Machine Learning

6장 Classification and Regression Trees (CART)

고려대학교 통계학과
박유성

Contents

01 Introduction

- CART의 다른 이름: "Decision Tree Learning"

- 목적: Target value y를 예측 (분류). y는 연속변수 or 이산변수 (class)

- 절차

  – [Step 1] 특성변수 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d)^T$의 샘플을 d차원 상의 M개 직사각형 cell들로 partition

    ▶ Cell (Region) 구성: Training data를 이용

    ▶ Generalization error 측정: Test data를 이용

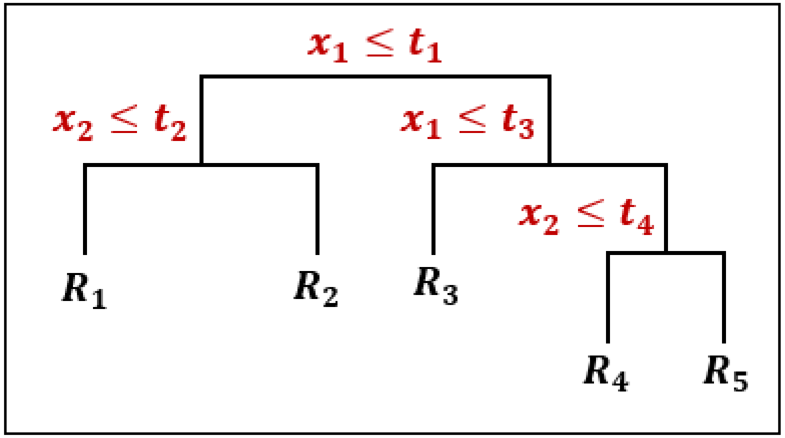
  – [Step 2] 각 cell (region)을 대표하는 y값 할당 (이 값을 각 cell에서의 추정치로 사용)

    ▶ If y가 연속변수, 각 cell에서의 평균값을 할당 ➔ "Regression Tree"

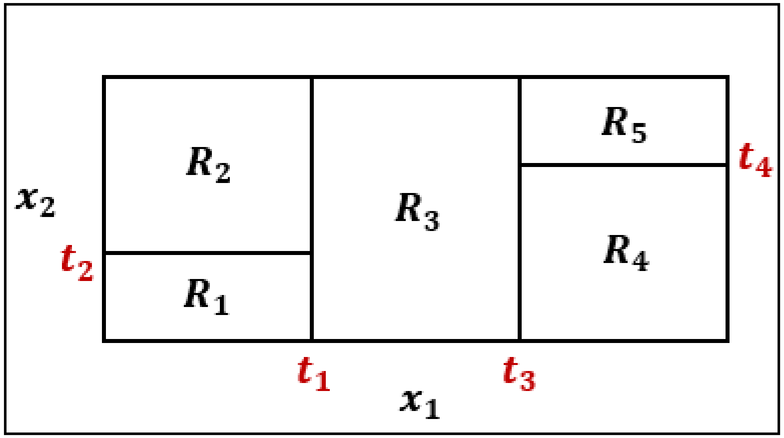
    ▶ If y가 이산변수, 각 cell에서 비중이 가장 큰 class를 할당 ➔ "Classification Tree"

Graphical Example

- (Example) 특성변수 두 개(x_1 and x_2. d=2), cell 개수 5개인 경우



<Decision Tree by x_1 and x_2>



<Decision Tree에 의한 직사각형 cells>

– (기호) t_1, t_2, t_3, t_4 : 이항분할 (binary partition) 값. ➔ "node"

- 핵심 결정사항

– 분할 시 특성변수의 순서를 어떻게 정할 것인지?

– 각 이항분할 값 (node)은 어떻게 결정할 것인지?

