AI 라이브러리 활용

13장 과적합 피하기

이 찬 우

학습 내용 : 과적합 피하기

1 | 데이터의 확인과 실행

2 | 과적합 이해하기

3 | 학습셋과 테스트셋

4 | 모델 저장과 재사용

5 | k겹 교차 검증

과적합 피하기

- **실습 데이터** 초음파 광물 예측
  - dataset/sonar.csv

과적합 피하기

- 1988년 존스홉킨스대학교의 세즈노프스키(Sejnowski) 교수는
  2년 전 힌튼 교수가 발표한 역전파 알고리즘에 관심을 가지고 있었음
- 그는 은닉층과 역전파가 얼마나 큰 효과가 있는지를 직접 실험해 보고 싶었음
- 광석과 일반 돌을 가져다 놓고 음파 탐지기를 쏜 후 그 결과를 데이터로 정리함
- 오차 역전파 알고리즘을 사용한 신경망이 과연 얼마나 광석과 돌을 구분하는 데
  효과적인지 알아보기 위해서임

1 | 데이터의 확인과 실행

- dataset/sonar.csv 파일을 가져옴

```
import pandas as pd

df = pd.read_csv('../dataset/sonar.csv', header=None)
print(df.info( ))
```

1 | 데이터의 확인과 실행

Range Index: 208 entries,0 to 207			
Data columns (total 61 columns):			
0	208	non-null	float64
1	208	non-null	float64
2	208	non-null	float64
3	208	non-null	float64
4	208	non-null	float64

1 | 데이터의 확인과 실행

Range Index: 208 entries,0 to 207			
Data columns (total 61 columns):			
5	208	non-null	float64
...	...	...	...
58	208	non-null	float64
59	208	non-null	float64
60	208	non-null	object
Dtypes: float64(60), object(1)			
memory usage: 99.2+ KB			

1 | 데이터의 확인과 실행

- 모든 컬럼이 실수형(float64)인데, 맨 마지막 컬럼만 객체형인 것으로 보아 마지막에 나오는 컬럼은 클래스이며 데이터형 변환이 필요한 것을 알 수 있음
- 실제로 맞는지 일부를 출력해 확인해 보자

```
print(df.head( ))
```

1 | 데이터의 확인과 실행

60 61

	0	1	2	3	...	59	60
0	0.02	0.0371	0.0428	0.0207	...	0.0032	R
1	0.0453	0.0523	0.0843	0.0689	...	0.0044	R
2	0.0262	0.0582	0.1099	0.1083	...	0.0078	R
3	0.01	0.0171	0.0623	0.0205	...	0.0117	R
4	0.0762	0.0666	0.0481	0.0394	...	0.0094	R

1 | 데이터의 확인과 실행

코드 13-1 초음파 광물 예측하기: 데이터 확인과 실행

- 예제 소스: run_project/04_Sonar.ipynb

```
from keras.models import Sequential
from keras.layers.core import Dense
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder

import pandas as pd
import numpy
import tensorflow as tf

# seed 값 설정
numpy.random.seed(3)
tf.random.set_seed(3)
```

1 | 데이터의 확인과 실행

```
# 데이터 입력
df = pd.read_csv('../dataset/sonar.csv', header=None)

dataset = df.values
X = dataset[:,0:60]
Y_obj = dataset[:,60]

# 문자열 변환
e = LabelEncoder( )
e.fit(Y_obj)
Y = e.transform(Y_obj)
```

1 | 데이터의 확인과 실행

```
# 모델 설정
model = Sequential()
model.add(Dense(24, input_dim=60, activation='relu'))
model.add(Dense(10, activation='relu'))
model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))
# 모델 컴파일
model.compile(loss='mean_squared_error',
              optimizer='adam',
              metrics=['accuracy'])
```

1 | 데이터의 확인과 실행

```
# 모델 실행
model.fit(X, Y, epochs=200, batch_size=5)

# 결과 출력
print("\n Accuracy: %.4f" % (model.evaluate(X, Y)[1]))
```

1 | 데이터의 확인과 실행

실행 결과

```
Epoch 1/200
208/208 [==============================] - 0s 601us/step - loss: 0.2449
- accuracy: 0.5673
Epoch 2/200
208/208 [==============================] - 0s 197us/step - loss: 0.2404
- accuracy: 0.5481
Epoch 3/200
208/208 [==============================] - 0s 197us/step - loss: 0.2268
- accuracy: 0.6202
Epoch 4/200
208/208 [==============================] - 0s 211us/step - loss: 0.2188
```

