1.分类与回归树简介

分类与回归树的英文是*Classfication And Regression Tree*，缩写为CART。CART算法采用**二分递归分割的技术**将当前样本集分为两个子样本集，使得生成的每个非叶子节点都有两个分支。非叶子节点的特征取值为**True**和**False**，左分支取值为**True**，右分支取值为**False**，因此CART算法生成的决策树是结构简洁的二叉树。CART可以处理连续型变量和离散型变量，利用训练数据递归的划分特征空间进行建树，用验证数据进行剪枝。

- 如果待预测分类是离散型数据，则CART生成分类决策树。
- 如果待预测分类是连续性数据，则CART生成回归决策树。

2.CART分类树

2.1算法详解

CART分类树预测分类离散型数据，采用基尼指数选择最优特征，同时决定该特征的最优二值切分点。分类过程中，假设有K个类，样本点属于第k个类的概率为Pk，则概率分布的基尼指数定义为

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

根据基尼指数定义，可以得到样本集合D的基尼指数，其中Ck表示数据集D中属于第k类的样本子集。

$$Gini(D)=1-\sum_{k=1}^{K}\left(\frac{|C_k|}{|D|}\right)^2$$

如果数据集D根据特征A在某一取值a上进行分割，得到D1,D2两部分后，那么在特征A下集合D的基尼系数如下所示。其中基尼系数Gini(D)表示集合D的不确定性，基尼系数Gini(D,A)表示A=a分割后集合D的不确定性。基尼指数越大，样本集合的不确定性越大。

$$Gain\_Gini(D,A)=\frac{|D1|}{|D|}Gini(D_1)+\frac{|D1|}{|D|}Gini(D_2)$$

对于属性A，分别计算任意属性值将数据集划分为两部分之后的Gain_Gini，选取其中的最小值，作为属性A得到的最优二分方案。然后对于训练集S，计算所有属性的最优二分方案，选取其中的最小值，作为样本及S的最优二分方案。

$$\min_{i\epsilon A}(Gain\_Gini(D,A))$$

$$\min_{A\epsilon Attribute}(\min_{i\epsilon A}(Gain\_Gini(D,A)))$$

2.2实例详解

名称	体温	胎生	水生	类标记
人	恒温	是	否	哺乳类
巨蟒	冷血	否	否	爬行类
鲑鱼	冷血	否	是	鱼类
鲸	恒温	是	是	哺乳类
蛙	冷血	否	有时	鱼类
巨蜥	冷血	否	否	爬行类
蝙蝠	恒温	是	否	哺乳类
猫	恒温	是	否	哺乳类
豹纹鲨	冷血	是	是	鱼类
海龟	冷血	否	有时	爬行类
豪猪	恒温	是	否	哺乳类
鳗	冷血	否	是	鱼类
蝾螈	冷血	否	有时	两栖类

针对上述离散型数据，按照**体温为恒温和非恒温**进行划分。其中恒温时包括哺乳类5个、鸟类2个，非恒温时包括爬行类3个、鱼类3个、两栖类2个，如下所示我们计算D1,D2的基尼指数。

$$Gini(D_1) = 1 - [(\frac{5}{7})^2 + (\frac{2}{7})^2] = \frac{20}{49}$$

$$Gini(D_2) = 1 - [(\frac{3}{8})^2 + (\frac{3}{8})^2 + (\frac{2}{8})^2] = \frac{42}{64}$$

然后计算得到特征**体温**下数据集的Gini指数，最后我们选择Gain_Gini最小的特征和相应的划分。

$$Gain\_Gini(D, \text{体温}) = \frac{7}{15} * \frac{20}{49} + \frac{8}{15} * \frac{42}{64}$$

