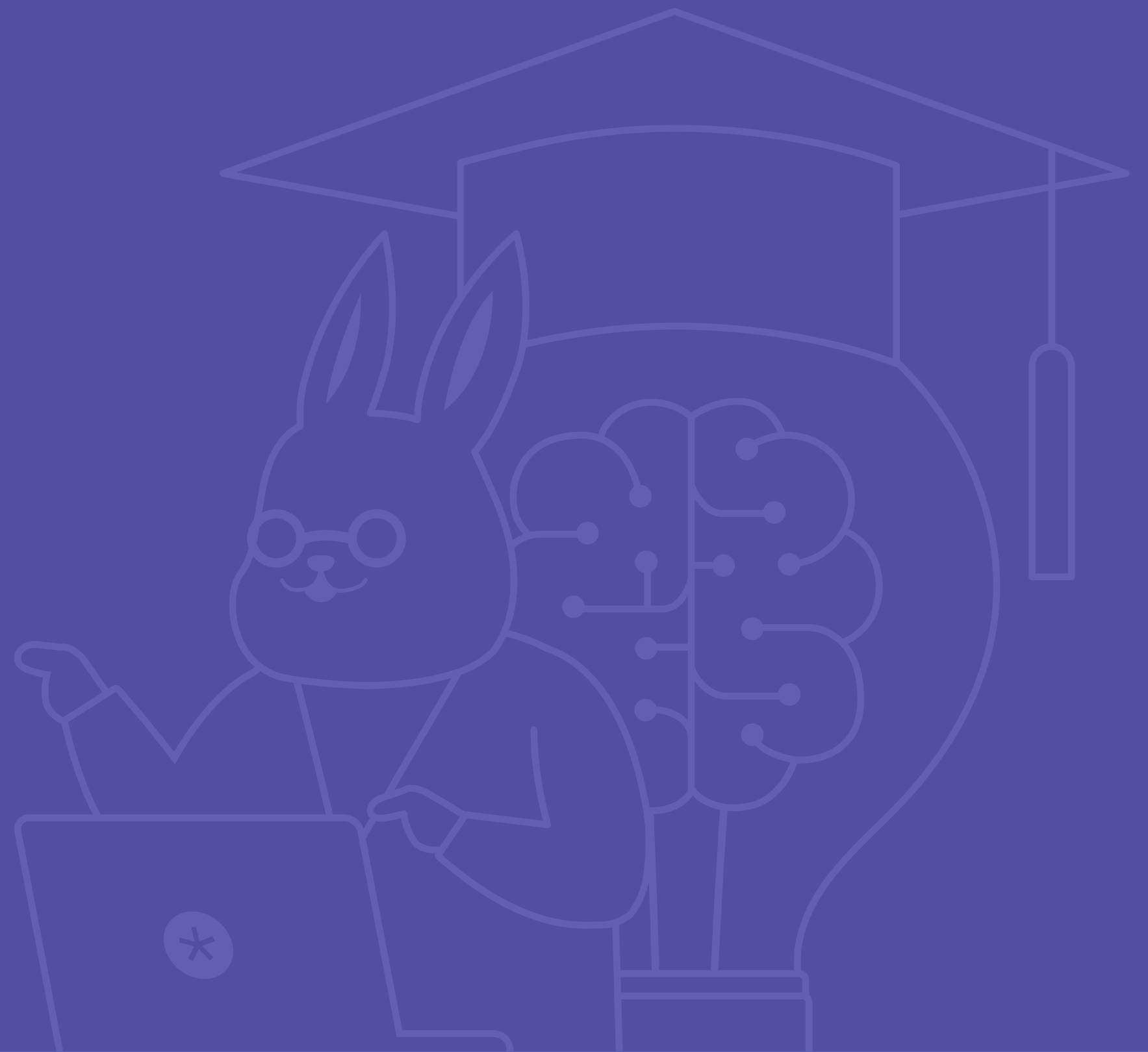




머신러닝 심화

1장 회귀



Contents

- 01. 회귀 개념 알아보기
- 02. 단순 선형회귀
- 03. 다중 선형회귀와 다항 회귀
- 04. 과적합과 정규화
- 05. 정규화를 적용한 회귀
- 06. 회귀 알고리즘 평가 지표

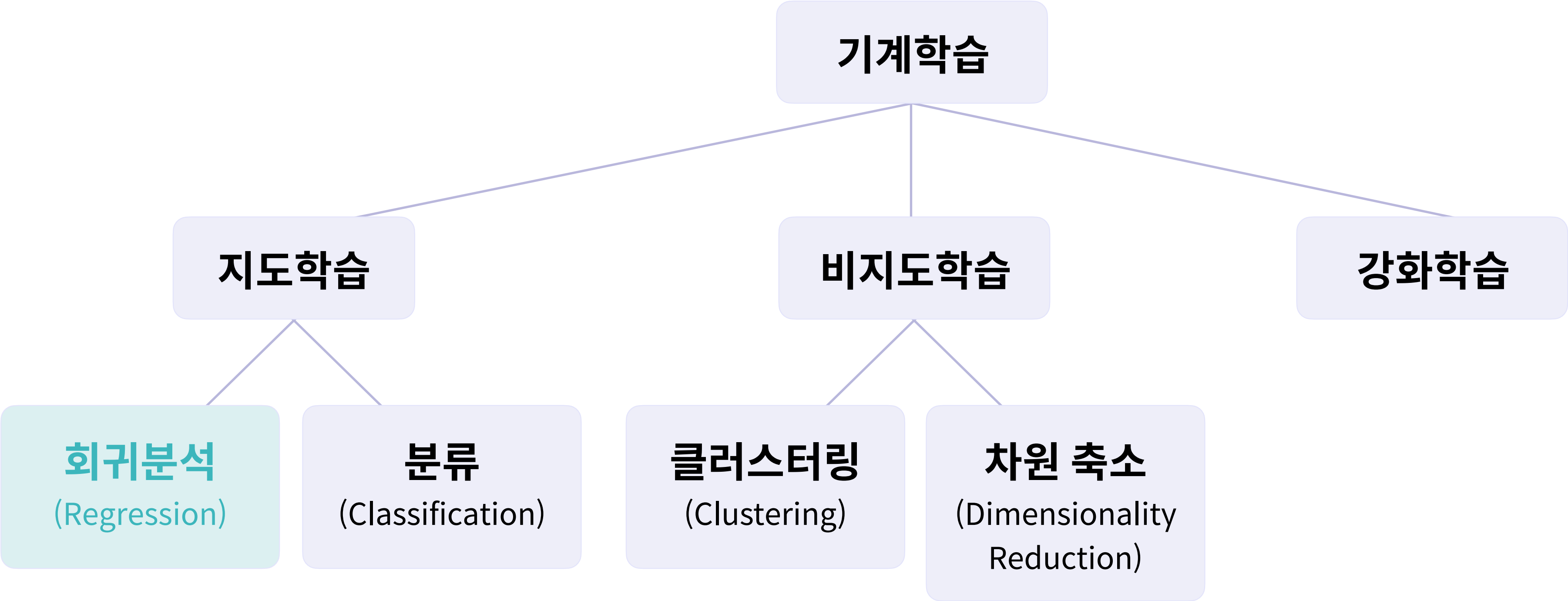
01

회귀 개념 알아보기



01 회귀 개념 알아보기

✔ 머신러닝(기계 학습) 분야



01 회귀 개념 알아보기

✔ 가정해보기

아이스크림 가게를
운영하는 주인이라고 가정해보자.

판매용 아이스크림 주문 시,
예상되는 실제 판매량만큼만 주문을 원한다.

이 때 만약 **평균 기온**을 활용하여
미래 판매량을 예측할 수 있다면?



01 회귀 개념 알아보기

✔ 문제 정의와 해결 방안

• 문제 정의

데이터 : X 과거 평균 기온 과 그에 따른 Y 아이스크림 판매량

가정 : 평균 기온과 판매량은 선형적인 관계를 가지고 있음

목표 : 평균 기온에 따른 아이스크림 판매량 예측하기

• 해결 방안

회귀 분석 알고리즘

X	Y
평균 기온(°C)	아이스크림 판매량(만개)
10	40
13	52.3
20	60.5
25	80

01 회귀 개념 알아보기

✓ 회귀 분석이란?

