



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

이 우 선 교수지도

석사학위청구논문

확장된 구형실험구역을 이용한
3-수준 반응표면설계

2011

성신여자대학교 대학원

통 계 학 과

김 하 안

확장된 구형실험구역을 이용한
3-수준 반응표면설계

이 우 선 교수지도

이 논문을 석사학위논문으로 제출함

2010년 11월

성신여자대학교 대학원

통 계 학 과

김 하 안

인 준 서

김하얀의 석사학위 논문으로 인준함.

심사위원 _____ 인

심사위원 _____ 인

심사위원 _____ 인

성신여자대학교 대학원

논문개요

반응표면 방법론은 어떤 생산공정을 개선하거나 최적화 하는데 이용되는 아주 유용한 통계적 방법이다. 이 방법은 기존 제품이나 서비스의 품질을 개선할 뿐만 아니라 새로운 제품의 계획과 개발 그리고 생산공정의 최적화에 응용될 수 있다. 이러한 이유로 반응표면 방법론은 산업현장에 주로 응용되며 실제로 제품의 품질에 영향을 주는 여러 생산 변수들의 최적조건을 찾는 작업은 제품생산에서 필수적인 생산 공정의 일부이다. 이러한 최적조건을 추정하기 위하여 최적조건이 있으리라 예상되는 실험구역을 탐색하여 실험을 실시한다. 그런데 이 실험구역은 과학이론의 근거, 실험의 환경의 제약 그리고 연구자의 선택 등으로 그 모습이 다양하게 달라질 수 있다. 따라서 이처럼 다양한 실험구역에 적합한 반응표면 설계가 필요하다. 반응표면 설계는 실험구역의 모양에 따라 보통 둥그런 모양의 “구형설계”와 육면체 모양의 “입방형설계”로 구분한다. 이 중에서도 구형설계는 회전성 혹은 근사회전성을 만족하는 특징이 있어 회전성을 확보하기 위해서는 실험구역이 둥그런 모양의 구형이어야 한다. 반응표면 방법론에서 가장 많이 사용되는 중심합성설계는 실험구역이 구형이고 5-수준인 실험설계이다. 이 때, 축점의 α 값을 $\alpha = \sqrt{k}$ 대신 $\alpha = 1$ 로 조정하면 5-수준이 아닌 3-수준 입방형 중심합성설계를 얻을 수 있다. 그러나 입방형 중심합성설계는 실험구역이 구형이 아니므로 회전성을 만족하지 못하는 문제가 있다. 이러한 이유로, 변수들의 수준 수를 3으로 제한하면서 실험구역은 구형인 실험설계가 필요할 때가 많다. 이에 대한 대표적 실험설계가 바로 박스-벤켄 실험설계이다. 이 박스-벤켄 실험설계는 2차 반응표면을 추정하기 위한 3-수준 실험설계로 매우 효과적인 방법으로 알려져 있다. 이 실험설계의 구성은 균형된 불

완비블록 구성방법을 이용하며 실험구역이 동그란 모양의 구형설계 이므로 회전성을 만족한다. 그러나 이 실험설계의 특징은 변수의 개수가 증가해도 실험구역의 크기는 상대적으로 커지지 않고 좁다는 점이다. 특히 실험구역의 중심보다 가장 자리에 대한 예측에 관심이 많을 경우, 변수의 개수에 비례하여 실험구역이 커지는 실험설계를 고려할 수 있다. 이러한 점들을 고려하여, 본 논문은 3-수준 실험의 경우, 입방형설계에 비하여 실험구역이 좁은 박스-벤켄 실험설계를 보완하여 구형설계를 만족하면서도 변수 수가 증가하면 실험구역이 변수 수에 따라 넓어지는 확장된 3-수준 구형 반응표면 방법론을 제안하였다. 아울러 예제를 통하여 새로운 3-수준 반응표면 방법론에 대한 실험설계와 분석과정을 가상자료를 이용하여 보여주고 있다.

목 차

논문 개요

제 1 장. 서론	1
제 2 장. 3-수준 반응표면 설계	3
2.1. 반응표면설계에 대한 평가기준	3
2.1.1 회전성	4
2.1.2 직교성	6
2.2. 3-수준 중심합성설계	6
2.2.1. 구성방법	6
2.2.2. 실험설계의 특징	8
2.3. 박스-벤켄 설계	10
2.3.1. 구성방법	10
2.3.2. 실험설계의 특징	12
2.4. 3-수준 확장 구형 설계	15
2.4.1. 구성방법	15
2.4.2. 실험설계의 특징	19
2.5. 3-수준 CCD, BBD 그리고 3-수준 ESD의 비교	20
제 3 장. 3ESD를 이용한 실험자료분석	23
3.1. 자료설명	23
3.2. 분석결과	25
제 4 장. 결론	32

참 고 문 헌

ABSTRACT

감사의 글

제 1 장 서 론

반응표면 방법론이란 하나 이상의 반응변수와 요인(독립변수)들 간의 관계를 추론 할 뿐만 아니라 더 나아가 반응 값을 최적화(optimization)하는 독립변수들의 수준을 찾기 위해 사용된다. 이를 위한 2^k -요인실험은 각 요인이 2 수준에서만 실험되기 때문에 요인의 수준이 변화하며 발생하는 반응 값의 곡면적인 변화를 알 수 없기 때문에 2차 반응표면식의 제곱 항 x_i^2 의 계수를 추정할 수 없다. 이러한 이유로, 2차 반응표면 식을 추정하기 위한 실험설계로 2^k -요인실험에 축점(axial points), 중심점(center points)을 추가시킨 이른바 중심합성설계(central composite design; CCD)가 널리 쓰이고 있다. 이 실험의 경우 모든 요인들이 각각 5-수준에서 실험 되어 2차 반응표면식의 모든 항의 모수를 추정할 수 있다. 2^k -요인실험은 수준이 2 인데 비해 중심합성설계는 각 요인들마다 $-\alpha, -1, 0, 1, \alpha$ 의 5개의 수준에서 실험을 하게 된다. 그러나 실험 여건의 제약 등으로 실험의 수준을 5개보다 적은, 이를테면 3개의 수준으로 실험을 해야 하는 상황을 생각해 보자.

기존의 중심합성설계를 응용할 경우, α 값을 1로 하면 5-수준 중심합성설계는 수준 수가 3인 3-수준 중심합성설계로 되어 3개의 수준으로 실험할 수 있는 대안이 될 수 있다. 그러나 이 경우, 실험구역이 입방형(cuboidal)이기 때문에 추정된 반응표면식이 우리가 원하는 회전성(rotatability)을 갖지 못하는 문제가 있다. 이 회전성을 만족하면서도 3-수준 실험설계의 대표적 방법으로 박스-벤켄(Box-Behnken)설계를 들 수 있다. 박스-벤켄설계는 동그란 모양의 구형 실험구역을 가지므로 회전성을 만족하며 불완비

블록설계 구성방법을 이용하면 구성이 어렵지 않다. 실험 횟수도 중심합성 설계에 비하여 크게 증가하지 않는 것으로 알려져 있다. 그러나 박스-벤켄 설계는 요인의 수가 증가해도 실험구역이 좁기 때문에 최적 값이 실험 구역 극단 쪽에 있는 경우 정확한 최적 값을 추정하는데 어려움이 있다.

이러한 점들을 고려하여 본 논문은 기존의 3-수준 반응표면설계들을 비교하고 그 중에서도 박스-벤켄 설계의 구성방법과 특징을 응용하여 실험 반경이 박스-벤켄 설계보다 넓으면서도 실험구역이 구형인 확장된 실험구역을 이용한 3-수준 구형실험설계를 제안하고 기존의 실험설계들과 비교하고자 한다. 2장에서는 반응표면설계를 평가하기 위한 여러 기준들을 설명하고 이러한 관점에서 기존의 실험설계들의 특징들을 음미하였다. 아울러 새로 제안한 실험설계가 기존의 방법들과 비교하여 어떠한 특징들이 있는지 비교하였다. 3장에서는 박스-벤켄 설계의 실제자료를 변형한 가상자료를 이용하여 3-수준 확장 구형설계를 이용한 실험설계 자료를 분석하는 과정을 예제를 통하여 보여주고 있다.

