

H-계획을 리용한 2수준최량겹친초포화계획구성방법

김철호, 김성혁

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학과 기술이 매우 빨리 발전하고있는 오늘의 현실은 기초과학을 발전시킬것을 더욱 절실하게 요구하고있습니다.》(《김정일선집》 증보판 제11권 138페이지)

우리는 실험인자들이 많은 경우 1차회귀모형을 추정하기 위한 적은 실험회수를 가지는 초포화계획의 한가지 구성방법에 대하여 연구하였다.

선행연구[3, 4]에서는 두수준초포화계획의 $E(S^2)$ -최량성기준을 만들고 직교계획과 BIB-계획 등을 리용하여 $E(S^2)$ -최량초포화계획들을 구성하는 방법과 초포화계획에 행을 더 첨가하여 최량초포화계획을 구성하는 방법들을 제기하였다.

또한 선행연구[1, 2]에서는 겹친계획의 구성방법으로 1차회귀모형에 대한 2수준초포화계획구성방법을 제기하였으며 선행연구[3]에서는 플랙케트-부맨계획을 리용하여 겹친초포화계획을 구성하고 그것이 유효성이 높은 2수준초포화계획으로 된다는것을 밝혔다.

론문에서는 H-계획을 리용하여 정보행렬의 최대최소성의 관점에서 최량겹친초포화계획을 구성하는 방법을 연구하였다.

이제 1차회귀모형

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \varepsilon \quad (1)$$

또는

$$Y = \beta_0 I + \beta X + \varepsilon \quad (2)$$

을 생각하자. 여기서 β_0 은 미지상수이고 I 는 모든 원소가 1인 $n \times 1$ 형벡터이며 $\beta = (\beta_1 \ \beta_2 \ \cdots \ \beta_m)^T$ 는 $n \times 1$ 형미지결수벡터, X 는 β 에 대응하는 $n \times m$ 형계획행렬이다. 그리고 $\varepsilon = (\varepsilon_1 \ \varepsilon_2 \ \cdots \ \varepsilon_n)^T$ 는 평균이 0이고 분산이 σ^2 인 정규분포에 따르는 우연오차이다.

이때 모형 (1), (2)에 대한 미지결수 (β_0, β) 를 추정하기 위한 초포화계획을 구성하자.

정의 1 [1] 행렬 B 를 원소가 ± 1 인 $2n \leq m$ 을 만족시키는 $n \times m$ 형행렬이라고 할 때 겹친행렬

$$X = \begin{pmatrix} B \\ -B \end{pmatrix} \quad (3)$$

를 모형 (1) 또는 (2)에 대한 기초계획 B 에 의한 겹친초포화계획이라고 부른다.

구성방법에 따라 계획 (3)은 주어진 모형 (1)에 대한 2수준초포화계획이다.

정의 2 [3] 임의의 초포화계획에 대응하는 정보행렬 $X^T X = (S_{ij})$ ($i, j = 1, \cdots, m$)에 대하여

$$E(S^2) = \sum_{i < j} \frac{S_{ij}^2}{C_m^2}$$

이 최소인 계획을 모형 (1)에 대한 $E(S^2)$ -최량초포화계획이라고 부른다.

정의 3 [4] 초포화계획 X 에 대하여 $UE_X(S^2) = \frac{1}{C_{m+1}^2} \left[\sum_{i=1}^m (1^T x_i)^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq m} (x_i^T x_j)^2 \right]$ 이 최

소인 계획을 모형 (1)에 대한 $UE(S^2)$ -최량초포화계획이라고 부른다.

보조정리[2] 수준균형이 보장되는 초포화계획들의 모임우에서 $E(S^2)$ -최량성과 $UE(S^2)$ -최량은 동등하지만 수준균형이 보장되지 않는 초포화계획들의 모임우에서는 동등하지 않다.

정의 4 [1] 초포화계획 (3)에 대한 정보행렬 $X^T X = (S_{ij})$, $i, j = 1, 2, \dots, m$ 에 대하여 $S_{\max} = \max_{i < j} |S_{ij}|$, $f_{S_{\max}} = \sum_{i < j} I_{S_{\max}}(|S_{ij}|)$ 가 최소로 될 때 X 를 최대최소성을 가지는 접친초포화계획이라고 부른다. 여기서 $I_a(b)$ 는 $a=b$ 이면 1이고 아니면 0인 정의함수이고 S_{ij} 는 계획 X 의 i 째 렬과 j 째 렬사이의 스칼라적, S_{\max} 는 정보행렬의 비대각선원소들중에서 최대값, $f_{S_{\max}}$ 는 정보행렬의 비대각선원소들중 최대값에 대응하는 렬들의 쌍의 총개수이다.

정의 5 초포화계획 (3)에 대하여 다음의 조건들이 만족된다고 하자.

① 계획 X 는 가상렬을 포함하지 않는다.

② 계획 X 는 최대최소성을 가진다.

이때 계획 (3)을 모형 (1)에 대한 2수준최량접친초포화계획이라고 부른다.

