전통적 머신러닝 알고리즘 심화

[이론] 김지수 [실습] 강민현, 김준목

{gisookim, mkang, jm0917}@unist.ac.kr

2023년 9월 13일

강의 목차

- ① 벡터와 행렬 연산
- ② 간단한 통계량
- ③ 확률 분포와 통계적 추론
- ◑ 선형회귀분석
- 5 로지스틱 회귀분석

벡터와 행렬

- 배열 (array) : 동일한 특성을 가지는 요소(예: 숫자)가 특정 규칙으로 나열되어 있는 데이터 집합
- 벡터 (vector) : 1차원의 배열.

$$a = [a_1, a_2, \cdots, a_n]^T \in \mathbb{R}^n$$

a_i: 벡터 a 의 i 번째 원소.

• **행렬** (matrix) : 2차원의 (사각형 모양의) 배열. 크기 $n \times m$ 인 행렬은 n 개의 행(row)과 m 개의 열(column)을 가짐.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

 a_{ij} : 행렬 A의 i 번째 행, j 번째 열에 위치한 원소. 만약 n=m이면 A를 정사각행렬이라 부름. 각 행은 행벡터, 각 열은 열벡터라 부르기도 함.

● 덧셈 & 뺄셈

$$\left(\begin{array}{ccc} 2 & 5 & -1 \\ 1 & 0 & -3 \end{array}\right) + \left(\begin{array}{ccc} -7 & 3 & 1 \\ 4 & 1 & 0 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{ccc} -5 & 8 & 0 \\ 5 & 1 & -3 \end{array}\right).$$

: 덧셈 & 뺄셈은 크기가 같은 행렬에 대해서만 가능. 원소별로 수행.

② 상수 곱

$$3 \times \left(\begin{array}{ccc} 2 & 5 & -1 \\ 1 & 0 & -3 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{ccc} 6 & 15 & -3 \\ 3 & 0 & -9 \end{array}\right)$$

◎ 벡터의 내적

$$a \circ b = a_1b_1 + a_2b_2 + \cdots + a_nb_n = \sum_{i=1}^n a_ib_i$$

행렬의 곱
 n × m 행렬 A 와 m × p 행렬 B를 곱하면 n × p 행렬이 됨:

$$A \times B = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{1.} \circ b_{.1} & a_{1.} \circ b_{.2} & \cdots & a_{1.} \circ b_{.p} \\ a_{2.} \circ b_{.1} & a_{2.} \circ b_{.2} & \cdots & a_{2.} \circ b_{.p} \\ a_{3.} \circ b_{.1} & a_{3.} \circ b_{.2} & \cdots & a_{3.} \circ b_{.p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n.} \circ b_{.1} & a_{n.} \circ b_{.2} & \cdots & a_{n.} \circ b_{.p} \end{pmatrix} (\neq B \times A)$$

example

$$\left(\begin{array}{ccc} 2 & 5 & -1 \\ 1 & 0 & -3 \end{array}\right) \times \left(\begin{array}{c} 3 \\ 1 \\ 5 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} 6 \\ -12 \end{array}\right)$$

행렬 곱셈은 (왼쪽 행렬의 열의 개수)=(오른쪽 행렬의 행의 개수) 일때만 가능.

● 행렬 곱의 성질

$$A(BC) = (AB)C, (A+B)C = AC + BC.$$

● 행렬의 전치(Transposition)

$$\left(\begin{array}{ccc} 2 & 5 & -1 \\ 1 & 0 & -3 \end{array}\right)^{T} = \left(\begin{array}{ccc} 2 & 1 \\ 5 & 0 \\ -1 & -3 \end{array}\right)$$

- 전치는 행렬의 행을 열로 바꿔줌 (=열을 행으로 바꿔줌)
- $\bullet \ (A^T)_{ij} = A_{ji}$
- $n \times m$ 행렬의 전치는 $m \times n$ 행렬임.
- \bullet $(AB)^T = B^T A^T$
- 두 벡터 a 와 b 의 내적 a b 를 a^T b 로 표현할 수 있음.

특수한 행렬들

● **단위 행렬 (Identity matrix)**: 대각 원소가 모두 1이고 비대각 원소가 모두 0 인 정사각 행렬.

$$I_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad I_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

성질 임의의 $n \times m$ 행렬 A에 대하여, $A \times I_m = I_n \times A = A$ 이 성립함.

② 대칭 행렬 (Symmetric matrix): 대각원소들을 기준으로 대칭을 이루는 행렬. 즉, 정사각 행렬이면서 $A = A^T$ 를 만족하는 행렬 A. example

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & -5 & 7 \\ 1 & 7 & -4 \end{pmatrix} = A^{T}$$

특수한 행렬들

 (n × n) 정사각 행렬 A 에 대하여 아래 식을 만족하는 행렬 B가 존재하면 A를 가역(invertible) 행렬이라 함.

$$A \times B = B \times A = I_n$$

B는 A의 역행렬이며 $(B = A^{-1})$, A도 B의 역행렬임 $(A = B^{-1})$.

