AI 기초

2019-2020

강봉주

[필요한 패키지]

```
In
         # 필요한 패키지
         import numpy as np
         import matplotlib.pyplot as plt
         import pandas as pd
         import scipy
         from scipy import linalg as la
         import scipy.stats as ss
         import scipy.special
         # 한글출력
         plt.rcParams['font.family'] = 'Malgun Gothic'
         plt.rcParams['axes.unicode_minus'] = False
         # 필요한 패키지 2
         import statsmodels.formula.api as smf
         import statsmodels.api as sm
         # 필요한 패키지 3
         import sklearn
         from matplotlib.ticker import FuncFormatter
         from sklearn.linear_model import Ridge
         from sklearn.linear model import Lasso
         from sklearn.model_selection import cross_val_score
         sklearn.__version_
         '0.22.1'
0ut
```

[개요]

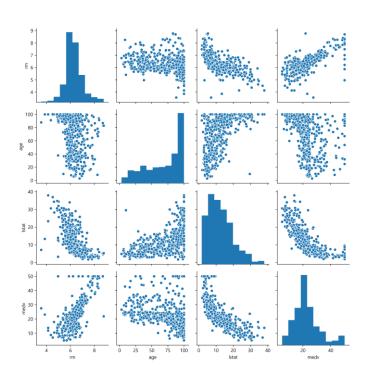
- 모형의 적합도(goodness of fit)가 비슷하다면 가급적 변수의 수를 줄이는 이유는 차원의 저주, 해석의 용이함, 모델적합 시간 단축 등
- 불필요하거나(redundant) 관련 없는(irrelevant) 변수의 제거
- 잡음(noise)까지 모형화하는 과적합 방지

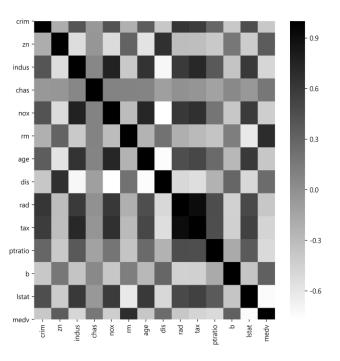
[개요]

- 완전 탐색 (exhaustive search) : 모든 가능한 변수 조합에 대하여 비용함수를 최소화 하는 변수 선택 방법
- 포장(wrapper) 방법: 블랙박스 모형
- 여과(filter) 방법: 상호 정보(mutual information), 피어슨 상관계수 등
- 내장 방법: 라쏘 또는 능형 회귀

[여과 방법]

- 산점도
- 상관 분석





- 여과 방법에서 한 걸음 더
- 분산 분석 기법
- 모델 간의 차이 검증

$$F = \frac{\left(SSE(reduced) - SSE(full)\right)/d}{SSE(full)/(n-k-1)} \sim F(d, n-k-1)$$

- d = 2개의 모델 간에 적합된 모수의 개수의 차이
- 차이가 유의미하면 완전 모델에만 있는 변수가 유의미함

- 교차 검증
- 블랙박스 모형의 결과 값 만을 이용한 변수 선택 또는 모형 선택 방법

- 교차 검증
- 단순 교차검증

순서	내용	비고
1	데이터를 무작위로 분할한다. 분할한 데이터를 각각 S_{train}, S_{valid} 로 한다.	일반적으로 훈련 데이터를 70%, 검증 데이터를 30%로 함
2	모든 후보 모형에 대하여 훈련 데이터인 S_{train} 로 학습시킨 후 모형 \hat{f}_i 을 얻는다.	각 모형에서 추정되어야 할 모수 들을 추정
3	모든 모형을 검증 데이터인 S _{valid} 에 적용하여 가장 작은 오차를 주는 모형을 선택한다.	