데이터를 가장 **잘 설명하는 선**을 찾아
입력값에 따른 미래 결과값을 예측하는 알고리즘

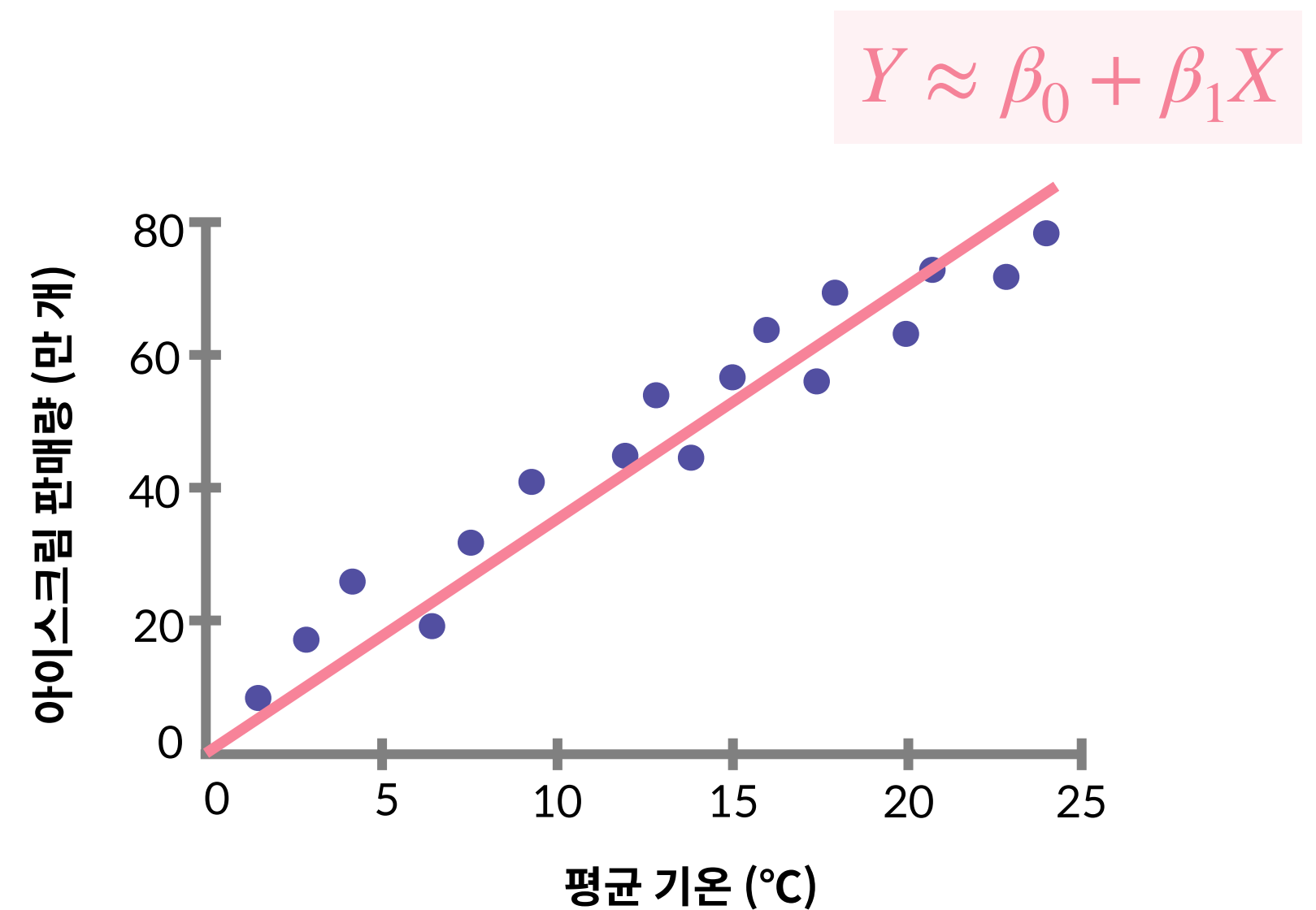
예시

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X$$

X = 평균 기온, Y = 아이스크림 판매량

= 적절한 β_0 (**y절편**)과 β_1 (**기울기**) 찾기

잘 설명하는 선



01 회귀 개념 알아보기

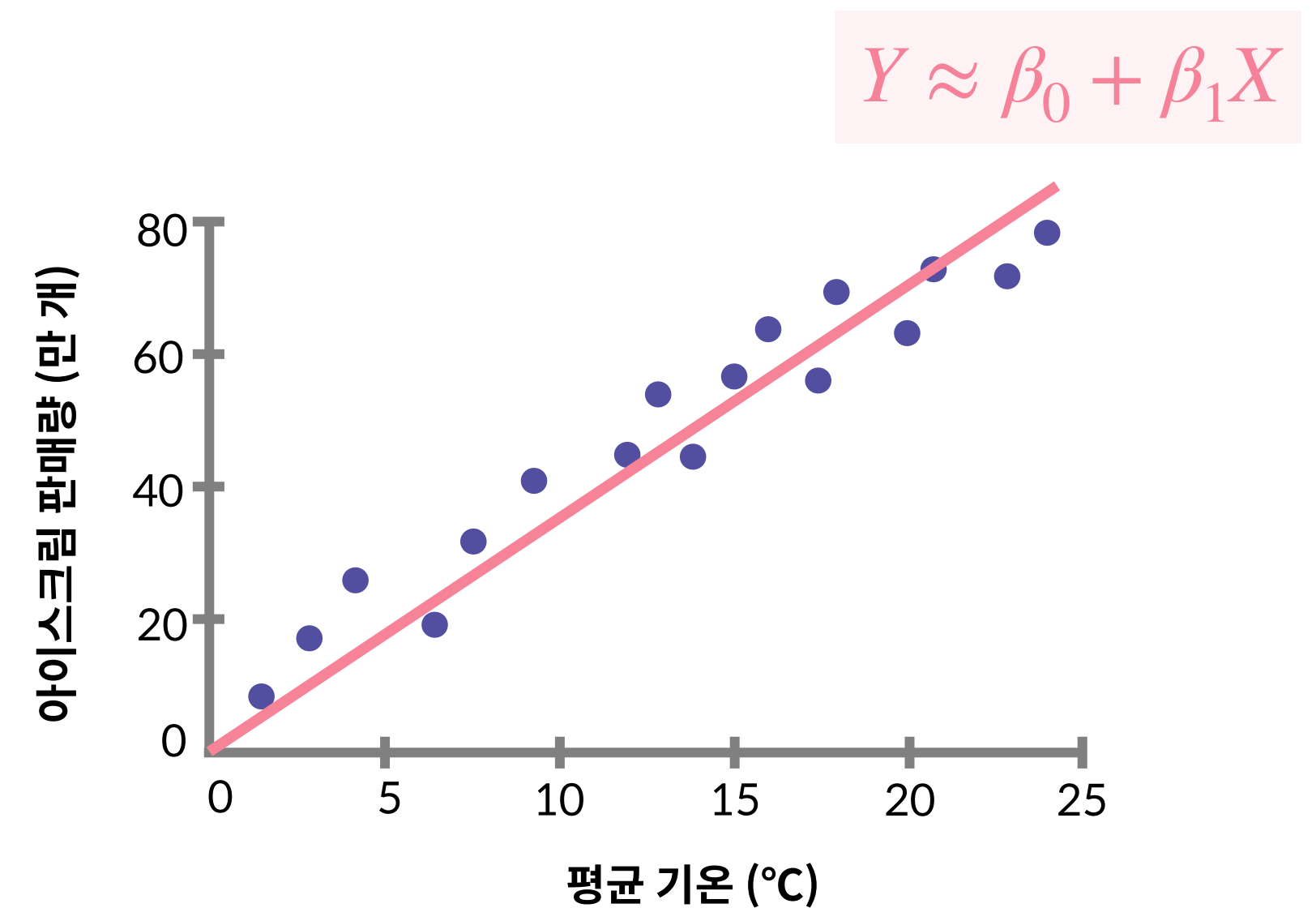
✔ 적절한 β_0 (y절편)과 β_1 (기울기) 찾기

아이디어 : 완벽한 예측은 불가능함!

각 데이터의 실제 값과 모델이 예측하는 값의
차이를 최소화하는 선을 찾자

전체 모델의 차이

즉, **Loss function**을 최소로 만드는 β_0, β_1 구하기



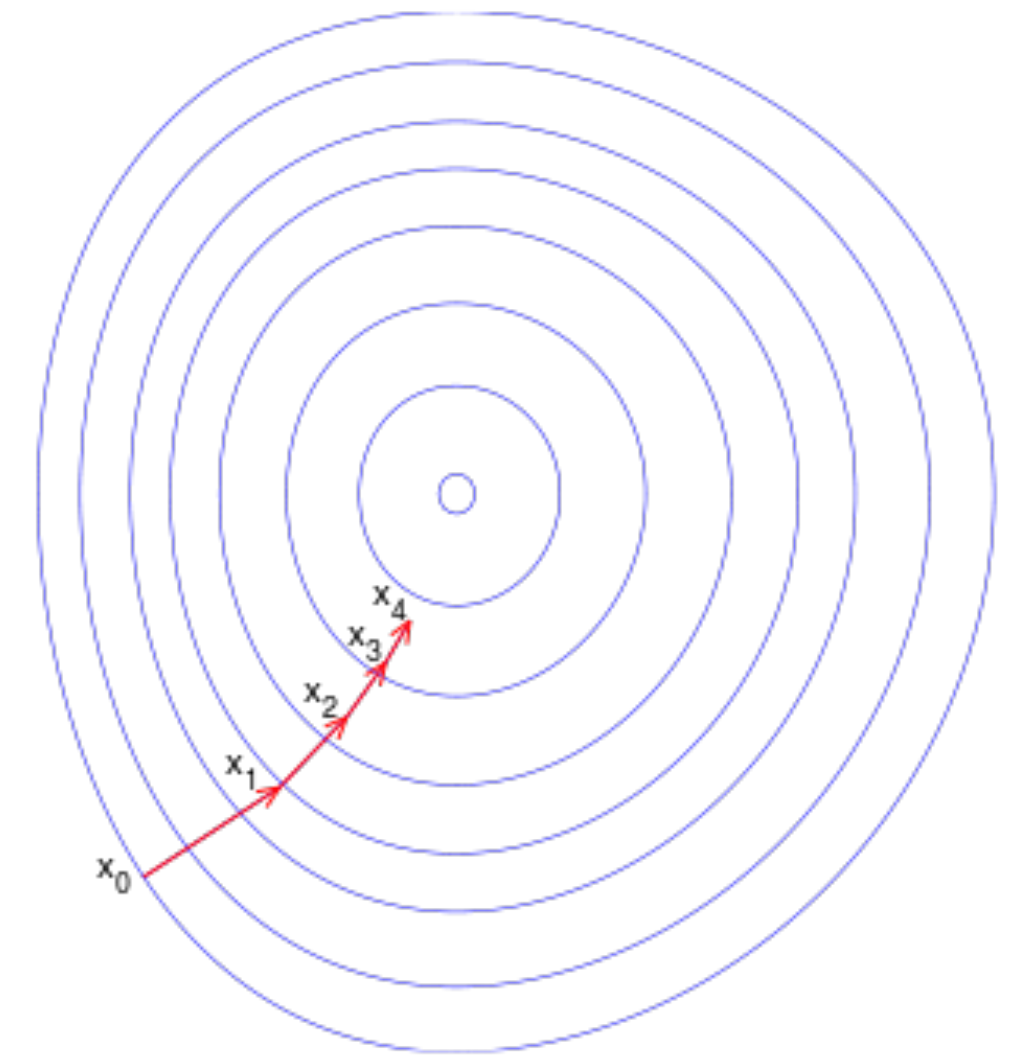
01 회귀 개념 알아보기

✔ 어떻게 찾을까?

산 정상 오르기

산 정상이 되는 지점을 찾고 싶다.

아무 곳에서나 시작했을 때,
가장 정상을 빠르게 찾아가는 방법은?



01 회귀 개념 알아보기

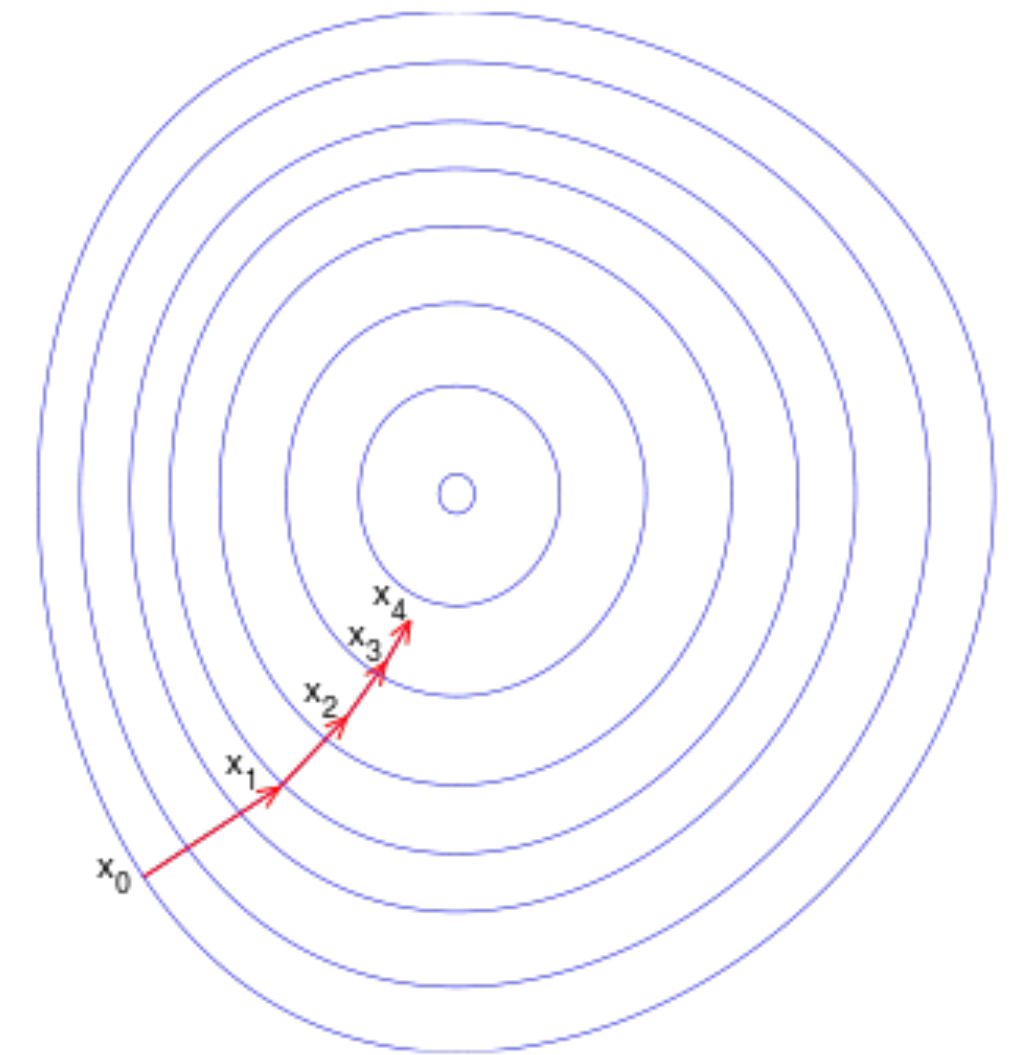
✔ 어떻게 찾을까?

