

AI 보안 기술개발 교육

머신러닝(Machine Learning) 모델 1





AI 보안 기술개발 교육

머신러닝 모델 1

- 1. 선형회귀 모델
- 2. 의사결정 트리
- 3. 앙상블 학습
- 4. 랜덤 포레스트



단순 선형 회귀(Simple Linear Regression)

- 회귀(Regression)의 목표는 연속형 반응 변수의 값을 예측
- 단순 선형 회귀란 설명 변수인 단일 특징과 단일 반응 변수 간에 선형 관계가 있다고 가정하고 초평면(hyper plane)을 선형 평면을 이용해 모델링
- 단순 회귀는 설명 변수의 차원과 반응 변수의 차원, 모두 2개의 차원
- 초평면은 한 차원 낮은 1차원(1차원의 초평면은 선)

$$y = \beta x + \alpha$$

학습을 통해 최적의 α 와 β 값을 찾는 것이 목표

- y: 반응 변수의 예측 값
- 계수 β 와 절편 항 α : 알고리즘을 통해 학습하게 되는 모델의 파라미터
- x : 설명 변수

단순 선형 회귀 (Simple Linear Regression)

- 회귀 모델의 기본 예측 능력 평가 지표: 결정계수 R²
- 데이터가 회귀선에 얼마나 가깝게 분포하는지를 측정
- 모델에 의해 설명된 반응 변수 분산의 비율을 기술

$$SS_{res} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2$$

$$SS_{tot} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2$$

$$SS_{tot} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$$

- R2은 이상치에 민감하고, 입력변수 X의 변수 종류가 많아지면 질수록 R-square가 증가되는 문제
- X가 많을 수록 패널티를 적용해서 R-squared를 줄여가는 adjusted R-squared 사용

다중 선형 회귀(Mutiple Linear Regression)

- 다중 선형 회귀는 설명 변수인 다수의 특징과 단일 반응 변수 간에 선형 관계가 있다는 가정하에 초평면으로 선형 평면을 이용해 모델링
- 다중 회귀는 설명 변수의 n차원과 반응 변수의 1차원, 모두 n + 1개의 차원
- 초평면은 한 차원 낮은 n차원

$$y = \alpha + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \dots + \beta_n x_n$$

- y : 반응 변수의 예측 값
- 절편 항 α 와 계수 β_n : 알고리즘을 통해 학습하게 되는 모델의 파라미터
- $-x_n$: 설명 변수

다중 선형 회귀 (Linear Regression)

■ 선형 회귀 모델의 벡터 표기법

$$Y = X\beta$$

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha + \beta X_1 \\ \alpha + \beta X_2 \\ \vdots \\ \alpha + \beta X_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

Y: 반응 변수의 예측 값을 가진 열 벡터

 β : 알고리즘을 통해 학습하게 되는 모델의 파라미터 값을 갖는 열 벡터

X: 설명 변수 값을 갖는 $m \times n$ 차원 행렬로 m은 훈련 데이터의 개수, n은 feature의 개수

- 보스턴 주택가격 데이터 셋 소개
 - Target Vector

MEDV: 1978 보스턴 주택 가격, 506개 타운의 주택 가격 중앙값 (단위 1,000 달러)

