

A Study on Projection Properties of the 12-Run Plackett-Burman Design

DongKwon Park¹⁾, Manyeob Han²⁾

Abstract

Non-regular designs such as the Plackett-Burman(PB) design have traditionally been used for screening only main effects because of complex aliasing. But, it was found that these designs could be used to estimate the 2-factor interactions as well as main effects through the hidden projection property. The goal of this paper is to propose the estimable model when projecting the 12-run PB design using the algebraic geometric method. The core of this method considers the design as a affine variety, and the Gröbner basis of the design ideal for this affine variety gives the estimable polynomial models. As the results of applying to the 12-run PB design, it is actually found that this design has the models not only with 2-factor interactions, but with 3-factor. This design is the maximal fan in 4-factor projection.

I. 서 론

요인실험 중 정규계획(regular design)에서는 정의관계식(defining relation)에 따라 교호작용 효과간에 완전 교락(aliasing)되거나 혹은 전혀 교락되지 않는 성질이 있어 고차 교호작용효과를 무시하고 관심의 대상이 되는 주효과 및 저차 교호작용효과를 추정하였다. 이러한 정의관계식을 이용하여 선명도(resolution)와 최소급변(minimum aberration) 등 기준을 통해 효율적인 계획을 선택할 수 있다.

이에 반해 직교배열(orthogonal array), PB 계획 등 비정규 계획(non-regular design)은 요인효과들의 관계를 간단한 정의관계식으로 표현할 수 없고, 실제로는 완전 교락이 아닌 부분 교락되어 있어 저차 교호작용효과를 추정하는 데 어려움이 있다. 이 중 실험의 횟수가 적어서 실제로 많이 이용되는 12-run PB 계획은 주효과와 2-요인 교호작용효과의 교락 계수 값이 1/3 또는 -1/3인 부분 교락된 계획으로 복잡한 교락 구조로 인해 전통적으로 주효과만을 선별(screening)하는 데에만 이용되어 왔다.

Box와 Hunter(1961)는 선명도 R을 가진 모든 부분요인실험에서 (R-1)개의 요인으로 투영 시켰을 때 결과로 얻어지는 계획은 반드시 완전실험계획이 됨을 밝혔다. PB 계획 등 비정규계획에서도 이와 유사한 성질들을 구해낼 수 있다. Lin과 Draper(1992), Hamada와 Wu(1992) 등은 투영을 통해 교호작용 중 일부를 실험횟수를 추가시킴 없이 추정할 수 있고 자료 분석에도 도움을 줄 수 있다는 것을 밝혔다. 이러한 결과는 투영의 문제를 부분적으로는 해결하였지만 교락 구조에 대한

1) Associated Professor, Department of Statistics, Yonsei University, Wonju City, Kangwon-Do, 220-710, Korea.

2) UNIBOSS Consulting Ltd., Seoul, Korea 150-010

설명으로는 불충분하였다.

이러한 문제를 해결하기 위해 본 논문에서는 Pistone과 Wynn(1996)이 제시한 대수기하적 접근 방법을 통하여 교락문제를 재조명하였다. 이 방법의 기본 개념은 실험계획의 각 처리조합을 어파인 다양체(affine variety) 즉, 다항방정식들의 해의 집합으로 보고, 이 방정식들에 대해 특별한 성질을 가진 그뢰브너(Gröbner) 기저(basis)(이하 G-기저)를 이용하여 추정가능한 모형을 이끌어 내 고자 한 것이다. 이 같은 방법은 실험계획에서 처리조합을 직접적으로 다루는 것을 피하고, 간접적으로 처리조합을 해로하는 다항식을 이용한다는 점과 실험 계획이 가지고 있는 구조적인 설명을 G-기저를 통해 쉽게 할 수 있다는 장점이 있다. G-기저를 구하기 위한 프로그램으로는 이탈리아 수학자들에 의해 만들어진 CoCoA(Computations in Commutative Algebra; 참조 cocoa@dima.unige.it)를 이용하였다. 이러한 대수기하적 방법은 통계학 전반에 확대 활용되고 있다.

이에 본 논문은 실험계획의 대수기하학적 접근 방법에 대해 간단히 살펴보고, 12-run PB 계획에서 $k=3, 4, 5, 6$ 개의 요인으로 투영했을 때의 추정 가능한 모형들을 이 방법을 이용하여 찾아보 고자 한다.

