Journal of the KSQC
Vol. 13, No. 2, 1985

混合物實驗의 工程變數에 관한 交絡 block効果
Block Confounding Effect for Mixture Experiments with Process Variables

정 중 희*
김 정 만**

ABSTRACT

The objective of mixture experiments with process variables is to find experimental blends and conditions that produce the product of highest quality. In this paper, designs for mixture experiments with process variables are presented, where the emphasis is on using only a fraction of the total number of possible design points and the fitting of reduced models for measuring the effects of the mixture components and process variables.

Ⅰ. 序 論

많은 製造工程에서는 最終製品生產을 爲해 混合要素의 混合成分을 다루게 되며, 이들 工程에 對한 實驗은 個別工程條件및 混合物의 比率을 多樣하게 함으로써 이루어진다.

勿論 이러한 實驗의 目的은 最良의 品質의 製品을 만들기 爲해 이들 混合物의 最適比率과 最適工程條件을 發見하는데 있다. 本文에서는 一部實施法(fractional factorial design)으로서 하나의 fraction만을 使用한 縮少모델(reduced model)을 定하여, 混合成分과 工程變數(process variables)의 各 水準에 대한 處理組合을 block에 割當하여 各要因들에 대한 情報를 block 效果와 交絡시켜, 交絡된 block의 効果를 測定하는 方法에 대해 論하고자 한다.

Ⅱ. 混合物에 관한 實驗의 데이터의 構造

一元配置, 二元配置, 分割法, 要因配置法 等에서 因子들이 取할 수있는 相互間의 比率이나, 그 合에 制約條件이 따르지 않음과는 달리, 混合物에 관한 實驗計劃에서는 各 成分(component)의 混合量보다 混合比率을 問題視함으로서 q 個의 成分을 가진 混合物內에 成分 i 에 의히 얻어지는 fractional proportion은 x_i ($1 \leq i \leq q$) 로서

*東亞大學校 工科大學 產業工學科
**慶北開放大學 產業工學科

表示되고, 混合比率 x_i는, $0 \leq x_i \leq 1.0$, $\sum_{i=1}^{q} x_i = 1.0$이라는 條件을 갖는다.

이 式을 滿足하는 成分의 比率의 實驗領域은 $(q-1)$次元의 Simplex S_q인데, $q=3$인 경우 三角形, $q=4$인 경우는 四面体가 될 것이고, 混合比率에 관한 實驗計劃은 結局 Simplex 上의 어떤 實驗點을 選擇하여 實驗하느냐에 달려있다. (參考文獻 1) 이때 data의 構造式은

$$y_i = \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \cdots\cdots + \beta_q x_{qi} + \varepsilon_i$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

$$Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0, \ i \neq j$$

$$i, j = 1, 2, \cdots, n$$

重回歸分析의 最小제곱법에 의해 β_i들의 最小제곱推定置 $\hat{\beta}_i$를 구하면 i번째 實驗點$(x_{1i}, x_{2i}, \cdots x_{qi})$에서 $E(y)$는

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_{2i} + \cdots\cdots + \hat{\beta}_q x_{qi}$$

로 表現 할 수 있다.

이렇게 混合成分(x)만을 생각할 때 이는 2^q-1 個의 實驗點을 가지며, 여기에는 항상 重心點 $\left(\frac{1}{q}, \frac{1}{q}, \cdots\cdots, \frac{1}{q}\right)$ 이 포함되므로, 이는 Simplex 中心配列의 形態가 되어 混合成分 모델은 $q=3$ 일때,

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{123} x_1 x_2 x_3 + \varepsilon$$

으로 된다.

또한 이에 工程變數(z)가 세가지 條件$(l=1, 2, 3)$으로 結合하고, 또 工程變數의 條件들이 각기 高位水準(high level)과 低位水準(low level)을 가질 때 工程變數 모델은,

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 z_1 + \alpha_2 z_2 + \alpha_3 z_3 + \alpha_{12} z_1 z_2 + \alpha_{13} z_1 z_3 + \alpha_{23} z_2 z_3 + \alpha_{123} z_1 z_2 z_3 + \varepsilon$$

으로 表現可能하다.

