데이터 과학 기초

04

로지스틱 회귀와 분류

경북대학교 배준현 교수

(joonion@knu.ac.kr)



- 선형모델의 일반화:
 - 선형회귀분석을 위한 조건:
 - 결과변수가 연속형 변수이면서 정규분포를 따라야 한다.
 - 선형회귀분석을 위한 조건에 맞지 않는 경우:
 - 결과변수가 범주형 변수일 때: 로지스틱 회귀분석
 - 결과변수가 어떤 사건이 발생하는 횟수일 때: 포아송 회귀분석



- 일반화 선형모델: *generalized* linear model
 - 선형회귀모델을 확장: 정규분포를 따르지 않는 결과변수에 대한 회귀모델 생성
 - 표준 선형회귀모델: $\mu_{\nu} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m$
 - μ_{ν} : 결과변수의 조건부 평균, χ_m : 예측변수, β_m : 회귀계수, m: 변수의 개수
 - 일반 선형회귀모델: $f(\mu_{\nu}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m$
 - $f(\mu_{\nu})$: 결과변수의 조건부 평균의 함수 (link function)
 - 표준 선형회귀모델은 일반선형모델의 한 특수한 경우
 - 링크함수가 항등함수: $f(\mu_{\nu}) = \mu_{\nu}$
 - 확률분포는 정규분포를 따름
 - 회귀계수의 추정: 최대우도법(MLE, Maximum Likelihood Estimation)



- 일반화 선형모델: generalized linear model
 - 로지스틱 회귀분석: logistic regression analysis
 - 결과변수가 범주형 변수일 때: 정규분포를 따르지 않음
 - 이분 변수(binary variable): 예/아니오, 성공/실패, 생존/사망 등
 - 다중 변수(multicategory variable): 우수/보통/미흡, A/B/AB/O 등
 - 포아송 회귀분석: Poisson regression analysis
 - 결과변수가 어떤 사건이 발생하는 횟수일 때: 포아송 분포를 따름
 - 연간 철도사고횟수, 월간 빈집털이횟수, 일간 상담횟수 등
 - 횟수변수는 포아송 분포를 따르고, 평균과 분산은 종종 상관관계를 가짐



- 포아송 회귀분석: *Poisson* regression analysis
 - 결과변수가 특정 기간 동안의 사건발생횟수(또는 개수)인 경우에 적용
 - 한 시간 동안 걸려오는 상담전화 횟수
 - 하루 동안 발생하는 범죄 횟수
 - 한 달 동안 발생하는 교통사고 횟수 등
 - 포아송 회귀모델: *Poisson* regression model
 - 링크함수는 $\ln(\lambda)$ 이며, 확률분포는 포아송 분포를 따름
 - $\ln(\lambda) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m$
 - λ : 결과변수 y의 평균



- 이항 로지스틱 회귀분석: *binomial* logistic regression analysis
 - 결과변수가 이분형 범주일 때 특정 사건이 발생할 확률을 직접 추정
 - 결과변수의 예측값이 항상 1(사건발생)과 O(미발생) 사이의 확률값
 - 확률값이 0.5보다 크면 사건이 발생, 0.5보다 작으면 발생하지 않음
 - 예) 기업부도가 발생할 확률
 - 로지스틱 변환: logistic transformation
 - 예측변수의 선형결합을 로그 변환한 결과변수로 나타냄
 - 이항 로지스틱 회귀모델: binomial logistic regression model

$$- \ln \left(\frac{p}{1-p} \right) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m$$

• p: 이항 사건의 성공 확률(사건발생), 1-p: 이항 사건의 실패 확률(미발생)



■ 이항 로지스틱 회귀분석:

- 오조: odds
 - $odds = \frac{p}{1-p}$: 사건 발생확률 대 사건 미발생 확률의 비율
 - 로짓(logit): 오즈에 로그를 취한 값= $ln\left(\frac{p}{1-p}\right)$
- 로지스틱 회귀모델:
 - 로그오즈(log odds=logit)에 대한 선형모델
 - 링크함수가 로그오즈이며, 확률분포는 이항분포
 - 사건발생확률 p에 대해서 정리:

•
$$p = \frac{e^z}{1+e^z} = \frac{1}{1+e^{-z}}, z = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m$$

- 회귀계수를 알면 결과변수의 사건발생확률을 구할 수 있음



- 오즈비: odds ratio
 - 다른 독립변수가 동일하다는 가정하에서
 - 특정 독립변수 한 단위 증가에 따른
 - 사건 발생확률 대 미발생확률 비율의 변화율
 - 오즈비는 오즈의 정의로부터 도출 가능
 - $\ln(odds) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m$
 - $odds = e^{\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m}$
 - x_1 변수의 오즈비 = $\frac{e^{\beta_0 + \beta_1 \times 1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m}}{e^{\beta_0 + \beta_1 \times 0 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m}} = \frac{e^{\beta_1 \times 1}}{e^{\beta_1 \times 0}} = e^{\beta_1}$



- 로지스틱 회귀분석과 예측:
 - 로지스틱 회귀계수를 알면 사건발생의 확률을 계산 가능

-
$$P($$
사건발생 $) = \frac{1}{1+e^{-z}}, z = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m$

