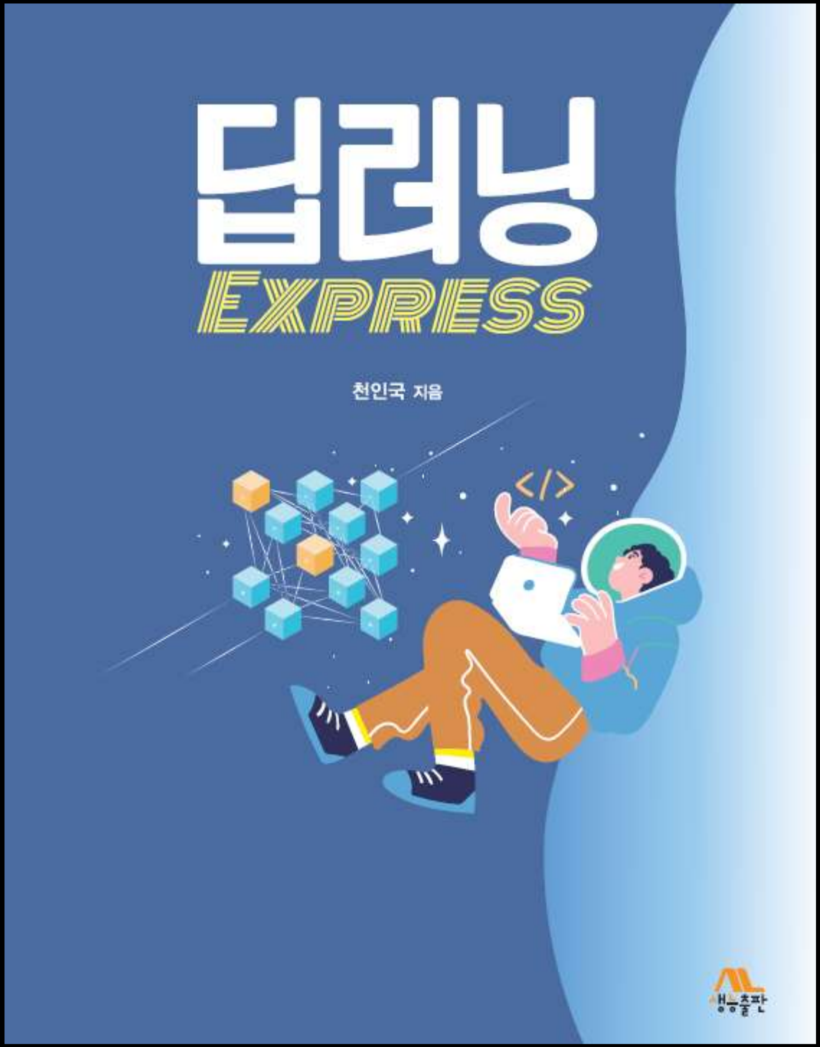
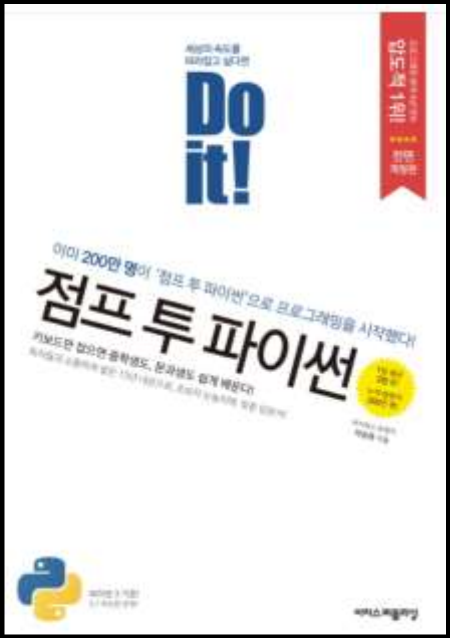
선형 회귀

Linear Regression

교재/참고도서


딥러닝
EXPRESS
천인국 지음
생능출판


Do it!
이미 200만 명이 '점프 투 파이썬'으로 프로그래밍을 시작했다!
점프 투 파이썬

학습 목표

- 회귀의 개념을 이해한다.
- 경사 하강법을 이해한다.
- 과잉 적합과 과소 적합을 이해한다.
- 파이썬과 sklearn, pandas를 이용하여 회귀를 구현해본다.

회귀(regression)와 분류(classification)

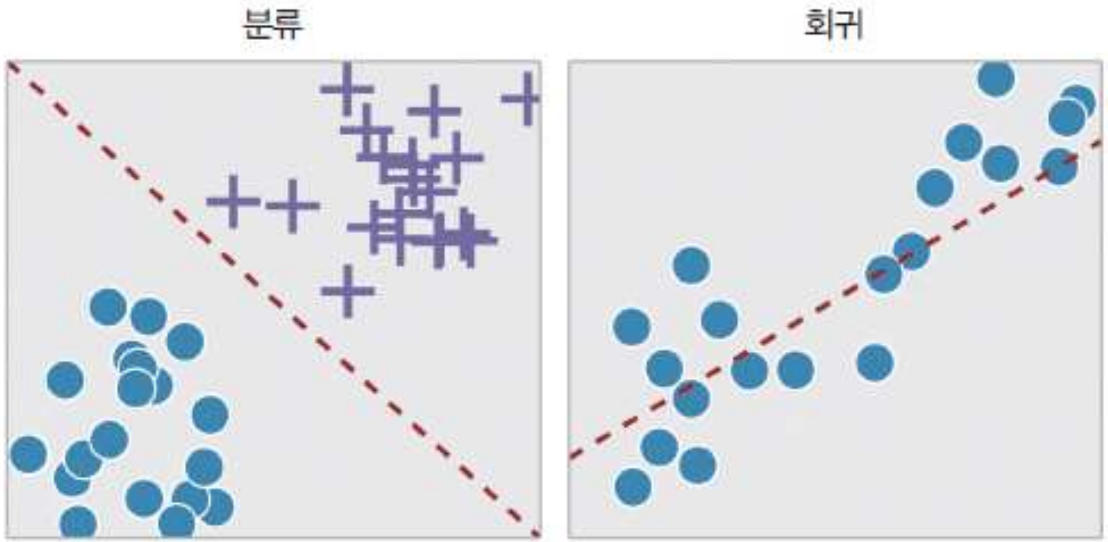


그림 4-1 회귀와 분류

선형 회귀

- 회귀란 일반적으로 데이터들을 2차원 공간에 찍은 후에 이들 데이터들을 가장 잘 설명하는 직선이나 곡선을 찾는 문제라고 할 수 있다.
- y = f(x)에서 출력 y가 실수이고 입력 x도 실수일 때 함수 f(x)를 예측하는 것이 회귀이다.

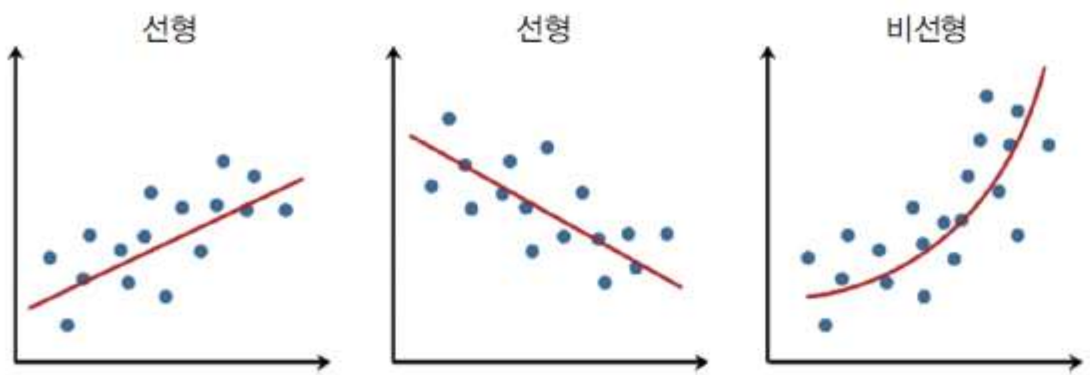


그림 4-2 회귀의 종류

선형 회귀의 예

- 부모의 키와 자녀의 키의 관계 조사
- 면적에 따른 주택의 가격
- 연령에 따른 실업율 예측
- 공부 시간과 학점 과의 관계
- CPU 속도와 프로그램 실행 시간 예측

선형 회귀 소개

- 직선의 방정식: **$f(x) = mx+b$**
- 선형 회귀는 입력 데이터를 가장 잘 설명하는 기울기와 절편값을 찾는 문제이다

- 선형 회귀의 기본식: **$f(x) = Wx+b$**
  - W: 기울기->가중치
  - B: 절편->바이어스

선형 회귀 예제

키(단위: cm)	몸무게(단위: kg)
174	71
152	55
138	46
128	38
186	88

그림 4-3 선형 회귀의 예제

선형 회귀의 종류

- 단순 선형 회귀: 단순 선형 회귀는 독립 변수(x)가 하나인 선형 회귀이다.

$$f(x) = wx + b$$

- 다중 선형 회귀: 독립 변수가 여러 개인 경우

$$f(x, y, z) = w_0 + w_1 x + w_2 y + w_3 z$$

$$\text{매출} = w_0 + w_1 \times \text{인터넷 광고} + w_2 \times \text{신문광고} + w_3 \times TV\text{광고}$$

