

2차 혼합물 반응표면 모형에서의 강건한 실험 설계*

임용빈¹⁾

요약

혼합물 성분들의 비율의 상한과 하한에 대한 제한조건이 부과된 제한된 혼합물 실험 공간 R에서의 혼합물 실험을 위한 최적 설계를 찾는 데에 D-, G-, V- 최적기준 등과 같은 다양한 최적 설계 기준이 사용된다. 각각의 실험 설계는 선택된 최적 기준에 대해서는 최적이지만, 제한된 혼합물 실험 공간에서의 예측력에 대해서는 만족스럽지 못하다는 것은 잘 알려진 사실이다. (Vining 등, 1993; Khuri 등, 1999). 우리의 관심사는 2차 혼합물 반응표면모형을 가정한 경우에 제한된 혼합물 공간에서의 효율적인 실험 설계를 찾는 것이다. 이 논문에서는 꼭지점, 선중심점, 면중심점, 중앙점과 내부점으로 구성된 확장된 후보 실험점 그룹을 구성한 다음에, D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준과 실험점들 간의 거리에 근거한 U-최적기준에 강건한 실험 설계를 제안한다. Khuri 등(1999)에서 분석된 비료 혼합물 실험과 Vining과 Cornell(1993)이 분석한 조명탄 혼합물 실험의 사례에서 강건한 실험설계들과 두 논문에서 추천된 실험 설계들에 대한 예측치의 표준화된 분산의 분위수의 그림(SVPQP)을 비교한 결과 강건한 설계가 상대적으로 우월함이 판명되었다.

주요용어: 이차 혼합물 반응표면모형, 제한된 혼합물 실험 공간, 강건한 실험설계, 예측치 분산의 분위수 그림.

1. 서론

혼합물 실험에서는 혼합물의 구성 성분을 결합하여 실험을 실시하고 반응변수를 측정한다. 혼합물 실험의 인자(또는 설명변수)들은 혼합물의 구성 성분이다. 혼합물 실험은 반응변수의 평균이 구성 성분의 비율만의 함수이고 혼합물의 양에는 영향을 받지 않는 반응표면 실험의 특수한 경우이다. 예를 들면, 파인애플, 오렌지, 자몽 주스를 섞어서 만드는 혼합물인 과일 음료(fruit punch)를 생각하자. 과일음료의 품질 특성인 맛과 선호도를 나타내는 측도가 반응변수가 되고, 반응변수의 평균은 세 가지 주스의 혼합비율에 따라서 결정이 되며 혼합비율이 동일하면, 만들어진 과일음료의 양인 총 혼합량에 관계없이 동일하다. 즉, q 개 성분의 혼합물에 있어서 x_i 를 i 번째 성분의 혼합비율이라고 하면, 혼합비율들은 다음과 같은 관계식을 만족해야 하기에,

* 이 논문은 2005년도 한국학술진흥재단 기초과학연구지원사업(KRF-2005-001-C00081)지원에 의한 연구결과임.

1) (120-750) 서울시 서대문구 대현동 21, 이화여자대학교 통계학과, 교수

E-mail: yblim@ewha.ac.kr.

$$x_1 + x_2 + \cdots + x_q = 1, x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, q \quad (1.1)$$

혼합물 실험의 실험 공간은 $q-1$ 차원 심플렉스 공간이 된다. 혼합물 실험공간에서의 모형은 혼합비율들의 합이 1이라는 식 (1.1)의 제약조건 때문에 상수항과 순수 2차항들을 포함하지 않는 Scheffe의 정준 다항식을 가정한다. 일차모형은

$$E(y) = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_q x_q \quad (1.2)$$

이고, 이차모형은

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j} \beta_{ij} x_i x_j \quad (1.3)$$

이고, 특별삼차모형은

$$E(y) = \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i<j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k} \beta_{ijk} x_i x_j x_k \quad (1.4)$$

이다.

또한 엔지니어링의 전문지식으로부터의 정보나 비용 절감 등의 경제적인 이유로 인하여, 혼합물 성분들의 비율에 대한 제한조건이 알려지는 경우가 많다. 즉, 각 성분의 혼합비율이 $0 \leq x_i \leq 1$ 의 모든 값을 취할 수 있는 것이 아니라 제한된 구간인

$$0 \leq a_i \leq x_i \leq b_i \leq 1, i = 1, 2, \dots, q \quad (1.5)$$

안에서만 값을 취할 수 있는 경우이다. 일반적으로 식 (1.5)를 만족하는 제한된 실험영역을 그려보면, $q = 3$ 인 경우에 삼각형이 되지 않고, $q = 4$ 인 경우에 사면체가 되지 않는다. $q = 3$ 인 경우에 제한된 실험영역의 모양은 삼각형, 사각형, 오각형, 육각형 중의 하나가 된다.

과일 음료 혼합물 실험의 목적은 맛과 선호도를 가장 크게 하는 최적의 혼합비율을 혼합물 실험 공간에서 결정하는 것이다. 이를 위해서는 혼합비율들을 효율적으로 결정하여 과일 음료를 만들고, 각각의 과일 음료의 반응치를 관측한 후에 혼합비율과 반응변수의 평균에 관한 혼합물 반응표면 분석을 실행하게 된다. 제한된 심플렉스 공간상에서 최적조건을 찾기 위해서 2차 모형을 가정한 경우에 효율적인 실험설계는 실용적으로 중요한 연구과제로 참고문헌은 Snee(1985), Myers과 Montgomery(2002) 등이다. 이 문헌들에서는 제한된 실험 영역의 꼭지점, 선중심, 면중심, 중앙점, 축점들 중에서, D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준 등을 만족하는 실험설계를 구하였다. Vining과 Cornell(1993)은 다양한 기준의 최적 혼합물 설계들을 실용적으로 평가하는 기준으로 각각의 혼합물 성분에서의 Cox 방향의 좌표축에서의 예측치들의 분산의 그림을 그려서, 혼합물 설계들을 평가하였다. Khuri 등(1999)은 주어진 혼합물 설계에 대해서 제한된 혼합물 공간에서 예측치의 표준화된 분산

의 분위수의 그림을 구한 후에, 분위수의 그림 비교를 통해서 다양한 기준의 최적혼합물 설계들을 실용적으로 평가하였다.

