

## On modified slope rotatability of central composite designs with two axial values

Hyuk Joo Kim<sup>a,1</sup>

<sup>a</sup>Division of Big Data & Financial Statistics, Wonkwang University

(Received August 16, 2019; Revised October 11, 2019; Accepted October 21, 2019)

---

### Abstract

In this paper, we applied modified slope rotatability introduced by Victorbabu (2005) to the central composite design of second type, and studied related content. We suggested methods of constructing central composite designs of second type which have modified slope rotatability. Especially, this property has the advantage that it can be used to sequential experiments, because we can obtain central composite designs of second type which have modified slope rotatability by adding experimental points without changing the axial values to central composite designs of second type having Box-Hunter rotatability. We explained central composite designs of second type which have modified slope rotatability by using two examples.

Keywords: response surface methodology, rotatability, modified slope rotatability, central composite design of second type

---

### 1. 서론

여러 개의 설명변수가 복합적으로 작용함으로써 반응변수에 영향을 주고 있을 때 이러한 반응이 이루는 반응표면을 통계적으로 분석하는 기법을 반응표면분석(response surface analysis)이라 한다. 반응표면 분석에서는 반응변수  $y$ 를 설명변수  $x_1, x_2, \dots, x_k$ 의 다항식으로 표현하는 모형을 사용하는데, 그중 가장 흔히 사용되는 모형은 다음과 같은 2차모형이다.

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

여기서  $\beta_0, \beta_i, \beta_{ii}, \beta_{ij}$ 들은 추정될 회귀계수들이며,  $\epsilon_u$ 들은 평균이 0이고 분산이  $\sigma^2$ 인, 서로 상관관계가 없는 오차항들이다.  $N$ 은 실험점의 총수이다. 최소제곱법에 의한  $\beta_0, \beta_i, \beta_{ii}, \beta_{ij}$ 의 추정량을 각각  $b_0, b_i, b_{ii}, b_{ij}$ 로 나타내면 적합된 회귀식은

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

로 표시된다.

---

<sup>1</sup>Division of Big Data & Financial Statistics, Wonkwang University, 460, Iksan-daero, Iksan, Jeonbuk 54538, Korea. E-mail: [hjkim@wku.ac.kr](mailto:hjkim@wku.ac.kr)

반응표면분석을 위한 실험설계가 가질 수 있는 바람직한 성질 중 하나가 회전성(rotatability)이다. 이 성질은 Box와 Hunter (1957)가 제시한 것으로서, 설계의 중심점으로부터 같은 거리에 있는 모든 점들에 대하여  $\hat{y}(x)$ 의 분산이 일정한 성질이다. 즉 회전성을 갖는 실험설계에서  $\hat{y}(x)$ 의 분산은 중심점으로부터 점  $x$ 까지의 거리  $\rho$ 만의 함수이다. 한편 Hader와 Park (1978)은 반응변수의 기댓값 자체보다 반응표면의 기울기를 추정하는 데에 관심이 있는 경우에 주목하여, 축 방향으로의 기울기 추정이 설계의 중심점으로부터 같은 거리에 있는 모든 점들에 대하여 동일한 신뢰도를 갖는 기울기회전성(slope rotatability)을 제시하고, 기울기회전성을 갖는 중심합성설계(central composite design)들을 구했다.

한편 Kim (2002)은 중심합성설계의 축점 부분을 확장하여 제2종의 중심합성설계를 제시하였으며, Kim과 Park (2006)은 제2종의 중심합성설계의 통계적 성질을 연구하였다. 또한 Victorbabu (2005)는 2차모형의 경우 기울기회전성을 변형한 수정기울기회전성(modified slope rotatability)을 소개하고, 수정기울기회전성을 갖는 중심합성설계를 구하였다.

본 논문에서는 Victorbabu의 수정기울기회전성을 제2종의 중심합성설계에 적용하여 관련 내용을 연구하고자 한다. 2절에서는 중심합성설계와 수정기울기회전성에 관하여 알아보고, 3절에서는 제2종의 중심합성설계가 수정기울기회전성을 갖기 위한 조건을 구하고 수정기울기회전성을 갖는 제2종의 중심합성설계들을 구할 것이다. 4절에서는 Box-Hunter의 회전성을 갖는 제2종의 중심합성설계에 실험점들을 추가함으로써 수정기울기회전성을 갖는 제2종의 중심합성설계를 만드는 방법을 알아본다.

## 2. 중심합성설계와 수정기울기회전성

Box와 Wilson (1951)에 의하여 소개된 중심합성설계(앞으로 이것을 CCD1이라 부른다)는 2차 반응표면모형의 경우 널리 쓰이는 실험설계이다.  $k = 2$  즉 설명변수가 두 개인 경우를 예로 들면, CCD1은 4개의 요인실험점  $(1, 1), (1, -1), (-1, 1), (-1, -1)$ 과 4개의 축점  $(\alpha, 0), (-\alpha, 0), (0, \alpha), (0, -\alpha)$ , 그리고 중심점  $(0, 0)$ 으로 이루어진다. 중심점과 축점은 반복(replication)될 수도 있다. 심플렉스설계나  $2^k$ 요인배치법이 2차 반응표면모형의 회귀계수들을 추정할 수 없기 때문에  $2^k$ 요인실험에 중심점과 축점을 추가한 실험설계가 CCD1이다. CCD1에서는  $\alpha$ 의 값에 의해 축점의 위치가 결정되고  $\alpha$ 의 값을 적절히 정함으로써 직교성, 회전성, 기울기회전성 등 좋은 성질을 갖는 CCD1을 만들 수 있기 때문에  $\alpha$ 의 중요성이 크다.

