# 인공지능과 신약개발을 위한 파이썬

## 5주차 머신 러닝의 이해

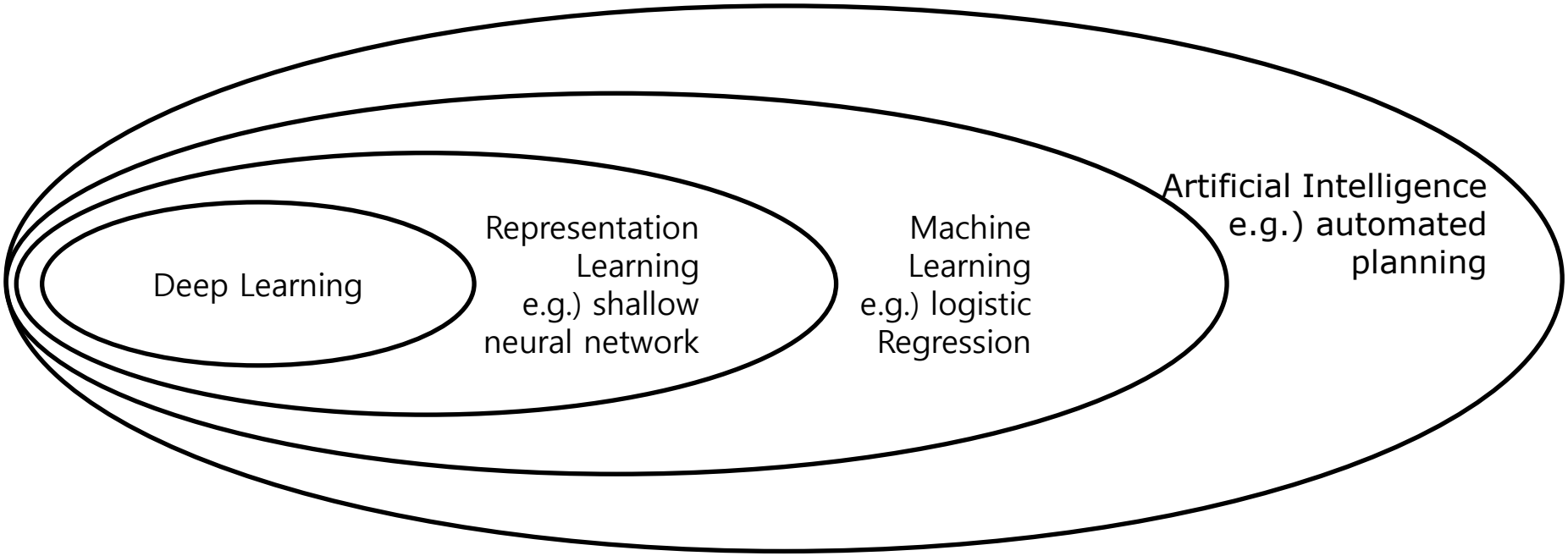
홍 성 은

sungkenh@gmail.com

# 목차

- 데이터 분석
- 머신러닝
- 회귀분석
- 분류
- 클러스터링

# 머신 러닝


Deep Learning
Representation Learning e.g.) shallow neural network
Machine Learning e.g.) logistic Regression
Artificial Intelligence e.g.) automated planning

# 머신 러닝

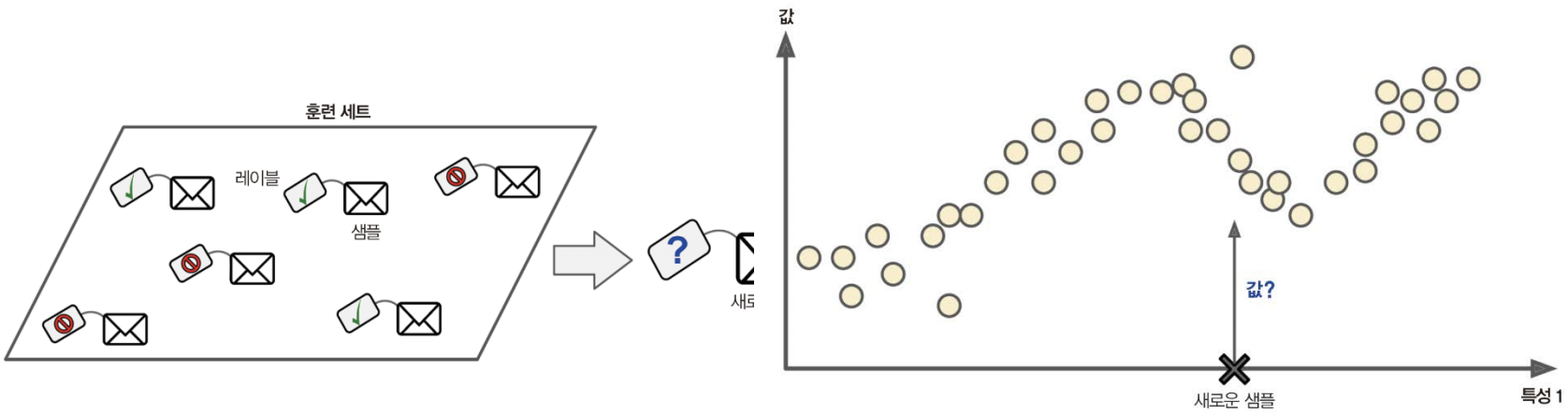
- 머신 러닝 해석
  - 머신 러닝이 학습한 것을 조사할 수 있음
  - 스팸 필터가 충분한 스팸 메일로 훈련되었다면 스팸을 예측하는데 가장 좋은 단어 및 단어의 조합을 확인할 수 있음
  - 간혹, 예상치 못한 연관성이나 새로운 추세가 발견되기도 해서 해당 문제를 더 잘 이해하도록 도와 줌
  - 머신 러닝 기술을 적용해서 대용량의 데이터를 분석하면 **겉으로 보이지 않는 패턴을 발견**할 수 있도록 해주는데 이를 **데이터 마이닝**이라고 함
- 머신 러닝 응용 분야
  - 제품 이미지를 보고 자동으로 분류하기
  - 자동으로 뉴스 기사를 분류하기
  - 내년도 회사의 수익을 예측하기
  - 음성을 듣고 이해하는 앱을 만들기
  - 구매 이력을 기반으로 고객을 나누기

# 머신 러닝

- 머신 러닝의 유형
  - 사람의 감독하에 훈련하는 것인지(지도, 비지도, 준지도, 강화학습)
  - 실시간으로 점진적인 학습을 하는지 아닌지(온라인 학습과 배치학습)
  - 단순하게 알고 있는 데이터 포인트와 새 데이터 포인트를 비교하는 것인지 훈련 데이터셋의 패턴을 발견하여 예측 모델을 만드는 것인지(사례 기반 학습, 모델 기반 학습)

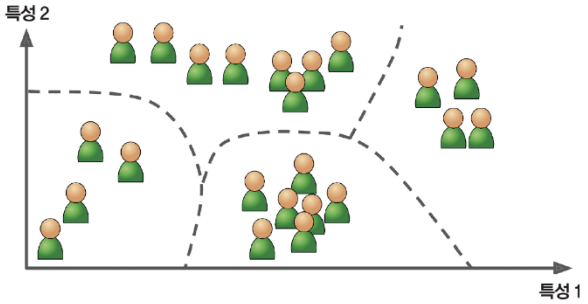
# 머신 러닝

- 지도학습
  - 지도학습은 정답이 주어지고 정답을 예측하는데 사용
  - 정답은 목적(target) 변수, 레이블이라고도 함
  - 예측은 분류와 회귀로 나누어짐
  - 분류
    - 분류(classification)란 어떤 항목(item)이 어느 그룹에 속하는지를 판별하는 기능을 말함
    - 두 가지 카테고리를 나누는 작업을 이진 분류(binary classification)라고 하고 세 개 이상의 클래스를 나누는 작업을 다중 분류(multiclass classification)라고 함
  - 회귀
    - 수치를 예측하는 것을 회귀라고 한다.

