Deep Learning with Python

Chapter 6 DNN 3

■ 목차

1. 학습 성능을 높이기 위한 데이터 분할

- a. Training set, Validation set, Test set
- b. 2-Way and 3-Way Hold out Method
- c. k-fold cross-validation

2. 학습 성능을 높이기 위한 데이터 전처리

- a. Feature engineering
- b. Feature scaling
- c. One-hot encoding
- d. Polynomial Features

■ 학습목표

- 1. 학습 성능을 높이기 위한 데이터 분할 방법을 알아보고 각 데이터 셋의 목적을 이해한다.
- 2. Feature Engineering의 개념을 이해하고 Feature Scaling과 One-hot Encoding, Polynomial Feature의 개념을 배운다.

Training set, Validation set, Test set의 개념

* Training set

- 모델 생성, 학습에 이용하는 데이터 셋으로 학습 데이터 셋이라고 한다.

* Validation set

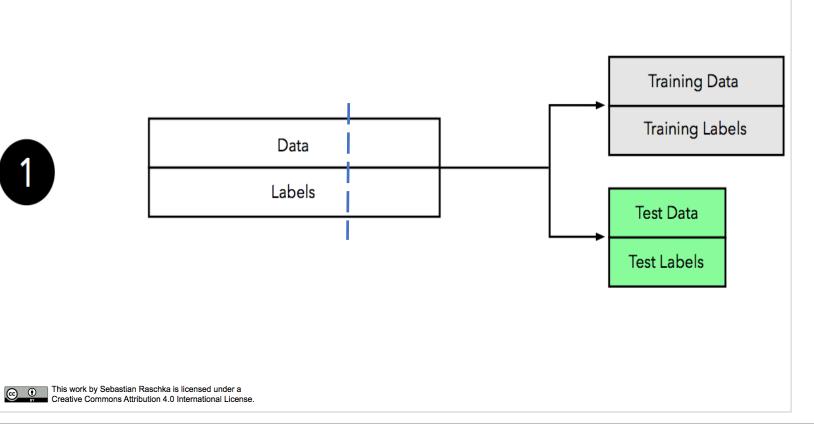
- 모델의 과적합(Overfitting)을 방지를 위한 데이터 셋으로 검증 데이터 셋이라고 한다.
- 모델의 성능을 높이기 위한 모의 Test set이다.

* Test set

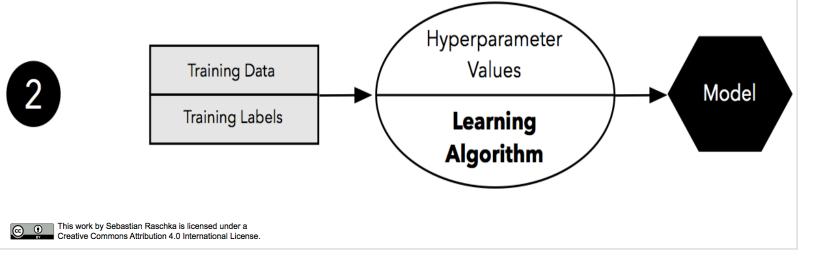
- 학습용 데이터에 맞춤형으로 만들어진 모델이 다른 상황에도 일반화될 수 있는지 검정하기 위한 데이터 셋이다.
- 모델의 예측 성능을 평가한다.

② 데이터 분할 방법 : 2-Way Holdout Method (1/4)

1. 데이터를 Training set과 Test set 두 개로 분리한다.



- ② 데이터 분할 방법 : 2-Way Holdout Method (2/4)
 - 2. Training set으로 모델을 학습한다.
 Learning Algorithm은 머신러닝, 딥러닝 알고리즘 등 다양하다.
 딥러닝에서 Hyperparameter는 학습 과정이 시작되기 전에 미리 세팅하는 값들이다. 예를 들어 Learning rate, Batch size, Epoch 등이 있다. 반대로 Model parameter는 학습 과정을 거쳐서 구하는 값으로 가중치(Weight), 편향(Bias)등이 있다.



