목차

교육 일정

EliceAcademy

머신러닝을 활용한 나노/탄소 소재 생산공정 최적화

03 금속분말 생산공정 최적화를 위한 머신러닝 기법

목차

머신러닝을 활용한
나노/탄소 소재 생산공정
최적화

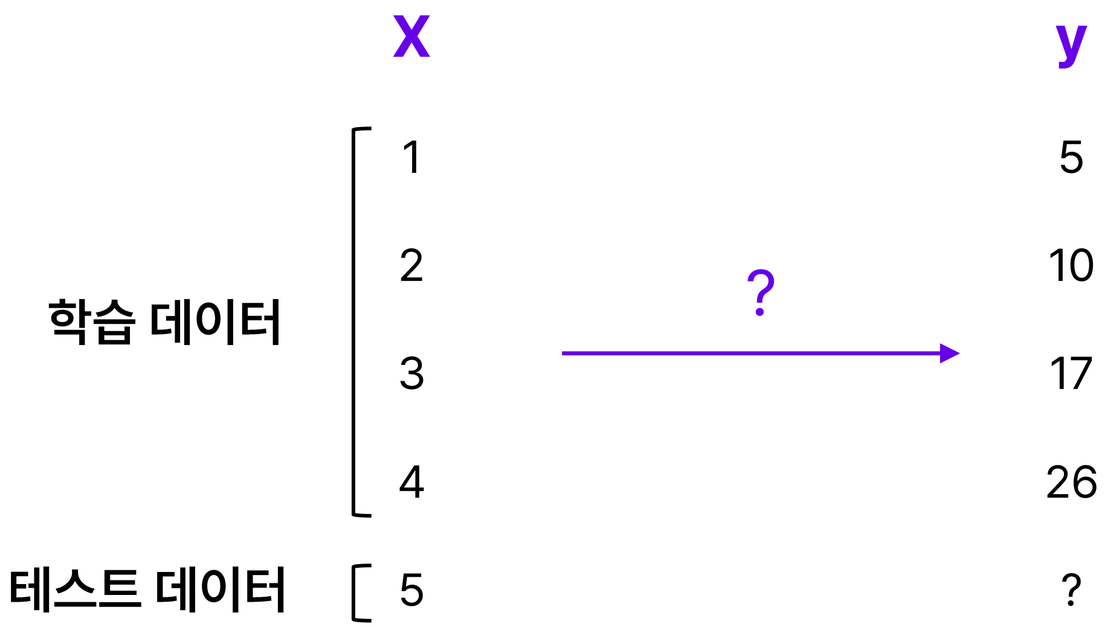
01

선형 회귀 분석

EliceAcademy

회귀 분석

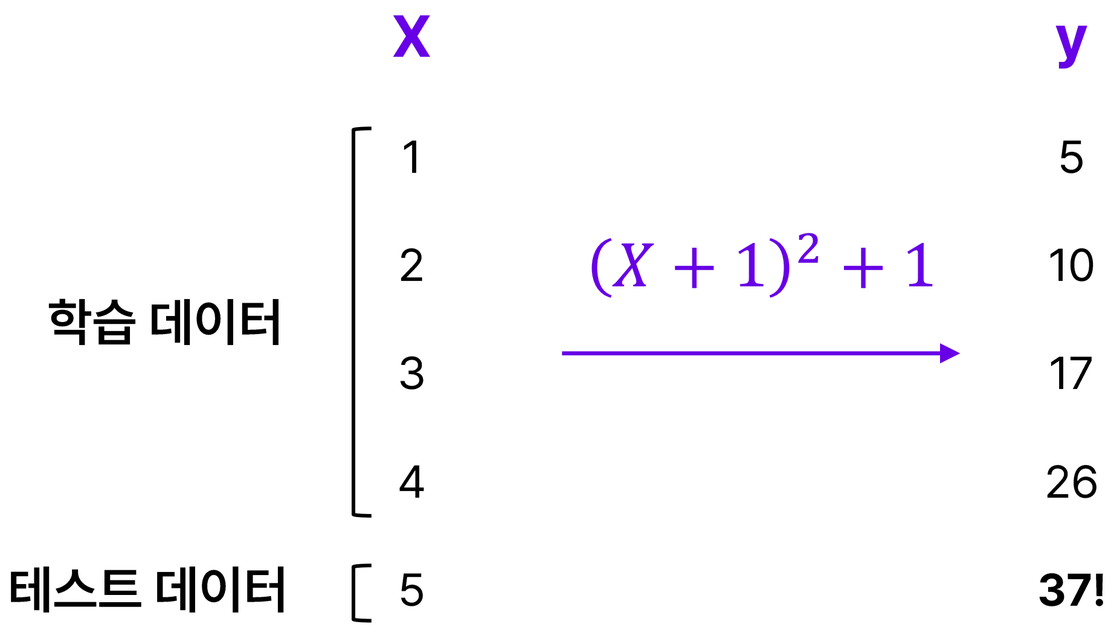
- 입력 변수와 출력 변수 사이의 관계를 모델링하여, 입력값에 대한 출력값을 예측하는 일.



