研究論文

# 반응표면실험을 위한 3-수준 구형(球形) 실험설계: 구형 실험지역의 반경이 요인 수에 따라 변화하도록 구축된 설계[1)]

이 우 선

성신여자대학교 통계학과

임 성 수

고려대학교 정보통계학과

# Some 3-Level Spherical Designs for Response Surface Experiments: Designs Constructed for the Radius of the Spherical Experimental Region to Vary with the Number of Factors

Woo Sun Lee

Department of Statistics, Sungshin Women's University

Sungsue Rheem

Department of Informational Statistics, Korea University

## Abstract

Response surface designs can be classified, according to the shape of the experimental region, into spherical designs and cuboidal designs. Among the central composite design(CCD)s and the Box-Behnken design(BBD)s that are popular in practice, when the number of factors is $k$, spherical designs are the CCDs with the axial value being $\sqrt{k}$ and the BBDs, and cuboidal designs are the CCDs with the axial value being 1. With the CCDs having $\sqrt{k}$ as the axial value, the radius of the experimental region varies with thnumber of factors, but these designs are the 5-level designs. With the BBDs that are 3-level designs, the radius of the experimental region does not vary with the number of factors. In this article, we propose the 3-level spherical designs which are constructed so that the radius of the experimental region varies with the number of factors.

1) 이 논문은 1999년도 성신여자대학교 학술연구 조성비 지원에 의하여 연구 되었슴

# 1. 서론

반응표면설3계(response surface design)들은 실험지역의 모양에 따라 구형 설계(球形設計, spherical design, 구형 지역을 위한 설계)들과 입방형 설계(立方形設計, cuboidal design, 입방형 지역을 위한 설계)들로 분류될 수 있다. 실용적으로 많이 사용되는 반응표면설계들인 중심합성설계(central composite design, CCD; Box and Wilson, 1951)들과 Box-Behnken 설계(BB design, BBD; Box and Behnken, 1960)들을 구형 설계와 입방형 설계로 분류할 수 있다. CCD의 주요 결정요소로 각 요인 축(軸, axis)상의 설계점(design point)과 설계의 중심점 간의 거리 $\alpha$(흔히 axial value라고 함)가 있으므로, CCD를 CCD($\alpha$=어떤 값)으로 표기하면, CCD($\alpha=\sqrt{k}$)와 BBD는 구형설계에 해당하고 CCD($\alpha=1$)은 입방형 설계이다. 여기에서 $k$는 요인들의 개수(個數)를 뜻한다.

구형 설계인 CCD($\alpha=\sqrt{k}$)에서는 실험 지역의 반경(radius)이 $\sqrt{k}$로 요인 수에 따라서 변화하는데, 이 실험설계에서 각 요인이 취할 수 있는 수준값들은 $-\sqrt{k}$, -1, 0, 1, $\sqrt{k}$로 다섯 개이므로, CCD($\alpha=\sqrt{k}$)는 5-수준 구형 설계이다. 그런데, 실험수행을 용이하게 하기 위하여 각 요인의 수준 값들을 5개 보다 적게, 즉 3개로 해야 하는 상황이 발생할 수 있다(Box and Draper, 1987, p. 515). 이런 상황에서 사용할 수 있는 반응표면설계로는 CCD($\alpha=1$)과 BBD가 있는데, CCD($\alpha=1$)은 입방형 설계이고, BBD는 구형 설계이다. CCD($\alpha=1$)의 실험지역은 $k$-차원의 입방체가 되는데, 이 입방체의 내부 중심점에서 각 꼭지점까지의 거리는 $\sqrt{k}$로 당연히 요인 수에 따라서 변화한다.

만일, 연구자가 3-수준 실험을 실시하면서 실험지역이 구형이기를 원하면, 현재까지는 BBD를 사용하여야 했었다.

BBD는, 각 요인이 취할 수 있는 수준값들이 -1, 0, 1인 3-수준 설계로, 경제적 또는 물리적 제약조건 때문에, 모든 요인 수준들을 동시에 고수준(1)으로, 또는 저수준(-1)으로, 또는 고수준과 저수준의 조합으로 구성하는 것이 불가능하여서, 요인 수준들 중 일부는 중간 수준(0)으로 할 필요가 있는 경우에 적절한 실험설계이다. 그런데, 반응표면방법론 관련 서적 또는 소프트웨어에 소개되어 있는 BBD들을 보면, 요인 수가 3, 4 또는 5일 때에는 실험지역의 반경이 $\sqrt{2}$에 머물러 있고, 요인 수가 6 또는 7일 때에는 실험지역의 반경이 $\sqrt{3}$에 머물러 있어 CCD와는 달리 요인 수에 따라 변화하지 않음을 볼 수 있다. 그리고, 요인수가 4 이상일 때, BBD는 요인 수에 비해 실험지역이 상대적으로 좁다는 문제점이 있다.

이에 본 논문에서는 구형 지역을 위한 3-수준 반응표면설계로 실험지역의 반경이 요인 수에 따라 변화하도록 구축된 설계를 제안한다. 본 실험설계에서 실험지역의 반경은 $\sqrt{k-1}$ 이 된다. 이 실험설계의 구축법을 설명하고, $k$ = 3, 4, 5, 6 일 때의 실험설계들을 구체적으로 제시한다. $k$ = 3 일 경우, 본 실험설계는 BBD와 일치하게 된다.

# 2. 실험설계의 구축방법,3-요인 실험설계 및 평가 측도

## 2.1 실험설계의 구축방법 및 3-요인 실험설계의 예

$k$를 요인수라 할 때, 먼저 $(k-1)$개의 열(column)로 이루어지는 2-수준 요인설계를 택하여 이를 기본 요인설계(basic factorial)라 한자. $(k-1)$개의 열과 2개의 수준을 갖는 기본 요인설계는 full factorial, fractional factorial, 그리고 Plackett-Burman 요인설계 중에서 택한다. 기본 요인설계를 택한 후, 기본 요인설계의 왼쪽에 0열을 추가해 part 1을 만든다. $k$=3인 경우 (basic factorial: $2^2$), part 1은 다음과 같다.

$$\begin{matrix} 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{matrix}$$

다음, part 1에서 제 1열과 제 2열을 서로 교환(interchange)함으로써 part 2를 만든다. 그 다음에는, part 2에서 제 2열과 제 3열을 서로 교환함으로써 part 3를 만든다. 이런 식으로, part $k$ 까지 만든다. Part $k$ 는 part $(k-1)$에서 제 $(k-1)$열과 제 $k$열을 교환한 것이다. 마지막으로, 적절한 개수의 center run( $k$개의 0으로 이루어진 행)들을 나열함으로써 part $(k+1)$를 만든다. 이제, Part 1부터 part $(k+1)$까지를 세로로 연결하여 실험설계를 구축한다. $k$=3인 경우의 완성된 실험설계는 <표 1>에 주어져 있다.

