3장 분류

목차

3.1 MNIST

MNIST 데이터셋

- 미국 고등학생과 인구조사국 직원들이 손으로 쓴 70,000개의 숫자 이미지로 구성된 데이터셋
- 사용된 0부터 9까지의 숫자는 각각 28*28= 784크기의 픽셀로 구성된 이미지 데이터
    - 2차원 어레이가 아닌 길이가 784인 1차원 어레이로 제공
- 레이블: 총 70,000개의 사진 샘플이 표현하는 값

문제 정의

- 지도학습: 각 이미지가 담고 있는 숫자가 레이블로 지정됨.

- 분류: 이미지 데이터를 분석하여 0부터 9까지의 숫자로 분류
    - 이미지 그림을 총 10개의 클래스로 분류하는 다중 클래스 분류(multiclass classification)
    - 다항 분류(multinomial classification)라고도 불림

- 배치 또는 온라인 학습: 둘 다 가능
    - 모델에 따라 처리 방법이 다름
        - 확률적 경사하강법(stochastic gradient descent, SGD): 배치와 온라인 학습 모두 지원
        - 랜덤 포레스트 분류기: 배치 학습

훈련 셋과 데이터 셋 나누기

- MNIST 데이터셋 이미 6:1 분류되어 있음
- 훈련 세트: 앞쪽 60,000개 이미지
- 테스트 세트: 나머지 10,000개의 이미지

3.2 이진 분류기 훈련

예제: 5-감지기

- 이미지 샘플이 5를 표현하는지 여부를 판단하는 이진 분류기

- 이를 위해 레이블을 0 또는 1로 수정
    - 기존에 0부터 9까지의 숫자 대신 0, 1 두 값으로만 구성된 새로운 타깃 벡터를 생성해서 학습에 사용
    - 숫자 5를 가리키는 이미지 레이블: 1
    - 숫자 5 이외의 수를 가리키는 이미지 레이블: 0

SGD 분류기 활용 학습

- SGDClassifier(SGD 분류기)
    - 확률적 경사 하강법(stochastic gradient descent) 사용
    - 한 번에 하나씩 훈련 샘플 처리 후 파라미터 조정
    - 매우 큰 데이터셋 처리에 효율적이며 온라인 학습에도 적합함.

- 학습

```
from sklearn.linear_model import SGDClassifier

sgd_clf = SGDClassifier(max_iter=1000, tol=1e-3, random_state=42)
sgd_clf.fit(X_train, y_train_5)
```

3.3 성능 측정

성능 측정 세가지 방법

- 교차 검증을 활용한 정확도 측정
- 정밀도/재현율 조율
- AUC 측정

교차 검증을 사용한 정확도 측정

- 2장에서 배운 교차검증 기술을 이용하여 SGD 분류기의 성능을 측정
- 성능 측정 기준: 정확도

- 정확도: 전체 샘플을 대상으로 정확하게 예측한 비율
    - 여기서는 숫자 5를 표현하는 이미지를 True로 예측한 비율

```
from sklearn.model_selection import cross_val_score

cross_val_score(sgd_clf, X_train, y_train_5, cv=3, scoring="accuracy")
```

- 교차 검증 결과가 95% 이상으로 매우 우수한 것으로 나옴.
- 하지만 무조건 '5 아님'이라고 찍는 분류기도 90%의 정확도를 보임.
- 훈련 세트의 샘플이 불균형적으로 구성되었다면, 정확도를 분류기의 성능 측정 기준으로 사용하는 것은 피해야 함