- Feature Matrix

CRIM : 범죄율

INDUS: 비소매상업지역 면적 비율

NOX: 일산화질소 농도

RM: 주택당 방수

LSTAT : 인구 중 하위 계층 비율

B: 인구중 흑인 비율

PTRATIO: 학생/교사 비율

ZN: 25,000 평방피트를 초과 거주지역 비율

CHAS: 찰스강의 경계에 위치한 경우는 1, 아니면 0

AGE: 1940년 이전에 건축된 주택의 비율

RAD: 방사형 고속도로까지의 거리

DIS: 직업센터의 거리

TAX: 재산세율

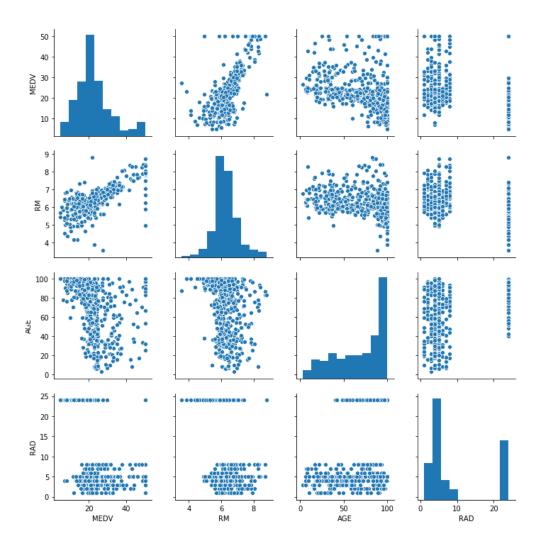
■ Feature Matrix와 Target Vector 추출

```
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.datasets import load boston
import matplotlib.pyplot as plt
boston = load_boston()
X = pd.DataFrame(boston.data, columns=boston.feature names)
y = pd.DataFrame(boston.target, columns=["MEDV"])
df = pd.concat([X, y], axis=1)
df.head()
    CRIM
            ZN INDUS CHAS
                              NOX
                                      RM
                                           AGE
                                                   DIS RAD
                                                              TAX PTRATIO
                                                                                 B LSTAT MEDV
0.00632
           18.0
                  2.31
                              0.538
                                     6.575
                                           65.2
                                                4.0900
                                                         1.0
                                                             296.0
                                                                        15.3
                                                                            396.90
                                                                                      4.98
                                                                                             24.0
1 0.02731
            0.0
                  7.07
                              0.469
                                    6.421
                                           78.9
                                                4.9671
                                                         2.0 242.0
                                                                        17.8
                                                                             396.90
                                                                                      9.14
                                                                                             21.6
2 0.02729
            0.0
                                                                             392.83
                  7.07
                              0.469
                                    7.185
                                           61.1 4.9671
                                                         2.0
                                                             242.0
                                                                        17.8
                                                                                      4.03
                                                                                             34.7
3 0.03237
                                           45.8
                                                             222.0
                                                                            394.63
            0.0
                  2.18
                                     6.998
                                                6.0622
                                                         3.0
                                                                        18.7
                                                                                      2.94
                                                                                             33.4
4 0.06905
            0.0
                  2.18
                          0.0 0.458 7.147 54.2 6.0622
                                                         3.0 222.0
                                                                        18.7 396.90
                                                                                      5.33
                                                                                             36.2
print(X.shape, y.shape)
(506, 13) (506, 1)
```

■ 주요 변수 EDA

```
import seaborn as sns

cols = ["MEDV", "RM", "AGE", "RAD"]
sns.pairplot(df[cols])
plt.show()
```



■ train 데이터와 test 데이터 분리

```
from sklearn.model_selection import train_test_split

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, random_state=1)
print(X_train.shape, X_test.shape, y_train.shape, y_test.shape)

(379, 13) (127, 13) (379, 1) (127, 1)
```

train_test_split()에서 test_size 파라미터를 지정하지 않으면트레이닝 사이즈가 75%, 테스트 사이즈가 25%로 설정됨

■ LinearRegression 모델 fitting

54.05800385466539

- 회귀 모델의 예측 능력 평가 지표 평균 제곱근 오차 RMSE(Root Mean Square Error)
- 평균 제곱근 오차는 분산의 제곱근, 즉 표준 오차

$$RMSE(\hat{\theta}) = \sqrt{MSE(\hat{\theta})} = \sqrt{E((\hat{\theta} - \theta)^2)} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\hat{\theta} - \theta)^2}$$

 $\hat{\theta}$: 예측 추정량

■ 회귀 모델의 성능 측정

```
from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score

y_pred = model.predict(X_test)

np.sqrt(mean_squared_error(y_test, y_pred))

RMSE

4.6795048238087364

r2_score(y_test, y_pred)
R2 square
```

Copyright 2020. CSLEE, All rights reserved.