Notes

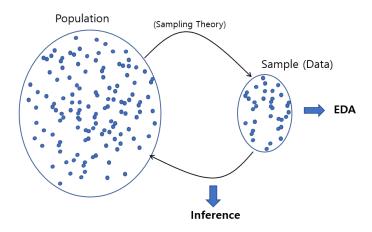
- 가역행렬이 아닌 행렬도 존재한다. 예를 들어, $A=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}$ 는 가역행렬이 아님.
- 2 × 2 행렬의 역행렬을 구하는 식:

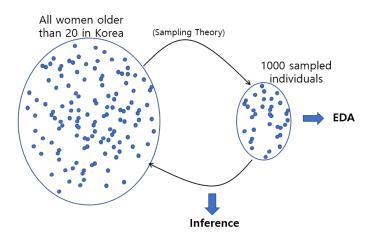
If
$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$
, $A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$

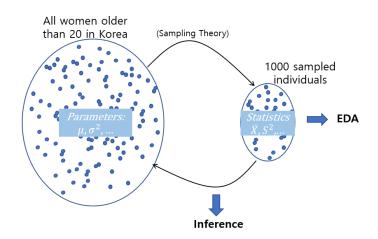
 2×2 행렬 A는 $ad - bc \neq 0$ 인 경우에만 가역행렬임.

간단한 통계량

- **통계학**은 관심 모집단으로부터 데이터를 수집하고, 데이터를 과학적으로 분석하고, 데이터로 부터 모집단에 대한 확률론적 추론을 하는 방법론을 통칭함.
- 통계학의 두 갈래:
 - ▷ **탐색적 데이터 분석** (Exploratory Data Analysis; EDA)
 - ▷ 통계적 추론 (Statistical Inference)







 $\underline{\text{example}}$: 한국의 모든 20세 이상 여성의 평균 키 (μ) 에 대한 추론을 하기 위하여 1000명을 추출하고 그들의 평균 키 (\bar{X}) 를 계산함.

중심 경향

• 평균(mean)

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

중앙값(median)
 -변수들을 크기 순서대로 나열한 후 계산: X₍₁₎, X₍₂₎, · · · , X_(n).

$$\breve{X} = \frac{1}{2} \{ X_{(\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor)} + X_{(\lceil \frac{n+1}{2} \rceil)} \}$$

어떤 통계량이 더 좋은가?



중심 경향

평균(mean)

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

중앙값(median) -변수들을 크기 순서대로 나열한 후 계산: $X_{(1)}, X_{(2)}, \cdots, X_{(n)}$.

$$\breve{X} = \frac{1}{2} \{ X_{(\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor)} + X_{(\lceil \frac{n+1}{2} \rceil)} \}$$

어떤 통계량이 더 좋은가? median

mean



산포

• 표본 분산

$$S^{2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_{i} - \bar{X})^{2}.$$

S를 표준편차라 한다.

• 엔트로피

$$\epsilon(X) = -\sum_{c \in \mathcal{C}} \hat{\rho}_c \log_2 \hat{\rho}_c.$$

 $(\hat{p}_c$: 데이터 내에서 범주 c의 비율.)

- $0 \le \epsilon(X) \le \log_2(|\mathcal{C}|)$.
- $\epsilon(X) = 0 \Leftrightarrow 특정 범주 c에 대하여 <math>\hat{p}_c = 1$.
- $\epsilon(X) = \log_2(|\mathcal{C}|) \Leftrightarrow$ 모든 범주 c에 대하여 $\hat{p}_c = 1/|\mathcal{C}|$.
- 그 외 통계량들 : 분위수, 사분위수(Q1: 25% 분위수, Q2: 중앙값, Q3: 75% 분위수), 사분위수 범위(Inter Quartile Range; IQR; Q3-Q1)

공변 (Covariation)

• 표본 공분산

$$S_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X}) (Y_i - \bar{Y})$$

• 표본 상관계수

$$r_{xy} = \frac{S_{xy}}{S_x S_y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X}) (Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2 \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2}}$$

- 두 변수의 선형 관계를 수치화
- r = 0는 선형 관계가 없음을 의미
- 부호는 선형관계의 방향을 의미 (양/음의 상관관계)
- $r_{(ax+b)(cy+d)} = r_{xy}$ $(a, b, c, d \in \mathbb{R} \text{ and } ac > 0)$

Supplementary: 공분산과 상관계수

- 공분산 (S _{xy})	상관계수 (<i>r_{xy}</i>)
두 확률 변수가 공변하는 양상을 측정하는 측도	두 확률변수의 선형 관계를 측정하는 측도
단위에 따라 다름	단위가 없음. 단위의 변화에 영향을 받지 않음.
$-\infty \le S_{xy} \le \infty$	$-1 \le r_{xy} \le 1$

Table: 공분산과 상관계수

Supplementary: 공분산과 상관계수

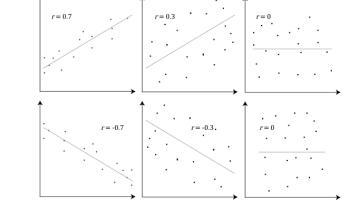


Figure: Retrieved from https://statistics.laerd.com/statistical-guides/pearson-correlation-coefficient-statistical-guide.php

통계량의 행렬 연산

평균과 분산, 공분산을 행렬 연산으로 나타내면?