<표 1>의 실험설계는 3-요인 BBD와 동일한데, center run들의 개수는, 2차다항회귀모형(second-order polynomial regression mo -del) 상수항을 제외한 모든 항들 사이에 직교(orthogonality)이 존재하도록 하기 위하여, 4로 하였다.

<표 1> 3-요인 실험설계
(3-요인 BBD와 동일함)

| x1 | x2 | x3 |
|---|---|---|
| $\mathbf{0}_4$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\mathbf{0}_4$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\mathbf{0}_4$ |
| $\mathbf{0}_4$ | $\mathbf{0}_4$ | $\mathbf{0}_4$ |

여기서 $\mathbf{0}_4$, $\pm\mathbf{1}_{(1)}$, $\pm\mathbf{1}_{(2)}$는 다음과 같음:

| $\mathbf{0}_4$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ |
|---|---|---|
| 0 | -1 | -1 |
| 0 | 1 | -1 |
| 0 | -1 | 1 |
| 0 | 1 | 1 |

## 2.2 실험설계로부터의 회귀계수 추정의 안정성에 대한 평가측도

<표 2>는, <표 1>의 실험설계로부터 얻어지는, 2차다항회귀모형의 각 회귀계수 추정치의 variance inflation(VI, 분산팽창)값을 보여주고 있다.

<표 2> <표 1>의 실험설계로부터의 각 회귀계수 추정치의 VI (variance inflation)

| Term | VI |
|---|---|
| Linear: x1, x2, x3 | 1 |
| Interaction: x1*x2, x1*x3, x2*x3 | 1 |
| Quadratic: x1*x1, x2*x2, x3*x3 | 1 |
| MVI (Mean Variance Inflation) = 1 | |

VI(term $j$)는, term $j$의 회귀계수 추정치의 분산이 다중공선성(multicollinearity)에 의하여 팽창되는 정도를 나타내는 측도로, $R^2$(term $j$)를 term $j$ 가 반응변수이고 term $j$ 가 아닌 다른 모든 항들이 설명변수들인 다중회귀모형에서의 결정계수(coefficient of determination)라 할 때,

$$\mathrm{VI(term}\ j) = 1/[1 - R^2(\mathrm{term}\ j)] \quad (1)$$

로 나타내어진다(참고문헌 (1), pp. 215-216 참조). VI의 최소값은 1이다. 회귀계수 추정치의 VI 값이 작을수록, 설명변수들 사이의 선형 연관성으로 인하여 추정치의 분산이 확대되는 정도가 작아지기 때문에 VI를 회귀계수 추정의 안정성의 측도로 볼 수 있다. 회귀분석에서는 보통 어떤 회귀계수 추정치의 VI가 10 이상이면, 그 회귀계수의 추정은 다중공선성에 의하여 심각한 피해를 입었다고 본다. 어떤 항의 회귀계수 추정치의 VI가 1이면, 그 회귀계수 추정치는 모형 내의 다른 항들의 존재 여부에 의한 영향을 받지 않으므로, 그 회귀계수 추정은 가장 안정적이라고 볼 수 있다. 이 때 그 회귀계수 추정치는 그 회귀계수 하나만 들어 있는 단순회귀모형에서의 회귀계수 추정치와 동일하다. 상수 항을 제외한 전체 항들 사이에 직교성(orthogonality)이 존재하면, 모든 항의 VI가 1이 되는데, 이것은 다중공선성이 전무(全無)한 상태로 모든 회귀계수 추정치들이 가장 안정적으로 되는 매우 바람직한 상태이다. <표 2>가 바로 그런 경우를 보여주고 있다. VI를 구하는 한 간단한 방법은 SAS proc reg의 model 문에서 vif(variance inflation factor)라는 옵션을 이용하는 것이다.

본고에서는 2차다항회귀모형의 회귀계수 추정치들의 평균분산팽창(mean variance inflation, MVI)을 실험설계로부터의 회귀계수 추정의 안정성에 대한 평가 측도로 사용한다. 본 논문의 실험설계에서 part 1부터 part $k$까지의 부분은 2차다항회귀모형의 선형 항(linear term)들과 교호작용 항(interaction term)들의 회귀계수 추정치들의 VI에 영향을 미치고, part $(k+1)$은, 즉 center run들의 개수는, 2차다항회귀모형의 제곱 항(quadratic term)들의 회귀계수 추정치들의 VI 값들에 영향을 미친다. 본 논문의 각 실험설계에서 center run들의 개수( $n_c$ )는 $n_c$ 값을 변화시켜가며 반복적으로 SAS proc reg를 실행시켜, 제곱 항들의 회귀계수 추정치들의 VI 값들을 최소화하는 (따라서 MVI 값을 최소화하는) $n_c$ 값을 선택하는 방법으로 결정하였다. <표 2>에 <표 1>의 실험설계의 MVI 값(=1)도 실어 놓았다.

# 3. 실험설계의 구형성(球形性)및 표기방법

## 3.1 실험설계의 구형성

이 실험설계의 part 1부터 part $k$ 까지에

서의 각 설계점은 $k$-차원 입방체(cube)의 두 꼭지점을 연결하는 모서리의 가운데 점이 된다. 다시 말하면, $a_i$($i=1, \cdots, j-1, j+1, \cdots, k$)가 1 또는 -1을 나타낸다고 할 때, 설계점 ($a_1, \cdots, a_{j-1}$, 0, $a_{j+1}, \cdots, a_k$)은 꼭지점 ($a_1, \cdots, a_{j-1}$, -1, $a_{j+1}, \cdots, a_k$)과 꼭지점 ($a_1, \cdots, a_{j-1}$, 1, $a_{j+1}, \cdots, a_k$)을 연결하는 모서리의 가운데 점이다. 예를 들어, <표 1>의 7번째 설계점인 (-1, 0, 1)은 3-차원 입방체의 두 꼭지점 (-1, -1, 1)과 (-1, 1, 1)을 연결하는 모서리의 가운데 점이다. $k$=3인 경우의 3-차원 입방체는 정육면체이고, 정육면체에는 12개의 모서리가 있다. <표 1>에서 번호 1부터 번호 12까지의 행들은 정육면체의 12개 모서리들 각각의 가운데 점들을 나타낸다.