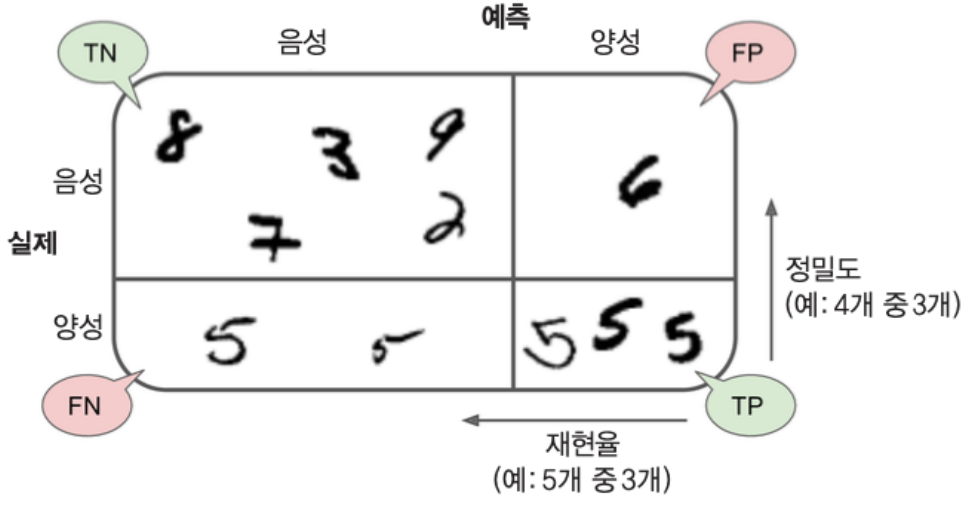
오차 행렬, 정밀도, 재현율

- 오차 행렬을 조사하여 분류기의 성능을 평가할 수 있음
- 정밀도와 재현율 확인

오차 행렬(confusion matrix)

- 오차 행렬: 클래스 별 예측 결과를 정리한 행렬
- 오차 행렬의 행은 실제 클래스를, 열은 예측된 클래스를 가리킴
    - 클래스 A의 샘플이 클래스 B의 샘플로 분류된 횟수를 알고자 하면 A행 B열의 값을 확인
- 예제: 숫자 5의 이미지 샘플을 3으로 잘못 예측한 횟수를 알고 싶다면?
    - 6행 4열, 즉, (6,4) 인덱스에 위치한 값을 확인 (0부터 9까지의 숫자임에 주의)

- 예제: '숫자 5-감지기'에 대한 오차 행렬 생성
    - 결과는 2x2 모양의 2차원 어레이
    - 레이블의 값이 0과 1 두 개의 값으로 구성되기 때문



정밀도(precision)

- 양성 예측의 정확도
- 여기서는 숫자 5라고 예측된 값들 중에서 진짜로 5인 숫자들의 비율

$$\text{precision} = \frac{TP}{TP + FP} = \frac{3530}{3530 + 687} = 0.8370$$

- 정밀도 하나만으로 분류기의 성능을 평가할 수는 없음
    - 숫자 5를 가리키는 이미지 중에 숫자 5가 아니라고 판명한 경우를 함께 고려하지 않기 때문
- 분류기가 정확하게 예측한 양성 샘플의 비율인 재현율을 함께 다루어야 함

재현율(recall)

- 양성 샘플에 대한 정확도, 즉, 분류기가 정확하게 감지한 양성 샘플의 비율
- 재현율을 민감도(sensitivity) 또는 참 양성 비율(true positive rate)로도 부름

$$\text{recall} = \frac{TP}{TP + FN} = \frac{3530}{3530 + 1891} = 0.6512$$

F_1 점수(F_1 score)

- 정밀도와 재현율의 조화 평균:

$$F_1 = \frac{2}{\frac{1}{precision} + \frac{1}{recall}} = \frac{2 \cdot precision \cdot recall}{precision + recall}$$

- F_1 점수가 높을 수록 분류기의 성능을 좋게 평가하지만, 경우에 따라 조심할 필요가 있음
    - 경우에 따라 재현율과 정밀도 둘 중의 하나에 높은 가중치를 두어야 할 때가 있기 때문

- 앞서 정의된 F_1 점수는 재현율과 정밀도의 중요도가 동일하다고 가정한 결과

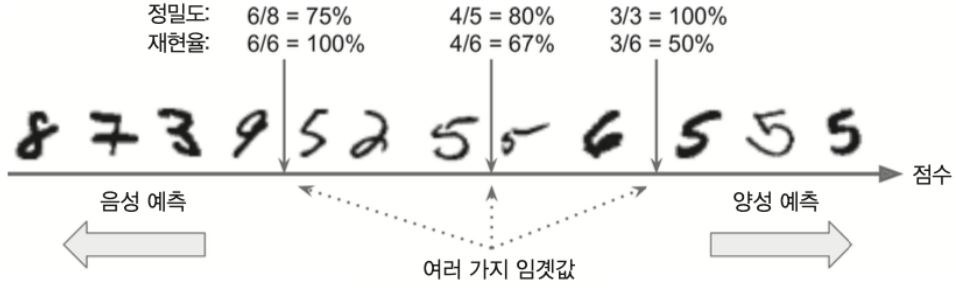
- 예를 들어, 암 진단 결과와 관련해서 아래 두 경우에 발생하는 비용이 다름
    - 실제로 음성지만 양성으로 오진(정밀도)
    - 실제로 양성이지만 음성으로 오진(재현율)

