Multicollinearity

20182101019 김도혜

목차

1. 다중공선성이란?

- 다중공선성 : 다중선형회귀분석에서 독립변수들 간에 강한 선형적 관계가 있는 경우
- 완전공선성 : 계획행렬(design matrix)의 열벡터들이 선형종속인 경우

*선형종속 : 벡터 집합 $x_1, x_2, \cdots, x_k$을 이루는 벡터의 선형조합이 영벡터가 되도록 하는 스칼라 계수 $c_1, c_2, \cdots, c_k$이 존재하면, 선형종속이라 함. $c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_k x_k = 0$(계수가 모두 0인 경우 제외)

→ 이 경우에는 최소제곱추정량을 구하는데 문제가 발생함.

*최소제곱추정량을 구할 때, $(X^T X)^{-1}$의 역행렬이 존재할 조건

$\exists (X^T X)^{-1} \Leftrightarrow X^T X$ 는 정방행렬이면서 full rank

$\Leftrightarrow \det(X^T X)^{-1} \neq 0$

→ 즉, 독립변수들이 선형종속관계에 있으면 full rank가 아니고, $\det(X^T X)^{-1} = 0$이므로 역행렬이 존재하지 않고, 최소제곱추정량을 구할 수 없게 된다.

*rank : 행렬의 열(행)벡터 중 서로 독립인 열(행)벡터의 최대 개수

$\text{rank}\, X \leq \min(n, p)$, $X \in R^{n \times p}$ 여기서 등호가 성립하면 full rank

- 완전공선성은 아니더라도 독립변수들 사이에 강한 선형적 관계가 있는 경우 모형의 회귀계수 추정과 예측에 문제가 발생할 수 있음. → $\det(X^T X)^{-1} \approx 0$이고 최소제곱추정량의 추정오차 $\sigma^2\{b\} = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$가 커짐

2. 다중공선성의 영향 및 문제점

- 일반적으로 회귀분석에서는 어떤 독립변수의 영향력을 파악할 때 다른 독립변수들을 모두 일정하다고 생각함. 즉, 독립변수들끼리 서로 독립이라는 것을 가정. 그래야 알아보고자 하는 변수의 영향력만을 알 수 있음
- 그러나 어느 두 독립변수가 서로에게 영향을 주고 있다면 둘 중 하나의 영향력을 검증할 때 다른 하나의 영향력을 완벽히 통제할 수 없음

- 영향 및 문제점

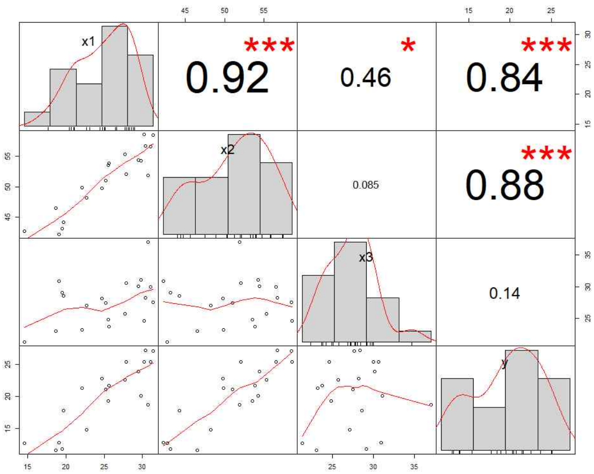
1) 독립변수의 포함여부가 회귀변수들을 변화시킴.
2) 이미 모형에 포함된 독립변수가 어떤 것들인지에 따라 한 독립변수의 추가제곱합이 달라짐.
3) 회귀모형의 독립변수들이 서로 높은 상관성일 때 회귀계수의 추정표준편차는 커짐.
4) 종속변수와 독립변수들 집단이 통계적으로 관계가 확실히 있음에도 불구하고, 추정된 회귀계수들 각각은 통계적으로 유의하지 않을 수 있음.

