시뮬레이션 실험에서 중심합성계획의 응용

권 치 명1)

Application of Central Composite Design in Simulation Experiment

Chimyung Kwon

Abstract

중심합성계획(central composite design: ccd)은 반응 표면이 곡면적인 특성을 나타낼 때 반응 공간을 추정하기 위해 사용되는 실험계획이다. 반응공간이 2차 회귀모형으로 나타나는 경우에 반응곡면의 변화량을 알기 위해서는 변수의 수준이 3이상이 되어야하는데 ccd는 적은 횟수의 실험으로 곡면을 효과적으로 추정하기 위해 2^k 요인실험에 추가적으로 중심점(central point)과 축점(axial point)을 표본점에 포함시키는 계획이다.

본 연구에서는 시뮬레이션 실험에서 반응변수가 2차 회귀모형으로 근사되는 경우에 ccd를 이용하여 관심 성과치의 반응표면을 추정하고자 한다. 일반적인 실험에서와는 달리 시뮬레이션 실험에서는 두개의 표본점(인자 수준의 조합)에서 분석자가 공통 난수계열(common random number series)을 부여하여 시뮬레이션 시스템 요소의 변화과정을 유사하게 통제할 수 있다. 일반적으로 공통난수법(common random number method)에 의해 얻어지는 두 표본점에서의 반응변수는 서로 양의 상관관계를 가지며 대조 난수(antithetic random number)에 의한 두 반응변수는 음의 상관성을 가지는 것으로 알려졌다.

본 연구는 ccd의 표본점에 공통난수와 대조난수 법을 이용하여 회귀모형의 파라미터를 효과적으로 추정하는 방법을 조사하고 이를 (s, S) 재고관리 모형에 적용하여 그 효율성을 평가하고자 한다.

Key Words: 중심합성계획, 공통난수, 대조난수, (s, S) 재고관리모형

1) 동아대학교 경영정보과학부

1. 서론

시뮬레이션 실험계획에서 성과에 영향을 미치는 설명변수의 수준에서 성과 반응변수의 표면이 2차 회귀모형으로 근사될 수 있는 경우를 가정해보자. 예를 들어 (s, S) 재고관리 모형에서 총 재고비용은 s와 S의 2차원 공간에서 곡면 형태의 반응 표면으로 나타난다[1]. 만일 모형의 설명변수가 적지 않다면 반응 표면을 추정하기 위해서는 설계점(표본점)의 수가 증가함에 따라 많은 량의 시뮬레이션이 요구된다. 예를 들어 인자의 수가 4일 때 각 인자의 수준은 적어도 3개 이상이 되어야 하므로 전체적으로 64개 이상의 설계점에서 시뮬레이션을 수행해야한다. 이러한 문제를 보완하고 적은 횟수의 실험으로 반응 곡면을 추정하기 위해 중심합성계획(central composite design: ccd)이 자주 이용된다[3].

본 연구에서는 시뮬레이션 실험에서 반응표면이 2차 회귀모형으로 표현될 때 회귀모형의 평균과 설명변수의 파라미터를 효과적으로 추정하는 시뮬레이션 실험계획 문제를 다루고자한다.

일반적인 실험계획과는 다르게 시뮬레이션 실험에서는 시뮬레이션 모형의 각 요소에 난수를 할당하여 실제 상황을 재현함으로써 표본점(인자 수준의 조합)의 반응치를 구하는 과정을 분석자가 통제할 수 있다는 장점이 있다. 어떤 표본점에서 시뮬레이션 모형의 발전과정은 할당되는 난수계열(random number stream)에 의해 완전히 결정된다고 볼 수 있다. 임의의 표본점에서 확률적인 요소를 재현하기 위해서 사용되었던 난수계열을 다른 표본점에 동일하게 사용하여 시뮬레이션 외부 환경을 비슷하게 재현함으로써 두 표본점의 반응치들 사이에 상관관계를 유도할 수 있다. 즉 두 표본점에서 공통 난수(common random numbers)를 할당하여 얻은 두 반응치들 사이에는 양의 상관관계를 가질 수 있게 된다. 이와 유사하게 두 표본점에서 외부 환경을 서로 반대로 재현하면 이 때 얻어지는 두 표본점의 반응치는 음의 상관관계를 나타내는 것으로 알려져 있다[5, 9].

