

4장 의사결정나무



충북대학교 정보통계학과 나종화
(cherin@cbnu.ac.kr)

CONTENTS

4.1 서론

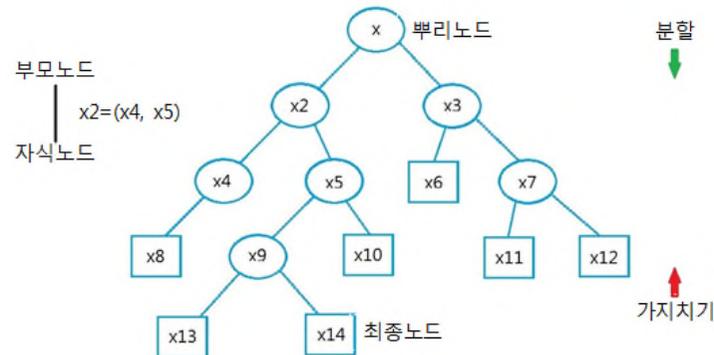
4.2 의사결정나무

4.1 서론

- 의사결정나무(decision tree) 또는 나무 모형(tree model)은 의사결정 규칙을 나무 구조로 나타내어 전체 자료를 몇 개의 소집단으로 분류(classification)하거나 예측(prediction)을 수행하는 분석방법이다.
- 상위 노드로부터 하위노드로 트리구조를 형성하는 매 단계마다 분류변수와 분류 기준값의 선택이 중요하다. 상위노드에서의 (분류변수, 분류 기준값)은 이 기준에 의해 분기되는 하위노드에서 노드(집단) 내에서는 동질성이, 노드(집단) 간에는 이질성이 가장 커지도록 선택된다.
- 나무 모형의 크기는 과대적합(또는 과소적합) 되지 않도록 합리적 기준에 의해 적당히 조절되어야 한다.
- 의사결정나무분석은 시장조사, 광고조사, 의학연구, 품질관리 등의 다양한 분야에서 활용되고 있으며, 구체적인 활용 예는 고객 타겟팅, 고객들의 신용점수화, 캠페인 반응분석, 고객행동예측, 고객 세분화 등을 들 수 있다.

4.2 의사결정나무

- 의사결정나무의 구조는 다음의 [그림 4.1]과 같다. 이 그림에서 맨 위의 마디를 뿌리노드(root node)라 하며, 이는 분류(또는 예측) 대상이 되는 모든 자료집단을 포함한다.
- 상위 마디를 부모마디(parent node)라 하고, 하위 마디를 자식마디(child node)라 하며, 더 이상 분기되지 않는 마디를 최종노드(terminal node)라고 부른다.
- 가지분할(split)은 나무의 가지를 생성하는 과정을, 가지치기(pruning)는 생성된 가지를 잘라내어 모형을 단순화하는 과정을 말한다.



