산업기술연구(강원대학교 산업기술연구소 논문집), 제31권 A호, 2011.
Journal of Industrial Technology, Kangwon Natl. Univ., Korea, No. 31 A, 2011.

분할법 구조를 갖는 반응표면 실험에서 최대경사법 수행 방법

Carrying Out the Method of Steepest Ascent in a Response Surface Experiment with Split-Plot Structure

이 종 성*
Lee, Jong-Seong

Abstract

In many industrial experiments, some practical constraints often force factors in an experiment to be much harder to change than others. Such an experiment involves randomization restrictions and it can be thought of as split-plot experiment. This paper investigates the path of steepest ascent/descent within a split-plot structure. A method is proposed for calculating the coordinates along the path.

키워드 : *반응표면분석, 분할실험법, 라그랑주 승수*
Keywords : *Response Surface Methodology, Split-Plot Design, Lagrange Multiplier*

1. 서론

신제품이나 신기술 개발, 공업화를 위한 각종 표준의 작성 및 제품 특성 검토, 공정 및 품질의 개선 등을 위한 연구에서 행하게 되는 소위 공장실험의 목적은 반응치를 최적화 할 수 있는 주요 설계인자의 수준을 찾아내는 것이다. 이와 같은 분야의 실험 계획 및 분석 방법을 반응표면분석법이라고 하는데, 대부분의 반응표면분석법은 다음의 세 단계에 따라 수행된다.

1. 스크리닝 실험을 통해서 반응치에 영향을 주리라고 기대되는 많은 후보 인자들 중에서 핵심인자를 선별한다.

2. 선별된 핵심인자들에 대한 축차적 실험을 통하여 최적조건의 근처 영역을 탐색한다.

3. 최적조건 근처영역에서 중심합성 설계 혹은 Box-Behnken 설계 등을 이용한 실험을 실시하여 반응표면 모형을 추정하고, 추정된 모형으로부터 반응치를 최적화 하는 설계인자의 최적조건을 도출한다.

단계 2의 축차실험을 통한 최적조건 근처영역 탐색 작업은 초기 실험영역에서 시작하여 최대경사법을 이용하여 반응치를 가장 잘 증가/감소시키는 방향으로 실험영역을 이동시켜 가면서 실험을 반복적으로 수행하여 반응치를 최적으로 하는 설계변수의 최적 근처영역을 찾아가는 것으로, 설계인자의 관심영역 전체에 대해 최적조건을 구한다는 반응표면분석의 기본특성을 구현하는 핵심부분이며 반응표면분석 수행에서 가장 많은 시간이 소요되는 작업이다.

종래의 반응표면분석에서는 전술한 세 단계에서 행하는 모든 실험을 완전랜덤화실험(Completely Randomized Design, CRD)으로 수행하는 것이 일

* 강원대학교 산업공학과 교수

반적이었는데, 실제의 공장실험 환경에서는 고려되는 설계인자들 중 그 수준의 변경이 용이한 것들도 있지만, 수준 변경에 많은 비용과 시간이 소요되어 수준의 변경이 곤란한 것들도 있어서, 완전랜덤화실험보다는 수준 변경의 용이성에 따라 랜덤화에 제약을 가하는 분할법 실험이 더 현실적이라는 주장이 대두되었다[6]. 한 실험에서 고려되는 설계인자들 중에서 일부는 수준변경이 쉽지만 나머지는 수준변경이 어렵다면 완전 랜덤화 실험을 수행하는 것은 실제로 곤란한 일이다. 예로서, 세 개의 인자를 고려하고 있는 실험에서 한 인자는 수준의 변경이 어렵고 나머지 두 개는 수준의 변경이 쉽다면, 실험자는 수준변경이 어려운 인자의 한 수준을 먼저 정한 후, 그 조건에서 나머지 두 인자의 모든 수준조합을 실행하고, 다시 수준변경이 어려운 인자의 다른 수준을 정하여 그 조건에서 수준변경이 쉬운 나머지 두 인자의 모든 수준조합을 실행하는 식으로 하여 전체 실험을 수행하는 것이 좋을 것이다. 이와 같은 형식으로 실험의 랜덤화가 제약되는 실험을 분할법이라고 한다. 여기서, 수준변경이 어려운 인자를 분할법의 주구인자(whole-plot factor)로 하고 수준변경이 쉬운 인자를 부구인자(subplot factor)로 하게 된다.

