축점의 위치를 두 개의 수가 지정하는 변형된 중심합성계획

김혁주[1)]

요약

축점의 위치가 두 개의 수에 의하여 지정되는 변형된 중심합성계획을 제시하고 이 계획의 성질을 연구하였다. 이 계획이 직교계획이 되기 위한 조건과 회전계획이 되기 의한 조건을 구하였으며, 회귀계수들을 추정하는 관점에서 이 계획의 효율성을 다른 계획들과 비교하였다.

주요용어: 반응표면방법론, 중심합성계획, 직교성, 회전성, 효율성

1. 서론

반응표면방법론에서 가장 많이 사용되는 모형인 2차 다항회귀모형

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i<j}^{k}\sum \beta_{ij} x_i x_j \tag{1.1}$$

으로 반응표면을 추정할 때에 많이 쓰이는 실험계획 중 Box와 Wilson(1951)이 제안한 중심합성계획(central composite design)이 있다.

중심합성계획에서 실험점의 총수를 M이라 하면 $M=F+S$가 된다. 단, 여기서 F는 요인실험점의 수로 $F=2^k$(일부실시법을 쓰는 경우에는 2^{k-p}. p는 적절한 정수)이며, S는 축점의 수와 중심점의 수를 합한 것으로 $S=2k+m_0$이다. m_0는 중심점의 수를 말한다.

반응표면 실험계획법이 가질 수 있는 바람직한 성질로 직교성과 회전성이 있다. 중심합성계획이 직교계획이 되기 위한 조건은

$$\alpha = \left(\frac{\sqrt{FM} - F}{2}\right)^{1/2} \tag{1.2}$$

이며 회전계획이 되기 위한 조건은

$$\alpha = F^{1/4} \tag{1.3}$$

인 것으로 알려져 있다. 이에 관한 자세한 내용은 Myers(1976)와 박성현(1995), Khuri와 Cornell(1996) 등에 나와 있다.

여기서 알 수 있듯이 중심합성계획에서는 축점의 위치를 지정해 주는 수인 α의 중요성이 크며 α의 값에 의해 축점의 위치를 조절할 수 있다는 점이 중심합성계획의 큰 특징이라고 할 수 있겠다. 본 논문에서는 이러한 흐름에서 축점에 관한 내용을 좀 더 다양화하여 생각해 보고자 한다. 즉 중심합성계획에서 축점의 위치를 지정해 주는 수가 한 개가 아니라 두 개인 경우에 관하여 연구하고자 한다.

---

1) (570-749) 전북 익산시 신용동 344-2 원광대학교 수학·정보통계학부 교수

2. 축점의 위치를 정해 주는 수가 두 개인 중심합성계획

축점의 위치가 두 개의 수에 의해 지정되는 중심합성계획의 계획행렬(design matrix)은 다음과 같은 것이다($k=2$인 경우).

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cc} x_1 & x_2 \end{array} \\
D= & \begin{pmatrix}
-1 & -1 \\
-1 & 1 \\
1 & -1 \\
1 & 1 \\
0 & 0 \\
\cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot \\
0 & 0 \\
-\alpha_1 & 0 \\
\alpha_1 & 0 \\
0 & -\alpha_1 \\
0 & \alpha_1 \\
-\alpha_2 & 0 \\
\alpha_2 & 0 \\
0 & -\alpha_2 \\
0 & \alpha_2
\end{pmatrix}
\end{array} \qquad (2.1)
$$

여기서 중심점의 수 n_0는 1이상의 정수이며, 축점의 위치를 지정해 주는 수인 α_1과 α_2는 $\alpha_2 \geq \alpha_1 > 0$을 만족시키는 수이다.

k가 3이상인 경우에도 $k=2$인 경우를 확장하여 생각하면 계획행렬을 쉽게 알 수 있다. 편의상 이러한 실험계획을 "CCD2"라 부르기로 하고, 제1절에서 설명한 보통의 중심합성계획을 "CCD1"이라 부르기로 하자. CCD2에서 실험점의 총수를 N이라 하면 $N=F+T$가 된다. 단, 여기서 F는 요인실험점의 수로 $F=2^k$(일부실시법을 쓰는 경우에는 2^{k-p}. p는 적절한 정수)이며, T는 축점의 수와 중심점의 수를 합한 것으로 $T=4k+n_0$이다.