● 평균

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i = \frac{1}{n} \mathbf{1} \circ X = \frac{1}{n} \mathbf{1}^T X$$

$$\mathbf{1} = [1, 1, \cdots, 1]^T$$
, $X = [X_1, X_2, \cdots, X_n]^T$

● 분산

퀴즈!

• 공분산

퀴즈!

확률 분포와 통계적 추론

확률 분포

모집단(population)은 특정 확률 분포를 따름. 확률 분포는 확률 변수의 값에 따른 확률의 분포를 가리킴.

- 이산형 변수의 확률 질량 함수 p(x): p(x) = P(X = x)
 - (1) $0 \le p(x) \le 1$
 - $(2) \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) = 1.$
 - (3) $\overline{P}(a \le X \le b) = \sum_{a \le x \le b} p(x)$.
- 연속형 변수의 확률 밀도 함수 p(x): $\int_a^b p(x) dx = P(a \le X \le b)$
 - $(1) \ 0 \leq p(x)$
 - (2) $\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1.$
 - (3) $P(a \le X \le b) = P(a < X \le b) = P(a \le X < b) = P(a < X < b) = \int_a^b p(x) dx$.

모집단의 평균

$$E(X) = \begin{cases} \sum_{x \in \mathcal{X}} x p(x) \\ \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx \end{cases}$$
$$E(f(X)) = \begin{cases} \sum_{x \in \mathcal{X}} f(x) p(x) \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(x) p(x) dx \end{cases}$$

Properties

- 임의의 $a, b \in \mathbb{R}$ 에 대하여 E(aX + b) = aE(X) + b.
- $E(af_1(X) + bf_2(X)) = aE(f_1(X)) + bE(f_2(X)).$

모집단의 분산

Let $\mu = E(X)$.

$$Var(X) = E[(X - \mu)^{2}] = \begin{cases} \sum_{x \in \mathcal{X}} (x - \mu)^{2} p(x) \\ \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^{2} p(x) dx \end{cases} = E(X^{2}) - \mu^{2}$$

$$sd(X) = \sqrt{Var(X)}$$

Properties

• 임의의 $a,b \in \mathbb{R}$ 에 대하여, $Var(aX + b) = a^2 Var(X)$.

결합 확률 분포

- 두 이산형 확률변수의 확률 질량 함수: p(x, y) = P(X = x, Y = y)
 - (1) $0 \le p(x, y) \le 1$
 - (2) $\sum_{y \in \mathcal{V}} \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x, y) = 1$.
 - (3) $P(a \le X \le b, c \le Y \le d) = \sum_{c < y < d} \sum_{a < x < b} p(x, y).$
- 두 연속형 확률변수의 확률 밀도 함수:

$$\int_{c}^{d} \int_{a}^{b} p(x, y) dx dy = P(a \le X \le b, c \le Y \le d)$$

주변 분포

- $p_X(x) = \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(x, y)$.
- $p_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x, y) dy$

결합 확률 분포

<u>기대값</u>

$$E(f(X,Y)) = \begin{cases} \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} f(x,y) p(x,y) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y) p(x,y) dx dy \end{cases}$$

두 확률변수의 **독립**

임의의 값 $x \in \mathcal{X}$ 와 $y \in \mathcal{Y}$ 에 대하여,

$$p(x,y) = p(x)p(y),$$

가 성립하면 *X*와 *Y*는 독립이다. 두 확률변수 *X*와 *Y*가 독립이면,

$$E(XY) = \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} xyp(x, y) = \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} xyp(x)p(y)$$
$$= \sum_{x \in \mathcal{X}} xp(x) \sum_{y \in \mathcal{Y}} yp(y) = E(X)E(Y).$$

모집단의 공분산과 상관계수

$$\mu_X = E(X), \ \mu_Y = E(Y), \ \sigma_X = sd(X), \ \sigma_Y = sd(Y)$$
라 하자.

$$Cov(X, Y) = E[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)].$$

$$Corr(X, Y) = E\left[\frac{(X - \mu_X)}{\sigma_X} \frac{(Y - \mu_Y)}{\sigma_Y}\right].$$

Random sample의 개념

- Random sample은 동일한 분포에서 독립적으로 추출한 (identically and independently distributed; i.i.d.) 확률 변수 X₁, X₂, · · · , X_n의 모음이다. 즉,
 - X₁, X₂, ..., X_n 이 서로 독립이다.
 - ② 임의의 $x \in \mathbb{R}$ 에 대하여 $p(X_1 = x) = p(X_2 = x) = \cdots = p(X_n = x)$.

특정 확률 분포를 가지는 모집단이 있다고 하자. 이 모집단으로 부터 무작위 반복추출로 표본을 추출하면 이 표본이 모집단의 random sample을 이룬다.

Random sample 을 이용하여 모집단에 대한 통계적 추론을 할 수 있다.

