선형 회귀

다중 선형 회귀(Multiple Linear Regression)

수치형(실수형) 설명변수 X와 연속형 숫자로 이뤄진 종속변수 Y의 관계를 선형으로 가정하고 이를 잘 표현할 수 있는 회귀계수 β를 데이터로 추정하는 모델

다중 선형 회귀 모델

$$y = f(x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_n x_n + \varepsilon$$

$$\varepsilon : \text{오차항}, \beta : \text{회귀계수(찾아야 하는 것)}$$

다중 선형 회귀 모델 방정식

n개의 데이터, k개의 설명변수$(x_{11}, \cdots, x_{nk})$, k개의 회귀계수$(\beta_0, \cdots, \beta_k)$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

$$\vec{y} = X\vec{\beta} + \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon} \sim N(E(\vec{\varepsilon}), V(\vec{\varepsilon})), E(\vec{\varepsilon}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, V(\vec{\varepsilon}) = \sigma^2 I$$

$$\vec{y}: \text{라벨}, X: \text{입력}, \vec{\beta}: \text{회귀계수}, \vec{\varepsilon}: \text{오차항}$$

회귀 계수 결정법

1. Direct Solution

오차 제곱합: 실제값(Y)과 모델 예측값($\hat{Y}$)의 차이를 최소로 하는 값을 회귀 계수로 선정 $error = loss = \| Y - \hat{Y} \|_2 \text{작도록 하는 값} \beta_0 \rightarrow \beta_k$

Sol. 회귀 계수에 대해 미분한 식 = 0(극소점)을 놓고 풀면 최적 계수들의 명시적인 해 구할 수 있다. $error \text{식의 미분값} = 0$

X와 Y 데이터만으로 회귀계수 구할 수 있다: $\vec{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T \vec{y}$

2. Numerical Search

경사하강법(Gradient Descent)

같은 방식을 반복하여 선형 회귀 계수를 구한다

목표: 어떤 함수 값(목적함수=비용함수=에러값)을 최소화

방법: 임의의 시작점 잡고, 해당 지점에서의 gradient를 구하고, gradient의 반대 방향으로 조금씩 이동하는 과정을 반복한다

조금씩 이동하는 과정의 정도: learning rate

경사하강법의 종류

1. Batch Gradient Descent(GD) = Vanilla Gradient Descent

    파라미터 업데이트할 때마다 모든 학습 데이터를 사용해서 cost function의 gradient 계산

    단점: 매우 낮은 학습 효율 보일 수 있다.

2. Stochastic Gradient Descent(SGD)

    파라미터 업데이트할 때, 무작위로 샘플링된 학습 데이터를 하나씩만 사용해서 cost function의 gradient 계산

    장점: 모델을 자주 업데이트하며, 성능 개선 정도를 빠르게 확인 가능
    local minima에 빠질 가능성 줄일 수 있음

    단점: 최소 cost에 수렴했는지 판단이 상대적으로 어려움

3. Mini Batch Gradient Descent

    파라미터 업데이트할 때마다 일정량의 데이터를 무작위로 뽑아 cost function의 gradient 계산(GD와 SGD 개념의 혼합)

    장점: SGD의 노이즈를 줄이면서, GD의 전체 배치보다 효율적

정규화

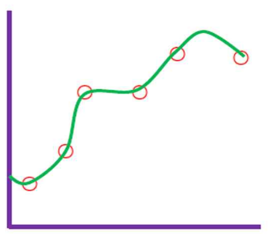
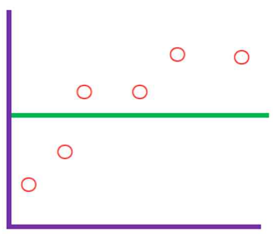
: **회귀계수**가 가질 수 있는 값에 **제약조건** 부여하여 미래 데이터에 대한 오차 기대