따라서, 混合成分$(q=3)$과 工程變數$(l=3)$ 이 주어졌을 때, 混合成分(x)와 工程變數(z) 간의 함수관계의 適合한 모델은,

$$\begin{aligned}\hat{y}(x, y) = \sum_{i=1}^{3} [b_i^0 + \sum_{l=1}^{3} b_i^l z_l + \sum_{l<m\leq 3} b_i^{lm} z_l z_m \\ + b_i^{123} z_1 z_2 z_3] x_i + \sum_{i<j\leq 3} [b_{ij}^0 + \sum_{l=1}^{3} b_{ij}^l z_l \\ + \sum_{l<m\leq 3} b_{ij}^{lm} z_l z_m + b_{ij}^{123} z_1 z_2 z_3] x_i x_j \\ + [b_{123}^0 + \sum_{l=1}^{3} b_{123}^l z_l + \sum_{l<m\leq 3} b_{123}^{lm} z_l z_m \\ + b_{123}^{123} z_1 z_2 z_3] x_1 x_2 x_3\end{aligned}$$

으로 될 것이다.

Ⅲ. 一部實施法에 의한 縮少모델

一部實施法으로서의 縮少모델은, 參考文獻 (1) (2)의 Cornell과 Daniel에 의해 아래와 같이 提示되고 있다.

$$M_{1+1} : \sum_{i=1}^{q} \beta_1^0 x_i + \sum_{l=i}^{q} \sum_{i=1}^{q} \beta_i^l x_i z_l$$

$$M_{1+2} : \sum_{1<m\leq n} \sum_{i=1}^{q} \beta_i^{lm} x_i z_l z_m$$

$$M_{1+3} : \sum_{l<m<p\leq n} \sum_{i=1}^{q} \beta_i^{lmp} x_i z_l z_m z_p$$

$\vdots$

$$M_{1+n} : \sum_{i=1}^{q} \beta_i^{12\cdots n} x_i z_l z_2 \cdots z_n$$

$$M_{2+1} : \sum_{i<j\leq q} \beta_{ij}^0 x_i x_j + \sum_{l=1}^{n} \sum_{i<j\leq q} \beta_{ij}^l x_i x_j z_l$$

$$M_{2+2} : \sum_{l<m\leq n} \sum_{i<j\leq q} \beta_{ij}^{lm} x_i x_j z_l z_m$$

$\vdots$

$$M_{3+1} : \sum_{i<j<k\leq q} \beta_{ijk}^0 x_i x_j x_k + \sum_{l=1}^{n} \sum_{i<j<k\leq q} \beta_{ijk}^l x_i x_j x_k z_l$$

$\vdots$

$$M_{3+n} : \sum_{i<j<k\leq q} \beta_{ijk}^{12\cdots n} x_i x_j x_k z_1 z_2 \cdots z_n$$

이러한 모델의 數는 $y=M_{1+1}+M_{2+1}+\cdots+M_{q+n}+\varepsilon$으로 되는 完備型 $2^{q+n}-2^{n}$ term 個의 모델까지 계속될 것이다.

만약 두가지 混合成分($q=2$)의 경우, 混合成分 x_1, x_2에 세가지 工程變數($n=3$) 가 結合될때 이에 適合한 모델은 $y=M_{1+1}+M_{2+1}+\varepsilon$ 이며 이는 half fractional replication을 滿足할 수 있는 모델로서, z_l들의 主効果에 대한 2次混合의 terms까지 포함하는 모델이라 定義할 수 있다.

이 모델에 適合시키기 위한 데이터는, z_1, z_2, z_3의 水準에서 選擇된 個個 處理組合에 대한 세가지 混合方法(blends) $(x_1, x_2)=(1, 0), (0, 1), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$에 의해 얻어진다. 여기에서 세 가지 混合方法 $(1, 0)$ $(0, 1)$ $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$을 a, b, ab라 하고, 세가지 工程變數 D, E, F를 d, e, f 로 나타내면 8個의 處理組合은 d, e, f의 高位水準, 低位水準에서

(1) d, e, de, f, df, ef, def가 된다.

縮少모델 $y=M_{1+1}+M_{2+1}+\varepsilon$의 係數($b$)를 計算하기 위해 Table 1의 Design 1 및 Table2의 Design2를 생각할 수 있다.

	ad	abd	bd
	ae	abe	be
	af	abf	bf
	adef	abdef	bdef
A:	1	½	0
B:	0	½	1
Fraction:	I + DEF		

Table 1. (Design 1) 2^{3-1} Fractional Replicate Design (I + DEF) in the Process Variables D, E, and F Set Up at the Three Points of Composition (a. ab, b)

이들 두가지 Design에서 D, E, F因子의 處理數는 (2^{3-1})의 half fractional replication 으로서 $2^3/2=4$로 減少된다.

	ad	abd	bd
	ae	abe	be
	af	abf	bf
	adef	abdef	bdef
A:	1	½	0
B:	0	½	1
Fraction:	I± DEF		

Table 2. (Design 2) 2^{3-1} Fractional Replicate Design (I ± DEF) in the Process Variables D, E, and F Set Up at the Three Points of Composition (a, ab, b)

$I+DEF$ fraction의 完備型 Design에서, 總平均과 工程變數의 因子 DEF의 交互作用効果는 測定値의 線形組合(linear combination)을 結合하여 구할 수 있다. 또 因子 D의 主効果 및 EF의 交互作用効果는, 測定値間의 對比(contrast)에 의해 計算될 수 있다.