가정

- 정상의 위치는 알 수 없다.
- 현재 나의 위치와 높이를 알 수 있다.
- 내 위치에서 일정 수준 이동할 수 있다.

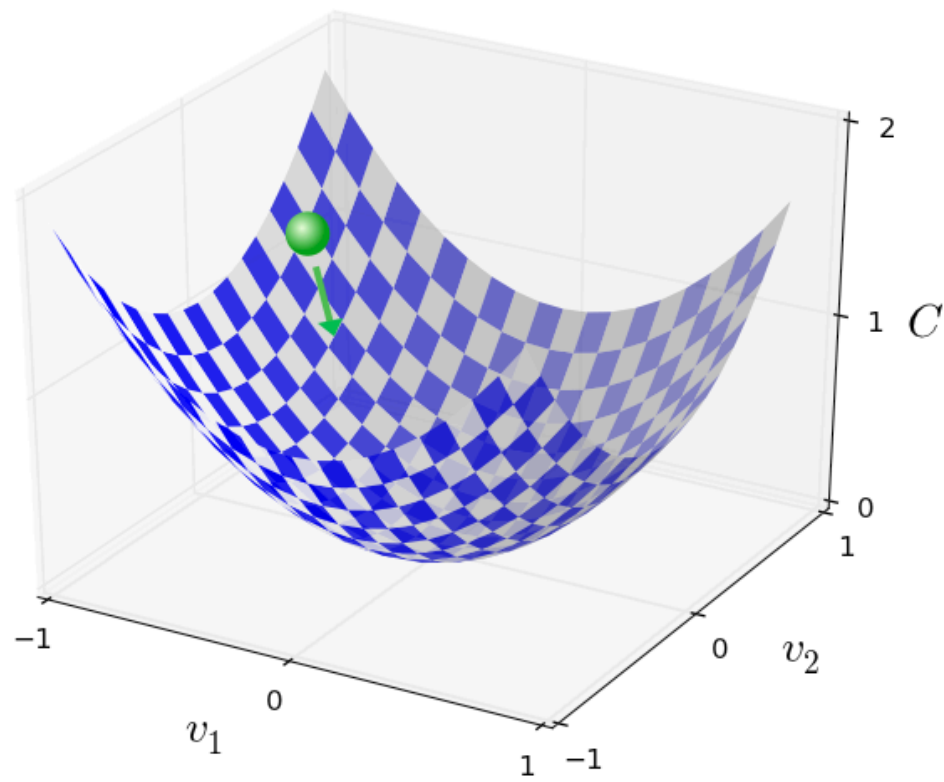
방법

- 현재 위치에서 가장 **경사가 높은 쪽**을 찾는다.
- 오르막 방향으로 일정 수준 이동한다.
- 더 이상 높이의 변화가 없을 때까지 반복!



01 회귀 개념 알아보기

✔ 거꾸로 된 산을 내려가기



Gradient Descent(경사하강법)

- 최적의 값을 찾기 위한 거꾸로 된 산을 내려가는 방법
- 전체 모델의 차이 즉, **Loss function**을 최소로 만드는 β_0, β_1 을 선정함

01 회귀 개념 알아보기

✔ 회귀 분석 개념 정리하기

Loss Function(실제 값과 모델이 예측하는 값의 오차)를 최소화하는
Gradient Descent(최적의 β_0, β_1 를 찾는 알고리즘)을 통해
데이터를 가장 잘 설명할 수 있는 선을 찾는 방법

02

단순 선형회귀



02 단순 선형회귀

✔ 문제에 적용하기

평균 기온 X 에 따른 아이스크림 판매량 Y 을 예측하고자 함

예시

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X$$

아이스크림 판매량 = $\beta_0 + \beta_1$ * 평균기온

/* elice */

02 단순 선형회귀

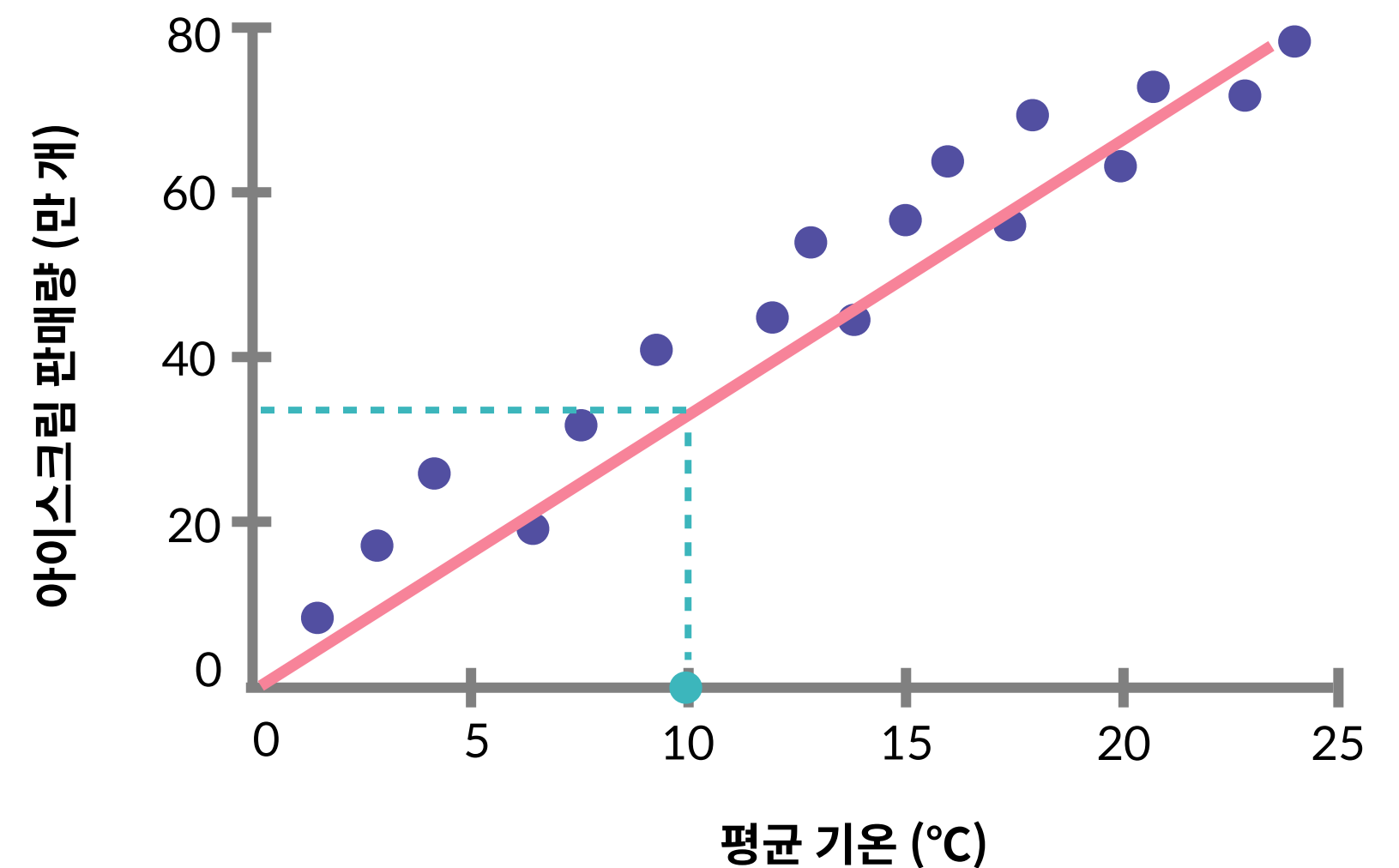
✓ 적용 결과

데이터를 잘 설명할 수 있는 선을 찾아
새로운 데이터에 대한 결과값 확인 가능

이러한 가장 단순한 회귀 모델을

단순 선형회귀
(Simple Linear Regression)라고 한다.

평균 기온이 **10°C** 일 때의 예측 판매량?



02 단순 선형회귀

✔ 단순 선형회귀(Simple Linear Regression)

가장 기본적이고 간단한 방법의 회귀 알고리즘

입력값 X 와 결과값 Y 의 관계를 설명할 때 가장 많이 사용되는 단순한 모델

회귀 알고리즘의 기초로 이를 응용한 다수 알고리즘 존재

단순 선형회귀의 함수식

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X$$

02 단순 선형회귀

✔ 단순 선형회귀 특징

- 가장 기초적이나 여전히 많이 사용되는 알고리즘
- 입력값(x)이 1개인 경우에만 적용이 가능함
- 입력값과 결과값의 관계를 알아보는 데 용이함
- 입력값이 결과값에 얼마나 영향을 미치는지 알 수 있음
- 두 변수 간의 관계를 직관적으로 해석하고자 하는 경우 활용

02 단순 선형회귀

✔ 가정해보기

만약, 평균 기온 뿐만 아니라
강수량이라는 새로운 입력값을 추가하여
판매량을 예측하고자 한다면 어떻게 해야 할까?

