Linear Regression

Hyunjoong Kim

soy.lovit@gmail.com

github.com/lovit/python_ml_intro

Vector

- 데이터를 테이블 형식으로 표현하는 경우가 많습니다.
  - 하나의 데이터 (row, data, point, instance, record, …) 는 이를 설명하는 변수 (column, feature, column, variables) 로 구성되어 있습니다.

	datetime	temperature	humidity	wind speed	demand
row 1	2016. 06. 25	33	45	3.5	254
row 2	2016. 05. 21	23	21	4.3	761
row 3	2016. 05. 23	27	57	2.1	340
row 4	…	…	…	…	…

Vector

- 숫자로 이뤄진 테이블은 그대로 벡터로 표현할 수 있습니다.

	datetime	temperature	humidity	wind speed	demand
row 1	2016. 06. 25	33	45	3.5	254
row 2	2016. 05. 21	23	21	4.3	761
row 3	2016. 05. 23	27	57	2.1	340
row 4	…	…	…	…	…

```
[[ 25,  33,  45,  3.5, 254 ],
 [ -10, 23,  21,  4.3, 761 ],
 [ -8,  27,  57,  2.1, 340 ],
   …
]
```

Vector

- 명목형 변수가 포함된 경우, 이를 dummy 로 표현할 수도 있습니다.

	Type	temperature	humidity	wind speed	demand
row 1	A	33	45	3.5	254
row 2	A	23	21	4.3	761
row 3	B	27	57	2.1	340
row 4	…	…	…	…	…

	Type A	Type B	…	humidity	wind speed	demand	temperature
row 1	1	0	0	45	3.5	254	33
row 2	1	0	0	21	4.3	761	23
row 3	0	1	0	57	2.1	340	27
row 4	…	…	…	…	…	…	…

Regression

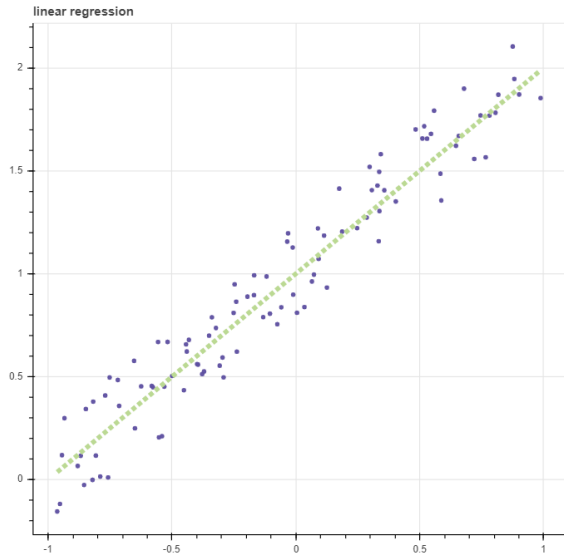
- Regression 은 입력변수 (input variables) 를 이용하여 숫자형 출력변수 (numerical output variable) 의 값을 예측 (predict) 하는 문제입니다.

(input variables) (output variables)

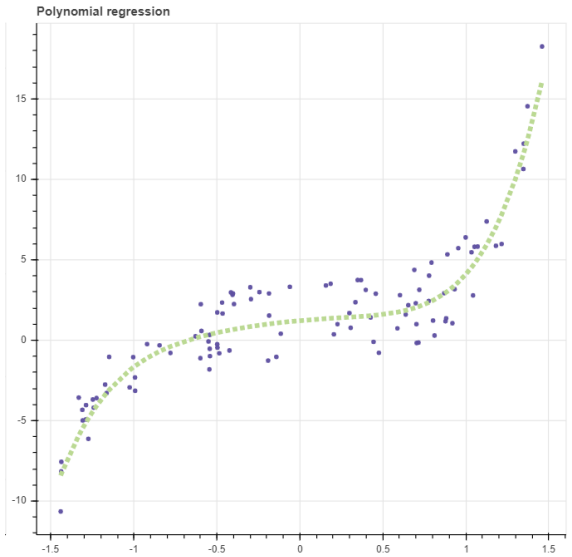
	datetime	temperature	humidity	wind speed	demand
row 1	25	33	45	3.5	254
row 2	-10	23	21	4.3	761
row 3	-8	27	57	2.1	340
row 4	...	...	...	...	...

Regression

- 추세선의 종류 (직선, 곡선)에 따라 linear / non-linear regression 으로 분류합니다.
  - 선형은 x 의 범위가 변하여도 y 와의 관계식이 일정하다는 가정이 필요합니다.



linear regression

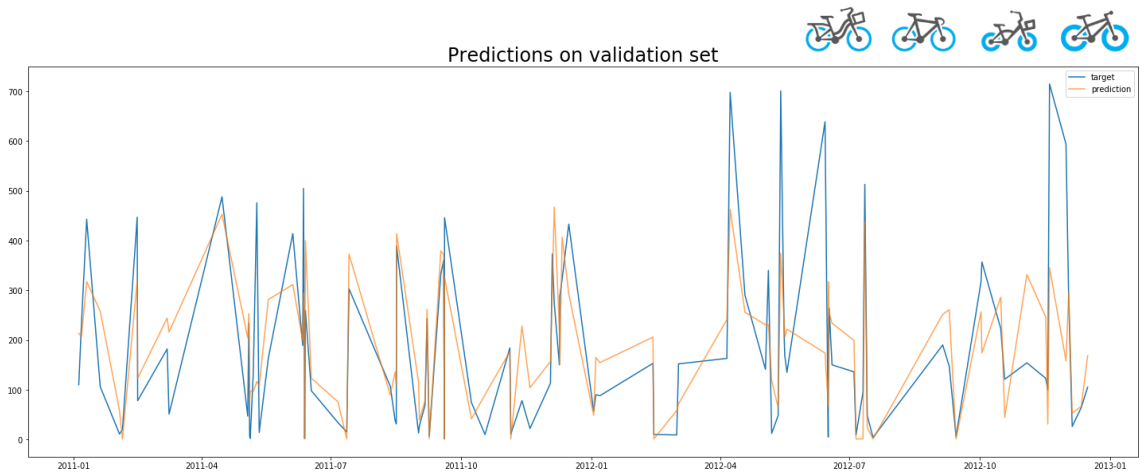


non-linear regression

Regression

- Regression 은 수요 예측의 모델링에 이용될 수 있습니다.
  - 수요 (output) 와 이를 설명하는 변수 (input) 와의 관계를 탐색합니다.

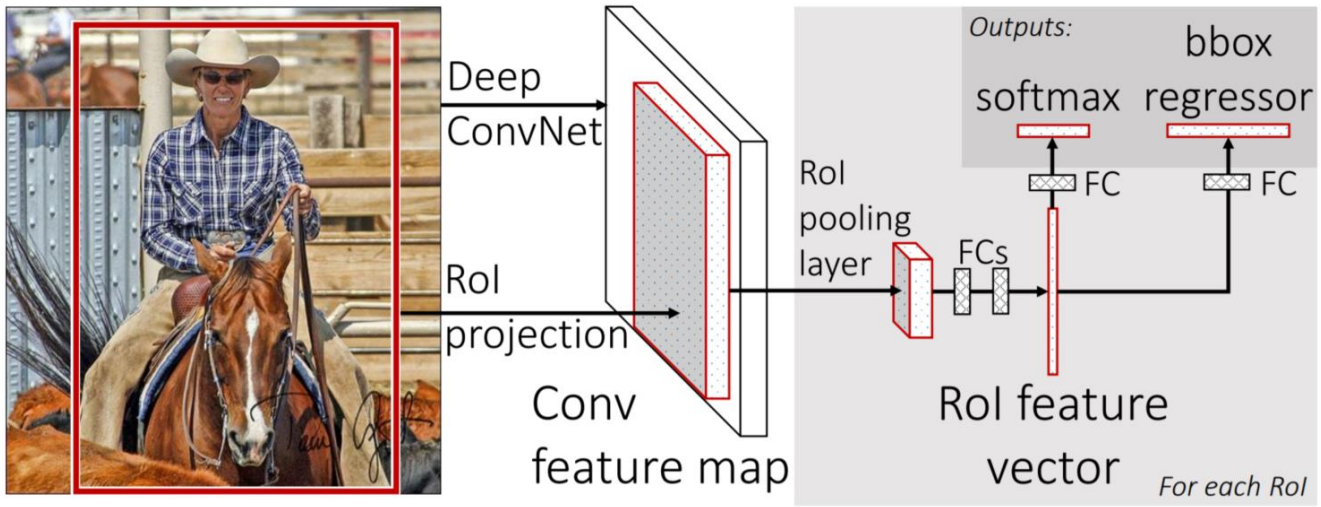
count = f(datetime, season, holiday, workingday, weather,
temp, humidity, windspeed, casual, registered)



https://www.kaggle.com/c/bike-sharing-demand

Regression

- 사진 (input) 에서 물체의 위치 (output) 를 탐색하는데도 이용됩니다.
  - 사진 속 물체의 상대적인 위치를 box 로 나타낼 수 있습니다.
  - 설명 변수와의 관계가 선형이 아니기 때문에 복잡한 형태의 모델을 이용합니다.

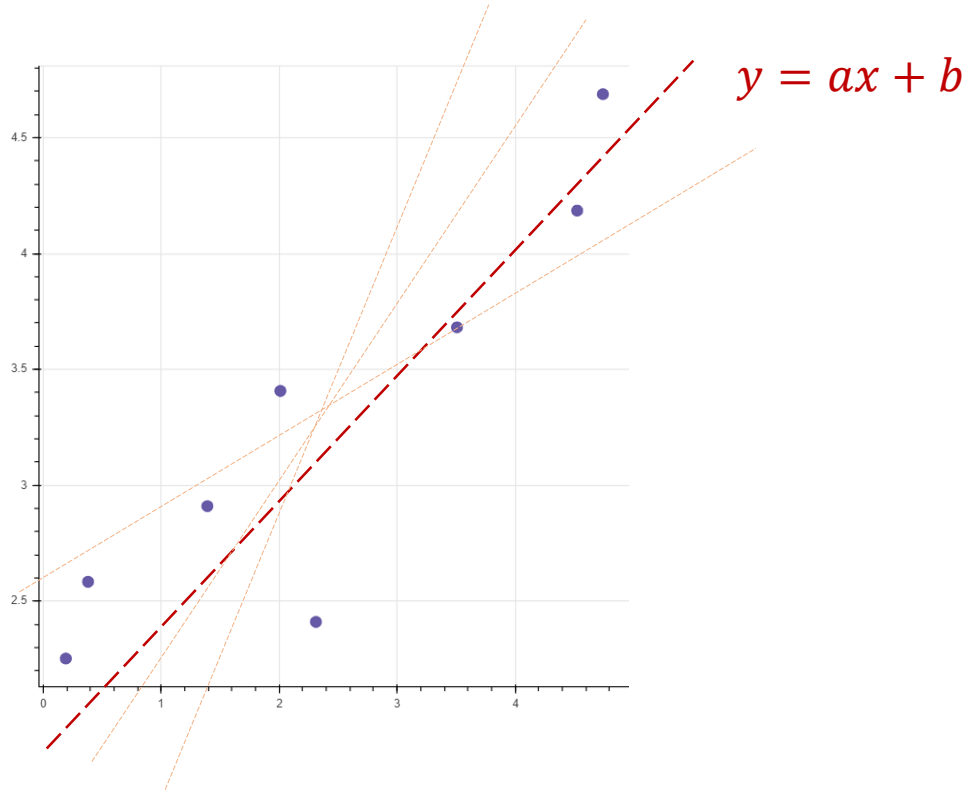


bounding box : (x_min, x_max, y_min, y_max)

- Fast R-CNN : https://arxiv.org/abs/1504.08083
- https://research.google.com/youtube-bb/download.html

Univariate Linear Regression

- 두 변수 (x, y) 간에는 $y = ax + b$ 라는 관계가 있다고 가정합니다.
  - 다양한 직선 중에서 데이터 간의 관계를 가장 잘 설명하는 직선을 선택합니다.
  - 설명력의 평가 기준이 필요합니다.



