정규세션 2주차 ToBig's 11기 심은선

Regression Analysis

회귀분석

nte nts

Unit	01 머신러닝	
Unit	02 Bias & Variance	
Unit	03 회귀분석	
Unit	04 모델 적합도	
Unit	05 회귀분석 심화	

Unit 01 | 머신러닝

머신러닝이란?

"만약 컴퓨터 프로그램이 특정한 태스크 T를 수행할 때 성능 P 만큼 개선되는 경험 E를 보이면 그 컴퓨터 프로그램은 태스크와 성능 P에 대해 경험 E를 학습했다라고 할 수 있다."

-Tom Mitchell

Ex) 선형회귀, KNN, SVM, Decision Tree, PCA 등



Unit 01 | 머신러닝

머신러닝 알고리즘 종류

1) 지도학습

- 데이터의 레이블(정답)이 주어진 상태에서 컴퓨터를 학습 ex) 회귀분석, 로지스틱회귀, KNN

2) 비지도학습

- 데이터의 레이블이 주어지지 않은 상태에서 컴퓨터를 학습 >>데이터의 숨겨진 특성 파악 ex) Clustering

3) 강화학습

- 에이전트가 주어진 환경(state)에서 행동(action)을 취하고 이로부터 보상(reward)을 얻는데, 보상을 최대화하는 방향으로 학습

레이블? -저번주 EDA과제의 Hammer_price변수! (=종속변수)

road_name	road_bunji1	road_bunji2	Close_date	Close_result	point.y	point.x	Hammer_price
해운대해변 로	30.0	NaN	2018-06-14 00:00:00	배당	35.162717	129.137048	760000000
마린시티2 로	33.0	NaN	2017-03-30 00:00:00	배당	35.156633	129.145068	971889999
모라로110 번길	88.0	NaN	2017-12-13 00:00:00	배당	35.184601	128.996765	93399999
황령대로 319번가길	110.0	NaN	2017-12-27 00:00:00	배당	35.154180	129.089081	256899000
오작로	51.0	NaN	2016-10-04 00:00:00	배당	35.099630	128.998874	158660000

<u>Unit 01 | 머신러닝</u>

머신러닝 알고리즘 종류

머신러닝 잘하는 방법???

No free lunch



EDA, 전처리부터 적절한 모델, 파라미터 등등… 많이 고민해보고 직접 해봐야함!

<유용한 자료>

https://github.com/ExcelsiorCJH/Hands-On-ML/blob/master/Chap02-End_to_End_ML_Project/Chap02-End_to_End_ML_Project.ipynb

https://github.com/KaggleBreak/walkingkaggle

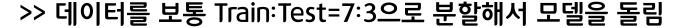
Training and Testing

1) Training data

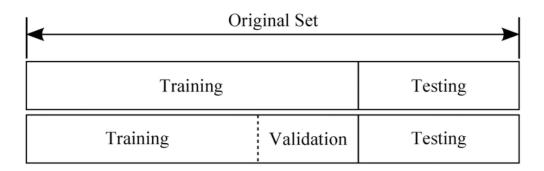
- 모델에 넣어 파라미터를 inference할 때 사용
- 현재, 과거의 경험(지식)

2) Test data

- inference한 모델이 실제 다른 데이터에도 잘 맞는지 평가
- 미래의 들어올 데이터를 imitate
- test data는 training 데이터와 관련 없어야 함

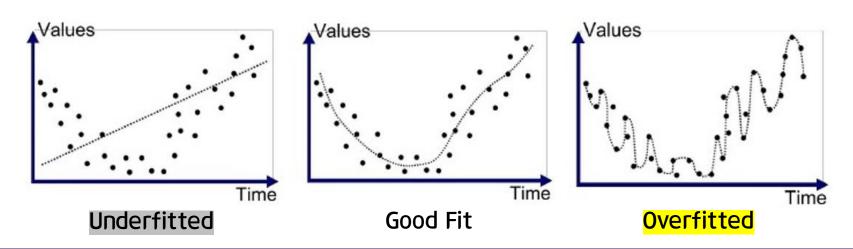


cf) Dev set을 사용할 경우 보통 Train:Dev:Test=6:2:2으로 분할 (Dev(validation) set은 하이퍼파라미터 튜닝 목적)



과대적합(Overfitting)과 과소적합(Underfitting)