요인들이 $k$개 있을 때, 이 실험설계의 part 1부터 part $k$ 까지에서의 각 행은 $(k-1)$개의 1과 한 개의 0으로 이루어져 있으므로, part 1부터 part $k$ 까지에서의 각 설계점을 ($x_{D1}$, $x_{D2}$, $\cdots$, $x_{Dk}$)로 표기할 때, 다음이 성립한다:

$$x^2_{D1} + x^2_{D2} + \cdots + x^2_{Dk} = k-1 \qquad (2)$$

식 (2)는

$$(x_{D1} - 0)^2 + (x_{D2} - 0)^2 + \cdots + (x_{Dk} - 0)^2 = (\sqrt{k-1})^2 \qquad (3)$$

으로 쓸 수 있고, 식 (3)은 각 설계점 ($x_{D1}$, $x_{D2}$, $\cdots$, $x_{Dk}$)가 중심(center)이 (0, 0, $\cdots$, 0)이고 반경(radius)이 $\sqrt{k-1}$인 $k$-차원 구($k$-dimensional sphere)의 방정식을 만족시킴을 나타낸다. 즉, 모서리의 가운데 점들은 모두 중심에서 같은 거리에 위치라고 있다. $k=3$인 경우의 실험설계인 <표 1>에 들어 있는 12개 모서리 가운데 점들은 반경이 $\sqrt{2}$인 3-차원 구의 방정식을 만족시킨다. 요인들이 $k$개 있을 때, 이 실험설계는 반경이 $\sqrt{k-1}$인 $k$-차원 구 상(上)의 점들과 그 구의 중심점으로 이루어지고, 이 실험설계가 다루는 지역은 반경이 $\sqrt{k-1}$인 $k$-차원 구의 내부가 된다. 따라서, 이 실험설계는 구형 실험설계이고, 이 실험설계로부터 적합시킨 2차다항회귀모형을 이용하여 최적 반응값을 산출시키는 점을 추정하기 위한 탐사(探查) 지역은 다음의 조건을 만족시켜야 할 것이다.

$$x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_k^2 \le k-1 \qquad (4)$$

## 3.2. 실험설계의 표기방법

이 실험설계는 3-수준구형설계(3-level sph -erical design, 3SD)이고, 설계의 결정요소들이 요인들의 개수($k$), 기본요인설계(basic factorial, bf), 그리고 중심점(center run)들의 개수($n_c$)이므로, 이 세 요소에 전체시행회수(n)를 추가하여 이 실험설계를,

3SD($k$=어떤 값, bf=어떤 요인설계,
$n_c$=어떤 값, n=어떤 값)

으로 표기하도록 하자. 이 실험설계에서의 전체시행회수(n)는, $n_{bf}$를 기본 요인설계에서의 시행회수라고 할 때,

$$n = k\, n_{bf} + n_c \qquad (5)$$

가 된다. <표 1>의 실험설계는, 전체시행회수가 n=(3)(4)+4=16 이고, 3SD($k$=3, bf=

$2^2$, $n_c$=4, n=16)으로 표기된다.

## 4. 4-요인 실험설계

요인이 4개일 때에는 기본 요인설계를 $2^3$ factorial로 한다. 기본 요인설계를 $2^{3-1}$ fractional factorial로 할 경우, SAS 프로그래밍에 의한 확인 결과, 2차다항회귀모형이 full rank 모형이 되지 않아 2차모형의 모든 항들을 추정하는 것이 불가능한 것으로 나타났다. 2차모형의 제곱 항들의 회귀계수 추정치들의 VI 값들을 최소화하는 center run들의 개수는 4로 나타났다. 전체시행회수는 n=(4)(8)+4=36 이 된다. 이 실험설계는 3SD ( $k$=4, bf= $2^3$, $n_c$=4, n=36)으로 표기되며, <표 3>에 주어져 있다. <표 4>에는, <표 3>의 실험설계로부터 얻어지는, 2차다항회귀모형에서의 각 회귀계수 추정치의 variance inflation 값과 MVI 값이 나타나 있다. 상수항을 제외한 모든 항들 사이에 직교성이 존재하여 MVI=1이 됨을 볼 수 있다.

<표 3> 4-요인 실험설계, 3SD( $k$=4, bf= $2^3$, $n_c$=4, n=36)

| x1 | x2 | x3 | x4 |
|---|---|---|---|
| $0_8$ | $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $0_8$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2}$ | $0_8$ | $\pm1_{(3)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2}$ | $\pm1_{(3)}$ | $0_8$ |
| $0_4$ | $0_4$ | $0_4$ | $0_4$ |

여기서 $0_8$, $\pm1_{(1)}$, $\pm1_{(2)}$, $\pm1_{(3)}$, $0_4$는 다음과 같음:

| $0_8$ | $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $0_4$ |
|---|---|---|---|---|
| 0 | -1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | 1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | -1 | 1 | |
| 0 | 1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | 1 | 1 | |
| 0 | 1 | 1 | 1 | |

<표 4> 3SD( $k$=4, bf= $2^3$, $n_c$=4,n=36) 로부터의 각 회귀계수 추정치의 VI

| Term | VI |
|---|---|
| Linear: x1, x2, x3, x4 | 1 |
| Interaction: x1*x2, x1*x3, x1*x4, x2*x3, x2*x4, x3*x4 | 1 |
| Quadratic: x1*x1, x2*x2, x3*x3, x4*x4 | 1 |
| MVI (Mean Variance Inflation) = 1 | |

## 5. 5-요인 실험설계

요인수가 5일때는 기본 요인설계를 $2^4$ factorial 와 $2^{4-1}$ fractional factorial은 물론, 요인 수가 4이고 시행회수가 12인 Plackett-Burman !설계(Plackett and Burman, 1946)로 할 수도 있다. 기본 요인설계가 클수록 전체 설계의 크기가 커지지만, MVI 값은 작아진다. 연구자는 비용과 시간을 고려하여 적절한 설계를 선택할 수 있다.