Schruben과 Margolin은 반응 표면이 1차 회귀모형으로 표현될 때 이러한 상관유도방법(correlation induction strategy)을 사용하여 표본점의 설계행렬(design matrix)이 직교행렬(orthogonal matrix)이고 두 개의 직교 불럭(orthogonal block)으로 나눌 수 있는 경우에 1차식의 계수 파라미터를 효율적으로 추정하는 방법을 제안하였다[9]. 이들이 제안한 방법(S-M 방법)은 독립적인 난수를 표본점에 할당하는 방법이나 모든 표본점에 동일한 난수를 할당하는 공통난수법보다 인자의 1차 계수 파라미터를 추정하는데 우수한 것으로 알려졌다. 2차 회귀모형을 추정하기 위한 상관유도방법에 대한 연구는 많지 않는데 이는 시뮬레이션 설계행렬이 2차 회귀모형에서는 두 개의 직교 불럭으로 나눌 수 없기 때문이다. 본 연구에서 다루게 될 중심합성계획에서도 설계행렬을 두 개의 직교행렬 불럭으로 나눌 수 없어 S-M 방법을 직접적으로 적용할 수 없지만 순수 2차식(pure second order)항에 대하여 변수 변환을 통하여 설계행렬을 직교행렬로 변환시킬 수 있다[7].

본 연구에서는 중심합성계획의 직교설계행렬이 직교 불럭으로 나눌 수 없으며 중심점(central point)의 수에 제한을 받지 않는 경우에 이를 반응표면의 2차 회귀모형을 추정하는 문제에 이용하여 모형의 파라미터를 효과적으로 추정하는 방법을 분석하고자 한다.

2. 반응표면 모형

반응성과에 영향을 미치는 설계인자

(design factor)의 수가 p 개이고 m개의 표본점으로 구성되는 시뮬레이션 실험 설계에서 표본점 i에서 반응표면의 값 y_i가 2차 회귀모형으로 근사될 수 있다면 y_i는 다음과 같이 표현된다.

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p}\beta_j\psi_j + \sum_{j=1}^{p}\beta_{jj}\psi_{ji}^2 + \sum_{j<k}\beta_{jk}\psi_{ji}\psi_{ki} + \epsilon_i,$$
$$i = 1,2,...,m; k = 1,2,...,p \quad (1)$$

여기서 ψ_{ji}는 표본점 i에서 인자 j의 수준이며 β_0는 미지의 상수이며 β_j는 1차식의 계수, β_{jj}는 2차식의 계수, β_{jk}는 인자 j와 k의 2차식 계수, ϵ_i는 모형의 오차를 각각 나타내며 $\epsilon_i \sim N(0,\sigma^2)$ 이다.

2차 회귀모형을 적합하기 위해서는 각 인자의 수준을 적어도 3개 이상 선택하여 실험을 시행해야한다. 인자 ψ_j의 수준을 동일한 거리가 되도록 3으로 선택하면 적절한 변환을 통하여 인자의 3 수준은 낮은 수준을 -1, 중심을 0, 높은 수준을 +1로 표현할 수 있다. 모든 인자를 이와 같이 변환시키고 표본점 i에서의 변환된 인자 j의 수준을 x_{ji}라 하면 모형 (1)은 다음과 같은 식으로 나타낼 수 있다.

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ji} + \sum_{j=1}^{p}\beta_{jj}x_{ji}^2 + \sum_{j<k}\beta_{jk}x_{ji}x_{ki} + \epsilon_i \quad (2)$$

이 식에서 순수 2차 항, 즉 x_{ji}^2을 m개 표본점의 평균 $\overline{x_j^2} = \sum_{i=1}^{m}x_{ji}^2$ 으로 중심화(centered)하면 다음과 같은 식으로 변환된다.

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p}\beta_j x_{ji} + \sum_{j=1}^{p}\beta_{jj}(x_{ji}^2 - \overline{x_j^2}) + \sum_{j<k}\beta_{jk}x_{ji}x_{ki} + \epsilon_i \quad (3)$$

반응벡터를 $y = (y_1, y_2, ..., y_m)'$, 모형의 파라미터 벡터를 β, X을 적절한 크기의 설계행렬, 오차 벡터 $\epsilon = (\epsilon_1, ..., \epsilon_m)'$로 각각 정의하면 위의 식은 다음과 같은 행렬식으로 표현된다.

$$y = X\beta + \epsilon, \quad (4)$$

여기서 $\epsilon \sim N(0,\sigma^2 I)$이다. 이 회귀모형의 최소자승 추정량은 $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y$ 로 나타난다.

