회귀

목차

- 선형회귀(Linear regression)
- 다항회귀(Polynomial regression)
- 서포트벡터 회귀(Support vector regression)
- 의사결정나무 회귀(Decision tree regression)
- 신경망 회귀(Neural Network regression)

선형회귀(Linear regression)

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 X_{i2} + \ldots + \beta_p X_{ip} + \varepsilon_i \quad , \ \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

◎ 가정

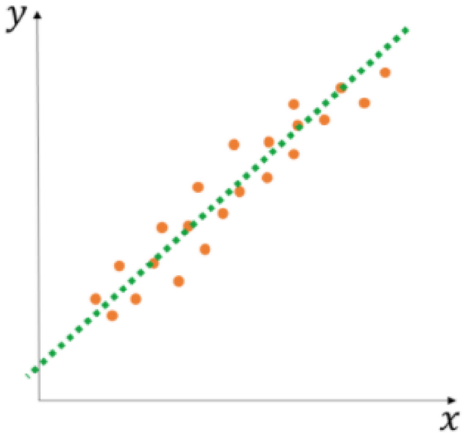
○ 모형의 형태에 대한 가정

- 선형성

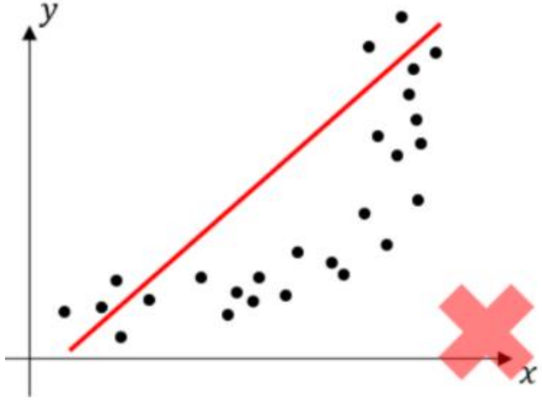
○ 오차에 대한 가정

- 독립성
- 등분산성
- 정규성

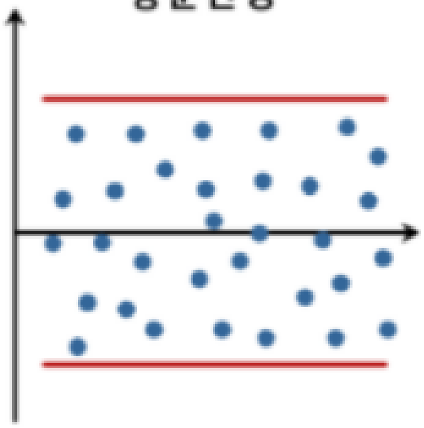
선형성



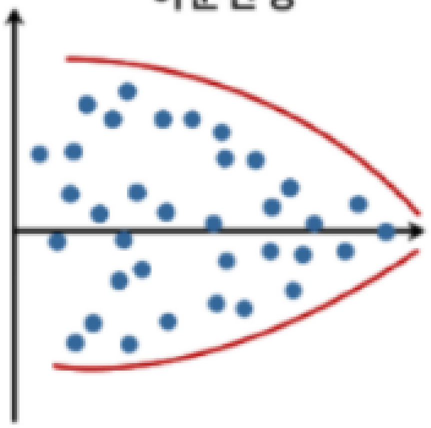
비선형성



등분산성



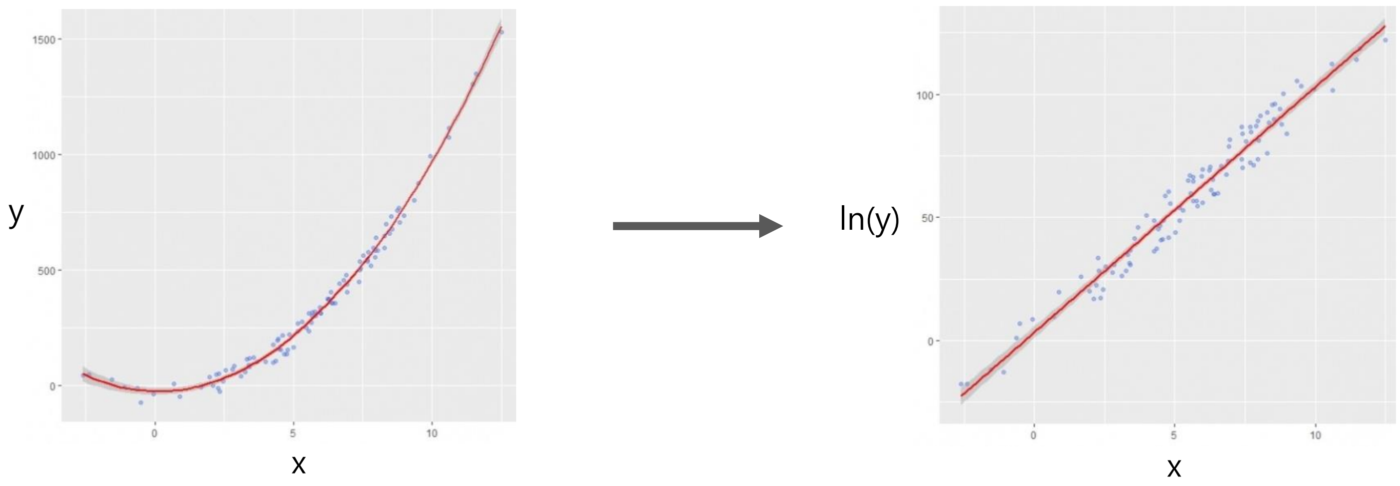
이분산성



선형회귀(Linear regression)

◎ 선형성 가정 위배

- 로그 변환



◎ 등분산성 가정 위배

- 가중최소제곱법(WLS) 적용
- 로그 변환
- 멱변환

선형회귀(Linear regression)

