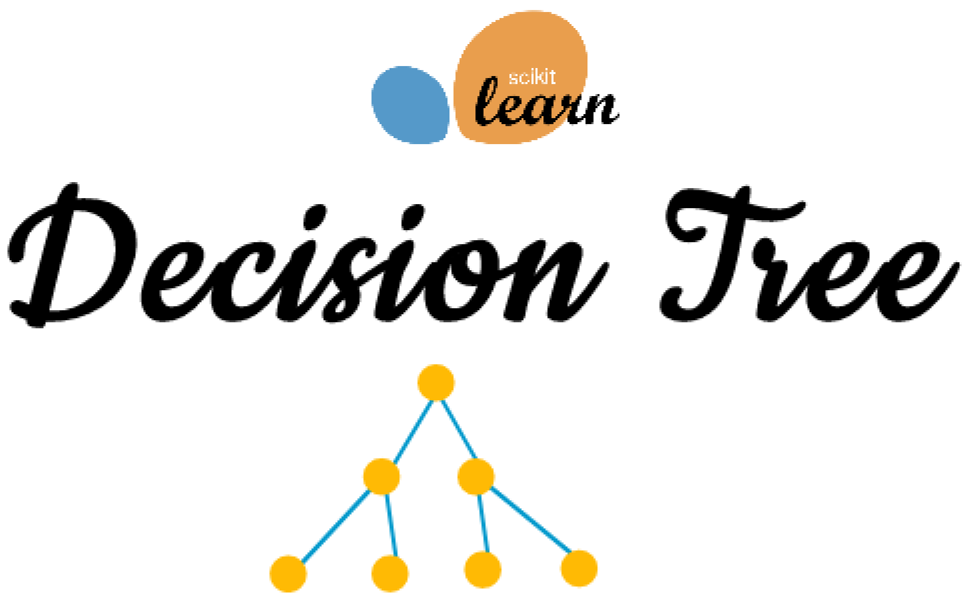
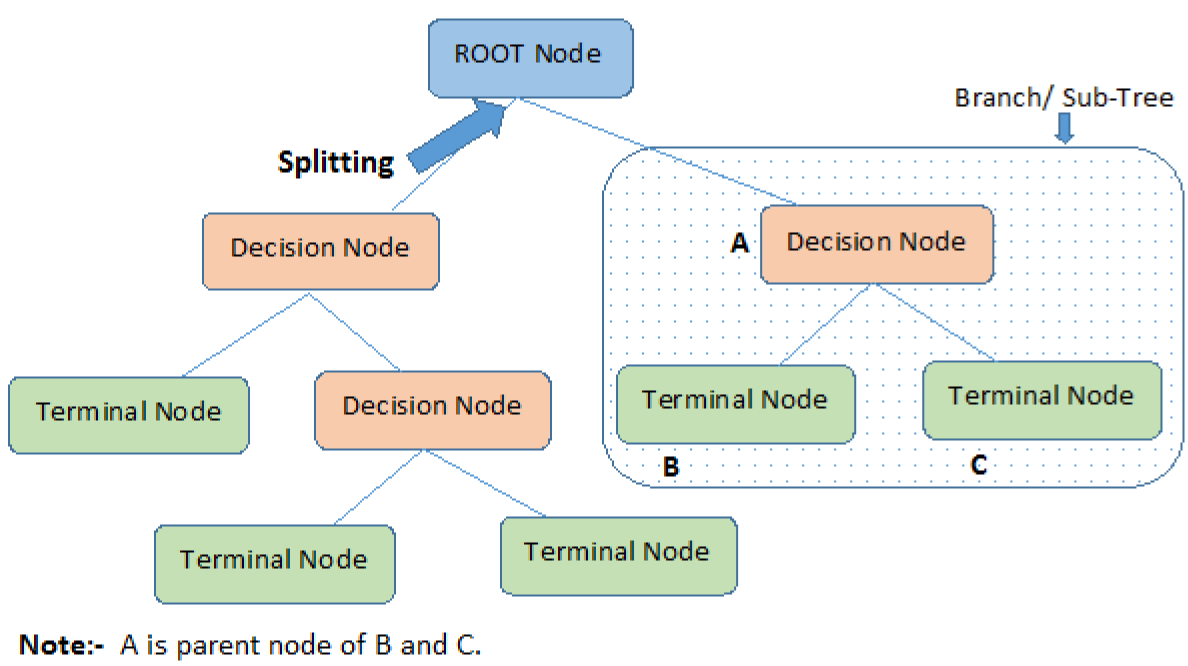
6. Decision Tree