선형 회귀의 원리

x	y
1	2
2	5
3	6

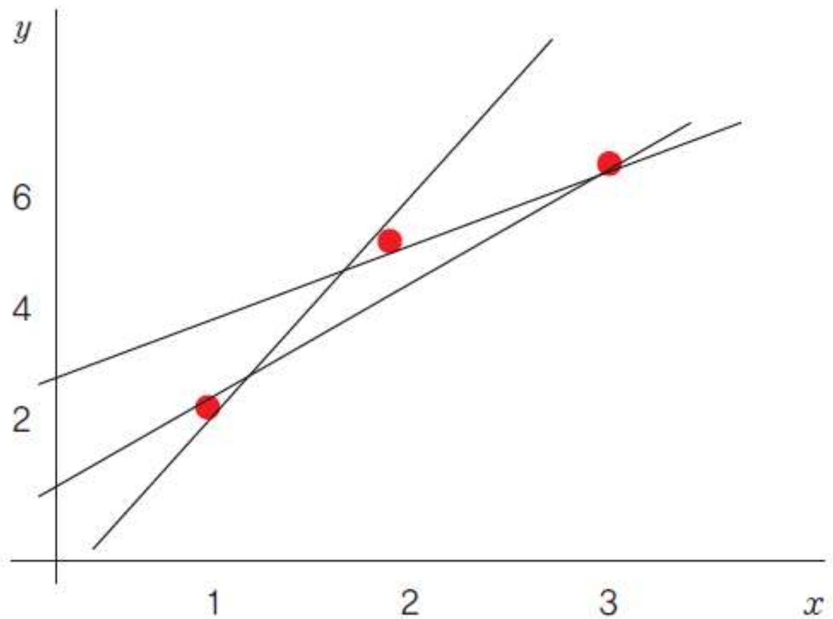


그림 4-4 데이터와 직선

직선과 데이터의 거리

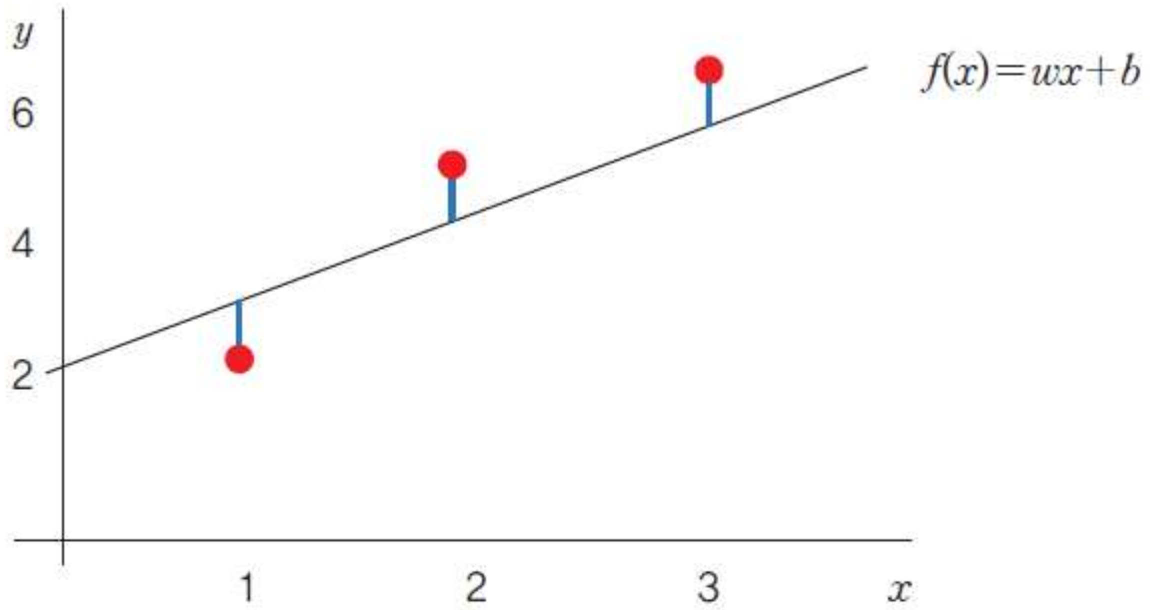


그림 4-5 데이터와 직선 간의 거리

손실함수 (loss function)

- 직선과 데이터 사이의 간격을 제곱하여 합한 값을 손실 함수(loss function) 또는 비용 함수(cost function)라고 한다.

$$Loss = \frac{1}{3}\left((f(x_1) - y_1)^2 + (f(x_2) - y_2)^2 + (f(x_3) - y_3)^2\right)$$

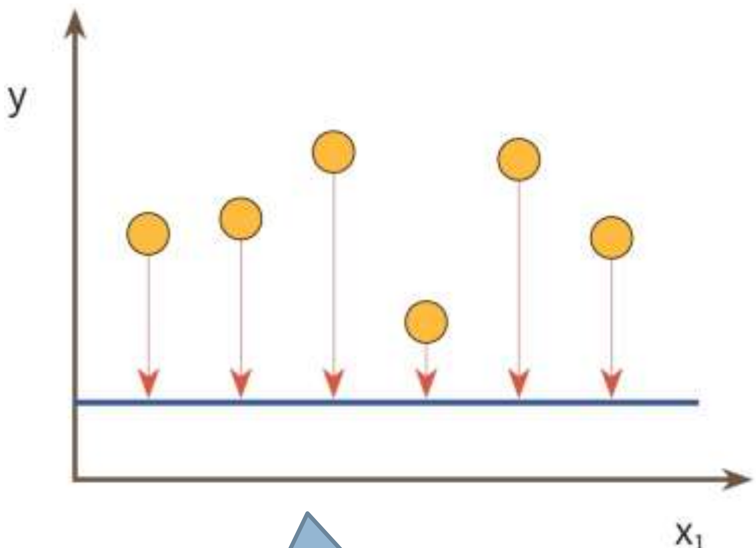
일반화

$$Loss(W, b) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(f(x_i) - y_i)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}((Wx_i + b) - y_i)^2$$

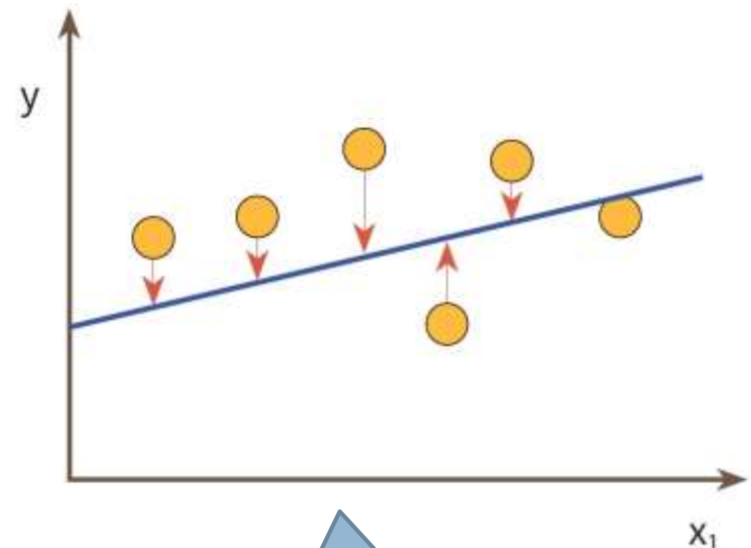
우리가 찾는 것

$$\underset{W, b}{\operatorname{argmin}}\ Loss(W, b)$$

손실 함수



손실이 큰 경우



손실이 작은 경우

선형 회귀에서 손실 함수 최소화 방법

- 분석적인 방법: 독립 변수와 종속 변수가 각각 하나인 선형 회귀
  - 최소제곱법 (https://datalabbit.tistory.com/49)

$$w = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}, \quad b = \bar{y} - w\bar{x}$$

- 경사 하강법(gradient descent method):
  - 경사 하강법은 손실 함수가 어떤 형태이라도, 또 매개 변수가 아무리 많아도 적용할 수 있는 일반적인 방법이다.
  - 점진적인 학습이 가능하다

