

# 2차 모형의 경제적 추정을 위한 소형실험계획의 활용 Implementation of Small Sized Designs for Economic Estimation of Second-Order Models

김정숙 · 변재현

경상대학교 산업시스템공학부, 공학연구원

## Abstract

Response surface methodology (RSM) is a useful collection of experimentation techniques for developing, improving, and optimizing products and processes. When we are to estimate second-order regression model and optimize quality characteristic by RSM, central composite designs and Box-Behnken designs are widely in use. However, in developing cutting-edge products, it is very crucial to reduce the time of experimentation as much as possible. In this paper small-sized second-order designs are introduced and their estimation abilities are compared in terms of D-optimality, A-optimality, and variance of regression coefficients, ease of experimentation, number of experiments. Then we present a guideline of using specific designs for specific experimentation circumstances. The result of this study will be beneficial to experimenters who face experiments which are expensive, difficult, or time-consuming.

## 1. 서론

실험을 통하여 신제품을 개발하거나 제조공정에서 발생하는 문제점을 해결하기 위하여 고려해야 하는 인자가 많을 경우에는 중요한 인자들을 우선 선별해야 한다. 그 다음 중요한 인자들을 대상으로 실험영역을 이동하여 가며 특성치를 개선하고, 최적조건이 있는 영역에 이르면 2차 모형에 근거한 최적조건을 파악하기 위하여 2차 반응표면 실험계획(response surface design)을 수행하게 된다(Myers and Montgomery, 2002). 일반적으로 2차 모형의 추정을 위해 가장 많이 이용되는 실험계획은 표준 2차 반응표면 계획인 중심합성계획(Central Composite Design, CCD)과 Box-Behnken 계획(Box-Behnken Design, BBD)이다(Box and Wilson, 1951, Box and Behnken, 1960). 이러한 실험계획을 이용하면 2차 반응표면 모형(second-order response surface model)을 추정하기 위한 충분한 실험점과 적합결여 검정(lack-of-fit test)을 위해 필요한 자유도를 확보할 수 있다. 그러나 반도체 등 첨단제품의 경우에는 신제품의 출시시기를 가능한 단축해야 하므로 중심합성계획이나 Box-Behnken 계획보다는 더 적은 실험점으로 2차 모형을 추정할 수 있는 실험을 실시하는 방법을 모색하는 것이 필요한데, 소형 2차 실험계획(small sized second-order designs)을 이용하면 표준 2차 반응표면 계획보다 더 적은

실험횟수로 2차 모형을 추정할 수 있다.

소형 2차 실험계획에 대한 기존 연구를 보면, 우선 Koshal(1933)은 한 실험조건에 한 인자의 수준만을 변경하여 실험점을 생성하는 Koshal design을 개발하였고, Hartley(1959)는 중심합성계획의 개념으로부터 유도한 소형합성계획(small composite designs)이라는 실험계획을 제안하였다. Roquemore(1976)는 k-1개의 인자의 수준 설정은 중심합성계획을 적용하고 k번째 인자의 수준은 회전성을 확보할 수 있도록 생성하는 Hybrid design을 개발하였다. 이러한 실험계획들은 추정된 모형의 예측능력 등 효율성(efficiency) 면에서 표준 2차 반응표면 계획보다 떨어지기는 하지만, 적은 실험점으로도 추정하고자 하는 항을 모두 추정할 수 있다는 장점을 가지고 있다.

본 논문에서는 인자가 2개 또는 3개인 경우를 대상으로 소형 2차 실험계획의 종류와 그 특징을 살펴보고, 각 실험계획의 설계행렬과 실험점의 위치를 이해하기 쉽도록 그림으로 나타내었다. 그리고 실험점의 수와 효율성의 측면에서 소형 2차 실험계획을 비교하고, 그들의 능력을 다시 표준 2차 반응표면 계획들과 비교함으로써, 실험자가 처한 환경에 따라서 어떠한 2차 실험계획을 이용하는 것이 좋은지에 대한 지침을 제시하고자 한다.

