BLUS殘差벡터에 관한 小考

鄭 基 俊*

〈目 次〉

I. 序

관측치의 수가 n이고 설명변수의 수가 k인 표준선형모형

$$y=X\beta+u,\ \mathrm{E}(u)=0,\ \ \mathrm{E}(uu')=\sigma^2 I_n \tag{1}$$

에서, β를 최소자승법에 의해서 추정하면 그 추정량 b는

$$b=(X'X)^{-1}X'y$$

이며 이로부터 계산되는 최소자승(least square: LS)잔차벡터는

$$e=y-Xb=My \tag{2}$$

로 쓸 수 있다. 단 $M=I_n-X(X'X)^{-1}X'$이다. 이 잔차벡터는 u의 推定量이라고도 생각될 수 있는데, 이렇게 볼 때 e는 u의 최량선형불편추정량(best linear unbiased estimator: BLUE)이라는 것을 보일 수 있다. 그러나 u의 共分散行列이 $\sigma^2 I_n$으로 주어지는 스칼라行列인 경우에도 e의 共分散行列은 $\sigma^2 M$이 되며 따라서 스칼라行列이 아니다. 이것이 e를 써서 u의 성질에 관한 推定 또는 檢定을 하는 데 커다란 방해요인이 되고 있는 것은 잘 알려진 사실이다.

타일(H. Theil)은 이 난점을 극복하기 위하여 e와 같은 最良線形不偏(BLU)의 성질을 가지며 또 그 共分散行列이 스칼라(S)인 잔차벡터를 구하고자 하였다. 그렇게 해서 구해진 것이 最良線形不偏스칼라共分散行列(BLUS)의 성질을 갖는 BLUS잔차벡터이다. 이에 관해서는 타일의 원논문[4, 5]이 있고, 코츠와 아브람스[2], 타일[6], 레스페랑스와 테일러[3], 초

* 本硏究所 硏究員, 서울大學校 經濟學科 副敎授

우〔1〕 등이 있으나, 그 설명이 오류를 포함하고 있거나, 난삽하거나, 논리유도방법이 복잡하거나, 불충분하거나, 동기가 명백히 드러나지 않는 등의 단점을 가지고 있어, 여기에 이들 결점을 보충하여, BLUS잔차벡터에 관한 좀 더 명확한 이해에 도움을 주고자 한다.

II. LU殘差벡터

오차항의 벡터 u의 추정량으로서의 잔차벡터가 線形이라는 것은 그것이 벡터 y의 선형함수로 표현됨을 뜻한다. 따라서 일반적인 선형잔차벡터는 $C^{*\prime}y$로 표현될 수 있다. 단 C^*는 임의의 $n \times n$行列이다.

不偏性은 $C^{*\prime}y$가 u의 추정량으로 생각되는 한, $C^{*\prime}y$의 기대치가 u의 기대치 즉 0벡터와 같다는 뜻으로 이해된다. 그런데,

$$\mathrm{E}(C^{*\prime}y) = \mathrm{E}(C^{*\prime}(X\beta + u)) = C^{*\prime}X\beta + \mathrm{E}(C^{*\prime}u) = C^{*\prime}X\beta \tag{3}$$

이므로, 이것이 0과 같기 위해서는, 즉 不偏性의 조건으로서는

$$C^{*\prime}X = 0 \tag{4}$$

가 성립해야 함을 알 수 있다. 따라서 式(4)는 $C^{*\prime}y$가 線形不偏(LU)잔차벡터가 되기 위한 조건이 된다.

조건(4)를 충족하는 선형불편잔차벡터는 다음 성질을 가진다.

(가) $C^{*\prime}y = C^{*\prime}u = C^{*\prime}e.$ (5)

(나) C^*의 位數는 $n-k$를 넘을 수 없다.

성질(가)의 첫번째 등식은 y대신 $X\beta + u$를 대입하고 조건(4)를 이용하면 얻어진다. 즉,

$$C^{*\prime}y = C^{*\prime}(X\beta + u) = C^{*\prime}X\beta + C^{*\prime}u = C^{*\prime}u.$$

성질(가)의 두번째 등식은 $e = My = Mu$의 관계로부터, $C^{*\prime}M = C^{*\prime}$이면 이 등식이 성립한다. 그런데,

$$C^{*\prime}M = C^{*\prime}(I - X(X'X)^{-1}X') = C^{*\prime} - C^{*\prime}X(X'X)^{-1}X' = C^{*\prime}$$