3. 중심합성계획

설명변수(인자)가 p인 2차 회귀모형의 추정에서 중심합성계획의 표본점은 각 변수의 수준이 2인 $a = 2^p$개의 정방점(cubic point), 각 변수의 축을 따라 중심에서 각각 α와 $-\alpha$에 위치하는 $b = 2p$ 개의 축점(axial point) 그리고 c개의 중심점(center point)으로 구성된다. 따라서 전체 표본점의 수는 $m = a + b + c$ 이다. 예를 들어 설명변수가 2개이고 중심점이 1개인 중심합성계획에서 표본점은 9개가 되며 설계행렬은 다음과 같다.

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -1 & +1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & +1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

위의 행렬 X에서 4번째와 5번째 열을 열의 평균으로 중심화하면 다음과 같은 직교행렬로 변환시킬 수 있다.

$X=$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & +1 & .5 & .5 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & .5 & .5 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & +1 & .5 & .5 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & .5 & .5 & -1 & -1 \\ 1 & .5 & 0 & -.25 & -.5 & 0 & 0 \\ 1 & -.5 & 0 & -.25 & -.5 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & .5 & -.5 & -.25 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -.5 & -.5 & -.25 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -.5 & .5 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

설계행렬 X로부터 $(X'X)$을 구하면 이는 순수 2차항 x_j^2에 대응하는 열을 제외하고는 ($m \times m$) 대각행렬이 된다. 행렬 $(X'X)$의 일반적인 형태는 다음과 같이 나타난다.

$$X'X = M_{m \times m} + N_{m \times 1}{}' N_{m \times 1} \quad (8)$$

여기서 행렬 $M_{m \times m}$은 대각선 원소가 $(m, a+2\alpha^2, \cdots, a+2\alpha^2, s, \cdots, s, a, \cdots, a)$ 인 대각행렬이고;

$s = [a(b+c) - 4a\alpha^2 - 4\alpha^4 + 2m\alpha^4]/m$;

벡터$N_{m \times 1}$은

$(0, \cdots, 0, t^{1/2}, \cdots, t^{1/2}, 0, \cdots 0)'$이며;

$t = [a(b+c) - 4a\alpha^2 - 4\alpha^4]/m$ 이다[7].

4. 상관관계 유도전략

시뮬레이션 모형에서 확률적인 모형의 요소(component)가 h개 있을 때 각 요소에 난수계열 R을 할당하여 이들의 발전과정을 재현한다. 즉 난수가 할당되면 이에 대응하는 확률적인 특성이 결정됨으로써 표본점에서의 반응변수도 완전히 결정된다. 일반적으로 두 표본점에서 각각 독립적인 난수 계열(random number series)을 사용하면 두 반응변수는 서로 독립적이다 (즉 두 변수 사이의 상관계수는 0). 두 표본점 i와 k에서 공통난수 계열 $R = (r_1, r_2, \cdots r_h)$을 사용하면 두 반응변수 y_i와 y_k는 양의 상관계수를, 그리고 두 표본점에서 난수 계열 R과 대조난수 계열 $\overline{R} = (\overline{r_1}, \overline{r_2}, \cdots, \overline{r_h})$ (단 $\overline{r_i} = (1 - r_i)$)을 각각 사용하면 두 반응변수는 음의 상관관계를 나타내는 것으로 알려져 있다. 또한 일반적인 실험계획에서와 같이 각 표본점에서 반응치의 분산은 동일한 것으로 가정할 수 있으며 다른 임의의 두 표본점에서 공통난수를 사용할 때 두 반응치 사이의 상관계수 ρ_1도 같다고 가정할 수 있다. 그리고 임의 표본점에서 난수계열 R을 다른 표본점에서 대조난수계열 $\overline{R}$을 사용할 때 실현되는 두 반응치 사이의 상관계수 ρ_2는 동일하며 $0 \le -\rho_2 \le \rho_1$의 관계를 가지는 것으로 알려져 있다. 이러한 사실로부터 다음과 같이 가정할 수 있다 [5,9].

가정 1: $Var(y_i) = \sigma^2, i = 1, 2, \cdots, m$

가정 2: $Cov(y_i, y_l) = \rho_1 \sigma^2 (\ge 0), i \ne l$; 공통난수계열 R 사용.

