

## 선형 캘리브레이션에서 베이저안 실험계획과 기존의 최적실험계획과의 효과비교<sup>1)</sup>

김 성 철<sup>2)</sup>

### 요 약

선형 캘리브레이션 실험계획 문제에 대하여, 베이저안 의사결정론을 이용하여 평균 제곱오차손실을 최소화한 Kim(1988,1993)의 실험계획과 관련 문헌의 결과인 몇 가지 최적계획을 비교한다. 비교대상 실험계획으로서 고전적 추정량의 점근분산을 최소화하는 Buonaccorsi (1986)의 최적계획, 회귀분석 모형에서  $M(x) = \sum x_i x_i'$ 의 함수를 최대화 또는 최소화하는 D-optimal 또는 A-optimal 계획, Hunter and Lamboy(1981)가 베이저안 추정량의 특성을 설명하기 위하여 그 논문에서 예로 들었던 실험계획을 고려한다. 서로 다른 기준에 의한 최적계획을 비교하기 위해서 우선 기대사후분산을 계산하여 비교하고 몇가지 사전분포에 대하여 몬테칼로 시뮬레이션을 통한 평균분산과 HPD 구간의 크기를 비교한다.

### 1. 서론

어느 시스템에서 미지의 참값( $X$ )을 그 측정값( $Y$ )으로부터 추론하려고 할 때 이들의 관계를 나타내는 시스템 모수에 대한 정보가 필요하다. 이를 위하여 캘리브레이션 실험을 수행하여 모수에 대한 정보를 얻고 이 정보를 이용하여 측정값  $Y$ 로부터 참값  $X$ 를 추론해야 한다. 캘리브레이션 문제는 이러한 일련의 과정을 다루는 것이며 예측(prediction)의 반대되는 개념이라는 의미에서 역회귀(inverse regression) 문제라고도 불린다.

다음과 같은 선형 캘리브레이션 문제를 고려하자.

$$y_i = \alpha + \beta(x_i - x_0) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1.1)$$

$$y_f = \alpha + \beta(x_f - x_0) + \varepsilon_f \quad (1.2)$$

계획된 캘리브레이션 실험 (1.1)에서  $(x_i, y_i)$ 를 관찰하고 미래상황의 실험 (1.2)에서 새로운  $y_f$  값을 관찰하여  $x_f$ 에 대하여 추론한다. 오차항  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ 과  $\varepsilon_f$ 는 각각 서로 독립이고 평균이 0

1) 본 연구는 한국과학재단 핵심전문연구비 (951-0103-031-1) 지원으로 수행되었으며 지원에 감사할 드립니다.

2) (156-743)서울 동작구 상도동 숭실대학교 자연과학대학 통계학과 부교수

이고 분산이  $\sigma^2$ 인 정규분포를 따른다고 가정한다. 캘리브레이션 실험계획 문제는  $x_f$ 에 대하여 가장 정확히 추론할 수 있도록 해주는 최적실험계획  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 을 구하는 것이다.

실험수준이 주어졌을 때  $x_f$ 를 추론하는 방법을 다루는 캘리브레이션 추론 분야에서는 1930년대부터 많은 연구가 진행되어 왔다.  $x_f$ 의 추정량으로 고전적, 역회귀, 베이지안 등의 3가지 추정량이 사용되는데, 고전적 추정량 (classical estimator)은 적합한 회귀식  $E(y) = \hat{\alpha} + \hat{\beta}x$ 로부터  $x = (y - \hat{\alpha}) / \hat{\beta}$ 의 식으로써  $x$ 를 추정하며 이 추정량의 분산은 존재하지 않으나 정규분포 오차의 가정 하에서는 MLE가 되며 또한 consistent하다. 역회귀 추정량 (inverse estimator)은  $x$ 와  $y$ 의 역할을 바꾼 회귀모형을 적합시킨  $E(x) = \hat{\gamma} + \hat{\delta}y$ 의 식으로부터  $x$ 를 추정하는 것으로 MSE가 상대적으로 작지만 bias가 크고 다른 모형을 적합시킨 결과이므로 특히 최적계획 분야에서는 사용하기가 어렵다. 베이지안 추정량 (Bayesian estimator)은  $\alpha, \beta, x$ 에 사전분포를 부여하여  $x$ 의 사후분포를 이용하여 추정하는 방법이다. 고전적 방법으로 Eisenhart (1939)의 연구를 시작으로 하여 Fieller (1954), Williams (1969), Shukla (1972) 등의 논문이 있고, 역회귀 방법에 관한 논문으로는 Krutchkoff (1967), Shukla & Datta (1985) 등이 있다. 베이지안 방법은 Hoadley (1970), Aitchison & Dunsmore (1975), Hunter & Lamboy (1981) 등이 연구하였다. 그 외에도 Scheffe (1973)와 Brown (1982) 등이 공통신뢰구간 (simultaneous interval)과 다변량 모형에 대하여 연구하였다.

일반적인 회귀분석 모형에 대한 최적 실험계획 문제 (optimal regression design)는 특히 선형모형에서 중요한 분야로 연구되고 있으며 D-optimal, E-optimal, A-optimal 등의 여러가지 기준에 의한 최적 실험계획이 다루어진다. Elfving (1952), Kiefer (1959) 등의 논문을 비롯하여 Fedorov (1972), Silvey (1980) 등의 단행본이 있으며 Chaloner (1984)는 선형 회귀분석에 있어서 베이지안 방법에 의한 최적 실험계획의 특성을 설명하였다.

캘리브레이션 최적 실험계획 분야는 Buonaccorsi (1986), Naszodi (1978), Ott & Myers (1968), Barlow et. al. (1991) 등이 연구하였다. Buonaccorsi는 classical estimator를 사용하여 asymptotic variance를 최소화하는 개념으로 접근하였고, Naszodi는 average absolute bias를 최소화하는 T-optimum 계획을 연구하였다. Ott & Myers는 classical estimator를 사용하여 평균 MSE를 최소화하는 실험계획을 제시하였으며 Barlow et. al.은 제곱오차손실에 의한 베이지안 결정론을 이용하여 최적해의 특성을 연구하였다.