Univariate Linear Regression

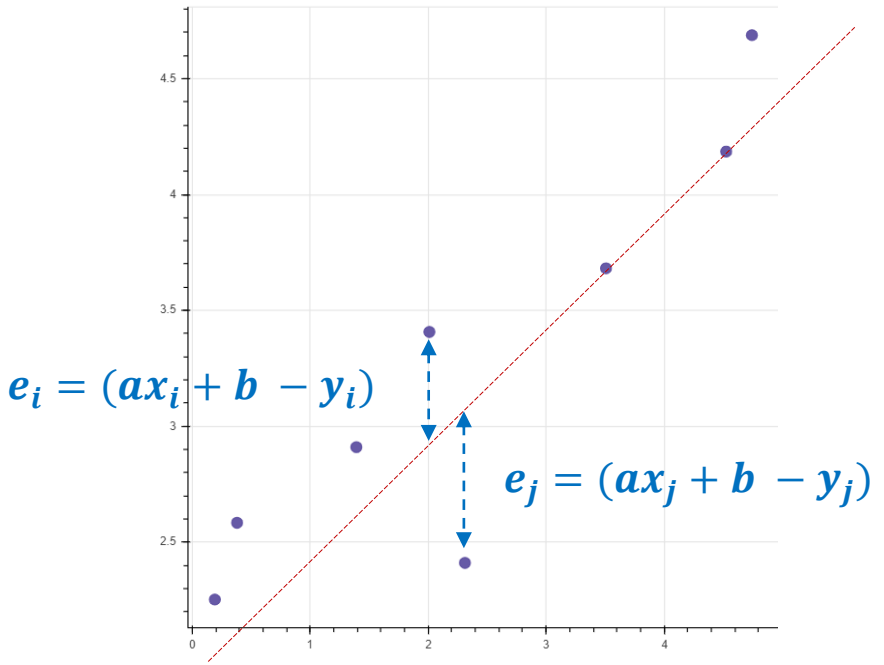
- 잔차 (residual, e_i) 는 회귀선의 예측이 틀린 정도로 정의합니다.
  - 잔차는 음수가 될 수 있기 때문에 제곱의 합이 최소가 되는 직선을 선택합니다.
  - Loss 는 주어진 식이 얼마나 틀렸는지를 나타내는 척도입니다.

loss := $\sum_i (ax_i + b - y_i)^2$

minimize loss

$\rightarrow \arg\min_{a,b} \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$

목적식 (objective)



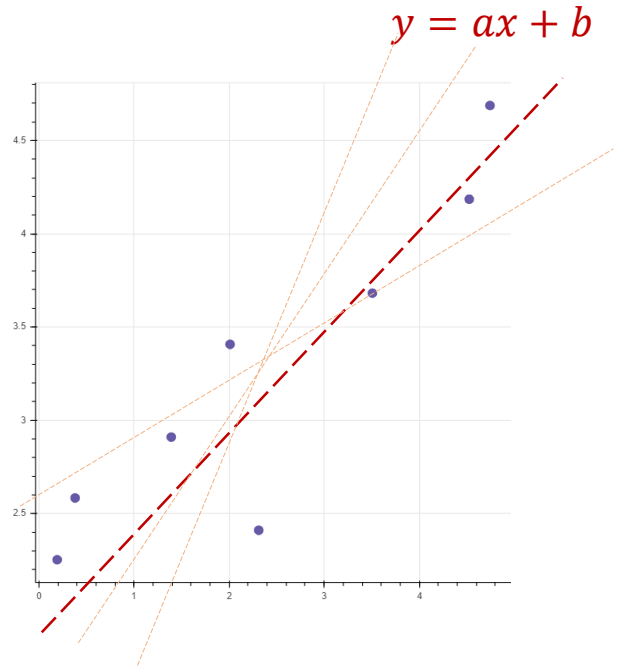
Univariate Linear Regression

- 잔차 제곱의 합으로 loss 를 정의하면 목적식은 a, b 의 2차 함수입니다.
  - 모델을 설명하는 변수 a, b 를 조절하여 loss 가 작은 직선을 탐색합니다.
  - 이 변수를 패러매터 (parameters) 라 합니다.

$$\arg\min_{a,b} \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

$$\rightarrow \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

$$= \sum_i a^2 x_i^2 + b^2 + y_i^2 + 2(abx_i - ax_i y_i - by_i)$$

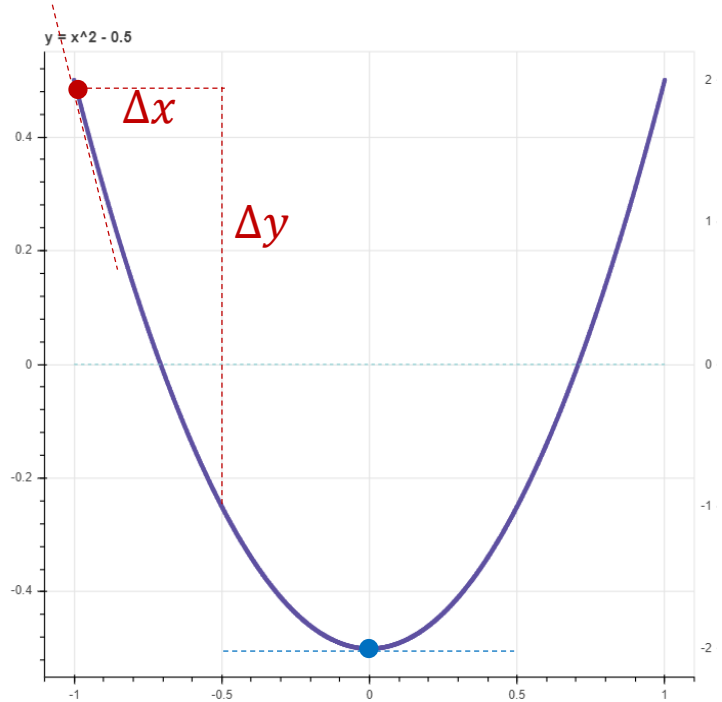


- $y = x^2 - 0.5$
- $\frac{dy}{dx} = 2x$

$\Delta y \,/\, \Delta x$ 는 (x, y) 를 지나는 인접한 직선의 기울기입니다

$\Delta x = 0.5, \Delta y = -0.75$

$\frac{\Delta y}{\Delta x} = -\frac{3}{2}$



2 차 함수의 최저점에서의 인접한 직선의 기울기는 0 입니다.

Least Squares (LS)

- 미분을 이용하면 … 최저점에서 기울기가 0 이므로

$$\arg\min_{a,b} f = \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

$$\frac{df}{db} = \sum_i 2(ax_i + b - y_i) = 0$$

$$\rightarrow nb = \sum_i y_i - \sum_i ax_i$$

$$\rightarrow b = \frac{\sum_i y_i}{n} - \frac{\sum_i ax_i}{n}$$

$$\rightarrow b = \bar{y} - a\bar{x}$$

$$\frac{df}{da} = \sum_i 2x_i(ax_i + b - y_i) = 0$$

$$= \sum_i 2x_i(ax_i - a\bar{x} + \bar{y} - y_i) = 0$$

$$\rightarrow \sum_i ax_i(x_i - \bar{x}) = \sum_i x_i(y_i - \bar{y})$$

$$\rightarrow a(\sum_i x_i(x_i - \bar{x}) - \bar{x}\sum_i (x_i - \bar{x})) = \sum_i x_i(y_i - \bar{y}) - \bar{x}\sum_i (y_i - \bar{y})$$

$$\rightarrow a = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$$

Least Squares (LS)

- 입력변수가 2 개 이상이라면 …

$$e_i = X_i\beta - y_{i'}$$

$$\arg\min_{\beta} \sum_i e_i^2 = (X\beta - y)^T(X\beta - y)$$

$$\rightarrow \frac{d}{d\beta}(X\beta - y)^T(X\beta - y) = -2X^T(X\beta - Y) = 0$$

$$\rightarrow (X^TX)\hat{\beta} = Xy$$

$$\rightarrow \hat{\beta} = (X^TX)^{-1}Xy$$

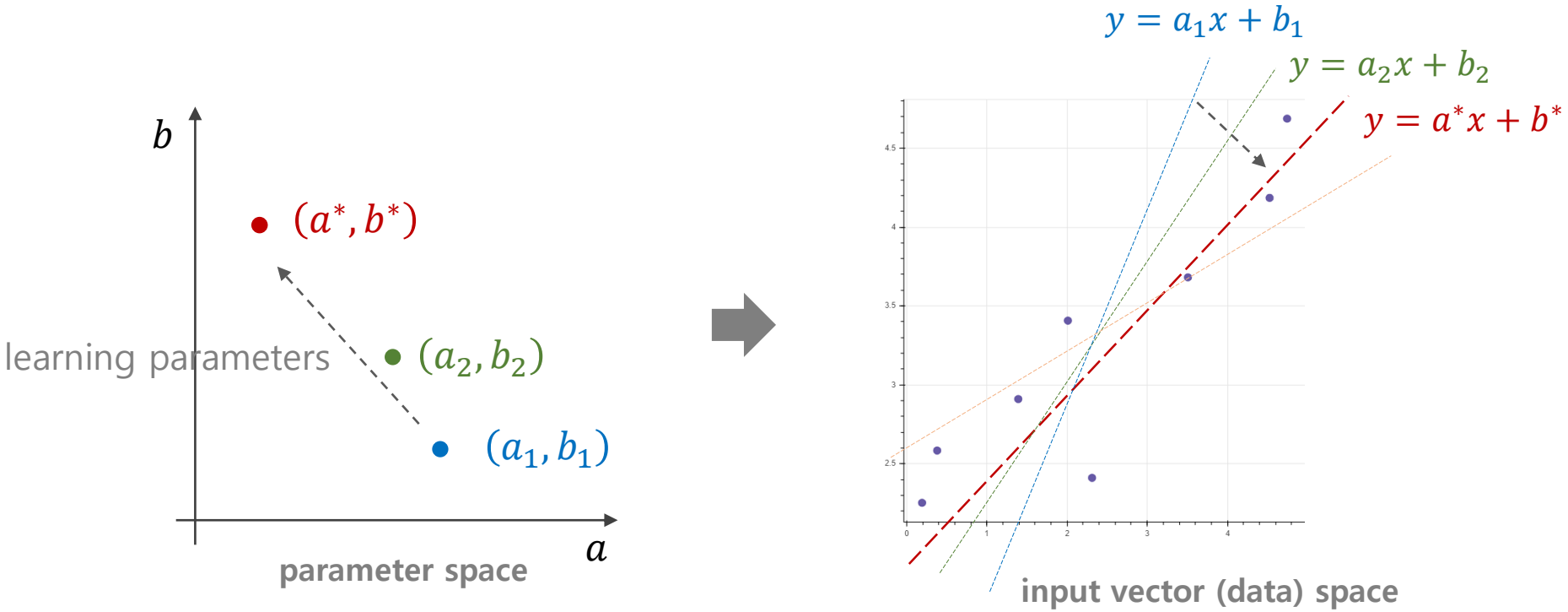
$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}$$

Least Squares (LS)

- 수식으로 결정되는 최적해를 탐색하는 방법은 loss 식이 2차 함수처럼 간단한 모양일 때는 잘 작동합니다.
  - 하지만 모델이 복잡하면 loss 의 식을 수식으로 풀 수 없기도 합니다.
  - 대신 경험적으로 (empirically) 최적해를 찾을 수도 있습니다.

Gradient descent

- 경사하강법 (gradient descent) 는 현재의 직선식 (a_1, b_1) 보다 잔차제곱의 합이 더 작은 직선으로 조금씩 loss 를 줄여갑니다.