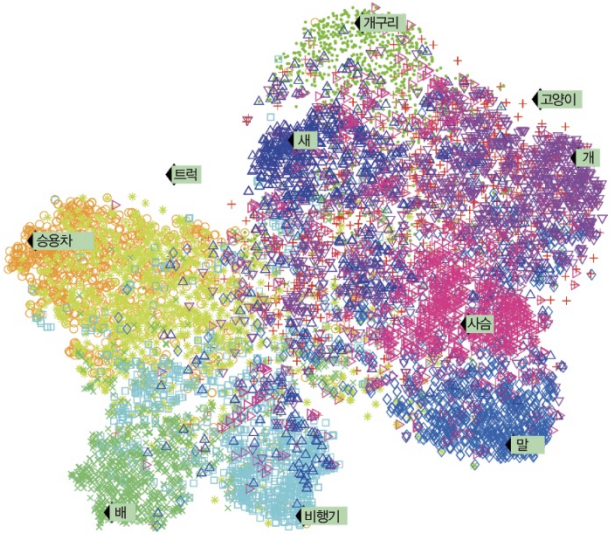


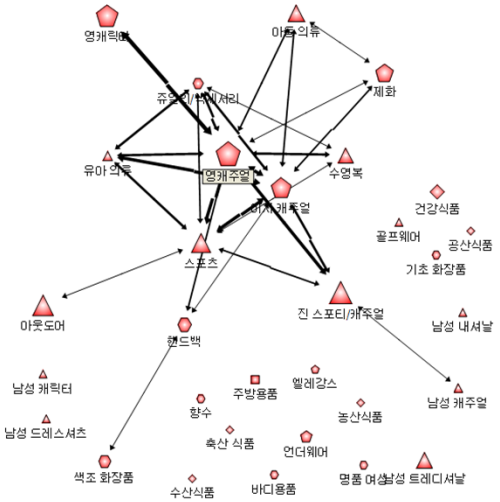
# 머신 러닝

- 비지도 학습
  - 비지도 학습이란 정답이 없이 데이터로부터 중요한 의미를 찾아내는 머신 러닝 기법임
    - 군집화: 유사한 항목들을 같은 그룹으로 묶음
    - 차원 축소 및 시각화 : 머신 러닝에 사용할 특성의 수를 줄임
    - 연관 분석
      - 어떤 사건이 다른 사건과 얼마나 자주 동시에 발생하는지 파악
      - 자주 발생하는 패턴 찾기(상품의 연관성, 취향의 연관성 등 분석)
      - 같이 구매한 상품 분석(market basket analysis, 장바구니 분석)
      - 상품의 진열 배치 및 상품 프로모션(쿠폰 발행 등)에 활용



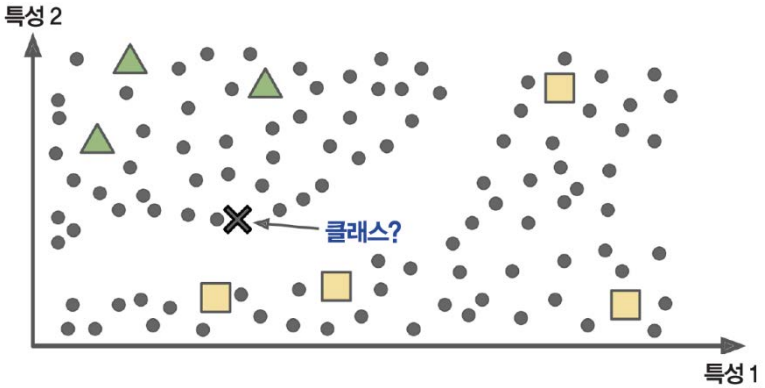




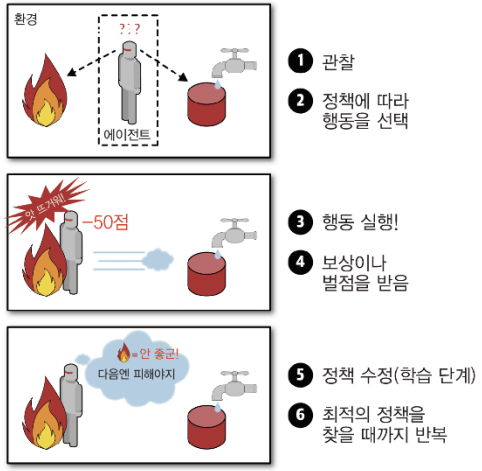



# 머신 러닝

- 준지도 학습
  - 데이터에 레이블을 다는 것이 시간과 비용이 많이 필요하기 때문에 레이블이 없는 샘플이 많고 레이블이 있는 샘플이 적음
  - 정답이 일부만 있는 경우를 준지도 학습이라고 함

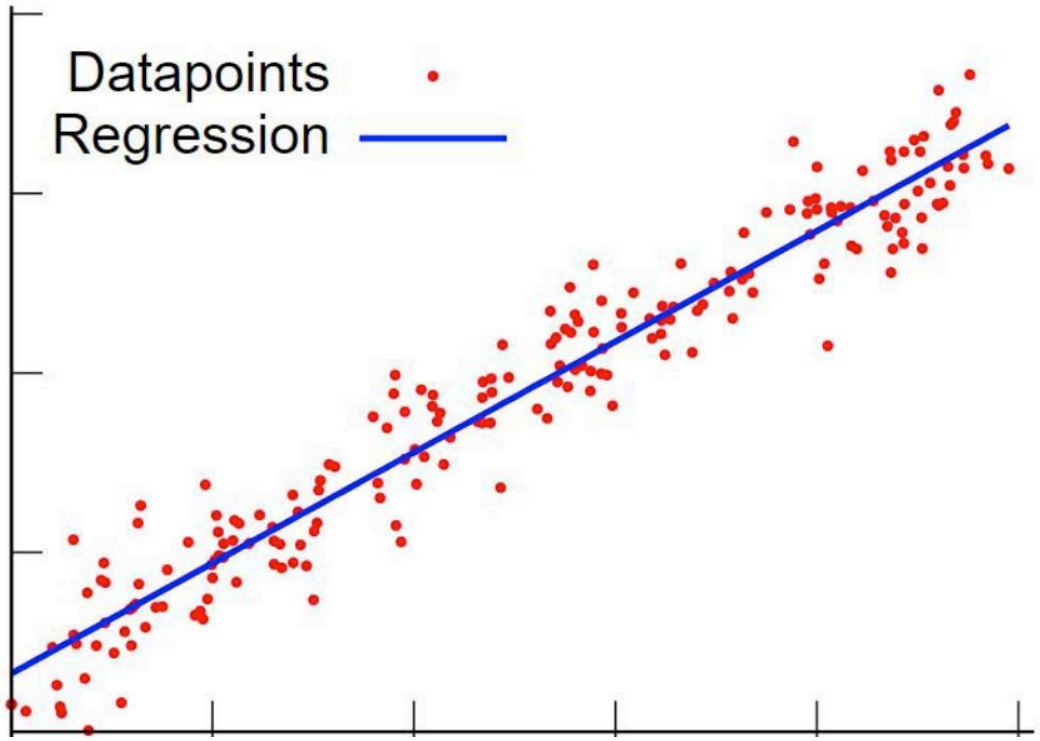



- 강화 학습
  - 학습하는 시스템을 **에이전트**
  - 환경을 관찰해서 행동을 실행하고 그 결과로 **보상, 벌점**부과
  - 시간이 지나며 가장 큰 보상을 얻기 위해 **정책**이라는 전략을 스스로 학습



