응용통계연구 제 13권 2호, 2000년, pp. 393-405

복합실험기준의 설정: 모형과 분산구조*

김영일[1]

요 약

원래 최적실험의 이론은 주어진 모형과 그에 따른 가정에 기초하여 발달되었기 때문에 하나의 최적실험기준이 실험이 가지고 있는 여러 목적을 모두 반영하는 것은 무리이다. 따라서 실험자가 다목적 실험기준의 필요성을 느끼는 경우에는 종종 여러 최적실험기준들의 균형을 이루는 방법을 통해 이러한 문제가 다루어진다. 본 연구에서는 이분산구조를 가지고 있는 모형을 예를 들어 복합적인 실험기준들을 알아본다. 왜냐하면 이분산인 경우 D- 최적과 G-최적실험간의 동격이론은 더 이상 성립되지 않음에 따라 두 실험기준의 특징은 현격하게 구분되어지기 때문이다. 제약조건최적실험, 결합최적실험, 그리고 minimax 실험방법을 통한 실험기준들간의 균형을 꾀하여 보았다. 처음 두 방법은 실험자의 주관이 반영되어 실제적으로 매우 세심한 주의가 필요한 반면, minimax는 그러한 점을 해소하였다고 본다. 또한 이를 확장하여 오차의 이분산 구조에 대한 불확실성이 존재할 때 적용될 수 있는 두 가지 실험기준도 마련하여 보았다. 간단한 알고리즘과 결어를 첨부하였다.

주요용어: D-최적, G-최적, I-최적실험계획법, 제약조건실험계획법, 결합실험계획법, minimax실험계획법.

1. 소개

실험계획법의 평가는 모수의 추정과 관련지어진다. 최적실험계획법은 이러한 목적을 위하여 자주 인용되곤 하는데 이에 대한 이론적인 근거는 Kiefer와 Wolfowitz(1960)의 논문에서 찾을 수 있다. 이후 나온 많은 전통적인 최적실험계획 절차는 등분산(homogeneous variance)의 가정하에서 평균모형(mean model)의 효율적인 추정에 관심을 기울이고 있다. 이에 따라 모형은 최적운영조건을 결정하는데 쓰이곤 하는데 다구치의 로버스트모수 실험계획법(robust parameter design) 이론이 나온 이래 현재는 이분산의 존재를 접목시킬 수 있는 실질적인 실험계획의 개발에 관심이 집중되고 있다.

이러한 목적을 위하여 본 연구에서는 이분산의 경우를 포괄하는 일반적인 선형모형을 고려하여 본다. R^k공간의 어떤 compact 부분집합 Ω에 정의된 m개의 독립인 연속 회귀함수(continuous regression function)로 구성된, $f^T(x) = (f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x))$가 있다고 가정하자. Ω 안에 있는 모든 x에 대하여 단변량 반응변수는 통계적인 모형에 의거 관측이 된다고 하자.

$$y(x) = f^T(x)\beta + e/\sqrt{\omega(x)} = \sum_{i=1}^{m} f_i(x)\beta_i + e/\sqrt{\omega(x)} \tag{1.1}$$

* 이 논문은 1997년도 학술진흥재단의 대학교수 해외파견연구지원에 의하여 연구되었음.

1) (456-756) 경기도 안성시, 중앙대학교 정보시스템학과, 교수 E-mail: yik01@cau.ac.kr

여기서 $\beta^T = (\beta_1, \cdots, \beta_m)$는 추정하여야 할 모수이고 e는 서로 비상관인 실수값을 가지는 기대값이 0 그리고 분산이 σ^2인 오차확률변수라 한다. 앞으로는 일반성의 손실없이 σ^2는 1로 가정한다. 여기서 $\omega(x)$는 Ω에 정의된 형태가 알려진 양의 실수값을 가지는 유계(bounded)함수라 가정한다. 이러한 함수 $\omega(x)$는 효율함수(efficiency function)라고 불린다. 만약 $\omega(x)$이 Ω에서 상수함수이면 오차들은 등분산의 형태를 띈다고 하고 그렇지 않은 경우를 이분산이라고 한다. 실험계획문제는 실험계획영역 안에 있는 s개의 점의 유한집합에 질량을 부여하는 확률질량함수 ξ로 기술될 수 있다. 크기가 작은 실험계획에서는 만약 n이 표본 크기라면 $n\xi(x_i)$가 정수여야 하는 제약을 지니지만 본 연구에서는 이러한 제약조건이 없는 표본이 큰 경우만을 고려하여 본다. 참고로 x_i는 실험계획 ξ의 받침점이라 부른다. 실험계획에 내재되어 있는 정보에 대한 척도로서 자주 쓰이는 것으로 다음과 같이 정의되는 정보행렬(information matrix)을 들 수 있다.

