1. 트리 (tree):

1) node와 edge로 구성. 계층적 구조를 표현하기 위한 자료 구조.

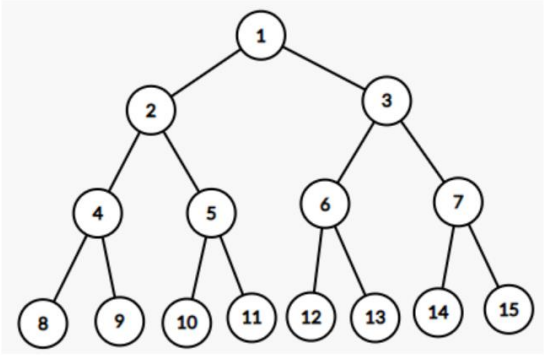
2) Edge는 node와 node를 연결한 선.

3) 맨 꼭대기 node는 root 노드. 자식이 없는 node를 leaf node.

4) 최대 두개의 자식을 갖는 트리를 이진 트리 (binary tree)라고 한다.

5) 트리의 depth: root노드로부터 특정 node까지의 경로 상의 edge 수

예: root node는 node 1, node 1의 자식 node는 node 2와 node 3, node 2의 부모는 node 1



<이진 트리의 예>

6) 실생활에서 tree 구조의 대표적 예

윈도우 파일 탐색기.

디렉토리 (node), 파일 (leaf node)

상위 디렉토리와 하위 디렉토리는: 부모와 자식 관계

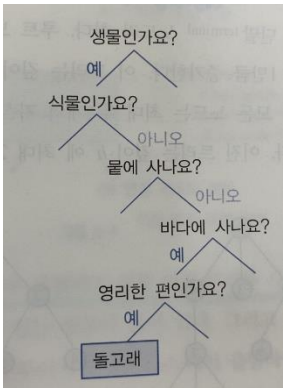
```
C:\
 ├── Program Files
 │    ├── Application1
 │    └── Application2
 ├── Users
 │    ├── User1
 │    └── User2
 └── Windows
```

2. 결정 트리 (decision tree):

1) 자료구조에서 나오는 트리 (tree) 구조를 사용한 머신 러닝 (ML)모델.

2) 훈련 데이터에 대하여 자동으로 질문을 만들어 새로운 데이터를 분류 또는 값을 예측.

3) 쉽게 생각하면 아래 그림과 같은 "스무 고개 놀이". 이것도 트리구조 이다. 훈련 (학습) 데이터를 통해 만들고 새로운 데이터를 예측하는 모델이다.



4) 결정 트리의 경우 대부분 이진 트리 형태

5) 결정 트리는 머신 러닝 방법 중에서 분류기에서 가장 많이 쓰이는 방법 중의 하나인 random forest 기본이 되는 방법으로 반드시 알아야 하는 중요한 방법.

6) 결정 트리는 non-parametric model (비모수적 모델)에 속함. 학습하기 전에 미리 정해진 파라미터의 수를 가정하지 않음.

7) 대표적인 parametric model은 linear regression (선형 회귀). 입력 데이터 (X)와 출력 데이터 (Y)간의 특정 형태를 가정. 예측해야 하는 파라미터가 고정되어 있음. y=aX+b

9) Scikit-learn의 decision tree 설명: 1.10. Decision Trees — scikit-learn 1.3.0 documentation

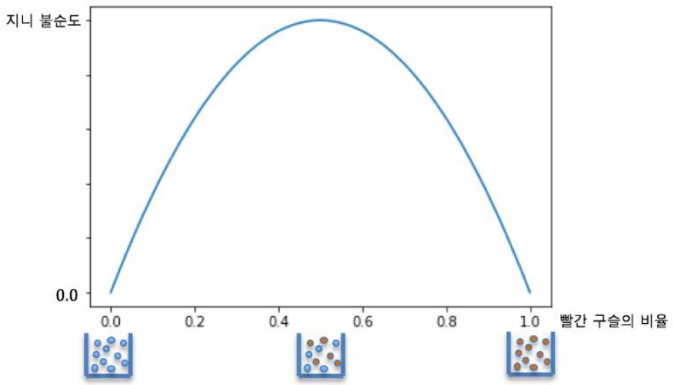
3. 지니 불순도 (Gini impurity): decision tree에는 지니 불순도라는 개념이 등장한다.