- <mark>과대적합</mark>: train 데이터를 매우 잘 설명하나, 새로운 데이터가 들어오면 잘 맞추지 못함 (일반성이 떨어짐)
- <mark>과소적합</mark>: 모델이 단순해서 train 데이터를 완벽하게 맞추지 못하지만, 새로운 데이터도 어느정도 잘 맞춤 (일반화된 모델)



Bias and Variance

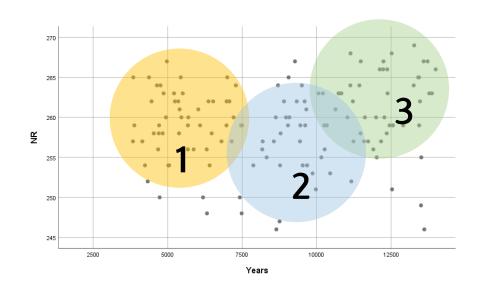
1) Bias

- True function과 모든 데이터셋으로 얻는 머신러닝 function과의 차이 (머신러닝 모델을 사용하기 때문에 필연적으로 발생하는 오차)

2) Variance

모든 데이터셋으로 얻는 ML function과
 수집된 일부 데이터로 얻은 ML function의 차이
 (제한된 데이터로 인해 발생하는 오차)

>>Bias, Variance는 오차이니까 <mark>작으면 좋음!</mark>



Bias and Variance

<모델의 정확도 높임>

: 모델이 True function과 가까워져 Bias <mark>감소</mark>, 주어진 데이터에 과하게 맞추기 때문에 Variance <mark>증가</mark>

<모델의 일반화>

: True function과 멀어져 Bias <mark>증가</mark>, 다른 데이터가 주어져도 비슷하게 맞추기 때문에 Variance <mark>감소</mark>

(과대적합- Bias 작음, Variance 큼 vs. 과소적합- Bias 큼, Variance 작음)

>> Bias와 Variance의 Trade-off 관계

(제한된 데이터로 인해 발생하는 오차)



K-fold Cross validation(교차검증)

- 데이터가 적은 경우에 데이터를 분할하면, 검증용 데이터가 적어서 검증의 신뢰도가 떨어진다.
 - 그렇다고 검증용 데이터를 늘리면 train데이터가 적어져 학습이 제대로 되지 않는다.
- >> 한정된 데이터에서 데이터가 많은 것처럼 흉내냄

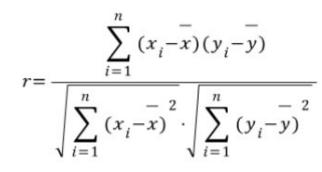
ex)4-fold cross validation



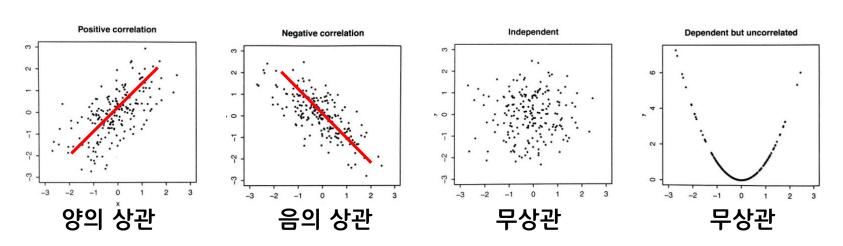
전체 데이터를 4개로 분할해서 3개를 train에 사용하고, 1개로 검증(test). 4개의 모델의 평균을 최종 성능 또는 최종 모델의 하이퍼파라미터로 사용

상관계수

- -두 변수간의 선형관계를 분석(인과관계x)
- (-1) ~ 1의 값을 가진다
- 1에 가까우면 강한 양의 상관관계, 0이면 무상관, -1에 가까우면 강한 음의 상관관계
- 선형관계만 측정할 뿐 다른 관계(2차…)는 알 수 없음



공분산을 두 변수의 표준편차로 나눔



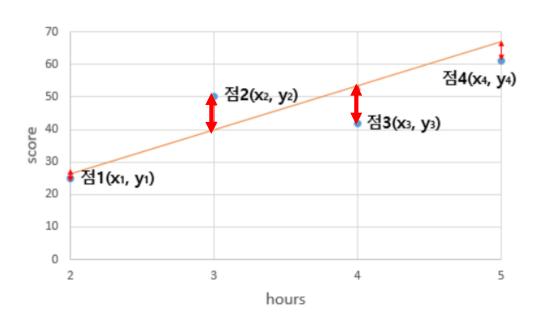
X가 증가할때 y가 증가(감소)하는 선형관계가 아니므로 (2차이지만) 무상관