경사하강법

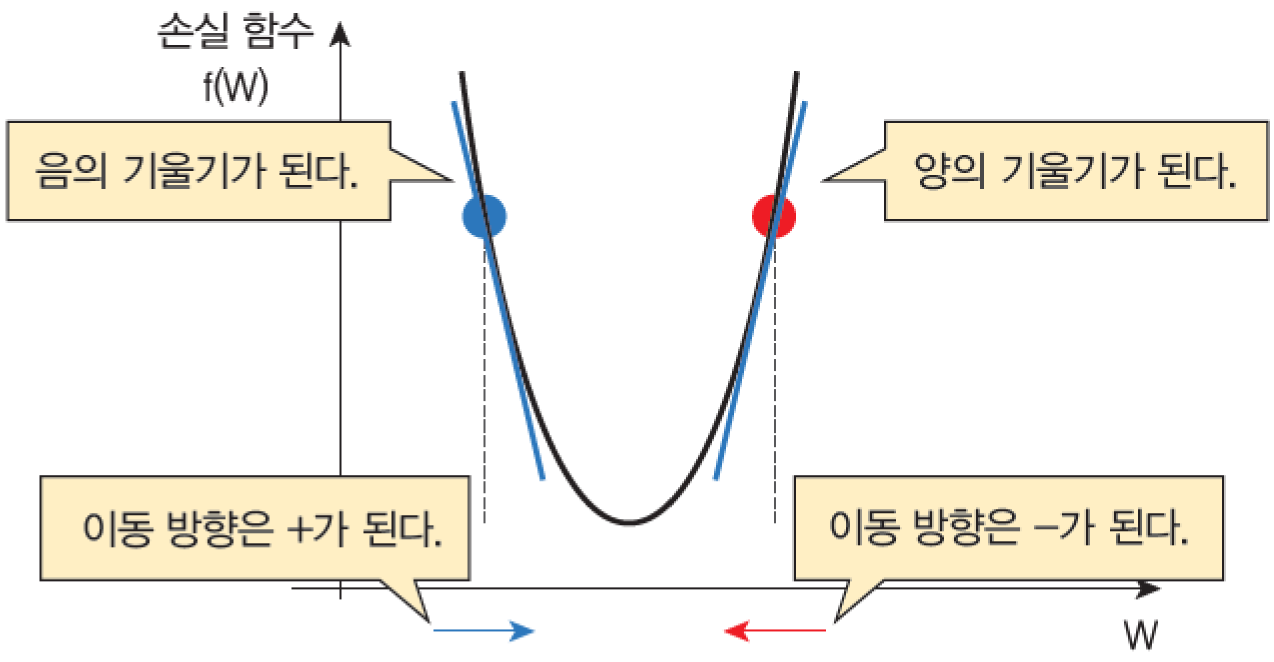
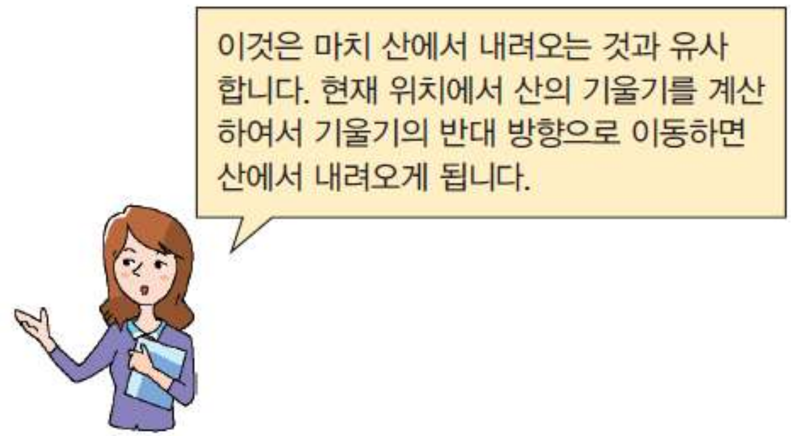


그림 4-7 경사 하강법의 이해

경사하강법


기울기가 음수이니
오른쪽으로 많이 이동
기울기가 음수이지만 작으므로
오른쪽으로 천천히 이동
목표 도달!


이것은 마치 산에서 내려오는 것과 유사
합니다. 현재 위치에서 산의 기울기를 계산
하여서 기울기의 반대 방향으로 이동하면
산에서 내려오게 됩니다.

학습률 (lr: learning rate)

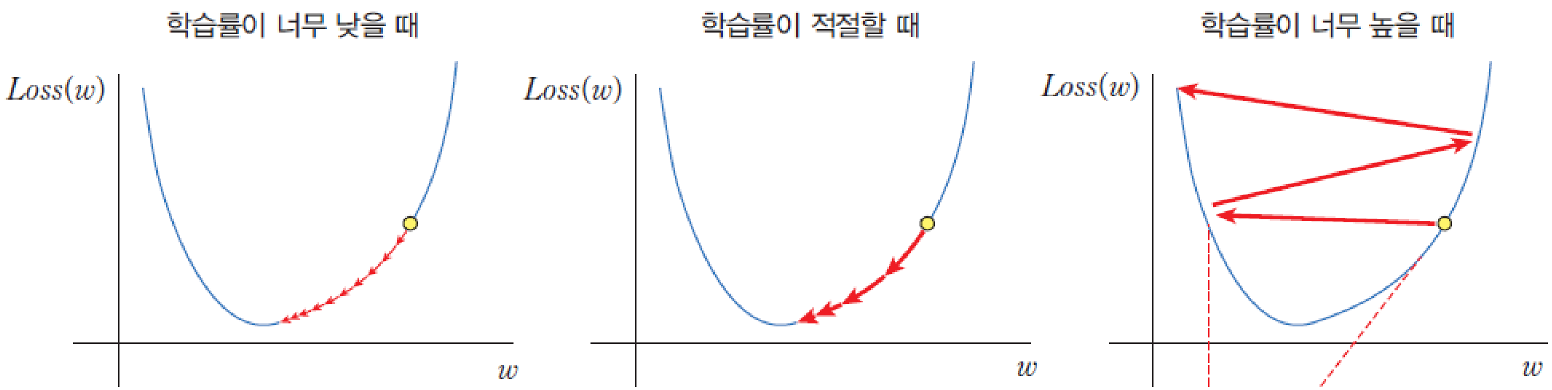


그림 4-9 학습률

지역최소값 문제

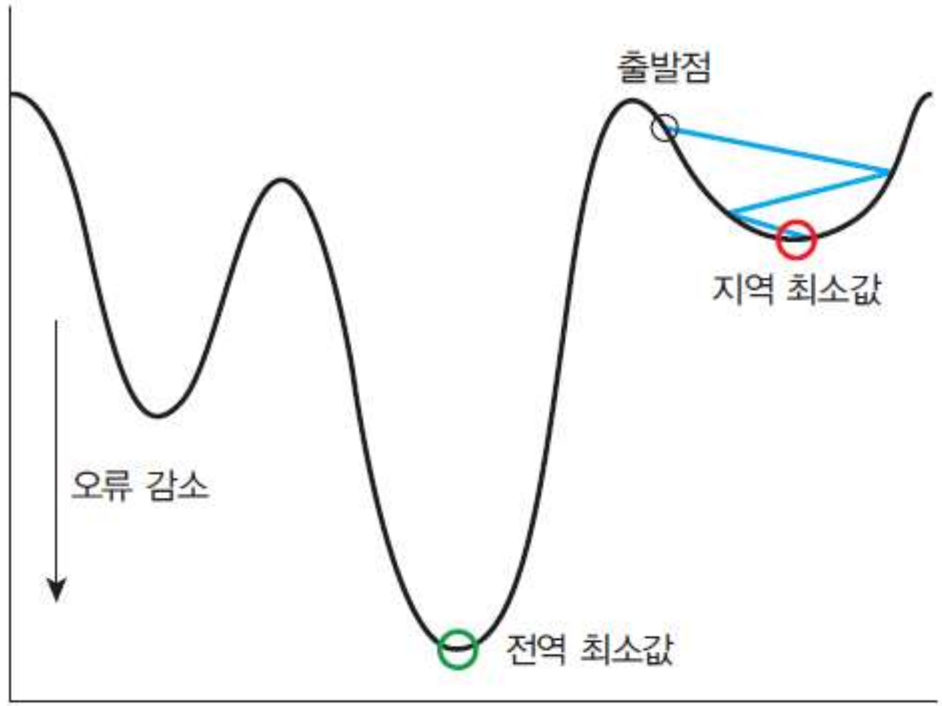


그림 4-10 지역 최소값과 전역 최소값

선형 회귀에서 경사하강법

$$Loss(W,b) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}((Wx_i + b) - y_i)^2$$

$$\frac{\partial Loss(W,b)}{\partial W} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} 2((Wx_i + b) - y_i)(x_i) = \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i((Wx_i + b) - y_i)$$

$$\frac{\partial Loss(W,b)}{\partial b} = \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n}((Wx_i + b) - y_i)$$

