Machine Learning

Linear Regression

김선녕(sykim.lecture@gmail.com)

개요

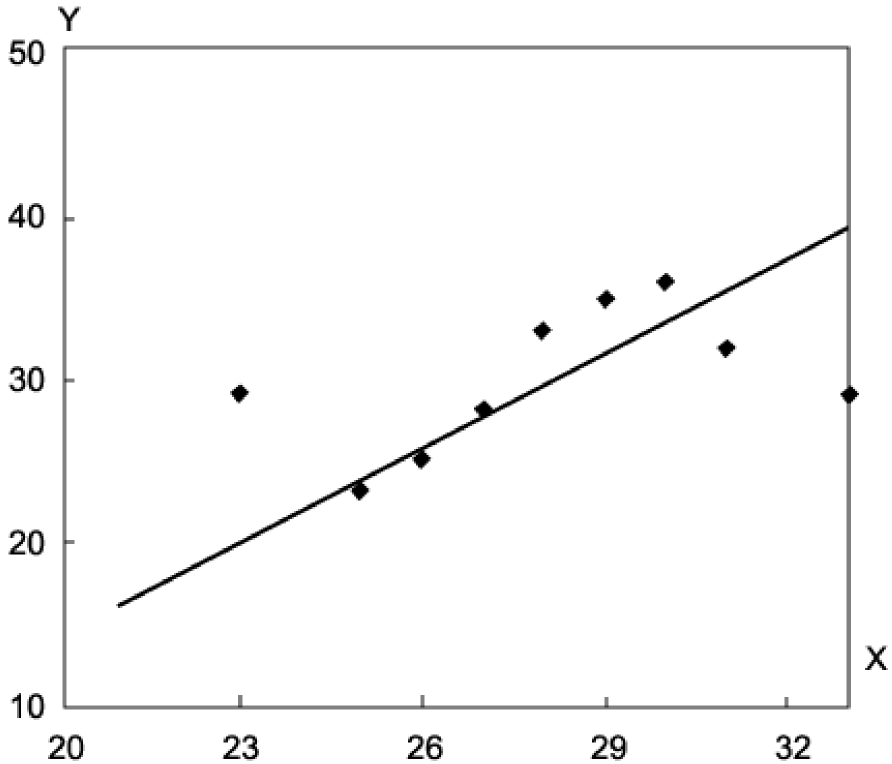
- 회귀의 유래
  - 서양에서는 영국의 유명한 유전학자 갈톤$(F. Galton, 1822 \sim 1891)$ 에 의해서 회귀라는 용어가 등장
    - 유전에 관한 논문「Family Likeness in Stature (1886)」에서 처음 회귀에 대하여 정의.
    - 보편적 회귀법칙 (law of universal regression)
      "일반적으로 키가 큰 부모에게서 키 큰 자녀가, 키가 작은 부모에게서 키 작은 자녀가 태어난다. 그렇지만 자녀들의 평균 키는 전체 인구의 평균 키로 회귀하는 경향이 있다.
      즉, 키가 큰 부모이든 작은 부모이든 그들에게서 태어난 자녀들의 평균 키는 전체 평균 키 수준에 접근하는 현상으로 나타난다는 것이다"
- 회귀분석
  - 변수와 변수 사이의 상관관계를 알아보기 위한 통계적 분석방법, 독립변수의 값에 의하여 종속변수의 값을 예측하기 위함
    - 독립변수$(independent\ variable)$: 종속변수에 영향을 미치는 변수
    - 종속변수$(dependent\ variable)$: 분석의 대상이 되는 변수
  - 머신러닝관점에서 독립변수는 특징$(feature)$, 종속변수는 결정값에 해당
  - 단순회귀분석$(단변량, simple\ regression\ analysis)$
    - 하나의 종속변수와 하나의 독립변수의 관계를 분석
  - 다중회귀분석$(다변량, multiple\ regression\ analysis)$:
    - 하나의 종속변수와 둘 이상의 독립변수간의 관계를 분석

Example

- 기온이 섭씨 1도 올라감에 따라 아이스크림 판매량에 미치는 영향(예측)은?

(단위 : 도, 십만 개)

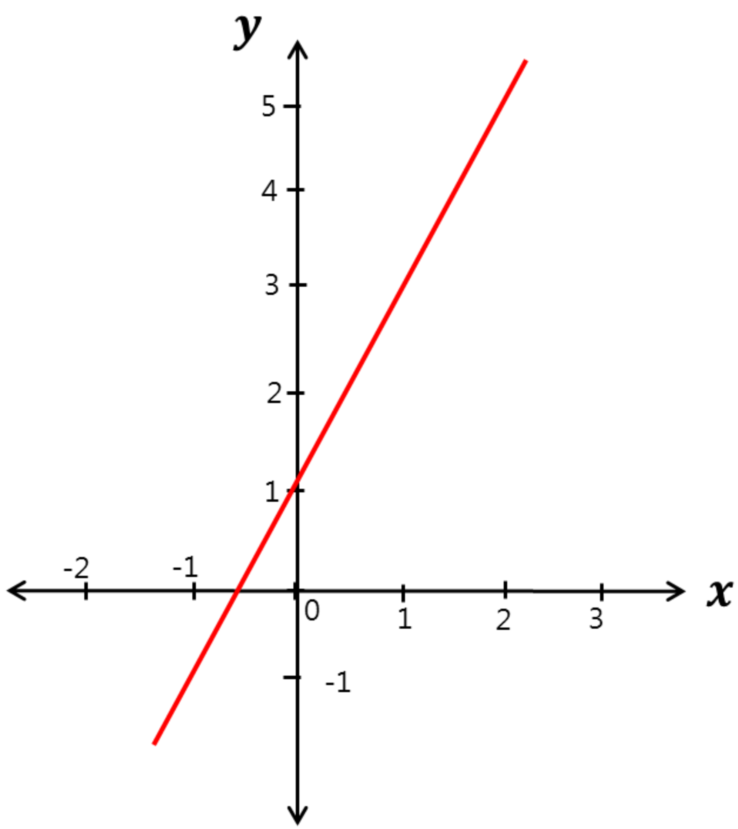
온　도 (X)	23	25	26	27	28	29	30	31	33
판매량 (Y)	29	23	25	28	33	35	36	32	29



