버섯의 물리적 특성을 이용한 식용 / 독성 분류

버섯의 갓 직경, 모양, 색상 등 다양한 물리적 특성을 기반으로 해당 버섯이 식용(e)인지 독성(p)인지 분류합니다.



2024. 09. KAGGLE · PLAYGROUND PREDICTION COMPETITION Binary Prediction of Poisonous Mushrooms

프로젝트 개요

모델링 및 하이퍼파라미터 최적화

탐색적 데이터 분석

최적화 된 모델 학습 및 검증

데이터 전처리

결과 분석 및 해석

OUTLINE 프로젝트 개요



Binary Prediction of Poisonous Mushrooms

Playground Series - Season 4, Episode 8

https://www.kaggle.com/competitions/playground-series-s4e8



UCI Machine Learning Repository의 Mushroom 데이터셋을 활용한 버섯 분류

- 버섯의 물리적 특성을 기반으로 식용 또는 독성 여부를 분류함
- 이 데이터셋은 8,124개의 샘플과 22개의 특성을 가진 다변량, 범주형 데이터로 구성

데이터셋 설명

이 데이터셋은 Agaricus 및 Lepiota 과(Family)에 속하는 23종의 주름버섯에 대한 가상의 표본 설명을 포함합니다. 각 종은 다음과 같이 분류됩니다:

- * 확실히 식용 가능
- * 확실히 독성
- * 식용 여부 불명 및 비권장 (이 분류는 독성 분류와 통합됨)

EDA 탐색적 데이터분석



버섯의 주요 특성 요약

줄기(Stem)

- Stem Height(줄기 높이) : 지면에서 갓 까지의 길이
- Stem Width(줄기 너비) :직경(좁음, 중간, 넓음
- Stem Surface(표면): 매끄러움, 섬유질, 비늘 모양 등
- Stem Root(줄기): 구근 모양, 뾰족함 등
- Stem Color(줄기 색상): 균일하거나, 길이에 따라 다양성을 보임

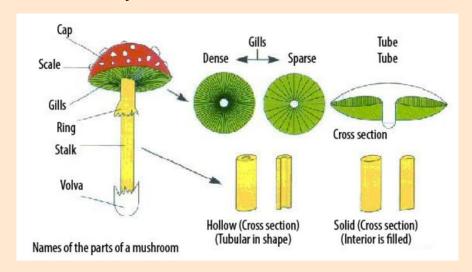
주름살(gill)

- Gill Attachment(주름살 부착): 자유형, 부착형, 내린형 등
- Gill Spacing(주름살 간격): 조밀, 간격 있음, 중간
- Gill Color(주름살 색상): 종 구별에 중요, 나이에 따라 변화

갓(Cap)

- Cap Diameter(갓 직경): 크기 측정 (mm~cm)
- Cap Shape(갓 모양): 원뿔형, 종 모양, 평평한 형태 등
- Cap Surface(갓 표면): 매끄러움, 비늘 모양, 끈적거림 등
- Cap Color(갓 색상): 다양하며 성숙도에 따라 변화 가능

2024. 09. KAGGLE · PLAYGROUND PREDICTION COMPETITION Binary Prediction of Poisonous Mushrooms



베일(veil) & 고리(ring)

- Veil Type(베일 종류): 부분 베일, 전체 베일
- Has Ring(고리 유무): 있음 또는 없음
- Ring Type(고리 종류): 단일, 이중, 벌어짐 등

기타

- Does Bruise or Bleed(멍들거나 출혈): 색 변화 또는 유색 액체 방출
- Spore Print Color(포자 흔적 색상): 중요한 식별 특징
- Habitat(서식지): 삼림지대, 초원, 도시 지역 등
- Season(계절): 나타나는 시기

