계량분석
이변량 단순최소자승

김현우, PhD[1]

[1] 충북대학교 사회학과 조교수

October 25, 2021

진행 순서

선형모형 입문

독립변수(X)와 종속변수(y) 사이의 관계를 선형적으로 묘사해보자.

- 이른바 선형모형(linear model)은 아래와 같이 설정할 수 있다.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + u_i$$

- 하첨자로 i가 붙어있으므로 관측치(observations)에 따라 상이한 X_i와 y_i, u_i를 담게 된다.
- 이때 β_0를 상수(constant) 또는 절편(intercept)이라고 부르고, β_1를 기울기 (slope)라고 부른다.
- 만일 β_1이 크다면 X가 한 단위 증가할 때, y는 더 크게 증가할 것이다(Why?).
- $X = 0$일 때, $y = \beta_0$이다(Why?).

선형모형 입문

우리는 초등수학에서 일차방정식(linear equation)의 그래프 그리기를 배웠다.

- 기억이 나지 않는다면 **desmos라는 웹사이트**에서 연습하자.
- β_1를 이리저리 바꾸어서 이것이 기울기임을 확인하고, β_0를 이리저리 바꾸어서 이것이 절편임을 확인하자.
- X가 수평축이고 y가 수직축임에 주목하자.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

데이터를 관통하는 하나의 선이 바로 회귀분석(regression analysis)의 핵심이다.

- 데이터에 가장 잘 맞는 직선(best-fitting straight line)을 그어 그 의미를 상상할 수 있다.
- 그런데 우리는 이미 상관분석을 배우면서 적합선(fitting line)을 이미 그려보았다.

Stata에서 폐암 데이터를 활용해 가장 잘 맞는 직선을 연습해보자(**[Stata 코드]** 참고).

- eCampus에서 lungcancer.dta를 사용하자. 이것은 8개 북유럽 국가의 일인당 담배 소비량과 인구 100만 명당 폐암 발병자수를 나타낸 것이다.
- 상관계수를 구해보고 또 산포도를 그린 뒤, 적합선도 그려보자.
- 어떤 조건을 갖춘 적합선이 가장 잘 데이터를 나타낼 수 있을까?

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

선형모형 입문

우리는 어떤 선형모델이 완벽하게 데이터를 설명할 수 없다는 현실을 받아들여야 한다.

- b_0와 b_1를 어떻게 설정하더라도 결국 데이터를 완벽하게 설명할 수가 없다.
- 따라서 우리는 추가적인 항(term)으로 오차항(u_i)을 고려해야 한다.

게다가 사실 우리는 대체로 모집단 대신 표본을 분석한다.

- 그렇기 때문에 모집단에서의 회귀모형과 표본에서의 회귀모형은 개념적으로 구별될 수 있다.

$$y_i = b_0 + b_1 X_i + e_i$$

- 여기서 우리는 더이상 β를 사용하지 않고 있고, u_i 대신 e_i를 사용하고 있다.
- u_i가 오차항이라고 불리웠던 반면, e_i는 잔차항(residual term)이라고 불리운다.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

선형모형 입문

본격적으로 회귀모형을 분석하기에 앞서 일단 흡연과 폐암 데이터를 통해 실습해보자.

- 이 데이터에서 사용할 수 있는 독립변수와 종속변수는 각각 무엇인가?
- Stata 명령어는 **regress**이다. 명령어 뒤에는 종속변수가 먼저 옴에 주의할 것.

회귀분석의 결과표는 크게 (1) 분산분석(ANOVA), (2) 요약정보, (3) 추정된 회귀모형의 세 부분으로 나뉜다.

- 지금은 무엇도 잘 이해가 가질 않는다. 당연한 일이다. 하지만 곧 모든 것을 다 이해할 수 있다.
- 적어도 하나는 이해할 수 있다. 표본수(number of observations)가 8개라는 점이다.
- 일단 "추정된 회귀모형" 부분을 살펴보자. 회귀계수(regression coefficient), 표준오차(standard error), t 값, 유의확률(p-value), 95% 신뢰구간이 보고되어 있다. 이 값들은 변수(X)와 상수(_cons)에 대해 각각 따로 보고되어 있다.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

회귀계수와 표준오차

회귀계수와 표준오차

회귀모형에 따르면 오차(error)를 최소화하는 적합선이야말로 “가장 잘 맞는 직선”이다.

