데이터 사이언스
분류 모형

2025 Spring

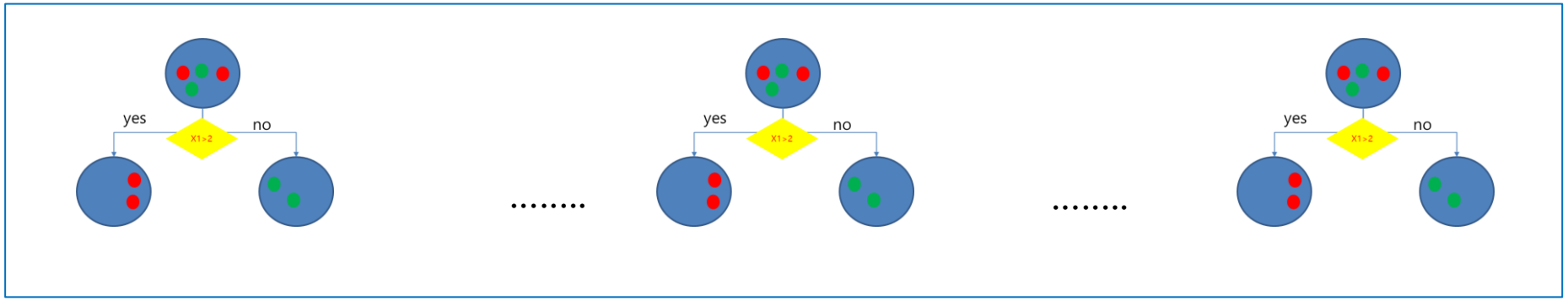
6. Random Forest

- 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

6. Random Forest

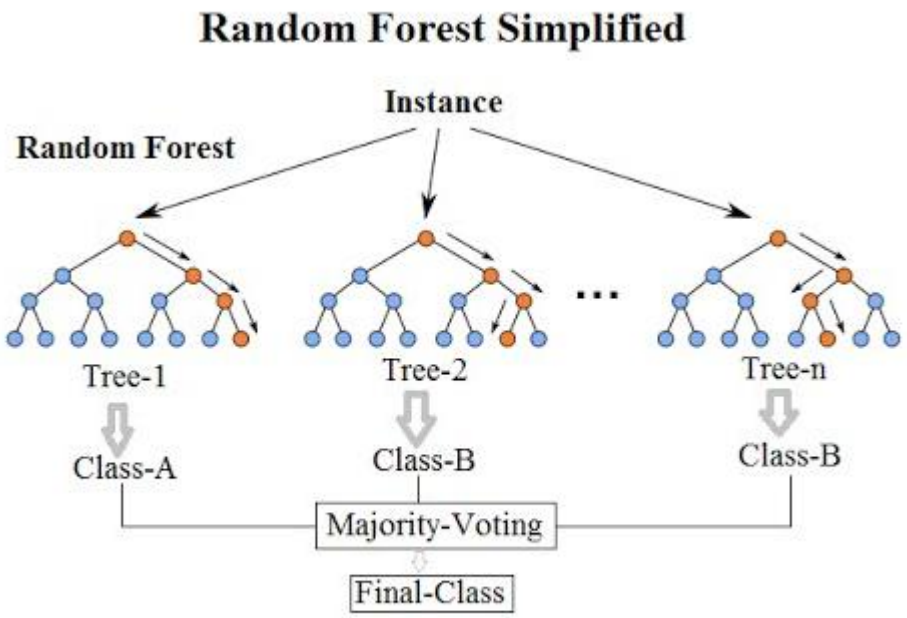
Random Forest

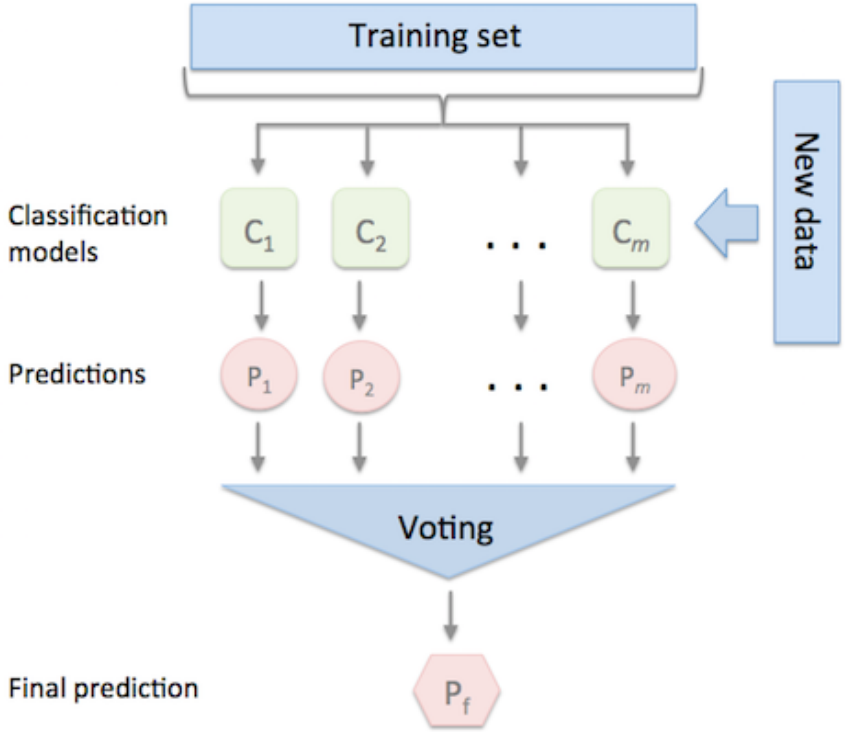
- Breiman의 " bagging " 과 변수 랜덤 선택 아이디어 기반
- 처음에는 random decision forests로 시작하여 발전
- 데이터의 다양한 경우를 반영할 수 있도록 보완
- 다양한 경우에 대한 Decision Tree를 통해 성능과 안정성을 제고



6. Random Forest

- **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**

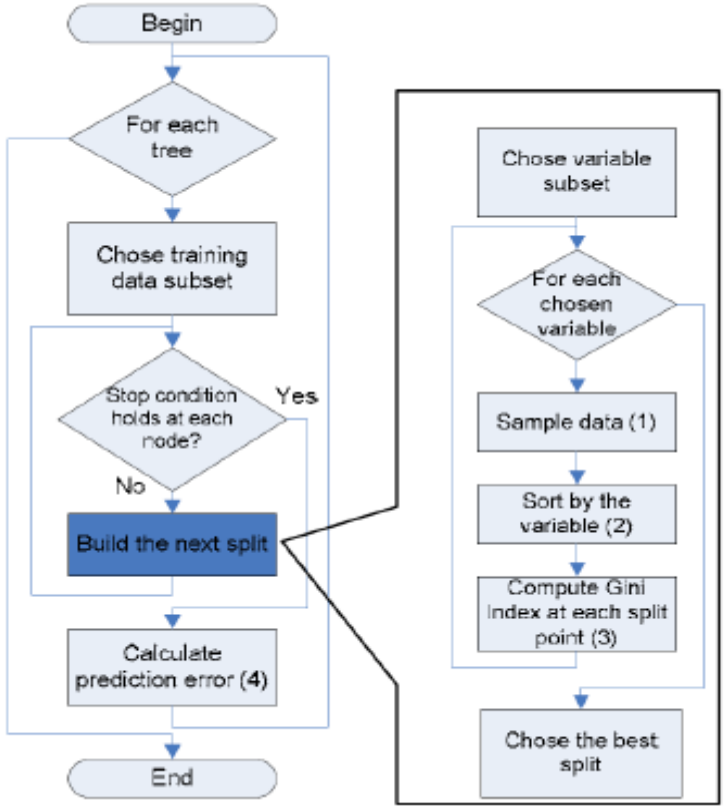
① N: # of training cases / M: 분류기의 변수

② M개 중 m개의 변수가 Tree의 각 노드에서 분류에 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