이 논문에서 비교하려고 하는 Kim (1988, 1993)의 연구는 베이지안 의사결정론의 과정으로부터의 베이지안 추정량을 이용한 결과로서 다음과 같은 선형모형을 가정하였다.

$$Y = 1\alpha' + (\mathbf{x} - x_0\mathbf{1})\beta + E$$

$$y_f = \alpha + (x_f - x_0)\beta + \epsilon_f$$

$x_f$ 는 scalar 실수이고  $\alpha, \beta, y_f, \epsilon_f$ 는  $q$ -vector,  $Y$ 와  $E$ 는  $(n \times q)$  행렬이다. 모형의 중심은  $x_0$ 이며 이것은  $x_f$ 의 사전분포의 평균이다.  $\epsilon_f$  ( $q$ -vector)는  $N(\mathbf{0}, \Gamma)$ 의 분포를 따르고  $\Gamma$ 는 알려

져 있으며,  $x_f$ 의 사전분포는  $N(x_0, \sigma_0^2)$ 이고  $(\alpha, \beta)$ 의 사전분포는 다변량(2q-variate) 정규분포이다. 일반적인 선형모형에서의 독립성 가정을 적용하였고 제곱오차 손실함수  $l(d, x_f) = (d - x_f)^2$ 를 고려하였다. 베이저안 결정론에 의하여 기대손실함수는

$$R(x) = E_{n, x} E_{y_f | Y, x} \text{Min}_d E[l(d, x_f) | y_f, Y, x]$$

으로 나타나며, 제곱오차손실의 경우에 위의  $d^* = E[x_f | y_f, Y, x]$ 이고 이 때 기대손실은

$$R(x) = E_{n, x} E_{y_f | Y, x} [ \text{Var}(x_f | y_f, Y, x) ]$$

와 같다.  $R(x)$ 는  $x = (x_1, \dots, x_n)$ 의 함수이지만  $n$ ,  $\bar{x} - x_0 = \sum(x_i - x_0)/n$ ,  $s_x^2 = \sum(x_i - x_0)^2/n$  만의 함수임을 보일 수 있다. 또한  $R(x)$ 는  $\bar{x} - x_0$ 의 부호에 대칭이라는 사실도 증명되었다.  $(y_f, Y, x)$ 를 관찰한 후의  $x_f$ 의 조건부 사후분포는 어떤 형태의 이론적인 분포도 아닌 것으로 나타나서 주어진 실험계획  $x$ 에 대한  $R(x)$ 를 계산하기 위하여 수치적분을 사용해야 한다. Kim(1988)에서 제시된  $R(x)$ 를 최소화하는 최적계획은 다음과 같다. ‘ $|\bar{x} - x_0|$ 는 작고  $s_x$ 는 크게, 즉 실험수준의 평균을  $x_f$ 의 사전평균(prior mean)과 같게 하면서 제곱합을 최대한 크게 한다.’ 이 결과는 기대손실함수의 특성 및 수치계산에 의한 conjecture의 형태를 갖지만 베이저안 켈리브레이션 실험계획으로서 중요한 결과라고 볼 수 있다.

여러 개의 최적계획을 비교함에 있어서 가장 중요한 문제는 비교기준의 설정에 관한 것이다. 즉, 주어진 최적계획들이 이미 어떤 기준에 의하여 가장 좋은 것으로 선택된 것이므로 그들을 다시 비교하기 위해서는 일반적이고 또한 각각의 특성에 맞는 기준이 필요하다. 2절에서는 베이저안 계획과 비교할 만한 실험계획들을 검토하여 수치적으로 비교할 구체적인 실험계획을 설정한다. 베이저안 계획(Kim,1988)은 다른 실험계획과의 수치적 비교를 위하여 (1.1)과 (1.2)에 제시된 일변량 모형을 사용한다. 3절에서는 HPD 구간, Fieller의 신뢰영역, Buonaccorsi의 accuracy curve 등의 개념을 이용한 비교기준들을 검토하고 기대사후분산과 HPD 구간을 이용한 기준에 의하여 2절에서 설정한 실험계획 들을 수치계산 및 몬테칼로 시뮬레이션에 의하여 비교한다. 비교분석에 의한 결론과 적용상의 고려사항 및 문제점등은 4절에 정리하였다.

## 2. 비교대상 실험계획

Hunter and Lamboy(1981)의 실험계획은 그 논문에서 Bayesian estimator의 특성을 설명하기 위하여 예로 들었던 실험계획이다. 최적계획은 아니지만 실험실에서 흔히 쓰일 수 있는 방법이며 다른 최적계획의 비교기준으로 사용된다. molybdenum의 양을 측정하는 실험에서  $X$ 를 실제의 양으로  $Y$ 를 측정치로 하여 20개의 관찰값을 1부터 10까지의 정수값에서 각각 2번씩 얻었다. 즉, 실험계획 벡터는  $x = (1, 1, 2, 2, \dots, 10, 10)$ 이며, 이 때 실험의 중심( $\bar{x} = 5.5$ )을 사

전분포의 평균으로 하면  $\bar{x}-x_0=0$ ,  $s_x^2 = \sum(x_i-x_0)^2/n = 8.25$ 가 된다. 이에 대한 관찰값을  $y_i = \alpha + \beta(x_i-x_0) + \varepsilon_i$ 의 모형에 적합시키면  $\bar{y}=6.19$ ,  $\hat{\alpha}=6.19$ ,  $\hat{\beta}=0.9873$ ,  $\hat{\sigma}^2=0.072$ 를 얻는다.

Buonaccorsi(1986)의 최적계획은 classical estimator의 asymptotic variance  $\sigma(x_f)^2$ 를 최소화하는 실험계획으로서 세부기준에 따라 Vx optimal, AV optimal, M optimal이 있다. Vx optimal은  $\sigma(x_f)^2$ 를 최소화하고, AV optimal은  $x_f$ 의 사전분포에 대하여  $\sigma(x_f)^2$ 의 기대값을 최소화하며, M optimal은  $\sigma(x_f)^2$ 의 최대값을 최소화한다. 만약  $x_f$ 의 값이 (a,b)의 유한한 구간으로 제한되고 그 사전분포의 평균이 구간의 중앙에 있다면, 즉  $x_0=(a+b)/2$  이라면, AV optimal 계획은 전체 n개의 실험을 둘로 나누어  $x_f=a$ 에서 n/2회,  $x_f=b$ 에서 n/2회의 실험을 수행하는 양단분배계획 (equally weighted endpoint design)이고 또한 이것은 [a,b] 구간에서의 최대분산을 고려할 때의 M optimal 계획이다. 그는 이 논문에서, 좋은 실험계획이 되려면  $\sum|x_i-\bar{x}| / \sum(x_i-\bar{x})^2$ 의 값을 작게 만들어야 한다고 주장하였다. Buonaccorsi의 최적계획 중에서 Vx optimal은  $x_f$ 의 값에 영향을 받는데 구간 내에서  $\bar{x}=x_f$ 가 되는 두 점 이상에서의 실험계획은 모두 Vx optimal이다. 따라서 베이지안 계획과 비교할 만한 최적계획은  $x_f$ 의 사전분포를 사용하는 AV optimal 계획이며 Hunter and Lamboy의 계획과 대응시켜서 n=20일 때  $\bar{x}=5.5$ 인 AV optimal 계획은  $x=1$ 에서 10개,  $x=10$ 에서 10개씩 관찰하는 양단분배계획  $x=(1, \dots, 1, 10, \dots, 10)$ 이다. 이 계획은 [a,b] 구간에서의 M optimal 계획이기도 하며  $\bar{x}-x_0=0$ 이고  $s_x^2=20.25$ 의 디자인 특성을 갖는다.

