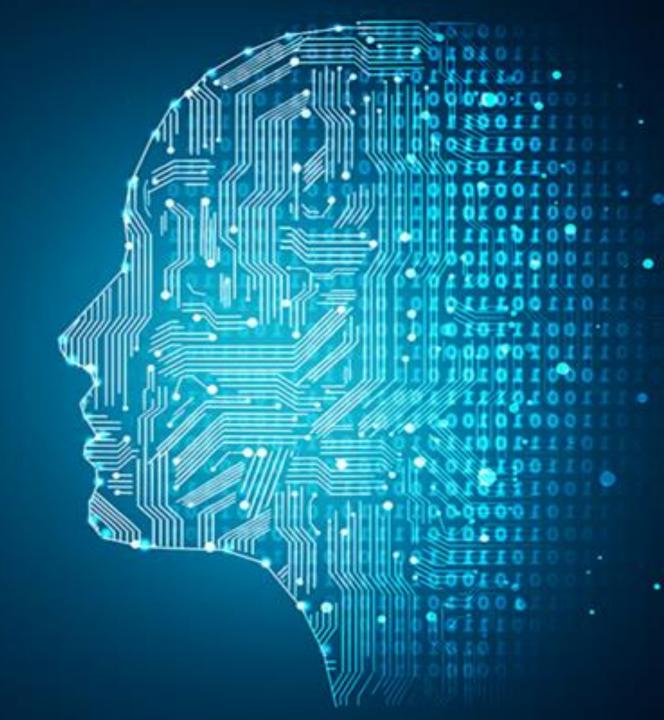
## 머신러닝 강의자료

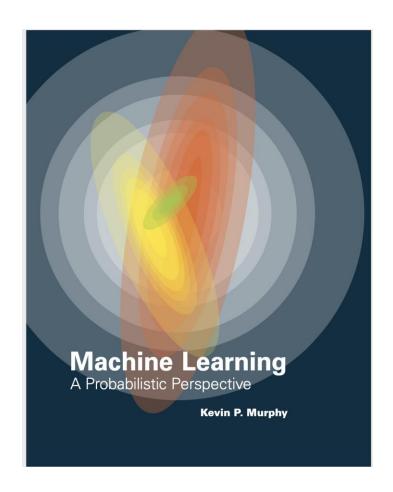
4강 – 회귀분석

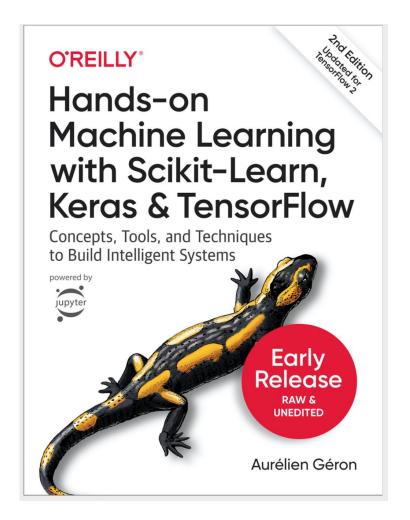
닥터윌컨설팅 딥러닝 R&D 책임연구원 고려대학교 인공지능대학원 박사과정

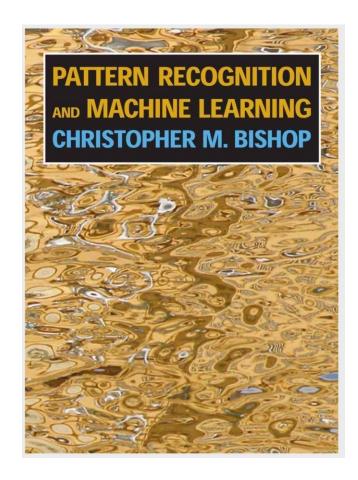
류회성(Hoe Sung Ryu)



#### 들어가기 앞서

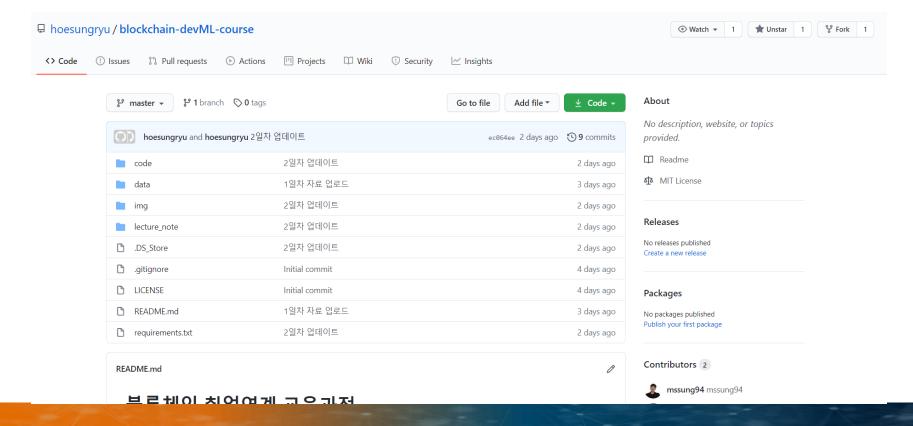






## 들어가기 앞서

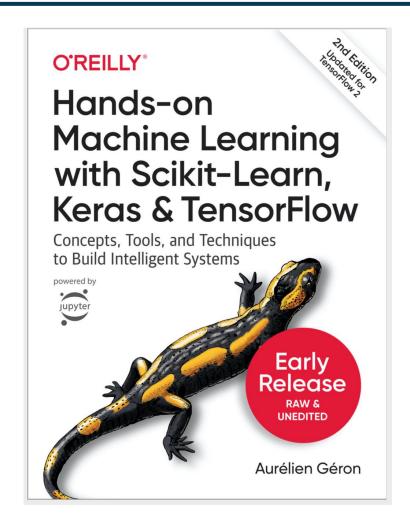
- GitHub
  - <a href="https://github.com/hoesungryu/blockchain-devML-course">https://github.com/hoesungryu/blockchain-devML-course</a>