2. 실험계획의 대수기하학적 접근

이번 장에서는 Cox, Little과 O'Shea(1992) 등을 참조하여 기본적인 대수기하학을 정리한다. m 개의 요인을 가진 실험계획에서 모든 처리조합의 집합은 m -차원 벡터들로 구성된 affine 공간이라 할 수 있다. 각각의 처리조합은 이 공간 내의 점이 된다. 따라서 실험계획은 이 점들의 집합이라 할 수 있다. 이를 바탕으로 m 개의 요인을 갖고 n 번 실험한 계획 D 를 다음과 같이 표기하자.

$$D = \{x^{(1)}, \dots, x^{(n)}; \text{ 여기서 } x = (x_1, \dots, x_m)\}$$

$d(x)$ 를 이 점들을 해로하는 다항식이라 하면 D 를 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$D = \{x : d(x) = 0\}$$

이와 같은 다항식의 해들의 집합을 다양체라고 한다. 쉬운 예로서 한 실험점 $x = (a_1, \dots, a_m)$ 은 다항식

$$x_1 - a_1, x_2 - a_2, \dots, x_m - a_m$$

의 다양체(variety)가 된다.

또한 D 상에서 0을 만족하는 모든 다항식들의 집합, 다시 말해서 다양체를 해로 갖는 모든 다항식의 집합을 다음과 같이 정의하고

$$I(D) = \{f(x) : f(x) = 0, \forall x \in D\}$$

아이디얼(ideal)이라고 부른다. 일반적으로 아이디얼은 아래의 성질들을 만족한다.

- ① $0 \in I$
- ② $f, g \in I$ 이면, $f + g \in I$
- ③ $f \in I$ 이고 $h \in k[x_1, \dots, x_n]$ 이면, $hf \in I$ 이다.

여기서 $k[x_1, \dots, x_n]$ 는 임의의 체(field) k 내의 계수들(coefficients)을 갖는 다항식의 집합을 말한다. 위에서 볼 수 있듯이 아이디얼은 선형대수의 부분공간(subspace)과 유사하다는 것을 알 수

있다. 아이디얼은 다항식 f_1, \dots, f_s 에 의해 생성(generated)되고 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\langle f_1, \dots, f_s \rangle = \left\{ \sum_{i=1}^s h_i f_i : h_1, \dots, h_s \in k[x_1, \dots, x_n] \right\}$$

여기서 f_1, \dots, f_s 를 기저라 한다.

대수기하학적 접근이란 공간 내의 점들 즉, 기하학적 대상인 다양체에 대한 문제를 다항식을 매개로 하여 아이디얼 즉, 대수적 문제로 전환하고자 한 것이라 할 수 있다. 실험계획의 경우에 적용시켜 보자. 예를 들어 2^2 -요인실험의 경우 모든 처리조합과 이에 대응하는 다양체, 아이디얼을 <표 1>에서 정리하였다. 2^2 -요인실험의 각 처리조합을 2-차원 어파인 공간 내의 네 개의 점으로 생각하면, 이 네 개의 점들은 각각 <표 1>의 다양체 및 아이디얼로 표현될 수 있다. $V(I)$ 는 아이디얼 I 에 의해 정의된 다양체를 말한다. 여기서 2^2 -완전요인실험은 네 점의 합집합으로 구성된다. 이에 대한 다양체는 각 다양체의 합집합으로, 또한 아이디얼은 각 아이디얼의 교집합으로 표현되어 <표 1>의 마지막 행과 같이 나타난다.

<표 1> 2^2 -요인실험의 다양체와 아이디얼

처 리 조 합	다 양 체	아 이 디 얼
(1, 1)	$V(x_1 - 1, x_2 - 1)$	$\langle x_1 - 1, x_2 - 1 \rangle$
(1, -1)	$V(x_1 - 1, x_2 + 1)$	$\langle x_1 - 1, x_2 + 1 \rangle$
(-1, 1)	$V(x_1 + 1, x_2 - 1)$	$\langle x_1 + 1, x_2 - 1 \rangle$
(-1, -1)	$V(x_1 + 1, x_2 + 1)$	$\langle x_1 + 1, x_2 + 1 \rangle$
2^2 -완전 요인실험	$V(x_1^2 - 1, x_2^2 - 1)$	$\langle x_1^2 - 1, x_2^2 - 1 \rangle$

임의의 다항식 f 가 아이디얼 $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$ 에 속하는지 결정하는 문제 등 여러 관련 문제들은 나누는 순서와 관련되어 있다. 불행하게도 단항식에서의 나누기와는 다르게 모든 기저에 대한 일반적인 나누기 알고리즘은 존재하지 않는다. 따라서, 다항식을 나누는 순서에 따라 다른 결과를 나타낼 수 있기 때문에 어떤 특별한 성질을 지닌 기저를 필요로 한다. 우선 최고차항(leading term)을 소거해 나가는 나누기 방법을 생각할 수 있는 데 이 경우 무엇이 최고차항이냐를 결정짓기 위해 단항식의 순서를 정할 필요가 있다. 본 논문에서는 대표적으로 이용되는 사전식 순서(lexicographic order: lex), 차수가 붙은 사전식 순서(graded lexicographic order: grelex), 차수가 붙은 역 사전식 순서(graded reverse lexicographic order: grevlex)를 이용하였다. 예를 들어 총차수가 2보다 작거나 같은 단항식에 대해서 변수들(indeterminates)의 기본 단항식 순서를 $x > y > z$ 로 하면, lex 순서는 다음과 같이 결정되고,

$$x^2 > xy > xz > x > y^2 > yz > y > z^2 > z > 1$$

grelex 순서는 다음과 같이 된다.

