Linear Regression

Jaeyoon Han

선형회귀법(Linear Regression)[1]

단순해보이지만 굉장히 깊이 있는 통계학 기반의 기계학습 방법인 선형회귀법에 대해서 알아보도록 하겠습니다. 선형회귀법은 *독립변수(independent variable)*와 *종속변수(dependent variable)* 사이의 관계를 모델링하는 기법을 말합니다. 한 변수(독립변수)의 변화로부터 다른 변수(종속변수)가 어떻게 변하는 지 예측하는 기법이 선형회귀법입니다. 이 때 독립변수의 개수가 하나인 경우 **단순 선형 회귀(Simple Linear Regression)**, 독립변수가 두 개 이상인 경우 **다중 선형 회귀(Multiple Linear Regression)**라고 부릅니다. 독립변수 Y와 종속변수 $X_1, X_2, \cdots, X_n$에 대하여 다음과 같이 나타낼 수 있습니다.

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \cdots + \beta_n X_n. \tag{1}$$

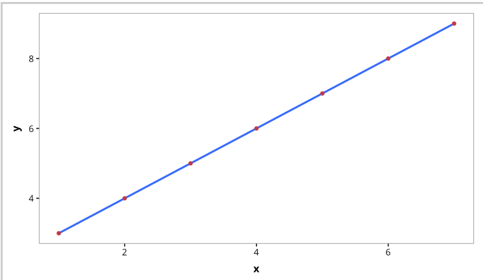
예를 들어, $X = (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7)$에 대하여 $Y = (3, 4, 5, 6, 7, 8, 9)$의 관계를 나타낸다면

$$Y = X + 2$$

로 나타낼 수 있습니다.

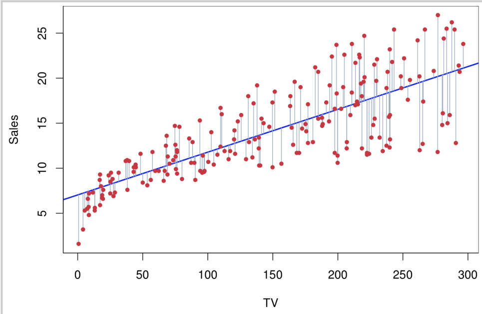
```
library(dplyr)
library(ggplot2)

data.frame(x = 1:7, y = 3:9) %>% ggplot(aes(x = x, y = y)) + geom_smooth() +
    geom_point(colour = "#C53842")
```



이 경우, 만약 새로운 X값인 8이 들어온다면 손쉽게 Y값은 10이라고 예측할 수 있습니다. 실제로는 이렇게 단순하게 모델링되는 경우는 거의 존재하지 않습니다. 조금 더 실제 상황에 맞는 데이터를 확인해보겠습니다.

밑의 그래프는 TV 광고량에 대한 매출 데이터를 선형회귀법을 이용해 모델링한 결과물입니다.



수많은 데이터 사이에 그어져 있는 파란선이 **회귀선(Regression Line)**입니다. 데이터를 기반으로 알아낸 예측값들을 나타내는 선이죠. 점들 사이에 적당하게 파란선을 그으면 회귀선이 될 수 있지 않을까하는 의심이 들 수 있습니다. 하지만 그래프에 있는 파란선은 엄밀한 수학적 근거에 기반을 둔 결과입니다.

각각의 점은 파란선까지의 거리가 회색선으로 표현되어 있습니다. 각각의 데이터 점의 y좌표를 y_i라고 하고, 그에 해당하는 파란선 위의 점의 y좌표를 $\hat{y}_i$라고 할 때, 그 차이값을 e_i로 두겠습니다. 이 값을 **잔차(residual)**라고 합니다. 쉽게 말해서 오차값입니다. 이 값이 작을 수록 더 좋은 예측을 했다고 볼 수 있습니다. 실제값과 예측값의 차이가 작기 때문이죠. 모든 데이터 점과 파란선 사이에는 잔차값이 있습니다. 이 값들을 각각 제곱해서 더하면 다음과 같습니다.

$$RSS = e_1^2 + e_2^2 + \cdots + e_n^2. \tag{2}$$

그 값을 **잔차제곱합(Residual sum of squares, RSS)**이라고 합니다. 이 값이 최소가 되는 회귀선이 바로 위 이미지에서 파란선이 됩니다. 이 쯤 되면, 선형회귀의 모든 것에 대해서 알게된 것 같지만, 선형회귀법에는 많은 전제와 가정이 따릅니다.

