5장 서포트 벡터 머신 1부

감사의 글

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

주요 내용

1부

- 선형 SVM 분류
- 비선형 SVM 분류

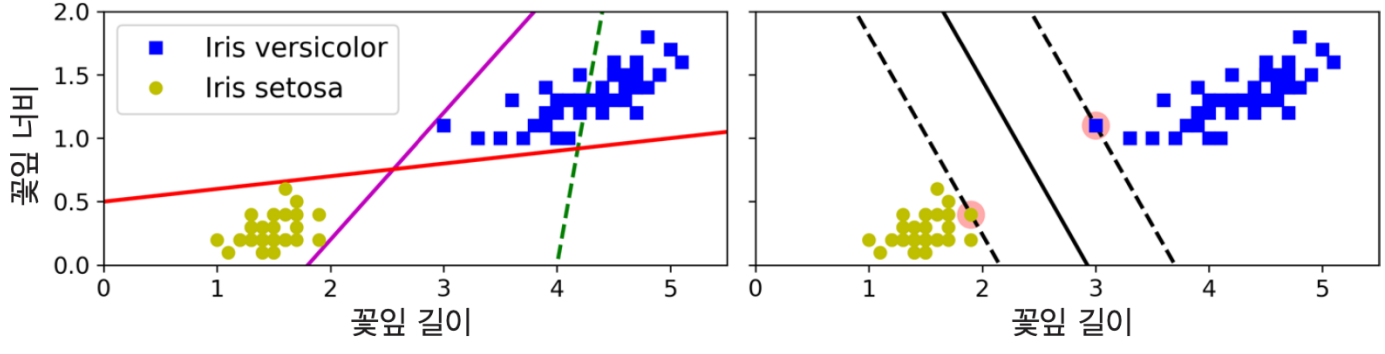
2부

- SVM 회귀
- SVM 이론

5.1 선형 SVM 분류

기본 아이디어

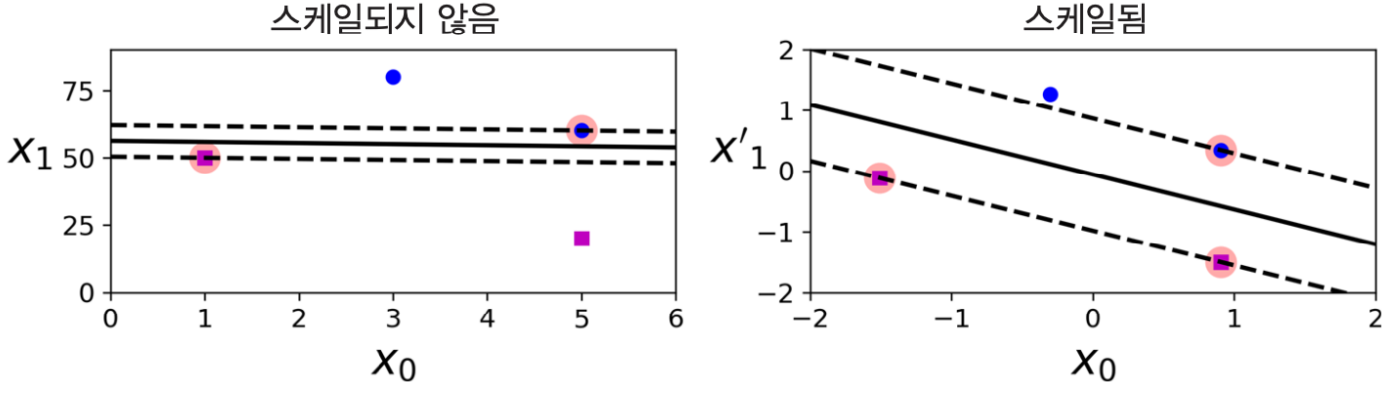
- 마진(margin): 클래스를 구분하는 도로의 경계
- 라지 마진 분류: 마진 폭을 최대로 하는 클래스 분류



	왼편 그래프	오른편 그래프
분류기:	선형 분류	라지 마진 분류
실선:	결정 경계	결정 경계
일반화:	일반화 어려움	일반화 쉬움

서포트 벡터

- 도로의 양쪽 경계에 위치하는 샘플 (아래 그림에서 동그라미 표시됨)
- 서포트 벡터 사이의 간격, 즉 도로의 폭이 최대가 되도록 학습
- 특성 스케일을 조정하면 결정경계가 훨씬 좋아짐.

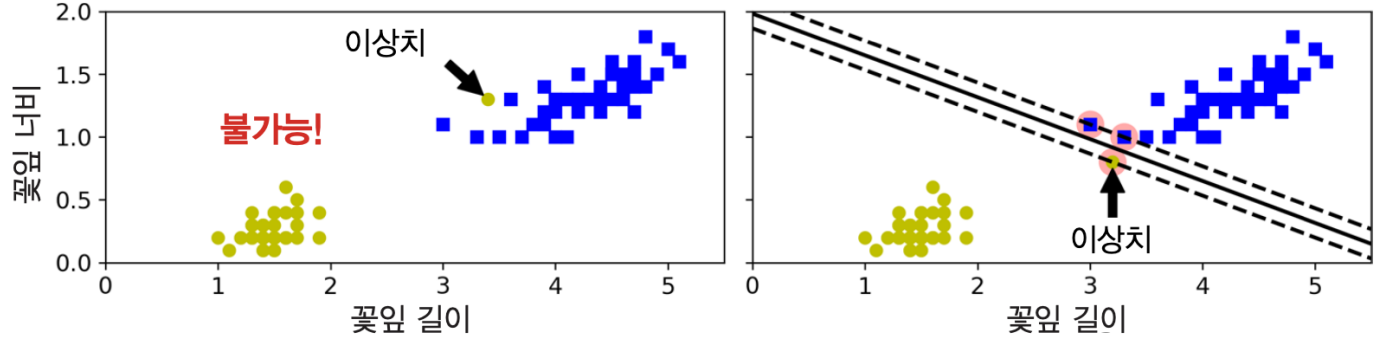


서포트 벡터 머신(SVM) 모델

- 두 클래스로부터 최대한 멀리 떨어져 있는 결정 경계를 찾는 분류기
- 목표: 특정 조건을 만족하면서 동시에 클래스를 분류하는 가능한 넓은 도로의 결정 경계 찾기