- 두 변수 사이에 positive(+) or negative(-)의 관계가 존재
- 두 변수는 선형관계 또는 비선형 관계
- 두 변수 사이에 존재하는 관련성(함수관계)

1차 방정식

- $y = ax + b$
- 기울기$(slope)$: a, Y절편$(intercept)$: b

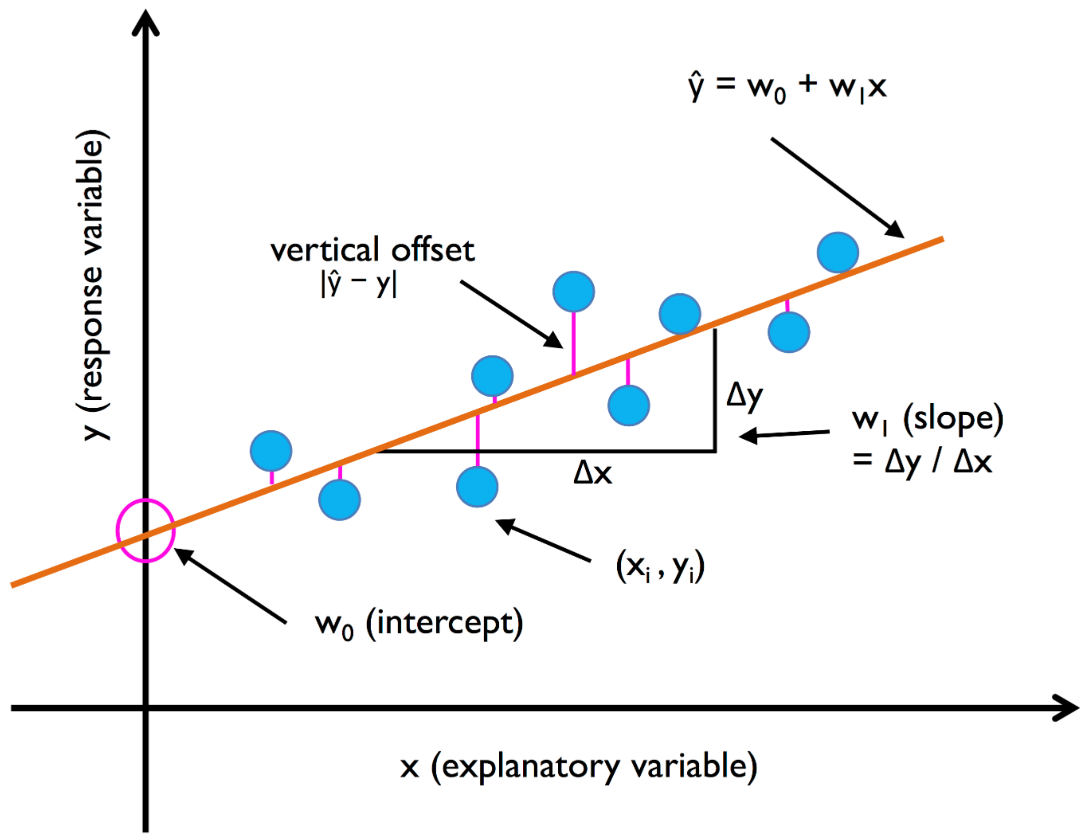


단변량 선형회귀

- 하나의 특성($explanatory\ variable, x$)과 연속적인 타깃($response\ variable, y$) 사이의 관계를 모델링