정밀도/재현율 트레이드오프

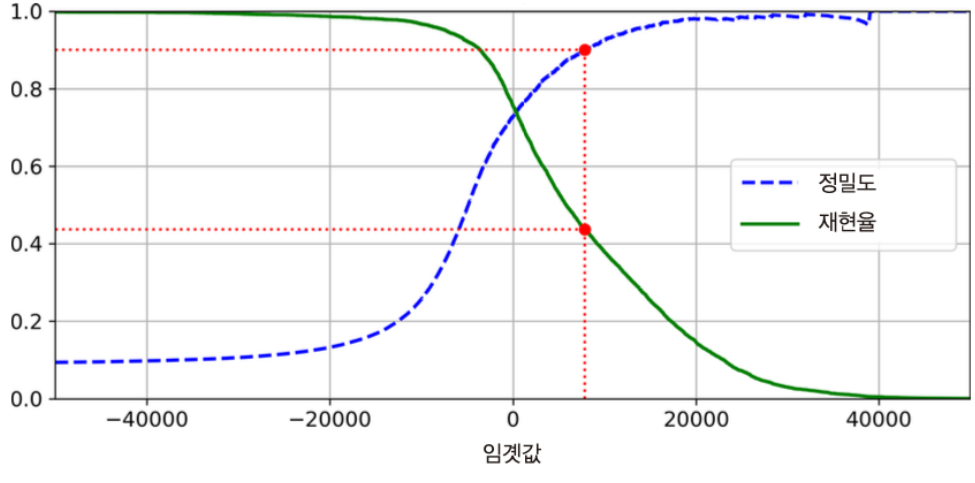
- 정밀도와 재현율 상호 반비례 관계
- 정밀도와 재현율 사이의 적절한 비율 찾기