1) 지니 불순도란 어떤 집합의 "순도 (purity)" 혹은 동질성을 측정

2) 아래 예를 보면 항아리에 10개의 구슬이 있다. 항아리 1은 파란색 구슬만 있음 (불순도=0). 항아리 3은 빨간색 구슬만 있음 (불순도=0).

3) 항아리 2는 빨간색 반, 파란색 반. 빨간 구슬의 비율이 1/2. 불순도가 가장 높음

4) 아래 그림을 보면 빨간 구슬의 비율이 0이거나 1일 경우 불순도=0이다. 빨간 구슬과 파란 구슬이 반반씩 섞인 경우 불순도가 0.5로 가장 큼. 즉, 순도가 가장 낮음



4. 지니 불순도 측정 수식: 결정 트리에서 i번째 node의 Gini 불순도 측정

$$G_i = 1 - \sum_{k=1}^{n} p_{i,k}^2$$

$p_{i,k}$: i번째 node에 있는 훈련 sample중 class k에 속한 sample의 비율

- 쉽게 생각하면 해당 node에서 class들이 혼합되어진 정도

5. 간단한 지니 불순도 측정 예: 어떤 노드 T에 9개의 sample이 있고 총 3개의 class가 있다. 9개의 sample 중에 class 1인 sample이 3개, class 2인 sampled 4개, class 3인 sample이 2개. 이 노드의 Gini 불순도 계산

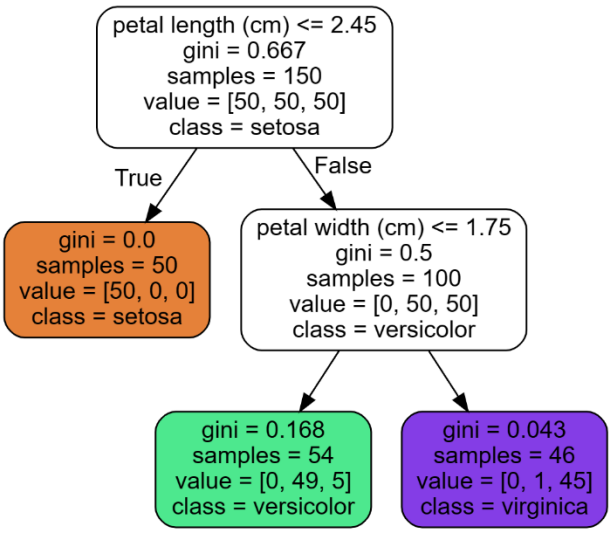
$$1 - (3/9)^2 - (4/9)^2 - (2/9)^2 \approx 0.642$$

- Q: 만일 노드 T에 9개의 sample이 있고 총 3개의 class가 있는데 9개의 sample이 모두 class 1이면. 이때의 지니 불순도는? 0

6. (실습) Iris dataset: iris dataset에 대한 설명.

1) 150개의 sample로 구성, 3개의 class (setosa, versicolor, virginica), 4개의 특징: sepal length (꽃받침 길이), sepal width (꽃받침 너비), petal length (꽃잎 길이), petal width (꽃잎 너비).

8. (실습) Iris dataset에 대한 결정 트리 분류기 학습 및 적용 예 (max_depth=2)



- Tree 구조에서 depth란: node가 root node로부터 얼마나 떨어져 있다?

- Tree 구조의 max depth: 최대 깊이

- Iris dataset에 대한 ML 결정 트리 적용 예

1) 먼저 root node에서 시작

2) root node에서 petal length가 2.45cm보다 짧은지 질문 (지니 불순도 0.67)

3) petal length가 2.45cm보다 짧으면 왼쪽 자식 node로 이동

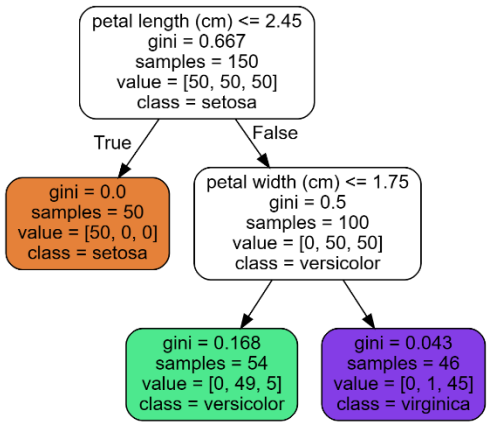
4) 이 경우 node가 leaf node이므로 추가적인 질문을 하지 않음. 지니 불순도가 0임 예측 시 Node에 있는 예측 class를 보고 결정 트리가 새로 발견한 꽃의 품종을 Setosa라고 판단함

- 첫번째 질문으로 Setosa class를 완벽하게 분리할 수 있다는 것을 의미함

5) root node에서 petal length가 2.45cm보다 크면 오른쪽 자식 node로 이동. 이 경우에는 leaf node가 아니기 때문에 추가로 질문. 지니 불순도=0.5. petal width가 1.75cm보다 작은가?.

