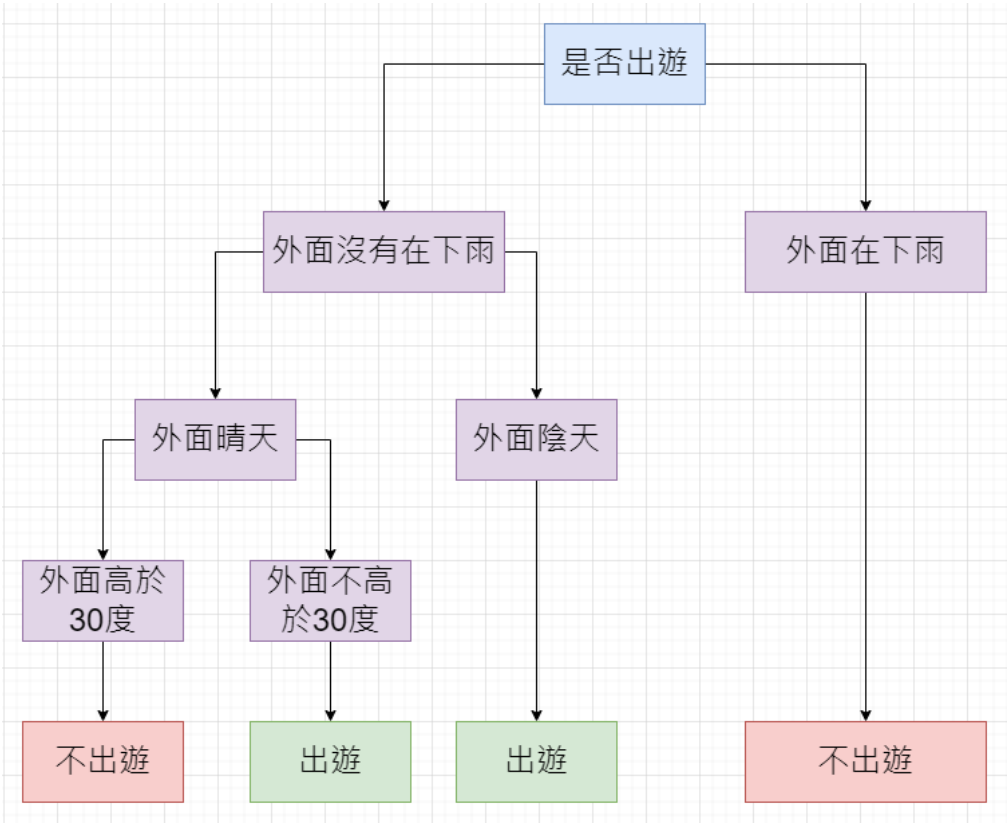
# Decision Tree（決策樹）

> 主要參考資料：
>
> 決策樹 (Decision Tree) Dr. Tun-Wen Pai
>
> Business intelligence and data mining Anil K. Maheshwari, Ph.D.

## 決策樹

決策樹用來對於一個樹狀事件給出一條路線引導出一個決策，例如是否借款，或者更複雜的決策系統。

舉一個生活化的例子，若要決定是否要出遊，則我們可以畫出以下的樹狀事件。




可以發現從「是否出遊」到任意一種出遊決策都是唯一路徑，換言之，在這棵樹上共有 4 條路徑。

對於一個決策系統來說也可能會很複雜，例如判斷手寫數字時，龐大而精確的決策系統能夠有效的幫助我們判斷出手寫的數字。

## 使用決策樹的優點與缺點

> Reference website:

> 1. https://scikit-learn.org/stable/modules/tree.html
> 2. https://zh.wikipedia.org/wiki/%E5%86%B3%E7%AD%96%E6%A0%91%E5%AD%A6%E4%B9%A0

- 優點
  1. 樹可以被視覺化，方便理解
  2. 資料需要被整理，資料的空值不被接受
  3. 任何作出決策的操作都取決於樹的節點數量，且為對數時間複雜度
  4. 支援輸出一種以上的結果（multi-output）
  5. 使用白箱模型，因為決策樹可以簡單解釋決策的來源與邏輯
  6. 可用統計測試來驗證模型
  7. 對於噪聲有很強的控制性

