Journal of the Korean Data & Information Science Society
2013, **24**(2), 333–339
http://dx.doi.org/10.7465/jkdi.2013.24.2.333
한국데이터정보과학회지

불완전계수의 선형모형에서 추정가능함수

최재성[1]

[1]계명대학교 통계학과

접수 2013년 2월 24일, 수정 2013년 3월 11일, 게재확정 2013년 3월 16일

요 약

본 논문은 불완전계수의 모형행렬을 갖는 선형모형에서 추정가능함수를 다루고 있다. 고정효과 모형의 모수들은 일반적으로 추정가능한 모수가 아니므로 추정가능한 모수들의 함수를 구하기 위한 방법으로 완전계수의 인자분해 방법을 제시하고 있다. 완전계수의 인자분해 방법으로 구해진 추정가능함수의 타당성을 확인하기 위한 사영행렬은 불완전계수의 모형행렬을 구성하는 행벡터로 생성되는 벡터공간으로의 사영행렬과 동일함을 보여주고 있다. 완전계수의 인자분해로 추정가능함수를 구하는 방법과 모수들의 선형함수가 추정가능함수인 가의 확인을 위한 사영행렬의 이용에 관해 벡터공간의 관점에서 다루어지고 있다. 또한, 추정가능함수의 기저 구성에 관한 구체적 논의가 행해지고 있다.

주요용어: 기저, 불완전계수, 사영행렬, 완전계수의 인자분해, 추정가능함수.

1. 서론

통계자료를 분석하기 위해 선형모형을 가정할 때 자료의 행렬표현에서 주어지는 모형행렬은 완전계수의 모형행렬이거나 불완전계수의 모형행렬이다. 완전계수의 모형행렬로 주어지는 경우에 모형내 모수벡터의 추정은 정규방정식으로부터 쉽게 구해진다. 불완전계수의 모형행렬로 주어지는 경우에 모수벡터는 일반적으로 추정가능한 모수들의 벡터가 아니므로 모수벡터의 추정은 의미가 없다.

불완전계수의 모형행렬을 갖는 선형모형이 가정되었을 때 추정가능한 함수들이 무엇인 가를 파악하는 것은 추정가능한 모수의 추론을 위해 필요하게 된다. 선형모형의 가정하에 추정가능함수에 대한 정의와 추론에 대한 논의는 Searle (1971), Graybill (1976) 그리고 Milliken과 Johnson (1984) 등에서 살펴볼 수 있다.

선형모형의 행렬식표현에서 모형행렬이 완전계수의 열행렬이 아닌 경우에 모형내 미지모수들을 추정하는 방법으로 일부 모수들을 영으로 두는 제약식을 이용하여 모형행렬의 계수에 해당하는 모수들을 추정하거나 또는 모수들의 합을 영으로 두는 제약식을 이용하여 추정하게 된다. 제약식을 이용하여 모수를 추정하는 경우에 추정가능하지 않는 모수들을 이용한 제약식의 이용은 모형행렬의 계수에 변화를 주지 않으나 추정가능한 모수가 제약식으로 이용되는 경우에는 모형행렬의 계수가 줄어들게 되고 제약식으로 이용된 추정가능함수의 추정은 가능하지 않게 된다.

불완전계수의 모형행렬을 갖는 행렬모형식으로부터 모수벡터의 선형함수로 주어지는 추정가능함수의 구성과 검증방식에 대한 논의는 모형연구에서 통계적 추론이 행해져야 하는 중요한 부분이다. 다시말하면, 추정가능함수의 구성방법과 행공간으로의 사영을 나타내는 사영행렬을 이용하여 추정가능성을 확인하는 방법이 필요하게 된다.

본 논문은 선형모형의 가정 하에 자료의 행렬식 표현에서 불완전계수의 모형행렬을 갖는 경우 미지의 모수벡터를 추정하는 방법으로 제약식을 이용하지 않고 불완전계수의 모형행렬을 완전계수의 모형행렬로 변환시켜 추정가능함수들로 주어지는 모수벡터를 추정하는 방법을 논의하고자 한다.

[1] (704-701) 대구광역시 달서구 신당동 1000번지, 계명대학교, 통계학과, 교수. E-mail: jschoi@kmu.ac.kr

2. 불완전계수의 선형모형

자료분석을 위한 선형모형으로 다음의 행렬모형식을 가정한다.