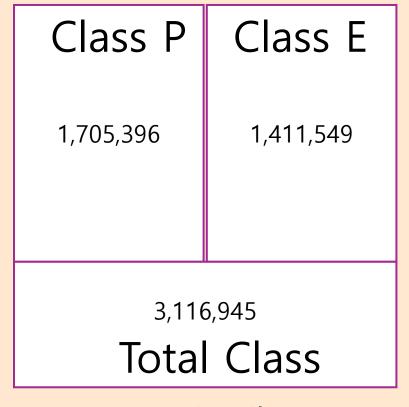
데이터 톧아보기1

전반적인 데이터 확인하기

	○ =I+I	○ FI0I •	== 경ᄎ기 ·	== Q1137k *		○ □ □ □ □ □ □ □	
÷		☆ 타입 ÷	23 결측값 ‡	123 유니크값 ‡	☆ 첫번째값 ‡	☆ 두번째값 ‡	☆ 세번째값 ‡
	id	int64	0	3116945		1	2
	class	object	0	2		р	е
2	cap-diameter	float64		3913	8.8	4.51	6.94
3	cap-shape	object	40	74	f	x	f
4	cap-surface	object	671023	83	s	h	s
5	cap-color	object	12	78			b
6	does-bruise-or-bleed	object	8	26	f	f	
7	gill-attachment	object	523936	78	а	а	x
8	gill-spacing	object	1258435	48			
9	gill-color	object	57	63	w		w
10	stem-height	float64	Θ	2749	4.51	4.79	6.85
11	stem-width	float64	Θ	5836	15.39	6.48	9.93
12	stem-root	object	2757023	38	NaN	NaN	NaN
13	stem-surface	object	1980861	60	NaN	у	s
14	stem-color	object	38	59	w		
15	veil-type	object	2957493	22	NaN	NaN	NaN
16	veil-color	object	2740947	24	NaN	NaN	NaN
17	has-ring	object	24	23	f	t	f
18	ring-type	object	128880	40	f	z	
19	spore-print-color	object	2849682	32	NaN	NaN	NaN
20	habitat	object	45	52	d	d	ι
21	season	object	Θ		a	W	w

- 피처의 타입을 보면 3가지(int, object, float) 로 분류되는 모습을 볼 수 있는데 이는 범주 형과 연속형으로 나눌 수 있어 보입니다.
- 결측값과 유니크값의 범위들이 꽤나 차이가 나는 모습을 볼 수 있는 것으로 보아 범위를 제한할 필요가 있어 보입니다.
- 샘플링 된 값들은 적절한 인코딩을 할 필요 가 있어 보입니다.

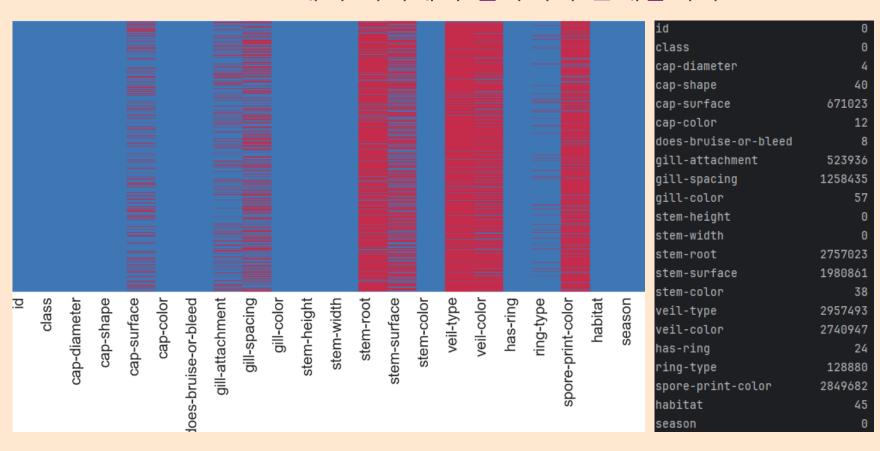
23종의 주름버섯에 대한 가상의 표본은 식용/독성 두가지 클래스로 분류되어 있습니다.



Train File

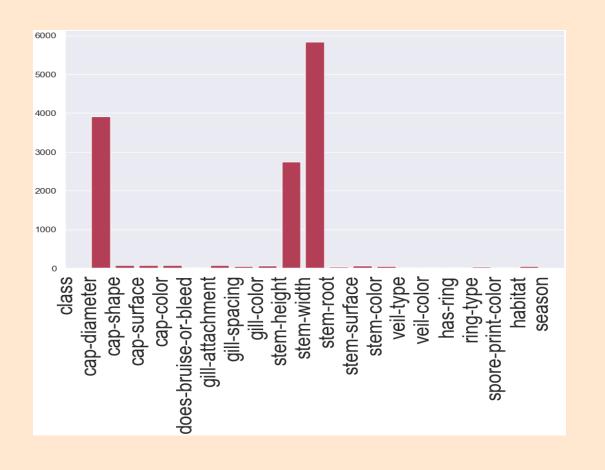
데이터 톧아보기

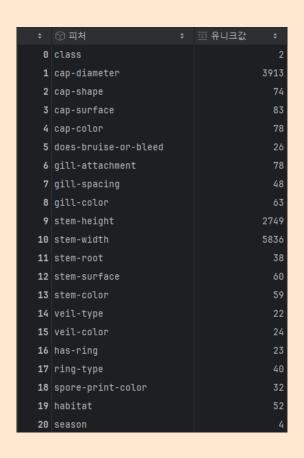
8개의 피쳐에서 결측치가 존재합니다.



유니크 값(*id 컬럼 제외)

유니크 값의 전체적인 범위가 꽤나 차이가 나는 모습을 보이고 있습니다.



