

反應表面分析과 그의 電算化

朴 聖 炫

SUMMARY

The primary objective of this paper is to aid the scientists and engineers in applying response surface procedures to obtain optimum operating conditions for many technical fields, particularly, for industrial manufacturing process.

When a set of data is available from an experimental design, it is often of interest to fit a second order polynomial regression model in k independent variables, and find the condition of the independent variables (e. g., temperature, pressure, etc.) that optimize the response variable (e. g., yield, strength, etc.).

This paper proposes a method how to obtain the optimum operating condition, and how to find the condition by using the computer. A computer program written in FORTRAN language is attached for the readers who may want to use the computer program.

I. 序 論

反應表面方法論(Response Surface Methodology (RSM))은 수없이 많은 統計的方法論의 한 분야이며 특히 工業的 처리과정에서 발생되는 문제를 주로 취급하고 있다. 이 反應表面分析의 응용은 여러개의 독립변수가 복합적인 작용을 함으로서 어떤 반응관계를 나타낼 때 널리 이용되고 있다. 여기서 독립변수(independent variables)는 반응에 영향을 주는 여러가지 요인을 말하며 일반적으로 이 독립변수는 실험하는 사람에 의하여 조절될 수 있는 것들이다.

예를들면 어떤 화학반응에 있어서 화학반응량이 온도, 습도 및 압력의 변화에 따라서 달라진다고 하자. 그러면 여기에서는 온도, 습도 및 압력이 독립변수가 되고 이들의 변화에 따라서 영향을 받는 반응량이 종속변수(dependent variable)가 될 것이다.

反應表面分析을 통해서 우리가 성취할 수 있는 것 중 중요한 것을 적어보면 다음과 같은 것들이다.

1. 독립변수와 종속변수간의 함수관계를 규명하여 독립변수들의 값의 변화에 따라서 반응량(종속변수)이 어떻게 달라지는가를 예측하고자 할 때.

2. 어떠한 값들의 독립변수가 종속변수인 반응량을 最適化(Optimize) 하는가에 대해서 알고자 할 때.

3. 종속변수와 독립변수간의 함수관계를 규명하고자 할 때에 어떠한 實驗計劃法을 쓰면 가장 좋은 精度를 얻을 것인가를 알고자 할 때.

위의 세가지를 反應表面分析研究를 통해서 성취할 수 있다면 이는 工業적인 면에서 볼 때에 統計學의 큰 공헌이 될 것이다. 특히 工業生産품의 질적향상 및 품질관리면에서 유용하게 응용될 수 있을 것이다.

反應表面分析에 관한 연구는 1951년 Box와 Wilson에 의하여 시작되었으며 그후 급속적인 이론의 전개가 이루어지고 工業분야 뿐 아니라 농업 및 생물 등 여러분야에 걸쳐서 광범위한 응용이 되어왔다. 앞으로 계속적으로 응용통계의 한 분야로서 각광을 받을 것이라고 생각하며 이 강좌에서는 몇가지 기본적인 내용을 다루려고 한다.

II. 基本的인 概念

이 章에서는 反應表面分析研究에서 하고 있는 일

* 서울大學校計算統計學科教授

** 이 연구는 한국과학재단의 일부 지원을 받아서 이루어진 것임.

반적인 假定에 대하여 論하고 어떠한 基本的인 統計概念이 다루어 지고 있는 가를 생각해 보기로 하겠다.

實驗者(experimenter)가 독립변수인 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ 의 변화에 좌우되는 반응(종속변수)인 η 에 관하여 규명하기를 희망하고 있다고 하자. 일반적으로 그 함수관계를 함수 f 로 표시하면

$$\eta = f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$$

로 쓰여질 것이다. 실제로 있어서 이 함수 f 는 잘 알려져 있지 않을 경우가 많고 어찌면 매우 복잡한 함수 일런지도 모른다.

反應表面의 統計的인 分析 과정에 있어서 제일 먼저 하게 되는 假定은 이 함수 f 가 독립변수들의 변화에 따라서 그려지는 曲面이 多項回歸曲面(polynomial regression surface)으로 표현될 수 있다는 것이다.

이 가정은 독립변수의 모든 값에 대하여 만족할 필요는 없으나 단지 실험자가 흥미를 가지고 있는 독립변수의 어떤 領域(region)에서만 만족되면 될 것이다. 독립변수 ξ 를 선형으로 변환시켜서 새로이 정의된 독립변수 x 의 중앙($x=0$)이 흥미영역(region of interest)의 한 가운데 위치한다고 하자. 그러면 이 새로운 독립변수들로 쓰여지는 第一次多項回歸模型(first order polynomial regression model)은

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k \quad (1)$$

이 될 것이다. 이와같은 제일차모형은 실험자가 아주 좁은 범위의 영역에서 종속변수 η 가 x 의 線型으로 近似하게 표현될 수 있다고 믿을 때에 사용될 수 있다.

만약 실험자가 x 의 흥미영역에서 f 의 반응표면이 곡면으로 표현될 것이라고 믿어진다면 第二次多項回歸模型(second order polynomial regression model)을 사용하는 것이 바람직하고 그 표현은

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{i,i} x_i^2 \quad (2)$$

으로 쓰여진다. 예로써 세개의 독립변수($k=3$)가 있다면

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{1,1} x_1^2 + \beta_{2,2} x_2^2 + \beta_{3,3} x_3^2 + \beta_{1,2} x_1 x_2 + \beta_{1,3} x_1 x_3 + \beta_{2,3} x_2 x_3$$

라고 표현될 수 있을 것이다.

第三次多項回歸模型도 고려될 수 있으나 실제적으로 흔히 쓰여지지 않는다고 있다. 이와같은 多項回歸模型의 假定은 테일러 系列擴張(Taylor series expansion)의 측면에서 볼때에도 근거가 있는 얘기이다.