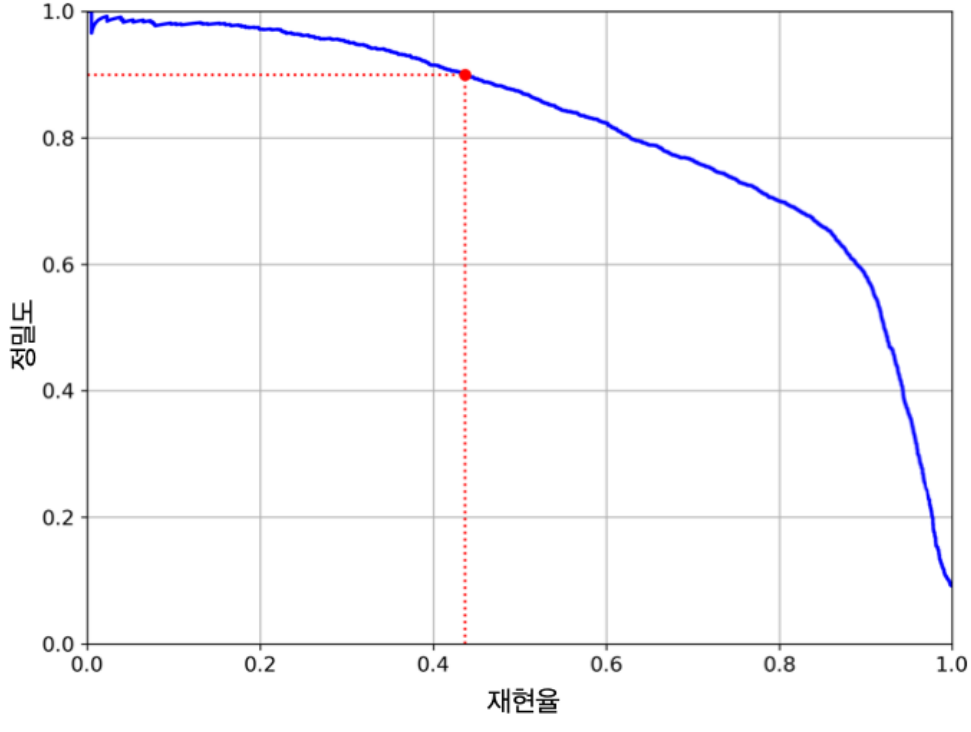
결정 함수와 결정 임곗값

- 결정 함수(decision function): 분류기가 각 샘플의 점수를 계산할 때 사용
- 결정 임계값(decision threshold): 결정 함수의 값이 이 값보다 갖거나 크면 양성 클래스로 분류, 아니면 음성 클래스



- 임곗값 커질 수록
  - 정밀도 올라감
  - 재현율 떨어짐




1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
정밀도
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
재현율

ROC 곡선과 AUC

- 수신기 조작 특성(receiver operating characteristic, ROC) 곡선을 활용하여 이진 분류기의 성능 측정 가능

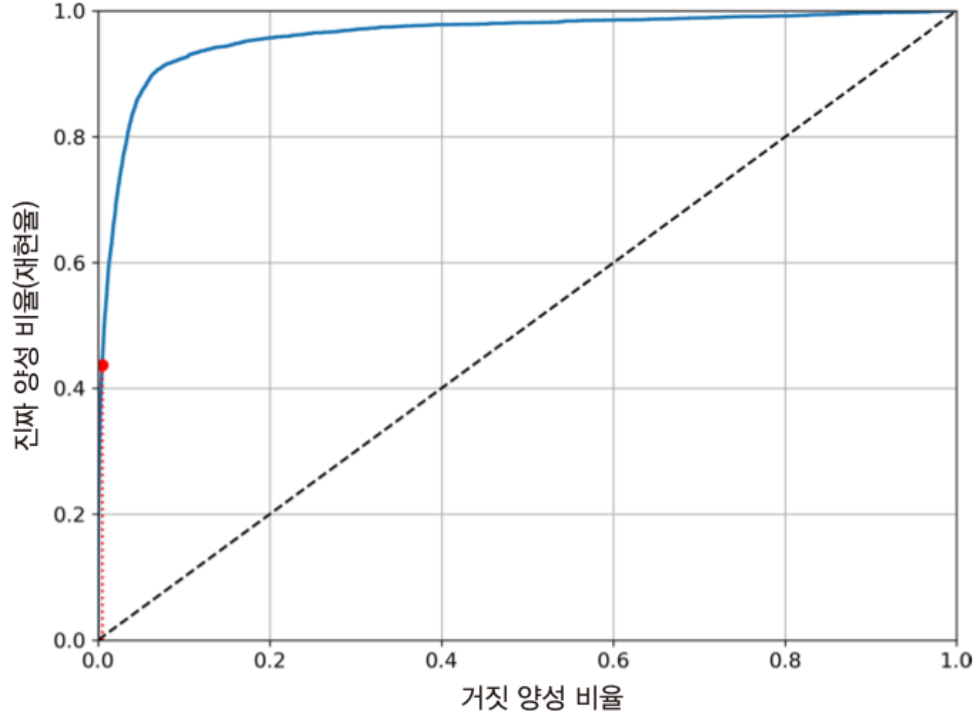
ROC 곡선

- 결정 임곗값에 따른 거짓 양성 비율(false positive rate, FPR)에 대한 참 양성 비율(true positive rate, TPR)의 관계를 나타낸 곡선

- 참 양성 비율: 재현율

- 거짓 양성 비율: 원래 음성인 샘플 중에서 양성이라고 잘못 분류된 샘플들의 비율
    - 예를 들어, 손글씨 숫자 분류기가 결정 임곗값이 0일 때 정해진 거짓 양성 비율은 아래와 같음

