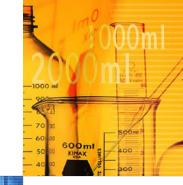
Machine learning



Chapter 8

Regression



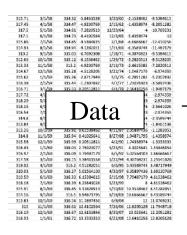


Sejong Oh
Bio Information Technology Lab.

Contents

- 회귀분석 개요
- 단순회귀분석
- 다중선형회귀

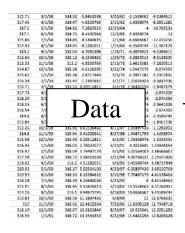
Classification



Predict class

Normal/Patient Pass/Fail

Regression



Predict value

Degree of pollution score



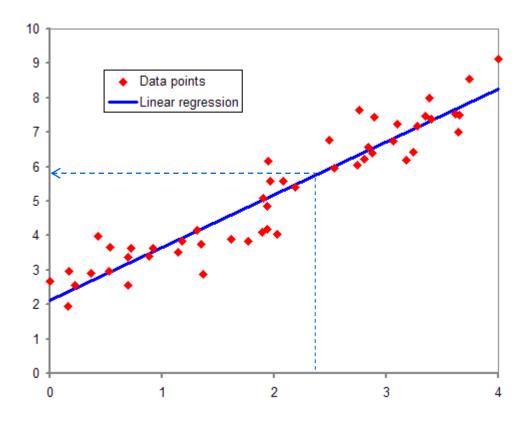
- 회귀 분석
 - 영국의 유전학자 갈턴(F. Galton)이 아버지와 아들의 키에 대한 유전 관계를 통계적으로 조사한 논문에서 regression 처음 사용
 - 연속형 두 변수 사이에 어떤 관계가 있는지 파악
 - 종속 변수가 독립변수에 의해 어떻게 설명 혹은 예측이 되는지를 알아 보는 통계적 방법

$$\underline{y} = \alpha + \beta x$$

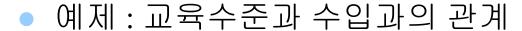
종속 변수 (dependent variable) 결과변수 (outcome variable) 반응변수 (response variable)

독립변수 (independent variable) 설명변수 (explanatory variable) 예측변수 (predictor variable) 위험인자 (risk factor)

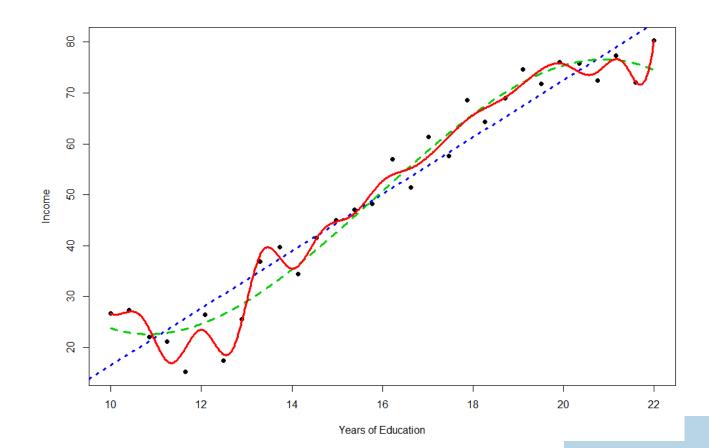
- 회귀분석의 과정
 - (1) training data 로 부터 회귀식을 구한다
 - (2) 회귀식을 이용하여 y 값을 예측한다

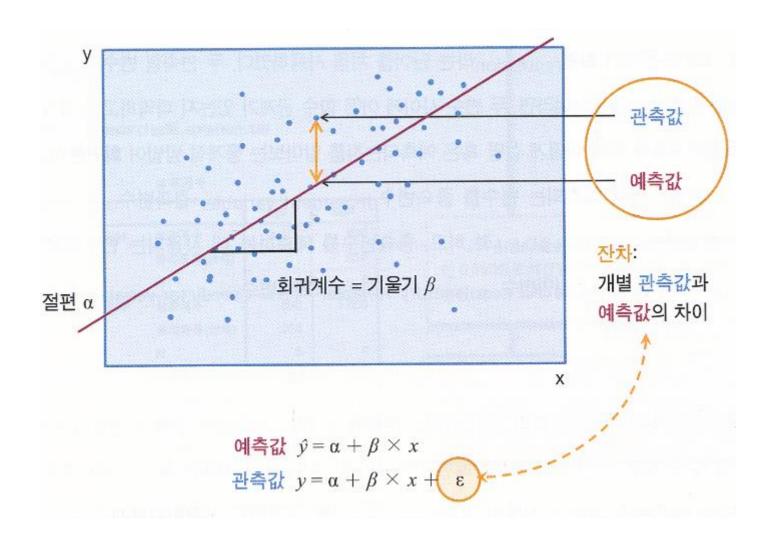


- 회귀 분석
 - 회귀분석은 함수 형태에 따라 1차, 2차, 3차 함수로 분류
 - 보건 의학 연구에서는 주로 1차 함수인 선형 회귀분석 (linear regression) 이 주로 이용
 - 선형 회귀식
 - 단순 회귀분석 (simple linear regression): 두 변수 사이의 선형 관계를 하나의 회귀 직선으로 표현
 - 다중 회귀분석 (multiple linear regression): 여러 개의 독립변수들에 의해 결과 변수를 예측



