

1. 지도학습과 비지도학습

Machine Learning 모형 구분

지도학습 (Supervised Learning)

종속 및 독립변수를 이용하여 주어진 독립(설명)변수를 바탕으로 종속(반응)변 수 예측 모형 제시

예: 회귀/분류 모형

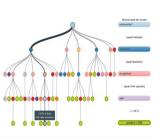


비지도학습 (Unsupervised Learning)

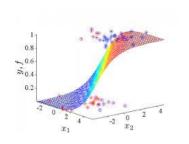
Target(종속변수/반응변수)이 없으며, 독립(설명)변수 간의 관계나 이를 바탕으로 개체들을 구분하여 의미 있는 결과를 제시

예:군집 분석, 연관성 분석, 주성분 / 요인분석

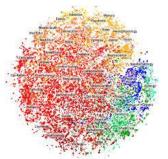
[decision tree]



[logistic regression]



[clustering analysis]

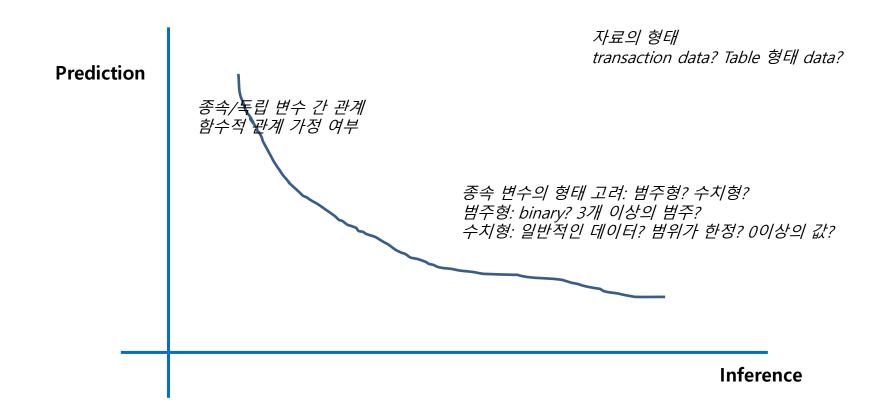


[link analysis]



1. 지도학습과 비지도학습

▶ 데이터 분석의 목적

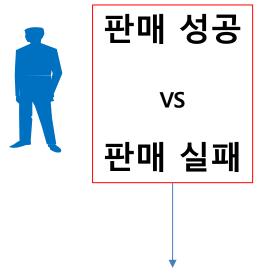


- 분류(Classification):
 - 지도 학습 중에서, 주어진 데이터를 기반으로 범주형 Target값에 따라 분류하고 예측하는 모형
- 정분류율(Accuracy):
 - 분류모형에서 실제 Target을 정확하게 예측한 비율
- 교차검증(Cross Validation):
 - 훈련용 데이터로 모델링을 하고 테스트 데이터로 모형의 성능을 파악

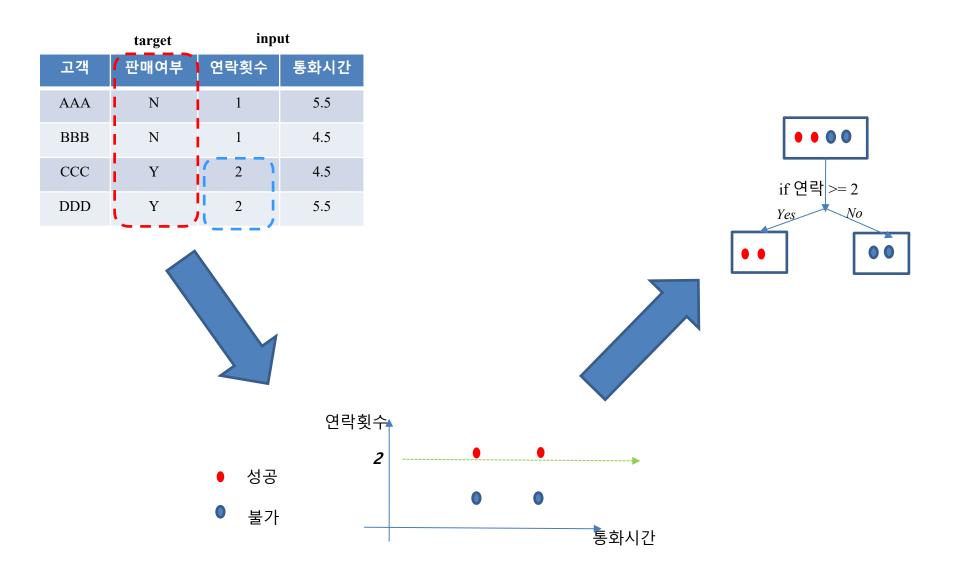
X1	X2	Х3	Υ
Yes	12	Blue	0
Yes	87	Green	0
No	44	Blue	X
Yes	19	Red	X
No	32	Green	0
No	14	Blue	0

- 분류(Classification) 모형
 - 주어진 변수를 사용해서 Target 변수를 예측하는 지도 학습의 기법으로,
 - 주어진 데이터를 바탕으로 <mark>범주형 Target값에 따라</mark> 분류하고 예측하는 모형

예: 마케팅의 성공 여부?



범주(Category): 같은 특성을 지닌 부류나 범위!



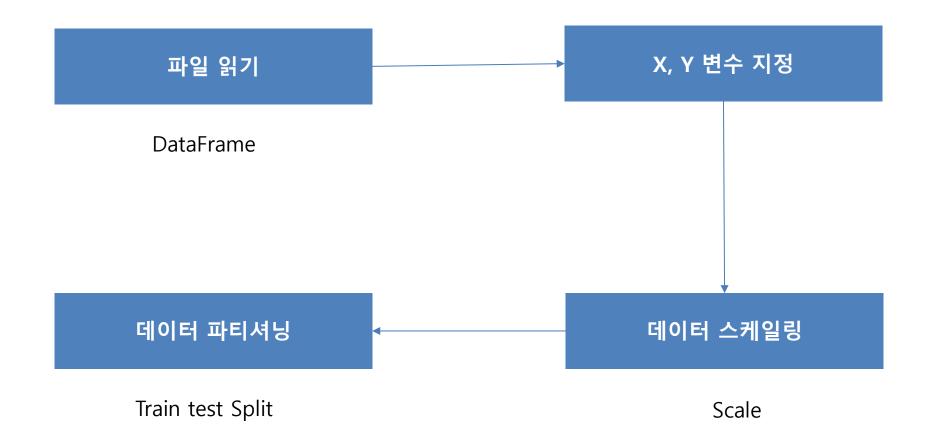
• 판매 예측 모형은 얼마나 정확할까? Cross Validation

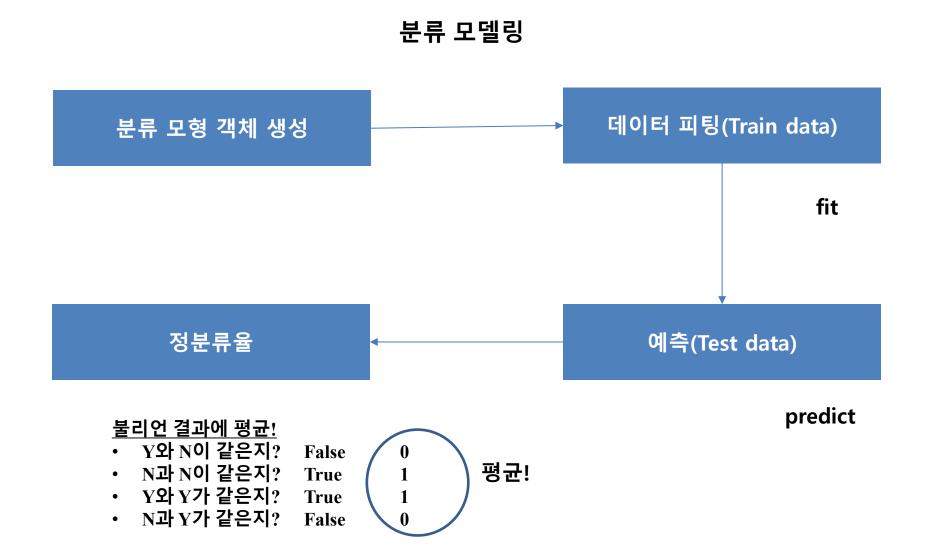
마케팅 결과

고객	판매 여부 (예측)	실제 결과
AAA	Y	N
BBB (N	N
CCC	Y) Y
DDD	N	Y

정분류율 (Accuracy): 50%

분류를 위한 데이터 준비





• 분류모형의 평가

Confusion Matrix

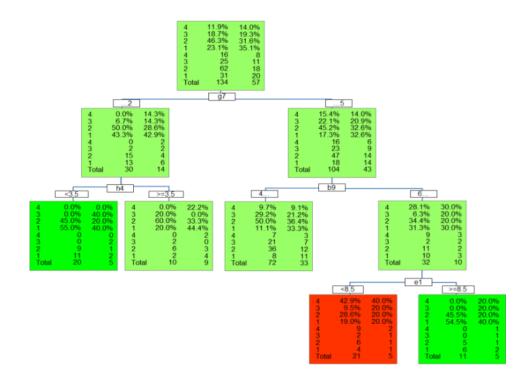
	실제 Y	실제 N
예측 Y	True Positive(TP)	False Positive(FP)
예측 N	False Negative(FN)	True Negative(TN)

- N=TP+FP+FN+TN
- 예측 결과에 따라 True, False 구분
- 예측 값에 따라 Positive, Negative 구분

Metric	Formula	설명
정분류율 or Accuracy	(TP+TN)/N	전체 결과 중 맞게 분류한 비율
오분류율	(FP+FN)/N	전체 결과 중 잘못 분류한 비율
Precision	TP/(TP+FP)	Y로 예측된 것 중 실제로도 Y인 비율

Decision Tree

- An empirical tree represents a segmentation of the data that is created by applying a series of simple rules
- _ 장점:
 - 해석의 용이성 / 상호작용 효과의 해석: / 비모수적 모형(선형성, 정규성, 등분산성 의 가정 불필요)



- Tree 구조: 그래프의 일종, 여러 노드로 구성이 되며, 서로 다른 두 노드를 잇는 길이 하나뿐인 구조, 최상위 노드인 루트노드로 부터 분기되어 형성
- 의사결정나무(Decision Tree): 일련의 간단한 규칙으로 만들어진, Target을 나눠가는 Tree 구조를 사용하는 분류모형
- 가지치기(Pruning): Decision Tree에서 자료에 과적합되는 것을 방지하기 위해 오분류율이 커지는 분기를 제거하는 것을 의미

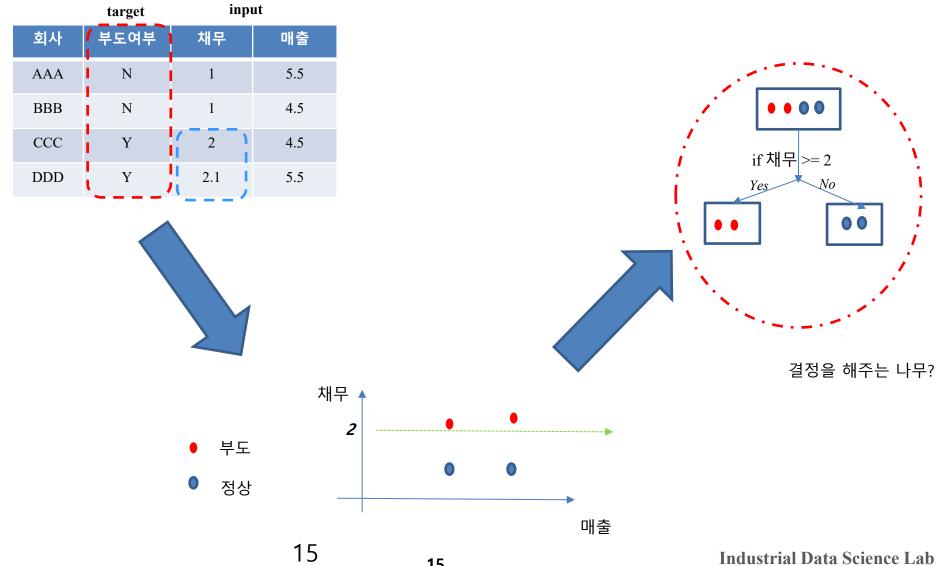
분류(Classification) 모형은 범주형 Target 변수를 예측하는 지도 학습의 기법!

