4장 Multiple Linear Regression

CONTENTS

- 4.1 서론
- 4.2 다중선형회귀
 - 4.2.1 다중선형회귀의 원리
 - 4.2.2 다중상관계수
- 4.3 변수선택법

4.1 서론

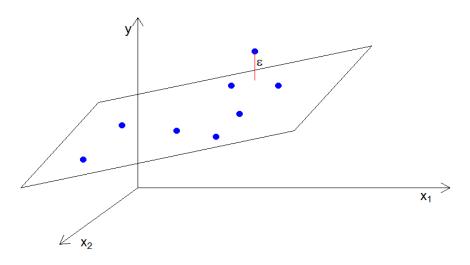
- 다중선형회귀는 스칼라 반응변수(반응변수가 1개)와 두 개 이상의 설명변수 간의 관계를 모형화하는 방법이다. 설명변수가 한 개인 경우는 단순 선형 회귀에 해당한다. 여러 개의 상관된 반응변수를 다루는 다변량 다중회귀와는 용어의 구분이 필요하다.
- •이 장에서는 다중선형회귀분석의 전반에 대한 주요 내용을 다룬다. 여기에는 다중회귀의 원리, 다중회귀의 적합 과정과 변수선택법등을 다룬다.

• 다중선형회귀(multiple linear regression)는 단순선형회귀의 확장으로 독립변수의 수가 여러 개인 경우에 해당하며, 모형은 다음과 같다. 오차(ϵ)에 대한 가정은 단순선형회귀의 경우와 동일하다.

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p + \epsilon.$$

4.2.1 다중선형회귀의 원리

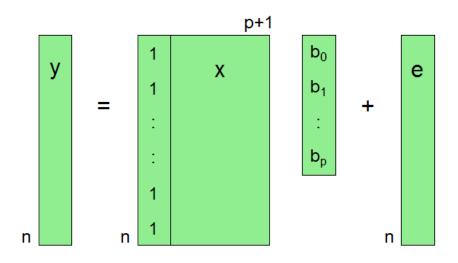
• 다중선형회귀는 아래의 [그림 4.1]에서와 같이 관측값 y와 미지인 초평면(hyperplane) $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_p x_p$ 까지의 (y축 방향으로의) 수직거리의 제곱합 즉, 오차 (ϵ) 들의 제곱합 $\sum_{i=1}^n \epsilon_i^2$ 을 최소로 하는 모수 (b_0, b_1, \dots, b_p) 를 찾는 것이다.



[그림 4.1] 다중회귀의 원리

• 최소제곱법 또는 OLS(Ordinary least square)에 의해 회귀계수(eta_0,eta_1,\dots,eta_p)는 다음 식 $b=(X|X)^{-1}X|y$

으로부터 추정된다. 위 식에서 X, y에 대한 정의는 다음 [그림 4.2]와 같다.



[그림 4.2] 다중회귀의 모형식

4.2.2 다중상관계수

- 다중상관계수(multiple correlation coefficient, multiple R²)는 다중회귀에서 반응변수에 대한 예측력을 평가하는데 사용된다. 이 값은 예측값(추정값)과 관측값 사이의 상관계수의 제곱(제곱상관계수)에 해당한다.
- 또한, 이 값은 독립변수에 의해 설명되어지는 반응변수의 분산의 비율로도 해석할 수 있다. 다 중상관계수는 총제곱합(SST)에서 회귀제곱합(SSR)이 차지하는 비율로 다음과 같이 정의된다.

$$R2 = \frac{SSR}{SST}$$

다중상관계수의 통계적 유의성은 F-검정을 이용한다.

유의

다중상관계수는 그 의미상 제곱다중상관계수(squared multiple correlation coefficient)의 표현이 더 정확하나, 통상적으로 "제곱"의 표현을 생략하고 사용한다.

• 다중상관계수는 모상관계수를 과대추정(overestimate)하는 경향이 있다. 수정상관계수 $(adjusted R^2)$ 는 이를 보완한 추정량으로 다음과 같이 정의된다.