- 예측: prediction
 - 새로운 예측변수의 값을 입력하면 결과변수값이 1인 확률을 예측가능
 - 훈련 데이터로부터 회귀계수를 학습한 결과로
 - 시험 데이터의 고객이 이탈할 확률을 예측할 수 있음



- 분류와 군집화: Classification .vs. Clustering
 - 분류: 지도 학습: 정답이 있는 데이터셋을 분류하는 것
 - 예) iris 데이터셋에서 품종의 분류.
 - 예) titanic 데이터셋에서 생존 여부를 예측.
 - 군집화: 비지도 학습: 정답이 없는 데이터셋을 분류하는 것
 - 예) iris 데이터셋에서 모양이 유사한 꽃들의 군집 찾기
 - 예) titanic 데이터셋에서 서로 가까운 사람들의 군집 찾기



■ 분류기의 종류:

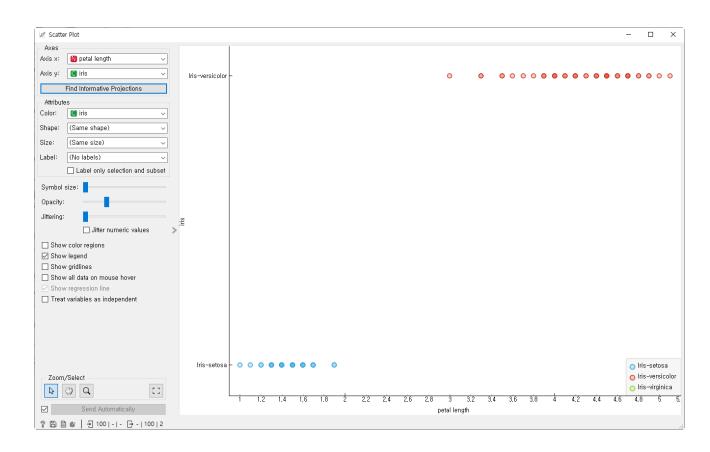
- 로지스틱 회귀분석: Logistic Regression
- 의사결정 트리: Decision Tree
- 랜덤 포리스트: Random Forest
- k-최근접 이웃: kNN, k-Nearest-Neighbor
- 나이브 베이지안: Naïve Bayesian
- 서포트 벡터 머신: SVM, Support Vector Machine



- 이진 분류: *Binary* Classification
 - 분류도 예측의 일종이지만, 종속변수가 범주형 변수
 - 이진 분류: 종속변수 값의 범위가 두 개일 때
 - 예) titanic 데이터셋: survival 변수는 (생존, 사망) 둘 중의 하나
 - 예) 암 진단: 종속 변수가 암에 (걸렸거나, 걸리지 않았거나) 둘 중의 하나

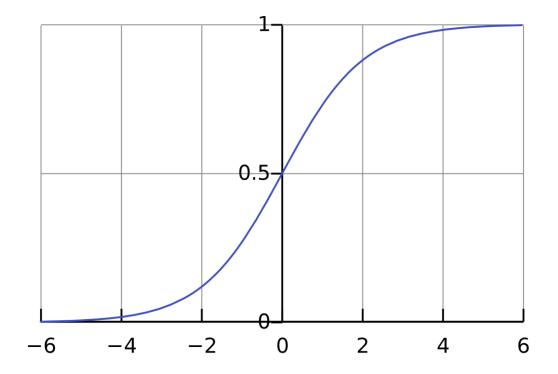


- 로지스틱 회귀: Logistic Regression
 - 종속변수의 값이 바이너리 형태인 경우에 적용하기 좋은 회귀 분석 모델
 - 직선으로는 이런 데이터를 잘 설명할 수 없으므로, 적절한 곡선을 찾아야 함.





- 로지스틱 함수: *Logistic* Function
 - 바이너리 값을 가지는 범주형 데이터를 잘 설명해 주는 지수 함수
 - $y = \frac{1}{1+e^{-x}}$, e는 자연상수(오일러의 수, 네이피어의 수).





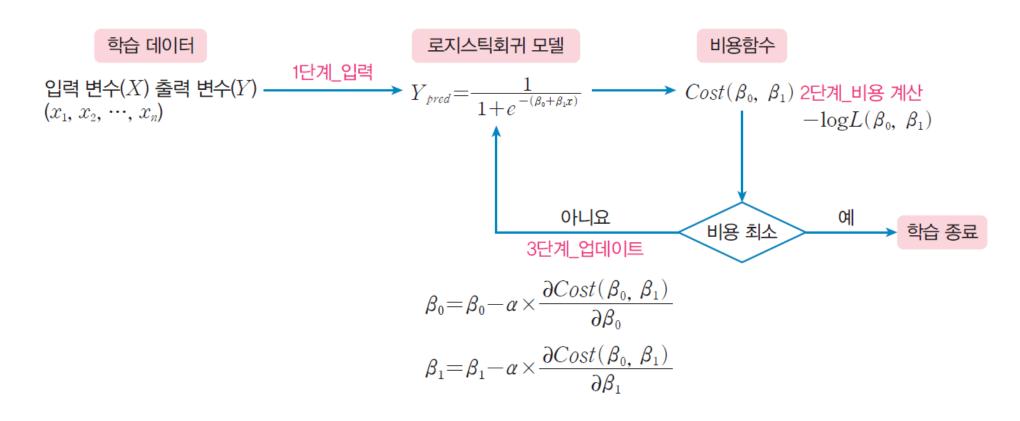
- 로지스틱 함수의 성질과 활용:
 - 시그모이드 함수: Sigmoid Function
 - bounded: 유한한 구간 (a, b) 사이의 한정된 값을 갖는다.
 - monotonic: 항상 양의 기울기를 가지는 단조증가 함수다.
 - 로지스틱 함수를 분류의 기준을 충족할 확률로 해석