선형회귀모형에 대한 최적계획은 최적화기준에 따라 여러가지가 있으나 그 중에서 가장 많이 적용되는 D-optimal 계획과,  $x_f$ 의 분포에 대하여 기대분산을 최소화하는 A-optimal 계획 (Silvey(1980)에서는 linear criterion 계획이라 함)을 고려한다. 선형모형  $y_i = \alpha + \beta(x_i-x_0) + \varepsilon_i$ 에서 절편  $\alpha$ 를 고려한 실험수준은  $(1, x_i)$ 이며  $M(x) = \sum x_{(i)} x_{(i)}^T$ 는

$$M(x) = \begin{bmatrix} n & \sum(x_i-x_0) \\ \sum(x_i-x_0) & \sum(x_i-x_0)^2 \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

가 된다. D-optimality는  $\det M(x)$ 를 최대화하는 계획으로

$$\det M(x) = n^2[s_x^2 - (\bar{x}-x_0)^2] \quad (2.2)$$

가 되므로 n이 고정되었을 때 D-optimal 계획은  $s_x$ 는 크고  $\bar{x}$ 는  $x_0$ 에 가깝게 하는 Kim(1988)의 베이지안 계획과 동일하다.

A-optimality를 적용하기 위해서  $c = (1, x_f)$ 에 대하여  $c$ 에 대한 확률분포를  $\mu(c)$ 라고 하면  $B = \int cc^T d\mu(c) = \begin{bmatrix} 1 & E(x_f - x_0) \\ E(x_f - x_0) & E[(x_f - x_0)^2] \end{bmatrix}$ 가 되고 A-optimality는  $\text{tr}[M(x)^{-1}B]$ 를

최소화하는 계획이다. 여기서  $M(x)^{-1} = \frac{1}{n^2[s_x^2 - (\bar{x} - x_0)^2]} \begin{bmatrix} \sum(x_i - x_0)^2 & -\sum(x_i - x_0) \\ -\sum(x_i - x_0) & n \end{bmatrix}$ 이

며,  $x_f$ 의 두가지 사전분포를 적용한다.

(1)  $x_f$ 가  $N(5.5, 1)$ 인 경우에는  $B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ 이 되므로  $\text{tr}[M(x)^{-1}B]$

$= \frac{1}{n} \left[ 1 + \frac{(\bar{x} - x_0)^2 + 1}{s_x^2 - (\bar{x} - x_0)^2} \right]$ 가 되어 A-optimal 계획은 역시  $s_x$ 는 크고  $\bar{x}$ 는  $x_0$ 에 가깝게 하는

베이지안 계획과 동일하다.

(2)  $x_f$ 가  $Uniform(1, 10)$ 의 사전분포를 갖는 경우에는  $B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 27/4 \end{bmatrix}$ 이 되므로  $\text{tr}[M(x)^{-1}B]$

$= \frac{1}{n} \left[ 1 + \frac{(\bar{x} - x_0)^2 + 27/4}{s_x^2 - (\bar{x} - x_0)^2} \right]$ 가 되어 이 경우의 A-optimal 계획도 역시 베이지안 계획과 동일

하다.

위에서  $x_f$ 의 사전분포의 평균이 구간의 중심인 경우에는 AV optimal 계획이 양단분배계획임을 설명하였다. 양단분배계획은 또한 이 경우의 베이지안 계획이며 D-optimal 계획이고 A-optimal 계획이다. 따라서 이처럼 전형적인 경우에는 베이지안 계획과 다른 최적계획이 동일해지는 것을 알 수 있다.  $x_f$ 의 사전평균이 구간의 중심이 아닐 경우에는 이 실험계획들이 모두 동일하다고 기대할 수 없다. 이 경우에는 양단분배계획의  $\bar{x} - x_0$ 가 0이 아닐 뿐만 아니라  $s_x^2$ 의 값도 최대라는 보장이 없다. 이 경우의 비교를 위하여 Buonaccorsi는 평균이  $x_0 = 7$ 이고 분산이  $\sigma_0 = 1$ 인  $x_f$ 의 사전분포에 대해서  $n=20$ 일 때의 근사적 AV optimal 계획이  $x=1$ 에서 7개,  $x=10$ 에서 13개를 관찰하는 계획이라고 제시하였다. 이 계획은  $\bar{x} - x_0 = -0.15$ 이고  $s_x^2 = 18.45$ 의 디자인 특성을 갖는다. 이것은  $\bar{x} - x_0$ 가 0이 아니므로 분명히 베이지안 계획이 아니며 평균이  $x_0 = 6.85$ 인 사전분포에 대해서  $\bar{x} - x_0$ 가 0이 되므로 이 때가 베이지안 계획에 더 가깝다. 이 동일한 실험계획이  $x_0 = 6.85$ 인 사전분포에 대해서는  $\bar{x} - x_0 = 0$ 이고  $s_x^2 = 18.4275$ 의 디자인 특성을 갖는다.

위의 여러 실험계획에 대한 검토를 종합하여 이 논문에서 비교하는 실험계획은 다음과 같다. 각 실험계획 공히  $n=20$ 이며  $x_f \in (1, 10)$ 의 유한구간을 고려한다.  $n$ 이 홀수이면 양단분배계획을

간단히 정의할 수 없으며 따라서  $n=21$ 인 경우에 대해서 3개의 디자인을 별도로 비교한다.

디자인 1: Hunter and Lamboy(1981)의 실험계획으로서  $\mathbf{x}=(1, 1, 2, 2, \dots, 10, 10)$ 이며,  $x_0=5.5$ ,  $\bar{x}-x_0=0$ ,  $s_x^2 = \sum(x_i-x_0)^2/n = 8.25$ 가 된다.

디자인 2: 양단분배계획으로서  $\mathbf{x}=(1, \dots, 1, 10, \dots, 10)$ 이고  $x_0=5.5$ ,  $\bar{x}-x_0=0$ ,  $s_x^2=20.25$ 가 된다. 평균이 5.5인  $x_j$ 의 사전분포에 대한 베이지안 계획이며 동시에 AV optimal, D-optimal, A-optimal 계획이기도 하다.