회귀분석

- 설명변수의 선형결합(1차식)으로 종속변수를 설명하는 분석방법 ex)기온(x)에 따른 빙수판매량(y)
- 설명변수의 개수에 따라 설명변수가 한 개면 단순회귀분석, 두 개 이상이면 다중회귀분석
- 데이터를 회귀모델에 돌리는 것(training)은 회귀계수 $(\beta_0, \beta_1, \beta_2 \cdots)$ 를 찾는 것

$$m{y} = m{eta_0} + m{eta_1} m{x} + m{\varepsilon_i}$$
 $Y = m{\beta_0} + m{\beta_1} m{X_1} + m{\beta_2} m{X_2} + \ldots + m{\beta_n} m{X_n} + m{\varepsilon}$ <단순선형회귀> <다중선형회귀>

최소제곱법(Least squares)



회귀식이 예측한 값과 실제 값이 가까울 수록 좋으니까 그 차이를 최소화하자!

최소제곱법

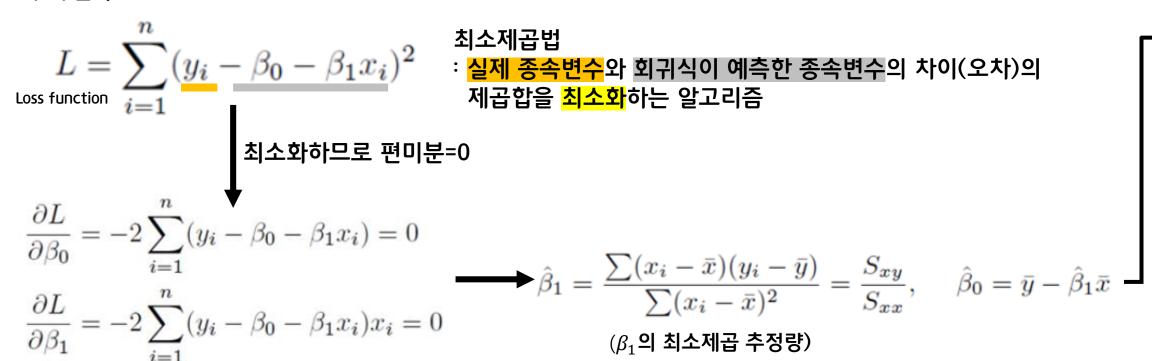
: <mark>실제 종속변수</mark>와 회귀식이 예측한 종속변수의 차이(오차)의 제곱합을 최소화하는 알고리즘

$$L = \sum_{i=1}^n (\underline{y_i} - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$
 Loss function

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

최소제곱법(Least squares)

- 목적함수(loss function) (단순회귀)



$$x_i)x_i = 0$$

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum (x_i - \bar{x})^2} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}, \quad \hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$

최소제곱법(Least squares)

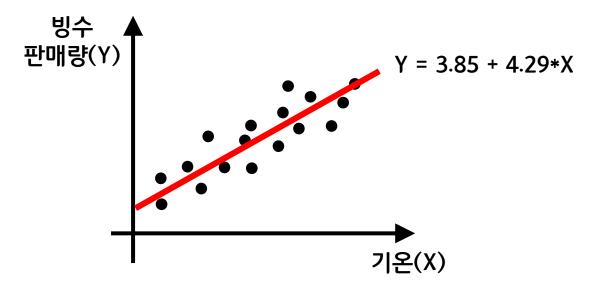
$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$$
<적합된 회귀식>

-예측: Xi에 값을 대입해 종속변수 예측

-해석: $\hat{\beta}_0$ = intercept(절편)