$$M(\xi) = \int_\Omega f(x)f(x)^T\omega(x)\xi(dx)$$

여기서는 정보행렬이 특이(singular)행렬이 아닌 비특이(nonsigular)실험계획에 대해서만 관심을 두고자 한다. 실험계획은 $(\Omega, f(x), \omega(x))$과 함께 실험자의 관심을 반영하는 볼록(convex) 실험기준함수를 결정하여야 하는데 제일 잘 알려진 기준으로서는 1974년에 발표된 Φ_{AP}를 들 수 있다. 만약 A가 계급(rank)이 m인 단위행렬 I이면 이는 $\Phi_P(M(\xi)) = (1/m\ tr(M^{-p}(\xi))^{1/p}$ 로 표현되며 이는 Φ_P-실험기준이라 부른다. 특히 Φ_0, Φ_1, 그리고 Φ_∞의 경우를 D-, A- 그리고 E-최적기준이라 불린다. 이러한 기준은 $A\beta$의 추정이 주 관심사일 때에 적용될 수 있는 기준들이다. 이러한 기준이외에 적합된 회귀곡선 (fitted regression curve)의 평균 제곱오차, $E[(f^T(x)\widehat{\beta} - f^T(x)\beta)^2]$의 어떠한 함수를 최소화하는 실험기준이 존재하는데, 만약 그 함수가 최대값이면 그 기준은 G-최적기준이다. 그리고 미지의 모수벡터 β는 최소제곱법에 의해서 추정되는 것으로 가정한다면 G-최적기준은 적합값의 분산 즉, $d(x,\xi) = f^T(x)M^{-1}(\xi)f(x)$의 최대값을 최소화하는 기준이 된다. Kiefer와 Wolfowitz(1959)의 논문은 D-최적기준과 G-최적기준의 동격성을 주장하였는데 이는 등분산의 오차구조를 가정한 경우에만 국한되는 것이다. 그리고 등분산의 경우는 주어진 실험의 D-최적 여부를 $\max_{\xi_D} f^T(x)M^{-1}(\xi_D)f(x) = m$이라는 사실에 입각하여 판단할 수 있다. 여기서 ξ_D는 D-최적실험을 의미한다. 그러나 이러한 동격이론은 이분산의 경우에는 해당되지 않는다. 최근에서야 Wong과 Cook(1993)에 의하여 이분산의 경우 G-최적기준을 확인하는 필요충분조건이 제시되었으나 이에 대한 절차가 아직은 등분산의 경우에 비해 매우 복잡하고 실용적이지 못하다. 물론 Fedorov(1972)가 그의 책에서도 밝혔듯이 효율함수 $\omega(x)$가 상수함수가 아니라 하더라도 실험자가 모수의 부분집합에 대해서 관심을 가지는 경우에는 식 (1.1)의 좌변과 우변에 $\sqrt{\omega(x)}$을 곱하여 주므로서 등분산 형태의 모형을 유도할 수 있기 때문에 전혀 문제가 되지 않는다. 즉, 등분산의 경우는 실험자가 두 가지 목적의 실험기준, D와 G-최적을 가지고 있다 하더라도 전혀 문제가 없겠지만 이분산인 경우는 이 두 가지 기준이 추구하는 특징을 연구할 필요가 있으며 경우에 따라서 이 두 기준의 균형을 이루는 문제가 대두된다. 2절에서는 이에 대한 필요성을 부각하는 예제를 살핀 다음 기존 문헌

에서 존재하는 방법론 등을 이용하여 실험기준들간의 균형을 이루는 방법을 모색함과 동시에 새로운 minimax 접근방법을 제시하고 3절에서는 불확실한 분산구조하에서 실험기준을 설정하는 방법을 보도록 한다. 그리고 4절에서는 실험 절차와 관련 일반적인 가이드라인을 결론과 함께 언급할 것이다.

2. 복합실험기준

2.1. 배경

종래 최적실험기준이 비판을 받은 주된 이유중의 하나로 모형 및 그에 따른 가정의 경직성을 들 수 있다. 로버스트 실험계획과 모형차별 실험계획으로 이분화되는 많은 연구들은 이러한 배경에서 출발하였다. Box와 Draper(1959) 및 Läuter(1974) 그리고 Stigler(1971)등 수많은 논문들이 있다. 그러나 이들 논문들은 한결같이 등분산을 가정하고 하나의 기준만을 고려하였기 때문에 실험기준간의 특성들을 파악하는데는 무리가 있었다. Box와 Draper(1975)는 실험을 계획하는데 있어 반드시 고려하여야 할 14가지의 기준을 리스트로 만들어 정리하였다. 그러나 이 중 몇 개의 기준은 하나의 목적으로는 달성할 수 없는 것들이거니와 다양한 목적을 소화해내는 하나의 실험기준들을 마련하는 것 자체가 무리이다. 따라서 거의 단일목적만을 가지고 있는 최적실험기준들의 특성을 파악하고 이를 적절히 융합시키는 노력이 한편으로 수행되었다고 볼 수 있다. 본 연구의 동기유발을 위한 예제로서 몇 가지 이분산구조들을 Kim(1987)과 Wong과 Cook(1993)의 연구에서 발췌하여 본다.

예제 2.1: 등분산 즉, $\omega(x) = 1$인 경우는 위에서도 언급하였듯이 D-최적과 G-최적은 동격인 것은 익히 알려져 있는 사실이다. 단순회귀모형 $f^T(x) = (1, x)$인 경우 D-(G) 최적실험계획 ξ_D은 실험영역 $\Omega = [-1, 1]$에서 다음과 같이 표기된다. 왜냐하면 $d(x, \xi_D) = f^T(x)M(\xi_D)^{-1}f(x)$의 최대값이 실험영역에서는 $m = 2$의 값을 가지기 때문이다.

$$\xi_D(\pm 1) = 1/2$$

그러나 이러한 사실은 특정의 이분산의 구조를 도입할 경우 매우 다른 양상을 띤다. 두 최적간의 동격성은 유지되지 않을 뿐 아니라 받침점 및 질량의 변화가 뒤따를 수 있다. 다음과 같은 두 가지 효율함수를 고려하여 보면 이를 이해할 수 있다.

(1) $\omega(x) = 1/(x + c),\ c > 1$:

$$\xi_G(1) = (c+1)/2c,\ \ \xi_G(-1) = (c-1)/2c$$

$$\xi_D(1) = 1/2, \xi_D(-1) = 1/2$$

(2) $\omega(x) = (x + c),\ c > 2$:

$$\xi_G(1) = (c-1)/2c,\ \ \xi_G(-1) = (c+1)/2c$$

$$\xi_D(1) = 1/2, \xi_D(-2/3) = 1/2$$

효율함수의 구조에 따라 (1)의 경우처럼 질량의 변화뿐만 아니라 (2)의 경우처럼 G-최적은 이상 등분산 D-최적과 같은 받침점을 유지할 필요가 없다. 이분산인 경우 이러한 D-최적과 G-최적간의 괴리가 있었음에도 불구하고 이러한 사실이 최근이 지나서야 문헌에 소개된 것은 매우 흥미롭다.