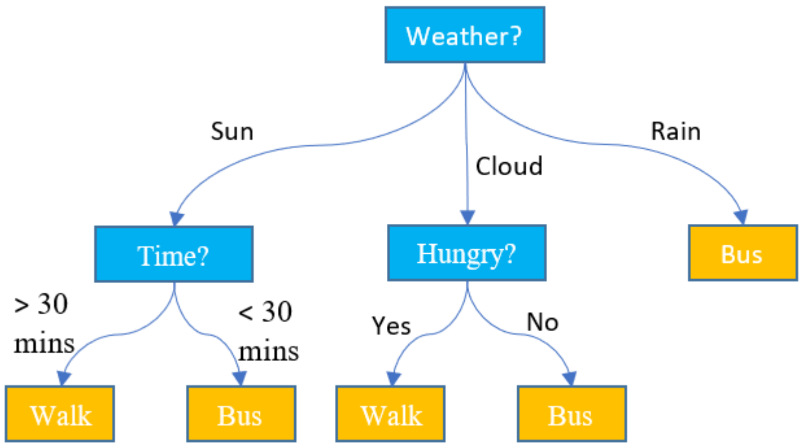
Decision Tree 란?

- 분류, 회귀, 다중출력 작업이 가능한 머신러닝 알고리즘
- 데이터에 내제되어 있는 **패턴을 변수 조합으로 나타내는 예측/분류 모델을 나무의 형태**로 만드는것
- 질문을 던져서 맞고 틀리는 것에 따라 **우리가 생각하고 있는 대상**을 좁혀나간다.



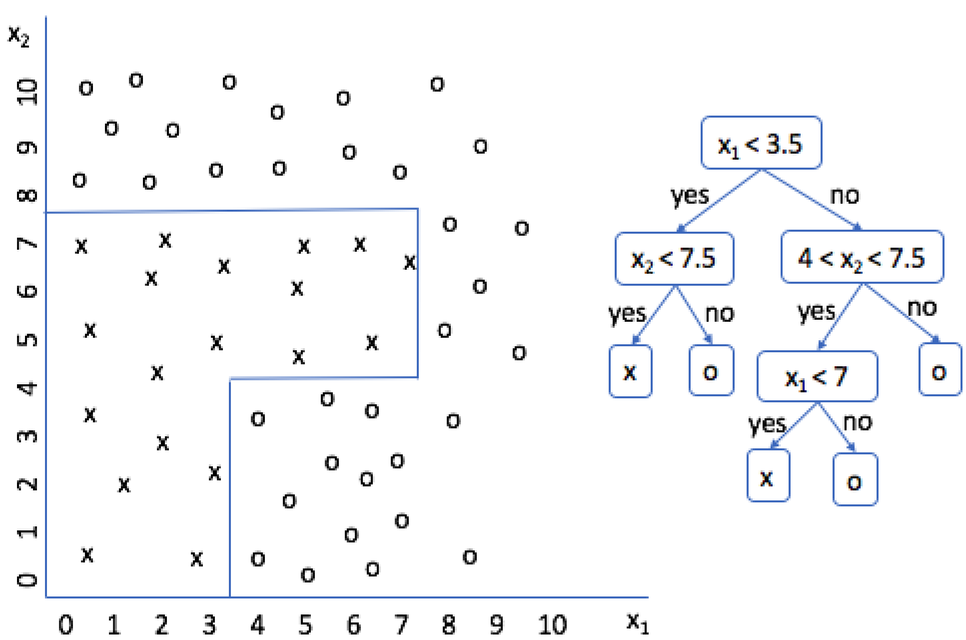
- 마지막 Node : Treminal Node
- 시작 Node : Root Node

예



이진분할

- 이진분할 문제는 무언가를 균등하게 나누는게 목표이다.
- 새로운 모델 → 분류 가능해야함
- 정해진 구역안에 새로운 데이터가 들어오면 어떻게 해야 할까?



- 5개의 부분집합으로 분류 된다.
- 분할의 갯수 = 끝마디의 갯수

Impurity

Cost Function

- 일반적인 모델에서의 CostFunction 은 매우 간단하고 직관적
    - $\sum(y - f(x))$
    - 차이를 나타내는 cost function 은 분류모델에서 의미가 없다.