혼합물 반응 표면의 최적 조건 근처의 영역에서 반응변수의 평균의 예측이나 곡선효과, 또는 특정 회귀계수의 추정에 특별한 관심이 있는 경우에는 D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준 등 여러 개의 최적기준의 효율에 강건한 실험설계가 필요하다. 이 논문에서는 제한된 혼합물 공간에서 이차모형을 가정한 경우에, D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준, U-최적기준에 강건한 실험 설계를 구하기 위한 전략으로 꼭지점, 선중심점, 면중심점, 중앙점으로 구성된 후보 실험점 그룹 I과 꼭지점과 중앙점, 선중심점과 중앙점, 면중심점과 중앙점의 중앙에 위치하는 내부점들이 추가된 후보 실험점 그룹 II를 구성하고, 우선 각각의 최적 기준치 근방의 실험 설계들에 대해서 다양한 최적 기준들에 대한 최악의 효율을 최대화 시키는 MiniMax 접근법에 의한 강건한 혼합물 실험계획의 결정방법을 제시한다. 제시된 강건한 혼합물 실험 설계의 실용성을 평가하기 위해서, Khuri 등(1999)에서 분석된 비료 혼합물 실험과 Vining과 Cornell(1993)이 분석한 조명탄 혼합물 실험의 사례에 대해서 제시된 방법에 따라서 구한 강건한 실험설계들과 두 논문에서 추천된 실험 설계에 대해서 예측치의 표준화된 분산의 분위수의 그림을 비교한 결과, 내부점을 포함하는 후보 실험점 그룹 II에서 구한 강건한 실험 설계가 우월함을 확인하였다. 또한, Vining과 Cornell(1993)이 분석한 조명탄 혼합물 실험의 사례에서 추천된 Mclean과 Anderson 실험 설계가 내부점을 포함하는 후보 실험점 그룹 II에서 구한 D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준, U-최적기준에 강건한 실험 설계와 일치함을 확인하여서, Mclean과 Anderson 실험 설계의 실용적인 타당성을 뒷받침해 준다.

2. 혼합물 실험설계 기준과 강건한 혼합물 실험설계

반응표면모형에 따라서 실험설계의 효율성이 결정되는 바와 마찬가지로, 혼합물 실험설계의 효율성도 혼합물 반응표면의 모형에 따라서 달라진다. 먼저, 최적 실험설계의 기준을 간단히 정리해 보자.

1. D-최적기준 : 혼합물 회귀계수의 추정치들의 일반화 분산인 $|\text{Var}(\hat{\beta})|$ 를 최소로 한다.
2. G-최적기준 : 혼합물 실험 공간상에 주어진 임의의 혼합비율 x_o 에서의 예측치의 분산인 $\text{Var}(x_o'\hat{\beta})$ 의 최대값을 최소로 한다.
3. V-최적기준 : 후보 실험점 그룹에 있는 각각의 혼합비율 x_o 에서의 예측치의 분산인 $\text{Var}(x_o'\hat{\beta})$ 의 평균을 최소로 한다.
4. U-최적기준 : 후보 실험점 그룹에 있는 각각의 혼합비율 x_o 에서 실험설계와의 거리의 합을 최소로 한다.

혼합물 실험설계는 혼합물 실험 공간상에서 정의된 확률 측도와 일대일 대응관계를 갖는다. 실험의 크기가 n 인 경우에, 각각의 실험점에서의 확률은 해당 실험점의 수를 n 으로 나눈 값이다. 이와 같이 혼합물 실험 공간상에 주어진 혼합비율 x_o 가 실험점으로 뽑힐 확률

이 $1/n$ 에 비례하는 경우를 정확 설계(exact designs)라고 한다. 이를 일반화하여, 주어진 혼합비율에서의 확률이 0 보다 크다고 가정한 실험 설계를 근사 설계(approximate designs)라고 한다. 혼합물 모형의 정확 설계들 중에서 D-최적 정확 설계는 실험의 크기에 따라서 달라지는 반면에, D-최적 근사 설계는 실험의 크기에 관계없이 대수학적으로 최적화를 통해서 결정된다. 예를 들어서 이차 혼합물 모형의 경우에 D-최적 근사 설계는 혼합물 실험 공간의 꼭지점들과 꼭지점과 인접한 꼭지점을 연결하는 선중심점들에서 동일한 확률을 갖는 실험설계이다. D-최적 근사 설계에 가장 가까운 정확 설계를 찾거나 D-최적 근사 설계에서 0 보다 큰 확률을 갖는 실험점들을 후보 실험점들로 취하여 D-정확 설계를 찾는데 D-최적 근사 설계가 실용적으로 활용된다.

