스마트 에너지를 위한

Machine Learning

2024년 1월 22일~ 1월 23일

인공지능과 머신러닝

- 인공지능을 구현하는 방법은 다양
- 머신 러닝 기반의 AI가 2000년대 이후 급속히 발전
- 딥러닝: 신경망을 기반으로 하는 머신 러닝 기술
  - 마치 사람이 많은 정보에 접하면서 학습하듯이 컴퓨터도 데이터를 보고 학습하는 방법
  - 음성인식, 자동차 번호판 인식, 언어 번역, 채팅 대화, 글쓰기, 작곡 등 여러 분야에서 좋은 성과를 낸다

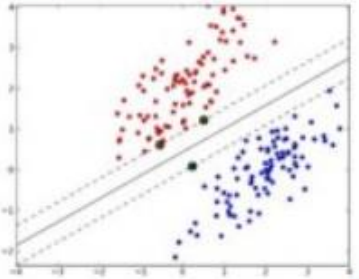
머신 러닝

인공지능(Artificial Intelligence)

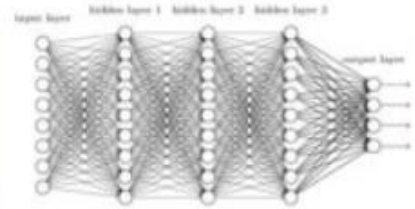
- Deep Blue

머신러닝(Machine Learning)

- Linear Regression
- Logistic Regression
- SVM



딥러닝(Deep Learning)



- CNN
- RNN
- LSTM

머신러닝 특징

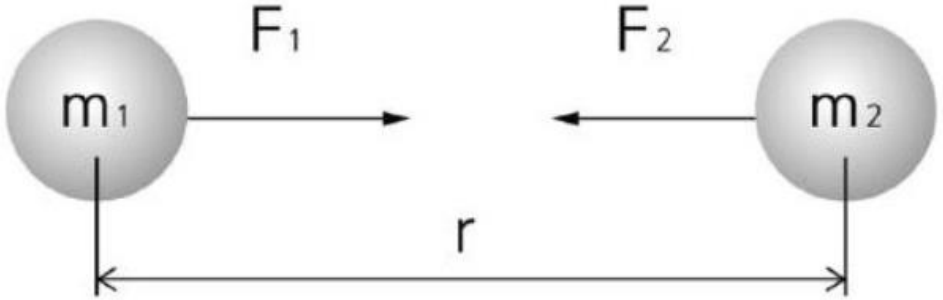
- 예전에는 컴퓨터는 프로그래머가 코딩한 대로만 동작
  - 계산을 빨리 하든지,
  - 이미지를 처리하든지,
  - 정해진 알고리즘대로 빠르고 정확하게 동작하는 일
- 머신러닝
  - 컴퓨터가 데이터를 보고, 스스로 기능을 향상시키는 방법을 찾아내어서 점차 성능을 향상시킨다.

머신 러닝

- 머신 러닝
  - 머신(컴퓨터)이 데이터를 보고 학습을 하여 점차 지능적인 동작 수행
  - 목적 : 학습을 하여 어떤 "모델(model)" 을 만드는 것
    - 모델 : 예측 작업(회귀, 분류)을 수행하는 알고리즘
- 머신 러닝 모델
  - 스팸 메일을 찾아내는 모델
  - 누가 게임에서 이길지 예측하는 모델
  - 내일 날씨를 예측하는 모델

모델

- 수학, 과학에서는 어떤 현상을 설명하는 모델로 수식을 주로 사용
  - 모든 질량을 가진 모든 물체는 서로 끌어당긴다 : 만유인력 법칙



$$F_1 = F_2 = \frac{G \cdot m_1 \cdot m_2}{r^2}$$

- 활용
  - 자유낙하 물체의 속도를 정확하게 예측
  - 많은 관련 기구를 설계

모델의 가치

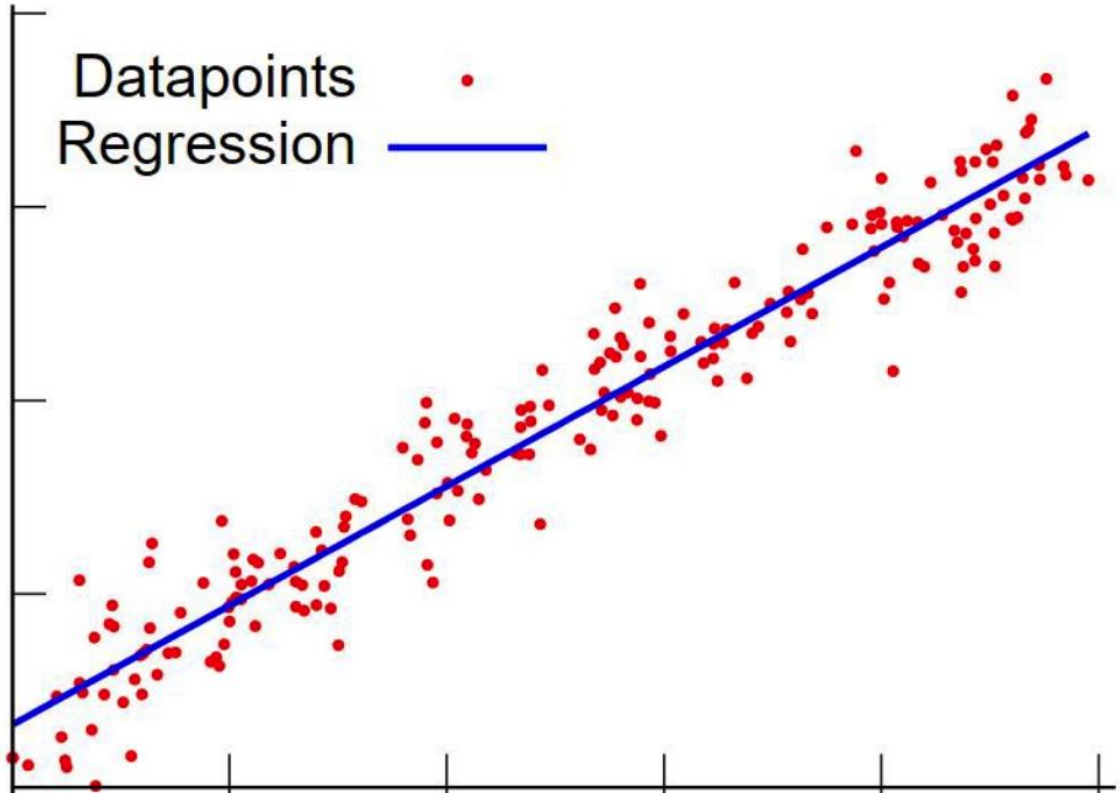
- 와인 품질 = 12.145 + (0.00117x겨울철 강수량)
  + (0.064x 재배철 평균기온) - (0.00386x 수확기 강수량)

머신러닝 모델

- 머신 러닝, AI 모델은 데이터 기반의 모델을 사용(학습)
- 현실 세계의 많은 현상
  - 수식으로 간단히 모델링하기 어렵고, 과학적으로 증명할 수도 없다.
  - 하지만 거의 정확히 예측할 수 있는 모델은 만들 수 있다.
    (단, 충분한 데이터 필요)
  - 머신 러닝 모델 예
    - 어느 고객이 불만이 많을 것인지
    - 어떤 영화가 관객을 많이 동원할지
    - 어떤 물건이 많이 팔릴지
    - 어떤 메일이 스팸일지
- 머신 러닝은 성능이 꽤 유용

