⊠ 응용논문

회귀모형 오차항의 1차 자기상관에 대한 베이즈 검정법 : SPC 분야에의 응용

김혜중 · 한성실
동국대학교 통계학과

A Bayesian Test for First Order Autocorrelation in Regression Errors : An Application to SPC Approach

Hea-Jung Kim · Sung-Sil Han
Dept. of Statistics, Dongguk University

Abstract

In case measurements are made on units of production in time order, it is reasonable to expect that the measurement errors will sometimes be first order autocorrelated, and a technique to test such autocorrelation is required to give good control of the productive process. Tool-wear process provide an example for which regression model can sometimes be useful in modeling and controlling the process. For the control of such process, we present a simple method for testing first order autocorrelation in regression errors. The method is based on Bayesian test method via Bayes factor and derived by observing that in general, a Bayes factor can be written as the product of a quantity called the Savage-Dickey density ratio and a correction factor ; both terms are easily estimated from Gibbs sampling technique. Performance of the method is examined by means of Monte Carlo simulation. It is noted that the test not only achieves satisfactory power but eliminates the inconvenience occurred in using the well-known Durbin-Watson test.

1. 서론

일반적인 회귀모형에서 오차항들은 서로 독립인 정규확률변수의 가정하에서 분석이 이루어진다. 그러나, SPC(statistical process control), SQC(statistical quality control) 등에서 사용되는 회귀분석의 응용에서 분석대상이 되는 자료들의 오차항이 시간에 대해 상관관계를 가지는 경우가 있으며, 이러한 경우 오차항들은 자기상관(autocorrelation)을 가진다고 한다. 회귀모형의 오차항들이 자기상관을 가지는 경우, 모형의 추정에는 추정량의 유효성에 심각한 문제를 발생시키는 최소자승법 대신 유효한 추정법인 Cochrane-Orcutt 방법, Hildreth-Lu 방법 등을 사용하게 된다[Pindyck과 Rubinfeld (1981) 참조]. 그러므로, 회귀모형을 유효하게 추정하기 위해서는 오차항들의 자기상관의 존재 여부를 검정하는 것이 중요하다.

SPC 분야에서는 위에서 언급된 문제에 대한 연구가 활발히 진행되어 왔다. Alwan과 Roberts(1989) 및 Montgomery(1985)는 SPC의 여러 응용분야에서 오차항이 1차 자기상관을 가진 회귀모형의 성공적인 사례 적용에 대해 논하였다. 또한, Marr와 Quesenberry(1991)는 Grant와 Leavenworth(1980), Quesenberry(1988) 등에 의해서 연구되어 온 Tool-Wear 공정에서 제품생산기계의 마모도를 선형회귀모형에 의해 추정하는 방법에 대해 논하였다. 그는 회귀모형에서 정의된 오차항의 자기상관이 마모도의 추정에 끼치는 문제점의 도출과 더불어 자기상관검정에 대해서 연구하였다.

표본이론에 의한 오차항의 자기상관 검정법으로는 Durbin과 Watson(1951)의 D 통계량에 의한 검정법이 널리 사용되고 있으며, White(1978) 및 Srivastava와 Yau(1989) 등이 여러 방법으로 D 통계량의 분포를 도출하여 Durbin-Watson 검정의 임계값 및 p-값(p-value)의 계산방법을 제시하였다. 이외에도 효율적인 공정관리에 사용되는 Marr와 Quesenberry(1991)의 NU(normalized uniform) 검정법이 있으나, 이것은 D 통계량에 의한 검정법보다 검정력이 떨어지는 문제점을 지니고 있다. 그러나, 베이지안 이론에 의한 오차항의 자기상관검정에 대한 연구는 자기상관계수의 주변사후확률분포가 복잡한 형태를 가지고 있어서 아직 이에 대한 연구가 행해지지 않은 상태이다 [Zellner(1971) 참조].

본 논문에서는 Verdinelli와 Wasserman(1995)이 제안한 일반화 Savage-Dickey 밀도비(generalized Savage-Dickey density ratio)와 사후확률분포 추정에 널리 사용되고 있는 Gibbs sampling 방법을 합성시켜서 베이지안 추론에서 가설 검정에 사용되는 베이즈요인을 자기상관모수의 검정에 적용하는 방법을 제시하고자 한다.

2장에서는 베이즈요인과 이를 이용한 검정방법에 대하여 설명하였고, 실제로 자기상관모수를 검정하기 위한 베이즈요인을 도출하였다. 3장에서는 베이즈요인을 계산하는 과정에서 발생되는 복잡한 수치적 적분 문제를 해결하기 위해 Verdinelli와 Wasserman이 제안한 일반화 Savage-Dickey 밀도비에 대해 설명하고, 이를 이용하여 자기상관모수 검정을 위한 베이즈요인의 유도 및 Gibbs Sampling 방법에 의한 추정법에 대해서 설명하였다. 마지막으로 4장에서는 모의실험을 통하여 제시된 자기상관

모수 검정법의 유용성을 검토하였다. 또한, 경험적 자료를 사용하여서 제안된 검정법이 SPC에 유용하게 활용될 수 있음을 보였다.

2. 자기상관검정을 위한 베이즈요인

2.1 베이즈요인

일반적으로 베이지안 분석에서 대립가설 H_1에 대한 귀무가설 H_0의 검정을 고려할 때 베이즈요인이 많이 사용되는데, 이러한 베이즈요인은 H_1에 대한 H_0의 사전확률의 승산비(prior odds)와 사후확률의 승산비(posterior odds)에 의해서 정의된다.

모수공간의 한 점에 대한 가설을 고려하자.

$$\begin{cases} H_0 : \ \theta \in \Theta_0 \\ H_1 : \ \theta \in \Theta_1 \end{cases}$$

여기서, Θ는 θ의 모수공간을 나타내며, $\Theta_0 = \{\theta; \theta = \theta_0\}$, $\Theta_1 = \{\theta; \theta \neq \theta_0\}$이고, $\Theta_0 \bigcup \Theta_1 = \Theta$, $\Theta_0 \bigcap \Theta_1 = \emptyset$ 이다.

