Chap 3. 분류 (Classification)

Seolyoung Jeong, Ph.D.

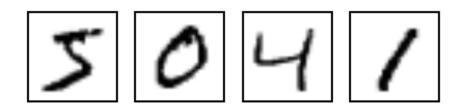
경북대학교 IT 대학

Contents

- **3.1 MNIST**
- 3.2 이진 분류기 훈련
- 3.3 성능 측정
 - 3.3.1 교차 검증을 사용한 정확도 측정
 - 3.3.2 오차 행렬
 - 3.3.3 정밀도와 재현율
 - 3.3.4 정밀도/재현율 트레이드오프
 - 3.3.5 ROC 곡선
- 3.4 다중 분류
- 3.5 에러 분석
- 3.6 다중 레이블 분류

3.1 MNIST

◆ MNIST : 미국에서 손으로 쓴 70,000개의 작은 숫자 이미지를 모은 데이터셋 (머신러닝 분야의 'Hello World')



◆ 목적 : 28x28 픽셀의 필기 숫자 이미지를 어떤 숫자인지 판별

MNIST 데이터셋 다운로드

다운로드 오류

- 'mnist_original.mat' 파일 다운로드
- Jupyter Notebook♀
- '/scikit_learn_data/mldata/' 위치에 업로드

◆ MNIST 딕셔너리 구조

- DESCR : 데이터셋에 대한 설명
- target : 레이블 배열
- data : 2차원 배열 [샘플][특성]
 - 샘플:image
 - 특성 : 0~255 (pixel)

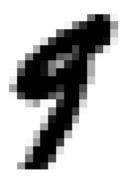
MNIST 배열 확인

◆ 배열 확인

- data : 이미지 70,000개, 각 이미지에는 784개 특성 (28x28 픽셀)
 - 특성: 0(흰색) ~ 255(검은색)까지의 픽셀 강도
- target : label 70,000개
 - 각 이미지별 0~9에 해당하는 정답 숫자

MNIST 이미지 확인

샘플의 특성 벡터 추출 → 28x28 배열로 크기 변경



```
In [9]: y[36000]
Out [9]: 9
```

MNIST 숫자 이미지

테스트 세트 분리

- ◆ MNIST 데이터셋은 이미 분리되어 있음
 - 훈련 세트 : 앞쪽 60,000개 이미지
 - 테스트 세트 : 뒤쪽 10,000개 이미지

```
In [12]: X_train, X_test, y_train, y_test = X[:60000], X[60000:], y[:60000], y[60000:]
```

◆ 훈련 세트를 섞어서 모든 교차 검증 폴드가 비슷해지도록... (하나의 폴드라도 특정 숫자가 누락되면 안됨)

```
In [13]: import numpy as np
shuffle_index = np.random.permutation(60000)
X_train, y_train = X_train[shuffle_index], y_train[shuffle_index]
```

- 경우에 따라, 섞는 것이 좋지 않을 수도 있음
- → 시계열 데이터를 다루는 경우 (예: 주식가격, 날씨 예보)

3.2 이진 분류기 훈련

- ◆ 하나의 숫자(예: 숫자 5)만 식별하는 예
 - 5-감지기: '5'와 '5 아님' 두 개의 클래스 구분 → 이진 분류기

```
In [14]: y_train_5 = (y_train == 5) y_test_5 = (y_test == 5)
```

- 5는 True, 다른 숫자는 모두 False
- ◆ 분류 모델 선택 후 훈련
 - 모델1) 확률적 경사 하강법 (Stochastic Gradient Descent : SGD) 분류기
 - 장점: 매우 큰 데이터셋을 효율적으로 처리
 - 한번에 하나씩 훈련 샘플을 독립적으로 처리 (온라인 학습에 적합)
 - 확률적 : 무작위성 사용

```
In [15]: from sklearn.linear_model import SGDClassifier

sgd_clf = SGDClassifier(max_iter=5, random_state=42)
sgd_clf.fit(X_train, y_train_5)
```

- 모델을 사용하여 숫자 5 이미지 감지

```
In [16]: sgd_clf.predict([some_digit])
Out [16]: array([False])
```

3.3 성능 측정

◆ 회귀모델 평가보다 분류기 평가에 사용할 수 있는 성능 지표가 더 많음!