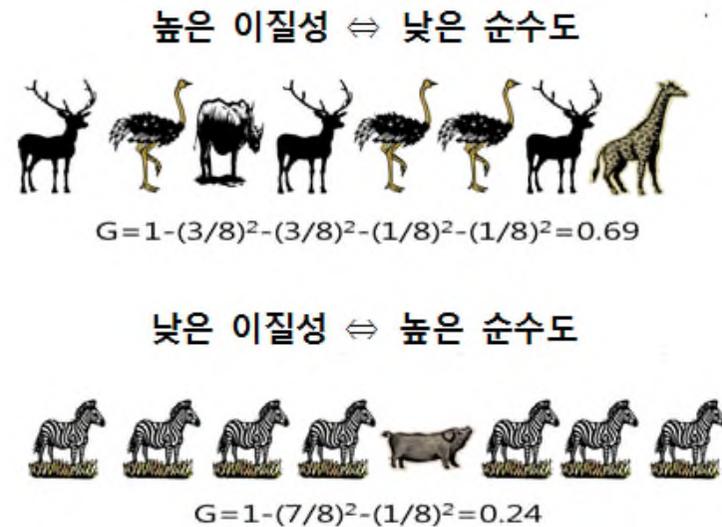
[그림 4.1] 의사결정나무의 구조

4.2 의사결정나무

- 의사결정나무는 목표변수가 이산형인 경우의 분류나무(classification tree)와 목표변수가 연속형인 경우의 회귀나무(regression tree)로 구분된다.
- 목표변수가 이산형인 분류나무의 경우 상위노드에서 가지분할을 수행할 때, 분류(기준)변수와 분류 기준값의 선택 방법으로 카이제곱 통계량(Chi-square statistic)의 p -값, 지니 지수(Gini index), 엔트로피 지수(entropy index) 등이 사용된다.
- 선택된 기준에 의해 분할이 일어날 때, 카이제곱통계량의 p -값은 그 값이 작을수록 자식노드 간의 이질성이 큼을 나타내며, 자식노드에서의 지니 지수나 엔트로피 지수는 그 값이 클수록 자식노드 내의 이질성이 큼을 의미한다. 따라서 이 값들이 가장 작아지는 방향으로 가지분할을 수행하게 된다.

4.2 의사결정나무

- 예를 들어, 아래의 [그림 4.2]에서 두 노드(집단)에 대한 지니 지수는 다음과 같이 계산된다. 지니 지수의 값이 클수록 이질적이며 순수도(purity)가 낮다고 할 수 있다.



[그림 4.2] 두 집단에 대한 지니 지수

4.2 의사결정나무

- 불확실성 측도(uncertainty measure)인 지니 지수와 엔트로피 지수에 대한 정의는 다음과 같다. 두 지수의 값의 범위는 다르나, 해석은 그 크기에 따라 유사하다.

- **지니 지수**: $G = 1 - \sum_i^c p_i^2$, $0 \leq G \leq 1/2$

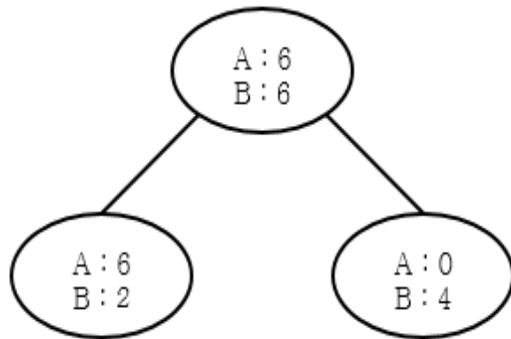
- **엔트로피 지수**: $E = - \sum_i^c p_i \log_2 p_i$, $0 \leq E \leq 1$

- 위 식에서 c 는 목표변수의 범주의 수이며, **각 지수의 범위는 $c=2$ 인 경우에 해당한다.**

4.2 의사결정나무

참고 지니지수와 카이제곱통계량의 계산

- 의사결정나무에서 아래 그림과 같은 분기를 생각하자. 분기 전과 후의 지니지수와 카이제곱통계량의 계산과정을 소개하면 다음과 같다.



- 지니지수

$$\text{분기전: } 1 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{2}$$

$$\text{분기후: } \left[1 - \left(\frac{3}{4}\right)^2 - \left(\frac{1}{4}\right)^2\right] \times \frac{2}{3} + \left[1 - \left(\frac{0}{4}\right)^2 - \left(\frac{0}{4}\right)^2\right] \times \frac{1}{3} = \frac{1}{8}$$

(분기 전에 비해 감소함)

- 카이제곱통계량

	A	B
Left	6(4)	2(4)
Right	0(2)	4(2)

$$\chi^2 = \frac{(6-4)^2}{4} + \frac{(2-4)^2}{4} + \frac{(0-2)^2}{2} + \frac{(4-2)^2}{2} = 6$$

4.2 의사결정나무

- 목표변수가 연속형인 회귀나무의 경우에는 분류변수와 분류 기준값의 선택방법으로 F -통계량의 F -값, 분산의 감소량 등이 사용된다.
- F -통계량은 일원배치법에서의 검정통계량으로 그 값이 클수록 오차의 변동에 비해 처리 (treatment)의 변동이 크다는 것을 의미하며, 이는 자식노드(처리들) 간에 이질적임을 의미하므로 이 값이 커지는(p -값은 작아지는) 방향으로 가지분할을 수행(자식노드를 생성)하게 된다.
- 분산의 감소량(variance reduction)도 이 값이 최대화 되는 방향으로 가지분할을 수행하게 된다.

