1장 한눈에 보는 머신러닝

모든 데이터 과학자가 꼭 알아야 할 여러 가지 기초 개념과 용어 설명

1.1 머신러닝이란?

- 머신러닝은 **명시적인 프로그래밍** 없이 컴퓨터가 학습하는 능력을 갖추게 하는 연구 분야

머신러닝 프로그램 예제

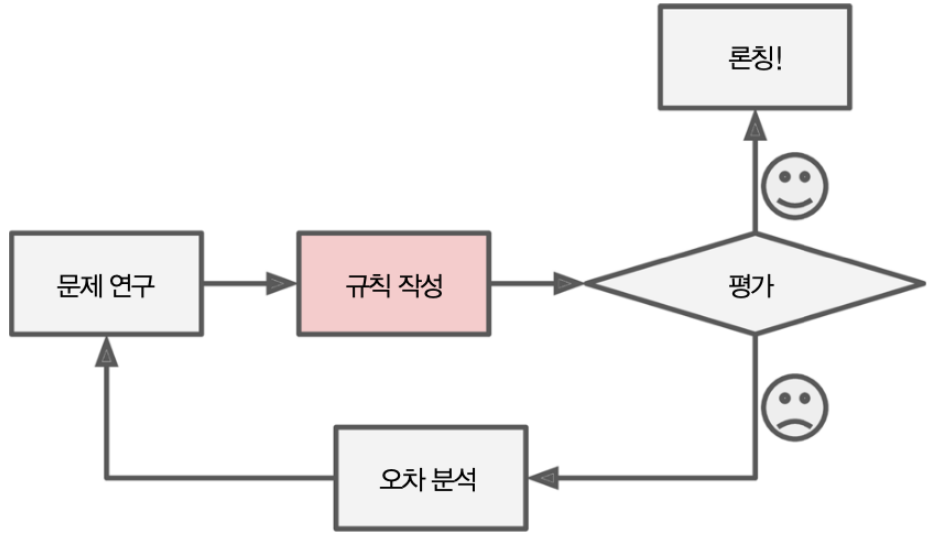
- 스팸 필터
- 스팸(spam)과 스팸이 아닌 메일(ham)의 샘플을 이용하여 스팸메일 구분법 학습

기본 용어

- 훈련 세트(training set): 머신러닝 프로그램이 훈련(학습)하는 데 사용하는 데이터 집합
- 훈련 사례 혹은 샘플(training instance): 각각의 훈련용 데이터

1.2 왜 머신러닝을 사용하는가?

전통적인 프로그래밍

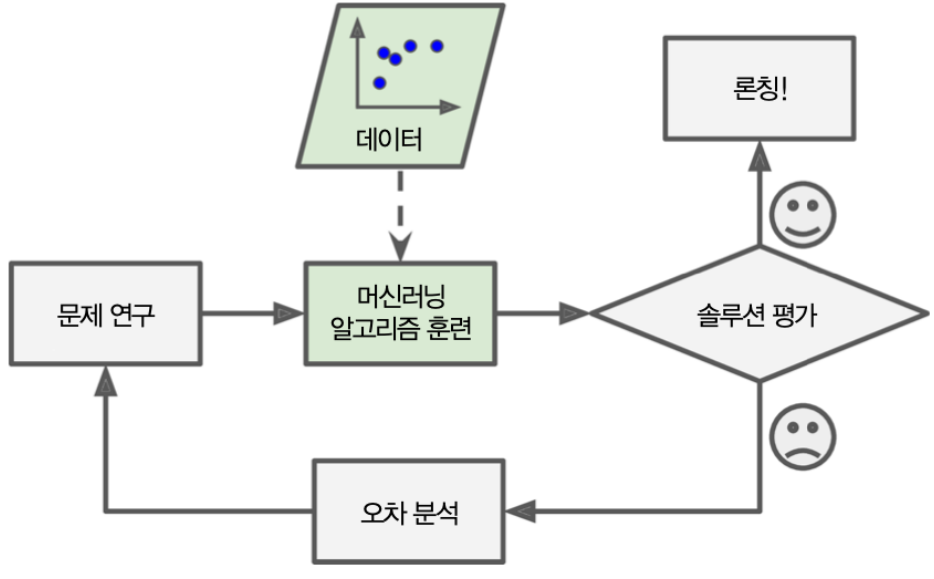


- 전통적인 프로그래밍 접근 방법은 다음과 같다.
    - **문제 연구**: 누군가가 문제를 해결하기 위해 해결책을 찾음
    - **규칙 작성**: 결정된 규칙을 개발자가 프로그램을 작성
    - **평가**: 만들어진 프로그램을 테스트
    - 문제가 없다면 **론칭**, 문제가 있다면 **오차를 분석**한 후 처음 과정부터 다시 실시

예제: 스팸 메일 분류

- **특정 단어**가 들어가면 스팸 메일로
- 프로그램이 론칭된 후 새로운 스팸단어가 생겼을 때 소프트웨어는 이 단어를 자동으로 분류할 수 없음
- 개발자가 새로운 규칙을 업데이트 시켜줘야 함
- **새로운 규칙이 생겼을 때 사용자가 매번 업데이트를** 시켜줘야하기 때문에 유지 보수가 어려움

머신러닝

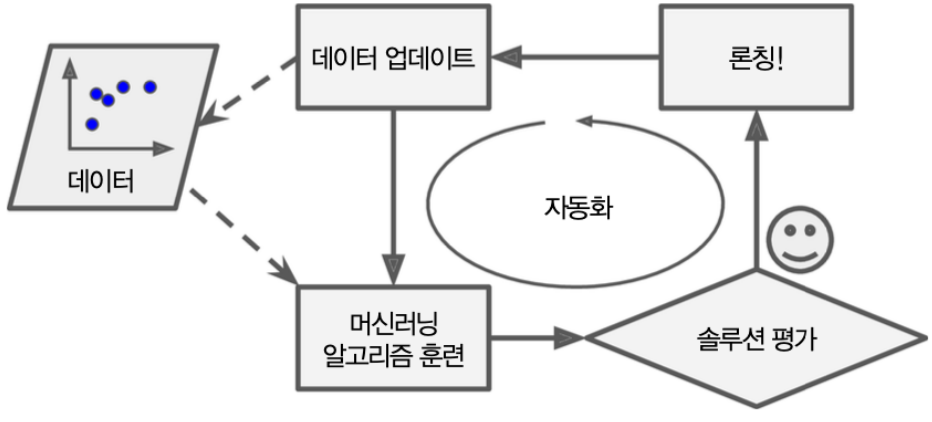


- 즉, 알고리즘이 데이터로부터 스스로 스팸의 특징을 찾음.
- 머신러닝 접근 방법
    - 문제 연구
    - 머신러닝 알고리즘 훈련: 주어진 데이터를 바탕으로 훈련
    - 솔루션 평가: 문제가 없다면 론칭, 문제가 있다면 오차를 분석한 후 처음 과정부터 다시 실시