$$W = W - 0.01 * \frac{\partial Loss}{\partial W}$$

$$b = b - 0.01 * \frac{\partial Loss}{\partial b}$$

경사 하강법 구현

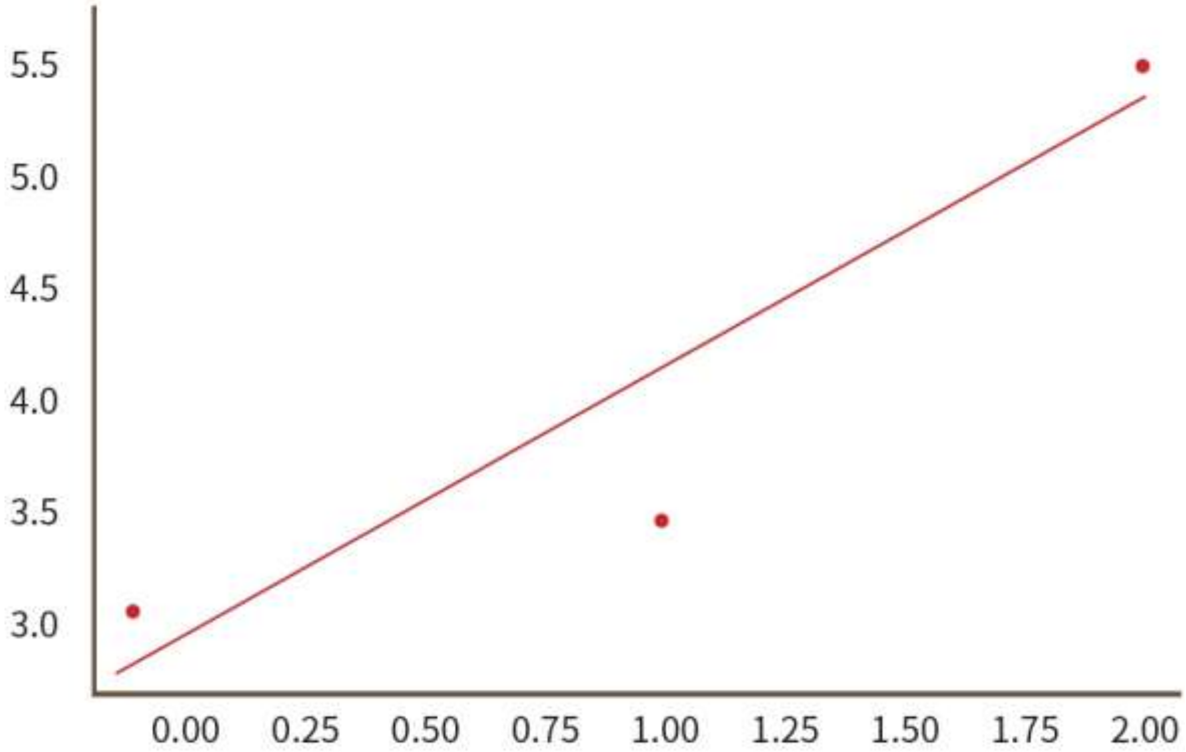
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

X = np.array([0.0, 1.0, 2.0])
y = np.array([3.0, 3.5, 5.5])

W = 0       # 기울기
b = 0       # 절편

lrate = 0.01  # 학습률
epochs = 1000  # 반복 횟수

n = float(len(X)) # 입력 데이터의 개수

# 경사 하강법
for i in range(epochs):
    y_pred = W*X + b  # 예측값
    dW = (2/n) * sum(X * (y_pred-y))
    db = (2/n) * sum(y_pred-y)
    W = W - lrate * dW  # 기울기 수정
    b = b - lrate * db  # 절편 수정
```

경사 하강법 구현

```
# 기울기와 절편을 출력한다.
print (W, b)

# 예측값을 만든다.
y_pred = W*X + b

# 입력 데이터를 그래프 상에 찍는다.
plt.scatter(X, y)

# 예측값은 선그래프로 그린다.
plt.plot([min(X), max(X)], [min(y_pred), max(y_pred)], color='red')
plt.show()
```

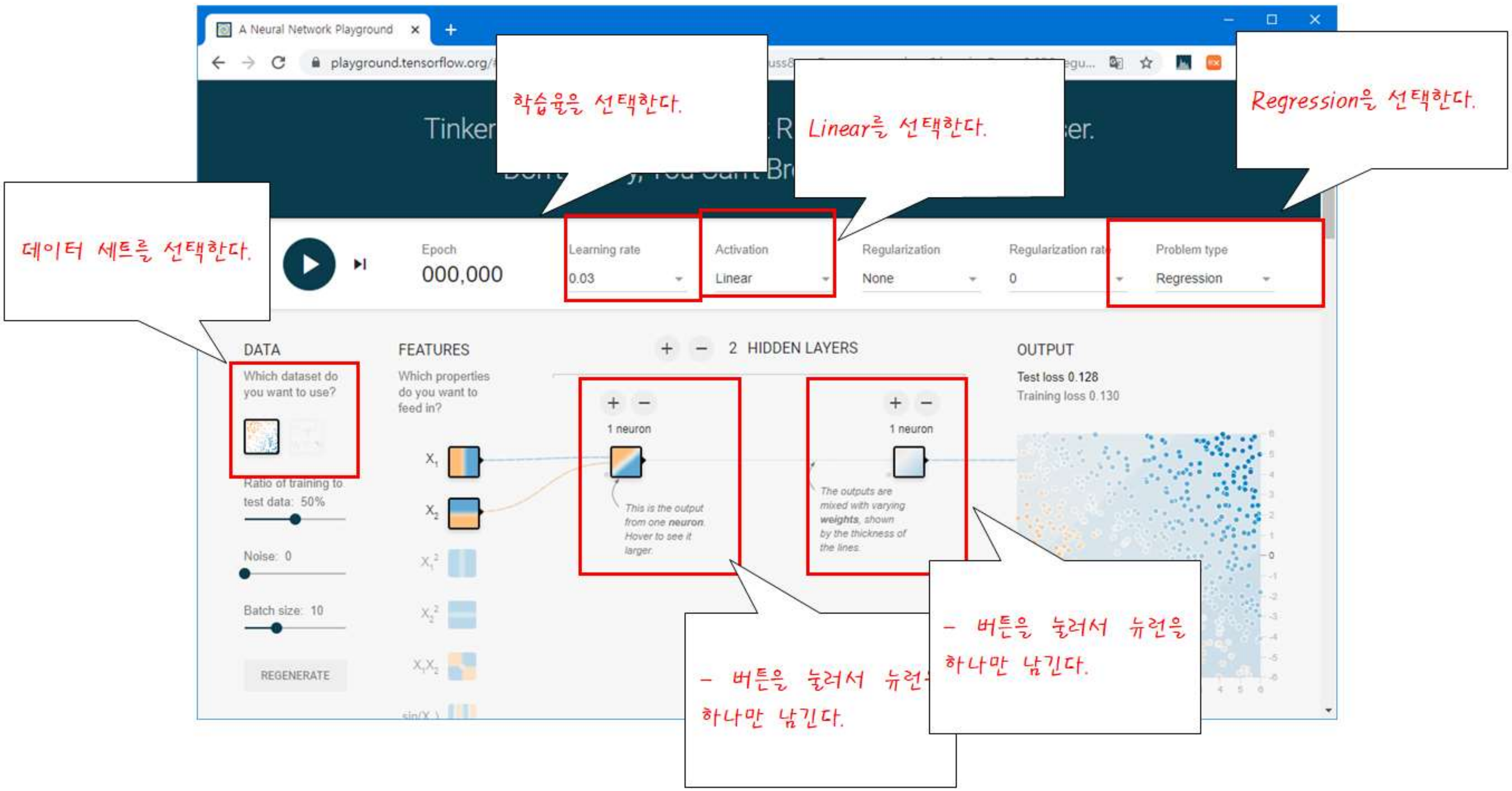
```
1.2532418085611319 2.745502230882486
```

경사 하강법 구현

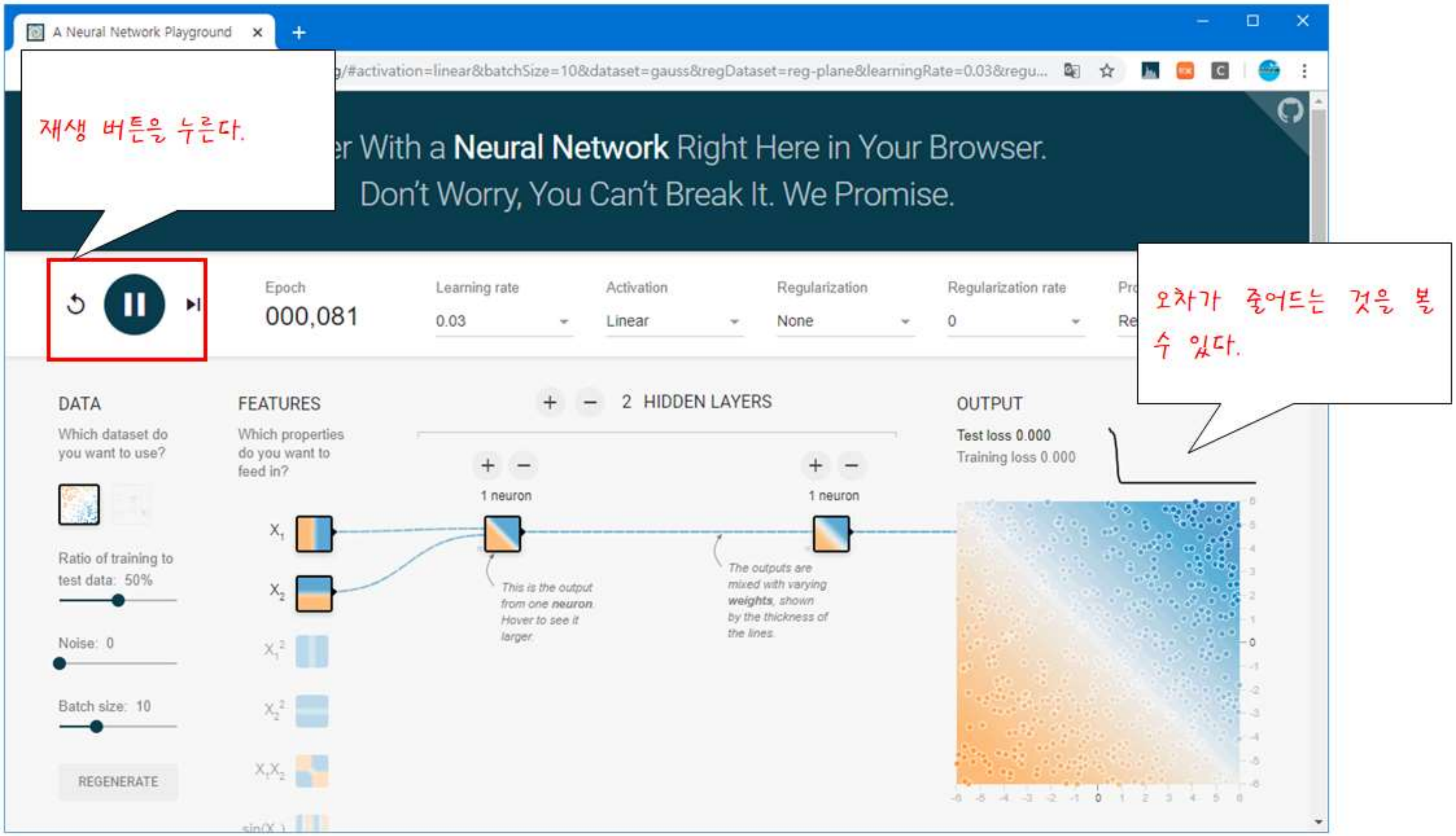


Lab: 학습률 실습

- 구글의 텐서 플로우 플레이그라운드는 아주 유용한 사이트 (https://playground.tensorflow.org)이다.



Lab: 학습률 실습



A Neural Network Playground
/#activation=linear&batchSize=10&dataset=gauss&regDataset=reg-plane&learningRate=0.03&regu...
재생 버튼을 누른다.
r With a Neural Network Right Here in Your Browser.
Don't Worry, You Can't Break It. We Promise.
Epoch
000,081
Learning rate
0.03
Activation
Linear
Regularization
None
Regularization rate
0
오차가 줄어드는 것을 볼 수 있다.
DATA
Which dataset do you want to use?
Ratio of training to test data: 50%
Noise: 0
Batch size: 10
REGENERATE
FEATURES
Which properties do you want to feed in?
2 HIDDEN LAYERS
1 neuron
1 neuron
This is the output from one neuron. Hover to see it larger.
The outputs are mixed with varying weights, shown by the thickness of the lines.
OUTPUT
Test loss 0.000
Training loss 0.000

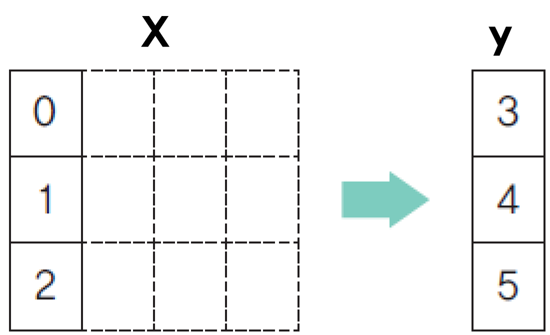
선형 회귀 예제

- 이번 절에서는 아나콘다에 포함되어 있는 **Scikit-Learn 라이브러리**를 사용하여 회귀 함수를 구현하는 방법을 살펴본다.