- 독립변수 X는 고정된 값이다.
- 오차항의 분산이 동일하다.
- 오차항간 상호 독립이다.
- 오차항의 평균은 0이며, 분산은 σ^2인 정규 분포를 따른다.
- 독립변수간 독립이다.
- 종속 변수와 독립변수간 수식 (1)이 성립한다.

이 조건들은 저절로 성립하는 것이 아니라, 만들어진 모형을 검증하여 부족한 점이 없는지 확인하거나, 독립변수와 종속변수를 변환하여 위 조건을 만족하도록 해야 합니다.

이제 R을 이용해서 선형회귀법을 실습해보도록 하겠습니다. 여러 가지 데이터가 필요하기 때문에, 다음의 패키지를 설치하겠습니다.

```
# install.packages('MASS')
library(MASS)
```

처음 해 볼 실습은 차량 관련 데이터를 활용한 단순선형회귀입니다. `cars` 데이터는 R에 내장되어 있는 데이터로, 차량의 속도에 따른 정지거리를 기록한 데이터입니다. 데이터에 대한 자세한 설명은 `?cars` 를 실행하여 확인할 수 있습니다.

```
data(cars)
head(cars)
```

speed	dist
4	2
4	10
7	4
7	22
8	16
9	10

`cars` 데이터에서 `speed` 는 차량의 속도, `dist` 는 정지거리를 의미합니다. 선형회귀는 `lm()` 함수를 사용해서 모델링할 수 있습니다. 사용법은 다음과 같습니다.

```
    lm(formula, data, ...)
```

`formula` 는 선형회귀 모델에 대한 공식을, `data` 는 사용할 데이터를 넣으면 됩니다. 일반적으로 정지거리는 속도가 빠를 수록 증가하므로, 다음과 같은 모델을 생각할 수 있습니다.

$$dist \approx \beta_0 + \beta_1 \times speed. \tag{3}$$

위 공식을 `lm()` 함수의 `formula` 자리에 넣고 모델링을 해보도록 하겠습니다.

```r
model <- lm(dist ~ speed, data = cars)
model
```

```


Call:
lm(formula = dist ~ speed, data = cars)

Coefficients:
(Intercept)        speed
    -17.579        3.932
```

모델링의 결과에 따르면 $\beta_0 = -17.579, \beta_1 = 3.932$가 나왔습니다. 다시 말해서 식 (3)은 아래 식 (4)와 같습니다.

$$dist \approx -17.579 + 3.932 \times speed.$$

본 모델의 내용들은 다음의 함수들을 이용해서 살펴볼 수 있습니다.

```r
# 회귀 계수
coef(model)
```

```
(Intercept)       speed
 -17.579095    3.932409
```

```r
# 예측 값(Fitted values)
fitted(model)[1:6]
```

```
        1         2         3         4         5         6
-1.849460 -1.849460  9.947766  9.947766 13.880175 17.812584
```

```r
# 잔차(Residuals)
residuals(model)[1:6]
```

```
        1         2         3         4         5         6
 3.849460 11.849460 -5.947766 12.052234  2.119825 -7.812584
```

```r
# 계수의 신뢰구간
confint(model)
```

	2.5 %	97.5 %

(Intercept)	-31.167850	-3.990340
speed	3.096964	4.767853

```
# 잔차제곱합(RSS)
deviance(model)
```

```
[1] 11353.52
```

이 때, 예측값과 잔차의 합은 원래의 데이터값과 일치합니다.