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \tag{2.1}$$

단, $\boldsymbol{y}$는 $n\times 1$벡터, $\boldsymbol{X}$는 계수가 $q\ (<p)$인 $n\times p$의 모형행렬이고 $\boldsymbol{\beta}$는 $p\times 1$인 모수벡터이며 $\boldsymbol{\epsilon}$은 $n\times 1$인 오차벡터이다. $\boldsymbol{X}$의 계수가 완전열계수가 아니므로 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$내 p개 모수들은 일반적으로 추정가능한 모수가 아니다. 식 (2.1)에서 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$의 한 선형함수를 $\boldsymbol{l'\beta}$라 둘때, $\boldsymbol{l'\beta}$의 불편추정량이 $\boldsymbol{y}$의 성분 y_i들의 한 선형함수이기만 하면 추정가능함수로 정의된다. 추정가능함수의 정의로부터 $E(\boldsymbol{c'y}) = \boldsymbol{l'\beta}$되는 추정량은 불편추정량이어야 하고 $\boldsymbol{y}$의 선형함수가 되는 벡터 $\boldsymbol{c}$가 존재해야 함을 의미하고 있다. 즉, $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{X} = \boldsymbol{l}'$가 되는 $\boldsymbol{c}$이므로 $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{X}$는 $\boldsymbol{X}$의 행벡터들의 한 선형결합임을 보여주고 있다. 다시 말하면, $\boldsymbol{X}$의 행벡터들에 의해 생성되는 행공간에 속하는 벡터이며 $\boldsymbol{l}'$이 되는 벡터이다.

계수가 q인 모형행렬 $\boldsymbol{X}$의 행벡터들에 의해 생성되는 행공간의 차원은 모형행렬 $\boldsymbol{X}$의 계수와 일치하므로 선형적으로 독립인 행벡터의 수는 q가 된다. 따라서, 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$의 선형함수이며 독립인 추정가능함수의 수는 q개 임을 알 수 있다. $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{X}$로 표현되는 $\boldsymbol{l}'$가 $\boldsymbol{X}$의 행공간에 속하는 벡터인 가를 확인하기 위해 사영행렬을 이용할 수 있다. $\boldsymbol{X}$의 행공간으로의 사영행렬은 $\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X}$이므로 $\boldsymbol{l}'$가 $\boldsymbol{X}$의 행공간에 속하는 벡터인 가는 $\boldsymbol{l}'$가 $\boldsymbol{l}'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X}$인 가를 확인하면 된다. $\boldsymbol{l}'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X} = \boldsymbol{l}'$일 때, 추정가능함수 $\boldsymbol{l}'\boldsymbol{\beta}$의 불편추정량이 되는 $\boldsymbol{c}'\boldsymbol{y}$의 $\boldsymbol{c}'$은 어떻게 구해야 되는 가를 생각해 보기로 한다.

모형행렬 $\boldsymbol{X}$의 계수가 q이므로 q개의 선형적으로 독립인 추정가능함수를 생각할 수 있다. 이들 q개의 추정가능함수를 $\boldsymbol{l}_1'\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{l}_2'\boldsymbol{\beta}, \cdots, \boldsymbol{l}_q'\boldsymbol{\beta}$라 두자. $\boldsymbol{L}$을 q개의 행벡터 $\boldsymbol{l}_i'\ (i = 1, 2, \cdots, q)$들로 구성된 $q\times p$행렬이라 두면 $\boldsymbol{L\beta}$는 추정가능함수들의 한 기저집합을 이루게 된다. $\boldsymbol{L\beta}$가 추정가능함수들의 한 기저집합을 이루고 있을 때 $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{L\beta}$라 두면 식 (2.1)은 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$로부터 $\boldsymbol{\theta}$로의 재모수화된 식으로 표현된다.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y} &= \boldsymbol{X}(\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L}))\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \\ &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \\ &= \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon} \end{aligned} \tag{2.2}$$