0.7789410172622884

선형 회귀 모델 적용 - Ridge/Lasso Regularization

- Ridge(L2 Regularization)
 - 모델의 가중치가 가능한 작게 유지하여 오버피팅 방지
 - 규제항은 훈련하는 동안에만 비용함수에 추가
 - 모델의 훈련이 끝나면 모델의 성능을 규제가 없는 성능 지표로 평가
 - 하이퍼파라미터 α 는 모델 규제를 조절
 - $-\alpha=0$ 이면 선형회귀와 동일하며, α 가 아주 크면 모든 가중치가 0에 가까워짐

$$J(\theta) = MSE(\theta) + \alpha \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \theta_i^2$$

- Lasso(L1 Regularization)
 - 제곱 대신 절대값을 사용

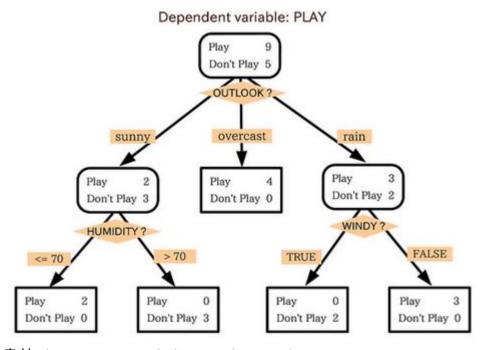
$$J(\theta) = MSE(\theta) + \alpha \sum_{i=1}^{n} |\theta_i|$$

Ridge/Lasso Regressions

```
from sklearn.linear_model import Ridge, Lasso
model = Ridge(alpha = 0.05)
model.fit(X train, y train)
y_pred = model.predict(X_test)
print(np.sqrt(mean_squared_error(y_test, y_pred)))
print(r2 score(y test, y pred))
4.6712457534017044
0.7797206427158482
model = Lasso(alpha = 0.05)
model.fit(X train, y train)
y_pred = model.predict(X_test)
print(np.sqrt(mean_squared_error(y_test, y_pred)))
print(r2_score(y_test, y_pred))
4.652781460340701
0.7814586219598383
```

의사결정 트리(Decision Tree)

- 의사결정 트리(Decision Tree)
- 분류, 회귀 작업에 사용되며, 복잡한 데이터 세트도 학습 가능
- 설명하기도 쉽고 해석하기도 쉬우면서 나이브 베이즈와 같이 범주형 데이터도 적합
- 의사결정 트리는 강력한 머신러닝 알고리즘 가운데 하나인 랜덤 포레스트의 기본 구성 요소
- ID3, C4.5, CART, CHAID와 같은 알고리즘이 있음



출처: https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/03/26/tree/

의사결정 트리(Decision Tree)

- 의사결정 트리(Decision Tree)의 생성
 - 데이터를 분할하기 위해 가장 중요한 특징이 무엇인지 선택하는 로컬 최적화 방법을 계속 적용하는 탐욕적 방식으로 트리를 생성함
 - 의사결정 트리는 학습 샘플을 서브 셋으로 분할하면서 생성되며, 분할의 과정은 각 서브 셋에 대해 재귀형태로 진행
 - 각 노드에서의 분할은 특징 값을 기반으로 조건 검사를 통해 진행
 - 서브 셋이 동일한 클래스 레이블을 가지는 경우나 분할을 통한 클래스 분류가 더 이상 의미가 없을 경우 트리 분할 작업을 종료

출처: https://ratsgo.github.io/machine%20learning/2017/03/26/tree/

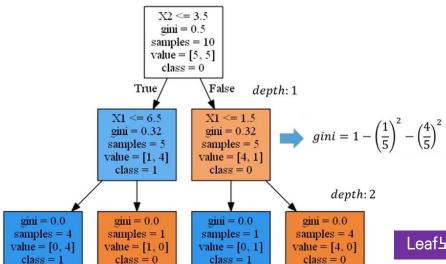
- CART(Classification and Regression Tree)란? 불순도를 지니계수(Gini Index)로 계산하는 의사결정 트리 알고리즘
- 노드를 왼쪽, 오른쪽 자식 노드로 분할 확장하면서 트리를 생성
- 분할 단계에서 가장 중요한 특징과 해당 값의 모든 가능한 조합을 측정 함수를 이용해 탐욕적으로 탐색
- 범주형 특징의 경우 해당 특징 값을 가진 샘플들을 오른쪽 자식 노드에 할당
- 수치형 특징의 경우 해당 값보다 큰 값을 가진 샘플들을 오른쪽 자식 노드에 할당