3.CART回归树

3.1算法详解

CART回归树预测回归连续型数据，假设X与Y分别是输入和输出变量，并且Y是连续变量。在训练数据集所在的输入空间中，递归的将每个区域划分为两个子区域并决定每个子区域上的输出值，构建二叉决策树。

$$D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \dots (x_n, y_n)\}$$

选择最优切分变量j与切分点s：遍历变量j，对规定的切分变量j扫描切分点s，选择使下式得到最小值时的(j,s)对。其中Rm是被划分的输入空间，cm是空间Rm对应的固定输出值。

$$\min_{j,s}[\min_{c_1}\sum_{x_i \epsilon R_i(j,s)}(y_i-c_1)^2+\min_{c_2}\sum_{x_i \epsilon R_i(j,s)}(y_i-c_1)^2]$$

用选定的(j,s)对，划分区域并决定相应的输出值

$$R_1(j,s)=\{x|x^{(j)}\leq s\},R_2(j,s)=\{x|x^{(j)}>s\}$$

$$\hat{c}_m=\frac{1}{N_m}\sum_{x_i \epsilon R_m(j,s)}y_i$$

$$x \epsilon R_m,m=1,2$$

继续对两个子区域调用上述步骤，将输入空间划分为M个区域R1,R2,...,Rm，生成决策树。

$$f(x)=\sum_{m=1}^{M}\hat{c}_m I(x \epsilon R_m)$$

当输入空间划分确定时，可以用**平方误差**来表示回归树对于训练数据的预测方法，用平方误差最小的准则求解每个单元上的最优输出值。

$$\sum_{x_i \epsilon R_m}(y_i-f(x_i))^2$$

3.2实例详解

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	5.56	5.70	5.91	6.40	6.80	7.05	8.90	8.70	9.00	9.05

考虑如上所示的连续性变量，根据给定的数据点，考虑**1.5,2.5,3.5,4.5,5.5,6.5,7.5,8.5,9.5**切分点。对各切分点依次求出**R1,R2,c1,c2及m(s)**，例如当切分点s=1.5时，得到R1={1},R2={2,3,4,5,6,7,8,9,10}，其中c1,c2,m(s)如下所示。

$$c_1=\frac{1}{N_m}\sum_{x_i \epsilon R_m(j,s)}y_i=\frac{1}{1}\sum_{x_i \epsilon R_1(1,1.5)}5.56=5.56$$

$$c_2=\frac{1}{N_m}\sum_{x_i \epsilon R_m(j,s)}y_i=\frac{1}{9}\sum_{x_i \epsilon R_2(1,1.5)}(5.70+5.91+...+9.05)=7.50$$

$$m(s)=\min_{j,s}[\min_{c_1}\sum_{x_i \epsilon R_i(j,s)}(y_i-c_1)^2+\min_{c_2}\sum_{x_i \epsilon R_i(j,s)}(y_i-c_1)^2]=0+15.72=15.72$$

依次改变(j,s)对，可以得到s及m(s)的计算结果，如下表所示。

s	1.5	2.5	3.5	4.5	5.5	6.5	7.5	8.5	9.5
$m(s)$	15.72	12.07	8.36	5.78	3.91	1.93	8.01	11.73	15.74

当x=6.5时，此时R1={1,2,3,4,5,6},R2={7,8,9,10},c1=6.24,c2=8.9。**回归树T1(x)**为

$$T_1(x)=\begin{cases}6.24,x<6.5\\8.91,x\geq 6.5\end{cases}$$

$$f_1(x)=T_1(x)$$

然后我们利用f1(x)拟合训练数据的残差，如下表所示

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	-0.68	-0.54	-0.33	0.16	0.56	0.81	-0.01	-0.21	0.09	0.14

用f1(x)拟合训练数据得到平方误差

$$L(y, f_1(x)) = \sum_{i=1}^{10}(y_i - f_1(x_i))^2 = 1.93$$

第二步求T2(x)与求T1(x)方法相同，只是拟合的数据是上表的残差。可以得到

$$T_2(x) = \begin{cases} -0.52, x < 3.5 \\ 0.22, x \geq 3.5 \end{cases}$$

$$f_2(x) = f_1(x) + T_2(x) = \begin{cases} 5.72, x < 3.5 \\ 6.46, 3.5 \leq x \leq 6.5 \\ 9.13, x \geq 6.5 \end{cases}$$

