Decision Tree

- 의결결정나무 란?
 - 학습 데이터를 분석하여 데이터에 <mark>내재되어 있는 패턴</mark>을 통해 새롭게 관측된 데이터를 예측 및 분류하는 모델
 - 개념적으로 질문을 던져서 대상을 좁혀 나가는 <mark>'스무고개'놀</mark>이와 비슷한 개념
 - 목적(Y)과 자료(X)에 따라 적절한 분리 기준과 정지 규칙을 지정하여 의사결정나무를 생성 질문 트리 깊이 (১৮)
 - 의사결정방식 과정의 표현법이 '나무'와 같다고 해서 의사결정나무라고 불림
 - 의사결정 규칙을 나무 모델로 표현

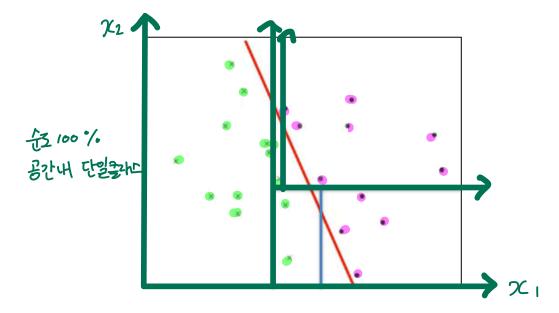
■ 스무 고개로 알아보는 의사결정나무



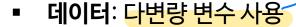
- 의사결정나무의 장점
 - 이해하기 쉽고 적용하기 쉬움
 - 나무 구조 (If-then 규칙)에 의해 표현 때문에 모델을 쉽게 이해할 수 있음
 - 의사결정과정에 대한 설명(해석) 가능
 - 오늘 야구 경기의 취소 사례의 이유 설명 가능
 - 중요한 변수 선택에 유용 (상단에서 상용된 설명 변수가 중요한 변수)
 - 데이터의 통계적 가정이 필요 없음 (예. LDA 가정: 데이터 <mark>정규성</mark>)

是代子からずらしまりを到立× 시합 진행: 9 시합 미 진행: 5 一分於學學的一般 흐린 날 밝은 날 바람 부는 날 시합 진행: 2 시합 진행: 3 시합 진행: 4 시합 미 진행: 2 시합 미 진행: 0 시합 미 진행: 3 습도? 바람? <= 70 TRUE **EALSE** 시합 진행: 2 시합 진행: 0 시합 진행: 3 시합 진행: 0 시합 미 진행: 2 시합 미 진행: 3 시합 미 진행: ()

- 의사결정나무의 단점
 - 좋은 모형을 만들기 위해 많은 데이터가 필요
 - 모형을 만드는데 상대적으로 <mark>시간이 많이 소요</mark> (Tree building)
 - 데이터의 <mark>변화에 민감</mark>(데이터에 따라 모델이 변화함)
 - ♥ 학습과 테스트 데이터의 도메인이 유사해야 함 (domain gap 이 작아야 함)
 - ■☆ 선형 구조 형 데이터 예측 시 더 복잡
 - 예시) 붉은선: 선형 회귀 결정 경계, 푸른선:의사결정나무 결정 경계



- 의사결정나무를 활용한 데이터 분석
 - 순서: 데이터 → 모델 학습 → 추론



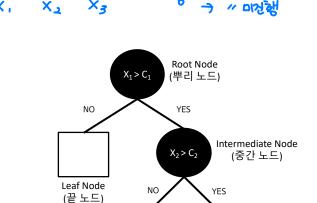
| | lnį | Output | | |
|----------------|----------------|--------|----------------|---|
| X ₁ | X ₂ | : | X _p | Υ |

- 모델 학습 (트리 구조 이용)
 - ① 한번에 설명 변수 하나씩 데이터를 선택
 - ② 2개 혹은 그 이상의 부분집합으로 분할하여
 - ③ 데이터 순도가 균일해지도록 재귀적 분할(Recursive Partitioning)

(재귀적 분할 종료 조건)

분류 문제: 끝 노드에 비슷한 범주(클래스)를 갖고 있는 관측데이터끼리 예측 문제: 끝 노드에 비슷한 수치(연속된 값)를 갖고 있는 관측데이터끼리

- 추론 (판별)
 - 분류: 끝 노드에서 가장 빈도가 높은 종속변수(y)를 새로운 데이터에 부여
 - 회귀: 끝 노드 의 종속변수(y)의 평균을 예측 값으로 반환