제 2 장 3-수준 반응표면설계 (3-Level Response Surface Design)

반응표면 방법론은 하나 이상의 반응변수와 실험 요인들 간의 관계를 볼 뿐만 아니라 더 나아가 반응 값을 최적화(optimize)하는 처리조합 곧 요인들의 수준을 찾기 위해 사용된다. 최적 값이 존재하리라 예상되는 처리조합 구역에서 실험 점들의 반응 값들에 대한 함수식, 이른바 반응표면 식을 구하고 이를 이용하여 반응 값이 최적이 되는 처리조합을 찾는다.¹⁾ 이러한 일련의 과정을 반응표면 설계(response surface design)라 한다. 이 장에서는 특별히 요인의 수준 수가 3인 3-수준 반응표면 설계에 널리 쓰이는 3-수준 중심합성설계와 박스-벤켄 설계에 대해 소개하고, 새로운 3-수준 확장된 구형설계를 소개하여 비교하고자 한다.

2.1 반응표면설계에 대한 평가기준

반응표면 방법론은 실험 자료를 2차 선형모형에 적합 시켜 모수를 추정하고 자료가 모형에 얼마나 잘 적합 되는지를 확인한다. 따라서 2차모형의 계수들을 독립적으로 추정할 수 있어야하고, 아울러 추정된 추정 반응표면식의 분산이 원점으로부터 같은 거리에 있는 실험구역은 전부 같아야 한다. 이러한 두 가지의 조건은 반응표면 방법론의 아주 중요한 판단기준이며 이

1) 이우선(2007), 최신실험설계

를 각각 직교성(orthogonality)과 회전성(rotatability)이라 한다. 이 장에서는 설계의 조건이 어떠한 때 그 설계가 회전성과 직교성을 갖는지에 대해 설명 하고자 한다.

2.1.1 회전성 (Rotatability)

반응표면에 대한 2차 모형(second order model)은 다음과 같다.

$$y_u = \beta_0 + \sum_i \beta_i x_{iu} + \sum_i \beta_{ii} x_{iu}^2 + \sum_i \sum_{i < j} \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + e_u, \quad u = 0, 1, 2, \dots, n \quad (2.1)$$

즉,

$$\underline{y} = X\underline{\beta} + \underline{\epsilon} \quad (2.2)$$

이 때 X 와 $\underline{\beta}$ 는 다음과 같다.

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{k1} & x_{11}^2 & x_{21}^2 & \cdots & x_{k1}^2 & x_{11}x_{21} & x_{11}x_{31} & \cdots & x_{(k-1)1}x_{k1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{k2} & x_{12}^2 & x_{22}^2 & \cdots & x_{k2}^2 & x_{12}x_{22} & x_{12}x_{32} & \cdots & x_{(k-1)2}x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{kn} & x_{1n}^2 & x_{2n}^2 & \cdots & x_{kn}^2 & x_{1n}x_{2n} & x_{1n}x_{3n} & \cdots & x_{(k-1)n}x_{kn} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

$$\underline{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k, \beta_{11}, \dots, \beta_{kk}, \beta_{12}, \dots, \beta_{(k-1)k}) \quad (2.4)$$

이때 원점으로부터 같은 거리에 있는 실험점에 대응하는 추정 반응표면식의 분산이 같아야하기 때문에 이를 만족하는 실험설계가 필요하게 된다. 각 실험점 $(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{k0})$ 이 원점 $(0, 0, \dots, 0)$ 으로부터 떨어져 있는 거리는 다음과 같다.

$$\rho = \sqrt{x_{10}^2 + x_{20}^2 + \cdots + x_{k0}^2} \quad (2.5)$$

원점으로부터 거리가 ρ 인 추정 반응치의 분산, $Var(\hat{y}_0)$ 이 일정하다는 것은 이 값이 방향에는 영향을 받지 않고 중심점으로부터의 거리만의 함수 ($Var(\hat{y}_0) = f(\rho)$)로 나타나게 된다. 이러한 성질을 갖는 실험설계를 회전성을 갖는 실험설계라고 한다.

만일 이러한 조건을 만족하지 못하면, 반응표면 추정 값에 대한 추정치의 분산이 거리뿐만 아니라 방향에도 영향을 받기 때문에 통계적 추론이 복잡하고 어려워진다. 따라서 우리는 회전성을 만족하는 적절한 실험설계를 찾아야 한다. 이 회전성에 관한 연구는 많은 학자들에 의하여 진행되어 왔다. 특히, Box와 Hunter(1957)는 회전성을 갖기 위한 실험설계의 필요충분조건을 다음과 같이 정의하였다. 2)

- (1) 모든 홀수차 적률(odd moments)은 zero(0)이어야 한다.
- (2) 짝수차 적률(even moments)간에는 다음 관계식이 성립되어야 한다.

$$\sum_u x_{iu}^4 - \sum_u x_{iu}^2 x_{ju}^2 = 2 \sum_u x_{iu}^2 x_{ju}^2 \quad (2.6)$$

$$\text{즉,} \quad \sum_u x_{iu}^4 = 3 \sum_u x_{iu}^2 x_{ju}^2 \quad (2.7)$$

$$\text{즉,} \quad [iiii] = 3[iijj] \quad (2.8)$$

2) 박성현(1995), 현대실험계획법

2.1.2 직교성 (Orthogonality)

반응표면실험설계가 직교성을 가지면 반응표면에 대한 2차모형의 회귀계수들의 추정값들이 독립적으로 추정이 가능하다. 2차 모형에 대한 1차항, 교차항 그리고 2차항 계수들이 독립적으로 추정가능하기 위해서는 실험설계의 설계행렬의 조건이 맞아야 한다. 이 직교성을 만족하기 위한 설계행렬의 조건은 다음과 같다.

$$\left(\sum_u x_{iu}^2\right)^2 = n \sum_u x_{iu}^2 x_{ju}^2 \quad (2.9)$$

즉,

$$[ii]^2 = n [iijj] \quad (2.10)$$

2.2 3-수준 중심 합성 설계

(3-level Central Composite Design)

중심합성설계(CCD)는 각 요인들마다 $-\alpha, -1, 0, 1, \alpha$ 의 5개의 수준에서 실험을 하게 된다. 그러나 실험 여건의 제약 등으로 실험의 수준을 5개보다 적은, 이를테면 3개의 수준으로 실험을 해야 하는 상황을 생각해 볼 수 있다. 이러한 경우 적절한 설계법에 대해 살펴보겠다.

2.2.1 구성방법

Box와 Wilson(1951)이 제안한 중심합성설계는 2차 반응표면 식을 적합

하여 추정할 수 있도록 3^k -요인실험 등을 실시하는 방법 대신, 기존의 2^k -요인실험에 중심점(central point)과 축점(axial point)을 추가시킨 형태로 구성된 새로운 실험설계를 제안하였다. 이때, 요인실험으로는 2^k -요인실험 혹은 해상도 5이상인 부분실험을 사용할 수 있다. 여기에 $2k$ 개의 축점 그리고 적절한 개수의 중심점(n_c)이 추가 되는데, 중심점의 개수는 추정 반응표면식의 분산을 고려하여 최소한 3~5개 정도는 필요한 것으로 알려져 있다. 중심점(수준=0)과 2^k -요인실험(수준= ± 1)에 축점(수준= $\pm \alpha$)을 추가하므로 결국 각각의 요인마다 5-수준을 실험하는 결과가 된다. 여기에서 5-수준 중심합성설계를 3-수준 중심합성설계(3-level CCD)로 만들기 위하여 축점 α 값을 $\alpha=1$ 로 조정하면 된다. 이 실험설계를 입방형 중심설계(face centered cube)라고 한다.

한편, CCD를 구성하는 각 부분의 역할은 모두 중요하다. 먼저 요인실험 부분(2^k -요인실험)에서 2^k -요인실험 대신 2^{k-p} -부분실험을 사용할 때 선형효과와 두 요인의 교호작용효과를 추정하기 위해 최소한 해상도 V(resolution V)이상을 사용하여야 한다. 축점과 중심점의 추가로 교호작용항과 2차 항 계수들의 추정이 가능해지고, 특히 축점의 추가는 입방형의 실험구역을 구형으로 만들어 최소한 근사적 회전성을 확보하는 효과도 얻게 된다. 만일 축점이 없다면 2차항의 계수들이 각각 독립적으로 추정되지 못하고 2차항의 합, $\sum_{i=1}^k \beta_{ii}$ 이 추정가능 하게 된다. 물론, 중심점의 추가도 매우 중요하다. 적당한 개수의 중심점의 추가는 순수 오차(pure error)를 추정할 수 있을 뿐만 아니라 축점과 함께 2차항 계수 각각의 β_{ii} 를 추정할 수 있도록 기여한다. 적절한 개수의 중심점의 추가로 추정 반응표면식의 분산을 최적화(variance optimality)하는 결과를 얻을 수 있다.

