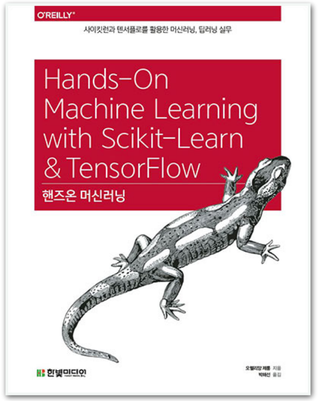


핸즈온 머신러닝

5장. 서포트 벡터 머신

박해선(옮긴이)
haesun.park@tensorflow.blog
https://tensorflow.blog

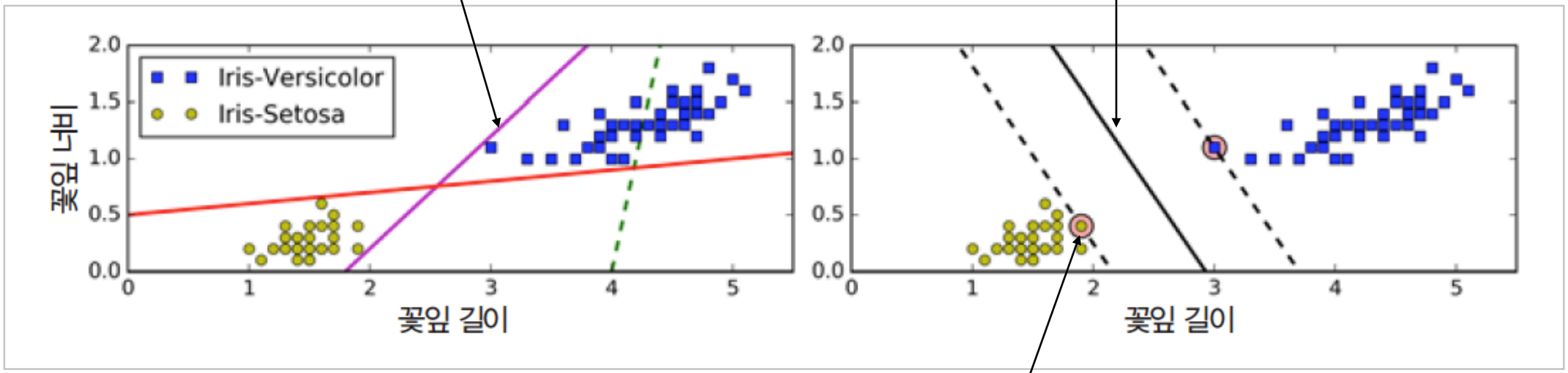
Support Vector Machine(SVM)

- 선형, 비선형 문제에 모두 적용 가능합니다.
- 분류, 회귀 문제에 모두 적용 가능합니다.
- 수학적으로 정의가 잘 되어 있습니다.
- 앙상블이나 신경망이 대두되기 전에 큰 인기를 끌었습니다.
- liblinear(coordinate descent), libsvm(quadratic programming)

SVM의 개념

결정 경계가 샘플에 너무 가깝습니다

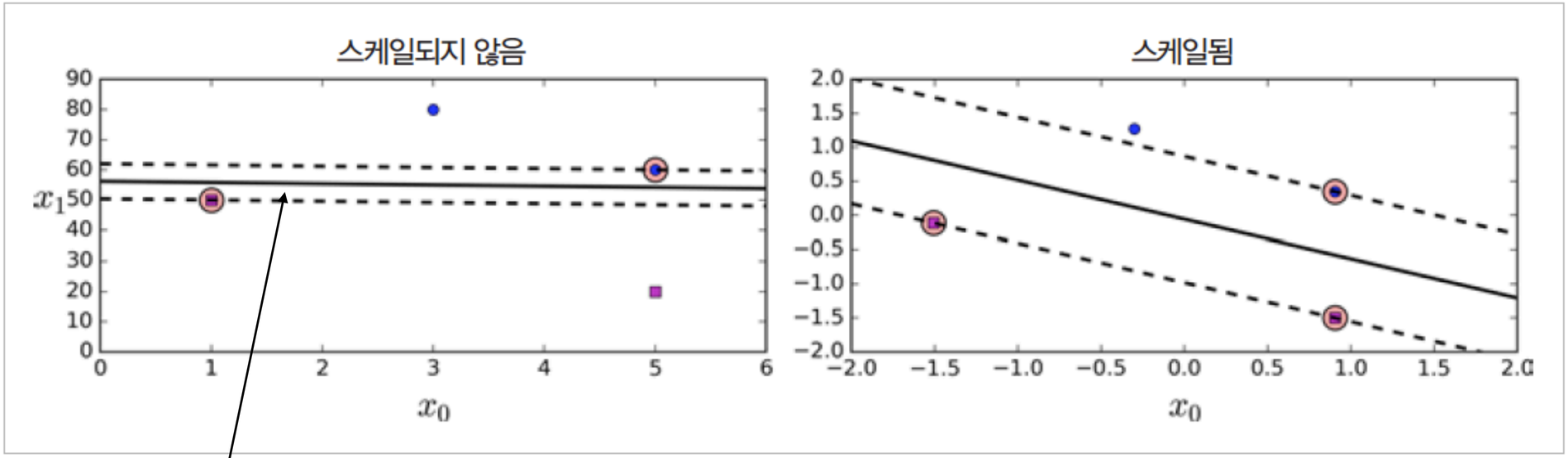
결정 경계가 가능한 샘플에서 멀리 떨어져 있습니다.
라지 마진(large margin) 분류라고도 부릅니다



경계에 위치한 샘플: 서포트 벡터(support vector)

