The Korean Communications
in Statistics Vol. 10 No. 2, 2003
pp. 341-352

Inference about Measure of Agreement in the General Mixture Model via Parameter Orthogonalization[1)]

Jongseok Um[2)]

Abstract

Collecting data through experiment, the observers are an import source of measurement error and the inference on the measure of agreement, say kappa, is necessary. The models commonly used are complicated general mixture model, which have many nuisance parameters. Orthogonalization of parameters reduce the effect of nuisance parameter. Orthogonalization of estimating function gives the same effect as the parameter orthogonalization. In this study, the method for orthogonalization of estimating equation is studied and applied to the Beta-binomial model to examine the properties of the estimate of kappa. As a result, the likelihood function is insensitive to the change of the nuisance parameter and bias is smaller than the result of m.l.e. when kappa has extreme values

Keywords : measure of agreement, estimating equation, parameter orthogonalization

1. 서론

의사가 환자를 진단하는 경우 혹은 실험을 통해 자료를 수집하는 경우 관찰자나 진단자간의 오류로 인하여 수집된 자료에 오차가 발생할 수 있다. 진단자간 일치도(measure of agreement) kappa는 한사람의 관찰자의 관찰값이 다른 사람들의 관찰값과 얼마나 일치하는가를 설명해 주거나(interobserver reliability) 혹은 한 시점에서 어떤 진단자의 관찰값이 동일한 진단자의 다른 여러 시점에서의 관찰값과 얼마나 일치하나(test-retest reliability)를 설명하는 지수로서 범주형자료에서 정의되어 왔다. Cohen(1960)이 처음으로 정의한 후 로 점차적으로 여러 가지 경우로 확장되어 정의되었다. 연속형자료에서는 급내상관계수가 정의되어 이의 추정 및 분산분석을 통한 검정절차가(Bartko, 1966) 확립되어 있다. 반면에 범주형자료에서는 Cohen(1960)이 처음으로 2명의 진단자가 n 명의 관찰대상자를 c 개의 범주로 분류하는 경우 kappa라는 계수를 2명의 진단자간 일치도로서 제시하였으며 그 후 진단자가 여러 명 있는 경우 Fleiss(1971) Hubert(1977) 등에서 다양

1) This research was supported by GRANT N0. 971-0105-020-1 from the Korea Science and Engineering Foundation
2) Associate professor, Information & Computer Engineering Division, Hansung University, Seoul, 136-792 E-mail : jsum@hansung.ac.kr

한 경우로 확장되었다. Kraemer(1979)에서 모집단의 모수들의 함수로 kappa를 정의하여 어느 요소가 kappa에 영향을 미치는가를 확인할 수 있어서 주어진 모형에서 kappa에 대한 통계적 추론을 가능케 하였다.

모집단의 모수로서 일치도를 정의된 후로 kappa에 대한 추정 및 검정이 용이하게 되었다. Verducci, Mack and DeGroot(1988)에서는 임의로 뽑은 관찰대상자를 진단자들이 독립적으로 2개의 범주로 분류할 경우 혼합이항분포만이 적당한 모형임을 보였으며, 다양한 혼합이항모형을 제시하였다. Crowder(1979)에서는 혼합이항모형중에 하나인 베타이항모형(beta-binomial model)에서 매개모수의 추정량을 주어진 조건으로 하는 kappa의 조건우도함수의 변동폭이 매개모수 추정량의 변화에 따라 매우 민감하게 변하며 그 변동폭이 크다는 것을 보임으로서 kappa의 추정값이 매개모수의 추정값에 많이 의존되어 있어 정확하게 kappa를 추정하는 것이 어렵다.

모수의 직교화를 이용하여 매개모수의 영향을 줄일 수 있다. 이는 Jeffreys(1961)나 Godambe 와 Tompson(1974)에서 제안된 것으로 각 모수의 추정량이 직교화된 모수의 다른 추정량의 변화에 민감하게 변하지 않는다는 특성을 가지고 있다. 모수의 직교화는 각 추정량의 영향을 제거하여 매개모수가 많을 경우 관심있는 모수의 추정값을 정확하게 찾을 수 있는 장점이 있지만 모수의 직교화는 비선형편미분방정식을 풀어야 하는 어려움에 있다. 그래서 모수의 모든 값에서 직교화가 성립되는 전제적 직교화보다는 모수공간의 일부분에서 직교화가 성립되는 지역적 직교화를 만족하도록 모수변환을 하는 경우가 많다. 지역적 직교화는 모수의 일부분에서만 모수직교화가 성립이 되어서 그 적용에 제한이 많다. 이러한 대안으로 모수의 추정량을 찾기보다는 그 추정량을 구할 수 있는 추정식을 구하여 추정식의 부분공간으로 투사(projection)함으로서 직교화의 효과를 얻을 수 있다. Godambe 와 Tompson(1974)에서는 매개모수가 모형에 있을 때 최적불편추정식을 찾는 법을 제시하였다. 흔히 매개모수가 있으면 추정식은 관심 있는 모수 뿐만 아니라 매개모수 역시 포함하게 된다. 그럴 경우 불편추정식을 매개모수의 변화에 영향을 받지 않는 추정식의 부분공간으로 투사시킴으로서 추정식의 변화가 매개모수의 변화에 둔감하게 만들 수 있다. 투사된 결과 얻어지는 추정식으로부터 얻은 추정량은 모수의 직교화와 같은 효과를 갖는다. 본 논문에서는 베타이항모형에서 진단자간 일치도 kappa를 정의하고 불편추정식의 투사를 이용하여 모수직교화와 같은 효과를 갖는 추정식을 찾아 kappa에 대한 정확한 추정방법을 제시하고자 한다.