Table 1, 2에서 b_1^l과 b_2^l의 係數推定値에 대한 公式은 $q=3$인 경우 {3, 3}의 格子(lattice)를 使用하여 모델을 簡便히 適合시키는 方法(參考文獻 5)으로서, 任意의 點(x_1, x_2, x_3)에서의 $E(y)$의 推定式

$$\hat{y}=\hat{\beta}_1x_1+\hat{\beta}_2x_2+\hat{\beta}_3x_3+\hat{\beta}_{12}x_1x_2$$

$$+\hat{\beta}_{13}x_1x_3+\hat{\beta}_{23}x_2x_3$$

을 利用하여, 여기에 混合成分($q=2$), 工程變數($l=3$)을 適合시켜 아래와 같은 公式을 얻을 수가 있는데, 여기에서는 設計點(design points)에 대한 平均反應(average response)의 單純한 線型組合을 사용한다.

$q=1$에 대해서

$$b_1^0=\frac{1}{4}(\text{ad}+\text{ae}+\text{af}+\text{adef})$$

$$=\bar{y} \quad \text{at} \quad x_1=1$$

$$b_1^1=\frac{1}{2}\left(\frac{\text{ad}+\text{adef}}{2}-\frac{\text{ae}+\text{af}}{2}\right)$$

$$=D^+ \quad \text{at} \quad x_1=1$$

$$b_1^2=\frac{1}{2}\left[\frac{ae+adef}{2}-\frac{ad+af}{2}\right]$$

$$=E^+ \quad at \quad x_1=1$$

$$b_1^3=\frac{1}{2}\left[\frac{af+adef}{2}-\frac{ad+ae}{2}\right]$$

$$=F^+ \quad at \quad x_1=1$$

$q=2$에 대해서

$$b_2^0=\frac{1}{4}(bd+be+bf+bdef)$$

$$=\bar{y} \quad at \quad x_2=1$$

同一한 方法으로

$$b_2^1=D^+ \quad at \quad x_2=1$$

$$b_2^2=E^+ \quad at \quad x_2=1$$

$$b_2^3=F^+ \quad at \quad x_2=1$$

여기에서 D^+, E^+, F^+는 각기 因子 D, E, F의 主效果對比를 意味하며, 이들은 $I+DEF$ fraction內의 處理를 使用하여 計算되므로 b_i^1은 成分 i의 線形效果에 관한 因子 D의 主效果의 推定値를 나타낸다.

또, 推定値 b_{12}^0와 b_{12}^1에 대한 公式은,

$$b_{12}^0=4[\bar{y} \text{ at } x_1=x_2=1/2]-2\{(\bar{y} \text{ at } x_1=1)+(\bar{y} \text{ at } x_2=1)\}$$

$$b_{12}^1=4[\text{main effect } D \text{ at } x_1=x_2=1/2]-2[(\text{main effect } D \text{ at } x_1=1)+(\text{main effect } D \text{ at } x_2=1)]$$

Design 1의 配置(Table 1)에서,

$$b_{12}^0=4[1/4(abd+abe+abf+abdef)]-2[1/4(ad+ae+af+adef)+1/4(bd+be+bf+bdef)]$$

$$b_{12}^1=4\left[1/2\left(\frac{abd+abdef}{2}-\frac{abe+abf}{2}\right)\right]-2\left[1/2\left(\frac{ad+adef}{2}-\frac{ae+af}{2}\right)+1/2\left(\frac{bd+bdef}{2}-\frac{be+bf}{2}\right)\right]$$

$$=4\left[D^+ \text{ at } x_1=x_2=1/2\right]-2\{(D^+ \text{ at } x_1=1)+(D^+ \text{ at } x_2=1)\}$$