가정 3: $Cov(y_i, y_l) = \rho_2 \sigma^2 (\le 0), i \ne l$; 난수계열 R과 대조난수 계열 $\overline{R}$ 사용.

가정 4: $0 \le -\rho_2 \le \rho_1$

반응치 사이에 상관관계를 유도하기 위해서 m 개의 표본점에서 처음 m_1개의 표본점은 공통난수계열 R을, 나머지 $m_2 = (m - m_1)$ 개의 표본점에서는 대조난수계열 $\overline{R}$을 할당하여 시뮬레이션을 수행하면 가정 1-3으로부터 반응변수의 분산-공분산 행렬은 다음과 같이 나타난다.

$$Cov(y) = \sigma^2 \begin{bmatrix} 1 & \rho_1 & \cdots & \rho_1 & \rho_2 & \cdots & \cdots & \rho_2 \\ \rho_1 & 1 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 1 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \rho_1 & \rho_1 & \cdots & \ddots & \rho_2 & \cdots & \rho_2 & \rho_2 \\ \rho_2 & \cdots & \cdots & \rho_2 & 1 & \rho_1 & \cdots & \rho_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \rho_1 & 1 & \vdots & \rho_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_2 & \rho_2 & \cdots & \rho_2 & \rho_1 & \rho_1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \sigma^2(1-\rho_1)I + \sigma^2(\rho_1+\rho_2)E \qquad (9)$$

여기서 E는 $(m \times m)$ 행렬로 모든 원소의 값아 1이다. 식 (9)은 다음 식으로 kxksof 수 있다.

$$Cov(y) = \sigma^2(1-\rho_1)I + \sigma^2(\rho_1+\rho_2)E$$
$$= \frac{1}{2}(\rho_1-\rho_2)XGX' + \frac{1}{2}(\rho_1+\rho_2)ZZ' + (1-\rho_1)I \qquad (10)$$

단, 여기서 정방행렬 G의 차원은 X의 열의 수와 같으며 $(1,0,\cdots,0)'(1,0,\cdots,0)$이고 Z는 $(m \times 1)$ 벡터로 모든 요소의 값은 1이다. 공분산 행렬이 식 (10)과 같이 나타나는 경우에 회귀모형의 가중 최소자승 추정량(weighted least squares estimator)과 단순 최소자승 추정량(ordinary least squares estimator)은 같은 것으로 알려져 있다. 따라서 회귀모형 (4)에서 최소자승 추정량은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$Cov(\hat{\beta}) = (X'X)^{-1}X'Cov(y)X(X'X)^{-1}$$
$$= \sigma^2(1-\rho_1)(X'X)^{-1} + \frac{\sigma^2}{2}(\rho_1-\rho_2)\begin{bmatrix} 1 & 0_{1\times m}' \\ 0_{m\times 1} & 0_{mm} \end{bmatrix} \qquad (11)$$

5. 중심합성계획 실험

5.1 시뮬레이션 모형

(s, S)재고관리 시스템에서 기간별 평균 재고관리 비용은 s와 S의 2차원 공간에 대해 곡면 형태의 표면으로 나타난다[1]. 재고관리비용의 영향요인으로는 재고정책, 수요량 함수, 인도기간, 수요간 시간 발생분포 등을 들 수 있는데 이런 요인을 모두 고려하여 재고비용함수를 추정하는 데는 많은 노력이 든다. 본 연구는 잘 알려진 이 시스템을 대상으로 중심합성계획을 적용하여 시뮬레이션을 통하여 반응표면을 추정하고자 한다.

(s, S)재고관리 시스템은 기간별로 기간초에 재고수준을 검토하여 재고량이 재주문점 s보다 적으면 S만큼 주문하고 아니면 주문을 하지 않는 재고관리 시스템이다. 수요량 D_i은 독립적이며 그 분포는 다음 표와 같으며 수요발생 시간간격은 $f(t)$~ expon(0.1)을 따른다고 가정한다.

표1. 수요량의 확률분포

수요량	1	2	3	4
확률	0.2	0.3	0.3	0.2

수요량에 대한 분포, 제품 인도기간, backlogging 정책, 주문비용, 재고 및 재고부족 비용이 규정되면 재고관리 정책, 즉 재 주문점 s와 주문량 S에 따라 총 재고관리 비용이 결정된다. 총 재고관리 비용은 주문비용, 재고유지 비용과 재고부족 비용의 합으로 나타나고, 주문비용은 (고정비 + 제품 단가 X 주문량)이며 재고비용 (재고부족비용)은 [단위기간 단위제품의 재고유지 비용 (재고부족비용) X 평균 재고량(재고부족량)]이다. 제품 인도기간은 일양분포 U(0.5, 1)를 따르며 backlogging이 허용된다. 기간 평균 재고관리 비용(반응변수), y가 변수 s와 S의 2차식으로 근사될 수 있다고 가정하고 중심합성계획을 적용하여 y을 추정하고자 한다.