하드 마진 분류

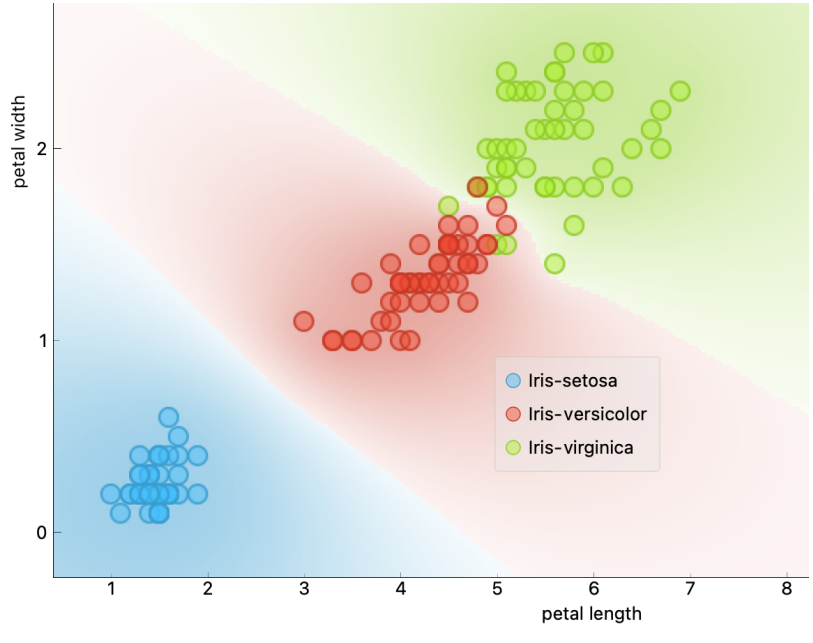
- 모든 훈련 샘플이 도로 바깥쪽에 올바르게 분류되도록 하는 마진 분류
- 훈련 세트가 선형적으로 구분되는 경우에만 가능
- 이상치에 민감함



	왼편 그래프	오른편 그래프
이상치:	타 클래스에 섞임	타 클래스에 매우 가까움
하드 마진 분류:	불가능	가능하지만 일반화 어려움

소프트 마진 분류

- 마진 오류(margin violation) 사례의 발생 정도를 조절하면서 도로의 폭을 최대로 넓게 유지하는 마진 분류
- **마진 오류:** 훈련 샘플이 도로 상에 위치하거나 결정 경계를 넘어 해당 클래스 반대편에 위치하는 샘플
- 하드 마진 분류 불가능 예제: 꽃잎 길이와 너비 기준의 버지니카와 버시컬러 품종

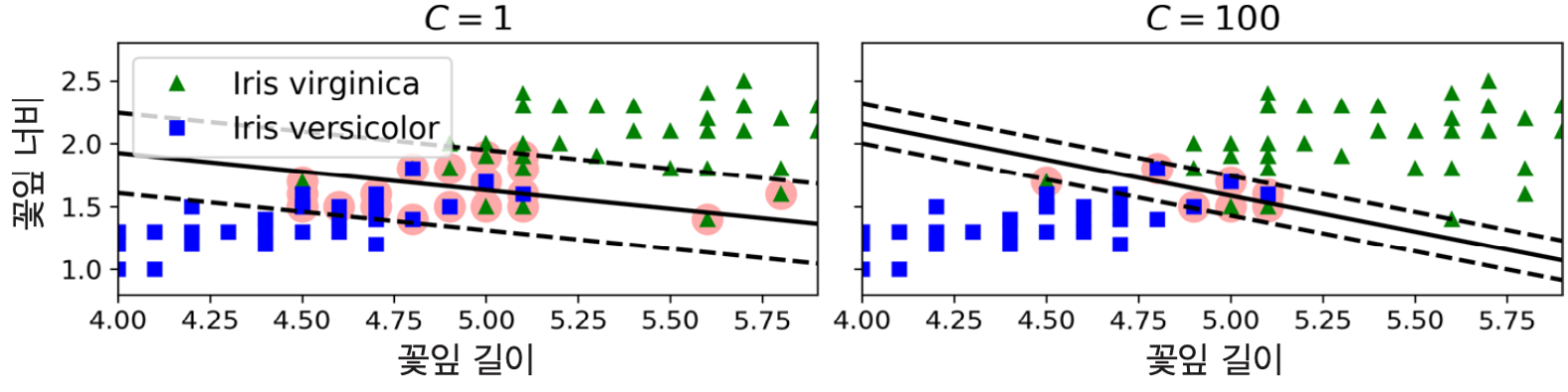


예제: 버지니까 품종 여부 판단

- 사이킷런의 선형 SVM 분류기 `LinearSVC` 활용

```
svm_clf1 = LinearSVC(C=1, loss="hinge", random_state=42)
```

- `C`: 무조건 양수이어야 하며 클 수록 마진 오류를 적게, 즉 도로폭을 작게 만듦. 결국 C가 클 수록 규제를 덜 가하게 되어 모델의 자유도를 올려 과대적합 가능성을 키움. 또한 `C=float("inf")`로 지정하면 하드 마진 분류 모델이 됨.
- `hinge`: 힌지 손실. 예측값과 실제 라벨 사이의 차이가 클 수록 큰 손실이 가해짐.
- `dual=True`: 쌍대성(duality) 이용 여부. True가 기본. 하지만 특성 수가 샘플 수보다 작을 때는 False 권장.