데이터 유형 및 예측 결과에 따라
다양한 회귀 알고리즘 필요



03

다중 선형회귀와 다항 회귀

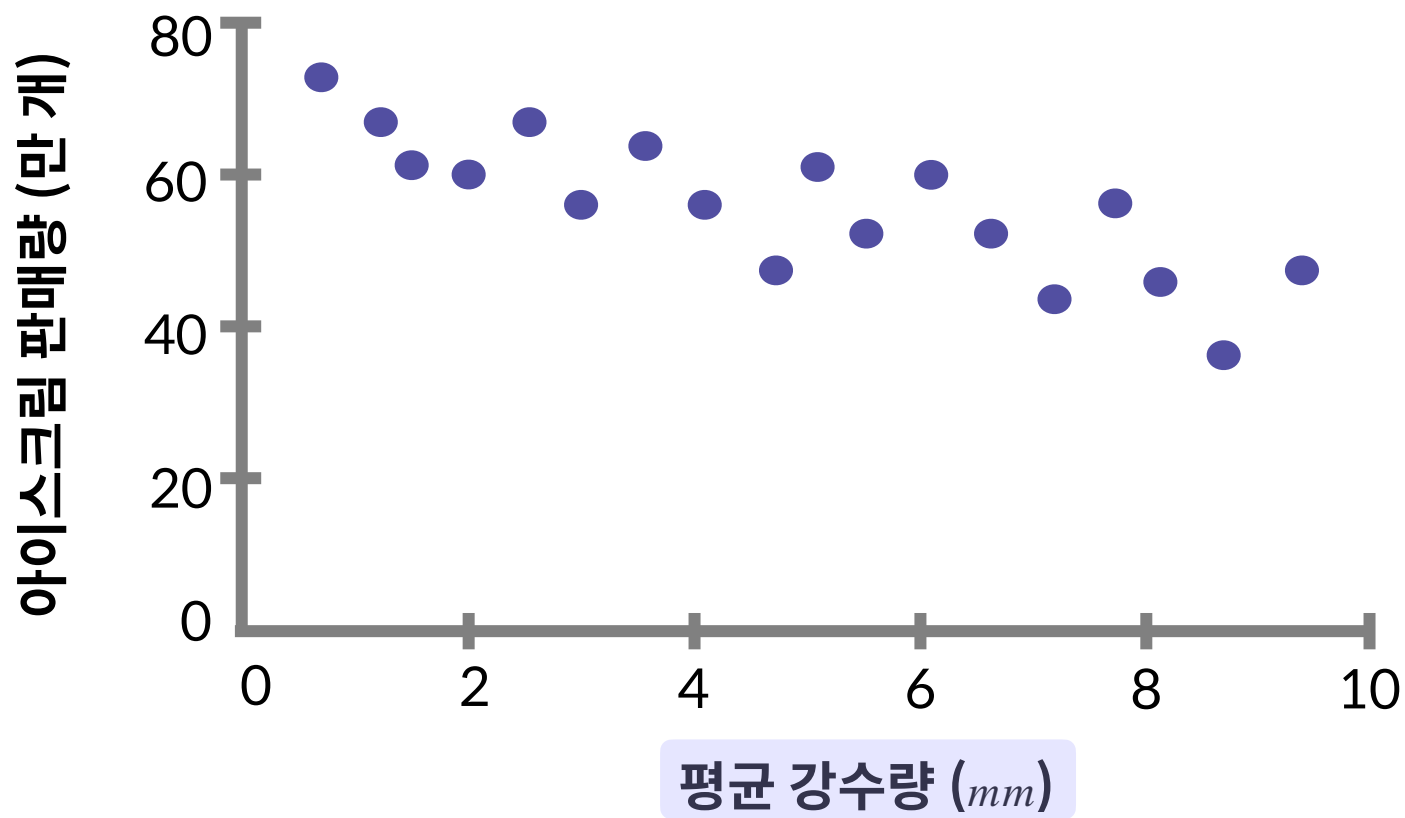


03 다중 선형회귀와 다항 회귀

문제

만약, 입력값 X 에 강수량이 추가된다면?
즉, 평균 기온과 평균 강수량에 따른 아이스크림 판매량을 예측하고자 할 때

X_0	X_1	Y
평균 기온(°C)	평균 강수량(mm)	아이스크림 판매량(만개)
10	10	40
13	7.5	52.3
20	2	60.5
25	0	80

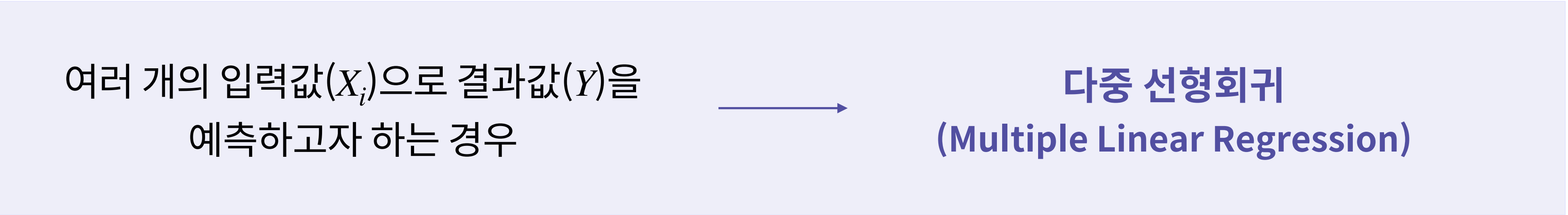


/* elice */

03 다중 선형회귀와 다항 회귀

✔ 문제 해결하기

평균 기온 X_1 과 평균 강수량 X_2 에 따른 아이스크림 판매량 Y 을 예측하고자 함



03 다중 선형회귀와 다항 회귀

✔ 다중 선형 회귀(Multiple Linear Regression)

입력값 X 가 여러 개(2개 이상)인 경우 활용할 수 있는 회귀 알고리즘
각 **개별** X_i 에 해당하는 **최적의** β_i 를 찾아야 함

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_i X_i$$

문제 : 평균 기온과 **평균 강수량**에 따른 **아이스크림 판매량**을 예측하고자 할 때

$$\text{아이스크림 판매량} = \beta_0 + \beta_1 * \text{평균기온} + \beta_2 * \text{강수량}$$

03 다중 선형회귀와 다항 회귀

✔ 다중 선형 회귀 특징

- 여러 개의 입력값과 결과값 간의 관계 확인 가능
- 어떤 입력값이 결과값에 어떠한 영향을 미치는지 알 수 있음.
- 여러 개의 입력값 사이 간의 **상관 관계***가 높을 경우 결과에 대한 신뢰성을 잃을 가능성이 있음.

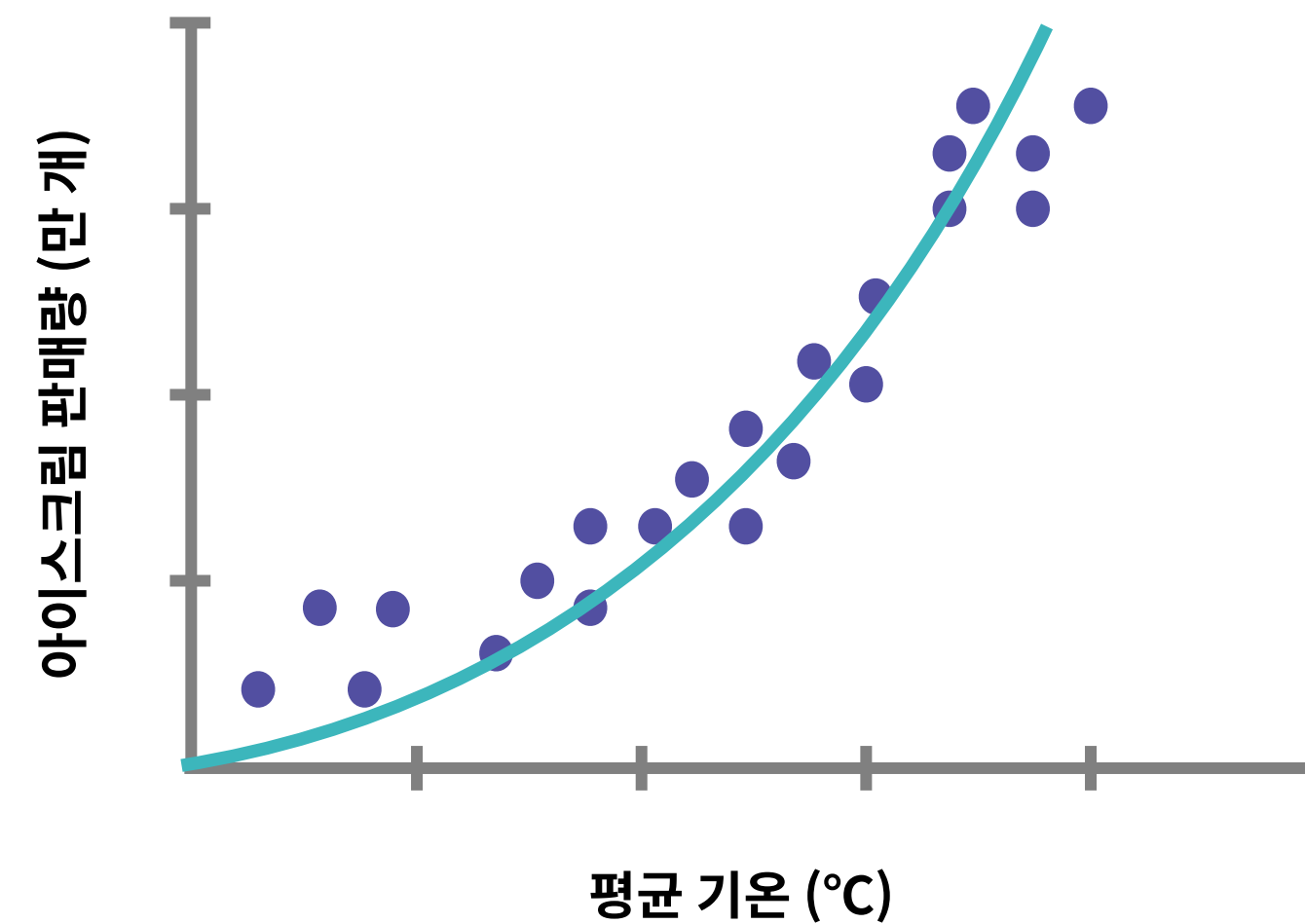
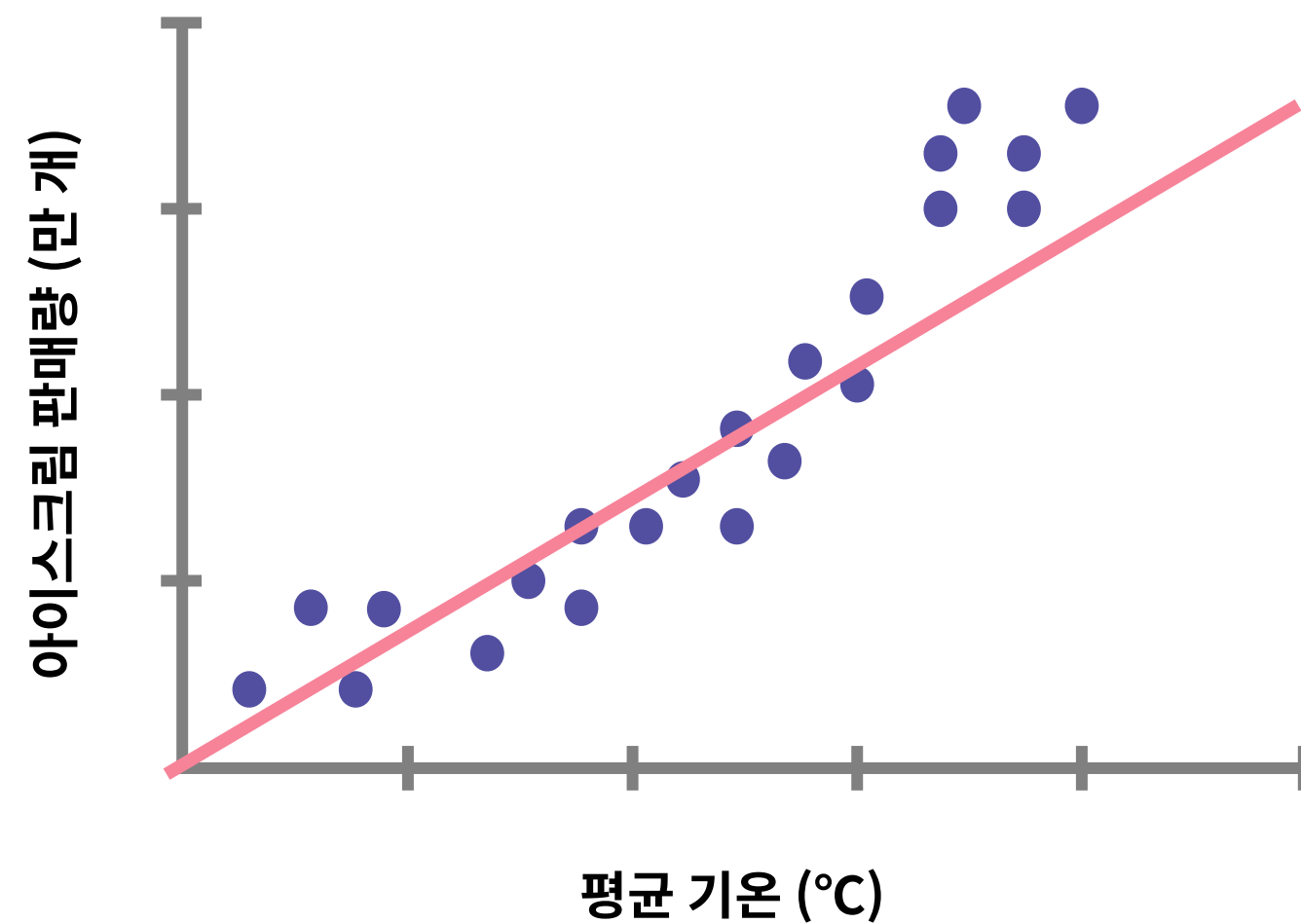
상관 관계

