4.5 부분회귀

만약 회귀분석을 한 후에 새로운 독립변수를 추가하여 다시 회귀분석을 한다면 그 전에 회귀분석으로 구했던 가중치의 값은 변할까 변하지 않을까? 예를 들어 x_1이라는 독립변수만으로 회귀분석한 결과가 다음과 같다고 하자.

$$y = w_1 x_1 + e$$

이 때 새로운 독립변수 x_2를 추가하여 회귀분석을 하게 되면 이 때 나오는 x_1에 대한 가중치 w_1'가 원래의 w_1과 같을까 다를까?

$$y = w_1' x_1 + w_2' x_2 + e'$$

답부터 말하자면

> **일반적으로 w_1'의 값은 원래의 w_1의 값과 다르다.**

즉. 우리가 종속변수에 영향을 미치는 모든 독립변수를 회귀모형에 포함하지 않는 한 모형의 가중치는 항상 편향된(biased) 값이 된다. 이 사실은 다음과 같이 증명할 수 있다.

독립변수를 X_1, X_2라는 두 개의 그룹으로 나눈다.

$$X = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 \end{bmatrix}$$

만약 독립변수 X_1만으로 회귀분석을 하면 가중치 벡터는 다음과 같다.

$$w_1 = (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T y$$

여기에 독립변수 X_2를 추가한 새로운 선형 회귀모형을 생각해 보자.

$$y = \hat{y} + e' = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1' \\ w_2' \end{bmatrix} + e'$$

이 식에서 w_1'과w_2'은 두 독립변수를 모두 사용한 새로운 모형의 가중치 벡터이고 e'는 새로운 모형의 잔차 벡터이다. 양변에 X를 곱하여 직교 방정식을 구하면,

$$\begin{bmatrix} X_1^T X_1 & X_1^T X_2 \\ X_2^T X_1 & X_2^T X_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1' \\ w_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1^T y \\ X_2^T y \end{bmatrix}$$

부분행렬의 역행렬 공식을 사용하여 이 방정식을 풀면 다음과 같은 공식을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} w_1' &= (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T (y - X_2 w_2') \\ &= (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T y - (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T X_2 w_2' \end{aligned}$$

이 값은 독립변수 X_1만으로 회귀분석을 한 결과와 다르다.

$$w_1' = w_1 - (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T X_2 w_2'$$

따라서

> **새로운 독립변수 그룹 X_2를 추가해서 다시 회귀분석을 한다면 기존 가중치 벡터의 값이 달라진다.**

단, 다음과 같은 경우에는 두가지 회귀분석의 결과가 같을 수 있다.

(1) $w_2' = 0$. 즉 X_2와 y의 상관관계가 없는 경우

(2) $X_1^T X_2 = 0$. 즉 독립변수 X_1과 독립변수 X_2가 직교하는 경우. 독립변수 X_1과 독립변수 X_2이 서로 상관관계가 없으면 직교할 가능성이 높다.

프리슈-워-로벨 정리

프리슈-워-로벨(Frisch–Waugh–Lovell) 정리 혹은 FWL 정리는 위 결과를 다른 방식으로 표현한 것이다.

(1) 특정한 독립변수 그룹 X_1로 종속변수 y를 선형 회귀분석하여 잔차 y^* 를 구한다.

(2) X_1로 다른 독립변수 x_2를 선형 회귀분석하여 나온 잔차 x_2^*를 구한다.

(3) y^* 를 종속변수로하고 x_2^*를 독립변수로 하여 선형 회귀분석하여 구한 가중치는 X_1과 x_2를 모두 사용하여 y를 선형 회귀분석하였을 때 x_2에 대한 가중치와 같다.