$$\hat{y} = w_0 + w_1 x$$

- 회귀선(regression line) : 훈련 데이터에 가장 잘 맞는 직선
- 오차 : 회귀선과 훈련데이터 사이의 직선 거리

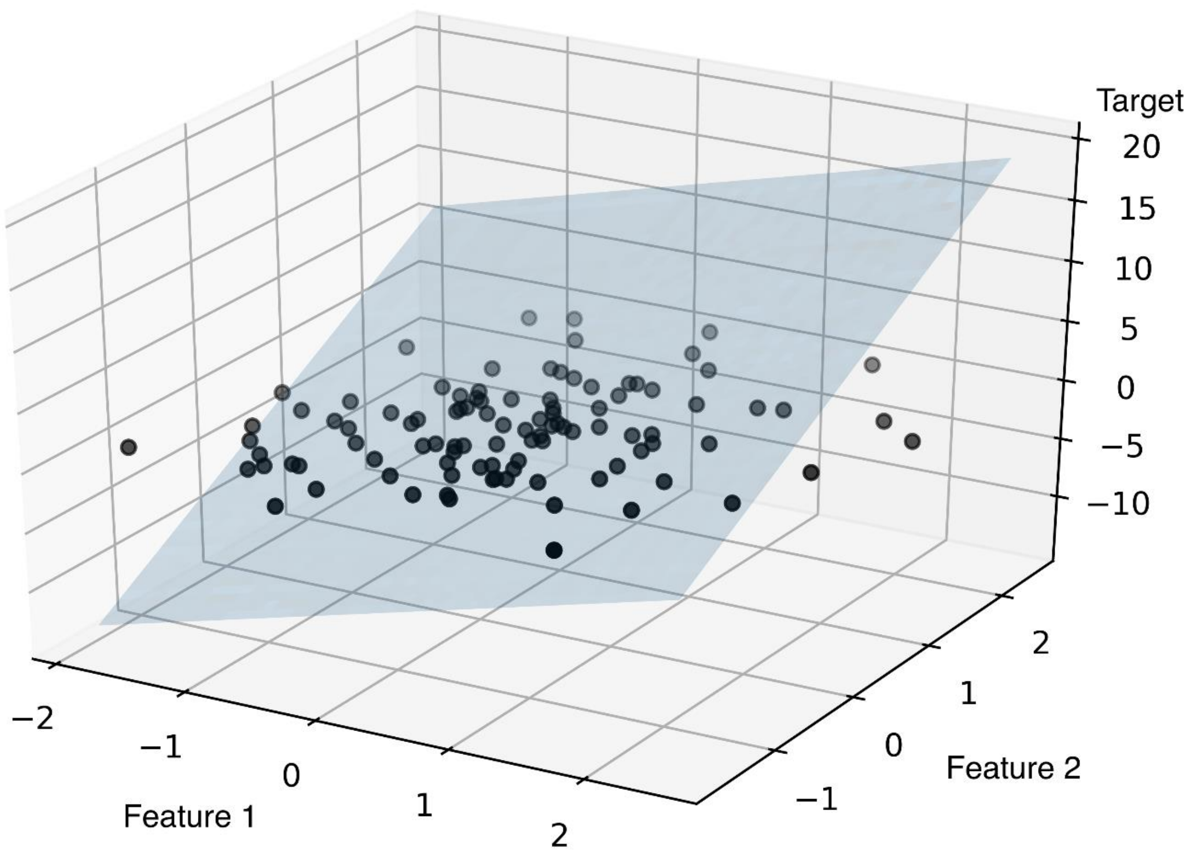


ref : python machine learning 2nd Ed

다변량 선형회귀

- 여러 개의 특성이 있는 경우

$$\hat{y} = w_0 x_0 + w_1 x_1 + \cdots + w_m x_m = \sum_{i=0}^{m} w_i x_i = w^T x$$



선형회귀모델

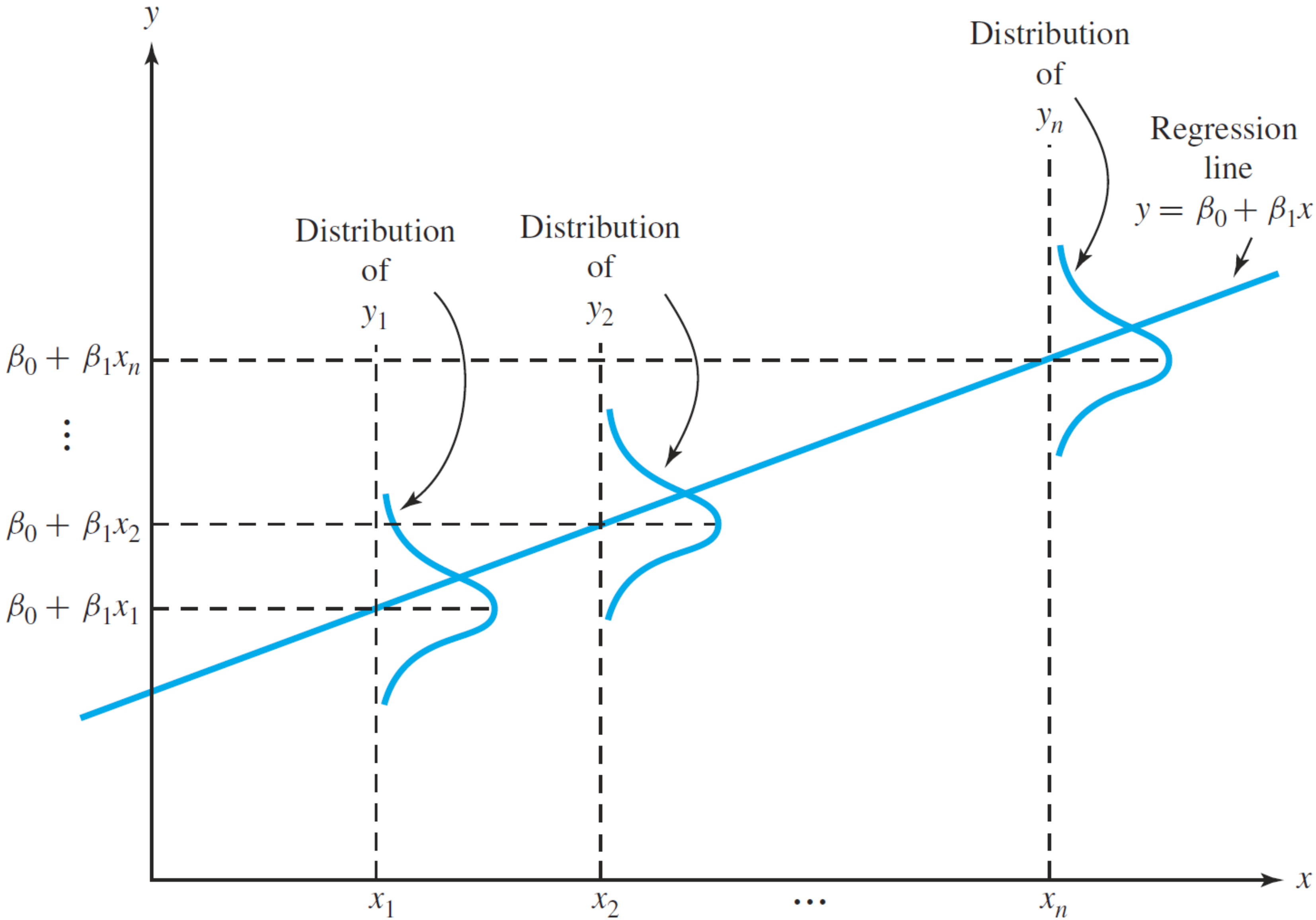
$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i$$

