

제2종의 중심합성계획의 통계적 성질*

김혁주¹⁾ 박성현²⁾

요약

Kim(2002)은 축점의 위치가 두 개의 수에 의하여 정해지는 제2종의 중심합성계획을 제시하고 이를 CCD2라 불렀다. 본 논문에서는 CCD2를 더욱 연구하여 몇 가지의 새로운 사실을 밝혔다. 직교성과 회전성, 직교성과 기울기회전성, 회전성과 균등정밀성을 동시에 갖는 CCD2들을 구하였으며, Park과 Kim(1992)이 제시한 기울기회전성의 측도를 이러한 CCD2들에 적용하여 그 결과를 관찰하였다.

주요용어: 제2종의 중심합성계획, 직교성, 회전성, 기울기회전성, 균등정밀성

1. 서론

Box와 Wilson(1951)에 의하여 소개된 중심합성계획(central composite design)은 반응표면방법론(response surface methodology)에서 널리 쓰이는 실험계획이다. 이 계획은 2차 다항회귀모형

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j}^k \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon \quad (1.1)$$

의 경우에 특히 많이 사용되는데, $k = 2$ (즉 설명변수가 두 개)인 경우를 예로 들면 4개의 요인실험점 $(1, 1)$, $(1, -1)$, $(-1, 1)$, $(-1, -1)$ 과 4개의 축점 $(\alpha, 0)$, $(-\alpha, 0)$, $(0, \alpha)$, $(0, -\alpha)$, 그리고 1개 이상의 중심점 $(0, 0)$ 으로 이루어진다.

중심합성계획에서는 α 의 값에 의해 축점의 위치가 결정되고 α 의 값을 적절히 정함으로써 좋은 성질을 갖는 중심합성계획을 만들 수 있기 때문에 α 의 중요성이 크다. 이러한 의미에서 Kim(2002)은 축점에 관한 내용을 좀 더 다양화하여, 축점의 위치가 한 개가 아니라 두 개의 수에 의해 지정되는 새로운 형태의 중심합성계획을 제시하였으며, 기존의 중심합성계획을 CCD1, 새로운 중심합성계획을 CCD2라 불렀다.

본 논문에서는 CCD2의 몇 가지 성질에 관하여 논의하고자 한다. 제2절에서는 CCD2의 직교성과 회전성 및 기울기회전성에 관한 기존의 결과들을 살펴보고 제3절부터는 CCD2에 관하여 새롭게 연구된 내용을 논의하겠다.

* 본 연구는 한국과학재단 목적기초연구(R01-2003-000-10220-0) 지원으로 수행되었음.

1) (570-749) 전북 익산시 신용동 344-2, 원광대학교 수학·정보통계학부 및 기초자연과학연구소, 교수

E-mail: hjkim@wonkwang.ac.kr

2) (151-747) 서울시 관악구 신림동 산 56-1, 서울대학교 통계학과, 교수

E-mail: parksh@plaza.snu.ac.kr

2. CCD2의 직교성과 회전성 및 기울기회전성

CCD2는 다음과 같은 계획행렬(design matrix)을 갖는 실험계획이다($k = 2$ 인 경우).

$$D = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ -1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \\ -\alpha_1 & 0 \\ \alpha_1 & 0 \\ 0 & -\alpha_1 \\ 0 & \alpha_1 \\ -\alpha_2 & 0 \\ \alpha_2 & 0 \\ 0 & -\alpha_2 \\ 0 & \alpha_2 \end{pmatrix}$$

여기서 중심점의 수 n_0 는 1 이상의 정수이며, 축점의 위치를 지정하는 α_1 과 α_2 는 $\alpha_2 \geq \alpha_1 > 0$ 인 수이다. k 가 3 이상인 경우에도 $k = 2$ 인 경우를 확장하여 생각하면 계획행렬을 쉽게 알 수 있다. CCD2의 실험점의 총수를 N 이라 하면 $N = F + 4k + n_0$ 가 된다. 단, 여기서 F 는 요인실험점의 수로 $F = 2^k$ (일부실시법을 쓰는 경우에는 2^{k-p} ; p 는 적절한 양의 정수)이다.

반응표면 실험계획이 가질 수 있는 바람직한 성질 중 직교성(orthogonality), 회전성(rotatability), 기울기회전성(slope rotatability)이 있다. 이 성질들에 관하여 간략히 설명한다.

먼저 직교성에 관하여 설명하기 위해서 식 (1.1)에서 각 설명변수의 제곱항이 평균에 대하여 수정된 모형인

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

를 생각하자. 여기서 x_{iu} 는 u 번째 실험점에서 설명변수 x_i 의 값이고 $\bar{x}_i^2 = \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 / N$ 이며, $\beta_0' = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} \bar{x}_i^2$ 이다. $\beta_0', \beta_i, \beta_{ii}, \beta_{ij}$ 의 최소제곱추정량을 각각 $b_0', b_i, b_{ii}, b_{ij}$ 라 하자. CCD2에서는 b_{ii} 와 b_{jj} 사이의 공분산 $Cov(b_{ii}, b_{jj})$ 를 제외한 모든 공분산이 0이 된다. 그런데 $(X'X)^{-1}$ 행렬이 대각선행렬이 되면 $Cov(b_{ii}, b_{jj})$ 도 0이 된다. 이러한 성질을 직교성이라고 부른다. 여기서 X 행렬의 구체적인 내용은