2차 반응표면모형을 위한 실험설계가 기울기회전성을 갖기 위한 조건은 다음과 같다 (Victorbabu와 Narasimham, 1991; Victorbabu, 2005). 여기서  $c, \lambda_2, \lambda_4$ 는 상수이다.

$$\text{홀수인 } \gamma_i \text{가 있는 경우 } \sum_{u=1}^N \prod_{i=1}^k x_{iu}^{\gamma_i} = 0 \quad \left( \text{단, } \sum_{i=1}^k \gamma_i \leq 4 \right) \quad (2.1)$$

$$\text{모든 } i \text{에 대해 } \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = \text{constant} = N\lambda_2 \quad (2.2)$$

$$\text{모든 } i \text{에 대해 } \sum_{u=1}^N x_{iu}^4 = \text{constant} = cN\lambda_4 \quad (2.3)$$

$$i \neq j \text{인 모든 } (i, j) \text{에 대해 } \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2 = \text{constant} = N\lambda_4 \quad (2.4)$$

$$(c + k - 1)\lambda_4 > k\lambda_2^2 \quad (2.5)$$

$$\lambda_4 \{k(5 - c) - (c - 3)^2\} + \lambda_2^2 \{k(c - 5) + 4\} = 0 \quad (2.6)$$

식 (2.5)는 정칙조건(non-singularity condition)이라 부른다. 추정된 회귀계수들의 분산과 공분산은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \text{Var}(b_0) &= \frac{\lambda_4(c+k-1)\sigma^2}{N\{\lambda_4(c+k-1) - k\lambda_2^2\}}, \\ \text{Var}(b_i) &= \frac{\sigma^2}{N\lambda_2}, \\ \text{Var}(b_{ij}) &= \frac{\sigma^2}{N\lambda_4}, \\ \text{Var}(b_{ii}) &= \frac{\sigma^2}{(c-1)N\lambda_4} \left\{ \frac{\lambda_4(c+k-2) - (k-1)\lambda_2^2}{\lambda_4(c+k-1) - k\lambda_2^2} \right\}, \\ \text{Cov}(b_0, b_{ii}) &= \frac{-\lambda_2\sigma^2}{N\{\lambda_4(c+k-1) - k\lambda_2^2\}}, \\ \text{Cov}(b_{ii}, b_{jj}) &= \frac{(\lambda_2^2 - \lambda_4)\sigma^2}{(c-1)N\lambda_4\{\lambda_4(c+k-1) - k\lambda_2^2\}}, \end{aligned}$$

그 밖의 공분산들은 0이다.

Victorbabu (2005)는 2차 반응표면모형의 경우  $\sum x_{iu}^2, \sum x_{iu}^4, \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2$  사이의 관계에 약간의 제약을 가함으로써 정의되는 수정기울기회전성을 소개하였다. 구체적으로 다음과 같은 제약을 통해서 수정기울기회전성을 도입하였다.

$$\left(\sum x_{iu}^2\right)^2 = N \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2, \quad \text{즉 } (N\lambda_2)^2 = N(N\lambda_4), \quad \text{즉 } \lambda_2^2 = \lambda_4$$

식 (2.6)에 위의 제약을 적용함으로써  $c = \sum x_{iu}^4 / \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2 = 5$  또는  $c = 1$ 을 얻게 되는데, 여기서 식 (2.5)에 의해  $c = 5$ 를 얻는다. Victorbabu (2005)는 또한 2차 반응표면모형의 경우 수정기울기회전성을 갖는 CCD1을 구하였다.

즉 수정기울기회전성을 갖는 실험설계는 Hader-Park의 기울기회전성을 갖는 설계들 중에서도  $\lambda_2^2 = \lambda_4$ , 즉  $c = \sum x_{iu}^4 / \sum x_{iu}^2 x_{ju}^2 = 5$ 라는 성질을 추가적으로 갖는 설계이다. 가까이 있는 두 점에서의 반응량의 차이에 관심이 있다면 이는 반응표면의 기울기를 추정하는 문제로 이어지므로, 기울기의 추정이 설계의 원점으로부터 같은 거리만큼 떨어진 모든 점들에 대하여 균일한 정도를 갖는다면 이것은 매우 바람직한 성질일 것이다. 또한  $c = 5$ 는 직교성으로 이어지는 성질이다. 더욱이 수정기울기회전성은 4절에서 보는 바와 같이 Box-Hunter의 회전성을 갖는 설계에 실험점들을 추가하여 얻을 수 있는 성질이며, 따라서 축차적 실험을 통해서 얻을 수 있다는 장점이 있다.

