

Classification(분류) - Part 1 -

주요내용

- MNIST 데이터셋
- 이진 분류기 훈련
- 분류기 성능 측정



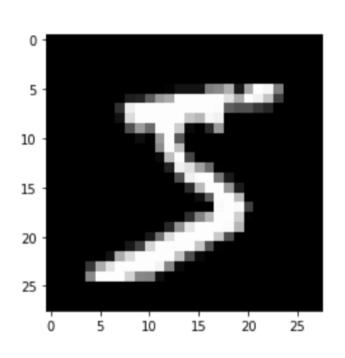
MNIST 데이터셋

- 미국 고등학생과 인구조사국 직원들이 손으로 쓴 70,000개의 숫자 이미지로 구성 된 데이터셋
 - 0부터 9까지 숫자들에 대한 손글씨 이미지
- 각 이미지는 28x28=784개의 픽셀들로 구성된 이미지 데이터
- 각 이미지는 2차원 배열이 아닌 길이가 784인 1차원 배열로 제공
- (이미지 데이터셋의 shape) = (70000, 784)
- 레이블: 총 70,000개의 사진 샘플들 각각이 어떤 숫자를 나타내는지에 대한 레이블 링이 되어 있음
- 레이블 데이터셋의 shape은 (70000,)



MNIST 데이터셋

■ 숫자 5에 대한 이미지 샘플 & MNIST 데이터셋에 처음 100개 이미지들







문제 정의

- 지도학습: 각 이미지가 어떤 숫자를 나타내는지에 대한 레이블 지정되어 있음
- 분류: 주어진 이미지 데이터가 0부터 9까지 중 어떤 숫자에 해당하는지를 예측
 - 여기서는 0~9까지의 숫자 각각이 하나의 클래스에 해당
 - 주어진 이미지 샘플이 총 10개 클래스 중 어느 클래스에 해당하는지를 분류하는 문제이며 이와 같은 문제를 다중 클래스 분류(multiclass classification) 또는 다항 분류(multinomial classification)라고 부름
- 배치 또는 온라인 학습: 둘 다 가능
 - 확률적 경사하강법(stochastic gradient descent, SGD) 분류기: 배치와 온라인 학습 모두 가능
 - 랜덤 포레스트 분류기: 배치 학습



훈련셋과 테스트셋 나누기

- MNIST 데이터셋은 이미 6:1의 비율로 훈련셋과 테스트셋으로 분류되어 있음
 - 훈련셋
 - 훈련용 이미지 데이터셋(X_train): 첫 60000개 이미지
 - 훈련용 레이블(y train): 첫 60000개 이미지에 대한 레이블
 - 테스트셋
 - 테스트용 이미지 데이터셋(X_test): 나머지 10000개 이미지
 - 테스트용 레이블(y_test): 나머지 10000개 이미지에 대한 레이블

```
X \text{ train, } X \text{ test, } y \text{ train, } y \text{ test } = X[:60000], X[60000:], y[:60000], y[60000:]
```

- 모든 샘플들이 랜덤하게 잘 섞여 있는 상태임





이진 분류기 훈련



숫자 5-감지기 (5-detector)

- 10개 클래스로 분류하는 다중 클래스 분류 모델을 훈련하기에 앞서 주어진 이미지 샘플이 숫자 5에 해당하는지 아닌지 여부를 판단하는 이진 분류기(binary classifier)를 훈련시키고자 함
- 이를 통해 분류기의 기본 훈련 과정과 성능 평가 방법을 알아보고자 함
- 각 이미지에 대한 레이블은 0 또는 1로 수정되어야 함
 - <mark>레이블 0:</mark> 해당 이미지가 5 이외의 숫자에 해당함을 의미하는 레이블
 - 레이블 1: 이미지가 숫자 5에 해당함을 의미하는 레이블 5 1; 0
- 훈련셋 레이블(y_train_5), 테스트셋 레이블(y_test_5)

```
y_train_5 = (y_train == '5')
y_test_5 = (y_test == '5')
```