CART는 scikit-learn의 의사결정 트리, 랜덤 포레스트가 사용하는 내부 알고리즘

- 지니계수(Gini Index) 란? 불순도(impurity) 특정 지표로서, 데이터의 통계적 분산정도를 정량화해서 표현한 값
- 지니 불순도(Gini Impurity)

$$G_i = 1 - \sum_{k=1}^{n} P_{ik}^2$$

 $P_{i,k}$: i번째 노드에 있는 훈련 샘플 중 k 클래스에 속한 샘플의 비율 $_{depth:\,0}$



Leaf노드(자식노드가 없는 노드)에서 지니계수는 0이 됨

■ Iris 데이터 로드 및 Scaling

```
from sklearn.datasets import load iris
iris = load iris()
X = iris.data
y = iris.target
print(X.shape, y.shape)
(150, 4) (150,)
from sklearn.model selection import train test split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3, random_state=0)
sc = StandardScaler()
sc.fit(X train)
StandardScaler(copy=True, with_mean=True, with_std=True)
X train std = sc.transform(X train)
X_test_std = sc.transform(X test)
```

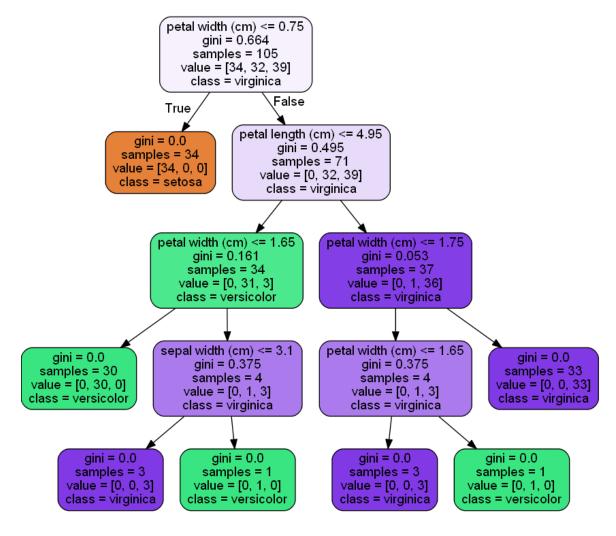
■ Decision Tree 모델 fitting 및 성능 측정

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
iris tree = DecisionTreeClassifier(max depth=5, random state=0)
iris tree.fit(X train, y train)
DecisionTreeClassifier(class_weight=None, criterion='gini', max_depth=5,
                       max features=None, max leaf nodes=None,
                       min impurity decrease=0.0, min impurity split=None,
                       min samples leaf=1, min samples split=2,
                       min weight fraction leaf=0.0, presort=False,
                       random state=0, splitter='best')
from sklearn.metrics import accuracy_score
y pred tr = iris tree.predict(X test)
print('Accuracy: %.2f' % accuracy score(y test, y pred tr))
Accuracy: 0.98
```

- Decision Tree 시각화
 - Graphviz 설치 : Anaconda Prompt에서 conda install graphviz

```
#!pip install pydot
from sklearn.tree import export graphviz
export graphviz(iris tree, out file="iris.dot", feature names=iris.feature names,
                class names=iris.target names, rounded=True, filled=True, impurity=True)
import pydot
graph = pydot.graph from dot file("iris.dot")[0]
graph
<pydot.Dot at 0x23b6f0072b0>
iris png = graph.create png()
from IPython.core.display import Image
Image(iris_png)
```

■ Decision Tree 시각화



- 온라인 광고 클릭 데이터 활용
- CTR: Click-Through Rate. 전체 페이지 뷰 횟수 대비 특정 광고를 클릭한 횟수의 비율
- 클릭 스루 예측이란 어떤 사용자가 현재 보고 있는 웹 페이지에 노출된 광고를 클릭할지를 예측하는 이진 분류 문제
- 캐글 온라인 광고 클릭 예측 모델을 위한 데이터 세트
- https://www.kaggle.com/c/avazu-ctr-prediction/download/train.gz
- train.csv : 시간 순으로 정렬된 10일 간의 클릭 스루 예측을 위한 데이터

■ 데이터 변수 구성

- id : 광고 아이디
- click: 클릭하지 않은 경우 0, 클릭한 경우 1
- hour: YYMMDDHH 포맷
- C1: 익명처리된 번주형 변수
- banner_pos: 배너 위치 0, 1
- site_id
- site_domain
- site_category

- app_id
- app_domain
- app_category
- device_id
- device_ip
- device_model
- device_type
- device_conn_type
- C14-C21 -- 익명처리된 번주형 변수

■ 데이터 로드 및 전처리