예제 2.2: 등분산과 $f^T(x) = (1, x, x^2)$인 경우 D-최적실험계획 ξ_D은 실험영역 $\Omega = [-1, 1]$내의 받침점 -1, 0, 그리고 1 에서 같은 크기의 질량 1/3 씩을 가진다. 그러나 예제 2.1 중 첫 번째 효율함수에서 c를 2로 취한 $\omega(x) = 1/(x+2)$경우를 생각하여 보면 ξ_D의 중간받침점은 더 이상 0이 아니고 -0.141191로 이동함을 쉽게 수치적으로 찾을 수가 있는데 이는 언뜻 보아 상식에 반하는 결과로 해석할 수 있다. 중간받침점을 분산이 작은 영역으로 이동시켜 선택하기 때문이다. 왜냐하면 효율함수의 역은 분산함수로 규정지어지는데 이 경우는 받침점 -1과 받침점 1에서의 분산의 비가 3임을 나타내는 구조이면서 분산이 선형으로 증가하기 때문이다. 이러한 분산구조는 예제 2.3에서 좀 더 자세히 다루기로 한다. 또한 G-최적을 구하여 보면 다음과 같다.

$$\xi_G(-1) = 1/6,\ \xi_G(0) = 1/6,\ \xi_G(1) = 1/2$$

중간받침점은 움직이지 않고 질량만 이동함을 알 수 있다. 그리고 질량의 비가 3임을 알 수 있다. 이는 분산이 큰 영역에 있는 받침점에 질량을 많이 배치함으로서 예측값의 분산의 최대값을 최소화하는 실험계획임을 알 수 있다. 이러한 결과를 놓고 볼 때 이분산 구조를 가지고 있는 실험영역에서의 실험기준 설정은 실험설계자로 하여금 많은 애로점을 가져다 줄 것이다. Lee(1987)가 지적하였듯이 같은 Φ_{AP}내의 실험기준이라면 어느 정도 같은 방향의 결과를 초래할 수도 있다고 볼 수 있지만 추정과 예측이라는 목적이 상반된 경우에는 설사 오차의 등분산구조를 가정하더라도 D-최적이 아닌 다른 기준과 G-최적간에는 이러한 유사성을 기대하기 어렵다. 따라서 여러 실험기준간의 균형을 적절히 잡아주어야 할 필요성이 대두가 된다.

복합기준을 다루는 실험기준으로서 문헌에서 많이 이용되는 두 가지 방법이 있는데 하나는 제약최적실험계획법(constrained optimal experimental design)이며 다른 하나는 결합실험계획법(compound optimal experimental design)이다.

2.2. 제약최적실험계획법

Stigler(1971)에 의해 시도된 이후 여러 사람에 의해 그 개념이 정립되었는데 문제의 단순성을 위하여 실험자가 두 가지 실험기준을 가지고 있다고 보자. 편의상 하나는 주기준 그리고 다른 하나는 보조기준으로 간주한다. 보조기준의 효율이 어느 정도 보장되는 범위내에서 주기준의 최적화를 꾀하는 방법이다. Lee(1987)는 해석적인 방법으로 접근하여 이에 대한 이해를 구한 바 있고 Mikulecka(1983)는 알고리즘개발을 시도하였으며 Cook과 Fedorov(1995)에 의한 연구는 이를 일반화된 제약실험계획법으로 승화시켰다. 예를 들어 이를 설명하여 본다.

예제 2.3: $f^T(x) = (1, x)$ 인 경우를 다시 생각하여 보자. 그리고 오차항에 대한 분산의 구조는 실험영역 Ω에서 선형으로 증가하며 최대분산과 최소분산의 비가 $\gamma > 1$라 한다면 이는 수학적으로 $\omega^{-1}(x) \propto (\gamma - 1)x + (\gamma + 1)$로 표현된다. 그리고 등분산인 경우를 포함하기 위해 $\omega^{-1}(x) = [(\gamma - 1)x + (\gamma + 1)]/2$로 한다. 참고로 예제 2.1의 (1)과 2.2에서 $c = 2$는 $\gamma = 3$에 해당된다. 이 모형인 경우 D-최적과 G-최적은 다음과 같다.

$$\xi_D(\pm 1) = 1/2$$

$$\xi_G(-1) = 1/(\gamma + 1), \xi_G(1) = \gamma/(\gamma + 1)$$

그리고 G-최적인 경우 $d(x, \xi) = f^T(x)M^{-1}(\xi)f(x)$의 최대값은 $\gamma + 1$이다. D-제약조건하에서의 G-최적 $\xi_{G(D)}$은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\min_{\xi} \max_{x \in \Omega} \quad f^T(x)M^{-1}(\xi)f(x)$$

$$s.t. \qquad D - efficiency > c$$

여기서 c는 실험자가 제공하여야할 상수이며, 효율(efficiency)은 실험계획 ξ이 최적실험기준에 대한 효율으로서 D-효율은 $D(\xi, \xi_D) = \{det M^{-1}(\xi_D)\ det(M(\xi)^{1/m})\}$ 이다. 그리고 G-효율은 $G(\xi, \xi_G) = \max\ d(x, \xi_G) / \max\ d(x, \xi)$로 규정지어진다. $\gamma = 3$인 경우 해석적인 해를 구해 보면 $\xi_{G(D)}(-1) = 1 - p, \xi_{G(D)}(1) = p$인 구조에서 $c > \sqrt{3}/2$이면 $p = (1 + \sqrt{1 - c^2})/2$이고 $c \leq \sqrt{3}/2$ 이면 $p = 3/4$이다. 위에서 추구하는 D-효율이 $\sqrt{3}/2$보다 떨어지면 실험자는 G-최적에만 신경을 써도 된다는 뜻으로 해석된다. 그러나 D-효율이 보다 높게 요구되면 제약실험기준은 D-와 G-최적간의 균형을 기하게 된다. 효율을 실험자가 제공한다는 것은 매우 신경이 쓰이는 경우로 두 가지 기준에 대한 균형을 맞추는 작업의 필요성을 느낀다. 그러나 Atkinson(1995)이 지적하였듯이 제약조건의 개수가 여러 개로 확장되는 경우 모든 제약조건식을 동시에 만족시키는 실험조건을 찾으면서 최적실험을 꾀하는 것은 이론적으로나 알고리즘면으로 보나 매우 어려운 일임에 틀림없다.

