# R 기반 의학통계 및 머신러닝

박 승



# CHAPTER 03

# 임상연구에서의 회귀분석 활용



#### ■회귀분석

- 회귀분석이란? 독립변수(설명 변수, 예측 변수)가 종속변수(반응 변수)에 미치는 영향을 분석하는 기법 특히 임상 연구에서는 변수 간의 관계를 수치화하고 인과관계를 추론하는 데 핵심적인 방법
- 변수 간의 관계 수치화 즉, 상관분석을 통해 변수간의 관계를 정립한 뒤, 논리적인 추론을 통해 두 변수 간 인과관계를 설명할 수 있음
- 독립변수의 편차가 커도 종속변수는 결국은 평균 근처로 회귀(Regression)한다는 뜻에서 '회귀분석'이라는 용어가 유래됨
- 현대 통계학에서는 수많은 독립변수들의 영향을 보정하고 변수간 관계를 규명하는데 있어서 널리 쓰임



#### ■ 선형 회귀분석

■ 단순 선형 회귀분석의 기본 모형 반응변수를 Y, 설명변수를 X라 하면 다음과 같이 정의

$$Y = \beta_o + \beta_1 X + \epsilon, \qquad \epsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

또는 X,Y에 대하여 관측된 n쌍의 데이터  $(X_i,Y_i), i=1,2,\cdots,n$ 를 사용하여 다음과 같이 표현

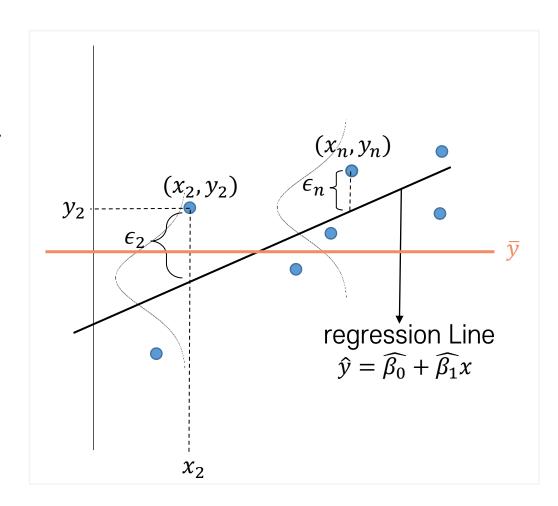
$$Y_i = \beta_o + \beta_1 X_i + \epsilon_i, \qquad \epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$



#### ■ 선형 회귀분석

- 선형 회귀분석의 기본 가정
  - (1) 선형성: X와 Y의 관계는 선형식으로 표현 가능
  - (2) 독립성: 오차  $\epsilon_i$ 는 서로 독립
  - (3) 정규성: 오차  $\epsilon_i$ 는 정규분포를 따름
  - (4) 등분산성: 오차  $\epsilon_i$ 는 동일한 분산을 가짐

$$\Rightarrow \epsilon_i \sim iid N(0, \sigma^2), \quad i = 1, 2, \dots, n$$





- 선형 회귀분석
  - 단순 선형 회귀분석의 계수 추정

회귀계수: y-절편  $\beta_0$ 와 회귀선의 기울기  $\beta_1$ 

관측된 데이터를 이용하여 회귀계수  $eta_0$ ,  $eta_1$ 의 추정과 검정

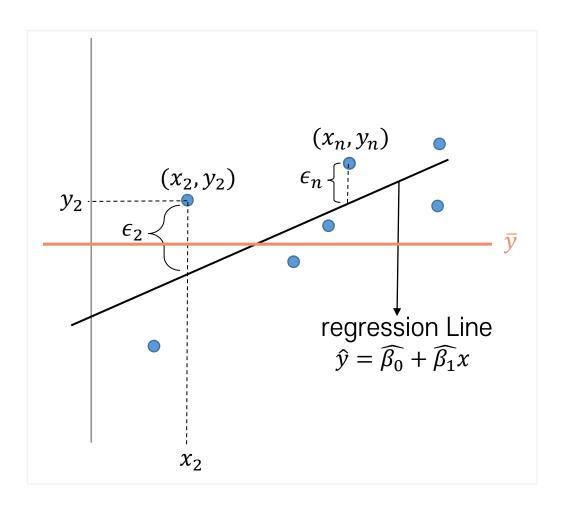
기울기  $\beta_1$ 은 X가 한 단위 증가할 때 Y가 얼마나 증가 또는 감소하는 지를 나타내므로 일반적으로  $\beta_0$ 보다  $\beta_1$ 에 관심을 더 갖게 됨



#### ■ 선형 회귀분석

- 최소제곱법 ( Method of Lease Sqaure)
  - 회귀선의 오차  $\epsilon$ 을 최소로 하는 것이 목표
  - $-\epsilon$ 는 음수 양수 모두 존재하기 때문에 제곱하여 미분한 뒤 최소가 되는  $\widehat{\beta_0}$  ,  $\widehat{\beta_1}$ 을 추정

$$Q = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i)^2$$





#### ■ 선형 회귀분석

$$Q = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i)^2$$

$$\frac{dQ}{d\beta_0} = -2 \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i) = 0, \qquad \frac{dQ}{d\beta_1} = -2 \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \beta_0 - \beta_1 X_i) X_i = 0$$

정규방정식: 위 식을 만족하는  $\beta_0, \beta_1$ 의 값을  $\widehat{\beta_0}, \widehat{\beta_1}$ 으로 대체한 뒤  $\widehat{\beta_0}, \widehat{\beta_1}$ 를 구함

$$\widehat{\beta_1} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}) Y_i}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} , \qquad \widehat{\beta_0} = \bar{Y} - \widehat{\beta_1} \bar{X}$$