02 Regression Tree

- Algorithm

– [Step 1] 각 특성변수 x_j (j=1, ⋯, d)의 관측치를 오름차순 정렬: (예) {−5, 1, −3, 3} ➔ {−5, −3, 1, 3}

– [Step 2] 각 특성변수 x_j (j=1, ⋯, d)에 대하여, 정렬된 관측치를 partition (즉, node t_k를 구함)

▶ $SSE(x_j) = \sum_{i \in l} (y_i - \overline{y_t}^{l})^2 + \sum_{i \in r} (y_i - \overline{y_t}^{r})^2$를 최소화하는 x_j의 관측치를 x_j의 노드로 선택 (j=1, ⋯, d)

(※l은 partition의 왼쪽 cell, r은 partition의 오른쪽 cell을 의미)

➔ 즉, Regression Tree의 손실함수는 SSE (Sum of Squared Error)

▶ (예) x_1의 정렬된 관측치가 {−1, 0, 2, 3}이면 4개의 $SSE(x_1)$이 계산되고, 만일 이 중 x_1=0이 최소 $SSE(x_1)$를 가지고 있다면 x_1의 node는 0이 됨.

– [Step 3] [Step 2]에서 구한 최소 $SSE(x_j)$의 값이 가장 작은 특성변수 (x^*) 기준으로 Split 수행

▶ 2개의 region이 생성 (left, right)

– [Step 4] [Step 3]에서 구한 2개의 region 각각에 대하여, [Step 1] – [Step 3]을 반복 수행

▶ 이 결과 얻게 되는 region들에 대해서도 [Step 1] – [Step 3]을 반복

예측치 계산 및 과적합 방지

- 예측치 계산

  – (기호) $R_1, \cdots, R_M$: [Step 1] – [Step 4] 결과 최종적으로 만들어진 regions (cells)

  – 새로운 관측치 $\boldsymbol{x}_0$에 대한 regression tree의 예측치: $\hat{y} = \sum_{m=1}^{M} \bar{y}_m I(\boldsymbol{x}_0 \in R_m)$

  ($I(\boldsymbol{x}_0 \in R_m) = 1$ if $\boldsymbol{x}_0 \in R_m$, 0 othewise. $\bar{y}_m = \frac{1}{N_m} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in R_m} y_i$, where N_m = size of $\{\boldsymbol{x}_i \in R_m\}$)

- 과대적합 방지: 가지치기 (Pruning)

  – 각 cell에 관측치가 오직 한 개 남을 때 까지 [Step 4] 반복 가능 ➔ 과적합의 문제 발생

  – 해결: Split의 깊이를 제한. ➔ "가지치기 (Pruning)"

  – (기호) T_M: 충분히 큰 Tree. (예) 각 region에 5개 이하의 관측치가 남을 때 까지만 키운 Tree

  – 아래 $C_\alpha(T)$를 최소로 하는 tree T를 구함 ($|T|$: T_M 보다 작은 Tree T 에서의 총 cell의 개수)

$$C_\alpha(T) = \sum_{m=1}^{|T|} N_m Q_m(T) + \alpha|T|, \text{ where } Q_m(T) = \frac{1}{N_m} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in R_m} (y_i - \bar{y}_m)^2.$$

  – α의 결정: by Cross-validation (제9장)

03 Classification Tree

- 불순도 (Impurity) 측도

  – (기호) $\hat{P}_{mk}$: region R_m에서 class k가 차지하는 비율 ($\hat{P}_{mk(m)}$: region R_m에서 $\hat{P}_{mk}$의 최대값)

  –

Gini Index	$I_G(R_m) = \sum_{m=1}^{K} \hat{P}_{mk}(1-\hat{P}_{mk}) = 1 - \sum_{m=1}^{K} \hat{P}_{mk}^2$
Cross Entropy	$I_C(R_m) = -\sum_{m=1}^{K} \hat{P}_{mk}\log_2(\hat{P}_{mk})$
Misclassification Error	$I_E(R_m) = 1 - P_{mk(m)}$

(***K***: class의 총 개수)