2. 추정식의 투사

모수 $\underline{\theta}$를 추정하기 위한 식 $\psi(x, \underline{\theta})=0$ 를 추정식이라 한다. 특히 다음과 같을 때 $\psi(x, \underline{\theta})$를 불편추정식이라 한다.

$$SI=\{\ \psi:\ E_{\theta}(\psi)=0,\ \forall\theta\ \}$$

특히 불편추정식중에서 다음과 같이 정의된 $eff(\psi, \theta)$ 를 모든 θ에 대해 최대화 시킬 때 이를 최적불편 추정식이라 한다.

$$eff(\psi,\theta)=\frac{[\nabla\psi(\theta)]^2}{||\psi(\theta)||^2_{\theta}}$$

$\nabla\psi(\theta)=\frac{\partial}{\partial\eta}\ E_{\eta}\psi(\theta)|_{\eta=\theta}$ 이며, 우도 함수 $L(\eta)$ 에 대해 $||\psi(\theta)||_{\theta}^2=\langle\psi(\theta),\psi(\theta)\rangle_{\theta}$,

$E_{\eta}\psi(\theta)=\langle\psi(\theta),L(\eta)\rangle=\int\psi(\theta)L(\eta)dx$, $\langle\psi(\theta),\psi(\theta)\rangle_{\theta}=E_{\theta}[\psi(\underline{x},\underline{\theta})\psi(\underline{x},\underline{\theta})]$ 이다.

2.1 추정식의 부분공간으로 투사

모든 불편 추정식의 집합을 Ψ 라고 하자. 그러면 $\psi_1\in\Psi$, $\psi_2\in\Psi$ 에서 $\psi_1+\psi_2\in\Psi$ 이고 또한 Ψ 에서 내적곱과 노름(norm)을 정의할 수 있고, 이를 이용해 complete를 보일 수 있기에 Ψ 는 Hilbert 공간이다. 공간 Ψ 에 있는 불편추정식의 적률을 통해서 Ψ 의 원소들중에서 모수변화에 민감하지 않은(모수에 대한 정보를 주지 않은) 추정식들과 모수변화에 민감한 추정식을 추출하여 분류할 수 있다. 그래서 아래의 2개의 부분공간에 대한 정의를 소개한다.

[정의 2.1] : <E-ancillary 함수의 부분공간> 다음 조건을 만족시키는 불편추정식의 $\phi\in\Psi$ 의 집합을 E-ancillary 함수의 부분공간이라 한다. 그리고 $\psi(\theta)$ 를 E-ancillary 함수라 한다.

$$E_{\eta}\phi(\theta)=0 \quad \text{모든} \quad \theta,\ \eta\in\Theta\ ,\ \Theta \text{ 는 모수 공간.}$$

E_{η} 를 기대범함수(expectation functional)라 하며 이는 선형범함수이며 E-ancillary 함수는 모수 θ의 변화에 민감하지 않다. 다음과 같이 정의되는 부분공간 S 는 E-ancillary 함수의 부분공간의 직교 여공간이 된다.

[정의 2.2] : <Complete E-sufficient 부분공간> A 를 E-ancillary 함수의 부분공간이라 하자. 다음을 만족하는 불편추정식 $\psi\in\Psi$ 의 집합 S를 Ψ 의 complete E-sufficient 부분공간이라 부른다.

$$\langle\psi,\phi\rangle_{\theta}=0 \ ,\ \text{모든}\ \theta\in\Theta\ ,\ \psi\in\Psi\ ,\ \text{그리고 모든}\ \phi\in A\ .$$

불편추정식을 부분공간으로 투사함으로서 특정모수의 변화에 민감하게, 혹은 둔감하게 만들 수 있으며 이를 이용하여 관심 있는 모수에 대하여 매개모수의 영향이 감소된 추정식을 구할 수 있다. 먼저 불편추정식의 Complete E-sufficient 부분공간으로 투사가 존재함을 Riesz Representation 정리에 의해 알 수 있다(Small and McLeish, 1991).

만약 $\psi_{\eta}(\theta)=\dfrac{L(\eta)}{L(\theta)}-1$ 이라면 다음과 같은 관계가 성립한다.

$$E_{\eta}\psi(\theta)=\langle\psi(\theta),\ \psi_{\eta}(\theta)L(\theta)\rangle\ =\ E_{\theta}[\psi(\theta)\ \psi_{\eta}(\theta)]\ =\ \langle\psi(\theta),\psi_{\eta}(\theta)\rangle_{\theta}$$

E_{η} 는 선형범함수(linear functional)이며, Ψ 에 정의되어 있으므로 Riesz Representation정리에 의하여 $\psi_{\eta}(\theta)\in\Psi$ 이며 또한 $\psi_{\eta}(\theta)$는 완비충분통계량인 우도비의 함수이므로 $\psi_{\eta}(\theta)$은 complete E-sufficient 부분공간에 속한다.

[정의 2.3] : 다음을 score 범함수라 한다.

$$\nabla^{(j)}\psi(\theta) = \frac{\partial^j}{\partial\eta^j} E_\eta[\psi(\theta)]\,|_{\eta=\theta}$$

$\psi_\eta(\theta)$ 를 전개하면 다음과 같이 된다.

$$\psi_\eta(\theta) = \sum_j \frac{(\eta-\theta)^j}{j!} \frac{\partial^j}{\partial\eta^j} \psi_\eta\,|_{\eta=\theta}$$

여기서 $\nabla^{(j)}\psi(\theta) = \langle\psi, \psi^{(j)}\rangle_\theta$, $\psi^{(j)}(\theta) = \frac{\partial^j \psi_\eta}{\partial\eta^j}\,|_{\eta=\theta}$ 이다.

Small and McLeish(1991)에서 만약 $\psi^{(j)}(\theta) \in \Psi$ 이고 $\psi_\eta(\theta)$의 전개식이 $\psi_\eta(\theta)$에 L^2-수렴한다면 추정식 $\psi^{(j)}(\theta)$, $j=1,2,\ldots$ 는 complete E-sufficient 부분공간의 기저가 됨을 보였다. 이 결과와 Riesz Representation 정리를 이용하여 불편추정식의 complete E-sufficient 부분공간에로의 투사식이 존재함을 알 수 있다. 즉, 다음과 같이 ψ^* 를 조건기대값으로 정의하자.

$$\psi(x,\mu)^* = E_\eta[\psi | \psi^{(j)},\ j=1,2,\ldots]$$

그러면 ψ^* 는 불편추정식이며, complete E-sufficient 부분공간의 기저의 함수로 표현되기 때문에 ψ^* 는 complete E-sufficient 부분공간의 원소가 되므로 ψ^* 는 ψ의 complete E-sufficient 부분공간에로의 투사가 된다. 또한 $\psi-\psi^*$ 는 ψ와 직교하는 추정식이므로 $\psi-\psi^*$ 는 E-ancially 부분공간에 속한다. 그러나 무한개의 기저를 조건으로 하는 기대값을 구하기 어려우므로 다음과 같이 r차 부분공간을 정의하여 투사시킨후 r을 증가시키는 방법으로 complete E-sufficient 부분공간에로 투사식을 유도한다.

