一、实验题目

决策树

二、实验内容

（一）、算法原理

决策树是一种基于树结构的非线性分类模型。

结构上看，决策树的根节点和中间节点表示对该节点有关的数据集合D依据特征空间A中的一个特征a进行分类 。节点通过边和子节点相连，每一条边关联a的一种取值。叶子节点的值表示最终的分类结果。

从特征空间的角度上看，决策树的建树过程相当于对特征空间不断使用直线（或高纬的超平面）进行划分。由于决策树可以对多个特征逐层划分，相当于可以画出很多条直线，从而可以解决非线性的分类问题。

决定决策树分类效果的关键在于选择哪个标准进行分类，根据这一点的不同衍生出了ID3，C4.5，CART三种决策树；以及剪枝方法，常见有前剪枝和后剪枝。

（二）、伪代码

1. 建树过程：该过程是一个递归过程，伪代码如下：

```
# 依据训练样本集D和特征集A训练决策树
# judge_func是一个函数参数，它的不同决定了决策树是ID3/C4.5还是CART
train(D, A, judge_func):
    # 训练集D的X，Y分开
    (X, Y) = D
    # 记mode为当前节点数据集的结果的众数
    mode = sum(Y) > len(Y) / 2
    '''
    结束条件有4种，分别是：
        1.训练集为空
        2.特征集为空
        3.所有训练数据特征均一致
        4.所有训练数据分类一致
    '''
    if empty(D) or empty(A) or all_equal(X) or all_equal(Y):
        # 设置当前节点为叶节点，结果为mode
        node.isLeaf = True
        node.Y = mode
        return node
```

```
    # 对于每一种特征计算信息增益或基尼系数的减少值
    info_gain = [judge_func(D, a) for a in A]
    # a* 是信息增益最大的一组特征
    a* = indexof(A, max(info_gain))
    # 在特征空间中移除a*
    erase(A, a*)
    # 对于a*的每个取值
    for i in featureValues[a*]:
        # 取对应属性相同的子训练集
        S = subset(D, a*)
        # 递归训练并添加到子节点集中
        node.child.append(train(S, A))
```

2. 计算信息增益或基尼系数的减少量的函数

首先定义计算概率为p的二项分布的熵函数和基尼系数函数

```
H(p): - p * log(p) - (1-p) * log(1-p)
gini(p): 2 * p * (1-p)
```

ID3，C4.5，CART的有关信息增益或基尼系数的减少值的计算过程基本相同，可以抽象出一个judge_func_base函数

```
judge_func_base(D, a, Fun):
    (X, Y) = D
    # 由于Y的取值仅为0或1，故sum(Y)即是Y中1的个数
    p = sum(Y) / len(Y)
    # 依据特征划分前的熵
    H_D = H(p)
    # 依据条件a划分条件熵
    H_D_When_a = 0
    # 依照公式，对a的每种取值算出p * Fun(p)求和
    for i in a:
        (SX, SY) = subset(D, i)
         p = len(SY) / sum(SY)
         H_D_When_a+= p * Fun(p)
    return H_D - H_D_When_a
```

基于它们可以分别定义ID3, C4.5, CART为

```
ID3(D, a): judge_func_base(D, a, H)
C45(D, a): judge_func_base(D, a, H) / split_info(D, a)
CART(D, a): judge_func_base(D, a, gini)
```

其中`split_info(D, a)`定义为

```
# 依照公式求和
split_info(D, a):
    for i in a:
        (SX, SY) = subset(D, i)
        p = len(SX) / len(D)
        SplitInfo += - p * log(p)
```

3. 预测函数

在建好树后即可对新的数据进行预测，预测代码很简单：

```
predict(x):
    # 从根节点开始遍历
    head = root
    # 如果没有遍历到叶节点就一直遍历
    while head is not leaf:
         # 取当X的用于划分当前节点的特征的值
        c = X[head.a]
         # 依据该值选择子节点
         head = head.child[c]
     # 返回叶子节点的值
     return head.y
```