### 3. 제2종의 중심합성설계의 수정기울기회전성

Kim (2002)은 중심합성설계의 축점 부분을 확장하여 제2종의 중심합성설계를 제시하였다. 앞으로 제2종의 중심합성설계를 CCD2로 표시한다.  $k = 2$ 인 경우를 예로 들면, CCD2는 요인실험점  $(1, 1), (1, -1), (-1, 1), (-1, -1)$ 과 축점  $(\alpha_1, 0), (-\alpha_1, 0), (0, \alpha_1), (0, -\alpha_1), (\alpha_2, 0), (-\alpha_2, 0), (0, \alpha_2), (0, -\alpha_2)$ , 그리고 중심점  $(0, 0)$ 으로 이루어진다. 여기서  $\alpha_1$ 과  $\alpha_2$ 는 축점의 위치를 정해 주는 값이며,  $\alpha_2 \geq \alpha_1 > 0$ 이다. 중심점과 축점은 반복될 수도 있다. 중심점의 반복수를  $n_0$ 라 하고 축점의 반복수를  $n_a$ 라 하자. 요인실험점의 수를  $F$ 라 하면  $F = 2^k$ 이며,  $k$ 가 큰 경우에는 요인실험점의 일부실시(fractional replication)를 사용하여  $F = 2^{k-p}$ ( $p$ 는 적절한 양의 정수)이 될 수도 있다. 실험점의 총수  $N$ 은  $N = F + 4kn_a + n_0$ 이다.

반응표면분석을 위한 실험설계가 가질 수 있는 바람직한 성질로 직교성, 회전성, 균등정밀성, 기울기회전성 등 여러 가지가 있다. CCD1을 비롯한 기존의 반응표면 실험설계에서는 이러한 바람직한 성질을 갖는 계획이 따로따로 존재하는 경우가 많은데 CCD2에서는 두 가지의 바람직한 성질을 동시에 갖는 계획들을 쉽게 구할 수 있다는 것이 장점이다.

CCD2에서 다음이 성립한다.

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = F + 2n_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2) = N\lambda_2, \quad (3.1)$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^4 = F + 2n_a(\alpha_1^4 + \alpha_2^4) = cN\lambda_4, \quad (3.2)$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2 = F = N\lambda_4. \quad (3.3)$$

식 (3.2)와 (3.3)으로부터  $1 + 2n_a(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)/F = c$ , 즉  $\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = (c-1)F/(2n_a)$ 가 성립하므로, 수정기울기회전성 ( $\lambda_2^2 = \lambda_4$ , 즉  $c = 5$ )을 갖기 위한 조건은

$$\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = \frac{2F}{n_a} \quad (3.4)$$

임을 알 수 있다. 또한 식 (3.1)과 (3.3)으로부터 각각  $\lambda_2 = \{F + 2n_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\}/N$ ,  $\lambda_4 = F/N$ 를 얻으므로 수정기울기회전 CCD2 ( $\lambda_4 = \lambda_2^2$ )가 되기 위해서는  $N = \{F + 2n_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\}^2/F$ 이어야 함을 알 수 있다. 따라서 중심점의 반복수는

$$n_0 = N - F - 4kn_a = \frac{\{F + 2n_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\}^2}{F} - F - 4kn_a \quad (3.5)$$

가 된다.  $\text{Var}(\partial\hat{y}(x)/\partial x_i)$ 는 다음과 같이 중심점으로부터의 거리  $\rho$ 만의 함수가 된다.

$$\begin{aligned} \text{Var}\left(\frac{\partial\hat{y}(x)}{\partial x_i}\right) &= \text{Var}(b_i) + 4x_i^2\text{Var}(b_{ii}) + \sum_{j \neq i}^k x_j^2\text{Var}(b_{ij}) \\ &= \frac{1}{N} \left( \frac{\lambda_4 + \lambda_2\rho^2}{\lambda_2\lambda_4} \right) \sigma^2 \\ &= \left( \frac{\sqrt{\lambda_4} + \rho^2}{N\lambda_4} \right) \sigma^2 \\ &= \left( \frac{1}{\sqrt{NF}} + \frac{\rho^2}{F} \right) \sigma^2 \end{aligned} \quad (3.6)$$

CCD1의 경우  $k, F, n_a$ 가 정해지면 수정기울기회전 CCD1이 되기 위한  $n_0$ 와  $\alpha$ 의 값이 정해진다. CCD2의 경우는 다음과 같이 정리할 수 있다.

- (1)  $k, F, n_a$ 가 정해지고  $n_0$ 가 정해지면 수정기울기회전 CCD2가 되기 위한  $\alpha_1, \alpha_2$ 의 값이 정해진다.
- (2)  $k, F, n_a$ 가 정해지고 축값 (즉  $\alpha_1, \alpha_2$ ) 중 하나가 정해지면 수정기울기회전 CCD2가 되기 위한 나머지 하나의 축값과  $n_0$ 의 값이 정해진다. 이때  $n_0$ 의 값은 정수가 아닌 값으로 나올 수 있으므로 가장 가까운 정숫값을 취하면 근사적인 수정기울기회전성을 갖는 CCD2를 얻게 된다.

먼저 (1)의 예를 들어 보자. 부록의 Table A.1은  $k, F, n_a, n_0$ 의 여러 조합에 대하여, 수정기울기회전

CCD2가 되게 하는  $\alpha_1, \alpha_2$ 의 값과 그때의  $\sigma^{-2}\text{Var}(\partial\hat{y}(x)/\partial x_i)$ 를 구하여 정리한 것이다. 이 표에서 (a)~(l)의 각 경우에 나오는 최초의  $n_0$ 는 수정기울기회전 CCD2가 존재하기 위한 중심점의 최소 개수이다. 각 경우에 중심점의 수가 증가함에 따라, 수정기울기회전 CCD2가 되게 하는  $\alpha_1$ 의 값은 커지고  $\alpha_2$ 의 값은 작아지며, 각 설명변수에 관해 편미분한 반응표면의 기울기의 분산은 조금씩 작아지는 것을 볼 수 있다. 이 기울기의 분산은 물론 설계의 중심점으로부터의 거리  $\rho$ 만의 함수이다.