1 | 데이터의 확인과 실행

```
– accuracy: 0.6394
Epoch 5/200
208/208 [==============================] – 0s 216us/step – loss: 0.2102
– accuracy: 0.7019
(중략)
Epoch 196/200
208/208 [==============================] – 0s 202us/step – loss:
3.8308e–04 – accuracy: 1.0000
Epoch 197/200
208/208 [==============================] – 0s 197us/step – loss:
3.7724e–04 – accuracy: 1.0000
```

1 | 데이터의 확인과 실행

```
Epoch 198/200
208/208 [==============================] - 0s 197us/step - loss:
3.6022e-04 - accuracy: 1.0000
Epoch 199/200
208/208 [==============================] - 0s 207us/step - loss:
3.5173e-04 - accuracy: 1.0000
Epoch 200/200
208/208 [==============================] - 0s 207us/step - loss:
3.5247e-04 - accuracy: 1.0000
208/208 [==============================] - 0s 86us/step

 Accuracy: 1.0000
```

2 | 과적합 이해하기

- 완전히 새로운 데이터에 적용하면 이 선을 통해 정확히 두 그룹으로 나누지 못하게 됨

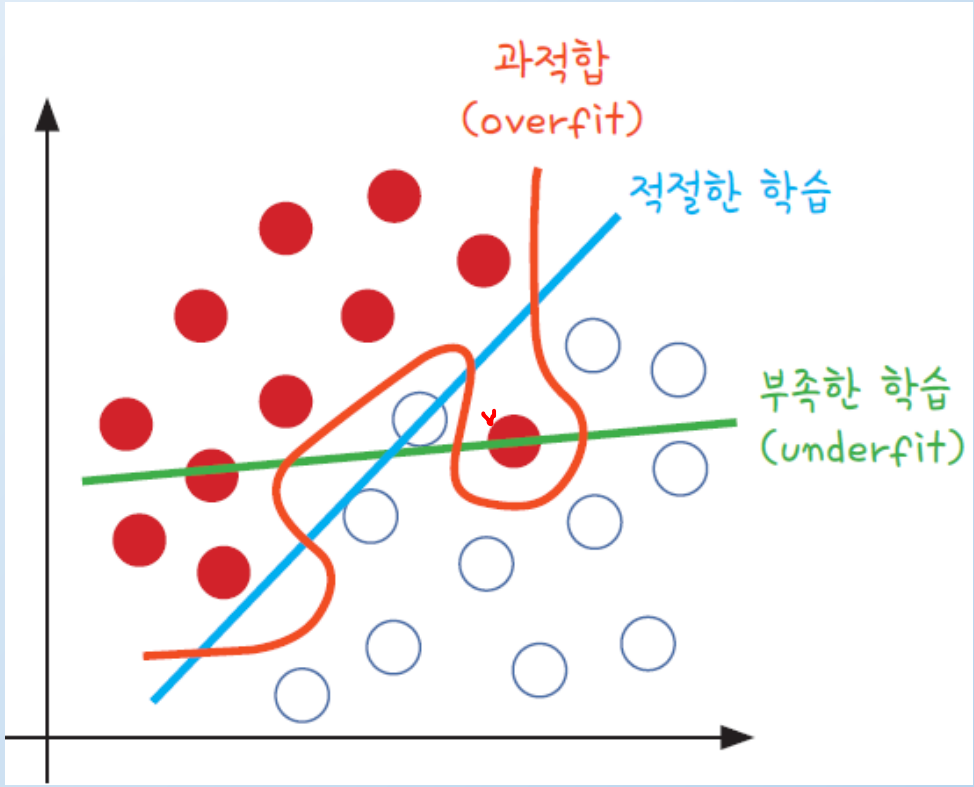
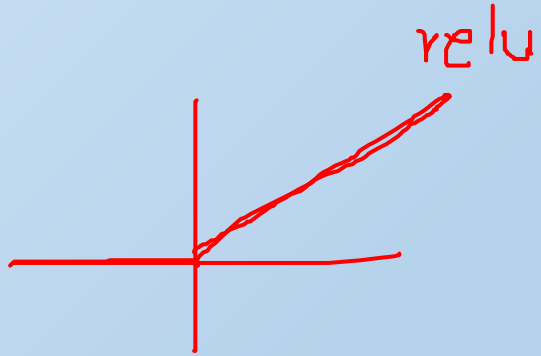


그림 13-1 과적합이 일어난 경우(빨간색)와 학습이 제대로 이루어지지 않은 경우(초록색)

2 | 과적합 이해하기

- 과적합은 층이 너무 많거나 변수가 복잡해서 발생하기도 하고 테스트셋과 학습셋이 중복될 때 생기기도 함
- 딥러닝은 학습 단계에서 입력층, 은닉층, 출력층의 노드들에 상당히 많은 변수들이 투입됨
- 딥러닝을 진행하는 동안 과적합에 빠지지 않게 늘 주의해야 함



3 | 학습셋과 테스트셋

- 과적합을 방지하려면 어떻게 해야 할까?

