# 교차검증

학습(training) 데이터 일부를 검증(validation) 데이터로 사용하는 방법을 홀드아웃(Hold-out) 교차 검증이라고 부른다. 검증 데이터는 모델 학습에 사용되지 않은 데이터이므로 모델의 일반화 성능을 평가하는데 사용한다. 결과적으로 테스트 데이터에 대한 예측력을 높일 수 있다.



사이킷런의 train\_test\_split 메소드를 사용하여 기존 학습 데이터 중에서 30%를 검증데이터(X\_ val, y\_val)로 분리하고, 나머지 70%를 훈련용 데이터(X\_tr, y\_tr)로 분할한다.

Tip shuffle 옵션을 True로 설정하면 데이터를 랜덤하게 섞은 다음 분리 추출하게 된다. 예측 모델이 데이터 순서 와 무관하게 일반화된 성능을 갖는지 확인할 수 있다.

랜덤 포레스트 모델에 훈련 데이터(X\_tr, y\_tr)를 입력하여 학습하고, 검증데이터(X\_val, y\_val)를 사용하여 모델의 성능을 평가한다. 검증 정확도가 훈련정확도보다 상당히 낮기 때문에 훈련 데이터에 과대적합이 발생되었다고 볼 수있다. 즉, 새로운 데이터에 대한 성능이 떨어진다.

```
[41] # 對合
   rfc = RandomForestClassifier(max_depth=3, random_state=20)
   rfc.fit(X_tr, y_tr)
    #:01年
    y_tr_pred = rfc_predict(X_tr)
   y_val_pred = rfc.predict(X_val)
   非对竞
    tr_acc = accuracy_score(y_tr, y_tr_pred)
    val_acc = accuracy_score(y_val, y_val_pred)
    print(Train Accuracy:%41" % tr_acc)
    print('Validation Accuracy: % 41" % val_acc)
Train Accuracy:0.9880
    Validation Accuracy:0,9167
```

```
[42] # 테스트 데이터 예측 및 평가

y_test_pred = rfc.predict(x_test)

test_acc = accuracy_score(y_test, y_test_pred)

print(Test Accuracy:% 41" % test_acc)

Test Accuracy:0,9000
```

테스트 데이터(X\_test)를 predict 메소드에 입력하여 예측한다. 테스트 정확도가 0.9000으로 검증 정확도보다 낮은 수준이다. 훈련 데이터에 과대적합하여 새로운 데이터에 대한 예측력 또한 낮은 편이다.

홀드아웃 검증에서는 학습 데이터를 훈련용과 검증용으로 한번 분할하여 모델 성능을 검증한다. K-fold 교차 검증은 홀드아웃 방법을 여러 번 반복하는 방법이다.



랜덤 포레스트 모델을 K-fold 교차 검증으로 평가한다.

```
[44] # 훈련용 데이터와 검증용 데이터의 행 인덱스를 각 Fold별로 구분하여 생성

val_scores = []

num_fold = 1

for tr_idx, val_idx in kfold.split(X_train, y_train):

# 훈련용 데이터와 검증용 데이터를 행 인덱스 기준으로 추출

X_tr, X_val = X_train.iloc[tr_idx, :] X_train.iloc[val_idx, :]

y_tr, y_val = y_train.iloc[tr_idx], y_train.iloc[val_idx]

# 학습

rfc = RandomForestClassifier(max_depth=5, random_state=20)

rfc.fit(X_tr, y_tr)
```

```
# 검증
      y_val_pred = rfc.predict(X_val)
      val_acc = accuracy_score(y_val, y_val_pred)
       print(%d Fold Accuracy:%41 % (num_fold, val_acc))
      val_scores.append(val_acc)
       num_fold += 1
1 Fold Accuracy:0,8750
   2 Fold Accuracy: 1,0000
   3 Fold Accuracy: 0,9167
   4 Fold Accuracy:0,9583
   5 Fold Accuracy:0,9565
```