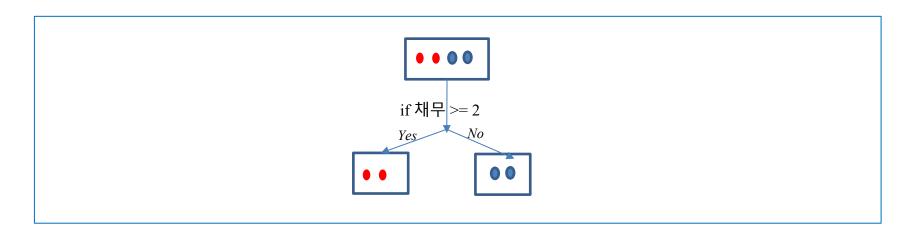


Decision tree

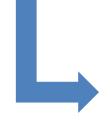
- 분류 기법 중 하나
- 1980년대 부터 사용!
 - C4.5 / C5.0 : information theory, entropy, Quinlan (1983)
 - CART(Classification and regression Tree): Gini index, Breiman et al. (1984)
 - CHAID(Chi-squared Automatic Interaction Detector): Chi-square test 이용, Kass(1980)
 - •

투자 대상 기업 4곳!



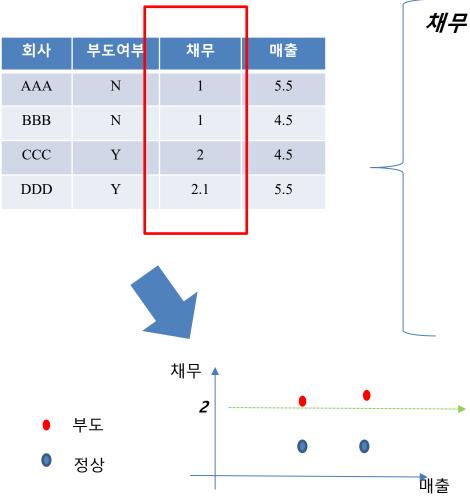


 Tree 구조: 그래프의 일종, Root로 부터 시작해서, 부모 노드에서 자식노 드로 분기해나가며 구성된 자료 구조



Decision Tree(의사결정나무)

"일련의 간단한 규칙으로 만들어진, Target을 나눠가는 Tree 구조"

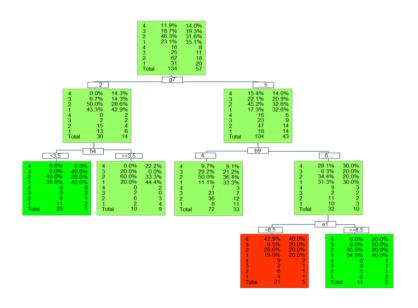


채무 변수의 값들: 1, 2, 2.1





<u>2.1을 기준으로</u>		
2.1 이상	VS	2.1 미만
•		• 0 0



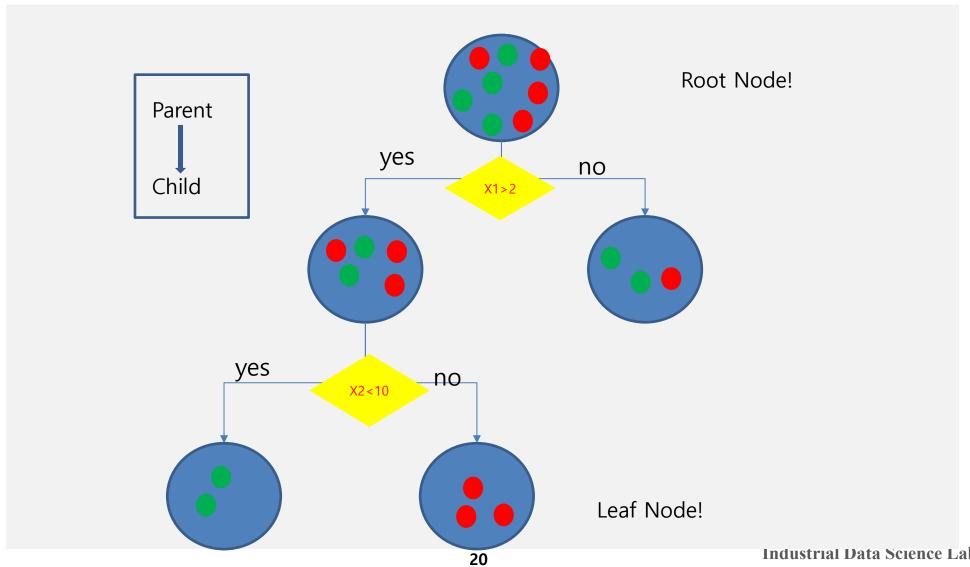
- 해석의 용이성
- 상호작용 효과의 해석
- 복잡한 가정 불필요!

VS

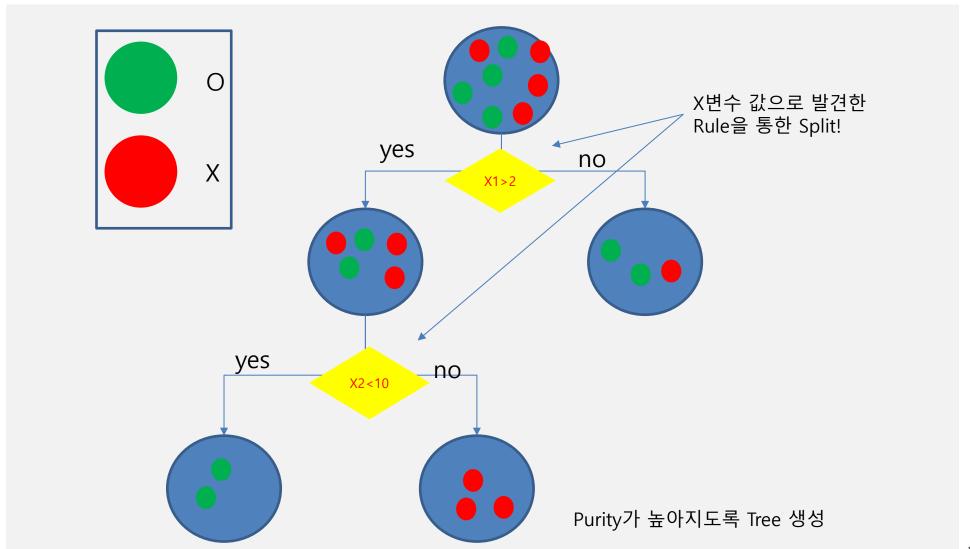
- 비연속성
- 선형성 또는 주효과 결여
- 안정성 부족

- Decision Tree 주요 구성요소
 - Decision Tree는 Root부터 Leaf node 사이 여러 Node로 구성되며, 이때 Node의 분기는 Rule에 의해 이뤄짐.
 - Root부터 각 Leaf Node까지를 각각 Branch라고 하며, Branch까지의 노드의 수를 Depth라고 부름.
- Decision Tree의 시각화: Text로 출력된 Rule들을 효과적으로 보기 위해 Tree구조를 시각화