[정의 2.4] : < r차 E-ancillary 부분공간> 다음을 만족하는 $\psi\in\Psi$ 의 집합을 r차 E-ancillary 부분공간이라하고 A_r 로 표기한다.

$$E_\eta\psi(\theta) = o\,(\eta-\theta)^r \quad \text{as} \quad \eta\to\theta\ .$$

A_r 의 직교 여공간을 S_r 이라 하고 S_r 을 r차 complete E-Sufficient 부분공간이라 한다.

[정의 2.5] : 다음이 성립하며 ψ_1, ψ_2 는 서로 직교하는 불편추정식이라 한다.

$$E_\eta(\psi_1, \psi_2) = 0\ ,\ \forall\ \psi_1 \in A_r,\ \psi_2 \in S_r$$

그래서 complete E-Sufficient 부분공간인 S 로 투사하기 위하여 S_r 차 공간으로 투사하여 근사적으로 추정식을 구하고 r을 증가시킴에 따라 S 에 투사 된 추정식으로 수렴한다. Small and McLeish(1991)에서 부분공간으로의 추정식을 다음과 같은 절차로 구하였다. Ψ 를 유한 차수 공간이라 하고, $\beta = (\beta_1(\theta), \ldots, \beta_n(\theta))$를 Ψ 의 기저라 하면 추정식은 아래와 같다.

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i(\theta)\, \beta_i(\theta),\ \psi\in\Psi$$

행렬 $M_{r\times n}$ 원소를 다음과 같이 정의하자.

$$M(i,j) = \frac{\partial^i}{\partial \eta^i} E_\eta\, \beta_j(\theta) \mid_{\eta=\theta}$$

행렬 $\Sigma_{n\times n}$의 원소는 $\Sigma(i,j) = \langle \beta_i(\theta), \beta_j(\theta) \rangle_\theta$ 이라 하자. 그러면 추정식 ψ의 r차 complete E-Sufficient 부분공간에로 투사식 ψ^*는 다음과 같다(Small and McLeish, 1991).

$$\psi^* = \underline{\alpha}\, M^T\, [M \Sigma^{-1} M^T]^{-1} M \Sigma^{-1}\, \underline{\beta}^T$$

추정식 ψ의 투사된 추정식 ψ^*의 기대값은 $\psi - \psi^*$ 가 E-ancillary 부분공간에 있기 때문에 $E_\eta(\psi^*) = E_\eta(\psi)$ 가 된다. 그리고 ψ^*는 유일하게 존재하며, ψ^*는 모수변화에 ψ보다 더 욱 민감하게 변화하고, $\|\psi^*\|_\theta \le \|\psi\|_\theta$ 이며, $\psi - \psi^*$ 는 모수 변화에 매우 둔감한 추정식이다

2.2 부분공간에 투사된 추정식

모수 $\theta = (x, \mu)$ 라 하고, x 를 관심있는 모수, μ 는 매개모수라 하고, (x, μ) 에 대한 불편 추정식 $\psi_1(x,\mu)$, $\psi_2(x,\mu)$ 가 있다고 하자. 그러면 x를 고정시키고 $\hat{\mu}_x$에 관해 두 번째 식 $\psi_2(x,\mu) = 0$ 을 풀어서 프로파일추정식인 $\psi_{PR}(x) = \psi_1(x, \hat{\mu}_x)$를 만들어서 $\psi_{PR}(x) = 0$ 을 푼다. 이런 경우 $\psi_{PR}(x)$ 가 불편추정식이 아닐 수도 있으며, $\psi_{PR}(x)$의 분포는 여전히 매개모수 μ 에 의존하는 경우가 많다. 만약 매개모수가 많은 경우, 각 추정식의 역할이 모호해지며, 관심있는 모수변화에 민감하게 변화하는 정도도 다를 것이다. 그래서 만약 ψ_2가 μ 에 관해서 푸는 추정식이라면, ψ_2는 매개모수 μ의 변화에 민감해야 된다. 반면에 ψ_1은 관심 있는 모수 x에 관해 푸는 추정식이라면, ψ_1 은 x 의 변화에 민감해야하고 매개모수 μ의 변화에는 둔감해야 한다. Complete E-sufficient 부분공간으로의 투사는 불편추정식의 모수 변화에 대한 민감도를 증가시켰듯이, 추정식을 매개모수의 E-ancillary 부분공간으로 투사하면 매개모수 변화에 둔감해진다. 그래서 x에 관해 푸는 추정식 ψ_1 은 μ의 변화에 둔감해야 하므로 매개모수 μ 의 E-ancillary 부분공간의 원소이고 동시에 ψ_1 은 모수 x 에 대한 complete E-sufficient 부분공간에 있으며, 또한 ψ_2는 x의 E-ancillary 부분공간의 원소이고 동시에 μ의 complete E-sufficient 부분공간의 원소라고 가정하면 ψ_1 과 ψ_2 는 서로 직교하는 추정식이 되며, 그 결과 ψ_1, ψ_2 의 근인 $\hat{x}, \hat{\mu}$ 은 서로 점근적으로 독립이다.