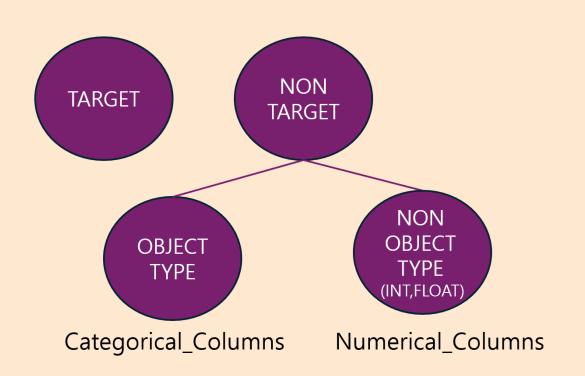


PREPORCESSING 데이터 전처리



변수 데이터 분리하기

타겟열과 타겟열을 제외한 열들의 오브젝트 타입과 비 오브젝트 타입으로 데이터 분리



Categorical_Columns

'cap-shape' 'stem-color'
'cap-surface' 'veil-type'
'cap-color' 'veil-color'
'does-bruise-or-bleed' 'has-ring'
'gill-attachment' 'ring-type'

'gill-spacing' 'spore-print-color'

'gill-color' 'habitat' 'stem-root' 'season'

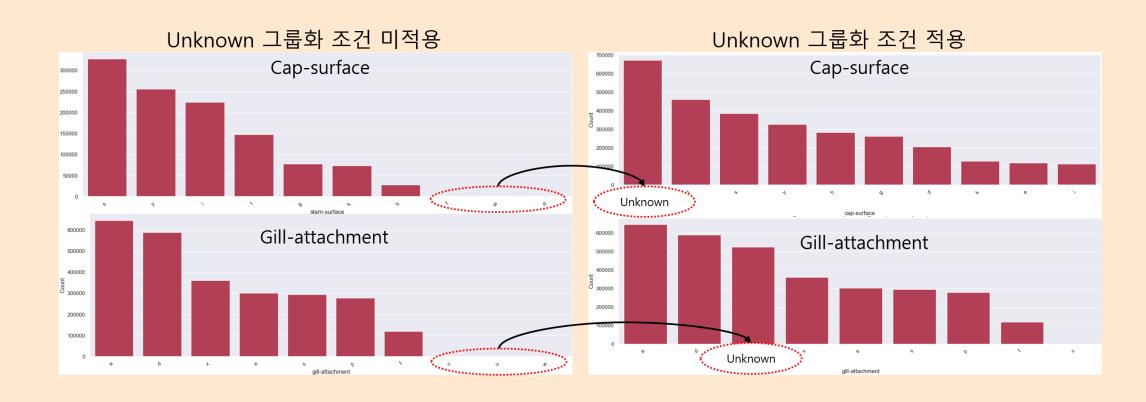
'stem-surface'

Numerical_Columns

'cap-diameter' 'stem-height' 'stem-width'

범주형 변수 처리하기

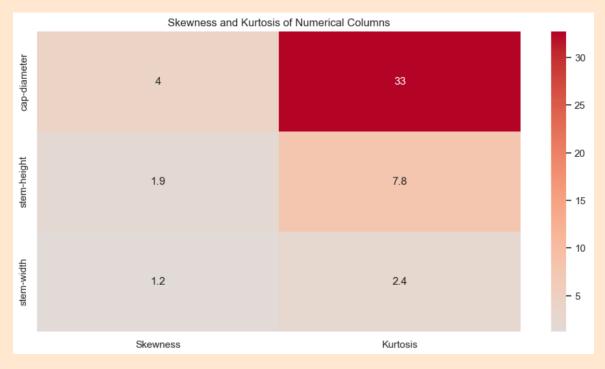
범주형 변수의 카디널리티에 기반하여 빈도수가 낮은 카테고리들을 특정 조건에 의해 새로운 범주 'UNKNWON'으로 그룹화 처리



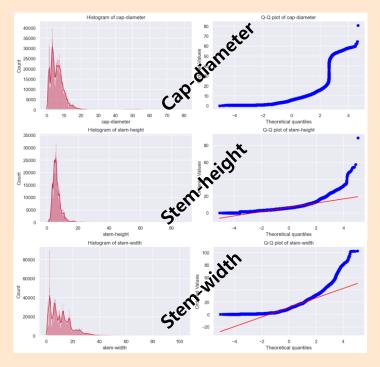
^{*}Unknown 적용 조건 : 각 특성에서 출현 빈도가 70회 이하 범주

연속형 변수 처리하기

왜도-첨도 분석, 히스토그램, QQ-plot을 통한 연속형 변수의 분포 특성 분석 및 정규성 검토 결과 정규성과 극단적인 값 존재



모든 특성이 높은 비대칭(왜도>1)과 뾰족한 분포(첨도>3)을 보이며, 특히 cap-diameter는 극단적(왜도4.0, 첨도33.0)이며 정규성 가정이 크게 위배 될 가능성을 나타냅니다.



