

초포화계획을 평가하기 위한 그래픽방법

장대흥

부경대학교 수리과학부 통계학전공

Graphical Methods for Evaluating Supersaturated Designs

Jang, Dae-Heung

Division of Mathematical Sciences, Pukyong National University

Key Words: Supersaturated Designs, Orthogonality Evaluation Scatterplot Matrix, r -plot, FDS plot

Abstract

직교성은 실험계획에서 중요한 개념이다. 실험계획에서 실험점의 개수보다 인자의 개수가 많은 상황에서 우리는 초포화계획을 사용한다. 이러한 초포화계획은 직교성을 만족하지 못하게 되는 데 얼마나 직교성을 만족하는 지를 평가하는 데 우리는 주로 수치적인 척도들을 사용한다. 우리는 초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 또 다른 탐색적 방법으로서 그래픽방법을 사용할 수 있다. 또한 초포화계획의 예측 능력을 평가하는 방법으로서 우리는 그래픽방법을 사용할 수 있다.

1. 서론

실험점의 개수에 비하여 요인의 수가 과다하게 많을 때 우리는 주로 초포화계획 (supersaturated design)을 사용한다. Booth와 Cox(1962) 이후 많은 학자들이 이러한 초포화계획에 대하여 연구하여 오고 있다 (예로, 2009년도에 발표되었거나 추후 발표될 초포화계획에 관한 논문으로서 Bruno와 3인(2009), Butler(2009), Jones와 2인(2009), Koukouvinos와 Mylona(2009), Koukouvinos와 2인(2009), Liu와 Zhang(2009), Phoa와 2

인(2009), Rais와 5인(2009), Sarkar와 2인(2009) 등이 있다.).

우리는 강도(strength) 2인 직교배열을 직교계획(orthogonal design)이라 부른다. r 제약을 갖으며 강도가 t 이고, 크기가 N 인 직교배열이란, 각 열이 2개 이상의 수준을 갖는 $N \times r$ 행렬 A 에서 A 의 $N \times t$ 부분행렬 각각이, 모든 가능한 $1 \times t$ 행벡터들을 같은 빈도로 갖는 행렬을 말한다.

$$L_N(q_1^{m_1} \times q_2^{m_2} \times \dots \times q_s^{m_s}), \sum_{i=1}^s m_i = r$$

를 q_i 개의 수준을 갖는 열들이 m_i 개인 직교 계획이라 하자. 직교계획의 정의는 다음과 같다.

- 1.(직교조건 1) 각 열에서 각 수준은 같은 빈도수로 나타난다.
- 2.(직교조건 2) 임의의 두 개의 열들에서 수준의 조합이 같은 빈도수로 나타난다.

종종 (조건 1)을 만족하는 계획을 U -형 계획이라 칭한다.

실험계획에서 실험점의 개수보다 인자의 개수가 많은 상황에서 우리는 초포화계획을 사용한다. 우리가 실험계획으로서 초포화계획을 쓰는 경우 이러한 초포화계획은 직교성을 만족하지 못하게 된다. 이런 경우 이 초포화계획의 직교성의 정도를 아는 것이 중요하다. 일반적인 초포화계획을 다음과 같이 표시하기로 하자.

$$L'_N(q_1^{m_1} \times q_2^{m_2} \times \dots \times q_s^{m_s}), \sum_{i=1}^s m_i = r$$

논의의 간편성을 위하여 $N \times r$ 행렬인 배열 A 는 U -형 계획이고, $A = (c_1, c_2, \dots, c_r)$ 라고 하자. 그리고 i 번째 열의 구성요소가 $1, 2, \dots, q$ 로 이루어졌다고 가정하자.

배열 A 의 임의의 두 개의 열 c_i 와 c_j 의 직교성을 평가하는 수치적인 기준 및 배열 A 의 직교성의 정도를 평가할 수 있는 수치적인 기준들을 여러 학자들이 제시하였다.

우리는 초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 또 다른 탐색적 방법으로서 그래픽 방법을 사용할 수 있다. Balkin과 Lin(1998)

은 초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 3가지 수치적인 측도들을 제시하고 이 수치적인 측도들을 그림으로 표현하기 위한 꺾은선그래프와 상자그림을 제안하였다. 우리는 3가지 수치적인 측도들 중 하나를 이용하여 초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 새로운 그림을 제시할 수 있다. 장대홍(2004)은 초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 그래픽방법으로서 직교화평가그래프, 직교화평가산점도행렬, 정다각기동평행좌표그림, 직교화평가행렬그림 등을 제시하였다. 우리는 기존의 직교화평가산점도행렬을 변형하여 새로운 직교화평가산점도행렬을 제시할 수 있다.

