4. 로지스틱 회귀모형

3) 모형의 적합도 측정

3. 모형의 적합도 측정

- Deviance: 현재 모형의 적합도를 측정하는 유용한 도구
- 이항반응변수의 경우, deviance로 적합도 측정이 어렵기 때문에 다른 측정 도구의 활용이 요구됨
- 이항반응변수 상황에서 사용 가능한 적합도 측정 도구
- 1. (유사) R²
- 2. 정분류율
- 3. AIC & BIC
- 4. ROC curve

1) R² (유사 R²)

- 정규분포 회귀모형에서 모형의 적합도 측정하는 대표적인 도구
- 로지스틱 회귀모형에 적용 가능하게 수정

$$R^{2} = \frac{1 - (\hat{L}_{0}/\hat{L}_{c})^{2/n}}{1 - (\hat{L}_{0})^{2/n}}$$

- *n*: 관찰값 개수
- \hat{L}_0 : 절편만 있는 모형의 maximized likelihood
- \hat{L}_c : 현재 모형의 maximized likelihood
- 분자: 두 likelihood 비율의 제곱에 기하평균 효과(1/n 승) 추가
- 분모: $0 \le R^2 \le 1$ 을 만족시키기 위한 보정값
- 모형간의 적합도 비교 용도로 사용 가능

- R에서 R² 계산: 패키지 pscl의 함수 pR2() 이용
 - 예제: 부인 직업 참여 자료

- Ilh : $\log \hat{L}_c$
- IlhNull : $\log \hat{L}_0$
- G2: $-2\left[\log \hat{L}_0 \log \hat{L}_c\right]$
- McFadden, r2ML, r2CU : 다른 유형의 유사 R²
- 우리가 사용할 통계량: r2CU=0.204

2) 정분류율(Correct Classification Rate: CCR)

• 추정된 $\hat{\pi}(x)$ 로 각 case를 다음의 방법에 의하여 두 범주로 분류

$$\hat{Y} = \begin{cases} 0 & \text{if } \hat{\pi}(x) < d \\ 1 & \text{if } \hat{\pi}(x) \ge d \end{cases}$$

• 관측값 Y와 예측값 \hat{Y} 으로 2차원 분할표 작성

		Prediction		
		$\hat{Y} = 1$	$\hat{Y} = 0$	Total
Observation	Y = 1	n_{11}	n_{10}	n_{1+}
	Y = 0	n_{01}	n_{00}	n_{0+}
Total		n_{+1}	n_{+0}	n

• CCR 정의

$$CCR = \frac{n_{11} + n_{00}}{n} \times 100$$

- 현재 모형에 의한 예측값이 관찰값과 동일한 범주로 분류된 비율
- 모형의 적합 정도를 판단할 수 있는 중요한 도구
- CCR의 문제점
 - 관측비율이 높은 범주로 단순 분류하더라도 정분류율은 50% 이상이 됨.
 - 예: $n_{1+} = 100$, $n_{0+} = 50$ 인 경우, $n_{+1} = 150$, $n_{+0} = 0$ 으로 단순 분류 $CCR = (100/150) \times 100 = 67\%$

- 수정된 CCR
 - 단순 추측으로 보장된 정분류율 $(\max_{r} n_{r+}/n)$ 을 차감
 - $-\max_{r} n_{r+}$: 행 합계 중 최대값. 관측비율이 더 높은 범주의 관측값 개수
 - 수정된 CCR의 정의

$$CCR_{adj} = \left(\frac{n_{11} + n_{00} - \max_{r} n_{r+}}{n}\right) \times 100$$

모형에 의하여 분류했을 경우, 단순 추측에 의한 분류보다 얼마나
 오류를 감소시킬 수 있는지 측정

• 예제 3.4: 부인 직업 참여 자료

분류 기준값을 d=0.5로 하여 분류표 작성하고 정분류율 계산

```
> library(carData)
> fit <- glm(lfp~. , family=binomial, Mroz)</pre>
```

CCR 계산

```
> sum(diag(table1))/sum(table1)*100
[1] 69.32271
```

• 수정된 CCR 계산

```
> y_max <- max(addmargins(table1,2))</pre>
```

> (sum(diag(table1))-y_max)/sum(table1)*100
[1] 12.4834

모형 추정에 사용된 자료를 대상으로 계산된 정분류율로 모형의 예측력을 측정하는 것에는 한계가 있음

3) AIC, BIC

- 모형의 적합도 비교에 사용되는 척도
 - Akaike's Information Criterion: $AIC = -2 \log \hat{L}_c + 2(p+1)$
 - Bayesian Information Criterion: $BIC = -2 \log \hat{L}_c + \log n \ (p+1)$