- 缺點
  1. 可能會 overfitting
  2. 因為可能會 overfitting，所以不好實行外推
  3. 優化決策樹是 NP-Complete 問題，優化決策樹無法在多項式時間內解決
  4. 有些概念沒有辦法清楚解釋（例如 XOR）
  5. 資料集的平衡很重要，否則樹可能會被一些資料所支配，產生出帶有偏見的決策樹

# 建立決策樹的方式

我們以一個出遊的資料集為例，如下圖。

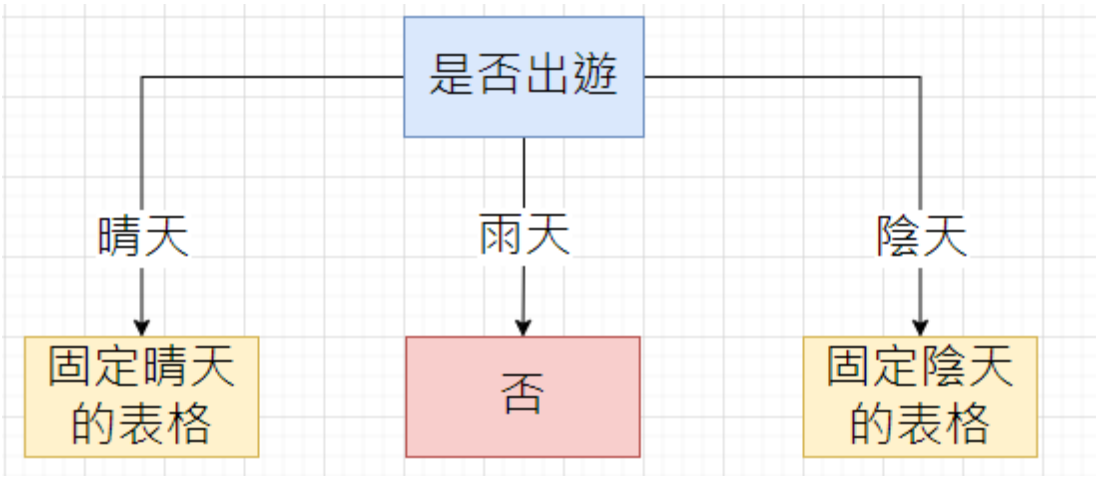
| 天氣 | 溫度 | 天 | 出遊與否 |
|---|---|---|---|
| 晴天 | 熱 | 工作日 | 否 |
| 晴天 | 熱 | 假日 | 否 |
| 晴天 | 冷 | 工作日 | 否 |
| 晴天 | 冷 | 假日 | 是 |
| 晴天 | 溫和 | 工作日 | 否 |
| 晴天 | 溫和 | 假日 | 是 |
| 陰天 | 熱 | 工作日 | 否 |
| 陰天 | 熱 | 假日 | 否 |
| 陰天 | 冷 | 工作日 | 否 |
| 陰天 | 冷 | 假日 | 是 |
| 陰天 | 溫和 | 工作日 | 否 |
| 陰天 | 溫和 | 假日 | 是 |
| 雨天 | 熱 | 工作日 | 否 |
| 雨天 | 熱 | 假日 | 否 |
| 雨天 | 冷 | 工作日 | 否 |
| 雨天 | 冷 | 假日 | 是 |
| 雨天 | 溫和 | 工作日 | 否 |
| 雨天 | 溫和 | 假日 | 是 |

決策樹是一種層級式的分支結構，我們可以分割表格，來計算錯誤合計。

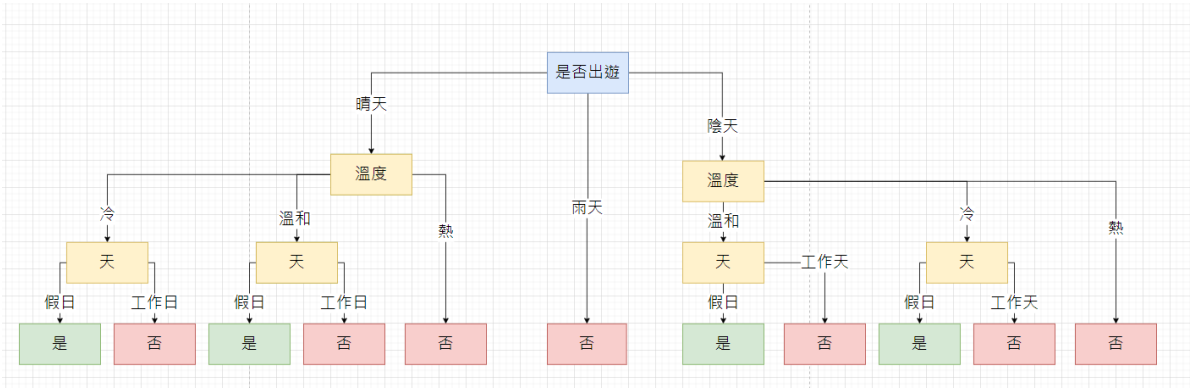
我們將現有資訊加上規則，可以得到以下的表格，可以看出錯誤統計均是 4/18，因此我們可以任意選擇一個來建樹。