```
import matplotlib.pylab as plt
from sklearn import linear_model

# 선형 회귀 모델을 생성한다.
reg = linear_model.LinearRegression()

# 데이터는 파이썬의 리스트로 만들어도 되고 아니면 넘파이의 배열로 만들어도 됨
X = [[0], [1], [2]]             # 2차원으로 만들어야 함
y = [3, 3.5, 5.5]               # y = x + 3

# 학습을 시킨다.
reg.fit(X, y)
```

학습 데이터 만들기

- 학습 데이터는 반드시 2차원 배열이어야 한다(한 열만 있어도 반드시 2차원 배열 형태로 만들어야 한다). 따라서 리스트의 리스트를 만들어서 다음과 같은 2차원 배열을 생성한다.



X = [[0], [1], [2]]   y = [3, 3.5, 5.5]

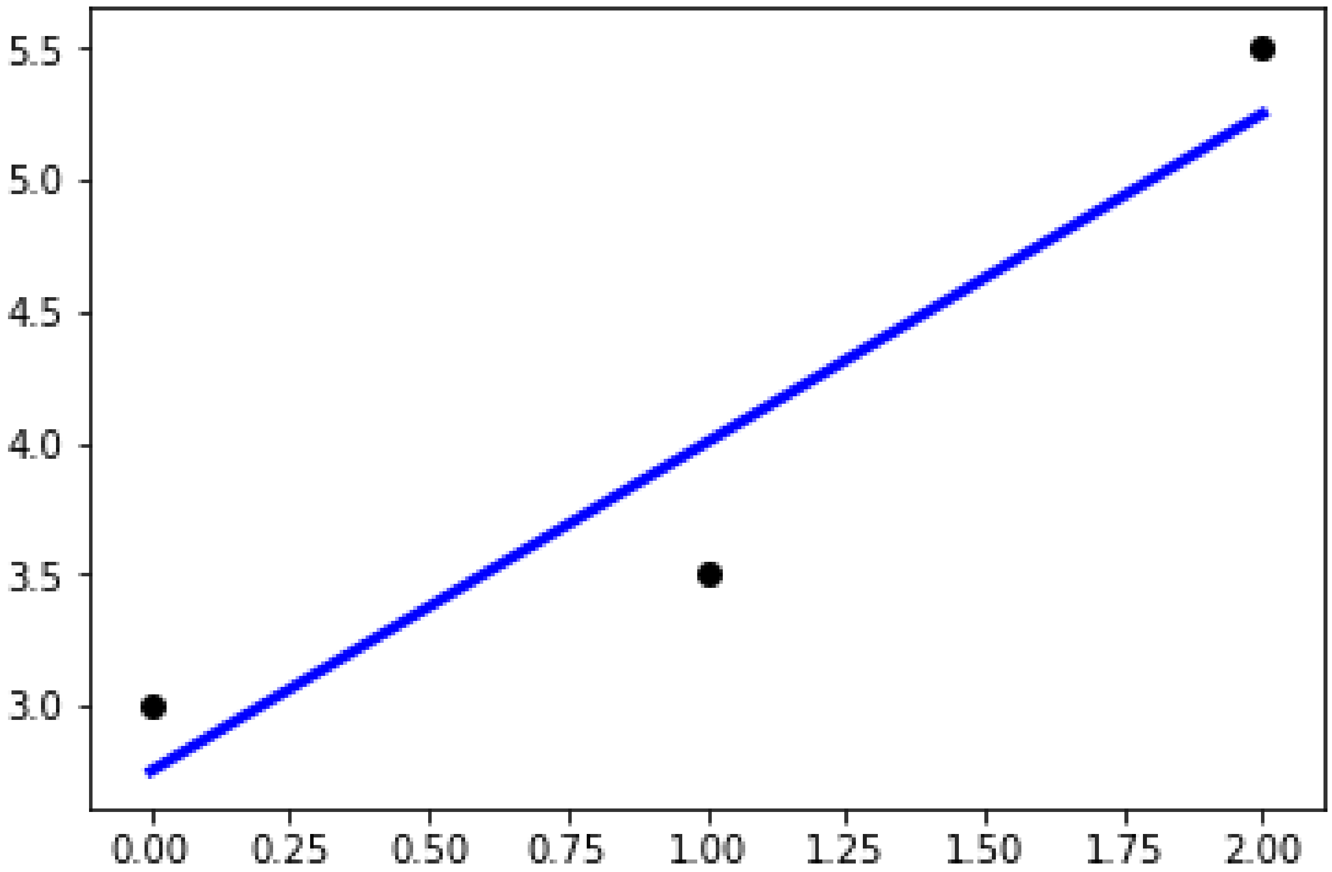
선형 회귀 예제

```
>>> reg.coef_                    # 직선의 기울기
array([1.25])

>>> reg.intercept_               # 직선의 y-절편
2.7500000000000004

>>> reg.score(X, y)              # R2 score
0.8928571428571429

>>> reg.predict([[5]])
array([8.])
```

그래프를 그려보자.

```
# 학습 데이터와 y 값을 산포도로 그린다.
plt.scatter(X, y, color='black')

# 학습 데이터를 입력으로 하여 예측값을 계산한다.
y_pred = reg.predict(X)

# 학습 데이터와 예측값으로 선그래프로 그린다.
# 계산된 기울기와 y 절편을 가지는 직선이 그려진다.
plt.plot(X, y_pred, color='blue', linewidth=3)
plt.show()
```

실행 결과



Lab: 선형 회귀 실습

- 인간의 키와 몸무게는 어느 정도 비례할 것으로 예상된다. 아래와 같은 데이터가 있을 때, 선형 회귀를 이용하여 학습시키고 키가 165cm일 때의 예측값을 얻어보자. 파이썬으로 구현하여 본다.

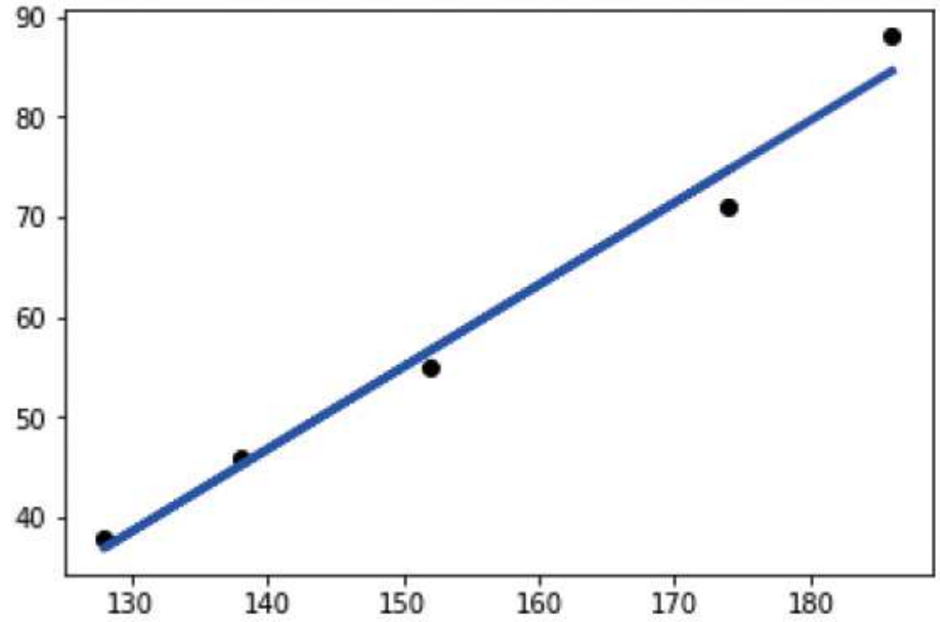
키(단위: cm)	몸무게(단위: kg)
174	71
152	55
138	46
128	38
186	88

Sol.