1. 베르누이 분포

<u>베르누이 분포</u>: Ber(p) (0

• 이항 변수의 분포.

$$\begin{array}{c|ccc} x & 0 & 1 \\ \hline p(x) = P(X = x) & 1 - p & p \end{array}$$

<u>예</u>: 성공/실패, 동전 던질 때의 앞면/뒷면, 질병 진단에 대한 양성/음성 결과, 결혼 여부

- 확률 질량 함수: $p(x) = p^{x}(1-p)^{(1-x)}$.
- Properties:

$$E(X) = 0 \times (1 - p) + 1 \times p = p$$

$$Var(X) = E[\{X - E(X)\}^2] = E(X^2) - \{E(X)\}^2 = p(1 - p).$$

1. 베르누이 분포

베르누이 분포 Ber(p)를 따르는 모집단으로부터 random sample X_1, \cdots, X_n 을 추출하였다고 가정하자. 이 random sample 의 표본 평균은 다음을 만족함을 쉽게 확인 할 수 있다.

- $E(\bar{X}) = p$
- $Var(\bar{X}) = \frac{p(1-p)}{n}$

 \bar{X} 의 분포는 ??

$$P(n\bar{X} = m) = P(X_1 + X_2 + \dots + X_n = m)$$

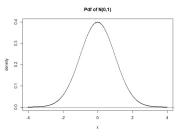
$$= \binom{n}{m} p^m (1 - p)^{n - m}$$

$$= \frac{n!}{m!(n - m)!} p^m (1 - p)^{n - m}$$

2. 정규분포

<u>정규분포</u>: $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$.

• 연속형 변수의 분포.



- $-x = \mu$ 에 대하여 대칭인 분포.
- 종 모양.
- 산포가 σ 에 의해 결정됨.

- 확률 밀도 함수: $p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}, -\infty < x < \infty.$
- Properties:

$$E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} xp(x)dx = \mu$$
$$Var(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^{2} p(x)dx = \sigma^{2}$$

2. 정규분포

Properties:

- 임의의 $a,b\in\mathbb{R}$ 에 대하여 $X\sim\mathcal{N}(\mu,\sigma^2)$ 이면,

$$aX + b \sim \mathcal{N}(a\mu + b, a^2\sigma^2).$$

- $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ 이면,

$$Z = rac{X - \mu}{\sigma} \sim \mathcal{N}(0, 1)$$
 : 표준 정규 분포.

 $-X_1\sim \mathcal{N}(\mu_1,\sigma_1^2), \ X_2\sim \mathcal{N}(\mu_2,\sigma_2^2)$ 이며 X_1 과 X_2 과 독립이면, 임의의 $a_1,a_2\in\mathbb{R}$ 에 대하여,

$$a_1X_1 + a_2X_2 \sim \mathcal{N}(a_1\mu_1 + a_2\mu_2, a_1^2\sigma_1^2 + a_2^2\sigma_2^2).$$

$$Var(a_1X_1 + a_2X_2) = E[\{(a_1X_1 + a_2X_2) - E(a_1X_1 + a_2X_2)\}^2]$$

$$= E[\{a_1(X_1 - \mu_1) + a_2(X_2 - \mu_2)\}^2]$$

$$= E[a_1^2(X_1 - \mu_1)^2 + a_2^2(X_2 - \mu_2)^2 + 2a_1a_2(X_1 - \mu_1)(X_2 - \mu_2)]$$

$$= a_1^2\sigma_1^2 + a_2^2\sigma_2^2 + 0.$$

2. 정규분포

정규분포 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ 를 따르는 모집단으로부터 random sample X_1, \cdots, X_n 을 추출하였다고 가정하자. 이 random sample 의 표본 평균은 다음을 만족함을 쉽게 확인 할 수 있다.

•
$$E(\bar{X}) = \mu$$

•
$$Var(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n}$$

 \bar{X} 의 분포는 ??

$$\bar{X} \sim \mathcal{N}(\mu, \frac{\sigma^2}{n}).$$

$$rac{ar{\mathcal{X}}-\mu}{\sigma/\sqrt{n}}\sim\mathcal{N}(0,1).$$

표본 평균의 성질

• 평균이 μ 이고 분산이 σ^2 인 임의의 모집단으로부터 **random sample** X_1, \dots, X_n 을 추출하였다고 가정하자. 표본 평균 $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ 의 성질은 아래와 같다.

$$\begin{split} E(\bar{X}) &= E\Big(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_{i}\Big) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}E(X_{i}) = \frac{1}{n}n\mu = \mu. \\ Var(\bar{X}) &= E\Big[\big\{\bar{X} - E(\bar{X})\big\}^{2}\Big] = E\Big[\big\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_{i} - \mu\big\}^{2}\Big] = E\Big[\big\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_{i} - \frac{1}{n}n\mu\big\}^{2}\Big] \\ &= \frac{1}{n^{2}}E\Big[\big\{\sum_{i=1}^{n}(X_{i} - \mu)\big\}^{2}\Big] = \frac{1}{n^{2}}E\Big[\sum_{i=1}^{n}(X_{i} - \mu)^{2} + \sum_{i \neq j}(X_{i} - \mu)(X_{j} - \mu)\Big] \\ &= \frac{1}{n^{2}}\Big[\sum_{i=1}^{n}E(X_{i} - \mu)^{2} + \sum_{i \neq j}E\big[(X_{i} - \mu)(X_{j} - \mu)\big]\Big] \\ &= \frac{1}{n^{2}}\Big[n\sigma^{2} + \sum_{i \neq j}\big[E(X_{i} - \mu)E(X_{j} - \mu)\big]\Big] = \frac{\sigma^{2}}{n}. \end{split}$$