QQ-plot: 직선에서 벗어난 정도가 클수록 정규 분포에서 벗어남을 나타냅니다. 특히 cap-diameter의 경우 큰 값에서 정규성에서 크게 벗어나는 것을 볼 수 있습니다.

히스토그램: 모든 변수가 오른쪽으로 치우친(right-skewed) 분포를 보이며, 특히 cap-diameter의 경우 극단적인 값들이 많이 관찰됩니다.

첨도(Kurtosis):

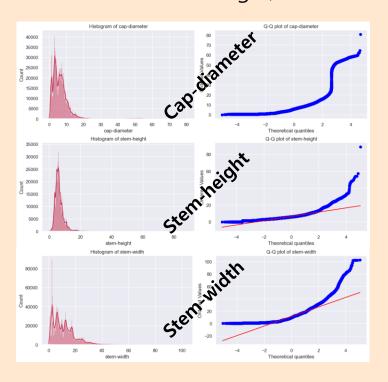
- 3에 가까우면 정규 분포와 유사한 뾰족함
- 3에 가까무한 3대 문모되 규칙한 표락됨
 3보다 크면 정규 분포보다 뾰족함 (heavy-tailed)
- 3보다 작으면 정규 분포보다 평평함 (light-tailed)

왜도(Skewness):

- |왜도| < 0.5: 거의 대칭
- 0.5 < |왜도| < 1: 중간 정도의 비대칭
- |왜되| > 1: 매우 비대칭

연속형 변수 처리하기

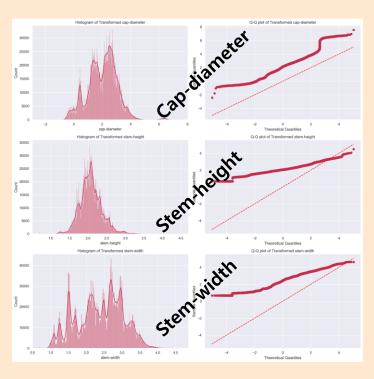
Stem-height, Stem-width는 로그 변환, Cap-diameter는 Box-Cox 변환



Box-Cox 변환

로그 변환

로그 변환



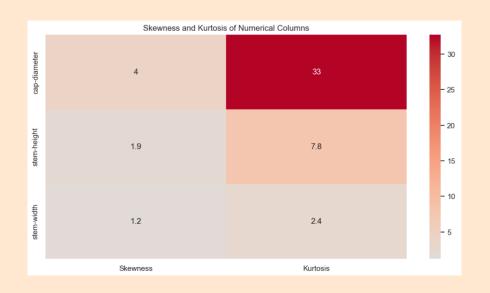
Cap-diameter의 경우 Box-Cox 변환 후 히스토그램이 더 대칭적인 형태로 바뀌고 Q-Q plot이 직선에 가까워진 것을 볼 수 있어 정규성이 크게 개선되었다고 할 수 있습니다. Stem-height, Stem-width도 로그변환 후 미세하게 개선이 되었음을 알 수 있습니다.

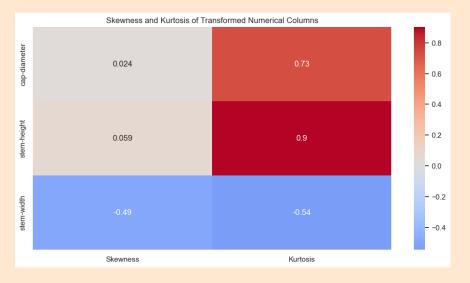
^{*} 로그 변환 : 데이터의 스케일을 조정하고 치우친 분포를 대칭적으로 만드는데 효과적이며, 양의 값을 가진 오른쪽으로 치우친 데이터에 주로 사용 됩니다.

Box-Cox 변환 : 로그변환을 포함한 더 일반화된 변환 방법으로, 데이터에 맞는 최적의 변환 파라미터를 찾아 정규성을 향상시키며, 특히 복잡한 비대칭 분포를 다루는데 유용합니다

연속형 변수 처리하기

왜도-첨도 분석, 히스토그램, QQ-plot을 통한 연속형 변수의 분포 특성 분석 및 정규성 검토 결과 정규성과 극단적인 값 존재





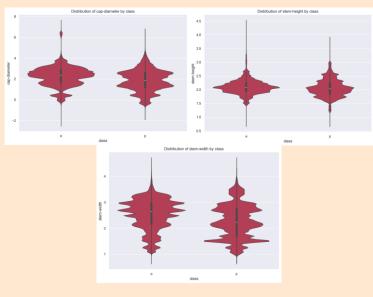
3보다 작으면 정규 분포보다 평평함 (light-tailed)

