# 第7讲

# 决策树与集成学习 Decision Tree and Ensemble Learning

决策树算法: ID3和C4.5

分类和回归树: CART

Bagging和随机森林

提升、AdaBoost和提升树

# 1. 决策树

- · 决策树 (decision tree) 是一种分层的决策结构,可用于分 类和回归;
- 决策树对于特征向量各分量混合属性的情形,尤其有效
- 决策树模型具有树型结构,学习过程中由样本集形成一棵 可做分层判决的树;
- 推断(预测)时,对于一个新的特征向量,从树的根结点起分层判决,达到可给出最后结果的叶结点,完成一次推断;
- 决策树推断速度快,可解释性强,是一种应用非常广泛的算法;
- 以决策树为基础树,可直接形成随机森林或提升树(集成学习),得到更高的分类率或回归精度。

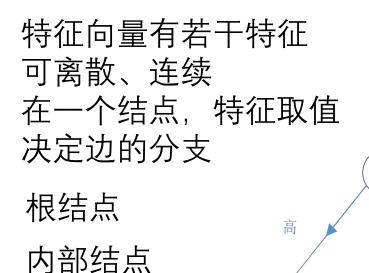
#### 样本集



#### 决策树的一些术语

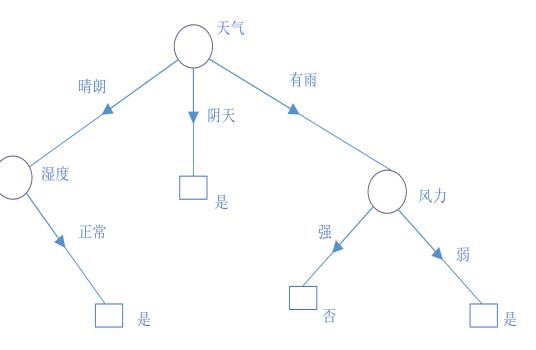
$$\mathbf{D} = \left\{ \left( \mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n \right) \right\}_{n=1}^N$$

决策树的结构是分层的结构,由 结点和边组成



叶结点:

可以得出结果的结点



#### 2. ID3算法和信息增益

#### **ID3算法基本思路**: (每个特征取值离散)

- 通过一个准则找到一个最合适的特征,以这个特征作 为根结点;
- 根结点对应了样本集的所有样本,确定一个特征作为 根结点,由该特征的各取值形成相应的几条边,引出 下一层的结点;
- 每一条边对应了根结点特征的一个取值,根据该特征的不同取值把样本集分成几组,每一组形成一子样本集;
- 子样本集的特征向量中,将根结点已用到的特征删去, 每一个子样本集对应一条边下端的结点;
- → 满足条件的节点定为叶节点,并确定对应输出,否则 递归执行。



#### 不纯性度量 (impurity measure)

ID3算法时用熵表示不纯性

$$H\left(\mathbf{D}\right) = -\sum_{k=1}^{K} p_k \log_2 p_k$$

实际计算经验熵

第 k 类的样本数目为  $c_k$ ,则  $p_k$  估计为  $p_k \approx \frac{c_k}{N}$ 

$$H\left(\mathbf{D}\right) = -\sum_{k=1}^{K} \frac{c_k}{N} \log_2 \frac{c_k}{N}$$

# 不约

#### 不纯性度量 (续)

考虑了特征 A 后的不纯性可用条件熵表示,即  $H(\mathbf{D}|A)$ 

$$H\left(\mathbf{D}|A\right) = \sum_{i \in [1,I]} p_i^{(A)} H\left(\mathbf{D}|A=i\right)$$

 $p_i^{(A)}$ 表示特征 A=i 的概率

$$H(\mathbf{D}|A) = -\sum_{i \in [1,I]} \frac{N_i}{N} \sum_{k=1}^{K} \frac{c_{ik}}{N_i} \log_2 \frac{c_{ik}}{N_i}$$



#### 不纯性度量 (续)

定义选择了特征A的熵增益为A

$$G(\mathbf{D}, A) = H(\mathbf{D}) - H(\mathbf{D}|A)$$

对每个特征 A, 计算熵增益 选择熵增益最大的特征作为根结点对应的特征 由特征的取值形成边, 边的下端为下一层的结点

各自对应了子样本集 $D_i$ 

#### ID3算法

ID3 (**D**, 分类类型, 特征)。

(1) 创建树的根结点。若**D**中的所有标注都相同,返回一个单一根结点树,输出为该标注类。若特征向量为空,返回一个单一根结点树,输出为标注最多的类。

(2) 计算备特征的信息增益,将信息增益最大的特征记为A。 A作为根结点特征。

对于A的每一个取值i。

在根结点下加一条新的边,其对应测试条件为A=i。

令 $\mathbf{D}_i$ 为 $\mathbf{D}$ 中满足A=i的样本子集。

如果 $\mathbf{D}_{i}$ 为空,。

该边下端设为叶结点,叶结点的输出为**D**中标注最多的类。 否则,。

在这个边下端加一个新的子树:调用  ${
m ID3}$  ( ${f D}_i$ ,分类类型,特征- $\{A\}$ )