만약 함수 f 를 $x_1=0, x_2=0, \dots, x_k=0$ 을 기점으로 테일러 계열확장을 하면

$$f = f_{x=0} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)_{x=0} x_1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)_{x=0} x_2 + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)_{x=0} x_k$$

이라고 표현되는데 이는 第一次多項回歸模型과 같은 형태이다. 이와같이 하여 第二次多項回歸模型도 테일러 계열확장을 第二次近似法(second order approximation)으로 하면 얻어질 수 있을 것이다. 반응표면의 연구 및 분석을 할 때에 일반적으로 요구되는 假定을 종합적으로 묶어 보면 다음과 같다.

1. 어떤 함수관계

$$\eta = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$$

가 존재하며 잘 알려져 있지 않거나 매우 복잡한 형태일 것이다.

2. 이 함수관계 f 는 어떤 흥미영역에서 低次(第一次나 第二次)의 多項回歸模型으로 近似하게 選出될 수 있다.

3. 독립변수 x_1, x_2, \dots, x_k 는 실험자에 의하여 임의로 조직될 수 있으며 매우 적은 실험오차를 가지며(실질적으로 거의 무시할 수 있는) 또 이 독립변수들은 量的이며 連續的이다.

최근에는 위의 세개의 假定이 벗어난 경우에 대한 많은 연구가 이루어지고 있으나 이 강좌는 기초적인 入門講좌라 보고 위의 가정에 입각한 이론을 제기할 것이다.

III. 最適反應條件의 決定

만약 종속변수인 η 가 우리가 얻고자 하는 어떤 화학반응량이라 한다면 이를 最人化시키는 독립변수들의 값을 결정하는데 우리는 흥미가 있을 것이다. 만약에 종속변수인 η 가 어떤 생산과정에서 발생되는 不純度(degree of impurity)를 나타낸다면 우리는 이 종속변수를 最小化시키는 독립변수의 反應條件에 흥미가 있을 것이다.

이 章에서는 反應表面이 統計的인 처리방법을 통해서 결정되었을 때에 어떻게 하면 독립변수들의 最適反應條件을 決定하는 가에 대해서 論하기로 하겠다.

어떤 實驗計劃法에 의하여 실험이 행하여져 n 개의 實驗資料를 얻었다고 하자. 실험자가 흥미영역에서

第二次多項回歸模型이 합당할 것이라 생각하여 最小自乘法에 의하여 適合된 反應表面(fitted response surface)을 구하면 다음과 같이 쓰여질 것이다.

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j \quad (3)$$

위에서 \hat{y} 는 η 의 抽定量이고 b_0, b_j 및 b_{ij} 는 각각 (2)식의 β_0, β_j 및 β_{ij} 의 最小自乘法에 의한 抽定量인데 여기에서 最小自乘法에 의한 과정을 行列을 사용하여 나타내면 다음과 같다.

$$Y = X\beta + k\epsilon$$

로 나타내질 수 있는 한 模型이 있다 하자. 여기에서 Y 는 實驗資料量으로 $(n \times 1)$ 벡타이고 X 는 $(n \times p)$ 행렬, β 는 $(p \times 1)$ 벡타, ϵ 는 오차로 $(n \times 1)$ 벡타라 하며 그 기대치는 영벡타, 분산은 $I\sigma^2$ 을 갖는다. 그러면 그 오차 自乘은

$$S = \epsilon'\epsilon = (Y - X\beta)'\epsilon = Y'Y - 2\beta'X'Y + \beta'X'X\beta$$

이고 이 값을 최소로 할 때의 β 를 찾기 위해서 S 를 β 로 편미분하여

$$\frac{\partial S}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} (Y'Y - 2\beta'X'Y + \beta'X'X\beta) = -2X'Y + 2X'X\beta$$

이 편미분값을 영으로 만드는 β 를 b 로 대치하면

$$X'Xb = X'Y$$

이를 정규방정식이라 부르며 $(X'X)$ 의 역행렬이 존재할때 b 는 다음 식으로 표시되며

$$b = (X'X)^{-1} X'Y \quad (4)$$

이 b 는 β 의 最小自乘法에 의한 抽定量이 된다.

위의 (3)식을 行列을 사용하여 표현하면,

$$\hat{y} = b_0 + x'b + x' Bx \quad (5)$$

라고 쓰여지는데 여기에서 각각

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12}/2 & b_{13}/2 & \cdots & b_{1k}/2 \\ & b_{22} & b_{23}/2 & \cdots & b_{2k}/2 \\ & & b_{33} & \cdots & b_{3k}/2 \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & b_{kk} \end{pmatrix}$$

을 나타낸다. \hat{y} 를 最大 또는 最小化하는 x 의 값을 구하기 위하여 \hat{y} 를 x 로 편미분하면

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial X} [b_0 + x'b + x' Bx] = b + 2Bx$$

만약 어떤 點 x_0 이 \hat{y} 를 最適化한다면 이 點에서 편미분이 영이 되므로

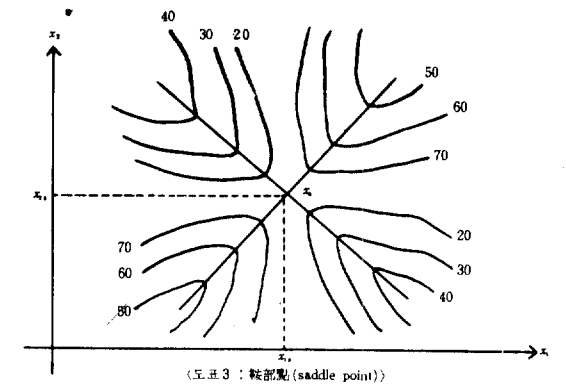
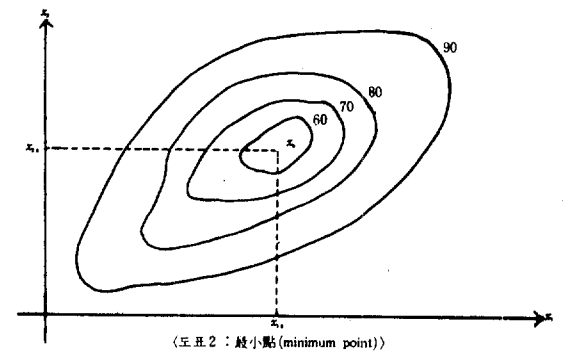
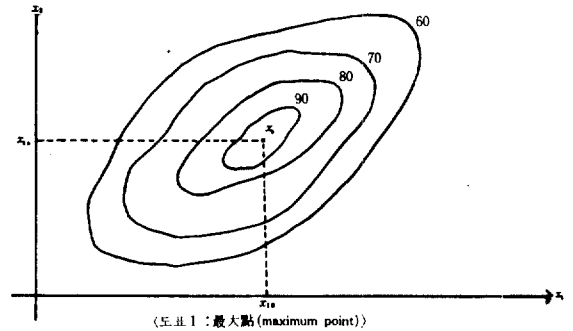
$$b + 2Bx_0 = 0$$

