비선형회귀모형들

이재용,임요한

서 울 대 학 교
통 계 학 과

2017년 8월

노트. 다루는 내용 I

이 장에서는 선형회귀보다 일반적인 비선형 회귀모형을 다룬다. 다음과 같은 내용을 다룬다.

1. 다항회귀
2. 계단함수
3. 회귀 스플라인
4. 평활 스플라인
5. 국소회귀
6. 일반화가법모형

다항회귀 I

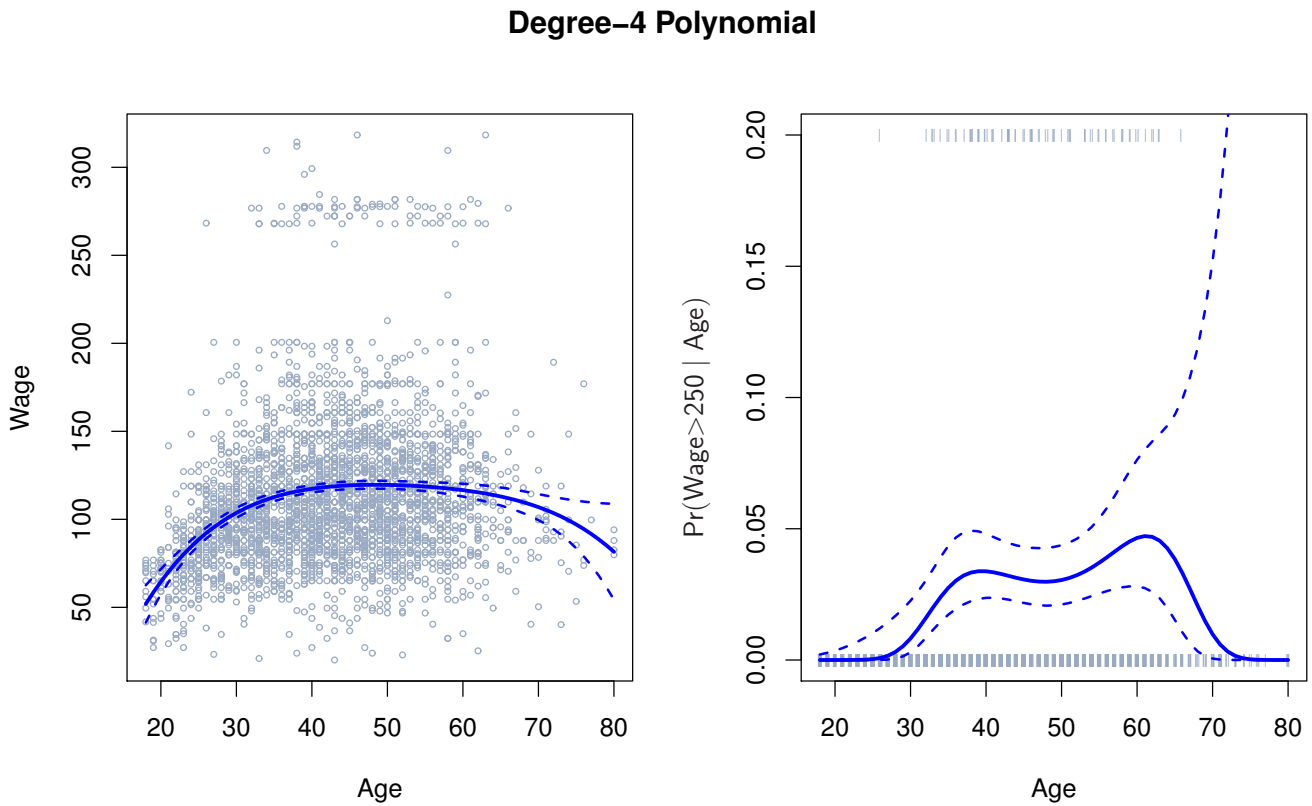
d차 다항회귀모형

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \ldots + \beta_d x_i^d + \epsilon_i, \ \epsilon_i \sim (0, \sigma^2), i = 1, 2, \ldots, n$$

특성들

1. 가장 간단하게 x의 비선형 회귀 함수를 표현할 수 있는 방법이다.
2. 4차가 넘어가면 함수의 모양이 너무 유연해져서, (특히 설명변수의 경계영역에서) 이상한 모양이 될 수 있다. 4차 이상의 모형은 잘 쓰지 않는다.

다항회귀 II



노트. 다항회귀 I

그림

1. ISLR 패키지에 있는 Wage 자료이다. 이 자료는 미국 중부아틀란틱 주(mid-atlantic states, 뉴잉글랜드와 남부 아틀란틱 사이의 주들로 New York, New Jersey, Pennsylvania, Delaware, Maryland, Washington D.C., Virginia, and West Virginia를 말한다. 기상에 관한 경우에 코네티컷을 포함하기도 한다.)들의 3000명의 연봉을 기록한 자료이다. 12개의 변수가 있다.
    1.1 year 연봉이 기록된 해
    1.2 age 노동자의 나이
    1.3 sex 성별
    1.4 maritl 결혼상태를 나타내는 팩터. 레벨의 의미는 다음과 같다. 1. Never Married 2. Married 3. Widowed 4. Divorced and 5. Separated.
    1.5 race 인종을 나타내는 팩터. 레벨의 의미 1. White 2. Black 3. Asian and 4. Other indicating race
    1.6 education 교육을 나타내는 팩터. 레벨의 의미 1. < HS Grad 2. HS Grad 3. Some College 4. College Grad and 5. Advanced Degree
    1.7 region 지역을 나타내는데, 이 경우 중부 아틀란틱만 있다.

노트. 다항회귀 II

1.8 jobclass 직종의 형태를 나타내는 팩터. 레벨의 의미 1. Industrial and 2. Information

1.9 health 건강상태를 나타내는 팩터. 레벨의 의미 1. <=Good and 2. >=Very Good

1.10 health_ins 건강보험 가입 여부를 나타내는 팩터. 레벨의 의미 1. Yes and 2. No

1.11 logwage 연봉에 로그를 취한 값

1.12 wage 연봉

2. 그림의 왼쪽은 4차 다항회귀모형을 적합한 그림이다. 점선은 추정량 $\pm 2\times$ 표준오차를 표현한다.

3. 그림의 오른쪽은 25만달라 이상의 연봉을 받은 사람들의 확률을 로지스틱 모형으로 추정한 것이다. 즉,

$$\mathbb{P}(y > 250|x) = \frac{e^{\beta_0+\beta_1 x+\ldots+\beta_4 x^4}}{1+e^{\beta_0+\beta_1 x+\ldots+\beta_4 x^4}}$$

다항회귀 R 코드 I

다항회귀모형의 적합

```
library(ISLR)
attach(Wage)
```

패키지를 로드한다. 이 예는 임금자료로 분석을 한다.

```
fit=lm(wage~poly(age,4),data=Wage)
coef(summary(fit))
```

```
##                 Estimate Std. Error    t value     Pr(>|t|)
## (Intercept)    111.70361  0.7287409 153.283015 0.000000e+00
## poly(age, 4)1  447.06785 39.9147851  11.200558 1.484604e-28
## poly(age, 4)2 -478.31581 39.9147851 -11.983424 2.355831e-32
## poly(age, 4)3  125.52169 39.9147851   3.144742 1.678622e-03
## poly(age, 4)4  -77.91118 39.9147851  -1.951938 5.103865e-02
```

poly 함수는 주어진 변수와 차수로 직교다항함수기저를 이용해 계획행렬을 생성한다.

다항회귀 R 코드 II

```
fit2=lm(wage~poly(age,4,raw=T),data=Wage)
coef(summary(fit2))

##                             Estimate   Std. Error   t value     Pr(>|t|)
## (Intercept)            -1.841542e+02 6.004038e+01 -3.067172 0.0021802539
## poly(age, 4, raw = T)1  2.124552e+01 5.886748e+00  3.609042 0.0003123618
## poly(age, 4, raw = T)2 -5.638593e-01 2.061083e-01 -2.735743 0.0062606446
## poly(age, 4, raw = T)3  6.810688e-03 3.065931e-03  2.221409 0.0263977518
## poly(age, 4, raw = T)4 -3.203830e-05 1.641359e-05 -1.951938 0.0510386498
```

직교다항함수기저가 아니라 다항함수 그 자체로 계획행렬을 생성하려면 아래와 같은 옵션을 쓰면 된다.

```
fit2a=lm(wage~age+I(age^2)+I(age^3)+I(age^4),data=Wage)
coef(fit2a)
fit2b=lm(wage~cbind(age,age^2,age^3,age^4),data=Wage)
```

위와 동일한 결과를 준다.

다항회귀 R 코드 III

예측과 그림 그리기

```
agelims=range(age)
age.grid=seq(from=agelims[1],to=agelims[2])
```

변수 age의 최대값과 최소값을 구하고, 그 것을 이용해 격자값을 구한다. 이 격자값들에서 예측값을 생성하려고 한다.

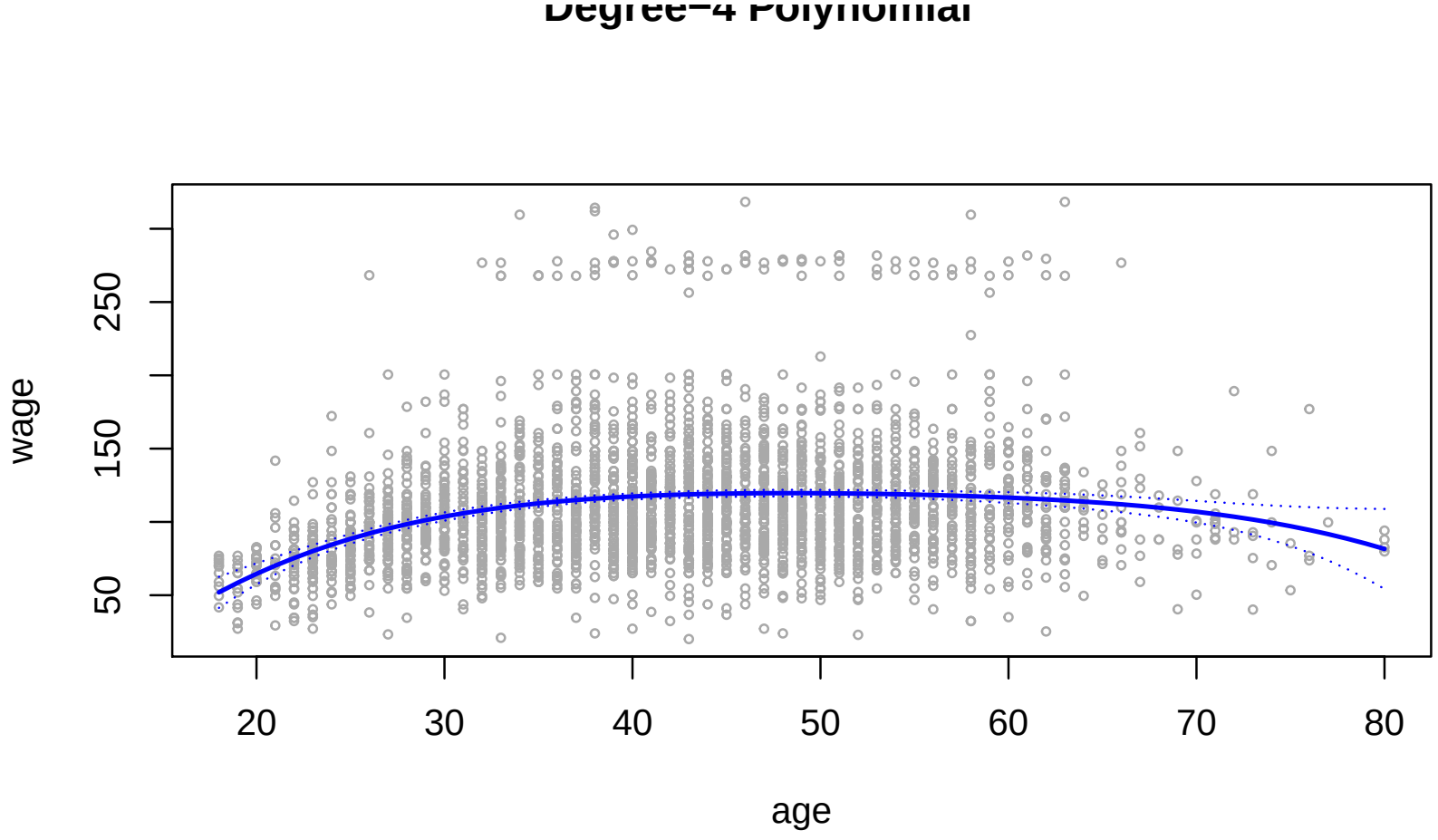
```
preds=predict(fit,newdata=list(age=age.grid),se=TRUE)
se.bands=cbind(preds$fit+2*preds$se.fit,preds$fit-2*preds$se.fit)
```

격자값에서 예측값을 구하고, 함수추정량의 표준오차를 이용해서 신뢰구간의 밴드를 구했다.

```
plot(age,wage,xlim=agelims,cex=.5,col="darkgrey")
title("Degree-4 Polynomial",outer=T)
lines(age.grid,preds$fit,lwd=2,col="blue")
matlines(age.grid,se.bands,lwd=1,col="blue",lty=3)
```

line width

다항회귀 R 코드 IV



그림을 그린다.

