4장 모델 훈련 1부

감사의 글

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

1부 주요 내용

- 수학적으로 선형 회귀 모델 구하기
- 경사하강법으로 선형 회귀 모델 구하기
- 경사하강법 종류
    - 배치 경사하강법
    - 미니배치 경사하강법
    - 확률적 경사하강법(SGD)
- 다항 회귀: 비선형 모델 훈련법
- 학습 곡선: 과소, 과대 적합 감지

2부 주요 내용

- 규제 선형 모델
    - 과대적합 위험 감소시키기
- 로지스틱 회귀와 소프트맥스 회귀
    - 회귀 모델을 분류기로 활용하기

4.1 선형 회귀

선형 회귀 모델 함수

- 한 개의 특성 x_1을 사용하는 i 번째 훈련 샘플에 대한 예측값

$$\hat{y}^{(i)} = \theta_0 + \theta_1 \, x_1^{(i)}$$

- $n \geq 1$ 개의 특성을 사용하는 i번째 훈련 샘플에 대한 예측값
    - 예제: 캘리포니아 주택 가격 예측 모델

$$\hat{y}^{(i)} = \theta_0 + \theta_1 \, x_1^{(i)} + \cdots + \theta_{16} \, x_{16}^{(i)}$$

    - $\hat{y}^{(i)}$: i 번째 훈련 샘플에 대한 예측값
    - $x_k^{(i)}$: i 번째 훈련 샘플의 k 번째 특성값
    - θ_k: 편향(θ_0) 및 k 번째 특성에 대한 가중치 파라미터

예측 함수

$$\begin{aligned}\hat{y}^{(i)} &= \theta_0 + \theta_1\, x_1^{(i)} + \cdots + \theta_n\, x_n^{(i)} \\ &= \theta^T\, \mathbf{x}^{(i)} \\ &= h_\theta(\mathbf{x}^{(i)})\end{aligned}$$

- $\mathbf{x}^{(i)} = [1, x_1^{(i)}, \ldots, x_n^{(i)}]^T$.
  - n은 특성 개수
  - 1이 추가됨에 주의할 것.
- $\theta = [\theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_n]^T$
- $h_\theta(\cdot)$: 예측 함수, 즉 모델의 `predict()` 메서드를 가리킴.

선형 회귀 모델의 행렬 연산 표기법

- $\mathbf{X}$: 전체 훈련 세트, 즉 모든 훈련 샘플을 모아놓은 행렬.
    - m은 훈련 세트의 크기.
    - $\mathbf{X}$는 $(m, n+1)$ 모양의 행렬

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} (\mathbf{x}^{(1)})^T \\ \vdots \\ (x_n^{(m)})^T \end{bmatrix}$$

- 넘파이 2차원 어레이 표현

데이터	어레이 기호	어레이 모양(shape)
레이블, 예측값	$\mathbf{y}$, $\hat{\mathbf{y}}$	$(m, 1)$
가중치	θ	$(n+1, 1)$
훈련 세트	$\mathbf{X}$	$(m, n+1)$

비용함수: 평균 제곱 오차(MSE)

- MSE를 활용한 선형 회귀 모델 성능 평가

$$\mathrm{MSE}(\theta) := \mathrm{MSE}(\mathbf{X}, h_\theta) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(\theta^T \, \mathbf{x^{(i)}} - y^{(i)} \right)^2$$

- 목표: $\mathrm{MSE}(\theta)$가 최소가 되도록 하는 θ 찾기
- **참고:** $m, \mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)}$은 모두 주어졌음.

- 방식 1: 정규방정식 또는 특이값 분해(SVD) 활용
    - 드물지만 수학적으로 비용함수를 최소화하는 θ 값을 직접 계산할 수 있는 경우 활용
    - 계산복잡도가 $O(n^2)$ 이상인 행렬 연산을 수행해야 함.
    - 따라서 특성 수(n)이 큰 경우 메모리 관리 및 시간복잡도 문제때문에 비효율적임.
- 방식 2: 경사하강법
    - 특성 수가 매우 크거나 훈련 샘플이 너무 많아 메모리에 한꺼번에 담을 수 없을 때 적합
    - 일반적으로 선형 회귀 모델 훈련에 적용되는 기법

4.1.1 정규 방정식

정규 방정식을 이용하여 비용함수를 최소화 하는 θ를 아래와 같이 구할 수 있음:

$$\hat{\theta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

SVD(특잇값 분해) 활용

- 행렬 연산과 역행렬 계산은 계산 복잡도가 $O(n^{2.4})$ 이상이고 항상 역행렬 계산이 가능한 것도 아님.
- 반면에, 특잇값 분해를 활용하여 얻어지는 무어-펜로즈(Moore-Penrose) 유사 역행렬 $\mathbf{X}^+$ 계산이 보다 효율적임. 계산 복잡도는 $O(n^2)$.

$$\hat{\theta} = \mathbf{X}^+ \mathbf{y}$$

4.2 경사 하강법

기본 아이디어

- 훈련 세트를 이용한 훈련 과정 중에 가중치 등과 같은 **파라미터를 조금씩 반복적으로 조정하기**
- 조정 기준: 비용 함수의 크기 줄이기

경사 하강법 관련 주요 개념

최적 학습 모델

- 비용함수를 최소화하는 또는 효용함수를 최대화하는 파라미터를 사용하는 모델

파라미터

- 예측값을 생성하는 함수로 구현되는 학습 모델에 사용되는 파라미터
- 예제: 선형 회귀 모델에 사용되는 편향과 가중치 파라미터

$$\theta = \theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_n$$

비용함수

- 모델이 얼마나 나쁜지를 계산해주는 함수
- 예제: 선형 회귀 모델의 평균 제곱 오차(MSE)

$$\mathrm{MSE}(\theta) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(\theta^T \, \mathbf{x^{(i)}} - y^{(i)} \right)^2$$

전역 최솟값

- 비용함수가 가질 수 있는 최솟값
- 예제: 선형 회귀 모델의 평균 제곱 오차(MSE) 함수가 갖는 최솟값

그레이디언트 벡터

- 다변수 함수의 미분값.
- (그레이디언트) 벡터는 방향과 크기에 대한 정보 제공
- 그레이디언트가 가리키는 방향의 **반대 방향**으로 움직여야 가장 빠르게 전역 최솟값에 접근
- 예제: 선형 회귀 MSE의 그레이디언트 벡터 $\nabla_\theta \mathrm{MSE}(\theta)$