이다. 여기서 마지막 등식은 조건(4) 때문에 성립한다. 이 식을 다시 쓰면

$$MC^* = C^*I_n \tag{6}$$

이 된다. C^*의 j번째 열을 c_j라 하면 이 식을

$$Mc_j = c_j \quad (j = 1, \cdots, n)$$

라고 쓸 수 있으므로, n개의 c_j는 모두 M의 고유치 1에 대응하는 고유벡터들이라고 해석할 수 있고, 따라서 C^*는 고유치 1에 대응하는 고유벡터들로 이루어지는 정방행열이다,

그런데 M의 1인 고유치의 수 즉 重根數(multiplicity)는 $n-k$이며 그에 대응하는 선형독립인 고유벡터의 수는 최대한 $n-k$개가 있을 수 있으므로, C^*가 $n\times n$행렬이라 할지라도 C^*의 位數는 $n-k$를 넘을 수 없다. 즉 성질(나)가 성립한다.

선형불편잔차벡터의 예로서 최소자승잔차벡터 e를 생각해 보자. 이것은 $C^{*\prime}=M$일 때이다. 즉 $e=My$이고 $MX=0$이므로, 선형불편잔차벡터이다. e는 확실히 성질 (가) 및 (나)를 충족시킨다. 즉 $e=My=Mu=Me$이며 M의 位數는 $\rho(M)=\mathrm{tr}M=n-k$이므로, $n\times n$행렬인 M은 $n-k$개의 선형독립인 열벡터만 가질 뿐이다.

III. LUS殘差벡터

그러면 선형불편잔차벡터로서 그 공분산행렬이 스칼라행렬이 되려면 어떤 조건이 추가되어야 할 것인가? $C^{*\prime}y=C^{*\prime}u$의 공분산행렬은 정의상

$$\mathrm{Var}(C^{*\prime}u)=\mathrm{E}(C^{*\prime}uu'C^*)=C^{*\prime}\mathrm{E}(uu')C^*=\sigma^2C^{*\prime}C^* \tag{7}$$

로 된다. 그런데 이것이 스칼라行列이 되어야 하므로 그렇게 되는 필요충분조건은,

$$C^{*\prime}C^*=I_n \tag{8}$$

이 되는 것이다. 그러나 이식은 성립할 수가 없는 것을 곧 알 수 있다. 왜냐하면 I_n의 위수는 n인데, 위수가 $n-k$인 행렬의 곱으로부터 위수가 $n-k$보다 큰 행렬은 나올 수 없기 때문이다.

그러므로 우리는 u_i의 선형불편추정량들이 스칼라共分散行列을 가지도록 하려 하면 n개의 u_i 전체에 대한 추정은 불가능함을 인정할 수 밖에 없다. 그러나 $n\times(n-k)$행렬 C를 써서 u_i중 $n-k$개만의 추정량으로서의 잔차벡터를 $C'y$로 정의하면, 우리는 $(n-k)\times1$ 벡터 $C'y$를 예컨대 u의 $(n-k)\times1$ 부분벡터 u_1의 선형불편스칼라공분산행렬(LUS)의 잔차벡터가 되게 할 수 있다. 즉 C로 하여금

$$C'X=\underset{(n-k)\times k}{0} \tag{4'}$$

$$C'C=I_{n-k} \tag{8'}$$

의 조건을 만족하게 한다면, $C'y$는 다음 성질을 가지게 됨을 보일 수 있다.

$$\begin{aligned}&(\text{가})\ C'y=C'u=C'e.\\&(\text{나})\ C\text{의 位數는 } n-k\text{이다.}\\&(\text{다})\ \mathrm{Var}(C'y)=\sigma^2I_{n-k}.\\&(\text{라})\ C'y\text{의 길이는 } e\text{의 길이와 같다.}\end{aligned} \tag{5'}$$

여기서 성질(가)는 앞절에서와 같은 방법으로 증명할 수 있다. 그리고 성질(나)와 (다)는 (8′)를 이용하여 간단히 증명할 수 있다. 성질(라)는 다음과 같은 과정을 거쳐서 증명할 수 있다. (가)의 증명과정에서