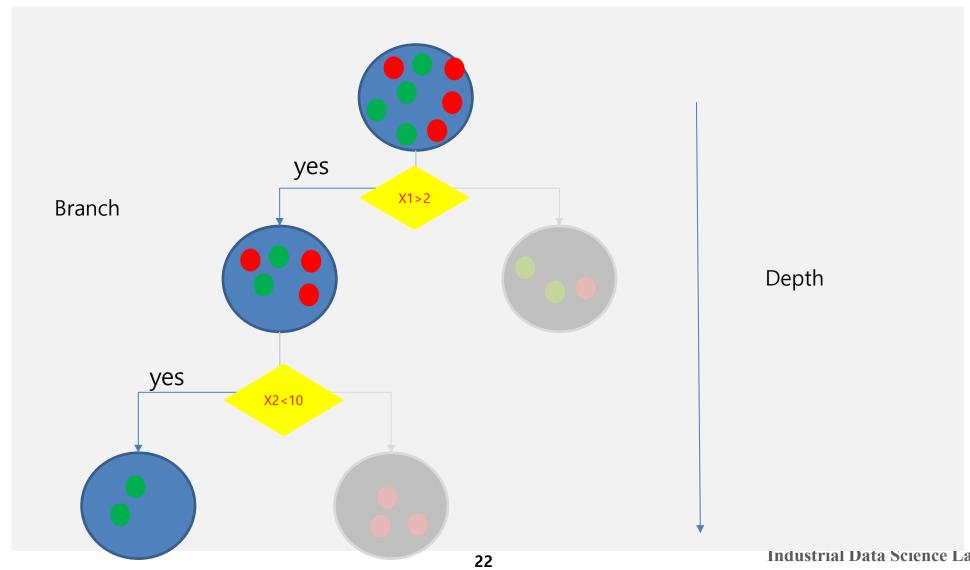
Decision Tree의 구성요소: Roof, Leaf Node



Decision Tree의 구성요소: Rule

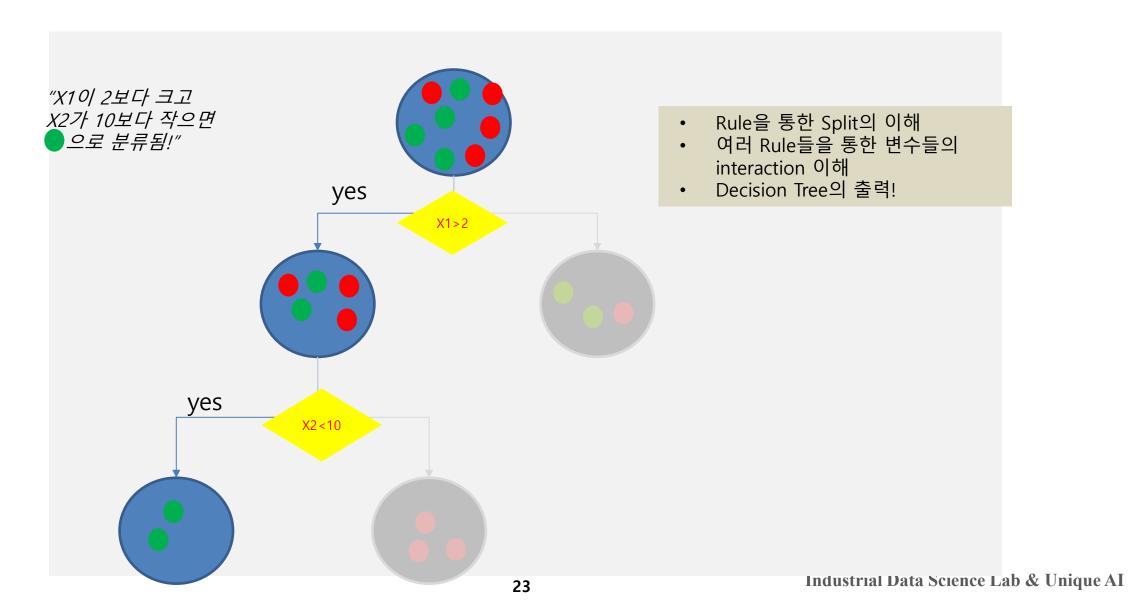


Decision Tree의 구성요소: Branch & Depth

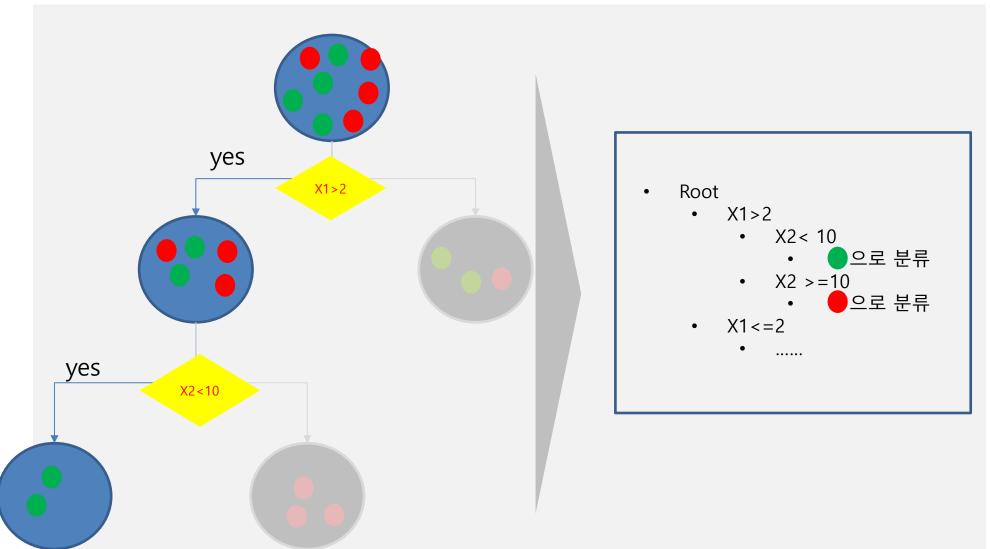


Industrial Data Science Lab & Unique AI

Decision Tree의 이해



Decision Tree의 이해



▶ 베이즈 정리

 확률변수의 조건부(conditional) 확률분포와 주변부(marginal) 확률분포를 연관 짓는 정리. 즉, 새로운 자료에서 나온 확률에 기반하여 과거의 확률을 향상(update).

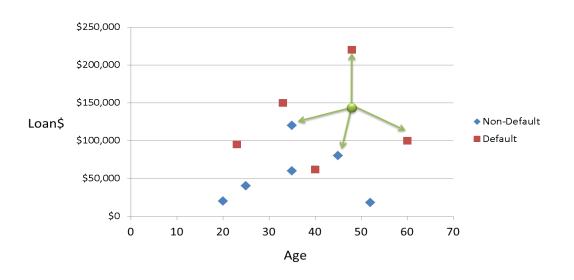
$$P(A|B) = \frac{P(B|A) P(A)}{P(B)}$$

▶ 베이즈 정리 이용 예

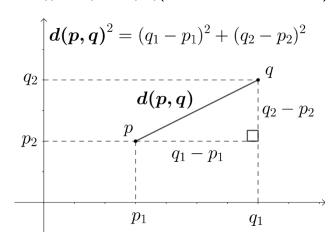
- 어떤 공장에서 일반적으로 공장이 원활한 경우 95%의 양품을 생산하지만, 공장이 원활하게 운영이 되지 않는 경우 70%의 양품을 생산
- 공장 관리자는 생산되는 제품의 품질을 바탕으로 공장 운영이 원활한지를 모니터링하고, 이를 공장 운영에 반영
- _ 정리
 - O: 공장이 원활하게 운영
 - OC: 공장이 원활하게 운영되지 않음
 - S: 양품 생산
 - SC:불량 생산
 - P(S|O)와 P(S|OC)를 알고 있음
- P(O|S)=?
 - 이 확률을 바로 구할 수 없으므로 베이즈 정리 이용
 - P(O|S) = P(S|O)P(O) / (P(S|O)P(O) + P(S|OC)P(OC))

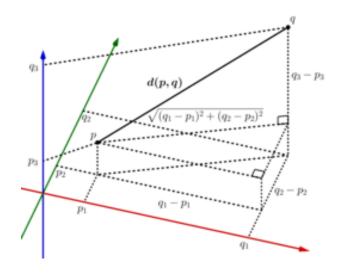
> KNN

- 1970년대 시작되었으며, 비모수적 기법
- 모든 가능한 케이스를 저장하고, 새로운 케이스를 유사도 기반하여 분류
- 모든 케이스는 n차원의 공간에서 점과 대응되며, 유클리드 혹은 맨해튼 거리 관점에서 인접한 이웃이 정의됨
- 이산형 및 연속형 가능
- 여러 명칭들
 - K-Nearest Neighbors
 - Memory-Based Reasoning
 - Example-Based Reasoning
 - Instance-Based Learning
 - Case-Based Reasoning
 - Lazy Learning

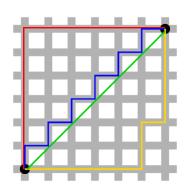


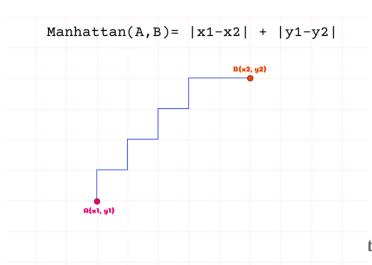
- ▶ 유클리드 거리와 맨해튼 거리 비교
 - 유클리드 거리(Euclidean Distance)





- 맨해튼 거리(Manhattan Distance)
 - 격자 모양의 경로에서 측정된 거리





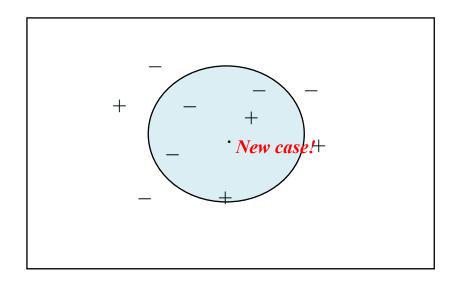
> KNN

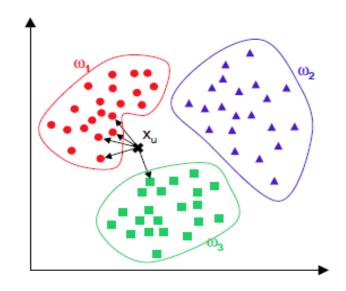
- Bayes Classifier의 한 종류
- K-Nearest Neighbor
 - Bayes Rule? 주어진 x에 대한 y의 확률
 - Classify observation to the class with largest probability
 - 간단한 방법 & 우수한 성능
 - 최적의 K를 구하기
- <mark>K?</mark>
 - If K=1, select the nearest neighbor
 - If K>1,
 - For classification select the most frequent neighbor.
 - For regression calculate the average of K neighbors.
 - K는 주로 홀수로 선택

> KNN

- 연속형 값에 대한 k-NN은 k개의 인접 이웃의 평균 값을 반환

 - Distance-weighted nearest neighbor algorithm
 각 k개의 이웃이 새로운 케이스에 얼마나 기여하는지를 거리를 기반으로 산출
- Robust to noisy data by averaging k-nearest neighbors





- Naïve Bayes 분류기
 - 베이즈 정리
 - conditional independence assumption: Feature끼리는 서로 독립!
 - 쉽고 빠른 학습이 가능
 - 이미 계산된 조건부 확률에 의해 예측이 이뤄짐
- Naïve Bayes: popular generative model
 - 비교적 성능이 우수
 - 앙상블 학습에서 Base 학습기로 잘 활용됨

두 사건 A, B에 대해 P(A and B)=P(A)P(B)이면 A와 B는 서로 독립

> Bayes classification

Difficulty: learning the joint probability

$$P(C \mid \mathbf{X}) \propto P(\mathbf{X} \mid C)P(C) = P(X_1, \dots, X_n \mid C)P(C)$$

- > Naïve Bayes classification
 - 가정: all input features are conditionally independent! (이런 가정이 Naïve)
 - MAP classification rule: for

$$P(X_1,\dots,X_n \mid C)$$

$$P(X_{1}, X_{2}, \dots, X_{n} \mid C) = P(X_{1} \mid X_{2}, \dots, X_{n}, C)P(X_{2}, \dots, X_{n} \mid C)$$

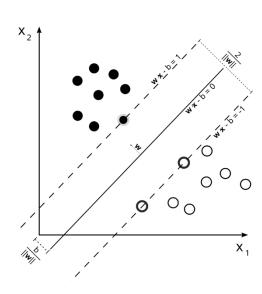
$$= P(X_{1} \mid C)P(X_{2}, \dots, X_{n} \mid C)$$

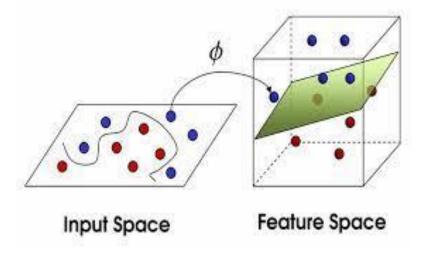
$$= P(X_{1} \mid C)P(X_{2} \mid C) \dots P(X_{n} \mid C)$$