EliceAcademy

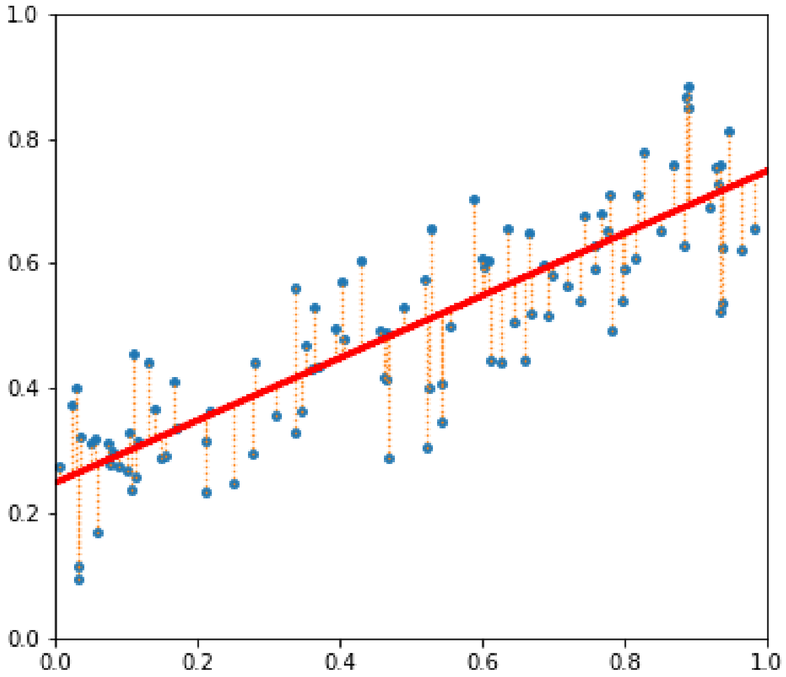
회귀 분석

- 입력 변수와 출력 변수 사이의 관계를 모델링하여, 입력값에 대한 출력값을 예측하는 일.



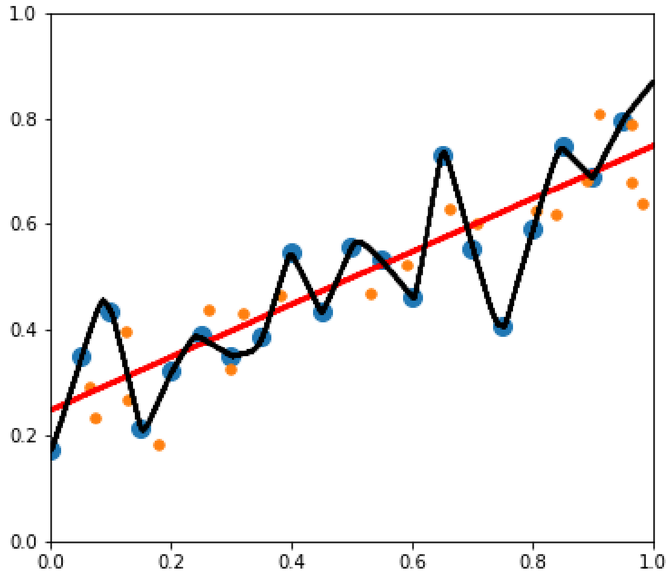
회귀 분석

- 회귀의 기본 원칙은 잔차를 최소화 하는 것



- 파란 점: 학습 데이터
- 빨간 선: 회귀 모델
- 주황 점선: 잔차

과적합



- 파란 점: 학습 데이터
- 주황 점: 테스트 데이터
- 검은 선: 과적합 된 모델
  - 학습 오차: 0
  - 테스트 오차: 0.19
- 빨간 선: 일반화가 잘 된 모델
  - 학습 오차: 0.07
  - 태스트 오차: 0.08

완벽한 모델을 만들 수는 없을까요?