(3) 返回根。

例:看电影样本集

序号。	女朋友 A <sub>l</sub> 。	作业 $A_2$ 。	预习 $A_3$ 。	电影类型 $A_4$ 。	决定。
1 .	女友去。	完成。	需要。	喜欢。	看电影。
2 .	女友去。	未完成。	需要。	不喜欢。	不去。
3 .	女友去。	未完成。	不需要。	不喜欢。	看电影。
4 .	女友去。	完成。	需要。	不喜欢。	看电影。
5 .	女友不去。	完成。	不需要。	喜欢。	看电影。
6 .	女友不去。	未完成。	不需要。	喜欢。	不去。
7 .	女友不去。	完成。	需要。	喜欢。	看电影。
8 .	女友不去。	完成。	不需要。	不喜欢。	不去。
9 .	女友不去。	未完成。	需要。	不喜欢。	不去。
10 .	无女友。	完成。	不需要。	喜欢。	看电影。
11 0	无女友。	未完成。	不需要。	喜欢。	不去。
12 -	无女友。	未完成。	需要。	喜欢。	不去。
13 -	无女友。	完成。	不需要。	不喜欢。	不去。
14 .	无女友。	未完成。	不需要。	喜欢。	不去。
15 .	无女友。	完成。	需要。	喜欢。	看电影。

数据集的经验熵

$$H(\mathbf{D}) = -\frac{7}{15}\log_2\frac{7}{15} - \frac{8}{15}\log_2\frac{8}{15} = 0.9966$$

每个特征的增益

$$G(\mathbf{D}, A_1) = H(\mathbf{D}) - H(\mathbf{D}|A_1)$$

$$=0.9966 - \frac{4}{15} \left( -\frac{3}{4} \log_2 \frac{3}{4} - \frac{1}{4} \log_2 \frac{1}{4} \right) - \frac{5}{15} \left( -\frac{2}{5} \log_2 \frac{2}{5} - \frac{3}{5} \log_2 \frac{3}{5} \right)$$

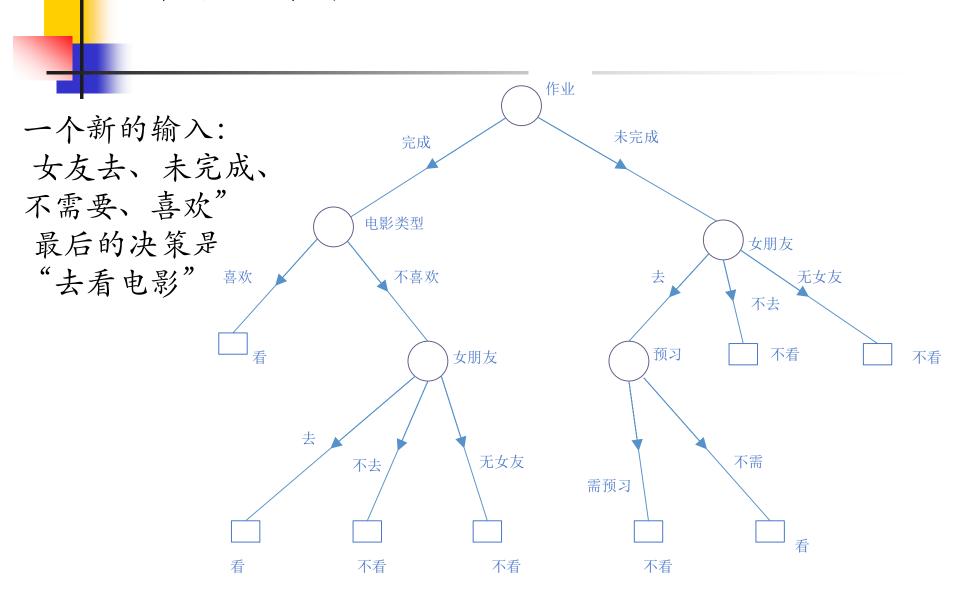
$$-\frac{6}{15}\left(-\frac{2}{6}\log_2\frac{2}{6} - \frac{4}{6}\log_2\frac{4}{6}\right) = 0.0866$$

$$G(\mathbf{D}, A_2) = 0.2876$$

$$G(\mathbf{D}, A_3) = 0.027$$

$$G(\mathbf{D}, A_4) = 0.0366$$

#### 最终的决策树



# 3. C4.5算法

- Quinian于1993年发表;
- ID3中用信息增益选择特征时偏向选择取值数多的特征 , C4.5用信息增益率来选择特征,适用于特征之间取 值数目比较分散的情况;
- 针对ID3易于过拟合的问题,在树构造过程中引入剪枝技术;
- ID3的特征只能取离散值,若一个特征是连续数值量,则需要预先离散化,C4.5既可以处理离散特征,也可处理连续特征;
- 能够处理样本特征不完整的情况。

# CART算法

- CART是分类与回归树的缩写: Classification And Regression Tree: CART。由Breiman等1984 年提出。
- CART的结构一般是一棵二叉树,每一个内部 节点有两条分支
- CART用于分类, 称为分类树; 用于回归, 称 为回归树。

#### 4.1 分类树

考虑二叉树结构

假设特征 A 的取值可为  $1,2,\cdots,I$  分别判断 A=i 时,对分类不纯性的改善当 A=j 时,对不纯性的改善最佳 则取 A=j 为该结点的判据 将分为 A=j 和  $A\neq j$  的两个分支,