$\beta_0{}' = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii}\overline{x_i^2}$(단, $\overline{x_i^2} = \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2/N$)로 놓고 β_0', β_i, β_{ii}, β_{ij}의 최소제곱추정량을 각각 b_0', b_i, b_{ii}, b_{ij}로 나타내면 다음과 같은 분산과 공분산들을 얻게 된다.

$$
\begin{aligned}
&Var(b_0') = \sigma^2/N \\
&Var(b_i) = \sigma^2/(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2) \quad (i=1, 2, \cdots, k) \\
&Var(b_{ij}) = \sigma^2/F \quad (i \neq j) \qquad\qquad (2.2) \\
&Var(b_{ii}) = \sigma^2 e \quad (i=1, 2, \cdots, k) \\
&Cov(b_{ii}, b_{jj}) = \sigma^2 f \ (i \neq j)
\end{aligned}
$$

그 밖의 모든 공분산은 0.

단, 여기서 $e=A_1/B$, $f=A_2/B$, $A_1=(k-1)FT-4(k-1)(\alpha_1^2+\alpha_2^2)(F+\alpha_1^2+\alpha_2^2)$ $+2N(\alpha_1^4+\alpha_2^4)$, $A_2=-FT+4(\alpha_1^2+\alpha_2^2)(F+\alpha_1^2+\alpha_2^2)$, $B=2(\alpha_1^4+\alpha_2^4)\{kFT-4k(\alpha_1^2+\alpha_2^2)(F+\alpha_1^2+\alpha_2^2)+2N(\alpha_1^4+\alpha_2^4)\}$ 이다.

3. 직교성과 회전성

3.1 직교성(orthogonality)

제2절에서 본 바와 같이 CCD2에서는 b_{ii}와 b_{jj} 사이의 공분산 $Cov(b_{ii}, b_{jj})$를 제외한 모든 공분산이 0이 된다. 그런데 만일 $f=0$이 되면 $Cov(b_{ii}, b_{jj})$도 0이 되게 된다. 이러한 성질을 직교성이라고 부른다. $f=0$이 되려면

$$\alpha_1^2+\alpha_2^2=\frac{\sqrt{FN}-F}{2} \tag{3.1}$$

가 성립해야 하며, 이것이 바로 CCD2가 직교계획이 되기 위한 조건이 된다.

<표 1>에는 k, p, n_0의 여러 값에 대하여, CCD2가 직교성을 갖게 해주는 $\alpha_1^2+\alpha_2^2$의 값을 구하여 수록해 놓았다.

<표 1> CCD2가 직교계획이 되기 위한 $\alpha_1^2+\alpha_2^2$의 값

n_0 \ $(k,\ p)$	(2, 0)	(3, 0)	(4, 0)	(5, 0)	(5, 1)	(6, 0)	(6, 1)	(7, 1)	(8, 2)
1	1.606	2.481	3.489	4.591	4.166	5.736	5.354	6.575	7.395
2	1.742	2.633	3.662	4.785	4.329	5.947	5.541	6.781	7.598
3	1.873	2.782	3.832	4.976	4.490	6.158	5.726	6.987	7.799
4	2.000	2.928	4.000	5.166	4.649	6.367	5.909	7.192	8.000
5	2.123	3.071	4.166	5.354	4.806	6.575	6.091	7.395	8.200

3.2 회전성(rotatability)