- ◆ 3.3.1 교차 검증을 사용한 정확도 측정
 - 훈련 세트를 3개의 폴드로 나누고, 각 폴드에 대해 예측을 만든 후 평가하기 위해 나머지 폴드로 훈련시킨 모델 사용

• 모든 교차 검증 폴드에 대해 정확도 95% 이상

3.3.1 교차 검증을 사용한 정확도 측정

◆ 모든 이미지를 '5 아님' 클래스로 분류 (임의의 더미 분류기)

- 정확도: 90% 이상
- 이미지의 10% 정도만 숫자 5이므로, 무조건 '5 아님'으로 예측하면 정확히 맞출 확률은 90%임
- ◆ 정확도는 분류기의 성능 측정 지표로 선호하지 않음 (특히, 불균형한 데이터셋을 다룰 때...)

3.3.2 오차 행렬

- 분류기 성능 평가에 더 좋은 방법 : 오차 행렬 조사
- ◆ 클래스 A의 샘플이 클래스 B로 분류된 횟수를 측정
- ◆ cross_val_predict() 함수
 - 교차 검증 수행 후 각 테스트 폴드에서 얻은 <u>예측값</u> 반환 (score 아님)

```
from sklearn.model_selection import cross_val_predict

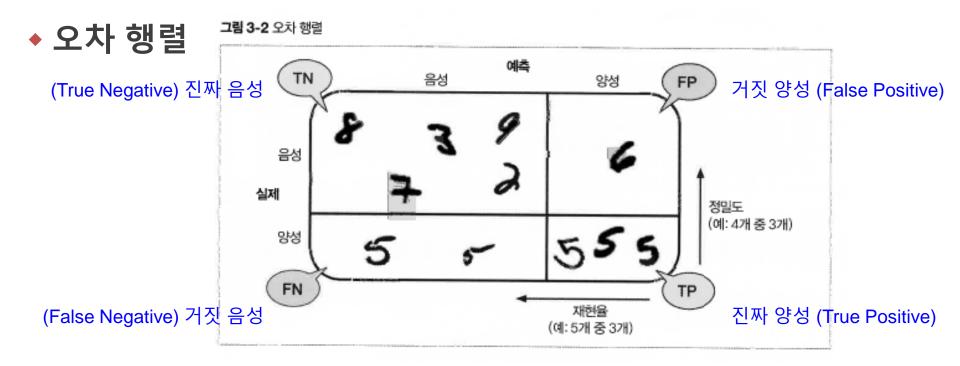
y_train_pred = cross_val_predict(sgd_clf, X_train, y_train_5, cv=3)

y_train_pred

array([False, False, False, ..., False, False, False])
```

- confusion_matrix() 함수로 오차 행렬 생성
 - 타깃 클래스: y_train_5
 - 예측 클래스 : y_train_pred

3.3.2 오차 행렬



◆ 완벽한 분류기라면 진짜 양성, 진짜 음성만 가지고 있음

3.3.2 오차 행렬

- 정밀도 : 양성 예측의 정확도
 - 분류기가 양성이라고 판단한 샘플(이미지) 중 실제 양성 샘플 수

정밀도 =
$$\frac{TP}{TP+FP}$$
 $TP: 진짜 양성 수, FP: 거짓 양성 수$

- ◆ 재현율 : 분류기가 정확하게 감지한 양성 샘플의 비율
 - 실제 양성인 샘플(이미지) 중에서 양성이라고 판단한 샘플 수
 - 민감도, 진짜 양성 비율

재현율 =
$$\frac{TP}{TP+FN}$$
 $FN:$ 거짓 음성 수

3.3.3 정밀도와 재현율

```
In [28]: from sklearn.metrics import precision_score, recall_score
    precision_score(y_train_5, y_train_pred)

Out [28]: 0.7338963404537175

In [30]: 4432 / (4432 + 1607)

Out [30]: 0.7338963404537175

In [31]: recall_score(y_train_5, y_train_pred)

Out [31]: 0.8175613355469471

In [32]: 4432 / (4432 + 989)

Out [32]: 0.8175613355469471
```

5로 판별된 이미지 중 73%만 정확, 전체 숫자 5에서 81%만 감지

◆ F₁ 점수: 정밀도와 재현율의 조화평균

Out [34]: 0,7734729493891798

정밀도와 재현율이 비슷한 분류기에서는 F_1 점수가 높다.