두 가지 것의 한쪽이 변화하면 다른 한쪽도 따라서 변화하는 관계

03 다중 선형회귀와 다항 회귀

✔ 더 생각해보기

다중 선형회귀 알고리즘 적용 시 예측 결과값이 좋지 않은 경우
만약, **평균기온**과 **예측 판매량** 간의 관계가 **선형적**이지 않다면?



/* elice */

03 다중 선형회귀와 다항 회귀

✔ 문제 해결하기

다중 선형회귀 적용 시 예측 결과값이 좋지 않고,
데이터들간의 관계가 선형적이지 않은 경우 → **다항 회귀**
(Polynomial Linear Regression)

03 다중 선형회귀와 다항 회귀

✔ 다항 회귀(Polynomial Regression)

1차 함수 선형식으로 표현하기 어려운 분포의 데이터를 위한 회귀
복잡한 분포의 데이터의 경우 일반 선형 회귀 알고리즘 적용 시 낮은 성능의 결과가 도출됨
데이터의 분포에 더 잘 맞는 모델이 필요함

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2^2 + \dots + \beta_i X_i^i$$

문제 : 아이스크림 판매량이 평균 기온의 **제공**과 관련이 있는 경우

$$\text{아이스크림 판매량} = \beta_0 + \beta_1 * \text{평균기온} + \beta_2 * \text{강수량}^2$$

03 다중 선형회귀와 다항 회귀

✓ 다항 회귀 원리

기존 **입력값** X_i 를 전처리 한 새로운 변수를 추가시켜 선형 회귀 모델로 예측할 수 있도록 함.

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2^2$$

사실은 다중 선형 회귀와 동일한 원리

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$$

: 각 **개별 입력값** X_i 에 해당하는 **최적의** β_i 를 찾아야 함.

03 다중 선형회귀와 다항 회귀

✔ 다항 회귀 특징

- 일차 함수 식으로 표현할 수 없는 복잡한 데이터 분포에도 적용 가능
- 극단적으로 높은 차수의 모델을 구현할 경우 과도하게 학습 데이터에 맞춰지는 **과적합** 현상 발생
- 데이터 관계를 선형으로 표현하기 어려운 경우 사용

04

과적합과 정규화



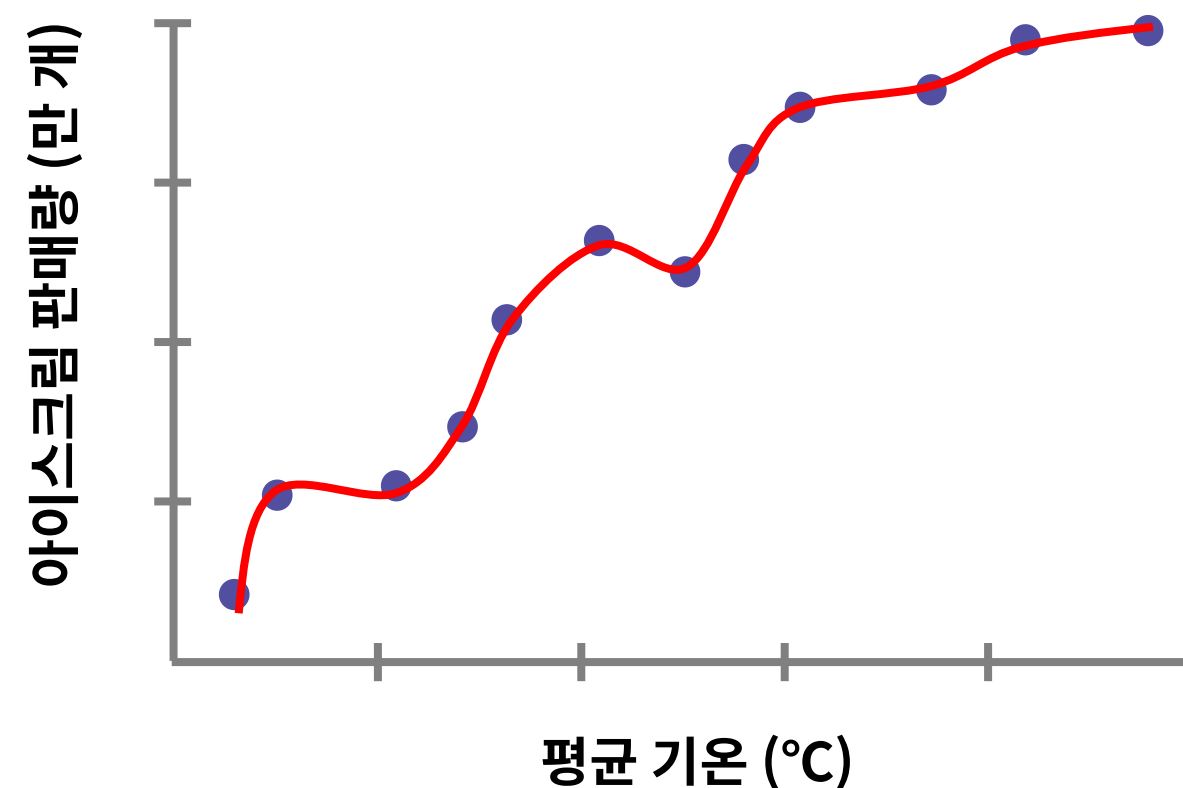
04 과적합과 정규화

✓ 문제

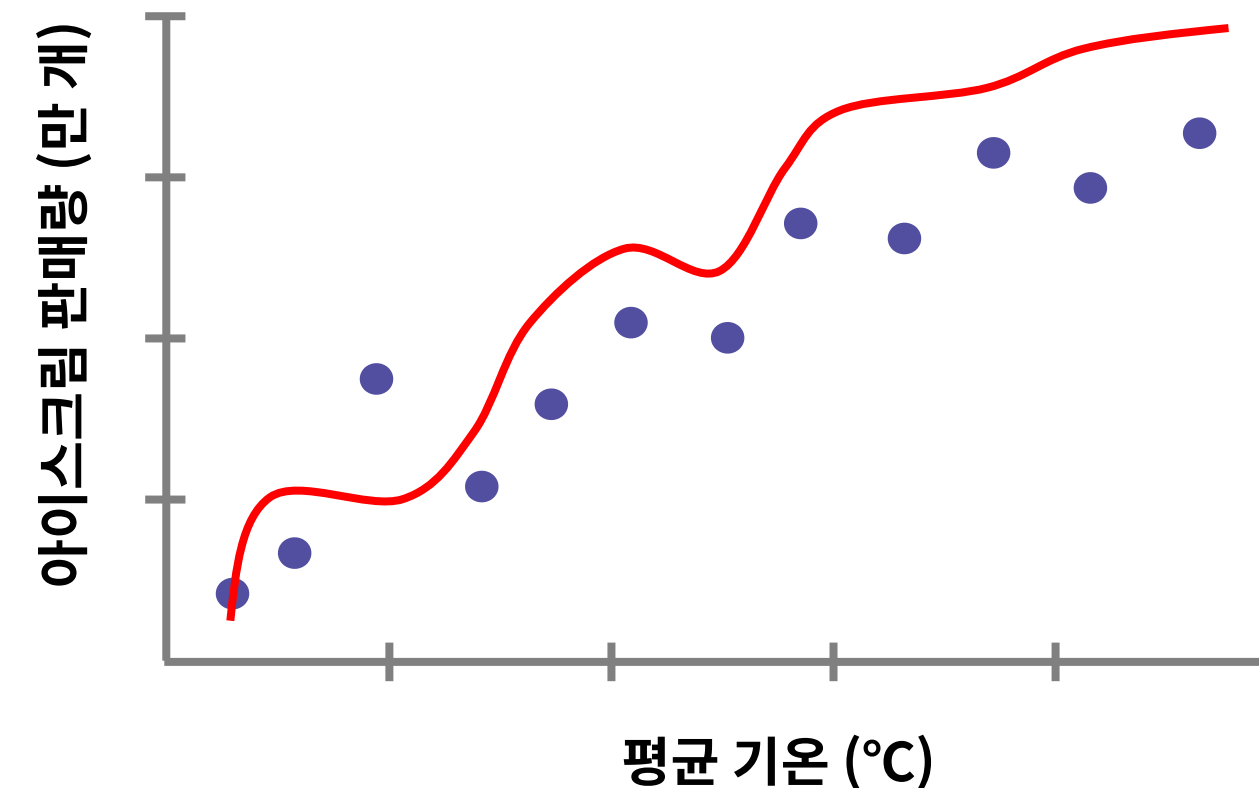
만약, 과거 데이터를 학습한 다항 회귀 모델을 활용하여 새로운 데이터에 대한 예측 결과가 매우 낮다면?