（三）、关键代码截图（带注释）

1.建树函数：

实际代码是用C++编写，和上述伪代码逻辑是基本一致的，区别在于对D为空的判断放在递归步判断，这样可以节省一次不必要的递归。决策树相关函数实现在DecisionTree类中。

```
/*
* 对应伪代码中的train函数
* Node为节点类型
* judge_func是一个函数参数，它的不同决定了决策树是ID3/C45还是CART
*/
void DecisionTree::train_worker(DecisionTree::Node *node, const JudgeFunc_t &judgeFunc)
{
    //获取该节点全部数据集的Y值
    auto D_Y = node->D.row(-1);
    //计算众数
    auto mode = (double)D_Y.sum() >= (node->D.cols() / 2.0);
    //若A为空集
    if(node->A.empty())
    {
        node->isLeaf = true;
        node->Y = mode;
        return;
    }
    //若D中全部样本属于同一类型
    if(all_equal(D_Y))
    {
        node->isLeaf = true;
        node->Y = D_Y[0];
        return;
    }
    //若所有样本各个属性值均相同
```

```
    bool flag = true;
    for(Index i = 0; i < node->D.rows() - 1; ++i)
    {
        if(!all_equal(node->D.row(i)))
        {
            flag = false;
            break;
        }
    }
    if(flag)
    {
        node->isLeaf = true;
        node->Y = mode;
        return;
    }
    //对于每一种特征计算信息增益（率）或基尼系数的减少值
    Vec<double> info_gain;
    for(auto i: node->A)
        info_gain.push_back(judgeFunc(node->D, i, featureValues[i]));
    //a_star是信息增益最大的一组特征
    auto a_star = node->A[max_element(info_gain) - std::begin(info_gain)];
    node->C = a_star;
    //依据该组特征值划分数据集
    Vec<Vec<Index>> S(featureValues[a_star]);
    for(int i = 0; i < node->D.cols(); ++i)
    {
        S[node->D(a_star, i)].push_back(i);
    }
    //在特征空间中移除a_star
    node->A.erase(ranges::v3::find(node->A, a_star));
    //对于a_star的每个取值
    for(int i = 0; i < featureValues[a_star]; ++i)
    {
        // 取对应属性值相同的子训练集
        auto n = new Node(matrix_view<int>(node->D, S[i]), node->A);
        // 若子训练集为空，则将这个子节点标为叶节点，无需递归下去
        if(S[i].empty())
        {
            n->isLeaf = true;
            n->Y = mode;
            node->child.push_back(n);
        }
        else
        {
            //递归训练并添加到子节点集中
            train_worker(n, judgeFunc);
            node->child.push_back(n);
        }
    }
```

```
}
```

由于计算信息增益（率）或基尼系数的减少量的函数是简单的公式翻译的产物，和伪代码更没什么大区别，这里就不展示了

四、创新点&优化

一、由于决策树构建过程中经常要用取子数据集的操作，因此我实现了一个matrix_view（矩阵视图）类。它接收一个矩阵（代码中使用Eigen3矩阵）或一个父视图，和一个包含子数据集数据编号set，生成表示子数据集的视图。它仅储存编号而不需要拷贝矩阵的内容，从而提高了训练速度。同时在输入向量维度为n时，能够降低近$\frac{n-1}{n}$的内存使用量。