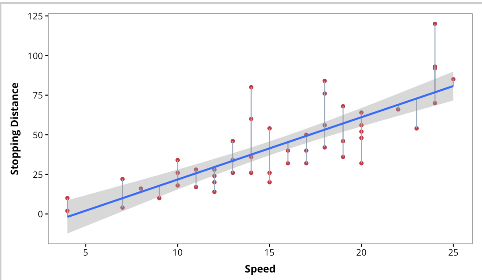
```
fitted(model)[1:6] + residuals(model)[1:6]
```

```
 1  2  3  4  5  6
 2 10  4 22 16 10
```

```
cars$dist[1:6]
```

```
[1]  2 10  4 22 16 10
```

```
cars %>% mutate(pred = -17.579 + 3.932 * speed) %>% ggplot(aes(x = speed, y = dist)) +
    geom_point(colour = "#C53842") + geom_segment(aes(x = speed, y = dist, xend = speed,
    yend = pred), colour = "#99A8BF") + geom_smooth(method = "lm") + xlab("Speed") +
    ylab("Stopping Distance")
```



더 자세한 내용을 보기 위해서는 `summary()` 함수를 사용해야 합니다.

```
summary(model)
```

```
Call:
lm(formula = dist ~ speed, data = cars)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-29.069  -9.525  -2.272   9.215  43.201 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) -17.5791     6.7584  -2.601   0.0123 *  
speed         3.9324     0.4155   9.464 1.49e-12 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 15.38 on 48 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6511,	Adjusted R-squared:  0.6438 
F-statistic: 89.57 on 1 and 48 DF,  p-value: 1.49e-12
```

많은 내용이 나옵니다. 수학적인 내용을 최대한 배제하고 설명드리겠습니다.

1. `Call` : 선형회귀 모델이 어떻게 생성되었는 지 보여줍니다.
2. `Residual` : 실제 데이터와 모델 사이의 잔차를 보여줍니다. 잔차의 최솟값은 -29.069, 최댓값은 43.201로 나타났습니다.
3. `Coefficients` : 생성된 모델의 회귀계수와 계수들의 통계적 유의성을 보여줍니다. 표준편차와 t-검정값, 그리고 이에 따른 p-value가 출력됩니다. 일반적으로 p-value가 0.05 미만일 때 통계적으로 유의하다고 이야기 합니다.
4. `R-squared` : 모델이 데이터의 분산을 얼마나 설명하는 지 알려줍니다.
5. `F-statistics` : 모델이 얼마나 통계적으로 의미가 있는지 보여줍니다.

이제 실제 데이터를 사용해서 선형회귀법을 실습해보겠습니다.

실습 : 의료비 예측

데이터 설명 (Data Description)

Blah Blah Blah

```r
insurance <- read.csv("insurance.csv")
head(insurance)
```

age	sex	bmi	children	smoker	region	charges
19	female	27.900	0	yes	southwest	16884.924
18	male	33.770	1	no	southeast	1725.552
28	male	33.000	3	no	southeast	4449.462
33	male	22.705	0	no	northwest	21984.471
32	male	28.880	0	no	northwest	3866.855
31	female	25.740	0	no	southeast	3756.622

데이터를 확보했다면 데이터가 어떻게 생겼는 지 알아야 합니다. 이 때는 데이터를 요약하고 구조를 살펴보는 함수를 사용합니다.

```
summary(insurance)
```

age	sex	bmi	children	smoker	region	charges
Min. :18.00	female:662	Min. :15.96	Min. :0.000	no :1064	northeast:324	Min. : 1122
1st Qu.:27.00	male :676	1st Qu.:26.30	1st Qu.:0.000	yes: 274	northwest:325	1st Qu.: 4740
Median :39.00	NA	Median :30.40	Median :1.000	NA	southeast:364	Median : 9382
Mean :39.21	NA	Mean :30.66	Mean :1.095	NA	southwest:325	Mean :13270
3rd Qu.:51.00	NA	3rd Qu.:34.69	3rd Qu.:2.000	NA	NA	3rd Qu.:16640
Max. :64.00	NA	Max. :53.13	Max. :5.000	NA	NA	Max. :63770

```
str(insurance)
```

```
'data.frame':	1338 obs. of  7 variables:
 $ age     : int  19 18 28 33 32 31 46 37 37 60 ...
 $ sex     : Factor w/ 2 levels "female","male": 1 2 2 2 2 1 1 1 2 1 ...
 $ bmi     : num  27.9 33.8 33 22.7 28.9 ...
 $ children: int  0 1 3 0 0 0 1 3 2 0 ...
 $ smoker  : Factor w/ 2 levels "no","yes": 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
 $ region  : Factor w/ 4 levels "northeast","northwest",..: 4 3 3 2 2 3 3 2 1 2 ...
 $ charges : num  16885 1726 4449 21984 3867 ...
```

각각의 변수들에 대한 정보는 다음과 같습니다.