Design 2의 配置 $(I\pm DEF)$에서,

$$b_{12}^0=4[1/4(ab+abde+abdf+abef)]-2[1/4(ad+ae+af+adef)]+1/4(bd+be+bf+bdef)]$$

$$b_{12}^1=4\left[1/2\left(\frac{abde+abdf}{2}-\frac{ab+abef}{2}\right)\right]-2\left[1/2\left(\frac{ad+adef}{2}-\frac{ae+af}{2}\right)+1/2\left(\frac{bd+bdef}{2}-\frac{be+bf}{2}\right)\right]$$

$$=4\{D^- \text{ at } x_1=x_2=1/2\}-2\{(D^+ \text{ at } x_1=1)+(D^+ \text{ at } x_2=1)\}$$

여기에서 D^- 및 D^+는 각기 $I+DEF$, $I-DEF$ fraction을 使用하여 計算된 因子 D의 主效果對比이다. 이렇게 얻어진 各係數(b)로서 混合成分과 工程變數의 函數關係의 推定式 $\hat{y}(x, z)$를 만들 수 있다.

Ⅳ. 2^k要因計劃을 前提로 한 混合物 實驗의 交絡 block效果

Ⅳ-1. 處理組合의 配置

design 1, 2(Table 1, 2)에 의한 處理組合의 配置는 Table 3, 4와 같이 나타낼 수 있다.

Process Variables			A(X1), B(X2) Mixture Composition		
Z1 D	Z2 E	Z3 F	(1, 0)	(½, ½)	(0, 1)
+	−	−	ad	abd	bd
−	+	−	ae	abe	be
−	−	+	af	abf	bf
+	+	+	adef	abdef	bdef
Fraction :			I + DEF		

Table 3. The Arrangement of Treatment Combination for Design 1. (Table 1)

Process Variables			A(X1), B(X2) Mixture Composition		
Z1 D	Z2 E	Z3 F	(1, 0)	(½, ½)	(0, 1)
+	−	−	ad		bd
−	+	−	ae		be
−	−	+	af		bf
+	+	+	adef		bdef
−	−	−		ab	
+	+	−		abde	
+	−	+		abdf	
−	+	+		abef	
Fraction :			I ± DEF		

Table 4. The Arrangement of Treatment Combination for Design 2 (Table 2).

이러한 配置를 擴張하여 混合成分($q=3$), 工程變數($l=3$)에 適用하면 Table 5, 6의 配置가 된다.

Table 5 ($I+DEF$)에서, 두개의 block를 假定할 때 D, E, F의 交互作用은 block와 交絡시킬 수 없게 되나, Table 6 ($I \pm DEF$)에서 D, E, F의 交互作用을 block와 交絡시킬 수 있는 配置方法은 Table 7과 같이 생각할 수 있다.

Table 7. The Arrangement of Treatment Combinations for D, E, F in I ± DEF.

Block I :	ad ae af adef bd be bf bdef cd ce cf cdef abcd abce abdf abcdef
Block II :	ab abde abdf abef ac acde acdf acef bc bcde bcdf bcef

Ⅳ－2, 交絡 block 効果의 檢定

각기 그 水準을 갖는 工程變數에 대해 block의 効果가 어느 因子의 効果와도 交互作用을 가지지 않는 I型 모델을 假定하면,

$$y_{ijkl} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + (\alpha\beta)_{ij} + (\alpha\beta)_{ik}$$

$$+ (\alpha\beta\gamma)_{ijk} + \rho_l + \varepsilon_{ijkl}$$

$$i=1,2 \quad j=1,2,\ k=1,2,\ l=1,2,\cdots r$$

$$\varepsilon_{ijkl} \sim IND\,(0, \sigma_l^2),\ \sum \alpha_i = \cdots \sum \rho_l = 0$$

여기에서 追加項ρ_l이 block効果에 對應해서 附加되어 ANOVA의 變動으로 나타난다. 데이터로 부터의 ρ_l의 推定量은 $\bar{y}_{\cdots l} - \bar{y}_{\cdots}$이므로 block 効果의 變動은 $2^l \Sigma (\bar{y}_{\cdots l} - \bar{y}_{\cdots})^2$이다.

block가 存在할 경우 誤差變動 S_e는, block가 存在하지 않을 경우의 誤差變動

$$Se = \sum_i^2 \sum_j^2 \sum_k^2 \sum_l^r (y_{ijkl} - \bar{y}_{ijkl})^2$$ 에서 SS_R가 差引되며, ϕ_e는 $2^l(r-1) - (r-1) = (2^l -)(r-1)$ 이다.