불편추정식 $\psi_1(x,\mu) = 0$ 를 매개변수 μ의 E-ancillary 부분공간으로 투사해 보자. 여기서 $\psi_2(x,\mu) = S_2(x,\mu)$ 로 놓고 $\psi_1(x,\mu)$ 는 일반적인 불편추정식이라 하자. 여기서 $S_2(x,\mu) = \frac{\partial \ln L(x,\mu)}{\partial \mu}$ 를 나타낸다. 제 2.1절의 결과를 이용하여 매개변수 μ의 1차 complete E-Sufficiant 부분공간으로 투사하자.

$$M_{1\times 2}=\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\eta} E_\eta(\psi_1)\mid_{\eta=\mu} \\ \frac{\partial}{\partial\eta} E_\eta(S_2)\mid_{\eta=\mu}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} E_\eta(\psi_1\cdot S_2)\mid_{\eta=\mu} \\ E_\eta(S_2\cdot S_2)\mid_{\eta=\mu}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} Cov(\psi_1, S_2) \\ Var(S_2)\end{pmatrix},$$

$$\Sigma=\begin{pmatrix} Var(\psi_1) & Cov(\psi_1, S_2) \\ Cov(\psi_1, S_2) & Var(S_2)\end{pmatrix}, \quad \underline{a}_2=(1,0).$$

이를 대입하면 다음과 같은 투사식을 구할 수 있다.

$$\psi_1^* = \underline{a}_2 M^T [M\Sigma^{-1} M^T]^{-1} M\Sigma^{-1} \underline{\beta}^T = \frac{Cov(\psi_1, S_2)}{Var(S_2)} S_2$$

그러므로 ψ_1의 μ의 1차 E-ancillary 부분공간으로 투사된 추정식은 아래와 같다.

$$\psi_1 - \psi_1^* = \psi_1 - \frac{\langle \psi_1, S_2\rangle_\theta}{\| S_2\|_\theta^2} S_2$$

같은 방법으로 $\psi_1(x,\mu)$ 를 μ의 2차 E-ancillary 부분공간으로 투사하면 다음과 같다.

$$\psi_1(x,\mu) - C_1(x,\mu)\, S_2(x,\mu) - C_2(x,\mu)[S_2^2(x,\mu) + S_{22}(x,\mu)]$$

여기서 $S_{22}(x,\mu) = \frac{\partial^2}{\partial\mu^2}\ln L(x,\mu)$ 이다. 그리고 C_1과 C_2 는 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} C1 \\ C2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} Var\, S_2 & Cov(S_2,\ S_2^2+S_{22}) \\ Cov(S_2,\ S_2^2+S_{22}) & Var(S_2^2+S_{22})\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} Cov(\psi_1, S_2) \\ Cov(\psi_1,\ S_2^2+S_{22})\end{pmatrix}$$

$\psi(x,\mu)$ 가 μ 에 대해 2차 E-ancillary 부분공간의 원소라고 하자. 그리고 $\psi(x,\mu)$ 을 $\hat{\mu}_x$ 에 대하여 μ 에서 Talyor 전개하여 기대값을 취해보면 다음과 같은 결과를 얻는다.

$$E_\theta[\psi(x,\ \hat{\mu}_x)] = E\,(\psi(x,\ \hat{\mu}_x) - \psi(x,\mu))^2 = O(n^{-\frac{1}{2}})$$

3. 베타이항모형에의 적용

베타-이항 모형은 아래와 같다.

$$\begin{aligned} f(y_i) &= \int_0^1 f(y_i|p_i)w(p_i)d(p_i) \\ &= \binom{n_i}{y_i}\frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}\cdot\frac{\Gamma(\alpha+\beta+n_i)}{\Gamma(\alpha+y_i)\Gamma(\beta+n_i-y_i)}, \quad y_i=0,\cdots,n_i \quad \text{그리고}\ \alpha,\beta>0\end{aligned}$$

$$E[Y_i] = n_i\frac{\alpha}{(\alpha+\beta)} = n_i\mu$$

$$x = 1/(\alpha+\beta+1)$$

현재 모수 (α,β) 를 새로운 모수 (x,μ) 로 모수 변환하면 베타-이항모형은 아래와 같다. 여기서 x는 관심 있는 모수로서 일치도에 해당하며 μ는 매개모수이다(엄종석, 1995).

$$f(y_1,\cdots,y_n;x,\mu) = \prod_{i=1}^{n}\left\{\binom{R_i}{y_i}\cdot I_1\cdot I_2\cdot \prod_{j=1}^{R_i}(1+\frac{x(j-1)}{1-x})^{-1}\right\} \quad , \quad y_i=0,\cdots,R_i.$$

$$I_1 = \begin{cases} 1 & y_i=0, \\ \prod_{j=1}^{y_i}(\mu+\frac{x(j-1)}{1-x}) & y_i\neq 0, \end{cases}$$

$$I_2 = \begin{cases} \prod_{j=1}^{R_i-y_i}(1-\mu+\frac{x(j-1)}{1-x}) & y_i\neq R_i, \\ 1 & y_i=R_i. \end{cases}$$

베타이항모형에서 불편추정식의 직교화를 통하여 관심 있는 모수 x를 추정하자. $Y_1,\ldots,Y_m$은 베타이항분포로부터 얻은 확률표본이며 $l(x,\mu)$ 는 우도함수다. score함수를 구하면 아래와 같다.

$$S_1(x,\mu)=\frac{\partial l}{\partial x} = \sum_{i=1}^{m}\left\{ \sum_{j=1}^{y_i}\frac{j-1}{(1-x)^2\,(\mu+\frac{x(j-1)}{1-x})}\right.$$

$$\left. + \sum_{j=1}^{n_i-y_i}\frac{j-1}{(1-x)^2(\,1-\mu+\frac{x(j-1)}{1-x})^2} - \sum_{j=1}^{n_i}\frac{j-1}{(1-x)^2\,(1+\frac{x(j-1)}{1-x})^2}\right\}$$

$$S_2(x,\mu)=\frac{\partial l}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^{m}\left\{ \sum_{j=1}^{y_i}\frac{1}{\mu+\frac{x(j-1)}{1-x}} - \sum_{j=1}^{n_i-y_i}\frac{1}{1-\mu+\frac{x(j-1)}{1-k}}\right\}$$

불편추정식 $\psi_1(x,\mu)= S_1(x,\mu)$, 그리고 $\psi_2(x,\mu)= S_2(x,\mu)$ 로 정하고 ψ_1을 매개모수 μ의 2차 E-ancillary 부분공간으로 투사해 보자.

