6.2 기저함수 모형과 과최적화

비선형 모형

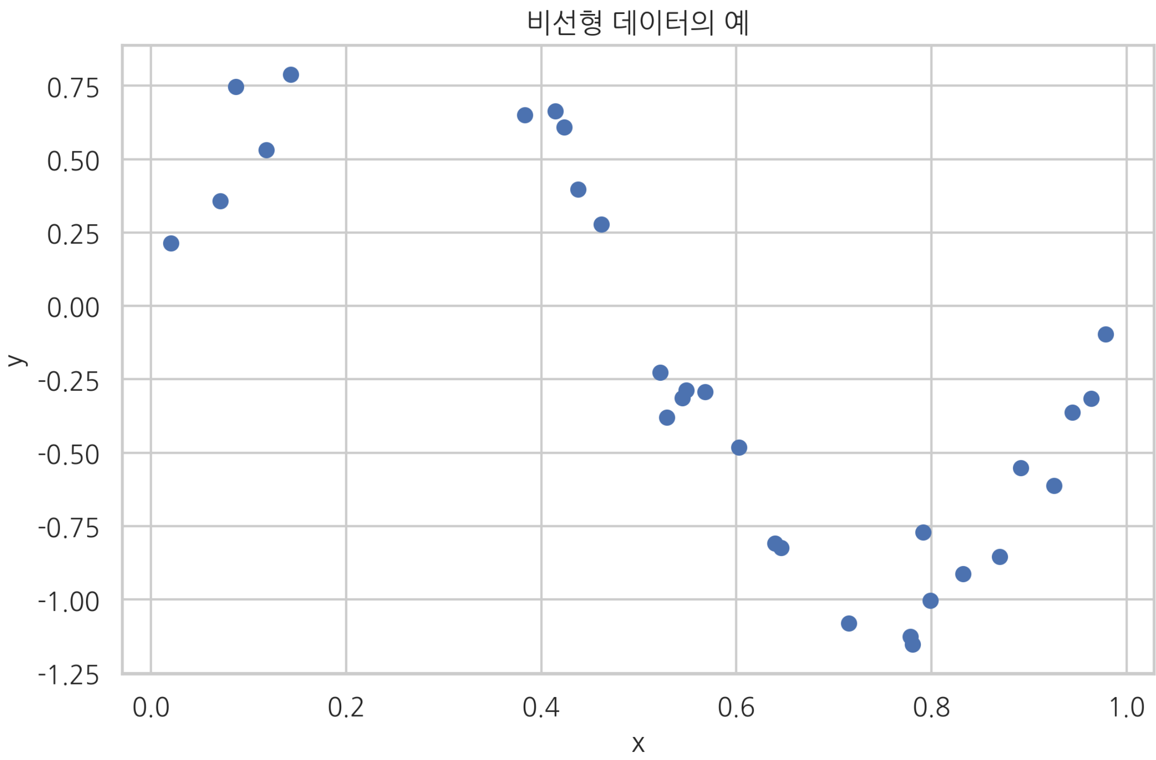
기본적인 선형회귀모형은 입력변수의 선형조합으로 이루어진다.

$$y_i = \sum_{i=1}^{D} w_i x_i = w^T x$$

하지만 데이터가 다음 그림처럼 비선형이면 위와 같은 선형회귀모형은 적합하지 않다.

In [1]:

```
def make_nonlinear(seed=0):
    np.random.seed(seed)
    n_samples = 30
    X = np.sort(np.random.rand(n_samples))
    y = np.sin(2 * np.pi * X) + np.random.randn(n_samples) * 0.1
    X = X[:, np.newaxis]
    return (X, y)

X, y = make_nonlinear()
plt.scatter(X, y)
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("y")
plt.title("비선형 데이터의 예")
plt.show()
```



이 때는 독립변수 벡터 x를 입력으로 가지는 여러개의 비선형 함수 $\phi_j(x)$들을 생각해 내어 원래의 입력 변수 x대신 $\phi_j(x)$들을 입력변수로 사용한 다음과 같은 모형을 쓰면 더 좋은 예측 성능을 가질 수도 있다.

$$y_i = \sum_{j=1}^{M} w_j \phi_j(x) = w^T \phi(x)$$

이 새로운 모형의 모수의 갯수는 원래의 독립변수의 갯수가 아니라 우리가 생각해 낸 비선형 함수의 갯수에 의존한다.