예제: 스팸 메일 분류

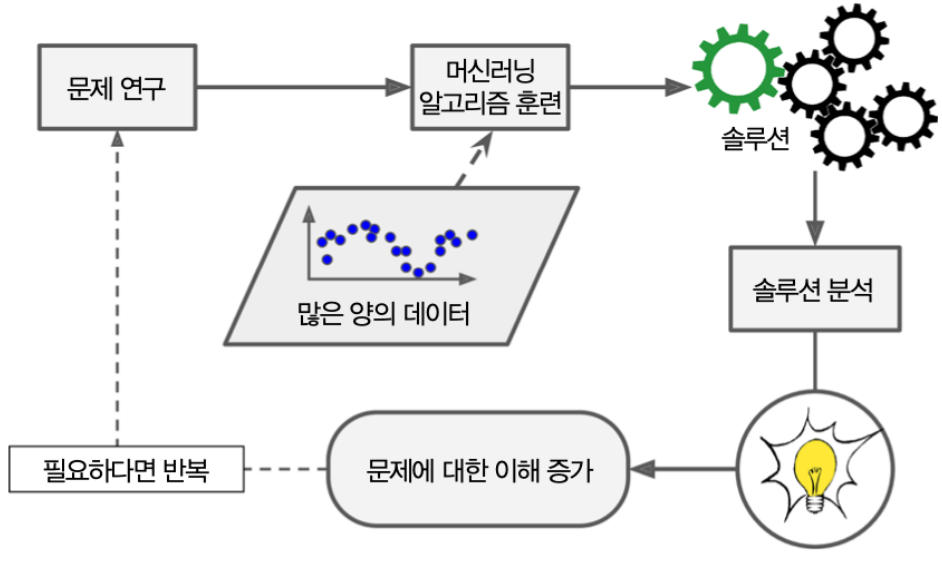
- 사용자가 스팸으로 지정한 메일에 'For U'가 자주 등장하는 경우 이 단어가 포함된 이메일을 스팸으로 분류하도록 스스로 학습

머신러닝 학습 자동화



- 머신러닝 작업 흐름의 전체를 **머신러닝 파이프라인** 또는 **MLOps(Machine Learning Operations, 머신러닝 운영)**라 부르며 자동화가 가능함.
- 참조: [MLOps: 머신러닝의 지속적 배포 및 자동화 파이프라인 (https://cloud.google.com/solutions/machine-learning/mlops-continuous-delivery-and-automation-pipelines-in-machine-learning)](https://cloud.google.com/solutions/machine-learning/mlops-continuous-delivery-and-automation-pipelines-in-machine-learning)

머신러닝의 장점



- 전통적인 방식으로는 해결 방법이 없는 복잡한 문제 해결 가능
- 머신러닝 시스템은 새로운 데이터에 쉽게 적응 가능
- 복잡한 문제와 대량의 데이터에서 통찰 얻기(**데이터 마이닝data mining**)

1.3 적용 사례

대표적인 머신러닝 적용 사례

- 이미지 분류 작업: 생산 라인에서 제품 이미지를 분석해 자동으로 분류
- 시맨틱 분할 작업: 뇌를 스캔하여 종양 진단
- 텍스트 분류(자연어 처리): 자동으로 뉴스 기사 분류
- 텍스트 분류: 토론 포럼에서 부정적인 코멘트를 자동으로 구분
- 텍스트 요약: 긴 문서를 자동으로 요약
- 자연어 이해 : 챗봇(chatbot) 또는 개인 비서 만들기

- 회귀 분석: 회사의 내년도 수익을 예측하기
- 음성 인식: 음성 명령에 반응하는 앱
- 이상치 탐지: 신용 카드 부정 거래 감지
- 군집 작업: 구매 이력을 기반 고객 분류 후 다른 마케팅 전략 계획
- 데이터 시각화: 고차원의 복잡한 데이터셋을 그래프로 효율적 표현
- 추천 시스템: 과거 구매 이력 관심 상품 추천
- 강화 학습: 지능형 게임 봇(bot) 만들기

1.4 머신러닝 시스템의 종류

머신러닝 시스템 분류 기준

훈련 지도 여부

- 지도 학습
- 비지도 학습
- 준지도 학습
- 강화 학습

실시간 훈련 여부

- 온라인 학습
- 배치 학습

예측 모델 사용 여부

- 사례 기반 학습
- 모델 기반 학습

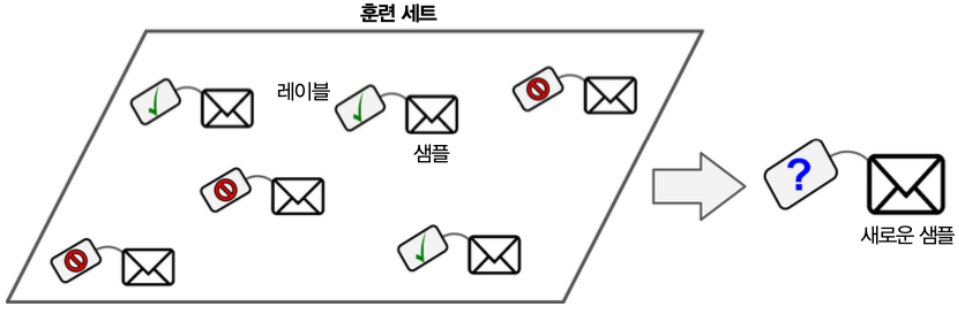
분류 기준의 비배타성

- 분류 기준이 상호 배타적이지 않음.
- 스팸 필터 예제
    - 심층 신경망 모델 활용 실시간 스팸 메일 분류 학습 가능
    - 지도 학습 + 온라인 학습 + 모델 기반 학습

지도 학습

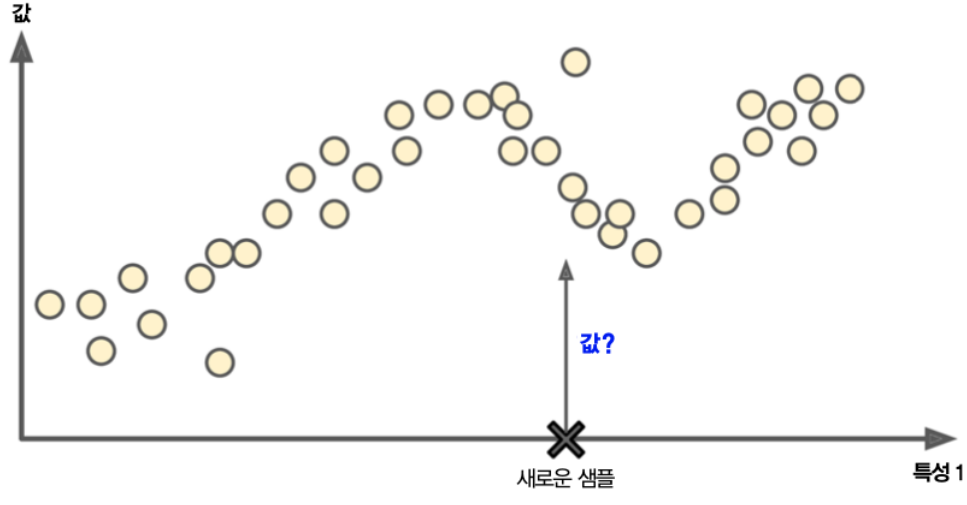
- 훈련 데이터에 **레이블(label)**이라는 답 포함
    - 레이블 대신에 **타깃(target)**이란 표현도 사용됨.
- 대표적 지도 학습
    - 분류
    - 회귀