이진 분류기로 SGD 분류기 활용

- SGD Classifier
 - 확률적 경사 하강법(stochastic gradient descent) 분류기라고 불림
 - 한번에 하나씩 훈련 샘플을 이용하여 학습한 후 파라미터를 조정
 - 매우 큰 데이터셋 처리에 효율적이며 온라인 학습에도 적합
 - 사이킷런의 SGDClassifier 클래스 활용
- SGDClassifier 객체의 fit() 메서드 호출을 통해 분류기 훈련
 - X_train: 훈련용 이미지 데이터셋, y_train_5: 훈련용 이미지에 대한 레이블(0 또는 1로 이루어짐) **from sklearn.linear_model import SGDClassifier**

```
sgd_clf = SGDClassifier(random_state=42)
sgd_clf.fit(X_train, y_train_5)
```

■ Predict() 메서드 호출을 통해 주어진 이미지가 0(숫자 5에 해당하지 않음) 또는 1(숫자 5에 해당) 중 어느 클래스에 해당하는지 예측

```
MYONGJI
```

```
>>> sgd_clf.predict([some_digit])
array([ True])
```

분류기 성능 측정

- 분류기 성능 평가는 회귀 모델 평가보다 고민할 점들이 많음
- 분류기 성능 측정 기준으로 다음 세가지가 많이 사용됨
 - 정확도(accuracy)
 - 정밀도(precision) / 재현율(recall)
 - ROC curve의 AUC



교차 검증을 사용한 정확도(accuracy) 측정

- k-fold 교차 검증(cross validation) 기법을 이용하여 SGD 분류기의 성능 평가
- 성능 평가 기준: <mark>정확도(accuracy)</mark>
 - accuracy = (number of correctly classified samples) / (total number of samples) → 간 단하게 말하면 분류기에 의해 올바르게 분류된 샘플들의 비율을 의미

■ 사이킷런의 cross_val_score() 함수 활용

```
>>> from sklearn.model_selection import cross_val_score
>>> cross_val_score(sgd_clf, X_train, y_train_5, cv=3, scoring="accuracy")
array([0.95035, 0.96035, 0.9604])
```

- 95%를 넘는 정확도를 보임



SGD 분류기의 정확도에 대한 고찰

from sklearn.dummy import DummyClassifier

■ 무조건 "5가 아님"으로 찍는 DummyClassifier 분류기를 생성하여 정확도 측정

```
dummy_clf = DummyClassifier()
dummy_clf.fit(X_train, y_train_5)
>>> cross_val_score(dummy_clf, X_train, y_train_5, cv=3, scoring="accuracy")
array([0.90965, 0.90965, 0.90965])
```

- 무조건 "5가 아님"으로 찍는 경우에도 90% 넘는 정확도를 보임
- 훈련셋의 10%만 숫자 5 이미지이고 나머지 90%는 5가 아닌 이미지들이기 때문
- 이처럼 훈련셋 샘플들의 클래스 불균형이 심한 경우에는 분류기의 성능 측정 지표로 정확도 (accuracy)는 부적합 함

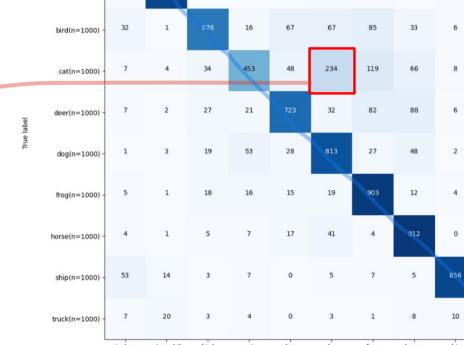
6 10 5 가



오차 행렬(Confusion Matrix)