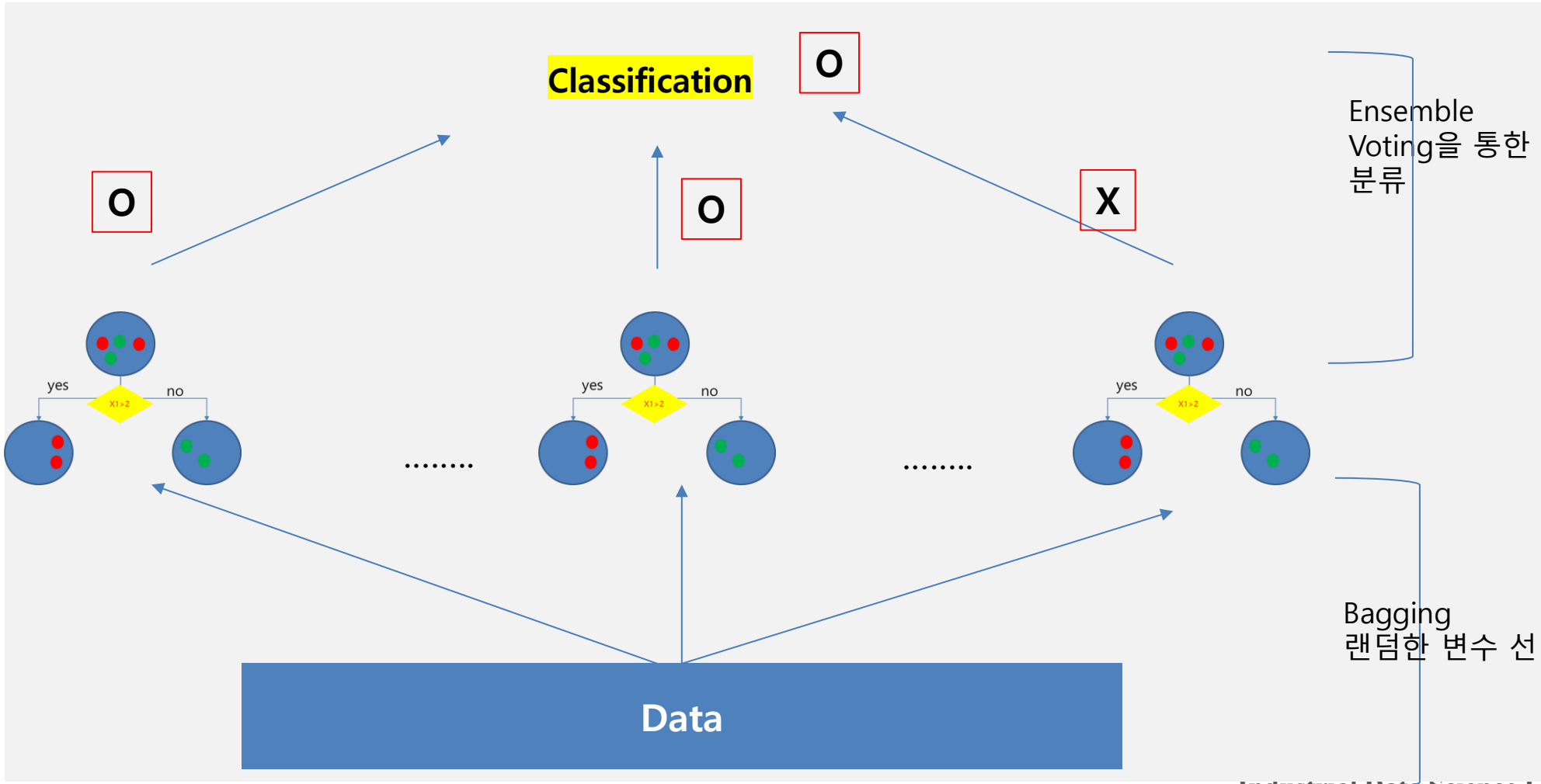
⑤ 각 Tree **fully grown and not pruned**



6. Random Forest

Random Forest

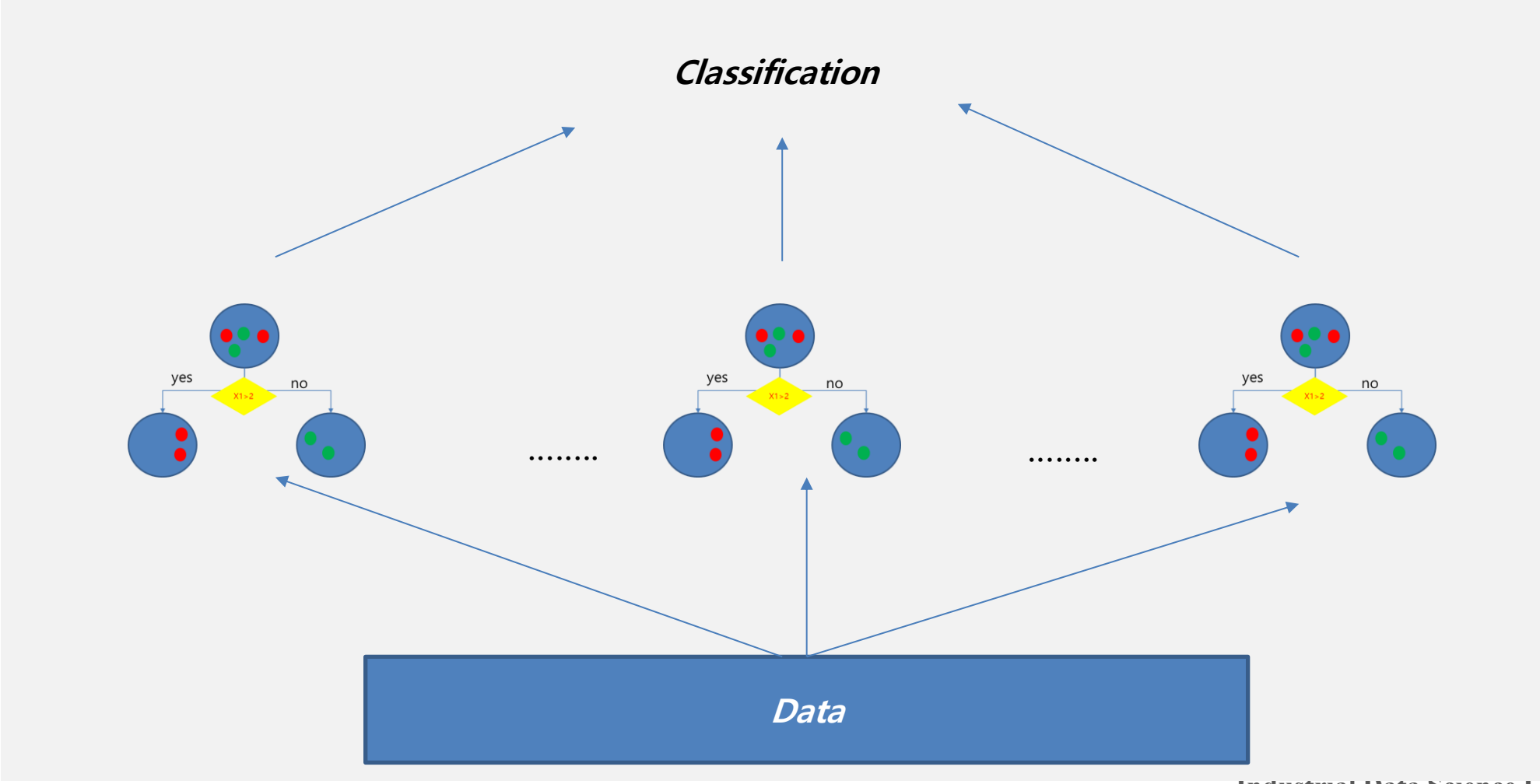
- 데이터의 다양한 경우를 반영할 수 있도록 보완
- 안정성을 제고



6. Random Forest

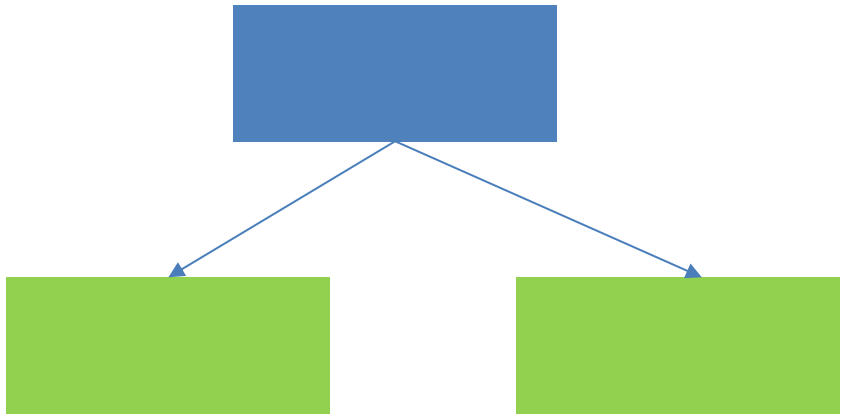
Random Forest

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



7. Adaboost

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

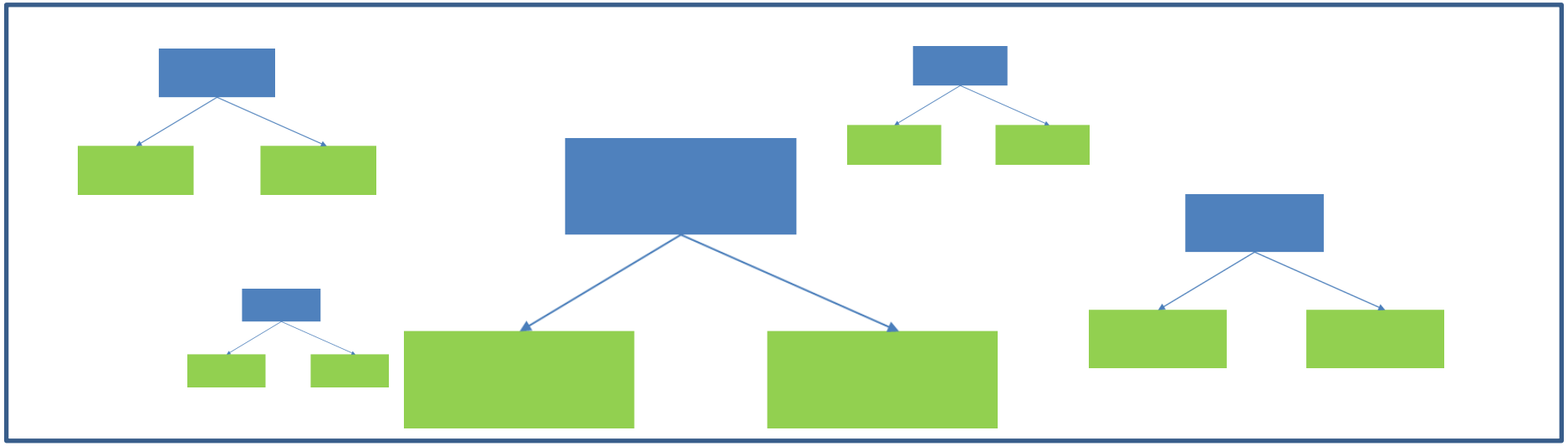


7. Adaboost

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

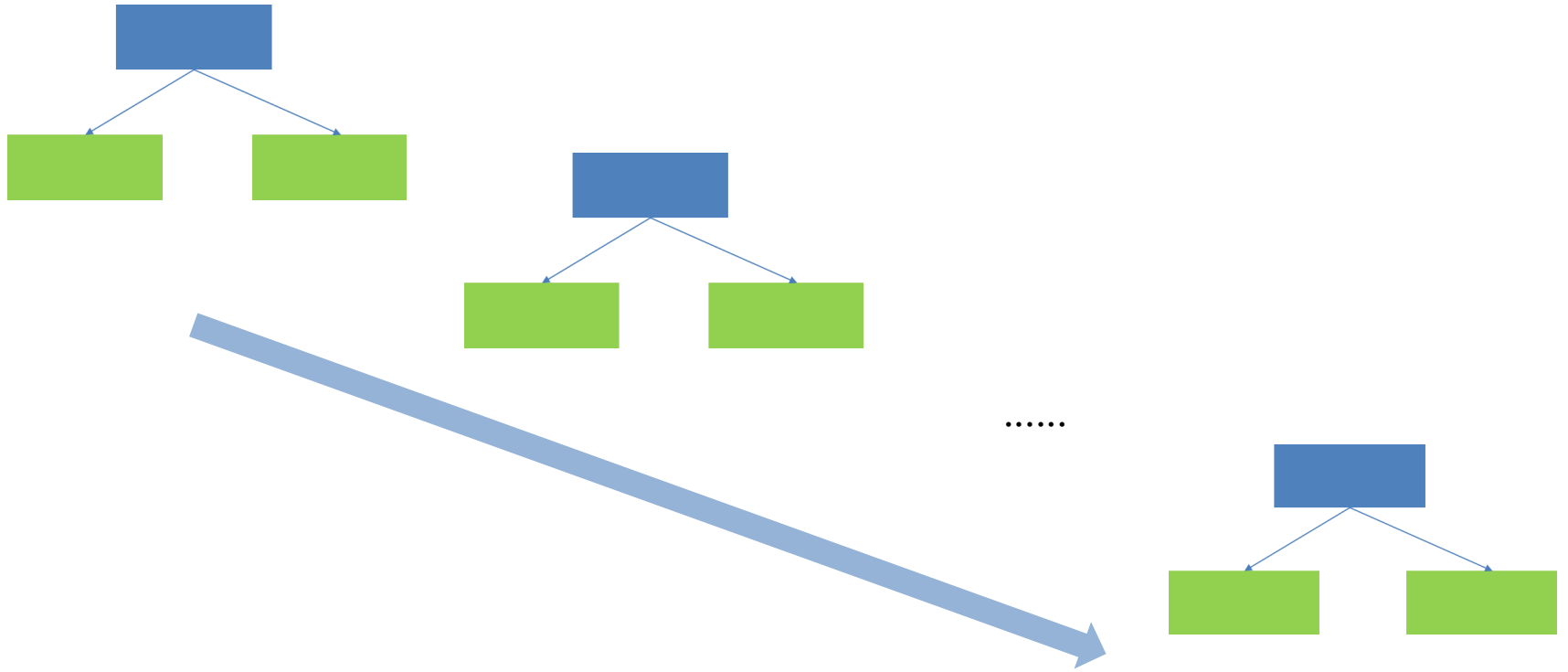