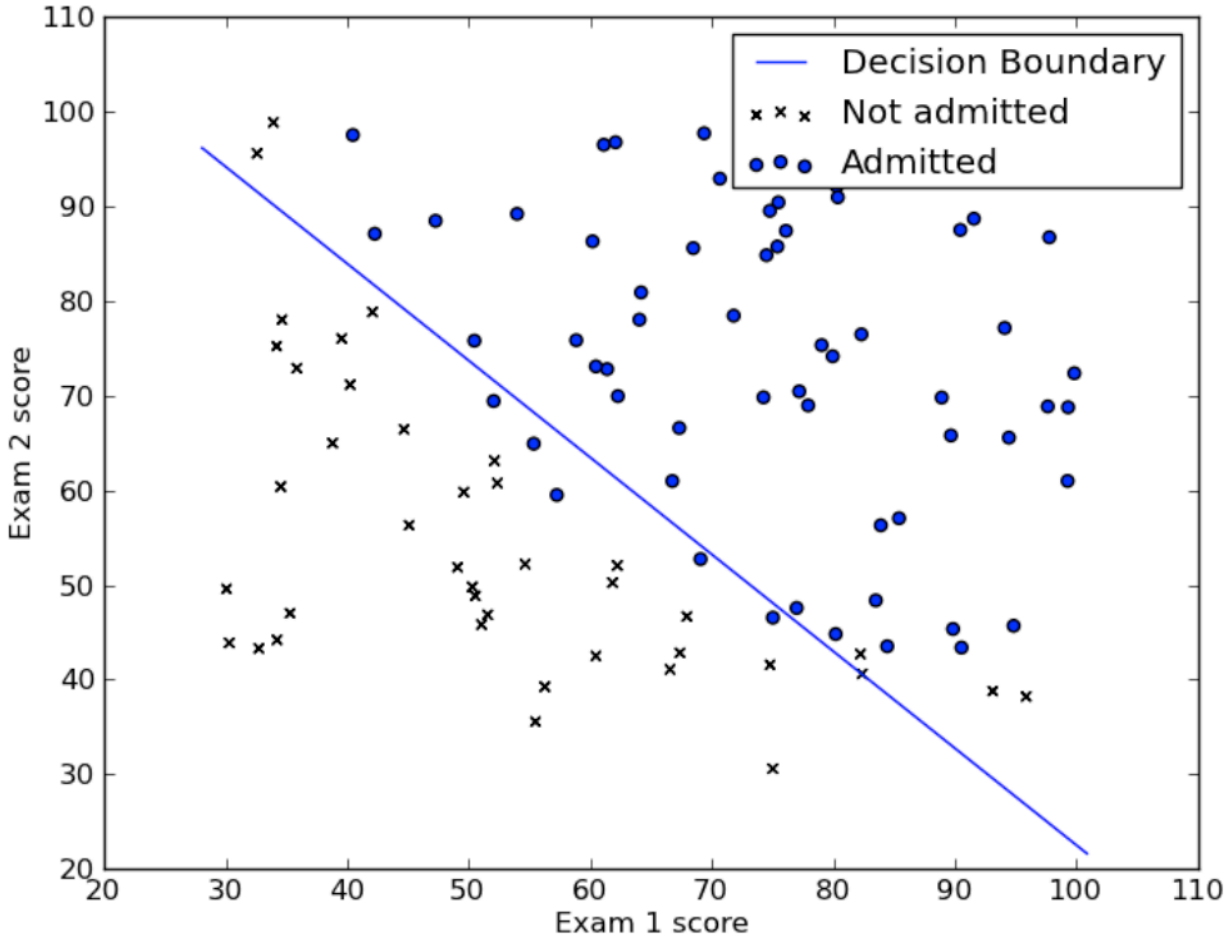
# 머신 러닝

- 선형 회귀(regression)  y = wX + b



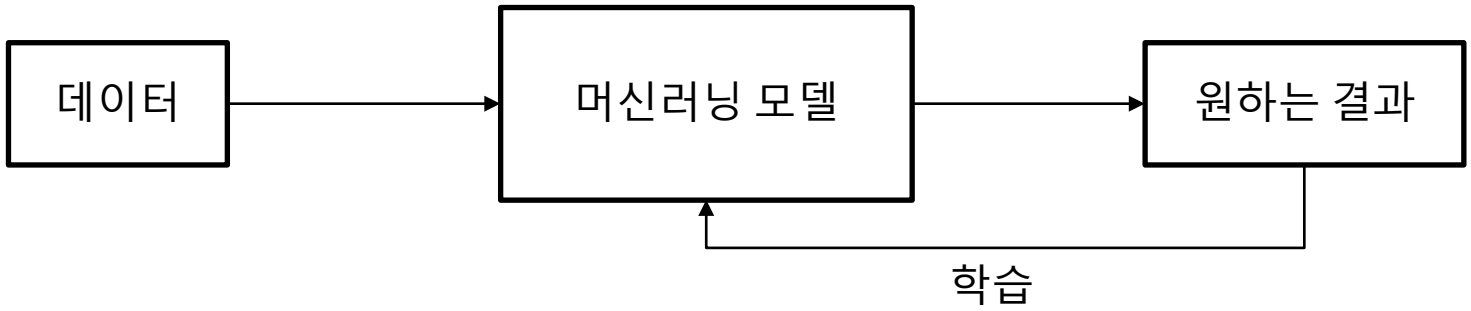
# 머신 러닝

- 선형 분류(classification)  $ay + bx > c$



# 머신 러닝

- 모델의 특징
  - 머신 러닝에서는 데이터에 기반한 모델을 사용 (학습)
  - 현실 세계의 많은 현상은 수식으로 간단히 모델링하기 어렵고 과학적으로 증명할 수는 없음
- 모델 구조와 파라미터
  - 모델 구조: 모델의 동작을 규정하는 방법
  - 모델 파라미터: 모델이 잘 동작하도록 정한 가중치 등 계수
    - 예: 머리카락 길이
    - 모델의 구조는 프로그래머가 선택
    - 적절한 파라미터를 찾는 것은 머신 러닝 프로그램이 학습하여 찾음



# 머신 러닝

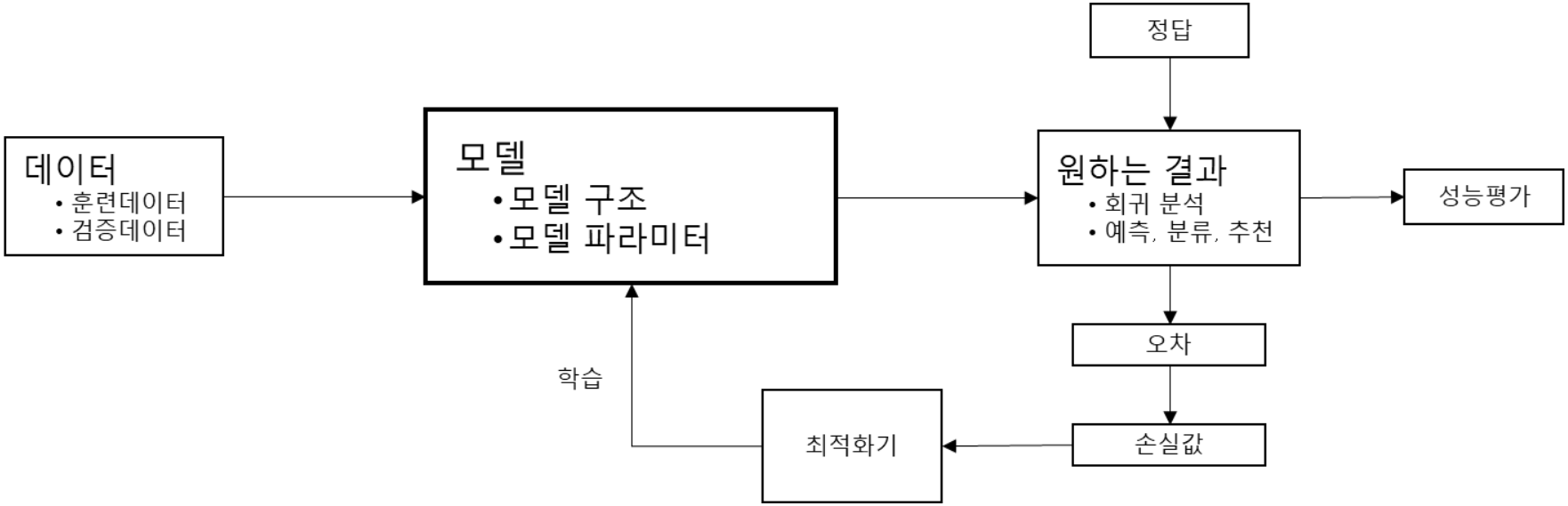
- 손실함수(비용 함수)
  - 모델의 예측 값과 실제 값과의 차이, 즉 오차로부터 손실함수(loss function)을 계산함
  - 이 손실함수를 줄이는 방향으로 모델을 최적화 (학습) 함
  - 회귀분석에서 많이 사용하는 손실함수로는 오차 자승의 합의 평균치(MSE: mean square error)
  - N: 배치 크기

$$MSE = \sum_{k=1}^{N} (y - \hat{y})^2$$

  - 배치 크기 같은 설정 환경 변수를 하이퍼파라미터라고 함
  - 하이퍼파라미터는 사람이 선택하는 변수이며, 기계 학습으로 자동으로 갱신되는 변수는 "파라미터"라고 함

# 머신 러닝

- 오차 손실함수, 최적화, 파라미터



# 머신 러닝

- 분류의 손실 함수
  - 분류에서는 손실함수로 MSE를 사용할 수 없음
  - 대신, 분류에서 정확도(accuracy)를 손실함수로 사용할 수 있음
  - 예를 들어 100명에 대해 남녀 분류를 시도하였으나 96명을 맞추고 4명을 틀렸다면 정확도는 0.96
  - 그러나 정확도를 손실함수로 사용하는데 다음과 같은 문제가 있음
- 카테고리 분포 불균형시 문제
  - 남자가 95명, 여자가 5명이 있는 그룹에서 남자는 1명을 잘 못 분류하고 여자는 3명을 잘 못 분류했다고 하면, 정확도는 여전히 0.96임
  - 손실을 제대로 측정하지 못함
  - 이를 보완하기 위해서 크로스 엔트로피(cross entropy)를 사용함

