김일성종합대학학보 주체108(2019)년
수 학 제65권 제4호

평등계획을 리용한 한가지 2차3수준유효초포화계획구성

김철호, 김철옥

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《현시대는 과학기술의 시대이며 과학기술의 발전수준은 나라의 종합적국력과 지위를 규정하는 징표로 됩니다.》

선행연구[2]에서는 완전2차회귀모형에 대한 한가지 3수준계획으로서 합리적인 초포화계획의 구성법을, 선행연구[3]에서는 불완전2차회귀모형에 대한 합리적인 초포화계획으로서 2수준홀더브계획의 구성법들을, 선행연구[4]에서는 같은 모형에서 주효과와 얽힘효과를 추정하기 위한 합리적인 초포화계획구성법들을, 선행연구[1]에서는 평등계획에 대한 행치환적을 도입하여 1차회귀모형에 대한 여러수준최량초포화계획구성법을 연구하였다.

론문에서는 2차유효초포화계획에 대한 개념을 제기하고 평등계획을 리용하여 2차3수준유효초포화계획의 구성법을 내놓고 그 성질을 연구하였다.

완전2차회귀모형

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

에 대하여 계획구역 $\Lambda=\{(x_1,\ x_2,\cdots,\ x_k)\,|\,x_i\in\{0,+1,-1\}\ (i=1,\ 2,\cdots,k)\}$ 에서의 합리적인 초포화계획을 구성하는 방법을 보기로 하자.

이제 다음과 같은 계획을 모형 (1)에 대한 계획(행렬)이라고 하자.

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

이때 완전2차회귀모형에 대한 미지파라메터개수는 $m=(k+1)(k+2)/2$이다.

인자 $x_{i\alpha}$들이 가지는 동일한 수준수를 p라고 하면 2차초포화계획을 다음과 같이 정의한다.

정의 1 계획행렬 (2)를 완전2차회귀모형 (1)에 대한 계획행렬이라고 할 때 이 계획을 $(p-1)m<N$이면 2차비포화계획, $(p-1)m=N$이면 2차포화계획, $(p-1)m>N$이면 2차초포화계획이라고 부른다.

계획행렬의 합리성을 위한 유효성기준에 대하여 보기로 하자.

모형 (1)을 다음과 같이 변경시킬수 있다.

$$y=\sum_{i=1}^{k}\beta_t x_t+\beta_0+\sum_{i=1}^{k}\beta_{ii}x_i^2+\sum_{i>j}^{k}\beta_{ij}x_i x_j+\varepsilon \tag{3}$$

모형 (3)에 대한 독립변수행렬은 $\tilde{D}=(D(N):D_1)$로 된다. 여기서 $D(N)$은 $(N\times k)$형계획행렬, D_1은 상수항, 2차항, 얽힘항에 대응되는 $(N\times(1+k(k+1)/2))$형행렬이다.

모형 (3)을 행렬모형으로 바꾸어쓰면

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

으로 된다. 여기서 $\theta_1 = (\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_k)^{\mathrm{T}}$, $\theta_2 = (1, \beta_{11}, \beta_{22}, \cdots, \beta_{kk}, \beta_{12}, \beta_{13}, \cdots, \beta_{k-1\,k})^{\mathrm{T}}$ 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.

$A = 0$ 이자면 계획행렬 D 와 D_1 에 대하여 $D^{\mathrm{T}}D_1 = 0$ 이면 충분하다.

한편 1차주효과추정에서 정확도를 높이자면 계획행렬 D 에 관하여 $D-$최량성기준으로서 $\det(D_0^{\mathrm{T}}D_0)$ 을 최대로 하여야 한다. 여기서 D_0 은 상수항을 포함한 $(N \times (1+k))$ 형행렬로서 $D_0 = (1 : D)$ $(1 = (1, 1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}})$이다.

이로부터 2차유효초포화계획의 개념을 다음과 같이 정의한다.