따라서, 귀무가설의 사전확률 $P(H_0)$를 π_0로 가정할 때 $(\pi_0 + \pi_1 = 1)$, 모수 θ의 사전확률분포함수는 혼합함수인 $F(\theta) = \pi_0 I_{[\theta_0, \infty)}(\theta) + \pi_1 \int_{-\infty}^{\theta} g(t)\,dt$로 가정할 수 있고, 대립가설 H_1에 대한 귀무가설 H_0의 사전확률의 승산비와 사후확률의 승산비는 다음과 같다.

$$\text{사전확률의 승산비} = \frac{\pi_0}{\pi_1} = \frac{P(H_0)}{P(H_1)} = \frac{P(\theta \in \Theta_0)}{P(\theta \in \Theta_1)},$$

$$\text{사후확률의 승산비} = \frac{p_0}{p_1} = \frac{P(H_0 \mid x)}{P(H_1 \mid x)} = \frac{P(\theta \in \Theta_0 \mid x)}{P(\theta \in \Theta_1 \mid x)}.$$

따라서, 이를 이용한 베이즈요인 B는 다음과 같이 정의된다[Lee(1988) 참조].

$$B = \frac{p_0 / p_1}{\pi_0 / \pi_1} = \frac{\pi_1}{\pi_0} \cdot \frac{p_0}{p_1}. \tag{1}$$

단, $\pi_i = P(\theta \in \Theta_i) = \int_{\Theta_i} p(\theta)\,d\theta$, $p(\theta) = dF(\theta)/d\theta$,

$$p_i = P(\theta \in \Theta_i \mid x) = \frac{\int_{\Theta_i} p(\theta)\,\ell(\theta)\,d\theta}{\int_{\Omega} p(\theta)\,\ell(\theta)\,d\theta}, \quad \Omega = \Theta_0 \bigcup \Theta_1, \quad i = 0, 1,$$

$\ell(\theta)$는 θ의 우도함수.

대립가설하에서의 θ의 사전밀도함수(prior density function)가 $g(\theta)$이므로, 모수공간 Θ_1에서 $g(\theta) = p(\theta)/\pi_1$의 관계가 성립한다.

따라서, 식 (1)에서 정의된 베이즈요인은 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$B = \frac{\pi_1}{\pi_0} \cdot \frac{\int_{\Theta_0} \pi_0 \,\ell(\theta)d\theta}{\int_{\Theta_1} \pi_1 g(\theta)\,\ell(\theta)\,d\theta} = \frac{\ell(\theta = \theta_0)}{\int_{\theta \neq \theta_0} g(\theta)\,\ell(\theta)d\theta}. \tag{2}$$

식 (2)에서 구해진 베이즈요인에 의한 가설검정법은 이 값이 1보다 크면 귀무가설을 채택하고, 그렇지 않으면 귀무가설을 기각하게 된다.

2.2 자기상관검정을 위한 베이즈요인

오차항이 다음과 같은 1차 자기회귀 과정을 가지는 단순선형회귀모형을 고려하자.

$$y_t' = \alpha + \beta x_t' + u_t, \quad u_t = \rho u_{t-1} + \varepsilon_t, \quad t = 1, 2, \cdots, T. \tag{3}$$

식 (3)에서 y_t'는 t번째 종속변수의 관측치이고, α, β는 회귀계수이며, x_t'는 t번째 독립변수의 관측치를 나타낸다. 또한, u_t는 1차 자기상관(first order autocorrelation)을 가지는 오차항이고, $|\rho| \le 1$는 자기상관모수이며, ε_t는 독립이고, 평균이 0, 분산이 σ^2인 정규분포를 따른다고 가정한다. 여기서, $\rho = 0$이면 식 (3)은 일반적인 회귀모형과 같게 된다.

본 논문에서는 식 (3)에서 정의된 회귀모형에서 절편을 나타내는 부분인 α를 고려하지 않은 다음과 같은 대체모형을 고려하였다.

$$y_t = \beta x_t + u_t, \quad u_t = \rho u_{t-1} + \varepsilon_t, \quad |\rho| \le 1, \quad t = 1, 2, \cdots, T. \tag{4}$$

여기서, $y_t = y_t' - \bar{y}$, $x_t = x_t' - \bar{x}$ 이다.

위 모형에서 오차항 u_t는 평균이 0, 분산이 $\sigma^2/(1-\rho^2)$인 정규분포를 따르며, 자기상관모수 ρ는 인접하는 두 시점에서의 오차항 u_t와 u_{t-1}사이의 상관계수를 나타낸다.

식 (4)에서 $u_t = y_t - \beta x_t$이고, 따라서 $u_{t-1} = y_{t-1} - \beta x_{t-1}$이므로 이를 이용하여 식 (4)를 다음과 같이 다시 쓸 수 있다. 즉,

$$y_t = \rho y_{t-1} + \beta(x_t - \rho x_{t-1}) + \varepsilon_t, \quad t = 1, 2, \cdots, T. \tag{5}$$

위 모형의 초기값(y_0)에 대한 가정은

$$y_0 - \beta x_0 = M + \varepsilon_0, \quad M = \rho(y_{-1} - \beta x_{-1})$$

이며, y_0는 평균이 $\beta x_0 + M$이고, 분산이 σ^2인 정규분포를 따른다[Zellner(1971) 참조].