- 개별 점은 주어진 데이터(data)이고, 적합선은 우리가 설명한 모형(model)이다.
- 일단 적합선을 그린 다음에는 X가 주어질 때, y를 예측(predict)할 수 있다
- 데이터의 y_i와 예측된(predicted) y_i ($\hat{y}$) 간의 차이는 곧 오차(error)라고 볼 수 있다.

$$e_i = y - \hat{y_i} = y_i - (\widehat{b_0} + \widehat{b_1}X)$$

- 이 오차를 줄인다는 것은 이론적 예측과 현실 데이터 사이의 괴리를 줄인다는 의미와 일맥상통한다.

회귀계수와 표준오차

- 단, 오차의 합을 그냥 최소화하지 않고 오차 제곱의 합(sum of squares)을 최소화한다(Why?).
- 오차의 제곱의 합을 최소화할 수 있는 b_0와 b_1을 찾음으로서 주어진 데이터를 가장 잘 설명할 수 있는 모형을 개발할 수 있게 된다.

$$\underset{b_0, b_1}{\operatorname{argmin}} \sum_{i}^{n} e_i^2$$

- 이것이 단순최소자승(ordinary least squares; OLS)이라고 불리우는 회귀모형의 계산 원리이다.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

회귀계수와 표준오차

OLS의 해(solutions) 찾기는 수학적으로 2차함수 최적화 문제(quadratic optimization problem)이다.

- 이 최적화 문제의 목적함수(objective function)는 오차의 제곱합(sum of squared error)이므로 2차항이다.
- 이 오차의 제곱을 b_0와 b_1에 대해 편미분(partial derivation)하되, 그 식을 0으로 놓고 풀면 "오차의 제곱을 최소화하는" b_0과 b_1의 값을 알아낼 수 있다.

$$\frac{\partial \sum e^2}{\partial b_0} = 0$$
$$\frac{\partial \sum e^2}{\partial b_1} = 0$$

- 이 식들을 풀어 정규방정식(normal equations)을 도출해 낼 수 있다.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

회귀계수와 표준오차

- 위와 같이 닫힌 형태의 해(closed-form solutions를 분석적으로 구할 수 있는데, 만약 양적 방법론을 전공하려면 이 과정을 반드시 꼼꼼하게 이해해야 한다. 처음에는 스칼라(scalar)로, 다음에는 행렬(matrix)로 이 과정을 거듭 이해해야 한다.
- 이 과정에서 미적분(calculus)과 선형대수학(linear algebra)에 대해 어느 정도의 지식이 요구된다. 수학의 기초를 꼼꼼히 다져두지 않으면 앞으로 배울 수 있는 내용의 수준에서 (공부한 사람과) 압도적인 격차가 벌어진다.
- 양적 방법론을 전공하지 않는다면 너무 여기에 집착하지 않고 Stata를 그냥 믿고 바른 해석과 폭넓은 응용에 집중하자.

회귀계수와 표준오차

다른 추리통계학과 마찬가지로 회귀분석 역시 표본을 넘어 모집단의 성격을 추리해야 한다.

- 설령 우리가 미분 문제를 풀어 오차제곱항을 최소화하는 b_0과 b_1를 구했다고 하더라도 이것은 어디까지나 표본의 성격, 즉 통계량(statistic)일 뿐이다.
- 우리는 다음과 같은 가설 구조에 따라 모집단의 성격, 즉 모수(parameter)에 대해서도 추리해야 한다.

$$
\begin{aligned}
H_0 : \beta_0 = 0, &\quad H_a : \beta_0 \neq 0 \\
H_0 : \beta_1 = 0, &\quad H_a : \beta_1 \neq 0
\end{aligned}
$$

- 우리는 모집단에서 수많은 표본을 뽑아 그로부터 b_0와 b_1를 구한 뒤, 이것들의 표집분포를 가상적으로 구축해 볼 수 있다.
- 이제 그 가상적인 표집분포의 표준편차를 (상수항 및 회귀계수의) 표준오차(standard error)라고 부를 수 있다.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

회귀계수와 표준오차

t 검정을 통해 표본의 검정 통계량에 대한 유의성 검정을 수행할 수 있다.