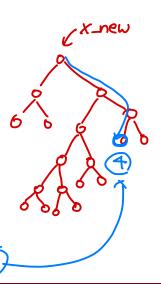


Leaf Node

(끝 노드)

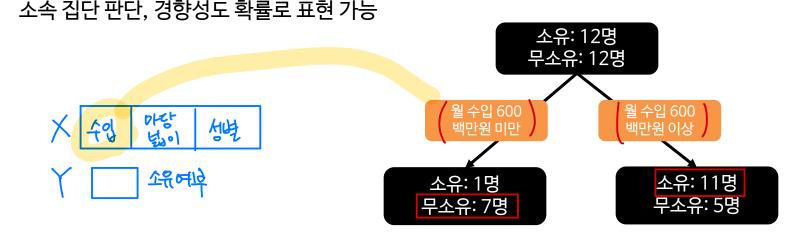
Leaf Node

(끝 노드)



- 구분
 - 분류 나무 (classification tree): 목표 변수가 범주형 변수 → 분류
 - 회귀 나무 (regression tree): 목표 변수가 수치형 변수 → 예측
- <mark>재귀적</mark> 분할 알고리즘
 - CART (Classification And Regression Tree)
 - C4.5, C5.0
 - CHAID (Chi-square Automatic Interaction Detection)
- 불순도 알고리즘 (분할 기준)
 - <mark>지니 지수 (Gini index</mark>)
 - 엔트로피 지수(Entropy index), 정보 이익(Information Gain)
 - 카이제곱 통계량 (Chi-Square Statistic)

- 분류 나무 (Classification Tree)
 - 목표 변수: <mark>범주형 변수</mark> (분리)
 - 분류 알고리즘과 불순도 지표
 - CART: 지니 지수 (Gini Index)
 - C4.5: 엔트로피(Entropy index), 정보이익(Information gain),
 정보이익비율(Information gain ratio)
 - CHAID: 카이 제곱 통계량 (Chi-Square statistic)
 - 분류 결과 (판별, 추론)



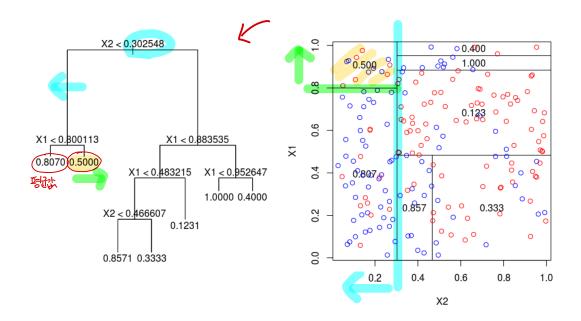
무소유 확률 → 7/8=87.5%

소유 확률 → 11/16=68.6%

- 회귀 나무 (Regression Tree)
 - 목표 변수: 수치형 변수 (예측) ex) 귀
 - 회귀 알고리즘과 불순도 지표
 - CART: F 통계량과 분산 감소량 (실제 값과 예측 값의 평균 차이가 작도록!)
 - 회귀 결과 (Class of Carton)

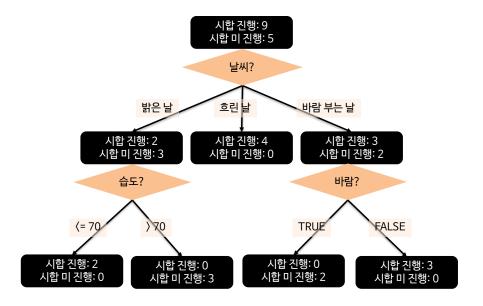
 arguin | Y Y | .

 yell = 1 | 4 | 4 | 에도 작아시도록
 - 끝 마디 집단의 <mark>평균</mark>
 - *예측일 경우 회귀나무보다 신경망 또는 회귀분석이 더 좋음

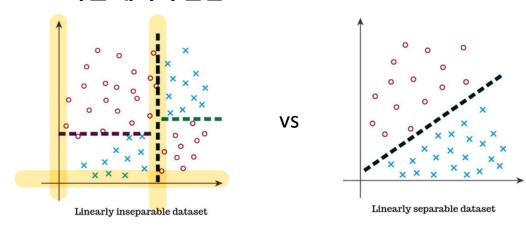


- 분할
 - 이진 분할(binary split): CART
 - 다중 분할(multi-way split): CHAID, C4.5, C5.0 etc