노트.

다항회귀 R 코드 V

1. cex는 글자와 심볼의 척도를 나타낸다. 1은 디폴트 크기이고 0.5는 디폴트 크기의 절반, 1.5는 1.5배인 것이다.
2. lwd는 선의 굵기를 나타내는 척도로 1은 디폴트 굵기, 1.5는 디폴트의 1.5배를 의미한다.

계단함수를 이용한 회귀모형 I

x를 범주형변수들로 변환

$c_1 < c_2 < \ldots < c_K$를 x의 범위의 구분점들이라 하자. 다음과 같이 범주형 변수들을 정의한다.

$$
\begin{aligned}
C_0(x) &= I(x < c_1) \\
C_1(x) &= I(c_1 \le x < c_2) \\
&\ddots \\
C_{K-1}(x) &= I(c_{K-1} \le x < c_K) \\
C_K(x) &= I(c_K \le x).
\end{aligned}
$$

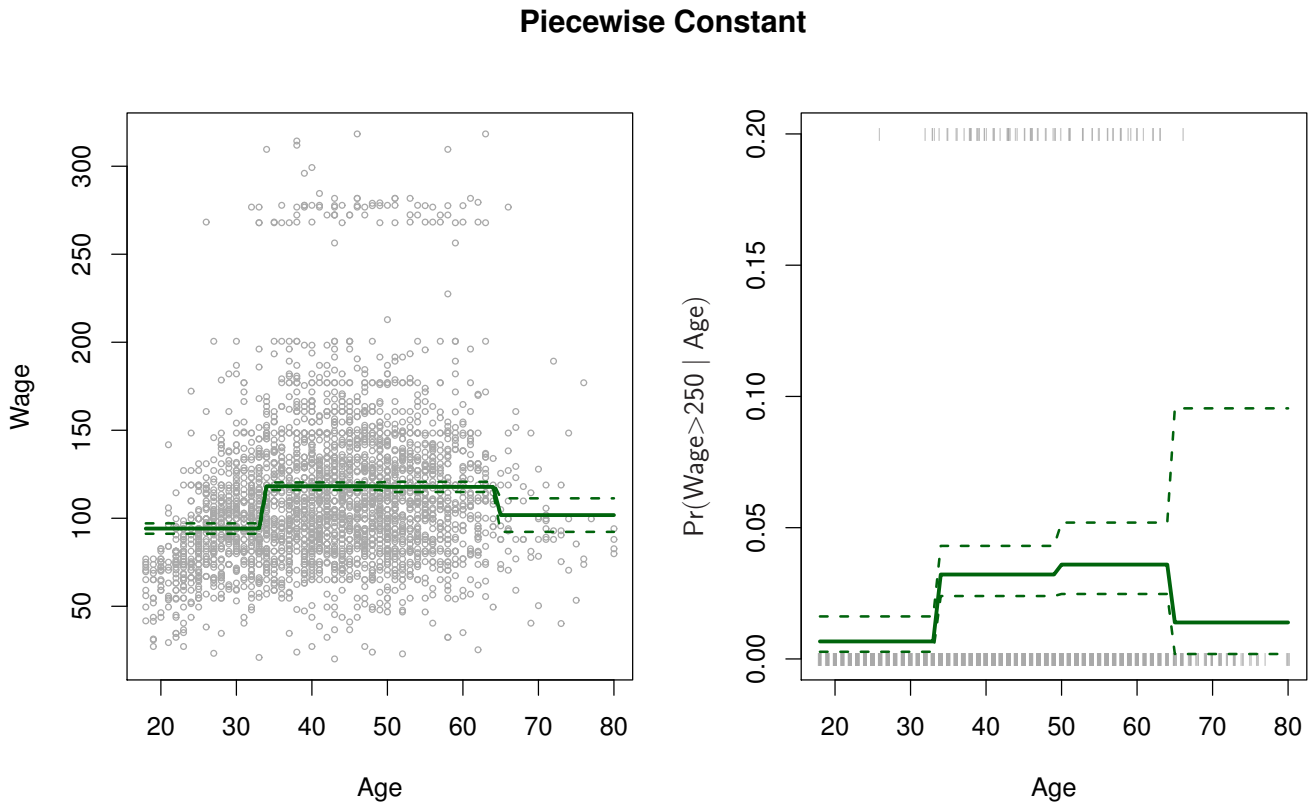
계단함수를 이용한 회귀모형

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 C_1(x_i) + \beta_2 C_2(x_i) + \ldots + \beta_K C_K(x_i) + \epsilon_i,\ \epsilon_i \sim (0, \sigma^2), i = 1, 2, \ldots, n$$

계단함수를 이용한 회귀모형 II

참고사항

1. $C_0(x) + C_1(x) + \ldots + C_K(x) = 1, \ \forall x$이어서, 모형에서 $C_0(x)$는 포함하지 않았다.



노트. 계단함수 I

그림

1. 그림의 왼쪽은 계단함수를 이용한 회귀모형을 적합한 그림이다. 점선은 추정량 $\pm 2\times$ 표준오차를 표현한다.
2. 그림의 오른쪽은 25만달라 이상의 연봉을 받은 사람들의 확률을 계단함수를 이용한 로지스틱 모형으로 추정한 것이다. 즉,

$$\mathbb{P}(y > 250|x) = \frac{e^{\beta_0+\beta_1 C_1(x)+\ldots+\beta_4 C_4(x)}}{1+e^{\beta_0+\beta_1 C_1(x)+\ldots+\beta_4 C_4(x)}}$$

계단함수를 이용한 회귀모형 R 코드 I

```
table(cut(Wage$age,4))

##
## (17.9,33.5]   (33.5,49]   (49,64.5] (64.5,80.1]
##         750        1399         779          72

fit=lm(wage~cut(age,4),data=Wage)
coef(summary(fit))

##                         Estimate Std. Error   t value     Pr(>|t|)
## (Intercept)             94.158392   1.476069 63.789970 0.000000e+00
## cut(age, 4)(33.5,49]    24.053491   1.829431 13.148074 1.982315e-38
## cut(age, 4)(49,64.5]    23.664559   2.067958 11.443444 1.040750e-29
## cut(age, 4)(64.5,80.1]   7.640592   4.987424  1.531972 1.256350e-01
```

노트.

cut(age, 4)는 변수 age를 4개의 영역으로 나눠준다. 격자의 분리점을 정하고 싶으면 breaks 옵션을 쓰면 된다.

기저함수(basis function)를 이용한 회귀모형 I

기저함수를 이용한 회귀모형

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 b_1(x_i) + \beta_2 b_2(x_i) + \ldots + \beta_K b_K(x_i) + \epsilon_i,\ \epsilon_i \sim (0, \sigma^2), i = 1, 2, \ldots, n$$

여기서, $b_1, \ldots, b_K$는 기저함수이다.

참고사항

1. 다항회귀모형과 계단함수를 이용한 회귀모형도 기저함수를 이용한 회귀모형으로 볼 수 있다.
2. 이 외에도 푸리에 기저(Fourier basis), 웨이블렛 기저(wavelet basis) 등을 사용할 수 있다.

회귀스플라인(regression spline) I

동기

1. 다항회귀모형의 문제점 : 다항회귀모형을 이용해서 모형의 유연성을 높이려면 다항식의 차수를 높여야 한다. 그런데 차수를 높이면 원치 않는 모양의 이상한 회귀함수 모양이 나타날 수 있다. 이는 어떤 관측치가 멀리 떨어진 곳의 함수 추정량에도 영향을 미치기 때문이다.
2. 계단함수의 문제점 : 이를 극복하기 위해서는 계단함수 같은 기저함수를 이용하면 된다. 그런데, 계단함수는 연속함수에 적용할 수 없다.
3. 스플라인 모형: 위의 문제점을 해결하기 위해 매듭(knot)으로 나누어진 구간에 낮은 차원의 다항식 모형을 적합하는 것을 고려한다. 조각별 다항식(piecewise polynomial)을 스플라인이라 한다.

회귀스플라인(regression spline) II

회귀스플라인

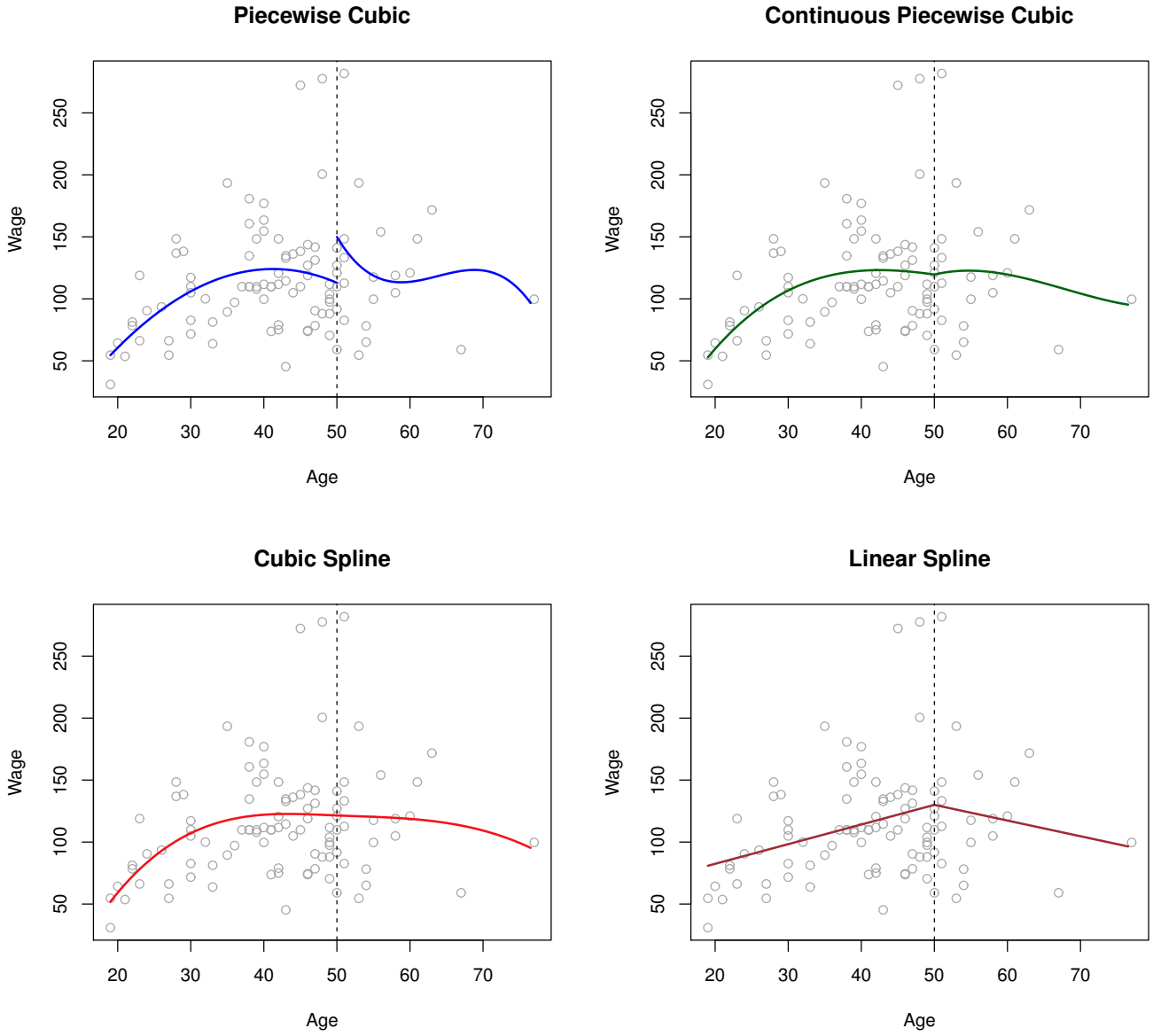
1. 차수가 d이고 매듭이 $\xi_1, \ldots, \xi_K$인 스플라인이란 매듭으로 이루어진 각 구간에서 차수가 d인 다항식이고 $d-1$차 도함수가 연속인 함수를 말한다. 이것들을 회귀스플라인이라고 한다.
2. 3차 스플라인(cubic spline) : 차수가 $d = 3$인 스플라인. 각 구간이 3차 다항식이고, 2차 도함수가 연속. 매듭의 불연속성이 사람의 눈에 보이지 않은 가장 차수가 낮은 스플라인. 이 이상 높은 차수는 사용할 필요가 없다.
3. 1차 스플라인(linear spline) : $d = 1$인 스플라인.
4. 보통 $d = 0, 1, 3$이 가장 많이 사용된다.

