Machine Learning Summary

1. Machine Learning 접근 방법

- 1) Machine Learning 정의
 - Field of study that gives computers the ability to learn without being explicitly programmed (Arthur Samuel, 1959)
 - ▶ 명시적인 프로그래밍 없이 데이터만을 제공하여 경험 누적을 통한 성능 개선
 - ▶ Data 를 제공하여 문제를 해결하거나 기능을 수행하는 모델을 만들어내는 기법
 - > Input: Model Input & Output Dataset
 - > Output : Model (Algorithm)
 - Classical/Conventional Approach (Non-ML / Non-NN)
 - ▶ 목표하는 기능 및 문제에 대해 매번 모델/알고리즘을 재설계해야함.
 - ➤ 목표하는 기능 및 문제에 대해 모델/알고리즘의 Parameter 를 Fine-Tuning 해야함.
 - Machine Learning / Neural Network Approach
 - ▶ 목표 기능 및 문제를 표현하는 Dataset 을 이용한 학습을 통해 모델/알고리즘을 도출함
 - ▶ **Dataset** 에 추가 데이터를 업데이트하고, 새로운 추가 데이터를 학습하여 모델/알고리즘의 성능을 개선함.
 - ▶ 모델/알고리즘의 Parameter 는 학습을 통해 Tuning 되기에 학습에 대한 Hyper Parameter (반복 학습 횟수 Epoch, 1 회 학습 데이터 크기 Batch Size, 학습 속도 Learning Rate 등)을 조정하여 모델/알고리즘의 학습 과정을 최적화함
 - ➤ 모델/알고리즘의 성능 개선을 위해서는 좋은 **Feature** 로 구성된 많은 데이터가 필요하며, 목표하는 기능 및 문제에 따라 매번 다른 학습이 요구됨.
- 2) Machine Learning 기법 분류
 - Supervised Learning
 - ➤ Input Dataset 과 Output Label (Input 에 대한 정답)을 모두 제공하여 모델을 학습하는 방법
 - ➤ Input 데이터에 따라 Error 가 최소화될 수 있도록 (Loss Function 값이 최소화도록) 적합한 정답을 도출하도록 모델/알고리즘을 학습시킴
 - ▶ 정해진 Label 을 추정하도록 학습되기에 Classification 문제를 해결하는 데에 특화됨
 - ➤ Linear Regression, Logistic Regression, KNN (K-Nearest Neighbors), SVM (Support Vector Machine), Decision Tree, Random Forest, Neural Network

- Unsupervised Learning
 - > Output Label 없이 Input Dataset 만 사용하여 모델을 학습하는 방법
 - > Clustering, Dimensionality Reduction, Association Rule Learning
- Semi-Supervised Learning
 - ➤ Supervised & Unsupervised Learning 의 조합으로 이루어짐
- Reinforcement Learning
 - ➤ Agent 가 상태(State)의 보상 (Reward) 최대화하는 방향으로 Neural Network 의 Parameter 를 최적화함

3) Dataset 구조

	Column 1	Column 2	• • •	Column M
	(Feature 1)	(Feature 2)		(Feature M)
Data 1				
Data 2				
:				
Data N				

- ▶ Dataset \ominus NxM 형태의 Matrix 로 구성되어있음. 데이터셋은 N 의 데이터로 구성되어있으며, 각 데이터는 M 개의 Feature 로 구성되어 표현됨
- ▶ Dataset 의 Row Vector 는 데이터셋의 데이터 1 개를 지칭함 (데이터 N 개)
- ▶ Dataset 의 Column Vector 는 각 데이터를 표현하는 Feature 를 상징함 (Feature M 개)
- ➤ Dataset 의 데이터는 ML 및 Neural Network 모델에 1xM 형태의 벡터로 입력됨

4) Machine Learning Implementation 순서

(1) Dataset 준비

- 목표하는 기능과 문제와 관련된 데이터셋을 확보해야함
- ▶ 데이터셋은 ML/DL 라이브러리와 연동되기 위해 NxM Matrix 형태로 구성되어야함

(2) Dataset Preporcessing

- ▶ 데이터셋의 각 Feature 는 다른 단위의 값으로 구성됨
- ▶ 각 Feature 별로 다른 단위를 사용하게 되면서 데이터의 분포가 달라지고 학습에 대한 영향력이 달라지는 Scale 문제로 인해 학습 과정 중 Overfitting 과 같은 Fitting 문제가 발생함
- ➤ Standardization, Normalization 등 데이터셋의 단위를 통일시키는 Preprocessing을 수행하여 모델/알고리즘의 Fitting을 개선함
- ▶ 만약 현재 데이터셋에서 사용하는 Feature 가 너무 많아 Classification 을 위한 학습이 복잡할 경우 데이터셋을 더 적은 Feature 로 재구성하는 Dimensionality Reduction 이 요구될 수 있음. 이 때, PCA (Principle Component Analysis)를 통해 설명력이 높은 소수의 새로운 Feature 로 데이터셋을 재구성하여 Classification 학습에 좀 더 쉬운 방향으로 유도할 수 있음.

(3) Dataset Analysis 를 통한 ML 기법 선정

Machine Learning 과 Neural Network 는 데이터셋에 매우 의존적이기 때문에 데이터셋의 Feature 성격에 따라 적합한 모델을 선정해야함.