✓ 최소제곱법(OLS)

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1} - \ldots - \beta_p x_{ip})^2$$

✓ 가중최소제곱법(WLS)

$$\sum_{i=1}^{n} w_i (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1} - \ldots - \beta_p x_{ip})^2$$

w_i : 분산에 반비례한 가중치

$w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$

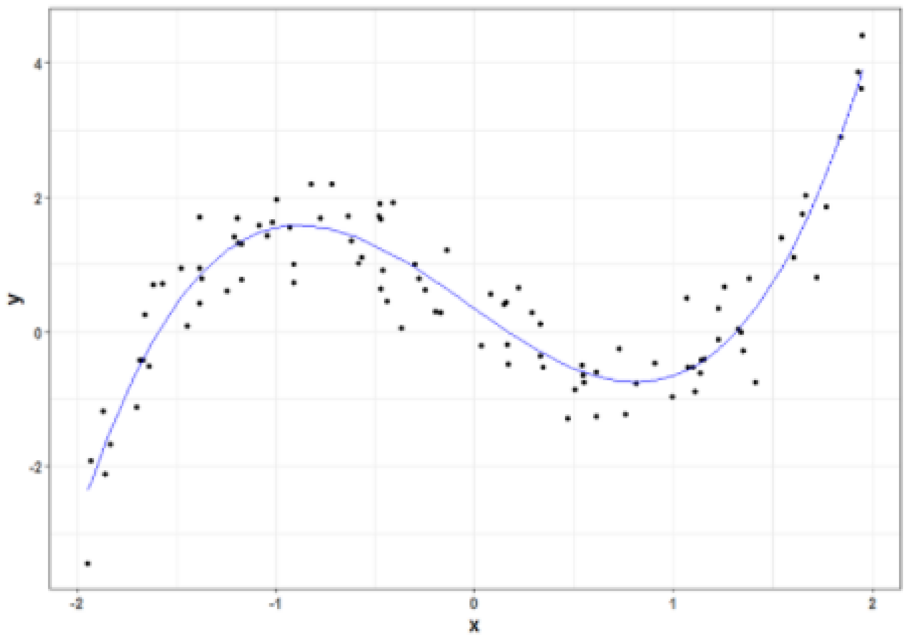
$w_i = 0$인경우, i번째 관측개체는 추정 과정에서 제외

- 분산(σ_i^2)을 모르는 경우

1. 최소제곱법을 이용하여 회귀모형 생성하여 잔차 e_i를 구한다.
2. $|e_i|$를 반응변수로 두고, x 를 예측 변수로 하여 최소제곱법을 이용하여 회귀 모형 생성
3. 2.에서 구한 회귀 계수는 $\widehat{\eta_0}, \ldots, \widehat{\eta_p}$ 일 때, $s_i = \widehat{\eta_0} + \widehat{\eta_1} x_{i1} + \cdots + \widehat{\eta_p} x_{ip}$ 로 설정하여 가중최소제곱법으로 회귀모형 생성
4. 3.에서 구한 회귀계수와 1.에서 구한 회귀계수의 차이가 크지 않으면 3.에서 구한 회귀모형을 최종 모형으로 결정

다항회귀(Polynomial regression)