\*\*다중 회귀 분석의 경우 벡터에 같은 방식을 적용



#### ■ 선형 회귀분석

#### 예제

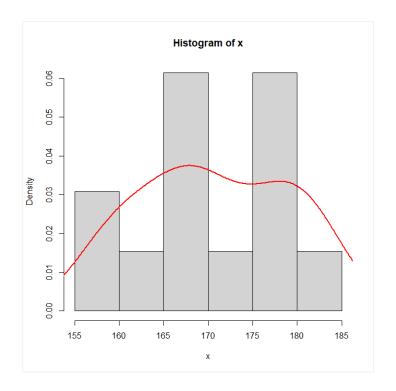
- 13명의 아버지와 이들의 아들의 키(단위:cm)를 측정한 자료가 다음과 같다. 단, 사람의 키는 정규분포를 따른다고 가정한다. 아버지의 키를 X, 아들의 키를 Y라 할 때, 단순 선형회귀모형을 구하시오.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
아버지	168	160	170	158	176	161	180	183	180	167	179	171	166
아들	179	169	180	160	178	170	183	187	179	172	181	173	165



- 선형 회귀분석
  - 데이터 탐색
  - 히스토그램(막대그래프)

```
x<-c(168,160,170,158,176,161,180,183,180,167,179,171,166)
y<-c(179,169,180,160,178,170,183,187,179,172,181,173,165)
hist(x, freq=F)
lines(density(x), col="red", lwd=2) |
```

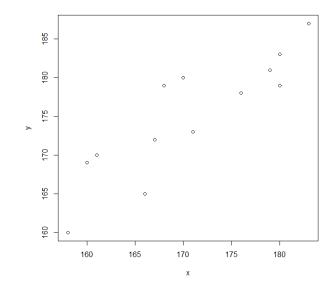




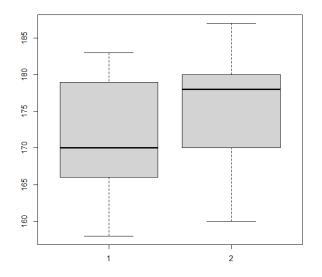
#### ■ 선형 회귀분석

#### ■ 데이터 탐색

산점도 plot(x,y)



상자그림 boxplot(x,y)





#### ■ 선형 회귀분석

```
x<-c(168,160,170,158,176,161,180,183,180,167,179,171,166) #X,Y 자료 입력
y < -c(179, 169, 180, 160, 178, 170, 183, 187, 179, 172, 181, 173, 165)
length(x)
           #X,Y 자료의 길이 비교
length(y)
lm(y\sim x) #Y를 종속변수로, X를 독립변수로 하는 선형 회귀 모형 적합
summary(lm(y~x)) #해당 모형의 내용 요약
```

회귀분석은 서로 대응되는 쌍의 자료로 이루어지므로 순서가 바뀌면 안됨



#### ■ 선형 회귀분석

다른 방법(데이터프레임 이용)

```
x<-c(168,160,170,158,176,161,180,183,180,167,179,171,166) #X,Y 자료 입력
y < -c(179, 169, 180, 160, 178, 170, 183, 187, 179, 172, 181, 173, 165)
ex1<- cbind(x,y) #X,Y 자료 합치기
str(ex1)
ex1<- data.frame(ex1) #데이터 프레임 형태로 변환, 생략한 경우 오류 발생
model1<-lm(y~x, (data=ex1)) #ex1 데이터 내부에 있는 y,x를 불러오는 경우 data= 항목이 필요
summary (model1)
```

> model1<-lm(y~x, data=ex1)</pre>

model.frame.default(formula = y ~ x, data = ex1, drop.unused.levels = TRUE)에서 다음과 같은 에러가 발생했습니다: 'data'는 행렬 또는 배열이 아닌 반드시 데이터 프레임이어야 합니다



#### ■ 선형 회귀분석

결과 해석

> model1

#### Call:

lm(formula = y ~ x, data = ex1) #  $Y = \beta_o + \beta_1 X$  모델 형태를 의미

#### Coefficients: (Intercept)

37.8090

0.8042

절편의 값 즉  $\beta_0$ 를 의미함

X의 계수 즉  $\beta_1$ 값을 의미함

아들의 키 = 37.809 + 0.804 × 아버지의 키



#### ■ 선형 회귀분석

```
> summary (model1)
Call:
lm(formula = v \sim x, data = ex1)
Residuals:
   Min 1Q Median 3Q Max #잔차의 분포 요약
-6.3034 -2.3244 -0.1076 2.5217 6.0882
                                                  #계수의 유의성 검정
Coefficients:
                                                 \beta_1의 검정의 경우, 귀무가설은 H_0: \beta_1=0
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
                                                 t value의 경우, 실제 x의 값에 따라 도출된 검정통계량
(Intercept) 37.8090 23.1870 1.631 0.131
                                                 귀무가설이 참이라는 전제하에 해당 검정통계량이 나올
                              (5.927)9.92e-05 ***
        0.8042 0.1357
Х
                                                 확률이 0.0000992
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
Residual standard error: 3.92 on 11 degrees of freedom
                                                         #분산분석표와 함께 설명
Multiple R-squared: 0.7615, Adjusted R-squared: 0.7398
F-statistic: 35.12 on 1 and 11 DF, p-value: 9.923e-05
```