- 교차 검증
- 단순 교차검증

단계	모형 구성	모형 검증	모형 선택
데이터	훈련 데이터	검증 데이터	
모형	$\hat{f}_1,\ldots,\hat{f}_m$	RSS_1, \dots, RSS_m	$arg min\{RSS_i\}$

- 교차 검증
- 단순 교차검증
- 데이터 분할

```
In # 데이터 분할
# 훈련 데이터
np.random.seed(123)
index = np.random.choice(np.arange(len(df)), size=np.int(len(df)*0.7), replace=False)
train = df.iloc[index]
train.shape
```

- 교차 검증
- 단순 교차검증
- 데이터 분할

```
In # 검증 데이터
non_index = list(set(np.arange(len(df)))-set(index))
valid = df.iloc[non_index]
valid.shape

Out (152, 14)
```

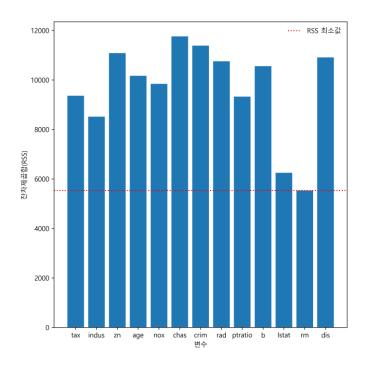
- 교차 검증
- 단순 교차검증
- 모형 적합

```
In # 입력 변수 구성
xvars = list(set(df.columns) - {'medv'})

# 각 변수를 하나씩 적합하기
rss = []
for j in np.arange(len(xvars)):
    varname = xvars[j]
    fit = smf.ols('medv~'+varname, data=train).fit()
    pred = fit.predict(sm.add_constant(valid[varname]))
    tmp_rss = np.sum((valid['medv'].values-pred)**2)
    rss.append(tmp_rss)

# 최소값을 주는 변수
xvars[np.nanargmin(rss)]
```

- 교차 검증
- 단순 교차검증
- 모형 적합



- 교차 검증
- K-겹 교차검증

순서	내용	비고
1	데이터를 무작위로 균등하게 K 개로 분할한다. 단, 서로 데이터가 겹치지 않도록 하여 $S_1,, S_K$ 을 구성한다.	데 이 터 개 수 가 100 개 이 고 5 등 분 한 다 면, 각 표본의 개수는 20개
2	모든 후보 모형에 대하여 S_j 을 제외한 나머지 표본의 합을 이용하여 모형 \hat{f}_{ij} 을 얻고 일반화 오차를 얻는다. 이 과정을 모든 분할된 표본에 적용하고 난 후 각 일반화 오차의 평균을 구한다.	여기서 <i>i</i> 는 후보 모형 색인번호, <i>j</i> 는 검증 데이터 색인번호
3	일반화 오차의 평균 중에 가장 낮은 값을 주는 모형을 선택한다.	

- 교차 검증
- K-겹 교차검증: 5-겹 교차 검증 예시

단계	데이터 구성	모형 구성	모형 검증	
데이터	훈련 데이터		검증 데이터	
1	2, 3, 4, 5	$\hat{f}_{11},\ldots,\hat{f}_{m1}$	1	$RSS_{11}, \dots, RSS_{m1}$
2	1, 3, 4, 5	$\hat{f}_{12},\ldots,\hat{f}_{m2}$	2	$RSS_{12}, \dots, RSS_{m2}$
3	1, 2, 4, 5	$\hat{f}_{13},\ldots,\hat{f}_{m3}$	3	$RSS_{13}, \dots, RSS_{m3}$
4	1, 2, 3, 5	$\hat{f}_{14},\ldots,\hat{f}_{m4}$	4	$RSS_{14}, \dots, RSS_{m4}$
5	1, 2, 3, 4	$\hat{f}_{15},\ldots,\hat{f}_{m5}$	5	$RSS_{15}, \dots, RSS_{m5}$

$$RSS_i = np.mean(\{RSS_{i1}, ..., RSS_{i5}\})$$

 $arg min\{RSS_i\}$

- 교차 검증
- K-겹 교차검증

```
In # 필요한 패키지
from sklearn.model_selection import KFold

# 폴더 정의
num_folds = 5
kf = KFold(n_splits=num_folds, shuffle=True)
X = df[xvars]
y = df['medv']
kf.get_n_splits(X, y)

Out 5
```

