2장 머신러닝 프로젝트 처음부터 끝까지 (2부)

감사의 글

자료를 공개한 저자 오렐리앙 제롱과 강의자료를 지원한 한빛아카데미에게 진심어린 감사를 전합니다.

2.5 머신러닝 알고리즘을 위한 데이터 준비

데이터 준비 자동화

- 모든 전처리 과정의 자동화. 언제든지 재활용 가능.
- 자동화는 **파이프라인**(pipeline)으로 구현
- 훈련 세트 준비: 훈련에 사용되는 특성과 타깃 특성(레이블) 구분하여 복사본 생성

```
housing = strat_train_set.drop("median_house_value", axis=1)
housing_labels = strat_train_set["median_house_value"].copy()
```

• 테스트 세트는 훈련이 완성된 후에 성능 측정 용도로만 사용.

데이터 전처리

- 데이터 전처리(data preprocessing): 효율적인 모델 훈련을 위한 데이터 변환
- 수치형 데이터와 범주형 데이터에 대해 다른 변환과정을 사용
- 수치형 데이터 전처리 과정
 - 데이터 정제
 - 조합 특성 추가
 - 특성 스케일링
- 범주형 데이터 전처리 과정
 - 원-핫-인코딩(one-hot-encoding)

변환 파이프라인

- 파이프라인(pipeline)
 - 여러 과정을 한 번에 수행하는 기능을 지원하는 도구
 - 여러 사이킷런 API를 묶어 순차적으로 처리하는 사이킷런 API
- 파이프라인 적용 과정
 - 수치형 데이터 전처리 과정에 사용된 세 가지 변환 과정의 자동화 파이프라인 구현
 - 수치형 데이터 파이프라인과 범주형 데이터 전처리 과정을 결합한 파이프라인 구현

사이킷런 API 활용

- '조합 특성 추가' 과정을 제외한 나머지 변환은 사이킷런에서 제공하는 관련 API 직접 활용 가능
- '조합 특성 추가' 과정도 다른 사이킷런 API와 호환이 되는 방식으로 사용자가 직접 구현 가능
- 사이킷런에서 제공하는 API는 일관되고 단순한 인터페이스를 제공

사이킷런 API의 세 가지 유형

추정기(estimator)

- 주어진 데이터셋과 관련된 특정 파라미터 값들을 추정하는 객체
- fit() 메서드 활용: 특정 파라미터 값을 저장한 속성이 업데이트된 객체 자신 반환

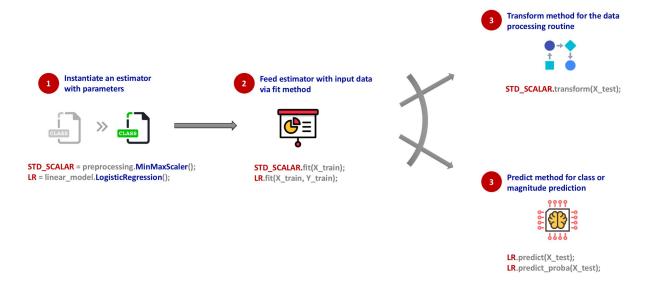
변환기(transformer):

- fit() 메서드에 의해 학습된 파라미터를 이용하여 주어진 데이터셋 변환
- transform() 메서드활용
- fit() 메서드와 transform() 메서드를 연속해서 호출하는 fit_transform() 메서드 활용 가능

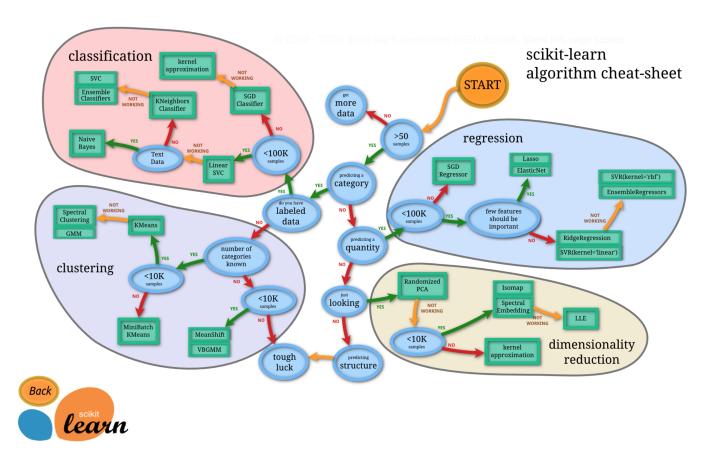
예측기(predictor)