SVM 특성 스케일링

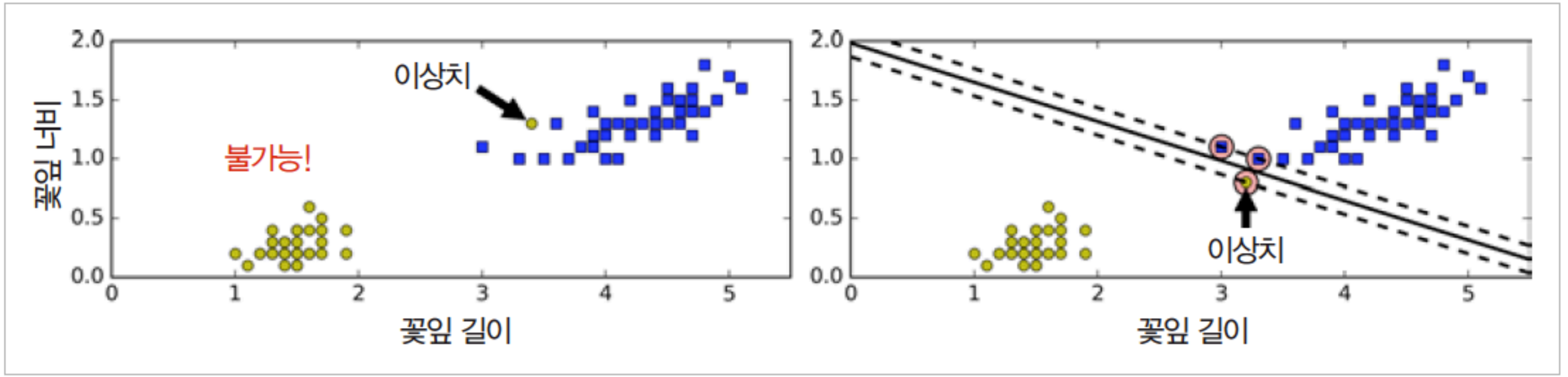
- SVM은 특성의 스케일에 영향을 많이 받습니다.



스케일이 큰 x1에 영향을 많이 받아 결정 경계가 수평에 가깝게 됩니다.

하드 마진(hard margin) 분류

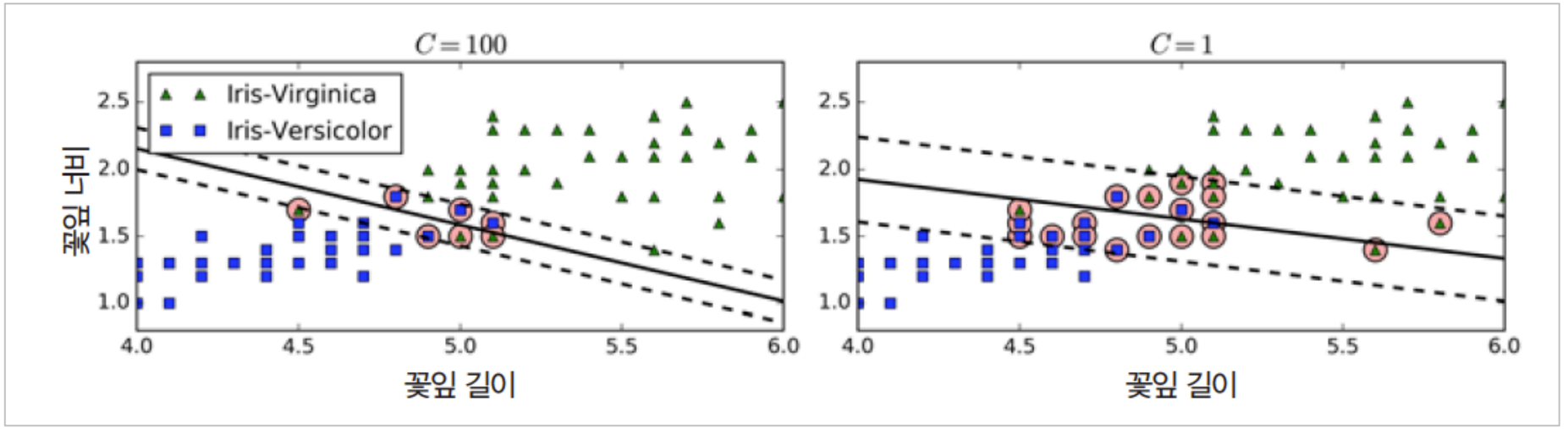
- 모든 샘플을 마진 바깥 쪽에 분류 시킵니다.
- 데이터가 선형적으로 구분될 수 있어야 합니다.
- 이상치에 민감합니다.



소프트 마진(soft margin) 분류

- 마진을 크게 하는 것과 마진 오류 사이에 균형이 필요합니다.
  사이킷런에서는 매개변수 C를 사용하여 조절합니다.

- 작은 C: 모델 규제, 마진 커짐, 마진 오류 늘어남
  큰 C: 마진 줄어듬, 마진 오류 줄어듬



LinearSVC 클래스

```
import numpy as np
from sklearn import datasets
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.svm import LinearSVC

iris = datasets.load_iris()
X = iris["data"][:, (2, 3)]  # 꽃잎 길이, 꽃잎 너비
y = (iris["target"] == 2).astype(np.float64)  # Iris-Virginica

svm_clf = Pipeline([
        ("scaler", StandardScaler()),
        ("linear_svc", LinearSVC(C=1, loss="hinge")),
    ])

svm_clf.fit(X, y)
```

liblinear

이진 분류 문제로 변경

편향도 규제합니다

힌지 손실 함수

```
>>> svm_clf.predict([[5.5, 1.7]])
array([ 1.])
```

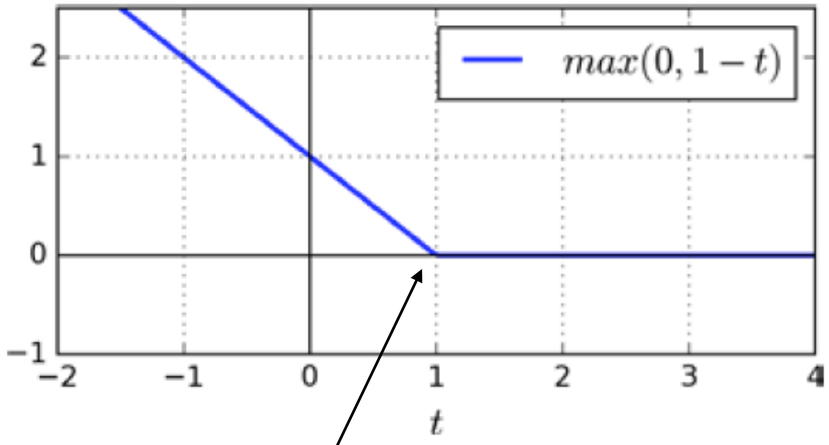
predict_proba 함수가 없습니다

SVC 클래스

- sklearn.svm.SVC 클래스, libsvm 라이브러리 사용.
- SVC(kernel=“linear”, C=1)
- 훈련 세트가 클 경우 속도가 느립니다.
- 항상 쌍대 문제를 풉니다.
- probability=True로 설정하면 predict_proba() 메서드를 제공합니다(느려짐)

