응용통계연구 제 **12**권 *1*호, *1999*년, *pp. 67–81*

2차 반응표면분석 모델 적합을 위한 부분합성계획에 관한 연구 *

박성현[1)]서혁[2)]박준오[3)]

요 약

2차 반응표면분석을 위한 부분합성계획은 실험 비용이 많이 들거나, 실험 자체가 어려워서 시간의 소비가 많은 경우, 실험오차의 독립추정이 가능할 때 효과적이다. 반응표면분석에서는 회전성과 기울기 회전성을 만족하는 것이 중요하다. 따라서 본 논문에서는 회전성과 기울기 회전성의 관점에서 부분합성계획을 살펴보고 또한 인자의 수와 중심점의 수가 변함에 따라서 어떤 α (중심에서 축점까지의 거리)의 값이 최적의 실험계획이 되도록 하는지를 연구하였다.

1. 서론

반응표면 분석기법은 몇 개의 독립변수가 종속변수에 영향을 주는 경우를 분석하는데 유용한 수리적 방법이며 일반적으로 독립변수(실험변수) $x_1,\ x_2, \cdots,\ x_k$와 종속변수(반응변수) η의 관계는

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

로 표현된다. 여기서, f의 명확한 형태는 일반적으로 알려져 있지 않으며 복잡한 형태를 갖지만, 많은 경우에 흥미영역 안에서는 다음과 같은 2차 다항모형

$$\eta(\mathbf{x}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i<j}^{k} \beta_{ij} x_i x_j,\ \mathbf{x}' = (x_1, x_2, \cdots, x_k)$$

으로 근사시킬 수 있다. 이 식을 행렬 표현식으로 나타내면

$$\eta(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_s' \beta$$

와 같이 된다. 여기서, $\mathbf{x}_s' = (1, x_1, \cdots, x_k, x_1^2, \cdots, x_k^2, x_1x_2, \cdots, x_{k-1}x_k)$이며, β는 회귀계수로 $p \times 1$ 열벡터이며 p는 $(k+1)(k+2)/2$이다. β를 최소제곱법에 의해 추정하면 추정량은 $\mathbf{b} = (X'X)^{-1}X'\mathbf{y}$와 같이 표현되며, 여기서, X는 실험점에 있는 $\mathbf{x}_s'$의 p요소의 값에 대한 $N \times p$행렬이고 $\mathbf{y}$는 $N \times 1$행렬이다. 만일, $\eta(\mathbf{x})$를 추정하기 위해서 $\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_s'\mathbf{b}$를 사용한다면 $\hat{y}(\mathbf{x})$의 분산은 다음과 같다.

$$Var[\hat{y}(\mathbf{x})] = \sigma^2 \mathbf{x}_s'(X'X)^{-1}\mathbf{x}_s.$$

* 본 논문은 교육부 지원 기초과학 학술연구 BSRI-97-1415에 의하여 부분적으로 지원된 것임.
1) (151-742) 서울 관악구 신림동 산 56-1, 서울대학교 통계학과, 교수
2) (151-742) 서울 관악구 신림동 산 56-1, 서울대학교 통계학과, 졸업 현 육군 대위
3) (151-742) 서울 관악구 신림동 산 56-1, 서울대학교 통계학과, 박사과정 수료

따라서, $Var[\hat{y}(\mathbf{x})]$는 벡터 $\mathbf{x}_s$와 행렬 $(X'X)^{-1}$에 의존함을 알 수있다.

회전성과 기울기 회전성은 반응표면계획에서 요구되는 중요한 특성인데, 회전성의 개념은 Box와 Hunter(1957)에 의해 제시되었으며, 기울기 회전성의 개념은 Hader와 Park(1978)에 의해 제시되었고, 이후 Park(1987)에 의해 발전되었다. 반응표면계획 중에서 중심합성계획(Central Composite Design : CCD)은 적은 횟수의 실험으로 곡면을 추정하기 위해 중심점(center points)과 축점(axial points)을 2^k요인 실험에 추가시킨 실험계획이다. 중심합성계획은 $k > 2$인 경우에 3^k요인 배치법보다 훨씬 적은 실험 횟수가 필요하고, 축차 실험(sequential experiments)이 가능하다는 장점을 갖고 있다.

2차 모형의 모든 모수를 추정할 필요가 있으나 실험횟수는 최대한 줄이는 것이 요구되는 실험환경을 고려해보자. 즉, 실험 비용이 많이 들거나, 실험자체가 어려워서 실험을 진행하는데 장시간이 걸리는 경우에는 CCD보다는 부분합성계획(Small Composite Design : SCD)을 사용하는 것이 좋다(Hartley(1959), Draper(1985), Myers와 Montgomery(1995)). SCD는 요인 부분의 교락 때문에 효율성에 문제는 있지만 제한된 실험비용을 가지고도 근사포화 또는 포화된 2차 모형을 사용할 수 있다. SCD의 가장 큰 장점은 축차 실험에서 잘 나타난다.

일반적으로, SCD의 전체 실험횟수 N은

$$N = F + 2k + n_0 = F + T$$

이다. 여기서, $F=$ 요인점의 수 (the number of factorial points) $=2^{k-p}$ $(p \geq 1)$, $n_0 =$ 중심점의 수, $T = 2k + n_0$이며, 중심점의 수는 1개 이상이다.