변수	설명
age	제 1순위 보험금 수령인의 나이
sex	성별
bmi	신체 용적 지수(BMI, Body Mass Index)

children	보험에서 보장하는 자녀의 수
smoker	규칙적인 흡연 여부
region	거주지 (북동, 남동, 남서, 북서)
charges	의료비

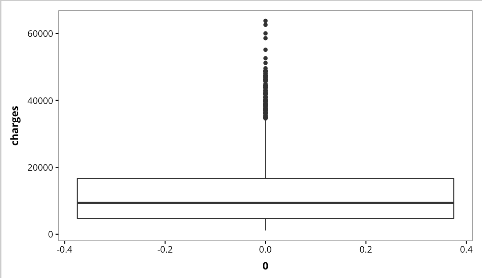
탐색적 데이터 분석 (Exploratory Data Analysis)

데이터가 어떤 형태로 생겼는 지 알면, 모델을 수립하는 데 훨씬 도움이 됩니다. 시각화 라이브러리 `ggplot2` 를 이용해서 탐색적 데이터 분석을 해보겠습니다.

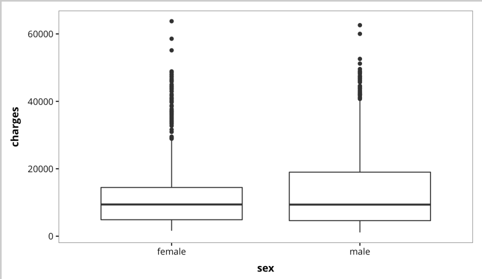
```
library(ggplot2)
```

각 변수에 따른 의료비의 분포를 확인해보겠습니다.

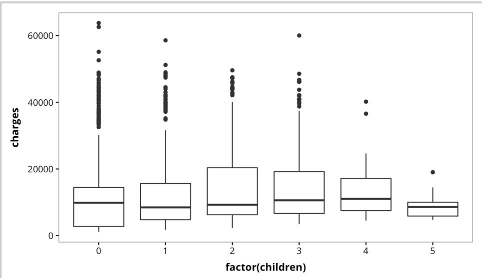
```
ggplot(data = insurance, aes(x = 0, y = charges)) + geom_boxplot()
```



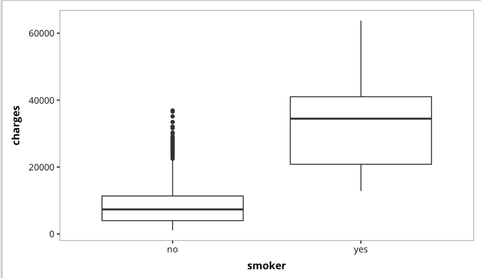

```
ggplot(data = insurance, aes(x = sex, y = charges)) + geom_boxplot()
```



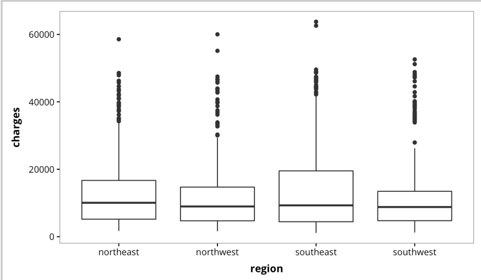

```
ggplot(data = insurance, aes(x = factor(children), y = charges)) + geom_boxplot()
```



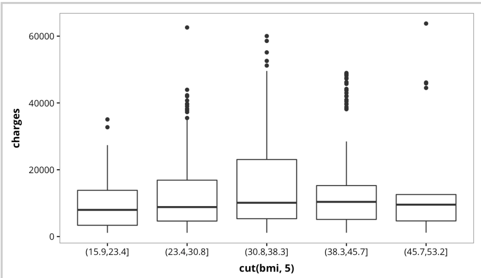

```
ggplot(data = insurance, aes(x = smoker, y = charges)) + geom_boxplot()
```




```
ggplot(data = insurance, aes(x = region, y = charges)) + geom_boxplot()
```




```
ggplot(data = insurance, aes(x = cut(bmi, 5), y = charges)) + geom_boxplot()
```



