확률통계 및 공통 알고리즘

5. 회귀분석

임채영

서울대학교

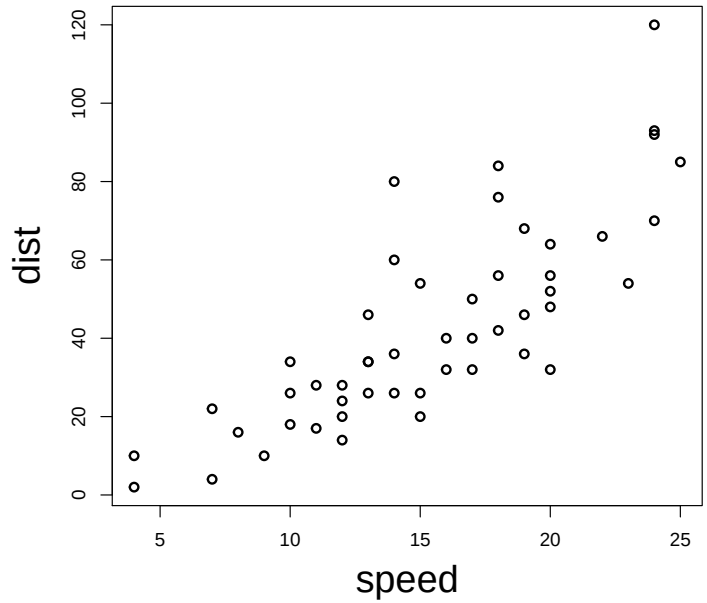
이번 강의에서 다룰 내용

- 단순선형회귀분석- 회귀계수의 추정, 결정계수, 회귀직선의 유의성 검정, 회귀계수의 유의성 검정, 평균반응에 대한 추론, 잔차분석
- 다중선형회귀분석 - 회귀계수의 추정, 결정계수, 유의성 검정, 범주형설명변수

선형 모형과 회귀분석

- 하나의 변수(설명변수, Explanatory variable)가 다른 하나의 변수(반응변수, Response variable)에 영향을 끼치는 관계를 설명하기 위한 모형을 생각해 볼 수 있다.
- 설명변수와 반응변수 간에는 다양한 함수 형태의 관계를 가정할 수 있는데, 특히 반응변수가 입력변수의 1차 함수 형태로 나타난다고 가정하는 경우, 선형 모형(Linear model)을 고려해볼 수 있다.

선형 모형 예시



자동차의 속도와 정지 시 제동 거리로 이루어진 자료의 산점도.

- ’자동차의 제동 거리는 속도에 대한 직선 형태의 함수로 나타날 것이다’ 라고 생각하면, 두 변수 간에 다음과 같은 선형 모형을 고려할 수 있다.
- 거리 $= \beta_0 +$ 속도 $\times \beta_1$

회귀분석

- 회귀분석 (Regression Analysis)

  변수사이의 모형을 가정하고 자료를 이용하여 추정하는 분석 방법
- 선형회귀모형 (Linear regression model)

  선형모형을 가정한 회귀모형

단순 선형회귀모형

- 단순선형회귀모형(Simple linear regression model)

  하나의 설명변수에 대해 만들어진 선형 회귀모형

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \epsilon,\ E(\epsilon) = 0,\ Var(\epsilon) = \sigma^2$$

- 회귀계수(Regression coefficient)

  모형의 계수들 (β_0, β_1)

단순 선형회귀모형의 가정

- 데이터 (Y_i, X_i)가 독립적으로 관측되었을때

  $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \epsilon_i,$

  $\epsilon_i \overset{i.i.d.}{\sim} (0, \sigma^2)$

  $E(Y_i|X_i) = \beta_0 + \beta_1 X_i$
- 독립성, 선형성, 등분산성
- 추가로 오차의 분포가 정규분포라는 가정을 통해,
  모회귀계수에 대한 추론을 할 수 있게 된다. (정규성 가정)

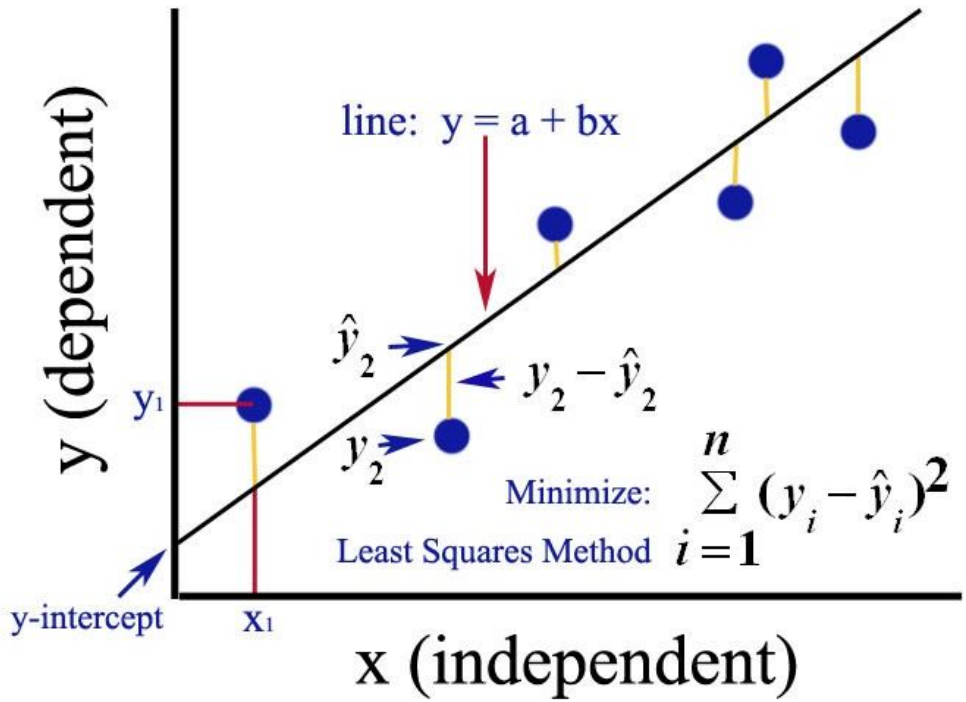
회귀계수의 추정

- 최소제곱법(method of least square)

  오차 제곱합 $\sum_{i=1}^{n}\{Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)\}^2$을 최소화시키는 β_0, β_1를 추정

- 이렇게 구해진 추정량을 최소제곱추정량(Least Square Estimator, LSE)이라 한다.

최소제곱법의 원리


line: y = a + bx
y (dependent)
x (independent)
y-intercept
y1
x1
$\hat{y}_2$
$y_2 - \hat{y}_2$
y_2
Minimize: $\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$
Least Squares Method

- 구체적으로 오차의 제곱합 $\sum_{i=1}^{n}\{Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)\}^2$ 을 β_0, β_1 에 대해 각각 편미분하여 얻은 식을 0으로 놓은 연립방정식 (정규 방정식, normal equation)의 해를 구함

$$\begin{cases} -2\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 X_i) = 0 \\ -2\sum_{i=1}^{n} X_i(Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 X_i) = 0 \end{cases}$$

- $\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{X}$, $\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$
- 최소제곱회귀직선

  최소제곱법으로 추정한 회귀계수를 대입하여 만든 직선

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X = \bar{Y} + \hat{\beta}_1(X - \bar{X})$$

- $\hat{Y}_i$: 반응변수의 기댓값인 $E(Y_i|X_i)$의 추정값, 즉, $\hat{Y}_i = \widehat{E(Y_i|X_i)}$

예시

20명의 수학능력시험의 국어영역과 영어영역의 점수가 아래와 같이 주어졌다고 하자.