요인의 수가 k개인 경우 자료의 구조는 다음과 같다.

x_1	x_2	$\cdots$	x_k
	2^{k-p}		
일부요인부분(fractional factorial portion)			
α	0	$\cdots$	0
$-\alpha$	0	$\cdots$	0
0	α	$\cdots$	0
0	$-\alpha$	$\cdots$	0
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
0	0	$\cdots$	α
0	0	$\cdots$	$-\alpha$
축점(axial points)			
0	**0**	$\cdots$	**0**
중심점(center points)			

본 논문에서는 SCD를 이용하여 반응표면분석을 시행할 때 적절한 실험계획을 찾기 위하여 회전성과 기울기 회전성의 관점에서 부분합성계획을 살펴보고, 인자의 수와 중심점의 수가 변함에 따라 어떤 α의 값이 최적의 실험계획이 되도록 하는지를 찾아보았다.

2. 최적의 SCD를 위한 α값의 선택

2.1. SCD의 회전성

어떤 실험계획에 의해 얻어진 $\hat{y}(\mathbf{x})$의 분산이 계획의 중심점으로부터 점 $\mathbf{x}$ 까지의 거리 $\rho = (x_1^2 + \cdots + x_k^2)^{1/2}$만의 함수로 표현된다면 이 실험계획은 회전성이 있다고 말한다. 회전성의 개념은 실험계획 선정의 중요한 기준이 된다. 정확한 회전성을 갖지 않는 경우에는 근접하게라도 회전성을 갖도록 만드는 것이 바람직하므로, 제안된 실험계획이 어느 정도의 회전성을 갖는지를 아는 것도 유용하다.

Park, Lim과 Baba(1993)는 주어진 실험계획에서 회전성의 정도(degree)를 나타내는 회전성의 측도를 고찰하였다. 이 논문에서 $V(\mathbf{x})$를 아래와 같이 정의하였다.

$$V(\mathbf{x}) = \frac{N}{\sigma^2} Var[\hat{y}(\mathbf{x})] = \frac{N}{\sigma^2} \mathbf{x}_s'(X'X)^{-1}\mathbf{x}_s \sigma^2 \tag{2.1}$$

k-차원 $(k \geq 2)$ 공간에서 $V(\mathbf{x})$는 구면좌표 변환을 통해 $(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$의 함수로 표현될 수 있다. 구면좌표 변환은,

$$\begin{aligned} x_1 &= \rho cos\phi_1, \\ x_2 &= \rho sin\phi_1 cos\phi_2, \\ &\vdots \\ x_{k-1} &= \rho sin\phi_1 sin\phi_2 \cdots sin\phi_{k-2} cos\theta, \\ x_k &= \rho sin\phi_1 sin\phi_2 \cdots sin\phi_{k-2} sin\theta \end{aligned} \tag{2.2}$$

이며, $\rho \geq 0,\ 0 \leq \phi_1, \cdots, \phi_{k-2} \leq \pi,\ 0 \leq \theta < 2\pi$이다.(Fleming(1977), p.218)

이 변환의 Jacobian 절대값은 다음과 같다.

$$|J| = \rho^{k-1} sin^{k-2}\phi_1 sin^{k-3}\phi_2 \cdots sin^2\phi_{k-3} sin\phi_{k-2} \tag{2.3}$$

만약 식 $(2\cdot2)$를 식 $(2\cdot1)$에 대입하면 식 $(2\cdot1)$은 $(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$만의 함수로 표현된다. 즉, $V(\mathbf{x}) = \omega(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$이다. 계획(design)의 중심에서부터 반지름이 ρ인 초구체의 모든 점들에 대한 $V(\mathbf{x})$의 평균값 $\bar{\omega}(\rho)$는

$$\bar{\omega}(\rho) = \frac{1}{I_k}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\cdots\int_0^{\pi} V(\mathbf{x})d\Omega = \frac{1}{I_k}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\cdots\int_0^{\pi} \omega(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)d\Omega$$

이며, 여기서 $d\Omega = sin^{k-2}\phi_1 \cdots sin\phi_{k-2} d\phi_1 \cdots d\phi_{k-2} d\theta$이고 $I_k = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\cdots\int_0^{\pi} d\Omega$ 이다.

「모든 ρ, ϕ_i, θ에 대하여, $\omega(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) = \bar{\omega}(\rho)$」이 성립되면 주어진 실험계획은 회전성을 만족한다. 따라서, 주어진 실험계획의 비회전성의 크기를 다음과 같은 양으로 표현하였다.

$$h(\rho) = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\cdots\int_0^{\pi} [\omega(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) - \bar{\omega}(\rho)]^2 d\Omega$$

홍미영역이 $0 \le \rho \le r$일 때, 회전성의 측도는

$$S_k(D) = \frac{1}{1+R_k(D)}$$

이고, $R_k(D) = \frac{1}{E_k}\int_0^r \rho^{k-1}h(\rho)d\rho$이며, E_k는 k에만 의존하는 양의 상수로 다음과 같다.

$$E_k = \int_0^r \rho^{k-1} I_k d\rho = \frac{I_k}{k} r^k \tag{2.4}$$

위의 $R_k(D)$는 적분영역위의 $(\omega - \bar{\omega})^2$의 평균값을 나타내며, 회전성이 있는 실험계획이면 $R_k(D)$는 0이고 $S_k(D)$는 1이다.

