

## 반응표면분석에 대한 교육 시 Maple의 사용

장대홍<sup>1)</sup>

요약

반응표면분석에 대한 교육은 실험계획법의 한 단원으로서 가르치는 데 실습시 통계 패키지를 사용한다. 이 때 수학패키지를 병행하여 사용하면 학습효과를 증진시킬 수 있다.

주요용어: 반응표면분석, 통계패키지, 수학패키지

### 1. 서론

반응표면분석은 복수 개의 설명변수들이 복합적인 작용을 함으로써 한 개나 여러 개의 반응변수들에 영향을 줄 때 이러한 반응의 변화가 이루는 반응표면에 대한 통계적인 분석 방법을 가리킨다. 이 반응표면분석은 회귀분석, 실험계획 및 최적화이론을 아우르는 학제 간 연구 학문분야이다. 통상적으로 학부나 대학원에서 반응표면분석에 대한 교육은 실험계획법의 한 단원으로서 가르치는 데 실습시 SAS, Minitab, Statistica, Design Expert 등과 같은 통계패키지를 사용한다. 이 때 수학패키지를 병행하여 사용하면 학습효과를 증진시킬 수 있다. 일반에게 널리 알려진 수학패키지로는 MATHEMATICA와 Maple이 있다. 이러한 수학패키지는 자료분석의 입장에서는 단점들을 갖고 있으나 수치계산뿐만 아니라 symbolic computation을 할 수 있고 강력한 그래픽스 기능이 있다는 장점들이 있다. 이러한 장점들은 통계패키지들이 갖고 있지 못한 기능들이다. 통계패키지도 그래픽스 기능이 있으나 통계기법을 중심으로 전개되는 반면 수학패키지는 수학함수를 중심으로 전개된다. 수학패키지를 이용한 통계학교재들로서는 기초통계학, 확률론 및 수리통계학을 중심으로 Abell의 2인(1999), Karian과 Tanis(1999), Hastings(2000), Rose와 Smith(2002), Rafter의 2인(2003) 등이 있다. 우리는 반응표면분석에 대한 교육 시 자료를 통한 실습은 통계패키지를 기본으로 하고 수학패키지를 보조수단으로 사용하는 교수시스템을 구현하여 볼 수 있다.

### 2. 수학패키지의 사용

반응표면분석은 다음과 같이 크게 3 가지 단계로 나눌 수 있다.

1. 실험계획의 결정
2. 반응표면모형 분석
3. 최적반응조건의 결정

---

1) (608-737) 부산광역시 남구 대연3동 599-1 부경대학교 자연과학대학 수리과학부 통계학전공 교수

그러므로 수학패키지를 활용하는 교수시스템 내용도 위의 세 단계로 나누어진다.

(1) 실험계획의 결정

1993년부터 2005년까지 반응표면분석을 응용한 전국 학회지 및 학술발표회 논문집 발표 논문 81편(반응표면분석 이론에 관한 논문은 제외) 중 무려 76편(비율로 계산하면 94%)이 중심합성계획을 사용하였다. 그만큼 중심합성계획은 2차 반응표면모형을 구하고 최적조건을 구하는 데 빈번하게 쓰이는 실험계획이다. 그래서 앞으로의 논의도 편의상 요인의 수가 두 개이고 축점을  $\alpha$ 로 갖는 중심합성계획을 중심으로 하겠다. 2차 추정회귀식은  $\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2$ 라 하자.

Maple에서 실험계획의 입력은 크게 worksheet 상에서 직접 입력하는 방법, Maple이 제공하는 spreadsheet를 사용하는 방법, 외부 데이터파일을 이용하는 방법이 있다. 이 중 Maple이 제공하는 spreadsheet를 사용하는 방법을 보면 다음 그림 1과 같은 spreadsheet를 이용하여 그림 2와 같이 계획행렬(design matrix)  $D$ (원점의 개수가 4개)를 구성한 후 그림 3과 같이 2차 모형행렬(model matrix)  $X$ 를 만들면

Spreadsheet

	A	B	C	D
1	$x_1$	$x_2$		
2	-1	-1		
3	1	-1		
4	-1	1		
5	1	1		
6	$-\alpha$	0		
7	$\alpha$	0		
8	0	$-\alpha$		
9	0	$\alpha$		
10	0	0		
11	0	0		
12	0	0		
13	0	0		
14				