초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 작업도 중요하지만 초포화계획의 예측 능력을 평가하는 작업도 중요하다. Zahran와 2인(2003)은 실험계획의 예측능력을 평가하기 위한 그래픽 수단으로서 FDS(Fraction of Design Space) 그림을 제시하였다. 우리는 이 FDS그림을 초포화계획의 예측 능력을 평가하는 그래픽방법으로서 사용할 수 있다.

2. 초포화계획을 평가하기 위한 그래픽방법

2.1 직교성의 정도를 평가하기 위한 그래픽방법

우리는 장대홍 (2004)이 제시한 직교화평가산점도행렬을 변형하여 새로운 형태의 직교화평가산점도행렬을 만들 수 있다. 이 새로운 직교화평가산점

도행렬이 기존의 직교화평가산점도행렬과 다른 점은 비대각선 패널 중 상삼각 비대각선 패널에, 대응되는 두 개의 열 c_i 와 c_j 에 대한 표본상관계수의 절대값을 표시한다는 것이다. 좀 더 자세히 설명하면 이 새로운 직교화평가산점도행렬에서 대각선 패널에는, 대응되는 배열 A 각 열의 수준의 빈도를 나타내는 히스토그램을 그리고 하삼각 비대각선 패널에는, 대응되는 두 개의 열 c_i 와 c_j 에 대한 수준조합행렬(Jang (2002) 참조.)을 표현하는 산점도를 나타내고 상삼각 비대각선 패널에는, 대응되는 두 개의 열 c_i 와 c_j 에 대한 표준상관계수의 절대값을 표시한다. 우리는 이 그림에서 대각선 패널에 나타나는 히스토그램을 이용하여 직교성의 첫 번째 조건을 평가하고, 비대각선 패널에 나타나는 산점도 및 상관계수의 절대값을 이용하여 직교성의 두 번째 조건을 평가할 수 있다.

직교성의 정도를 평가하기 위한 또 다른 그래픽 방법으로서 우리는 r -그림을 제안할 수 있다. r -그림은 Balkin과 Lin (1998)이 제시한, 초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 3가지 수치적인 측도들 중 하나인 r -값(두 개의 열 사이의 표본상관계수의 절대값)들을 바둑판 모양의 그림으로 나타내는 방법이다. 배열 A 의 각 열 $c_i(i = 1, 2, \dots, r)$ 와 $c_j(i = 1, 2, \dots, r)$ 을 각각 x -축과 y -축에 따라 배열하여 정사각형 형태의 각 셀(cell)로 표시하고 c_i 와 c_j 에 대한 표준상관계수의 절대값에 따라 각 셀의 색깔에 명암을 주되 표준상관계수의 절대값이 1에 가까우면 검정색에 가까운 회색으로, 0에 가까우면 흰색에 가까운 회색으로 표시하는 방법으로 색깔에 명암을 주어 전체적으로 보면 바둑판이나 체스판 모양의 행렬을 만든다. 우리는 대각선에 있는 셀들의 명암을 보며 직교성의 첫 번째 조건을 평가하고 비대각선에 있는 셀들의 명암을 보며 직교성의 두 번째 조건을 평가할 수 있다.

만일 배열 A 가 직교성의 첫 번째 조건과 두 번째 조건을 모두 만족한다면(직교배열이면) 모든 셀이 흰색을 띠 것이고 배열 A 가 직교배열에서 멀어질수록 회색의 색깔이 점점 검정색을 띠 것이고 검정색의 비율도 늘게 될 것이다. 우리는 이 회색의 명암을 통하여 비직교화 패턴을 한 눈에 알아 볼 수 있다.

배열 A 의 직교성의 정도를 평가할 수 있는 수치적인 기준들은 하나의 수치임으로 직교성을 평가할 때 한계가 있다. 한 예로 두 배열을 비교할 때 직교성의 정도를 평가할 수 있는 수치적인 기준값이 같으면 이 두 배열의 직교성 정도가 같다고 결론을 내리게 된다. 그러나 직교성의 정도를 평가할 수 있는 수치적인 기준값이 같더라도 각 배열에서 직교성의 정도를 나타내는 패턴이 다를 수가 있다. 우리는 직교화평가산점도행렬이나 r -그림을 통하여 이러한 패턴을 살필 수가 있고 비직교화하는 쌍들을 확인할 수 있다.

