

확장된 구형설계를 이용한 반응표면설계

김하안¹ · 이우선²

¹성신여자대학교 대학원 통계학과, ²성신여자대학교 통계학과

(2011년 12월 13일 접수, 2012년 1월 16일 수정, 2012년 1월 16일 채택)

요약

반응표면 방법론은 어떤 공정을 개선하거나 최적화하는데 이용되는 아주 유용한 통계적방법이다. 이러한 최적조건을 추정하기 위하여 최적조건이 있으리라 예상되는 실험구역을 탐색하여 실험을 실시한다. 그런데 이 실험구역은 실험의 환경의 제약 그리고 연구자의 선택 등으로 그 모습이 다양하게 달라질 수 있다. 반응표면 설계는 실험구역의 모양에 따라 보통 둥그런 모양의 “구형설계”와 육면체 모양의 “입방형설계”로 구분한다. 구형설계는 회전성을 만족하거나 회전성에 상당히 근접하는 “유사회전성”을 갖는 특징이 있다. 반응표면 설계에서 가장 많이 사용되는 중심합성설계는 실험구역이 구형인 5수준 실험설계이다. 이 때, 축점의 α 값을 $\alpha = \sqrt{k}$ 대신 $\alpha = 1$ 로 조정하면 5-수준이 아닌 3-수준 입방형 중심합성설계를 얻을 수 있다. 그러나 입방형 중심합성설계는 실험구역이 구형이 아니므로 회전성을 만족하지 못하는 문제가 있다. 이러한 이유로, 변수들의 수준 수를 3으로 제한하면서 실험구역은 구형인 실험설계가 필요할 때가 많다. 이에 대한 대표적 실험설계가 바로 박스-벤켄 실험설계이다. 이 실험설계는 구형의 실험구역으로 회전성을 만족하나 실험구역의 크기가 변수의 개수가 증가해도 제자리 수준으로 좁은 특징이 있다. 현실적으로 실험구역의 가상 자리 부분에 대한 예측에 관심이 있을 경우 변수의 개수가 많아지면 이에 비례하여 실험구역이 커지는 실험설계가 바람직하다. 본 논문은 3-수준 입방형설계에 비하여 실험구역이 유달리 좁은 박스-벤켄 실험설계를 보완하여 구형설계를 만족하면서도 다른 한편으로는 변수 수에 따라 실험반경이 커지는 3-수준 구형 반응표면 설계를 소개하고자 한다. 이 방법을 기존의 실험설계들과 비교한 결과 변수수가 비교적 작을 경우 실험횟수 등을 고려하여 응용가치가 있음을 확인하였다

주요용어: 구형설계, 입방형설계, 3수준 실험설계, 회전성.

1. 서론

반응표면 방법이란 하나이상의 반응변수와 실험 요인들 간의 관계를 볼 뿐만 아니라 반응 값을 최적화(optimization)하는 요인들의 수준을 찾기 위해 사용된다. 2^k -요인실험은 각 요인이 2수준에서만 실험되기 때문에 요인의 수준이 변화하며 발생하는 반응 값의 곡면에 대한 변화를 감지할 수 없다. 따라서 2차 회귀모형에서의 계수 x_i^2 의 계수를 추정할 수 없다. 곡면에 관련된 계수를 추정하기 위해 흔히 2^k -요인실험에 추가하여 축점(axial points), 중심점(center points)을 포함시킨 이른바 중심합성설계(central composite design)방법이 널리 사용되고 있다.

2^k -요인 실험은 수준이 2개인데 비해 중심합성설계는 실제로 각 요인들마다 $-\alpha, -1, 0, 1, \alpha$ 의 5개의 수준에서 실험을 하게 된다. 그러나 실험여건의 제약 등의 이유로 요인들의 수준을 5수준보다 적은 3수준으로 실험을 해야 하는 상황이 종종 발생할 수 있다. 이럴 경우, 기존의 중심합성설계에서 α 값을 1로 하면 3수준 중심합성설계로 변환되어 3수준 실험을 원할 경우 이에 대한 대안이 될 수 있다. 그러나 이

²교신저자: (136-742) 서울 성북구 동선동 4가 249-1, 성신여자대학교 통계학과, 교수.