2차모형을 가정한 경우에 D-최적 근사 설계의 실험점들은 꼭지점들과 선 중심점들로 구성되는데, 모두 혼합물 실험공간상의 경계상에 있는 점들이고 내부점들은 없다. 성분의 수가 3개이고 성분의 혼합비율에 제약조건이 없는 경우에는 한 개의 성분들로 구성된 순수 혼합물과 두 개의 성분을 반반씩 섞은 두 성분 혼합물에서만 실험을 실시하고, 3 개의 성분을 섞은 완전 혼합물인 내부점에서는 실험을 실시하지 않는다. 또한 2차모형을 가정한 경우에 실험자료의 분석 결과들 중에서 모형의 진단에서 문제점이 발견된 경우에는 자료가 특별 삼차 모형을 지지하는지 조사해 보는 것이 좋은데, 이를 검토하기 위해서는 면중심점에서 실험을 실시해야 한다. Khuri 등(1999)은 제약조건을 갖는 4개의 비료 성분에 대한 혼합물 실험설계로 D-최적설계, 전문가의 의견을 반영한 실험 설계 그리고 Design-Expert 소프트웨어에서 제공하는 Distance-Based 설계에 대해서 실용성을 비교하였다. 이 중 D-최적 설계는 제한된 혼합물 실험공간의 꼭지점, 선중심점, 면중심점, 중앙점들을 후보 실험점으로 정하였고, Distance-Based 설계를 구할 때의 후보 실험점들에는 중앙점과 꼭지점, 중앙점과 선중심점, 중앙점과 면중심점의 중앙에 있는 점들로 구성된 내부점들이 후보 실험점에 추가 되었다. Design-Expert 소프트웨어에서 제공하는 Distance-Based 설계는 제한된 혼합물 실험공간에서 골고루 실험점들이 선택되도록 하기 위해 실험점들 간의 최소 거리를 크게 하도록 실험점들을 선택하는 방법을 사용하였다.

이 논문에서는 D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준 등 여러 개의 최적기준의 효율에 강건한 실험 설계를 구하기 위한 전략을 다음과 같이 제안한다.

1. 강건한 설계를 구하기 위해서 각각의 최적 기준치 근방의 실험 설계들로 구성된 후보 실험 설계의 묶음(pools)을 만든다.
2. 묶음에 있는 각각의 실험 설계에 대해서 다양한 최적 기준들에 대한 효율과 이들 효율들 중에서 최소값인 최악의 효율을 구한다.
3. 묶음에 있는 후보 실험설계들 중에서 최악의 효율을 최대화 시키는 실험 설계를 찾는다.

즉, 제안된 전략은 MiniMax 접근법에 의한 강건한 혼합물 실험계획의 결정방법이다. 여기서 최적 기준치 근방의 실험 설계란 실험설계의 기준치가 최적 기준치에 가까운 실험설계들이다. 후보 실험 설계의 묶음을 만들기 위해서 최적 기준치 근방의 실험설계를 구해야 하

기 때문에, 꼭지점, 선중심점, 면중심점, 중앙점과 내부점들로 구성된 확장된 후보 실험점 그룹 II를 사용하는 것이 유리할 가능성이 높다.

3. 혼합물 실험 사례를 통한 실험 설계들의 비교

Welch(1985)에 의해서 개발된 ACED는 최적 설계를 구하기 위한 전문 소프트웨어이다. 이 절에서는 잘 알려진 혼합물 실험의 사례에 대해서 접근성이 용이한 통계 범용 소프트웨어인 SAS의 PROC Optex를 활용하여 D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준에 강건한 실험 설계인 R1과 후보 실험점들의 대표성과 관련된 실험점들간의 거리 기준인 U-최적기준을 포함하는 4개 최적 기준에 강건한 실험설계인 R2를 구한다.

예 3.1 (Khuri 등, 1999). 비료의 혼합물 성분들에 다음의 제약조건이 부과된다.

$$.3 \leq N \leq .6, .4 \leq P \leq .33, .27 \leq K \leq .56, 0 \leq Ca \leq .2 \quad (3.1)$$

식 (3.1)을 만족하는 제한된 혼합물 실험 공간은 12개의 꼭지점, 18개의 선중심점, 8개의 면중심점과 중앙점인 총 39개의 후보 실험점 그룹 I을 갖고, 꼭지점, 선중심점, 면중심점과 중앙점의 중앙에 위치하는 내부점을 후보 실험점 그룹 I에 추가시키는 경우에는 총 77개의 확장된 후보 실험점 그룹 II를 갖는다. 우리의 목표는 각각의 후보 실험점 그룹에 대해서 실험의 크기 15인 효율적인 혼합물 실험 설계를 찾는 것이다. SAS의 PROC Optex는 최적 실험설계를 찾아주는 Procedure로 특정한 후보 실험점 그룹, 모형과 최적 기준을 지정해야 한다. 모형으로 2차 모형을 지정해주고, 내부점들의 후보 실험점 그룹에 포함 여부에 따라서 후보 실험점 그룹 I과 후보 실험점 그룹 II를 지정해준다. SAS의 PROC Optex에서는 V-최적기준의 용어 대신에 I-최적기준의 용어를 사용한다. 4개의 최적기준에 대해서 PROC Optex를 각각 3회 실행하였다. 후보 실험점 그룹 I을 지정하고 각 실행에서 30회의 최적 설계 찾기를 시도하고, 누적된 실험 설계를 활용하여 각각의 효율(efficiency) 즉, 기준치의 크기 순서로 최적 기준치 근방의 3개의 실험 설계를 선택한 결과가 표 3.1에 주어진다. 여기서 U-최적 기준에서 2차 모형의 회귀계수의 추정이 불가능한 실험 설계는 실험 설계의 후보에서 제외시켰고, PROC Optex를 각각 3회 실행한 이유는 특히 G-최적 기준에서 각 실행마다 찾아진 30 개의 실험 설계의 G-효율이 차이가 나서 최적 기준치 근방의 실험 설계 찾기의 정확성을 높이기 위함이다.