- **Impurity 추정**(분류 모델에서의 **Costfunction**)
    - 분류모델에서의 Cost Function 은 직관적이지는 않다.
    - 범주형 데이터 이기 때문
        - 성공 or 실패
        - 사과, 배, 포도

purity

- 서로 다른 Target Data가 섞이지 않게 해야 한다.
- Decision Tree 의 결과는 pure 한 상황이어야 한다.
- 서로 다른 Target Data가 섞여 있다면 Impurity 가 높다 라고 한다.

Goal

- Impurity 를 작게 → 최대한 pure한 상황
- Impurity Function 을 이용해 측정할수 있다.

Impurity Function

- Entropy
- Gini Impurity
- Missclassification Error

Entropy

$E(A) = -\sum_{k=1}^{m} p_k log_2(p_k), 0 \leq E(A) \leq 1$

- p_k : A 영역에 속하는 record 중 K class 에 속하는 record의 비율

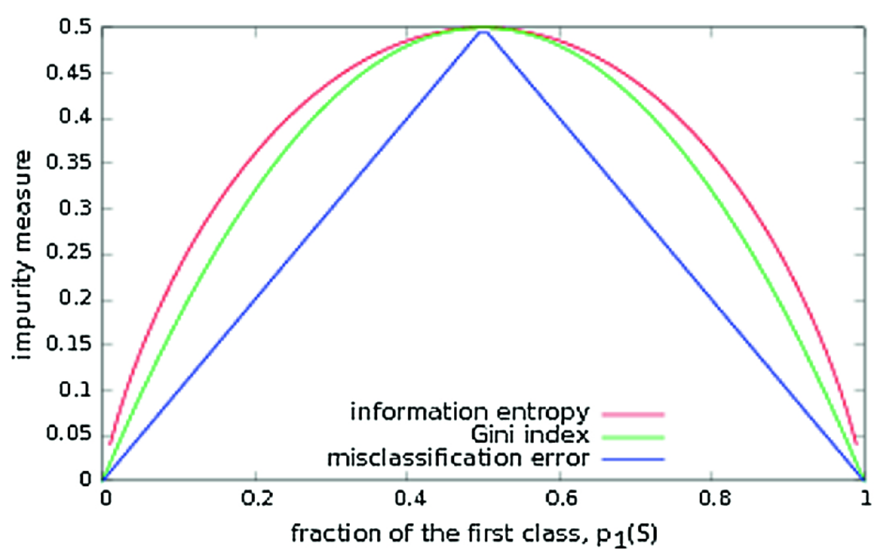
$$\begin{aligned} E(A) &= -\sum_{k=1}^{m} p_k \log_2(p_k) \\ &= -\frac{6}{16}\log_2\left(\frac{6}{16}\right) - \frac{10}{16}\log_2\left(\frac{10}{16}\right) \\ &\approx 0.95 \end{aligned}$$

Gini Impurity

Impurity를 판단하는 기준은 Gini Impurity 라고 한다.

$G(A) = 1 - \sum_{k=1}^{m} p_k^2, \leq G(A) \leq \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} I(A) &= 1 - \sum_{k=1}^{m} p_k^2 \\ &= 1 - \left(\frac{6}{16}\right)^2 - \left(\frac{10}{16}\right)^2 \\ &\approx 0.47 \end{aligned}$$



Gini vs Entropy

- 기본적으로 지니 불순도가 사용되지만 criterion 매개변수를 "entropy"로 지정하여 엔트로피 불순도를 사용할 수 있음
- 엔트로피는 분자의 무질서함을 측정하는 열역학의 개념
  - 분자가 안정되고 질서 정연하면 엔트로피가 0에 가까움
  - 메시지의 평균 정보 양을 측정하는 섀넌의 정보 이론: 모든 메시지가 동일할 때 엔트로피가 0
  - 머신러닝에서는 불순도의 측정 방법: 어떤 세트가 한 클래스의 샘플만 담고 있다면 엔트로피가 0
- 지니 불순도와 엔트로피 중 어떤 것을 사용해야 할까?
  - 실제로는 큰 차이가 없이 둘 다 비슷한 트리를 만듦

    - 지니 불순도가 조금 더 계산이 빠르기 때문에 기본값으로 좋음
    - 그러나 다른 트리가 만들어지는 경우 지니 불순도가 가장 빈도 높은 클래스를 한쪽 가지(branch)로 고립시키는 경향이 있는 반면 엔트로피는 조금 더 균형 잡힌 트리를 만듦