二、实现了PEP（悲观错误剪枝）

悲观错误剪枝是一种后剪枝方法，它仅依赖训练集。它首先计算训练集在某个中间节点上的错误率ec

$$ec = \frac{E + punish * L}{N}$$

其中E是分类错误的个数，punish是乘法系数，L是中间节点的子孙中叶子节点的个数，N的输入数据总个数。

假设样本以伯努利分布，则根据ec计算出误判次数的标准差

$$SD = \sqrt{N * ec * (1 - ec)}$$

而若将中间节点改为叶子节点，新的错误率ec_{new}为

$$ec_{new} = E_{new} + punish$$

若$ec + SD > ec_{new}$ 则将该节点剪枝。

实现代码如下：

```
//PEP剪枝函数，返回值是当前节点下的叶子节点个数
int DecisionTree::prune_worker(Node* node)
{
    //若当前节点是叶子节点，直接返回1
    if(node->isLeaf)
        return 1;
    else
    {
        //统计叶子节点个数
        int num_leaf = 0;
        for(auto& i: node->child)
            num_leaf += prune_worker(i);
        //统计当前训练集上的错误个数error
        auto ret = predict(node->D);
        auto num_X = node->D.cols();
        double error = 0;
        for(Eigen::Index i = 0; i < num_X; ++i)
            if(node->D(-1, i) != ret[i])
```

```
                error++;
        //计算错误率ec
        constexpr double punish = 0.5;
        auto ec = (error + punish * num_leaf) / num_X;
        //假设样本为伯努利分布，计算标准差SD
        auto SD = std::sqrt(num_X * ec * (1-ec));
        //计算剪枝后的错误个数new_error
        auto D_Y = node->D.row(-1);
        auto mode = (double)D_Y.sum() >= (node->D.cols() / 2.0);
        double new_error = 0;
        for(Eigen::Index i = 0; i < num_X; ++i)
            if(node->D(-1, i) != mode)
                new_error++;
        //若剪枝后错误率更低，则剪枝
        if(error + SD > new_error + punish)
        {
            //将当前节点设为叶子节点，结果设为众数
            node->isLeaf = true;
            node->C = -1;
            node->Y = mode;
            //删除子节点
            for(auto &i: node->child)
                delete(i);
            node->child.clear();
            //返回叶子节点数为1
            return 1;
        }
        //否则不剪枝
        else
            return num_leaf;
    }
}
```

五、实验结果展示

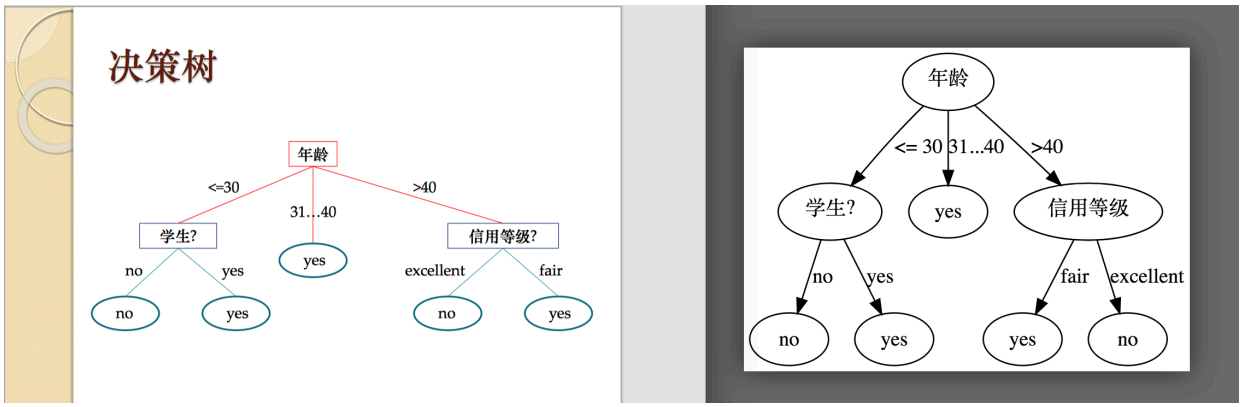
1.使用理论课课件的小数据集测试

理论课课件中提供了一个关于是否购买电脑的小数据集的ID3决策树样例（如下图）：

决策树

年龄	收入	学生?	信用等级?	是否买电脑
<=30	high	no	fair	no
<=30	high	no	excellent	no
31…40	high	no	fair	yes
>40	medium	no	fair	yes
>40	low	yes	fair	yes
>40	low	yes	excellent	no
31…40	low	yes	excellent	yes
<=30	medium	no	fair	no
<=30	low	yes	fair	yes
>40	medium	yes	fair	yes
<=30	medium	yes	excellent	yes
31…40	medium	no	excellent	yes
31…40	high	yes	fair	yes
>40	medium	no	excellent	no

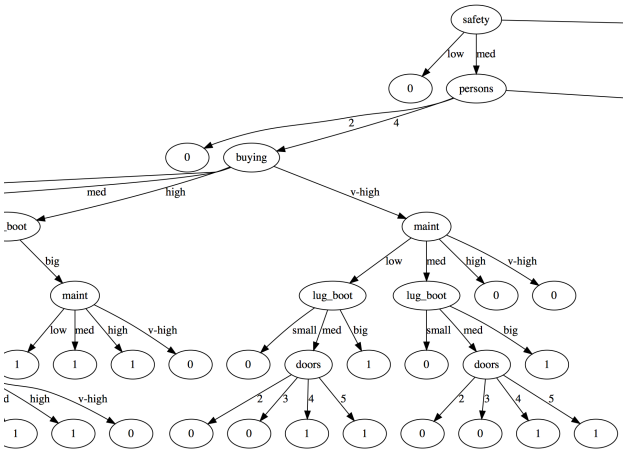
我使用graphviz库实现了生成的决策树的可视化，将我使用ID3算法得到的结果（下图右边）与理论课课件的结果（左图）比较，发现是完全一致的，初步验证了结果的正确性。



