

决策树

谭忠





建模方法

6666



当今应用

灰色思想

1

案例分析

源头问题



Part

当今应用



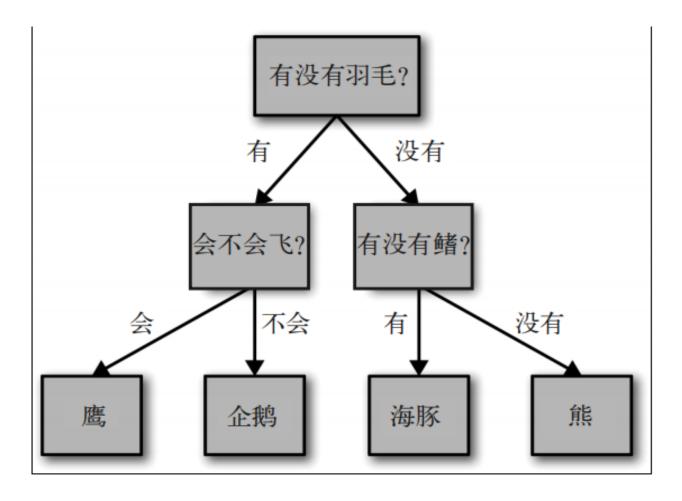
12.1源头问题与当今应用

决策树(decision tree) 每个决策或事件(即自然状态) 都可能引出两个或多个事件,导致不同的结果,为了便 于理解,把这种决策分支画成树的形状,故称决策树。 想象一下, 你想要区分下面这四种动物: 熊、鹰、企鹅 和海豚。目标是通过提出尽可能少的问题来得到正确答 案。



你可能首先会问:这种动物有没有羽毛,这个问题会将可能的动物减少到只有两种。如果答案是"有",你可以问下一个问题,帮你区分鹰和企鹅。例如,你可以问这种动物会不会飞。如果这种动物没有羽毛,那么可能是海豚或熊,所以你需要问一个问题来区分这两种动物——比如问这种动物有没有鳍。







Part 2

决策树思想与建模方法





一、决策树算法的基本思想:

选择最优划分划分当前样本集合并把这个属性作为决 策树的一个节点 不断重复这个过程构造后继节点 直到满足下面三个条件之一停止: 对于当前节点, 所有样本属于同一类 或者没有属性可以选择了

或者没有样本可以划分了



那么我们应该如何选择最优划分属性呢?

所谓最优划分属性,其目的在于依靠这个属性划分后能得到 "纯度"最高的分类样本。

常用的指标有

- 1. 信息增益
- 2. 增益率
- 3. 基尼指数





1、信息增益

信息熵(Information Entropy)是度量样本集合纯度最常用的一种指标。设X是一个取有限个值的离散随机变

量,其概率分布为

$$P(X = x_i) = p_i, i = 1, 2, ..., n$$

则随机变量X的熵定义为

$$H(X) = -\sum_{i=1}^{n} p_i log p_i$$



• 假定离散属性 a 有 V 个可能的取值 $\{a^1, a^2, ..., a^V\}$, 所谓信息增益就是用属性a对样本进行划分并给分支结点赋予权重 $|D^v|/|D|$,所得到的的信息熵的增量

• Gain
$$(D, a) = \text{Ent}(D) - \sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} \text{Ent}(D^v)$$



表 4.1 西瓜数据集 2.0

编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
1 .	青绿	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
2	乌黑	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
3	乌黑	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
5	浅白	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹	软粘	是
8	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	硬滑	是
9	乌黑	稍蜷	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否
10	青绿	硬挺	清脆	清晰	平坦	软粘	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦	硬滑	否
12	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	软粘	否
13	青绿	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	否
17	青绿	蜷缩	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否

Ent
$$(D) = -\sum_{k=1}^{2} p_k \log_2 p_k = -\left(\frac{8}{17}\log_2 \frac{8}{17} + \frac{9}{17}\log_2 \frac{9}{17}\right) = 0.998$$