기저함수

하지만 이러한 비선형 모형을 만들기 위해서는 데이터에 적합한 비선형 함수를 충분히 많이 생각해 낼 수 있어야 한다. 이러한 고충을 덜기 위해 만들어진 것이 기저함수(basis function) 모형이다. 기저함수는 특정한 규칙에 따라 만들어지는 함수의 열(sequence)로서 충분히 많은 수의 함수가 있으면 어떤 모양의 함수라도 비슷하게 흉내 낼 수 있는 것을 말한다.

기저함수 중 가장 간단한 것이 다항 기저함수(polynomial basis function)이다.

$$\phi_0(x) = 1, \phi_1(x) = x, \phi_2(x) = x^2, \phi_3(x) = x^3, \cdots$$

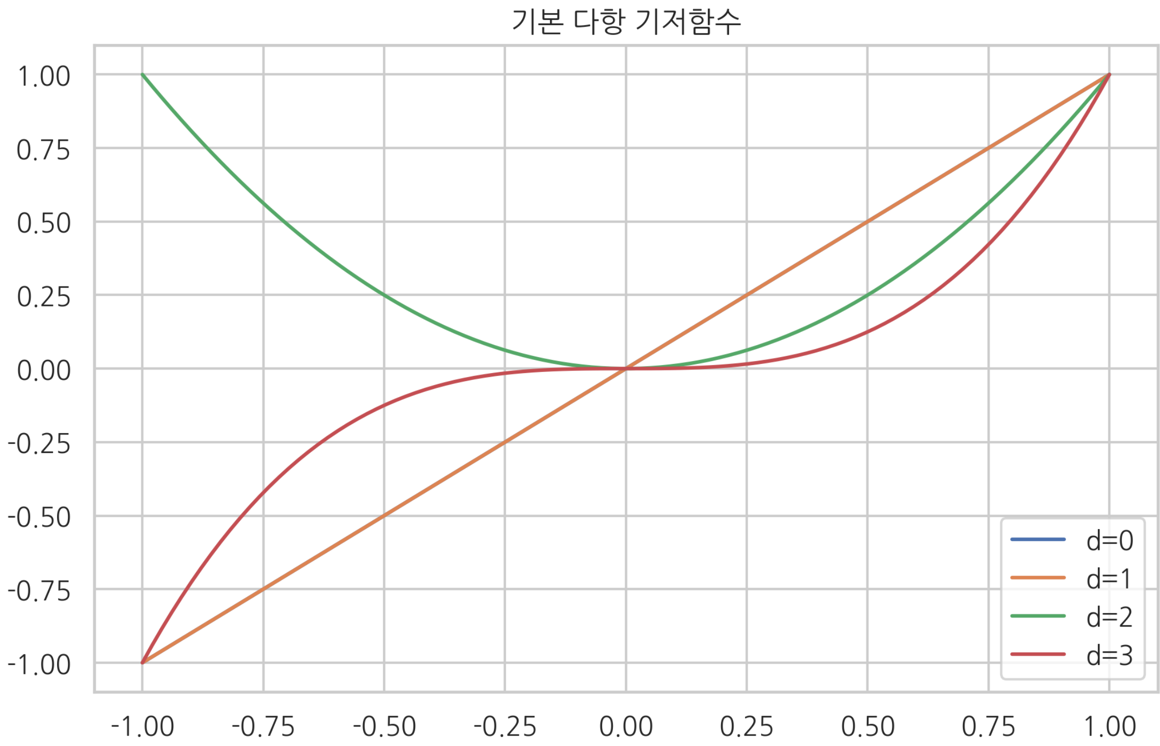
다항회귀(polynomial regression)는 다항 기저함수를 사용하는 기저함수 모형이다. 따라서 종속 변수와 독립 변수의 관계는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$y = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \ldots + w_M x^M$$

기저함수는 사람이 하나씩 생각해내는 것이 아니라 미리 만들어진 규칙에 의해 자동으로 생성되므로 비선형 함수를 만들기 위해 고민할 필요가 없다.