[표2.1] CCD와 3-수준 CCD

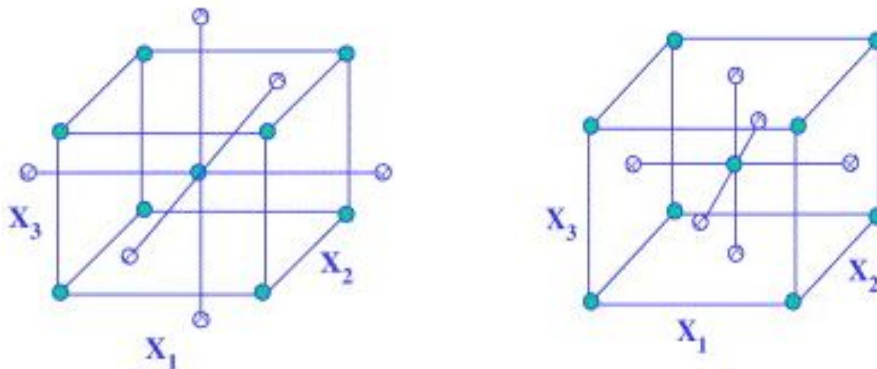
CCD			3-수준 CCD		
x_1	x_2	x_3	x_1	x_2	x_3
-1	-1	-1	-1	-1	-1
1	-1	-1	1	-1	-1
-1	1	-1	-1	1	-1
1	1	-1	1	1	-1
-1	-1	1	-1	-1	1
1	-1	1	1	-1	1
-1	1	1	-1	1	1
1	1	1	1	1	1
$-\alpha$	0	0	-1	0	0
α	0	0	1	0	0
0	$-\alpha$	0	0	-1	0
0	α	0	0	1	0
0	0	$-\alpha$	0	0	-1
0	0	α	0	0	1
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
0	0	0	0	0	0

2.2.1 실험설계의 특징

모든 실험점이 중심점으로부터 같은 거리에 있을 때 이를 구형 중심합성설계(Spherical CCD; SCD)라 한다. 즉 SCD는 $\alpha = \sqrt{k}$ 일 때이므로 실험구

역의 반경(radius)이 \sqrt{k} 가 되며 때문에 요인의 수가 증가하면서 실험구역도 넓어지게 되는 장점이 있다. 중심합성설계의 경우 완벽한 회전성을 만족하기 위해선 $\alpha = \sqrt[4]{F}$ (단 F =요인실험 개수)이다. 따라서 구형 CCD는 회전성 혹은 근사-회전성(near rotatability)을 갖는다는 좋은 성질이 있다.

따라서 실험구역이 구형이면 회전성을 만족하는 실험설계에 가까워지는 사실을 알 수 있다. 회전성을 만족하는 중심합성설계(rotatable CCD)는 중심점으로부터의 거리가 같은 실험 점에 대응하는 반응표면 예측값의 분산이 오로지 거리에만 영향을 받게 된다. 예를 들어 두 요인 반응표면실험의 경우 반경이 1인 두 실험점 $(1, 0)$ 와 $(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})$ 은 방향은 각각 동쪽과 동북방향으로 달라도 같은 거리의 원주에 있으므로 각각의 분산이 동일하다. 한편, 3-수준 CCD는 $\alpha=1$ 이므로 실험구역이 다음과 같이 된다.



[그림2.1] CCD 설계(구형)와 3-수준 CCD(입방형)

[그림2.1]에서 보는 바와 같이 3수준 CCD는 실험구역이 입방형이므로 회전성을 만족하지 않게 된다. 그러나 관심 있는 실험구역이 명확하게 입방형이라면 회전성을 만족하지 않아도 이러한 실험설계를 선택할 수도 있다. 그러나 특별한 이유가 없을 경우 일반적으로 회전성을 만족하는 실험설계를

선호하게 된다. 추정 반응표면식의 분산의 크기를 살펴보면, CCD 경우, 중심점 개수가 3~5개일 때 분산이 줄어들어 안정된 모습을 보이고, 3수준-CCD의 경우 중심점의 개수가 1~2개 정도만 되어도 분산이 줄어들어 안정된 모습을 보임을 확인할 수 있다. 반응표면 분석에서 분산의 최적을 평가하는 방법으로 $N \text{Var}[\hat{y}(x)]/\sigma^2 = 1 + \rho_x^2$ 를 이용하는데 이 식은 오로지 원점과 실험점까지의 거리에만 의존하는 함수이다. 식의 구조나 자료를 통한 시뮬레이션을 통하여 우리는 CCD에서는 중심점의 개수에 따라 이 식의 값이 민감하게 변화하지만 3수준 CCD에서는 CCD에 비하여 둔감하게 영향을 받는다. 한편, 3수준 CCD는 실험구역이 입방형으로서 회전성을 갖지 못한다는 문제가 있기 때문에 박스와 벤켄(1960)은 3-수준 반응표면실험의 경우 실험구역이 구형으로 회전성 혹은 근사-회전성을 갖는 박스-벤켄 설계를 제안하고 있다.

2.3 박스-벤켄 설계(Box-Behnken Design, BBD)

박스-벤켄 실험설계는 대표적인 3수준 반응표면설계로서 불완비블록설계의 구성 알고리즘을 이용하여 구성하기 때문에 구성방법이 명료하고 실험구역이 구형에 가깝기 때문에 회전성을 비교적 잘 만족하는 실험설계이다.

2.3.1 구성방법

Box와 Behnken(1960)은 2차 반응표면 적합을 위한 3-수준 요인실험으로 이른바 “박스-벤켄 설계(Box-Behnken design; BBD)”를 제안하였

다. 이 방법은 균형된 불완비블록설계(Balanced Incomplete Block Design; BIBD)와 2^k -요인설계를 결합하여 얻어지는데 그 구체적 방법은 다음과 같다. 예를 들어, 4요인의 경우 먼저 4개의 처리와 한 블록마다 2개의 처리가 일어나는 6개의 블록을 가진 BIBD를 생각한다.

[표2.2] BIBD ($k=4, b=6, \lambda=1, r=3$)

		x_1	x_2	x_3	x_4
b=6 blocks	1	*	*		
	2			*	*
	3	*			*
	4		*	*	
	5		*		*
	6	*		*	

다음으로 위의 BIBD의 * 부분에 다음의 2^2 -요인실험을 결합한다.

[표2.3] 2^2 -요인실험

x_i	x_j
-1	-1
1	-1
-1	1
1	1

그러면 다음과 같은 4요인 박스-벤켄 설계를 얻게 된다. 이 경우, 총 실험 횟수는, $N=27$ 이다(단, $n_c=3$).

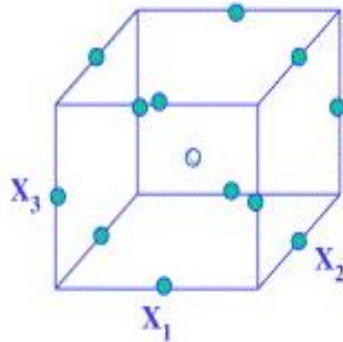
[표2.4] 4요인 BBD의 설계행렬

x_1	x_2	x_3	x_4
-1	-1	0	0
1	-1	0	0
-1	-1	0	0
1	1	0	0
0	0	-1	-1
0	0	1	-1
0	0	-1	-1
0	0	1	1
-1	0	0	-1
1	0	0	-1
-1	0	0	1
1	0	0	1
0	-1	-1	0
0	1	-1	0
0	-1	1	0
0	1	1	0
0	-1	0	-1
0	1	0	-1
0	-1	0	1
0	1	0	1
-1	0	-1	0
1	0	-1	0
-1	0	1	0
1	0	1	0
0	0	0	0

2.3.2 실험설계의 특징

박스-벤켄 설계는 2차 반응표면 분석을 위한 3-수준 실험설계의 대표적인 방법으로서, 실험구역이 구형이고 기타의 3-수준 실험설계 방법들과 비교하여 총 실험회수가 크게 증가하지 않으면서도 구성과 실험의 편리성이 있

는 유용한 실험설계로 잘 알려져 있다. 특히 요인 수 $k \leq 6$ 일 경우 중심합성설계와 비교할 때 전체 실험 횟수가 많지 않은 것으로 알려져 있다. 특히 무엇보다도 중요한 박스-벤켄 설계의 특징은 실험구역이 둥그런 모양인 구형설계(spherical design)라는 것이다. 이 경우, 모든 실험점들은 중심점으로부터 떨어진 거리가 모두 같다. 예를 들어 요인 수 $k=3$ 인 경우 [그림 2.2]와 같이 모든 실험점들은 정육면체의 각 가장자리에 있게 되며 중심점으로부터의 거리가 모두 $\sqrt{2}$ 이다. 이 설계의 실험구역은 구형이기 때문에 요인의 수에 따라서 회전성을 갖거나 근사회전성(near-rotatability)을 갖게 된다. 요인 수 $k=4$ 그리고 $k=7$ 일 때에는 정확하게 회전성을 갖는다.