여러 개의 실험계획을 비교하기 위해서는 계획의 척도화를 고려해야 한다. 전통적인 방법은 $\frac{1}{N}\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = 1$이 되도록 하는 것이나 본 논문에서는 Draper와 Pukelsheim(1990)에 의해 사용된 것과 같이 모든 실험 점들이 단위구내에 존재하도록 척도화 하였다. 즉, 척도인자 (scaling factor) g는 $g = 1/r$로써 다음과 같이

$$g = \begin{cases} 1/\alpha, & if \quad \alpha \ge \sqrt{k} \\ 1/\sqrt{k}, & if \quad \alpha < \sqrt{k} \end{cases}$$

로 정의되며 중심점의 수가 바뀌어도 중심점 이외의 실험점들을 재척도화할 필요가 없는 장점을 갖는다. 이렇게 척도화를 하면 E_k는 $\int_0^1 \rho^{k-1} I_k d\rho = \frac{I_k}{k}$ 로 바뀌고 $\int_0^r \rho^{k-1}h(\rho)d\rho$는 $\int_0^1 \rho^{k-1}h(\rho)d\rho$가 된다. 한편, 인자의 수 k의 값에 관계없이 $h(\rho)$는 척도불변이므로 결국 $R_k(D) = \frac{I_k}{k}\int_0^1 \rho^{k-1}h(\rho)d\rho$가 된다.

SCD를 이용하여 $k=2$이고 $p=1$인 경우(요인부분의 정의 대비 : $x_2 = x_1$)에 대해 위의 과정을 구체적으로 살펴보면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} Var[\hat{y}(\mathbf{x})] &= \mathbf{x}_s'(X'X)^{-1}\mathbf{x}_s\sigma^2 \\ &= (1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1x_2)(X'X)^{-1}(1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1x_2)'\sigma^2 \end{aligned}$$

이다. 위의 $(X'X)^{-1}\sigma^2$은 아래와 같이 표현된다.

$$(X'X)^{-1}\sigma^2 = \begin{pmatrix} v_0 & 0 & 0 & c_{0,11} & c_{0,22} & c_{0,12} \\ 0 & v_1 & c_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{1,2} & v_2 & 0 & 0 & 0 \\ c_{0,11} & 0 & 0 & v_{11} & c_{11,22} & c_{11,12} \\ c_{0,22} & 0 & 0 & c_{11,22} & v_{22} & c_{22,12} \\ c_{0,12} & 0 & 0 & c_{11,12} & c_{22,12} & v_{12} \end{pmatrix}$$

여기서, $v_0 = Var(b_0), v_i = Var(b_i), v_{ii} = Var(b_{ii}), v_{12} = Var(b_{12}), c_{1,2} = Cov(b_1, b_2), c_{0,ii} = Cov(b_0, b_{ii}), c_{0,12} = Cov(b_0, b_{12}), c_{11,22} = Cov(b_{11}, b_{22}), c_{ii,12} = Cov(b_{ii}, b_{12}), (i = 1, 2)$이다.
따라서,

$$Var[\hat{y}(\mathbf{x})] = \mathbf{x}_s'(X'X)^{-1}\mathbf{x}_s\sigma^2$$

$$= (1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1x_2)\begin{pmatrix} v_0 & 0 & 0 & c_{0,11} & c_{0,22} & c_{0,12} \\ 0 & v_1 & c_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{1,2} & v_2 & 0 & 0 & 0 \\ c_{0,11} & 0 & 0 & v_{11} & c_{11,22} & c_{11,12} \\ c_{0,22} & 0 & 0 & c_{11,22} & v_{22} & c_{22,12} \\ c_{0,12} & 0 & 0 & c_{11,12} & c_{22,12} & v_{12} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_2^2 \\ x_1x_2 \end{pmatrix}$$

$$= v_0 + v_1x_1^2 + v_2x_2^2 + v_{11}x_1^4 + v_{22}x_2^4 + v_{12}x_1^2x_2^2 + 2c_{0,11}x_1^2 + 2c_{0,22}x_2^2 + 2c_{0,12}x_1x_2$$
$$+ 2c_{1,2}x_1x_2 + 2c_{11,22}x_1^2x_2^2 + 2c_{11,12}x_1^3x_2 + 2c_{22,12}x_1x_2^3$$
$$= v_0 + v_1(x_1^2 + x_2^2) + v_{11}(x_1^4 + x_2^4) + 2c_{0,11}(x_1^2 + x_2^2) + (v_12 + 2c_{11,22})x_1^2x_2^2$$
$$+ 2x_1x_2(c_{0,12} + c_{1,2}) + 2c_{11,12}x_1x_2(x_1^2 + x_2^2)$$
$$= v_0 + (v_1 + 2c_{0,11})\rho^2 + v_{11}\rho^4 + (v_{12} + 2c_{11,22} - 2v_{11})(x_1^2x_2^2)$$
$$+ 2x_1x_2(c_{0,12} + c_{1,2} + c_{11,12}\rho^2).$$

단, $\rho^2 = (x_1^2 + x_2^2)$이고 네 번째 등호는 $v_1 = v_2, v_{11} = v_{22}, c_{0,11} = c_{0,22}, c_{11,12} = c_{22,12}$이기 때문에 성립한다.

여기서 $R_k(D)$를 계산하는데 유용한 등식을 소개하면 다음과 같다.