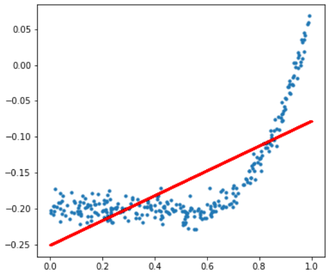
- 실제 데이터에는 **노이즈**가 있을 수 밖에 없음
- All models are wrong, but some are useful!
- 완벽한 모델이라는 것은 없음!
- 데이터 분석을 통해 제한된 시간과 자원으로 **적절한 모델**을 찾는 것이 중요

https://en.wikipedia.org/wiki/All_models_are_wrong

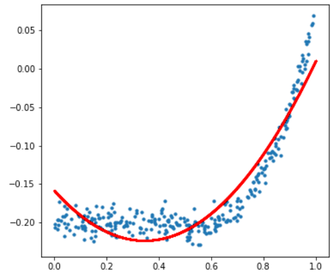
EliceAcademy

선형 회귀 모델

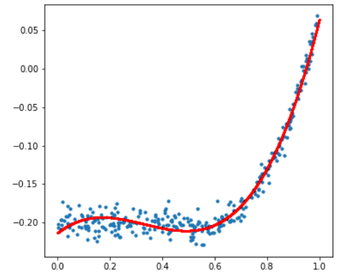
- 모델의 변수 β_i와 Y가 선형 관계.
  - $Y = \beta_1 X + \beta_0$
  - $Y = \beta_2 X^2 + \beta_1 X + \beta_0$
  - $Y = \beta_3 X^3 + \beta_2 X^2 + \beta_1 X + \beta_0$
  - ...
- 목적: 잔차를 최소화하는 β를 찾는 것.
- 장점: 빠르고 효율적이며, 최적화가 쉽다.
- 단점: 복잡한 관계를 모델링하기 어렵다.
- *e.g.*, 최소 제곱 선형 회귀 모델, Ridge 회귀 모델



$Y = \beta_1 X + \beta_0$



$Y = \beta_2 X^2 + \beta_1 X + \beta_0$



$Y = \beta_3 X^3 + \beta_2 X^2 + \beta_1 X + \beta_0$

EliceAcademy

선형 회귀 모델

독립변수 / 종속변수	1개	2개 이상
1개	단변량 단일 선형 회귀	단변량 다중 선형 회귀
2개 이상	다변량 단일 선형 회귀	다변량 다중 선형 회귀

단변량 단일 선형 회귀

- 독립 변수: 1개
- 종속 변수: 1개
- *e.g.,* 키로부터 몸무게 예측
- $y = \beta_1 x + \beta_0$

단변량 다중 선형 회귀

- 독립 변수: 2개 이상
- 종속 변수: 1개
- *e.g.,* 키와 체지방량으로부터 몸무게 예측
- $y = \beta_N x_N + \beta_{N-1} x_{N-1} + \cdots + \beta_1 x_1 + \beta_0$

다변량 단일 선형 회귀

- 독립 변수: 1개
- 종속 변수: 2개 이상
- *e.g.,* 키로부터 체중과 체지방량 예측
- $[y_N, y_{N-1}, \cdots, y_1] = \overrightarrow{\beta_1} x_1 + \overrightarrow{\beta_0}$

다변량 다중 선형 회귀

- 독립 변수: 2개 이상
- 종속 변수: 2개 이상
- *e.g.,* 키와 체중으로부터 체지방량과 골격근량 예측, 금속분말 데이터셋
- $\left[y_{N_y}, y_{N_y-1}, \cdots, y_1\right] = \left[\overrightarrow{\beta}^T_{N_y}\left[x_{N_x}, x_{N_x-1}, \cdots, x_1, 1\right], \overrightarrow{\beta}^T_{N_y-1}\left[x_{N_x}, x_{N-1}, \cdots, x_1, 1\right], \cdots, \overrightarrow{\beta}^T_1\left[x_{N_x}, x_{N_x-1}, \cdots, x_1, 1\right]\right]$