[그림 2.2] 3요인 BBD의 실험구역

[표2.5] 요인 수에 따른 박스-벤켄 설계

요인수	블록수	블록크기	각 블록의 요인설계점 (factorial pts. per block)	2차모형에서 추정할 모수의 수
3	3	2	4	10
4	6	2	4	15
5	10	2	4	21
6	6	3	8	28
7	7	3	8	36
8	14	4	8	45
9	15	3	8	55
10	10	4	16	66
11	11	5	16	78
12	12	4	16	91
16	24	4	16	153

그러나, 박스-벤켄 설계 구성 방법을 살펴보면 실험구역이 상대적으로 좁다는 사실을 발견하게 된다. 중심합성설계가 요인수가 증가하면서 실험반경이 넓어지는데 비해 박스-벤켄 설계는 요인수의 증가와 실험지역의 반경이 비례하지 않는다. 실제로 실험을 실시하는 지역이 좁아 실제 최적값이 실험구역 바깥에 존재할 경우 이를 추정하는데 어려움이 있다. 이러한 이유로 박스-벤켄 설계는 실험의 환경이 각 요인의 모든 수준을 동시에 최고 혹은 최저 수준으로 하여 실험이 불가능 할 경우, 혹은 최적 값이 원점으로부터 멀지 않은 실험구역에서 존재하리라 예상되는 실험의 경우 이를 이용하는데 큰 무리가 없다. 그러나 반대로 실험구역의 가장자리 구역에 대한 추정에 관심이 클 경우는 이 방법을 이용한 실험은 최적점을 찾는데 적절하지 않다고 생각된다. 이러한 문제점들을 다소나마 해결할 수 있는 방법을 살펴보기로 하자.

2.4 3-수준 확장구형설계

(3-level Expanded Spherical Design ; 3-ESD)

이 장에서는 실험구역의 중심보다 가장 자리에 대한 예측에 관심이 많을 경우, 입방형 설계에 비하여 실험구역이 좁은 박스-벤켄 실험설계를 보완하여 구형설계를 만족하면서도 변수의 개수에 비례하여 실험구역이 커지는 실험설계에 대해 소개하겠다.

2.4.1 구성방법

박스-벤켄 설계에서 요인 수에 따른 블록의 크기는 [표2.5]에서와 같으며 이 블록의 크기에 따라 실험지역의 반경(radius)이 영향을 받는다. 그런데 이 블록의 크기는 요인 수에 정비례하지 않기 때문에 실험구역의 크기가 요인수가 증가해도 변하지 않을 수 있다. 박스-벤켄 설계의 요인 수가 4일 때를 예로 들어 설명하겠다. BIBD에서 블록의 수는 4개의 요인에서 2개의 요인을 선택하는 모든 조합(${}_4C_2 = 6$)의 수와 같게 된다. 그렇게 되면 [표 2.2]와 같이 BIBD에서 블록의 수는 6개이고 블록의 크기는 2가 된다. 이 경우 실험반경은 $\sqrt{2}$ 가 된다. 요인수가 5일 때는 블록의 수는 ${}_5C_2 = 10$ 이고 블록의 크기는 2가 되어 요인 수는 증가하였지만 실험반경은 4요인일 때와 마찬가지로 여전히 $\sqrt{2}$ 이다.

이러한 좁은 실험반경의 한계를 개선하기 위해 본 논문에서는 BIBD를 구성할 때 BIBD의 조건을 만족하면서 블록의 크기 최대한 키움으로써 실험반경을 넓힐 수 있는 설계를 제안하고자 한다. 즉 k개의 요인의 경우, (k-1)을 블록의 크기로 한다. 따라서 모든 조합(${}_kC_{k-1}$)이 블록이 되며 블록의 수

는 언제나 k 이다. 즉, 박스-벤켄 설계에서 2^{k-1} -요인실험 혹은 2^{k-p} -요인 실험(해상도 V 이상)과 BIBD(블록의 크기= $k-1$)를 결합하는 설계와 동일하다. 이렇게 되면 블록의 크기는 $(k-1)$ 이 되며 실험반경은 $\sqrt{k-1}$ 이 된다.

박스-벤켄설계의 구성방법을 좀 더 일반화 시키고 실험반경을 확장시키는데 초점을 맞췄기 때문에 이 실험을 3수준 확장 구형 설계(3-level expanded spherical design; 3-ESD)라 한다. 3-ESD의 2^{k-1} -요인실험 혹은 2^{k-p} -요인실험의 기본요인 설계와 중간수준을 나타내는 0을 한 열에 병렬로 결합시킨 후, 열과 열을 서로 바꾸는 방법을 사용한다. 여기에 적당한 개수의 중심점(center points)을 추가한다. 3-요인의 경우를 들어 그 구성방법을 살펴보자.

1단계: 2^2 -요인실험을 기본 요인 설계로 선택한 후, 기본 요인 설계의 왼쪽에 0열을 추가해 part1을 만든다.

2단계: 다음으로 part1의 제1열과 제2열을 서로 교환하여 part2를 만든다.

3단계: 다음으로 part2의 제2열과 제3열을 서로 교환하여 part3을 만든다.

4단계: 마지막으로, 적절한 개수의 center point를 추가, part4를 만든다.

위의 구성방법을 이용하면 설계 행렬은 다음과 같이 된다.

[표2.6] 3요인 3ESD의 설계행렬

x_1	x_2	x_3	
0	-1	-1	
0	1	-1	
0	-1	1	part1
0	1	1	
-1	0	-1	
1	0	-1	
-1	0	1	part2
1	0	1	
-1	-1	0	
1	-1	0	
-1	1	0	part3
1	1	0	
0	0	0	
0	0	0	
0	0	0	part4
0	0	0	

n_{bf} 을 기본 요인 설계에서의 시행회수라고 할 때, 전체 시행회수 N 은 다음과 같다.

$$N = kn_{bf} + n_c$$

[표2.6]의 3요인의 경우 $N = 3 \times 4 + 4 = 16$ 이다.

한편, R.W. Mee(2000)은 요인의 수가 4, 5일 때 기존의 박스-벤켄의 실험설계 구성방법을 그대로 이용하되 BIBD(블록의 크기=3)를 선택하여 2^2 -요인실험을 결합한 것이 아니라 2^3 -요인실험을 결합한 새로운 박스-벤켄

실험설계(New BBD)를 제안하였다.

[표2.7] New BBD (k=4, 5)

x1	x2	x3	x4	
±1	±1	±1	0	← 2 ³
±1	±1	0	±1	← 2 ³
±1	0	±1	±1	← 2 ³
0	±1	±1	±1	← 2 ³
0	0	0	0	← n _c 반복

x1	x2	x3	x4	x5	
±1	±1	0	±1	0	← 2 ³
0	±1	±1	0	±1	← 2 ³
±1	0	±1	±1	0	← 2 ³
0	±1	0	±1	±1	← 2 ³
0	0	0	0	0	← n _c 반복

[표2.7]을 보면, 요인 k=4, 5일 때 블록의 크기는 3이 되므로 실험반경은 $\sqrt{3}$ 이 된다. 박스-벤켄에서 $\sqrt{2}$ 였던 것에 비하여 넓어졌음을 알 수 있다. k=4인 경우, New BBD는 3ESD와 동일하고 k=5인 경우 3ESD는 실험반경이 $\sqrt{4}$ 인 반면 New BBD는 $\sqrt{3}$ 이므로 3ESD가 실험구역이 더 넓다.