$$x^2 > xy > y^2 > xz > yz > z^2 > x > y > z > 1$$

이제 G-기저를 정의하자. G-기저란 정해진 단항식 순서 아래서 아이디얼 I의 유한 부분집합 $G = \{g_1, \dots, g_s\}$ 가 아래 식을 만족하면, G를 G-기저라고 한다.

$$\langle LT(g_1), \dots, LT(g_s) \rangle = \langle LT(I) \rangle$$

여기서 $LT(I)$ 는 정해진 단항식 순서 하에서 아이디얼을 구성하고 있는 다항식의 최고차항을 말한다. 예를 들어, $g_1 = x^3 - 2xy$, $g_2 = x^2y - 2y^2 + x$ 에 의해 생성된 아이디얼 I를 고려해 보자. lex 순서에서 $y(x^3 - 2xy) - x(x^2y - 2y^2 + x) = -x^2$ 이므로 $-x^2$ 는 이 아이디얼의 한 원소다. 하지만 $LT(g_1) = x^3$, $LT(g_2) = x^2y$ 는 $LT(I) = x^2$ 를 나누지 못하기 때문에 $LT(I) = x^2$ 를 생성하지 못한다. 즉 $\langle g_1, g_2 \rangle$ 는 G-기저가 아니다. lex 순서에서 G-기저는 다음과 같다.

$$G = \{g'_1 = xy, g'_2 = x^2, g'_3 = 2y - x\}$$

G-기저는 특별한 성질을 가지고 있다. 첫째로, $G = \{g_1, \dots, g_s\}$ 가 아이디얼 $I \subset k[x_1, \dots, x_n]$ 의 G-기저라 하고 다항식 $f \in k[x_1, \dots, x_n]$ 라 하면, $f = \sum_{i=1}^s q_i g_i + r$ 을 만족하는 나머지 $r \in k[x_1, \dots, x_n]$ 은 유일하게 존재한다. 이때 나머지 r을 아이디얼 I에 대한 f의 정규형(normal form)이라 한다. 만일 나머지가 0이라면 이것은 $f \in I$ 이기 위한 필요충분조건이 된다. 그러나, G-기저도 구성하는 원소의 순서, 즉 g_i 의 순서를 달리하면 나머지는 변하지 않을 지라도 몫 q_i 는 달라진다. 둘째로, 나머지 r의 어떤 항도 $LT(g_1), \dots, LT(g_s)$ 에 의해 나뉘지지 않는다. 마지막으로 단항식 순서를 정하는 데에 따라 최고차항이 달라지기 때문에, 순서를 달리 정의하면 G-기저 또한 달라질 수 있다.

<표 2>의 2^{6-3} -부분실험에서 앞의 예와 같은 방법으로 아이디얼을 구성하고, CoCoA를 이용하여 lex 순서로 G-기저를 구한 결과 다음과 같았다.

$$\langle x_6 - x_1 x_2 x_3, x_5 + x_2 x_3, x_4 + x_1 x_2, x_3^2 - 1, x_2^2 - 1, x_1^2 - 1 \rangle$$

위의 G-기저를 보면 이 디자인이 어떻게 구성되어 있는지 명확하게 알 수 있다. 결과를 보면 요인 x_4, x_5, x_6 가 다음과 같이 교락되어 있는 계획임을 알 수 있다.

$$x_4 = -x_1 x_2, \quad x_5 = -x_2 x_3, \quad x_6 = x_1 x_2 x_3$$

실제로 <표 2>는 정의관계식 $I = 1236 = -235 = -124$ 에 의한 정규 2^{6-3} -부분요인실험이다. 위의 결과로부터 G-기저를 이용하여 계획을 분석할 경우 쉽고 정확하게 구조를 파악할 수 있음을 알 수 있다.

3. 모형의 추정 가능 함수와 Fan 실험계획

본 절에서는 주어진 실험계획에 대한 추정 가능한 모형을 찾는 데 G-기저 이론이 어떻게 이용될 수 있는 지에 관해 설명하고자 한다. $I \subset k[x_1, \dots, x_n]$ 를 아이디얼이라 하고, $f, g \in k[x_1, \dots, x_n]$ 을 다항식이라 하자. 이때 $f - g \in I$ 이면 f, g 는 모듈 I에 관하여 합동

<표 2> 2^{6-3} -부분요인실험

1	-1	-1	1	-1	1
1	1	-1	-1	1	-1
1	1	1	-1	-1	1
-1	1	1	1	-1	-1
1	-1	1	1	1	-1
-1	1	-1	1	1	1
-1	-1	1	-1	1	1
-1	-1	-1	-1	-1	-1

