

반응표면분석에서의 다반응 최적화 : 기대 상대오차제곱 추정치 가중합의 최소화에 의한 방법

임성수* · 이우선**†

* 고려대학교 정보통계학과 · ** 성신여자대학교 통계학과

Multiresponse Optimization in Response Surface Analysis : A Method by Minimization of Weighted Sum of Estimates of Expected Squared Relative Errors

Sungsue Rheem* · Woosun Lee**†

* Department of Informational Statistics, Korea University

** Department of Statistics, Sungshin Women's University

Key Words : Multiresponse Optimization, Expected Squared Relative Error

Abstract

This article proposes a practical approach, which is based on the concept of the expected squared relative error, that can consider both the prediction quality and the practitioner's subjectivity in simultaneously optimizing multiple responses. Through a case study, multiresponse optimization using the expected squared relative error approach is illustrated, and the SAS program to implement the proposed method is provided.

1. 서 론

제품의 품질은 여러 속성으로 이루어지는 경우가 자주 있어, 다반응 최적화는 제품 또는 공정의 품질 향상을 위한 연구에서 중요한 최종 목적인 경우가 많다. 예를 들어, 반응표면방법론이 자주 이용되는 식품과학 분야 학술지들의 실험연구 논문들은 다수의 경우에서 여러 개의 반응들을 다루고 있다. 각 반응을 동시에 최대한도로 최적화하는 요인수준 조합은 사실상 거의 존재하지 않기 때문에, 여러 반응들의 동시적 최적화(simultaneous optimization)는, 대부분의 경우, 반응들 사이의 타협적 최적화(compromised optimization)이다.

이러한 다반응 최적화 방법들 중에서 하나 이상의 어떤 수($k \geq 1$)의 반응들에도 적용가능한 세 가지 주요한 방법들로 바람직성 함수 방법(desirability function approach ; Derringer and Suich, 1980), 일반화 거리 방법(generalized distance approach ; Khuri and Conlon, 1981), 그리고 오차손실 제곱 방법(squared error loss approach, Vining, 1998)을 들 수 있다(Myers and Montgomery, 2002, pp. 281-286). 제2장에서는 이러한 기존의 주요 다반응 최적화 방법론을 소개하고, 일부 방법론들의 기본 아이디어들을 비교한다.

제3장에서는 실무자들이 그 개념을 쉽게 이해할 수 있는 기대 상대오차제곱(expected squared relative error)이라는 측도를 제시하고, 이 측도에 근거한 다반응 최적화 방법을 제안한다. 이 방법은 Vining(1998)의 아이디어에 바탕을 두고 있는데, 각 반응에서 기대 상대오차제곱의 추정치를 구한 다음,

† 교신저자 wslee@sungshin.ac.kr

※ 본 연구는 제 1저자의 2002년 고려대학교 특별연구비에 의하여 수행되었음.

이것들의 가중합을 최소화하는 요인수준 조합을 찾는 방법이다.

제4장에서는 사례 데이터를 대상으로 기대 상대 오차제곱 방법을 사용하여 다반응 최적화를 실시한다. 사례연구에서의 분석에 사용된 SAS 프로그램도 제공한다.

기대 상대오차제곱 방법의 특징에 대한 설명을 포함하고 있는 결론과 향후 연구 과제가 제5장에 제시된다.

2. 기존의 다반응 최적화 방법론

2.1 바람직성 함수 방법

Derringer and Suich(1980)의 바람직성 함수 방법은 각 반응에 대해 바람직성 함수(반응값이 만족스러울 때 1의 값을 가지고, 반응값을 받아들이지 않을 때 0의 값을 가짐)를 적절하게 정의하고, 이들 바람직성 함수들의 기하평균(geometric mean)을 종합 바람직성 함수로 하여, 이를 최대화하는 요인수준 조합을 찾는 기법이다. 이 방법은, 품질통계학을 중점적으로 다루고 있다고 하는 Minitab의 Stat 메뉴에 소속된 DOE(Design of Experiments)의 Response Optimizer가 사용하는 방법이며, 현재 가장 널리 사용되고 있다고 할 수 있다.

이 방법은 각 반응에 대한 바람직성 함수에 가중치 정보를 투입할 수 있게 하여 연구자의 주관적 판단을 수용하여 특정 변수를 더 중점적으로 최적화하는 것이 가능하게 해 준다. 그러나, 이 방법은 반응간 공분산 구조나 반응표면 모형 적합치의 분산은 고려하지 않는다. 이 방법은 Myers and Montgomery (2002)에도 구체적으로 설명되어 있다.

2.2 일반화 거리 방법

Khuri and Conlon(1981)의 일반화 거리 방법은 반응들의 개별적 최적값 벡터(vector of individual optima)와 실험지역 내의 지점(point)에서 추정된 반응값 벡터 간의 Mahalanobis 거리를 최소화하는 요인수준 조합을 찾는 기법이다. 이 방법은, $\hat{y}(x)$ 를 요인수준 조합을 나타내는 좌표점 x 에서의 반응 적합치들의 vector, θ 를 반응 목표치들의 vector,

$\Sigma_{\hat{y}(x)}$ 를 $\hat{y}(x)$ 의 분산-공분산 행렬이라고 할 때,

$$[\hat{y}(x) - \theta]' \Sigma_{\hat{y}(x)}^{-1} [\hat{y}(x) - \theta] \quad (1)$$

를 최소화하는 좌표점 x 를 실험설계 공간에서 찾는 방법이다(Myers and Montgomery, 2002, p. 285).

이 방법은 반응표면 모형 적합치들 사이의 분산-공분산 구조는 고려하지만, 특정 변수를 더 중점적으로 최적화할 수 없고, 이 방법의 사용을 추천할 수 없게 하는 중대한 문제점이 있다. 이 문제점에 대하여 대하여는 2.4절에서 논하기로 한다.