2.2 예측 능력을 평가하기 위한 그래픽방법

반응표면분석모형에서 척도화 추정반응값분산(scaled prediction variance)은 다음과 같다.

$$\frac{N \text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})]}{\sigma^2} = N \mathbf{f}'(\mathbf{x})(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

여기서, N 은 실험계획의 크기이고 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 는 k 개의 설명변수 x_1, x_2, \dots, x_k 로 구성된 반응표면회귀모형이다. FDS그림은 실험계획의 공간상에서 정의되는 분위수그림(quantile plot)이다. 즉 실험계획공간의 크기를 나타내는 분위수를 x -축으로, 분위수에 대응하는 척도화 추정반

응답분산을 y -축으로 하는 분위수그림이다. 이 FDS그림을 통하여 우리는 실험계획들의 공간에서 척도화 추정반응값분산의 분포를 확인할 수 있고 이를 통하여 해당 실험계획의 예측능력을 평가할 수 있다.

3. 수치 예

다음과 같이 5가지 2수준계(수준을 1과 -1로 한) 초포화계획들을 선택하여 비교하였다. 이 5가지 초포화계획들은 모두 $L'_{12}(2^{16})$ 인 계획들이다.

1. Wu계획(Wu (1993))
2. Lin계획(Lin (1995))
3. Li-Wu(a, b)계획(Li와Wu(1997))
4. Cela계획(Cela와 2인(2001))

다음 그림 3.1은 Wu계획에 대한 직교화평가산점도행렬을 나타낸다. 하삼각 비대각선 패널에서 실험 점들을 구별하기 위하여 호트림(jittering)을 적용하였다. 대각선 패널에 나타나는 히스토그램의 높이가 다 같아 Wu계획이 직교성의 첫 번째 조건을 만족하여 U -형 계획임을 알 수 있다. 또한 비대각선 패널에 나타나는 산점도 및 상관계수의 절대값을 통하여 Wu계획이 직교성의 두 번째 조건을 만족하지 못 함을 알 수 있다. $n_0=45$ 이고 $m_0=0.33$ 임을 알 수 있다. 여기서 n_0 는 비직교화하는 쌍들의 개수이고 m_0 는 표준상관계수의 절대값 중 최대값을 의미한다. $m_0=0.33$ 가 한 곳에 집중적으로 나타남을 알 수 있다. 즉 2번째 열에서 11번째 열까지의 그룹과 12번째 열에서 16번째 열까지의 그룹 사이에서 $m_0=0.33$ 이 집중적으로 나타남으로써 이 부분에서 직교성의 두 번째 조건이 깨짐을 알 수 있다. $m_0=0.33$ 에 대응되는 산점도를 보면 실험

점들이 $(-1,-1),(-1,1),(1,-1),(1,1)$ 에 균등하게 3개씩 배당되지 못하고 4개와 2개씩 불균등하게 배당되어 비직교화가 나타나게 됨을 알 수 있다.

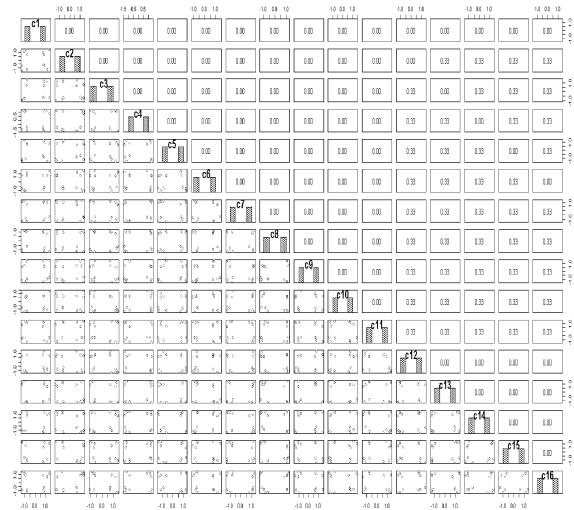


그림 3.1. Wu계획에 대한 직교화평가산점도행렬

Lin계획, Li-Wu(a, b)계획, Cela계획에 대해서도 마찬가지로 직교화평가산점도행렬을 그려 직교성의 정도를 나타내는 패턴을 살펴 수가 있고 비직교화하는 쌍들을 확인할 수 있다. 또한 각 초포화계획에 대응하는 직교화평가산점도행렬들을 서로 비교하여 봄으로써 직교성의 정도를 나타내는 패턴의 차이를 평가할 수 있다.