2.3. 결합최적실험계획법(COMBINED OPTIMAL DESIGN)

제약최적실험을 대체하는 다른 하나의 복합실험기준으로 Läuter(1974)가 발표한 실험기준이 있다. 그녀는 모형이 알려져 있지는 않으나 어떤 집합내의 하나의 형태로 존재한다고 보고 D-최적기준의 선형결합을 적용하여 해당되는 동격이론을 유도하였다. 이를 일반화시켜 본 연구에 적용하여 볼 수 있다. 실험자가 여러 실험기준을 가지고 있을 때 이들의 효율의 선형결합으로 나타나는 기준을 생각하여 볼 수 있다. 만약 D-효율과 G- 효율의 선형결합으로 나타나는 효율을 최대화시키는 기준을 마련하여 보면 다음과 같다.

$$\min_{\xi} \phi(\xi|\lambda)$$

여기서 $\phi(\xi|\lambda)$ 는 $\lambda G(\xi, \xi_G) + (1 - \lambda)D(\xi, \xi_D)$ 이고 λ는 실험자가 제공하여야 하는 $0 \leq \lambda \leq 1$의 숫자다. 예제 2.3의 경우를 이러한 기준으로 실험계획을 만들어 보도록 한다. 그러나

$\phi(\xi|\lambda)$를 위와 같이 효율의 선형결합으로 직접 쓰기 보다는 $\phi_1(\xi) = -G^-1(\xi, \xi_G)$와 $\phi_2(\xi) = log(D(\xi, \xi_D))^{1/2}$ 의 선형결합 즉, $\phi(\xi|\lambda) = \lambda\phi_1(\xi) + (1-\lambda)\phi_2(\xi)$로 표기하면 편하다. 왜냐하면 $\phi_1(\xi)$ 및 $\phi_2(\xi)$는 위로 볼록한 함수(concave)이므로 목적함수는 효율의 단조함수(monotonic function)로 표기 할 수 있을 것이다. 부연하면 G-효율과 구성하고 있는 $d(x, \xi)$와 $log|M(\xi)|$는 각각 아래로 볼록한(convex) 함수, 위로 볼록한 (concave) 함수란 점이 확인될 수 있기 때문이다. 이러한 사실을 근거로 예제 2.3의 경우를 해석적으로 실험계획을 구성하여 보면 $\lambda \geq 1/2$인 경우는 $p = 3/4$이고 $\lambda \leq 1/2$ 인 경우는 p는 다음과 같이 표기된다.

$$p = \{(5\lambda - 2) - \sqrt{(2 - 5\lambda)^2 + 4(4 - 4\lambda)(3\lambda)}\}/(8\lambda - 8)$$

D-효율에 대한 가중치 $(1 - \lambda)$가 1/2 이하이면 G-최적실험계획과 같음을 알 수 있다. 그러나 D-효율에 대한 가중치가 1/2 이상이면 G-최적과 D-최적의 균형이 이루어진다. 이 예제를 보면 제약실험계획법과 결합최적실험계획은 근본적으로 같음을 즉감적으로 알 수 있는데 $\lambda = 1/2$인 경우 결합기준은 G-최적에 해당되고 이의 D-효율은 $\sqrt{3}/2$으로서 제약실험계획법에서 제시한 기준 $c = \sqrt{3}/2$와 일치함을 알 수 있다. 따라서 제약실험계획법의 기준으로 따지면 이는 바로 제약 G-최적이 추구하는 실험계획이라는 사실을 알 수 있다. 실제적으로 Cook과 Wong(1994)의 연구에 의하면 이 두 가지 실험계획법은 동격이 된다. 따라서 적절한 λ를 선택하는 문제가 관건으로 떠오를 수 있다. 그러나 실험기준이 가지고 있는 특성상 효율의 민감도가 다르기 때문에 가중치가 같다고 해서 두 기준의 효율이 결과적으로 같다고는 볼 수 없다. 이 예제인 경우 G-효율은 D-효율에 비하여 매우 민감하다고 할 수 있다. 이러한 이유로 Cook 과 Wong(1994)은 λ를 x축으로 하여 결합실험이 두 기준에 대해 가지고 있는 효율을 그림으로 그려본 후 가중치 λ를 결정하는 것이 실험자로 하여금 도움을 준다고 하였다. 그러나 위의 제약실험계획법에서 그러하였듯이 기준이 두 개인 경우는 별 문제가 없으나 만약 3개 이상의 기준 이 도입될 경우는 이러한 방법 역시 불가능하여 실험자를 매우 혼돈에 빠뜨리게 할 가능성이 있다. 이와 같이 제약실험계획법이나 결합최적기준은 각각의 단점을 가지고 있다. 특히 제약최적실험계획법은 알고리즘 측면에서 아직 완성단계가 아니라고 보여지는 바 본 연구에서는 다음과 같은 실험기준을 제안하여 본다.