- |왜도| < 0.5: 거의 대칭
- 0.5 < |왜도| < 1: 중간 정도의 비대칭
- |왜되| > 1: 매우 비대칭

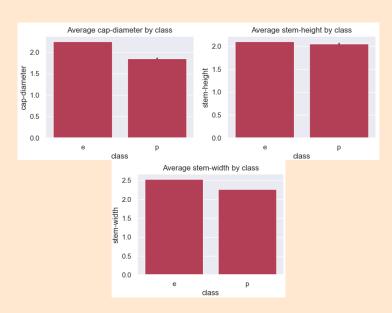
^{• 3}에 가까우면 정규 분포와 유사한 뾰족함

 ³에 기계구된 영규 분포되 규칙된 표극됨
 3보다 크면 정규 분포보다 뾰족함 (heavy-tailed)

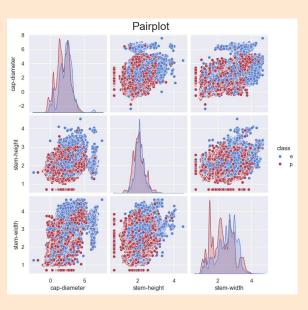
수치적 특성들 간의 상관관계 탐색



Stem-width에서 'e' 클래스가 'p'클래스보다 넓은 분포를 가지는 것이 뚜렷하게 보이긴 하지만 이러한 특성만으로는 두 클래스를 구분하기는 어려울 것으로 보입니다.



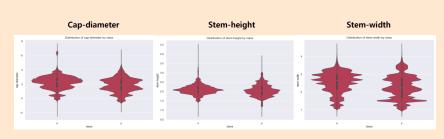
Cap-diameter, Stem-heigh에서는 클래스 간 평균 차이가 미미 하지만, stem-width에서는 'e' 클래스와 평균이 'p' 클래스보다 높은 것을 볼 수 있습니다만, 분포의 복잡성이나 변동성은 크게 보이지 않습니다.

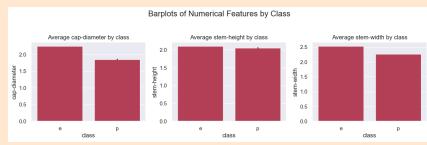


Stem-width와 다른 특성들 간의 관계에서 클래스 간 구분이 가장 뚜렷하게 나타나는 것을 확인 할 수 있습니다. 이는 Stem-width가 클래스 예측('e' 'p' 구분)에 중요한 역할(특성)을 할 수 있음을 시 사합니다.

^{*} 로그 변환 : 데이터의 스케일을 조정하고 치우친 분포를 대칭적으로 만드는데 효과적이며, 양의 값을 가진 오른쪽으로 치우친 데이터에 주로 사용 됩니다. * Box-Cox 변환 : 로그변환을 포함한 더 일반화된 변환 방법으로, 데이터에 맞는 최적의 변환 파라미터를 찾아 정규성을 향상시키며, 특히 복잡한 비대칭 분포를 다루는데 유용합니다.

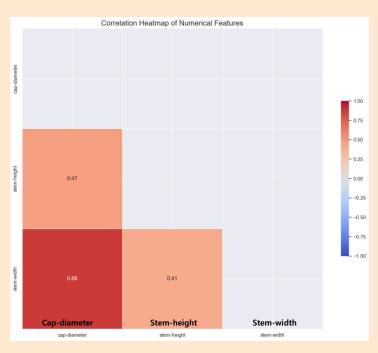
수치적 특성들 간의 상관관계 탐색



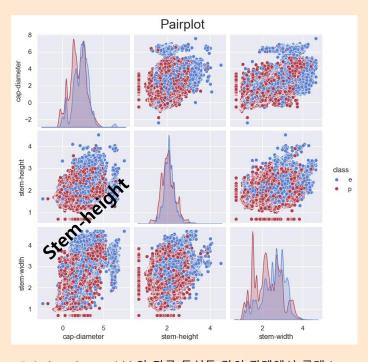


Violinplot : Stem-width에서 'e' 클래스가 'p'클래스보다 넓은 분포를 가지 는 것이 뚜렷하게 보이긴 하지만 이러한 특성만으로는 두 클래스를 구분하 기는 어려울 것으로 보입니다.

Barplot : Cap-diameter, Stem-heigh에서는 클래스 간 평균 차이가 미미하지만, stem-width에서는 'e' 클래스와 평균이 'p' 클래스보다 높은 것을 볼 수 있습니다만, 분포의 복잡성이나 변동성은 크게 보이지 않습니다.



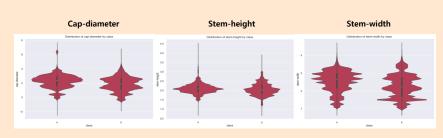
Correlation: 0.88의 높은 상관계수를 보이고 있어, 이 두 특성이 매우 강한 양의 상관관계를 가지고 있음을 알 수 있습니다. 이는 버섯의 갓 지름이 커질수록 줄기의 너비도 함께 증가하는 경향이 있다는 것을 의미합니다.