5.2 모형설계점과 상관관계 유도전략

반응표면의 영향인자로 편의상 2개의 인자 즉 s와 S을 고려할 경우 중심합성계획의 설계행렬은 식(6)과 같다. 설계행렬에서 축점의 값 α을 0으로 하면 설계점의 인자조합은 표2 와 같다. 가정된 시뮬레이션 모형에서 확률적인 특성을 가지는 모형의 요소는 수요량 함수, 수요발생 간 시간 그리고

제품 인도기간이다. 설계점 1, 4, 5, 7 그리고 9에서는 모두 동일한 난수계열 $R = (r_1, r_2, r_3)$을 사용하여 시뮬레이션을 실행하고 설계점 2, 3, 6, 8에서는 대조난수 계열 $\overline{R}$을 공통 사용하여 시뮬레이션을 실행한다.

표2. 중심합성계획의 설계점

설계점	인자 조합	
i	$s\ (x_{1i})$	$S\ (x_{2i})$
1	20(-1)	60(-1)
2	40(+1)	60(-1)
3	20(-1)	80(+1)
4	40(+1)	80(+1)
5	40(+1)	70(0)
6	20(-1)	70(0)
7	30(0)	80(+1)
8	30(0)	60(-1)
9	30(0)	70(0)

5.2 실험결과의 분석

시뮬레이션 실험은 우선 9개의 설계점에서 서로 독립적인 난수계열을 할당하여 얻는 반응변수를 사용하여 반응모형을 추정한 다음, 5.2 절에서 설명한 방법으로 반응표면을 추정한다. 두 방법으로 구한 추정량의 분산, 추정량의 분산-공분산 행렬의 행렬식과 trace를 사용하며 추정량의 효율성을 평가하고자 한다.

6. 결론

본 연구는 시뮬레이션 성과의 반응표면이 인자들의 2차식으로 나타나는 경우에 반응표면을 효과적으로 추정하기 위해서 중심합성계획법을 사용하였다. 인자의 2차 항이 회귀모형에 포함되면 설계행렬을 두 개의 직교하는 블럭으로 나눌 수 없으므로 시뮬레이션 설계 모형의 동일한 실험에 공통난수법과 대조난수법을 동시에 사용하기가 용이하지 않다. 본 연구는 2차 회귀모형의 시뮬레이션 실험설계에서 두 개의 난수 할당법을 결합하여 사용하는 방법을 제안하고 (s, S) 재고관리 시스템에 적용하여 제안된 방법의 효율성을 평가하고자 한다.

참고문헌

1. 권치명. (2003). (s, S) 재고관리 시스템에 대한 확률최적화 기법의 응용. 한국시뮬레이션학회 논문지, 제12권 제2호. 1-12.

2. Barton, R. R. (2001). Design of Simulation Experiment. *Proceedings of the 2001 WSC.* 47-52.

3. Box, G. E. P. and Draper, N. R. (1987). *Empirical Model Building and Response Surface.* John Wiley & Sons, New York.

4. Goldsman, D. and Tokol, G. (2000). Output Analysis Procedures for Computer Simulations. *Proceedings of the 2000 WSC.* 39-45.

5. Kwon, C. M. and Tew, J. D. (1994). Combining Antithetic and Control Variates in Designed Simualtion Experiments. *Management Science,* 40, No. 8. 1021-1034.

6. Law, A. M. and Kelton, W. D. (1991). *Simulation Modeling and Analysis.* McGraw Hill, New York.

7. Myers, R. H. (1976). *Response Surface Methodology.* Edward Brothers, Ann Arbor.

8. Sanchez, S. M. (2000). Robust Design: Seeking the Best of All Possible Worlds. *Proceedings of the 2000 WSC.* 69-76.

9. Schruben, L. W. and Margolin, B. H.

(1978). Pseudorandom Number Assignment in Statistically Designed simulation and Distribution Sampling Experiments. *JASA,* 73, 504-525.