학생 번호	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
국어	42	38	51	53	40	37	41	29	52	39
영어	30	25	34	35	31	29	33	23	36	30
학생 번호	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
국어	45	34	47	35	44	48	47	30	29	34
영어	32	29	34	30	28	29	33	24	30	30

모국어에 관련된 어학 능력이 외국어에 관련된 어학 능력에 영향을 끼치는지 알아보기 위해, 국어 점수를 설명변수로 하고 영어 점수를 반응변수로 하는 단순회귀모형을 적합해보도록 한다.

- X와 Y를 각각 국어성적과 영어성적이라 했을 때, 통계량 및 회귀계수는 다음과 같다.
- $\bar{x} = 40.75, \bar{y} = 30.25, S_{xx} = 1083.75, S_{xy} = 379.25$
- $\hat{\beta}_1 = \frac{379.25}{1083.75} = 0.3499,\ \hat{\beta}_0 = 30.25 - \hat{\beta}_1 \cdot 40.75 = 15.9899$
- 즉, 적합된 회귀모형은 다음과 같다.

$$\hat{Y}_i = 15.9899 + 0.3499 \times x_i$$

- Python statmodels 모듈을 사용한 회귀분석 시행 결과

```
In [207]: kor = df(data=kor) # 모듈 이 저장시에는 pandas.DataFrame
     ...: eng = df(data=eng)
     ...: score =pd.concat([kor, eng], axis=1)
     ...: #axis= 0 : 한 열로 이어붙이기, 1 : 서로 다른 열로 구분해서 합치기
     ...: score_model=sm.ols(formula='eng~kor', data=score) # ols : 모형화 함수
     ...: score_result=score_model.fit() # 모형화 결과(빈 괄호부분을 생략하면 결과를 볼 수 없다.)
     ...: print(score_result.summary()) #결과 정리 : 결과값은 이 과정을 통해 볼 수있다.
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                    eng   R-squared:                       0.573
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.549
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     24.12
Date:                Tue, 19 Dec 2017   Prob (F-statistic):           0.000113
Time:                        22:13:08   Log-Likelihood:                -44.376
No. Observations:                  20   AIC:                             92.75
Df Residuals:                      18   BIC:                             94.74
Df Model:                           1
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept     15.9899      2.950      5.419      0.000       9.791      22.189
kor            0.3499      0.071      4.911      0.000       0.200       0.500
==============================================================================
Omnibus:                        1.491   Durbin-Watson:                   2.023
Prob(Omnibus):                  0.474   Jarque-Bera (JB):                1.301
Skew:                          -0.521   Prob(JB):                        0.522
Kurtosis:                       2.310   Cond. No.                         233.
==============================================================================
```

잔차 (residual)

- 잔차(residual)

$$\hat{\epsilon}_i = Y_i - \hat{Y}_i$$

- 오차 $\epsilon_1, \epsilon_2, \cdots, \epsilon_n$의 관측값 개념으로 생각할 수 있고, 이들은 오차분산 σ^2의 크기에 따라 값이 크거나 작게 나타남
- 잔차의 크기가 작을 수록 최소제곱회귀직선이 실제 관측 결과를 잘 설명해준다고 생각할 수 있음

잔차제곱합 (Residual sum of square)

- 잔차제곱합(Residual sum of square, SSE)

$$SSE(= SS_{Res}) = \sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y}_i)^2$$

- 오차분산 σ^2 추정에 사용

  $\hat{\sigma}^2 = MSE = \frac{SSE}{n-2} = \frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y}_i)^2$

  - *MSE* (평균제곱오차, Mean squared error): SSE를 잔차제곱합의 자유도 (표본의 수 - 회귀계수의 수)로 나눈값

편차의 분해

자료를 적합시킨 선형회귀모형이 관측자료를 얼마나 잘 설명하고 있는지 판단하기 위해 고려함

- 편차, $y_i - \bar{y}$: 관측값 y_i와 평균 $\bar{y}$의 차이
  - x_i (설명변수)가 없을때 y_i (반응변수)를 설명하는 $\bar{y}$와의 차이
- 편차의 분해

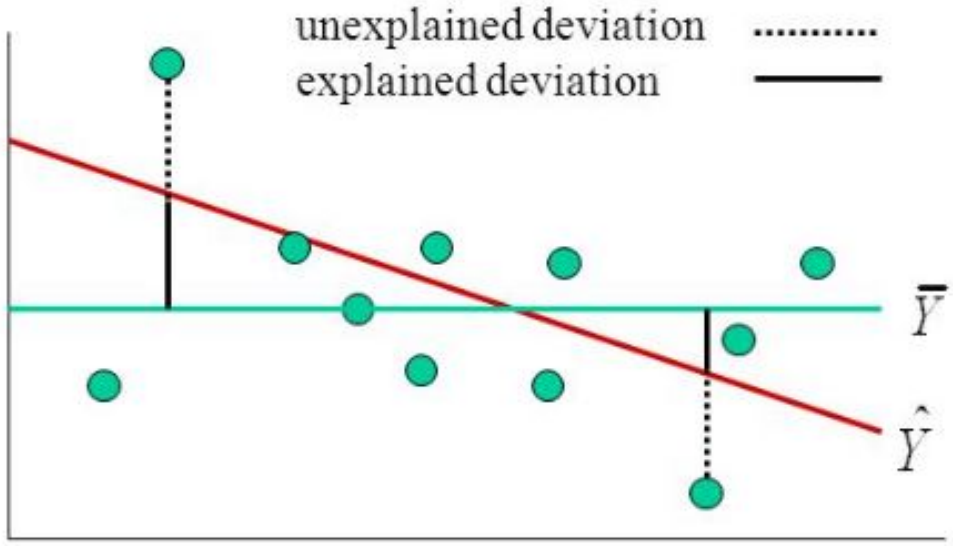
$$y_i - \bar{y} = (y_i - \hat{y}_i) + (\hat{y}_i - \bar{y}) = \hat{\epsilon}_i + (\hat{y}_i - \bar{y})$$

  - $(y_i - \hat{y}_i)$: 잔차, 회귀직선으로 설명하지 못하는 부분
  - $(\hat{y}_i - \bar{y})$는 회귀직선에 의해 설명되는 부분
- 두 종류의 편차를 더했다는 뜻에서 $y_i - \bar{y}$를 총편차(total deviation)라고 부른다.

편차의 분해

그림으로 나타낸 편차의 분해

- 실선: 회귀직선에 의해 설명되는 편차
- 점선: 잔차



편차의 제곱합

- 반응변수 값의 변동 중 회귀직선을 통해 설명할 수 있는 변동을 구할수 있음
- 편차의 합은 그 특성상 무조건 0이 되므로, 편차의 제곱합을 사용

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

- 총제곱합 (Total sum of square, SST): 총편차의 제곱합, 자료 전체의 변동
- 회귀제곱합 (Regression sum of square, SSR): 회귀직선을 통해 설명할 수 있는 편차의 제곱합
- 잔차제곱합(SSE or SS_{Res})

결정계수, R^2

- 결정계수(Coefficient of determination, R^2)

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST}$$

  - 총 제곱합 중 회귀제곱합이 차지하는 비율
- 총제곱합 중 회귀제곱합의 부분이 클 수록 회귀모형이 관측결과를 잘 설명해주는 것이라 할 수 있다.

