응용통계연구 제 **15**권 *1*호, *2002*년, *pp. 179–186*

근사직교블럭화를 평가하기 위한 측도

장대흥[1]

요 약

반응표면분석시 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어지어야 하는 데 그렇지 못할 경우 우리는 블럭화를 행하게 된다. 반응표면분석모형으로서 우리는 주로 2차 모형을 사용한다. 본 논문은 우리가 반응표면분석모형으로서 2차 모형을 사용할 때 근사직교블럭화를 평가하기 위한 간단한 측도들을 제시하였다.

주요용어: 근사직교블럭화, 직교블럭화지수, 직교블럭화평가행렬

1. 서론

반응표면분석시 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어지어야 하는 데 그렇지 못할 경우 우리는 블럭화를 행하게 된다. Khuri(1992, 1994, 1996)은 블럭효과가 각각 고정적인 경우, 변동적인 경우, 혼합적인 경우로 나누어 통계적 추론을 제시하였다. 이를 이용하여 Park과 Jang(1999a, b)는 블럭화의 영향을 평가할 수 있는 측도들을 제시하였다. 반응표면분석모형으로서 우리는 주로 2차 모형을 사용한다. 이 때, 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어지지 않아 블럭화를 행하는 경우 우리는 2차 모형 하에서 직교블럭화를 평가하기 위한 간단한 측도들을 제시할 수 있다. 본 논문은 2차 모형 하에서 직교블럭화가 이루어지지 않을 때 근사직교블럭화를 평가하기 위한 간단한 측도들을 제시하고 예를 보였다. 이 측도들은 Ma, Fang과 Liski(2000)이 근사직교배열(nearly orthogonal array)를 구하기 위하여 제안하였던 방법을 이용하여 구하였다.

2. 근사직교블럭화

반응표면분석모형으로서 우리는 주로 다음과 같은 2차 모형을 사용한다.

$$y_u = \beta_0 + \sum_{k=1}^{k}\beta_i x_{ui} + \sum_{k=1}^{k}\beta_{ii} x_{ui}^2 + \sum\sum_{i<j}^{k}\beta_{ij} x_{ui} x_{uj} + \epsilon_u, u = 1, 2, ..., N \tag{2.1}$$

1) (608-737) 부산광역시 남구 대연3동 599-1 부경대학교 자연과학대학 수리과학부, 교수
E-mail: dhjang@pknu.ac.kr

이 때, 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어지지 않아 블럭화를 행하는 경우 직교블럭화가 되기 위한 조건은 다음과 같다.

$$\sum_{u(l)} x_{ui} = 0, i = 1,2,...,k; l = 1,2,...,b \tag{2.2}$$

$$\sum_{u(l)} x_{ui}x_{uj} = 0, i,j = 1,2,...,k, i \neq j; l = 1,2,...,b \tag{2.3}$$

$$\frac{\sum_{u(l)} x_{ui}^2}{\sum_{u=1}^{N} x_{ui}^2} = \frac{n_l}{N}, i = 1,2,...,k; l = 1,2,...,b \tag{2.4}$$

여기서, $\sum_{u(l)}$은 l번째 블럭에 속하는 실험점들만 합한다는 의미이고, n_l은 l번째 블럭의 크기, 즉 l번째 블럭에 속하는 실험점들의 개수이다.

우리는 종종 위의 조건들을 만족치 못하여 직교블럭화가 이루어지지 않을 때가 있다. 이런 경우 이러한 근사직교블럭화를 평가하기 위한 측도를 제시할 필요가 있다.

3. 근사직교블럭화를 평가하기 위한 측도

$A = (\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, ..., \mathbf{c}_r)$가 $N \times r$ 행렬이고, 이 행렬의 i 번째 열의 원소가 $1, 2, ..., q_i$라 하자. Ma, Fang과 Liski(2000)는 다음과 같이 근사직교배열의 비직교성을 측정하기 위한 열직교성 판정기준을 제시하였다.

$$f_\phi(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j) = \sum_{k=1}^{q_i}\sum_{l=1}^{q_j} \phi(|N_{\mathbf{c}_i,\mathbf{c}_j}(k,l) - \frac{N}{q_iq_j}|) \tag{3.1}$$

$$D_{\phi,\theta}(A) = \sum_{1 \le i < j \le r} \theta(f_\phi(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)) \tag{3.2}$$

여기서, $\phi(\cdot)$와 $\theta(\cdot)$는 $[0,\infty)$에서 단조증가함수이고, $\phi(0) = \theta(0) = 0$이다. $\mathbf{c}_i\mathbf{c}_j$는 A의 임의의 두 열이고, $N_{\mathbf{c}_i,\mathbf{c}_j}(k,l)$는 $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$에서의 (k,l)-쌍의 수이고, $\frac{N}{q_iq_j}$는 두 열 $\mathbf{c}_i$와 $\mathbf{c}_j$에서 수준조합들의 평균빈도수이다.

