4장 모델 훈련 2부

감사의 글

자료를 공개한 저자 오렐리앙 제롱과 강의자료를 지원한 한빛아카데미에게 진심어린 감사를 전합니다.

4.5 규제를 사용하는 선형 모델

자유도와 규제

- 자유도(degree of freedom): 학습 모델 결정에 영향을 주는 요소(특성)들의 수
    - 단순 선형 회귀의 경우: 특성 수
    - 다항 선형 회귀 경우: 차수
- 규제(regularization): 자유도 제한
    - 단순 선형 회귀 모델에 대한 규제: 가중치 역할 제한
    - 다항 선형 회귀 모델에 대한 규제: 차수 줄이기

가중치를 규제하는 선형 회귀 모델

- 릿지 회귀
- 라쏘 회귀
- 엘라스틱넷

규제 적용 주의사항

규제항은 훈련 과정에만 사용된다. 테스트 과정에는 다른 기준으로 성능을 평가한다.

- 훈련 과정: 비용 최소화 목표
- 테스트 과정: 최종 목표에 따른 성능 평가
    - 예제: 분류기의 경우 재현율/정밀도 기준으로 성능 평가

4.5.1 릿지 회귀

- 비용함수

$$J(\theta) = \text{MSE}(\theta) + \alpha \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \theta_i^2$$

- α(알파): 규제 강도 지정. $\alpha = 0$이면 규제가 전혀 없는 기본 선형 회귀
- α가 커질 수록 가중치의 역할이 줄어듦. 비용을 줄이기 위해 가중치를 작게 유지하는 방향으로 학습
- θ_0은 규제하지 않음
- 주의사항: 특성 스케일링 전처리를 해야 성능이 좋아짐.