◎ 데이터 분할 방법 : 2-Way Holdout Method (3/4)

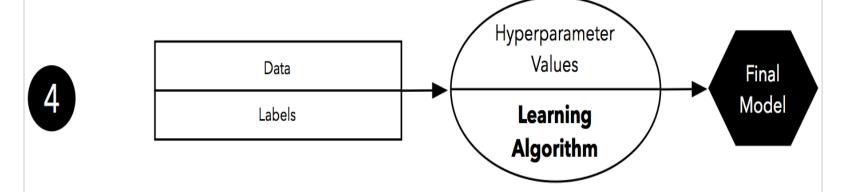
3. Training set으로 학습한 모델을 Test set을 대상으로 평가한다. 평가한 예측값과 Test set의 Label을 비교하여 성능을 측정한다.

Test Data Prediction → Performance Model Test Labels

This work by Sebastian Raschka is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License.

데이터 분할 방법 : 2-Way Holdout Method (4/4)

4. 최적의 Hyperparameter Values를 찾기 위해 Data set을 다시 한번 학습하고 최종 모델을 결정한다.



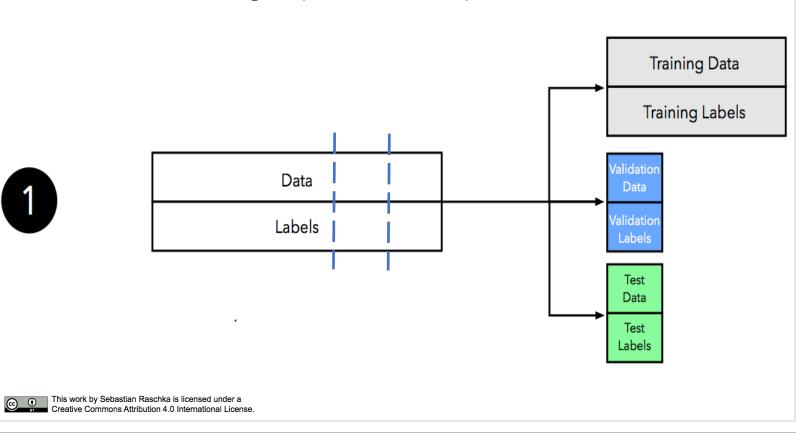
장점: 데이터 분할이 간단하며 모델 생성에 오랜 시간이 소요되지 않는다.

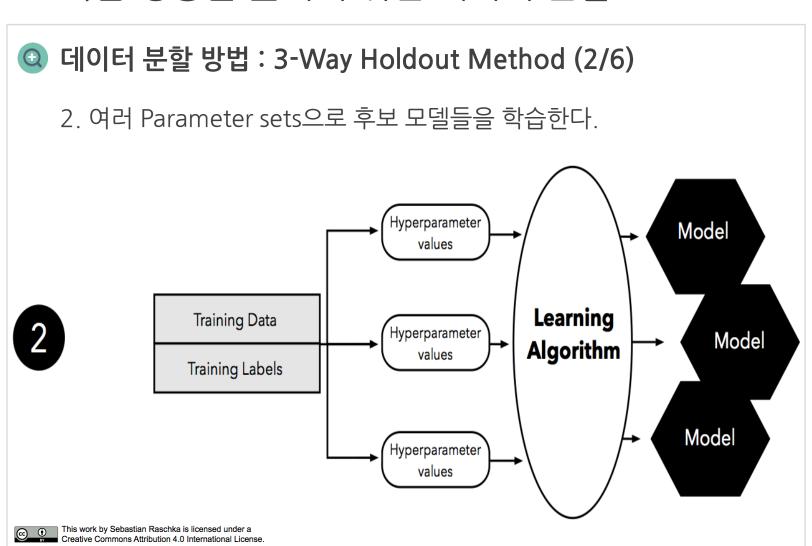
단점: Overfitting 방지가 어렵다.