以色泽为例计算信息增益,首先计算信息熵

$$\operatorname{Ent}(D^{1}) = -\left(\frac{3}{6}\log_{2}\frac{3}{6} + \frac{3}{6}\log_{2}\frac{3}{6}\right) = 1.000$$

$$\operatorname{Ent}(D^2) = -\left(\frac{4}{6}\log_2\frac{4}{6} + \frac{2}{6}\log_2\frac{2}{6}\right) = 0.918$$

$$\operatorname{Ent}(D^3) = -\left(\frac{1}{5}\log_2\frac{1}{5} + \frac{4}{5}\log_2\frac{4}{5}\right) = 0.722$$



最后计算出信息增益

Gain (D, 色泽) = Ent (D) -
$$\sum_{v=1}^{3} \frac{|D^v|}{|D|}$$
 Ent(D^v)
$$= 0.998 - \left(\frac{6}{17} \times 1.000 + \frac{6}{17} \times 0.918 + \frac{5}{17} \times 0.722\right)$$

$$= 0.109.$$



类似的, 我们可计算出其他属性的信息增益:

Gain(D, 根蒂) = 0.143; Gain(D, 敲声) = 0.141;

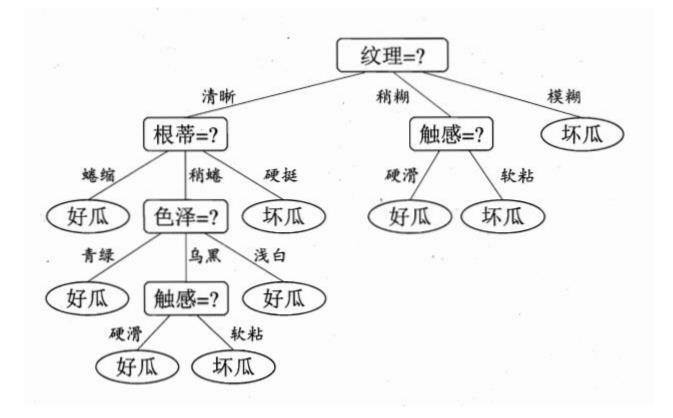
Gain(D, 纹理) = 0.381; Gain(D, 脐部) = 0.289;

Gain(D, 触感) = 0.006.

其中纹理获得了最大的信息增益,将其选择为最优划分。



以此类推, 我们就可以得到整颗决策树





信息增益的缺点:

信息增益对可取数目较多的属性有偏好,比如20个样本中有某个属性能取到20个值,即每个样本可以依靠该属性自成一类,那么显然此时按照该属性进行分类纯度将达到最大。

为了解决这个问题, C4.5决策树算法提出使用增益率 来代替信息增益。





增益率的定义为:

Gainratio
$$(D, a) = \frac{\text{Gain } (D, a)}{\text{IV } (a)}$$

其中

$$IV(a) = -\sum_{v=1}^{V} \frac{|D^{v}|}{|D|} \log_2 \frac{|D^{v}|}{|D|}$$

称为属性的 a 的 "固有值",当取值属性越多,它通常就会越大。



3、基尼指数

基尼值的定义为:

Gini (D)
$$= \sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} \sum_{k' \neq k} p_k p_{k'}$$
$$= 1 - \sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} p_k^2$$

显然基尼值描述了数据集*D*的纯度,即任意抽取两个 样本,它们不一致的概率。



基尼指数就是基尼指在某个属性上的加权平均:

Gini_index
$$(D, a) = \sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} \text{Gini}(D^v).$$