박스 플롯(Box plot)을 이용해 본 변수에 따른 의료비의 분포 중 유의미해 보이는 것은 자녀의 수와 흡연 여부 정도입니다. 특히 흡연 여부의 경우, 흡연을 하지 않는 사람에 비해 평균값이 25000 이상 높은 것을 알 수 있습니다.

모델 수립 (Construction)

위 데이터의 약 70%를 가지고 선형회귀 모델을 만들고, 나머지 30%를 이용해서 모델의 성능을 평가하려고 합니다. 이 때, 모델을 만들 때 활용하는 데이터를 **학습 데이터(Training data)**, 나머지 평가용 데이터를 **테스트 데이터(Test data)**라고 합니다. 학습 데이터와 테스트 데이터를 만들 때는 최대한 랜덤 추출을 하는 것이 좋습니다. 또한 테스트 데이터는 종속변수인 의료비를 예측해야 되므로, 의료비 변수를 데이터에서는 지우고 따로 저장하도록 하겠습니다.

```
set.seed(1234)  # Reproducibility
train <- sample_frac(insurance, 0.7)
trainIndex <- as.numeric(row.names(train))
test <- insurance[-trainIndex, ]

train <- arrange(train)
test <- arrange(test)
charges <- test$charges
test$charges <- NULL
```

모델을 수립해야 하는데, 조심해야 하는 부분이 있습니다. 선형회귀법은 식 (1)과 같이 수식으로 나타나는데, 우리가 가지고 있는 데이터는 숫자가 아닌 변수가 세 개가 있습니다. 성별, 흡연 여부, 지역 변수가 요인형(factor) 변수입니다. 이러한 요인형 변수는 일반적으로 더미 변수(dummy variable)로 변환하여 사용합니다.

예를 들어, 성별의 경우 `female` 과 `male` 을 각각 0, 1로 바꿉니다. `region` 의 경우 네 개의 요인으로 구성되어 있기 때문에, 이 변수를 세 개로 나눕니다. `northeast`, `northwest`, `southeast` 로 나눠보겠습니다. 해당되는 지역에는 1, 나머지는 0이 되겠죠. 만약 `southwest` 라면 위 세 개의 변수가 모두 0이 될겁니다. R에서는 이러한 작업을 모두 자동적으로 해주기 때문에 번거롭게 직접 수정하지 않아도 됩니다. 이제 범주형 변수 핸들링에 대해서 배웠기 때문에, 바로 선형회귀 모델을 세워보도록 하겠습니다. 종속변수는 `charges` 이고, 나머지는 모두 독립변수입니다.

```
# 다른 변수를 모두 독립변수로 넣는다면 . 을 써서 편하게 쓸 수 있습니다.
insurance_model <- lm(charges ~ ., data = train)
summary(insurance_model)
```

```


Call:
lm(formula = charges ~ ., data = train)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max 
-11069.2  -2933.7   -875.5   1515.8  25666.7 

Coefficients:
                 Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)     -12743.13    1151.74 -11.064  < 2e-16 ***
age                259.15      13.64  18.994  < 2e-16 ***
sexmale           -298.25     385.80  -0.773 0.439684    
bmi                346.26      33.38  10.372  < 2e-16 ***
children           615.49     161.48   3.812 0.000147 ***
smokeryes        23807.68     480.25  49.574  < 2e-16 ***
regionnorthwest    348.31     554.74   0.628 0.530243    
regionsoutheast   -698.61     558.08  -1.252 0.210953    
regionsouthwest   -492.90     547.80  -0.900 0.368475    
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 5885 on 928 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7626,	Adjusted R-squared:  0.7606 
F-statistic: 372.7 on 8 and 928 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

결과물을 보니, 우선 잔차의 폭이 굉장히 큽니다. 위에서 의료비의 분포를 박스 플롯으로 확인했을 때의 결과를 생각해보면 당연하다는 것을 알 수 있습니다. 두 번째로, 회귀계수를 확인했을 때 흡연 여부가 예상했던 대로 굉장한 영향을 미칩니다. 흡연을 하는 경우가 안하는 사람보다 의료비가 23,807 달러를 더 내는 것으로 모델이 수립되었습니다. t-value 역시 굉장히 통계적으로 유의하다고 나왔습니다. 나머지 변수들은 크게 영향을 미치는 것 같지 않습니다. 이 모델은 전체 분산의 약 76%를 설명하고 있으며, F-검정값의 p-value가 낮은 것으로 보아 충분히 통계적으로 유의한 모델입니다.

이제 이 모델을 이용해 의료비를 예측해보도록 하겠습니다. 모델을 이용한 예측은 `predict()` 함수를 사용합니다. 이렇게요.