- Random Forest에서는 Tree가 같은 중요도를 지님

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



7. Adaboost

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



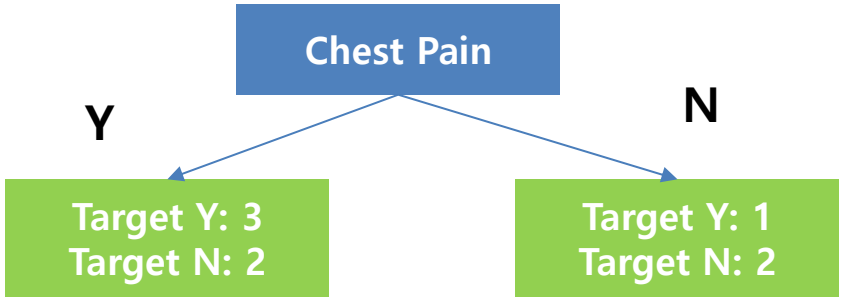
7. Adaboost

- **Example**

Target Sample Weight의 합은 1

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

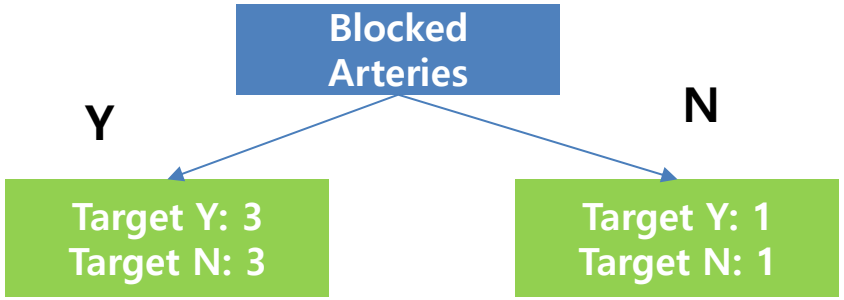
- 각 변수별 Target과의 관계



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

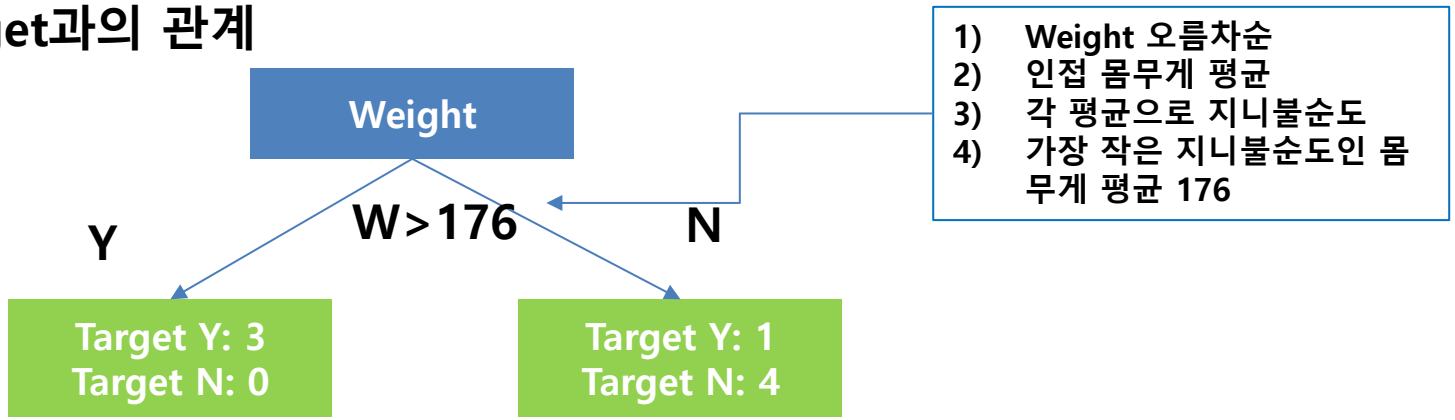
7. Adaboost

- 각 변수별 Target과의 관계



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