- Information Gain

  – Classification Tree에서 분할 (split) 변수 (x_j) 및 node 선택의 기준

  – 상위 cell R에서 두 개의 영역 R_l (왼쪽)과 R_r (오른쪽)로 나누어질 때, N, N_{R_l}, N_{R_r}을 각각 R, R_l, R_r에 포함된 관측치의 개수라고 하면 ($N = N_{R_l} + N_{R_r}$),

$$IG(R, x_j) = I(R) - \frac{N_{R_l}}{N_R} I(R_l) - \frac{N_{R_r}}{N_R} I(R_r).$$

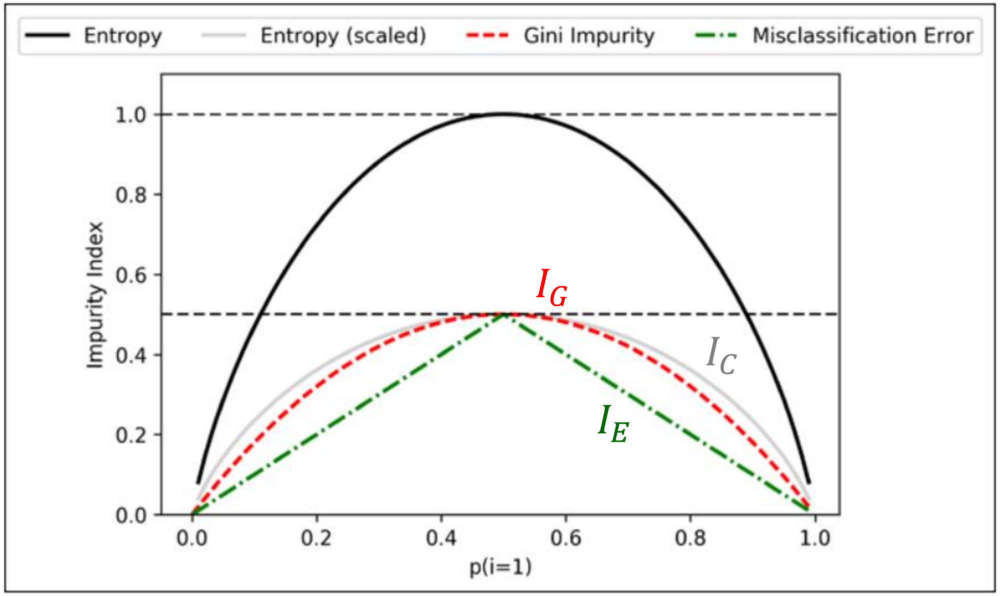
  – $IG(R, x_j)$가 최대가 되도록 분할변수 (x_j)와 node를 선택

불순도 (Impurity)의 성질

- (예) y가 두 개의 class $\{1,2\}$를 갖는 경우
  -

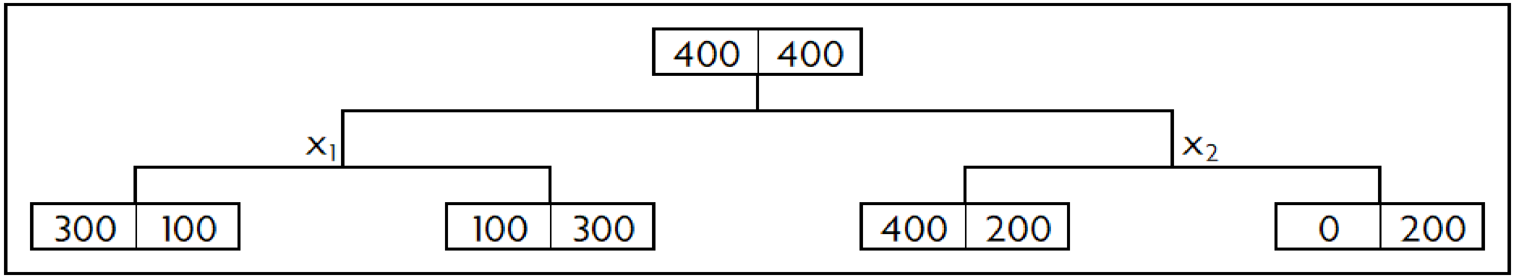
Gini Index	$I_G(R_m) = 1 - \left(\hat{P}_{m1}^2 + \hat{P}_{m2}^2\right)$	$(\hat{P}_{m1} + \hat{P}_{m2} = 1)$
Cross Entropy	$I_C(R_m) = -\left(\hat{P}_{m1}\log_2\hat{P}_{m1} + \hat{P}_{m2}\log_2\hat{P}_{m2}\right)$	
Misclassification Error	$I_E(R_m) = 1 - \max\left(\hat{P}_{m1},\ \hat{P}_{m2}\right)$	