 \hat{L}_c : 현재 모형의 maximized likelihood

p: 현재 모형에 포함된 설명변수 개수

n: 자료 개수

- 설명변수의 개수 증가 \rightarrow $-2 \log \hat{L}_c$ 감소 \rightarrow $2(p+1), \log(n)(p+1)$ 증가
- AIC, BIC 값이 작을수록 적합도가 더 높다고 판단

예제 3.5: 부인 직업 참여 자료

• 모형 M_1 : 설명변수 (X_1, X_2, \dots, X_7) 모두 포함 모형 M_2 : 설명변수 (X_1, X_3, X_4) 만 포함

```
> fit <- glm(lfp ~ . , family=binomial, Mroz)
> fit_m2 <- glm(lfp ~ k5 + age + wc,family=binomial, Mroz)</pre>
```

• 두 모형의 AIC 비교

```
> fit$aic
[1] 921.2659
> fit_m2$aic
[1] 950.8633

> AIC(fit); AIC(fit_m2)
[1] 921.2659
[1] 950.8633

> BIC(fit); BIC(fit_m2)
[1] 958.2584
[1] 969.3596
```

더 작은 값의 AIC, BIC를 갖는 모형 M₁이 더 선호됨

4) ROC curve

• 추정된 $\hat{\pi}(x)$ 로 각 case를 다음의 방법에 의하여 두 범주로 분류

$$\hat{Y} = \begin{cases} 0 & \text{if } \hat{\pi}(\mathbf{x}) < d \\ 1 & \text{if } \hat{\pi}(\mathbf{x}) \ge d \end{cases}$$

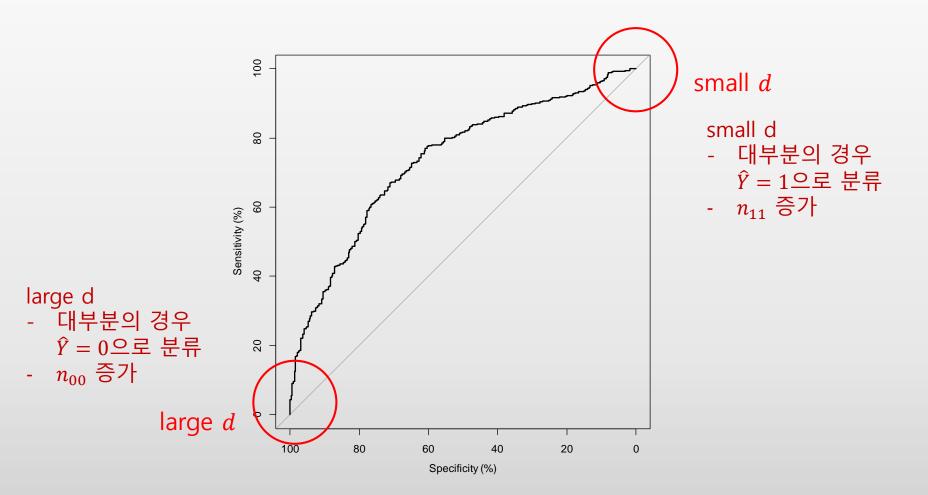
ROC(Receiver Operating Characteristic) curve: 주어진 모형의 분류 정확도에 대한 평가 도구

- 분류결과는 분류 기준값 d에 따라 달라짐
- 특정 d에 대한 분류결과가 다음과 같다고 하자.

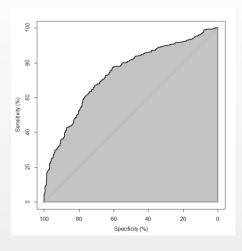
		Prediction		
		$\hat{Y} = 1$	$\hat{Y} = 0$	Total
Observation	Y = 1	n_{11}	n_{10}	n_{1+}
	Y = 0	n_{01}	n_{00}	n_{0+}
Total		n_{+1}	n_{+0}	n

- Sensitivity(민감도): n_{11}/n_{1+} Y=1로 관측된 자료 중 $\hat{Y}=1$ 로 분류된 자료의 비율
- Specificity(특이도): n_{00}/n_{0+} Y=0로 관측된 자료 중 $\hat{Y}=0$ 로 분류된 자료의 비율