표 3.1에서 D_{eff} 는 SAS의 PROC Optex의 출력결과 중에서 최적 설계에 대한 d-efficiency와 주어진 실험 설계의 d-efficiency의 비율로 정의된다. $\min(DVG)$ 는 주어진 실험 설계의 상대효율인 $D_{eff}, V_{eff}, G_{eff}$ 들의 최소값이고, $\min(DVGU)$ 는 주어진 실험 설계의 상대효율인 $D_{eff}, V_{eff}, G_{eff}, U_{eff}$ 의 최소값이다. 최적 기준치 근방의 실험 설계들 중에서 $\min(DVG)$ 를 가장 크게 하는 실험 설계는 D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준에 강건한 실험 설계로 간주할 수 있고, $R1_I$ 이라 명한다. $\min(DVGU)$ 를 가장 크게 하는 실험 설계를 D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준, U-최적기준에 강건한 실험 설계로 간주할 수 있고 $R2_I$ 라 명한다. 표 3.1에서 $\min(DVG)$ 값을 가장 크게 하는 값은 0.997로, $R1_I$ 은 V-효율을 두 번째로 크게 하는 실험 설계로 d-optimal3와 g-optimal2와도 일치한다. $\min(DVGU)$ 의 최대값은

표 3.1: 비료 혼합물 실험의 39개의 후보 실험점 그룹 I에 대한 최적 기준치 근방의 설계에 대한 상대 효율

	D_{eff}	V_{eff}	G_{eff}	U_{eff}	min(DVG)	min(DVGU)
d-optimal1	1.000	0.982	0.988	0.689	0.982	0.689
d-optimal2	0.999	0.994	1.000	0.688	0.994	0.688
d-optimal3	0.998	0.997	1.000	0.668	0.997	0.668
v-optimal1	0.994	1.000	0.961	0.671	0.961	0.671
v-optimal2	0.998	0.997	1.000	0.668	0.997	0.668
v-optimal3	0.999	0.994	1.000	0.688	0.994	0.688
g-optimal1	0.999	0.994	1.000	0.688	0.994	0.688
g-optimal2	0.998	0.997	1.000	0.668	0.997	0.668
g-optimal3	1.000	0.982	0.988	0.689	0.982	0.689
u-optimal1	0.695	0.621	0.742	1.000	0.621	0.621
u-optimal2	0.714	0.629	0.762	0.998	0.629	0.629
u-optimal3	0.711	0.626	0.737	0.991	0.626	0.626

0.689로 $R2_I$ 는 D-최적 설계이다. 동일한 방법으로 38개의 내부점을 추가 시켜서 총 77 개의 후보 실험점 그룹 II에 대한 최적 기준치 근방의 설계에 대한 상대 효율을 구한 결과가 표 3.2에 주어진다. min(DVG)와 min(DVGU)를 최대로 하는 실험 설계가 V-최적 설계와 우연히도 일치한다.

따라서 $R1_{II}$ 과 $R2_{II}$ 가 일치하고, 이 실험 설계를 $(R1\&R2)_{II}$ 라 명한다. $(R1\&R2)_{II}$ 는 12개의 꼭지점, 2개의 내부점과 중앙점으로 구성된다. 후보 실험점 그룹 II에 대한 U-최적 기준치 근방의 실험설계들 중에서 min(DVG) 값을 가장 크게 하는 실험 설계는 U-효율을 두 번째로 크게 하는 설계로 UR_{II} 로 명한다. Khuri 등(1999)이 제공한 제한된 혼합물 공간에서 예측치의 표준화된 분산의 분위수의 그림(Scaled Prediction Variance Quantile Plot)을 그리기 위한 S-plus 프로그램(인터넷 주소 <http://ifasstat.ufl.edu/spvplots/> 에서 다운로드 받을 수 있음)을 활용하여 강건한 실험 설계의 후보로 구한 $R1_I$, $R2_I$, $(R1\&R2)_{II}$, UR_{II} 와 Khuri 등(1999)이 SPVQP의 관점에서 가장 우월하다고 추천한 Distance-Based 최적 설계 D2에 대한 분위수 그림이 그림 3.1에 주어진다. 먼저 39개의 후보 실험점 그룹 I에 대해서 D-, V-, G-최적 기준에 강건하게 선택된 실험설계인 $R1_I$ 과 Khuri 등(1999)이 추천한 Distance-Based 최적 설계인 D2를 비교할 때, 예측치의 분산의 90 분위수 정도까지는 D2가 약간 우월하지만, 상위 10 분위수 이내에서는 $R1_I$ 이 상당히 우월함을 확인할 수 있다. 그런데, 내부점을 포함하는 77개의 후보 실험점 그룹 II에서 강건한 실험 설계로 선택된 $(R1\&R2)_{II}$ 의 그림이 $R1_I$ 과 D2의 그림 보다 훨씬 아래에 있어서, 예측치의 분산이 제한된 혼합물 실험 공간에서 전반적으로 상당히 작다는 것을 확인할 수 있고, $(R1\&R2)_{II}$ 에서 선택된 2개의 내부점들이 예측치의 분산을 작게 하는데 기여했다고 판단된다. UR_{II} 은 제