2.3 오차손실 제곱 방법

Vining(1998)의 오차손실제곱 방법은 추정의 오차제곱 평균(mean squared error, MSE) 개념에 근거한 방법이다. 이 방법은, $\hat{y}(x)$ 를 요인수준 조합을 나타내는 좌표점 x 에서의 반응 적합치들의 vector, θ 를 반응 목표치들의 vector, $\Sigma_{\hat{y}(x)}$ 를 $\hat{y}(x)$ 의 분산-공분산 행렬, C 를 가중치 또는 비용을 나타내는 positive definite 행렬이라고 할 때, 오차손실함수를

$$L = [\hat{y}(x) - \theta]' C [\hat{y}(x) - \theta] \quad (2)$$

로 정의하고, L 의 기대치

$$E(L) = [E(\hat{y}(x)) - \theta]' C [E(\hat{y}(x)) - \theta] + \text{Trace}[C \Sigma_{\hat{y}(x)}] \quad (3)$$

의 추정치인

$$\hat{E}(L) = [\hat{y}(x) - \theta]' C [\hat{y}(x) - \theta] + \text{Trace}[C \hat{\Sigma}_{\hat{y}(x)}] \quad (4)$$

를 최소화하는 좌표점 x 를 실험설계 공간에서 찾는 방법이다(Myers and Montgomery, 2002, p. 286).

이 방법은 C 에 의하여 특정 반응에 대한 더 중점적인 최적화를 수용할 수 있고, $\text{Trace}[C \hat{\Sigma}_{\hat{y}(x)}]$ 에 의하여 모형 적합치의 분산-공분산 구조를 반영할 수 있다. 물론 C 가 diagonal 행렬일 경우에는 각 모형 적합치의 분산만 반영된다. 또한 C 로 $\Sigma_{\hat{y}(x)}^{-1}$ 를 사용할 경우에는 (4)의 최소화가 (1)의 최소화와 동등하게 되므로, Vining의 방법은 Khuri and Conlon

의 방법을 특별한 경우로 포함한다(Vining, 1998). C 를 적절히 지정하면, 연구자의 주관을 반영시키며 예측의 질(prediction quality)이 더 높은 요인수준 조합을 최적점으로 추정할 수 있으므로, 이 방법은 Khuri and Conlon의 방법보다 더 우수한 방법이다. 예측의 질이 관련된 우월성에 대하여는 2.4절에서 논하기로 한다.

2.4 일반화 거리 방법과 오차손실제곱 방법의 기본 아이디어 비교

여기서는 Khuri and Conlon의 방법과 Vining의 방법의 기본 아이디어를 비교하여, Khuri and Conlon의 방법의 문제점을 지적한다.

Khuri and Conlon의 측도 식 (1)의 가장 단순한 형태는, 반응이 하나일 때의 형태인

$$(\hat{y}-\theta)^2/\widehat{\text{Var}}(\hat{y}) \tag{5}$$

이다.

Vining의 측도 (4)의 가장 단순한 형태는, C 가 identity 행렬이고 반응이 하나일 때의 형태로

$$(\hat{y}-\theta)^2 + \widehat{\text{Var}}(\hat{y}) \tag{6}$$

이다.

식 (1)과 식 (4)는 비슷해 보이지만 그 형태는 전혀 다를 수 있다는 것을 가장 단순한 형태들인 식 (5)와 식 (6)을 비교하여 봄으로써 밝히고자 한다.

θ 가 반응의 최대값이나 최소값이 아닌 목표치인 경우, 실제적으로 구현가능한 요인수준 조합들 중에서 θ 에 가장 가까운 \hat{y} 를 산출시키는 요인수준 조합들이 여러 개 있을 수 있다. 이러한 요인수준 조합들에서의 \hat{y} 들은 특정 등고선 상의 값들이다. 이러한 요인수준 조합들에 측도 식 (5)와 측도 식 (6)을 적용하여 보면, 측도 식 (5)와 식 (6) 모두 최소화의 대상이기 때문에, 측도 식 (5)를 사용할 경우에는 $\widehat{\text{Var}}(\hat{y})$ 이 가장 큰 요인수준 조합들을 선택하게 되고, 측도 식 (6)을 사용할 경우에는 $\widehat{\text{Var}}(\hat{y})$ 이 가장 작은 요인수준 조합을 선택하게 된다. 이 경우, 예측의 질은 $\widehat{\text{Var}}(\hat{y})$ 이 가장 작은 요인수준 조합에서 가장 좋고 $\widehat{\text{Var}}(\hat{y})$ 이 가장 큰 요인수준 조합에서 가장 나쁘기 때문에, 측도 (5)는 추천할 수 없는 측도가 되고, 따라서 측도 (1)도 추천할 수 없는 측

도가 된다. 측도 (5)를 사용할 경우에는, 어떤 요인수준 조합이 그 조합에서 \hat{y} 이 θ 에 가깝다는 이유가 아니라 $\widehat{\text{Var}}(\hat{y})$ 이 크다는 이유로 선택될 가능성도 배제할 수 없다.

회귀모형 적합치의 분산은 적합치를 구하는 지점이 설명변수들의 중심점에서 멀리 떨어질수록 커지기 때문에, Khuri and Conlon의 방법을 사용할 경우에는 중심점에서 멀리 떨어진 점이 추정된 최적점으로 선택되는 경향이 있을 것으로 보인다. 실제로 Khuri and Conlon(1981)의 예제에서 추정된 다반응 최적점은 실험설계 공간의 경계선(perimeter) 상의 점으로 실험설계 공간의 중심점에서 가장 멀리 떨어진 지점들 중 하나이다(Khuri and Cornell, 1996, pp. 291-293). 단일반응의 경우에 추정치와 목표치 간의 차이를 추정치의 표준오차로 나누어주는 것을 포함하는 일반화 거리의 개념은, 추정치의 분산, 즉 예측의 질을 고려하는 관점에서 보면, 반응 최적화에서는 적절하지 않음을 깨달을 수 있다.