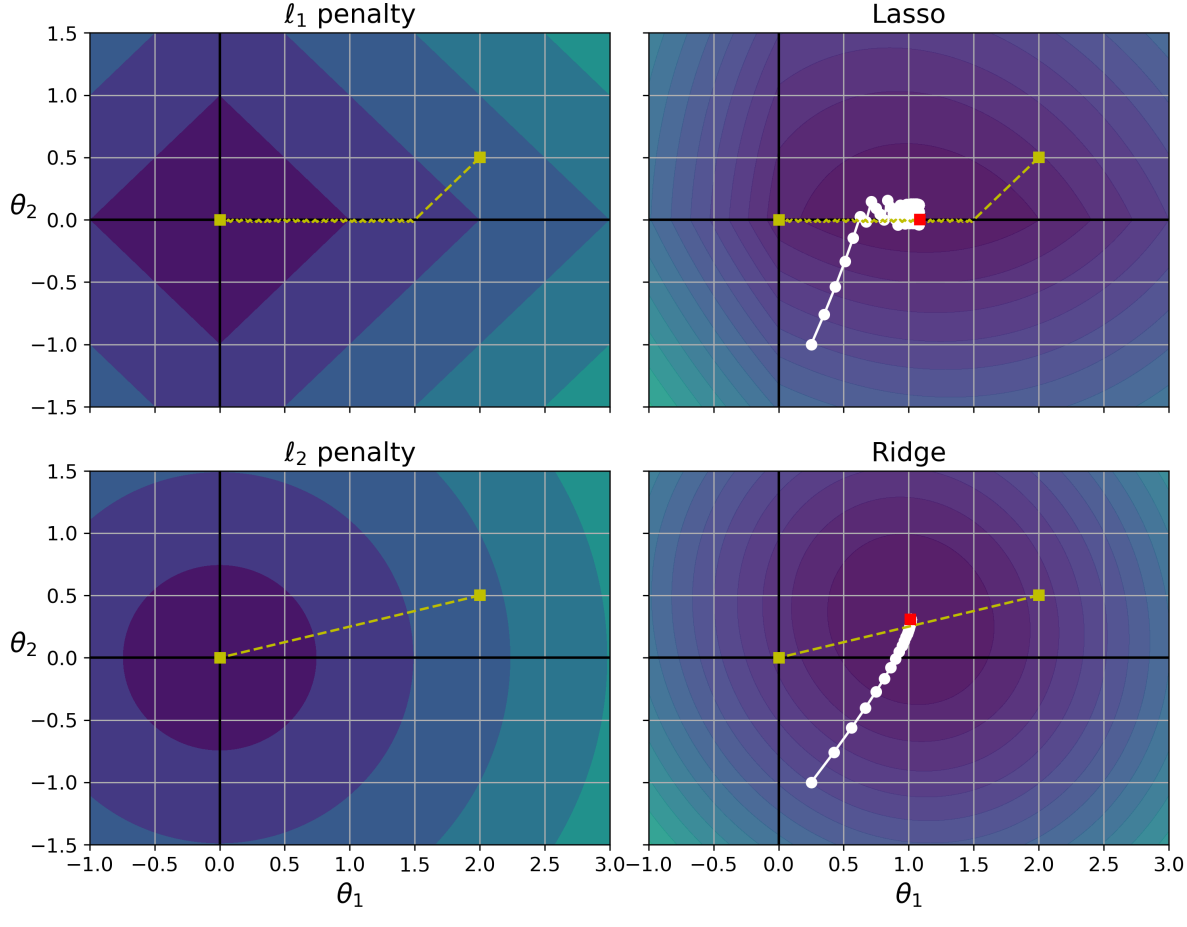
4.5.2 라쏘 회귀

- 비용함수

$$J(\theta) = \mathrm{MSE}(\theta) + \alpha \sum_{i=1}^{n} | \theta_i|$$

- α(알파): 규제 강도 지정. $\alpha = 0$이면 규제가 전혀 없는 기본 선형 회귀
- θ_i: 덜 중요한 특성을 무시하기 위해 $|\theta_i|$가 0에 수렴하도록 학습 유도.
- θ_0은 규제하지 않음

라쏘 회귀 대 릿지 회귀 비교



4.5.3 엘라스틱넷

- 비용함수

$$J(\theta) = \mathrm{MSE}(\theta) + r\,\alpha \sum_{i=1}^{n} \mid \theta_i \mid + \frac{1-r}{2}\,\alpha \sum_{i=1}^{n} \theta_i^2$$

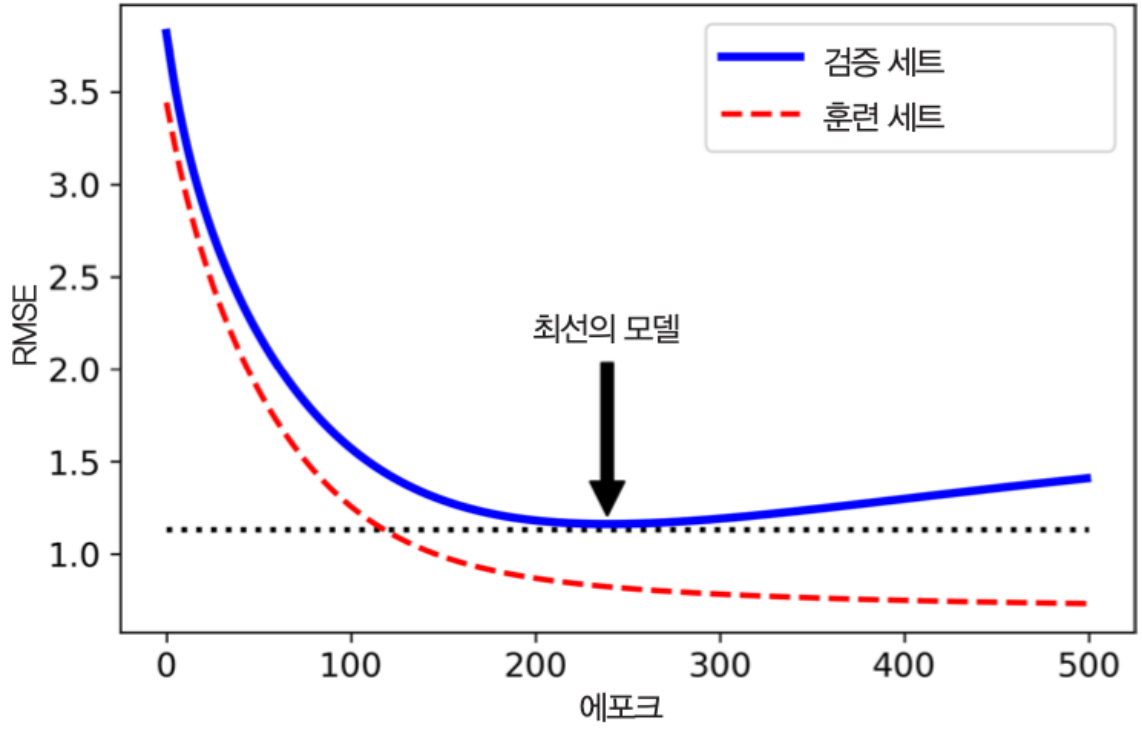
- 릿지 회귀와 라쏘 회귀를 절충한 모델
- 혼합 비율 r을 이용하여 릿지 규제와 라쏘 규제를 적절하게 조절