## 2. 소형 2차 실험계획의 종류

### 2.1 소형합성계획(Small composite design)

Hartley(1959)는 2차 반응표면 모형의 추정을 위해 표준 2차 반응표면 계획인 CCD와 BBD보다 더 적은 실험점으로 2차 항의 추정이 가능한 소형합성계획(Small Composite Design, SCD)을 개발하였다. 소형합성계획은 CCD의 개념으로부터 유도되었으며, 실험점은 요인실험점(factorial point), 축점(axial point), 그리고 중심점(center point)으로 이루어진다. 요인실험점은 특수한 resolution III 일부실시인 resolution III\*를 이용하여 생성하는데, 여기서 resolution III\*는 정의관계의 문자 수가 4개가 아닌 것을 말한다(Hartley, 1959 ; Myers and Montgomery, 2002). 이 실험계획은 포화 또는 포화 설계에 가까운 2차 실험계획이 되며, CCD와 BBD보다 실험점이 더 작다. 다음의 그림 1은 인자의 수가 2, 3개인 경우에 대한 소형합성계획의 설계행렬과 실험점의 위치를 그림으로 표시한 것이다. 여기서  $\alpha$ 는  $4\sqrt{F}$ 로 계산할 수 있으며, 실험계획의 비교에서  $4\sqrt{F}$ 를 이용하여 계산할 것이다. 그러나 실험자의 이해를 돕기 위해 설계행렬에서는 1로 나타내었다.

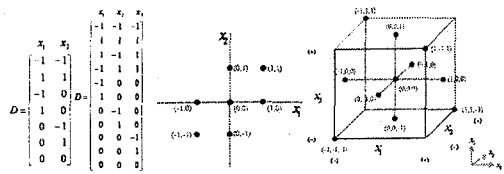


그림 1. 소형합성계획의 설계행렬 및 실험점의 위치

## 2.2 Koshal Design

1933년에 Koshal은 각 인자별로 한 수준만을 변경하여 적은 실험횟수로 2차 항의 추정 가능한 포화실험계획(saturated design)을 제안하였다. 실험계획 생성절차는 다음과 같다. 우선 첫 번째 실험조건은 모든 인자의 수준을 0으로 놓고, 그 다음 1차 항의 추정을 위해  $i$ 번째 인자의 수준을 1로 정하고 나머지 인자의 수준은 0으로 하여  $k$ 개의 실험조건을 생성하며, 2차 항의 추정을 위해서는 다시 첫 번째 실험조건을 기준으로 하여  $i$ 번째 인자의 수준을 2(또는 -1)로 하여  $k$ 개의 조건을 만든다. 그리고 2인자 교호작용 효과의 추정을 위해 두 인자의 수준은 1로 하고 나머지 인자의 수준은 0으로 두는  $kC_2$ 개의 실험조건을 생성한다. 다음은 인자의 수가 2, 3개인 경우에 대한 Koshal design의 설계행렬과 실험점의 위치를 그림으로 나타낸 것이며, 2차 항을 위한 인자의 수준을 2로 한 결과이다.

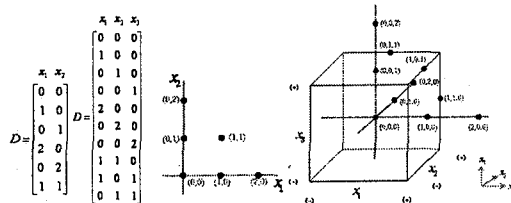


그림 2. Koshal designs의 설계행렬과 실험점의 위치

## 2.3 Hybrid designs

Roquemore는 1976년에 hybrid design이라고 하는 2차 실험계획을 제안하였는데, 이 계획 또한 포화설계이거나 또는 포화설계에 가까운 2차 실험계획이다(Roquemore, 1976; Myers and Montgomery, 2002). 2차 반응표면을 추정하기 위해  $k$ 개의 인자를 고려할 경우, hybrid design을 생성하는 절차는 다음과 같다. 먼저  $k-1$ 개의 인자를 대상으로 중심점 2개를 포함한 중심합성계획을 생성한 다음,  $k$ 번째 인자의 수준은 실험계획이 회전성을 갖거나 거의 회전성을 갖도록 정한다. 이때  $k$ 번째 인자는 수준을 바꾸기가 가장 쉬운 것으로 선정한다. Hybrid design은 인자의 수가 3, 4, 6, 그리고 7개일 때 이용 가능하며, 인자 수가 2개 또는 5개일 때에는 이용이 불가능하다.