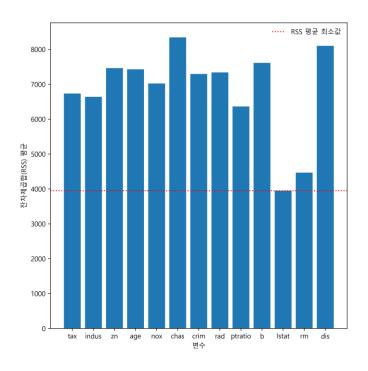
- 교차 검증
- K-겹 교차검증

```
In
       # 결과 배열 정의
       mm = np.zeros(shape=(num folds, len(xvars)))
       # 각 폴더에 대하여
       for i, (train index, valid index) in enumerate(kf.split(X)):
           X train, X valid = X.iloc[train index], X.iloc[valid index]
           y train, y valid = y.iloc[train index], y.iloc[valid index]
           # 각 변수에 대하여
           for j in np.arange(len(xvars)):
               varname = xvars[i]
               fit = smf.ols('medv~' + varname, data=pd.concat([X train, y train], axis=1)).fit()
        #
                 pred = fit.predict(sm.add constant(X valid[varname]))
               pred = fit.predict(X valid[varname])
               tmp rss = np.sum((y valid.values - pred) ** 2)
               mm[i, j] = tmp rss
       # 각 변수별로 잔차 제곱합 평균 구하기
       rss mean = np.mean(mm, axis=0)
        np.round(rss_mean, 3)
        array([6736.29, 6641.34, 7464.565, 7429.984, 7023.898, 8345.789,
0ut
              7295.099, 7339.837, 6364.507, 7612.974, 3949.518, 4467.281,
              8103.1031)
```

- 교차 검증
- K-겹 교차검증

```
In # 최소값을 주는 변수
xvars[np.argmin(rss_mean)]
Out 'lstat'
```

- 교차 검증
- K-겹 교차검증



[후보 모형의 구성]

- 단계적 모형 선택(stepwise selection)
- 전진 단계 선택(변수 추가)
- 후진 단계 제거(변수 제거)
- 혼성 방법(단계 선택)

[후보 모형의 구성]

■ 전진 단계 선택(변수 추가)

순서	내용	비고
1	초기화를 한다. 즉, $\mathcal{M}_0=\emptyset$.	변수를 1개도 사용하지 않은 경우를 일반적으로 널 모형(null model)이 라 한다.
2	모든 $k = 0,, p - 1$ 에 대하여 아래 과정을 반복한다. 1) 기존 모형인 \mathcal{M}_k 에 변수를 1개씩 추가하여 $p - k$ 개의 모형을 구성한다. 2) 모형 중에서 훈련 데이터에서 가장 좋은 적합도를 주는 모형을 \mathcal{M}_{k+1} 로 정의한다.	모형을 선택하는 기준(일종의 적합 도)이 필요하다. 적합도는 RSS이나 R ² 을 사용한다.
3	\mathcal{M}_k 중에 교차 검증 결과 가장 좋은 적합도를 나타내는 모형을 최적 모형으로 선택하며, 그 모형에 포함된 변수를 유의미한 변수로 선정 한다.	교차검증 방법을 사용하지 않은 경우에는 2의 결과 모형에 대하여 AIC, AICC, BIC 등을 적용하여 모형을 선택한다.

[후보 모형의 구성]

	X_1	X_2	<i>X</i> ₃	X_4	<i>X</i> ₅	X ₆	<i>X</i> ₇	X ₈	<i>X</i> 9	X ₁₀	X ₁₁	X ₁₂	X ₁₃
M_1													
M_2													
M_3													
M_4													
M_5													
M_6													
M_7													
M_8													
M_9													
M_{10}													
M_{11}													
M_{12}													
M_{13}													

