

## Derivation of a Simplified Measure of Slope Rotatability for a Particular Class of Response Surface Designs<sup>1)</sup>

Hyuk Joo Kim<sup>2)</sup>, Sung Hyun Park<sup>3)</sup>, and Tae-Sung Kim<sup>4)</sup>

### Abstract

Slope rotatability of response surface designs is a desirable property when we are interested in estimating slopes of response surfaces. In this paper, we derive a simplified measure of slope rotatability from new viewpoints for response surface designs that are frequently used in response surface methodology.

*Keywords* : Response surface design, Slope variance, Slope rotatability.

### 1. 서론

반응표면방법론(response surface methodology)에서 흔히 사용되는 모형은 반응변수  $\eta$  가 설명 변수  $x_1, x_2, \dots, x_k$  의 2차식으로 다음과 같이 표현될 수 있다는 것이다.

$$y_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_{iu}^2 + \sum_{i < j}^k \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + \varepsilon_u \quad (u=1, 2, \dots, N)$$

여기서  $y$ 는  $\eta$ 의 측정치를 나타내며,  $\beta_0, \beta_i, \beta_{ii}, \beta_{ij}$ 들은 최소제곱법에 의하여 추정될 회귀계수들이다. 또한  $\varepsilon_u$ 들은 평균이 0이고 분산이  $\sigma^2$ 인, 서로 상관관계가 없는 오차항들이다. 최소제곱법에 의하여 적합된 회귀식은

$$\hat{y}(x) = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j}^k b_{ij} x_i x_j \quad (1.1)$$

로 나타낼 수 있다.

반응표면의 기울기를 추정하는 데에 관심이 있는 경우를 생각하자. 식(1.1)에서  $x_i$ 에 대한  $\hat{y}(x)$ 의 1차 도함수는

- 
- 1) This work was supported by grant No.R01-2003-000-10220-0 from the Basic Research Program of the Korea Science & Engineering Foundation.
  - 2) Professor, Division of Mathematics and Informational Statistics and Institute of Basic Natural Sciences, Wonkwang University, Iksan, Jeonbuk 570-749, Korea  
E-mail: hjkim@wonkwang.ac.kr
  - 3) Professor, Department of Statistics, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea
  - 4) Professor, Division of Mathematics and Informational Statistics and Institute of Basic Natural Sciences, Wonkwang University, Iksan, Jeonbuk 570-749, Korea

$$\frac{\partial \hat{y}(x)}{\partial x_i} = b_i + 2b_{ii}x_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k b_{ij}x_j \quad (1.2)$$

이며, 이 도함수의 분산은 주어진 점  $x = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$  와 주어진 실험계획의 함수이다. 그런데 만약 다음과 같은 두 조건이 만족되기만 하면, 주어진 계획은 기울기회전계획(slope-rotatable design)이라 불린다.

[C1] 각각의  $i(i=1, 2, \dots, k)$ 에 대하여  $Var(\partial \hat{y}(x)/\partial x_i)$ 는 원점(계획의 중심점)에서 점  $x$  까지의 거리  $\rho = (x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_k^2)^{1/2}$  만의 함수이다.

[C2] 인자공간 안의 임의의 점  $x$ 에 대하여

$$Var\left(\frac{\partial \hat{y}(x)}{\partial x_1}\right) = Var\left(\frac{\partial \hat{y}(x)}{\partial x_2}\right) = \dots = Var\left(\frac{\partial \hat{y}(x)}{\partial x_k}\right)$$

이다.

어떤 계획이 기울기회전계획인 경우, 축 방향으로의 기울기의 추정은 계획의 중심점으로부터 같은 거리에 있는 모든 점들에 대하여 동일한 신뢰도를 가질 것이다. 기울기회전성의 개념은 Hader와 Park(1978)에 의하여 제안되었다.

한편 Park과 Kim(1992)은 주어진 임의의 반응표면 실험계획에 대하여 그 계획이 기울기회전계획으로부터 얼마나 먼가 하는 것을 수치로 나타낼 수 있는 하나의 측도(measure)를 제시하였다. 여러 계획들의 기울기회전성의 정도를 비교할 수 있게 해 주는 이 측도는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} Q_k(D) &= \frac{1}{2(k-1)\sigma^4} \left[ (k+2)(k+4) \sum_{i=1}^k \left\{ (v_i - \bar{v}) + \frac{a_i - \bar{a}}{k+2} \right\}^2 \right. \\ &\quad + \frac{4}{k(k+2)} \sum_{i=1}^k (a_i - \bar{a})^2 + 2 \sum_{i=1}^k \left\{ (4v_{ii} - \frac{a_i}{k})^2 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k (v_{ij} - \frac{a_i}{k})^2 \right\} \\ &\quad \left. + 4(k+4) \sum_{i=1}^k (4c_{i,ii}^2 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k c_{i,ij}^2) + 4 \sum_{i=1}^k (4 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k c_{ii,ij}^2 + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq i, k \neq i}}^k c_{ij,ik}^2) \right] \end{aligned} \quad (1.3)$$