```
import pandas as pd
train df = pd.read csv("data/click/train.csv", nrows=100000)
# train df.head()
unused_columns, label_column = ["id", "hour", "device_id", "device_ip"], "click"
train df = train df.drop(unused columns, axis=1)
y train = train df[label column]
test df = pd.read csv("data/click/train.csv", header=0, skiprows=(1, 100000), nrows=100000)
# test_df.head()
test_df = test_df.drop(unused_columns, axis=1)
y test = test df[label column]
```

- BoW(Bag of Words) 생성
- Bag of Words란 단어들의 순서에 상관없이 단어들의 출현 빈도(frequency)만 고려하는 텍스트 데이터의 수치화 표현 방법
- 해당 문서 내에서 특정 단어가 N번 등장했다면, Bag에는 그 특정 단어가 N개 존재
- BoW를 생성 과정
 - ① 각 단어에 고유한 정수 인덱스를 부여
 - ② 각 인덱스의 위치에 단어 토큰의 등장 횟수를 기록한 벡터 생성

■ DictVectorizer를 이용한 BoW 생성

```
from sklearn.feature_extraction import DictVectorizer

X_dict_train = list(train_df.drop(label_column, axis=1).T.to_dict().values())
X_dict_test = list(test_df.drop(label_column, axis=1).T.to_dict().values())

vectorizer = DictVectorizer(sparse=True)
X_train = vectorizer.fit_transform(X_dict_train)
X_test = vectorizer.fit_transform(X_dict_test)
```

■ Grid Search를 이용한 Hyper Parameter 최적화 및 모델 fitting

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.model selection import GridSearchCV
params = {"max_depth": [3, 10, None]}
tree = DecisionTreeClassifier(criterion="gini", min samples split=30)
grid search = GridSearchCV(tree, params, n jobs=-1, cv=3, scoring="roc auc")
grid search.fit(X train, y train)
grid search.best params
{'max depth': 10}
tree best = grid search.best estimator
y_pred = decision_tree_best.predict(X test)
array([0, 0, 0, ..., 0, 0, 0], dtype=int64)
```

■ 분류 모델 성능 측정

에축 (Prediction) 실제 (Actual)	True	False
True	TP	FN
False	FP	TF

■ 정확도(accuracy): 전체 샘플에서 정확하게 예측한 샘플 수의 비율

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

■ 정밀도(precision): Positive 클래스로 예측한 샘플에서 실제 Positive 클래스에 속하는

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

■ 재현율(recall) 실제 Positive 클래스에 속한 샘플에서 Positive 클래스에 속한다고 예측한 샘플 수의 비율 (참 긍정률: True Positive rate, 민감도: Sensitivity)

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

■ 특이도(specificity): 실제 Negative 클래스에 속한 샘플에서 Negative 클래스에 속한다고 예측한 샘플 수의 비율 (1-False Positive Rate)

$$Specificity = \frac{TN}{TN + FP}$$

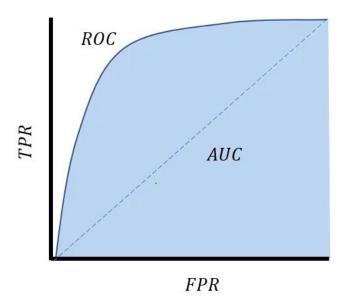
■ F1 score : 정밀도와 재현율의 조화평균, score에 상수 2를 곱해 정밀도와 재현율이 모두 1일 경우, score가 1이 되도록 함

$$\frac{2 * Precision * Recall}{Precision + Recall}$$

■ 분류 모델 성능 측정

```
from sklearn.metrics import accuracy_score
accuracy score(y test, y pred)
0.83248
from sklearn.metrics import confusion matrix
confusion matrix(y test, y pred)
array([[81151, 1359],
       [15393, 2097]], dtype=int64)
from sklearn.metrics import recall score
recall score(y test, y pred)
0.11989708404802744
from sklearn.metrics import f1_score
f1 score(y test, y pred)
0.20022916069894015
```

- ROC(Receiver Operating Characteristic) curve
- AUC(Area Under The Curve) 곡선하 면적
- 참 긍정률(TPR)과 거짓 부정률(FPR) 사이를 표현하기 위해 ROC(Receiver Operating Characteristics) 커브를 사용
- 예측된 확률로부터 여러 클래스로 분류를 수행하는 데 활용



