

제16장 단순회귀분석



회귀분석(regression analysis)

- 회귀분석: 변수와 변수 사이의 관계를 알아보기 위한 통계적 분석방법, 독립변수의 값에 의하여 종속변수의 값을 예측하위 위함
 - 독립변수(independent variable): 종속변수에 영향을 미치는 변수
 - 종속변수(dependent variable): 분석의 대상이 되는 변수
- 회귀분석의 분류
 - 단순회귀분석(simple regression analysis): 하나의 종속변수와 하나의 독립변수의 관계를 분석
 - 다중회귀분석(multiple regression analysis): 하나의 종속변수와 둘 이상의 독립변수간의 관계를 분석
 - 단순회귀분석이 간단하고 결과의 해석도 명확하지만 종속변수를 하나의 독립변수로 설명하기 어려운 경우가 많다.



두 변수간의 관계

○ 두 변수간의 관계

- 함수적 관계(functional relation): X값을 알면 Y값을 정확히 알 수 있는 관계
- 통계적 관계(statistical relation): X값에 대한 Y의 값이 유일하게 결정되지 않는 관계
- 산포도(scatter diagram): X와 Y의 통계적 관계를 그림으로 나타낸 것



단순선형회귀모형

- 선형모형(linear model): 두 변수간의 관계가 비례적인 선형관계일 때
- 비선형모형(nonlinear model): 두 변수간의 관계가 비선형관계로 나타날 때
- 비선형의 경우도 변수를 적절히 조작하여 선형으로 바꿀 수 있기 때문에 선형회귀모형이 중요한 의미를 가짐
- 산포도의 작성
 - 두 변수간의 관계가 선형인지 비선형인지 알아보기 위해 산포도를 그려본다.

선형회귀모형(1)

- X와 Y가 1차식으로 나타날 때 선형회귀모형이 되고 다음과 같은 전제가 필요
 - 독립변수 X의 각 값에 대한 Y의 확률분포가 존재한다.
 - Y의 확률분포의 평균은 X값의 변함에 따라 일정한 추세를 따라 움직인다.

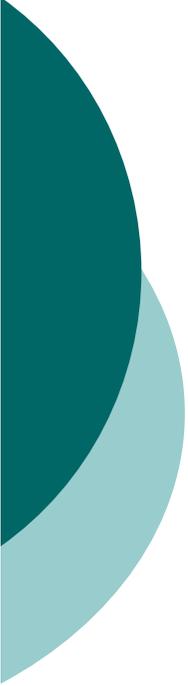
$$Y_i = \underbrace{\beta_0 + \beta_1 X_i}_{\text{회귀식}} + \underbrace{\varepsilon_i}_{\text{오차}}$$

회귀모형에서 ε_i 에 대한 기본가정

1. ε_i 는 정규분포의 형태를 이룬다.
2. ε_i 의 기대치는 0이다. 즉, $E(\varepsilon_i) = 0$. 이 가정은 실제 관찰값이 회귀선상에 있는 점을 중심으로 분포되어 있다는 뜻이다.
3. ε_i 의 분산은 모든 X값에서 동일하다.

$$\sigma^2(\varepsilon_i) = \sigma^2$$

4. ε_i 들은 서로 독립적이다.



선형회귀모형(2)

○ 단순회귀모형

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

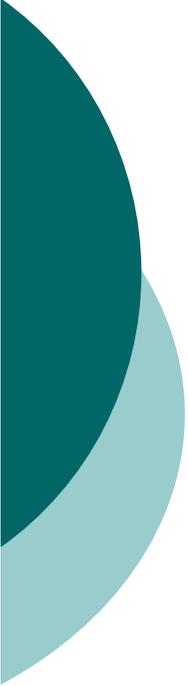
단, Y_i : i 번째 종속변수의 값

X_i : i 번째 독립변수의 값

β_0 : 선형회귀식의 절편

β_1 : 선형회귀식의 기울기

ε_i : 오차항으로 ε_i 는 독립적이며 $N(0, \sigma^2)$ 의 분포를 이룬다.



Y의 확률분포

- 오차항 ε_i 가 확률변수이므로 Y_i 도 확률변수가 된다. 또한 $E(\varepsilon_i)=0$ 이므로 Y_i 의 기대치는 다음과 같다.

$$E(Y_i) = E(\beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i) = \beta_0 + \beta_1 X_i$$

위 식을 모든 X 와 Y 에 대하여 나타내면

$$E(Y) = \beta_0 + \beta_1 X_i$$

이것이 바로 회귀함수(*regression function*)가 된다.