# 머신 러닝

- 크로스 엔트로피

$$CE = \sum_i p_i \log\left(\frac{1}{p_i'}\right)$$

  - Pi는 어떤 사건이 일어날 실제 확률이고, Pi' 는 예측한 확률이다
  - 남녀가 50명씩 같은 경우

$$CE = -0.5 \times \log\left(\frac{49}{50}\right) - 0.5 \times \log\left(\frac{47}{50}\right) = 0.02687$$

  - 남자가 95명 여자가 5명인 경우

$$CE = -0.95 \times \log\left(\frac{94}{95}\right) - 0.05 \times \log\left(\frac{2}{5}\right) = 0.17609$$

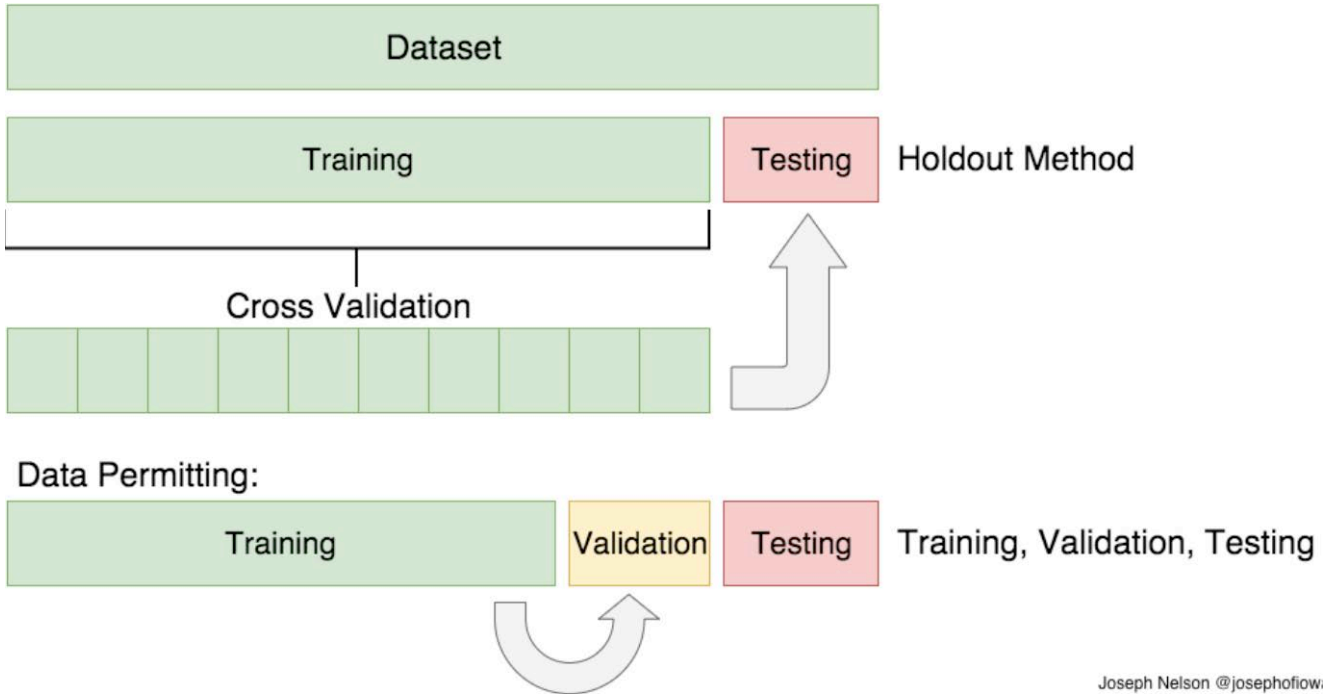
# 머신 러닝

- 훈련과 검증
  - 모델이 데이터를 이용하여 학습하는 과정을 훈련 (training)이라고 함
  - 최적화 알고리즘에 의해서 파라미터(가중치 등)를 계속 갱신하여 모델의 예측 값이 실제 값에 수렴하도록 하는 것
  - 검증(validation) : 훈련된 모델이 잘 동작하는지 확인하는 과정

- 모델 동작이 얼마나 우수한지를 검증할 때는 훈련 데이터로 해서는 안되며 훈련에 사용하지 않은, 새로운 검증 데이터(validation data)를 사용해야 함
- 보통 검증 데이터를 따로 제공하지 않으므로 훈련에 사용할 데이터의 일부를 검증용으로 미리 확보해야 함
- 훈련에 사용하지 않고 남겨 두었다가 모델이 제대로 동작하는지 테스트할 때 사용하는 데이터를 hold-out 데이터라고 함

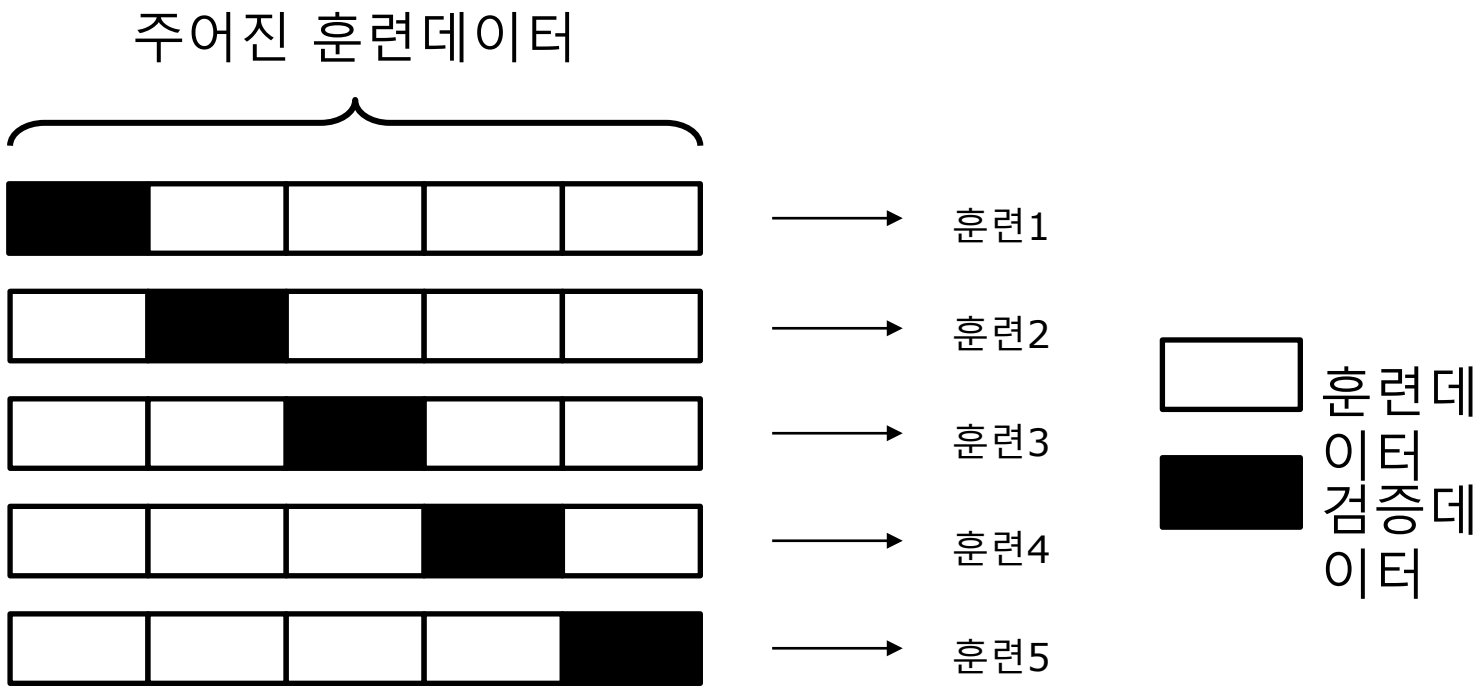
# 머신 러닝

- 훈련과 검증
  - 훈련 데이터 : 모델 파라미터를 훈련하는데 사용
  - 검증 데이터 : 과대적합이나 과소적합을 검사하고 최적 모델 구조(하이퍼파라미터 등)를 찾는데 사용
  - 테스트 데이터 : 모델의 성능을 최종적으로 테스트 하는데 사용