측도 식 (6)은 \hat{y} 의 편향(bias) 제곱의 추정치와 분산의 추정치의 합이므로, 측도 식 (6)의 최소화는 예측의 질이 더 높은 최적화를 추구하다고 할 수 있다. 따라서, Vining의 방법은 Khuri and Conlon의 방법보다 우월하다고 볼 수 있다.

3. 기대 상대오차제곱 방법

일반적으로 동일한 생산 조건들에서 산출되는 품질 특성치에도 어느 정도의 변동이 생기게 되므로, 반응이 하나 있을 경우, 반응 적합치가 목표치에 가장 가깝게 되는 요인수준 조합을 찾아내는 것 보다는 반응 적합치의 기대오차제곱(expected squared error(ESE), mean squared error(MSE)라고도 함)을 최소화하는 요인수준 조합을 찾아내는 것이 현실적으로 더 의미있는 일이라고 본다. 이러한 기대오차제곱 개념을 다반응 상황에 맞추어 보완하고 확장한 방법을 여기에서 제안한다.

k 개의 반응 y_1, y_2, \dots, y_k 와 반응의 각 목표치 $\theta_i(i=1, \dots, k)$ 가 있을 때, 각 목표치 θ_i 에 대하여 반응의 모형 적합치 \hat{y}_i 의 상대오차(relative error)를

$$(\hat{y}_i - \theta_i)/\theta_i \tag{7}$$

로 정의한다. 예를 들어, 목표치가 100일 때 추정치

가 110이면, 상대오차는 $(110-100)/100 = 0.1$ 이 되고, 목표치가 1,000일 때 추정치가 1,010이면, 상대오차는 $(1,010-1,000)/1,000 = 0.01$ 이 된다. 즉, 오차가 10으로 같아도, 각 경우에서의 오차의 의미는 서로 다른데, 이를 상대오차가 나타내주는 것이다.

\hat{y}_i 의 기대 상대오차제곱(expected squared relative error, ESRE)은

$$\begin{aligned} \text{ESRE}(\hat{y}_i) &= E [((\hat{y}_i - \theta_i)/\theta_i)^2] \\ &= [(E(\hat{y}_i) - \theta_i)^2 + \text{Var}(\hat{y}_i)]/\theta_i^2 \\ &= [(\text{bias}(\hat{y}_i))^2 + \text{Var}(\hat{y}_i)]/\theta_i^2 \quad (8) \end{aligned}$$

이고, 기대 상대오차제곱의 추정치(estimate of ESRE)는

$$\widehat{\text{ERSE}}(\hat{y}_i) = [(\widehat{\text{bias}}(\hat{y}_i))^2 + \widehat{\text{Var}}(\hat{y}_i)]/\theta_i^2 \quad (9)$$

으로 표기된다.

본 논문에서는 실험설계 공간 내의 격자 상 탐색(search on a grid)을 통하여 최적점을 찾아내는 방법을 사용할 것이다. m 개의 요인이 있고, $\pm b$ ($b > 0$)를 코드화된 각 요인수준의 상한과 하한(예: $\pm\sqrt{m}$), δ ($\delta > 0$)를 각 요인수준의 증분(increment, 예: 0.1, 0.05, 0.01), 실험설계 공간을 Ω (예: 중심이 원점이고 반경이 \sqrt{m} 인 m -차원 구(m -dimensional sphere)의 내부)라고 할 때, 실험설계 공간 내의 m -요인 δ -증분 격자(m -factor δ -increment grid in the experimental design space)는 다음과 같은 요인수준 조합들의 집합으로 정의된다.

$$\{(x_1, \dots, x_m) : x_i = -b, -b + \delta, -b + 2\delta, \dots, b; \\ i = 1, 2, \dots, m; (x_1, \dots, x_m) \in \Omega\}$$

격자를 이루는 점들을 격자점(grid point)들이라고 한다. 예를 들어, 본 논문의 제4장의 <표 2>에 주어져 있는, 원점(origin)과 축 점(axial point) 간의 거리가 $\sqrt{2}$ 인 중심합성설계(central composite design)에서의 실험설계 공간 내의 2-요인 0.01-증분 격자는 중심점이 (0, 0)이고 반경이 $\sqrt{2}$ 인 원의 내부의 다음과 같은 격자점들의 집합으로 정의된다.

$$\{(x_1, x_2) : x_i = -1.41, -1.40, -1.39, \dots, 1.41; \\ i = 1, 2; x_1^2 + x_2^2 \leq 2\}$$

본 논문에서 제안하는 격자 상 탐색 방법을 사용하면, 탐색대상 공간 전체를 탐색하게 되므로, 탐색대상 공간에서 local 최적점이 아닌 global 최적점을 항상 찾아낼 수 있다. 최적점 탐색에 많이 사용되어 온 기존의 direct search 방법에서는 탐색공간 전체를 탐색하지 않고, 탐사가 초기점에서 시작되어 최적화가 최소화일 때에는 골짜기를 처음 발견하면 멈추고, 최적화가 최대화일 때는 봉우리를 처음 발견하면 멈추기 때문에, 더 깊은 골짜기나 더 높은 봉우리를 놓칠 수 있다는 문제점이 있다. 따라서, direct search 방법을 사용하는 경우에는 여러 개의 초기점들을 사용하여 탐사를 번거롭게 여러 번 하기도 한다. 격자 상 탐색 방법에는 이러한 문제점이나 번거로움이 발생하지 않는다.

이제 측도 (9)에서의 $\widehat{\text{bias}}(\hat{y}_i)$ 를 최적화의 목적에 따라 다음과 같이 정의한다.