미래에 대한 오차 기댓값 = 모델의 Bias와 Variance

정규화: variance를 감소시켜 일반화 성능 높이는 기법

(단, 이 과정에서 bias 증가할 수 있다)

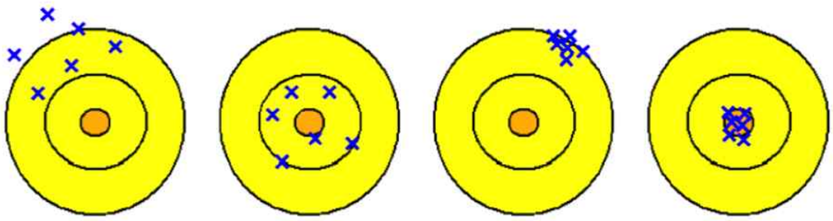
정규화 정도: $C = \frac{1}{\lambda}$ (C↓ → λ↑ → 규제강도↑)

	Overfitting 학습 데이터는 잘 맞추지만, 미래 데이터가 조금만 바뀌어도 예측값이 들쑥날쑥할 수 있다.
	정규화의 결과로 학습 데이터에 대한 설명력을 다소 포기한 대신 미래 데이터 변화에 상대적으로 안정적인 결과를 나타낼 수 있다.

Bias-Variance Decomposition

일반화(generalization) 성능을 높이는 정규화(regularization), 앙상블(ensemble) 기법의 이론적 배경

: 학습에 쓰지 않은 미래 데이터에 대한 오차의 기댓값을 모델의 bias와 variance로 분해하자



Bias	High	Low	High	Low
Variance	High	High	Low	Low

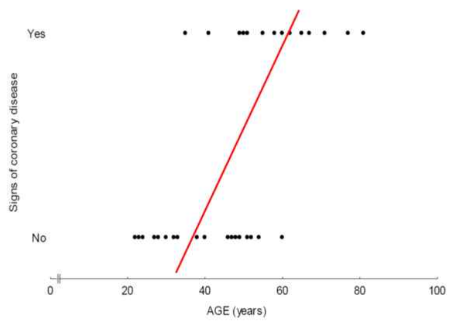
부스팅(Boosting): bias를 줄여 성능을 높이는 기법

라쏘 회귀(Lasso regression): variance를 줄여 성능을 높이는 기법

Bias	Variance		
Low	High	NN, SVM, kNN(small k)	튜닝만 잘 하면 과녁을 제대로 맞출 모델
High	Low	Logistic Repression, LDA, kNN(large k)	데이터 노이즈에 강인한 모델

Why 선형 회귀는 선형 분류 문제 풀 수 X?

선형 회귀(수치형x연속형: 나이와 혈압)에서 선형 분류(수치형x범주형: 나이와 암 발병 여부)로 넘어가는 이유



: 범주형 숫자는 연속형 숫자와 달리 의미를 지니지 않는다

= 0(음성)과 1(양성)을 바꿔서 0(양성)과 1(음성)으로 해도 상관없다

∴분류 문제에 다중 선형 회귀 모델을 적용하지 못한다.

해결 방법: 범주형 숫자에 로지스틱 회귀 모델을 적용할 수 있다.

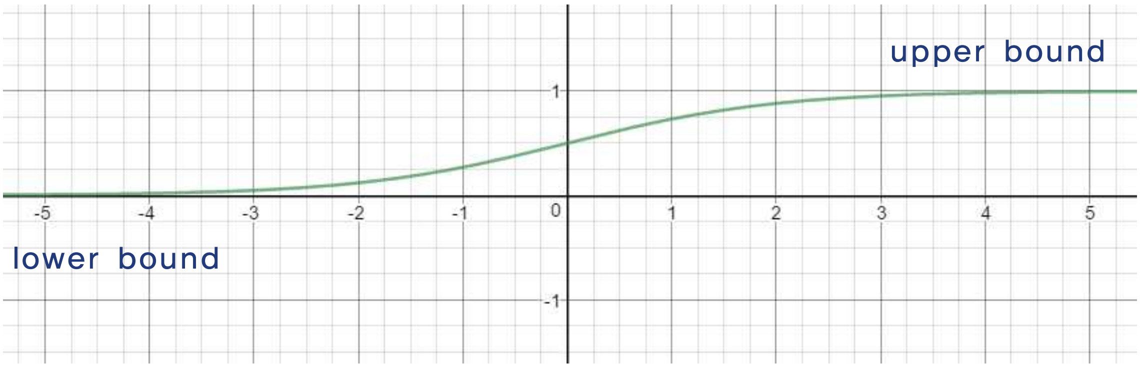
로지스틱 회귀(Logistic Regression)