이제 CCD2가 Box와 Hunter(1957)가 제시한 회전성을 갖기 위한 조건을 구해 보자. 식(2.1)의 D를 확장한 일반적인 경우를 생각하면 된다. 홀수차 적률이 모두 0이 됨은 쉽게 알 수 있으며, 회전성과 관련된 짝수차 적률은 $\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^4=F+2\alpha_1^4+2\alpha_2^4$, $\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 x_{ju}^2=F\ (i\neq j)$임을 알 수 있다. 회전계획이 되려면 $\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^4=3\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 x_{ju}^2\ (i\neq j)$를 만족시켜야 하므로, CCD2가 회전계획이 되기 위한 조건은

$$\alpha_1^4+\alpha_2^4=F \tag{3.2}$$

가 된다. 이 값은 중심점의 수 n_0하고는 관계가 없음을 알 수 있다.

4. 3^k요인계획 및 CCD1과의 효율성 비교

예를 들어 혼합2차계수(mixed quadratic coefficient) $b_{ij}(i\neq j)$를 추정하는 관점에서 두 실험계획 D_1과 D_2를 비교하려 한다 하자. D_1과 D_2에서 요구되는 실험점의 수를 각각 N_1과 N_2

라 하면 D_2에 대한 D_1의 상대효율은 다음 식으로 주어진다(Myers(1976) 7.2절 참조).

$$E(D_1|D_2)=\frac{\{D_2\text{에서의 } Var(b_{ij})\}N_2}{\{D_1\text{에서의 } Var(b_{ij})\}N_1} \tag{4.1}$$

이 경우 비교가 공평하게 이루어지기 위해서 실험계획들은 2차적률 $\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2/N$의 값이 같도록 스케일링되어야 하며, 이를 위해서 다음의 스케일링 기준을 사용한다.

$$[ii]=\frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}x_{iu}^2=1$$
$$[i]=\frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}x_{iu}=0 \qquad (i=1,2,\cdots,k) \tag{4.2}$$

4.1 혼합2차계수 $b_{ij}(i\neq j)$를 추정하는 관점에서 비교

식(2.2)에 의해 CCD2에서 $Var(b_{ij})=\sigma^2/F$이다. 그런데 이것은 식(4.2)의 스케일링을 하기 전의 것이다. CCD2에서 $[ii]=(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)/(F+T)$이므로 $[ii]=1$을 만들기 위해서는 각각의 x_i열에 $g=\{(F+T)/(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)\}^{1/2}$를 곱해줘야 한다. 그런데 $Var(\underset{\sim}{b})=\sigma^2(X'X)^{-1}$이므로 식(4.2)의 스케일링을 한 뒤의 $Var(b_{ij})$는 $(\sigma^2/F)\cdot(1/g^4)$ 즉 $(\sigma^2/F)\{(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)/(F+T)\}^2$이 된다. 3^k요인계획에 대해서도 같은 방식으로 생각할 수 있으므로, b_{ij}를 추정하는 관점에서 3^k요인계획에 대한 CCD2의 상대효율은 식(4.1)에 의해 다음과 같이 구해진다.

$$E(CCD2|3^k\text{요인계획})=\frac{\frac{\sigma^2}{(4)(3^{k-2})}\left(\frac{4}{9}\right)(3^k)}{\frac{\sigma^2}{F}\left(\frac{F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2}{F+T}\right)^2(F+T)} =\frac{F(F+T)}{(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^2} \tag{4.3}$$

식(4.3)으로부터 $E(CCD2|3^k\text{ 요인계획})=1$ 일 조건 즉 CCD2가 3^k요인계획과 같은 정도로 효율적이기 위한 조건은

$$\alpha_1^2+\alpha_2^2=\frac{\sqrt{F(F+T)}-F}{2}=\frac{\sqrt{FN}-F}{2} \tag{4.4}$$

임을 얻는다. 식(4.4)는 식(3.1)과 동일한 것이므로, 직교성을 갖는 CCD2가 3^k요인계획과 효율성이 같다는 것을 알 수 있다. 우리는 또한 식(4.3)으로부터 CCD2가 3^k요인계획보다 효율적일 조건은 $\alpha_1^2+\alpha_2^2<(\sqrt{FN}-F)/2$이고 그 반대일 조건은 $\alpha_1^2+\alpha_2^2>(\sqrt{FN}-F)/2$라는 것을 알 수 있다.