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{k1} & x_{11}^2 - \overline{x_1^2} & \cdots & x_{k1}^2 - \overline{x_k^2} & x_{11}x_{21} & \cdots & x_{k-1,1}x_{k1} \\ 1 & x_{12} & \cdots & x_{k2} & x_{12}^2 - \overline{x_1^2} & \cdots & x_{k2}^2 - \overline{x_k^2} & x_{12}x_{22} & \cdots & x_{k-1,2}x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & \cdots & x_{kN} & x_{1N}^2 - \overline{x_1^2} & \cdots & x_{kN}^2 - \overline{x_k^2} & x_{1N}x_{2N} & \cdots & x_{k-1,N}x_{kN} \end{pmatrix}$$

이다. 반응표면 실험계획이 직교성을 가지면 모형의 회귀계수들의 추정값들이 상관관계를 갖지 않게 되고 계산이 간편해진다는 장점이 있다. Kim(2002)은 CCD2가 직교성을 가질 조건이

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = \frac{\sqrt{F(F+4k+n_0)} - F}{2} \quad (2.1)$$

임을 보였다.

일반 선형회귀모형에서 반응변수의 기대값 $E(y)$ 의 추정량인 \hat{y} 의 분산은

$$\text{Var}(\hat{y}) = \underline{x}'_f (X'X)^{-1} \underline{x}_f \sigma^2$$

이고, 이것은 $\underline{x}'_f = (1, x_1, \cdots, x_k, x_1^2, \cdots, x_k^2, x_1x_2, \cdots, x_{k-1}x_k)$ 의 함수이므로 좌표 $\underline{x}' = (x_1, x_2, \cdots, x_k)$ 에 따라 \hat{y} 의 분산은 달라진다. 여기서 X 행렬은

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{k1} & x_{11}^2 & \cdots & x_{k1}^2 & x_{11}x_{21} & \cdots & x_{k-1,1}x_{k1} \\ 1 & x_{12} & \cdots & x_{k2} & x_{12}^2 & \cdots & x_{k2}^2 & x_{12}x_{22} & \cdots & x_{k-1,2}x_{k2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & \cdots & x_{kN} & x_{1N}^2 & \cdots & x_{kN}^2 & x_{1N}x_{2N} & \cdots & x_{k-1,N}x_{kN} \end{pmatrix}$$

이며 σ^2 은 식 (1.1)의 오차항 ϵ 의 분산이다. 그런데 만일 $\text{Var}(\hat{y})$ 이 중심점 $(0, 0, \cdots, 0)$ 으로부터의 거리

$$\rho = (x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_k^2)^{1/2}$$

만의 함수라면, 우리는 이러한 실험계획을 회전계획이라고 한다. 회전성을 갖는 실험계획은, 실험의 중심점으로부터 같은 거리만큼 떨어진 모든 점에서 \hat{y} 의 신뢰도가 동일하다는 장점을 갖는다. Kim(2002)은 CCD2가 회전성을 가질 조건이

$$\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = F \quad (2.2)$$

임을 보였다.

반응표면의 기울기를 추정하는 데에 관심이 있는 경우에는 기울기회전성이 바람직한 성질이다. 기울기회전성에는 Hader와 Park(1978)의 축방향 기울기회전성(slope rotatability over axial directions)과 Park(1987)의 전방향 기울기회전성(slope rotatability over all directions)이 있다.

최소제곱법에 의하여 적합된 회귀식은

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

로 나타낼 수 있는데, 여기서 x_i 에 대한 $\hat{y}(\underline{x})$ 의 1차도함수는

$$\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_i} = b_i + 2b_{ii}x_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^k b_{ij}x_j$$

이며, 이 도함수의 분산은 도함수가 추정되는 점 $\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_k)'$ 와 주어진 실험계획의 함수이다. 그런데 만일 다음과 같은 두 조건이 만족되면, 주어진 실험계획을 축방향 기울기회전계획이라 부른다.

- [1] 각각의 $i(i = 1, 2, \dots, k)$ 에 대하여 $Var(\partial \hat{y}(\underline{x})/\partial x_i)$ 는 원점에서 점 \underline{x} 까지의 거리 $\rho = (x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_k^2)^{1/2}$ 만의 함수.
 [2] 인자공간 안의 임의의 점 \underline{x} 에 대하여

$$Var\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_1}\right) = Var\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_2}\right) = \dots = Var\left(\frac{\partial \hat{y}(\underline{x})}{\partial x_k}\right).$$

어떤 실험계획이 축방향 기울기회전계획이라면 축 방향으로의 기울기의 추정은 계획의 원점으로부터 같은 거리에 있는 모든 점들에 대하여 동일한 신뢰도를 가질 것이다. Kim과 Ko(2004)는 CCD2가 축방향 기울기회전성을 갖기 위한 조건이 아래와 같음을 밝혔다.