6) 참이라면 꽃의 품종을 versiclolor로 판단. 거짓이라면 virginica로 판단.

9. (실습) 위의 예에서 결정 트리의 각 node의 속성들



1) node의 sample 속성: 얼마나 많은 훈련 sample이 적용되었는지 따짐.

- 주황색 node: 전체 150개의 sample 중 50개의 훈련 sample이 petal length가 2.45cm보다 짧거나 같다.

- 100개의 훈련 sample이 petal length가 2.45cm보다 크다. 그중 54개의 sample이 petal width가 1.75cm보다 짧거나 같고 46개의 sample이 petal width가 1.75cm보다 길다.

2) node의 value 속성: 각 node에서 각각의 class에 얼마나 많은 sample이 있는지

- Value=[setosa, versicolor, virginica]

- root node: value=[50, 50, 50]. setosa=50개, versicolor=50개, virginica=50개

- 보라색 node: value=[0, 1, 45]. setosa=0개, vericolor=1개, virginica=45개

3) node의 Gini 속성: 각 node의 Gini 불순도 측정

- 한 노드의 모든 sample이 같은 class (주황색 node): Gini 불순도=0

- Q: root node의 Gini 불순도: 1-(1/3)^2-(1/3)^2-(1/3)^2=2/3=0.667

10. 결정 트리 훈련 알고리즘: CART 알고리즘

1) 기본 idea: 최대한 각 자식 node (subset)가 불순도가 낮도록 (즉, 동일한 class를 갖도록) 분류해야 한다. 즉, 그런 특징 (feature)과 그 경계값을 선택해야 한다. 불순도가 낮다는 것은 한 node에 동질의 class들끼리 있다는 것이고 그래야 분류가 잘된 것이다.

3) 어떻게? 각 특징에 대해서 분류 후에 Gini 불순도 계산. 그 중에 어떤 특징으로 분류했을 때 Gini 불순도가 가장 낮아지는지 따진다. 그 특징으로 가장 먼저 나눈다.

- 구체적으로 아래 J를 최소화 하는 특징 선택

$$J = \frac{m_{left}}{m} G_{left} + \frac{m_{right}}{m} G_{right}$$

G_{left}: 왼쪽 subset의 불순도, G_{right}: 오른쪽 subset의 불순도

m_{left}: 왼쪽 subset의 sample수, m_{right}: 오른쪽 subset의 sample 수

4) 최초에 Gini 불순도가 가장 낮아지는 feature를 결정 트리의 root node로 둔다.

5) 이를 각각의 자식 node에 대해서도 recursive하게 반복

6) 언제 멈춤: 최초에 정해진 max_depth (tree의 깊이) 까지

11. CART 알고리즘 예제

CART 알고리즘은 각 Feature에 대해 가능한 모든 분할을 테스트하고, **지니 불순도(Gini Impurity)** 를 최소화하는 분할을 선택합니다.

분할을 반복하여 재귀적으로 트리를 확장합니다.

CART 알고리즘 예제 (3개의 Feature)

문제

학생들이 시험에 합격(Pass)할지 실패(Fail)할지를 예측하는 문제입니다. 학생 데이터는 다음과 같고, Feature는 세 개입니다:

공부 시간(Hours)	과목 선호도(Preference)	집중도(Attention)	시험 결과(Pass/Fail)
2	5	4	Fail
3	7	3	Fail
6	6	7	Pass
8	9	8	Pass
4	4	5	Fail

Feature 1: 공부 시간(Hours)
분할 예시: $\text{Hours} \leq 4$와 $\text{Hours} > 4$

1. **왼쪽 그룹 ($\text{Hours} \leq 4$)**: [2, 3, 4] → 결과: [Fail, Fail, Fail]
   - 지니 불순도:
   $$G_{\text{left}} = 1 - (1^2 + 0^2) = 0$$
2. **오른쪽 그룹 ($\text{Hours} > 4$)**: [6, 8] → 결과: [Pass, Pass]
   - 지니 불순도:
   $$G_{\text{right}} = 1 - (0^2 + 1^2) = 0$$
3. **전체 지니 불순도(가중 평균)**:
   $$G_{\text{total}} = \frac{3}{5} \cdot 0 + \frac{2}{5} \cdot 0 = 0$$

분석: 이 분할에서 지니 불순도는 완벽히 0입니다.