- 예시 데이터 (x1: 삼두근 피하지방 두께, x2: 허벅지 둘레, x3: 팔 둘레, y: 체지방)

```
> head(ex)
    x1   x2   x3    y
1 19.5 43.1 29.1 11.9
2 24.7 49.8 28.2 22.8
3 30.7 51.9 37.0 18.7
4 29.8 54.3 31.1 20.1
5 19.1 42.2 30.9 12.9
6 25.6 53.9 23.7 21.7
```

```
> round(cor(ex),3)

      x1    x2    x3     y
x1 1.000 0.924 0.458 0.843
x2 0.924 1.000 0.085 0.878
x3 0.458 0.085 1.000 0.142
y  0.843 0.878 0.142 1.000
```



다중공선성의 영향

1) 회귀계수와 회귀계수의 추정오차($s\{b_k\}$)의 영향

- 다른 변수의 포함 여부에 의해 회귀계수가 크게 달라짐.
- 추정된 회귀계수는 더 많은 독립변수들이 회귀모형에 추가될 때 점점 더 부정밀해짐.
- $s\{b_k\}$는 점점 커짐. 또한, 다중공선성이 있다면 예측된 회귀계수에 대해 분산을 증가시킴.

변수	b1	b2	b3
x1	0.857	-	-
x2	-	0.857	-
x3	-	-	0.199
x1,x2	0.222	0.659	-
x1,x3	0.984	-	-0.308
x2,x3		0.872	0.068
x1,x2,x3	-4.334	-2.857	-2.186

변수	$s\{b_1\}$	$s\{b_2\}$	$s\{b_3\}$
x1	0.129	-	-
x2	-	0.110	-
x3	-	-	0.327
x1,x2	0.303	0.291	-
x1,x3	0.128	-	0.176
x2,x3		0.112	0.161
x1,x2,x3	3.015	2.582	1.595

2) 추가제곱합의 영향

- 추가제곱합(extra sum of squares) : 원래 X변수(들)가 회귀모형에 있을 때의 오차제곱합과 새로운 X변수(들)가 회귀모형에 추가되었을 때 오차제곱합의 차이.

ex) $SSR(X_2|X_1) = SSE(X_1) - SSE(X_1, X_2) = 143.12 - 109.95 = 33.17$

이 오차제곱합의 감소는 X_1이 이미 모형에 있을 때 X_2를 추가하는 것의 한계효과를 측정하는 것.

```
> anova(lm(y~x1,data=ex)) # x1만 포함된 모형

           Df  Sum Sq  Mean Sq  F value     Pr(>F)
x1          1  352.27   352.27   44.305  3.024e-06 ***
Residuals  18  143.12     7.95

> anova(lm(y~x2,data=ex)) # x2만 포함된 모형

           Df  Sum Sq  Mean Sq  F value   Pr(>F)
x2          1  381.97   381.97   60.617  3.6e-07 ***
Residuals  18  113.42     6.30

> anova(lm(y~x1+x2,data=ex)) # x1,x2가 포함된 모형

           Df  Sum Sq  Mean Sq  F value     Pr(>F)
x1          1  352.27   352.27  54.4661  1.075e-06 ***
x2          1   33.17    33.17   5.1284     0.0369 *
Residuals  17  109.95     6.47
```

- $SSR(X_2)$=381.97 와 비교하여 $SSR(X_2|X_1)$=33.17 가 매우 작은 것은 모형에 X_2가 포함되는 것이 X_1과 거의 같은 정보를 주기 때문임 (X_2은 X_1가 제공하고 있는 정보를 넘어서서 추가 정보를 제공하는 양이 적다는 것)

2) β_k검정에의 영향

- 다중회귀모형을 분석할 때 각각의 회귀계수를 차례차례 $\beta_k = 0\,(k = 1, \cdots, p-1)$인지를 결정하기 위해 t^*통계량을 살펴보게 됨.

- 그런데 다중공선성 문제가 있는 경우에는 분산이 크니까 $t^* = \frac{b_k}{s\{b_k\}}$의 분모가 커져서 0처럼 보이게 되고, t-test 결과 유의하지 않다는 결과가 나옴.