 $\hat{\beta}_1 = x_i$ 가 한 단위 증가할 때 종속변수의 증가(감소)량

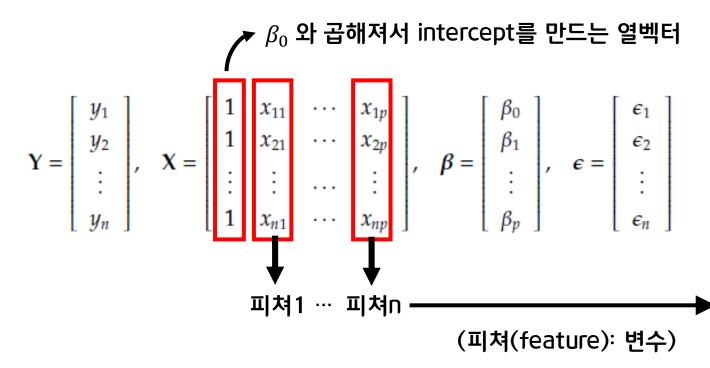
-베타hat: 추정된 회귀계수



빙수판매량 = 3.85 + 4.29*(기온)

기온과 관계없이(기온이 0이어도) 빙수 3.85그릇이 팔리고 기온이 1도 증가하면 빙수 4.29그릇이 더 팔린다

최소제곱법(Least squares)-행렬



	road_name	road_bunji1	road_bunji2	Close_date	Close_result	point.y	point.x
	해운대해변 로	30.0	NaN	2018-06-14 00:00:00	배당	35.162717	129.137048
	마린시티2 로	33.0	NaN	2017-03-30 00:00:00	배당	35.156633	129.145068
>	모라로110 번길	88.0	NaN	2017-12-13 00:00:00	배당	35.184601	128.996765
	황령대로 319번가길	110.0	NaN	2017-12-27 00:00:00	배당	35.154180	129.089081
	오작로	51.0	NaN	2016-10-04 00:00:00	배당	35.099630	128.998874

최소제곱법(Least squares)-행렬

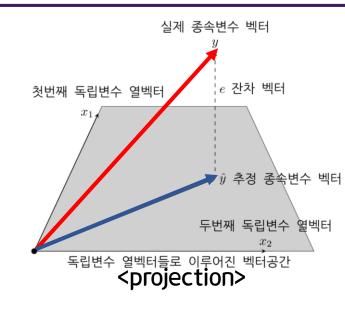
Loss =
$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1} - \dots - \beta_p x_{ip})^2$$

$$= (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}).$$

최소화하므로 편미분=0

$$\Rightarrow$$
 β 에 관해 미분 $\frac{\partial S}{\partial \beta} = -2X'Y + 2X'X\beta = 0$

- $XX\hat{\beta}=XY$
- $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$



추정된 회귀계수를 행렬을 통해 다음과 같이 표현할 수도 있음

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^{0}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}.$$

적합된 회귀식:
$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \cdots + \hat{\beta}_p x_{ip}$$
,

회귀분석 결과

_____ Dep. Variable: median house value R-squared: 0.677 Model: Adj. R-squared: 0.676 F-statistic: Method: Least Squares 2669. Date: Tue, 05 Jun 2018 Prob (F-statistic): 0.00

OLS Regression Results

Time: 14:52:54 Log-Likelihood: -2.5564e+05
No. Observations: 20433 AIC: 5.113e+05
Df Residuals: 20416 BIC: 5.114e+05

Df Model: 16
Covariance Type: nonrobust

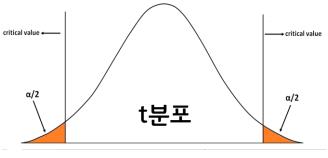
31							
				5, [4]			
	coef	std err	t	P> t	[0.025	0.975]	cr
Intercept	-2.483e+06	8.79e+04	-28.267	0.000	-2.66e+06	-2.31e+06	
ocean_proximity[T.INLAND]	-3.19e+04	1687.358	-18.906	0.000	-3.52e+04	-2.86e+04	
ocean_proximity[T.ISLAND]	1.269e+05	2.94e+04	4.314	0.000	6.92e+04	1.85e+05	
ocean_proximity[T.NEAR BAY]	-7677.1895	1833.345	-4.188	0.000	-1.13e+04	-4083.687	
ocean_proximity[T.NEAR OCEAN]	-721.1056	1512.901	-0.477	0.634	-3686.513	2244.302	
longitude	-2.915e+04	992.666	-29.365	0.000	-3.11e+04	-2.72e+04	
latitude	-2.847e+04	984.297	-28.924	0.000	-3.04e+04	-2.65e+04	
housing_median_age	1140.3596	42.411	26.888	0.000	1057.231	1223.488	
total_rooms	7416.5613	7599.836	0.976	0.329	-7479.726	2.23e+04	
total_bedrooms	-1.3510	7.521	-0.180	0.857	-16.092	13.390	
population	-5958.6495	7421.124	-0.803	0.422	-2.05e+04	8587.348	
households	12.2682	8.324	1.474	0.141	-4.048	28.585	
median_income	3.404e+04	582.505	58.445	0.000	3.29e+04	3.52e+04	
income_cat	1.42e+04	1063.823	13.344	0.000	1.21e+04	1.63e+04	
rooms_per_household	4.526e+04	9363.233	4.834	0.000	2.69e+04	6.36e+04	
bedrooms per room	3.922e+05	1.63e+04	24.114	0.000	3.6e+05	4.24e+05	
population_per_household	-1.21e+05	1.05e+04	-11.537	0.000	-1.42e+05	-1e+05	