# 머신 러닝

- K-fold 교차 검증

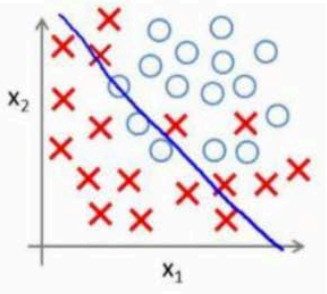


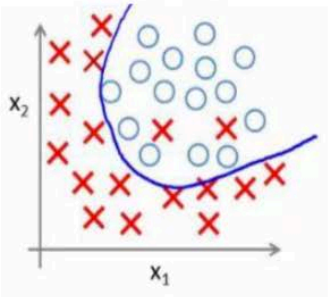
# 머신 러닝

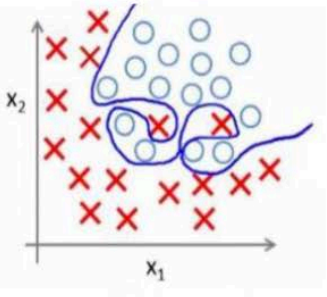
- 데이터의 대표성
  - 훈련 데이터가 미래에 나타날 가능성이 있는 모든 데이터의 특징을 반영하도록 구성해야 함
    - 예: 지리적, 인종적, 나이별, 소득별, 성별 등 균일성 유지
  - 훈련, 검증, 테스트 샘플 데이터가 전체 데이터의 특징을 계속 유지할 수 있어야 함

# 머신 러닝

- 과대적합(over fitting)
  - 모델이 훈련 데이터에 대해서만 잘 동작하도록 훈련되어 새로운 데이터에 대해서는 오히려 잘 동작하지 못하는 것
  - 과대적합된 모델은 훈련 데이터에 대해서는 매우 우수한 성능을 보이지만 일반화가 떨어짐
  - 머신러닝에서는 과대적합을 피해서 일반적으로 잘 동작하게 모델을 만드는 것이 매우 중요함
    - 이를 모델의 일반화(generalization)라고 함




- 과소 적합(under fitting)
  - 모델이 너무 간단하여 성능이 미흡한 경우
  - 과소적합을 피하려면 좀 더 상세한 모델 구조를 사용해야 함
  - 머신러닝에서는 과대적합과 과소적합을 모두 피해야 하며 최적의 예측을 수행하는 모델을 만드는 것이 중요함

# 머신 러닝

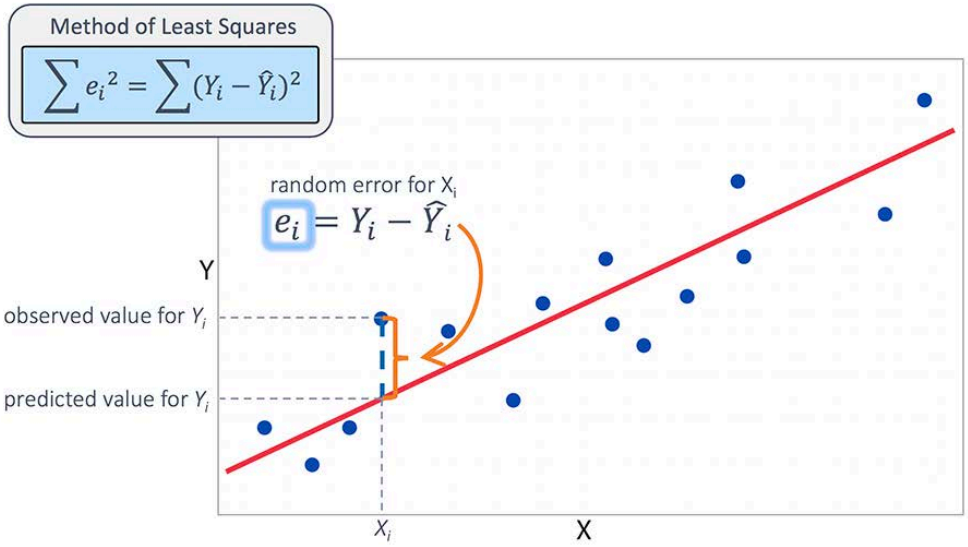
- 모델의 성능
  - 모델의 성능을 평가하는 척도 필요
  - 분류에서는 정확도(accuracy)를 성능 척도로 주로 사용
    - (참고) 분류에서 손실함수로 크로스 엔트로피를 주로 사용
  - 손실함수와 성능 지표의 차이점
    - 손실함수를 정하는 목적은 모델을 훈련시킬 때의 기준으로 삼기 위해서임
    - 모델은 손실함수를 최소화 하는 방향으로 학습
    - 모델의 성능은 이렇게 만든 모델이 궁극적으로 얼마나 잘 동작하는지를 평가하는 척도임

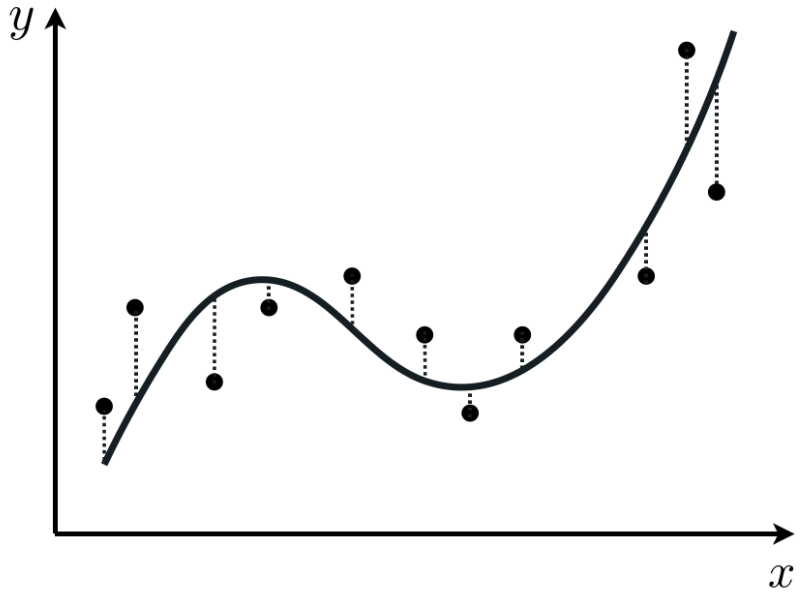
| | 손실함수 | 성능 지표 |
|---|---|---|
| 정 의 | 손실함수를 줄이는 방향으로 모델이 학습을 함 | 성능을 높이는 것이 머신러닝을 사용하는 목적임 |
| 회귀 모델 | MSE (오차 자승의 평균) | R2 |
| 분류 모델 | 크로스 엔트로피 | 정확도, 정밀도, 재현률, F1점수 |

# 회귀 분석

- 회귀 분석
  - 수치형 종속변수와 수치형 독립변수사이의 영향 또는 인과관계를 알 수 있는 분석
  - 학습 데이터 x로 부터 y를 예측하는 함수 f(x)를 찾는 과정으로 x와 y는 모두 연속적인 수치 값
  - 도출된 회귀식에서 직선의 기울기와 상수를 알 수 있는데, 이를 통해 독립변수의 변화에 따른 종속변수의 변화를 알 수 있는 것

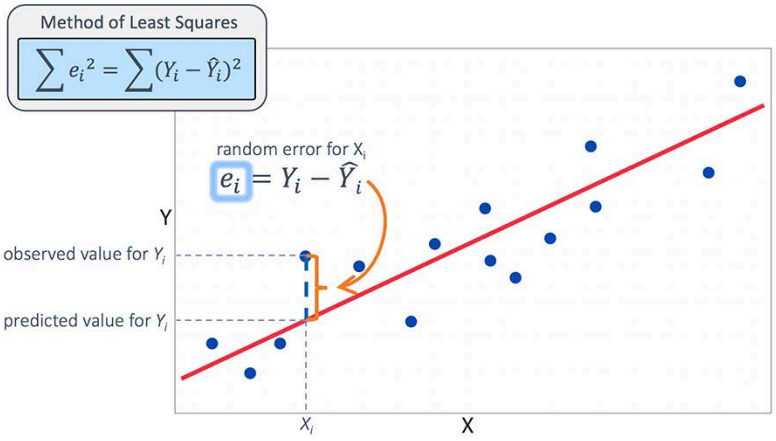
$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \beta_2 X_i + \cdots + \beta_k X_i + \epsilon_i \, , (i = 1, \cdots, n)$$



# 회귀 분석

- 회귀 문제와 손실함수
  - MAE(Mean absolute Error): 원본 값과 예측 값에 대한 절대 오류의 평균
  - MSE(Mean Squared Error): 원본 값과 예측 값에 대한 오류 제곱의 평균
  - RMSE(Root MSE): MSE의 제곱근
  - R-squared: 원본 값과 예측 값을 비교하여 회귀모델이 얼마나 잘 원본 값을 나타내는지 [0,1]




$$MAE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}|y_i - \hat{y}|$$

$$MSE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y})^2$$

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y})^2}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(y_i - \hat{y})^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2}$$