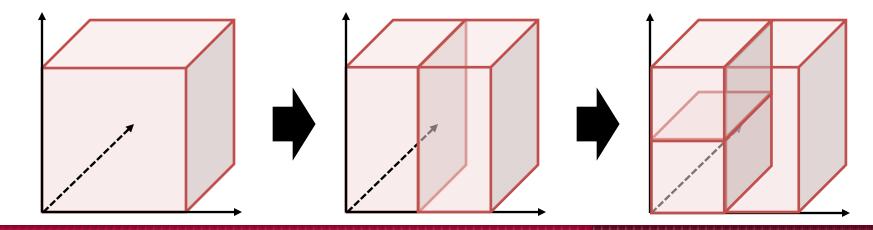




- 이진 분할 (분할이란?)
 - 2차원 데이터 분할

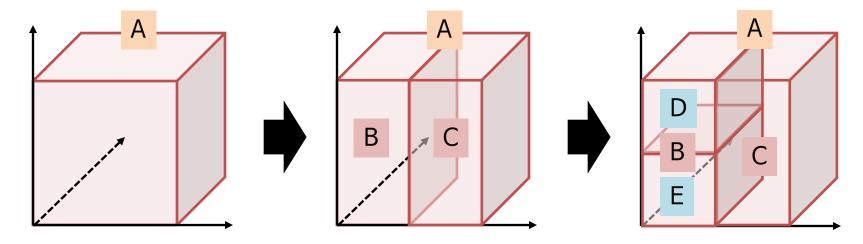


■ 3차원 데이터 분할



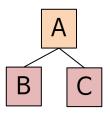
의사결정나무 표현

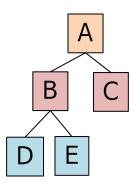
- 트리 구조를 이용한 데이터 분할 표현법
 - 3차원 데이터 분할 표현법



■ 전 차원 데이터 분할 표현법 (일반화) <u>트</u> 각국工







의사결정나무 II

Decision Tree

■ 재귀적 분할 알고리즘 정리

| | CART | C4.5 | CHAID |
|----------------|--------------------------|------------------------------------|-----------------|
| 분류 나무(분류) | 0 | 0 | 0 |
| 회귀 나무(예측) | 0 | 0 | X |
| 예측변수 | 범주, 수치 | 범주, 수치 | 범주 |
| 불순도 알고리즘 | Gini index | Entropy | Chi-square, 통계량 |
| 분리 | Binary | Multi-way | Multi-way |
| 나무성장 | 완전 모형 생성(full t | <u>최적 모형 개발 Sto</u> (즉, 완전모형생성 없음) | |
| 가지치기 (교차검증) | 학습시 학습 데이터 검증시 검증 데이터 | 학습 데이터만 사용 | X |
| 개발연도 | 1984 | 1993 | 1980 |
| | 2 | 3 | / |

분류 나무: CART

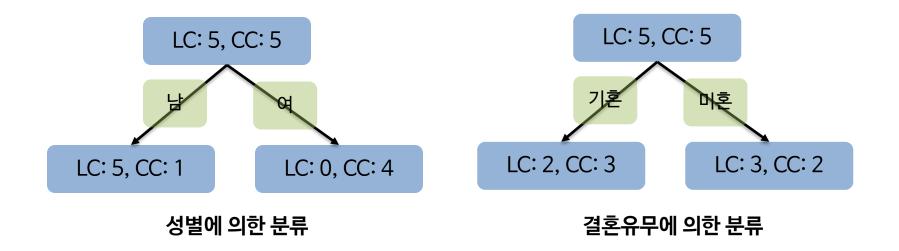
- CART (Classification & Regression Tree)
 - Breiman 등이 개발
 - 종류: 분류 나무, 회귀 나무
 - 분리: <mark>이진</mark> 분할

- 가지치기 (교차 타당도) : 학습 데이터로 나무 생성, 검증용 데이터로 가지치기
- 불순도 알고리즘: Gini index (불확실성) 는 낮아지는게 좋음

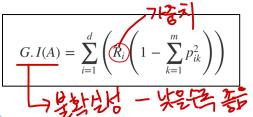
$$G.I(A) = \sum_{i=1}^{d} \left(R_i \left(1 - \sum_{k=1}^{m} p_{ik}^2 \right) \right)$$