In [2]:

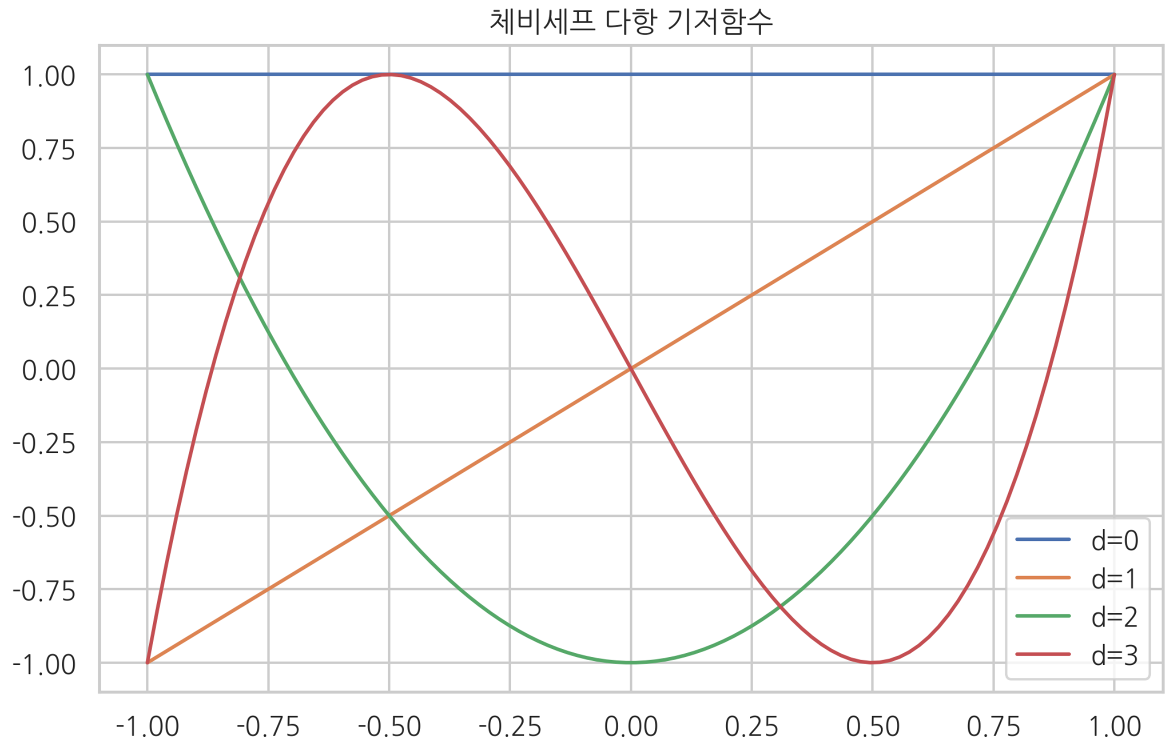
```
phi_0 = np.polynomial.Polynomial.basis(1)
phi_1 = np.polynomial.Polynomial.basis(1)
phi_2 = np.polynomial.Polynomial.basis(2)
phi_3 = np.polynomial.Polynomial.basis(3)

x = np.linspace(-1, 1, 100)

plt.plot(x, phi_0(x), label="d=0")
plt.plot(x, phi_1(x), label="d=1")
plt.plot(x, phi_2(x), label="d=2")
plt.plot(x, phi_3(x), label="d=3")
plt.legend()
plt.title("기본 다항 기저함수")
plt.show()
```



기저함수중에서도 서로 다른 두 기저함수의 곱의 정적분 값이 0이 되면 직교기저함수(orthogonal basis function)라고 한다. 체비세프 다항식은 직교기저함수의 한 예다.