- \circ $\alpha + \beta X$
- $\bullet \ \alpha + \beta_1 X + \beta_2 X^2 + \beta_3 X^3$
- \circ $\alpha + g(X)$





- 독립변수(x) 와 종속변수(y) 가 선형 관계에 있을 때 y=lpha+eta x 의 선형 회귀 식을 추정하는 것이 목적
- α, β : **회귀계수**(regression coefficient). β 만 회귀계수라고 부르기도 함
- α : 절면(intercept), β :기울기(slope)
- 회귀분석에서는 기울기에 관심
- 회귀식은 현상을 설명하는 하나의 모형이라는 의미에서 **회귀 모형** (regression model) 이라고 부르기도 한다
- <mark>잔차/오차항</mark> (residual error): 표본집단/모집단에서 관측값과 회귀선에 의한 예측 값의 차이. (회귀식 또는 회귀 모형에 의해 설명이 되지 않는 부분).
 - 회귀분석이 적절히 수행되었는지를 판단하는 근거
- 단순회귀 분석은 다중회귀분석, 로지스틱 회귀분석, Cox의 비례 위험 모형 등으로 확장됨

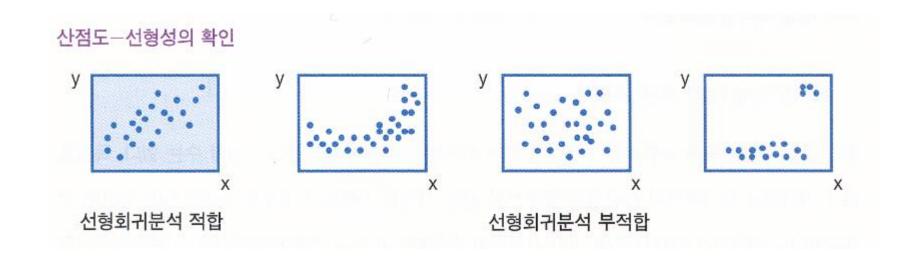
- 회귀 모형에 대한 기본 가정
 - 독립변수(x)와 종속변수(y)가 선형 관계에 있어야 한다. (선형성)
 - 모든 독립변수(x)의 값에서 종속변수(y) 는 정규분포를 이룰 것 (오차항의 정규성)
 - 잔차들은 서로 영향을 받지 않고 독립적으로 분포 할 것 (오차항의 독립성)
 - 모든 독립변수(x)의 값에서 종속변수(y)의 분산은 같을 것 (오차항의 등 분산성)
 - 회귀분석시 회귀선의 추정및 검정 뿐만 아니라 위의 네가지 기본 가정이 잘 충족되고 있는지 살펴 보아야 한다

• 회귀 모형에 대한 기본 가정

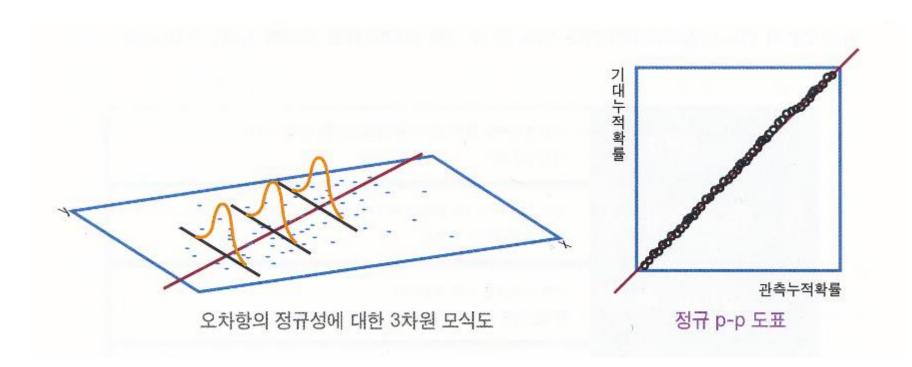
1	선형성	 독립변수(x)와 종속변수(y)의 관계는 선형 관계에 있다. 산점도로 확인
2	오차항의 정규성	 모든 독립변수(x)의 값에서 종속변수(y)는 정규 분포를 이룬다. 정규 P-P 곡선으로 확인
3	오차항의 독립성	 개별 잔차들은 서로 독립이다. 잔차산점도, Durbin-Watson 통계량으로 확인
4	오차항의 등분산성	・ 모든 독립변수(x)의 값에서 종속변수(y)의 분산은 같다. ・ 잔차산점도로 확인



