$E(s^2)$최량초포화계획을 리용한 불완전2차2수준 유효초포화계획구성법

김철욱, 김철호

최근에 실험회수를 줄이기 위한 실험계획적연구가 심화되면서 2차초포화계획에 대한 연구가 많이 진행되고있다.

선행연구[2]에서는 완전2차회귀모형에 대한 한가지 3수준계획으로서 합리적인 초포화계획의 구성법을, 선행연구[3]에서는 불완전2차회귀모형에 대한 합리적인 초포화계획으로서 2수준홀더브계획의 구성법들을, 선행연구[4, 5]에서는 같은 모형에서 주효과와 얽힘효과를 추정하기 위한 합리적인 초포화계획의 구성법들을, 선행연구[1]에서는 몇가지 2수준초포화계획들의 구성법을 연구하였다.

론문에서는 $E(s^2)$ 최량초포화계획의 구성법과 그것의 성질을 리용하여 불완전2차회귀모형에 대한 2수준유효초포화계획의 구성법을 연구하였다.

불완전2차회귀모형

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1'}^{k} \beta_t x_t + \sum_{j<j}^{k} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon,\ \varepsilon : N(0,\ \sigma^2) \tag{1}$$

에 대하여 계획구역

$$\Lambda = \{(x_1,\ x_2, \cdots,\ x_k) : x_i \in \{+1, -1\},\ i = 1,\ 2, \cdots,\ k\} \tag{2}$$

에서의 합리적인 초포화계획을 구성하는 방법을 보기로 하자.

$$D(N) = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \dots & x_{k1} \\ x_{12} & x_{22} & \dots & x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1N} & x_{2N} & \dots & x_{kN} \end{pmatrix} \tag{3}$$

을 모형 (1)에 대한 계획(행렬)이라고 하면 불완전2차회귀모형에 대한 미지파라메터개수는 $m = 1 + [(k+1)k]/2$ 이다. 그리고 인자 $x_{i\alpha}$ 들이 가지는 동일한 수준수가 2이므로 $N < m$ 이면 계획 (3)은 모형 (1)에 대한 구역 (2)에서의 초포화계획이다.

이제 계획행렬의 합리성을 위한 유효성기준에 대하여 보기로 하자.

모형 (1)에 대한 독립변수행렬은 $\tilde{D} = (D : D_1)$ 이다. 여기서 $D = (1 : D_1)$ 은 $(N \times (k+1))$ 형 행렬이고 D_1 은 차모형의 얽힘항에 대응되는 $(N \times k(k-1)/2)$ 형행렬이다.

모형 (1)을 행렬모형으로 바꾸어쓰면

$$y = D\theta_1 + D_1\theta_2 + \varepsilon \tag{4}$$

으로 된다. 여기서 $\theta_1 = (\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_k)^{\mathrm{T}}$, $\theta_2 = (\beta_{12}, \beta_{13}, \cdots, \beta_{k-1,\,k})^{\mathrm{T}}$ 이다.

1차주효과모형 $y = D\theta_1 + \varepsilon$ 에서 θ_1 의 최소두제곱추정량을 구하면 $\hat{\theta}_1 = (D^{\mathrm{T}} D)^{-1} D^{\mathrm{T}} y$ 이며 모형 (4)를 리용하면 $E\hat{\theta}_1 = \theta_1 + A\theta_2$ 로 된다. 여기서 $A = (D^{\mathrm{T}} D)^{-1} D^{\mathrm{T}} D_1$ 이다.

이때 θ_1에 대한 불편추정량을 구하자면 $A=0$이여야 한다. $A=0$이려면 계획행렬 D와 D_1에 대하여 $D^{\mathrm{T}}D_1=0$이면 충분하다.

한편 1차주효과추정에서 정확도를 높이자면 계획행렬 $D(N)$에 관하여 $D-$최량성기준으로서 $\det(D_0^{\mathrm{T}}D_0)$을 최대로 하여야 한다.

정의 1 완전2차회귀모형 (1)에 대한 계획 (2)에 대하여 다음의 조건들을 만족시키는 계획을 2차유효초포화계획이라고 부른다.