E-mail: wslee@sungshin.ac.kr

경우, 실험구역이 입방형(cuboid)이기 때문에 회전성을 만족하기 어려운 문제점이 있다. 이러한 문제점을 해결할 수 있는 다른 방법으로 박스-벤켄(Box-Behnken)설계를 들 수 있다. 이 설계는 구형의 실험구역을 가지면서도 비교적 실험횟수도 적은 아주 유용한 3수준 실험설계로 잘 알려져 있다. 하지만 이 설계를 유심히 살펴보면 요인들의 수가 증가해도 실험구역이 모든 가능한 요인들의 수준들의 경우를 포함하도록 팽창하지 못하는 특징이 있다. 따라서 실험구역이 중심점을 중심으로 좁은 구역으로 한정되기 때문에 반응 값의 최적 값이 요인들 수준의 극단의 조합일 경우 이 점에서의 실험이 이루어지지 않음으로 제한된 추정 최적 값을 얻게 된다. 이 문제를 다소나마 해결하기 위하여 본 논문에서는 요인수가 증가함에 따라 실험구역이 박스-벤켄설계 보다 넓은 새로운 실험설계 방법에 대해 생각해보고자 한다.

2. 3수준 반응표면설계

반응표면 방법론은 하나이상의 반응변수와 실험 요인들 간의 관계를 볼 뿐만 아니라 더 나아가 반응 값을 최적화하는 처리조합 곧 요인들의 수준을 찾기 위해 사용된다. 요인들의 수준이 3수준인 경우의 대표적 반응표면 설계로 박스-벤켄설계, 3수준 중심합성설계를 들 수 있다.

2.1. 반응표면설계에 대한 평가기준

2.1.1. 회전성(Rotatability) 실험구역을 포함한 관심지역 내 어떤 점($x_{10}, x_{20}, \dots, x_{k0}$)에 대응하는 추정치의 분산은 $\text{Var}(\hat{y}_0) = \sigma^2 X'(X'X)^{-1}X$ 이다. 이때, 원점($0, 0, \dots, 0$)으로부터 떨어져 있는 거리($\rho = \sqrt{x_{10}^2 + x_{20}^2 + \dots + x_{k0}^2}$)가 같은 점들에 대응하는 추정치의 분산이 같은 크기를 가질 경우 회전성을 만족한다. 이 성질은 추정치의 분산이 방향에는 영향을 받지 않고 오로지 중심점으로부터의 거리의 함수($\text{Var}(\hat{y}_0) = f(\rho)$)로 나타낼 수 있음을 의미한다 (Montgomery, 2005). 반응표면식이 2차 모형(second order model)의 경우 회전성을 만족하기 위한 실험의 설계행렬(Design Matrix)의 필요충분 조건은 다음과 같다.

- (1) 모든 홀수 차 적률(odd moment)은 0이다.
- (2) 모든 짝수 차 적률(even moment)은 다음의 관계식이 성립한다.

$$\sum_u x_{iu}^4 = 3 \sum_u x_{iu}^2 x_{ju}^2, \\ [iiii] = 3[iijj]. \quad (2.1)$$

2.1.2. 직교성(Orthogonality) 반응표면식이 2차 모형(second order model)의 경우 반응표면실험설계가 직교성을 만족하면 모형의 회귀계수들의 추정 값들이 상관관계를 갖지 않게 되고 독립적으로 추정되는 장점이 있다. 직교성을 만족하기 위한 조건은 다음과 같다.

$$\left(\sum_u x_{iu}^2 \right)^2 = n \sum_u x_{iu}^2 x_{ju}^2, \\ [ii]^2 = n[iijj]. \quad (2.2)$$

2.2. 3수준 중심합성설계

2.2.1. 구성방법 Box와 Wilson (1951)이 제안한 중심합성설계는 비선형적 변화를 감지할 수 없는 2^k -요인배치법의 단점을 보완하기 위해 기존의 2^k -요인배치법에 중심점과 축점을 추가시킨 형태이다.