In [3]:

```
phi_0 = np.polynomial.chebyshev.Chebyshev.basis(0)
phi_1 = np.polynomial.chebyshev.Chebyshev.basis(1)
phi_2 = np.polynomial.chebyshev.Chebyshev.basis(2)
phi_3 = np.polynomial.chebyshev.Chebyshev.basis(3)

x = np.linspace(-1, 1, 100)

plt.plot(x, phi_0(x), label="d=0")
plt.plot(x, phi_1(x), label="d=1")
plt.plot(x, phi_2(x), label="d=2")
plt.plot(x, phi_3(x), label="d=3")
plt.legend()
plt.title("체비세프 다항 기저함수")
plt.show()
```



이외에도 다음과 같은 기저함수들도 존재한다.

- 방사 기저함수

- 삼각 기저함수
- 시그모이드 기저함수

StatsModels를 이용한 다항회귀

StatsModels에서는 `OLS` 클래스의 `from_formula` 메서드를 사용하여 다항회귀를 할 수 있다.

In [4]:

```
dfX = pd.DataFrame(X, columns=["x"])
dfX = sm.add_constant(dfX)
dfy = pd.DataFrame(y, columns=["y"])
df = pd.concat([dfX, dfy], axis=1)

print(sm.OLS.from_formula("y ~ x", data=df).fit().summary())
```

```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                      y   R-squared:                       0.565
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.549
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     36.36
Date:                Sun, 23 Jun 2019   Prob (F-statistic):           1.69e-06
Time:                        17:40:22   Log-Likelihood:                -15.360
No. Observations:                  30   AIC:                             34.72
Df Residuals:                      28   BIC:                             37.52
Df Model:                           1
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept      0.7140      0.176      4.064      0.000       0.354       1.074
x             -1.6422      0.272     -6.030      0.000      -2.200      -1.084
==============================================================================
Omnibus:                        3.728   Durbin-Watson:                   0.259
Prob(Omnibus):                  0.155   Jarque-Bera (JB):                1.766
Skew:                           0.257   Prob(JB):                        0.414
Kurtosis:                       1.928   Cond. No.                         4.85
==============================================================================

Warnings:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly spe
cified.
```

In [5]:

```
print(sm.OLS.from_formula("y ~ x + I(x**2)", data=df).fit().summary())
```

```
                            OLS Regression Results                            
==============================================================================
Dep. Variable:                      y   R-squared:                       0.577
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.545
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     18.38
Date:                Sun, 23 Jun 2019   Prob (F-statistic):           9.14e-06
Time:                        17:40:22   Log-Likelihood:                -14.953
No. Observations:                  30   AIC:                             35.91
Df Residuals:                      27   BIC:                             40.11
Df Model:                           2                                         
Covariance Type:            nonrobust                                         
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept      0.8638      0.248      3.487      0.002       0.356       1.372
x             -2.4942      1.025     -2.432      0.022      -4.598      -0.390
I(x ** 2)      0.8295      0.962      0.862      0.396      -1.145       2.804
==============================================================================
Omnibus:                        3.235   Durbin-Watson:                   0.280
Prob(Omnibus):                  0.198   Jarque-Bera (JB):                1.622
Skew:                           0.235   Prob(JB):                        0.445
Kurtosis:                       1.962   Cond. No.                         23.0
==============================================================================

Warnings:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly spe
cified.
```

In [6]:

```
print(sm.OLS.from_formula("y ~ x + I(x**2) + I(x**3)", data=df).fit().summary())
```

```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                      y   R-squared:                       0.956
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.951
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     186.7
Date:                Sun, 23 Jun 2019   Prob (F-statistic):           1.06e-17
Time:                        17:40:22   Log-Likelihood:                 18.883
No. Observations:                  30   AIC:                            -29.77
Df Residuals:                      26   BIC:                            -24.16
Df Model:                           3
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept     -0.2039      0.109     -1.876      0.072      -0.427       0.020
x             12.2209      1.044     11.709      0.000      10.075      14.366
I(x ** 2)    -35.4061      2.452    -14.439      0.000     -40.446     -30.366
I(x ** 3)     23.5598      1.581     14.903      0.000      20.310      26.809
==============================================================================
Omnibus:                        0.801   Durbin-Watson:                   1.769
Prob(Omnibus):                  0.670   Jarque-Bera (JB):                0.816
Skew:                           0.212   Prob(JB):                        0.665
Kurtosis:                       2.313   Cond. No.                         160.
==============================================================================

Warnings:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly spe
cified.
```