그러므로, y_0와 $\mathbf{y}' = (y_1, y_2, \cdots, y_T)$에 대한 결합확률분포함수(joint probability distribution function)는 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} f(y_0, \mathbf{y} \mid \beta, \rho, \sigma, M) &= f(y_0 \mid \beta, \rho, \sigma, M) \cdot f(\mathbf{y} \mid y_0, \beta, \rho, \sigma, M) \\ &\propto \frac{1}{\sigma^{T+1}} \exp\Big\{ -\frac{1}{2\sigma^2}(y_0 - \beta x_0 - M)^2 \\ &\qquad - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^{T} [y_t - \rho y_{t-1} - \beta(x_t - \rho x_{t-1})]^2 \Big\}, \\ &\qquad -\infty < \beta, M < \infty, \ \sigma > 0, \ |\rho| \le 1. \end{aligned} \tag{6}$$

자기상관의 존재 여부(또는, 자기상관모수의 값)를 검정하기 위해서 다음과 같은 일반적인 가설을 고려해 보자.

$$\begin{cases} H_0 : \rho = \rho_0 \\ H_1 : \rho \neq \rho_0 \end{cases} \tag{7}$$

식 (6)에서 주어진 모수들에 대한 결합사전밀도함수(joint prior density function)를 $p_A(\beta, \rho, M, \sigma)$로 나타내면

$$p_A(\beta, \rho, M, \sigma) = p(\beta, \sigma, M \mid \rho)\, p_A(\rho), \quad A = \{\rho \,;\, -1 \le \rho \le 1\} \tag{8}$$

이 성립하고, 여기서 ρ와 (β, σ, M)가 사전독립(prior independence)이라고 가정하면, 식 (8)은 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$p_A(\beta, \rho, M, \sigma) = p(\beta, \sigma, M)\, p_A(\rho). \tag{9}$$

이제, $p(\beta, \sigma, M)$와 $p_A(\rho)$의 사전분포를 Zellner(1971)에서와 같이 모호한 사전분포(vague prior distribution)와 균일분포(uniform distribution)로 가정하자.

$$p(\beta, M, \sigma) \propto \frac{1}{\sigma}, \quad p_A(\rho) = \frac{1}{2}, \quad \text{단 } A = \{\rho: -1 \le \rho \le 1\}. \tag{10}$$

그러면, 정의된 모수들의 결합사전밀도함수는 다음과 같이 정의된다.

$$p_A(\beta, \rho, M, \sigma) \propto \frac{1}{\sigma}, \quad -\infty < \beta, M < \infty, \quad \sigma > 0, \quad -1 \le \rho \le 1. \tag{11}$$

따라서, 식 (6)과 식 (11)에 의해 (β, ρ, M, σ)에 대한 결합사후밀도함수(joint posterior density function)는

$$\begin{aligned} p_A(\beta, \rho, M, \sigma \mid \mathbf{y}, y_0) &\propto p_A(\beta, \rho, M, \sigma) f(y_0, \mathbf{y} \mid \beta, \rho, M, \sigma) \\ &\propto \frac{1}{\sigma^{T+2}} \cdot \exp\Big\{ -\frac{1}{2\sigma^2}(y_0 - \beta x_0 - M)^2 \\ &\qquad - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{t=1}^{T} [y_t - \rho y_{t-1} - \beta(x_t - \rho x_{t-1})]^2 \Big\}, \\ &\qquad -\infty < \beta, M < \infty, \quad \sigma > 0, \quad -1 \le \rho \le 1. \end{aligned} \tag{12}$$

와 같이 구해지며, 식 (1)에 의해 자기상관의 존재여부를 검정하기 위한 베이즈요인 B를 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$B = \frac{\pi_1 \int_\beta \int_\sigma \int_M p_A(\rho_0, \beta, M, \sigma \mid \mathbf{y})\, dM\, d\sigma\, d\beta}{\pi_0 \int_\beta \int_{\substack{\rho \ne \rho_0 \\ -1 \le \rho \le 1}} \int_\sigma \int_M p_A(\rho, \beta, M, \sigma \mid \mathbf{y})\, dM\, d\sigma\, d\rho\, d\beta}. \tag{13}$$

단, π_0와 π_1은 각각 H_0와 H_1의 사전확률.

여기서, 사후밀도함수가 우도함수와 사전밀도함수의 곱에 비례한다는 성질을 이용하면

모수공간 A에서 자기상관모수 검정을 위한 베이즈요인 B는 식 (14)와 같이 다시 쓸 수 있다.

$$B = \frac{\int_{\beta} \ell(\rho_0, \beta) p_0(\beta)\, d\beta}{\int_{\beta} \int_{\substack{\rho \neq \rho_0 \\ -1 \le \rho \le 1}} \ell(\rho, \beta) p_A(\rho, \beta)\, d\rho\, d\beta}. \quad (14)$$

단, $p_0(\beta)$는 귀무가설하에서의 β의 사전밀도함수이고, $\ell(\rho, \beta)$ 및 $p_A(\rho, \beta)$는 각각 ρ와 β의 우도함수와 대립가설에서의 사전밀도함수를 나타낸다.

식 (14)에서 정의된 베이즈요인 B의 정확한 값은 수치적 적분과정을 통해서 얻어질 수 있으나, ρ의 분포가 $A = \{\rho: -1 \le \rho \le 1\}$에 절단된 형태를 가지고 있어서 우도함수 $\ell(\cdot)$의 도출 및 B의 수치적 적분에 어려움이 따른다. 따라서, 본 논문에서는 식 (14)에서 유도된 베이즈요인 B를 Verdinelli와 Wasserman이 제안한 일반화 Savage- Dickey의 밀도비의 형태로 변환시키고, 이것을 이용하여 근사적으로 베이즈요인을 추정하는 방법에 대해서 논하고자 한다.

3. 일반화 Savage-Dickey 밀도비에 의한 베이즈요인 추정

3.1 일반화 Savage-Dickey 밀도비

일반적으로 식 (14)의 형태와 같이 베이즈요인을 계산하기 어려운 경우 이를 해결하기 위한 방법으로는 Laplace 방법에 의한 근사적 적분방법이 주로 사용되어 왔으나, 최근에는 이러한 방법을 사용하지 않고, 사후분포로부터 추출된 표본을 이용하여 베이즈요인을 근사적으로 추정하는 방법이 많이 연구되고 있다[Newton과 Raftery (1994), Gelfand와 Dey(1994) 참조]. 최근에 Verdinelli와 Wasserman(1995)은 이러한 방법들 중의 하나로 다음에서 정의되는 일반화 Savage-Dickey 밀도비를 이용하여 베이즈요인을 계산하는 방법을 제안하였다.