그들은 이 측도를 근사직교배열 A의 비직교성을 위한 (ϕ, θ)-판정기준이라 명하였다. 우리는 Ma, Fang과 Liski(2000)의 아이디어와 식 (2) - (4)를 이용하여 다음과 같은 근사직교블럭화를 평가하기 위한 측도를 제시할 수 있다.

$$f_{\phi_1}(x_{i(l)}) = \phi_1(|\sum_{u(l)} x_{ui}|)$$

$$B_{\phi_1,\theta_1}(D) = \frac{1}{kb}\sum_{i=1}^{k}\sum_{l=1}^{b} \theta_1(f_{\phi_1}(x_{i(l)})) \tag{3.3}$$

$$f_{\phi_2}(x_{i(l)}, x_{j(l)}) = \phi_2(|\sum_{u(l)} x_{ui}x_{uj}|)$$

$$B_{\phi_2,\theta_2}(D) = \frac{1}{b_k C_2} \sum_{1\le i<j\le k} \sum_{l=1}^{b} \theta_2(f_{\phi_2}(x_{i(l)}, x_{j(l)})) \tag{3.4}$$

$$f_{\phi_3}(x_{i(l)}) = \phi_3(|\frac{\sum_{u(l)} x_{ui}^2}{\sum_{u=1}^{N} x_{ui}^2} - \frac{n_l}{N}|)$$

$$B_{\phi_3,\theta_3}(D) = \frac{1}{kb} \sum_{i=1}^{k} \sum_{l=1}^{b} \theta_3(f_{\phi_3}(x_{i(l)})) \tag{3.5}$$

$$B_{\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}}(D) = B_{\phi_1,\theta_1}(D) + B_{\phi_2,\theta_2}(D) + B_{\phi_3,\theta_3}(D) \tag{3.6}$$

$$P(D) = \frac{1}{1 + B_{\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}}(D)} \tag{3.7}$$

여기서, $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \phi_2, \phi_3)$이고, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$이다. $\phi_1(\cdot), \phi_2(\cdot), \phi_3(\cdot), \theta_1(\cdot), \theta_2(\cdot), \theta_3(\cdot)$는 각각 $[0, \infty)$에서 단조증가함수이며, $\phi_1(0) = \phi_2(0) = \phi_3(0) = \theta_1(0) = \theta_2(0) = \theta_3(0) = 0$인 함수이다. $\phi_1(\cdot), \phi_2(\cdot), \phi_3(\cdot), \theta_1(\cdot), \theta_2(\cdot), \theta_3(\cdot)$로서 단조증가함수를 쓰는 이유는 계획들의 근사직교화의 정도를 비교하기 위하여 $|\sum_{u(l)} x_{ui}|, |\sum_{u(l)} x_{ui}x_{uj}|, |\frac{\sum_{u(l)} x_{ui}^2}{\sum_{u=1}^{N} x_{ui}^2} - \frac{n_l}{N}|$들의 양이 필요한 데, 이들에 대하여 단조증가함수를 적용하여야 상대적인 크기의 서열이 바뀌지 않는다. 통상적으로 우리는 모든 ϕ와 θ함수를 1차식 $\phi(x) = \theta(x) = x$로 이용할 수 있다.

위의 $P(D)$를 직교블럭화지수라 하자. 직교블럭화지수 $P(D)$가 1이면 계획 D는 직교블럭계획이고, 직교블럭화지수 $P(D)$가 1에 가까울수록 점점 더 직교블럭계획에 가까와 지고, 0에 가까울수록 점점 더 비직교블럭계획이 된다. 위의 식에서 보는 것처럼 $P(D)$ 중 $B_{\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}}(D)$는 3가지 성분들로 구성되어 있다. 첫 번째 성분은 1차 직교블럭화조건식 (2.2)식을 평가하는 성분이고, 두 번째 성분은 혼합2차 직교블럭화조건식 (2.3)식을 평가하는 성분이고, 세 번째 성분은 순수2차 직교블럭화조건식 (2.4)식을 평가하는 성분이다.