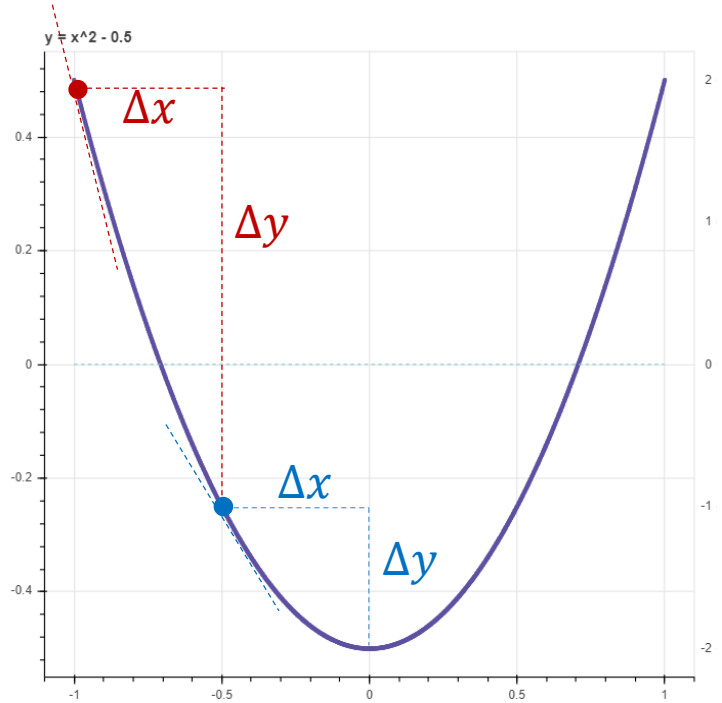
Gradient descent

- $y = x^2 - 0.5$
- $\frac{dy}{dx} = 2x$

$\Delta y \,/\, \Delta x$ 는 (x, y) 를 지나는 인접한 직선의 기울기입니다

$\Delta x = 0.5, \Delta y = -0.75$

$\frac{\Delta y}{\Delta x} = -\frac{3}{2}$



$\Delta x = 0.5, \Delta y = -0.25$

$\frac{\Delta y}{\Delta x} = -\frac{1}{2}$

x 를 Δx 만큼 이동하면 y 값이 Δy 만큼 증가합니다 (감소).

Gradient descent

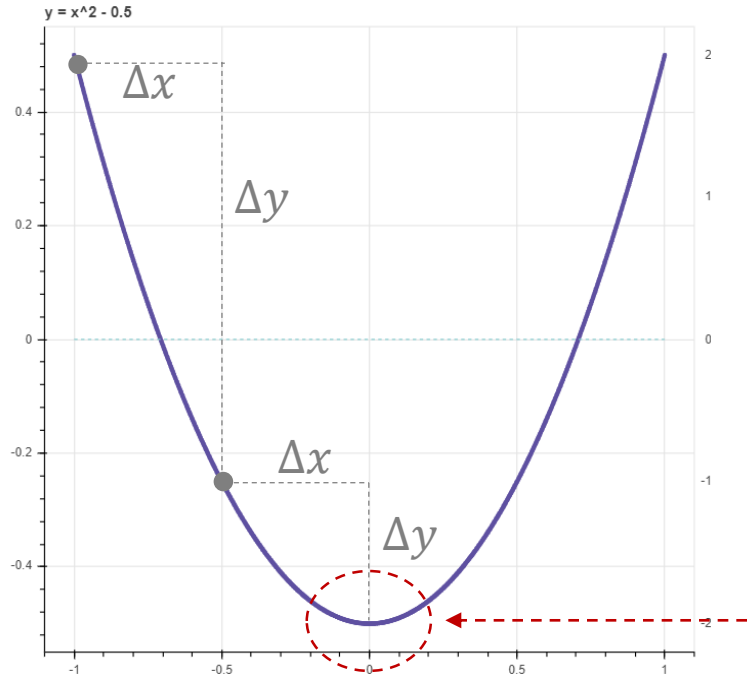
- $y = x^2 - 0.5$
- $\frac{dy}{dx} = 2x$

$\Delta x = 0.5, \Delta y = -0.75$

$\frac{\Delta y}{\Delta x} = -\frac{3}{2}$

$\Delta x = 0.5, \Delta y = -0.25$

$\frac{\Delta y}{\Delta x} = -\frac{1}{2}$



최저점 근처에서는 작은 Δx 에 대한 Δy 도 매우 작습니다.
사실상 0 에 가깝습니다

Gradient descent

- $y = x^2 - 0.5$
- $\frac{dy}{dx} = 2x$

최저점을 지나면 $\frac{\Delta y}{\Delta x}$ 의 값이 양수입니다.

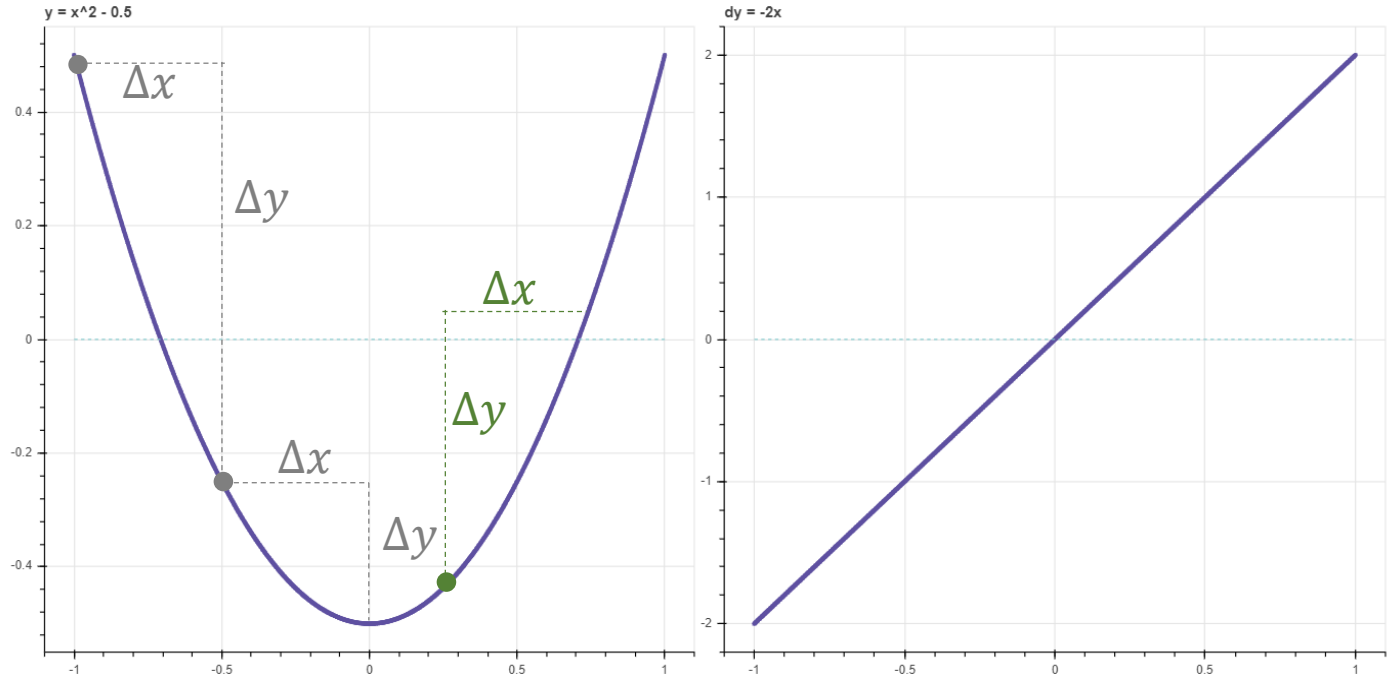
x 를 증가하면 y 도 증가합니다. x 를 줄이는 방향으로 이동합니다.

$\Delta x = 0.5, \Delta y = -0.75$

$\frac{\Delta y}{\Delta x} = -\frac{3}{2}$

$\Delta x = 0.5, \Delta y = -0.25$

$\frac{\Delta y}{\Delta x} = -\frac{1}{2}$



도함수 $(dy\ /\ dx)$ 는 기울기의 관계를 표현한 함수입니다.

최저점에서 기울기의 값이 0 입니다.

Gradient descent

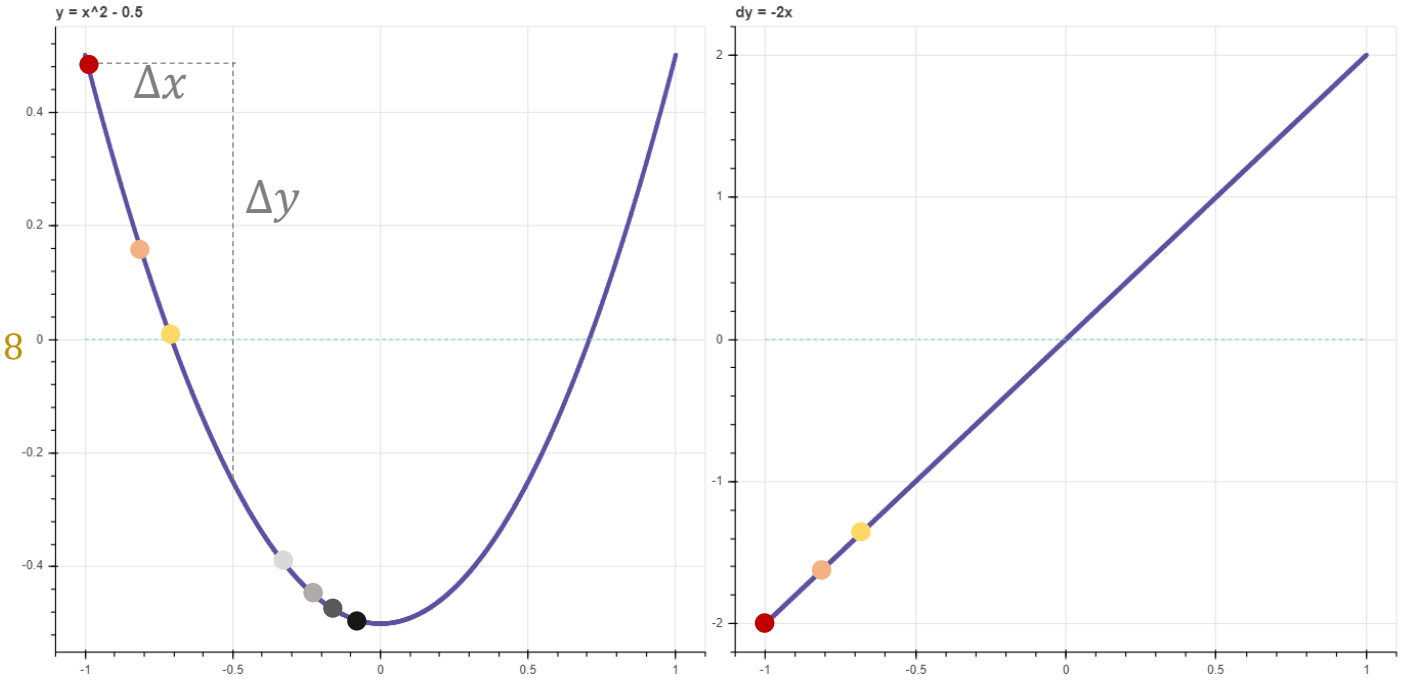
- 경사하강법 (gradient descent) 은 y 가 줄어드는 방향으로 x 를 이동하여 y 의 최저점을 탐색합니다.
- x 는 $-dy\,/\,dx$ 에 작은 수 (learning rate) 를 곱한 값만큼만 이동합니다.