식 (14)에서 $m = \int_{\beta} \int_{\substack{\rho \neq \rho_0 \\ -1 \le \rho \le 1}} \ell(\rho, \beta) p_A(\rho, \beta)\, d\rho\, d\beta$로 나타내면, 베이즈요인 B는 다음과 같이 Dickey(1971)가 제안한 Savage의 밀도비와 수정계수 곱 형태인 Savage-Dickey 밀도비로 나타낼 수 있다.

$$B = \frac{\int_{\beta} \ell(\rho_0, \beta) p_0(\beta)\, d\beta}{m}$$

$$= p_A(\rho_0 \mid \boldsymbol{y}) \int_\beta \frac{\ell(\rho_0, \beta) p_0(\beta)}{p_A(\rho_0 \mid \boldsymbol{y}) m} d\beta$$

$$= p_A(\rho_0 \mid \boldsymbol{y}) \int_\beta \frac{\ell(\rho_0, \beta) p_0(\beta) p(\beta \mid \rho_0, \boldsymbol{y})}{p_A(\rho_0, \beta \mid \boldsymbol{y}) m} d\beta$$

$$= \frac{p_A(\rho_0 \mid \boldsymbol{y})}{p_A(\rho_0)} \; E\left[\frac{p_0(\beta)}{p(\beta \mid \rho_0)} \right]. \tag{15}$$

여기서, $E[\cdot]$ 는 사후확률분포 $p(\beta \mid \rho_0, \boldsymbol{y})$에 대한 기대값을 나타낸다. 또한, $p_A(\rho \mid \boldsymbol{y})$는 절단된 집합(truncated set) $A = \{\rho\,;\ -1 \le \rho \le 1\}$에서의 ρ의 주변사후밀도함수(marginal posterior density function)로서 결합사후밀도함수인 식 (12)를 β, M 및 σ에 대해서 차례로 적분함으로써 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} p_A(\rho \mid \boldsymbol{y}) &= \frac{p(\rho \mid \boldsymbol{y})}{\int_{-1}^{1} p(\rho \mid \boldsymbol{y})\, d\rho} \\ &\propto \left\{ \sum_{t=1}^{T} (x_t - \rho x_{t-1})^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot \left\{ \sum_{t=1}^{T} (y_t - \rho y_{t-1})^2 - \frac{\left[\sum_{t=1}^{T} (y_t - \rho y_{t-1})(x_t - \rho x_{t-1}) \right]^2}{\sum_{t=1}^{T} (x_t - \rho x_{t-1})^2} \right\}^{-(T-1)/2} \end{aligned} \tag{16}$$

$$-\infty < \beta, M < \infty, \quad \sigma > 0, \quad -1 \le \rho \le 1.$$

그런데, 식 (8)에서 정의된 바와 같이 모수들에 대한 사전결합확률분포에서 ρ와 (β, σ, M)가 사전독립이라고 가정했으므로 $p(\beta, \sigma, M \mid \rho) = p(\beta, \sigma, M)$이 되고, 이 식의 양변을 M과 σ에 대해 적분하여 제거시키면, $p(\beta \mid \rho_0) = p_0(\beta)$가 된다. 이와 같은 결과에 식 (10)을 사용하면, 자기상관모수의 검정에 필요한 베이즈요인인 식 (15)는 다음과 같이 간단히 표현된다.

$$B = \frac{p_A(\rho_0 \mid \boldsymbol{y})}{p_A(\rho_0)} = 2 p_A(\rho_0 \mid \boldsymbol{y}). \tag{17}$$

그러나, 식(16)에서 유도된 $p_A(\rho \mid \boldsymbol{y})$의 분포는 불완전한 형태(unclosed form)를 가지고 있어 식 (17)을 이용하여 베이즈요인 B를 직접 계산하기는 어렵고, 이를 근사적으로 추정하여야 된다.

3.2 Gibbs sampling 방법에 의한 베이즈요인의 추정

식 (17)로부터 자기상관모수 ρ의 검정을 위한 베이즈요인 B의 추정문제는 모수공간 $A = \{\rho;\ -1 \le \rho \le 1\}$에서 유도된 ρ의 주변사후확률밀도함수 $p_A(\rho \mid \mathbf{y})$의 추정문제와 동일함을 알 수 있다.

본 절에서는 주변사후확률분포의 추정에 널리 사용되고 있는 Gibbs sampling 방법(Gelfand와 Smith(1990) 참조)을 이용하여 식 (17)에서 정의된 베이즈요인 B를 추정하는 방법을 제시하고자 한다.

Palmer와 Broemeling(1993)은 오차항이 폭발적인 1차 자기회귀과정(즉, $-\infty < \rho < \infty$인 경우)을 가진 단순선형회귀모형하에서 ρ와 β간의 조건부 사후확률분포를 유도해 내었다. 이들의 유도과정을 식 (4)의 모형에 적용시키면, 식 (11)에서 정의된 모수들의 결합사전밀도함수의 가정하에서 ρ와 β간의 조건부 사후확률분포들은 다음과 같이 각각 자유도 $(T-2)$인 절단된 $t-$분포(truncated t-distribution)와 자유도 $(T-2)$인 $t-$분포를 가짐을 쉽게 유도해 낼 수 있다.

$$
\begin{aligned}
&\frac{\rho - \hat{\rho}(\beta)}{s(\beta)} \ \Big|\ \beta, x_1, \cdots, x_T, \mathbf{y} \ \sim \ t_{A(T-2)},\\
&\frac{\beta - \hat{\beta}(\rho)}{s(\rho)} \ \Big|\ \rho_A, x_1, \cdots, x_T, \mathbf{y} \ \sim \ t_{(T-2)}.
\end{aligned}
\tag{18}
$$