Adjusted R² = 1 -
$$\frac{SS_{residuals}}{SS_{total}} (n - K)$$

위 식에서 n은 표본의 크기, K는 예측변수의 수를 나타낸다.

예제 1 Prestige{car} 자료를 이용하여 상관분석과 다중회귀분석을 수행한다.

```
> library(car)
> data(Prestige)

> str(Prestige)
'data.frame': 102 obs. of 6 variables:
$ education: num 13.1 12.3 12.8 11.4 14.6 ...
$ income : int 12351 25879 9271 8865 8403 11030 8258 14163 11377 11023 ...
$ women : num 11.16 4.02 15.7 9.11 11.68 ...
$ prestige : num 68.8 69.1 63.4 56.8 73.5 77.6 72.6 78.1 73.1 68.8 ...
$ census : int 1113 1130 1171 1175 2111 2113 2133 2141 2143 2153 ...
$ type : Factor w/ 3 levels "bc", "prof", "wc": 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 ...
```

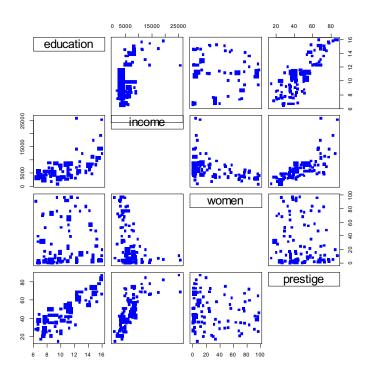
<pre>> head(Prestige)</pre>	education	income	women	prestige	census	type
<pre>gov.administrators general.managers</pre>	13.11 12.26		11.16 4.02	68.8 69.1	1113 1130	•
accountants purchasing.officers	12.77 11.42		15.70 9.11	63.4	1171 1175	prof
chemists physicists	14.62 15.64		11.68 5.13	73.5 77.6	2111 2113	prof
physicists	15.64 	11030	5.13	//.6	2113	prot

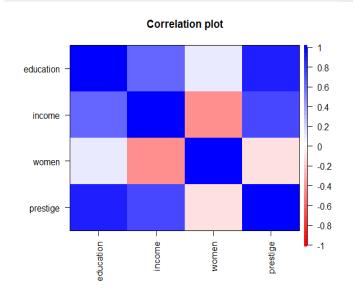
자료 설명

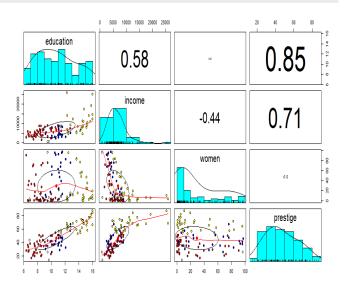
이 자료는 1971년 캐나다의 직업에 대한 자료이다. 102개의 직업군별로 6개의 변수가 조사되었다. 변수는 평균교육연수(education), 평균연봉(income), 여성비율(women), 명망점수 (prestige), 인구조사직업코드(census), 직업형태(type)이다. 여기서는 income을 반응변수로 education, women, prestige을 예측변수로 하는 다중회귀모형을 적합하고자 한다.

```
> summary(Prestige)
  education
                  income
                                              prestige
                                women
Min. : 6.380 Min. : 611
                                            Min. :14.80
                             Min. : 0.000
1st Qu.: 8.445 1st Qu.: 4106
                             1st Qu.: 3.592
                                            1st Qu.:35.23
Median :10.540 Median : 5930
                             Median :13.600
                                           Median :43.60
Mean :10.738 Mean : 6798
                             Mean :28.979
                                           Mean :46.83
3rd Qu.:12.648 3rd Qu.: 8187
                             3rd Qu.:52.203
                                           3rd Qu.:59.27
Max. :15.970
             Max. :25879
                             Max. :97.510
                                            Max.
                                                 :87.20
    census type
             bc :44
Min.
       1113
1st Qu.:3120 prof:31
Median :5135 wc :23
Mean :5402 NA's: 4
3rd Qu.:8312
Max. :9517
```