- 클래스 별 예측 결과를 정리한 행렬
- 행은 실제 클래스를(true label), 열은 분류기에 의해 예측된 클래스(predicted label)를 의미
 - (오른쪽 오차 행렬의 cat 행에 대한 설명)
- E.g., 오른쪽 오차 행렬에서 cat에 해당하는 이미지 샘플을 dog으로 잘못 분류한 횟수를 알고 싶다면 (cat 행, dog 열)에 위치한 값을 확인

cat dog



airplane(n=1000)

automobile(n=1000)

Confusion Matrix

106

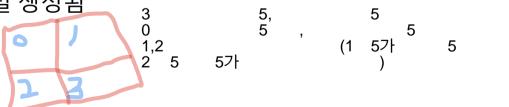
27

50



숫자5-감지기에 대한 오차 행렬

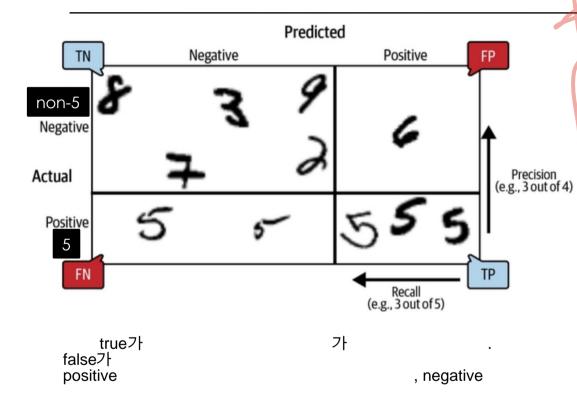
- cross_val_predict() 함수: cross_val_score() 함수와 마찬가지로 k-fold 교차 검증 수행하지만 성능 평가 점수 대신에 각 validation fold의 샘플들에 대해 분류기가 예측한 결과(y_train_pred)를 반환
- confusion_matrix() 함수: 타깃 클래스(y_train_5)와 예측된 클래스(y_train_pred) 정보를 이용하여 숫자5-감지기에 대한 오차 행렬 생성
- 결과적으로 2x2 크기의 오차 행렬 생성됨





숫자5-감지기에 대한 오차 행렬





- ▶ True Positive(TP): 실제 5인 이미지를 5로 맞게 예측한 경우
- False Positive(FP): 실제 non-5 이미지를 5로 틀리게 예측한 경우
 - True Negative(TN): 실제 non-5인 이미지를 non-5로 맞게 예측한 경우
 - False Negative(FN): 실제 5 이미지를 non-5 로 틀리게 예측한 경우
- 오차 행렬이 분류 결과에 대한 많은 정보를 제 공하지만 더 요약된 지표가 필요함
 - 정밀도(precision), 재현율(recall)





정밀도(Precision), 재현율(Recall)

* 앞서 살펴본 accuracy는 "정확도"로 번역됨



정밀도(Precision)

$$ext{precision} = rac{TP}{TP + FP}$$
ਾਮ

- **Positive 예측의 정확도**를 나타내는 지표:
 - 정밀도는 classifier가 positive(e.g., 숫자5 클래스)라고 예측한 인스턴스(샘플)들 중에서 실제 positive 인 인스턴스의 비율
- 분류기의 정밀도(precision)가 높다는 것은 주어진 instance를 classifier가 positive라고 예측하면 그 예측이 맞을(진짜 positive일) 확률이 높다는 의미
 - E.g., 정밀도가 높은 classifier가 숫자 5라고 예측한 이미지는 진짜 숫자 5 이미지일 확률이 높다는 의미
- 앞서 살펴본 SGD classifier의 정밀도: $\frac{3530}{3530+687} = 0.83708.$ >>> from sklearn.metrics import precision_score, recall_score
 >>> precision_score(y_train_5, y_train_pred) # == 3530 / (68
 0.8370879772350012

 >>> cm
 array([[53892, 3530]])