2.4. Minimax 방법

보통의 경우 실험자가 두 가지 혹은 여러 가지 실험기준에 대해 선호도를 가지고 있다 하더라도 위의 경우들에서 보다시피 그 정도를 정확하게 실험에 반영하기는 매우 어렵다. 이러한 의미에서 한 실험이 실험자가 염두에 두고 있는 여러 최적기준에 대해 가지는 최저의 효율을 최대화하는 실험기준을 마련하여 볼 수 있다. 이는 실험자가 가지고 있는 최적기준들의 집합을 E, 그 중 하나의 원소를 e라 하다면 모든 $e \in E$에 대해 발생할 수 있는 최악의 효율을 최대로 끌어 올려 볼 수 있다는 의미이다.

정의 2.1 실험계획 ξ^*은 아래 조건이 만족할 때 효율-로버스트(efficiency robust) 실험이라 한다.

$$\max_\xi \min_{e \in E} E(\xi, \xi_c) = \min_{e \in E} E(\xi^*, \xi_c)$$

여기서 $E(\xi, \xi_c)$는 ξ가 ξ_c에 대해 가지는 효율을 의미한다.

이러한 실험기준은 위에서 언급한 두 가지 실험기준과는 달리 실험기준에 대한 선호도를 사전에 명시할 필요가 없는 특징을 가진다. 사전에 선호도가 명시될 수 있는 상황이면 다른 방법들이 더 좋겠지만 선호도가 명확하지 않은 경우는 정리 2.1에 의한 방법이 우위를 점할 수 있다. 이러한 minimax방법은 Φ_{AP}의 기준을 염두에 두고 p를 $\{0, \infty\}$의 하나의 원소로 생각한다면 좀 더 광범위한 의미의 효율-로버스트 실험이 될 것이다. 문제의 단순성을 위하여 이분산이 있을 경우 성격을 달리하는 두 기준 D와 G-최적만이 있는 집합 E를 고려하여 본다. 그리고 결합최적실험기준이 주어진 두 실험기준에 대해 효율이 같은 결과가 나오는 가중치를 찾는 문제는 이러한 minimax 방법과 같은 맥락에서 이해될 수 있을 것이다. 후에 예를 통해 설명하여 본다. 그리고 이러한 문제를 위한 알고리즘을 구성하여 보면

알고리즘

단계 2.1 시작을 위한 정칙(non-singular)인 실험계획을 ξ_0라 한다. $i = 0$.

단계 2.2 다음이 성립되는 c를 구한다.

$$\max_{c\in E} E^{-1}(\xi_i, \xi_c) = c_i$$

단계 2.3 동시에 단계 2.2에서 나오는 최대값 c_i을 가져다주는 $x_i \in \Omega$를 찾는다.

단계 2.4 $\alpha_i = 1/(i+s), s \geq 0$ 로 정하고

단계 2.5 $\xi_{i+1} = (1-\alpha_i)\xi_i + \alpha_i \xi_{x_i}$ 로 새로운 실험을 세운다. 여기서 ξ_{x_i}는 x_i에 질량전체를 부여 하는 실험이다.

단계 2.6 두 개의 연속된 c_i의 차이가 충분히 작으면 알고리즘을 정지하고 그렇지 않으면 단계 2.2로 돌아간다.

알고리즘에 대한 추가설명:

단계 2.3에서 $x_i \in \Omega$를 찾는 문제가 이러한 알고리즘의 관건이 된다. 먼저 정의 2.1에서 언급된 데로 D-효율과 G-효율을 직접 비교하여 알고리즘을 구성할 수 있다. 즉, 임의의 실험의 D-효율이 G-효율보다 작으면 D-효율을 가져다 준 받침점을 찾으면 되고 그렇지 않으면 G-효율을 가져다 준 받침점을 찾아 단계 2.5에서 처럼 실험을 갱신하면 된다. 또한 Atwood(1969)의 결과를 이용한 다른 알고리즘을 구성하여 볼 수 있다. Atwood는 주어진 실험 ξ이 D-최적과 G-최적과 비교하여 나오는 두 개의 효율은 항상 D- 효율이 G-효율에 비하여 높다고 하였다. 즉 G-효율은 D-효율의 아래 한계를 제공하는바 G-효율을 높이는 실험의 D-효율의 결과는 항상 높을 수 밖에 없다. Atwood는 등분산을 가정하여 결과를 유도하였지만 이분산의 경우라도 1절 말미에 언급된 $\sqrt{\omega(x)}$를 모형 (1.1) 양변에 곱하는 논리로 $D(\xi_D, \xi) \geq G^*(\xi_{G^*}, \xi) = m/\max\omega(x)d(x, \xi)$을 유도할 수 있다. G^*를 준(pseudo) G-효율이라 부른다. 단계 2.3에서는 이러한 G^*가 최대값이 되게하는 실험점 $x_i \in \Omega$을 필요한 경

우 찾으면 된다. 이러한 논리는 D-효율을 G^*-효율로 대체함으로서 결과적으로 G^*-효율과 D-효율을 동시에 끌어올리는 결과를 가져다 줄 것이다. 이러한 논리는 계산상의 편리함 때문만 아니라 후의 예제에서 언급을 하겠지만 오차분산의 구조가 불명확하게 제시되는 상황하에서의 복합기준에서도 쓰일 수 있기 때문에 본 연구에서는 후자를 염두에 둔 알고리즘을 구성하여 예제를 제시하여 본다.