- 주어진 데이터셋과 관련된 값을 예측하는 기능을 제공하는 추정기
- predict() 메서드활용
- fit()과 predict() 메서드가 포함되어 있어야함
- predict() 메서드가 추정한 값의 성능을 측정하는 score() 메서드도 포함
- 일부 예측기는 추정치의 신뢰도를 평가하는 기능도 제공





<그림 출처: <u>Scikit-Learn: A silver bullet for basic machine learning</u> (https://medium.com/analytics-vidhya/scikit-learn-a-silver-bullet-for-basic-machine-learning-13c7d8b248ee)>



<그림 출처: <u>Scikit-Learn: Choosing the right estimator (https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine_learning_map/index.html)</u>>

2.5.1 데이터 정제: 수치형 데이터 전치러 과정 1

- 누락된 특성값이 존재 경우, 해당 값 또는 특성을 먼저 처리해야 함.
- total_bedrooms 특성에 207개 구역에 대한 값이 null로 채워져 있음, 즉, 일부 구역에 대한 정보가 누락됨.

	longitude	latitude	housing_median_age	total_rooms	total_bedrooms	population	households	median_income	ocean_p
4629	-118.30	34.07	18.0	3759.0	NaN	3296.0	1462.0	2.2708	<1⊦
6068	-117.86	34.01	16.0	4632.0	NaN	3038.0	727.0	5.1762	<1⊦
17923	-121.97	37.35	30.0	1955.0	NaN	999.0	386.0	4.6328	<1⊦
13656	-117.30	34.05	6.0	2155.0	NaN	1039.0	391.0	1.6675	
19252	-122.79	38.48	7.0	6837.0	NaN	3468.0	1405.0	3.1662	<1⊦

null 값 처리 옵션

- 옵션 1: 해당 구역 제거
- 옵션 2: 전체 특성 삭제
- 옵션 3: 평균값, 중앙값, 0, 주변에 위치한 값 등 특정 값으로 채우기. 책에서는 중앙값으로 채움.

옵션	코드
옵션 1	housing.dropna(subset=["total_bedrooms"])
옵션 2	housing.drop("total_bedrooms", axis=1)
옵션 3	<pre>median = housing["total_bedrooms"].median()</pre>

housing["total_bedrooms"].fillna(median, inplace=True)

<옵션 3 활용>

	longitude	latitude	housing_median_age	total_rooms	total_bedrooms	population	households	median_income	ocean_p
4629	-118.30	34.07	18.0	3759.0	433.0	3296.0	1462.0	2.2708	<1F
6068	-117.86	34.01	16.0	4632.0	433.0	3038.0	727.0	5.1762	<1F
17923	-121.97	37.35	30.0	1955.0	433.0	999.0	386.0	4.6328	<1F
13656	-117.30	34.05	6.0	2155.0	433.0	1039.0	391.0	1.6675	
19252	-122.79	38.48	7.0	6837.0	433.0	3468.0	1405.0	3.1662	<1F

SimpleImputer 변환기

- 옵션 3를 지원하는 사이킷런 변환기
- 중앙값 등 통계 요소를 활용하여 누락 데이터를 특정 값으로 채움

```
from sklearn.impute import SimpleImputer
imputer = SimpleImputer(strategy="median")
housing_num = housing.drop("ocean_proximity", axis=1)
imputer.fit(housing_num)
```

2.5.2 텍스트와 범주형 특성 다루기: 원-핫 인코딩

- 범주형 특성인 해안 근접도(ocean_proximity)를 수치형 데이터로 변환해야 함.
- 단순 수치화 적용 가능

범주	숫자
<1H OCEAN	0
INLAND	1
ISLAND	2
NEAR BAY	3
NEAR OCEAN	4

단순 수치화의 문제점

- 해안 근접도는 단순히 구분을 위해 사용. 해안에 근접하고 있다 해서 주택 가격이 기본적으로 더 비싸지 않음.
- 반면에 수치화된 값들은 크기를 비교할 수 있는 숫자
- 따라서 모델 학습 과정에서 숫자들의 크기 때문에 잘못된 학습이 이루어질 수 있음.