증명은 다음과 같다. 모든 독립변수를 사용한 회귀분석 모형에서 X_1에 대한 가중치 벡터 w_1는 원래 다음 관계에서 구해야 한다.

$$y = \begin{bmatrix} X_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} + e$$

이 때 직교 방정식은 다음과 같다.

$$\begin{bmatrix} X_1^T X_1 & X_1^T x_2 \\ x_2^T X_1 & x_2^T x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1^T y \\ x_2^T y \end{bmatrix}$$

이 식의 아랫 부분만 쓰면 다음과 같다.

$$x_2^T X_1 w_1 + x_2^T x_2 w_2 = x_2^T y$$

여기에 앞에서 구했던 w_1 값을 대입하면,

$$w_1 = (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T y - (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T x_2 w_2$$

이 식을 정리하면

$$x_2^T X_1 (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T y - x_2^T X_1 (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T x_2 w_2 + x_2^T x_2 w_2 = x_2^T y$$
$$x_2^T (I - X_1 (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T) x_2 w_2 = x_2^T (I - X_1 (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T) y$$

여기에 X_1으로 선형 회귀분석하였을 때의 잔차 행렬 M_1

$$M_1 = I - X_1 (X_1^T X_1)^{-1} X_1^T$$

을 적용하면,

$$x_2^T (M_1 x_2) w_2 = x_2^T (M_1 y)$$

이다. 잔차 행렬의 성질을 이용하면,

$$(M_1 x_2)^T (M_1 x_2) w_2 = (M_1 x_2)^T (M_1 y)$$

가 된다.

$M_1 x_2$는 X_1으로 x_2를 회귀분석한 잔차 벡터이고 $M_1 y$는 X_1으로 y를 회귀분석한 잔차 벡터이므로

$$x_2^{*T} x_2^* w_2 = x_2^{*T} y^*$$

따라서 x_2^*를 독립변수, y^*를 종속변수로 선형 회귀분석한 결과와 같아진다.

부분회귀 플롯

독립변수의 갯수가 많을 때 **특정한 하나의 독립변수의 영향력을 시각화하는 방법이 부분회귀 플롯(Partial Regression Plot)**이다. Added Variable Plot이라고도 한다.

부분회귀 플롯을 그리기 위해서는 3번의 선형 회귀분석을 해야 한다.

1. 특정한 독립변수 x_2를 제외한 나머지 독립변수 X_1들로 종속변수 y를 선형 회귀분석하여 잔차 y^*를 구한다.
2. 특정한 독립변수 x_2를 제외한 나머지 독립변수 X_1들로 특정한 독립변수 x_2를 선형 회귀분석하여 잔차 x_2^*를 구한다.
3. 잔차 x_2^*를 독립변수로, 잔차 y^*를 종속변수로 하여 선형 회귀분석한다.

이렇게 구한 x_2^*, y^*의 스캐터 플롯과 회귀분석 결과를 나타낸 것이 부분회귀 플롯이다.

보스턴 데이터를 예로 들어보자.

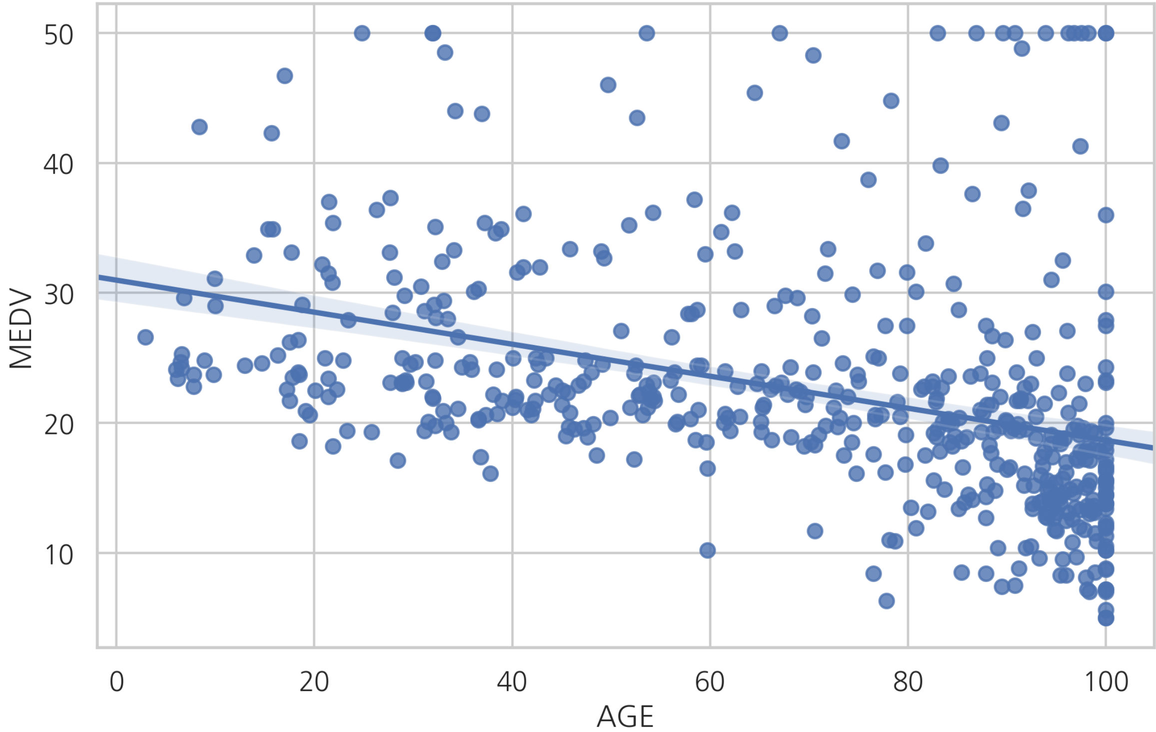
In [1]:

```
from sklearn.datasets import load_boston

boston = load_boston()

dfX0 = pd.DataFrame(boston.data, columns=boston.feature_names)
dfX = sm.add_constant(dfX0)
dfy = pd.DataFrame(boston.target, columns=["MEDV"])
df = pd.concat([dfX, dfy], axis=1)

model_boston = sm.OLS(dfy, dfX)
result_boston = model_boston.fit()
```