$$- y = \alpha x + \beta, f(x) = \frac{1}{1 + e^{-(\alpha x + \beta)}}$$

- f(x) > 0.5: y = 1이라고 분류
- f(x) < 0.5: y = 0이라고 분류



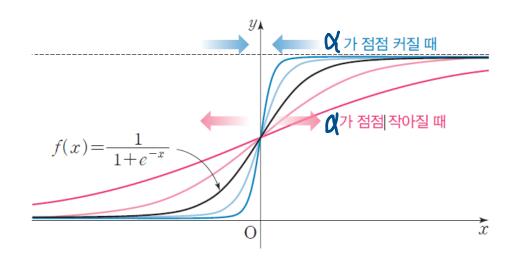
■ 로지스틱 회귀식을 학습하기 위한 과정:

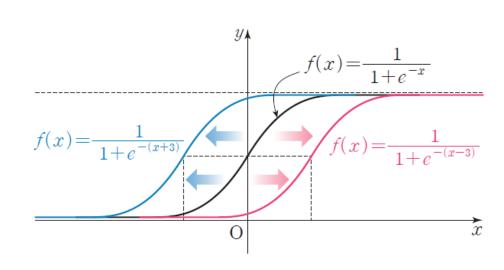


출처: 수학과 함께 하는 Al 기초, EBS



- 로지스틱 회귀식을 찾는 방법:
 - 로지스틱 함수 f(x)에서 가장 적절한 α 와 β 찾기
 - 최대우도추정법: MLE, Maximum Likelihood Estimation
 - 우도 함수: Likelihood Function
 - $-L(\alpha,\beta) = \prod_{i=1}^{n} \{f(x_i)\}^{y_i} \{1 f(x_i)\}^{1-y_i}$







• R: glm()

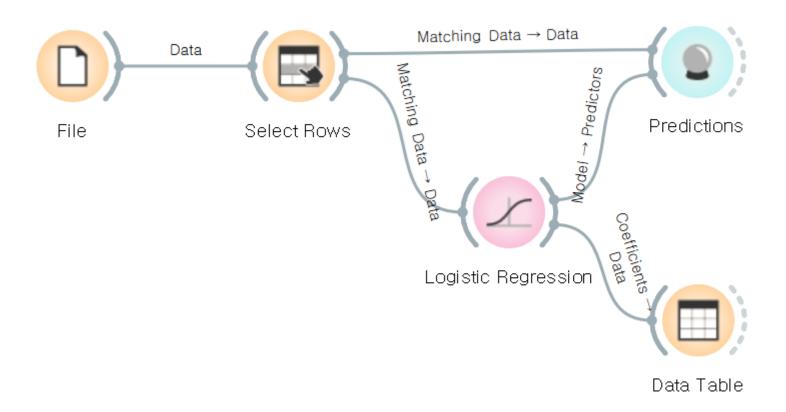
```
data(iris)
df <- iris[1:100, ]</pre>
df$Species <- as.numeric(df$Species)</pre>
head(df)
model <- glm(Species ~ ., data=df)</pre>
model
          > model
          Call: glm(formula = Species ~ ., data = df)
          Coefficients:
           (Intercept) Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length
                                                                   Petal.Width
                                           -0.16820
                                                          0.20313
               1.36970
                            -0.02849
                                                                        0.28785
```



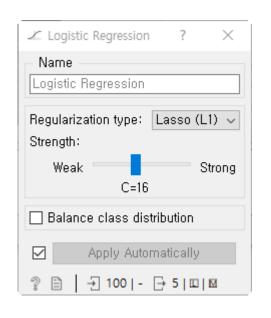
```
# Prepare test data
v1 \leftarrow c(2.7, 2.4, 1.65, 0.67)
v2 \leftarrow c(5.84, 5.48, 3, 2.16)
v3 \leftarrow c(3.97, 4.01, 1.7, 0.67)
mat <- matrix(c(v1, v2, v3), nrow=3, ncol=4, byrow=TRUE)
df.test <- data.frame(mat)</pre>
colnames(df.test) <- colnames(iris[1:4])</pre>
pred <- predict(model, df.test)</pre>
df.test$pred = round(pred, 0)
df.test
               > df.test
                 Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width pred
                                                           0.67
                        2.70
                             2.40 1.65
                     5.84 5.48 3.00
                                                           2.16
                        3.97 4.01 1.70
                                                           0.67
```