원-핫 인코딩(one-hot encoding)

- 수치화된 범주들 사이의 크기 비교를 피하기 위해 더미(dummy) 특성을 추가하여 활용
 - 범주 수 만큼의 더미 특성 추가
- 예를 들어, 해안 근접도 특성 대신에 다섯 개의 범주 전부를 새로운 특성으로 추가한 후 각각의 특성값을 아래처럼 지정
 - 해당 카테고리의 특성값: 1
 - 나머지 카테고리의 특성값: 0

OneHotEncoder 변환기

- 원-핫 인코딩 지원
- sparse 키워드 인자
 - 기본값은 True.
 - 1의 위치만 기억하는 희소 행렬로 처리. 대용량 행렬 처리에 효과적임.
 - False로 지정할 경우 일반 행렬로 처리.

2.5.3 나만의 변환기: 수치형 데이터 전처리 과정 2 (조합 특성 추가)

- 아래 특성 추가 용도 변환기 클래스 직접 선언하기
 - 가구당 방 개수(rooms for household)
 - 방하나당침실개수(bedrooms for room)
 - 가구당 인원(population per household)
- 변환기 클래스: fit(), transform() 메서드를 구현하면 됨.
 - 주의: fit() 메서드의 리턴값은 self

예제: CombinedAttributesAdder 변환기 클래스 선언

- init () 메서드: 생성되는 모델의 **하이퍼파라미터** 지정 용도
 - 모델에 대한 적절한 하이퍼파라미터를 튜닝할 때 유용하게 활용됨.
 - 예제: 방 하나당 침실 개수 속성 추가 여부
- fit() 메서드: 계산해야 하는 파라미터가 없음. 바로 self 리턴
- transform() 메서드: 넘파이 어레이를 입력받아 속성을 추가한 어레이를 반환

```
class CombinedAttributesAdder(BaseEstimator, TransformerMixin):
    def __init__(self, add_bedrooms_per_room = True):
        ...

def fit(self, X, y=None):
        return self

def transform(self, X):
        ...
```

상속하면 좋은 클래스

- BaseEstimator 상속: 하이퍼파라미터 튜닝 자동화에 필요한 get_params(), set_params() 메서드 제공
- TransformerMixin 상속: fit_transform() 자동 생성

2.5.4 특성 스케일링: 수치형 데이터 전처리 과정 3

- 머신러닝 알고리즘은 입력 데이터셋의 특성값들의 스케일(범위)이 다르면 제대로 작동하지 않음
- 특성에 따라 다루는 숫자의 크기가 다를 때 통일된 스케일링이 필요
- 아래 두 가지 방식이 일반적으로 사용됨.
 - min-max 스케일링
 - 표준화 (책에서 사용)
- 주의: 타깃(레이블)에 대한 스케일링은 하지 않음

min-max 스케일링

- 정규화(normalization)라고도 불림
- 특성값 $x = \frac{x min}{max min}$ 로 변환
- 변환 결과: **0에서 1**사이
- 이상치에 매우 민감
 - 이상치가 매우 **크면 분모가 매우 커져서** 변환된 값이 **0 근처**에 몰림

표준화(standardization)

• 특성값 $x = \frac{x-\mu}{\sigma}$ 로 변환

■ *μ*: 특성값들의 **평균**값

■ *σ*: 특성값들의 **표준편차**

- 결과: 변환된 데이터들이 표준정규분포를 이름
 - 이상치에 상대적으로 영향을 덜 받음.
- 사이킷런의 StandardScaler 변환기 활용 가능 (책에서 사용)