단순하게 AGE라는 독립변수와 MEDV 종속변수간의 관계를 살펴보면 마치 음의 상관관계가 있는 것처럼 보인다.

In [2]:

```
sns.regplot(x="AGE", y="MEDV", data=df)
plt.show()
```



statsmodels 패키지의 `sm.graphics.plot_partregress` 명령을 쓰면 부분회귀 플롯을 그릴 수 있다. 이 때 다른 변수의 이름을 모두 지정해 주어야 한다.

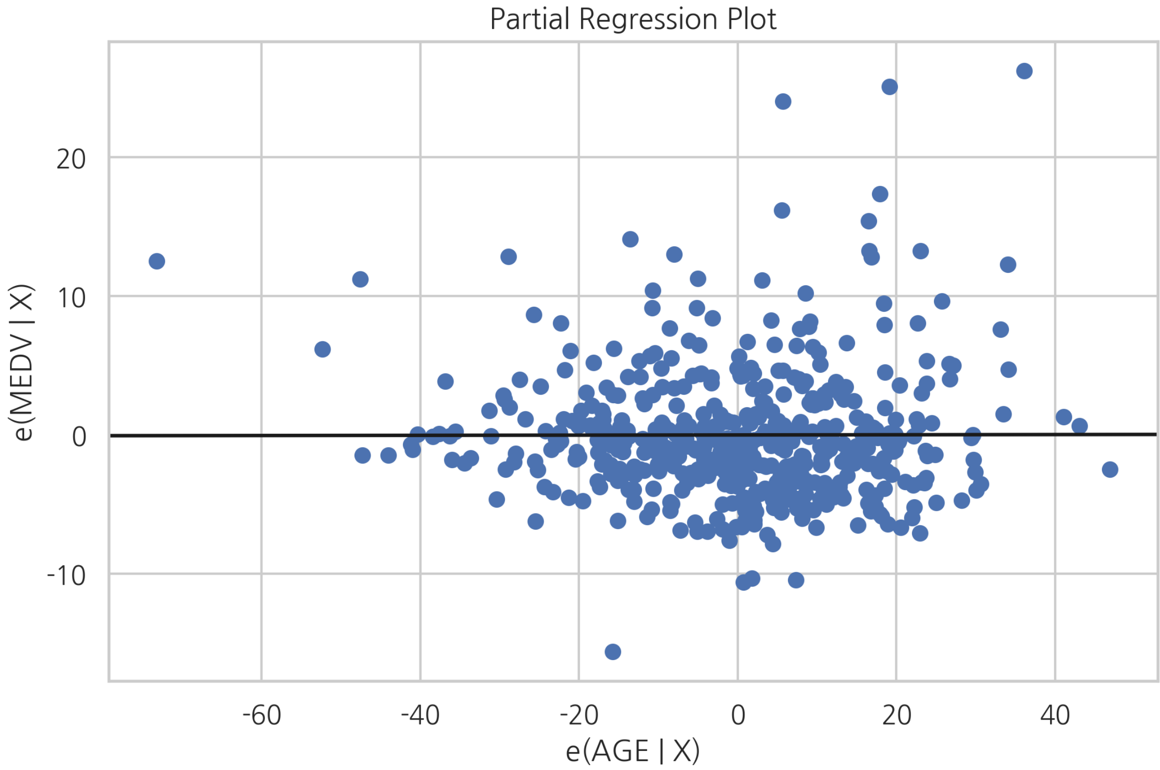
```
plot_partregress(endog, exog_i, exog_others, data=None, obs_labels=True, ret_coords=False)
```