Where,

$\hat{y}$ – *predicted value of* $y$

$\bar{y}$ – *mean value of* $y$

# 회귀 분석

- 단순 회귀 분석
  - 하나의 수치형 설명변수가 하나의 수치형 종속변수에 어떤 인과관계 또는 영향을 미치는지에 대한 분석을 말함
  - 많은 변수는 고려하지 않고 오직 하나의 종속변수(Y)와 하나의 독립변수(X)에 의해서만 시행
  - Ex) 쇼핑몰의 입점 매장 수가 고객의 방문빈도에 어떤 영향을 미치는지를 확인하려 하는 상황에 우리는 단순회귀분석을 사용

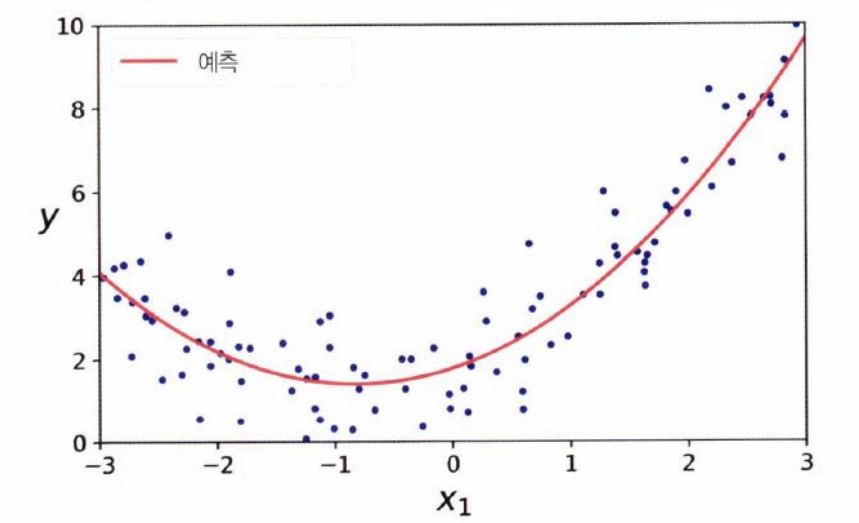
$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i, (i = 1, \cdots, n)$$

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 X$$

| | 총매출액 | 방문빈도 | 1회평균매출액 | 쿠폰사용횟수 | 거래기간 |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 12717240 | 109 | 116672 | 4 | 1093 |
| 1 | 12802210 | 22 | 581919 | 20 | 1002 |
| 2 | 12815010 | 27 | 474630 | 11 | 1066 |
| 3 | 13038990 | 24 | 543291 | 5 | 1069 |
| 4 | 13072260 | 37 | 353304 | 9 | 1077 |

# 회귀 분석

- 다항 회귀 분석
  - 한 특성과 예측값의 관계가 선형이 아닌 2차, 3차 이상의 관계를 갖는 회귀 방법

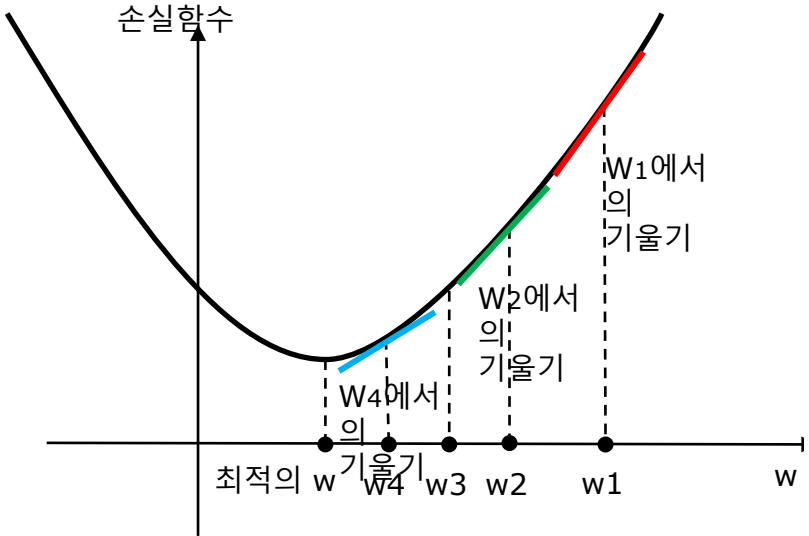


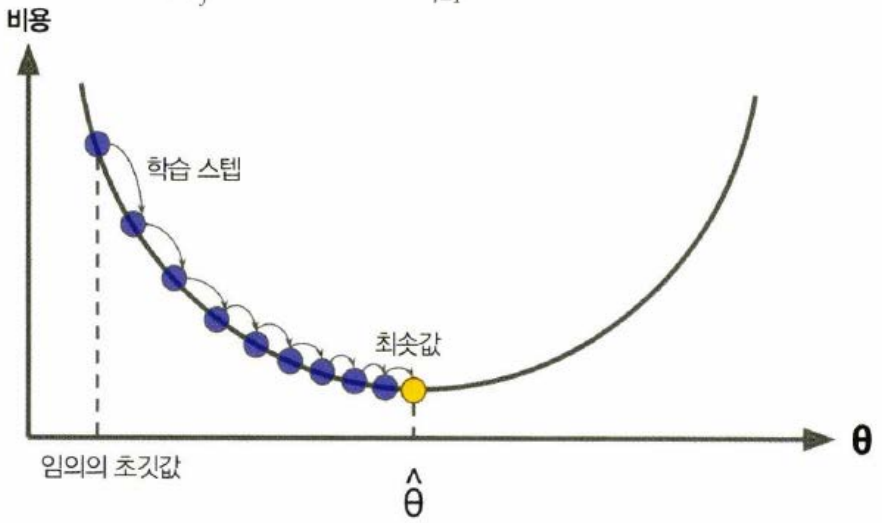
# 회귀 분석

- 최적화(경사 하강법)
  - 가장 일반적인 최적화 알고리즘: (Gradient Descent)
  - 손실함수를 계수에 관한 그래프로 그렸을 때 최소값으로 빨리 도달하기 위해서는 현재 위치에서의 기울기(미분 값)에 비례하여 반대방향으로 이동하는 방식
- 경사 하강법 특징
  - 경사 하강법을 적용하려면 특성 변수들을 모두 동일한 방식으로 스케일링해야 한다.
  - 특성 값마다 크기의 편차가 크면 특정 변수에 너무 종속되어 동작할 수 있고 이로 인해 수렴속도가 직선이 되지 않고 오래 걸릴 수가 있다.

$$W_i = W_{i-1} - \eta Grad(i)$$

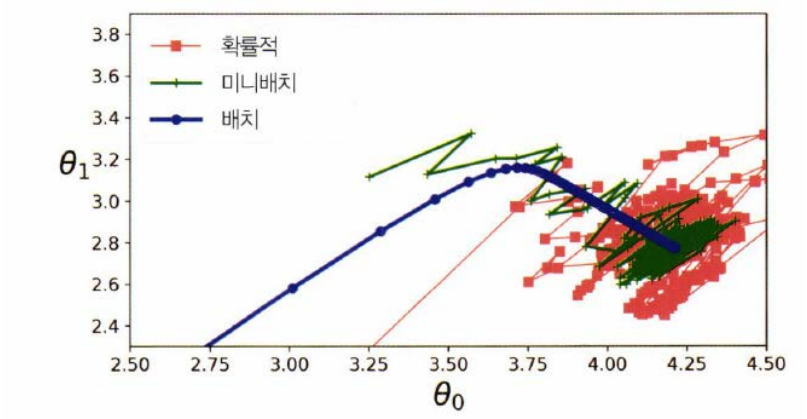
$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} \mathrm{MSE}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^{m} \left( \boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}^{(i)} - y^{(i)} \right) x_j^{(i)}$$