규제 사용 방법

- 대부분의 경우 약간이라도 규제 사용 추천
- 릿지 규제가 기본
- 유용한 속성이 많지 않다고 판단되는 경우
    - 라쏘 규제나 엘라스틱넷 활용 추천
    - 불필요한 속성의 가중치를 0으로 만들기 때문
- 특성 수가 훈련 샘플 수보다 크거나 특성 몇 개가 강하게 연관되어 있는 경우
    - 라쏘 규제는 적절치 않음.
    - 엘라스틱넷 추천

4.5.4 조기 종료

- 모델의 훈련 세트에 대한 과대 적합 방지를 위해 훈련을 적절한 시기에 중단시키기.
- 조기 종료: 검증 데이터에 대한 손실이 줄어 들다가 다시 커지는 순간 훈련 종료



- 확률적 경사 하강법 등의 경우 손실 곡선의 진동 발생. 검증 손실이 한동안 최솟값보다 높게 유지될 때 훈련 멈춤. 최소 검증 손실 모델 확인.

4.6 로지스틱 회귀

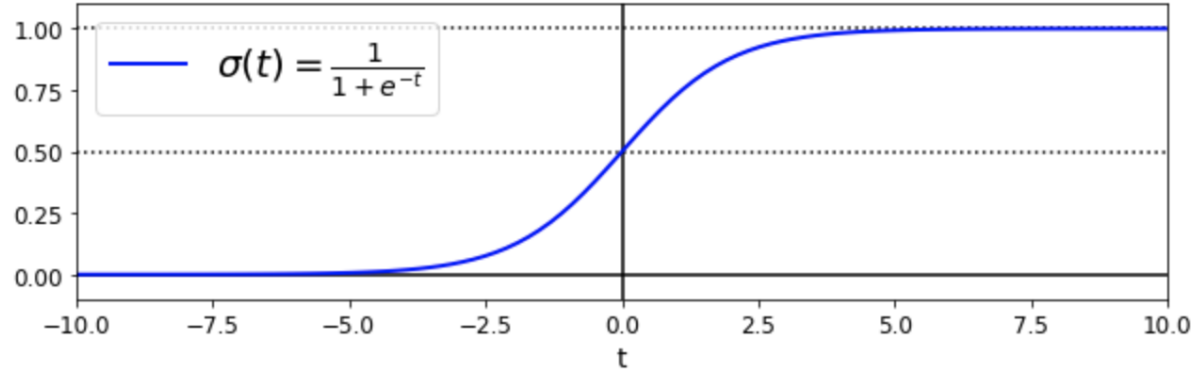
회귀 모델을 분류 모델로 활용할 수 있다.