# CART算法的不纯性度量: 基尼指数

对于样本集表示为 D

$$Gini(\mathbf{D}) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{j \neq k} p_k p_j$$

$$= \sum_{k=1}^{K} p_k (1 - p_k) = 1 - \sum_{k=1}^{K} p_k^2$$

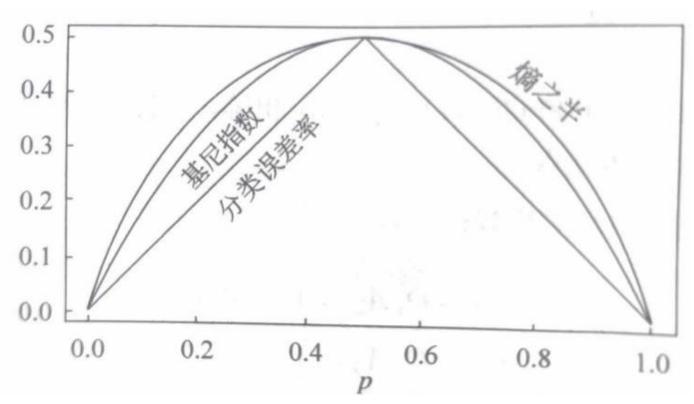
若  $p_k$ 估计为  $p_k \approx \frac{c_k}{N}$ 

基尼指数计算为

$$Gini(\mathbf{D}) = 1 - \sum_{k=1}^{K} \left(\frac{c_k}{N}\right)^2$$



#### 两类情况下, 熵的一半与基尼指数的关系图



#### 基尼指数作为测试条件

当测试特征 A = i 时,

按照样本的特征 A 是否满足 A = i 将样本集分成两类

$$\mathbf{D}_1 = \left\{ \left( \mathbf{x}_n, y_n \right) \middle| A\left( \mathbf{x}_n \right) = i \right\}, \ \mathbf{D}_2 = \left\{ \left( \mathbf{x}_n, y_n \right) \middle| A\left( \mathbf{x}_n \right) \neq i \right\}$$

在特征 A = i 的条件下,基尼指数为

$$Gini(\mathbf{D}, A = i) = \frac{N_1}{N}Gini(\mathbf{D}_1) + \frac{N_2}{N}Gini(\mathbf{D}_2)$$

设 $Gini(\mathbf{D}, A = j)$ 最小,则选择特征A,以A = j是或否为分支

CART-C (**D**, 分类类型, 特征)。 (1)创建树的根结点。 (2)将样本集分为 $\mathbf{D}_1$ , $\mathbf{D}_2$ ,分为两条支路:

若D中的所有标注都相同,返回一个单一根结点树,输出为该标注类。 若特征向量为空,返回一个单一根结点树,输出为标注最多的类。 若一个特征A只有一个取值,删除该特征。

计算各特征和特征的各取值的 Gini 指数 (若特征 A 只有两个取值,只计算第一 个值的基尼指数,具有最小基尼指数的特征和取值为A=j,以是或否A=j,

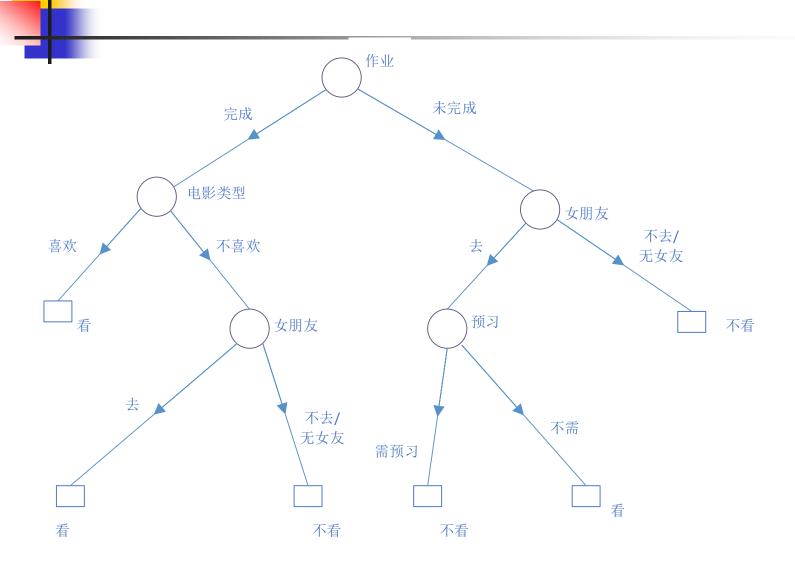
A=j "是"支路,调用 CART-C ( $\mathbf{D}_1$ ,分类类型,特征- $\{A\}$ )。 A = j "否"支路,调用 CART-C ( $\mathbf{D}_2$ ,分类类型,特征 A 取值集合- $\{j\}$ )

若 $\mathbf{D}_i$ 为空,结点设为叶结点,叶结点的输出为 $\mathbf{D}$ 中标注最多的类。 (3)

