김일성종합대학학보 (자연과학) 주체106(2017)년 제63권 제10호
JOURNAL OF **KIM IL SUNG** UNIVERSITY (NATURAL SCIENCE) Vol. 63 No. 10 JUCHE106(2017).

제한조건을 가진 배합비실험계획에서 D-최량계획의 한가지 구성법

림 창 호

여러가지 제한조건을 가진 배합비계획구역에서 최량계획을 구성하는 문제는 현실에서 많이 제기된다.

론문에서는 제한조건을 가지는 배합비계획구역에서 포화D-최량계획을 구성하고 그것에 의한 순차성D-최량계획을 구성하였다.

선행연구[2]에서는 $T_n=\{(x_1,\cdots,x_k)\,|\,x_1+\cdots+x_k=1,\ x\in \boldsymbol{R}_+^n\}$, $C^n=[0,1]^n$과 단체우에서 평등실험계획을 얻는 방법을 론의하였으며 선행연구[3]에서는 보충제한을 가지는 구역

$$T_n(a,\ b)=\{(x_1,\cdots,x_k)\,|\,x_1+\cdots+x_k=1,\ 0\le a_i\le x_i\le b_i\le 1,\ 1\le i\le n\}$$

우에서 평등분포를 생성하는 방법을 론의하였다.

선행연구[1]에서는 불룩결합제한을 가진

$$T^*(a,\ b,\ \alpha,\ r)=\{(x_1,\cdots,x_s)\,|\,0\le a_i\le x_i\le b_i\le 1,\ 0<\alpha_i\le 1,\ 1\le i\le s,\ \alpha_1x_1+\cdots+\alpha_sx_s=r\}$$

에서 평등실험계획을 구성하였으며 선행연구[4]에서는 다차원반응선형모형에 대한 D-최량계획구성문제를 론의하였다.

우리는 계획구역

$$G=\left\{(x_1,\cdots,x_k)\left|\sum_{i=1}^k x_i=1,\ 0\le a_i\le x_i\le b_i\le 1,\ d_1\le\sum_{i=1}^k c_ix_i\le d_2,\ 0\le c_i,\ i=1,\cdots,k\right.\right\}$$

에서 1차회귀모형 $y=\beta_1x_1+\cdots+\beta_kx_k+\varepsilon$에 대한 순차성D-최량계획을 구성한다.

k개의 실험점들에 대한 포화계획은 $X=\begin{pmatrix} x_{1\,1} & x_{2\,1} & \cdots & x_{k\,1}\\ x_{1\,2} & x_{2\,2} & \cdots & x_{k\,2}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{1\,k} & x_{2\,k} & \cdots & x_{k\,k}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}_1\\ \boldsymbol{x}_2\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}_k\end{pmatrix}$이며 이 실험계획에 대한 정보행렬식값은 $M=\dfrac{1}{k}|X^{\mathrm{T}}X|$이다.

포화계획 X에 대한 순차성D-최량계획은 정보행렬식값 $M=\dfrac{1}{k+1}|\overline{X}^{\mathrm{T}}\overline{X}|$가 최대로 되는 계획 $\overline{X}=\begin{pmatrix} x_{1\,1} & x_{2\,1} & \cdots & x_{k\,1}\\ x_{1\,2} & x_{2\,2} & \cdots & x_{k\,2}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{1\,k} & x_{2\,k} & \cdots & x_{k\,k}\\ x_{1\,k+1} & x_{2\,k+1} & \cdots & x_{k\,k+1}\end{pmatrix}$이다.

먼저 포화D-최량계획을 구성하자.

보조정리 1 실험계획 X가 포화계획이면 D－최량계획은 계획구역 G에서 k개의 계획점들을 정점으로 하는 다면체의 체적이 최대로 되는 계획이다.

증명 $M=\frac{1}{k}|X^{\mathrm{T}}X|=\frac{1}{k}|X|^2$이므로 보조정리 1의 결론이 나온다.(증명끝)

이로부터 실험계획 X가 포화계획일 때 D－최량계획을 구성하려면 우선 계획구역 G의 정점들을 모두 찾고 다음 k개의 정점들가운데서 $M=|X^{\mathrm{T}}X|/k$가 최대로 되는 포화계획 X를 찾으면 된다.

다음으로 순차성D－최량계획을 구성하자.

순차성D－최량계획구성문제는 정보행렬식값 $M=\frac{1}{k+1}|\overline{X}^{\mathrm{T}}\overline{X}|$가 최대로 되는 계획 $\overline{X}=\begin{pmatrix} x_{1\,1} & x_{2\,1} & \cdots & x_{k\,1} \\ x_{1\,2} & x_{2\,2} & \cdots & x_{k\,2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1\,k} & x_{2\,k} & \cdots & x_{k\,k} \\ x_{1\,k+1} & x_{2\,k+1} & \cdots & x_{k\,k+1} \end{pmatrix}$의 $k+1$째 계획점 $\boldsymbol{x}_{k+1}=(x_{1\,k+1}, x_{2\,k+1}, \cdots, x_{k\,k+1})$을 구하는 문제로 된다. 여기서 X와 k는 기지이다.