회귀스플라인(regression spline) III

노트. 참고.

K개의 매듭을 가진 3차 스플라인은 $K+4$개의 기저가 필요하다. ξ_1보다 작은 구간에서 3차 다항식을 나타내는 4개의 기저가 필요하다. 매듭이 하나 추가될 때 마다 기저가 하나씩 필요하다. 도함수 조건을 고려하지 않으면, 매듭이 하나 추가 될 때, 새로운 3차 다항식이 필요하므로 기저가 4개가 필요하다. 그런데, 2차 도함수까지 연속이어야 하므로, 세 가지 제한조건이 생긴다. 따라서 매듭이 한 개 생길 때마다, 한 개의 기저가 필요하다.

회귀스플라인(regression spline) IV



회귀스플라인(regression spline) V

Generate the B-spline basis matrix for a polynomial spline. bs(x, df = NULL, knots = NULL, degree = 3, intercept = FALSE, Boundary.knots = range(x))

회귀스플라인의 기저 표현

차수가 d이고 매듭이 $\xi_1, \ldots, \xi_K$인 스플라인 모형은

$$\begin{aligned} y_i &= \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \ldots + \beta_d x_i^d \\ &\quad + \beta_{d+1} h(x_i, \xi_1) + \beta_{d+2} h(x_i, \xi_1) + \ldots + \beta_{d+K} h(x_i, \xi_K) + \epsilon_i, \quad \epsilon_i \sim (0, \sigma^2), \end{aligned}$$

과 같이 나타낼 수 있다. 즉, 위 모형의 회귀함수는 매듭으로 구성되는 각 구간에서 d차 다항식이고, 각 매듭에서 $d-1$차 도함수가 연속이다.
여기서

$$h(x, \xi) := (x - \xi)_+^d = \begin{cases} (x-\xi)_+^d, & x > \xi \\ 0, & o.w. \end{cases}$$

노트. 증명.

$d = 3$일 때만 고려하자. $x < \xi$일 때,

$$\left[(x-\xi)_+^3\right]' = \left[(x-\xi)_+^3\right]'' = \left[(x-\xi)_+^3\right]''' = 0$$

회귀스플라인(regression spline) VI

이다. $x > \xi$일 때,

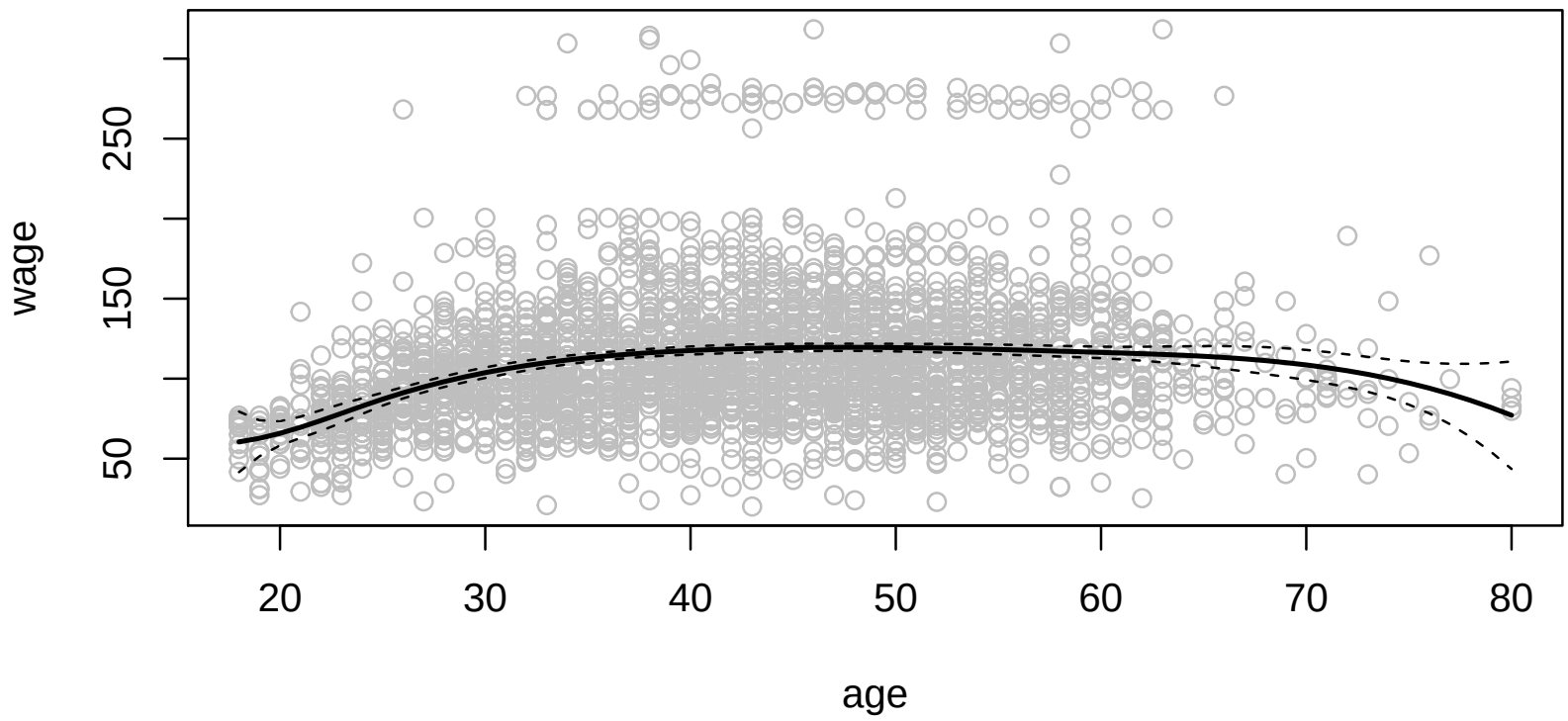
$$\begin{aligned}
\left[(x-\xi)_+^3\right]' &= 3(x-\xi)^2 \\
\left[(x-\xi)_+^3\right]'' &= 3 \cdot 2(x-\xi) \\
\left[(x-\xi)_+^3\right]''' &= 3 \cdot 2 \cdot 1
\end{aligned}$$

이다. 따라서, 1차, 2차 도함수는 $x = \xi$에서 연속이지만, 3차도함수는 ξ에서 연속이 아니다. $x \neq \xi$일 때는 모든 차수의 도함수가 연속이다. 이를 이용하면 위의 사실을 얻을 수 있다.

회귀 스플라인 R 코드 I

```
library(splines)
fit=lm(wage~bs(age,knots=c(25,40,60)),data=Wage)
pred=predict(fit,newdata=list(age=age.grid),se=T)
plot(age,wage,col="gray")
lines(age.grid,pred$fit,lwd=2)
lines(age.grid,pred$fit+2*pred$se,lty="dashed")
lines(age.grid,pred$fit-2*pred$se,lty="dashed")
```

회귀 스플라인 R 코드 II



bs는 회귀스플라인 기저를 예측변수로 갖는 계획행렬을 생성한다. 이를 이용해 선형회귀모형을 적용해서 회귀스플라인 모형을 적합한다.

회귀 스플라인 R 코드 III

```
dim(bs(age,knots=c(25,40,60)))

## [1] 3000    6

dim(bs(age,df=6))

## [1] 3000    6

attr(bs(age,df=6),"knots")

##   25%   50%   75%
## 33.75 42.00 51.00
```

bs 함수에서 자유도는 매듭의 개수를 결정한다. 자유도만 주어져도 계획행렬을 구할 수 있다.

자연 스플라인(natural spline) I

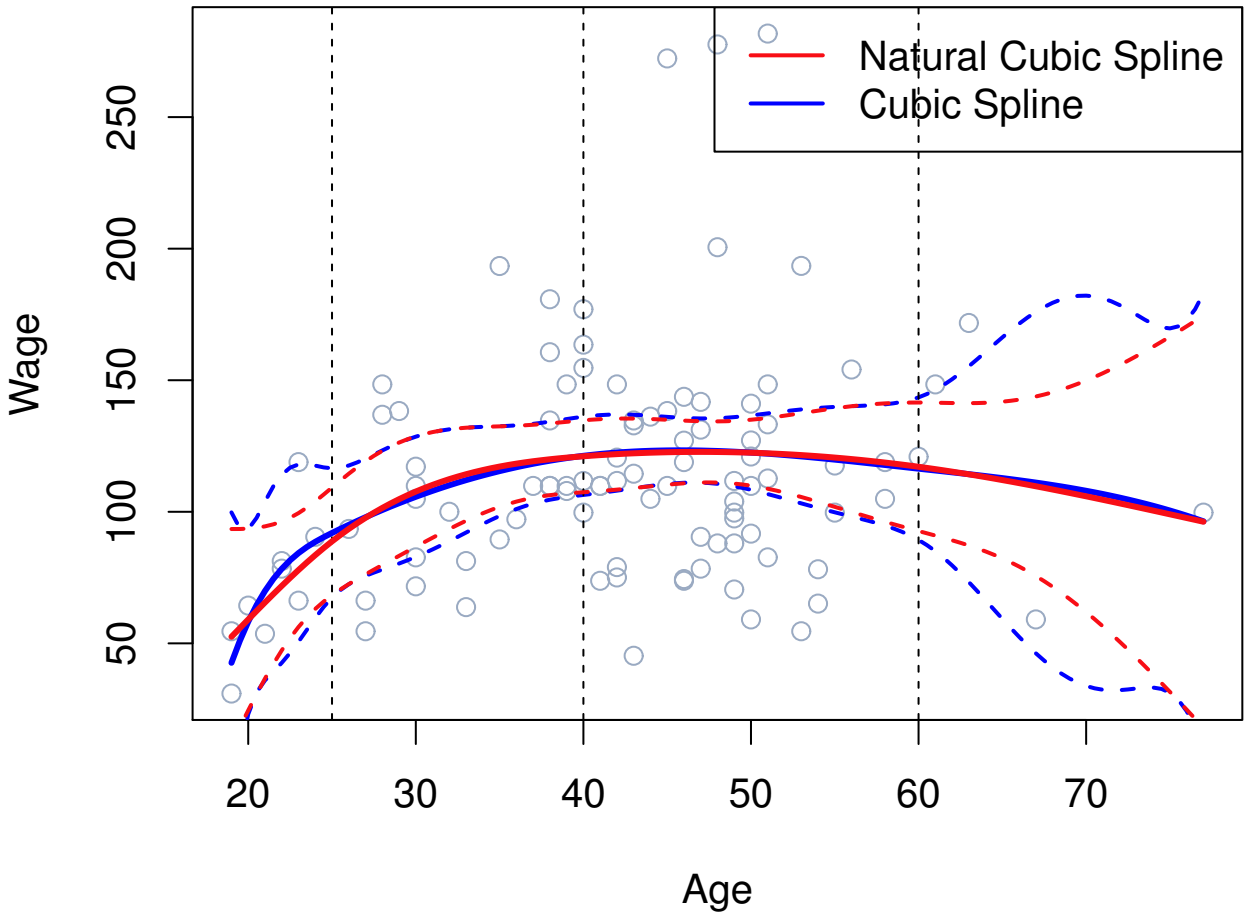
자연 스플라인(natural spline)

1. 자연스플라인은 3차 스플라인에서 $x < \xi_1$ 혹은 $x > \xi_K$일 때, 1차 다항식으로 대치한 것을 말한다.
2. 회귀스플라인은 경계 부근에서 큰 분산을 갖는다. 자연스플라인은 경계부근에서 안정된 분산을 갖게 한다.

노트.