  - 세 불순도 모두 $\hat{P}_{m1}$=0.5 (⇔ 분류 의미 X)일 때 최대이고, $\hat{P}_{m1}$이 0 or 1로 접근할 때 점점 낮아짐.



Example

- 부모 cell로 부터 x_1과 x_2에 의해 분류된 예



– (Gini Index 사용) $I_G(R) = 1 - \left[\left(\frac{4}{8}\right)^2 + \left(\frac{4}{8}\right)^2\right] = 0.5$

▶ x_1 기준: $I_G(R_l) = 1 - \left[\left(\frac{3}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2\right] = 0.375$, $I_G(R_r) = 1 - \left[\left(\frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{3}{4}\right)^2\right] = 0.375.$

$$\therefore IG_G(R, x_1) = 0.5 - \frac{4}{8}0.375 - \frac{4}{8}0.375 = 0.125.$$

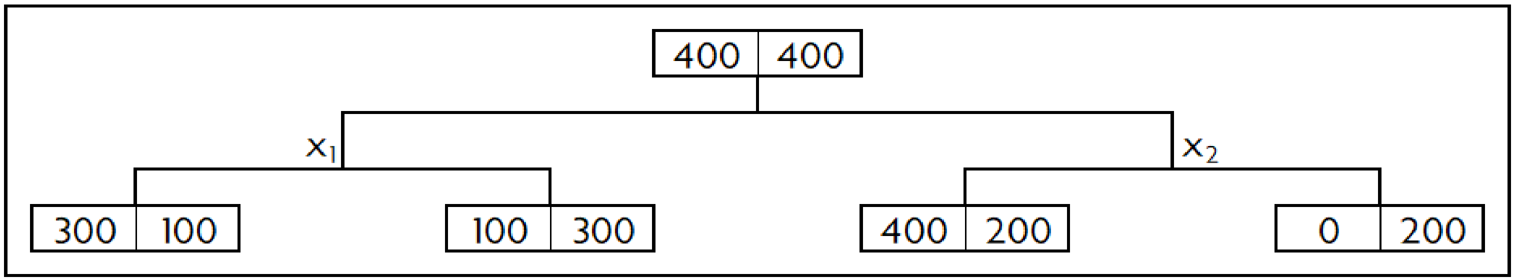
▶ x_2 기준: $I_G(R_l) = 1 - \left[\left(\frac{4}{6}\right)^2 + \left(\frac{2}{6}\right)^2\right] = 0.444$, $I_G(R_r) = 1 - \left[\left(\frac{0}{2}\right)^2 + \left(\frac{2}{2}\right)^2\right] = 0.$

$$\therefore IG_G(R, x_2) = 0.5 - \frac{6}{8}0.444 - \frac{2}{8}0 = 0.167.$$

➔ $IG_G(R, x_1) < IG_G(R, x_2)$ 이므로, Gini Index에 의한 하위 cell 분류 기준은 x_2 .