표본 평균의 성질

• 평균이 μ 이고 분산이 σ^2 인 임의의 모집단으로부터 random sample X_1, \dots, X_n 을 추출하였다고 가정하자. 표본 평균 $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ 의 성질은 아래와 같다.

$$\begin{split} E(\bar{X}) &= E\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_{i}\right) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}E(X_{i}) = \frac{1}{n}n\mu = \mu. \\ Var(\bar{X}) &= E\left[\left\{\bar{X} - E(\bar{X})\right\}^{2}\right] = E\left[\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_{i} - \mu\right\}^{2}\right] = E\left[\left\{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}X_{i} - \frac{1}{n}n\mu\right\}^{2}\right] \\ &= \frac{1}{n^{2}}E\left[\left\{\sum_{i=1}^{n}(X_{i} - \mu)\right\}^{2}\right] = \frac{1}{n^{2}}E\left[\sum_{i=1}^{n}(X_{i} - \mu)^{2} + \sum_{i \neq j}(X_{i} - \mu)(X_{j} - \mu)\right] \\ &= \frac{1}{n^{2}}\left[\sum_{i=1}^{n}E(X_{i} - \mu)^{2} + \sum_{i \neq j}E\left[(X_{i} - \mu)(X_{j} - \mu)\right]\right] \\ &= \frac{1}{n^{2}}\left[n\sigma^{2} + \sum_{i \neq j}\left[E(X_{i} - \mu)E(X_{j} - \mu)\right]\right] = \frac{\sigma^{2}}{n}. \end{split}$$

 \Rightarrow 표본 평균 \bar{X} 은 샘플 숫자가 커질수록 모집단의 평균 μ 에 가까워진다.

표본평균의 성질

```
In [2]: mu, sigma=0.1
In [3]: np.random.normal(loc=mu, scale=sigma)
Out[3]: 0.5331692716674414
In [4]: X=np.random.normal(loc=mu, scale=sigma, size=10000)
In [5]: X #data
Out[5]: array([ 0.71269468, -1.23367117, 1.22896926, ..., 2.10196696,
               -1.01883226, 1.13204636])
        \bar{X}
In [6]: X.mean()
Out [6]: 0.0024860210670137267
```

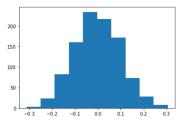
표본평균의 성질

```
In [7]: means=[np.mean(np.random.normal(loc=mu, scale=sigma,size=100)) for i in range(1000)]
```

In [8]: plt.hist(means)

Out[8]: (array([3., 24., 82., 160., 234., 217., 171., 73., 28., 8.]), array([-0.31337143, -0.25135704, -0.18334264, -0.12732824, -0.05531365, -0.00329945, 0.05871495, 0.12072934, 0.18274374, 0.24475814, 0.306772541),

<BarContainer object of 10 artists>)



$$\bar{X} \sim \mathcal{N}(\mu, \frac{\sigma^2}{N})$$

- In [9]: np.mean(means)
- Out [9]: -0.002006202496045791
- In [10]: np.var(means) # close to 0.01 = 1/100
- Out [10]: 0.010147261232552805

선형회귀분석



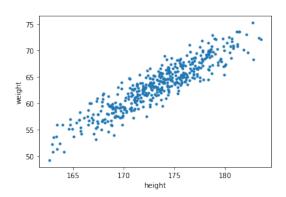
회귀분석

• 두개 이상의 변수 사이의 관계를 추정하기 위한 통계적 과정.

<u>Process</u>

- 종속변수 (dependent variable) 와 설명변수 (explanatory variable) 간의 수학적 모형 가정하기.
- 위에서 가정한 수학적 모형을 바탕으로 변수의 관측값(=데이터)을 이용하여 관계 추정하기.
- 추정된 모형이 데이터에 잘 맞는지 테스트 하기. 가정한 수학적 모형이 맞는지 확인하기.

회귀분석

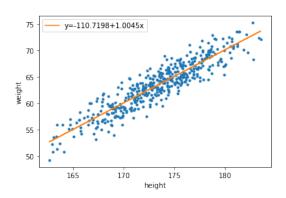


example

Y (종속 변수) : 몸무게

X (설명 변수): 키

회귀분석



example

Y (종속 변수): 몸무게

X (설명 변수): 키

Relationship: Y = f(X). 선형 관계: $Y = \beta_0 + \beta_1 X$.