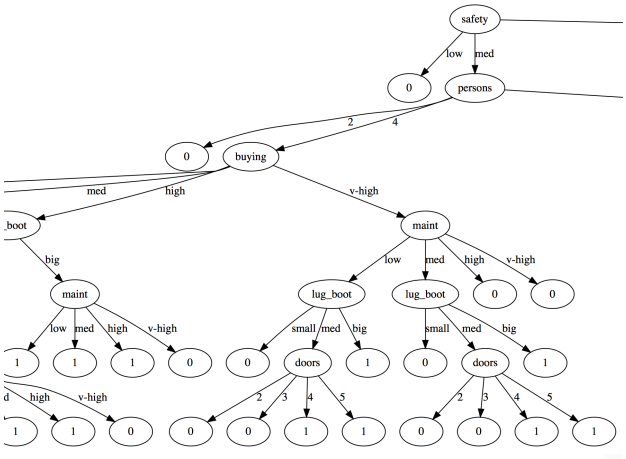
2. 训练集测试

以完整的训练集作为输入，我分别测试了ID3，C4.5，CART三种算法，生成的完整树很宽，因此保存为了PDF文件。这里仅展示部分效果

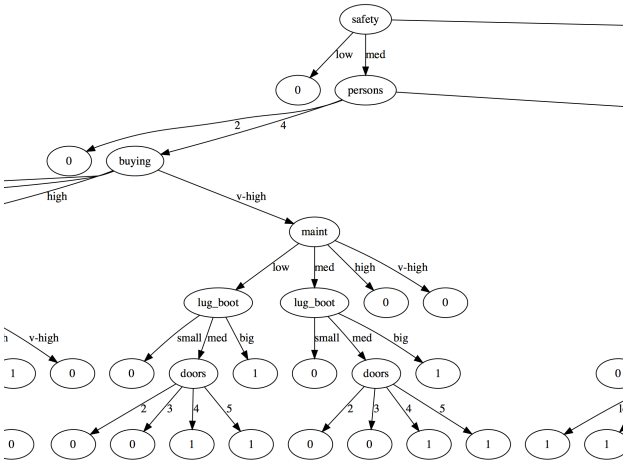
ID3:



C4.5:



CART:



可以观察到，三种算法生成的树结果基本是相同的，事实上，ID3与C4.5的结果中仅有3个节点是不同的，而ID3与CART的结果是完全一致的。

注意到本实验给出的样本的特殊性：给出的特征足够丰富，导致从输入样本X到分类结果Y是一个单射，训练集在生成的决策树上的准确率为1，因此PEP剪枝算法不会剪掉任何一个节点，因此结果展示和下面评测分析中不区分是否采用该方法剪枝（结果是完全一样的）。但在实际中，给出的特征常常是不足的，PEP算法对于这种情况有着防止过拟合的价值。

六、评测指标展示即分析

我使用了K交叉验证方法，即从样本分割为K份，依次选取其中一份作为验证集，其余数据作为训练集。我遍历了K从2到8的情况。验证用代码如下（C++，range函数是通过封装了range-v3库提供的view::ints函数实现）