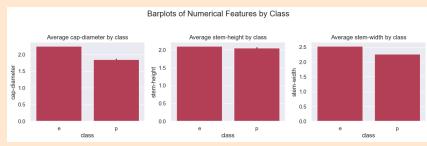


Pairplot: Stem-width와 다른 특성들 간의 관계에서 클래스 간 구분이 가장 뚜렷하게 나타나는 것을 확인 할 수 있습니다. 이는 Stem-width가 클래스 예측('e' 'p' 구분)에 중요한 역할 (특성)을 할 수 있음을 시사합니다.

^{*} 로그 변환 : 데이터의 스케일을 조정하고 치우친 분포를 대칭적으로 만드는데 효과적이며, 양의 값을 가진 오른쪽으로 치우친 데이터에 주로 사용 됩니다. * Box-Cox 변환 : 로그변환을 포함한 더 일반화된 변환 방법으로, 데이터에 맞는 최적의 변환 파라미터를 찾아 정규성을 향상시키며, 특히 복잡한 비대칭 분포를 다루는데 유용합니다.

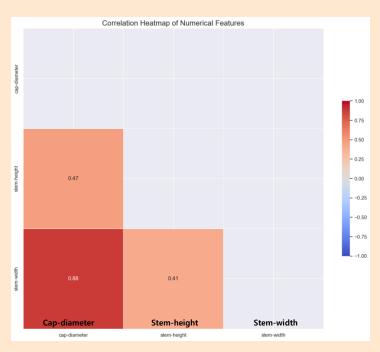
수치적 특성 이상치 탐지 및 처리



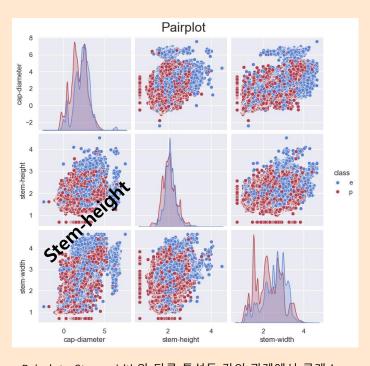


Violinplot : Stem-width에서 'e' 클래스가 'p'클래스보다 넓은 분포를 가지 는 것이 뚜렷하게 보이긴 하지만 이러한 특성만으로는 두 클래스를 구분하 기는 어려울 것으로 보입니다.

Barplot : Cap-diameter, Stem-heigh에서는 클래스 간 평균 차이가 미미하지만, stem-width에서는 'e' 클래스와 평균이 'p' 클래스보다 높은 것을 볼 수 있습니다만, 분포의 복잡성이나 변동성은 크게 보이지 않습니다.



Correlation: 0.88의 높은 상관계수를 보이고 있어, 이 두 특성이 매우 강한 양의 상관관계를 가지고 있음을 알 수 있습니다. 이는 버섯의 갓 지름이 커질수록 줄기의 너비도 함께 증가하는 경향이 있다는 것을 의미합니다.

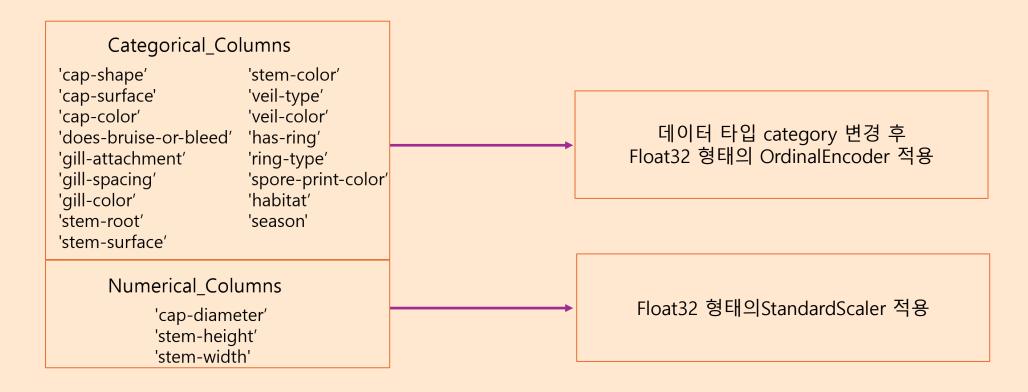


Pairplot: Stem-width와 다른 특성들 간의 관계에서 클래스 간 구분이 가장 뚜렷하게 나타나는 것을 확인 할 수 있습니다. 이는 Stem-width가 클래스 예측('e' 'p' 구분)에 중요한 역할 (특성)을 할 수 있음을 시사합니다.