- (1) 반응 y_i 를 목표치화하고자 하고 목표치가 θ_i 이며 반응의 하방한계치와 상방한계치가 각각 L_i 과 U_i 경우, 실험설계 공간 내의 격자점들 각각에서 \hat{y}_i 을 구하여 $L_i \leq \hat{y}_i \leq U_i$ 인 격자점들만 탐색대상으로 하고, 이 격자점들에서 $\widehat{\text{bias}}(\hat{y}_i)$ 를 $(\hat{y}_i - \theta_i)$ 로 정의한다.
- (2) 반응 y_i 를 최대화하고자 하고 상방목표치가 θ_i 이어서 $\theta_i \leq \hat{y}_i$ 인 \hat{y}_i 에 대하여 만족하며 반응의 하방한계치가 L_i 일 경우, 실험설계 공간 내의 격자점들 각각에서 \hat{y}_i 을 구하여 $L_i \leq \hat{y}_i$ 인 격자점들만 탐색대상으로 하고, 이 격자점들에서 $\widehat{\text{bias}}(\hat{y}_i)$ 를 $\hat{y}_i < \theta_i$ 인 \hat{y}_i 에 대하여는 $(\hat{y}_i - \theta_i)$ 로 정의하고, $\theta_i \leq \hat{y}_i$ 인 \hat{y}_i 에 대하여는 0으로 정의한다.
- (3) 반응 y_i 를 최소화하고자 하고 하방목표치가 θ_i 이어서 $\hat{y}_i \leq \theta_i$ 인 \hat{y}_i 에 대하여 만족하며 반응의 상방한계치가 U_i 일 경우, 실험설계 공간 내의 격자점들 각각에서 \hat{y}_i 을 구하여 $\hat{y}_i \leq U_i$ 인 격자점들만 탐색대상으로 하고, 이 격자점들에서 $\widehat{\text{bias}}(\hat{y}_i)$ 를 $\theta_i < \hat{y}_i$ 인 \hat{y}_i 에 대하여는 $(\hat{y}_i - \theta_i)$ 로 정의하고, $\hat{y}_i \leq \theta_i$ 인 \hat{y}_i 에 대하여는 0으로 정의한다.
- (4) 반응 y_i 가 특정범위 $[L_i, U_i]$ 에 속하기만 하면

만족하고 그 범위를 벗어나는 것은 허용하지 않을 경우, 실험설계 공간 내의 격자점들 각각에서 \hat{y}_i 을 구하여 $L_i \leq \hat{y}_i \leq U_i$ 인 격자점들만 탐색대상으로 하고, 이 격자점들에서 $\widehat{\text{bias}}(\hat{y}_i)$ 를 0으로 정의한다. 측도 (9)의 값을 구하기 위해서는 θ_i 의 값이 필요하므로, 이 경우에는 θ_i 의 값을 다음과 같이 이 특정범위의 중간값으로 정한다 : $\theta_i = (L_i + U_i) / 2$

Vining(1998)은 예제에서 두 개의 반응의 동시적 최적화를 다루고 있는데, 첫 번째 반응 y_1 의 최적화가 상방목표치 θ_1 이 존재하는 최대화임에도 불구하고, 상방목표치 θ_1 보다 더 큰 \hat{y}_1 에서는 $(\hat{y}_1 - \theta_1)$ 를 0으로 대체한다는 언급이 없어, 상방목표치 θ_1 보다 더 커서 만족스런 \hat{y}_1 가 존재할 경우에 그런 \hat{y}_1 에서도 $(\hat{y}_1 - \theta_1)^2$ 으로 인한 오차가 발생하게 되어 있는 문제점이 있다.

다음으로 k 개의 반응 y_1, y_2, \dots, y_k 각각에 대해서 연구자의 판단에 의하여 가중치 w_1, w_2, \dots, w_k 를 부여한다. 더 중점적으로 최적화하고자 하는 반응, 즉 그 값을 해당 목표치에 더 가깝게 하고자 하는 반응에 대하여는 더 큰 가중치를 부여한다.

k 개의 반응 y_1, y_2, \dots, y_k 를 설명하는 요인들이 m 개 있어 이것들의 코드화된 수준들의 조합을 (x_1, \dots, x_m) 으로 나타낼 때, 아래에 W로 표기되어 있는 기대 상대오차제곱 추정치 가중합(weighted sum of estimates of ESREs)을 최소화하는 (x_1, \dots, x_m) 점을 실험설계 공간 내의, 모든 반응들의 공통 탐색대상 격자점들 중에서 찾아냄으로써 다반응 최적화를 구현할 수 있다.

$$W = \sum_{i=1}^k w_i \widehat{\text{ERSE}}(\hat{y}_i) = \sum_{i=1}^k w_i [(\widehat{\text{bias}}(\hat{y}_i))^2 + \widehat{\text{Var}}(\hat{y}_i)] / \theta_i^2 \quad (10)$$

측도 (10)은 Vining(1998)의 측도 (4)에 $C = \text{diag}_k [w_i / \theta_i^2]$ (여기서 diag_k 는 $k \times k$ 대각 (diagonal) 행렬을 나타냄)을 대입한 것과 유사하다. 한 가지 다른 점은 $(\hat{y}_i - \theta_i)^2$ 이 0으로 대체되는 경우들을 지정한 것이다.

측도 (10)에 포함되어 있는 \hat{y}_i 와 $\text{Var}(\hat{y}_i)$ 를 구하기 위한 다반응 모형화에서는 각 반응변수에 모두 완전 2차다항회귀모형(full second-order polynomial regression model)을 적합시키는 것을 제안한다. 반응들을 제품의 품질을 구성하는 품질특성치들이라고 할 때, 동일한 실험조건 하에서 측정되는 품질특성치들 사이에는 상관(correlation)이 존재할 수 있으므로, 일반적으로 다반응의 모형화에는 반응간 공분산들을 고려하여 회귀계수들을 추정하는 SUR(seemingly unrelated regressions; Zellner, 1962) 모형이 가장 적절하다(Khuri and Cornell, 1996, pp. 252-254). 그런데, 각 반응의 모형화에 동일한 모형이 사용될 경우에는, 다행스럽게도, SUR 모형을 사용하여 각 반응의 회귀방정식을 동시적으로 추정할 때의 결과가 각 반응에 대하여 개별적으로 OLS(ordinary least squares) 추정 방법을 사용할 때의 결과와 동일하게 된다(Khuri and Cornell, 1996, p. 254). 반응표면분석에서 다반응 최적화를 위하여 반응을 모형화할 때에는 각 회귀계수의 통계적 유의성에 관계없이 완전 2차다항회귀모형을 사용하는 것을 권하는 견해(Ames et al., 1997)와 각 반응의 회귀방정식을 개별적으로 OLS 방법에 의하여 추정할 경우에 $\text{Var}(\hat{y}_i)$ 를 쉽게 구할 수 있다는 점에 근거하여, 우리의 절차에서는 각 반응변수에 모두 완전 2차다항회귀모형을 적합시킬 것이다.