$$M_{2\times 2}=\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\eta}E_\eta(S_1)\,|_{\eta=\mu} & \frac{\partial}{\partial\eta}E_\eta(S_2)\,|_{\eta=\mu} \\ \frac{\partial^2}{\partial\eta^2}E_\eta(S_1)\,|_{\eta=\mu} & \frac{\partial^2}{\partial\eta^2}E_\eta(S_2)\,|_{\eta=\mu}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} Cov(S_1,\,S_2) & Var(S_2) \\ Cov(S_1,\,S_{22}+S_2^2) & Cov(S_1,\,S_{22}S_2^2)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{m\,i}_{x\mu} & \mathrm{m\,i}_{\mu\mu} \\ Cov(S_1,\,S_{22}S_2^2) & Cov(S_1,\,S_{22}S_2^2)\end{pmatrix}$$

$$\Sigma=\begin{pmatrix} \mathrm{m\,i}_{\mu\mu} & Cov(S_2,\;S_2^2+S_{22}) \\ Cov(S_2,\;S_2^2+S_{22}) & Var(\;S_2^2+S_{22})\end{pmatrix}$$

여기서 $i_{x\mu}$ 와 $i_{\mu\mu}$는 한 개의 관찰값에 대한 기대정보행열(expected information matrix) 의 원소들이다. 이를 이용하여 μ에 대해 2차 E-ancillary 부분공간으로의 ψ_1 의 투사된 추정식은 아래와 같다.

$$\psi_1^{**}= S_1(x,\mu)- C_1(x,\mu)\,S_2(x,\mu)- C_2(x,\mu)[\;S_2^2(x,\mu)+S_{22}(x,\mu)]$$

$$C_1(x,\mu)=\frac{\mathrm{m\,i}_{k\mu}Var(\;S_2^2+S_{22})-Cov(\;S_2,\;S_2^2+S_{22})Cov(\;S_1,\;S_2^2+S_{22})}{\mathrm{m\,i}_{\mu\mu}Var(\;S_2^2+S_{22})-Cov(\;S_2,\;S_2^2+S_{22})^2}$$

$$C_2(x,\mu)=\frac{-\mathrm{m\,i}_{k\mu}Cov(S_2,\ S_2{}^2+S_{22})+\mathrm{m\,i}_{\mu\mu}Cov(S_1,\ S_2{}^2+S_{22})}{\mathrm{m\,i}_{\mu\mu}Var(S_2{}^2+S_{22})-Cov(S_2,\ S_2{}^2+S_{22})^2}$$

이와 유사한 방법으로 μ에 관해 풀어야 할 추정식 ψ_2를 모수 x의 변화에 둔감한 x에 대한 E-ancillary 부분공간으로 투사하여 얻은 추정식 ψ_2^{**}는 다음과 같다.

$$\psi_2^{**}=S_2(x,\mu)-d_1(x,\mu)S_1(x,\mu)-d_2(x,\mu)[S_1^2(x,\mu)+S_{11}(x,\mu)]$$

여기서 d_1 과 d_2는 아래와 같다.

$$d_1(x,\mu)=\frac{\mathrm{m\ i}_{x\mu}\mathrm{Var}(S_1^2+S_{11})-Cov(S_1,S_1^2+S_{11})Cov(S_2,S_1^2+S_{11})}{\mathrm{m\ i}_{xx}\mathrm{Var}(S_1^2+S_{11})-\mathrm{Cov}(S_1,S_1^2+S_{11})^2}$$

$$d_2(x,\mu)=\frac{-\mathrm{m\ i}_{x\mu}\mathrm{Cov}(S_1,S_1^2+S_{11})+\mathrm{m\ i}_{x\mu}\mathrm{Cov}(S_2,S_1^2+S_{11})}{\mathrm{m\ i}_{xx}\mathrm{Var}(S_1^2+S_{11})-\mathrm{Cov}(S_1,S_1^2+S_{11})^2}$$

투사된 추정식은 불편추정식이며 매개모수 μ의 변화에 둔감하다. $\psi_2^{**}(x,\mu)=0$ 에서 x를 주어진 상수로 간주하여 $\widehat{\mu}_x$를 구한다. $\psi_2^{**}(x,\mu)$ 는 x의 변화에 둔감하므로, $\widehat{\mu}_x$은 주어진 x의 값에 영향을 적게 받는다. $\widehat{\mu}_x$을 $\psi_1^{**}(x,\mu)$ 에 대입하여 프로파일우도함수 $\psi_{PR}(x,\ \widehat{\mu}_x)=\psi_1^{**}(x,\ \widehat{\mu}_x)$ 를 만들어 $\hat{x}$를 구한다. $\psi_1^{**}(x,\mu)$ 은 μ의 변화에 둔감하기 때문에 $\widehat{\mu}_x$의 값이 갖고 있는 오차에 영향을 덜 받는 x의 추정값을 구할 수 있다.

4. 시뮬레이션을 통한 비교

이 절에서는 베타이항모형에서 불편추정식의 직교화를 통해 얻은 두 개의 2차 근사 직교추정식 ψ_1^{**}과 ψ_2^{**}를 이용하여 얻은 x 와 μ의 추정값과 일반적으로 사용하는 정규방정식을 이용한 최우추정값의 결과를 비교하고자 한다. 먼저 x와 μ가 주어진 베타-이항분포에서 100개의 표본을 추출하여 이를 이용하여 x와 μ의 추정값을 각 각의 방법대로 구한다. x와 μ의 값을 각 각 0.1에서 0.9로 변화시키면서 이와 같은 작업을 1000번 반복하여 구한 $\hat{x}$들의 평균과 표본표준오차를 기록한 것이 <표 4.1>이며 $\hat{\mu}$ 들의 평균과 표본표준오차를 기록한 것이 주어진 <표 4.2>이다. 각 각의 표에서 추정값의 괄호 안에 있는 값은 표준오차를 나타내며, 각 칸의 윗 부분의 값은 ψ_1^{**}과 ψ_2^{**}를 이용하여 구한 추정값이며 밑 부분의 값은 정규방정식을 Newton 방법에 의해 수치적으로 구한 최우추정값이다. 두 방법 모두 적률추정값을 초기값으로 사용하였다. <표 4.1>에서 보면 x값이 작거나 큰 경우에는 μ의 모든 값에서 ψ_1^{**}과 ψ_2^{**}를 이용하여 구한 x의 추정값의 편의가 작다. 그러나 x값이 0.5 근방에서는 최우추정값의 편의가 직교추정식의 추정값보다 작은 경향이 있거나 같아지지만 그 차이가 소수 4째 자리에서 발생된다. 그 이유는 x값이 작거나 클 경우 우도 함수는 모수 x와 μ의 변화에 더 민감해 지는데 ψ_1^{**}과 ψ_2^{**}는 모수의 변화에 둔