#### 강의내용

#### ● 오늘 배울 내용

- 선형 회귀
- 경사 하강법
- 다항 회귀
- 학습 곡선
- 규제가 있는 선형 모델
- 로지스틱 회귀



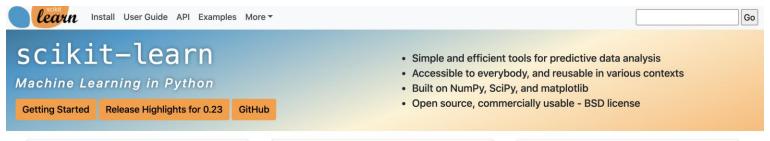
## [지난시간복습]

#### 지도 학습

- 훈련 데이터에 정답이 있음
- 전형적인 지도 학습 작업
  - 분류(Classification)
  - 회귀(Regression)
- 대표적인 지도 학습 알고리즘
  - k-최근접 이웃(k-Nearest Neighbors)
  - 선형 회귀(Linear Regression)
  - 로지스틱 회귀(Logistic Regression)
  - 서포트 벡터 머신(Support Vector Machine)
  - 결정 트리(Decision Tree)과 랜덤 포레스트(Random Forest)
  - 신경망(Neural Network)



#### 머신러닝 파이프라인



# Classification Identifying which category an object belongs to. Applications: Spam detection, image recognition. Algorithms: SVM, nearest neighbors, random forest, and more...

#### **Dimensionality reduction**

Reducing the number of random variables to consider.

Applications: Visualization, Increased efficiency

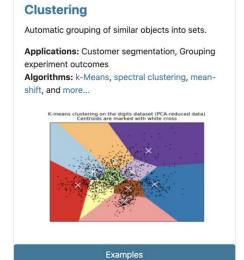
#### 

#### Model selection

Comparing, validating and choosing parameters and models.

Examples

Applications: Improved accuracy via parameter



#### **Preprocessing**

Feature extraction and normalization.

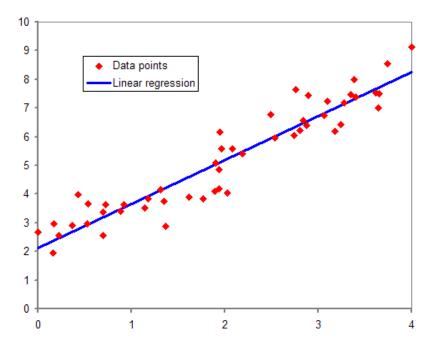
**Applications:** Transforming input data such as text for use with machine learning algorithms.

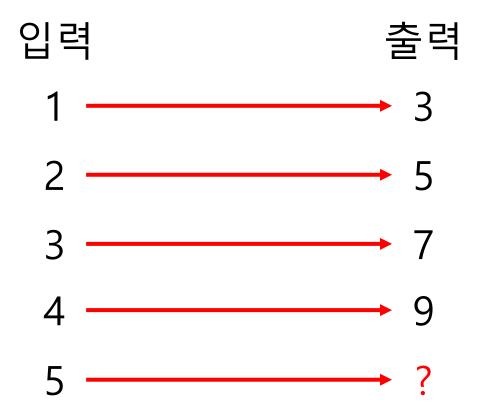
## 머신러닝 파이프라인

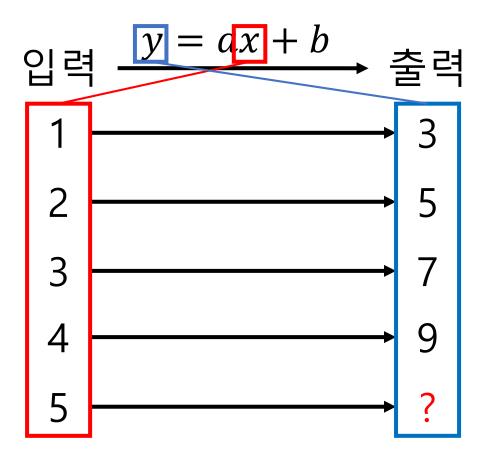
분류	모듈명	설명		
예제 데이터	sklearn.datasets	Scikit-learn에 내장된 예제 데이터셋		
피쳐 처리	sklearn.preprocessing	데이터 전처리에 필요한 다양한 기능 제공(인코딩, 정규화, 스케일링 등)		
	sklearn.feature_selection	알고리즘에 영향을 미치는 특성을 우선순위대로 선택 작업을 수행하는 다양 한 기능 제공		
	sklearn.feature_extraction	텍스트 데이터나 이미지 데이터의 벡터화된 피쳐를 추출하는데 사용됨.		
	sklearn.decomposition	차원 축소와 관련된 알고리즘 지원 (PCA, NMF 등)		
데이터 분리, 검증 & 파라미터 튜닝	sklearn.model_selection	교차 검증을 위한 훈련용/테스트용 데이터 분리, GridSearch 기능 등 제공		
평가	sklearn.metrics	각종 머신 러닝 알고리즘(회귀, 분류, 클러스터링 등)의 다양한 성능 측정 방법 제공 (accuracy, precision, recall, ROC-AUC 곡선 등)		
머신 러닝 알고리즘	sklearn.ensemble	앙상블 알고리즘 제공(Random Forest, AdaBoost, Gradient boosting, 등)		
	sklearn.linear_model	선형회귀, 릿지, 라쏘 및 로지스틱 회귀 등 회기ㅜ 관련 알고리즘 지원		
	sklearn.naïve_bayes	나이브 베이즈 알고리즘 제공. 가우시안 NB, 다항 분포 NB 등		
	sklearn.neighbors	KNN 알고리즘 제공		
	sklearn.svm	SVM 알고리즘 제공		
	sklearn.tree	의사 결정 트리 알고리즘 제공		
	sklearn.cluster	클러스터링 알고리즘 제공 (k-means, DBScan 등)		
유틸리티 (지원 기 능)	sklearn.pipeline	피쳐 처리 등의 변환과 ML 알고리즘 학습, 예측 등을 함께 묶어서 실행할 수 있는 유틸리티 제공		