- > # 상관분석 시각화
- > plot(Prestige[,1:4], pch=15, col="blue")







```
> ## 다중선형회귀 적합: lm() 함수 이용

> mod1 = lm(income ~ education + prestige + women, data=Prestige)

> summary(mod1)

Call:
lm(formula = income ~ education + prestige + women, data = Prestige)

Residuals:
Min 1Q Median 3Q Max
-7715.3 -929.7 -231.2 689.7 14391.8
(...)
```

해 석

education 변수가 유의하지 않으므로, 이를 제외한 모형을 적합하기로 한다.

```
Coefficients:

Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)

(Intercept) 431.574 807.630 0.534 0.594

prestige 165.875 14.988 11.067 < 2e-16 ***

women -48.385 8.128 -5.953 4.02e-08 ***

---

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

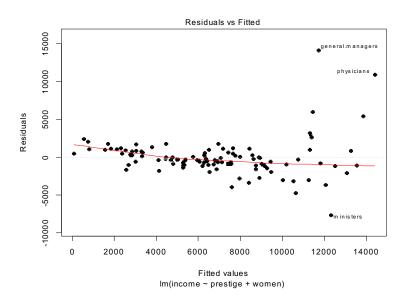
Residual standard error: 2573 on 99 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.64, Adjusted R-squared: 0.6327

F-statistic: 87.98 on 2 and 99 DF, p-value: < 2.2e-16
```

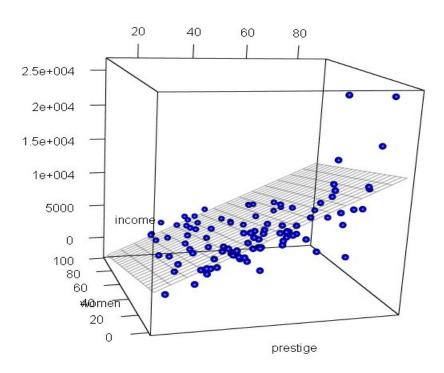
해 석 모형이 잘 적합되며, 두 변수(prestige, women)가 모두 유의하다.

> plot(mod2, pch=16, which=1) # 잔차 그림



해석

잔차분석 결과 오차에 대한 등분산성 가정이 위배되며, 비선형성을 보이고 있어 모형의 개선이 필요해 보인다. 잔차분석을 포함한 보다 자세한 회귀진단과 모형에 대한 개선은 여기서 다루지 않기로 한다.



• 다중회귀에서 최종 적합모형에 포함될 예측변수의 선택은 중요하다. 변수선택의 기본 원리는 "데이터에 대한 설명력이 뛰어나며, 동시에 단순한 형태를 가지는 모형"을 찾는 것이다. 변수 선택에는 두 가지 접근법이 있다. 하나는 모든 가능한 회귀 접근법과 자동화된 변수선택법이다.

(a) 모든 가능한 회귀 접근법(all possible regression approach)

 이 방법은 예측변수의 모든 가능한 부분집합에 대해 모형을 적합한 뒤, 적절한 판정기준(예를 들어, 수정결정계수, AIC, BIC)에 의해 최적의 모형을 선택하는 방법이다. 이들 기준은 각 모형 에 점수를 할당하고, 가장 우수한 점수를 가지는 모형을 선택하도록 한다.

R의 regsubsets{leaps} 함수는 모든 가능한 회귀를 통한 변수 선택에 유용하다. 이 함수의 적용 결과를 시각화하여 변수를 선택할 수 있다. 이 함수의 일반 형식은 다음과 같다.

- x= 계획행렬 또는 모형식 지정
- nbest = 변수의 수별로 상위 몇 개를 나타낼지를 지정
- nvmax= 부분집합의 최댓값(변수의 수) 지정
- method= 탐색방법을 지정

● 위 함수의 수행 결과 객체(regsubsets 객체)에 대해 다음의 함수가 유용하다.

```
plot(object, scale=c("adjr2", "aic", "bic", ...))
summary(object, all.best=TRUE,
matrix=TRUE,
    matrix.logical=FALSE,df=NULL,...)
```

● all.best= 모든 최적의 부분집합 도는 예측변수의 크기별로 하나의 최적모형 제공

```
coef(object,id,vcov=FALSE,...
) vcov(object,id,...)
```