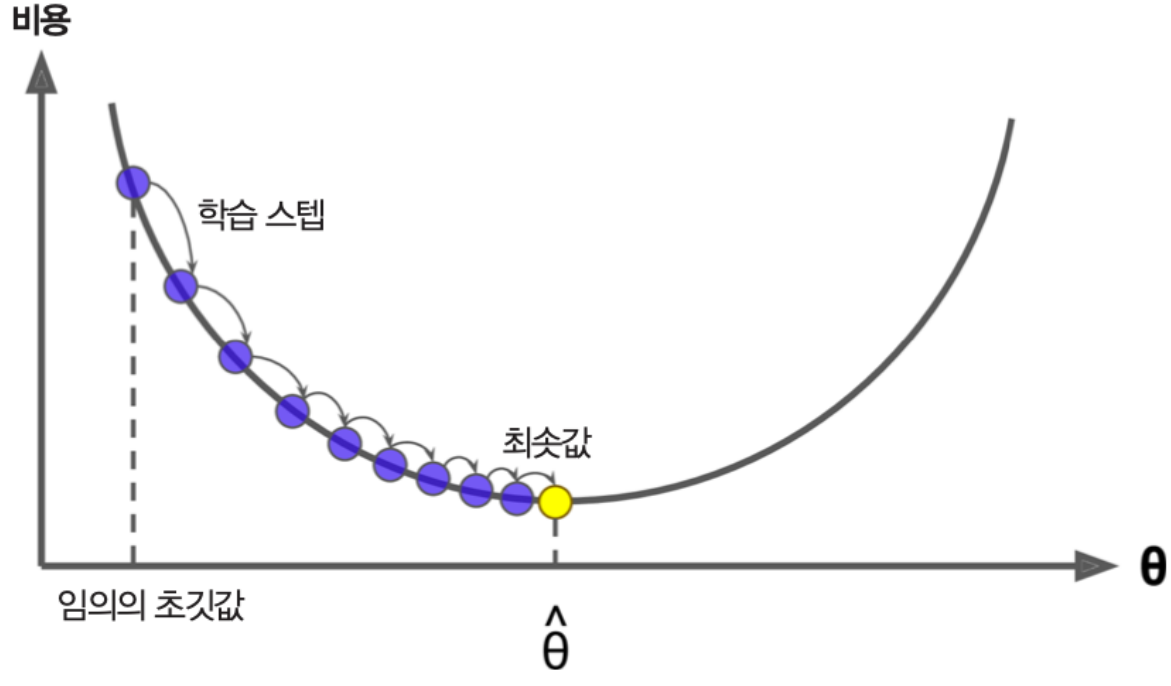
$$\nabla_\theta \mathrm{MSE}(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \theta_0} \mathrm{MSE}(\theta) \\ \frac{\partial}{\partial \theta_1} \mathrm{MSE}(\theta) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial \theta_n} \mathrm{MSE}(\theta) \end{bmatrix} = \frac{2}{m} \mathbf{X}^T \left(\mathbf{X}\, \theta^T - \mathbf{y} \right)$$

학습률

- 훈련 과정에서의 비용함수 파라미터 조정 비율

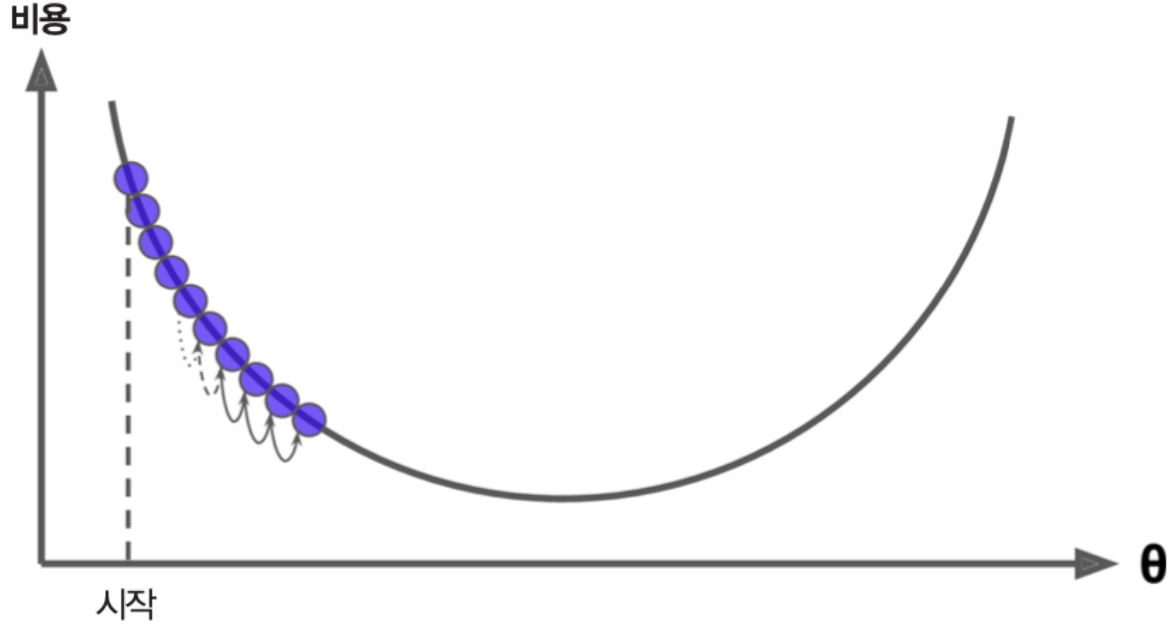
예제: 선형회귀 모델 파라미터 조정 과정

- θ를 임의의 값으로 지정한 후 훈련 시작
- 아래 단계를 θ가 특정 값에 지정된 오차범위 내로 수렴할 때까지 반복
    1. (배치 크기로) 지정된 수의 훈련 샘플을 이용하여 학습.
    2. 학습 후 $\mathrm{MSE}(\theta)$ 계산.
    3. 이전 θ에서 $\nabla_\theta \mathrm{MSE}(\theta)$과 학습률 η를 곱한 값 빼기.