#### ■ 선형 회귀분석

```
> summary(aov(model1))
          Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
          1 539.9 539.9 35.12 9.92e-05 ***
Residuals 11 169.1 15.4
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

 $\sum_{i=1}^n (\widehat{Y}_i - \overline{Y})^2$ , 회귀직선으로 설명되는 부분



#### ■ 선형 회귀분석

비고	제곱합	자유도	평균제곱합	F-값
회귀제곱합	539.86	1 1	539.86	35.12635
오차제곱합	169.06	11	<b>5</b> 15.36909	
총제곱합	708.92	12		

Residual standard error: 3.92 on 11 degrees of freedom Multiple R-squared: 30.7615 Adjusted R-squared: 0.7398 F-statistic: 35.12 on 1 and 11 DF, p-value: 9.923e-05

 $(3) extit{ #}R^2 = rac{SSReg}{SSTotal}, 총 제곱합 중 회귀제곱합의 비율$ 단순선형 회귀의 경우, 상관계수( $\rho$ )의 제곱 =  $R^2$ 

2 #Residual standard error는 평균제곱합의 제곱근

> cor(x, y)[1] 0.8726475

#F-통계량 값은 35.12635로,  $F_{1,11}$ 분포를 따름. 단순선형 회귀의 경우 t-값의 제곱이 F-값. (5.927 $^2 \approx 35.129$ )

$$\Rightarrow t_r^2 \sim \left(\frac{Z}{\sqrt{\frac{W}{r}}}\right)^2 = \frac{Z^2/1}{W/r} \sim F_{1,r}$$

다시 말해,  $\beta_1$ 의 유의성 검정(회귀계수에 대한 검정)이 모형의 적합성 검정과 같은 의미



#### ■ 선형 회귀분석

총 제곱합 = 잔차 제곱합 + 회귀 제곱합

$$\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \widehat{Y}_i + \widehat{Y}_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \widehat{Y}_i)^2 + \sum_{i=1}^{n} (\widehat{Y}_i - \bar{Y})^2 + 2\sum_{i=1}^{n} (Y_i - \widehat{Y}_i)(\widehat{Y}_i - \bar{Y})$$

$$\therefore \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{Y}_i)^2 + \sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$$

SST (총제곱합) = SSE (잔차제곱합) + SSReg (회귀제곱합)

\*\* 데이터의 총 변동량 즉, 총 제곱합은 회귀제곱합과 잔차제곱합의 두 부분으로 나눌 수 있음 회귀선으로 설명되는 변동량 = 회귀제곱합, 오차로 설명되는 변동량 = 잔차제곱합

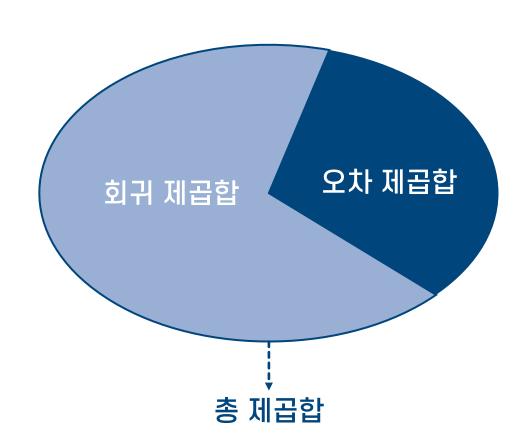


- 선형 회귀분석
  - 총 제곱합 = 잔차 제곱합 + 회귀 제곱합 ■ *R*<sup>2</sup>와 제곱합 간의 관계
  - $R^2$  값은 총 변동량 중 회귀제곱합의 비율

$$R^2 = \frac{$$
회귀 제곱합  $}{$$ 총 제곱합  $} = \frac{SSReg}{SSTotal}$ 

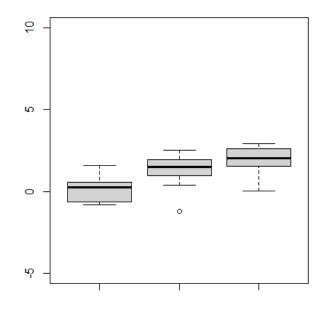
즉,  $R^2$ 값은 회귀선으로 표현 가능한 데이터의 비율

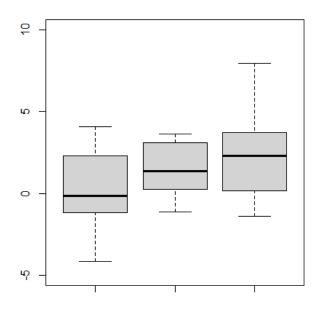
- 데이터가 회귀선으로 설명되는 비중이 클 수록  $R^2$  값이 높아짐
- 반대로, 데이터가 회귀선으로 잘 설명되지 않을 경우 즉, 오차 제곱합이 클 수록  $R^2$ 값은 낮아짐





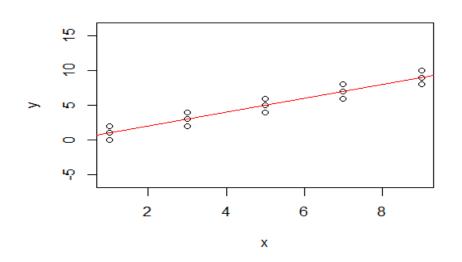
- 선형 회귀분석
  - 총 제곱합 = 잔차 제곱합 + 회귀 제곱합
  - example)
    - 아래와 같은 상자 그림을 살펴 보자. 각각 모집단의 평균은 각각 0, 1, 2으로 동일하며, 분산만 다르다. 세 집단의 평균이 같지 않다는 귀무가설을 설정했을 때, 이를 기각할 확률은 어느 쪽이 높을까?

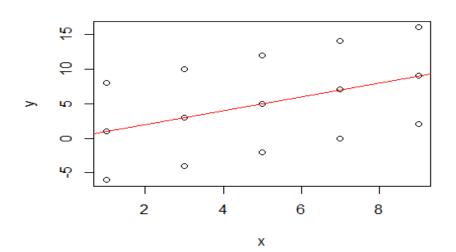






- 선형 회귀분석 총 제곱합 = 잔차 제곱합 + 회귀 제곱합
  - example)
    - 오른쪽의 두 산점도+회귀직선 그림을 비교해보자
    - 두 그룹의 회귀직선은 동일하다
    - 두 그룹의 절편도 동일하다
    - 이때 회귀 직선의 계수 즉 , $eta_1$ 가 0이다(= 회귀 직선이 유의 하지 않다) 라는 귀무가설을 설정했을 때, 귀무가설을 기각 할 가능성이 높은 것은 위와 아래 중 어느쪽일까?





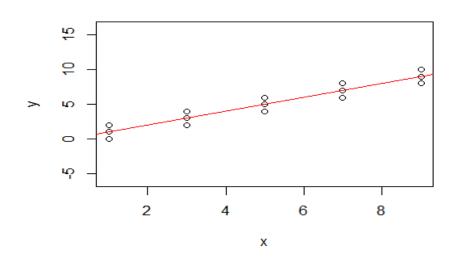


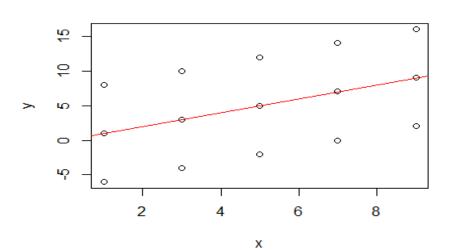
#### ■ 선형 회귀분석

#### 총 제곱합 = 잔차 제곱합 + 회귀 제곱합

#### ■ 실습)