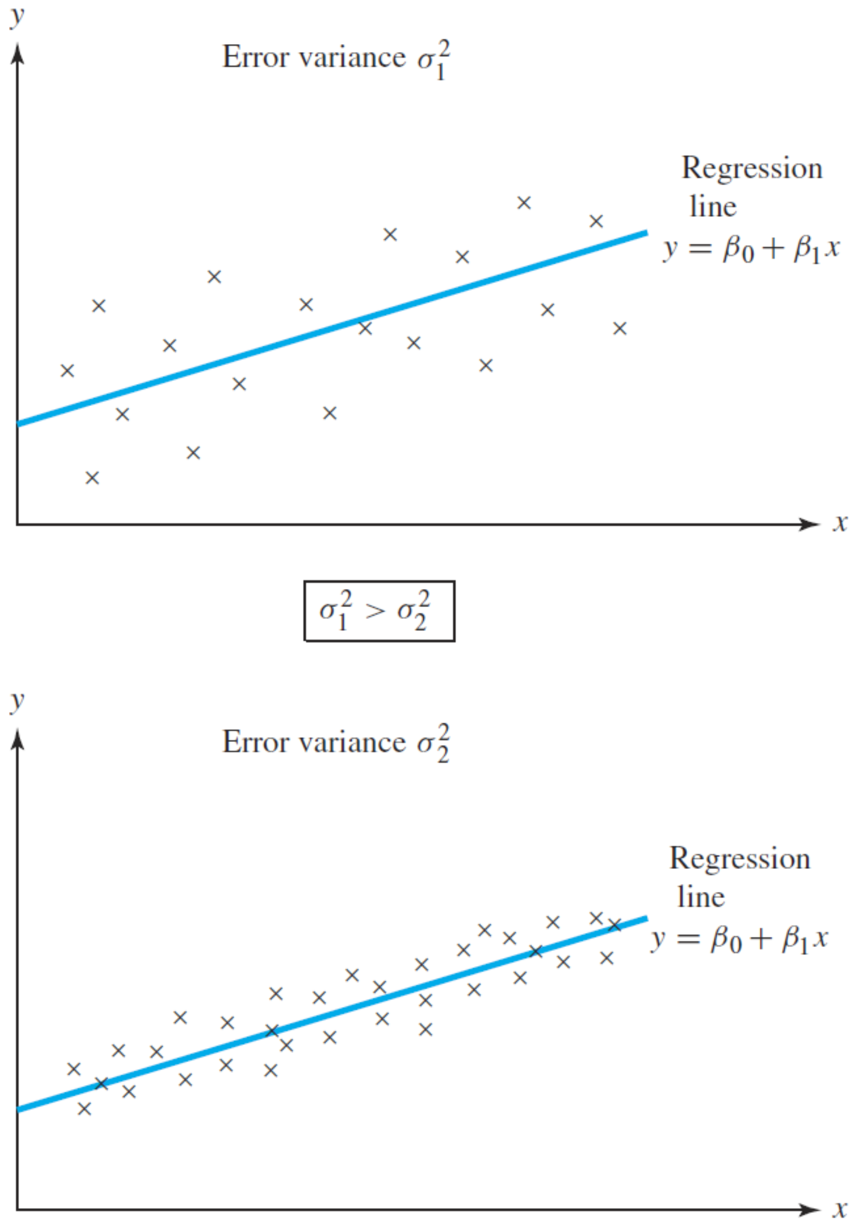
β_0 : 절편(intercept), β_1 : 기울기(slope), ϵ_i : 오차항