우리는 H-계획을 리용하여 모형 (1)에 대한 2수준최량접친초포화계획을 구성하는 방법을 연구한다.

정리 1 계획 (3)이 모형 (1)에 대한 2수준최량접친초포화계획이기 위해서는 기초계획 B 가 가상렬을 포함하지 않는 최대최소성을 가진 초포화계획일것이 필요하고 충분하다.

증명 계획 (3)의 구성방법에 따라 정보행렬은 $X^T X = (B^T, -B^T) \begin{pmatrix} B \\ -B \end{pmatrix} = 2B^T B$ 이므로

계획 X 의 가상렬존재성과 최대최소성문제는 기초계획 B 의 가상렬존재성과 최대최소성 문제에 따라 결정된다.(증명끝)

정리 1의 결과로부터 모형 (1)에 대응하는 2수준최량접친초포화계획을 구성하자면 가상렬이 포함되지 않으면서 최대최소성을 만족시키는 기초계획을 구성하면 충분하다는 것을 알수 있다. 이제 D 를 $m=2^k$ 개의 행과 n 개의 인자를 가지는 H-계획의 부분인자 계획이라고 하면 D 는 직교하는 n 개의 렬을 가진 행렬이다.

이때 기초계획을 $B=D^T$ 로 놓으면 다음의 결과가 얻어진다.

정리 2 계획 $B=D^T$ 는 $UE(S^2)$ -최량초포화계획이다.

정리 3 D 를 $m=2^k$ 개의 행과 n 개의 인자렬을 가지는 H-계획의 부분인자 계획이라고 할 때 k 개의 독립인 렬을 가진 이 계획의 정의식이 홀수길이를 가지면 계획행렬 D 는 가상행을 가지지 않는다.

정리 2, 3에 의하여 기초계획 $B=D^T$ 는 가상렬을 가지지 않는 n 개 행을 가진 $UE(S^2)$ -최량초포화계획이다.

따라서 H-계획의 부분계획으로 구성된 B 에 의한 접친계획 (3)은 가상렬을 포함하지 않는 $m=2^k$ 개 인자와 $N=2n$ 개의 행을 가지는 $UE(S^2)$ -최량초포화계획이다.

이제 $B=D^T$ 에 의한 겹친계획 X 가 최대최소성의 의미에서 최량계획을 구성하는 방법을 보기 위하여 다음의 계산과정을 진행한다.

① $k=3, 4, 5$ 인 경우 $2n \leq m=2^k$ 을 만족시키는 모든 n 들을 찾는다.

② 매개 n 에 대하여 홀수길이를 가지는 정의식에 의하여 행렬 D 들을 구성한다.

③ 매개 n 에 따르는 행렬 D 를 시초계획으로 하는 겹친계획 (3)들을 구성한다.

④ 매개 n 과 행렬 D 에 의한 겹친계획 (3)에 의하여 얻어지는 정보행렬들을 리용하여 S_{\max} 와 $f_{S_{\max}}$ 들을 계산하여 최소인 계획을 찾는다.

⑤ $k=6$ 인 경우에는 $n \leq 14$ 인 모든 n 에 대하여 행렬 D 와 겹친행렬을 만들어 대응하는 정보행렬들을 리용하여 S_{\max} 와 $f_{S_{\max}}$ 들을 계산하여 최소인 계획을 찾는다.

이때 얻어지는 겹친행렬들은 모형 (1)에 대한 2수준최량겹친초포화계획이다.

실례 $k=3$ 인 경우 $2n \leq m=2^3=8$ 을 만족시키는 n 은 4이다.

이때 $n=4$ 인 H-계획의 부분계획을 만드는 홀수길이를 가지는 정의식에 대응하는 발생식들은 $x_4=x_1x_2$, $x_4=x_1x_3$, $x_4=x_2x_3$ 이다.

이 발생식들에 의하여 만들어지는 부분계획들은 다음과 같다.

$$D_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, D_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, D_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

이 행렬들에 기초하여 겹친행렬을 만들면 다음과 같다.

$$X_1 = \begin{pmatrix} D_1^T \\ -D_1^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, X_2 = \begin{pmatrix} D_2^T \\ -D_2^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$X_3 = \begin{pmatrix} D_3^T \\ -D_3^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

계획행렬들로부터 독립변수행렬 $\tilde{X}=(1:X)$ 를 리용하여 정보행렬 $\tilde{X}^T\tilde{X}$ 의 상반행렬

들을 구하고 S_{\max} 와 $f_{S_{\max}}$ 들을 계산하면 다음과 같다. 여기서 1은 모든 원소가 1인 $n \times 1$ 행벡터이다.