[A1] $\int d\Omega = 2\pi^{k/2}/\Gamma(k/2),$

[A2] $\int x_i^2 d\Omega = \rho^2 I_k/k,$

[A3] $\int x_i^2x_j^2 d\Omega = (1/3)\int x_i^4 d\Omega = \rho^4 I_k/k(k+2), (i \neq j)$

[A4] $\int x_i^2x_j^2x_l^2 d\Omega = (1/3)\int x_i^4x_j^2 d\Omega = (1/15)\int x_i^6 d\Omega = \rho^6 I_k/k(k+2)(k+4), (i \neq j \neq l \neq i)$

[A5] $\int x_i^2x_j^2x_l^2x_m^2 d\Omega = (1/3)\int x_i^4x_j^2x_l^2 d\Omega = (1/9)\int x_i^4x_j^4 d\Omega = (1/15)\int x_i^6x_j^2 d\Omega$

$$= (1/105)\int x_i^8 d\Omega = \rho^8 I_k/k(k+2)(k+4)(k+6),\ (i, j, l, m\text{은 모두 다름}).$$

단, $i, j, l, m = 1, 2, \cdots, k, \int = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\cdots\int_0^{\pi}$ 이고 적어도 하나의 x_i가 홀수차 지수를 가지면 적분값은 0이 된다. 따라서, 위의 등식을 이용하여 다음의 결과를 얻을 수 있다.

$$V(\mathbf{x}) = \frac{N}{\sigma^2}[v_0 + (v_1 + 2c_{0,11})\rho^2 + v_{11}\rho^4 + (v_{12} + 2c_{11,22} - 2v_{11})(x_1^2x_2^2) + 2x_1x_2(c_{0,12} + c_{1,2} + c_{11,12}\rho^2)]$$

따라서, $\bar{\omega}(\rho) = \frac{N}{\sigma^2}[v_0 + (v_1 + 2c_{0,11})\rho^2 + v_{11}\rho^4 + (v_{12} + 2c_{11,22} - 2v_{11})\frac{1}{8}\rho^4]$이고,

$$[\omega(\rho, \phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) - \bar{\omega}(\rho)]^2$$
$$= \left(\frac{N}{\sigma^2}\right)^2[(v_{12} + 2c_{11,22} - 2v_{11})(x_1^2x_2^2 - \frac{1}{8}\rho^4) + 2x_1x_2(c_{0,12} + c_{1,2} + c_{11,12}\rho^2)]^2$$

이다. 이로부터,

$$
\begin{aligned}
h(\rho) &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\cdots\int_0^{\pi}[\omega(\rho,\phi_1,\phi_2,\cdots,\phi_{k-2},\theta)-\bar{\omega}(\rho)]^2 d\Omega \\
&= \Big(\frac{N}{\sigma^2}\Big)^2[(v_{12}+2c_{11,22}-2v_{11})^2\frac{\rho^8 I_2}{128}+(c_{0,12}+c_{1,2}+c_{11,12}\rho^2)^2\frac{\rho^4 I_2}{2}]
\end{aligned}
$$

이 되며, 앞에서 언급한 것과 같이 위의 $h(\rho)$가 척도불변임을 쉽게 알 수 있다. SCD에서 척도를 고려한 회전성의 측도인 $S_2(D)$는 다음과 같이 α에 관한 함수식이다.

$$
\begin{aligned}
R_2(D) &= \frac{2}{I_2}\int_0^1 \rho^{2-1}h(\rho)d\rho = \Big(\frac{N}{\sigma^2}\Big)^2[(v_{12}+2c_{11,22}-2v_{11})^2/640 \\
&\qquad + (c_{0,12}^2+c_{1,2}^2+2c_{0,12}c_{1,2})/6+c_{11,12}^2/10+(c_{0,12}+c_{1,2})c_{11,12}/4], \\
&= \frac{N^2(19968+23232\alpha^2+16352\alpha^4-5184\alpha^6-10244\alpha^8-36\alpha^{10}+1307\alpha^{12})}{7680\alpha^8(2+\alpha^2)^2}, \\
S_2(D) &= \frac{1}{1+R_2(D)}.
\end{aligned}
$$

$k=2$인 경우와 동일한 과정을 반복하면 $k=3,4,5$인 경우에도 $R_k(D)$와 $S_k(D)$를 유도할 수 있다. 이렇게 구한 $S_k(D)$의 식을 이용하여 회전성을 만족하거나 회전성에 가까운 α의 값을 찾아보았다. 참고로 2.3절의 $k=3,4,5$이고 $p=1$인 경우의 척도를 고려한 $R_k(D)$는 각각 다음과 같다.

$$
\begin{aligned}
R_3(D) &= \Big(\frac{N}{\sigma^2}\Big)^2[12(v_{12}+2c_{11,22}-2v_{11})^2/5775+4c_{1,12}^2/35] \\
R_4(D) &= \Big(\frac{N}{\sigma^2}\Big)^2[(v_3-v_1)^2/32+(c_{11,22}-v_{11})^2/120+3c_{1,12}^2/40+(v_{12}^2+v_{13}^2)/128 \\
&\qquad +(v_1-v_3)(v_{12}-v_{13})/80+\{2c_{11,22}(v_{12}+v_{13})-2v_{11}(v_{12}+v_{13})-3v_{12}v_{13}\}/960] \\
R_5(D) &= \Big(\frac{N}{\sigma^2}\Big)^2[40(v_{12}+2c_{11,22}-2v_{11})^2/21021]
\end{aligned}
$$

2.2. SCD의 기울기 회전성

$\eta(\mathbf{x})$의 1차 도함수에 대한 추정에 관심이 있다고 하자. 2차 모형에서 x_i에 대한 $\hat{y}(\mathbf{x})$의 1차 도함수는 $\partial\hat{y}(\mathbf{x})/\partial x_i = b_i + 2b_{ii}x_i + \sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} b_{ij}x_j$이다.