정밀도

- 정밀도 100%를 달성할 수 있는 간단한 방법
 - E.g., 기본적으로 항상 non-5로 예측하다가 정말로 숫자 5가 확실하다고 판단되는 이미지 샘플하나만 5로 예측 → FP=0 & TP=1 → Precision = 1 1/(0+1) 100 .
 - 하지만 이러한 분류기는 숫자 5인 이미지들 중 오직 하나만 숫자 5로 맞게 예측한 것이기 때문에 전혀 유용하지 않음
 - 결과적으로 정밀도만으로는 좋은 분류기를 가려낼 수 없으며, 따라서 정밀도를 보완할 수 있는 성능 지표가 추가로 필요함

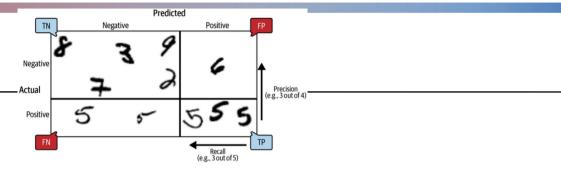
precision()가 ??? -> NO .



(100)

재현율(Recall)

$$ext{recall} = rac{TP}{TP + FN} \, _{ ext{(1)}} \, _{ ext{)}} \,$$



- Positive(e.g., 숫자5 클래스에 해당하는) 샘플에 대한 예측 정확도
 - 데이터셋에 포함된 모든 positive instance들 중에서 classifier가 positive라고 분류한 비율
 - E.g., 실제 숫자5에 해당하는 이미지 샘플들 중 분류기가 숫자5라고 맞게 예측한 비율
- 재현율(recall)이 높다는 것은 classifier가 positive instance를 놓치지 않고 잘 감 지해낸다는 의미
- SGD classifier의 재현율: $\frac{3530}{3530+1891} = 0.6511..$

>>> recall_score(y_train_5, y_train_pred)
0.6511713705958311



- 정밀도와 재현율의 harmonic mean
 - 서로 다른 종류의 두 분류기 모델의 성능을 하나의 metric으로 비교하고자 할 때 유용
- F₁ Score 계산식 예:

$$F_1 = rac{2}{rac{1}{ ext{precision} + rac{1}{ ext{recall}}} = 2 imes rac{ ext{precision} imes ext{recall}}{ ext{precision} + ext{recall}} = rac{TP}{TP + rac{FN + FP}{2}}$$

- 정밀도와 재현율이 모두 높아야 F₁ Score도 높게 나타나는 경향
- SGD classifier의 F₁ Score: >>> from sklearn.metrics import f1_score >>> f1_score(y_train_5, y_train_pred)
 0.7325171197343846
- F₁ Score 계산 시 정밀도와 재현율에 대한 가중치 설정
 - 위 계산식은 정밀도와 재현율을 동일한 중요도로 반영하여 F₁ Score 계산하는 경우
 - 경우에 따라서는 정밀도와 재현율 중 하나에 더 높은 가중치를 두어야 할 때도 있음



정밀도(Precision) vs 재현율(Recall)

- 모델 사용의 목적에 따라 정밀도와 재현율의 중요도가 상이할 수 있음
- 재현율이 보다 중요한 경우: e.g., 암 진단 분류기

19

- 정밀도: 암(즉, positive)으로 진단된 경우 중에 실제로 암인 경우의 비율. 암으로 진단한 경우에 대한 신뢰도/정확도를 의미.
- 재현율: 실제로 암인 케이스들 중에서 놓치지 않고 암으로 진단한 경우의 비율
- 일반적으로 이 경우에는 암인 케이스를 놓치지 않고 암으로 예측해내는 것이 중요함

가

- 정밀도가 보다 중요한 경우: e.g., 아이가 시청해도 되는 안전한 동영상 분류기
 - 정밀도: 분류기에 의해 안전하다고(positive 클래스에 해당) 판단된 동영상 중에서 실제로도 안 전한 동영상의 비율
 - 재현율: 실제로 안전한 동영상 중에서 분류기에 의해 안전하다고 예측된 영상 샘플들 비율
 - 이 경우에는 안전한 동영상으로 예측된 샘플 중에 실제로는 안전하지 않은 동영상이 포함되어 있을 경우 문제가 됨