인자의 수가 3개인 경우에는  $D_{310}$ ,  $D_{311A}$ ,  $D_{311B}$  hybrid design이 있다.  $D_{310}$ 에서 '3'은 인자의 수를, '10'은 실험점의 수를 나타낸다.  $D_{311A}$ 는 3개의 인자를 대상으로 11개의 실험점을 가지며, 'A' 유형의 실험계획이라는 뜻이다. 'B' 유형 실험계획인  $D_{311B}$ 는 인자의 수준이 너무 복잡하기 때문에 현실적으로 이용하기가 어렵다. 다음의 그림 3은 인자의 수가 3인 경우에 대한  $D_{310}$ ,  $D_{311A}$ 의 설계행렬과  $D_{311A}$ 의 실험점의 위치를 나타낸 것이다.

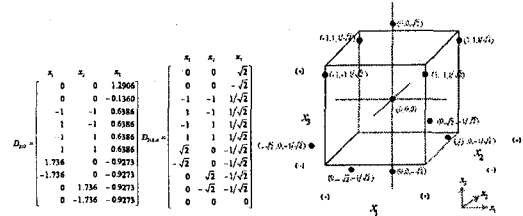


그림 3. Hybrid designs의 설계행렬( $D_{310}$ ,  $D_{311A}$ )

## 2.4 Notz's designs

Notz(1982)는 D-optimal 포화 실험계획을 개발하여 적은 실험점으로 2차 항을 추정 하였다. 이 실험계획은 인자의 수가 2~6개일 때 이용 가능하며, 실험점은 요인실험점과 축점으로 이루어져 있다. 요인실험점은 완전한  $2^k$  요인 실험계획에서 D-optimal 실험계획이 되도록 인자의 수에 따라 4개, 7개, ..., 등의 실험점을 선택하고, 축점은  $i$ 번째 인자의 수준을 1로 정하고 나머지 인자의 수준은 0으로 하여  $k$ 개의 실험조건을 생성하며, 중심점은 포함하지 않는다. 다음은 인자의 수가 2, 3인 경우에 대하여 각 실험계획의 설계행렬과 실험점의 위치를 그림으로 나타낸 것이다.

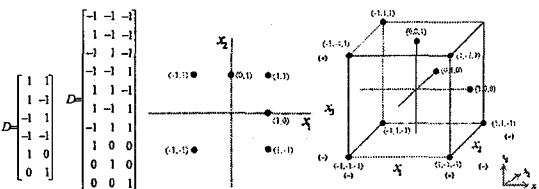


그림 4. Notz designs의 설계행렬과 실험점의 위치

## 2.5 Draper and Lin's designs

Draper and Lin(1990)은 요인실험점의 생성을 위해 일부실험법 대신 Plackett-Burman 계획(PBD)을 이용하였다. PBD를 이용하여 요인실험점을 선정할 때 인자의 수만큼의 열을 선택하는데, 이를 선택하기 위한 기준은 D-값이 된다. 여기서 D-값은  $|X'X|/N^p$ 을 의미하며, 실험계획을 평가하고 비교하기 위한 기준이다. 인자의 수에 따라 열을 선택하는 경우의 수가 상당히 많으므로 모든 경우의 수를 고려하여 각각의 D-값을 계산한 다음, 가장 큰 값을 가지는 열을 선정한다. 예를 들어, 인자가 3개이고, 실험수가 12회인 PBD를 이용하는 경우에 3개의 열을 선택하는 경우의 수는  ${}_{11}C_3 = 165$ 개가 된다. 이때, 임의로 열을 선택하기 때문에 반복점이나 실험점의 부호가 모두 반대되는 점(mirror-image)이 존재할 수 있으며, 실험점의 수를 줄이기 위해 두 실험점 중 하나를 제거할 수 있다. 다음은 인자가 3개인 경우의 설계행렬과 실험점의 위치를 나타낸 그림이다.