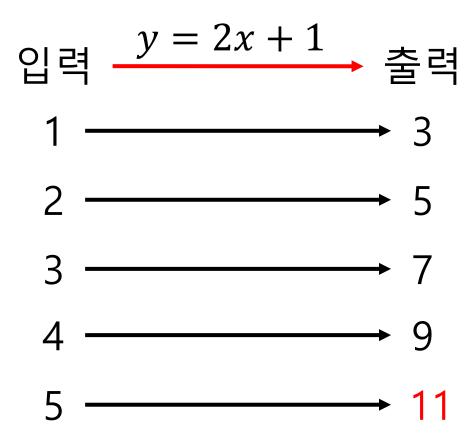


- 종속 변수 y와 한 개 이상의 독립변수 x와의 상관관계를 모델링 하는 분석기법
- 변수들 간의 상관관계를 파악하여, 어떤 특정 변수의 값을
   다른 변수값을 이용하여 설명/ 예측하는 기법

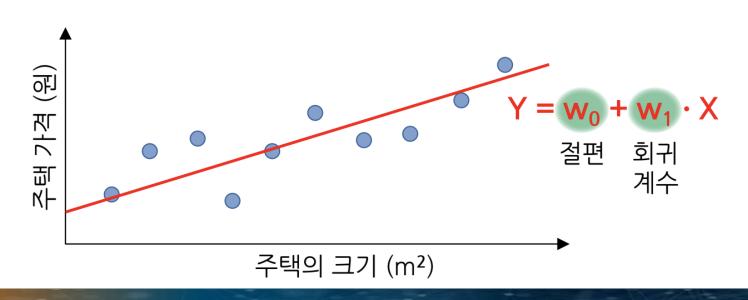




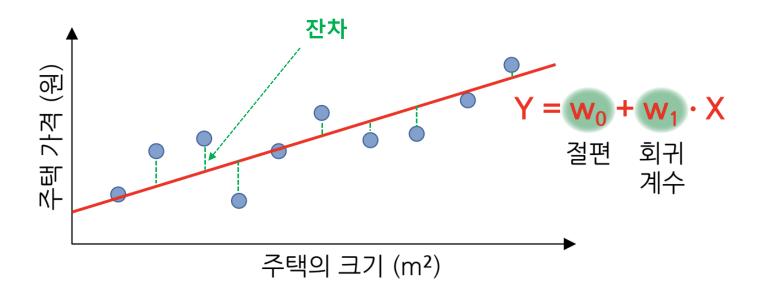




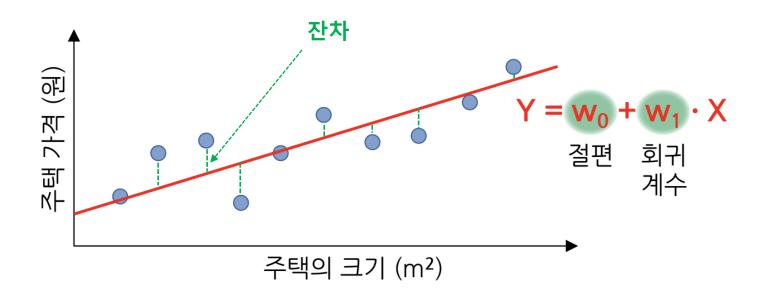
- 독립변수X 와 종속변수 Y의 관계를  $Y = w_0 + w_1 X$  형태의 1차 함수식으로 표현 가능
- 회귀계수(Coefficient)
  - 독립변수가 종속변수에 끼치는 영향력의 정도로서 직선의 기울기를 뜻한다.
- 절편(intercept)
  - 독립변수가 0일 때의 상수 값



- 독립변수X 와 종속변수 Y의 관계( $Y = w_0 + w_1X$ )를 어떻게 찾을 수 있을까?
  - 잔차(Residual) 의 총 합이 가장 작은 1차 함수식을 찾자



- 잔차(Residual)의 총합을 회귀분석에서 손실함수(Loss function)라 한다.
- 최적의 회귀 모형을 만든다는 것은 이러한 손실함수가 최소가 되는 회귀계수를 구한다는 의미이다.



● 회귀 분석에 대한 주요 평가 지표는 다음과 같다.

평가 지표	의미	수식	모듈
MAE (Mean Absolute Error)	실제값과 예측값 차이의 절대값들의 평균	$\sum  y - \hat{y} $	sklearn.metric 에서 mean_absolute_error
MSE (Mean Squared Error)	실제값과 예측값 차이의 제곱의 평균	$\sum (y - \hat{y})^2$	sklearn.metric 에서 mean_squared_error
RMSE (Root MSE)	MSE의 제곱근 값	$\sqrt{MSE}$	np.sqrt(MSE)
$R^2$	결정 계수 실제값의 분산대비 예측값의 분산의 비율	예측값 분산 실제값 분산	sklearn.metric 에서 r2_score

- <u>결정계수(Coefficient of Determination) 란?</u>
  - 회귀식이 얼마나 정확한지 나타내는 지표
  - 변수 X, Y에 대하여 각각의 크기(단위)에 영향을 받지 않도록 단위를 보정한 값

$$R^2 = rac{\text{예측값 분산}}{\text{실제값 분산}} = rac{\Sigma(\hat{y}-m)^2}{\Sigma(m-y)^2}$$
 (이 때,  $\hat{y}$  는 예측값,  $y$ 는 실제값,  $m$  평균)

- 결정 계수의 값은  $0 \le R^2 \le 1$  이며,

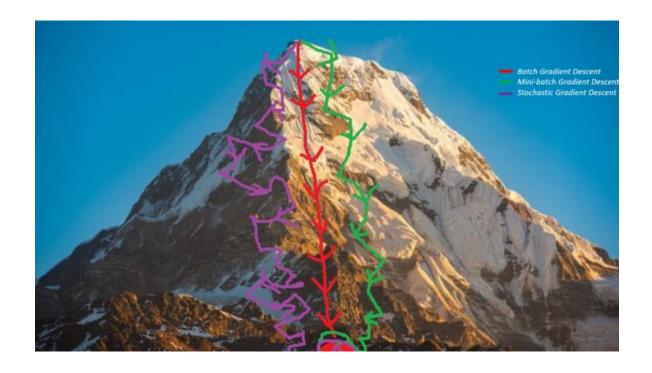
1 에 가까울수록 설명력이 강하고, 0 에 가까울수록 설명력이 약하다.