분할법의 실험은 완전랜덤화 실험보다 효율성이 더 높은 것으로 알려져 있다. 그 이유는 σ^2_{SP} < σ^2_{CRD} < $\sigma^2_{\wp}$이기 때문이다[1][6]. 여기서, σ^2_{SP}는 부구 오차분산, $\sigma^2_{\wp}$는 주구 오차분산, 그리고 σ^2_{CRD}는 완전랜덤화 실험의 오차분산이다.

설계인자의 수준 변경 용이성을 고려하여 반응표면 실험에 분할법 구조를 도입하는 것은 반응표면분석법의 3단계 수행을 복잡하게 만든다. 공학실험에서 분할법 실험이 완전랜덤화 실험보다 더 효율적이며 정확한 분석 결과를 얻을 수 있다는 Box[1]의 연구이래로, 분할법 구조를 갖는 반응표면 실험의 설계 및 분석 방법은 많은 연구자들의 관심대상이 되어왔다. Vining, Kowalski, and Montgomery[2]는 분할법 구조에 알맞게 수정된 중심합성법을 제안하고, 이 수정된 중심합성법의 실험으로부터 얻은 최소자승 추정치가 일반적인 최소자승 추정치와 동일하다는 것을 증명하였다. Kowalski, Vining, Montgomery, and Borror[4]는 분할법 구조를 갖는 반응표면 실험에서 공정평균과 분산을 동시에 관리하는 모형을 추정하기위한 중심합성계획의 수정방법을 제시하였다. 또한, Kowalski, Cornel, and Vining[5]은 공정변수를 갖는 혼합물실험에서 분할법 구조를 적용하고 이로부터 모형의 계수를 추정하는 방법을 제시하였다.

이상의 연구들은 모두 핵심인자 선별을 위한 스크리닝 실험이나 최적조건 근처영역에서의 최적화 실험의 설계 및 분석에 대한 것들이다. 본 연구에서는 반응표면분석의 2단계 - 최적조건 근처영역 탐색 단계에서 실험의 분할법 구조를 반영한 최대경사법의 수행 방법을 제시하고자 한다.

2. 최대경사법

최대경사법이란 특성치를 가장 빨리 증가(혹은 감소)시키는 방향을 따라 실험영역을 옮겨가는 방법을 말한다. 일반적으로 일차회귀모형을 사용하며, 적합된 회귀모형의 추정계수로부터 이동할 방향이 결정된다. 다음과 같은 일차 회귀모형이 적합되었다고 하자.

$$\hat{y}=\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1x_1+\hat{\beta}_2x_2+\cdots+\hat{\beta}_kx_k \qquad (1)$$

위 모형에서 설계변수 x_j의 방향을 따라 특성치 y를 증가 혹은 감소시키는 방향은 x_j의 계수 $\hat{\beta}_j$의 부호에 따라 결정되며, 증감의 양은 $\hat{\beta}_j$의 크기에 비례한다. 전체 설계변수 x_1, x_2, $\cdots$, x_k에 대하여 특성치 y를 최대로 증가시키는 방향을 결정하는 문제는 현재의 실험 중심점을 원점으로 하는 반경 r인 구형의 제약식 $\sum_{j=1}^{k}x_j^2=r^2$을 만족하면서 (1)의 선형회귀식을 최대로 하는 x_1, x_2, $\cdots$, x_k의 좌표값을 찾는 것으로, 이 문제는 전통적인 라그랑주 승수법을 이용하여 결정하게 된다. 즉,

$$Q(x_1,x_2,\cdots,x_k)=\hat{\beta}_0+\sum_{j=1}^{k}\hat{\beta}_jx_j-\lambda\left(\sum_{j=1}^{k}x_j^2-r^2\right) \qquad (2)$$

에서, 각 x_j와 λ에 대한 Q의 편미분 값을 0이 되게 하는 $x_j^*=\dfrac{\hat{\beta}_j}{2\lambda}$, $j=1,2,\cdots,k$ 가 식 (1)을 최대화하는 경로의 좌표가 되는 것이다. 여기서 λ는 라그랑주 승수이다.

x_j^*의 값을 구하기 위해서는 라그랑주 승수 λ의 값을 결정해 주어야 하는데, 보통 (1)의 추정 회귀식에서 그 절대값이 가장 큰 회귀계수를 갖는 변수의 이동거리 Δ를 지정하여 λ값을 정하고, 나머지 k-1개 변수의 이동거리도 λ와 각 추정 회귀계수의 값으로부터 결정할 수 있다. 이와 같이 Δ값이 결정되면 실험영역의 특성에 따라 Δ, 2Δ, 3Δ, $\cdots$만큼 씩 실험의 중심점을 이동하여 가면서 실험을 축차적으로 반복하므로서 최적조건의 근처영역을 탐색하게 된다. 최대경사법에 대한 자세한 수행절차는 Myers and Montgomery[3]를 참조하기 바란다.