디자인 3: 평균이  $x_0=7$ 이고 분산이  $\sigma_0^2=1$ 인  $x_j$ 의 사전분포에 대한 근사적 AV optimal 계획으로서  $x=1$ 에서 7개,  $x=10$ 에서 13개를 관찰하는 계획이며  $\bar{x}-x_0=-0.15$ ,  $s_x^2=18.45$ 가 된다. 사전평균이 구간의 중심이 아닌 경우이며 디자인 4와 비교한다.

디자인 4: 디자인 3보다 베이지안 계획에 가깝도록 한 계획으로서 물리적으로는 디자인 3과 같이  $x=1$ 에서 7개,  $x=10$ 에서 13개를 관찰하지만 사전평균이  $x_0=6.85$ 이고  $\bar{x}-x_0=0$ ,  $s_x^2=18.4275$ 가 된다.

여러 실험계획을 비교하는데 필요한 공통모수의 값은 주로 Hunter and Lamboy의 계획으로부터 계산된 값을 사용한다. 즉,  $n=20$ ,  $a=E[\alpha]=6.19$ ,  $b=E[\beta]=0.9873$ ,  $\sigma^2 = \text{Var}(\varepsilon_i)=0.072$ 이다. 디자인 3에서 사용된  $\sigma_0^2 = \text{Var}(x_j)=1$ 을 공통으로 사용하고  $\alpha$ 와  $\beta$ 의 사전분산인  $\sigma_a^2$ 와  $\sigma_b^2$ 의 값은 임의로 선택된 0.1, 0.5, 1의 값으로 비교한다.

앞절에서 설명한 Kim(1988)의 베이지안 실험계획은  $x_j$ 와 모수  $(\alpha, \beta)$ 의 사전분포가 각각 정규분포인 경우의 결과이다.  $(\alpha, \beta)$ 의 사전분포로써 비정보적 locally uniform 분포를 사용할 경우에 대해서도 위의 실험계획들의 비교가 가능하다. 이를 위하여  $(\alpha, \beta)$ 의 사후분포를 다음과 같이 유도할 수 있다.  $(\alpha, \beta)$ 의 likelihood는

$$L(\alpha, \beta | \text{data}, x_0) \propto \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum [y_i - \alpha - \beta(x_i - x_0)]^2\right] \quad (2.3)$$

이고  $(\alpha, \beta)$ 의 사전분포는 상수이므로  $(\alpha, \beta)$ 의 사후분포는 likelihood의 형태로부터

$$BVN\left(\begin{bmatrix} \mu_\alpha \\ \mu_\beta \end{bmatrix}, \sigma^2 [X'X]^{-1}\right) \quad (2.4)$$

임을 보일 수 있고 이 이변량 정규분포의 모수는 다음과 같이 정리된다.

$$\sigma_a^2 = \frac{\sigma^2 \sum (x_i - x_0)^2}{n \sum (x_i - x_0)^2 - [\sum (x_i - x_0)]^2}$$

$$\sigma_{\beta}^2 = \frac{n\sigma^2}{n\sum(x_i-x_0)^2 - [\sum(x_i-x_0)]^2}$$

$$Cov(\alpha, \beta) = \frac{-\sigma^2 \sum(x_i-x_0)}{n\sum(x_i-x_0)^2 - [\sum(x_i-x_0)]^2}$$

$$\mu_{\beta} = \frac{n\sum y_i(x_i-x_0) - n^2(\bar{x}-x_0)\bar{y}}{n\sum(x_i-x_0)^2 - [\sum(x_i-x_0)]^2}$$

$$\mu_{\alpha} = \bar{y} - \mu_{\beta}(\bar{x}-x_0)$$

이 경우도 정규사전분포에서와 마찬가지로  $x_f$ 의 사후분포가 이론적인 분포를 따르지 않으므로 수치적분이 필요하다. 그러나 위의  $\sigma_{\beta}^2$ 의 식으로부터  $s_x^2$ 가 크고  $|\bar{x}-x_0|$ 가 작은 실험계획이  $\beta$ 의 사후분산을 작게 하여 기울기에 대한 정보를 많이 얻을 수 있음을 예상할 수 있다.

### 3. 실험계획의 비교

#### 3.1. 비교기준의 선택

$x_f$ 의 신뢰구간을 이용하는 것은 Fieller(1940)와 Graybill(1976)에 소개되어 있다. 이 신뢰구간을 C라고 하면 이것은 유한구간일 수 있고 무한구간일 수 있다. C가 무한구간일 확률은 0보다 크므로 C의 길이의 기대값은 물론 무한대이다. C가 무한구간이 될 확률을 최소화하려면  $\hat{\beta}^2$ 를 크게 유지하도록  $Var(\hat{\beta})$ 를 작게 해야 하며 이 기준에 의해서는 유한실험구간에서 양단분배계획이 최적계획임이 알려져 있다.

Buonaccorsi(1986)는 accuracy curve

$$P(x_0) = P(x_0; x_f, d) = \Pr(C \text{가 } x_0 \text{를 포함} \mid \text{실제값} = x_f, \text{ 실험계획} = d)$$

를 정의하여 신뢰구간 C를  $H_0: x_f = x_0$ 의 가설이 채택되는  $x_0$ 의 구간으로 해석하여  $x_0 = x_f$  일 때  $P(x_0) = 1 - \text{유의수준}$ 이고  $x_0 \neq x_f$ 이면  $P(x_0) = \Pr(\text{type II error})$ 가 되므로 이 때  $P(x_0)$ 를 최소화하도록 하는 것이 자연스럽다고 하였다. 이 논문의 예에서 몇가지 실험계획의  $P(x_0)$ 를 같은 축에 그려서 비교하기도 하였는데 이 분석을 통하여 양단분배계획이 AV optimality임을 보여주기도 하였다. 그러나 accuracy curve에 의한 비교에서 그의 최적계획의 우위는  $x_f$ 의 극단적인 값에서 보여지므로 실제 비교효과는 기대할 수 없다. 뿐만 아니라 베이지안 계획에서는

$x_0$ 가  $x_f$ 의 사전평균으로 그 값에 따라서  $x_f$ 의 분포가 바뀌게 되므로 동일한 개념으로 적용할 수 없게 된다.

Bayesian estimator와 classical estimator에 의한 실험계획을 비교할 수 있는 방법으로 Highest Posterior Density (HPD) 구간을 고려할 수 있다.  $x_f$ 와  $(\alpha, \beta)$ 에 대하여 각 실험계획에 적합하면서 공통적으로 사용될 수 있는 사전분포를 사용하여  $x_f$ 의 HPD 구간을 구하여 비교한다. 이 HPD 구간은 사전분포의 영향을 받게 되므로  $(\alpha, \beta)$ 의 사전분포가 정규분포와 균일분포인 경우에 대하여 각각 비교해 본다.  $x_f$ 의 사전분포는 정규분포로 고정하였는데, 만약 실험계획공간 전체에 균일분포를 부여하면  $x_f$ 의 분산이 커져서 비교의 의미가 없어지고 계산상의 어려움도 생긴다. HPD 구간을 이용하여 일반적으로 비교하기 위하여 Monte Carlo 시뮬레이션에 의하여  $x_f$ 의 사후밀도함수를 구하여 분산의 평균과 HPD 구간의 평균길이 등을 검토한다.