분류



- 특성을 사용한 데이터 분류
- 예제: 스팸 필터
    - 특성: 소속 정보, 특정 단어 포함 여부 등
    - 레이블(타깃): 스팸 또는 햄

회귀



- 특성을 사용하여 타깃(target) 수치 예측
- 예제: 중고차 가격 예측
    - 특성: 주행거리, 연식, 브랜드 등
    - 타깃: 중고차 가격

중요한 지도학습 알고리즘들

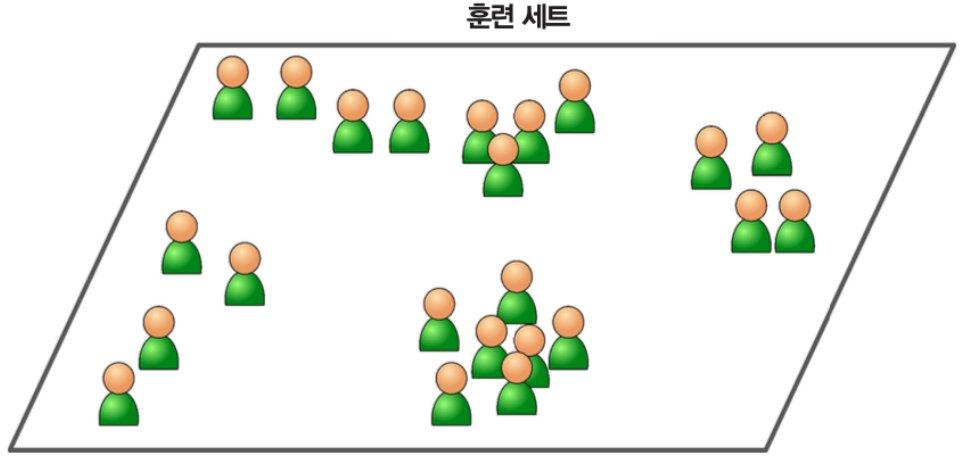
- k-최근접 이웃(k-NNs)
- 선형 회귀(linear regression)
- 로지스틱 회귀(logistic regression)
- 서포트 벡터 머신(support vector machines, SVCs)
- 결정 트리(decision trees)와 랜덤 포레스트(random forests)
- 신경망(neural networks)

주의사항

- 일부 회귀 알고리즘을 분류에 사용
- 일부 분류 알고리즘을 회귀에 사용
- 예제: 로지스틱 회귀, SVM 등등

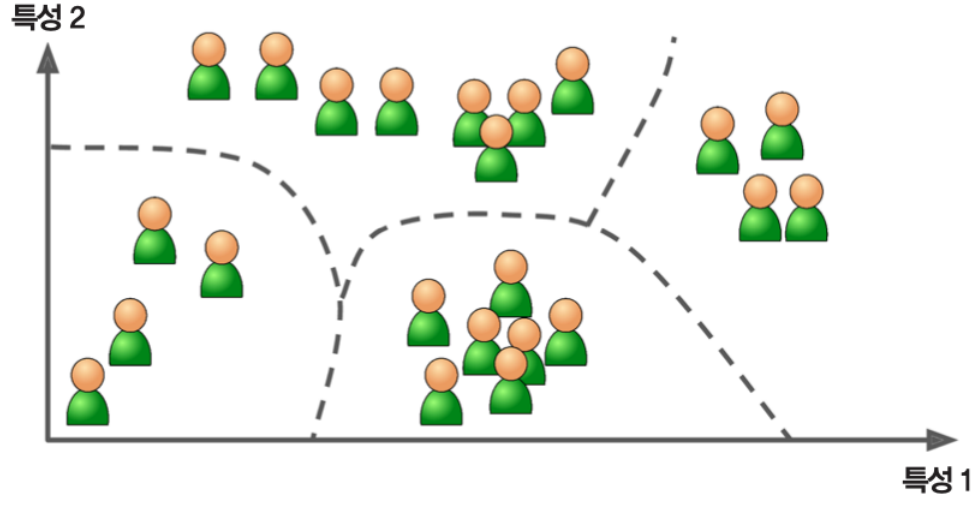
비지도 학습

- **레이블 없는 훈련 데이터**를 이용하여 시스템 스스로 학습



- 대표적 비지도 학습
    - 군집
    - 시각화
    - 차원 축소
    - 연관 규칙 학습

군집



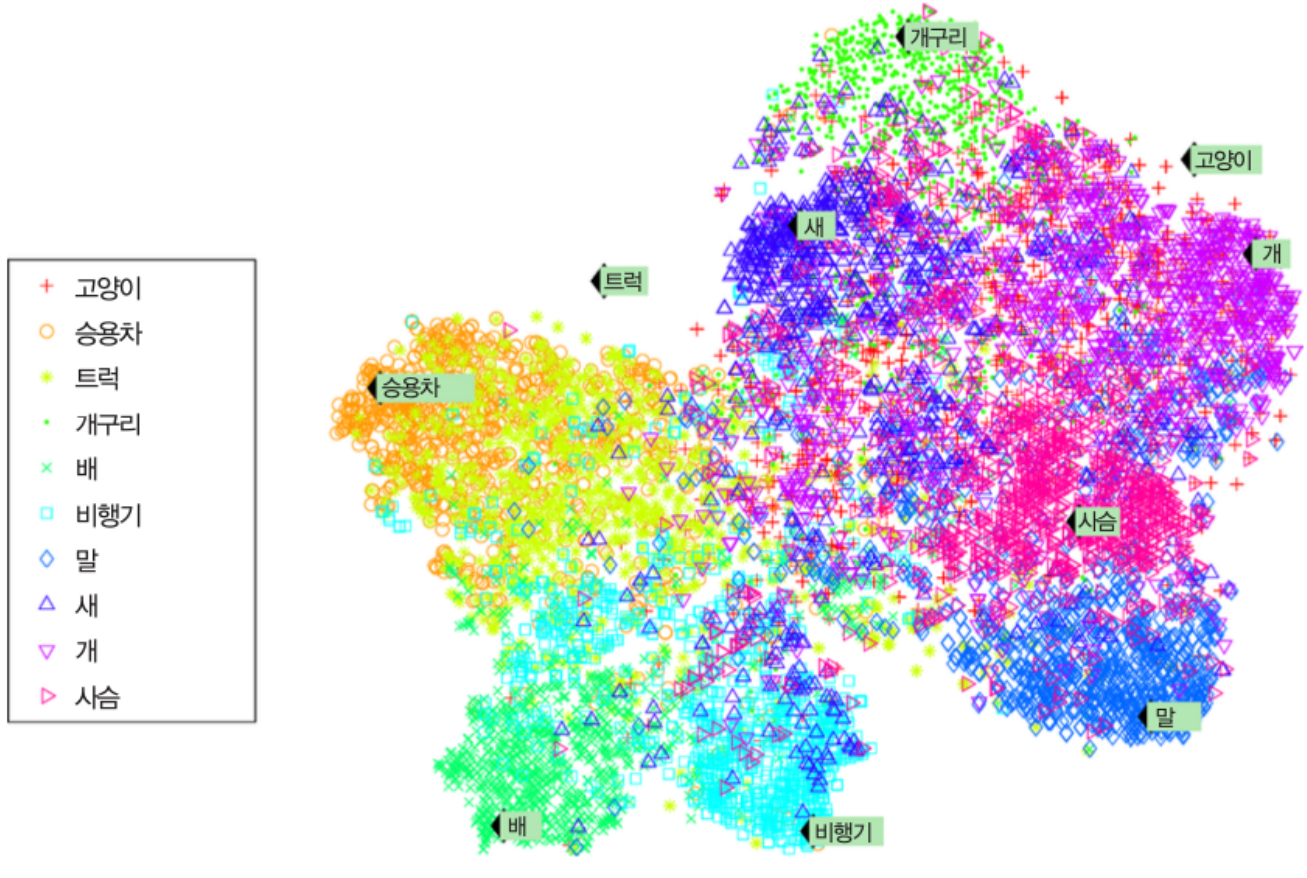
- 데이터를 비슷한 특징을 가진 몇 개의 그룹으로 나누는 것
- 예제
    - 블로그 방문자들을 그룹으로 묶기: 남성, 여성, 주말, 주중, 만화책, SF, 등등