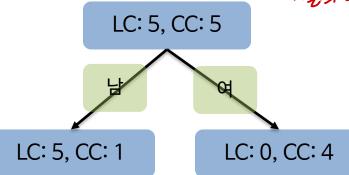
분류 나무: CART

- 예제
 - 우리 홈쇼핑에서 충성 고객과 탈퇴 고객을 구분하는 규칙을 생성하고자 함
 - 충성 고객(LC: Loyal Customer)
 - 탈퇴 고객(CC: Churn Customer)
 - 총 10명의 고객을 대상으로 성별, 결혼유무 중 어느 변수가 더 분류를 잘하는 변수인지 찾고, 분류 규칙을 찾고자 함



분류 나무: CART





LC: 5, CC: 5

기혼

LC: 2, CC: 3

LC: 3, CC: 2

성별에 의한 분류



G(root) =
$$1 - \left(\frac{5}{10}\right)^2 - \left(\frac{5}{10}\right)^2 = 0.5$$

G(남) =
$$1 - \left(\frac{5}{6}\right)^2 - \left(\frac{1}{6}\right)^2 = 0.278$$

$$G(\Theta) = 1 - \left(\frac{0}{4}\right)^2 - \left(\frac{4}{4}\right)^2 = 0$$

$$G(dg) = \frac{76}{10} * G(H) + 76 \times G(H)$$

= $\left(\frac{6}{10}\right)(0.278) + \left(\frac{4}{10}\right)(0) = 0.167$
인생 내가 내가 되어 하다

一 台里中州 休天山

결혼유무에 의한 분류

G(root) =
$$1 - \left(\frac{5}{10}\right)^2 - \left(\frac{5}{10}\right)^2 = 0.5$$

$$G(7|\bar{z}) = 1 - \left(\frac{2}{5}\right)^2 - \left(\frac{3}{5}\right)^2 = 0.48$$

$$G(미혼) = 1 - \left(\frac{3}{5}\right)^2 - \left(\frac{2}{5}\right)^2 = 0.48$$

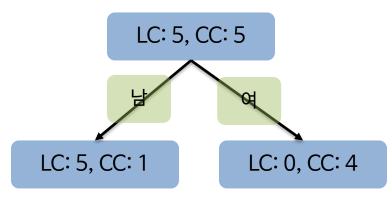
$$G(결혼) = 가중치 * G(기혼) + 가중치 * G(미혼)$$

= $\left(\frac{5}{10}\right)(0.48) + \left(\frac{5}{10}\right)(0.48) = 0.48$

$$Entropy(A) = \sum_{i=1}^{d} R_i \left(-\sum_{k=1}^{m} \underline{p_k \log_2(p_k)} \right)$$

- **C4.5, C5.0**
 - Quinlan 등이 개발
 - 종류: 분류 나무, 회귀 나무
 - 분리: 다중 분할
 - 불순도 알고리즘: 엔트로피(불확실성), <mark>정보이론, 정보 이득률</mark>
 - <mark>가지치기</mark> (교차 타당도) : 학습 데이터만 이용하여 나무 성장 및 가지치기 수행
 - 정보이론→엔트로피 -불의기
 - Log₂로 계산하는 이유 → bit 수로 정보 계산
 - $Log_2(8) = 3bit$
 - -log2로 계산하는 이유: log2(1/2) = -1이기 때문에 + 로 전환 필요
 - 정보이익 (IG: Information Gain) *정보의 가치 높아야 좋음
 - IG = E(before) E(After)

$$Entropy(A) = \sum_{i=1}^{d} R_i \left(-\sum_{k=1}^{m} p_k \log_2(p_k) \right)$$



성별에 의한 분류

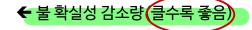
E(root) =
$$-\left(\frac{5}{10}\right) log_2\left(\frac{5}{10}\right) - \left(\frac{5}{10}\right) log_2\left(\frac{5}{10}\right) = 1$$

E(남) =
$$-\left(\frac{5}{6}\right) log_2\left(\frac{5}{6}\right) - \left(\frac{1}{6}\right) log_2\left(\frac{1}{6}\right) = 0.65$$

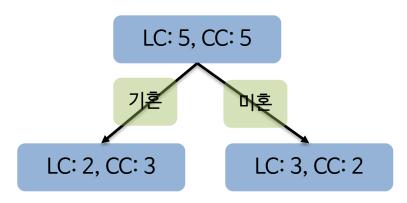
$$\mathsf{E}(\mathsf{G}) = -\left(\frac{0}{4}\right)\log_2\left(\frac{0}{4}\right) - \left(\frac{4}{4}\right)\log_2\left(\frac{4}{4}\right) = 0$$