### 5.1 $2^4$ factorial를 선택할 경우

첫번째로, 기본 요인설계, $2^4$ factorial를 선택할 경우의 실험설계를 <표 5>에 제공한

<표 5> 5-요인 실험설계 1, 3SD( $k$=5, bf= $2^4$, $n_c$=5, n=85)

| x1 | x2 | x3 | x4 | x5 |
|---|---|---|---|---|
| $\mathbf{0}_{16}$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\mathbf{0}_{16}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\mathbf{0}_{16}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\mathbf{0}_{16}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\mathbf{0}_{16}$ |
| $\mathbf{0}_{5}$ | $\mathbf{0}_{5}$ | $\mathbf{0}_{5}$ | $\mathbf{0}_{5}$ | $\mathbf{0}_{5}$ |

<표 6> 3SD( $k$=5, bf= $2^4$, $n_c$=5, n=85)로부터의 각 회귀계수 추정치의 VI

| Term | VI |
|---|---|
| Linear: x1, x2, x3, x4, x5 | 1.00000000 |
| Interaction: x1*x2, x1*x3, x1*x4, x1*x5, x2*x3, x2*x4, x2*x5, x3*x4, x3*x5, x4*x5 | 1.00000000 |
| Quadratic: x1*x1, x2*x2, x3*x3, x4*x4, x5*x5 | 1.00058824 |
| MVI (Mean Variance Inflation) = 1.00014706 | |

여기서 $\mathbf{0}_{16}$, $\pm\mathbf{1}_{(1)}$, $\pm\mathbf{1}_{(2)}$, $\pm\mathbf{1}_{(3)}$, $\pm\mathbf{1}_{(4)}$, $\pm\mathbf{1}_{(5)}$, $\mathbf{0}_4$는 다음과 같음:

| $\mathbf{0}_{16}$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\mathbf{0}_{5}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | -1 | -1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | -1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | 1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | -1 | 1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | -1 | 1 | -1 | |
| 0 | -1 | 1 | 1 | -1 | |
| 0 | 1 | 1 | 1 | -1 | |
| 0 | -1 | -1 | -1 | 1 | |
| 0 | 1 | -1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | 1 | -1 | 1 | |
| 0 | 1 | 1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | -1 | 1 | 1 | |
| 0 | 1 | -1 | 1 | 1 | |
| 0 | -1 | 1 | 1 | 1 | |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 1 | |

다. 2차모형의 제곱 항들의 회귀계수 추정치들의 VI들을 최소화시키는 center run들의 개수는 5로 나타났다. 전체시행 회수는 n=(5)(16)+5=85 가 된다. 따라서, 이 실험설계는 3SD( $k$=5, bf= $2^4$, $n_c$=5, n=85)로 표기된다. <표 5>의 실험설계는, 5.2절과 5.3절의 설계들에 비하면, 설계의 크기는 가장 크지

<표 7> 5-요인 실험설계 2, 3SD( $k$=5, bf= $2^{4-1}$ with I=x1 · x2 · x3 · x4, $n_c$=3, n=43)

| x1 | x2 | x3 | x4 | x5 |
|---|---|---|---|---|
| $0_8$ | $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $0_8$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $0_8$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $0_8$ | $\pm1_{(4)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ | $0_8$ |
| $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ |

여기서 $0_8$, $\pm1_{(1)}$, $\pm1_{(2)}$, $\pm1_{(3)}$, $\pm1_{(4)}$, $0_3$는 다음과 같음:

| x1 | x2 | x3 | x4 | x5 |
|---|---|---|---|---|
| $0_8$ | $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $0_8$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $0_8$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $0_8$ | $\pm1_{(4)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ | $0_8$ |
| $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ |

<표 8> 3SD( $k$=5, bf= $2^{4-1}$ with I=x1 · x2 · x3 · x4, $n_c$=3, n=43)로부터의 각 회귀계수 추정치의VI

| Term | VI |
|---|---|
| Linear: x1, x2, x3, x4, x5 | 1.00000000 |
| Interaction: x1*x2, x1*x3, x1*x4, x1*x5, x2*x3, x2*x4, x2*x5, x3*x4, x3*x5, x4*x5 | 1.62500000 |
| Quadratic: x1*x1, x2*x2, x3*x3, x4*x4, x5*x5 | 1.00193798 |
| MVI (Mean Variance Inflation) = 1.31298450 ≈ 1.31 | |

만, MVI 값은 가장 작다. <표 6>에는 이 실험설계로부터 추정되는 각 항의 variance inflation과 MVI 값이 나타나 있다. <표 6>을 보면, 선형 항(linear term)들과 교호작용항(interaction term)의 회귀계수 추정은 최대한으로 안정적(VI=1)이고, 제곱항(quadratic term)들의 회귀계수 추정은 거의 최대한으로 안정적(VI=1.00058824)임을 알 수 있다. MVI 값도 1.00014706로 거의 1이다.

## 5.2 $2^{4-1}$ fractional factorial를 선택할 경우

<표 5>에서의 실험설계 3SD( $k$=5, bf= $2^4$, $n_c$=5, n=85)는 MVI 값은 가장 작지만 시행회수가 너무 많다는 문제점이 있다. 여기서 제안하는 두 번째 실험설계는 기본 요인설계를 defining relation이 I=x1 · x2 · x3 · x4인 $2^{4-1}$ fractional factorial로 한다. Defining relation을 I=-x1 · x2 · x3 · x4로 하는 경우에는, SAS 프로그래밍에 의한 확인 결과, 2차다항회귀모형이 full rank 모형이 되지 않아 2차모형의 모든 항들을 추정하는 것이 불가능한 것으로 나타났다. 2차모형의 제곱 항들의 회귀계수 추정치들의 VI들을 최소화시키는 center run들의 개수는 3으로 나타났다.

