2장 머신러닝 프로젝트 처음부터 끝까지

• 주택 가격을 예측하는 회귀 작업을 살펴보면서 선형 회귀, 결정 트리, 랜덤 포레스트 등 여러 알고 리즘 학습

2.1 실제 데이터로 작업하기

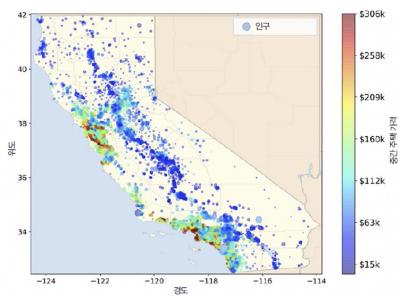
- 유명한 공개 데이터 저장소
 - UC 얼바인Irvine 머신러닝 저장소(<u>http://archive.ics.uci.edu/ml</u> (<u>http://archive.ics.uci.edu/ml</u>))
 - 캐글Kaggle 데이터셋(<u>http://www.kaggle.com/datasets</u> (<u>http://www.kaggle.com/datasets</u>))
 - 아마존 AWS 데이터셋(<u>https://registry.opendata.aws</u> (<u>https://registry.opendata.aws</u>))
- 메타 포털(공개 데이터 저장소가 나열)
 - 데이터 포털Data Portals(http://dataportals.org(http://dataportals.org(http://dataportals.org(http://dataportals.org(http://dataportals.org))
 - 오픈 데이터 모니터Open Data Monitor(<u>http://opendatamonitor.eu</u> (<u>http://opendatamonitor.eu</u>))
 - 퀀들Quandl(<u>http://quandl.com (http://quandl.com)</u>)
- 인기 있는 공개 데이터 저장소가 나열되어 있는 다른 페이지
 - 위키백과 머신러닝 데이터셋 목록(<u>https://goo.gl/SJHN2k</u> (<u>https://goo.gl/SJHN2k</u>))
 - Quora.com(https://homl.info/10)
 - 데이터셋 서브레딧subreddit(<u>http://www.reddit.com/r/datasets</u> (<u>http://www.reddit.com/r/datasets</u>)

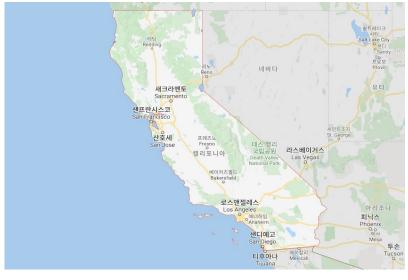
2.2 큰 그림 보기

- 주어진 데이터: 미국 캘리포니아 인구조사 데이터
 - 특성: 구역(block)별 인구, 중간 소득, 경도, 위도 등
 - 레이블: 중간 주택 가격
- 목표: 캘리포니아 주택가격 모델 구현

문제 정의

- 지도 학습(supervised learning): 조사된 주택가격 레이블 활용 훈련
- 회귀(regression): 중간 주택 가격 예측
 - 다중 회귀(multiple regression): 여러 특성을 활용한 예측
 - 단변량 회귀(univariate regression): 구역마다 하나의 가격만 예측
- 배치 학습(batch learning): 빠르게 변하는 데이터에 적응할 필요가 없음





2.3 데이터 구하기

작업환경 만들기

- 추천: 구글 코랩, Docker 등 활용
- 직접 개발환경 설정하기는 교재 2.3.1절 참조

데이터 다운로드

- StaLib 저장소에 있는 데이터 활용
- 저자가 교육 목적으로 일부 특성 제외 및 범주형 특성 추가

데이터 구조 훑어보기

pandas의 데이터프레임 활용

• head(), info(), describe(), hist() 등을 사용하여 데이터 구조 훑어보기

head () 메서드 활용 결과

In [5]: housing.head()