이번에는 CCD2와 CCD1의 효율성을 비교해 보자. b_{ij}를 추정하는 관점에서 CCD1에 대한 CCD2의 상대효율은 다음과 같이 얻어진다.

$$E(CCD2|CCD1)=\frac{(F+2\alpha^2)^2(F+T)}{(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^2(F+S)} \tag{4.5}$$

식(4.5)로부터 $E(CCD2|CCD1)>1$일 조건 즉 CCD2가 CCD1보다 효율적일 조건은

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 < \frac{1}{2}\left\{(F+2\alpha^2)\sqrt{\frac{F+T}{F+S}} - F\right\} \tag{4.6}$$

임을 얻게 된다.

식(1.2)와 식(3.1)을 식(4.5)에 대입하여 계산하면 1이라는 값이 나온다. 이로부터 직교CCD2는 직교CCD1과 같은 정도의 효율성을 갖는다는 것을 알 수 있다. 더욱이 직교CCD2는 3^k요인계획과 효율성이 같다는 것이 위에서 밝혀졌으므로, b_{ij}를 추정하는 관점에서 볼 때 3^k요인계획과 직교CCD1 및 직교CCD2는 모두 동일한 효율성을 갖는다. 또한 CCD2가 3^k요인계획과 직교CCD1보다 효율적일 조건은 $\alpha_1^2 + \alpha_2^2$이 <표 1>에 기입되어 있는 값보다 작은 값을 갖는 것이다.

이번에는 CCD2와 회전성을 갖는 CCD1의 효율 비교를 생각해 보자. 식(1.3)을 식(4.6)에 대입해 보면 알 수 있듯이, CCD2가 회전CCD1보다 효율적일 조건은

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 < \frac{1}{2}\left\{(F+2\sqrt{F})\sqrt{\frac{F+T}{F+S}} - F\right\} \tag{4.7}$$

이다. 예를 들어 $k=3$, $p=0$ (즉 $F=8$)인 경우 $m_0=1$개의 중심점을 사용하는 회전 CCD1 ($\alpha=1.682$)과 $n_0=1$개의 중심점을 사용하는 CCD2를 비교해 보면 식(4.7)은

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 < 4.080 \tag{4.8}$$

이 된다. 회전성을 갖는 CCD 2중에서 식(4.8)을 만족시키는 실험계획은 쉽게 찾을 수 있다. 예를 들어 $\alpha_1=1$, $\alpha_2=1.627$인 CCD2는 식(3.2)를 만족시키므로 회전성을 가지며, $\alpha_1^2+\alpha_2^2=3.647$로서 식(4.8)도 만족시키므로 회전CCD1보다 효율적이다. 구체적인 상대효율은 식(4.5)에 의하여

$$\frac{(8+2\sqrt{8})^2(8+13)}{\{8+(2)(3.647)\}^2(8+7)} = 1.116$$

으로 얻어진다.

4.2 순수2차계수 b_{ii}를 추정하는 관점에서 비교

이번에는 순수2차계수(pure quadratic coefficient) b_{ii}를 추정하는 관점에서 CCD2의 효율성을 3^k요인계획 및 CCD1과 비교하는 문제를 생각해 보자. 여기서도 식(4.2)의 스케일링을 적용한다.

먼저 식(4.1)을 이용하면 3^k요인계획에 대한 CCD2의 상대효율이 다음과 같이 얻어진다.

$$E(CCD2|3^k\text{요인계획}) = \frac{2(F+T)}{e(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^2} \tag{4.9}$$

여기서 분모의 e는 제2절에서 정의된 바와 같다.