> Multi-Colinearity 존재할 경우

- 우선적으로 데이터셋의 Feature 간 선형성 (Colinearity)를 파악해야함.
- 다수의 **Feature** 로 구성된 데이터셋에서 **Feature** 간에 서로 독립적인 것이 이상적이나 **Feature** 간 서로 영향을 주는 **Multi-Colinearity** 가 존재할 수 있음.
- 이를 파악하기 위해 Feature M 개에 대한 MxM Correlation Matrix 를 구성해서 각 Feature 가 서로에게 Correlation (선형성 존재여부)을 가지는지 파악함.

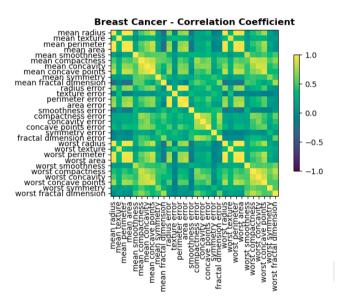


Fig 1: Correlation Matrix (Breast Cancer Dataset)

- Multi-Colinearity 가 존재하는 Feature 사이에는 Linear Classifier 는 적용할 수 없음.
- Multi-Colinearity 가 존재하는 Feature 사이에 Classification 을 위해서는 보다 복잡한 구조의 모델/알고리즘이 요구됨.

(ex : Neural Network, SVM, Random Forest, Decision Tree)

➤ 데이터셋의 Non-Linearity 존재할 경우

- 데이터셋 Feature 의 물리적 특성이 달라 Non-Linearity 가 존재할 수 있음. (ex: 2D 이미지 vs 3D Translation / 2D 이미지 vs 3D Rotation)
- Non-Linear 데이터셋에 대해서는 Linear Classifier 를 적용할 수 없으며, 더 많은 Parameter 를 학습하여 Non-Linear 한 추정을 할 수 있는 복잡한 모델/알고리즘이 요구됨. (ex: Neural Network)

(4) Training/Validation/Test Dataset 분리

데이터셋은 학습 및 성능 평가를 위해 전체에서 일정 비율로 **Training Set**, **Validation Set**, **Test Set** 으로 각각 분리하며, 서로 중첩이 없어야하며 **Random** 하게 선정됨.

> Training Set

• MIL 모델 학습을 위해 사용하는 데이터셋

> Validation Set

- ML 모델 학습에 필요한 Hyper Parameter 를 찾기 위해 사용하는 데이터셋
- 학습이 종료된 후 **Test Set** 이 주어지기 전까지 학습 과정 중 모의 평가를 하기 위해 사용
- 모의 평가를 통해 Unseen Data 에 대한 정확도를 확인하여 Test Set 에 대한 정확도를 가늠할 수 있음.
- 모의 평가를 통해 Training Set, Validation Set 2 개에 대해 모두 정확도가 높게 나오게 만듬으로서 Training Set 에만 최적화되는 Overfitting 을 방지함.

> Test Set

• 학습된 모델을 평가하기 위한 데이터셋

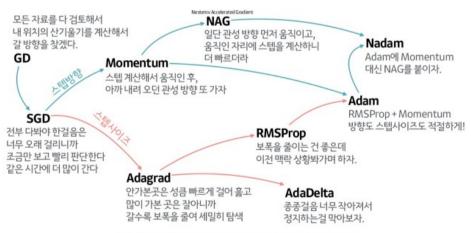
(5) Training 수행 + Optimization

> Loss Function 선정

- 목표하는 Output 을 최대한 원하는 정답에 가깝게 만들기 위해 Error 를 최소화 시키는 방향으로 학습해야함
- 사용하는 모델의 Output 형태와 Label/Target Output 의 형태에 따라 Error 의 형태와 종류가 다름. 그러므로 최소화하려는 Error 의 형태에 따라 적합한 Loss Function 을 선정해서 학습을 수행함.

(ex : MSE (Mean Squared Error), Cross Entropy Error)

Optimizer 선정



출처: https://www.slideshare.net/yongho/ss-79607172

Fig 2: Optimizer Types (https://light-tree.tistory.com/141)

• ML/NN 모델 학습 방향과 방식에 따라 Optimizer 를 선정하여 사용함

➤ Training 수행 및 수행 결과 분석

- Training 수행 시 Training Set 과 Validation Set 에 대해 각각 학습을 수행하여
 Overfitting 을 방지함.
- Training Set 에서의 Loss Function, Validation Set 에서의 Loss Function 을 각각 확인하여 Overfitting, Underfitting 을 판단함.

5) Machine Learning Dataset Preprocessing 및 Analysis 기법

- Dataset Preprocessing
 - Dataset Rescaling
 - Rescaling 이 필요한 이유
 - **Feature** 별로 사용하는 단위가 다른 경우 어떤 단위를 사용하는 가에 따라 데이터 분포가 극심하게 달라짐.

(ex: cm 단위의 데이터는 m 단위로 표현할 경우 서로 차이 없이 분포됨)

- **Distance** 기반 모델 (ex:SVM) 경우 사용하는 단위에 따라 성능이 달라지게됨. 그러므로 단위 **Scale** 에 의한 영향을 최소하기 위해 **Feature** 들의 사용 단위/**Scale** 을 통일시켜야함.
- Standardization (Z-Score / 표준화)
 - Standardization 공식 및 효과

 $X' = \frac{X - \mu}{\sigma}$ X' : 표준화된 데이터 (Z-Score) X : 원본 데이터 $\mu : 특정 Feature 에 대한 X 의 평균 <math>\sigma : 특정 Feature 에 대한 X 의 표준편차$

◆ M 개의 Feature 로 구성된 데이터에 대해 각 Feature 의 평균과 표준편차를 사용하여 각 Feature 에 대해 Z-Score 로 데이터를 Rescaling 하여 표준화함.