가



정밀도와 재현율 간 Trade-off

- 정밀도와 재현율은 trade-off 관계임(상호 반비례 관계)
- E.g., 정밀도가 높아질 수록 재현율은 저하됨
- 예1: 아이가 시청해도 되는 안전한 동영상 분류기 _{1/(0+1)}
 - 정밀도를 높이기 위해서는 <u>확실하게 안전하다고 판단되는 영상만을 안전한 것으로 예측</u>해야함. 하지만 이렇게 되면 실제 안전한 동영상임에도 (작은 이유로) 안전하지 않다고 잘못 예측되는 비율이 증가하게 되며, 이는 재현율(recall) 저하를 의미한다.
- 예2: 암 진단 분류기
 - 재현율을 높이기 위해서는 조금이라도 암일 가능성이 있는 케이스를 보수적으로 암으로 진단 해야함. 하지만 이런 접근을 취할 경우 암으로 진단한 케이스 중에서 실제로는 암이 아닌 케이스의 비율이 높아질 수 있으며, 이는 정밀도(precision)가 떨어진다는 의미.

= 가 =



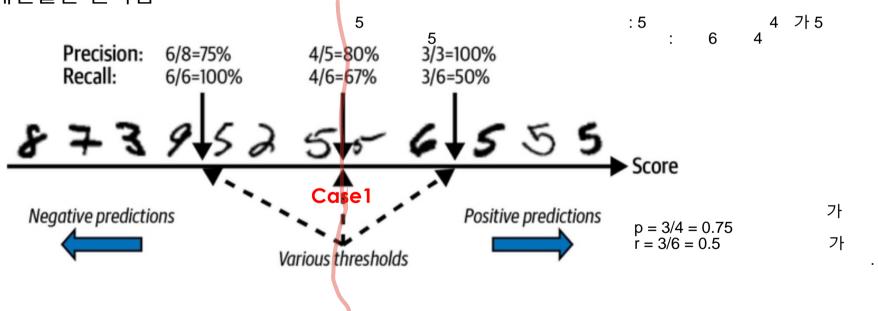
- 정밀도와 재현율 모두 높은 분류기는 이론적으로 불가능함
- 주어진 문제의 성격에 따라 요구되는 최소한의 정밀도/재현율 수준이 있을 것이고 그것을 충족시키는 분류기를 도출해야함
- 이를 위해서는 분류기가 주어진 인스턴스(샘플)의 클래스를 예측하는 기본 원리에 대한 이해가 필요



- SGD 분류기는 <mark>결정 함수(decision function)를 사용</mark>하여 **주어진 인스턴스의 클** 래스를 결정하기 위한 점수를 계산함
- 계산된 점수가 <mark>결정 임계값(decision threshold) 보다 크면</mark> positive 클래스(e.g., <u>숫자 5 클래스)로 예측</u>하고, <u>반대의 경우 negative 클래스(e.g., non-5)로 예측</u>함

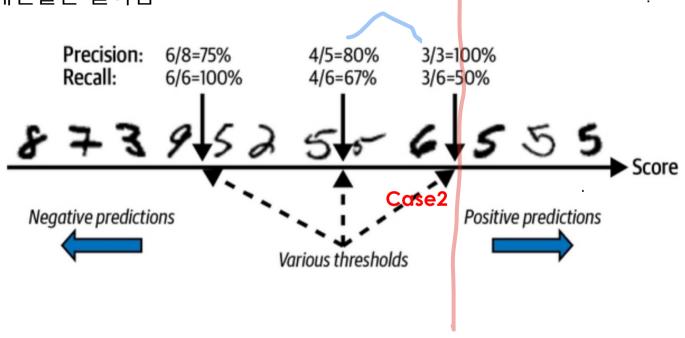


- 결정 임계값에 따른 분류기의 정밀도 및 재현율 변화 추이
 - E.g., 임계값을 높이면(5로 판단하는 기준을 더 까다롭게 한다는 의미로 이해) 정밀도는 높아지지만 재현율은 떨어짐