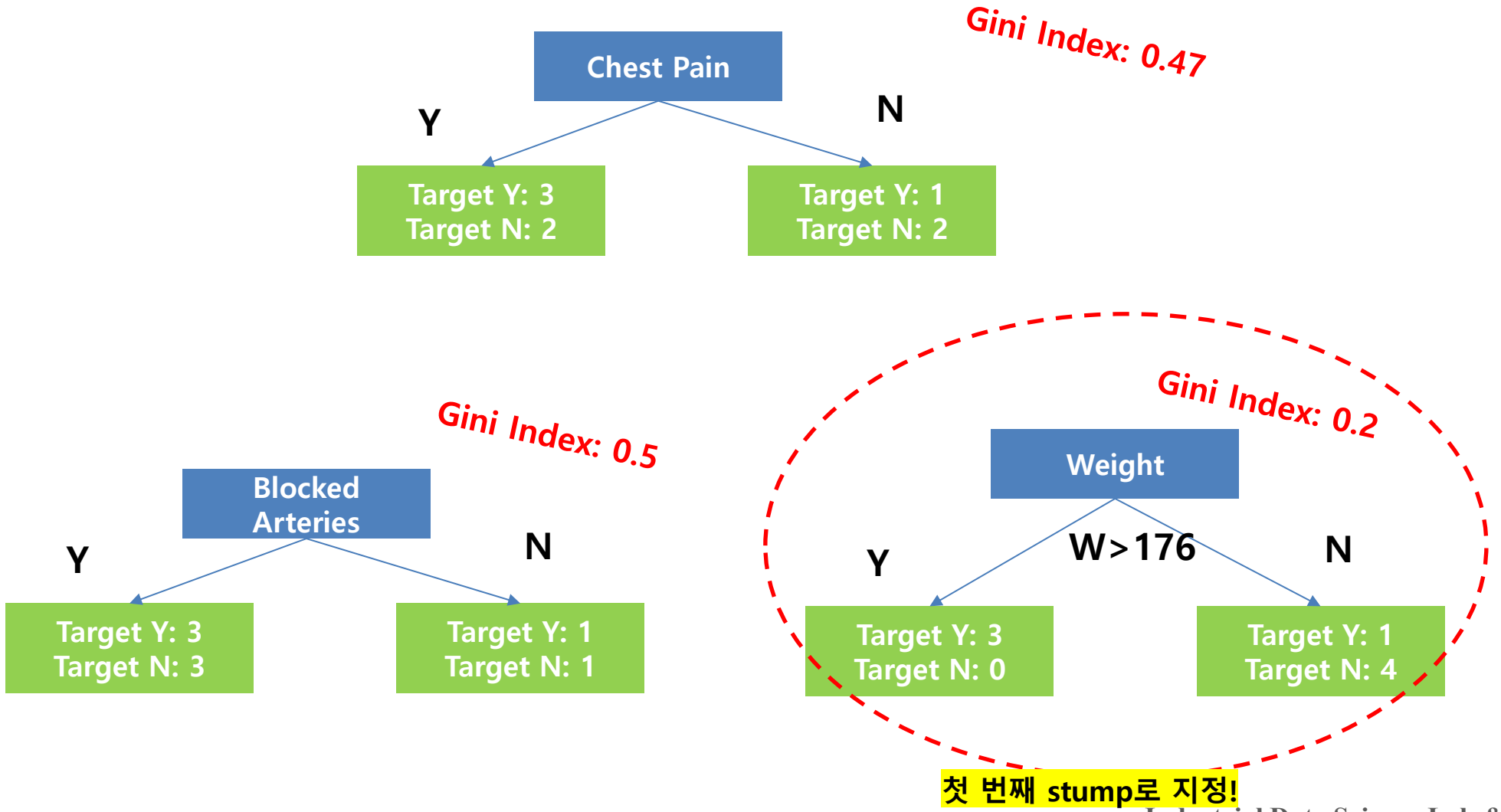
- 각 변수별 Target과의 관계



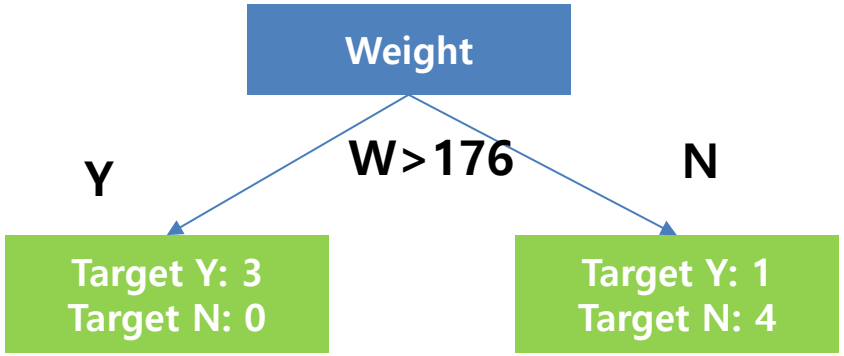
Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight
Y	Y	205	Y	1/8
N	Y	180	Y	1/8
Y	N	210	Y	1/8
Y	Y	167	Y	1/8
N	Y	156	N	1/8
N	Y	125	N	1/8
Y	N	168	N	1/8
Y	Y	172	N	1/8

7. Adaboost

- 각 stump별 지니 계수



- 첫 stump의 Total Error



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

Amount of Say = 0.97

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

Amount of Say 계산

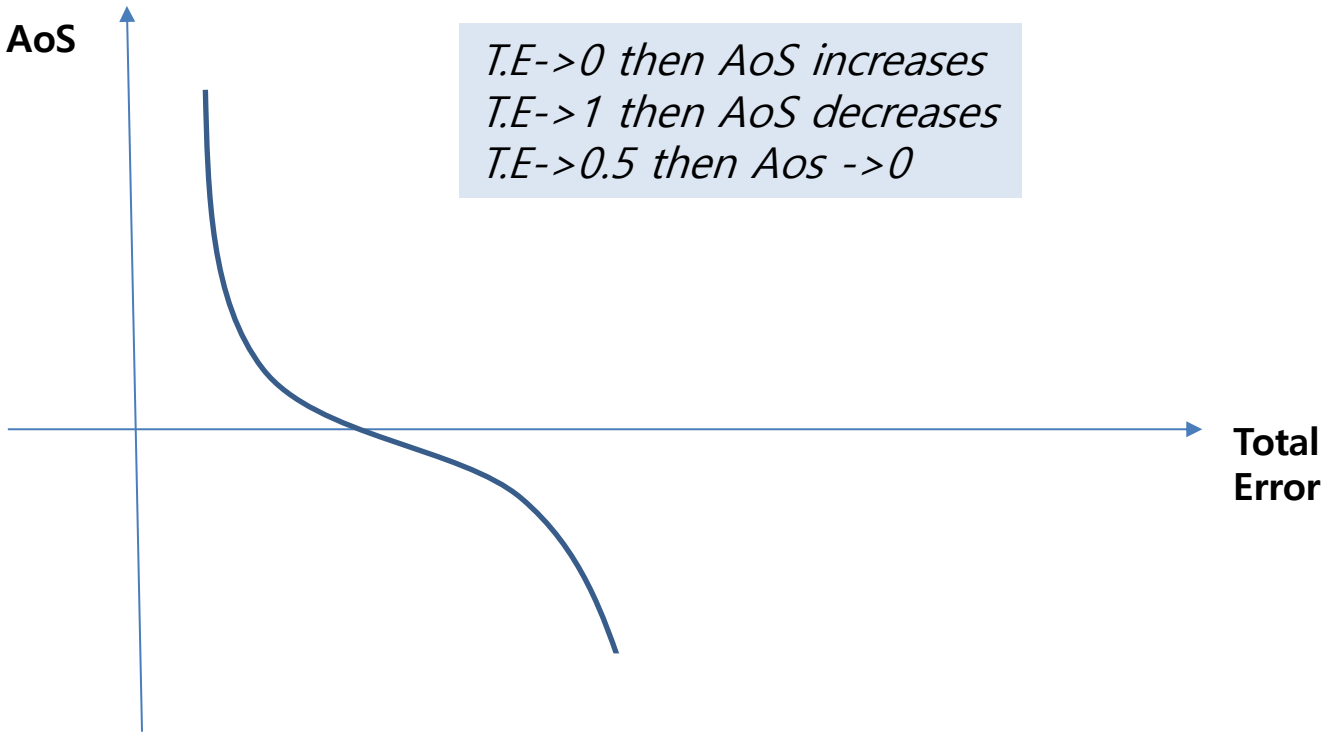
Total Error = 1/8
(0~1사이 값)