예제 2.4: $f^T(x) = (1, x)$이고 , $\omega^{-1}(x) = [(\gamma-1)x + (\gamma+1)]/2$인 경우를 다시 생각하여 보자. 실험기준이 두 가지만 있으므로 해석적인 방법으로 해를 구하여 보면 $\xi(-1) = 1-p$, $\xi(1) = p$ 인 구조에서 $p = 2\gamma/(3\gamma+1)$ 이다. 여기서 D-효율과 G^*-효율은 같을 것이다. 위의 예제와 비교하면 $\gamma = 3$ 인 경우 $p = 3/5$ 을 알 수가 있다. D-최적의 질량 1/2에 1/10을 더한 결과로 나타난다. 그리고 분산이 무한대로 증가하더라도 p값은 2/3이다. 또한 이러한 결과는 D-최적과 G-최적의 선형결합으로 해석할 수 있다. $\xi|\lambda = \lambda\xi_G + (1-\lambda)\xi_D$ 에서 λ는 $\lambda = (\gamma+1)/(3\gamma+1), 1/3 \le \lambda \le 1/2$ 로 나타난다. 즉, minimax 접근방법에서 나오는 실험방법은 $\gamma = 3$ 인 경우 G-최적에 대한 가중치가 2/5임을 알 수 있다. 참고로 minimax 접근방법의 D-와 G-기준에 대한 효율을 계산하면 각각 98%와 80%임을 알 수 있다. D-효율이 상승하였음을 주시할 필요가 있다. 참고로 D-효율과 G-효율을 직접 비교한 알고리즘을 이용하여 실험계획을 구하여 보면 $\gamma = 3$인 경우 $\xi(-1) = 4/13, \xi(1) = 9/13$이 나왔다. 그리고 D-와 G-기준에 대한 효율은 모두 92.3%로 높게 나왔으나 G^*-효율은 61.5%로 매우 저조하게 나왔다.

예제 2.5: $f^T(x) = (1, x, x^2)$ 이고 $\omega^{-1}(x) = [(\gamma-1)x + (\gamma+1)]/2, \gamma \ge 1$인 경우 minimax 접근방법에 의한 해를 알고리즘을 통해 구해 보면 다음과 같다. 예제 2.2에서 언급한 바 이분산인 경우 D-최적인 경우 중간받침점이 더 이상 0이 아니고 좌측으로 이동한다는 사실을 이미 알고 있다. 이러한 사실을 반영한 실험계획이 다음과 같이 구해졌다. $\gamma = 3$을 기준으로 하였다.

$$\xi(1) = 0.430, \xi(-1) = \xi(-0.1375) = 0.285$$

중간받침점이 0이 아닌 경우이므로 해석적인 해를 구할 수 없었지만 G-최적에 대한 효율은 85.8%로 오히려 예제 2.4에서 본 단순선형모형의 경우보다 더 높게 나왔다. 즉, 받침점의 개수가 3개로 늘어나고 중간받침점이 있음으로 해서 높은 효율을 가져왔다고 해석된다.

3. 이분산구조

실제로 이분산 구조가 알려져 있다고 가정하고 실험을 하는 경우는 매우 드물다. 이분산의 구조의 형태라든지 이분산의 정도라든지(위 예제들인 경우 이는 γ로 표현)등 의 지식들은 공정을 책임지고 있는 담당자가 알고 있는 경우도 있지만 정확한 분산의 형태를 함수로 제공한다는 것은 무리가 따른다. 이 경우는 분산의 함수의 형태를 찾고자 하는실험계획이 선행되어야 한다. Atkinson과 Cook(1995)은 다양한 분산함수를 포함한 D- 최적실험계획을 연구하였다. Fedorov(1972)에 의하면 효율함수의 추정을 위하여 축차실험을 실시할 수 있

으나 아직 이론적으로나 실제적인 사례가 없는 상황이다. 그러나 이산형의 실험계획을 하고 받침점이 붙박이로 사전에 설정되어 있는 경우는 각 받침점에 해당되는 분산의 크기만 알고 있어도 비교적 쉽게 이분산하에서 실험계획을 구할 수 있다. Mays와 Easter(1997)의 연구가 이러한 접근방법을 취하였는데 본 연구에서 제시한 이분산 구조에 따른 결과는 그들의 모의실험에서 얻어지는 결론을 이론적으로 정리하였다고 본다. 자세한 내용은 그들의 논문 p. 68-69을 참조바란다. 두 가지 최적에 대한 선택내지는 결합이 대두가 되는 경우에는 본 연구의 접근방법이 채택될 수 있다. 오차구조의 함수형태에 대해 확신이 서지 않을 경우에는 다음과 같은 두 가지 오차복합실험기준을 고려하여 볼 수 있다. 여기서는 오차의 구조는 선형으로는 생각되나 γ 값에 대한 확신이 없는 경우로 γ 값이 어떠한 집합 Γ에 속해 있는 값이라 가정한다.

정의 3.1 실험계획 ξ^*은 아래 조건이 만족할 때 결합-오차효율 로버스트실험이라 한다.

$$\max_{\xi} \min_{\gamma \in \Gamma} \phi(\xi|\lambda) = \min_{\gamma \in \Gamma} \phi(\xi^*|\lambda)$$

여기서 $\phi(\xi|\lambda)$ 는 주어진 λ에 따른 결합효율을 의미한다.

정의 3.2 실험계획 ξ^*은 아래 조건이 만족할 때 minimax-오차효율 로버스트실험이라 한다.

$$\max_{\xi} \ \min_{\gamma \in \Gamma} \min_{c \in E} E(\xi, \xi_c) = \min_{\gamma \in \Gamma} \min_{c \in E} E(\xi^*, \xi_c)$$

이에 대한 알고리즘은 위에서 제시된 알고리즘의 약간 변형한 형태를 취하면 된다. 즉, 단계 2.2에서 구하는 c_i를 두 단계로 나누어 생각할 수 있을 것이다. 그러나 일반적으로 λ를 명시하여야 하는 불편함이 있는 정의 3.1의 결합실험기준의 방법이라든지 혹은 제약조건 실험계획은 현실적으로 도입하기가 어렵다. 이러한 맥락에서 λ와 γ에 대한 maxmin도 실시하여 볼 수 있을 것이다. 그러나 λ값은 사용자가 명시하여야 하는 면이 강하기 때문에 본 연구의 방법에서는 제외하나 다른 하나의 기준이 될 수 있다. 예제 3.1에서는 정의 3.1을 예제 3.2에서는 정의 3.2의 실험계획의 특징을 살펴보도록 한다.