Hader와 Park(1978)은 기울기 회전성의 기준을 다음과 같이

[B1] $i=1,2,\cdots,k$에 대하여 $Var[\partial\hat{y}(\mathbf{x})/\partial x_i]$은 $\rho=(x_1^2+x_2^2+\cdots+x_k^2)^{1/2}$만의 함수,

[B2] $i=1,2,\cdots,k$에 대하여, $\partial\hat{y}(\mathbf{x})/\partial x_i$의 분산은 같다. 즉,

$$
Var[\frac{\partial\hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_1}] = Var[\frac{\partial\hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_2}] = \cdots = Var[\frac{\partial\hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_k}]
$$

로 제시하였다. 기울기 회전성이 있는 실험계획이 되기 위한 필요충분 조건은 다음과 같다.

$$v_1 = v_2 = \cdots = v_k,$$
$$4v_{11} = 4v_{22} = \cdots = 4v_{kk} = v_{12} = v_{13} = \cdots = v_{k-1,k},$$
$$c_{i,ii} = c_{i,ij} = c_{ii,ij} = c_{ij,il} = 0,\ (i \neq j \neq l \neq i).$$

구면좌표계로 $\mathbf{x}$를 변수 변환하면 k-차원 $(k \geq 2)$ 공간에서, 실험점 $\mathbf{x}$는 식 (2.2)처럼 구좌표로 표현되며 이 변환의 Jacobian 절대값은 식 (2.3)이다. $\hat{y}(\mathbf{x})$의 1차 도함수의 분산은

$$\begin{aligned} Var[\frac{\partial \hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_i}] =& Var(b_i) + 4x_i^2 Var(b_{ii}) + \sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} x_j^2 Var(b_{ij}) \\ &+ 4x_i Cov(b_i, b_{ii}) + 2\sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} x_j Cov(b_i, b_{ij}) \\ &+ 4x_i \sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} x_j Cov(b_{ii}, b_{ij}) + 2\sum_{j<l \text{ and } j,\, l\neq i}^{k} x_j x_l Cov(b_{ij}, b_{il}) \end{aligned} \tag{2.5}$$

로 표현되고, 만약 식 (2.2)를 식 (2.5)에 대입한다면 식 (2.5)는 아래와 같이 $(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$의 함수로 표현된다.

$$Var[\frac{\partial \hat{y}(\mathbf{x})}{\partial x_i}] = w_i(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta).$$

Park과 Kim(1992)은 위의 기울기 회전성을 만족하기 위한 조건을 다음과 같이
$[B1']$ $i = 1, \cdots, k$에 대하여, $w_i(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$은 ρ만의 함수,
$[B2']$ 모든 $(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$에 대하여 $w_1(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) = \cdots = w_k(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$
로 표현하였고 2차 반응표면분석을 위한 모든 실험계획에 적용될 수 있는 기울기 회전성 측도를 제안하였다. 위의 조건을 바탕으로

$$g(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) = \sum_{i=1}^{k} [w_i(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) - \bar{w}(\rho)]^2$$

을 정의하고,

$$h(\rho) = \int g(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) d\Omega = \sum_{i=1}^{k} \int [w_i(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) - \bar{w}(\rho)]^2 d\Omega$$

을 정의하였으며 여기서,

$$d\Omega = sin^{k-2}\phi_1 \cdots sin\phi_{k-2} d\phi_1 \cdots d\phi_{k-2} d\theta, \bar{w}(\rho) = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} \bar{w}_i(\rho),$$

$$\bar{w}(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} w_i(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta),$$

$$\bar{w}_i(\rho) = \frac{1}{I_k}\int w_i(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta) d\Omega, I_k = \int d\Omega.$$

$g(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$은 고정된 점 $(\rho, \phi_1, \cdots, \phi_{k-2}, \theta)$에서 k축 방향에 관한 w_i의 변동의 측도이고 $h(\rho)$는 반지름이 r인 초구체상의 모든 점에 있는 g들의 합이다. 여기서 흥미영역 $0 \le \rho \le r$에 대한 $h(\rho)$들의 적분값을 구하면, $Q_k(D) = \frac{1}{E_k}\int_0^r \rho^{k-1}h(\rho)d\rho$이다. 단, E_k는 식 (2.4)와 동일하다. 위의 $h(\rho)$는 $h(\rho) = I_k A_k + \frac{2\rho^2 I_k}{k}B_k + \frac{3\rho^4 I_k}{k(k+2)}C_k$이고,