단순선형회귀모형에서의 결정계수

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = \frac{(S_{xy})^2}{S_{xx}S_{yy}} = \left\{ \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_{xx}}\sqrt{S_{yy}}} \right\}^2 = r^2$$

- 단순선형회귀모형

  $SSR = \sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^{n}\{\hat{\beta}_1(x_i - \bar{x})\}^2 = \frac{(S_{xy})^2}{S_{xx}}$

  $SST = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 = S_{yy}$
- 결정계수 R^2은 표본상관계수 r의 제곱
- R^2이 1에 가까울수록 산점도에서 점들이 직선 주위에 밀집되어 나타난다고 볼 수 있다. 즉, 회귀직선이 자료를 잘 설명한다고 해석할 수 있다.

예시

- 앞에서 다룬 국어 성적과 영어 성적의 편차 제곱합을 구해보자.
- $S_{xx} = 1083.75, S_{xy} = 379.25, S_{yy} = 231.75$
- $SST = S_{yy} = 231.75, SSR = \frac{(S_{xy})^2}{S_{xx}} = 132.716$
  $SSE = SST - SSR = 99.034$
- 총제곱합과 회귀제곱합을 통해 구한 결정계수와 앞서 구한 상관계수의 관계를 구해보자.

$$R^2 = \frac{132.716}{231.75} = 0.573 = (0.757)^2 = r^2$$

- 즉, 앞서 적합한 단순선형회귀모형은 자료의 변동의 약 57.3%를 설명한다고 볼 수 있고, 결정계수가 상관계수의 제곱으로 나타난다는 것 역시 확인해보았다.

단순회귀분석에서의 추론: 회귀직선의 유의성 검정

- 설명변수 x를 고려한 회귀직선이 의미가 있는지에 대한 검정
- $\frac{SSR}{SSE}$의 값이 커질 수록 회귀직선의 유의하다는 증거가 강해지는것으로 해석
- $SSR/\sigma^2 \sim \chi^2(1)$, $SSE/\sigma^2 \sim \chi^2(n-2)$
- $F = \frac{SSR/1}{SSE/(n-2)} = \frac{MSR}{MSE} \sim F(1, n-2)$

F검정

- 귀무가설: H_0 : 회귀모형이 유의하지 않다.($\beta_1 = 0$)
- 대립가설 H_1 : 회귀모형이 유의하다.($\beta_1 \neq 0$)
- 검정통계량 : $F = \frac{SSR/1}{SSE/(n-2)}$
- 검정통계량의 관측값 f_0.
- 유의확률: $P(F \geq f_0)$
- 유의수준 α에서 기각역 : $F > F_{1-\alpha}(1, n-2)$
- $F \sim F(k_1, k_2)$일때, $P(F \leq F_p(k_1, k_2)) = p$.

분산분석표

- 분산분석표(Analysis of variance table)

  회귀직선의 유의성 검정 과정을 표로 요약

요인	제곱합	자유도	평균제곱	F 값	유의확률
회귀	SSR	1	$MSR = SSR\ /1$	$f_0 = MSR/MSE$	$P(F \geq f_0)$
잔차	SSE	$n-2$	$MSE = SSE\ /(n-2)$		
계	SST	$n-1$			

예시

앞서 국어성적을 x로 설정하고 영어성적을 y로 설정하여 적합한 회귀직선 $Y_i = 15.9899 + 0.3499 \times x_i + \epsilon_i$에 대한 F검정을 해보자.

- 회귀모형에 대한 가설
  H_0 : 회귀모형이 유의하지 않다.($\beta_1 = 0$)
  H_1 : 회귀모형이 유의하다.($\beta_1 \neq 0$)

	제곱합	자유도	평균제곱	F값	유의확률
회귀	132.716	1	132.716	24.122	<0.001
잔차	99.034	18	5.502		
계	231.75				

- 분산분석표를 관측한 결과, 귀무가설을 기각할 수 있음을 확인할 수 있다. 즉, 적합된 회귀직선은 유의하다고 할 수 있다.

- statsmodels 패키지 안의 stats 서브패키지에 있는 anova 모듈 안의 *anova_lm* 함수를 활용하여 분산분석표를 얻을 수 있다.

```
In [208]: anova.anova_lm(score_result)
C:\Users\user\Anaconda3\lib\site-packages\scipy\stats\_distn_infrastructure.py:879: RuntimeWarning: invalid
value encountered in greater
  return (self.a < x) & (x < self.b)
C:\Users\user\Anaconda3\lib\site-packages\scipy\stats\_distn_infrastructure.py:879: RuntimeWarning: invalid
value encountered in less
  return (self.a < x) & (x < self.b)
C:\Users\user\Anaconda3\lib\site-packages\scipy\stats\_distn_infrastructure.py:1821: RuntimeWarning: invalid
value encountered in less_equal
  cond2 = cond0 & (x <= self.a)
Out[208]:
            df      sum_sq     mean_sq          F    PR(>F)
kor        1.0  132.715629  132.715629  24.12174  0.000113
Residual  18.0   99.034371    5.501910       NaN       NaN
```

회귀계수 (β_1)의 유의성에 대한 검정

- 회귀계수의 최소제곱추정량의 성질을 이용하여 회귀계수의 유의성에 대한 검정 가능
- 단순선형회귀에서

$$\hat{\beta}_1 \sim N\left(\beta_1, \frac{\sigma^2}{S_{xx}}\right)$$

$$t = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\hat{\sigma}/\sqrt{S_{xx}}} \sim t(n-2)$$

회귀계수 유의성검정을 위한 t 검정

- 귀무가설: H_0 : 회귀계수가 유의하지 않다.($\beta_1 = b$)
- 대립가설 H_1 : 회귀계수가 유의하다.($\beta_1 \neq b$)
- 검정통계량 : $t = \frac{\hat{\beta}_1 - b}{\hat{\sigma}/\sqrt{S_{xx}}}$
- 검정통계량의 관측값: t_0

$T \sim t(k)$일때, $P(T \leq t_p(k)) = p$.

대립가설 H_1	유의확률	유의수준 α의 기각역
$\beta_1 > b$	$P(T > t_0)$	$T > t_{1-\alpha}(n-2)$
$\beta_1 < b$	$P(T < t_0)$	$T < -t_{1-\alpha}(n-2)$
$\beta_1 \neq b$	$P(\lvert T\rvert > \lvert t_0\rvert)$	$\lvert T\rvert > t_{1-\alpha/2}(n-2)$

예시

중고차의 사용 연수에 따라 중고차의 가격이 얼마나 달라지는 지에 대해 알아보기 위해, 중고차의 사용 연수를 설명변수(x, 단위 : 1년), 가격을 반응변수(y, 단위 : 100만원)로 하는 단순선형회귀모형을 고려해보자

사용년수 (x_i)	1.0	1.5	2.0	2.0	3.0	3.0	3.2	4.0	4.5	5.0	5.0	5.5
중고차가격 (y_i)	4.5	4.0	3.2	3.4	2.5	2.3	2.3	1.6	1.5	1.0	0.8	0.4

중고차의 사용 연수 및 가격 자료

- n = 12, $\bar{x} = 3.308$, $\bar{y} = 2.292$
  $S_{xx} = 24.649$, $S_{xy} = -21.169$, $\hat{\sigma}^2 = MSE = 0.0289$
- $\hat{\beta}_1 = \frac{-21.169}{24.649} = -0.859, \hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = 5.133$
- 적합된 회귀모형:

$$\hat{Y}_i = 5.133 - 0.859 \times x_i$$

적합된 회귀모형의 회귀계수 β_1이 유의한지에 대해 유의수준 5%에서
t 검정을 시행해보자.