- $y = x^2 - 0.5$
- $\frac{dy}{dx} = 2x$

$-\frac{dy}{dx}(x = -1) * 0.1 = -0.2$

$-\frac{dy}{dx}(x = -0.8) * 0.1 = -0.16$

$-\frac{dy}{dx}(x = -0.64) * 0.1 = -0.128$

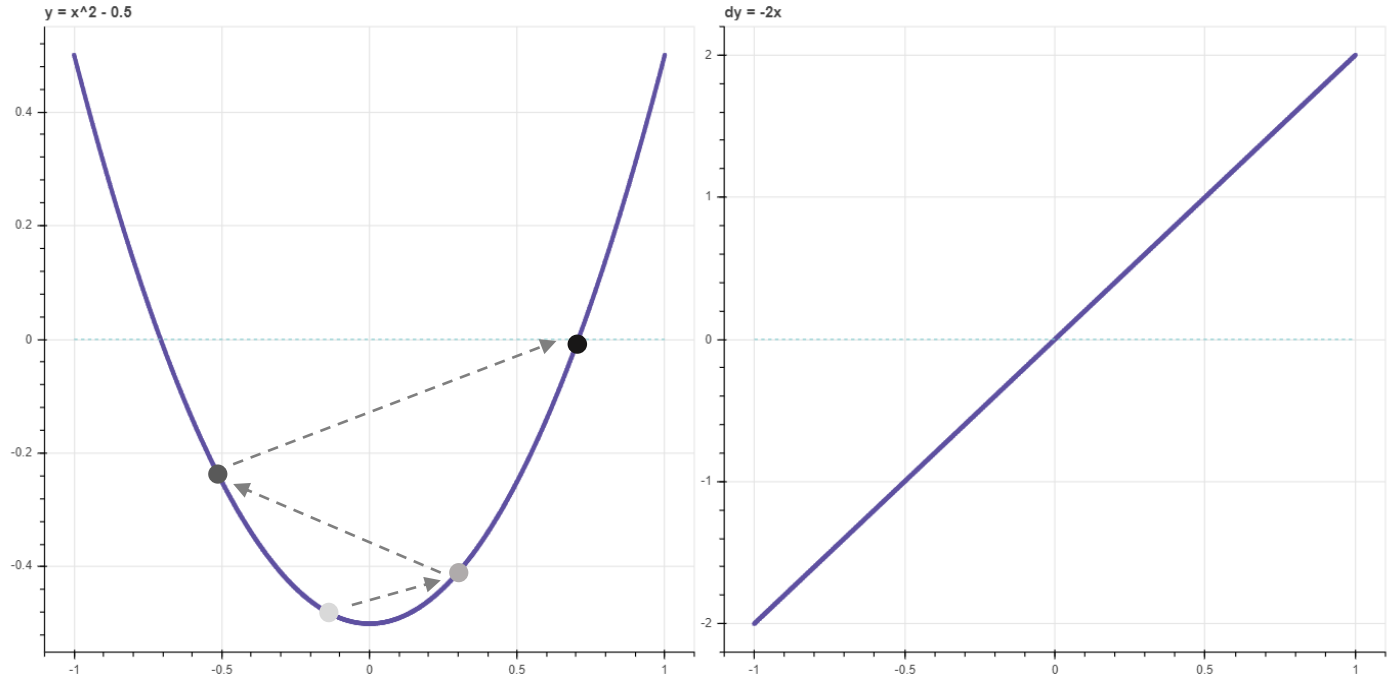


작은 수를 곱하기 때문에 최저점을 지나치지 않을 가능성이 높습니다.

Gradient descent

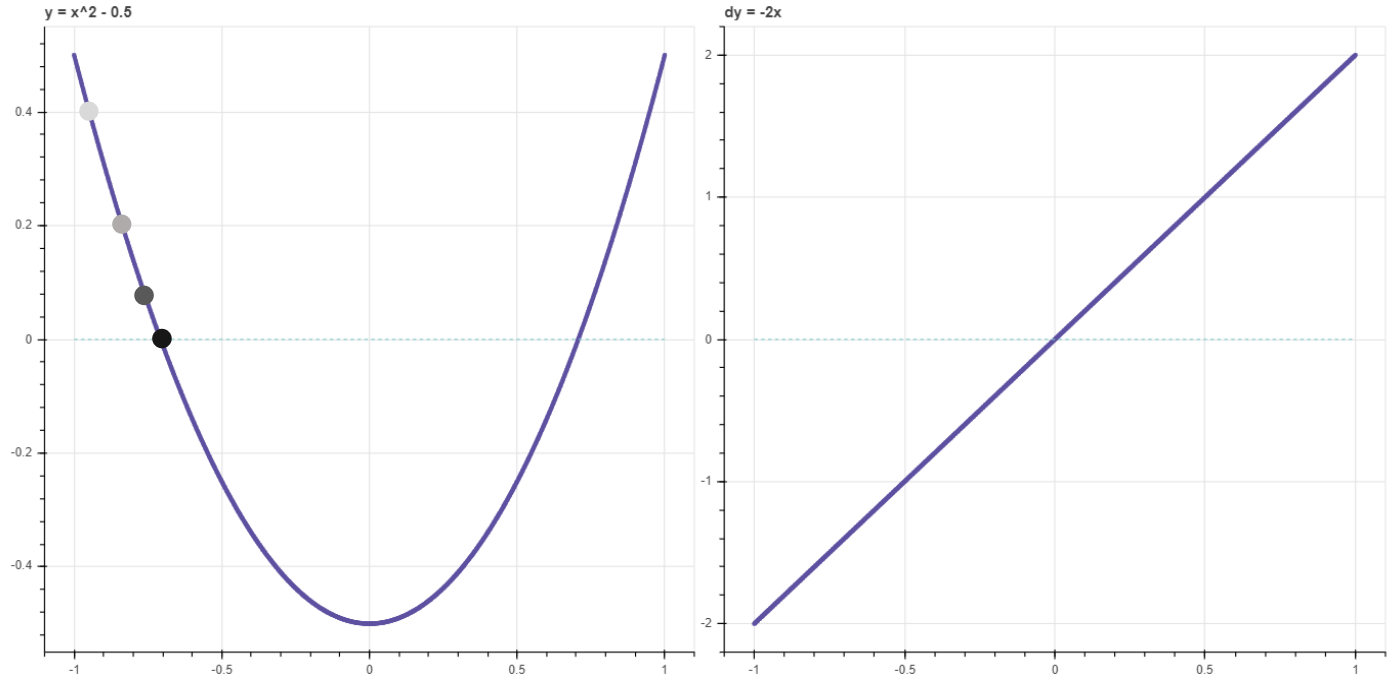
- Learning rate 로 큰 숫자를 이용하면 최저점을 지나 더 먼 곳으로 튕겨질 수 있습니다.
  이러한 현상을 "gradient explosion" 이라 합니다.
- Learning rate 로 작은 숫자를 이용하는 이유입니다.

- $y = x^2 - 0.5$
- $\frac{dy}{dx} = 2x$



Gradient descent

- Explosion 을 방지하기 위하여 언제나 작은 learning 를 이용하면 최저점 탐색이 비효율적입니다
- 계속 같은 방향의 gradient 가 주어지는데도 불구하고 속도를 줄이면 최저점까지 이동하기 위한 steps 횟수가 많아집니다.



Gradient descent

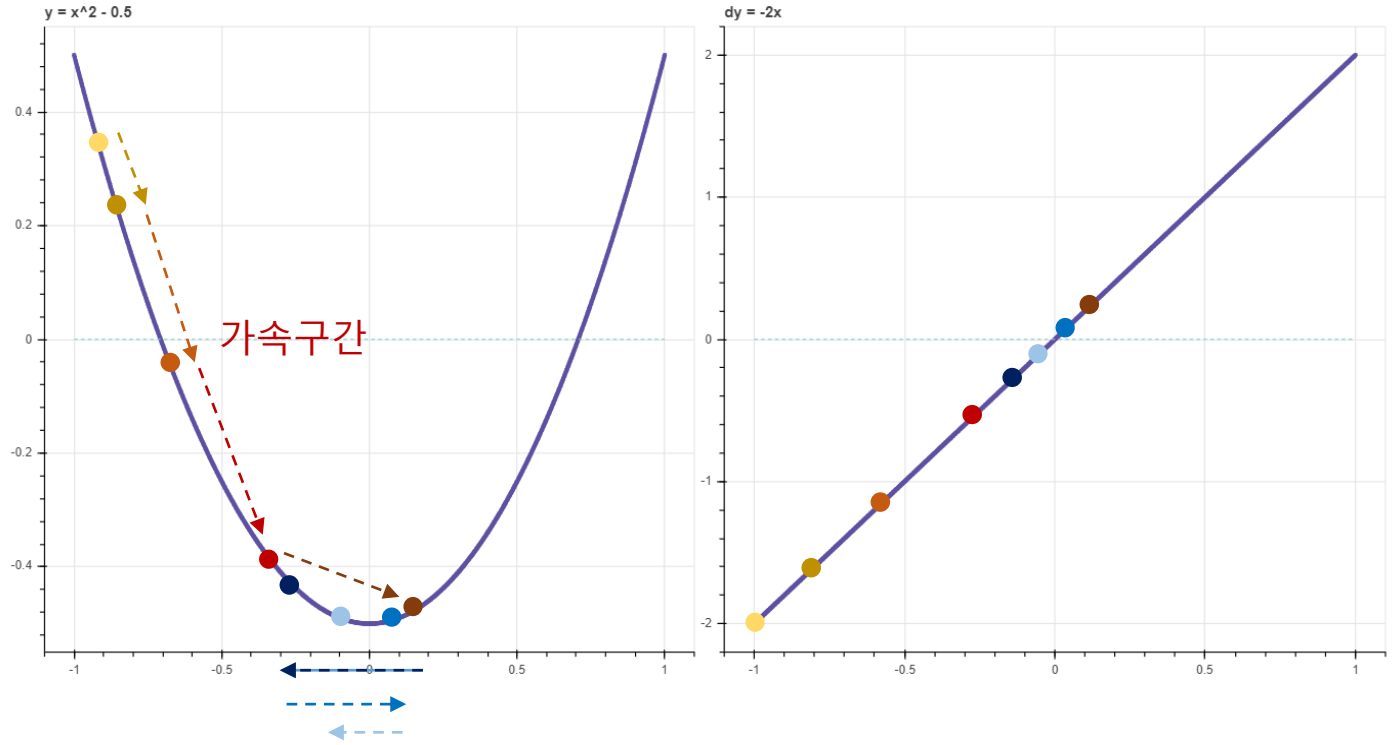
- Adaptive gradient (AdaGrad) 같은 방법은 이전 dy / dx 에 현재의 dy / dx 를 누적하여 방향이 동일하면 이동량을 가속합니다

$$\Delta x_1 = \frac{dy}{dx}(x_1)$$

$$\Delta x_2 = \alpha \frac{dy}{dx}(x_1) + \frac{dy}{dx}(x_2)$$

$$\Delta x_3 = \alpha^2 \frac{dy}{dx}(x_1) + \alpha \frac{dy}{dx}(x_2) + \frac{dy}{dx}(x_3)$$