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

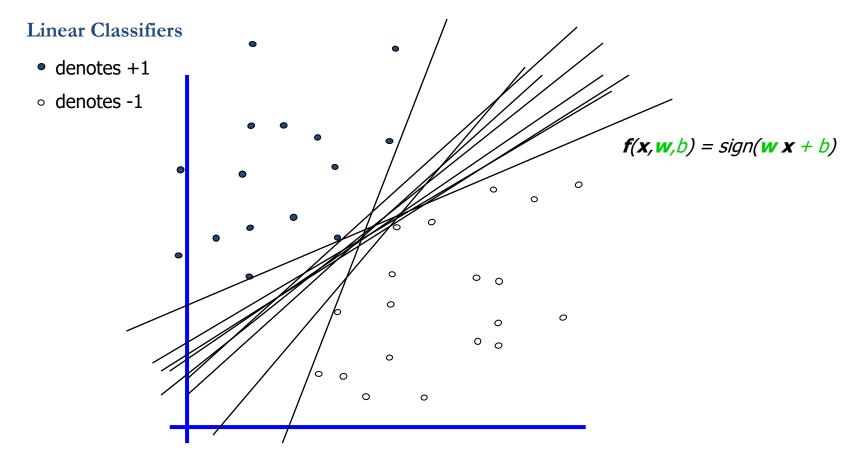
$$[P(x_1 | c^*) \cdots P(x_n | c^*)]P(c^*) > [P(x_1 | c) \cdots P(x_n | c)]P(c), c \neq c^*, c = c_1, \cdots, c_L$$

- > Support Vector Machine
 - 1990년대 개발
 - One of the best "out of the box" classifiers
 - Maximal Margin Classifier의 Generalization 모형





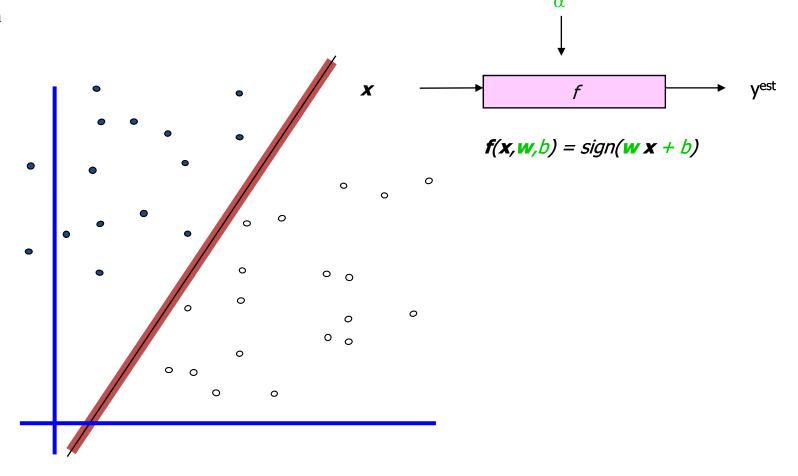
- > Support Vector Machine
 - ›· > 두 종류 점을 구분하는 방법을 고민
 - 아래의 직선들로 가능하지만 다양한 가능성이 존재
 이 중에서 최선의 직선을 찾는다면?



▶ Margin: 점에 닿기 전까지의 선형 분류기의 width

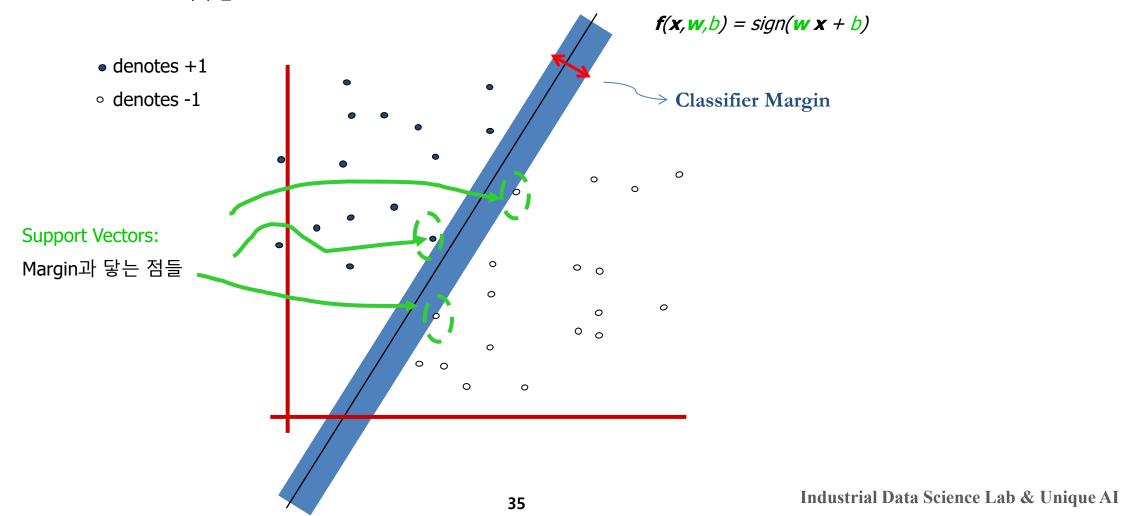
Classifier Margin

- denotes +1
- denotes -1

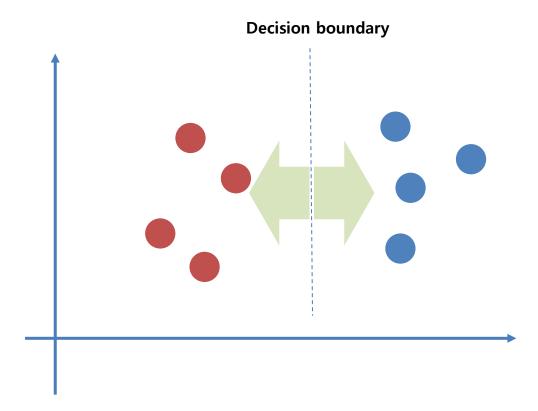


Support Vector Machine

- ✓ Margin: 점에 닿기 전까지의 선형 분류기의 width
- ✓ Maximum margin linear classifier : 최대 margin을 갖는 선형 분류기, 특히 이것은 가장 단순한 형태의 SVM으로 Linear SVM이라 함

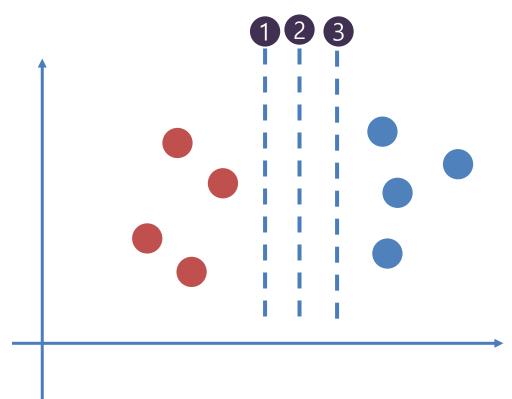


- > Support Vector Machine
 - 특징
 - <u>Margin의 최대화</u>
 - Robustness
 - 성능 개선
 - 이상치의 처리



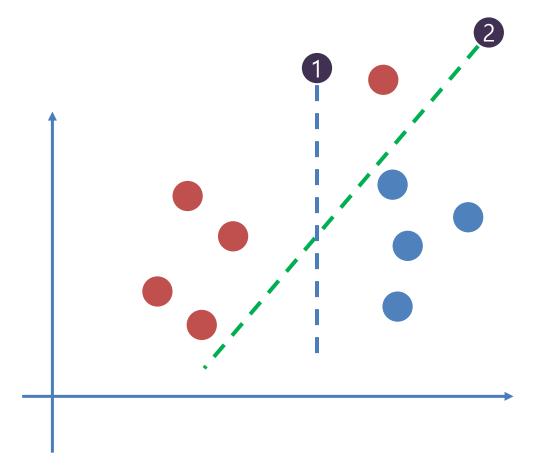
- > Support Vector Machine
 - 특징
 - Margin의 최대화
 - **Robustness**
 - 성능 개선
 - 이상치의 처리

- Decision boundary가 2인 경우 모형이 RobustMaximum Margin은 Robustness를 최대화



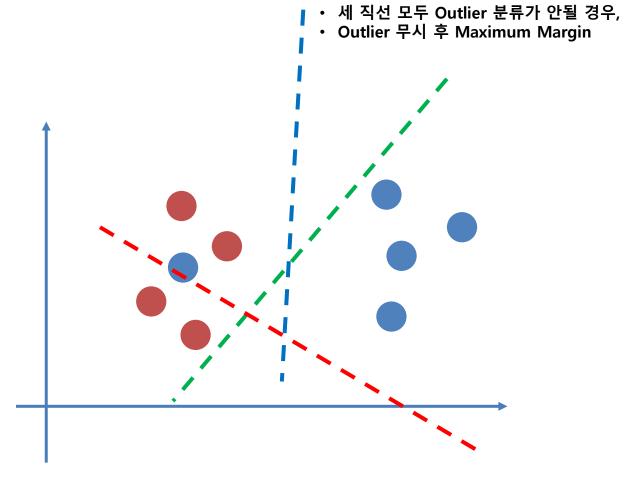
- > Support Vector Machine
 - 특징
 - Margin의 최대화
 - Robustness
 - 성능 개선-보다 정확한 분류
 - 이상치의 처리

• Maximum Margin 보다는 정확한 분류가 우선



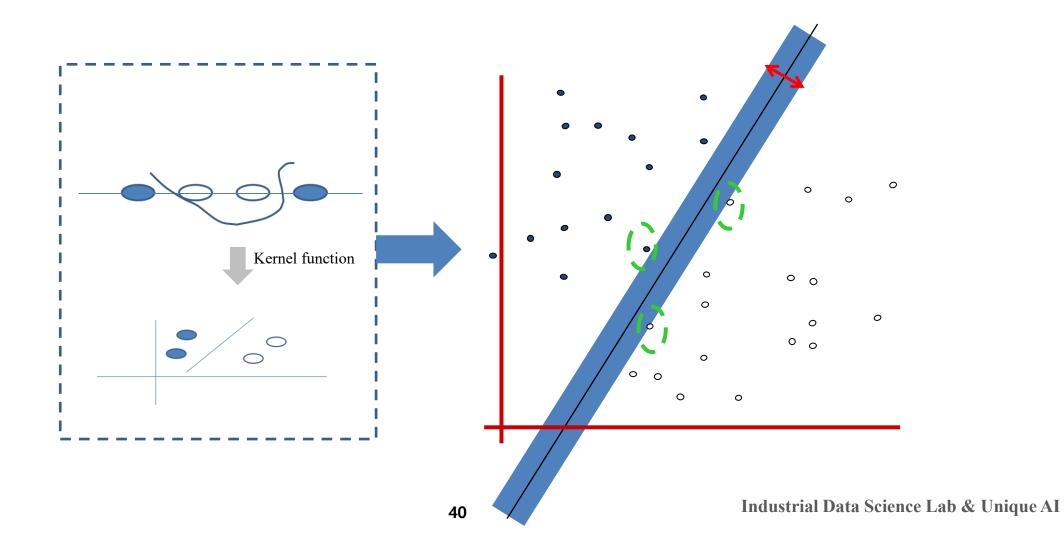
> Support Vector Machine

- 특징
 - Margin의 최대화
 - Robustness
 - 성능 개선
 - 이상치의 처리



> Support Vector Machine

✓ Kernel Trick: 모든 데이터를 항상 초평면 또는 선으로 나눌 수 없으며, 이 경우 주어진 자료를 평면으로 표현할 수 있는 고 차원을 변환