- 앞의 예시로 보면,

```
> summary(lm(y~x1+x2,data=ex))$coefficients

             Estimate  Std. Error  t value   Pr(>|t|)
(Intercept)  -19.1742      8.3606   -2.293     0.0348 *
x1             0.2224      0.3034    0.733     0.4737
x2             0.6594      0.2912    2.265     0.0369 *
```

F검정 $H_0 : \beta_1 = \beta_2 = 0$ 결과는 $F^* = \frac{MSR}{MSE} = \frac{197.72}{6.47} = 29.8$ 이고, $F_{0.95;2,17} = 3.59$ 이므로 기각.

→ 두 회귀계수는 0이 아니다. 유의하다.

t검정 $H_0 : \beta_1 = 0$ 결과는 $t^* = \frac{b_k}{s\{b_k\}} = \frac{0.2224}{0.3034} = 0.733$ 이고 $t_{0.9875,17} = 2.46$ 이므로 기각할 수 없음.

→ 회귀계수 β_1은 유의하지 않다.

$H_0 : \beta_2 = 0$ 결과는 $t^* = \frac{b_k}{s\{b_k\}} = \frac{0.6594}{0.2912} = 2.265$ 이고 $t_{0.9875,17} = 2.46$ 이므로 기각할 수 없음.

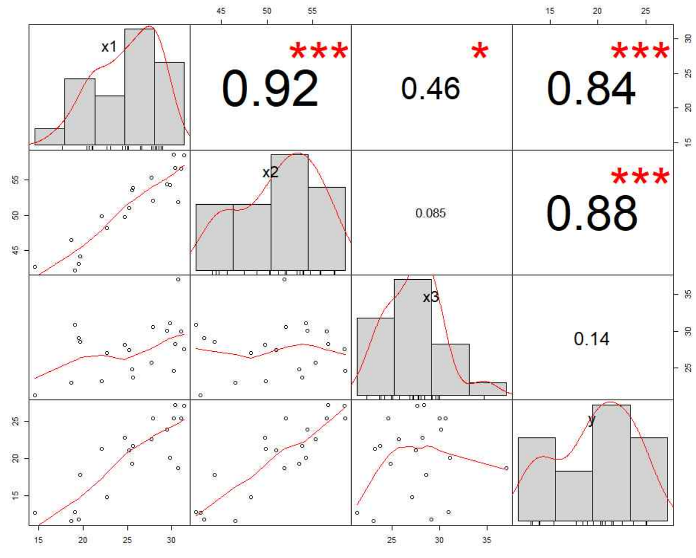
→ 회귀계수 β_2은 유의하다.

3. 진단

1) 비정형적 진단

- 독립변수나 관측값의 포함 여부에 의한 추정회귀계수의 큰 변화
- 중요한 독립변수들에 대해 각 회귀계수 검정이 유의하지 않은 결과(t-value가 0에 가까움)
- 추정회귀계수가 사전 경험이나 이론적 고찰과 반대 방향의 부호를 가짐
- 두 독립변수의 상관행렬 r_{XX}에서 상관계수의 큰 값
- 독립변수들끼리 산점도를 그렸을 때 점들이 직선 주위에 밀집
- 하나의 독립변수를 종속변수로 두고, 나머지 독립변수들을 독립변수로 하여 선형회귀분석을 실시하였을 때 결정계수의 값이 1에 가까움

- 산점도, 상관계수로 판단



- x1과 x2의 상관관계가 높게 나타난다(0.92)
- x1과 x2의 산점도를 보면 직선 주위에 밀집되어 있다

- 회귀분석 결과로 판단 (x1,x2,x3 변수 모두 모형에 포함)

```
> fit<-lm(y~.,data=ex)
> summary(fit)

Call:
lm(formula = y ~ ., data = ex)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-3.7263 -1.6111  0.3923  1.4656  4.1277

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  117.085     99.782   1.173    0.258
x1             4.334      3.016   1.437    0.170
x2            -2.857      2.582  -1.106    0.285
x3            -2.186      1.595  -1.370    0.190

Residual standard error: 2.48 on 16 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8014,	Adjusted R-squared:  0.7641
F-statistic: 21.52 on 3 and 16 DF,  p-value: 7.343e-06

> vif(fit)
      x1       x2       x3
708.8429 564.3434 104.6060
```