$$\Delta x_n = \alpha \cdot \Delta x_{n-1} + \frac{dy}{dx}(x_n)$$

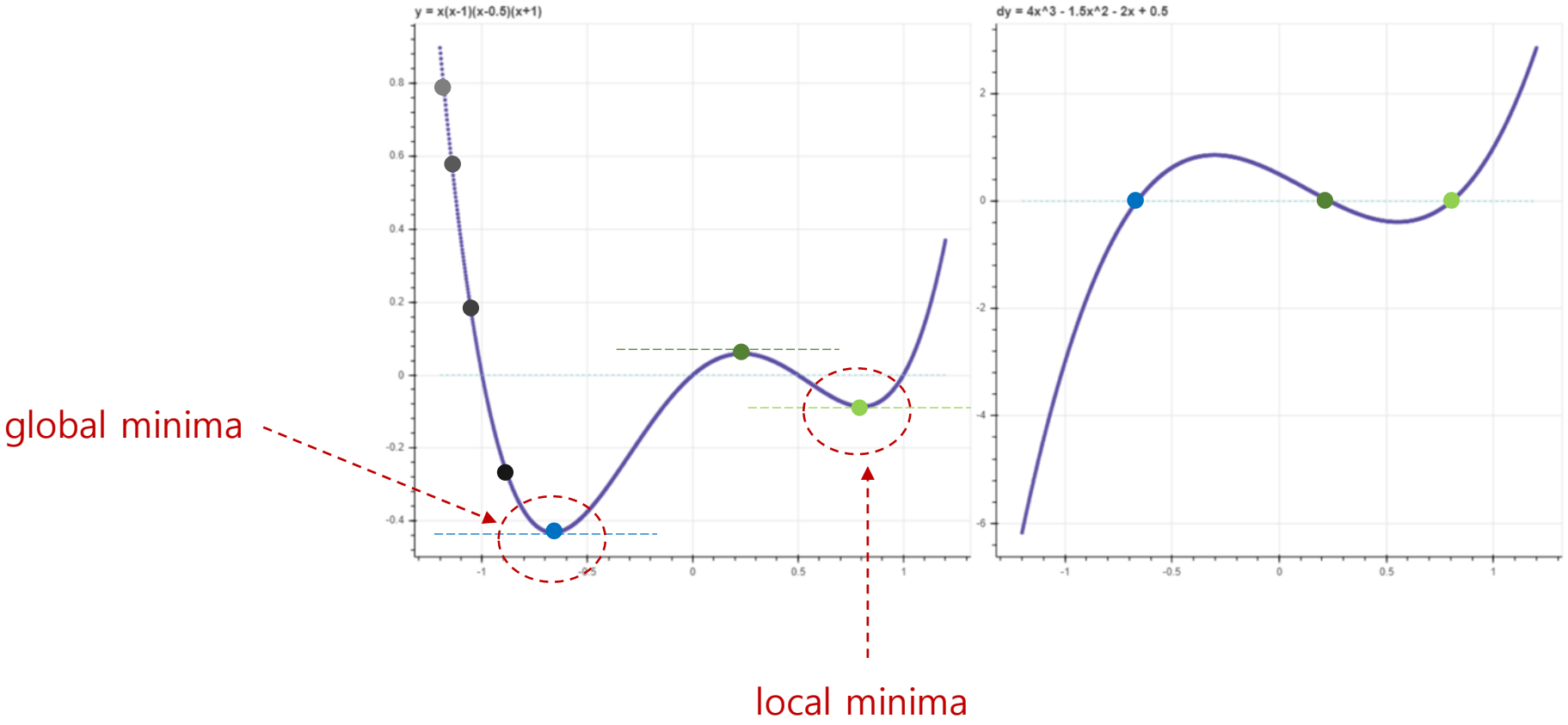


$\frac{dy}{dx}$ 의 방향이 바뀌면 누적된 값이 줄어들어 감속됩니다

Gradient descent

- 경사하강법의 접근은 복잡한 함수에도 적용할 수 있습니다
- 그러나 (지역적으로) 최저인 점이 여러 개 존재합니다.

- $y = x(x-1)(x-0.5)(x+1)$
- $\frac{dy}{dx} = 4x^3 - 1.5x^2 - 2 + 0.5$

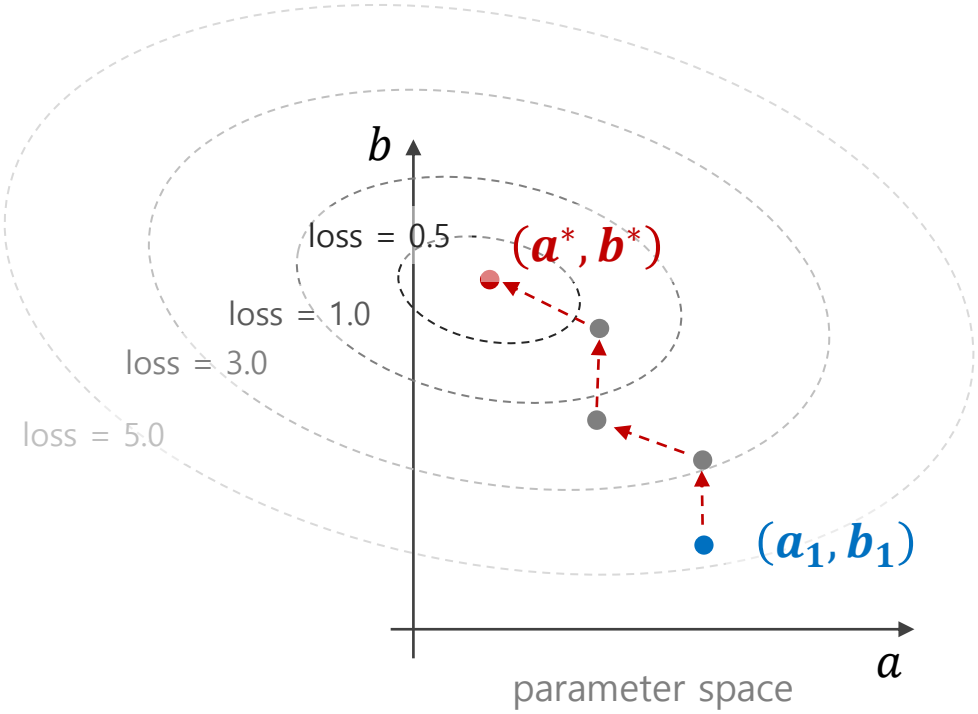


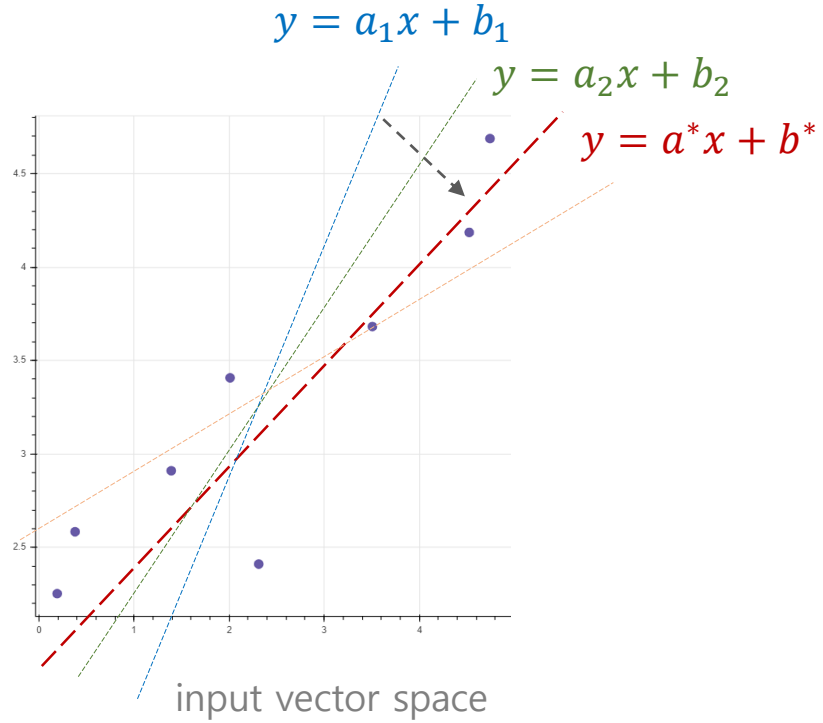
Gradient descent

- 경사하강법 기반으로 패러매터 학습하기 위한 다양한 전략들이 있습니다.
  - 이들이 Adam, AdaGrad, RMSProp 등의 optimizers 입니다.
  - Local optima 를 방지하며, 효율적으로 최저점을 탐색하는 것이 공통된 목적입니다.

Gradient descent

- 경사하강법 (gradient descent) 는 현재의 직선식 (a_1, b_1) 보다 잔차제곱의 합이 더 작은 직선으로 조금씩 loss 를 줄여갑니다.





Gradient descent

- 정리하면,
  - 경사하강법은 모델의 품질을 측정하는 기준 (loss) 이 주어지면
  - 현재의 패러매터보다 품질이 더 좋은 패러매터로 조금씩 패러매터를 수정하는
  - 경험적인 패러매터 탐색법입니다.

  - LS 처럼 수학적으로 해를 정의할 수 없을 때에도 이용가능합니다. 즉, 다양한 모델에 범용적으로 이용할 수 있다는 의미입니다.

Maximum Likelihood Estimation (MLE)

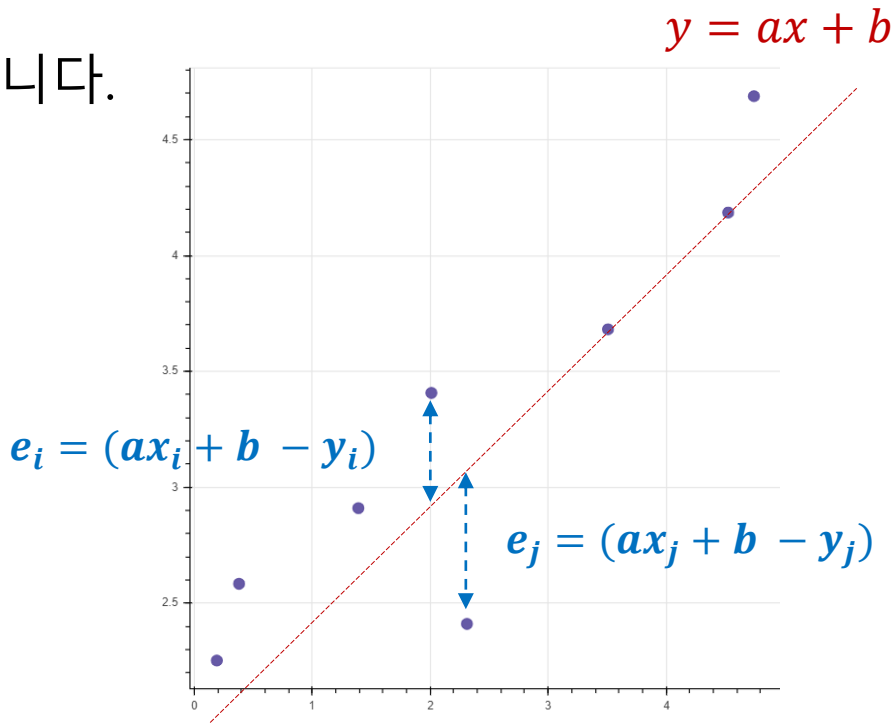
- 회귀직선의 품질을 다른 방식으로 정의할 수도 있습니다.
  - 주어진 식을 이용하여 예측한 $\hat{y} = ax_i + b$ 의 값이 y_i 에 가깝게 만들고 싶습니다.
  - 잔차 $\hat{y} - y_i$ 의 크기가 작을수록 확률이 높도록 확률식을 정의합니다.
  - 잔차는 정규분포 $N(0, \sigma)$ 를 따른다고 가정합니다.

$$\text{Likelihood} := \Pi_i \, \mathrm{P}(e_i) = \Pi_i \, \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\left(\frac{e_i}{\sigma}\right)^2\right)$$

$$= \Pi_i \, \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\left(\frac{ax_i + b - y_i}{\sigma}\right)^2\right)$$

$$\arg\max_{a,b} \Pi_i \, \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\left(\frac{ax_i + b - y_i}{\sigma}\right)^2\right)$$

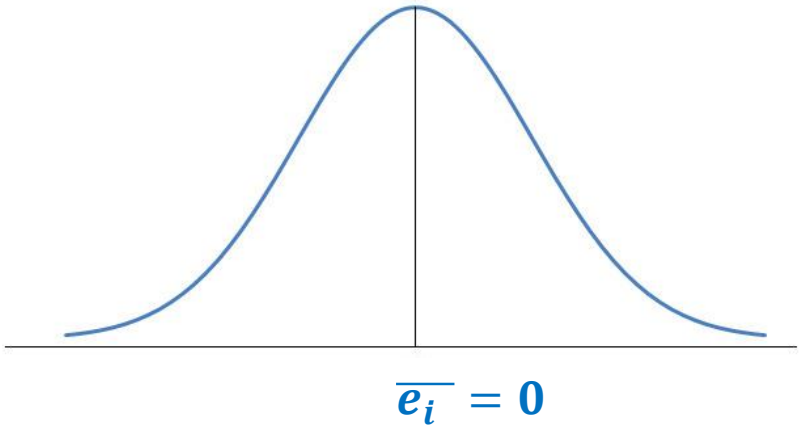
목적식 (objective)



Maximum Likelihood Estimation (MLE)

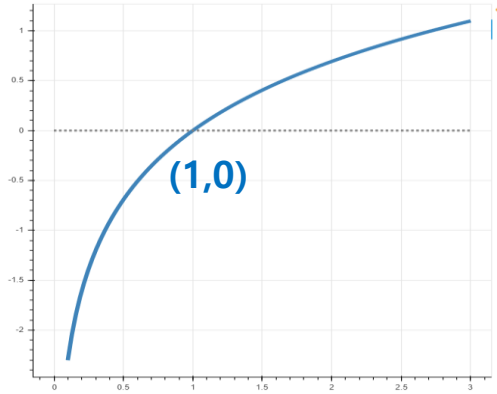
- MLE 는 확률을 최대화 하는 패러매터 a, b 를 탐색합니다.
  - 잔차가 작으면 확률이 큽니다.
  - 이번에도 경사하강법을 이용하여 패러매터를 탐색합니다.

$$\arg\max_{a,b} \Pi_i \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\left(\frac{ax_i+b-y_i}{\sigma}\right)^2\right)$$



Negative Log Likelihood (NLL)

- log 함수는 단조증가 함수입니다.
  - 함수 $f(x)$ 와 $\log(f(x))$ 의 최소값의 위치가 같습니다.