첫 stump에서 틀린 Case

7. Adaboost

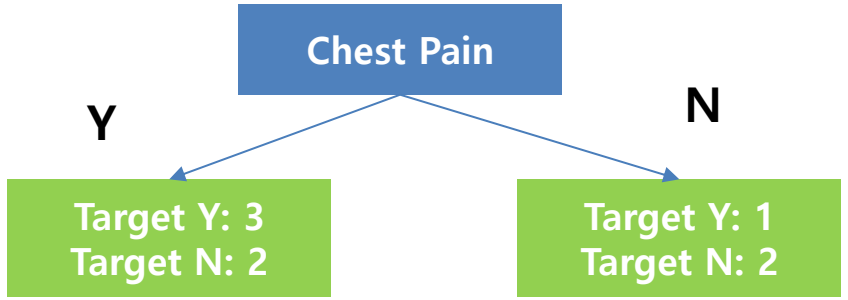
- 첫 stump의 Total Error

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



T.E->0 then AoS increases
T.E->1 then AoS decreases
T.E->0.5 then Aos ->0

- AoS 계산 예: Chest Pain (실제 stump는 아님)



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

Amount of Say = 0.42

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

Amount of Say 계산

Total Error = 3/8
(0~1사이 값)

Chest Pain stump에서 틀린 Case

- **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

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

AoS가 크면 Weight도 증가

- 첫 stump에서의 4번째 행

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

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

- **두 번째 Stump 계산**
  - 첫 Stump에서 정분류된 Sample은 낮은 Weight으로 덜 Sampling
    - 다음 Stump에서 이전 단계에 정분류된 Obs.는 덜 고려함

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

AoS가 크면 Weight는 감소

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

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

- **Weight의 합이 1이 되도록 정규화**

7. Adaboost

- 두 번째 Stump를 위한 Sampling

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

7. Adaboost

- 다음 Stump를 위한 Sampling 및 학습 반복

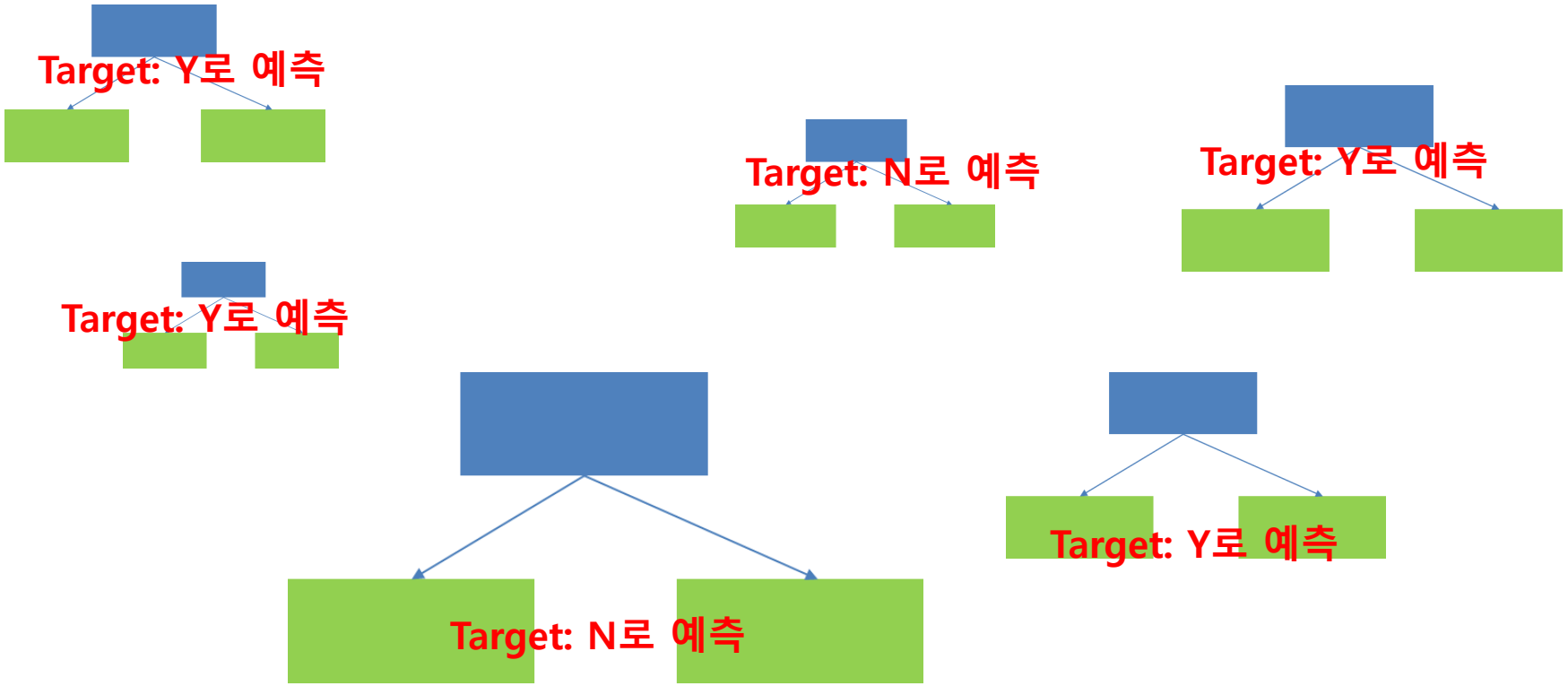
Chest Pain	Blocked Arteries	Patient Weight	Heart Disease	Sample Weight	New Weight	Sampling 을 위한 값
Y	Y	205	Y	1/8	0.07	0~0.07
N	Y	180	Y	1/8	0.07	0.07~0.14
Y	N	210	Y	1/8	0.07	0.14~0.21
Y	Y	167	Y	1/8	0.49	0.21~0.7
N	Y	156	N	1/8	0.07	0.7~0.77
N	Y	125	N	1/8		
Y	N	168	N	1/8		
Y	Y	172	N	1/8		

- 다음 계산을 위해 가중치 초기화

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

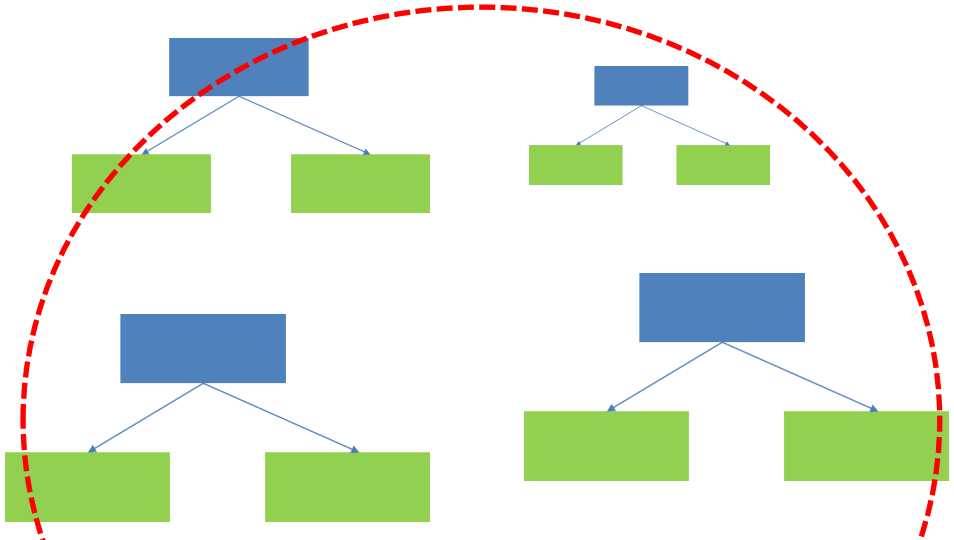
7. Adaboost

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



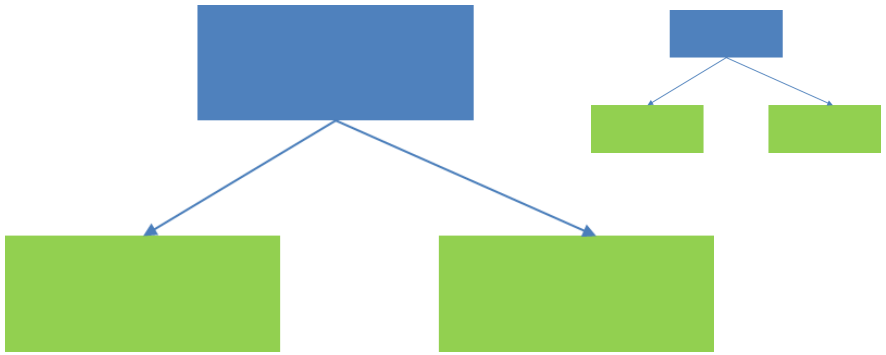
- **Adaboost의 예측 방식**
  - 주어진 X값에 대해 Forest of Stump 내의 Stump에 적용