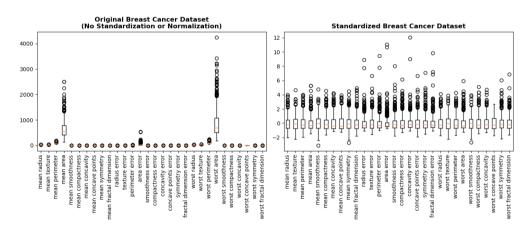


Fig 3: Dataset Standardization

- ◆ Standardization 을 통해 데이터셋의 각 데이터는 1 x M 으로 구성된 Z-Score 데이터로 재구성됨.
- ◆ Standardization 을 통해 데이터셋의 모든 Feature 는 동일한 평균과 표준편차를 가지게 되며, 동일한 범위의 분포 내에 재구성될 수 있음.
- ◆ Standardization 을 통해 각 Feature 별로 다른 Scale 을 가지는 것을 동일한 분포를 가지게 하여 Scale 을 통일시킬 수 있음.

사용 API

◆ Scikit Learn – StandardScaler 의 fit 함수, transform 함수 (sklearn.preprocessing.StandardScaler)

fit 함수를 통해 평균과 표준편차를 구하고, transform 함수를 통해 Feature 데이터를 Z-Score 로 표준화함.

Normalization

Min-Max Normalization 공식 및 효과

$$x' = \frac{x - max(x)}{max(x) - min(x)}$$
 X' : 정규화된 데이터 X : 원본 데이터 $max(X)$: 특정 Feature 에 대한 X 의 최대값 $min(X)$: 특정 Feature 에 대한 X 의 최소값

 M 개의 Feature 로 구성된 데이터에 대해 각 Feature 의 최대값과 최소값을 사용하여 각 Feature 에 대해 0 ~ 1 사이의 값으로 Rescaling 하여 정규화함

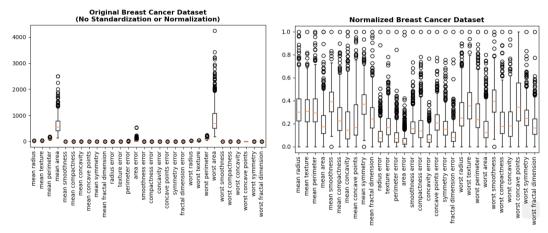


Fig 4: Dataset Normalization

- ◆ Min-Max Normalization 은 데이터셋의 각 데이터를 $0 \sim 1$ 사이 값으로 구성된 $1 \times M$ 데이터로 재구성함.
- ◆ Min-Max Normalization 을 통해 각 Feature 별로 다른 Scale 을 가지는 것을 0~1 사이 값으로 통일시킴으로서 Scale 을 통일시킬 수 있음.

사용 API

◆ Scikit Learn – MinMaxScaler 의 fit 함수, transform 함수 (sklearn.preprocessing.MinMaxScaler) fit 함수를 통해 최소값과 최대값을 구하고, transform 함수를 통해

Feature 데이터를 $0 \sim 1$ 사이로 정규화함.

Dimensionality Reduction (차원 축소)

- I. 차원 축소가 필요한 이유
 - 데이터셋의 데이터가 과도하게 많은 **Feature** 로 구성되어있을 시 학습에 필요한 시간과 학습 속도가 매우 느림.
 - **Feature** 가 너무 많을 경우 학습하기 쉬운 **Feature** 에만 특화되는 **Overfitting** 이 발생할 수 있음.

II. Simple Projection 의 문제점 - Swiss Roll 문제

• Feature 의 개수를 줄이기 위해 데이터를 특정 Feature (Dimension)로만 구성된 공간에 Projection 함. 그러나 Feature (Dimension)을 줄이는 행위는 정보 손실이 발생할 뿐만 아니라 오히려 Classification 하기 어려운 분포가 되는 경우가 있음.

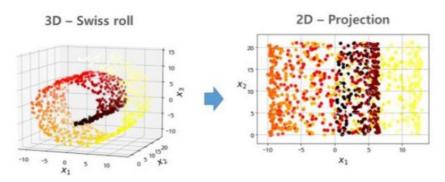
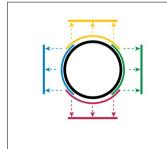


Fig 5: 3D Swiss Roll - 2D Projection

• 3D Swiss Roll 예제가 대표적인 경우임. 3 개의 Feature 로 구성된 데이터셋은 3 차원 좌표계에 표현될 수 있음. 그러나 데이터셋을 1 개의 Feature (Dimension)을 제거하고 2D 평면에 바로 Projection 할 경우 각 Label 별 데이터가 오히려 섞이는 현상이 발생함. 그러므로 단순히 Projection 하는 것은 효과적인 데이터셋 전처리 방법이 아니라는 것을 알 수 있음.

III. Manifold Approach

• Manifold 는 다양체라고도 하며 국소적으로 Euclidean 공간과 닯은 위상 공간임



전체 구조는 원이지만 노란색 구간에서만의 미시적인 관점에서 원 전체를 느낄 수 없으며, 미시적으로 직선이라 생각할 수 있음.

• Manifold 는 국소적인 구간과 미시적인 관점에서 전체 구조를 다른 구조와 위상적으로 동형이라는 것을 사용하여 데이터셋의 Feature 를 재정의하고, 데이터셋을 보다 이해하기 쉬운 구조로 재구성함.

