

Graphical Methods for Evaluating the Degree of the Orthogonal Blocking¹⁾

Jang, Dae-Heung²⁾

Abstract

When using response surface designs, the experimental trials should be carried out in blocks in case of heterogeneity of conditions. When we use nearly orthogonal blocking, we need evaluate the degree of orthogonal blocking. Graphical methods for evaluating the degree of orthogonal blocking are suggested.

Keywords : Nearly orthogonal blocking, Star graph

1. 서론

반응표면분석 시 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어지어야 하는 데 그렇지 못할 경우 우리는 블록화를 시행하게 된다. Khuri(1992, 1994, 1996)은 블록효과가 각각 고정적인 경우, 변동적인 경우, 혼합적인 경우로 나누어 통계적 추론 방법을 제시하였다. 이를 이용하여 Park과 Jang(1999a, b)는 블록화의 영향을 평가할 수 있는 측도들을 제시하였다.

반응표면분석모형으로서 우리는 주로 2차 모형을 사용한다. 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어지지 않을 경우 직교블록화를 행한다. 장대홍(2002)는 2차 모형 하에서 직교블록화가 이루어지지 않아 근사직교블록화를 행할 때 이 직교블록화의 정도를 평가하기 위한 수치적인 측도들을 제시하였다. 본 논문을 통하여 장대홍(2002)이 제시한 측도들을 이용하여 직교블록화의 정도를 평가하기 위한 그래픽 방법을 제시하고자 한다.

1) 본 연구는 한국과학재단의 2002년도 목적기초연구(R05-2002-000-00161-0)지원으로 수행되었음.

2) 부산광역시 남구 대연3동 599-1 부경대학교 수리과학부 통계학전공 교수
E-mail: dhjang@pknu.ac.kr

2. 근사직교블록화를 평가하기 위한 그래픽 방법

반응표면분석모형으로서 우리는 주로 다음과 같은 2차 모형을 사용한다.

$$y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{ui} + \sum_{i \leq j}^k \beta_{ij} x_{ui} x_{uj} + \epsilon_u, \quad u = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

이 때 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어지지 않아 블록화를 행하는 경우 직교블록화가 되기 위한 조건은 다음과 같다.

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

$$\sum_{u(l)} x_{ui} x_{uj} = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, k; i \neq j; l = 1, 2, \dots, b \quad (3)$$

$$\frac{\sum_{u(l)} x_{ui}^2}{N} = \frac{n_l}{N}, \quad i = 1, 2, \dots, k; l = 1, 2, \dots, b \quad (4)$$

여기서, $\sum_{u(l)}$ 은 l 번째 블록에 속하는 실험점들만 합한다는 의미이고, n_l 은 l 번째 블록의 크기이다.

우리는 종종 위의 조건들을 만족치 못하여 직교블록화가 이루어지지 않을 때가 있다. 이런 경우 직교블록화의 정도를 평가하기 위한 측도를 장대홍(2002)은 다음과 같이 제시하였다. 즉, (2)-(4)식을 이용하여 이에 대응하는 측도를 다음과 같이 제시하였다.

$$B1(D) = \frac{1}{kb} \sum_{i=1}^k \sum_{l=1}^b \left| \sum_{u(l)} x_{ui} \right| \quad (5)$$

$$B2(D) = \frac{1}{\binom{k}{2} b} \sum_{1 \leq i < j \leq k} \sum_{l=1}^b \left| \sum_{u(l)} x_{ui} x_{uj} \right| \quad (6)$$

$$B3(D) = \frac{1}{kb} \sum_{i=1}^k \sum_{l=1}^b \left| \frac{\sum_{u(l)} x_{ui}^2}{N} - \frac{n_l}{N} \right| \quad (7)$$

$$B(D) = B1(D) + B2(D) + B3(D) \quad (8)$$

$$P(D) = \frac{1}{1 + B(D)} \quad (9)$$

$B1(D)$, $B2(D)$, $B3(D)$ 는 각각 1차 적률, 혼합 2차 적률, 순수 2차 적률에 대하여 직교블록화의 정도를 평가하는 측도들이다. $P(D)$ 가 1이면 직교블록계획이고, $P(D)$ 가 1에 가까울수록 점점 더 직교블록계획에 가깝게 되고, $P(D)$ 가 0에 가까울수록 점점 더 직교블록계획에서 멀어진다.