SGDClassifier 클래스

- sklearn.linear_model.SGDClassifier
- SGDClassifier(loss="hinge", alpha=1/(m*C))
- 외부 메모리 훈련 또는 온라인 학습 가능

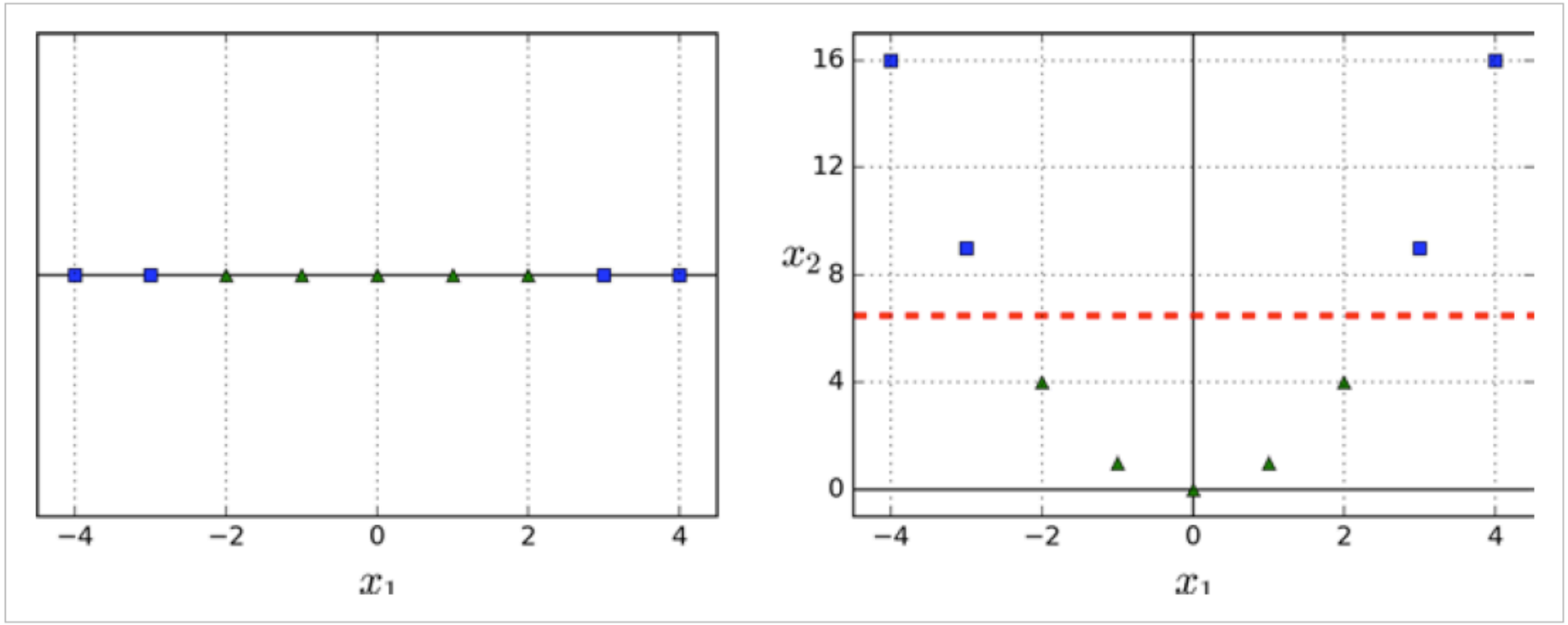


훈련 샘플 개수

서브그래디언트: SGDClassifier는 -1을 사용

비선형 문제

- 첫 번째 특성을 제곱하여 선형적으로 구분되는 데이터셋을 만듭니다.



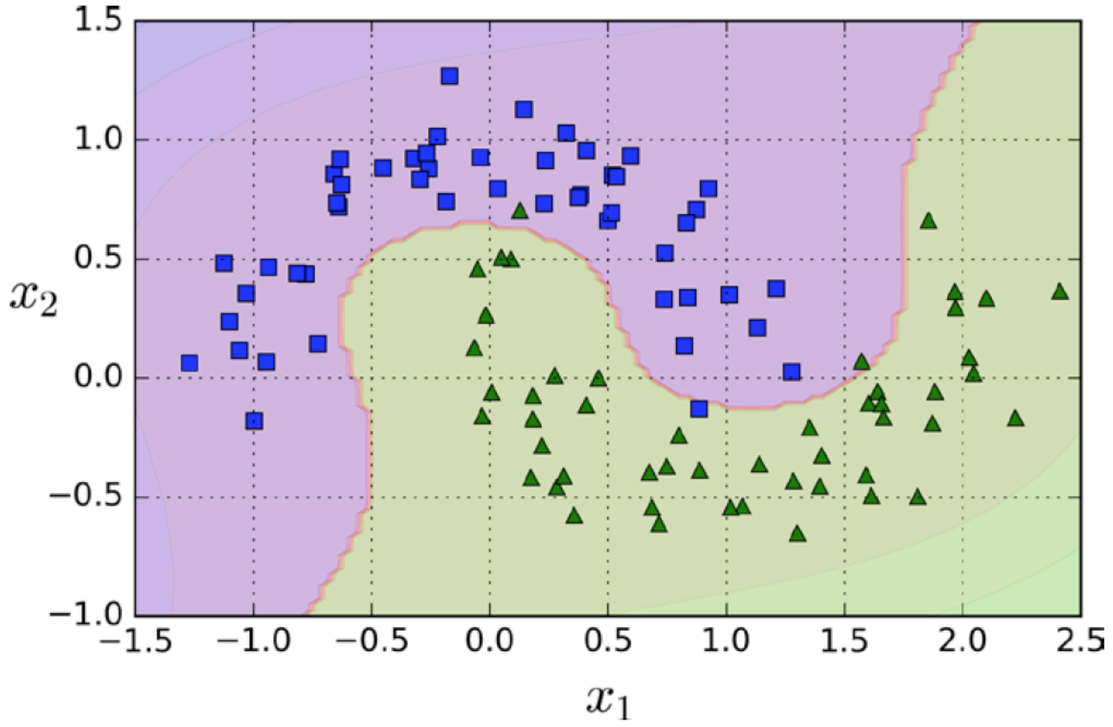
PolynomialFeatures + LinearSVC

```
from sklearn.datasets import make_moons
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures

X, y = make_moons(n_samples=100, noise=0.15, random_state=42)

polynomial_svm_clf = Pipeline([
        ("poly_features", PolynomialFeatures(degree=3)),
        ("scaler", StandardScaler()),
        ("svm_clf", LinearSVC(C=10, loss="hinge"))
    ])

polynomial_svm_clf.fit(X, y)
```

