The Korean Communications
in Statistics Vol. 9, No. 3, 2002
pp. 595-605

Extended Central Composite Designs with the Axial Points Indicated by Two Numbers[1]

Hyuk Joo Kim[2]

Abstract

The central composite design is widely used for estimating second order response surfaces. This type of design is composed of 2^k factorial points, axial points and center points. In this paper, we suggest a version of central composite design where the positions of the axial points are indicated by two numbers, and study properties of this design. We obtain the variances and covariances of the estimators of the regression coefficients. Conditions are obtained for this design to be orthogonal and rotatable. This design is compared with other designs on the basis of efficiency.

Keywords : Response surface methodology, Central composite design, Orthogonality, Rotatability, Efficiency.

1. 서론

반응표면방법론에서 가장 많이 사용되는 모형인 2차 다항회귀모형

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

으로 반응표면을 추정할 때에 많이 쓰이는 실험계획 중 중심합성계획(Central Composite Design; CCD)이 있다. 이것은 적은 횟수의 실험으로 곡면을 추정하기 위하여 중심점과 축점을 2^k요인실험에 추가한 실험계획으로, $k=2$인 경우에는 다음과 같은 계획행렬을 갖는다.

1) This paper was supported by Wonkwang University in 2001.
2) Professor, Division of Mathematics and Informational Statistics and Institute of Basic Natural Science Wonkwang University, Iksan, Jeonbuk, 570-749, Korea
E-mail : hjkim@wonkwang.ac.kr

$$D=\begin{array}{c} \begin{array}{cc} x_1 & x_2 \end{array} \\ \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ 0 & 0 \\ -\alpha & 0 \\ \alpha & 0 \\ 0 & -\alpha \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \end{array}$$

중심합성계획에서 실험점의 총수를 M이라 하면 $M=F+S$가 된다. 단, 여기서 F는 요인실험점의 수로 $F=2^k$(일부실시법을 쓰는 경우에는 2^{k-p}; p는 적절한 정수)이며, S는 축점의 수와 중심점의 수를 합한 것으로 $S=2k+m_0$이다. m_0는 중심점의 수를 말한다. 중심합성계획은 Box와 Wilson(1951)에 의하여 제안된 후 많은 연구자들에 의하여 연구되고 적용되어 왔으며, 적은 실험횟수로 반응표면분석을 할 수 있게 해주는 등 장점을 많이 가지고 있어서 널리 쓰이고 있다.

반응표면 실험계획법이 가질 수 있는 바람직한 성질로 직교성과 회전성이 있다. 이 성질들에 관해서는 제3절에서 간략히 설명할 것이다. 중심합성계획도 물론 이 성질들을 가질 수 있다. 중심합성계획이 직교계획이 되기 위한 조건은

$$\alpha=\left(\frac{\sqrt{FM}-F}{2}\right)^{1/2} \tag{1.2}$$

이며 회전계획이 되기 위한 조건은

$$\alpha=F^{1/4} \tag{1.3}$$

인 것으로 알려져 있다. 이에 관한 자세한 내용은 Myers(1976)와 박성현(1995), Khuri와 Cornell(1996) 등에 나와 있다.

여기서 알 수 있듯이 중심합성계획에서는 축점의 위치를 지정해주는 수인 α의 중요성이 크며 α의 값에 의해 축점의 위치를 조절할 수 있다는 점이 중심합성계획의 큰 특징이라고 할 수 있겠다. 본 논문에서는 이러한 흐름에서 축점에 관한 내용을 좀 더 다양화하여 생각해보고자 한다. 즉 중심합성계획에서 축점의 위치를 지정해주는 수가 한 개가 아니라 두 개인 경우에 관하여 연구하고자 한다. 그러한 경우 회귀계수들을 추정할 때 회귀계수들에 대한 추정량들의 분산과 공분산을 구할 것이며, 그러한 실험계획이 직교계획과 회전계획이 되기 위한 조건들을 찾아낼 것이다. 또한 회귀계수들을 추정하는 관점에서 새로운 중심합성계획의 효율성을 기존의 중심합성계획 및 3^k요인계획과 비교할 것이다.

2. 축점의 위치를 지정하는 수가 두 개인 중심합성계획

축점의 위치가 두 개의 수에 의해 지정되는 중심합성계획의 계획행렬(design matrix)은 다음과 같은 것이다($k=2$인 경우).

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} x_1 & x_2 \end{array} \\ D= & \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ 0 & 0 \\ -\alpha_1 & 0 \\ \alpha_1 & 0 \\ 0 & -\alpha_1 \\ 0 & \alpha_1 \\ -\alpha_2 & 0 \\ \alpha_2 & 0 \\ 0 & -\alpha_2 \\ 0 & \alpha_2 \end{pmatrix} \end{array} \tag{2.1}$$

여기서 중심점의 수 n_0는 1이상의 정수이며, 축점의 위치를 지정하는 수인 α_1과 α_2는 $\alpha_2 \geq \alpha_1 > 0$을 만족시키는 수이다.

k가 3이상인 경우에도 $k=2$인 경우를 확장하여 생각하면 계획행렬을 쉽게 알 수 있다. 편의상 이러한 실험계획을 'CCD2'라 부르기로 하고, 제1절에서 설명한 보통의 중심합성계획을 'CCD1'이라 부르기로 하자. CCD2에서 실험점의 총수를 N이라 하면 $N=F+T$가 된다. 단, 여기서 F는 요인실험점의 수로 $F=2^k$(일부실시법을 쓰는 경우에는 2^{k-p}; p는 적절한 정수)이며, T는 축점의 수와 중심점의 수를 합한 것으로 $T=4k+n_0$이다. 중심점의 수가 같다면 CCD2가 CCD1보다 실험점의 총수가 $2k$만큼 더 많지만 3^k요인배치법에 비하면 훨씬 적다는 것을 알 수 있다.