```
import matplotlib.pylab as plt
from sklearn import linear_model

reg = linear_model.LinearRegression()

X = [[174], [152], [138], [128], [186]]
y = [71, 55, 46, 38, 88]

reg.fit(X, y)                                  # 학습

print(reg.predict([[165]]))

# 학습 데이터와 y 값을 산포도로 그린다.
plt.scatter(X, y, color='black')

# 학습 데이터를 입력으로 하여 예측값을 계산한다.
y_pred = reg.predict(X)

# 학습 데이터와 예측값으로 선그래프로 그린다.
# 계산된 기울기와 y 절편을 가지는 직선이 그려진다.
plt.plot(X, y_pred, color='blue', linewidth=3)
plt.show()
```

Sol.

```
[67.30998637]
```



과잉 적합 vs 과소 적합

- 과잉 적합(overfitting)이란 학습하는 데이터에서는 성능이 뛰어나지만 새로운 데이터(일반화)에 대해서는 성능이 잘 나오지 않는 모델을 생성하는 것이다.
- 과소 적합(underfitting)이란 학습 데이터에서도 성능이 좋지 않은 경우이다. 이 경우에는 모델 자체가 적합지 않은 경우가 많다. 더 나은 모델을 찾아야 한다.

과잉 적합 vs 과소 적합

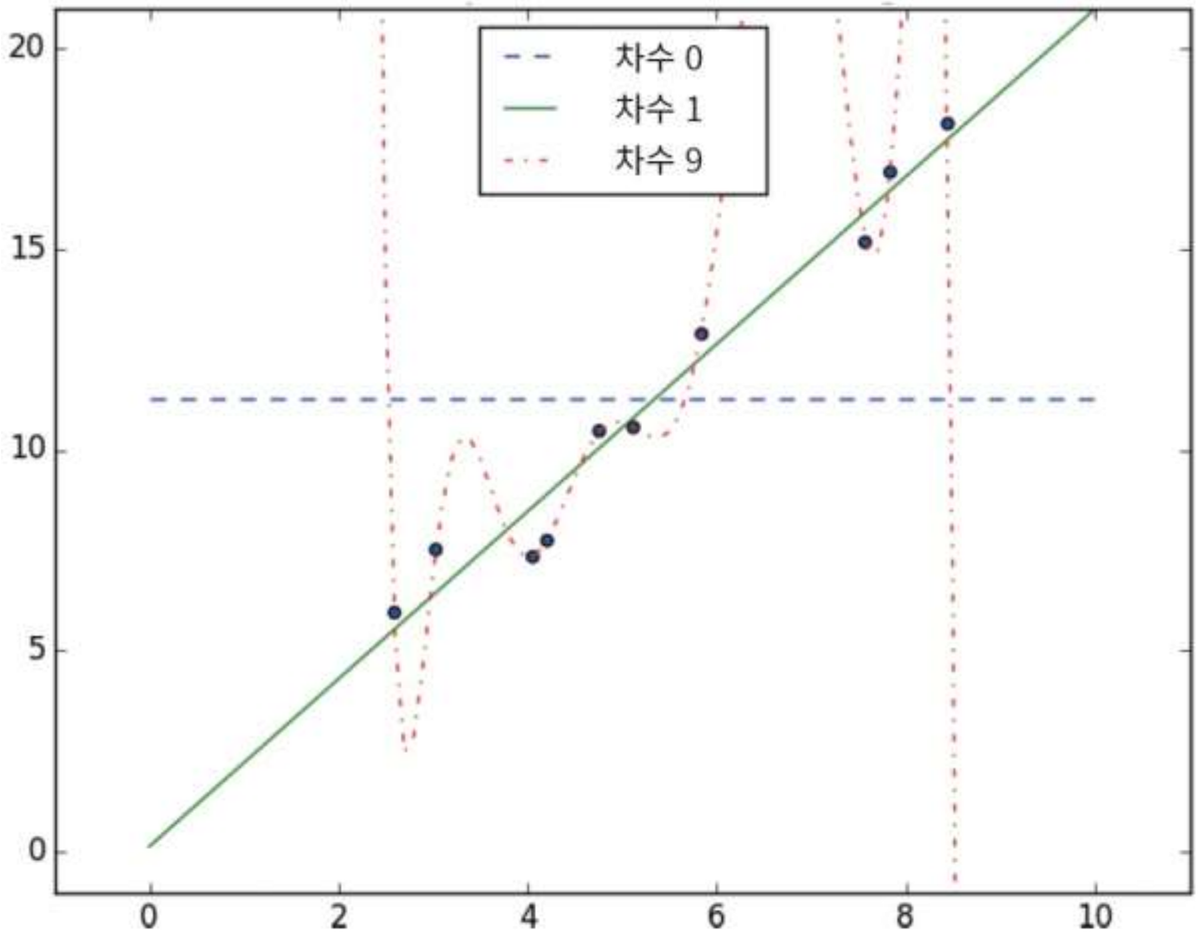
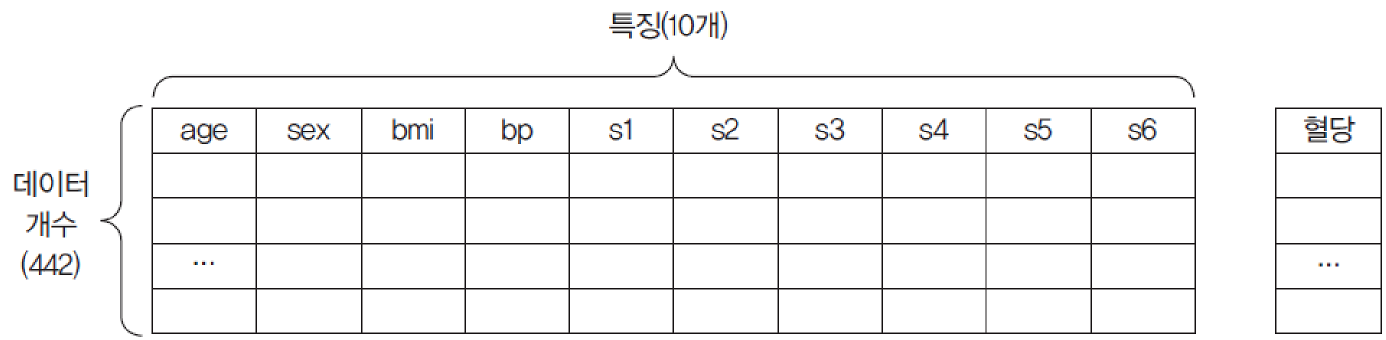


그림 10-5 회귀에서 과잉 적합의 예

Lab: 당뇨병 예제

- sklearn 라이브러리에는 당뇨병 환자들의 데이터가 기본적으로 포함되어 있다.



sklearn.datasets.load_diabetes