In [33]: from sklearn.metrics import f1_score f1_score f1_score(y_train_5, y_train_pred)
$$F_1 = \frac{2}{\frac{1}{\text{정밀도}} + \frac{1}{\text{재현율}}} = 2 \times \frac{\text{정밀도} \times \text{재현율}}{\text{정밀도} + \text{재현율}} = \frac{TP}{TP + \frac{FN + FP}{2}}$$
In [34]: $4432 \text{ / } (4432 + (1607 + 989)/2)$

3.3.3 정밀도와 재현율

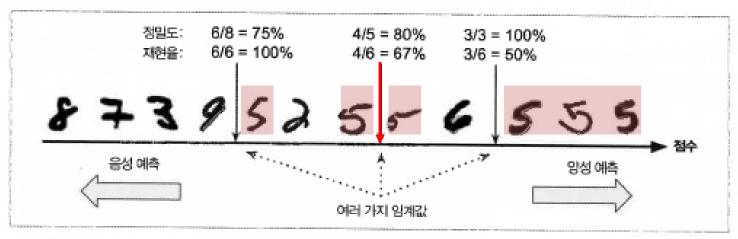
◆ 상황에 따라 정밀도 or 재현율 중요도 다를 수 있음

- 예) 어린 아이에게 안전한 동영상을 걸러내는 분류기
 - (재현율 보다는) 높은 정밀도 선호
 - 나쁜 동영상 몇개 노출보다 좋은 동영상이 많이 제외되더라도 (낮은 재현율) 안전한 것들만 노출(높은 정밀도)
- ◆예) 감시 카메라를 통해 좀도둑을 잡아내는 분류기
 - (정밀도 보다는) 높은 재현율 선호
 - 분류기의 재현율이 99%라면 정확도가 30%만 되더라도 괜찮음
 - 잘못된 알람 자주 발생하나, 거의 모든 좀도둑을 잡음
- ◆ 정밀도 / 재현율 트레이드오프 관계
 - 정밀도를 올리면 재현율이 줄고, 그 반대도 마찬가지

◆ 현재 분류기(SGD)의 결정 점수

- 결정함수(decision function)로 각 샘플 점수 계산
- 점수 > 임곗값 : 양성 클래스에 할당 (아니면 음성 클래스에 할당)

그림 3-3 결정 임곗값과 정밀도/재현율 트레이드오프



- 결정 임곗값 : 가운데 화살표
 - 양성 예측 : 진짜 양성(숫자 5) 4개, 거짓 양성(숫자6) 1개
 - 정밀도 80% (5개 중 4개)
 - 실제 숫자 5는 6개, 분류기는 4개만 감지
 - 재현율 67% (6개 중 4개)
- 임곗값을 높이면 : 정밀도 (3/3) = 100%, 재현율 (3/6) = 50%
- 임곗값을 내리면 : 정밀도 (6/8) = 75%, 재현율 (6/6) = 100%

- 사이킷런에서 임곗값을 직접 지정할 수는 없지만, 예측에 사용한 점수 확인 가능
 - decition_function()에 의한 샘플의 점수

SGDClassifier 임곗값 = 0 → 결과 True

```
In [36]: threshold = 0
    y_some_digit_pred = (y_scores > threshold)
In [37]: y_some_digit_pred
```

• SGDClassifier 임곗값 = 200000 → 결과 False

```
In [38]: threshold = 200000
y_some_digit_pred = (y_scores > threshold)
y_some_digit_pred
```

◆ 적절한 임곗값 결정

• 훈련 세트에 있는 모든 샘플의 점수 구함 (결정 점수)

• 이 점수를 이용하여 가능한 모든 임곗값에 대해 정밀도와 재현율 계산

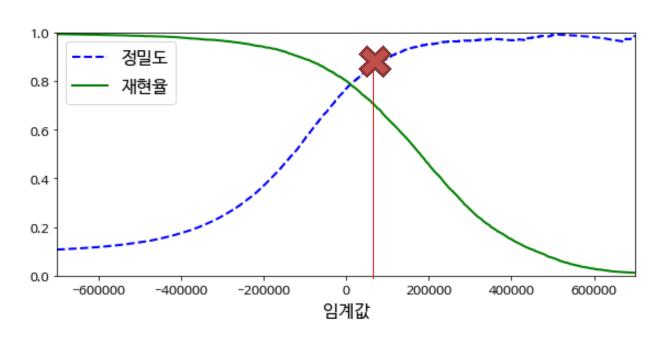
```
from sklearn.metrics import precision_recall_curve
precisions, recalls, thresholds = precision_recall_curve(y_train_5, y_scores)
```