^{*} 로그 변환 : 데이터의 스케일을 조정하고 치우친 분포를 대칭적으로 만드는데 효과적이며, 양의 값을 가진 오른쪽으로 치우친 데이터에 주로 사용 됩니다. * Box-Cox 변환 : 로그변환을 포함한 더 일반화된 변환 방법으로, 데이터에 맞는 최적의 변환 파라미터를 찾아 정규성을 향상시키며, 특히 복잡한 비대칭 분포를 다루는데 유용합니다.

인코딩, 스케일링

변수 인코딩, 스케일링 및 모델 메모리 최적화



^{*} OrdinalEncoder : 범주형 데이터를 수치형으로 변환. 범주간 관계를 수치로 표현하며, NaN값과 같이 알 수 없는 범주의 처리가 가능 * StandardScaler : 수치형 특성을 정규화함. 특성 간 스케일 제거, 모특성 간 가중치 균형 유지, 이상치 영향 감소의 기능

MODELING OPTIMIZATION TUNING 모델링 최적화 튜닝



XGBoost와 CatBoost 모델의 하이퍼 파라미터 최적화 : Grid SearchCV, Randomized SearchCV, Optuna

XGBClassifier + GridSearchCV XGBClassifier + RandomizedSearchCV CatBoost + Optuna

XGBoost, Extreme Gradient Boost

- 기존 Gradient Tree Boosting 알고리즘을 개선한 고성능 지도학습 프레임워크입니다. 트리 기반 앙상 블 모델로, 약한 학습기를 순차적으로 결합하여 강력한 예측 모델을 구축합니다.
- 주요 특징으로는 높은 예측 정확도, 과적합 방지 기능, 빠른 실행 속도가 있으며, 특징이며 Binary Prediction of Poisonous Mushrooms과 같은 대규모 데이터셋 처리에 효과적입니다. 효율적인 누락 값처리, 병렬 처리 지원, 정규화 기법 등을 통해 성능을 최적화합니다.
- 단점으로는 계산 복잡도가 높으며, 하이퍼파라미터에 전문성이 요구되고, 대규모 데이터셋 처리시 높은 메모리 요구사항이 필요합니다.

^{*} OrdinalEncoder : 범주형 데이터를 수치형으로 변환. 범주간 관계를 수치로 표현하며, NaN값과 같이 알 수 없는 범주의 처리가 가능

^{*} StandardScaler: 수치형 특성을 정규화함. 특성 간 스케일 제거, 모특성 간 가중치 균형 유지, 이상치 영향 감소의 기능

XGBoost에 GridSearchCV, RandomizedSearchCV 적용

XGBClassifier GridSearchCV

XGBClassifier RandomizedSearchCV

XGBClassifier + GridSearchCV

- 모든 가능한 하이퍼파라미터 조합을 철저히 탐색하여 주어진 파라미터 공간 내에서 최적 의 조합을 보장함
- 계산 비용이 높고 시간이 많이 소요되다 보니 파라미터 공간이 넓은 경우 비효율적임

XGBClassifier + RRandomizedSearchCV

- GridSearchCV 보다 적은 계산 리소스로 더 넓 은 파라미터 공간을 빠르게 탐색이 가능함
- 무작위 특성으로 인해 최적의 조합을 놓칠 가 능성과 적절한 반복 횟수의 설정이 필요함

^{*} StandardScaler : 수치형 특성을 정규화함. 특성 간 스케일 제거. 모특성 간 가중치 균형 유지. 이상치 영향 감소의 기능

"Catboost is a high-performance open source library for gradient boosting on decision trees"

CatBoost: Ordered Boosting 기반의 고성능 그래디언트 부스팅 라이브러리

기존의 Boosting 모델

기존 Boosting 모델들은 모든 훈련 데이 터를 대상으로 잔차계산함

Catboost

Catboost는 Ordered Boosting 방식으로 일부 학습데이터를 사용해 잔차계산의 결과로 모델을 생성하고 다시 일부 학 습 데이터로 잔차계산을 점진적으로 반복하여 모델을 꾸준히 개선해 나감

Ordered Boosting 방식:

- 1. 학습데이터 무작위 정렬
- 2. 소수의 데이터로 초기 모델 학습
- 3. 모댈 예측, 잔차 계산, 모델 개선
- 4. 데이터 포인트 점진적 확대
- 5. 전체 데이터셋을 사용할 때까지 3~4회 반복

Ordered Boosting 방식의 이점 점진적 학습으로 과적합을 감소 데이터의 순서를 무작위로 섞어 특정 순서에 의한 편향 감소 계산 코스트 감소

^{*} OrdinalEncoder : 범주형 데이터를 수치형으로 변환. 범주간 관계를 수치로 표현하며, NaN값과 같이 알 수 없는 범주의 처리가 가능 * StandardScaler : 수치형 특성을 정규화함, 특성 간 스케일 제거, 모특성 간 가중치 균형 유지, 이상치 영향 감소의 기능

"Optuna is an open-source hyperparameter optimization framework to automate hyperparameter search"