Target: Y로 예측



- Amount of Say: 0.97, 0.32, 0.78, 0.63
- Total AoS: 2.7

Target: N로 예측



- Amount of Say: 0.41, 0.82
- Total AoS: 1.23

8. Gradient Boost

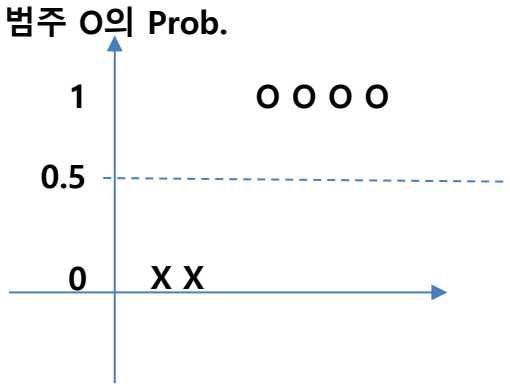
- **Adaboost VS Gradient Boost**
  - Adaboost: 여러 Stump의 순차적 계산
  - GB: leaf로 부터 시작
    - Leaf: Target에 대한 초기 추정값(예: 평균, log(odds ratio) 등)
    - Stump가 아닌 Tree를 생성: 각 tree는 leaf가 8~32개 크기 수준으로 생성

X1	X2	X3	Target
Y	12	Blue	O
Y	87	Green	O
N	44	Blue	X
Y	19	Red	X
N	32	Green	O
N	14	Blue	O

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

X1	X2	X3	Target
Y	12	Blue	O
Y	87	Green	O
N	44	Blue	X
Y	19	Red	X
N	32	Green	O
N	14	Blue	O

- **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

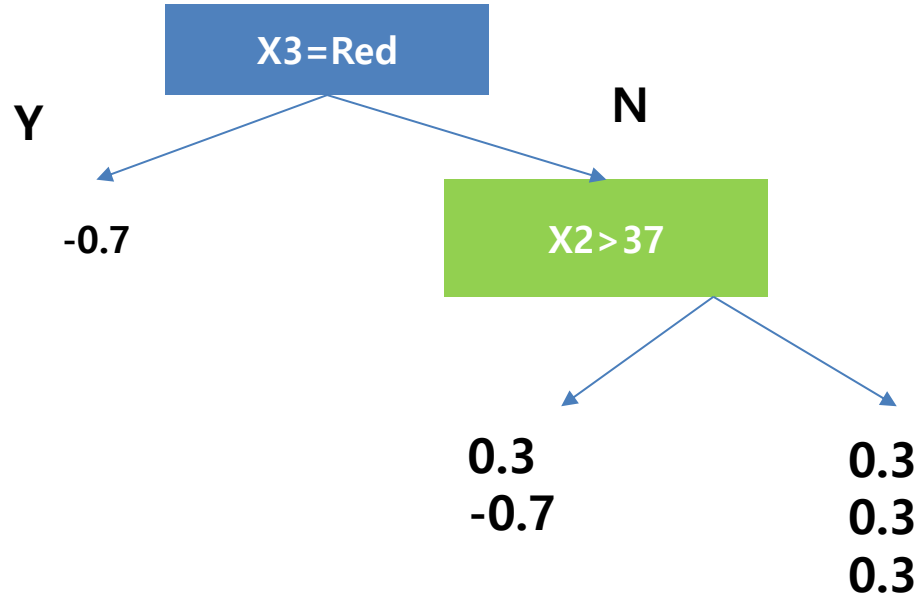


같은 X변수들로
Residual에 대한 Tree

X1	X2	X3	Target	Residual
Y	12	Blue	O	0.3
Y	87	Green	O	0.3
N	44	Blue	X	-0.7
Y	19	Red	X	-0.7
N	32	Green	O	0.3
N	14	Blue	O	0.3

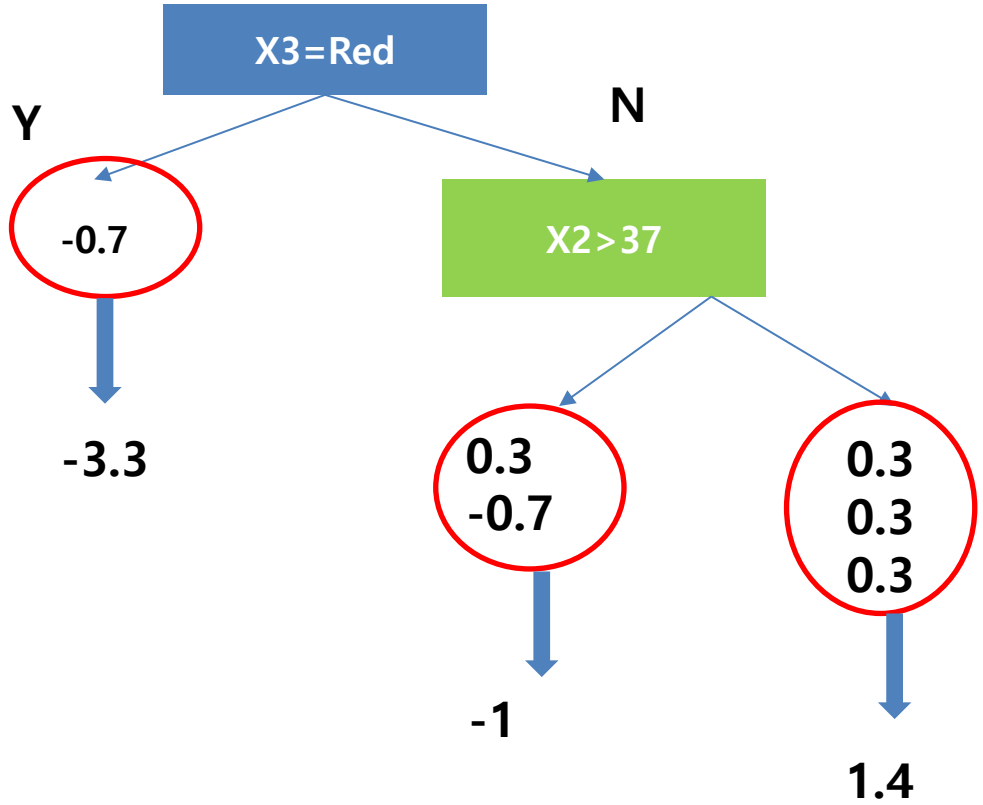
8. Gradient Boost

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



8. Gradient Boost

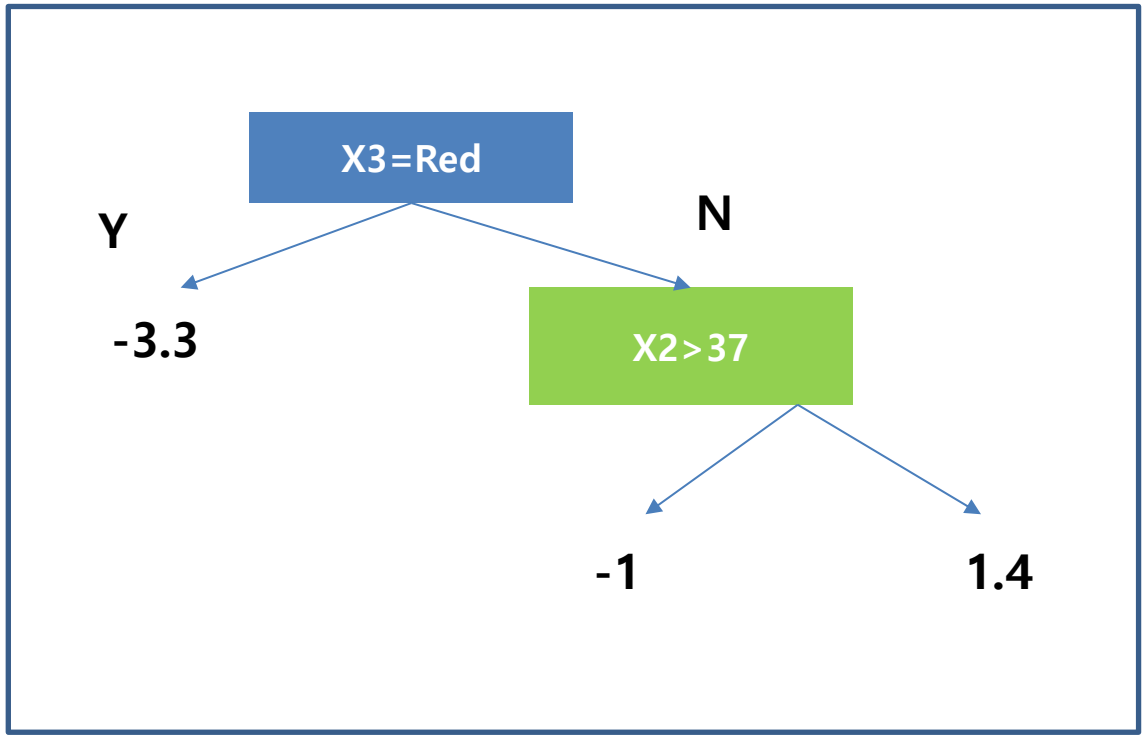
- **Gradient Boost, Step 1**
  - **1st Tree**



