

5.2 회귀분석의 기하학

회귀 벡터공간

선형 회귀분석으로 예측한 값 \hat{y} 는 X 의 각 열 c_1, \dots, c_M 의 선형조합으로 표현된다.

$$\begin{aligned}\hat{y} &= Xw \\ &= \begin{bmatrix} c_1 & \cdots & c_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_M \end{bmatrix} \\ &= w_1 c_1 + \cdots + w_M c_M\end{aligned}$$

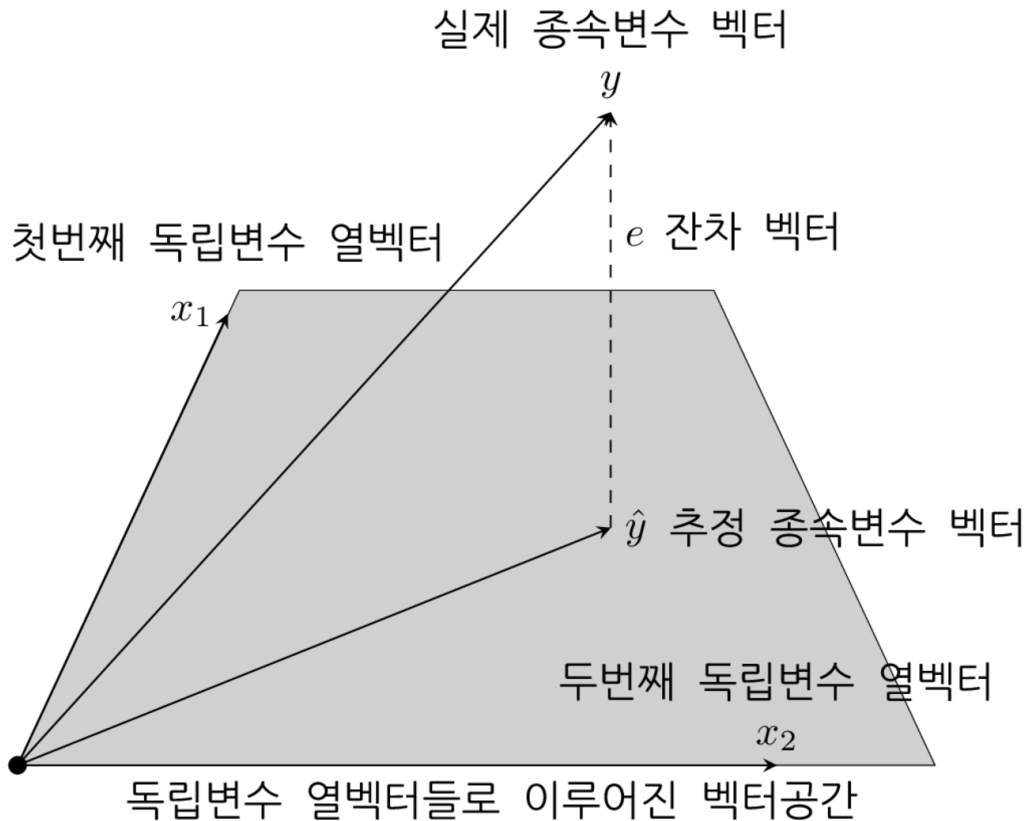
모든 열이 선형독립이면 예측값 \hat{y} 는 X 의 각 열 c_1, \dots, c_M 을 기저벡터(basis vector)로 하는 벡터공간(vector space)위에 존재한다는 것을 알 수 있다.

실제 종속변수 데이터 y 와 예측값 \hat{y} 의 차이가 잔차 벡터 e 이다. 따라서 잔차 벡터 e 의 크기를 가장 작게 만드는 최적의 예측값 \hat{y} 는 벡터공간내에 존재하면서 y 와 가장 가까운 벡터이다. 이 때 잔차 벡터 e 는 벡터 공간에 직교한다. 따라서 예측값 벡터 \hat{y} 는 y 를 X 의 각 열 c_1, \dots, c_M 을 기저벡터로 하는 벡터공간에 투영(projection)한 벡터이고 잔차 벡터 e 는 투영하고 남은 직교 벡터이다.

In [1]:

```
%load_ext tikzmagic
```

In [2]:



잔차행렬과 투영행렬

벡터 a 에서 다른 벡터 b 를 변형하는 과정은 변형행렬(transform matrix) T 를 곱하는 연산으로 나타낼 수 있다.

$$b = Ta$$

종속값 벡터 y 를 잔차 벡터 e 로 변형하는 변환 행렬 M 를 정의하자. 이 행렬을 **잔차행렬(residual matrix)**이라고 한다.

$$e = My$$

종속값 벡터 y 를 예측값 벡터 \hat{y} 로 변형하는 변환 행렬 H 를 정의하자.. 이 행렬을 **투영행렬(projection matrix)**이라고 한다.