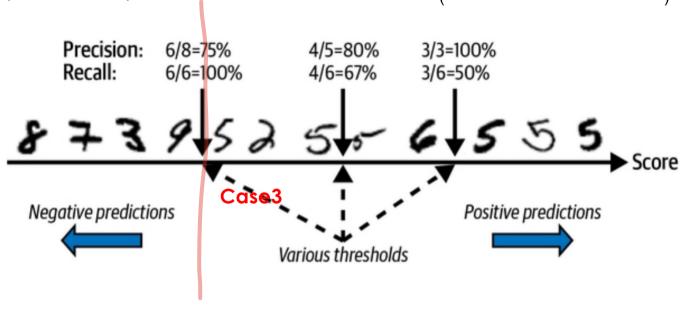


- 결정 임계값에 따른 분류기의 정밀도 및 재현율 변화 추이
 - E.g., 임계값을 높이면(5로 판단하는 기준을 더 까다롭게 한다는 의미로 이해) 정밀도는 높아지지만 재현율은 떨어짐





- 결정 임계값에 따른 분류기의 정밀도 및 재현율 변화 추이
 - E.g., 임계값을 높이면(5로 판단하는 기준을 더 까다롭게 한다는 의미로 이해) 정밀도는 높아지지만 재현율은 떨어짐 ()





■ k-fold 교차 검증 수행하며 결과로는 훈련셋의 각 인스턴스에 대해 decision function을 통해 계산 된 점수를 반환

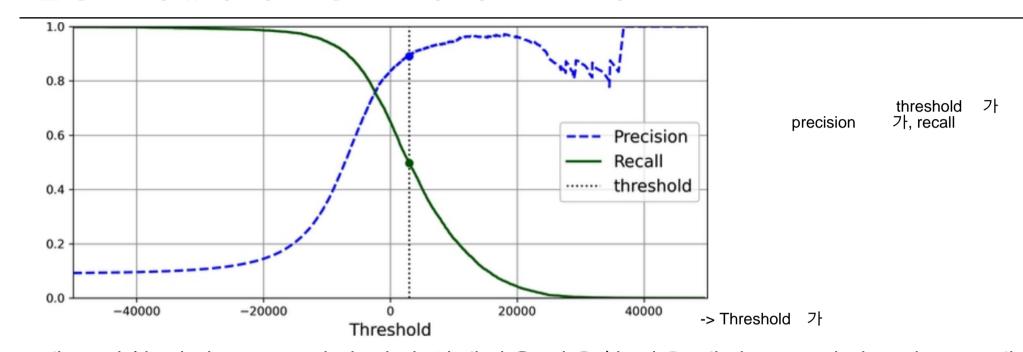
from sklearn.metrics import precision_recall_curve

precisions, recalls, thresholds = precision_recall_curve(y_train_5, y scores)

- 모든 가능한 결정 임계값에 대해 SGD 분류기의 precision과 recall을 계산해서 반환
- precision_recall_curve() 함수 결과로 3개 배열 리턴됨
 - precisions, thresholds 배열은 인덱스가 커짐에 따라 <u>값이 증가</u>하는 배열
 가
 - 반대로 recalls 배열은 인덱스가 커짐에 따라 값이 감소하는 배열