자연스플라인이 경계부근에서 안정된 분산을 갖는 이유. 경계에서 3차회귀모형 대신에 1차모형을 적합해서 모형의 유연성을 줄였다. 따라서, 편향을 크게하는 대신, 분산을 줄이게 된다.

자연 스플라인(natural spline) II



자연 스플라인(natural spline) III

자연 3차 스플라인의 기저표현

K개의 매듭이 있을 때, K개의 기저가 필요하다. 3차 스플라인은 $K+4$개의 기저가 필요한데, 가장 작은 구간과 가장 큰 구간에서 2개씩의 제한조건이 있어서 4를 빼줘야 한다. K개의 기저는 다음과 같다.

$$N_1(x) = 1,\ N_2(x) = x,\ N_{k+2}(x) = d_k(x) - d_{K-1}(x),\ k = 1, 2, \ldots, K-2.$$

여기서,

$$d_k(x) := \frac{(x-\xi_k)_+^3 - (x-\xi_K)_+^3}{\xi_K - \xi_k}$$

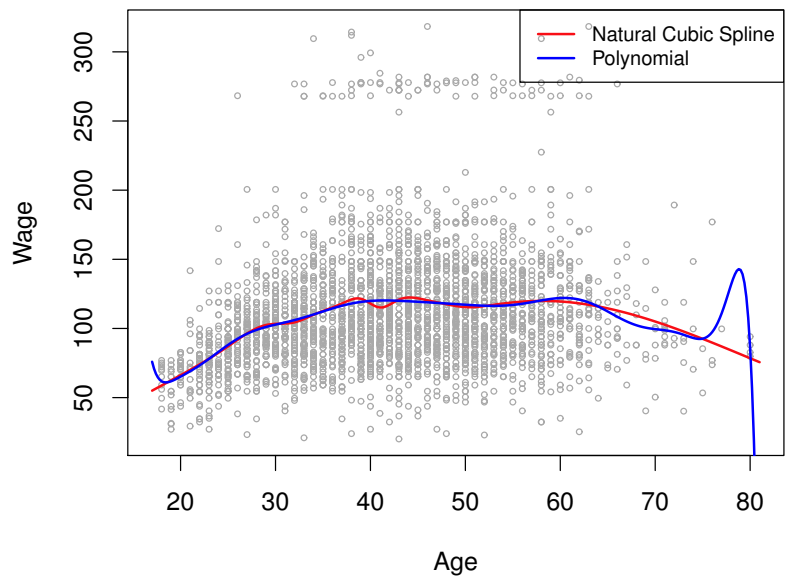
이다. N_k의 2차와 3차 도함수는 $x > \xi_K$에서 0이다.

매듭의 위치와 개수를 정하는 법

1. 위치. 매듭이 촘촘하게 있는 구간에서 스플라인은 더 유연하다. 대개의 경우 설명변수의 분위수를 이용해 정한다. K개의 매듭의 위치를 정하는 경우, $x_{(n\frac{i}{K+1})}, i = 1, 2, \ldots, K$에 정한다.
2. 매듭의 개수 K는 교차검증방법을 이용해서 정한다.

자연 스플라인(natural spline) IV

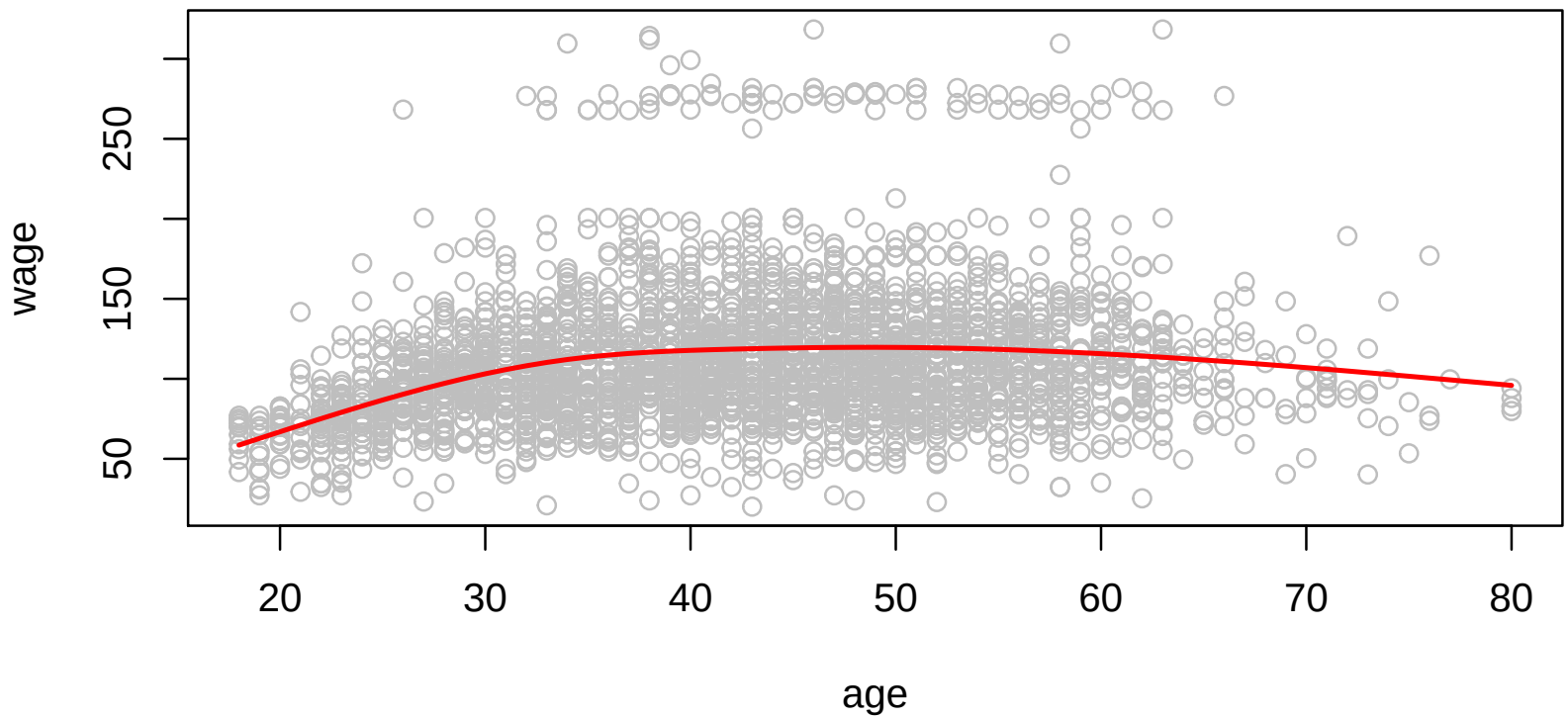
다항회귀모형과 스플라인모형의 비교



자유도가 15인 다항회귀모형과 자연스플라인 모형이 비교되었다.
다항회귀인 경우 경계부근에서 원치않는 효과가 있다.

자연 스플라인 R 코드 I

```
fit2=lm(wage~ns(age,df=4),data=Wage)
pred2=predict(fit2,newdata=list(age=age.grid),se=T)
plot(age,wage,col="gray")
lines(age.grid, pred2$fit,col="red",lwd=2)
```



자연 스플라인 R 코드 II

함수 ns는 자연스플라인기저로 생성되는 계획행렬을 생성한다.
자연스플라인모형은 이 기저에 lm 함수를 적용한다.

평활스플라인(smoothing spline) I

정의

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - g(x_i))^2 + \lambda \int g''(x)^2 dx$$

를 최소화 하는 함수 g를 평활스플라인이라고 한다.

설명

1. λ : 조율파라미터(tuning parameter)
2. $\sum_{i=1}^{n}(y_i - g(x_i))^2$: 손실함수(loss function)
3. $\int g''(x)^2 dx$: 벌점(penalty). 이차도함수는 함수의 구불구불한 정도를 나타낸다.

평활스플라인(smoothing spline) II

평활스플라인은 자연3차스플라인

평활스플라인은 매듭이 중복되지 않는(distinct) $x_1, \ldots, x_n$인 자연3차스플라인이다.

유효자유도(effective degree of freedom)

g가 회귀함수일 때, $(g(x_1), \ldots, g(x_n))'$의 추정값을

$$\hat{g}_\lambda = S_\lambda y$$

와 같이 나타낼 수 있다. 이 때, 유효자유도는

$$df_\lambda := tr(S_\lambda)$$

로 정의된다.

노트. 참고.

평활스플라인(smoothing spline) III

1. 평활스플라인이 자연스플라인이기 때문에, 평활스플라인의 자유도는 중복되지않는 x_i들의 개수(n)라고 생각할 수 있지만 그렇지 않다. λ가 0에서 ∞로 움직이면서 자유도는 0에서 n까지 움직인다.
2. S_λ는 모자행렬로 선형회귀모형에서 $H = X'(X'X)^{-1}X$이다. 이 때, $tr(H) = p + 1$로 회귀계수의 개수와 같다.

평활스플라인(smoothing spline) IV

앞에서 설명한 spline들은 knot들의 위치를 통하여 곡선의 부드러운 정도를 조절한다.

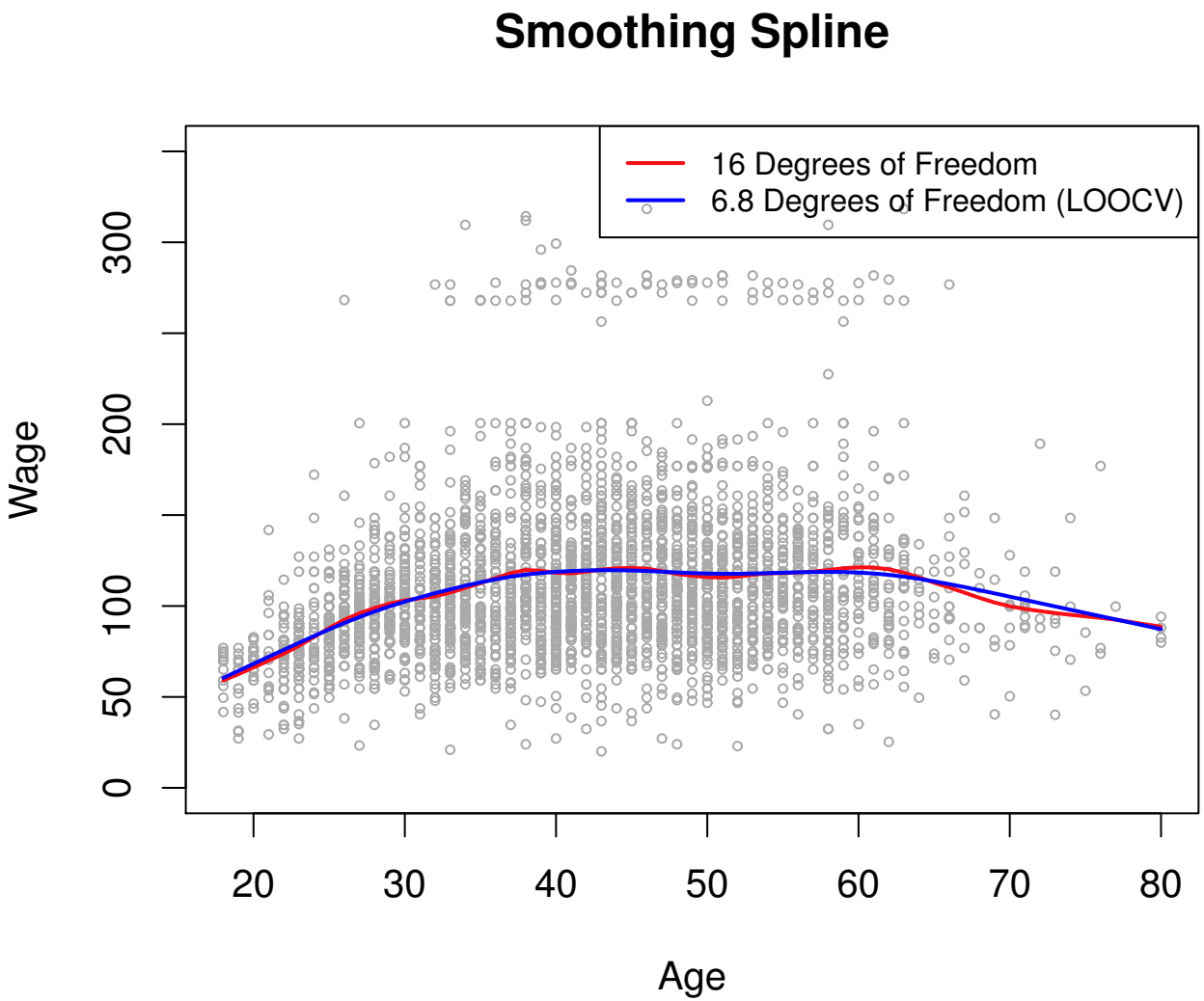
조율파라미터의 결정

λ의 값은 교차검증을 이용해 결정할 수 있다. 그런데, 평활스플라인에서 하나빼기교차검정오차는 다음과 같이 수식이 알려져 있어, 빠르게 계산할 수 있다.

$$RSS_{cv}(\lambda) := \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{g}_\lambda^{(-i)}(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{y_i - \hat{g}_\lambda(x_i)}{1-(S_\lambda)_{ii}}\right]^2$$

여기서, $\hat{g}_\lambda^{(-i)}(x)$는 i번째 관측치를 제외하고 구축한 함수의 추정치이고, $(S_\lambda)_{ii}$는 S_λ의 i번째 대각행렬이다.