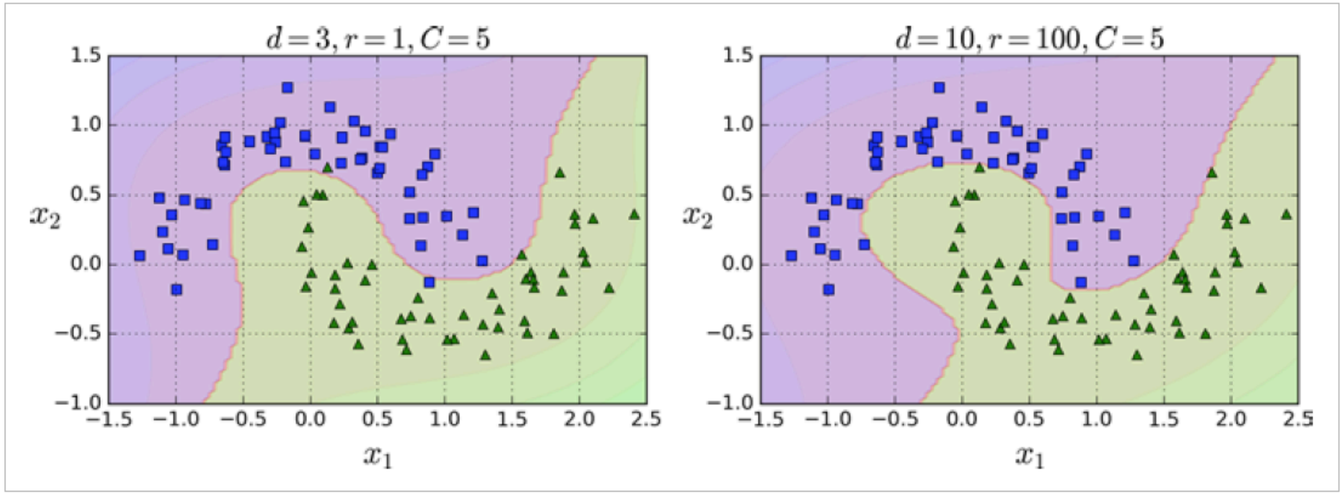


커널 트릭

- 실제 다항 특성을 추가하지 않고 비슷한 효과를 만드는 수학적 트릭입니다.

- 다항 커널 $K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\gamma \mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b} + r)^d$

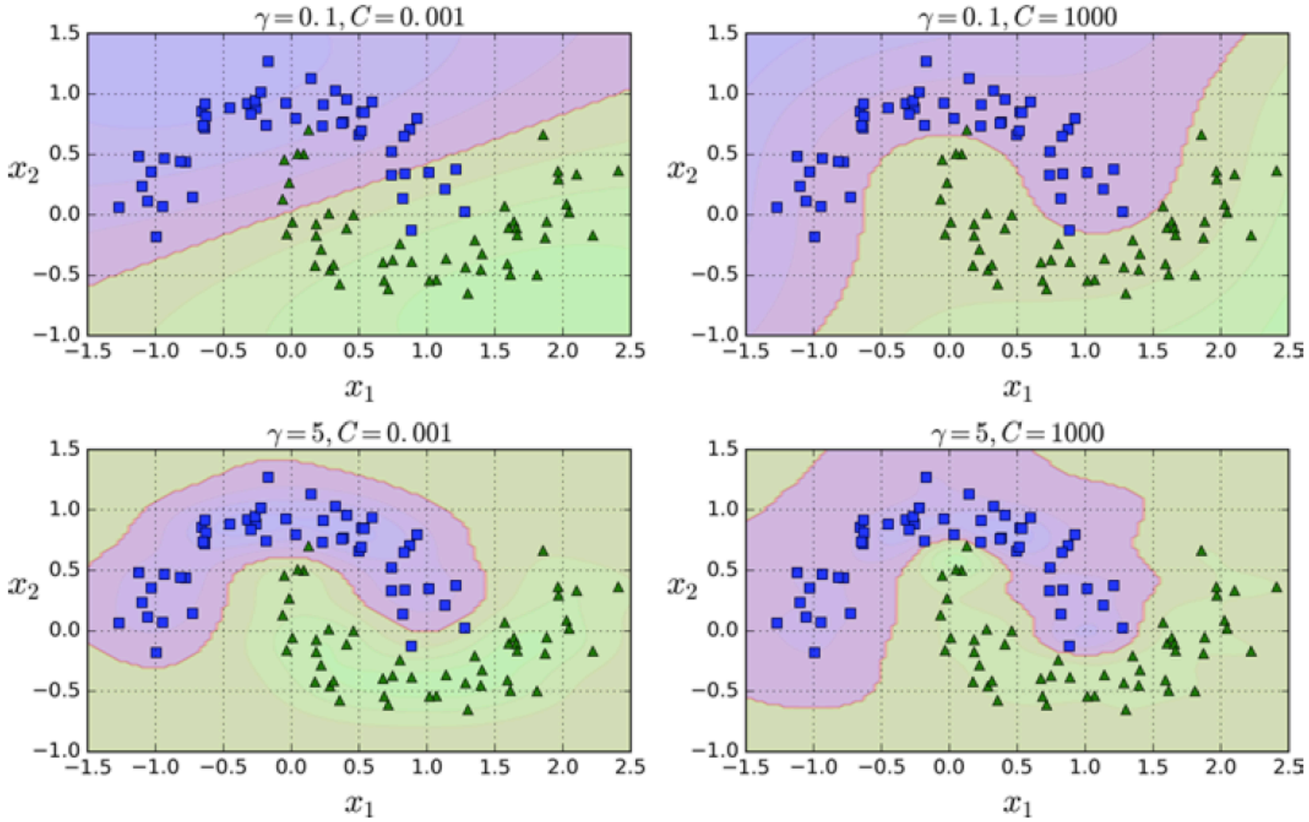
```
from sklearn.svm import SVC
poly_kernel_svm_clf = Pipeline([
        ("scaler", StandardScaler()),
        ("svm_clf", SVC(kernel="poly", degree=3, coef0=1, C=5))
    ])
poly_kernel_svm_clf.fit(X, y)
```