EliceAcademy

선형 회귀에서 피쳐 선택

$x_1 \quad x_2$ → **피쳐 폭발** → $x_1 \quad x_2 \quad x_1x_2 \quad x_1^2 \quad x_1^3x_2 \quad \frac{x_1}{x_2} \quad log\ x_1 \quad \cdots$ → **피쳐 선택** → $x_1 \quad x_1x_2 \quad x_2^3$

입력값을 조합하여 피쳐를 늘림

늘린 피쳐 중 의미있는 피쳐 선택

02

선형 회귀 모델

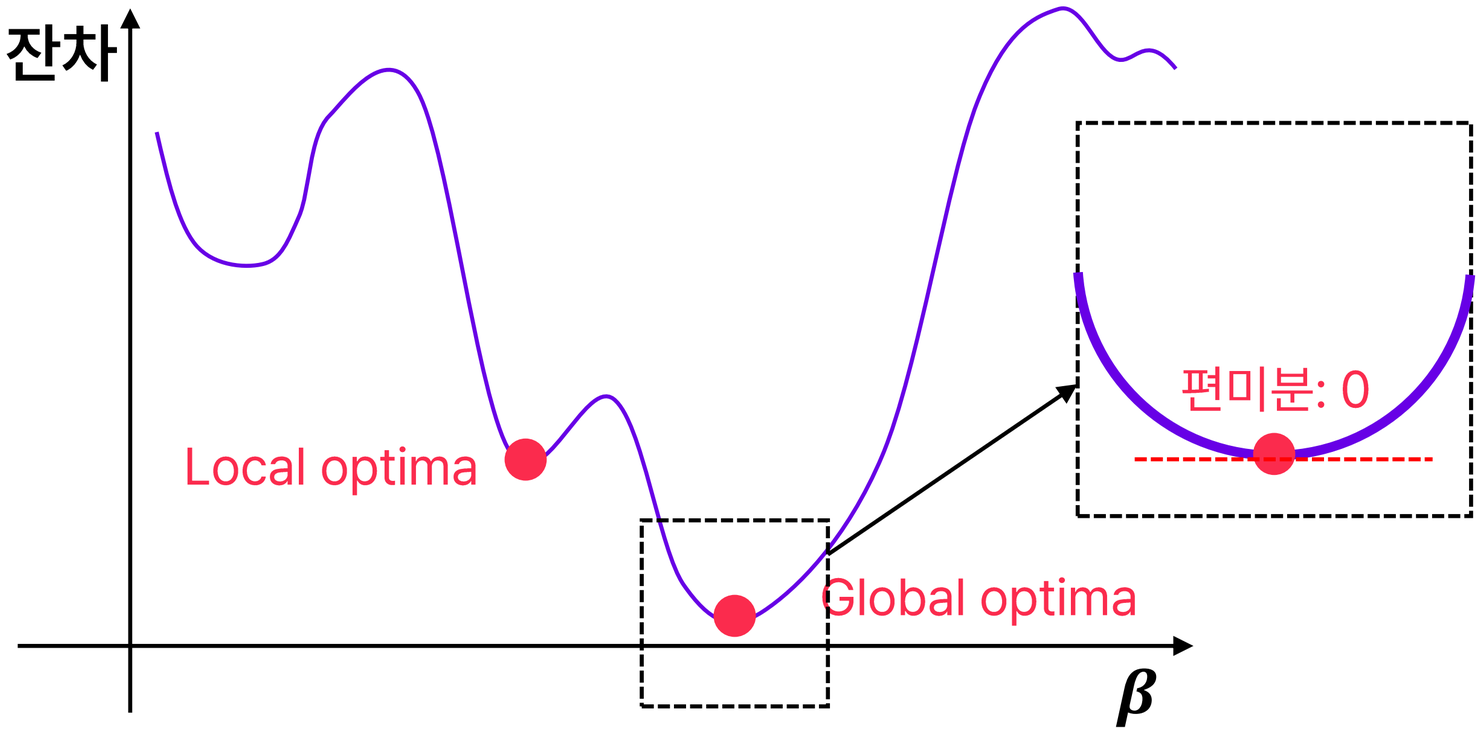
EliceAcademy

선형 회귀 모델의 목표

- 잔차를 최소화 하는 모델의 변수 β 를 찾는 것
- 과적합 되지 않고 일반화가 잘 되어야 한다.
- 다변량 다중 선형 회귀 모델에서의 β
  - $[y_N, y_{N-1}, \dots, y_1] = \left[\overrightarrow{\beta}^T_N[x_N, x_{N-1}, \dots, x_1], \overrightarrow{\beta}^T_{N-1}[x_N, x_{N-1}, \dots, x_1], \dots, \overrightarrow{\beta}^T_1[x_N, x_{N-1}, \dots, x_1]\right]$
  - $\beta = [\overrightarrow{\beta}^T_N, \overrightarrow{\beta}^T_{N-1}, \dots, \overrightarrow{\beta}^T_1]$