- `endog` : 종속변수 문자열
- `exog_i` : 분석 대상이 되는 독립변수 문자열
- `exog_others` : 나머지 독립변수 문자열의 리스트
- `data` : 모든 데이터가 있는 데이터프레임
- `obs_labels` : 데이터 라벨링 여부
- `ret_coords` : 잔차 데이터 반환 여부

부분회귀 플롯으로 살펴보면 AGE 변수와 종속변수는 상관관계가 없다는 것을 알 수 있다.

In [3]:

```
others = list(set(df.columns).difference(set(["MEDV", "AGE"])))
p, resids = sm.graphics.plot_partregress(
    "MEDV", "AGE", others, data=df, obs_labels=False, ret_coords=True
)
plt.show()
```



부분회귀 플롯에서 가로축의 값은 독립변수 자체의 값이 아니라 어떤 독립변수에서 다른 독립변수의 영향을 제거한 일종의 "순수한 독립변수 성분"을 뜻한다.

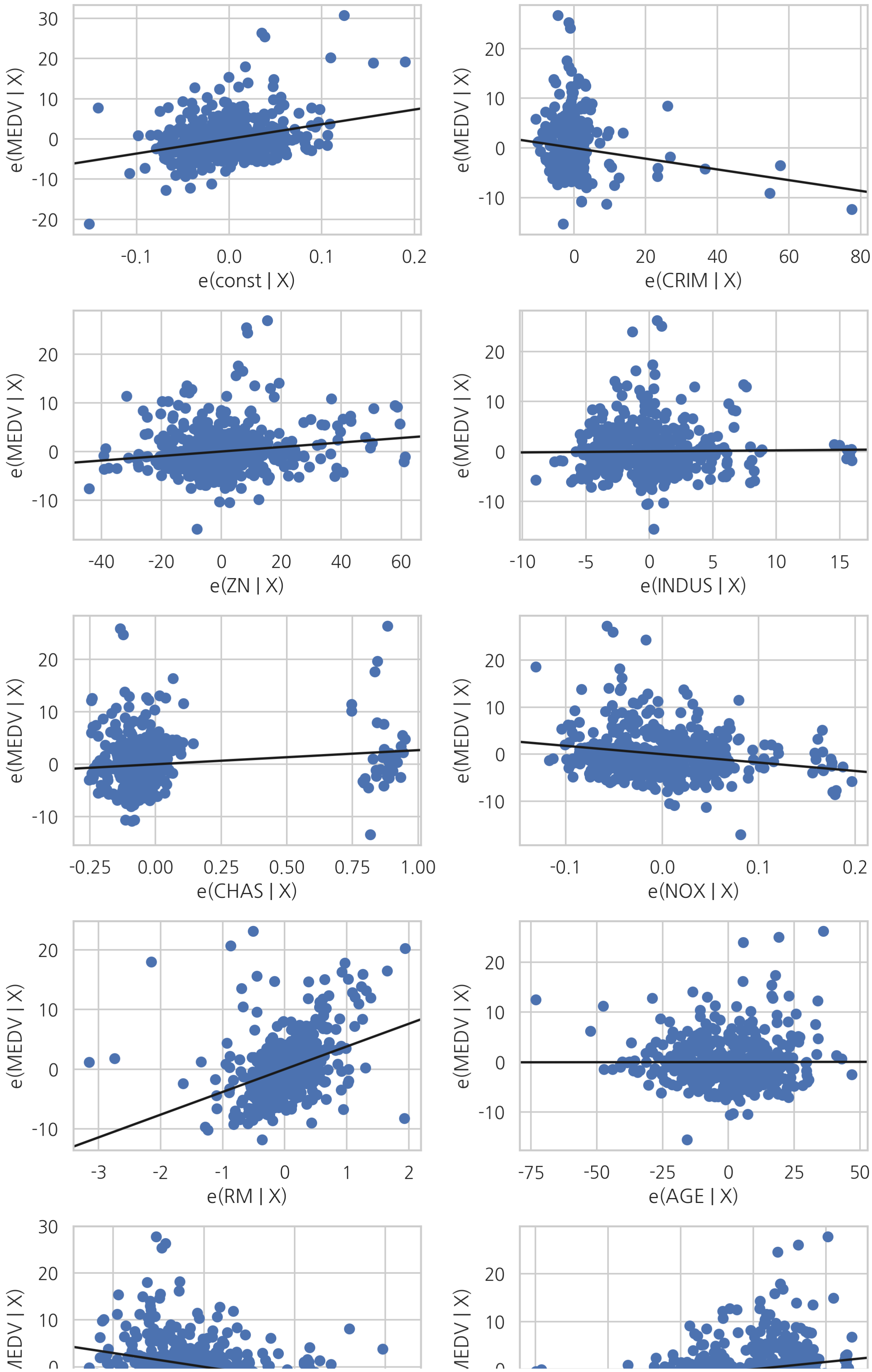
`sm.graphics.plot_partregress_grid` 명령을 쓰면 전체 데이터에 대해 한번에 부분회귀 플롯을 그릴 수 있다.