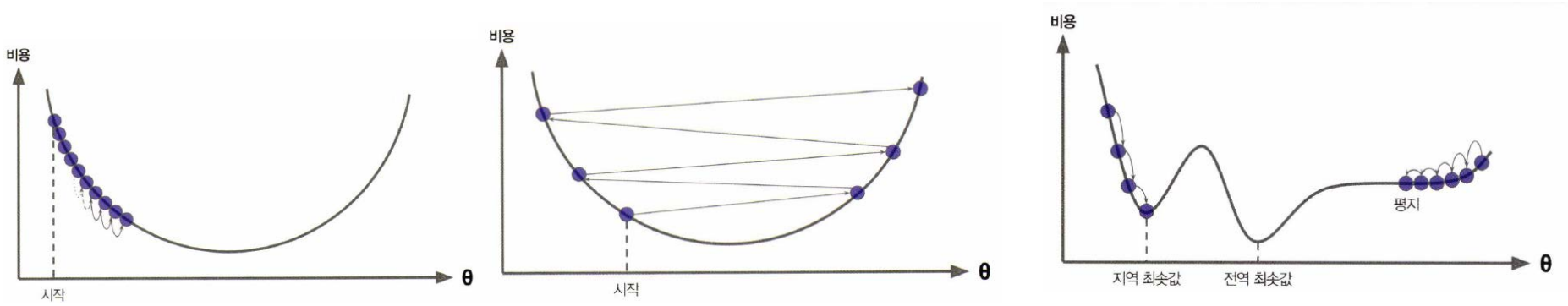
# 회귀 분석

- 경사 하강법 종류
  - 배치(Batch) GD
    - 일반적으로 배치 GD방식을 많이 사용하는데, 적절한 크기의 배치단위로 입력 신호를 나누어 경사 하강법을 적용하는 방식임
  - SGD (확률적 경사 하강법)
    - 한 번에 한 샘플씩 랜덤하게 골라서 훈련에 사용하는 방법이다.
    - 즉 샘플을 하나만 보고 계수를 조정함
    - 계산량이 적어 동작속도가 빠르고, 랜덤한 방향으로 학습을 하므로 전역 최소치를 가능성이 높아짐
    - 매 샘플이 너무 랜덤하여 방향성을 잃고 수렴하는데 시간이 오래 걸릴 가능성도 있음



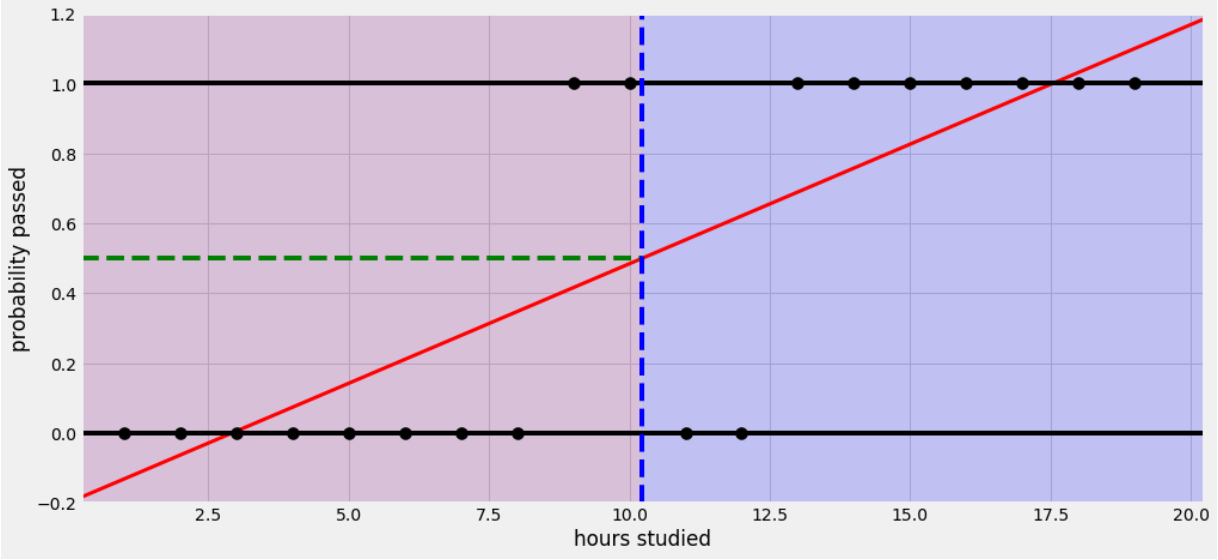
# 회귀 분석

- 학습률
  - 계수를 업데이트 하는 속도를 조정하는 변수
  - 학습률이 너무 작으면 수렴하는데 시간이 오래 걸리지만 최저점에 도달했을 때 흔들림 없이 안정적인 값을 얻게 되고,
  - 학습률을 너무 크게 정하면 학습하는 속도는 빠르나 자칫하면 최저점으로 수렴하지 못하고 발산하거나 수렴하더라도 흔들리는 오차가 남아있을 수 있음
- 학습 스케줄(learning schedule) 기법
  - 초기에는 학습률을 크게 정하고 (학습률을 빠르게 하고) 오차가 줄어들면 학습률을 줄여서 안정상태(steady state)의 오차를 줄이는 방법



# 회귀 분석

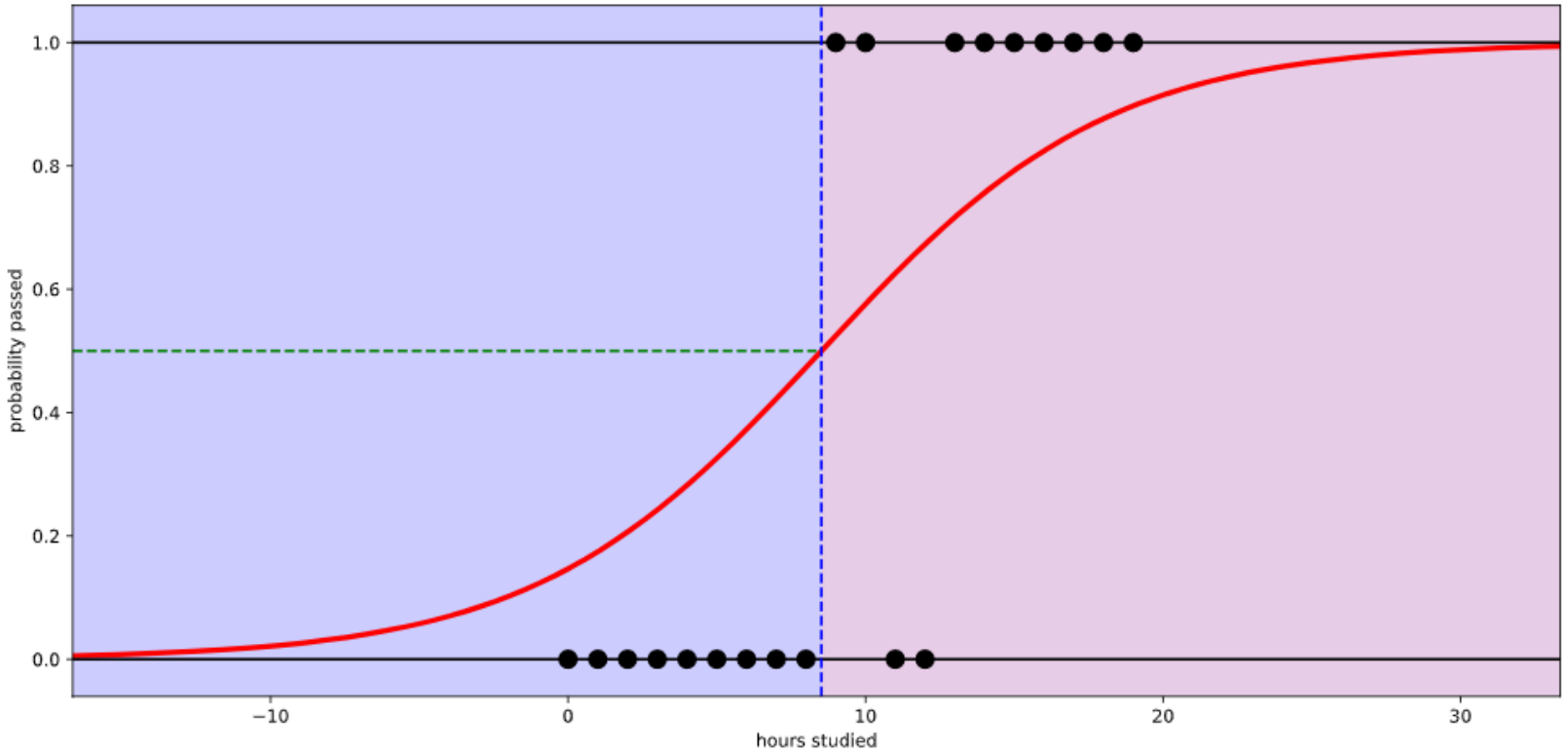
- 로지스틱 회귀
  - 임의의 범위를 갖는 값으로부터 0과 1사이의 값을 예측하거나 이진 분류에 사용하는 알고리즘임
  - 로지스틱 회귀분석은 보통 독립 변수와 종속 변수의 관계를 S형 커브로 매핑함(선형 회귀분석 사용이  불가한 경우)
  - 신용도 판단, 연간 구매량 기준 우수 고객 여부 판단, 평가 지표 기준 합격 여부 판단, 건강 지표에 따른 건강 여부, 팀의 승리/패배 여부 예측 등 여러 경우에 사용함
- 공부시간과 합격 여부




https://hleecaster.com/ml-logistic-regression-concept/

# 회귀 분석

- 로지스틱 회귀
  - 데이터가 특정 범주에 속할 확률을 예측하는 단계
  - 모든 속성(feature)들의 계수(coefficient)와 절편(intercept)을 0으로 초기화
  - 각 속성들의 값(value)에 계수(coefficient)를 곱해서 log-odds를 구함
  - Log-odds를 sigmoid 함수에 넣어서 [0,1] 범위의 확률을 구함