변환기 관련 주의사항

- fit() 메서드: 훈련 세트에 대해서만 적용. 테스트 세트는 활용하지 않음.
- transform() 메서드: 테스트 세트 포함 모든 데이터에 적용
 - 훈련 세트를 이용하여 필요한 파라미터를 확인한 후 그 값들을 이용하여 전체 데이터셋 트를 변환

2.5.5 변환 파이프라인

- 모든 전처리 단계가 정확한 순서대로 진행되어야 함
- 사이킷런의 Pipeline 클래스를 이용하여 파이프라인 변환기 객체 생성 가능

수치형 데이터 변환 파이프라인

- 인자: 이름과 추정기로 이루어진 쌍들의 리스트
- 마지막 추정기 제외 나머지 추정기는 모두 변환기이어야 함.
 - fit_transform() 메서드지원

- 파이프라인으로 정의된 추정기의 유형은 마지막 추정기의 유형과 동일
 - num_pipeline는 변환기. 이유는 std_scaler가 변환기이기 때문임.
- num_pipeline.fit()호출:
 - 마지막 단계 이전 추정기: fit_transform() 메소드 연속 호출. 즉, 변환기가 실행될 때마다 변환도 동시에 진행.
 - 마지막 추정기: fit() 메서드 호출

수치형 / 범주형 데이터 전처리 과정 통합 파이프라인

- 사이킷런의 ColumnTransformer 클래스를 이용하여 특성별로 지정된 전처리를 처리할 수 있도록 지정 가능
- 인자: (이름, 추정기, 적용 대상 열(column) 리스트) 튜플로 이루어진 리스트
- fit() 메서드에 pandas의 데이터프레임을 직접 인자로 사용 가능

- 수치형 특성: num_pipeline 변환기
 - 적용대상열(columns):list(housing_num)
- 범주형 특성: OneHotEncoder 변환기
 - 적용대상열(columns): ["ocean_proximity"]

2.6 모델 선택과 훈련

- 목표 달성에 필요한 두 요소를 결정해야함
 - 학습 모델
 - 회귀 모델 성능 측정 지표
- 목표: 구역별 중간 주택 가격 예측 모델
- 학습 모델: 회귀 모델
- 회귀 모델 성능 측정 지표: 평균 제곱근 오차(RMSE)

2.6.1 훈련 세트에서 훈련하고 평가하기

- 지금까지 한 일
 - 훈련 세트 / 테스트 세트 구분
 - 변환 파이프라인을 활용한 데이터 전처리
- 이제 할 일
 - 예측기 모델 선택 후 훈련시키기
 - 예제: 선형 회귀, 결정트리 회귀
- 예측기 모델 선택 후 훈련과정은 매우 단순함.
 - fit() 메서드를 전처리 처리가 된 훈련 데이터셋에 적용

선형 회귀 모델(4장)

- 선형 회귀 모델 생성: 사이킷런의 LinearRegression 클래스 활용
- 훈련 및 예측
 - 예측은 훈련 세트에 포함된 몇 개 데이터를 대상으로 예측 실행

from sklearn.linear_model import LinearRegression

```
lin_reg = LinearRegression()
lin_reg.fit(housing_prepared, housing_labels)
lin reg.predict(housing prepared)
```

선형 회귀 모델의 훈련 세트 대상 예측 성능

- RMSE(평균 제곱근 오차)가 68628.198 정도로 별로 좋지 않음.
- 훈련된 모델이 훈련 세트에 **과소적합** 됨.
 - 보다 좋은 특성을 찾거나 더 강력한 모델을 적용해야 함.
 - 보다 좋은 특성 예제: 로그 함수를 적용한 인구수 등
 - 모델에 사용되는 규제(regulaization, 4장)를 완화할 수도 있지만 위 모델에선 어떤 규제도 적용하지 않았음.