  → 먼저 학습을 하는 데이터셋과 이를 테스트할 데이터셋을 완전히 구분한 다음 학습과 동시에 테스트를 병행하며 진행하는 것이 한 방법

- 데이터셋이 총 100개의 샘플로 이루어져 있다면 다음과 같이 두 개의 셋으로 나눔

70개 샘플은 학습셋으로	30개 샘플은 테스트셋으로

3 | 학습셋과 테스트셋

- 신경망을 만들어 70개의 샘플로 학습을 진행한 후 이 학습의 결과를 저장함

  → 이렇게 저장된 파일을 '모델'이라고 부름
- 모델은 다른 셋에 적용할 경우 학습 단계에서 각인되었던 그대로 다시 수행함
- 나머지 30개의 샘플로 실험해서 정확도를 살펴보면 학습이 얼마나 잘 되었는지를 알 수 있는 것

3 | 학습셋과 테스트셋

- 딥러닝 같은 알고리즘을 충분히 조절하여 가장 나은 모델이 만들어지면,
  이를 실생활에 대입하여 활용하는 것이 바로 머신러닝의 개발 순서

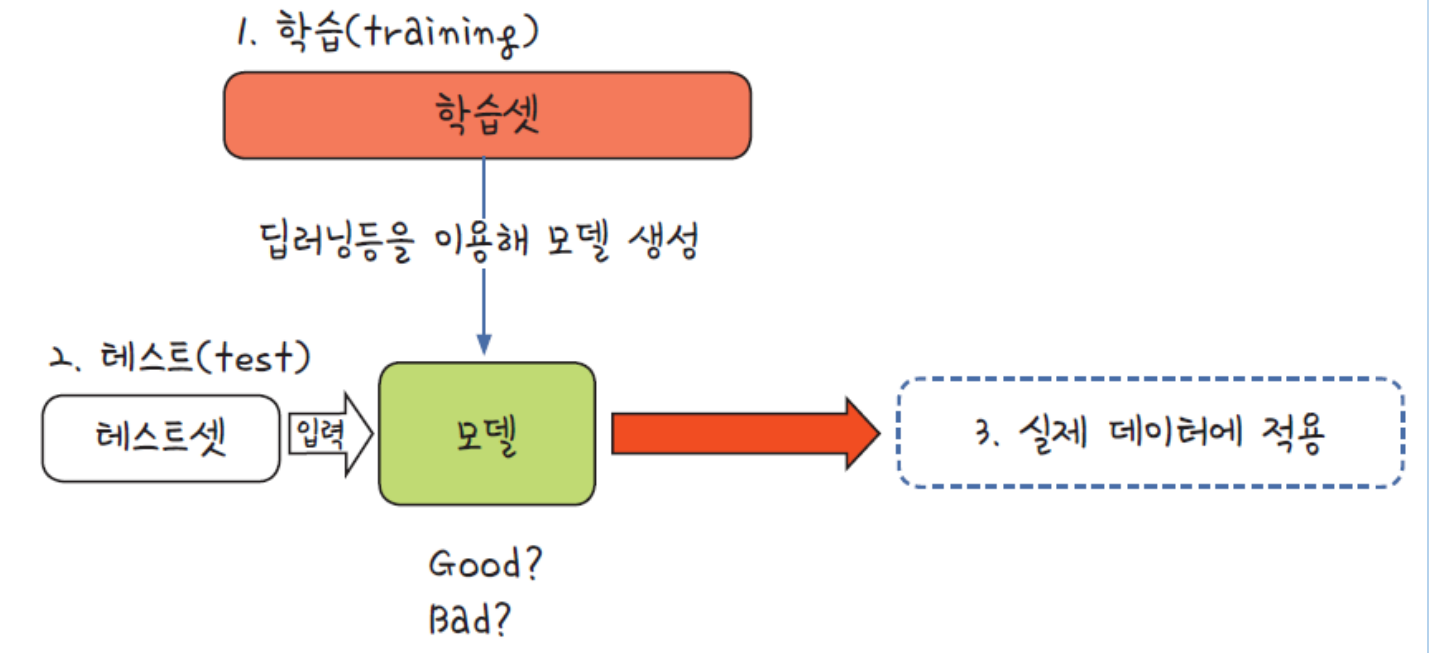


그림 13-2 학습셋과 테스트셋

3 | 학습셋과 테스트셋

- 학습 데이터를 이용해 정확도를 측정한 것은 데이터에 들어있는
  모든 샘플을 그대로 테스트에 활용한 결과임
- 학습에 사용된 샘플은 테스트에 쓸 수 없으므로
  학습 단계에서 테스트할 샘플은 자동으로 빼고,
  이를 테스트한 결과를 모아 정확도를 계산하는 것
- 이러한 방법은 빠른 시간에 모델 성능을 파악하고 수정할 수 있도록 도와 줌
- 머신러닝의 최종 목적은 과거의 데이터를 토대로 새로운 데이터를 예측하는 것
- 테스트셋을 만들어 정확한 평가를 병행하는 것이 매우 중요함

3 | 학습셋과 테스트셋

- 학습셋만 가지고 평가할때, 층을 더하거나 에포크(epoch) 값을 높여 실행 횟수를 늘리면 정확도가 계속해서 올라갈 수 있음
- 학습이 깊어져서 학습셋 내부에서의 성공률은 높아져도 테스트셋에서는 효과가 없다면 과적합이 일어나고 있는 것