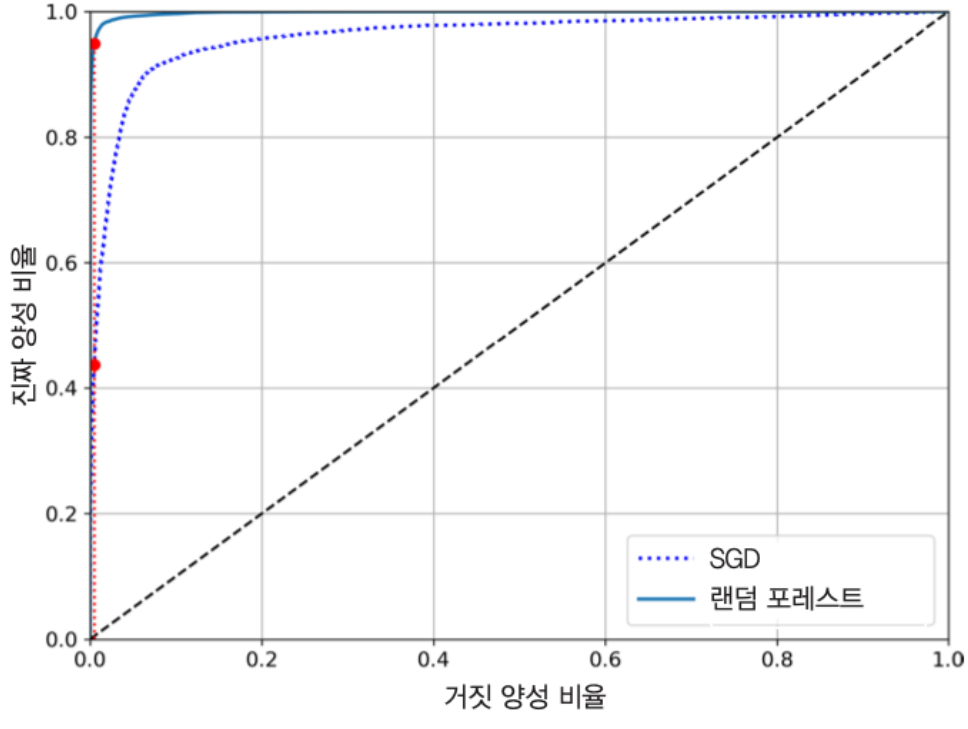
$$\text{FPR} = \frac{FP}{FP + TN}$$


1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
진짜 양성 비율(재현율)
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
거짓 양성 비율

AUC와 분류기 성능

- 재현율(TPR)과 거짓 양성 비율(FPR) 사이에도 서로 상쇄하는 기능이 있다는 것을 확인 가능
    - 재현율(TPR)을 높이고자 하면 거짓 양성 비율(FPR)도 함께 증가
- 따라서 좋은 분류기는 재현율은 높으면서 거짓 양성 비율은 최대한 낮게 유지해야함
- ROC 곡선이 y축에 최대한 근접하는 결과가 나오도록 해야함.
- AUC: ROC 곡선 아래의 면적
    - 이 면적이 1에 가까울 수록 성능이 좋은 분류기로 평가

- SGD와 랜덤 포레스트의 AUC 비교



3.4 다중 클래스 분류

다중 클래스 분류기(multiclass classifier)

- 세 개 이상의 클래스로 샘플을 분류하는 예측기
- 다항 분류기(multinomial classifier)라고도 부름
- 예를 들어, 손글씨 숫자 분류의 경우 0부터 9까지 10개의 클래스로 분류해야 함

다중 클래스 분류 지원 분류기

- SGD 분류기
- 랜덤 포레스트 분류기
- 나이브 베이즈(naive Bayes) 분류기

이진 분류만 지원하는 분류기

- 로지스틱 회귀
- 서포트 벡터 머신

이진 분류기 활용

- 이진 분류기를 활용하여 다중 클래스 분류 가능
    - 일대다(OvR 또는 OvA)
    - 일대일(OvO)

일대다 방식(OvA 또는 OvR)

- OvA(One-versus-All) 또는 OvR(One-versus-Rest)
- 숫자 5 예측하기에서 사용했던 이진 분류 방식을 동일하게 모든 숫자에 대해서 실행
- 각 샘플에 대해 총 10번 각기 다른 이진 분류기를 실행
- 이후 각 분류기의 결정 점수 중에서 가장 높은 점수를 받은 클래스를 선택

일대일 방식 (0v0)

- One-versus-One
- 조합 가능한 모든 일대일 분류 방식을 진행하여 가장 많은 결투(duell)를 이긴 숫자를 선택
- MNIST의 경우, 아래와 같이 총 9+8+...+1 = 45개의 결투를 판별하는 분류기를 이용
    - 훈련 세트의 각 샘플에 대해 총 45번 결투가 벌어지며 그중에서 가장 높은 점수를 얻는 숫자 k가 선택됨

예제: OvO 활용

- 서프트 벡터 머신(SVC)
    - OvO 선호

- 대부분의 이진 분류기는 일대다 전략을 선호

예제: OvR 활용

- 이진 분류기를 일대일 전략 또는 일대다 전략으로 지정해서 학습하도록 만들 수 있음.