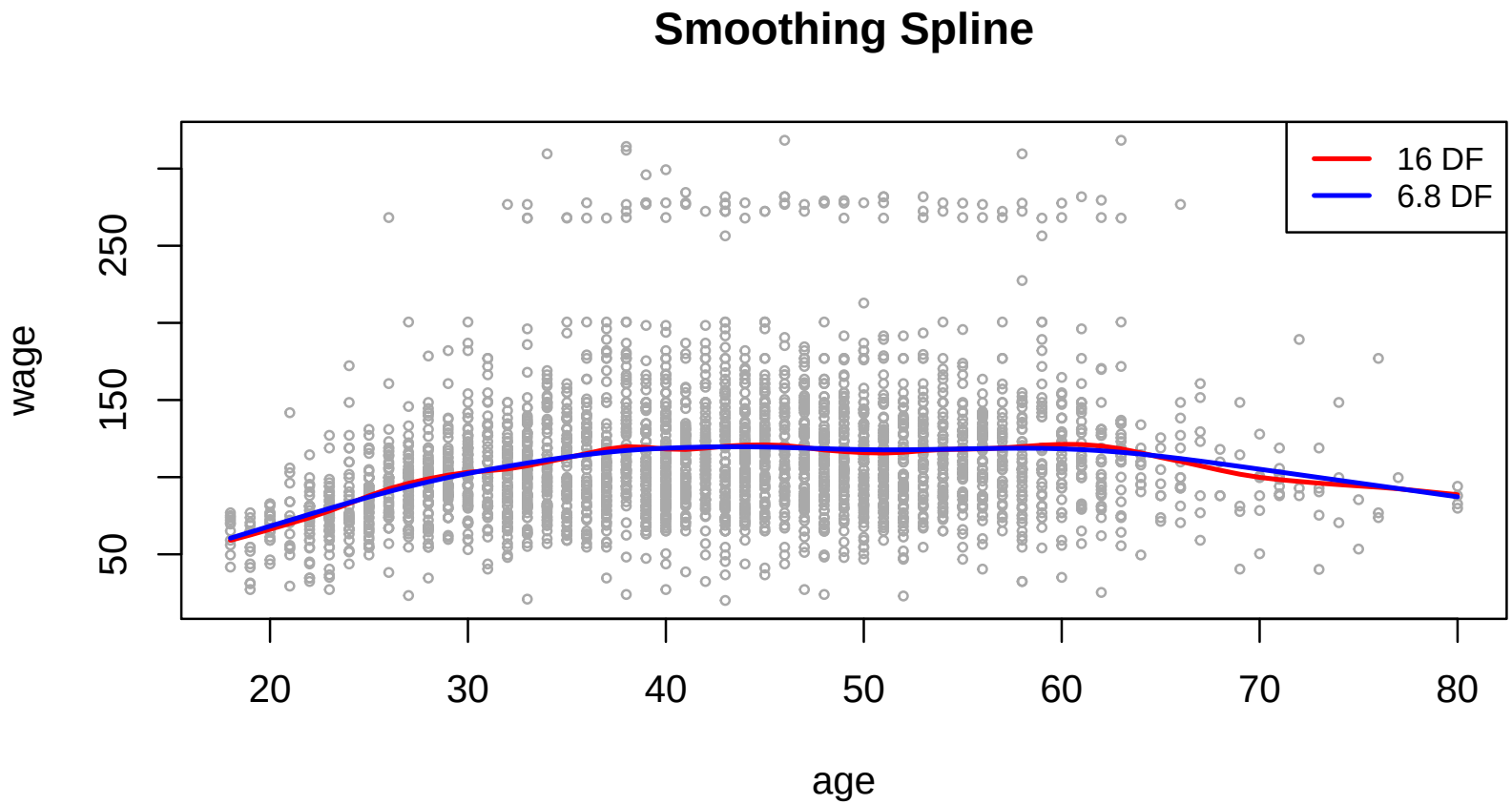
평활스플라인(smoothing spline) V



평활 스플라인 R 코드 I

```
plot(age,wage,xlim=agelims,cex=.5,col="darkgrey")
title("Smoothing Spline")
fit=smooth.spline(age,wage,df=16)
fit2=smooth.spline(age,wage,cv=TRUE)

## Warning in smooth.spline(age, wage, cv = TRUE): cross-validation with
non-unique 'x' values seems doubtful

fit2$df

## [1] 6.794596

lines(fit,col="red",lwd=2)
lines(fit2,col="blue",lwd=2)
legend("topright",legend=c("16 DF","6.8 DF"),col=c("red","blue"),lty=1,lwd=2,cex=.8)
```

평활 스플라인 R 코드 II



평활스플라인은 smooth.spline 함수를 이용해서 적합한다. fit은 df=16이 주어져서 조율파라미터가 가 결정이 되었다. fit2는 교차검정을 이용해서 조율파라미터가 결정되었다.

국소회귀(local regression) I

$x = x_0$에서 $\hat{g}$의 계산

x_0에 가까운 $s = k/n$개의 관측치에 가중치 $K(x_i, x_0)$를 주고 1차 회귀모형을 적합한다. 즉,

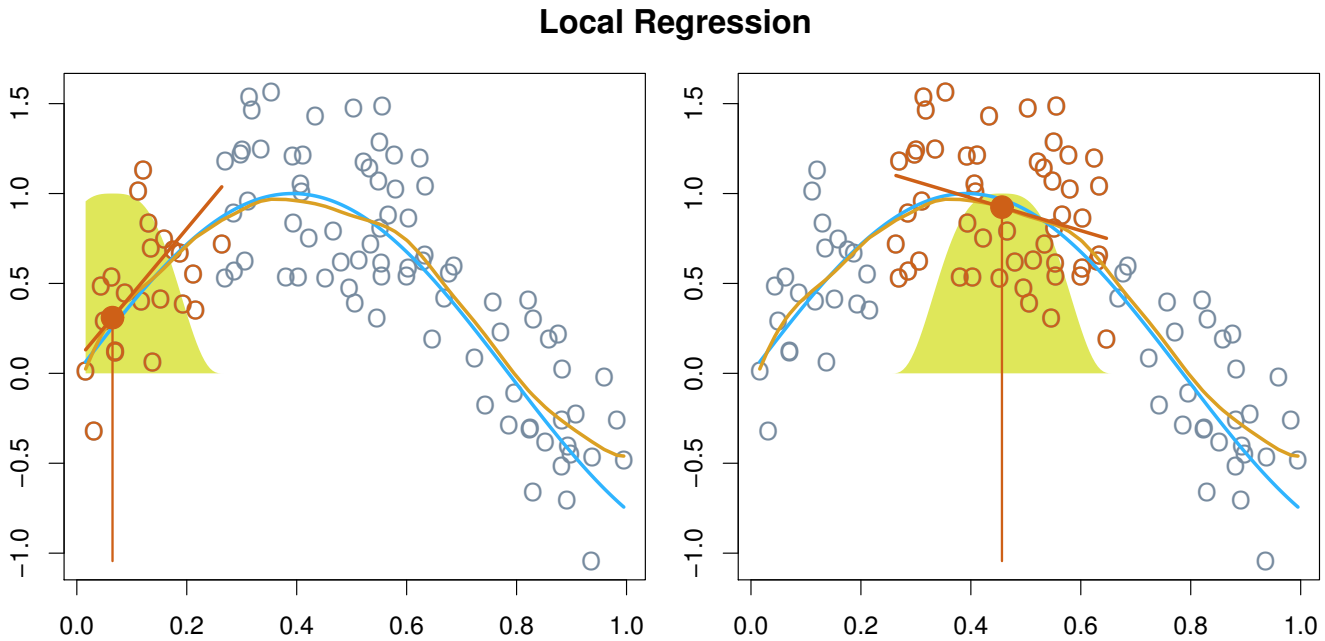
$$\sum_{i=1}^{n} K(x_i, x_0)(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

을 최소화하여 β_0와 β_1을 얻는다. 예측치는

$$\hat{f}(x_0) := \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0$$

가 된다. 위에서 선형회귀 대신 p차 회귀모형을 쓸 수 있다. 위에서 s를 펼침(span)이라 부른다.

국소회귀(local regression) II

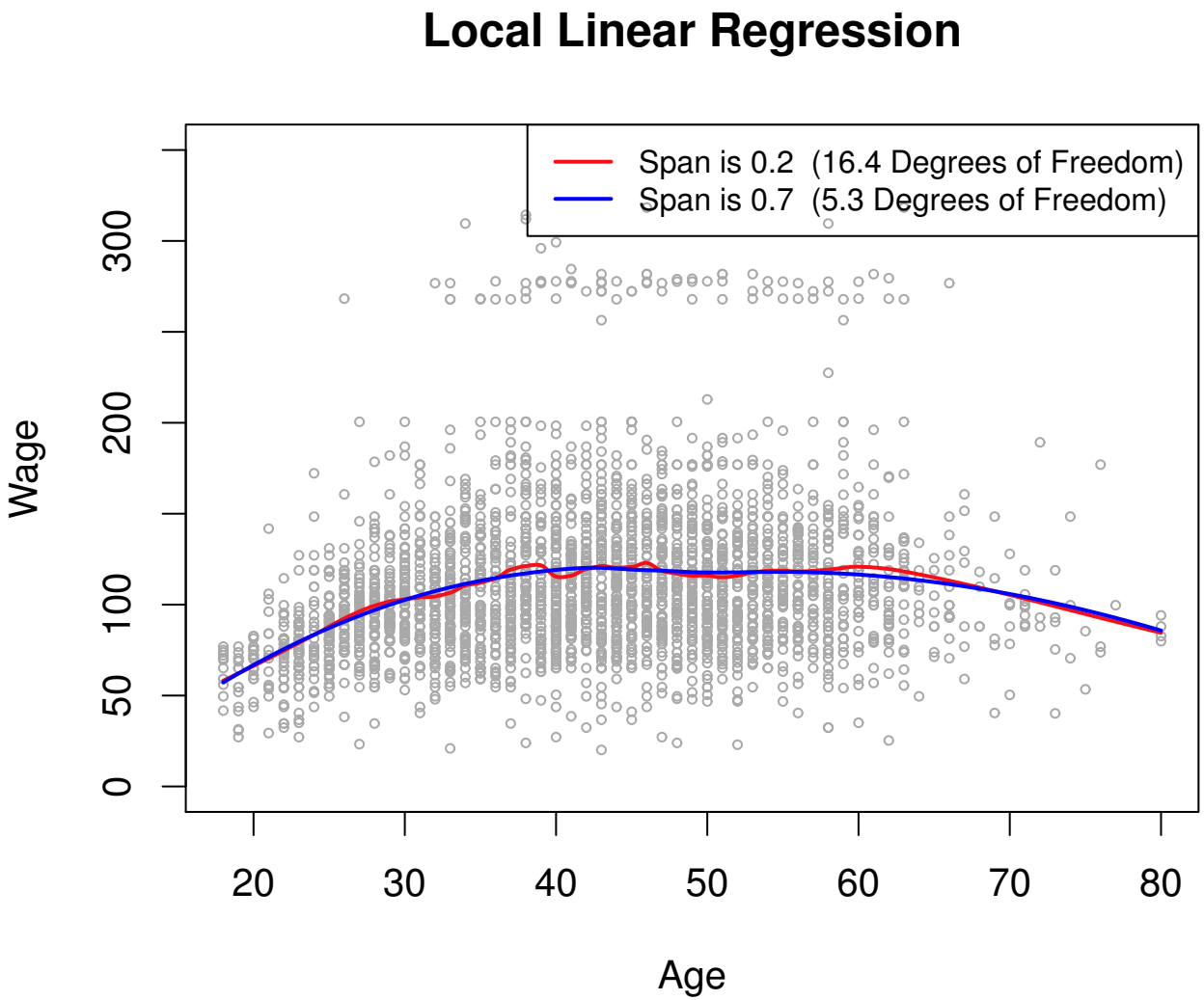


(span=the fraction of the data to be used for the estimation)

펼침 s의 결정

국소회귀를 적합할 때, 가중치 K, 회귀모형의 차수, 펼침 s를 결정해야 한다. 이 중 s의 결정이 제일 중요하다. s는 모형의 유연성을 결정하고, 교차검증으로 결정할 수 있다.