Information Gain

$IG = IF(parent) - [weightedaverage]IF(children)$

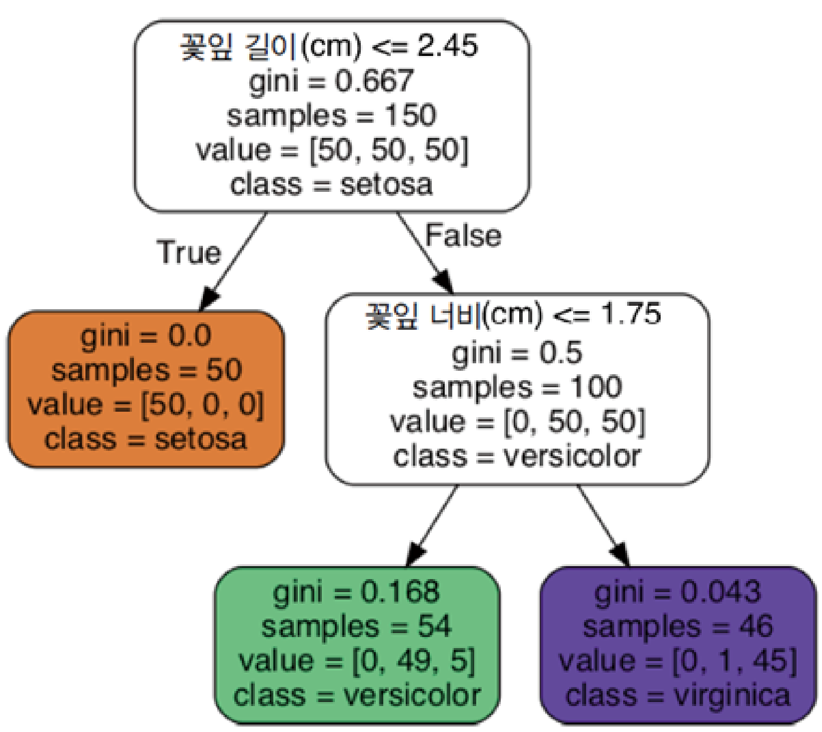
- IG = Information Gain
- IF = Information Function

예

- 불순도 1 → 불순도 0.4 인경우 IG = 0.6

트리가 어떻게 예측을 만들어내는지 살펴보자

- 새로 발견한 붓꽃의 품종을 분류하려 한다고 가정
- 노드의 sample 속성은 얼마나 많은 훈련 샘플이 적용되었는지 헤아린 것
- 노드의 gini 속성은 불순도(impurity)를 측정.



▲ 그림 6-1 붓꽃 결정 트리

- 꽃잎 길이 ≤ 2.45 : child node를 만들기 위한 규칙조건
    - Leaf(terminal node)에는 규칙 조건이 존재하지 않는다.
    - gini : Gini Impurity
        - 한 노드의 모든 샘플이 같은 클래스에 속해 있다면 이 노드를 순수(gini=0)하다고 표현. 예를 들어 깊이 1의 왼쪽 노드는 Iris-Setosa 훈련 샘플만 가지고 있으므로 순수 노드이고 gini 점수가 0.
    - sample : 현재 조건에 해당하는 data 의 수
    - value : 각 class 에 해당하는 data수
        - [0, 49, 5] 3개의 class 로 분류되고 있으며 setosa 0개, versicolor 49개, virginica 5개
    - class : value 내에 가장 많은 data를 가진 결정값