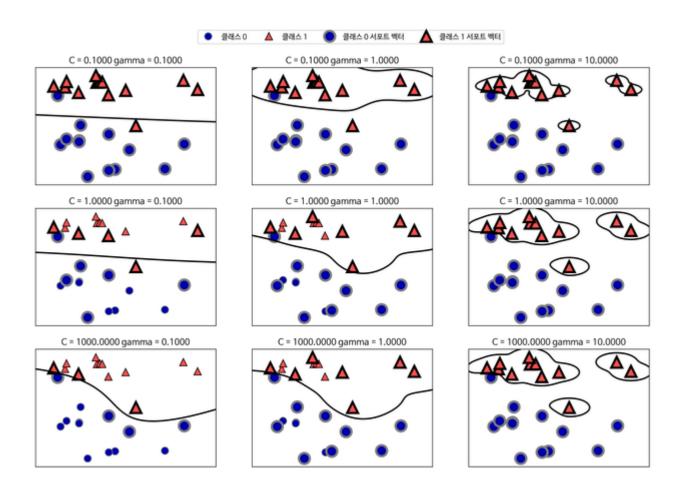


- > Support Vector Machine
 - ✓ 저차원 공간(Low dimensional space)을 고차원 공간(High dimensional space)로 매핑
 - ① X,Y 변수가 Not Separable!
 - ② X,Y에 커널 트릭을 통해 변수 생성: Z, Q, R,
 - Can be linearly separable!
 - ③ 고차원 공간의 Linearly Separable Line
 - ④ 저차원 공간으로 다시 맵핑
 - Non linear separable Line

Support Vector Machine in sklearn

- Kernel (Decision boundary의 모양)
 - Linear, polynomial, sigmoid, rbf
- C: Decision boundary의 Training points와 Smoothing 정도
 - C가 크면 더 많은 Training points : 곡선, 굴곡
 - C가 작으면 더 Smoothing : 직선
- Gamma: Decision Boundary의 Training point에 영향을 주는 데이터의 범위, 즉 reach를 의미
 - Gamma가 크다!
 - Reach가 작다 -> Decision Boundary 인근의 Training point가 영향, 개별 Training point의 영향->굴곡
 - Gamma가 작다!
 - Reach가 크다 -> 더 많은 데이터가 Training point로 사용 >직선 모양

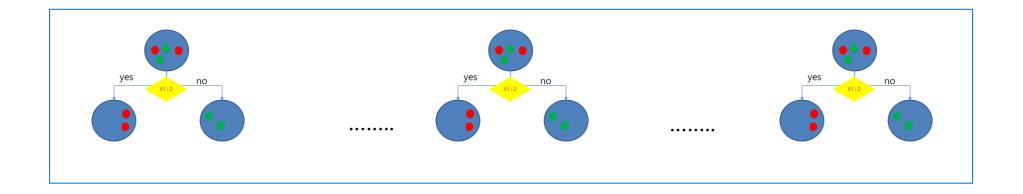
> Support Vector Machine in sklearn



- Ensemble 기법: 여러 분류 모형의 결과를 결합하는 기법
- Random Forest: 앙상블 학습 방법의 일종으로, 훈련 과정에서 구성한 다수의 Decision Tree로부터 Voting을 통해 결과 예측
- Bagging: 주어진 데이터에서 랜덤하게 여러 개의 같은 크기의 부분집합을 생성
- Out of Bag과 Voting: Out of Bag(OOB)는 Bagging에서 제외되는 데이터들을 의미하며, Voting은 Random Forest내 여러 Decision Tree의 결과 중 다수의 결과를 선택하는 방법

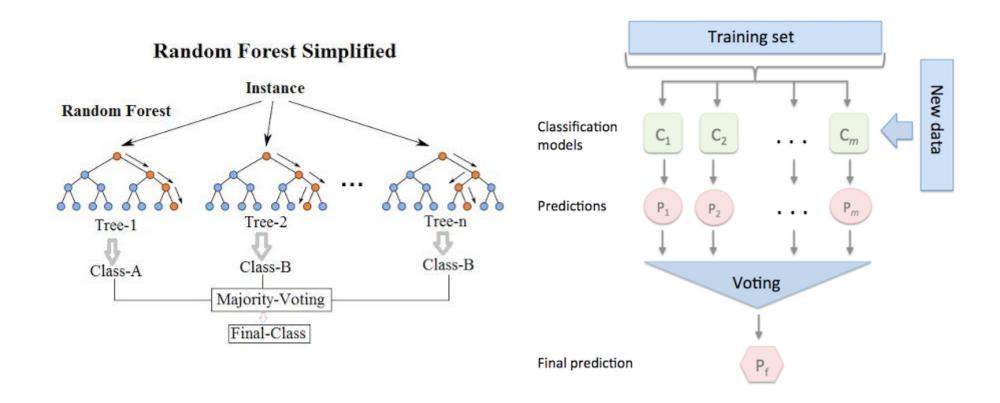
Random Forest

- Breiman의 "bagging" 과 변수 랜덤 선택 아이디어 기반
- 처음에는 random decision forests로 시작하여 발전
- 데이터의 다양한 경우를 반영할 수 있도록 보완
- 다양한 경우에 대한 Decision Tree를 통해 성능과 안정성을 제고



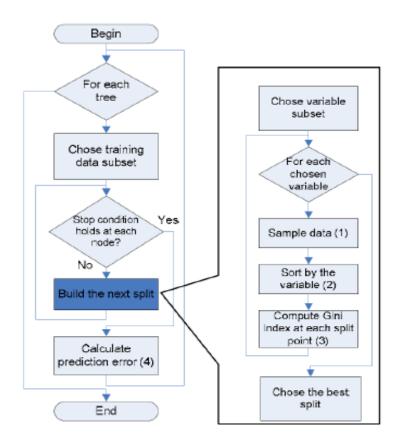
Random forest (or random forests)

 Ensemble classifier that consists of many decision trees and outputs the class that is the m ode of the class's output by individual trees



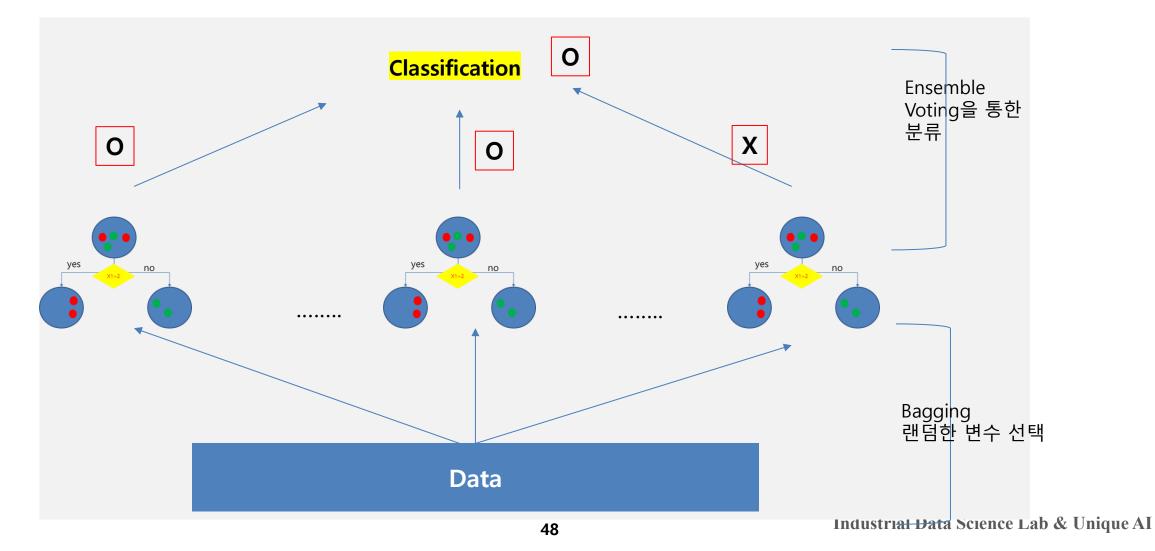
Algorithm

- ① N: # of training cases / M: 분류기의 변수
- ② M개 중 m개의 변수가 Tree의 각 노드에서 분류 에 사용
- ③ N개의 training case 중에서 각 tree에 사용되는 n개의 case를 선택 (예: bootstrap sample). 선택되지 않은 Case는 error 추정에 사용
- ④ 각 tree의 각 노드에서, m개의 변수를 무작위 선택하여 분류에 사용. 이후 m개의 변수로 가장 분류를 잘하도록 계산
- ⑤ 각 Tree fully grown and not pruned



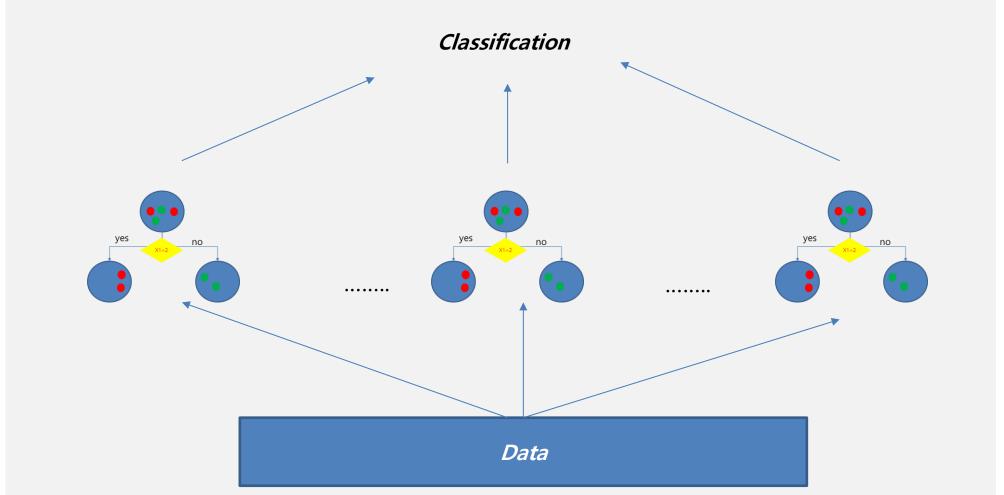
Random Forest

- 데이터의 다양한 경우를 반영할 수 있도록 보완
- 안정성을 제고

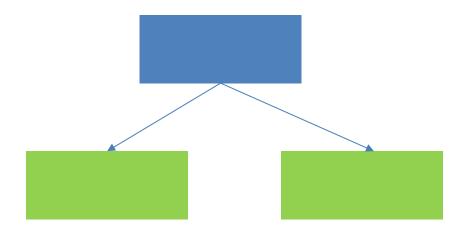


Random Forest

- 몇 개의 Decision Tree를 만들 것인지? 몇 개의 X변수를 Random하게 선택할 것인지?