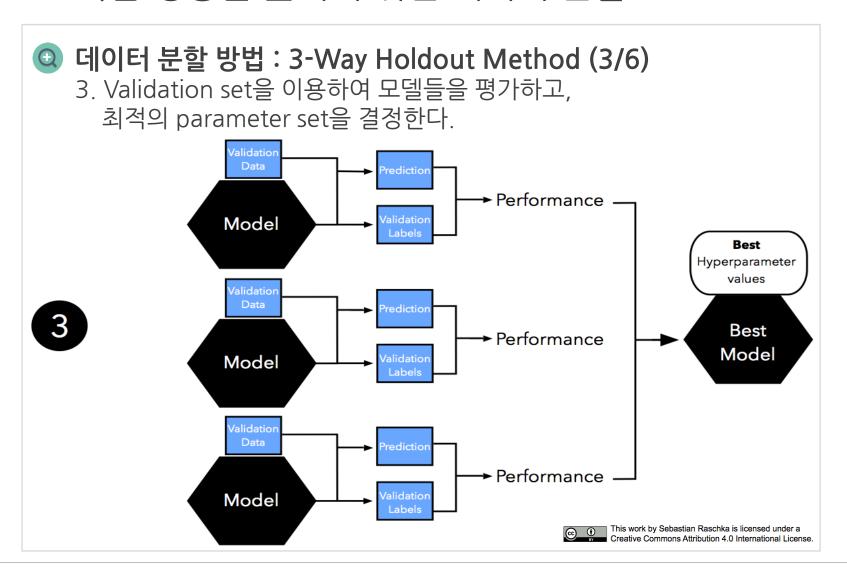
This work by Sebastian Raschka is licensed under a



1. 데이터를 Training set, Validation set, Test set으로 분리한다.

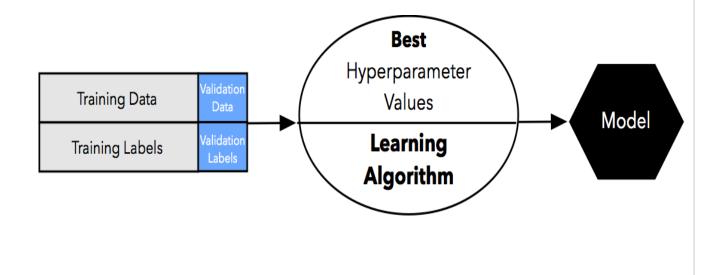








4. Training set과 Validation set을 합쳐, Best parameter set으로 모델을 재학습한다.



4

This work by Sebastian Raschka is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

데이터 분할 방법: 3-Way Holdout Method (5/6)

5. Training set + Validation set으로 학습한 모델을 Test set을 대상으로 평가한다. 예측값과 Test set의 Label을 비교하여 성능을 측정한다.

Test Data

Prediction

Performance

Model

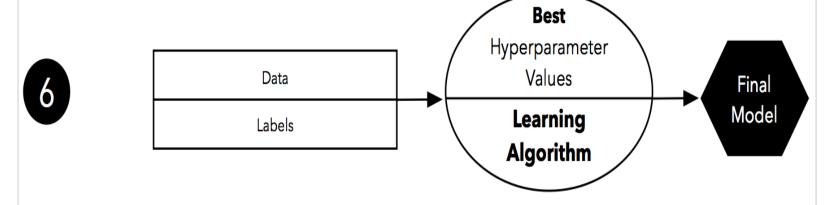
Test Labels

Test Labels

Tist work by Sebastian Raschka is licensed under a Creative Commons Altribution 4.0 International License.

② 데이터 분할 방법: 3-Way Holdout Method (6/6)

6. 최적의 Hyperparameter Values를 찾기 위해 Data set을 다시 한번 학습하고 최종 모델을 결정한다.