예제 3.1: $f^T(x) = (1, x, x^2)$ 이고 $\omega^{-1}(x) = [(\gamma-1)x + (\gamma+1)]/2, \gamma \geq 1$ 이나 γ값이 불확실한 경우를 고려하여 보자. $\gamma \in \Gamma = [1, 5]$는 최대분산과 최소분산의 비가 최소 1, 최대 5인 경우를 가정한다. 표 3.1a에서는 정의 3.1에서 나오는 가중치 λ의 값을 0에서 1까지 변화시켜 결합-오차효율 로버스트 실험을 알아 보았고, 표 3.1b에서는 D- 와 G-최적기준에 대한 효율을 계산하여 보았다. 정의 3.1에서 나온 결합-오차효율 로버스트실험은 γ값에 관계없이 매우 안정적인 결합효율을 가지고 있음을 알 수 있다. 특히 G-최적에 대한 가중치 λ값이 1인 경우에는 즉, D-최적에 대한 가중치가 0인 경우에는 어떠한 γ값이 참으로 밝혀지든지 간에 최저효율이 81.8%로 나타났다. 이는 γ값을 1로 가정으로 한 D-최적이 γ값이 5인 경우에 대한 G-효율이 60 % 혹은 γ 값이 5인 경우의 G-최적이 γ 값이 1인 경우에 대한 효율이 33.3%에 그치는데 비하면 상당히 높은 수치이다. 문제는 실험자가 D-와 G-최적에 대한 균형을 맞추는 λ값을 어떻게 정하느냐에 있다. λ의 선택여부는 참으로 밝혀질 γ값에 따라 의존하므로 실제 실험자가 이를 사전에 명시하는 것은 어려운 일이다.

표 3.1a: 결합-오차효율 로버스트실험계획법

λ	정의 3.1에 의한 실험계획법
$\lambda = 0.0$	$\xi(-1) = 0.327, \xi(-0.2) = 0.165, \xi(0.02) = 0.181, \xi(1) = 0.327$
$\lambda = 0.2$	$\xi(-1) = 0.314, \xi(-0.17) = 0.126, \xi(0.02) = 0.199, \xi(1) = 0.361$
$\lambda = 0.4$	$\xi(-1) = 0.307, \xi(-0.12) = 0.103, \xi(0) = 0.206, \xi(1) = 0.384$
$\lambda = 0.6$	$\xi(-1) = 0.292, \xi(-0.08) = 0.05, \xi(0) = 0.235, \xi(1) = 0.412$
$\lambda = 0.8$	$\xi(-1) = 0.285, \xi(0) = 0.280, \xi(1) = 0.435$
$\lambda = 1.0$	$\xi(-1) = 0.273, \xi(0) = 0.273, \xi(1) = 0.455$

표 3.1b: 결합-오차효율 로버스트실험기준의 D-와 G-효율

γ	1		2		3		4		5	
λ	D	G	D	G	D	G	D	G	D	G
$\lambda = 0.0$	98.9%	98.3	99.4	73.8	99.3	65.6	99.1	61.5	98.9	59.1
$\lambda = 0.2$	99.2	94.7	99.3	81.4	99.0	72.3	98.7	67.8	98.4	65.1
$\lambda = 0.4$	99.2	91.8	99.1	86.5	98.7	76.9	98.3	72.1	97.9	69.2
$\lambda = 0.6$	98.6	87.8	98.3	88.7	97.8	82.5	97.3	77.4	97.0	74.3
$\lambda = 0.8$	97.9	84.0	97.4	84.1	96.9	84.2	96.4	81.6	96.0	78.3
$\lambda = 1.0$	97.0	81.8	96.5	81.8	95.9	81.8	95.4	81.8	95.0	81.8

예제 3.2: 예제 3.1과 같이 $f'(x) = (1, x, x^2)$ 이고 $\omega^{-1}(x) = [(\gamma-1)x + (\gamma+1)]/2, \gamma \geq 1$ 이나 γ 값이 불확실한 경우를 다시 고려하여 보자. 역시 $\gamma \in \Gamma = [1, 5]$로 가정한다. 정의 3.2에 의한 실험계획은 다음과 같다.

$$\xi(-1) = 0.270, \xi(-0.2) = 0.135, \xi(-0,02) = 0.147, \xi(1) = 0.449$$

이 실험이 여러가지 γ값에 따른 D-와 G-최적에 대한 효율은 표 3.2에 표기하였다.

표 3.2: minimax-오차효율 로버스트실험기준의 D, G-효율

γ	1	2	3	4	5
D-효율	96.2%	96.6	96.5	96.3	96.1
G-효율	81.0	83.3	84.7	84.3	80.9

어떠한 γ 값이 참으로 밝혀지든지 간에 정의 3.2에 의한 실험은 G-효율은 80% 이상의 높은 효율을 보장한다. 위에서 언급하였듯이 정의 3.1에 의한 실험에서는 λ를 명시하여야 하 필요가 있었으나 정의 3.2에 의한 실험기준은 λ값에 구애받지 않고 높은 효율을 유지할 수 있는 장점을 지녔다고 할 수 있다.