```
library(dplyr)
par(mfrow=c(2,1))
x < -c(1,1,1,3,3,3,5,5,5,7,7,7,9,9,9)
y < -c(0,1,2,2,3,4,4,5,6,6,7,8,8,9,10)
plot(x,y, ylim=c(-6,16))
abline (lm(y\sim x), col="red")
lm(y~x) %>% summary
lm(y\sim x) %>% aov %>% summary
u < -c(1,1,1,3,3,3,5,5,5,7,7,7,9,9,9)
v < -c(-6, 1, 8, -4, 3, 10, -2, 5, 12, 0, 7, 14, 2, 9, 16)
plot(u,v,ylim=c(-6,16))
abline(lm(v~u), col="red")
lm(v~u) %>% summary
lm(v\sim u) %>% aov %>% summary
```







- 선형 회귀분석
  - 총 제곱한 = 잔차 제곱한 + 회귀 제곱한
  - 실습)
    - 왼쪽 그룹의  $R^2$ 값은 0.917, 오른쪽 그룹의  $R^2$ 값은 0.135로 나타남
    - 두 그룹은 동일한 회귀직선을 가지고 있음에도 불구하고, 오차항의 크기 차이 때문에 다른 결과가 나타남

```
Coefficients:
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -9.17e-16 4.60e-01
                                             0.0
               1.00e+00 8.01e-02 12.5 1.3e-08 ***
Signif. codes: 0 \***' 0.001 \**' 0.01 \*' 0.05 \'.' 0.1 \' 1
Residual standard error: 0.877 on 13 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.923, Adjusted R-squared: 0.917
F-statistic: 156 on 1 and 13 DF, p-value: 1.29e-08
                  Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
                                                   156 1.3e-08 ***
Residuals
```

```
Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.83e-15 3.22e+00
                                     0.00 1.000
             1.00e+00 5.60e-01 1.78 0.098.
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
Residual standard error: 6.14 on 13 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.197, Adjusted R-squared: 0.135 F-statistic: 3.18 on 1 and 13 DF, p-value: 0.0977
               Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
                                        3.18 0.098 .
Residuals
```



#### ■ 선형 회귀분석

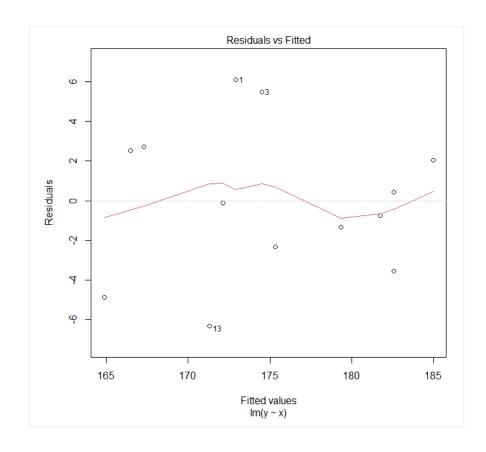
- 잔차분석 plot(model1)
- residuals vs. fitted values

잔차와 적합값의 비교

잔차의 독립성 및 추세를 확인 가능

잔차가 특정한 패턴을 보이는 경우 독립성 위배

- 시계열 분석 등의 다른 분석 방법 도입 필요





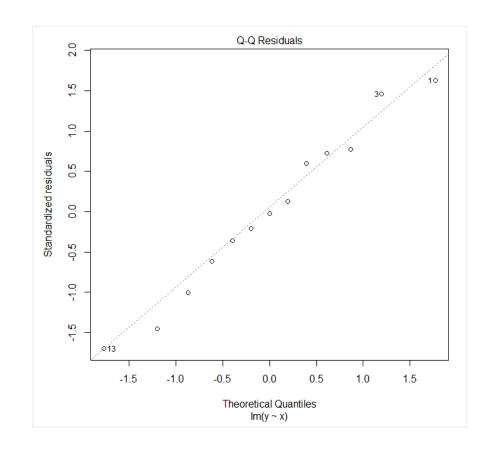
- 선형 회귀분석
  - 잔차분석 plot(model1)
  - Q-Q plot

잔차의 정규성 검정

shapiro.test(model1\$residuals)

대각선에서 멀리 위치하는 경우 잔차의 정규성 가정이 위배될 수 있음

- 변수 변환등의 방법을 통해 정규성 확보 필요





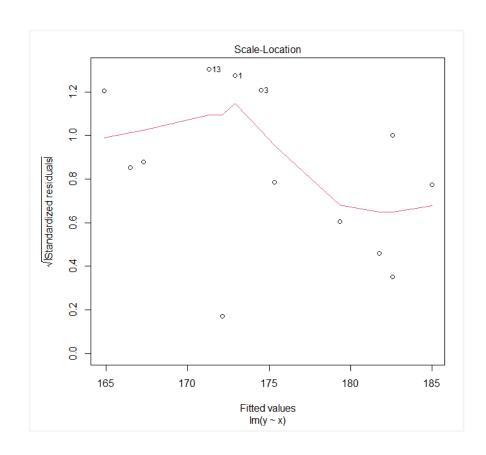
- 선형 회귀분석
  - 잔차분석 plot(model1)
  - scale-Location

잔차의 등분산성 검정

적합값(예측값)에 따른 잔차의 변화를 보여줌

붉은 선이 추세를 띠거나 요동치면 등분산성 위배

- 변수 변환등의 방법을 통해 등분산성 확보 필요



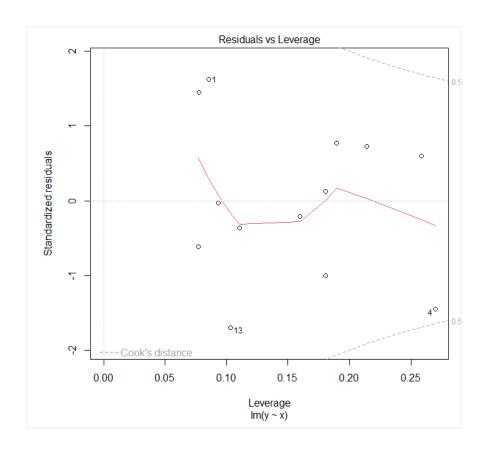


- 선형 회귀분석
  - 잔차분석 plot(model1)
  - Residuals vs. Leverage

이상치 또는 극단값 확인

Cook's Distance 라인 밖에 위치하면 극단값으로 간주

- 해당 샘플 확인 후 제거 또는 보정 필요

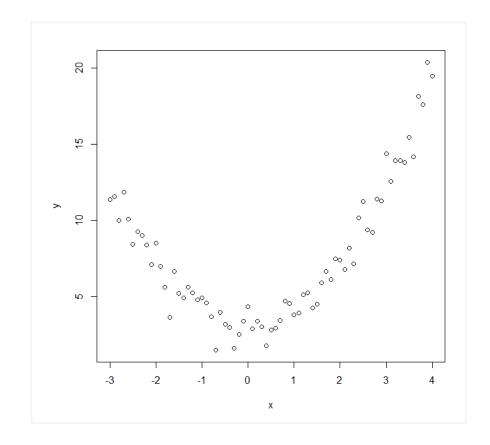




#### ■ 선형 회귀분석

- 변수변환
- 다음과 같은 자료를 고려하는 경우