다음으로 (2)의 예를 생각해 보자.  $k = 2, F = 4, n_a = 1$ 인 경우 축값 중 하나로  $\alpha_1 = 1$ 을 사용하고 싶으면 식 (3.4)에 의해  $\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = 8$ 이 되어  $\alpha_2 = 1.6266$ 을 얻게 되며, 식 (3.5)에 의해  $n_0 = 19.875$ 이므로  $n_0 = 20$  (즉  $N = 32$ )을 사용하면 근사적인 수정기울기회전 CCD2를 얻는다. 이때 모든 설명변수  $x_i$ 에 대해  $\text{Var}(\partial\hat{y}(x)/\partial x_i) = (0.0884\sigma^2 + 0.2500\sigma^2)\rho^2$ 이 되어 기울기의 분산은 설계의 중심점으로부터의 거리  $\rho$ 만의 함수이다. 부록의 Table A.2는  $k, F, n_a$ 의 여러 조합에 대하여, 축값 중 하나를 먼저 정한 경우 얻어지는 몇 개의 수정기울기회전 CCD2를 나타낸 것이다.

이번에는 식 (3.4)와 (3.5)에 의해 얻어지는 수정기울기회전 CCD2가 기울기회전계획이 되기 위한 조건인 식 (2.1)–(2.6)을 만족함을 확인해 보자. 식 (2.1)–(2.4)가 성립함은 명백하다. 이제 정칙조건인 식 (2.5)를 보이자. 위에서  $c - 1 = 2n_a(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)/F$ 이므로

$$\begin{aligned} (c + k - 1)\lambda_4 - k\lambda_2^2 &= \left\{ k + \frac{2n_a(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)}{F} \right\} \left( \frac{F}{N} \right) - k \cdot \left\{ \frac{F + 2n_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)}{N} \right\}^2 \\ &= \frac{kF(N - F)}{N^2} + \frac{2n_a}{N^2} \left\{ N(\alpha_1^4 + \alpha_2^4) - 2kF(\alpha_1^2 + \alpha_2^2) - 2kn_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 \right\} \end{aligned}$$

인데, 여기서  $\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = 2F/n_a$ 와  $N = \{F + 2n_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\}^2/F$ 임을 이용하면

$$(c + k - 1)\lambda_4 - k\lambda_2^2 = \frac{4F}{N} > 0$$

이 되어 식 (2.5)가 만족됨을 알 수 있다. 마지막으로 식 (2.6)은 복잡한 수식의 정리 후에

$$\begin{aligned} &2n_a(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)^2 + (k - 4)Fn_a(\alpha_1^4 + \alpha_2^4) - \frac{k}{N}F^2n_a(\alpha_1^4 + \alpha_2^4) - \frac{4k}{N}Fn_a^2(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)(\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \\ &- \frac{4k}{N}n_a^3(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 + \frac{8}{N}(k - 1)Fn_a^2(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 + \frac{8}{N}(k - 1)F^2n_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2) \\ &+ \frac{2}{N}(k - 1)F^2(F - N) = 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

의 형태가 된다. 그런데 식 (3.6)에서 알 수 있듯이 CCD2가 Hader-Park의 기울기회전성을 갖기 위한 조건은  $4\text{Var}(b_{ii}) = \text{Var}(b_{ij})$ 이다. 식 (3.7)은 바로 이것으로부터 나오는 식이므로 수정기울기회전 CCD2에 의해 만족되는 식이다.

다음 예에서는 수정기울기회전성을 갖는 CCD2를 사용한 모의실험을 통해 데이터를 얻고 이를 분석하였다.

예제 3.1: 설명변수가 2개인 2차 반응표면모형

$$y = 2.5 + 0.8x_1 + 0.6x_2 + 1.5x_1^2 + 1.2x_2^2 - 0.9x_1x_2 + \epsilon$$

을 생각하자. Table A.1의 (a) 중  $n_0 = 12$ 인 수정기울기회전 CCD2를 사용하여 모의실험을 한다. 오차항  $\epsilon$ 의 분포는 정규분포  $N(0, 0.2^2)$ 으로 설정하였다. 24개의 실험점에서 얻어진 데이터는 Table 3.1과 같다.

**Table 3.1.** Data from a modified slope-rotatable CCD2

$x_1$	-1	-1	1	1	0	0	0	0
$x_2$	-1	1	-1	1	0	0	0	0
$y$	2.9492	5.8194	6.2050	5.6120	2.5504	2.4828	2.1178	2.5905
$x_1$	0	0	0	0	0	0	0	0
$x_2$	0	0	0	0	0	0	0	0
$y$	2.4598	2.5443	2.2523	2.3809	2.6734	2.6382	2.3712	2.3716
$x_1$	-0.2673	0.2673	0	0	-1.6815	1.6815	0	0
$x_2$	0	0	-0.2673	0.2673	0	0	-1.6815	1.6815
$y$	2.2226	3.0170	2.5150	2.5924	5.5461	8.2345	4.9798	7.2623

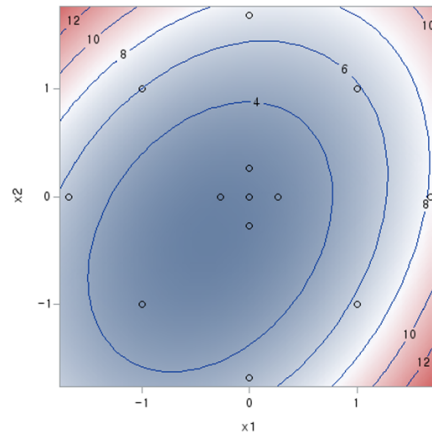
**Figure 3.1.** Contour plot for  $\hat{y}$ .