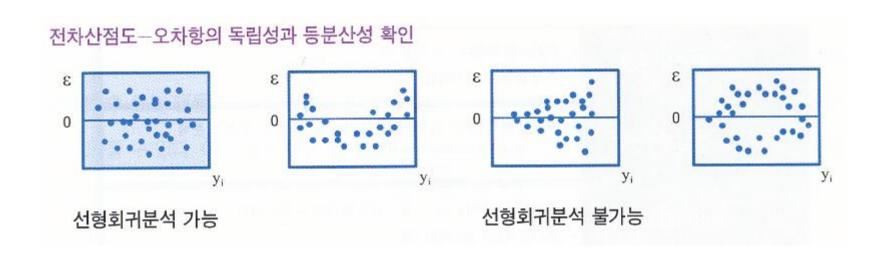
- 1) 선형성
 - 통계 프로그램은 선형관계가 없는 두 변수 사이에서도 회귀식을 추정해 낸다.
 - 산점도를 통해 두 변수사이에 실제 선형 관계가 있는 지 눈으로 확인하는 것이 필요



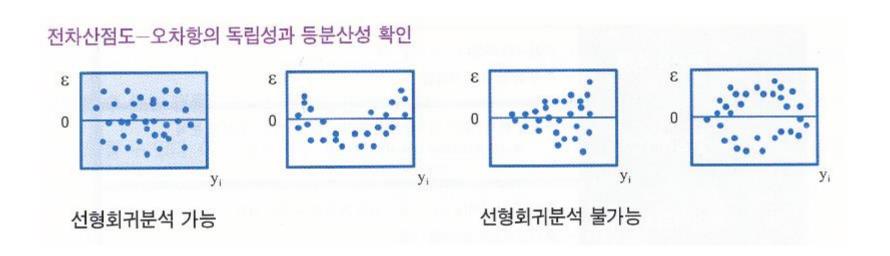
- 회귀 모형에 대한 기본 가정
 - 2) 오차항의 정규성
 - 회귀선을 그었을 때 모든 독립변수(x)의 값에서 종속변수(y) 의 관측 값은 정규분포를 이룰 것
 - 정규 p-p 곡선을 그려 눈으로 확인 가능



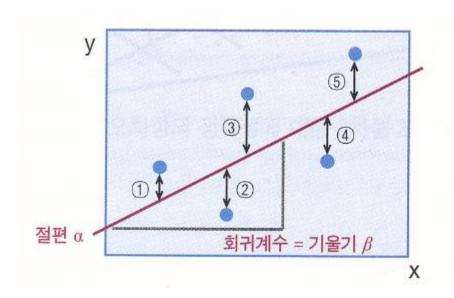
- ▶ 회귀 모형에 대한 기본 가정
 - 3) 오차항의 독립성
 - 잔차들은 서로 연관성이 없이 독립적이어야
 - 잔차 산점도를 그렸을 때 모든 예측값에 대해 잔차들이 불규칙성을 보여야 한다
 - 만일 어떤 규칙성이 관찰되면 이에 대한 설명이 필요



- 회귀 모형에 대한 기본 가정
 - 4) 오차항의 등분산성
 - 모든 독립변수(x) 에 대해 잔차의 분산이 같다는 의미
 - 예를 들어 x 가 커질수록 분산이 커진다면 등분산성 위배
 - 산점도(잔차 산점도)를 통해 확인 가능



- 단순 회귀 분석의 시행
 - 1) 회귀식 $(y = \alpha + \beta x)$ 의 추정
 - 최소제곱법(least square method): 모든 잔차의 제곱의 합을 최소화 하는 직 선을 결정
 - 추정 직선에서 관측치들이 떨어진 정도가 작을 수록 회귀식의 자료에 대한 적합도가 더 높다