[후보 모형의 구성]

```
# 필요한 패키지
In
     import itertools
      from sklearn.model_selection import KFold
      from sklearn import linear_model
      from sklearn.metrics import mean_squared_error
      from sklearn.model_selection import train_test_split
     # 데이터 구성
     xvars = list(set(df.columns) - {'medv'})
     X = df[xvars]
     y = df['medv']
     # 변수의 개수
     k = len(xvars)
      k
0ut
     13
```

[후보 모형의 구성]

```
In #
# 전진 선택 알고리즘: 후보 모형 구성하기
#
# 남아있는 변수 리스트 및 선정된 변수 리스트 정의하기
remaining_features = list(X.columns.values)
features = []
# 색인이 0 부터 시작하므로 처음 값을 무한대로 정의
RSS_list, R_squared_list = [np.inf], [np.inf]
# 특징 리스트는 사전으로 정의: 키는 변수의 개수
features_list = dict()
```

[후보 모형의 구성]

```
In # 알고리즘
    # 변수의 개수 별로
    for i in range(1, k + 1):
        best RSS = np.inf
        # 남아 있는 변수 1개씩 추가
        for combi in itertools.combinations(remaining_features, 1):
     # 회귀 모형 적합
            testing features = list(combi) + features
            fit = sm.OLS(y, sm.add constant(X[testing features])).fit()
            RSS = fit.ssr
            R squared = fit.rsquared
            if RSS < best_RSS:</pre>
                best RSS = RSS
                best_R_squared = R_squared
                # 튜플이므로 앞의 1개
                best_feature = combi[0]
        # 결과 갱신
        features.append(best feature)
        remaining features.remove(best feature)
        # 결과 저장
        RSS list.append(best RSS)
        R_squared_list.append(best_R_squared)
        features_list[i] = features.copy()
```

[후보 모형의 구성]

```
In # 결과 보기
    [(features_list[i], RSS_list[i].round(1)) for i in np.arange(1, 5)]
Out [(['lstat'], 19472.4),
    (['lstat', 'rm'], 15439.3),
    (['lstat', 'rm', 'ptratio'], 13728.0),
    (['lstat', 'rm', 'ptratio', 'dis'], 13228.9)]
```

[후보 모형의 구성]

```
In
         # 결과 데이터 구성
          rdf = pd.concat([pd.DataFrame({'features':features_list}),
                          pd.DataFrame({'RSS':RSS list, 'R squared': R squared list})],
                         axis=1, join='inner')
          rdf['num_features'] = rdf.index
          print(rdf.head(3))
0ut
                        features
                                          RSS R_squared num_features
                         [lstat] 19472.381418 0.544146
                                                                    1
          1
                     [lstat, rm] 15439.309201
                                                0.638562
          2
                                                                    2
          3 [lstat, rm, ptratio] 13727.985314
                                                0.678624
                                                                    3
```

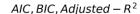
- 전진 단계 선택
- 벌점이 부여된 모형 선택 기준 통계량

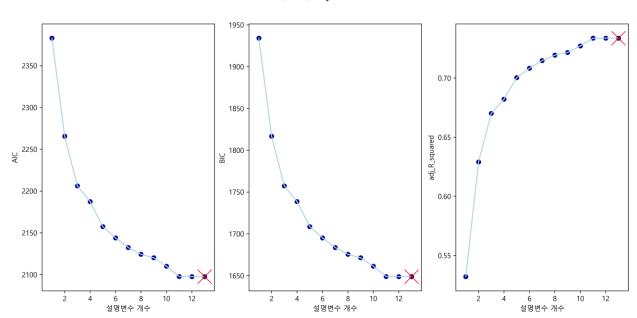
모형 선택 기준	계산식
AIC (Akaike information criterion)	$n\log\left(\frac{SSE}{n}\right) + 2p + n + 2$
BIC, SBC (Bayesian information criterion, Schwarz criterion)	$n\log\left(\frac{SSE}{n}\right) + p\log(n)$
AdjRSQ	$1 - \frac{(n-1)(1 - R^2)}{n - p}$