군집 알고리즘

* k-평균
* DBSCAN
* 계층 군집 분석

시각화

- 다차원 특성을 가진 데이터셋을 2D 또는 3D로 표현하기
- 시각화를 하기 위해서는 데이터의 특성을 2가지로 줄여야함



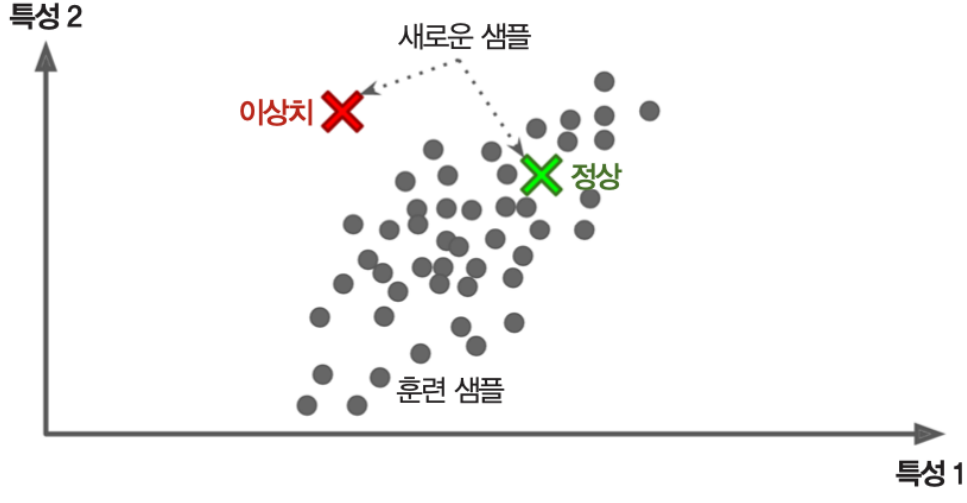
차원 축소

- 데이터의 특성 수 줄이기
- 예제
    - 특성 추출: 상관관계가 있는 여러 특성을 하나로 합치기
    - 자동차의 주행거리와 연식은 상관관계가 높음. 따라서 차의 '마모정도'라는 하나의 특성으로 합칠 수 있음.
- 차원 축소의 장점: 머신러닝 알고리즘의 성능 향상
    - 훈련 실행 속도 빨라짐
    - 메모리 사용 공간 줄어듬

시각화와 차원축소 알고리즘

* 주성분 분석(PCA)
* 커널 PCA
* 지역적 선형 임베딩
* t-SNE

비정상 탐지(anomaly detection)



- 정상 샘플을 이용하여 훈련 후 입력 샘플의 정상여부 판단.
- 예제
    - 부정거래 사용 감지
    - 제조 결함 잡아내기
    - 이상치(outliers) 자동 제거

특이치 탐지(novelty detection)

- 전혀 '오염되지 않은'(clean) 훈련 세트 활용 후 훈련 세트에 포함된 데이터와 달라 보이는 테이터 감지하기

비정상 탐지 vs. 특이치 탐지

- 예제: 수 천장의 강아지 사진에 치와와 사진이 1%정도 포함되어 있는 경우
    - 특이치 탐지 알고리즘은 새로운 치와와 사진을 특이한 것으로 간주하지 않음.
    - 반면에 비정상 탐지 알고리즘은 새로운 치와와 사진을 다른 강아지들과 다른 종으로 간주할 수 있음.

비정상 탐지와 특이치 탐지 알고리즘

- 원-클래스 SVM
- Isolation Forest

연관 규칙 학습

- 데이터 특성 간의 흥미로운 관계 찾기
- 예제
    - 마트 판매 기록: 바비규 소스와 감자 구매와 스테이크 구매 사의 연관성이 밝혀지면 상품을 서로 가까이 진열해야 함.

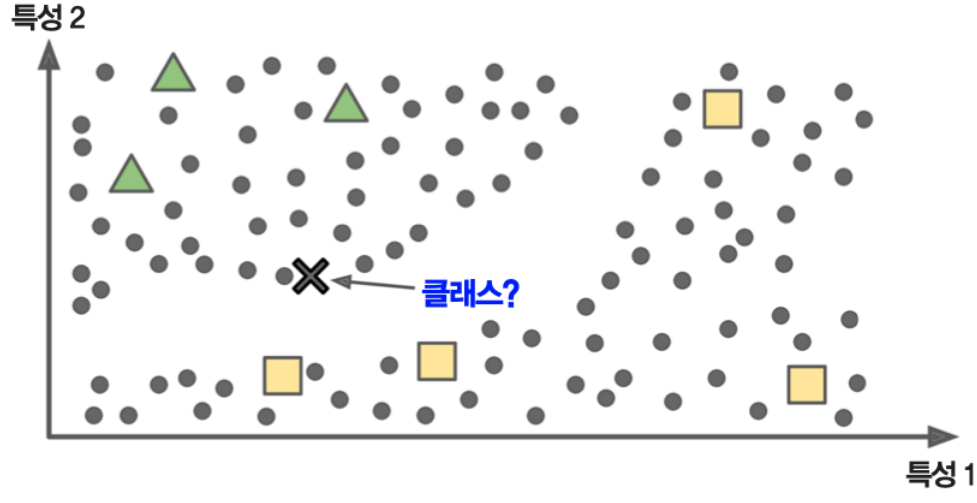
연관 규칙 학습 알고리즘

- Apriori(에이프라이어라이)
- Eclat(에이클라)