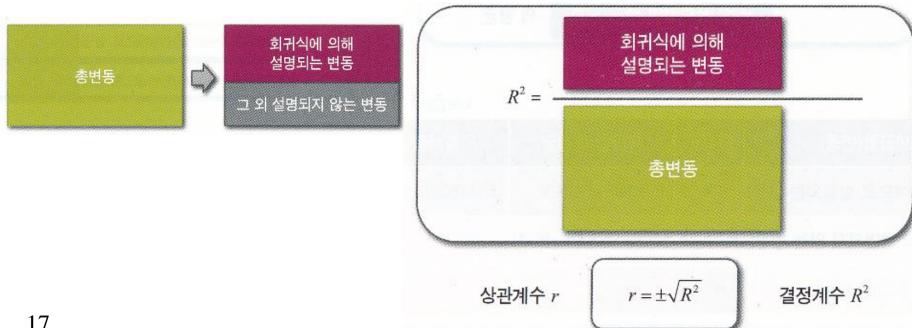
잔차의 제곱합을 최소화하는

$$(1)^2 + 2)^2 + 3)^2 + 4)^2 + 5)^2$$

회귀식을 추정

즉, 절편 α 와 회귀계수 β 를 추정

- 단순 회귀 분석의 시행
 - 2) 결정계수 R^2
 - 회귀식에서 y 의 총변동은 이 회귀식으로 설명될수 있는 변동과 그 외 설명 되지 않는 변동으로 설명
 - 결정계수(coefficient of determination) : 총변동중 회귀식에 의해 설명되는 변
 - $0 \le R^2 \le 1$. 두 변수 사이의 관계가 강할 수록 R^2 은 1 에 근접



[실습] 단순회귀 분석

- 다음은 322명의 건강한 성인의 건강검진 자료이다.
- 허리둘레로 BMI 를 예측하는 회귀식을 구하라

환자번호 나이 키 몸무게 허리둘레 BMI 수축기혈압 age height weight waistline BMI SBP

```
> # 자료 입력및 관찰
> ds = read.csv("6 correlation and regression.csv")
> attach(ds)
> head(ds)
 age height weight waistline BMI SBP
  57
        164
           62.0
                        85 23.1 147
1
2
  25 172 54.0
                         65 18.3 116
3
  57 157 59.0
                        83 23.9 122
  43
4
     170
           87.8
                        104 30.4 130
  52 155 50.0
                        83 20.8 120
5
6
  27 163 76.0
                        83 28.6 128
>
```

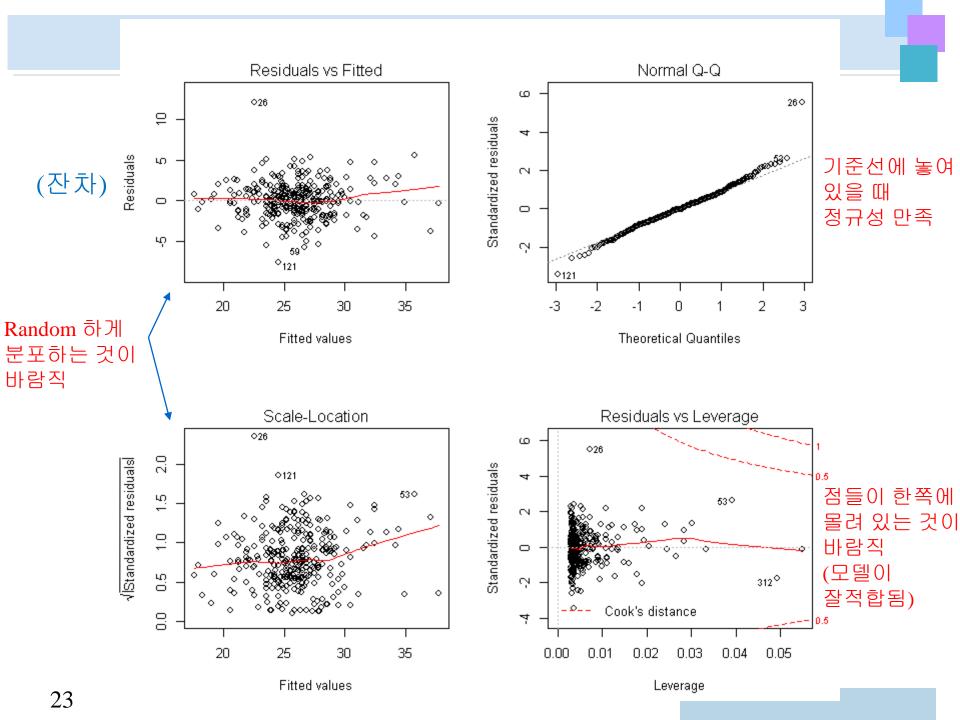
- > # 단순회귀분석 : BMI 와 waistline
- > result = lm(BMI~waistline)

_____ 독립변수 종속변수

```
> summary(result)
Call:
lm(formula = BMI ~ waistline)
Residuals:
   Min 10 Median 30 Max
-7.5197 -1.3087 -0.0444 1.2532 12.0683
Coefficients:
          Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -3.97611 1.25481 -3.169 0.00168 **
          waistline
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 2.186 on 320 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.6411, Adjusted R-squared: 0.6399
F-statistic: 571.5 on 1 and 320 DF, p-value: < 2.2e-16
```

- > par(mfrow=c(2,2))
- > plot(result)
- > detach(ds)