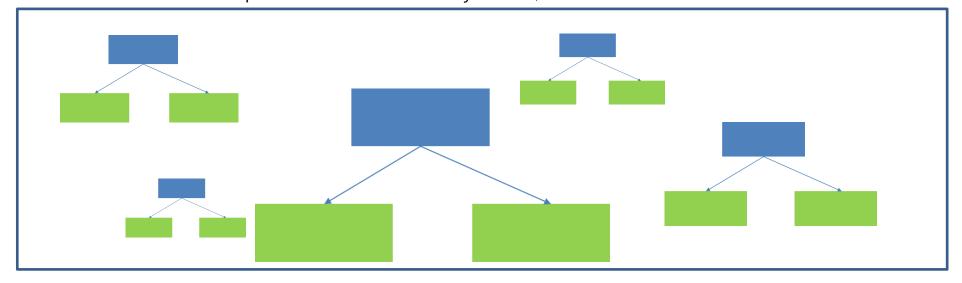
- Adaboost는 Ensemble 기법의 Boosting을 DT에 적용
- Stump로 부터 학습을 시작
 - Stump: 단순한 형태의 Tree, Weak learner



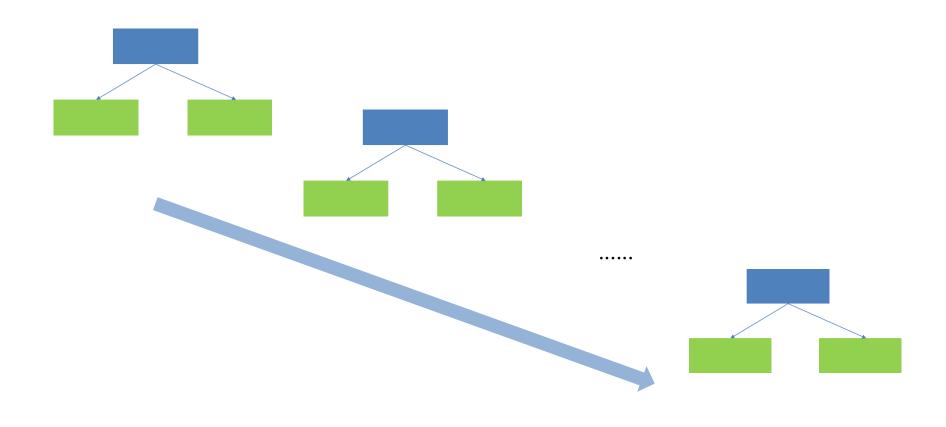
- Forest of stumps를 활용
 - Random Forest: 모든 tree는 같은 weight을 갖음
 Adaboost: Stump마다 중요도의 차이가 존재
- Random Forest에서는 Tree가 같은 중요도를 지님



Adaboost에서의 stump의 중요도: Amount of say로 표현, 클 수록 결과에 큰 영향을 미침



- Forest of stumps
 - 첫 stump는 다음 stump에 영향, 순차적으로 다음 stump에 영향을 주는 방식



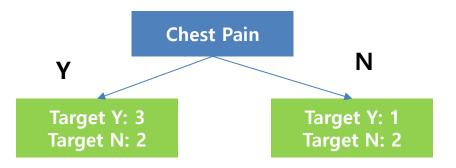
Example

Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Y	Y	205	Y	1/8
Ν	Y	180	Υ	1/8
Y	N	210	Υ	1/8
Υ	Υ	167	Υ	1/8
N	Υ	156	N	1/8
N	Υ	125	N	1/8
Y	N	168	N	1/8
Υ	Υ	172	N	1/8

Target

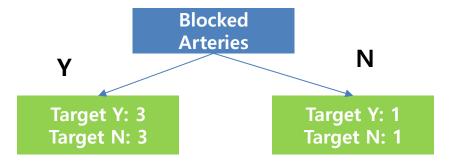
Sample Weight의 합은 1

• 각 변수별 Target과의 관계



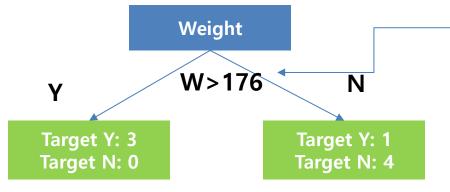
Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Υ	Υ	205	Υ	1/8
N	Υ	180	Υ	1/8
Υ	N	210	Υ	1/8
Υ	Υ	167	Υ	1/8
N	Υ	156	N	1/8
N	Υ	125	N	1/8
Υ	N	168	N	1/8
Υ	Υ	172	N	1/8

• 각 변수별 Target과의 관계



Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Υ	Υ	205	Υ	1/8
N	Υ	180	Υ	1/8
Υ	N	210	Υ	1/8
Υ	Υ	167	Υ	1/8
N	Υ	156	N	1/8
N	Υ	125	N	1/8
Υ	N	168	N	1/8
Υ	Υ	172	N	1/8

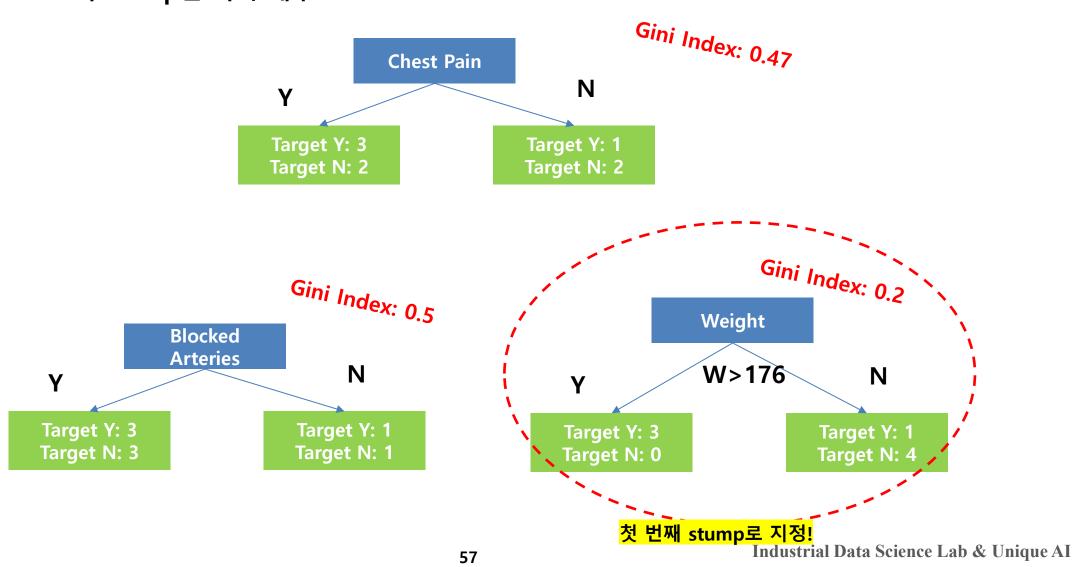
• 각 변수별 Target과의 관계



- Weight 오름차순 인접 몸무게 평균 각 평균으로 지니불순도
- 가장 작은 지니불순도인 몸 무게 평균 176

Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Υ	Υ	205	Υ	1/8
N	Υ	180	Υ	1/8
Υ	N	210	Υ	1/8
Υ	Υ	167	Υ	1/8
N	Υ	156	N	1/8
N	Υ	125	N	1/8
Υ	N	168	N	1/8
Υ	Υ	172	N	1/8

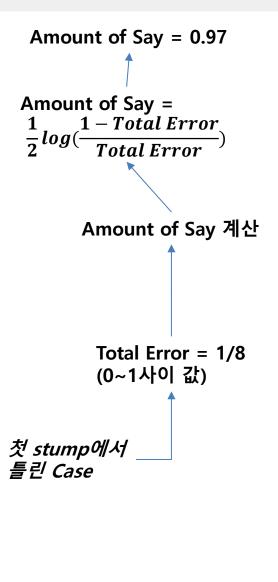
• 각 stump별 지니 계수





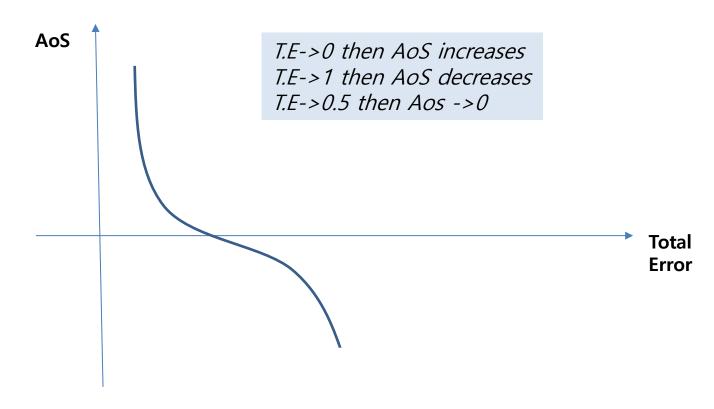


Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Υ	Υ	205	Υ	1/8
N	Υ	180	Υ	1/8
Y	N	210	Y	1/8
Υ	Υ	167	Υ	1/8
N	Y	156	N	1/8
N	Υ	125	N	1/8
Υ	N	168	N	1/8
Υ	Υ	172	N	1/8

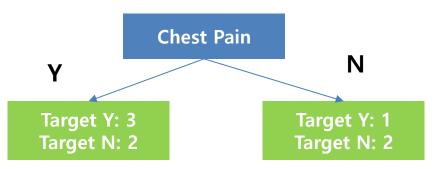


• 첫 stump의 Total Error

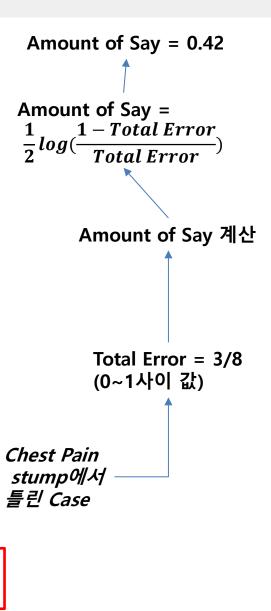
Amount of Say =
$$\frac{1}{2}log(\frac{1-Total\ Error}{Total\ Error})$$



• AoS 계산 예: Chest Pain (실제 stump는 아님)



Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Υ	Υ	205	Υ	1/8
N	Υ	180	Υ	1/8
Υ	N	210	Υ	1/8
Υ	Υ	167	Υ	1/8
N	Υ	156	N	1/8
N	Υ	125	N	1/8
Υ	N	168	N	1/8
Υ	Υ	172	Ν	1/8



• 두 번째 Stump 계산

- 첫 Stump가 잘못 분류한 Sample의 Weight를 높여줌
 - 이후 원래 데이터에서 샘플링을 통해 새롭게 데이터 구성
 - Weight를 활용한 샘플링
- 첫 Stump에서 오분류된 Sample이 높은 Weight으로 더 많이 Sampling됨
 - 다음 Stump에서 이전 단계에 오분류된 Obs.에 집중