다음 장에서 SAS 프로그래밍을 사용한 이 방법의 실행이 예시된다.

4. 사례연구 및 SAS 프로그램

4.1 다반응 최적화 문제와 실험 데이터 및 모형화

본 연구에서는 Myers and Montgomery(2002)와 Montgomery(2001)의 다반응 최적화 예제에서 사용된 데이터에 대한 재분석을 통하여 기대 상대오차제곱 방법에 의한 다반응 최적화를 예시하고자 한다. 이 실험 데이터는 어떤 화학공정에서의 2-요인 3-반응 실험으로부터 얻어졌다. 이 실험에서의 반응들은 수율(yield, y_1), 점성(viscosity, y_2) 및 분자무게(molecular weight, y_3)이고, 요인들은 시간

(time, x_1)과 온도(temperature, x_2)이다. <표 1>에 각 반응의 최적화 목적 및 목표(Montgomery and Myers, 2002, p. 283)가 주어져 있다.

<표 1> 각 반응의 최적화 목적 및 목표

반응	최적화 목적	최적화 목표
수율, y_1	반응을 최대화함	상방 목표치 $\theta_1 = 80$ 하방 한계치 $L_1 = 70$
점성, y_2	반응을 목표치화함	상방 한계치 $U_2 = 68$ 목표치 $\theta_2 = 65$ 하방 한계치 $L_2 = 62$
분자 무게, y_3	반응을 특정 범위에 속하게 함	상한 $U_3 = 3400$ 중간값 $\theta_3 = 3300$ 하한 $L_3 = 3200$

실험 설계 및 반응 데이터는 <표 2>에 나타나 있다. <표 2>의 실험설계는 원점(origin)과 축 점(axial point) 간의 거리가 $\sqrt{2}$ 이고 중심점들의 개수가 5인 중심합성설계이다.

Myers and Montgomery(2002, pp. 273- 286)와 Montgomery(2001, pp. 448-455)는 SUR 모형에 대한 언급없이 y_1, y_2, y_3 각각에 대하여 개별적인 OLS 추정에 의한 모형화를 실시하였는데, y_1 과

y_2 에는 완전 2차다항모형(모형 항 : 절편, $x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1x_2$)을 적합시켰고, y_3 에는 축소 모형인 1차모형(모형 항 : 절편, x_1, x_2)을 적합시켰다. 이런 식으로 각 반응에 대하여 적합된 모형이 공통적이지 않은 것이 허용되려면, 반응간 공분산들이 모두 0이라는 귀무가설을 검정하여 그 결과가 귀무가설의 기각이 아니어야 한다. 이러한 검정은 Buck(1999)을 참조하여 실시할 수 있다. 이 검정 결과가 귀무가설의 기각이라면, SUR 모형을 사용하여 세 가지 반응들의 회귀방정식들을 동시에 추정해야 한다. 이러한 추정은 SAS/ETS의 PROC SYSLIN SUR 또는 PROC SYSLIN ITSUR(iterative seemingly unrelated regressions)을 사용하여 실시할 수 있다 (SAS Institute, 1999).

우리는 각 반응에 공통적으로 완전 2차다항회귀모형을 적합시켰다, 이 경우 각 반응의 회귀방정식에 대한 SUR 동시 추정 결과가, 반응간 공분산들에 관계없이, OLS 개별 추정 결과와 같으므로, OLS 개별 추정을 실시하더라도 반응간 공분산들이 모두 0이라는 귀무가설에 대한 검정은 필요하지 않다. 우리는 각 반응에 대하여 개별적 OLS 추정을 실시하는 SAS/STAT의 PROC GLM을 사용하여 각 반응을 모형화하였다. 각 반응에 대한 모형 적합 결과는 다음의 <표 3>에 나타나 있다.

<표 2> 실험 설계 및 반응 데이터

Run	Natural Factors		Coded Factors		Responses		
	Time	Temperature	x_1	x_2	y_1	y_2	y_3
1	80	170	-1	-1	76.5	62	2940
2	80	180	-1	1	77	60	3470
3	90	170	1	-1	78	66	3680
4	90	180	1	1	79.5	59	3890
5	85	175	0	0	79.9	72	3480
6	85	175	0	0	80.3	69	3200
7	85	175	0	0	80	68	3410
8	85	175	0	0	79.7	70	3290
9	85	175	0	0	79.8	71	3500
10	92.07	175	1.414	0	78.4	68	3360
11	77.93	175	-1.414	0	75.6	71	3020
12	85	182.07	0	1.414	78.5	58	3630
13	85	167.93	0	-1.414	77	57	3150

<표 3> 각 반응 데이터에의 완전 2차다항모형 적합 결과

Model Term	Regression Coefficients		
	y_1	y_2	y_3
Intercept	79.93995	70.00021	3375.97523
x_1	0.99505	-0.15527	205.12597
x_2	0.51520	-0.94839	177.36678
x_1^2	-1.37645	-0.68732	-41.74373
x_2^2	-1.00134	-6.68913	58.28648
x_1x_2	0.25000	-1.25000	-80.00000
$\sqrt{MS_{Error}}$	0.26629	2.27477	172.32428
R^2	0.98273	0.89973	0.75899

4.2 기대 상대오차제곱 방법에 의한 다반응 최적화

이제 제3장에서 제안한 기대 상대오차제곱 방법을 사용하여 <표 1>에 주어진 각 반응의 최적화 목적 및 목표를 동시에 가능한 한 최대로 충족시키기 위한 다반응 최적화를 실시한다. 이를 위한 SAS macro 프로그램을 <프로그램 1>에 제공한다. <프로그램 1>은 다음의 4개의 step들로 이루어져 있다.