- 이진 분류: 로지스틱 회귀
- 다중 클래스 분류: 소프트맥스 회귀

4.6.1 확률 추정

- 시그모이드 함수

$$\sigma(t) = \frac{1}{1 + e^{-t}}$$



- 로지스틱 회귀 모델에서 샘플 $\mathbf{x}$가 양성 클래스에 속할 확률

$$\hat{p} = h_\theta(\mathbf{x}) = \sigma(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_n x_n)$$

예측값

$$\hat{y} = \begin{cases} 0 & \text{if } \hat{p} < 0.5 \\ 1 & \text{if } \hat{p} \geq 0.5 \end{cases}$$

- 양성 클래스인 경우:

$$\theta_0 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_n x_n \geq 0$$

- 음성 클래스인 경우:

$$\theta_0 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_n x_n < 0$$

4.6.2 훈련과 비용함수

- 비용함수: 로그 손실(log loss) 함수 사용

$$J(\theta) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} [y^{(i)} \log(\hat{p}^{(i)}) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - \hat{p}^{(i)})]$$

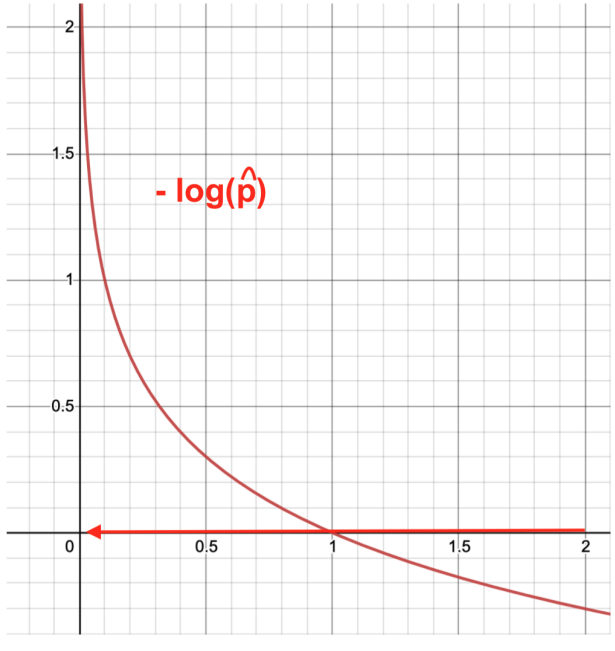
- 모델 훈련: 위 비용함수에 대해 경사 하강법 적용

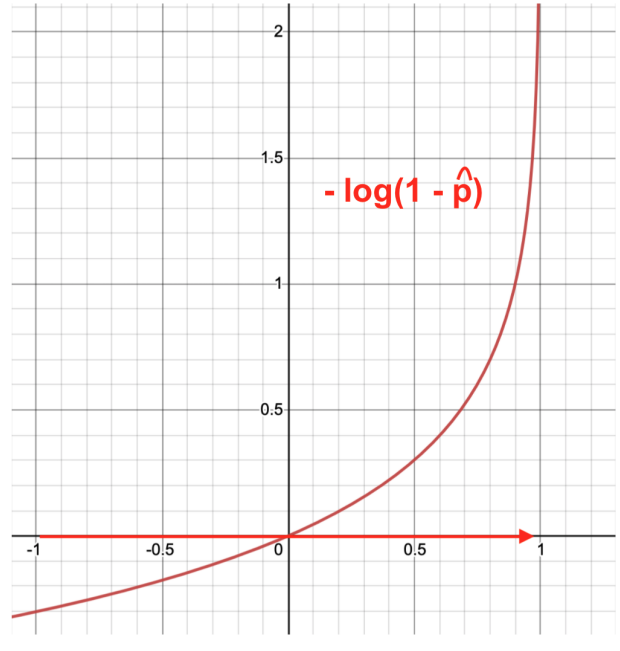
로그 손실 함수 이해

- 틀린 예측을 하면 손실값이 많이 커짐

$$-[y \log(\hat{p}) + (1-y) \log(1-\hat{p})]$$

y는 1인데 $\hat{p}$는 0에 가까워지는 경우	y는 0인데 $\hat{p}$는 1에 가까워지는 경우





로그 손실 함수의 편도 함수

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} \mathrm{J}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(\sigma(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)} \right) x_j^{(i)}$$

- 편도 함수가 선형 회귀의 경우와 매우 비슷한 것에 대한 확률론적 근거가 있음.
- **참고:** 앤드류 응(Andrew Ng) 교수의 Stanford CS229