Table 3.1의 데이터에 대해 최소제곱법으로 적합된 회귀식은 다음의 식 (3.8)과 같다.

$$\hat{y} = 2.456 + 0.796x_1 + 0.626x_2 + 1.540x_1^2 + 1.267x_2^2 - 0.866x_1x_2 \quad (3.8)$$

$\underline{x}' = (x_1, x_2)$ 라 하고 식 (3.8)을

$$\hat{y} = b_0 + \underline{x}'\underline{b} + \underline{x}'B\underline{x}$$

로 나타냈을 때 반응표면의 정상점(stationary point)은

$$\underline{x}_0 = -\frac{1}{2}B^{-1}\underline{b} = \begin{pmatrix} -0.363 \\ -0.370 \end{pmatrix}$$

으로 얻어진다. Figure 3.1은  $\hat{y}$ 의 값이 같은 점들끼리 연결한 등고선그림(contour plot)이다. 평면상의 동그란 점들은 실험점을 나타낸다. 등고선들은 타원을 이루며, 위의 정상점은  $\hat{y}$ 를 최소로 하는 최소점(minimum point)임을 알 수 있다. 또한 Figure 3.2는 공통적인  $\text{Var}(\partial\hat{y}(\underline{x})/\partial x_i)$  ( $i = 1, 2$ )의 값이 같은 점들끼리 연결한 등고선그림이다. 기울기회전성을 가진 CCD2로부터 그려진 그림이므로 등고선들이 원을 이루는 것을 확인할 수 있다.

#### 4. 회전 CCD2에 실험점을 추가함으로써 수정기울기회전 CCD2 만들기

Box와 Hunter (1957)가 제시한 회전성은 반응변수  $y$ 의 기댓값을 추정할 때 중요한 성질이다.  $n_a = 1$

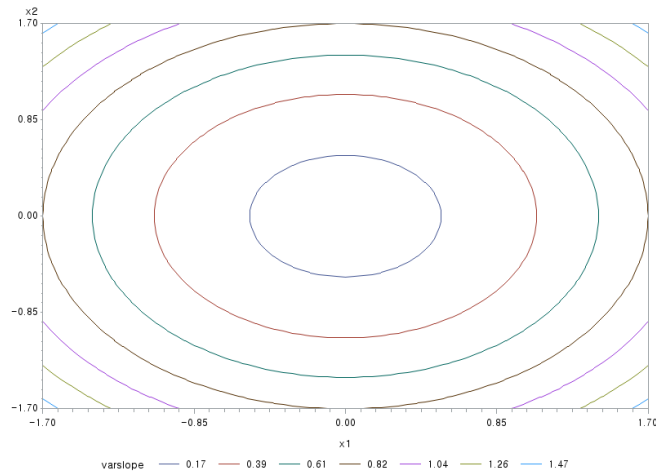


Figure 3.2. Contour plot for  $\sigma^{-2}\text{Var}(\hat{y}(x)/\partial x_i)$ .

인 경우 CCD2가 회전성을 갖기 위한 조건은  $\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = F$ 임이 알려져 있다 (Kim, 2002). 이를 일반화 하면, 축점의 반복수가  $n_a$ 인 경우 CCD2가 회전성을 갖기 위한 조건은

$$\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = \frac{F}{n_a} \tag{4.1}$$

임을 얻게 된다. 한편 CCD2가 Hader-Park의 기울기회전성을 갖기 위한 조건은  $4\text{Var}(b_{ii}) = \text{Var}(b_{ij})$ 인데, 이것은 위의 식 (3.7)로 이어진다.

식 (4.1)과 (3.7)에서 보듯이 CCD2가 Box-Hunter의 회전성을 갖기 위한 조건과 Hader-Park의 기울기회전성을 갖기 위한 조건 ( $\alpha_1, \alpha_2$ 의 값)은 전혀 달라서 이 두 성질을 갖는 CCD2는 각각 따로 구할 수밖에 없었다. 그러나 3절에서 CCD2가 수정기울기회전성을 갖기 위한 조건이  $\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = 2F/n_a$ 임이 밝혀졌으므로, 이를 이용하면 회전성을 갖는 CCD2를 사용한 후 축값의 변경 없이 기울기회전성을 갖는 CCD2를 얻을 수 있다. 이 내용을 다음의 정리에 기술하였다.

**정리 4.1** 회전성을 갖는 CCD2에서 축값을 그대로 둔 채 축점의 반복수를 두 배로 하고 중심점의 수를  $n_0$ 로 하면 수정기울기회전성을 갖는 CCD2를 얻는다. 단, 여기서  $n_0 = \{F + 2n_a(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)\}^2 / F - F - 4kn_a$ 이다.