$$MC=CI_{n-k} \tag{6'}$$

가 된다는 사실을 확인할 수 있고, 따라서 C는 M의 1인 고유치에 대응하는 선형독립인 고유벡터들로 이루어지는 행렬이고, 그 重根數는 $n-k$이다. 앞에서 C는 行列 M의 $n-k$개의 1인 고유치에 대응하는 선형독립인 고유벡터들로 이루어지는 行列이라고 하였다. 여기에 0인 고유치에 대응하는 선형독립인 고유벡터들로 이루어지는 $n\times k$행렬 F를 첨가하여 직교행렬 $[C\ F]$를 만들 수 있고, 직교행렬의 정의상 $[C\ F]^{-1}=\begin{bmatrix} C' \\ F' \end{bmatrix}$이 된다. 그리고 M의 고유치를 대각원소로 하는 $n\times n$대각형렬은 $\begin{bmatrix} I_{n-k} & O \\ O & O_k \end{bmatrix}$의 형태를 취한다. 그런데 이 고유벡터행렬과 고유치행렬 사이에는 다음과 같은 관계가 일반적으로 성립한다. 즉,

$$M[C\ F]=[C\ F]\begin{bmatrix} I & O \\ O & O \end{bmatrix}.$$

$$M=[C\ F]\begin{bmatrix} I & O \\ O & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C' \\ F' \end{bmatrix}.$$

이를 간단히 하면

$$M=CC'. \tag{9}$$

이 식을 이용하면 $C'y$의 $n-k$개의 원소의 제곱의 합은 n개의 최소자승잔차의 제곱의 합과 같음을 보일 수 있다.

$$(C'y)'(C'y)=y'CC'y=y'My=(My)'(My)=e'e. \tag{10}$$

즉 $C'y$와 e의 길이는 같다.

IV. BLUS殘差벡터

우리는 앞에서

$$MC=CI_{n-k} \tag{6'}$$

가 된다는 사실을 확인하였다. 그런데 이 조건을 만족하는 C는 무수히 많이 존재한다. 즉 u의 부분벡터 u_1에 대응하는 선형불편스칼라공분산행렬의 성질을 가지는 잔차벡터 $C'y$는 무수히 존재한다. 그러므로 이 가운데서 어떤 의미에서 最良의 성질을 갖는 것을 찾아 보기로 하자.

선형불편이고 스칼라공분산행렬을 가지는 잔차벡터 $C'y$는 $n-k$개의 오차항만을 추정할 수 있다고 하였다. 그러므로 일반성을 잃지 않으면서 우리는 n개의 관측치 가운데 처음

k개를 제외한 나머지에 대응하는 잔차벡터만을 구하는 것으로 논의를 진행시키고자 한다. 이를 위해서는 관계되는 행렬 및 벡터들을 다음과 같이 분할하는 것이 편리하다.

$$y=\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \end{bmatrix},\ X=\begin{bmatrix} X_0 \\ X_1 \end{bmatrix},\ u=\begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \end{bmatrix},\ e=\begin{bmatrix} e_0 \\ e_1 \end{bmatrix},\ C=\begin{bmatrix} C_0 \\ C_1 \end{bmatrix}.$$

이 분할에서, 위의 것은 모두 行의 數가 k개이고, 아래 것은 $n-k$개이다. 예컨대 C_0는 $k\times(n-k)$, C_1은 $(n-k)\times(n-k)$行列이다. 行列 X는 位數가 k인 $n\times k$행렬이다. 따라서 필요하면 관측순서를 바꿈으로써 X_0가 $k\times k$ 비특이행렬이 되게 할 수 있다. 그러므로 일반성을 잃음이 없이 우리는 X_0가 k계의 비특이행렬이라고 가정한다.

우리는 앞절에서, $C'y$가 선형불편이며 스칼라共分散行列을 갖는 잔차벡터가 되기 위한 조건으로

$$C'X=0 \tag{4'}$$

$$C'C=I_{n-k} \tag{8'}$$

를 얻었다. 그리고 $C'y$가 선형불편추정량일 때는

$$C'y=C'e=C'u \tag{5'}$$

과 된다는 사실도 알았다.

여기서 $C'y$ 또는 $C'e$는 u_1의 추정량이라고 해석된다. 그러므로, 여기서 추정의 오차벡터는 $C'e-u_1$이라고 쓸 수 있다. 그런데 이때 「最良性」을 어떻게 정의할 것인가가 문제가 된다. 최소자승잔차벡터 e에 관해서는 오차 $e-u$의 공분산행렬이 어떤 다른 선형불편잔차벡터의 경우의 오차의 공분산행렬보다 작다는 의미에서 「최량」이라고 할 수 있다(타일 〔6, p. 195〕 참조). 그러나 추정량 $C'y$와 그 오차 $C'y-u_1$에 관하여 그와 같은 기준에서 最良性을 증명해보려는 타일〔5〕의 시도는 실패하였고 타일〔6, p. 206, 정리 5.4〕에서처럼, 오차벡터의 길이의 자승의 기대치가 다른 어떤 선형불편스칼라공분산행렬잔차벡터의 오차벡터보다 작다는 기준을 설정할 수 밖에 없다. 즉 $E[(C'y-u_1)'(C'y-u_1)]$을 주어진 조건 하에서 극소화하는 C를 구하는 것이 우리의 문제가 된다.