• ROC curve: 모든 분류 기준값 d에 대하여 specificity (n_{00}/n_{0+}) 와 sensitivity (n_{11}/n_{1+}) 를 (x,y) 좌표로 하여 작성된 도표



• AUC(Area under the curve): ROC 곡선 아래 부분의 면적



- 분류 정확도를 나타내는 척도
- 급격한 기울기의 ROC curve: 분류 정확도가 높은 모형
 → 큰 값의 AUC
- Correct 분류 비율 = Wrong 분류 비율 모형:
 - → specificity(%)+sensitivity(%)=100% 유지
 - → AUC: 50%
 - → 분별력이 없는 모형

예제: 부인 직업 참여

- 설명변수를 모두 포함시킨 모형의 ROC curve를 작성하고 AUC 값 계산
- R에서 ROC curve 작성: 패키지 pROC의 함수 roc() 이용

roc(response, predictor, percent=TRUE, plot=TRUE, ci=TRUE)

- response: 이항 반응변수 벡터
- predictor: $\hat{\pi}(x)$ 벡터. 함수 predict()로 계산
- percent=TRUE: sensitivities, specificities, AUC 값을 백분율로 계산
- plot=TRUE: ROC curve 작성

```
> library(pROC)
> library(carData)

> fit <- glm(lfp ~ .,family=binomial, Mroz)

> pred <- predict(fit, type="response")

> roc(Mroz$lfp, pred, percent=TRUE, plot=TRUE)

Data: pred in 325 controls (Mroz$lfp no) < 428 cases (Mroz$lfp yes).
Area under the curve: 73.64%</pre>
```

표 3.11과 비교

- ROC curve

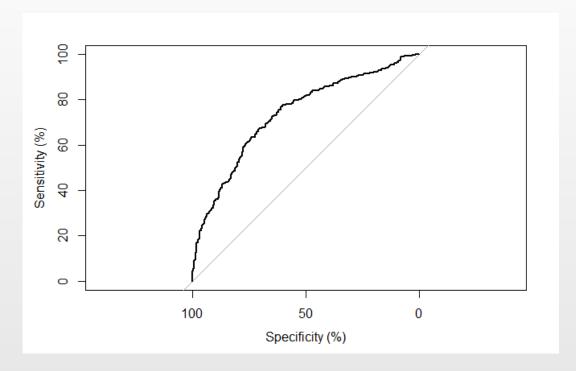


그림 3.1과 비교

연습문제 3.1

- ▶ 설명변수: 130개 기업 채권; 투자성 등급(Y=1), 투기성 등급(Y=0)
- 설명변수

X₁: 총자산 규모(1억 달러)

X₂: 레버리지 척도(장기부채/총자본)

X₃: 수익성 척도(순이익/총자산)

X₄: 불안정척도(순이익 변동계수)

X₅: 주식 등급(1~6 척도)

▶ 자료 파일: p2-1.dat

1) 개별 회귀계수에 대한 유의성을 Wald test로 실시하라.

```
> fit <- glm(y~.-id, family=binomial, data=p21)</pre>
Warning message:
glm.fit: 적합된 확률값들이 0 또는 1 입니다
> summary(fit)
Coefficients:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) 1.464e+01 3.462e+00 4.228 2.36e-05 ***
            3.239e-04 1.691e-04 1.915 0.055471
x1
x2
           -1.100e+01 3.790e+00
                                  -2.901 0.003715 **
x3
           9.126e-01 8.977e-01 1.017 0.309351
          -1.387e-01 9.284e-02
                                  -1.494 0.135098
x4
           -2.679e+00 7.238e-01
                                  -3.701 0.000215 ***
x5
```

2)
$$H_0$$
: $\beta_2 = \beta_5$ 생략

3) H_0 : $\beta_3 = \beta_4 = 0$

귀무가설을 기각할 수 없음

4) $H_0: \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_5 = 0$

귀무가설 기각

5) 분류기준값 d = 0.5로 분류하고 정분류율 계산

분류행렬

정분류율

> sum(diag(my_table))/sum(my_table)*100
[1] 91.53846

수정된 정분류율

> y_max <- max(table(p21\$y))
> (sum(diag(my_table))-y_max)/sum(my_table)*100
[1] 26.15385

6) 모형 M_1 : 설명변수 (X_1, \cdots, X_5) . 모형 M_2 : 설명변수 (X_2, X_5) 두 모형의 AIC 비교

```
> fit_25 <- glm(y~x2+x5,family=binomial,data=p21)</pre>
```