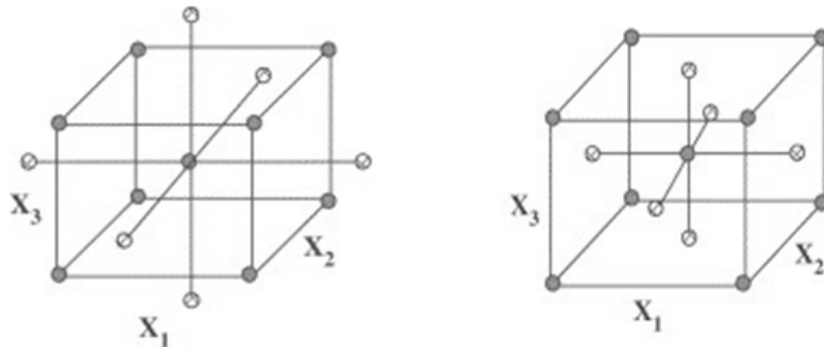


그림 2.1. 구형 중심합성설계와 3수준 중심합성설계의 비교

중심점의 수(n_c)는 적절히 주는데 연구 결과 보통 3~5개면 적절하다. 중심점 수준(0), 2^k -요인배치법의 수준(± 1) 그리고 축점 수준($\pm \alpha$)을 추가하여 각 요인들에 대하여 각각 5수준 실험이 실시되게 된다. 3수준 중심합성설계(3-level central composite design; 3CCD)는 축점 수준의 값이 ± 1 인 경우이다. 우리는 이러한 실험설계를 face-centered composite design(혹은 face-centered cube)이라 한다. 여기서 실험설계를 구성하는 각 부분의 역할이 중요하다. 요인실험 부분에서 2^{k-p} -부분실험을 사용할 경우 요인들의 선형효과와 상호 교호작용효과를 추정하기 위해 최소한 해상도 V(resolution V)이상을 선택하여야 한다. 또, 축점의 경우는 2차항을 추정하기 위해 사용되며 축점이 없다면 2차항의 합, $\sum_{i=1}^k \beta_{ii}$, 만이 추정된다. 아울러 적당한 개수의 중심점은 순수 오차(pure error)와 2차항을 추정하는데 기여한다.

2.2.2. 3수준 중심합성설계의 특징 모든 실험 점들이 중심점으로 부터 같은 거리에 존재할 때 우리는 이를 구형 중심합성설계(Spherical central composite design; SCD)라 한다. 즉 구형 중심합성설계는 $\alpha = \sqrt{k}$ 일 때 이다. 실험구역의 반경(radius)의 길이는 \sqrt{k} 이므로 요인의 수가 증가하면 실험구역도 넓어지는 장점이 있다. 이러한 장점이외에도 구형 중심합성설계는 근사회전성(near-rotatability)을 만족하는 좋은 성질이 있다. 회전 가능한 설계(rotatable design)는 중심점으로부터의 거리가 같은 모든 실험 점들에 대하여 예측분산을 일정하게 하는 성질을 가지고 있어 예측력을 높여준다는 장점이 있다. 예를 들어 두 요인 반응표면실험의 경우 반경이 1인 두 실험점 (1,0)와 $(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ 은 방향은 각각 동쪽과 동북방향으로 달라도 같은 거리의 원주에 있으므로 각각의 분산이 동일하다는 뜻이다. 한편 3수준 중심합성설계는 $\alpha = 1$ 이므로 구형 중심합성설계에 비하여 실험구역이 다음과 같다.

입방형 실험설계는 구형설계와 달리 회전성을 만족하기 어렵다. 한편, 실험횟수의 경우, 중심합성설계의 경우 중심점의 개수를 1부터 증가시키면서 예측 값의 분산(평가지표: $N\text{Var}[\hat{y}(x)]/\sigma^2$)의 변화를 살펴보면 처음에는 같은 구에 해당되는 예측 값의 분산이 큰 차이로 감소하다가 약 3~5개의 중심점이 확보되는 시점부터 분산의 크기의 변화가 크게 줄어들어 안정적인 모습을 보인다 (Myers와 Montgomery, 2002). 따라서 중심합성설계의 경우 3~5개 중심점의 개수를 선택하게 된다. 그러나 3수준 중심합성설계는 같은 방법으로 적절한 중심점의 개수가 1~2개임을 확인할 수 있다. 따라서 3수준 중심합성설계의 경우 예측 분산의 안정화를 위해 중심점의 실험을 여러 번 반복할 필요가 없게 되므로 전체실험횟수가 줄어드는 장점이 있다. 그러나 3수준 중심합성설계는 실험구역이 입방형으로서 회전성을 만족하기 어려운 문제가 있기 때문에 이를 해결할 수 있는 실험구역이 구형(spherical)으로 회전성 또는 근사회전성을 만족하는 박스-벤켄 설계를 대안으로 생각할 수 있다.