5개 폴드의 검증 정확도를 평균한다.

```
[45] # 평균 Accuracy 계산

import numpy as np

mean_score = np.mean(val_scores)

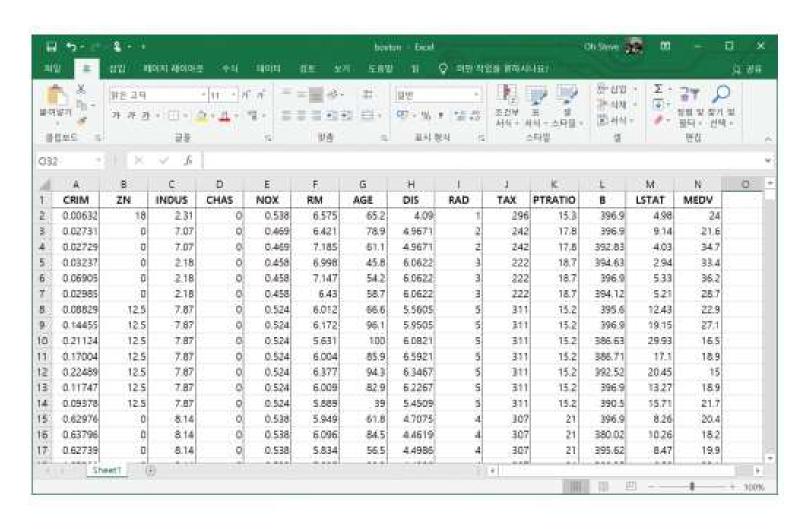
print("평균 검증 Accuraccy:", np.round(mean_score, 4))

[화 평균 검증 Accuraccy:0,9413
```

회귀(Regression)

보스턴 주택 가격 예측

14개의 변수(열:column)로 구성된다. 각 열은 주택의 속성을 나타내는 피처(feature)를 말하고, 각 행은 개별 주택에 대한 데이터의 집합(레코드)을 나타낸다.



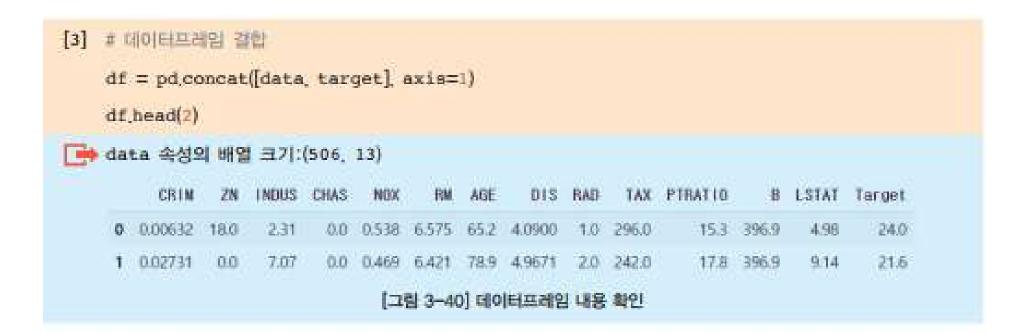
마지막 MEDV 속성이 주택 가격을 나타내며 회귀 모델을 설계할 때 최종 예측 대상인 목표 변수가 된다.

변수	설명		
CRIM	해당 지역의 1인당 범죄 발생률		
ZN	면적 25,000평방피트를 넘는 주백용 토지의 비율		
INDUS	해당 지역의 비소매 상업 지역 비율		
CHAS	해당 부지의 찰스강 인접 여부(인접한 경우 1, 그렇지 않은 경우 1		
NOX	일산화질소 농도		
RM	(거주 목적의)방의 개수		
AGE	1940년 이전에 건축된 자가 주택의 비율		
DIS	보스턴의 5대 고용 지역까지의 거리		
RAD	고속도로 접근성		
TAX	재산세		
PTRATIO	교사-학생 비율		
В	흑인 거주비율		
LSTAT	저소득층 비율		
MEDV	소유주 거주 주택의 주택 가격(중간값)		

```
(△△) 3.4_boston_regression.ipynb
[1] # 기본 라이브러리
    Import pandas as pd
   import numpy as np
   Import matplotlib.pyplot as plt
   import seaborn as sns
   # skleran 데이터셋에서 보스턴 주택 데이터셋 로당
   from sklearn Import datasets
   housing = datasets_load boston()
   # 뒤셔너리 형태이므로 key 값 확인
   housing keys()
dict_keys(['data', 'target', 'feature_names', 'DESCR', 'filename'])
```

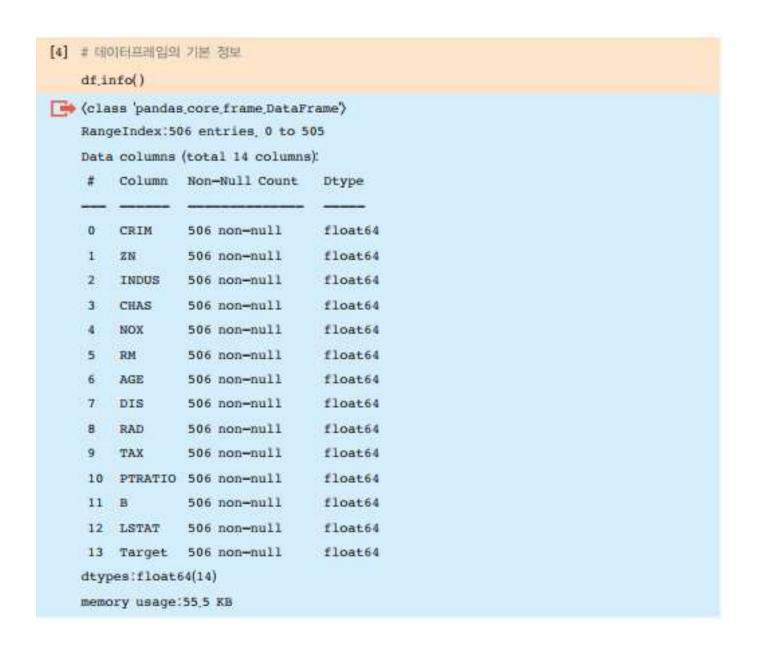
housing 데이터의 'data' 키를 이용하여 피처(설명 변수) 데이터를 가져와 데이터프레임으로 변환 한다.