단, 여기서

$$\begin{aligned} v_i &= Var(b_i), \quad v_{ii} = Var(b_{ii}), \quad v_{ij} = Var(b_{ij}) \\ c_{i,ii} &= Cov(b_i, b_{ii}), \quad c_{i,ij} = Cov(b_i, b_{ij}), \quad c_{ii,ij} = Cov(b_{ii}, b_{ij}), \quad c_{ij,ii} = Cov(b_{ij}, b_{ii}) \\ \bar{v} &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k v_i \\ a_i &= 4v_{ii} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k v_{ij} \\ \bar{a} &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k a_i \end{aligned}$$

이다.

이 측도는 주어진 계획이 기울기회전계획인 경우에는 0인 값을 갖고, 기울기회전계획으로부터 멀수록 큰 값을 갖는다.

Hader와 Park(1978)은 중심합성계획(central composite design)(Box와 Wilson(1951) 참조)의 기울기회전성에 관하여 논하였다. 중심합성계획에서는 다음의 조건들이 성립한다.

$$\begin{aligned} c_{i, ii} &= c_{i, ij} = c_{ii, ij} = c_{ij, ii} = 0 \quad (i \neq j \neq l \neq i) \\ v_1 &= v_2 = \cdots = v_k \\ v_{11} &= v_{22} = \cdots = v_{kk} \\ v_{12} &= v_{13} = \cdots = v_{k-1, k} \end{aligned} \tag{1.4}$$

따라서 식(1.2)로 표시된 도함수의 분산은

$$\begin{aligned} Var\left(\frac{\partial \hat{y}(x)}{\partial x_i}\right) &= v_i + 4x_i^2 v_{ii} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k x_j^2 v_{ij} \\ &= v_1 + 4v_{11}x_i^2 + v_{12} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k x_j^2 \end{aligned} \tag{1.5}$$

이 되며, 기울기회전계획이 되기 위한 조건은

$$4v_{11} = v_{12}$$

가 된다. 따라서 식(1.4)가 성립하는 계획에서는 [C1]과 [C2]가 서로 동치(equivalence)인 조건이 된다. 식(1.4)를 만족하는 계획들로는 중심합성계획뿐 아니라 Box-Behnken 계획(Box와 Behnken(1960) 참조),  $3^k$  요인배치법( $3^k$  factorial design), 정다각형계획(regular polygonal design), 20면체(icosahedron)를 이용한 계획, 12면체(dodecahedron)를 이용한 계획 등이 있다. 그리고 Kim(2002)이 제시한 제2종의 중심합성계획도 이에 속한다. 이러한 계획들은 반응표면분석을 위하여 잘 고안되어 만들어진 것들이므로 유용한 계획들이다.

식(1.3)으로 주어진 측도는 식(1.4)가 성립하지 않는 일반적인 계획(실험점들이 아무렇게나 배치되어 있어서 실용성이 거의 없는 계획 포함)에 대해서도 기울기회전성의 정도를 측정할 수 있도록 한 것이므로 지극히 복잡한 과정을 거쳐서 유도된 것이다. 그런데 반응표면분석에서 유용하게 쓰이는 계획들은 대부분 식(1.4)를 만족하는 것들이므로 이러한 계획들에 대해서는 복잡한 과정을 거칠 필요가 없이 [C1]과 [C2]가 동치라는 사실을 이용하여 측도를 유도할 수 있다. 본 논문에서는 식(1.4)를 만족하는 반응표면 실험계획들에 대하여 기울기회전성의 측도를 Park와 Kim(1992)에서와 다른 방법으로 유도하고자 한다. 두 가지([C1]의 관점과 [C2]의 관점에서 한 가지씩)의 접근 방법을 사용하여 측도를 유도하겠다. [C1]과 [C2]가 동치인 계획들을 대상으로 하는 것이므로 두 방법에 의하여 유도된 측도들은 서로 일관성을 가지고 있어야 할 것이다.

## 2. 그래프를 이용하는 방법

기울기회전계획이란, 계획의 중심점으로부터 같은 거리만큼 떨어져 있는 모든 점들에 대하여 식(1.5)로 주어진 분산이 동일한 값을 갖게 되는 계획을 말한다. 따라서 다음과 같이 생각해 나가면 기울기회전성에 대한 하나의 측도를 얻을 수 있을 것이다.

