数选举

抵消随机误差

有放回的选取一定比例的样本是为了解决异常样本的问题，那些没选到异常样本的数据集训练结果会更好。

随机森林算法优点

- 准确率可以和Adaboost媲美
- 对错误和离群点更加鲁棒性
- 决策树容易过度拟合的问题会随着森林规模而削弱
- 在大数据情况下速度快，性能好

①在当前所有算法中，具有极好的准确率；

②能够有效地运行在大数据集上；

③能够处理具有高维特征的输入样本，而且不需要降维能够评估各个特征在分类问题上的重要性在生成过程中，能够获取到内部生成误差的一种无偏估计；

④对于缺省值问题也能够获得很好得结果；

⑤一般很多的决策树算法都会包含 剪枝 过程来避免 过度拟合(over-fitting)，但是由于随机森林的两个随机采样的过程保证了随机性，所以就算不剪枝也不容易出现over-fitting；

缺点：对于许多统计建模者来说，随机森林给人的感觉像是一个黑盒子——你几乎无法控制模型内部的运行，只能在不同的参数和随机种子之间进行尝试。

R的randomForest包

```
> library(randomForest)
randomForest 4.6-7
Type rfNews() to see new features/changes/bug fixes.
警告信息:
程辑包'randomForest'是用R版本3.0.3 来建造的
> model.forest <-randomForest(Species ~ ., data = iris)
> pre.forest=predict(model.forest, iris)
> table(pre.forest,iris$Species)

pre.forest   setosa versicolor virginica
  setosa         50          0         0
  versicolor      0         50         0
  virginica       0          0        50
> library(rpart)
> model.tree=rpart(Species ~ ., data = iris,method='class')
> pre.tree=predict(model.tree, data = iris,type='class')
> table(pre.tree,iris$Species)

pre.tree     setosa versicolor virginica
  setosa         50          0         0
  versicolor      0         49         5
  virginica       0          1        45
> 
```