13개 설명 변수가 담긴 data 데이터프레임과 목표 변수 데이터를 갖는 target 데이터프레임을 결 합한다.



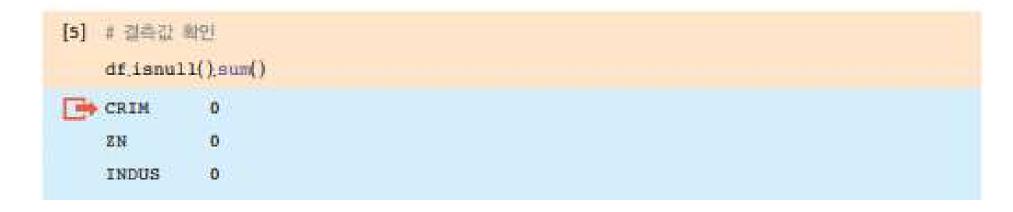
## 데이터 탐색 - 기본정보

info 함수를 사용하여 데이터프레임의 기본 정보를 확인한다.



# 데이터 탐색 - 결측값 확인

데이터프레임 각 열의 결측값(missing value) 개수를 확인한다.



변수 간의 상관 계수를 구하고, 시각화 분석한다.

```
[6] # 성판 관계 행명

df_corr = df,corr()

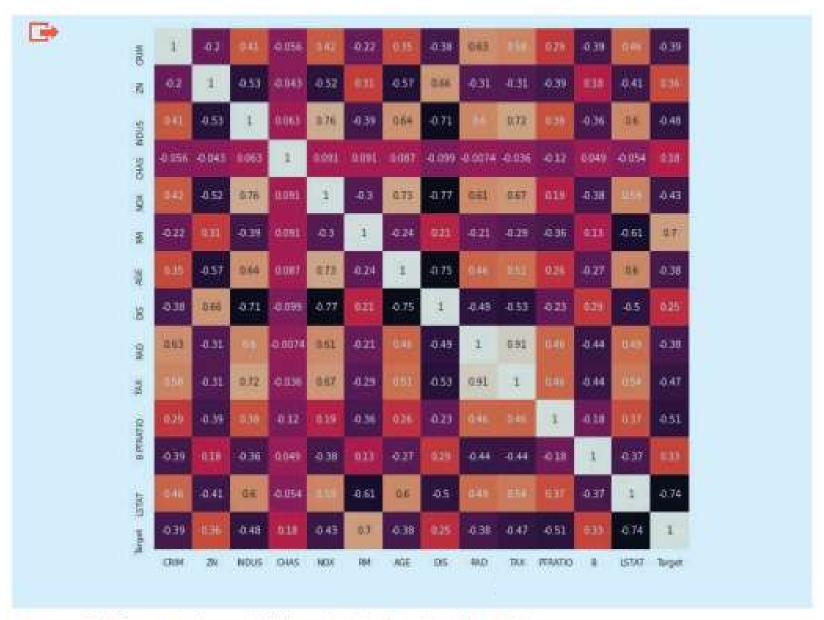
# 히토맵 그라기

plt,figure(figsize=(10, 10))

sns.set(font_scale=0.8)

sns.heatmap(df_corr, annot=True, cbar=False);

plt.show()
```