<표 4.1> $n_i=5, m=100$ 에서 직교추정식과 정규방정식으로 구한 κ의 추정값

μ \ κ	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
0.1	0.0981	0.1928	0.2955	0.3867	0.4802	0.6065	0.6924	0.8177	0.9087
	(0.0030)	(0.0057)	(0.0056)	(0.0065)	(0.0100)	(0.0074)	(0.0076)	(0.0055)	(0.0040)
	0.0918	0.1800	0.2943	0.3914	0.4816	0.5997	0.6816	0.8057	0.8958
	(0.0025)	(0.0051)	(0.0056)	(0.0065)	(0.0089)	(0.0067)	(0.0075)	(0.0052)	(0.0034)
0.2	0.0995	0.1955	0.2969	0.3955	0.4841	0.6050	0.7062	0.8091	0.9110
	(0.0020)	(0.0029)	(0.0037)	(0.0070)	(0.0043)	(0.0058)	(0.0048)	(0.0023)	(0.0013)
	0.0951	0.1950	0.2953	0.3958	0.4977	0.6069	0.6982	0.7967	0.8999
	(0.0019)	(0.0029)	(0.0033)	(0.0043)	(0.0030)	(0.0039)	(0.0037)	(0.0024)	(0.0012)
0.3	0.1081	0.2059	0.3107	0.4071	0.4854	0.6083	0.7000	0.8063	0.9095
	(0.0016)	(0.0019)	(0.0033)	(0.0045)	(0.0060)	(0.0030)	(0.0032)	(0.0034)	(0.0012)
	0.1021	0.2041	0.3083	0.3929	0.4915	0.6070	0.6995	0.7984	0.8973
	(0.0016)	(0.0018)	(0.0029)	(0.0037)	(0.0032)	(0.0024)	(0.0024)	(0.0020)	(0.0012)
0.4	0.0999	0.1963	0.2956	0.4066	0.4916	0.6070	0.7043	0.8163	0.9125
	(0.0016)	(0.0019)	(0.0019)	(0.0021)	(0.0028)	(0.0023)	(0.0021)	(0.0018)	(0.0011)
	0.0948	0.1953	0.2926	0.4007	0.4983	0.5998	0.6973	0.8072	0.9008
	(0.0016)	(0.0018)	(0.0019)	(0.0020)	(0.0026)	(0.0023)	(0.0020)	(0.0016)	(0.0010)
0.5	0.0968	0.1970	0.3014	0.4043	0.4783	0.6137	0.7078	0.8053	0.9131
	(0.0013)	(0.0022)	(0.0023)	(0.0023)	(0.0022)	(0.0039)	(0.0022)	(0.0014)	(0.0010)
	0.0917	0.1969	0.3011	0.4038	0.5017	0.6010	0.6986	0.7964	0.9019
	(0.0013)	(0.0022)	(0.0023)	(0.0023)	(0.0021)	(0.0025)	(0.0021)	(0.0014)	(0.0009)
0.6	0.0982	0.1956	0.3083	0.3996	0.5019	0.6004	0.7167	0.8100	0.9113
	(0.0014)	(0.0019)	(0.0030)	(0.0027)	(0.0027)	(0.0037)	(0.0025)	(0.0015)	(0.0010)
	0.1010	0.1944	0.3048	0.3939	0.4995	0.5940	0.7089	0.8007	0.8986
	(0.0015)	(0.0018)	(0.0029)	(0.0025)	(0.0027)	(0.0034)	(0.0023)	(0.0014)	(0.0009)
0.7	0.0915	0.1994	0.2979	0.4077	0.4999	0.5975	0.6922	0.8014	0.9138
	(0.0017)	(0.0028)	(0.0030)	(0.0036)	(0.0047)	(0.0058)	(0.0057)	(0.0028)	(0.0008)
	0.0865	0.1976	0.2920	0.3930	0.5019	0.5998	0.6937	0.7959	0.9025
	(0.0017)	(0.0026)	(0.0026)	(0.0029)	(0.0039)	(0.0042)	(0.0036)	(0.0021)	(0.0007)
0.8	0.1033	0.2039	0.2892	0.3929	0.4814	0.6025	0.6982	0.8041	0.8999
	(0.0019)	(0.0033)	(0.0051)	(0.0055)	(0.0062)	(0.0079)	(0.0047)	(0.0027)	(0.0017)
	0.0980	0.2045	0.2881	0.3853	0.4925	0.5972	0.6922	0.7929	0.8889
	(0.0015)	(0.0032)	(0.0046)	(0.0045)	(0.0040)	(0.0055)	(0.0038)	(0.0026)	(0.0017)
0.9	0.1011	0.1839	0.2775	0.3618	0.4817	0.6009	0.7101	0.7956	0.8923
	(0.0030)	(0.0039)	(0.0062)	(0.0090)	(0.0060)	(0.0111)	(0.0080)	(0.0082)	(0.0038)
	0.0943	0.1889	0.2865	0.3749	0.4915	0.5969	0.7023	0.7928	0.8809
	(0.0026)	(0.0041)	(0.0065)	(0.0087)	(0.0097)	(0.0090)	(0.0076)	(0.0052)	(0.0034)

각 칸의 윗 부분은 직교추정식을 이용한 측정값이고 아랫 부분은 정규방정식으로부터 구한 최우추정값이며 괄호 안은 표본표준편차이다.