그림 1. spreadsheet

"Design Matrix"

$$D1 = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ -\alpha & 0 \\ \alpha & 0 \\ 0 & -\alpha \\ 0 & \alpha \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

그림 2. 계획행렬

"Model Matrix"

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

그림 3. 모형행렬

표본의 크기를  $N$ 이라 할 때 적률행렬(moment matrix)  $\frac{1}{N}X'X$  및 정밀도행렬(precision matrix)  $N(X'X)^{-1}$ 을 구한 후 이 정밀도행렬을 이용하여  $\alpha$ 의 변화에 따른 추정회귀계수들의 분산 및 공분산들의 변화패턴을 표시하면(오차항의 분산  $\sigma^2$ 을 무시하자.) 다음 그림 4와 같다.  $\alpha$ 의 변화에 따른 추정회귀계수들의 분산 및 공분산들의 변화패턴이 다양함을 알 수 있다. 특히  $Var(b_{12})$ 는  $\alpha$ 의 변화에 관계없이  $\frac{1}{4}$ 로 일정함을 알 수 있다.

```

> print("Moment Matrix"):scalarmul(XX, 1/12):
"Moment Matrix"
      1      0      0      1/3 + alpha^2/6      1/3 + alpha^2/6      0
      0      1/3 + alpha^2/6      0      0      0      0
      0      0      1/3 + alpha^2/6      0      0      0
      1/3 + alpha^2/6      0      0      1/3 + alpha^4/6      1/3      0
      1/3 + alpha^2/6      0      0      1/3      1/3 + alpha^4/6      0
      0      0      0      0      0      1/3

> print("Precision Matrix"):scalarmul(IXX, 12):
"Precision Matrix"
      3(alpha^4 + 4) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4))      0      0      -3(alpha^2 + 2) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4))      -3(alpha^2 + 2) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4))      0
      0      6 / (alpha^2 + 2)      0      0      0      0
      0      0      6 / (alpha^2 + 2)      0      0      0
      -3(alpha^2 + 2) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4))      0      0      3(5alpha^4 - 4alpha^2 + 8) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4)alpha^4)      3(alpha^4 + 4alpha^2 - 8) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4)alpha^4)      0
      -3(alpha^2 + 2) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4))      0      0      3(alpha^4 + 4alpha^2 - 8) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4)alpha^4)      3(5alpha^4 - 4alpha^2 + 8) / (2(alpha^4 - 2alpha^2 + 4)alpha^4)      0
      0      0      0      0      0      0      3
    
```

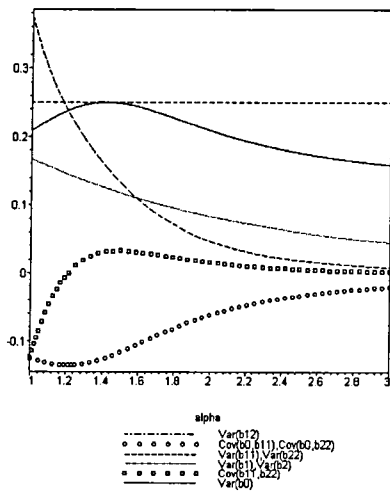


그림 4.  $\alpha$ 의 변화에 따른 추정회귀계수들의 분산 및 공분산들의 변화패턴

중심점의 개수를  $n0$ 라 놓으면 다음과 같이 적률행렬 및 정밀도행렬을 만들 수 있다.

```

> print("Moment Matrix"); scalar mul(XX, 1/(8*n0));

```

$$\begin{matrix}
 & & & \text{"Moment Matrix"} & & & \\
 \begin{bmatrix}
 1 & 0 & 0 & \frac{4+2\alpha^2}{8+n0} & \frac{4+2\alpha^2}{8+n0} & 0 \\
 0 & \frac{4+2\alpha^2}{8+n0} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & \frac{4+2\alpha^2}{8+n0} & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{4+2\alpha^2}{8+n0} & 0 & 0 & \frac{4+2\alpha^4}{8+n0} & \frac{4}{8+n0} & 0 \\
 \frac{4+2\alpha^2}{8+n0} & 0 & 0 & \frac{4}{8+n0} & \frac{4+2\alpha^4}{8+n0} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{8+n0}
 \end{bmatrix}
 \end{matrix}$$

```

> print("Precision Matrix"); scalar mul(IXX, 3*n0);