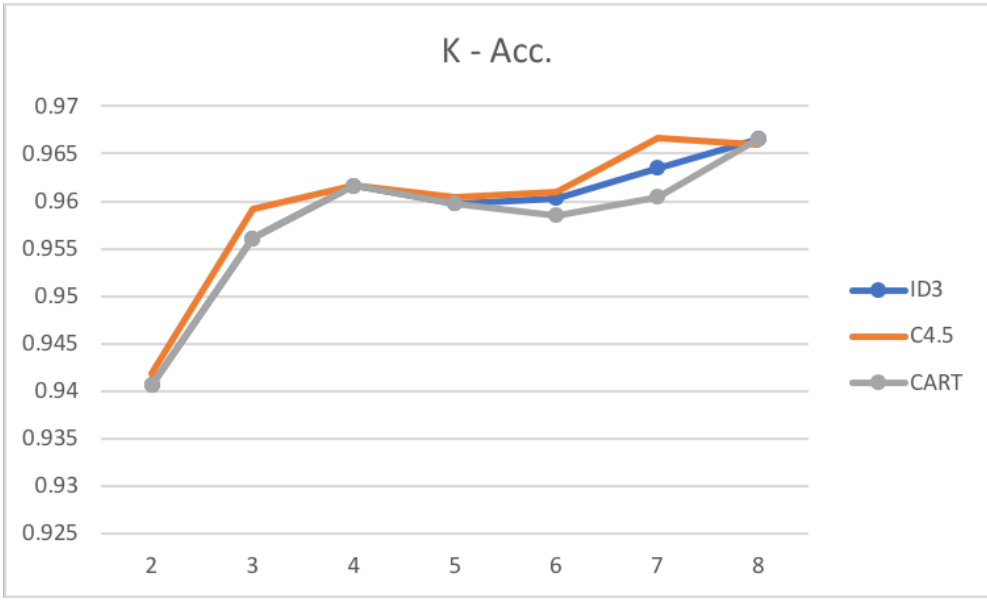
```
//读取训练集数据
auto f = readFile("data/Car_train.csv");
//向量化
auto data = vectorizeData(f, mp);
//K遍历2到8的值
for(double K: range(2, 9))
{
    //N是总输入数据数
    int  N = data.cols();
    int  pieceSize = N / K;
    auto all = range(0, N);
    for(auto i : range(0, K))
    {
        //分割验证集 1/K 的数据作为验证集
        auto vaildSetRange = range(i * pieceSize, (i + 1) * pieceSize);
        matrix_view<int> vaildSet(data, vaildSetRange);
        //其余数据作为训练集
        auto trainSetRange = view::set_difference(all, vaildSetRange);
        matrix_view<int> trainSet(data, trainSetRange);
        //遍历三种决策树方法
        for(auto& [name, Func] : JudgeFuncs)
        {
            //各个特征的取值可能数
            auto featureValRanges = {4,4,4,3,3,3};
            DecisionTree t(trainSet, featureValRanges);
            //计时并建树
            auto start = now();
            t.train(Func);
            auto diff = now() - start;
            //验证并打印结果
            auto acc = t.vaild(vaildSet);
            print_ret(K, name, diff, acc);
        }
    }
}
```

验证结果如下：

如图，横坐标是不同的K值，纵坐标是确定一个K值后，进行K此交叉验证的平均分类准确率，

横向比较K值和准确度的关系，我们可以观察到，除K取2时准确度相对较低之外，K取3到8时准确度均在96%±0.6%的区间内。我认为这是由于K=2时没有足够的信息来支持决策树的建立。观察到K=4时是一个极值点，再增加时时反而降低，这可能是过拟合引起的。K>5时准确度再次上升，然而此时验证集已经越来越小，所得的结果不能很好反映决策树的预测能力。

纵向比较来看，C4.5的准确率一直是三者中最高的。



思考题

1. 决策树有哪些避免过拟合的方法?

   答：一、样本角度：对样本进行筛选，排除错误值和离群值。

   二、决策树角度：采用剪枝方法，包括预剪枝和后剪枝。前者是在建树时限制决策树的高度和叶子节点的数目。后者是通过用叶子节点代替一些置信度不够的中间节点。

2. C4.5相比于ID3的优点是什么，C4.5又可能有什么缺点?

   答：ID3倾向于选择分支较多的特征，考虑一种极端情况，样本集合D中每个元素的特征a均不同，那么ID3就会直接选择这一特征并完成建树。这样得到的树是严重过拟合的。C4.5通过引入SplitInfo和信息增益率，每次分割涉及的数据越多SplitInfo越大，SplitInfo作为分母，信息增益率就越小。从而避免了过拟合。缺点是运算量稍大。

3. 如何用决策树来进行特征选择（判断特征的重要性）？

   决策树总是试图选择能将同类节点整合在一起，选择能够最大程度降低分类不确定性的特征，因此自然采用熵族函数（满足上凸并在两端为0）对特征的重要性进行评估。具体有基于信息增益（互信息）的ID3算法，基于信息增益率（互信息除以分割熵）的C4.5算法和基于gini系数的CART算法。