$$\tilde{X}_1^T \tilde{X}_1 = \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 8 & 0 & 0 & 0 & 4 & -4 & -4 & -4 \\ & & 8 & 0 & 0 & -4 & 4 & -4 & -4 \\ & & & 8 & 0 & -4 & -4 & 4 & -4 \\ & & & & 8 & -4 & -4 & -4 & 4 \\ & & & & & 8 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & & 8 & 0 & 0 \\ & & & & & & & 8 & 0 \\ & & & & & & & & 8 \end{pmatrix}, S_{\max}(X_1) = 4, f_{S_{\max}}(X_1) = 16$$

$$\tilde{X}_2^T \tilde{X}_2 = \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 8 & 4 & 0 & -4 & 0 & -4 & 0 & -4 \\ & & 8 & -4 & 0 & -4 & 0 & 4 & 0 \\ & & & 8 & 4 & 0 & -4 & 0 & -4 \\ & & & & 8 & -4 & 0 & -4 & 0 \\ & & & & & 8 & 4 & 0 & -4 \\ & & & & & & 8 & -4 & 0 \\ & & & & & & & 8 & 4 \\ & & & & & & & & 8 \end{pmatrix}, S_{\max}(X_2) = 4, f_{S_{\max}}(X_2) = 16$$

$$\tilde{X}_3^T \tilde{X}_3 = \begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 8 & 0 & 4 & -4 & 4 & 0 & -4 & -4 \\ & & 8 & -4 & 4 & 0 & 0 & -4 & -4 \\ & & & 8 & 0 & -4 & -4 & 0 & 0 \\ & & & & 8 & -4 & -4 & 0 & 0 \\ & & & & & 8 & 0 & 4 & -4 \\ & & & & & & 8 & -4 & 4 \\ & & & & & & & 8 & 0 \\ & & & & & & & & 8 \end{pmatrix}, S_{\max}(X_3) = 4, f_{S_{\max}}(X_3) = 17$$

따라서 $k=3$ 인 경우 2수준최량접친초포화계획은 X_1 또는 X_2 이다.

다음의 표는 $k=3, 4, 5, 6$ 인 경우 H-계획의 부분계획들에 의한 2수준최량접친초포화계획구성을 보여준다.

표. H-계획의 부분계획들에 의한 2수준최량접친초포화계획

| k | P | n | 발생식 | m | S_{\max} |
|-----|-----|-----|-----------------|-----|------------|
| 3 | 1 | 4 | $x_4 = x_1 x_2$ | 8 | 4 |
| | | | $x_4 = x_2 x_3$ | | |
| 4 | 1 | 5 | $x_5 = x_3 x_4$ | 16 | 6 |
| | 2 | 6 | $x_6 = x_1 x_2$ | 16 | 4 |
| | 3 | 7 | $x_7 = x_2 x_4$ | 16 | 6 |
| | 4 | 8 | $x_8 = x_1 x_4$ | 16 | 8 |

표계 속

| k | P | n | 발생 식 | m | S_{\max} |
|-----|-----|-----|----------------------------|-----|------------|
| 5 | 1 | 6 | $x_6 = x_4x_5$ | 32 | 8 |
| | 2 | 7 | $x_7 = x_1x_2x_4x_5$ | 32 | 10 |
| | 3 | 8 | $x_8 = x_3x_5$ | 32 | 8 |
| | 4 | 9 | $x_9 = x_4x_2$ | 32 | 10 |
| | 5 | 10 | $x_{10} = x_1x_3$ | 32 | 8 |
| | 6 | 11 | $x_{11} = x_2x_5$ | 32 | 10 |
| | 7 | 12 | $x_{12} = x_1x_5$ | 32 | 8 |
| | 8 | 13 | $x_{13} = x_3x_4$ | 32 | 10 |
| | 9 | 14 | $x_{14} = x_1x_2$ | 32 | 8 |
| | 10 | 15 | $x_{15} = x_2x_3x_4x_5$ | 32 | 10 |
| 6 | 1 | 7 | $x_7 = x_6x_5$ | 64 | 10 |
| | 2 | 8 | $x_8 = x_1x_2x_3x_4$ | 64 | 8 |
| | 3 | 7 | $x_7 = x_6x_5$ | 64 | 8 |
| | | 8 | $x_8 = x_2x_3$ | | |
| | | 9 | $x_9 = x_1x_2x_3x_4x_5x_6$ | | |
| | 4 | 10 | $x_{10} = x_4x_6$ | 64 | 12 |
| | 5 | 11 | $x_{11} = x_1x_3x_4x_5$ | 64 | 10 |
| | 6 | 12 | $x_{12} = x_1x_2$ | 64 | 8 |

참 고 문 헌

- [1] E. Anna et al.; Technometrics, 59, 1, 48, 2017.
- [2] N. T. Diamond et al.; Australian Journal of Statistics, 33, 159, 1991.
- [3] C. Y. Dasl; J. Statist. Plann. Inference, 140, 1398, 2010.
- [4] K. Chatterjee et al.; J. Statist. Plann. Inference, 138, 3749, 2008.

주체109(2020)년 9월 5일 원고접수

A Construction Method of Two-level Optimal Foldover Supersaturated Design Using H-design

Kim Chol Ho, Kim Song Hyok

We study the construction method of two-level optimal foldover supersaturated design for one-order regression model using H design.

Keywords: foldover design, optimal supersaturated design