국소회귀(local regression) III



국소회귀(local regression) IV

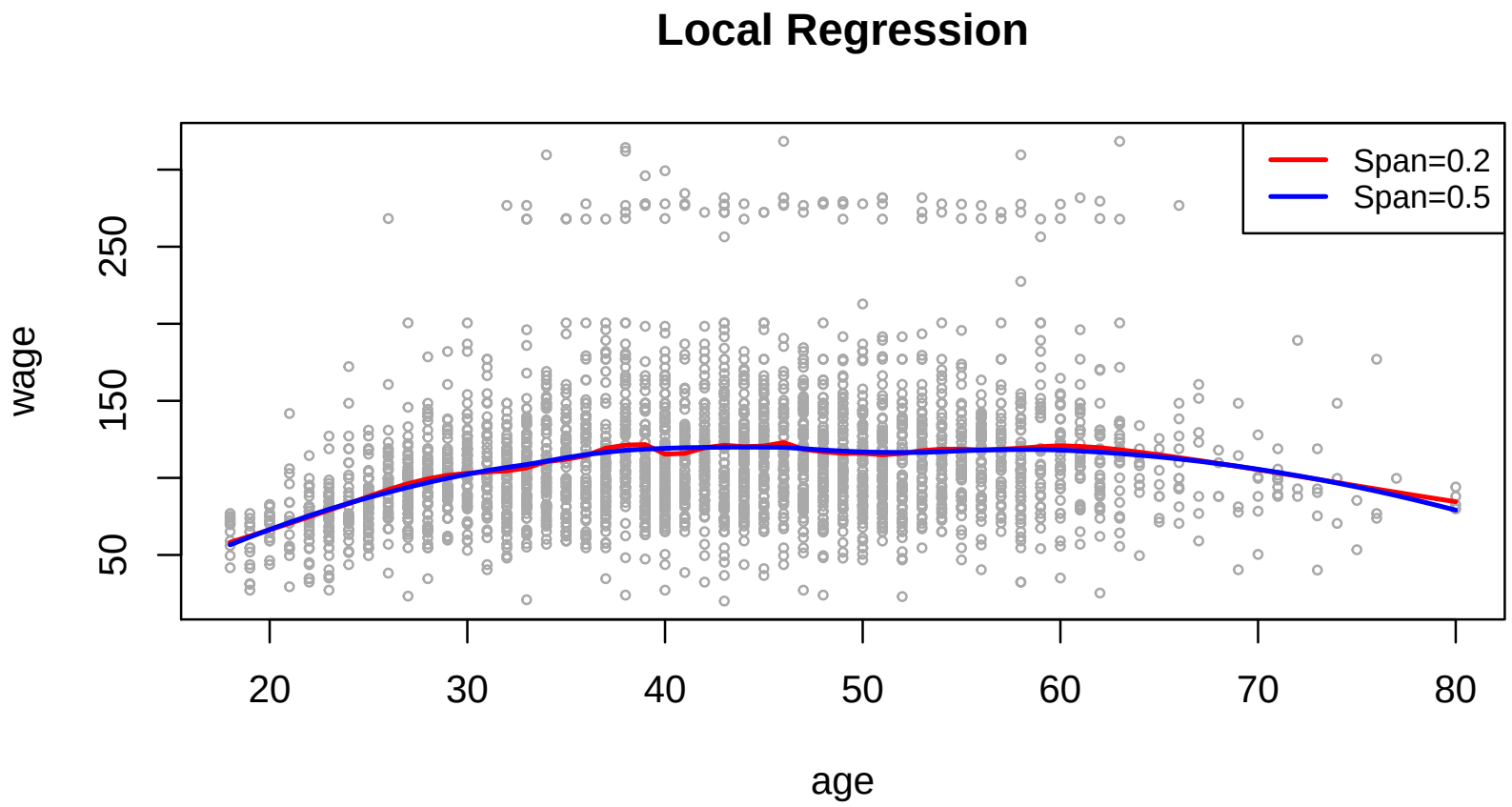
국소회귀모형의 확장

1. 일부 설명변수에는 국소회귀모형을 쓰고, 일부 설명변수에는 전역회귀모형을 쓸 수 있다. 시간이 설명변수일 때, 시간을 국소회귀모형으로 쓰면 시간변동계수모형(time varying coefficient model)이 된다.
2. 국소회귀모형은 고차원 자료에 확장이 잘 된다.
3. 회귀모형의 차수 p가 $3, 4$보다 크면 성능이 나빠질 수 있다.

국소회귀 R 코드 I

```
plot(age,wage,xlim=agelims,cex=.5,col="darkgrey")
title("Local Regression")
fit=loess(wage~age,span=.2,data=Wage)
fit2=loess(wage~age,span=.5,data=Wage)
lines(age.grid,predict(fit,data.frame(age=age.grid)),col="red",lwd=2)
lines(age.grid,predict(fit2,data.frame(age=age.grid)),col="blue",lwd=2)
legend("topright",legend=c("Span=0.2","Span=0.5"),col=c("red","blue"),lty=1,lwd=2,cex=.8)
```

국소회귀 R 코드 II


Local Regression
Span=0.2
Span=0.5
wage
50
150
250
20
30
40
50
60
70
80
age

일반화가법모형(generalized additive models) I

모형

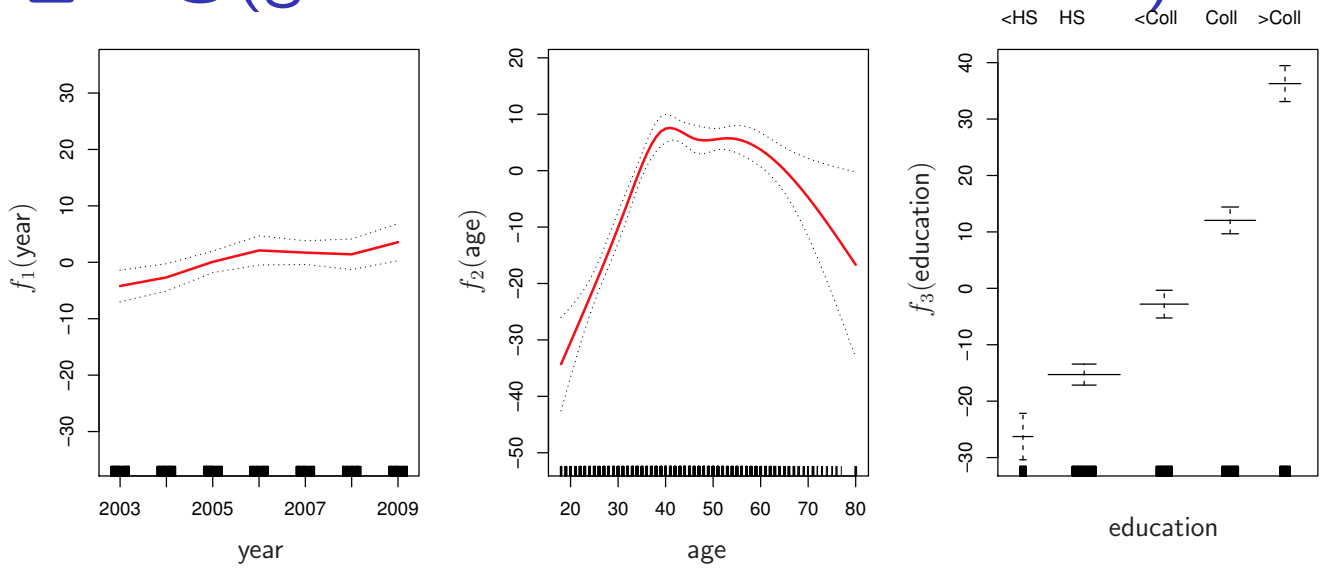
여러 개의 설명변수가 있을 때, 각 변수에 1변수 회귀함수를 적용하는 것을 말한다.

$$y_i = \beta_0 + f_1(x_{i1}) + \ldots + f_p(x_{ip}) + \epsilon_i, \;\; i = 1, 2, \ldots, n.$$

연봉자료의 예

$$wage = \beta_0 + f_1(year) + f_2(age) + f_3(education) + \epsilon$$

일반화가법모형(generalized additive models) II



역적합(backfitting)

설명변수 하나씩 돌아가면서 나머지 설명변수와 그의 적합된 함수를 고정한 후, 한 개의 변수에 관해서만 회귀함수를 구하는 방법

노트. 참고.

평활스플라인의 경우 최소제곱법을 사용할 수 없기 때문에,
일반화가법모형 전체에 최소제곱법을 적용하는 것이 어렵다.

일반화가법모형(generalized additive models) III

일반화가법모형의 장점과 단점

1. 각 설명변수에 비선형 함수 f_j를 적용하기 때문에, 설명변수를 변환할 필요가 없다.
2. 설명변수의 비선형 함수는 예측 성능을 향상시킬 수 있다.
3. 모형이 가법이기 때문에, 다른 설명변수들을 고정시켰을 때, 한 설명변수의 효과가 f_j이다.
4. f_j의 유연성은 자유도로 요약된다.
5. (단점) 가법모형이기 때문에 교호작용을 표현하지 못한다. 하지만, 교호작용을 표현하고 싶으면 $f(x_i, x_j)$를 적합하면 된다.

이산형 반응변수와 가법모형

반응변수가 이산형일 때도 가법모형을 적용할 수 있다.

$$\log\left(\frac{p(x)}{1-p(x)}\right) = \beta_0 + f_1(x_1) + \ldots + f_p(x_p)$$

일반화 가법모형 R 코드 I

```
gam1=lm(wage~ns(year,4)+ns(age,5)+education,data=Wage)
```

예측변수 모두가 자연스플라인 기저로 구성된 가법모형을 적용하려면 lm을 이용하면 된다. 가법모형이 큰 선형모형일 뿐이기 때문이다.

```
library(gam)

## Loading required package: foreach
## Loaded gam 1.12

gam.m3=gam(wage~s(year,4)+s(age,5)+education,data=Wage)
```

하나 이상의 예측변수에 평활스플라인을 적용하려면 gam 패키지의 함수 gam이 필요하다. 함수 gam 안의 함수 s는 평활스플라인의 기저를 생성하는 함수로 gam 패키지 안에 있는 함수이다.