Likelihood : $\arg\max_{a,b} \Pi_i \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\left(\frac{ax_i+b-y_i}{\sigma}\right)^2\right)$

Log-likelihood: $\underset{a,b}{\text{argmax}} \sum_i \left(\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}\right) + \log\exp\left(-\left(\frac{ax_i+b-y_i}{\sigma}\right)^2\right)\right)$

$\rightarrow \arg\max_{a,b} \sum_i -\left(\frac{ax_i+b-y_i}{\sigma}\right)^2$

로그를 덧씌우면 경사하강법을 적용하기 편리합니다.

Negative LL : $\rightarrow \arg\min_{a,b} \sum_i \left(\frac{ax_i+b-y_i}{\sigma}\right)^2 = \arg\min_{a,b} \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$

부호를 바꾸면 최소값이 원함수의 최대값입니다.

Negative Log Likelihood (NLL)

- 잔차 확률과 최소자승법으로 정의한 회귀직선의 품질 기준이 동일합니다.

$$\arg\max_{a,b} \Pi_i \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\left(\frac{ax_i + b - y_i}{\sigma}\right)^2\right) = \arg\min_{a,b} \sum_i (ax_i + b - y_i)^2$$

- NLL 의 접근방법은 임의의 확률기반 loss 에 이용할 수 있습니다.
  - NLL loss 는 확률이 작을수록 loss 가 크다는 의미입니다.

Summary

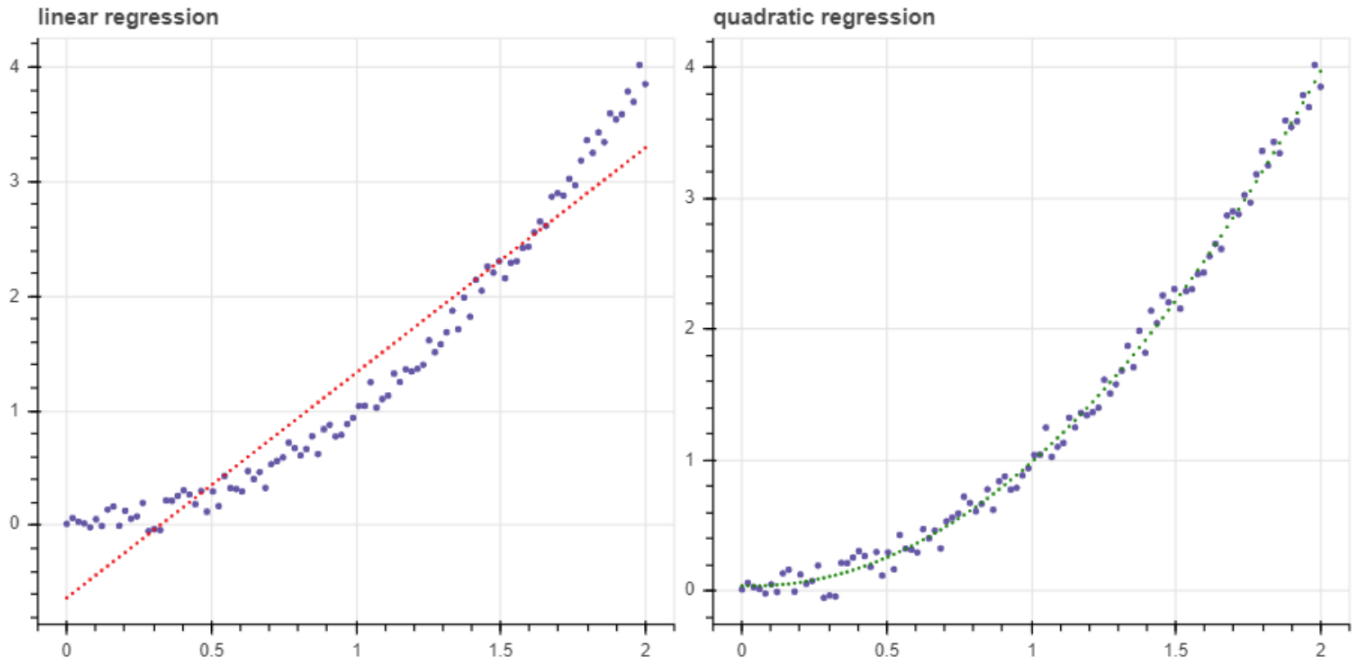
- Vector space
  - features, variable, vector space
  - Categorical variable → dummy variables
- 용어들
  - 미분, gradient descent, local optima, global optima
  - Maximum Likelihood Estimation (MLE) / Negative Log Likelihood (NLL)

Summary

- 정리하면,
  - 모델의 품질 기준을 설정합니다 (least square, log-likelihood)
  - 경사하강법은 품질이 더 좋은 (loss 가 적은) 방향으로 패러매터를 이동합니다.
  - 앞의 수식을 완벽히 이해하지는 않으셔도 됩니다.
  - 패러매터를 이동할 때, explosion 이 일어나지 않도록 조금씩 움직입니다. 품질이 더 좋아지지 않으면 학습 (패러매터 이동)을 종료합니다.
  - 수식을 통하여 최적해를 찾는 것이 아닌, 경험적으로 더 좋은 해로 개선합니다.

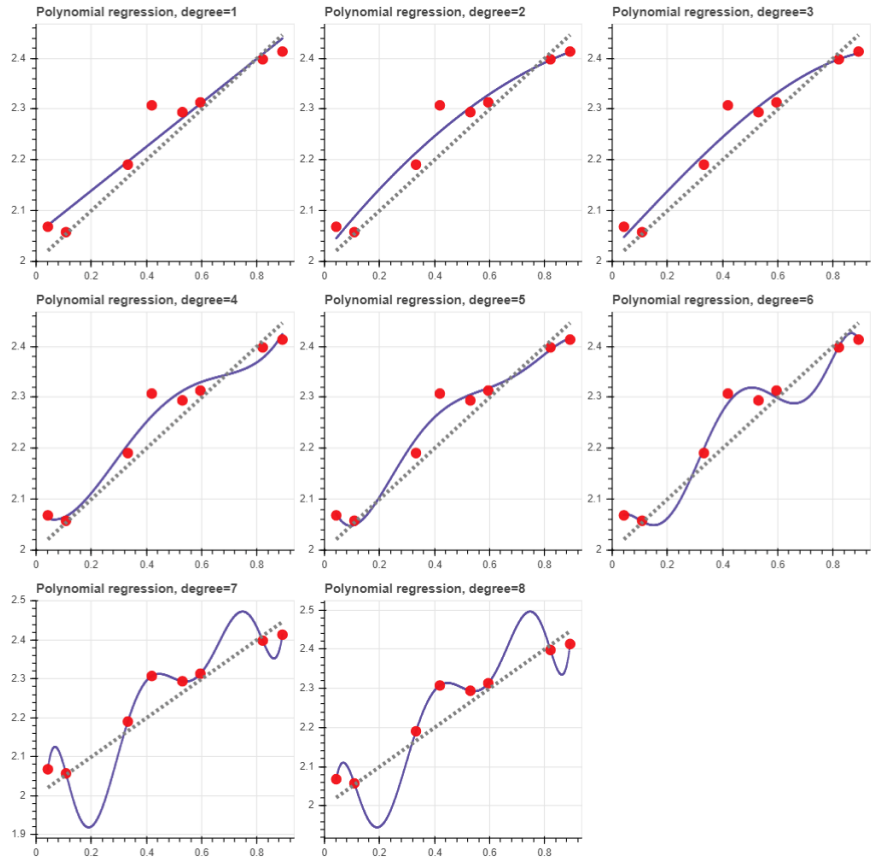
Variable selection

- 주어진 변수의 설명력이 부족하면 변수를 추가할 수 있습니다.
  - 2차 함수곡선을 설명하기 위하여 $x \rightarrow (x, x^2)$ 로 변수를 추가하면 예측이 잘됩니다.



Variable selection

- 변수의 개수가 지나치게 많으면 과적합 (overfitting) 이 발생합니다.
  - 머신러닝 알고리즘은 어느 정도 "반복된" 데이터로부터 주요 패턴을 학습하는데 능숙합니다.
  - LS 를 이용한 모델의 과적합 특징 중 하나는 패러매터의 값이 매우 큽니다.



Variable selection

- 같은 예측 성능이라면 변수의 개수가 적은 모델이 효율적/안정적입니다.

Entities are not to be multiplied without necessity

(Occam's razor)

Variable selection

- Exhaustive search 는 변수의 개수가 p 개일 때, 2^p -1 개의 모든 조합에 대하여 모델링을 수행하는 것으로, 비현실적인 방법입니다.
- Forward selection 은 유의미한 성능 향상이 있는 변수를 하나씩 추가하는 방법입니다.
- Backward elimination 은 성능 하락이 없다면 변수를 하나씩 제거하는 방법입니다.
- Stepwise selection 은 forward selection 과 backward elimination 을 동시에 진행합니다.

- 성능 변화의 유의성은 통계 (ANOVA) 를 기반으로 검증합니다. 그러나 이러한 방법은 통계학에서 이용하는 방법이며, 머신러닝에서는 다른 방식으로 접근합니다.

Regularization

- p-norm은 벡터의 크기를 정의하는 방법입니다
  - $|X|_p = \sqrt[p]{|X_1|^P + \ldots + |X_q|^P}$ 로 정의되며, X_j는 j번째 차원의 값
  - p = 2 이면, L2 norm (Euclidean distance)
  - $|(3,0,4)|_{p=2} = \sqrt[2]{|3|^2 + 0^2 + |4|^2} = 5$

Regularization

- p-norm은 벡터의 크기를 정의하는 방법입니다
  - $|X|_p = \sqrt[p]{|X_1|^P + \ldots + |X_q|^P}$ 로 정의되며, X_j는 j번째 차원의 값
  - p = 1 이면, X의 각 차원의 값의 절대값의 합. (Manhattan distance)
  - $|(3, 0, -4)|_{p=1} = \sqrt[1]{|3|^1 + |0|^1 + |-4|^1} = 7$

Regularization

- p-norm은 벡터의 크기를 정의하는 방법입니다
  - $|X|_p = \sqrt[p]{|X_1|^P + \ ... + \left|X_q\right|^P}$ 로 정의되며, X_j는 j번째 차원의 값
  - p = 0 이면, X 에서 0이 아닌 차원의 갯수
  - $|(3,0,4)|_{p=0} = |3|^0 + \ |4|^0 = 2$

Regularization

- Linear regression 의 패러매터도 “벡터”입니다.
  - L1, L2 regularization 은 p-norm 을 이용하여 패러매터의 모습을 유도합니다.