- 사이킷런의 경우: `OneVsOneClassifier` 또는 `OneVsRestClassifier` 사용

다중 클래스 지원 분류기

- SGD 분류기는 다중 클래스 분류를 직접 지원
- 따라서 사이킷런의 OvR, OvO 등을 적용할 필요 없음

다중 클래스 분류기 성능 측정

- 다중 클래스 분류기의 성능 평가는 교차검증을 이용하여 정확도를 측정

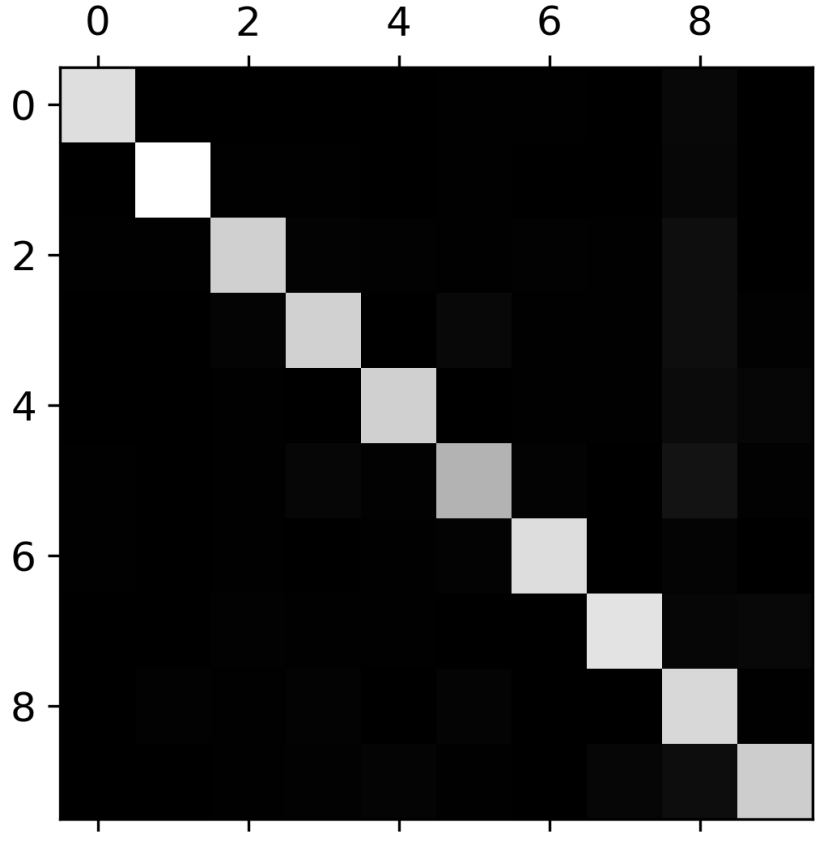
- MNIST의 경우 0부터 9까지 숫자가 균형 있게 분포되어 있어서 데이터 불균형의 문제가 발생하지 않음.