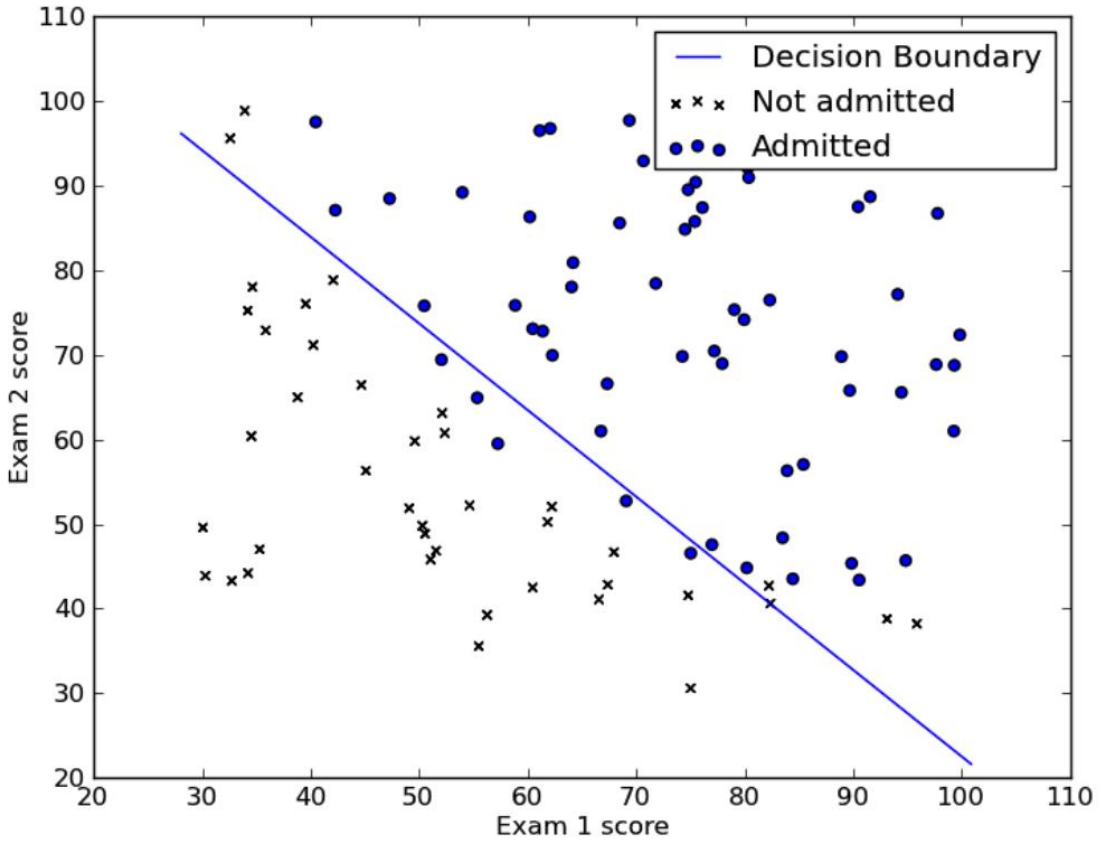
선형 회귀 모델

- 선형 회귀(regression) y = wX + b



선형 분류 모델

- 선형 분류(classification) ay + bx > c



모델 구조와 파라미터

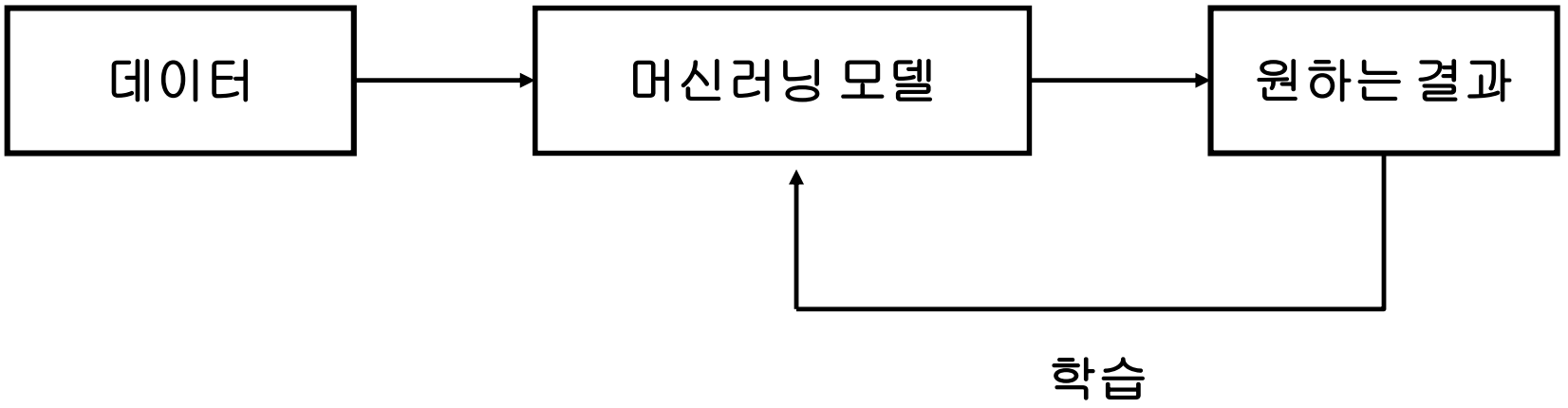
- 모델
  - 모델 구조 : 모델의 동작을 규정
  - 모델 파라미터 : 모델이 잘 동작하도록 정한 가중치 등 계수
- 예) 사람의 뒷모습을 멀리서 보고 남녀를 구분하는 문제
  - 모델 : 머리카락 길이가 20cm 이상이면 여성으로 판단
  - 모델 구조 : 머리카락 길이를 보고 남녀를 구분
  - 모델 파라미터 : 머리카락 길이
- 하나의 특정 모델은 데이터(지역 등)에 따라 예측 정확도가 달라질 수 있다
  - 적절한 모델 구조 : 프로그래머가 선택
  - 적절한 모델 파라미터 : 머신러닝 프로그램이 데이터 기반하여 학습

모델 요약

- 모델 구조
  - 모델의 동작을 규정하는 방법
  - Programmer가 선택 : hyper parameter
- 모델 파라미터
  - 모델이 잘 동작하도록 학습하는 매개 변수(parameter)
    - 모델 계수 (신경망의 경우, 가중치)
- 모델 학습
  - 주어진 데이터에 가장 적절한 parameter를 찾는 작업
  - 머신 러닝 : 학습을 통하여 찾는다

머신 러닝의 기본 동작

- **머신러닝 목표**
  - **주어진 학습 데이터를 보고 원하는 동작을 잘 수행하는 모델을 만드는 것**
  - **즉, 회귀 또는 분류 작업을 정확하게 수행**
  - **좋은 모델을 만들기 위해서는 → 좋은 데이터가 필요**



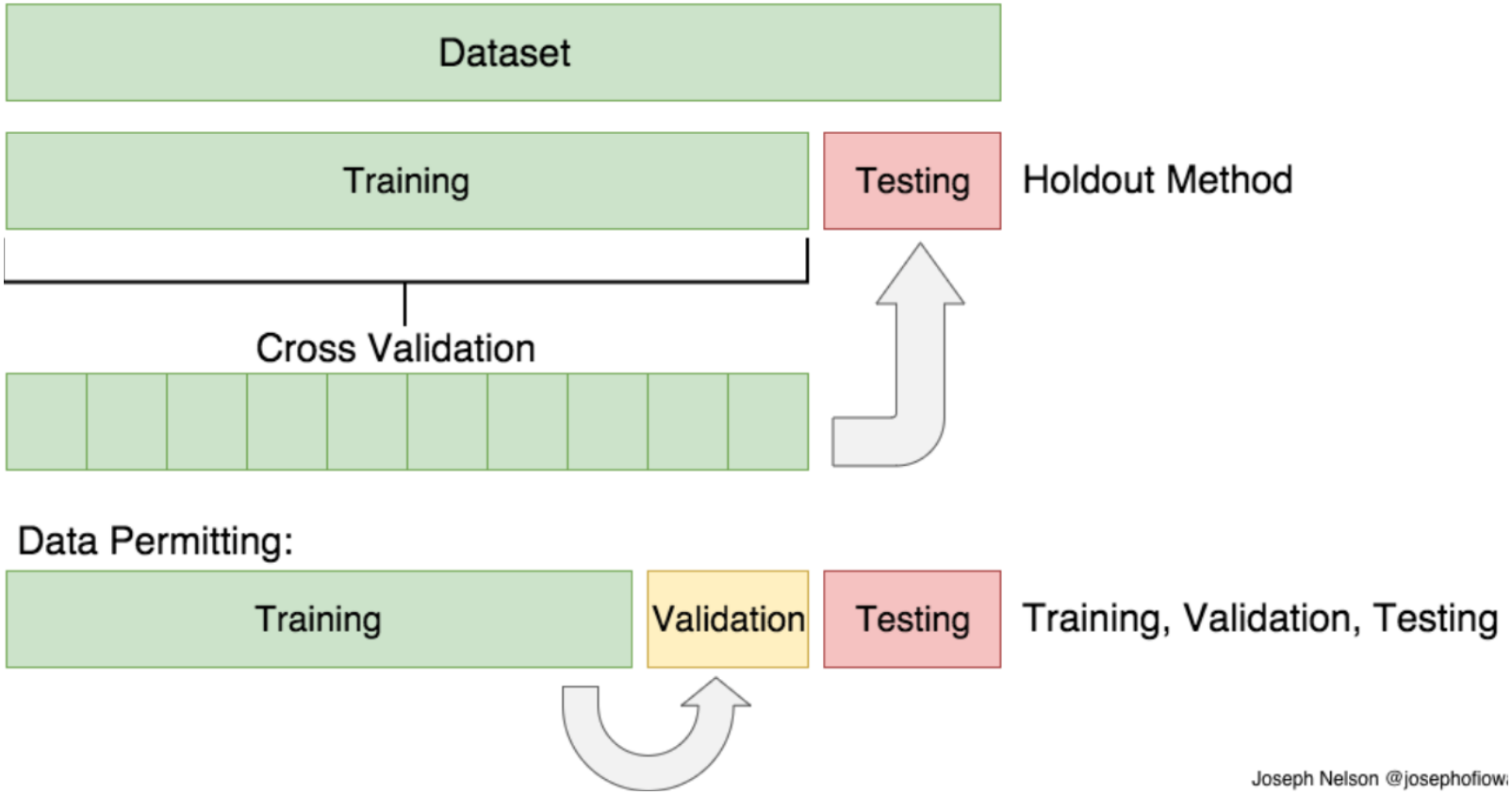
훈련과 검증

- **모델 훈련(Training)**
  - **모델이 데이터를 이용하여 모델 파라미터를 학습하는 과정**
  - **모델 파라미터 값 : 보통 랜덤한 값으로 초기화**
  - **학습**
    - **훈련 데이터에 기반하여 최적화 알고리즘에 의해서 모델 파라미터 값을 계속 갱신하여 모델의 예측 값이 실제 값에 수렴하도록 하는 훈련 과정**
- **모델 검증 (Validation)**
  - **모델을 학습시킨 후, 모델이 잘 동작하는지를 확인하는 과정**
  - **보통 검증 데이터를 따로 제공하지 않으므로 훈련에 사용할 데이터의 일부를 검증용으로 미리 확보해야**

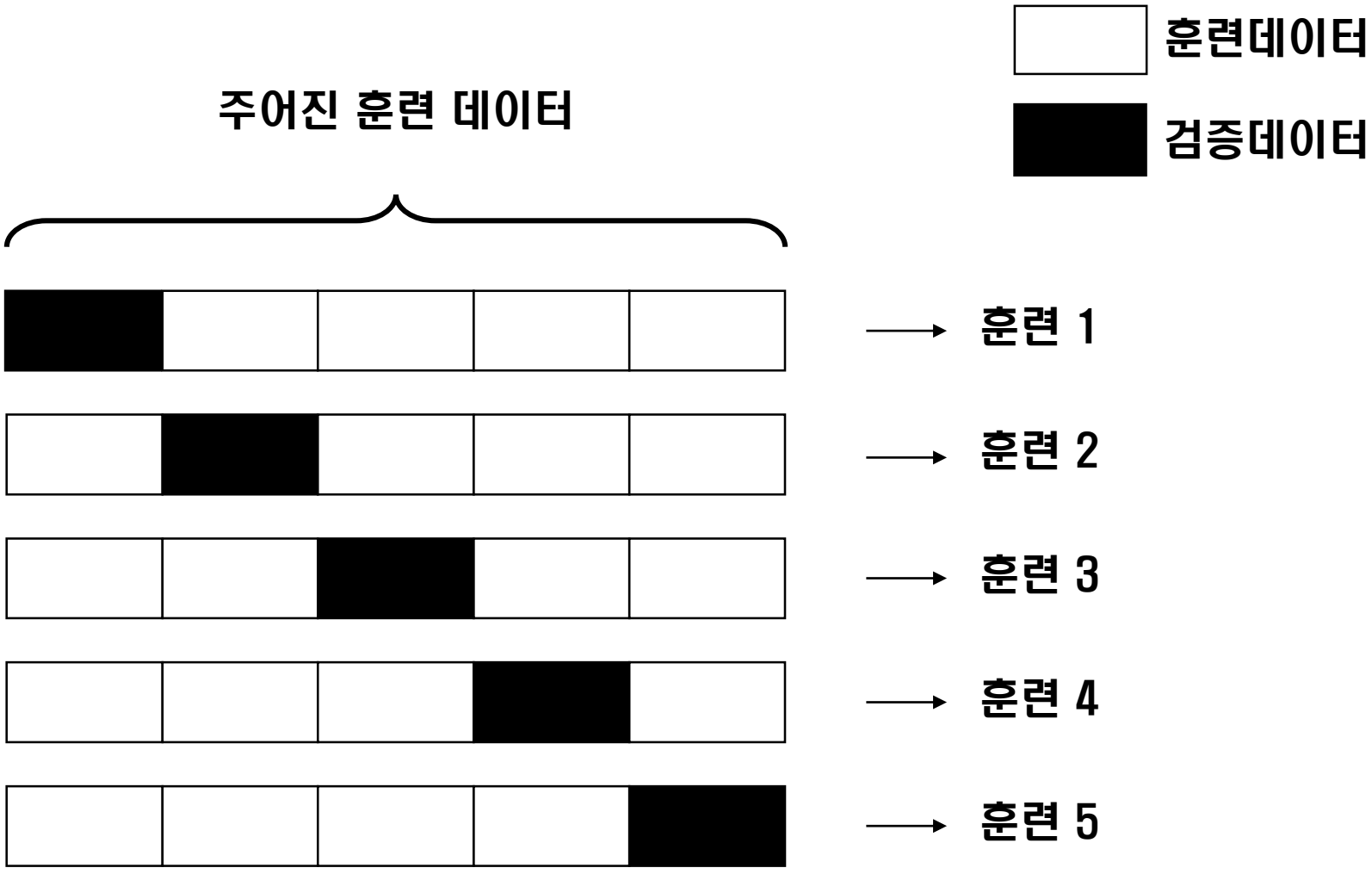
훈련, 검증, 테스트 데이터

- 훈련(Training) 데이터
  - 모델 parameter를 학습시키는데 사용
- 검증(Validation) 데이터
  - 모델의 학습 중에 과소적합, 과대적합을 검사하고, 최적 모델 구조(hyper parameter 등)를 찾는데 사용
  - 훈련 데이터 중의 일부를 학습에 참여시키지 않고 남겨 둔 데이터
- 테스트(Test) 데이터
  - 모델의 성능을 최종적으로 시험하는데 사용