또, 박스-벤켄설계는 적당한 BIBD를 찾아서 거기에 요인실험을 결합한 방법으로 실험설계를 구성해야 하기 때문에 실무자들이 이용하기 어려운 부분이 있지만 3ESD의 경우 비교적 손쉽게 실험설계를 구성할 수 있다는 장점이 있다. 단지 최적의 BIBD를 이용하지 않은 이유로 경우에 따라 총 실험 횟수가 크게 증가할 수 있다는 위험성은 있다. 그러나 요인수가 그리 크지 않을 경우 그 위험은 그리 크지 않을 것으로 생각된다.

2.4.2 실험설계의 특징

이 실험설계의 각 설계점은 k -차원 입방체(cube)의 두 꼭짓점을 연결하는 모서리의 가운데 점이 된다. 예를 들면, [표2.5]에서 첫 번째 실험점 $(0, -1, -1)$ 은 점 $(-1, -1, -1)$ 과 점 $(1, -1, -1)$ 를 연결하는 가운데 점이다. [표2.5]에서도 보듯이 요인 수 $k=3$ 인 경우에는 3요인 박스-벤켄 설계와 동일하다. 박스-벤켄과 같이 정육면체의 각 모서리의 가운데 점들이 실험점이 된다. k 요인의 경우 part 1부터 part k 까지의 임의의 한 행은 $(k-1)$ 개의 (± 1) 과 하나의 0으로 이루어져 있으므로 다음이 성립한다.

$$\begin{aligned}x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_k^2 &= k-1 \\ \Leftrightarrow (x_1-0)^2 + (x_2-0)^2 + \cdots + (x_k-0)^2 &= (\sqrt{k-1})^2\end{aligned}\quad (2.11)$$

식 (2.11)은 중심이 $(0, \dots, 0)$ 이고 모든 실험점까지의 거리가 $(\sqrt{k-1})$ 인 k -차원의 구이다. 즉, 실험점인 모서리의 가운데 점들은 중심점으로부터 같은 거리에 위치하고 있다. 또한 실험의 반경은 $\sqrt{k-1}$ 이 된다. 박스-벤켄과 같이 구형설계가 되므로 완벽한 회전성은 아니더라도 최소한 근사회전성을 가질 수 있게 된다. 때문에 3ESD는 박스-벤켄 설계의 구형성을 유지하는 동시에 실험반경을 키울 수 있도록 고안된 실험설계법이라고 볼 수 있다.

2.5 3-수준 CCD, BBD 그리고 3-수준 ESD의 비교

이 장에서는 3-수준 반응표면설계인 3-수준 중심합성설계(3CCD), 박스-벤켄 설계(BBD), 3-수준 확장구형설계(3ESD)에 대하여 반응표면 설계의 성질을 판단하는 중요한 기준인 회전성, 직교성, 총 실험횟수, 실험반경, 실험구역의 모습들을 비교하고자 한다.

식 (2.8)에서 $[iiii] = 3[iijj]$ 일 때 회전성을 만족한다. 즉 $\frac{[iiii]}{3[iijj]} = 1$ 일 때는 완벽한 회전성을 갖고 1에 가까운 값일수록 근사 회전성을 갖는다고 할 수 있다. 마찬가지로 식 (2.10)에서 $[ii]^2 = n[iijj]$ 일 때 직교성을 만족한다. 즉 $\frac{[ii]^2}{n[iijj]} = 1$ 일 때에는 완벽한 직교성을 갖고 이 값 역시 1에 가까울수록 근사 직교성을 갖는다고 볼 수 있다. 이를 이용하여 회전성의 정도와 직교성의 정도를 계산한 결과가 [표2.8]에 있다. [표2.8]을 보면 총 실험횟수(N)는 부분실시로 하는 경우 3CCD가 가장 적은 횟수의 실험이 가능하고 BBD와 3ESD는 거의 비슷하다. 회전성과 직교성을 보면 3CCD는 모두 이들을 갖지 않고, BBD는 회전성을 갖거나 근사회전성을 갖는다. 3ESD도 BBD보다는 약하지만 회전성 또는 근사회전성을 갖는다. 실험반경 측면에서 보면 3CCD가 가장 넓고 다음으로 3ESD, BBD순임을 알 수 있다. 3CCD는 k요인일 때 \sqrt{k} 의 실험반경을 갖는데 비해 BBD는 $k=3, 4, 5$ 인 경우에는 실험반경(radius)이 $\sqrt{2}$ 이고 $k=6, 7$ 인 경우에는 $\sqrt{3}$ 이 된다. 한편, 3ESD는 k요인일 때 $\sqrt{k-1}$ 의 실험반경을 갖는다.

[표2.8] 3-수준 CCD, BBD 그리고 3-수준 ESD의 비교

		3CCD	BBD	3ESD	비교
실험구역		입방형	구형	구형	
k=3	N	$14 + n_c$	$12 + n_c$	$12 + n_c$	3CCD : 2^3 -실행
	Degree of Rotatability	$\frac{10}{24} = 0.4$	$\frac{8}{12} = 0.7$	$\frac{8}{12} = 0.7$	
	Degree of Orthogonality	$\frac{100}{120} = 0.8$	$\frac{64}{64} = 1$	$\frac{64}{64} = 1$	3ESD : 2^3 -실행
	실험반경	$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	
k=4	N	$24 + n_c$	$24 + n_c$	$32 + n_c$	3CCD : 2^4 -실행
	Degree of Rotatability	$\frac{18}{48} = 0.4$	$\frac{12}{12} = 1$	$\frac{12}{12} = 1$	
	Degree of Orthogonality	$\frac{324}{432} = 0.7$	$\frac{144}{108} = 1.3$	$\frac{576}{288} = 2$	3ESD : 2^4 -실행
	실험반경	$\sqrt{4}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	
k=5	N	$(26 + n_c)$	$40 + n_c$	$(40 + n_c)$	3CCD : 2^{5-1} 부분실행
	Degree of Rotatability	$\frac{18}{48} = 0.4$	$\frac{16}{12} = 1.3$	$\frac{32}{72} = 0.4$	
	Degree of Orthogonality	$\frac{324}{464} = 0.7$	$\frac{256}{180} = 1.4$	$\frac{1024}{1032} = 0.9$	3ESD : 2^{4-1} 부분실행
	실험반경	$\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{4}$	
k=6	N	$(44 + n_c)$	$48 + n_c$	$(48 + n_c)$	3CCD : 2^{6-1} 부분실행
	Degree of Rotatability	$\frac{18}{48} = 0.4$	$\frac{24}{24} = 1$	$\frac{40}{96} = 0.4$	
	Degree of Orthogonality	$\frac{324}{496} = 0.7$	$\frac{576}{1176} = 0.5$	$\frac{1600}{1600} = 1$	3ESD : 2^{5-2} 부분실행
	실험반경	$\sqrt{6}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{5}$	

(참고: N=총실험 횟수, 완벽한 회전성 = $\frac{[iii]}{3[iij]} = 1$, 완벽한 직교성 = $\frac{[ii]^2}{n[iij]} = 1$)

3CCD의 경우 요인수가 증가함에 따라 실험반경도 비례하여 넓어지지만 BBD는 이에 비해 좁은 실험지역을 갖는다. 반면 3CCD는 실험구역이 입방형이기 때문에 회전성을 갖지 않지만 BBD는 구형설계로서 회전성 또는 근사회전성을 갖는다. 비록 full factorial로 실험할 경우 BBD에 비해서 요인수가 증가 할수록 총실험횟수도 크게 증가하는 문제가 있고 회전성이 BBD에 비해 만족스럽지 않다. 그러나 3ESD는 3CCD에서 회전성과 직교성의 단점을 어느 정도 개선하고 BBD에서의 실험반경을 보완하여 더 넓은 설계로 볼 수 있다.