L2 regularization

- 목적식을 loss 와 regularization cost 의 합으로 정의합니다.
  - λ 는 loss 와 regularization 의 중요도를 조절하는 사용자 지정 변수입니다.
  - L2 regularization 은 b_j 중 유독 큰 값이 없도록 유도합니다. ($\frac{d}{db_j} = 2\lambda b_j$ 이므로)

$$\text{objective} : \arg\min_{a,b} \sum_i \left(b_0 + b_1 x_{i1} + b_2 x_{i2} + \ \ldots + b_p x_{ip} - y_i\right)^2 + \lambda \cdot \left(b_0^2 + b_1^2 + \ \ldots + b_p^2\right)$$

loss

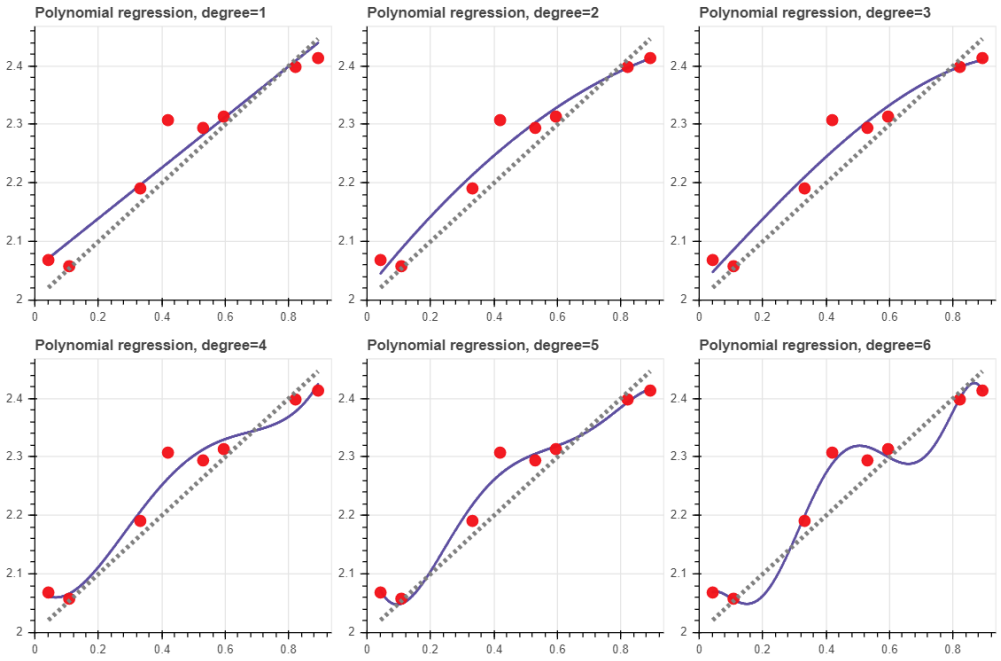
regularization cost

training cost = loss + regularization cost

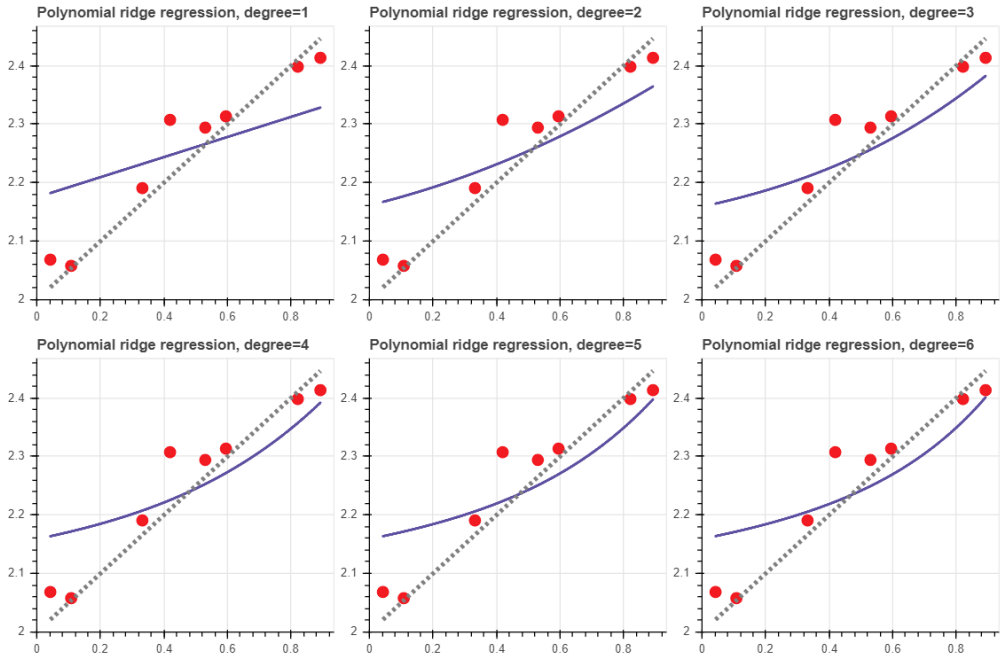
Ridge regression

$$\arg\min_{\beta} \sum_{i} (X_i\beta - y_i)^2 + \lambda \cdot |\beta|_2^2$$

- L2 regularization 을 이용하는 선형회귀를 ridge regression 라 합니다.
  과적합 방지 능력이 있습니다.



polynomial linear regression



polynomial ridge regression

L1 regularization

- L1 regularization 은 변수 선택의 효과를 얻을 수 있습니다.
  - $b_j = 0$ 이면 해당 변수를 이용하지 않는다는 의미입니다.

$$\frac{d|b_j|}{db_j} = \begin{cases} 1 & \text{if } b_j > 0 \\ 0 & \text{if } b_j = 0 \\ -1 & \text{if } b_j < 0 \end{cases}$$

$$\text{objective} : \arg\min_{a,b} \sum_i \left(b_0 + b_1 x_{i1} + b_2 x_{i2} + \ \ldots + b_p x_{ip} - y_i\right)^2 + \lambda \cdot \left(|b_0| + |b_1| + \ \ldots + |b_p|\right)$$

loss

regularization cost

L1 regularization

- 특히 변수가 데이터의 개수보다 많거나 (fat data $n \leq p$) ,중복된 변수가 존재하는 경우에는 과적합 방지를 위하여 L1 regularization 이 필요합니다.
  - L1 regularization 은 logistic regression 에서 더 자세히 살펴봅니다.

- The Elements of Statistical Learning ^1 에 L1 regularization 이 왜 sparse coefficient 를 학습하는지에 대한 수학적인 설명이 있습니다.

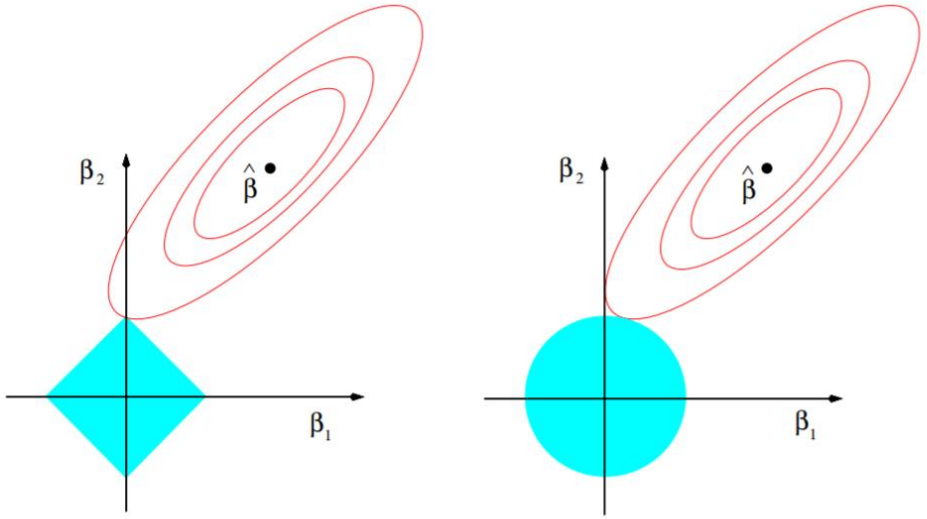


FIGURE 3.11. *Estimation picture for the lasso (left) and ridge regression (right). Shown are contours of the error and constraint functions. The solid blue areas are the constraint regions* $|\beta_1| + |\beta_2| \leq t$ *and* $\beta_1^2 + \beta_2^2 \leq t^2$*, respectively, while the red ellipses are the contours of the least squares error function.*

^1: https://web.stanford.edu/~hastie/Papers/ESLII.pdf

Summary

- Regularization 은 모델의 overfitting 을 방지합니다.
  - L2 regularization 은 특정한 변수의 패러매터값이 크지 않도록,
    (모델이 완만한 회귀선을 학습하도록)
  - L1 regularization 은 예측 성능이 크게 저하되지 않는 선에서 최소한의 변수를 이용하도록 유도합니다.

Evaluation

R^2

- y 의 분산 대비 잔차의 비율이 작을수록 모델이 데이터를 잘 설명합니다.
  - $R^2 \leq 1$ 로, 1에 가까울수록 잔차가 없음을 의미합니다.

$$R^2 = \frac{\sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{\sum_i (e_i)^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}$$

$$\begin{aligned}
&\sum_i (y_i - \bar{y})^2 \\
&= \sum_i (y_i - \hat{y}_i + \hat{y}_i - \bar{y})^2 \\
&= \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \\
&= \sum_i e_i^2 + \sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow R^2 = 1 - \frac{\sum_i (e_i)^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}$$

Adjusted R^2

- 변수의 개수를 고려한 R^2 입니다.
  - 변수 개수에 penalty 를 부여합니다.

$$R^2_{adj} = 1 - \left(\frac{n-1}{n-k-1}\right)(1-R^2)$$

n : number of data
k : number of input variables

Average Error

- 잔차의 크기가 크더라도 평균은 0 일 수 있습니다.

$$avg.error = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i}(\hat{y}_i - y_i)$$

y_i	$\hat{y}_i$	residual
5.329	5.212	-0.117
1.812	1.792	-0.02
4.781	4.771	-0.01
6.53	6.44	-0.09
6.265	6.242	-0.023
5.334	5.572	0.238
3.362	3.402	0.04
2.759	2.74	-0.019

Average error = -0.000125

Mean Absolute Error (MAE)

- y_i 의 크기에 관계없이 잔차의 영향력이 같습니다.
  - $(1, 2)$ 에서의 0.1 과 $(10, 20)$ 에서의 0.1 잔차는 다릅니다.

$$\mathrm{MAE} = \frac{1}{\mathrm{n}} \sum_{i} |\hat{y}_i - y_i|$$

y_i	$\hat{y}_i$	$\lvert y_i - \hat{y}_i \rvert$
5.329	5.212	-0.117
1.812	1.792	-0.02
4.781	4.771	-0.01
6.53	6.44	-0.09
6.265	6.242	-0.023
5.334	5.572	0.238
3.362	3.402	0.04
2.759	2.74	-0.019

MAE = -0.069

Mean Absolute Percentage Error (MAPE)

- y_i 의 크기를 고려한 잔차의 상대적 크기를 계산합니다.

$$\text{MAPE} = \frac{1}{\text{n}} \sum_{i} \frac{|\widehat{y_i} - y_i|}{|y_i|}$$

y_i	$\widehat{y_i}$	$\left\lvert\frac{y_i - \widehat{y_i}}{y_i}\right\rvert$
5.329	5.212	-0.117
1.812	1.792	-0.02
4.781	4.771	-0.01
6.53	6.44	-0.09
6.265	6.242	-0.023
5.334	5.572	0.238
3.362	3.402	0.04
2.759	2.74	-0.019

MAPE = 0.014

Root Mean Squared Error (RMSE)

- e_i 의 크기가 클 경우 더 큰 패널티를 부여합니다.
- RMSE 는 잔차와 y_i 의 스캐일을 동일하게 맞춥니다.