일반적으로 결정계쑤의 값이 0.65 이상 이면 설명력이 있다고 판단한다.



# [경사하강법] 20 Copyright (C) Hoe Sung Ryu all rights reserved

- 주어진 문제의 비용함수(Cost function)의 결과 값을 최소화 하도록 반복하여 매개변수를 조정해 가는 최적화(optimization) 기법
  - 늦은 밤 산 속에서 길을 잃었다면, 매 위치에서 가장 가파른 경사를 따라서 아래로 내려가는 것이 좋다.



#### ● 기본 아이디어

- 비용 함수를 최소화하기 위해 여러 번 반복해서 파라미터를 조정해 나가자.
- 변수  $\theta$  에 대하여 경사(gradient)를 계산하여 비용 함수의 값이 감소되는 방향으로 진행

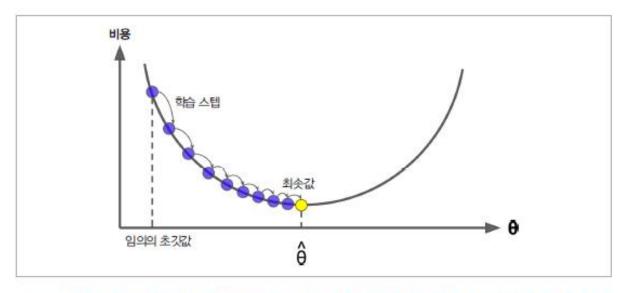


그림 4-3 이 경사 하강법 그림에서 모델 파라미터가 무작위하게 초기화된 후 반복적으로 수정되어 비용 함수를 최소화합니다. 학습 스텝 크기는 비용 함수의 기울기에 비례합니다. 따라서 파라미터가 최솟값에 가까워질수록 스텝 크기가 점 진적으로 줄어듭니다.

#### ● 학습률

- 스텝 사이즈
- 얼마만큼의 크기로 학습시킬건지

#### • 학습률이 너무 작을 때

- 수렴하기 위해서 반복을 많이 진행해야 하므로 시간이 오래 걸림

#### • 학습률이 너무 클 때

- 수렴하지 못하고 더 큰 값으로 발산하게 되므로 학습이 되지 않음

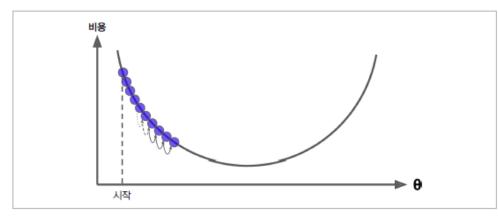


그림 4-4 학습률이 너무 작을 때

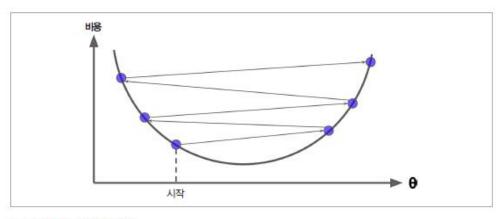


그림 4-5 학습률이 너무 클 때

#### ● 경사 하강법의 문제점

- 무작위 초기화 때문에 전역 최솟값이 아닌 지역 최솟값으로 수렴
- 평탄한 지역을 지나기 위해 시간이 오래 걸리고 일찍 멈추게 됨

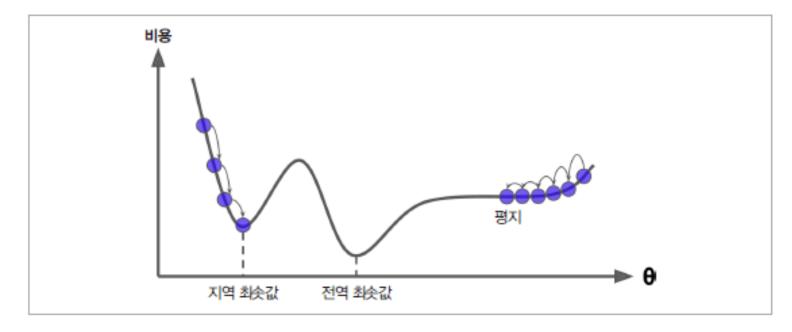


그림 4-6 경사 하강법의 문제점

#### ● 3가지 종류의 경사 하강법

- 배치 경사 하강법
  - 매 경사 하강법 스텁에서 전체 훈련 세트에 대해서 그레디언트를 계산
  - 전체 훈련 세트를 사용하기 때문에 느림
- 확률적 경사 하강법
  - 매 반복마다 딱 하나의 샘플만으로 그레디언트를 계산하여 업데이트함
  - 학습이 매우 불안정하게 됨
- 미니배치 경사 하강법
  - 위 두가지 방법의 단점을 보완
  - 적당한 사이즈만큼 샘플을 가져와서 그레디언트를 업데이트