표 3.2: 비료 혼합물 실험의 내부점들을 포함하는 77개의 후보 실험점 그룹 II에 대한 최적 기준치 근방의 설계에 대한 상대 효율

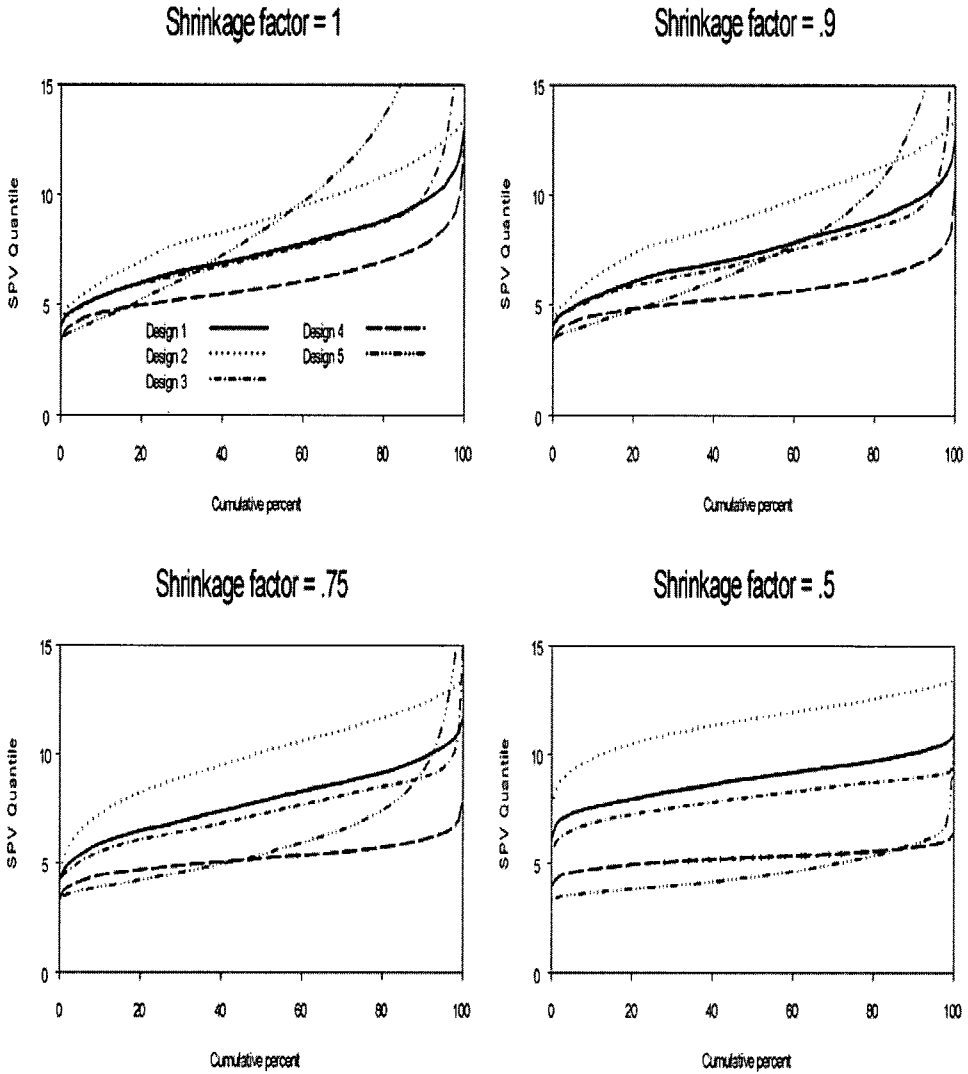
	D_{eff}	V_{eff}	G_{eff}	U_{eff}	min(DVG)	min(DVGU)
d-optimal1	1.000	0.755	0.926	0.583	0.755	0.583
d-optimal2	0.999	0.848	0.946	0.597	0.848	0.597
d-optimal3	0.999	0.856	0.937	0.584	0.856	0.584
v-optimal1	0.978	1.000	0.952	0.628	0.952	0.628
v-optimal2	0.930	0.983	0.765	0.592	0.765	0.592
v-optimal3	0.928	0.969	0.802	0.611	0.802	0.611
g-optimal1	0.993	0.900	1.000	0.591	0.900	0.591
g-optimal2	0.993	0.898	0.990	0.592	0.898	0.592
g-optimal3	0.990	0.872	0.955	0.620	0.872	0.620
u-optimal1	0.416	0.388	0.418	1.000	0.388	0.388
u-optimal2	0.492	0.485	0.411	0.996	0.411	0.411
u-optimal3	0.451	0.356	0.269	0.992	0.269	0.269

한된 혼합물 실험 공간을 중앙점을 중심으로 50%로 축소할 영역이 관심영역인 그림 3.1의 Shrinkage Factor=.5인 경우에는 우월하지만 관심영역이 제한된 혼합물 공간의 경계로 확장됨에 따라서 예측치의 분산 값이 상대적으로 굉장히 커지게 되어 예측치의 분산의 관점에서에서는 실용적인 설계가 아님을 알 수 있다.