(b) 자동화된 변수선택법

- 자동화된 변수선택법은 예측변수의 수가 크고, 따라서 모든 가능한 회귀 방법의 적용이 어려운 경우에 유용하다. 이 경우, 적절한 탐색 알고리즘(예를 들어, 전진선택법, 후진제거법, 단계별선 택법)을 사용하여 최적의 모형을 찾는 것이 보다 효율적이다.
 - 전진선택법(forward selection method): 절편항만 포함하는 가장 작은 모형에서 반응변수에 가장 큰 영향을 주는 설명변수를 차례로 모형에 포함시켜나가되 더 이상 의미 있는 변수가 없을 때 중단하는 방법.
 - **후진제거법(backward elimination method)**: 모든 설명변수를 포함하는 모형에서 기여도가 낮은 변수를 차례로 제거해 나가되 더 이상 제거할 변수가 없을 때 중단하는 방법.
 - 단계별선택법(stepwise selection method): 전진선택법에서 한번 선택된 변수는 다음 단계에서 제거될 기회를 갖지 못한다(후진제거법의 경우는 반대임). 단계별 선택법은 이러한 단점을 보완한 방법으로 먼저 선택된 변수도 다음 단계에서 제거될 수 있도록 변수선택의 매 단계마다 체크해 나가는 방법.

• R의 step() 함수는 자동화된 변수선택을 제공한다. 이 함수의 일반 형식은 다음과 같다.

```
step(object, scope, scale = 0, direction = c("both", "backward",

"forward"), trace = 1, keep = NULL, steps = 1000, k = 2, ...)
```

- object= "lm" 또는 "glm" 객체
- scope= 고려할 모형의 범위를 지정
 (예) scope=list(lower=null, upper=full), null과 full은 "Im" 객체임
- direction= 변수선택 방법 지정. "both"(단계별선택법)는 디폴트임

예제 2

swiss 자료를 이용하여 다중선형회귀에서의 여러 가지 변수선택법을 적용한다.

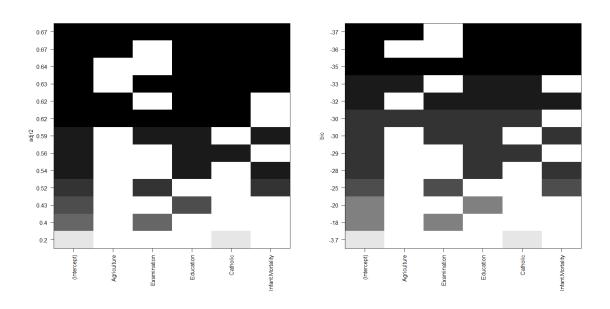
자료 설명

이 자료는 1988년 스위스의 출산(측도)과 사회경제지표에 대한 자료이다. Fertility를 반응변수로, 나머지를 예측변수로 하는 다중회귀모형을 적합하고자 한다.

```
> ## (a) 모든 가능한 회귀 적용: regsubsets{leaps} 함수 이용
> library(leaps)
> a <- regsubsets(x=Fertility~.,data=swiss,nbest=3)</pre>
> summary(a)
Subset selection object
Call: regsubsets.formula(x = Fertility \sim ., data = swiss, nbest = 3)
5 Variables (and intercept)
                Forced in Forced out
Agriculture
                   FALSE
                              FALSE
Examination
               FALSE
                              FALSE
Education
              FALSE
                              FALSE
Catholic
                  FALSE
                              FALSE
Infant.Mortality FALSE
                              FALSE
3 subsets of each size up to 5
```

```
Selection Algorithm: exhaustive
            Agriculture Examination Education Catholic Infant.Mortality
                                               " * "
                              " * "
                                                              " * "
                                               "*"
                                                             " * "
                                                                          11 11
                                               " * "
                                                                          " * "
                              " * "
                                                                          " * "
                                               " * "
                                                              " * "
                                                                           " * "
                                                              "*"
                                                                           11 11
                                               " * "
                                               "*"
                              "*"
                                                                          "*"
                                               " * "
                                                              "*"
                                                                          "*"
                              "*"
                                               " * "
                                                             " * "
                                                                          " * "
                                                              " * "
                                                                           11 11
                              " * "
                                               " * "
                                                              " * "
                              " * "
                                               " * "
                                                                          " * "
```

```
> par(mfrow=c(1,2))
> plot(a, scale="adjr2")
> plot(a, scale="bic")
```