선형회귀분석

- 단순 선형 회귀분석: $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i$ (β_0 : intercept, β_1 : slope) $E(y_i|X=x_i) = \beta_0 + \beta_1 x_i$
- 다중 선형 회귀분석: $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_p x_{pi} + \varepsilon_i$ (β_0 : intercept, β_1, \dots, β_p : slopes) $E(y_i|X_1 = x_{1i}, X_2 = x_{2i}, \dots, X_p = x_{pi}) = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_p x_{pi}$

계수 $\beta_0, \beta_1, \beta_j$ 의 값을 추정해야 함.

 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_N$ 은 모두 서로 독립이며 $E(\varepsilon) = 0$, $Var(\varepsilon) = \sigma^2$ 라 가정함.

데이터로부터 β_0 와 β_1 을 추정하는 방법? \Rightarrow 최소제곱법 (Least Squares Method)

• 최소제곱법

Find
$$\beta_0$$
 and β_1 that minimize $\sum_{i=1}^N \left\{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \right\}^2$

$$\sum_{i=1}^{N} \left\{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \right\}^2 = \sum_{i=1}^{N} \left\{ y_i^2 - 2y_i(\beta_0 + \beta_1 x_i) + (\beta_0 + \beta_1 x_i)^2 \right\}$$

$$= N\beta_0^2 - 2\beta_0 \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i) + \sum_{i=1}^{N} \{y_i^2 - 2\beta_1 x_i y_i + \beta_1^2 x_i^2 \}$$

$$= N \left\{ \beta_0^2 - 2\beta_0 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i) \right\} + \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i)^2$$

$$= N \left\{ \beta_0 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i) \right\}^2 - \frac{1}{N} \left\{ \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i) \right\}^2 + \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i)$$

Set

$$\hat{\beta}_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i) = \bar{y} - \beta_1 \bar{x}.$$

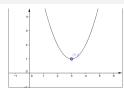
이를 대입하면 아래와 같음.

$$R = -\frac{1}{N} \left\{ \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i) \right\}^2 + \sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i)^2.$$

$$\begin{split} \frac{R}{N} &= -\left\{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i - \beta_1 \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i\right\}^2 + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i)^2 \\ &= -\left\{\bar{y} - \beta_1 \bar{x}\right\}^2 + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (y_i - \beta_1 x_i)^2 \\ &= -(\bar{y})^2 + 2\beta_1 \bar{x} \bar{y} - \beta_1^2 (\bar{x})^2 + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i^2 - \frac{2}{N}\beta_1 \sum_{i=1}^{N} x_i y_i + \beta_1^2 \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \\ &= \beta_1^2 \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2 - 2\beta_1 \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) + C \end{split}$$

최소제곱 추정치:

$$\hat{\beta}_{1} = \frac{\sum_{i=1}^{N} (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{N} (x_{i} - \bar{x})^{2}} = \frac{S_{XY}}{S_{X}^{2}} = \frac{S_{XY}}{S_{XX}}$$
$$\hat{\beta}_{0} = \bar{y} - \hat{\beta}_{1}\bar{x}$$



다른 계산방법: 미분 방정식

-소실함수 $\sum_{i=1}^{N} \{y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\}^2$ 의 기울기를 0으로 두는 미분방정식을 세운다.

$$\frac{\partial}{\partial \beta_0} \sum_{i=1}^{N} \left\{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \right\}^2 = -2 \sum_{i=1}^{N} \left\{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \right\} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta_1} \sum_{i=1}^{N} \left\{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \right\}^2 = -2 \sum_{i=1}^{N} x_i \left\{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \right\} = 0$$

즉, 아래의 연립방정식을 푼다.

$$\left\{egin{array}{l} Neta_0 + \sum_{i=1}^N x_i eta_1 = \sum_{i=1}^N y_i \ \sum_{i=1}^N x_i eta_0 + \sum_{i=1}^N x_i^2 eta_1 = \sum_{i=1}^N x_i y_i \ \end{array}
ight.$$
শুছৰ দেখলও প্ৰমান প্ৰক্ৰ

행렬로 접근해보자

$$\Rightarrow Y = X\beta + E$$

$$\sum_{i=1}^{N} \{y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\}^2 = (Y - X\beta)^T (Y - X\beta) = (Y^T - (X\beta)^T) (Y - X\beta)$$

$$= (Y^T - \beta^T X^T) (Y - X\beta) \quad (\because (AB)^T = B^T A^T)$$

$$= Y^T Y - \beta^T X^T Y - Y^T X\beta + \beta^T X^T X\beta$$

$$= Y^T Y - 2Y^T X\beta + \beta^T X^T X\beta$$

손실함수:

$$L(\beta) = Y^T Y - 2Y^T X \beta + \beta^T X^T X \beta$$

• 손실함수의 편미분:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} L(\beta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \beta_0} L(\beta) \\ \frac{\partial}{\partial \beta_1} L(\beta) \end{bmatrix} = -2X^T Y + 2X^T X \beta$$

• 최소제곱 추정치:

$$X^{T}X\beta = X^{T}Y$$
의 해:

$$(X^{T}X)^{-1}X^{T}X\beta = (X^{T}X)^{-1}X^{T}Y$$

$$I\beta = (X^{T}X)^{-1}X^{T}Y$$

$$\Rightarrow \hat{\beta} = (X^{T}X)^{-1}X^{T}Y$$

기울기 강하(Gradient Descent)

기울기 강하 방법: 선형회귀분석에서는 손실함수를 최소화하는 β 값을 한번에 찾을 수 있지만 딥러닝에서는 그러지 못 함. 이때, 최적의 계수 β 값을 찾을 때 손실함수의 기울기의 반대방향으로 β 값을 조금씩 이동하면서 찾아나감. (즉, 기울기 강하 방법은 반복적인 과정을 통해 추정치를 도출함.)