```

$$\begin{matrix}
 & & & \text{"Precision Matrix"} & & & \\
 \begin{bmatrix}
 \frac{(8+n0)(\alpha^4+4)}{n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16} & 0 & 0 & -\frac{(8+n0)(2+\alpha^2)}{n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16} & -\frac{(8+n0)(2+\alpha^2)}{n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16} & 0 \\
 0 & \frac{8+n0}{2(2+\alpha^2)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & \frac{8+n0}{2(2+\alpha^2)} & 0 & 0 & 0 \\
 -\frac{(8+n0)(2+\alpha^2)}{n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16} & 0 & 0 & \frac{(8+n0)(n0\alpha^4+6\alpha^4-8\alpha^2+2n0+8)}{2(n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16)\alpha^4} & \frac{(8+n0)(\alpha^4+4\alpha^2-n0-4)}{(n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16)\alpha^4} & 0 \\
 -\frac{(8+n0)(2+\alpha^2)}{n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16} & 0 & 0 & \frac{(8+n0)(\alpha^4+4\alpha^2-n0-4)}{(n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16)\alpha^4} & \frac{(8+n0)(n0\alpha^4+6\alpha^4-8\alpha^2+2n0+8)}{2(n0\alpha^4+4\alpha^4-16\alpha^2+4n0+16)\alpha^4} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2+\frac{n0}{4}
 \end{bmatrix}
 \end{matrix}$$

이렇게 구한 정밀도행렬을 이용하여  $n_0$ 와  $\alpha$ 의 변화에 따른 추정회귀계수들의 분산 및 공분산들의 변화패턴을 표시하면(오차항의 분산  $\sigma^2$ 을 무시하자.) 다음 그림 5와 같다.  $n_0$ 와  $\alpha$ 의 변화에 따른 추정회귀계수들의 분산 및 공분산들의 변화패턴이 다양함을 알 수 있다. 특히  $Var(b_{12})$ 는  $n_0$ 와  $\alpha$ 의 변화에 관계없이  $\frac{1}{4}$ 로 일정함을 알 수 있고  $Var(b_1)$ 과  $Var(b_2)$ 는  $n_0$ 와 관계없고  $\alpha$ 에만 의존함을 알 수 있다.

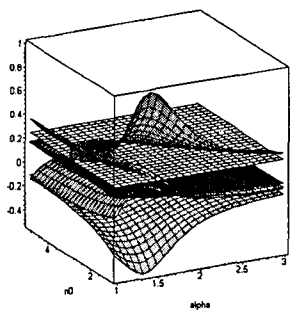


그림 5.  $n_0$ 와  $\alpha$ 의 변화에 따른 추정회귀계수들의 분산 및 공분산들의 변화패턴

## (2) 반응표면모형 분석 및 최적조건의 결정

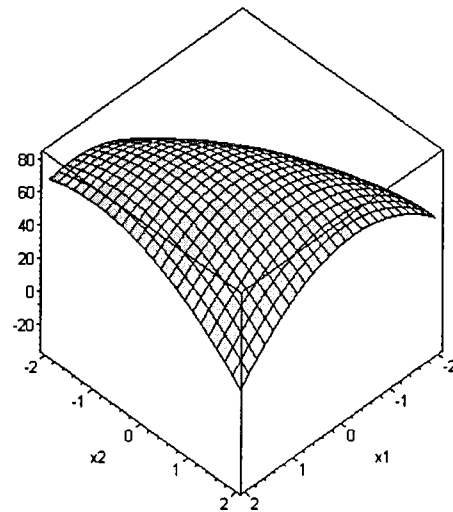
Myers와 Montgomery(2002) 책에 나와 있는 예제를 이용하자. 실험계획으로  $\alpha = \sqrt{2}$ 이어서 회전계획인 중심합성계획을 사용하였다. 설명변수  $x_1$ 와  $x_2$ 는 각각 반응온도(°C)와 촉매농도(%)에 대한 코드화변수이고 반응변수는 화학반응 변환비율이다. 이 자료를 이용하여 2차 회귀식을 구하면 다음과 같다.

$$\hat{y} = 79.75 + 10.178x_1 + 4.216x_2 - 8.5x_1^2 - 5.25x_2^2 - 7.75x_1x_2$$

이 추정반응식을 그려 보면 다음과 같다.