- 앞서 배웠듯 t 값은 다음과 같이 구할 수 있다.

$$t = \frac{\widehat{b} - \beta}{\widehat{SE}_{\widehat{b}}}$$

- 그런데 영가설에 따라 $\beta = 0$ 이므로 사실 $t = \widehat{b}/\widehat{SE}_{\widehat{b}}$ 이다!
- 계산된 t 값에 대응하는 유의확률(p-value)이 예컨대 0.05보다 작다면 95% 신뢰수준에서 영가설을 기각한다.

잠깐 다시 폐암 데이터의 회귀분석 결과를 되돌아보자(**[Stata 코드]** 참고).

- 이제 회귀계수(regression coefficient), 표준오차(standard error), t 값, 유의확률 (p-value), 95% 신뢰구간이 어떤 의미인지 이해할 수 있다.
- smoke를 x축, cancer를 y축에 놓는다면 y절편은 21.51이고 기울기는 0.355임을 알 수 있다.

모형의 적합도

모형의 적합도

이제 모형의 적합도(goodness-of-fit)를 살펴보자.

- 우리가 모형(model)을 세워 그것을 현실 데이터에 맞추어(fit) 본 이상, 이것이 얼마나 잘 맞는가를 말할 수 있어야 한다. 이것이 모형의 현실 적합도이다.
- 우리는 특히 세 가지 적합도 지표(goodness-of-fit indices)를 공부한다: 결정계수 (R^2), 조정된(adjusted) 결정계수($\bar{R}^2$), 그리고 RMSE.
- 어느 한 가지 지표에만 맹목적으로 의존하지 않고 모든 지표들을 균형있게 살펴보면서 자신이 세운 모델이 얼마나 데이터에 잘 맞는가를 확인해야 한다.
- 물론 적합도 지표에 근거해 여러 가지 모델들을 비교 평가할 수도 있다.

모형의 적합도

R^2는 종종 결정계수(coefficient of determination)라고도 불린다.

- 결정계수는 제법 흥미로운 수리적 아이디어를 통해 계산된다.
- 우리에게 데이터가 주어지고 여기에 총변량(total variation)이 있다면, 이것은 모형에 의해 설명되는 변량(explained variation)과 그렇지 못하고 남은 변량 (residual variation)의 합이라고 할 수 있다.

$$\text{Variation}_{\text{Total}} = \text{Variation}_{\text{Explained}} + \text{Variation}_{\text{Residual}}$$

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

모형의 적합도

- 그렇다면 설명되는 변량의 비율(ratio)은 모형의 높은 설명력 내지 데이터 적합도를 의미한다고 볼 수 있다.

$$R^2 = \frac{\text{Variation}_{\text{Explained}}}{\text{Variation}_{\text{Total}}} = 1 - \frac{\text{Variation}_{\text{Residual}}}{\text{Variation}_{\text{Total}}}$$

- 이것이 바로 결정계수(R^2)의 직관적 의미이다. 변량의 비율이므로 0과 1사이에 놓인다. 1에 가까울수록 모델은 높은 적합도를 보인다고 할 수 있고, 0에 가까울수록 모델은 형편없는 적합도를 보인다고 할 수 있다.
- 이제 남은 문제는 세 변량들이 어떤 식으로 정의되는가를 파악하는 것이다.

모형의 적합도

독립변수(X)가 없을 때 종속변수(y)를 가장 잘 예측하는 요소는 무엇일까?