4.3 자동화된 변수선택법

4.3 자동화된 변수선택법

```
(...)
Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)
             66.91518
                     10.70604 6.250 1.91e-07 ***
             Agriculture
Examination
             -0.25801 0.25388 -1.016 0.31546
             Education
        0.10412 0.03526 2.953 0.00519 **
Catholic
Infant.Mortality 1.07705 0.38172 2.822 0.00734 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 7.165 on 41 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7067, Adjusted R-squared: 0.671
F-statistic: 19.76 on 5 and 41 DF, p-value: 5.594e-10
```

4.3 자동화된 변수선택법

```
> ## (b) 자동화된 변수선택법: step() 함수 이용
> slm1 <- step(lm1, data = swiss)
> summary(slm1)
Call:
lm(formula = Fertility ~ Agriculture + Education + Catholic + Infant.Mortality, data = swiss)

Residuals:
Min 1Q Median 3Q Max
-14.6765 -6.0522 0.7514 3.1664 16.1422
(...)
```

```
(...)
Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)
             62.10131
                      9.60489 6.466 8.49e-08 ***
            Agriculture
Education
            Catholic
Infant.Mortality 1.07844 0.38187 2.824 0.00722 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 7.168 on 42 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.6993, Adjusted R-squared: 0.6707
F-statistic: 24.42 on 4 and 42 DF, p-value: 1.717e-10
```

- 다음의 [예제 3]은 Im() 함수의 반복 적용을 통해, 수동적인 방법으로, 최적모형을 찾아가는 과정을 보여준다. 자동화된 변수선택법(step() 함수 적용)의 결과도 함께 제시하고 그 결과를 비교한다.
- 아울러 모형에 포함된 예측변수들 간의 상대적인 중요도를 파악하기 휘해 표준화된 예측변수
 를 사용한 결과를 제시한다.

예제 3

분석에 사용될 자료(state.x77)는 미국의 50개 주에서 여러 변수값(인구, 수입, 문맹비율, 기대수명, 살인율, 고졸비율, 연평균영하기온일수, 면적)을 측정한 자료이다. 이 가운데 기대수명 (Life Exp)을 반응변수로 하여 다중회귀분석을 실시한다. 모든 변수는 연속형이다.

> data(state) # state.x77은 행렬 객체임

유의

다중상관계수는 그 의미상 제곱다중상관계수(squared multiple correlation coefficient)의 표현이 더 정확하나, 통상적으로 "제곱"의 표현을 생략하고 사용한다.

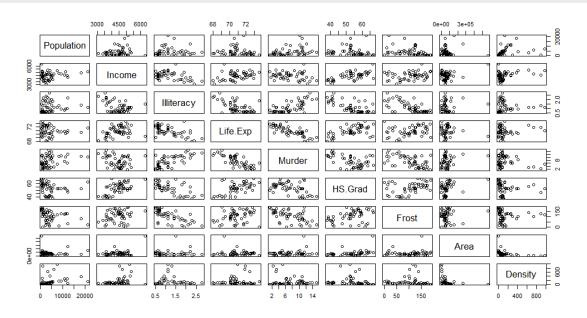
```
> st <- as.data.frame(state.x77)
> str(st)

> colnames(st)[4] <- "Life.Exp" # 변수명에 빈칸을 제외
> colnames(st)[6] <- "HS.Grad"
```