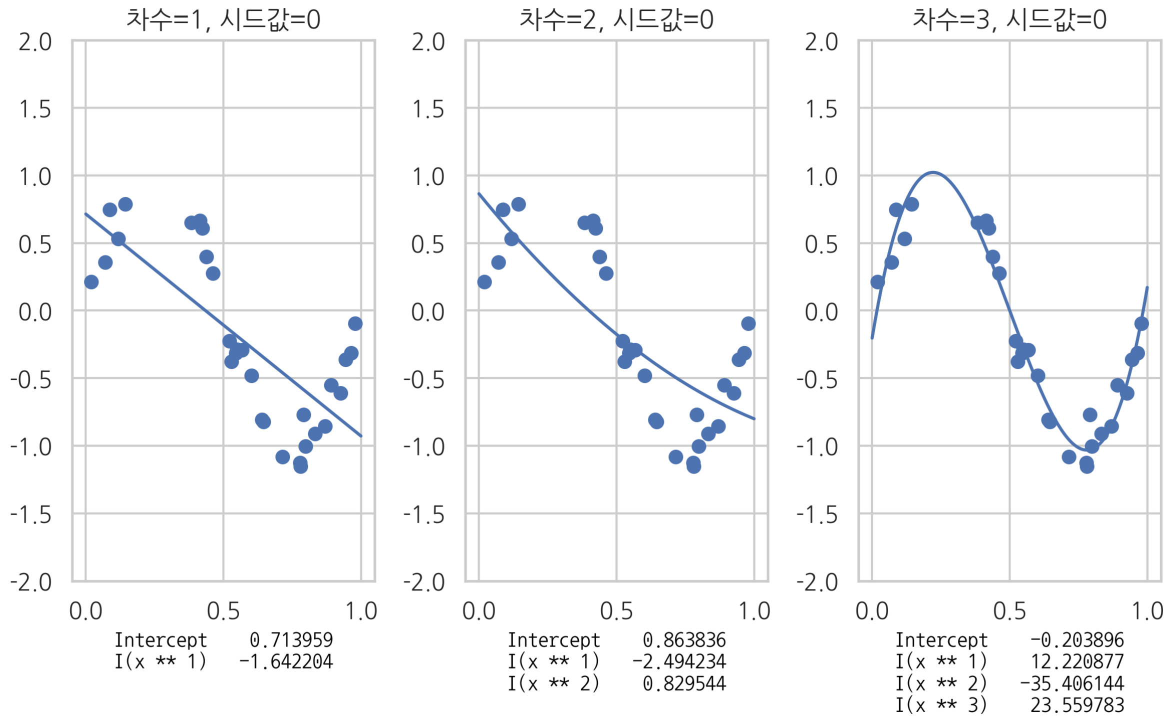
회귀분석 결과를 그림으로 그리면 다음과 같다.

In [7]:

```
def polyreg(degree, seed=0, ax=None):
    X, y = make_nonlinear(seed)

    dfX = pd.DataFrame(X, columns=["x"])
    dfX = sm.add_constant(dfX)
    dfy = pd.DataFrame(y, columns=["y"])
    df = pd.concat([dfX, dfy], axis=1)

    model_str = "y ~ "
    for i in range(degree):
        if i == 0:
            prefix = ""
        else:
            prefix = " + "
        model_str += prefix + "I(x**{})".format(i + 1)
    model = sm.OLS.from_formula(model_str, data=df)
    result = model.fit()

    if ax:
        ax.scatter(X, y)
        xx = np.linspace(0, 1, 1000)
        dfX_new = pd.DataFrame(xx[:, np.newaxis], columns=["x"])
        ax.plot(xx, result.predict(dfX_new))
        ax.set_ylim(-2, 2)
        ax.set_title("차수={}, 시드값={}".format(degree, seed))
        xlabel = "₩n".join(str(result.params).split("₩n")[:-1])
        font = {'family': 'NanumGothicCoding', 'color':  'black', 'size': 10}
        ax.set_xlabel(xlabel, fontdict=font)

    return result
```

In [8]:

```
ax1 = plt.subplot(131)
polyreg(1, ax=ax1)
ax2 = plt.subplot(132)
polyreg(2, ax=ax2)
ax3 = plt.subplot(133)
polyreg(3, ax=ax3)
plt.tight_layout()
plt.show()
```



과최적화

모형을 특정 샘플 데이터에 대해 과도하게 최적화하는 것을 과최적화(overfitting)이라고 한다.