직교블럭화지수는 하나의 수치값이므로 직교블럭계획이 아닌 경우 어떤 패턴으로 비직교블럭화가 이루어지는 지 알기가 쉽지 않다. 그래서, 어떤 패턴으로 비직교블럭화가 이루어지는 지 알기 위하여 다음과 같은 측도들을 제안할 수 있다. 첫 번째 측도는 1차 및 혼합2차 직교블럭화평가행렬 $F_l = (f_{ij(l)}),\ i, j = 1, 2, ..., k; l = 1, 2, ..., b$이다. 여기서, $f_{ij(l)}$은 $i = j$일 때 $f_{\phi_1}(x_{i(l)})$이고 $i \neq j$일 때 $f_{\phi_2}(x_{i(l)}, x_{j(l)})$이 된다. 이 행렬들 $\{F_l\}, l = 1, 2, ..., b$를 이용하여 각 블록에서 1차 직교블럭화조건식 (2.2)식과 혼합2차 직교블럭화조건식 (2.3)식을 평가할 수 있다. 즉, 1차 및 혼합2차 직교블럭화를 검토할 수 있다. 또한, 어떤 설명변수에서 1차 및 혼합2차 비직교블럭화가 발생하는 지, 그 정도는 어느 정도인 지를 알 수 있다. 두 번째 측도는 순수2차 직교블럭화평가행렬 $G = (g_{il}), i = 1, 2, ..., k; l = 1, 2, ..., b$이다. 여기서, g_{il}은 $f_{\phi_3}(x_{i(l)})$이다. 이 행렬을 이용하면 순수2차 직교블럭화조건식 (2.4)식을 평가할 수 있다. 즉, 어떤 설명변수와 블럭에서 순수2차 비직교블럭화가 발생하는 지, 그 정도는 어느 정도인 지를 알 수 있다. 위의 두 가지 측도들인 1차 및 혼합2차 직

교블럭화평가행렬 $\{F_l\}, l = 1, 2, ..., b$와 순수2차 직교블럭화평가행렬 G는 직교블럭화지수를 보완하는 측도들로 쓸 수 있다.

4. 수치예

다음 표 4.1은 Box와 Draper(1987, p. 360)에 나오는 직교블럭계획이다. 이 직교블럭계획을 참조하여 또 다른 4 가지 비직교블럭계획들을 표 4.2처럼 만들 수 있다. 예로, D_1는 첫 번째 블럭이 실험번호 1, 2, 5, 6, 11, 12로 이루어져 있고, 두 번째 블럭이 실험번호 3, 4, 7, 8, 9, 10으로, 세 번째 블럭이 실험번호 13, 14, 15, 16, 17, 18로, 네 번째 블럭이 실험번호 19, 20, 21, 22, 23, 24로 이루어져 있다. D_1은 직교블럭계획이고, 나머지 계획들 $D_2 - D_5$는 각각 블럭 개수가 4개인 비직교블록계획이다. 이러한 4 가지 비직교블럭계획들을 만든 이유는 이 들을 직교블럭계획 D_1과 비교하고, 비직교블럭계획들 서로를 비교하기 위함이다. 이 5가지 계획들에 대한 근사직교블럭화를 평가하기 위한 측도들은 표 4.3과 같다. 여기서는 모든 ϕ와 θ함수를 1차식 $\phi(x) = \theta(x) = x$로 이용하였다. D_1은 직교블럭화지수가 1이므로 직교블럭계획이고, 나머지 계획들은 직교블럭화지수가 1이 아니므로 비직교블럭계획들임을 알 수 있다. 4개의 비직교블록계획들의 근사직교블럭화의 정도는 $D_4 < D_3 < D_2 = D_5$ 순이다. 이 5가지 계획들에 대한 1차 및 혼합2차 직교블럭화평가행렬 $\{F_l\}, l = 1, 2, ..., b$와 순수2차 직교블럭화평가행렬 G들은 표 4.3과 같다. D_1의 모든 $\{F_l\}$과 G의 원소들이 0이므로 직교블럭계획임을 알 수 있고, 나머지 계획들에 대해서는 어떤 설명변수와 블럭에서 비직교블럭화가 발생하는 지, 그 정도는 어느 정도인 지를 알 수 있다. 예로, D_2에서는 F_1을 통하여 첫 번째 블럭에서 2번째 설명변수가 1차 직교블럭화조건식 (2.2)식을 만족치 못하고, 첫 번째와 두 번째 설명변수 사이에서 혼합 2차 직교블럭화조건식 (2.3)식을 만족치 못함을 알 수 있다. F_2를 통하여 두 번째 블럭에서도 첫 번째 블럭에서와 같은 결론을 내릴 수 있다. F_3와 F_4를 통하여 세 번째 블럭과 네 번째 블럭에서는 1차 및 혼합 2차 직교블럭화조건식 (2.2)식과 (2.3)식을 만족함을 알 수 있다. G를 통하여는 첫 번째와 두 번째 블록에서 순수 2차 직교블럭화조건식 (2.4)식을 만족치 못함을 알 수 있다.