4.2 의사결정나무

- 의사결정나무의 분석과정은 다음과 같다.

[단계 1] 목표변수와 관계가 있는 설명변수들의 선택

[단계 2] 분석목적과 자료의 구조에 따라 적절한 분리기준과 정지규칙을 정하여 의사결정 나무의 생성

[단계 3] 부적절한 나뭇가지는 제거: 가지치기

[단계 4] 이익(gain), 위험(risk), 비용(cost) 등을 고려하여 모형평가(교차타당성 방법도 사용됨)

[단계 5] 분류(classification) 및 예측(prediction) 수행

4.2 의사결정나무

- 의사결정나무분석을 위한 알고리즘에는 CHAID(Kass, 1980), CART(Breiman 등, 1984), ID3(Quinlan, 1986), C4.5(Quinlan, 1993), C5.0(Quinlan, 1998) 등과 이들의 장점을 결합한 다양한 알고리즘이 있다.

주요 알고리즘과 분류 기준변수의 선택법을 요약하면 다음의 [표 4.1]과 같다.

[표 4.1] 의사결정나무의 주요 알고리즘

	이산형 목표변수	연속형 목표변수
CHAID(다지분할)	카이제곱 통계량	ANOVA F-통계량
CART(이진분할)	지니지수	분산감소량
C4.5	엔트로피지수	.

4.2 의사결정나무

- 다음의 [예제 1]은 R 패키지 {rpart}의 rpart() 함수를 이용하여 의사결정나무 분석을 수행한다. rpart는 recursive partitioning and regression tree의 약어이다.

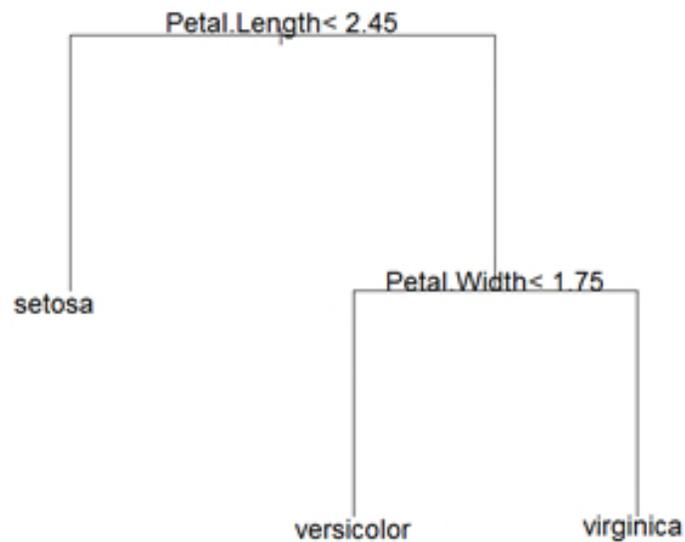
예제 1 iris 자료를 이용하여 의사결정나무 분석을 수행한다.

```
> library(rpart)
> c <- rpart(Species ~., data=iris)
> c
n= 150
node), split, n, loss, yval, (yprob)
      * denotes terminal node
1) root 150 100 setosa (0.3333 0.3333 0.3333)
2) Petal.Length< 2.45 50 0 setosa (1.0000 0.0000 0.0000) *
3) Petal.Length>=2.45 100 50 versicolor (0.0000 0.5000 0.5000)
6) Petal.Width< 1.75 54 5 versicolor (0.0000 0.9074 0.0925) *
7) Petal.Width>=1.75 46 1 virginica (0.0000 0.0217 0.9782) *
```

4.2 의사결정나무

- 적합된 트리모형의 시각화는 plot() 함수를 이용한다.

```
> plot(c, compress=T, margin=0.3)
> text(c, cex=1.5)
```



4.2 의사결정나무

- predict() 함수를 이용하여 새로운 자료에 대해 예측을 수행한다. 여기서는 편의상 모형구축에 사용된 자료를 재대입한 결과를 제시한다.