```
set.seed(1) #시드 고정
x<- seq(-3,4, by=0.1) #공차 0.1인 수열 생성
y < -3+x^2+rnorm(length(x),0,1)
         #정규분포 랜덤 샘플 생성
plot(x, y)
```

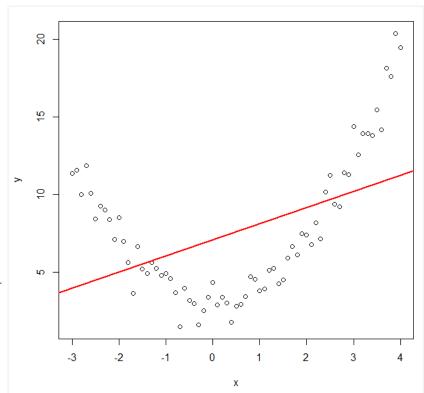




#### ■ 선형 회귀분석

- 변수변환
- 제곱형태의 자료

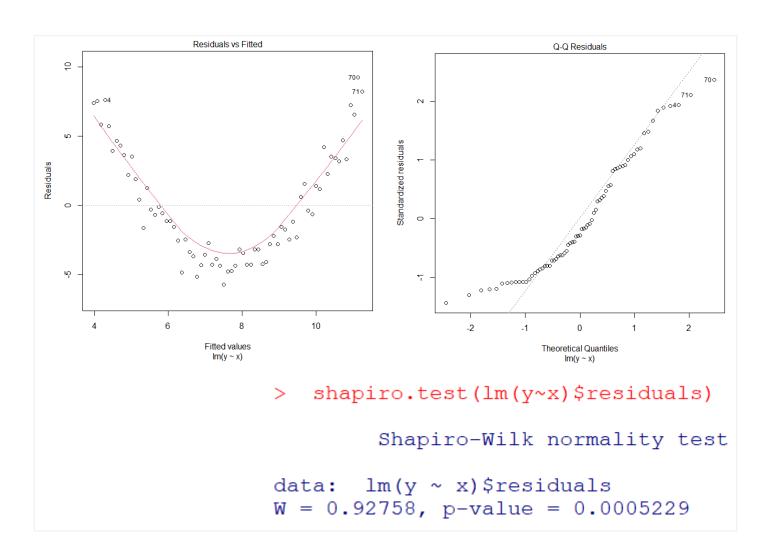
```
Residuals:
          10 Median 30
  Min
                           Max
                                  #잔차의 차이가 큼
-5.724 -3.290 -1.133 3.359 9.238
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
            7.0915
                       0.4901 14.471 < 2e-16 ***
(Intercept)
             1.0394
                       0.2323 4.474 2.95e-05 ***
X
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 4.012 on 69 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.2249, Adjusted R-squared: 0.2136
F-statistic: 20.02 on 1 and 69 DF, p-value: 2.946e-05
                                  #R^2값이 0.22로 저조
```





- 선형 회귀분석
  - 변수변환
  - 제곱형태의 자료 잔차분석

잔차분석 결과 잔차의 추세가 확인되며 정규성도 위배됨





#### ■ 선형 회귀분석

- 변수변환
- 제곱형태의 모형 수립

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i^2 + \epsilon_i$$

```
summary (lm(y\sim I(x^2)))
```

```
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 3.03485 0.15721 19.30 <2e-16 ***
I(x^2) 1.02839 0.02547 40.38 <2e-16 ***
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
Residual standard error: 0.9181 on 69 degrees of freedom
```

Multiple R-squared: 0.9594, Adjusted R-squared: 0.9588

F-statistic: 1631 on 1 and 69 DF, p-value: < 2.2e-16

Max

10 Median 30

-2.33160 -0.46119 -0.08998 0.59800 2.11124

y~x^2로 타이핑할 경우, ^2를 상호작용으로 인식하기때문에 I(x^2)로 표시해주어야 함

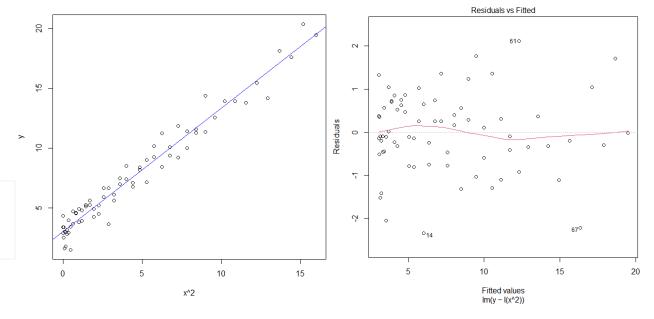
Residuals:

Min



- 선형 회귀분석
  - 변수변환
  - 제곱형태의 모형 수립