제 3 장 3ESD를 이용한 실험자료분석

3.1 자료 설명

과당의 수준(Fructose concentration), CSL의 농도(CSL concentration), 용존산소의 수준(dissolved oxygen concentration), 세균 배양액의 농도(Agar concentration)에 따라 미생물로부터 합성된 박테리아 셀룰로오즈(Bacterial Cellulose)의 생산이 어떻게 영향을 받으며 각각 어떤 수준에서 박테리아 셀룰로오즈 생산을 최적화 시키는지 연구하기 위한 실험 내용이다.

[표3.1] 실험설계에 사용된 4개의 요인들

요인	요인	부호화된 요인의 수준		
		-1	0	1
X_1	과당의 수준 (% , w/v)	3	4	5
X_2	CSL의 농도 (% , v/v)	2	3	4
X_3	용존산소 (%)	25	30	35
X_4	세균배양액의 농도 (% , w/v)	0.3	0.4	0.5

각 요인의 수준은 [표3.1]과 같고 부호화되지 않은 원자료(uncoded factor)로 분석을 실시하였다.

[표3.2] 3ESD 실험 자료

실험	x_1	x_2	x_3	x_4	y
1	0	-1	-1	-1	9.461
2	0	1	-1	-1	8.501
3	0	-1	1	-1	10.058
4	0	1	1	-1	9.288
5	0	-1	-1	1	8.916
6	0	1	-1	1	9.073
7	0	-1	1	1	8.973
8	0	1	1	1	9.820
9	-1	0	-1	-1	8.032
10	1	0	-1	-1	10.210
11	-1	0	1	-1	8.619
12	1	0	1	-1	12.047
13	-1	0	-1	1	7.882
14	1	0	-1	1	13.432
15	-1	0	1	1	9.384
16	1	0	1	1	13.184
17	-1	-1	0	-1	8.005
18	1	-1	0	-1	12.535
19	-1	1	0	-1	7.317
20	1	1	0	-1	12.447
21	-1	-1	0	1	8.357
22	1	-1	0	1	12.630
23	-1	1	0	1	6.208
24	1	1	0	1	12.082
25	-1	-1	-1	0	6.878
26	1	-1	-1	0	14.410
27	-1	1	-1	0	3.832
28	1	1	-1	0	11.385
29	-1	-1	1	0	8.027
30	1	-1	1	0	10.857
31	-1	1	1	0	7.747
32	1	1	1	0	11.177
33	0	0	0	0	12.024
34	0	0	0	0	16.241
35	0	0	0	0	15.111
36	0	0	0	0	12.948

* 위 자료는 BBD의 자료를 근간으로 만든 자료임.

3.2 분석 결과

[표3.3] 분산분석

Response Surface for Variable Y	
Response Mean	10.197117
Root MSE	1.164413
R-Square	0.8868
Coefficient of Variation	11.4190

Regression	DF	Type I Sum of Squares	R-Square	F Value	Pr > F
Linear	4	138.162	0.5491	25.48	<.0001
Quadratic	4	74.622	0.2966	13.76	<.0001
Crossproduct	6	10.339	0.0411	1.27	0.3125
Total Model	14	223.122	0.8868	11.75	<.0001

Residual	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Lack of Fit	18	17.229	0.957	0.26	0.9742
Pure Error	3	11.244	3.748		
Total Error	21	28.473	1.356		

[표3.3]의 결과를 보면 R^2 는 88.6%이고, 2차항(quadratic)이 통계적으로 유의한 것으로 미루어 이 자료는 2차 반응표면 분석방법이 타당할 것으로 판단된다. 이 사실은 2차 모형에 대한 적합도 검정(lack of fit)검정 결과를 보아도 알수 있다(p값= 0.9742).

[표3.4] 모수추정

Parameter	DF	Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1	-110.548	21.877	-5.05	<.0001
X1	1	12.297	4.009	3.07	0.0058
X2	1	8.605	3.453	2.49	0.0211
X3	1	4.413	1.057	4.17	0.0004
X4	1	78.596	40.091	1.96	0.0633
X1*X1	1	-1.006	0.412	-2.44	0.0235
X2*X1	1	0.176	0.291	0.61	0.5511
X2*X2	1	-2.094	0.412	-5.09	<.0001
X3*X1	1	-0.117	0.058	-2.00	0.0583
X3*X2	1	0.087	0.058	1.50	0.1483
X3*X3	1	-0.068	0.017	-4.11	0.0005
X4*X1	1	2.644	2.911	0.91	0.3741
X4*X2	1	0.508	2.911	0.17	0.8630
X4*X3	1	-0.219	0.582	-0.38	0.7109
X4*X4	1	-103.385	41.168	-2.51	0.0203

[표3.4]와 같이 추정된 각 반응표면의 회귀계수에 대한 추정치를 가지고 반응표면식을 구해보면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \hat{y} = & -110.548 + 12.297x_1 + 8.605x_2 + 4.413x_3 + 78.596x_4 \\ & - 1.006x_1^2 + 0.176x_{12} - 2.094x_2^2 - 0.117x_{13} + 0.087x_{23} \\ & - 0.068x_3^2 + 2.644x_{14} + 0.508x_{24} - 0.219x_{34} - 103.385x_4^2 \end{aligned} \quad (3.1)$$

이므로 정상점 $x_0 = \begin{pmatrix} 1.2271 \\ -0.0618 \\ -0.1386 \\ 0.2317 \end{pmatrix}$ 이다. 이 때 $\hat{y}_0 = 15.525$ 이다. 여기서 추정

된 회귀식 \hat{y} 은 $x' = (x_1, \dots, x_k)$ 의 함수로 나타나며 \hat{y} 을 최대 또는 최소 시키는 x 의 값을 찾기 위하여 \hat{y} 을 x 로 편미분하여 0으로 놓고 이를 만족 시키는 점 x_0 를 정상점(stationary point)라고 한다. 정상점 주위에서 반응표면이 어떤 형태를 갖는지 알아보기 위해 정준분석을 사용할 수 있다. 이 결과는 [표3.5]에서 보는 바와 같다. 최대(maximum), 최소(minimum) 혹은 안장점(saddle point) 여부를 알아보기 위해 식(3.1)을 정준형으로 고쳐 쓰면 다음과 같다.

$$\hat{y} = 15.525 - 0.808w_1^2 - 1.124w_2^2 - 1.669w_3^2 - 2.225w_4^2$$

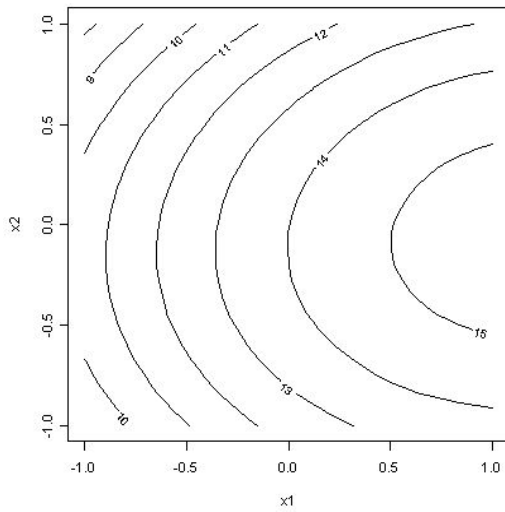
모든 고유값이 음수이기 때문에 $x = x_0$ 인 정상점(stationary point)은 최대가 된다.

[표3.5] 정준분석

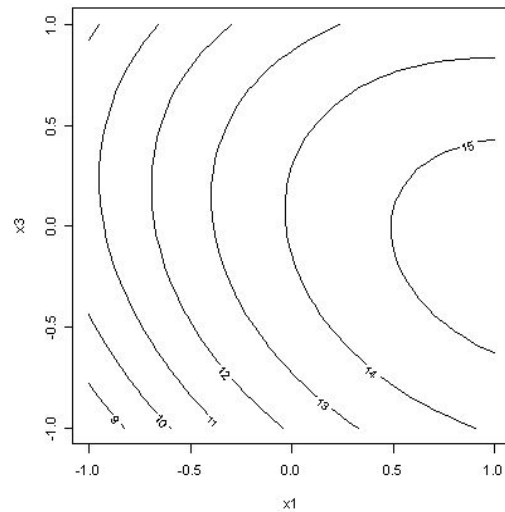
Factor	Critical Value	
	Coded	Uncoded
X1	1.227053	5.227053
X2	-0.061777	2.938223
X3	-0.138558	29.307211
X4	0.231618	0.423162
Predicted value at stationary point: 15.525		

Eigenvalues	Eigenvectors			
	X1	X2	X3	X4
-0.808070	0.792465	0.015598	-0.290481	0.536075
-1.124152	-0.503740	0.017764	0.183992	0.843847
-1.668894	0.299140	0.484384	0.822052	-0.010862
-2.224632	-0.169588	0.874536	-0.453871	-0.020685
Stationary point is a maximum.				