가우시안 커널

- RBF(방사 기저 함수)를 사용합니다. $K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = e^{-\gamma||\mathbf{a}-\mathbf{b}||^2}$
- 지수함수의 테일러 급수 전개 때문에 무한차원의 다항식으로 생각할 수 있습니다.

```
rbf_kernel_svm_clf = Pipeline([
        ("scaler", StandardScaler()),
        ("svm_clf", SVC(kernel="rbf", gamma=5, C=0.001))
    ])
rbf_kernel_svm_clf.fit(X, y)
```



커널 선택 가이드

- 먼저 선형 커널을 시도합니다(LinearSVC가 SVC(kernel='linear') 보다 빠릅니다).
- 훈련 세트가 크거나 특성이 많을 때 LinearSVC를 선택합니다.
- 훈련 세트가 크지 않으면 가우시안 커널을 시도합니다.

계산 복잡도

- SVC의 tol 기본값 0.001, LinearSVC의 tol 기본값 0.0001
- tol 값을 낮추면 훈련 시간이 오래 걸립니다.

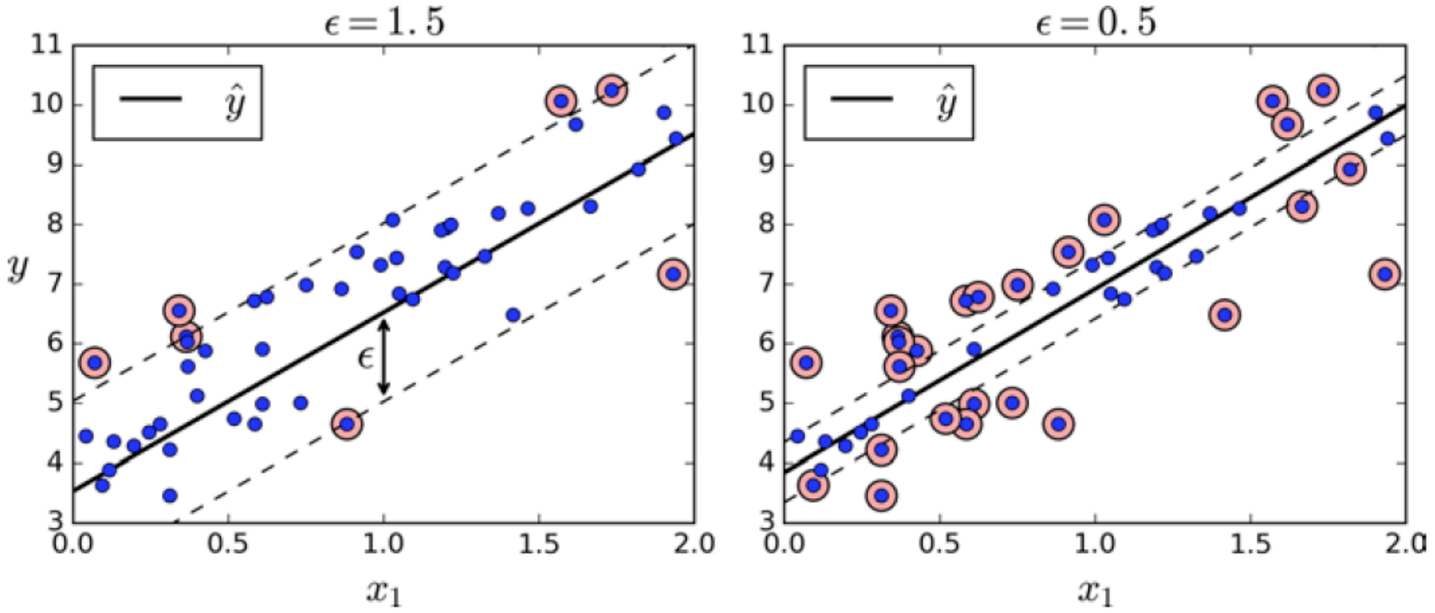
파이썬 클래스	시간 복잡도	외부 메모리 학습 지원	스케일 조정의 필요성	커널 트릭
LinearSVC	$O(m \times n)$	아니오	예	아니오
SGDClassifier	$O(m \times n)$	예	예	아니오
SVC	$O(m^2 \times n) \sim O(m^3 \times n)$	아니오	예	예

샘플 수에 민감

희소 특성에 강함

SVM 회귀

- sklearn.svm.LinearSVR, SVR
- 분류와는 달리 마진 안에 최대한 많은 샘플을 포함하는 것이 목적입니다.
- 허용 오차: tol, 마진: epsilon
- 마진안에 샘플이 추가되어도 예측에 영향을 미치지 않습니다(e-insensitive).