예제 4.1: 이 예의 상황은 Park (2003, p.485)에 소개된 것이며, 원래의 출처는 Cragle 등 (1955)이다. 소의 정액(bovine semen)을 섭씨 영하 79도로 하여 보관하고 있는 어떤 실험실에서, 정액의 생존율(survival %)을 최대로 하기 위한 인자들의 최적조건을 찾기 위하여 실험을 하려고 한다. 3개의 인자(독립변수)로서 첫째로 구연산나트륨(sodium citrate)의 %, 둘째로 글리세린(glycerine)의 %, 셋째로 평형시간(equilibration time)을 취해 주었다. 반응변수  $y$ 로는 소의 정자(spermatozoa) 중에 살아 있는 백분율을 취하였다. 독립변수들의 값을 다음과 같은 변환에 의하여 간략화하였다.

$$x_1 = \frac{\text{구연산나트륨 \%} - 3}{0.7},$$

$$x_2 = \frac{\text{글리세린 \%} - 8.0}{3.0},$$

$$x_3 = \frac{\text{평형시간} - 16.0}{6.0}.$$

**Table 4.1.** Design levels and real values of the three independent variables

		Design level						
		-1.6785	-1	-0.5	0	0.5	1	1.6785
Real value	$x_1$ (%)	1.825	2.3	2.65	3.0	3.35	3.7	4.175
	$x_2$ (%)	2.965	5.0	6.5	8.0	9.5	11.0	13.036
	$x_3$ (hour)	5.929	10.0	13.0	16.0	19.0	22.0	26.071

$k = 3$ ,  $F = 8$ ,  $n_a = 1$ ,  $\alpha_1 = 0.5$ ,  $\alpha_2 = 1.6785$ 인 CCD2를 생각해 보자.  $\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = F/n_a$ 이므로 이 CCD2는 회전성을 갖는다. 여기에 축점을 반복하여  $n_a = 2$ 로 하고 중심점의 반복수를  $n_0 = 19$ 개로 하면  $\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = 2F/n_a$ 가 근사적으로 성립하므로 근사적인 수정기울기회전성을 갖는 CCD2가 된다. 이 실험에서 각 독립변수는 7개의 수준에서 측정되고 이들의 값과 실제 값과의 관계는 Table 4.1과 같다.

## 5. 결론

본 논문에서는 Victorbabu (2005)가 소개한 수정기울기회전성을 CCD2에 적용하여, 이 성질을 갖는 CCD2를 구하는 방법을 알아보았다. 특히 Box-Hunter의 회전성을 갖는 CCD2에 축점을 반복하고 중심점을 추가함으로써 수정기울기회전성을 갖는 CCD2를 만들 수 있으므로 축차적 실험을 통하여 얻을 수 있다.

Hader-Park의 기울기회전성은 반응표면의 기울기를 추정할 때 필요한 성질이므로 반응변수  $y$ 의 기댓값을 추정할 때 바람직한 성질인 Box-Hunter의 회전성과 별도로 생각해야 하는 성질이고 필요한 축값 ( $\alpha_1$ 과  $\alpha_2$ )도 전혀 다르지만, 수정기울기회전성은 Hader-Park의 기울기회전성을 가지면서도 Box-Hunter의 회전성을 갖는 설계에 실험점들을 추가하여 얻을 수 있는 성질이다. 따라서 반응변수  $y$ 의 기댓값을 추정하기 위하여 회전성을 갖는 실험설계를 통해 실험을 한 뒤, 이번에는 반응표면의 기울기를 추정하기 위하여 기울기회전성을 갖는 실험설계를 작성할 때 축값 ( $\alpha_1$ 과  $\alpha_2$ )을 바꿀 필요 없이 실험점들을 추가함으로써 원하는 성질을 가진 설계를 얻을 수 있으므로 매우 바람직한 성질이라고 할 수 있다.

## 부록

**Table A.1.** Some modified slope-rotatable CCD2's (Case 1)(a)  $k = 2$ ,  $F = 4$ ,  $n_a = 1$ 

$n_0$	12	13	14	15	16	17	18
$\alpha_1$	0.2673	0.4209	0.5338	0.6289	0.7137	0.7919	0.8661
$\alpha_2$	1.6815	1.6801	1.6775	1.6735	1.6680	1.6607	1.6514
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.1021+ 0.2500 $\rho^2$	0.1000+ 0.2500 $\rho^2$	0.0981+ 0.2500 $\rho^2$	0.0962+ 0.2500 $\rho^2$	0.0945+ 0.2500 $\rho^2$	0.0928+ 0.2500 $\rho^2$	0.0913+ 0.2500 $\rho^2$

(b)  $k = 2$ ,  $F = 4$ ,  $n_a = 2$ 

$n_0$	17	18	19	20	21	22	23
$\alpha_1$	0.2045	0.2898	0.3557	0.4117	0.4614	0.5069	0.5492
$\alpha_2$	1.4141	1.4136	1.4128	1.4117	1.4102	1.4083	1.4061
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0822+ 0.2500 $\rho^2$	0.0811+ 0.2500 $\rho^2$	0.0801+ 0.2500 $\rho^2$	0.0791+ 0.2500 $\rho^2$	0.0781+ 0.2500 $\rho^2$	0.0772+ 0.2500 $\rho^2$	0.0762+ 0.2500 $\rho^2$



(c)  $k = 3, F = 8, n_a = 1$

$n_0$	13	14	15	16	17	18	19
$\alpha_1$	0.3550	0.5043	0.6206	0.7205	0.8103	0.8935	0.9721
$\alpha_2$	1.9995	1.9980	1.9954	1.9915	1.9864	1.9798	1.9715
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0615+ 0.1250 $\rho^2$	0.0606+ 0.1250 $\rho^2$	0.0598+ 0.1250 $\rho^2$	0.0589+ 0.1250 $\rho^2$	0.0581+ 0.1250 $\rho^2$	0.0574+ 0.1250 $\rho^2$	0.0566+ 0.1250 $\rho^2$