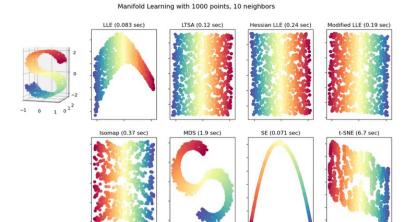


Fig 6: sci-kit learn: Comparison of Manifold Learning Methods

• Manifold 를 응용하여 고차원/다차원에서 복잡한 데이터셋을 재구성하고, 이를 기반으로 모델 학습을 수행하는 것을 Manifold Learning 이라함.

IV. PCA (Principle Component Analysis)

- PCA 는 데이터셋의 전체를 최대한 많이 설명할 수 있는 새로운 Feature Axis (Dimension Axis)를 새로 산출하는 방법임.
- PCA 는 표준화된 데이터셋이 특정 Eigen Vector (고유 벡터)에 Projection 되었을 시에 최대한 많은 데이터를 수용되어야함. 최대한 많은 데이터셋을 수용/설명할 수 있는 특정 Eigen Vector 를 구하기위해 Projection 된 결과의 Variance (Eigen Value)가 최대가 되는 경우를 찾음.
 - ※ Eigen Vector 를 사용하는 이유 : 돌아가지 않는 고정된 Axis 필요 새로운 Feature/Dimension Axis 로 사용될 것이기 때문에 Matrix 에 곱해져도 Translation 만 변하고, Phase 가 유지되는 Vector 가 필요함

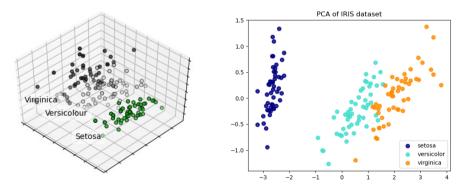


Fig 7: sci-kit learn: PCA Example with Irisi Data-set

- PCA 는 다수의 Eigen Vector 인 PC (Principle Component)를 제공함.
 M 개의 Feature 로 구성된 데이터셋은 PCA 를 통해 최대 M 개의 PC 를 생성할 수 있음.
- 1st PC 는 PC 중 제일 설명력이 강한 새로운 Feature/Dimension Axis 임. PCA 를 통해 구해진 PC 를 새로운 Feature 로 사용하여 데이터셋을 재구성함으로서 설명력을 최대한 유지하면서 이전보다 더 적은 Feature 로 데이터셋을 구성할 수 있음.

Dataset Analysis

➤ Linearity 판단: Correlation Matrix

I. Correlation

- 특정 데이터 X, Y 간의 선형성 여부를 알려주는 지표
- 선형성 여부와 강도만 알려줄 뿐 선형성의 크기를 알려주지는 않음 (Correlation ≠ 기울기)

II. Correlation Matrix 를 사용하는 이유

- 데이터셋의 Feature 간 독립적인 것이 이상적이지만 항상 모든 데이터셋의 Feature 는 독립적이지 않음.
- 특정 Feature 의 변화가 다른 Feature 에 영향을 주면서 Output 에도 영향을 주기 때문에 그에 따른 Feature 간 선형성 관계 여부와 강도를 알아야함.
- **Correlation Matrix** 를 통해 다수 **Feature** 간 선형성 (**Multi-Colinearity**)가 발생할 경우 그에 따라 적합한 모델과 전처리 기법을 사용해야함.

6) Machine Learning 설계 주요 중점: Model Fitting

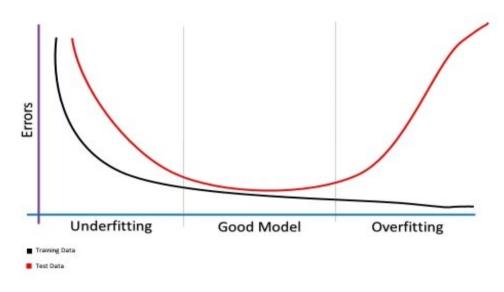


Fig 8: Overfitting vs Underfitting

(https://meditationsonbianddatascience.com/2017/05/11/overfitting-underfitting-how-well-does-your-model-fit/)

Overfitting

▶ 학습 과정 중 Training Loss 와 Validation Loss 가 서로 유사하지 못하면서 Validation Loss 가 Training Loss 보다 높은 상황

▶ 발생하는 이유

- 과도한 양의 Feature 로 구성된 매우 복잡한 모델을 학습하는 과정에서 학습하기 쉬운 Feature 에 대해서만 하면서 모델이 Training Set 에 특화되어 버리기 때문임.
- Training Set 에 특화되어버리기 때문에 다른 데이터셋인 Validation Set 에 대해서는 낮은 성능을 보임.

▶ 해결방법

Overfitting 이 발생하는 이유는 데이터셋이 너무 많은 Feature/Dimension 으로 구성되어있는 고차원 모델이기 때문임. 많은 Feature/Dimension 으로 구성된 만큼 데이터를 더 사용하거나 Feature/Dimension 을 축소시켜서 모델을 간소화시켜야함

- 데이터셋의 Feature/Dimension 개수를 줄이는 작업 (Dimensionality Reduction 또는 Feature 일부만 선정해서 학습)을 통해 입력 학습 데이터셋을 간소화시킴
- 더 많은 학습 데이터를 모아서 제공함
- 학습 데이터의 노이즈를 줄임

Underfitting

▶ 학습 과정 중 Training Loss 와 Validation Loss 가 낮게 유지되지 못하면서 Training Loss 가 Validation Loss 보다 높거나 같은 상황

▶ 발생하는 이유

- 학습에 사용되는 **Feature** 가 너무 적어서 학습 데이터를 모두 표현할 수 있는 모델을 만들지 못하는 상황임.
- Training Set 에서 제대로 학습을 하지 못했기에 Training Set 에서 낮은 성능을 보이며, Validation 에서도 높은 성능을 보이지 못함.