가 되고 이 點 x_0 을 定常點(stationary point)이라 부르며 (5)식으로부터 $x_0 = -B^{-1}b/2$ (7)

에 의하여 얻어질 수 있다. 이 定常點 x_0 는 適合된 反應表面上에서 다음의 세가지 중에 하나가 될 것이다.

1. \hat{y} 이 最大値를 얻게 되는 x 의 點
2. \hat{y} 이 最小値를 얻게 되는 x 의 點
3. \hat{y} 이 最大도 아니고 最小도 아닌 x 의 鞍部點(saddle point)

위의 세가지의 경우를 두개의 독립변수가 있다고 하고 \hat{y} 의 값을 표시해주는 도표로서 等高線表(Contour chart)을 그려보면 다음의 각 경우에 해당된다.



〈도표1〉에서 보는 바와 같이 만일 x_0 가 最大點이면 x 가 x_0 에서 멀어질수록 \hat{y} 의 값이 적어지고, 반대로 x_0 가 最小點이면 〈도표2〉에서 보는 바와 같이 x 가 x_0 에서 멀어지면 \hat{y} 의 값이 커지게 될 것이다. 그러나 만약 x_0 이 鞍部點이면 x 가 x_0 에서 멀어질 때에 방향에 따라서 \hat{y} 이 증가되는 쪽이 있고 \hat{y} 이 감소되는 쪽도 〈도표3〉에서 보는 바와 같이 생기게 될 것이다.

만약 어떤 흥미영역 안에 x_0 이 들어있지 않다면 이 흥미영역 안에서의 等高線表는 위의 세계의 도표와는 상이한 모양의 그림이 될 것이다. 그러나 우리는 실험자가 실험에 관하여 어느 정도의 지식이 있고 定常點이 있을 만한 영역이 그의 흥미영역이라면 위의 세가지 형태의 等高線表에 관심을 집중하여 反應表面을 分析해도 일반성을 상실했다고 볼 수 없을 것이다.

IV. 反應表面의 正準分析 (Canonical Analysis)

앞 章에서 \hat{y} 의 값을 最適化시키는 x 의 값을 찾는 방법을 연구하고 \hat{y} 의 값을 나타내는 等高線表를 고려하여 보았다. 실제로 定常點 x_0 의 값은 (7)식에 의하여 쉽게 구할 수 있으나 反應表面의 형태를 (5)식으로부터 추측하기란 매우 어려운 문제이며 〈도표1〉, 〈도표2〉 또는 〈도표3〉과 같은 等高線表를 그리는 것은 용이한 일이 아니다.

반응표면의 특성을 알아내기 위해서 다음의 正準分析은 많은 자료를 우리에게 줄 수 있을 것이다.

x_0 에서의 η 의 抽定値를 \hat{y}_0 이라고 하자. 그러면 (5)식으로부터

$$\hat{y}_0 = b_0 + x_0' b + x_0' B x_0$$

이 되고 좌표의 原點을 x_0 으로 옮기기 위하여

$$z = x - x_0$$

이라고 하자. 그러면 (5)식은

$$\begin{aligned} \hat{y} &= b_0 + (z' + x_0') b + (z' + x_0') B (z + x_0) \\ &= (b_0 + x_0' b + x_0' B x_0) + z' b + z' B x_0 + x_0' B z + z' B z \\ &= \hat{y}_0 + z' (b + 2B x_0) + z' B z \\ &= \hat{y}_0 + z' [b - 2B(B^{-1}b/2)] + z' B z \\ &= \hat{y}_0 + z' B z \end{aligned} \tag{8}$$

여기서 잠깐 行列의 特性根(characteristic root)에 관한 하나의 定理를 이용하기로 하자

〈定理1〉 만약 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ 가 實對稱行列 B 의 特性根이라고 하면 어떤 直交變換 $x = Pw$ 가 존재해서 $Q = x' B x$ 는 다음과 같은 正準形態(canonical form)을 가진다.

$$x' B x = \lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 + \dots + \lambda_k w_k^2$$

위의 〈定理1〉을 이용하면 (8)식의 $z' B z$ 에 대해서 어떤 直交變換

$$z = M w \tag{9}$$

가 존재해서 (8)식은

$$\begin{aligned} \hat{y} &= \hat{y}_0 + z' B z \\ &= \hat{y}_0 + w' M' B M w \\ &= \hat{y}_0 + \lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 + \dots + \lambda_k w_k^2 \end{aligned} \tag{10}$$

으로 표시되며 여기에서 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ 는 行列 B 의 特性根들이다.

(9)식에 있는 行列 M 은 $(k \times k)$ 直交行列이다. 즉 $M' M = I_k$ 이다. 行列 M 의 결정은 어떤 경우에는 중요한 의미를 갖는데 왜냐하면 (9)식에 M' 을 곱하게 되면

$$w = M' z \tag{11}$$

가 되는데 이 관계식은 새로운 독립변수 w 가 어떻게 z 와 관련되어 있는가를 설명해 주고 있기 때문이다.