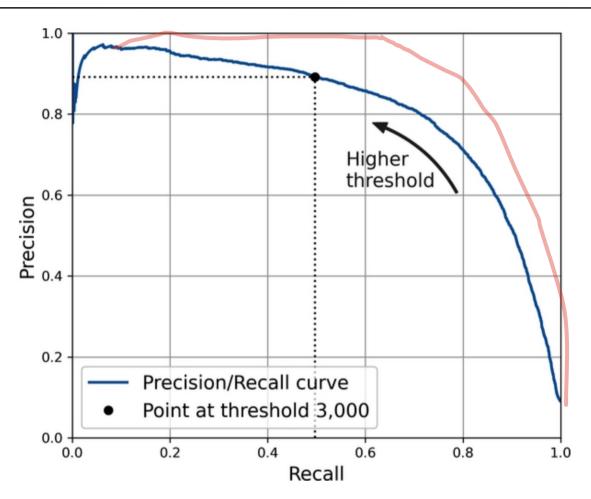
결정 임계값에 따른 정밀도와 재현율 그래프



- 세로 방향 점선으로 표시된 결정 임계값을 사용할 경우 대략 90% 정밀도와 50% 재 현율을 달성함
- 결정 임계값을 높였을 때 일시적으로 정밀도가 떨어지는 패턴이 관찰될 수 있음.
 하지만 결정 임계값을 계속 높이면 결국엔 정밀도가 상승하게 됨



재현율 대 정밀도 그래프





정밀도/재현율 요구조건을 충족시키기 위한 결정 임계값 찾기

■ 예1: precision_recall_curve() 함수를 통해 계산된 precisions, recalls, thresholds 배열을 이용하여 정밀도 0.9 이상을 만족하기 위한 최소한의 결정 임계 값 찾기

```
>>> idx_for_90_precision = (precisions >= 0.90).argmax()
>>> threshold_for_90_precision = thresholds[idx_for_90_precision]
>>> threshold_for_90_precision
3370.0194991439557
```

- why ? 가 - precisions 배열에서 0.9 이상의 값이 저장된 lowest index를 확인
- 확인된 index 위치에 해당하는 결정 임계값을 thresholds 배열에서 확인하면 그 임계값이 정밀도 0.9 이상을 충족시키는 임계값 최소치에 해당함

가

thresholds, precisions 가 가 가 가 가 () recall



トフレ

Colab

실습

정밀도/재현율 요구조건을 충족시키기 위한 결정 임계값 찾기

■ 예2: precision_recall_curve() 함수를 통해 계산된 precisions, recalls, thresholds 배열을 이용하여 재현율 0.8 이상을 충족시키기 위한 결정 임계값 찾기

recall

recall



정밀도/재현율 요구조건을 충족시키기 위한 결정 임계값 찾기

```
- recalls 배열은 값이 줄어드는 패턴
idx_for_80_recall = (recalls >= 0.80).argmin() - recalls 배열에서 값이 0.8 미만인 lowest index 확인
```

thresholds[idx_for_80_recall-1]

(idx_for_80_recall-1) index 위치의 임계값이 재현율 80% 이상을 충족시키기 위한 임계값 최대치에 해당함

```
y_train_pred_80_recall = (y_scores >= thresholds[idx_for_80_recall-1]) 전태
```

선택된 임계값으로 훈련셋 샘플들에 대한 예측 수행

```
precision_score(y_train_5, y_train_pred_80_recall)
0.7120341487440486
```

타깃 클래스(y_train_5)와 예측 클래스 (y_train_pred_80_recall)을 이용하여 precision score 계산

```
recall_score(y_train_5, y_train_pred_80_recall)
0.8000368935620734
```

타깃과 예측을 이용하여 recall score 계산



ROC 곡선과 AUC

- ROC(receiver operating characteristic) 곡선은 이진 분류기 성능 평가에 널리 사용됨
- ROC 곡선은 결정 임계값이 달라짐에 따라 FPR과 TPR의 변화 추이를 보여주는 곡 선
 - TPR(true positive rate, 재현율의 또 다른 명칭)
 - FPR(false positive rate): 실제 negative 클래스에 해당하는 모든 샘플들 중 positive로 잘못 예측된 비율
 - E.g., non-5인 모든 이미지 샘플들 중 숫자 5로 잘못 분류된 샘플들의 비율
 - FPR = FP / (FP + TN)