과최적화는

- 독립 변수 데이터 갯수에 비해 모형 모수의 수가 과도하게 크거나
- 독립 변수 데이터가 서로 독립이 아닌 경우에 발생한다.

이러한 상황에서는 같은 조건에 대해 답이 복수개 존재할 수 있기 때문이다.

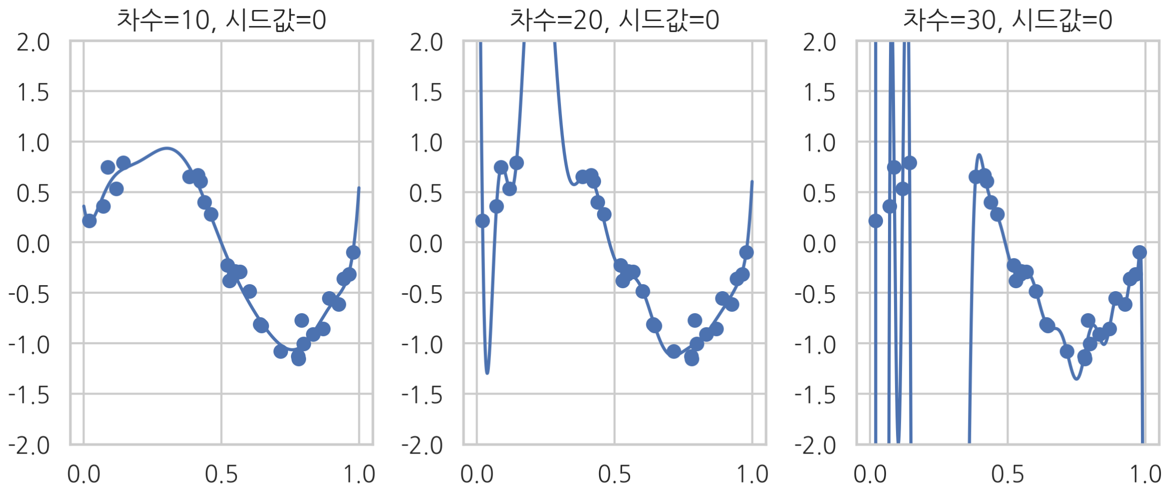
과최적화가 문제가 되는 이유는 다음과 같다.

- 트레이닝에 사용되지 않은 새로운 독립 변수 값을 입력하면 오차가 커진다. (cross-validation 오차)
- 샘플이 조금만 변화해도 가중치 계수의 값이 크게 달라진다. (추정의 부정확함)

다음 그림에서 과최적화가 발생하면 주어진 데이터가 아닌 다른 새로운 x 데이터가 들어올 때 오차가 커지는 것을 볼 수 있다.

In [9]:

```
plt.figure(figsize=(8, 8))
ax1 = plt.subplot(131)
polyreg(10, ax=ax1)
ax2 = plt.subplot(132)
polyreg(20, ax=ax2)
ax3 = plt.subplot(133)
polyreg(30, ax=ax3)
plt.tight_layout()
plt.show()
```




```
Intercept          0.359229
I(x ** 1)        -16.269083
I(x ** 2)        550.619725
I(x ** 3)      -6410.138142
I(x ** 4)      39308.600281
I(x ** 5)    -141790.158988
I(x ** 6)     314998.092685
I(x ** 7)    -436426.940280
I(x ** 8)     367729.235611
I(x ** 9)    -172499.133187
I(x ** 10)    34556.273141
```