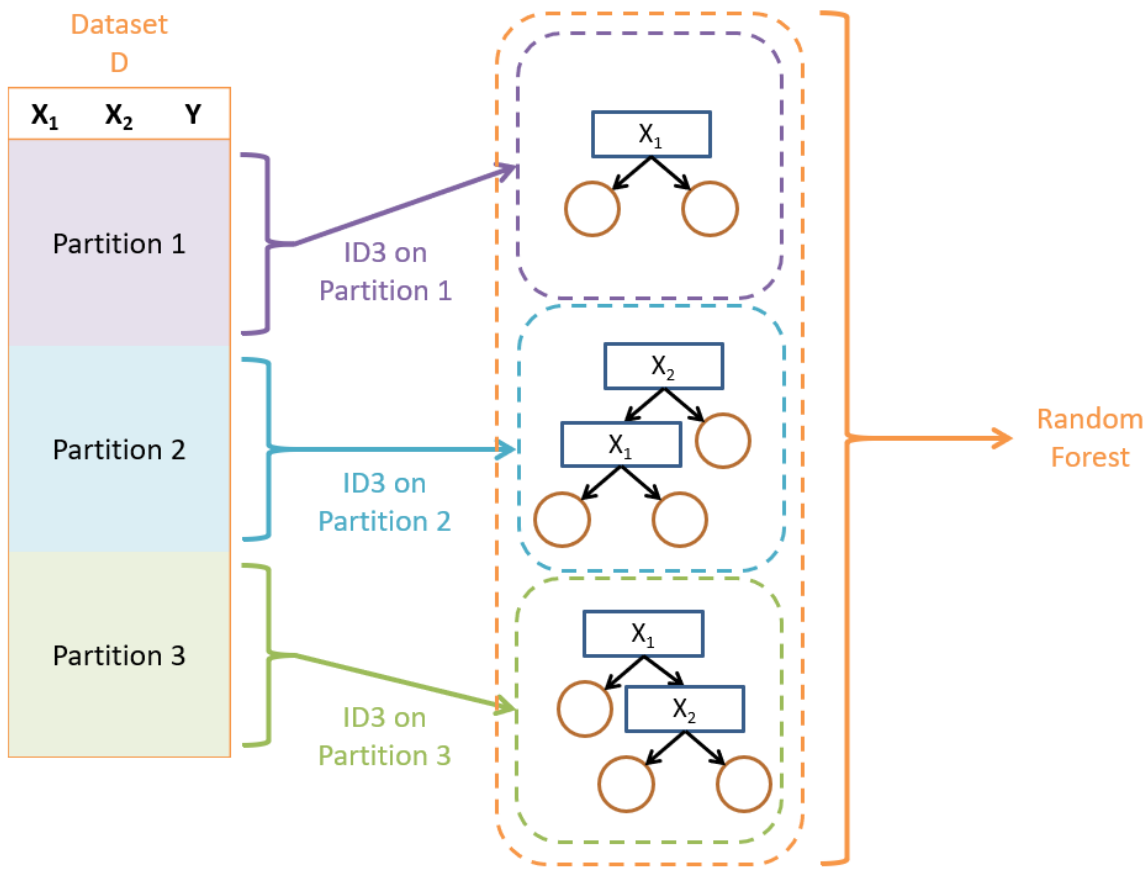
CART (Classification and Regression Trees)

- 사이킷런은 결정 트리를 훈련시키기 위해(즉, 트리를 성장시키기 위해) CART 알고리즘을 사용
- CART 알고리즘은 지니계수로 불순도를 계산 한다.
    - ID3 : Entropy 를 사용해 불순도를 계산

- CART 훈련 알고리즘
    - 먼저 훈련 세트를 하나의 특성 k의 임곗값 tk를 사용해 두 개의 서브셋으로 나눔 (예를 들면 꽃잎의 길이 ≤ 2.45cm). 어떻게 k와 tk를 고를까? (크기에 따른 가중치가 적용된) 가장 순수한 서브셋으로 나눌 수 있는 (k, tk) 짝을 찾음. 이 알고리즘이 최소화해야 하는 비용 함수는 다음과 같다

$$J(k, t_k) = \frac{m_{\text{left}}}{m} G_{\text{left}} + \frac{m_{\text{right}}}{m} G_{\text{right}} \qquad \begin{cases} G_{\text{left right}} \text{는 왼쪽/오른쪽 서브셋의 불순도} \\ M_{\text{left right}} \text{는 왼쪽/오른쪽 서브셋의 샘플 수} \end{cases}$$

- CART 알고리즘이 훈련 세트를 성공적으로 둘로 나누었다면 같은 방식으로 서브셋을 또 나누고 그다음엔 서브셋의 서브셋을 나누고 이런 식으로 계속 반복.
이 과정은 (max_depth 매개변수로 정의된) 최대 깊이가 되면 중지하거나 불순도를 줄이는 분할을 찾을 수 없을 때 멈추게 됨



주요 파라미터

Max_depth

- 트리의 최대 깊이
- Defaulf(none) 설정은 완전히 Class를 나눌때까지 depth를 키우며 분할
- 깊이가 깊어질수록 Overfitting 된다