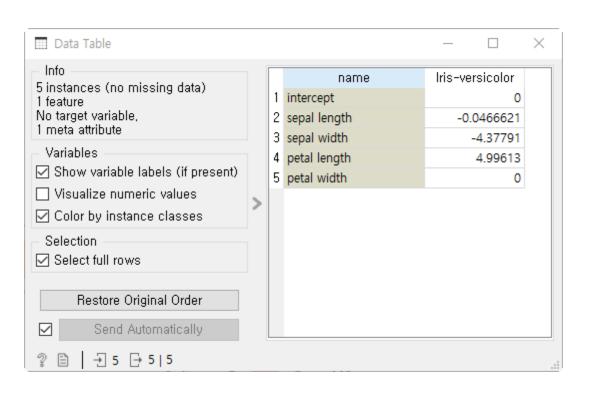


Orange: Logistic Regression

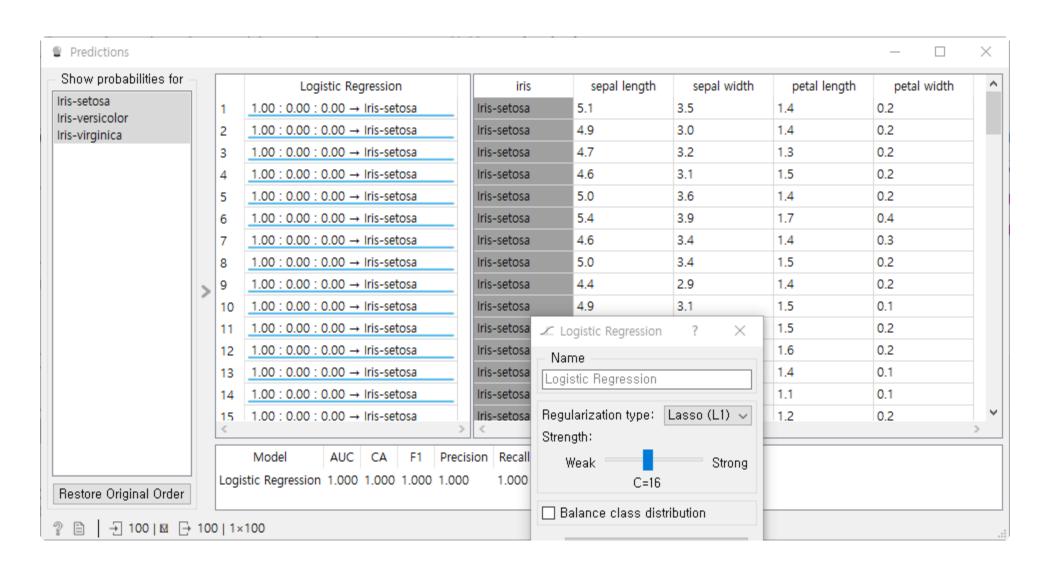






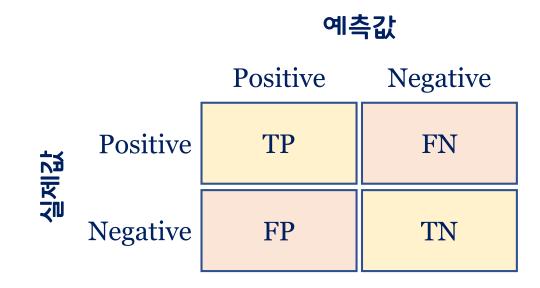






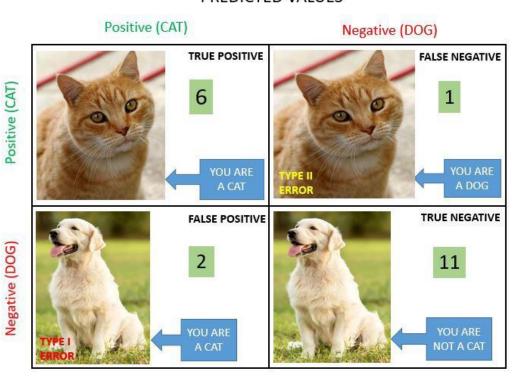


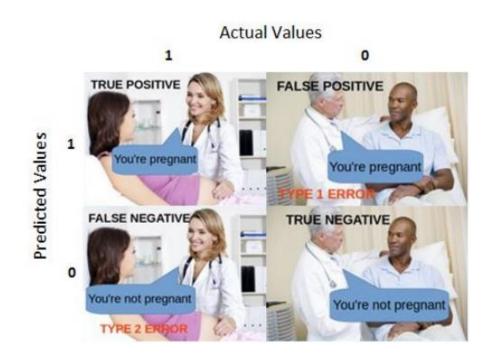
- 이진 분류의 결과 표현:
 - 혼동 행렬: Confusion Matrix
 - 이진 분류기의 분류 결과를 2×2 행렬로 표시한 행렬
 - 이진 분류기가 분류(예측)할 때, 얼마나 많이 헷갈렸는가를 나타냄





PREDICTED VALUES





ACTUAL VALUES



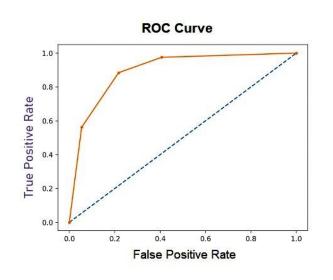
- 분류 모델의 성능 평가 지표: Evaluation Metric
 - 정확도: *CA*, Classification *Accuracy*