정의 2 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 3[5] 회귀모형

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_s x_s \tag{5}$$

에 대하여 계획구역 D^s 에서 n 개의 점으로 이루어진 실험계획

$$X(N) = (x_k = (x_{k1}, x_{k2}, \cdots, x_{ks}) \ (k = 1, 2, \cdots, N))$$

의 최대허용편차 $D(p_n) = \max\limits_{(x_1, x_2, \cdots, x_s) \in D^s} |F_n(x_1, x_2, \cdots, x_s) - F(x_1, x_2, \cdots, x_s)|$ 가 최소로 될 때 계획 $X(N)$ 을 계획구역 D^s 에서 회귀모형 (5)에 대한 평등계획이라고 부른다. 여기서

$$F(x_1, x_2, \cdots, x_s) = \prod_{i=1}^{s} x_i, \ F_n(x) = F_n(x_1, x_2, \cdots, x_s) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} I\{x_{k1} < x_1, \cdots, x_{ks} < x_s\}$$

정의 4[5] n 수준 U 형계획 $U_n(n^m)$ 들중에서 다음의 기준값이 최소로 되는 계획을 U 평등계획이라고 부른다.

$$CD_2(P_n) = \left[\left(\frac{13}{12}\right)^2 - \frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n}\prod_{i=1}^{s}\left(1 + \frac{1}{2}\left|x_{ki} - \frac{1}{2}\right| - \frac{1}{2}\left|x_{ki} - \frac{1}{2}\right|^2\right) + \frac{1}{n^2}\sum_{k,\,l=1}^{n}\prod_{i=1}^{s}\left(1 + \frac{1}{2}\left|x_{ki} - \frac{1}{2}\right| + \frac{1}{2}\left|x_{li} - \frac{1}{2}\right| - \frac{1}{2}|x_{ki} - x_{li}|\right)\right]^{1/2}$$

정의 5[4] 행렬 A 를 매 렬이 치환렬로 구성된 $(n \times m)$ 형행렬, 행렬 B 를 $(n \times p)$ 형행렬이라고 할 때 다음과 같은 넘기기를 생각하자.

① 행렬의 첫렬에 A 의 첫렬의 행순서대로 B 의 매 행들을 치환한 $(n \times p)$ 형행렬을 놓는다.

② 행렬의 둘째 렬에는 A 의 둘째 렬의 행순서대로 B 의 매 행들을 치환한 $(n \times p)$ 형행렬을 놓는다.

③ 우의 과정을 m 째 렬까지 반복하여 $(n \times mp)$ 형행렬 C 를 얻는다. 이런 넘기기를 A 의 렬에 따르는 A 와 B 의 행치환적이라고 부르고 $C = A \oplus B$ 로 표시한다.

2차3수준초포화계획을 다음과 같이 구성한다.

3수준직교계획 $X_n(3^s)$ 과 U 평등계획 $U_n(n^2)$ 에 의한 행치환적을 실시한다. 즉

$$X_n(3^s) \oplus U(n^2) = (X(3^s) : \tilde{X}(3^s))$$

라고 한다.

2차3수준초포화계획 $D(N:k)$ 는

$$D(N:k) = \begin{pmatrix} X(3^s) & : \tilde{X}(3^s) \\ -X(3^s) & : \tilde{X}(3^s) \\ 0 & : \ 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

이다. 여기서 $\tilde{X}(3^s)$ 은 U 평등계획에 의하여 $X(3^s)$ 이 변형된 행렬이며 구성된 계획행렬은 $N = 2n,\ k = 2s$ 인 $(N \times k)$ 형행렬이고 $0 = (0,\ 0,\ \cdots,\ 0) \in \mathbf{R}^s$ 이다.

다음으로 계획 $D(N:k)$ 의 성질에 대하여 보자.

정리 1 2차3수준초포화계획 (6)은 직교계획이다.

정리 2 2차3수준초포화계획 (6)은 1차주효과추정에 관하여 불편인 초포화계획이다. 즉 $D^{\mathrm{T}} D_1 = 0$ 인 초포화계획이다.