표 2.1. BIBD($k = 2, b = 3, \lambda = 1, r = 2$)와 2^2 -요인설계

		x_1	x_2	x_3		
$b = 3$ (블록수)	1	*	*		x_i	x_j
	2	*		*	-1	-1
	3		*	*	-1	1
					1	-1
					1	1

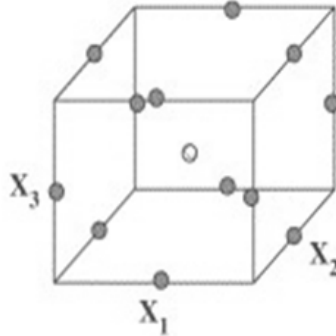


그림 2.2. 3요인 박스-벤켄설계

2.3. 박스-벤켄설계

2.3.1. 구성방법 Box와 Behnken (1960)은 2차 반응표면설계방법으로 균형된 불완비블록설계(BIBD)와 2^k -요인설계를 결합한 이른바 박스-벤켄설계(Box-Behnken design; BBD)를 제안하였다. 그 구성방법을 3요인 경우의 예를 살펴보자. 우선 3개의 처리와 한 블록마다 2개의 처리가 일어나는 3개의 블록을 가진 불완비블록설계와 2^2 -요인설계를 생각해보자. 이 설계에서 각 처리는 3회 나타난다 (Khuri와 Cornell, 1996).

표 2.1의 각 블록에 2^2 -요인설계를 *에 대응시켜 3개의 블록을 세로로 병렬로 나열하면 12개의 실험점과 몇개의 중심점으로 구성된 그림 2.2와 같은 박스-벤켄설계를 얻을 수 있다.

2.3.2. 박스-벤켄 설계의 특징 박스-벤켄 설계는 구형의 실험구역이면서 실험횟수도 비교적 적고 3개의 수준으로 실험할 수 있는 유용한 실험 설계법으로 잘 알려져 있다. 요인수 $k \leq 6$ 일 때 중심합성설계와 비교할 때 실험 횟수가 더 적다. 또, 박스-벤켄설계의 중요한 특징 중 하나는 실험구역 관점에서 구형설계라는 점이다. 즉 모든 실험 점들은 중심점으로부터 떨어진 거리가 모두 같다. 예를 들어 $k = 3$ 인 경우 그림 2.2와 같이 모든 실험점들이 정육면체의 각 가장자리에 있게 되며 중심점으로부터의 거리가 모두 $\sqrt{2}$ 이다. 이 실험구역은 구형설계이기 때문에 요인의 수에 따라서 회전성을 갖거나 근사회전성을 만족한다. 요인 수 $k = 4$ 그리고 $k = 7$ 일 때에는 정확하게 회전성을 갖는다.

중심합성설계가 요인수가 증가에 비례해 실험구역이 넓어지는데 비해 박스-벤켄설계는 요인수의 증가에 비례하여 실험구역이 넓어지지 않는다. 따라서 실험을 실시하는 지역이 좁아 반응 값의 최적 값이 실험 반경을 벗어나 모서리 극단에 존재할 경우 이를 찾기가 어려워진다. 이런 이유로 박스-벤켄설계는 각 요인의 모든 수준이 극단인 경우 관심이 없거나 반응 값의 최적 값이 실험구역 내에 존재한다는 확신이 들 때 사용하는데 무리가 없다. 반대로 각 요인의 모든 수준이 극단인 경우 관심이 크거나 반응 값의 최적 값이 가능 실험구역의 모서리 극단에 존재 하리라 예상되는 경우 적절한 실험설계로 생각하기 어렵다.

표 2.2. 요인 수에 따른 BIBD와 박스-벤켄설계

요인수	블록수(b)	블록크기(k)	각 블록 요인실험 횟수	2차 모형의 모수의 수
3	3	2	4	10
4	6	2	4	15
5	10	2	4	21
6	6	3	8	28
7	7	3	8	36
8	14	4	8	45
9	15	3	8	55
10	10	4	16	66
11	11	5	16	78
12	12	4	16	91
16	24	4	16	153