_____ Omnibus: 1.050 4084.560 Durbin-Watson: Prob(Omnibus): 0.000 Jarque-Bera (JB): 13229,172 Skew: Prob(JB): 0.00 Kurtosis: 6.380 Cond. No. 1.78e + 05

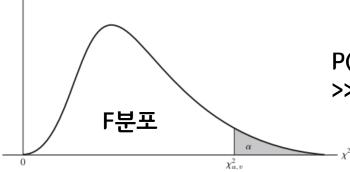
coef: 추정한 회귀계수 값

P>ItI: 추정된 회귀계수의 p값(유의확률, 양측)

P(F통계량): 회귀 모형 전체의 유의성 판단(단측)



p값 > 유의수준(보통 0.05)
>>통계적으로 의미없는 추정값
>>해당 변수 삭제/다른 조치
(p값이 클수록 안좋음)



P(F통계량) > 유의수준 >>통계적으로 의미없는 모형

변수선택법

- 1) 후진제거법(backward elimination)
 - : 독립변수 모두 사용한 모델에서 제거해도 큰 변화가 없는 독립변수를 하나씩 제거
- 2) 전진선택법(forward selection)
 - : 독립변수를 하나도 넣지 않은 모델에서 중요한 독립변수를 하나씩 추가
- >>두 방법은 한번 빠진(선택한) 변수를 다시 추가(제거)할 수 없음
- 3) 단계적선택법(stepwise regression)
 - : 후진제거+전진선택
 - (후진제거를 하면서 이미 빠진 변수를 다시 넣을 수도 있고,
 - 전진선택을 하면서 기존에 포함된 변수를 제거할 수도 있음)

변수선택법

- 변수선택법의 기준
- 1) AIC, BIC

$$AIC = rac{1}{n\hat{\sigma^2}}(RSS + 2d\hat{\sigma^2}) \hspace{0.5cm} BIC = rac{1}{n\hat{\sigma^2}}(RSS + log(n)d\hat{\sigma^2})$$

모델의 <mark>에러(RSS)가 포함된 지표(AIC, BIC가 <mark>작을수록 좋음</mark>) 설명변수의 개수가 증가하면 AIC(BIC)의 값이 커지는 패널티를 준다. 설명변수를 추가했는데 AIC, BIC값이 증가하지 않으면 좋은 변수(변수의 설명력>패널티)</mark>

- 2) R-square
- cf) Mallow-Cp, t-test, F검정

모델 적합도

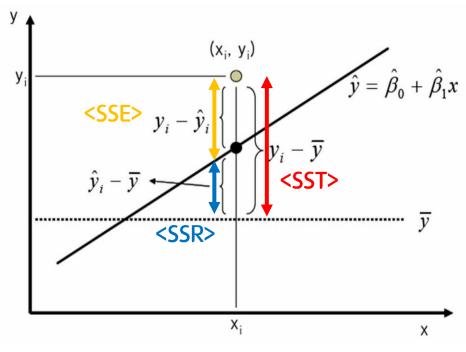
- 제곱합 분해

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

SST: 총제곱합

SSR: 회귀제곱합 (전체 제곱합 중 <mark>회귀식으로 설명</mark>할 수 있는 부분)

SSE: 잔차제곱합 (전체 제곱합 중 회귀식으로 설명하지 못하는 부분)



>>모델이 데이터를 잘 설명할수록 SSR증가(=SSE 감소)