- 전진 단계 선택
- 벌점이 부여된 모형 선택 기준 통계량

```
# 벌점화된 통계량에 의한 변수 선택
In
     # 결과 데이터로부터 AIC, BIC and R-square adjusted 계산
     p = len(xvars) + 1
     n = len(y)
     rdf['AIC'] = n * np.log(rdf['RSS']/n) + 2*p + n + 2
     rdf['BIC'] = n * np.log(rdf['RSS']/n) +p*np.log(n)
     rdf['adj R squared'] = 1 - (n-1)*(1-rdf['R squared'])/(n-p)
     print(rdf.head(3))
                   features
                                     RSS R squared num features
0ut
                                                                         AIC \
     1
                    [lstat] 19472.381418 0.544146
                                                              1 2383.009161
                                                              2 2265.576519
                 [lstat, rm] 15439.309201 0.638562
     3 [lstat, rm, ptratio] 13727.985314 0.678624
                                                              3 2206.131472
                BIC adj_R_squared
     1 1934.180675
                         0.532101
     2 1816.748032
                         0.629011
     3 1757.302985
                         0.670133
```

- 전진 단계 선택
- 벌점이 부여된 모형 선택 기준 통계량





- 전진 단계 선택
- 교차 검증

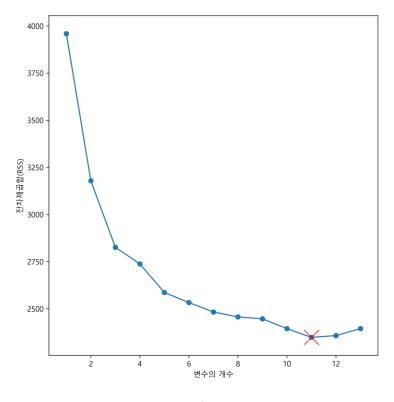
```
In # 교차 검증

# 폴더 정의
num_folds = 5
kf = KFold(n_splits=num_folds, shuffle=True)
X = df[xvars]
y = df['medv']

# 폴더 갯수
kf.get_n_splits(X, y)
```

```
# 교차 검증 알고리즘
In
              # 결과 행렬 정의
              result list = []
              # 각 폴더에 대하여
              for i, (train_index, valid_index) in enumerate(kf.split(X)):
                  X train, X valid = X.iloc[train index], X.iloc[valid index]
                  y train, y valid = y.iloc[train index], y.iloc[valid index]
                  tmp list = []
                  # 각 변수 그룹에 대하여
                  for j in np.arange(len(rdf)):
                      vars = rdf.iloc[i]['features']
                      fit = sm.OLS(y train, sm.add constant(X train[vars])).fit()
                      RSS = np.sum((y valid - fit.predict(sm.add constant(X valid[vars])))**2)
                      R squared = 1 - RSS / np.sum((y valid - np.mean(y valid))**2)
                      tmp list.append(RSS)
                  result list.append(tmp_list)
              result list = np.array(result list)
              # 각 변수별로 잔차 제곱합 평균 구하기
              rss mean = np.nanmean(result list, axis=0)
              # 최소값을 주는 변수 목록
              min index = np.nanargmin(rss mean)
              rdf.iloc[min_index]['features']
```

- 전진 단계 선택
- 교차 검증



[후보 모형의 구성]

■ 후진 단계 제거

순서	내용	비고
1	초기화를 한다. 즉, \mathcal{M}_p 을 모든 변수를 이용한 모형으로 정의한다.	\mathcal{M}_p 을 완전 모형(full model) 이라 한다.
2	모든 $k = p, p - 1,, 0$ 에 대하여 아래 과정을 반복한다. 1) 기존 모형인 \mathcal{M}_k 에 변수를 1개씩 제거하여 k 개의 모형을 구성한다. 2) 모형 중에서 훈련 데이터에서 가장 좋은 적합도를 주는 모형을 \mathcal{M}_{k-1} 로 정의한다.	모형을 선택하는 기준(일종의 적합 도)이 필요하다. 적합도는 RSS이나 R ² 을 사용한다.
3	\mathcal{M}_k 중에 교차 검증 결과 가장 좋은 적합도를 나타내는 모형을 최고의 모형으로 선택하며, 그 모형에 포함된 변수를 유의미한 변수로선정한다.	교차검증 방법을 사용하지 않은 경 우에는 2의 결과 모형에 대하여 AIC , AICC, BIC 등을 적용하여 모형을 선택한다.