3 | 학습셋과 테스트셋

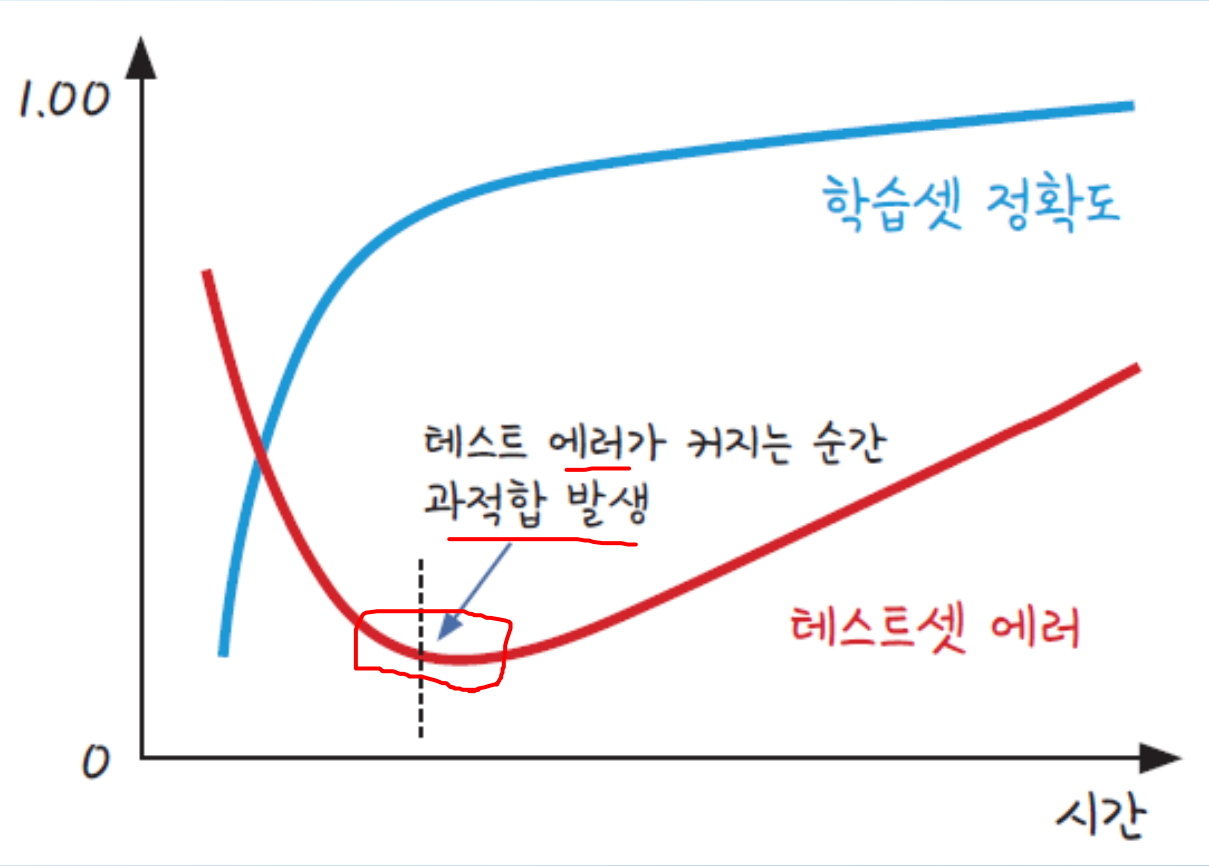


그림 13-3 학습이 계속되면 학습셋에서의 정확도는 계속 올라가지만, 테스트셋에서는 과적합이 발생

3 | 학습셋과 테스트셋

- 학습을 진행해도 테스트 결과가 더 이상 좋아지지 않는 지점에서 학습을 멈춰야 함
- 이때의 학습 정도가 가장 적절한 것으로 볼 수 있음
- 우리가 다루는 초음파 광물 예측 데이터를 만든 세즈노프스키 교수가 실험 결과를 발표한 논문의 일부를 가져와 보겠음

TABLE 2
Aspect-Angle Dependent Series

Number of Hidden Units	Average Performance on Training Sets (%)	Standard Deviation on Training Sets (%)	Average Performance on Testing Sets (%)	Standard Deviation on Testing Sets (%)
0	79.3	3.4	73.1	4.8
2	96.2	2.2	85.7	6.3
3	98.1	1.5	87.6	3.0
6	99.4	0.9	89.3	2.4
12	99.8	0.6	90.4	1.8
24	100.0	0.0	89.2	1.4

Summary of the results of the aspect-angle dependent series of experiments with training and testing sets selected to include all target aspect angles. The standard deviation shown is across networks with different initial conditions.

그림 13-4 학습셋과 테스트셋 정확도 측정의 예(RP Gorman et.al.,1998)

3 | 학습셋과 테스트셋

은닉층 수의 변화	학습셋의 예측률	테스트셋의 예측률
0	79.3	73.1
2	96.2	85.7
3	98.1	87.6
6	99.4	89.3
12	99.8	90.4
24	100	89.2

표 13-1 은닉층 수의 변화에 따른 학습셋 및 테스트셋의 예측률

- 식이 복잡해지고 학습량이 늘어날수록 학습 데이터를 통한 예측률은 계속해서 올라가지만, 테스트셋을 이용한 예측률은 오히려 떨어지는 것을 확인할 수 있음

3 | 학습셋과 테스트셋