다음 그림 3.2는 Wu계획에 대한 r -그림이다. 대각선에 있는 셀들이 모두 흰색이므로 Wu계획이 직교성의 첫 번째 조건을 만족하여 U -형 계획임을 알 수 있다. 또한 비대각선에 있는 셀들에서 독특한 패턴(2번째 열에서 11번째 열까지의 그룹과 12번째 열에서 16번째 열까지의 그룹 사이에서 $m_0=0.33$ 이 집중적으로 나타남.)을 확인할 수 있다.

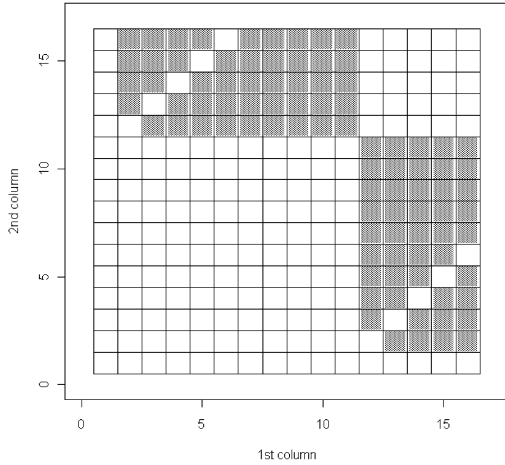


그림 3.2. Wu계획에 대한 r -그림

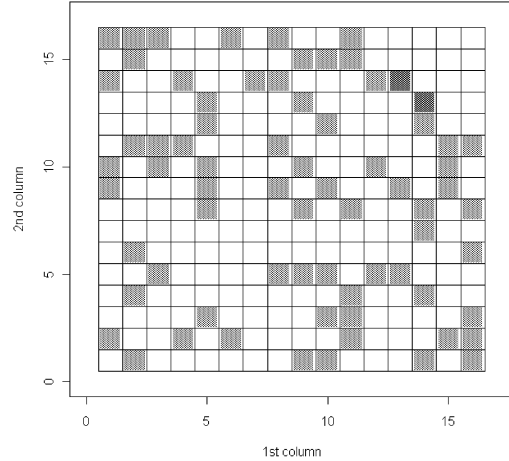


그림 3.4. Li-Wu(b)계획에 대한 r -그림

다음 그림 3.3은 r -그림에서 표준상관계수의 절대값과 회색의 명암 사이의 대응관계를 나타낸 그림이다.

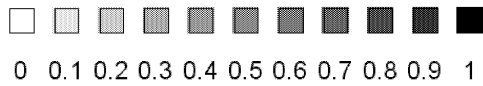


그림 3.3. 표준상관계수의 절대값과 회색의 명암 사이의 대응관계

다음 그림 3.4는 Li-Wu(b)계획에 대한 r -그림이다. 대각선에 있는 셀들이 모두 흰색이므로 Li-Wu(b)계획이 직교성의 첫 번째 조건을 만족하여 U -형 계획임을 알 수 있다. 또한 비대각선에 있는 셀들에서 산발적 패턴을 확인할 수 있다. 이러한 비직교화 패턴은 그림 3.2에 나타난 Wu계획에서의 비직교화 패턴과는 아주 다른 모습을 띤다. 13번째 열과 14번째 열 사이에서 비직교화가 더 심하게 나타남을 알 수 있다.

다음 그림 3.5는 5가지 초포화계획들에 대한 FDS그림이다.

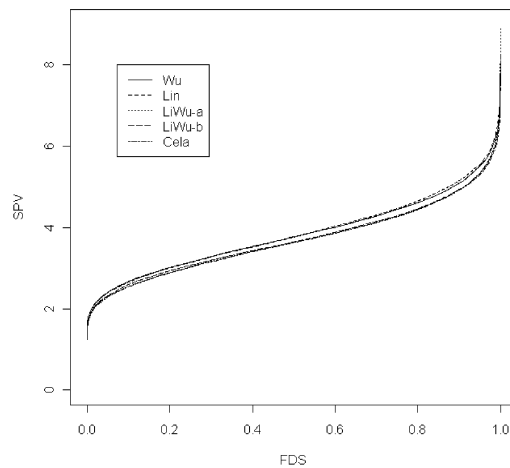


그림 3.5. 5가지 초포화계획들에 대한 FDS그림

전체적으로 보면 Wu계획과 Lin계획이 상대적으로 Li-Wu(a)계획, Li-Wu(b)계획, Cela계획보다 예측 능력이 떨어짐을 확인할 수 있다.