Feature 2: 과목 선호도(Preference)
분할 예시: $\text{Preference} \leq 6$와 $\text{Preference} > 6$

1. **왼쪽 그룹 ($\text{Preference} \leq 6$)**: [5, 7, 6, 4] → 결과: [Fail, Fail, Pass, Fail]
   - 클래스 비율: Fail = $\frac{3}{4}$, Pass = $\frac{1}{4}$
   - 지니 불순도:
   $$G_{\text{left}} = 1 - \left(\left(\frac{3}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2 \right) = 1 - \left(\frac{9}{16} + \frac{1}{16} \right) = \frac{6}{16} = 0.375$$
2. **오른쪽 그룹 ($\text{Preference} > 6$)**: [9] → 결과: [Pass]
   - 지니 불순도:
   $$G_{\text{right}} = 1 - (1^2 + 0^2) = 0$$
3. **전체 지니 불순도(가중 평균)**:
   $$G_{\text{total}} = \frac{4}{5} \cdot 0.375 + \frac{1}{5} \cdot 0 = 0.3$$

분석: 이 분할에서 지니 불순도는 0.3으로 비교적 낮지만, 공부 시간보다 덜 효과적입니다.

Feature 3: 집중도(Attention)
분할 예시: $\text{Attention} \leq 5$와 $\text{Attention} > 5$

1. **왼쪽 그룹 ($\text{Attention} \leq 5$)**: [4, 3, 5] → 결과: [Fail, Fail, Fail]
   - 지니 불순도:
   $$G_{\text{left}} = 1 - (1^2 + 0^2) = 0$$
2. **오른쪽 그룹 ($\text{Attention} > 5$)**: [7, 8] → 결과: [Pass, Pass]
   - 지니 불순도:
   $$G_{\text{right}} = 1 - (0^2 + 1^2) = 0$$
3. **전체 지니 불순도(가중 평균)**:
   $$G_{\text{total}} = \frac{3}{5} \cdot 0 + \frac{2}{5} \cdot 0 = 0$$

분석: 이 분할에서도 지니 불순도는 0입니다.

3단계: 최적 분할 선택

모든 Feature에 대해 지니 불순도를 계산한 결과:

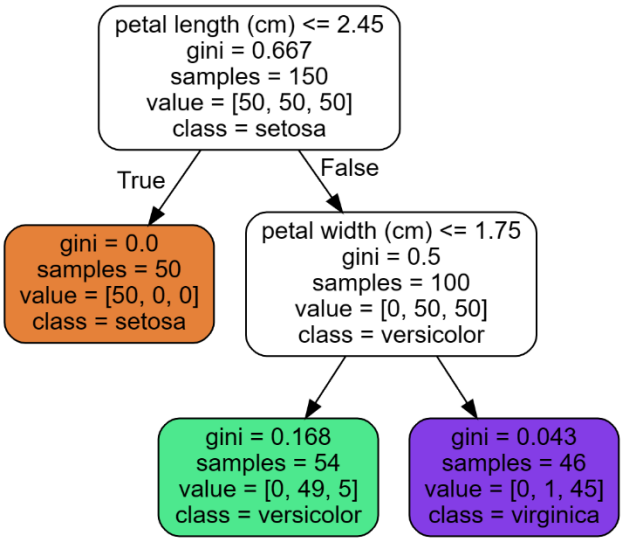
- 공부 시간(Hours): $G_{\text{total}} = 0$
- 과목 선호도(Preference): $G_{\text{total}} = 0.3$
- 집중도(Attention): $G_{\text{total}} = 0$