제약성: 본 연구에서 취한 선형의 이분산구조는 실제로 자주 접하는 구조이긴 하지만 이러한 형태의 함수만이 유일한 것은 아니다. 그리고 현실적으로 분산구조를 알고 실험을 하는 경우는 거의 없을 것이다. 모형과 마찬가지로 추정을 위한 사전실험 단계가 있어야 함은 물론이거니와 여러 형태의 함수관계를 잘 정립하여야만 본 연구에서 취한 접근방법을 시도할 수 있을 것이다. 그리고 위에서도 언급하였지만 받침점이 고정되어 있는 이산형 실험인 경우는 이러한 문제점은 어느 정도 해결이 될 수 있다고 본다. 그리고 본 연구에서는 실험자가 예측값의 평균제곱오차의 함수로 최대값을 이용한 G-최적만을 염두에 두었지만 이러한 G-최적은 최적성 판단 여부가 아직도 복잡한 단계를 거쳐야하는 불편한 점이 있다. 대안으로서 I-최적을 들 수 있다. G-최적이 최대값을 최소화하는 기준이라면 I-최적은 분산함수의 가중평균값 즉, $\int_\Omega f^T(x)M^{-1}f(x)d_\lambda(\xi)$ 를 최소화하는 기준이다. 여기서 λ는 가중함수이다. 이는 Fedorov(1972)가 발표한 선형-최적(linear optimality)의 한 종류이다. G-최적에 비해 보다 큰 장점은 주어진 실험의 최적여부를 알 수 있는 판단기준이 이미 알려져 있다는 사실이다. 오히려 G-최적보다 가중함수를 이용하면 더 유연한 기준을 마련할 수 있다고 본다.

4. 결어

본 연구에서는 복수의 실험기준을 염두에 둔 실험계획법을 모색하였다. 특히 추정과 예측의 문제는 이분산구조의 경우 매우 다른 특징을 지니고 있는 바, 이에 대한 이해가 절대적으로 필요하며 이에 대한 균형을 잡아주는 문제는 3가지 접근방법으로 해결하여 보았다. 제약조건실험계획이나 결합실험기준을 이용한 실험계획법은 모두 실험자로 하여금 세밀한 사전 조건을 명시하여야 하는 반면 본 연구에서 제안한 minimax는 이를 개선하여 최악의 경우라 할지라도 어느 정도 효율을 보장할 수 있는 장점을 지녔다고 본다. 물론 이변수 이상의 다항회귀모형에서의 이분산구조의 모형개발을 어떻게 하여야 하는지 연구가 진행이 되어야 하겠지만 지금에서는 축차실험을 통한 방법이 하나의 대안이 될 수 있다.

참고문헌

[1] Atkinson, A.C. (1995). "Discussion" on Cook and Fedorov(1995), *Statistics*, 26, 149-150.

[2] Atkinson, A.C. and Cook, R.D. (1995). "D-optimum designs for heteroscedastic linear models", *J. of the American Statistical Association*, 90, 204-212.

[3] Atwood, C.L. (1969). "Optimal and efficient design of experiments", *Annals of Math. Statistics*, 40, 1570-1602.

[4] Box, G.E.P. and Draper, N.R. (1959). "A basis for the selection of a response surface design", *J. of the American Statistical Association*, 54, 622-653.

[5] Box, G.E.P. and Draper, N.R. (1975). "Robust Designs", *Biometrika*, 62, 347-352.

[6] Cook, R.D. and Wong, W.K. (1994). "On the equivalence of constrained and compound optimal designs", *J. of the American Statistical Association*, 89, 687-692.

[7] Cook, R.D. and Fedorov, V.V. (1995). "Constrained optimization of experimental design" with discussion, *Statistics*, 26, 129-178.

[8] Fedorov, V.V. (1972). *Theory of Optimal Experiments*, New York, Academic Press.

[9] Kiefer, J. and Wolfowitz, J. (1960). "The equivalence of two extreme problems", *Canadian J. of math.*, 12, 363-366.

[10] Kim, Y.I. (1987). *Error-robust statistical experimental design with application to model based sampling in auditing*, Ph.D. thesis, University of Minnesota.

[11] Läuter, E. (1974). "Experimental design in a class of models", *Mathematische Operations Forshung und Statistik*, 5, 379-398.

[12] Lee, C.M.S. (1987). "Constrained optimal designs for regression models", *Communications in Statistics, Part A-theory and Methods*, 16, 765-783.

[13] Mays, D.P. and Easter, S.M. (1997). "Optimal response surface designs in the presence of dispersion effects", *J. of Quality Technology*, 29, 59-70.

[14] Mikulecka, J. (1983). "On hybrid experimental design", *Kybernetika*, 19, 1-14.

[15] Stigler, S.M. (1971). "Optimal experimental design for polynomial regression", *J. of the American Statistical Association*, 66, 311-318.

[16] Wong, W.K. and Cook, R.D. (1993). "Heteroscedastic G-optimal designs", *J. of the Royal Statistical Society*, ser. B, 55, 971-880.

[1999년 4월 접수, 2000년 5월 채택]

Composite Design Criteria : Model and Variance *

Youngil Kim [1)]

ABSTRACT

Box and Draper(1975) listed some properties of a design that should be considered in design selection. But it is impossible that one design criterion from optimal experimental design theory reflects many potential objectives of an experiment, because the theory was originally based on the underlying model and its strict assumption about the error structure. Therefore, when it is necessary to implement multi-objective experimental design, it is common practice to balance out the several optimal design criteria so that each design criterion involved benefits in terms of its relative "high" efficiency. In this study, we proposed several composite design criteria taking the case of heteroscedastic model. When the heteroscedasticity is present in the model, the well known equivalence theorem between D- and G-optimality no longer exists and furthermore their design characteristics are sometimes drastically different. We introduced three different design criteria for this purpose: constrained design, combined design, and minimax design criteria. While the first two methods do reflect the prior belief of experimenter, the last one does not take it into account, which is sometimes desirable. Also we extended this method to the case when there are uncertainties concerning the error structure in the model. A simple algorithm and conclusion follow.

Keywords: D-optimality, G-optimality, Constrained optimal design, Combined optimal design, minimax design.

* This paper was accomplished with Research Fund provided by korea research Foundation, Support for Faculty Research Abroad

1) Dept. of Information System, ChungAng University. E-mail: yik01@cau.ac.kr