Max_features

- 최적의 분할을 위해 고려할 최대 Feature의 개수
- Default(none) 는 모든 Feature를 고려하여 분할 수행
- sqrt, auto : $\sqrt{전체 feature}$ 의 개수만큼 Feature 선정
- log : $log_2 전체 Feature$

min_samples_split

- node 분할을 위한 최소 Sample data 개수
- Overfitting 문제를 해결을 위해 사용.

min_sample_leaf

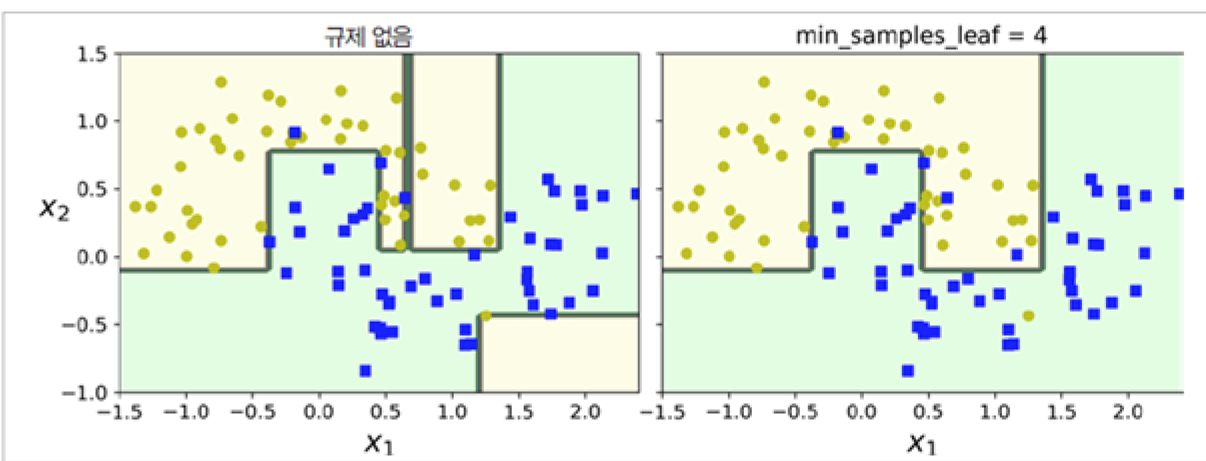
- Leaf(terminal node) 가 되기 위한 최소한의 Samole data수
- Overfitting 문제 해결을 위해 사용

max_leaf_nodes

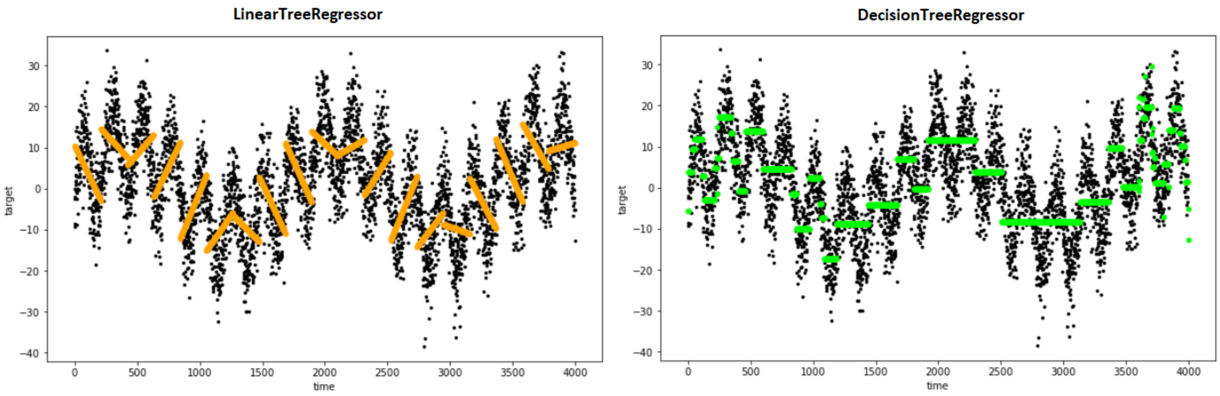
- leaf(terminal node)의 최대 개수

6.7 규제 매개변수

- 선형 모델은 데이터가 선형일 거라 가정
- 제한을 두지 않으면 트리가 훈련 데이터에 아주 가깝게 맞추려고 해서 대부분 과대적합되기 쉬움
- 주의
    - 제한을 두지 않으면 트리가 훈련 데이터에 아주 가깝게 맞추려고 해서 대부분 과대적합되기 쉬움
    - 선형 모델 같은 파라미터 모델은 미리 정의된 모델 파라미터 수를 가지므로 자유도가 제한되고과대적합될 위험이 줄어들고 과소적합될 위험은 커짐