3. 분할법 구조에서 최대경사 경로 계산

스크리닝 실험을 통하여 핵심인자들이 선별되었으며, 이들 중 일부는 수준 제어가 용이한 인자이고 나머지는 수준제어가 곤란한 인자로 판명되어 분할법의 실험을 수행하여 최적조건 근처영역을 탐색하는 상황에서 최대경사법의 수행에 대하여 생각하여 보자. 수준제어가 곤란한 인자를 주구변수 z_i로하고, 수준제어가 용이한 인자를 부구변수 x_j로 하는 분할법 실험을 수행한다. 이때의 추정 일차회귀모형은 다음과 같다.

$$\hat{y}=\hat{\beta}_0+\sum_{i=1}^{a}\hat{\delta}_i z_i+\sum_{j=1}^{b}\hat{\gamma}_j x_j \tag{3}$$

식 (3)을 이용하여 최대경사 경로를 구해 보기로 한다. 분할법 실험에는 주구변수와 부구변수의 두 유형의 변수가 존재하므로, 이들 각각에 대하여 별도의 증분 이동거리를 생각하여야 한다. 주구변수에 대한 증분 이동거리를 Δ_i, 부구변수에 대한 증분 이동거리를 Δ_j라 하자. 또한, 주구변수에 대하여 반경 r_1의 구형제약조건 $\sum_{i=1}^{a} z_i^2 = r_1^2$, 부구변수에 대하여 반경 r_2의 구형제약조건 $\sum_{j=1}^{b} x_j^2 = r_2^2$을 생각하면, 다음과 같은 두 개의 라그랑주 승수에 관한 식을 얻게 된다.

$$Q(z_1,z_2,\cdots,z_a)=\hat{\beta}_0+\sum_{i=1}^{a}\hat{\delta}_i z_i-\lambda\left(\sum_{i=1}^{a} z_i^2-r_1^2\right) \tag{4}$$

$$L(x_1,x_2,\cdots,x_b)=\sum_{j=1}^{b}\hat{\gamma}_j x_j-\theta\left(\sum_{j=1}^{b} x_j^2-r_2^2\right) \tag{5}$$

여기서 λ와 θ는 라그랑주 승수이다. 특성치 y를 최적화하는데 식 (1)과 같이 설계인자들 간에 교호작용이 없는 일차회귀모형을 가정하고 있으므로, 분할법 실험에서 주구변수와 부구변수 간의 교호작용도 무시되는 것으로 가정한다. 따라서 식 (4)와 (5)는 개별적으로 그 해를 구할 수 있다. 식 (4)에서 각 z_i와 λ에 대한 Q의 편미분을 0으로 놓으면

$$\frac{\partial Q}{\partial z_i}=\delta_i-2\lambda z_i=0,\ i=1,2,\cdots,a$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \lambda}=-\sum_{i=1}^{a} z_i^2+r_1^2=0$$

을 얻고, 이로부터 $z_i^*=\frac{\hat{\delta}_i}{2\lambda},\ i=1,2,\cdots a$를 얻는다. 마찬가지로 식 (5)에서 각 x_j와 θ에 대한 L의 편미분을 0으로 하는 방정식으로부터 그 해 $x_j^*=\frac{\hat{\gamma}_j}{2\theta},\ j=1,2,\cdots b$ 를 얻을 수 있다. z_i^*와 x_j^*, 그리고 지정된 증분 이동거리 Δ_i와 Δ_j 로부터 두 개의 새로운 실험중심점의 좌표를 구하게 된다. 하나는 주구변수 z_i에 대한 것이고 나머지 하나는 부구변수 x_j에 대한 것이다.