<표 4.2> $n_i=5,\ m=100$ 에서 직교추정식과 정규방정식으로 구한 μ의 추정값

μ \ x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
0.1	0.1005 (0.0002)	0.0975 (0.0003)	0.1023 (0.0004)	0.0977 (0.0005)	0.0975 (0.0006)	0.0982 (0.0006)	0.1009 (0.0006)	0.1005 (0.0007)	0.0956 (0.0009)
	0.1005 (0.0002)	0.0974 (0.0003)	0.1022 (0.0004)	0.0975 (0.0005)	0.0972 (0.0006)	0.0972 (0.0006)	0.1000 (0.0005)	0.1006 (0.0008)	0.0950 (0.0008)
0.2	0.2017 (0.0005)	0.2014 (0.0005)	0.2005 (0.0008)	0.1955 (0.0008)	0.1973 (0.0009)	0.2009 (0.0010)	0.1947 (0.0012)	0.1950 (0.0017)	0.2611 (0.3593)
	0.2017 (0.0005)	0.2019 (0.0005)	0.2012 (0.0008)	0.1958 (0.0008)	0.1969 (0.0009)	0.1995 (0.0010)	0.1940 (0.0012)	0.1937 (0.0016)	0.2007 (0.0014)
0.3	0.2997 (0.0007)	0.2977 (0.0006)	0.3070 (0.0049)	0.3044 (0.0011)	0.2960 (0.0011)	0.3004 (0.0014)	0.2992 (0.0015)	0.2974 (0.0016)	0.2977 (0.0018)
	0.2997 (0.0007)	0.2977 (0.0005)	0.3002 (0.0008)	0.3038 (0.0010)	0.2959 (0.0011)	0.3000 (0.0014)	0.2985 (0.0015)	0.2977 (0.0015)	0.2983 (0.0019)
0.4	0.3976 (0.0005)	0.4036 (0.0009)	0.3979 (0.0011)	0.3993 (0.0013)	0.4010 (0.0013)	0.3997 (0.0017)	0.4067 (0.0015)	0.4033 (0.0017)	0.3999 (0.0021)
	0.3975 (0.0005)	0.4035 (0.0009)	0.3973 (0.0010)	0.3996 (0.0013)	0.4003 (0.0013)	0.3995 (0.0017)	0.4073 (0.0015)	0.4048 (0.0017)	0.4002 (0.0022)
0.5	0.4983 (0.0009)	0.5026 (0.0012)	0.5008 (0.0013)	0.5022 (0.0011)	0.5019 (0.0018)	0.5068 (0.0017)	0.5001 (0.0017)	0.4934 (0.0024)	0.5057 (0.0022)
	0.4983 (0.0009)	0.5025 (0.0012)	0.5008 (0.0013)	0.5013 (0.0011)	0.5023 (0.0017)	0.5054 (0.0017)	0.4989 (0.0016)	0.4939 (0.0024)	0.5058 (0.0021)
0.6	0.6008 (0.0006)	0.6056 (0.0010)	0.6036 (0.0010)	0.6005 (0.0014)	0.5935 (0.0015)	0.6032 (0.0017)	0.6024 (0.0021)	0.5999 (0.0019)	0.5963 (0.0028)
	0.6008 (0.0006)	0.6055 (0.0010)	0.6036 (0.0010)	0.6006 (0.0014)	0.5933 (0.0014)	0.6037 (0.0017)	0.6019 (0.0021)	0.6007 (0.0019)	0.5969 (0.0027)
0.7	0.6997 (0.0006)	0.6990 (0.0007)	0.7012 (0.0012)	0.7013 (0.0010)	0.6968 (0.0010)	0.7058 (0.0013)	0.7045 (0.0018)	0.7007 (0.0020)	0.6949 (0.0024)
	0.6997 (0.0006)	0.6987 (0.0007)	0.7010 (0.0011)	0.7010 (0.0010)	0.6974 (0.0011)	0.7059 (0.0012)	0.7042 (0.0018)	0.7014 (0.0020)	0.6966 (0.0020)
0.8	0.7968 (0.0005)	0.7957 (0.0006)	0.8071 (0.0008)	0.8007 (0.0010)	0.8035 (0.0012)	0.8043 (0.0012)	0.8007 (0.0013)	0.7988 (0.0018)	0.8027 (0.0015)
	0.7968 (0.0005)	0.7958 (0.0006)	0.8075 (0.0008)	0.8015 (0.0009)	0.8043 (0.0012)	0.8038 (0.0012)	0.8016 (0.0013)	0.7995 (0.0016)	0.7995 (0.0011)
0.9	0.8970 (0.0002)	0.9010 (0.0004)	0.9024 (0.0004)	0.9033 (0.0005)	0.8994 (0.0006)	0.9011 (0.0006)	0.9019 (0.0006)	0.9016 (0.0008)	0.8974 (0.0015)
	0.8970 (0.0002)	0.9009 (0.0004)	0.9024 (0.0004)	0.9037 (0.0004)	0.8997 (0.0006)	0.9015 (0.0005)	0.9027 (0.0006)	0.9012 (0.0008)	0.8962 (0.0008)

각 칸의 윗 부분은 직교추정식을 이용하여 구한 추정값이며 아랫 부분은 정규방정식으로부터 구한 최우추정값이다. 괄호 안은 표본표준오차이다.