로지스틱 함수(Logistic function) = 시그모이드 함수(Sigmoid func.)

: x값으로 어떤 값이든 받을 수 있지만
출력 결과 y는 항상 0과 1 사이의 값이 된다.

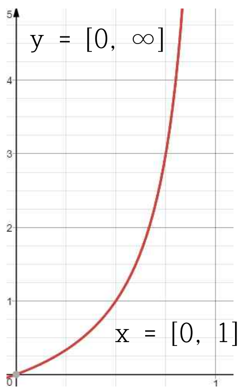
$$y = \frac{1}{1+e^{-x}}$$

확률 밀도 함수(probability density function) 요건 충족



승산(Odds)

: 임의의 사건 A가 발생하지 않을 확률 대비 일어날 확률의 비율



$$odds = \frac{P(A)}{P(A^c)} = \frac{P(A)}{1-P(A)}$$

P(A)가 1에 가까울수록 승산이 커지고,
반대로 P(A)가 0이라면 승산은 0이다.

이항 로지스틱 회귀

Y가 범주형일 경우, 다중선형회귀 모델 적용 불가

다중선형회귀모델: $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_n x_n = \vec{\beta}^T \vec{x}$

라벨: 연속형 Y → 범주형 Y [0, 1]로 하기 위해

1. Y를 확률식으로 바꿔보면(좌변은 그대로) $P(Y=1 | X=\vec{x}) = \vec{\beta}^T \vec{x}$

범위: 좌변 [0, 1], 우변 [−∞, ∞]으로 좌변과 우변의 레벨이 맞지 않다

2. Y를 승산으로 바꿔보면(좌변은 그대로) $\frac{P(Y=1|X=\vec{x})}{1-P(Y=1|X=\vec{x})}=\vec{\beta}^T\vec{x}$

범위: 좌변 [0, ∞], 우변 [−∞, ∞]으로 좌변과 우변의 레벨이 맞지 않다

3. Y 승산에 로그를 취하면 $\log_e(\frac{P(Y=1|X=\vec{x})}{1-P(Y=1|X=\vec{x})})=\vec{\beta}^T\vec{x}$

범위: 좌변 [−∞, ∞], 우변 [−∞, ∞] 으로 좌변과 우변의 레벨이 맞다

4. x가 주어졌을 때 범주 1일 확률$=p(x)$, 우변 $\vec{\beta}^T\vec{x}=a$로 치환하면

$$\log_e(\frac{p(x)}{1-p(x)})=a$$
$$\frac{p(x)}{1-p(x)}=e^a$$
$$p(x)=e^a\{1-p(x)\}=e^a+e^ap(x)$$
$$p(x)(1+e^a)=e^a$$
$$p(x)=\frac{e^a}{1+e^a}=\frac{1}{1+e^{-a}}$$

$\therefore P(Y=1|X=\vec{x})=\frac{1}{1+e^{-\vec{\beta}^T\vec{x}}}$ ⇒ 로지스틱 함수(시그모이드 함수)