우선 $C'y$를 달리 표현해 보면,

$$C'y=C'u=[C_0'\ C_1']\begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \end{bmatrix}=C_0'u_0+C_1'u_1$$

이 되며 따라서 오차벡터는,

$$C'y-u_1=(C_0'u_0+C_1'u_1)-u_1=C_0'u_0+(C_1'-I)u_1$$

이며 이 오차벡터의 길이의 자승의 기대치 즉 오차들의 분산의 합은,

$$\begin{aligned} E[(C'y-u_1)'(C'y-u_1)]&=E[\mathrm{tr}(C'y-u_1)(C'y-u_1)'] \\ &=\mathrm{tr}E[\{C_0'u_0+(C_1'-I)u_1\}\{u_0'C_0+u_1'(C_1-I)\}] \end{aligned}$$

$$=\mathrm{tr}[C_0'C_0+C_1'C_1-C_1'-C_1+I]\sigma^2$$

이 된다. 그런데 조건식 중의 하나는 $C'X=0$이다. 이를 분할 표현하면,

$$C'X=(C_0' \ \ C_1')\begin{bmatrix} X_0 \\ X_1 \end{bmatrix}=C_0'X_0+C_1'X_1=0$$

그런데 이 식에서 X_0가 비특이행렬이므로, 이 조건식은 다음과 같이 표현될 수 있다. 즉,

$$C_0'=-C_1'X_1X_0^{-1}=-C_1'Z.$$

단 $Z\equiv X_1X_0^{-1}$로 정의한다.

그러므로

$$C_0'C_0=(-C_1'Z)(-Z'C_1)=C_1'ZZ'C_1$$

을 얻고 이를 위의 식에 대입하면, 목적식인 오차들의 분산의 합을 다음과 같이 고쳐 쓸 수 있다. 즉,

$$\mathrm{E}[(C'y-u_1)'(C'y-u_1)]=\sigma^2\mathrm{tr}[C_1'(I+ZZ')C_1-C_1'-C_1+I].$$

이 목적식은 조건식 중의 하나 즉 $C'X=0$를 고려한 것이다. 그러나 아직 고려되지 않은 것이 있다. 조건식 중에 아직 고려되지 않은 $C'C=I_{n-k}$를 분할해서 표현하면 다음과 같다.

$$C'C=(C_0' \ \ C_1')\begin{bmatrix} C_0 \\ C_1 \end{bmatrix}=C_0'C_0+C_1'C_1$$

$$=(-C_1'Z)(-Z'C_1)+C_1'C_1=C_1'[I+ZZ']C_1=I_{n-k}.$$

그러므로 우리의 문제는

$$C_1'[I+ZZ']C_1=I_{n-k}$$

를 충족하는 C_1 가운데서 위의 목적식을 극소화하는 C_1을 찾는 것이 된다. C_1을 구하고 나면 C_0를 $C_0'=-C_1'Z$에서 구함으로써 C를 구할 수 있기 때문이다.

위의 결과를 종합하여 최적의 C_1을 구하기 위한 라그랑지함수를 만들면 다음과 같다.

$$L(C_1,\ B)=\mathrm{tr}[C_1'(I+ZZ')C_1-C_1'-C_1+I]+\mathrm{tr}B[I-C_1'(I+ZZ')C_1].$$

여기서 B는 $n-k$계의 대칭인 라그랑지승수행렬이다. 우리가 승수와 조건식의 곱의 합을 위와 같이 쓸 수 있는 이유는, 일반적으로 $\mathrm{tr}AB=\iota'(A*B')\iota$로 정의할 수 있기 때문이다. 즉 $\mathrm{tr}AB$는 A와 B'의 대응하는 원소들의 곱의 총합계가 되는 것이다. (*는 대응하는 원소끼리의 곱(Hadamard product)을 의미한다.) 또 이와 같은 정의로부터 일반적으로,

$$\frac{\partial \mathrm{tr}AB}{\partial A}=B',\ \frac{\partial \mathrm{tr}AB}{\partial B'}=A$$

임도 쉽게 알 수 있다.