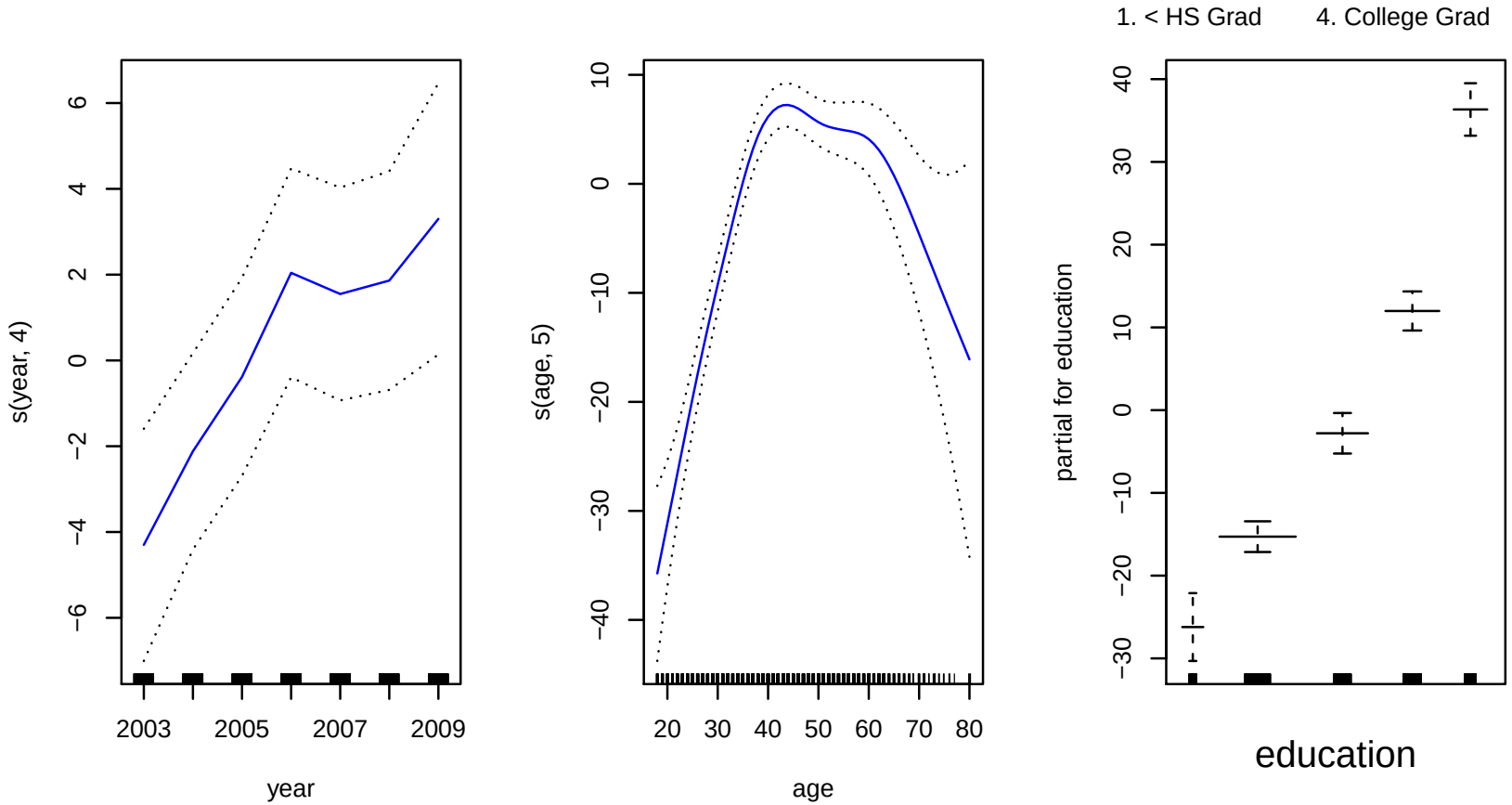
일반화 가법모형 R 코드 II

```
summary(gam.m3)


##
## Call: gam(formula = wage ~ s(year, 4) + s(age, 5) + education, data = Wage)
## Deviance Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -119.43  -19.70   -3.33   14.17  213.48
##
## (Dispersion Parameter for gaussian family taken to be 1235.69)
##
##     Null Deviance: 5222086 on 2999 degrees of freedom
## Residual Deviance: 3689770 on 2986 degrees of freedom
## AIC: 29887.75
##
## Number of Local Scoring Iterations: 2
##
## Anova for Parametric Effects
##              Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
## s(year, 4)    1   27162   27162  21.981 2.877e-06 ***
## s(age, 5)     1  195338  195338 158.081 < 2.2e-16 ***
## education     4 1069726  267432 216.423 < 2.2e-16 ***
## Residuals  2986 3689770    1236
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Anova for Nonparametric Effects
##             Npar Df Npar F  Pr(F)
## (Intercept)
## s(year, 4)        3  1.086 0.3537
## s(age, 5)         4 32.380 <2e-16 ***
## education
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1


preds=predict(gam.m3,newdata=Wage)
```

일반화 가법모형 R 코드 III

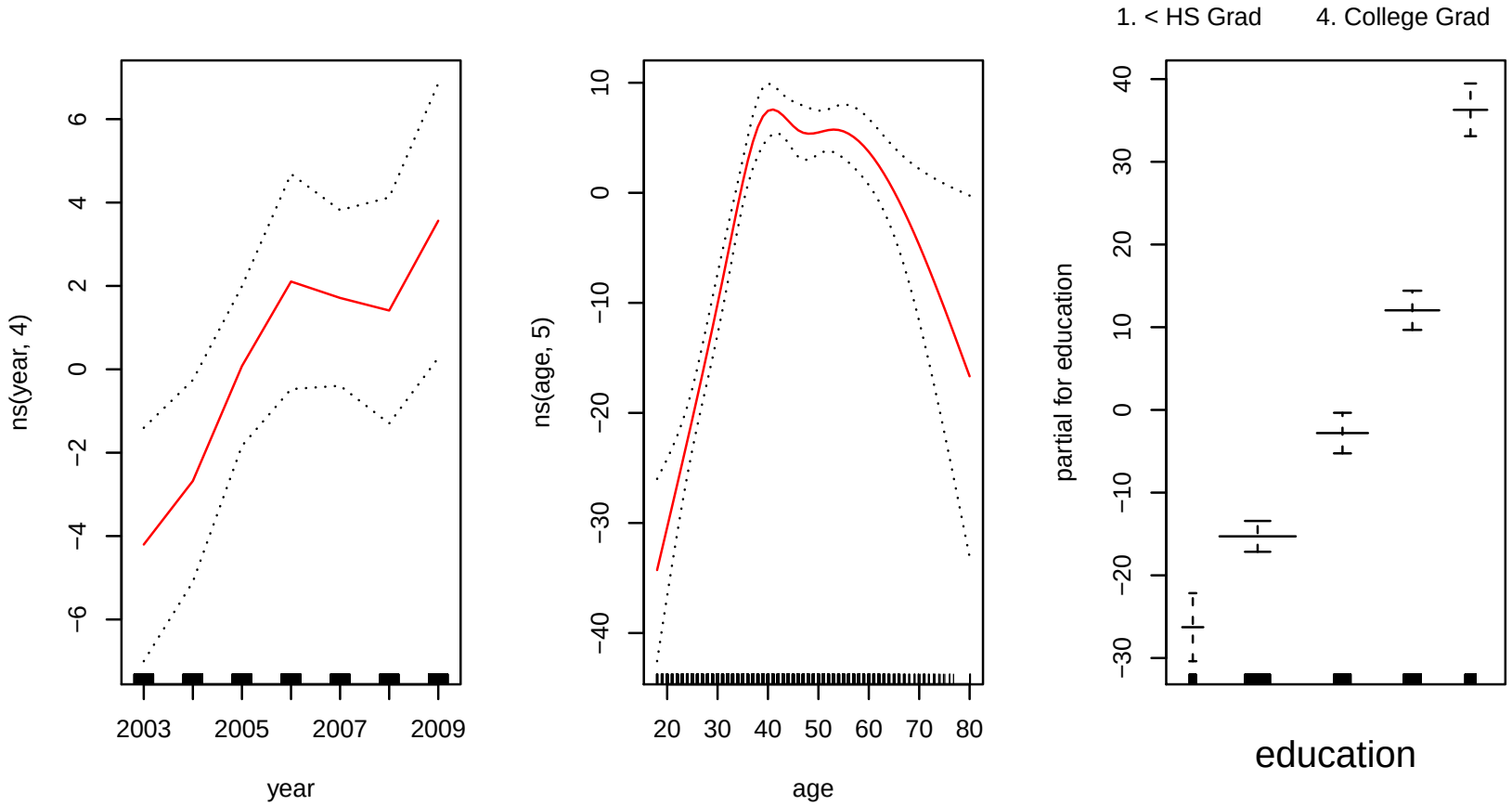
summary 함수와 predict 함수를 쓸 수 있다.

```
par(mfrow=c(1,3))
plot(gam.m3, se=TRUE,col="blue")
```



일반화 가법모형 R 코드 IV

```
plot.gam(gam1, se=TRUE, col="red")
```



gam 객체에 plot을 적용하면 세 개의 그림을 준다. gam1은 gam 객체가 아니지만 plot.gam 함수를 이용해서 동일한 그림을 그렸다.

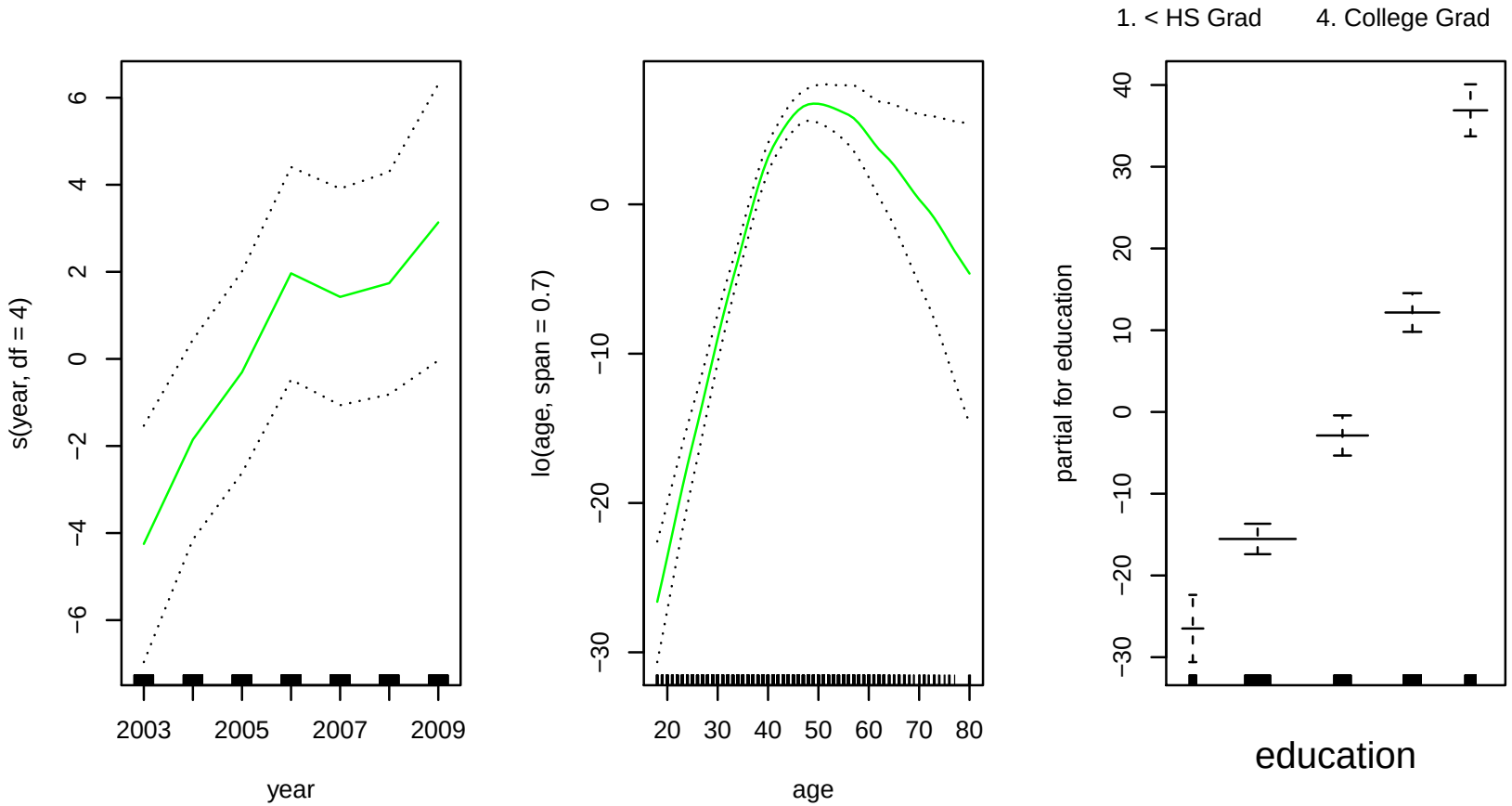
일반화 가법모형 R 코드 V

```
gam.m1=gam(wage~s(age,5)+education,data=Wage)
gam.m2=gam(wage~year+s(age,5)+education,data=Wage)
anova(gam.m1,gam.m2,gam.m3,test="F")

## Analysis of Deviance Table
##
## Model 1: wage ~ s(age, 5) + education
## Model 2: wage ~ year + s(age, 5) + education
## Model 3: wage ~ s(year, 4) + s(age, 5) + education
##   Resid. Df Resid. Dev Df Deviance       F    Pr(>F)
## 1      2990    3711731
## 2      2989    3693842  1  17889.2 14.4771 0.0001447 ***
## 3      2986    3689770  3   4071.1  1.0982 0.3485661
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

세 개의 모형을 anova 함수를 이용해서 비교하였다.