### 3.2. 기대사후분산에 의한 비교

먼저  $x_f$ 와  $(\alpha, \beta)$ 의 사전분포로써 정규분포를 부여하여 얻게 되는  $x_f$ 의 사후분산의 기대값을 최소화하는 Kim(1988)의 최적화 기준을 고려하자. 이 기준에 의하여 제시된 최적계획이 소위 베이지안 계획이며  $R(x) = E_{y|x} E_{y|y,x} [Var(x_f|y_f, y, x)]$ 를 최소화하는 기준이다. 실험계획은  $x$ 로 구분되며 부여되는 사전분포와 함께  $R(x)$ 의 값을 결정한다.  $x_f$ 의 사후밀도함수가 수치적분을 통하여 구해지므로  $R(x)$ 는 3중적분에 의해서 계산된다. 수치적분은 Simpson 공식에서 100개의 소구간을 사용하여 수행되고 비교대상 실험계획에 공통적으로  $x_f$ 와  $(\alpha, \beta)$ 의 정규사전분포가 적용되었다.  $(\alpha, \beta)$  사전분포의 3가지 경우의 표준편차 값에 따른 계산 결과가 <표 1>에 정리되어 있다. 근소한 차이이지만 세 경우 공통적으로,  $x_0$ 가 구간의 중심에 있을 때에는 양단분배계획(디자인 2)의 기대분산이 가장 작고  $x_0$ 가 구간의 중심에 있지 않을 때에는 디자인 4가 근사적 AV optimal 계획(디자인 3)보다 작은 기대분산을 갖는다. 디자인 4에서  $x_0$ 의 변화에 의해서  $s_x$ 가 감소 하였으나  $\bar{x} - x_0$ 가 0이 됨으로써 기대분산을 감소시켰다.

$s_x$ 와  $\bar{x} - x_0$ 의 영향은  $n$ 이 홀수인 경우에 더욱 크게 나타난다.  $n$ 이 홀수이면  $x_0$ 가 구간의 중심에 있을 때에도 양단분배계획을 적용할 수 없으므로 양단분배 후에 남은 횡수의 실험을 어디에 배치하느냐에 따라 그 결과가 달라진다. <표 2>에  $n=21$ 일 때 3개의 실험계획을 비교하였다. (a)양쪽 끝에 10회씩 배치한 후 나머지 1회의 실험을 중앙에 배치, (b)양쪽 끝에 10회씩 배치한 후 나머지 1회의 실험을 한쪽 끝에 배치, (c)양쪽 끝과 중앙에 각 7회씩 배치. 역시  $(\alpha, \beta)$  사전분포의 표준편차 값에 따른 변화를 보기 위하여 세 가지 경우에 대하여 비교하였



다. 베이지안 최적화 기준에 의하여 계획(c)는 계획(a)보다 열등하므로 (a)와 (b)를 비교하면 세 경우 공통적으로  $s_x$ 의 값이 큰 계획(b)가 우수한 것으로 나타났다. 이번에는  $n=20$ 인 경우와 달리  $s_x$ 의 영향을 더 많이 받은 것으로 드러났다. Kim(1988)의 결과에 의하면,  $\sigma_b=0$ 이면  $R(x)$ 는  $s_x$ 나  $\bar{x}-x_0$ 의 값에 관계없이  $n$ 에 의해서만 결정되고  $\sigma_a=0$ 이면 고정된  $n$  값에 대해서  $s_x$ 가 커질수록  $R(x)$ 가 감소한다는 것을 알 수 있는데, <표 2>에서는 세 경우 모두  $\sigma_a$  또는  $\sigma_b$ 가 작으므로  $s_x$ 의 영향을 많이 받고 <표 1>에서는 두 디자인의  $s_x$ 의 차이가 크지 않으므로  $\bar{x}-x_0$ 의 영향을 받은 것으로 보인다. 어느 결과이건 베이지안 최적화기준은 적용되는 것으로 나타났다.

<표 1>  $x_f$ 의 기대사후분산에 의한 실험계획 비교

$$n=20, \sigma=0.2683, \sigma_0=1, a=6.19, b=0.9873$$

| 구 분   | $(x_1, \dots, x_{20})$ | $x_0$ | $x-x_0$ | $s_x$  | 기대분산 $R(x)$             |                         |                         |
|-------|------------------------|-------|---------|--------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
|       |                        |       |         |        | $\sigma_a=\sigma_b=0.1$ | $\sigma_a=\sigma_b=0.5$ | $\sigma_a=\sigma_b=1.0$ |
| 디자인 1 | 1부터 10까지<br>각 2번씩      | 5.5   | 0       | 2.8723 | 0.07967763              | 0.15547531              | 0.19580224              |
| 디자인 2 | 1과 10에서 각<br>10번씩      | 5.5   | 0       | 4.5    | 0.07943695              | 0.15515455              | 0.19540110              |
| 디자인 3 | 1에서 7번,<br>10에서 13번    | 7     | -0.15   | 4.2953 | 0.08237239              | 0.15817502              | 0.19758193              |
| 디자인 4 | 1에서 7번,<br>10에서 13번    | 6.85  | 0       | 4.2927 | 0.08204346              | 0.15783178              | 0.19732969              |

<표 2>  $n$ 이 홀수인 경우의  $x_f$ 의 기대사후분산에 의한 실험계획 비교

$$n=21, \sigma=0.2683, \sigma_0=1, a=6.19, b=0.9873$$

| 구 분   | $(x_1, \dots, x_{21})$             | $x_0$ | $x-x_0$ | $s_x$   | 기대분산 $R(x)$                |                         |                            |
|-------|------------------------------------|-------|---------|---------|----------------------------|-------------------------|----------------------------|
|       |                                    |       |         |         | $\sigma_a=1, \sigma_b=0.1$ | $\sigma_a=\sigma_b=0.5$ | $\sigma_a=0.1, \sigma_b=1$ |
| 계획(a) | 1부터 10까지<br>각 2번씩,<br>$x_{21}=5.5$ | 5.5   | 0       | 4.39155 | 0.08013649                 | 0.15496186              | 0.19413924                 |
| 계획(b) | 1부터 10까지<br>각 2번씩,<br>$x_{21}=10$  | 5.5   | 0.2143  | 4.4949  | 0.08013065                 | 0.15495381              | 0.19412497                 |
| 계획(c) | 1, 5.5, 10 에서<br>각 7번씩             | 5.5   | 0       | 3.6742  | 0.08020844                 | 0.15505657              | 0.19425901                 |