4. 사례

분할법 구조의 반응표면분석에서 최대경사법 수행의 예로서, 어떤 금속광물의 야금공정에서 정제물의 순도를 최대로 하는 공정조건을 찾는 실험을 생각하여 보자. 스크리닝 실험으로부터 반응치인 정제물의 순도에 영향을 주는 핵심 인자로 다음의 4개 인자 – 금속광물에 포함되어 있는 인의 함량(A), 재 용해물질의 비율(B), 용융시간(C), 그리고 유지시간(D)가 선별되었다. 여기서 광물에 포함되어 있는 인의 함량(A)와 재 용해물질의 비율(B)는 실험에서 그 수준을 변경하기가 곤란한 인자로 분류되고, 용융시간(C)와 유지시간(D)는 수준의 변경이 용이한 인자로 분류되었다. 따라서 인자 A와 B를 주구변수 z_1, z_2로 하고 인자 C와 D를 부구변수 x_1, x_2로하는 2^4-요인실험을 분할법 실험으로 실시하기로 하였다. 처음의 실험 중심점에서 추정된 일차회귀모형은 다음과 같다.

$$\hat{y}=86.756-0.744z_1+1.181z_2-0.669x_1+0.769x_2 \tag{6}$$

여기서 z_1, z_2, x_1, x_2는 모두 낮은 수준이 -1, 높은 수준이 +1, 그리고 실험의 중심점이 0가 되도록 선형변환된 변수(coded variables)들이다. 추정 회귀모형 (6)에서 두 주구변수 중에서 계수의 절대값이 큰 변수는 z_2이므로, z_2에 대하여 Δ_i=1로 하면 $\lambda=\frac{1.181}{2(1)}=0.591$이 되고, 이에 대응되는 z_1의 변화량은 $\Delta_i=\frac{-0.744}{2(0.591)}=-0.629$가 된다. 한편, 두 부구변수 중에서 계수의 절대값이 큰 변수는 x_2이므로, x_2에 대하여 Δ_j=1로 하면 $\theta=\frac{0.769}{2(1)}=0.385$이고, 이에 대응되는 x_1의 변화량

$\Delta_j = \frac{-0.669}{2(0.385)} = -0.869$가 된다. 이와 같은 방법으로 최대경사 이동경로를 계산한 결과를 정리하면 [표 1]과 같다.

표 1 분할법 구조의 최대경사 경로

	z_1	z_2		x_1	x_2
원점 1	0	0	원점 2	0	0
Δ_i	-0.629	1.0	Δ_j	-0.869	1.0
원점 $+\Delta_i$	-0.629	1.0	원점 $+\Delta_j$	-0.869	1.0
원점 $+2\Delta_i$	-1.258	2.0	원점 $+2\Delta_j$	-1.738	2.0
원점 $+3\Delta_i$	-1.887	3.0	원점 $+3\Delta_j$	-2.607	3.0

완전랜덤화 실험의 경우에는 최대경사로를 따라 단순하게 한 번에 하나씩 실험을 실시해 나가면 된다. 그러나 분할법에 의한 실험에서 실험의 랜덤화에 제약이 있으므로 이를 고려하여 실시하여야 한다. 먼저 주구변수의 한 실험조건을 결정한 후, 여러 부구의 수준조합들이 실시되어야 하는데, 각 주구와 부구의 실험조건에 대해서 어떤 방식으로 최대경사 경로를 선택하여 새로운 실험 중심점을 찾을 것인지를 정해야 한다.

여기서는 식 (6)을 이용하여 새로운 실험 중심점을 찾는 방법을 설명하기로 한다. 여기서 제안하는 방법은 먼저 주구의 한 실험조건을 정한 후 이 조건에서 여러 부구에 대한 최대경사로를 탐색하고, 이렇게 하여 얻은 부구의 최적 경로에서 다시 주구의 영 조건들을 실행하는 방법으로 실험의 최적경로를 찾아내는 것이다,

먼저 주구에 대한 첫 번째 실험조건을 원점1 + Δ_i로 정하고, 이 조건에서 여러 부구의 실험조건들(원점2 + Δ_j, 원점2 + 2Δ_j, ⋯, 원점2 + 4Δ_j)을 랜덤한 순서로 실시한다. 이 결과로부터 특성치 y를 가장 많이 증가시키는 부구의 경로를 결정하게 된다. 한 주구의 조건에서 수행될 부구의 조건수는 수행중인 실험의 고유 기술적 특성에 따라 정하면 될 것이다. 여기서는 임의로 4개 조건을 실행하였다. 이렇게 수행된 실험결과가 [표 2] 이다.