회귀식을 이용하여 허리둘레가 90 일 때 BMI 값을 예측해 보자

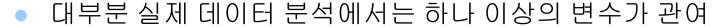


[과제 1]



 실습의 데이터를 이용하여 키로 몸무게를 예측하는 회귀식을 작성하시오

 이 회귀식을 이용하여 경우 키 180 인 경우 몸무게가 얼마인지 예측하시오



- 이 경우 다중 선형 회귀를 이용
- 단순 선형회귀

$$Y = \alpha + \beta X$$

• 다중 선형회귀

0	Y	=	α	+	β_1	X	
---	---	---	---	---	-----------	---	--

age	height	weight	waistline	BMI	SBP
57	164	62	85	23.1	147
25	172	54	65	18.3	116
57	157	59	83	23.9	122
13	170	Ω7 Ω	104	3U V	130



- 수치 데이터를 모델화 하기 위한 가장 일반적인 접근법
- 거의 모든 데이터를 모델화 할수 있다
- 속성(변수)과 결과간의 견고성과 크기를 추정할 수 있다.

• 단점

- 데이터에 대한 강한 가정을 만든다
- 결측치가 포함된 경우 잘 작동되지 않는다
- 수치 속성만 작동하고 범주형 데이터는 부가 처리가 필요하다
- 모델을 이해하려면 통계적 지식이 필요하다

- > data(state.x77)
- > head(state.x77)

	Populat	cion Income	Illiter	acy Life	Exp Mur	der HS	Grad F	'rost	Area
Alabama	3615	3624	2.1	69.05	15.1	41.3	20	50708	
Alaska	365	6315	1.5	69.31	11.3	66.7	152	566432	
Arizona	2212	4530	1.8	70.55	7.8	58.1	15	113417	
Arkansas	2110	3378	1.9	70.66	10.1	39.9	65	51945	
California	21198	5114	1.1	71.71	10.3	62.6	20	156361	
Colorado	2541	4884	0.7	72.06	6.8	63.9	166	103766	

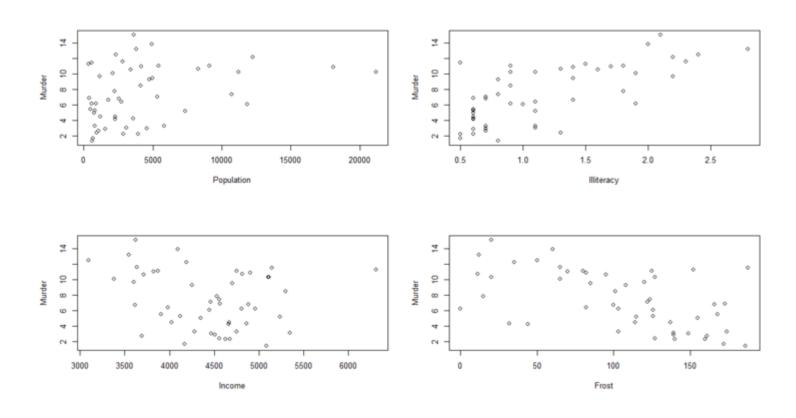
> states <as.data.frame(state.x77[,c("Murder","Population","Illite
racy","Income","Frost")])</pre>

Population(인구), Income(수입), Illiteracy(문 맹률), Frost(추운날수) 로 부터 Murder(살인율)을 예측하는 모델을 만들어 보자

```
# model fitting
> fit <- lm(Murder~.,data = states)</pre>
> fit
            Murder~Population+Illiteracy+Income+Frost
Call:
lm(formula = Murder ~ ., data = states)
Coefficients:
(Intercept) Population Illiteracy
                                                       Frost
                                          Income
  1.235e+00 2.237e-04 4.143e+00
                                       6.442e-05
                                                   5.813e-04
```

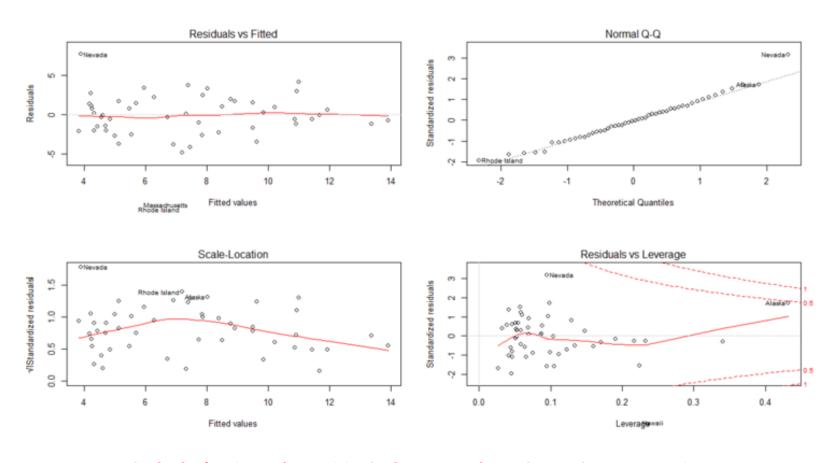
데이터에 대한 산점도 그리기

> plot(Murder~.,data = states)