(congruent modulo I)이라 하고 $f \equiv g \pmod I$ 로 표기하자. 모듈 I에 관해 합동인 다항식들은 $k[x_1, \dots, x_n]$ 에서 동치 관계에 있다. 이 같은 동치 관계로 인해서 $k[x_1, \dots, x_n]$ 의 다항식들은 아이디얼에 대해서 동치류(equivalence class)라 하는 다항식의 부분집합들로 분할된다. 여기서 임의의 다항식 $f \in k[x_1, \dots, x_n]$ 에 대해서 모듈 I에 관해 합동인 다항식들의 집합을 f의 류(class)라 하고, 아래와 같이 표기한다.

$$[f] = \{g \in k[x_1, \dots, x_n] : g \equiv f \pmod I\}$$

특히 $I = I(V)$ 가 다양체의 아이디얼인 경우, $f \equiv g \pmod I(V)$ 는 f와 g가 다양체 V 상에서 같은 함수를 정의한다는 것에 대한 필요충분조건이 된다. 다시 말하면, 다양체 V 상에서 같은 함수를 정의하는 다항식들은 모듈 $I(V)$ 에 관해 합동 관계에 있는 다항식들의 동치류들과 일대일 대응관계에 있다. 결국 다양체 상에서 같은 함수를 정의하는 다항식들은 다양체의 아이디얼에 대해 합동인 동치류를 통해 알 수 있다.

$$k[x_1, \dots, x_n]/I = \{[f] : f \in k[x_1, \dots, x_n]\}$$

m개의 요인을 갖고 n번 실험한 계획에서 단항식 순서 τ 를 결정하고 이 디자인에 대한 G-기저를 다음과 같이 정의하자.

$$G_\tau = \{g_1(x), \dots, g_s(x)\}$$

그러면, 일반적인 다항식 모형 $f(x)$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$f(x) = \sum_{j=1}^s s_j(x)g_j(x) + r(x)$$

이 때 주어진 G-기저는 나머지 $r(x)$ 를 유일하게 결정하기 때문에 나머지에 따라서 다항식들을 분할할 수 있다. 또한, 모든 $x^{(i)} \in D$ 에 대해서 $g_j(x^{(i)}) = 0$ 이므로, 다음을 만족한다.

$$f(x^{(i)}) = r(x^{(i)}) \quad (i = 1, \dots, n)$$

또한 두 다항식 $f_1(x), f_2(x)$ 가 모든 $x^{(i)} \in D$ 에 대해서 $f_1(x^{(i)}) = f_2(x^{(i)})$ 을 만족하면, 즉

두 다항식의 나머지가 같은 경우 두 다항식 $f_1(x), f_2(x)$ 은 D 와 G_r 에 대해 교락되어 있다고 한다. 교락되어 있는 모든 다항식들은 $k[x_1, \dots, x_m]/I(D)$ 에 속하게 된다. 이때 G -기저의 최고차항으로 나누어지지 않는 단항식들은 $k[x_1, \dots, x_m]/I(D)$ 의 기저가 된다.

중요한 사실은 G -기저의 최고차항들에 의해 나누어지지 않는 단항식들의 수는 계획의 실험횟수와 같기 때문에 이 단항식들의 선형결합으로 나타나는 다항식 모형은 포화모형(saturated model) 이 된다 (Pistone과 Wynn(1996) 참조). 예를 들어, $(0, 0), (1, 0), (0, 1), (1, 1)$ 네 개의 점으로 구성된 2^2 -완전요인실험을 고려해 보자. 이 계획에 대한 G -기저의 최고차항들은 x_1^2, x_2^2 이므로 $k[x_1, x_2]/I(D)$ 의 기저는 $\{1, x_1, x_2, x_1x_2\}$ 가 된다. 여기서 이 계획에 대한 추정 가능한 모형은 이 단항식 항들의 선형결합으로 나타난다. 이때 이 모형에 대한 계획 행렬을 구하면 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

이 계획 행렬은 정칙(non-singular) 행렬이기 때문에 해가 존재함을 확인할 수 있다. 결국 이 디자인에서 추정 가능한 모형은 다음과 같이 된다.

$$y = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_1 x_2$$

위의 다항식 모형으로부터 2^2 -완전요인실험에서는 두 요인의 주효과와 교호작용효과를 추정할 수 있음을 알 수 있다.

지금까지 주어진 계획에서의 추정 가능한 모형에 대하여 설명하였다. 그러나 이 모형들은 G -기저의 선택에 영향을 받는다. 이는 곧 이 모형들이 단항식 순서를 어떻게 결정하느냐에 따라 달라질 수 있음을 의미한다. 따라서 본 절에서는 가능한 단항식 순서에 따라 결정될 수 있는 모든 추정 가능한 모형들에 대해서 설명하고자 한다. 계획 D 와 단항식 순서 τ 에 대해 $E_{D,\tau}$ 를 다음과 같이 정의하자.

$$E_{D,\tau} = \{ \forall g_i \in G_r, LT(g_i) \text{로 나누어지지 않는 모든 다항식} \}$$

$E_{D,\tau}$ 는 순서 아이디얼(order ideal)이라 부르는 데 다음의 두 조건을 만족한다.