표 2 주구조건 원점1 + Δ_i에서의 실험결과

부구	x_1	x_2	y
원점2 + Δ_j	-0.869	1.0	88.57
원점2 + 2Δ_j	-1.738	2.0	89.92*
원점2 + 3Δ_j	-2.607	3.0	89.83
원점2 + 4Δ_j	-3.476	4.0	88.38

[표 2]에서 부구의 최적 경로는 원점2 + 2Δ_j임을 알 수 있다. 이번에는 [표 2]에서 얻은 부구의 조건에서 주구의 여러 조건(원점1 + Δ_i, 원점1 + 2Δ_i, ⋯, 원점1 + 4Δ_i)에 대한 실험을 수행한다. 이 실험의 결과가 [표 3]이다.

표 3 부구조건 원점2 + 2Δ_j에서 여러 주구 조건에 대한 실험 결과

주구	z_1	z_2	y
원점1 + Δ_i	-0.629	1.0	89.92
원점1 + 2Δ_i	-1.258	2.0	90.01*
원점1 + 3Δ_i	-1.887	3.0	89.73
원점1 + 4Δ_i	-2.516	4.0	88.33

[표 3]에서 원점1 + 2Δ_i에서 반응치의 값이 최대가 됨을 알 수 있다. 따라서 이 사례 실험에서 특성치를 가장 빨리 증가시키는 새로운 실험영역의 중심점은 주구변수는 원점1+ 2Δ_i (z_1=-1.258, z_2=2.0), 부구변수는 원점2 + 2Δ_j (x_1=-1.738, x_2=2.0)가 됨을 알 수 있다.

이렇게 하여 얻은 새로운 실험 중심점에서 다시 앞에서와 같은 절차를 반복하여 또 다시 새로운 중심점을 찾는 절차를 반복하여 실험의 최적조건 근처영역을 탐색하게 된다. 물론 최적조건 근처영역의 판단은 실험자가 실험의 고유 기술적 특성을 고려하여 결정하여야 할 것이다. 여기서는 이하의 절차에 대한 설명은 생략하기로 한다.

5. 결론

대부분의 공학실험은 특성치를 최적화하는 공정인자의 최적조건을 찾는 반응표면분석의 범주에 속하는 실험이 된다. 반응표면분석에서는 최대경사법에 의한 최적조건 근처영역의 탐색에 많은 시간과 비용이 소요되고 있다. 또한 공학실험에서 고려되는 공정인자들은 그 수준의 변화의 용이성에 많은 차이가 있어 일반적인 완전랜덤화 실험을 수행하는 것이 매우 곤란하다. 따라서 수준변화의 용이성에 따라 실험 랜덤화에 제약을 가하는 분할법 실험을 수행하는 것이 실험의 효율성 면에서 타당하다 할 것이다. 본 연구에서는 분할법 구조의 반응표면 실험에서 최대경사 경로 탐색을 위해 주구와 부구에 각각 별개의 라그랑주 승수를 도입하여 두 개의 방정식을 도입함으로써 최대경사 경로를 탐색하는 방법을 제시하였고, 단순한 사례를 통해서 제시한 방법의 실현 결과를 보여 주었다. 그러나 본 연구에서는 최대경사법의 수행방법과 실행사례만을 제시하였을 뿐, 이 방법의 실제적 효율성을 설명하지 못하였다. 앞으로 좀 더 실제적인 적

용 사례와 이론적 고찰을 통해 제시된 방법의 효율성을 확인하는 연구가 필요할 것이다.

참 고 문 헌

[1] G. E. P. Box, “Split-Plot Experiments”, *Quality Engineering*, Vol.8, pp.515-520, 1996.

[2] G. G. Vining, S M. Kowalski, and D. G. Montgomery, “Response Surface Designs Withih a Split-Plot Structure”, *Journal of Quality Tecnology*, Vol.37, No.2, pp.115-129, 2005.

[3] R. H. Myers, and D. C. Montgomery, “Response Surface Methodology, 2nd edition”, John Wiley & sons, INC., 2002.

[4] S. M. Kowalski, G. G. Vining,D. S. Montgomery, and C. M. Borror, “Modifying Central Composite Design to Model the Process Mean and Variance When Ther Are Hard-to-Change Factors”, *Appl. Statist*, Vol. 55, Part 5, pp.615 -630, 2006.

[5] S. M. Kowalski, J. A. Cornell, and G. G. Vining, “Split-Plot Designs and Estimation Methods for Mixture Experiments With Process Variables”, *Technometrics*, Vol.44, No.1, pp.72-79, 20025.

[6] W. M. Wooding, “The Split-Plot Design”, *Journal of Quality Technology*, Vol.5, No.1 pp.16-33, 1973.