Table 5. Design I + DEF ... Coefficients for Effects in One-Half Replication of Simplex-Centroid*2^3 Factorial Design

	(1, 0, 0)				(0, 1, 0)				(0, 0, 1)				(½, ½, 0)				(½, 0, ½)				(0, ½, ½)				(1/3, 1/3, 1/3)			
	ad	ae	af	ad ef	bd	be	of	bd ef	cd	ce	cf	cd ef	ab	ab de	ab df	ab ef	ac	ac de	ac df	ac ef	bc	bc de	bc df	bc ef	ab cd	ab ce	ab cf	abc def
D	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+
E	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+
F	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+
DE	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+
DF	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+	–	+
EF	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+	+	–	–	+
DEF	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

D is D x (DEF) = D^2EF = EF

E is E x (DEF) = DE^2F = DF

F is F x (DEF) = DEF^2 = DE.

Table 6. Design I ± DEF ... Coefficients for Effects in One-Half Replication of Simplex-Centroid*2^3 Factorial Design

	(1, 0, 0)				(0, 1, 0)				(0, 0, 1)				(½, ½, 0)				(½, 0, ½)				(0, ½, ½)				(1/3, 1/3, 1/3)			
	ad	ae	af	ad ef	bd	be	of	bd ef	cd	ce	cf	cd ef	ab	ab de	ab df	ab ef	ac	ac de	ac df	ac ef	bc	bc de	bc df	bc ef	ab cd	ab ce	ab cf	abc def
DEF	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	+	+	+	+

全 block에 대한 平均은

$$y_{ijk}=\mu+\alpha_i+\beta_j+\gamma_k+(\alpha\beta)_{ij}+(\alpha\gamma)_{ik}$$

$$+(\beta\gamma)_{jk}+(\alpha\beta\gamma)_{ijk}+\bar{\varepsilon}_{ijk.}$$

$\bar{\varepsilon}_{ijk.}\sim IND(0, \sigma_i/r)$ 이며

이때 各要因의 効果는 相對情報를 使用하는 Yates의 方法으로도 計算할 수 있음은 周知의 사실이다. (參考文獻 6)

block의 變動은

$$2^{l-1}\sum_{i=1}^{r}\sum_{m=1}^{2}(\bar{y}_{\dots lm}-\bar{y}_{\dots})^2$$ 이며 이때

$\phi_{block}=2r-1$, 이며 各處理効果의 分散은 $\sigma_e^2/(2^{l-2}r)$이다.

따라서, 交絡 block에 대한 $100(1-\alpha)\%$의 信頼區間은

block 効果 $\pm\{1-\alpha/2:(2^l-2)(r-1)\}$

$\sqrt{S_i^2/(2^{l-2}r)}$ 이며,

H_0 : block 効果$=0$에 대한 檢定은, F(block 効果)와 $F(1-\alpha;\phi)$의 比較가 될 것이다.

V. 結　論

混合物의 實驗에 관해서, 一部實施法의 縮少모델中 相對情報가 比較的 높고, 1/2反復을 滿足하는 모델을 選擇하여, 各處理組合을 block에 配當하는 두가지 方法(I+DEF, I±DEF)을 取하고 이들中 二重交互作用, 三重交互作用을 block効果와 交絡시킬 수 있는 方法을 생각하였다.

그러나, 三重交互作用을 block効果와 交絡시킴에 의해, 두개의 block에서 處理組合의 數가 相異해지고 따라서, 만약 $r>1$일 경우 各 block 間의 交絡要因効果의 推定精度가 同一해 질 수 있을까 하는 問題가 있다. 또 本文에서는 混合成分의 모든 變數와 모든 工程變數間의 交互作用을 取扱하지 않았으나, 이들間의 存在可能한 交互作用의 數는 各變數의 水準數가 늘어남에 따라 急增할 것이고, 이들 모두를 생각할때 問題는 더욱 복잡해 질 것이다.

參 考 文 獻

1. Cornell, J.A. (1984), *Fractional Design Plans in Mixture-Experiments,* Journal of Technology
2. 中村慶一訳, 應用統計學, 森北出版株式会社, 1978
3. 日本規格協會品質管理便覽編輯委員會, 品質管理便覽, 1982
4. 宋瑞日, 實驗計劃法, 英志文化社, 1985
5. 朴聖炫, 現代實驗計劃法, 大英社, 1985
6. 朴聖炫, 回歸分析, 大英社, 1984
7. 安藤貞一, 實驗計劃法演習, 日科技連, 1979
8. Charles, R. Hicks, *Fundamental Concepts in the Design of Experiments,* Winston, 1978.