전체시행회수는 n=(5)(8)+3=43이다. 따라서, 이 실험설계는 3SD( $k$=3, bf= $2^{4-1}$ with

<표 9> 5-요인 실험설계 3,
3SD( $k$=5, bf=4-factor 12-run Plackett-Burman, $n_c$=4, n=64)

| x1 | x2 | x3 | x4 | x5 |
|---|---|---|---|---|
| $\mathbf{0}_{12}$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\mathbf{0}_{12}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\mathbf{0}_{12}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\mathbf{0}_{12}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\mathbf{0}_{12}$ |
| $\mathbf{0}_4$ | $\mathbf{0}_4$ | $\mathbf{0}_4$ | $\mathbf{0}_4$ | $\mathbf{0}_4$ |

여기서 $\mathbf{0}_{12}$, $\pm\mathbf{1}_{(1)}$, $\pm\mathbf{1}_{(2)}$, $\pm\mathbf{1}_{(3)}$, $\pm\mathbf{1}_{(4)}$, $\mathbf{0}_4$는 다음과 같음:

| $\mathbf{0}_{12}$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\mathbf{0}_4$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | -1 | 1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | -1 | 1 | 0 |
| 0 | -1 | 1 | 1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | -1 | 1 | 1 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | -1 | 1 | |
| 0 | 1 | 1 | 1 | -1 | |
| 0 | -1 | 1 | 1 | 1 | |
| 0 | -1 | -1 | 1 | 1 | |
| 0 | -1 | -1 | -1 | 1 | |
| 0 | 1 | -1 | -1 | -1 | |
| 0 | -1 | 1 | -1 | -1 | |
| 0 | -1 | -1 | -1 | -1 | |

I=x1 · x2 · x3 · x4, $n_c$=4, n=43)으로 표기된다. <표 7>에 이 실험설계를, <표 8>에 이 실험설계로부터 추정되는 2차다항회귀모형(second- order polynomial regre ssion model)의 각 회귀계수 추정치의 variance inflation 및 MVI를 싣는다.

<표 8>을 보면, 선형 항들의 회귀계수 추정은 최대한으로 안정적(VI=1)이고, 제곱 항들의 회귀계수 추정은 거의 최대한으로 안정적(VI=1.00193798)이며, 교호작용 항들의 회귀계수 추정의 안정성도 VI=1.625로 현실적으로 받아들일 수 있는 수준이라고 할 수있다. MVI 값은 1.31로 1에 비교적 가깝다고 할 수 있다.

## 5.3 Plackett-Burman설계 (요인수 : 4, 시행회수: 12)를 선택할 경우

세 번째로, 기본 요인설계로 요인 수가 4이고 시행회수가 12인 Plackett-Burman 설계를 사용하여 보자. 이 경우, 회귀계수 추정의 안정성은 5.1절의 경우와 5.2절의 경우의 중간 수준이 될 것이다. Plackett-Burman 설계는 Minitab을 이용하면 쉽게 얻을 수 있

<표 10> 3SD( $k$=5, bf=4-factor 12-run Plackett-Burman, $n_c$=4, n=64)로부터의 각 회귀계수 추정치의 VI

| Linear Term (VI) | Interaction Term (VI) | Interaction Term (VI) | Quadratic Term (VI) |
|---|---|---|---|
| x1 (1.19985970) | x1*x2 (1.14347965) | x2*x4 (1.16124750) | x1*x1 (1) |
| x2 (1.19985970) | x1*x3 (1.18446721) | x2*x5 (1.14823298) | x2*x2 (1) |
| x3 (1.22372116) | x1*x4 (1.16124750) | x3*x4 (1.18642916) | x3*x3 (1) |
| x4 (1.29225261) | x1*x5 (1.14823298) | x3*x5 (1.10968089) | x4*x4 (1) |
| x5 (1.18079798) | x2*x3 (1.18446721) | x4*x5 (1.26048169) | x5*x5 (1) |
| MVI (Mean Variance Inflation) = 1.13922290 ≈ 1.14 | | | |

<표 11> 6-요인 실험설계 1,
3SD( $k$=6, bf= $2^{5-1}$ with I=x1 · x2 · x3 · x4 · x5, $n_c$=4, n=100)

| x1 | x2 | x3 | x4 | x5 | x6 |
|---|---|---|---|---|---|
| $0_{16}$ | $\pm 1_{(1)}$ | $\pm 1_{(2)}$ | $\pm 1_{(3)}$ | $\pm 1_{(4)}$ | $\pm 1_{(5)}$ |
| $\pm 1_{(1)}$ | $0_{16}$ | $\pm 1_{(2)}$ | $\pm 1_{(3)}$ | $\pm 1_{(4)}$ | $\pm 1_{(5)}$ |
| $\pm 1_{(1)}$ | $\pm 1_{(2)}$ | $0_{16}$ | $\pm 1_{(3)}$ | $\pm 1_{(4)}$ | $\pm 1_{(5)}$ |
| $\pm 1_{(1)}$ | $\pm 1_{(2)}$ | $\pm 1_{(3)}$ | $0_{16}$ | $\pm 1_{(4)}$ | $\pm 1_{(5)}$ |
| $\pm 1_{(1)}$ | $\pm 1_{(2)}$ | $\pm 1_{(3)}$ | $\pm 1_{(4)}$ | $0_{16}$ | $\pm 1_{(5)}$ |
| $\pm 1_{(1)}$ | $\pm 1_{(2)}$ | $\pm 1_{(3)}$ | $\pm 1_{(4)}$ | $\pm 1_{(5)}$ | $0_{16}$ |
| $0_4$ | $0_4$ | $0_4$ | $0_4$ | $0_4$ | $0_4$ |

다. 2차모형의 제곱 항들의 회귀계수 추정치들의 VI들을 최소화시키는center run들의 개수는 4로 나타났다.

전체시행회수는 $n=(5)(12)+4=64$ 가 된다. 이 실험설계는 3SD( $k$=5, bf=4-factor 12-run Plackett-Burman, $n_c=4$, $n=64$)로 표기된다. <표 9>에 이 실험설계를, <표 10>에 이 실험설계로부터 추정되는 2차다항회귀모형의 각 회귀계수 추정치의 variance inflation 및 MVI 값을 싣는다.

<표 10>을 보면, MVI 값이 1.14로 <표 8>의 1.31보다 1에 더 가까운 것을 볼 수 있다. 제곱 항들의 VI가 모두 1인 것은 흥미로운 현상이며, 2차다항회귀모형에서 가장 관심을 두는 것은 제곱 항의 회귀계수들이므로 바람직한 현상이라고 할 수 있다.