2.4. 3수준 확장구형설계

2.4.1. 구성방법 박스-벤켄설계에서 요인 수에 따른 블록의 크기는 표 2.2에서 볼 수 있다. 이 블록의 크기에 따라 실험구역의 크기가 영향을 받는다. 박스-벤켄설계의 요인 수가 4일 경우, 블록의 수는 6이고 블록의 크기는 2가 된다. 이 경우 실험반경은 $\sqrt{2}$ 가 된다. 마찬가지로 요인수가 5일 때에도 블록의 크기는 2가 되어 4요인과 마찬가지로 실험구역의 크기를 나타내는 실험반경의 크기가 $\sqrt{2}$ 가 된다. 이우선과 임성수 (2001)은 BIBD를 구성할 때 BIBD의 조건을 만족하면서 블록의 수를 줄이고 블록의 크기를 키우는 방법으로 실험구역을 확장하는 실험설계를 생각하였다. 즉 k 개의 요인에서 $(k-1)$ 개의 요인을 선택하는 모든 조합(${}_k C_{k-1}$)을 블록의 수로 한다. 이 경우, 블록의 크기는 $(k-1)$ 이 되며 실험반경은 언제나 $\sqrt{k-1}$ 이다. 박스-벤켄설계의 구성방법을 변형해 실험반경을 확장하였으므로 이 실험설계를 3수준 확장 구형 설계(3-level Expanded Spherical Design; 3ESD)라 한다. 그 구성방법은 다음과 같다.

- 1) 2^2 -요인실험을 기본 요인 설계로 왼쪽 옆에 0열을 추가 part 1을 만든다.
- 2) part 1의 제 1열과 제 2열을 서로 교환하여 part 2를 만든다.
- 3) part 2의 제 2열과 제 3열을 서로 교환하여 part 3을 만든다.
- 4) 적절한 개수의 center point를 추가하여 part 4를 만든다.

여기에서 n_{bf} 을 기본 요인 설계에서의 시행회수라고 할 때, 전체 실험회수(N)는 $N = kn_{bf} + n_c$ 이다. 3요인의 경우 전체 실험회수는, $N = 3 \times 4 + 4 = 16$ 이다. 박스-벤켄설계는 우선 요인수에 따라 적절한 BIBD를 구하고 거기에 요인실험을 결합하여 실험을 구성해야 하기 때문에 구성이 난해하고 실험구역을 확장하는데 한계가 있다. 결론적으로 박스-벤켄설계는 요인들의 극단값에 대한 추정에 관심이 없을 때 최선의 방법으로 판단되며, 거꾸로 요인들의 극단값에 대한 추정에 관심이 있을 경우 총 실험회수가 큰 차이가 나지 않은 범위 내에서 3ESD 방법이 박스-벤켄설계에 대한 대안이 될 수 있다. 특히 요인수가 6이하의 경우 3ESD의 실험회수가 기존의 방법들에 비하여 크게 크지 않다는 점을 확인하였다.

2.4.2. 3ESD의 특징 이 실험설계의 각 설계점은 k -차원 입방체(cube)의 두 꼭짓점을 연결하는 모서리의 가운데 점이 된다. 예를 들면, 표 2.3에서 첫 번째 실험점 $(0, -1, -1)$ 은 점 $(-1, -1, -1)$ 과 점 $(1, -1, -1)$ 를 연결하는 가운데 점이다. 표 2.4에서 확인할 수 있듯이 요인 수 $k = 3$ 인 경우에는 3요인 박스-벤켄설계와 동일하다. 박스-벤켄설계와 같이 정육면체의 각 모서리의 가운데 점들이 실험점이

표 2.3. 3ESD 구성 예

x_1	x_2	x_3	
0	-1	-1	part 1
0	1	-1	
0	-1	1	
0	1	1	
-1	0	-1	part 2
1	0	-1	
-1	0	1	
1	0	1	
-1	-1	0	part 3
1	-1	0	
-1	1	0	
1	1	0	
0	0	0	part 4
0	0	0	
0	0	0	
0	0	0	

된다. k 요인의 경우 part 1부터 part k 까지의 임의의 한 행은 $(k-1)$ 개의 (± 1) 과 하나의 0으로 이루어져 있으므로 다음이 성립한다.

$$x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_k^2 = k - 1 \Leftrightarrow (x_1 - 0)^2 + (x_2 - 0)^2 + \cdots + (x_k - 0)^2 = (\sqrt{k-1})^2. \quad (2.3)$$

식 (2.3)은 중심이 $(0, \dots, 0)$ 이고 모든 실험점까지 거리가 $(\sqrt{k-1})$ 인 k -차원의 구이다. 즉, 실험점인 모서리의 가운데 점들은 중심점으로부터 같은 거리에 위치하고 있다. 또한 실험의 반경은 $\sqrt{k-1}$ 이 된다. 따라서 박스-벤켄설계와 같은 구형설계이므로 회전성 혹은 근사회전성을 만족하게 된다. 결론적으로 3ESD는 박스-벤켄설계의 구형성을 만족하면서 동시에 실험구역을 확장하는 효과가 있다.