matplotlib을 이용해 임곗값의 함수로 정밀도 재현율 그림

```
def plot_precision_recall_vs_threshold(precisions, recalls, thresholds):
    plt.plot(thresholds, precisions[:-1], "b--", label="정말도", linewidth=2)
    plt.plot(thresholds, recalls[:-1], "g-", label="재현율", linewidth=2)
    plt.xlabel("임계값", fontsize=16)
    plt.legend(loc="upper left", fontsize=16)
    plt.ylim([0, 1])

plt.figure(figsize=(8, 4))
plot_precision_recall_vs_threshold(precisions, recalls, thresholds)
plt.xlim([-700000, 700000])

plt.show()
```



정밀도 90% 달성 분류기

0.7070651171370596

```
      (y_train_pred = (y_scores > 0)).all()

      True

      y_train_pred_90 = (y_scores > 70000)

      precision_score(y_train_5, y_train_pred_90)
      정밀도를 높게 만들더라도,

      0.855198572066042
      거의 90%

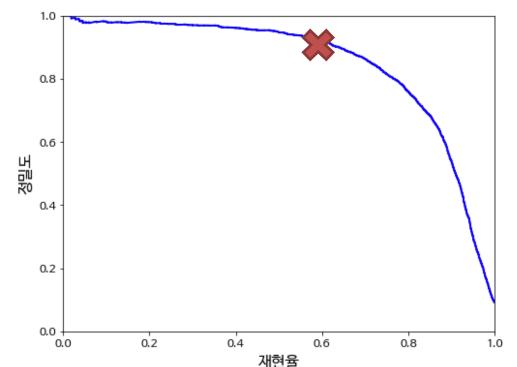
      recall_score(y_train_5, y_train_pred_90)
      유용하지 않음!
```

20

◆ 작업에 맞는 최선의 정밀도/재현율 트레이드오프를 만드는 임곗값 선택

```
def plot_precision_vs_recall(precisions, recalls):
    plt.plot(recalls, precisions, "b-", linewidth=2)
    plt.xlabel("재현율", fontsize=16)
    plt.ylabel("정밀도", fontsize=16)
    plt.axis([0, 1, 0, 1])

plt.figure(figsize=(8, 6))
plot_precision_vs_recall(precisions, recalls)
plt.show()
```



재현율 80% 근처에서 정밀도가 급격하게 줄어들기 시작. 이 하강점 직전을 정밀도/재현율 트레이드오프로 선택하는것이 좋다.

예) 재현율 60% 정도인 지점.

◆ ROC (Receiver Operating Charactoeristic) 곡선

- 이진 분류 평가에 많이 사용됨
- 거짓 양성 비율에 대한 진짜 양성 비율(재현율)의 곡선 (정밀도/재현율 곡선과 비슷하게 생김)
- 거짓 양성 비율(FPR) = 1 진짜 음성 비율 (TNR: 특이도)
- ROC 곡선 : 민감도(재현율)에 대한 1- 특이도 그래프
- 여러 임곗값에서 TPR, FPR 계산 : roc_curve() 함수

```
from sklearn.metrics import roc_curve

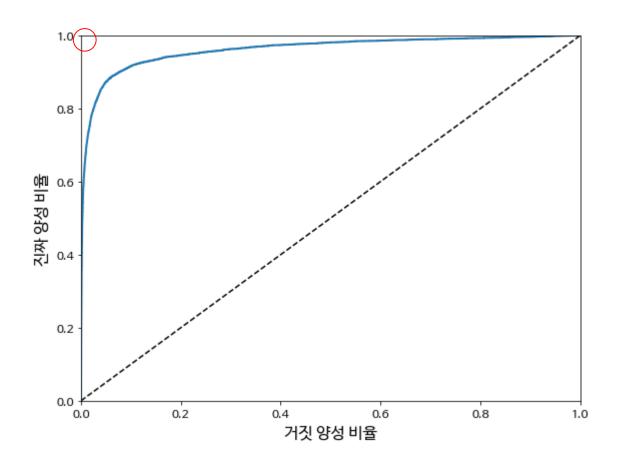
fpr, tpr, thresholds = roc_curve(y_train_5, y_scores)
```

```
def plot_roc_curve(fpr, tpr, label=None):
    plt.plot(fpr, tpr, linewidth=2, label=label)
    plt.plot([0, 1], [0, 1], 'k--')
    plt.axis([0, 1, 0, 1])
    plt.xlabel('거짓 양성 비율', fontsize=16)
    plt.ylabel('진짜 양성 비율', fontsize=16)

plt.figure(figsize=(8, 6))
    plot_roc_curve(fpr, tpr)

plt.show()
```