단, $\boldsymbol{Q}$는 계수가 q인 $n\times q$의 완전열계수의 모형행렬이다. 추정가능함수들의 한 기저집합을 나타내는 행렬 $\boldsymbol{L}$은 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X}$의 성질을 갖는 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$의 알려진 계수행렬이다. $\boldsymbol{L}$은 $\boldsymbol{X}$의 행공간에 속하는 q개의 행벡터들의 집합이므로 $\boldsymbol{L}$의 행공간으로의 사영행렬을 $\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L}$로 나타내면 $\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L} = \boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X}$이다. 행렬 $\boldsymbol{L}$을 구하는 한 가지 방법은 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$에 가우스 소거법을 적용하여 q개의 선형적으로 독립인 행벡터들을 구하여 구성할 수 있다. 본 논문은 불완전계수의 모형행렬 $\boldsymbol{X}$를 행렬들의 곱으로 분해하여 완전열계수의 행렬로 표현하게 되면 추정가능함수의 또 다른 기저집합을 얻을 수 있다는 점에 착안하고 있다. 모형행렬 $\boldsymbol{X}$가 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{R}$로 최대계수의 행렬로 인자분해 되면 해당하는 모형식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y} &= (\boldsymbol{C}\boldsymbol{R})\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \\ &= \boldsymbol{C}\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\epsilon} \end{aligned} \tag{2.3}$$

이다. 단, $\boldsymbol{C}$는 $n\times q$인 완전열계수 행렬이고 $\boldsymbol{R}$은 $q\times p$인 완전행계수 행렬이다. 그리고 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{R\beta}$인 $q\times 1$벡터이다. 식 (2.3)은 모형행렬 $\boldsymbol{X}$를 최대계수의 행렬로 인자분해하게 되면 추정가능함수들의 한 기저집합이 $\boldsymbol{R\beta}$로 주어짐을 의미하고 있다. 그러므로 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$에 가우스 소거법을 적용하여 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X}$의 성질을 갖는 행렬을 구하지 않아도 된다.

모형행렬 $\boldsymbol{X}$의 최대계수 인자분해를 생각해 보자. $\boldsymbol{X}$의 분할행렬을 $\begin{bmatrix} \boldsymbol{X}_{11} & \boldsymbol{X}_{12} \\ \boldsymbol{X}_{21} & \boldsymbol{X}_{22} \end{bmatrix}$라 둔다. 여기서 $\boldsymbol{X}_{11}$은 $q \times q$인 정칙행렬이다. $\boldsymbol{X}_{12}$는 $q \times (p-q)$인 행렬이고 $\boldsymbol{X}_{21}$은 $(n-q) \times q$인 행렬이며 $\boldsymbol{X}_{22}$는 $(n-q) \times (p-q)$인 행렬로 주어진다. 분할행렬 $\boldsymbol{X}$의 $\boldsymbol{CR}$인자분해는

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}_{11} \\ \boldsymbol{X}_{21} \end{pmatrix} (\boldsymbol{I},\ \boldsymbol{X}_{11}^{-1}\boldsymbol{X}_{12}) \text{ 이거나 또는 } \boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I} \\ \boldsymbol{X}_{21}\boldsymbol{X}_{11}^{-1} \end{pmatrix} (\boldsymbol{X}_{11},\ \boldsymbol{X}_{12})$$

로 표현된다. $\boldsymbol{R}$로 표현되는 두 유형의 행렬 중 어느 것을 이용하여도 동일한 행공간을 생성하며 이들에 의한 사영행렬도 $\boldsymbol{X}^{-}\boldsymbol{X}$임을 알 수 있다. 행렬 $\boldsymbol{X}$의 분할에서 $\boldsymbol{X}_{11}$이 정칙행렬이 아닌 경우에는 교환행렬을 이용하여 정칙행렬로 표현한 다음 인자분해 하면 된다.

3. 추정가능함수의 벡터공간

모형행렬 $\boldsymbol{X}$가 불완전계수이면 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$의 원소들은 일반적으로 추정가능하지 않은 모수들로 구성된다. 따라서 모형식에서 주어지는 모수벡터의 어떤 함수가 추정가능한 가에 대한 논의는 추론에 있어서 중요하다고 본다. 모형식 (2.1)에서 $\boldsymbol{\beta}$의 선형함수들인 $A\boldsymbol{\beta}$가 추정가능하다고 하자. A를 계수가 $r\ (\le q)$인 $q \times p$행렬이라 둘 때, $A\boldsymbol{\beta}$는 추정가능함수들의 벡터이므로 $A = A\boldsymbol{X}^{-}\boldsymbol{X}$인 성질을 만족하게 된다. 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$의 선형함수로 추정가능함수를 나타내는 행렬 A와 모형행렬 $\boldsymbol{X}$그리고 완전행계수 행렬 $\boldsymbol{R}$이 갖는 특성을 살펴보기로 한다. 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$의 추정가능함수는 행렬 $\boldsymbol{X}$의 행벡터들로 생성되는 행공간내 벡터와의 선형결합으로 주어진다. 따라서 추정가능함수이기 위한 조건은

$$A = A\boldsymbol{R}^{-}\boldsymbol{R} = A\boldsymbol{X}^{-}\boldsymbol{X} \tag{3.1}$$

이다.