이 行列 M 은 다음과 같이 k 개의 벡터로 구성되어 있고

$$M = (M_1 M_2 \dots M_k)$$

M_i 를 구하기 위해서 다음의 두개의 방정식을 풀면 된다.

$$(B - \lambda_i I_k) M_i = 0 \tag{12}$$

$$M_i' M_i = 1$$

지금까지 最適反應條件을 결정하는 방법과 反應表面의 성질을 알기 위한 正準分析方法을 이론적으로 전개하였다. 이제 다음 章에서 이와같은 이론이 실제 어떻게 응용되는 가를 관찰해 보자.

V. 例題

어떤 化學工場에서 생산되고 있는 제품이 마지막 생산과정에서 두개의 독립변수(압력과 온도)에 의하여 그 제품의 強度(grams/inch²)가 영향을 받는다고 하자. 이 실험은 어떤 압력과 온도를 주는 것이 強度를 세게할 것인가를 알아보고 압력과 온도의 변화에 따라서 제품의 強度에 어떤 변화를 가져오는지를 알아보기 위해 다음과 같은 자료를 실험에 의하여 얻었다. 여기에서

$$x_1 = \frac{\text{압력 (PSI)} - 30}{20}$$

$$x_2 = \frac{\text{온도 } (^\circ\text{C}) - 205}{10} \quad (13)$$

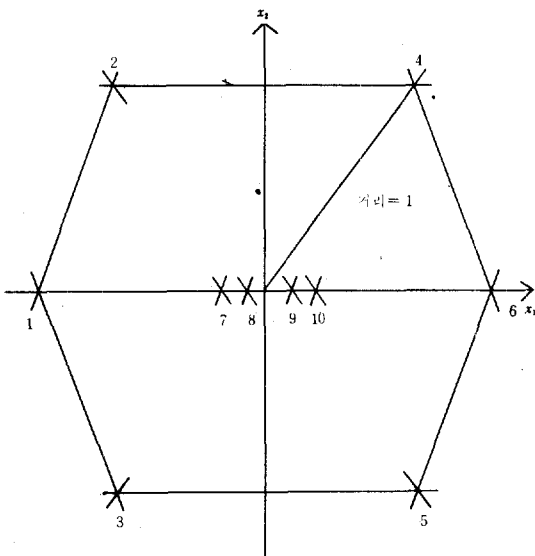
에 의하여 독립변수의 값을 바꾸어 주었다.

다음의 <Table 1>에 실려있는 자료는 六角形實驗

計劃法 (hexagonal experimental design)에 의하여 얻어진 것이며 이를 그림으로 그려보면 <도표 4>와 같다. 여기에서 별표는 資料點 (data point)을 표시한다.

관측 번호	변화된 독립변수 x_1	독립변수 x_2	실제의 독립변수 x_1	독립변수 x_2	실제의 반응량 y	추정된 반응량 \hat{y}
1	-1	0	10	205	54.6	56.32
2	$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{0.75}$	20	213.66	71.7	69.98
3	$-\frac{1}{2}$	$-\sqrt{0.75}$	20	196.34	59.8	58.08
4	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{0.75}$	40	213.66	78.7	80.42
5	$\frac{1}{2}$	$-\sqrt{0.75}$	40	196.34	78.9	80.62
6	1	0	50	205	91.0	89.28
7	0	0	30	205	90.4	89.30
8	0	0	30	205	87.5	89.30
9	0	0	30	205	91.0	89.30
10	0	0	30	205	88.3	89.30

<Table 1> 例題의 資料



<도표 4 : 六角形實驗計劃法>

위의 실험에서 변환된 독립변수 x_1 과 x_2 의 원점을 중심으로한 부분이 흥미영역이라 하고 이 영역근처

에서 第二次多項回歸模型이 반응관계를 나타내는데 적합하다고 생각하면 우리는 다음의 모형을 고려하게 된다.

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{22} x_2^2 \quad (14)$$

이 모형을 최소자승법에 의하여 抽定하면 計劃行列 X 와 반응을 나타내는 벡터 Y 는 다음과 같으므로

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -\frac{1}{2} & \sqrt{0.75} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{2}\sqrt{0.75} & 0.75 \\ 1 & -\frac{1}{2} & -\sqrt{0.75} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2}\sqrt{0.75} & 0.75 \\ 1 & \frac{1}{2} & \sqrt{0.75} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{2}\sqrt{0.75} & 0.75 \\ 1 & \frac{1}{2} & -\sqrt{0.75} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2}\sqrt{0.75} & 0.75 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} Y = \begin{pmatrix} 54.6 \\ 71.7 \\ 59.8 \\ 78.7 \\ 78.9 \\ 91.0 \\ 90.4 \\ 87.5 \\ 91.0 \\ 88.3 \end{pmatrix}$$

이 모형의 係數는 다음에 의하여 抽定된다.

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_{11} \\ b_{12} \\ b_{22} \end{pmatrix} = (X'X)^{-1} X'Y = \begin{pmatrix} 89.3 \\ 16.483 \\ 3.378 \\ -16.5 \\ -6.986 \\ -17.2 \end{pmatrix}$$

그러므로 (14)식의 抽定은

$$\hat{y} = 89.3 + 16.483X_1 + 3.378X_2 - 16.5X_1^2 - 6.986X_1X_2 - 17.2X_2^2$$

(5)식에 있는 벡터 b 와 行列 B 는

$$b = \begin{pmatrix} 16.483 \\ 3.378 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} -16.5 & -3.493 \\ -3.493 & -17.2 \end{pmatrix}$$

이고 行列 B 의 逆行列은

$$B^{-1} = \begin{pmatrix} -0.06333 & 0.01286 \\ 0.01286 & -0.06075 \end{pmatrix}$$

이다. 이제 定常點 x_0 은 (7)식으로부터

$$x_0 = -B^{-1}b/2 = \begin{pmatrix} 0.5002 \\ -0.0034 \end{pmatrix}$$

이다. 正準分析을 하기 위하여 B 의 特性根을 구하면

$$|B - \lambda I| = \begin{vmatrix} -16.5 - \lambda & -3.493 \\ -3.493 & -17.2 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

으로부터 $\lambda_1 = -13.34$ 와 $\lambda_2 = -20.36$ 을 얻게 된다.