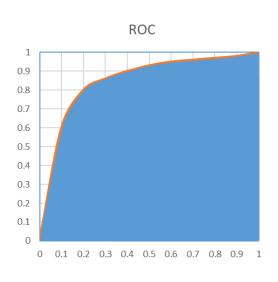
-
$$Accuracy = \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$$

- 정밀도: Precision
 - $Precision = \frac{TP}{TP+FP}$, 분류기가 양성으로 판정한 것이 얼마나 정확한가?
- 재현율: Recall
 - $Recall = \frac{TP}{TP + FN}$, 분류기가 양성으로 판정한 것의 비율은 얼마인가?
- F1-Score
 - $-F1 = \frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$, 정밀도와 재현율의 조화평균



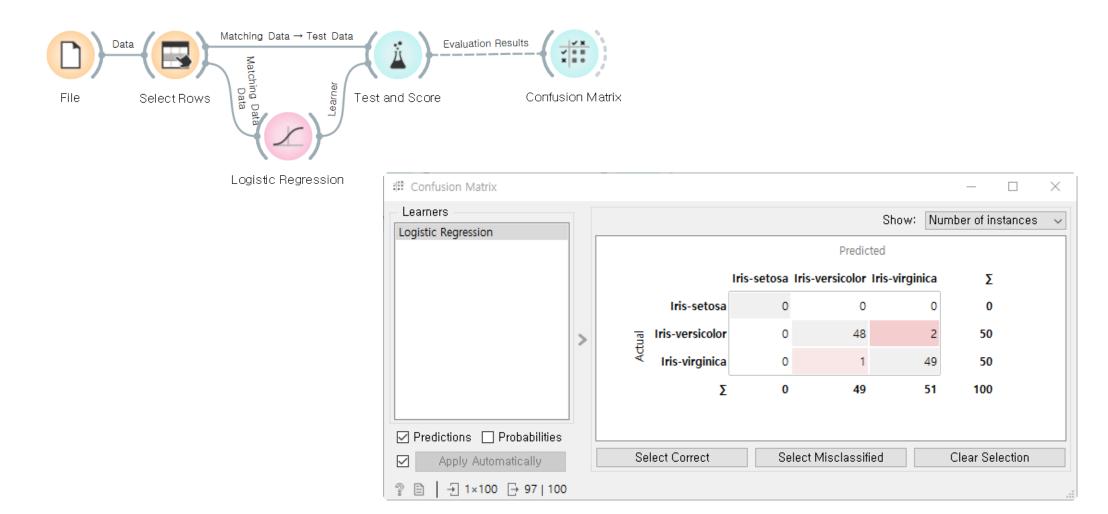
- 분류 모델의 성능 평가 지표:
 - ROC 곡선: Receiver Operation Characteristic Curve
 - 이진 분류의 결과에서 FP 비율과 TP 비율의 관계를 그린 곡선
 - AUC: Area Under Curve
 - ROC 곡선의 하부 면적으로 표현하는 성능 평가 지표