## 6. 6-요인 실험설계

요인이 6개일 때에는, $2^{5-1}$ fractional factorial이 resolution V이므로 각 part에

<표 12> 3SD( $k$=6, bf= $2^{5-1}$ with I=x1 · x2 · x3 · x4 · x5, $n_c=4$, n=100)
로부터의 각 회귀계수 추정치의 VI

| Term | VI |
|---|---|
| Linear: x1, x2, x3, x4, x5, x6 | 1 |
| Interaction: x1*x2, x1*x3, x1*x4, x1*x5, x1*x6, x2*x3, x2*x4, x2*x5, x2*x6, x3*x4, x3*x5, x3*x6, x4*x5, x4*x6, x5*x6 | 1 |
| Quadratic: x1*x1, x2*x2, x3*x3, x4*x4, x5*x5, x6*x6 | 1 |
| MVI (Mean Variance Inflation) = 1 | |

여기서 $\mathbf{0}_{16}$, $\pm\mathbf{1}_{(1)}$, $\pm\mathbf{1}_{(2)}$, $\pm\mathbf{1}_{(3)}$, $\pm\mathbf{1}_{(4)}$, $\pm\mathbf{1}_{(5)}$, $\mathbf{0}_4$는 다음과 같음:

| $\mathbf{0}_{16}$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(5)}$ | $\mathbf{0}_4$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | -1 | -1 | 1 | -1 | |
| 0 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | |
| 0 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | |
| 0 | -1 | 1 | 1 | 1 | | |
| 0 | -1 | -1 | -1 | | -1 | |
| 0 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | |
| 0 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | 1 | 1 | -1 | 1 | |
| 0 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | 1 | -1 | | 1 | |
| 0 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | |
| | | | | 1 | 1 | |
| | | | | 1 | | |

<표 13> 6-요인 실험설계 2, 3SD( $k$=6, bf= $2^{5-2}$ with I=x1 · x3 · x4 and I=x2 · x3 · x5, $n_c$=2, n=50)

| x1 | x2 | x3 | x4 | x5 | x6 |
|---|---|---|---|---|---|
| $\mathbf{0}_8$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(5)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\mathbf{0}_8$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(5)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\mathbf{0}_8$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(5)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\mathbf{0}_8$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(5)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\mathbf{0}_8$ | $\pm\mathbf{1}_{(5)}$ |
| $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(5)}$ | $\mathbf{0}_8$ |
| $\mathbf{0}_2$ | $\mathbf{0}_2$ | $\mathbf{0}_2$ | $\mathbf{0}_2$ | $\mathbf{0}_2$ | $\mathbf{0}_2$ |

여기서 $\mathbf{0}_8$, $\pm\mathbf{1}_{(1)}$, $\pm\mathbf{1}_{(2)}$, $\pm\mathbf{1}_{(3)}$, $\pm\mathbf{1}_{(4)}$, $\pm\mathbf{1}_{(5)}$, $\mathbf{0}_2$는 다음과 같음:

| $\mathbf{0}_8$ | $\pm\mathbf{1}_{(1)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(2)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(3)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(4)}$ | $\pm\mathbf{1}_{(5)}$ | $\mathbf{0}_2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | |
| 0 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | |
| 0 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | 1 | 1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | |

<표 14> 3SD( $k$=6, bf= $2^{5-2}$ with I=x1 · x3 · x4 and I=x2 · x3 · x5, $n_c$=2, n=50) 로부터의 각 회귀계수 추정치의 VI

| Linear Term (VI) | Interaction Term (VI) | Interaction Term (VI) | Quadratic Term (VI) |
|---|---|---|---|
| x1 (2.61706211) | x1*x2 (2.01439405) | x2*x6 (2.10480837) | x1*x1 (1) |
| x2 (2.22555544) | x1*x3 (2.19609171) | x3*x4 (2.48572941) | x2*x2 (1) |
| x3 (3.10722463) | x1*x4 (2.31982847) | x3*x5 (1.62578745) | x3*x3 (1) |
| x4 (3.10722463) | x1*x5 (2.10480837) | x3*x6 (2.31982847) | x4*x4 (1) |
| x5 (2.22555544) | x1*x6 (1.85904157) | x4*x5 (2.11617182) | x5*x5 (1) |
| x6 (2.61706211) | x2*x3 (2.11617182) | x4*x6 (2.19609171) | x6*x6 (1) |
| | x2*x4 (1.62578745) | x5*x6 (2.01439405) | |
| | x2*x5 (1.99692878) | | |
| MVI (Mean Variance Inflation) = 1.96279807 ≈ 1.96 | | | |

$2^{5-1}$ fractional factorial을 넣어도 2-요인 교호작용 항의 회귀계수들이 추정가능하다. 따라서 기본 요인설계로 $2^5$ factorial을 사용할 필요가 없다. 여기서는 기본 요인설계를

<표 15> 6-요인 실험설계 3, 3SD( $k$=6, bf=5-factor 12-run Plackett-Burman, $n_c$=3, n=75)

| x1 | x2 | x3 | x4 | x5 | x6 |
|---|---|---|---|---|---|
| $0_{12}$ | $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ | $\pm1_{(5)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $0_{12}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ | $\pm1_{(5)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $0_{12}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ | $\pm1_{(5)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $0_{12}$ | $\pm1_{(4)}$ | $\pm1_{(5)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ | $0_{12}$ | $\pm1_{(5)}$ |
| $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ | $\pm1_{(5)}$ | $0_{12}$ |
| $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ | $0_3$ |

여기서 $0_{12}$, $\pm1_{(1)}$, $\pm1_{(2)}$, $\pm1_{(3)}$, $\pm1_{(4)}$, $\pm1_{(5)}$, $0_3$는 다음과 같음:

| $0_{12}$ | $\pm1_{(1)}$ | $\pm1_{(2)}$ | $\pm1_{(3)}$ | $\pm1_{(4)}$ | $\pm1_{(5)}$ | $0_3$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 0 |
| 0 | -1 | 1 | 1 | -1 | 1 | 0 |
| 0 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | |
| 0 | 1 | 1 | -1 | 1 | 1 | |
| 0 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | 1 | 1 | 1 | -1 | |
| 0 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | |
| 0 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | |
| 0 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | |
| 0 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | |
| 0 | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 | |