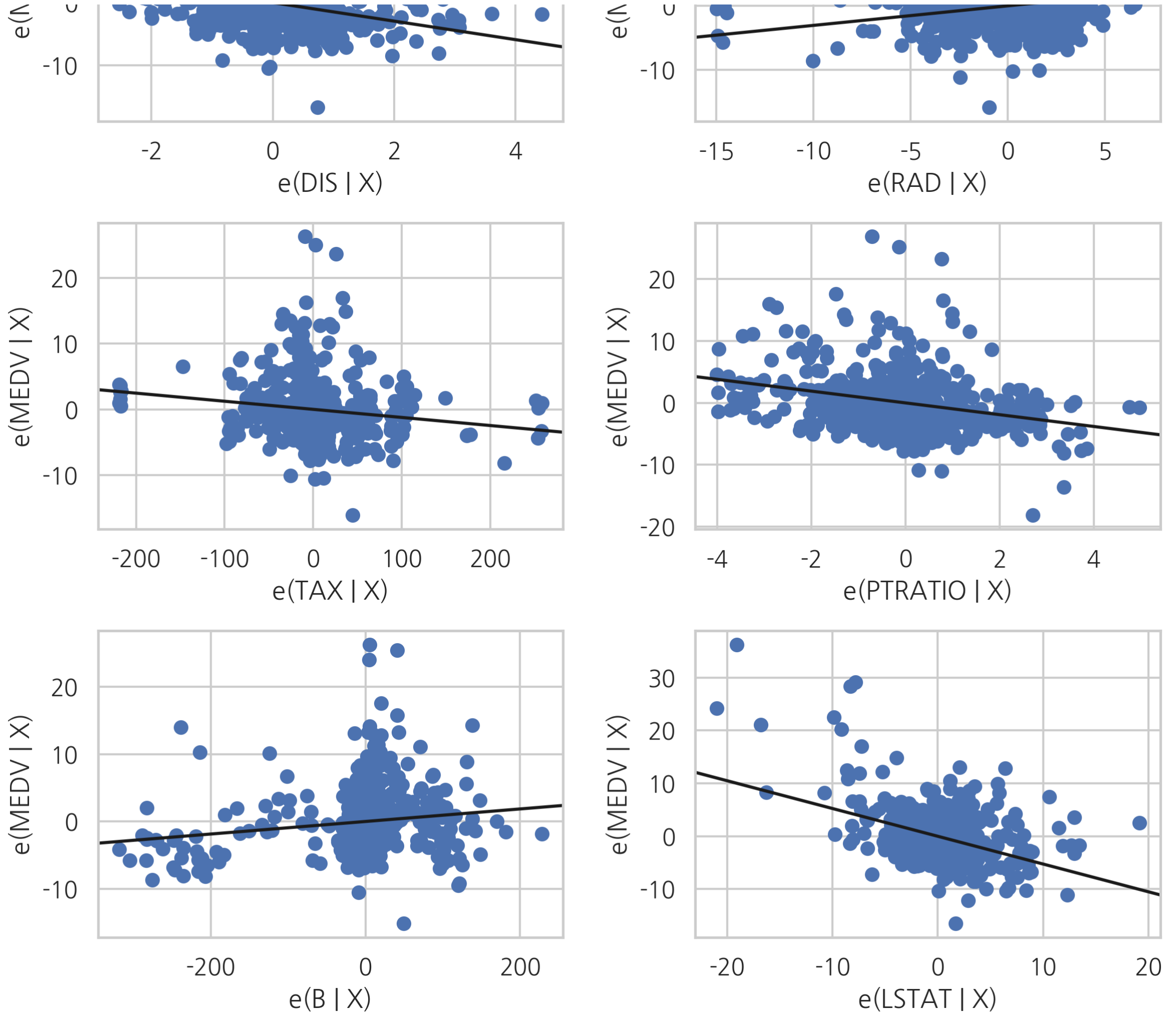
```
plot_partregress_grid(result, fig)
```