Step 1 : 원점과 축점 간의 거리가 $\sqrt{2}$ 인 구형 (spherical) 실험설계 공간 내에서 2-요인 0.01-중분 격자를 생성하고 이 격자 데이터를 실험 데이터와, 실험 데이터 아래에 격자 데이터를 놓는 방식으로, 세로로 결합함.

Step 2 : 각 반응에 완전 2차다항회귀모형을 적합시키고 실험설계 점들을 포함하는 전체 격자 점들에서 각 반응의 적합치와 적합치의 표준오차를 계산함.

Step 3 : 전체 격자 점들 중에서 각 반응의 최적화 목적 및 목표에 따라서 탐색대상 격자 점들을 지정하고, 이 격자 점들에서 각 반응의 $\widehat{bias}(\widehat{y}_i)$ 를 적절히 정의한 후, $W = \sum_{i=1}^k w_i [(\widehat{bias}(\widehat{y}_i))^2 + \widehat{Var}(\widehat{y}_i)] / \theta_i^2$ 를 계산함.

Step 4 : 탐색대상 격자 점들을, 처음에 놓이는 W 값이 W의 최소값이 되도록, W의 값이 증가하는 순서로 sorting하여 처음 25개의 격자 점들과 그 점들에서의 원점과 격자 점 간의 거리, 각 요인 수준, 각 반응값, 각 반응값의 표준오차, W 값을 출력함.

<프로그램 1> 기대 상대오차제곱 방법을 사용하여 <표 1>의 다반응 최적화를 <표 2>의 데이터에 대하여 실시하기 위한 SAS macro 프로그램

```

DATA A ; INPUT X1 X2 Y1 Y2 Y3 ;
      TIME=85+ 5*X1 ; TEMPERATURE=175+ 5*X2;
      X0=1 ; X1X1=X1*X1 ; X2X2=X2*X2 ;
      X1X2=X1*X2;
LINES;
-1.000 -1.000 76.5 62 2940
-1.000 1.000 77.0 60 3470
1.000 -1.000 78.0 66 3680
1.000 1.000 79.5 59 3890
0.000 0.000 79.9 72 3480
0.000 0.000 80.3 69 3200
0.000 0.000 80.0 68 3410
0.000 0.000 79.7 70 3290
0.000 0.000 79.8 71 3500
1.414 0.000 78.4 68 3360
-1.414 0.000 75.6 71 3020
0.000 1.414 78.5 58 3630
0.000 -1.414 77.0 57 3150
;

%MACRO MOPTW(DATASET=, CENTERX1=,
CENTERX2=, HALF_RANGE=, INCREMENT=,
W1=, W2=, W3=) ;

* STEP 1 ;
DATA GRID_IN_DESIGN_SPACE ;
      DO X1=&CENTERX1-&HALF_RANGE TO
&CENTERX1+ &HALF_RANGE BY
&INCREMENT;
      DO X2=&CENTERX2-&HALF_RANGE TO
&CENTERX2+ &HALF_RANGE BY
&INCREMENT ;
      Y1=. ; Y2=. ; Y3=. ;
      IF X1*X1 + X2*X2 <= 2 THEN OUTPUT;
      END ; END;

DATA GRID_IN_DESIGN_SPACE ;
      SET &DATASET GRID_IN_DESIGN_SPACE ;
    
```

```

* STEP 2 ;
TITLE 'Fitting a Second-Order Polynomial Model
to Data on Each Response' ;
PROC GLM DATA=GRID_IN_DESIGN_SPACE ;
  MODEL Y1-Y3=X1 X2 X1*X1 X2*X2 X1*X2 ;
  OUTPUT OUT=GRID_IN_DESIGN_SPACE
         P=FIT1-FIT3
         STDP=SE_FIT1-SE_FIT3;
RUN ;

* STEP 3 ;
DATA SEARCH_SPACE ;
  SET GRID_IN_DESIGN_SPACE ;
  L1=70 ; IF L1 <= FIT1 ;
  L2=62 ; U2=68 ; IF L2 <= FIT2 <= U2 ;
  L3=3200 ; U3=3400 ; IF L3 <= FIT3 <= U3 ;
  T1=80 ; T2=65 ; T3=3300 ;
  W1=&W1 ; W2=&W2 ; W3=&W3 ;
  IF FIT1 < T1 THEN BIAS1=FIT1-T1 ;
  ELSE BIAS1=0 ;
  BIAS2=FIT2-T2 ;
  BIAS3=0 ;
  ESRE1=(BIAS1*BIAS1+ SE_FIT1*SE_FIT1)
        /(T1*T1) ;
  ESRE2=(BIAS2*BIAS2+ SE_FIT2*SE_FIT2)
        /(T2*T2) ;
  ESRE3=(BIAS3*BIAS3+ SE_FIT3*SE_FIT3)
        /(T3*T3) ;
  W=W1*ESRE1 + W2*ESRE2 + W3*ESRE3 ;
  KEEP X1 X2 FIT1-FIT3
        SE_FIT1-SE_FIT3 W ;

* STEP 4 ;
TITLE1 'Multiresponse Optimization by
Minimization of Weighted Sum' ;
TITLE2 'of Estimated ESRE(Expected Squared
Relative Error)s' ;
TITLE4 "Weight for Y1 = &W1 ; Weight for Y2 =
&W2 ; Weight for Y3 = &W3" ;
TITLE6 'Best 25 (X1, X2) Points in the Search
Space' ;

PROC SORT DATA = SEARCH_SPACE
  OUT = SORTED ;
  BY W ; RUN ;

DATA BEST25 ; SET SORTED ; RANKING=_N_ ;
  IF RANKING <= 25 ;
  DISTANCE=SQRT(X1*X1 + X2*X2) ;
  TIME=85+5*X1 ; TEMPERATURE=175+5*X2 ;