- 회귀계수에 대한 가설
  H_0 : 회귀계수 β_1이 유의하지 않다.($\beta_1 = 0$)
  H_1 : 회귀계수 β_1이 유의하다.($\beta_1 \neq 0$)
- 검정통계량의 관측값 :
  $t_0 = \frac{\hat{\beta}_1 - 0}{\hat{\sigma}/\sqrt{S_{xx}}} = \frac{-0.859}{\sqrt{0.0289/24.649}} = -25.087$
- 기각역: $|t_0| > |t_{0.975}(10)| = 2.281$
- 유의수준 5%에서 회귀계수가 유의하다고 볼 수 있다.

summary 명령어를 통해 나온 결과로부터 계수의 유의성검정 진행

```
In [209]: usedcar_model=sm.ols(formula='price~year', data=usedcar) # ols : 모형화 함수
     ...: usedcar_result=usedcar_model.fit() # 모형화 결과(빈 괄호부분을 생략하면 결과를 볼 수 없다.)
     ...: print(usedcar_result.summary()) #결과 정리 : 결과값은 이 과정을 통해 볼 수있다.
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:                  price   R-squared:                       0.984
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.983
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     629.8
Date:                Tue, 19 Dec 2017   Prob (F-statistic):           2.31e-10
Time:                        22:16:16   Log-Likelihood:                 5.3366
No. Observations:                  12   AIC:                            -6.673
Df Residuals:                      10   BIC:                            -5.703
Df Model:                           1
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept      5.1329      0.123     41.600      0.000       4.858       5.408
year          -0.8588      0.034    -25.095      0.000      -0.935      -0.783
==============================================================================
Omnibus:                        0.703   Durbin-Watson:                   1.413
Prob(Omnibus):                  0.704   Jarque-Bera (JB):                0.588
Skew:                           0.073   Prob(JB):                        0.745
Kurtosis:                       1.926   Cond. No.                         9.66
==============================================================================
```

예시

이번에는 회귀계수의 값, 즉 연 평균 중고차 가격의 감소액이 80 만원을 초과하는지에 대해 검정해보도록 한다.

- 회귀계수에 대한 가설
  $H_0 : \beta_1 = -0.8,\ H_1 : \beta_1 < -0.8$
- 검정통계량의 관측값
  $t_0 = \frac{\hat{\beta}_1 - (-0.8)}{\hat{\sigma}/\sqrt{S_{xx}}} = \frac{-0.859-(-0.8)}{\sqrt{0.0289/24.649}} = -1.719$
- 기각역 : $t_0 < -t_{0.95}(10) = -1.812$
- 통계량의 관측값이 기각역에 들어가지 못하므로, 유의수준 5% 에서 귀무가설을 기각하지 못한다.

예시: β_1의 신뢰구간

- 앞서 구한 $Var(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$를 이용하여 회귀계수 $\hat{\beta}_1$에 대한 95% 신뢰구간을 구할 수 있다

$$\hat{\beta}_1 \pm t_{0.975}(12-2)\frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{S_{xx}}} = -0.859 \pm 2.228 \cdot \sqrt{\frac{0.0289}{24.649}}$$

$$= -0.859 \pm 0.076 \;\Rightarrow\; (-0.935, -0.783)$$

- 중고차의 가격은 1년이 지날 때마다 평균적으로 783,000 원에서 935,000 사이로 감소한다고 신뢰수준 95%에서 결론내릴 수 있다.

t검정과 F검정의 관계

- 단순선형회귀분석에서,

  회귀모형의 유의성에 대한 F 검정 = 회귀계수의 유의성에 대한 t 검정

$$F = \frac{SSR/1}{SSE/(n-2)} = \frac{\hat{\beta}_1^2 S_{xx}}{MSE} = \left\{ \frac{\hat{\beta}_1 - 0}{\hat{\sigma}/\sqrt{S_{xx}}} \right\}^2 = T^2$$

- $T \sim t(n-2) \rightarrow T^2 \sim F(1, n-2)$

회귀직선의 상수항 (β_0) 에 대한 추론

- 상수항이 어떤값을 갖는지에 대한 유의성 검정을 최소제곱법 추정량 $\hat{\beta}_0$의 성질을 이용하여 할수 있다.
- $\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$로부터
- $E(\hat{\beta}_0) = E(\bar{y}) - E(\hat{\beta}_1 \bar{x}) = \beta_0 + \beta_1 \bar{x} - \beta_1 \bar{x} = \beta_0$
- $Var(\hat{\beta}_0) = Var(\bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}) =$
  $Var(\bar{y}) + (\bar{x})^2 var(\hat{\beta}_1) - 2Cov(\bar{y}, \hat{\beta}_1 \bar{x})$
  $= \frac{\sigma^2}{n} + (\bar{x})^2 \frac{\sigma^2}{S_{xx}} = \sigma^2(\frac{1}{n} + \frac{(\bar{x})^2}{S_{xx}})$
  ($\because Cov(\bar{y}, \hat{\beta}_1 \bar{x}) = \bar{x} Cov(\bar{y}, \hat{\beta}_1) = 0$임이 알려져 있다.)
- $\hat{\beta}_0 \sim N\left(\beta_0, \sigma^2\left(\frac{1}{n} + \frac{(\bar{x})^2}{S_{xx}}\right)\right)$
- $T = \frac{\hat{\beta}_0 - \beta_0}{\hat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(\bar{x})^2}{S_{xx}}}} \sim t(n-2)$

- 귀무가설 $H_0 \ : \ \beta_0 = b$
- 검정 통계량: $T = \frac{\hat{\beta}_0 - b}{\hat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(\bar{x})^2}{S_{xx}}}}$
- 검정통계량의 관측값: t_0

$T \sim t(k)$일때, $P(T \leq t_p(k)) = p$.