- `result` : 회귀분석 결과 객체
- `fig` : `plt.figure` 객체

In [4]:

```
fig = plt.figure(figsize=(8, 20))
sm.graphics.plot_partregress_grid(result_boston, fig=fig)
fig.suptitle("")
plt.show()
```





CCPR 플롯

CCPR(Component-Component plus Residual) 플롯도 부분회귀 플롯과 마찬가지로 특정한 하나의 변수의 영향을 살펴보기 위한 것이다.

다음과 같은 회귀 모형이 있다고 가정하자.

$$y = \hat{y} + e = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_i x_i + \cdots + w_K x_K + e$$

CCPR 플롯은 이 성분 중에서

- x_i를 가로축으로
- $w_i x_i + e$을 세로축으로

그린 스캐터 플롯이다.

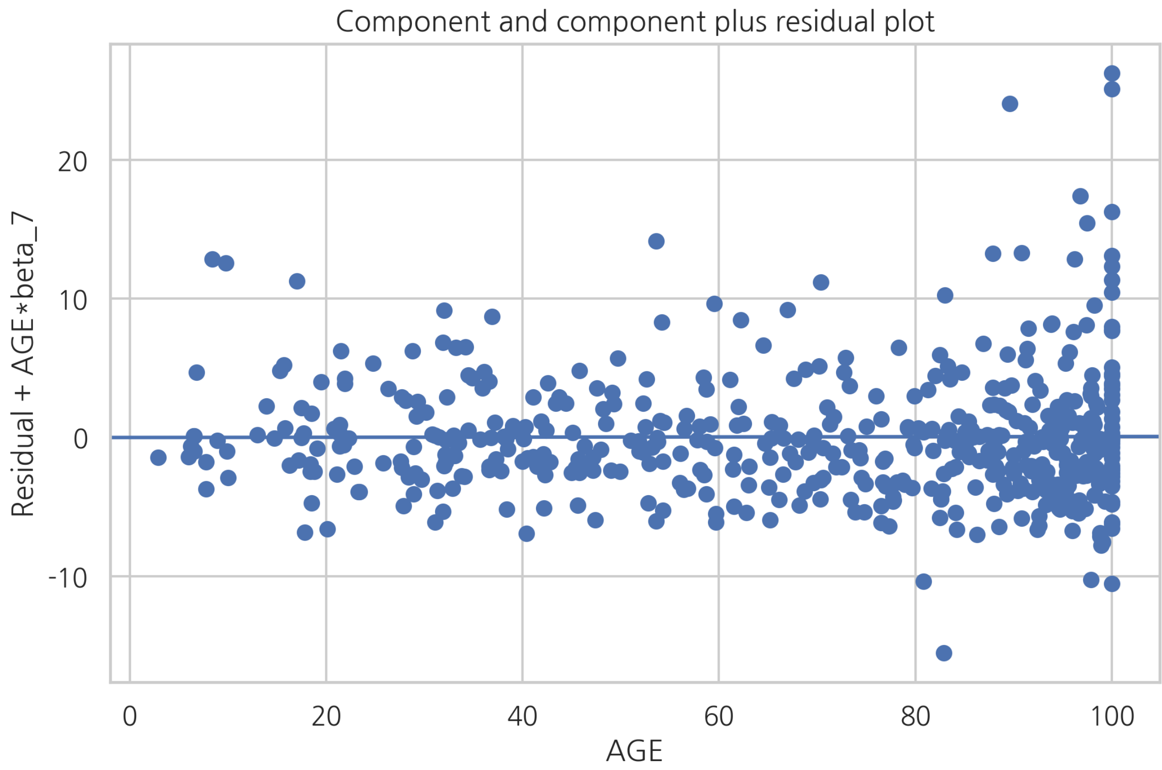
statsmodels 패키지의 `sm.graphics.plot_ccpr` 명령으로 CCPR 플롯을 그릴 수 있다.

```
plot_ccpr(result, exog_idx)
```