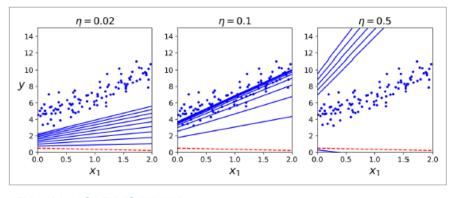


그림 4-8 여러 가지 학습률에 대한 경사 하강법

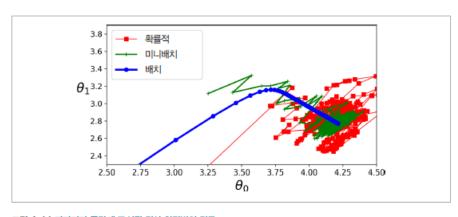


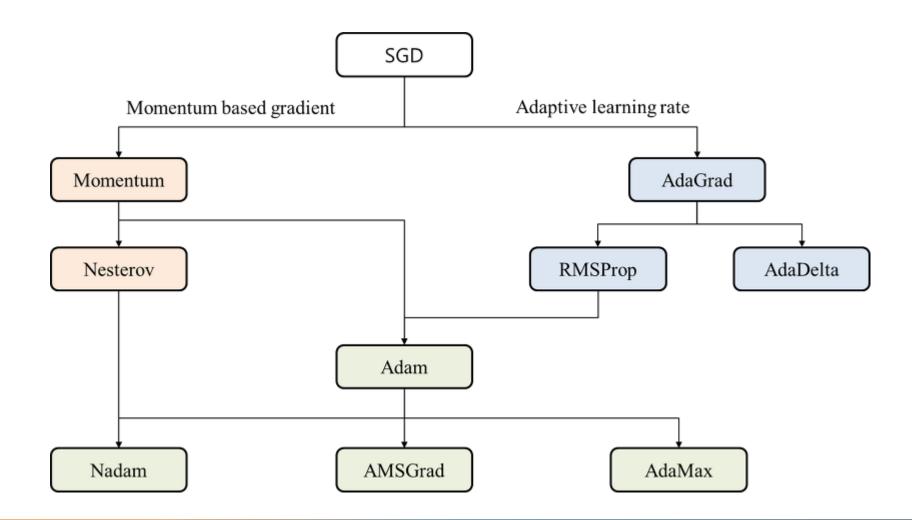
그림 4-11 파라미터 공간에 표시된 경사 하강법의 경토

● 선형 회귀를 사용했을 때 알고리즘 비교

표 4-1 선형 회귀를 사용한 알고리즘 비교20

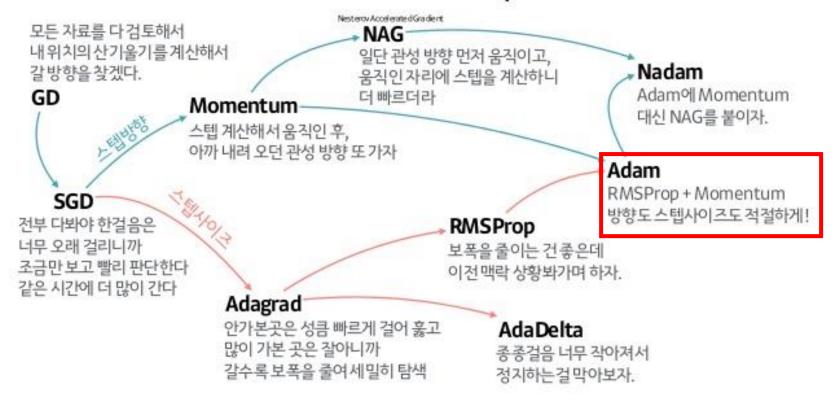
알고리즘	m이클때	외부 메모리 학습 지원	끼이클때	하이퍼 파라미터 수	스케일 조정 필요	사이킷런
정규방정식	빠름	No	느림	0	No	N/A
SVD	빠름	No	느림	0	No	LinearRegression
배치 경사 하강법	느림	No	빠름	2	Yes	SGDRegressor
확률적 경사 하강법	뻐름	Yes	빠름	≥2	Yes	SGDRegressor
미니배치 경사 하강법	빠름	Yes	빠름	≥2	Yes	SGDRegressor

## 그 외 최적화 방법들



#### 그 외 최적화 방법들

#### 산 내려오는 작은 오솔길 잘찾기(Optimizer)의 발달 계보



#### 선형회귀 수학적 이해

● 선형회귀식 정의하기

$$\hat{y} = b + wX$$

● 제곱 오차 정의하기

$$Residual = (y - \hat{y})^2$$

● 가중치에 대하여 제곱 오차 미분하기

$$\frac{\partial \text{Residual}}{\partial w} = \frac{\partial (y - \hat{y})^2}{\partial w}$$
$$= 2(y - \hat{y})(-\frac{\partial}{\partial w}\hat{y})$$
$$= 2(y - \hat{y})(-x)$$

• 가중치 업데이트

$$w_{n+1} = w_n - \frac{\partial \text{Residual}}{\partial w}$$
  
$$w_{n+1} = w_n + 2(y - \hat{y})(x)$$

#### 선형회귀 수학적 이해

● 절편에 대하여 제곱오차 미분하기

$$\frac{\partial \text{Residual}}{\partial b} = \frac{\partial (y - \hat{y})^2}{\partial b}$$
$$= 2(y - \hat{y})(-\frac{\partial}{\partial b}\hat{y})$$
$$= 2(y - \hat{y})(-1)$$

● 절편 업데이트

$$b_{n+1} = b_n - \frac{\partial \text{Residual}}{\partial b}$$
$$b_{n+1} = b_n + 2(y - \hat{y})$$

#### 선형회귀 수학적 이해

● 파이썬 코딩

```
class LinearRegression:
   def init (self):
       self.w = 1.0
                        # initailize weight
       self.b = 1.0
                        # initailize intecept
       self.lr = 0.01
   def forpass(self, x):
       y_hat = x * self.w + self.b
                                      \# calcuate y = wx + b
       return y hat
   def backprop(self, x, err):
                                  # cacluate gradient of weight
       w_grad =(-1) *2* x * err
       b grad = (-1)*2*1*err
                                  # cacluate gradient of intecept
       return w grad, b grad
   def fit(self, x, y, epochs=5):
       for i in range(epochs):
                                      # repeat depend on epoch
           for x i, y i in zip(x, y): # repeat for all samples
               y hat = self.forpass(x i) # forward
               err = (y i - y hat ) # backpropagation*
               w grad, b grad = self.backprop(x i, err) # calculate backpropagation
               # update
               self.w -= self.lr*w grad
                                                # weight update
               self.b -= self.lr*b grad
                                                # intecept update
```