E(성별) = 가중치 * E(남) + 가중치 * E(여)
=
$$\left(\frac{6}{10}\right)(0.65) + \left(\frac{4}{10}\right)(0) = 0.39$$





제시인텍다감독 ///



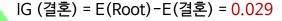
결혼유무에 의한 분류

E(root) =
$$-\left(\frac{5}{10}\right)log_2\left(\frac{5}{10}\right) - \left(\frac{5}{10}\right)log_2\left(\frac{5}{10}\right) = 1$$

$$E(7|\bar{z}) = -\left(\frac{2}{5}\right)log_2\left(\frac{2}{5}\right) - \left(\frac{3}{5}\right)log_2\left(\frac{3}{5}\right) = 0.971$$

E미혼) =
$$-\left(\frac{3}{5}\right)log_2\left(\frac{3}{5}\right) - \left(\frac{2}{5}\right)log_2\left(\frac{2}{5}\right) = 0.971$$

E(결혼) = 가중치 * E(남) + 가중치 * E(여)
=
$$\left(\frac{5}{10}\right)(0.971) + \left(\frac{5}{10}\right)(0.971) = 0.971$$



🗲 거의 변화가 없음. 작, 결혼 여부는 큰 영향을 주지 못함

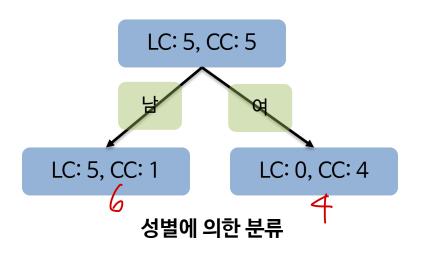
- 정보 이득율 (Information gain ratio)
 - C4.5 에서는 information gain → information gain ratio 추가 도입
 - 가지수가 많을 수록 information gain 이 높아지는 경향을 보임
 - 이진분할 vs 다중 분할
 - 단점 보안 위해 IV (Intrinsic Value) 도입하여 정보 이득율을 정규화
 - 가지가 많으면 감점

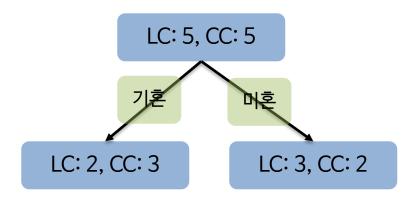
$$IV(A) = -\sum_{k=0}^{n} \frac{1}{n} \log_2 \left(\frac{1}{n}\right)$$

이득율

$$IGR(A) = \frac{IG(A)}{IV(A)}$$

$$IV(A) = -\sum_{k=0}^{n} \frac{1}{n} log_2(\frac{1}{n})$$





결혼유무에 의한 분류

$$V(65) = -\left(\frac{6}{10}\right)log_2\left(\frac{6}{10}\right) - \left(\frac{4}{10}\right)log_2\left(\frac{4}{10}\right) = 0.97$$

IGR(성별) = IG(성별)/IV(성별) = 0.61/0.97 = 0.63

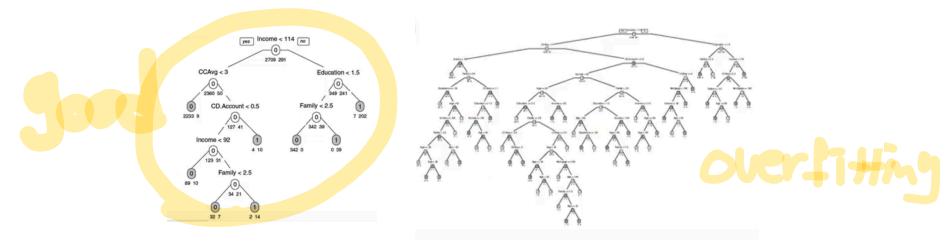
IV(결혼) =
$$-\left(\frac{5}{10}\right)log_2\left(\frac{5}{10}\right) - \left(\frac{5}{10}\right)log_2\left(\frac{5}{10}\right) = 1$$