```

```

LABEL
  DISTANCE='DISTANCE FROM THE ORIGIN'
  SE_FIT1='STANDARD ERROR OF FIT1'
  SE_FIT2='STANDARD ERROR OF FIT2'
  SE_FIT3='STANDARD ERROR OF FIT3' ;

PROC PRINT DATA=BEST25 LABEL ;
  ID RANKING ;
  VAR X1 X2 DISTANCE TIME TEMPERATURE
      FIT1-FIT3 SE_FIT1-SE_FIT3 W ;
RUN ;

%MEND;

```

각 반응의 가중치를 동일하게 $w_1 = w_2 = w_3 = 1$ 로 하여 다반응 최적화를 실시하려면, <프로그램 1-1>을 실행시키면 된다.

<프로그램 1-1> 각 반응의 가중치를 $w_1 = w_2 = w_3 = 1$ 로 하여 기대 상대오차 제곱에 의한 다반응 최적화 결과를 얻기 위한 SAS 명령문

```

%MOPTW(DATASET=A,CENTERX1=0,CENTERX2=0,
HALF_RANGE=1.41,INCREMENT=0.01,W1=1,W2=1,
W3=1);

```

<프로그램 1>은 처음 단계에서 격자점들을 생성하는데, <프로그램 1-1>의 실행에 의해서 생성된 격자점들은 격자의 중심점이 (0, 0), 각 요인수준의 범위가 [-1.41, 1.41], 각 요인수준의 증분이 0.01인 격자 내의 점들로 다음의 집합에 속해 있다 :

$$\{(x_1, x_2) : -1.41 \leq x_1, x_2 \leq 1.41 ; x_1^2 + x_2^2 \leq 2\}$$

<프로그램 1>은 격자의 생성에도 융통성을 부여하여 격자의 중심점과 각 요인수준의 범위 및 증분을 변경할 수 있도록 하였다. 이 프로그램을 참고로 하여 요인 수가 3 이상인 경우에 격자 상 탐색으로 다반응 최적화를 구현하기 위한 SAS macro 프로그램을 작성해서 실행할 때에는, 격자점 간 간격이 작고 요인의 수가 클 경우에 격자점들의 수가 대단히 크게(수백만 또는 수천만까지) 될 수 있으므로, 처음에는 격자점간 간격을 결정하는 증분을 너무 작지 않게(예를 들면, 요인 수의 제곱근을 반경으로 하는 구형(spherical) 중심합성설계를 사용할 경우, 요인 수가 3일 때는 각

<표 4> 기대 상대오차제공 방법에 의한 다반응 최적화 결과

각 반응의 가중치	x_1	x_2	최적점과 원점 간의 거리	시간	온도	\hat{y}_1	\hat{y}_2	\hat{y}_3	$\widehat{SE}(\hat{y}_1)$	$\widehat{SE}(\hat{y}_2)$	$\widehat{SE}(\hat{y}_3)$
$w_1 = 1,$ $w_2 = 1,$ $w_3 = 1$	0.06	-0.91	0.91198	85.30	170.45	78.6830	65.3804	3279.36	0.12966	1.10763	83.9082
$w_1 = 100,$ $w_2 = 10,$ $w_3 = 1$	0.23	-0.80	0.83241	86.15	171.00	78.9970	66.6358	3331.08	0.12407	1.05982	80.2863
$w_1 = 10,$ $w_2 = 100,$ $w_3 = 1$	-0.01	-0.93	0.93005	84.95	170.35	78.5870	65.0866	3258.64	0.13119	1.12070	84.8982

요인수준의 범위를 [-1.7, 1.7], 증분을 0.05로 하고 ; 요인 수가 4일 때는 각 요인수준의 범위를 [-2, 2], 증분을 0.1로 하고 ; 요인 수가 5일 때는 각 요인수준의 범위를 [-2.2, 2.2], 증분을 0.2로 하는 식으로)하여 macro 프로그램을 실행하고, 프로그램의 두 번째 실행에서는, 첫 번째 실행에서 발견된 최적점을 격자의 중심점으로 놓고 각 요인수준의 범위는 적절히 좁고 증분은 적절히 작도록(예를 들어, 0.01)하여, 더 좁은 공간 내에서 더 조밀한 간격의 격자점들을 탐색하는 것을 권한다.

최적화의 우선 순위를 y_1, y_2, y_3 로 하며 y_1 을 매우 중점적으로 최적화하기 위하여 가중치들을 $w_1 = 100, w_2 = 10, w_3 = 1$ 로 하여 다반응 최적화를 실시하려면, <프로그램 1-2>를 실행시키면 된다.

<프로그램 1-2> 각 반응의 가중치를 $w_1=100, w_2=10, w_3=1$ 로 하여 기대 상대오차 제공에 의한 다반응 최적화 결과를 얻기 위한 SAS 명령문

```
%MOPTW(DATASET=A,CENTERX1=0,CENTERX2=0,
HALF_RANGE=1.41,INCREMENT=0.01,W1=100,
W2=10,W3=1);
```

최적화의 우선 순위를 y_2, y_1, y_3 로 하며 y_2 를 매우 중점적으로 최적화하기 위하여 가중치들을 $w_1 = 10, w_2 = 100, w_3 = 1$ 로 하여 다반응 최적화를 실시하려면, <프로그램 1-3>을 실행시키면 된다.

<프로그램 1-3> 각 반응의 가중치를 $w_1 = 10, w_2 = 100, w_3 = 1$ 로 하여 기대 상대오차 제공에 의한 다반응 최적화 결과를 얻기 위한 SAS 명령문

```
%MOPTW(DATASET=A,CENTERX1=0,CENTERX2=0,
HALF_RANGE=1.41,INCREMENT=0.01,W1=10,
W2=100,W3=1);
```

<프로그램 1-1>, <프로그램 1-2>, <프로그램 1-3>의 실행으로부터 얻어진 각 최적화 결과가 <표 4>에 주어져 있다. <표 4>에서 $\widehat{SE}(\hat{y}_i)$ 는 적합치 \hat{y}_i 의 표준오차(standard error)의 추정치로 $\widehat{SE}(\hat{y}_i) = \sqrt{\widehat{Var}(\hat{y}_i)}$ 이다.