$$\text{MSE} = \frac{1}{\text{n}}\sum_i (\hat{y}_i - y_i)^2$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{\text{n}}\sum_i (\hat{y}_i - y_i)^2}$$

y_i	$\hat{y}_i$	$(y_i - \hat{y}_i)^2$
5.329	5.212	-0.117
1.812	1.792	-0.02
4.781	4.771	-0.01
6.53	6.44	-0.09
6.265	6.242	-0.023
5.334	5.572	0.238
3.362	3.402	0.04
2.759	2.74	-0.019

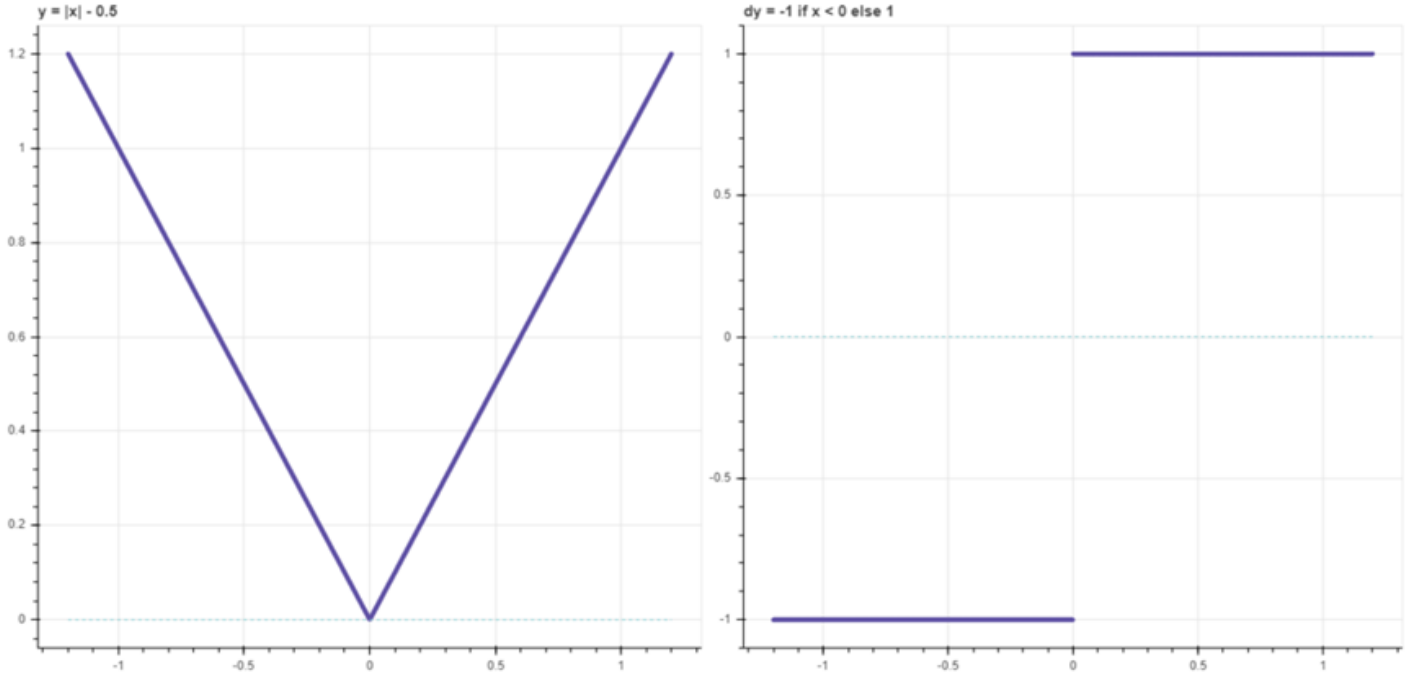
RMSE = 0.101

Why we use RMSE loss instead MAP

- $|e_i|$ 의 미분값은 -1, 1 입니다.
  - 최저점 근방에 도착하여도 속도가 줄어들지 않습니다.

$y = |e| - 0.5$

$$\frac{dy}{de} = \begin{cases} 1 & \text{if } e > 0 \\ -1 & \text{if } e < 0 \end{cases}$$



- Evaluation metric 은 사후 품질 평가 수단으로도 이용되지만,
  경사하강법에서는 패러매터의 이동 방향을 결정하는 지표로도 이용됩니다.
- 손쉬운 미분이 가능한 평가 척도가 경사하강법의 loss 로 자주 이용됩니다.

Summary

- Evaluation 은 모델의 품질을 평가합니다.
  - 학습 과정에서 loss 를 정의하는 기준으로도,
  - 학습 완료 후 모델의 최종 품질을 평가하는데도 이용됩니다.
- RMSE, MAP, R^2 등 다양한 방법이 있습니다.
  - Loss 로는 미분이 손쉬운 RMSE 가 주로 이용됩니다.

Seaborn

scatter plot 을 그리는 두 가지 방법

```
import seaborn as sns

g = sns.scatterplot(x="total_bill", y="tip", data=tips)
```

```
# to save
g = g.get_figure()
g = savefig("filepath")
```

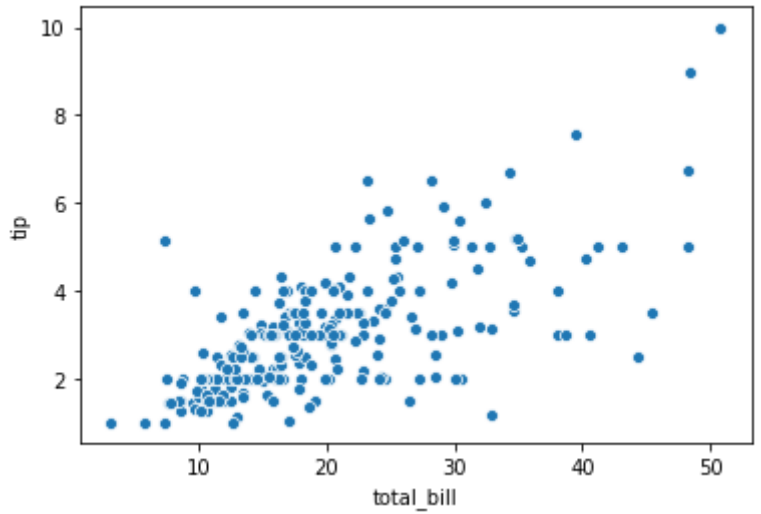
return type: matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot

```
import seaborn as sns

g = sns.relplot(x="total_bill", y="tip", data=tips, kind="scatter")
```

```
# to save
g = savefig("filepath")
```

return type: seaborn.axisgrid.FacetGrid



relplot() vs scatterplot()

seaborn.relplot(..., kind='scatter')

- execute matplotlib.pyplot.close()
- prepare new FacetGrid
- execute seaborn.scatterplot()
- return the grid

return type = AxesSubplot

scatterplot 의 옵션은 모두 이용가능합니다 (hue, size, ...)

seaborn.relplot(..., kind='line')

- execute matplotlib.pyplot.close()
- prepare new figure
- execute seaborn.lineplot()
- return the grid

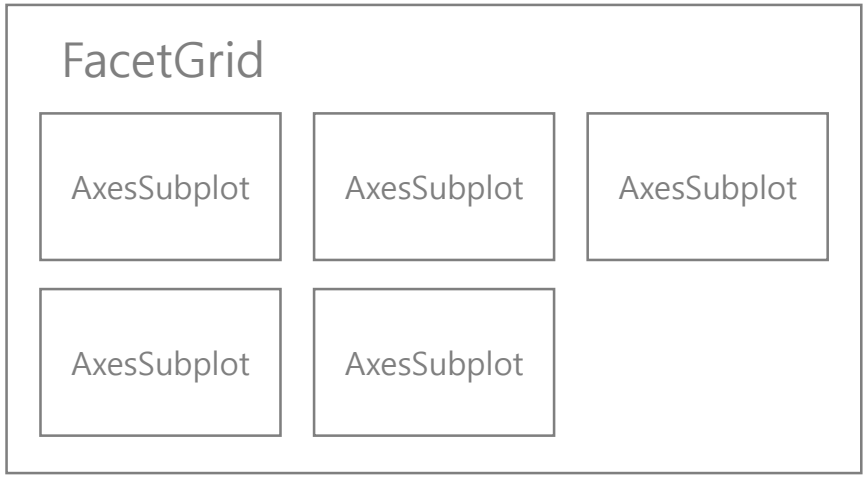
relplot() vs scatterplot()

seaborn.relplot(..., kind='scatter', col='variable', col_wrap=3)

execute matplotlib.pyplot.close()
prepare new FacetGrid

for var in variable:
    execute seaborn.scatterplot(x_var, y_var)
return the grid

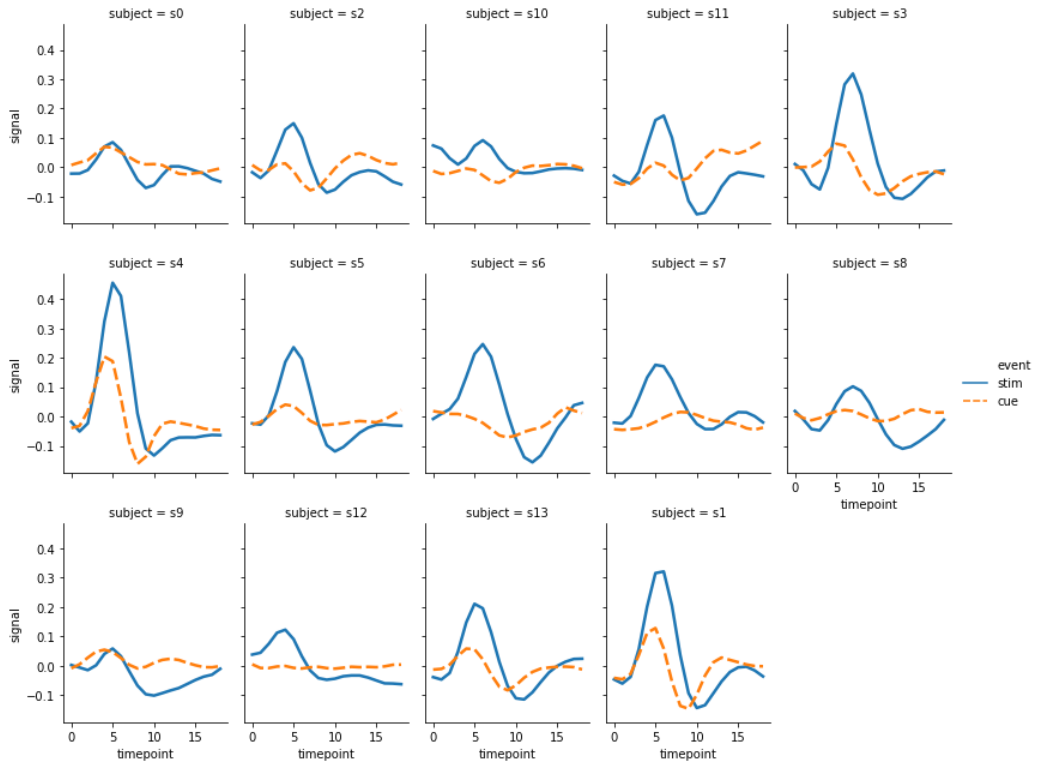
return type = AxesSubplot



relplot() vs scatterplot()

```
import seaborn as sns

g = sns.relplot(…, col="subject", col_wrap=5)
```



seaborn.relplot(..., kind='scatter')

- 'scatter'
- 'line'

seaborn.catplot(..., kind='box')

- 'strip'
- 'swarm'
- 'box'
- 'violin'
- 'point'
- 'bar'
- 'count'

Pairwise plot

- 변수 간의 관계에 대하여 모두 relplot, catplot 을 그려줍니다.
  - 변수의 개수 p 의 p^2 개의 그림을 그리기 때문에 필요한 변수들을 꼭 설정합니다.
  - Lower, upper, diagonal 에 모두 다른 플랏을 그릴 수 있습니다.

```
import seaborn as sns

g = sns.PairGrid(data, hue= …)
g = sns.PairGrid(data, vars=[“var1", “var2"], hue= …)
g = g.map_upper(plt.scatter)
g = g.map_lower(sns.kdeplot)
g = g.map_diag(all_functions(x,y, …))
```