- 모든 회귀계수들의 t-value는 0에 가까운데 F-value는 값이 큼

- F-test 결과는 유의한데, t-test 결과는 유의하지 않음

- ‘x1’ 변수 제거 후 회귀분석

```
> fit2<-lm(y~.-x1,data=ex)
> summary(fit2)

Call:
lm(formula = y ~ . - x1, data = ex)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.0777 -1.8296  0.1893  1.3545  4.1275

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -25.99695    6.99732  -3.715  0.00172 **
x2            0.85088    0.11245   7.567 7.72e-07 ***
x3            0.09603    0.16139   0.595  0.55968
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 2.557 on 17 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7757,	Adjusted R-squared:  0.7493
F-statistic:  29.4 on 2 and 17 DF,  p-value: 3.033e-06

> vif(fit2)
     x2      x3
1.00722 1.00722
```

- 'x2' 변수 제거 후 회귀분석

```
> fit3<-lm(y~.-x2,data=ex)
> summary(fit3)

Call:
lm(formula = y ~ . - x2, data = ex)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-3.8794 -1.9627  0.3811  1.2688  3.8942 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)   6.7916     4.4883   1.513   0.1486    
x1            1.0006     0.1282   7.803 5.12e-07 ***
x3           -0.4314     0.1766  -2.443   0.0258 *  
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.496 on 17 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7862,	Adjusted R-squared:  0.761 
F-statistic: 31.25 on 2 and 17 DF,  p-value: 2.022e-06

> vif(fit3)
      x1       x3 
1.265118 1.265118 
```

- 'x3' 변수 제거 후 회귀분석

```
> summary(lm(y~.-x3,data=ex))

Call:
lm(formula = y ~ . - x3, data = ex)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-3.9469 -1.8807  0.1678  1.3367  4.0147 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)  
(Intercept) -19.1742     8.3606  -2.293   0.0348 *
x1            0.2224     0.3034   0.733   0.4737  
x2            0.6594     0.2912   2.265   0.0369 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.543 on 17 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7781,	Adjusted R-squared:  0.7519 
F-statistic:  29.8 on 2 and 17 DF,  p-value: 2.774e-06

> vif(lm(y~.-x3,data=ex))
      x1       x2 
6.825239 6.825239 
```