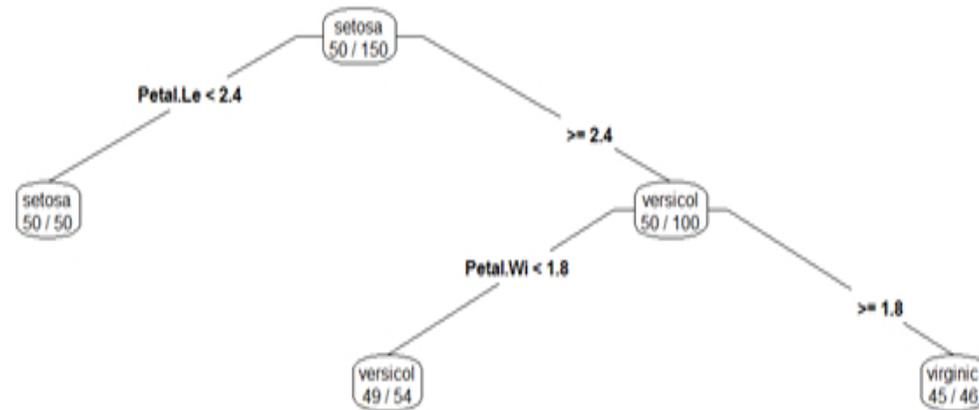
```
> head(predict(c, newdata=iris, type="class"))
      1      2      3      4      5      6
setosa  setosa  setosa  setosa  setosa  setosa
Levels: setosa versicolor virginica
```

```
> tail(predict(c, newdata=iris, type="class"))
     145     146     147     148     149     150
virginica virginica virginica virginica virginica virginica
Levels: setosa versicolor virginica
```

4.2 의사결정나무

- R 패키지 {rpart.plot}을 이용하여 적합된 의사결정나무 모델을 여러 가지 방식으로 시각화 할 수 있다.

```
> library(rpart.plot)
> prp(c, type=4, extra =2)
```



4.2 의사결정나무

- 최종 노드(terminal node)에 대한 해석은 다음과 같다.
- 예를 들어, 두 조건($\text{Petal.Length} \geq 2.4$ 와 $\text{Petal.Width} < 1.8$)을 만족하는 노드에서 49/54는 이 노드에 속하는 해당 개체가 54개이며 이 가운데 versicolor가 49임을 나타낸다. 따라서 이 노드에 해당되는 새로운 자료는 versicolor로 분류된다.

4.2 의사결정나무

- rpart() 수행 결과는 다음의 정보를 제공한다.

```
> ls(c)
[1] "call"      "control"   "cptable"
[4] "frame"     "functions" "method"
[7] "numresp"   "ordered"   "parms"
[10] "splits"    "terms"     "variable.importance"
[13] "where"     "y"
```

- 이 가운데 \$cptable은 트리의 크기에 따른 비용-복잡도 모수(cost-complexity parameter)를 제공하며, 교차타당성오차(cross-validation error)를 함께 제공한다.
- 이 값들은 prune() 또는 rpart.control() 함수에서 가지치기(pruning)와 트리의 최대 크기(maximum size)를 조절하기위한 옵션으로 사용된다.

4.2 의사결정나무

- 다음은 교차타당성오차를 최소화 하는 트리를 형성하는 과정이다. 여기서는 위의 rpart()를 수행한 결과와 동일한 결과를 얻게 되어 그 결과는 생략한다.