손실함수:

$$L(\beta) = Y^T Y - 2Y^T X \beta + \beta^T X^T X \beta$$

• 손실함수의 편미분:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} L(\beta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \beta_0} L(\beta) \\ \frac{\partial}{\partial \beta_1} L(\beta) \end{bmatrix} = -2X^T Y + 2X^T X \beta$$

• 기울기 강하 (Gradient Descent) : 편미분(기울기) 반대방향으로의 이동

$$\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \gamma \left. \frac{\partial}{\partial \beta} L(\beta) \right|_{\beta = \hat{\beta}_t}$$
$$= \hat{\beta}_t - \gamma \left\{ -2X^T Y + 2X^T X \hat{\beta}_t \right\}$$

 $(\gamma > 0$ 를 학습률이라 함.)

기울기 강하(Gradient Descent)

- $f(x) \in \mathbb{R}$ 가 벡터 $x \in \mathbb{R}^d$ 의 함수라 하자.
- 함수의 편미분은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial x_1}f(x), \frac{\partial}{\partial x_2}f(x), \cdots, \frac{\partial}{\partial x_d}f(x)$$

• (임의의 유닛 벡터 u에 대한) 방향도함수(Directional derivative) =u의 방향으로 변화하는 정도

$$D_{u}f(a) = \left[\frac{\partial}{\partial x}f(x)\Big|_{x=a}\right]^{T}u$$
$$= \left|\left|\frac{\partial}{\partial x}f(x)\right|_{x=a}\right|\left|||u||\cos\theta$$

• $D_u f(a)$ 는 $\theta = 0^\circ$ 일때 가장 크고 $\theta = 180^\circ$ 일때 가장 작음.

다중 선형 회귀분석: 추정

Let
$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$$
, $X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{p1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{p2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & x_{2N} & \cdots & x_{pN} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times (p+1)}$, $E = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_N \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$, and $\beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(p+1) \times 1}$.

$$\Rightarrow Y = X\beta + E,$$

$$\sum_{i=1} \left\{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_p x_{pi}) \right\}^2 = (Y - X\beta)^T (Y - X\beta)$$
$$= Y^T Y - 2Y^T X\beta + \beta^T X^T X\beta$$

다중 선형 회귀분석: 추정

최소제곱추정치는 $X^T X \beta = X^T Y$ 의 해다.

$$X^{T}X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1N} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{\rho 1} & x_{\rho 2} & \cdots & x_{\rho N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{\rho 1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{\rho 2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & x_{2N} & \cdots & x_{\rho N} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} N & \sum_{i} x_{1i} & \sum_{i} x_{2i} & \cdots & \sum_{i} x_{\rho i} \\ \sum_{i} x_{1i} & \sum_{i} x_{1i}^{2} & \sum_{i} x_{1i} x_{2i} & \cdots & \sum_{i} x_{1i} x_{\rho i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i} x_{\rho i} & \sum_{i} x_{1i} x_{\rho i} & \sum_{i} x_{2i} x_{\rho i} & \cdots & \sum_{i} x_{\rho i}^{2} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(\rho+1)\times(\rho+1)}$$

$$X^{T}Y = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1N} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{1} \\ y_{2} \\ \vdots \\ y_{N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i} y_{i} \\ \sum_{i} x_{1i} y_{i} \\ \sum_{i} x_{2i} y_{i} \\ \vdots \\ \sum_{i} x_{ni} y_{i} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(\rho+1)\times1}$$

다중 선형 회귀분석: 추정

$$X^T X \beta = X^T Y \Leftrightarrow :$$

만약 $(X^TX)^{-1}$ 가 존재하면,

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y.$$

기울기 강하(Gradient Descent)

• 손실함수:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^{N} \{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_p x_{pi}) \}^2 = Y^T Y - 2Y^T X \beta + \beta^T X^T X \beta$$

• 손실함수의 편미분:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} L(\beta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \beta_0} L(\beta) \\ \frac{\partial}{\partial \beta_1} L(\beta) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial \beta_p} L(\beta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \sum_{i=1}^{N} \{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_p x_p) \} \\ -2x_{1i} \sum_{i=1}^{N} \{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_p x_p) \} \\ \vdots \\ -2x_{pi} \sum_{i=1}^{N} \{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_p x_p) \} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} L(\beta) = -2X^T Y + 2X^T X \beta = -2X^T (Y - X \beta)$$

• 기울기 강하 (Gradient Descent) : 편미분(기울기) 반대방향으로의 이동

최대가능도 추정

• 손실함수:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^{N} \{ y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \dots + \beta_p x_{pi}) \}^2 = Y^T Y - 2Y^T X \beta + \beta^T X^T X \beta$$

● 위의 식을 손실함수로 쓰는 근거? ⇒ 최대가능도 (Maximum Likelihood) 추정치를 도출하기 때문에!