식 (3.1)은 $\boldsymbol{R}^{-}\boldsymbol{R}$과 $\boldsymbol{X}^{-}\boldsymbol{X}$에 의해 생성되는 벡터공간은 동일함을 의미하고 있다. $\boldsymbol{R}^{-}\boldsymbol{R}$과 $\boldsymbol{X}^{-}\boldsymbol{X}$는 또한 동일 벡터공간으로의 사영행렬을 나타내므로 $\boldsymbol{X}^{-}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{R}^{-}\boldsymbol{R}$로 표현된다. 동일 벡터공간을 나타내는 사영행렬을 이용하여 고유근과 고유벡터를 얻을 수 있다. 추정가능함수들의 한 기저집합은 모형행렬의 행공간을 구성하는 정규직교기저의 공간 점으로 주어진다. 따라서 주어진 추정가능함수를 추정하기 위해 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$나 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'$의 고유근과 고유벡터를 구한 다음 행공간의 정규직교 기저로 이용할 수 있다. 즉, $\boldsymbol{l}'\boldsymbol{\beta}$가 추정가능함수일 때, $\boldsymbol{l}'\boldsymbol{\beta}$의 추정값 $\boldsymbol{l}'\widehat{\boldsymbol{\beta}}$은 정규방정식

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} \tag{3.2}$$

의 해 $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} + [\boldsymbol{I} - (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}]\boldsymbol{h}$를 이용하여 구한다. $\boldsymbol{h}$는 임의의 벡터이고 $(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-}$는 Moore-Penrose의 일반화된 역행렬이다. $\boldsymbol{l}'\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{l}'\boldsymbol{X}^{-}\boldsymbol{y}$로 구해진다. 모형행렬 $\boldsymbol{X}$가 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{CR}$로 인자분해 되면 해당하는 정규방정식의 형태는

$$\boldsymbol{C}'\boldsymbol{C}\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{C}'\boldsymbol{y} \tag{3.3}$$

이다. $\boldsymbol{\alpha}$의 해 $\widehat{\boldsymbol{\alpha}} = (\boldsymbol{C}'\boldsymbol{C})^{-1}\boldsymbol{C}'\boldsymbol{y}$로 구해진다. 모형행렬 $\boldsymbol{X}$에서의 추정가능함수 $\boldsymbol{l}'\boldsymbol{\beta}$는 완전계수 행렬 $\boldsymbol{C}$에서의 모수벡터 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{\beta}$와의 관계는

$$\boldsymbol{l}'\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{l}'\boldsymbol{R}^{-}\boldsymbol{\alpha} \tag{3.4}$$

이다. 또한 $\boldsymbol{l}'\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{l}'\boldsymbol{R}^{-}\widehat{\boldsymbol{\alpha}}$으로 구해짐을 알 수 있다. 이는 불완전계수의 모형행렬을 갖는 모형에서의 추정가능함수는 완전계수의 모형에서도 동일하게 구해짐을 나타내고 있다. 실제로 불완전계수의 모

형행렬 $\boldsymbol{X}$나 완전계수로 변환된 행렬 $\boldsymbol{C}$에 의해 생성되는 벡터공간은 동일한 사영공간을 나타내므로 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^- = \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^-$가 된다. 사영행렬에서의 계수가 $R(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^-) = R(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^-) = q$이면 독립인 추정가능함수의 수는 q이다. 이들 q개의 독립인 기저함수의 일반적인 형태는 상호독립인 행벡터들을 구함으로써 파악될 수 있다.

$\boldsymbol{l}'\boldsymbol{\beta}$가 추정가능함수이면 모형행렬 $\boldsymbol{X}$의 행공간에서 $\boldsymbol{l}$은 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 열벡터들의 선형함수로 주어진다. 또한, $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 고유벡터와 고유근에 의한 스펙트럼 분해를 이용하여 모형행렬 $\boldsymbol{X}$의 계수에 해당하는 추정가능함수의 기저를 유도할 수 있다.