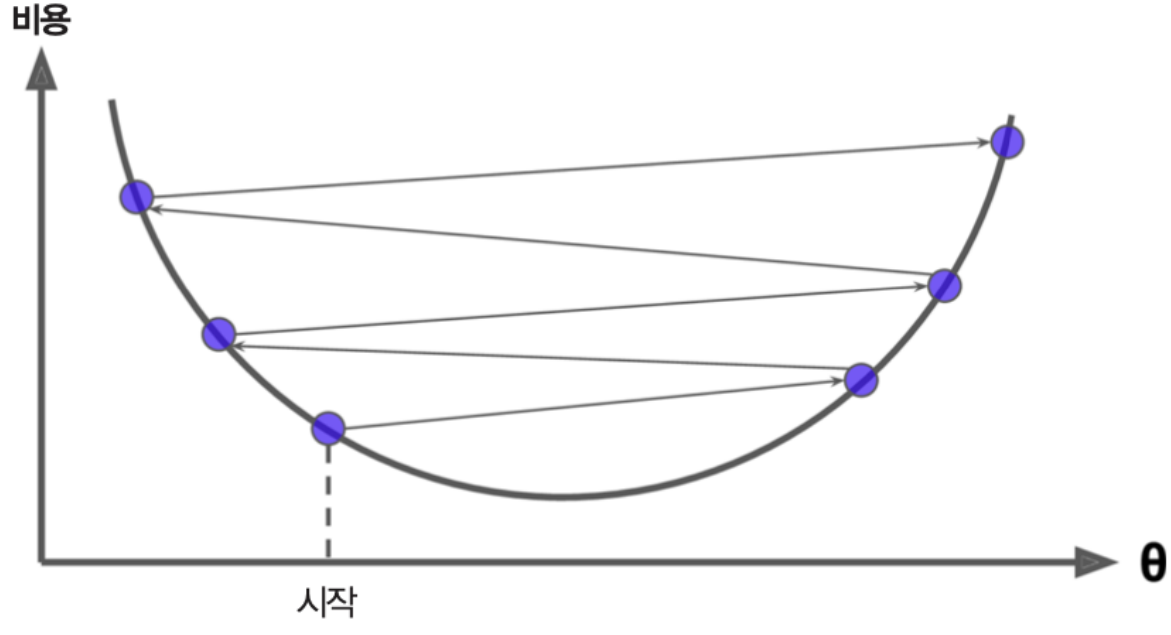


$$\theta^{(\text{new})} = \theta^{(\text{old})} - \eta \cdot \nabla_{\theta} \text{MSE}(\theta^{(\text{old})})$$

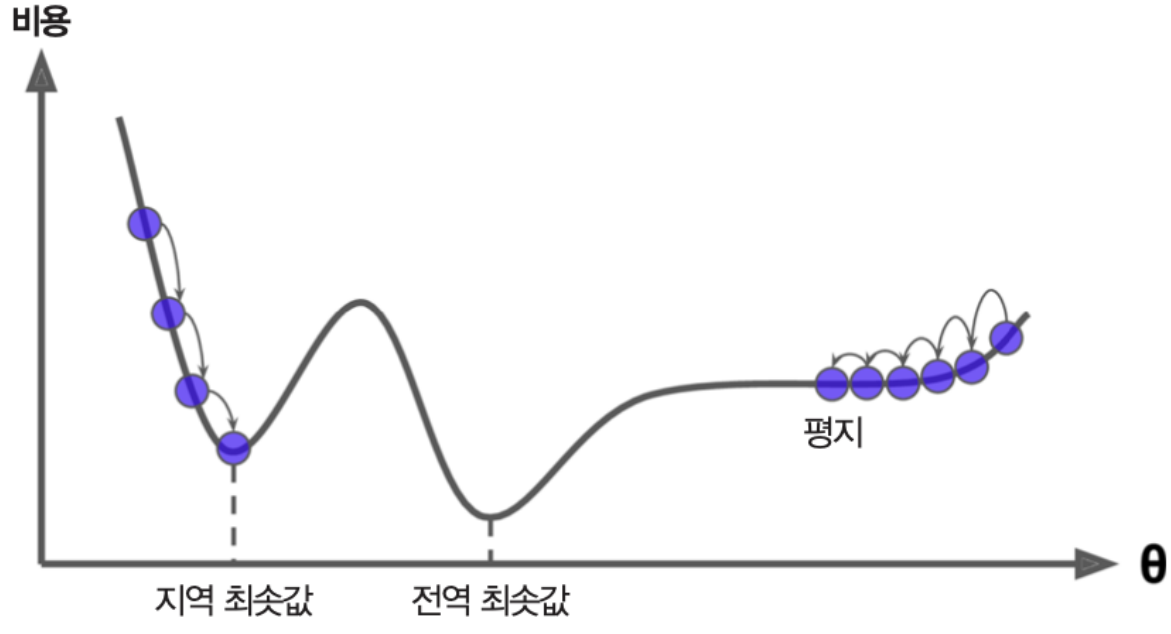
- 학습률이 너무 작은 경우: 비용 함수가 전역 최소값에 너무 느리게 수렴.



- 학습률이 너무 큰 경우: 비용 함수가 수렴하지 않음.



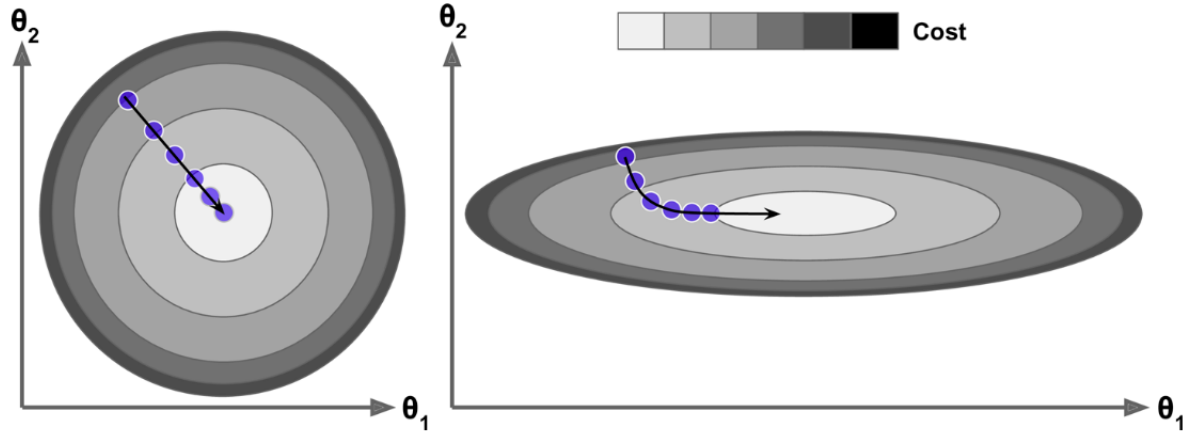
- (선형 회귀가 아닌 경우에) 시작점에 따라 지역 최솟값에 수렴하지 못할 수도 있음.



- 선형 회귀와 학습률
    - 비용함수(MSE)가 볼록 함수. 즉, 지역 최솟값을 갖지 않음
    - 따라서 학습률이 너무 크지 않으면 언젠가는 전역 최솟값에 수렴

특성 스케일링

- 특성들의 스켈일을 통일시키면 보다 빠른 학습 이루어짐.