$$\begin{aligned} & 2(F + 2k + n_0)(\alpha_1^8 + \alpha_2^8) - 8k(\alpha_1^6\alpha_2^2 + \alpha_1^2\alpha_2^6) \\ & + 4(F + 2k + n_0)\alpha_1^4\alpha_2^4 - 4kF(\alpha_1^6 + \alpha_1^4\alpha_2^2 + \alpha_1^2\alpha_2^4 + \alpha_2^6) \\ & - F\{4(F + 4k + n_0) - k(4k + n_0) - 8k + 8\}(\alpha_1^4 + \alpha_2^4) + 16(k - 1)F\alpha_1^2\alpha_2^2 \\ & + 8(k - 1)F^2(\alpha_1^2 + \alpha_2^2) - 2(k - 1)F^2(4k + n_0) = 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

기울기를 추정하는 문제에서, 반응표면의 한 점 \underline{x} 에서 축 방향으로 그은 접선의 기울기 뿐 아니라 임의의 방향으로 그은 접선의 기울기를 추정하는 데에 관심이 있는 경우도 많을 것이다. 이 기울기의 분산은 점 \underline{x} 의 좌표와 접선의 방향 및 실험계획의 함수이다. 만일 모든 가능한 방향에 걸쳐 기울기의 분산을 평균한 값을 생각한다면 이 평균분산은 점 \underline{x} 의 좌표와 실험계획만의 함수가 된다. 그런데 실험계획을 선택함으로써 계획의 원점으로부터 같은 거리에 있는 모든 점들에 대하여 이 평균분산을 일정하게 할 수 있다. 이러한 성질을 전방향 기울기회전성이라 부른다. CCD2는 α_1 과 α_2 의 값, 그리고 중심점의 수 n_0 와 관계없이 항상 전방향 기울기회전성을 갖는다는 것이 역시 Kim과 Ko(2004)에 의해 밝혀졌다.

3. 직교성과 회전성을 동시에 갖는 CCD2

주어진 k , F , n_0 의 값에 대하여 식 (2.1)과 식 (2.2)를 동시에 생각하면 이것은 연립방정식이 된다. 이 연립방정식의 해는 직교성과 회전성을 동시에 갖는 CCD2(이하 ‘직교-회전 CCD2’라 부름)를 지정해 준다. 표 3.1은 k , F , n_0 의 여러 값에 대하여 직교-회전 CCD2의 α_1 과 α_2 의 값을 구한 것이다. 또한 시각적인 이해를 돕기 위하여 표 3.1의 내용을 그림 3.1에 나타냈다.

표 3.1: 직교-회전 CCD2

(a) $k = 2, F = 4$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	없음	없음	없음	없음	0.3566	0.5095	0.6318	0.7409	0.8453	0.9533
α_2	없음	없음	없음	없음	1.4128	1.4082	1.3999	1.3868	1.3667	1.3348

(b) $k = 3, F = 8$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	없음	없음	없음	0.3188	0.5041	0.6426	0.7617	0.8709	0.9760	1.0824
α_2	없음	없음	없음	1.6813	1.6784	1.6728	1.6638	1.6507	1.6319	1.6045

(c) $k = 4, F = 16$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	없음	없음	없음	없음	0.4112	0.5862	0.7243	0.8445	0.9547	1.0593
α_2	없음	없음	없음	없음	1.9991	1.9963	1.9914	1.9839	1.9735	1.9594

(d) $k = 5, F = 32$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	없음	없음	없음	없음	없음	없음	0.2629	0.5079	0.6723	0.8074
α_2	없음	없음	없음	없음	없음	없음	2.3783	2.3772	2.3746	2.3705

(e) $k = 5, F = 16$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	0.4112	0.5862	0.7243	0.8445	0.9547	1.0593	1.1616	1.2652	1.3756	1.5079
α_2	1.9991	1.9963	1.9914	1.9839	1.9735	1.9594	1.9405	1.9146	1.8773	1.8141

표 3.1은 다음 사실들을 말해 준다. 먼저 $(k, F) = (2, 4)$ 인 경우를 보자. 중심점이 4개 이하이면 직교-회전 CCD2가 존재하지 않으나, 중심점이 5개일 때부터 10개일 때까지는 존재하며 중심점의 수가 증가함에 따라 α_1 의 값은 커지고 α_2 의 값은 조금씩 작아진다. $(k, F) = (3, 8), (4, 16), (5, 32)$ 의 경우에도 직교-회전 CCD2가 존재하는 n_0 의 범위만 약간