계획의 중심점으로부터 같은 거리  $\rho$  ( $\rho$ 는 고정된 값)만큼 떨어져 있는 모든 점  $x = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$ 에 대한 분산 식(1.5)의 값들 사이에 존재하는 변동의 크기가 어느 정도인지를 생각한다. 이 변동이 클수록, 주어진 계획은 고정된 거리  $\rho$ 에서 볼 때 “기울기회전계획”으로부터

면 것이다. 그런데 이 변동은 고정된 거리  $\rho$ 에서 생각한 것이므로, 구형(spherical)의 일정한 영역  $R$  전체에 걸쳐서  $\rho$ 를 변화시켜 가며 변동의 총합을 구하면 이것이 바로 주어진 계획이 기울기회전계획에서 벗어난 정도를 나타내는 값이 된다.

$k=2$ 인 경우를 생각해 보자. 적합된 2차 회귀식은

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2$$

이며, 이것을  $x_1$ 에 관하여 편미분하면

$$\frac{\partial \hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_1} = b_1 + 2b_{11}x_1 + b_{12}x_2$$

가 된다. 따라서

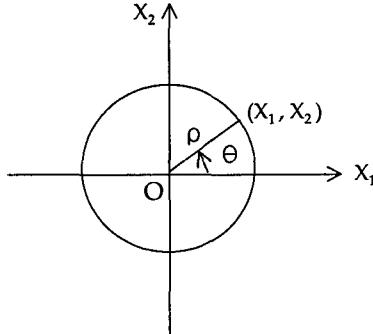
$$Var\left(\frac{\partial \hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_1}\right) = v_1 + 4x_1^2v_{11} + x_2^2v_{12} \quad (2.1)$$

가 성립한다.

임의의 점  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)'$ 에 관하여 생각해 보자. 이 점  $\mathbf{x}$ 와 계획의 중심점 사이의 거리를  $\rho$ 라 하면  $\rho = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$ 이 되며, 계획의 중심점과 점  $\mathbf{x}$ 를 잇는 선분이  $x_1$  축의 양의 방향과 이루는 각을  $\theta$ 라 하면

$$x_1 = \rho \cos \theta, \quad x_2 = \rho \sin \theta \quad (\rho \geq 0, 0 \leq \theta < 2\pi) \quad (2.2)$$

가 성립한다(<그림 1> 참조).



<그림 1> 중심점으로부터 같은 거리만큼 떨어진 점들의 집합

식(2.2)를 식(2.1)에 대입하면

$$\begin{aligned} Var\left(\frac{\partial \hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_1}\right) &= v_1 + 4\rho^2 \cos^2 \theta \cdot v_{11} + \rho^2 \sin^2 \theta \cdot v_{12} \\ &= v_1 + \rho^2 v_{12} + \rho^2 \cos^2 \theta \cdot (4v_{11} - v_{12}) \end{aligned}$$

가 되는데, cosine의 가법정리에 의하여  $\cos^2 \theta = (1 + \cos 2\theta)/2$ 임을 이용하면

$$Var\left(\frac{\partial \hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_1}\right) = A + B \cos 2\theta \quad (2.3)$$

를 얻는다. 단, 여기서  $A = v_1 + 2\rho^2 v_{11} + (\rho^2/2)v_{12}$ ,  $B = (\rho^2/2)(4v_{11} - v_{12})$  이다.

고정된  $\rho$ 에 대하여 분산 식(2.3)은  $\theta$ 의 함수임을 알 수 있다. 이제  $\theta$ 가 0부터  $2\pi$ 까지 변함에 따라 이 분산이 변화하는 모양을 살펴보기 위하여  $\theta$ 를 가로축으로,  $Var(\partial\hat{y}(x)/\partial x_1)$ 을 세로축으로 하여 그래프를 그려 보자. 세 가지의 경우로 나누어 생각할 수 있다.

(1)  $B=0$  (즉  $4v_{11} = v_{12}$ )일 때 :

$\theta$ 에 관계없이  $Var(\partial\hat{y}(x)/\partial x_1)$ 이 일정하므로, 즉 중심점으로부터 같은 거리만큼 떨어져 있는 모든 점들에 대하여  $Var(\partial\hat{y}(x)/\partial x_1)$ 이 일정하므로, 주어진 계획은 기울기회전계획이다 ( $Var(\partial\hat{y}(x)/\partial x_2)$ 도  $\theta$ 에 관계없이 일정하게 된다는 것을 쉽게 알 수 있다).