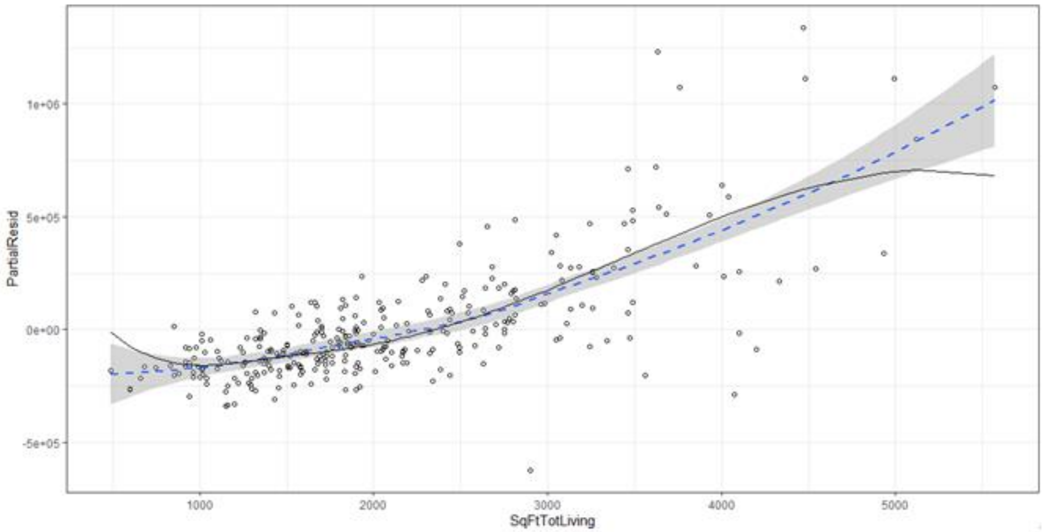
$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 \mathrm{X} + \beta_2 \mathrm{X}^2 + \ldots. + \beta_\mathrm{p} \mathrm{X}^\mathrm{p} + \varepsilon_\mathrm{i}$$



✓ 스플라인 회귀

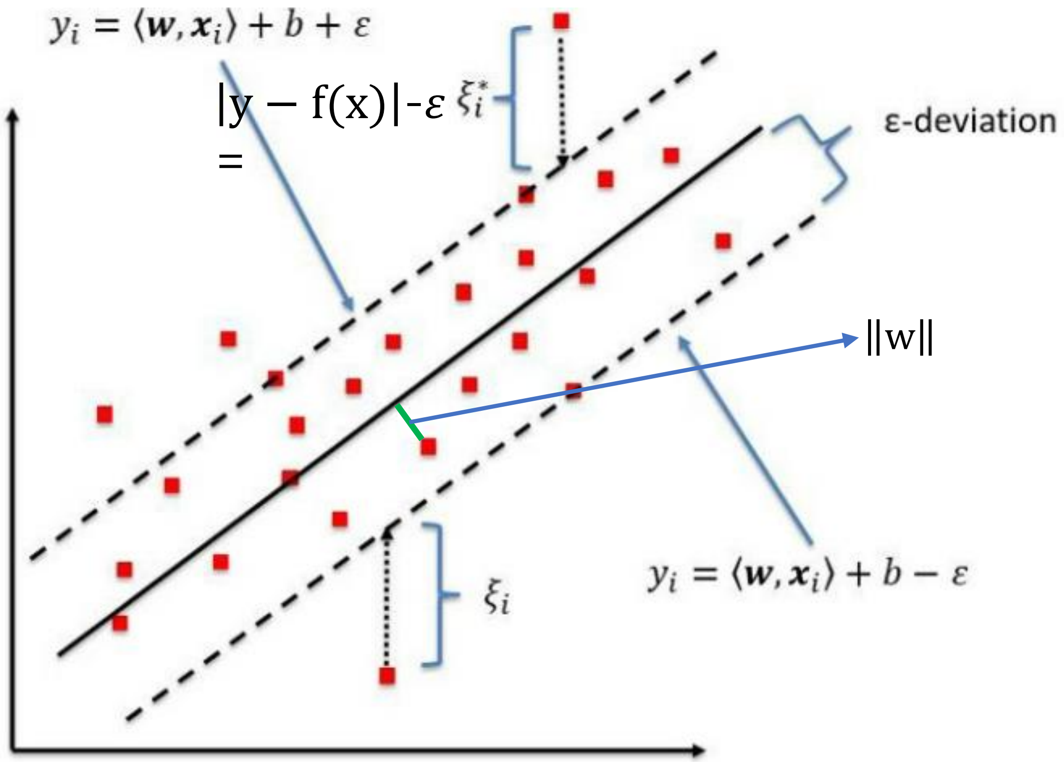
스플라인: 고정된 점들 사이를 부드럽게 보간하는 방법

매듭: 스플라인 구간을 구분하는 값



- 실선: 스플라인 회귀
- 점선: 평활 곡선

서포트 벡터 회귀(SVR, Support Vector Regression)