결정트리 회귀 모델(6장)

- 결정 트리 모델은 데이터에서 복잡한 비선형 관계를 학습할 때 사용
- 결정트리 회귀 모델 생성: 사이킷런의 DecisionTreeRegressor 클래스 활용
- 훈련 및 예측
 - 예측은 훈련 세트에 포함된 몇 개 데이터를 대상으로 예측 실행

from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor

```
tree_reg = DecisionTreeRegressor(random_state=42)
tree_reg.fit(housing_prepared, housing_labels)
housing predictions = tree reg.predict(housing prepared)
```

결정트리 회귀 모델의 훈련 세트 대상 예측 성능

- RMSE(평균 제곱근 오차)가 0으로 완벽해 보임.
- 훈련된 모델이 훈련 세트에 심각하게 **과대적합** 됨.
 - 실전 상황에서 RMSE가 0이 되는 것은 불가능.
 - 훈련 세트가 아닌 테스트 세트에 적용할 경우 RMSE가 크게 나올 것임.

2.6.2 교차 검증을 사용한 평가

- 테스트 세트를 사용하지 않으면서 훈련 과정을 평가할 수 있음.
- **교차 검증** 활용

k-겹 교차 검증

- 훈련 세트를 **폴드**(fold)라 불리는 k-개의 부분 집합으로 무작위로 분할
- 총 k 번 지정된 모델을 훈련
 - 훈련할 때마다 매번 다른 하나의 폴드 선택
 - 다른 (k-1) 개의 폴드를 이용해 훈련
 - 평가는 선택된 폴드 활용
- 최종적으로 k 번의 평가 결과가 담긴 배열 생성

예제: 결정 트리 모델 교차 검증 (k = 10인 경우)

- k-겹 교차 검증의 모델 학습 과정에서 성능을 측정할 때 높을 수록 좋은 **효용함수** 활용
 - scoring="neg mean squared error"
 - RMSE의 음숫값
- 교차 검증의 RMSE: 다시 음숫값(-scores) 사용
 - 평균 RMSE: 약 71407
 - 별로 좋지 않음.

예제: 선형 회귀 모델 교차 검증 (k = 10 인 경우)

- 교차 검증의 RMSE 평균: 약 69052
 - 결정트리 회귀 모델보다 좋음.

앙상블 학습 (7장)

- 여러 개의 다른 모델을 모아서 하나의 모델을 만드는 기법
- 머신러닝 알고리즘의 성능을 극대화는 방법 중 하나

랜덤 포레스트 회귀 모델 (7장)

- 앙상블 학습에 사용되는 하나의 기법
- 특성을 무작위로 선택해서 생성한 여러 개의 결정 트리를 훈련 시킨 후 각 모델의 예측 값의 평균 값을 예측값으로 사용하는 모델

- 사이킷런의 RandomForestRegressor 클래스 활용
- 훈련 및 예측

from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor

```
forest_reg = RandomForestRegressor(n_estimators=100, random_state=42)
forest_reg.fit(housing_prepared, housing_labels)
```

housing_predictions = forest_reg.predict(housing_prepared)

- 랜덤 포레스트 모델의 RMSE: 약 50182
 - 지금까지 사용해본 모델 중 최고
 - 하지만 여전히 과대적합되어 있음.

2.7 모델 세부 튜닝

- 살펴 본 모델 중에서 **랜덤 포레스트** 모델의 성능이 가장 좋았음
- 가능성이 높은 모델을 선정한 후에 **모델 세부 설정을 튜닝**해야함
- 튜닝을 위한 세 가지 방식
 - 그리드 탐색
 - 랜덤 탐색
 - 앙상블 방법

2.7.1 그리드 탐색

- 지정한 하이퍼파라미터의 모든 조합을 교차검증하여 최선의 하이퍼파라미터 조합 찾기
- 사이킷런의 GridSearchCV 활용

예제: 그리드 탐색으로 랜덤 포레스트 모델에 대한 최적 조합 찾기

- 총 (3x4 + 2x3 = 18) 가지의 경우 확인
- 5-겹 교차검증(cv=5)이므로, 총 (18x5 = 90)번 훈련함.

그리드 탐색 결과

- 최고 성능의 랜덤 포레스트 하이퍼파라미터가 다음과 같음.
 - max_features:8
 - n estimators:30
 - 지정된 구간의 최고값들이기에 구간을 좀 더 넓히는 게 좋아 보임
- 최고 성능의 랜덤 포레스트에 대한 교차검증 RMSE: 49682
 - 하나의 랜덤 포레스트보다 좀 더 좋아졌음.