若 $\mathbf{D}_i$ 只有一种标注,结点设为叶结点,输出为该标注。

若特征为空,结点设为叶结点, $\mathbf{D}$ ,中最多类型的标注为输出。

#### 看电影的CART分类树



#### 4.2 CART回归树

回归树的不纯性函数使用平方误差 在一个样本集  $\mathbf{D}$  中  $x_i$  出现的所有取值的集合记为  $A_i$ 对每一个特征  $A_i$  的每一个取值  $a \in A_i$ 将特征空间划分为两个区域

$$\mathbf{R}_1(A_i,a) = \{\mathbf{x} | x_i \le a\}, \quad \mathbf{R}_2(A_i,a) = \{\mathbf{x} | x_i > a\}$$
 $a \in A_i$  称为切分点

回归树:

对应的样本集分为两个子样本集



$$\mathbf{D}_{1} = \{ (x_{n}, y_{n}) | x_{ni} \le a, n \in [1, N] \}$$

$$\mathbf{D}_{2} = \{ (x_{n}, y_{n}) | x_{ni} > a, n \in [1, N] \}$$

对每一个子样本集的样本,

用一个常数 $\hat{g}_m$ , m=1,2逼近,则逼近误差为

$$\sum_{m=1}^{2} \sum_{(\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n) \in \mathbf{D}_m} (\mathbf{y}_n - \hat{\mathbf{g}}_m)^2$$

求 $\hat{g}_m$ , m=1,2 使得平方误差和最小

最优值 
$$\hat{g}_m = \frac{1}{N_m} \sum_{(\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathbf{D}_m} y_n, \qquad m = 1, 2$$

#### 回归树:



在根结点需要选出一个特征和一个切分点,使得

$$(A_j, a_o) = \underset{A_i, a \in A_i}{\text{arg min}} \left\{ \sum_{m=1}^{2} \sum_{(\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathbf{D}_m} (y_n - \hat{g}_m)^2 \right\}$$

选择了第 j 个特征和 j 特征的取值  $a_o$  作为切分点 在根结点,按照  $x_i \le a_o$  和  $x_i > a_o$  分成左右两个分支 将样本集分成  $\mathbf{D}_1$ ,  $\mathbf{D}_2$  ,并计算逼近误差

$$\varepsilon_m = \sqrt{\frac{1}{N_m}} \sum_{(\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n) \in \mathbf{D}_m} (\mathbf{y}_n - \hat{\mathbf{g}}_m)^2, \quad m = 1, 2$$

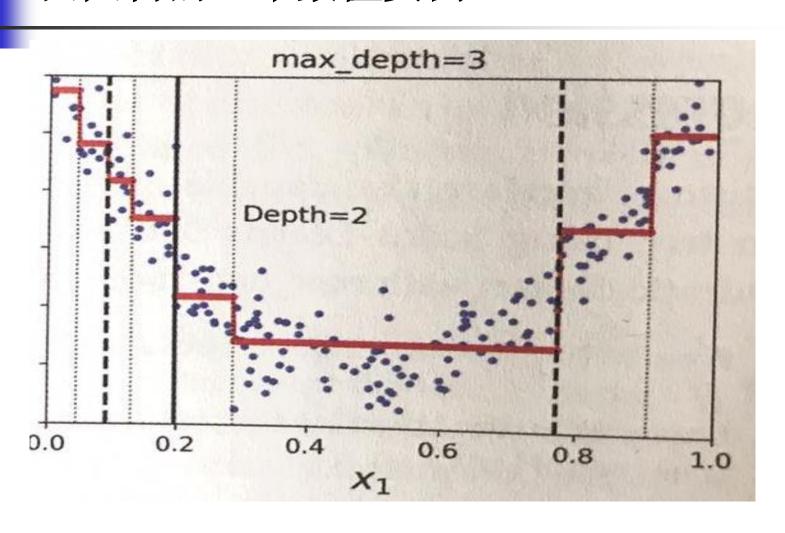
#### 回归树:

对于预定门限 $\epsilon_0$ ,若在子结点 $T_1$ 满足 $\epsilon_1 < \epsilon_0$ 

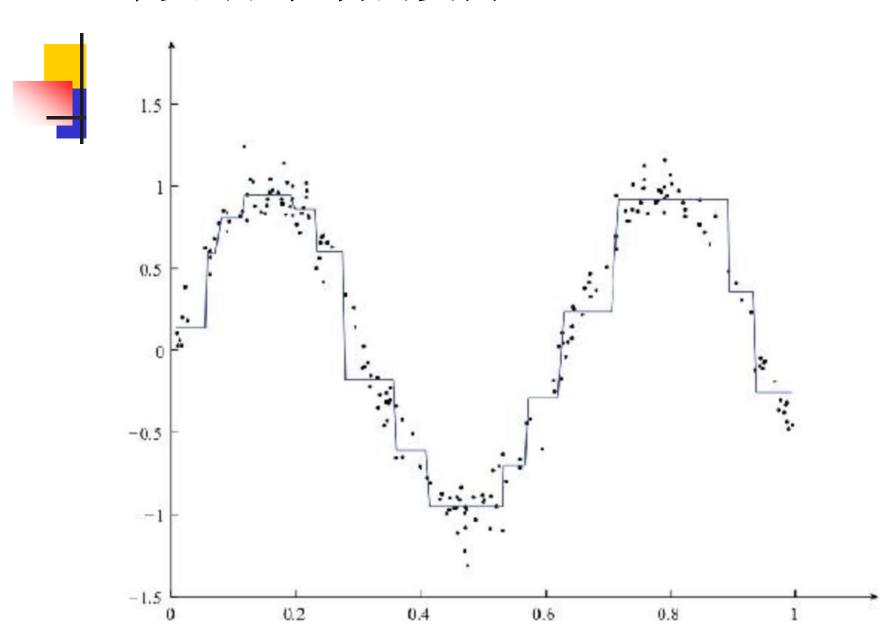
则  $T_1$ 设为叶结点,该结点的输出为  $\hat{g}_1$  否则 以  $T_1$ 为子树的根结点,  $\mathbf{D}_1$  为样本集 递归进行操作,对  $T_2$  也是同样过程 直到所有结点都终结在叶结点 当回归树完成后,设共形成 M  $\mathbf{\Lambda}$  叶结点 M  $\mathbf{\Lambda}$  C 域