우리는 위의 수치적인 측도들($B1(D)$, $B2(D)$, $B3(D)$)을 그림으로 나타내면 여러 실험계획들을 한 눈에 평가하여 볼 수 있다. 그래픽 방법 중 별그림(star graph), 레이더차트(radar chart)라고도 함.)을 이용하여 ($B1(D)$, $B2(D)$, $B3(D)$)을 나타내어 보면 효과적으로 여러 실험계획들을 한 눈에 평가하여 볼 수 있다. 축점을 이용하는 중심합성계획의 경우는 축점 α 의 값에 따라 ($B1(D)$, $B2(D)$, $B3(D)$)값이 달라지므로 α 의 값의 변화에 따른 별그림을 누적시켜 하나의 삼차원그림으로 형상화시킨 누적별그림(stacked star graph)을 이용하면 ($B1(D)$, $B2(D)$, $B3(D)$)값에 미치는 α 의 효과를 평가할 수 있다.

기존의 블록계획에 실험점이 첨가되는 경우나 빠지는 경우 우리는 별그림의 변화를 통하여 직교블록화의 정도가 어떻게 변하는 지 알아볼 수 있다.

($B1(D)$, $B2(D)$, $B3(D)$)값을 삼차원 산점도에 그려 나타내거나 $B1(D)$ 와 $B2(D)$ 의 값을 더하여 x 좌표 값으로 하고 $B3(D)$ 의 값을 y 좌표 값으로 하는 산점도를 이용하는 방법도 고려하여 볼 수 있다.

3. 수치 예

다음 <표 1>은 Box와 Draper(1987, p. 360)에 나오는 직교블록계획 $D1$ 이다. 이 직교블록계획을 참조하여 4가지 비직교블록계획들을 <표 2>처럼 만들 수 있다. 예로, $D2$ 는 첫 번째 블록이 실험번호 1, 2, 5, 6, 11, 12로 이루어져 있고, 두 번째 블록은 실험번호 3, 4, 7, 8, 9, 10으로, 세 번째 블록은 실험번호 13, 14, 15, 16, 17, 18로, 네 번째 블록은 실험번호 19, 20, 21, 22, 23, 24로 이루어져 있다.

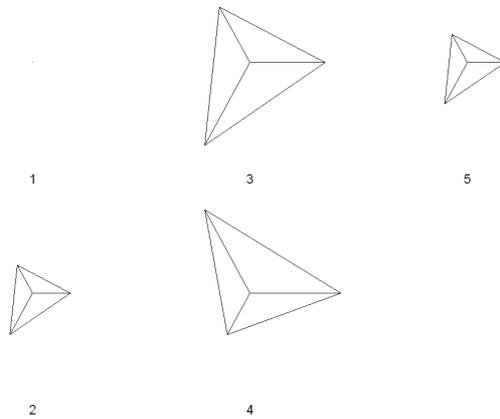
실험계획 $D1 - D5$ 에 대하여 근사직교블록화를 평가하기 위한 별그림을 그려보면 다음 <그림 1>과 같다. $D1$ 은 직교블록계획임을 알 수 있고, 직교블록화의 정도가 $D4 < D3 < D2 = D5$ 의 순으로 커져 감을 알 수 있다. 별의 크기가 클수록 직교블록계획으로부터 멀어진다. $D4$ 를 보면 $B1(D)$ 와 $B2(D)$ 의 값은 다른 계획에 비하여 크나 $B3(D)$ 의 값은 $D2$ 나 $D5$ 에서의 $B3(D)$ 만큼 작음을 알 수 있다.