준지도 학습

- 적은 수의 샘플에만 레이블 적용
- 비지도 학습을 통해 군집을 분류한 후 샘플들을 활용해 지도 학습을 시킴
- 대부분 지도 학습과 비지도 학습 혼합 사용

준지도 학습 예제



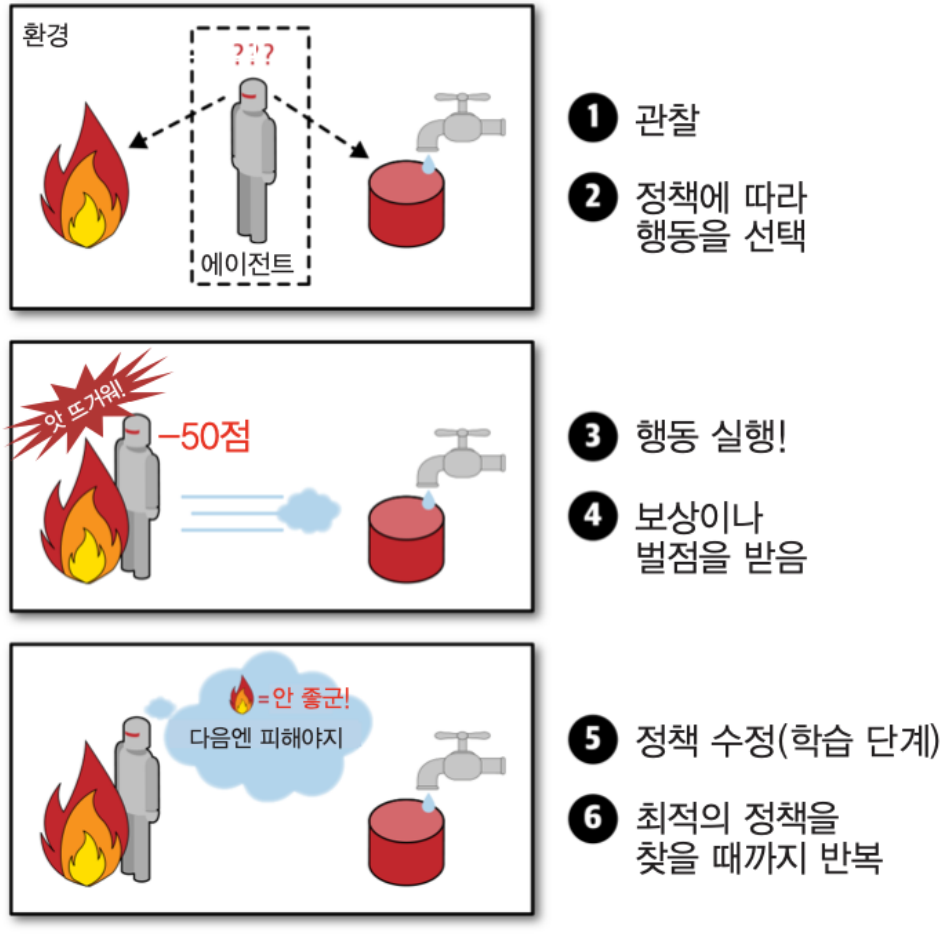
- 구글 포토 호스팅: 가족 사진 몇 장에만 레이블 적용. 이후 모든 사진에서 가족사진 확인 가능.
- 아래 그림 참조: 새로운 사례 x를 세모에 더 가깝다고 판단함.

준지도 학습 알고리즘

- 심층 신뢰 신경망(deep belief network, DBN)
    - 제한된 볼츠만 기계(restricted Boltzmann mahcine)이라는 비지도 학습 활용 후, 전체 시스템을 지도학습시킴.

강화 학습

- 에이전트(학습 시스템)가 취한 행동에 대해 보상 또는 벌점을 주어 가장 큰 보상을 받는 방향으로 유도하기



강화 학습 예제

- 보행 로봇
- 딥마인드(DeepMind)의 알파고(AlphaGo)

배치 학습 vs. 온라인 학습

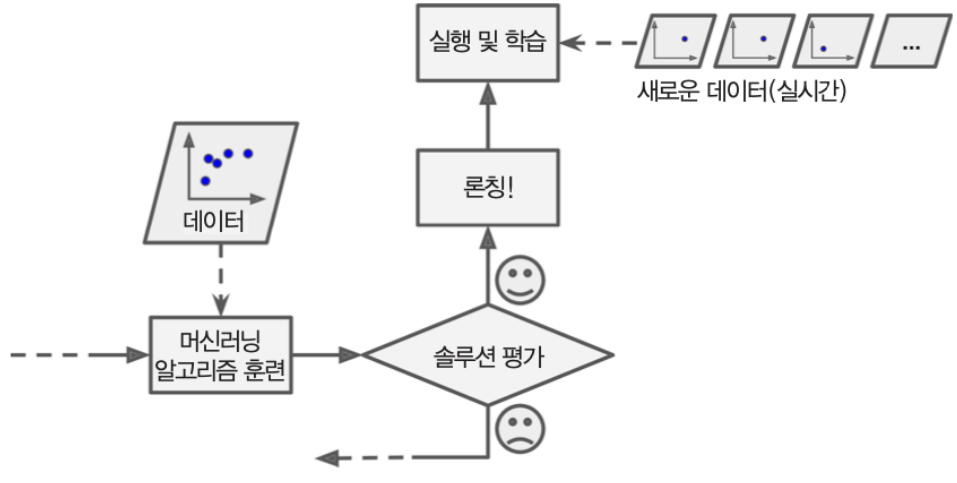
- 점진적으로 입력되는 데이터로부터 학습 가능여부에 따라 구분

배치 학습(batch learning)

- 주어진 훈련 세트 전체를 사용해 오프라인에서 훈련
- 먼저 시스템을 훈련시킨 후 더 이상의 학습 없이 제품 시스템에 적용
- 단점
    - 컴퓨팅 자원(cpu, gpu, 메모리, 저장장치 등)이 충분한 경우에만 사용 가능
    - 새로운 데이터가 들어오면 처음부터 새롭게 학습해야 함. 하지만 MLOps (https://cloud.google.com/solutions/machine-learning/mlops-continuous-delivery-and-automation-pipelines-in-machine-learning) 등을 이용한 자동화 가능