훈련, 검증, 테스트 데이터


Dataset
Training
Testing
Holdout Method
Cross Validation
Data Permitting:
Training
Validation
Testing
Training, Validation, Testing
Joseph Nelson @josephofiow

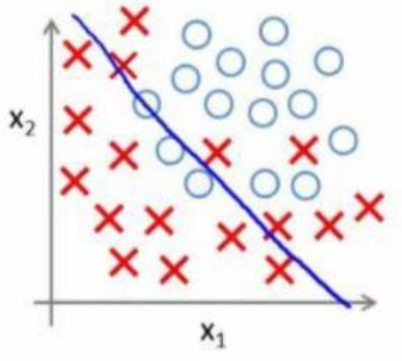
k-fold 교차 검증



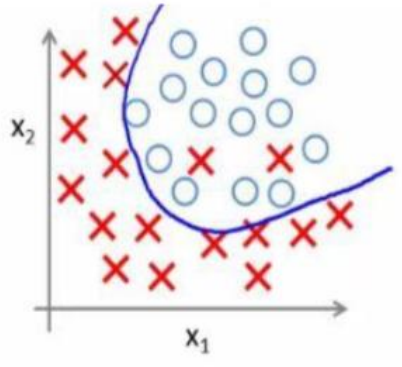
k-fold 교차 검증

- fold : 검증 데이터
- 주어진 데이터 전체를 골고루 검증용으로 사용
  - 모델의 동작을 보다 정교하게 확인하기 위함
  - K 값은 보통 5~10 주로 사용
  - cross_val_score() : 교차 검증 자동 수행 & 성능 평가
- 교차 검증의 목적은 성능 검증
- K개의 점수가 골고루 나와야 안정적인 모델

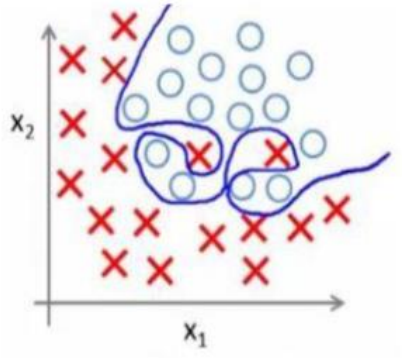
과대 적합, 과소 적합



과소 적합



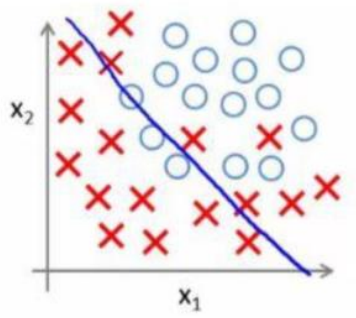
Good fit

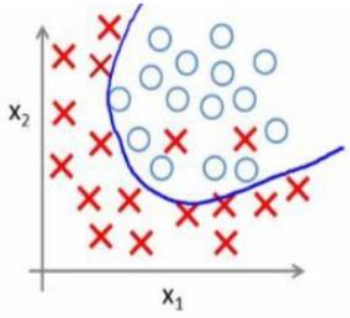


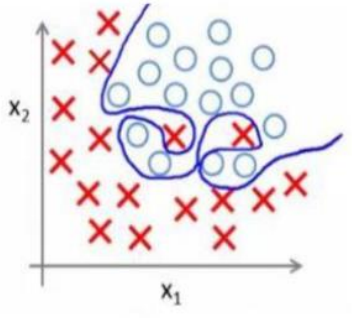
과대 적합

과소 적합(Underfitting)

- 문제의 복잡도에 비해 **모델이 너무 간단**하여 주어진 **훈련 데이터에서 조차도** 잘 동작하지 못하는 것
- 대책
  - 모델의 보다 복잡(상세)하게 구성
  - 제약을 줄여준다

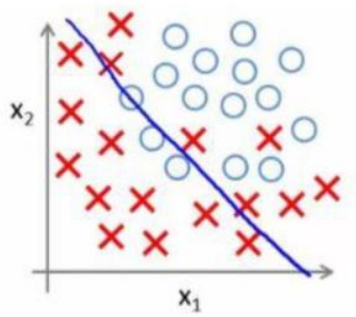


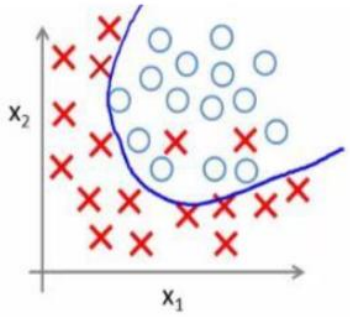


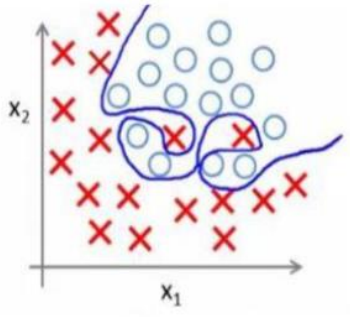


과대 적합(Overfitting)

- 모델이 훈련 데이터에 대해서만 잘 동작하도록 훈련되어, 새로운 데이터에 대해서는 오히려 잘 동작하지 못하는 것
  - 주어진 훈련 데이터를 너무 세밀하게 학습에 반영하여 발생하는 현상
- 과대 적합된 모델은 훈련 데이터에 대해서는 매우 우수한 성능을 보이지만 일반성이 떨어진다







일반화(Generalization)

- **모델의 일반화(Generalization)**
  - **머신러닝에서는 과대 적합을 피해서 일반적으로 잘 동작하게 모델을 만드는 것이 매우 중요**
- **과대 적합의 원인 & 대책**
  - **원인 : 훈련 데이터가 너무 적어서 학습을 충분히 할 수 없는 경우**
    - **대책 : 다양한 경우를 고려한 훈련 데이터를 많이 확보**
  - **원인 : 모델이 너무 복잡한 경우**
    - **대책 : 모델을 좀 단순하게**

규제화(Regularization)

- 규제화
  - 모델이 일반화 능력을 갖도록 모델의 기능을 제한하는 것
  - 예) 만일 학습할 데이터가 부족하다면,
    - 모델 구조를 좀 단순하게 만들어서 주어진 데이터에 대한 과대 적합을 피해야 한다
- 머신러닝에서는 일반화 능력을 가진 모델을 만드는 것이 중요
  - 이를 위하여 모델에 적절한 제한을 가하는 기법을 사용

데이터의 대표성

- 훈련 데이터 구성
  - 미래에 나타날 가능성이 있는 모든 데이터의 특징을 골고루 반영
  - 예) 투표 결과 예측
    - 실제 인구 구성에 비례하여 성별, 지역, 인종, 나이별, 소득별 등 균형성 유지
- 계층적 샘플링(stratified sampling)
  - 데이터의 대표성을 고려하여 데이터를 수집하는 방법
    - 예) 어느 학교의 남녀 학생 비율이 8:2 → 의견수렴 샘플도 8:2 유지
- 훈련, 검증, 테스트 샘플 데이터가 전체 데이터의 특징을 계속 유지할 수 있어야 함

모델 구축 과정

- 머신러닝 모델 선택
  - 해결할 문제에 최적의 모델 선택
    - 훈련 데이터, 원하는 목적(기능) 등 고려
  - 선형모델, 결정트리, 신경망, SVM, 랜덤포레스트 등
- 모델 학습 : 훈련 데이터 사용
  - fit(), train() 함수
- 모델이 과대 적합 또는 과소 적합인지를 검증
  - 과대 적합 → 모델을 더 일반화(모델 단순화 또는 규제화)
  - 과소적합 → 모델을 더 복잡(상세)하게 설계
- 성능 평가 : 실제 테스트 데이터를 적용
  - predict(), score() 함수

머신 러닝의 유형별 대표적 알고리즘

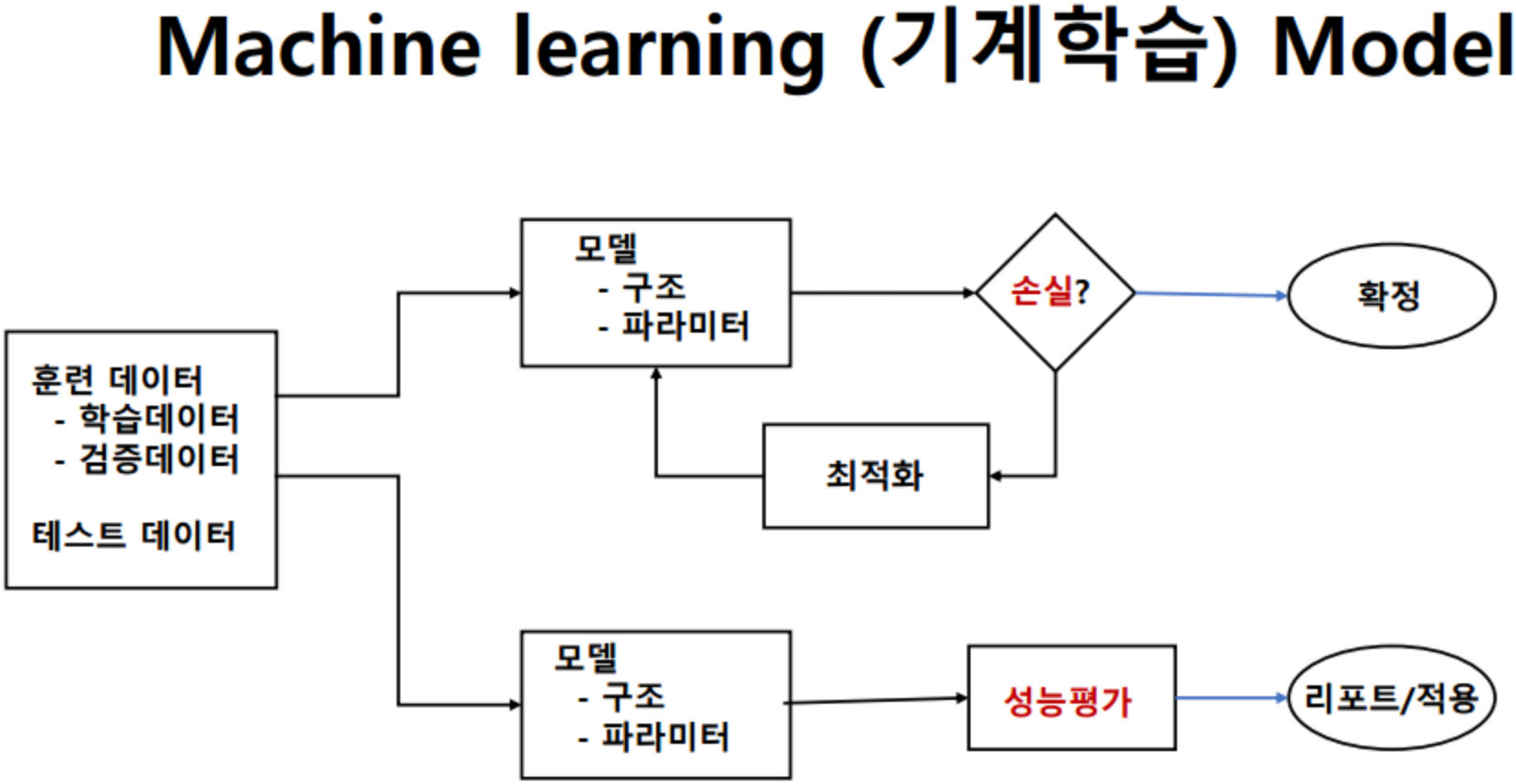
	머신러닝 유형	알고리즘
지도학습	분류	kNN, 베이즈, 결정 트리, 랜덤 포레스트, 로지스틱 회귀, 그라디언트부스팅, 신경망
	회귀	선형 회귀, SVM, 신경망
비지도학습	군집화	k-means, DBASCAN
	데이터 변환	스케일링, 정규화, 로그변환
	차원축소	PCA, 시각화