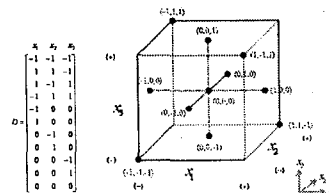


그림 5. Draper and Lin design의 설계행렬과 실험점의 위치

### 3. 소형 2차 실험계획의 비교

지금까지 적은 실험점으로 2차 항의 추정이 가능한 실험계획의 종류에 대해서 알아보았다. 본 절에서는 2절에서 소개한 실험계획들을 여러 가지 기준에 의하여 비교를 하고자 한다. 소형 실험계획의 비교와 관련하여 선행 연구된 내용을 살펴보면 다음과 같다. Notz(1982)는 자신이 제안한 실험계획과 다른 소형 실험계획을  $D^{1/p}$ 값으로 비교하였고, Draper and Lin(1990)은 소형 실험계획에 대하여 실험점의 수와  $D^{1/p}$ 값을 비교하였다.  $D^{1/p}$ 값은 실험계획을 비교할 때 가장 많이 쓰이는 기준으로 값이 클수록  $|X'X|$ 을 최대화하는 실험계획이 되며,  $(|X'X|/N^p)^{1/p}$ 으로 계산할 수 있다. 여기서 X는 설계행렬, N은 실험점의 수, p는 모형 항의 수를 나타낸다. 또 다른 비교 기준으로 A-optimality가 있는데, 이는 회귀계수의 분산의 합으로 나타내며, 이 값이 작을수록 회귀계수의 분산의 합을 최소화하는 실험계획이라 할 수 있다. 본 논문에서는 실험점의 수,  $D^{1/p}$ 값, A-optimality 그리고 회귀계수의 분산을 비교하고자 한다.

#### 3.1 k=2, 3인 경우 소형 2차 실험계획의 비교

2절에서 설명한 실험계획들을 대상으로 각 실험계획 간의 차이를 비교해 보았다. 먼저 각 실험계획의 실험점의 수를 비교하였으며, 그 결과를 다음의 표 1에 나타내었다. 표 1의 실험점의 수는 중심점을 포함한 것이다.

표 1. 소형 2차 실험계획의 실험점의 수(k=2, 3)

	Factors, k	
	2	3
Coefficients	6	10
Koshal designs	6	10
Small composite designs	7	11
Hybrid designs	-	10(또는 11)
Notz designs	6	10
Draper and Lin design	-	11

인자가 k인 경우에 모형 항은 다음의 식 (1)과 같으며, 인자가 2개인 경우에는 평균, 1차 항, 2차 항, 2인자 교호작용 항을 포함하여 총 6개의 항을 가지고, 3개인 경우에는 총 10개의 항을 가진다. 표 1의 각 실험계획들은 포화설계 또는 포화설계에 가까운 실험계획임을 알 수 있다.

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

다음은 각 실험계획의  $D^{1/p}$ 값과 A-optimality를 비교한 표이다.

표 2. 소형 2차 실험계획의  $D^{1/p}$ 과 A-optimality(k=2)

Small sized designs	$D^{1/p}$		A-optimality	
	2	3	2	3
Koshal designs	0.265	0.152	9.000	19.000
Small composite designs	0.417	0.442	4.174	3.607
Hybrid design(D <sub>310</sub> )	-	0.634	-	2.925
Hybrid design(D <sub>311A</sub> )	-	0.514	-	2.984
Notz designs	0.420	0.400	6.500	5.875
Draper and Lin design	-	0.442	-	3.607

여기서 Koshal design은 2차 항과 관련된 인자의 수준이 -1인 경우에 대해 계산하였다. 표 2를 보면, 인자의 수가 2개인 경우에는 Notz design의  $D^{1/p}$ 값이 0.420으로 가장 크고, A-optimality는 소형합성계획이 4.174로 가장 작음을 알 수 있다. 인자의 수가 3개인 경우에는  $D^{1/p}$ 값이 0.634이고 A-optimality가 2.925인 hybrid design(D<sub>310</sub>)이 가장 적합한 실험계획이라 할 수 있다. 다음은 각 실험계획의 회귀계수의 분산을 비교한 것이다.