예 3.2 (McLean과 Anderson, 1966). 조명탄의 밝기를 강해지도록 하는 4개의 혼합물 성분들인 마그네슘(x_1), 질산나트륨(x_2), 질산스트론튬(x_3)과 접착제(x_4)의 최적 혼합비를 찾으려고 한다. 공학 지식을 활용할 때에 혼합물 성분들에 다음의 제약조건이 부과된다.

$$0.40 \leq x_1 \leq 0.60, 0.10 \leq x_2 \leq 0.50, 0.10 \leq x_3 \leq 0.50, 0.03 \leq x_4 \leq 0.08 \quad (3.2)$$

식 (3.2)을 만족하는 제한된 혼합물 실험 공간은 8개의 꼭지점, 12개의 선중심점, 6개의 면중심점과 중앙점으로 구성된 총 27개의 후보 실험점 그룹 I을 갖고, 이 점들이 표 3.3에 나열되어 있다. 꼭지점, 선중심점, 면중심점과 중앙점의 중앙에 위치하는 내부점을 후보 실험점 그룹 I에 추가시키는 경우에는 총 53개의 확장된 후보 실험점들로 구성된 후보 실험점 그룹 II를 갖는다. 우리의 목표는 실험의 크기 15인 효율적인 혼합물 실험 설계를 찾는 것이다. 이차모형을 가정할 때에, McLean과 Anderson(1966)은 8개의 꼭지점, 6개의 면중심점과 중앙점에서 실험하는 것을 제안하였다. 예 3.1에서와 같은 방법으로 SAS의 PROC Optex를 활용하여 최적 기준치 근방의 실험 설계 찾기를 시도하였다. 후보 실험점 그룹 I에 대한 최적 기준치 근방의 실험 설계에 대한 상대효율을 나열한 표 3.4에서 min(DVG) 값을 가장 크게 하는 값은 0.990로, $R1_I$ 는 V-최적 실험 설계이고, d-optimal2와 일치한다. min(DVGU)의 최대값은 0.839로 $R2_I$ 는 G-효율을 세 번째로 크게 하는 실험 설계이다. 동



Design 1: $R1_I$, Design 2: $R2_I$, Design 3: D2, Design 4: $(R1 \& R2)_{II}$,
 Design 5: UR_{II}

그림 3.1: 5개의 혼합물 실험설계에 대한 예측치의 표준화된 분산의 분위수의 그림(SPVQP)

표 3.3: 조명탄 혼합물 실험의 후보 실험점 그룹 I에 있는 27개의 실험점들

실험점	x_1	x_2	x_3	x_4	실험점	x_1	x_2	x_3	x_4
꼭지점					선중심점				
1	0.40	0.10	0.47	0.03	9	0.40	0.100	0.445	0.055
2	0.60	0.10	0.27	0.03	10	0.40	0.445	0.100	0.055
3	0.40	0.47	0.10	0.03	11	0.40	0.285	0.285	0.030
4	0.60	0.27	0.10	0.03	12	0.40	0.260	0.260	0.080
5	0.40	0.10	0.42	0.08	13	0.60	0.100	0.245	0.055
6	0.40	0.42	0.10	0.08	14	0.60	0.245	0.100	0.055
7	0.60	0.10	0.22	0.08	15	0.60	0.185	0.185	0.030
8	0.60	0.22	0.10	0.08	16	0.60	0.160	0.160	0.080
면중심점					17	0.50	0.100	0.370	0.030
21	0.40	0.2725	0.2725	0.055	18	0.50	0.100	0.320	0.080
22	0.60	0.1725	0.1725	0.055	19	0.50	0.370	0.100	0.030
23	0.50	0.1000	0.3450	0.055	20	0.50	0.320	0.100	0.080
24	0.50	0.3450	0.1000	0.055	중앙점				
25	0.50	0.2350	0.2350	0.030	27	0.50	0.2225	0.2225	0.055
26	0.50	0.2100	0.2100	0.080					