<표 4>에서 y_1 의 가중치 w_1 이 가장 클 때 \hat{y}_1 이 가장 크고, y_2 의 가중치 w_2 가 가장 클 때 \hat{y}_2 가 목표치 65에 가장 가까움을 볼 수 있다.

5. 결론 및 향후 연구 과제

본 논문은 실용적인 관점에서 기존의 다반응 최적화 방법론들에 대하여 기본 아이디어 설명, 비교, 문제점 지적을 포함하는 검토를 수행하였고, 실무자가 그 개념을 손쉽게 이해할 수 있고 예측의 질과 연구자의 주관이 고려될 수 있는 방법인 기대 상대오차제공 방법에 의한 다반응 최적화 절차를 제안하였으며, 사례연구를 통하여 기대 상대오차제공 방법

에 의한 다반응 최적화를 예시하였다. 또한, 적절한 통계적 방법의 유효성을 인정하는 경우에도 그 통계적 방법을 실행하기 위한 프로그래밍 방법을 모를 때에는 사실상 그러한 통계적 방법의 실행이 불가능하다는 사실을 감안하여, 사례연구에서 분석에 사용된 SAS macro 프로그램을 제공하였다. 이 프로그램은 계산시간이 최소화되어 프로그램의 효율성이 높아지도록 작성되었다. 이 프로그램을 살펴보면, 본고에서 제안하는 절차를 더욱 확실하게 이해할 수 있을 것이다.

본 논문에서 제안하는 기대 상대오차제곱 방법과 기존의 바람직성 함수 방법을, 두 방법을 비교하는 관점에서, 고려하여 보면, 최적점을 추정하는 데 있어 바람직성 함수 방법은 예측 분산은 고려하지 않고 예측치만 사용하는 것이 비해, 기대 상대오차제곱 방법은 예측치와 예측 분산을 함께 고려하기 때문에, 기대 상대오차제곱 방법에 의하여 추정된 최적점에서 예측치의 변동이 더 작을 것으로 생각된다. 그리고, 코드화된 수준들로 표기된 요인수준 조합의 좌표가 원점에 가까울수록 그 요인수준 조합에서의 예측 분산이 작아지기 때문에, 기대 상대오차제곱 방법에 의하여 추정된 최적점은 바람직성 함수 방법에 의하여 추정된 최적점보다 원점에 더 가까운 경향이 있을 것으로 보인다. 기존 생산조건을 보통 코드화된 수준들의 좌표 상에서는 원점에 위치시키기 때문에, 기대 상대오차제곱 방법은 상대적으로 신중하고 보수적인(conservative) 최적화를 산출할 것으로 생각된다.

실무에서는 기대 상대오차제곱 방법에 의하여 추정된 최적점과 바람직성 함수 방법에 의하여 추정된 최적점 각각에서 확인실험을 실시하여 더 좋은 결과를 산출하는 점을 선택하는 것을 권한다. 이 때, 각 점에서 1회씩의 시행을 하는 것보다 다수의 시행을 하여 반응값의 정확도(accuracy, 반응값의 평균이 목표치에 가까운 정도)와 정밀도(precision, 반응값의 표준편차가 작은 정도)를 모두 평가하는 것이 바람직할 것이다. 본 논문에서 제안하는 방법은 반응값과 정확도와 정밀도를 함께 높이고자 하는 방법이다.

향후 연구 과제로는 제어불가능한 잡음적 환경 속에서도 품질특성치가 변동이 작으면서 최적의 값을 가지도록 제어가능한 요인들의 수준값들을 정하고자 하는 로버스트 파라미터 디자인(robust parameter design) 문제에 반응표면적 방법을 사용할 때의 다반응 최적화 절차를 본고에서 제안한 방법론

을 활용하여 구축하는 것을 들 수 있겠다.

참 고 문 헌

- [1] Ames, A. E., Mattucci, D., MacDonald, S., Szongi, G. and Hawkins, D. M.(1997), "Quality Loss Functions for Optimization Across Multiple Response Surfaces", *Journal of Quality Technology*, Vol. 29, pp. 339-346.
- [2] Buck, A. J.(1999), *Econometrics Lecture Notes, Seemingly Unrelated Regression*, <http://oll.temple.edu/economics/notes/seeminly/seeminly.HTM>.
- [3] Derringer, D. and Suich, R.(1980), "Simultaneous Optimization of Several Response Variables", *Journal of Quality Technology*, Vol. 12, pp. 214-219.
- [4] Khuri, A. I. and Conlon, M.(1981), "Simultaneous Optimization of Multiple Response Represented by Polynomial Regression Functions", *Technometrics*, Vol. 23, pp. 363-375.
- [5] Khuri, A. I. and Cornell, J. A.(1996), *Response Surfaces: Designs and Analyses*, Dekker, New York.
- [6] Montgomery, D. C.(2000), *Design and Analysis of Experiments*, 5th Edition, John Wiley & Sons, New York.
- [7] Myers, R. H. and Montgomery, D. C.(2002). *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, 2nd Edition. John Wiley & Sons, New York.
- [8] SAS Institute(1999), *SAS Version 8*, SAS Institute, Cary, NC.
- [9] Vining, G. G.(1998), "A Compromise Approach to Multiresponse Optimization", *Journal of Quality Technology*, Vol. 30, pp. 309-313.
- [10] Zellner, A.(1962), "An Efficient Method of Estimating Seemingly Unrelated Regressions and Tests for Aggregation Bias", *Journal of the American Statistical Association*, Vol. 57, pp. 348-368.