= **과적합(Overfitting)** 발생

• 2019년 데이터로 학습한 다항 회귀 모델 A



• 학습된 다항 회귀 모델 A에 새로운 데이터 입력



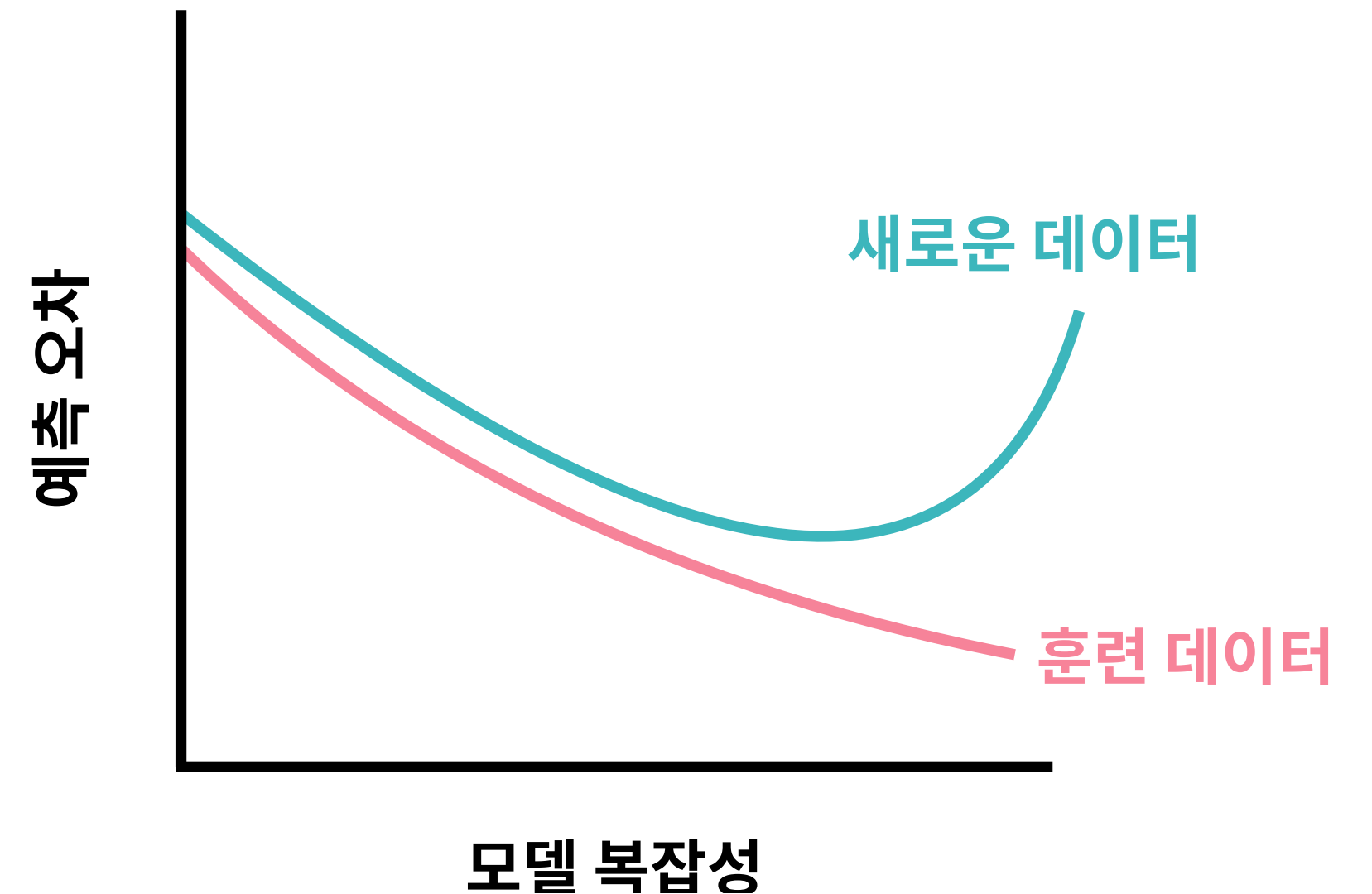
/* elice */

04 과적합과 정규화

✔ 과적합(Overfitting)

모델이 주어진 훈련 데이터에 과도하게 맞춰져
새로운 데이터가 입력 되었을 때 잘 예측하지 못하는 현상

즉, 모델이 과도하게 복잡해져
일반성이 떨어진 경우를 의미함



04 과적합과 정규화

✓ 과적합 방지 방법

모델이 잘 적합되어 실제 데이터와 유사한 예측 결과를 얻을 수 있도록
과적합 방지를 위해 다양한 방법을 사용함

예시

교차 검증(Cross Validation), 정규화(Regularization)

04 과적합과 정규화

✔ 교차 검증(Cross Validation)

모델이 잘 적합되었는지 알아보기 위해

훈련용 데이터와 별개의 **테스트 데이터**, 그리고 **검증 데이터**로 나누어 성능 평가하는 방법

다양한 방법들이 있지만, 일반적으로 **k-fold 교차 검증**을 많이 사용함

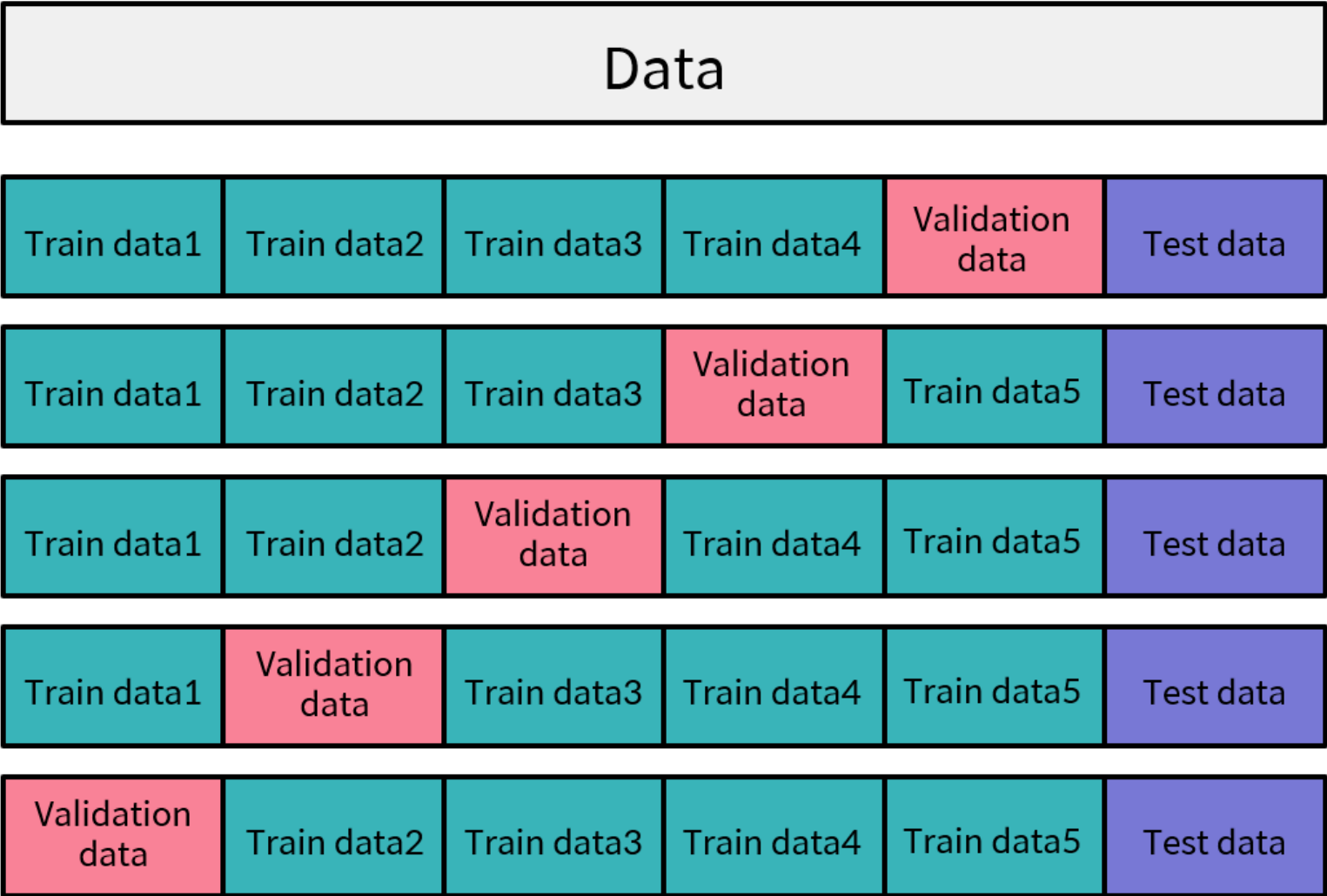
Train (훈련용 데이터)	Validation (검증용 데이터)	Test (테스트용 데이터)
--------------------	-------------------------	--------------------

04 과적합과 정규화

✔ K-fold 교차 검증

훈련 데이터를 계속 변경하며 모델을 훈련시킴
: 데이터를 K등분으로 나누고 K번 훈련시킴

- 1. K를 설정하여 데이터 셋을 K개로 나눔
- 2. K개 중 한 개를 검증용, 나머지를 훈련용으로 사용
- 3. K개 모델의 평균 성능이 최종 모델 성능



04 과적합과 정규화

✔ 정규화(Regularization)

모델의 복잡성을 줄여
일반화된 모델 구현을 위한 방법



모델 β_i 에 패널티를 부여함*

*선형 회귀를 위한 정규화 : L1, L2 정규화

04 과적합과 정규화

✓ 선형 회귀를 위한 정규화 방법

- L1 정규화(Lasso)

불필요한 입력값에 대응되는 β_i 를 **정확히 0**으로 만든다.

- L2 정규화(Ridge)

아주 큰 값이나 작은 값을 가지는 이상치에 대한 β_i 를 **0에 가까운 값**으로 만든다.

04 과적합과 정규화

✔ 정규화 방법을 적용한 회귀 알고리즘

회귀 알고리즘에 정규화 방법을 적용하면?