Y_i 의 확률분포

1. Y_i 는 정규분포를 이룬다.
2. $E(Y_i) = \beta_0 + \beta_1 X_i$
3. $\sigma^2(Y_i) = \sigma^2$



선형회귀함수의 추정

- 선형회귀함수의 모수 β_0 과 β_1 은 표본으로 점추정한다.(구간추정은 다음장에서)
- 최소자승법(least square method)
 - 잔차의 제곱의 합을 최소화하는 회귀식

$E(Y) = \beta_0 + \beta_1 X$ 일 때 β_0 과 β_1 에 대한 점추정량은 b_0 와 b_1 으로 나타내고 추정회귀식은 $\hat{Y} = b_0 + b_1 X$ 과 같다.

여기서 \hat{Y} 은 $E(Y)$ 에 대한 추정량이므로 X_i 값에 대한 Y_i 의 추정치는

$$\hat{Y}_i = b_0 + b_1 X_i$$

이때 관찰값 Y_i 와 예측치 \hat{Y}_i 가 일치하지 않는 것이 보통이고, 이 차이를 잔차(residual)라고 하고 e_i 로 표시한다.

$$e_i = Y_i - \hat{Y}_i$$

추정회귀식의 산출

- 잔차제곱의 합을 Q 로 놓으면

$$Q = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n [Y_i - (b_0 + b_1 X_i)]^2$$

Q 를 최소로 하는 b_0 와 b_1 의 값을 구하기 위하여 Q 를 b_0 와 b_1 에 대하여 편미분하면

$$\sum Y_i = n b_0 + b_1 \sum X_i$$

$$\sum X_i Y_i = b_0 \sum X_i + b_1 \sum X_i^2$$

위식을 정규방정식(*normal equation*)이라고 하며

이 방정식을 풀면 모집단회귀계수 β_0 과 β_1 의 추정량 b_0 와 b_1 을 구할 수 있다.

- 회귀계수의 추정

- 모집단회귀계수 β_0 과 β_1 에 대한 최소자승추정량은 다음과 같다.

$$b_1 = \frac{n \sum X_i Y_i - \sum X_i \sum Y_i}{n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2} = \frac{\sum (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sum (X_i - \bar{X})^2} = \frac{S_{XY}}{S_X^2}$$

$$b_0 = \frac{1}{n} (\sum Y_i - b_1 \sum X_i) = \frac{\sum Y_i}{n} - \frac{b_1 \sum X_i}{n} = \bar{Y} - b_1 \bar{X}$$

잔차

- 오차(error term): ε_i 는 관찰값 Y_i 와 모집단회귀식과의 편차
- 잔차(residual): e_i 는 관찰값 Y_i 와 추정회귀식과의 편차

$$e_i = Y_i - \hat{Y}_i$$

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i$$

$$Y_i = b_0 + b_1 X_i + e_i$$

$$\text{즉, } \varepsilon_i = Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_i)$$

$$e_i = Y_i - (b_0 + b_1 X_i)$$

- ε_i 는 실제 알 수 없기 때문에 e_i 에 의해 추정
- e_i 는 통계적 추정에 있어 무작위변동의 크기를 측정, 회귀모형이 기본가정을 만족하는지를 평가(다음 장)
- 최소자승법의 속성상 잔차의 합은 항상 0이 된다.

$$\begin{aligned} \sum e_i &= \sum (Y_i - \hat{Y}_i) = \sum (Y_i - b_0 - b_1 X_i) = \sum Y_i - nb_0 - b_1 \sum X_i \\ &= \sum Y_i - n(\bar{Y} - b_1 \bar{X}) - b_1 \sum X_i = \sum Y_i - \sum Y_i + b_1 \sum X_i - b_1 \sum X_i = 0 \end{aligned}$$



단순선형회귀모형의 분산분석(1)

- 분산분석(analysis of variance)
 - 회귀모형의 설명력과 유용성을 분석하는 효과적인 방법을 보통 ANOVA라 부른다.
- 제곱의 합의 계산
 - SSTO (total sum of squares)
 - 독립변수 X 를 이용하지 않고 종속변수 Y 를 예측하는데 있어서 불확실성은 관찰값 Y 의 변이성에 기인하며 다음의 편차에 의하여 측정한다.

$$Y_i - \bar{Y}$$

만약 모든 관찰값 Y_i 가 동일하다면, 모든 편차에 대하여 $Y_i - \bar{Y} = 0$ 즉, Y 의 변이성이 클수록 $Y_i - \bar{Y}$ 는 커지게 되며 X 를 이용하지 않고 Y 를 예측하는데 불확실성이 커진다.