	왼편 그래프	오른편 그래프
C	작게	크게
도로폭(마진 오류 수)	크게	작게
분류	덜 정교하게	보다 정교하게

스케일 조정의 중요성

- `LinearSVC` 모델의 경우 편향도 규제 대상임. 따라서 평균을 빼서 0으로 편향을 없애는 것이 중요. 하지만 표준화 스케일링을 하면 자연스럽게 해결됨.
- 반면에 `SVC` 모델은 편향을 규제하지는 않음. 그럼에도 불구하고 기본적으로 표준화 스케일링을 진행하는 것이 보다 좋은 성능의 모델을 훈련시킴.
- 이전의 두 그림 모두 표준화 스케일링 전처리를 한 후에 학습을 시킨 모델임.

기타 선형 SVM 지원 모델 예제 (주피터 노트북 부록 B 참조)

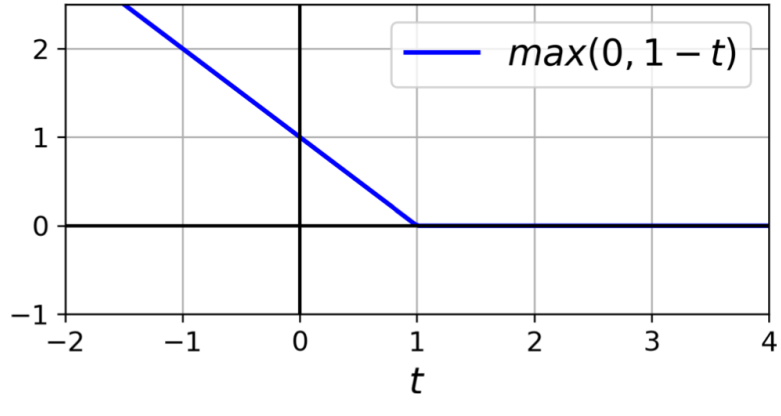
- 선형 분류는 `LinearSVC` 모델이 제일 빠름. 하지만 'SVC + 선형 커널' 조합도 사용 가능.

```
SVC(kernel="linear", C=1)
```

- SGDClassifier + hinge 손실함수 활용 + 규제: 규제 강도가 훈련 샘플 수(`m`)에 반비례.

```
SGDClassifier(loss="hinge", alpha=1/(m*C))
```

- hinge 손실 함수: 어긋난 예측 정도에 비례하여 손실값이 선형적으로 커짐.



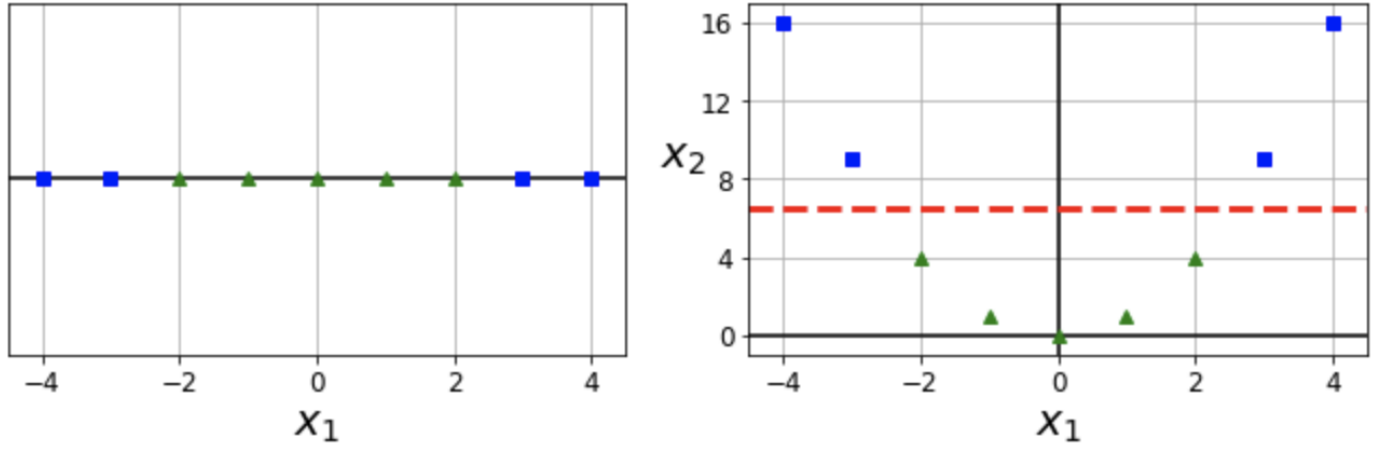
5.2 비선형 분류

- 방식 1: 특성 추가 + 선형 SVC
    - 다항 특성 활용: 다항 특성을 추가한 후 선형 SVC 적용
    - 유사도 특성 활용: 유사도 특성을 추가한 후 선형 SVC 적용
- 방식 2: `SVC` + 커널 트릭
    - 커널 트릭: 새로운 특성을 실제로 추가하지 않으면서 동일한 결과를 유도하는 방식
    - 예제 1: 다항 커널 (**주의**: 책에서는 다항식 커널로 불림)
    - 예제 2: 가우시안 RBF(방사 기저 함수) 커널