| 屬性 | 規則 | 錯誤 | 錯誤總和 |
|---|---|---|---|
| 天氣 | 晴天->是 | 2/6 | 4/18 |
| | 陰天->是 | 2/6 | |
| | 雨天->否 | 0/6 | |
| 溫度 | 熱->否 | 0/6 | 4/18 |
| | 溫和->是 | 2/6 | |
| | 冷->是 | 2/6 | |
| 天 | 假日->是 | 4/9 | 4/18 |
| | 工作日->否 | 0/9 | |

例如我們選擇天氣，可以得到以下的事件樹狀圖。




按照同樣方式進行推廣，可以得到以下的樹狀結構。




這樣有點智障，因為晴天跟陰天應該可以合併，且冷跟溫和也該可以合併。

一個決策樹主要基於分支準則、停止條件與修剪而有所不同，也因此衍伸出了決策樹演算法。

## 決策樹演算法

主要分成：ID3、CART、CHAID，這份筆記主要會講解 ID3、CART 演算法。

# ID3 演算法

## *Entropy*

Entropy（資訊熵），一種量化資料同源的數值，介於 0 ~ 1 之間。

若一個資料是絕對同源，則 Entropy = 0，若一個資料絕對異源，則 Entropy = 1。

定義一個樣本的 Entropy 為：

$$Entropy(S) = -\sum_i P(x_i)\log_2(P(x_i)) - \sum_i Q(x_i)\log_2(Q(x_i))$$

其中 $\lim_{p\to 0} p\log p = 0$。

## *Information Gain*

Information Gain（訊息增益）為資訊熵經過分割 Attribute 後所減少的數值，介於 0 ~ 1 之間。

當我們在分割樹的時候，我們會選擇 Infomation Gain 大的來當作我們的父節點或根節點，若 Entropy = 0 時則為子節點。

我們可以定義一個樣本在分割成一個 Attribute 之後的 Infomation Gain 為

$$IG(S,A) = Entropy(S) - \sum_{v\in D_A}\frac{|S_v|}{|S|}Entropy(S_v)$$

## *優缺點*

- 優點：
  1. 好理解決策的邏輯，因為可以畫成一棵樹
  2. 建立迅速
  3. 建立較小的樹
  4. 只需要足夠數量的測試資料
  5. 只需要測試足夠多的屬性來讓所有資料都被分類
  6. 在分類測試資料時可以被修剪，利於減少測試數量
  7. 使用整個資料集，搜索空間完整
- 缺點
  1. 會因為測試資料過小導致 over-fitted 跟 over-classified，不利於推廣預測。
  2. 每次預測只測試一個 Attribute。
  3. 測試連續資料可能會導致大量運算，產生大量的樹。

## *範例*

以這張圖為範例，利用 ID3 來建立決策樹。

| outlook | temperature | humidity | wind | play |
|---|---|---|---|---|
| sunny | hot | high | false | no |
| sunny | hot | high | true | no |
| overcast | hot | high | false | yes |
| rainy | mild | high | false | yes |
| rainy | cold | normal | false | yes |
| rainy | cold | normal | true | no |
| overcast | cold | normal | true | yes |
| sunny | mild | high | false | no |
| sunny | cold | normal | false | yes |
| rainy | mild | normal | false | yes |
| sunny | mild | normal | true | yes |
| overcast | mild | high | true | yes |
| overcast | hot | normal | false | yes |
| rainy | mild | high | true | no |