추정가능함수의 가능한 기저는 모형행렬 $\boldsymbol{X}$가 완전계수이거나 또는 불완전계수의 행렬이거나 간에 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 가우스행렬에서 구해지는 독립인 행벡터들을 이용할 수 있다. 모수벡터의 한 선형함수가 추정가능함수가 되기 위한 조건은 행공간을 구성하는 행벡터들의 선형함수이어야 하므로 가우스행렬로부터 선형독립인 벡터를 구한다. 모수벡터의 선형비교를 나타내는 관심의 함수가 추정가능한 가의 진위여부는 행공간으로의 사영행렬을 이용하여 확인할 수 있다. 추정가능함수에 대한 논의는 Searle (1971), Graybill (1976) 그리고 Milliken과 Johnson (1984) 등에서 살펴볼 수 있다. Choi (2010, 2011)은 반복측정의 분할구 실험자료의 분석을 위한 혼합모형과 일원 확률모형의 분산성분을 사영에 의해 추론하는 방법을 다루었다. 그리고 Choi (2012)는 모수모형에서 추정가능함수들을 구하는 방법으로 가우스-조르단 소거법에 의한 기약가우스행렬의 이용을 제시하고 있다. Elswick (1991)은 선형모형에서 추정함수를 구하기 위한 간편한 방법을 논의하고 있다.

4. 추정가능함수의 자료 예

불완전계수의 모형행렬을 갖는 식 (2.1)에서 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$는 추정가능한 모수들의 집합이 아니다. 일원 분류상의 자료분석을 통해 추정가능함수의 의미를 구체적으로 살펴보고 확인해 보기로 한다. Table 4.1은 세 가지 처리에 따른 실험단위의 반응자료이고 처리는 실험단위들에 임의로 배정되었다 가정한다.

Table 4.1 One-way experimental data

treatment1	treatment2	treatment3
19, 20, 21	24, 26, 26	32, 35, 32

Table 4.1의 자료분석을 위한 모형행렬식 (2.1)의 $\boldsymbol{X}$는 계수가 3인 행렬이고 해당하는 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$는 $\boldsymbol{\beta}' = (\mu, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$이다. 여기서 μ는 전체평균을 나타내고 α_i는 i번째 처리효과를 나타낸다 ($i = 1, 2, 3$). 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$내 개별원소는 추정가능한 모수들이 아니므로 이들 모수에 대한 추론은 가능하지 않게 된다. 따라서 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$의 선형함수로서 추정가능한 함수를 구하기 위해 $\boldsymbol{l}'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X} = \boldsymbol{l}'$되는 $\boldsymbol{l}$을 찾아야 한다. $\boldsymbol{l}'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X} = \boldsymbol{l}'$의 의미는 $\boldsymbol{l}'$이 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 독립인 행벡터들의 선형결합임을 나타내므로 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 독립인 행벡터들을 구해야 한다. $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 독립인 행벡터를 구하는 한 가지 방법은 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 가우스행렬을 이용하는 것이다. $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 가우스행렬로부터 모든 원소가 0아닌 행벡터들을 얻는다. 모든 원소가 0아닌 행벡터들의 수는 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 계수에 해당한다. Table 4.1의 자료를 분석하기 위한 모형행렬식 (2.1)의 적용에서 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 독립인 세 행벡터들은

$$\boldsymbol{r}_1 = (1, 1/3, 1/3, 1/3),\ \boldsymbol{r}_2 = (0, 1, -1/2, -1/2),\ \boldsymbol{r}_3 = (0, 0, 1, -1)$$

로 구해진다.

이들 세 벡터의 한 선형결합으로 $3\boldsymbol{r}_1 + 2\boldsymbol{r}_2 + \boldsymbol{r}_3$주어지는 $\boldsymbol{l}_1' = (3, 3, 1, -1)$이다. 이때의 $\boldsymbol{l}_1'$는 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$와의 선형결합으로 추정가능함수가 되어야한다. 즉, $\boldsymbol{l}_1'\boldsymbol{\beta}$가 추정가능함수인 가의 확인은 $\boldsymbol{l}_1'$가

$\boldsymbol{l}_1'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X} = \boldsymbol{l}_1'$로 검증된다. 서로 독립인 행벡터들의 선형함수로 추정가능한 함수들의 수는 제한되어 있지 않다. 추정가능함수들의 한 기저집합은 선형적으로 독립인 추정가능함수들로 구성된다.