하이퍼파라미터(hyperparameter)

- 학습 모델을 지정할 때 사용되는 값. 학습률, 배치 크기, 에포크, 허용오차, 스텝 크기 등
- 에포크(epoch): 훈련 세트 크기만큼의 샘플을 훈련하는 단계
    - 에포크 수: 에포크 반복 횟수
- 배치(batch) 크기: 파라미터를 업데이트하기 위해, 즉 그레이디언트 벡터를 계산하기 위해 사용되는 훈련 샘플 수.
- 허용오차(tolerance): 비용함수의 그레이디언트 벡터의 크기가 허용오차보다 작아지면 학습 종료
- 스텝(step): 지정된 배치 크기의 샘플을 학습한 후에 파라미터를 조정하는 단계
    - 스텝 크기 = (훈련 샘플 수) / (배치 크기)
    - 예제: 훈련 세트의 크기가 1,000이고 배치 크기가 10이면, 하나의 에포크 기간동안 총 100번의 스텝이 실행됨.

경사 하강법 종류

배치 경사 하강법

- 전체 훈련 샘플을 대상으로 훈련한 후에, 즉 에포크마다 그레이디언트를 계산하여 파라미터 조정
- **주의**: 여기서 사용되는 '배치'의 의미가 '배치 크기'의 '배치'와 다른 의미

확률적 경사 하강법

- 배치 크기: 1
- 즉, 하나의 훈련 샘플을 학습할 때마다 그레이디언트를 계산해서 파라미터 조정

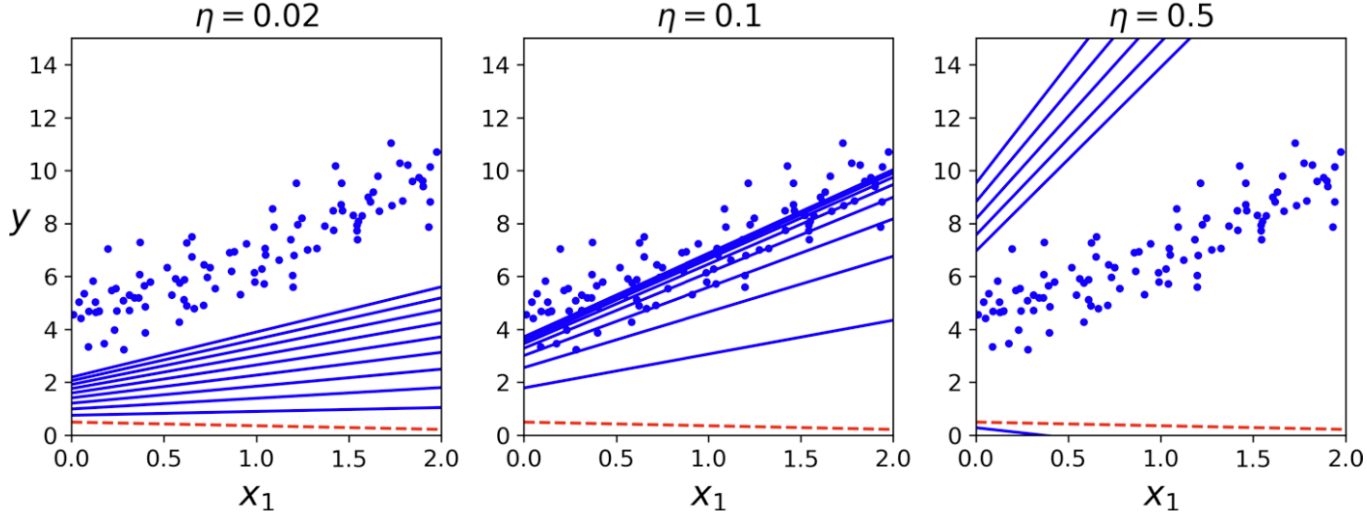
미니배치 경사 하강법

- 배치 크기: 2에서 수백 사이
- 최적 배치 크기: 경우에 따라 다름. 여러 논문이 32 이하 추천

4.2.1 배치 경사 하강법

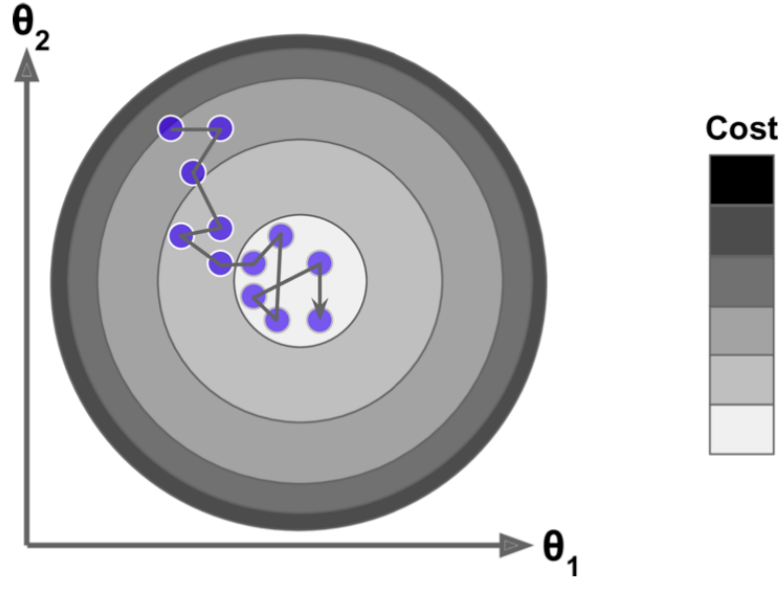
- 에포크와 허용오차
    - 에포크 수는 크게 설정한 후 허용오차를 지정하여 학습 시간 제한 필요. 이유는 포물선의 최솟점에 가까워질 수록 그레이디언트 벡터의 크기가 0에 수렴하기 때문임.
    - 허용오차와 에포크 수는 서로 반비례의 관계임. 즉, 오차를 1/10로 줄이려면 에포크 수를 10배 늘려야함.
- 단점
    - 훈련 세트가 크면 그레이디언트를 계산하는 데에 많은 시간 필요
    - 아주 많은 데이터를 저장해야 하는 메모리 문제도 발생 가능
- **주의사항**
    - 사이킷런은 배치 경사 하강법을 활용한 선형 회귀 지원하지 않음. (책 176쪽, 표 4-1에서 사이킷런의 SGDRegressor가 배치 경사 하강법을 지원한다고 **잘못** 명시됨.)