표 3. 소형 2차 실험계획의 회귀계수의 분산(k=2)

Small sized designs	$b_0$	$b_i$	$b_{ii}$	$b_{ij}$
Koshal design	1.000	0.500	1.500	4.000
Small composite design	1.000	0.250	0.748	1.169
Notz design	2.750	0.250	1.500	0.250

표 4. 소형 2차 실험계획의 회귀계수의 분산(k=3)

Small sized designs	$b_0$	$b_i$	$b_{ii}$	$b_{ij}$
Koshal design(b)	1.000	0.500	1.500	4.000
Small composite design	0.708	0.251	0.215	0.501
Hybrid design(D <sub>310</sub> )	0.935	0.115 (0.269)	0.178 (0.545)	0.250 (0.170)
Hybrid design(D <sub>311A</sub> )	1.000	0.125	0.2423 (0.375)	0.250 (0.250)
Notz design	1.3750	0.2500	1.0000	0.250
Draper and Lin design	0.708	0.251	0.215	0.501

회귀계수의 분산은  $Var(b) = (X'X)^{-1}\sigma^2$ 으로 구할 수 있으며, 여기서  $\sigma^2$ 의 값은 계산의 편의를 위하여 1로 가정하였다. A-optimality와 마찬가지로 그 값이 작을수록 좋은 실험계획이라 할 수 있는데, 인자의 수가 2개인 경우에는 소형합성계획과 Notz design의 분산이 다른 실험계획의 회귀계수 분산보다 대체로 작음을 알 수 있고, 3개인 경우에는 hybrid design의 회귀계수의 분산이 나머지 실험계획의 분산보다 대체로 작음을 알 수 있다.

#### 3.2 소형 2차 실험계획과 표준 2차 반응표면 계획의 비교

본 절에서는 표준 2차 반응표면 계획인 중심합성계획(CCD)과 Box-Behnken 계획(BBD)을 소형 2차 실험계획과 비교해 보았다. 먼저 CCD와 BBD의 개념을 살펴보면 다음과 같다. CCD는 Box and Wilson(1951)에 의해 처음 소개 되었으며, 실험점은 요인실험점( $2^k$ ), 축점( $2k, \alpha$ ), 그리고 중심점( $n_c$ )으로 이루어진다. Box and Behnken 계획은 균형 불완비 블록 계획법(balanced incomplete block design)의 구조를 기본으로 하는 3수준 실험계획으로 인자의 수가 3개 이상인 경우에 이용 가능하다(Myers and Montgomery, 2002).

다음은 소형 2차 실험계획과 표준 2차 반응표면 계획을 비교기준에 의해 비교한 결과이다. 표 5는 실험점의 수를 비교한 것이다. 인자가 2개인 경우, 소형 2차 실험계획의 실험점의 수는 6~7개인 반면에 표준 2차 반응표면 계획은 9개의 실험점을 가진다. 인자가 3개인 경우, 소형 2차 실험계획의 실험점의 수는 10~11개이며, 표준 2차 반응표면 계획은 각각 13, 15개이다.

표 5. 소형 2차 실험계획과 표준 2차 실험계획의 실험점의 수(k=2, 3)

		Factors, k	
		2	3
Coefficients	-	6	10
Small sized designs	Koshal designs	6	10
	Small composite design	7	11
	Hybrid designs	-	10(또는 11)
	Notz designs	6	10
	Draper and Lin design	-	11
Standard Second-order designs	CCD	9	15
	BBD	-	13

표 6. 소형 2차 실험계획과 표준 2차 실험계획의  $D^{1/p}$  과 A-optimality(k=2, 3)

		$D^{1/p}$		A-optimality	
		2	3	2	3
Factor, k		2	3	2	3
Small sized designs	Small composite design	0.417	0.442	4.174	3.607
	Hybrid designs( $D_{310}$ )	-	0.634	-	2.925
	Notz designs	0.420	0.400	6.500	5.875
Standard Second-order designs	CCD	0.629	0.687	2.187	2.079
	BBD	-	0.278	-	3.438

표 6은  $D^{1/p}$  값과 A-optimality를 비교한 것이다. CCD가 소형 2차 실험계획보다  $D^{1/p}$  값은 크며, A-optimality는 작음을 알 수 있다. 다음은 회귀계수의 분산을 비교한 결과이다. 인자가 2개인 경우는 표 7에, 인자가 3개인 경우는 표 8에 나타내었으며, CCD의 회귀계수 분산이 소형 2차 실험계획의 분산보다 더 작음을 알 수 있다.