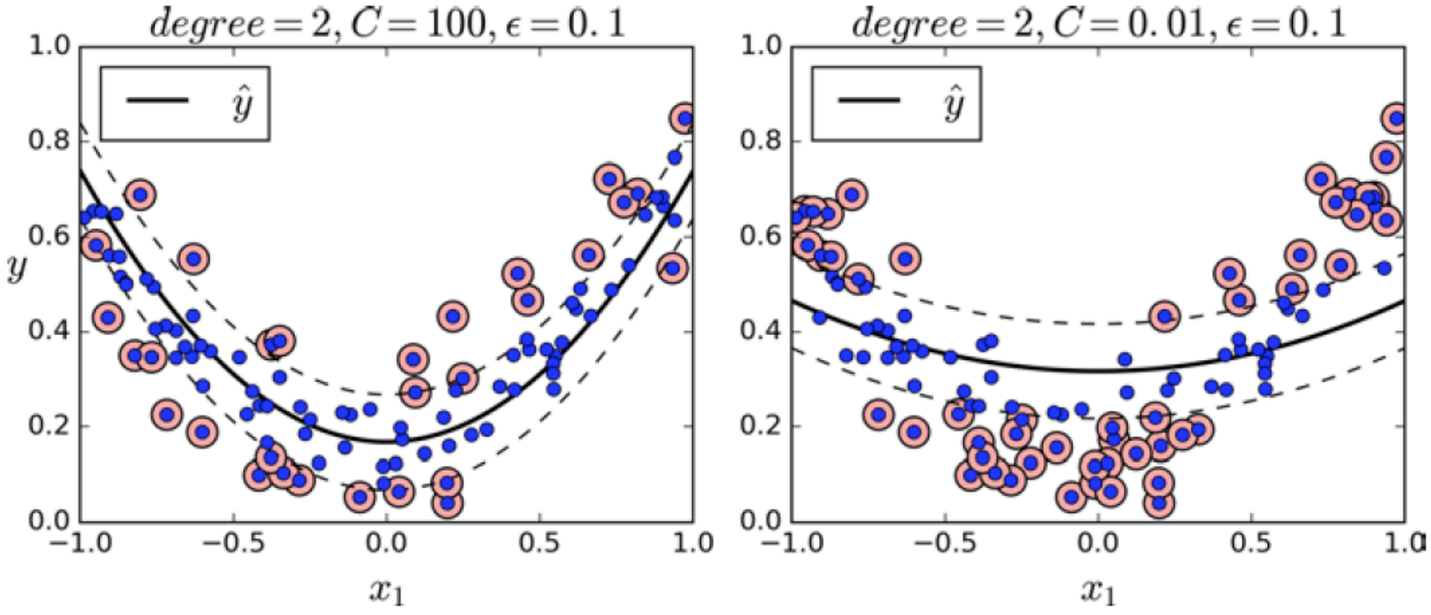
SVR

```
from sklearn.svm import SVR

svm_poly_reg = SVR(kernel="poly", degree=2, C=100, epsilon=0.1)
svm_poly_reg.fit(X, y)
```

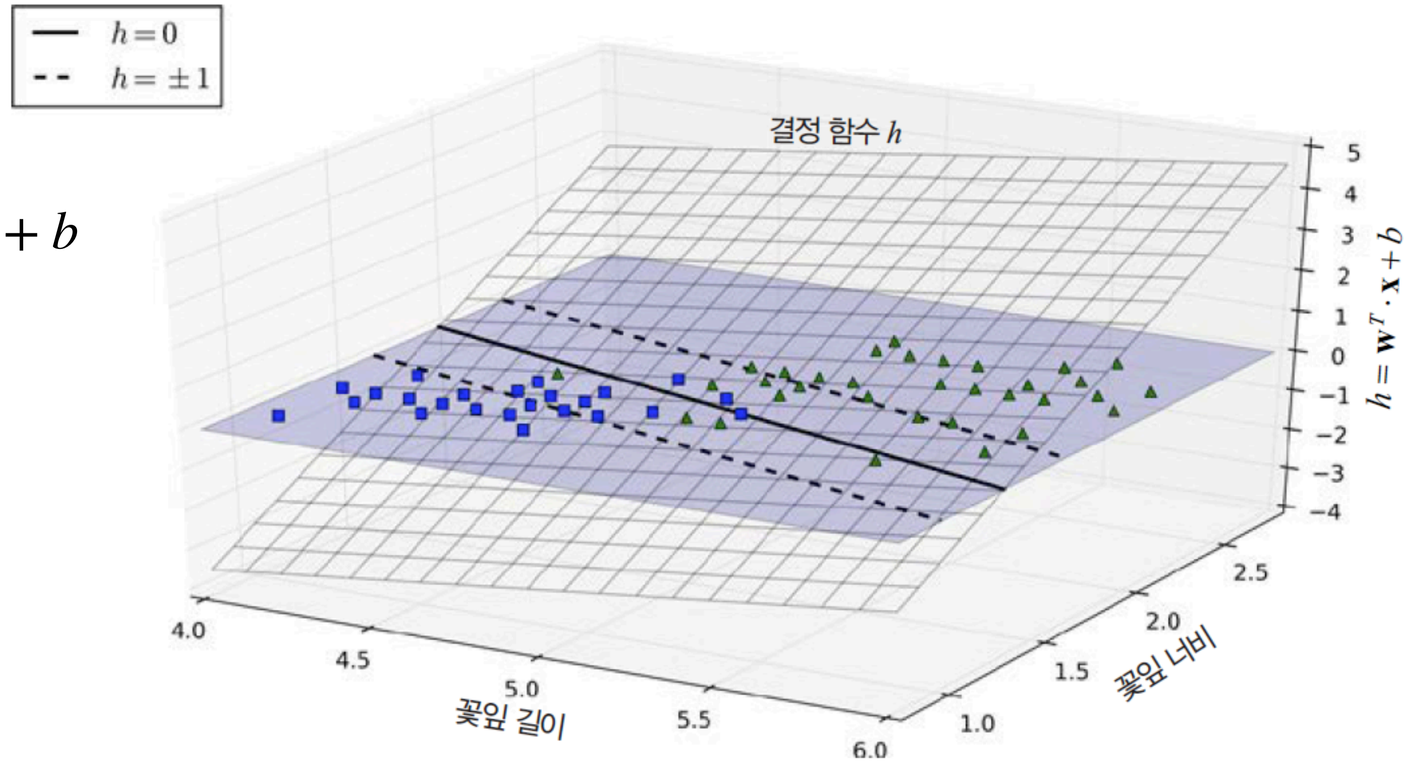
SVC와 마찬가지로
훈련 세트의 크기가 커지면
속도가 많이 느려집니다.

규제 증가



선형 SVM 모델

- 마진 오류가 전혀 없거나(하드 마진), 어느 정도 오류를 가지면서(소프트 마진) 최대한 마진을 크게하는 **w**와 b를 찾는 것입니다.