- ① $E_{D,\tau}$ 는 단항식 항들의 유한 집합(finite set)이다.
- ② $x^\alpha \in E_{D,\tau}$ 이고 x^β 가 x^α 를 나눈다면, $x^\beta \in E_{D,\tau}$ 를 만족한다.

특히 ②의 조건을 나누기 조건(divisibility condition) 또는 D-조건이라 한다. $E_{D,\tau}$ 는 추정 가능한 주효과 및 교호작용의 한 집합체로서 단항식 순서에 영향을 받는다. 따라서 단항식 순서에 따라 $E_{D,\tau}$ 는 다른 단항식항들을 가질 수 있다. 이때 모든 가능한 $E_{D,\tau}$ 의 집합을 D 의 팬(fan)이라고 하고 각각의 구성 원소가 되는 $E_{D,\tau}$ 를 잎(leaf)이라고 한다. 즉 두 단항식 순서 τ_1 과 τ_2 에 대해서 E_{D,τ_1} 와 E_{D,τ_2} 가 다른 항들을 가질 때, 각각은 다른 잎이 되지만 경우에 따라 $E_{D,\tau_1} = E_{D,\tau_2}$ 이면, 두 단항식 순서에 대해서 같은 잎에 속하게 된다. 예를 들어, 다음의 3^{4-2} 부분요인실험의 처리조합을 고려해 보자.

-1	-1	-1	-1
-1	0	0	0
-1	1	1	1
0	-1	0	1
0	0	1	-1
0	1	-1	0
1	-1	1	0
1	0	-1	1
1	1	0	-1

기본순서를 $x_4 > x_3 > x_2 > x_1$ 로 하고, 단항식 순서를 lex, grelex로 하여 G-기저의 최고차항 및 다항식 모형을 구한 결과는 아래와 같았다. 따라서 이 계획은 적어도 두 개의 다른 점이 존재한다. 그리고 lex 순서일 때, x_1 과 x_2 두 요인의 주효과와 교호작용효과를 추정할 수 있는 모형과 grelex 순서일 때, 네 가지 요인의 주효과와 두 개의 교호작용효과를 추정할 수 있는 모형을 제시하는 계획이 된다.

lex 순서	최고 차항	$\{ x_4, x_3, x_2^3, x_1^3 \}$
	단항식 항	$\{ 1, x_1, x_1^2, x_2, x_2^2, x_1x_2, x_1^2x_2, x_1x_2^2, x_1^2x_2^2 \}$
grelex 순서	최고 차항	$\{ x_4^2, x_4x_3, x_3^2, x_4x_2, x_3x_2, x_4x_1, x_3x_1^2, x_2^3, x_2^2x_1, x_2x_1^2, x_1^3 \}$
	단항식 항	$\{ 1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_1x_2, x_2^2, x_1^2, x_1x_3 \}$

$$E_{D, lex} = \{ 1, x_1, x_1^2, x_2, x_2^2, x_1x_2, x_1^2x_2, x_1x_2^2, x_1^2x_2^2 \}$$

$$E_{D, grelex} = \{ 1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_1x_2, x_2^2, x_1^2, x_3x_1 \}$$

D-조건을 만족하고 n 개의 단항식항으로 구성된 모든 다항식 모형들을 n 개의 점으로 구성된 계획으로 추정할 수 있다면, 이 디자인을 최대 팬 계획(maximal fan design)이라 한다. 예를 들어, D-조건을 만족하면서 세 개의 항으로 구성되어 있는 2-차원 모형은 세 가지 모형 $\{1, x_1, x_1^2\}$, $\{1, x_2, x_2^2\}$, $\{1, x_1, x_1x_2\}$ 이 전부이다. 이에 대해 계획 $D = \{(0, 0), (1, 1), (3, 2)\}$ 를 고려해보자. 단항식 순서에 따라 이 계획에서 가능한 2-차원 다항식 모형을 정리하면 다음과 같다.

- ① $x_2 > x_1$ 이고 lex 순서일 때, $\{1, x_1, x_1^2\}$
- ② grelex 순서일 때, $\{1, x_1, x_1x_2\}$
- ③ $x_1 > x_2$ 이고 lex 순서일 때, $\{1, x_2, x_2^2\}$

위에서 보는 바와 같이 가능한 세 가지 모형을 추정할 수 있다. 따라서 이 계획은 최대 팬이 된다. 반면에 팬이 단지 하나의 잎만을 갖는 계획을 최소 팬 (minimal fan) 계획이라고 한다. 예를 들어 완전요인실험은 어떠한 단항식 순서에서도 하나의 잎을 가지기 때문에 완전요인실험은 최소 팬이 된다. 하나의 모형만을 추정할 수 있는 것보다는 여러 모형을 추정할 수 있는 계획이 보다 효율적이라는 생각에서 최대 팬 계획을 찾는 것이 주요 과제이다.