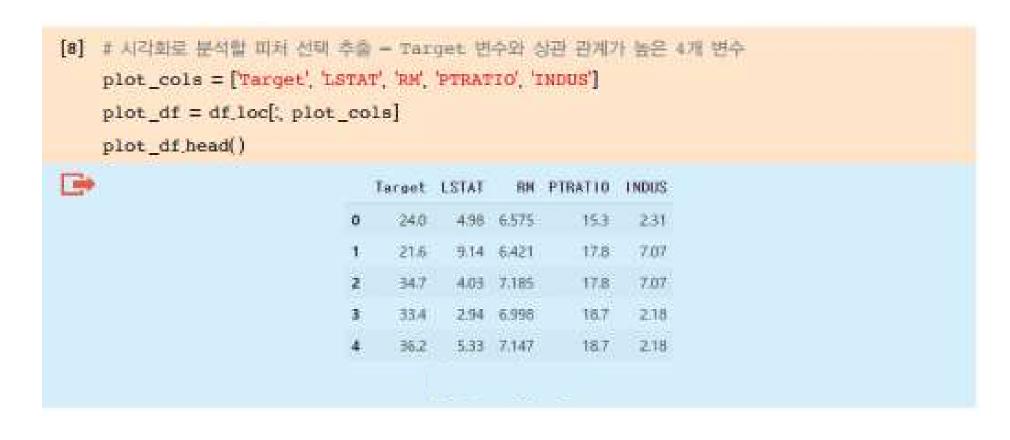


Tip cbar 옵션을 True로 바꾸고 실행해 보면 색상표가 오른쪽에 표시된다.

목표 변수인 Target 열과 상관 계수가 높은 순서대로 열 이름과 상관 계수를 출력한다.

```
[7] # 변수 간의 상관 관계 분석 - Target 변수와 상관 관계가 높은 순서대로 정리
    corr_order = df_corr()_loc['LSTAT', 'Target']_abs()_sort_values(ascending=False)
    corr_order
LSTAT
             0.737663
    RM
            0,695360
    PTRATIO 0,507787
            0.483725
    INDUS
    TAX
            0,468536
    NOX
            0.427321
    CRIM
            0 388305
    RAD
             0.381626
             0 376955
    AGE
             0.360445
    ZM
```

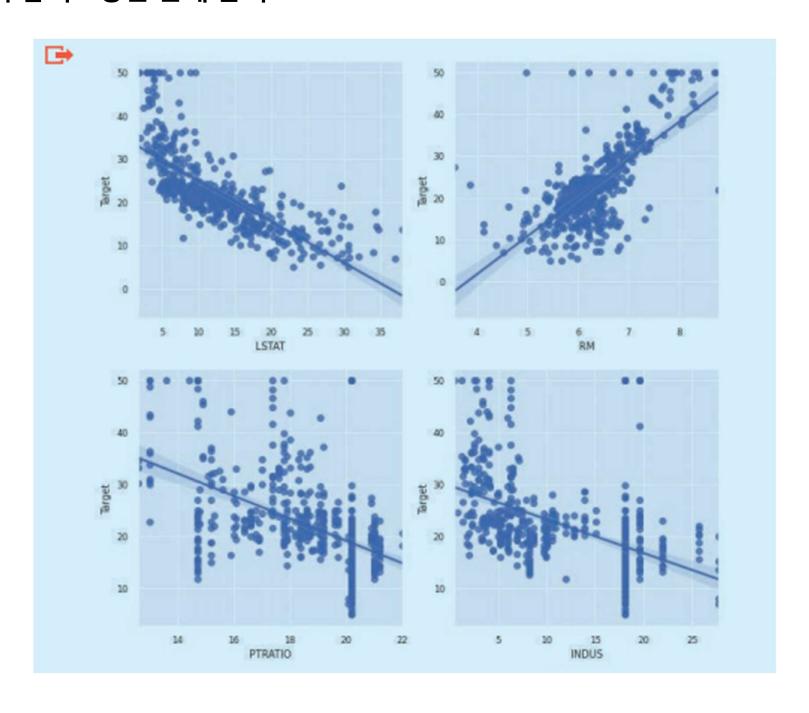
데이터 분포를 파악하는 좋은 방법은 그래프를 그려보는 것이다. Target 변수와 함께 상관 계수가 높은 순서대로 4개 피처(LSTAT, RM, PTRATIO, INDUS)를 추출한다.



시본 regplot 함수로 선형 회귀선을 산점도에 표시한다.