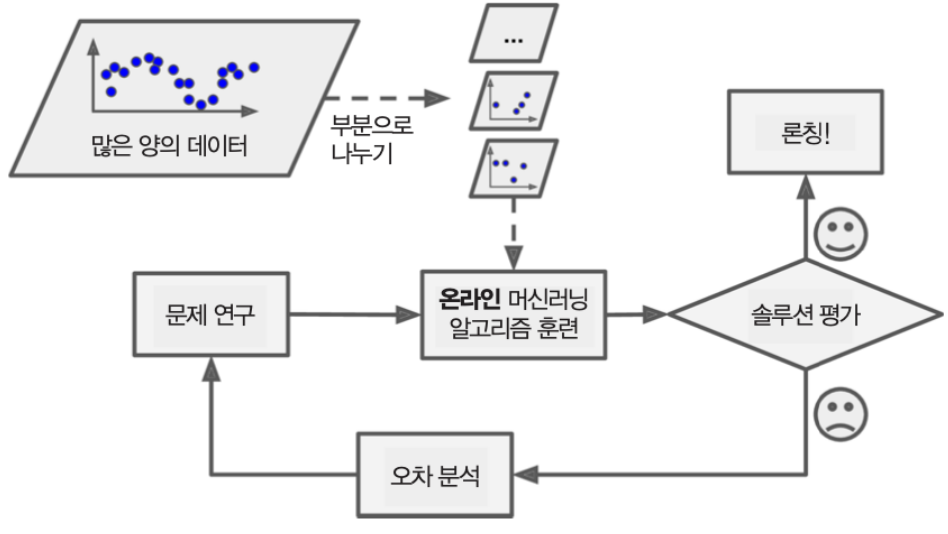
온라인 학습(online learing)

- 적은 양의 데이터(미니배치, mini-batch)를 사용해 점진적으로 훈련



- 단점
    - 나쁜 데이터가 주입되는 경우 시스템 성능이 점진적으로 떨어질 수 있음.
    - 지속적인 시스템 모니터링 필요

- 예제
  - 주식가격 시스템 등 실시간 반영이 중요한 시스템
  - 스마트폰 등 제한된 자원의 시스템
  - 외부 메모리 학습: 매우 큰 데이터셋 활용하는 시스템

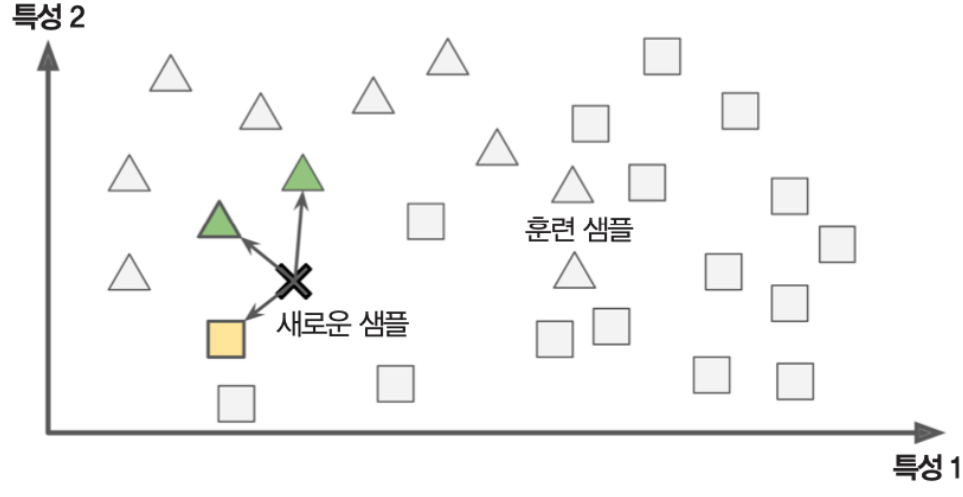


사례 기반 학습 vs. 모델 기반 학습

- 머신러닝 시스템의 **일반화(generalization)** 방식에 따른 분류
- 일반화: '새로운 데이터에 대한 예측을 잘한다'는 의미

사례 기반 학습

- **샘플을 기억**하는 것이 훈련의 전부
- 예측을 위해 기존 샘플과의 **유사도** 측정
- 예제
    - k-NN 알고리즘
    - 아래 그림: 새로운 샘플 x가 기존에 세모인 샘플과의 유사도가 높기 때문에 세모로 분류.

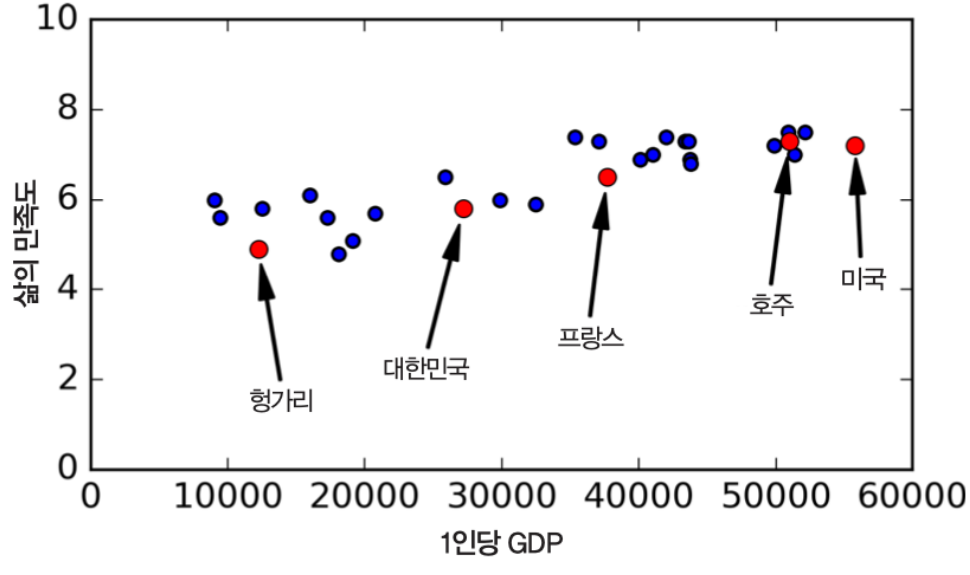

특성 2
훈련 샘플
새로운 샘플
특성 1

모델 기반 학습

- 모델을 미리 지정한 후 훈련 세트를 사용해서 모델을 훈련시킴
- 훈련된 모델을 사용해 새로운 데이터에 대한 예측 실행
- 예제
    - 이 책의 다루는 대부분의 알고리즘
    - 위 그림: 학습된 모델을 이용하여 새로운 데이터 $\mathbf{x}$를 세모 클래스로 분류

선형 모델 학습 예제

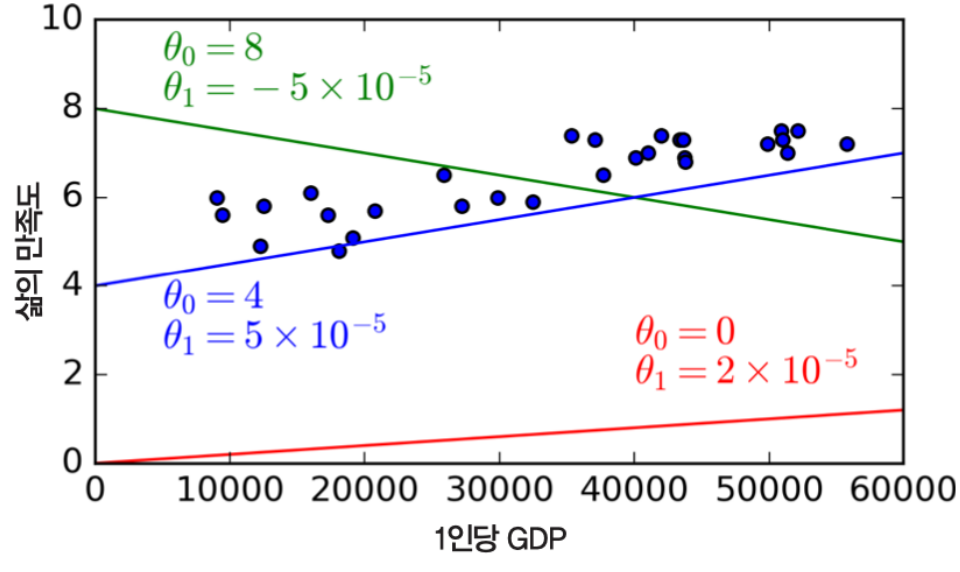
- 목표: OECD 국가의 1인당 GDP(1인당 국가총생산)와 삶의 만족도 사이의 관계 파악