▶ 해결방법

Underfitting 이 발생하는 이유는 데이터셋에 사용되는 Feature/Dimension 이 적어서 모델이 학습할 정보량이 부족하기 때문임. 그러므로 데이터셋에 사용되는 Feature 의 개수를 증가시켜야함.

- 학습 데이터셋에 더 많은 **Feature/Dimension** 를 추가해서 낮은 차원의 데이터셋을 고차원으로 개선하여 모델이 각 데이터로부터 더 많은 정보를 학습할 수 있게 만듬
- 기존에 사용하던 Feature 보다 더 좋은 Feature 를 선정해서 학습함.
- 모델의 제약을 줄임.

2. 다양한 기초 Classification 기법

1) Linear Regression

● 주요 특성 및 원리

- > X, Y 사이에 서로 Linear 한 관계가 있다는 가정하에 X, Y 의 Linear 한 관계를 표현할 수 있는 수식 (모델 / Y = f(X))을 찾아내는 방법.
- ightarrow X 는 N x M 으로 구성된 데이터셋에서 1 x M Vector 형태로 M 개의 Feature 로 구성된 데이터임. Y 는 X 의 Feature 의 조합으로 구성된 모델의 Output 임.

Linear Regression 모델: $Y = \sum_{i=1}^{M} X_i = w_0 * X_0 + w_1 * X_1 + w_2 * X_2 ... + w_M * X_M$

- ➤ 모든 ML 기법의 기본이 되는 모델 학습 방법이며 여러 종류의 데이터셋을 최대한 Linear Regression 의 형태에 유사하게 만들어서 학습을 수행하려함.
- ➤ 모델의 Prediction Y'와 데이터셋의 정답 Y 간의 Error 를 최소화하는 방향으로 Gradient Descent 를 수행하여 Training Set 과 Validation Set 에서 최소의 Error 를 가지는 f(X) 모델을 구함

● 한계점

- ➤ Input X 와 Output Y 사이에 서로 Linear 한 관계가 있다는 가정하에 모델을 도출하는 학습을 하기 때문에 Non-Linear 한 데이터셋, Multi-Colinearity 데이터셋에 대해서는 학습할 수 없음.
- ➤ Non-Linear 한 상황, Multi-Colinearity 상황에 대해 데이터셋의 Feature 를 재구성하여 데이터를 Linear 한 분포로 유도하는 기법이 요구됨

2) Ridge / Lasso / ElasticNet

● 주요 특성 및 원리

> Regularization (Shrinkage)

: Multi-Colinearity 상황에서 Input X 의 Feature 사이에 Linearity 가 발생하여 모델 추정 시 각 Feature 에 대해 독립적인 Weight 를 보장하지 못하게됨.

: 이에 대해서 Regularization 을 통해 Multi-Colinearity 가 발생하는 Feature 에 대해 Penalty 값을 부여하여 유의미한 Feature 만 모델 생성에 기여하도록함.

> Ridge

: L2 Penalty 를 사용하여 Multi-Colinearity 를 가진 Feature 의 Weight 를 줄임으로서 모델에 대한 기여도를 약화시킴.

: L2 형태로 Penalty 가 들어가기 때문에 완전히 0 이 되지 못하고, 0 에 근사화됨.

> Lasso

: L1 Penalty 를 사용하여 Multi-Colinearity 를 가진 Feature 의 Weight 를 **0** 으로 수렴하게하여 유의미한 Feature 만 남게하는 Feature Selection 을 수행함

➤ ElasticNet

: Ridge 와 Lasso 를 같이 사용하여 Lasso 가 과도하게 Feature 를 없애는 것을 Ridge 를 통해 완화시킴.

● 한계점

➤ Ridge: Feature 를 0으로 만들지 않기 때문에 불필요한 Feature 를 없애지 못함.

➤ Lasso: Colinear 한 Feature 가 다수 존재하는 경우 1 개만 Penalty 를 가할 수 있음.

3) KNN (K-Nearest Neighbors)

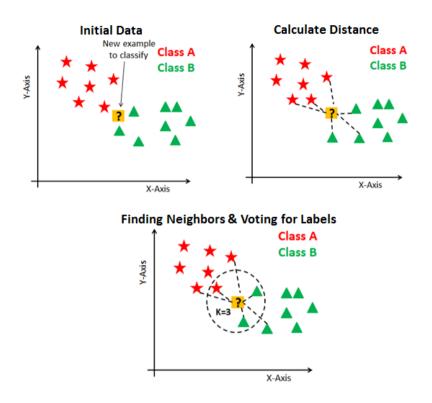


Fig 9: KNN Classification Process

(https://www.datacamp.com/community/tutorials/k-nearest-neighbor-classification-scikit-learn)

● 주요 특성 및 원리

- ➤ 전체 데이터셋 분포에서 입력 데이터와 거리가 가까운 데이터를 **K** 개 선정함. 선정된 **K** 개의 데이터의 **Label** 에 대해 **Majority Voting** 을 수행하여 입력 데이터에 대한 **Label** 을 정함.
- ➤ 입력 데이터와 가깝게 배치된 데이터들이 서로 유사한 Label을 가진다는 가정하에 설계된 Classification 방식.
- ▶ 별도의 학습 과정이 필요 없으며, 데이터만 충분히 있다면 Classification 을 손쉽게 구현할 수 있음.