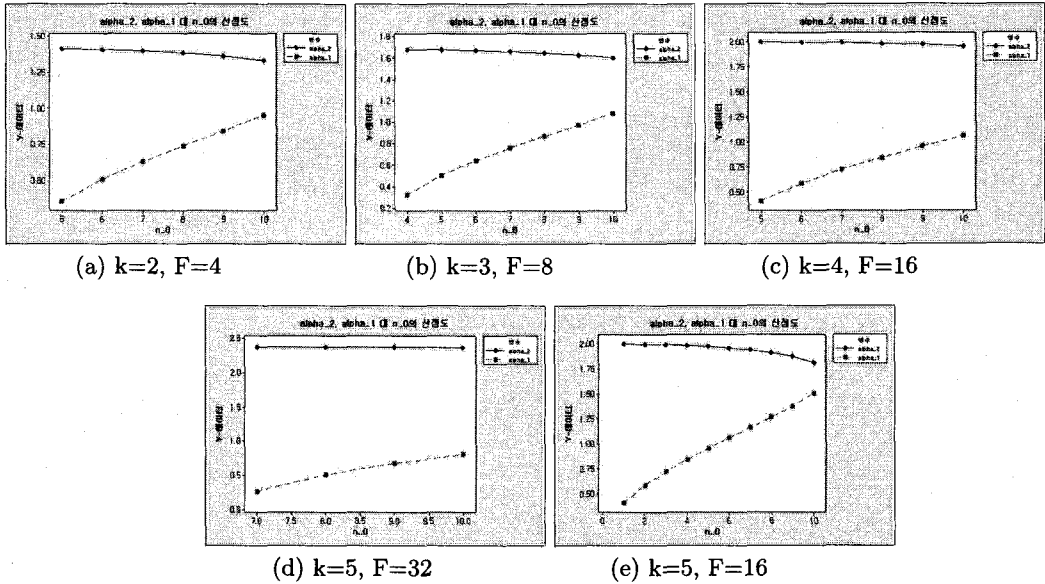


그림 3.1: 직교-회전 CCD2의 α_1 과 α_2

달라질 뿐 유사한 내용이 성립한다. 요인실험점들의 1/2만 사용하는 $(k, F) = (5, 16)$ 인 경우에는 직교-회전 CCD2가 $n_0 = 1$ 일 때부터 존재한다. 표로 나타내지는 않았지만 $k = 6, 7, 8$ 인 경우에도 유사한 현상이 관찰되었다. 즉 요인실험점들을 다 사용할 때보다 1/2만 사용할 때, 그리고 1/2만 사용할 때보다 1/4만 사용할 때 직교-회전 CCD2가 존재하기 위한 중심점의 최소 개수가 더 적었다.

참고로 직교성과 회전성을 동시에 갖는 CCD1(이하 ‘직교-회전 CCD1’이라 부름)에 관하여 생각해 보자. CCD1이 직교성을 갖기 위한 조건은 $\alpha = \{[\sqrt{F(F + 2k + n_0)} - F]/2\}^{1/2}$ 이고 회전성을 갖기 위한 조건은 $\alpha = F^{1/4}$ 임이 알려져 있다. 이 두 식을 연립으로 풀면 $n_0 = 4(1 + \sqrt{F}) - 2k$ 가 된다. 그런데 n_0 는 중심점의 수이므로 위의 식에 따라 계산된 n_0 의 값이 정수가 아니면 직교-회전 CCD1이 존재하지 않는 것이다. 표 3.2를 보면 $(k, F) = (3, 8), (5, 32), (6, 32), (7, 128), (8, 128)$ 의 경우 이 n_0 의 값이 정수가 아니므로 직교-회전 CCD1이 존재하지 않음을 알 수 있다.

이처럼 직교-회전 CCD1이 존재하지 않는 (k, F) 의 값에 대해서도 CCD2의 경우에는 중심점을 일정 개수 이상 사용하면 직교-회전 CCD2가 존재한다. 이것은 CCD2의 융통성과 활용성을 말해 주는 것으로서, CCD2의 큰 의미가 여기에 있다고 하겠다.

그러면 주어진 (k, F) 의 값에 대하여, 표 3.1에 나와 있는 직교-회전 CCD2들 중 어느 것을 선택하는 것이 좋을까? 이것은 중심점의 수 n_0 를 얼마로 할 것인가를 결정하는 문제가 된다. 여기서는 기울기회전성을 기준으로 하여 생각해 보겠다. 제2절에서 언급한 바와 같이 CCD2는 모두 전방향 기울기회전성을 갖는다는 것이 밝혀졌으므로 앞으로 기울기회전성은 축방향 기울기회전성을 의미하는 것으로 한다. 직교-회전 CCD2들 중 기울기회전계

표 3.2: 직교-회전 CCD1

(k, F)	(2,4)	(3,8)	(4,16)	(5,32)	(5,16)	(6,64)
n_0	8	9.3137	12	16.6274	10	24
존재 여부	○	×	○	×	○	○
α	1.4142		2		2	2.8284
(k, F)	(6,32)	(7,128)	(7,64)	(8,256)	(8,128)	(8,64)
n_0	14.6274	32.2548	22	52	33.2548	20
존재 여부	×	×	○	○	×	○
α			2.8284	4		2.8284

획에 가까운 것은 무엇인가를 생각해 보자.

Kim과 Ko(2004)는 CCD2의 기울기회전성의 측도를 아래의 식으로 유도하였다.

$$Q_k(D) = \left(\frac{F + 2\alpha_1^2 + 2\alpha_2^2}{N} \right)^4 \left(4e - \frac{1}{F} \right)^2 \quad (3.1)$$

단, 여기서

$$e = \frac{A_1}{B}$$

$$A_1 = (k-1)F(4k+n_0) - 4(k-1)(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)(F + \alpha_1^2 + \alpha_2^2) + 2N(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)$$

$$B = 2(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)\{kF(4k+n_0) - 4k(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)(F + \alpha_1^2 + \alpha_2^2) + 2N(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)\}$$

이다. 이 측도는 Park과 Kim(1992)이 제안한 기울기회전성의 측도를 CCD2에 적용한 것이다. 실험계획 D 가 기울기회전계획이면 $Q_k(D) = 0$ 이고 D 가 기울기회전계획으로부터 멀수록 $Q_k(D)$ 의 값은 크다.