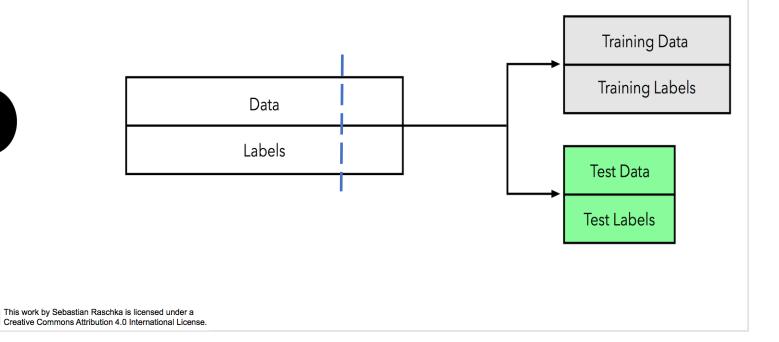


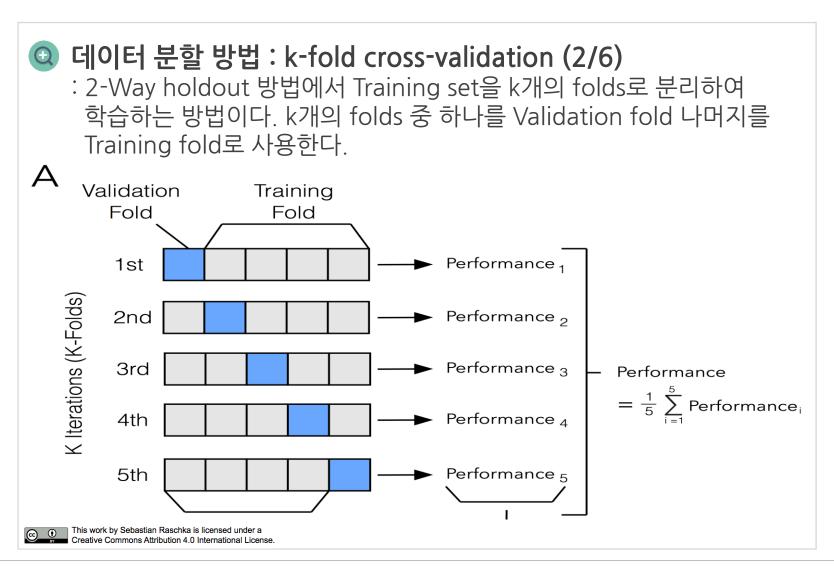
장점: 2-Way holdout에 비해 학습한 모델의 일반화 성능을 Validation set으로 찿을 수 있다.

단점: Training set의 크기가 원 데이터 셋에 비해 작다.

This work by Sebastian Raschka is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International Licens

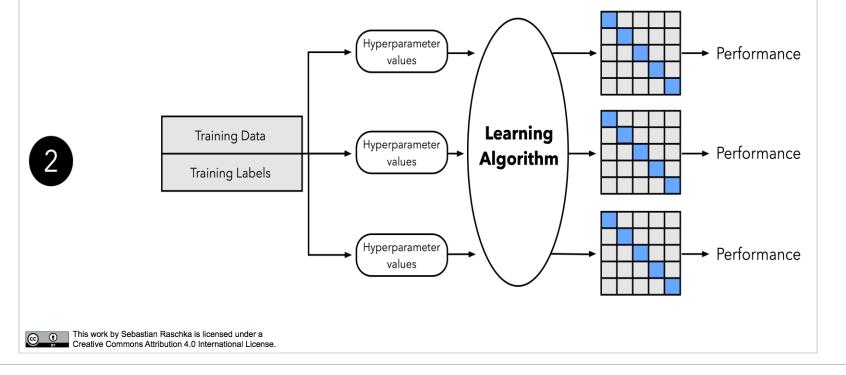
- ◎ 데이터 분할 방법 : k-fold cross-validation (1/6)
 - : k-fold CV방법을 단계별로 살펴보면 다음과 같다.
 - 1. 데이터를 Training set, Test set으로 분리한다.