用f2(x)拟合训练数据的平方误差

$$L(y, f_2(x)) = \sum_{i=1}^{10}(y_i - f_2(x_i))^2 = 0.79$$

继续求得T3(x)、T4(x)、T5(x)、T6(x)，如下所示

$$T_3(x) = \begin{cases} 0.15, x < 6.5 \\ -0.22, x \geq 6.5 \end{cases} L(y, f_3(x)) = 0.47$$

$$T_4(x) = \begin{cases} -0.16, x < 4.5 \\ 0.11, x \geq 4.5 \end{cases} L(y, f_4(x)) = 0.30$$

$$T_5(x) = \begin{cases} 0.07, x < 6.5 \\ -0.11, x \geq 6.5 \end{cases} L(y, f_5(x)) = 0.23$$

$$T_6(x) = \begin{cases} -0.15, x < 2.5 \\ 0.04, x \geq 2.5 \end{cases}$$

$$f_6(x) = f_5(x) + T_6(x) = T_1(x) + \ldots + T_6(x) = \begin{cases} 5.63, x < 2.5 \\ 5.82, 2.5 \leq x \leq 3.5 \\ 6.56, 3.5 \leq x \leq 4.5 \\ 6.83, 4.5 \leq x \leq 6.5 \\ 8.95, x \geq 6.5 \end{cases}$$

用f6(x)拟合训练数据的平方损失误差如下所示，假设此时已经满足误差要求，那么f(x)=f6(x)便是所求的回归树。

$$L(y, f_6(x)) = \sum_{i=1}^{10}(y_i - f_6(x_i))^2 = 0.71$$

4.CART剪枝

> 此处我们介绍代价复杂度剪枝算法

我们将一颗充分生长的树称为**T0**，希望减少树的大小来防止过拟化。但同时去掉一些节点后预测的误差可能会增大，那么如何达到这两个变量之间的平衡则是问题的关键。因此我们用一个变量α 来平衡，定义损失函数如下

$$C_\alpha(T) = C(T) + \alpha|T|$$

- T为任意子树，|T|为子树T的叶子节点个数。
- α是参数，权衡拟合程度与树的复杂度。
- C(T)为预测误差，可以是平方误差也可以是基尼指数，C(T)衡量训练数据的拟合程度。

那么我们如何找到这个合适的α来使拟合程度与复杂度之间达到最好的平衡呢? 准确的方法就是将α从0取到正无穷，对于每一个固定的α，我们都可以找到使得Cα(T)最小的最优子树T(α)。

- 当α很小的时候，T0 是这样的最优子树.
- 当α很大的时候，单独一个根节点就是最优子树。

尽管α的取值无限多，但是T0的子树是有限个。Tn是最后剩下的根结点，子树生成是根据前一个子树Ti，剪掉某个内部节点后，生成Ti+1。然后对这样的子树序列分别用测试集进行**交叉验证**，找到最优的那个子树作为我们的决策树。子树序列如下