Decision Tree Regression



회귀 결정 트리를 만들어 살펴보기

- 사이킷런의 DecisionTreeRegressor를 사용해 잡음이 섞인 2차 함수 형태의 데이터셋에서 max_depth=2

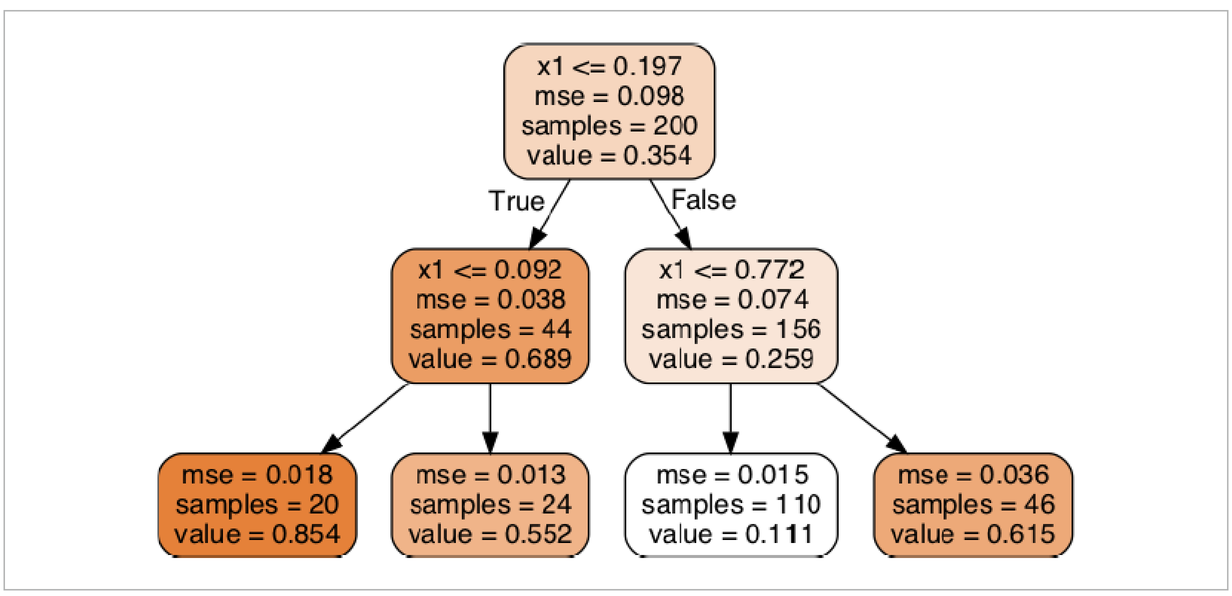


그림 6-4 회귀 결정 트리

- 분류에서와 같이 회귀 작업에서도 결정 트리가 과대적합되기 쉬움
- 규제가 없다면(즉, 기본 매개변수를 사용하면) [그림 6-6]의 왼쪽과 같은 예측을 하게 되며, 이 예측은 확실히 훈련 세트에 아주 크게 과대적합되었음.
- min_samples_leaf=10으로 지정하면 [그림 6-6]의 오른쪽 그래프처럼 훨씬 그럴싸한 모델이 만들어짐