# 회귀 분석

- 다항 로지스틱 회귀(소프트맥스 회귀)
  - 앞에서는 이진 분류, 즉 합격/불합격 등 두 개의 레이블을 가진 경우에 로지스틱 회귀를 사용하는 예를 소개했음
  - 그런데 2개가 아니라 3개 이상의 클래스 중에 하나를 예측해야 하는 경우는 다항 로지스틱 회귀(multinomial logistic regression)를 이용함
  - 소프트맥스 (softmax) 함수를 사용함
    - k : 범주의 수
    - s(x) : 샘플 x에 대한 각 범주의 점수를 담고 있는 벡터
    - σ(s(x))k : 이 샘플이 범주 k에 속할 확률

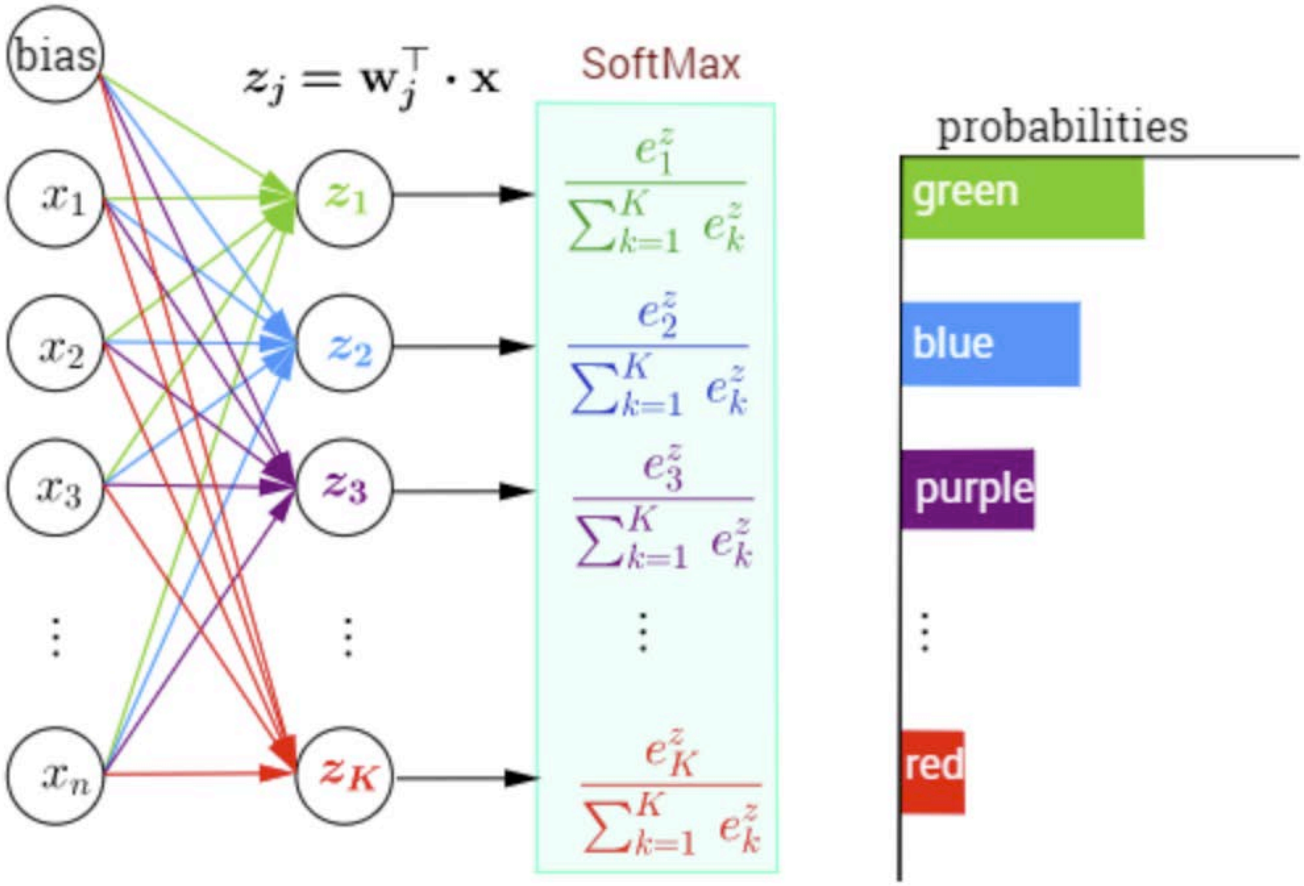
$$s_k(\mathbf{x}) = (\boldsymbol{\theta}^{(k)})^T \mathbf{x} \qquad \hat{p}_k = \sigma(\mathbf{s}(\mathbf{x}))_k = \frac{\exp\left(s_k(\mathbf{x})\right)}{\sum_{j=1}^{K} \exp\left(s_j(\mathbf{x})\right)}$$

  - Argmax
    - 이 연산은 함수를 최대화하는 변수의 값을 반환한다(numpy에도 비슷한 함수가 있는데 array에서 최댓값을 가지는 원소의 index를 반환)

$$\hat{y} = \underset{k}{\operatorname{argmax}}\, \sigma(\mathbf{s}(\mathbf{x}))_k = \underset{k}{\operatorname{argmax}}\, s_k(\mathbf{x}) = \underset{k}{\operatorname{argmax}}\, \left((\boldsymbol{\theta}^{(k)})^T \mathbf{x}\right)$$

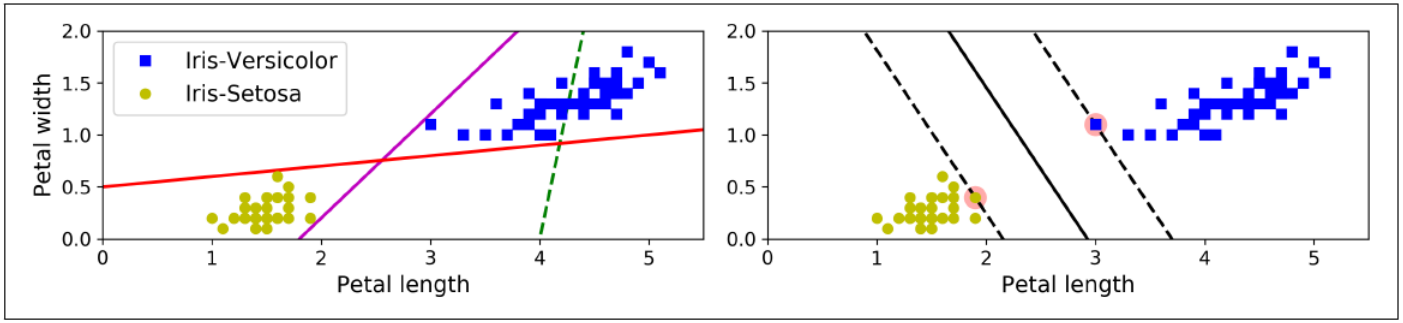
# 회귀 분석

- 소프트맥스


bias
$x_1$
$x_2$
$x_3$
$x_n$
$z_j = \mathbf{w}_j^\top \cdot \mathbf{x}$
$z_1$
$z_2$
$z_3$
$z_K$
SoftMax
$\frac{e_1^z}{\sum_{k=1}^K e_k^z}$
$\frac{e_2^z}{\sum_{k=1}^K e_k^z}$
$\frac{e_3^z}{\sum_{k=1}^K e_k^z}$
$\frac{e_K^z}{\sum_{k=1}^K e_k^z}$
probabilities
green
blue
purple
red

# 회귀 분석

- 서포트 벡터 머신(SVM)
  - SVM은 비선형, 선형 분류, 회귀, 이상치 탐색을 하는데 사용할 수 있는 강력한 ML 모델 중 하나
  - SVM은 특히 복잡한 문제에 잘 맞으며 작거나 중간 크기의 데이터 셋에 적합
- 선형 SVM(라지 마진 분류)



# 회귀 분석

- 서포트 벡터 머신(SVM)
  - 소프트 마진 분류
    - 모든 샘플이 마진 바깥쪽에 올바르게 분류되어 있는 경우를 **하드마진 분류**
      - **데이터가 선형적으로 구분되어야 제대로 동작**
      - **이상치에 민감**
    - 도로의 폭을 가능한 넓게 유지하는 것과 마진 오류 사이의 적절한 균형을 찾는 **소프트 마진 분류**