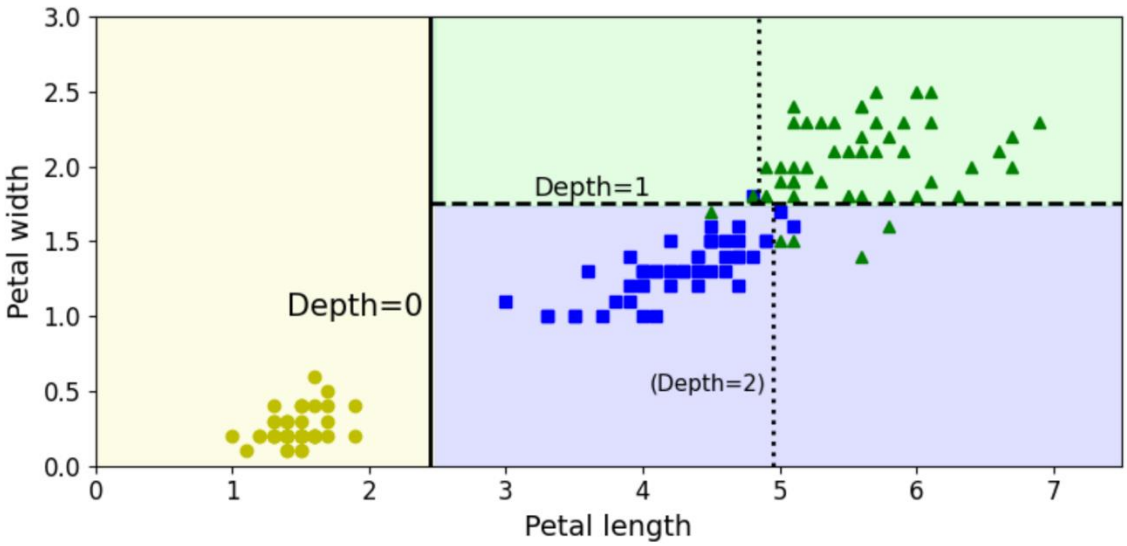
→ 공부 시간(Hours) 또는 집중도(Attention)가 최적의 분할 기준입니다. 여기서는 공부 시간(Hours)을 선택합니다.

4단계: 트리 확장

공부 시간(Hours)을 기준으로 트리를 나누고, 각 그룹에서 다시 CART 알고리즘을 반복합니다.

12. (실습) 결정 트리를 사용한 결정경계 시각화





1) Depth 0에서의 결정 경계: Petal length = 2.45cm

2) 왼쪽은 Iris-setosa만 있어서 더 나눌게 없음

3) 오른쪽은 Petal width 1.75cm에서 나눠짐. 1.76cm보다 작으면 versicolor, 크면 virginica

4) Max_depth를 2로 했기 때문에 결정트리는 더 이상 분할되지 않음

5) 만일, max_depth가 3이면 깊이 2의 두 node가 각각 결정 경계를 추가로 만듭니다 (점선 부분)

---

13. Decision tree의 동작

1) 데이터 준비

2) 트리 구조 준비: root node (트리 시작점)

3) 특징 선택 및 분할: CART 알고리즘으로 node의 지니 불순도를 최소화하도록 분할

4) 트리를 반복적으로 분할. 데이터가 더 이상 분할할 수 없을 때 leaf 노드 생성

5) 특정 종료 조건에 다다르면 트리 생성 멈춤

예: 1. 노드에 있는 데이터들이 모두 같은 class

2. 사전 설정된 "최대 깊이" 도달

3. 사전 설정된 "최초 샘플 수 조건" (노드에 있는 데이터가 너무 적음) 만족

4. 분할로 인한 지니 불순도의 변화가 미미함등

---

14. Overfitting 문제 and regularization (규제):

1) overfitting 문제: 머신 러닝 모델이 훈련 데이터에 과하게 너무 맞춰져서, 새로운 데이터에 대한 일반화 (generalization) 능력이 떨어지는 것. 훈련 데이터에는 높은 성능을 보이지만 새로운 데이터에 대해서는 성능이 낮은 문제

2) 결정 트리는 overfitting문제에 취약할 수 있음. 훈련 데이터에 맞춰서 너무 세분화된 결정경계가 만들어 질 수 있음. 이 경우에 일반화 능력이 떨어질 수 있음.