- 불러온 X 데이터와 Y 데이터에서 각각 정해진 비율(%)만큼 구분하여 한 그룹은 학습에 사용함
- 다른 한 그룹은 테스트에 사용하게 하는 함수가 sklearn 라이브러리의 train_test_split( ) 함수임
- 학습셋을 70%, 테스트셋을 30%로 설정했을때의 예

```
from sklearn.model_selection import train_test_split


# 학습셋과 테스트셋의 구분
X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X, Y, test_
size=0.3, random_state=seed)
```

3 | 학습셋과 테스트셋

- 모델을 실행하는 부분에서 위에서 만들어진 학습셋으로 학습을,
  테스트셋으로 테스트를 하게 하려면 다음과 같이 실행함

```
model.fit(X_train, Y_train, epochs=130, batch_size=5)


# 테스트셋에 모델 적용
print("\n Test Accuracy: %.4f" % (model.evaluate(X_test, Y_test)
[1]))
```

3 | 학습셋과 테스트셋

코드 13-2 초음파 광물 예측하기: 학습셋과 테스트셋 구분

- **예제 소스**: run_project/05_Sonar_Train_Test.ipynb

```
from keras.models import Sequential
from keras.layers.core import Dense
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
from sklearn.model_selection import train_test_split

import pandas as pd
import numpy
import tensorflow as tf
```

3 | 학습셋과 테스트셋

```
# seed 값 설정
seed = 0
numpy.random.seed(seed)
tf.random.set_seed(3)
df = pd.read_csv('../dataset/sonar.csv', header=None)

dataset = df.values
X = dataset[:,0:60]
Y_obj = dataset[:,60]


e = LabelEncoder( )
e.fit(Y_obj)
Y = e.transform(Y_obj)
```