여기서, $$\hat{\rho}(\beta) = \frac{\sum_{t=1}^{T}(y_{t-1}-\beta x_{t-1})(y_t-\beta x_t)}{\sum_{t=1}^{T}(y_{t-1}-\beta x_{t-1})^2},$$

$$(T-2)\,s^2(\beta) = \frac{\sum_{t=1}^{T}\left[y_t-\beta x_t-\hat{\rho}(\beta)\,(y_{t-1}-\beta x_{t-1})\right]^2}{\sum_{t=1}^{T}(y_{t-1}-\beta x_{t-1})^2},$$

$$\hat{\beta}(\rho) = \frac{\sum_{t=1}^{T}(x_t-\rho x_{t-1})(y_t-\rho y_{t-1})}{\sum_{t=1}^{T}(x_t-\rho x_{t-1})^2},$$

$$(T-2)\,s^2(\rho) = \frac{\sum_{t=1}^{T}\left[y_t-\rho y_{t-1}-\hat{\beta}(\rho)\,(x_t-\rho x_{t-1})\right]^2}{\sum_{t=1}^{T}(x_t-\rho x_{t-1})^2},$$

이고, $t_{A(T-2)}$는 모수공간 $A = \{\rho;\ -1 \le \rho \le 1\}$에서 절단된 $t_{(T-2)}$의 분포를 나타낸다.

위와 같이 도출된 조건부 사후확률분포들을 이용하여 N개 사후표본을 추출하는 Gibbs sampling 절차는 다음과 같다.

(1) $\rho^{(i)} \sim \rho \mid \beta^{(i-1)}$와 $\beta^{(i)} \sim \beta \mid \rho^{(i)}$ ($i = 1, 2, \cdots, m$)를 이용하여 m번째 iteration이 끝난 후의 첫번째 표본 $(\rho_1^{(m)}, \beta_1^{(m)})$을 얻는다. 여기서, 초기치 $\beta^{(0)}$는 임의의 값으로 주어진다.

(2) 이러한 과정을 N번 반복함으로써 다음과 같은 N개 사후표본을 얻을 수 있다.
$(\rho_1^{(m)}, \beta_1^{(m)})$, $(\rho_2^{(m)}, \beta_2^{(m)})$, $\cdots$, $(\rho_N^{(m)}, \beta_N^{(m)})$.

한편, 식 (18)로부터 ρ의 조건부 사후확률분포를 유도하면

$$p_A(\rho \mid \mathbf{y}, \beta) = \frac{p(\rho \mid \mathbf{y}, \beta)}{\int_{-1}^{1} p(\rho \mid \mathbf{y}, \beta)\, d\rho} \tag{19}$$

단,

$$p(\rho \mid \mathbf{y}, \beta) = \frac{\Gamma\left(\frac{T-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{T-2}{2}\right)\sqrt{(T-2)\pi}} [s^2(\beta)]^{-1/2} \left\{1 + \frac{[\rho - \hat{\rho}(\beta)]^2}{(T-2)s^2(\beta)}\right\}^{-(T-1)/2}$$

이 되고, ρ의 조건부 사후확률분포가 식 (19)와 같이 완전한 형태(closed form)를 가지고 있으므로 식 (17)에서 정의된 베이즈요인은 다음과 같이 추정된다[Gelfand와 Smith (1990) 참조].

$$\hat{B} = 2\ \hat{p}_A(\rho_0 \mid \mathbf{y}) = 2 \cdot \frac{1}{N} \cdot \sum_{j=1}^{N} p_A(\rho_0 \mid \mathbf{y}, \beta_j^{(m)}). \tag{20}$$

또한, 식 (20)에서 정의된 추정량 $\hat{B}$의 일치성 등에 대한 성질은 Tierney(1991)의 결과에 의해 쉽게 유도해 낼 수 있다.

4. 모의실험 및 경험적 자료분석

4.1 모의실험

3장에서 제안된 베이즈요인 추정법으로 자기상관모수를 검정하는 경우, 그 검정의 유효성을 근사표본이론에 의한 Durbin-Watson 검정법의 검정력을 기준으로 상대 평

가하기 위하여 Monte Carlo 모의실험을 실시하였다. 모의실험에서는 모형 (4)의 모수들을 각각 $T=20$, $x_t=t$, $\beta=2$, $\sigma^2=1$로 고정시키고, 주어진 자기상관모수 값인 ρ하에서 종속변수의 값 $\{y_t;\ t=1, \cdots, T\}$을 발생시킨 후 귀무가설 $H_0: \rho=0$을 검정하였다.

이와 같은 검정을 주어진 자기상관모수값 $\rho=-0.9\,(0.1)\,0.9$ 하에서 각각 100번씩 반복실험하여 얻은 평균 베이즈요인 값, Durbin-Watson 검정 통계값, 제안된 검정법및 Durbin-Watson 검정법의 검정력이 <표 1>에 나타나 있다. 특히, <표 1>에는 Durbin-Watson 검정에서 검정불능(test fail)인 경우의 수도 함께 나타나 있다.

Monte Carlo 모의실험을 통해 제안된 검정법의 유용성을 검토한 결과 귀무가설 $H_0: \rho=0$의 검정에서 <표 1>에 나타난 것과 같이 양호한 검정력을 보였으며, 서로 다른 Gibbs sequence $m=10$과 $m=20$을 사용한 검정결과가 유사한 점으로 미루어 볼 때 제안된 베이즈요인 추정법에 사용된 Gibbs Sampling 방법이 안정적으로 베이즈요인의 추정에 필요한 사후표본을 발생시키고 있음을 알 수 있다.