$$
\begin{aligned}
A_k &= \sum_{i=1}^{k} v_i^2 - \frac{1}{k}(\sum_{i-1}^{k} v_i)^2,\\
B_k &= \sum_{i=1}^{k} v_i(4v_{ii} + \sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} v_{ij}) - \frac{1}{k}(\sum_{i=1}^{k} v_i)[\sum_{i=1}^{k}(4v_{ii} + \sum_{j=1,\, j\neq 1}^{k} v_{ij})]\\
&\quad + 2\sum_{i=1}^{k}(4c_{i,ii}^2 + \sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} c_{i,ij}^2),\\
C_k &= \sum_{i=1}^{k}(16v_{ii}^2 + \sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} v_{ij}^2) - \frac{k+2}{3k^2}[\sum_{i=1}^{k}(4v_{ii} + \sum_{j=1,\, j\neq 1}^{k} v_{ij})]^2\\
&\quad + \frac{2}{3}\sum_{i=1}^{k}(4v_{ii}\sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} v_{ij} + \sum_{j<l \text{ and } j,\, l\neq i}^{k} v_{ij}v_{il}) + \frac{4}{3}\sum_{i=1}^{k}(4\sum_{j=1,\, j\neq i}^{k} c_{ii,ij}^2 + \sum_{j<l \text{ and } j,\, l\neq i}^{k} c_{ij,il}^2).
\end{aligned}
$$

SCD에서 그 계획이 기울기 회전성에 얼마나 가까운가를 수치로 나타내기 위한 기울기 회전성의 측도를

$$H_k(D) = \frac{1}{1 + Q_k(D)}$$

로 정의하면 $H_k(D)$는 실험계획이 기울기 회전성이 있으면 1이 된다.

회전성에서와 마찬가지 방법으로 계획의 척도화를 고려하자. 기울기 회전성에서의 $h(\rho)$는 척도불변이 아니고 $h(\rho)/g^4$가 되므로 $Q_k(D) = \frac{k}{g^4 I_k}\int_0^1 \rho^{k-1}h(\rho)d\rho$가 된다. $k = 2$이고 중심점이 1개인 경우 척도화를 고려하여 $Q_2(D)$를 구체적으로 구해보면

$$A_2 = B_2 = 0,\ C_2 = \frac{2}{3g^8}(16v_{11}^2 - 8v_{11}v_{12} + v_{12}^2 + 16c_{11,12}^2),$$

$$Q_2(D) = \frac{1}{12g^4}(16v_{11}^2 - 8v_{11}v_{12} + v_{12}^2 + 16c_{11,12}^2) = \frac{404 - 288\alpha^2 + 116\alpha^4 - 48\alpha^6 + 9\alpha^8}{48\alpha^8 g^4}$$

와 같이 α의 식으로 표현된다.

$k = 2$인 경우와 동일한 과정을 반복하면 $k = 3, 4, 5$인 경우에도 $Q_k(D)$와 $H_k(D)$를 유도할 수 있다. 이렇게 구한 $H_k(D)$의 식을 이용하여 기울기 회전성을 만족하거나 기울기 회전성에 가까운 α의 값을 찾아보았다. 참고로 2.3절의 $k = 3, 4, 5$이고 $p = 1$인 경우의 척도를

고려한 $Q_k(D)$는 각각 다음과 같다.

$$Q_3(D) = \frac{4}{35g^4}[16v_{11}^2 + v_{12}^2 - 10v_{11}v_{12}]$$
$$Q_4(D) = \frac{1}{32g^4}[24(v_1^2 + v_3^2) + 64v_{11}^2 + 16(v_1 - v_{11})v_{12} + 7(v_{12}^2 + v_{13}^2)$$
$$- 16(v_1 + v_{11})v_{13} - 10v_{12}v_{13} + 16(v_{13} - v_{12} - 3v_1)v_3]$$
$$Q_5(D) = \frac{8}{63g^4}(4v_{11} - v_{12})^2$$

2.3. SCD에서 $S_k(D)$와 $H_k(D)$의 비교

이제 SCD에서 척도를 고려하여 회전성의 측도인 $S_k(D)$와 기울기 회전성의 측도인 $H_k(D)$를 비교해보고 k값과 n_0의 수에 따라 α의 값을 정하고자 한다.

2.3.1. $k = 2$인 경우 (요인 부분의 정의대비 : $x_2 = x_1$)

x_1	x_2
-1	-1
1	1
α	0
$-\alpha$	0
0	α
0	$-\alpha$
0	**0**

여기서, 정의대비를 $x_2 = -x_1$로 해도 $S_k(D)$와 $H_k(D)$의 값은 동일하다.

표 2.1: $k = 2$인 경우의 SCD에 대한 $S_k(D)$와 $H_k(D)$의 값의 비교

$n_0 = 1$	α	**1.50**	1.53	1.56	1.59	1.62	**1.65**	1.71
	$S_k(D)$	**0.9873***	0.9738	0.9330	0.8764	0.8135	0.7505	0.6368
	$H_k(D)$	0.8995	0.9293	0.9531	0.9704	0.9809	**0.9846****	0.9725
$n_0 = 3$	α	1.50	1.53	1.56	**1.59**	1.62	1.65	1.71
	$S_k(D)$	0.8114	0.8249	0.8321	**0.8341***	0.8317	0.8261	0.8080
	$H_k(D)$	0.9556	0.9622	0.9660	**0.9673****	0.9661	0.9625	0.9487
$n_0 = 5$	α	1.50	1.53	**1.56**	1.59	1.62	1.65	**1.71**
	$S_k(D)$	0.7303	0.7507	0.7667	0.7787	0.7872	0.7927	**0.7968***
	$H_k(D)$	0.9412	0.9439	**0.9446****	0.9435	0.9406	0.9362	0.9227

* $S_k(D)$가 최대가 되도록 하는 α의 값

** $H_k(D)$가 최대가 되도록 하는 α의 값

2.3.2. $k=3$인 경우 (요인 부분의 정의대비 : $x_3 = x_1x_2$)

x_1	x_2	x_3
-1	-1	1
-1	1	-1
1	-1	-1
1	1	1
α	0	0
$-\alpha$	0	0
0	α	0
0	$-\alpha$	0
0	0	α
0	0	$-\alpha$
0	**0**	**0**

여기서, 정의대비가 $x_3 = -x_1x_2$인 경우에도 $S_k(D)$와 $H_k(D)$의 값은 동일하다.