5.2.1 다항 커널

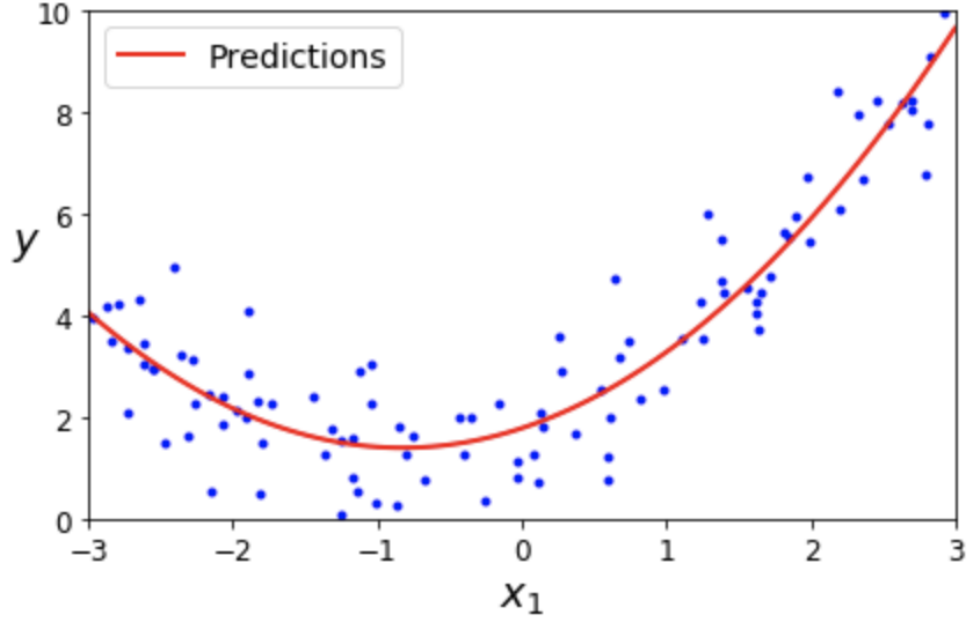
다항 특성 추가 + 선형 SVM

- 예제 1: 특성 x_1 하나만 갖는 모델에 새로운 특성 x_1^2을 추가한 후 선형 SVM 분류 적용

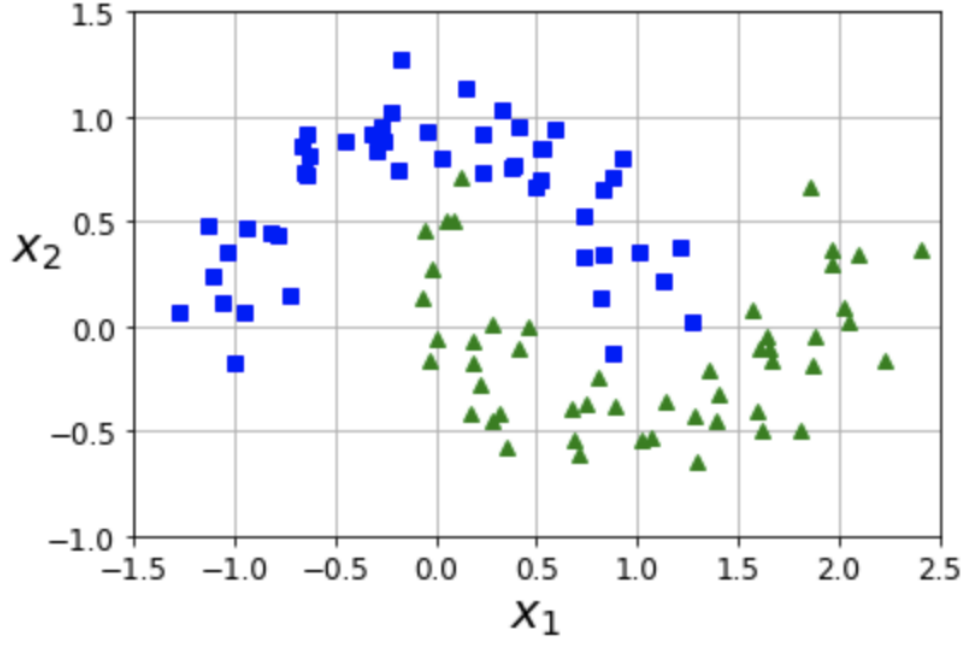


- 다항 특성 + 선형 회귀(4장): 특성 x_1 하나만 갖는 모델에 새로운 특성 x_1^2을 추가한 후 선형회귀 적용

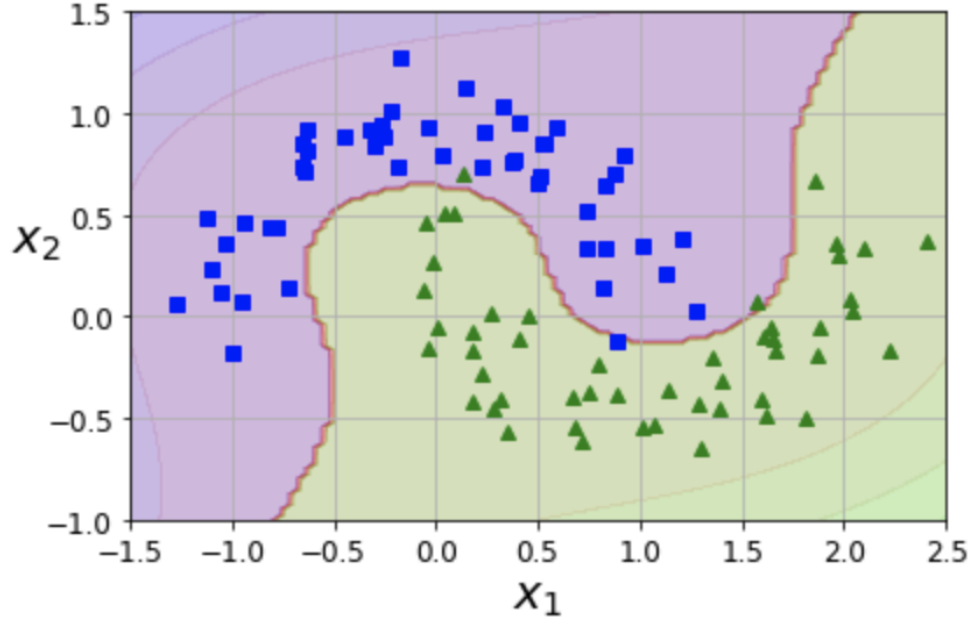
$$\hat{y} = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_1^2$$