```
sklearn.datasets.load_diabetes(*, return_X_y=False, as_frame=False, scaled=True)
```

Load and return the diabetes dataset (regression).

Samples total	442
Dimensionality	10
Features	real, -.2 < x < .2
Targets	integer 25 - 346

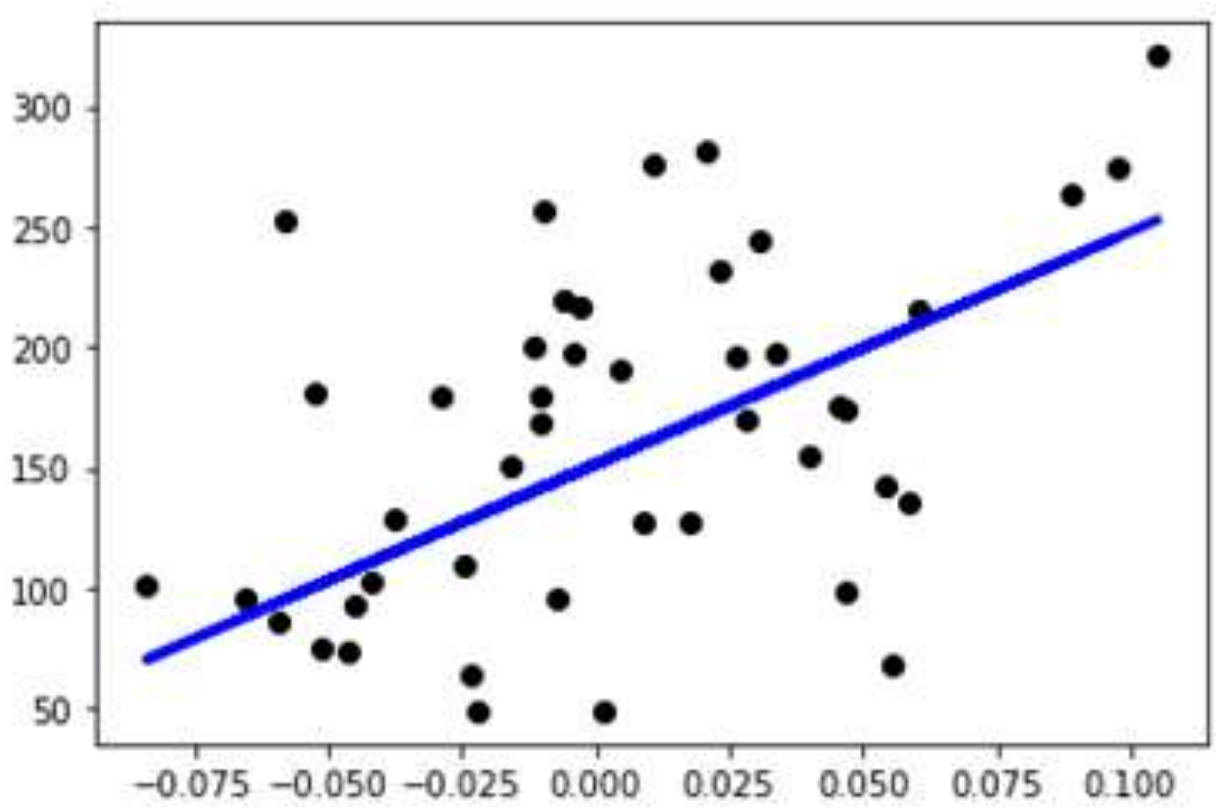
선형 회귀 예제

```
import matplotlib.pylab as plt
import numpy as np
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn import datasets

# 당뇨병 데이터 세트를 적재한다.
diabetes_X, diabetes_y = datasets.load_diabetes(return_X_y=True)

# 하나의 특징(BMI)만 추려내서 2차원 배열로 만든다. BMI 특징의 인덱스가 2이다.
diabetes_X_new = diabetes_X[:, np.newaxis, 2]

# 학습 데이터와 테스트 데이터를 분리한다.
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(diabetes_X_new, diabetes_y,
test_size=0.1, random_state=0)
```

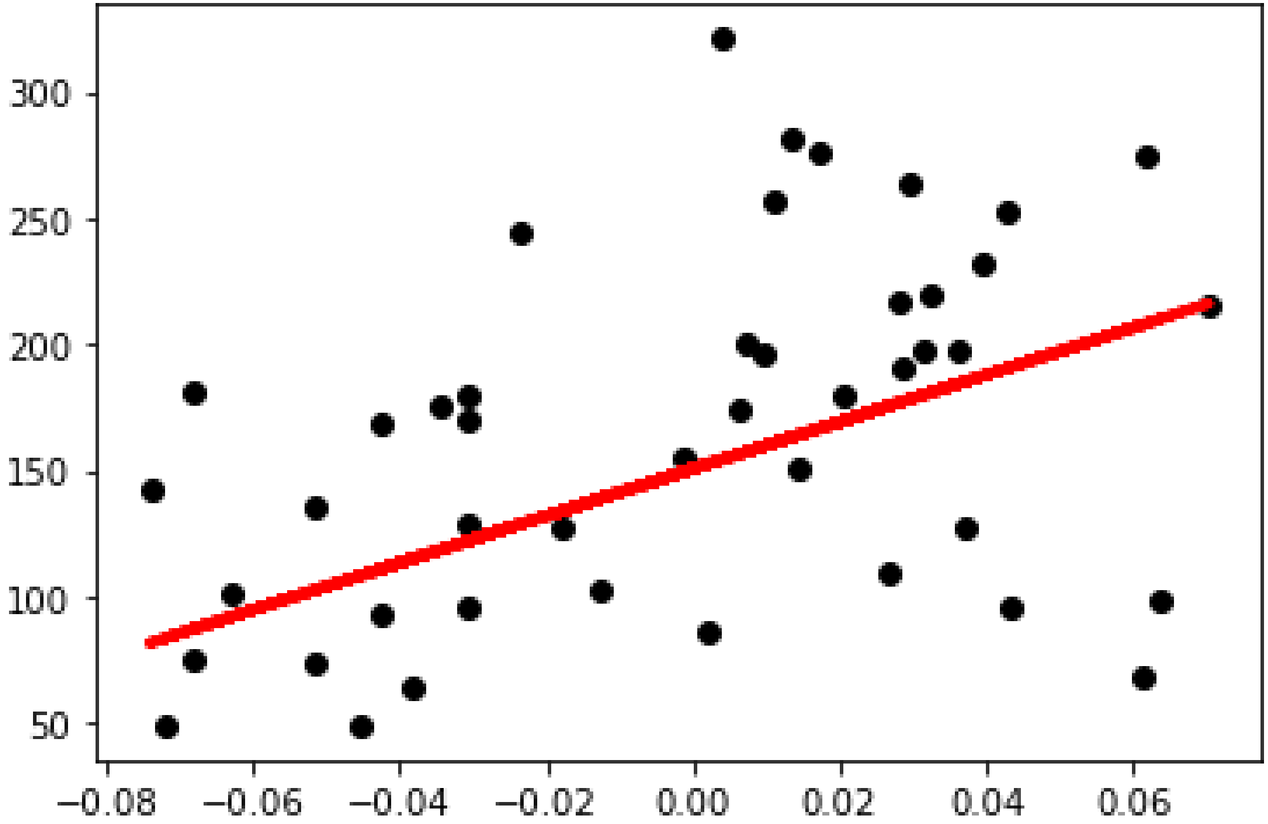
선형 회귀 예제

```
regr = linear_model.LinearRegression()
regr.fit(X_train, y_train)