> fit\$aic
[1] 68.21485

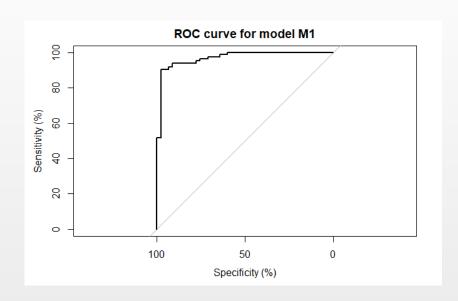
> fit_25\$aic
[1] 68.67355

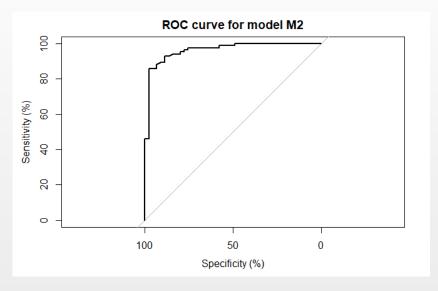
7) 모형 M₁과 M₂에 대한 ROC curve 작성과 비교

- > library(pROC)
 > pred_m1 <- predict(fit, type="response")
 > pred_m2 <- predict(fit_25, type="response")</pre>
- > roc(p21\$y, pred_m1, percent=TRUE, plot=TRUE,
 main="ROC curve for model M1")

 Data: pred_m1 in 45 controls (p21\$y 0) < 85 cases (p21\$y 1).
 Area under the curve: 97.07%</pre>
- > roc(p21\$y, pred_m2, percent=TRUE, plot=TRUE,
 main="ROC curve for model M2")

 Data: pred_m2 in 45 controls (p21\$y 0) < 85 cases (p21\$y 1).
 Area under the curve: 96.42%</pre>





- 두 모형 사이에 큰 차이가 없음단순한 M₂ 모형이 더 선호됨

연습문제 3.4

- 기업 파산에 대한 통계적 예측모형 개발
- 반응변수: Y=1 (정상 기업), Y=0 (파산 기업)
- 설명변수

X₁: 현금흐름 대 총부채 비율(유동성 지표)

X₂: 순이익 대 총자산 비율(수익성 지표)

X₃: 유동자산 대 유동부채 비율(단기지급능력 지표)

X₄: 유동자산 대 순매출액 비율(자산운영 효율성 지표)

 자료 파일: p2-4.dat (파산 선고된 21개 기업과 정상 운영되는 25개 기업 자료)

1) 개별 회귀계수에 대한 유의성 검정

- 2) H_0 : $\beta_1 = \beta_4$ 생략
- 3) H_0 : $\beta_1 = \beta_2 = \beta_4 = 0$

귀무가설 기각

4) H_0 : $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta_4 = 0$

```
> fit_n <- glm(y ~ 1,family=binomial,data=p24)
> anova(fit_n, fit, test="Chisq")
Analysis of Deviance Table

Model 1: y ~ 1
Model 2: y ~ (id + x1 + x2 + x3 + x4) - id
  Resid. Df Resid. Dev Df Deviance Pr(>Chi)
1     45     63.421
2     41     27.467     4     35.954     2.957e-07 ***
```

- 귀무가설 기각
- 3)의 가설이 기각되었기 때문에 큰 의미 없음
- 가장 먼저 검정해야 할 가설

5) 분류 기준값이 0.5일 때 분류행렬 작성하고 CCR 및 수정된 CCR 계산

```
> sum(diag(my_table))/sum(my_table)*100
[1] 91.30435
```

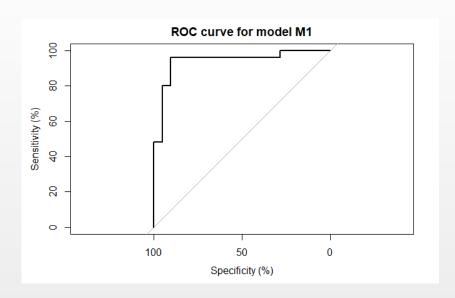
```
> y_max <- max(table(p24$y))
> (sum(diag(my_table))-y_max)/sum(my_table)*100
[1] 36.95652
```

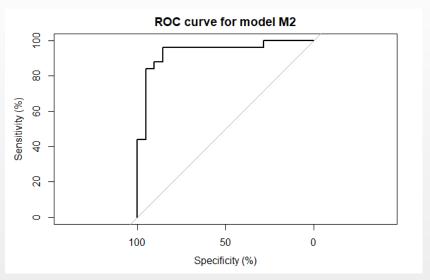
6) 모형 M₁(X₁, X₂, X₃, X₄) vs 모형 M₂(X₁, X₃) AIC 비교

```
> fit_13 <- glm(y~x1+x3, family=binomial, data=p24)
> fit$aic
[1] 37.46722
> fit_13$aic
[1] 34.6579
```