● 한계점

- ➤ 효과적인 Classification 을 위해서는 많은 데이터를 요구함
- ➤ Label 별로 Linear 한게 분포된 데이터에 대해서는 효과적이나 Non-Linear 하게 분포된 경우 효과적인 Classification 을 수행할 수 없음
- ▶ 효과적인 데이터셋의 분포 및 K 개 최단 거리 데이터 선정을 위해 상황에 따른 전처리 과정과 최단 거리 연산이 요구됨.

4) Logistic Regression

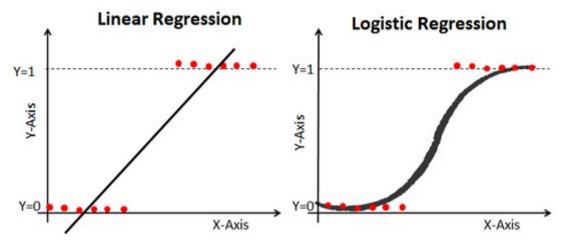


Fig 10: Logistics Regression

(https://nittaku.tistory.com/478)

● 주요 특성 및 원리

- ➤ Prediction 하고자하는 Output Y 가 범주형 (Categorical)이면서 0 또는 1 인 경우 사용하는 회귀 분석임.
- ▶ 기존의 Linear Regression 은 Continuous Input X, Continuous Output Y 에 대해 Fitting 될 수 있는 모델을 찾는 것이 주요 목적이었음. 그러나 Discrete 한 Y 로 구성된 데이터셋에 대해서는 효과적으로 Fitting 할 수 없음.
- ➤ Discrete Output 에 대한 Fitting 을 위해 Linear 한 직선이 아닌 Curve 를 사용하여 Fitting 함.
- ▶ 이를 위해 Input X 에 대해 각각 Output Y 가 발생할 수 있는 확률을 통해 Odds
 를 구하고, Logit 함수를 도출하여 Curve Fitting 함.

● 한계점

➤ Output Y 가 Discrete 한 상황(Yes or No / 0 or 1)에 대해서 적용할 수 있기 때문에 사용 가능한 상황은 매우 제한적임.

5) Naive-Bayes Classifier

● 주요 특성 및 원리

- ➤ Y 라는 Target Output 이 있을 때, Feature X 에 대한 확률 분포가 있다고 가정함.
- ▶ Feature 가 주어졌을 때 확률이 제일 높은 Label을 찾을 확률(P(Y|X))을 찾도록 모델을 학습시킴. Bayes Rule을 이용하여 간접적으로 데이터로부터 답을 유추하도록 학습됨.

3. SVM (Support Vector Machine)

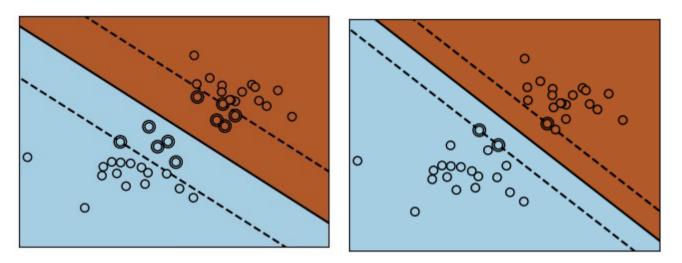


Fig 11: sci-kit learn: SVM Margins Example

1) 주요 특성 및 원리

- Linear Regression 은 Training Set 내에서 Prediction Y'와 Tareget Output Y 간의 Error 를 최소화 시키는 방향으로 모델/Decision Boundary 를 산출하도록 학습됨.
- SVM 은 Linear Regression 과 다르게 전체 데이터셋에서 Label 간의 간격이 최대가 되도록 Decision Boundary 를 산출하도록 하는 기법임.
- 전체 데이터셋에 대해서 직접 **Decision Boundary** 를 산출하기 때문에 별도의 학습이 요구되지 않음.
- Non-Linear 한 데이터셋 분포에 대해서는 Kernel Trick 을 적용하여 Dimensionality Reduction 과 유사하게 데이터셋을 좀 더 Linear 한 분포로 재구성함.

2) 한계점

- SVM 은 기본적으로 Label 간의 거리를 최대화하는 방향으로 Decision Boundary 를 만들기 때문에 거리를 산출하는 데에 영향을 주는 Feature 의 단위에 크게 영향을 받음. 데이터셋의 Feature 에 사용되는 단위/Scale 에 따라 데이터 분포가 바뀌고 그에 따라 Decision Boundary 의 성능이 크게 달라짐. 그러므로 데이터셋에 대한 Rescaling 전처리가 요구됨.
- Non-Linear 한 데이터셋 분포에서 Kernel 의 종류에 따라 성능이 크게 달라짐.

4. Decision Tree

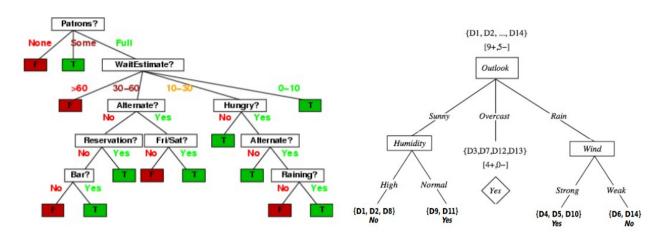


Fig 12: Decision Tree Structure

1) 주요 특성 및 원리

- 스무고개 하듯이 데이터셋의 Feature 를 하나씩 확인하면서 각 Feature 별로 조건 만족 여부에 따라 Tree 를 탐색하면서 Classification 을 수행함.
- Decision Tree 에서 매 선택을 해야하는 순간에 Uncertainty 가 존재함.
- 매번 선택을 할 때마다 Uncertainty 가 최대로 감소하는 방향으로 Tree 를 탐색함. (※ 선택을 할 수록 더 확고한 결론에 도달하는 것을 목표함)
- Decision Tree 에서는 Information 을 Uncertainty 의 양이라 정의하며, Information 에 대한 기대값을 Entropy 라 지칭함. Information Gain 은 선택하면서 Uncertainty 가 얼마나 감소하는지 보여주는 지표임.
- Decision Tree 는 Information Gain 이 큰 방향으로 Tree 를 탐색함으로서 선택할 때마다 더 확고한 Classification 결론에 도달하게 만드는 Greedy Algorithm 임.