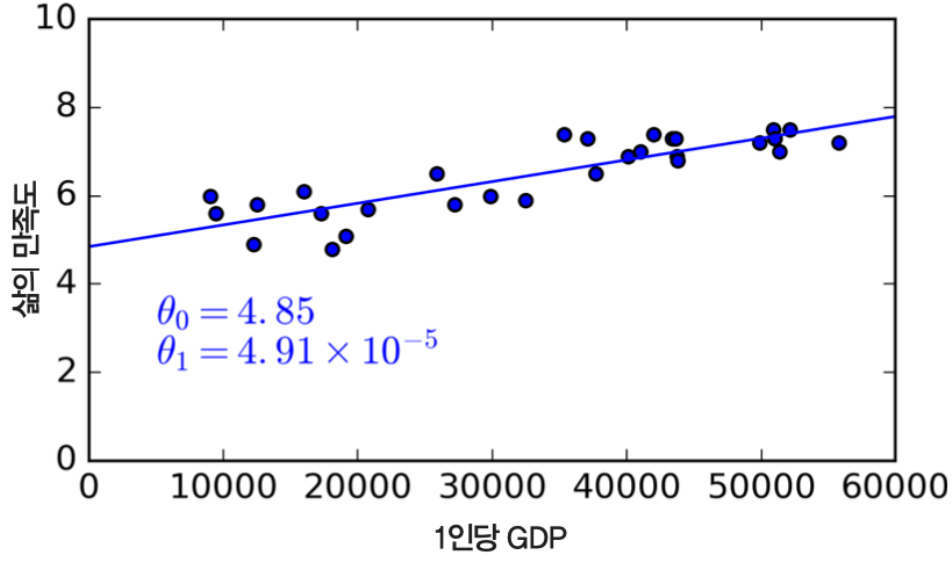
- 1인당 GDP가 증가할 수록 삶의 만족도가 선형으로 증가하는 것처럼 보임.
- 데이터를 대표하는 하나의 직선(선형 모델)을 찾기

- 선형 모델:
    - 삶의만족도 = $\theta_0 + \theta_1 \times$ 1인당GDP
        - θ_0, θ_1: 모델 파라미터
        - θ_0: 기울기
        - θ_1: 편향(절편)

- 데이터를 대표할 수 있는 선형 방정식을 찾아야 함



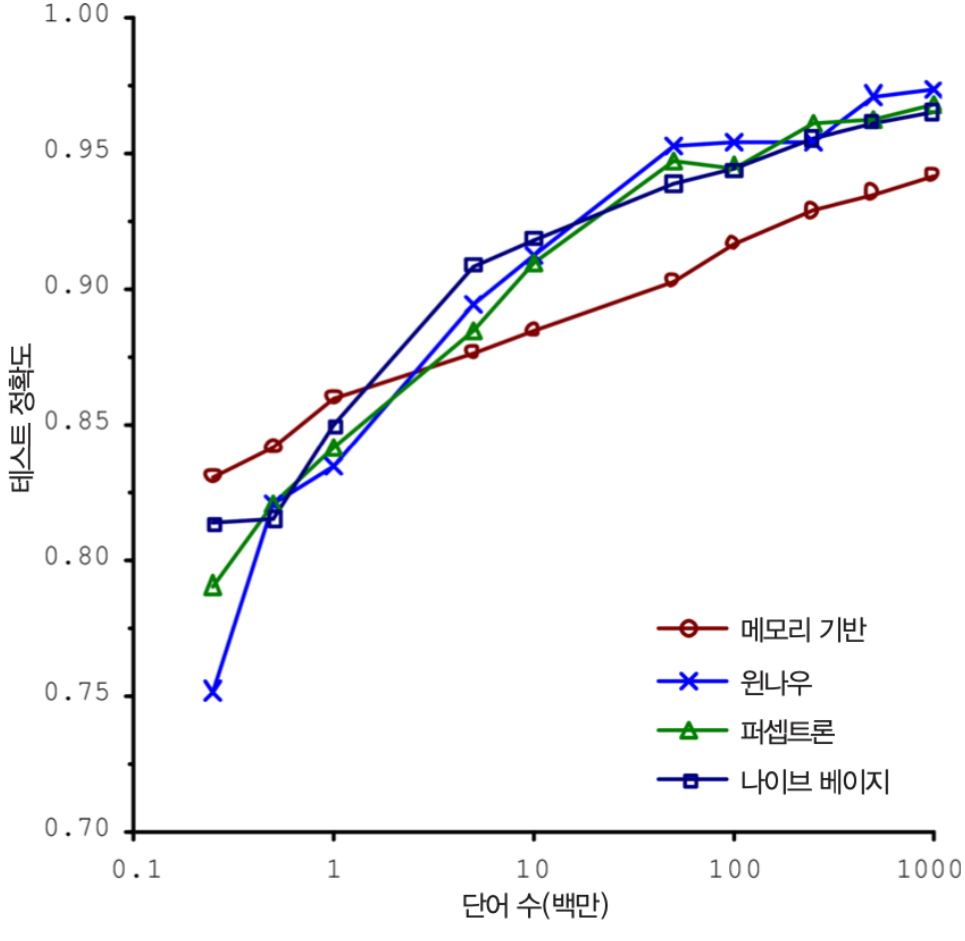
- 학습되는 모델의 성능평가기준을 측정하여 가장 적합한 모델 학습
  - 효용 함수: 모델이 얼마나 좋은지 측정
  - 비용 함수: 모델이 얼마나 나쁜지 측정



1.5 머신러닝의 주요 도전 과제

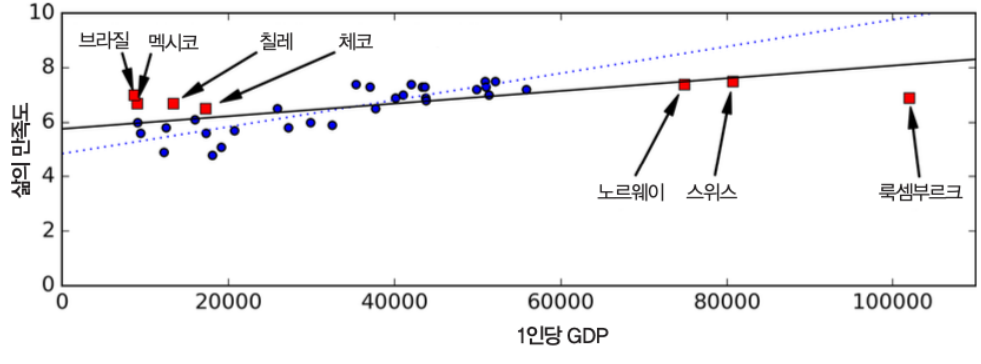
충분하지 않은 양의 훈련 데이터

- 간단한 문제라도 수천 개의 데이터가 필요
- 이미지나 음성 인식 같은 문제는 수백만 개가 필요할 수도 있음
- 데이터가 부족하면 알고리즘 성능 향성 어려움