(2)  $B > 0$  일 때 및 (3)  $B < 0$  일 때 :

중심점으로부터 같은 거리만큼 떨어져 있는 모든 점들에 대하여  $Var(\partial\hat{y}(x)/\partial x_1)$ 이 일정하지 않으므로, 주어진 계획은 기울기회전계획이 아니다.  $\theta$ 의 변화에 따른  $Var(\partial\hat{y}(x)/\partial x_1)$ 의 변화가 “상수”로부터 멀수록 기울기회전계획으로부터 멀다고 할 수 있으며, 고정된  $\rho$ 에 대하여 <그림 2>에서 벗금친 부분의 면적을  $Var(\partial\hat{y}(x)/\partial x_1)$ 의 변동에 대한 하나의 측도로 삼을 수 있다.

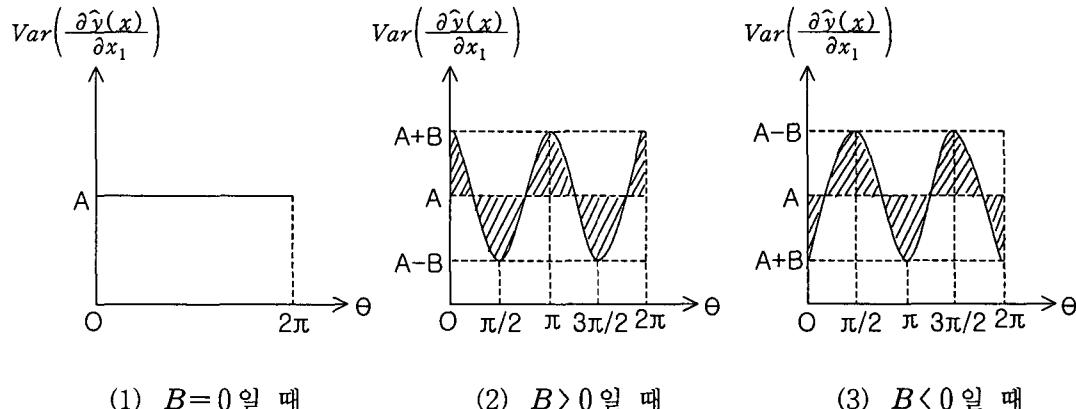
먼저 (2)의 경우 벗금친 부분의 면적은

$$8 \int_0^{\pi/4} [(A + B\cos 2\theta) - A] d\theta = 8B \int_0^{\pi/4} \cos 2\theta d\theta = 4B$$

이며, (3)의 경우에는

$$8 \int_0^{\pi/4} [A - (A + B\cos 2\theta)] d\theta = -8B \int_0^{\pi/4} \cos 2\theta d\theta = -4B$$

이다.



(1)  $B=0$  일 때

(2)  $B > 0$  일 때

(3)  $B < 0$  일 때

<그림 2>  $\theta$ 에 대한  $Var(\partial\hat{y}(x)/\partial x_1)$ 의 그래프 ( $k=2$ ;  $\rho$ 는 고정된 값)

따라서 (1), (2), (3)을 종합하면 빗금친 부분의 면적은  $4|B|$ , 즉  $2\rho^2|4v_{11} - v_{12}|$  가 된다((1)의 경우는 빗금친 부분이 없으므로 면적을 0으로 생각하면 된다). 그런데 이 면적은 고정된  $\rho$ 에 대한 것이므로, 일정한 영역  $R$ 에 걸쳐 적분해 보자.

$R$  이 원형영역(circular region)  $\{(x_1, x_2) : x_1^2 + x_2^2 \leq c\}$  인 경우 적분값은

$$\int_0^c \rho \cdot 2\rho^2 |4v_{11} - v_{12}| d\rho = \frac{c^4}{2} |4v_{11} - v_{12}| \quad (2.4)$$

가 된다. 그런데 여기서  $c^4\sigma^2/2$  이라는 값은 모든 계획에 대하여 일정한 상수이므로 식(2.4)를 이 값으로 나누면

$$P(D) = \frac{1}{\sigma^2} |4v_{11} - v_{12}| \quad (2.5)$$

라는 값을 얻게 되며, 이 값이 바로 주어진 계획  $D$ 가 기울기회전계획으로부터 벗어난 정도를 나타내는 값이 된다. 따라서 이  $P(D)$ 를 계획  $D$ 의 기울기회전성의 한 측도로 삼을 수 있다.  $P(D)=0$  일 때  $D$ 는 기울기회전계획이 되고,  $P(D)$ 의 값이 클수록  $D$ 는 기울기회전계획으로부터 멀다.

$k \geq 3$  인 경우에 대해서도 유사한 방법으로 식(2.5)와 같은 측도를 얻을 수 있다.