## □ Fitted regression model

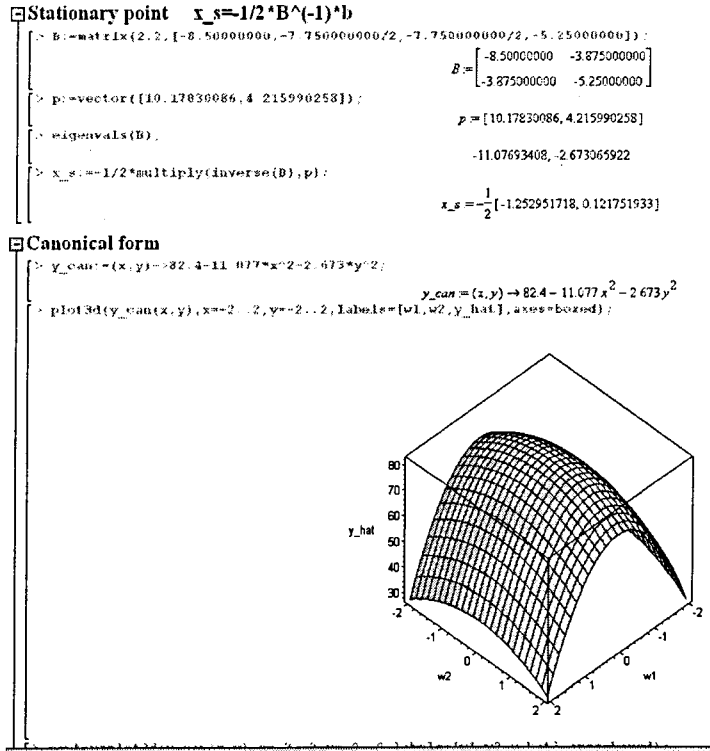
```
> y_hat := (x, y) -> 79.75 + 10.178*x + 4.216*y - 8.5*x^2 - 5.25*y^2 - 7.75*x*y;
                                     y_hat := (x, y) -> 79.75 + 10.178*x + 4.216*y - 8.5*x^2 - 5.25*y^2 - 7.75*x*y
> plot3d(y_hat(x, y), x=-2..2, y=-2..2, labels=[x1, x2, y_hat], axes=boxed);
```



정준분석을 행하여 정상점을 구하면  $(x_1, x_2) = (0.627, -0.061)$ 이고 이 정상점에서의 추정반응값은 82.4이다. 고유값을 구하면  $\lambda_1 = -11.077, \lambda_2 = -2.673$ 이 된다. 이 두 고유값의 부호가 모두 음수이므로 정상점은 최대점이 된다. 추정반응식을 고유값을 이용한 식으로 표현하면

$$\hat{y} = 82.4 - 11.077w_1^2 - 2.673w_2^2$$

이 된다. 이 추정반응식을 그려 보면 다음과 같다.



### 3. 결론

반응표면분석에 대한 교육 시 통계패키지 뿐만이 아니라 수학패키지를 병행하여 사용하면 반응표면분석에 대한 교육 학습효과를 증진시킬 수 있다.

### 참고문헌

- [1] Abell, M. L., Braselton, J. P., and Rafter, J. A.(1999). *Statistics with Mathematica*, Academic Press.
- [2] Hastings, K. J.(2000). *Introduction to Probability with Mathematica*, Lewis Publishers, Inc.
- [3] Karian, Z. A. and Tanis, E. A.(1999). *Probability and Statistics: Exploration with Maple*, Prentice Hall.
- [4] Rafter, J. A., Braselton, J. P., and Abell, M. L.(2003). *Statistics with Maple*, Academic Press.
- [5] Rose, C. and Smith, M. D.(2002). *Mathematical Statistics with Mathematica*, Springer Verlag.
- [6] Myers, R. H. and Montgomery, D. C.(2002). *Response Surface Methodology*, John Wiley, 56p.