- 분류/회귀 알고리즘 : 교차 사용 가능
  - 선형 회귀 : 선형 분류, 결정 트리(분류) : 회귀 사용 가능 등

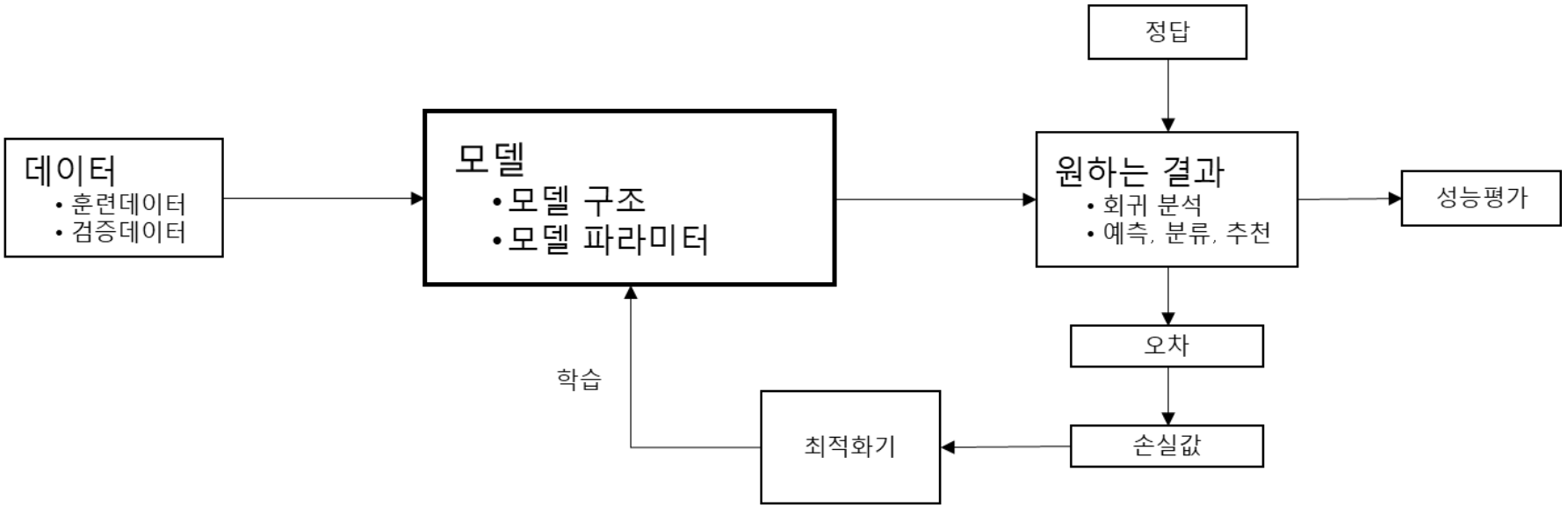
모델의 동작 성능

- 모델의 동작 속도
  - **학습 시간** : 모델을 만드는데 걸리는 시간
  - **동작 속도** : 모델을 적용하는데 걸리는 시간
- 일반적으로 모델이 정교하고 복잡할수록 성능은 좋아지지만 모델을 만들거나 적용하는데 시간이 오래 걸린다.

모델의 동작


Machine learning (기계학습) Model
훈련 데이터
- 학습데이터
- 검증데이터
테스트 데이터
모델
- 구조
- 파라미터
손실?
확정
최적화
모델
- 구조
- 파라미터
성능평가
리포트/적용

모델의 학습


데이터
• 훈련데이터
• 검증데이터
모델
• 모델 구조
• 모델 파라미터
원하는 결과
• 회귀 분석
• 예측, 분류, 추천
정답
성능평가
오차
손실값
최적화기
학습

손실 함수

- **손실함수**(loss function)
  - 모델의 **예측값**과 **실제 값**과의 **차이**, 즉 **오차(error)**를 계산
- 이 **오차를 줄이는 방향**으로 모델을 **최적화**(**학습**) 한다
- **회귀분석**에서 **많이 사용**하는 손실함수
  - 오차 자승의 합의 평균치(MSE: mean square error)

$$MSE = \sum_{k=1}^{N} (y - \hat{y})^2$$

  - N: 배치 크기

- 배치 크기 같은 설정 환경 변수를 hyper parameter라고 한다.
  - **hyper parameter** : 사람이 선택하는 변수
  - **parameter** : 기계 학습으로 자동으로 갱신되는 변수

분류의 손실 함수

- 분류에서는 손실함수로 MSE를 사용할 수 없다
- 대신, 분류에서 정확도(accuracy)를 손실함수로 사용할 수 있다
  - 예) 100명에 대해 남녀 분류 문제
    - 96명을 맞추고 4명을 오 분류 : 정확도 0.96
  - 그러나 정확도를 손실함수로 사용하는 데에는 다음과 같은 문제가 있다
- Category 분포 불균형시 문제
  - 예)
    - Group : 남자 95명, 여자 5명
    - 오 분류 케이스 – 남자 1명, 여자 3명
    - 정확도는 여전히 0.96 :
    - 문제 : 여자의 경우, 5명 중 3명을 오 분류 ➔ 결과 심각
  - 데이터 분포가 비대칭인 상황 : 질병 진단의 경우 자주 발생
  - 손실을 제대로 측정하지 못함
  - 이를 보완하기 위해서 크로스 엔트로피(cross entropy)를 사용
    - Category가 둘 이상인 경우에도 동일한 개념으로 적용 가능

크로스 엔트로피(Cross Entropy)

$$CE = \sum_i p_i \log\left(\frac{1}{p_i'}\right)$$

- p_i : 어떤 사건이 일어날 실제 확률, p_i' : 예측한 확률
- 남녀가 50명씩 같은 경우

$$CE = -0.5 \times \log\left(\frac{49}{50}\right) - 0.5 \times \log\left(\frac{47}{50}\right) = 0.02687$$

- 남자가 95명 여자가 5명인 경우

$$CE = -0.95 \times \log\left(\frac{94}{95}\right) - 0.05 \times \log\left(\frac{2}{5}\right) = 0.17609$$

배치와 이포크

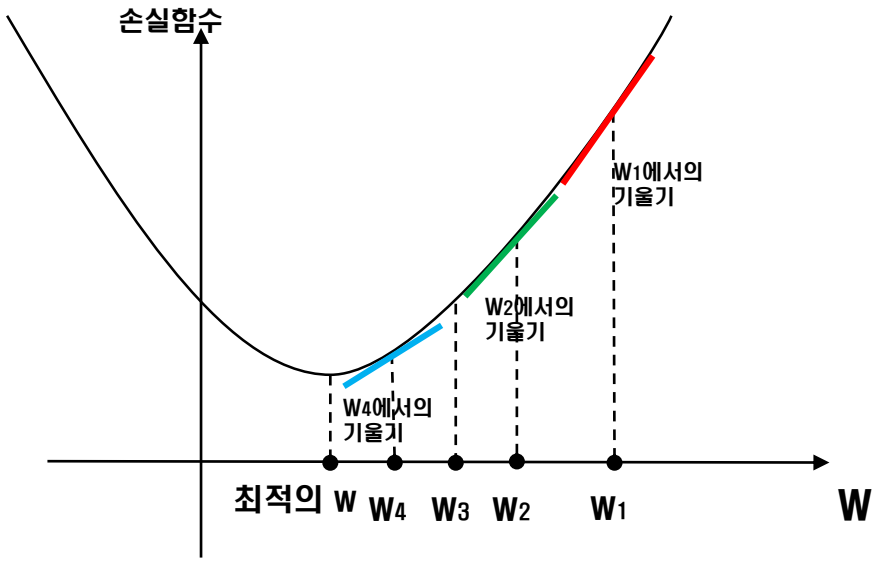
- 배치(Batch) 크기 : 한번 학습에 사용하는 샘플 수
- 예를 들어, 총 1,000개의 데이터로 예측 모델을 만들 때, 한번에 1,000개의 데이터를 모두 입력하여 손실함수를 구하고 학습을 시키는 것은 비효율적
  - 배치 크기가 클수록 학습이 정교하고, 기울기를 정확히 구할 수 있으나 계산량이 많아진다.
  - 한번에 필요한 메모리 사용량이 많아 메모리 오류가 날 가능성이 높다
  - 일반적으로 훈련 데이터를 일정 크기의 배치 단위로 나누어 학습을 시키는 것이 효과적
- 배치 크기가 작을 때에는 기울기가 상대적으로 정확하게 계산되지 못하므로 학습률도 작게 잡는 것이 좋다

배치와 이포크

- 이포크(Epoch) : 주어진 훈련 데이터 전체를 한번 학습에 사용하는 것
- 학습에 주어진 1,000개의 훈련 데이터를 모두 학습에 사용하였어도 아직 최적의 모델 파라미터를 찾지 못했으면 주어진 데이터를 다시 반복하여 사용할 필요 있다
  - 머신러닝에서는 일반적으로 여러 이포크를 수행