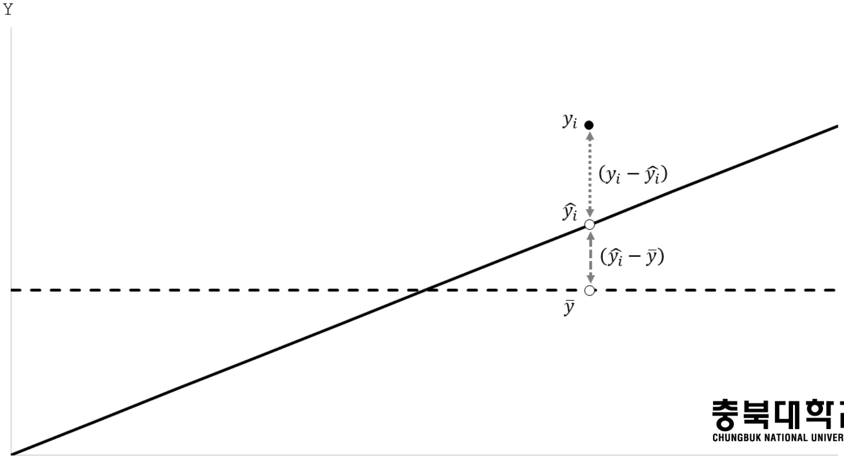
- 이 질문은 생각보다 매우 중요하다! 그것은 바로 종속변수의 평균($\bar{y}$)이다(Why?). 우리는 사실 학부 시절 이른바 중심성향(central tendency)에 관해 공부하면서 이것을 은근슬쩍 배웠다.
- 이 원리는 우리에게 중요한 원칙 하나를 제공한다: 어떤 모델을 세우던지 최소한 종속변수의 평균($\bar{y}$)보다는 나은 설명력을 보여야 한다.
- 종속변수의 평균($\bar{y}$)은 일종의 기준점이자 최소한의 바닥이다. 이것보다도 못한 모델은 아무런 가치도 없다.
- 한편 종속변수의 실제 값(y_i)은 일종의 이상점이자 최고의 천장이다. 이것은 모델이 추구할 수 있는 최고의 이상이다.
- (직관적으로 설명한다면) 당연히 모델의 예측값($\hat{y}_i$)은 y_i와 $\bar{y}$ 사이 어딘가 놓이리라 생각할 수 있다(물론 실제로는 꼭 그렇지 않을수도 있다).

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

모형의 적합도

- (아주 엄밀하지는 않지만) 그림을 통해서 우리는 총변량이 "설명된 변량"과 "잔여 변량"의 합임을 직관적으로 이해할 수 있다.

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



모형의 적합도

- 우리는 이제 제곱합(Sum of Squares; SS) 개념을 가지고 다음의 공식에 도달할 수 있다.

$$SS_{\text{Total}} = SS_{\text{Explained}} + SS_{\text{Residual}}$$
$$\sum(y_i - \bar{y})^2 = \sum(y_i - \widehat{y}_i)^2 + \sum(\widehat{y}_i - \bar{y})^2$$

- 당연히 R^2에 관해서도 정의할 수 있다.

$$R^2 = \frac{SS_{\text{Explained}}}{SS_{\text{Total}}} = \frac{\sum(y_i - \widehat{y}_i)^2}{\sum(y - \bar{y})^2} = 1 - \frac{SS_{\text{Residual}}}{SS_{\text{Total}}} = 1 - \frac{\sum(\widehat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2}$$

- 아까 그림을 통해 되새겨보면, y_i에 더 가까운 위치에 $\widehat{y}_i$가 놓일수록 R^2 역시 높으리라고 추측할 수 있다.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

모형의 적합도

다행히 RMSE (Root Mean Squared Error)는 보다 직관적이다.

- 사회학자들이 종종 RMSE를 그다지 고려하지 않는데, 데이터 과학자들 사이에는 R^2를 그다지 고려하지 않는 점이 흥미롭다.
- 수리적인 관점에서 보면 RMSE는 R^2만큼 흥미롭지는 않다. 다만 너무나 명쾌하다!
- RMSE는 MSE (Mean Squared Error)의 제곱근(square root)이다. MSE는 다음과 같이 정의된다.

$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{n}\sum(y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{n}\sum e_i^2$$

- 즉 오차의 제곱의 합이다. 제곱을 했으니 제곱근을 통해 팽창한 부분을 제거해야 좋다.
- 그러면 RMSE은 모형을 통해 예측한 값들과 실제 데이터의 값들 사이에서 나타나는 평균적인 오차의 합이 된다.
- 만약 종속변수가 (0점에서 100점 사이의) 수학시험 점수이고 RMSE가 7이라면 모형을 통한 예측과 실제 값 사이에는 평균적으로 7점의 오차가 있다고 해석할 수 있다.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

모형의 적합도

잠깐 다시 폐암 데이터의 회귀분석 결과를 되돌아보자.