2.5. 3수준 중심합성설계, 박스-벤켄설계, 3수준 확장구형설계의 비교

3수준 중심합성설계, 박스-벤켄설계, 3수준 확장구형설계에 대해 총 실험횟수(N), 회전성과 직교성의 만족의 정도, 실험반경, 실험구역형태를 기준으로 이들을 비교하면 표 2.4와 같다.

3. 결론 및 토의

표 2.4을 보면 실험횟수는 부분실험을 실시하는 경우를 고려하면 3CCD가 가장 적고, BBD와 3ESD는 거의 비슷하다. 회전성과 직교성의 관점에서 보면, 3CCD는 두 성질을 두루 만족하지 못하는 것으로 평가된다. 우리가 관심을 가지고 있는 회전성을 보면 BBD가 모든 경우에 있어 두루 회전성을 갖거나 근사회전성을 갖는 것으로 평가된다. 아울러 3ESD 경우 BBD보다는 못하지만 두루 회전성 또는 근사회전성을 만족함을 알 수 있다. 마지막으로 실험을 살펴보기 위하여 실험반경을 근거로 비교하여보면 3CCD가 가장 넓다. 그러나 3ESD와 BBD를 비교하여보면 요인 수가 증가함에 따라 3ESD가 BBD에 비하여 확장된 실험구역에서 실험이 실시되고 있음을 알 수 있다. 3CCD는 k 요인일 때 \sqrt{k} 의 실험반경을 갖는데 비해 BBD는 $k = 3, 4, 5$ 인 경우에는 실험반경이 $\sqrt{2}$ 이고 $k = 6, 7$ 인 경우에는 $\sqrt{3}$ 이 된다. 3ESD 경우는 k 요인일 때 언제나 $\sqrt{k-1}$ 의 실험반경을 갖게 된다. 따라서 3ESD는 3CCD의 입방

표 2.4. 3종류 반응표면 설계의 비교

		3CCD	BBD	3ESD
k = 3	N	14 + n _c	12 + n _c	12 + n _c
	회전성	$\frac{10}{24} = 0.4$	$\frac{8}{12} = 0.7$	$\frac{8}{12} = 0.7$
	직교성	$\frac{100}{120}$	$\frac{64}{64} = 1$	$\frac{64}{64} = 1$
	실험반경	$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$
	실험구역	입방형	구형	구형
k = 4	N	24 + n _c	22 + n _c	32 + n _c
	회전성	$\frac{18}{48}$	$\frac{12}{12} = 1$	$\frac{12}{12} = 1$
	직교성	$\frac{324}{432}$	$\frac{144}{108}$	$\frac{576}{288}$
	실험반경	$\sqrt{4}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$
	실험구역	입방형	구형	구형
k = 5 (1/2)	N	26 + n _c	40 + n _c	40 + n _c
	회전성	$\frac{18}{48}$	$\frac{12}{16}$	$\frac{32}{72}$
	직교성	$\frac{324}{464}$	$\frac{256}{180}$	$\frac{1024}{1032} = 1$
	실험반경	$\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{4}$
	실험구역	입방형	구형	구형
k = 6 (1/4)	N	44 + n _c	48 + n _c	48 + n _c
	회전성	$\frac{18}{48}$	$\frac{24}{24}$	$\frac{40}{96}$
	직교성	$\frac{324}{496}$	$\frac{576}{1176}$	$\frac{1600}{1600} = 1$
	실험반경	$\sqrt{6}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{5}$
	실험구역	입방형	구형	구형

* 회전성 및 직교성의 만족의 정도는 식 (2.1)과 (2.2)의 좌변과 우변의 비로 나타냈으며 바람직한 실험설계는 회전성 = 1, 직교성 = 1, 실험반경 = \sqrt{k} , 실험구역 = 구형인 경우 임