① $A=0$

② $D-$최량계획 D_{0*}에 관하여 $[\det(D_0^{\mathrm{T}}D_0)/\det(D_{0*}^{\mathrm{T}}D_{0*})]^{1/p}\Rightarrow\max$ $(p=k+1)$이다.

정의 1에서 조건 ①은 2차유효초포화계획이 불완전2차회귀모형에서 1차주효과들의 추정을 얽힘효과들과 독립적으로 추정할수 있게 한다는것이며 조건 ②는 2차유효초포화계획이 1차주효과들에 관하여 $D-$최량성기준의 의미에서 좋은 계획이라는것이다.

정의 2[1] 0, 1을 원소로 가지는 $(n\times m)$ 형행렬 $B=\begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{m1}\\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{m2}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{mn}\end{pmatrix}$이 조건

$$\begin{cases}\sum_{\alpha=1}^{n}x_{i\alpha}=k, & (i=1,\ 2,\ \cdots,\ m)\\ \sum_{i=1}^{m}x_{i\alpha}=r, & (\alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ n)\\ \sum_{i=1}^{m}x_{i\alpha}x_{i\beta}=\lambda & (\alpha\neq\beta,\ \alpha,\ \beta=1,\ 2,\ \cdots,\ n)\end{cases}$$

를 만족시킬 때 B를 파라메터 $n,\ m,\ k,\ r,\ \lambda$를 가지는 BIBD계획이라고 부르고 BIBD$(n,\ m,\ k,\ r,\ \lambda)$로 표시한다.

정의 3[1] 시초블로크의 순환에 의하여 만들어지는 0, 1을 원소로 가지는 n차행렬

$$N=\begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{n1}\\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{n2}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{nn}\end{pmatrix}$$

이 조건

$$\begin{cases}\sum_{\alpha=1}^{n}x_{i\alpha}=k & (i=1,\ 2,\ \cdots,\ m)\\ \sum_{i=1}^{n}x_{i\alpha}=k & (\alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ n)\end{cases}$$

를 만족시킬 때 N을 $(n,\ k,\ k)$형순환계획행렬이라고 부른다.

보조정리[1] $(n,\ m)=(2k+2,\ t(2k+1))$인 경우에 $E(s^2)$ 최량초포화계획의 존재성과 BIBD$(2k+2,\ t(2k+1),\ k-1,\ t(k-1),\ t(k-2)/2)$의 존재성은 서로 동등하며 이러한 BIBD는 존재한다. 여기서 $k\geq3$이고 t는 짝수이다.

$(n,\ m)=(2k+2,\ t(2k+1))$일 때 $(n\times m)$형초포화계획 X가 $E(s^2)$ 최량이기 위해서는

$$XX^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix} m & -t & \cdots & -t\\ -t & m & \cdots & -t\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ -t & -t & \cdots & m\end{pmatrix}$$

일것이 필요하고 충분하다.

정리 X가 $t<(k+1)/2+1/k$을 만족시키는 짝수 t에 관한 다음과 같은 $(k\times t(k-1))$형 $E(s^2)$최량초포화계획이라고 하자.

$$D=\begin{pmatrix} X^{\mathrm{T}} \\ Y \end{pmatrix} \tag{5}$$

여기서 Y는 $t/2$개 행은 +1, 나머지 $t/2$개 행은 -1을 원소로 가지는 $(t\times k)$형행렬이다.

그러면 계획 (5)는 모형 (1)에 대한 구역 (2)에서의 2수준유효초포화계획이다.

증명 먼저 계획 (5)의 초포화성을 보자.

계획 (5)의 실험점개수 N은 $N=t(k-1)+t=tk$이며 모형 (1)의 파라메터개수는 $m=k(k+1)/2+1$이므로 조건 $t<(k+1)/2+1/k$로부터 $N>m$은 성립된다.

다음 계획 (5)가 직교계획이라는것을 보자.