$$\hat{y} = Hy$$

잔차행렬은 다음과 같이 구한다.

$$\begin{aligned} e &= y - \hat{y} \\ &= y - Xw \\ &= y - X(X^T X)^{-1} X^T y \\ &= (I - X(X^T X)^{-1} X^T) y \\ &= My \end{aligned}$$

투영행렬은 다음과 같이 구한다.

$$\begin{aligned}\hat{y} &= y - e \\ &= y - My \\ &= (I - M)y \\ &= X(X^T X)^{-1} X^T y \\ &= Hy\end{aligned}$$

따라서 M, H 는 각각 다음과 같다.

$$\begin{aligned}H &= X(X^T X)^{-1} X^T \\ M &= I - X(X^T X)^{-1} X^T\end{aligned}$$

투영 행렬은 y 로부터 \hat{y} 가 계산된다고 해서 **햇(hat) 행렬** 또는 **영향도 행렬(influence matrix)**이라고 부르기도 한다. 영향도 행렬이라는 명칭의 의미는 아웃라이어 분석에서 다시 다룬다.

잔차 행렬과 투영 행렬은 다음과 같은 성질이 있다.

(1) 대칭행렬이다.

$$\begin{aligned}M^T &= M \\ H^T &= H\end{aligned}$$

(2) 곱해도 자기 자신이 되는 행렬이다. 이러한 행렬을 **멱등(idempotent)행렬**이라고 한다. 멱등행렬은 몇번을 곱해도 자기 자신이 된다.

$$\begin{aligned}M^2 &= M \\ H^2 &= H\end{aligned}$$

(3) M 과 H 는 서로 직교한다.

$$MH = HM = 0$$

(4) M 은 X 와 직교한다.

$$MX = 0$$

(5) X 에 H 를 곱해도 변하지 않는다.

$$HX = X$$

위 성질은 다음과 같이 증명한다.

(1) 대칭행렬의 증명

$$\begin{aligned}M^T &= (I - X(X^T X)^{-1} X^T)^T \\ &= I - X(X^T X)^{-T} X^T \\ &= I - X((X^T X)^T)^{-1} X^T \\ &= I - X(X^T X)^{-1} X^T \\ &= M\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H^T &= (X(X^T X)^{-1} X^T)^T \\
 &= X((X^T X)^T)^{-1} X^T \\
 &= X(X^T X)^{-1} X^T \\
 &= H
 \end{aligned}$$

(2) 역등성 증명

$$\begin{aligned}
 M^2 &= (I - X(X^T X)^{-1} X^T)(I - X(X^T X)^{-1} X^T) \\
 &= I - 2X(X^T X)^{-1} X^T + X(X^T X)^{-1} X^T X(X^T X)^{-1} X^T \\
 &= I - X((X^T X)^T)^{-1} X^T \\
 &= M
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H^2 &= (X(X^T X)^{-1} X^T)(X(X^T X)^{-1} X^T) \\
 &= X(X^T X)^{-1} (X^T X)(X^T X)^{-1} X^T \\
 &= X(X^T X)^{-1} X^T \\
 &= H
 \end{aligned}$$

(3) M 과 H 의 직교 증명

$$\begin{aligned}
 MH &= (I - X(X^T X)^{-1} X^T)X(X^T X)^{-1} X^T \\
 &= X(X^T X)^{-1} X^T - X(X^T X)^{-1} X^T X(X^T X)^{-1} X^T \\
 &= X(X^T X)^{-1} X^T - X(X^T X)^{-1} X^T \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

(4) M 과 X 의 직교 증명

$$\begin{aligned}
 MX &= (I - X(X^T X)^{-1} X^T)X \\
 &= X - X(X^T X)^{-1} X^T X \\
 &= X - X \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

(5) H 과 X 의 곱에 대한 증명

$$\begin{aligned}
 HX &= (X(X^T X)^{-1} X^T)X \\
 &= X(X^T X)^{-1} X^T X \\
 &= X
 \end{aligned}$$

위 성질들을 이용하면 y 벡터의 제곱합은 잔차 벡터 e 의 제곱합과 추정치 벡터 \hat{y} 의 제곱합의 합이라는 것을 알 수 있다.

$$y = \hat{y} + e = Hy + My = (H + M)y$$

$$\begin{aligned}
y^T y &= ((H + M)y)^T ((H + M)y) \\
&= y^T (H + M)^T (H + M)y \\
&= y^T (H + M)(H + M)y \\
&= y^T (H^2 + MH + HM + M^2)y \\
&= y^T (H + M)y \\
&= y^T Hy + y^T My \\
&= y^T H^2 y + y^T M^2 y \\
&= y^T H^T Hy + y^T M^T My \\
&= (Hy)^T (Hy) + (My)^T (My) \\
&= \hat{y}^T \hat{y} + e^T e
\end{aligned}$$

이 관계식은 나중에 분산 분석(ANOVA)에 사용된다.