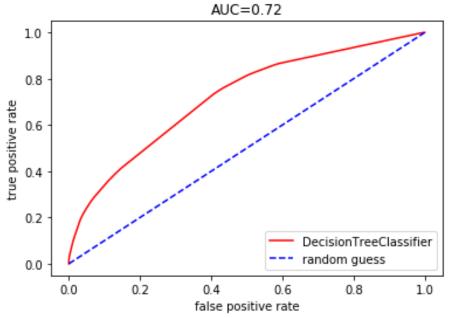
모든 케이스에 대해 정확히 분류할 경우(TPR=1,FPR=0) AUC 면적은 1이됨(사각형 모양)

ROC(Receiver Operating Characteristic) curve

```
from sklearn.metrics import roc_auc_score, roc_curve
y_pred_proba = decision_tree_best.predict_proba(X_test)[:, 1]
fpr, tpr, _ = roc_curve(y_test, y_pred_proba)
auc = roc_auc_score(y_test, y_pred_proba)

import matplotlib.pyplot as plt

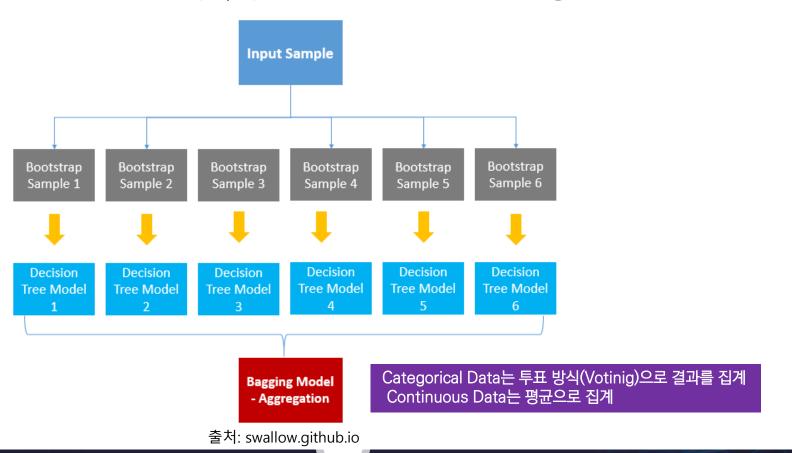
plt.plot(fpr, tpr, "r-", label="DecisionTreeClassifier")
plt.plot([0, 1], [0, 1], "b--", label="random guess")
plt.xlabel("false positive rate")
plt.ylabel("true positive rate")
plt.title("AUC={0:.2f}".format(auc))
plt.legend(loc="lower right");
plt.show()
```



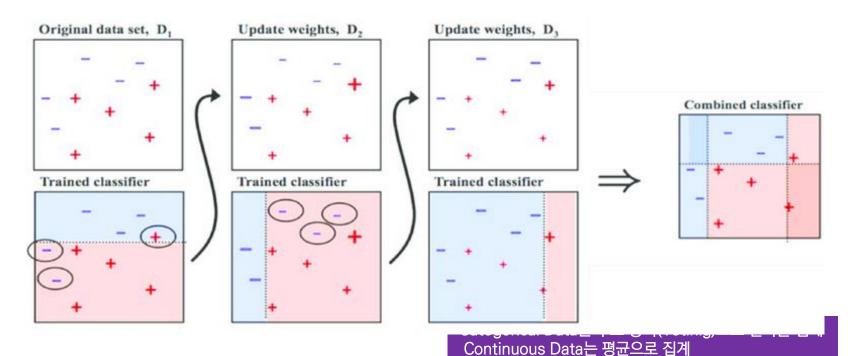
- 앙상블(Ensemble)
- 여러 개의 의사결정 트리(Decision Tree)를 결합하여 하나의 의사결정 트리를 사용하는 것 보다 더 좋은 성능을 내도록 하는 머신러닝 기법
- 앙상블 학습의 핵심은 여러 개의 약 분류기 (Weak Classifier)를 결합하여 강 분류기(Strong Classifier) 를 생성
- 앙상블 학습 기법에는 배깅(Bagging)과 부스팅(Boosting)

■ 배깅(Bagging)

Bagging은 Bootstrap Aggregation의 약자로 데이터로부터 부트스트랩(복원 랜덤 샘플링) 을 수행 부트스트랩한 데이터로 모델을 학습, 학습된 모델의 결과를 집계하여 최종 결과 값 도출