2.7.2 랜덤 탐색

- 그리드 탐색은 적은 수의 조합을 실험해볼 때 유용
- 조합의 수가 커지거나, 설정된 탐색 공간이 커지면 랜덤 탐색이 효율적
 - 설정값이 연속적인 값을 다루는 경우 랜덤 탐색이 유용
- 사이킷런의 RandomizedSearchCV 추정기가 랜덤 탐색을 지원

예제: 랜덤 탐색으로 랜덤 포레스트 모델에 대한 최적 조합 찾기

- n iter=10: 랜덤 탐색이 총 10회 진행
 - n estimators와 max features 값을 지정된 구간에서 무작위 선택
- cv=5: 5-겹 교차검증. 따라서 랜덤 포레스트 학습이 (10x5=50)번 이루어짐.

랜덤 탐색 결과

- 최고 성능의 랜덤 포레스트 하이퍼파라미터가 다음과 같음.
 - max_features:7
 - n_estimators:180
- 최고 성능의 랜덤 포레스트에 대한 교차검증 RMSE: 49150

2.7.3 앙상블 방법

- 결정 트리 모델 하나보다 랜덤 포레스트처럼 여러 모델로 이루어진 모델이 보다 좋은 성능을 낼 수 있음.
- 또한 최고 성능을 보이는 서로 다른 개별 모델을 조합하면 보다 좋은 성능을 얻을 수 있음
- 7장에서 자세히 다룸

2.7.4 최상의 모델과 오차 분석

- 그리드 탐색과 랜덤 탐색 등을 통해 얻어진 최상의 모델을 분석해서 문제에 대한 좋은 통창을 얻을 수 있음
- 예를 들어, 최상의 랜덤 포레스트 모델에서 사용된 특성들의 중요도를 확인하여 일부 특성을 제외할 수 있음.
 - 중간 소득(median income)과 INLAND(내륙, 해안 근접도)가 가장 중요한 특성으로 확인됨
 - 해안 근접도의 다른 네 가지 특성은 별로 중요하지 않음

```
[(0.36615898061813423, 'median income'),
(0.16478099356159054, 'INLAND'),
(0.10879295677551575, 'pop per hhold'),
(0.07334423551601243, 'longitude'),
(0.06290907048262032, 'latitude'),
(0.056419179181954014, 'rooms per hhold'),
(0.053351077347675815, 'bedrooms per room'),
(0.04114379847872964, 'housing median age'),
(0.014874280890402769, 'population'),
(0.014672685420543239, 'total rooms'),
(0.014257599323407808, 'households'),
(0.014106483453584104, 'total bedrooms'),
(0.010311488326303788, '<1H OCEAN'),
(0.0028564746373201584, 'NEAR OCEAN'),
(0.0019604155994780706, 'NEAR BAY'),
(6.0280386727366e-05, 'ISLAND')]
```

2.7.5 테스트 셋으로 시스템 평가하기

1. 최고 성능 모델 확인

final_model = grid_search.best_estimator_

- 1. 테스트 세트 전처리
 - 전처리 파이프라인의 transform() 메서드를 직접 활용
 - **주의**: fit() 메서드는 전혀 사용하지 않음
- 1. 최고 성능 모델을 이용하여 예측하기
- 1. 최고 성능 모델 평가 및 론칭

최상의 모델 성능 평가

• 테스트 세트에 대한 최고 성능 모델의 RMSE: 47730

최상의 모델 성능 배포



데이터셋 및 모델 백업

- 완성된 모델은 항상 백업해 두어야 함. 업데이트된 모델이 적절하지 않은 경우 이전 모델로 되돌려 야 할 수도 있음.
 - 백업된 모델과 새 모델을 쉽게 비교할 수 있음.
- 동일한 이유로 모든 버전의 데이터셋을 백업해 두어야 함.
 - 업데이트 과정에서 데이터셋이 오염될 수 있기 때문임.