IGR(결혼) = IG(결혼)/IV(결혼) = 0.029/1 = 0.029

*다중 분할 예시로 변경하면 - log2()이 계속 붙게 되고 IV가 1을 넘기도 함

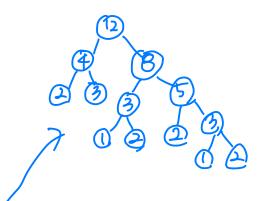
분류 나무

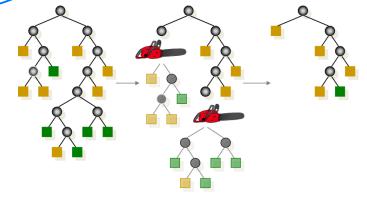
- 끝 없는 분할의 단점
 - 과적합 (Overfitting)
 - 학습용 데이터에 완전히 적합
 - 학습용 데이터에 잡음도 포함되므로 테스트 데이터에서 오차는 일반적으로 증가
 - 과적합 피하는 법
 - 나무 성장 중단
- 모델 학습의 목적
 - (잘못된 학습) 학습용 데이터에서는 높은 성과 → 평가용 데이터에서는 낮은 성과
 - (올바른 학습) 현재 데이터의 설명 → 미래 데이터 예측

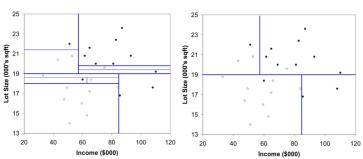


분류 나무: 과적합 방지

- 성장 멈추기 (Stop condition)
 - 나무 모델의 깊이 파라미터로 설정 dePth (전체)
 - 나무 모델을 성장시키면서 특정 조건에서 성장을 중단
 - 노드 내의 최소 관측치의 수 : 2
 - 불<u>순도 최소 감소량</u> ひしくみ
 - CHAID에서 사용
 - 가지치기 사용하지 않고 종료
- 가지치기 (Pruning): 다해보고 결정하자!
 - <mark>완전 모형 생성</mark> 후 가지치기
 - 데이터 버리는 개념 아닌 <mark>합치(merge)는</mark> 개념
 - 나무 모델 생성 후 필요 없는 가지 제거
 - 성정 멈추기 보다 성능 우수
 - 가지치기 비용함수를 최소로 하는 분기를 찾음







의사결정나무 III

Decision Tree

<mark>회귀</mark>나무

- 입력 데이터(변수 값)의 결과 예측
 - 데이터가 도달한 끝 노드 데이터들의 평균으로 결정
- 불순도 측정 방법
 - 제곱 오차 합 (the sum of the squared errors)
 - 오차 = 실제 값-예측 값

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

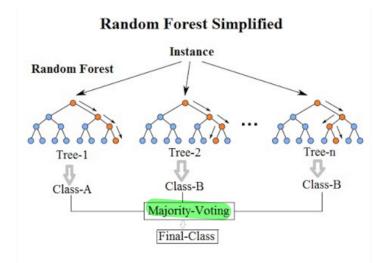
- 성능 평가 방법
 - 예측모델 평가 방법: RMSE

四年次

(Y-F:)2

앙상블(Ensemble)

- 앙상블
 - 여러 모델을 함께 사용하자!!
 - 의사결정나무, KNN, LDA, 로지스틱 등
 - 퀴즈쇼에서 사용되는 힌트: 100인의 정답
 - 설명보다는 예측이 중요할 경우에 사용
 - 예측 알고리즘을 조합하여 예측 성능을 향상
 - 랜덤 숲(Random Forest), Boosted Trees
 - 좋은 의사결정<mark>나무</mark>를 모아서 숲을 만들자!



앙상블(Ensemble)

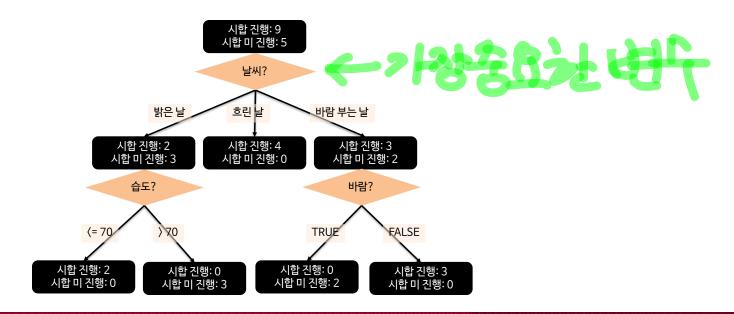
- Random Forest
 - Bootstrap 사용

100개分(0개岁)、水(100升100十...