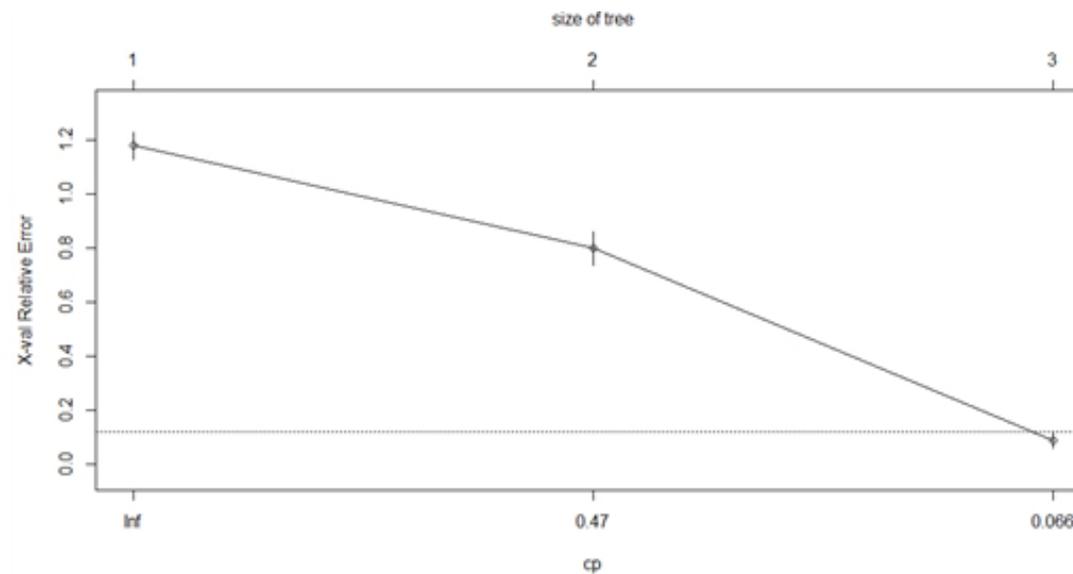
```
> c$cptable
CP nsplit  rel error xerror          xstd
1  0.50    0  1.00    1.18 0.05017303393
2  0.44    1  0.50    0.80 0.06110100927
3  0.01    2  0.06    0.09 0.02908607914
```

```
> opt <- which.min(c$cptable[, "xerror"])
> cp <- c$cptable[opt, "CP"]
> prune.c <- prune(c, cp = cp)
> plot(prune.c)
> text(prune.c, use.n=T)
```

4.2 의사결정나무

- R 패키지 {rpart}의 plotcp() 함수를 이용하면 cp값을 그림으로 나타낼 수 있다.

```
> plotcp(c)
```



4.2 의사결정나무

- 다음의 [예제 2]는 패키지 {party}의 ctree() 함수를 이용하여 의사결정나무모형을 적합한다. ctree는 “conditional inference tree”의 약어이다.

예제 2 분석에 사용된 자료는 146명의 전립선 암 환자의 자료(stagec)이다. 7개의 예측변수를 이용하여 범주형의 반응변수(ploidy)를 예측(또는 분류)한다.

```
> library(party)
> data(stagec)      # stagec는 {rpart}에서 제공함
> str(stagec)
'data.frame':  146 obs. of  8 variables:
 $ pgtime      : num  6.1  9.4  5.2  3.2  1.9  4.8  5.8  7.3  3.7 15.9 ...
 $ pgstat      : int   0  0  1  1  1  0  0  0  1  0 ...
 $ age         : int  64  62  59  62  64  69  75  71  73  64 ...
 $ eet         : int   2  1  2  2  2  1  2  2  2  2 ...
 $ g2          : num 10.26 NA  9.99  3.57 22.56 ...
 $ grade       : int   2  3  3  2  4  3  2  3  3  3 ...
 $ gleason     : int   4  8  7  4  8  7 NA  7  6  7 ...
 $ ploidy      : Factor w/  3 levels "diploid","tetraploid",...: 1 3 1 1 2 1 ...
```

4.2 의사결정나무

- 다음은 결측값을 제거하는 과정이다.

```
> stagec1<- subset(stagec, !is.na(g2))
> stagec2<- subset(stagec1, !is.na(gleason))
> stagec3<- subset(stagec2, !is.na(eet))
> str(stagec3)
```

- 결측값이 제거된 134개의 자료를 이용하여 모형을 적합한다. 모형구축을 위한 훈련용 자료 (training data)와 모형의 성능을 검증하기위한 검증용 자료(test data)를 70%와 30%로 구성한다.

```
> set.seed(1234)
> ind <- sample(2, nrow(stagec3), replace=TRUE, prob=c(0.7, 0.3))
```

4.2 의사결정나무

- 모델을 만들기 전에 stagec 자료를 복원 추출 방법을 이용하여 두 개의 부분집합 training (70%)와 test(30%)로 만들고 결과의 재현성을 위해 random seed를 고정하였다.