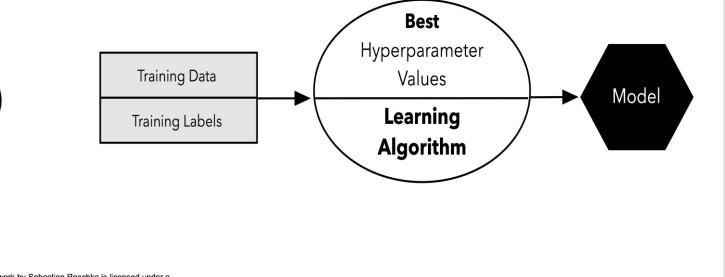
② 데이터 분할 방법: k-fold cross-validation (3/6)

2. Training set을 이용하여 여러 개의 parameter set에 대해 k-fold cross-validation을 수행한다.



② 데이터 분할 방법: k-fold cross-validation (4/6)

3. k-fold corss-validation 학습 결과가 가장 좋은 parameter set을 선택하고, 이를 이용해 training set에 모델을 학습한다.

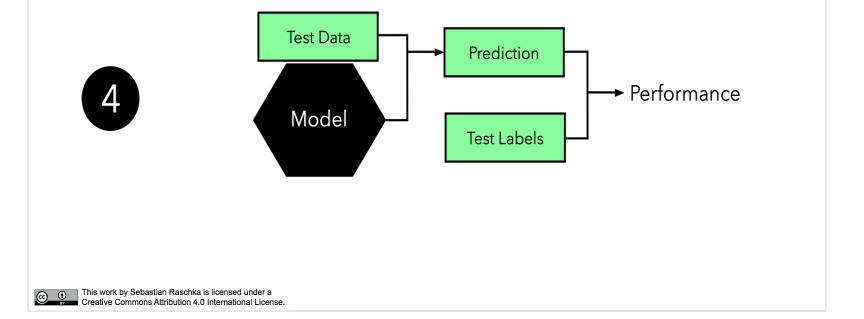


This work by Sebastian Raschka is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International Licen

3

◎ 데이터 분할 방법 : k-fold cross-validation (5/6)

4. 학습한 모델을 Test set을 대상으로 평가한다. 예측값과 Test set의 Label을 비교하여 성능을 측정한다.



◎ 데이터 분할 방법 : k-fold cross-validation (6/6)

5. 전체 데이터를 대상으로 최종 모델을 학습한다.

Data

Data

Labels

Best

Hyperparameter

Values

Learning

Algorithm

Final

Model

장점: 겹치지 않는 Validation set을 이용하므로 모델의 편향(bias)과

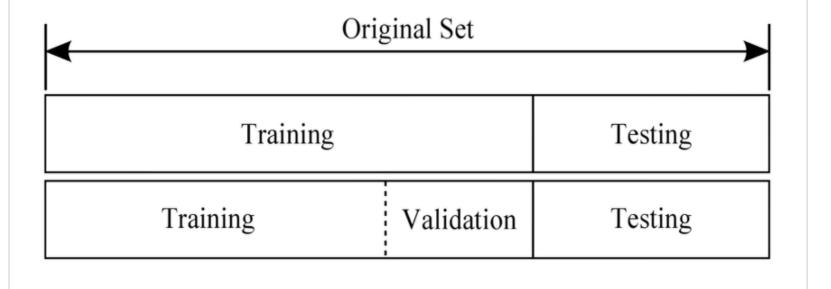
분산(variance)을 측정하기에 용이하다.

단점: 여러 번 모델 학습이 이뤄지므로 학습 시간이 오래 걸린다.

This work by Sebastian Raschka is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License



- 전체 데이터를 분할할 때 비율은 보통 다음과 같다.
- Training 70% / Test 30%
- Training 50% / Validation 25% / Test 25%
- Training 60% / Validation 20% / Test 20%



- ◎ 데이터 분할 시 고려해야 할 사항 (2/2)
 - 데이터 분할 전에 전체 데이터 셋을 random하게 섞는 것이 좋다
 - sklearn.util.shuffle 함수 이용
 - sklearn.model_selection.train_test_split 함수로 분할을 함께 처리
 - 다만 시계열 데이터처럼 앞뒤 순서가 있는 경우 섞지 않은 것이 좋다.

② Feature란?