1.00
0.95
0.90
0.85
0.80
0.75
0.70
테스트 정확도
0.1
1
10
100
1000
단어 수(백만)
메모리 기반
윈나우
퍼셉트론
나이브 베이지

대표성 없는 훈련 데이터

- 샘플링 잡음: 우연에 의해 대표성이 없는 데이터
- 샘플링 편향: 표본 추출 방법이 잘못된 대표성이 없는 데이터



낮은 품질의 데이터

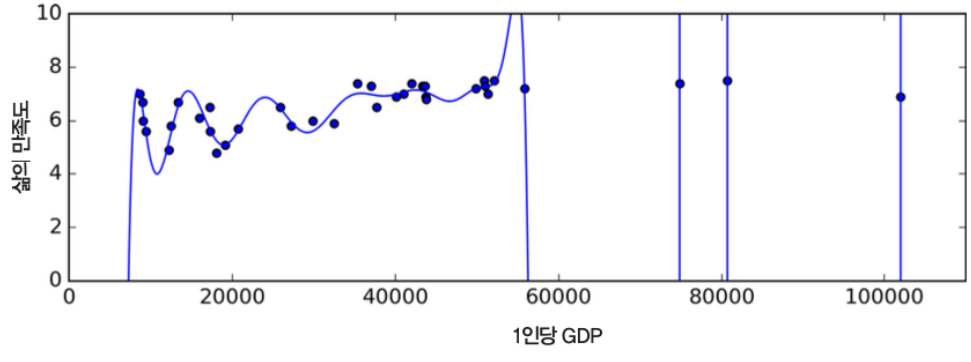
- 이상치 샘플이라면 고치거나 무시
- 특성이 누락되었다면
    - 해당 특성을 제외
    - 해당 샘플을 제외
    - 누락된 값을 채움
    - 해당 특성을 넣은 경우와 뺀 경우 각기 모델을 훈련

관련이 없는 특성

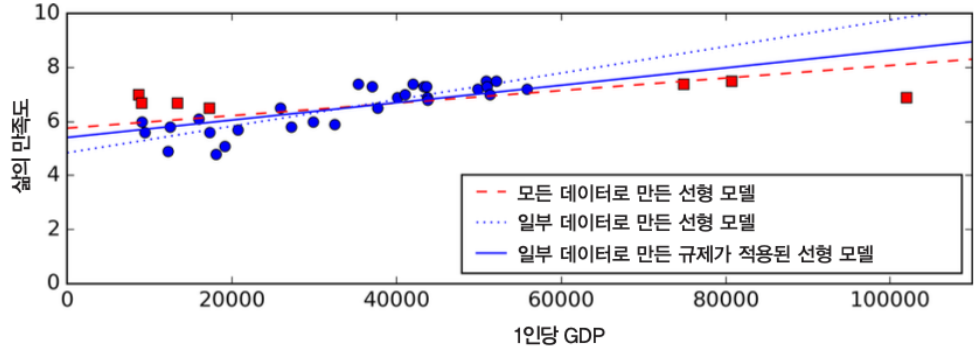
- 특성 공학: 풀려는 문제에 관련이 높은 특성 찾기
    - 특성 선택: 준비되어 있는 특성 중 가장 유용한 특성을 찾음
    - 특성 추출: 특성을 조합하여 새로운 특성을 만듦

과대적합

- 훈련 세트에 특화되어 일반화 성능이 떨어지는 현상



- 여러 규제를 적용해 과대적합을 감소시킬 수 있음



과소적합

- 모델이 너무 단순해서 훈련 세트를 잘 학습하지 못함
- 해결 방법
    - 모델 파라미터가 더 많은 강력한 모델을 사용
    - 특성 공학으로 더 좋은 특성을 찾음
    - 규제의 강도를 줄임

1.6 테스트와 검증

검증

- 훈련된 모델의 성능 평가: 테스트 세트 활용
- 전체 데이터셋을 훈련 세트(80%)와 테스트 세트(20%)로 구분
    - 훈련 세트: 모델 훈련용.
    - 테스트 세트: 모델 테스트용
    - 데이터셋이 매우 크면 테스트 세트 비율을 낮출 수 있음.
- 검증 기준: **일반화 오차**
    - 새로운 샘플에 대한 오류 비율
    - 학습된 모델의 일반화 성능의 기준
- 과대 적합: 훈련 오차에 비해 일반화 오차가 높은 경우

하이퍼파라미터 튜닝과 교차 검증

하이퍼파라미터(hyper-parameter)

- 알고리즘 학습 모델을 지정에 사용되는 파라미터
- 훈련 과정에 변하는 파라미터가 아님
- 하이퍼파라미터를 조절하면서 가장 좋은 성능의 모델 선정

교차 검증

- 예비표본(홀드아웃holdout) 검증
    - 예비표본(검증세트): 훈련 세트의 일부로 만들어진 데이터셋
    - 다양한 하이퍼파라미터 값을 후보 모델 평가용으로 예비표본을 검증세트로 활용하는 기법
- 교차 검증
    - 여러 개의 검증세트를 사용한 반복적인 예비표본 검증 적용 기법
    - 장점: 교차 검증 후 모든 모델의 평가를 평균하면 훨씬 정확한 성능 측정 가능
    - 단점: 훈련 시간이 검증 세트의 개수에 비례해 늘어남

데이터 불일치

- 모델 훈련에 사용된 데이터가 실전에 사용되는 데이터를 완벽하게 대변하지 못하는 경우 발생
- 예제: 꽃이름 확인 알고리즘
    - 인터넷으로 구한 꽃사진으로 모델 훈련
    - 이후 직접 촬영한 사진으로 진행한 성능측정이 낮게 나오면 **데이터 불일치** 가능성 높음

- 데이터 불일치 여부 확인 방법
    - 훈련-개발 세트: 예를 들어, 인터넷에서 다운로드한 꽃사진의 일부
    - 나머지 꽃사진으로 모델 훈련 후, 훈련-개발 세트를 이용한 성능 평가 진행
    - 데이터 불일치 발생: 성능 평가가 좋지만 직접 촬영한 사진으로 구성된 검증 세트에 대한 성증이 좋지 않은 경우

공짜 점심 없음(No free lunch)

- 주어진 데이터셋에 가장 적절한 모델을 미리 알 수 없음.
- 다양한 모델과 다양한 하이퍼파라미터 튜닝을 통해 확인해야 함.