표 7. 소형 2차 실험계획과 표준 2차 반응표면 계획의 회귀계수의 분산(k=2)

Design		$b_0$	$b_i$	$b_{ii}$	$b_{ij}$
Small sized designs	Small composite design	1.000	0.250	0.746	1.169
	Notz design	2.750	0.250	1.500	0.250
Standard Second-order designs	CCD	1.000	0.125	0.345	0.250

표 8. 소형 2차 실험계획과 표준 2차 반응표면 계획의 회귀계수의 분산(k=3)

Design		$b_0$	$b_i$	$b_{ii}$	$b_{ij}$
Small sized designs	Small composite design	0.708	0.251	0.215	0.501
	Hybrid design( $D_{310}$ )	0.935	0.115	0.178	0.250
Standard Second-order designs	CCD	0.987	0.073	0.165	0.125
	BBD	1.000	0.125	0.438	0.250

#### 4. 결론

본 논문에서는 적은 실험횟수로 2차 반응표면 모형을 추정할 수 있는 소형 2차 실험계획들의 종류를 설명하였고, 각 실험계획의 설계행렬과 실험점의 위치를 그림으로 나타내어 실험점이 실험영역에 어떻게 배치되어 있는지 이해하기 쉽게 나타내었다. 또한 인자의 수가 2개 또는 3인 경우에 대하여 각 실험계획들의 실험점의 수,  $D^{1/p}$  값, A-optimality, 회

귀계수의 분산을 비교해 보았다. 소형 2차 실험계획과 표준 2차 반응표면 계획을 비교한 결과, 중심합성계획의  $D^{1/p}$  값이 더 컸으며, A-optimality를 비교한 결과도 마찬가지로 중심합성계획의 A-optimality가 소형 2차 실험계획보다 작았다. 이와 같이 소형 2차 실험계획이  $D^{1/p}$  값, A-optimality 측면에서 중심합성계획보다 떨어지기는 하나, Box-Behnken 계획보다는  $D^{1/p}$  값이 크며, A-optimality가 작고, 실험점의 수가 적으므로, 2차 모형의 추정을 위해 소형 2차 실험계획을 유용하게 이용할 수 있을 것이라 판단된다.

따라서 실험에 주어진 시간이 짧은 경우, 실험을 진행함에 있어서 비용이 문제되는 경우, 혹은 출시시기를 다투는 제품을 개발 또는 생산해야 하는 경우 등에서 2차 반응표면 모형의 추정을 위한 실험을 진행해야 할 때에 본 논문에서 설명한 소형 2차 실험계획을 이용하면, 실험에 소요되는 시간이 줄어들 뿐만 아니라 비용 측면에서도 절약이 될 것이며, 표준 2차 실험계획을 이용한 결과만큼 좋은 결과를 얻을 수 있을 것이다. 본 논문은 인자가 2개 또는 3개인 경우에 한하여 각 실험계획을 비교한 결과로써, 인자가 2개일 경우에 적은 실험점으로 실험을 하고자 할 때에는 소형합성계획 또는 Notz design을 이용하고, 인자가 3개인 경우에는 hybrid design을 이용하는 것이 바람직할 것이라 판단된다.

#### 참고문헌

Box G. E. P. and Behnken D. W. (1960), "Some New Three-Level Designs for the Study of Quantitative Variables", *Technometrics*, No. 2, 455-475.

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.

Draper N. R. (1985), "Small Composite Designs", *Technometrics*, Vol. 27, No. 2, 173-180.

Draper N. R. and Lin D. K. J. (1990), "Small Response-Surface Designs", *Technometrics*, Vol. 32, No. 2, 187-194.

Hartley H. O. (1959), "Smallest Composite Designs for Quadratic Response Surfaces", *Biometrics*, Vol. 15, No. 4, 611-624.

Koshal R. S. (1933), "Application of the Method of Maximum Likelihood to the Improvement of Curves Fitted by the Method of Moments", *Journal of the Royal Statistical Society*, vol. 96, No. 2, 303-313.

Myers, R. H. and Montgomery, D. C. (2002), *Response Surface Methodology, Process and Product Optimization Using Designed Experiments, 2nd Edition*, Wiley, New York.

Notz W. (1982), "Minimal Point Second Order Designs", *Journal of Statistical Planning and Inference* 6, 47-58.

Roquemore K. G. (1976), "Hybrid Designs for Quadratic Response Surfaces", *Technometrics*, Vol. 18, No. 4, 419-423.

Stat-Ease (2003), *Design-Expert Software for Design of Experiments, Version 6.0.10*. Stat-Ease, Inc., Minneapolis, MN.