Out[5]:

	longitude	latitude	housing_median_age	total_rooms	total_bedrooms	population
0	-122.23	37.88	41.0	880.0	129.0	322.0
1	-122.22	37.86	21.0	7099.0	1106.0	2401.0
2	-122.24	37.85	52.0	1467.0	190.0	496.0
3	-122.25	37.85	52.0	1274.0	235.0	558.0
4	-122.25	37.85	52.0	1627.0	280.0	565.0

info() 메서드 활용 결과

- 1. 총 샘플링 개수: 20,640
 - 캘리포니아를 20,640구역으로 나위어 조사한 인구조사
 - 구역 크기:8 600 ~ 3,000명
- 2. 구역별로 경도, 위도, 중간 주택 연도, 해안 근접도 등 총 10개의 조사 항목
- 3. '해안 근접도'는 범주형 데이터이고 나머지는 수치형 데이터.
- 4. '방의 총 개수'의 경우 누락된 데이터인 207개의 null 값 존재

범주형 데이터 탐색

- '해안 근접도'는 5개의 범주로 구분
 - <1H OCEAN: 해안에서 1시간 이내
 - INLAND: 내륙
 - NEAR OCEAN: 해안 근처
 - NEAR BAY: Bay Area라 불리는 샌프란시스코 도시 중심 지역
 - ISLAND: 섬

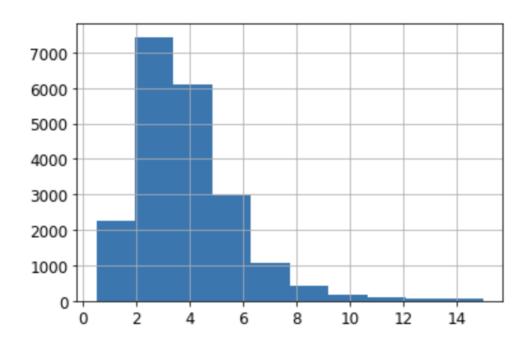
테스트 세트 만들기

- 모델 학습 시작 이전
 - 준비된 데이터셋을 훈련 세트과 테스트 세트로 구분
- 테스트 세트에 포함된 데이터는 미리 분석하지 말 것.
 - 미리 분석 시 **데이터 스누핑 편향**을 범할 가능성이 높아짐
 - 미리 보면서 알아낸 직관이 학습 모델 설정에 영향을 미칠 수 있음
 - 테스트 세트 크기: 전체 데이터 셋의 20%
- 훈련 세트와 데이터 세트를 구분하는 방식에 따라 결과가 조금씩 달라짐
 - 무작위 샘플링 vs. 계층적 샘플링
- 여기서는 계층적 샘플링 활용

계층적 샘플링

- 계층: 동질 그룹
- 테스트 세트: 전체 계층을 대표하도록 각 계층별로 적절한 샘플 추출
 - 계층 기준 예제: 소득
- 소득의 범주: 계층별로 충분한 크기의 샘플이 포함되도록 지정
 - 학습 과정에서 편향이 발생하지 않도록 하기 위해
 - 특정 소득 구간에 포함된 샘플이 과하게 적거나 많으면 해당 계층의 중요도가 과대 혹은 과소 평가될 것

• 전체 데이터셋의 중간 소득 히스토그램 활용



- 대부분 구역의 중간 소득이 **1.5~6.0**(15,000~60,000\$) 사이
- 소득 구간을 아래 숫자를 기준으로 5개로 구분

[0, 1.5, 3.0, 4.6, 6.0, np,inf]

계층 샘플링과 무작위 샘플링 비교

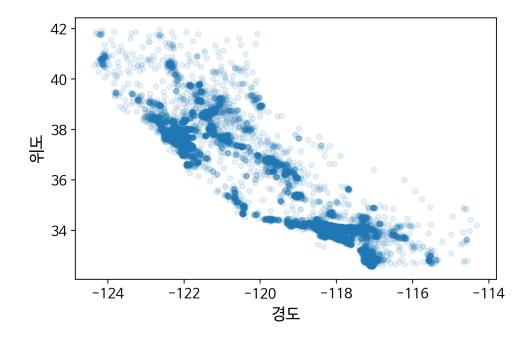
	전체	계층 샘플링	무작위샘플링	무작위 샘플링 오류율	계층 샘플링 오류율
1	0.039826	0.039729	0.040213	0.973236	-0.243309
2	0.318847	0.318798	0.324370	1.732260	-0.015195
3	0.350581	0.350533	0.358527	2.266446	-0.013820
4	0.176308	0.176357	0.167393	-5.056334	0.027480
5	0.114438	0.114583	0.109496	-4.318374	0.127011