- 회귀식

$$y = f(x) = \langle w, x \rangle + b = \sum_{j=1}^{M} w_j x_j + b,\ y, b \in \mathbb{R}, x, w \in \mathbb{R}^M$$

$$f(x) = \begin{bmatrix} w \\ b \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x \\ 1 \end{bmatrix} = w^T x + b \quad x, w \in \mathbb{R}^{M+1}$$

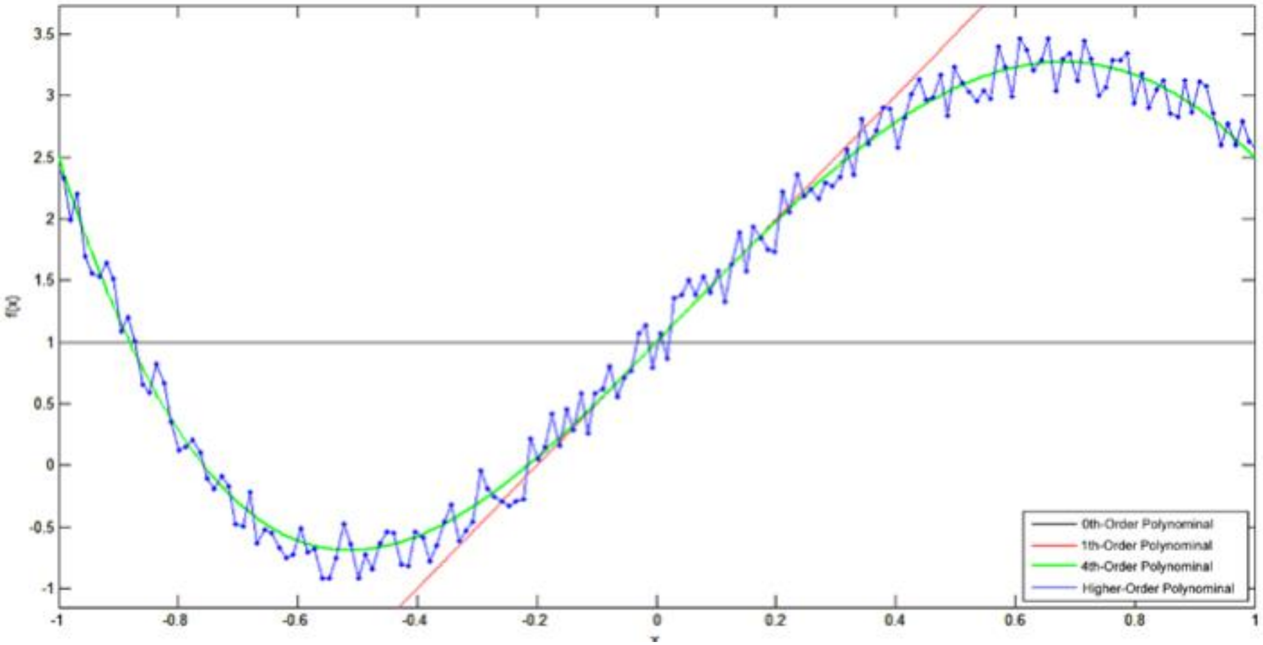
M : 회귀식 차수

회귀식 주변의 가장 좁은 폭의 튜브를 찾는 것이 최적화 문제

$$min \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i + \varepsilon_i^*$$

‖w‖ : 회귀식에 대한 법선 벡터 크기

서포트 벡터 회귀(SVR, Support Vector Regression)



$$y = f(x) = \langle w, x \rangle + b = \sum_{j=1}^{M} w_j x_j + b,\ y, b \in \mathbb{R}, x, w \in \mathbb{R}^M$$