회귀 모형의 적절성 확인

> plot(fit)



선형성과 정규성, 등분산성 모두 만족하는 것으로 보임

```
# 네개의 독립변수에 대한 유의성 확인
> summary(fit)
Call:
lm(formula = Murder ~ ., data = states)
Residuals:
   Min 10 Median 30
                                Max
-4.7960 -1.6495 -0.0811 1.4815 7.6210
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 1.235e+00 3.866e+00 0.319 0.7510
Population 2.237e-04 9.052e-05 2.471 0.0173 *
Illiteracy 4.143e+00 8.744e-01 4.738 2.19e-05 ***
Income 6.442e-05 6.837e-04 0.094 0.9253
Frost 5.813e-04 1.005e-02 0.058 0.9541
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 2.535 on 45 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.567, Adjusted R-squared: 0.5285
F-statistic: 14.73 on 4 and 45 DF, p-value: 9.133e-08
```

```
# 유의한 두 변수만 가지고 회귀모형을 다시 구해 봄 (사실은 이렇게
하면 안됨)
> fit2 <- lm(Murder~Population + Illiteracy, data =</pre>
states)
> summary(fit2)
Call:
lm(formula = Murder ~ Population + Illiteracy, data = states)
Residuals:
   Min
      10 Median 30 Max
-4.7652 -1.6561 -0.0898 1.4570 7.6758
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 1.652e+00 8.101e-01 2.039 0.04713 *
Population 2.242e-04 7.984e-05 2.808 0.00724 **
Illiteracy 4.081e+00 5.848e-01 6.978 8.83e-09 ***
```



• 회귀식의 도출

▶ 예측값 과 실제 값의 비교

Population	Illiteracy	Murder(예측)	Murder(실제)	오차(실제-예측)
3615	2.1	11.03	15.1	4.07
365	1.5	7.86	11.3	3.44
2212	1.8	9.49	7.8	-1.69
2110	1.9	9.88	10.1	0.22
21198	1.1	10.89	10.3	-0.59
2541	0.7	5.08	6.8	1.72

다중 공선성(Multicollinearity)

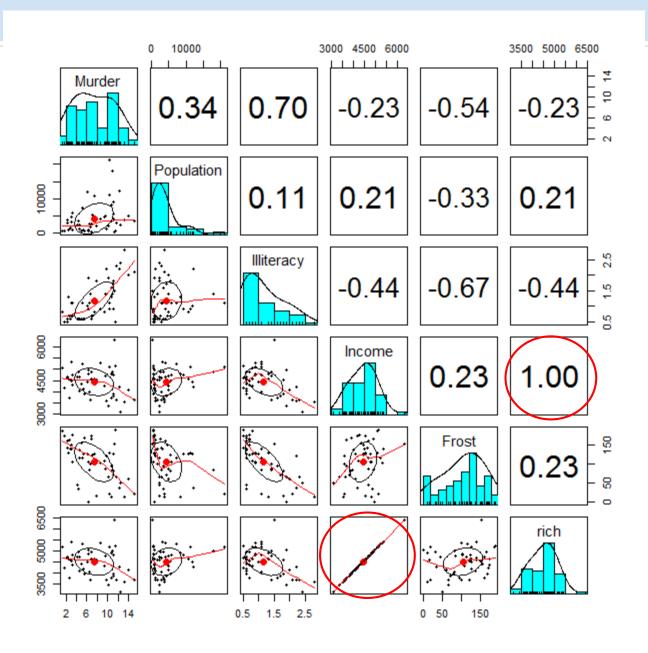
- 다중 공선성: 다중회귀분석에서 x변수(설명변수, 독립변수)들 끼리 상관관계가 존재할 경우 회귀 계수의 분산을 크게 하여, 회귀분석시 추정 회귀 계수를 믿을 수 없게 되는 문제.
- 다중 공선성을 고려하여 x변수를 선정하고 회귀식을 만들어야 함 (자동화된 tool 이 있음)
- 다중 공선성을 확인하기 위해 상관관계가 있는 변수를 하나 만들어 넣는다.
 - > rich <- sqrt(states\$income) + states\$Income
 - > tmp <- cbind(states,rich)</pre>
 - <- as.factor(tmp\$rich)</pre>

head(tmp)

다중 공선성(Multicollinearity)

- # 산점도를 그려 다중 공선성 확인
- > library(psych)
- > library(car)
- > pairs.panels(tmp[names(tmp)])