● 인구밀도를 나타내는 새로운 변수(Density)를 생성한다(이를 파생변수(derived variable)라함). 잘 고안된 파생변수는 회귀모형에서 매우 중요한 변수로 작용할 수 있다.

```
> st[,9] <- st$Population*1000/st$Area
> colnames(st)[9] <- "Density" # 새로운 열을 생성하고 이름 부여
> str(st)
'data.frame': 50 obs. of 9 variables:
 $ Population: num 3615 365 2212 2110 21198 ...
 $ Income : num 3624 6315 4530 3378 5114 ...
 $ Illiteracy: num 2.1 1.5 1.8 1.9 1.1 0.7 1.1 0.9 1.3 2 ...
 $ Life.Exp : num 69 69.3 70.5 70.7 71.7 ...
 $ Murder : num 15.1 11.3 7.8 10.1 10.3 6.8 3.1 6.2 10.7 13.9 ...
 $ HS.Grad : num 41.3 66.7 58.1 39.9 62.6 63.9 56 54.6 52.6 40.6
 $ Frost
           : num ...
 $ Area
           : num 20 152 15 65 20 166 139 103 11 60 ...
 $ Density
           : num 50708 566432 113417 51945 156361 ...
                   71.291 0.644 19.503 40.62 135.571 ...
```

- 자료에 대한 기초분석(기술통계, 상관계수)을 수행한다.
 - > summary(st)
 - > cor(st)
 - > pairs(st)



- Im() 또는 step() 함수를 통해 다중회귀모형을 적합한다.
- Im() 함수를 통해 다중회귀모형을 적합하는 과정은 다음과 같다. 단계별로 p-값이 가장 큰 변수를 하나씩 제거해 나가면서 모형을 적합한다(모든 변수의 p-값이 0.05보다 작아질 때 까지).

```
> model1 <- lm(Life.Exp ~ ., data=st)</pre>
> summary.aov(model1)
          Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
         1 0.409 0.409 0.760 0.38849
Population
Income
       1 11.595 11.595 21.541 3.53e-05
Illiteracy 1 19.421 19.421 36.081 4.23e-07
Murder 1 27.429 27.429 50.959 1.05e-08
HS.Grad 1 4.099
                   4.099 7.615 0.00861
       1 2.049
                   2.049 3.806 0.05792
Frost
     1 0.001
                     0.001
                            0.002 0.96438
Area
Density 1 1.229
                     1.229
                            2.283 0.13847
Residuals
          41 22.068
                     0.538
```

```
> model2 <- update(model1, .~.-Area)</pre>
> summary(model2)
> anova(model1, model2) # 모형간 비교
> model3 <- update(model2, .~.-Illiteracy)</pre>
> summary(model3)
> model4 <- update(model3, .~.-Income)</pre>
> summary(model4)
> model5 <- update(model4, .~.-Density)</pre>
> summary(model5)
> model6 <- update(model5, .~.-Population)</pre>
```

```
> summary(model6)
Call:
                               HS.Grad + Frost, data = st)
lm(formula = Life.Exp ~ Murder +
Residuals:
                                  Max
            10 Median
   Min
                           3Q
-1.5015 -0.5391 0.1014 0.5921 1.2268
Coefficients:
(Intercept) Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
           71.036379 0.983262 72.246 < 2e-16
Murder
          -0.283065 0.036731 -7.706 8.04e-10
HS.Grad
          0.049949 0.015201 3.286 0.00195
Frost
          -0.006912
                      0.002447 -2.824 0.00699
                              (...)
```

(...)

Residual standard error: 0.7197 on 45 degrees of freedom Multiple R-squared: 0.736, Adjusted R-squared: 0.7126 F-statistic: 31.37 on 4 and 45 DF, p-value: 1.696e-12

해 석

인구(Population)와 고졸비율(HS.Grad)이 높을수록 기대수명(Life.Exp)은 증가하는 반면, 살 인율(Murder)과 연평균영하기온일수(Frost)가 높을수록 기대수명이 줄어듦을 알 수 있다.

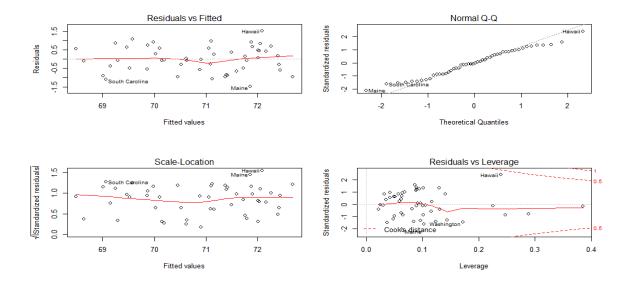
• confint() 함수를 통해 회귀계수에 대한 신뢰구간을 구할 수 있다.