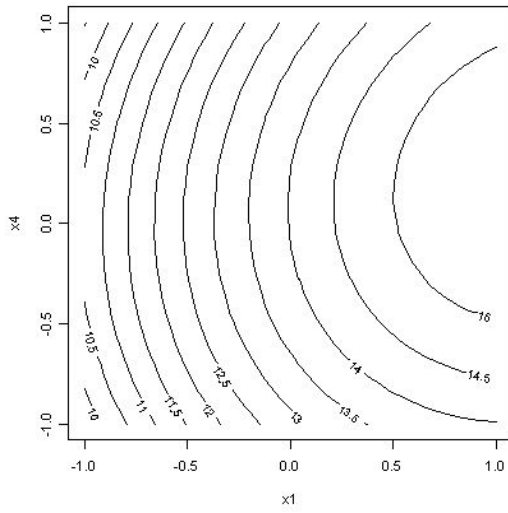
다음으로 식(3.1)의 회귀 모형식을 이용하여 등고선과 반응표면을 그려 각 요인이 어느 수준에서 세균성 섬유소생성을 최대화 하는지 시각적으로 살펴 보았다. 등고선 그림의 경우 2차원의 그래프 밖에 제공해주지 않기 때문에 여기서는 두 요인의 값을 최적값을 주는 수준값으로 고정한 후 나머지 두 요인에 관한 등고선 그림을 그려보았다.



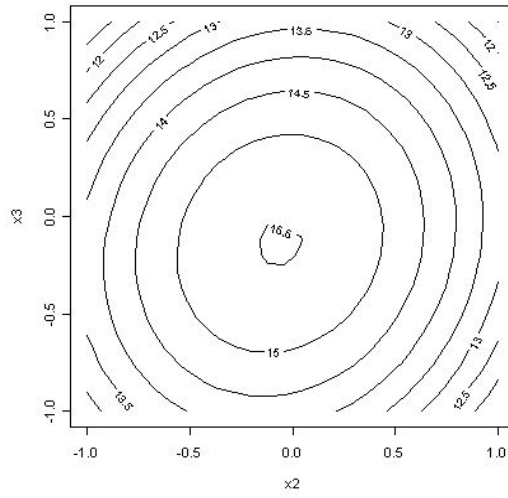
(a) $x_3 = -0.14$, $x_4 = 0.23$



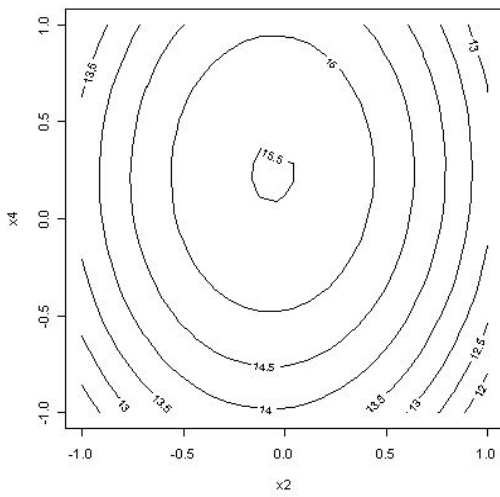
(b) $x_2 = -0.06$, $x_4 = 0.23$



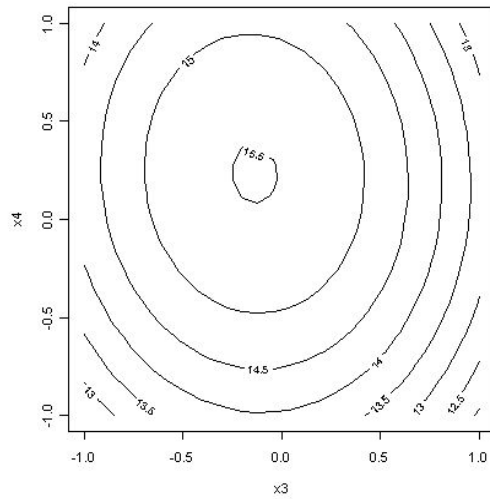
(c) $x_2 = -0.06, x_3 = -0.14$



(d) $x_1 = 1.23, x_4 = 0.23$



(e) $x_1 = 1.23, x_3 = -0.14$



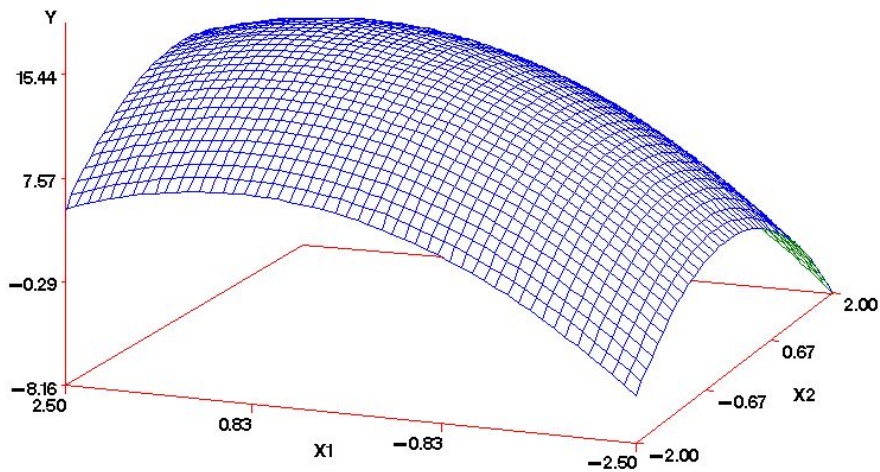
(f) $x_1 = 1.23, x_2 = -0.06$

[그림3.1] X1, X2의 등고선 그림

[그림3.1]은 최적값이 요인의 어느 수준에서 나타나는지 실험구역을 살펴본 것이다. 최적값을 주는 두 요인의 수준을 고정한 후 나머지 두 요인의 수준을 0.1씩 변화시키며 등고선 그림(contour plot)을 그려보았다. 그 결과 x_1 의 수준을 고정시킨 (d), (e), (f)의 경우 최댓값을 갖는 최적값을 잘 찾아주지만 x_1 의 수준을 고정시키지 않은 (a), (b), (c)의 경우에는 최적값을 찾기 위해 구간을 더 넓혀야 한다.

[그림3.2]은 x_3 과 x_4 모두 중간수준으로 고정한 후 x_1 , x_2 에 따른 Y 의 반응표면을 그린 것이다. x_1 과 x_2 가 모두 중간 수준인 지점에서 반응표면이 가장 높은 값을 가지고 있음을 알 수 있다.

결론적으로 x_1 (Fructose concentration)은 고수준인 5%, x_2 (CSL concentration)은 중간수준인 2%, x_3 (dissolved oxygen)을 중간수준인 30%로, x_4 (Agar concentration) 역시 중간수준인 0.4%로 하면 세균성 섬유소 생산은 최대가 된다.



[그림3.2] $X_3=0$, $X_4=0$ 일 때의 X_1 , X_2 에 따른 Y 의 반응표면

이 실험 자료는 박스-벤켄 설계로 실험한 실제자료를 가공하여 분석한 결과로 박스-벤켄 실험의 결과와 비교하는 것은 무리가 있다. 똑같은 실험주제를 가지고 두 설계를 이용하여 실험하여 자료를 구했다면 실제 최적 점의 위치에 따라 두 방법의 결과가 달라지리라 기대된다. 특히 최적 값이 박스-벤켄 실험구역을 벗어난 지역에 위치하고 있을 경우 3ESD를 이용한 최적점의 탐색은 효과적일 수 있다고 판단된다.