모델 적합도

- R-square(=결정계수, 설명력)

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST}$$

Adjusted R² = 1 -
$$\frac{SS_{residuals}}{SS_{total}} (n - K)$$

1) R-square

전체 제곱합중 회귀식으로 설명가능한 부분 모델이 좋을수록(데이터를 잘 설명할수록) 결정계수 증가 >><mark>결정계수가 클수록 좋음</mark>

하지만 설명변수를 추가하면 SSR이 항상 커져, 결정계수가 항상 증가 따라서 설명변수의 개수가 다른 모델의 결정계수 단순 비교불가

2)Ajdusted R-square(조정된 결정계수)

설명변수의 개수를 고려하는 R-square 설명변수가 증가하면 값이 감소하도록 패널티를 줌 >>설명변수를 추가했는데 adjusted R-square가 감소하지 않는다면, 패널티를 감수할만큼 설명을 잘하는 변수

모델 적합도

MSE(mean squared error)

	자유도 (Degree of Freedo m)	제곱합 (SS, Sum of Square)	제곱평균 (MS, Mean of Squar e)	F-통계량 (F-Value)
회귀 (Regression) <ssr></ssr>	k 설명변수 k개	회귀제곱합 (SSR) $\sum (\hat{y} - \overline{y})^2$	회귀제곱평균 (MSR) SSR / k	F비 MSR / MSE
잔차 (Error) <sse></sse>	n - k - 1	잔차제곱합 (SSE) $\sum (y - \hat{y})^2$	잔차제곱평균 (MSE) SSE / (n - k - 1)	
총 (Total) <sst></sst>	n - 1	총제곱합 (SST) SSR + SSE	총제곱평균 (MST) SST / (n - 1)	

SSE(잔차제곱합)를 그 자유도로 나눈 값. 단순하게 생각하면 평균적인 error이다.

R-square는 회귀식이 설명하는 부분이고, MSE는 회귀식이 설명하지 못하는 부분!

>>MSE가 <mark>작을수록 좋음</mark>

다중공선성(Multicollinearity)

독립변수간 상관관계가 강해 독립변수의 일부를 다른 독립변수의 조합으로 표현가능한 것.

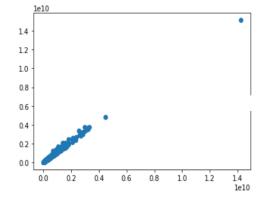
상관계수, scatter plot, VIF 등으로 확인

다중공선성 제거 방법: 변수 삭제(선택), PCA, 정규화 등

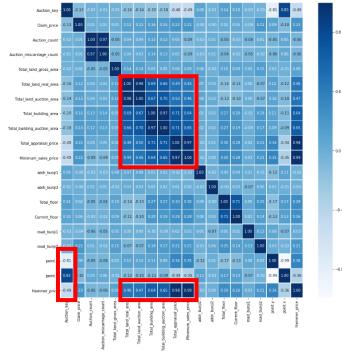
VIF(variance inflation factor)

: i번째 독립변수를 다른 독립변수들로 회귀한 성능 다른 독립변수들과 <mark>상관관계가 강할수록</mark> VIF값이 <mark>큼</mark> >>VIF값이 큰 변수 제거(10 이상이면 다중공선성 의심)

$$ext{VIF}_i = rac{\sigma^2}{(n-1) ext{Var}[X_i]} \cdot rac{1}{1-R_i^2}.$$



ex) $X_2 = 2X_1$, $X_3 = X_1 + X_2$



Cf)회귀분석의 가정

1) 선형성

: X와 Y가 베타에 대한 선형관계이다.

2) 독립성

: **설명변수끼리 독립이다**. (다중공선성이 강하면 독립성 위배)

3) 등분산성

: 오차항이 동일한 분산을 가진다.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i$$
$$Var(\epsilon_i) = \sigma^2 + \dots$$

4) 정규성

: 오차항이 정규분포를 따른다. $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$

Unit 05 | 회귀분석 심화

회귀분석 심화

다중공선성을 제거하는 이유??