2) 주요 문제점

- Tree 를 구성하는 Feature 를 어떤 것을 사용할 것인가?
- Tree 의 가지치기 (Split)을 어느 지점까지 할 것인가?
- 새로운 Feature 데이터가 추가될 때마다 새로운 가지치기 (Split)이 요구됨.
- Decision Tree 1 개가 만들어지면 수정하는 것이 매우 힘듬.

5. Random Forest

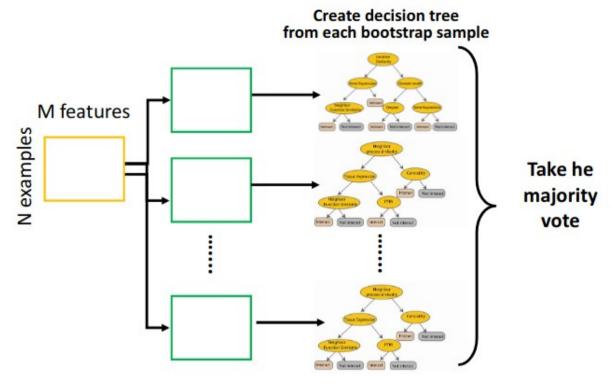


Fig 13: Random Forest Structure / Majority Voting

1) 주요 특성 및 원리

- **Decision Tree** 를 1 개 만들면 **Classification** 방식이 고정되는 단점이 있음.
- 이를 보완하기 위해 Random Forest 는 데이터셋의 모든 Feature 를 사용하는 Decision Tree 와 달리 데이터셋의 Feature 의 일부를 다양하게 조합하여 여러가지 Decision Tree 를 만듬.

(Bagging: 동일한 데이터셋에 대해 일부 Feature 만 사용해서 여러 버전을 준비함 / 중복 추출)

● 다양한 Feature 의 조합으로 만들어진 다수의 Decision Tree 는 Input X 에 대해 각각 Classification 결과를 도출함. 도출된 결과에 대해 Majority Voting 을 수행하여 최종 Classification 결과를 결정함.

2) 한계점

- **Decision Tree** 를 여러 개로 구성되기 때문에 대규모의 **Tree** 를 저장할 수 있는 메모리 공간이 요구됨.
- Decision Tree 여러 개를 모두 탐색해야하기 때문에 Time-Critical 한 시스템에 적용시키기에는 부적합함.

6. ANN (Artificial Neural Network)

1) Artificial Neuron (Perceptron) Modeling

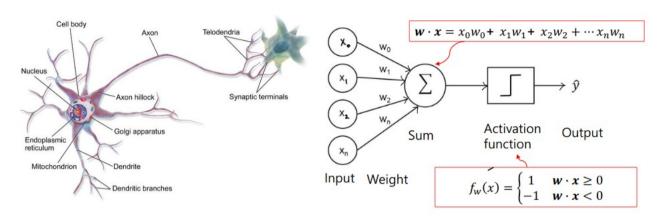


Fig 14: Artificial Neuron (Perceptron) Mathematical Modeling

- 인간의 뉴런은 외부 전기적 자극을 받아 종합되어 외부로 전기적 자극을 방출함.
- Artificial Neuron (Perceptron)은 인간의 뉴런의 작동 과정의 수학적 모델임.
 - ▶ 외부 전기적 자극을 받아 종합
 - = 입력 데이터에 대해 Weighted Sum 을 계산 (= Linear Regression)
 - ▶ 외부로 전기적 자극을 방출
 - = Weighted Sum 을 Activation Function 에 대입하여 다음 단계에 연결된 뉴런에 입력으로 사용
- Artificial Neuron 은 ReLU, Leaky ReLU, Sigmoid 등 Non-Linear 함수를 Activation 함수로 사용함. 왜냐하면 Non-Linear 한 Input/Output 데이터셋에 대해 Non-Linear 한 Prediction 을 수행하기 위해 Non-Linear Activation Function 을 사용함.

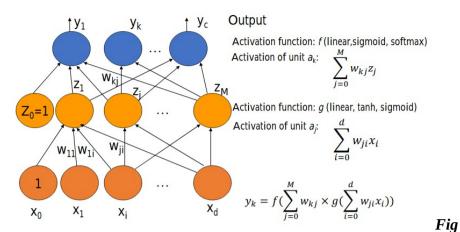
2) Perceptron

- 주요 특성 및 원리
 - ➤ Perceptron 은 Prediction Output Y'와 Target Y 의 Error 가 최소화 되도록 Gradient Descent 를 사용하여 Weight 를 최적화하는 학습을 수행함.
 - ➤ 단일 Perceptron 은 Input 에 대한 Weighted Sum 에서 Gradient Descent 를 통해 Weight 를 최적화하기 때문에 Linear Regression 과 유사함.

● 한계점

 ▶ 단일 Perceptron 으로는 Non-Linear 데이터셋에 대해 효과적인 Prediction 을 할 수 없음. 이를 극복하기 위해 다수의 Perceptron 을 여러 Layer 로 구성한 Multi-Layer Perceptron (MLP) / Neural Network 를 사용함.