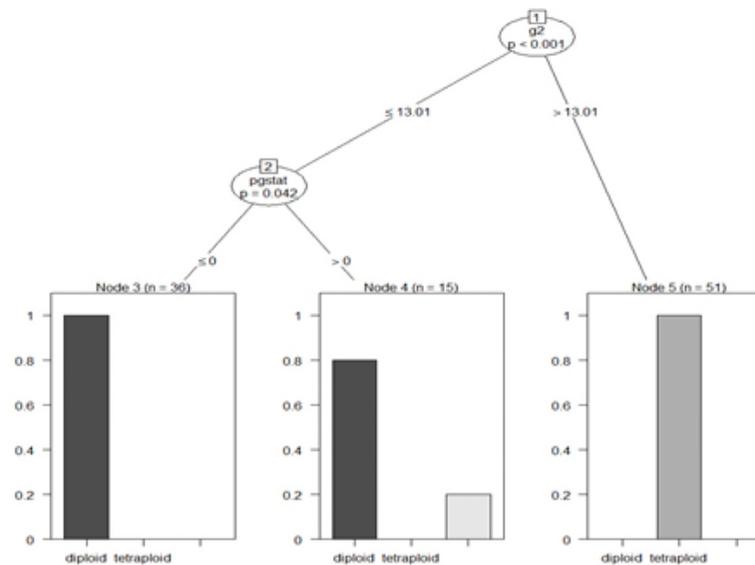
```
> ind
[1] 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 2 2 1 1 1
1 1 1 2 1 1 2 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 2 1 2 2 1 1 1 1 2
1 1 1
[70] 1 1 2 1 2 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1 2 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1 2
1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 2 1 1 2 2 1 1 2 2 2 2 2 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1
```

```
> trainData <- stagec3[ind==1, ]      # n=102개
> testData <- stagec3[ind==2, ]      # n=32개
```

4.2 의사결정나무

- 훈련용 자료(n=20)에 대해 ctree()를 적용한 결과는 다음과 같다.

```
> tree <- ctree(ploidy ~ ., data=trainData)
> tree
> plot(tree)
```



4.2 의사결정나무

- 최종노드의 막대그래프(barplot)는 반응변수(ploidy)의 각 범주별 비율을 나타낸다.
- predict() 함수를 통해 검증용 자료에 대해 적합모형을 적용하면 다음과 같다.

```
> testPred = predict(tree, newdata=testData)
> table(testPred, testData$ploidy)
testPred diploid tetraploid aneuploid
diploid    17         0         1
tetraploid  0         13        1
aneuploidy  0         0         0
```

4.2 의사결정나무

- 다음의 [예제 3]은 `ctree()` 함수를 이용하여 반응변수가 연속형인 경우 의사결정나무(회귀나무)를 통한 예측을 수행한다.

예제 3 `airquality` 자료에 대해 의사결정나무모형을 적합한다. 먼저 반응변수 `Ozone`이 결측인 자료를 제외한 후 `ctree()` 함수를 적용한다.

```
> airq <- subset(airquality, !is.na(Ozone))
```

```
> head(airq)
```

	Ozone	Solar.R	Wind	Temp	Month	Day
1	41	190	7.4	67	5	1
2	36	118	8.0	72	5	2
3	12	149	12.6	74	5	3
4	18	313	11.5	62	5	4
6	28	NA	14.9	66	5	6
7	23	299	8.6	65	5	7

4.2 의사결정나무

```
> airtc <- ctree(Ozone ~ ., data=airq)
```

```
> Airtc
```

```
Conditional inference tree with 5 terminal nodes
```

```
Response: Ozone
```

```
Inputs: Solar.R, Wind, Temp, Month, Day
```