직교-회전 CCD2의 경우 식 (2.1)과 식 (2.2)가 성립하므로 이를 식 (3.1)에 대입하여 식을 정리하면 $\{(F + 2\alpha_1^2 + 2\alpha_2^2)/N\}^4 = (\sqrt{FN}/N)^4$, $A_1 = 2FN$, $B = 4F^2N$, $e = 1/2F$ 가 되어 측도는 다음과 같이 된다.

$$Q_k(D) = \frac{1}{N^2} \quad (3.2)$$

이 값은 0이 아니므로 직교-회전 CCD2는 정확한 기울기회전성을 가질 수 없다는 것을 알 수 있다. 그러나 중심점의 수가 많아지면 N 이 커지므로 $Q_k(D)$ 의 값이 0에 가까워져서 D 는 기울기회전계획에 가까워진다. 따라서 이론적으로는 직교-회전 CCD2를 기울기회전계획에 가깝게 하려면 중심점의 수를 가능한 한 많게 해야 하나, 중심점의 수가 너무 많은 실험계획은 현실성이 없으므로, 실무에서 사용되는 범위를 고려하여 중심점의 수 n_0 를 5~6 정도로 하면 무난할 것으로 생각된다($k=5$, $F=32$ 인 경우는 $n_0=7\sim 8$ 정도). 실제로 중심점의 수가 이보다 많아지면 n_0 의 증가에 따른 $Q_k(D)$ 값의 변화가 아주 작다.

4. 직교성과 기울기회전성을 동시에 갖는 CCD2

계산상의 편의를 도모하고 모형 회귀계수들의 상관관계 없는 추정값들을 얻고자 하는 동시에 반응표면의 기울기 추정에도 관심이 있는 경우에는 직교성과 기울기회전성을 동시에 갖는 실험계획이 필요할 것이다.

주어진 k, F, n_0 의 값에 대하여 식 (2.1)과 식 (2.3)을 연립방정식으로 풀면 직교성과 기울기회전성을 동시에 갖는 CCD2(이하 ‘직교-기울기회전 CCD2’라 부름)를 얻을 수 있다. 그 결과가 표 4.1에 나와 있으며, 이 표의 내용을 그림 4.1에 나타냈다. CCD1을 포함한 기존의 반응표면 실험계획 중에는 직교성과 기울기회전성을 동시에 갖는 계획이 현재까지 발견되지 않았다. 비록 중심점이 10개 이상 필요하기는 하지만 CCD2에서는 이 성질들을 동시에 갖는 계획들을 얼마든지 만들어낼 수 있다는 데에 큰 의미가 있다.

한편 식 (2.1)과 식 (2.3)을 연립으로 푸는 과정에서 재미있는 현상이 발견되었다. 이 두 식을 연립으로 푸는 것은 식 (2.1)과 식

$$\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = 2F \tag{4.1}$$

을 연립으로 푸는 것과 동일하다는 것이 수리적으로 밝혀졌다. 식 (2.3)의 복잡성과 식 (4.1)의 단순성을 대조해 보면 기울기회전성을 직교성과 결합하여 생각하는 것이 수학적으로 큰 의미를 갖는다는 것을 알 수 있다.