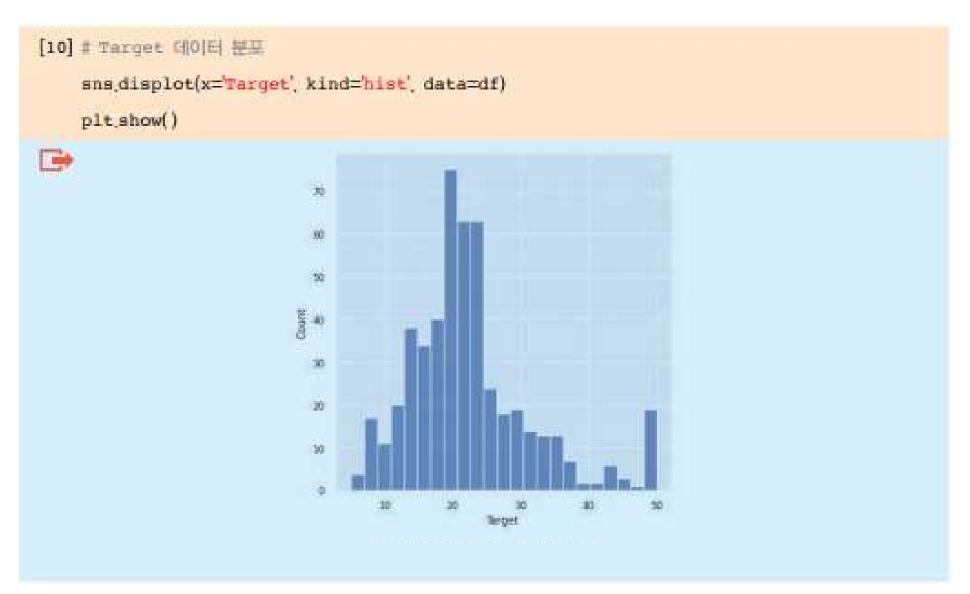
```
[9] # regplot으로 선형회귀선 표시
plt_figure(figsize=(10,10))

for idx, col in enumerate(plot_cols[1:]):
    ax1 = plt_subplot(2, 2, idx+1)
    sns_regplot(x=col, y=plot_cols[0], data=plot_df, ax=ax1)
plt_show()
```



## 데이터 탐색 – 목표 변수 (Target 열) – 주택 가격

Target 열의 주택 가격 데이터 분포를 displot 함수로 그린다. kind 속성을 'hist'로 지정하면 히스토그램을 그린다. 한편, 'kde'로 지정하면 KDE 밀도함수 그래프를 그린다.



#### 데이터 전처리 – 피처 스케일링

각 피처(열)의 데이터 크기에 따른 상대적 영향력의 차이를 제거하기 위하여 피처의 크기를 비슷 한 수준으로 맞춰주는 작업이 필요하다. 이 과정을 피처 스케일링(Feature Scaling)이라고 부른다.

사이킷런 MinMaxScaler를 활용한다.

#### 데이터 전처리 – 피처 스케일링

```
[11] # 사이킷런 MinMaxScaler 적용
     from sklearn preprocessing import MinMaxScaler
     scaler=MinMaxScaler()
     df scaled = df_iloc[: :-1]
     scaler_fit(df scaled)
     df scaled = scaler_transform(df scaled)
     # 스케일링 변환된 값을 데이터프레임에 반명
     df_iloc[: :-1] = df scaled[: :]
     df head()
CRUM
                       TRIDUS CHAS
                                                   MEE
                                                                  BAD
                                                                         TAX PIRATIO
                                                                                             LETAT Target
        D 0.000000 0.38 0.067815
                                                                                                     24.0
                              RB B314815 0577505 0641607 0269200 0.000000 0.200015 0.207244 1.000000
        1 0.000236 0.00 0.242302
                                                                                                     215
                              HB B172840 0.547998 0.782698 0.348982 0.043478 0.164962 0.553191
                                                                                                    147
        2 0.000236 0.00 0.242302
                              BB B172840 0.694388 0.599382 0.348962
        3 - 0.000299 - 0.00 - 0.063050
                                                                                                     13.4
        4 0.0000705 0.00 0.063050
                                                                                                     36.2
```

Tip loc 인덱서는 인덱스 이름을 사용하지만, iloc 인덱서는 원소의 순서를 나타내는 정수 인덱스(0, 1, 2, …)를 사용한다. 즉, iloc 인덱서는 행과 열의 위치 순서만 고려한다. loc 인덱서는 범위의 끝을 포함하지만, iloc 인덱서는 포함하지 않는다. 따라서 dt.iloc(:,:-1)은 가장 마지막 열인 Target을 제외한 나머지 13개 열을 추출한다.

#### 베이스라인 모델 – 선형 회귀

LinearRegression 클래스 객체를 생성 하고, fit 메소드에 학습 데이터(X\_train, y\_train)를 입력한다.

```
[13] # 선형 희귀 모형

from sklearn_linear_model import LinearRegression
lr = LinearRegression()
lr,fit(X_train, y_train)

print ('회귀계수(기울기):', np.round(lr,coef__ 1))
print ('상수형(절면):', np.round(lr,intercept_, 1))

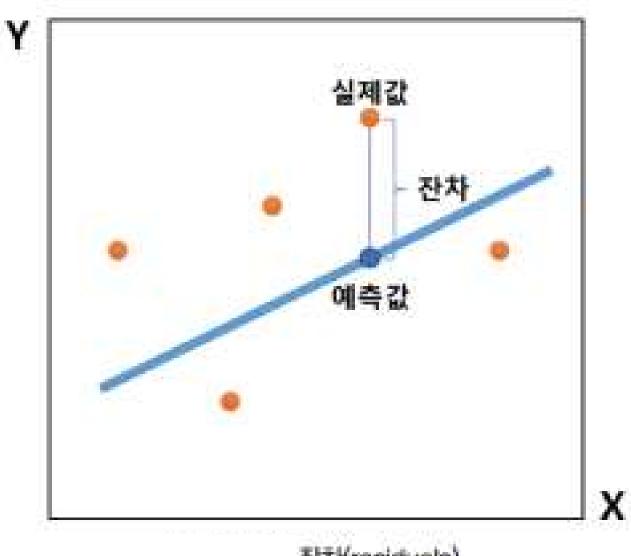
과귀계수(기울기):[-23.2 25.4]
상수형(절면):16.3
```