## [다항선형회귀] 33 Copyright (C) Hoe Sung Ryu all rights reserved

### 다항 회귀

- 간단한 2차방정식으로 비선형 데이터 생성
  - 선형 회귀만으로는 근사가 안됨

```
m = 100
X = 6 * np.random.rand(m, 1) - 3
y = 0.5 * X**2 + X + 2 + np.random.randn(m, 1)
```

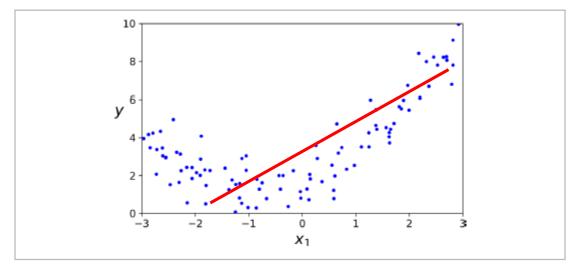


그림 4-12 노이즈가 포함된 비선형 데이터셋

### 다항 회귀

- 간단한 2차방정식으로 비선형 데이터 생성
  - 특성이 여러 개일 때는 다항 회귀를 사용하자

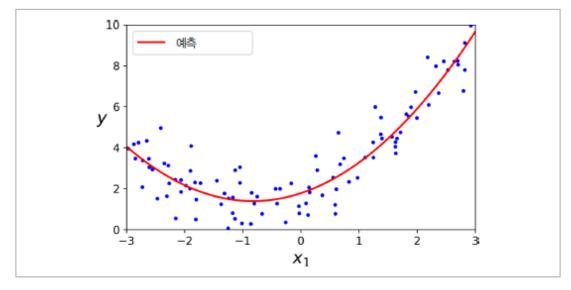


그림 4-13 다항 회귀 모델의 예측



# 다중 선형 회귀

- 단순선형 회귀에서 독립변수의 개수만 늘어난 선형회귀이다.
- 따라서, 단순선형와 동일한 절차를 이용하여 분석을 수행 할 수 있다.
- 단, 변수의 수가 많아지므로 이로 인해 발생할 수 있는 경우들을 고려하여야 한다.

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_1 + \hat{\beta}_2 X_2 + \dots \hat{\beta}_n X_n$$

# 다중 선형 회귀

#### ● 독립변수들의 최초 선택

- 회귀분석의 목적은 종속변수를 가장 잘 설명하는 독립변수들의 특징을 찾아내어 예측하는 것이다.
- 즉, 독립변수 일부를 임의로 누락시키면 해당 모형의 설명력이 낮아지는 문제를 불러올 수 있다.
- 따라서 통계적으로 회귀분석을 수행 하는 경우 '<mark>다중공선성</mark>'을 고려하여 변수를 설정한다.



# 다중 선형 회귀

#### 다중 공선성(Multi-collinearity)

- 독립변수들 간에 강한 상관관계가 나타나는 것을 다중 공선성 이라 한다.
- 독립변수들 사이의 상관계수 R 이 높으면 회귀모형이 유의미하다고 보기 어렵다.
- 다중공선성문제를 피하려면 상관계수가 높은 변수들을 삭제하거나, 차원축소 기법을 이용하여 의존적인 성분을 제거한 뒤 회귀 분석을 수행해야 한다.

# [학습곡선] Copyright (C) Hoe Sung Ryu all rights reserved 40

# 학습 곡선

- 일반화가 잘 되고 있는지 확인하기 위해선?
  - 학습 세트와 훈련 세트를 나누고
  - 학습 곡선을 살펴보자

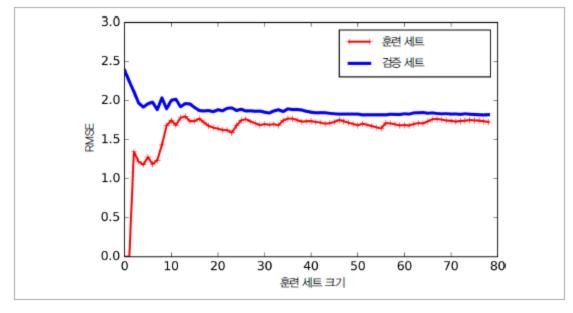


그림 4-15 학습 곡선

# 학습 곡선

#### ● 모델이 너무 복잡하다면

- 훈련 데이터의 오차는 작을지 몰라도
- 이렇게 오버 피팅이 발생함을 확인할 수 있음

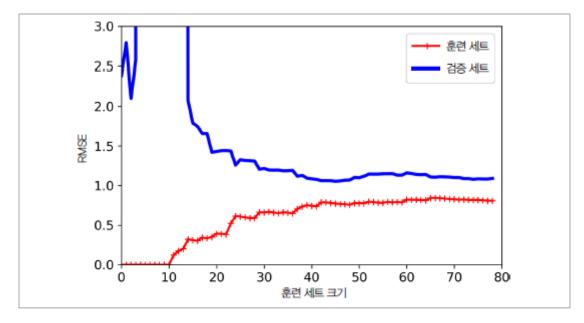


그림 4-16 10차 다항 회귀의 학습 곡선

# 편향 / 분산 트레이드오프

#### 편향

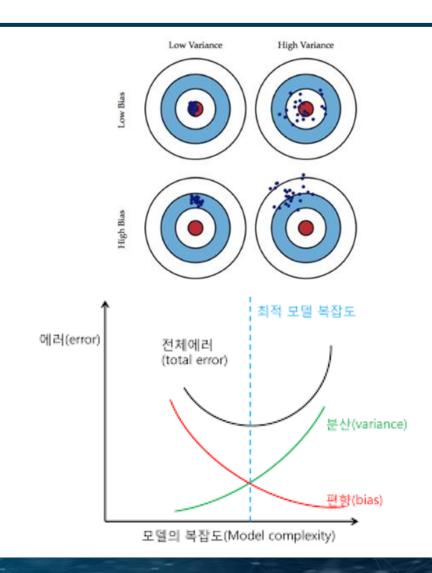
- 일반화 오차 중에서 편향은 잘못된 가정으로 인한 것

#### ●분산

- 훈련 데이터에 있는 작은 변동에 모델이 과도하게 민감하기 때문에 발생
- 자유도가 높은 모델이 높은 분산을 가지기 쉽기
   때문에 오버피팅이 발생할 확률 높음