### 3. 한 점에서의 분산들 간의 산포를 이용하는 방법

임의의 점  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$ 에 대하여

$$v_i(\mathbf{x}) = \text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_i}\right) \quad (i=1, 2, \dots, k)$$

로 놓자. 그러면  $v_i(\mathbf{x})$  는  $\partial \hat{y}(\mathbf{x}) / \partial x_i$  의 분산을 점  $\mathbf{x}$ 에서 계산한 값을 뜻한다. 즉

$$v_i(\mathbf{x}) = v_i + 4x_i^2 v_{ii} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k x_j^2 v_{ij} = v_1 + 4v_{11}x_i^2 + v_{12} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k x_j^2 \quad (3.1)$$

이다. 기울기회전계획은 임의의  $\mathbf{x}$ 에 대하여

$$v_1(\mathbf{x}) = v_2(\mathbf{x}) = \dots = v_k(\mathbf{x})$$

가 성립하는 계획이다.

점  $\mathbf{x}$ 에서  $v_1(\mathbf{x}), v_2(\mathbf{x}), \dots, v_k(\mathbf{x})$  사이의 산포의 한 측도를

$$d(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^k [v_i(\mathbf{x}) - \bar{v}(\mathbf{x})]^2 \quad (\text{단}, \bar{v}(\mathbf{x}) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k v_i(\mathbf{x})) \quad (3.2)$$

이라 하자. 그러면

$$\begin{aligned} \bar{v}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k v_i(\mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (v_1 + 4v_{11}x_i^2 + v_{12} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k x_j^2) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{k} (kv_1 + 4v_{11} \sum_{i=1}^k x_i^2 + v_{12} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1, j \neq i}^k x_j^2)$$

인데,

$$\sum_{i=1}^k \sum_{j=1, j \neq i}^k x_j^2 = (k-1) \sum_{j=1}^k x_j^2 = (k-1)\rho^2(\mathbf{x})$$

임을 주목하면

$$\bar{v}(\mathbf{x}) = v_1 + 4v_{11} \cdot \frac{\rho^2(\mathbf{x})}{k} + v_{12} \cdot \frac{(k-1)\rho^2(\mathbf{x})}{k} \quad (3.3)$$

가 되므로, 식(3.1)과 식(3.3)에 의하여

$$\begin{aligned} v_i(\mathbf{x}) - \bar{v}(\mathbf{x}) &= 4v_{11} \left[ x_i^2 - \frac{\rho^2(\mathbf{x})}{k} \right] + v_{12} \left[ \sum_{j=1, j \neq i}^k x_j^2 - \frac{(k-1)\rho^2(\mathbf{x})}{k} \right] \\ &= (4v_{11} - v_{12}) \left[ x_i^2 - \frac{\rho^2(\mathbf{x})}{k} \right] \end{aligned}$$

이면, 식(3.2)의  $d(\mathbf{x})$ 는

$$d(\mathbf{x}) = (4v_{11} - v_{12})^2 \sum_{i=1}^k \left[ x_i^2 - \frac{\rho^2(\mathbf{x})}{k} \right]^2 \quad (3.4)$$

으로 얻어진다.

한 점  $\mathbf{x}$ 에서  $v_1(\mathbf{x}), v_2(\mathbf{x}), \dots, v_k(\mathbf{x})$  사이의 산포의 크기를 나타내는 값이  $d(\mathbf{x})$  이므로 이  $d(\mathbf{x})$ 를 일정한 영역  $R$  전체에 걸쳐서 적분해 보자. 이 방법은 일정한 영역의 형태에 관계없이 (즉 구형이든 입방형이든 또는 다른 형태이든) 적용될 수 있는 방법이다.

식(3.4)로부터

$$\begin{aligned} &\int \int_R \cdots \int d(\mathbf{x}) dx_1 dx_2 \cdots dx_k \\ &= (4v_{11} - v_{12})^2 \int \int_R \cdots \int \sum_{i=1}^k \left[ x_i^2 - \frac{\rho^2(\mathbf{x})}{k} \right]^2 dx_1 dx_2 \cdots dx_k \quad (3.5) \end{aligned}$$

가 되는데, 여기서

$$\sigma^4 \int \int_R \cdots \int \sum_{i=1}^k \left[ x_i^2 - \frac{\rho^2(\mathbf{x})}{k} \right]^2 dx_1 dx_2 \cdots dx_k$$

는 모든 계획에 대하여 일정한 상수이므로 식(3.5)를 이 값으로 나누면

$$Q(D) = \frac{1}{\sigma^4} (4v_{11} - v_{12})^2 \quad (3.6)$$

이라는 값을 얻게 되며, 이 값이 바로 주어진 계획  $D$ 가 기울기회전계획으로부터 벗어난 정도를 나타내는 값이 된다. 따라서 식(3.6)의  $Q(D)$ 를 계획  $D$ 의 기울기회전성의 한 측도로 삼을 수 있다.  $Q(D)=0$  이면  $D$ 는 기울기회전계획이고,  $Q(D)$ 의 값이 클수록  $D$ 는 기울기회전계획으로부터 멀다. 이  $Q(D)$ 는 제2절에서 유도된  $P(D)$ 의 제곱이 되는 관계가 있음을 알 수 있다.