$$T_0 > T_1 > T_2 > T_3 > ... > T_n$$

因此CART剪枝分为两部分，分别是生成子树序列和交叉验证，在此不再详细介绍。

5.Sklearn实现

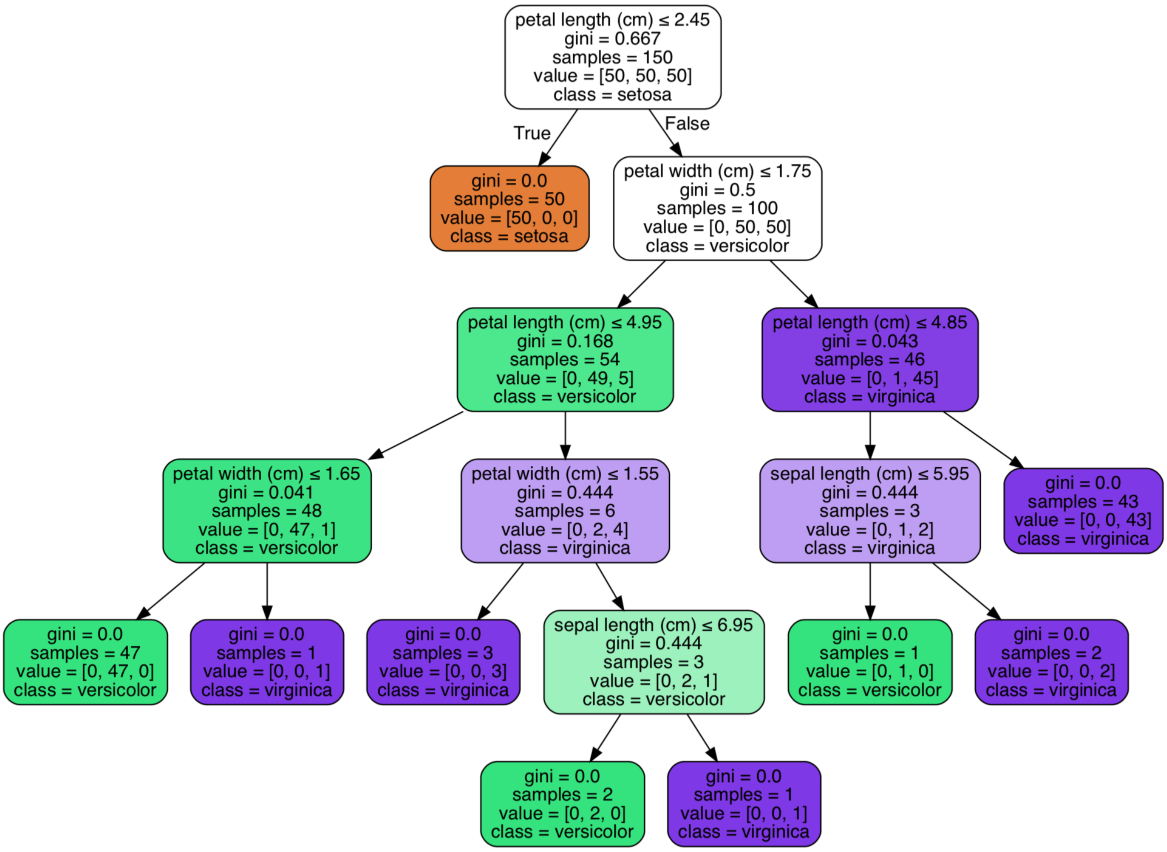
我们以sklearn中iris数据作为训练集，iris属性特征包括花萼长度、花萼宽度、花瓣长度、花瓣宽度，类别共三类，分别为Setosa、Versicolour、Virginca。

```
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn import tree

#load data
iris=load_iris()
X=iris.data
y=iris.target
clf=tree.DecisionTreeClassifier()
clf=clf.fit(X,y)

#export the decision tree
import graphviz
#export_graphviz support a variety of aesthetic options
dot_data=tree.export_graphviz(clf,out_file=None,
                              feature_names=iris.feature_names,
                              class_names=iris.target_names,
                              filled=True,rounded=True,
                              special_characters=True)

graph=graphviz.Source(dot_data)
graph.view()
```



6.推广

更多内容请关注公众号**谓之小一**，若有疑问可在公众号后台提问，随时回答，欢迎关注，内容转载请注明出处。

「谓之小一」希望提供给读者别处看不到的内容，关于互联网、数据挖掘、机器学习、书籍、生活……

- 知乎：@谓之小一
- 公众号：@谓之小一
- GitHub：@weizhixiaoyi
- 技术博客：https://weizhixiaoyi.com

长按关注微信公众号