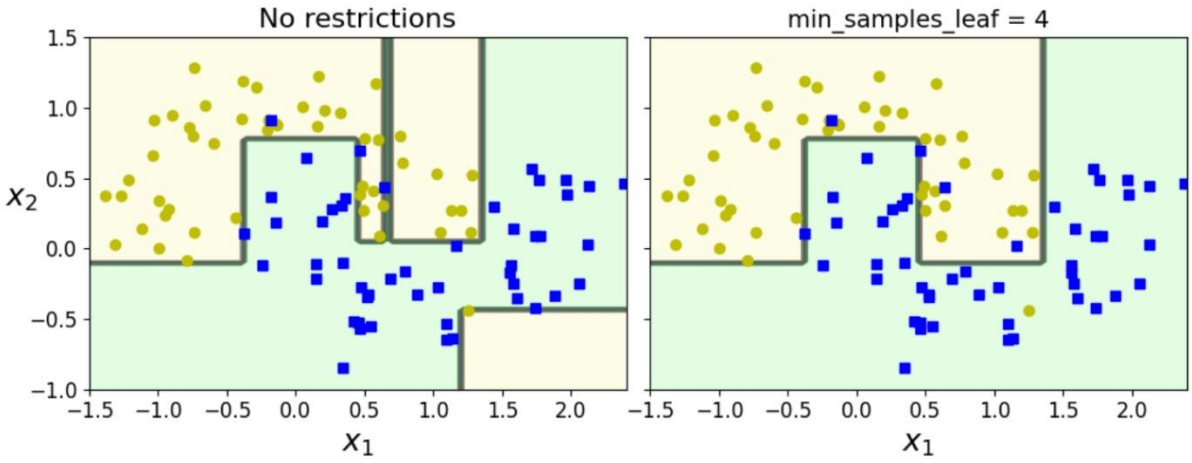
3) 간단한 규제 방법은 결정 트리의 최대 깊이 (max_depth)를 두어 제어 가능. 너무 많은 질문을 하

지 못하게 함.

15. (실습) Overfitting

왼쪽 그림: 규제가 없음. 훈련 데이터에 지나치게 overfitting됨.

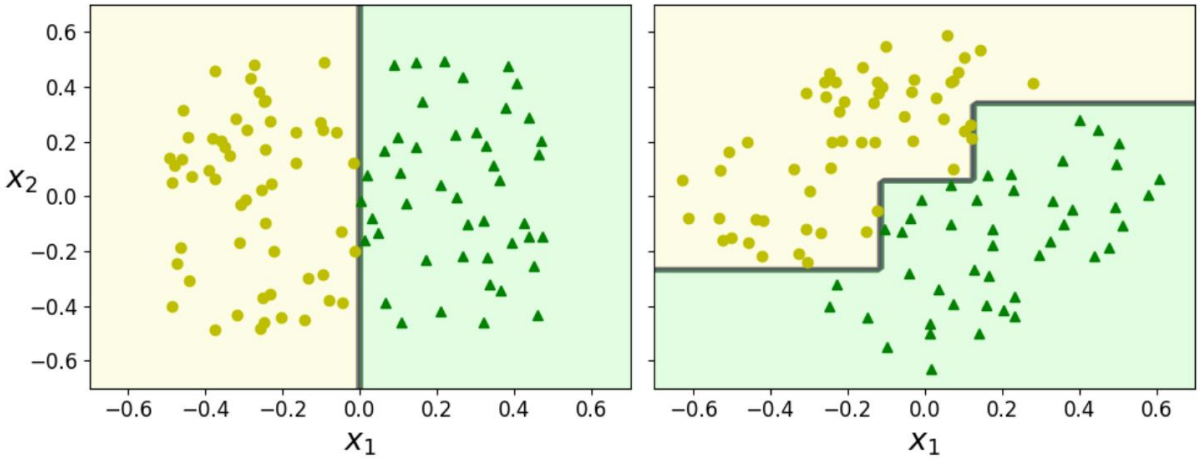
오른쪽 그림: 규제가 있음. leaf node가 가져야할 최소 sample 수=4 지정. Overfitting 문제없음



16. (실습) Sensitivity to training set

1) 데이터를 45도만큼 회전한 경우 (오른쪽)

2) 불필요하게 구불구불해져서 두 결정 트리 모두 훈련 세트를 완벽하게 학습하지만 오른쪽 모델은 잘 일반화가 되지 않음.



Decision tree의 장, 단점

1) 대표적인 decision tree의 장점: 이해가 쉽고 해석 가능, data 정규화와 같은 data 전처리가 필요 없음, white box model (설명가능한 모델)

2) 대표적인 decision tree의 단점: generalization 문제, overfitting 가능성