학습율과 경사 하강법의 관계

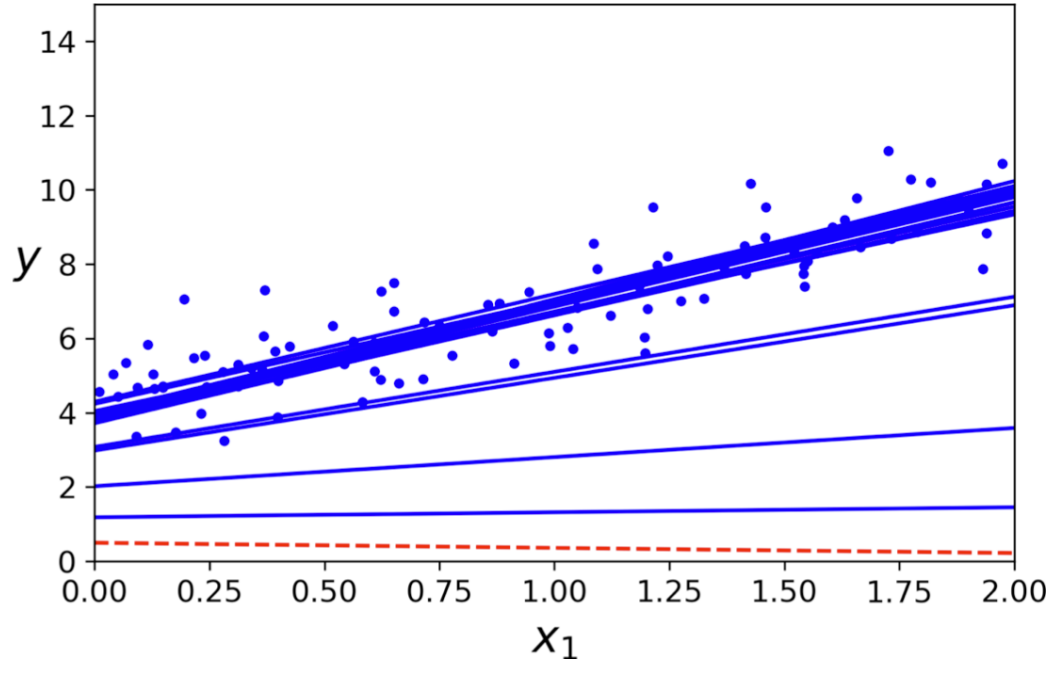


4.2.2 확률적 경사 하강법

- 장점
    - 매우 큰 훈련 세트를 다룰 수 있음. 예를 들어, 외부 메모리(out-of-core) 학습을 활용할 수 있음
    - 학습 과정이 매우 빠르며 파라미터 조정이 불안정 할 수 있기 때문에 지역 최솟값에 상대적으로 덜 민감
- 단점: 학습 과정에서 파라미터의 동요가 심해서 경우에 따라 전역 최솟값에 수렴하지 못하고 계속해서 발산할 가능성도 높음



처음 20 단계 동안의 SGD 학습 내용: 모델이 수렴하지 못함을 확인할 수 있음.



학습 스케줄

- 요동치는 파라미터를 제어하기 위해 학습률을 학습 과정 동안 천천히 줄어들게 만들 수 있음
- 주의사항
    - 학습률이 너무 빨리 줄어들면, 지역 최솟값에 갇힐 수 있음
    - 학습률이 너무 느리게 줄어들면 전역 최솟값에 제대로 수렴하지 못하고 맴돌 수 있음
- 학습 스케줄(learning schedule)
    - 훈련이 지속될 수록 학습률을 조금씩 줄이는 기법
    - 에포크, 훈련 샘플 수, 학습되는 샘플의 인덱스에 따른 학습률 지정

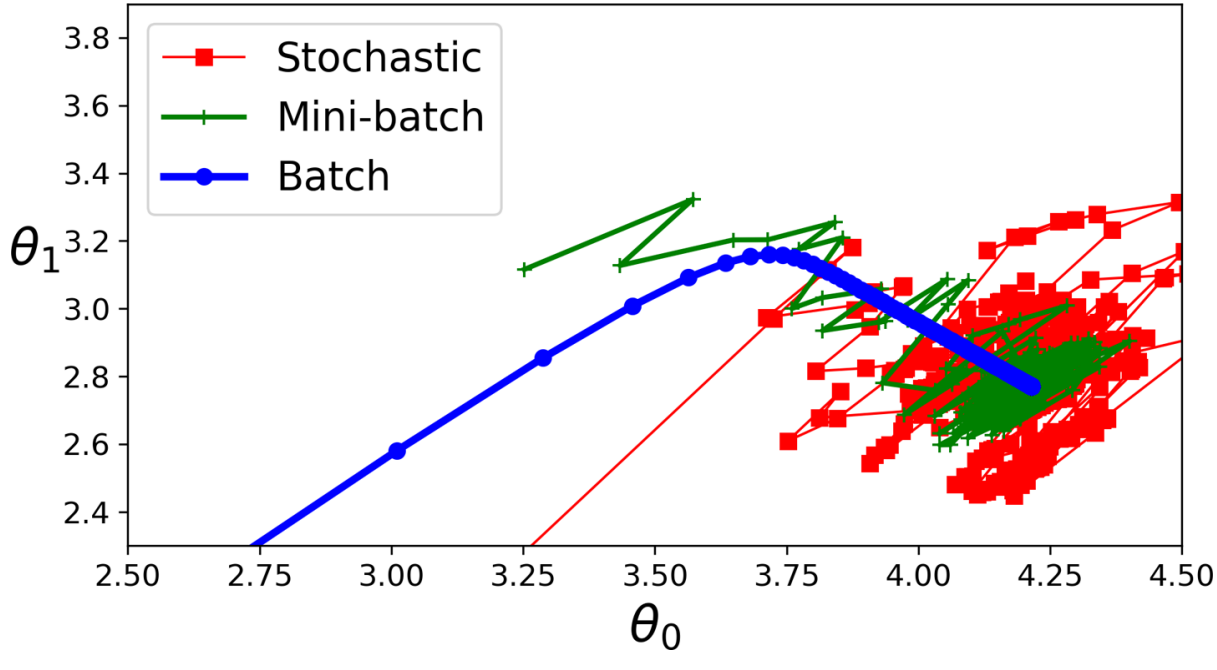
사이킷런의 `SGDRegressor`

- 경사 하강법 사용
- 사용되는 하이퍼파라미터
    - `max_iter=1000` : 에포크 수 제한
    - `tol=1e-3` : 하나의 에포크가 지날 때마다 0.001보다 적게 손실이 줄어들 때까지 훈련.
    - `eta0=0.1` : 학습 스케줄 함수에 사용되는 매개 변수. 일종의 학습률.
    - `penalty=l2` : 규제 사용 여부 결정 (추후 설명)

4.2.3 미니배치 경사 하강법

- 장점
    - 배치 크기를 어느 정도 크게 하면 확률적 경사 하강법(SGD) 보다 파라미터의 움직임이 덜 불규칙적이 됨
    - 반면에 배치 경사 하강법보다 빠르게 학습
    - 학습 스케줄 잘 활용하면 최솟값에 수렴함.
- 단점
    - SGD에 비해 지역 최솟값에 수렴할 위험도가 보다 커짐.