- ◆ 재현율(TPR)이 높을수록 분류기가 만드는 거짓 양성(FPR)이 늘어남
 - 점선 : 완전한 랜덤 분류기의 ROC 곡선
 - 좋은 분류기: 점선에서 최대한 멀리 떨어져 있어야 (왼쪽 위 모서리)



◆ ROC 곡선 아래 면적 : Area Under the Curve (AUC)

- 완벽한 분류기는 ROC의 AUC가 1
- 완전한 랜덤 분류기는 0.5

```
from sklearn.metrics import roc_auc_score
roc_auc_score(y_train_5, y_scores)
```

0.9614189997126434

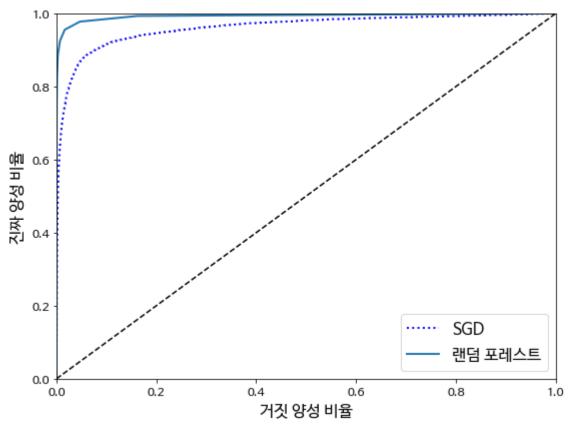
•예) RandomForestClassifier vs. SGDClassifier 비교

• 훈련 세트의 샘플에 대한 점수

확률이 아니라, 점수 필요 > 양성 클래스 확률을 점수로 사용

```
y_scores_forest = y_probas_forest[:, 1] # 점수는 양성 클래스의 확률입니다
fpr_forest, tpr_forest, thresholds_forest = roc_curve(y_train_5,y_scores_forest)
```

```
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(fpr, tpr, "b:", linewidth=2, label="SGD")
plot_roc_curve(fpr_forest, tpr_forest, "랜덤 포레스트")
plt.legend(loc="lower right", fontsize=16)
plt.show()
```



```
roc_auc_score(y_train_5, y_scores_forest)
```

0.9928250745111685

- ◆ 다중 분류기 (다항 분류기) : 둘 이상의 클래스 구별
- ◆ 여러 개 클래스 직접 처리 가능 : RandomForest, NaiveBayes
- ◆ 이진분류만 가능 : SVM, 선형분류기
- ◆ 이진분류기를 이용한 다중분류 구성 방법
 - 특정 숫자 하나만 구분하는 숫자별 이진분류기 10개 (0~9)를 훈련시켜, 클래스가 10개인 숫자 이미지 분류 시스템 구성
 - 이미지 분류 시 각 분류기의 결정 점수 중 가장 높은 것을 클래스로 선택
 - 일대다(OvA) 전략
 - 0과 1 구별, 0과 2 구별, 1과 2구별 등 각 숫자 조합마다 이진 분류기 훈련
 - 일대일(OvO) 전략
 - 클래스가 N개라면 분류기는 Nx(N-1)/2개 필요
 - MNIST 문제: 45개 분류기 훈련 필요

- ◆ 다중 클래스 분류 작업에 이진 분류 알고리즘을 선택하면 사이킷런이 자동으로 감지해 OvA (SVM 분류기일 때는 OvO) 적용
 - 0~9까지의 원래 타깃 클래스(y_train)을 사용하여 SGDClassifier를 훈련시키고 예측 생성
 - 내부에서는 사이킷런이 실제로 10개의 이진 분류기를 훈련시키고 각각의 결정 점수를 얻어 점수가 가장 높은 클래스를 선택
 - decision_function() 함수 : 클래스마다 하나씩, 총 10개의 점수 반환
 - → 가장 높은 점수 : 클래스 5