2.4 데이터 이해를 위한 탐색과 시각화

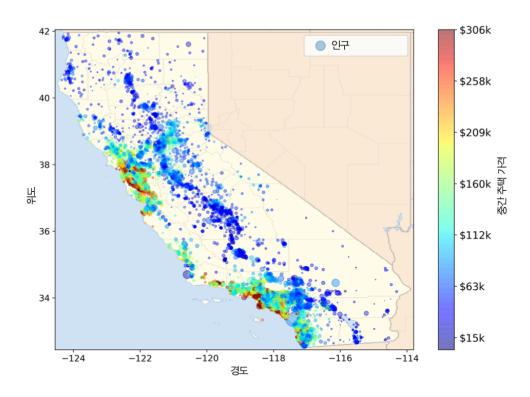
• 테스트 세트를 제외한 훈련 세트에 대해서만 시각화를 이용하여 탐색

지리적 데이터 시각화

- 구역이 집결된 지역과 그렇지 않은 지역 구분 가능
- 샌프란시스코의 베이 에어리어, LA, 샌디에고 등 밀집된 지역 확인 가능



- 주택 가격이 해안 근접도, 인구 밀도와 관련이 큼
- 해안 근접도: 위치에 따라 다르게 작용
 - 대도시 근처: 해안 근처 주택 가격이 상대적 높음
 - 북부 캘리포니아 지역: 높지 않음



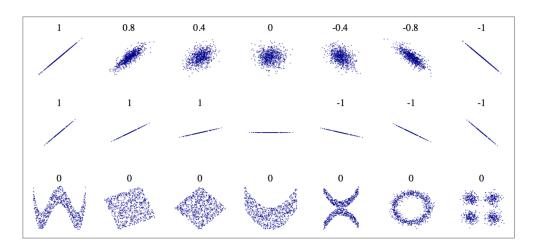
상관관계 조사

• 중간 주택 가격 특성과 다른 특성 사이의 상관관계: 상관계수 활용

```
In [39]: corr_matrix["median_house_value"].sort_values(ascending=False)
Out[39]: median_house_value
                              1.000000
         median income
                              0.687160
         total rooms
                              0.135097
         housing median age
                              0.114110
         households
                              0.064506
         total bedrooms
                              0.047689
         population
                             -0.026920
         longitude
                             -0.047432
         latitude
                             -0.142724
         Name: median house value, dtype: float64
```

상관계수의 특징

- 상관계수: [-1, 1] 구간의 값
- 1에 가까울 수록: 강한 양의 선형 상관관계
- -1에 가까울 수록: 강한 음의 선형 상관관계
- 0에 가까울 수록: 매우 약한 선형 상관관계



주의사항

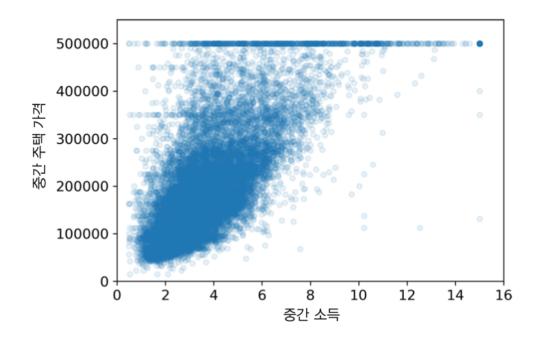
- 상관계수가 0에 가까울 때: 선형 관계가 거의 없다는 의미이지, 아무런 관계가 없다는 의미는 아님
- 상관계수는 기울기와 아무 연관 없음

상관계수를 통해 확인할 수 있는 정보

- 중간 주택 가격과 중간 소득의 상관계수가 0.68로 가장 높음
 - 중간 소득이 올라가면 중간 주택 가격도 상승하는 경향이 있음

중간 주택 가격과 중간 소득의 관계

- 산점도활용
 - 점들이 너무 넓게 퍼져 있음. 완벽한 선형관계와 거리 멂.
 - 50만 달러 수평선: 가격 제한
 - 35만, 28만, 그 아래 정도에서도 수평선 존재
 - 이상한 형태를 학습하지 않도록 해당 구역을 제거하는 것이 좋음.