CCD2에서 b_{ii}의 분산은 대단히 복잡하기 때문에 CCD2가 3^k요인계획보다 효율적일 조건이 b_{ij}를 추정하는 경우처럼 명백한 형태로 나타나지는 않으나, 다음과 같은 방식으로 비교할 수 있다. $k=3$인 경우 $F=8$개의 요인실험점과 $4k=12$개의 축점 및 $n_0=1$개의 중심점을 갖는 직교 CCD2 ($\alpha_1=1$, $\alpha_2=1.217$)를 3^3요인계획과 비교해 보면 식(4.9)의 값이 1.597로 나온다. 따라서, 이 직교 CCD2가 3^3요인계획보다 훨씬 효율적임을 알 수 있다.

다음으로 CCD1에 대한 CCD2의 상대효율은

$$E(CCD2|CCD1) = \frac{e_1(F+2\alpha^2)^2(F+T)}{e(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^2(F+S)} \tag{4.10}$$

로 얻어진다. 여기서 e_1은 CCD1에 관련된 값으로서

$$e_1 = \frac{(k-1)FS-4(k-1)F\alpha^2+2(M-2k+2)\alpha^4}{2\alpha^4\{kFS-4kF\alpha^2+2(M-2k)\alpha^4\}}$$

이다. $k=3$, $p=0$인 경우 $n_0=1$, $\alpha_1=1$, $\alpha_2=1.217$인 직교 CCD2와 $m_0=1$, $\alpha=1.215$인 직교CCD1을 비교해 보자. 식(4.10)의 값을 계산해 보면 1.462로 나와 CCD2가 더 효율적이라는 것을 말해 준다. 또 하나의 예로 역시 $k=3$, $p=0$인 경우 중심점을 두 개씩 사용하는 회전CCD2 ($n_0=2$, $\alpha_1=1$, $\alpha_2=1.627$)와 회전CCD1 ($m_0=2$, $\alpha_1=1.682$)을 식(4.10)에 의해 비교해 보면 $E(CCD2|CCD1)=1.429$로 얻어져 역시 CCD2가 더 효율적임을 알 수 있다.

4.3 1차계수 b_i를 추정하는 관점에서 비교

4.1절의 시작 부분에서와 같은 방식으로 논의할 수 있다. 식(2.2)에 의해 CCD2에서 $Var(b_i)=\sigma^2/(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)$인데, $[ii]=1$이 되도록 스케일링을 한 뒤의 $Var(b_i)$는 여기에 $1/g^2$을 곱한 것이므로 $\sigma^2/(F+T)$가 된다. 같은 방법으로 구해 보면, 스케일링 뒤의 $Var(b_i)$는 3^k요인계획의 경우 $\{\sigma^2/(2)(3^{k-1})\}(2/3)=\sigma^2/3^k$이며 CCD1의 경우에는 $\{\sigma^2/(F+2\alpha^2)\}\{(F+2\alpha^2)/(F+S)\}=\sigma^2/(F+S)$이다. 따라서 식(4.1)에 의하여 상대효율을 구하면 $E(CCD2|3^k$요인계획$)$과 $E(CCD2|CCD1)$의 값이 모두 1로 나온다. 이것은 1차계수 b_i를 추정하는 관점에서 CCD2와 CCD1 및 3^k요인계획의 효율성이 축점의 위치와 중심점의 수에 관계없이 모두 동일하다는 것을 말해 준다.

참고문헌

[1] 박성현(1995), *현대실험계획법* (증보판), 민영사.
[2] Box, G.E.P. and Hunter, J.S.(1957), Multifactor experimental design for exploring response surfaces, *Annals of Mathematical Statistics*, 28, 195-241.
[3] Box, G.E.P. and Wilson, K.B. (1951), On the experimental attainment of optimum conditions, *Journal of the Royal Statistical Society*, B13, 1-45.
[4] Khuri, A.I. and Cornell, J.A.(1996), *Response Surfaces : Designs and Analyses* (2nd ed.), Marcel Dekker, Inc.
[5] Myers, R.H. (1976), *Response Surface Methodology*, Blacksburg, VA : Author (distributed by Edwards Brothers, Ann Arbor, MI).