<표 1> 직교블록계획 $D1$

블록	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 블록과 동일함.		

<표 2> 비직교블록계획들의 블록배열

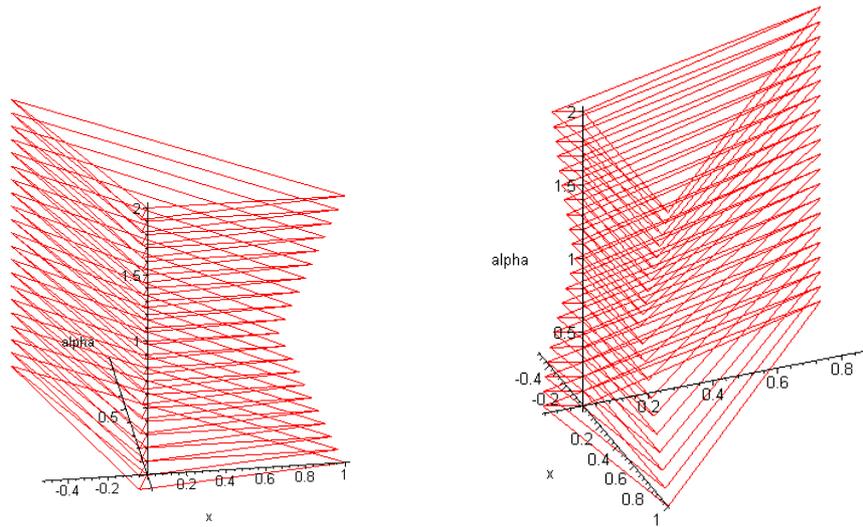
계획	블록1	블록2	블록3	블록4
$D2$	1,2,5	3,4,7	13,14,15	19,20,21
$D3$	6,11,12	8,9,10	16,17,18	22,23,24
$D4$	3,4,5	9,10,11	1,2,15	7,8,21
$D5$	6,13,14	12,19,20	16,17,18	22,23,24
$D6$	2,3,4	8,9,10	1,14,15	7,20,21
$D7$	5,6,13	11,12,19	16,17,18	22,23,24
$D8$	3,4,5	7,8,9	1,2,15	19,20,21
$D9$	6,13,14	10,11,12	16,17,18	22,23,24



<그림 1> 근사직교블록화를 평가하기 위한 별그림

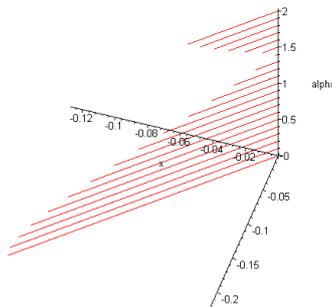
<그림 2>와 <그림 3>은 실험계획 $D4$ 에 대하여 축점 $\alpha = \sqrt{2}$ 의 값 대신 α 의 값이 0에서 2로 바뀔에 따른 누적별그림을 다른 각도에서 본 두 개의 삼차원 그림이다. 이 누적별그림을 컴퓨터 화면 상에 그린 후 마우스를 이용하여 어느 방향으로든지 이 그림을 회전시켜 누적별그림의 패턴을 다양하게 볼 수 있다. 그 결과 실험계획 $D4$ 에서 축점 α 의 값이 0에서 2로 바뀔에 따라 $B2(D)$ 의 값은 변하지 않으나 $B1(D)$ 와

$B3(D)$ 의 값은 감소하다가 증가하는 패턴을 이룸을 알 수 있고, 이러한 변화는 $B1(D)$ 에서 더 심함을 알 수 있다. 또한 α 의 값이 1에서 $B1(D)$ 와 $B3(D)$ 의 값이 제일 작음을 알 수 있다.