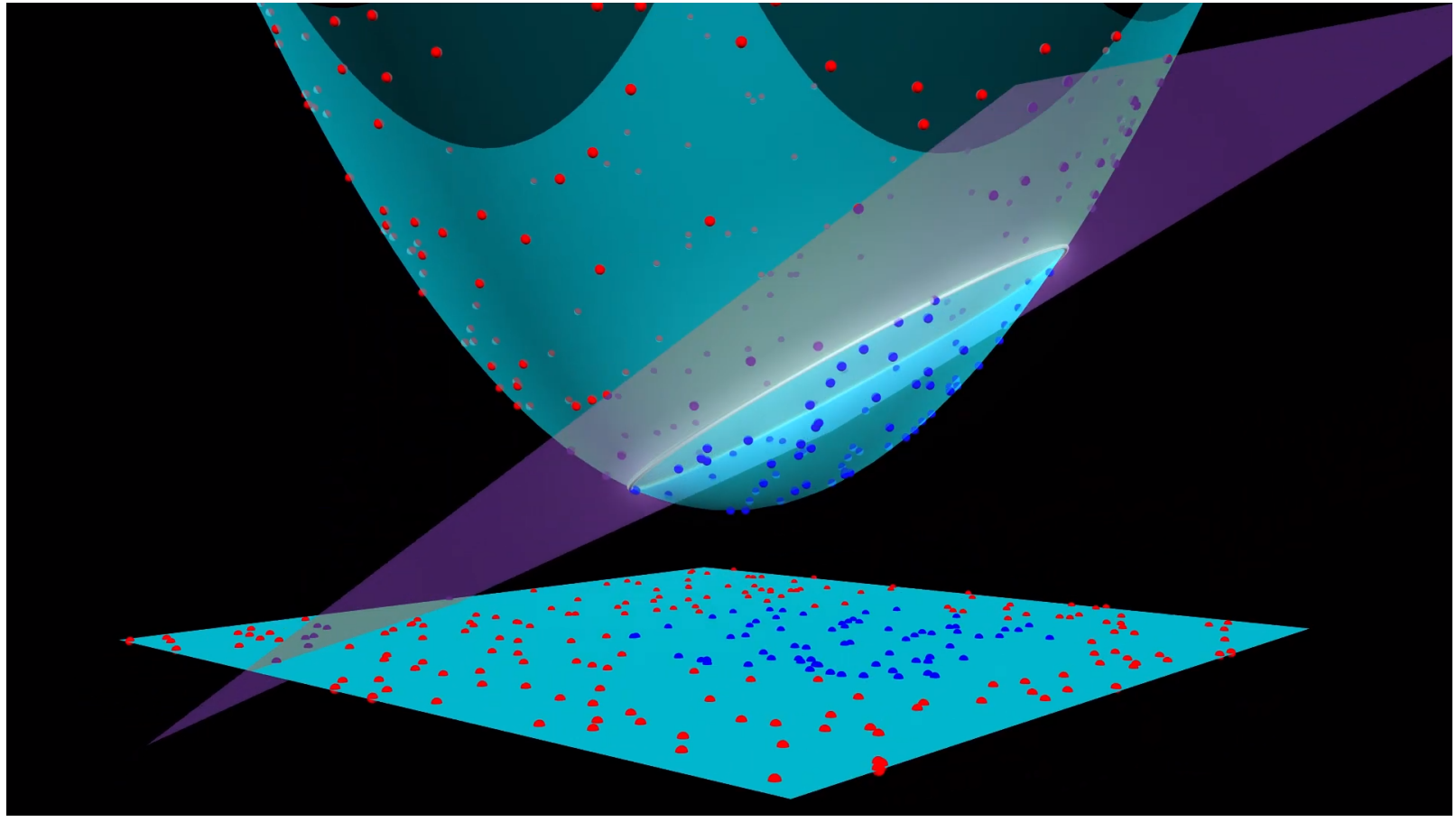
- 예제 2: moons 데이터셋. 마주보는 두 개의 반원 모양으로 두 개의 클래스로 구분되는 데이터



```
# 3차 항까지 추가
polynomial_svm_clf = Pipeline([
        ("poly_features", PolynomialFeatures(degree=3)),
        ("scaler", StandardScaler()),
        ("svm_clf", LinearSVC(C=10, loss="hinge", random_state=42))
    ])
```