3 | 학습셋과 테스트셋

```
# 학습셋과 테스트셋의 구분
X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X, Y, test_
size=0.3, random_state=seed)

model = Sequential( )
model.add(Dense(24, input_dim=60, activation='relu'))
model.add(Dense(10, activation='relu'))
model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))

model.compile(loss='mean_squared_error',
              optimizer='adam',
              metrics=['accuracy'])

model.fit(X_train, Y_train, epochs=130, batch_size=5)
```

3 | 학습셋과 테스트셋

```
# 테스트셋에 모델 적용
print("\n Test Accuracy: %.4f" % (model.evaluate(X_test, Y_test)
[1]))
```

3 | 학습셋과 테스트셋

실행 결과

```
Epoch 1/130
145/145 [==============================] - 0s 765us/step - loss: 0.2486
- accuracy: 0.5379
Epoch 2/130
145/145 [==============================] - 0s 207us/step - loss: 0.2344
- accuracy: 0.5931
Epoch 3/130
145/145 [==============================] - 0s 214us/step - loss: 0.2233
- accuracy: 0.7241
Epoch 4/130
145/145 [==============================] - 0s 227us/step - loss: 0.2125
- accuracy: 0.6966
```

3 | 학습셋과 테스트셋

```
Epoch 5/130
145/145 [==============================] - 0s 227us/step - loss: 0.2040
- accuracy: 0.7310
(중략)
Epoch 126/130
145/145 [==============================] - 0s 207us/step - loss: 0.0050
- accuracy: 1.0000
Epoch 127/130
145/145 [==============================] - 0s 200us/step - loss: 0.0073
- accuracy: 1.0000
Epoch 128/130
145/145 [==============================] - 0s 214us/step - loss: 0.0071
- accuracy: 0.9931
```

3 | 학습셋과 테스트셋

```
Epoch 129/130
145/145 [==============================] - 0s 193us/step - loss: 0.0054
- accuracy: 1.0000
Epoch 130/130
145/145 [==============================] - 0s 200us/step - loss: 0.0046
- accuracy: 1.0000
63/63 [==============================] - 0s 238us/step

Test Accuracy: 0.8095
```

TIP

실전에서는 더 정확한 테스트를 위해 테스트셋을 두 개로 나누어, 하나는 앞서 설명한 방식대로 테스트셋으로 사용하고, 나머지 하나는 최종으로 만들어 낸 모델을 다시 한번 테스트하는 용도로 사용하기도 합니다. 추가로 만들어낸 테스트셋을 검증셋(Validation sets)이라고도 부릅니다.

4 | 모델 저장과 재사용

- 학습이 끝난 후 테스트해 본 결과가 만족스러울 때 이를 모델로 저장하여 새로운 데이터에 사용할 수 있음
- 앞서 학습한 결과를 모델로 저장하려면 다음과 같이 실행함

```
from keras.models import load_model


model.save('my_model.h5')
```

4 | 모델 저장과 재사용

- 이를 불러오려면 다음과 같이 실행함

```
model = load_model('my_model.h5')
```

4 | 모델 저장과 재사용

코드 13-3 초음파 광물 예측하기: 모델 저장과 재사용

- 예제 소스: run_project/06-Sonar-Save-Model.ipynb

```
from keras.models import Sequential, load_model
from keras.layers.core import Dense
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder

import pandas as pd
import numpy
import tensorflow as tf
```

4 | 모델 저장과 재사용

```
# seed 값 설정
seed = 0
numpy.random.seed(seed)
tf.random.set_seed(3)

df = pd.read_csv('../dataset/sonar.csv', header=None)

dataset = df.values
X = dataset[:,0:60]
Y_obj = dataset[:,60]

e = LabelEncoder( )
e.fit(Y_obj)
Y = e.transform(Y_obj)
```

4 | 모델 저장과 재사용

```
# 학습셋과 테스트셋을 나눔
from sklearn.model_selection import train_test_split

X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X, Y, test_
size=0.3, random_state=seed)

model = Sequential( )
model.add(Dense(24, input_dim=60, activation='relu'))
model.add(Dense(10, activation='relu'))
model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))

model.compile(loss='mean_squared_error',
              optimizer='adam',
              metrics=['accuracy'])
```

4 | 모델 저장과 재사용

```
model.fit(X_train, Y_train, epochs=130, batch_size=5)
model.save('my_model.h5')    # 모델을 컴퓨터에 저장

del model   # 테스트를 위해 메모리 내의 모델을 삭제
model = load_model('my_model.h5') # 모델을 새로 불러옴

print("\n Test Accuracy: %.4f" % (model.evaluate(X_test, Y_test)
[1]))  # 불러온 모델로 테스트 실행
```