TPR FPR



ROC 곡선과 AUC

■ ROC 곡선을 그리기 위해서는 모든 가능한 결정임계값에 대해 FPR과 TPR을 계산 해야하며 roc_curve() 함수를 이용하여 계산 가능

```
from sklearn.metrics import roc_curve

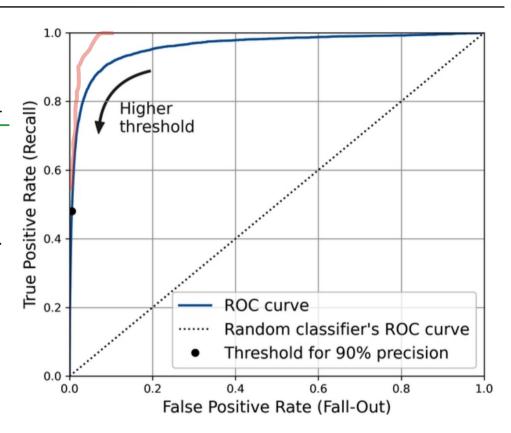
fpr, tpr, thresholds = roc_curve(y_train_5, y_scores)

roc_curve .
```



SGD 분류기에 대한 ROC 곡선

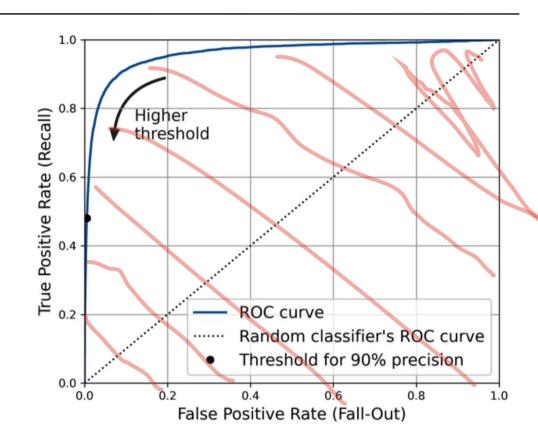
- FPR과 TPR(재현율) 간에도 trade-off 관계 존재
 - 결정 임계값 조정을 통해 TPR을 높이면 FPR 또한 증가하게 됨
- 좋은 분류기이기 위해서는 FPR은 최대한 낮게 유지하면서도 높은 수준의 TPR에 도달 할 수 있어야 함





AUC와 분류기 성능

- AUC(area under the curve)
 - ROC 곡선의 AUC는 ROC 곡선 아래의 면적을 의미한다.
- 좋은 분류기이기 위해서는 FPR은 최대한 낮게 유지하면서도 높은 수준의 TPR에 도 달할 수 있어야 함
- 따라서 좋은 분류기의 ROC 곡선은 topleft 코너에 근접하게 됨
- AUC가 1에 가까울 수록 좋은 성능의 분류 기로 평가된다.





ROC 곡선 vs 정밀도(precision)/재현율(recall) 곡선

- 다음 경우에는 정밀도/재현율 곡선이 분류기 성능 평가 방법으로 선호됨
 - 전체 샘플들 중 positive 클래스에 해당하는 샘플들이 드문 경우
 - 또는 false negative 보다 false positive가 더 문제가 되는 경우
 - E.g., 아이가 시청해도 되는 안전한 동영상 분류기의 경우 실제로는 아이가 보면 안되는 위험한 동영 상(negative 클래스에 해당)인데 안전한 것(positive 클래스)으로 분류되는 것이 심각한 문제임

가 .

■ 나머지 경우에는 ROC 곡선이 선호됨



정밀도/재현율 곡선을 이용한 분류기 성능 비교

- 좋은 분류기이기 위해서는 높은 수준 의 recall에서도 높은 수준의 precision을 유지할 수 있어야 함
- 분류기의 정밀도/재현율 곡선이 top-right 코너에 근접할 수록 좋은 성능의 분류기로 평가됨
 - 정밀도/재현율 곡선의 AUC 또한 1에 가까울 수록 좋은 분류기라는 의미
- SGD 분류기 vs Random Forest 분 류기