특성 조합 실험

- 구역별 방의 총 개수와 침실의 총 개수 대신 아래 특성이 보다 유용함
 - '가구당 방 수'(rooms for household)
 - '방 하나당 침실 수'(bedrooms for room)
 - '가구당 인원'(population per household)

- 특성별 상관계수 다시 확인
 - 중간 주택 가격과 방 하나당 침실 개수: -0.26
 - 방하나당 침실 개수가 적을 수록 주택 가격이 상승하는 경향

2.5 머신러닝 알고리즘을 위한 데이터 준비

데이터 전치리와 변환 파이프라인

- 데이터 전처리(data preprocessing): 모델 학습을 효율적으로 진행하기 위해 주어진 데이터를 변환시키는 것
- 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)
- 수치형 데이터 전처리 과정에 사용된 세 가지 변환과정은 파이프라인을 이용하여 자동화
- 이후 원-핫-인코딩 변화과정으로 변환된 범주형 데이터와 결합하면서 전처리 과정이 완료됨

사이킷런 API 활용

- 변환과정 중에서 '조합 특성 추가' 과정을 제외한 나머지 과정은 사이킷런에서 제공하는 관련 API 를 활용
- '조합 특성 추가' 과정도 다른 사이킷런 API와 호환이 되는 방식으로 사용자가 직접 구현하는 방법을 설명
- 사이킷런에서 제공하는 API는 일관되고 단순한 인터페이스를 제공
- 이 성질을 이용하여 '조합 특성 추가' 과정을 지원하는 API를 구현하면 사이킷런의 다른 API와 자동으로 호환

일관성

- 모든 사이킷런의 API는 일관되고 단순한 인터페이스를 제공
- 대표적인 API는 세 가지

- 추정기(estimator)
 - 데이터셋을 기반으로 특정 모델 파라미터들을 추정하는 클래스의 객체이며, fit() 메서 드가 이 기능을 수행
 - fit()메서드의 리턴값: 생성된 모델 파라미터를 인스턴스 속성으로 갖는 self
 - 특정 속성이 업데이트된 객체 자신이 리턴값

- 변환기(transformer):
 - 데이터셋을 변환하는 추정기이며, transform()이 이 기능을 수행
 - 변환기는 fit()과 transform() 모두 포함되어 있어야 함
 - fit() 메서드에 의해 학습된 파라미터를 이용하여 데이터셋을 변환한다.
 - 모든 변화기는 fit() 메서드와 transform() 메서드를 연속해서 호출하는 fit_transform() 메서드를 함께 제공

- 예측기(predictor): 데이터셋의 특정 특성에 대한 예측을 하는 추정기
 - 주어진 데이터셋과 관련된 값을 예측하는 기능을 제공하는 추정기이며, predict() 메서 드가 이 기능을 수행
 - fit()과 predict() 메서드가 포함되어 있어야 함
 - predict() 메서드가 추정한 값의 성능을 측정하는 score() 메서드도 포함
 - 일부 예측기는 추정치의 신뢰도를 평가하는 기능도 제공

수치형 데이터 전치러 과정 1: 데이터 정제

- 누락된 특성값 존재 경우
 - 해당 값 또는 특성을 먼저 처리하고 모델 학습 진행
- total_bedrooms 특성에 207개 구역에 대한 값이 null로 채워져 있음, 즉, 일부 구역에 대한 정보가 누락됨.

- null 값 처리 방법
 - 해당 구역 제거
 - 전체 특성 삭제
 - 특정 값으로 채우기
 - 0, 평균값, 중앙값 등
 - 책에서는 중앙값으로 채움.

