4.2 선형회귀분석의 기초

회귀분석은 독립변수 x에 대응하는 종속변수 y와 가장 비슷한 값 $\hat{y}$를 출력하는 함수 $f(x)$를 찾는 과정이다.

$$\hat{y} = f(x) \approx y$$

만약 $f(x)$가 다음과 같은 선형함수면 이 함수를 **선형회귀모형(linear regression model)**이라고 한다. 선형회귀모형을 사용하는 회귀분석은 선형회귀분석이라고 한다.

$$\hat{y} = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_D x_D = w_0 + w^T x$$

위 식에서 독립변수 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_D)$는 D차원 벡터다. 가중치 벡터 $w = (w_0, \cdots, w_D)$는 함수 $f(x)$의 계수(coefficient)이자 이 선형회귀모형의 **모수(parameter)**라고 한다.

상수항 결합

회귀분석모형 수식을 간단하게 만들기 위해 다음과 같이 상수항을 독립변수 데이터에 추가하는 것을 **상수항 결합**(bias augmentation)작업이라고 한다.

$$x_i = \begin{bmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ \vdots \\ x_{iD} \end{bmatrix} \rightarrow x_{i,a} = \begin{bmatrix} 1 \\ x_{i1} \\ x_{i2} \\ \vdots \\ x_{iD} \end{bmatrix}$$

상수항 결합을 하게 되면 모든 원소가 1인 벡터가 입력 데이터 행렬에 추가된다.

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1D} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2D} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{ND} \end{bmatrix} \rightarrow X_a = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1D} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2D} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{ND} \end{bmatrix}$$

이렇게 되면 전체 수식이 다음과 같이 상수항이 추가된 가중치 벡터 w와 상수항이 추가된 입력 데이터 벡터 x의 내적으로 간단히 표시된다.

$$f(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_D x_D = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_2 & \cdots & x_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix} = x_a^T w_a = w_a^T x_a$$

일반적으로 선형회귀모형은 항상 상수항 결합을 하기 때문에 특별히 벡터 기호를 x_a 또는 w_a라고 표시하지 않아도 상수항 결합이 되어있는 것으로 볼 수 있다.

statsmodels 패키지는 상수항 결합을 위한 `add_constant` 함수를 제공한다.

In [1]:

```
X0 = np.arange(10).reshape(5, 2)
X0
```

Out[1]:

```
array([[0, 1],
       [2, 3],
       [4, 5],
       [6, 7],
       [8, 9]])
```

In [2]:

```
import statsmodels.api as sm

X = sm.add_constant(X0)
X
```

Out[2]:

```
array([[1., 0., 1.],
       [1., 2., 3.],
       [1., 4., 5.],
       [1., 6., 7.],
       [1., 8., 9.]])
```

최소자승법

최소자승법(OLS: Ordinary Least Squares)는 잔차제곱합(RSS: Residual Sum of Squares)를 최소화하는 가중치 벡터를 구하는 방법이다.

우리가 사용하는 예측 모형은 다음과 같이 상수항이 결합된 선형모형이다.

$$\hat{y} = Xw$$

이때 잔차 벡터(residual vector) e는

$$e = y - \hat{y} = y - Xw$$

이고 잔차 제곱합(RSS:residual sum of squares)은

$$\begin{aligned} \text{RSS} &= e^T e \\ &= (y - Xw)^T (y - Xw) \\ &= y^T y - 2y^T Xw + w^T X^T Xw \end{aligned}$$

이다. 잔차의 크기(잔차 제곱합)를 가장 작게 하는 가중치 벡터를 구하기 위해 이 식을 미분하여 잔차 제곱합의 그레디언트(gradient) 벡터를 구하면 다음과 같다.

$$\dfrac{d\text{RSS}}{dw} = -2X^T y + 2X^T Xw$$

잔차가 최소가 되는 최적화 조건은 그레디언트 벡터가 0벡터이어야 하므로 다음 식이 성립한다.

$$\dfrac{d\text{RSS}}{dw} = 0$$

$$X^T X w^* = X^T y$$

만약 $X^T X$ 행렬의 역행렬이 존재한다면 다음처럼 최적 가중치 벡터 w^*를 구할 수 있다.

$$w^* = (X^T X)^{-1} X^T y$$

$X^T X$ 행렬의 역행렬이 존재하고 위에서 구한 값이 최저값이 되려면 잔차 제곱합의 헤시안 행렬인 $X^T X$가 양의 정부호(positive definite)이어야 한다.

$$\frac{d^2 \text{RSS}}{dw^2} = 2X^T X > 0$$

X의 각 행렬이 서로 독립(X가 풀랭크)이 아니면 $X^T X$가 양의 정부호가 아니고 역행렬이 존재하지 않으므로 위와 같은 해를 구할 수 없다.