- 능형 회귀
- 사전에 데이터 표준화가 필수

[내장 방법]

예제 [HOUSING] 자료에서 모든 변수에 대하여 다음과 같은 표준화를 해보자.

$$\mathbf{z}_{i} = \frac{x_{i} - \overline{x}}{\sqrt{\frac{\sum_{i}(x_{i} - \overline{x})^{2}}{n - 1}}}$$

- 능형 회귀
- 사전에 데이터 표준화가 필수

```
In # 능형회귀, 라쏘회귀 적합을 위한 데이터 전 처리
# 변수 리스트 구성하기
target_var = "medv"
input_vars = list(df.columns)
input_vars.remove(target_var)

# 표준화
sdf = (df - np.mean(df)) / np.sqrt(np.var(df, ddof=1))

# X, y 분리
X = sdf[input_vars].values
y = sdf[target_var].values
Out
```

[내장 방법]

- 능형 회귀
- 비용 함수

$$J(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 = RSS + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2$$

 $\lambda \geq 0$ 는 조율모수(tuning parameter)

statsmodels를 사용하는 경우의 비용 함수 w_{L_1} : L_1 가중값

$$\frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \left((1 - w_{L_1}) \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2 + w_{L_1} \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \right)$$

- 능형 회귀
- 람다 값에 따라 후보 모형 생성
- 각 후보 모형에 대하여 교차 검증 방법으로 모형 선택

[내장 방법]

예제 [HOUSING] 자료에서 주택중위가격(medv)를 종속변수, 나머지 모든 변수를 독립변수로 하여 능형회귀를 적합 시킬 때 람다(λ) 값에 따른 비용함수의 변화를 5-겹 교차검증 방법에 의해 살펴보자.

[내장 방법]

예제 [HOUSING] 자료에서 주택중위가격(medv)를 종속변수, 나머지 모든 변수를 독립변수로 하여 능형 회귀를 적합 시킬 때 람다(λ) 값에 따른 평균제곱오차의 변화를 5-겹 교차검증 방법에 의해 살펴보자.

```
In # 추정해야 할 모수 (절편 제외)
nparams = len(input_vars)

# 람다 값의 범위
lambdas = np.logspace(-7, 12, 100, base=np.e)

# 모수 값을 넣기 위한 행렬 생성: 하나의 열이 동일한 람다 값
coefficients = np.zeros(shape=(nparams, len(lambdas)))

# 평균제곱오차 값을 넣기 위한 벡터 생성
costs = np.zeros_like(lambdas, float)

# 교차 검증에 의한 평균제곱오차 계산
num folders = 5
```

```
In
      for i, l in enumerate(lambdas):
         # 람다 값에 따른 모형의 구성
         ridge = Ridge(alpha=l, fit intercept=False)
         ridge.fit(X, y)
         coefficients[:, i] = ridge.coef
         # 각 람다 값에 따른 교차 검증에 의한 평균제곱오차의 계산
         fold_costs = []
         kf = KFold(n splits=num folds, shuffle=True, random state=123)
         for train index, valid index in kf.split(X):
             X train, X valid = X[train_index], X[valid_index]
             y train, y valid = y[train index], y[valid index]
             # 각 폴더에 대한 모형 적합
             ridge = Ridge(alpha=l, fit_intercept=False)
             ridge.fit(X train, y train)
             # 평균제곱오차 계산
             pred = ridge.predict(X valid)
             cost = np.sum((pred - y valid)**2) / len(y valid)
             fold costs.append(cost)
         # 평균제곱오차 평균계산
         costs[i] = np.mean(fold_costs)
```