# 테스트 데이터로 예측해보자.
y_pred = regr.predict(X_test)

# 실제 데이터와 예측 데이터를 비교해보자.
plt.plot(y_test, y_pred, '.')

plt.scatter(X_test, y_test,  color='black')
plt.plot(X_test, y_pred, color='blue', linewidth=3)
plt.show()
```

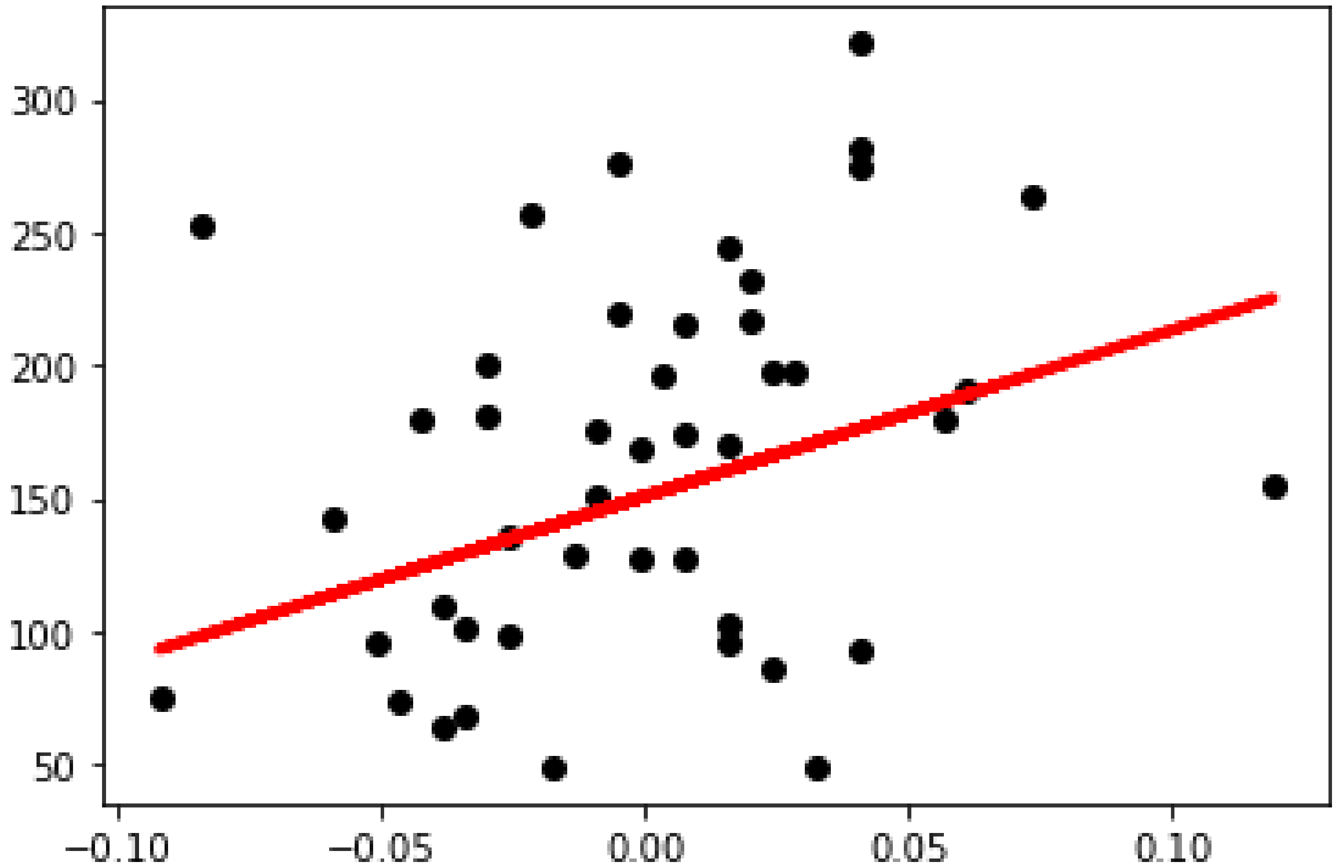
실행 결과: *bmi vs. target (r2 = 0.334)*



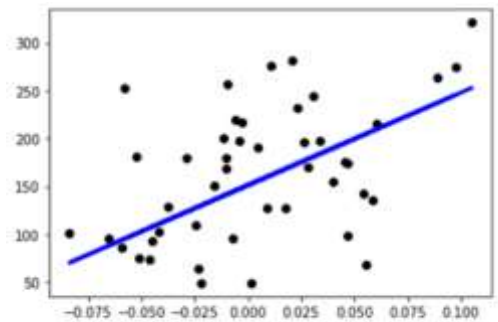
실행 결과: *s5(ltg) vs. target (r2 = 0.335)*

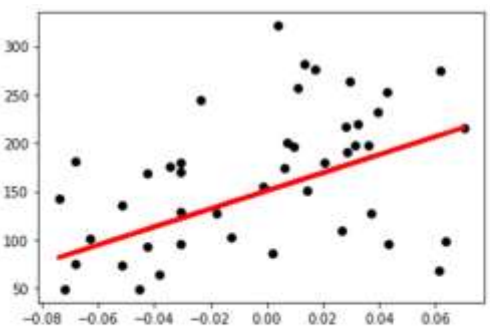


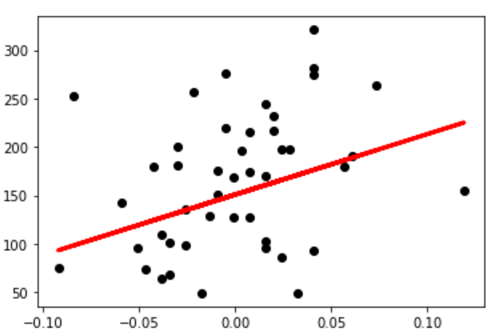
실행 결과: *s6(glu) vs. target (r2 = 0.299)*

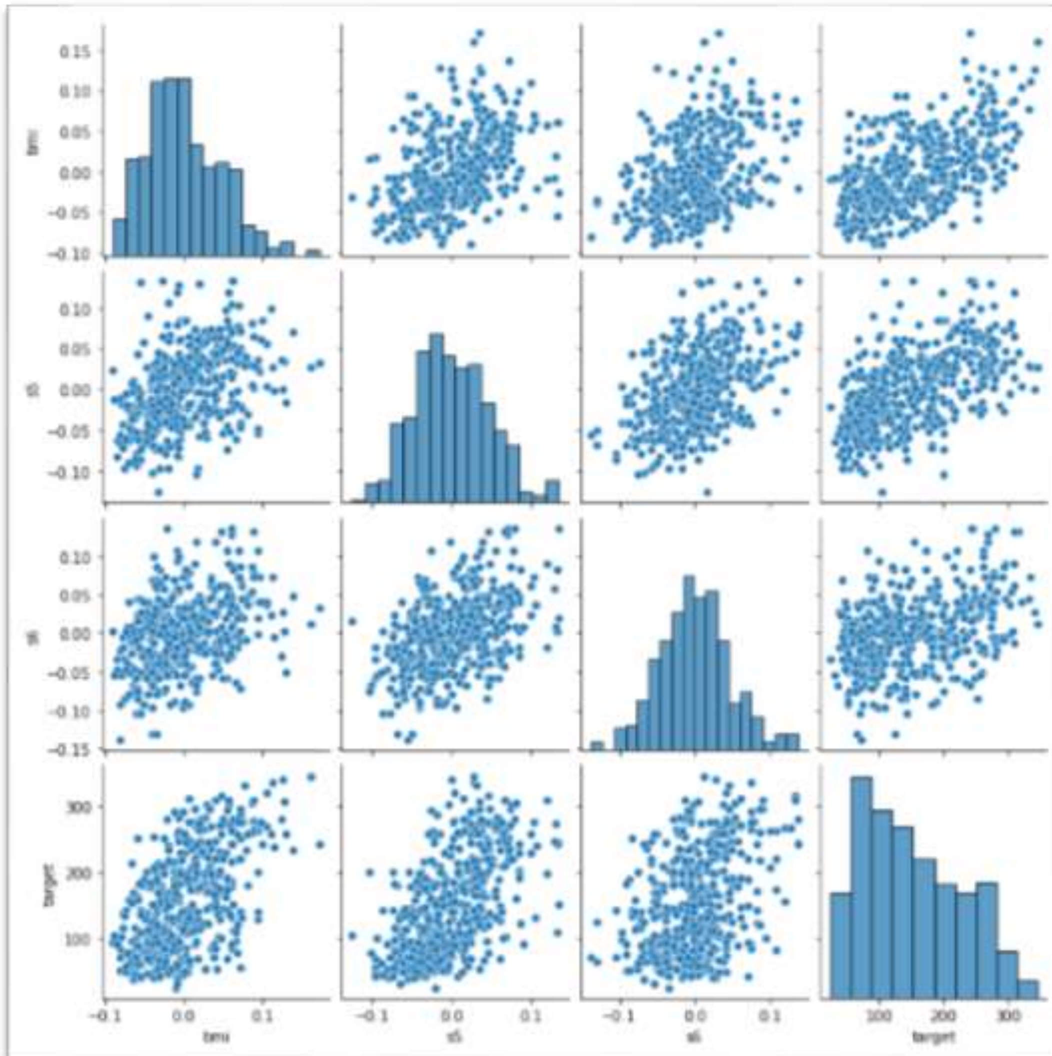


실행 결과: *bmi,s5,s6 vs. target*



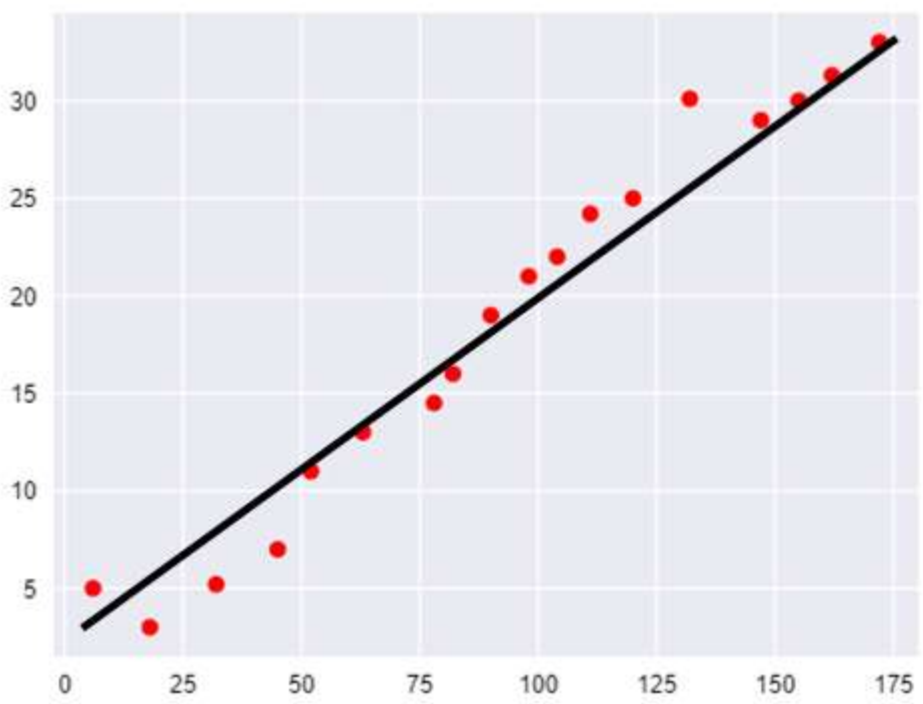






Mini Project: 면적에 따른 집값 예측

- 사용자가 아파트 면적을 입력하면 아파트의 가격이 출력되는 시스템을 만들어보자. 아파트 면적과 가격은 모두 실수이므로 기계 학습의 방법 중에서 선형 회귀를 사용하여야 한다



Summary

- 지도 학습에는 회귀(regression)와 분류(classification)가 있었다. 전자는 연속적인 값을 예측하고 후자는 입력을 어떤 카테고리 중의 하나로 예측한다.
- 선형 회귀는 입력 데이터를 가장 잘 설명하는 직선의 기울기와 절편값을 찾는 문제이다.
- 손실 함수(loss function)란 실제 데이터와 직선 간의 차이를 제곱한 값이다.
- 회귀란 손실 함수를 최소로 하는 직선의 기울기와 절편값을 계산하는 것이다.
- 손실 함수의 값이 작아지는 방향을 알려면 일반적으로 경사 하강법(gradient descent method)과 같은 방법을 많이 사용한다.

Q & A