5 | k겹 교차 검증

- 딥러닝 혹은 머신러닝 작업을 할 때 늘 어려운 문제 중 하나는 알고리즘을 충분히 테스트하였어도 데이터가 충분치 않으면 좋은 결과를 내기가 어렵다는 것
- 이러한 단점을 보완하고자 만든 방법이 바로 k겹 교차 검증 (k-fold cross validation)
- k겹 교차 검증 :

  데이터셋을 여러 개로 나누어 하나씩 테스트셋으로 사용하고

  나머지를 모두 합해서 학습셋으로 사용하는 방법
- 이렇게 하면 가지고 있는 데이터의 100%를 테스트셋으로 사용할 수 있음

5 | k겹 교차 검증

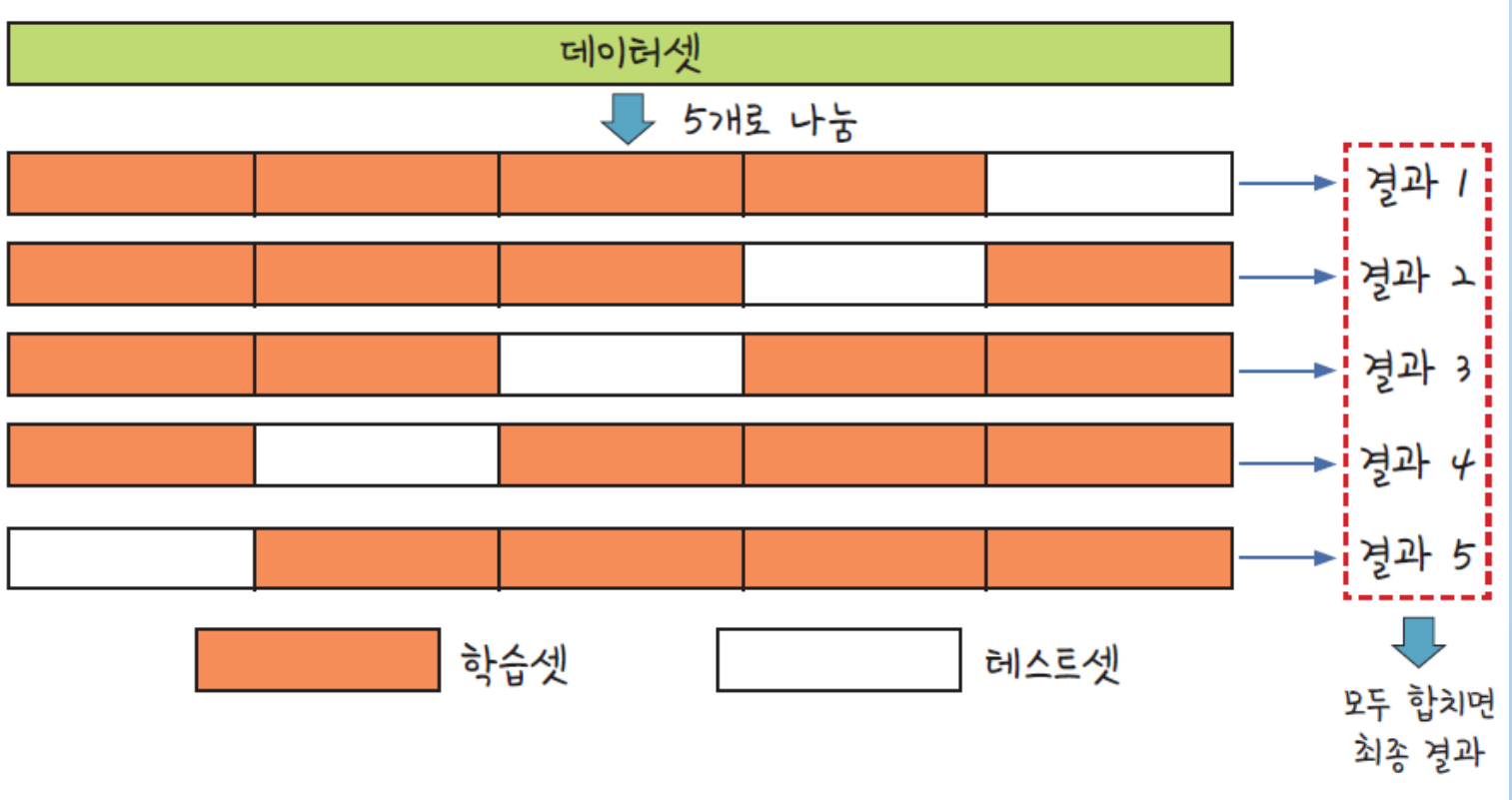


그림 13-5 5겹 교차 검증의 도식

5 | k겹 교차 검증

- 데이터를 원하는 숫자만큼 쪼개 각각 학습셋과 테스트셋으로 사용되게 만드는 함수는 sklearn의 StratifiedKFold( ) 함수

```
from sklearn.model_selection import StratifiedKFold


n_fold = 10
skf = StratifiedKFold(n_splits=n_fold, shuffle=True, random_
state=seed)
```

5 | k겹 교차 검증

- 모델을 만들고 실행하는 부분을 for 구문으로 묶어 n_fold만큼 반복되게 함

```
for train, test in skf.split(X, Y):
    model = Sequential()
    model.add(Dense(24, input_dim=60, activation='relu'))
    model.add(Dense(10, activation='relu'))
    model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))
    model.compile(loss='mean_squared_error',
                  optimizer='adam',
                  metrics=['accuracy'])
    model.fit(X[train], Y[train], epochs=100, batch_size=5)
```

5 | k겹 교차 검증

- 정확도(Accuracy)를 매번 저장하여 한 번에 보여줄 수 있게 accuracy 배열을 만듦

```
accuracy = []

for train, test in skf.split(X, Y):
    (중략)
    k_accuracy = "%.4f" % (model.evaluate(X[test], Y[test])[1])
    accuracy.append(k_accuracy)

print("\n %.f fold accuracy:" % n_fold, accuracy)
```

5 | k겹 교차 검증

코드 13-4 초음파 광물 예측하기: k겹 교차 검증

- 예제 소스: run_projec/07_Sonar-K-fold.ipynb

```
from keras.models import Sequential
from keras.layers.core import Dense
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
from sklearn.model_selection import StratifiedKFold

import numpy
import pandas as pd
import tensorflow as tf