경사 하강법 비교


Stochastic
Mini-batch
Batch
3.8
3.6
3.4
3.2
3.0
2.8
2.6
2.4
θ_1
2.50
2.75
3.00
3.25
3.50
3.75
4.00
4.25
4.50
θ_0

선형 회귀 알고리즘 비교

알고리즘	많은 샘플 수	외부 메모리 학습	많은 특성 수	하이퍼 파라미터 수	스케일 조정	사이킷런 지원
정규방정식	빠름	지원 안됨	느림	0	불필요	지원 없음
SVD	빠름	지원 안됨	느림	0	불필요	LinearRegression
배치 GD	느림	지원 안됨	빠름	2	필요	LogisticRegression
SGD	빠름	지원	빠름	>= 2	필요	SGDRegressor
미니배치 GD	빠름	지원	빠름	>=2	필요	지원 없음

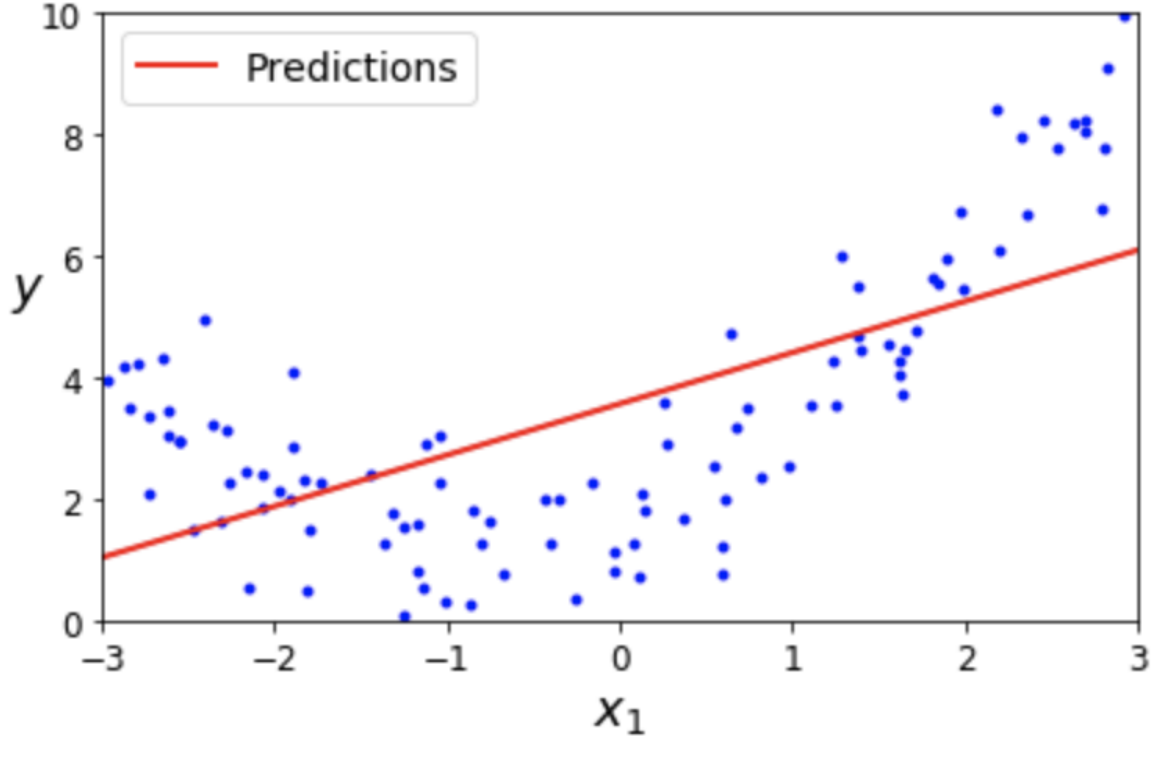
4.3 다항 회귀

- 다항 회귀(polynomial regression)란?
    - 선형 회귀를 이용하여 비선형 데이터를 학습하는 기법
    - 즉, 비선형 데이터를 학습하는 데 선형 모델 사용을 가능하게 함.
- 기본 아이디어
    - 특성들의 조합 활용
    - 특성 변수들의 다항식을 조합 특성으로 추가