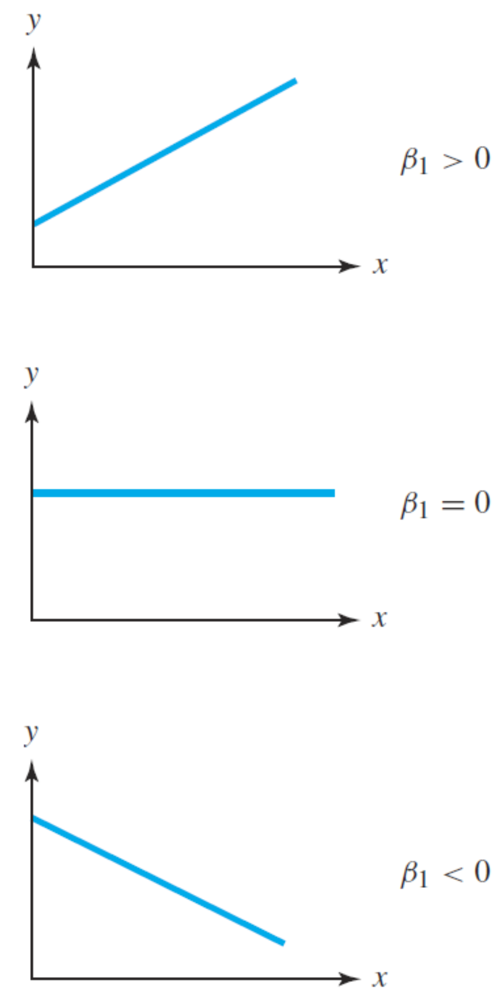
- 오차항 $\epsilon_1, \ldots, \epsilon_n$: 오차분산 σ^2에 대하여 정규분포 한다고 가정 $N(0, \sigma^2)$
  - 평균은 0이다. 실제 관찰 값이 회귀선상에 있는 점을 중심으로 분포되어 있다는 뜻
  - 오차분산 σ^2은 모든 x 값에 동일하다.

- 회귀분석에서 가장 주된 목적은 β_0, β_1 를 찾는 것

❖ 정규분포($normal\ distribution$) : $N(\mu, \sigma^2)$ (평균 μ, 분산 σ^2)

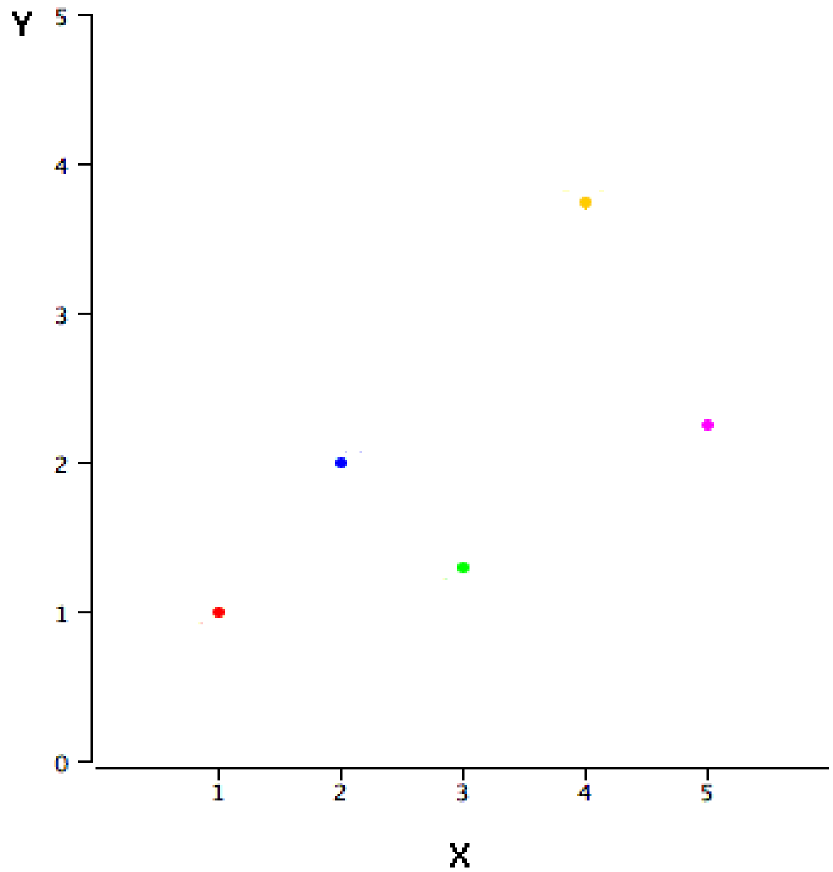

y
Distribution
of
y_n
Regression
line
$y = \beta_0 + \beta_1 x$
Distribution
of
y_1
Distribution
of
y_2
$\beta_0 + \beta_1 x_n$
$\vdots$
$\beta_0 + \beta_1 x_2$
$\beta_0 + \beta_1 x_1$
x_1
x_2
$\cdots$
x_n
x


y
Error variance σ_1^2
Regression line
$y = \beta_0 + \beta_1 x$
x
$\sigma_1^2 > \sigma_2^2$
y
Error variance σ_2^2
Regression line
$y = \beta_0 + \beta_1 x$
x


y
x
$\beta_1 > 0$
y
x
$\beta_1 = 0$
y
x
$\beta_1 < 0$

- **어느 선이 예측 데이터의 최적의 선인가?**
- X에서 Y를 예측한다면, X의 값이 높을 수록 Y의 예측 값도 높다.
- $Y = aX + b$, 기울기(slope) : a, Y절편(intercept) : b