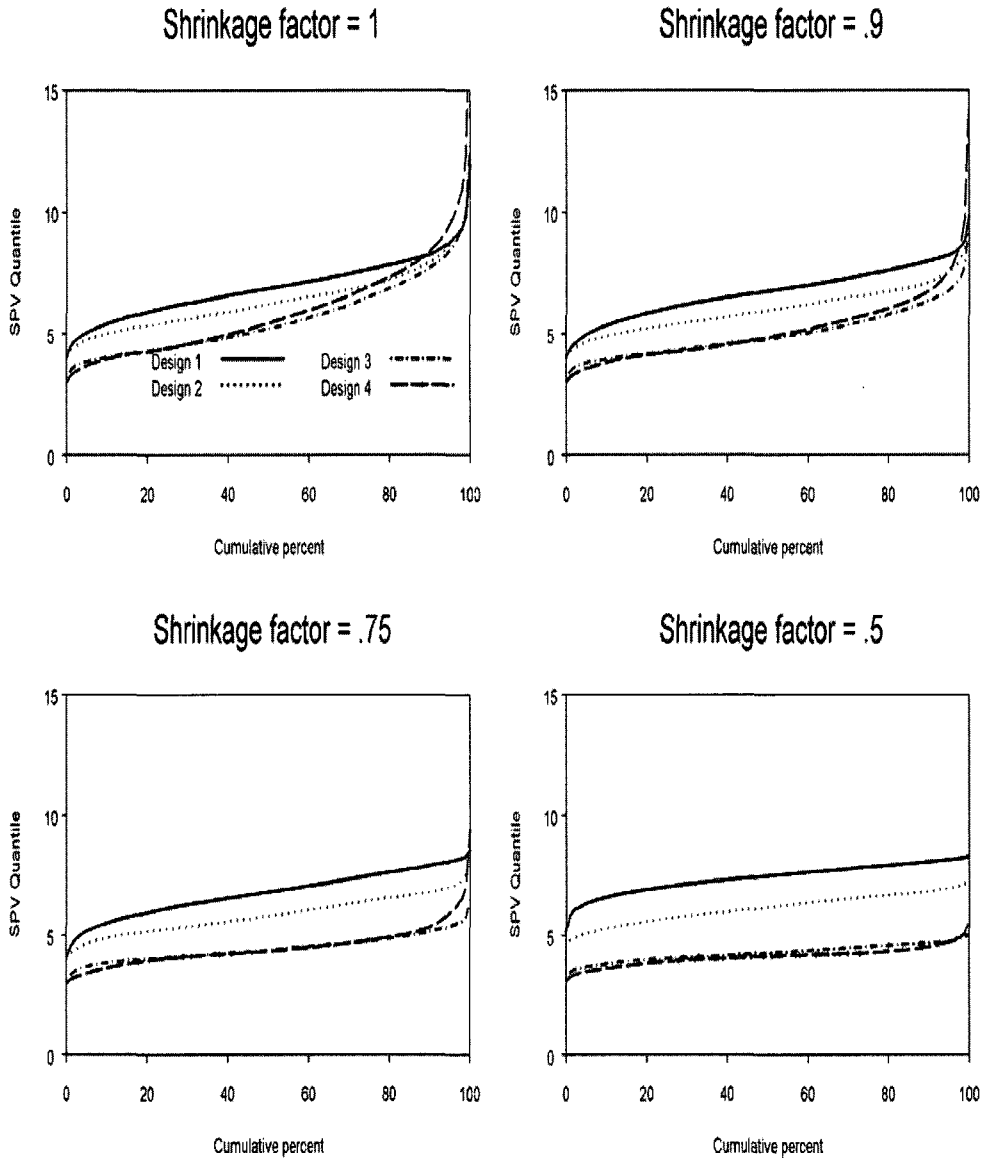
일한 방법으로 26개의 내부점을 추가 시켜서 총 53 개의 후보 실험점 그룹 II에 대한 최적 기준치 근방의 설계에 대한 상대 효율을 구한 결과가 표 3.5에 주어진다. $R1_{II}$ 은 V-효율을 두 번째로 크게 하는 실험 설계이고, $R2_{II}$ 는 V-효율을 세 번째로 크게 하는 실험 설계이다. 표 3.6에는 각각의 강건한 혼합물 설계의 실험점들이 나열되어 있다. 내부점의 후보실험점에 포함 여부에 따라서, G-기준치와 V-기준치, U-기준치의 값이 달라지지만, 표 3.6에 따르면 내부점을 포함하는 후보실험점 그룹 II에서 선택된 강건한 실험 설계가 내부점을 포함하지 않음을 알 수 있다. $R1_{II}$ 은 7개의 꼭지점, 3개의 선중심점, 4개의 면중심점과 중앙점으로 구성된다. 흥미롭게도 $R2_{II}$ 는 McLean과 Anderson(1966)이 제안한 실험 설계와 일치한다. Vining(1993) 등은 혼합물 실험 설계를 시각적으로 평가하는 방법으로 Cox 방향의 좌표축에서의 예측치의 분산에 대한 그림을 비교하는 것을 제시했고, 27개의 후보 실험점들에 대한 A-, D-, G-, V-최적 설계의 그림과 비교했을 때에, McLean과 Anderson이 제안한 실험 설계가 우월함을 확인하였다. 이제 두 종류의 후보 실험점들에 대해서 강건한 실험 설계들인 $R1_I$, $R2_I$, $R1_{II}$, $R2_{II}$ 에 대해서 Khuri 등(1999)이 제안한 혼합물 공간에서 예측치의 표준화된 분산의 분위수의 그림인 그림 3.2를 살펴보자. 놀랍게도 $R1_{II}$ 이 McLean과 Anderson 실험 설계인 $R2_{II}$ 보다 분위수의 그림에서 상대적으로 우월함을 확인할 수 있어서, $R1_{II}$ 을 추천한다.

표 3.4: 조명탄 혼합물 실험의 27개의 후보 실험점 그룹 I에 대한 최적 기준치 근방의 실험 설계에 대한 상대 효율

	D_{eff}	V_{eff}	G_{eff}	U_{eff}	min(DVG)	min(DVGU)
d-optimal1	1.000	0.992	0.983	0.474	0.983	0.474
d-optimal2	0.992	1.000	0.990	0.601	0.990	0.601
d-optimal3	0.989	0.963	0.982	0.570	0.963	0.570
v-optimal1	0.992	1.000	0.990	0.601	0.990	0.601
v-optimal2	0.981	0.992	0.983	0.635	0.981	0.635
v-optimal3	1.000	0.992	0.983	0.474	0.983	0.474
g-optimal1	0.984	0.984	1.000	0.601	0.984	0.601
g-optimal2	0.941	0.940	0.993	0.831	0.940	0.831
g-optimal3	0.972	0.975	0.991	0.839	0.972	0.839
u-optimal1	0.675	0.400	0.330	1.000	0.330	0.330
u-optimal2	0.858	0.727	0.671	0.994	0.671	0.671
u-optimal3	0.571	0.262	0.265	0.988	0.262	0.262