대립가설 H_1	유의확률	유의수준 α의 기각역
$\beta_0 > b$	$P(T > t_0)$	$T > t_{1-\alpha}(n-2)$
$\beta_0 < b$	$P(T < t_0)$	$T < -t_{1-\alpha}(n-2)$
$\beta_0 \neq b$	$P(\lvert T\rvert > \lvert t_0\rvert)$	$\lvert T\rvert > t_{1-\alpha/2}(n-2)$

β_0의 $100(1-\alpha)\%$ 신뢰구간
$(\hat{\beta}_0 - t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2)\hat{\sigma}\sqrt{n^{-1} + \bar{x}^2/S_{xx}}, \hat{\beta}_0 + t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-2)\hat{\sigma}\sqrt{n^{-1} + \bar{x}^2/S_{xx}})$

평균반응에 대한 추론

- 평균반응:

  $E(Y|x) = \beta_0 + \beta_1 x$

- 평균반응의 추정량

  $\hat{Y} = \widehat{E(Y|x)} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$

- 평균반응 추정량의 성질

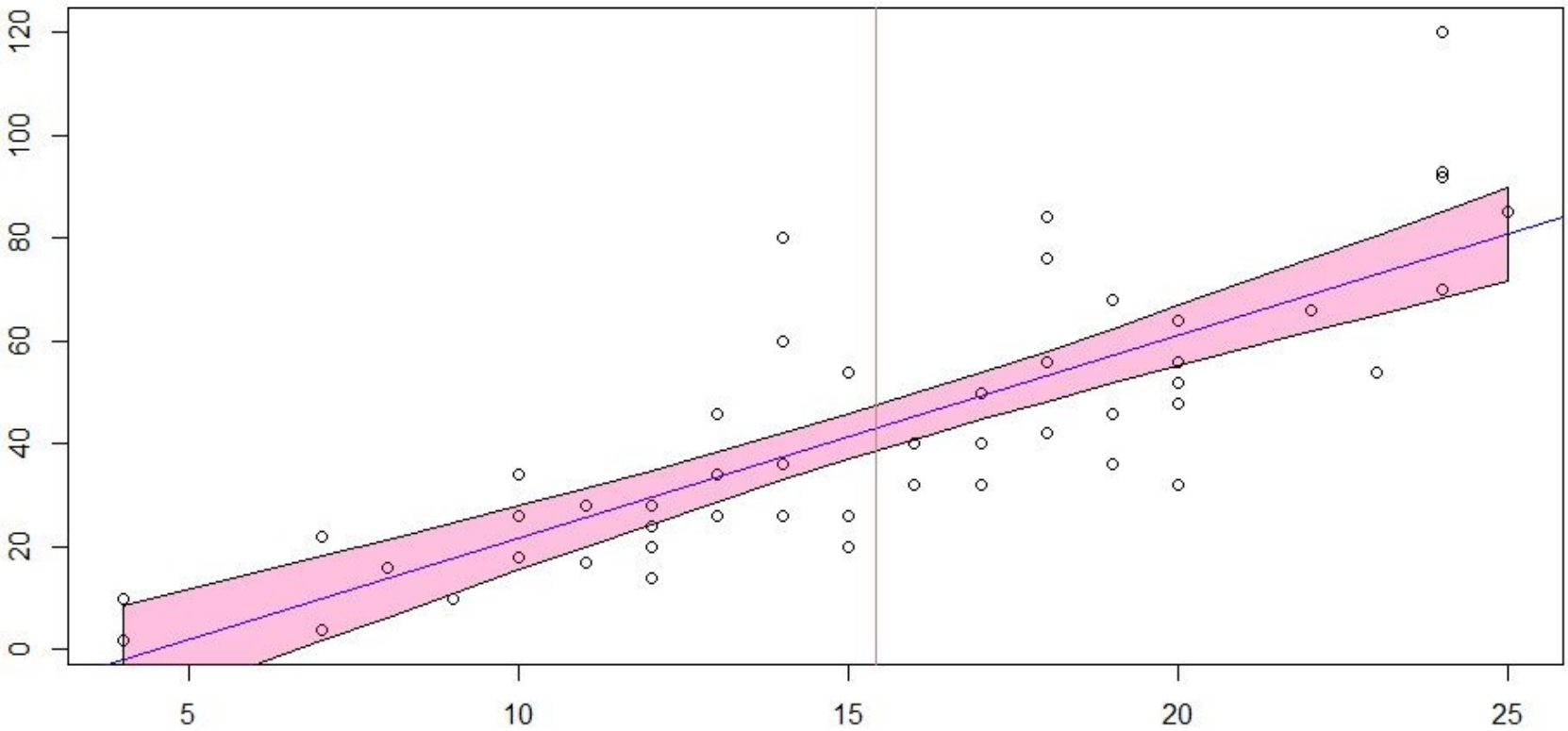
$$E(\hat{Y}) = E(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x) = \beta_0 + \beta_1 x = E(Y)$$

$$Var(\hat{Y}) = Var(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x) = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{(x - \bar{x})^2}{S_{xx}} \right]$$

- $T = \frac{(\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1 x)-(\beta_0+\beta_1 x)}{\sqrt{\hat{\sigma}^2\left[\frac{1}{n}+\frac{(x-\bar{x})^2}{S_{xx}}\right]}} \sim t(n-2)$
- 평균반응의 $100(1-\alpha)\%$ 신뢰구간

$$(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x) \pm t_{1-\alpha/2}(n-2)\sqrt{\hat{\sigma}^2\left[\frac{1}{n}+\frac{(x-\bar{x})^2}{S_{xx}}\right]}$$

- 설명변수의 값이 표본평균으로부터 멀어질 수록 신뢰구간의 폭이 넓어진다



평균반응의 신뢰구간 도표. x값이 표본평균으로부터 멀어질 수록 신뢰구간의 폭이 넓어진다.

평균반응에 대한 검정

- 귀무가설: $H_0 : \beta_0 + \beta_1 x = \mu_0$
- 검정통계량: $T = \frac{(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x) - \mu_0}{\sqrt{\hat{\sigma^2}[\frac{1}{n} + \frac{(x-\bar{x})^2}{S_{xx}}]}}$
- 검정통계량의 관측값: t_0

$T \sim t(k)$일때, $P(T \leq t_p(k)) = p$.

대립가설 H_1	유의확률	유의수준 α의 기각역
$\beta_0 + \beta_1 x > \mu_0$	$P(T > t_0)$	$T > t_{1-\alpha}(n-2)$
$\beta_0 + \beta_1 x < \mu_0$	$P(T < t_0)$	$T < -t_{1-\alpha}(n-2)$
$\beta_0 + \beta_1 x \neq \mu_0$	$P(\|T\| > \|t_0\|)$	$\|T\| > t_{1-\alpha/2}(n-2)$

예시

- 앞서 다루었던 중고차의 사용연수에 따른 가격 변화에 대한 회귀모형에서 사용 연수가 2.5년인 중고차의 평균 가격이 얼마정도 될 지에 대해 알아보고, 95% 신뢰구간을 구해보자.
- $\widehat{E(Y|x=2.5)} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \times 2.5 = 5.133 - 0.859 \times 2.5 = 2.986$
- 95% 신뢰구간

$$2.986 \pm t_{0.975}(10)\sqrt{0.0289[\tfrac{1}{12} + \tfrac{(2.5-3.308)^2}{24.649}]}$$
$$= (2.860, 3.111)$$

잔차분석 (Residual analysis)

- 잔차의 분포를 분석하여 단순선형회귀모형에 대한 가정이 타당한지 점검하여 모형의 적정성 여부를 검토
- 단순회귀모형의 가정

$$\begin{cases} Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i \text{ (선형성)} \\ \epsilon_i \sim \boldsymbol{N}(0, \sigma^2) \text{이고, 서로 독립 (독립성, 등분산성, 정규성)} \end{cases}$$

스튜던트화 잔차

- 오차항의 성질

  $$\frac{\epsilon_i}{sd(\epsilon_i)} = \{Y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\}/\sigma \sim_{iid} N(0,1),\ i = 1, 2, \cdots, n$$

- 스튜던트화 잔차(Studentized residual):

  $$\hat{e}_{st,i} = \hat{\epsilon}_i / \hat{sd}(\hat{\epsilon}_i)$$

- 스튜던트화 잔차를 마치 표준화된 오차항의 관측값처럼 생각하여 회귀모형의 가정을 검토.