- ◆ OvO 혹은 OvA를 강제로 지정하기 위해 OneVsOneClassifier, OneVsRestClassifier를 사용
- ◆ SGDClassifier 기반으로 OvO 사용

```
from sklearn.multiclass import OneVsOneClassifier
ovo_clf = OneVsOneClassifier(SGDClassifier(max_iter=5, random_state=42))
ovo_clf.fit(X_train, y_train)
ovo_clf.predict([some_digit])
array([5.])

len(ovo_clf.estimators_)
45
```

◆ RandomForestClassifier 기반 훈련

- 직접 샘플을 다중 클래스로 분류
- 5를 80%확률로 추측

```
forest_clf.fit(X_train, y_train)
forest_clf.predict([some_digit])|

array([5.])

forest_clf.predict_proba([some_digit])

array([[0.1, 0. , 0. , 0.1, 0. , 0.8, 0. , 0. , 0. , 0. ]])
```

- ◆ 분류기 평가 : 교차 검증 사용
- ◆ 모든 테스트 폴트에서 84% 이상

```
cross_val_score(sgd_clf, X_train, y_train, cv=3, scoring="accuracy")
array([0.84063187, 0.84899245, 0.86652998])
```

◆ 입력의 스케일을 조정하면 정확도 90%이상

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
scaler = StandardScaler()
X_train_scaled = scaler.fit_transform(X_train.astype(np.float64))
cross_val_score(sgd_clf, X_train_scaled, y_train, cv=3, scoring="accuracy")
array([0.91011798, 0.90874544, 0.906636])
```

실제 프로젝트라면...

- 여러 모델을 시도하고,
- 가장 좋은 몇 개를 골라,
- GridSearchCV를 사용해 하이퍼파라미터를 세밀하게 튜닝하고,
- 가능한 한 자동화

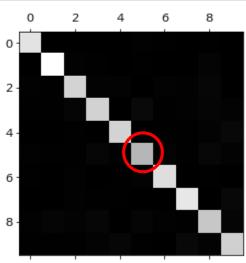
◆ 가능성이 높은 모델을 하나 선정, 모델의 성능 향상

만들어진 에러 종류 분석 → 오차행렬 분석

```
v train pred = cross_val_predict(sgd_clf, X_train_scaled, y_train, cv=3)
conf_mx = confusion_matrix(y_train, y_train_pred)
conf_mx
array([[5730.
                                                        39.
                                                              31.
                     22,
                                      52,
                                            47,
                                11,
                     54,
         1, 6459,
                          29,
                                6, 43,
                                          6,
                                                 11, 123,
                                                            10],
                           90,
                                                  57, 157,
               34, 5371,
                                     23,
         53,
                                80,
                                            79,
                                                            14],
                                     248,
         48,
               37,
                   147, 5315,
                                 3,
                                            36,
                                                  58, 143,
                                                             96],
               25,
                          10, 5338,
                                                  36,
                                                      87,
         20,
                     45,
                                     10,
                                            49,
                                                            222],
         72,
                     38,
               40,
                         170,
                                72, 4616,
                                           108,
                                                  28,
                                                      186,
                                                             91],
         35,
              24.
                     56,
                         1,
                                39,
                                     86, 5622,
                                                  6.
                                                       49.
                                                            01.
         22,
              20, 73,
                                     12,
                                            4, 5832,
                          28,
                                48,
                                                       18,
                                                            208],
                                                  27. 5037.
         53, 146,
                   84, 152,
                                14, 147,
                                            55,
                                                            136] ,
                     29.
                                                 211.
               33.
                               164.
                                      39,
                                                        77. 5260]].
         44,
     dtype=int64)
```

- ◆ 이미지화 →
 - 배열에서 가장 큰 값 흰색, 가장 작은 값 검은색으로 정규화
- ◆ 대부분의 이미지가 올바르게 분류되었음
 - 숫자 5의 색상이 다른 색에 비해 조금 어두움
 - 데이터셋에 숫자 5의 이미지가 적거나, 분류기가 숫자 5를 다른 숫자만큼 잘 분류하지 못함

plt.matshow(conf_mx, cmap=plt.cm.gray)
plt.show()

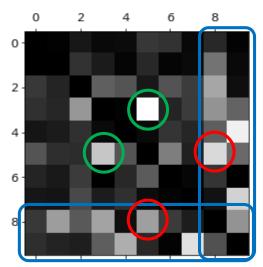


• 오차 행렬의 각 값을 대응되는 클래스의 이미지 개수로 나누어 에러 비율 비교