그런데 실험계획들을 효율성에 근거를 두고 비교하거나 모형의 회귀계수들의 추정량의 정도 (precision)와 관련한 어떤 기준에 근거를 두고 비교하기 위해서는 일정한 기준에 따라 계획들을

스케일링(scaling)할 필요가 있다. 따라서 제2절의  $P(D)$  와 이 절의  $Q(D)$ 에 관계되어 있는  $v_{11}$ 과  $v_{12}$ 는 계획  $D$ 에 대하여 일정한 기준에 따라 스케일링을 한 뒤의 것들이다. 예컨대 계획의 순수2차적률인  $[ii] = \sum_{u=1}^N x_{iu}^2/N$  을 퍼짐(spread)의 측도로 삼아 다음과 같이 계획들의 퍼짐이 동일하도록 스케일링을 하는 Myers(1976, p.135)의 방법을 사용할 만하다.

$$\begin{aligned}[i] &= \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu} = 0 \\ [ii] &= \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = 1 \\ (i &= 1, 2, \dots, k)\end{aligned}\tag{3.7}$$

#### 4. 유도된 측도의 적용 예

이 절에서는 측도  $P(D)$  를 몇 가지의 잘 알려진 계획들에 적용해 보자. 측도  $Q(D)$ 의 값들은  $P(D)$ 의 값들을 제곱하기만 하면 될 것이다.

##### 4.1 $3^k$ 요인배치법

$3^k$  요인배치법은 세 개씩의 수준을 갖는  $k$ 개의 인자를 고려하는 것으로서  $3^k$ 개의 모든 수준 조합에서 실험이 이루어지는 계획이다. 각각의  $x_i (i=1, 2, \dots, k)$ 에 대하여 세 수준은  $-1, 0, 1$ 로 표시된다. 식(3.7)로 주어진 스케일링을 적용하면  $3^k$  요인배치법에 대한  $P(D)$ 는

$$P(D) = \frac{1}{\sigma^2} \left( \frac{2}{3} \right)^2 \left| 4 \cdot \frac{\sigma^2}{2 \cdot 3^{k-2}} - \frac{\sigma^2}{4 \cdot 3^{k-2}} \right| = \frac{7}{3^k}\tag{4.1}$$

이 된다. 이 값은 0이 아니므로  $3^k$  요인배치법은 기울기회전계획이 아니라는 것을 알 수 있다.

이제  $3^k$  요인배치법에  $n_0 - 1$  개의 중심점이 추가되어 총  $n_0 (\geq 1)$  개의 중심점을 갖는 경우를 생각해 보자. 이 계획에 대해서는 위에서와 같은 방법에 의해

$$P(D) = \frac{3^k \{7 \cdot 3^k + (14k - 9)(n_0 - 1)\}}{(3^k + n_0 - 1)^2 \{3^k + (2k + 1)(n_0 - 1)\}}\tag{4.2}$$

을 얻는다.  $n_0 = 1$  이면 이것은 물론 식(4.1)과 같아진다.

식(4.2)를 관찰하면, 고정된  $k$ 에 대해  $P(D)$ 는  $n_0$ 의 감소함수이며  $n_0$  가 한없이 커지면  $P(D)$ 의 값은 0에 수렴함을 알 수 있다. 이것은 중심점의 수가 증가함에 따라  $3^k$  요인배치법은 기울기회전계획에 가까워진다는 것을 의미한다.  $k$ 와  $n_0$ 의 여러 값에 대한  $P(D)$ 의 값을 <표 1>에 구해 놓았다.