잔차도

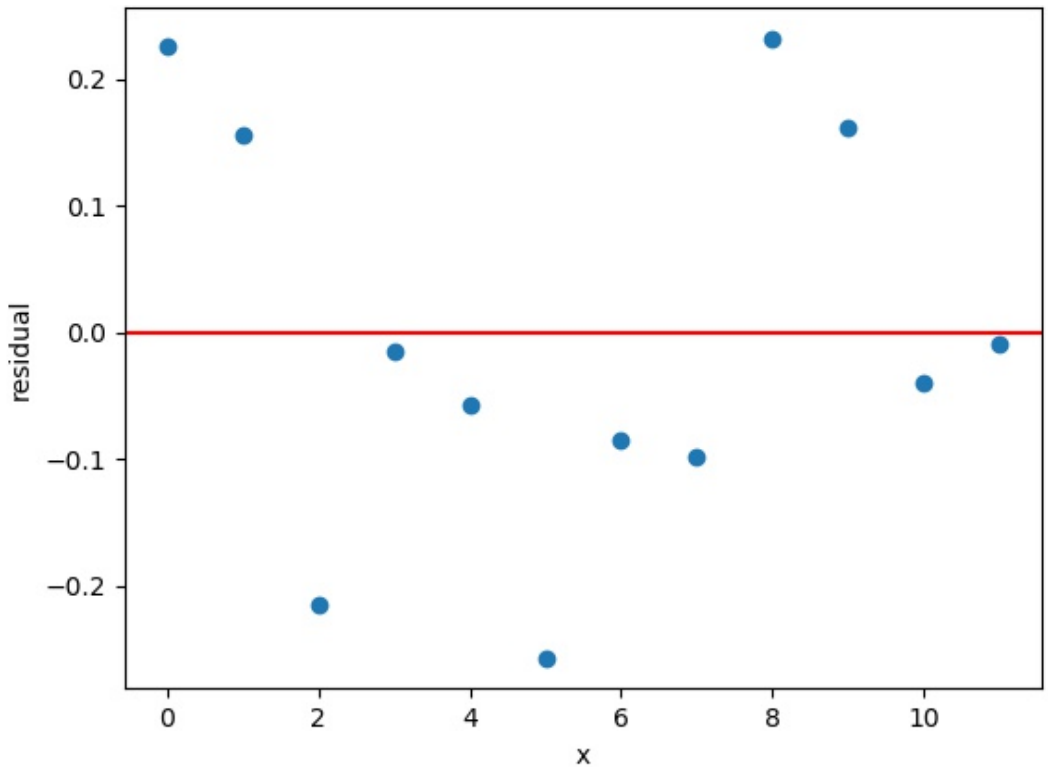
- 잔차도 (Residual plot)

  설명변수의 값들을 x좌표로, 스튜던트화 잔차를 y좌표로 그린 산점도

- 잔차도를 통해 잔차의 분포를 파악하여 회귀모형의 가정이 맞는지를 판단.
  - 대략 0에 관하여 대칭적으로 나타난다.
  - 설명변수의 값에 따라 잔차의 산포가 크게 달라지지 않는다.
  - 점들이 특정한 형식을 가지고 나타나지 않는다.
  - 거의 모든 점이 ± 2 범위 내에 나타난다.

예시1

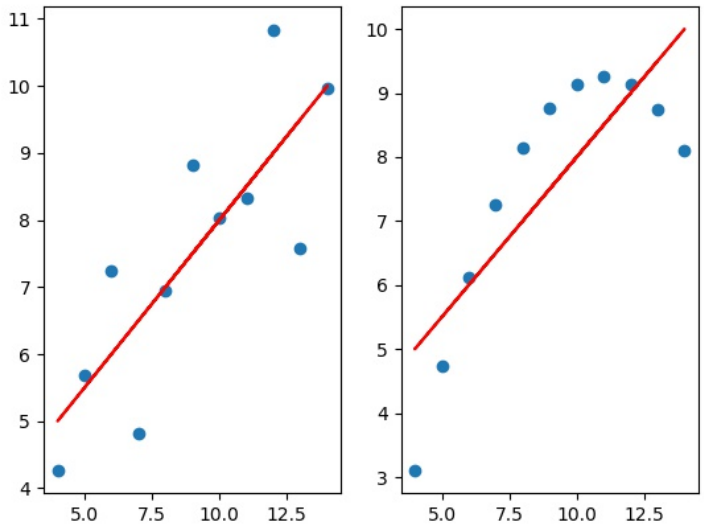
- 중고차의 사용 연수와 가격에 대한 자료를 이용하여 잔차도를 그린 결과



예시2

자료	10	8	13	9	11	14	6	4	12	7	5
A	8.04	6.95	7.58	8.81	8.33	9.96	7.24	4.26	10.84	4.82	5.68
자료	10	8	13	9	11	14	6	4	12	7	5
B	9.14	8.14	8.74	8.77	9.26	8.10	6.13	3.10	9.13	7.26	4.74

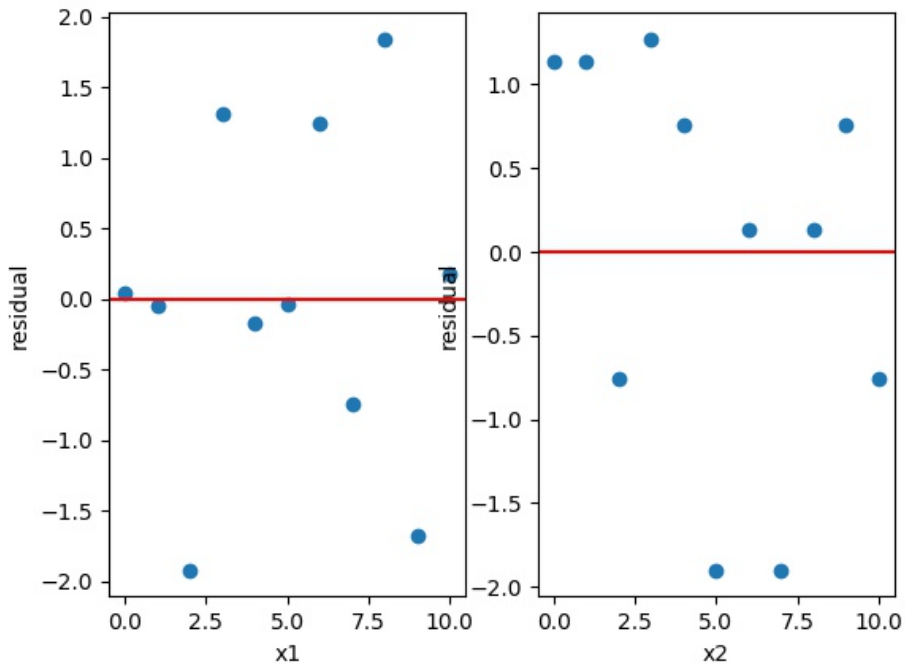
- 각 자료를 바탕으로 회귀직선 및 R^2 계산
  - 자료 A의 회귀직선 :$y = 3.00 + 0.500x$, $R^2 = 0.6665$, F = 17.990
  - 자료 B의 회귀직선 :$y = 3.00 + 0.500x$, $R^2 = 0.6662$, F = 17.965



두 자료의 산점도 및 최소제곱회귀곡선.