텍스트와 범주형 특성 다루기: 원-핫 인코딩

• 범주형 입력 특성인 해안 근접도(ocean_proximity)를 수치형 데이터로 변환

단순 수치화의 문제점

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

원-핫 인코딩(one-hot encoding)

- 수치화된 범주들 사이의 크기 비교를 피하기 위해 더미(dummy) 특성을 추가하여 활용
- 생성되는 더미 특성은 사용된 범주를 사용
- 예를 들어, 해안 근접도 특성 대신에 다섯 개의 범주 전부를 새로운 특성으로 추가 -> 각각의 특성 값을 아래와 같이 정함
 - 해당 카테고리의 특성값: 1
 - 나머지 카테고리의 특성값: 0

수치형 데이터 전처리 과정 2: 조합 특성 추가

- 특성 추가를 위해 변환기 클래스를 직접 정의
- 앞서 살펴본 다음 세 가지 특성을 자동으로 추가하는 변환기 클래스를 정의
 - 가구당 방 개수(rooms for household)
 - 방하나당 침실 개수(bedrooms for room)
 - 가구당 인원(population per household)
- 변환기 클래스를 선언하기 위해서는 fit() 메서드와 transform() 메서드만 정의하면 됨
- 주의: fit() 메서드의 리턴값은 self

CombinedAttributesAdder 변환기 클래스 선언

- init() 메서드: 방 하나당 침실 개수 속성을 추가할지 여부를 확인
- fit() 메서드: 계산해야 하는 파라미터가 없음
 - 아무 일도 할 필요 없이 바로 self를 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):
        ...
```

수치형 데이터 전처리 과정 3: 특성 스케일링

- 머신러닝 알고리즘은 입력 데이터셋의 특성값들의 스케일(범위)이 다르면 제대로 작동하지 않음
- 특성에 따라 다루는 숫자의 크기가 다를 때 통일된 스케일링이 필요
- 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.

주의사항

- 모든 변환기의 fit() 메서드는 훈련 데이터에 대해서만 적용
- transform() 메서드는 모든 데이터에 대해 적용
 - 훈련 세트를 이용하여 필요한 파라미터를 확인한 후 그 값들을 이용하여 전체 데이터셋 트를 변환
 - 예를 들어, 따로 떼어놓은 테스트 데이터들은 훈련 데이터를 이용하여 확인된 값들을 이용하여 특성 스케일링을 진행

변환 파이프라인

- 모든 전처리 단계를 정확한 순서대로 연속적으로 진행되어야 함
- 사이킷런의 Pipeline 클래스가 이 기능을 지원
- 수치형 데이터 전처리 과정을 파이프라인으로 묶은 방법

pipeline 클래스 활용

- Pipeline의 인스턴스 생성에 필요한 인자는 추정기의 이름과 추정기의 쌍으로 이루어진 튜플들의 리스트
- 마지막 추정기를 제외하면 모두 변환기 즉, fit_transform() 메서드를 포함하고 있어야 함
- 생성된 파이프라인 객체의 fit() 메서드를 호출하면, 마지막 단계 이전까지는 해당 변환기의 fit_transform() 메소드가 연속해서 호출되며, 최종적으로 마지막 추정기의 fit() 메서드가 호출

ColumnTransformer 클래스

- 사이킷런의 ColumnTransformer 클래스를 이용하여 특성별로 지정된 전처리를 처리할 수 있도록 지정 가능
 - 수치형 특성: num_pipeline 변환기
 - 범주형 특성: OneHotEncoder 변환기

2.6 모델 선택과 훈련

- 전처리 후 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)

회귀 모델 성능 측정 지표

평균 제곱근 오차(root mean square error, RMSE):

ullet RMSE는 유클리디안 노름 또는 ℓ_2 노름으로도 불림

RMSE(X, h) =
$$\sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m-1} (h(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)})^2}$$

- X: (평가대상) 데이터셋 전체 샘플들의 특성값들로 구성된 행렬, 레이블(타겟) 제외
 - m: 데이터셋 X의 크기
 - $\mathbf{x}^{(i)}$: i 번째 샘플의 전체 특성값 벡터. 레이블(타겟) 제외
 - $y^{(i)}$: i 번째 샘플의 레이블
 - *h*: 예측 함수
 - $\hat{y}^{(i)} = h(\mathbf{x}^{(i)})$: i 번째 샘플에 대한 예측 값

• 주의

- 인덱스 *i* 가 책에서와는 달리 0부터 시작함.
- 이유는 파이썬 넘파이 어레이, 데이터프레임에 사용되는 인덱스 개념과 통일시키기 위해서임.

평균 절대 오차(mean absolute error, MAE):

- MAE는 맨해튼 노름 또는 ℓ_1 노름으로도 불림
- 이상치가 많은 경우 활용

MAE(**X**, h) =
$$\frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m-1} |h(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)}|$$

훈련 세트에서 훈련하고 평가하기

- 지금까지 한 일
 - 훈련 세트와 테스트 세트로 분류
 - 머신러닝 알고리즘에 주입할 데이터를 자동으로 정제하고 준비하기 위해 변환 파이프 라인 작성
- 이제 할 일
 - 모델 선택 후 훈련시키기
 - 예제: 선형 회귀, 결정트리 회귀

선형 회귀 모델(4장)

• 사이킷런의 선형 회귀 모델은 LinearRegression 예측기 클래스가 제공

● 훈련:

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression
lin_reg = LinearRegression()
lin_reg.fit(housing_prepared, housing_labels)
```