● predict() 함수를 통해 주어진 자료에 대한 예측값을 구할 수 있다.

• 여러 가지 회귀진단의 결과는 다음과 같다.

```
> par(mfrow=c(2,2))
```

> plot(model.step)



해 석

그림1(좌측 상단)은 적합값에 대한 잔차 그림으로, 어떤 특별한 패턴을 보이지 않으므로 적합된 선형모형이 적절하다고 할 수 있다. 그림2(우측 상단)는 정규확률그림으로 점들이 비교적 직선 상 에 잘 위치하므로 잔차의 정규성 가정이 잘 만족된다고 할 수 있다. 그림3(좌측 하단)은 적합 값에 대한 |표준화 잔차|의 제곱근으로, 정규분포의 가정을 잘 만족하는 것으로 판단된다. 그림 4(우측 하단)는 지렛값에 대한 표준화 잔차와 영향점 진단을 위한 쿡의 거리를 보여준다. 지렛값 이 큰 점 이 몇 개 보이며(영향점), 동시에 큰 잔차를 가지는 점(이상치)이 한 개 포함되어 있다.

• 다중회귀모형의 자세한 적합결과는 다음의 방법으로 추출(확인)할 수 있다.

```
> names(model.step)
[1] "coefficients" "residuals" "effects"
                                                "rank"
                                 "qr"
                                                "df.residual"
[5] "fitted.values" "assign"
[9] "xlevels"
                                 "terms"
                                                "model"
                   "call"
[13] "anova"
> model.step[[1]]
 (Intercept) Population
                               Murder
                                           HS.Grad
                                                          Frost
7.102713e+01 5.013998e-05 -3.001488e-01 4.658225e-02 -5.943290e-03
```

<pre>> model.step[</pre>	[2]]			
Alabama	Alaska	Arizona	Arkansas	California
0.56888134	-0.54740399	-0.86415671	1.08626119	-0.08564599
Colorado	Connecticut	Delaware	Florida	Georgia
0.95645816	0.44541028	-1.06646884 (생략)	0.04460505	-0.09694227
-0.06691392	-0.96272426	-0.96982588	0.47004324	-0.58678863
<pre>> sort(model.</pre>	stantnasid)			
•	South Carolina	Delaware	West Virginia	Washington
-1.47095411	-1.10109172	-1.06646884	-0.96982588	-0.96272426
Pennsylvania	Mississippi	Arizona	Montana	New Jersey
-0.95045527	-0.91535384	-0.86415671 (생략)	-0.84024805	-0.66612086
North Dakota	Texas	Colorado	Arkansas	Hawaii
0.90350550	0.92114057	0.95645816	1.08626119	1.50683146

에타계수(beta coefficients) 또는 표준화계수(standardized coefficients)는 모든 변수들이 표준화되었을 때의 회귀계수를 의미한다. 베타계수는 예측변수들의 상대적인 중요도를 비교하는 데 유용하다(비표준화 계수 또는 p -값만으로는 상대적인 중요도를 알 수 없다). 모든 변수에 scale() 함수를 적용한 후 Im()을 수행한다.

```
Coefficients:
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)
                            0.1018 696.392 < 2e-16 ***
                 70.8786
scale(Population)
                0.2238 0.1121 1.996 0.05201 .
                 -1.1080 0.1351 -8.199 1.77e-10 ***
scale(Murder)
scale(HS.Grad) 0.3762 0.1198 3.142 0.00297 **
                 -0.3089
                            0.1258 -2.455 0.01802 *
scale(Frost)
Signif. codes: 0 '*** 0.001 '** 0.01 '* 0.05 '.' 0.1 ' 1
Residual standard error: 0.7197 on 45 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.736, Adjusted R-squared: 0.7126
F-statistic: 31.37 on 4 and 45 DF, p-value: 1.696e-12
```

해 석

베타계수의 절대값을 비교해보면 변수의 중요도는 Murder > HS.Grad > Frost > Population 순이다.