New Sample Weight = Sample Weight
$$\times$$
 $e^{amount\ of\ say}$
AoS가 크면 Weight도 증가

• 첫 stump에서의 4번째 행

Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Υ	Υ	205	Υ	1/8
N	Υ	180	Υ	1/8
Y	N	210	Y	1/8
Υ	Υ	167	Υ	1/8
N	Y	156	N	1/8
N	Υ	125	N	1/8
Υ	N	168	N	1/8
Υ	Υ	172	N	1/8

New Sample Weight =
$$\frac{1}{8} \times e^{0.97} = 0.125 \times 2.64 = 0.33$$

• 두 번째 Stump 계산

- 첫 Stump에서 정분류된 Sample은 낮은 Weight으로 덜 Sampling
 - 다음 Stump에서 이전 단계에 정분류된 Obs.는 덜 고려함

New Sample Weight = Sample Weight
$$\times e^{-amount \ of \ say}$$

AoS가 크면 Weight는 감소

Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Υ	Υ	205	Υ	1/8
N	Υ	180	Υ	1/8
Υ	N	210	Υ	1/8
Υ	Υ	167	Υ	1/8
N	Y	156	N	1/8
N	Υ	125	N	1/8
Υ	N	168	N	1/8
Υ	Υ	172	N	1/8

New Sample Weight =
$$\frac{1}{8} \times e^{-0.97} = 0.125 \times 0.38 = 0.05$$

• <u>Weight의 합이 1이 되도록 정규화</u>

• 두 번째 Stump를 위한 Sampling

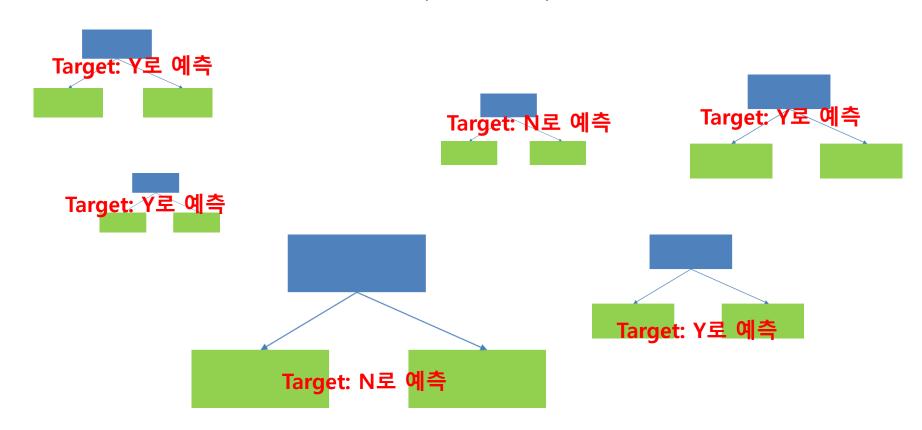
Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight	New Weight	Sampling 을 위한 값
Υ	Υ	205	Υ	1/8	0.07	0~0.07
N	Υ	180	Υ	1/8	0.07	0.07~0.14
Y	N	210	Y	1/8	0.07	0.14~0.21
Υ	Υ	167	Υ	1/8	0.49	0.21~0.7
N	Y	156	N	1/8	0.07	0.7~0.77
N	Υ	125	N	1/8	0.07	0.77~0.84
Υ	N	168	N	1/8	0.07	0.84~0.91
Υ	Υ	172	N	1/8	0.07	0.91~1

- 0~1사이 난수 생성
- 해당 난수 값이 속하는 행을 선택
- 중복해서 선택 가능
- Weight가 높은 행이 Sampling될 확률이 높음

• 다음 Stump를 위한 Sampling 및 학습 반복

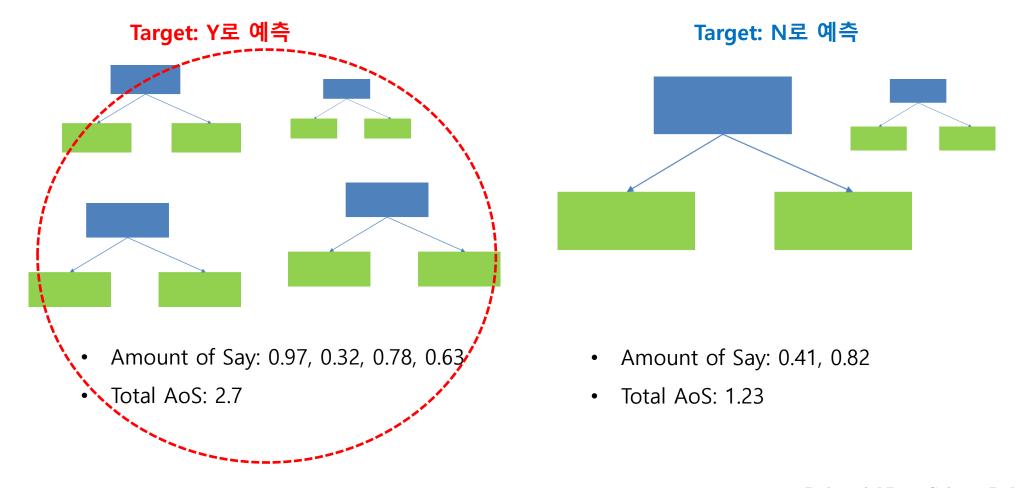
Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight	New Weight	Sampling 을 위한 값				
Υ	Υ	205 \	Υ	1/8	0.07	0~0.07				
N	Υ	180	Υ	1/8	0.07	0.07~0.14		• [나음 계산을 위히	ᆘᄀ ᅜᅔᆡᅕᄀᆝᅎ
Υ	N	210	Y	1/8	0.07	0.14~0.21		• ∟	·[금 계신글 퓌º	1 기중시 소기 <u>:</u>
Υ	Υ	167	Y	1/8	0.49	0.21~0.7				
N	Y	156	N	1/8	0.07	0.7~0.77				4 !
N Y	Y N	125 168	N	1/8 1/8		est Pain	Blocked	Patient	Heart	Sample
Υ	Υ	172	N	1/8	<u> </u>		Arteries	Weight	Disease	Weight
						N	Υ	156	N	1/8
						Υ	Υ	167	Υ	1/8
					*	N	Υ	125	N	1/8
						Υ	Υ	167	Υ	1/8
						Υ	Y	167	Y	1/8
						Υ	Υ	172	N	1/8
					4	Υ	Υ	205	Υ	1/8
						Υ	Υ	167	Υ	1/8

- Adaboost의 예측 방식
 - 주어진 X값에 대해 Forest of Stump 내의 Stump에 적용



• Adaboost의 예측 방식

• 주어진 X값에 대해 Forest of Stump 내의 Stump에 적용



Adaboost VS Gradient Boost

• Adaboost: 여러 Stump의 순차적 계산

• GB: leaf로 부터 시작

• Leaf: Target에 대한 초기 추정값(예: 평균, log(odds ratio) 등)

• Stump가 아닌 Tree를 생성: 각 tree는 leaf가 8~32개 크기 수준으로 생성

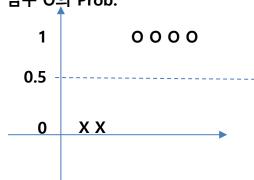
X1	X2	Х3	Target
Υ	12	Blue	0
Υ	87	Green	0
N	44	Blue	X
Υ	19	Red	X
N	32	Green	0
N	14	Blue	0

- Gradient Boost for Classification, Step 1
 - Leaf의 계산
 - X 범주 2개 대비 O범주는 4개, Odds = 4/2, leaf는 log(odds) = 0.7

X1	X2	Х3	Target
Υ	12	Blue	0
Υ	87	Green	0
N	44	Blue	X
Υ	19	Red	X
N	32	Green	0
N	14	Blue	0

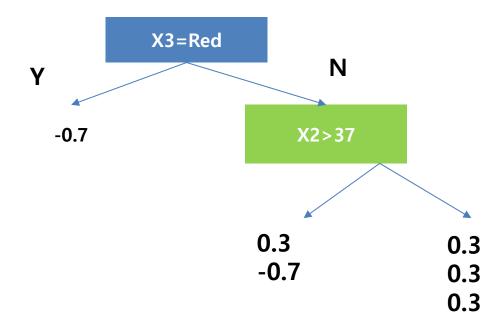
- Gradient Boost for Classification, Step 1
 - Leaf의 계산: X 범주 2개 대비 O범주는 4개, Odds = 4/2, leaf는 log(odds) = 0.7
 - Leaf를 통한 O 범주의 확률?
 - Exponential(log(odds)) / (1+exponential(log(odds))) = 0.7
 - 이 값이 기준인 0.5와 비교하여 O, X 분류
 - Residual을 계산: 예를 들어 O는 확률 1이고, leaf 는 0.7이어서 Residual은 0.3

같은 X변수들로
Residual에 대한 Tree
범주 O의 Prob.

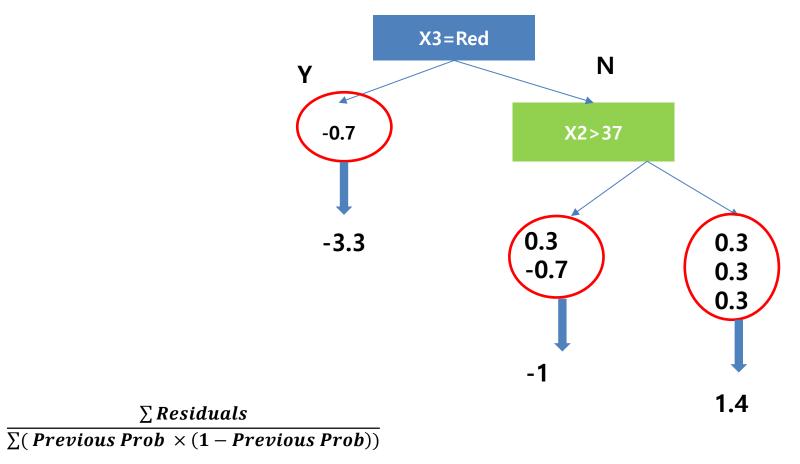


X1	X2	Х3	Target	Residual
Υ	12	Blue	0	0.3
Y	87	Green	0	0.3
N	44	Blue	Х	-0.7
ΙY	19	Red	Х	-0.7
N	32	Green	0	0.3
N	14	Blue	0	0.3
L		;		

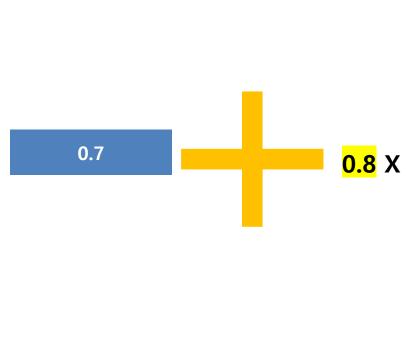
- Gradient Boost, Step 1
 - 1st Tree
 - leaf의 수를 8~32로 제한하며 그 범위내에서 tree 생성