별도로 시행된 모의실험 결과 귀무가설 $H_0: \rho=\rho_0\,(\rho_0\neq 0, -1\leq\rho_0\leq 1)$의 검정에서도 <표 1>과 유사한 검정력을 보였다. 이에 대한 결과표는 본문에서 생략한 대신 <그림 1>을 통해서 제안된 베이즈요인 추정법이 자기상관모수 ρ의 주변사후확률분포를 주어진 ρ의 참값인 ρ_0에서 단봉인 형태로 정확하게 추정하고 있음을 보였다.

또한, 제안된 검정법과 근사적 표본이론에 의한 Durbin-Watson 검정법간에 검정력 비교 결과 예상한대로 표본수가 20인 상황에서도 Durbin-Watson 검정의 검정력이 제안된 검정법보다 현저히 떨어짐을 보여주고 있어서, 소표본인 경우는 제안된 검정법의 유용도가 훨씬 높을 것으로 기대된다.

<그림 1>은 자기상관모수가 $\rho=-0.9, 0, 0.9$인 경우 모의실험을 통해서 추정한 자기상관모수의 주변사후확률분포를 각각 도시한 것이며, 이들의 추정에 사용된 Gibbs sequence는 $m=10$이다.

4.2 경험적 자료분석 예

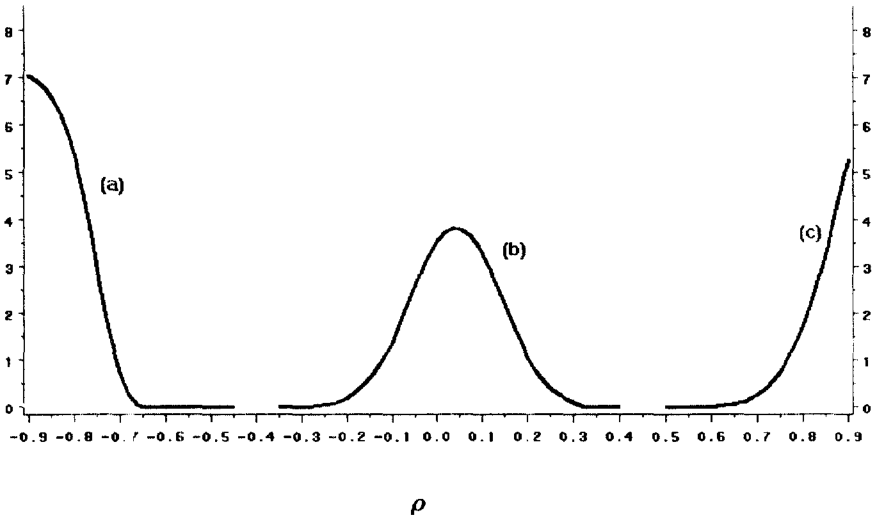
이 절에서는 Marr와 Quesenberry(1991)에서 사용한 자료를 가지고 3장에서 제안한 자기상관검정이 SPC분야에서 보다 나은 공정관리를 위해 유용하게 사용될 수 있음을 보이고자 한다. 이 자료는 공작기계의 마모에 따라 그것에 대한 자동조절기능을 가진 변속기 생산공정에서 사용된 어느 절단기구(cutting tool)가 폐기될 때까지 생산한 346개 변속기 부품의 생산순서 및 지름을 측정한 것이다. 이들 중에서 자동조절장치(setting) (87, 107, 112)에서 각각 생산된 부품(77개, 20개, 16개)의 자료만 이용하여서 생산된 부품의 지름과 생산순서간에 회귀모형을 다음과 같이 설정하여 분석하였다.

$$(\text{부품의 지름}) = \alpha + \beta(\text{생산순서}) + \text{오차항}. \tag{21}$$

위 모형의 회귀계수 β는 절단기구의 마모도를 나타내고, 이 값은 SPC에서 절단기구의 수명 및 자동조절장치 값을 계산하는데 사용된다.

< 표 1 > 귀무가설 $H_0: \rho = 0$ 하에서 실제모수 ρ의 변화에 따른 평균 베이즈요인, D-W 통계값 및 검정력

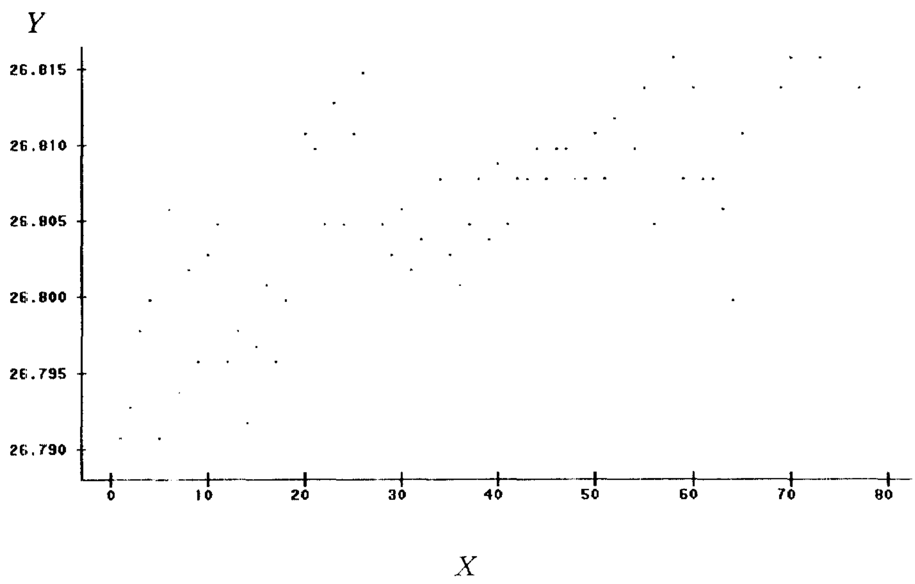
Gibbs sequence / 실제 모수	$m=10$		$m=20$		Durbin-Watson 검정 ($\alpha=0.05$)		
	평균 베이즈요인	검정력 (%)	평균 베이즈요인	검정력 (%)	평균 D-W 통계값	검정력 (%)	검정불능
$\rho = -0.9$	0.000	100	0.000	100	3.726	100	0
$\rho = -0.8$	0.000	100	0.000	100	3.533	100	0
$\rho = -0.7$	0.000	100	0.000	100	3.339	99	1
$\rho = -0.6$	0.000	100	0.000	100	3.147	99	4
$\rho = -0.5$	0.004	100	0.004	100	2.955	59	39
$\rho = -0.4$	0.054	98	0.054	98	2.763	24	35
$\rho = -0.3$	0.468	85	0.469	85	2.572	6	20
$\rho = -0.2$	2.083	40	2.086	40	2.382	5	2
$\rho = -0.1$	4.687	12	4.690	12	2.209	4	0
$\rho = 0$	5.767	3	5.766	3	2.021	4	0
$\rho = 0.1$	4.378	10	4.373	11	1.835	4	0
$\rho = 0.2$	2.207	49	2.204	49	1.649	5	1
$\rho = 0.3$	0.709	80	0.709	80	1.464	6	18
$\rho = 0.4$	0.137	96	0.138	96	1.279	20	46
$\rho = 0.5$	0.019	99	0.019	99	1.096	64	26
$\rho = 0.6$	0.002	100	0.002	100	0.913	91	11
$\rho = 0.7$	0.000	100	0.000	100	0.732	98	1
$\rho = 0.8$	0.000	100	0.000	100	0.552	98	2
$\rho = 0.9$	0.000	100	0.000	100	0.377	100	0