此时最优划分属性为基尼指数最小的属性。

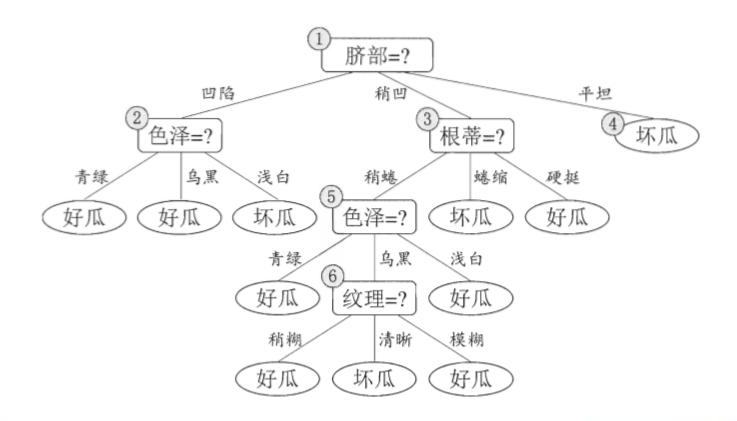


二、剪枝

剪枝是决策树算法中应对过拟合的一种策略,它分为预剪枝和后剪枝。预剪枝为自上而下的剪枝方法,而后剪枝则刚好相反。



1、预剪枝





将西瓜数据分为训练集和验证集

表 4.2 西瓜数据集 2.0 划分出的训练集(双线上部)与验证集(双线下部)

编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
1	青绿	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
2	乌黑	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是是
3	乌黑	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹 .	软粘	是
10	青绿	硬挺	清脆	清晰	平坦	软粘	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	否
17	青绿	蜷缩	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否
编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
5	浅白	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
8	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	硬滑	是
9	乌黑	稍蜷	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦	硬滑	否
12	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	软粘	否
13	青绿	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	否



预剪枝要求我们基于验证集上的精度来判断是否 进行剪枝操作。

将脐部这个叶结点标记为 "好瓜". 用表 4.2 的验证集对这个单结点决策树进行评估,则编号为 {4,5,8} 的样例被分类正确, 另外 4 个样例分类错误,

于是, 验证集精度为 $\frac{3}{7} \times 100\% = 42.9\%$.



若对脐部进行进一步的划分,三个节点的训练样例分别 为{1,2,3,14}、{6,7,15,17}、{10,16} , 此时三个节点分别 被标记为被标记为叶结点 "好瓜"、"好瓜"、"坏 瓜",验证集中 {4,5,8,11,12} 的样例被分类正确,验证集 精度为 $\frac{5}{7} \times 100\% = 71.4\% > 42.9\%$. 于是, 用 "脐部" 进行划分得以确定.



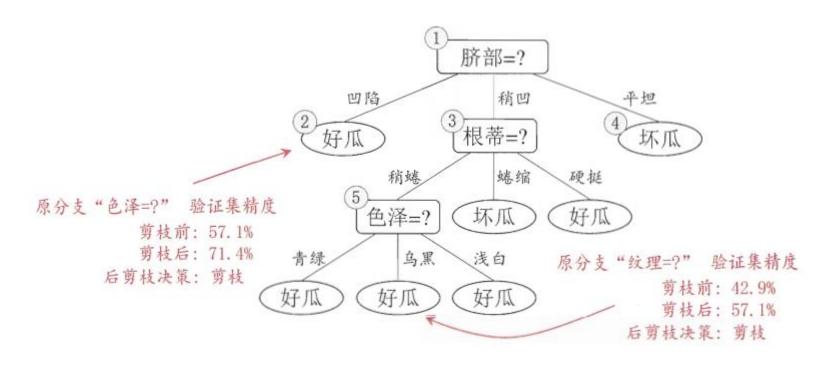
再根据信息增益原则对每个节点进一步划分,若划分后 验证集的精度下降或者不变,则禁止这个划分。最后得 到的仅以脐部进行划分的一棵决策树。 预剪枝的优点在于大量减少了训练时间和验证时间,但 会造成欠拟合的风险,即按某个属性展开后导致的验证 集精度下降是暂时的,可能完全展开后会得到性能更好 的树。



后剪枝先从训练集生成一棵完整决策树,以节点6为例,若将其领衔的分支剪除,则相当于把(6)替换为叶结点.替换后的叶结点包含编号为 {7,15} 的训练样本,于是,该结点的类别标记为"好瓜",此时决策树的验证集精度提高至 57.1%.于是,后剪枝策略决定剪枝。