```
gam.lo=gam(wage~s(year,df=4)+lo(age,span=0.7)+education,data=Wage)
par(mfrow=c(1,3))
plot.gam(gam.lo, se=TRUE, col="green")
```

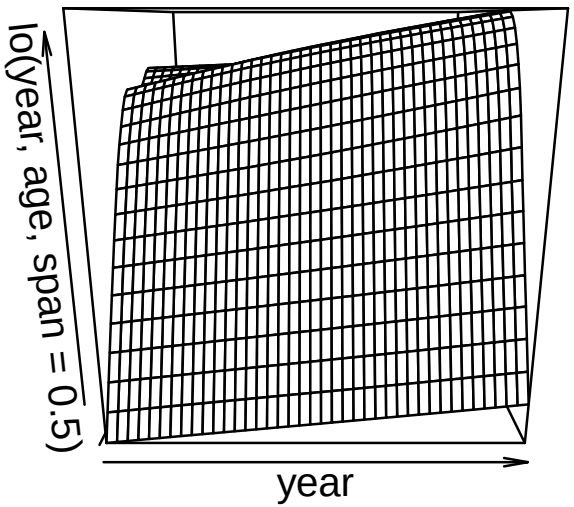
일반화 가법모형 R 코드 VI

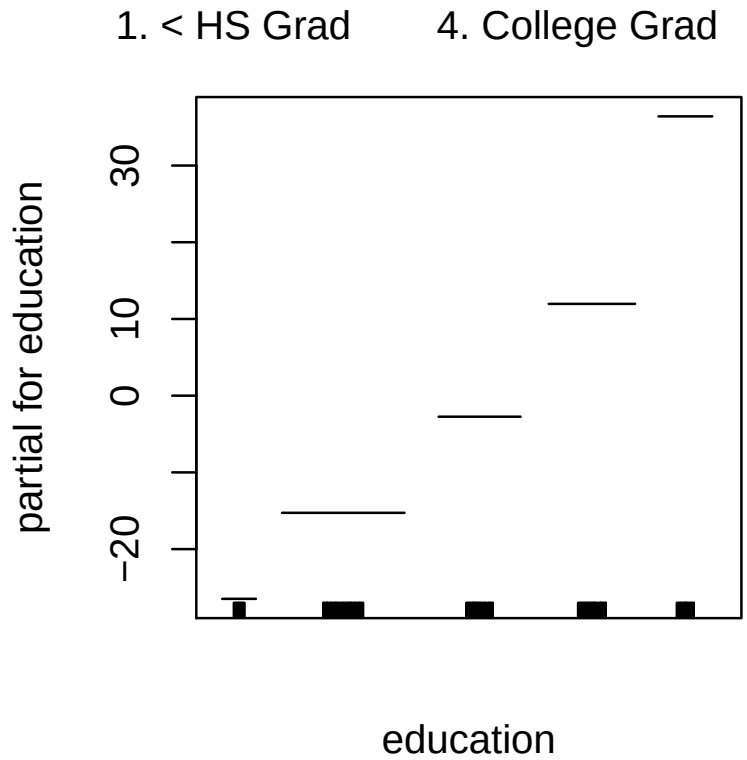


gam 함수안에 국소회귀를 쓸 수도 있다. lo는 국소회귀를 나타낸다.

```
gam.lo.i=gam(wage~lo(year,age,span=0.5)+education,data=Wage)
library(akima)
par(mfrow=c(1,2))
plot(gam.lo.i)
```

일반화 가법모형 R 코드 VII

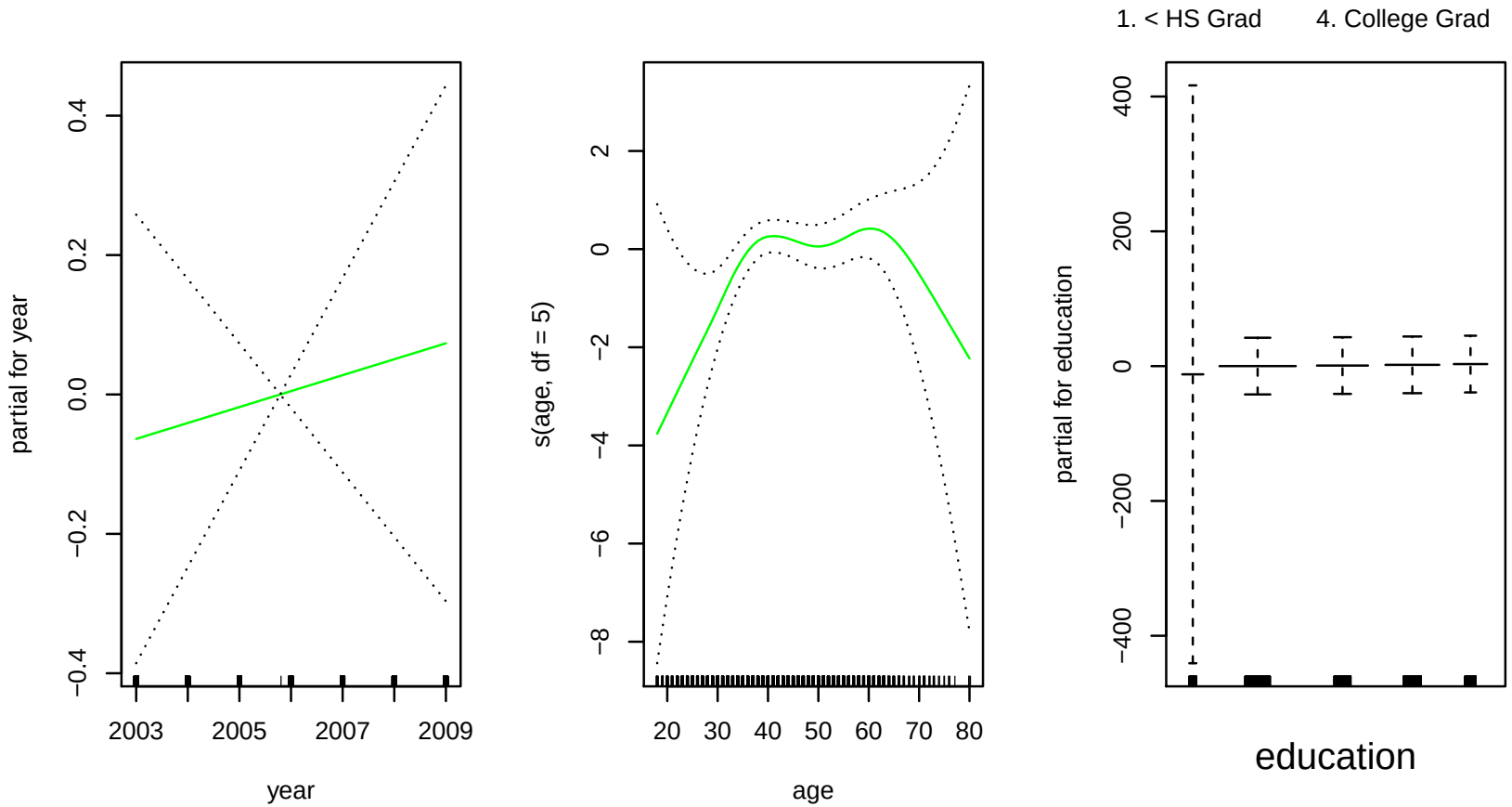




국소회귀는 두 개의 변수에 적용할 수 있다. 두 변수의 교호작용의 그림은 akima 패키지를 이용해 그릴 수 있다.

일반화 가법모형 R 코드 VIII

```
gam.lr=gam(I(wage>250)~year+s(age,df=5)+education,family=binomial,data=Wage)
par(mfrow=c(1,3))
plot(gam.lr,se=T,col="green")
```

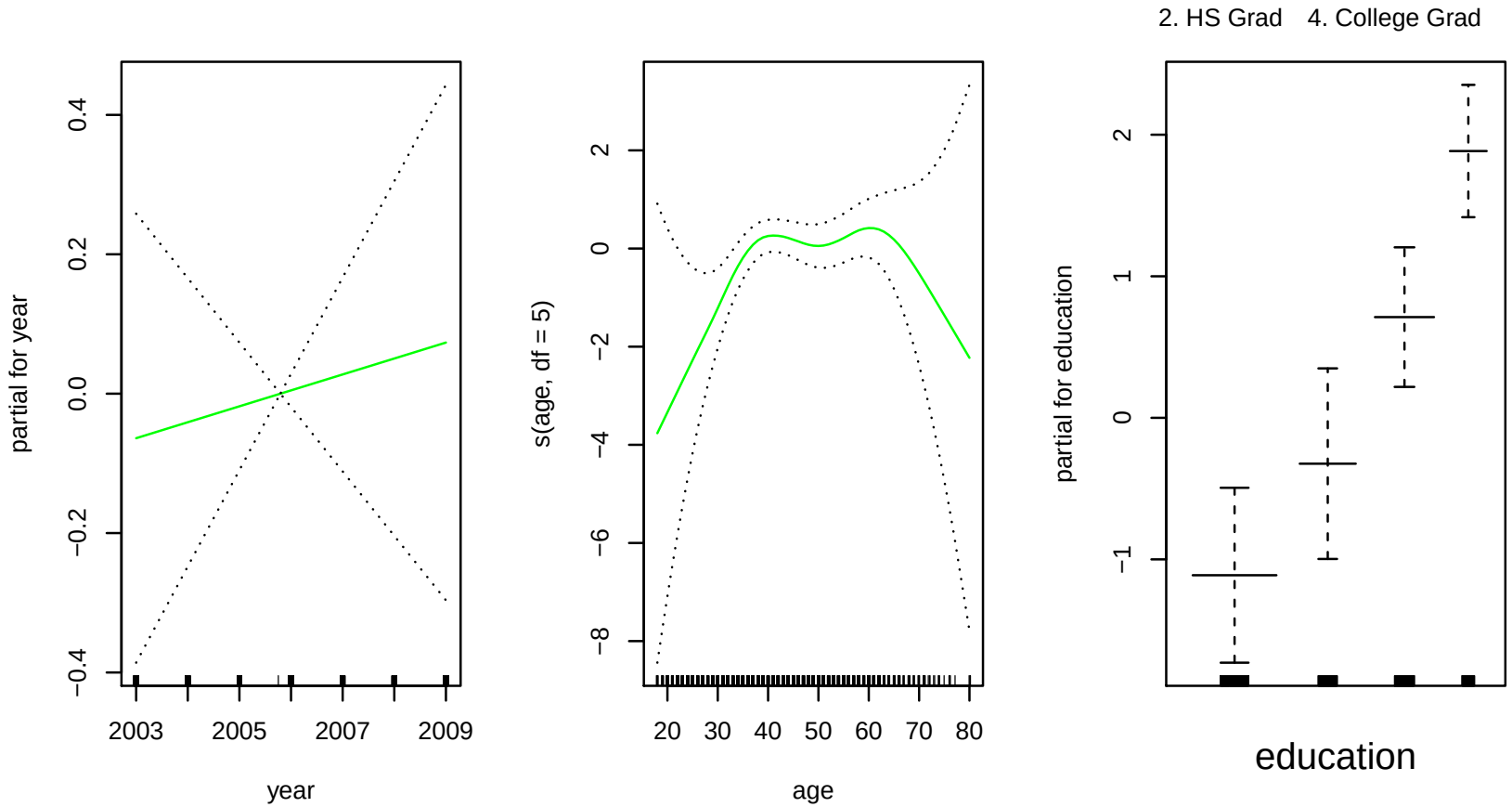


gam 함수를 이용해서 로지스틱모형을 적합할 수도 있다.

일반화 가법모형 R 코드 IX

```
table(education,I(wage>250))

##
## education             FALSE TRUE
##   1. < HS Grad          268    0
##   2. HS Grad            966    5
##   3. Some College       643    7
##   4. College Grad       663   22
##   5. Advanced Degree    381   45

par(mfrow=c(1,3))
gam.lr.s=gam(I(wage>250)~year+s(age,df=5)+education,family=binomial,data=Wage,subset=(educa
plot(gam.lr.s,se=T,col="green")
```

일반화 가법모형 R 코드 X



고등학교 졸업 미만의 교육을 받은 사람들 중에는 소득이 25만불 이상되는 고소득자가 없다. 고등학교 졸업 미만의 교육을 받은 사람들을 빼고 다시 적합했다.

참고문헌

아래의 책에서 제공하는 그림들을 사용하였다.

1. Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, and Robert Tibshirani. *An introduction to statistical learning*. Springer, 2013.