首先先計算 $Entropy(Play)$，也就是

$$Entropy(Play) = -\frac{9}{14}\log_2\frac{9}{14} - (\frac{5}{14}\log_2\frac{5}{14}) \approx 0.94$$

接著可以考慮

1. 三種不同類型的 Outlook 所產生出來的 $Entropy(Play, Outlook)$

   $Entropy(Sunny) = -\frac{2}{5}\log_2(\frac{2}{5}) - \frac{3}{5}\log_2(\frac{3}{5}) \approx 0.97$

   $Entropy(Overcast) = -\frac{4}{4}\log_2(\frac{4}{4}) - \frac{0}{4}\log_2(\frac{0}{4}) = 0$

   $Entropy(Rainy) = -\frac{3}{5}\log_2(\frac{3}{5}) - \frac{2}{5}\log_2(\frac{2}{5}) \approx 0.97$

   $Entropy(Play, Outlook) = \frac{5}{14}Entropy(Sunny) + \frac{4}{14}Entropy(Overcast) + \frac{5}{14}Entropy(Rainy) = 0.6936$

2. 三種不同類型的 Temperature 所產生出來的 $Entropy(Play, Temperature)$

   $Entropy(Hot) = -\frac{2}{4}\log_2(\frac{2}{4}) - \frac{2}{4}\log_2(\frac{2}{4}) = 1$

   $Entropy(Mild) = -\frac{2}{6}\log_2(\frac{2}{6}) - \frac{4}{6}\log_2(\frac{4}{6}) \approx 0.92$

   $Entropy(Cold) = -\frac{3}{4}\log_2(\frac{3}{4}) - \frac{1}{4}\log_2(\frac{1}{4}) \approx 0.81$

   $Entropy(Play, Temperature) \approx 0.911$

3. 兩種不同類型的 Humidity 所產生出來的 $Entropy(Play, Humidity)$

   $Entropy(High) = -\frac{3}{7}\log_2(\frac{3}{7}) - \frac{4}{7}\log_2(\frac{4}{7}) \approx 0.985$

   $Entropy(Normal) = -\frac{6}{7}\log_2(\frac{6}{7}) - \frac{6}{7}\log_2(\frac{6}{7}) \approx 0.592$

   $Entropy(Play, Humidity) \approx 0.7885$

4. 兩種不同類型的 Wind 所產生出來的 $Entropy(Play, Wind)$

$$Entropy(True) = -\frac{3}{6}\log_2(\frac{3}{6}) - \frac{3}{6}\log_2(\frac{3}{6}) = 1$$

$$Entropy(False) = -\frac{6}{8}\log_2(\frac{6}{8}) - \frac{2}{8}\log_2(\frac{2}{8}) \approx 0.811$$

$$Entropy(Play, Wind) \approx \frac{6}{14} \times 1 + \frac{8}{14} \times 0.811 \approx 0.892$$

我們可以分別算出，分支這四種類型所產生的 $InformationGain$，得到

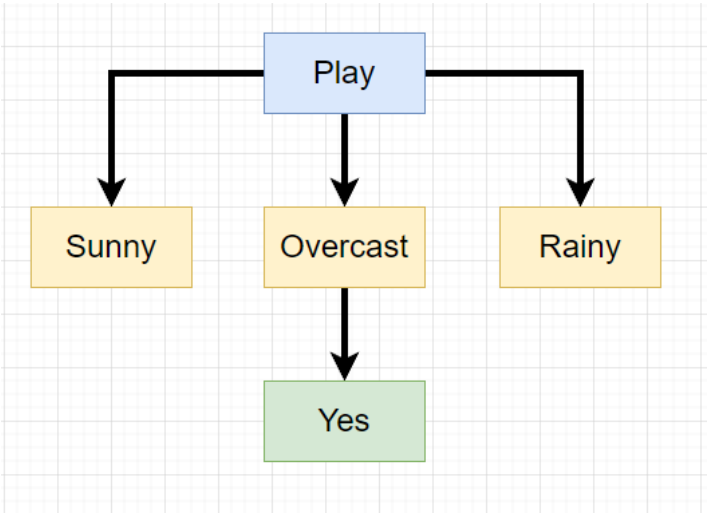
$IG(Outlook) = Entropy(Play) - Entropy(Play, Outlook) = 0.2464$