### 3.3. HPD 구간에 의한 비교

이 절에서는 각 비교대상 실험계획에 대하여 주어진 사전분포에 의하여 모수를 발생시키고 여기서부터 관찰되는 실험결과로부터  $x_f$ 의 HPD 구간을 구하는 Monte Carlo 시뮬레이션을 수행하여 실험계획을 비교한다. 캘리브레이션 문제를 구성하는 두 개의 실험, 캘리브레이션 실험과 미래 실험의 모형을 다시 적으면 다음과 같다.

$$y_i = \alpha + \beta(x_i - x_0) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

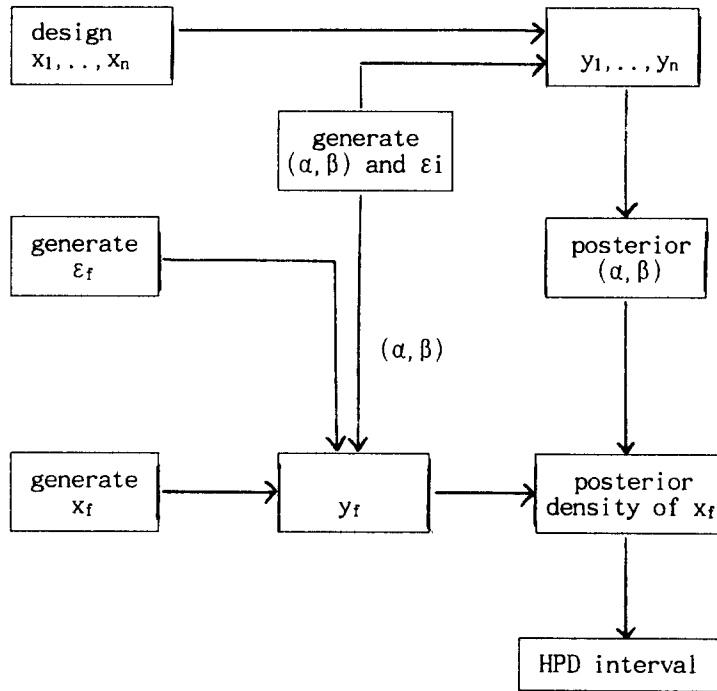
$$y_f = \alpha + \beta(x_f - x_0) + \varepsilon_f$$

각 실험계획에 대하여 주어진 사전분포에 의하여 발생된  $(\alpha, \beta)$ 의 값을 이용하여 캘리브레이션 실험결과  $(y_1, y_2, \dots, y_n)$ 을 계산하고 이 값을 이용하여  $(\alpha, \beta)$ 의 사후분포를 구한다. 미래실험에서의  $x_f$ 를 사전분포에 의해서 발생시키고 새로운 오차  $\varepsilon_f$ 를 발생시킨다.  $(\alpha, \beta)$ 는 캘리브레이션 실험에서의 값을 그대로 사용하여 미래실험의 관찰값  $y_f$ 를 계산하고 이 관찰값과  $(\alpha, \beta)$ 의 사후분포를 이용하여 수치적분을 통하여  $x_f$ 의 사후밀도를 계산한다. 이 수치적분에는 역시 100개의 소구간을 사용한 Simpson 공식을 적용하며 계산된  $x_f$ 의 사후밀도로부터 HPD 구간을 구한다. 하나의 실험계획에 대하여 HPD 구간을 1000회 반복하여 구하며 각 반복마다  $(\alpha, \beta)$ 를 새로 발생시켜 사용한다. 1000회의 반복으로부터 사후분산  $Var(x_f | y_f, data)$ 의 평균과 HPD 구간의 평균길이를 계산한다. <그림 1>에서 위의 Monte Carlo 시뮬레이션의 과정을 도식적으로 표현하였다.  $\alpha$ 와  $\beta$ 의 사전분포로서 1차로 서로독립인  $N(a, \sigma_a^2)$ 와  $N(b, \sigma_b^2)$ 를 사용하여 그 결과를 <표 3>에 정리하였으며, 2차로 평균과 분산이 각각 1차의 정규분포와 동일한 균일분포를 사용하여 <표 4>에 결과를 정리하였다. <표 4>에서 필요한 사후분포의 유도는 앞절의 식 (2.4)에 정리되어 있다.

<표 3>에서 보면 평균사후분산은 <표 1>의 세 경우의 기대사후분산과 비슷한 값을 나타내어 결과의 일관성을 보여주고, 디자인 2가 평균사후분산과 HPD 평균길이의 측면에서 모두 우수함을 보여준다. 디자인 4는 디자인 3과 거의 같은 결과를 보였는데 이것은  $\bar{x} - x_0$ 를 0으로 놓아서 향상된 측면과  $s_x$ 의 감소에 의한 반대의 측면이 서로 작용하여 나타난 결과로 볼 수 있다. 오차분산( $\sigma^2 = 1, 0.5, 4$ )과  $(\alpha, \beta)$ 의 사전평균 및 분산을 변화시켜서 얻은 결과에서도 같은 양상을 보였다.  $(\alpha, \beta)$ 의 사전분포 측면에서 보면 실험계획의 우수성은  $\sigma_a$ 보다  $\sigma_b$ 에 더 영향을 많이 받는 것을 보여주며, 이것은  $\sigma_b = 0$ 이면  $R(x)$ 는  $s_x$ 나  $\bar{x} - x_0$ 의 값에 관계없이  $n$ 에 의해서만 결정되고  $\sigma_a = 0$ 이면 고정된  $n$  값에 대해서  $s_x$ 가 커질수록  $R(x)$ 가 감소한다는 Kim(1988)의 결과와 부합되는 것이다. 즉,  $\beta$ 를 정확히 안다면  $\alpha$ 에 대한 정보는 가치가 없다는 것이다.

<표 4>의 균일 사전분포의 경우에서도 역시 디자인 2가 우수함을 보여주며, 디자인 4가 디자인 3보다 HPD 평균길이의 측면에서 약간 우수하지만 큰 차이는 보이지 않는다.  $(\alpha, \beta)$ 가 locally uniform하면 이론적으로  $\sigma_a, \sigma_b$ 가 무의미하지만 실제로 균일분포 구간의 크기가 분산에 영향을 미치므로 결과에 차이가 난다. 그러나 여기서는  $\sigma_a$ 의 값은 전혀 무관함을 볼 수 있다.