```
row_sums = conf_mx.sum(axis=1, keepdims=True)
norm_conf_mx = conf_mx / row_sums
```

• 다른 항목은 그대로 유지, 주대각선만 0으로 채워서 그래프로 그림

```
np.fill_diagonal(norm_conf_mx, 0)
plt.matshow(norm_conf_mx, cmap=plt.cm.gray)
plt.show()
```



행 : 실제 클래스

열 : 예측한 클래스

- 8과 9의 열이 상당히 밝음
 → 많은 이미지가 8과 9로 잘못 분류되었음
- 8과 9의 행도 밝음
 - → 숫자 8과 9가 다른 숫자들과 혼돈이 자주 됨
- 클래스 1의 열은 매우 어두움
 → 대부분의 숫자 1이 정확하게 분류되었음
- 8→5로 잘못 분류된 경우 > 5→8로 잘못 분류된 경우
- 3→5, 5→3 잘못 분류되는 경우 많음

3과 5의 샘플 그림

```
cl_a, cl_b = 3, 5
X_aa = X_train[(y_train = cl_a) & (y_train_pred = cl_a)]
X_ab = X_train[(y_train = cl_a) & (y_train_pred = cl_b)]
X_ba = X_train[(y_train = cl_b) & (y_train_pred = cl_a)]
X_bb = X_train[(y_train = cl_b) & (y_train_pred = cl_b)]

plt.figure(figsize=(8,8))
plt.subplot(221); plot_digits(X_aa[:25], images_per_row=5)
plt.subplot(222); plot_digits(X_ab[:25], images_per_row=5)
plt.subplot(223); plot_digits(X_ba[:25], images_per_row=5)
plt.subplot(224); plot_digits(X_bb[:25], images_per_row=5)
save_fig("error_analysis_digits_plot")
plt.show()
```

```
33333 33333
33333 33333
33333 33333
33333 33333
```

왼쪽 블록 두 개 : 3으로 분류된 이미지 오른쪽 블록 두개 : 5로 분류된 이미지

3과 5는 몇 개의 픽셀만 다름 SGDClassifier를 사용하는 경우, 픽셀에 가중치를 할당하고, 픽셀 강도의 가중치 합을 클래스 점수로 계산 → 3과 5 쉽게 혼동

분류기는 이미지의 위치나 회전 방향에 매우 민감 3과 5의 에러를 줄이는 방법 예) 이미지를 중앙에 위치시키고, 회전되어 있지 않도록 전처리

3.6 다중 레이블 분류

◆ 샘플마다 여러 개의 클래스를 출력해야 하는 경우

- 예) 얼굴 인식 분류기
 - 같은 사진에 여러 사람이 등장
 - 인식된 사람마다 레이블을 하나씩 할당
 - 분류기 인식 얼굴 : [앨리스, 밥, 찰리] 인 경우
 - 한 사진에 앨리스&찰리 → 분류기는 [1,0,1] 출력
- ◆ 다중 레이블 분류: 여러 개의 이진 레이블을 출력하는 분류 시스템

3.6 다중 레이블 분류

- ◆ 각 숫자 이미지에 두 개의 타깃 레이블이 담긴 y-multilabel 배열 생성
 - 7 이상
 - 홀수 여부

3.6 다중 레이블 분류

◆ 다중 레이블 분류기 평가

예) 각 레이블의 F₁ 점수를 구하고, 간단하게 평균 점수 계산

```
import time
start_time = time.time()
y_train_knn_pred = cross_val_predict(knn_clf, X_train, y_multilabel, cv=3
f1_score(y_multilabel, y_train_knn_pred, average="macro")
print("start_time", start_time) #출력해보면, 시간형식이 사람이 읽기 힘든 일련번호형*
print("--- %s seconds ---" %(time.time() - start_time))

start_time 1538413119.2766328
--- 3582.56902384758 seconds ---
```

• 주의!!! 실행하는데 시간이 매우 오래 걸림 (하드웨어에 따라 몇 시간씩 걸리기도...)

Any Questions... Just Ask!