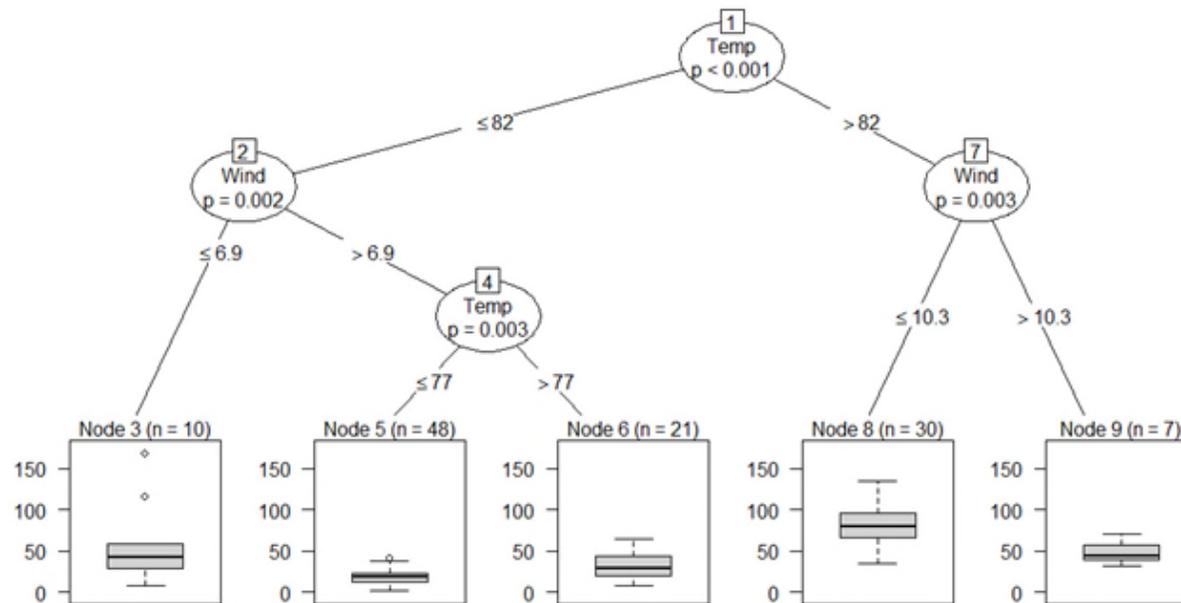
```
Number of observations: 116
```

- 1) Temp <= 82; criterion = 1, statistic = 56.086 # criterion=1-p값으로 기준값 이상이면 분할 수행
- 2) Wind <= 6.9; criterion = 0.998, statistic = 12.969 # 예측변수와 반응변수 간의 독립성 검정
- 3)* weights = 10
- 2) Wind > 6.9
- 4) Temp <= 77; criterion = 0.997, statistic = 11.599
- 5)* weights = 48
- 4) Temp > 77
- 6)* weights = 21
- 1) Temp > 82
- 7) Wind <= 10.3; criterion = 0.997, statistic = 11.712
- 8)* weights = 30
- 7) Wind > 10.3
- 9)* weights = 7

4.2 의사결정나무

- 최종노드(*로 표시된 마디)가 5개인 트리모형을 나타낸다. 이를 시각화하면 다음과 같다.

```
> plot(airct)
```



4.2 의사결정나무

- 위 모형으로부터 새로운 자료에 대한 예측은 `predict()` 함수를 이용한다. 연속형 반응변수에 대한 예측값은 최종노드에 속한 자료들의 평균값이 제공된다. 분석에 사용된 자료를 재대입한 결과는 다음과 같다.

```
> head(predict(airct, data=airq))
      Ozone
[1,] 18.47917
[2,] 18.47917
[3,] 18.47917
[4,] 18.47917
[5,] 18.47917
[6,] 18.47917
```

4.2 의사결정나무

- 자료가 속하는 해당 최종노드의 번호를 출력하고 싶을 때는 type="node" 옵션을 사용한다.

```
> predict(airct, data=airq, type="node")    # > where(airct)의 결과  
와 동일  
[1] 5 5 5 5 5 5 5 5 3 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 5 6 3 5 6 9 9 6  
(이하 생략)
```

- 예측값을 이용하여 평균제곱오차를 구하면 다음과 같다.

```
> mean((airq$Ozone - predict(airct))^2)  
[1] 403.6668
```

4.2 의사결정나무

- 의사결정나무모형의 장, 단점은 다음과 같다.
- 장점으로는 그 구조가 단순하여 해석이 용이하고, 유용한 입력변수의 파악과 예측변수간의 상호작용 및 비선형성을 고려하여 분석이 수행되며, 선형성, 정규성, 등분산성 등의 수학적 가정이 불필요한 비모수적 모형이다.
- 단점으로는 분류 기준값의 경계선 근방의 자료 값에 대해서는 오차가 클 수 있으며(비연속성), 로지스틱 회귀와 같이 각 예측변수의 효과를 파악하기 어려우며, 새로운 자료에 대한 예측이 불안정할 수 있다.