- 산점도의 형태는 확연하게 다름

- 두 자료의 스튜던트화 잔차를 이용한 잔차도



- 자료 B의 경우, 스튜던트화 잔차가 0에 관하여 비대칭적으로 나타난 것을 확인

다중회귀분석 (Multiple regression analysis)

- 두 개 이상의 설명변수의 영향을 받는 경우
- 두 개 이상의 설명변수를 사용하는 선형회귀모형 : 다중회귀선형모형(Multiple linear regression model)
- k개의 설명변수를 갖는 선형 모형의 가정

$$\begin{cases} Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_k x_{ik} + \epsilon_i \\ \epsilon_i \sim_{iid} \boldsymbol{N}(0, \sigma^2) \end{cases}$$

- $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_k$는 회귀계수, σ^2 오차분산

- 최소제곱법을 이용하여 β_j 추정

$$\sum_{i=1}^{n}\{Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_k x_{ik})\}^2$$

- 위의 식을 최소화하는 회귀계수들을 편미분을 이용하여 만들어진 정규방정식을 이용하여 구함

회귀계수 추정량

- 선형회귀모형의 행렬을 이용한 식: $Y = X\beta + \epsilon$

$$Y = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_k)$$

$$\epsilon = (\epsilon_1, \epsilon_2, \cdots, \epsilon_n)^T$$

- 최소제곱법을 통한 회귀계수의 최소제곱추정량

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

다중회귀분석에서의 회귀직선 유의성 검정

- 귀무가설:
- $H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_k = 0$
- 대립가설: H_1 : 적어도 하나의 회귀계수는 0이 아니다.
- 단순회귀분석에서의 회귀직선의 유의성 검정과 마찬가지로 $F = MSR/MSE$를 이용

요인	제곱합	자유도	평균제곱	F 값	유의확률
회귀	SSR	$\boldsymbol{k}$	$MSR = SSR/k$	MSR/MSE	$P(F \geq f)$
잔차	SSE	$\boldsymbol{n-k-1}$	$MSE = SSE/(n-k-1)$		
계	SST	$\boldsymbol{n-1}$			

다중회귀분석의 결정계수

전체 자료의 변동중에 회귀직선으로 설명되는 변동의 비율

- $R^2 = \frac{SSR}{SST}$
- 결정계수는 설명변수의 개수 k에 대한 증가함수로, 설명변수의 유의성 여부와 관계없이 설명변수의 개수가 많아지면 그 값이 증가하게 되는 단점
- 단점을 보완하기 위해 수정된 결정계수(Adjusted R-Square, R_{adj})를 사용

$$R_{adj} = 1 - \frac{SSE/(n-k-1)}{SST/(n-1)} = 1 - \frac{(1-R^2)(n-1)}{n-k-1}$$

예시 - 붓꽃 데이터 (iris dataset)

- 150 송이의 붓꽃들의 꽃받침(Sepal) 길이, 꽃받침 너비, 꽃잎(Petal) 길이, 꽃잎 너비, 품종을 기록한 dataset
- 붗꽃의 다른 수치형 변수들(꽃잎 너비, 꽃받침 길이, 꽃잎 길이)이 붗꽃의 꽃받침 너비에 영향을 주는지 알아보기 위해, 다중회귀선형모형을 적합해보도록 하자.

회귀모형을 적합 결과

```
In [407]: iris_result = sm.ols(formula='SepalWidth ~ SepalLength+PetalLength+PetalWidth', data=iris).fit()
     ...: print(iris_result.summary())
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:             SepalWidth   R-squared:                       0.524
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.514
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     53.58
Date:                Wed, 20 Dec 2017   Prob (F-statistic):           2.06e-23
Time:                        16:35:24   Log-Likelihood:                -32.100
No. Observations:                 150   AIC:                             72.20
Df Residuals:                     146   BIC:                             84.24
Df Model:                           3
Covariance Type:            nonrobust
==============================================================================
                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
------------------------------------------------------------------------------
Intercept      1.0431      0.271      3.855      0.000       0.508       1.578
SepalLength    0.6071      0.062      9.765      0.000       0.484       0.730
PetalLength   -0.5860      0.062     -9.431      0.000      -0.709      -0.463
PetalWidth     0.5580      0.123      4.553      0.000       0.316       0.800
==============================================================================
Omnibus:                        0.738   Durbin-Watson:                   1.889
Prob(Omnibus):                  0.691   Jarque-Bera (JB):                0.426
Skew:                          -0.102   Prob(JB):                        0.808
Kurtosis:                       3.163   Cond. No.                         82.1
==============================================================================
```

- 데이터로 적합한 (fitted) 회귀직선

$$SepalWidth = 1.0431 + 0.6071 \cdot SepalLength$$

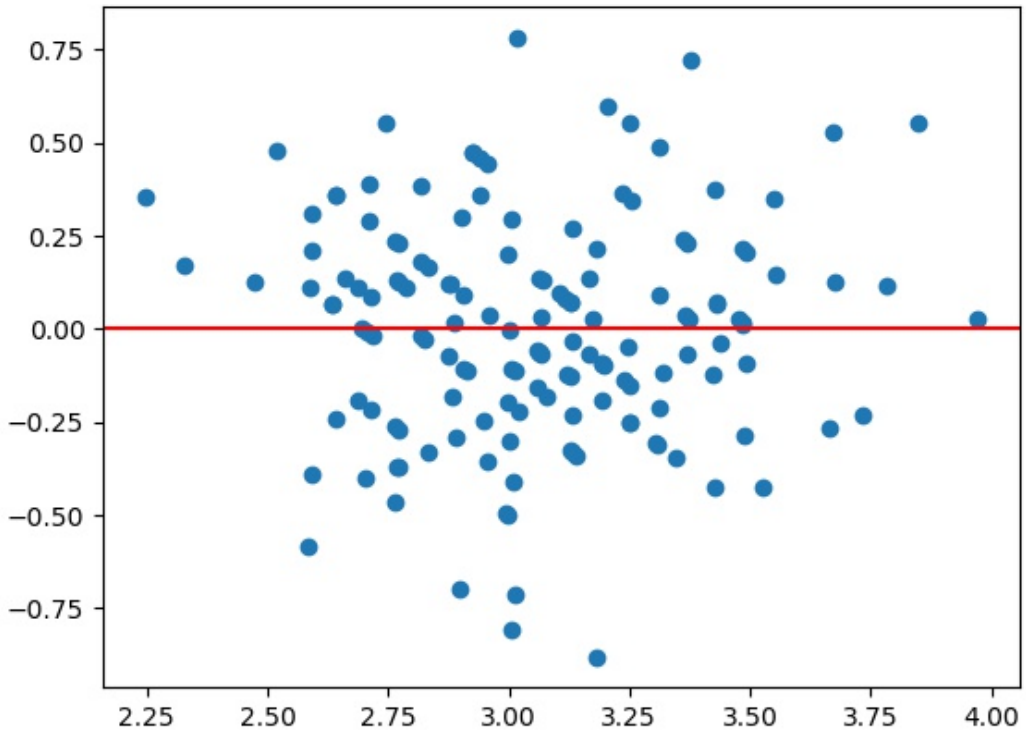
$$-0.586 \cdot PetalLength + 0.558 \cdot PetalWidth$$