이항 로지스틱 회귀의 결정 경계

이항 로지스틱 모델에 입력 벡터 x를 넣으면 범주 1에 속할 확률을 반환한다

판단 기준: $P(Y=1|X=\vec{x})>P(Y=0|X=\vec{x})$

범주가 2개 뿐이므로 $P(Y=1|X=\vec{x})=p(x)$로 치환하면

$$p(x)>1-p(x)$$
$$\frac{p(x)}{1-p(x)}>1$$
$$\log\frac{p(x)}{1-p(x)}>0$$
$$\therefore \vec{\beta}^T\vec{x}>0$$

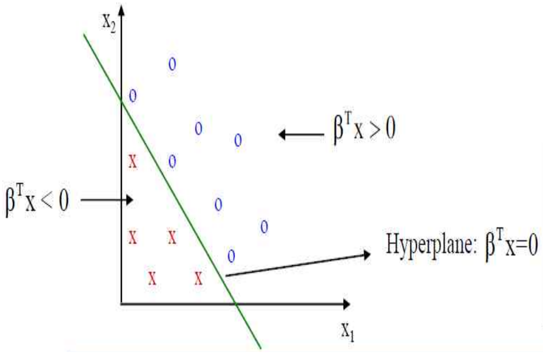
마찬가지로 $\vec{\beta}^T\vec{x}<0$이면 데이터 범주를 0으로 분류한다.

로지스틱 결정 경계(decision boundary)

: $\vec{\beta}^T\vec{x}=0$인 하이퍼플레인(hyperplane)

$\vec{\beta}^T\vec{x}>0\Rightarrow 1, \vec{\beta}^T\vec{x}<0\Rightarrow 0$

$\vec{\beta}^T\vec{x}=0\Rightarrow$ 로지스틱 결정 경계 = 하이퍼프레인



Classifier

$$y = \frac{1}{1 - e^{-\vec{\beta}^T \vec{x}}} \left(\begin{array}{l} y \rightarrow 1 \quad \text{if} \quad \vec{\beta}^T \vec{x} \rightarrow \infty \\ y = \frac{1}{2} \ \text{if} \quad \vec{\beta}^T \vec{x} = 0 \\ y \rightarrow 0 \quad \text{if} \quad \vec{\beta}^T \vec{x} \rightarrow -\infty \end{array} \right)$$

다항 로지스틱 회귀

이항 로지스틱 회귀 모델을 이용해서 다항 로지스틱 회귀 문제 풀기

$$\log \frac{P(Y=1|X=\vec{x})}{P(Y=3|X=\vec{x})} = \beta_1^T \vec{x}$$

$$\log \frac{P(Y=2|X=\vec{x})}{P(Y=3|X=\vec{x})} = \beta_2^T \vec{x}$$

(범주 3에 속할 확률) = 1 – (범주 1에 속할 확률) – (범주 2에 속할 확률)

$$P(Y=1|X=\vec{x}) = \frac{e^{\vec{\beta_1}^T \vec{x}}}{1 + e^{\vec{\beta_1}^T \vec{x}} + e^{\vec{\beta_2}^T \vec{x}}}$$

$$P(Y=2|X=\vec{x}) = \frac{e^{\vec{\beta_2}^T \vec{x}}}{1 + e^{\vec{\beta_1}^T \vec{x}} + e^{\vec{\beta_2}^T \vec{x}}}$$

$$P(Y=3|X=\vec{x}) = \frac{1}{1 + e^{\vec{\beta_1}^T \vec{x}} + e^{\vec{\beta_2}^T \vec{x}}}$$

k개 범주를 분류하는 다항 로지스틱 회귀 모델의 입력 벡터 x가 각 클래스로 분류될 확률

$$P(Y=1|X=\vec{x}) = \frac{e^{\vec{\beta_k}^T \vec{x}}}{1 + \sum_{i=1}^{K-1} e^{\vec{\beta_i}^T \vec{x}}} \quad (k = 0, 1, ..., K-1)$$

$$P(Y=K|X=\vec{x}) = \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^{K-1} e^{\vec{\beta_i}^T \vec{x}}}$$

소프트맥스(Softmax function)