```
plot(x^2, y)
abline (lm(y\sim I(x^2)))
shapiro.test(lm(y\sim I(x^2))$residuals)
```



- X<sup>2</sup>& Y의 선형관계 유지
- 잔차의 추세 사라짐
- 잔차의 독립성 만족

shapiro.test( $lm(y\sim I(x^2))$ )\$residuals)

Shapiro-Wilk normality test

```
lm(y \sim I(x^2))$residuals
W = 0.9891, p-value = 0.8003
```



#### ■ 선형 회귀분석\_회귀분석에서의 선형성





**ex)** 
$$y = \beta_1 \exp(x)$$
  $\exp(x) = t \Rightarrow y = \beta_1 t$ 

$$y = 1 - \exp\left(-\left(\frac{x}{\eta}\right)^{\beta}\right) \quad \ln x = t \quad \Rightarrow \quad \ln\{-\ln(1-y)\} = -\beta \ln \eta + \beta t$$

2. 변수변환을 해도 선형이 되지 않는 경우는 비선형

ex) 
$$y = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 x}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 x}}$$
 (로지스틱 모형)



- 다중 회귀분석
  - 데이터 로드
  - 내장데이터 이용(mtcars)
  - ?mtcars 를 통해 데이터에 관한 변수 설명 등의 도움말을 얻을 수 있음 (해당 도움말이 작동하지 않는 경우 R을 관리자 권한으로 실행 시도)

#### Format

A data frame with 32 observations on 11 (numeric) variables.

- [, 1] mpg Miles/(US) gallon
- [, 2] cyl Number of cylinders
- [, 3] disp Displacement (cu.in.)
- [, 4] hp Gross horsepower
- [, 5] drat Rear axle ratio
- [, 6] wt Weight (1000 lbs)
- [, 7] qsec 1/4 mile time
- [, 8] vs Engine (0 = V-shaped, 1 = straight)
- [, 9] am Transmission (0 = automatic, 1 = manual)
- [,10] gear Number of forward gears
- [,11] carb Number of carburetors



- 다중 회귀분석
  - 데이터 탐색
  - str(mtcars)를 통해 데이터의 형태를 파악 가능
    - 맞춤 EDA 전략 수립

```
> str(mtcars)
'data.frame': 32 obs. of 11 variables:
 $ mpg : num 21 21 22.8 21.4 18.7 18.1 14.3 24.4 22.8 19.2 ...
 $ cyl : num 6 6 4 6 8 6 8 4 4 6 ...
 $ disp: num 160 160 108 258 360 ...
 $ hp : num 110 110 93 110 175 105 245 62 95 123 ...
             3.9 3.9 3.85 3.08 3.15 2.76 3.21 3.69 3.92 3.92 ...
 $ drat: num
 $ wt : num 2.62 2.88 2.32 3.21 3.44 ...
 $ qsec: num 16.5 17 18.6 19.4 17 ...
 $ vs : num
             0 0 1 1 0 1 0 1
 $ am : num 1 1 1 0 0 0 0 0 0 ...
 $ gear: num 4 4 4 3 3 3 3 4 4 4 ...
 $ carb: num 4 4 1 1 2 1 4 2 2 4 ...
```



#### ■ 다중 회귀분석

- 데이터 탐색
  - 독립변수간 상관계수가 대체로 높게 나타남
  - 절대값 0.5~0.7의 상관계수가 많음

library(writexl) write\_xlsx(data.frame(cor(mtcars)), "0228.xlsx")

	mpg	cyl	disp	hp	drat	wt	qsec	vs	am	gear	carb
mpg	1	-0.85	-0.85	-0.78	0.68	-0.87	0.42	0.66	0.60	0.48	-0.55
cyl	-0.85	1	0.90	0.83	-0.70	0.78	-0.59	-0.81	-0.52	-0.49	0.53
disp	-0.85	0.90	1	0.79	-0.71	0.89	-0.43	-0.71	-0.59	-0.56	0.39
hp	-0.78	0.83	0.79	1	-0.45	0.66	-0.71	-0.72	-0.24	-0.13	0.75
drat	0.68	-0.70	-0.71	-0.45	1	-0.71	0.09	0.44	0.71	0.70	-0.09
wt	-0.87	0.78	0.89	0.66	-0.71	1	-0.17	-0.55	-0.69	-0.58	0.43
qsec	0.42	-0.59	-0.43	-0.71	0.09	-0.17	1	0.74	-0.23	-0.21	-0.66
VS	0.66	-0.81	-0.71	-0.72	0.44	-0.55	0.74	1	0.17	0.21	-0.57
am	0.60	-0.52	-0.59	-0.24	0.71	-0.69	-0.23	0.17	1	0.79	0.06
gear	0.48	-0.49	-0.56	-0.13	0.70	-0.58	-0.21	0.21	0.79	1	0.27
carb	-0.55	0.53	0.39	0.75	-0.09	0.43	-0.66	-0.57	0.06	0.27	1

⇒ 다중공선성(multicollinearity): 독립변수들 간 강한 상관관계가 있는 경우 발생하는 문제



#### ■ 다중 회귀분석

■ 모형 적합

model2<-lm(mpg ~. ,data=mtcars)</pre> summary (model2)

- R<sup>2</sup>값은 0.869  $R_{adi}^{2}$ 값은 0.807로 높지만 모든 변수가 유의하지 않게 나타남
- 수정 결정계수:  $R_{adj}^2 = 1 \frac{n-1}{n-n-1} (1 R^2)$