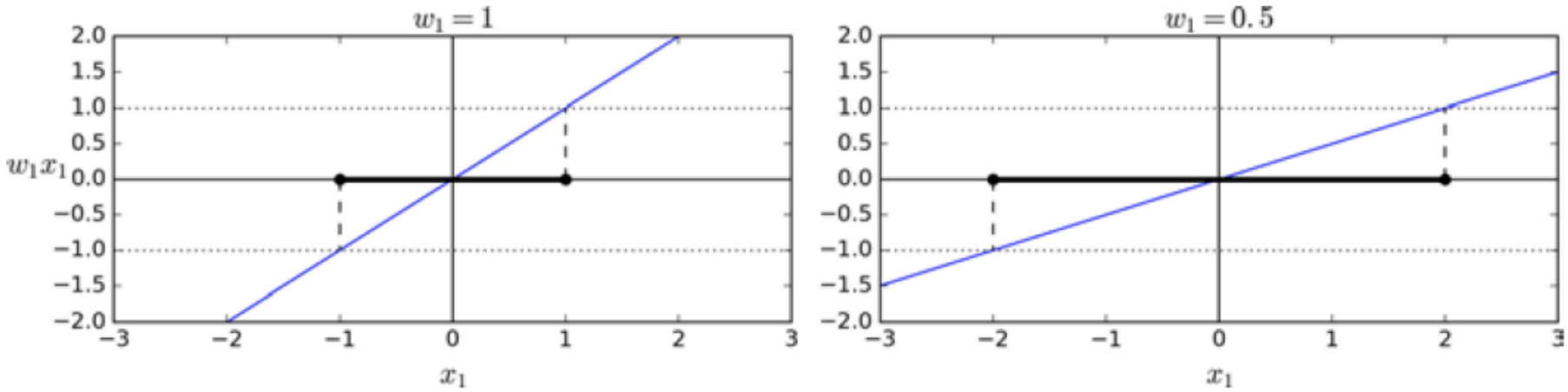


결정함수 : $\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b = w_1 x_1 + \cdots + w_n x_n + b$

예측 : $\hat{y} = \begin{cases} 0 & \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b < 0 \text{일 때} \\ 1 & \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b \geq 0 \text{일 때} \end{cases}$

결정 함수의 가중치 효과

- 가중치가 줄어들면 결정 함수 기울기가 줄어들고 +1~-1 사이 마진이 늘어납니다.
- 마진을 크게 하기 위해 가중치를 최소화합니다.



제약이 있는 최적화 문제

$$\hat{y} = \begin{cases} 0 & \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b < 0 \text{일 때} \quad t = -1 \\ 1 & \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b \geq 0 \text{일 때} \quad t = 1 \end{cases} \longrightarrow t^{(i)}(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b) \geq 1$$

- 하드 마진 선형 분류기의 목적 함수

$$\underset{\mathbf{w}, b}{\text{minimize}} \ \frac{1}{2}\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{w}$$

[조건] $i = 1, 2, \cdots, m$일 때 $\quad t^{(i)}\left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b\right) \geq 1$

소프트 마진을 위한 분류 목적 함수

- 슬랙 변수(slack variable)를 도입하여 각 샘플이 마진을 얼마나 위배할 지 정합니다.

하이퍼파라미터(양쪽을 절충): C가 커지면 마진 오류가 중요해짐, 마진 폭이 줄고 가중치가 커짐, 규제 효과

가중치를 작게 만듬(마진 폭을 넓히는 효과)

마진 오류를 줄임(마진 폭을 줄이는 효과)

$$\underset{w,b,\varsigma}{\text{minimize}} \ \frac{1}{2}\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{w} + C\sum_{i=1}^{m}\varsigma^{(i)}$$

[조건] $i = 1, 2, \cdots, m$일 때 $t^{(i)}\left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b\right) \geq 1 - \varsigma^{(i)}$이고 $\varsigma^{(i)} \geq 0$

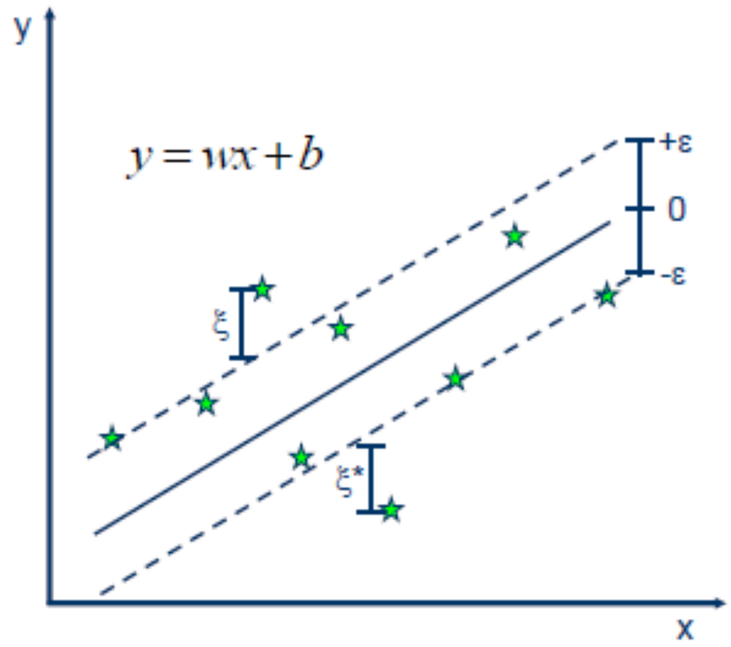
소프트 마진을 위한 회귀 목적 함수

- 결정 경계 양쪽 마진에 해당하는 두 개의 슬랙 변수를 도입합니다

$$\underset{w,b,\varsigma,\varsigma^*}{\text{minimize}} \ \frac{1}{2}\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{w} + C\sum_{i=1}^{m}(\zeta^{(i)} + \zeta^{(i)*})$$

[조건] $i = 1, 2, \cdots, m$일 때 $y^{(i)} - \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b\right) \le \varepsilon + \varsigma^{(i)}$

$$\left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b\right) - y^{(i)} \le \varepsilon + \varsigma^{(i)*}$$



콰드라틱 프로그래밍

- 제약 조건이 있는 볼록 함수의 이차 최적화 문제

$$\underset{\mathbf{w},b}{\text{minimize}}\ \frac{1}{2}\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{w}$$

[조건] $i = 1, 2, \cdots, m$ 일 때 $\quad t^{(i)}\left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b\right) \geq 1$

$$\underset{\mathbf{p}}{\text{minimize}}\ \frac{1}{2}\mathbf{p}^T \cdot \mathbf{H} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{f}^T \cdot \mathbf{p}$$

[조건] $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \leq \mathbf{b}$

여기서
- $\mathbf{p}$는 n_p 차원의 벡터(n_p = 모델 파라미터 수) ← n+1
- $\mathbf{H}$는 $n_p \times n_p$ 크기 행렬 ← 첫 번째는 0인 단위 행렬
- $\mathbf{f}$는 n_p 차원의 벡터 ← 0
- $\mathbf{A}$는 $n_c \times n_p$ 크기 행렬 (n_c = 제약 수) ← m
- $\mathbf{b}$는 n_c 차원의 벡터 ← 1

쌍대 문제

- 쌍대 문제(dual problem)는 원 문제(primal problem)의 하한값이거나 같습니다.
- LinearSVC, LinearSVR은 dual 매개변수의 기본값 True를 False로 바꾸면 원 문제를 풉니다. SVC, SVR은 쌍대 문제를 풉니다.
- 샘플 개수가 특성 개수보다 작을 때 쌍대 문제가 더 빠릅니다.
- 커널 트릭을 가능하게 합니다.