홀수  $n$  ( $n=21$ )의 경우에 기대사후분산의 비교에서와 마찬가지로 (a) (b) (c) 세 개의 실험계획을 비교하였다. <표 5>의  $\sigma_a$ 와  $\sigma_b$ 의 변화에 따른 3가지 경우에 대한 결과로부터, 계획(b)의 HPD 평균길이가 세 경우 모두 가장 짧게 나타났고 평균사후분산의 측면에서도 계획(b)가 세 경우 중 두 경우에서 가장 작게 나타났다. 이것은 앞절의 기대사후분산에서의 결과와 일치하는 것이다.



<그림 1> Monte Carlo 시뮬레이션의 과정

<표 3>  $(\alpha, \beta)$  정규사전분포에 대한  
몬테칼로 시뮬레이션 및 HPD 구간 분석 결과

|                 | 실험계획  | $(\sigma_a, \sigma_b)$ |           |         |         |         |
|-----------------|-------|------------------------|-----------|---------|---------|---------|
|                 |       | (0.1,0.1)              | (0.5,0.5) | (1,1)   | (1,0.5) | (0.5,1) |
| 평균사후분산          | 디자인 1 | 0.07372                | 0.15289   | 0.18601 | 0.15410 | 0.18632 |
|                 | 2     | 0.07362                | 0.15253   | 0.18587 | 0.15371 | 0.18615 |
|                 | 3     | 0.07366                | 0.15298   | 0.18623 | 0.15416 | 0.18650 |
|                 | 4     | 0.07366                | 0.15298   | 0.18622 | 0.15415 | 0.18649 |
| HPD 구간의<br>평균길이 | 디자인 1 | 1.05712                | 1.32088   | 1.37267 | 1.32443 | 1.37480 |
|                 | 2     | 1.05612                | 1.31868   | 1.37142 | 1.32216 | 1.37350 |
|                 | 3     | 1.05648                | 1.32002   | 1.37220 | 1.32343 | 1.37426 |
|                 | 4     | 1.05646                | 1.32001   | 1.37217 | 1.32341 | 1.37420 |

<표 4>  $(\alpha, \beta)$  균일사전분포에 대한  
몬테칼로 시뮬레이션 및 HPD 구간 분석 결과

|                 | 실험계획  | $(\sigma_a, \sigma_b)$ |           |         |         |         |
|-----------------|-------|------------------------|-----------|---------|---------|---------|
|                 |       | (0.1,0.1)              | (0.5,0.5) | (1,1)   | (1,0.5) | (0.5,1) |
| 평균사후분산          | 디자인 1 | 0.07467                | 0.17162   | 0.21280 | 0.17162 | 0.21280 |
|                 | 2     | 0.07427                | 0.17080   | 0.21238 | 0.17080 | 0.21238 |
|                 | 3     | 0.07442                | 0.17129   | 0.21257 | 0.17129 | 0.21257 |
|                 | 4     | 0.07442                | 0.17128   | 0.21257 | 0.17128 | 0.21257 |
| HPD 구간의<br>평균길이 | 디자인 1 | 1.06316                | 1.38722   | 1.45912 | 1.38722 | 1.45912 |
|                 | 2     | 1.06031                | 1.38340   | 1.45684 | 1.38340 | 1.45684 |
|                 | 3     | 1.06132                | 1.38522   | 1.45729 | 1.38522 | 1.45729 |
|                 | 4     | 1.06129                | 1.38517   | 1.45727 | 1.38517 | 1.45727 |

<표 5> n=21인 경우의  $(\alpha, \beta)$  정규사전분포에 대한  
몬테칼로 시뮬레이션 및 HPD 구간 분석 결과

|                 | 실험계획   | $(\sigma_a, \sigma_b)$ |           |           |
|-----------------|--------|------------------------|-----------|-----------|
|                 |        | (1.0,0.1)              | (0.5,0.5) | (0.1,1.0) |
| 평균사후분산          | 계획 (a) | 0.07435                | 0.14068   | 0.18258   |
|                 | (b)    | 0.07432                | 0.14064   | 0.18261   |
|                 | (c)    | 0.07436                | 0.14092   | 0.18291   |
| HPD 구간의<br>평균길이 | 계획 (a) | 1.05747                | 1.27140   | 1.37617   |
|                 | (b)    | 1.05729                | 1.27128   | 1.37612   |
|                 | (c)    | 1.05766                | 1.27217   | 1.37701   |

#### 4. 결론 및 고찰

최적실험계획 문제는 사후분포의 특성만을 보는 posterior analysis가 아니고 그 기대값의 특성 즉, 평균적인 특성을 분석하는 preposterior analysis이므로 결과수치의 큰 차이를 기대하기 어렵다. 더구나 소위 최적계획 또는 좋은 계획의 비교이므로 그 차이는 더욱 작게 나타날 수밖에 없다. 따라서 각 수치결과의 작은 차이는 유의성보다는 그 수치 자체로 분석해야 할 것이다.

$x_f$ 의 사전분포의 평균이 구간의 중심인 경우에는 베이지안 계획과 AV optimal 계획, D-optimal 계획 및 A-optimal 계획이 모두 양단분배계획으로 동일한 최적계획이 된다. 이처럼 전형적인 경우에는 베이지안 계획과 다른 최적계획이 동일하지만  $x_f$ 의 사전분포의 평균이 구간의 중심이 아닐 경우에는 이 실험계획들이 모두 동일하다고 기대할 수 없다. 이 경우에는 양단분배계획의  $\bar{x}-x_0$ 가 0이 아닐 뿐만 아니라  $s_x^2$ 의 값도 최대라는 보장이 없다.  $x_0$ 가 구간의 중심에 있지 않을 때의 비교로써 베이지안 계획에 좀더 가까운 디자인 4가 근사적 AV optimal 계획(디자인 3)보다 작은 기대분산을 갖는다. 디자인 4가 HPD 구간에 의한 비교에서는 커다란 차이를 보이지 않았으나  $\bar{x}-x_0$ 가 0이 되게 함으로써 결과를 향상시켰다고 볼 수 있다.

$s_x$ 와  $\bar{x}-x_0$ 의 영향은  $n$ 이 홀수인 경우에 더욱 크게 나타난다. 이 경우에는 양단분배 후에 남는 횟수의 실험을 어디에 배치하느냐에 따라 그 결과가 달라지는데 베이지안 최적화기준에 의하여  $s_x$ 는 크고  $|\bar{x}-x_0|$ 는 작게 배치해야 한다. 이 때 실험계획의 결과는  $\sigma_a$  보다  $\sigma_b$ 가 더 큰 영향을 미치므로  $\sigma_b$ 가 작은 경우에는 별 차이가 없으나 그렇지 않은 경우에는  $\beta$ 에 대한 정보를 많이 얻을 수 있도록 해야 한다.  $n$ 이 홀수인 경우에,  $n$ 이 어느 정도 크면 양단 분배 후의 한번의 실험을 한 쪽 끝에 배치함으로써  $|\bar{x}-x_0|$ 를 작게 유지하면서  $s_x$ 를 증가시켜 소기의 목적을 달성할 수 있다.