3.5 에러 분석

- 가능성이 높은 모델을 하나 찾았다고 가정하고 이 모델의 성능을 향상시킬 방법 모색
- 예제: 에러 종류 분석하기

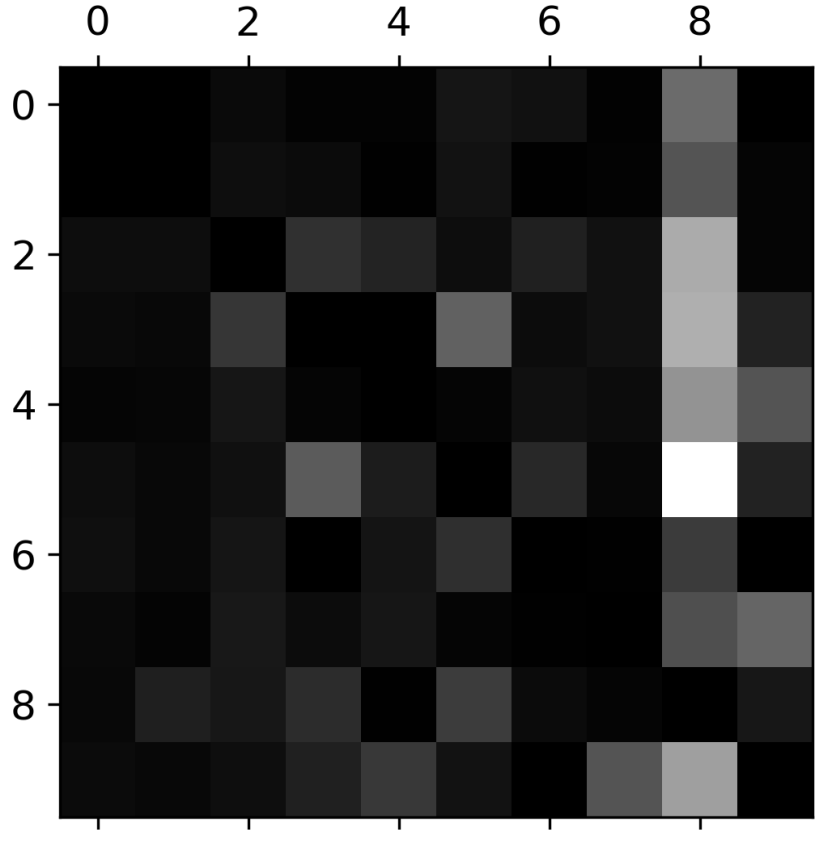
오차 행렬 활용

- 손글씨 클래스 분류 모델의 오차 행렬을 이미지로 표현 가능
- 대체로 잘 분류됨: 대각선이 밝음.
- 5행은 좀 어두움. 숫자 5의 분류 정확도가 상대적으로 낮음

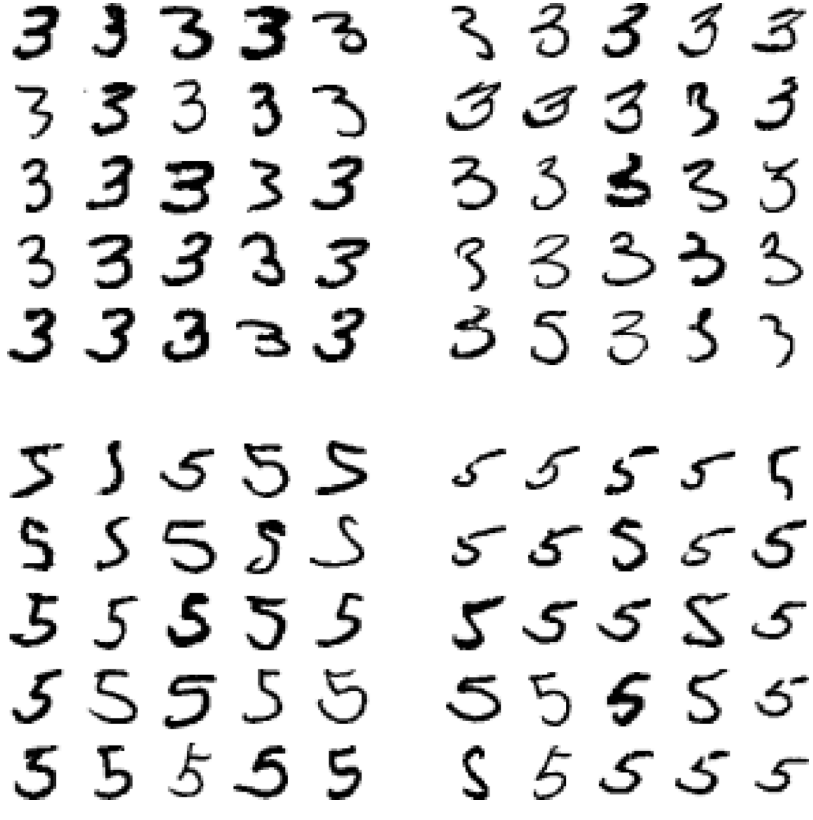


오차율 이미지

- 8행이 전반적으로 어두움.
    - 8은 잘 분류되었다는 의미임.
- (3, 5)와 (5,3)의 위치가 상대적으로 밝음.
    - 3과 5가 서로 많이 혼동됨.