X	Y
1.00	1.00
2.00	2.00
3.00	1.30
4.00	3.75
5.00	2.25



http://onlinestatbook.com/2/regression/intro.html

- 상관계수 : 두 변수들 간의 연관 정도
- m_x : mean of X
- m_y : mean of Y
- s_x : standard deviation of X : $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - m_x)^2}{n-1}}$
- s_y : standard deviation of Y : $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(Y_i - m_y)^2}{n-1}}$
- r : the correlation between X and Y(**Pearson's r**) :

$$\frac{\sum xy}{\sqrt{\sum x^2 \sum y^2}}, \qquad (x = X - m_x, y = Y - m_y)$$

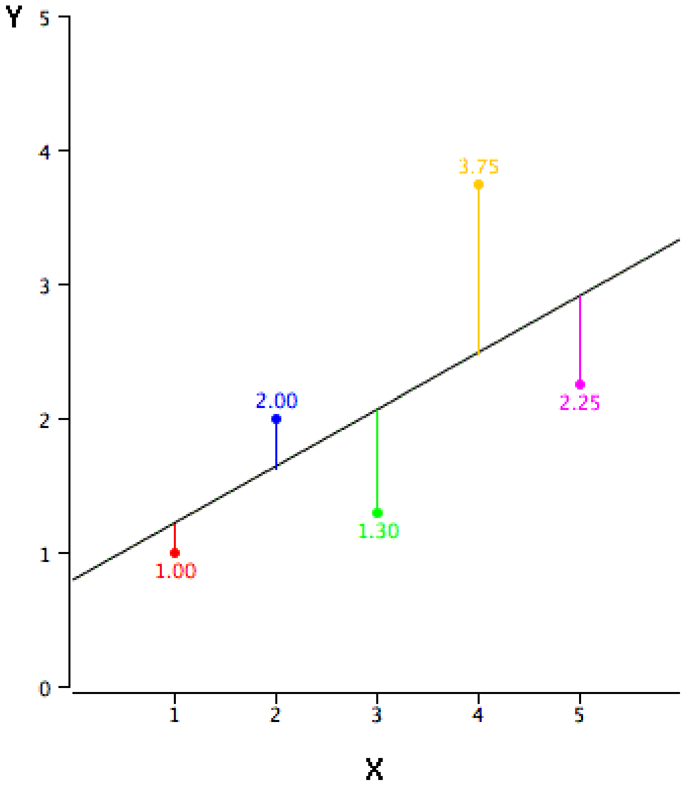
m_x	m_y	s_x	s_y	r
3	2.06	1.581	1.072	0.627

- $slope(a) \; = r \cdot s_x / s_y = (0.627) \cdot (1.072)/1.581 = 0.425$
- $intercept(b) \; = \; m_y - a \cdot m_x = 2.06 - (0.425)(3) = 0.785$

- $\hat{Y}$: *predicted values*
- $Y - \hat{Y}$: *errors of prediction*
- $\hat{Y} = \mathbf{0.425}\boldsymbol{X} + \mathbf{0.786}$
- *Best – fitting line*

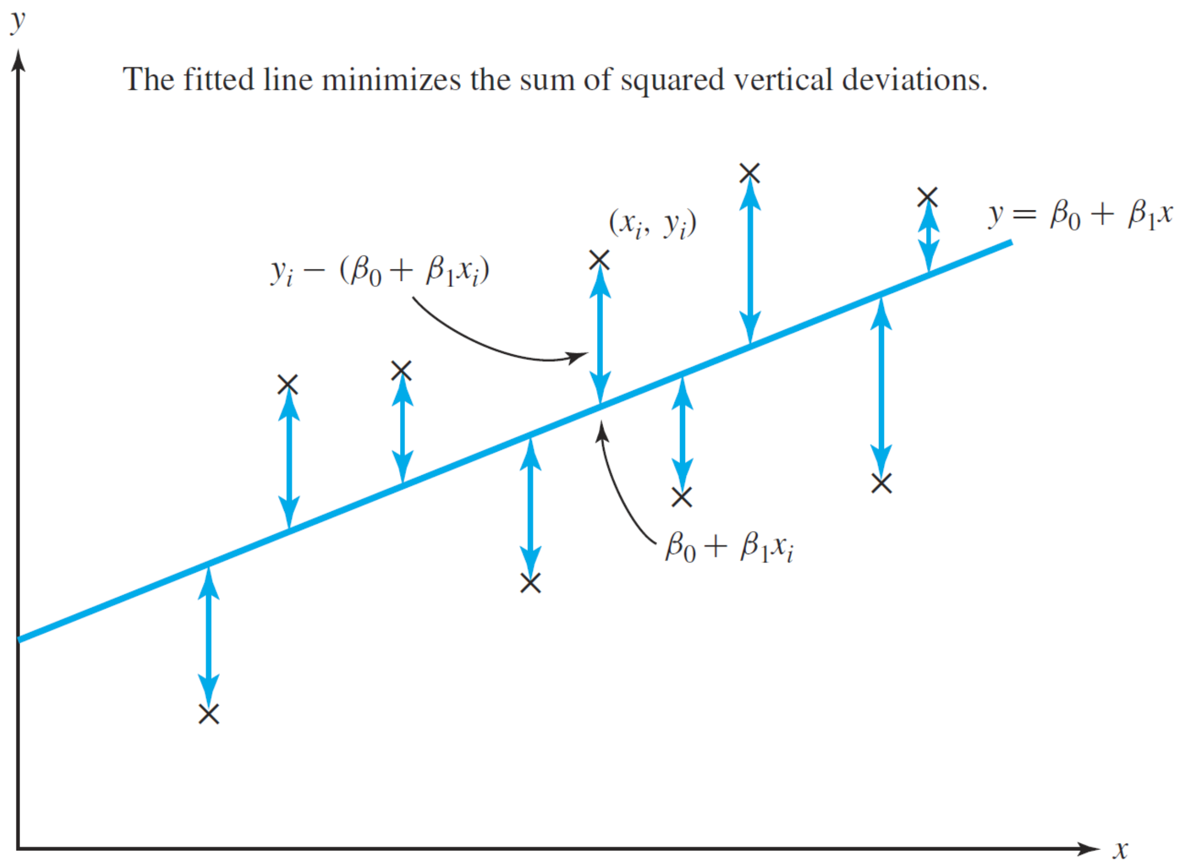
  minimizes *the sum of the squared errors of prediction*.