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

$n_0$	15	16	17	18	19	20	21
$\alpha_1$	0.1390	0.2673	0.3522	0.4209	0.4804	0.5338	0.5830
$\alpha_2$	1.6818	1.6815	1.6810	1.6801	1.6790	1.6775	1.6757
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0516+ 0.1250 $\rho^2$	0.0510+ 0.1250 $\rho^2$	0.0505+ 0.1250 $\rho^2$	0.0500+ 0.1250 $\rho^2$	0.0495+ 0.1250 $\rho^2$	0.0490+ 0.1250 $\rho^2$	0.0486+ 0.1250 $\rho^2$

(e)  $k = 4, F = 16, n_a = 1$

$n_0$	15	16	17	18	19	20	21
$\alpha_1$	0.2339	0.4508	0.5952	0.7128	0.8156	0.9088	0.9954
$\alpha_2$	2.3784	2.3776	2.3761	2.3736	2.3701	2.3656	2.3600
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0365+ 0.0625 $\rho^2$	0.0361+ 0.0625 $\rho^2$	0.0357+ 0.0625 $\rho^2$	0.0354+ 0.0625 $\rho^2$	0.0350+ 0.0625 $\rho^2$	0.0347+ 0.0625 $\rho^2$	0.0343+ 0.0625 $\rho^2$

(f)  $k = 4, F = 16, n_a = 2$

$n_0$	17	18	19	20	21	22	23
$\alpha_1$	0.2505	0.3550	0.4357	0.5043	0.5652	0.6206	0.6721
$\alpha_2$	1.9999	1.9995	1.9989	1.9980	1.9968	1.9953	1.9936
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0310+ 0.0625 $\rho^2$	0.0308+ 0.0625 $\rho^2$	0.0305+ 0.0625 $\rho^2$	0.0303+ 0.0625 $\rho^2$	0.0301+ 0.0625 $\rho^2$	0.0299+ 0.0625 $\rho^2$	0.0297+ 0.0625 $\rho^2$

(g)  $k = 5, F = 32, n_a = 1$

$n_0$	21	22	23	24	25	26	27
$\alpha_1$	0.4097	0.5816	0.7150	0.8290	0.9308	1.0242	1.1116
$\alpha_2$	2.8281	2.8272	2.8255	2.8232	2.8201	2.8162	2.8114
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0207+ 0.0313 $\rho^2$	0.0205+ 0.0313 $\rho^2$	0.0204+ 0.0313 $\rho^2$	0.0203+ 0.0313 $\rho^2$	0.0201+ 0.0313 $\rho^2$	0.0200+ 0.0313 $\rho^2$	0.0199+ 0.0313 $\rho^2$

(h)  $k = 5, F = 32, n_a = 2$

$n_0$	22	23	24	25	26	27	28
$\alpha_1$	0.2339	0.3587	0.4508	0.5276	0.5952	0.6564	0.7128
$\alpha_2$	2.3784	2.3781	2.3776	2.3770	2.3761	2.3750	2.3736
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0182+ 0.0313 $\rho^2$	0.0181+ 0.0313 $\rho^2$	0.0180+ 0.0313 $\rho^2$	0.0179+ 0.0313 $\rho^2$	0.0179+ 0.0313 $\rho^2$	0.0178+ 0.0313 $\rho^2$	0.0177+ 0.0313 $\rho^2$

(i)  $k = 6, F = 64, n_a = 1$

$n_0$	30	31	32	33	34	35	36
$\alpha_1$	0.3718	0.5708	0.7182	0.8417	0.9507	1.0499	1.1418
$\alpha_2$	3.3635	3.3629	3.3618	3.3603	3.3582	3.3556	3.3524
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0115+ 0.0156 $\rho^2$	0.0115+ 0.0156 $\rho^2$	0.0114+ 0.0156 $\rho^2$	0.0114+ 0.0156 $\rho^2$	0.0113+ 0.0156 $\rho^2$	0.0113+ 0.0156 $\rho^2$	0.0112+ 0.0156 $\rho^2$

(j)  $k = 6, F = 64, n_a = 2$ 

$n_0$	33	34	35	36	37	38	39
$\alpha_1$	0.2892	0.4097	0.5027	0.5816	0.6514	0.7150	0.7739
$\alpha_2$	2.8283	2.8281	2.8277	2.8272	2.8264	2.8255	2.8245
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0104+ 0.0156 $\rho^2$	0.0103+ 0.0156 $\rho^2$	0.0103+ 0.0156 $\rho^2$	0.0103+ 0.0156 $\rho^2$	0.0102+ 0.0156 $\rho^2$	0.0102+ 0.0156 $\rho^2$	0.0102+ 0.0156 $\rho^2$

(k)  $k = 6, F = 32, n_a = 1$ 

$n_0$	17	18	19	20	21	22	23
$\alpha_1$	0.4097	0.5816	0.7150	0.8290	0.9308	1.0242	1.1116
$\alpha_2$	2.8281	2.8272	2.8255	2.8232	2.8201	2.8162	2.8114
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0207+ 0.0313 $\rho^2$	0.0205+ 0.0313 $\rho^2$	0.0204+ 0.0313 $\rho^2$	0.0203+ 0.0313 $\rho^2$	0.0201+ 0.0313 $\rho^2$	0.0200+ 0.0313 $\rho^2$	0.0199+ 0.0313 $\rho^2$