```
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 12.30337
                    18.71788
                               0.657
                                       0.5181
                   1.04502 -0.107
           -0.11144
                                       0.9161
cyl
disp
           0.01334 0.01786
                              0.747
                                       0.4635
                      0.02177 - 0.987
hp
           -0.02148
                                       0.3350
           0.78711
                      1.63537
                              0.481
                                       0.6353
drat
          -3.71530
                     1.89441 -1.961
                                       0.0633 .
wt
                      0.73084 1.123
           0.82104
                                       0.2739
qsec
                      2.10451 0.151
           0.31776
                                       0.8814
VS
           2.52023
                      2.05665 1.225
                                       0.2340
am
                      1.49326 0.439
      0.65541
                                       0.6652
gear
           -0.19942
                      0.82875 - 0.241
                                       0.8122
carb
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
Residual standard error: 2.65 on 21 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.869, Adjusted R-squared: 0.8066
F-statistic: 13.93 on 10 and 21 DF, p-value: 3.793e-07
```

■ 결정계수 R<sup>2</sup>은 변수 개수가 늘어나면 항상 증가하는 단점이 있음 수정결정계수  $R_{adi}^2$ 는 독립변수 개수를 고려하여 패널티로 보정한 값



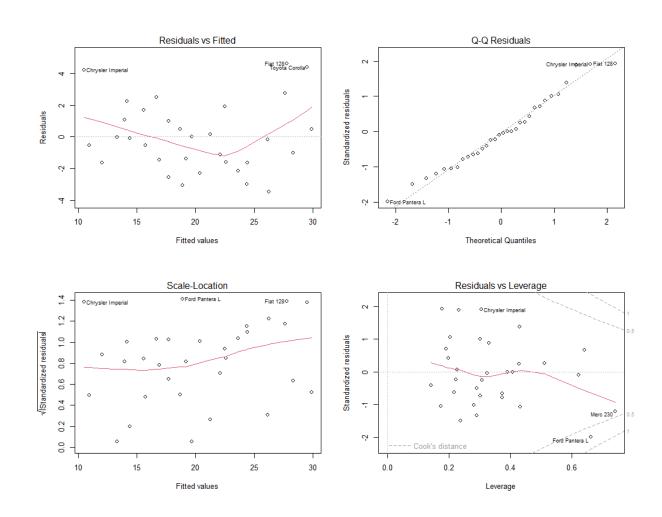
- 다중 회귀분석
  - 모형 진단(잔차분석)

```
par(mfrow=c(2,2)) #plot을 2by2로 출력
plot (model2)
```

shapiro.test(model2\$residuals)

Shapiro-Wilk normality test

data: model2\$residuals W = 0.95694, p-value = 0.2261





#### ■ 다중 회귀분석

■ 모형 진단(다중공선성)

> vif(model2)

■ cyl 변수 약 15, disp 변수 약 21, wt 변수 약 15로 높게 나타남

\*\* 
$$VIF_j = \frac{1}{1-R_j^2}$$
,  $R_j^2 :$  특정 독립변수  $X_j$ 를 나머지 독립변수들로 회귀분석 했을 때의 결정 계수

- 다중 공선성이 있는 것으로 보임 ( 대략 15~20정도면 다중공선성이 있는 것으로 간주함)
- 다중공선성은 독립변수들끼리 강한 상관관계를 가지는 것으로, 회귀계수의 신뢰성이 낮아지고 모형의 해석이 어려워지는 문제가 있음(변수의 제거 등 차원 축소가 필요)



#### ■ 다중 회귀분석

- 변수선택법 (전진선택, 후진제거, 단계선택)
- 1. 전진선택법 (Forward Selection)
  - 상수항만 있는 모형에서 변수를 하나씩 추가하는 방식
- 2. 후진제거법 (Backward Elimination)
  - 전체 모형에서 변수를 하나씩 제거해나가는 방식
- 3. 단계선택법 (Stepwise Selection)
  - 매 시도마다 전진선택법과 후진제거법을 둘 다 고려하는 방식

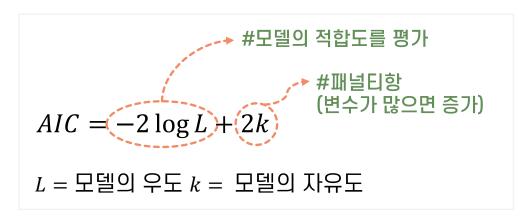


#### ■ 다중 회귀분석

■ 변수선택법 (전진선택, 후진제거, 단계선택)

\*\* AIC (Akaike Information Criterion)

- R에서는 변수선택의 기준으로 AIC를 사용
- AIC는 절대적인 기준이 있는 것은 아님 상관계수처럼 다른 모델과의 상대적 비교에 사용되며, 작을 수록 좋음
- 모델이 데이터를 잘 설명하면 logL 부분이 커져서 AIC가 작아짐
- 변수가 많아질 수록 패널티(2k)가 증가하여 불필요한 변수 추가를 억제함





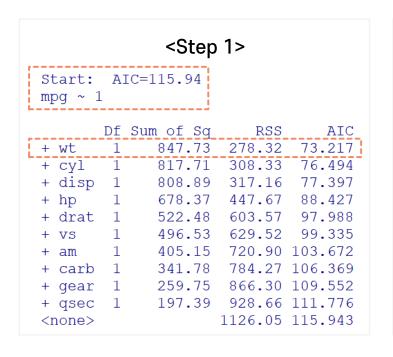
- 다중 회귀분석
  - 변수선택법 (전진선택, 후진제거, 단계선택)
  - 1. 전진선택법 (Forward Selection)

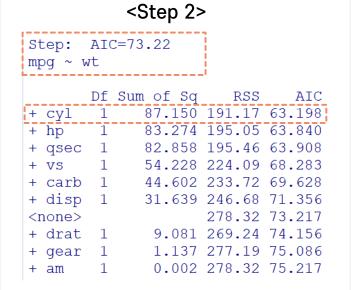
```
null<-lm(mpg ~1 ,data=mtcars) #상수항만 있는 모델
full<-lm(mpg ~ .,data=mtcars) #model2와 동일 #모든 변수가 있는 모델
summary(step(null, 1. 상수항만 있는 모델에서 출발해서
       direction="forward", 2. 전진선택법으로 변수를 추가해가며
        scope=list(lower=null, upper=full)) 3. 상수항만 있는 모델부터 모든 변수가 있는 모델까지 고려
```



#### ■ 다중 회귀분석

■ 1. 전진선택법 (Forward Selection)





#### <Step 3> Step: AIC=63.2 mpg ~ wt + cyl Df Sum of Sq RSS + hp 14.5514 176.62 62.665 + carb 1 <none> 191.17 63.198 10.5674 180.60 63.378 + qsec 1 + gear 1 3.0281 188.14 64.687 + disp 1 2.6796 188.49 64.746 + VS 0.7059 190.47 65.080 + am 0.1249 191.05 65.177 + drat 1 0.0010 191.17 65.198



#### ■ 다중 회귀분석

- 1. 전진선택법 (Forward Selection)
- 최종 모형 wt, cyl, hp 3개의 변수가 선택됨
- $R^2 = 0.8431, R_{adi}^2 = 0.8263$  $R^2$  값은 감소했지만  $R^2_{adi}$ 값은 증가