다양한 파라미터를 지원하고, 베이지안 최적화를 활용한 자동화된 하이퍼파라미터 튜닝 프레임 워크

CatBoost + Optuna

CatBoost와 Optuna의 조합

- Optuna는 많은 하이퍼파라미터를 가진 복잡한 모델(CatBoost)의 최적화에 유용함
- 모델의 성능을 자동화된 최적화 루프를 통해 지속적인 개선 가능성 증가
- 초기 설정 및 구현에 노력이 필요하고 계산 코스트가 증가할 가능성이 있음

CatBoost + Optuna의 최적화 프로세스

1.초기 설정:

초기 파라미터 탐색 범위 정의

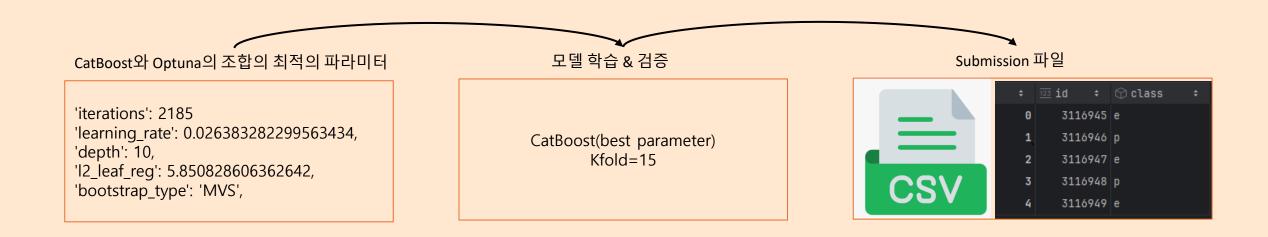
- 2. 목적 함수 정의 (objective):
- CatBoost 모델 생성 및 학습
- Matthews Correlation Coefficient (MCC) 계산 및 반환(*MCC는 이진 분류모델의 성능을 평가하는 지표)
- 3. 파라미터 범위 업데이트 함수 (update_param_ranges):
- 현재 최적 파라미터 주변으로 탐색 범위 조정
- 4. Optuna 생성:
- TPESampler를 사용하여 최대화 방향으로 스터디 설정
- 5. 최적화 루프:
- 설정된 횟수(n_trials)만큼 반복
- 각 시도마다 목적 함수 실행 및 결과 기록
- 일정 횟수 동안 성능 향상이 없으면 파라미터 범위 업데이트해 효과적인 탐색 수행 6. 최종 결과 출력:
- 최적의 파라미터 및 최고 MCC 점수 출력

OPTIMIZATION MODEL LEARNING VALIDATION 최적화 된 모델 학습, 검증



최적화된 모델 학습 및 검증

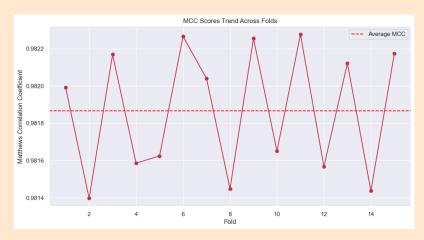
Optuna로 최적화된 파라미터의 CatBoost, Kfold 학습, 검증제출 Submission 파일 생성



ANALYSIS AND INTERPRETATION OF RESULTS 결과 분석 및 해석



학습결과 MCC평가



MCC Scores Trend Across Folds:
MCC 점수가 0.9814에서 0.9823 사이로 매우 안정적인 모습을 보여줌.
최대 변동 폭이 약 0.0000로 변동성이 매우 낮음.
모델이 다양한 데이터 분할에 대해 매우 안정적이고 높은 성능을 보이며,
과적합의 징후가 없음을 알 수 있음



Distribution of MCC Scores: 중앙값이 약 0.9820으로 높음. 눈에 띄는 이상치는 없고 모델 성능이 일관적이고 안정 적임



MCC Scores for Each Fold: 모든 폴드에서 0.92 이상의 높은 일관성을 가진 MCC 점수를 보임 최고 성능과 최저 성능의 폴드 간 차이가 작아 모든 폴드에서 일관되 게 우수한 성능을 보이며 특정 데이터 분할에 대해서 과도하게 의존 하지 않음을 알 수 있음

과적합 징후가 보이지 않으며 모델이 새로운 데이터에 대해서 일관된 성능을 보일 것으로 예상할 수 있으며, Optuna를 통홰 최적화된 파라미터가 문제없이 효과적이었음을 시사함.

Binary Prediction of Poisonous Mushrooms

Playground Series - Season 4, Episode 8



MCC 점수 통계(최소값:0.9814, 최대값:0.9823, 평균:0.9819, 표준편차:0.0003) Fold 15 - Matthews Correlation Coefficient: 0.9821744047342607 Kaggle Score 651/2422