6. Plackett-Burman 계획의 fan

다음 <표 3>은 12-run PB계획이다. 이 계획은 주효과와 2-요인 교호작용효과의 교락계수 값이 1/3 또는 -1/3인 계획으로, 복잡한 교락구조로 인해 전통적으로 주효과만을 선별하는 데에만 이용되어 왔다.

<표 3> 12-run PB계획

run	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	+	+	-	+	+	+	-	-	-	+	-
2	-	+	+	-	+	+	+	-	-	-	+
3	+	-	+	+	-	+	+	+	-	-	-
4	-	+	-	+	+	-	+	+	+	-	-
5	-	-	+	-	+	+	-	+	+	+	-
6	-	-	-	+	-	+	+	-	+	+	+
7	+	-	-	-	+	-	+	+	-	+	+
8	+	+	-	-	-	+	-	+	+	-	+
9	+	+	+	-	-	-	+	-	+	+	-
10	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+	+
11	+	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+
12	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

숨겨진 투영성질(hidden projection property)이란 투영된 계획이 적당한 선명도나 처리조합을 갖지 않고 있어도, 갖고 있는 것과 같이 교호작용효과를 추정할 수 있는 경우를 말한다. 따라서 이 투영성질을 이용하면 PB 계획을 지금까지와는 달리 보다 효율적으로 이용할 수 있을 것이다. 이 투영성질을 이용하여 PB 계획을 n 개의 요인에 투영했을 때 추정 가능한 모형을 대수기하학적으로 접근하여 찾아보고, 기존의 결과와 비교하고자 한다. 또한 최대 팬 디자인이 되는 경우를 찾아보겠다. $k=3, 4, 5, 6$ 요인에 투영된 각 계획에 대해 먼저 D-조건을 만족하는 모든 다항식 모형을 제시하고, 실제로 프로그램을 통해 얻은 결과는 표로써 나타내었다.

(1) 3-요인에 투영할 경우 :

12행 PB 계획에서 임의의 3-열을 선택하면 두 부분으로 구성된다. 하나는 2^3 -완전요인실험에 해당하는 8개의 점이고, 다른 하나는 2^{3-1} 부분 요인실험에 해당하는 4개의 점이다. 따라서 <표

4>에서 보듯 3-요인 투영일 때 PB 계획은 세 개의 주요인효과, 세 개의 2-요인효과, 그리고 한 개의 3-요인효과를 가진 모형을 추정할 수 있다.

<표 4> 3-요인 투영일 때의 추정 가능한 모형

lex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2\}$
grelex	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3, x_1x_2x_3\}$
grevlex		

(2) 4-요인 투영일 경우 :

계획에서 임의로 4개의 열을 선택하면 한 종류의 12개 행 가운데 두 행이 같은 처리조합을 갖게 되어 결국 11개의 행만이 남는다. D-조건을 만족하면서 11개의 항으로 구성될 수 있는 다항식 모형은 다음과 같은 두 가지 경우밖에 존재하지 않는다.

- ① 네 개의 주효과와 여섯 개의 2-요인 교호작용효과를 갖는 모형
- ② 네 개의 주효과, 다섯 개의 2-요인 교호작용효과 그리고, 한 개의 3-요인 교호작용효과를 갖는 모형

<표 5>에서 볼 수 있듯이 4-요인 투영일 경우에는 ①과 ②의 모형을 모두 추정할 수 있다. PB 계획의 경우 숨겨진 투영성질이 있어서 네 개의 요인에 투영하면 추가실험 없이도 모든 여섯 개의 교호작용효과까지도 추정할 수 있다. 즉 lex 순서일 때는 네 개의 주효과와 네 개의 2-요인 교호작용효과 그리고, 한 개의 3-요인 교호작용효과를 갖는 모형이 추정가능하며, grelex 순서일 때는 네 개의 주효과 및 모든 가능한 교호작용효과를 가진 모형이 추정가능하다. 따라서 이 디자인은 최대 팬 계획이 된다.

<표 5> 4-요인 투영일 때의 추정 가능한 모형

lex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_1x_2, x_1x_3x_4\}$
	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_1x_3, x_1x_4, x_2x_3, x_2x_4, x_3x_4, x_2x_3x_4\}$
grelex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_1x_2x_3, x_1x_2x_4, x_1x_3x_4, x_2x_3x_4\}$
	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_2x_3, x_2x_4, x_3x_4\}$

(3) 5-요인 투영일 경우 :

계획에서 5개의 열을 선택할 때 두 가지의 계획이 가능하다. 하나는, 예로서 1, 2, 3, 4, 10 열을 선택하면 4-요인 투영일 경우와 마찬가지로 한 개의 행이 같은 처리조합을 갖게 되어 11개 행만 남는 경우이고, 다른 하나는 1에서 5열을 선택할 때와 같이 12개 행이 모두 가능한 경우가 있다.