Example

- 부모 cell로 부터 x_1과 x_2에 의해 분류된 예 (계속)



– (Cross Entropy 사용) $I_C(R) = -\frac{4}{8}\log_2(\frac{4}{8}) - \frac{4}{8}\log_2(\frac{4}{8}) = 1$

▶ x_1 기준: $I_C(R_l) = -\frac{3}{4}\log_2\left(\frac{3}{4}\right) - \frac{1}{4}\log_2\left(\frac{1}{4}\right) = 0.811$, $I_C(R_l) = -\frac{1}{4}\log_2\left(\frac{1}{4}\right) - \frac{3}{4}\log_2\left(\frac{3}{4}\right) = 0.811.$

$$\therefore\ IG_C(R, x_1) = 1 - \frac{4}{8}0.811 - \frac{4}{8}0.811 = 0.189.$$

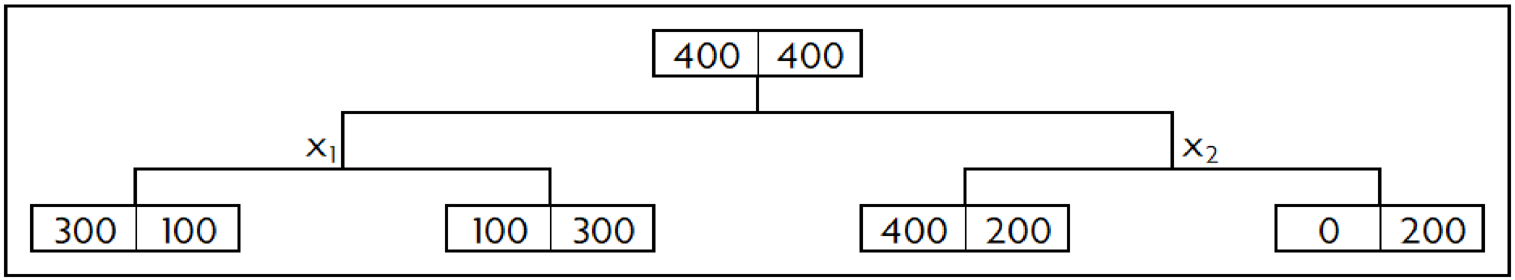
▶ x_2 기준: $I_C(R_l) = -\frac{4}{6}\log_2\left(\frac{4}{6}\right) - \frac{2}{6}\log_2\left(\frac{2}{6}\right) = 0.918$, $I_C(R_r) = -\frac{0}{2}\log_2\left(\frac{0}{2}\right) - \frac{2}{2}\log_2\left(\frac{2}{2}\right) = 0.$

$$\therefore\ IG_C(R, x_2) = 0.5 - \frac{6}{8}0.918 - \frac{2}{8}0 = 0.311.$$

➔ $IG_C(R, x_1) < IG_C(R, x_2)$ 이므로, Cross Entropy에 의한 하위 cell 분류 기준은 x_2 .

Example

- 부모 cell로 부터 x_1과 x_2에 의해 분류된 예 (계속)



– (Misclassification Error 사용) $I_E(R) = 1 - max\left[\frac{4}{8}, \frac{4}{8}\right] = 0.5$

▶ x_1 기준: $I_E(R_l) = 1 - max\left[\frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right] = 0.25$, $I_E(R_r) = 1 - max\left[\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right] = 0.25.$

$$\therefore IG_E(R, x_1) = 0.5 - \frac{4}{8}0.25 - \frac{4}{8}0.25 = 0.25.$$

▶ x_2 기준: $I_E(R_l) = 1 - max\left[\frac{4}{6}, \frac{2}{6}\right] = 0.333$, $I_E(R_r) = 1 - max\left[\frac{0}{2}, \frac{2}{2}\right] = 0.$

$$\therefore IG_E(R, x_2) = 0.5 - \frac{6}{8}0.333 - \frac{2}{8}0 = 0.25.$$

➔ $IG_E(R, x_1) = IG_E(R, x_2)$ 이므로, Misclassification Error에 의한 하위 cell 분류 기준 선택 불가.

– Pruning에서는 불순도 측도로서 misclassification error을 사용함.

Q & A