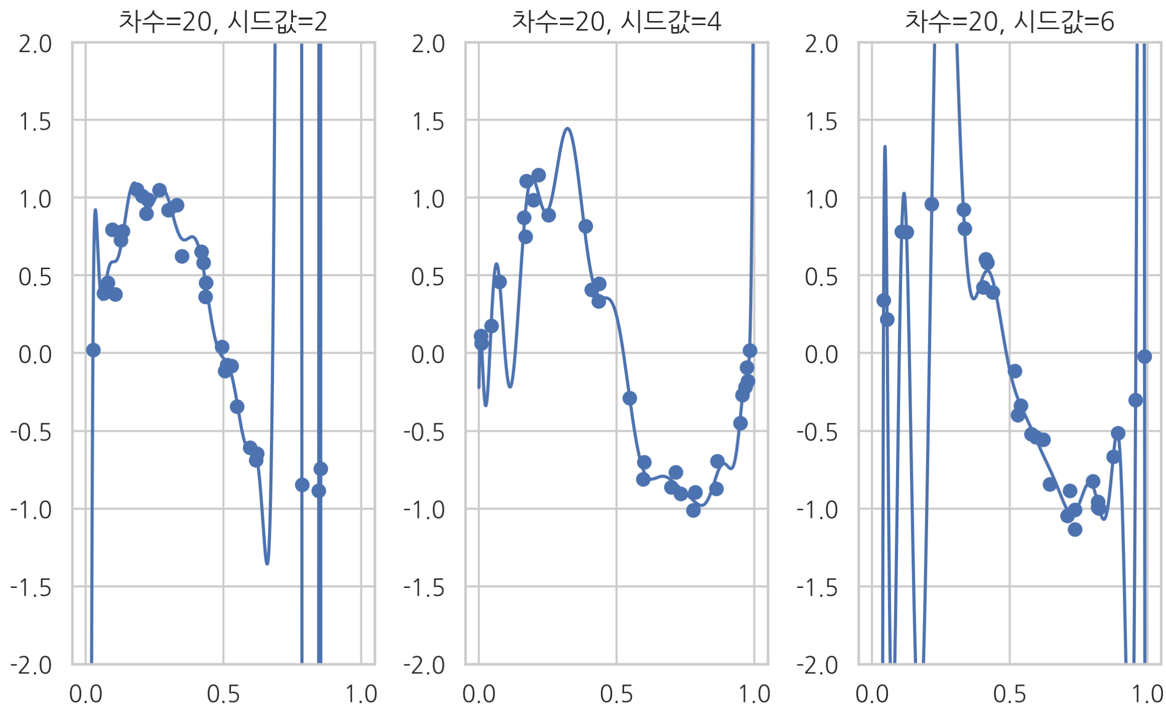
```
Intercept     6.984839e+00
I(x ** 1)    -4.184396e+02
I(x ** 2)    -1.049989e+03
I(x ** 3)     4.221026e+05
I(x ** 4)    -1.043838e+07
I(x ** 5)     1.280820e+08
I(x ** 6)    -9.598029e+08
I(x ** 7)     4.765564e+09
I(x ** 8)    -1.626345e+10
I(x ** 9)     3.838496e+10
I(x ** 10)   -6.058318e+10
I(x ** 11)    5.552872e+10
I(x ** 12)   -8.067606e+09
I(x ** 13)   -4.735617e+10
I(x ** 14)    5.090477e+10
I(x ** 15)    4.593433e+09
I(x ** 16)   -5.857197e+10
I(x ** 17)    6.321831e+10
I(x ** 18)   -3.455775e+10
I(x ** 19)    1.011035e+10
I(x ** 20)   -1.264247e+09
```

```
Intercept     1.902716e+03
I(x ** 1)    -2.068479e+05
I(x ** 2)     8.452951e+06
I(x ** 3)    -1.840639e+08
I(x ** 4)     2.453761e+09
I(x ** 5)    -2.150483e+10
I(x ** 6)     1.288988e+11
I(x ** 7)    -5.383573e+11
I(x ** 8)     1.563125e+12
I(x ** 9)    -3.047029e+12
I(x ** 10)    3.545230e+12
I(x ** 11)   -1.303962e+12
I(x ** 12)   -2.230832e+12
I(x ** 13)    2.300184e+12
I(x ** 14)    1.480380e+12
I(x ** 15)   -2.278838e+12
I(x ** 16)   -1.566326e+12
I(x ** 17)    1.887697e+12
I(x ** 18)    2.046010e+12
I(x ** 19)   -1.124854e+12
I(x ** 20)   -2.461177e+12
I(x ** 21)    4.757356e+10
I(x ** 22)    2.491547e+12
I(x ** 23)    1.046020e+12
I(x ** 24)   -2.181513e+12
I(x ** 25)   -1.806949e+12
I(x ** 26)    2.047929e+12
I(x ** 27)    1.992343e+12
I(x ** 28)   -3.389920e+12
I(x ** 29)    1.658857e+12
I(x ** 30)   -2.868101e+11
```