- 'x3'을 종속변수로, 'x1','x2'를 독립변수로 하고 회귀분석

```
> fit5<-lm(x3~.-y,data=ex)
> summary(fit5)

Call:
lm(formula = x3 ~ . - y, data = ex)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max 
-0.58200 -0.30625  0.02592  0.29526  0.56102 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) 62.33083    1.23934   50.29   <2e-16 ***
x1           1.88089    0.04498   41.82   <2e-16 ***
x2          -1.60850    0.04316  -37.26   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.377 on 17 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9904,	Adjusted R-squared:  0.9893 
F-statistic: 880.7 on 2 and 17 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

- 결정계수의 값이 1에 가까움

- **비정형적 진단의 한계점**
  - 다중공선성의 영향에 대한 양적인 척도 제시 불가
  - 다중공선성이 없는 때에도 위와 같은 모습들이 발견될 수도 있음

2) 정형적 진단

- 분산팽창인수(VIF) : 독립변수들이 선형관계가 없는 경우와 비교했을 때 추정회귀계수들의 분산이 얼마나 크게 (팽창) 되었는지를 측정하는 지수

*다중회귀모형 : $Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{i,1} = + \cdots + \beta_{p-1} X_{i,p-1} + \varepsilon_i$, $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, $i = 1, \cdots, n$

*표준화회귀모형(표준화한 변수로부터 얻어진 회귀모형)

$Y_i^* = \beta_1^* X_{i,1}^* + \cdots + \beta_{p-1}^* X_{i,p-1}^* + \varepsilon_i^*$

*여기서 r_{XX}(X 변수들의 상관행렬) = $X^T X$

$$\underset{(p-1)\times(p-1)}{r_{XX}} = \begin{bmatrix} 1 & r_{12} & \cdots r_{1,p-1} \\ r_{21} & 1 & \cdots r_{2,p-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ r_{p-1,1} & r_{p-1,2} \cdots & 1 \end{bmatrix}, \quad \underset{n\times(p-1)}{X} = \begin{bmatrix} X_{11}^* & \cdots X_{1,p-1}^* \\ X_{21}^* & \cdots X_{2,p-1}^* \\ \vdots & \vdots \\ X_{n1}^* & \cdots X_{n,p-1}^* \end{bmatrix} \Rightarrow \underset{(p-1)\times(p-1)}{X^T X} = r_{XX}$$

$$\sum (X_{i1}^*)^2 = \sum \left(\frac{X_{i1} - \overline{X_1}}{\sqrt{n-1}\, s_1} \right)^2 = \frac{\sum (X_{i1} - \overline{X_1})^2}{n-1} \div s_1^2 = 1$$ 이고

$$\sum X_{i1}^* X_{i2}^* = \sum \left(\frac{X_{i1} - \overline{X_1}}{\sqrt{n-1}\, s_1} \right)\left(\frac{X_{i2} - \overline{X_2}}{\sqrt{n-1}\, s_1} \right)$$

$$= \frac{1}{n-1} \frac{\sum (X_{i1} - \overline{X_1})(X_{i2} - \overline{X_2})}{s_1 s_2} = \frac{\sum (X_{i1} - \overline{X_1})(X_{i2} - \overline{X_2})}{\sqrt{\sum (X_{i1} - \overline{X_1})^2 \sum (X_{i2} - \overline{X_2})^2}} = r_{12}$$

* VIF는 최소제곱법 추정회귀계수의 정밀도(precision), 즉 추정회귀계수의 분산으로부터 측정됨

  $\sigma^2\{\mathrm{b}\} = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$

  $\sigma^2\{\mathrm{b}^*\} = (\sigma^*)^2 \mathrm{r}_{\mathrm{XX}}^{-1}$ 여기서 $\mathrm{r}_{\mathrm{XX}}^{-1}$ 행렬의 k번째 대각원소를 $(VIF)_k$라 표기하면,

  $b_k^* (k = 1, \cdots, p-1)$는 다음과 같다. $\sigma^2\{b_k^*\} = (\sigma^*)^2 (VIF)_k$

  → **대각원소 $(VIF)_k$는 b_k^*의 분산팽창인수(variance inflation factor, VIF)라고 함.**

* $(VIF)_k = \dfrac{1}{1 - R_k^2}$, $k = 1, 2, \cdots, p-1$

  여기서 R_k^2은 X_k를 다른 $p-2$개의 X변수들로 회귀했을 때의 다중결정계수. 따라서 $\sigma^2\{b^*\} = \dfrac{(\sigma^*)^2}{1 - R_k^2}$ 임.

* R_k^2=0(X_k가 다른 X변수들과 선형의 관계가 아닐 때) 이면 $(VIF)_k$=1

  R_k^2=1(X_k가 다른 X변수들과 완벽한 선형관계) 이면 $(VIF)_k \approx \infty$

  R_k^2이 1에 가깝다는 것은 X_k가 다른 독립변수로 표현될 수 있다는 것이고, $(VIF)_k$가 크다는 것은, X_k가 다른 독립변수들에 의해 선형 함수로 표현될 수 있다는 것. 그래서 결정계수들 중에 적어도 하나의 값은 1에 가까울 때 다중공선성 존재한다고 함.
* VIF의 최대값이 10을 초과하는 경우 다중공선성이 존재한다고 함.

* **VIF의 평균값** 역시 추정표준화회귀계수 b_k^*들이 참값인 β_k^*들로부터 얼마나 멀리 떨어져 있는지에 대한 다중공선성의 강도의 정보를 제공함. 즉, 큰 VIF의 값들은 평균적으로 표준화회귀계수의 추정된 값과 참값 사이의 큰 차이를 만듦.

  $$E\left\{ \sum_{k=1}^{p-1} (b_k^* - \beta_k^*)^2 \right\} = (\sigma^*)^2 \sum_{k=1}^{p-1} (VIF)_k \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \ (1)$$

  여기서 R_k^2=0 일 때, 제곱오차합의 평균은 아래와 같음.

  $$E\left\{ \sum_{k=1}^{p-1} (b_k^* - \beta_k^*)^2 \right\} = (\sigma^*)^2 (p-1) \qquad (VIF)_k \equiv 1 \text{ 일때} \qquad \cdots\cdots\cdots \ (2)$$

  → (1)과 (2)의 비율은 제곱오차의 합에 미치는 다중공선성의 영향에 대한 유용한 정보를 제공함.

$$\frac{(\sigma^*)^2 \sum_{k=1}^{p-1} (VIF)_k}{(\sigma^*)^2 (p-1)} = \frac{\sum_{k=1}^{p-1} (VIF)_k}{(p-1)} = (\overline{VIF})$$

즉, 이 비율은 VIF의 평균이 되고, 이 평균이 1보다 크다는 것은 다중공선성 문제로 생각.