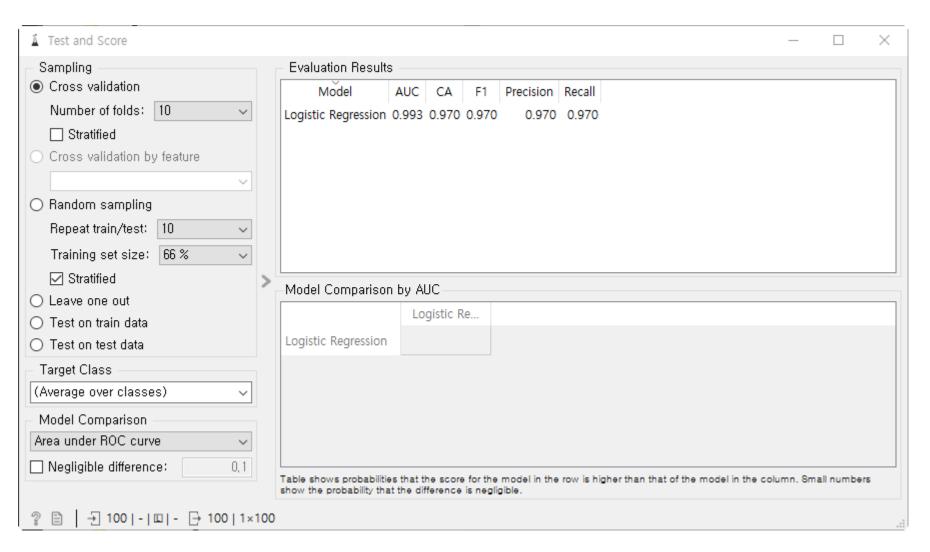


Orange: Confusion Matrix



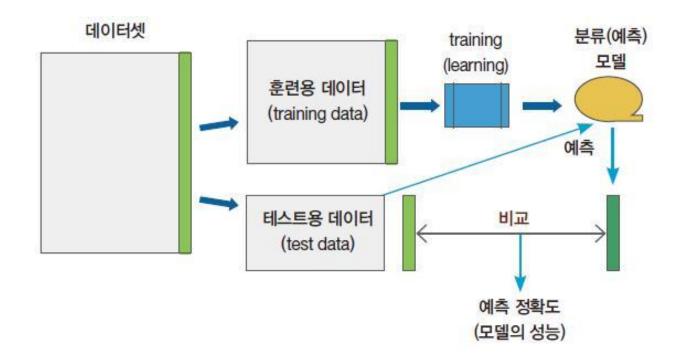


Orange: Test and Score





- 교차 검증: Cross Validation
 - 훈련용 데이터셋을 가지고 분류기의 정확성을 검증하는 방법은?
 - 훈련용 데이터와 시험용 데이터로 나누어서 성능 평가
 - 훈련용/시험용 데이터로 나누는 좋은 방법은?

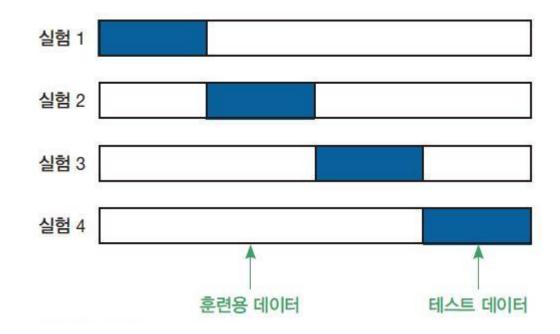




- 교차 검증 방법들:
 - k-폴드 교차 검증: k-Fold Cross Validation
 - 데이터셋을 k개의 폴드로 분리하여 하나만 시험용으로 사용
 - Stratified: 원본 데이터의 라벨 분포를 먼저 고려
 - 랜덤 샘플링: Random Sampling
 - 임의로 학습용/시험용 데이터셋을 추출하여 교차 검증
 - 리브-언-아웃: *Leave-One-Out* Cross Validation (LOOCV)
 - 폴드 하나에 샘플 하나만 남겨두는 k-폴드 교차 검증



- k-폴드 교차 검증: k-Fold Cross Validation
 - 주어진 데이터셋을 k개로 나누어서 훈련용/검증용 데이터로 번갈아 사용
 - k개의 검증용 데이터셋으로 분류 모델의 성능을 테스트한 평균값을 지표로 사용





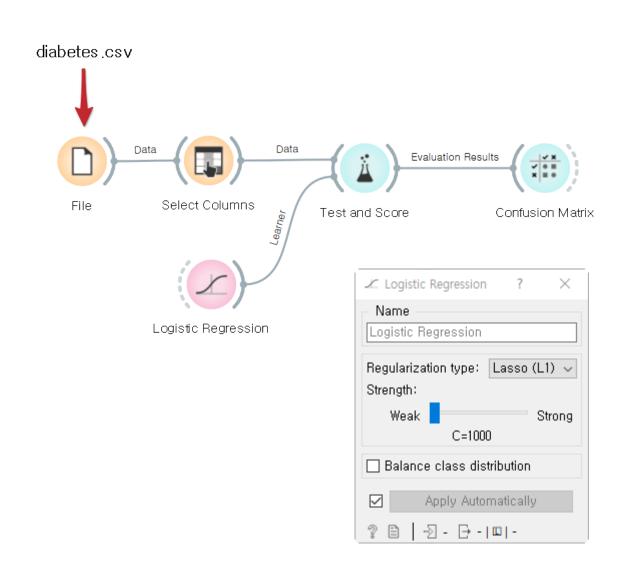
- 피마 인디언 당뇨병 데이터셋: Pima Indians Diabetes Database
 - 캐글: https://www.Kaggle.com/uciml/pima-Indians-diabetes-database
 - 북아메리카 피마 지역 원주민의 당뇨병 데이터
 - 9개의 변수, 768개의 관측값
 - numeric feature 87H, categorical target 17H
 - 목적 변수:
 - Outcome (categorical): o 또는 1

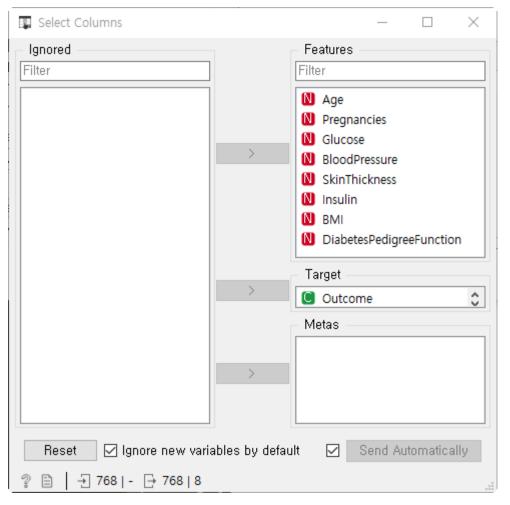


■ 피마 인디언 당뇨병 데이터셋:

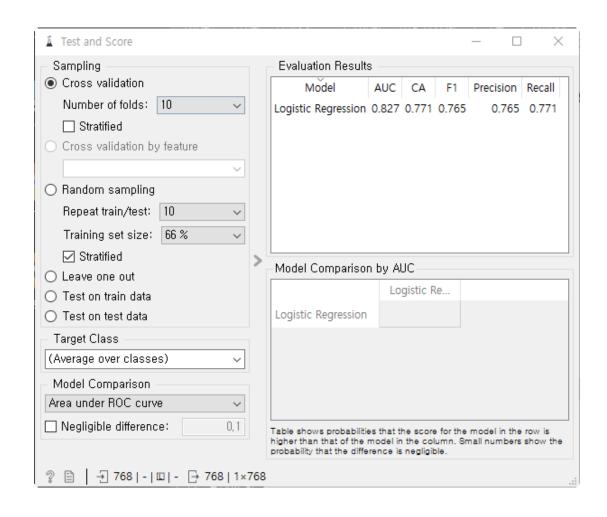
- 독립 변수:
 - Pregnancies: 임신 횟수
 - Glucose: 포도당 검사 수치
 - BloodPressure: **혈압 수치** (mm Hg)
 - SkinThickness: 삼두근 뒤쪽의 피하지방 측정값 (mm)
 - Insulin: **혈청 인슐린** (mu U/ml)
 - BMI: 체질량 지수(weight in kg/(height in m)²)
 - DiabetesPedigreeFunction: 당뇨 내력 가중치 값
 - Age: Liol

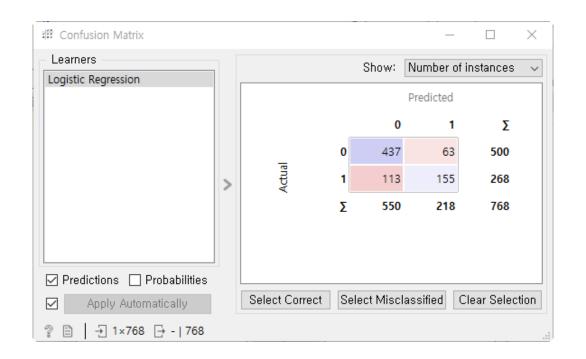












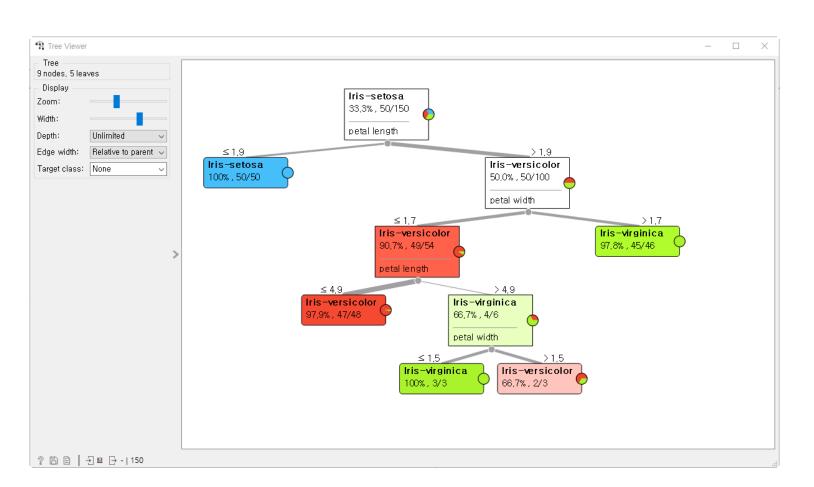


- 결정 트리: Decision Tree
 - 데이터를 학습해서 트리 기반의 분류 규칙을 만드는 방법
 - 일종의 스무고개 방식: 분할 정복 (*Divide-and-Conquer*)
 - 루트 노드: 모든 데이터를 포함
 - 중간 노드: 특정 조건에 따른 데이터의 분할
 - 리프 노드: 분류 조건에 맞는 데이터의 집합



Orange: Tree, Tree Viewer







- 결정 트리를 학습하는 방법:
 - 분할 조건이 되는 특징을 어떻게 식별할 것인가?
 - 순도(*purity*): 단일 분류 데이터를 포함하는 정도
 - 분류의 기준: 각 단계별로 순도가 높아지는 방향으로 분류
 - 정보 이득: information gain
 - 데이터를 나누기 전과 데이터를 나눈 후의 정보량의 변화



- 정보 엔트로피: Information Entropy
 - 정보량: 어떤 데이터가 포함하고 있는 정보의 총 기대치
 - 어떤 사건이 발생할 확률이 p이면 그 사건의 정보량은 $\log_b \frac{1}{p}$
 - 어떤 사건의 정보량의 기대치: $p \log_b \frac{1}{p} = -p \log_b p$
 - 정보 엔트로피: 전체 사건의 기대치
 - 각 사건의 기대치의 합: $H=-\sum_{i=1}^n p_i \log p_i$
 - 사건의 확률이 1/2이라면: \log 의 밑은 2: $H = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log_2 p_i$
 - 데이터의 순도가 높아지는 방향: 정보 엔트로피가 낮아지는 방향