직교 방정식

여기에서 그레디언트가 0벡터가 되는 관계를 나타내는 다음 식을 **직교 방정식(normal equation)**이라고 한다.

$$X^T y - X^T X w = 0$$

$$X^T (y - Xw) = 0$$

$$X^T e = 0$$

즉, c_d가 모든 데이터의 d번째 차원의 원소로 이루어진 데이터 벡터(특징 행렬의 열벡터)라고 할 때 모든 차원 $d \ (d = 0, \ldots, D)$에 대해 c_d는 잔차 벡터 e와 직교다.

$$c_d^T e = 0 \quad (d = 0, \ldots, D)$$

또는

$$c_d \perp e \quad (d = 0, \ldots, D)$$

직교 방정식으로부터 다음과 같은 성질을 알 수 있다.

(1) 모형에 상수항이 있는 경우에 잔차 벡터의 원소의 합은 0이다. 즉, 잔차의 평균은 0이다.

$$\sum_{i=0}^{N} e_i = 0$$

(2) x 데이터의 평균값 $\bar{x}$에 대한 예측값은 y 데이터의 평균값 $\bar{y}$이다.

$$\bar{y} = w^T \bar{x}$$

1번 성질은 상수항 결합이 되어 있으면 X의 첫번째 열이 1-벡터라는 것을 이용하여 증명할 수 있다.

$$c_0^T e = \mathbf{1}^T e = \sum_{i=0}^{N} e_i = 0$$

2번 성질은 다음처럼 증명한다.

$$
\begin{aligned}
\bar{y} &= \frac{1}{N}\mathbf{1}^T y \\
&= \frac{1}{N}\mathbf{1}^T (Xw + e) \\
&= \frac{1}{N}\mathbf{1}^T Xw + \frac{1}{N}\mathbf{1}^T e \\
&= \frac{1}{N}\mathbf{1}^T Xw \\
&= \frac{1}{N}\mathbf{1}^T \begin{bmatrix} c_1 & \cdots & c_M \end{bmatrix} w \\
&= \begin{bmatrix} \frac{1}{N}\mathbf{1}^T c_1 & \cdots & \frac{1}{N}\mathbf{1}^T c_D \end{bmatrix} w \\
&= \begin{bmatrix} \bar{c}_1 & \cdots & \bar{c}_D \end{bmatrix} w \\
&= \bar{x}^T w
\end{aligned}
$$

NumPy를 이용한 선형 회귀분석

이제 NumPy의 선형대수 기능을 사용하여 OLS 방법으로 선형 회귀분석을 해보자. 우선 `make_regression` 명령을 사용하여 다음과 같이 1차원 특징 데이터 x와 이 값에 의존하는 y를 만든다.

In [3]:

```
from sklearn.datasets import make_regression

bias = 100
X0, y, w = make_regression(
    n_samples=200, n_features=1, bias=bias, noise=10, coef=True, random_state=1
)
X = sm.add_constant(X0)
y = y.reshape(len(y), 1)
```

우리가 준 바이어스 값은 100이고 `make_regression` 명령이 생성한 모수 값은 다음과 같다.

In [4]:

```
w
```

Out[4]:

```
array(86.44794301)
```

따라서 x와 y는 다음과 같은 관계를 가진다.

$$y = 100 + 86.44794301x + \epsilon$$

위에서 구한 수식을 이용하여 선형회귀 계수를 추정하면 다음과 같다.

In [5]:

```
# OLS 해를 직접 이용하는 방법
w = np.linalg.inv(X.T @ X) @ X.T @ y
w
```

Out[5]:

```
array([[99.79150869],
       [86.96171201]])
```

즉, 최소자승법으로 구한 선형회귀모형은 다음과 같다.