回归模型为 
$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{M} \hat{g}_{i} I(\mathbf{x} \in \mathbf{R}_{i})$$

# 回归树的一个数值实例



# 一个更深回归树的实例

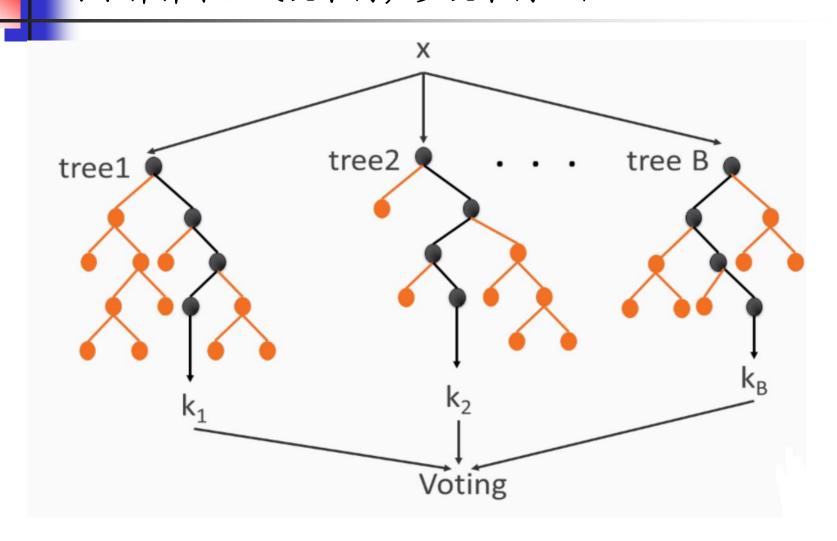


# 5. 决策树的一些扩展问题

- 连续数值变量
- 正则化和剪枝技术
  - ■预剪枝技术
  - ■后剪枝技术
- 缺少属性的训练样本问题
- 逻辑表达式和解释性

#### **6.** 集成学习**-1:** Bagging和随机森林 (Random Forests)

在决策树基础上的集成学习方法:对样本进行随机采样, 对采样样本生成决策树,多决策树组合。 Breiman 2001



#### 6.1 自助采样和Bagging算法

自助采样 (bootstrap)

原始训练样本集为 
$$\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_n, y_n)\}_{n=1}^N$$

自助采样是指,随机的从D中抽取一个样本放入 $D^*$ 中,同时将该样本放回D中,按照这个方式采样N次,组成自助样本集 $D^*$ 。

可获得B个自助样本集,记为 $\mathbf{D}^{*(b)}$ , $b=1,2,\dots,B$ 。

假设N充分大, $(x_k, y_k)$ 被包含在样本集 $\mathbf{D}^{*(j)}$ 中的概率为

$$1 - \left(1 - \frac{1}{N}\right)^N \approx 1 - e^{-1} \approx 0.632$$



#### Bagging(bootstrap aggregation)算法

- (1) 由训练样本集 $\mathbf{D}$ , 重采样得到 $\mathbf{B}$ 个自助样本集 $\mathbf{D}^{*(b)}$ ,  $b=1,2,\cdots,B$
- (2) 对于每一个 $oldsymbol{D}^{*(b)}$ ,通过基学习算法训练一个基学习器 $\hat{f}^{*(b)}(x)$
- (3)则 Bagging 集成学习器为

$$\hat{f}_{bag}\left(\boldsymbol{x}\right) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \hat{f}^{*(b)}\left(\boldsymbol{x}\right)$$

特点:

在每个基学习器  $\hat{f}^{*(b)}(x)$  是一种"不稳定"学习器时 Bagging 可显著降低集成学习器的方差。

#### 6.2 随机森林算法描述(Random Forests)



通过进一步增加随机性: 随机选取特征, 提高有效性

- 1. 对于 $b = 1, 2, \dots, B$ 
  - (a) 通过自举采样,从训练集中得到 N 个样本的集合  $\mathbf{X}_b$  .
  - (b) 利用自举样本集生成一棵随机森林树 $T_b$ , 在树的每个节点通过递归重复如下步骤,直到达到最小节点规模 $n_{\min}$ 
    - (I) 从 D 个特征变量中随机选取 m 个变量
    - (II) 在m个变量中选择最好的变量和切分点
    - (Ⅲ) 分裂结点到两个子结点。
  - 2. 输出树的集合 $\left\{T_b\right\}_{b=1}^{B}$