감해지도록 만들었기 때문에 프로파일우도함수가 모수의 변화에 크게 민감하게 변화하지 않으므로 ψ_1^{**}과 ψ_2^{**}를 이용한 κ 추정값의 편의가 작아진다. κ가 0.5근처의 값을 가질 경우에는 우도함수가 모수의 변화에 따른 변화가 크지 않아서 ψ_1^{**}과 ψ_2^{**}에서 구한 추정값과 정규방정식에서 구한 추정값과 비슷하거나 정규방정식의 추정값의 편의가 작아진다. 즉 표본이 주어진 상태에서의 우도함수가 표본을 발생시킨 확률밀도함수와 비슷한 형태를 갖는다. 그래서 표본이나 μ값이 변하더라도 우도함수가 확률밀도함수와 비슷한 형태를 가지므로 최우추정값의 편의가 작아진다. 반면 κ값이 작거나 큰 값을 갖으면 표본이나 μ의 변화에 따른 우도함수의 변화가 커서 정규방정식에 의해 구한 최우추정값의 편의가 커진다. ψ_1^{**}과 ψ_2^{**}는 모두 2차 E-ancillary 부분공간으로 투사하였기에 κ가 중간 값을 갖는 경우 최우추정값보다 편의가 커졌으나 투사부분공간의 차수를 높임으로써 편의를 줄일 수 있으나 투사된 불편추정식을 얻기 위해서는 복잡한 계산을 요구한다. 대체로 최우추정값의 표준오차가 직교추정식의 추정값보다 작은 경향이 있다. <표 4.2>에서 보면 μ의 추정량을 보면 직교추정식의 μ의 추정값이 모수공간 대부분에서 최우추정값보다 편의가 작거나 같은 값을 갖는데 이는 직교추정식을 이용함으로서 추정량의 오차를 줄일 수 있음을 보여준다.

5. 결론

일반적으로 혼합모형은 많은 모수를 포함한다. 모형에 모수가 많이 존재하는 경우 관심 있는 모수에 대한 추론은 주로 조건 프로파일 우도함수를 이용한다. 그러나 비지수족에서는 조건 프로파일 우도함수가 매개모수의 변화에 매우 민감하게 변화하므로 관심 있는 모수에 대한 추론에 오차가 커진다. 이 대안으로 모수 직교화가 있으나 비지수족인 경우 모수공간에서 전역적 모수 직교화 과정이 어려워 이를 적용하는데 한계가 있다. 모수 직교화 대안으로 추정식의 직교화를 통하여 모수의 직교화와 같은 효과를 얻을 수 있다. 즉 추정식을 특정모수의 E-ancillary 함수의 부분공간으로 투사시킴으로 추정식의 직교화를 얻을 수 있다. ψ_1은 κ를 추정하기 위해 매개변수 μ의 E-ancillary부분공간으로 투사하고, ψ_2는 μ를 추정하기 위하여 κ의 E-ancillary부분공간으로 투사하며, ψ_1과 ψ_2는 투사된 공간의 기저함수로 표현하면 투사된 추정식 ψ_1^{**}과 ψ_2^{**}는 서로 근사적으로 직교하여 직교추정식이 되며, 이는 모수의 직교화와 같은 효과를 갖는다. 제2.2절에서 부분공간으로 투사된 추정식이 주어졌으며, 이를 제3절에서 베타이항모형에 적용하였다. 그 결과 <표 4.1>에서 보듯이 μ의 값이 0.1에서 0.5사이이며 κ값이 0.3 이하인 경우와 μ의 값이 0.8에서 0.9사이이며 κ값이 0.7에서 0.9 사이인 경우 최우추정법으로 추정한 추정값보다 직교추정식을 이용하여 구한 추정값의 편의가 작아졌다. κ값이 0.5주위의 중간 값인 경우 대체적으로 직교추정식을 이용한 추정값이 최우추정값보다 편의가 크지만 소수 4째 이하 자리에서 차이를 보여 직교추정식을 이용한 결과가 매우 좋음을 알 수 있다. 더욱이 <표 4.2>에서 보듯이 직교 추정식을 이용하여 얻은 μ의 추정값은 모수공간 대부분에서 최우추정값보다 편의가 같거나 작으며 표준오차도 비슷한 값을 갖음을 알았다. 추정식의 직교화를 통하여 얻은 추정 결과는 최우추정법

을 이용한 결과보다 모수의 전 영역에서 편의가 작거나 같은 것으로 판명되어 모수가 많이 포함된 모형에 정확한 추정값을 얻을 수 있다. 실세계의 많은 모형이 비지수족인 혼합모형 형태를 가지므로 그 응용분야는 넓다고 하겠다. 직교추정식을 이용하여 구한 추정량의 분포를 구하여 관심있는 모수에 대하여 검정을 유도하는 것이 향후 연구과제이다.

참고문헌

[1] 엄종석 (1995). 일반혼합이항모형에서 평가일치도의 로버스트 추정, *The Korean Communications in Statistics*, Vol. 2, No. 2, 74-84.

[2] Bartko, J.J. (1966). The Intraclass Correlation Coefficient as a Measure of Reliability. *Psycho. Rep.* 19, 3-11.

[3] Cohen, J.(1960). A Coefficient of Agreement for Nominal Scales. *Educational and Pschological Measurement* 20, 30-46.

[4] Crowder, M.J. (1979). Inference about the Intraclass Correlation Coefficient in the Beta-Binomial Anova for Proportions. *J.R.S.S. B* 41, 230-234

[5] Fleiss, J.L. (1971). Measuring Nominal Scale Agreement Among Many Raters. *Psychol. Bulletin* 76, 378-382.

[6] Godambe, V.P. and Tompson, M.E (1974). Estimating Equations in the Presence of a Nuisance Parameter. *Annals of Statistics.* 2, 568-571

[7] Hubert, L.(1977). Kappa Revisited. *Psychol. Bulletin* 84, 289-297.

[8] Huzurbazar, V.S. (1950). Probability Distribution and Orthogonal Parameters. *Proc. Camb. Phil. Soc.* 46, 281-284.

[9] Jeffreys, H. (1961) *Theory of Probability.* 3rd edition. Oxford.

[10] Kraemer, H.C. (1979) Ramifications of a Population Model for Kappa as a Coefficient of Reliability. *Psychometrika* 44, 461-472.

[11] Rudin, W.(1987) *Real and Complex Analysis*, 3rd ed., McGraw-Hill, New York, Ch6.

[12] Small, C.G and McLeish, D.L.(1991). *Geometrical Aspects of efficiency criteria for spaces of estimating functions,* In *Estimating funtion,* Oxford University Press, Oxford.

[13] Verducci, J.S., Mack, E.M. and DeGroot, M.H. (1988) Estimating multiple rater agreement for a rare diagnosis. *Journal of Multivariate Analysis* 27, 512-534.

[2003년 5월 접수, 2003년 7월 채택]