7) 모형 M₁과 M₂의 ROC 곡선 비교

```
> library(pROC)
> pred_m1 <- predict(fit, type="response")
> pred_m2 <- predict(fit_13,type="response")</pre>
```





연습문제 3.5

- 신생아 몸무게(BWT)가 2.5kg 미만인 미숙아 출산과 관련된 위험요인에 관한 연구
- 반응변수: Low=0(정상), Low=1(미숙아)
- 설명변수

Age: 출산 시 산모 나이

Lwt: 출산 직전 산모 몸무게

Race: 인종(1=백인, 2=흑인, 3=기타)

Smoke: 임신 중 흡연여부(1=흡연, 0=금연)

Ptl: 미숙아 출산 경험여부(1=있음, 0=없음)

Ht: 고혈압여부(1=고혈압, 0=정상)

Ui: 자궁자극성여부(1=있음, 0=없음)

Ftv: 임신 첫 3개월간 진찰횟수

자료 입력

- 변수 age와 lwt를 제외한 나머지 변수는 모두 범주형
- 변수 race는 3개 범주: factor로의 전환이 필수
- 나머지 변수는 모두 2개 범주: 0 또는 1의 값을 갖고 있기 때문에 factor로 전환하지 않아도 함수 glm()에서 사용 가능

1) 개별 회귀계수에 대한 유의성 검정

```
> fit <- glm(low~.-id-bwt, family=binomial, p25)</pre>
> summary(fit)
Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)
                       1.196888 0.402 0.68801
            0.480623
age
           -0.029549 0.037031 -0.798 0.42489
lwt
           -0.015424
                      0.006919 -2.229 0.02580 *
        1.272260
race2
                      0.527357 2.413 0.01584 *
race3
            0.880496
                      0.440778 1.998 0.04576 *
smoke
            0.938846
                       0.402147
                                 2.335
                                        0.01957 *
ptl
                                 1.573
                                        0.11571
            0.543337
                       0.345403
ht
            1.863303
                      0.697533 2.671 0.00756 **
ui
            0.767648
                       0.459318
                                 1.671
                                        0.09467 .
ftv
            0.065302
                       0.172394
                                 0.379
                                        0.70484
```

race2 (1=흑인, 0=그 외), race3(1=기타, 0=그 외) → reference 범주가 백인

- 다중 범주를 갖고 있는 factor가 설명변수가 된 경우의 해석 방법
 - 변수 race는 3개의 범주를 갖고 있는 factor
 - 이 경우 race를 설명변수에 포함시키면 2개의 dummy 변수가 생성됨
 - race2는 흑인, race3는 기타 인종의 경우에만 각각 1이 됨
 - race2는 흑인과 백인의 차이, race3는 기타 인종과 백인의 차이
 - 이 경우 race의 첫 번째 범주인 "1"(백인)을 reference 범주라고 함

교재에서는 reference 범주를 "3"(기타 인종)으로 처리하여 D₁(1=백인, 0=그 외), D₂(1=흑인, 0=그 외)를 dummy 변수로 사용함

• reference 범주를 변경하고 다시 적합

```
> p25 <- dplyr::mutate(p25,race=relevel(race, ref="3"))</pre>
> fit <- glm(low ~ . -id -bwt, family=binomial, p25)
> summary(fit)
Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) 1.361119 1.104589 1.232 0.21786
           -0.029549
                      0.037031 -0.798 0.42489
age
lwt
           -0.015424
                      0.006919
                               -2.229 0.02580 *
           -0.880496
                      0.440778
                               -1.998
                                      0.04576 *
race1
race2
         0.391764
                      0.537609 0.729
                                       0.46618
smoke
                      0.402147 2.335 0.01957 *
       0.938846
ptl
         0.543337
                      0.345403 1.573
                                      0.11571
ht
           1.863303
                      0.697533 2.671
                                       0.00756 **
ui
           0.767648
                      0.459318 1.671
                                       0.09467 .
ftv
                                0.379
                                       0.70484
            0.065302
                      0.172394
```

race1 백인과 기타 인종의 차이, race2 흑인과 기타 인종의 차이

```
4) H_0: \beta_1 = \cdots = \beta_9 = 0
```

```
> fit_n <- glm(low ~ 1,family=binomial, p25)
> anova(fit_n, fit, test="Chisq")
Analysis of Deviance Table

Model 1: low ~ 1
Model 2: low ~ (id + age + lwt + race + smoke + ptl + ht + ui + ftv + bwt) - id - bwt
  Resid. Df Resid. Dev Df Deviance Pr(>Chi)
1     188     234.67
2     179     201.28 9     33.387 0.0001143 ***
```