<표 1>  $n_0 - 1$  개의 중심점이 추가된  $3^k$  요인배치법들의  $P(D)$  값

$k \backslash n_0$	1	2	3	4	5
2	0.7778	0.5271	0.3954	0.3125	0.2552
3	0.2593	0.2249	0.1997	0.1800	0.1640
4	0.0864	0.0822	0.0785	0.0752	0.0723
5	0.0288	0.0283	0.0279	0.0274	0.0270

## 4.2 중심합성계획

중심합성계획은  $2^k$  개의 요인실험점  $(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$ 과  $2k$  개의 축점  $(\pm \alpha, 0, \dots, 0), (0, \pm \alpha, \dots, 0), \dots, (0, \dots, 0, \pm \alpha)$ , 그리고  $n_0 (\geq 1)$  개의 중심점  $(0, 0, \dots, 0)$ 으로 구성된다. 요인실험점은 일부실시법(fractional replication)에 의해  $2^{k-p}$  ( $p \geq 1$ ) 개가 될 수도 있으며, 축점은  $n_a$  번 반복될 수도 있다. 따라서 실험점의 총수  $N$ 은

$$N = F + T$$

로 나타낼 수 있다. 여기서  $F$ 는 요인실험점의 수로  $F = 2^k$  또는  $2^{k-p}$ 이며,  $T = 2kn_a + n_0$ 이다.

중심합성계획의  $P(D)$ 는

$$P(D) = \left( \frac{F + 2n_a\alpha^2}{N} \right)^2 \left| 4e - \frac{1}{F} \right|$$

로 얻어진다. 단, 여기서

$$e = \frac{(k-1)FT - 4(k-1)Fn_a\alpha^2 + 2n_a\{N - 2(k-1)n_a\}\alpha^4}{2n_a\alpha^4\{kFT - 4kFn_a\alpha^2 + 2n_a(N - 2kn_a)\alpha^4\}}$$

이다.

$k, F, n_0$  와  $\alpha$ 의 여러 값에 따라 계산된 중심합성계획의  $P(D)$  값이 <표 2>에 수록되어 있다. 이 표에서  $n_a = 1$ 로 가정했으며, \*는 기울기회전계획이 되는  $\alpha$ 의 값을 의미한다.

<표 2> 중심합성계획들의  $P(D)$  값(1)  $k=2, F=4$ 

$\alpha \backslash n_0$	1	2	3	4	5
1.0	0.7778	0.5271	0.3954	0.3125	0.2553
1.3	0.9031	0.4409	0.0890	0.2011	0.1531
1.6	0.6826	0.2909	0.0515	0.1032	0.0705
1.9	0.2412	0.0652	0.0059	0.0178	0.0277
2.2	0.1306	0.1731	0.1721	0.1596	0.1446
2.5	0.04919	0.4390	0.3820	0.3315	0.2887
2.8	0.9044	0.7604	0.6423	0.5476	0.4714
3.1	1.4094	1.1625	0.9716	0.8227	0.7049
*	2.090	1.984	1.911	1.859	1.820

(2)  $k=3, F=8$ 

$\alpha \backslash n_0$	1	2	3	4	5
1.0	0.6358	0.5438	0.4733	0.4170	0.3709
1.3	0.3981	0.2971	0.2403	0.2022	0.1743
1.6	0.4406	0.2383	0.1647	0.1258	0.1014
1.9	0.3442	0.1614	0.0982	0.0670	0.0489
2.2	0.1277	0.0499	0.0183	0.0029	0.0052
2.5	0.0319	0.0553	0.0628	0.0640	0.0624
2.8	0.1619	0.1564	0.1465	0.1356	0.1250
3.1	0.2915	0.2647	0.2396	0.2171	0.1971
*	2.432	2.339	2.268	2.213	2.172

(3)  $k=4, F=16$ 

$\alpha \backslash n_0$	1	2	3	4	5
1.0	0.7818	0.7187	0.6636	0.6150	0.5719
1.3	0.3405	0.3036	0.2750	0.2515	0.2316
1.6	0.2431	0.1876	0.1573	0.1372	0.1223
1.9	0.2726	0.1540	0.1115	0.0889	0.0746
2.2	0.1993	0.1053	0.0702	0.0518	0.0406
2.5	0.0755	0.0410	0.0243	0.0147	0.0088
2.8	0.0002	0.0109	0.0165	0.0194	0.0209
3.1	0.0523	0.0532	0.0525	0.0511	0.0492
*	2.799	2.730	2.673	2.626	2.587

(4)  $k=5, F=16$ 

$a \backslash n_0$	1	2	3	4	5
1.0	0.6995	0.6491	0.6041	0.5638	0.5274
1.3	0.2819	0.2590	0.2393	0.2221	0.2070
1.6	0.1577	0.1372	0.1225	0.1112	0.1019
1.9	0.1397	0.0977	0.0778	0.0657	0.0573
2.2	0.1583	0.0789	0.0523	0.0389	0.0308
2.5	0.0916	0.0410	0.0219	0.0123	0.0067
2.8	0.0143	0.0035	0.0116	0.0157	0.0177
3.1	0.0380	0.0422	0.0434	0.0432	0.0423
*	2.872	2.775	2.695	2.632	2.583

### 4.3 정다각형계획

정다각형계획은 설명변수가 두 개인 경우 널리 쓰이는 계획이며, Box와 Hunter(1957)의 회전성(rotatability)을 갖는다. 이 계획은 반지름이  $\rho$ 인 원상에 등간격으로 배치된  $n_1 (\geq 5)$  개의 실험점들과  $n_0 (\geq 1)$  개의 중심점으로 구성된다. 정다각형계획의 기울기회전성의 측도  $P(D)$ 는

$$P(D) = \frac{n_1}{n_0(n_1 + n_0)} \quad (4.3)$$

으로 얻어진다.