$$\hat{y} = 99.79150869 + 86.96171201x$$

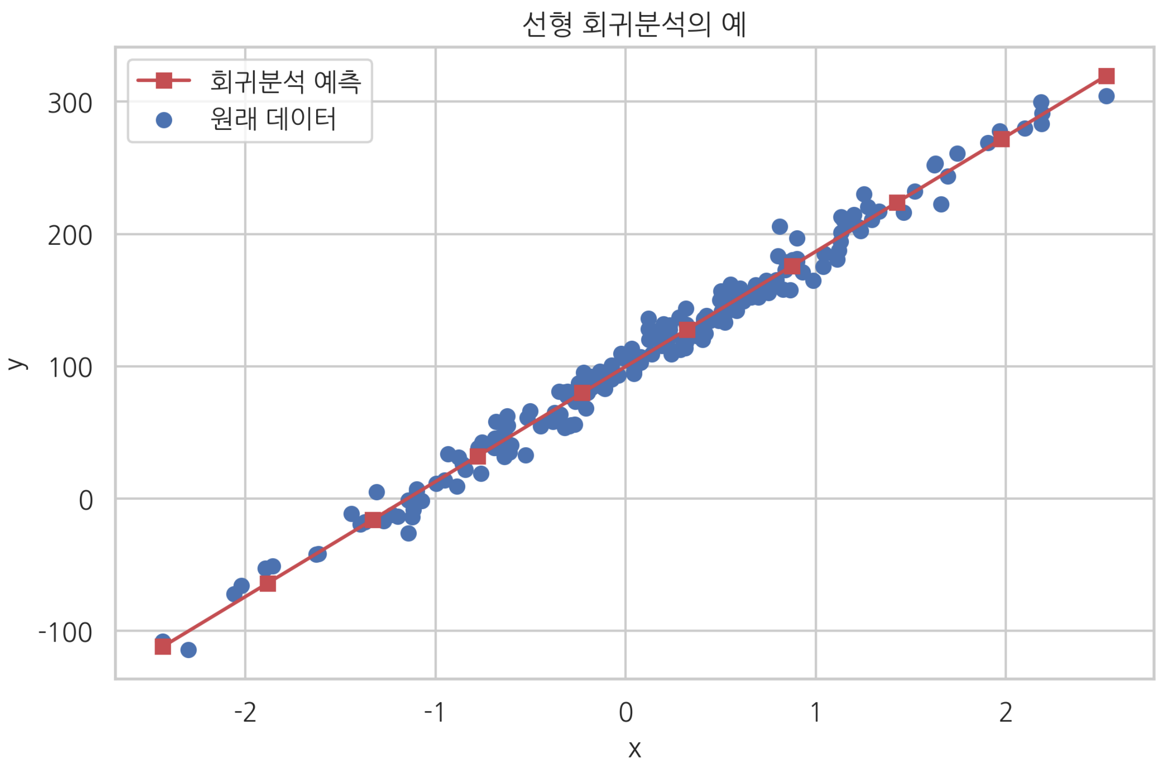
이 결과에서 알 수 있는 것은 선형 회귀를 통해 구한 가중치 벡터는 **정답과 비슷하지만 똑같지는 않다**는 점이다.

이 식에 여러가지 x값을 대입하여 $\hat{y}$을 구해본 결과를 원래 데이터와 비교하면 다음 그림과 같다.

In [6]:

```
x_new = np.linspace(np.min(X0), np.max(X0), 10)
X_new = sm.add_constant(x_new)  # 상수항 결합
y_new = np.dot(X_new, w)

plt.scatter(X0, y, label="원래 데이터")
plt.plot(x_new, y_new, 'rs-', label="회귀분석 예측")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("y")
plt.title("선형 회귀분석의 예")
plt.legend()
plt.show()
```



scikit-learn 패키지를 사용한 선형 회귀분석

scikit-learn 패키지를 사용하여 선형 회귀분석을 하는 경우에는 `linear_model` 서브 패키지의 `LinearRegression` 클래스를 사용한다. 사용법은 다음과 같다.

(1) `LinearRegression` 클래스 객체를 생성한다.

```
model = LinearRegression(fit_intercept=True)
```

`fit_intercept` 인수는 모형에 상수항이 있는가 없는가를 결정하는 인수이다. 디폴트 값이 `True` 다. 만약 상수항이 없으면 `fit_intercept=False` 로 설정한다.

(2) `fit` 메서드로 가중치 값을 추정한다. 상수항 결합을 자동으로 해주므로 사용자가 직접 `add_constant` 등의 명령를 써서 상수항 결합을 할 필요는 없다.

```
model = model.fit(X, y)
```

`fit` 메서드를 호출하면 모형 객체는 다음과 같은 속성을 가지게 된다. 또한 `fit` 메서드는 객체 자신을 반환한다.