- 데이터로부터 복원 추출(뽑은 표본 원<mark>복)</mark>을 이용하여 여러 샘플을 추출
- Forest 생성
 - 무작위로 예측 변수를 선택하여 모델 구축
 - 즉, 의사결정나무는 예측 변수 선택 시 기준 지표를 사용하였으나 무작위 숲에서는 무작위로 선택함
- 앙상블 결과 결합
 - 분류 문제→투표, 예측 문제→평균화
- 비록 나무 구조이지만, 숲<mark>이 되면서 해석 가능한 모델의 장점은 사라짐</mark>
- 그러나 결과 분석을 통해 설명 변수 중 중요한 변수 판별 가능

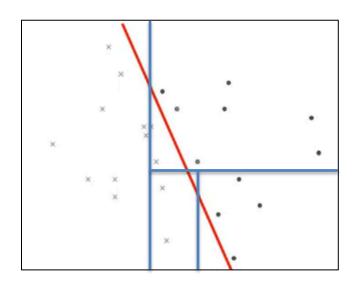
의사결정나무 장점 (복습)

- 의사결정나무의 장점
 - 이해하기 쉽고 적용하기 쉬움
 - 나무 구조 (If-then 규칙)에 의해 표현 때문에 모델을 쉽게 이해할 수 있음
 - 의사결정과정에 대한 설명(해석) 가능
 - 오늘 야구 경기의 취소 사례의 이유 설명 가능
 - 중요한 변수 선택에 유용 (상단에서 상용된 설명 변수가 중요한 변수)
 - 데이터의 통계적 가정이 필요 없음 (예. LDA 가정: 데이터 정규성)



의사결정나무 단점 (복습)

- 의사결정나무의 단점
 - 좋은 모형을 만들기 위해 많은 데이터가 필요
 - 모형을 만드는데 상대적으로 시간이 많이 소요 (Tree building)
 - 데이터의 변화에 민감(데이터에 따라 모델이 변화함)
 - 학습과 테스트 데이터의 도메인이 유사해야 함 (domain gap 이 작아야 함)
 - 선형 구조 형 데이터 예측 시 더 복잡
 - 예시) 붉은선: 선형 회귀 결정 경계, 푸른선:의사결정나무 결정 경계



요약

■ 주요 방법

- Trees and Rules 구조
 - 규칙은 **나무 모델로** 표현
 - 결과는 규칙으로 표현
- 재귀적 분할 (Recursive Partitioning)
 - 의사결정나무 생성 과정
 - 그룹이 최대한 동질 하도록 반복적으로 하위 그룹으로 분리
- プススコン (Pruning the trees)
 - 생성된 나무를 자르는 과정 (정교화)
 - 과적합(overfitting)을 피하기 위해 필요 없는 가지를 간단히 정리하는 과정
- 구분
 - 분류 나무: 목표 변수가 범주형 변수
 - 회귀 나무: 목표 변수가 수치형 변수

요약

- 재귀적 분할 알고리즘
 - CART, C4.5, CHAID
- 불순도 알고리즘
 - 지니 지수, 엔트로피 지수, 카이제곱 통계량
- 의사결정나무 과정
 - 나무 모델 생성→과적합문제해결→검증→해석 및 예측
 - 생성: CART(Gini), C4.5(Entorpy), CHAID(Chi-Square)
 - 과적합문제: 완전나무모형생성 후 가지치기 (CART, C4.5)
 - 검증: 교차타 당성을 이용하여 의사결정나무 평가
 - 해석 및 예측: 의사결정나무를 해석하고 예측 모형 설정
- 앙상블
 - Random Forest

의사결정나무 실습

- 데이터셋: Iris 데이터
- 학습/시험 데이터: x_train/x_test
- 학습/시험 데이터 라벨: y_train/y_test → (0,1,2)
- 데이터 로더, 범주형 데이터 변환, 데이터 분할
 - 3, 4,5장 실습과 동일

```
1 # Iris data 불러오기
2 import seaborn as sns # seaborn을 불러옴.
3 iris=sns.load_dataset('iris') # iris라는 변수명으로 Iris data를 download함.
4 X=iris.drop('species',axis=1) # 'species'열을 drop하고 특성변수 X를 정의함.
5 y_=iris['species'] # 'species'열을 label y를 정의함.
6
7 from sklearn.preprocessing import LabelEncoder # LabelEncoder() method를 불러옴
8 classle=LabelEncoder()
9 y=classle.fit_transform(iris['species'].values) # species 열의 문자형을 범주형 값으로 전환
10
11 from sklearn.model_selection import train_test_split
12 X_train,X_test,y_train,y_test=train_test_split(X,y, test_size=0.3, random_state=123, stratify=y)
13
```