#### 随机森林做预测

对于新的输入x做预测,分别:

回归: 
$$\hat{y}_{rf}^{B}(\mathbf{x}) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} T_{b}(\mathbf{x})$$

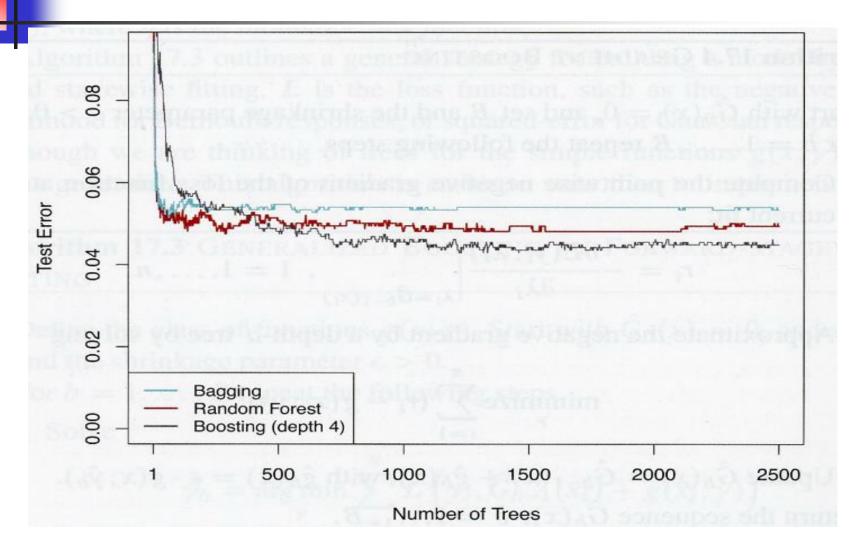
 $(T_b(\mathbf{x})$  表示树 $T_b(\mathbf{x})$  的回归输出)

分类: 投票原则, 
$$\hat{C}_{rf}^{B}(\mathbf{x}) = vote \left\{ \hat{C}_{rf}^{b}(\mathbf{x}) \right\}_{b=1}^{B}$$

 $(\hat{C}_{rf}^b(\mathbf{x})$ 是树 $T_b$ 的类型输出)

#### 性能比较

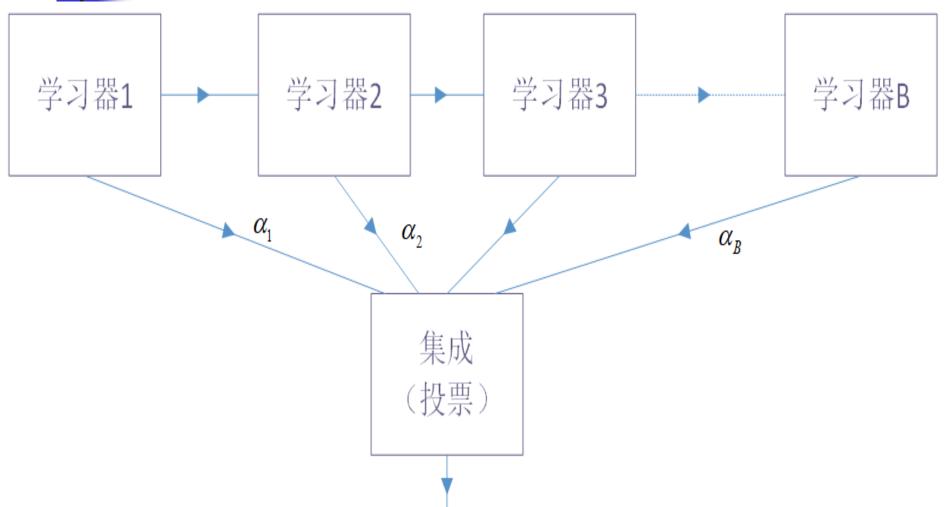
对spam数据集, Bagging、随机森林和提 升树性能比较



#### 7. 集成学习-2: 提升和AdaBoost算法



提升(boosting) 类算法,组合若干个弱学习器构成一个强学习器。(串行结构)



#### AdaBoost算法



#### AdaBoost由Freund和Schapiro于1995年提出

基本的AdaBoost算法用于2分类问题,以 {-1,+1} 表示两类

#### AdaBoost算法的基本思想:

- (1) 对基学习器进行多轮调用;
- (2) 在每一轮调用时,都对样本集中每个样本在 损失函数中的权重进行调整
- (3) 初始时所有样本具有相等的权重,但在经过每一轮,被正确分类的样本给予较小权重,没有被正确分类的样本权重增加
- (4) 难以正确分类的样本会持续获得高权重,使得后续基学习器重点关注和解决较难分类的样本。

#### AdaBoost算法描述

给定训练样本集
$$\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_n, y_n)\}_{n=1}^N, \mathbf{x}_n \in \mathbf{X}, y_n \in \{-1, +1\}$$