표 2.2: $k=3$인 경우의 SCD에 대한 $S_k(D)$와 $H_k(D)$의 값의 비교

$n_0=1$	α	1.44	1.50	1.57	1.65	1.75	1.85	**1.99**
	$S_k(D)^\Delta$	0.5492	0.5876	0.6290	0.6717	0.7183	0.7579	0.8032
	$H_k(D)$	0.8864	0.8926	0.9040	0.9250	0.9568	0.9824	**1.0000****
$n_0=3$	α	1.44	1.50	**1.57**	1.65	1.75	1.85	1.99
	$S_k(D)^\Delta$	0.4659	0.5050	0.5483	0.5942	0.6461	0.6915	0.7450
	$H_k(D)$	0.9948	0.9987	**1.0000****	0.9984	0.9926	0.9807	0.9534
$n_0=5$	α	**1.44**	1.50	1.57	1.65	1.75	1.85	1.99
	$S_k(D)^\Delta$	0.3958	0.4338	0.4769	0.5238	0.5782	0.6274	0.6870
	$H_k(D)$	**1.0000****	0.9987	0.9949	0.9887	0.9791	0.9626	0.9318

**$H_k(D)$가 최대가 되도록 하는 α의 값

Δ α의 값이 $+\infty$에서 최대값을 갖는 경우

2.3.3. $k=4$인 경우 (요인 부분의 정의대비 : $x_4 = x_1x_2$)

$k=4$인 경우에 만약 정의대비를 $x_4 = x_1x_2x_3$로 하면 Resolution IV 디자인이 되어 2인자 교호작용들간에 (예를 들면 x_1x_2와 x_3x_4) 완전한 별명관계를 이루어 6개의 2인자 교호작용을 모두 추정할 수가 없고 행렬 X도 완전계수를 갖지 못한다. 반면, 정의대비를 $x_4 = x_1x_2$로 하면 요인부분에서는 주효과와 2인자 교호작용이 별명관계를 이루지만 축점부분이 상이하기 때문에 추정하고자 하는 모수를 모두 추정할 수 있다. 따라서 자료의 구조는 다음과 같이 된다.

x_1	x_2	x_3	x_4
-1	-1	-1	-1
-1	-1	1	-1
-1	1	-1	-1
-1	1	1	1
1	-1	-1	-1
1	-1	1	1
1	1	-1	1
1	1	1	1
α	0	0	0
$-\alpha$	0	0	0
0	α	0	0
0	$-\alpha$	0	0
0	0	α	0
0	0	$-\alpha$	0
0	0	0	α
0	0	0	$-\alpha$
0	**0**	**0**	**0**

표 2.3: $k=4$인 경우의 SCD에 대한 $S_k(D)$와 $H_k(D)$의 값의 비교

$n_0=1$	α	1.40	1.60	1.80	2.00	2.19	2.26	**2.43**
	$S_k(D)^{\Delta}$	0.3172	0.4418	0.5546	0.6470	0.7152	0.7360	0.7783
	$H_k(D)$	0.4822	0.6367	0.7378	0.8228	0.8611	0.8732	**0.8855****
$n_0=1$	α	1.40	1.60	1.80	2.00	2.19	**2.26**	2.43
	$S_k(D)^{\Delta}$	0.2711	0.3879	0.4992	0.5947	0.6678	0.6905	0.7375
	$H_k(D)$	0.4971	0.6671	0.7876	0.8648	0.8727	**0.8733****	0.8692
$n_0=1$	α	1.40	1.60	1.80	2.00	**2.19**	2.26	2.43
	$S_k(D)^{\Delta}$	0.2316	0.3378	0.4429	0.5364	0.6102	0.6336	0.6825
	$H_k(D)$	0.5023	0.6729	0.7908	0.8637	**0.8676****	0.8670	0.8612

** $H_k(D)$가 최대가 되도록 하는 α의 값

Δ α의 값이 $+\infty$에서 최대값을 갖는 경우

2.3.4. $k=5$인 경우 (요인 부분의 정의대비 : $x_5 = x_1x_2x_3x_4$)

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
		2^{5-1}		
일부요인부분(fractional factorial portion)				
α	0		$\cdots$	0
$-\alpha$	0		$\cdots$	0
0	α		$\cdots$	0
0	$-\alpha$		$\cdots$	0
$\vdots$	$\vdots$		$\ddots$	$\vdots$
0	0		$\cdots$	α
0	0		$\cdots$	$-\alpha$
축점(axial points)				
0	**0**		$\cdots$	**0**
중심점(center points)				