위의 x_0 에서의 반응을 계산해 보면 $\hat{y}_0 = 93.417$ 이므로 (9)식의 표현은 다음과 같이 된다.

$$\hat{y} = 93.417 - 13.34w_1^2 - 20.36w_2^2 \quad (15)$$

따라서 우리는 定常點 x_0 이 最大點이라는 것을 알 수 있으며 새로이 얻어진 독립변수 w_1 과 w_2 가 변환에 따라서 \hat{y} 의 값이 감소되는 것을 알 수 있다. (13) 식으로부터 強度를 최대화 하는 실제 독립변수의 값은,

$$0.5002 = \frac{\text{압력} - 30}{20}$$

$$-0.0034 = \frac{\text{온도} - 205}{10}$$

으로부터 압력은 약 40 PSI 이고 온도는 약 205°C 이다. 이 最適條件에서 強度는 93.417 grams/inch² 까지 도달될 수 있다.

(15)식에 있는 w_1 과 w_2 , 그리고 x_1 과 x_2 의 관계를 규명하기 위하여 (12)식을 이용하여 行列 M 을 구하여 보자.

M_1 과 M_2 를 각각

$$M_1 = \begin{pmatrix} m_{11} \\ m_{21} \end{pmatrix} \quad (M_2 = \begin{pmatrix} m_{12} \\ m_{22} \end{pmatrix})$$

라 하고

$$(B - \lambda_i I)M_i = 0, \quad i = 1, 2$$

을 전개하면 다음 두 방정식을 얻게 된다. 먼저 $i=1$ 이면

$$3.16m_{11} + 3.493m_{21} = 0$$

$$3.493m_{11} + 3.86m_{21} = 0$$

이제 $m_{11}^2 + m_{21}^2 = 1$ 이라는 조건을 사용하여 위의 방정식을 풀면

$$\begin{pmatrix} m_{11} \\ m_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.74152 \\ -0.67093 \end{pmatrix}$$

을 얻는다. 다음으로 $i = 2$ 이면

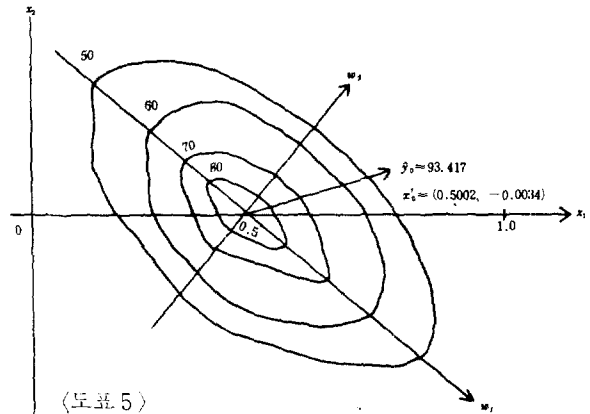
$$3.86m_{12} - 3.493m_{22} = 0$$

$$-3.493m_{12} + 3.16m_{22} = 0$$

이 되고 $m_{12}^2 + m_{22}^2 = 1$ 을 사용하면

$$\begin{pmatrix} m_{12} \\ m_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.67093 \\ 0.74152 \end{pmatrix}$$

이 된다. 이제 이들 변수의 관계를 \hat{y} 의 等高線表와 같이 도표에 그려보면 <도표 5>를 얻을 수 있다.



즉 변환행렬 M 은

$$M = \begin{pmatrix} 0.74152 & 0.67093 \\ -0.67093 & 0.74152 \end{pmatrix}$$

이고 (11)식으로부터 w 와 x 의 관계는

$$w = M'(x - x_0)$$

이므로

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.74152 & -0.67093 \\ 0.67093 & 0.74152 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - 0.5002 \\ x_2 + 0.0034 \end{pmatrix}$$

<도표 5>를 자세히 관찰해 보면 w_1 과 w_2 가 $(w_1, w_2) = (0, 0)$ 에서 움직임에 따라 \hat{y} 의 값이 감소되

는 것을 알 수 있고 그 감소의 정도는 w_2 쪽이 더 빠르다는 것을 볼 수 있다.

VI. 反應表面分析方法의 전산화

反應表面分析 방법은 그 계산과정에 있어서 변수가 많거나 수가 복잡한 경우 시간과 노력면에 많은 낭비가 있을 수 있다. 따라서 이 章에서는 반응표면분석의 전산화를 위한 한 프로그램을 소개하겠다.

<도표 6 : 반응표면 분석방법의 FORTAN 프로그램>

```
REAL*8 OUT3 (7)
DIMENSION X(200,36), Y(200), XXPD (36,36),
XYPD (36), LI(36), L2(36),
1 SB(7), B(7,7), BINV (7,7), R(7, 7),
RAMDA(7), BH(36), XO(36), XOPT(7),
2 OUT1 (7), OUT2 (7) R1(49), XINV (1296),
BNIN(49 ), BXIN(49), FMT (20)
DATA OUT1/ X1 , X2 , X3 , X4 , X5 , X
6 , X7/
DATA OUT2/ W1 , W2 , W3 , W4 , W5 ,
W6 , W7 /
DATA OUT3/ W1 *W1 , W2 *W2 , W3*
W3 , W4*W4 , W5*W5 , W6 *W6 , W7*W7/
```