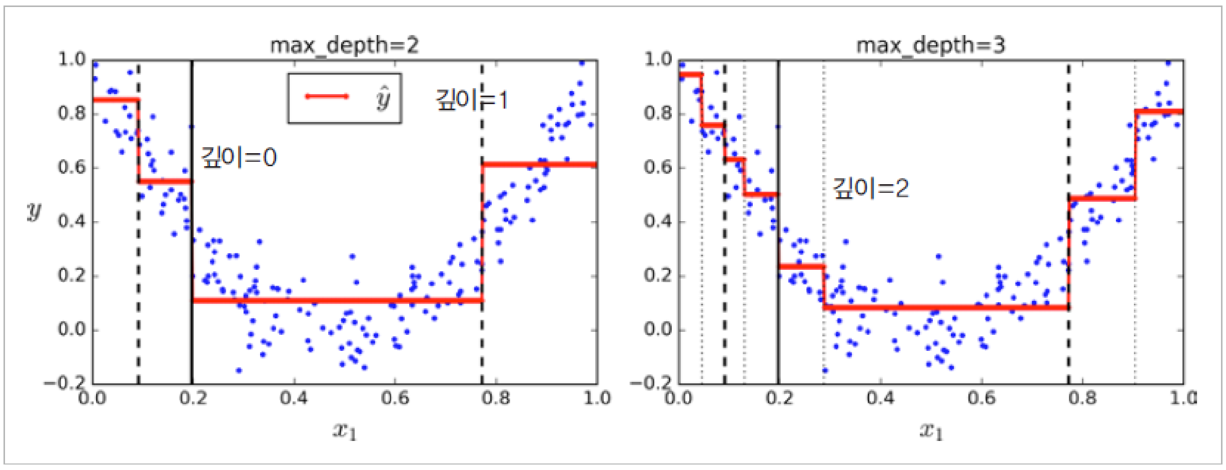
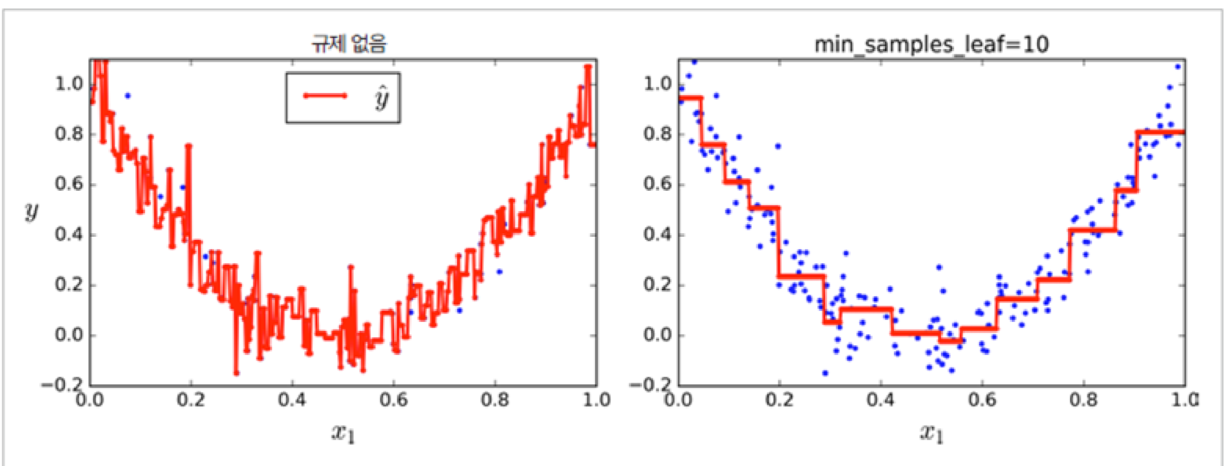


그림 6-5 두 개의 결정 트리 회귀 모델의 예측

- 규제가 없는 경우



▲ 그림 6-6 결정 트리 회귀 모델의 규제

회귀 트리 학습

회귀 트리는 top-down으로 진행되며, greedy(탐욕) 방식으로 가장 좋은 가지를 찾아서 분기를 나누는 방식을 반복한다. 모든 변수 $X_1, ..., X_p$와 모든 가능한 cutpoint ss에 대해

- RSS를 가장 많이 줄여주는 j와 s를 선택하게 된다. j와 s로 나뉜 구역(half-planes)은 다음과 같이 정의 가능하다.
    - j : 어떤 변수를 선택할 것인가
    - s : 변수를 나눌 기준은 무엇인가?
- $R1(j,s) = \{x|x_j < s\}$
- $R2(j,s) = \{x|x_j \geq s\}$

다음 수식을 최소화시키는 j와 s를 구하는 식으로 첫 분기를 나눈다.

손실함수

$argmin_{j,s}[\sum_{i:x_i \in R_1(j,s)}(y_i - \hat{y}_{R_1})^2 + \sum_{i:x_i \in R_2(j,s)}(y_i - \hat{y}_{R_2})^2]$

$\hat{y}_{R_i} = avg[y_i|x_i \in R_i(j,s)]$: R_i 에서 원소들의 평균

문제점

- Terminal Node의 갯수가 늘어날수록 과적합 된다. (Low Bias, High Variance)
- 계층적 구조로 인해 Error 또는 Noise 발생시 다음 단계로 계속 전파되어 결과에 크게 영향을 미친다.