X가 $E(s^2)$최량초포화계획이므로 보조정리로부터

$$XX^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix} t(k-1) & -t & \cdots & -t \\ -t & t(k-1) & \cdots & -t \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -t & -t & \cdots & t(k-1) \end{pmatrix}$$

이며 행렬 Y의 표시를 고려하면

$$D^{\mathrm{T}}D=\begin{pmatrix} X^{\mathrm{T}} \\ Y \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}(X^{\mathrm{T}}:Y)=(XX^{\mathrm{T}})+(Y^{\mathrm{T}}Y)=\begin{pmatrix} tk & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & tk & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & tk \end{pmatrix} \tag{6}$$

임을 알수 있다. 이것은 계획 (5)에 대하여

$$\sum_{\alpha=1}^{tk}x_{i\alpha}x_{j\alpha}=0,\ i\neq j,\quad \sum_{\alpha=1}^{tk}x_{i\alpha}^2=tk \tag{7}$$

이며 이때 계획 X의 BIBD의 성질로부터 계획 (5)의 렬들에 관하여 다음과 같다.

$$\sum_{\alpha=1}^{tk}x_{i\alpha}=0\ \ (i=1,\ 2,\cdots,\ k) \tag{8}$$

한편 식 (7), (8)에 의하여 $A=D^{\mathrm{T}}D_1=0$이 얻어지며 식 (6)으로부터

$$[\det(D_0^{\mathrm{T}}D_0)/\det(D_{0*}^{\mathrm{T}}D_{0*})]^{1/p}=1$$

이므로 $D-$최량성도 나온다.(증명끝)

따름 1 2수준직교표 $L_k(2^r)$에서 수준 1을 $(+1,\ -1)$로, 수준 2를 $(-1,\ +1)$로 바꾸어 놓은 $(k\times 2r)$형행렬을 X라고 하자.

그러면 계획 $D=\begin{pmatrix} X^{\mathrm{T}} \\ +I_k \\ -I_k \end{pmatrix}$는 실험회수가 $N=2r$인 모형 (1)에 대한 구역 (2)에서 2수준 유효초포화계획이다. 여기서 $+I_k$, $-I_k$는 k차원행벡토르 즉

$$+I_k=(+1,\ +1,\cdots,\ +1),\ \ -I_k=(-1,-1,\ \cdots,-1).$$

따름 2 N_j $(I=1, 2, \cdots, t)$ 를 순환계획행렬들이라고 하면 $N=(N_1, N_2, \cdots, N_t)$ 는 BIBD$(2k+1, t(2k+1), tk, t(k-1)/2)$ 이며 $X=\begin{pmatrix} I_m \\ N \end{pmatrix}$ 은 $(2k+2, t(k+1))$ 형 $E(s^2)$ 최량초포화계획으로 된다. 여기서 I_m 은 모든 원소가 +1인 $m=t(2k+1)$ 차행벡토르이다.

이때 $D=\begin{pmatrix} X^{\mathrm{T}} \\ Y \end{pmatrix}$ 에서 첫렬을 제외한 $(tk\times(k-1))$ 형행렬 $\overline{D}$ 는 실험회수가 $N=tk$ 이고 인자의 개수가 $(k-1)$ 인 모형 (1)에 대한 구역 (2)에서 2수준유효초포화계획이다. 여기서 Y 는 $t/2$개 행은 +1, 나머지 $t/2$개 행은 –1을 원소로 가지는 $(t\times k)$ 형행렬이다.

참 고 문 헌

[1] M. Liua et al.; Journal of Statistical Planning and Inference, 91, 139, 2000.

[2] J. Bradley et al.; Technometrics, 43, 1, 2011.

[3] J. Bradley et al.; Technometrics, 59, 48, 2017.

[4] T. E. Pieter et al.; Technometrics, 59, 69, 2017.

[5] B. Jones et al.; Journal of Quality Technology, 45, 121, 2013.

주체108(2019)년 6월 10일 원고접수

Construction of Incomplete Second-Order Two-Level Efficient Supersaturated Design using $E(s^2)$ Optimal Supersaturated Design

Kim Chol Ok, Kim Chol Ho

We establish an efficient supersaturated design for the incomplete second-order regression in two-level design sphere and study the construction method and the property of the incomplete second-order two-level efficient supersaturated design using $E(s^2)$ optimal supersaturated design.

Key words: incomplete second-order regression, efficient supersaturated design