표 3.5: 조명탄 혼합물 실험의 53개의 후보 실험점 그룹 II에 대한 최적 기준치 근방의 실험 설계에 대한 상대 효율

	D_{eff}	V_{eff}	G_{eff}	U_{eff}	min(DVG)	min(DVGU)
d-optimal1	1.000	0.850	0.992	0.402	0.850	0.402
d-optimal2	0.996	0.772	0.996	0.405	0.772	0.405
d-optimal3	0.992	0.883	1.000	0.481	0.883	0.481
v-optimal1	0.934	1.000	0.865	0.535	0.865	0.535
v-optimal2	0.952	0.998	0.947	0.512	0.947	0.512
v-optimal3	0.914	0.989	0.834	0.561	0.834	0.561
g-optimal1	0.992	0.883	1.000	0.481	0.883	0.481
g-optimal2	0.996	0.772	0.996	0.405	0.772	0.405
g-optimal3	0.977	0.775	0.995	0.468	0.775	0.468
u-optimal1	0.126	0.014	0.058	1.000	0.014	0.014
u-optimal2	0.169	0.014	0.056	0.981	0.014	0.014
u-optimal3	0.140	0.013	0.051	0.977	0.013	0.013



Design 1: $R1_I$, Design 2: $R2_I$, Design 3: $R1_{II}$, Design 4: $R2_{II}$

그림 3.2: 4개의 혼합물 실험설계에 대한 예측치의 표준화된 분산의 분위수의 그림(SPVQP)

표 3.6: 4개의 혼합물 실험설계의 실험점 목록

	$R1_I$	$R2_I$	$R1_{II}$	$R2_{II}$
꼭지점(1-8)	1-8	1-7	1-6,8	1-8
선중심점(9-20)	10,11,14,19	10,11,12,14,19,20	11,13,18	
면중심점(21-26)	21,23,26	23	21,23,24,25	21-26
중앙점(27)		27	27	27

4. 요약 및 결론

제한된 혼합물 공간에서 이차모형을 가정한 경우에, 다양한 최적 기준에 강건한 실험 설계를 구하기 위한 전략으로 꼭지점, 선중심점, 면중심점, 중앙점과 내부점으로 구성된 확장된 후보 실험점의 그룹을 구성하고, D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준에 강건한 실험 설계인 R1과 D-최적기준, G-최적기준, V-최적기준, U-최적기준에 강건한 실험 설계인 R2를 구한다. 제안된 강건한 혼합물 설계를 평가하기 위해서 잘 알려진 4개의 성분을 갖는 비료 실험과 McLean과 Anderson의 조명탄 실험에 대해서 통계 소프트웨어인 SAS의 PROC Optex를 사용하여 강건한 실험 설계를 구하고, 각 예제에서 강건한 실험 설계의 표준화된 예측치의 분산의 분위수 그림인 SPVQP를 Khuri 등(1999)과 Vining 등(1993)에서 추천된 실험 설계의 SPVQP와 비교한 결과, 확장된 후보 실험점 그룹에서부터 선택된 강건한 실험 설계가 참고문헌에서 추천된 실험 설계보다 우수함이 판명되었다. 놀랍게도, McLean과 Anderson의 실험 설계가 강건한 실험설계로 선택되어졌는데, 이 사실이 왜 McLean과 Anderson의 실험 설계가 실용적으로 추천되는가에 관한 이유를 설명할 수 있다고 생각된다.

참고문헌

- Khuri, A. I., Harrison, J. M. and Cornell, J. A. (1999). Using quantile plots of the prediction variance for comparing designs for a constrained mixture region: an application involving a fertilizer experiment, *Applied Statistics*, **48**, 521-532.
- McLean, R. A. and Anderson, V. L. (1966). Extreme vertices design of mixture experiments, *Technometrics*, **8**, 447-454.
- Myers, R. H. and Montgomery, D. C. (2002). *Response Surface Methodology*, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York.
- Snee, R. D. (1985). Computer-Aided design of experiments: some practical experiences, *Journal of Quality Technology*, **17**, 222-236.
- Stat-Ease(2005). *Design-Expert, software for response surface methodology and mixture experiments, Version 7*, Minneapolis: Stat-Ease.
- Vining, G. G., Cornell, J. A. and Myers, R. H. (1993). A graphical approach for evaluating mixture designs, *Applied Statistics*, **42**, 127-138.

Welch, W. (1985). ACED: algorithm for the construction of experimental designs, *American Statistician*, **39**, 146.

[2006년 11월 접수, 2007년 1월 채택]

Robust Designs of the Second Order Response Surface Model in a Mixture*

Yong Bin Lim¹⁾

ABSTRACT

Various single-valued design optimality criteria such as D-, G-, and V-optimality are used often in constructing optimal experimental designs for mixture experiments in a constrained region R where lower and upper bound constraints are imposed on the ingredients proportions. Even though they are optimal in the strict sense of particular optimality criterion used, it is known that their performance is unsatisfactory with respect to the prediction capability over a constrained region. (Vining *et al.*, 1993; Khuri *et al.*, 1999) We assume the quadratic polynomial model as the mixture response surface model and are interested in finding efficient designs in the constrained design space for a mixture. In this paper, we make an expanded list of candidate design points by adding interior points to the extreme vertices, edge midpoints, constrained face centroids and the overall centroid. Then, we want to propose a robust design with respect to D-optimality, G-optimality, V-optimality and distance-based U-optimality. Comparing scaled prediction variance quantile plots (SPVQP) of robust designs with that of recommended designs in Khuri *et al.* (1999) and Vining *et al.* (1993) in the well-known examples of a four-component fertilizer experiment as well as McLean and Anderson's Railroad Flare Experiment, robust designs turned out to be superior to those recommended designs.

Keywords: Robust designs in a mixture, quadratic canonical model, expanded list of candidate design points.

* This work was in part supported by the Korea Research Foundations, Korea, under grant KRF-2005-001-C00081.

1) Professor, Department of Statistics, Ewha Women's University, Sodaemooon Gu, Seoul 120-750, Korea
E-mail: yblim@ewha.ac.kr