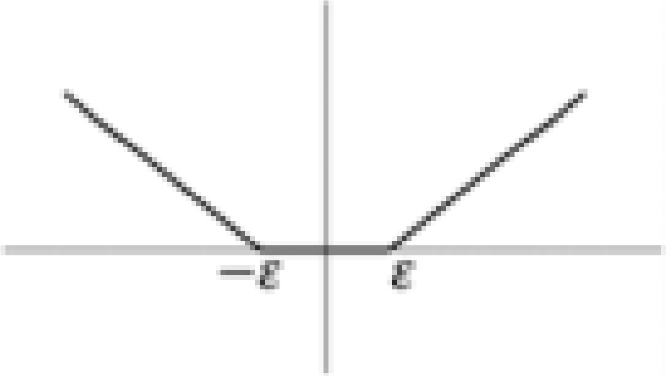
$$f(x) = \begin{bmatrix} w \\ b \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x \\ 1 \end{bmatrix} = w^T x + b \quad x, w \in \mathbb{R}^{M+1}$$

서포트 벡터 회귀(SVR, Support Vector Regression)

✓손실함수

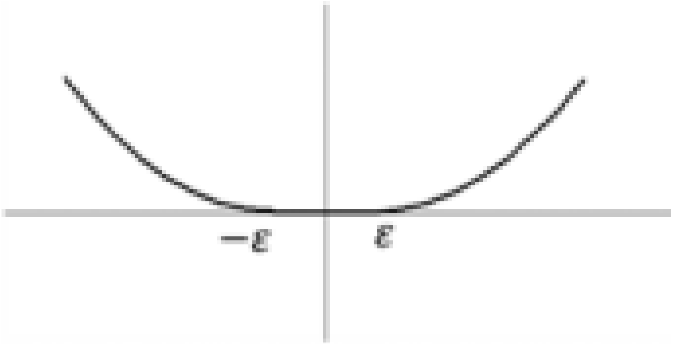
- 선형

$$L_\varepsilon(y, f(x,w)) = \begin{cases} 0 & |y - f(x,w)| \le \varepsilon; \\ |y - f(x,w)| - \varepsilon & \textit{otherwise}, \end{cases}$$



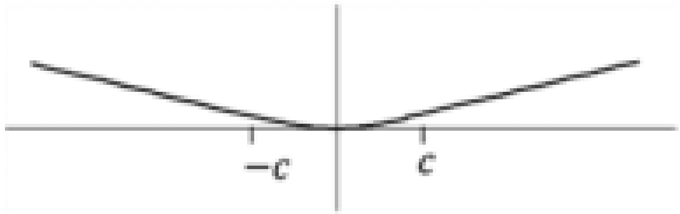
- 2차

$$L_\varepsilon(y, f(x,w)) = \begin{cases} 0 & |y - f(x,w)| \le \varepsilon; \\ (|y - f(x,w)| - \varepsilon)^2 & \textit{otherwise}, \end{cases}$$



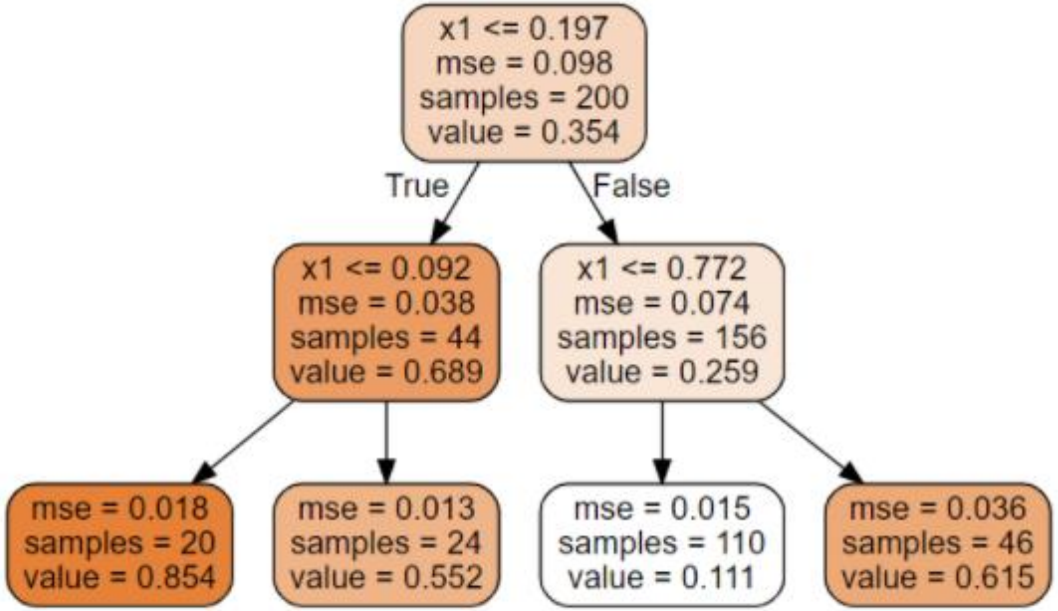
- Huber

$$L(y, f(x,w)) = \begin{cases} c|y - f(x,w)| - \frac{c^2}{2} & |y - f(x,w)| > c \\ \frac{1}{2}|y - f(x,w)|^2 & |y - f(x,w)| \le c \end{cases}$$