$\boldsymbol{l}_2' = (0, 2, 0, -2)$라 둘 때, $\boldsymbol{l}_2'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X} = \boldsymbol{l}_2'$인 조건을 만족하므로 $\boldsymbol{l}_2'\boldsymbol{\beta}$는 추정가능함수이다. 또한, $\boldsymbol{l}_3' = (1, 1, 0, 0)$라 둘 때, $\boldsymbol{l}_3'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X} = \boldsymbol{l}_3'$인 조건을 만족하므로 $\boldsymbol{l}_3'\boldsymbol{\beta}$는 추정가능함수이다. $\boldsymbol{l}_1'\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{l}_2'\boldsymbol{\beta}$그리고 $\boldsymbol{l}_3'\boldsymbol{\beta}$로 구성되는 집합을 행렬로 구성해 보면

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{l}_1'\boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{l}_2'\boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{l}_3'\boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 0 & -2 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

이다. $\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{l}_1, \boldsymbol{l}_2, \boldsymbol{l}_3)'$이라 두자. $\boldsymbol{L}$은 계수가 3이므로 $\boldsymbol{L\beta}$는 선형적으로 독립인 추정가능함수들의 한 기저를 나타내는 기저벡터이다.

추정가능함수를 구하기 위한 또 다른 방법은 불완전계수의 모형행렬식 (2.1) 대신에 완전계수의 모형행렬식 (2.3)에서 완전행계수 행렬 $\boldsymbol{R}$을 이용하여 구할 수 있다. 모형행렬 $\boldsymbol{X}$를 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{CR}$로 최대계수의 행렬로 인자분해하였을 때 $\boldsymbol{C}$와 $\boldsymbol{R}$은 다음과 같다.

$$\boldsymbol{C}' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{R}$의 세 행벡터들은 독립이므로 이들 행벡터의 선형결합으로 주어지는 계수벡터는 추정가능함수이어야 한다. 선형결합으로 주어지는 한 계수벡터를 $\boldsymbol{a}_1$이라 표시한다. $\boldsymbol{a}_1' = (1, 1, 1, -1)$라 두자. $\boldsymbol{a}_1'\boldsymbol{\beta}$가 추정가능함수인 가를 확인하는 방법으로 식 (3.1)을 이용할 수 있다. 즉,

$$\boldsymbol{a}_1'\boldsymbol{R}^-\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 1, & 1, & 1, & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.75 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \\ 0.25 & 0.75 & -0.25 & -0.25 \\ 0.25 & -0.25 & 0.75 & -0.25 \\ 0.25 & -0.25 & -0.25 & 0.75 \end{pmatrix}$$

의 계산으로부터 $\boldsymbol{a}_1' = (1, 1, 1, -1)$이 되므로 $\boldsymbol{a}_1'\boldsymbol{\beta} = \mu + \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3$는 추정가능함수임을 알 수 있다. 불완전계수의 모형행렬 $\boldsymbol{X}$를 완전계수의 행렬 $\boldsymbol{CR}$로 표현하였을 때 추정가능함수를 구하기 위한 독립인 벡터들은 행렬 $\boldsymbol{R}$의 행벡터들이다. 이는 모형행렬 $\boldsymbol{X}$의 행벡터들에 의해 생성되는 벡터공간은 완전행계수의 행렬 $\boldsymbol{R}$의 행벡터들로 생성되는 벡터공간과 동일하기 때문이다. 따라서 동일 행공간으로의 사영행렬들을 나타내는 $\boldsymbol{R}^-\boldsymbol{R}$와 $\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X}$는 동일한 값들의 행렬로 얻어진다. $\boldsymbol{R}$의 행벡터들의 선형결합으로 $\boldsymbol{a}_2' = (1, 1, 0, 0)$과 $\boldsymbol{a}_3' = (0, 1, 1, -2)$라 두면 $\boldsymbol{a}_2'$과 $\boldsymbol{a}_3'$은 각기 $\boldsymbol{a}_2'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X} = \boldsymbol{a}_2'$와 $\boldsymbol{a}_3'\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{X} = \boldsymbol{a}_3'$이 되는 계수벡터임을 알 수 있다. 행렬 $\boldsymbol{A}$가 독립인 세 행벡터로 구성될 때 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{AXX}^-$이므로 $\boldsymbol{A\beta}$는

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1'\boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{a}_2'\boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{a}_3'\boldsymbol{\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

인 추정가능함수들의 한 기저집합을 나타낸다.