1) 첫 번째, 11개 행을 갖는 계획에서 가능한 다항식 모형은 다음과 같다.

- ① 네 개의 주효과와 여섯 개의 2-요인 교호작용효과를 갖는 모형
- ② 네 개의 주효과, 다섯 개의 2-요인 교호작용효과, 그리고 한 개의 3-요인 교호작용효과를 갖는 모형
- ③ 다섯 개의 주효과와 다섯 개의 2-요인 교호작용효과를 갖는 모형
- ④ 다섯 개의 주효과, 네 개의 2-요인 교호작용효과, 그리고 한 개의 3-요인 교호작용효과를 갖는 모형

<표 6>의 결과를 보면, 여기서 사용된 단항식 순서에 의해 위에서 제시한 모형 중에 단지 ②와 ③의 모형만이 추정 가능함을 알 수 있다. 따라서 이 계획은 lex 순서일 때 네 개의 주효과, 네 개의 2-요인 교호작용효과 그리고, 한 개의 3-요인 교호작용효과를 추정할 수 있다. 또한 grelex 순서일 때는 다섯 개의 주효과와 다섯 개의 2-요인 교호작용효과를 추정할 수 있다.

2) 두 번째, 12개의 행을 갖는 디자인에서는 다음과 같은 모형이 가능하다.

- ① 네 개의 주효과, 여섯 개의 2-요인 교호작용효과, 그리고 한 개의 3-요인 교호작용효과를 갖는 모형
- ② 네 개의 주효과, 다섯 개의 2-요인 교호작용효과, 그리고 두 개의 3-요인 교호작용효과를 갖는 모형
- ③ 다섯 개의 주효과와 여섯 개의 2-요인 교호작용효과를 갖는 모형
- ④ 다섯 개의 주효과, 다섯 개의 2-요인 교호작용효과, 그리고 한 개의 3-요인 교호작용효과를 갖는 모형

계획에서 1, 2, 3, 10, 11열을 선택하면 grevlex 순서에서 $LT(G)$ 는 <표 6>의 결과와 약간 다르다.

$$LT(G) = \{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_1x_2, x_1x_3, x_2x_3, x_2x_4, x_1x_4x_5, x_3x_4x_5\}$$

하지만, E 는 같아서 추정 가능한 모형은 변함이 없다. <표 7>을 보면 앞에서 제시한 모형 중 ③과 ④의 모형만이 추정 가능하다. 따라서 5-요인 투영일 때 두 번째 계획에서는 lex 순서에서 다섯 개의 주효과와 다섯 개의 2-요인 교호작용효과 그리고, 한 개의 3-요인 교호작용효과를 추정할 수 있다. 또한 grelex 및 grevlex 순서에서는 다섯 개의 주효과와 여섯 개의 2-요인 교호작용효과를 추정할 수 있다.

(4) 6-요인 투영일 경우 :

계획에서 여섯 개의 열을 선택할 경우 두 가지의 다른 구조를 갖는 계획이 가능하다. 그러나 모두 12개의 행을 갖기 때문에 D-조건을 만족하면서 12개 항을 가지고 있는 다항식 모형은 변함이 없다. 모형들은 다음과 같다.

- ①~④ 5-요인 투영에서 두 번째 12개 행을 갖는 계획과 같다.
- ⑤ 여섯 개의 주효과와 다섯 개의 2-요인 교호작용효과를 갖는 모형
- ⑥ 여섯 개의 주효과, 네 개의 2-요인교호작용효과, 그리고 한 개의 3-요인 교호작용효과를 갖는 모형

<표 6> 5-요인 투영일 때의 추정 가능한 모형(1)

lex	$LT(G)$	$\{x_1, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_2x_3, x_2x_4x_5\}$
	E	$\{1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_2x_4, x_2x_5, x_3x_4, x_3x_5, x_4x_5, x_3x_4x_5\}$
grelex grevlex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_1x_5, x_2x_3, x_2x_4x_5, x_3x_4x_5\}$
	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_2x_4, x_2x_5, x_3x_4, x_3x_5, x_4x_5\}$

<표 7> 5-요인 투영일 때의 추정 가능한 모형(2)

lex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_1x_5, x_2x_3, x_2x_4x_5\}$
	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_2x_4, x_2x_5, x_3x_4, x_3x_5, x_4x_5, x_3x_4x_5\}$
grelex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_1x_5, x_2x_3x_4, x_2x_3x_5, x_2x_4x_5, x_3x_4x_5\}$
	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_2x_3, x_2x_4, x_2x_5, x_3x_4, x_3x_5, x_4x_5\}$
grevlex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_2x_3, x_2x_4x_5, x_3x_4x_5\}$
	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_1x_5, x_2x_4, x_2x_5, x_3x_4, x_3x_5, x_4x_5\}$