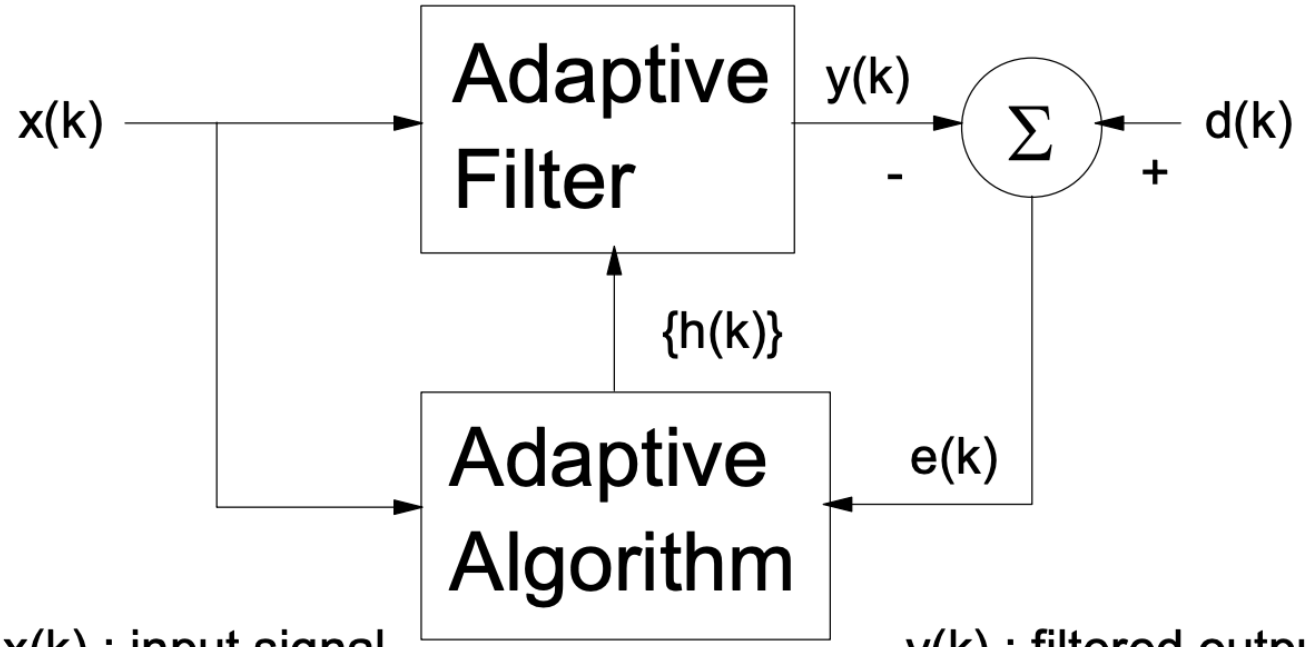
훈련 방법 : 최적화 – 경사 하강법

- **경사 하강법**(Gradient Descent)
  - **가장 일반적인** 최적화 알고리즘
  - 손실함수를 계수에 관한 그래프로 그렸을 때 최소값으로 빨리 도달하기 위해서는 현재 위치에서의 **기울기**(미분값)에 **비례**하여 **반대방향**으로 이동



$$W_i = W_{i-1} - \eta Grad(i)$$

경사 하강법의 원리



x(k) : input signal

y(k) : filtered output

d(k) : desired response

h(k) : impulse response of adaptive filter

The cost function may be $E\{e^2(k)\}$ or $\sum_{k=0}^{N-1} e^2(k)$

경사 하강법의 원리

$$\underline{W}(n+1) = \underline{W}(n) - \mu \frac{\partial e^2(n)}{\partial \underline{W}(n)}$$

$$= \underline{W}(n) - \mu \frac{\partial e^2(n)}{\partial e(n)} \cdot \frac{\partial e(n)}{\partial \underline{W}(n)}$$

$$= \underline{W}(n) - 2\mu e(n) \cdot \frac{\partial \left[d(n) - \underline{W}^T(n) \cdot \underline{X}(n) \right]}{\partial \underline{W}(n)},$$

$$= \underline{W}(n) + 2\mu e(n) \underline{X}(n)$$

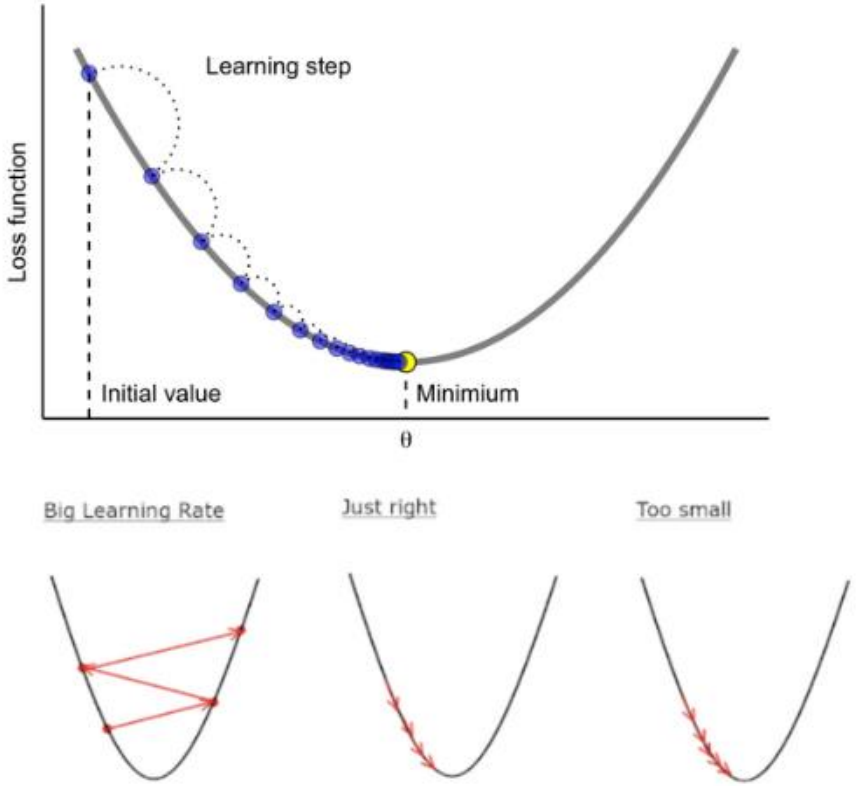
$$\frac{\partial \underline{A}^T \cdot \underline{B}}{\partial \underline{A}} = \underline{B}$$

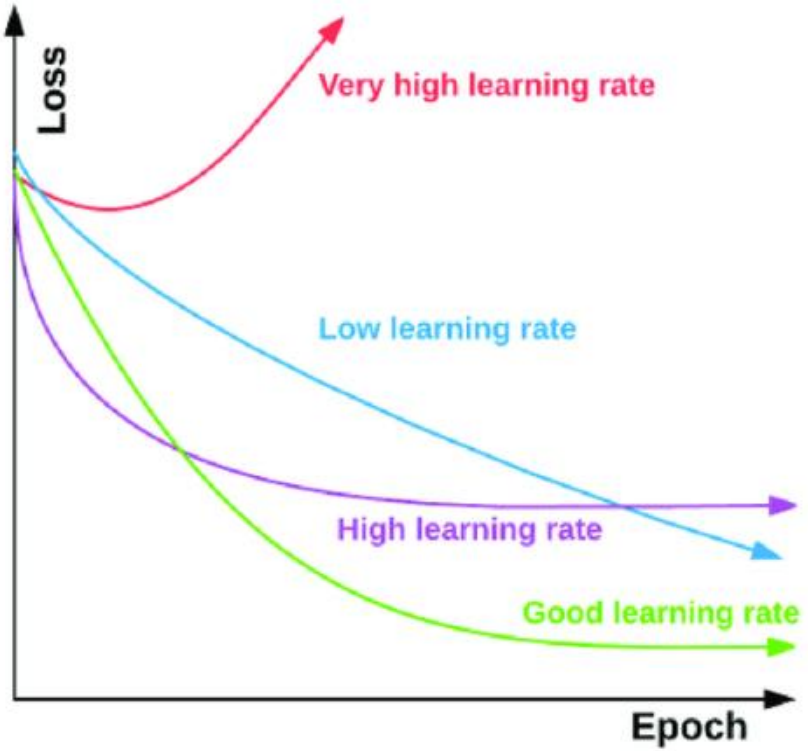
학습률 (Learning Rate)

- **학습률: 학습 속도를 조정하는 변수**
  - **학습률이 너무 작게 잡으면**
    - **수렴하는데 시간이 오래 걸리지만 최저점에 도달했을 때 흔들림 없이 안정적인 값을 얻을 수 있다**
  - **학습률을 너무 크게 정하면**
    - **학습하는 속도는 빠르나 자칫하면 최저점으로 수렴하지 못하고 발산하거나 수렴하더라도 흔들리는 오차가 남아있을 수 있다.**
- **학습 스케줄(**learning schedule**) 기법**
  - **초기에는 학습률을 크게 정하고(학습을 빠르게 하고), 오차가 줄어들면 학습률을 줄여서 안정 상태(**steady state**)의 오차를 줄이는 방법**

학습률 (Learning Rate)

학습률(Learning rate) : 학습 속도를 조정하는 변수





경사 하강법 특징

- 경사하강법을 적용하려면 특성 변수들을 모두 동일한 방식으로 스케일링해야 한다.
- 특성 값마다 크기의 편차가 크면
  - 특정 변수에 너무 종속되어 동작할 수 있고 이로 인해 수렴속도가 직선이 되지 않고 오래 걸릴 수가 있다.

경사 하강법의 종류

- **배치(**Batch) GD
  - **일반적으로 배치** GD**방식을 많이 사용하는데, 적절한 크기의 배치 단위로 입력 신호를 나누어 경사 하강법을 적용하는 방식**
- SGD (**확률적 경사 하강법)**
  - **한 번에 한 샘플씩 랜덤하게 골라서 훈련에 사용하는 방법**
  - **즉 샘플을 하나만 보고 계수를 조정**
  - **계산량이 적어 동작속도가 빠르고, 랜덤한 방향으로 학습을 하므로 전역 최소치를 가능성이 높아진다**
  - **매 샘플이 너무 랜덤하여 방향성을 잃고 수렴하는데 시간이 오래 걸릴 가능성도 있다**

모델의 성능 지표

- 모델의 성능을 평가하는 척도 필요

- 분류에서는 성능 척도로 정확도(accuracy)를 주로 사용
  - (참고) 분류에서 손실함수로 크로스 엔트로피를 주로 사용

- 손실함수와 성능 지표의 차이점
  - **손실함수** :
    - 모델을 훈련시킬 때의 기준
    - 모델은 손실함수를 최소화 하는 방향으로 학습
  - **성능 지표**
    - 이렇게 만든 모델이 궁극적으로 얼마나 잘 동작하는지를 평가하는 척도

  - 예) 과속단속을 통한 교통사고율을 줄이는 작업
    - 손실함수에 해당 : 과속 단속
    - 성능 평가 지표(궁극적 목표) : 교통 사고를 줄이는 것 → 교통 사고율 측정

모델의 성능 지표

- MSE(또는 RMSE)
  - 키를 예측 : RMSE = 5.7
  - 몸무게를 예측 : RMSE = 3.8
    - 단순히 RMSE 값만으로는 각각 성능이 얼마나 우수한 지 알기 어렵다
    - 또한 서로 데이터의 성격, 범위가 다르므로 상호 객관적 비교 평가도 어렵다
- R^2
  - 회귀분석에서 어떠한 모델에서도 동일한 의미의 성능평가 척도
    - 데이터 종류와 값의 크기 범위와 관계없이 성능 평가를 객관적
  - 실제 값을 잘 예측 (= 1)
  - 평균치 예측 정도의 수준 (= 0)
  - 평균치 예측만도 못한 수준 (= 음수)

대표적인 손실함수와 성능지표

	손실함수	성능 지표
정 의	손실함수를 줄이는 방향으로 학습	성능을 높이는 것이 머신러닝을 사용하는 최종 목적
회귀 모델	MSE (오차 자승의 평균)	R^2
분류 모델	크로스 엔트로피	정확도, 정밀도, 재현률, F1점수

Regression (회귀) – 예측, 분류

❖ **What to reduce? (Loss Function: 손실함수)**

- **MSE** (Mean Square Error)

$$MSE = \sum_{k=1}^{N} (y - \hat{y})^2$$

❖ **How Good it is? (Performance: 성능지표)**

- **R^2** (R-Squared)

$$R^2 \equiv 1 - \frac{SS_{\text{res}}}{SS_{\text{tot}}}$$

$$SS_{\text{res}} = \sum_i (y_i - f_i)^2 = \sum_i e_i^2$$

$$SS_{\text{tot}} = \sum_i (y_i - \bar{y})^2$$

Classification (분류)