```
> fit<-lm(y~.,data=ex)
> vif(fit)
      x1       x2       x3 
708.8429 564.3434 104.6060 

> mean(vif(fit))
[1] 459.2641
```

→ 제곱오차합의 기댓값은 X변수들이 무상관일 경우에 비해 거의 460배.

→ 또한, 변수 x3의 VIF가 104.60으로 큰 값을 보임. (r_{13}^2, r_{23}^2은 크지 않음)

→ x3이 x1과 x2의 조합과 강하게 연관되어 있음을 알 수 있음.

- 상태지수(condition number) : X^TX의 최대고유값과 최소고유값의 차이

  * 다중공선성 문제가 있으면 상태지수(condition number)의 값이 큼.

  * $k = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}}$, 보통 $k \geq 30$이면 다중공선성이 있다고 판단

```
> X = cbind(rep(1,length(ex$x1)),ex$x1,ex$x2,ex$x3)
> eigen.X = eigen(t(X)%*%X)
> eigen.X
eigen() decomposition
$values
[1] 8.129024e+04 2.942499e+02 1.198158e+02 6.165867e-04

$vectors
            [,1]        [,2]        [,3]        [,4]
[1,] -0.01560414  0.00965285 -0.03861731  0.99908560
[2,] -0.40266387 -0.18165656  0.89663553  0.03012348
[3,] -0.80607618 -0.39389683 -0.44093021 -0.02582705
[4,] -0.43342763  0.90097337 -0.01157473 -0.01592177

> # condition number
> sqrt(max(eigen.X$values)/min(eigen.X$values))
[1] 11482.12
```

→ 상태지수가 매우 크기 때문에 다중공선성 문제가 있다고 할 수 있음.

4. 다중공선성 해결방안

1) 변수제거

: 다중공선성 문제를 일으키는 변수를 제외함. 일반적으로 다중공선성 문제를 일으키는 변수 중 종속변수와의 상관관계가 높은 것을 남겨두고, 상관관계의 차이가 거의 없다면 해석이 용이한 독립변수를 남겨둠.

2) 능형회귀(ridge regression), 주성분회귀

: 다중공선성 문제일 때, 최소고유값 $\lambda_p \approx 0$ 이고, 선형독립일 때는 $\lambda_p = 0$임. 이때, $\frac{1}{\lambda_p}$ 역수 취하면 엄청 커지고 분산과 MSE($MSE(\hat{\beta}^{\mathrm{LSE}}) = \sum_{i=1}^{p} \frac{\sigma^2}{\lambda_i}$)도 커짐. 결국 분산이 커서 문제가 발생

*능형회귀 : $MSE(\hat{\beta}^{\mathrm{Ridge}}) = \sum_{i=1}^{p} \frac{\sigma^2}{\lambda_i + \lambda}$

→ $\lambda_i + \lambda$ 'λ(lambda)'라는 양수를 더해줘서 0에 가깝지 않게 해주면 분산이 엄청 크지는 않게됨. 그렇게 분산을 줄이는 아이디어

*주성분회귀 : $MSE(\hat{\beta}^{\mathrm{PCA}}) = \sum_{i=1}^{q} \frac{\sigma^2}{\lambda_i}$

→ 0에 가까운 고유값들은 버리고 적당한 값을 가지는 것만 쓰는 것