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



단순선형회귀모형의 분산분석(2)

- 제공의 합의 계산

- SSE (error sum of squares)

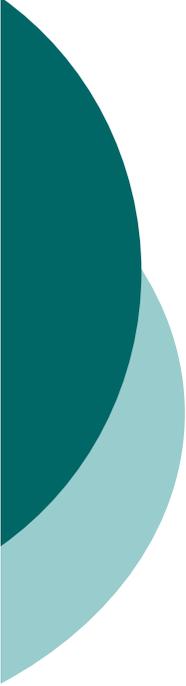
- 종속변수 Y 를 예측하는데 독립변수 X 의 정보를 이용하게 되면, 예측의 불확실성은 추정회귀식 주위에 흩어진 Y_i 의 변이성에 해당되며 다음의 편차로 측정

$$Y_i - \hat{Y}_i$$

만약 모든 관찰값이 회귀선상에 위치하면 $Y_i - \hat{Y}_i = 0$

즉, $Y_i - \hat{Y}_i$ 의 값이 커질수록 X 를 이용한 Y 의 예측에 불확실성이 커진다.

$$SSE = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 \quad \text{그런데 } Y_i - \hat{Y}_i = e_i \text{이므로} \quad SSE = \sum_{i=1}^n e_i^2$$



단순선형회귀모형의 분산분석(3)

- 제공의 합의 계산

- SSR (regression sum of squares)

- 종속변수 Y 를 예측하는데 독립변수 X 의 정보를 이용하여 총변동에서 줄어든 부분 즉, 회귀식에 의하여 변동이 줄어든 양

$$SSR = SSTO - SSE$$

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

만약 $SSR = 0$ 이라면 독립변수 X 를 도입하여도 변이성이 전혀 줄어들지 않는 경우라고 할 수 있다.

- SSR: X 를 도입함으로 인하여 Y_i 의 총변동이 줄어든 부분
 - SSE: X 를 도입한 후에도 남아 있는 Y_i 의 변동부분

단순선형회귀모형의 분산분석(4)

- 단순회귀모형에서 총변동은 다음과 같이 나누어 질 수 있다.

$$\underbrace{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}_{SSTO} = \underbrace{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2}_{SSR} + \underbrace{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}_{SSE}$$

$$SSTO = \sum Y_i^2 - \frac{(\sum Y_i)^2}{n}$$

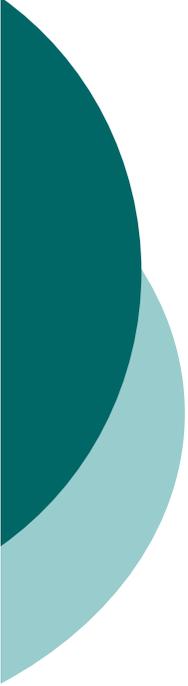
$$SSR = \frac{\left(\sum X_i Y_i - \frac{\sum X_i \sum Y_i}{n} \right)^2}{\sum X_i^2 - \frac{(\sum X_i)^2}{n}}$$

$$SSE = SSTO - SSR$$



분산분석표

- 자유도
 - 제곱의 합은 각각의 자유도(degree of freedom)를 가진다.
 - SSTO의 자유도 $n-1$
 - SSE의 자유도 $n-2$
 - SSR의 자유도 1
 - 자유도의 분해
 - SSTO의 자유도=SSR의 자유도 + SSE의 자유도
 - $N-1=1+n-2$
- 평균제곱(mean square)
 - 제곱의 합을 자유도로 나눈 값
 - $MSR=SSR/1$
 - $MSE=SSE/n-2$
- 분산분석표



결정계수와 상관계수(1)

- 회귀분석결과 독립변수가 종속변수를 얼마나 잘 설명하고 있는지 측정이 필요
- 결정계수
 - 회귀식의 적합도를 SSTO에 대한 SSR의 상대적인 크기에 의하여 측정

$$r^2 = \frac{SSR}{SSTO} = \frac{SSTO - SSE}{SSTO} = 1 - \frac{SSE}{SSTO}$$

$$0 \leq r^2 \leq 1$$



결정계수와 상관계수(1)

- 상관계수(coefficient of simple correlation)

- 결정계수의 제곱근

- 5차시에서는 공분산을 이용하여 계산

$$r = \pm\sqrt{r^2}$$

여기에서 부호는 b_1 의 부호를 따른다.

$$-1 \leq r \leq 1$$

- 상관계수는 실무에서 많이 이용되지만 회귀식에 의한 전체 변량의 비율 즉, 회귀식에 의하여 설명되는 부분을 직접적으로 나타내지는 않는다.
- 그리고 0과 1사이의 값을 제곱근을 취하게 되면 그 값이 커지게 되므로 실제 보다 더 밀접한 관계가 있는 것 처럼 볼일 수 있다는 점에 주의하여 한다.