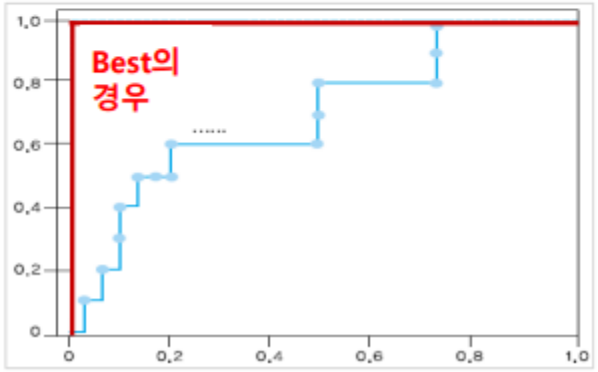
❖ **What to reduce? (Loss Function: 손실함수)**

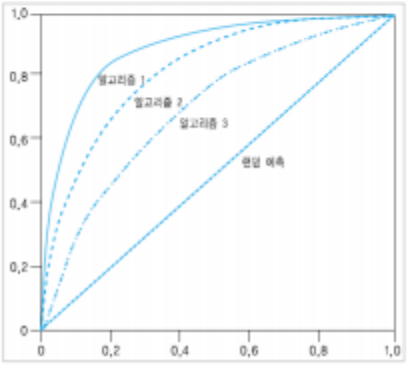
- **Cross Entropy (CE)**
- **Gini (지니계수)**

$$CE = \sum_i p_i \log(\frac{1}{p_i}) \qquad Gini = 1 - \sum_{k=1}^{m} p_k^2$$

❖ **How Good it is? (Performance: 성능지표)**

- **Confusion Matrix**: Accuracy, Recall, Precision, F-1 Score
- **Ranking(순서)**: ROC (Receiver Operating Characteristic), AUC (Area Under Curve)





머신러닝 유형

- **머신러닝을 사용하는 목적 즉, 머신러닝으로 문제를 해결하는 유형**
  - **설명**(description)
    - **클러스터링**
    - **비지도 학습**
  - **예측**
    - **회귀**(regression)
    - **분류**(classification)
    - **지도학습**
  - **추천**(recommendation)
  - **연관분석**
  - **강화학습**

데이터 분석의 유형 – 지도 학습

- 지도 학습(Supervised learning)
  - 입력 값(x)과 정답(y, label)를 포함하는 훈련용 데이터(training data)를 이용하여 학습하고, 그 학습된 결과를 바탕으로 미지의 데이터(test data)에 대해 미래 값을 예측(predict)하는 방법
  - 회귀나 분석 등 예측 모델은 시간이 지나면 정답을 확인할 수 있고, 모델의 성능에 대한 정확한 평가가 가능
  - 정답에 해당하는 값 : 목적변수(target variable), 레이블(label)
    - 회귀 : 수치 값
    - 분류 : 카테고리 변수
  - 예) 스팸 메일 분류기의 학습
    - 수집한 데이터로부터 어떤 메일이 스팸이었는 지 정답 샘플도 같이 주어져야 한다.

데이터 분석의 유형 – 지도 학습

- 회귀 분석
  - 수치를 예측하는 것

- 회귀 분석의 응용
  - 경제지표 예측
  - 사회학 연구
  - 마케팅
  - 의학에서 치료효과 분석

- 회귀 분석 알고리즘
  - 선형회귀
  - KNN
  - SVM
  - 로지스틱 회귀
  - 랜덤 포레스트
  - 신경망

데이터 분석의 유형 – 지도 학습

- 분류
  - 어떤 항목(item)이 어느 그룹에 속하는지를 판별
  - 이진 분류(binary classification)
    - 두 가지 카테고리를 나누는 작업
  - 다중 분류(multiclass classification)
    - 세 개 이상의 클래스를 나누는 작업

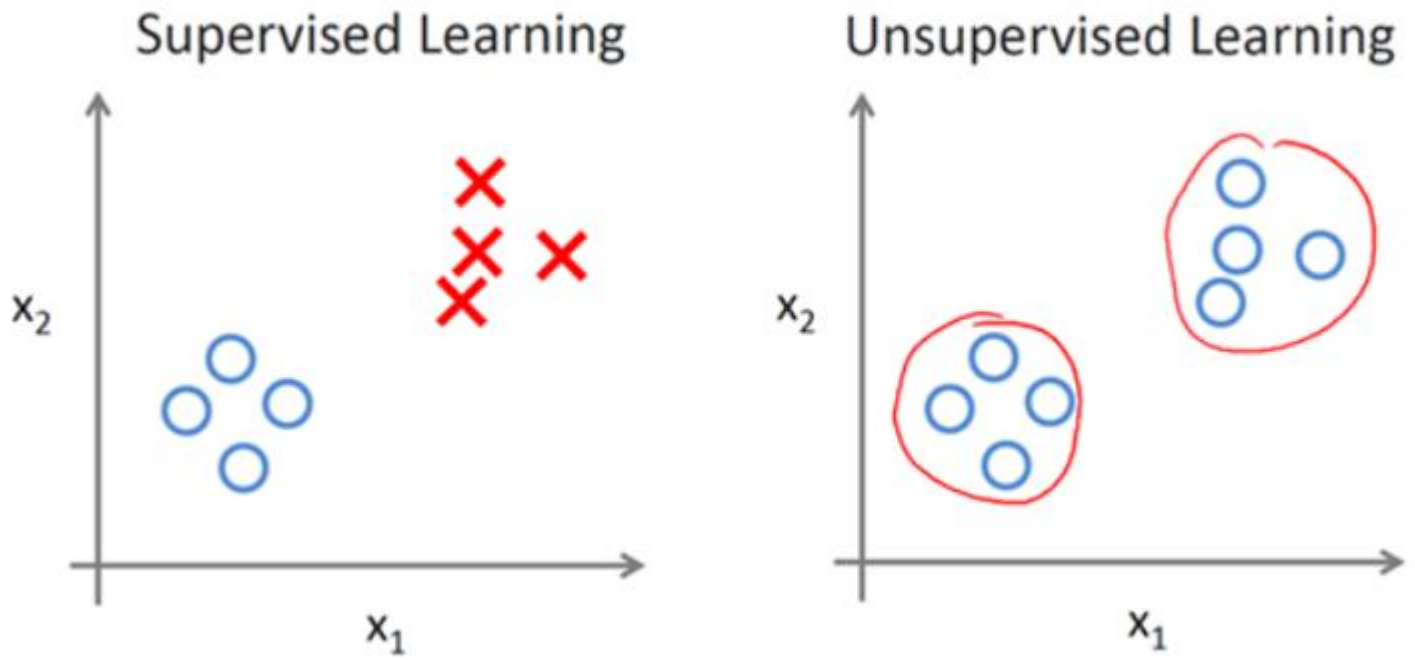
- 분류의 응용
  - 스팸 메일/우수 고객/충성심 높은 신입사원/투자할 좋은 회사 구분
  - 매장 입장 고객의 타입 분류
    - 물건을 구매, 단순히 구경, 항의 고객인지 판단하여 적절한 대응
  - 과거의 구매 이력/SNS 등을 분석하여 구매 확률이 높은 고객 구분
    - 광고 안내문, 기념품을 잠재 고객에게 보낼 때 필요

데이터 분석의 유형 – 비지도 학습

- 비지도 학습(Supervised learning)
  - 정답(label)은 없고 입력 데이터만 있는 훈련용 데이터(training data)를 이용한 학습을 통해 정답을 찾는 것이 아닌 입력 데이터의 패턴, 특성 등을 발견하는 방법
  - 데이터의 특성을 기술하는 서술형 모델

- 기법
  - 군집화(clustering)
    - 유사한 항목들을 같은 그룹으로 묶는다
  - 시각화
    - 데이터의 속성을 명확하게 시각화하기 위해서 고차원의 특성 값들을 2차원이나 3차원으로 차원을 축소하는 작업
  - 데이터 변환
    - 데이터를 분석하기 좋게 다른 형태로 변환
  - 주성분 분석(PCA)
    - 머신 러닝에 사용할 특성의 수를 줄인다.

지도 학습 vs 비지도 학습



데이터 분석의 유형 – 비지도 학습

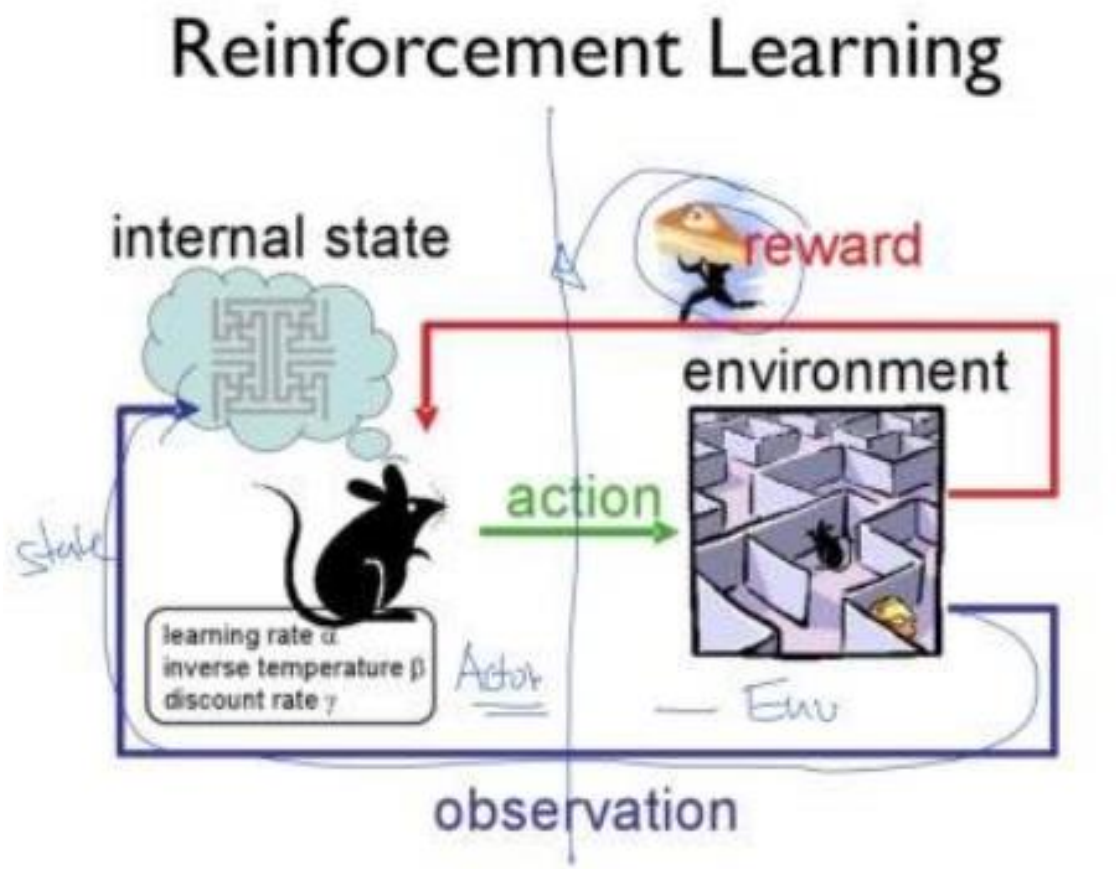
- **연관 분석**
  - 어떤 사건이 다른 사건과 얼마나 자주 동시에 발생하는지 파악
  - 자주 발생하는 패턴 찾기(상품의 연관성, 취향의 연관성 등 분석)
  - 같이 구매한 상품 분석(market basket analysis, 장바구니 분석)
  - 상품의 진열 배치 및 상품 프로모션(쿠폰 발행 등)에 활용