<표 8> 6-요인 투영일 때의 추정 가능한 모형

lex	$LT(G)$	$\{x_1, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_6^2, x_2x_3, x_2x_4, x_2x_5, x_2x_6, x_3x_4, x_3x_5x_6\}$
	E	$\{1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_3x_5, x_3x_6, x_4x_5, x_4x_6, x_5x_6, x_4x_5x_6\}$
grelex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_6^2, x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_1x_5, x_1x_6, x_2x_3, x_2x_4, x_2x_5, x_2x_6, x_3x_4, x_3x_4x_6, x_4x_5x_6\}$
	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_3x_5, x_3x_6, x_4x_5, x_4x_6, x_5x_6\}$
grevlex	$LT(G)$	$\{x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_6^2, x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_1x_5, x_1x_6, x_2x_3, x_2x_4, x_2x_5, x_3x_4, x_3x_5, x_4x_5x_6\}$
	E	$\{1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_2x_6, x_3x_6, x_4x_5, x_4x_6, x_5x_6\}$

6-요인 투영일 때, 예로서 1에서 6열을 선택할 때와 1에서 5열과 7열을 선택할 때와 같이 두 가지 계획이 가능하다. 1에서 6열을 선택할 때의 결과를 <표 8>에 정리하였다. 결과를 보면 위의 모형 중 ④와 ⑤의 모형이 추정 가능하다는 것을 알 수 있다. 즉, lex 순서일 때는 다섯 개의 주효과와 다섯 개의 2-요인 교호작용효과, 그리고 한 개의 3-요인 교호작용효과를 추정할 수 있다. 또한 grelex와 grevlex 순서에서는 여섯 개의 주효과와 다섯 개의 2-요인 교호작용효과를 추정할 수 있다. 그리고, 1에서 5열과 7열을 선택할 때의 결과는 grevlex 순서일 때에 약간의 차이가 있을 뿐 나머지 순서에서는 같은 결과를 얻었다. 두 번째 디자인에서 grevlex 순서일 때의 $LT(G)$ 와 E 는 다음과 같다.

$$LT(G) = \{ x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2, x_5^2, x_6^2, x_1x_2, x_1x_3, x_1x_4, x_1x_5, x_2x_3, x_2x_4, x_2x_5, x_3x_4, x_3x_5, x_4x_5 \}$$

$$E = \{ 1, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_1x_6, x_2x_6, x_3x_6, x_4x_6, x_5x_6 \}$$

위의 결과를 종합적으로 정리하면 다음과 같다.

- (1) 3-요인 투영일 경우는 PB 계획은 최소 팬 계획이 된다.
- (2) 4-요인 투영일 경우, D-조건을 만족하는 다항식 모형 ①과 ②를 모두 추정 할 수 있으므로 이 계획은 최대 팬 계획이 된다. 그리고, Wang과 Jeff Wu(1995)도 ②의 모형이 추정 가능함을 밝히고 있다. 위의 결과에 의하면 3-요인 교호작용효과도 추정 가능함을 알 수 있다.
- (3) 5-요인 투영일 경우, 첫 번째 계획에서는 ②와 ③의 모형이 추정 가능하다는 결과를 얻을 수 있었다. 또한, Wang과 Wu는 ③의 모형이 추정 가능하다 밝히고 있다. 두 번째 계획에서는 ③과 ④의 모형이 추정 가능하다. Wang과 Wu는 이 계획에서 ③의 모형이 추정 가능함을 밝혔다.
- (4) 6-요인 투영일 경우, 두 계획 모두 ④와 ⑤의 모형이 추정 가능하다. 그리고, Wang과 Wu는 ⑤ 모형의 추정 가능성을 확인하였다.

참 고 문 헌

- [1] Box, G.E.P. and Hunter, J.S. (1961). The 2^{k-p} fractional factorial designs. *Technometrics*, 3, 311-351, 449-458.
- [2] Cox, D., Little, J., and O'Shea, D. (1992). *Ideal, Varieties, and Algorithms*, Springer-Verlag, New York.
- [3] Hamada, M and Wu, C.F.J. (1992). Analysis of designed experiments with complex aliasing. *Journal of Quality Technology*, 24, 130-137.
- [4] Lin, D.K.J. and Draper, N.R. (1992). Projection properties of Plackett and Burman designs. *Technometrics*, 34, 423-428.
- [5] Pistone, G. and Wynn, H. P. (1996). Generalized confounding with Gröbner bases, *Biometrika*, 83, 653-666.
- [6] Plackett, R. L. and Burman, J. P. (1946) The design of optimum multifactorial experiments, *Biometrika*, 33, 305-325.
- [7] Wang, J. C. and Jeff Wu, C. F. (1995) A hidden projection property of Plackett-Burman and related designs, *Statistica Sinica*, 5, 235-250.