라그랑주 함수

- 제약이 있는 최적화 문제에서 제약을 목적 함수를 옮겨서 푸는 방법입니다.
- 목적 함수에서 라그랑주 승수를 곱한 제약을 뺍니다(라그랑주 함수).
- 최적화 문제에 해가 있다면 라그랑주 함수의 정류점(안장점) 중 하나여야 합니다. 즉 라그랑주 함수의 도함수가 0인 지점입니다.

하드 마진 문제의 라그랑주 함수

maxmize a, minimize w, b

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{m} \alpha^{(i)} \left(t^{(i)} \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b \right) - 1 \right)$$

여기서 $\alpha^{(i)} \geq 0 \qquad i = 1, 2, \cdots, m$에 대해

라그랑주 함수의 편도 함수 :

$$\nabla_{\mathbf{w}} \mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \alpha) = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{m} \alpha^{(i)} t^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$$

$$\frac{\partial}{\partial b} \mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \alpha) = -\sum_{i=1}^{m} \alpha^{(i)} t^{(i)}$$

정류점 :

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i=1}^{m} \hat{\alpha}^{(i)} t^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$$

$$\sum_{i=1}^{m} \hat{\alpha}^{(i)} t^{(i)} = 0$$

쌍대 형식

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{m} \alpha^{(i)} \left(t^{(i)} \left(\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} + b \right) - 1 \right)$$

대입

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i=1}^{m} \hat{\alpha}^{(i)} t^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$$

여기서 $\alpha^{(i)} \geq 0 \qquad i = 1, 2, \cdots, m$에 대해

$$\sum_{i=1}^{m} \hat{\alpha}^{(i)} t^{(i)} = 0$$

쌍대 형식 : minimize a

$$\mathcal{L}\left(\hat{\mathbf{w}}, \hat{b}, \alpha\right) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha^{(i)} \alpha^{(j)} t^{(i)} t^{(j)} x^{(i)^T} \cdot x^{(j)} - \sum_{i=1}^{m} \alpha^{(i)}$$

$$\hat{b} = \frac{1}{n_s} \sum_{\substack{i=1 \\ \hat{\alpha}^{(i)} > 0}}^{m} \left(t^{(i)} - \hat{\mathbf{w}}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)} \right)$$

여기서 $\alpha^{(i)} \geq 0 \qquad i = 1, 2, \cdots, m$일 때

커널 함수

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi\left(\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} x_1^2 \\ \sqrt{2}x_1x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}$$

$$\phi(\mathbf{a})^T \cdot \phi(\mathbf{b}) = \begin{pmatrix} a_1^2 \\ \sqrt{2}a_1a_2 \\ a_2^2 \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} b_1^2 \\ \sqrt{2}b_1b_2 \\ b_2^2 \end{pmatrix} = a_1^2b_1^2 + 2a_1b_1a_2b_2 + a_2^2b_2^2$$

$$= (a_1b_1 + a_2b_2)^2 = \left(\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}^T \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}\right)^2 = (\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b})^2$$

$$\mathscr{L}(\hat{\mathbf{w}}, \hat{b}, \alpha) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha^{(i)}\alpha^{(j)}t^{(i)}t^{(j)}x^{(i)^T} \cdot x^{(j)} - \sum_{i=1}^{m}\alpha^{(i)}$$

머서의 조건 : $K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \phi(\mathbf{a})^T \cdot \phi(\mathbf{b})$

선형: $K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b}$

다항식: $K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\gamma\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b} + r)^d$

가우시안 RBF: $K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \exp(-\gamma\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|^2)$

시그모이드[25]: $K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \tanh(\gamma\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{b} + r)$

커널 트릭을 사용한 예측

$$h_{\hat{\mathbf{w}}\hat{b}}\left(\phi\left(\mathbf{x}^{(n)}\right)\right) = \hat{\mathbf{w}}^T \cdot \phi\left(\mathbf{x}^{(n)}\right) + \hat{b} = \left(\sum_{i=1}^{m} \hat{\alpha}^{(i)} t^{(i)} \phi\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)\right)^T \cdot \phi\left(\mathbf{x}^{(n)}\right) + \hat{b}$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \hat{\alpha}^{(i)} t^{(i)} \left(\phi\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)^T \cdot \phi\left(\mathbf{x}^{(n)}\right)\right) + \hat{b}$$

$$= \sum_{\substack{i=1 \\ \hat{\alpha}^{(i)}>0}}^{m} \hat{\alpha}^{(i)} t^{(i)} K\left(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(n)}\right) + \hat{b}$$

$$\hat{\mathbf{w}} = \sum_{i=1}^{m} \hat{\alpha}^{(i)} t^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$$

$$\hat{b} = \frac{1}{n_s} \sum_{\substack{i=1 \\ \hat{\alpha}^{(i)}>0}}^{m} \left(t^{(i)} - \hat{\mathbf{w}}^T \cdot \phi\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)\right) = \frac{1}{n_s} \sum_{\substack{i=1 \\ \hat{\alpha}^{(i)}>0}}^{m} \left(t^{(i)} - \left(\sum_{j=1}^{m} \hat{\alpha}^{(j)} t^{(j)} \phi\left(\mathbf{x}^{(j)}\right)\right)^T \cdot \phi\left(\mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$$

$$\hat{b} = \frac{1}{n_s} \sum_{\substack{i=1 \\ \hat{\alpha}^{(i)}>0}}^{m} \left(t^{(i)} - \hat{\mathbf{w}}^T \cdot \mathbf{x}^{(i)}\right)$$

$$= \frac{1}{n_s} \sum_{\substack{i=1 \\ \hat{\alpha}^{(i)}>0}}^{m} \left(t^{(i)} - \sum_{\substack{j=1 \\ \alpha^{(j)}>0}}^{m} \hat{\alpha}^{(j)} t^{(j)} K\left(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}\right)\right)$$

감사합니다