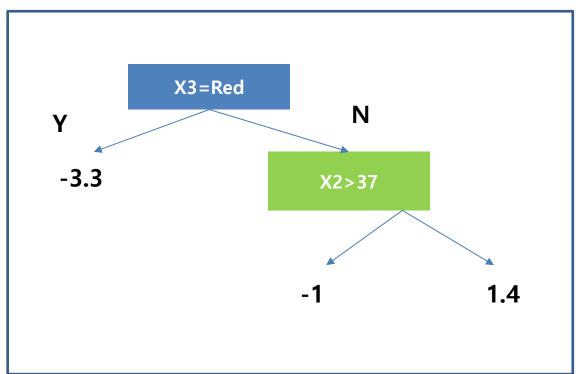


- Gradient Boost, Step 1
 - 1st Tree



- Gradient Boost, Step 2
 - Leaf 의 initial prediction에 tree에 학습율 반영하여 계산
 - Leaf + 1st Tree





- Gradient Boost for Classification, Step 3
 - 각 범주에 대한 발생 확률 계산
 - 1st Obs의 업데이트된 log(odds)는 1.8
 - Leaf 0.7 + 1.4(from tree) X 0.8 = 1.8
 - 1st Obs의 확률: $\frac{e^{1.8}}{1+e^{1.8}}$

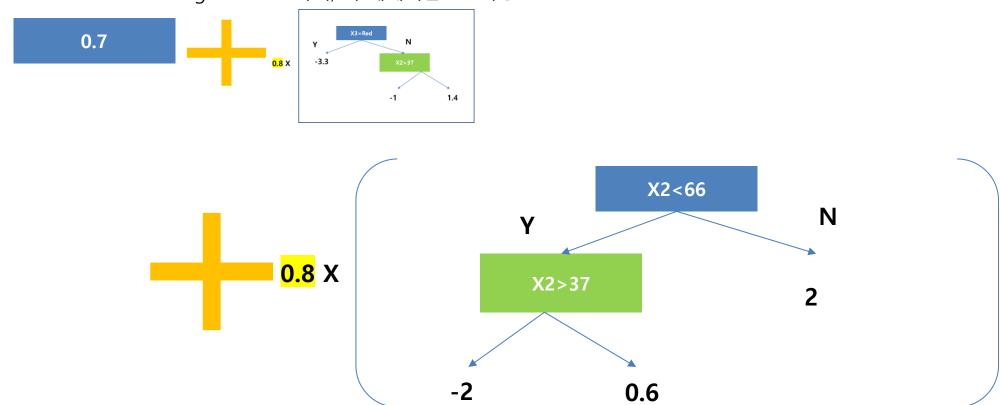
X1	X2	X 3	Target	Residual	Prob
Y	12	Blue	0	0.3	0.9
Υ	87	Green	0	0.3	0.5
N	44	Blue	X	-0.7	0.5
Υ	19	Red	X	-0.7	0.1
N	32	Green	0	0.3	0.9
N	14	Blue	0	0.3	0.9

- Gradient Boost for Classification, Step 3
 - Residual 다시 계산, 다음 tree 생성

. – – – – –			:		i	
X1	X2	Х3	Target	Residual	Prob.	New Residual
Υ	12	Blue	0	0.3	0.9	1-0.9
Y	87	Green	0	0.3	0.5	1-0.5
N	44	Blue	Х	-0.7	0.5	0-0.5
Y	19	Red	X	-0.7	0.1	0-0.1
N	32	Green	0	0.3	0.9	1-0.9
N	14	Blue	0	0.3	0.9	1-0.9

Gradient Boost, Step 3

• Learning Rate: 0~1사이, 이 예에서는 0.1 사용



Gradient Boost for Regression

- GB: leaf로 부터 시작
 - Leaf: Target에 대한 초기 추정값(예: 평균, log(odds ratio) 등)
 - Stump가 아닌 Tree를 생성: 각 tree는 leaf가 8~32개 크기 수준으로 생성

Target

Height	Color	Gender	Weight
1.6	В	M	88
1.6	G	F	76
1.5	В	F	56
1.8	R	M	73
1.5	G	M	77
1.4	В	F	57

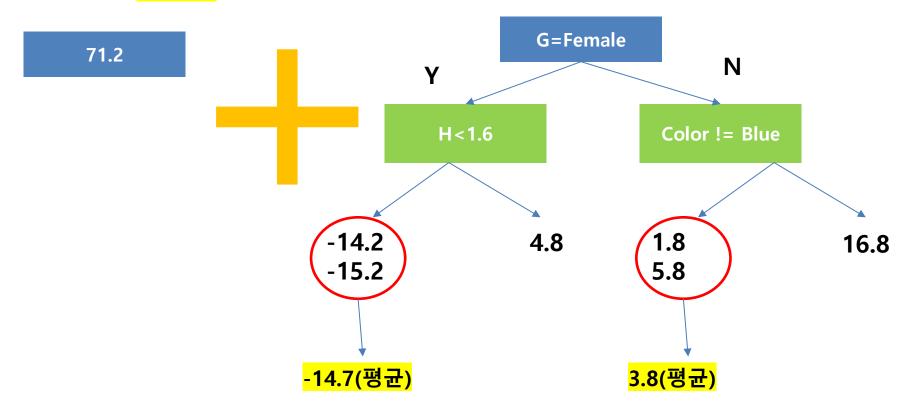
Gradient Boost, Step 1

- Leaf의 계산
- Target인 Weight의 평균: 71.2
- Residual을 계산: 실제값과 예측값의 차이(error)

같은 X변수들로 Residual에 대한 Tree

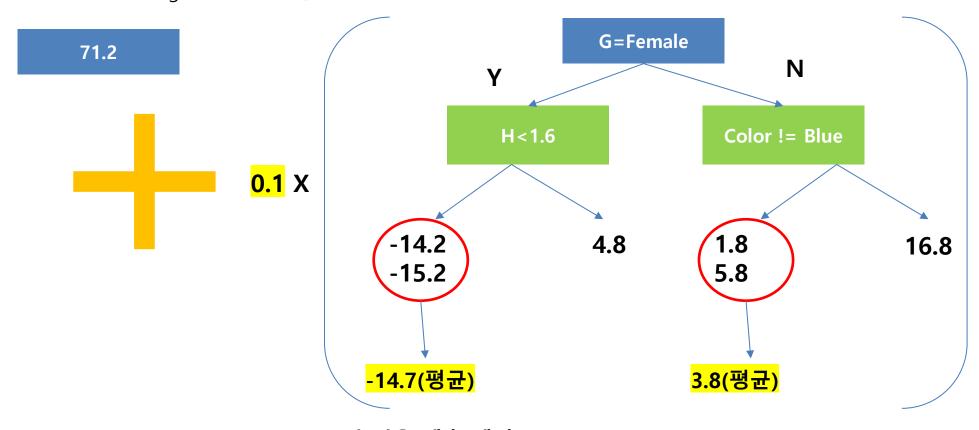
		i		
Height	Color	Gender	Weight	Residual
1.6	В	М	88	16.8
1.6	G	F	76	4.8
1.5	В	F	56	-15.2
1.8	R	М	73	1.8
1.5	G	М	77	5.8
1.4	В	F	57	-14.2
		i		
		i	L. L.	

- Gradient Boost, Step 1
 - Leaf + 1st Tree



- Male, Blue인 경우 예측 예시:
 - 71.2 + 16.8 = 88 (관측치와 동일하지만 과적합)
 - Bias는 작지만 Variance 큰 상태

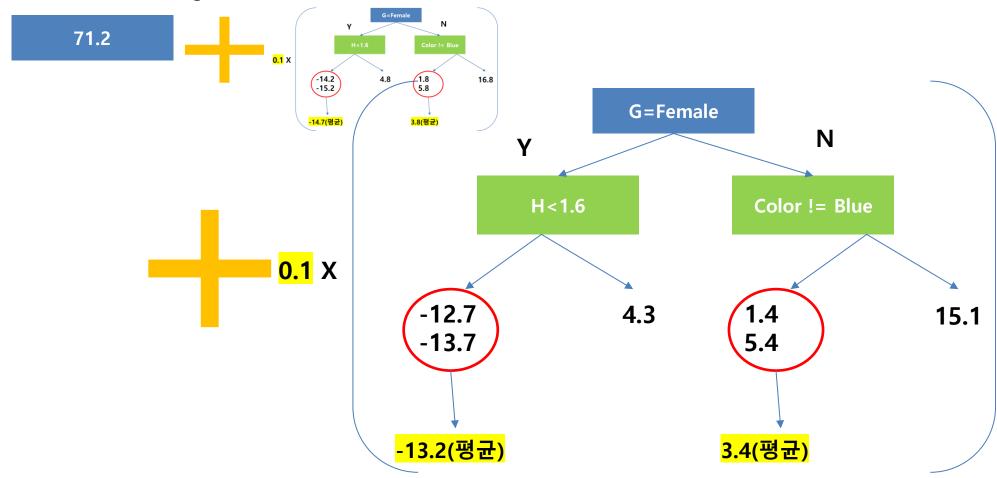
- Gradient Boost, Step 2
 - 과적합 방지, 학습속도 조절을 위한 학습율 도입
 - Learning Rate: 0~1사이, 이 예에서는 0.1 사용



- Male, Blue인 경우 예측 예시: 71.2 + 0.1 X 16.8 = 72.9
 - 실제값에 가까워지지만, 그 정도가 조절됨 (Gradient의 개념)
 - Variance를 낮게 유지할 수 있음

Gradient Boost, Step 3

• Learning Rate: 0~1사이, 이 예에서는 0.1 사용



• H=1.6, Male, Blue인 경우 예측 예시: 71.2 + 0.1 X 16.8 + 0.1 X 15.1 = 74.4

- Gradient Boost, Step 3
 - 학습율 반영 예측값을 통한 두 번째 Residual 계산

같은 X변수들로 New Residual에 대한 Tree

Height	Color	Gender	Weight	Residual	Residual(new)
1.6	В	М	88	16.8	15.1
1.6	G	F	76	4.8	4.3
1.5	В	F	56	-15.2	-13.7
1.8	R	М	73	1.8	1.4
1.5	G	М	77	5.8	5.4
1.4	В	F	57	-14.2	-12.7

Residual 크기 감소

- 위의 과정을 계속 반복
 - 정해진 iteration한도 까지 반복
 - 또는 이전 단계와 이후 단계의 Residual 차이가 없을 때까지 반복
- 매 iteration에서의 Tree의 leaf는 8~32개 사이에서 생성
- 매 iteration마다 다르게 생성
 - 1st tree: leaf 8개
 - 2nd tree: leaf 32개
 - 3rd tree: leaf 16개
 - ...



Industrial Data Science Lab

Contact:

won.sang.l@gwnu.ac.kr

https://sites.google.com/view/idslab