X	Y	$\hat{Y}$	$Y - \hat{Y}$	$(Y - \hat{Y})^2$
1.00	1.00	1.210	-0.210	0.044
2.00	2.00	1.635	0.365	0.133
3.00	1.30	2.060	-0.760	0.578
4.00	3.75	2.485	1.265	1.600
5.00	2.25	2.910	-0.660	0.436



- 회귀직선 $y = \beta_0 + \beta_1 x$ 를 데이터 $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$에 적합$(fit)$시키는 과정
  - 데이터셋에 가장 근접한 직선을 찾는 과정. 즉, Q를 최소화하는 직선을 선택하는 것

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

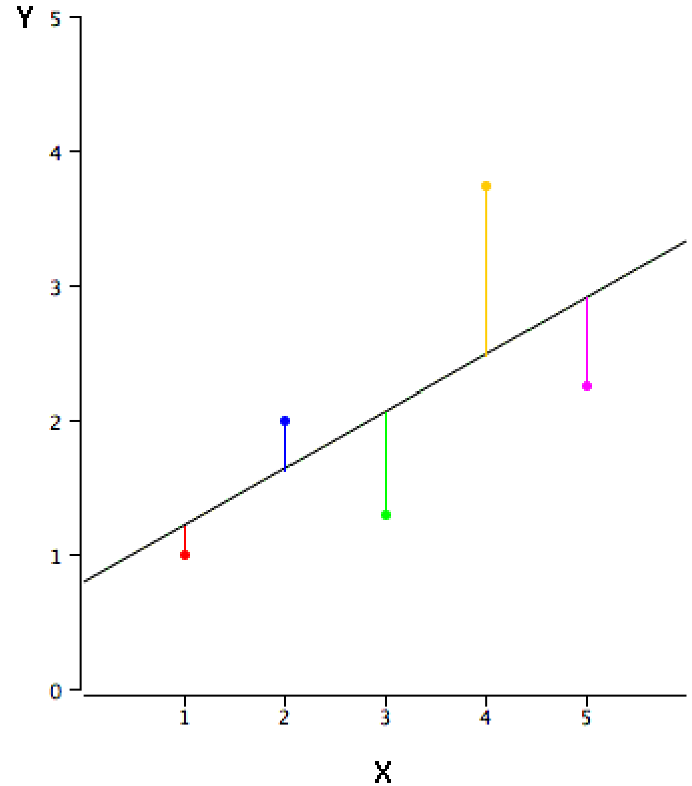


- 실제 값에서 예측 값간의 차이 제곱의 합이 최소일 때의 값을 찾는 방법
  - 실제 값(Y)과 예측된 값($\hat{Y}$)의 차이가 최소가 되어야 한다.
  - 차이는 +, - 상관없이 양수이어야 하므로 제곱을 한다.
  - 차이가 클수록 거리가 더 커진다.

- $(\hat{Y} - Y)^2$ $\quad$ $\hat{y}$: 예측값, Y : 실제 값

$$\frac{(\hat{y}^{(1)} - y^{(1)})^2 + (\hat{y}^{(2)} - y^{(2)})^2 + \cdots + (\hat{y}^{(5)} - y^{(5)})^2}{5}$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{Y}_{(i)} - Y_{(i)})^2$$