<표 16> 3SD( $k$=6, bf=5-factor 12-run Plackett-Burman, $n_c$=3, n=75)로부터의 각 회귀계수 추정치의 VI

| Linear Term (VI) | Interaction Term (VI) | Interaction Term (VI) | Quadratic Term (VI) |
|---|---|---|---|
| x1 (2.20408818) | x1*x2 (1.55017727) | x2*x6 (1.54683087) | x1*x1 (1) |
| x2 (2.03634377) | x1*x3 (1.35908385) | x3*x4 (1.79192084) | x2*x2 (1) |
| x3 (1.77142806) | x1*x4 (1.44676619) | x3*x5 (1.47210674) | x3*x3 (1) |
| x4 (1.63053528) | x1*x5 (1.49494297) | x3*x6 (1.35606004) | x4*x4 (1) |
| x5 (1.74771705) | x1*x6 (1.74663167) | x4*x5 (2.01978470) | x5*x5 (1) |
| x6 (1.77074472) | x2*x3 (1.55332683) | x4*x6 (1.54050363) | x6*x6 (1) |
| | x2*x4 (1.42562870) | x5*x6 (1.82056527) | |
| | x2*x5 (1.33071137) | | |
| MVI (Mean Variance Inflation) = 1.50429252 ≈ 1.5 | | | |

$2^{5-1}$ fractional factorial, $2^{5-2}$ fractional factorial, 또는 요인 수가 5이고 시행회수가 12인 Plackett-Burman 설계로 하는 경우들을 각각 소개한다. 여기서도 물론, 기본 요인설계가 클수록 전체 설계의 크기가 커지지만 MVI 값은 작아진다.

## 6.1 $2^{5-1}$ fractional factorial를 선택 할 경우

첫 번째로, 기본 요인설계를 $2^{5-1}$ fractional factorial로 택할 경우의 실험설계를 <표 11>에 제공한다. 여기서는 $2^{5-1}$ fractional factorial의 defining relation을 I=x1 · x2 · x3 · x4 · x5 로 하든 I=-x1 · x2 · x3 · x4 · x5로 하든, 두 경우 모두에서 resolution V가 성립하기 때문에, 상관없다. <표 11>의 실험설계에서는 기본 요인설계를 defining relation이 I=x1 · x2 · x3 · x4 · x5인 $2^{5-1}$ fractional factorial로 하였다. 2차모형의 제곱 항들의 회귀계수 추정치들의 VI들을 최소화시키는 center run들의 개수는 4로 나타났다. 전체시행회수는 n=(6)(16)+4=100이 된다. 따라서, 이 실험설계는 3SD( $k$=6, bf= $2^{5-1}$ with I=x1 · x2 · x3 · x4 · x5, $n_c$=4, n=100)으로 표기된다.

<표 11>의 실험설계는, 6.2절과 6.3절의 설계들에 비하면, 설계의 크기는 가장 크지만, MVI 값은 가장 작다. <표 12>에는 이 실험설계로부터 추정되는 2차다항회귀모형의 각 항의 variance inflation과 MVI 값이 나타나 있다. 상수 항을 제외한 모든 항들 사이에 직교성이 존재하여 MVI=1이 됨을 볼 수 있다.

## 6.2 $2^{5-2}$ fractional factorial를 선택할 경우

<표 11>에서의 실험설계 3SD( $k$=6, bf= $2^{5-1}$ with I=x1 · x2 · x3 · x4 · x5, $n_c$=4, n=100)은 MVI 값은 가장 작지만 시행회수가 너무 많다는 문제점이 있다. 여기서 기본 요인설계를 $2^{5-2}$ fractional factorial으로 하는 6-요인 설계를 제시해 보고자 한다.

$2^{5-2}$ fractional factorial들은 Resolution III를 갖는데, 가능한 종류 수는 모두 60이다.

그런데, 이 60개의 $2^{5-2}$ fractional factorial들 중에서 어떤 fraction이 기본 요인설계로 사용되는가에 따라서, 2차모형의 선형 항들과 교호작용 항들의 회귀계수 추정치들의 VI들이 다르게 나오는 것으로 나타났다. 2차모형의 제곱 항들의 회귀계수 추정치들의 VI들은 어느 fraction이 기본 요인설계로 사용되는가에 관계없이 일정하며, center run의 개수가 2일 때, 각각이 최소값 1을 갖는 것으로 나타났다. 따라서, SAS 프로그래밍을이용하여, 60개의 $2^{5-2}$ fraction들 중에서 회귀계수 추정치들의 MVI를 가장 작게 하는 fraction을 찾아 기본 요인설계로 사용하였다. MVI를 최소화하는 $2^{5-2}$-factorial은 정의대비가 I=x1 · x3 · x4 와 I=x2 · x3 · x5으로 나타났다. Center run들의 개수를 2로하였기 때문에, 전체시행회수는 n=(6)(8)+2=50이 된다. 따라서, 이 실험설계는 3SD ( $k$=6, bf= $2^{5-2}$ with I=x1 · x3 · x4 and I=x2 · x3 · x5, $n_c$=2, n=50)으로 표기된다. <표 13>에 이 실험설계를, <표 14>에 이 실험설계로부터 추정되는 2차다항회귀모형의

각 회귀계수 추정치의 variance inflation 및 MVI를 싣는다. <표 14>를 보면, MVI 값이 1.96으로 그렇게 크지는 않은 것을 볼 수 있다. 제곱 항들의 VI가 모두 1인 것은 흥미로운 현상이며, 2차다항회귀모형에서 가장 관심을 두는 것은 제곱 항의 회귀계수들이므로 바람직한 현상이라고 할 수 있다.

## 6.3 Plackett-Burman 설계 (요인 수: 5, 시행회수: 12)를 선택할 경우

세 번째로, 기본 요인설계로 요인 수가 5이고 시행회수가 12인 Plackett-Burman 설계를 사용하여 보자. 이 경우, 회귀계수 추정의 안정성은 6.1절의 경우와 6.2절의 경우의 중간 수준이 될 것이다. 2차모형의 제곱 항들의 회귀계수 추정치들의 VI들을 최소화시키는 center run들의 개수는 3으로 나타났다.

전체시행회수는 n=(6)(12)+3=75 가 된다. 이 실험설계는 3SD( $k$=6, bf=5-factor 12-run Plackett-Burman, $n_c$=3, n=75)로 표기된다.

<표 9>에 이 실험설계를, <표 10>에 이 실험설계로부터 추정되는 2차다항회귀모형의 각 회귀계수 추정치의 variance inflation 및 MVI 값을 싣는다.

<표 16>을 보면, MVI 값이 1.5로 <표 14>의 1.96보다 1에 더 가까운 것을 볼 수 있다. 제곱 항들의 VI가 모두 1인 것은 흥미로운 현상이며, 2차다항회귀모형에서 가장 관심을 두는 것은 제곱 항의 회귀계수들이므로 바람직한 현상이라고 할 수 있다.