적용한 정규화 방법에 따라

라쏘(Lasso), 릿지(Ridge), 엘라스틱 넷(Elasticnet) 회귀로 분류

05

정규화를 적용한 회귀



05 정규화를 적용한 회귀

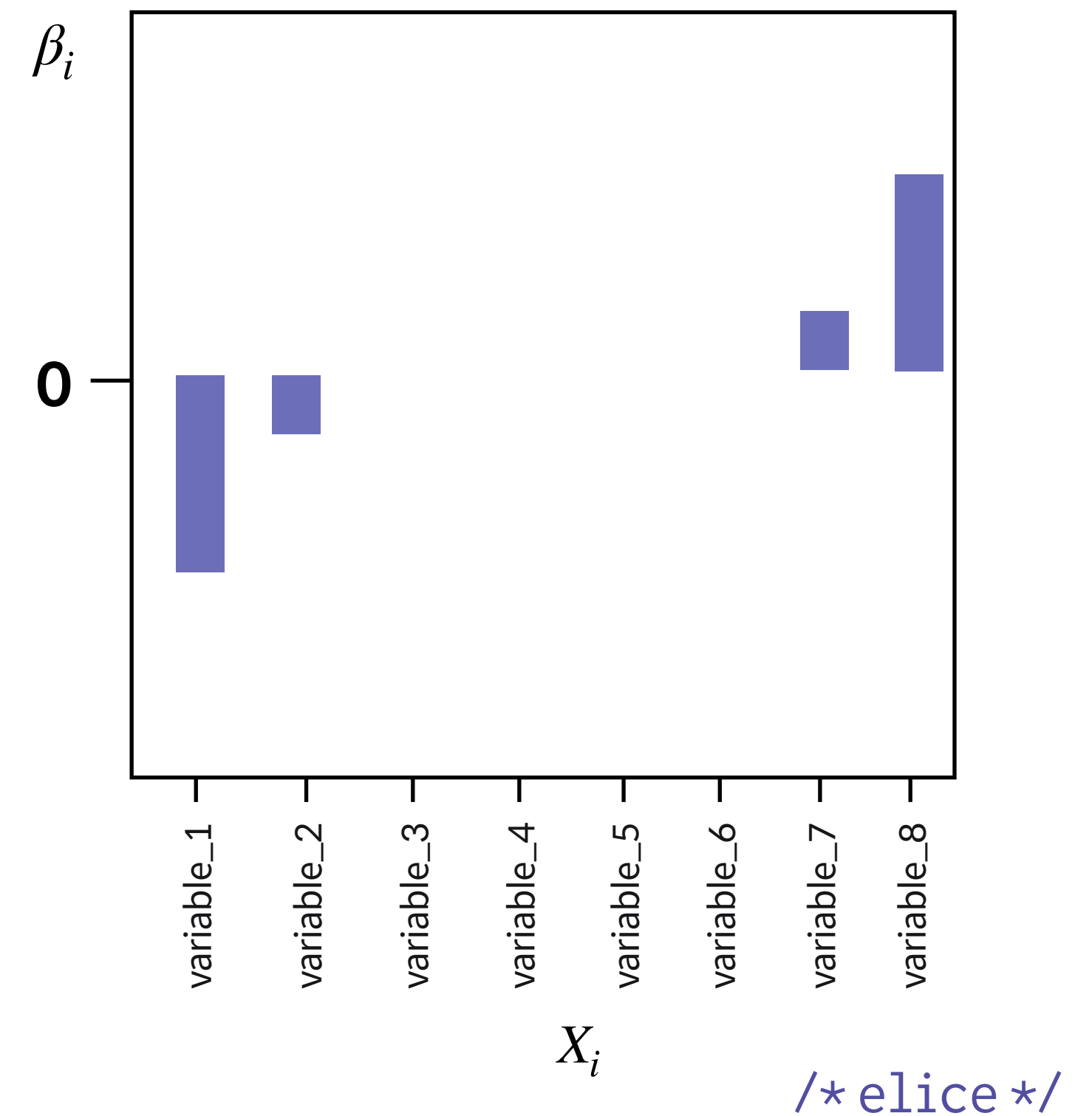
✔ 정규화 기법을 적용한 회귀(1) - Lasso Regression

회귀 학습에 사용되는

Loss Function(비용 함수)에 **L1 정규화** 항을 추가

중요하지 않은 β_i 를 **0으로 만들어**

모델의 복잡성을 줄일 수 있음



05 정규화를 적용한 회귀

✔ 정규화 기법을 적용한 회귀(1) - Lasso Regression

특징

- 너무 많은 β_i 를 0으로 만들 수 있어 모델의 정확성이 떨어질 수 있음
- 몇 개의 중요 변수만 선택하기 때문에 정보 손실의 가능성이 있음

05 정규화를 적용한 회귀

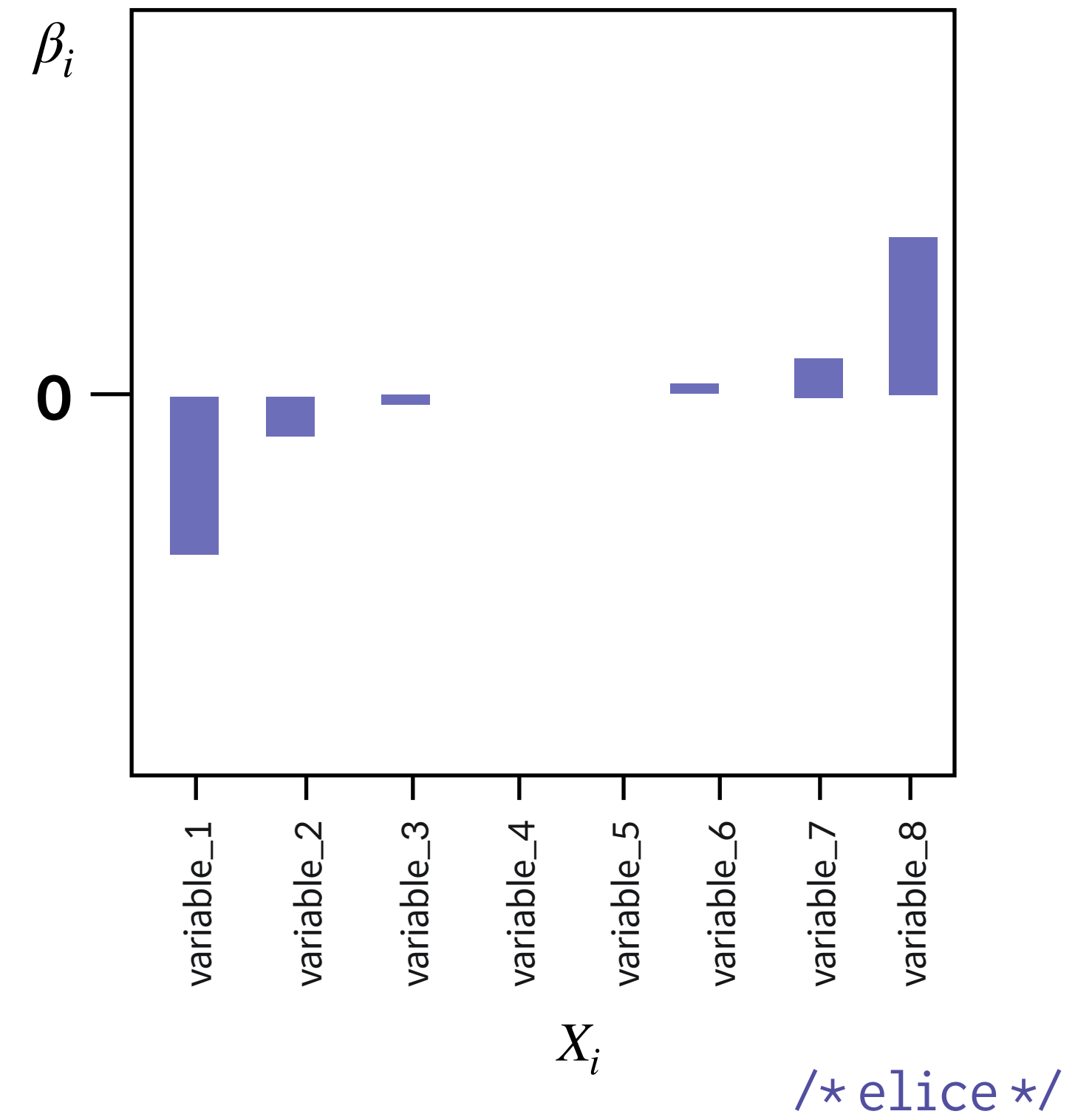
✔ 정규화 기법을 적용한 회귀(2) - Ridge Regression

회귀 학습에 사용되는

Loss Function(비용 함수)에 **L1 정규화** 항을 추가

중요하지 않은 β_i 를 **0에 가깝게 만들어**

모델의 복잡성을 줄일 수 있음



05 정규화를 적용한 회귀

✔ 정규화 기법을 적용한 회귀(2) - Ridge Regression

특징

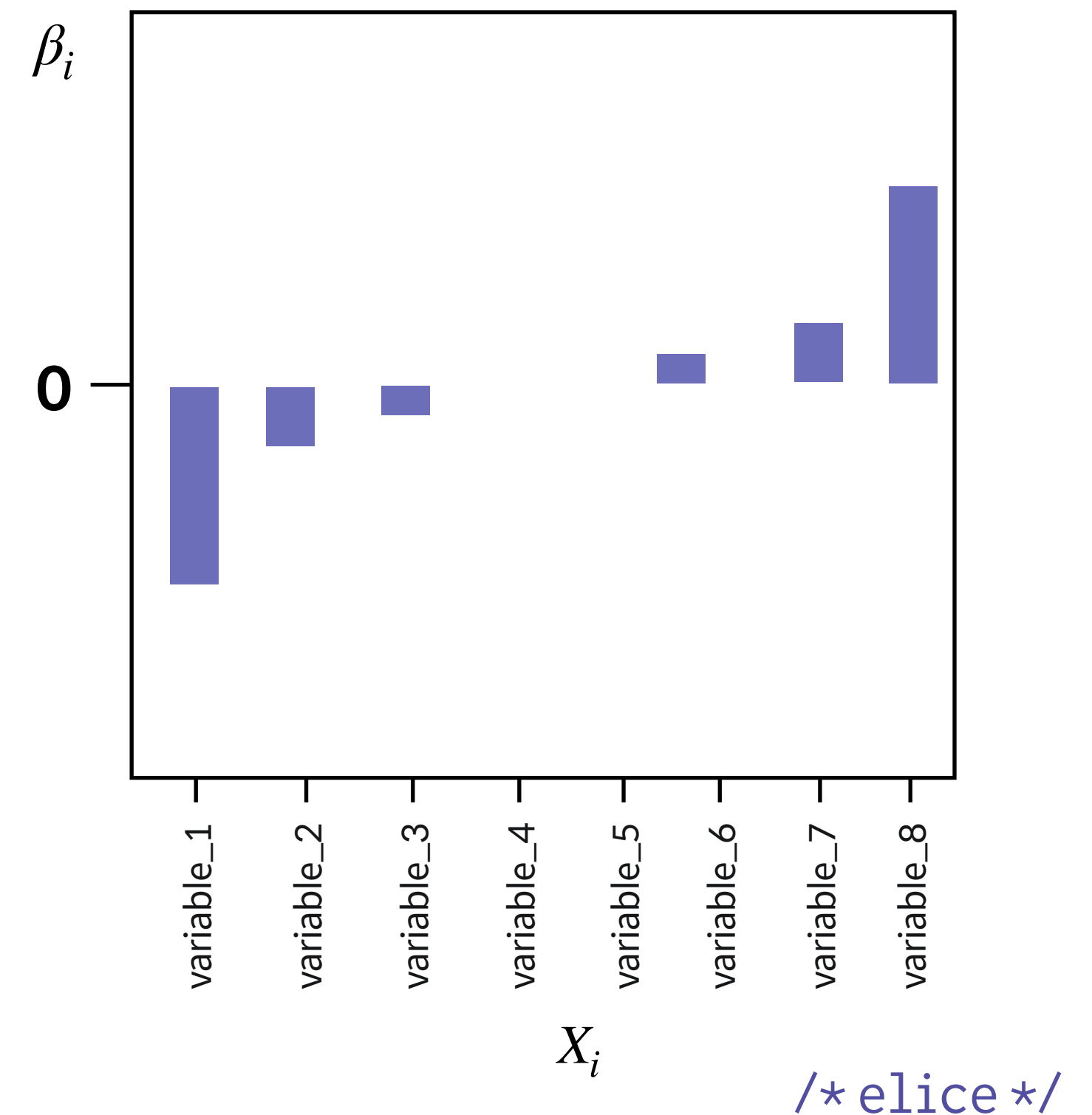
- β_i 를 0에 가깝게 만들지만 완전한 0은 아니기 때문에 모델이 여전히 복잡할 수 있음

05 정규화를 적용한 회귀

✔ 정규화 기법을 적용한 회귀(3) - Elastic Net Regression

Lasso 회귀, Ridge 회귀의 단점을 보완하기 위함

Lasso 회귀의 L1 정규화와
Ridge 회귀의 L2 정규화
적용 **비율을 조정**하여 모델 구현



06

회귀 알고리즘 평가 지표



06 회귀 알고리즘 평가 지표

✔ 회귀 알고리즘 평가

어떤 모델이 좋은 모델인지를 어떻게 평가할 수 있을까?
목표를 얼마나 잘 달성했는지 정도를 평가해야 함.