http://onlinestatbook.com/2/regression/intro.html

LinearRegression

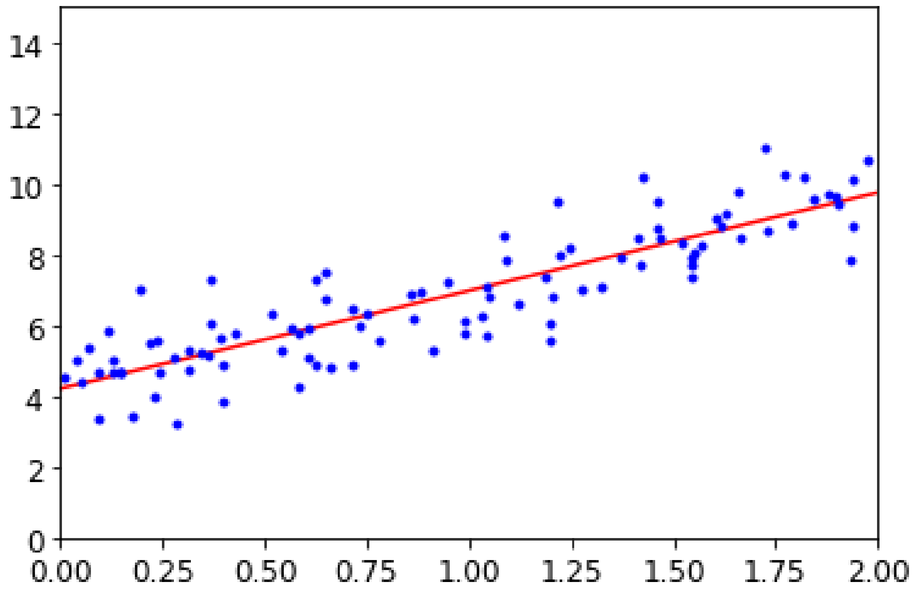

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression

lin_reg = LinearRegression()
lin_reg.fit(X, y)
lin_reg.intercept_, lin_reg.coef_
```

β_0, β_1 (array([4.04967799]), array([[3.01093259]]))

```
X_new = np.array([[0], [2]])
lin_reg.predict(X_new)
```

[0], [1] 의 예측 결과 : array([[4.04967799], [10.07154317]])

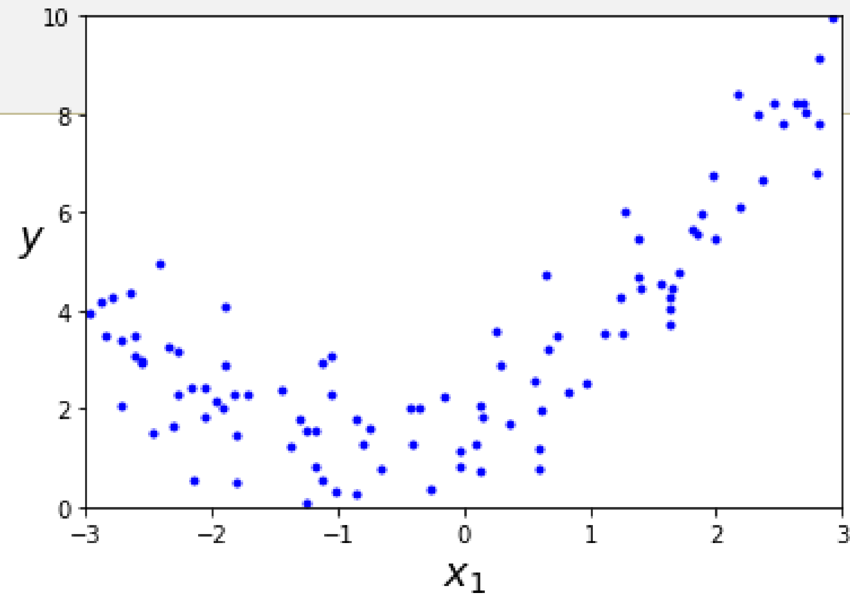


다항회귀


```
import numpy.random as rnd
np.random.seed(42)

# 2차 방정식으로 비선형 데이터 생성
m = 100
X = 6 * np.random.rand(m, 1) - 3
y = 0.5 * X**2 + X + 2 + np.random.randn(m, 1)

plt.plot(X, y, "b.")
plt.xlabel("$x_1$", fontsize=18)
plt.ylabel("$y$", rotation=0, fontsize=18)
plt.axis([-3, 3, 0, 10])
plt.show()
```



```
# 훈련세트에 있는 각 특성을 제곱(2차 다항)하여 새로운 특성 추가
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
poly_features = PolynomialFeatures(degree=2, include_bias=False)
X_poly = poly_features.fit_transform(X)
X[0]
```

array([-0.75275929])

```
X_poly[0]
```

array([-0.75275929, 0.56664654])

```
lin_reg = LinearRegression()
lin_reg.fit(X_poly, y) # X_poly : 원래 특성 x와 새로운 특성 포함
lin_reg.intercept_, lin_reg.coef_
```

(array([1.78134581]), array([[0.93366893, 0.56456263]]))

- 실제함수 : $y = 0.5{x_1}^2 + 1.0x_1 + 2.0$
- 예측모델 : $y = 0.56{x_1}^2 + 0.93x_1 + 1.78$

```
X_new=np.linspace(-3, 3, 100).reshape(100, 1)
X_new_poly = poly_features.transform(X_new)
y_new = lin_reg.predict(X_new_poly)
plt.plot(X, y, "b.")
plt.plot(X_new, y_new, "r-", linewidth=2, label="Predictions")
plt.xlabel("$x_1$", fontsize=18)
plt.ylabel("$y$", rotation=0, fontsize=18)
plt.legend(loc="upper left", fontsize=14)
plt.axis([-3, 3, 0, 10])
plt.show()
```