이와 같은 성질을 이용하여 위의 라그랑지함수에서 극소화의 필요조건인 1계조건을 구하면 다음과 같다.

$$\frac{\partial L}{\partial C_1}=2(I+ZZ')C_1-2I-2(I+ZZ')C_1B=0.$$

$$\frac{\partial L}{\partial B}=I-C_1'(I+ZZ')C_1=0.$$

이 첫째 조건식의 앞에 C_1'을 곱하면서 정리하면,

$$C_1'(I+ZZ')C_1=C_1'+C_1'(I+ZZ')C_1B$$

가 되며, 둘째 조건식을 여기에 대입하면,

$$I=C_1'+B$$

즉 $$C_1'=I-B$$

또는 $$C_1=I-B$$

이다. 왜냐하면 I와 B가 모두 대칭이기 때문이다. 따라서 C_1도 대칭이다. 이 식에서 얻는 $B=I-C_1$을 첫째 조건식에 대입하여 정리하면,

$$\begin{aligned}(I+ZZ')C_1&=I+(I+ZZ')C_1(I-C_1)\\&=I+(I+ZZ')C_1-(I+ZZ')C_1^2\end{aligned}$$

가 된다. 이를 다시 정리하면

$$(I+ZZ')C_1^2=I$$

이다. 이 식으로부터 C_1을 구하려면

$$C_1^2=(I+ZZ')^{-1}$$

에서, 우변의 평방근행렬을 구하여야 한다. 그리고 $(I+ZZ')^{-1}$가 양정부호행렬이기 때문에 그러한 행렬은 언제나 존재하며, 다음과 같이 구할 수 있다.

행렬 $I+ZZ'$의 고유벡터들로 되는 직교행렬을 P, 그에 대응하는 고유치들을 대각원소로 하는 행렬(고유치행렬)을 D^2이라 하면,

$$I+ZZ'=PD^2P'$$

$$(I+ZZ')^{\alpha}=PD^{2\alpha}P' \quad (\alpha\text{는 모든 실수})$$

의 관계가 성립한다. 그러므로,

$$C_1=(I+ZZ')^{-1/2}=PD^{-1}P'.$$

그리고

$$\underset{k\times(n-k)}{C_0}=-Z'C_1=-ZPD^{-1}P'.$$

그러므로 우리가 구하는 BLUS잔차벡터 $\hat{e}_1$은

$$\hat{e}_1=C'y,\ \text{단}\ C=\begin{bmatrix}C_0\\C_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-Z\\I\end{bmatrix}PD^{-1}P'=\begin{bmatrix}-ZPD^{-1}P'\\PD^{-1}P'\end{bmatrix}$$

이다.

이 C_1 또는 C가 과연 목적함수인 분산의 합을 극소화하는지를 확인하기 위하여는 목적함

수의 C_1에 관한 2계도함수가 양정부호행렬임을 보이면 충분하다. 즉 극소화의 충분조건은

$$\frac{\partial}{\partial C_1 \partial C_1'} \mathrm{tr}[C_1'(I+ZZ')C_1-C_1'-C_1+I]=2(I+ZZ')$$

이 양정부호행렬이 되는 것이다. 그런데 $I+ZZ'$은 양정부호행렬이므로 이 조건은 충족된다. 그러므로 $\hat{e}_1$은 우리가 구하는 BLUS잔차벡터이다.

V. BLUS殘差벡터의 誤差分散

다음은 우리가 구한 $\hat{e}_1$의 u_1으로부터의 오차벡터 $\hat{e}_1-u_1$의 공분산행렬과 그 대각합 즉 오차분산의 합을 구해보자. $\hat{e}_1-u_1$의 공분산행렬은 앞에서 나온 목적식의 대각합을 구하기 전의 모습과 같다. 즉,

$$\mathrm{Var}(\hat{e}_1-u_1)=\sigma^2[C_1'(I+ZZ')C_1-C_1'-C_1+I].$$

그런데 최적상태에서

$$C_1'(I+ZZ')C_1=I$$

$$C_1'=C_1=PD^{-1}P'$$

이므로, 이 공분산행렬은

$$\mathrm{Var}(\hat{e}_1-u_1)=\sigma^2[2I-2C]=2\sigma^2I-PD^{-1}P'$$

$$=2\sigma^2P(I-D^{-1})P' \qquad (11)$$

이다.

여기서 설명을 직접 진행시키기에 앞서 약간의 우회적 설명을 곁들이기로 하자.