```
predict_charges <- predict(insurance_model, test)
head(predict_charges)
```

```
         2          5          6         15         16         21 
 3233.3300  5599.6300  3504.5632 31652.5811   522.9997 15272.8239 
```

값을 예측했는데 이게 얼마나 잘 예측된 것인지 확인할 수 있는 방법이 없습니다. 그래서 우리는 평균절대오차(Mean Absolute Error, MAE)를 사용하려고 합니다. 개념은 간단합니다. 실제값과 예측값 사이의 오차들의 평균입니다. 수식으로 나타내면 다음과 같습니다.

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i - p_i| = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|e_i|.$$

R에는 MAE를 계산해주는 함수가 없기 때문에 따로 만들어줘야 합니다.

```
mae <- function(actual, predict) {
    length <- length(actual)
    error <- abs(actual - predict)
    return(sum(error)/length)
}

mae(charges, predict_charges)
```

```
[1] 4421.055
```

MAE 값은 4421.055로 나왔습니다. 평균 오차가 4421 달러나 되는 것이죠. 생각보다 너무 오차가 큽니다. 여러 가지를 고려해서 예측 모델을 개선해보도록 하겠습니다.

모델 개선 (Improving the Model)

피처 엔지니어링 (Feature Engineering)

처음 할 작업은 변수의 형태를 바꾸는 것입니다. 다루고자 하는 변수는 `bmi` 입니다. `bmi` 는 신체용적지수로 비만의 척도가 됩니다. 하지만 비만의 기준은 BMI가 30 이상일 때이므로, 그 미만값들은 의료비 산정에 큰 영향을 미치지 못할 것이라고 생각할 수 있습니다. 따라서 비만 여부에 대한 변수로 `bmi30` 를 새로 만들도록 하겠습니다.

```
train <- train %>% mutate(bmi30 = ifelse(bmi >= 30, 1, 0))
test <- test %>% mutate(bmi30 = ifelse(bmi >= 30, 1, 0))
```

다중공선성(Multicollinearity)

다중공선성이란 독립변수들 사이에 강한 상관관계가 나타나는 특성을 말합니다. 독립변수간 다중공선성이 존재하면 회귀계수 추정치의 신뢰성과 안정성에 큰 문제를 발생시키기 때문에 반드시 제거해야 합니다. 독립변수들 사이에 다중공선성을 확인하려면 다음과 같이 하면 됩니다.

```
detach("package:MASS", unload = TRUE)
detach("package:dplyr", unload = TRUE)
library(MASS)
library(dplyr)

train %>% select(age, bmi, bmi30, children, charges) %>% cor()
```

	age	bmi	bmi30	children	charges
age	1.0000000	0.1233367	0.0894113	0.0180523	0.3220826
bmi	0.1233367	1.0000000	0.8037249	-0.0066694	0.1910091
bmi30	0.0894113	0.8037249	1.0000000	0.0142448	0.2025957
children	0.0180523	-0.0066694	0.0142448	1.0000000	0.0728839
charges	0.3220826	0.1910091	0.2025957	0.0728839	1.0000000

예상대로 `bmi` 와 `bmi30` 간에 공선성이 확인되었습니다. 이런 경우에는 보통 한 변수를 제거하는 경우가 많습니다. 이번에는 `bmi` 변수를 제거하고 모델을 수립해보겠습니다.