predict 함수에 테스트 데이터(X\_test)를 입력하면 목표 변수(Target)에 대한 예측값을 얻는다. 예측값을 y\_test\_pred에 저장하고, 실제값인 y\_test와 함께 산점도로 그려비교한다. 맷플롯립의 scatter 함수를 이용한다.

# 베이스라인 모델 – 선형 회귀

```
[14] # 메측
    y_test_pred = lr.predict(X_test)
    # 예측값 실제값의 분포
    plt_figure(figsize=(10, 5))
    plt.scatter(X_test[LSTAT], y_test, label='y_test')
   plt.scatter(X_test['LSTAT'], y_test_pred, c='r', label='y_pred')
    plt_legend(loc=best)
   plt.show()
X_test 검증 데이터에 대한 예측값(y_pred)과 실제값(y_test) 분포
```

실제값(정답)과 예측값의 차이를 잔차(residuals)라고 한다.



잔차(residuals)

회귀모델의 성능을 평가하는 지표는 RMSE 등이 있다.

구분	수식	설명
MAE(Mean Absolute Error)	$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_{i}-\hat{Y}_{i} $	실제값 $(Y_i)$ 과 예측값 $(Y_i)$ 의 차이, 즉 잔차의 절대값을 평균한 값
MSE(Mean Squared Error)	$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i-\hat{Y}_i)^2$	실제값 $(Y_i)$ 과 예측값 $(Y_i)$ 의 차이, 즉 잔차의 제곱을 평균한 값
RMSE(Root Mean Squared Error)	$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i-\bar{Y}_i)^2$	MSE의 제곱근

회귀 모형의 성능 평가 지표

mean\_squared\_error 함수로 계산한다.

```
from sklearn.metrics import mean_squared_error
  y_train_pred = lr.predict(X_train)

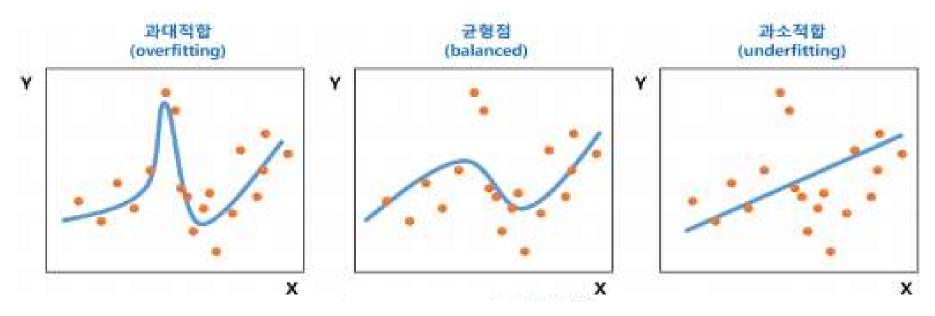
train_mse = mean_squared_error(y_train, y_train_pred)
  print(Train MSE:%.4f" % train_mse)

test_mse = mean_squared_error(y_test, y_test_pred)
  print(Test MSE:%.4f" % test_mse)

Train MSE:30,8042
  Test MSE:29,5065
```

cross\_val\_score 함수를 이용하여 K-Fold 교차 검증을 간단하게 수행할 수 있다.

과대적합(overfitting)은 모델이 학습에 사용한 데이터와 비슷한 데이터는 잘 예측하지만, 새로운 특성을 갖는 데이터에 대해서는 예측력이 떨어지는 현상을 말한다. 한편, 과소적합(underfitting)은 훈련 데이터의 특성을 파악하기 충분하지 않을 정도로 모델의 구성이 단순하거나 데이터 개수가 부족할 때 발생한다.