以此类推考察每个结点,得到





- 三、连续值与缺失值
- 1、连续值处理

对于离散值,我们通常用""=""来描述每个样例的取值,那么很容易想到,对于连续值来说可以用"<"">"来描述该属性的分布。



给定样本集 D 和连续属性 a, 假定 a 在 D 上出现了 n 个不同的取值, 将这 些值从小到大进行排序, 记为 $\{a^1, a^2, ..., a^n\}$. 基于划分点 t 可将 D 分为子集 D_t^- 和 D_t^+ ,其中 D_t^- 包含那些在属性 a 上取值不大于 t 的样本, 而 D_t^+ 则包含 那些在属性 a 上取值大于 t 的样本. 因此, 对 连续属性 a, 我们 可考察包含 n-1 个元素的候选划分点集合

$$T_a = \left\{ \frac{a^i + a^{i+1}}{2} \mid 1 \leqslant i \leqslant n-1 \right\},$$



再根据信息增益再这t-1个点中选择最优划分:

$$Gain (D, a) = \max_{t \in T_a} Gain (D, a, t)$$

$$= \max_{t \in T_a} \operatorname{Ent}(D) - \sum_{\lambda \in \{-,+\}} \frac{\left|D_t^{\lambda}\right|}{|D|} \operatorname{Ent}(D_t^{\lambda}),$$



在之前的数据中加入密度和含糖率

表 4.3 西瓜数据集 3.0

编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	密度	含糖率	好瓜
1	青绿	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	0.697	0.460	是
2	乌黑	蜷缩.	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	0.774	0.376	是
3	乌黑	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	0.634	0.264	是
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	0.608	0.318	是
5	浅白	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	0.556	0.215	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	0.403	0.237	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹	软粘	0.481	0.149	是
8	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	硬滑	0.437	0.211	是
9	乌黑	稍蜷	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	0.666	0.091	否
10	青绿	硬挺	清脆	清晰	平坦	软粘	0.243	0.267	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦	硬滑	0.245	0.057	否
12	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	软粘	0.343	0.099	否
13	青绿	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	0.639	0.161	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	0.657	0.198	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	0.360	0.370	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	0.593	0.042	否
17	青绿	蜷缩	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	0.719	0.103	否



例如对属性"密度", 在决策树学习开始时, 根结点包含的17个训练样本在该属性上取值均不同. 该属性的候选划分点集合包含16个候选值:

T密度 = {0.244,0.294,0.351,0.381,0.420,0.459,0.518, 0.574,0.600,0.621,0.636,0.648,0.661,0.681,0.708,0.746}. 可计算出属性 "密度" 的信息增益为 0.262, 对应于划分点 0.381.



再比较其他属性的信息增益,我们最终可以得到如下的决策树。

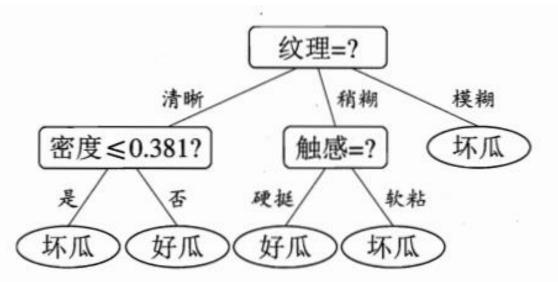


图 4.8 在西瓜数据集 3.0 上基于信息增益生成的决策树



2、缺失值的处理 由于一系列原因,我们得 到的数据往往是不完整的, 如:

表 4.4 西瓜数据集 2.0α

编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
1	_	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
2	乌黑	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	_	是
3	乌黑	蜷缩	_	清晰	凹陷	硬滑	是
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
5	-	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	-	软粘	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹	软粘	是
8	乌黑	稍蜷	浊响	-	稍凹	硬滑	是
9	乌黑	_	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否
10	青绿	硬挺	清脆	_	平坦	软粘	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦		否
12	浅白	蜷缩	_	模糊	平坦	软粘	否
13	_	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	-	软粘	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	否
17	青绿	_	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否



我们需解决两个问题:

- (1) 如何在属性值缺失的情况下进行划分属性选择?
- (2) 给定划分属性, 若样本在该属性上的值缺失, 如何对样本进行划分?