$$\frac{\sum Residuals}{\sum(Previous\ Prob\ \times (1 - Previous\ Prob))}$$

8. Gradient Boost

- **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: $\frac{e^{1.8}}{1+e^{1.8}}$

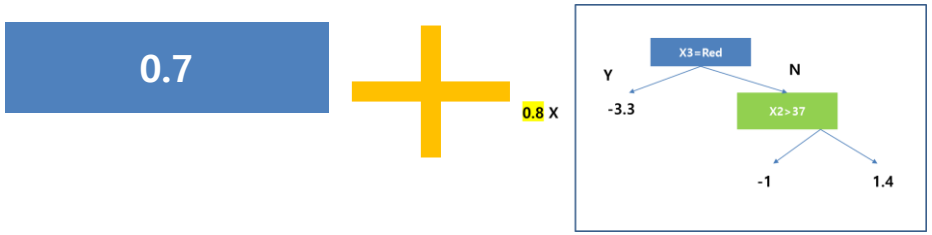
X1	X2	X3	Target	Residual	Prob.
Y	12	Blue	O	0.3	0.9
Y	87	Green	O	0.3	0.5
N	44	Blue	X	-0.7	0.5
Y	19	Red	X	-0.7	0.1
N	32	Green	O	0.3	0.9
N	14	Blue	O	0.3	0.9

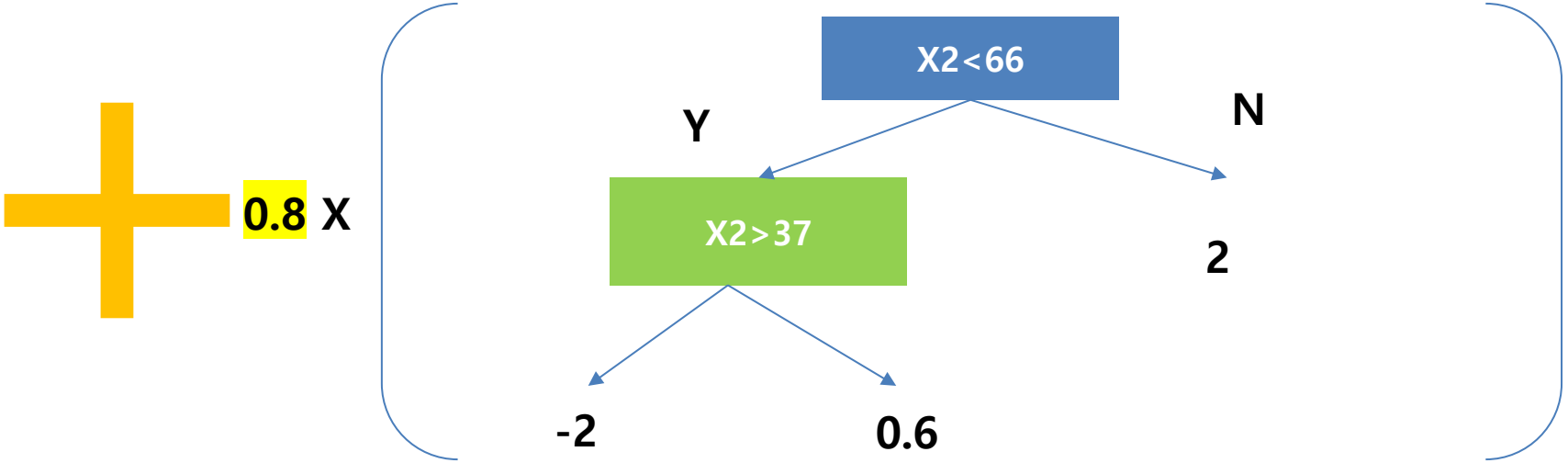
- **Gradient Boost for Classification, Step 3**
  - Residual 다시 계산, 다음 tree 생성

X1	X2	X3	Target	Residual	Prob.	New Residual
Y	12	Blue	O	0.3	0.9	1-0.9
Y	87	Green	O	0.3	0.5	1-0.5
N	44	Blue	X	-0.7	0.5	0-0.5
Y	19	Red	X	-0.7	0.1	0-0.1
N	32	Green	O	0.3	0.9	1-0.9
N	14	Blue	O	0.3	0.9	1-0.9

8. Gradient Boost

- **Gradient Boost, Step 3**
  - Learning Rate: 0~1사이, 이 예에서는 0.1 사용





8. Gradient Boost

- **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

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

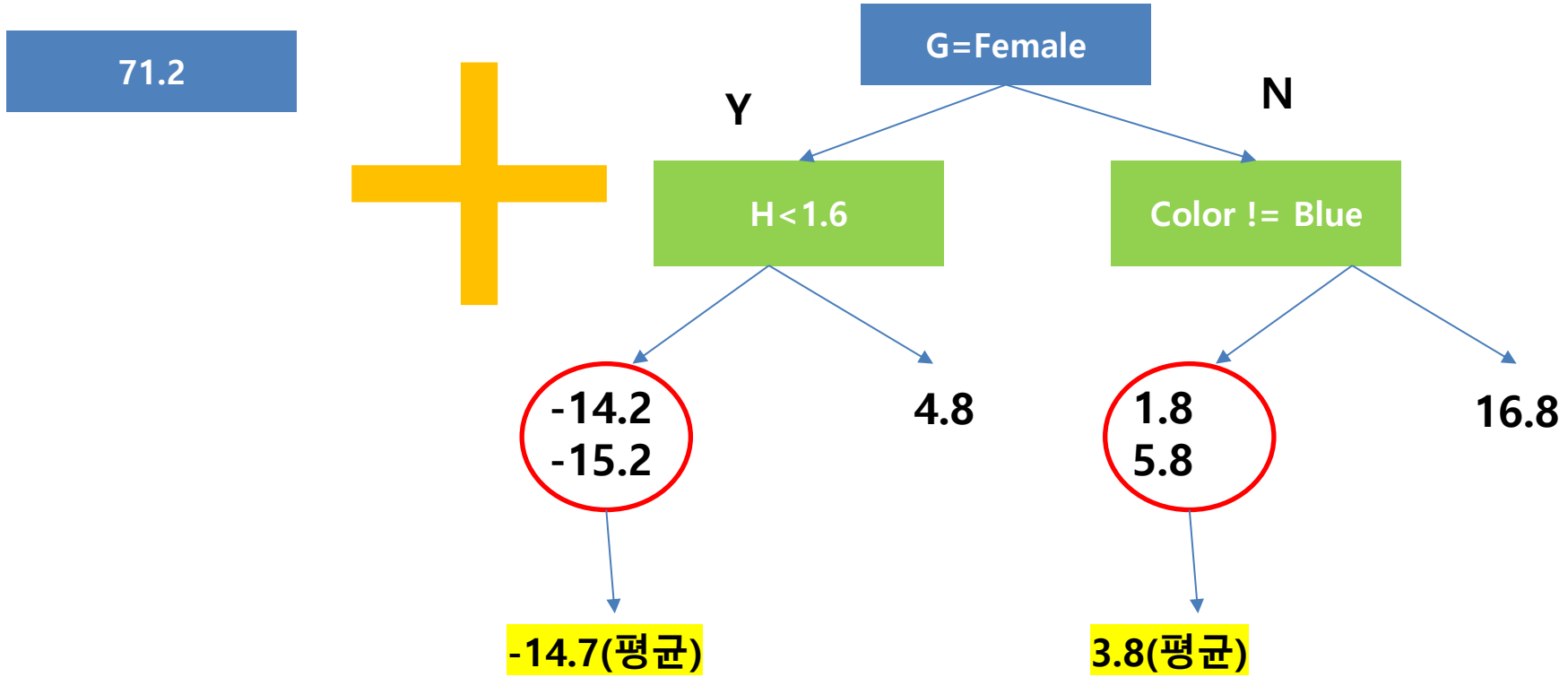
- **Gradient Boost, Step 1**
  - Leaf의 계산
  - Target인 Weight의 평균: 71.2
  - Residual을 계산: 실제값과 예측값의 차이(error)