4. 결론

우리가 초포화계획을 사용할 때 이러한 초포화 계획이 얼마나 직교성을 만족하는 지를 평가하는데 우리는 주로 수치적인 측도들을 사용한다. 우리는 초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 그래픽방법으로서 직교화평가산점도행렬과 r -그림을 사용할 수 있다. 초포화계획의 직교성의 정도를 평가하는 작업도 중요하지만 초포화계획의 예측 능력을 평가하는 작업도 중요하다. 초포화계획의 예측능력을 평가하는 그래픽방법으로서 우리는 FDS 그림을 사용할 수 있다.

참고문헌

- 장대홍 (2004). 근사직교배열의 직교성의 정도를 평가하기 위한 그래픽방법, <품질경영학회지>, **32**, 220-228.
- Balkin, S. D. and Lin, D. K. J. (1998). A graphical comparison of supersaturated designs, *Communications in Statistics-Theory and Methods*, **27**, 1289-1303.
- Booth, K. H. V. and Cox, D. R. (1962). Some systematic supersaturated designs, *Technometrics*, **4**, 489-495.
- Bruno, M. C., Dobrijevic, M., Luu, P. T., and Sergent, M. (2009). A new class of supersaturated designs: Application to a sensitivity study of a photochemical model, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **95**, 86-93.
- Butler, N. A. (2009). Two-level supersaturated designs for 2^k runs and other cases, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **139**, 23-29.
- Cela, R., Martinez, E., and Carro, A. M. (2000). Supersaturated experimental designs: New approaches to building and using it, Part I. Building optimal supersaturated designs by means of evolutionary algorithms, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **52**, 167-182.
- Cela, R., Martinez, E., and Carro, A. M. (2001). Supersaturated experimental designs: New approaches to building and using it, Part II. Solving supersaturated designs by genetic algorithms, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **57**, 75-92.
- Jang, D. H. (2002). Measures for evaluating non-orthogonality of experimental designs, *Communications in Statistics-Theory and Methods*, **31**, 249-260.
- Jones, B. A., Nachtsheim, C. J., and Ye, K. Q. (2009). Model-robust supersaturated and partially supersaturated designs, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **139**, 45-53.
- Koukouvinos, C. and Mylona, K. (2009). Group screening method for the statistical analysis of $E(f_{NOD})$ -optimal mixed-level supersaturated designs, *Statistical Methodology*, **6**, 380-388.
- Koukouvinos, C., Mylona, K., and Simos, D. E. (2009). A hybrid SAGA algorithm for the construction of $E(s^2)$ -optimal cyclic supersaturated designs, *Statistical Methodology*, **6**, 380-388.
- Li, W. W. and Wu, C. F. J. (1997). Columnwise-pairwise algorithms with

- applications to the construction of supersaturated designs, *Technometrics*, **39**, 171-179.
- Lin, D. K. J. (1995). Generating systematic supersaturated designs, *Technometrics*, **37**, 213-225.
- Liu, M. Q. and Zhang L. (2009). An algorithm for constructing mixed-level k -circulant supersaturated designs, *Computational Statistics and Data Analysis*, **53**, 2465-2470.
- Phoa, F. K. H., Pan, Y. H., and Xu, H. (2009). Analysis of supersaturated designs via Danzig selector, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **139**, 2362-2372.
- Rais, F., Kamoun, A., Chaabouni, M., Bruno, C., Luu, P. T., and Sergent, M. (2009). Supersaturated designs for screening factors influencing the preparation of sulfated amides of olive pomace oil fatty acids, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, in press.
- Sarkar, A., Lin, D. K. J., and Chatterjee, K. (2009). Probability of correct model identification in supersaturated designs, *Statistics and Probability Letters*, **79**, 1224-1230.
- Wu, C. F. J. (1993). Construction of supersaturated designs through partially aliased interactions, *Biometrika*, **80**, 661-669.
- Zahran, A., Anderson-Cook, C. M., and Myers, R. H. (2003). Fraction of design space to assess prediction capability of response surface designs, *Journal of Quality Technology*, **35**, 377-386.