- 현상들을 설명하고 표현하는 요소로 변수 또는 특징이라고 한다.
- 다른 말로 Variable, Attribute, Factor, Field, Column이라고도 한다.
- 머신러닝/딥러닝에서는 입력 변수를 Feature라고 한다.

Predictor variables(예측 변수)
Input variables(입력 변수)
Independent variables(독립 변수)
Feature(특징)

Target variables(타켓 변수) Output variables(출력 변수) Dependent variables(종속 변수)

ID	X ₁	X ₂	•••	X _p	Υ
1	X ₁₁	X ₁₂	•••	X_{1p}	Y ₁
2	X ₂₁	X ₂₂	• • •	X_{2p}	Y ₂
•••	• • •	• • •	•••	• • •	•••
n	X _{n1}	X _{n2}	•••	X_{np}	Y _n

- ② Feature Engineering 이란?
 - 모델의 성능을 높이기 위해 주어진 초기 데이터로부터 특징(Feature)을 가공하고 생성하여 모델에 입력할 데이터를 만드는 전체 과정을 의미한다.
 - Feature Engineering을 데이터 사이언스 단계로 살펴보면 다음과 같다.
 - 1. Project Scoping (문제 정의)
 - 2. Data Collection (데이터 수집)
 - 3. EDA (탐색적 자료분석)
 - 4. Data Preprocessing (데이터 전처리)
 - 5. Feature Engineering (데이터 가공)
 - 6. Modeling (모델링)
 - 7. Evaluation (모델 평가)
 - 8. Project Delivery / Insights (통찰력 제고)

Feature Engineering 의 구성

- Feature Engineering은 Feature Selection(특징 선택), Feature Extraction(특징 추출), Feature Transformation and Generation(특징 변형과 생성)으로 구성된다.

1. Feature Selection(특징 선택)

- 특징 선택의 목적은 원본 데이터에서 불필요한 특징 집합을 제거하여 간결한 특징 집합을 만드는 것이다.

2. Feature Extraction(특징 추출)

- 원본 데이터들의 특징 조합으로 새로운 특징을 만들어 내는 것이다.

3. Feature Transformation and Generation(특징 변형과 생성)

- 특징 변형과 생성에는 Feature Scaling, One-hot Encoding 등의 방법이 있다.

Feature Scaling

- Feature Scaling이란 Feature(입력값)의 범위를 조정하는 작업으로 Feature간의 범위 차이가 크다면 경사하강법을 적용하기가 어려워진다.

X1	X2
1	2000
3	-6000
7	1000
4	-5000
:	;

② Feature Scaling 방법 Centering

- 각 Feature(입력값)의 평균을 추출하는 방법으로 Feature를 0을 중심으로 만든다. Centering에서 Scaling한 입력값은 다음과 같다.

$$X' = X - \mu_X$$
, $\mu_X : X$ 의 평균

Standardization

- Centering 방법에서 0을 중심으로 조정된 입력값에 표준편차로 나눈다.

$$X = \frac{X - \mu_x}{\sigma_x}$$
, $\mu_X : X$ 의 평균, $\sigma_X : X$ 의 표준편차

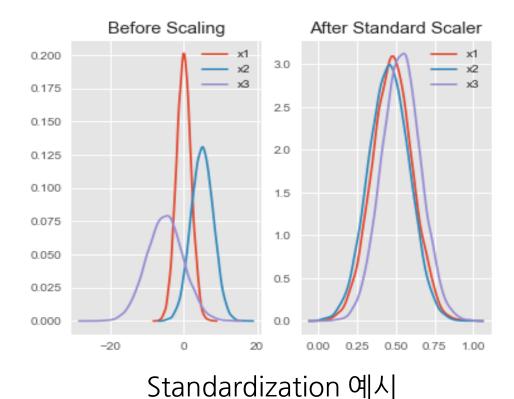
min-max scaling

- [최솟값, 최댓값]의 고정된 범위에 입력값을 Scaling 한다.