#### ● 편향과 분산을 동시에 줄일 수 없다

- 데이터 자체에 있는 노이즈 때문
- 노이즈를 제거하면 가능할 수 있음



# [규제가 있는 선형 모델]

#### ● 회귀모형과 회귀계수

- 지금까지의 선형 회귀 모형은 비용함수를 최소화 하는 것에 초점을 맞추었다.
- 이에 따라서 훈련데이터는 지나치게 잘 맞추고, 회귀계수가 커지게 되어, 평가 데이터에서는 올바르게 예측하지 못할 수 있다. (overfitting)
- 비용함수는 최소화 하면서도 회귀계수값이 <mark>너무 커지지 않도록 균형을</mark> 이룰 필요가 있다.
- 결과적으로 아래와 같이 비용함수가 수정된다.

$$Loss = \sum (y - \hat{y})^2 + \alpha * R(w)$$
  
원래 비용 함수 규제항

#### ●규제항

- 매개변수  $\alpha$  값에 따라 규제항의 비중이 달라짐
- 만약  $\alpha$  가 0 이라면, 비용함수는 기존과 동일 하게 된다.
- 만약  $\alpha$  가 매우 큰 값이라면, 상대적으로 R(w) 값이 비용함수의 대부분을 차지하게 되어 R(w) 를 최소화시키는 것이 된다.

$$Loss = \sum (y - \hat{y})^2 + \alpha * R(w)$$
  
원래 비용 함수 규제항

#### ● 릿지 회귀

- 규제항  $\alpha \sum_{i=1}^{n} \theta_i^2$ 이 비용 함수에 추가
- 모델의 가중치가 가능한 한 작게 유지되도록 노력 > 아예 0이 되진 않음
- 훈련 시에만 비용함수에 추가, 평가 시엔 사용하지 않음
- $\alpha$  값에 따라서 규제 정도가 달라짐
- L2 규제라고도 함

```
>>> from sklearn.linear_model import Ridge
>>> ridge_reg = Ridge(alpha=1, solver="cholesky")
>>> ridge_reg.fit(X, y)
>>> ridge_reg.predict([[1.5]])
array([[1.55071465]])
```

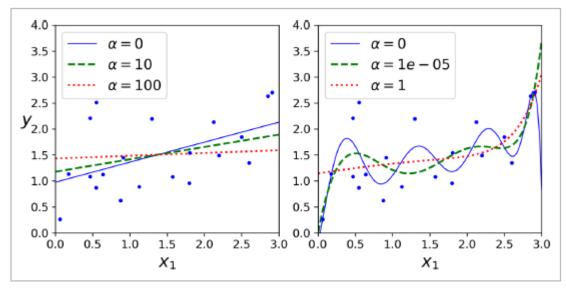


그림 4-17 다양한 수준의 릿지 규제를 사용한 선형 회귀(왼쪽)와 다항 회귀(오른쪽).

#### ● 라쏘 회귀

- 규제항  $\alpha \sum_{i=1}^{n} |\theta_i|$ 이 비용 함수에 추가
- 덜 중요한 특성의 가중치는 점점 제거됨
- 자동으로 특성 선택되는 역할
- $\alpha$  값에 따라서 규제 정도가 달라짐
- L1규제라고도 함

```
>>> from sklearn.linear_model import Lasso
>>> lasso_reg = Lasso(alpha=0.1)
>>> lasso_reg.fit(X, y)
>>> lasso_reg.predict([[1.5]])
array([1.53788174])
```

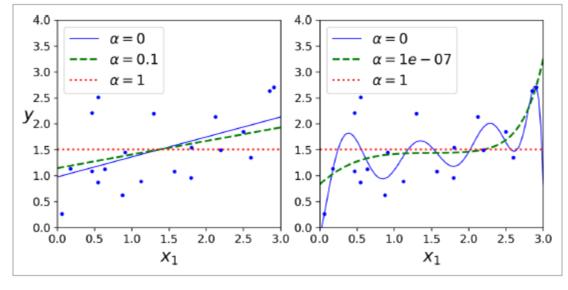


그림 4-18 다양한 수준의 라쏘 규제를 사용한 선형 회귀(왼쪽)와 다항 회귀(오른쪽).

● 릿지 회귀 vs 라쏘 회귀

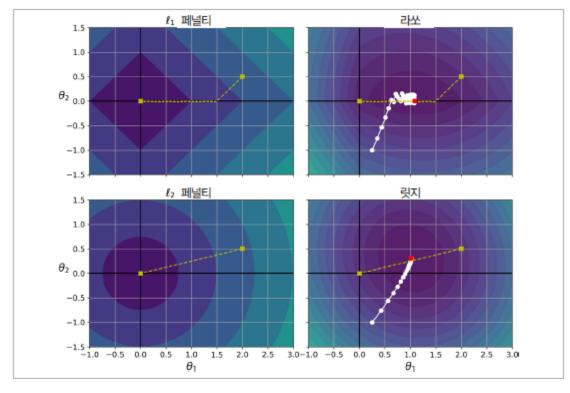


그림 4-19 라쏘 대 릿지 규제

#### ● 엘라스틱 회귀

- 릿지 와 라쏘를 혼합한 회귀를 엘라스틱 회귀라고 한다.
- 릿지 규제를 사용해야 할지 라쏘 규제를 사용해야 할지 모를 때 사용
- 감마는 릿지와 라쏘를 혼합할 비율을 설정한다.

$$Loss = \sum (y - \hat{y})^2 + (1 - \gamma) * \alpha * 릿지 + \gamma 라쏘$$
 원래 비용 함수 릿지 라쏘

```
>>> from sklearn.linear_model import ElasticNet
>>> elastic_net = ElasticNet(alpha=0.1, l1_ratio=0.5)
>>> elastic_net.fit(X, y)
>>> elastic_net.predict([[1.5]])
array([1.54333232])
```

#### ● 조기 종료

- 검증 에러가 최솟값에 도달하면 바로 훈련 중지시킴
- 과대적합되기 전에 훈련을 멈추게 함으로써 규제를 함
- <mark>사이킷런에서는</mark> 에러가 높아지는 지점에서 자동으로 멈추게 되어있다.