데이터 분석의 유형 – 강화 학습

- 강화 학습(Reinforcement learning)
  - 입력 샘플마다 정답이 있어 답을 알려주는 것이 아니라 일정 기간 동안의 행동(action)에 대해 보상(reward)을 해 줌으로써 어느 방향으로 학습해야 하는 지 방향성만 알려주는 학습 방법

- 응용 예
  - 게임의 경우 매 입력시마다 답을 주지는 못하지만, 게임을 이기고 있는 지, 지고 있는 지를 알려 줌
    - 스스로 게임을 잘 수행하는 방법을 터득
  - 로봇이 혼자 그네 타는 방법, 바둑 두는 방법을 터득
  - Alphago(바둑 프로그램)

강화 학습


Reinforcement Learning
internal state
reward
environment
action
learning rate α
inverse temperature β
discount rate γ
observation

결정 트리

결정 트리 개요

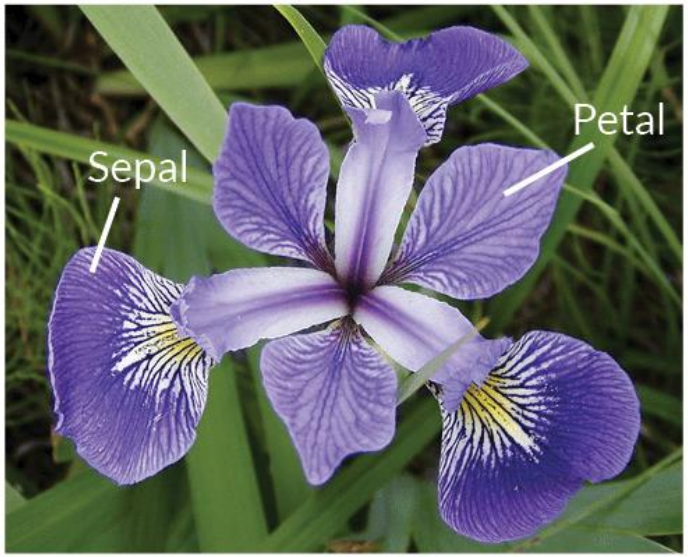
- **선형 모델**
  - **특성들을 대상으로 곱셈과 덧셈과 같은 연산**
  - **그 값을 기준으로 회귀나 분류를 예측**

- **결정 트리(**decision tree)
  - **각 특성을 독립적으로 하나씩 검토하여 분류 작업을 수행**
  - **마치 스무고개 하여 예측을 하듯이 동작 한 번에 한 특성을 따져보는 방법**
  - **분류, 회귀 모두에 사용**
    - **분류용 모델 :** DecisionTreeClassifier() **함수**
    - **회귀분석 모델 :** DecisionTreeRegressor() **함수**

동작 원리

- 결정 트리에서 핵심이 되는 부분
  - 가장 효과적인 분류를 위해서 먼저 어떤 변수를 가지고 판별을 할지 결정하는 것
- 이 판별은 트리를 내려가면서 계속
  - 매 단계마다 어떤 변수를 기준으로 분류를 하는 것이 가장 효과적인지를 찾아야 함
- 그룹을 효과적으로 "잘 나누는 것" 의 기준
  - 그룹을 나눈 후에 생성되는 하위 그룹들에 가능하면 같은 종류의 아이템들이 모이는지를 기준으로 삼는다
  - 한 그룹에 같은 종류의 아이템이 많이 모일수록 순수(pure)하다고 한다
  - 만일 나누어진 하위 그룹이 100% 같은 항목들로만 구성 → 순도(purity) 100%

결정 트리 예 – iris data

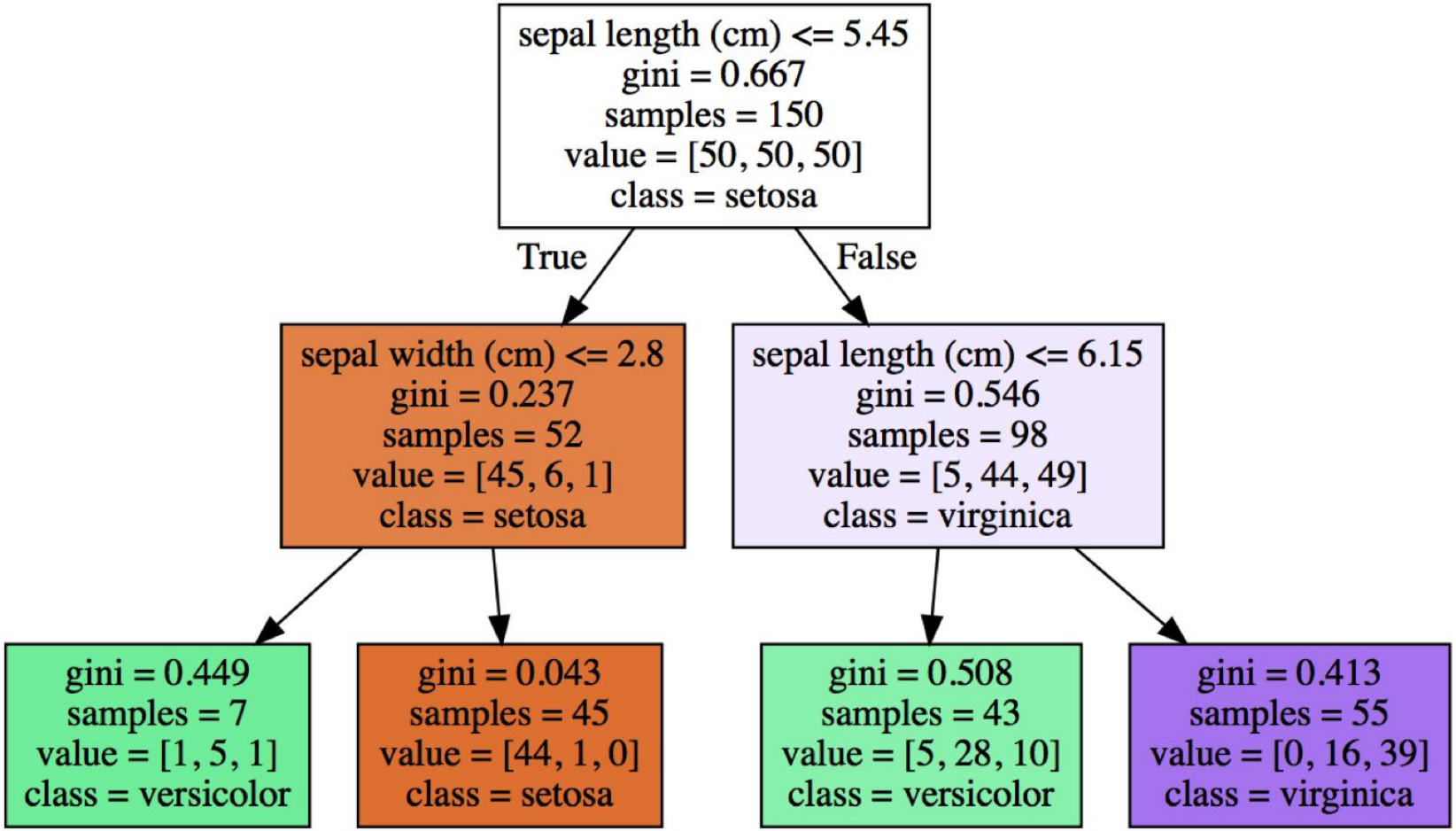


Iris Versicolor

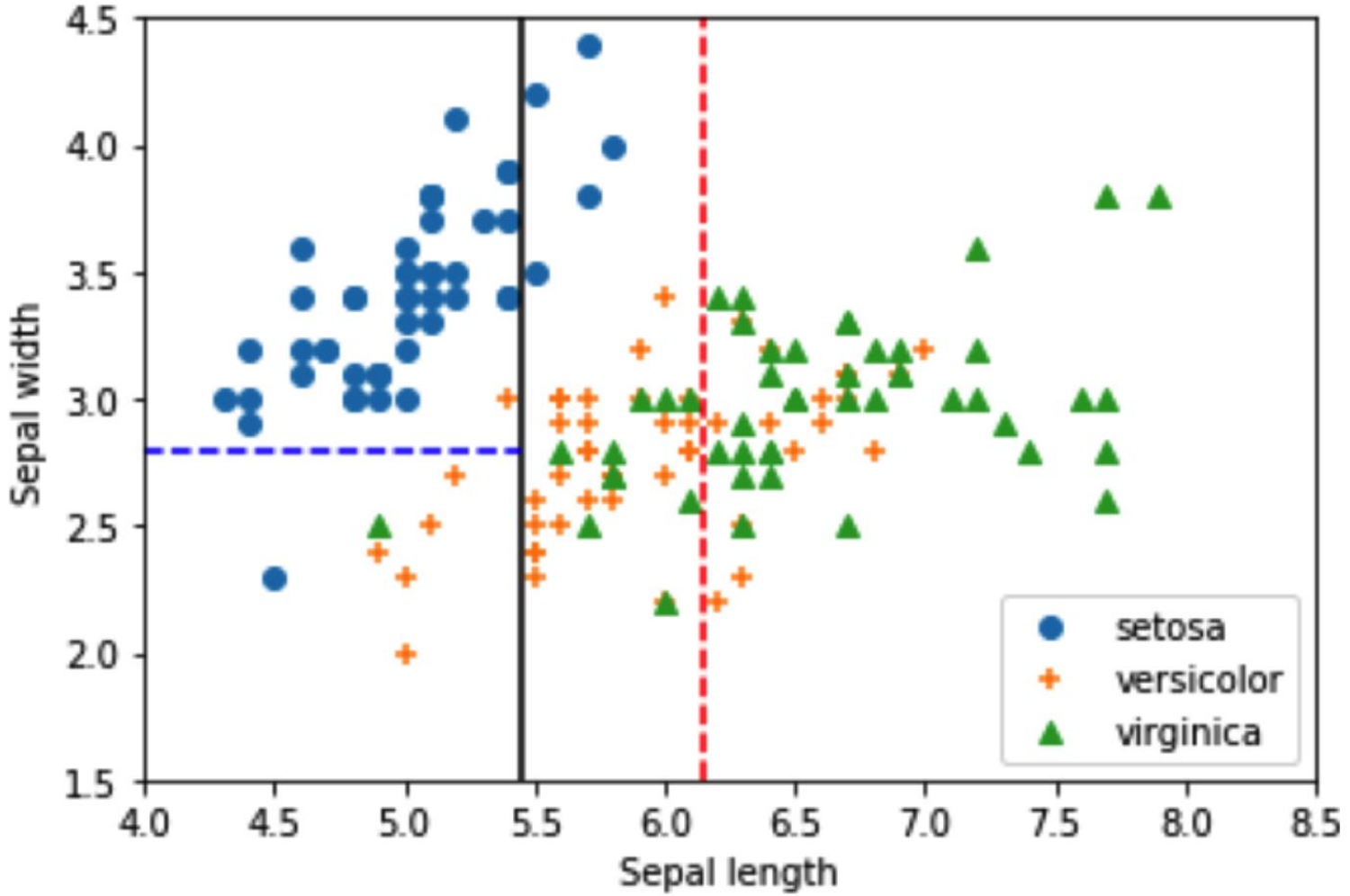
Iris Setosa

Iris Virginica

결정 트리 예


sepal length (cm) <= 5.45
gini = 0.667
samples = 150
value = [50, 50, 50]
class = setosa
True
False
sepal width (cm) <= 2.8
gini = 0.237
samples = 52
value = [45, 6, 1]
class = setosa
sepal length (cm) <= 6.15
gini = 0.546
samples = 98
value = [5, 44, 49]
class = virginica
gini = 0.449
samples = 7
value = [1, 5, 1]
class = versicolor
gini = 0.043
samples = 45
value = [44, 1, 0]
class = setosa
gini = 0.508
samples = 43
value = [5, 28, 10]
class = versicolor
gini = 0.413
samples = 55
value = [0, 16, 39]
class = virginica