```
insurance_model <- lm(charges ~ age + sex + bmi30 + children + smoker + region,
    data = train)
summary(insurance_model)
```

```


Call:
lm(formula = charges ~ age + sex + bmi30 + children + smoker +
    region, data = train)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-12899.7  -3571.0     64.1   1422.8  26506.9

Coefficients:
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)     -4601.79     711.59  -6.467 1.62e-10 ***
age               263.95      13.54  19.495  < 2e-16 ***
sexmale          -294.10     384.30  -0.765 0.444300
bmi30            4208.42     391.59  10.747  < 2e-16 ***
children          584.09     160.89   3.630 0.000298 ***
smokeryes       23691.10     478.19  49.543  < 2e-16 ***
regionnorthwest   289.18     552.57   0.523 0.600873
regionsoutheast  -189.75     545.98  -0.348 0.728270
regionsouthwest  -380.65     544.91  -0.699 0.485009
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 5863 on 928 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7644,    Adjusted R-squared:  0.7624
F-statistic: 376.4 on 8 and 928 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

아까의 `bmi` 의 회귀계수는 346에 그쳤던 데에 반해, `bmi30` 의 회귀계수는 4208로 매우 영향력있는 변수가 되었음을 알 수 있습니다. 다시 MAE를 이용해서 모델을 평가해보겠습니다.

```
predict_charges <- predict(insurance_model, test)
mae(charges, predict_charges)
```

```
[1] 4427.726
```

오히려 MAE 값이 증가했습니다. 어떤 방법을 사용해야 할까요?

상호작용항 (Interaction Term)

상식적으로 생각했을 때, 흡연을 하는 사람 중에서 뚱뚱한 사람들이나 비만이 있는 사람들이 훨씬 의료비가 많이 들 것 같습니다. 어떤 의미로는 의료비 관점에서 시너지가 발생하는 것이죠. 이러한 현상을 통계학에서는 상호작용 효과라고 합니다. 상호작용 항을 회귀모델에 추가하면 모델을 보다 유연하게 수립할 수 있습니다. 회귀모델에 상호작용 항을 포함해서 모델을 다시 수립해보도록 하겠습니다. 이 때 상호작용항은 `bmi30 * smoker` 가 됩니다.

```
insurance_model <- lm(charges ~ age + sex + bmi30 * smoker + children + region,
    data = train)
summary(insurance_model)
```

```
Call:
lm(formula = charges ~ age + sex + bmi30 * smoker + children +
    region, data = train)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-18392.9  -1843.1  -1270.1   -492.7  24812.7

Coefficients:
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)      -2257.4      543.4  -4.154 3.56e-05 ***
age                265.2       10.2  26.000  < 2e-16 ***
sexmale           -655.8      289.9  -2.262   0.0239 *
bmi30              364.0      328.6   1.108   0.2682
smokeryes        13544.5      524.8  25.811  < 2e-16 ***
children           576.3      121.2   4.754 2.32e-06 ***
regionnorthwest    191.4      416.4   0.460   0.6458
regionsoutheast   -420.4      411.5  -1.022   0.3072
regionsouthwest   -763.4      410.9  -1.858   0.0635 .
bmi30:smokeryes  19164.7      720.5  26.598  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 4418 on 927 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8664,    Adjusted R-squared:  0.8651
F-statistic: 667.9 on 9 and 927 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

```
predict_charges <- predict(insurance_model, test)
mae(charges, predict_charges)
```

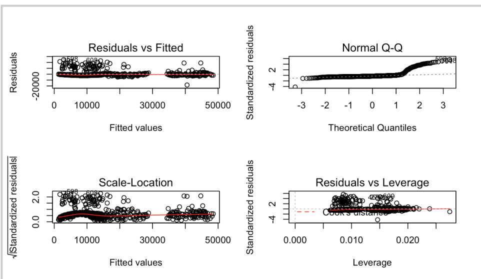
```
[1] 2599.737
```

놀랍게도 MAE 값이 2599까지 떨어졌습니다. 아까보다 40% 정도의 성능 개선이 있었다고 볼 수 있습니다. 상호작용항은 회귀계수가 19164.7로 굉장히 영향력 있는 항임을 알 수 있었으며, 통계적으로도 유의함을 확인할 수 있습니다.

이상치(Outlier)

이상치(Outlier)는 모델의 안정성을 떨어뜨리는 데 큰 영향을 미칩니다. 우선 이상치가 모델에 포함되는 경우 오차값이 증가하게 되고, 이러한 오차값은 모든 신뢰구간과 p-value 계산에 사용되므로 선형 모델을 구축하는 데에 문제를 발생시킬 수 있습니다.