5. 결론

반응표면분석모형으로서 우리는 주로 2차 모형을 사용한다. 이 때, 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어지지 않을 때 블럭화를 행한다. 본 논문은 블럭화를 행하는 경우 2차 모형 하에서 직교블럭화가 이루어지지 않을 때 근사직교블럭화를 평가하기 위한 측도로서 직교블럭화지수를 제시하였고, 직교블럭화평가행렬들을 직교블럭화지수를 보완하는 측도들로서 제시하였다.

참고문헌

[1] Box, G. E. P. and Draper, N. R.(1987). *Empirical Model-Building and Response Surfaces*, John Wiley Sons, Inc. New York.

[2] Khuri, A. I.(1992). Response Surface Models with Random Block Effects, *Technometrics*, **34**, 26-37.

[3] ______(1994). Effect of Blocking on the Estimation of a Response Surface, *Journal of Applied Statistics*, **21**, 305-316.

[4] _____(1996). Response Surface Models with Mixed Effects, *Journal of Quality Technology*, **28**, 177-186.

[5] Ma, C., Fang, K., and Liski, E.(2000). A New Approach in Constructing Orthogonal and Nearly Orthogonal Arrays, *Metrika*, **50**, 255-268.

[6] Park. S. H. and Jang, D. H.(1999a). Measures for Evaluating the Effect of Blocking in Response Surface Designs, *Communications in Statistics - Theory and Methods*, **28**, 1599-1616.

[7] Park. S. H. and Jang, D. H.(1999b). A Graphical Method for Evaluating the Effect of Blocking in Response Surface Designs, *Communications in Statistics - Simulation and Computation*, **28**, 369-380.

[2001년 7월 접수, 2002년 1월 채택]

표 5.1: 직교블럭계획 D_1

블럭	실험번호	x_1	x_2	x_3
1	1	-1	-1	1
	2	1	-1	-1
	3	-1	1	-1
	4	1	1	1
	5	0	0	0
	6	0	0	0
2	7	-1	-1	-1
	8	1	-1	1
	9	-1	1	1
	10	1	1	-1
	11	0	0	0
	12	0	0	0
3	13	$-\sqrt{2}$	0	0
	14	$\sqrt{2}$	0	0
	15	0	$-\sqrt{2}$	0
	16	0	$\sqrt{2}$	0
	17	0	0	$-\sqrt{2}$
	18	0	0	$\sqrt{2}$
4	19-24	3번 블럭과 동일함.		

블럭배열	블럭 1	블럭 2	블럭 3	블럭 4
D2	1,2,5,6,11,12	3,4,7,8,9,10	13,14,15,16,17,18	19,20,21,22,23,24
D3	3,4,5,6,13,14	9,10,11,12,19,20	1,2,15,16,17,18	7,8,21,22,23,24
D4	2,3,4,5,6,13	8,9,10,11,12,19	1,14,15,16,17,18	7,20,21,22,23,24
D5	3,4,5,6,13,14	7,8,9,10,11,12	1,2,15,16,17,18	19,20,21,22,23,24

표 5.3: 평가 측도들

측도	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5
$P(D)$	0	0.578	0.407	0.349	0.578
F_1	O_3	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.414 & 1 & 1 \\ & 1 & 1 \\ & & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$
F_2	O_3	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.414 & 1 & 1 \\ & 1 & 1 \\ & & 1 \end{pmatrix}$	O_3
F_3	O_3	O_3	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.414 & 1 & 1 \\ & 1 & 1 \\ & & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$
F_4	O_3	O_3	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ & 2 & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.414 & 1 & 1 \\ & 1 & 1 \\ & & 1 \end{pmatrix}$	O_3
G	$O_{3\times4}$	$\begin{pmatrix} 1/8 & 1/8 & 0 & 0 \\ 1/8 & 1/8 & 0 & 0 \\ 1/8 & 1/8 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$1/8I_{3\times4}$	$1/16I_{3\times4}$	$\begin{pmatrix} 1/8 & 0 & 1/8 & 0 \\ 1/8 & 0 & 1/8 & 0 \\ 1/8 & 0 & 1/8 & 0 \end{pmatrix}$

Measures for Evaluating Nearly Orthogonal Blocking

Dae-Heung Jang [1)]

We usually execute the blocking under heterogeneity of experimental condition in response surface methodology. We can suggest the measure for evaluating nearly orthogonal blocking under second order models.

Keywords: Nearly orthogonal blocking, Orthogonal blocking index, Orthogonal blocking evaluating matrix.

1) Professor, Division of Mathematical Sciences, Pukyong National University.
E-mail: dhjang@pknu.ac.kr