[0,1] scaling:
$$X = \frac{1}{\max(x) - Min(x)}(X - \min(x))$$

Feature Scaling 예시

- 아래 예시처럼 Feature Scaling으로 입력값의 범위를 조정하면 경사하강법을 적용하기가 용이하다.



One-hot Encoding

- One-hot Encoding이란 단 하나의 값만 True이고 나머지는 모두 False인 Encoding을 의미한다.
- 계절이라는 범주형 변수로 One-hot Encoding하면 다음과 같다.

ID	계절	ID	-
1	봄	1	
2	여름	2	
3	가을	3	
4	겨울	4	
:	÷	÷	

ID	봄	여름	가을	겨울
1	1	0	0	0
2	0	1	0	0
3	0	0	1	0
4	0	0	0	1
:	:	:	÷	:

One-hot Encoding

- '계절'이라는 하나의 feature에 1~4의 값을 담는 것보다 [봄, 여름, 가을, 겨울] 4개의 feature에 one-hot encoding하는 것이 학습에 유리하다
- '계절'이라는 하나의 feature에 값을 담으면 해당 feature에 대응하는 가중치가 점진적으로 학습되며 2.5와 같은 연속적이고 불명확한 중간 값을 가질 수 있기 때문이다.
- [봄, 여름, 가을, 겨울] 4개 feature로 명확히 나누게 되면 불명확한 중간 값이 없어지고 해당 feature를 정확하게 학습시킬 수 있다.

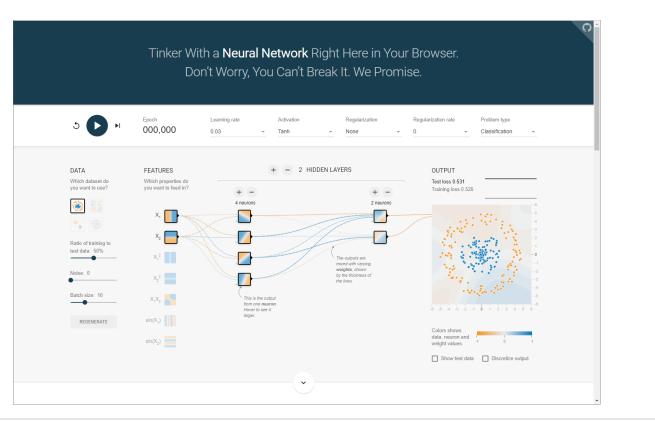


Polynomial Features

- 주어진 feature를 조합하여 새로운 feature를 만들어낼 수 있다.
- 주택 가격을 예측하는 모델을 만든다고 가정했을 때 feature로 가로 세로 길이가 주어진다면 이 둘을 곱한 '면적'을 추가하는 것이 학습에 유리하다.
- 비선형의 특징을 가지는 데이터라면 해당 비선형을 표현할 수 있는 함수로 feature를 변형하여 추가하면 학습이 더 잘된다.

Polynomial Features

- Neural Network Playground 예계 https://playground.tensorflow.org



감사합니다.

참고자료(Reference)

"모두를 위한 딥러닝 강좌 시즌 1", 김성훈

1. MNIST 문자인식

http://solarisailab.com/archives/303

https://localab.jp/blog/simple-neural-network-using-tensorflow/

2. Keras 소개 및 특징

https://blog.naver.com/sundooedu/221315683165

3. Keras 이미지

https://mparsec.com/wp-content/uploads/2017/07/anacondafeaturedimg.png

4. Holdout method 이미지

https://sebastianraschka.com/images/blog/2016/model-evaluation-selection-part1/testing.png

https://sebastianraschka.com/images/blog/2016/model-evaluation-selection-part2/holdout-validation.png

5. 데이터 분할 이미지

http://cfile22.uf.tistory.com/image/9951E5445AAE1BE0258820

6. Feature Engineering 개념

http://hero4earth.com/blog/learning/2018/01/29/Feature_Engineering_Basic/

7. Feature Scaling 이미지

https://cdn-images-1.medium.com/max/1600/1*-9SPkqHA12dkiDCAHnXLuw.png