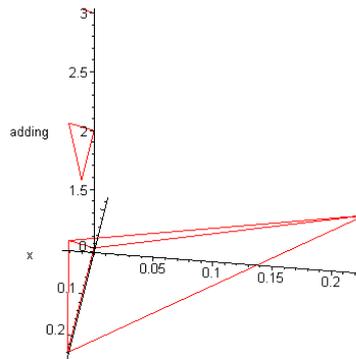
<그림 2> 계획 $D4$ 에 대한 누적별그림(1) <그림 3> 계획 $D4$ 에 대한 누적별그림(2)

<그림 4>는 실험계획 $D1$ 에 대하여 축점 $\alpha = \sqrt{2}$ 의 값 대신 α 의 값이 0에서 2로 바뀐에 따른 누적별그림이다. 실험계획 $D1$ 에서 축점 α 의 값이 0에서 2로 바뀐에 따라 $B1(D)$ 과 $B2(D)$ 의 값은 0으로 변함이 없으나 $B3(D)$ 의 값은 감소하다가 증가하는 패턴을 이룸을 알 수 있다. 또한 α 의 값이 $\sqrt{2}$ 에서 $B3(D)$ 의 값이 0이 됨을 알 수 있다.



<그림 4> 실험계획 $D1$ 에 대한 누적별그림

실험계획 $D1$ 은 직교블록계획이다. 그러므로 $B1(D)$, $B2(D)$, $B3(D)$ 의 값이 모두 0이 된다. 실험계획 $D1$ 에 대하여 요인실험점을 하나 첨가한 경우(블록 1에 실험번호 1을 하나 더 첨가), 축점을 하나 첨가한 경우(블록 3에 실험번호 13을 하나 더 첨가), 원점을 하나 첨가한 경우(블록 1에 실험번호 6을 하나 더 첨가)의 새로운 실험계획을 각각 $A1$, $A2$, $A3$ 라 하자. <그림 5>는 이러한 $A1$, $A2$, $A3$ 에 대하여 그린 별그림이다. 원점을 첨가하는 경우는 $B1(D)$ 과 $B2(D)$ 의 값은 0으로 변함이 없으나 $B3(D)$ 의 값은 0이 아닌 값을 갖는다. 축점을 첨가하는 경우는 $B2(D)$ 의 값은 0으로 변함이 없으나 $B1(D)$ 과 $B3(D)$ 의 값은 0이 아닌 값을 갖는다. 요인실험점을 첨가하는 경우는 $B1(D)$, $B2(D)$, $B3(D)$ 의 값이 모두 0이 아닌 값이 되고 세 가지 경우 중 가장 큰 값을 갖는다.



<그림 5> 실험계획 $D1$ 에 실험점을 첨가한 경우의 별그림
(위: 원점 첨가, 가운데: 축점 첨가, 아래: 요인실험점 첨가)

4. 결론

반응표면분석 시 모든 실험이 동일한 조건 하에서 이루어져야 하는 데 그렇지 못할 경우 우리는 블록화를 시행하게 된다. 직교블록화가 이루어지지 않아 근사직교블록화를 행할 때 우리는 별그림과 누적 별그림을 실험계획들의 직교블록화의 정도를 평가하는 그래픽 방법으로 사용할 수 있다.

참고문헌

1. 장대홍(2002). 근사직교블럭화를 평가하기 위한 측도, *응용통계연구*, Vol. 15, 179-186.
2. Box, G. E. P. and Draper, N. R.(1987). *Empirical Model-Building and Response Surfaces*, John Wiley Sons, Inc., New York.
3. Khuri, A. I.(1992), Response Surface Models with Random Block Effects, *Technometrics*, Vol. 34, 26-37.
4. Khuri, A. I.(1994), Effect of Blocking on the Estimation of a Response Surface, *Journal of Applied Statistics*, Vol. 21, 305-316.
5. Khuri, A. I.(1996), Response Surface Models with Mixed Effects, *Journal of Quality Technology*, Vol. 28, 177-186.
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*, Vol. 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*, Vol. 28, 369-380.

[2006년 4월 접수, 2006년 6월 채택]