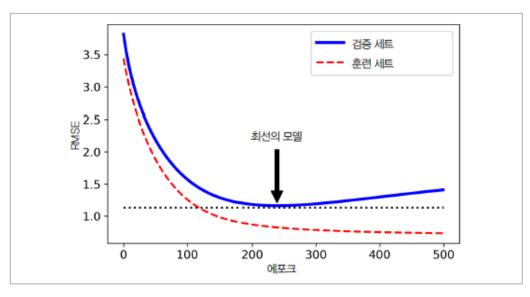


그림 4-20 조기 종료 규제

# [로지스틱회귀] Copyright (C) Hoe Sung Ryu all rights reserved

- 선형회귀 모형을 '분류' 에 적용한 기법
- 데이터가 특정 클래스에 속할 활률을 추정한다.
  - Ex1. 이 이메일이 스팸일 확률은 얼마인가?
  - Ex2. 이번 시험에서 합격할 확률은 얼마인가?
- 다른 선형 회귀 모형과는 다르게 종속변수가 수치형이 아니라 범주형이다.
  - Ex1. 스팸메일 or 정상메일
  - Ex2. 합격, 불합격

- 특정 클래스에 대하여 추정된 확률이 50% 이상이면 해당 클래스에 속하는 것으로 분류
  - 이와 같은 성질을 만족하는 함수(<mark>시그모이드</mark>)를 사용하여 분류한다.
  - 예측값 t 가 시그모이드 함수에 전달되면 결과값이 계산 되는데 이때 값이 곧 확률이다.

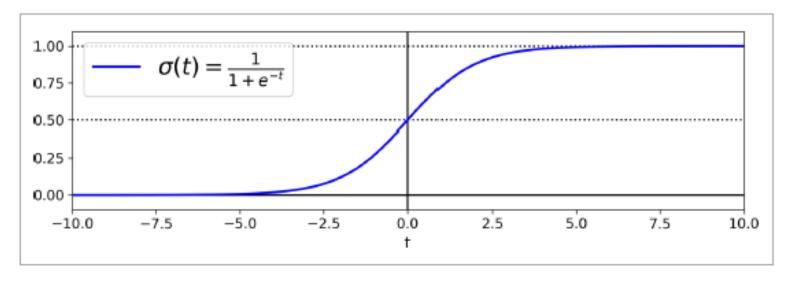
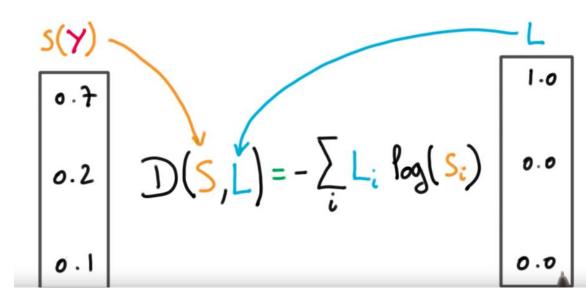


그림 4-21 로지스틱 함수

#### ● 로그손실

- 로지스틱 회귀의 비용함수
- $-J(\theta) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} [y^{(i)} \log(\hat{p}^{(i)}) + (1 y^{(i)}) \log(1 \hat{p}^{(i)})]$ 
  - 양성 샘플을 0에 가까운 확률로 추정하면 비용이 크게 증가
  - 음성 샘플을 1에 가까운 확률로 추정하면 비용이 크게 증가
- 볼록 함수
  - 전역 최솟값을 찾는 것이 보장됨



#### ● 결정 경계

```
>>> from sklearn import datasets
>>> iris = datasets.load_iris()
>>> list(iris.keys())
['data', 'target', 'target_names', 'DESCR', 'feature_names', 'filename']
>>> X = iris["data"][:, 3:] # 꽃잎의 너비
>>> y = (iris["target"] = 2).astype(np.int) # 1 Iris-Virginica면 1, 그렇지 않으면 0
```



그림 4-22 세 종류의 붓꽃 40

#### ● 결정 경계

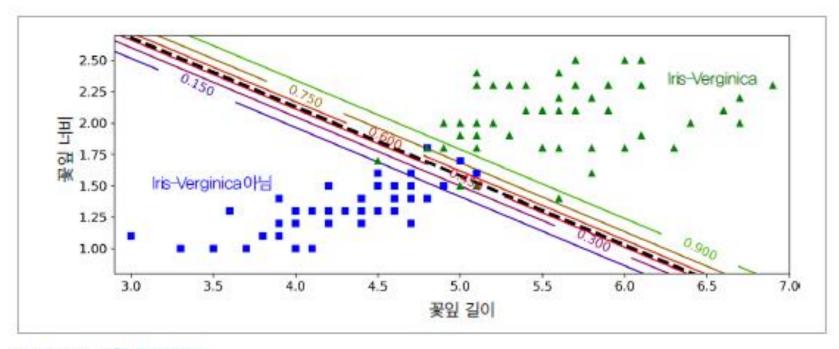


그림 4-24 선형 결정 경계

#### Quiz

● 선형 회귀 평가지표에는 어떤 것들이 있을까요?

● 결정계수란 무엇일까요?

● 선형회귀를 분류에 사용하기 위해서는 어떠한 함수가 필요한가요?

● 규제는 왜 필요하며 어떤 규제들이 있을까요?



# 붓꽃 데이터셋으로 분류 문제를 풀어봅시다!