```
Call:
lm(formula = mpg ~ wt + cyl + hp, data = mtcars)
Residuals:
   Min
            10 Median
                                  Max
-3.9290 -1.5598 -0.5311 1.1850 5.8986
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 38.75179
                     1.78686 21.687 < 2e-16 ***
           -3.16697 0.74058 -4.276 0.000199 ***
        -0.94162
                     0.55092 -1.709 0.098480 .
cyl
hp
           -0.01804
                     0.01188 -1.519 0.140015
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' 1
Residual standard error: 2.512 on 28 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8431, Adjusted R-squared: 0.8263
F-statistic: 50.17 on 3 and 28 DF, p-value: 2.184e-11
```



- 다중 회귀분석
  - 2. 후진제거법 (Backward Elimination)최종 모형

```
summary(step(full,
        direction = "backward")
```

```
<Step 1>
Start: AIC=70.9
mpg ~ cyl + disp + hp + drat + wt + qsec + vs + am + gear + carb
Df Sum of Sq RSS AIC
- cyl 1 0.0799 147.57 68.915
     1 0.1601 147.66 68.932
- carb 1 0.4067 147.90 68.986
- gear 1 1.3531 148.85 69.190
- drat 1 1.6270 149.12 69.249
- disp 1
         3.9167 151.41 69.736
     1 6.8399 154.33 70.348
- hp
- qsec 1 8.8641 156.36 70.765
                 147.49 70.898
<none>
- am 1 10.5467 158.04 71.108
     1 27.0144 174.51 74.280
- wt
```

```
<Step 2>
Step: AIC=68.92
mpg ~ disp + hp + drat + wt + qsec + vs + am + gear + carb
      Df Sum of Sq RSS AIC
- vs 1 0.2685 147.84 66.973
- carb 1 0.5201 148.09 67.028
- gear 1 1.8211 149.40 67.308
- drat 1 1.9826 149.56 67.342
- disp 1 3.9009 151.47 67.750
- hp 1
           7.3632 154.94 68.473
                  147.57 68.915
<none>
- gsec 1 10.0933 157.67 69.032
     1 11.8359 159.41 69.384
- am
- wt
          27.0280 174.60 72.297
```



#### ■ 다중 회귀분석

- 2. 후진제거법 (Backward Elimination)최종 모형
- wt, qsec, am 3개의 변수가 선택됨

$$R^2 = 0.8497$$
,  $R_{adi}^2 = 0.8336$ 

#### 후진제거법 역시

 $R^2$  값은 감소했지만  $R^2_{adi}$ 값은 증가

```
Call:
lm(formula = mpg ~ wt + qsec + am, data = mtcars)
Residuals:
   Min
           10 Median
                          30
                                 Max
-3.4811 -1.5555 -0.7257 1.4110 4.6610
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 9.6178 6.9596 1.382 0.177915
           -3.9165 0.7112 -5.507 6.95e-06 ***
wt
    1.2259 0.2887 4.247 0.000216 ***
gsec
           2.9358 1.4109 2.081 0.046716 *
am
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
Residual standard error: 2.459 on 28 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8497, Adjusted R-squared: 0.8336
F-statistic: 52.75 on 3 and 28 DF, p-value: 1.21e-11
```



#### ■ 다중 회귀분석

■ 3. 단계선택법 (Stepwise Selection)

```
summary(step(full,
        direction="both")
```

```
<Step 1>
Start: AIC=70.9
mpg ~ cyl + disp + hp + drat + wt + qsec + vs + am + gear + carb
Df Sum of Sq RSS AIC
- cyl 1 0.0799 147.57 68.915
    1 0.1601 147.66 68.932
           0.4067 147.90 68.986
- carb 1
- gear 1
           1.3531 148.85 69.190
- drat 1
           1.6270 149.12 69.249
- disp 1
           3.9167 151.41 69.736
- hp
      1 6.8399 154.33 70.348
- qsec 1 8.8641 156.36 70.765
                   147.49 70.898
<none>
      1 10.5467 158.04 71.108
- am
           27.0144 174.51 74.280
- wt
```

```
<Step 2>
Step: AIC=68.92
mpg ~ disp + hp + drat + wt + qsec + vs + am + gear + carb
     Df Sum of Sq RSS AIC
1 0.2685 147.84 66.973
- carb 1 0.5201 148.09 67.028
           1.8211 149.40 67.308
- gear 1
- drat 1
         1.9826 149.56 67.342
- disp 1 3.9009 151.47 67.750
- hp 1 7.3632 154.94 68.473
                   147.57 68.915
<none>
- qsec 1 10.0933 157.67 69.032
      1 11.8359 159.41 69.384
- am
+ cyl
      1 0.0799 147.49 70.898
           27.0280 174.60 72.297
```



#### ■ 다중 회귀분석

- 3. 단계선택법 (Stepwise Selection)
- 최종 모형

wt, qsec, am 3개의 변수가 선택됨

$$R^2 = 0.8497, R_{adj}^2 = 0.8336$$

세 방법 중 단계선택법을 가장 흔히 사용

 $\Rightarrow R^2$ 의 손실은 줄이고 3개의 변수만을 사용하는 간단하고 효율적인 모형으로 적합

```
Call:
lm(formula = mpg ~ wt + qsec + am, data = mtcars)
Residuals:
   Min
            10 Median
                                  Max
-3.4811 -1.5555 -0.7257 1.4110 4.6610
Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 9.6178
                       6.9596
                              1.382 0.177915
            -3.9165 0.7112 -5.507 6.95e-06 ***
            1.2259 0.2887 4.247 0.000216 ***
gsec
             2.9358 1.4109 2.081 0.046716 *
am
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1
Residual standard error: 2.459 on 28 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8497, Adjusted R-squared: 0.8336
F-statistic: 52.75 on 3 and 28 DF, p-value: 1.21e-11
```

# 감사합니다