EliceAcademy

머신러닝의 최적화 방법론



- 학습 변수의 변화에 따라 잔차가 정해진다.
- Global optima 지점의 β를 찾는 것이 최적화이다.
- Global optima 지점에서 잔차를 β에 대해 편미분하면 0이 됨을 이용한다.
- 그러나, 그 지점이 local optima 일수도 있다.

최소 제곱 선형 회귀 (Linear least square regression)

- $X = \{X_1, \dots, X_N\}, \quad y = \{y_1, \dots, y_N\}, \quad X$는 입력데이터, y는 출력데이터, N은 데이터 개수.
- $X_i = \{x_{i1}, \dots, x_{id}\}$, d는 입력데이터 차원 수.
- $\hat{y}_i = f(X_i; \beta) = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_d x_{id} = \beta_0 + \beta^T X_i$.
- $X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{Nd} \end{bmatrix} \rightarrow X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1d} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & \cdots & x_{Nd} \end{bmatrix}$
- $\hat{y} = X\beta$
- $e = y - \hat{y} = y - X\beta$
  에서 $e^T e = \sum_i^N (y_i - \hat{y}_i)^2 = (\mathrm{y} - \mathrm{X}\beta)^T (y - X\beta)$를 최소화하는 $\beta = \{\beta_0, \dots, \beta_d\}$ 최적화.
- $e^T e$를 잔차제곱합 (RSS: residual sum of squares)라고 한다.

최소 제곱 선형 회귀 (Linear least square regression)

- $e^T e$를 최소화하는 $\beta = \{\beta_0, \dots, \beta_d\}$ 최적화

  → $e^T e$를 β로 편미분하여 0이 되는 β를 찾자!

- $e^T e = (\mathrm{y} - \mathrm{X}\beta)^T (y - X\beta) = y^T y - 2X^T y\beta + \beta^T X^T X\beta$

- $\frac{d(e^T e)}{d\beta} = -2X^T y + 2X^T X\beta = 0$

- $X^T X\beta = X^T y$

- 이 때, $X^T X$가 역행렬을 가진다면 최적의 β인 β^*는

  $\beta^* = (X^T X)^{-1} X^T y$

Ridge 선형 회귀 모델 (Ridge regression)

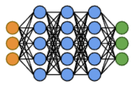
- 최소제곱 선형 회귀 모델은 **과적합**이 발생할 수 있음.
- Ridge 회귀 모델은 잔차제곱합 (RSS)을 최소화하는 대신, 아래의 식을 최소화하는 것을 목표로 한다.

$$RSS + \lambda \sum \beta^2, \quad \lambda\text{는 작은 상수.}$$

- 즉, 목적 함수에 **학습 계수의 제곱합**을 더하여 특정 계수가 너무 커지는 것을 방지하여 과적합을 예방한다.
- 위와 같이 학습 계수의 제곱합을 목적함수에 더하는 것을 **Ridge regularization** (Ridge 정규화)라고 한다.
- 학습 계수의 절대값의 합을 목적함수에 더하는 것은 **Lasso regularization** (Lasso 정규화)라고 한다.

비선형 회귀 모델

- 모델의 변수 β_i와 Y가 비선형 관계.
  - $Y = \frac{\beta_0 X + \beta_1}{\beta_2 e^X + \beta_3}$
  - ...
- 복잡한 관계를 모델링하기 적합하다.
- 선형 회귀 모델보다 복잡하며, 최적화가 어려울 수 있다.
- *e.g.,* 딥러닝 (Multi layer perceptron, convolutional neural network)



고양이

03

선형 회귀 모델의 평가

회귀 평가 지표

- 학습한 선형 회귀 모델의 성능 평가를 위한 지표
- 실제값과 모델이 예측한 값의 차이에 기반한 평가 방법 사용
- *e.g.*, RSS, MSE, MAE, MAPE, R^2