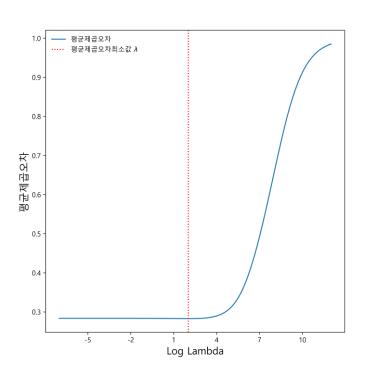
```
In # 평균제곱오차를 최소화 하는 인덱스
min_index = np.argmin(costs)
min_index

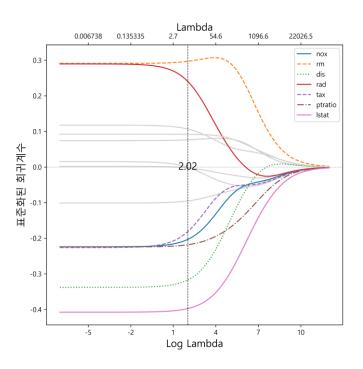
Out 47

In # 람다 값
lambdas[min_index].round(5)

Out 7.53985
```

```
# 최소값을 줄 때의 표준화된 회귀계수 값들
In
       res = pd.DataFrame({'Variable':input_vars, 'Coefficient':coefficients[:, min_index]})
       print(res.round(3))
0ut
       Variable Coefficient
       12
            lstat
                        -0.397
              dis
                        -0.317
       7
          ptratio
                        -0.218
                        -0.203
       4
              nox
                        -0.181
              tax
             crim
                        -0.095
       6
                        -0.002
              age
       2
            indus
                        -0.001
       3
             chas
                        0.076
       11
                        0.092
                b
       1
                         0.107
               zn
       8
                         0.241
              rad
       5
                         0.297
               rm
```





[내장 방법]

- 라쏘회귀
- 비용 함수

$$J(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| = RSS + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$

 $\lambda \ge 0$ 는 조율모수(tuning parameter)

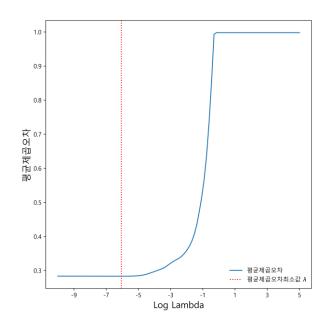
- 라쏘회귀
- 람다 값에 따라 후보 모형 생성
- 각 후보 모형에 대하여 교차 검증 방법으로 모형 선택

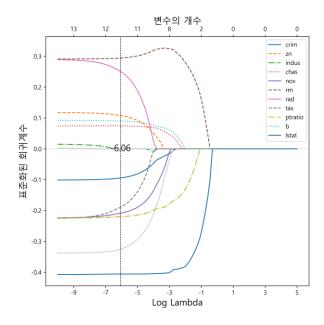
```
In # 람다 값
min_lambda = lambdas[min_index]
min_lambda

# 로그 단위로 변환
min_log_lambda = np.log(min_lambda)

np.round([min_lambda,min_log_lambda], 5)

Out array([ 2.33000e-03, -6.06061e+00])
```





[내장 방법]

```
In
       # 최소값을 줄 때의 표준화된 회귀계수 값들
       res = pd.DataFrame({'Variable':input_vars, 'Coefficient':coefficients[:, min_index]})
        print(res)
0ut
       Variable Coefficient
        12
             lstat
                      -0.405697
        7
               dis
                    -0.324987
        10
           ptratio
                     -0.219876
               nox
                      -0.208698
                      -0.189174
               tax
              crim
                      -0.094369
                     0.000000
             indus
                      -0.000000
               age
                     0.074332
              chas
        11
                       0.090229
                 b
        1
                       0.107855
                zn
               rad
                       0.250554
                       0.294126
        5
                rm
```

51

[내장 방법]

과제 [HOUSING] 자료에서 주택중위가격(medv)를 종속변수, 나머지 모든 변수를 독립변수로 하여 라쏘 회귀를 적합 시킬 때 람다(λ) 값에 따른 평균제곱오차의 변화를 5-겹 교차검증 방법에 의해 살펴보자.