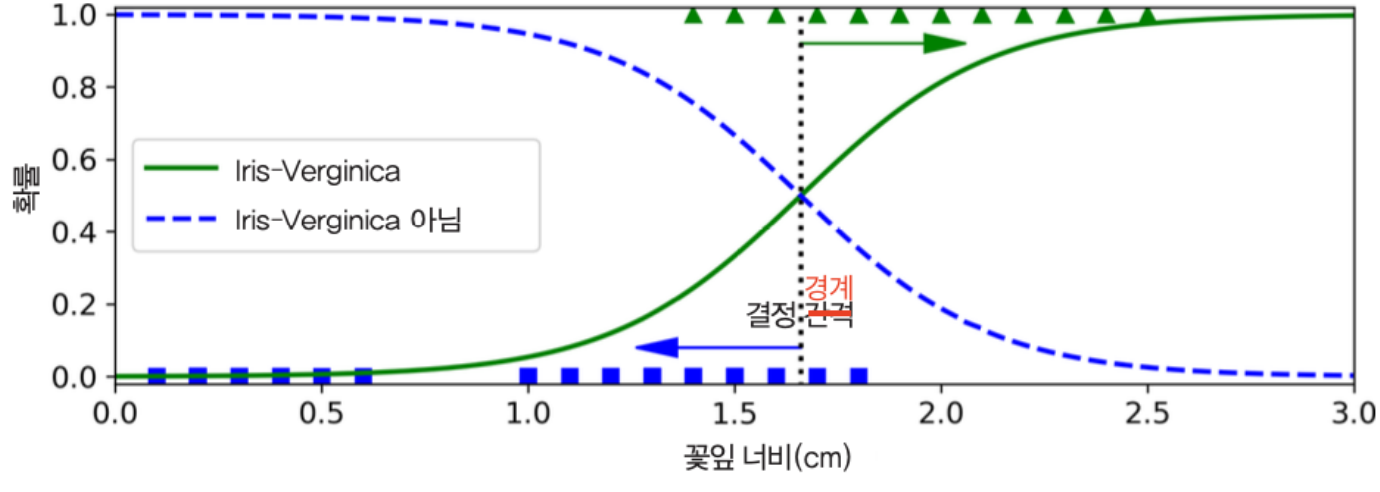
4.6.3 결정 경계

예제: 붓꽃 데이터셋

- 꽃받침(sepal)과 꽃입(petal)과 관련된 4개의 특성 사용
    - 꽃받침 길이
    - 꽃받침 너비
    - 꽃잎 길이
    - 꽃잎 너비
- 타깃: 세 개의 품종
    - 0: Iris-Setosa(세토사)
    - 1: Iris-Versicolor(버시컬러)
    - 2: Iris-Virginica(버지니카)