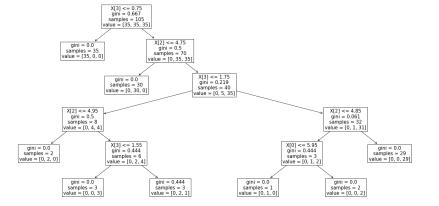
- 데이터셋: Iris 데이터
- 학습/시험 데이터: x_train/x_test
- 학습/시험 데이터 라벨: y_train/y_test → (0,1,2)
- 의사결정나무 API: Manual
 - DecisionTreeClassifier 클래스 호출
 - criterion : 불순도 알고리즘 옵션, default='gini' 가능 파라미터={entropy,gini}

```
1 # Classification Tree# 또는 from sklearn import DecisionTreeClassifier
2
3 # 과적합 사례 확인 법: max_depth 3=> 5=> 7 높일 수록 학습 데이터 정확도 올라라고 테스트 정확도 고정
4 #dtc = tree.DecisionTreeClassifier(criterion='gini', max_depth=3, random_state=1)
5 dtc = tree.DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', max_depth=7, random_state=1)
6 dtc.fit(X_train, y_train)
7 y_train_pred = dtc.predict(X_train) # Training accuracy
8 y_test_pred = dtc.predict(X_test) # Test accuracy
9
```

- 데이터셋: Iris 데이터
- 학습/시험 데이터: x_train/x_test
- 학습/시험 데이터 라벨: y_train/y_test → (0,1,2)
- 의사결정나무 API: Accuracy & Confusion Matrix
 - 3, 4, 5 장 실습과 동일

- 데이터셋: Iris 데이터
- 학습/시험 데이터: x_train/x_test
- 학습/시험 데이터 라벨: y_train/y_test → (0,1,2)
- Plot: tree.plot_tree [API]

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 #tree.plot_tree(dtc.fit(X_train,y_train))
3 fig, ax = plt.subplots(figsize=(25, 12))
4 tree.plot_tree(dtc.fit(X_train, y_train), fontsize=15)
5 plt.savefig('tree_high_dpi', dpi=100)
```

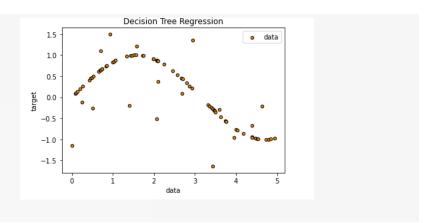


Values =: 각 클래스별 데이터 수

의사결정나무(DT) 실습 #2 (회귀)

■ 데이터셋: 합성데이터

```
7 # Create a random dataset
8 rng = np.random.RandomState(1)
9 X = np.sort(5 * rng.rand(80, 1), axis=0)
10 y = np.sin(X).ravel()
11 y[::5] += 3 * (0.5 - rng.rand(16))
12
```



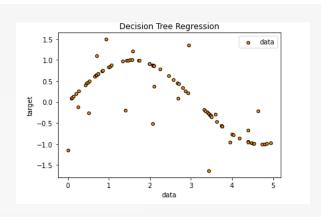
- 의사결정나무 API: Manual
 - DecisionTreeRegressor 클래스 호출
 - criterion : 불순도 알고리즘, {"mse", "friedman_mse", "mae"}, default="mse"

```
[22] 1 # Fit regression model
2 regr_1 = DecisionTreeRegressor(max_depth=2)
3 regr_2 = DecisionTreeRegressor(max_depth=5)
4 regr_1.fit(X, y)
5 regr_2.fit(X, y)
6
7 y_pred_1 = regr_1.predict(X)
8 y_pred_2 = regr_2.predict(X)
```

의사결정나무(DT) 실습 #2 (회귀)

■ 데이터셋: 합성데이터

```
7 # Create a random dataset
8 rng = np.random.RandomState(1)
9 X = np.sort(5 * rng.rand(80, 1), axis=0)
10 y = np.sin(X).ravel()
11 y[::5] += 3 * (0.5 - rng.rand(16))
12
```



- 의사결정나무 API: MSE/RMSE [API]
 - Mean_squared_error: squared=True → MSE, False→RMSE