$\frac{1}{k+1}|\overline{X}^{\mathrm{T}}\overline{X}|\Rightarrow \max \Leftrightarrow |\overline{X}^{\mathrm{T}}\overline{X}|\Rightarrow \max$이므로 $|\overline{X}^{\mathrm{T}}\overline{X}|\Rightarrow \max$로 되는 계획

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=(x_{1\,k+1},\ x_{2\,k+1}, \cdots,\ x_{k\,k+1})$$

을 구성하기 위하여 포화계획 X의 k개 계획점들을 정점으로 가지는 새 자리표계를 도입하고 새 자리표계 $\boldsymbol{z}=(z_1, z_2, \cdots, z_k)$에서 론의한다. 여기서 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z}X,\ \boldsymbol{z}=\boldsymbol{x}X^{-1}$이다.

따라서 포화D－최량계획 X를 새 자리표계에서 표시하면 다음과 같다.

$$Z=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{z}_1 \\ \boldsymbol{z}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{z}_k \end{pmatrix}$$

이때 $|\overline{Z}^{\mathrm{T}}\overline{Z}|\Rightarrow \max$로 되는 계획 $\boldsymbol{z}_{k+1}=(z_{1\,k+1},\ z_{2\,k+1}, \cdots,\ z_{k\,k+1})$을 구성하면 다음과 같다. 여기서 $\overline{Z}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \\ z_{1\,k+1} & z_{2\,k+1} & \cdots & z_{k\,k+1} \end{pmatrix}$이다.

보조정리 2 $|\overline{Z}^{\mathrm{T}}\overline{Z}|=1+\sum_{i=1}^{k} z_{i\,k+1}^2$

증명 $k=2$이면 $|\overline{Z}^{\mathrm{T}}\overline{Z}|=1+\sum_{i=1}^{2} z_{i\,3}^2$이다.

$k=n-1$이면 $|\overline{Z}^{\mathrm{T}}\overline{Z}|=1+\sum_{i=1}^{n-1} z_{i\,n}^2$이라고 가정하자.

이때 $k=n$ 이면 $|\overline{Z}^{\mathrm{T}}\overline{Z}|=\begin{vmatrix} 1+z_{1\ n+1}^2 & z_{1\ n+1}z_{2\ n+1} & \cdots & z_{1\ n+1}z_{n\ n+1} \\ z_{1\ n+1}z_{2\ n+1} & 1+z_{2\ n+1}^2 & \cdots & z_{2\ n+1}z_{n\ n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{1\ n+1}z_{n\ n+1} & z_{2\ n+1}z_{n\ n+1} & \cdots & 1+z_{n\ n+1}^2 \end{vmatrix}$ 이다.

이 식에서 n번째 행에 관하여 행렬식을 전개하고 정돈하면 $|\overline{Z}^{\mathrm{T}}\overline{Z}|=1+\sum_{i=1}^{n}z_{i\ n+1}^2$ 이 성립된다.(증명끝)

따라서 새 자리표계에서의 순차성D—최량계획구성문제는 새 자리표계에 의한 계획구역 G' 에서 $f(z_{1\ k+1}, \cdots, z_{k\ k+1})=|\overline{Z}^{\mathrm{T}}\overline{Z}|=1+\sum_{i=1}^{k}z_{i\ k+1}^2$ 이 최대로 되는 계획

$$\boldsymbol{z}_{k+1}=(z_{1\ k+1},\ z_{2\ k+1},\ \cdots,\ z_{k\ k+1})$$

을 찾으면 된다.

$f(z_{1\ k+1},\ z_{2\ k+1},\ \cdots,\ z_{k\ k+1})=|\overline{Z}^{\mathrm{T}}\overline{Z}|=1+\sum_{i=1}^{k}z_{i\ k+1}^2$ 은 $\boldsymbol{z}_{k+1}=(0,\ 0,\ \cdots,\ 0)$ 에서 유일한 극소값점만을 가지므로 계획구역 G' 의 경계에서 최대값을 가진다.

보조정리 3 순차성D—최량계획은 계획구역 G' 에서 원점으로부터의 거리가 최대로 되는 점 $\boldsymbol{z}_{k+1}=(z_{1\ k+1},\ z_{2\ k+1},\ \cdots,\ z_{k\ k+1})$ 이다.

새 자리표계에서 순차성D—최량계획 $\boldsymbol{z}_{k+1}=(z_{1\ k+1},\ z_{2\ k+1},\ \cdots,\ z_{k\ k+1})$ 을 다시 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z}X$ 로 변환하면 $\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{z}_{k+1}X$ 를 얻는다.

정리 계획구역 G 에서 순차성D—최량계획은 $\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{z}_{k+1}X$ 이다.

참 고 문 헌

[1] 리창성; 조선민주주의인민공화국 과학원통보, 3, 6, 주체104(2015).

[2] K. T. Fang et al.; Statist. Probab. Lett., 46, 113, 1999.

[3] Y. Wang et al.; Sci. China, A 39, 264, 1996.

[4] Rong-Xian Yue et al.; J. Multivariate Anal., 124, 57, 2014.

주체106(2017)년 6월 5일 원고접수

A Construction Method of D-optimal Designs in the Mixture Design of Experiments with the Restricted Condition

Rim Chang Ho

We constructed saturated D-optimal designs and sequential D-optimal designs by using it for linear regression models $y=\beta_1x_1+\cdots+\beta_kx_k+\varepsilon$ in the design domain with the restricted condition

$$G=\left\{(x_1,\ \cdots,\ x_k)\left|\sum_{i=1}^{k}x_i=1,\ 0\le a_i\le x_i\le b_i\le 1,\ d_1\le\sum_{i=1}^{k}c_ix_i\le d_2,\ 0\le c_i,\ \ i=1,\cdots,k\right.\right\}.$$

Key words: experimental design, saturated design, sequential design, D-optimal design