初始化分布: 
$$D_1(n) = \frac{1}{N}$$
,  $n = 1, 2, \dots, N$ 

对于 
$$t = 1, 2, \dots, B$$

根据分布 $D_t$ 训练弱分类器,得到弱分类器 $h_t: \mathbf{X} \to \{-1, +1\}$ 

目标:选择 $h_t$ 使得加权后的误差 $\mathcal{E}_t$ 最小, $\mathcal{E}_t$ 为。

$$\varepsilon_{t} \doteq P_{n \sim D_{t}} \left( h_{t}(\boldsymbol{x}_{n}) \neq y_{n} \right) = \sum_{n=1}^{N} D_{t}(n) I \left( h_{t}(\boldsymbol{x}_{n}) \neq y_{n} \right)$$

#### AdaBoost算法描述 (续)



取
$$\alpha_t = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 - \varepsilon_t}{\varepsilon_t} \right)$$

进行如下更新,对 $n=1,2,\dots,N$ 。

$$D_{t+1}(n) = \frac{D_t(n)}{Z_t} \exp\left(-\alpha_t y_n h_t(\mathbf{x}_n)\right)$$

这里, $Z_t$ 是归一化因子,保证 $D_{t+1}$ 是一个分布。

输出最终的学习器。

$$H(\mathbf{x}) = \operatorname{sgn} \left[ \sum_{t=1}^{B} \alpha_t h_t(\mathbf{x}) \right] =$$

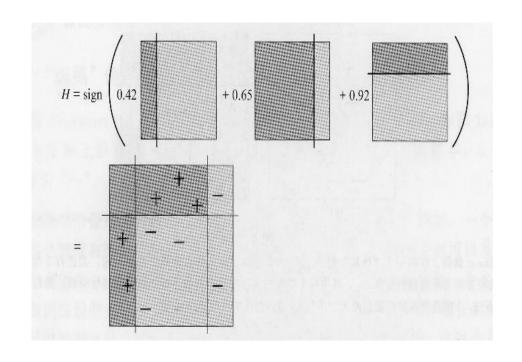
# **(** (b) (c) (d)

#### AdaBoost算法的示例:

三轮提升,得到对所有样本正确分类的集成分类器。

图中分别用"+"和"-"表示样本的类型

$$H(x) = \operatorname{sgn} \left[ 0.42h_1(x) + 0.65h_2(x) + 0.92h_3(x) \right]$$

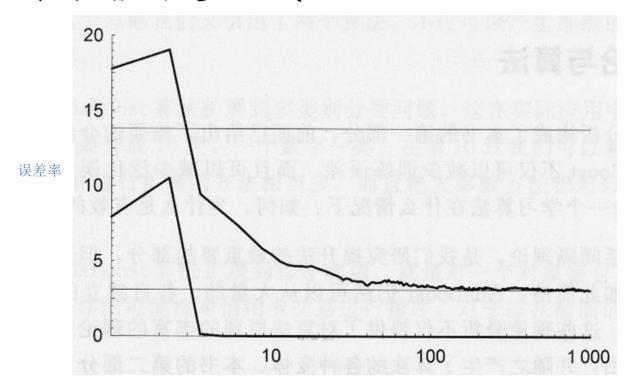


#### AdaBoost的泛化性能评价

4

对于手写英文字母(OCR)数据集(16000训练样本,4000测试样本),使用C4.5决策树做基分类器

利用AdaBoost集成方法,随提升数增加时训练误差和测试误差的变化曲线



提升轮数

#### 8. 加法模型和提升树算法

加法模型表示为

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{t=1}^{B} \beta_t b(\mathbf{x}; \theta_t)$$

定义目标函数 L(y,F(x))

加法模型优化问题为

$$\min_{\left\{\beta_{t}, \theta_{t}\right\}_{t=1}^{B}} \left\{ \sum_{n=1}^{N} L\left(y_{n}, \sum_{t=1}^{B} \beta_{t} b(\boldsymbol{x}_{n}; \theta_{t})\right) \right\}$$

#### 加法模型和提升树算法 (续)

模型分步更新



$$F_t(\mathbf{x}) = F_{t-1}(\mathbf{x}) + \beta_t b(\mathbf{x}; \theta_t)$$

前向一步优化问题简化为

$$(\beta_t, \theta_t) = \underset{\beta, \theta}{\operatorname{arg\,min}} \left\{ \sum_{n=1}^N L(y_n, F_{t-1}(\boldsymbol{x}_n) + \beta b(\boldsymbol{x}_n; \theta)) \right\}$$

基学习器  $b(x; \theta_t)$  采用决策树,则构成提升树

一棵决策树的模型表示

$$T(\mathbf{x}; \boldsymbol{\Theta}) = \sum_{j=1}^{J} c_{j} I\left(\mathbf{x} \in R_{j}\right)$$

决策树的参数:  $\Theta = \left\{R_j, c_j\right\}_{j=1}^J$  , J是树深度

#### 加法模型和提升树算法 (续)



#### 提升树模型表示为

$$F_B(\mathbf{x}) = \sum_{t=1}^B T(\mathbf{x}; \boldsymbol{\Theta}_t)$$

#### 第t轮决策树参数的确定为如下优化问题

$$\hat{\Theta}_{t} = \arg\min_{\Theta_{t}} \left\{ \sum_{n=1}^{N} L(y_{n}, F_{t-1}(\boldsymbol{x}_{n}) + T(\boldsymbol{x}_{n}; \Theta_{t})) \right\}$$