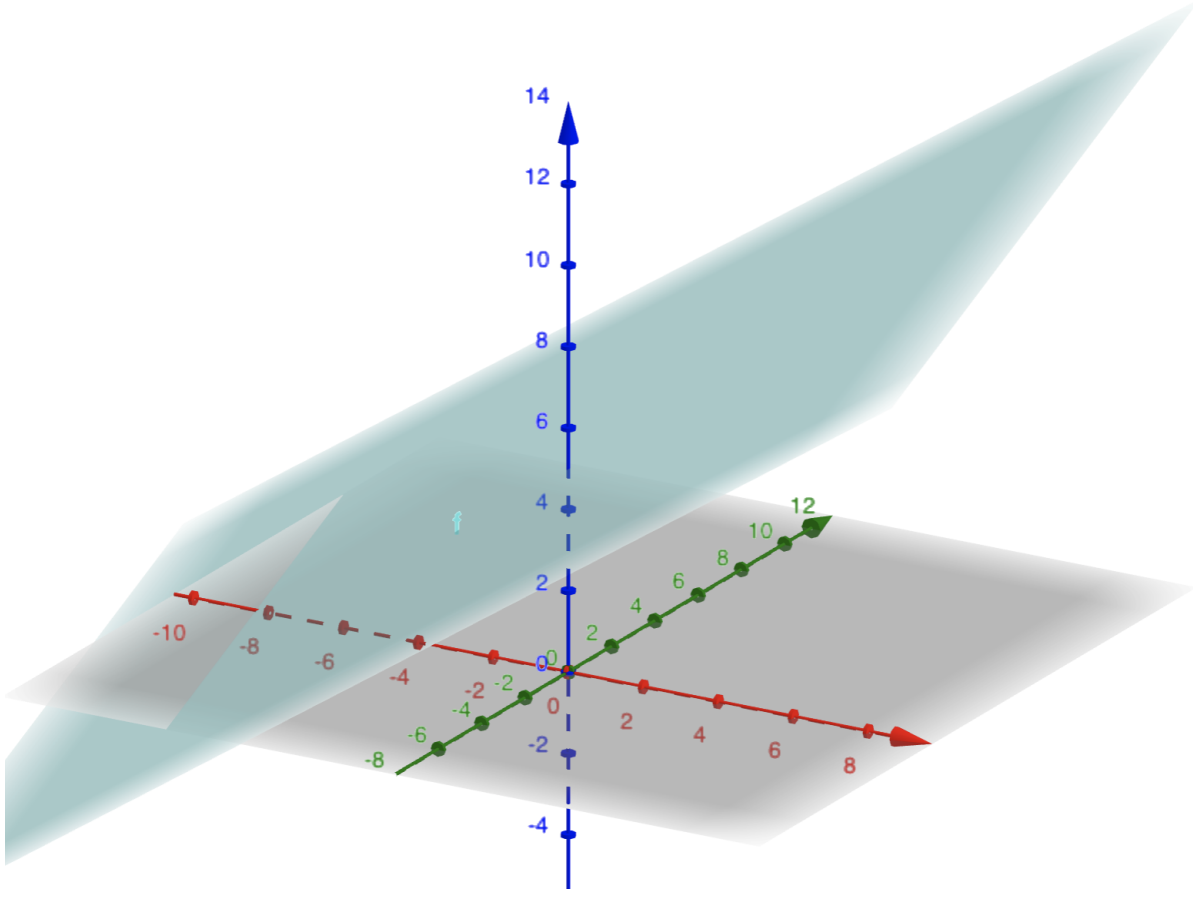


참고 영상: SVM + 다항 커널



- 3차원의 선형 방정식 그래프 예제:

$$z = \frac{3}{5}x + \frac{1}{5}y + 5 \quad \Longleftrightarrow \quad 3x + y - 5z + 25 = 0$$

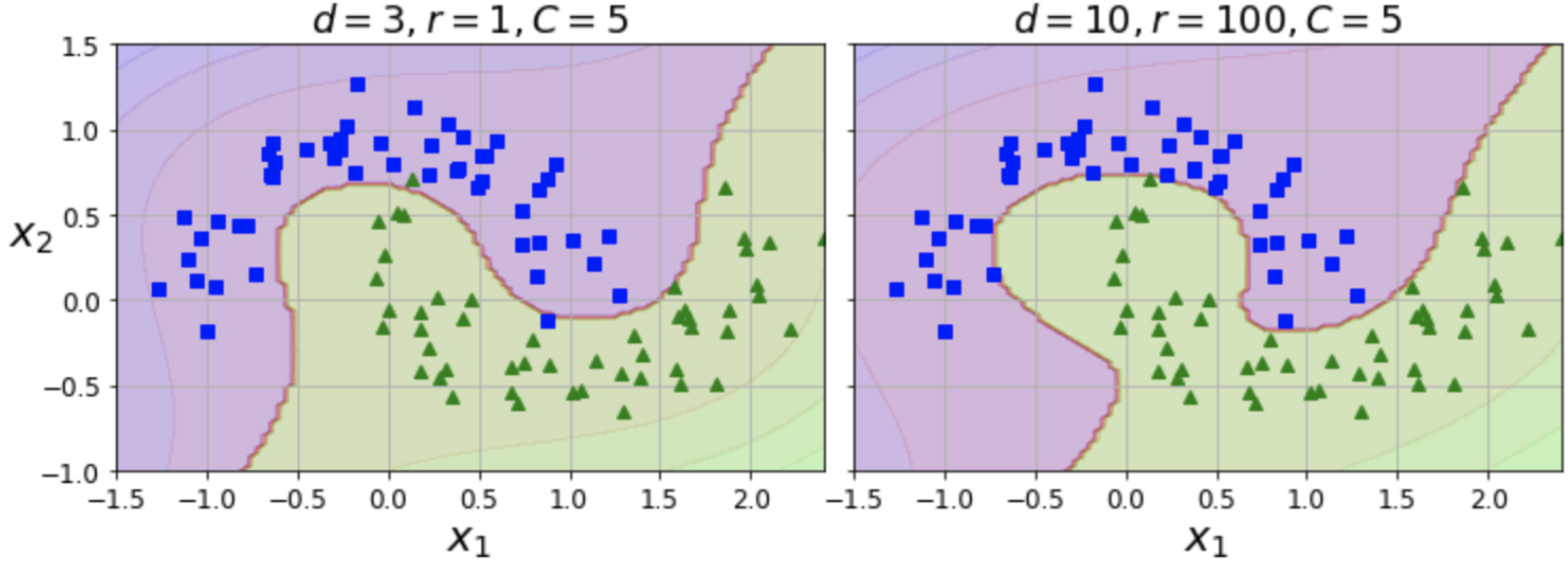


<그림 출처: 지오지브라(GeoGebra)>

SVC + 다항 커널

- SVM 모델을 훈련시킬 때 다항 특성을 실제로는 추가 하지 않으면서 수학적으로는 추가한 효과를 내는 성질 이용
- 예제: moons 데이터셋

```
poly_kernel_svm_clf = Pipeline([
          ("scaler", StandardScaler()),
          ("svm_clf", SVC(kernel="poly", degree=3, coef0=1, C=5)) ])
```



	왼편 그래프	오른편 그래프
degree	3차 다항 커널	10차 다항 커널
coef0(r)	높은 차수 강조 조금	높은 차수 강조 많이

적절한 하이퍼파라미터 선택

- 모델이 과대적합이면 차수를 줄여야 함
- 적절한 하이퍼파라미터는 그리드 탐색 등을 이용하여 찾음
- 처음에는 그리드의 폭을 크게, 그 다음에는 좀 더 세밀하게 검색
- 하이퍼파라미터의 역할을 잘 알고 있어야 함