증명 실험점개수가 $N = 2n = 2 \times 3^l$ 이고 $s = (3^l - 1)/2$ 이므로 렬의 개수(인자의 개수)는 $k = 2s = 3^l - 1$이다. 따라서 총 파라메터개수가 $m = (k+1)(k+2)/2 = 3^l(3^l + 1)/2$ 이므로

$$2m - N = 2 \times 3^l \times (3^l + 1)/2 - 2 \times 3^l = 3^l(3^l - 1) > 0$$

이다. 한편 정리 1에서와 마찬가지로 초기계획 $X_n(3^s)$ 의 직교성과 U 평등계획의 성질, 행치환적의 성질에 의하여 1차주효과들은 2차주효과들, 얽힘효과들과 독립적으로 추정된다. 즉 $\frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N} x_{i\alpha}^2 x_{j\alpha} = \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N} x_{i\alpha} x_{j\alpha}^2 = \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N} x_{i\alpha} x_{j\alpha} x_{l\alpha} = 0\ \ (i,\ j,\ l = 1,\ 2,\ \cdots,\ 2s\ \ (i \neq j \neq l))$이다.(증명끝)

구성방법에 의하여 얻어지는 대표적인 2차유효초포화계획들은 다음과 같다.

$k = 4$ 인 경우 $X_6(3^2) = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ 0 & -1 \\ +1 & 0 \\ +1 & 0 \\ -1 & +1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow D(13:4) = \begin{pmatrix} X_6(3^2) & : & \tilde{X}_6(3^2) \\ -X_6(3^2) & : & \tilde{X}_6(3^2) \\ 0 & : & 0 \end{pmatrix}$

$k = 5,\ 6,\ 7,\ 8$ 인 경우 $X_9(3^4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & +1 & +1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & 0 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & 0 \\ +1 & -1 & 0 & +1 \\ -1 & 0 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & +1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow D(19:8) = \begin{pmatrix} X_9(3^4) & : & \tilde{X}_9(3^4) \\ -X_9(3^4) & : & \tilde{X}_9(3^4) \\ 0 & : & 0 \end{pmatrix}$

$k=9, \cdots, 14$ 인 경우 초기계획으로서 직교표 $L_{18}(2^1\times3^7)$ 에서 첫렬을 없애고 $0\to0$, $1\to+1$, $2\to-1$ 로 변형한 $X_{18}(3^7)$ 을 선택하고 구성방법에 따라 다음과 같이 구성한다.

$$D(37:14)=\begin{pmatrix} X_{18}(3^7) & : & \tilde{X}_{18}(3^7) \\ -X_{18}(3^7) & : & \tilde{X}_{18}(3^7) \\ 0 & : & 0 \end{pmatrix}$$

표. 계획 $D(N:k)$ 의 유효성평가

N	k	m	$D(N:k)$	$\left[\dfrac{\det(D_0^{\mathrm{T}}D_0)}{\det(D_{0*}^{\mathrm{T}}D_{0*})}\right]^{1/p}$ (%)
13	4	15	$D(13:4)$	72.58
19	5	21	$D(19:5)$	71.70
	6	28	$D(19:6)$	70.90
	7	36	$D(19:7)$	70.43
	8	45	$D(19:8)$	70.01
37	9	55	$D(37:9)$	69.73
	10	66	$D(37:10)$	69.45
	11	78	$D(37:11)$	69.29
	12	91	$D(37:12)$	69.09
	13	105	$D(37:13)$	68.96
	14	120	$D(37:14)$	68.90

2차3수준초포화계획 (6)에 대한 $D-$최량성의 의미로서의 유효성평가는 1차직교계획에 령점을 포함한 $D-$최량계획들의 정보행렬식들을 리용하여 실험점개수와 파라메터개수에 따르는 $[\det(D_0^{\mathrm{T}}D_0)/\det(D_{0*}^{\mathrm{T}}D_{0*})]^{1/p}$ 을 계산하는 방법으로 진행하였다.

계산결과는 표와 같다.

표에서 보는바와 같이 계획 $D(N:k)$ 는 유효성기준을 만족시킨다.

참 고 문 헌

[1] 황철규 등; 조선민주주의인민공화국 과학원통보, 6, 26, 주체105(2016).

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

[3] E. Anna et al.; Technometrics, 59, 48, 2017.

[4] E. Candes et al.; Ann. Statist., 35, 2313, 2007.

[5] C. Kashinath et al.; Statist. Sinica, 23, 1, 2015.

주체108(2019)년 6월 10일 원고접수

Construction of a Second-Order Three-Level Efficient Supersaturated Design using Uniform Design

Kim Chol Ho, Kim Chol Ok

We suggest the concept of second-order efficient supersaturated design and study the construction method and the property of second-order three-level efficient supersaturated design using uniform design.

Key word: second-order efficient supersaturated design