선형 회귀 vs. 다항 회귀

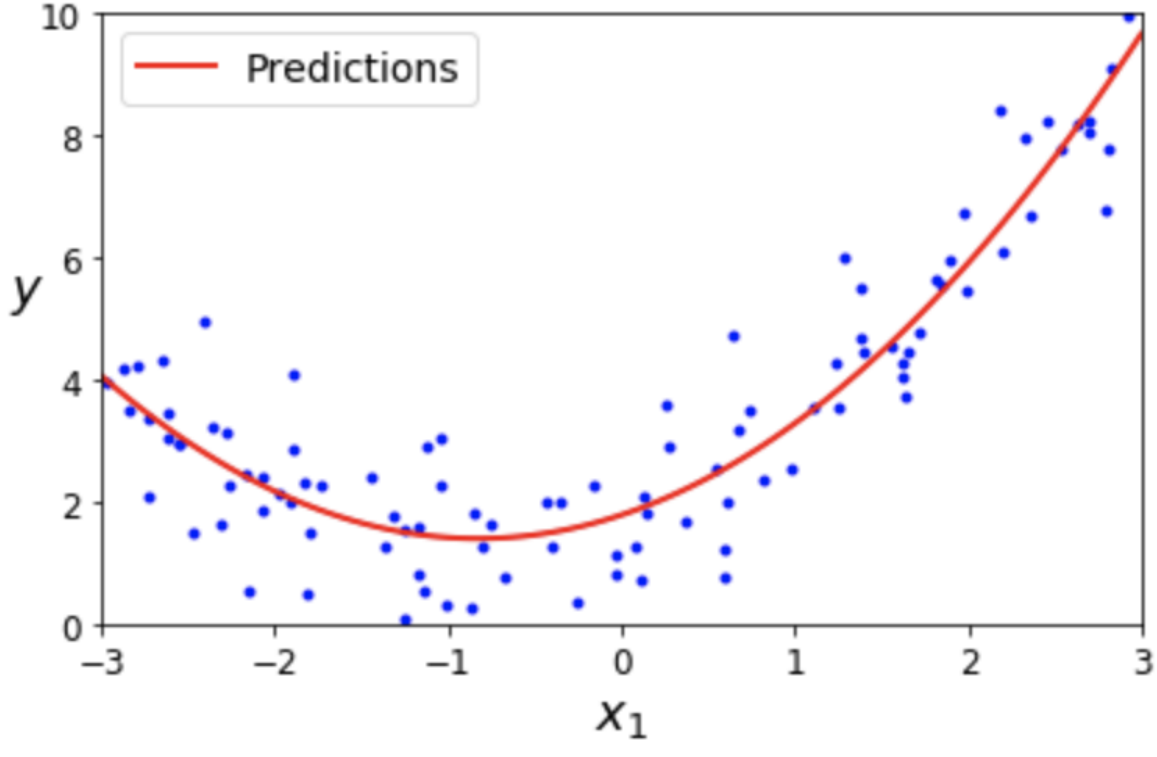
선형 회귀: 1차 선형 모델

$$\hat{y} = \theta_0 + \theta_1 x_1$$



다항 회귀: 2차 다항식 모델

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



사이킷런의 `PolynomialFeatures` 변환기

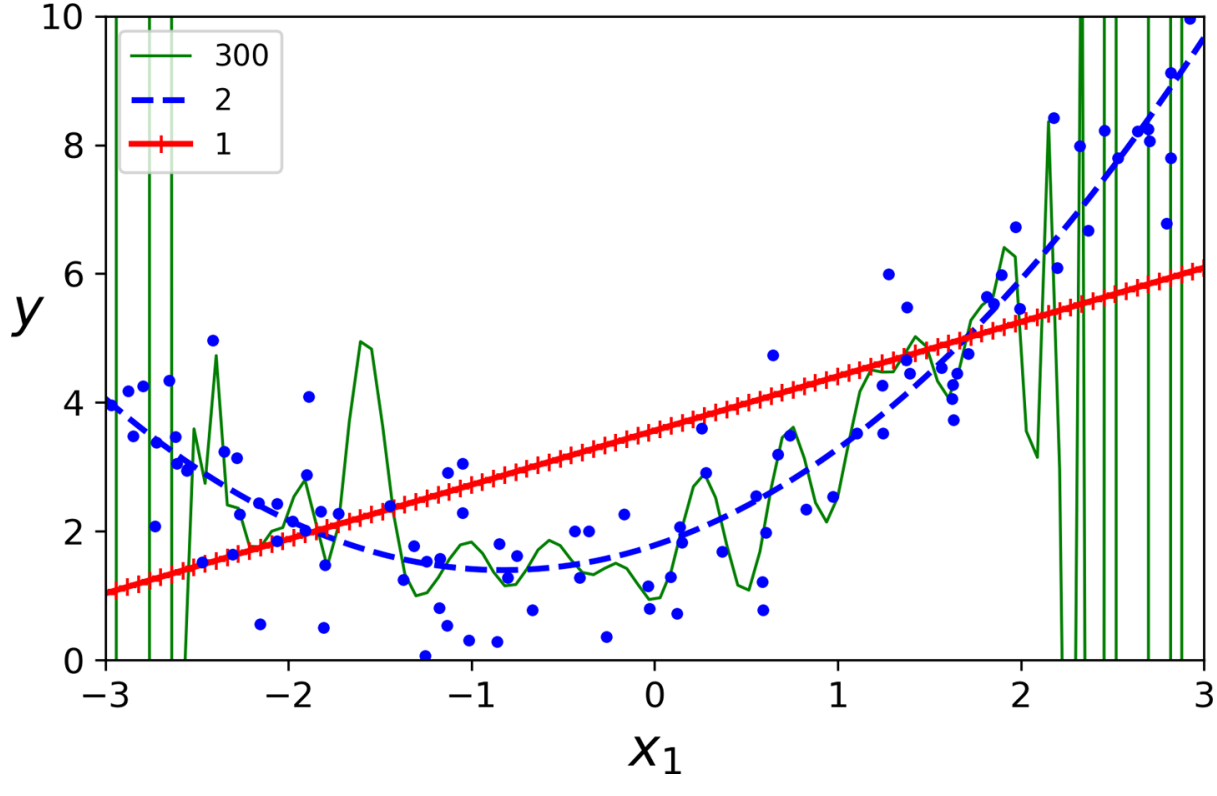
- 주어진 특성들의 거듭제곱과 특성들 사이의 곱셈을 실행하여 특성을 추가하는 기능 제공
- `degree=d` : 몇 차 다항식을 활용할지 지정하는 하이퍼파라미터
    - 이전 예제: $d = 2$으로 지정하여 x_1^2에 대한 특성 변수가 추가됨.
- 예제: $n = 2, d = 3$인 경우에 $(x_1 + x_2)^2$과 $(x_1 + x_2)^3$의 항목에 해당하는 7개 특성 추가

$$x_1^2,\ x_1x_2,\ x_2^2,\ x_1^3,\ x_1^2x_2,\ x_1x_2^2,\ x_2^3$$

4.4 학습 곡선

과소적합/과대적합 판정

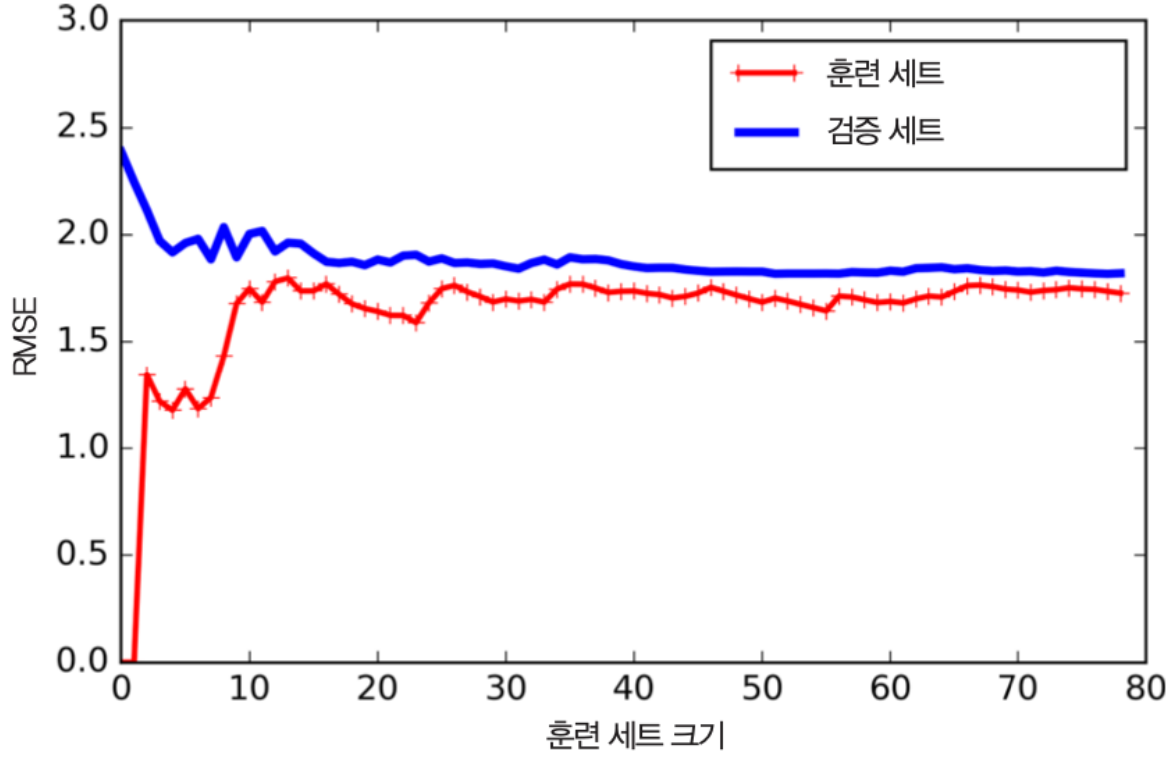
- 예제: 선형 모델, 2차 다항 회귀 모델, 300차 다항 회귀 모델 비교
- 다항 회귀 모델의 차수에 따라 훈련된 모델이 훈련 세트에 과소 또는 과대 적합할 수 있음.