5.2.2 유사도 특성

유사도 함수

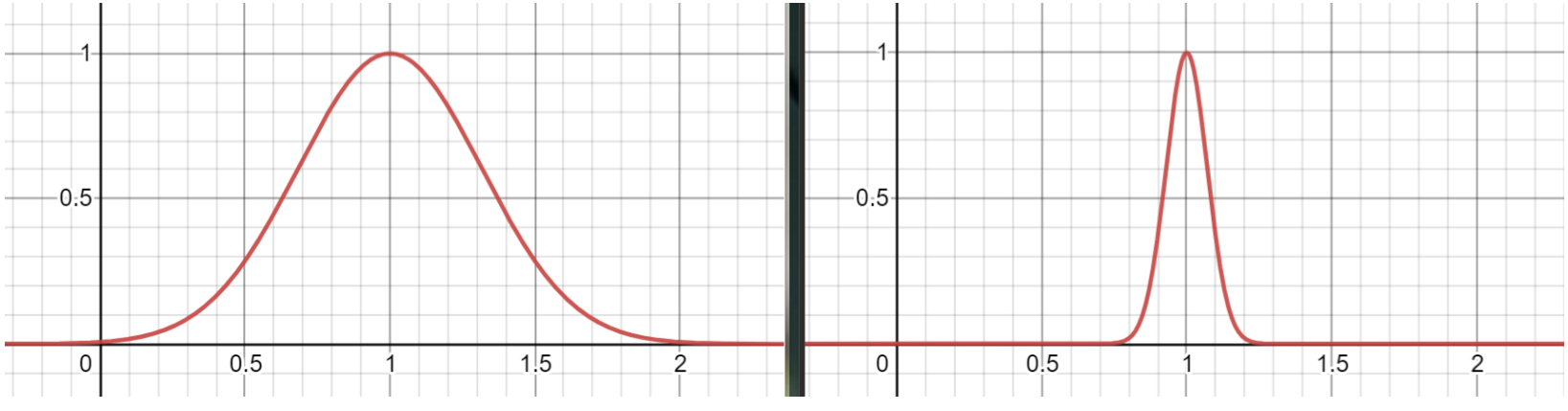
- 유사도 함수: **랜드마크**(landmark)라는 특정 샘플과 각 샘플 사이의 유사도(similarity)를 측정하는 함수
- 유사도 함수 예제: **가우시안 방사 기저 함수**(RBF, radial basis function)

$$\phi(\mathbf{x}, \ell) = \exp\left(-\gamma \left\|\mathbf{x} - \ell\right\|^2\right)$$

  - ℓ: 랜드마크
  - γ: 랜드마크에서 멀어질 수록 0에 수렴하는 속도를 조절함
  - γ 값이 클수록 가까운 샘플 선호, 즉 샘플들 사이의 영향을 보다 적게 고려하여 모델의 자유도를 높이게 되어 과대적합 위험 커짐.