의사결정나무 회귀(Decision Tree regression)

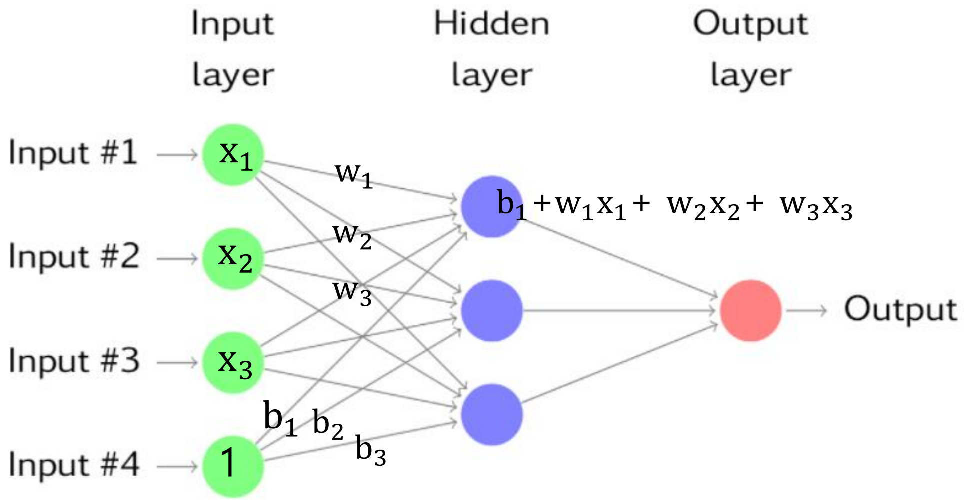
평균제곱오차(MSE)를 최소화하는 방향으로 모델 설계



◎ 규제 항목(sklearn 0.19 기준)

- max_depth
- min_samples_split: 분할되기 위해 노드가 가져야 할 최소 샘플 수
- min_samples_leaf: 리프 노드가 가지고 있어야 할 최소 샘플 수
- min_weight_fraction_leaf: min_sample_leaf와 동일하지만 가중치 부여된 전체 샘플 수에서의 비율
- max_leaf_nodes: 리프 노드의 최대 수
- max_features: 각 노드에서 분할에 사용할 특성 최대 수
- min_impurity_decrease: 분할 대상이 되기 위해 필요한 최소한의 불순도

신경망 회귀



하이퍼파라미터	값
입력 뉴런 수	예측변수 개수
출력 뉴런 수	1
은닉층의 활성화 함수	ReLU(또는 SELU)
출력층의 활성화함수	없음 (출력이 양수) ReLU/ softplus (출력 범위 제한) logistic/ tanh
손실함수	MSE (이상치 존재 시) MAE/ Huber