RSS (잔차제곱합, Residual Sum of Squares)

- 전체 데이터에 대한 실제 값과 예측 값의 오차 제곱 합
- $\mathrm{RSS} = \sum(y_i - \bar{y}_i)^2$
- 장점
  - 가장 간단한 평가 방법
  - 직관적 해석 가능
- 단점
  - 데이터의 개수에 의존적임
  - 데이터의 스케일에 의존적임

MSE (평균제곱오차, Mean Squared Error)

- 전체 데이터에 대한 실제 값과 예측 값의 오차 제곱 평균
- $\mathrm{MSE} = \frac{\mathrm{RSS}}{\mathrm{N}}$
- 이상치에 민감함
  - 실제값과 크게 다르게 예측한 값에서 오차가 커짐
- 장점
  - 간단한 방법으로 직관적 해석 가능
  - RSS와 달리, 데이터의 개수에 의존적이지 않음
- 단점
  - 여전히 데이터의 스케일에 의존적임

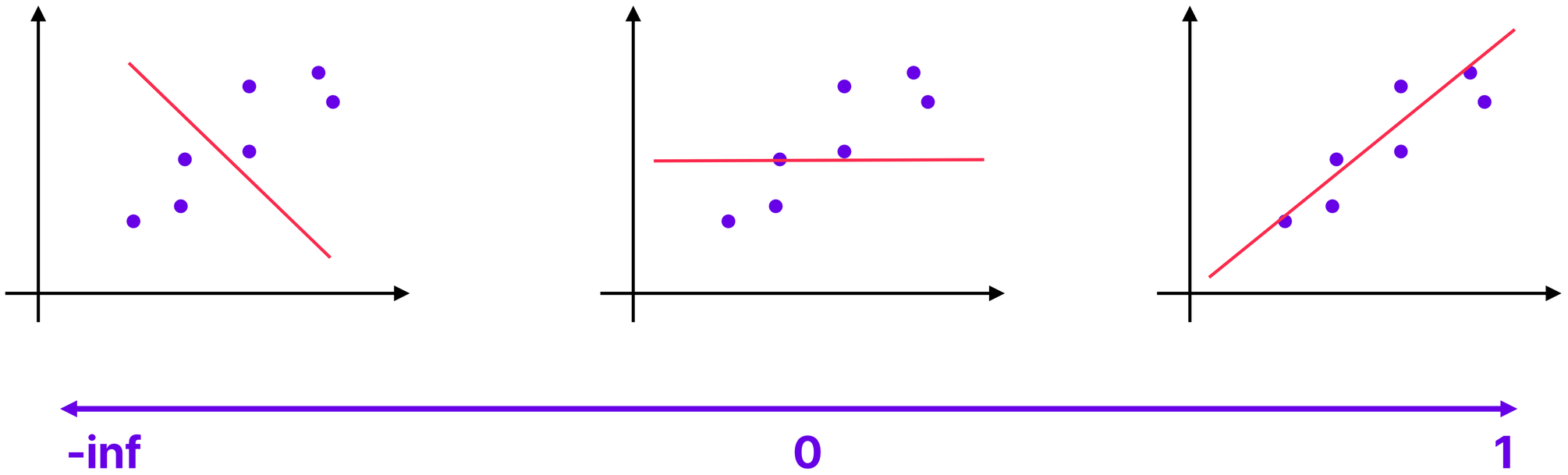
MAE (평균 절대값 오차, Mean Absolute Error)

- 전체 데이터에 대한 실제 값과 예측 값의 오차 절대값 평균
- $\mathrm{MAE} = \frac{\sum|(y_i - \bar{y}_i)|}{N}$
- 이상치에 덜 민감함
  - 변동성이 큰 지표와 낮은 지표를 함께 예측할 시 유용
- 장점
  - 간단한 방법으로 직관적 해석 가능
  - RSS와 달리, 데이터의 개수에 의존적이지 않음
- 단점
  - MSE와 마찬가지로 여전히 데이터의 스케일에 의존적임

R^2 (결정계수, R-squared)

- 회귀 모델의 설명력을 표현하는 지표
  - $R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS}$
- TSS 는 데이터 평균값 (μ_y) 과 실제값 차이의 제곱합
  - $TSS = \sum(y_i - \mu_y)^2$
- 해석
  - 1에 가까울수록 설명력이 좋음
  - 0이면 데이터의 평균값으로 예측한 모델
  - 음수이면 평균값 예측보다 성능이 좋지 못한 모델