추정가능함수 $\boldsymbol{a}_1'\boldsymbol{\beta} = \mu + \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3$의 추정값을 $\boldsymbol{a}_1\widehat{\boldsymbol{\beta}}$으로 둘 때 $\boldsymbol{a}_1\widehat{\boldsymbol{\beta}}$의 값은 식 (3.2)에서 구해지는 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$을 이용한다. 자료로부터 구해진 $\widehat{\boldsymbol{\beta}}' = (19.67, 0.33, 5.67, 13.67)$이므로 $\boldsymbol{a}_1'\widehat{\boldsymbol{\beta}}= 12$로 추정된다.

5. 결론

본 논문은 불완전계수의 모형행렬을 갖는 선형모형의 가정하에서 실험자료를 분석할 때 모형내 모수들인 고정효과의 추정가능한 함수를 다루고 있다. 불완전계수의 모수모형에서 통계적 추론은 추정가능함수일 때만 가능하기 때문이다. 가정된 선형모형으로부터 모수들의 추정가능함수를 구하는 방법과 확인하는 방법을 논의하고 있다. 모수들의 추정가능함수를 구하는 방법으로 불완전계수의 모형행렬 $\boldsymbol{X}$에서 변수벡터간의 관련성을 나타내는 $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$로부터 구해지는 가우스행렬을 이용하는 방법과 불완전계수의 모형행렬 $\boldsymbol{X}$를 완전계수의 행렬곱으로 표현하여 추정가능함수를 구하는 방법을 다루고 있다. $\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$의 행벡터에 의해 생성된 벡터공간과 $\boldsymbol{R}'\boldsymbol{R}$의 행벡터로 생성되는 벡터공간은 동일하다는 사실에 근거하여 추정가능함수의 타당성을 해당하는 공간으로의 사영행렬로 확인할 수 있음을 보여주고 있다. 불완전계수의 모형행렬을 완전계수의 행렬들의 곱으로 분해하여 추정가능함수의 타당성을 살펴보는 것은 가우스소거법에 의해 구해지는 가우스행렬에 의존하지 않는 기법이라 할 수 있다. 추정가능함수의 기저를 얻기 위해 이용되는 행렬이 다르므로 또한 구해지는 기저도 다름을 쉽게 예상할 수 있다.

참고문헌

Choi, J. S. (2010). A mixed model for repeated split-plot data. *Journal of the Korean Data & Information Science Society*, **21**, 1-9.

Choi, J. S. (2011). Variance components in one-factor random model by projections. *Journal of the Korean Data & Information Science Society*, **22**, 381-387.

Choi, J. S. (2012). Estimable functions of fixed-effects model by projections. *Journal of the Korean Data & Information Science Society*, **23**, 487-494.

Elswick, R. K., Gennings, Jr. and C., Chinchilli, V. M. and Dawson, K. S. (1991). A simple approach for finding estimable functions in linear models. *The American Statistician*, **45**, 51-53.

Graybill, F. A. (1976). *Theory and application of the linear model*, Wadsworth Publishing Company, Inc., Belmont.

Johnson, R. A. and Wichern, D. W. (1988). *Applied multivariate statistical analysis*, 2nd edition, Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs.

Milliken, G. A. and Johnson, D. E. (1984). *Analysis of messy data*, Van Nostrand Reinhold, New York.

Searle, S. R. (1971). *Linear models*, John Wiley and Sons, Inc., New York.

Journal of the Korean Data & Information Science Society
2013, **24**(2), 333–339

http://dx.doi.org/10.7465/jkdi.2013.24.2.333
한국데이터정보과학회지

Estimable functions of less than full rank linear model

Jaesung Choi[1]

[1]Department of Statistics, Keimyung University

Received 24 February 2013, revised 11 March 2013, accepted 16 March 2013

Abstract

This paper discusses a method for getting a basis set of estimable functions of less than full rank linear model. Since model parameters are not estimable estimable functions should be identified for making inferences proper about them. So, it suggests a method of using full rank factorization of model matrix to find estimable functions in easy way. Although they might be obtained in many different ways of using model matrix, the suggested full rank factorization technique could be one of much easier methods. It also discusses how to use projection matrix to identify estimable functions.

Keywords: Basis, estimable function, full rank factorization, less than full rank, projection matrix,

[1] Professor, Department of Statistics, Keimyung University, Daegu 704-701, Korea.
E-mail: jschoi@kmu.ac.kr