  - 해석예시: 다른 설명변수가 고정되어 있을때, 꽃잎의 길이 (Petal Length)가 1 (cm)증가할때, 반응변수인 꽃받침의 너비 (Sepal Width)가 -0.586cm만큼 감소
- 회귀직선의 유의성에 대한 F 검정
  - F statistics = 53.58
- 각각의 회귀계수 및 상수항에 대한 t검정
  - 모두 유의하게 나타남
- 결정계수, R^2=0.524

잔차분석

- 설명변수의 개수가 여러개이므로, 설명변수를 x좌표로 두고 잔차를 나타내는 것이 적절하지 않다.
- 대신 평균반응의 추정값 $\hat{y}$를 x좌표로 사용

잔차도 예시



범주형 설명변수

- 설명변수가 범주형 변수(categorical variable)인 경우
- Python이나 R과 같은 통계분석 프로그램에서 회귀모형을 적합할때 내부적으로 지시변수(Indicator variable) 개념 사용
- 지시변수란, 범주에 따라 0과 1 중 하나의 값을 배정하는 정수 형태의 변수
- 범주의 갯수가 p개일 때, $p-1$개의 지시변수 필요

범주형 설명변수 예시

- 붓꽃자료에서 범주형 변수 품종 (Species)의 경우 3개의 범주 (Setosa, Versicolor, Virginica)가 있다.
- 품종을 추가한 선형 회귀모형

  $$SepalWidth = \beta_0 + \beta_1 SepalLength + \beta_2 PetalLength + \beta_4 PetalWidth + \lambda_1 Ind_{versicolor} + \lambda_2 Ind_{virginica}$$

- 지시변수의 계수를 통해, 품종에 따라 상수항이 서로 다른 회귀직선이 된다

붓꽃 자료에 범주형 설명변수인 '품종'을 추가한 회귀모형을 적합해본 결과

```
In [441]: result_with_cate = sm.ols(formula='SepalWidth ~ SepalLength+PetalLength+PetalWidth+Species',
data=iris).fit()
     ...: print(result_with_cate.summary())
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:             SepalWidth   R-squared:                       0.635
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.622
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     50.14
Date:                Wed, 20 Dec 2017   Prob (F-statistic):           7.15e-30
Time:                        17:11:13   Log-Likelihood:                -12.154
No. Observations:                 150   AIC:                             36.31
Df Residuals:                     144   BIC:                             54.37
Df Model:                           5
Covariance Type:            nonrobust
===================================================================================
                     coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
-----------------------------------------------------------------------------------
Intercept           1.6572      0.256      6.475      0.000       1.151       2.163
Species[T.versicolor]   -1.1603      0.193     -6.003      0.000      -1.542      -0.778
Species[T.virginica]   -1.3983      0.277     -5.045      0.000      -1.946      -0.850
SepalLength         0.3778      0.066      5.761      0.000       0.248       0.507
PetalLength        -0.1876      0.083     -2.246      0.026      -0.353      -0.023
PetalWidth          0.6257      0.123      5.072      0.000       0.382       0.870
==============================================================================
Omnibus:                        8.540   Durbin-Watson:                   2.024
Prob(Omnibus):                  0.014   Jarque-Bera (JB):               10.898
Skew:                          -0.356   Prob(JB):                      0.00430
Kurtosis:                       4.112   Cond. No.                         122.
==============================================================================
```

- 적합한 회귀직선

  $$SepalWidth = 1.6572 + 0.3778 SepalLength - 0.1876 PetalLength + 0.6257 PetalWidth - 1.1603 Ind_{versicolor} - 1.3983 Ind_{virginica}$$

- 품종이 Versicolor일때의 회귀직선

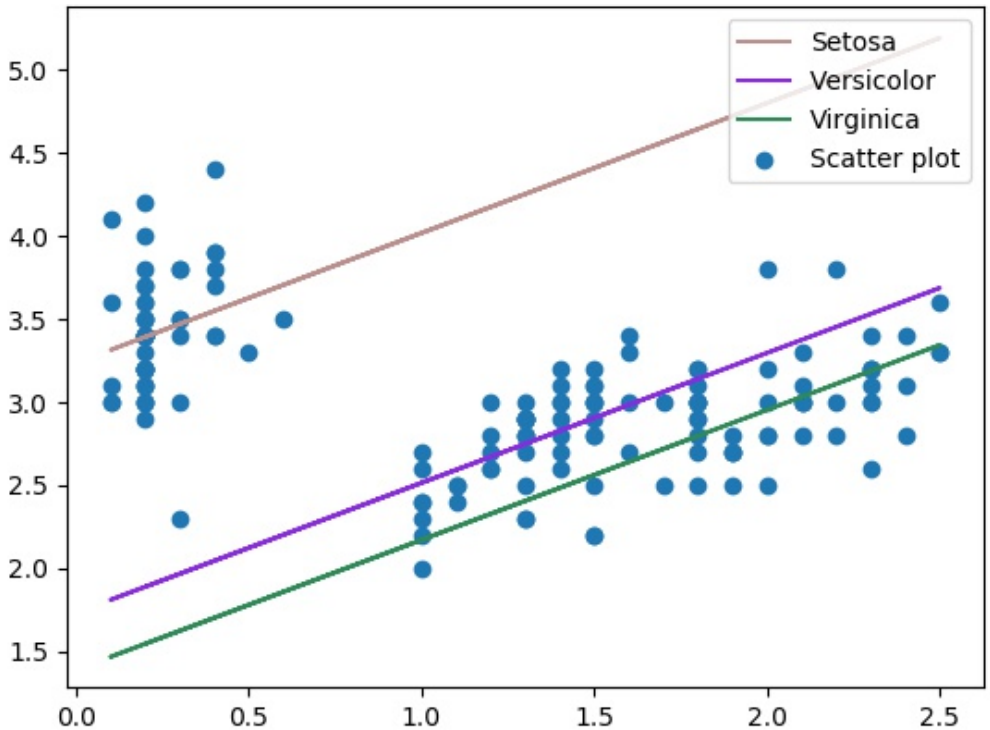
  $$SepalWidth = (1.6572 - 1.1603) + 0.3778 SepalLength - 0.1876 PetalLength + 0.6257 PetalWidth$$

- 품종이 Virginica일때의 회귀직선

  $$SepalWidth = (1.6572 - 1.3983) + 0.3778 SepalLength - 0.1876 PetalLength + 0.6257 PetalWidth$$

- 품종이 Setosa일때의 회귀직선

  $$SepalWidth = 1.6572 + 0.3778 SepalLength - 0.1876 PetalLength + 0.6257 PetalWidth$$



2차원 도표를 그리기 위해 반응변수를 '꽃받침의 너비', 설명변수를 '꽃잎의 너비'와 '품종'으로 축소시킨 회귀모형의 회귀직선. 품종에 따라 상수항이 다른 것을 확인할 수 있다.