给定训练集 D 和属性 a, 令 \tilde{D} 表示 D 中在属性 a 上没有 缺失值的样本子集. 对问题(1), 显然我们仅可根据 \tilde{D} 来判 断属性 a 的优劣. 假定属性 a 有 V 个 可取值 $\{a^1, a^2, ..., a^V\}$, 令 \tilde{D}^{ν} 表示 \tilde{D} 中在属性 a 上取值为 a^{ν} 的 样本子集, \tilde{D}_k 表示 \tilde{D} 中属于第 k 类 $(k = 1,2,...,|\mathcal{Y}|)$ 的 样本子集, 则显然有 $\tilde{D} = \bigcup_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} \tilde{D}_k$, $\tilde{D} = \bigcup_{v=1}^{V} \tilde{D}^v$.



假定我们为每个样本 x 赋予一个权重 w_x , 并定义

$$\rho = \frac{\sum_{x \in \tilde{D}} w_x}{\sum_{x \in D} w_x}$$

$$\tilde{p}_k = \frac{\sum_{x \in \tilde{D}_k} w_x}{\sum_{x \in \tilde{D}} w_x} \ (1 \leqslant k \leqslant |\mathcal{Y}|),$$

$$\tilde{r}_v = \frac{\sum_{x \in \widetilde{D}^v W_x}}{\sum_{x \in \widetilde{D}} W_x} \ (1 \leqslant v \leqslant V).$$



基于上述定义, 我们可将信息增益的计算推广为

Gain
$$(D, a) = \rho \times \text{Gain } (\tilde{D}, a)$$

= $\rho \times \left(\text{Ent } (\tilde{D}) - \sum_{v=1}^{V} \tilde{r}_v \text{Ent} (\tilde{D}^v) \right),$

其中

Ent
$$(\tilde{D}) = -\sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} \tilde{p}_k \log_2 \tilde{p}_k$$
.



对于问题2,我们可以将属性取值未知的数据以不同概率划入所有子结点中,即将样本权值在与属性值 a^v 对应的子结点 中调整为 $\tilde{r}_v \cdot w_x$



在学习开始时, 根结点包含样本集D中全部 17 个样例, 各样例的权值均为1. 以属性"色泽"为例, 该属性上无缺失值的样例子集 \tilde{D} 包含14个样例. 显然, \tilde{D} 的信息熵为

Ent
$$(\tilde{D}) = -\sum_{k=1}^{2} \tilde{p}_k \log_2 \tilde{p}_k$$

= $-\left(\frac{6}{14}\log_2\frac{6}{14} + \frac{8}{14}\log_2\frac{8}{14}\right) = 0.985.$



令 \tilde{D}^1 , \tilde{D}^2 与 \tilde{D}^3 分别表示在属性 "色泽" 上取值为 "青绿" "乌黑" 以及"浅白"的样本子集, 有

$$\operatorname{Ent}(\tilde{D}^{1}) = -\left(\frac{2}{4}\log_{2}\frac{2}{4} + \frac{2}{4}\log_{2}\frac{2}{4}\right) = 1.000$$

$$\operatorname{Ent}(\tilde{D}^{2}) = -\left(\frac{4}{6}\log_{2}\frac{4}{6} + \frac{2}{6}\log_{2}\frac{2}{6}\right) = 0.918$$

$$\operatorname{Ent}(\tilde{D}^{3}) = -\left(\frac{0}{4}\log_{2}\frac{0}{4} + \frac{4}{4}\log_{2}\frac{4}{4}\right) = 0.000$$



因此, 样本子集 Ď 上属性 "色泽" 的信息增益为

$$Gain(\tilde{D}, \, 色泽) = Ent(\tilde{D}) - \sum_{v=1}^{3} \tilde{r}_v Ent(\tilde{D}^v)$$
$$= 0.985 - \left(\frac{4}{14} \times 1.000 + \frac{6}{14} \times 0.918 + \frac{4}{14} \times 0.000\right) = 0.306$$



于是, 样本集 D 上属性 "色泽"的信息增益为

Gain (D, 色泽) =
$$\rho \times$$
 Gain (\tilde{D} , 色泽) = $\frac{14}{17} \times 0.306$ = 0.252.