행렬 D^2은 행렬 $I+ZZ'$의 고유치행렬로 정의하였다. 그러므로 D^2-I는 ZZ'의 고유치행렬이 될 것이며, ZZ'은 양반정부호행렬이므로, h개 $(h\leq k)$의 양인 근과 $(n-k)-h$개의 0인 근을 갖는다. 그리하여 D^2대각원소는 h개는 1보다 크고 $n-k-h$개는 1이다. 즉 D^2은 다음과 같이 분할될 수 있다.

$$D^2=\begin{bmatrix} D_0^2 & O \\ O & I_{n-k-h} \end{bmatrix}.$$

여기서 D_0^2은 $h\times h$의 행렬로 대각원소는 1보다 크다. 따라서 D^2-I는 다음과 같이 분할된다.

$$D^2-I=\left(\begin{array}{c:c} D_0^2-I_h & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right).$$

여기서 $D_0^2-I_h$의 대각원소는 양의 값을 가지며 행렬 ZZ'의 0보다 큰 근들로 이루어진다.

그런데 행렬 ZZ'과 $Z'Z$는 모두 양반정부호행렬이며, 동일한 陽의 근을 가진다. 그리고 ZZ'과 $Z'Z$의 고유벡터들도 밀접한 관계를 가진다. 그런데 ZZ'은 $(n-k)$계의 행렬이고, $Z'Z$는 k계의 행렬이며, 실제에 있어서는 $n-k$보다는 k가 훨씬 작은 것이 보통이다. 그런데 고유치, 고유벡터문제는 낮은 계의 행렬을 다루는 것이 훨씬 쉬우므로 만일 ZZ'과 $Z'Z$ 사이의 관계를 이용한다면 우리의 문제는 훨씬 간단하게 풀릴 수 있을 것이다.

행렬 ZZ'과 $Z'Z$는 동일한 양의 근을 가지므로, $k\times k$행렬 $Z'Z$는 $D_0^2-I_h$의 대각원소들로 나타내지는 h개의 양의 근을 가지며, 그에 대응하는 h개의 직교인 정규화된 고유벡터들로 이루어지는 $k\times h$계의 행렬을 Q라 하면

$$Z'ZQ=Q(D_0^2-I_h),\quad Q'Q=I_h$$

라는 관계식이 성립한다. 그리고 이 관계식의 양변의 앞에 Z를 곱하면

$$ZZ'(ZQ)=(ZQ)(D_0^2-I_h)$$

가 되어, ZQ가 ZZ'의 고유벡터들이 됨을 보여줄 수 있게 된다. 그리고 ZZ'의 $n-k$개의 고유벡터들로 이루어지는 직교행렬 P와 그에 대응하는 고유벡터행렬 D^2-I의 관계식

$$ZZ'P=P(D^2-I)$$

를 분할하여

$$ZZ'[P_0\ P_1]=[P_0\ P_1]\begin{bmatrix} D_0^2-I_h & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

로 표현하여 보자. 단 P_0는 $(n-k)\times h$, P_1은 $(n-k)\times(n-k-h)$행렬이다. 이를 다시 쓰면 특히

$$ZZ'P_0=P_0(D_0^2-I_h)$$

라는 식을 얻는다. 그리고 P가 직교행렬이므로,

$$I_{n-k}=P'P=\begin{bmatrix} P_0' \\ P_1' \end{bmatrix}[P_0\ P_1]=\begin{bmatrix} P_0'P_0 & P_0'P_1 \\ P_1'P_0 & P_1'P_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} I_h & O \\ O & I_{n-k-h} \end{bmatrix}$$

에서, 특히

$$P_0'P_0=I_h$$

가 된다.

앞의 $Z'Z$와 ZZ'의 고유벡터 간의 관계를 나타내는 식과 비교하면 $Z'Z$의 고유벡터행렬 Q로부터 다음과 같이 P_0를 유도할 수 있음을 알 수 있다. 즉 ZQ를 변형하여, $(ZQK)'(ZQK)=I_h$가 되도록 하는 K가 존재하고 또 이를 구할 수 있다면, ZQK가 바로 P_0가 된다.

그런데

$$(ZQK)'(ZQK)=K'Q'Z'ZQK=I_h$$

에서

$$Z'ZQ=Q(D_0^2-I_h)$$

임을 고려하면,

$$K'Q'Q(D_0^2-I_h)K=K'(D_0^2-I_h)K=I$$

이고 따라서

$$K=K'=(D_0^2-I_h)^{-1/2}$$

로 놓을 수 있다. 즉

$$P_0=ZQ(D_0^2-I_h)^{-1/2}.$$

우리는 지금까지 D^2 및 D의 분석에 많은 지면을 사용하였다. 이제 본론으로 돌아가 지금까지에서 얻은 결과를 이용해보자.