단항식이 아닌 다항식으로 선형 회귀식을 만들면 복잡한 구조를 갖게 되어 모델의 예측력을 높일 수 있다.

```
[17] # 2차 다항식 변환

from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures

pf = PolynomialFeatures(degree=2)

X_train_poly = pf.fit_transform(X_train)

print('원본 학습 데이터셋:', X_train_shape)

print('2차 다항식 변환 데이터셋:', X_train_poly.shape)

원본 학습 데이터셋:(404, 2)

2차 다항식 변환 데이터셋:(404, 6)
```

2차식으로 변환된 데이터셋을 선형 회귀 모델에 입력하여 학습한다. 1차항 모델보다 성능이 좋은 편이다.

```
[18] # 2차 다양식 변환 데이터셋으로 선형 화귀 모형 학습
   lr = LinearRegression()
   lr.fit(X_train_poly, y_train)
    # 테스트 데이터에 대한 예측 및 평가
   y_train_pred = lr.predict(%_train_poly)
    train_mse = mean_squared_error(y_train_y_train_pred)
    print(Train MSE:% 41" % train_mse)
   X_test_poly = pf.fit_transform(X_test)
   y_test_pred = lr.predict(X_test_poly)
    test_mse = mean_squared_error(y_test, y_test_pred)
    print(Test MSE:%41" % test_mse)
my Train MSE:21,5463
    Test MSE:16,7954
```

15차 다항식으로 변환해 보자. Test MSE는 급격하게 증가한다. 과대적합이 발생한 것으로 볼 수 있다.

```
[19] # 15차 다항식 변환 데이터셋으로 선형 회귀 모형 학습
   pf = PolynomialFeatures(degree=15)
    X_train_poly = pf.fit_transform(X_train)
   lr = LinearRegression()
    lr.fit(X_train_poly, y_train)
   # 테스트 데이터에 대한 예측 및 평가
   y_train_pred = lr.predict(X_train_poly)
    train_mse = mean_squared_error(y_train_y_train_pred)
    print("Train MSE: %4f" % train_mse)
    X_test_poly = pf_fit_transform(X_test)
    y_test_pred = lr.predict(X_test_poly)
    test_mse = mean_squared_error(y_test, y_test_pred)
    print(Test MSE: % 41" % test_mse)
Train MSE:11,1589
    Test MSE:108504063264728,0625
```

다항식 차수에 따른 차이를 비교한다.

```
[20] # 다항식 차수에 따른 모델 적합도 변화
    plt_figure(figsize=(15.5))
    for n. deg in enumerate([1, 2, 15]):
       ax1 = plt_subplot(1, 3, n+1)
       # plt.axis(off')
       # degree법 다항 회귀 모형 적용
       pf = PolynomialFeatures(degree=deg)
       X_train_poly = pf.fit_transform(X_train_loc[: [LSTAT]])
       X_test_poly = pf.fit_transform(X_test.loc[: [LSTAT]])
       1r = LinearRegression()
       1r.fit(X_train_poly, y_train)
       y_test_pred = lr_predict(X_test_poly)
```

```
# 실제라 분포
    plt_scatter(X_test_loc[: [LSTAT']] y_test_label='Targets')
    # 애측감 분포
    plt_scatter(X_test_loc[: ['LSTAT']], y_test_pred, label='Predictions')
    # 제목 莊人
    plt_title("Degree %d" % deg)
    # 범례 표시
    plt_legend()
 plt_show()
          Depres 1
                                         Degree 2
                                                                        Degree 25
-15 -10 -03 00 03 1E 13 26 25
                                                              -15 -10 -05 00 05 10 15
                                   모델 복잡도에 따른 과소/과대적합
```

모델의 복잡도를 낮추면 과대적합을 억제할 수 있다. 모델을 설명하는 각 피처가모델의 예측 결과에 미치는 영향력을 가중치(회귀계수)로 표현하는데, 이런가중치들이 커지면 페널티를 부과 하여 가중치를 낮은 수준으로 유지한다.이처럼 모델의 구조가 복잡해지는 것을 억제하는 방법을 규제(Regularization)라고부른다.

모델의 구조를 간결하게 하는 방법 중 L2/L1 규제가 있다. L2 규제는 모델의 '가중치의 제곱합' 에 페널티를 부과하고, L1 규제는 '가중치 절대값의 합'에 페널티를 부과하여 모델의 복잡도를 낮출 수 있다.