*** RESPONSE SURFACE ANALYSIS ***

1—CONTROL CARD

```
COL. 3 - 10
PROBLEM NAME
COL11 - 15
NUMBER OF OBSERVATIONS
COL 16- 20
NUMBER OF VARIABLES
```

2—FORMAT CARD

3—DATA CARDS

```
REQUIRED SUBROUTINE --- MINV
EIGEN
```

PRINT 1

```
1 FORMAT (1H1/ /30X, RESPONSE SURFA
CE ANALYSIS)
114 READ(1, 3, END=999) PR, PRI, N, MV
3 FORMAT(2X,2A4, 10I5)
READ(1, 5) FMT
5 FORMAT(20A4)
PRINT 7, PR, PRI
```

7 FORMAT(1HI, RESPONSE SURFACE ANALYSIS. . . . , 2A4)

```
DD 100 I=1 , N
100 X(I, 1)=1.
M=1+2*MV+(MV*(MV-1) ) /2
DO 400 I=1 , M
XYPD(I)=0.
BH(I)=0.
DO 400 J=1 , M
400 XXPD(I, j)=0.
DO 500 I=1 , MV
XOPT(I)=0.
DO 500 J=1 , MV
500 R(I, J)=0.
MV1=MV+1
DO 110 I=1 , N
110 READ (1, FMT) Y(I) , (X(1, J) , J=2, MV1)
WRITE (3, 11)
11 FORMAT (/ /10X, INPUT DATA/10X,10( - ))
WRITE(3, 12) (OUT1(I) , I=1 , MV)
12 FORMAT (23X , Y VALUE , 7 (2X , A2,
VALUE) ) DO 900 I=1 , N.
9:10 WRITE(3, 13) I , Y (I) , (X(I, J) , J= 2 ,
MV1)
13 FORMAT(15X , 15 , 8F10 . 3)
MF=MV1
DO 120 I=2 , MF
DO 120 J=I , MF
MV1=MV1+1
DO 120 K= 1 , N
120 X(K , MV1)=X(K,I) *X(K,J)
C
C BETA COEFFICIENT ESTIMATION
USING LEAST SQUARE METHOD
C
DO 130 I=I, M
DO 130 J= I , M
DO 130 K=I , M
130 XXPD (I, J)=XXPD(I, J)+X(K , I) *X
(K, J)
NX=0
DO 135 J= I , M
DO 135 I=I ,M,
NX=NX+1
135 XINV (NX)=XXPD(I, J)
C
CALL MINV(XINV, M, RD, 11, 12)
C
```

```

NX=0
DO 136 J= 1 , M
DO 136 I=1 , M
NX=NX+1
136 XXPD(I, J)=XINV(NX)
DO 140 I=1 , M
DO 140 K= 1 , N
140 XYPD(I)=XYPD(I)+X(K, I)*Y(K)
DO 150 I=1 , M
DO 150 J=1 , M
150 BH(I)=BH(I)+XXPD(I, J)*XYPD(J)
WRITE(3, 21)
21 FORMAT(1HO// 10X, BETA COEFFI-
CIENT /10X , 16 (-) )
DO 151 I=1 , MF
II=I-1
151 WRITE (3, 23) II , BH(I)
II=MF
DO 152 I=1 , MV
DO 152 J=I , MV
II=II+1
152 WRITE (3, 24) I,J,BH(II)
23 FORMAT(14X, B( ,I1, ) ,2X,E15.7)
24 FORMAT(14X, B( ,2I1, ) ,1X,E15.7)
22 FORMAT (20X,E15.7)
C
C CALCULATE STATIONARY POINT
C
DO 160 I=1 , MV
II=I+1
160 SB(I)=BH(II)
MF1=MF
DO 170 I=1 , MV
DO 170 J=I , MV
MF1=MF1+1
B(I, J)=BH(MF1)
170 IF(I . NE . J) B(I, J)=B(I, J)/2.
DO 180 I=2 , MV
II=I-1
DO 180 J= 1 , II
180 B(I, J)=B(J, I)
NB=0
DO 200 J=1 , MV
DO 200 I=1 , MV
NB=NB+1
200 BNIN(NB)=B(I, J)
C
CALL MINV (BNIN,MV,RD,11,12)
C

NB=0
DO 205 J=1 ,MV
DO205 I=1 , MV
NB=NB+1
205 BINV (I, J)= BNIN(NB)
DO 210 I=1 , MV
DO 210 J=1 , MV
210 XOPT(I)=XOPT(I)-BINV(I, J)*SB(J)/2.
WRITE (3, 31)
31 FORMAT (1HO// 10X, STATIONARY
POINT /10X,16 (-) )
WRITE (3, 22) (XOPT(I) , I=1 , MV)
C
C THE ESTIMATED RESPONSE AT
C STATIONARY POINT
C
XO(1)=1.
DO 220 I=1 , MV
II=I+1
220 XO(II)=XOPT(I)
MF2=MV+1
DO 230 I=1 , MV
DO 230 J=I , MV
MF2=MF2+1
230 XO(MF2)=XOPT(I)*XOPT(J)
YH=0.
DO 240 I=1 , M
240 YH=YH+BH(I)*XO(I)
WRITE(3, 41) YH
41 FORMAT(1HO// 10X, THE ESTIMATE
D RESPONSE AT STATIONARY
POINT / 1 10X, 42( - )/20X, E15 . 7)
C
C CANONICAL ANALYSIS FORM
C
NC=0
DO 242 I=1 , MV
DO 242 J=I , MV
NC=NC+1
242 BXIN(NC)=B(J, I)
C
CALL EIGEN (BXIN,R1,MV,O)
C
NB=0
DO 245 J=1 , MV
DO 245 I=1 , MV
NB=NB+1
245 R(I, J)=R1(NB)
NC=0