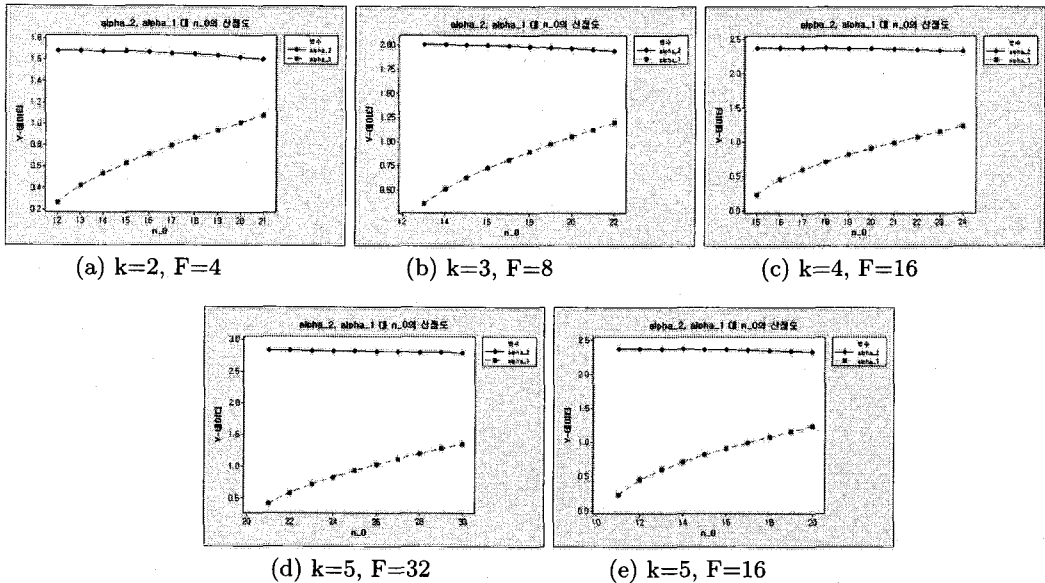


그림 4.1: 직교-기울기회전 CCD2의 α_1 과 α_2

한편 회전성과 기울기회전성을 동시에 갖는 CCD2의 존재 여부에 관해서도 조사하였으나, $(k, F)=(2, 4), (3, 8), (4, 16), (5, 32), (5, 16), (6, 64), (6, 32), (7, 128), (7, 64), (8, 256), (8,$

표 4.1: 직교-기울기회전 CCD2

(a) $k = 2, F = 4$

n_0	1~11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
α_1	없음	0.2673	0.4209	0.5338	0.6289	0.7137	0.7919	0.8661	0.9379	1.0089	1.0812
α_2	없음	1.6815	1.6801	1.6775	1.6735	1.6680	1.6607	1.6514	1.6396	1.6245	1.6049

(b) $k = 3, F = 8$

n_0	1~12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
α_1	없음	0.3550	0.5043	0.6206	0.7205	0.8103	0.8935	0.9721	1.0478	1.1218	1.1955
α_2	없음	1.9995	1.9980	1.9954	1.9915	1.9864	1.9798	1.9715	1.9612	1.9486	1.9329

(c) $k = 4, F = 16$

n_0	1~14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
α_1	없음	0.2339	0.4508	0.5952	0.7128	0.8156	0.9088	0.9954	1.0772	1.1556	1.2317
α_2	없음	2.3784	2.3777	2.3761	2.3736	2.3702	2.3656	2.3600	2.3530	2.3446	2.3345

(d) $k = 5, F = 32$

n_0	1~20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
α_1	없음	0.4097	0.5816	0.7150	0.8290	0.9308	1.0242	1.1116	1.1943	1.2736	1.3502
α_2	없음	2.8281	2.8272	2.8255	2.8232	2.8201	2.8162	2.8114	2.8057	2.7989	2.7910

(e) $k = 5, F = 16$

n_0	1~10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
α_1	없음	0.2339	0.4508	0.5952	0.7128	0.8156	0.9088	0.9954	1.0772	1.1556	1.2317
α_2	없음	2.3784	2.3777	2.3761	2.3736	2.3702	2.3656	2.3600	2.3530	2.3446	2.3345

128), (8, 64)의 경우에 대해 $n_0 = 1, 2, \dots, 100$ 의 어느 경우에도 이러한 계획은 존재하지 않았다.

5. 회전성과 균등정밀성을 동시에 갖는 CCD2

회전성을 갖는 반응표면 실험계획 중 선택가능한 것으로 균등정밀성(uniform precision)을 갖는 계획들이 있다. 이 균등정밀성이라는 성질은 계획의 중심점으로부터의 거리 $\rho = \left(\sum_{i=1}^k x_i^2\right)^{1/2}$ 가 1인 곳에서의 $Var(\hat{y})$ 이 계획의 중심점에서의 $Var(\hat{y})$ 과 동일한 값을 갖는 성질이다. 이 성질은 $\rho \leq 1$ 인 영역 안에서 반응의 추정이 균등한 중요성을 가져야 한다는 관념에 바탕을 두고 있다. 따라서 균등정밀성을 갖는 계획은 회전성을 갖는 계획의 장점에서 한발 더 나아간 장점을 갖는 것이다.

2차모형에 쓰이는 회전계획이 균등정밀성을 갖기 위한 조건은 계획의 혼합4차적률(mixed fourth moment)인 $\lambda_4 = N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2 (i \neq j)$ 이 표 5.1에 있는 값을 갖는 것이다. 단, 여기서 λ_4 는 계획들의 1차적률과 순수2차적률이 $N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{iu} = 0, N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = 1 (i = 1, 2, \dots, k)$ 로 스케일링(scaling)되어 있는 상태의 것을 말한다(Myers(1976, p.135), Khuri와 Cornell(1996, p.108) 참조).

표 5.1: 2차모형에 쓰이는 회전계획이 균등정밀성을 갖기 위한 λ_4 의 값

(출처: Box와 Hunter(1957))

k	2	3	4	5	6	7	8	9
λ_4	0.7844	0.8385	0.8704	0.8918	0.9070	0.9184	0.9274	0.9346

CCD2의 경우를 생각하자. 회전성과 균등정밀성을 동시에 갖는 CCD2(이하 ‘회전-균등정밀 CCD2’라 부름)를 구하는 문제는 두 식

$$\alpha_1^4 + \alpha_2^4 = F \tag{5.1}$$

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{F(F + 4k + n_0)}{\lambda_4}} - F \right) \tag{5.2}$$

를 연립방정식으로 푸는 문제가 된다. k, F, n_0 의 여러 값에 대하여 이를 구한 결과를 표 5.2에 정리하였다. 그림 5.1은 표 5.2의 내용을 나타낸 것이다.