```

5 | k겹 교차 검증

```
# seed 값 설정
seed = 0
numpy.random.seed(seed)
tf.set_random_seed(seed)

df = pd.read_csv('../dataset/sonar.csv', header=None)

dataset = df.values
X = dataset[:,0:60]
Y_obj = dataset[:,60]

e = LabelEncoder( )
e.fit(Y_obj)
Y = e.transform(Y_obj)
```

5 | k겹 교차 검증

```
# 10개의 파일로 쪼갬
n_fold = 10

skf = StratifiedKFold(n_splits=n_fold, shuffle=True, random_
state=seed)


# 빈 accuracy 배열
accuracy = []
```

5 | k겹 교차 검증

```
# 모델의 설정, 컴파일, 실행
for train, test in skf.split(X, Y):
    model = Sequential()
    model.add(Dense(24, input_dim=60, activation='relu'))
    model.add(Dense(10, activation='relu'))
    model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))
    model.compile(loss='mean_squared_error',
                  optimizer='adam',
                  metrics=['accuracy'])
    model.fit(X[train], Y[train], epochs=100, batch_size=5)
    k_accuracy = "%.4f" % (model.evaluate(X[test], Y[test])[1])
    accuracy.append(k_accuracy)
```

5 | k겹 교차 검증

```
# 결과 출력
print("\n %.f fold accuracy:" % n_fold, accuracy)
```

실행 결과

```
(중략)
Epoch 98/100
188/188 [==============================] - 0s 191us/step - loss: 0.0166
- accuracy: 0.9894
Epoch 99/100
188/188 [==============================] - 0s 181us/step - loss: 0.0130
- accuracy: 0.9947
```

5 | k겹 교차 검증

```
Epoch 100/100
188/188 [==============================] - 0s 186us/step - loss: 0.0136
- accuracy: 1.0000
20/20 [==============================] - 0s 650us/step

 10 fold accuracy: ['0.8182', '0.7143', '0.8095', '0.8095', '0.7619', '0.8095', '0.8571',
'0.9500', '0.7500', '0.8000']
```

정리 학습 : 과적합 피하기

1 | 데이터의 확인과 실행

2 | 과적합 이해하기

3 | 학습셋과 테스트셋

4 | 모델 저장과 재사용

5 | k겹 교차 검증

다음 수업

베스트 모델 만들기