```



```

DO 291 I=1 , MV
DO 291 J=I , MV
NC=NC+1
291 BINV(J , I)=BXIN(NC)
DO 300 I=1 , MV
300 RAMDA(I)=BINV(I , I)
WRITE(3 , 42) YH
42 FORMAT(1HO// 10X,CANONICAL
ANALYSIS FORM/10X,23 ( - )/
1 15X, Y = ,E15 . 7)
WRITE( 3, 43) (RAMDA(I) , OUT 3(I),
I=1, MV)
43 FORMAT(18X, + ,E15. 7, 1X,A5)
WRITE ( 3, 51)
51 FORMAT (1HO/10X, W = M (X-XO)
/10X , 12( - )// 10X, M=)
DO 444 I=1 , MV
WRITE ( 3,52) (R(I, J) ,J=1 , MV)
52 FORMAT (20X , 7E15 . 7)
444 CONTINUE
GO TO 111
999 STOP
END

SUBROUTINE MINV(A,N,D,L,M)
DIMENSION A(1) , L(1) , M(1)

SEARCH FOR LARGEST

D=1 . 0
NK=-N
DO 80 K=1 , N
NK=NK+N
L(K)=K
M(K)=K
BIGA=A(KK)
DO 20 J=K , N
IZ=N*(J-1)
DO 20 I=K , N
IJ=IZ+I
10 IF( ABS(BIGA)-ABS(A(IJ))) 15 , 20 , 20
15 BIGA=A(IJ)
L(K)=I
M(K)=J
20 CONTINUE

INTERCHANGE ROWS

J=L(K)

```

C
C
C
C

C
C
C

```

IF(J-K) 35 , 35 , 25
25 KI=K-N
DO 30 I=1 , N
KI=KI+N
HOLD=-A(KI)
JI=KI-K+J
A(KI)=A(JI)
30 A(JI)=HOLD

C
C INTERCHANGE COLUMNS
35 I=M(K)
IF(I-K) 45 , 45 , 38
38 JP=N*(I-1)
DO 40 J=1 , N
JK=NK+J
JI=JP+J
HOLD=-A(JK)
A(JK)=A(JI)
40 A(JI)=HOLD

C
C DIVIDE COLUMN BY MINUS
C PIVOT (VALUE OF PIVOT
C ELEMENT IS CONTAINED
C IN BIGA)
45 IF(BIGA) 48 , 46 , 48
46 D=O . O
RETURN
48 DD 55 I=1 , N
IF(I-K) 50 , 55 , 50
50 IK=NK+I
A(IK)=A(IK)/(-BIGA)
55 CONTINUE

C
C REDUCE MATRIX
C
DD 65 I= 1 , N
IK=NK+I
HOLD=A(IK)
IJ=I-N
DO 65 J=1 , N
IJ=IJ+N
IF(I-K) 60,, 65 , 60
60 IF(J-K) 62 , 65 , 62
62 KJ=IJ-I+K
A(IJ)=HOLD*A(KJ)+A(IJ)
65 CONTINUE

C
C DIVIDE ROW BY PIVOT
C

```

```

      KJ=K-N
      DO 75 J=1 , N
      KJ=KJ+N
      IF(J-K) 70 , 75 , 70
70  A(KJ)=A(KJ)/BIGA
      75  CONTINUE
C
C          PRODUCT OF PIVOTS
C
      D=D*BIGA
C
C          REPLACE PIVOT BY
C          RECIPROCAL
C
      A(KK)=1.0/BIGA
80  CONTINUE
C
C          FINAL ROW AND COLUMN
C          INTERCHANGE
C
      K=N
100 K=K-1
      IF(K) 150 , 150 , 105
105 I=L(K)
      IF(I-K) 120 , 120 , 108
108 JQ=N*(K-1)
      JR=N*(I-1)
      DO 110 J=1 , N
      JK=JQ+J
      HOLD=A(JK)
      JI=JR+J
      A(JK)=-A(JI)
110 A(JI)=HOLD
120 J=M(K)
      IF(J-K) 100 , 100 , 125
125 KI=K-N
      DO 130 I=1 , N
      KI=KI+N
      HOLD=A(KI)
      JI=KI-K+J
      A(KI)=-A(JI)
130 A(JI)=HOLD,
      GO TO 100
150 RETURN
      END
      SUBROUTINE EIGEN(A , R , N , MV)
      DIMENSION A(1) , R(1)
C
C          GENERATE IDENTITY MATRIX
C
      5  RANGE=1.0E-6
      IF(MV-1) 10 , 25 , 10
10  IQ=-N
      DO 20 J=1 , N
      IQ=IQ+N
      DO 20 I=1 , N
      IJ=IQ+I
      R(IJ)=0.
      IF(I-J) 20 , 15 , 20
15  R(IJ)=1 , 0
20  CONTINUE
C
C          COMPUTE INITIAL AND FINAL
C          NORMS (ANORM AND ANORMX)
C
25  ANORM=0.
      DO 35 I=1 , N
      DO 35 J=I , N
      IF(I-J) 30 , 35 , 30
30  IA=I+(J+J-J)/2
      ANORM=ANORM+A(IA)*A(IA)
35  CONTINUE
      IF(ANORM) 165 , 165 , 40
40  ANORM=1.414*SQRT(ANORM)
      ANRMX=ANORM*RANGE/FLOAT(N)
C
C          INITIALIZE INDICATORS AND
C          COMPUTE THRESHOLD, THR
C
      IND=0
      THR=ANORM
45  THR=THR/FLOAT(N)
50  L=1
55  M=L+1
C
C          COMPUTE SIN AND COS
C
60  MQ=(M*M-M)/2
      LQ=(L*L-L)/2
      LM=L+MQ
62  IF(ABS(A(LM)) - THR) 130 , 65 , 65
65  IND=1
      LL=L+LQ
      MM=M+MQ
      X=0.5*(A(LL)-A(MM))
68  Y=-A(LM)/SQRT(A(LM)*A(LM)+X*
      X)
      IF(X) 70 , 75 , 75