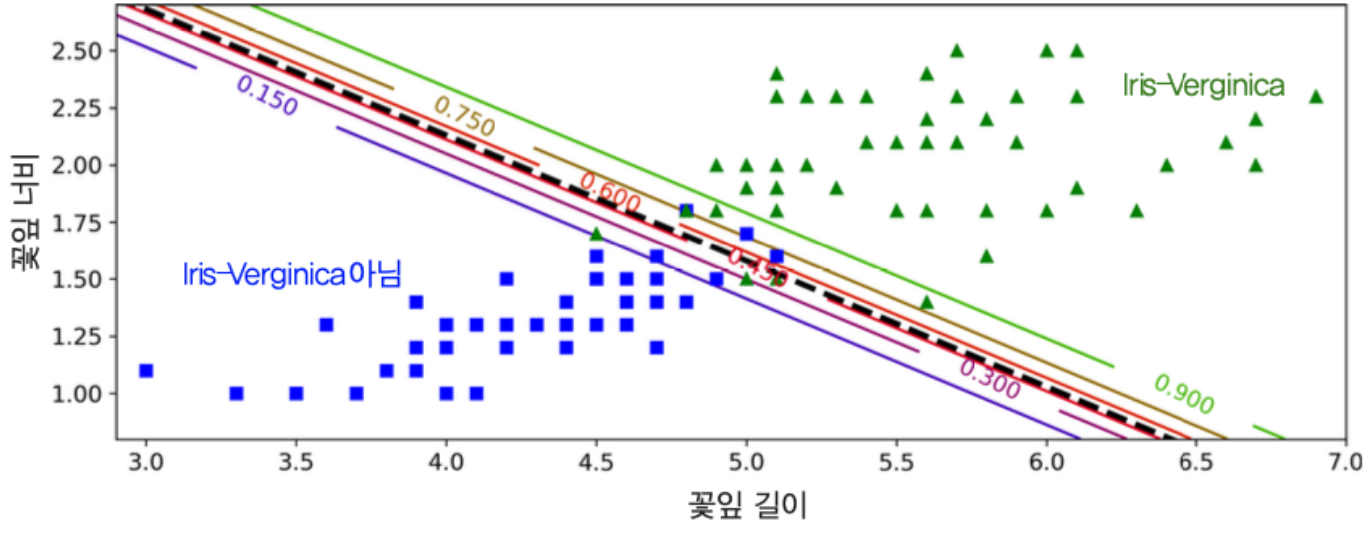
꽃잎의 너비를 기준으로 Iris-Virginica 여부 판정하기

- 결정경계: 약 1.6cm



꽃잎의 너비와 길이를 기준으로 Iris-Virginica 여부 판정하기

- 결정경계: 검정 점선



로지스틱 회귀 규제하기

- 하이퍼파라미터 `penalty`와 `C` 이용
- `penalty`
    - `l1`, `l2`, `elasticnet` 세 개중에 하나 사용.
    - 기본은 `l2`, 즉, ℓ_2 규제를 사용하는 릿지 규제.
    - `elasticnet`을 선택한 경우 `l1_ration` 옵션 값을 함께 지정.
- `C`
    - 릿지 또는 라쏘 규제 정도를 지정하는 α의 역수에 해당.
    - 따라서 0에 가까울 수록 강한 규제 의미.

4.6.4 소프트맥스(softmax) 회귀

- 로지스틱 회귀 모델을 일반화하여 다중 클래스 분류를 지원하도록 한 회귀 모델
- **다항 로지스틱 회귀** 라고도 불림
- 주의사항: 소프트맥스 회귀는 다중 출력 분류 지원 못함. 예를 들어, 하나의 사진에서 여러 사람의 얼굴 인식 불가능.

소프트맥스 회귀 학습 아이디어

- 샘플 $\mathbf{x}$가 주어졌을 때 각각의 분류 클래스 k 에 대한 점수 $s_k(\mathbf{x})$ 계산. 즉, `k*(n+1)` 개의 파라미터를 학습시켜야 함.

$$s_k(\mathbf{x}) = \theta_0^{(k)} + \theta_1^{(k)}\, x_1 + \cdots + \theta_n^{(k)}\, x_n$$

- **소프트맥스 함수**를 이용하여 각 클래스 k에 속할 확률 $\hat{p}_k$ 계산

$$\hat{p}_k = \frac{\exp(s_k(\mathbf{x}))}{\sum_{j=1}^{K} \exp(s_j(\mathbf{x}))}$$

- 추정 확률이 가장 높은 클래스 선택

$$\hat{y} = \mathrm{argmax}_k s_k(\mathbf{x})$$

소프트맥스 회귀 비용함수

- 각 분류 클래스 k에 대한 적절한 가중치 벡터 θ_k를 학습해 나가야 함.
- 비용함수: 크로스 엔트로피 비용 함수 사용

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{K} y_k^{(i)}\ \log(\hat{p}_k^{(i)})$$

- 위 비용함수에 대해 경사 하강법 적용

- $K = 2$이면 로지스틱 회귀의 로그 손실 함수와 정확하게 일치.
- 주어진 샘플의 타깃 클래스를 제대로 예측할 경우 높은 확률값 계산
- 크로스 엔트로피 개념은 정보 이론에서 유래함. 자세한 설명은 생략.

다중 클래스 분류 예제

- 사이킷런의 `LogisticRegression` 예측기 활용
  - `multi_class=multinomial`로 지정
  - `solver=lbfgs` : 다중 클래스 분류 사용할 때 반드시 지정
- 붓꽃 꽃잎의 너비와 길이를 기준으로 품종 분류
  - 결정경계: 배경색으로 구분
  - 곡선: Iris-Versicolor 클래스에 속할 확률