- `coef_` : 추정된 가중치 벡터
- `intercept_` : 추정된 상수항

(3) `predict` 메서드로 새로운 입력 데이터에 대한 출력 데이터 예측

```
y_new = model.predict(x_new)
```

위 예제를 `LinearRegression` 클래스로 선형회귀를 하면 다음과 같다.

In [7]:

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression

model = LinearRegression().fit(X0, y)
print(model.intercept_, model.coef_)
```

```
[99.79150869] [[86.96171201]]
```

`predict` 메서드를 사용하면 새로운 x_{new} 값에 대응하는 y 값을 예측할 수 있다. x_{new} 값으로 2차원 배열을 써야한다는 점을 주의한다.

In [8]:

```
model.predict([[-2], [-1], [0], [1], [2]])
```

Out[8]:

```
array([[-74.13191534],
       [ 12.82979668],
       [ 99.79150869],
       [186.7532207 ],
       [273.71493272]])
```

statsmodels 패키지를 사용한 선형 회귀분석

statsmodels 패키지에서는 `OLS` 클래스를 사용하여 선형 회귀분석을 실시한다. `OLS` 클래스 사용법은 다음과 같다.

1. 독립변수와 종속변수가 모두 포함된 데이터프레임 생성. 상수항 결합은 하지 않아도 된다.
2. `OLS` 클래스 객체 생성. 이 때 from_formula 메서드의 인수로 종속변수와 독립변수를 지정하는 formula 문자열을 넣는다. data 인수로는 독립변수와 종속변수가 모두 포함된 데이터프레임을 넣는다.

   ```
   model = OLS.from_formula(formula, data=df)
   ```

   또는 독립변수만 있는 데이터프레임 `dfX` 와 종속변수만 있는 데이터프레임 `dfy` 를 인수로 넣어서 만들 수도 있다. 이 때는 독립변수만 있는 데이터프레임 `dfX` 가 상수항을 가지고 있어야 한다.

   ```
   model = OLS(dfy, dfX)
   ```

3. `fit` 메서드로 모형 추정. scikit-learn 패키지와 달리 추정 결과는 별도의 `RegressionResults` 클래스 객체로 출력된다.

   ```
   result = model.fit()
   ```

4. `RegressionResults` 클래스 객체는 결과 리포트용 `summary` 메서드와 예측을 위한 `prediction` 메서드를 제공한다.

   ```
   print(result.summary())
   ```

   ```
   y_new = result.predict(x_new)
   ```

   이 때, 예측을 위한 데이터는 추정시와 동일하게 상수항 결합을 해 주어야 한다.

위 1차원 데이터 예제를 statsmodels의 `OLS` 명령으로 선형회귀를 하면 다음과 같다. 우선 독립변수와 종속변수가 모두 포함된 데이터프레임 생성. 상수항 결합은 하지 않아도 된다.

In [9]:

```
df = pd.DataFrame({"x": X0[:, 0], "y": y[:, 0]})
df
```

Out[9]:

	x	y
0	0.232495	127.879017
1	-0.038696	93.032914
2	0.550537	161.857508
3	0.503185	141.692050
4	2.186980	283.260119
...	...	...
195	-0.172428	87.874277
196	-1.199268	-13.626664
197	1.462108	216.106619
198	1.131629	212.743149
199	0.495211	150.017589

200 rows × 2 columns

다음으로 모델 객체를 만든다. 독립변수만 있는 데이터프레임 `dfX` 와 종속변수만 있는 데이터프레임 `dfy` 를 인

수로 넣어서 만들 수도 있다. 이 때는 수동으로 상수항 추가를 해주어야 한다.

In [10]:

```
dfy = df[["y"]]
dfX = sm.add_constant(df[["x"]])
model = sm.OLS(dfy, dfX)
result = model.fit()
```

또는 formula 문자열을 사용하여 모형을 만들 수도 있다. formula 문자열을 만드는 방법은 `~` 기호의 왼쪽에 종속변수의 이름을 넣고 `~` 기호의 오른쪽에 독립변수의 이름을 넣는다. 만약 독립변수가 여러개일 경우에는 patsy 패키지의 formula 문자열을 만드는 법을 따른다.

In [11]:

```
model = sm.OLS.from_formula("y ~ x", data=df)
result = model.fit()
```

`RegressionResults` 클래스 객체의 `summary` 메서드는 복잡한 형태의 보고서를 보여준다. 보고서의 자세한 내용에 대해서는 확률적 회귀모형에서 추후 설명한다. 여기에서는 coef 열의 값이 가중치값이라는 것만 알면 된다.

In [12]:

```
print(result.summary())
```

```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                      y   R-squared:                       0.985
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.985
Method:                 Least Squares   F-statistic:                 1.278e+04
Date:                Mon, 18 Nov 2019   Prob (F-statistic):          8.17e-182
Time:                        21:54:22   Log-Likelihood:                -741.28
No. Observations:                 200   AIC:                             1487.
Df Residuals:                     198   BIC:                             1493.
Df Model:                           1
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept     99.7915      0.705    141.592      0.000      98.402     101.181
x             86.9617      0.769    113.058      0.000      85.445      88.479
==============================================================================
Omnibus:                        1.418   Durbin-Watson:                   1.690
Prob(Omnibus):                  0.492   Jarque-Bera (JB):                1.059
Skew:                           0.121   Prob(JB):                        0.589
Kurtosis:                       3.262   Cond. No.                         1.16
==============================================================================

Warnings:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly spe
cified.
```

`RegressionResults` 클래스 객체의 `predict` 메서드를 사용하면 새로운 x_{new} 값에 대응하는 y 값을 예측할 수 있다.

In [13]:

```
result.predict({"x": [-2, -1, 0, 1, 2] })
```

Out[13]:

```
0    -74.131915
1     12.829797
2     99.791509
3    186.753221
4    273.714933
dtype: float64
```

`RegressionResults` 클래스는 분석 결과를 다양한 속성에 저장해주므로 추후 사용자가 선택하여 활용할 수 있다. 자주 사용되는 속성으로는 다음과 같은 것들이 있다.

- `params` : 가중치 벡터
- `resid` : 잔차 벡터

가중치 벡터의 값은 다음처럼 확인한다.

In [14]:

```
result.params
```

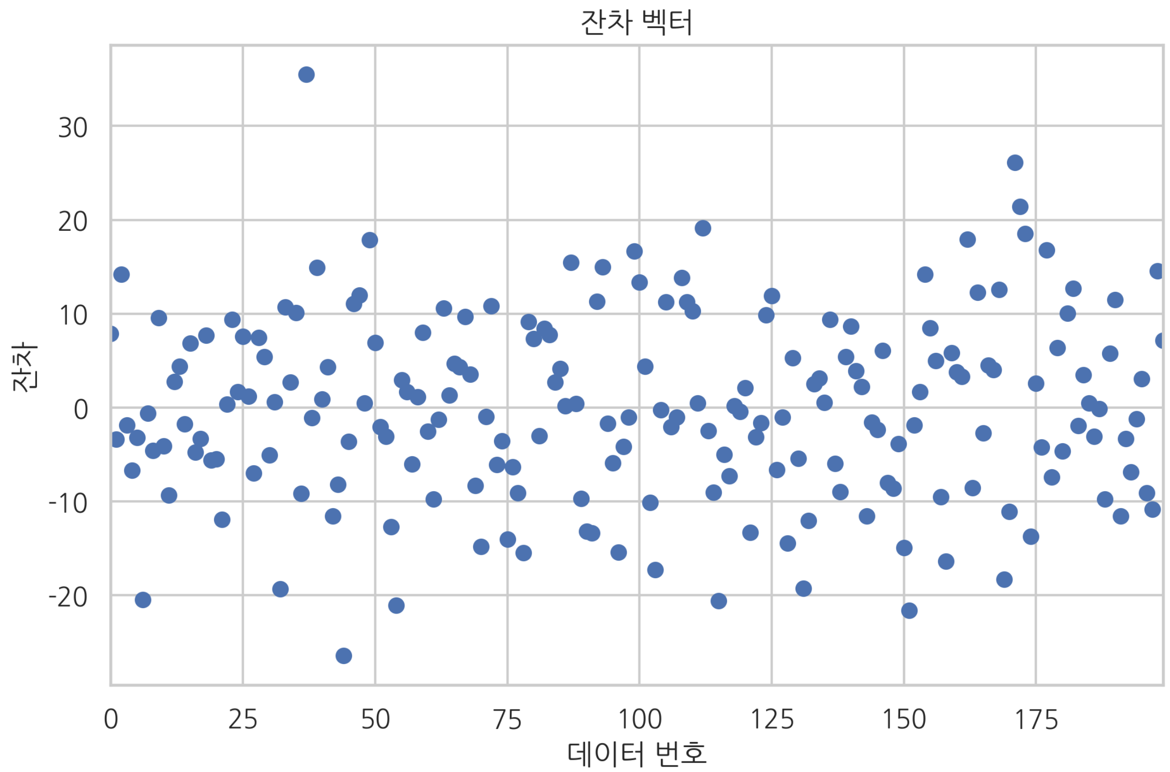
Out[14]:

```
Intercept    99.791509
x            86.961712
dtype: float64
```

잔차 벡터의 형태는 다음과 같다.

In [15]:

```
result.resid.plot(style="o")
plt.title("잔차 벡터")
plt.xlabel("데이터 번호")
plt.ylabel("잔차")
plt.show()
```



직교방정식에서 나온 두 가지 성질이 성립하는지 살펴보자. 우선 잔차의 합을 구하면 0이라는 것을 알 수 있다.

In [16]:

```
result.resid.sum()
```

Out[16]:

```
3.7339020764193265e-12
```

다음으로 x의 평균값을 넣으면 y의 평균값과 같은 값이 나온다는 것도 확인할 수 있다.

In [17]:

```
result.predict({"x": X0.mean()})
```

Out[17]:

```
0     109.069351
dtype: float64
```

In [18]:

```
y.mean()
```

Out[18]:

```
109.06935068170775
```

보스턴 집값 예측

보스턴 집값 데이터를 statsmodels의 `OLS` 명령으로 분석한 결과는 다음과 같다.

In [19]:

```
from sklearn.datasets import load_boston

boston = load_boston()

dfX0 = pd.DataFrame(boston.data, columns=boston.feature_names)
dfX = sm.add_constant(dfX0)
dfy = pd.DataFrame(boston.target, columns=["MEDV"])

model_boston2 = sm.OLS(dfy, dfX)
result_boston2 = model_boston2.fit()
print(result_boston2.summary())
```

```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                   MEDV   R-squared:                       0.741
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.734
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     108.1
Date:                Mon, 18 Nov 2019   Prob (F-statistic):          6.72e-135
Time:                        21:54:23   Log-Likelihood:                -1498.8
No. Observations:                 506   AIC:                             3026.
Df Residuals:                     492   BIC:                             3085.
Df Model:                          13
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
const         36.4595      5.103      7.144      0.000      26.432      46.487
CRIM          -0.1080      0.033     -3.287      0.001      -0.173      -0.043
ZN             0.0464      0.014      3.382      0.001       0.019       0.073
INDUS          0.0206      0.061      0.334      0.738      -0.100       0.141
CHAS           2.6867      0.862      3.118      0.002       0.994       4.380
NOX          -17.7666      3.820     -4.651      0.000     -25.272     -10.262
RM             3.8099      0.418      9.116      0.000       2.989       4.631
AGE            0.0007      0.013      0.052      0.958      -0.025       0.027
DIS           -1.4756      0.199     -7.398      0.000      -1.867      -1.084
RAD            0.3060      0.066      4.613      0.000       0.176       0.436
TAX           -0.0123      0.004     -3.280      0.001      -0.020      -0.005
PTRATIO       -0.9527      0.131     -7.283      0.000      -1.210      -0.696
B              0.0093      0.003      3.467      0.001       0.004       0.015
LSTAT         -0.5248      0.051    -10.347      0.000      -0.624      -0.425
==============================================================================
Omnibus:                      178.041   Durbin-Watson:                   1.078
Prob(Omnibus):                  0.000   Jarque-Bera (JB):              783.126
Skew:                           1.521   Prob(JB):                    8.84e-171
Kurtosis:                       8.281   Cond. No.                     1.51e+04
==============================================================================

Warnings:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly spe
cified.
[2] The condition number is large, 1.51e+04. This might indicate that there are
strong multicollinearity or other numerical problems.
```

따라서 보스턴 집값을 예측하는 식은 다음과 같다.

$$
\begin{aligned}
y = & \; 36.4595 - 0.1080\,\text{CRIM} + 0.0464\,\text{ZN} + 0.0206\,\text{INDUS} + 2.6867\,\text{CHAS} \\
& - 17.7666\,\text{NOX} + 3.8099\,\text{RM} + 0.0007\,\text{AGE} - 1.4756\,\text{DIS} + 0.3060\,\text{RAD} \\
& - 0.0123\,\text{TAX} - 0.9527\,\text{PTRATIO} + 0.0093\,\text{B} - 0.5248\,\text{LSTAT}
\end{aligned}
$$