(l)  $k = 6, F = 32, n_a = 2$ 

$n_0$	14	15	16	17	18	19	20
$\alpha_1$	0.2339	0.3587	0.4508	0.5276	0.5952	0.6564	0.7128
$\alpha_2$	2.3784	2.3781	2.3776	2.3770	2.3761	2.3750	2.3736
$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$	0.0182+ 0.0313 $\rho^2$	0.0181+ 0.0313 $\rho^2$	0.0180+ 0.0313 $\rho^2$	0.0179+ 0.0313 $\rho^2$	0.0179+ 0.0313 $\rho^2$	0.0178+ 0.0313 $\rho^2$	0.0177+ 0.0313 $\rho^2$

**Table A.2.** Some modified slope-rotatable CCD2's (Case 2)

$k$	$F$	$n_a$	$\alpha_1^4$	$\alpha_2^4$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$n_0$	$N$	$\sigma^{-2}\text{Var}\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i}\right)$
2	4	1	4	4	1.4142	1.4142	24	36	0.0833 + 0.2500 $\rho^2$
2	4	1	1	7	1.0000	1.6266	20	32	0.0884 + 0.2500 $\rho^2$
2	4	2	1	3	1.0000	1.3161	36	56	0.0668 + 0.2500 $\rho^2$
3	8	1	4	12	1.4142	1.8612	25	45	0.0527 + 0.1250 $\rho^2$
3	8	2	4	4	1.4142	1.4142	40	72	0.0417 + 0.1250 $\rho^2$
3	8	2	1	7	1.0000	1.6266	32	64	0.0442 + 0.1250 $\rho^2$
4	16	1	16	16	2.0000	2.0000	32	64	0.0313 + 0.0625 $\rho^2$
4	16	1	4	28	1.4142	2.3003	26	58	0.0328 + 0.0625 $\rho^2$
4	16	2	4	12	1.4142	1.8612	42	90	0.0264 + 0.0625 $\rho^2$
5	32	1	32	32	2.3784	2.3784	41	93	0.0183 + 0.0313 $\rho^2$
5	32	1	16	48	2.0000	2.6321	39	91	0.0185 + 0.0313 $\rho^2$
5	32	2	16	16	2.0000	2.0000	56	128	0.0156 + 0.0313 $\rho^2$
5	32	2	4	28	1.4142	2.3003	45	117	0.0163 + 0.0313 $\rho^2$
5	16	1	16	16	2.0000	2.0000	28	64	0.0313 + 0.0625 $\rho^2$
5	16	1	4	28	1.4142	2.3003	22	58	0.0328 + 0.0625 $\rho^2$
5	16	2	4	12	1.4142	1.8612	34	90	0.0264 + 0.0625 $\rho^2$

## References

- Box, G. E. P. and Hunter, J. S. (1957). Multifactor experimental designs for exploring response surfaces, *Annals of Mathematical Statistics*, **28**, 195–241.
- 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.
- Cragle, R. G., Myers, R. M., Waugh, R. K., Hunter, J. S., and Anderson, R. L. (1955). The effects of

- various levels of sodium citrate, glycerol, and equilibrium time on survival of bovine spermatozoa after storage at  $-79^{\circ}\text{C}$ , *Journal of Dairy Science*, **38**, 508–512.
- Hader, R. J. and Park, S. H. (1978). Slope-rotatable central composite designs, *Technometrics*, **20**, 413–417.
- Kim, H. J. (2002). Extended central composite designs with the axial points indicated by two numbers, *The Korean Communications in Statistics*, **9**, 595–605.
- Kim, H. J. and Park, S. H. (2006). Statistical properties of second type central composite designs, *The Korean Journal of Applied Statistics*, **19**, 257–270.
- Park, S. H. (2003). *Design of Experiments (Revised ed)*, Minyoungsa, Seoul.
- Victorbabu, B. Re. (2005). Modified slope rotatable central composite designs, *Journal of the Korean Statistical Society*, **34**, 153–160.
- Victorbabu, B, Re. and Narasimham, V. L. (1991). Construction of second order slope rotatable designs through balanced incomplete block designs, *Communications in Statistics - Theory and Methods*, **20**, 2467–2478.

# 두 개의 축값을 갖는 중심합성설계의 수정기울기회전성에 관하여

김혁주<sup>a,1</sup>

<sup>a</sup>원광대학교 빅데이터·금융통계학부

(2019년 8월 16일 접수, 2019년 10월 11일 수정, 2019년 10월 21일 채택)

---

## 요약

본 논문에서는 Victorbabu (2005)가 소개한 수정기울기회전성을 제2종의 중심합성설계에 적용하여, 관련된 내용을 연구하였다. 이 성질을 갖는 제2종 중심합성설계를 구하는 방법을 제시하였다. 특히 Box-Hunter의 회전성을 갖는 제2종 중심합성설계에 축값의 변동 없이 실험점을 추가함으로써 수정기울기회전성을 갖는 설계를 만들 수 있으므로 축차적 실험에 이용할 수 있다는 장점이 있다. 두 가지의 예를 통해서 수정기울기회전성을 갖는 제2종 중심합성설계를 설명하였다.

주요용어: 반응표면방법론, 회전성, 수정기울기회전성, 제2종의 중심합성설계

---

<sup>1</sup>(54538) 전북 익산시 익산대로 460, 원광대학교 빅데이터·금융통계학부. E-mail: hjkim@wku.ac.kr