결정 트리 예

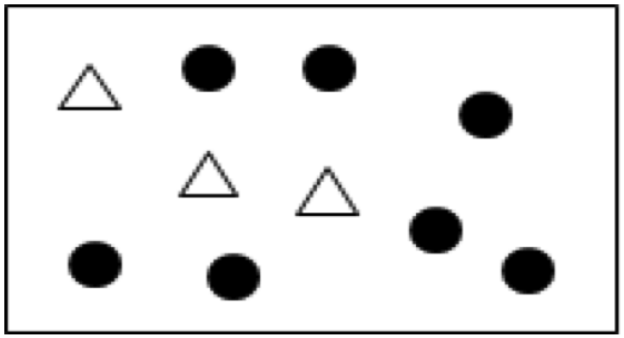

Sepal width
Sepal length
4.5
4.0
3.5
3.0
2.5
2.0
1.5
4.0
4.5
5.0
5.5
6.0
6.5
7.0
7.5
8.0
8.5
setosa
versicolor
virginica

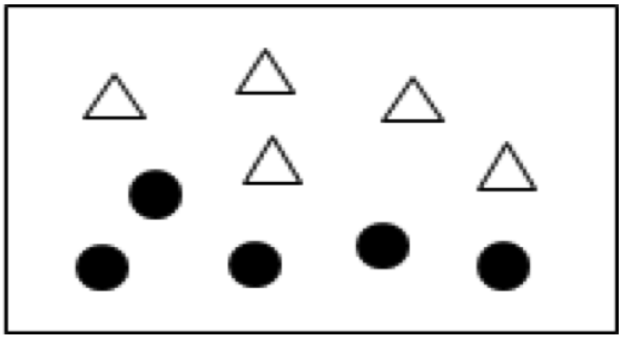
판별 기준

- **결정 트리는 나누어지는 그룹의 순도가 가장 높아지도록 그룹을 나누어야 한다**
- **그룹의 순도를 표현**
  - **지니(**Gini**) 계수, 엔트로피(**entrophy**) 주로 사용**
- Gini **계수**

$$Gini = 1 - \sum_{k=1}^{m} p_k^2$$

판별 기준





$$\text{좌측 박스: 지니}(7:3) = 1 - \left[\left(\frac{7}{10}\right)^2 + \left(\frac{3}{10}\right)^2\right] = 1 - (0.49 + 0.09) = 0.42$$

$$\text{우측 박스: 지니}(5:5) = 1 - \left[\left(\frac{5}{10}\right)^2 + \left(\frac{5}{10}\right)^2\right] = 1 - (0.25 + 0.25) = 0.5$$

정보량

- 데이터(이벤트)가 포함하고 있는 정보의 총 기대치, 정보의 가치
- 정보량을 표현
  - 해당 사건이 발생할 확률(probability)을 사용
- 사건 발생 확률에 따른 정보 가치
  - 확률 = 1 : 정보가 주는 가치가 없다
  - 사건 발생 확률이 낮을수록 : 정보가 주는 가치가 높음
- 정보량
  - 일어날 확률의 역수에 비례
- 정보량 정의

$$log\left(\frac{1}{p}\right)$$

정보량과 엔트로피

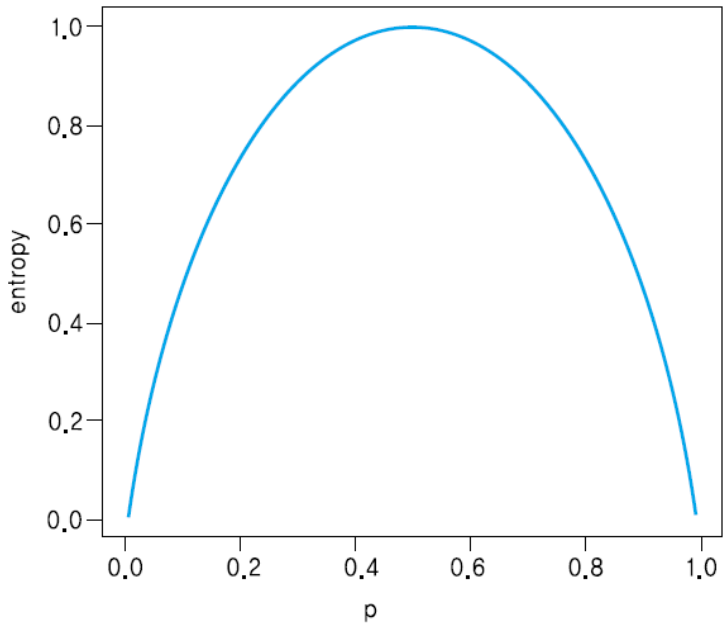
- 정보량의 기대치
  - 어떤 사건이 갖는 가치와 그 사건이 발생할 확률의 곱
  - 이를 엔트로피(entropy)라고 함

- 엔트로피(정보량의 기대치)

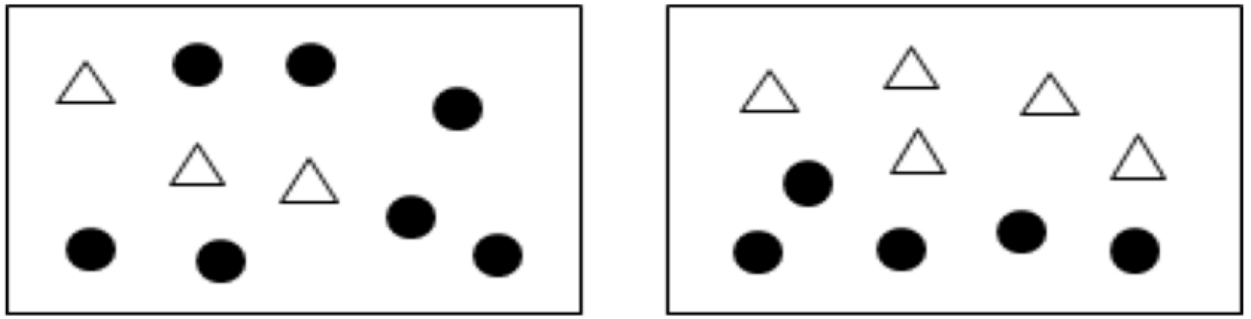
$$p \log\left(\frac{1}{p}\right) = -plog(p)$$

정보량과 엔트로피

- 바이너리(binary) 사건의 경우
  - 엔트로피는 p가 0.5 일 때 가장 높음
- 즉, 불확실성이 가장 높을 때 엔트로피가 가장 높음



정보량과 엔트로피



$$Entropy = -\sum_{k=1}^{m} p_k \log_2(p_k)$$

$$\begin{aligned} \text{좌측}(7:3) &= -\left[0.7^{*}\log_2(0.7) + 0.3^{*}\log_2(0.3)\right] \\ &= -\left[(-0.36) + (-0.52)\right] = -(-0.88) = 0.88 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{우측}(5:5) &= -\left[0.5^{*}\log_2(0.5) + 0.5^{*}\log_2(0.5)\right] \\ &= -\left[(-0.5) + (-0.5)\right] = -(-1) = 1 \end{aligned}$$

지니 계수와 엔트로피

- 결정 트리의 성능
  - Gini 계수를 사용하든, entropy를 사용하든 성능에는 큰 차이가 없다

- 분류 속도(계산량)
  - Gini 계수의 계산 속도가 조금 빠르다 (entropy의 경우 log 연산 포함)

트리 종료 조건

- 결정 트리를 계속 만들어 상세하게 분류를 하면
  - 언젠가는 훈련 데이터에 대해서 100% 순도의 분류가 가능
  - 이는 과대적합 → 테스트 데이터에 대해서는 성능이 오히려 떨어지게 됨

- 결정 트리 모델의 트리 깊이
  - 깊이를 제한하지 않으면 과대적합할 위험이 높으므로 주의해야
  - 트리의 깊이를 적절한 값보다 너무 작게 제한하면 과소적합이 됨

트리 종료 조건 – 하이퍼 파라미터

- max_depth: **트리의 최대 깊이**
  - **이보다 깊은 트리를 만들지 않는다**
- max_leaf_nodes: **리프 노드의 최대 수**
  - **리프 노드를 이보다 많이 만들지 않는다**
- min_samples_split: **분할하기 위한 최소 샘플수**
  - **이보다 작으면 분할하지 않는다**
- min_samples_leaf: **리프 노드에 포함될 최소 샘플수**
  - **이보다 작은 노드는 만들지 않는다**
- max_features: **최대 특성수**
  - **분할할 때 이보다 적은 수의 특성만 사용한다**

내부 변수

- **결정 트리 모델을 만든 후에, 어떤 특성이 결정 트리를 생성할 때 중요한 역할을 했는지 비중을 파악 가능**
- **이 결과를 보고 중요하지 않은 특성은 향후에 제외하기도 함**
- **내부 변수로 확인**
  - feature_importances_

클래스 확률

- **테스트 결과**
  - **테스트 샘플이 속할 가장 확률이 높은 클래스 하나만 알려준다**
  - **이 샘플이 각 클래스에 속할 확률을 각각 알려주는 것도 가능**
- **소프트 투표(**soft voting**) 도입**
  - **보다 정확한 다중 분류를 수행할 수 있다**
  - **각 클래스에 속할 확률 :** predict_proba() **함수를 사용**

결정 트리의 특징

- 거의 모든 종류의 분류에 가장 많이 사용하는 범용 모델
- 장점
  - 알고리즘의 동작을 설명하기 수월함
    - 대출이 왜 거부되었는지
    - 당신의 신용도가 왜 낮은지
    - 왜 불합격되었는지 등
  - 특성 변수간의 연산이 없기 때문에 변수의 스케일링이 필요 없다
    - (분류 작업을 수행) 한번에 한 특성 변수씩 검토하여 어떤 기준으로 트리를 나누어 나가면 순도가 올라가는지만 점검하면 됨
- 단점
  - 훈련 데이터가 바뀌면 모델의 구조가 달라진다
  - 훈련 데이터에 따라 바뀌는 모델을 남에게 설명하기 어려울 수도