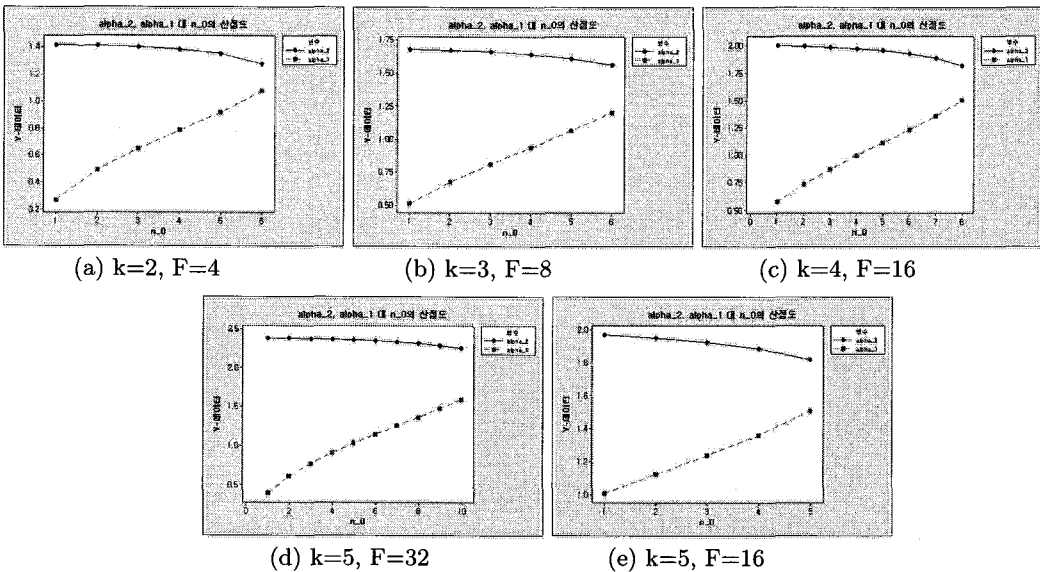


그림 5.1: 회전-균등정밀 CCD2의 α_1 과 α_2

표 5.2를 보면 $(k, F) = (2, 4), (3, 8), (4, 16), (5, 32), (5, 16)$ 의 경우에 대하여 회전-균등정밀 CCD2를 항상 구할 수 있음을 알 수 있다. 기존의 CCD1에서는 회전성을 갖는 것 중 균등정밀성을 정확하게 갖는 것이 존재하지 않아서 근사적으로 갖는 것만 구해 놓은 경우가 많다(Myers(1976, Table 7.8) 참조).

표 5.2: 회전-균등정밀 CCD2

(a) $k = 2, F = 4$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	0.2689	0.4889	0.6457	0.7826	0.9169	1.0789	없음	없음	없음	없음
α_2	1.4138	1.4091	1.3986	1.3798	1.3471	1.2753	없음	없음	없음	없음

(b) $k = 3, F = 8$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	0.5109	0.6722	0.8095	0.9365	1.0623	1.2006	없음	없음	없음	없음
α_2	1.6782	1.6710	1.6588	1.6398	1.6105	1.5600	없음	없음	없음	없음

(c) $k = 4, F = 16$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	0.5730	0.7322	0.8685	0.9929	1.1115	1.2294	1.3534	1.5010	없음	없음
α_2	1.9966	1.9910	1.9820	1.9689	1.9505	1.9244	1.8857	1.8180	없음	없음

(d) $k = 5, F = 32$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	0.3870	0.6036	0.7654	0.9031	1.0271	1.1428	1.2537	1.3625	1.4722	1.5868
α_2	2.3780	2.3759	2.3720	2.3660	2.3575	2.3461	2.3311	2.3116	2.2859	2.2507

(e) $k = 5, F = 16$

n_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_1	1.0064	1.1218	1.2371	1.3586	1.5039	없음	없음	없음	없음	없음
α_2	1.9672	1.9486	1.9224	1.8838	1.8164	없음	없음	없음	없음	없음

참고로, 식 (5.2)에서 $\lambda_4 = 1$ 인 경우 이 식은 식 (2.1)과 동일한 식이 됨을 알 수 있다. 이것은 앞에서 설명한 기준대로 스케일링을 한 상태에서 혼합4차적분 λ_4 의 값이 1인 CCD2는 직교계획이 된다는 사실을 말해 주는 것이다.

회전-균등정밀 CCD2의 기울기회전성에 관하여 생각해 보자. 식 (3.1)로 주어진 측도에 식 (5.1)과 식 (5.2)를 대입하여 계산하면 다음의 결과가 나온다.

$$Q_k(D) = \left(\frac{1}{N}\right)^2 \left\{ \frac{k - \frac{k-2}{\lambda_4}}{(k+2)\lambda_4 - k} \right\}^2 \quad (5.3)$$

따라서 직교-회전 CCD2의 경우와 마찬가지로, 주어진 (k, F) 에 대하여 중심점의 수 n_0 의 값이 클수록 $Q_k(D)$ 의 값은 작아서 회전-균등정밀 CCD2는 기울기회전계획에 가깝게 된다.