같은 X변수들로
Residual에 대한 Tree

Height	Color	Gender	Weight	Residual
1.6	B	M	88	16.8
1.6	G	F	76	4.8
1.5	B	F	56	-15.2
1.8	R	M	73	1.8
1.5	G	M	77	5.8
1.4	B	F	57	-14.2

8. Gradient Boost

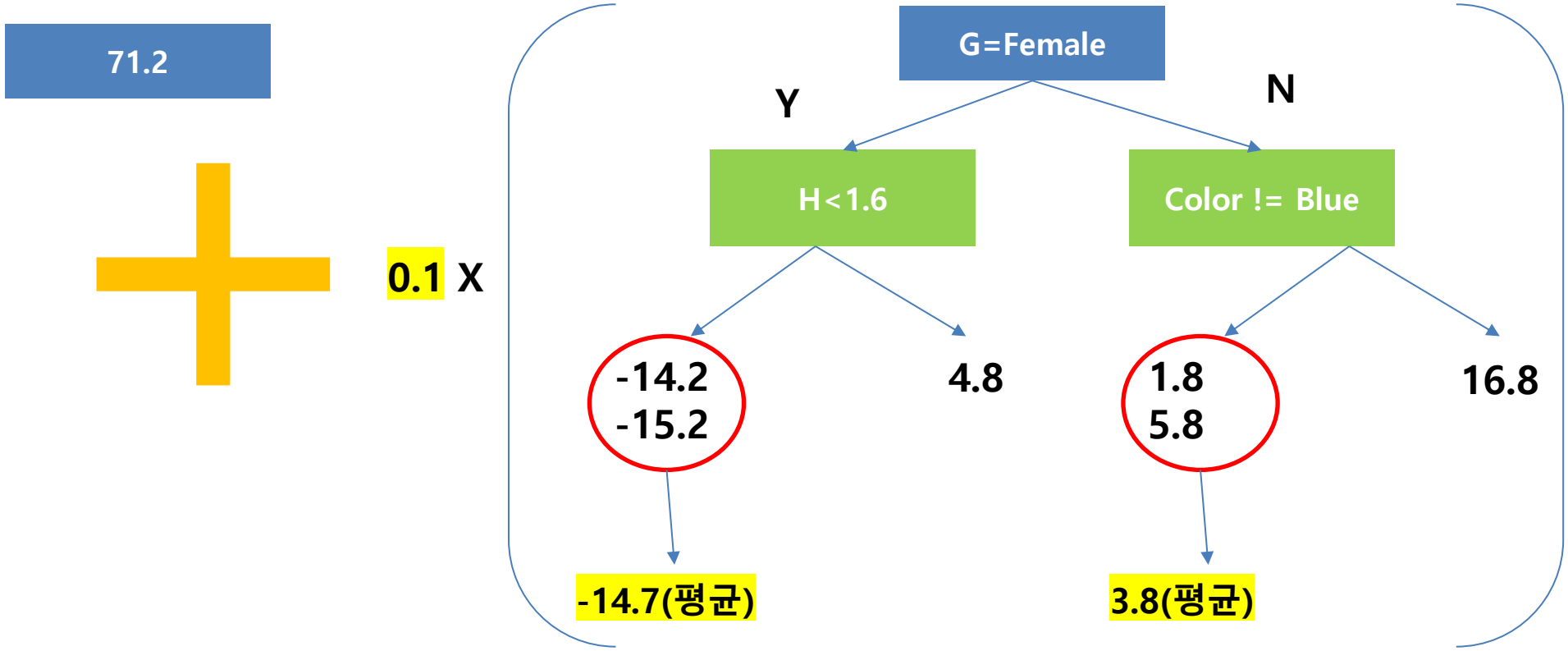
- **Gradient Boost, Step 1**
  - **Leaf + 1st Tree**



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

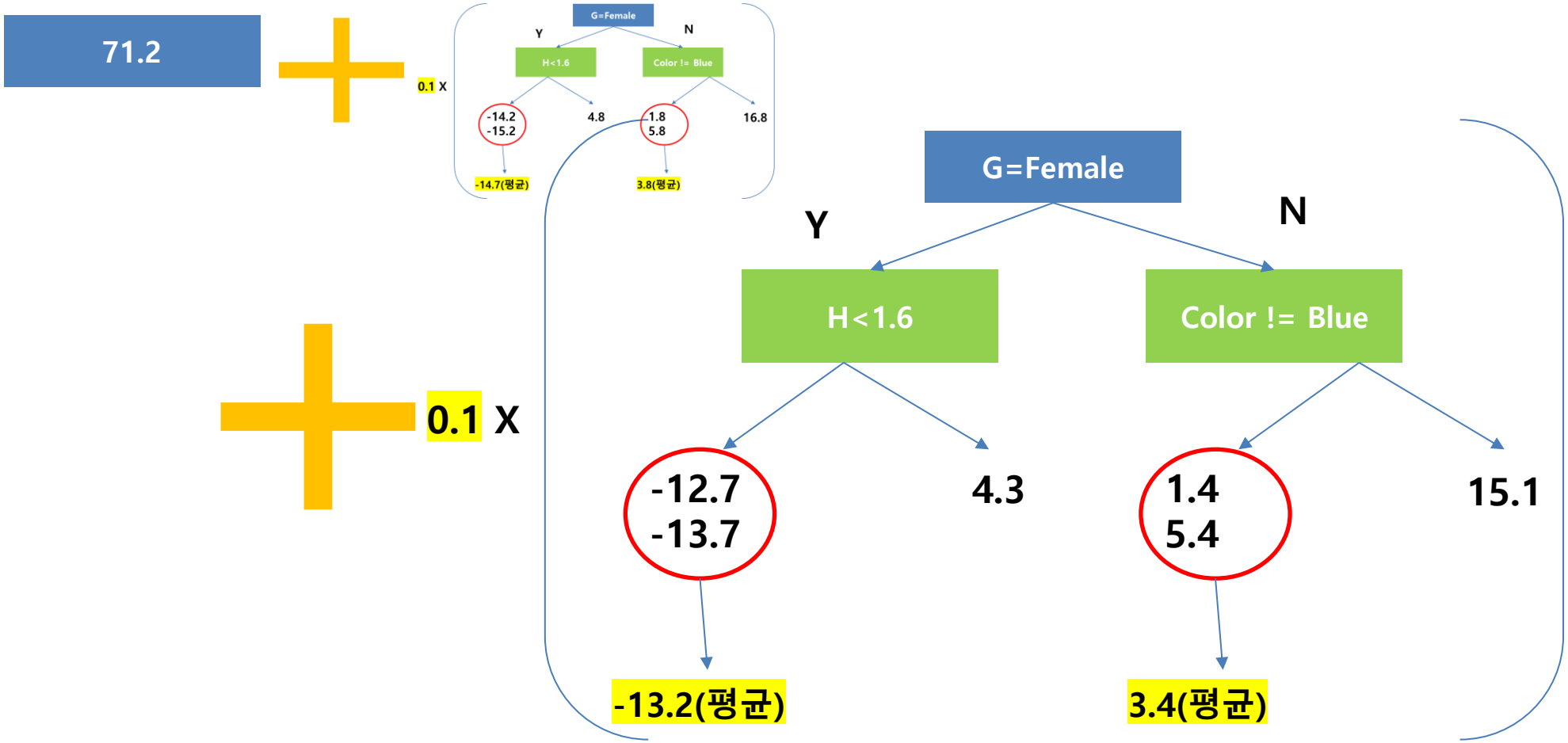
8. Gradient Boost

- **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	B	M	88	16.8	15.1
1.6	G	F	76	4.8	4.3
1.5	B	F	56	-15.2	-13.7
1.8	R	M	73	1.8	1.4
1.5	G	M	77	5.8	5.4
1.4	B	F	57	-14.2	-12.7

Residual 크기 감소

- **Gradient Boost**
  - 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
    - …