```
par(mfrow = c(2, 2))
plot(insurance_model)
```



이상치인 데이터를 식별하기 위해서는 위 플롯들 중 네 번째 플롯이 가장 큰 도움이 됩니다. 네 번째 플롯은 레버리지(leverage)와 표준화된 잔차(standardized residuals)의 관계를 나타낸 그래프입니다. 빨간선을 중심으로 많은 데이터 포인트가 몰려있으나, 잔차가 큰 데이터들도 충분히 많습니다. 이 때 잔차가 너무 큰 데이터를 제외하고 모델을 수립하면 모델의 성능이 비약적으로 증가하는 경우가 있습니다. 그림에는 표준화된 잔차값이 나와있지만, 일반적으로 **스튜던트화 잔차(studentized residuals)**를 이용하여 이상치를 식별합니다. 이 값의 절대값이 3보다 큰 경우 이상치일 가능성이 높습니다. 이 값들을 제외하고 모델을 수립하겠습니다. 스튜던트화 잔차는 `MASS` 패키지의 `studres()` 함수를 이용해 구할 수 있습니다. 괄호 안에는 예측 모델이 들어가면 됩니다.

```
studentized <- studres(insurance_model)
outliers <- which(abs(studentized) > 3)
refine_train <- train[-outliers, ]

insurance_model <- lm(charges ~ age + sex + bmi30 * smoker + children + region,
    data = refine_train)
summary(insurance_model)
```

```


Call:
lm(formula = charges ~ age + sex + bmi30 * smoker + children +
    region, data = refine_train)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4313.4  -965.8  -517.7   147.5 14253.1

Coefficients:
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)     -3028.45     304.38  -9.949  < 2e-16 ***
age               264.92       5.70  46.481  < 2e-16 ***
sexmale          -509.55     161.86  -3.148   0.0017 **
bmi30             314.78     183.77   1.713   0.0871 .
smokeryes       14014.35     290.16  48.299  < 2e-16 ***
children          447.61      67.55   6.626 5.99e-11 ***
regionnorthwest  -165.42     233.22  -0.709   0.4783
regionsoutheast  -255.05     228.90  -1.114   0.2655
regionsouthwest  -577.82     229.04  -2.523   0.0118 *
bmi30:smokeryes 19325.03     399.12  48.418  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2408 on 885 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9582,    Adjusted R-squared:  0.9577
F-statistic:  2252 on 9 and 885 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

```
predict_charges <- predict(insurance_model, test)
mae(charges, predict_charges)
```

```
[1] 2099.234
```

모델의 성능이 비약적으로 좋아졌습니다. 생성된 모델은 전체 분산의 약 95.8%를 설명할 수 있게 되었고, F-검정값이 증가하였으며 p-value 값을 통해 모델이 통계적으로 유의함을 알 수 있게 되었습니다. 심지어 MAE값은 2599.737에서 2099.234까지 감소한 것을 알 수 있습니다. 이처럼 다양한 방법을 통하여 모델을 개선하여 최적의 모델을 찾는 것이 데이터 사이언스에서 모델을 수립하는 과정입니다.

1. 회귀(regression)라는 용어는 영국의 우생학자인 프랜시스 갈튼(Sir Francis Galton, 1822-1911)으로부터 유래했습니다. 갈튼은 부모의 키와 아이들의 키 사이의 연관 관계를 연구하면서 아이들의 키는 부모의 키 평균으로 ’돌아가려는 경향’이 있다는 가설을 세우고 이를 분석하는 방법으로 회귀분석이라고 하였죠. 회귀라는 뜻의 영어 단어 regress에서 파생되었습니다.↩