- `result` : 회귀분석 결과 객체
- `exog_idx` : 분석 대상이 되는 독립변수 문자열

In [5]:

```
sm.graphics.plot_ccpr(result_boston, "AGE")
plt.show()
```



CCPR 플롯에서는 부분회귀 플롯과 달리 독립변수가 원래의 값 그대로 나타난다.

마찬가지로 `sm.graphics.plot_ccpr_grid` 명령을 쓰면 전체 데이터에 대해 한번에 CCPR 플롯을 그릴 수 있다.

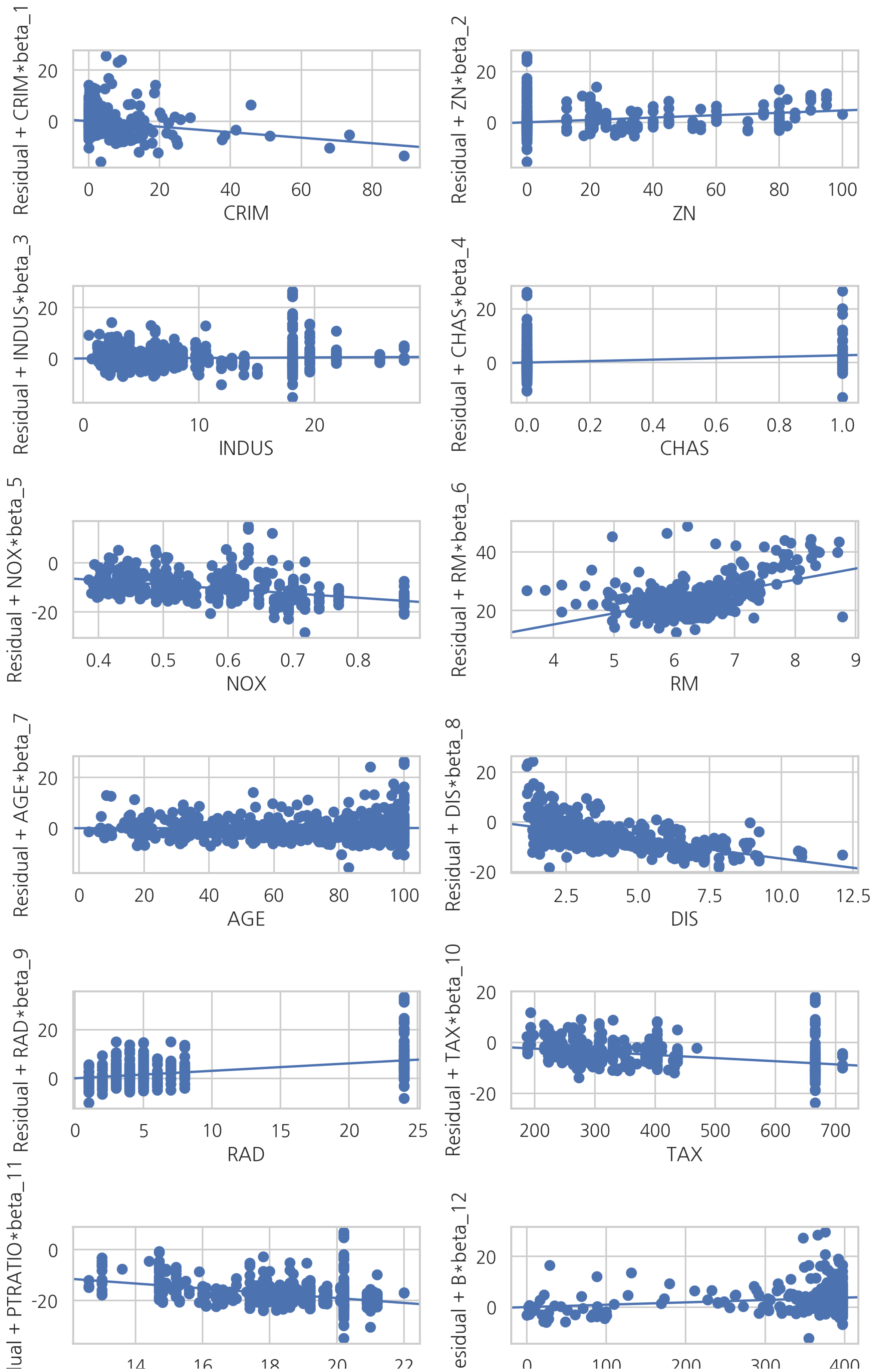
`plot_ccpr_grid` 명령은 모든 독립변수에 대해 CCPR 플롯을 그려준다.