$IG(Temperature) = Entropy(Play) - Entropy(Play, Temperature) \approx 0.029$

$IG(Humidity) = Entropy(Play) - Entropy(Play, Humidity) \approx 0.1515$

$IG(Wind) = Entropy(Play) - Entropy(Play, Wind) \approx 0.048$

我們挑 $IG$ 最高的當作分支條件，所以 $Outlook$ 先分支，如圖。




接著我們考慮 Sunny，得到

1. 三種不同類型的 temperature。

$$Entropy(Hot) = -\frac{0}{2}\log_2\frac{0}{2} - \frac{2}{2}\log_2\frac{2}{2} = 0。$$

$$Entropy(Mild) = -\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} = 1$$

$$Entropy(Cold) = -\frac{1}{1}\log_2\frac{1}{1} - \frac{0}{1}\log_2\frac{0}{1} = 0$$

可以得到 $Entropy(Sunny, Temperature) = \sum_i P(x_i)Entropy(x_i) = \frac{2}{5}$

2. 兩種不同類型的 humidity。

$$Entropy(High) = -\frac{0}{3}\log_2\frac{0}{3} - \frac{3}{3}\log_2\frac{3}{3} = 0$$

$$Entropy(Normal) = -\frac{0}{2}\log_2\frac{0}{2} - \frac{2}{2}\log_2\frac{2}{2} = 0$$

可以得到 $Entropy(Sunny, Humidity) = \sum_i P(x_i)Entropy(x_i) = 0$

3. 兩種不同類型的 wind。

$$Entropy(True) = -\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} = 1$$

$$Entropy(False) = -\frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3} - \frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3} = 0.918$$