「로그 승산」으로 된 좌변을 「로그확률」로 변경하기

$$P(Y=1|X=\vec{x}) = \frac{e^{\vec{\beta_1}^T\vec{x}}}{1+\sum_{i=1}^{K-1} e^{\vec{\beta_i}^T\vec{x}}}$$

$$P(Y=2|X=\vec{x}) = \frac{e^{\vec{\beta_2}^T\vec{x}}}{1+\sum_{i=1}^{K-1} e^{\vec{\beta_i}^T\vec{x}}}$$

$$\vdots$$

$$P(Y=K|X=\vec{x}) = \frac{1}{1+\sum_{i=1}^{K-1} e^{\vec{\beta_i}^T\vec{x}}}$$

$$\Rightarrow$$

$$Z = 1+e^{\vec{\beta_1}^T}\vec{x}+e^{\vec{\beta_2}^T}\vec{x}+\cdots = 1+\sum_{i=1}^{K-1} e^{\vec{\beta_i}^T\vec{x}}$$

$$\log P(Y=1|X=\vec{x}) = \vec{\beta_1}^T\vec{x} - \log Z$$

$$\log P(Y=2|X=\vec{x}) = \vec{\beta_2}^T\vec{x} - \log Z$$

$$\vdots$$

$$\log P(Y=K|X=\vec{x}) = \vec{\beta_K}^T\vec{x} - \log Z$$

로그 성질을 이용해 범주 c에 속할 확률을 기준으로 식을 정리하기

$$\log P(Y=c) + \log Z = \vec{\beta_c}^T\vec{x}$$

$$\log\{P(Y=c)\times Z\} = \vec{\beta_c}^T\vec{x}$$

$$P(Y=c)\times Z = e^{\vec{\beta_c}^T\vec{x}}$$

$$P(Y=c) = \frac{1}{Z}e^{\vec{\beta_c}^T\vec{x}}$$

plus. 전체 확률의 합 = 1

$$1 = \sum_{k=1}^{K} P(Y=k) = \sum_{k=1}^{K}\frac{1}{Z}e^{\vec{\beta_k}^T\vec{x}} = \frac{1}{Z}\sum_{k=1}^{K} e^{\vec{\beta_k}^T\vec{x}}$$

$$\therefore Z = \sum_{k=1}^{K} e^{\vec{\beta_k}^T\vec{x}}$$

$$\Rightarrow P(Y=c) = \frac{e^{\vec{\beta c}^T\vec{x}}}{\sum_{k=1}^{K} e^{\vec{\beta_k}^T\vec{x}}}$$ **: 소프트맥스 함수**

정리

선형 회귀 → 이항 로지스틱 회귀 → 다항 로지스틱 회귀

ㄴ시그모이드 함수 ㄴ소프트맥스 함수

로지스틱 회귀 api

[sklearn.linear_model.LogisticRegression(penalty='l2', C=1.0, random_state=None)]

→ $C = \frac{1}{\lambda}$로 규제화의 정도를 조절: c값이 클수록 규제화 강도가 줄어든다

규제 강도에 따른 실험

1. L1, L2 규제화

    penalty: {'l1', 'l2', 'elasticnet', 'none'}, default = 'l2'

2. $C = \frac{1}{\lambda}$로 규제화

→ 테스트 데이터의 라벨을 알 수 없을 경우,

    학습 데이터의 일부를 검증 데이터(validation data)로 구성하여 테스트

규제 강도에 따른 초정계수(회귀계수) 실험

- 규제 강도↑ → 추정된 계수들의 크기(절댓값)↓

    L1 규제화: 규제 강도↑ → 계수에 0이 많아진다

    계수에 대응하는 특성 변수(설명 변수 = x)를 제거하는 역할이다.

    L2: β 거의 변화 없이 그대로

    L1: $\beta \rightarrow 0$, $\beta_0 + \cancel{\beta_1 x_1} + \beta_2 x_2 + \cdots$