- 귀무가설 기각
- 적어도 한 개 이상의 유의한 변수 존재

```
3) H_0: \beta_{Age} = \beta_{Ptl} = \beta_{Ftv} = 0
```

귀무가설 기각할 수 없음

5-1) 분류 기준값이 0.05일 때 분류행렬 작성하고 CCR과 수정된 CCR 계산

```
> low_hat <- (fit$fitted >= 0.05)*1
> my_table <- table(p25$low, low_hat)</pre>
> addmargins(my_table)
     low_hat
          1 Sum
        5 125 130
  1 0 59 59
  Sum 5 184 189
> sum(diag(my_table))/sum(my_table)*100
Γ11 33.86243
> y_max <- max(table(p25$low))</pre>
> (sum(diag(my_table))-y_max)/sum(my_table)*100
[1] -34.92063
```

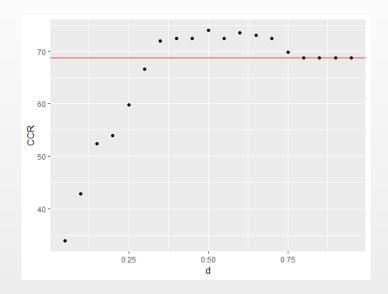
5-2) 분류 기준값이 0.3, 0.4, 0.6, 0.7인 경우 같은 분석 실시 어떤 기준값에서 정분류율이 가장 높은가?

- 방법 1: 앞에서 실행시킨 code에서 d값만 수정하고 반복 시행 방법 2: 사용자 정의함수를 만들어서 시행 → 동일한 분석을 반복 시행해야 하는 경우 효과적인 방법
- 함수 CCR 작성 및 실행

```
> CCR <- function(d, y, pred){
    y_hat=(pred>=d)*1
    my_table=table(y, y_hat)
    ccr=sum(diag(my_table))/sum(my_table)*100
    res=c(d,ccr)
    return(res)
}
```

```
> CCR(d=0.05, y=p25$low, pred=fit$fitted)
[1] 0.05000 33.86243
```

• 다양한 d 값에 대한 CCR 계산 및 그래프 작성



d=0.5일 때 정분류율이 가장 높게 나옴

- 다양한 d 값에 대한 CCR 계산

```
> d <- seq(0.05,0.95,by=0.05)
> res <- numeric(length(d)*2)
> dim(res) <- c(length(d),2)

> for(i in seq_along(d)){
    res[i,]=CCR(d=d[i], y=p25$low, pred=fit$fitted)
}
```

- 계산 결과 그래프 작성

```
> colnames(res) <- c("d","ccr")
> max_t <- max(table(p25$low))/sum(table(p25$low))*100
> library(ggplot2)
> ggplot(data.frame(res), aes(x=d, y=ccr)) +
    geom_point() +
    geom_hline(yintercept=max_t, color="red") +
    labs(x="d", y="CCR")
```

6) 모형 M_1 : 모든 설명변수 포함 모형 M_2 : 설명변수 (Lwt, Race, Smoke, Ht, Ui)만 포함

두 모형의 AIC 비교

```
> fit_m1 <- glm(low ~ . -id -bwt, family=binomial, p25)
> fit_m2 <- update(fit_m1, . ~ . -age -ptl -ftv)

> fit_m1$aic
[1] 221.2848
> fit_m2$aic
[1] 218.2166
```

7) 모형 M₁과 M₂의 ROC 곡선 작성

```
> library(pROC)
> pred_m1 <- predict(fit_m1, type="response")</pre>
> pred_m2 <- predict(fit_m2, type="response")</pre>
> roc(p25$low, pred_m1, percent=TRUE, plot=TRUE,
      main="ROC curve for model M1")
Data: pred_m1 in 130 controls (p25$low 0) < 59 cases (p25$low 1).
Area under the curve: 74.62%
> roc(p25$low, pred_m2, percent=TRUE, plot=TRUE,
      main="ROC curve for model M2")
Data: pred_m2 in 130 controls (p25$low 0) < 59 cases (p25$low 1).
Area under the curve: 73.51%
```