可以得到 $Entropy(Sunny, Wind) = \sum_i P(x_i)Entropy(x_i) = 0.9508$

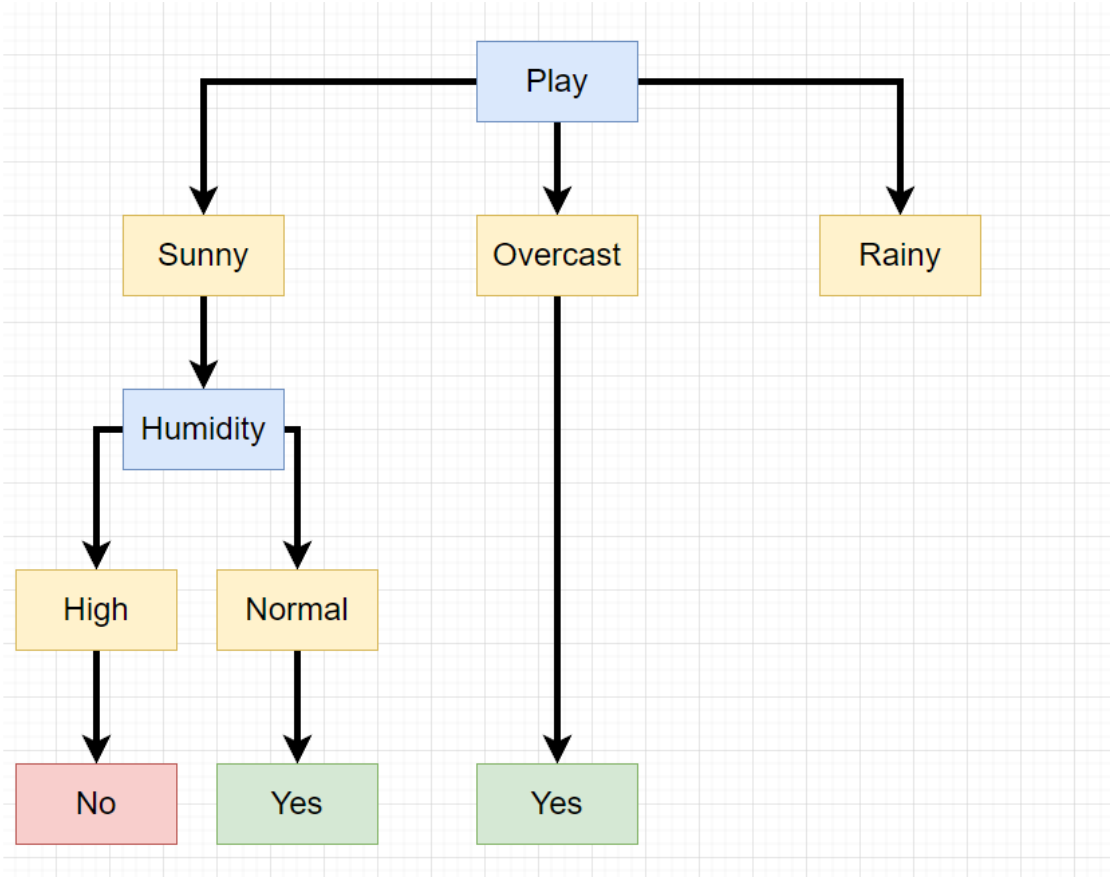
可以分別算出這三種分支的 Infomation Gain，也就是

$IG(Temperature) = Entropy(Sunny) - Entropy(Sunny, Temperature) = 0.57$

$IG(Humidity) = Entropy(Sunny) - Entropy(Sunny, Humidity) = 0.97$

$IG(Wind) = Entropy(Sunny) - Entropy(Sunny, Wind) = 0.0192$

選擇 Infomation Gain 最高的來分支，得到下圖。




接著我們考慮 Rainy，得到

1. 兩種不同類型的 temperature。

   $Entropy(Mild) = -\frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3} - \frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3} = 0.918$

   $Entropy(Cold) = -\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} = 1$

   $Entropy(Rainy, Temperature) = \frac{3}{5}Entropy(Mild) + \frac{2}{5}Entropy(Cold) = 0.951$

2. 兩種不同類型的 humidity。

   $Entropy(High) = -\frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} = 1$

   $Entropy(Normal) = -\frac{2}{3}\log_2\frac{2}{3} - \frac{1}{3}\log_2\frac{1}{3} = 0.918$

   $Entropy(Rainy, Humidity) = \frac{2}{5}Entropy(High) + \frac{3}{5}Entropy(Normal) = 0.951$

3. 兩種不同類型的 wind。

   $Entropy(True) = -\frac{0}{2}\log_2\frac{0}{2} - \frac{2}{2}\log_2\frac{2}{2} = 0$

$$Entropy(False) = -\frac{3}{3}\log_2\frac{3}{3} - \frac{0}{3}\log_2\frac{0}{3} = 0$$

$$Entropy(Rainy, Wind) = \frac{2}{5}Entropy(True) + \frac{3}{5}Entropy(False) = 0$$