R^2 (결정계수, R-squared)



EliceAcademy

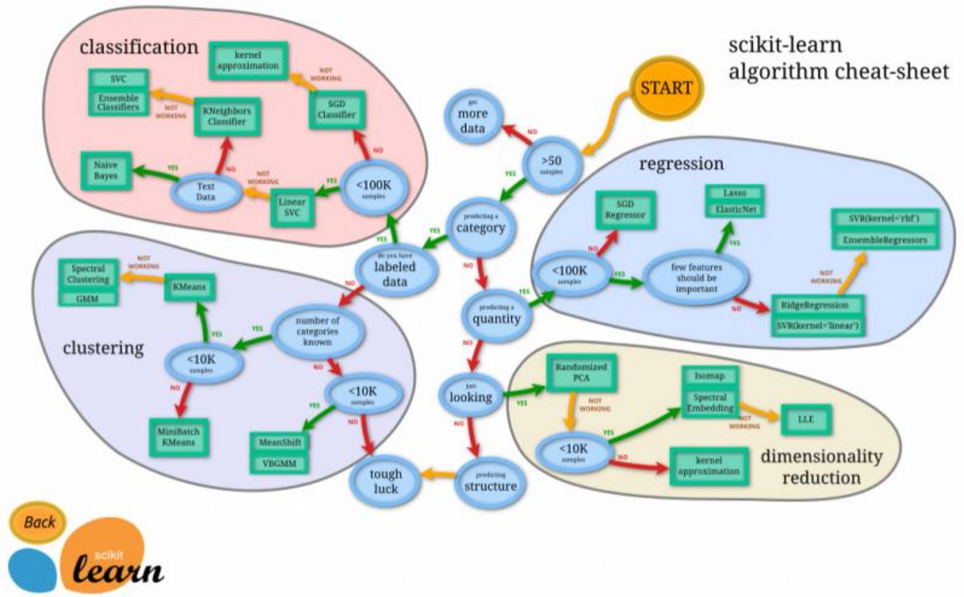
04

선형 회귀 모델의 구현

EliceAcademy

사이킷런 (scikit-learn) 라이브러리

- Python 을 대표하는 머신러닝 라이브러리
- 오픈소스
- 다양한 머신러닝 알고리즘을 쉽게 구현 가능



최소 제곱 선형 회귀 모델 구현

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression

fitter = LinearRegression() # 최소 제곱 선형 회귀 모델 생성
fitter.fit(X_train, y_train) # 모델 학습
pred = fitter.predict(X_test) # 테스트 데이터에 대해 예측
```

Ridge 선형 회귀 모델 구현

```
from sklearn.linear_model import Ridge

fitter = Ridge(alpha = 1.0) # Ridge 선형 회귀 모델 생성, alpha는 λ의 값
fitter.fit(X_train, y_train) # 모델 학습
pred = fitter.predict(X_test) # 테스트 데이터에 대해 예측
```

RSS, MSE, MAE의 구현

```
def RSS(gt, pred):
    return ( (gt - pred) ** 2 ).sum()

def MSE(gt, pred):
    data_len = len(gt)
    return ( (gt - pred) ** 2 ).sum() / data_len

def MAE(gt, pred):
    data_len = len(gt)
    return ( np.abs(gt - pred) ).sum() / data_len
```

R^2 구현

```
from sklearn.metrics import r2_score

y_pred = model.predict(X)
r2 = r2_score(y, y_pred)
```

Quiz

- 독립변수에 의해 영향을 받는 값으로, 머신러닝 모델에서 출력값에 해당하는 변수를 무엇이라 부르나요?
  - 종속변수

Quiz

- 머신러닝 모델 학습에서 찾고자 하는 지점으로, loss를 학습계수로 편미분 하였을 때 0이 되면서

  Local optima 가 아닌 지점을 무엇이라 부르나요?

  - Global optima

Quiz

- Minima 지점에서 가중치에 대한 목적함수의 편미분 값은 무엇인가요?
  - 0

Quiz

- 선형 회귀 분석의 평가 방법으로 올바르지 않은 것은 무엇인가요?

① RSS

② R^2 score

③ MSE

④ STD