제 4 장 결 론

반응표면 방법론이란 하나 이상의 반응변수와 실험 요인들 간의 관계를 볼 뿐만 아니라 더 나아가 반응 값을 최적화하는 요인들의 최적수준을 찾기 위해 사용된다. 2^k -요인실험은 각 요인이 두 수준에서만 실험되기 때문에 요인의 수준이 변화하며 발생하는 반응 값의 곡면적인 변화를 감지할 수 없어 2차 회귀모형에서의 제곱 항 x_i^2 의 계수를 추정할 수 없다. 이를 해결하는 방법으로 3^k -요인실험을 생각할 수 있는데 이 방법은 반응표면 식의 직교성 그리고 회전성 등의 문제로 널리 사용되지 않는다. 그 후 많은 연구의 결과로, 2^k -요인실험에 축점과 중심점을 추가한 형태인 중심합성설계가 소개되고 2차 반응표면 분석 방법으로 널리 애용되고 있다. 중심합성설계는 각 요인들마다 $-\alpha, -1, 0, 1, \alpha$ 의 5개의 수준에서 실험 하여야 한다. 그러나 실험여건이나 과학적 근거 등으로 수준수가 5보다 적은, 이를테면 3의 수준으로만 해야 하는 상황이 발생할 수 있다. 때문에 각 요인의 수준이 3인 3-수준 중심합성설계, 박스-벤켄 설계 등은 이에 대한 좋은 대안책이 될 수 있다. 요인(독립변수)이 k 인 3-수준 중심합성설계의 경우 실험구역이 충분히 넓은 \sqrt{k} 의 실험반경을 갖지만 실험구역의 모습이 입방형이기 때문에 회전성을 갖지 않는다는 문제가 있다. 반면 박스-벤켄 설계는 구형의 실험구역을 갖기 때문에 회전성 또는 근사회전성을 갖는다. 하지만 이 설계는 요인의 수가 증가해도 실험구역이 좁다는 단점이 있다. 만약 최적 값이 실험지역 극단 쪽에 존재한다면 최적 값을 찾는데 어려움이 있다.

따라서 본 논문에서는 2차 반응표면 분석을 위한 3 수준 실험의 경우, 3-수준 중심합성설계가 입방형이기 때문에 갖지 못하는 회전성을 개선하고

박스-벤켄 설계의 좁은 실험반경을 확장시킬 수 있는 방법을 제안하고 이를 3-수준 확장 구형실험설계법이라 하였다. 이 방법은 총 실험횟수가 경우에 따라 크게 증가할 수 있는 위험은 있으나 요인 수가 크지 않을 경우 효과적인 방법이 될 수 있다고 판단된다. 이 방법의 적용사례를 보여 주기 위하여 기존의 박스-벤켄 설계로 실험한 자료를 부분적으로 가공하여 3-수준 확장 구형실험설계를 적용하여 분석하였다.

결론적으로, 3-수준 확장 구형실험설계는 요인의 수가 4, 5, 6인 경우에 총 실험횟수 관점에서 박스-벤켄 설계와 비교했을 때 큰 차이가 나지 않으며 반면, 실험반경은 넓어지게 되는 장점이 있다. 따라서 최적 값이 원점으로부터 멀지 않은 제한된 실험구역 안에 존재하지 않고 실험구역의 가장자리 근처에 존재하리라 예상되어 연구가의 관심이 실험구역 바깥부분에 있어 실험반경을 더 넓히고 싶을 경우에 유용한 방법이다.

참 고 문 헌

- [1] 박성현(1995), 현대 실험계획법, 민영사.
- [2] 박성현, 김혁주(2006), “제 2종의 중심합성계획의 통계적 성질, 응용통계연구 제 19권 2호, pp.257-270.
- [3] 이우선(2007), 최신실험설계, 우용출판사.
- [4] Box, G.E.P. and Behnken, D.W. (1960), "Some New Three Level Designs for the Study of Quantitative Variables", *Technometrics*, Vol.2, pp.455-475.
- [5] Box, G.E.P. and Draper N.R. (1987), Response Surfaces, Mixtures, And Ridge Analyses(2nd ed.), Wiley, New York.
- [6] Box, G.E.P. and Wilson, K.B. (1951), "On the Experimental Attainment of Optimum Conditions", *Journal of the Royal Ststistical Society, B*, Vol.13, pp.1-45.
- [7] Khuri, A.I. and Cornell, J.A.(1996), Response Surfaces(2nd ed.), Marcel Dekker, New York.
- [8] Montgomery, D. C. (2005), Design and Analysis of Experiments(6th ed.), John Wiley&Sons, New York.
- [9] Myers, R. H. and Montgomery D. C. (2002), Response Surface Methodology(2nd ed.), John Wiley&Sons, New York.
- [10] R.W. Mee(2000), “New Box-Behnken design”, University of Tennessee.

ABSTRACT

3–Level Response Surface Design by using Expanded Spherical Experimental Region

Ha-yan Kim

Department of Statistics

The Graduate School

Sungshin Women's University

Response surface methodology (RSM) is a very useful statistical technique for improving and optimizing the product process. It also could be applied for the design, development and formulation of new products, as well as for the improvement of the existing product design. By this reason, RSM has been extensively utilized in the industrial world, particularly in the circumstances where several product variables potentially influence some quality characteristics of a product. It is an essential part of the production process to identify the optimal condition of product variables which improve the quality of product. In order to estimate the optimal condition of product variables, an experiment is being conducted defining appropriate experimental region. However, this experimental region can vary with the scientific theory, experimental circumstances and

choice of a researcher. Response surface designs can be classified, according to the shape of the experimental region, into spherical designs and cuboidal design. In the spherical case, the design is either rotatable or very near-rotatable. The central composite design (CCD) widely used in RSM is an example of 5-level and spherical design. The cuboidal CCDs (CCDs with $\alpha=1$) is appropriate when an experimental region is cuboidal but this design does not satisfy the rotatability as it is not spherical. Practically, a 3-level spherical design is often required in the industrial world where various level of experiments are not available. Box-Behnken design (BBD) is most popular 3-level spherical designs for fitting second-order response surfaces and is based on the construction of balanced incomplete block designs satisfying the rotatability. However, the weakness of BBDs lies on the radius of the experimental region which does not vary with the number of variables. The new experimental design with expanded experimental region can be considered if the predicting response at the extremes are interested. This paper proposes a new 3-level spherical RSM which is constructed to expand the experimental region together with number of product variables and illustrate some example. This paper also shows the experimental design and analysis for new 3-level expanded RSM through the example.

감사의 글

대학원 진학에 대한 목표를 주신것부터 논문을 마치기까지 지금껏 저를 인도해주시고 큰 은혜를 주신 하나님께 감사드립니다.

또한 저의 부족함과 어리숙함에도 불구하고 이 논문을 완성하기까지 저를 지도해주시고 격려해주신 많은 분들께 감사를 드립니다.

논문을 쓰기 위해 필요한 공부부터 시작해서 완성하기까지 꼼꼼하게 지도해주시며 격려해주신 이우선 지도교수님께 진심으로 감사드립니다. 그리고 따뜻한 격려를 주신 이해용 교수님, 관심가지고 물어봐주시고 꼼꼼히 심사해주신 송일성 교수님, 저로 통계학에 흥미를 갖게 해주시고 학부때부터 6년동안 지켜봐주시며 아버지와같은 조언과 가르침을 주신 이종협교수님, 항상 열정적으로 가르쳐주시고 훈련시켜주신 이성건 교수님, 질문할 때마다 자세히 알려주시고 꼼꼼히 심사하여 조언해주신 박만식 교수님께 깊이 감사드립니다.

2년동안 같이 대학원 생활하면서 큰 웃음을 주고 함께해준 정운언니, 늘 묵묵히 잘 챙겨주고 함께 기뻐하고 고민해준 보미에게 큰 고마움을 전합니다. 그리고 옆에서 격려해주고 도와준 소영과 슬지, 여러 상담과 조언을 주신 희원언니, 인경언니, 애란언니, 경혜언니에게도 감사드립니다.

대학원 기간 내내 항상 기도해주시며 격려해주신 현숙언니, 늘 함께하며 큰 힘과 위로가 되었던 현미, 선혜, 그 외에도 자신의 일처럼 관심가져주시고 기도해주신 많은 형제·자매님들께 깊은 감사를 드립니다.

마지막으로 부족한 딸을 위해 이제껏 늘 사랑으로 든든히 지원해주시고 기도해주신 아빠, 엄마, 그리고 동생이지만 오빠같은 주녕이에게 말로 다 할 수 없는 감사와 사랑의 마음을 전합니다.