- 설명변수간 독립적이지 않으면 회귀계수의 추정값이 존재하지 않을 수도 있고, 또는 회귀계수의 추정값이 매우매우 커짐! (<mark>불안정한 추정</mark>)

$$\hat{m{\beta}} = (\mathbf{X'X})^{-1}\mathbf{X'Y}.$$
 설명변수끼리 완벽한 선형관계가 존재하면 이부분이 Full rank가 아니여서 역행렬 존재 $\mathbf{X'Y}$ 완벽한 선형관계가 아니더라도 강한 다중공선성이 존재하면 이 부분이 작아서 역행렬을 취하면 값이 매우 커짐

>>따라서 회귀계수를 안정화 시켜야함

Unit 05 | 회귀분석 심화

Regularization(정규화)

1) 정규화

단순한 모델을 사용하거나, 복잡한 모델을 현재 train data에 둔감하게 만들어(regularization) overfitting을 피할 수 있음. 정규화를 하면 현재 train 셋의 accuracy는 감소하지만, 잠재적인으로 test 셋의 accuracy를 증가시킴 (Variance 감소, Bias 증가)

2) Ridge regularization(L2 regularization)

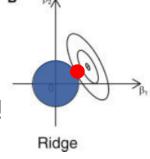
$$E(w) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N} (train_n - g(x_n, w))^2 + \frac{\lambda}{2} ||w||^2$$
 기존 Loss 식 뒤에 회귀계수 크기에 대한 제약조건 term이 붙은 새로운 Loss 새로운 Loss를 최소화시킴(최소제곱법)

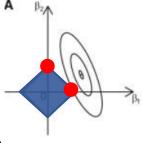
3) Lasso regularization(L1 regularization)

$$E(w) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N} (train_n - g(x_n, w))^2 + \lambda |w|$$

(회귀계수 열벡터)

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix},$$





(Lasso 방법은 좌표축의 한 변수만 선택되어 변수선택 방법으로도 사용)

Unit 05 | 회귀분석 심화

Regularization(정규화)

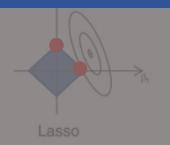
<Ridge, Lasso>

1) 회귀 계수의 크기에 제약을 줘서 회귀계수를 <mark>안정화</mark>
2) Regularization으로 overfitting을 방지

of casso regularization(Erregularization)

$$E(w) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N} (train_n - g(x_n, w))^2 + \lambda |w|$$

Lasso 방법은 좌표축의 한 변수만 선택되어 변수선택에도 사용됨



과제

<과제1>

- 실습 코드에서 과제 부분을 채우고, 데이터에 추가해서 모델돌리기

<과제2>

- 추정된 회귀계수를 구하는 함수 구현하기 (행렬곱을 이용해서 간단하게, numpy사용, 5줄 이하) input: data_x(독립변수 행렬 데이터), data_y(종속변수 벡터 데이터) output: 추정된 회귀계수(벡터)

<과제3>

1주차 Auction master 데이터로 회귀분석 (아래 목록들을 포함해야함)

- 자유롭게 EDA, 전처리 (저번주 과제 참고o)
- 변수 제거, 선택 시 이유 설명
- 다중공선성 확인, 처리
- fit된 모델의 평가(R-square, MSE 등등) (선택: 정규화, 변수선택법 등등)

Q&A

들어주셔서 감사합니다.

Reference

투빅스 11기 정규세션 회귀분석(박규리님) 투빅스 3기 정규세션 회귀분석(김상진님) 회귀분석 강의(유규상 교수님) 인공지능 및 기계학습 개론(문일철 교수님)

http://solarisailab.com/archives/1785

https://circle.haus/t/chap-4-2/103

https://datascienceschool.net/view-notebook/266d699d748847b3a3aa7b9805b846ae/

https://m.blog.naver.com/PostView.nhn?blogId=mykepzzang&logNo=220838509912&proxyReferer=https%3A%2F%2Fwww.google.com%2F

https://wikidocs.net/21670

https://datascienceschool.net/view-notebook/e6ef730b7a3b4be7be4ff028d39d67f7/

https://ko.wikipedia.org/wiki/%EC%A0%9C%EA%B3%B1%ED%95%A9

https://kmrho1103.tistory.com/entry/%EC%A0%9C2%EC%9E%A5-%EC%A4%91%ED%9A%8C%EA%B7%80%EB%AA%A8%ED%98%95-%EC%A4%91%ED%9A%8C%EA%B7%80%EB%AA%A8%ED%98%95-

https://cinema4dr12.tistory.com/1275