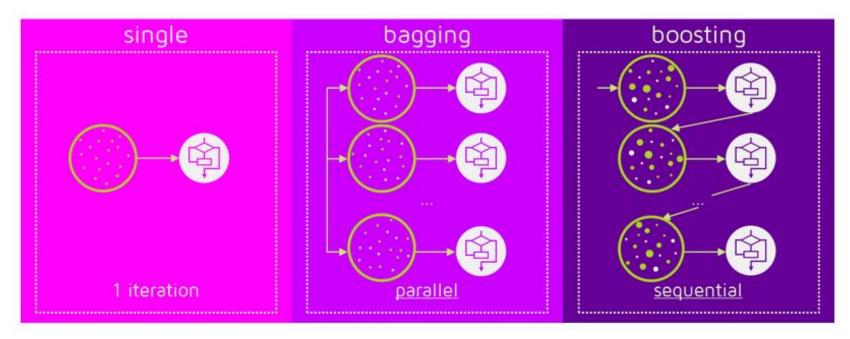


- 부스팅(Boosting)
- 부스팅은 가중치를 활용하여 weak classifier로 strong classifier를 생성하는 과정
- 오분류 데이터에 높은 가중치 부여, 정분류 데이터는 낮은 가중치 부여
- 선행 모델의 오분류 데이터에 가중치를 부여하여 후행 모델에 반영



출처: swallow.github.io

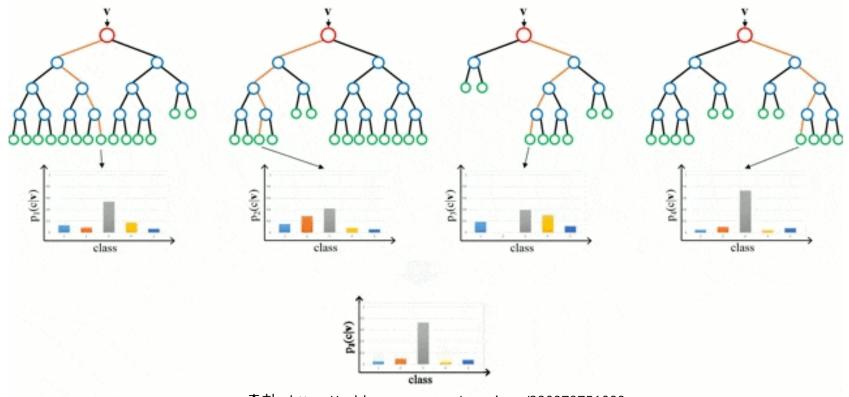
- 배깅(Bagging)과 부스팅(Boosting)
- 배깅은 병렬로 학습하는 반면, 부스팅은 순차적으로 학습
- 부스팅은 배깅에 비해 error가 적고 성능이 좋으나 속도가 느리고 오버피팅 가능성 높음
- 개별 결정 트리의 낮은 성능이 문제라면 부스팅이 적합하고, 오버 피팅이 문제라면 배깅이 적합



출처: swallow.github.io

랜덤 포레스트(Random Forest)

- 랜덤 포레스트는 특징 기반 배깅 기법을 적용한 의사결정 트리의 앙상블
- 트리 배깅은 의사결정 트리 모델의 단점 중 하나인 고분산을 줄여 단일 트리보다 고성능
- 랜덤 포레스트의 무작위적 특성은 트리를 보다 다양하게 생성하고, 분산을 축소



출처: https://m.blog.naver.com/samsjang/220979751089

랜덤 포레스트(Random Forest)

- 랜덤 포레스트 성능 개선을 위한 하이퍼 파라미터
- max_features: 최적의 분할 지점을 찾기 위해 검토할 특징의 개수로 일반적으로 n차원의 데이터 세트의 \sqrt{n} 의 반올림 값을 설정('auto')
- n_estimators : 트리의 개수가 많을수록 성능이 더 좋지만 계산 시간 장시간 소요 일반적으로 100, 200, 500을 설정
- min_sample_splits : 노드에서 추가 분할을 위해 필요한 샘플의 최소 개수 숫자가 너무 작으면 오버피팅, 너무 크면 언더피팅 발생가능 일반적으로 10, 30, 50으로 설정

랜덤 포레스트(Random Forest)

■ Grid Search를 이용한 하이퍼 파라미터 설정



Nank Jos