Ridge 모델은 선형회귀 모형에 L2 규제를 구현한 알고리즘이다. 알파(alpha) 값으로 L2 규제 강도를 조정한다. 알파 값을 증가시키면 규제 강도가 커지고 모델의 가중치를 감소시킨다.

```
[21] # Bldge(L2 규제)
    from sklearn,linear_model Import Ridge
    rdg = Ridge(alpha=2.5)
    rdg.fit(X_train_poly, y_train)
    y_train_pred = rdg.predict(X_train_poly)
    train_mse = mean_squared_error(y_train_y_train_pred)
    print(Train MSE:%41" % train_mse)
    y_test_pred = rdgpredict(X test_poly)
    test_mse = mean_squared_error(y_test, y_test_pred)
    print('Test MSE: %,41" % test_mse)
 Train MSE:35,8300
    Test MSE:41,8125
```

L1 규제를 적용한 Lasso 모델을 학습한다.

```
[22] # Lasso(L1 규제)
    from sklearn linear model import Lasso
    las = Lasso(alpha=0.05)
    las.fit(X_train_poly, y_train)
    y train_pred = las_predict(X_train_poly)
    train_mse = mean_squared_error(y_train_y_train_pred)
    print(Train MSE:% 4t" % train_mse)
    y_test_pred = las.predict(X_test_poly)
    test_mse = mean_squared_error(y_test_y_test_pred)
    print(Test MSE: %,41" % test_mse)
 Train MSE:32,3204
    Test MSE:37,7103
```

ElasticNet 알고리즘은 L2 규제와 L1 규제를 모두 적용한 선형 회귀 모델이다. ElasticNet의 알파 (alpha) 값은 L2 규제 강도와 L1 규제 강도의 합이다. I1\_ratio 옵션은 L1 규제 강도의 상대적 비 율을 조정한다.

```
ela = ElasticNet(alpha=0.01, 11_ratio=0.7)
  elafit(X train poly, y train)
  y train pred = elapredict(X train poly)
  train_mse = mean_squared_error(y_train_y_train_pred)
  print(Train MSE:% 41" % train_mse)
  y_test_pred = elapredict(X_test_poly)
  test_mse = mean_squared_error(y_test, y_test_pred)
  print(Test MSE:% 41" % test mse)
Train MSE:33 7390
  Test MSE:39,4738
```

#### 트리 기반 모델 – 비선형 회귀 : 의사결정나무

DecisionTreeRegressor는 의사결정나무 알고리즘으로 회귀 모형을 구현한 것이다.

```
[35] # 의사결정나무
    from sklearn tree Import DecisionTreeRegressor
    dtr = DecisionTreeRegressor(max_depth=3, random_state=12)
   dtr.fit(X_train, y_train)
   y train pred = dtr.predict(X train)
    train_mse = mean_squared_error(y_train, y_train_pred)
   print(Train MSE:%4f" % train_mse)
   y test pred = dtr.predict(X test)
    test_mse = mean_squared_error(y_test, y_test_pred)
   print('Test MSE: % 41" % test_mse)
Train MSE:18,8029
    Test MSE:17,9065
```

## 트리 기반 모델 – 비선형 회귀 : 램덤 포레스트

하나의 트리를 사용하는 의사결정나무에 비하여, 여러 개의 트리 모델이 예측한 값을 종합하기 때문에 전체 예측력을 높일 수 있다.

```
[36] # 팬텀 포레스트

from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor

rfr = RandomForestRegressor(max_depth=3, random_state=12)

rfr.fit(X_train, y_train)
```

## 트리 기반 모델 – 비선형 회귀 : 램덤 포레스트

```
[36] # 랜덤 모레스트
    from sklearn ensemble import RandomForestRegressor
    rfr = RandomForestRegressor(max_depth=3_random_state=12)
    rfr.fit(X_train, y_train)
    y_train_pred = rfr.predict(X_train)
    train_mse = mean_squared_error(y_train, y_train_pred)
    print(Train MSE:%4f" % train_mse)
    y_test_pred = rfr_predict(X_test)
    test_mse = mean_squared_error(y_test, y_test_pred)
    print(Test MSE: % 11" % test_mse)
Train MSE:16,0201
    Test MSE:17,7751
```

#### 트리 기반 모델 – 비선형 회귀: XGBoost

부스팅 알고리즘인 XGBRegressor를 적용한다.

```
[37] # MGBoost
    from xgboost import XGBRegressor
    xgbr = XGBRegressor(objective='reg'squarederror', max_depth=3, random_state=12)
    xgbr.fit(X_train, y_train)
    y_train_pred = xgbr.predict(X_train)
    train_mse = mean_squared_error(y_train, y_train_pred)
    print('Train MSE: % 41" % train_mse)
    y_test_pred = xgbr.predict(X_test)
    test_mse = mean_squared_error(y_test_y_test_pred)
    print(Test MSE: % 41" % test_mse)
Train MSE:8,2326
    Test MSE: 18,0318
```

Tip 데이터의 개수가 작기 때문에 XGBoost와 같이 복잡도가 높은 알고리즘이 쉽게 과대적합될 위험성이 있다. XGBoost 알고리즘은 데이터의 개수가 비교적 많고, 모델 예측의 난이도가 높은 경우 탁월한 성능을 보인다.