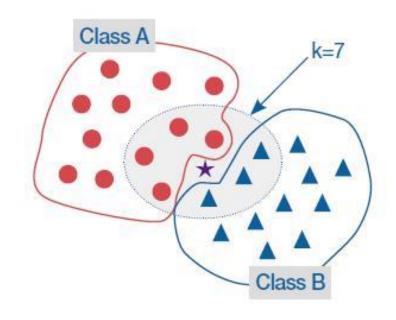


• R: rpart()

```
library(rpart)
df <- iris</pre>
model <- rpart(Species ~ ., data = df, method="class")</pre>
model
plot(model)
text(model)
                                                Petal.Length< 2.45
                                                                Petal.Width< 1.75
                                   etosa
                                                                             virginica
```



- k-최근접-이웃: *k-Nearest-Neighbor*
 - 어떤 데이터와 가장 가까운 k개의 이웃을 보고, 가장 적절한 분류를 결정
 - 협업 필터링: Collaboration Filtering
 - 예) 유튜브/넷플릭스/페이스북의 추천 알고리즘



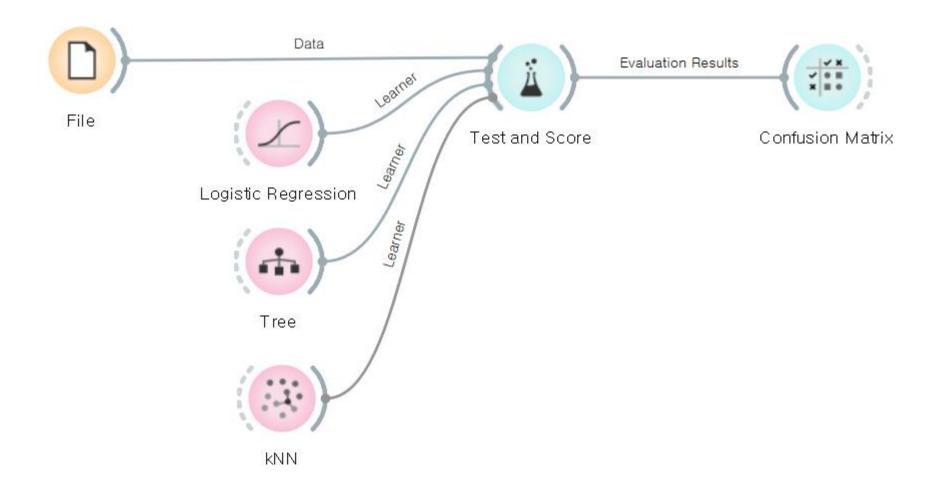


• kNN의 적용:

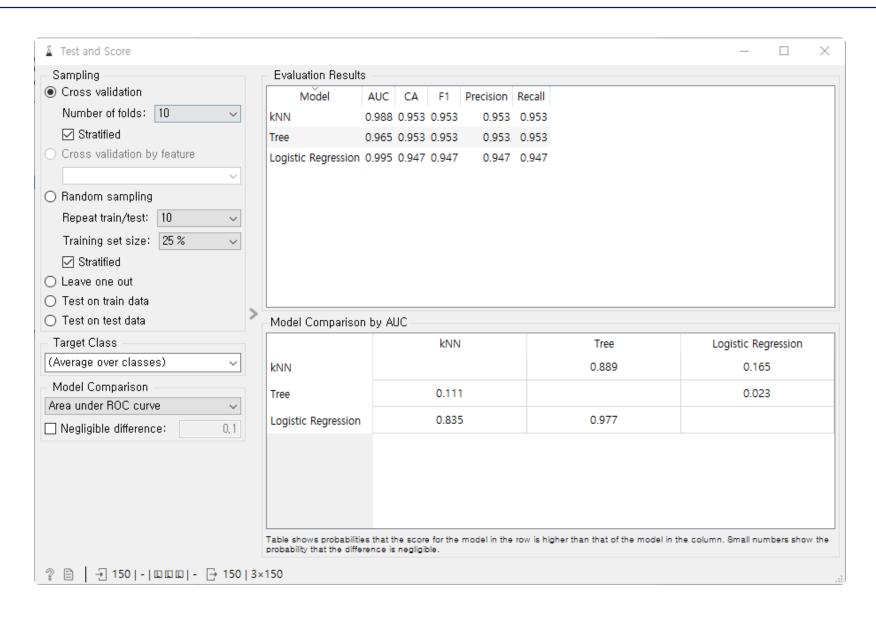
- k의 값을 어떻게 결정할 수 있는가?
 - ullet 데이터셋의 관측값의 개수가 ullet ullet 이 ullet ullet ullet 작은 것이 좋음
 - 보통은 1~10의 값을 차례로 실험해 보면서 예측의 정확도를 평가
- 이웃의 군집이 동수가 나오면?
 - 일반적으로는 둘 중 하나를 임의로 선택 (random choice)
 - k의 값을 줄이거나 늘려서 선택하는 방법도 있음
- k개의 이웃을 찾는 것은 쉬운가?
 - 새로운 데이터 P가 도착했을 때 k개의 이웃을 찾으려면
 - 기존의 모든 데이터들과 거리를 비교해야 함



■ 분류 모델의 성능 비교:







Any Questions?