- 3과 5의 오차행렬 그려보기
    - 음성: 3으로 판정
    - 양성: 5로 판정



- 3과 5의 구분이 어려운 이유
    - 선형 모델인 SGD 분류기를 사용했기 때문
    - 픽셀마다 가중치를 적용하여 단순히 픽셀 강도에만 의존하기 때문

- 이미지 분류기의 한계
    - 이미지의 위치나 회전 방향에 민감함
    - 이미지를 중앙에 위치시키고 회전되지 않도록 전처리하면 좀 더 좋은 성능 가능

3.6 다중 레이블 분류

- 샘플마다 여러 개의 클래스 출력

예제: 얼굴 인식 분류기

- 한 사진에 여러 사람이 포함된 경우, 인식된 사람마다 하나씩 꼬리표(tag)를 붙여야 함.
- 앨리스, 밥, 찰리의 포함여부를 확인 할 때, 밥이 없는 경우:
    - `[True, False, True]` 출력

예제: 숫자 분류

- 7 이상인지 여부와 함께 홀수 여부도 동시 출력
- 5가 입력될 때:
    - `[False, True]` 출력

다중 레이블 분류 지원 모델

- k-최근접 이웃 분류기

- 사이킷런의 `KNeighborsClassifier`

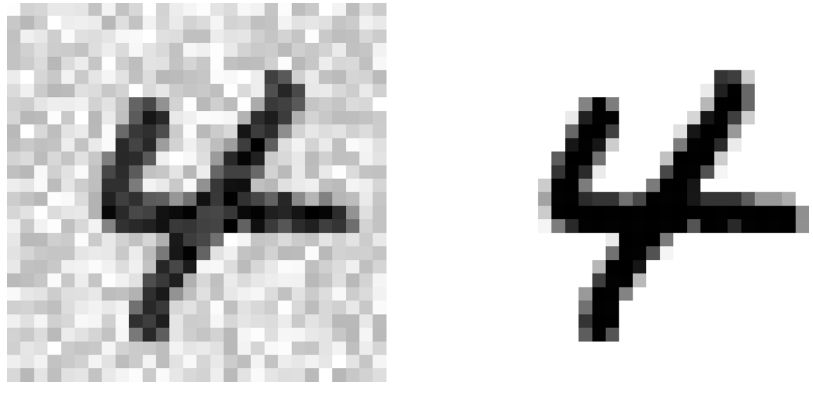
- 다중 레이블 분류기를 평가하는 방법은 다양함
    - 모든 레이블의 가중치가 같다고 가정: 각 레이블의 F1 점수를 구하고 평균 점수를 계산
    - 가중치: 레이블에 클래스의 지지도(즉, 타깃 레이블에 속한 샘플 수)를 가중치로 사용 가능

3.7 다중 출력 분류

- 원래 다중 출력 다중 클래스 분류라고 불림
- 다중 레이블 분류에서 한 레이블이 다중 클래스가 될 수 있도록 일반화한 것
- 다중 레이블 분류기 지원 모델: k-최근접 이웃 분류기
    - 사이킷런의 `KNeighborsClassifier`

예제: 이미지에서 잡음을 제거하는 시스템

- 잡음이 많은 숫자 이미지를 입력으로 받고, 깨끗한 숫자 이미지를 MNIST 이미지처럼 픽셀의 강도를 담은 배열로 출력
- 아래 왼쪽: 잡음 포함된 사진
- 아래 오른쪽: 깨끗한 타깃 이미지



- 다중 레이블: 각각의 픽셀이 레이블 역할 수행
- 다중 클래스: 레이블이 0부터 255까지 픽셀 강도를 가짐.
- 분류기를 훈련시켜 잡음이 섞인 입력 이미지를 깨끗한 타깃 이미지로 만들어 보기
- 아래 사진: 분류기가 만들어낸 이미지