• 예측

lin_reg.predict(housing_prepared))

결정트리 회귀 모델(6장)

- 결정 트리 모델은 데이터에서 복잡한 비선형 관계를 학습할 때 사용
- 사이킷런의 DecisionTreeRegressor 예측기가 결정 트리 회귀 모델을 생성

● 훈련:

from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor

tree_reg = DecisionTreeRegressor(random_state=42)
tree_reg.fit(housing_prepared, housing_labels)

• 예측:

housing_predictions = tree_reg.predict(housing_prepared)

교차 검증을 사용한 평가

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 폴드를 평가에 사용
 - 다른 (k-1) 개의 폴드를 이용해 훈련
- 최종적으로 k 번의 평가 결과가 담긴 배열 생성

예제: 결정 트리 모델 교차 검증

• k = 10으로 설정

• 주의

- 효용함수: k-겹 교차 검증의 모델 학습 과정에서 성능을 측정할 때 높을 수록 좋은 효용 함수 활용
- RMSE의 음숫값을 이용하여 훈련되는 모델 평가
 - o scoring="neg_mean_squared_error"
- 교차 검증 결과 평가를 위해 다시 음숫값(-scores)을 사용해야 함.

예제: 선형 회귀 모델 교차 검증

• k = 10으로 설정

앙상블 학습(7장)

- 여러 다른 모델을 모아서 하나의 모델을 만드는 기법
- 즉, 교차 검증을 일반화 시킨 모델 학습법임.
- 머신러닝 알고리즘의 성능을 극대화는 방법 중 하나

- 앙상블 학습 예제: 랜덤 포레스트
 - 특성을 무작위로 선택해서 많은 결정 트리를 만들고 그 예측을 평균 내는 모델
 - 사이킷런의 RandomForestRegressor 사용법은 기본적으로 동일함.

● 훈련

from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor

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

• 예측

housing_predictions = forest_reg.predict(housing_prepared)

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

그리드 탐색

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

- 예제: **랜덤 포레스트 모델에 대한 최적 조합**을 찾기
 - 총 (3 × 4 + 2 × 3 = 18) 가지 조합 확인
 - 5-겹 교차검증(cv=5)이므로, 총 (18 × 5 = 90)번 훈련함.

from sklearn.model_selection import GridSearchCV

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
- 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 $(10 \times 5 = 50)$ 번 이루어짐

앙상블 방법

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

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 제외 할 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

테스트 셋으로 최상의 모델 평가하기

1. 최상의 모델 확인

final_model = grid_search.best_estimator_

- 2. 테스트 세트 전처리
 - 전처리 파이프라인의 transform() 메서드를 직접 활용
 - **주의**: fit() 메서드는 전혀 사용하지 않음
- 3. 최상의 모델을 이용하여 예측하기
- 4. 최상의 모델 평가 및 론칭