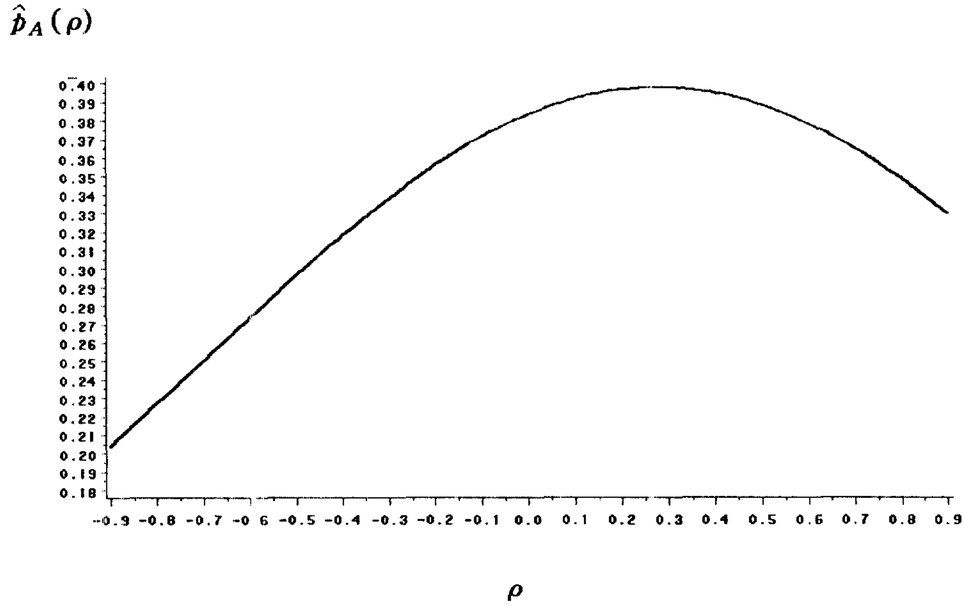
(a) $\rho = -0.9$, (b) $\rho = 0$, (c) $\rho = 0.9$에 대한 주변사후확률분포

< 그림 1 > Gibbs sampling 방법에 의해 얻어진 자기상관모수

<그림 2>와 <그림 3>은 자동조절장치 87 자료의 산포도와 Gibbs sampling 방법에 의해 얻어진 자기상관모수 ρ의 주변사후확률분포를 나타낸다.



< 그림 2 > 자료의 산포도(87 Data 장치의 경우)



< 그림 3 > Gibbs sampling 방법에 의해 얻어진 자기상관모수 ρ의 주변사후확률분포(87 Data 장치의 경우)

<표 2>는 $H_0: \rho = 0$의 검정을 위해 각 자동조절장치로부터 얻은 자료를 가지고 추정한 베이즈요인 값 및 Durbin-Watson 검정통계값들을 나타낸다. 이를 살펴보면 각 자료에 대해서 모두 베이즈요인의 값이 1보다 작게 나타나며, 따라서 자기상관계수의 값이 0이라는 귀무가설을 기각하게 됨을 알 수 있다.

이에 반하여 유의수준 $\alpha = 0.05$ 하에서 실시된 Durbin-Watson 검정에 의하면 장치 107과 112에 대해서 설정된 회귀모형의 자기상관은 검정불능(test fail)이었고, 장치 87인 경우에만 제안된 검정 결과와 같이 양의 자기상관이 있는 것으로 나타났다.

< 표 2 > 경험적 자료에 대한 Gibbs sampling 방법에 의해 추정된 베이즈요인과 Durbin-Watson 검정통계값

자동조절 setting	87	107	122
Gibbs sampling 방법에 의해 추정된 베이즈요인	0.76581	0.72536	0.71000
Durbin-Watson 검정통계량	1.441	1.220	1.093

<표 3>은 각 자동조절장치 자료로부터 추정된 β의 추정치로써 오차항간에 자기상관이 있을 경우, 이를 감안한 추정치와 일반적인 최소자승추정치간에 유의한 차가

있음을 보여준다. 이것은 변속기 생산공정의 불량률 관리 및 공작기계 수명 계산을 위해서는 공작기계 마모도(β)의 추정을 위한 모형 (21)의 자기상관계수 검정이 매우 중요함을 나타낸다.

결론적으로 <표 2>와 <표 3>은 근사적인 표본이론에 의한 Durbin-Watson 검정법보다 제안된 베이즈 검정법이 모형 (21)의 자기상관검정에 더 효과적이며, 공작기계 마모도(β)도 역시 더 정확하게 추정해 줌을 보여주고 있다.