- 이제 결정계수(R-squared)가 어떤 의미인지 이해할 수 있다.
- 0.2965라는 결정계수는 너무 낮을까? 그렇지만도 않다. 많은 사회과학 연구를 돌이켜보면 이 정도면 괜찮다.
- 바로 아래 조정된 결정계수(adjusted R^2)는 무엇인가? 기본적으로 결정계수는 보다 많은 독립변수를 집어넣을 때 무제한적으로 팽창하는 성향이 있다. 그런데 이것은 오캄의 면도날 원칙(Occam's Razor)에 반하는 것이므로, 독립변수를 추가적으로 집어넣을 때마다 적절한 패널티를 가할 필요가 있다. 조정된 결정계수는 바로 이렇게 패널티가 가해진 결정계수이고, 보다 구체적인 내용은 다음 주에 배우게 된다.
- 그 밑에 RMSE를 보자. 7.8778이라는 값은 모형을 통한 예측이 데이터와 평균적으로 7.8778만큼의 오차를 냄을 시사한다.

충북대학교 CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

회귀분석의 연습

회귀분석의 연습

Stata에서 미세먼지 해결을 위한 국민여론조사(2019) 자료를 활용해 연습해보자(**[Stata 코드]** 참고).

- 코드북을 참조해 “제1차 국민정책제안 각 과제”의 의견 총합과 “중장기 정책과제”의 의견 총합 사이의 관계를 보자.
- 많은 사회조사에서는 이른바 숫자형 척도가 좀처럼 조사되지 않고 대체로 범주형인 경우가 많다. 이 수업 말고 범주형 자료분석(categorical data analysis)를 배울 다른 기회가 있을 것이다. 일단 상관분석이나 회귀분석이나 숫자형 변수를 다루므로 우리는 유사한 범주형 변수를 모두 더하여 하나의 연속형 변수를 만들기로 한다.
- 상관계수를 구해보고 또 산포도를 그린 뒤, 적합선도 그려보자.
- 회귀분석을 수행하고 회귀계수와 표준오차, t 값과 유의확률을 해석해보자.
- 결정계수와 RMSE를 해석해보자.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

회귀분석의 연습

Stata에서 성별-연령별 유동인구 자료를 활용해 연습해보자(**[Stata 코드]** 참고).

- 여자 50대를 종속변수로 남자 50대를 독립변수로 회귀분석을 수행한다.
- 그 이전에 산포도를 그려보고 극단치를 제거하자.
- 회귀분석을 수행하고 회귀계수와 표준오차, t 값과 유의확률을 해석해보자.
- 결정계수와 RMSE를 해석해보자.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

회귀분석의 연습

회귀계수 b_1 은 독립변수와 종속변수 사이의 "선형적 관계"의 기울기를 의미한다.

- 회귀분석을 할 때도 산포도를 그려가면서 두 변수 사이의 관계를 눈으로 확인하는 것은 제법 중요하다.
- 다행히 회귀분석은 매우 탄력적이라서 두 변수 사이에 비선형적 관계(nonlinear relationship)가 있더라도 어렵지 않게 살펴볼 수 있다. 구체적인 방법은 나중에 배운다.

충북대학교
CHUNGBUK NATIONAL UNIVERSITY

회귀분석의 연습

오늘 우리가 배운 회귀분석은 인과분석이 아니다.

- “상관분석은 상관관계를 살펴보고, 회귀분석은 인과관계를 살펴본다”는 식의 헛소문은 전혀 사실이 아니다.
- 회귀분석을 통해 계산된 회귀계수는 사실 수학적으로 꼼꼼히 따져보면 표준화된 상관계수에 불과하다.
- 비실험적 자료(non-experimental data) 혹은 관찰자료(observational data)라고 불리우는 일반적인 사회과학 데이터를 가지고 평범하게 회귀분석하였다면 단지 상관관계만을 파악한 것이다.
- 물론 인과관계가 아니라고 연구로서 무가치해지는 것은 아니다. 다만 회귀분석의 결과를 해석할 때 인과관계로 거짓보고만 하지 않으면 된다.