형 실험구역의 결과인 회전성과 직교성의 취약점을 어느 정도 개선하면서 동시에 BBD의 좁은 실험구역을 확장하는 새로운 BBD로 생각할 수 있다. 그러나 요인수가 더 많을 경우 실험횟수가 크게 증가하는 약점이 있다. 따라서 요인수가 6-7 이하이고 요인의 최고 혹은 최소 수준들의 결합 점에서 실험의 결과를 필요로 할 경우 선택적으로 BBD의 대안으로 구성이 쉬운 3ESD 방법이 활용 될 수 있다고 판단된다. 예를 들어 비스킷의 바삭함을 최대로 하는 여러 요인들(버터의 양, 반죽의 농도, 굽는 온도, 굽는 시간 등)의 최적처리조합을 찾는 실험에서 연구자가 이 요인들의 극단값(최대수준들의 결합)에 대한 반응 값 추정에 관심이 있을 경우 BBD 보다는 3ESD가 요인들의 극단값들에 근접하는 실험구역을 확보할 수 있음을 알 수 있다. 그 이유는 3ESD는 언제나 여러 요인들 중 하나의 요인만 중간수준(0)이고 나머지 요인들은 저 혹은 고수준(± 1)을 선택하는 결과로 BBD에 비하여 훨씬 확장된 실험구역을 확보할 수 있음을 이해할 수 있다. 실제 자료 분석에서 박스-벤켄 실험의 결과에 대한 최적 값과 3WSD의 경우 최적 값이 다를 것으로 기대된다. 예를 들어 4요인에 대한 박스-벤켄 실험설계의 경우 실험반경이 $\sqrt{2}$ 인데 비해 3WSD의 실험반경은 $\sqrt{3}$ 이기 때문에 더 확장된 지역에서의 실험이 이루어진 결과로 서로 다른 2차 반응 표면식이 추정 된 결과이다. 그러나 요인수가 증가할수록 증가되는 실험횟수에 대한 부담과 회전성의 결여는 실험의 목적과 환경에 따른 사용자의 선택적 판단으로 남아 있다.

참고문헌

- 이우선, 임성수 (2001). 반응표면실험을 위한 3-수준 구형실험설계, <품질경영학회지>, **29**, 24-40.
- Box, G. E. P. and Behnken, D. W. (1960). Some new three level designs for the study of quantitative variables, *Technometrics*, **2**, 455-475.
- Box, G. E. P. and Wilson, K. B. (1951). On the experimental attainment of optimum conditions, *Journal of the Royal Statistical Society, B*, **13**, 1-45.
- Khuri, A. I. and Cornell, J. A. (1996). *Response Surfaces*, Marcel Dekker, New York.
- Montgomery, D. C. (2005). *Design and Analysis of Experiments*, John Wiley & Sons, New York.
- Myers, R. H. and Montgomery, D. C. (2002). *Response Surface Methodology*, John Wiley & Sons, New York.

3-Level Response Surface Design by Using Expanded Spherical Experimental Region

Ha-yan Kim¹ · Woo-sun Lee²

¹Graduate School of Sungshin Women's University

²Department of Statistics, Sungshin Women's University

(Received December 13, 2011; Revised January 16, 2012; Accepted January 16, 2012)

Abstract

Response surface methodology(RSM) is a very useful statistical techniques for improving and optimizing the product process. By this reason, RSM has been utilized extensively in the industrial world, particularly in the circumstances where several product variables potentially influence some quality characteristic of the product. In order to estimate the optimal condition of product variables, an experiment is being conducted defining appropriate experimental region. However, this experimental region can vary with the experimental circumstances and choice of a researcher. Response surface designs can be classified, according to the shape of the experimental region, into spherical and cuboidal. In the spherical case, the design is either rotatable or very near-rotatable. The central composite design(CCD)s widely used in RSM is an example of 5-level and spherical design. The cuboidal CCDs(CCDs with $\alpha = 1$) is appropriate when an experimental region is cuboidal but this design dose not satisfy the rotatability as it is not spherical. Practically, a 3-level spherical design is often required in the industrial world where various level of experiments are not available. Box-Behnken design(BBD)s are a most popular 3-level spherical designs for fitting second-order response surfaces and satisfy the rotatability but the experimental region does not vary with the number of variables. The new experimental design with expanded experimental region can be considered if the predicting response at the extremes are interested. This paper proposes a new 3-level spherical RSM which are constructed to expand the experimental region together with number of product variables.

Keywords: Spherical design, cuboidal design, 3-level design, rotatability.

²Corresponding author: Professor, Department of Statistics, Sungshin Women University, 249-1 Dongseon-dong 3-ga Seongbuk-gu, Seoul 136-742, Korea. E-mail: wslee@sungshin.ac.kr