또한 데이터가 조금만 달라져도 가중치 값이 크게 달라지는 것도 확인할 수 있다.

In [10]:

```
plt.figure(figsize=(8, 8))
ax1 = plt.subplot(131)
polyreg(20, seed=2, ax=ax1)
ax2 = plt.subplot(132)
polyreg(20, seed=4, ax=ax2)
ax3 = plt.subplot(133)
polyreg(20, seed=6, ax=ax3)
plt.tight_layout()
plt.show()
```




```
Intercept     -6.393975e+01
I(x ** 1)      7.297669e+03
I(x ** 2)     -3.465945e+05
I(x ** 3)      9.269982e+06
I(x ** 4)     -1.578309e+08
I(x ** 5)      1.828724e+09
I(x ** 6)     -1.501398e+10
I(x ** 7)      8.953459e+10
I(x ** 8)     -3.929181e+11
I(x ** 9)      1.271035e+12
I(x ** 10)    -2.990846e+12
I(x ** 11)     4.914042e+12
I(x ** 12)    -5.003590e+12
I(x ** 13)     1.642394e+12
I(x ** 14)     3.063028e+12
I(x ** 15)    -4.114909e+12
I(x ** 16)     1.024248e+11
I(x ** 17)     4.158423e+12
I(x ** 18)    -4.361210e+12
I(x ** 19)     2.002877e+12
I(x ** 20)    -3.669588e+11
```

```
Intercept     -2.217948e-01
I(x ** 1)      1.345253e+02
I(x ** 2)     -1.756829e+04
I(x ** 3)      8.419221e+05
I(x ** 4)     -2.027372e+07
I(x ** 5)      2.895837e+08
I(x ** 6)     -2.697671e+09
I(x ** 7)      1.737493e+10
I(x ** 8)     -8.023403e+10
I(x ** 9)      2.712037e+11
I(x ** 10)    -6.756193e+11
I(x ** 11)     1.227591e+12
I(x ** 12)    -1.557797e+12
I(x ** 13)     1.185776e+12
I(x ** 14)    -9.060498e+10
I(x ** 15)    -1.039265e+12
I(x ** 16)     1.438152e+12
I(x ** 17)    -1.062116e+12
I(x ** 18)     4.771599e+11
I(x ** 19)    -1.233835e+11
I(x ** 20)     1.418909e+10
```

```
Intercept     -5.751138e+02
I(x ** 1)      4.815238e+04
I(x ** 2)     -1.688172e+06
I(x ** 3)      3.304615e+07
I(x ** 4)     -4.076330e+08
I(x ** 5)      3.389148e+09
I(x ** 6)     -1.978998e+10
I(x ** 7)      8.312838e+10
I(x ** 8)     -2.534785e+11
I(x ** 9)      5.560598e+11
I(x ** 10)    -8.418373e+11
I(x ** 11)     7.651013e+11
I(x ** 12)    -1.409398e+11
I(x ** 13)    -6.025864e+11
I(x ** 14)     6.984682e+11
I(x ** 15)    -2.175533e+09
I(x ** 16)    -7.396520e+11
I(x ** 17)     8.554550e+11
I(x ** 18)    -4.920761e+11
I(x ** 19)     1.511771e+11
I(x ** 20)    -1.986700e+10
```