회귀 분석 알고리즘 목표

과대적합의 반대의미로,
모델이 너무 단순하여 학습된 데이터조차 잘 예측하지 못하는 현상

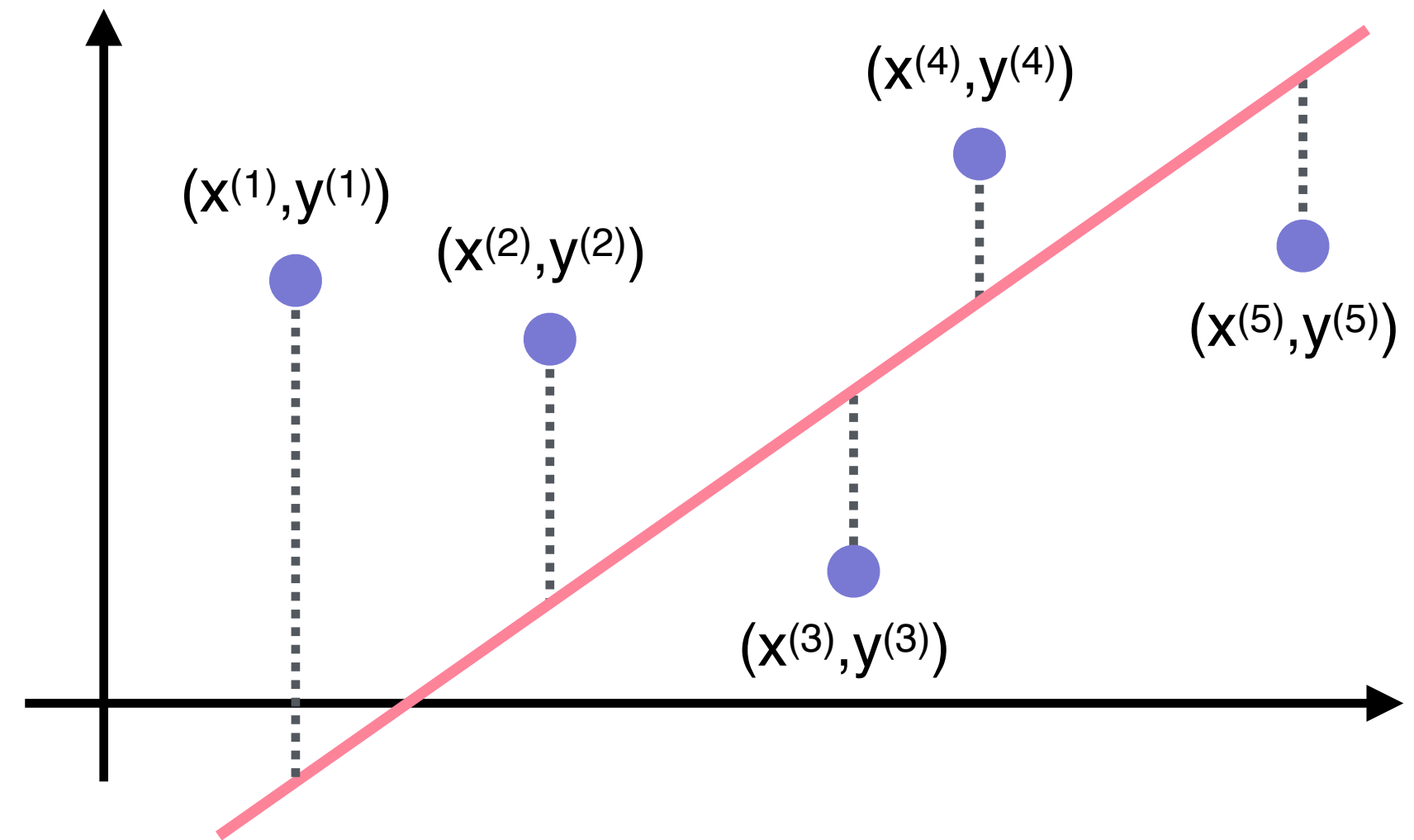
06 회귀 알고리즘 평가 지표

✓ 목표 달성 평가 방법

실제 값과 모델이 예측하는 값의 **차이**에
기반한 평가 방법 사용

예시

$RSS, MSE, MAE, MAPE, R^2$

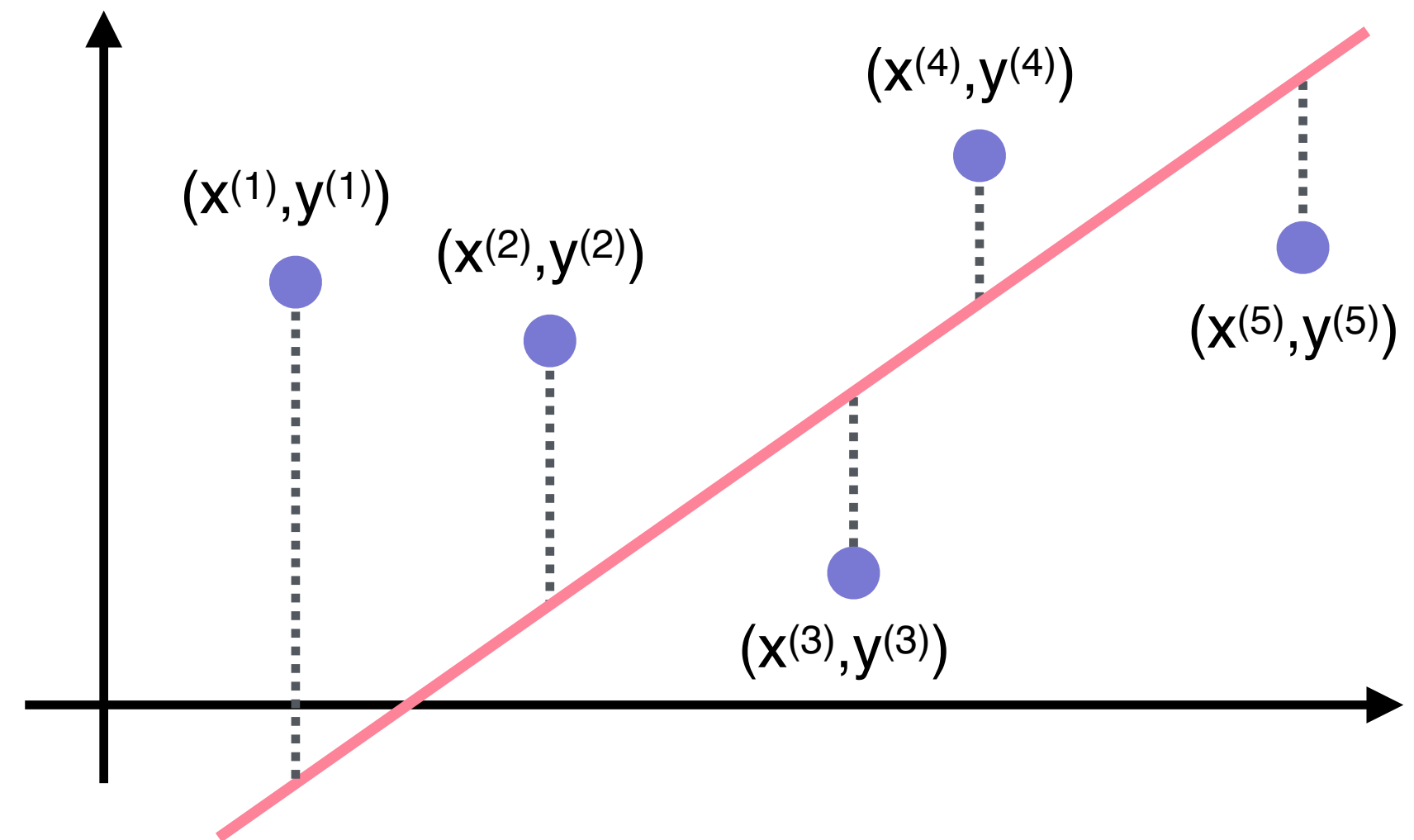


06 회귀 알고리즘 평가 지표

✓ RSS - 단순 오차

• RSS(Residual Sum of Squares)

1. 실제값과 예측값의 **단순 오차 제곱 합**
2. 값이 작을수록 모델의 성능이 높음
3. 전체 데이터에 대한 실제 값과 예측하는 값의 오차 제곱의 총합



06 회귀 알고리즘 평가 지표

✓ RSS 특징

- 가장 간단한 평가 방법으로 직관적인 해석이 가능함
- 그러나 오차를 그대로 이용하기 때문에 입력값의 **크기에 의존적임**

06 회귀 알고리즘 평가 지표

✔ MSE, MAE - 절대적인 크기에 의존한 지표

- MSE(Mean Squared Error)

평균 제곱 오차, RSS에서 데이터 수만큼 나눈 값
작을수록 모델의 성능이 높다고 평가할 수 있음.

- MAE(Mean Absolute Error)

평균 절대값 오차, 실제값과 예측값의 오차의 절대값의 평균
작을수록 모델의 성능이 높다고 평가할 수 있음.

06 회귀 알고리즘 평가 지표

✔ MSE, MAE 특징

- MSE : 이상치(Outlier) 즉, 데이터들 중 크게 떨어진 값에 민감함
- MAE : 변동성이 큰 지표와 낮은 지표를 같이 예측할 시 유용
- 가장 간단한 평가 방법들로 직관적인 해석이 가능함
- 그러나 평균을 그대로 이용하기 때문에 입력값의 **크기에 의존적임**

06 회귀 알고리즘 평가 지표

✓ R^2 (결정 계수)

회귀 모델의 설명력을 표현하는 지표

1에 가까울수록 높은 성능의 모델이라고 해석할 수 있음.

예시

$$1 - \frac{\text{SSE}}{\text{TSS}} \quad (0 \leq R^2 \leq 1)$$

06 회귀 알고리즘 평가 지표

✓ R^2 특징

- 백분율로 표현하기 때문에 크기에 의존적이지 않음
- 실제값이 1보다 작을 경우, 무한대에 가까운 값 도출, 실제값이 0일 경우엔 계산 불가

06 회귀 알고리즘 평가 지표

✔ 평가 지표 선정 방법

절대적인 평가 지표는 존재하지 않음!

다양한 평가 지표를 적용해보고, 결과값을 비교하며 모델의 성능을 **다양한 측면에서 확인**해봐야 함

Contact

TEL

070-4633-2015

WEB

<https://elice.io>

E-MAIL

contact@elice.io