- 예제

$\exp(-5\,\|\mathbf{x}-1\|^2)$ $\exp(-100\,\|\mathbf{x}-1\|^2)$

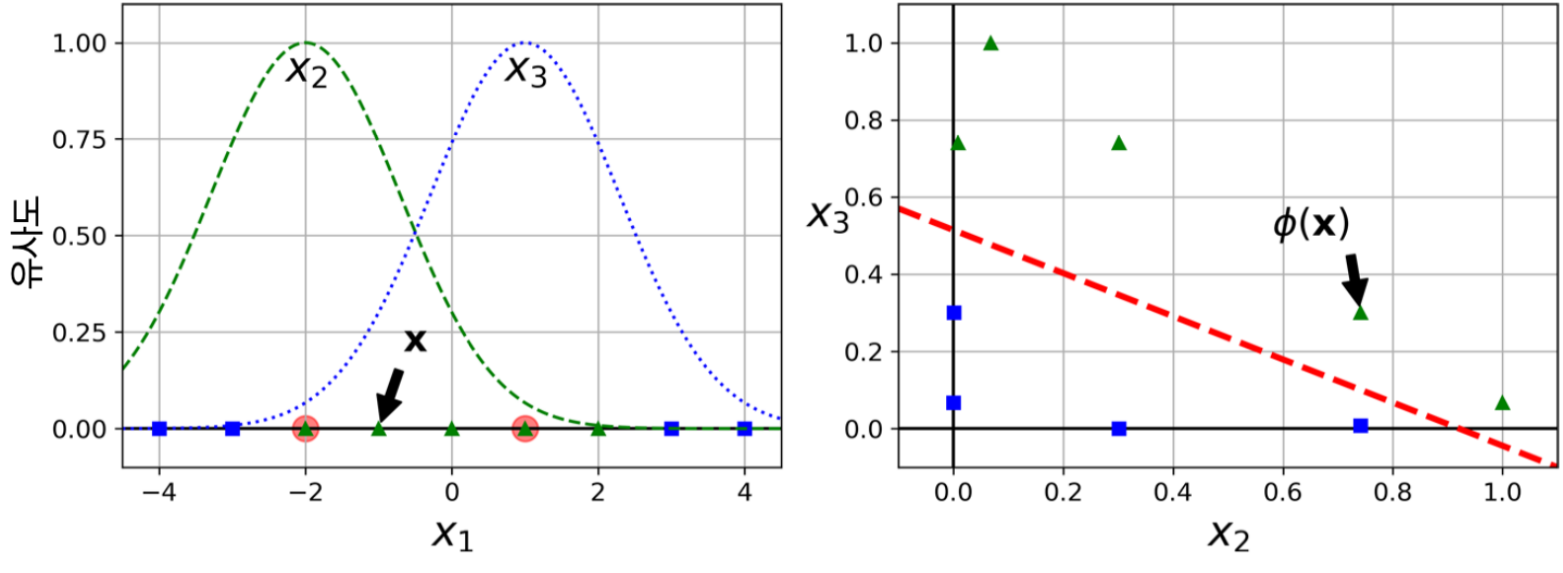


<그림 출처: 데스모스(desmos)>

유사도 특성 추가 + 선형 SVC

- 모든 샘플을 랜드마크로 지정 후 각 랜드마크에 대한 유사도를 새로운 특성으로 추가하는 방식이 가장 간단함.
- (n 개의 특성을 가진 m 개의 샘플) $\Rightarrow$ ($n+m$ 개의 특성을 가진 m 개의 샘플)
- 장점: 차원이 커지면서 선형적으로 구분될 가능성이 높아짐.
- 단점: 훈련 세트가 매우 클 경우 동일한 크기의 아주 많은 특성이 생성됨.

- 예제
  - 랜드마크: -2와 1
  - x_2와 x_3: 각각 -2와 1에 대한 가우시안 RBF 함수로 계산한 유사도 특성
  - 화살표가 가리키는 점: $\mathbf{x} = -1$

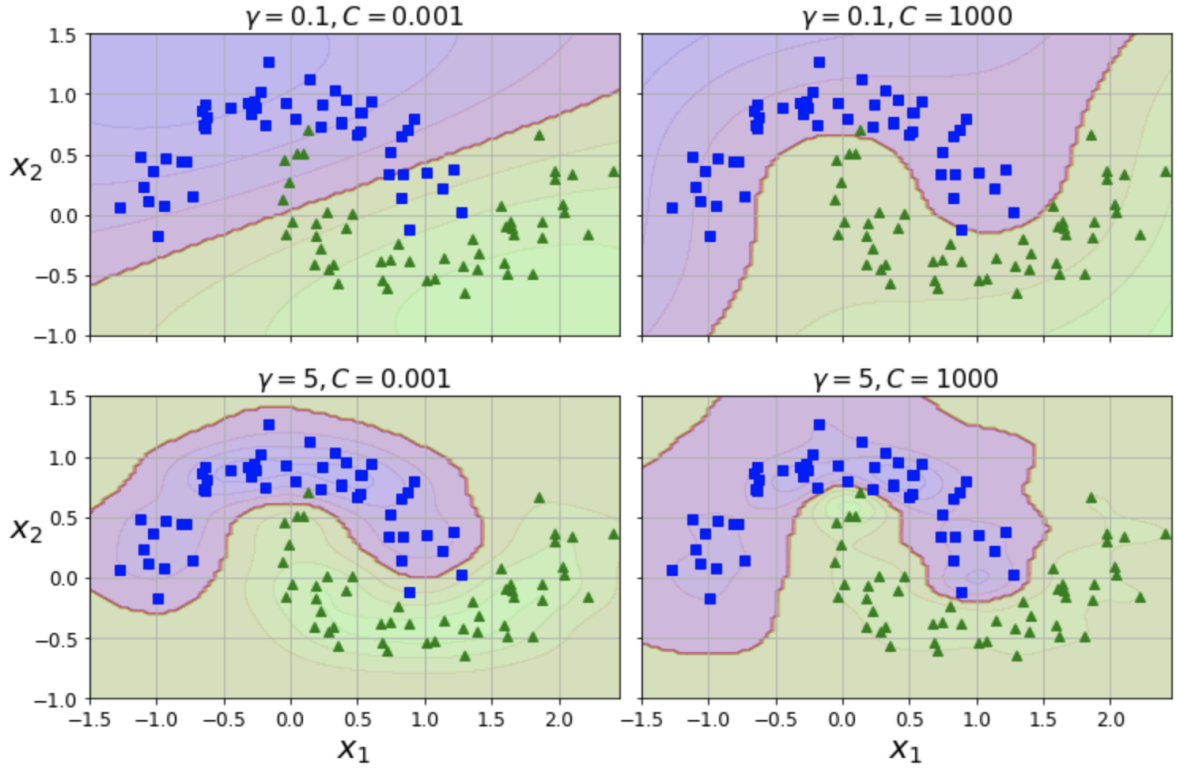


5.2.3 가우시안 RBF 커널

- SVM 모델을 훈련시킬 때 유사도 특성을 실제로는 추가 하지 않으면서 수학적으로는 추가한 효과를 내는 성질 이용

```
rbf_kernel_svm_clf = Pipeline([
        ("scaler", StandardScaler()),
        ("svm_clf", SVC(kernel="rbf", gamma=0.1, C=0.001)) ])
```

SVC + RBF 커널 예제: moons 데이터셋



	상단 그래프	하단 그래프
gamma	랜드마크에 조금 집중	랜드마크에 많이 집중

	왼편 그래프	오른편 그래프
C	규제 많이	규제 적게

추천 커널

- `SVC`의 `kernel` 기본값은 `"rbf"` => 대부분의 경우 이 커널이 잘 맞음
- 선형 모델이 예상되는 경우 `SVC`의 `"linear"` 커널을 사용할 수 있음 하지만 훈련 세트가 크거나 특성이 아주 많을 경우 `LinearSVC`가 빠름
- 시간과 컴퓨팅 성능이 허락한다면 교차 검증, 그리드 탐색을 이용하여 적절한 커널을 찾아볼 수 있음
- 훈련 세트에 특화된 커널이 알려져 있다면 해당 커널을 사용

5.2.4 계산 복잡도

분류기	시간 복잡도(m 샘플 수, n 특성 수)	외부 메모리 학습	스케일 조정	커널 트릭	다중 클래스 분류
LinearSVC	$O(m \times n)$	미지원	필요	미지원	OvR 기본
SGDClassifier	$O(m \times n)$	지원	필요	미지원	지원
SVC	$O(m^2 \times n) \sim O(m^3 \times n)$	미지원	필요	지원	OvR 기본