第t轮参数:  $\Theta_t = \{R_{tj}, c_{tj}\}_{j=1}^{J_t}$ 

#### 实现示例-1: 指数函数和AdaBoost

取损失函数:  $L(y_n, F(x_n)) = e^{-y_n F(x_n)}$  提升树为Adaboost

#### 加法模型和提升树算法 (续)

实现示例-2: 平方误差函数-回归提升树

对于回归问题, 取

$$L(y,F(x)) = \frac{1}{2}[y-F(x)]^2$$

#### 参数优化问题为

$$\hat{\Theta}_{t} = \underset{\Theta_{t}}{\operatorname{arg \,min}} \left\{ \sum_{n=1}^{N} L(y_{n}, F_{t-1}(\boldsymbol{x}_{n}) + T(\boldsymbol{x}_{n}; \boldsymbol{\Theta}_{t})) \right\}$$

$$= \underset{\Theta_{t}}{\operatorname{arg \,min}} \left\{ \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2} [y_{n} - F_{t-1}(\boldsymbol{x}_{n}) - T(\boldsymbol{x}_{n}; \boldsymbol{\Theta}_{t})]^{2} \right\}$$

$$= \underset{\Theta_{t}}{\operatorname{arg \,min}} \left\{ \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2} [r_{tn} - T(\boldsymbol{x}_{n}; \boldsymbol{\Theta}_{t})]^{2} \right\}$$

定义残差:  $r_{tn} = y_n - F_{t-1}(\boldsymbol{x}_n)$ 

第t轮决策树,目标函数以残差替代标注值训练一棵决策树

#### 回归提升树算法

输入: 训练数据集  $\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_n, y_n)\}_{n=1}^N$ ; 给出收缩因子  $0 < \epsilon \le 1$ 

初始化:  $F_0(\mathbf{x}) = 0$ ,  $r_n = y_n$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ 

对于  $t = 1, 2, \dots, B$ 

以 $r_n$ 为标注,学习一棵回归树 $T(x,\Theta_t)$ (树结点数 $J_t$ )。

得到收缩决策树:  $\hat{T}(x; \Theta_t) = \varepsilon T(x; \Theta_t)$ 

集成决策树:  $F_t(\mathbf{x}) = F_{t-1}(\mathbf{x}) + \hat{T}(\mathbf{x}; \Theta_t)$ 

更新残差:  $r_n \leftarrow r_n - \hat{T}(\mathbf{x}_n; \Theta_t), n = 1, 2, \dots, N$ 

输出提升树:  $F_B(x)$ 。



#### 9. 梯度提升树算法

(gradient boosting decision tree, GBDT)

在一般情况下, 定义新的等价残差为负梯度

$$r_{tn} = -g_{tn} = -\left[\frac{\partial L(y_n, F(x_n))}{\partial F(x_n)}\right]_{F(x_n) = F_{t-1}(x_n)}$$

引入收缩参数

$$0 < \varepsilon \le 1$$

对于一系列损失函数,引入梯度提升决策树算法并应用于回归和分类

#### (回归的) 梯度提升决策树。

输入:训练数据集 $\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_n, y_n)\}_{n=1}^N$ ,给出目标函数 $L(\cdot, \cdot)$ 。

给出收缩因子0<ε≤1。

初始化: 
$$F_0(\mathbf{x}) = \underset{c}{\operatorname{arg \, min}} \sum_{n=1}^N L(y_n, c)$$

对于  $t = 1, 2, \dots, B$ 

(a) 对于  $n = 1, 2, \dots, N$ , 计算。

$$r_{tn} = -\left[\frac{\partial L(y_n, F(x_n))}{\partial F(x_n)}\right]_{F(x_n) = F_{t-1}(x_n)}$$



(b) 训练一个回归树去拟合标注 $\Gamma_m$ ,得到叶结点和对应的区域。

$$R_{tj}$$
,  $j = 1, 2, \dots, J_t$ 

(c) 对于 $j=1,2,\cdots,J_t$ , 计算。

$$c_{tj} = \arg\min_{c} \left\{ \sum_{\mathbf{x}_n \in R_{tj}} L(y_n, F_{t-1}(\mathbf{x}_n) + c) \right\}$$

(d) 更新集成决策树:  $F_t(\mathbf{x}) = F_{t-1}(\mathbf{x}) + \varepsilon \sum_{j=1}^{J_t} c_{tj} I(\mathbf{x} \in R_{tj})$ 

输出提升树:  $F_B(x)$ 。

# 决策树和集成学习小结

- 决策树简单、可解释性强,但性能不高
- 集成学习可有效提升单学习器的性能
- 以决策树为基本学习器构成随机森林,是一种高效、并行性强的集成算法
- AdaBoost是一种有效的串行分类提升算法
- 提升树尤其梯度提升树(GBDT)构成一类广泛的集成算法
- GBDT的增强版,XGBoost或LightGBM等可在性能 或有效性方面进一步提升(可参考其网络社区)。