최대가능도 (Maximum Likelihood) 방법

• 가능도 함수(Likelihood): 데이터의 확률분포를 모수(β)의 함수로 표현한 것.

예) 선형회귀분석 문제를 다시 생각해보자.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_p x_{pi} + \varepsilon_i$$

여기서 확률 변수 ε_i 가 독립이며, 정규분포 $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ 을 따른다고 가정하자. 즉, $y_i \sim \mathcal{N}(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \cdots + \beta_p x_{pi}, \sigma^2)$ 이며 확률밀도함수는

$$p(y_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{1i} - \dots - \beta_p x_{pi}}{\sigma} \right)^2}$$

 Ψ , y_1, y_2, \dots, y_N 의 결합 확률밀도함수는

$$p(y_1, y_2, \dots, y_N) = \prod_{i=1}^{N} p(y_i) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{1i} - \dots - \beta_p x_{pi}}{\sigma} \right)^2}$$

$$\Rightarrow Likelihood(\beta) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{1i} - \dots - \beta_p x_{pi}}{\sigma}\right)^2}$$

최대가능도 (Maximum Likelihood) 추정치

• 최대가능도 추정치 (Maximum Likelihood Estimate; MLE): 가능도 함수를 최대로 하는 모수의 값.

예) 선형회귀분석 문제의 MLE 구하기

 $Likelihood(\beta)$ 를 최대로 하는 β 값과 $logLikelihood(\beta)$ 를 최대로 하는 β 값은 동일하므로, $logLikelihood(\beta)$ 를 구해보면 아래와 같다:

$$\log \textit{Likelihood}(\beta) = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} - \frac{1}{2} \left(\frac{y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{1i} - \dots - \beta_p x_{pi}}{\sigma} \right)^2 \right\}$$

 $\log Likelihood(\beta)$ 를 최대로 하는 β 값은 $L(\beta) = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{1i} - \dots - \beta_p x_{pi}\right)^2$ 를 가장 작게 하는 최소제곱추정치와 동일함을 알 수 있다!

최대가능도 (Maximum Likelihood) 추정치

- 최대가능도 추정치 (Maximum Likelihood Estimate) 를 사용하는 이유
 - 데이터 개수 N이 커지면 추정치가 실제값으로 확률 수렴(consistent)한다.
 - ② 점근적으로 효율적인 (asymptotically efficient) 추정치다.

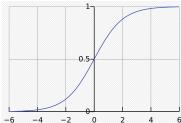
• 로지스틱 회귀분석 문제:

$$y_i \sim Ber(\pi(x_i)), \quad \pi(x_i) = \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_p x_{pi})}{1 + \exp(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \dots + \beta_p x_{pi})}$$

즉, y;는 0과 1중 하나의 값을 가지는 이항 확률 변수이며

$$P(y_i = 1|x_i) = \pi(x_i), \quad P(y_i = 0|x_i) = 1 - \pi(x_i)$$

이다.



이때 y_i의 확률 질량 함수는

$$p(y_i|x_i) = \pi(x_i)^{y_i}(1-\pi(x_i))^{1-y_i}$$

이며 y_1, y_2, \cdots, y_N 들이 독립이라고 가정하면 결합 확률 질량 함수는

$$p(y_1, \dots, y_N | x_1, \dots, x_N) = \prod_{i=1}^N p(y_i | x_i) = \prod_{i=1}^N \pi(x_i)^{y_i} (1 - \pi(x_i))^{1-y_i}$$

$$\Rightarrow$$
 Likelihood $(\beta) = \prod_{i=1}^{N} \pi(x_i)^{y_i} (1 - \pi(x_i))^{1-y_i}$

$$\Rightarrow \log Likelihood(\beta) = \sum_{i=1}^{N} \left\{ y_i \log \pi(x_i) + (1 - y_i) \log(1 - \pi(x_i)) \right\}$$

- 기울기 강하 등의 방법을 통해 $\log Likelihood(\beta)$ 를 최대로 하는 β 의 값을 찾을 수 있다.
- $-\log Likelihood(\beta)$ 를 교차 엔트로피 (cross-entropy) 손실함수라고 부르기도 한다.
- $-\log Likelihood(β)$ 의 편미분은?

퀴즈!

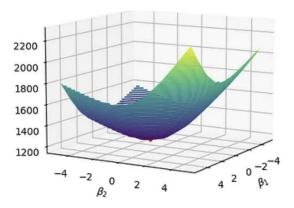


Figure: Graph of Negative log likelihood (ref: Nicolo Cosimo Albanese, "Negative log-partial likelihood of the Cox model with local optimum", towardsdatascience, Published date: Dec 10, 2022,

https://towardsdatascience.com/survival-analysis-optimize-the-partial-likelihood-of-the-cox-model-b56b8f112401)