식(4.3)으로부터 다음의 사실들을 관찰할 수 있다.

- (1)  $P(D)$ 는 0이 될 수 없으므로 정다각형계획은 기울기회전계획이 아니다.
- (2)  $P(D)$ 는  $n_1$ 개의 점들이 배치되어 있는 원의 반지름  $\rho$ 에 무관하다.
- (3) 주어진  $n_1$ 에 대해  $P(D)$ 는  $n_0$ 의 감소함수이고  $n_0$ 가 한없이 커짐에 따라 0에 수렴한다. 즉 중심점의 수가 증가함에 따라 정다각형계획은 기울기회전계획에 가까워진다.
- (4) 주어진  $n_0$ 에 대해  $P(D)$ 는  $n_1$ 의 증가함수이다. 즉 중심점의 수가 고정되어 있으면 정다각형계획 중 정오각형계획이 기울기회전계획에 가장 가깝고 그 다음 정육각형계획, 정칠각형계획, …의 순이다.

$n_1$ 과  $n_0$ 의 여러 값에 따른  $P(D)$ 의 값들을 <표 3>에 수록하였다.

<표 3> 정다각형계획들의  $P(D)$  값

$n_1 \backslash n_0$	1	2	3	4	5
5	0.8333	0.3571	0.2083	0.1389	0.1000
6	0.8571	0.3750	0.2222	0.1500	0.1091
7	0.8750	0.3889	0.2333	0.1591	0.1167
8	0.8889	0.4000	0.2424	0.1667	0.1231
9	0.9000	0.4091	0.2500	0.1731	0.1286

## 5. 결론 및 토의

본 논문에서는 식(1.4)의 조건들을 만족하는 반응표면 실험계획들에 대하여 기울기회전성의 정도를 알 수 있게 해 주는 측도를 두 가지 방법으로 유도하였다.

제2절의  $P(D)$  와 제3절의  $Q(D)$  를 비교해 보면

$$Q(D) = \{P(D)\}^2 \quad (5.1)$$

이라는 관계가 성립한다.  $P(D)$  와  $Q(D)$  는 0보다 크거나 같은 값만 가질 수 있는 것들이므로, 식(5.1)의 관계가 성립한다는 것은 이 두 측도가 여러 계획들의 기울기회전성의 대소관계에 따른 순서를 보존해 준다는 것을 의미한다. 즉  $P(D)$  와  $Q(D)$  는 서로 일관성을 갖는 측도들이다. 따라서 두 측도를 한 가지로 통일하여 둘 중 하나를 계획  $D$  의 기울기회전성의 측도로 삼는 것도 생각할 수 있을 것이다. 그리고 측도  $Q(D)$  는 식(1.3)으로 주어진 Park과 Kim(1992)의 측도에 식(1.4)로 주어진 조건들을 적용한 결과와도 일치하는 것이다. 측도의 값이 0 이면  $D$  는 기울기회전계획이고, 측도의 값이 클수록  $D$  는 기울기회전계획으로부터 멀다. 이 측도는 설명변수의 개수  $k$  가 동일한 계획들의 기울기회전성의 정도를 비교하는 데에 사용될 수 있다.

## 참 고 문 헌

- [1] Box, G. E. P. and Behnken, D. W. (1960). Some new three-level designs for the study of quantitative variables, *Technometrics*, 2, 455-475.
- [2] Box, G. E. P. and Hunter, J. S. (1957). Multifactor experimental designs 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, Series B*, 13, 1-45.
- [4] Hader, R. J. and Park, S. H. (1978). Slope-rotatable central composite designs, *Technometrics*, 20, 413-417.
- [5] Kim, H. J. (2002). Extended central composite designs with the axial points indicated by two numbers, *The Korean Communications in Statistics*, 9, 595-605.
- [6] Myers, R. H. (1976). *Response Surface Methodology*, Blacksburg, VA : Author (distributed by Edwards Brothers, Ann Arbor, MI).
- [7] Park, S. H. and Kim, H. J. (1992). A measure of slope-rotatability for second order response surface experimental designs, *Journal of Applied Statistics*, 19, 391-404.

[ 2004년 6월 접수, 2004년 9월 채택 ]