식 (11) 에서 $P(I-D^{-1})P'$을 D_0^2와 그에 대응하는 정규화된 직교 고유벡터행렬 Q로 나타내보자.

$$P(I_{n-k}-D^{-1})P'=[P_0\ P_1]\begin{bmatrix} I_h-D_0^{-1} & O \\ O & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} P_0' \\ P_1' \end{bmatrix}=P_0(I_h-D_0^{-1})P_0'$$

여기에 앞에서 얻은

$$P_0=ZQ(D_0^2-I_h)^{-1/2}$$

을 대입하면,

$$\begin{aligned} P_0(I-D_0^{-1})P_0' &= ZQ(D_0^2-I_h)^{1/2}(I-D_0^{-1})(D_0^2-I_h)^{-1/2}\ Q'Z' \\ &= ZQ(D_0^2-I_h)^{-1}(I-D_0^{-1})Q'Z' \\ &= ZQ(D_0+I_h)^{-1}(D_0-I_h)^{-1}(D_0-I_h)D_0^{-1}Q'Z' \\ &= ZQ(D_0+I_h)^{-1}D_0^{-1}Q'Z'. \end{aligned}$$

따라서 $\hat{e}_1-u_1$의 공분산행렬은,

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}(\hat{e}_1-u_1) &= 2\sigma^2P(I-D^{-1})P'=2\sigma^2P_0(I_h-D_0^{-1})P_0' \\ &= 2\sigma^2ZQ(D_0+I_h)^{-1}D_0^{-1}Q'Z' \end{aligned}$$

으로 나타낼 수 있다.

이 결과를 써서 $\hat{e}_1-u_1$의 각 원소의 분산의 합을 구해보면, 그것은 $\mathrm{tr}[\mathrm{Var}(\hat{e}_1-u_1)]$이므로

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}[\mathrm{Var}(\hat{e}_1-u_1)] &= 2\sigma^2\ \mathrm{tr}ZQ(D_0+I_h)^{-1}D_o^{-1}Q'Z' \\ &= 2\sigma^2\ \mathrm{tr}(D_0+I_h)^{-1}D_0^{-1}Q'Z'ZQ \\ &= 2\sigma^2\ \mathrm{tr}(D_0+I_h)^{-1}D_0^{-1}Q'Q\ \ (D_0^2-I) \\ &= 2\sigma^2\ \mathrm{tr}(D_0+I_h)^{-1}D_0^{-1}(D_0^2-I) \\ &= 2\sigma^2\ \mathrm{tr}D_0^{-1}(D_0+I_h)^{-1}(D_0+I)(D_o-I) \end{aligned}$$

$$=2\sigma^2\ \mathrm{tr}D_0^{-1}(D_0-I)=2\sigma^2\ \mathrm{tr}(I_h-D_0^{-1})$$

$$=2\sigma^2\sum_{i=1}^{h}\left(1-\frac{1}{d_i}\right)=2\sigma^2\sum_{i=1}^{h}\left(\frac{d_i-1}{d_i}\right).$$

즉

$$\mathrm{tr}\,[\mathrm{Var}(\hat{e}_1-u_1)]=2\sigma^2\sum_{i=1}^{h}\left(\frac{d_i-1}{d_i}\right).$$

단 d_i는 D_0^2의 대각원소의 평방근이다.

IV. BLUS殘差벡터와 LS殘差벡터 간의 관계

BLUS잔차벡터 $\hat{e}_1$은 식(5′)에 의해서

$$\hat{e}_1=C'y=C'e$$

로도 쓸 수 있다. 그리고 이를 분할해서 표현하면,

$$\hat{e}_1=[C_0'\ \ C_1']\begin{bmatrix} e_0 \\ e_1 \end{bmatrix}=C_0'e_0+C_1'e_1. \tag{12}$$

또 e와 X 간에는 언제나 $e'X=0$의 관계가 성립한다. 이 조건을 다시 쓰면,

$$e'X=[e_0'\ \ e_1']\begin{bmatrix} X_0 \\ X_1 \end{bmatrix}=e_0'X_0+e_1'X_1=0.$$

즉

$$e_0'=-e_1'X_1X_0^{-1}=-e_1'Z.$$

여기서 얻은 e_0와 앞에서 본 $C_0'=-C_1'Z$를 식(12)에 대입하면 다음과 같다.