그래프에서 숫자는 상관관계를 나타내며, -1에 가까우면 음의 상 관관계, 1에 가까우면 양의 상관관계. 그래프에서 1,0.7과 같이 1에 가까운 수가 있으므로 다중공선성 이 의심



다중 공선성(Multicollinearity)

```
# 수치로 다중 공선성 확인

> fit <- lm(Murder~.,data = tmp)

> car::vif(fit)

Population Illiteracy Income Frost rich
1.317121e+00 3.422561e+00 1.221961e+07 2.278193e+00 1.222273e+07

> sqrt(car::vif(fit)) > 2

Population Illiteracy Income Frost rich
FALSE FALSE TRUE FALSE TRUE
```

car::vif() : car 패키지에 있는 vif() 함수를 사용. 동일한 이름의 함수가 여러 패키지에 있을 때 충돌을 피하기 위함 vif :분산팽창요인(Variance Inflation Factor)

sqrt(car::vif(fit)) 가 2보다 크면 다중공선성이 있는 것으로 판단 (느슨하게는 car::vif(fit) 가 10 보다 크면 다중공선성 판단) 위에서는 Income, rich 가 TRUE 이므로 다중공선성이 있다고 판단

다중 공선성(Multicollinearity)

- 다중 공선성의 해결 방법
 - 상관관계가 높은 독립변수중 하나 혹은 일부를 제거한다.
 - 변수를 변형시키거나 새로운 관측치를 이용한다.
 - 자료를 수집하는 현장의 상황을 보아 상관관계의 이유를 파악하여 해 결한다.

- 주어진 종속변수 y 에 대해 이를 잘 설명할 수 있는 독립변수들을 선별하는 작업이 필요
- 다음의 함수를 이용하여 이 작업을 자동적으로 실시할수 있다
 - 전진 선택(forward)
 - 후진 소거(backward)
 - 단계별 선택(stepwise): 전진선택, 후진 소거를 동시에 적용

```
## forward search
# 먼저 상수항만 포함된 회귀모형을 생성 (선택된 변수 없음)
> fit.con <- lm(Murder~1,data=tmp)</pre>
# 전진선택
> fit.forward <-</pre>
step(fit.con,scope=list(lower=fit.con,upper=fit),
                    direction = "forward")
> fit.forward
Call:
lm(formula = Murder ~ Illiteracy + Population, data = tmp)
Coefficients:
(Intercept) Illiteracy Population
  1.6515497 4.0807366 0.0002242
```

```
> fit.forward <- step(fit.con,scope=list(lower=fit.con,upper=fit),</pre>
       direction = "forward")
Start: AIC=131.59
Murder ~ 1
           Df Sum of Sq RSS AIC
+ Illiteracy 1 329.98 337.76 99.516
+ Frost 1 193.91 473.84 116.442
+ Population 1 78.85 588.89 127.311
+ rich 1 35.39 632.35 130.871
+ Income 1 35.35 632.40 130.875
                                        AIC 값이 가장 작은 변수를 선택
        667.75 131.594
<none>
Step: AIC=99.52
Murder ~ Illiteracy
           Df Sum of Sq RSS AIC
+ Population 1 48.517 289.25 93.763
+ Income 1 4.916 332.85 100.783
+ rich 1 4.914 332.85 100.783
Step: AIC=93.76
Murder ~ Illiteracy + Population
        Df Sum of Sq RSS AIC
<none>
                    289.25 93.763
+ Income 1 0.057022 289.19 95.753
+ rich 1 0.056346 289.19 95.753
+ Frost 1 0.021447 289.22 95.759
```

```
## backward elimination
> fit.backward <-</pre>
step(fit,scope=list(lower=fit.con,upper=fit),
                      direction = "backward")
> fit.backward
Call:
lm(formula = Murder ~ Population + Illiteracy + Income + rich,
   data = tmp)
Coefficients:
                                                    rich
(Intercept) Population Illiteracy
                                       Income
 108.40286
               0.00027
                          3.34423
                                      3.17920 -3.15585
> summary(fit.backward)
```

```
Coefficients:

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

(Intercept) 1.084e+02 6.447e+01 1.681 0.099613.

Population 2.700e-04 8.755e-05 3.084 0.003486 **

Illiteracy 3.344e+00 8.036e-01 4.162 0.000141 ***

Income 3.179e+00 1.912e+00 1.663 0.103296

rich -3.156e+00 1.898e+00 -1.663 0.103302
```

```
> fit.backward <- step(fit,scope=list(lower=fit.con,upper=fit),</pre>
                   direction = "backward")
Start: AIC=96.55
Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost + rich
           Df Sum of Sq RSS AIC
            1 1.212 272.45 94.771
- Frost
                       271.24 96.549
<none>
- rich 1 17.930 289.17 97.749
- Income 1 17.931 289.17 97.749
- Illiteracy 1 48.844 320.08 102.828
- Population 1 50.123 321.36 103.027
Step: AIC=94.77
Murder ~ Population + Illiteracy + Income + rich
           Df Sum of Sq RSS AIC
                       272.45 94.771
<none>
          1 16.740 289.19 95.753
- rich
- Income 1 16.741 289.19 95.753
- Population 1 57.580 330.03 102.358
- Illiteracy 1 104.852 377.30 109.051
```

```
## stepwise
> fit.both <-</pre>
step(fit.con,scope=list(lower=fit.con,upper=fit),
direction = "both")
> fit.both
Call:
lm(formula = Murder ~ Illiteracy + Population, data = tmp)
Coefficients:
(Intercept) Illiteracy Population
 1.6515497 4.0807366
                         0.0002242
> summary(fit.both)
```

```
> fit.both <- step(fit.con,scope=list(lower=fit.con,upper=fit), direction = $</pre>
Start: AIC=131.59
Murder ~ 1
           Df Sum of Sq RSS
                                AIC
+ Illiteracy 1 329.98 337.76 99.516
+ Frost 1 193.91 473.84 116.442
+ Population 1 78.85 588.89 127.311
+ rich 1 35.39 632.35 130.871
+ Income 1 35.35 632.40 130.875
<none>
                       667.75 131.594
Step: AIC=99.52
Murder ~ Illiteracy
           Df Sum of Sq RSS
                                 AIC
+ Population 1 48.52 289.25 93.763
<none>
                       337.76 99.516
+ Frost 1 5.39 332.38 100.712
+ Income 1 4.92 332.85 100.783
+ rich 1 4.91 332.85 100.783
- Illiteracy 1 329.98 667.75 131.594
Step: AIC=93.76
Murder ~ Illiteracy + Population
           Df Sum of Sq RSS
                                 AIC
                       289.25 93.763
<none>
           1 0.057 289.19 95.753
+ Income
+ rich 1 0.056 289.19 95.753
+ Frost 1 0.021 289.22 95.759
- Population 1 48.517 337.76 99.516
- Illiteracy 1 299.646 588.89 127.311
```