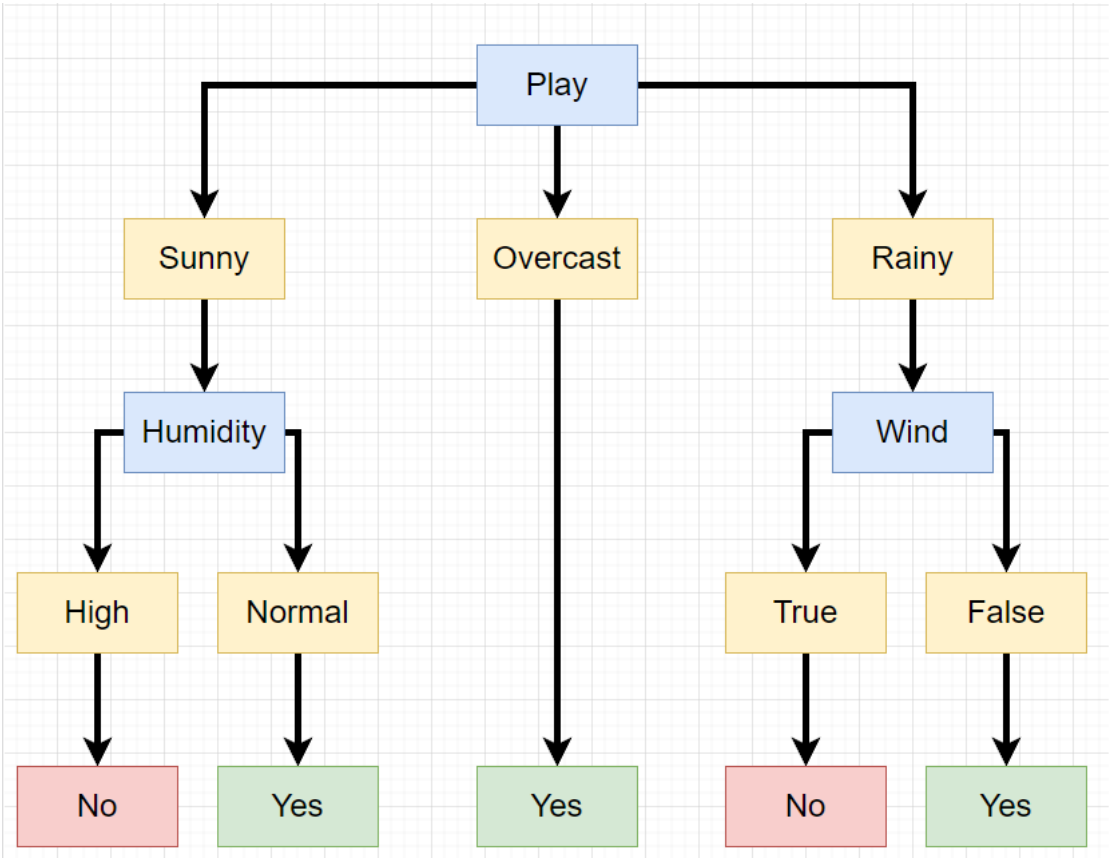
可以分別算出這三種分支的 Information Gain，如下：

$IG(Temperature) = Entropy(Rainy) - Entropy(Rainy, Temperature) = 0.97 - 0.951 = 0.019$

$IG(Humidity) = Entropy(Rainy) - Entropy(Rainy, Humidity) = 0.97 - 0.951 = 0.019$

$IG(Wind) = Entropy(Rainy), Entropy(Rainy, Wind) = 0.97 - 0 = 0.97$

選擇 Information Gain 大的當作分支，得到下圖。




此時決策樹已建立完成。

# CART 演算法

> Reference:
>
> 1. https://ppt.cc/feiiIx
> 2. https://www.youtube.com/watch?v=qrDzZMRm_Kw

## *CART 演算法*

一個基於吉尼不純度係數 (Gini Impurity) 作為分割標準的分類演算法，先前提到的 ID3 是基於 Information Gain。

演算法主要運行如下：

1. 尋找最佳特徵分割方式，例如有 K 種特徵，必有 K-1 種分割方式，對於每一種分割方式算出吉尼不純度係數，

並選擇最大的吉尼不純度係數分割方式。

2. 尋找最佳的節點分割方式
3. 繼續分割，直到達到結束條件。

### *CART - Entropy*

對於一個 CART 演算法，其 Entropy 算法與 ID3 相同，定義如下。

$$Entropy(A) = -\sum_{k=1}^{m} p_k \log_2(p_k)$$

其中 $0 \leq Entropy(A) \leq 1$，當 $Entropy(A) = 0$ 時則代表完全分類，$Entropy(A) = 1$ 時則代表完全不分類。

### *CART - Gini Impurity*

對於一個 CART 演算法的分割標準，主要以吉尼不純度係數（Gini Impurity）來做參考標準，定義如下。

$$GI(A) = 1 - \sum_{k=1}^{m} p_k^2$$

其中 $0 \leq GI(A) \leq 1 - \frac{1}{m}$，當 $GI(A) = 0$ 時，所有資料都被歸類在同一類，$GI(A) = 1 - \frac{1}{m}$ 時所有類別均不分類。

### *CART - 範例*

> 待補

### *CART - 迴歸樹*

> 待補

## 決策樹的 Overfitting 問題

決策樹其中一個問題就是很容易 overfitting。

### *Overfitting 簡介*

Overfitting 就是過度擬合，也就是對於一個訓練資料集，只對資料集的資料有作用，不利於推廣更多資料。

如果看不懂上面的文字，可以看下面找到的一張圖。


由於只對資料集的資料有作用，因此若在預判不是資料集的資料時，很容易出現預判失敗的問題。

## *迴避 Overfitting 的方法*

迴避 Overfitting 可以使用剪枝來迴避，分成先剪枝（prepruning）與後剪枝（postpruning）。

1. 先剪枝：可以設定一個條件，使得後面的子樹停止構建，當前的節點變成葉節點。
2. 後剪枝：先建照一個完整的決策樹，再將這個樹進行修剪。

當然，資料集也很重要，所以如同 data mining 一樣，需要對資料集的品質有所把持。