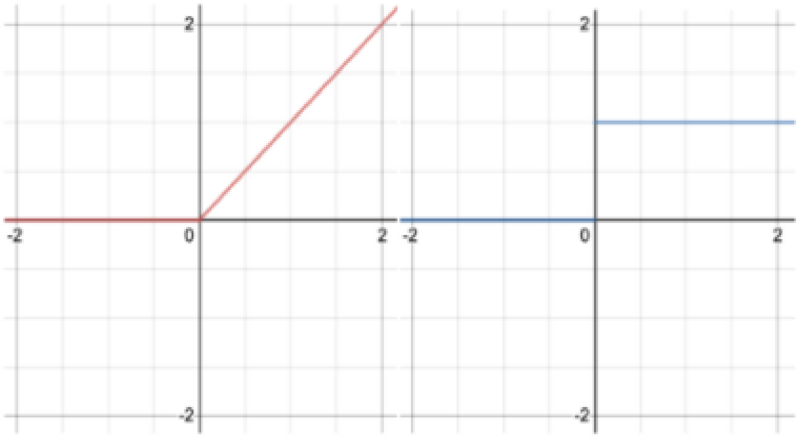
신경망 회귀

✓ 활성화함수

- SELU

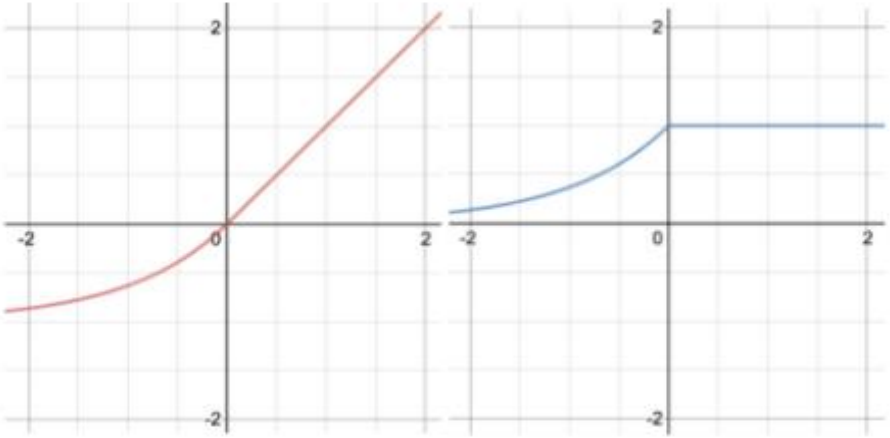
- RELU

$$f(x)=\begin{cases} x(x\geq 0) \\ 0(x<0) \end{cases} \qquad f'(x)=\begin{cases} 1 & (x\geq =0) \\ 0 & (x<0) \end{cases}$$

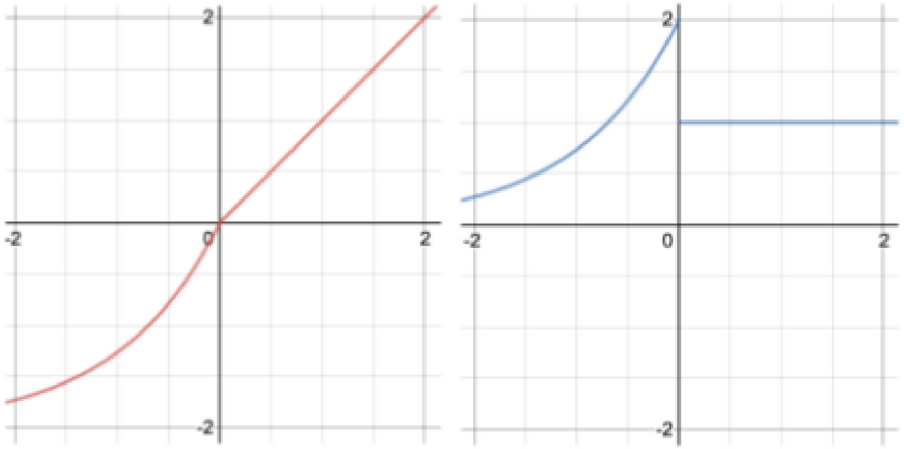


- ELU

$$f(\alpha,x)=\begin{cases} x & (x>0) \\ \alpha(e^{x}-1) & (x\leq 0) \end{cases} \qquad f'(\alpha,x)=\begin{cases} 1 & (x>0) \\ f(\alpha,x)+\alpha & (x\leq 0) \end{cases}$$



- SELU

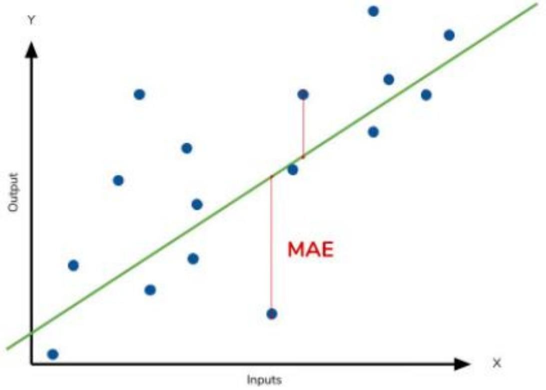


신경망 회귀

✓ 손실함수

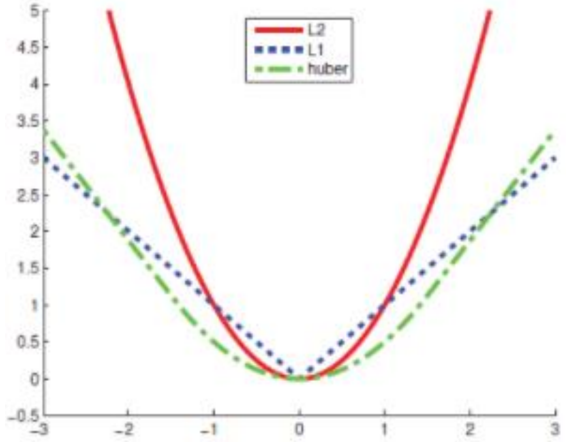
- 평균절대오차(MAE, Mean Absolute Error)