이번에는 직교-회전 CCD2와 회전-균등정밀 CCD2의 기울기회전성의 정도를 비교해 보자. 식 (3.2)와 식 (5.3)으로부터, 주어진 (k, F) 에 대하여 중심점의 수가 동일한 직교-회전 CCD2 (D_1)와 회전-균등정밀 CCD2 (D_2)의 기울기회전성의 측도의 비인 $Q_k(D_1)/Q_k(D_2)$ 의 값이 표 5.3과 같이 계산되었다. 우리는 이 표로부터, $2 \leq k \leq 9$ 일 때 중심점의 수가 동일한 경우 직교-회전 CCD2가 회전-균등정밀 CCD2보다 기울기회전계획에 더 가깝다는 것을 알 수 있다.

표 5.3: 직교-회전 CCD2와 회전-균등정밀 CCD2의 기울기회전성의 측도의 비

k	2	3	4	5	6	7	8	9
$\frac{Q_k(D_1)}{Q_k(D_2)}$	0.3235	0.4353	0.5157	0.5769	0.6241	0.6618	0.6931	0.7191

6. 결론

반응표면 실험계획이 가질 수 있는 바람직한 성질로는 몇 가지가 있다. 그 중 직교성, 회전성, 균등정밀성, 기울기회전성은 흔히 요구되는 성질들이다. 그런데 둘 이상의 바람직한 성질을 동시에 갖는 실험계획을 얻을 수 있다면 아주 유용할 것이다. 이러한 의미에서 본 논문에서는 Kim(2002)에 의하여 제시된 제2종의 중심합성계획인 CCD2의 몇 가지의 성질에 관하여 논의하였다. 직교성과 회전성, 직교성과 기울기회전성, 회전성과 균등정밀성을 동시에 갖는 CCD2들을 각각 제3절, 제4절, 제5절에서 구하였으며, 기울기회전성의 측도를 CCD2에 적용하여 몇 가지 사실들을 알아보았다.

표 3.1, 표 4.1, 표 5.2를 관찰하면 공통의 경향이 발견된다. 즉 중심점이 많아질수록 두 성질을 동시에 갖는 CCD2의 α_1 값은 커지고 α_2 값은 조금씩 작아지고 있다. 한편 표 3.1, 표 4.1과 표 5.2가 상반된 현상을 보이는 점도 있다. 직교-회전 CCD2와 직교-기울기회전 CCD2가 존재하지 않는 경우는 중심점이 적은 쪽에서 나타나는 반면(표 3.1의 (e)는 제외되는데, 이때는 요인실험점의 일부분만 사용하므로 $n_0 = 1$ 일 때부터 직교-회전 CCD2가 존재한다), 회전-균등정밀 CCD2가 존재하지 않는 경우는 중심점이 많은 쪽에서 나타나는 것을 볼 수 있다.

CCD1을 비롯한 기존의 반응표면 실험계획에서는 두 가지의 바람직한 성질을 동시에 갖는 계획이 존재하지 않는 경우가 많은데 CCD2에서는 회전성과 기울기회전성을 동시에 고려하는 경우를 제외하고는 이러한 계획들이 얼마든지 존재하므로 CCD2는 상당한 융통성과 실용성을 갖는 실험계획이다.

참고문헌

- 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.
- Hader, R. J. and Park, S. H. (1978). Slope-rotatable central composite designs, *Technometrics*, **20**, 413-417.
- Khuri, A. I. and Cornell, J. A. (1996). *Response Surfaces: Designs and Analyses* (2nd edition), Marcel Dekker, Inc.
- 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 Ko, Y. M. (2004). On slope rotatability of central composite designs of the second type, *The Korean Communications in Statistics*, **11**, 121-137.
- Myers, R. H. (1976). *Response Surface Methodology*, Blacksburg, VA: Author (distributed by Edwards Brothers, Ann Arbor, MI).
- Park, S. H. (1987). A class of multifactor designs for estimating the slope of response surfaces, *Technometrics*, **29**, 449-453.
- Park, S. 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.

[2005년 8월 접수, 2006년 3월 채택]

Statistical Properties of Second Type Central Composite Designs*

Hyuk Joo Kim¹⁾ Sung Hyun Park²⁾

ABSTRACT

Kim(2002) proposed a second type of central composite design in which the positions of the axial points are indicated by two numbers, and called it CCD2. In the present paper, we have studied CCD2 further and obtained several new facts. We have obtained CCD2's that have both orthogonality and rotatability, both orthogonality and slope rotatability, and both rotatability and uniform precision. We also have applied Park and Kim's (1992) measure of slope rotatability to such CCD2's and observed some useful results.

Keywords: Central composite design of the second type, Orthogonality, Rotatability, Slope rotatability, Uniform precision.

* This work was supported by grant No. R01-2003-000-10220-0 from the Basic Research Program of the Korea Science and Engineering Foundation.

1) Professor, Division of Mathematics and Informational Statistics and Institute of Basic Natural Sciences, Wonkwang University, Iksan, Jeonbuk 570-749, Korea.

E-mail : hjkim@wonkwang.ac.kr

2) Professor, Department of Statistics, Seoul National University, Seoul 151-747, Korea.

E-mail : parksh@plaza.snu.ac.kr