```

```

70 Y= -Y
75 SINX=Y/SQRT(2.0*(1.0+(SQRT(1.0-Y
  *Y))))
  SINX2=SINX*SINX
78 COSX=SQRT(1.0-SINX2)
  COSX2=COSX*COSX
  SINCS=SINX*COSX
C
C   ROTATE L AND M COLUMNS
C
  ILQ=N*(L-1)
  IMQ=N*(M-1)
  DO 125 I=1, N
  IQ=(I*I-I)/2
  IF(I-L) 80, 115, 80
80 IF(I-M) 85, 115, 90
85 IM=I+MQ
  GO TO 95
90 IM=M+IQ
95 IF(I-L) 100, 105, 105
100 IL=I+LQ
  GO TO 110
105 IL=L+IQ
110 X=A(IL)*COSX-A(IM)*SINX
  A(IM)=A(IL)*SINX+A(IM)*COSX
  A(IL)=X
115 IF(MV-1) 120, 125, 120
120 ILR=ILQ+I
  IMR=IMQ+I
  X=R(ILR)*COSX-R(IMR)*SINX
  R(IMR)=R(ILR)*SINX+R(IMR)*COSX
  R(ILR)=X
125 CONTINUE
  X=2.0*A(LM)*SINCS
  Y=A(LL)*COSX2+A(MM)*SINX2-X
  X=A(LL)*SINX2+A(MM)*COSX2+X
  A(LM)=(A(LL)-A(MM))*SINCS+A(LM)
  *(COSX2-SINX2)
  A(LL)=Y
  A(MM)=X
C
C   TESTS FOR COMPLETION
C
C   TEST FOR M=LAST COLUMN
C
130 IF(M-N) 135, 140, 135
135 M=M+1
  GO TO 60

```

```

C
C   TEST FOR L = SECOND FROM LAST
  COLUMN
C
140 IF(L-(N-1)) 145, 150, 145
145 L=L+1
  GO TO 55
155 IND=0
  GO TO 50
150 IF(IND-1) 160, 155, 160
C
C   COMPARE THRESHOLD WITH FINAL
  NORM
C
160 IF(THR-ANRMX) 165, 165, 45
C
C   SORT EIGENVALUES AND EIGEN-
  VECTORS
C
165 IQ=-N
  DO 185 I=1, N
  IQ=IQ+N
  LL=I+(I*I-I)/2
  JQ= N * (I-2)
  DO 185 J=I, N
  JQ=JQ+N
  MM=J+(J*J-J)/2
  IF(A(LL)-A(MM)) 170, 185, 185
170 X=A(LL)
  A(LL)=A(MM)
  IF(MV-1) 175, 185, 175
175 DO 180 K=1, N
  ILR=IQ+K
  IMR=JQ+K
  X=R(ILR)
  R(ILR)=R(IMR)
180 R(IMR)=X
185 CONTINUE
  RETURN
  END

```

<도표 8 : 프로그램의 인쇄결과>

INPUT DATA

	Y VALUE	X1 VALUE	X2 VALUE
1	54.600	-1.000	0.0
2	71.700	-0.500	0.866
3	59.800	-0.500	-0.866
4	78.700	0.500	0.866
5	78.900	0.500	-0.866

6	91.000	1.000	0.0
7	90.400	0.0	0.0
8	87.500	0.0	0.0
9	91.000	0.0	0.0
10	88.300	0.0	0.0

BETA COEFFICIENT

```

B(0)      0.8929974E 02
B(1)      0.1648332E 02
B(2)      0.3377601E 01
B(11)     -0.1649983E 02
B(12)     -0.6986131E 01
B(22)     -0.1720074E 02
    
```

STATIONARY POINT

```

0.5002192E 00
-0.3400981E-02
    
```

THE ESTIMATED RESPONSE AT STATIONARY POINT

0.9341661E 02

CANONICAL ANALYSIS FORM

```

Y = 0.9341661E 02
  + -0.1333968E 02 W1*W1
  + -0.2036087E 02 W2*W2
    
```

W = M (X-XO)

M =

```

0.7415618E 00 0.6708845E 00
-0.6708845E 00 0.7415618E 00
    
```

〈도표6〉은 反應表面分析方法의 포트란 프로그램이다. 프로그램은 일반적으로 많이 사용되는 第二次多項回歸模型을 가정하였으며 200개의 實驗資料와 7개의 독립변수까지 이용할 수 있도록 되어 있다.

이 프로그램에서 요구되는 入力資料形態는 實驗資料를 천공한 카드앞에 두장의 카드를 넣도록 하고 있다. 첫번째 카드의 3-10년, 11-15년, 16-20년에는 각각 문제이름, 실험자료의 수, 독립변수의 수를 명시하며 두번째 카드에는 資料의 Format을 실수형태로 괄호안에 나타내므로써 따라오는 實驗資料의 천공형태를 알려주도록 하고 있다. 또한 실험자료 카드는 첫번째 자료부터 카드의 맨앞에 반응값을 천공하고 독립변수를 차례로 천공하도록 한다.

이 프로그램으로 인쇄되는 내용은 입력시킨 실험자료와 모형의 추정된 계수, 定常點, 定常點에서의 반응, 正準分析 및 M행렬이다.

앞 장의 例題에 있는 자료로 이 프로그램을 이용하기 위한 입력자료형태와 그 인쇄 결과가 각각 〈도표7〉, 〈도표8〉에 나타나 있다.

끝으로 특히 서울대학교 전자계산소에서는 이를 보다 이용하기 쉽도록 〈도표9〉와 같이 간단한 형태로 入力시키면 원하는 결과를 얻을 수 있게 하고 있다.

SAMPLE	10	2
(3 F8. 0)		
54.6	-1.0	0.0
71.7	-0.5	0.866
59.8	-0.5	-0.866
78.7	0.5	0.866
78.9	0.5	-0.866
91.0	1.0	0.0
90.4	0.0	0.0
87.5	0.0	0.0
91.0	0.0	0.0
88.3	0.0	0.0

〈도표7 : 입력 자료 형태의 예〉

```

// JoB
// EXEC SNURSA
SAMPLE      10      2
(3 F8. 0)
(data)
/ *
/ &
    
```

〈도표9 : 서울대 전자계산소에서의 사용예〉