회귀식에 의한 종속변수 예측

7

fit.both 모델을 가지고 Murder 를 예측해 보자

```
## 점추정
> pre murder <- predict(fit.both, newdata = tmp)</pre>
> pre murder <- as.data.frame(pre murder)</pre>
> pre murder
             pre murder
Alabama
             11.031529
            7.854483
Alaska
Arizona
           9.492775
Arkansas
         9.877982
California 10.892657
Colorado
          5.077722
Connecticut 6.835337
```

회귀식에 의한 종속변수 예측

```
## 구간 추정 -
> pre murder <- predict(fit.both, newdata = tmp,</pre>
interval = "confidence")
> pre murder <- as.data.frame(pre murder)</pre>
> pre murder
                   fit
                            lwr
                                     upr
             11.031529 9.716444 12.346615
Alabama
Alaska
             7.854483 6.810613 8.898352
            9.492775 8.394405 10.591146
Arizona
             9.877982 8.687628 11.068336
Arkansas
California
             10.892657 8.070037 13.715277
           5.077722 4.157763 5.997681
Colorado
Connecticut 6.835337 6.103519 7.567155
            5.454016 4.502294 6.405739
Delaware
Florida
            8.812096 7.853265 9.770927
```

회귀식에 의한 종속변수 예측

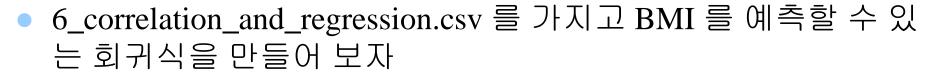


추정치와 실제값 비교 -----

- > ttmp <- cbind(pre_murder,tmp\$Murder)</pre>
- > ttmp

	fit	lwr	upr	tmp\$Murder
Alabama	11.031529	9.716444	12.346615	15.1
Alaska	7.854483	6.810613	8.898352	11.3
Arizona	9.492775	8.394405	10.591146	7.8
Arkansas	9.877982	8.687628	11.068336	10.1
California	10.892657	8.070037	13.715277	10.3
Colorado	5.077722	4.157763	5.997681	6.8
Connecticut	6.835337	6.103519	7.567155	3.1
Delaware	5.454016	4.502294	6.405739	6.2
Florida	8.812096	7.853265	9.770927	10.7

[과제 2]



age	height	weight	waistline	BMI	SBP
57	164	62	85	23.1	147
25	172	54	65	18.3	116
57	157	59	83	23.9	122
13	170	Q7 Q	104	30.4	120

- BMI 예측에 도움이 되는 변수를 선택한다
- 회귀 모델을 이용하여 BMI 를 예측해보자
- 예측한 값과 실제 BMI 값의 차이를 비교해 보자