类似地可计算出所有属性在 D 上的信息增益:

Gain(D, 色泽) = 0.252; Gain(D, 根蒂) = 0.171

Gain(D, 敲声) = 0.145; Gain(D, 纹理) = 0.424

Gain(D, 脐部) = 0.289; Gain(D, 触感) = 0.006



因此选择纹理为最优划分属性,其中编号为8的样本在纹理上缺失,固以 $\frac{7}{15}$ 、 $\frac{5}{15}$ 和 $\frac{3}{15}$ 的权重划入所有子节点。编号10类似。



四、多变量决策树

若将每一个样本看做是 高维空间中的一个点, 决策树算法的每次划分 都对应这一条与轴平行 的直线,如图

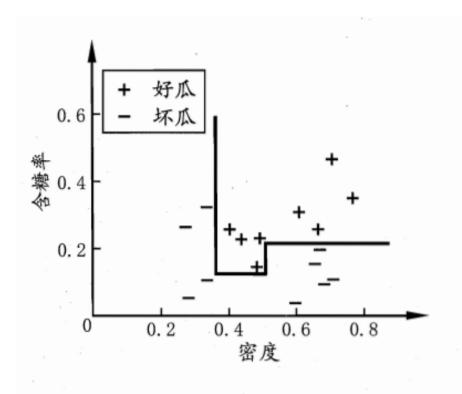


图 4.11 图 4.10 决策树对应的分类边界



如果能使用斜的划分边界,时间成本将大大减少

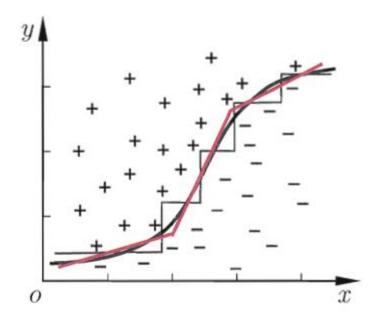


图 4.12 决策树对复杂分类边界的分段近似



"多变量决策树" 就是能实现这样的"斜划分" 甚至更 复杂划分的决策树. 以实现斜划分的多变量决策树为例, 每 个非叶结点是一个形如 $\sum_{i=1}^{d} w_i a_i = t$ 的线性分类器, 其中 w_i 是属性 a_i 的权重, w_i 和 t 可在该结点所含的样本集和 属性集上学得. 于是, 与传统的"单 变量决策树"不同, 在 多变量决策树的学习过程中, 不是为每个非叶结点寻找一 个最优划分属性,而是试图建立一个合适的线性分类器。



以西瓜数据为例

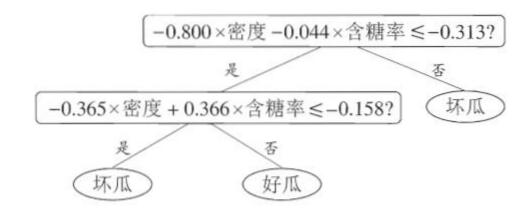


图 4.13 在西瓜数据集 3.0α 上生成的多变量决策树

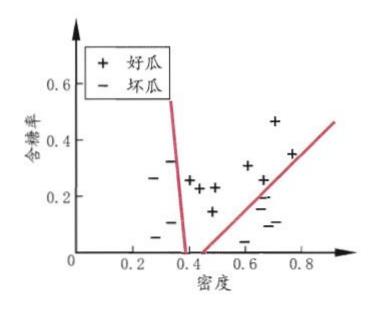


图 4.14 图 4.13 多变量决策树对应的分类边界



Part 3 案例分析



我们使用威斯康星州乳腺癌数据集,该数据集可以从sklearn中导入。

In[4]:

from sklearn.datasets import load_breast_cancer cancer = load_breast_cancer() print("cancer.keys(): \n{}".format(cancer.keys()))

Out[4]:

cancer.keys():

dict_keys(['feature_names', 'data', 'DESCR', 'target',
'target_names'])





Accuracy on test set: 0.937

In[58]:

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn import tree
cancer = load breast cancer()
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
cancer.data, cancer.target, stratify=cancer.target, random_state=42)
a = DecisionTreeClassifier(random state=0)
a.fit(X_train, y_train)
print("Accuracy on training set: {:.3f}".format(a.score(X_train, y_train)))
print("Accuracy on test set: {:.3f}".format(a.score(X_test, y_test)))
Out[58]:
Accuracy on training set: 1.000
```



不出所料, 训练集上的精度是 100%, 这是因为叶结点都 是纯的,树的深度很大,足以完美地记住训练数据的所有 标签。但是这常常会导致过拟合。对新数据的泛化性能不 佳。现在我们将预剪枝应用在决策树上,这可以在完美拟 合训练数据之前阳止树的展开。一种选择是在到达一定深 度后停止树的展开。这里我们设置 max_depth=4, 这意味 着只可以连续问4个问题。限制树的深度可以减少过拟合。 这会降低训练集的精度,但可以提高测试集的精度:



In[59]:

```
a= DecisionTreeClassifier(max_depth=4, random_state=0)
a.fit(X_train, y_train)
print("Accuracy on training set: {:.3f}".format(a.score(X_train, y_train)))
print("Accuracy on test set: {:.3f}".format(a.score(X_test, y_test)))
```

Out[59]:

Accuracy on training set: 0.988

Accuracy on test set: 0.951



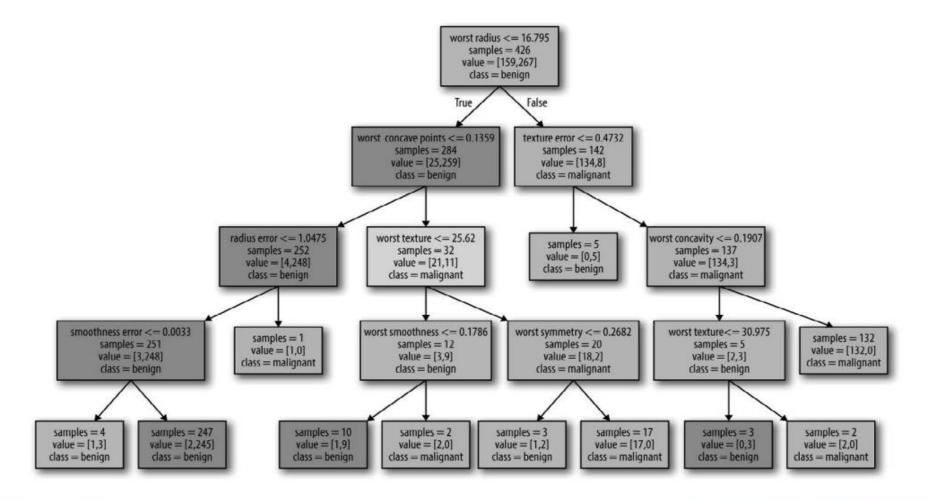


最后我们将数据可视化

In[60]:

a=a.fit(X_train, y_train)
tree.plot_tree(a)







•决策树的一个主要缺点在于经常对训练数据过拟合。随机 森林是解决这个问题的一种方法。随机森林本质上是许多 决策树的集合,其中每棵树都和其他树略有不同。随机森 林背后的思想是,每棵树的预测可能都相对较好,但可能 对部分数据过拟合。如果构造很多树,并且每棵树的预测 都很好,但都以不同的方式过拟合,那么我们可以对这些 树的结果取平均值来降低过拟合。既能减少过拟合又能保 持树的预测能力,这可以在数学上严格证明。



- 随机森林中的每棵树对数据自助采样,并且在指定的特征个数下对特征进行随机选择。这样保证了森林中的每棵树都不相同。
- 对乳腺癌的包含了100棵树的随机森林预测,可以看到在测试集上的准确率要高于单棵决策树。



- In[70]:
- from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
- X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
- cancer.data, cancer.target, random_state=0)
- forest = RandomForestClassifier(n_estimators=100, random_state=0)
- forest.fit(X_train, y_train)
- print("Accuracy on training set: {:.3f}".format(forest.score(X_train, y_train)))
- print("Accuracy on test set: {:.3f}".format(forest.score(X_test, y_test)))
- Out[70]:
- Accuracy on training set: 1.000
- Accuracy on test set: 0.972





THANK YOU