베이지안 계획과 고전적 계획은 유한구간에서 대칭인 사전분포를 사용할 때에는 일치하지만 그렇지 않은 경우가 대부분이다. 이들의 실험계획의 디자인 특성은 공통적으로  $\bar{x}-x_0$ 와  $s_x$ 로 나타낼 수 있으나 근본적으로  $x_f$ 에 대한 추정량이 다르고 문제를 접하는 관점이 다르기 때문에 어느 실험계획이 항상 우월하다고 말할 수 없다. 그러나 이러한 접근을 통하여 베이지안 분석의 타당성과 두 방법의 공통적 결과를 확인하고 또한 그 차이점을 분석하여 서로 보완해서 적용할 수 있을 것이다.

## 참 고 문 헌

- [1] Aitchison, J. and I.R. Dunsmore (1975). *Statistical Prediction Analysis*, Cambridge University Press.
- [2] Barlow, R.E., R.W. Mensing and N.G. Smiriga (1991). Computing the optimal design for a calibration experiment, *Journal of Statistical Planning and Inference*, 29, 5-19.
- [3] Brown, P.J. (1982). Multivariate calibration (with discussion), *Journal of Royal Statistical Society, Ser B*, 44, 287-321.
- [4] Buonaccorsi, J.P. (1986). Design considerations for calibration, *Technometrics*, 28, 149-155.
- [5] Chaloner, K. (1984). Optimal Bayesian experimental design for linear models, *Annals of Statistics*, 12, 283-300.
- [6] Eisenhart, C. (1939). The interpretation of certain regression methods and their use in biological and industrial research, *Annals of Mathematical Statistics*, 10, 162-186.
- [7] Elfving, G. (1952). Optimum allocation in linear regression theory, *Annals of Mathematical Statistics*, 23, 255-262.
- [8] Fedorov, V.V. (1972). *Theory of Optimal Experiments*, Academic Press, New York.
- [9] Fieller, E.C. (1940). The Biological Standardization of Insulin *Journal of Royal Statistical Society, Supplement 7*, 1-64.
- [10] Fieller, E.C. (1954). Some problems in interval estimation, *Journal of Royal Statistical Society, Ser B*, 16, 175-185.
- [11] Graybill, F.A. (1976). *Theory and Application of the General Linear Model*, North Scituate, MA, Duxbury Press.
- [12] Hoadley, B. (1970). A Bayesian look at inverse linear regression, *Journal of American Statistical Association*, 65, 356-369.
- [13] Hunter, W.G. and W.F. Lamboy (1981). A Bayesian analysis of the linear calibration problem (with discussion), *Technometrics*, 23, 323-350.
- [14] Kiefer, J. (1959). Optimum experimental designs, *Journal of Royal Statistical Society, Ser B*, 21, 272-319.
- [15] Kim, S.C. (1988). *Bayesian Calibration Experimental Designs Based on Linear Models*, Ph.D. Thesis, Dept. of Industrial Engineering & Operations Research, University of California, Berkeley, CA.
- [16] Kim, S.C. (1993). Approximations of optimal calibration experimental designs using Gaussian influence diagrams, *Journal of Korean Statistical Society*, 22, 219-234.
- [17] Krutchkoff, R.G. (1967). Classical and inverse regression methods of calibration, *Technometrics*, 9, 425-439.

- [18] Naszodi, L.J. (1978). Elimination of the bias in the course of calibration, *Technometrics*, 20, 201-206.
- [19] Ott, R.L. and R.H. Myers (1968). Optimal experimental designs of estimating the independent variable in regression, *Technometrics*, 10, 811-823.
- [20] Scheffe, H. (1973). A statistical theory of calibration, *Annals of Statistics*, 1, 1-37.
- [21] Shukla, G.K. (1972). On the problem of calibration, *Technometrics*, 14, 547-553.
- [22] Shukla, G.K. and P. Datta (1985). Comparison of the inverse estimator with the classical estimator subject to a preliminary test in linear calibration, *Journal of Statistical Planning and Inference*, 12, 93-102.
- [23] Silvey, S.D. (1980). *Optimal Design*, Chapman and Hall, London.
- [24] Williams, E.J. (1969). A note on regression methods in calibration, *Technometrics*, 11, 189-192.

## Performance of a Bayesian Design Compared to Some Optimal Designs for Linear Calibration<sup>3)</sup>

Sung Chul Kim<sup>4)</sup>

### Abstract

We consider a linear calibration problem,

$$\begin{aligned} y_i &= \alpha + \beta(x_i - x_0) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \\ y_f &= \alpha + \beta(x_f - x_0) + \varepsilon, \end{aligned}$$

where we observe  $(x_i, y_i)$ 's for the controlled calibration experiments and later we make inference about  $x_f$  from a new observation  $y_f$ . The objective of the calibration design problem is to find the optimal design  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$  that gives the best estimates for  $x_f$ .

We compare Kim(1988)'s Bayesian design which minimizes the expected value of the posterior variance of  $x_f$  and some optimal designs from literature. Kim suggested the Bayesian optimal design based on the analysis of the characteristics of the expected loss function and numerical results. The suggested optimal design is such that the average of the design must be equal to the prior mean and that the sum of squares be as large as possible.

The designs to be compared are (1) Buonaccorsi(1986)'s AV optimal design that minimizes the average asymptotic variance of the classical estimators, (2) D-optimal and A-optimal design for the linear regression model that optimize some functions of  $M(\mathbf{x}) = \sum x_i x_i'$ , and (3) Hunter & Lamboy (1981)'s reference design from their paper. In order to compare the designs which are optimal in some sense, we consider two criteria. First, we compare them by the expected posterior variance criterion and secondly, we perform the Monte Carlo simulation to obtain the HPD intervals and compare the lengths of them.

If the prior mean of  $x_f$  is at the center of the finite design interval, then the Bayesian, AV optimal, D-optimal and A-optimal designs are identical and they are equally weighted end-point design. However if the prior mean is not at the center, then they are not expected to be identical. In this case, we demonstrate that the almost Bayesian-optimal design was slightly better than the approximate AV optimal design. We also investigate the effects of the prior variance of the parameters and solution for the case when the number of experiments is odd.

---

3) This work was supported by a grant No. KOSEF 951-0103-031-1 from the Korea Science and Engineering Foundation.

4) Associate Professor, Department of Statistics, Soongsil University, Dongjak-ku, Seoul 156-743, Korea