3) Neural Network / MLP: Multi-Layer Perceptron



15: Neural Network / MLP Structure

● 주요 특성 및 원리

- ➤ Non-Linear 데이터셋에 대한 단일 Perceptron 의 한계를 극복하기 위해 다수의 Perceptron 으로 다중 Layer 네트워크를 구성하여 Linear/Non-Linear 한 상황 모두에서 Decision Boundary 를 생성할 수 있음.
- ▶ 다수의 Perceptron 이 연결되어있는 구조이기 때문에 Linear Regression 과 유사한 단일 Perceptron 과 달리 Error Optimization 을 위한 Gradient Descent 가 매우 복잡함. 이를 극복하기 위해 Chain-Rule 을 기반으로 Backpropagation 을 사용함.

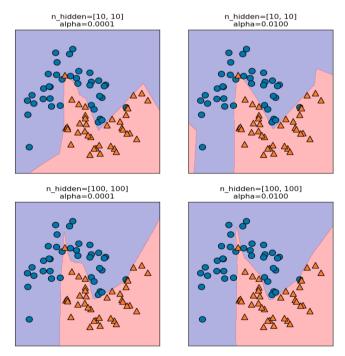


Fig 16: MLP Decision Boundary

➤ 더 많은 Perceptron 과 Layer 로 Neural Network 를 구성할수록 Non-Linear 한 데이터셋에 대해 더 효과적인 Non-Linear Decision Boundary 를 만들 수 있음.

Backpropagation

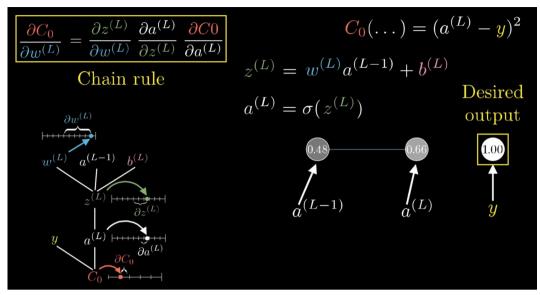


Fig 17: Backpropagation Calculus & Chain Rule (https://www.youtube.com/watch?v=tIeHLnjs5U8)

- ➤ Prediction Output Y'과 Target Output Y 간의 Error 값은 Neural Network 최종 Output Layer 에서 도출할 수 있음.
- ➤ 그러나 역방향으로 Prediction Y'의 변화에 따른 Error 변화에 비례해서 이전 Layer 의 모든 Weight 값을 업데이트하기 위해 이전 Layer 를 매번 방문하는 것은 매우 비효율적임. 특히 Layer 가 늘어날 수록 Weight 업데이트에 소요되는 시간이 기하급수적으로 증가함.
- ▶ 이를 해결하기 위해 Prediction Output 대비 Error (Loss)의 변화량(편미분)을 Chain Rule 를 통해 각 Layer 별 Input 대비 Output 변화량 (편미분)의 조합으로 재정리하여 보다 쉽게 Gradient Descent 에 필요한 편미분을 모두 산출할 수 있음.
- ▶ Prediction Output 대비 Error (Loss)를 편미분하면서 이전 Layer 의 Activated 된 Weighted Sum 의 편미분이 밖으로 연속적으로 꺼내지게됨. 각 Layer 별 Weighted Sum 의 편미분이 Backpropagation 을 통해 모두 구해지기 때문에 모든 Layer 의 Weight 업데이트에 필요한 업데이트량을 알 수 있음.
- ➤ Backpropagation 을 통해 어떤 Weight 가 다음 Layer 의 Output (최종적으로 Error/Loss Fucntion)에 연속적으로 얼마나 영향을 주는지 알 수 있음.

● 주요 문제점

> Vanishing Gradient

- Deep Learning 과 같이 매우 많은 Layer 로 구성된 Neural Network 의 경우
 Output Layer 에서 Input Layer 로 갈 수록 미분하는 횟수가 증가함.
- 미분 횟수가 너무 증가하게 되면 결국 Input Layer 에 가까운 Weighted
 Sum 의 Error/Loss 에 대한 편미분은 거의 0 에 수렴하게 되면서 Weight
 업데이트량이 0 에 수렴하게됨. 이로 인해 Input Layer 쪽에 가까운 Weight 가
 업데이트 되지 않는 Vanishing Gradient 현상이 발생함.
- 이는 각 Layer 의 Weighted Sum 이 거치는 Activation Function 이 미분을 여러번 거치면서 점점 0 에 수렴하기에 발생하는 현상임.
- 이를 해결하기 위해 미분을 해도 0 에 수렴되지 않는 Non-Linear Function 인
 ReLU, Leaky ReLU 등을 Activation 함수로 사용함.

▶ 매우 많은 데이터량 및 Computing 연산 능력 요구

- Neural Network 의 경우 Layer 가 깊어지고 Perceptron 을 많이 사용할수록 그에 따라 사용되는 Weight 의 개수, Backpropagation 을 위해 저장하는 데이터의 개수가 기하급수적으로 증가함.
- 또한 CPU 의 경우 병렬적인 연산보다는 단일 고속 연산에 특화되어있기 때문에 CPU 를 이용한 Backpropagation 및 Neural Network 학습은 매우 느림.
- 이를 해결하기 위해서 CPU 대신 병렬 연산에 특화된 GPU를 사용해야함. 그리고 $Neural\ Network$ 를 작동시키는 프로그램이 데이터를 시스템에 등재시키기 위해 대량의 RAM 와 VRAM을 사용해야함.