교차 검증 vs. 학습 곡선

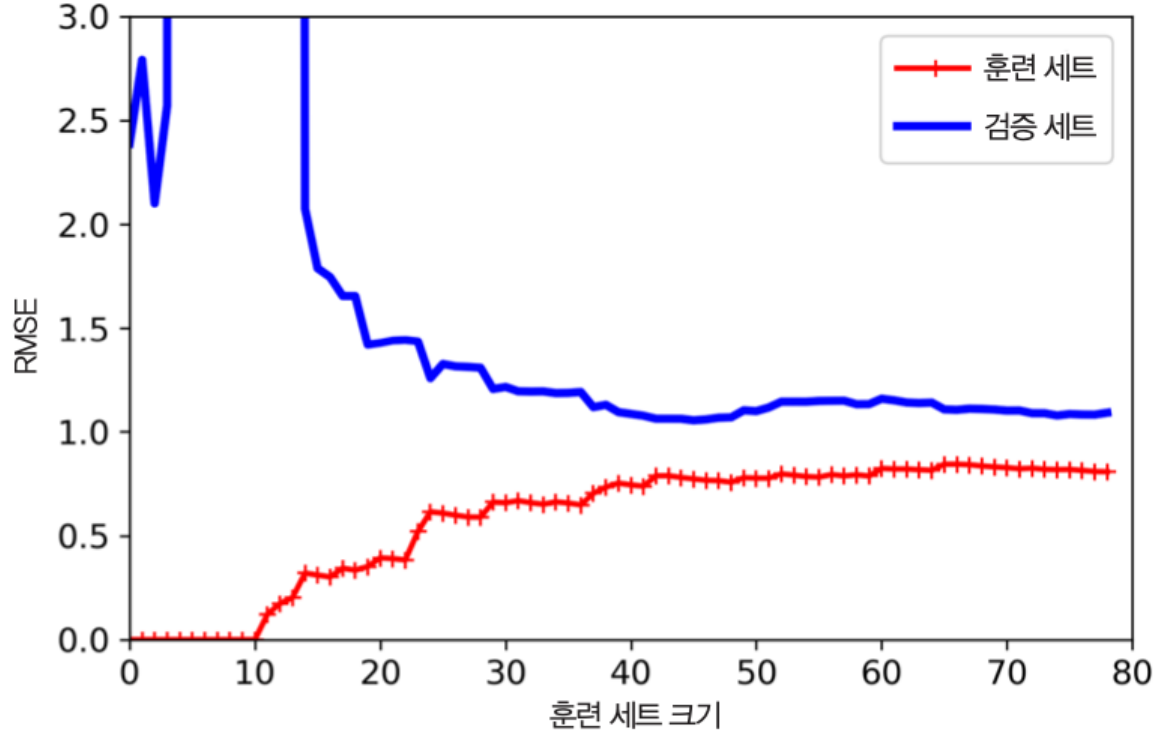
- 교차 검증(2장)
    - 과소적합: 훈련 세트와 교차 검증 점수 모두 낮은 경우
    - 과대적합: 훈련 세트에 대한 검증은 우수하지만 교차 검증 점수가 낮은 경우
- 학습 곡선 살피기
    - 학습 곡선: 훈련 세트와 검증 세트에 대한 모델 성능을 비교하는 그래프
    - 학습 곡선의 모양에 따라 과소적합/과대적합 판정 가능

과소적합 모델의 학습 곡선 특징



- 훈련 데이터(빨강)에 대한 성능
    - 훈련 세트가 커지면서 RMSE(평균 제곱근 오차)가 커짐
    - 훈련 세트가 어느 정도 커지면 더 이상 RMSE가 변하지 않음
- 검증 데이터(파랑)에 대한 성능
    - 검증 세트에 대한 성능이 훈련 세트에 대한 성능과 거의 비슷해짐

과대적합 모델의 학습 곡선 특징



- 훈련 데이터(빨강)에 대한 성능: 훈련 데이터에 대한 평균 제곱근 오차가 매우 낮음.
- 검증 데이터(파랑)에 대한 성능: 훈련 데이터에 대한 성능과 차이가 크게 벌어짐.
- 과대적합 모델 개선법: 훈련 데이터 추가

편향 vs 분산

- 편향(bias)
    - 잘못된 가정으로 인해 발생.
    - 예제: 실제로는 2차원 모델인데 1차원 모델을 사용하는 경우
    - 과속적합 발생 가능성 높음.
- 분산(variance)
    - 모델이 훈련 데이터에 민감하게 반응하는 정도
    - 고차 다항 회귀 모델의 경우가 높은 분산을 가질 수 있음.
    - 과대적합 발생 가능성 높음.
- 편향과 분산의 트레이드 오프
    - 복잡한 모델일 수록 편향을 줄어들지만 분산을 커짐.

모델 일반화 오차

- 훈련 후에 새로운 데이터 대한 예측에서 발생하는 오차를 가리키며 세 종류의 오차가 있음.
- 편향
- 분산
- 줄일 수 없는 오차
    - 데이터 자체가 갖고 있는 잡음(noise) 때문에 발생.
    - 잡음을 제거해야 오차를 줄일 수 있음.