< 표 3 > 경험적 자료에 대한 회귀계수(β)의 추정치 및 표준편차

자동조절 setting	87	107	122
최소자승법에 의한 회귀계수(β)의 추정치	0.0002994 (0.00003)	0.0003091 (0.00018)	0.0007471 (0.00027)
Gibbs sampling 방법에 의한 회귀계수(β)의 추정치	0.0002948 (0.00004)	0.0002167 (0.00036)	0.0003905 (0.00065)

5. 결론

본 논문에서는 단순회귀모형의 오차항들 사이에 존재하는 자기상관모수의 존재 여부(또는 자기상관모수의 값)를 검정하는 방법으로 베이지안 추론에서 널리 사용되는 베이즈요인을 적용하는 방법을 제안하였다.

자기상관모수의 검정에 필요한 베이즈요인을 유도하였으며, 일반화 Savage-Dickey 밀도비와 Gibbs Sampling 방법을 합성시켜서 베이즈요인 추정 및 자기상관모수 검정법을 제시하였다. 이는 현재 소표본 이론하에서 자기상관계수 검정법이 개발되어 있지 않은 상태에서 본 논문은 표본의 수에 제약을 받지 않고, 자기상관계수 검정을 효과적으로 수행할 수 있는 검정법을 제안하였다는 점에서 그 의미가 있다.

또한, 3장에서 제안한 Gibbs Sampling 방법은 자기상관모수 ρ의 검정에 필요한 베이즈요인 추정 및 회귀계수의 주변사후확률분포 추정을 일괄적으로 해결해 주고 있어서, ρ의 검정 및 회귀계수 추정을 별도로 시행하게 되어 있는 표본이론에 의한 방법들보다 더 효율적인 것으로 생각된다.

끝으로 본 논문에서는 모형 (4)에 포함된 모수들의 결합사전밀도함수가 Zellner (1971)에서와 같이 식 (11)이라는 가정하에서 자기상관모수의 검정법을 제안하였다. 그러므로, 제안된 검정법이 다양한 결합사전확률분포에 대해서 과연 로버스트성(robustness)을 가지고 있는지에 대한 연구가 필요하다. 이에 대한 연구는 본 논문에서는 다루지 않고 앞으로의 연구과제로 남겨두었다.

참고문헌

[1] Alwan, L.C. and Robert, H.V.(1989), "Time Series Modeling for Statistical Process Control," in *Statistical Process Control in Automated Manufacturing*, eds. J. B. Keats and N. F. Hubele, New York : Marcel Dekker, pp. 45-65

[2] Casella, G. and George, E.I.(1992), "Explaining the Gibbs Sampler," *American Statistical Association*, Vol. 46, No. 3, pp. 167-174.

[3] Dickey, J.(1971), "The Weighted Likelihood Ratio, Linear Hypotheses on Normal Location Parameters," *The Annals of Statistics*, Vol. 42, pp. 204-223.

[4] Durbin, J. and Watson, G.S.(1951), "Testing for Serial Correlation in Least Square Regression," *Biometrika*, Vol. 38, pp. 159-177.

[5] Gelfand, A., and Smith, A.F.M.(1990), "Sampling-Based Approaches to Calculating Marginal Densities," *Journal of The American Statistical Association*, Vol. 85, pp. 398-409.

[6] Gelfand, A. and Dey, D.(1994), "Bayesian Model Choice: Asymptotics and Exact Calculations," *Journal of Royal Statistical Society, Ser. B* 56, pp. 501-514.

[7] Grant, E.L. and Leavenworth, R.S.(1980), *Statistical Quality Control*, 5th ed. Mcgraw-Hill, New York.

[8] Lee, P.E.(1988), *Bayesian Statistics : An introduction*, University of York, England.

[9] Marr, R.L. and Quesenberry, C.P.(1991), "A NU Test of Serial Correlation of Residuals from One or More Regression Regimes," *Technometrics*, Vol. 33, pp. 441-457.

[10] Montgomery, D.C.(1985), *Introduction to Statistical Quality Control*, John Wiley & Sons, New York

[11] Newton, M.A. and Raftery, A.E.(1994), "Approximate Bayesian Inference with the Weighted Likelihood Bootstrap," *Journal of Royal Statistical Society, Ser. B* 56, pp. 3-48.

[12] Palmer, J.L., and Broemeling, L.D.(1993), "Regression Models with Autocorrelated Errors : A Gibbs Sampling Approach," *1993 ASA Proceeding of the section on Bayesian Statistical Science*, pp. 91-95.

[13] Pindyck, R.S., and Rubinfeld, D.L.(1981), *Econometrics Models and Economic Forecasts*, 2nd. ed., McGraw-Hill, New York.

[14] Quesenberry, C.P.(1988), "An SPC Approach to Compensating a Tool-Wear Process," *Journal of Quality Technology*, Vol. 20, pp. 220-229.

[15] Srivastava, M.S. and Yau, Y.K.(1988), "Tail Probability Approximations of General Statistics," *Technical Report* #88-38, University of Pittsburgh.

[16] Tierney, L., Kass, R.(1991), "Exploring Posterior Distributions Using Markov Chains'" *in Computer Science and Statistics: Proceedings of the 23rd Symposium on the Interface, ed. E. M. Keramidas, Fairfax Station, VA: Interface Foundation*, pp. 563-570.
[17] Verdinelli, I., and Wasserman, L.(1995), "Computing Bayes Factors Using a Generalization of the Savage-Dickey Density Ratio." *Journal of The American Statistical Association*, vol. 90, pp. 614-618.
[18] White, K.J.(1978), "A General Computer Program for Econometric Models SHAZAM," *Econometrica*, vol. 46, pp. 151-159.
[19] Zellner, A.(1971), *Bayesian inference in Econometrics*, John Wiley & Sons, Inc, New York.