# 7. Box-Behnken 설계와의 비교

본고의 실험설계들 중 3SD( $k$=3, bf= $2^2$, = $n_c$4, n=16)는 3-요인 BBD와 일치하고 있는데, Box-Behnken class는 2-수준 full factorial 또는 2-수준 Resolution V fractional factorial과 불완비 블록 설계(incomplete block design)의 결합으로 이루어지는 설계들의 모임이다 (Hinkelmann and Kempthorne, 1994, pp. 414-415). 따라서, 3SD( $k$=3, bf= $2^2$, $n_c$=4, n=16) 뿐만 아니라 3SD( $k$=4, bf= $2^3$, $n_c$=4, n=36), 3SD( $k$=5, bf= $2^4$, $n_c$=5, n=85), 그리고 3SD( $k$=6, bf= $2^{5-1}$ with I=x1 · x2 · x3 · x4 · x5, $n_c$=4, n=100)도 full factorial 또는 Resolution V fractional factorial과 블록 크기(block size)가 처리 개수보다 하나 작은 불완비 블록 설계의 결합으로 볼 수 있기 때문에 Box-Behnken class에 속한다고 볼 수 있다. 그러나, 3SD( $k$=5, bf= $2^{4-1}$ with I=x1 · x2 · x3 · x4, $n_c$=3, n=43), 3SD( $k$=5, bf= 4-factor 12-run Plackett-Burman, $n_c$=4, n=64), 3SD( $k$=6, bf= $2^{5-2}$ with I=x1 · x3 · x4 and I=x2 · x3 · x5, $n_c$=2, n=50), 그리고 3SD( $k$=6, bf=5-factor 12-run Plackett-Burman, $n_c$=3, n=75)는 기본 요인설계가 full factorial도 아니고 Resolution V <표 17>을 보면, $k$=4인 경우 3SD의 시행회수가 BBD의 시행회수보다 8번이 더 많지만, 3SD의 실험지역의 반경이 더 커서 3SD가 더 넓은 실험지역을 다루고 있으며, MVI는 3SD에서 근소하게 더 작음을 알수 있다. $k$=5인 경우에서는 두 설계의 시행회수가 동일하면서, 3SD가 더 넓은 실험지역을 다루고 있으며, MVI는 3SD에서 약간 더 큼을 볼 수 있

다. $k$=6인 경우에서도 두 설계의 시행회수가 동일하면서, 3SD가 더 넓은 실험지역을 다루고 있음을 알 수 있는데, MVI는 3SD fractional factorial도 아니므로, Box-Behnken class에 속하지 않는다.

<표 17>에서, 요인 수가 4, 5, 6 일 때, 반응표면방법론 관련 서적에 등장하는 BBD와 본고에 등장하는 최소시행회수의 3SD를 시행회수, 실험지역의 반경, 그리고 2차다항회귀모형의 회귀계수 추정치들의 mean

<표 17> Box-Behnken 설계와 본고에서의 설계 간 비교

| 실험설계 및 비교기준 / 요인 수 ( $k$ ) | 반응표면방법론 관련 서적에 등장하는 BBD | | | 본고에 등장하는 최소시행회수의 3SD | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | 시행회수 ( $n_c$ = center run들의 개수) | 실험지역의 반경 | 2차다항 회귀모형의 회귀계수 추정치들의 MVI | 시행회수 ( $n_c$ = center run들의 개수) | 실험지역의 반경 | 2차다항 회귀모형의 회귀계수 추정치들의 MVI |
| 4 | $24 + n_c$ | $\sqrt{2}$ | 1.04 ( $n_c$ = 4 일 때) | $32 + n_c$ | $\sqrt{3}$ | 1.00 ( $n_c$ = 4 일 때) |
| 5 | $40 + n_c$ | $\sqrt{2}$ | 1.14 ( $n_c$ = 3 일 때) | $40 + n_c$ | $\sqrt{4}$ | 1.31 ( $n_c$ = 3 일 때) |
| 6 | $48 + n_c$ | $\sqrt{3}$ | 1.15 ( $n_c$ = 2 일 때) | $48 + n_c$ | $\sqrt{5}$ | 1.96 ( $n_c$ = 2 일 때) |

variance inflation (MVI) 관점에서 비교하여 본다. 에서 더 크지만 그 차이가 심하지는 않은 것으로 나타났다.

## 8. 맺음말

본 논문에서 제안하는 실험설계들은, 요인들이 $k$개 있을 때, 각 시행에서 $(k-1)$ 개의 요인수준들은 고수준(1) 또는 저수준(-1)으로 하고 한 개의 요인수준은 중간수준(0)으로 할 필요가 있는 경우에 가장 적절하다. 그리고, 경우에 따라서는 BBD의 적절한 대안(代案, alternative)으로 사용될 수 있다.

반응표면설계의 회전성(rotatability)은 본고의 실험설계들에서는 성립하지 않는 것으로 나타났다. 그러나, 어차피 추정된 최적점에서 확인실험을 실시함으로써 추정된 최적점의 최적성을 확인하기 때문에, 회전성이 성립하지 않는 것은 별 문제가 되지 않는 것으로 본다.

본고에 제시된 실험설계에서 설계점들은 표준적으로 배열되어 있다. 실제 실험에서 처리를 실험단위에 랜덤(random)하게 배치하거나 처리의 시행순서를 랜덤하게 할 필요가 있을 경우에는 설계점들의 배열을 랜덤화(randomization)하기 바란다.

본 논문은 실험연구자들에게 사용가능한

반응표면설계들의 선택의 폭을 더 넓게 해 주는 의미가 있다고 본다.

## 참고 문헌

[1] 허명회,이태림,임성수 (1994), 「통계자료분석 · I-SAS-」, 한국방송대학교 출판부.

[2] 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.

[3] Box, G. E. P. and Draper, N. R. (1987), Empirical Model-Building and Response Surfaces, Wiley, New York.

[4] Box, G. E. P. and Wilson, K. B. (1951), "On the Experimental Attainment of Optimum Conditions (with Discuss-ion)," Journal of the Royal Statistical Society, B, Vol. 13, pp. 1-45.

[5] Hinkelmann, K. and Kempthorne, O. (1994), Design and Analysis of Experiments, Volume I: Introduction to Experimental Design, Wiley, New York.

[6] Plackett, R. L. and Burman, J. P. (1946), "The Design of Optimum Multifactorial Experiments," Biometrika, Vol. 33, pp. 305-325.