$$\text{MAE} = MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|x_i - x|$$

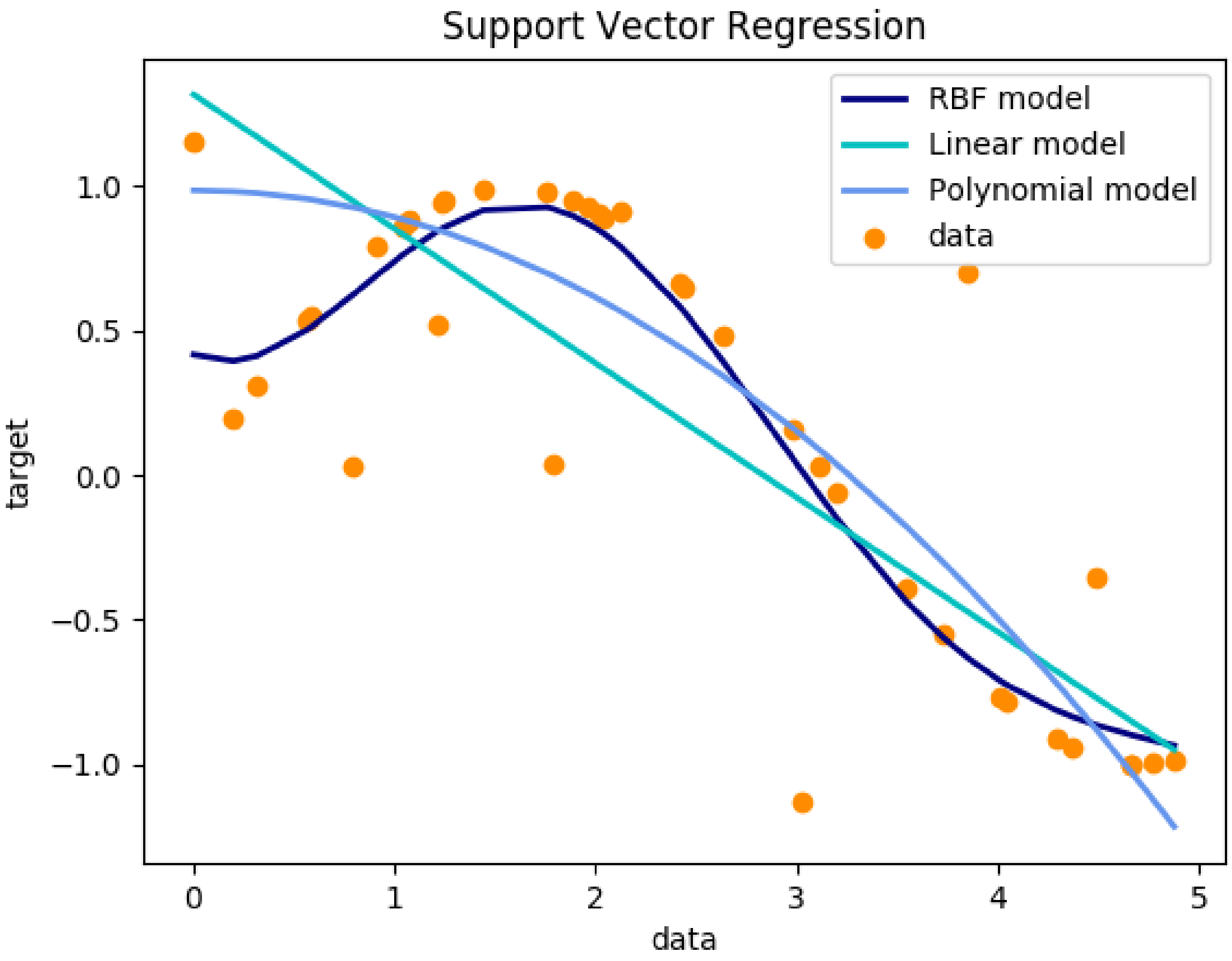


- Huber

$$L_H(\gamma, \delta) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y - f(x))^2 & if\ |y - f(x)| \le \delta \\ \delta|y - f(x)| - {\delta^2}/{2} & otherwise \end{cases}$$



정리



Support Vector Regression
RBF model
Linear model
Polynomial model
data
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
target
0
1
2
3
4
5
data