$$\hat{e}_1=C_0'e_0+C_1'e_1=(-C_1'Z)(-Z'e_1)+C_1'e_1$$

$$=C_1'ZZ'e_1+C_1'e_1=C_1'(I+ZZ')e_1.$$

그런데 여기서 $C_1(I+ZZ')$은

$$C_1(I+ZZ')=\begin{cases} C_1C_1^{-2}=C_1^{-1} \\ (I+ZZ')^{-1/2}(I+ZZ') \end{cases}=(I+ZZ')^{1/2}$$

$$=PDP'$$

으로 쓸 수 있고 또 이는,

$$PDP'=P(I+D-I)P'=PP'+P(D-I)P'$$

$$=I+P(D-I)P'$$

으로 쓸 수 있다. 여기서 앞절에서 설명한 D_0^2와 Q를 이용하기 위하여 우선 $D-I$를 다음과 같이 분할할 수 있을 것이다.

$$D-I=\begin{bmatrix} D_0-I_h & O \\ O & O \end{bmatrix}.$$

그리하여

$$P(D-I)P' = [P_0 \;\; P_1]\begin{bmatrix} D_0-I_h & O \\ O & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} P_0' \\ P_1' \end{bmatrix} = P_0(D_0-I_h)P_0'.$$

여기에 Q로 표현된 P_0, 즉

$$P_0 = ZQ(D_0^2-I_h)^{-1/2}$$

을 대입하면

$$\begin{aligned} P(D-I)P' &= P_0(D_0-I_h)P_0' \\ &= ZQ(D_0^2-I_h)^{-1/2}(D_0-I_h)(D_0^2-I_h)^{-1/2}Q'Z'. \end{aligned}$$

그런데 대각행렬끼리는 순서를 바꾸어도 좋으므로,

$$\begin{aligned} (D_0^2-I_h)^{-1/2}(D_0-I_h)(D_0^2-I_h)^{-1/2} &= (D_0-I_h)(D_0^2-I_h)^{-1} \\ &= (D_0-I_h)[(D_0+I_h)(D_0-I_h)]^{-1} \\ &= (D_0-I_h)(D_0-I_h)^{-1}(D_0+I_h)^{-1} \\ &= (D_0+I_h)^{-1} \end{aligned}$$

를 얻는다. 이를 위의 식에 대입하면,

$$P(D-I)P' = ZQ(D_0+I_h)^{-1}Q'Z'.$$

이리하여 우리는 ZZ'의 고유치와 고유벡터에서 구해져야 할 D와 P를 $Z'Z$의 양인 고유치와 그에 대응하는 고유벡터에서 구해지는 D_0와 Q에 의해서 표현할 수 있게 되었다. 이를 쓰면 C_1은

$$C_1 = [I+P(D-I)P']^{-1} = [I+ZQ(D_0+I_h)^{-1}Q'Z']^{-1}$$

가 되며 이를 써서 BLUS잔차벡터 $\hat{e}_1$을 직접 구할 수도 있겠으나, 그보다는 이를 이용하여 $\hat{e}_1$과 e 간의 관계를 표현해 보는 것이 훨씬 많은 시사를 준다. 즉 앞에 나왔던 식으로부터

$$\begin{aligned} \hat{e}_1 &= C_1'(I+ZZ')e^1 = PDP'e_1 \\ &= [I+P(D-I)P']e_1 \\ &= [I+ZQ(D_0+I_h)^{-1}Q'Z']e_1 \\ &= e_1+ZQ(D_0+I_h)^{-1}Q'Z'e_1. \end{aligned}$$

그리고 여기서 $Z=X_1X_0^{-1}$, $e_0=-Z'e_1$임을 고려하면, 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\hat{e}_1 = e_1 - X_1X_0^{-1}Q(D_0+I_h)^{-1}Q'e_0.$$

즉 $\hat{e}_1$과 e 간의 관계를 얻었다.

參 考 文 獻

[1] Chow, Gregory C., "A Note on the Derivation of Theil's BLUS Residuals," *Econo*

metrica, 44 (May 1976), pp. 609～10.

〔2〕 Koerts J., and A.P.J. Abrahamse, *On the Theory and Application of the General Linear Model*, Rotterdam Univ. Press, 1971.

〔3〕 L'Esperance, W.L., and D. Taylor, "The Power of Four Tests of Autocorrelation in the Linear Regression Model," *Journal of Econometrics*, 3 (1975).

〔4〕 Theil, H., "The Analysis of Disturbances in Regression Analysis," *Journal of the American Statistical Association*, 60 (1965), pp. 1067～1079.

〔5〕 Theil, H., "A Simplification of the BLUS Procedure for Analysing Regression Disturbances," *Journal of the American Statistical Association*, 63 (1968), pp. 242～251.

〔6〕 Theil, H., *Principles of Econometrics*, Wiley, 1971.