표 2.4: $k=5$인 경우의 SCD에 대한 $S_k(D)$와 $H_k(D)$의 값의 비교

$n_0=1$	α	**2.00**	2.20	2.40	2.58	2.70	2.80	**2.87**
	$S_k(D)$	**1.0000***	0.9994	0.9986	0.9978	0.9974	0.9979	0.9968
	$H_k(D)$	0.8996	0.9114	0.9457	0.9815	0.9945	0.9992	**1.0000****
$n_0=1$	α	**2.00**	2.20	2.40	2.58	**2.70**	2.80	2.87
	$S_k(D)$	**1.0000***	0.9994	0.9983	0.9975	0.9970	0.9966	0.9964
	$H_k(D)$	0.9689	0.9861	0.9944	0.9991	**1.0000****	0.9993	0.9980
$n_0=1$	α	**2.00**	2.20	2.40	**2.58**	2.70	2.80	2.87
	$S_k(D)$	**1.0000***	0.9993	0.9981	0.9971	0.9965	0.9961	0.9958
	$H_k(D)$	0.9804	0.9937	0.9985	**1.0000****	0.9993	0.9978	0.9961

* $S_k(D)$가 최대가 되도록 하는 α의 값

** $H_k(D)$가 최대가 되도록 하는 α의 값

3. 결 론

표 2.1-표 2.4로부터 SCD는 α가 증가함에 따라 대체로 $S_k(D)$의 값이 $H_k(D)$의 값보다 민감하게 변한다. 즉 α의 값에 대하여 $H_k(D)$가 $S_k(D)$보다 더 로버스트하다고 할 수 있다. 인자의 수가 2, 3, 4, 5이고 각각의 중심점의 수가 1, 3, 5일 때 회전성과 기울기 회전성의 관점에서 최적의 α값을 구하여 표 3.1에 나타내었다.

표 3.1: $p=1$인 경우 SCD에서 최적의 α값

k	n_0	$S_k(D)$를 최대로 하는 α값	$H_k(D)$를 최대로 하는α값	$S_k(D)+H_k(D)$를 최대로 하는α값
2	1	1.50	1.65	1.53
	3	1.59	1.59	1.59
	5	1.71	1.56	1.64
3	1	$+\infty$	1.99	2.11
	3	$+\infty$	1.57	2.10
	5	$+\infty$	1.44	2.16
4	1	$+\infty$	2.43	2.67
	3	$+\infty$	2.26	2.77
	5	$+\infty$	1.44	2.85
5	1	2.0	2.87	2.86
	3	2.0	2.70	2.67
	5	2.0	2.58	2.52

$k=5$이고 $p=1$인 경우는 $\alpha=2$인 경우에 회전성을 만족하며, $k=3,5$이고 $p=1$인 경우에는 기울기 회전성을 만족하는 α가 존재한다. $k=3,4$인 경우는 축점의 값이 증가함에 따라 회전성의 측도가 점차1에 수렴한다. 중심점의 수가 증가하면 기울기 회전성을 만족하는 α의 값은 대체로 감소한다.

참고문헌

[1] Box, G. E. P. and Hunter, J. S. (1957). Multifactor experimental design for exploring response surfaces, *Annals Mathematical Statistics*, 28, 195-241.

[2] Draper, N. R. (1985). Small composite designs, *Technometrics*, 27, 173-180.

[3] Draper, N. R. and Pukelsheim, F. (1990). Another look at rotatability, *Technometrics*, 32, 195-202.

[4] Fleming, W. (1977). *Functions of Several Variables*, 2nd ed., Springer, New York.

[5] Hader, R. J. and Park, Sung H. (1978). Slope-rotatable central composite designs, *Technometrics*, 20, 413-417.

[6] Hartley, H. O. (1959). Smallest composite designs for quadratic response surfaces, *Biometrics*, 15, 611-624.

[7] Myers, R. H. (1976). *Response Surface Methodology*, Ann Arbor, Michigan, Edward Brothers(distributors).

[8] Myers, R. H. and Montgomery, D. C. (1995). *Response Surface Methodology*, John Wily & Sons, Inc.

[9] Park, Sung H. (1987). A class of multifactor designs for estimating the slope of response surfaces, *Technometrics*, 29, 449-453.

[10] Park, Sung H. and Kim, H. J. (1992). A measure of slope-rotatability for second order response surface experimental designs, *Journal of applied Statistics*, 19, 391-404.

[11] Park, Sung H., Lim, J. H., and Baba, Y. (1993). A measure of rotatability for second order response surface designs, *Annals of Institute of Statistical Mathematics*, 45, 655-664.

[1998년 4월 접수, 1998년 9월 최종수정]

A Study on Small Composite Designs for Fitting Second Order Response Surface Models *

Park Sung-Hyun [1)] Seo Hyeok [2)] Park Jun-Oh [3)]

Abstract

The small composite design for second order response surface might be appropriate when experimentation is expensive, difficult, or time-consuming, especially when an independent estimate of experimental error is available. It is important that the small composite designs for response surface analysis would be rotatable and slope-rotatable. Therefore the small composite designs are studied from the viewpoint of rotatability and slope-rotatability, and the optimal values of α (the distance of axial points from the center) are investigated as k (the number of independent variables) and n_0(the number of center points) are changed.

* This research was partially supported by the Basic Science Research Institute program, Ministry of Education, 1997, project No. BSRI-97-1415.

1) Professor, Dept of Statistics, Seoul National University, Kwanak-ku, Seoul, 151-742, Korea
2) Dept of Statistics, Seoul National University, Kwanak-ku, Seoul, 151-742, Korea
3) Dept of Statistics, Seoul National University, Kwanak-ku, Seoul, 151-742, Korea