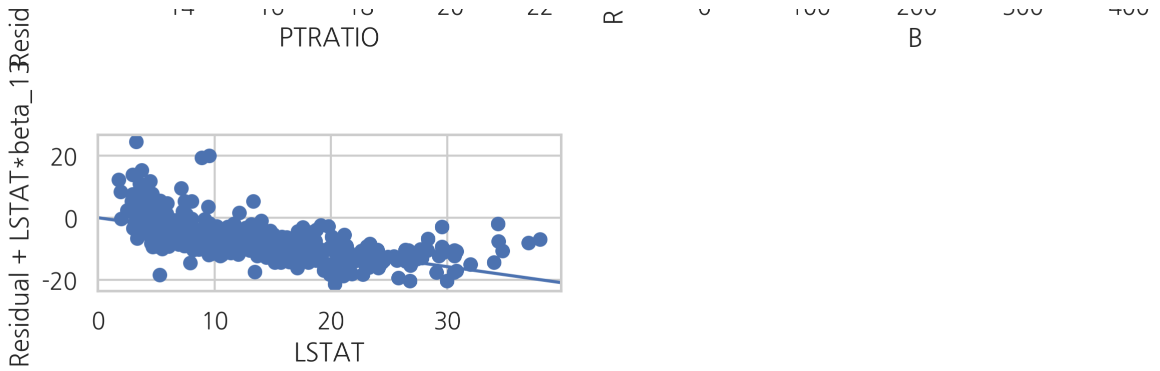
```
plot_ccpr_grid(result, fig)
```

- `result` : 회귀분석 결과 객체
- `fig` : `plt.figure` 객체

In [6]:

```
fig = plt.figure(figsize=(8, 15))
sm.graphics.plot_ccpr_grid(result_boston, fig=fig)
fig.suptitle("")
plt.show()
```





`plot_regress_exog` 명령은 부분회귀 플롯과 CCPR을 같이 보여준다.

```
plot_regress_exog(result, exog_idx)
```

- `result` : 회귀분석 결과 객체
- `exog_idx` : 분석 대상이 되는 독립변수 문자열

In [7]:

```python
fig = sm.graphics.plot_regress_exog(result_boston, "AGE")
plt.tight_layout(pad=4, h_pad=0.5, w_pad=0.5)
plt.show()
```