식(1.1)에서 η의 측정값을 y로 놓으면 이 모형은

$$y=\beta_0+\sum_{i=1}^{k}\beta_i x_i+\sum_{i=1}^{k}\beta_{ii}x_i^2+\sum_{i<j}^{k}\beta_{ij}x_i x_j+\varepsilon \ (\varepsilon \sim (0,\sigma^2)\text{이고 서로 독립})$$

이 된다. 계산이 간단해지도록 하기 위하여 대체모형을 쓰면

$$y_u=\beta_0'+\sum_{i=1}^{k}\beta_i x_{iu}+\sum_{i=1}^{k}\beta_{ii}(x_{iu}^2-\overline{x_i^2})+\sum_{i<j}^{k}\beta_{ij}x_{iu}x_{ju}+\varepsilon_u \tag{2.2}$$

$$(u=1,2,\cdots,N)$$

가 된다. 단, 여기서 $\overline{x_i^2}=\sum_{u=1}^{N}x_{iu}^2/N$이고 $\beta_0'=\beta_0+\sum_{i=1}^{k}\beta_{ii}\overline{x_i^2}$이며 CCD2의 경우에는 $\overline{x_i^2}=(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)/N$이 된다.

행렬과 벡터를 사용하여 식(2.2)를 나타내면

$$\underline{y} = X\underline{\beta} + \underline{\varepsilon} \quad (\underline{\varepsilon} \sim (\underline{0},\ I\sigma^2))$$

으로 쓸 수 있다. 여기서

$$\underline{y} = (y_1,\ y_2,\ \ldots,\ y_N)'$$

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

$$\underline{\beta} = (\beta_0,\ \beta_1, \cdots,\ \beta_k,\ \beta_{11}, \cdots,\ \beta_{kk},\ \beta_{12}, \cdots \beta_{k-1,k})'$$

$$\underline{\varepsilon} = (\varepsilon_1,\ \varepsilon_2,\ \cdots,\ \varepsilon_N)'$$

이다. 따라서 CCD2의 경우 $X'X$행렬과 $(X'X)^{-1}$행렬은 다음과 같이 된다.

$$X'X = \begin{pmatrix} N & & & & & & & \\ & F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2 & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2 & & & & \\ & & & & c & d & \cdots & d & \\ & & & & d & c & \cdots & d & \\ & & & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ & & & & d & d & \cdots & c & \\ & & & & & & & & FI_{k(k-1)/2} \end{pmatrix}$$

$$(X'X)^{-1} = \begin{pmatrix} N^{-1} & & & & & & & \\ & (F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^{-1} & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & (F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^{-1} & & & & \\ & & & & e & f & \cdots & f & \\ & & & & f & e & \cdots & f & \\ & & & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ & & & & f & f & \cdots & e & \\ & & & & & & & & F^{-1}I_{k(k-1)/2} \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

단 여기서 $I_{k(k-1)/2}$는 $k(k-1)/2$차 단위행렬이다. 또한

$$c = F(1-\overline{x_i^2})^2 + 2(\alpha_1^2 - \overline{x_i^2})^2 + 2(\alpha_2^2 - \overline{x_i^2})^2 + (T-4)(\overline{x_i^2})^2$$

$$= \frac{1}{N}\{FT - 4(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)(F + \alpha_1^2 + \alpha_2^2) + 2N(\alpha_1^4 + \alpha_2^4)\}$$

$$d = F(1-\overline{x_i^2})^2 - 4(\overline{x_i^2})(\alpha_1^2 - \overline{x_i^2}) - 4(\overline{x_i^2})(\alpha_2^2 - \overline{x_i^2}) + (T-8)(\overline{x_i^2})^2$$

$$= \frac{1}{N}\{FT - 4(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)(F + \alpha_1^2 + \alpha_2^2)\}$$

$$e = \frac{c+(k-2)d}{(c-d)\{c+(k-1)d\}} = \frac{A_1}{B} \tag{2.4}$$

$$f = \frac{-d}{(c-d)\{c+(k-1)d\}} = \frac{A_2}{B} \tag{2.5}$$

$$A_1 = (k-1)FT - 4(k-1)(\alpha_1^2+\alpha_2^2)(F+\alpha_1^2+\alpha_2^2) + 2N(\alpha_1^4+\alpha_2^4) \tag{2.6}$$

$$A_2 = -FT + 4(\alpha_1^2+\alpha_2^2)(F+\alpha_1^2+\alpha_2^2) \tag{2.7}$$

$$B = 2(\alpha_1^4+\alpha_2^4)\{kFT - 4k(\alpha_1^2+\alpha_2^2)(F+\alpha_1^2+\alpha_2^2) + 2N(\alpha_1^4+\alpha_2^4)\} \tag{2.8}$$

이며, 표시가 안 된 부분의 원소는 모두 0이다.

$\underline{\beta}$의 최소제곱추정량은

$$\underline{b} = (X'X)^{-1}X'\underline{y}$$

에 의해 구할 수 있으며, $\underline{b}$의 분산·공분산행렬은

$$Var(\underline{b}) = \sigma^2(X'X)^{-1}$$

이므로 다음과 같은 분산과 공분산들을 얻게 된다.

$$\begin{aligned} Var(b_0') &= \sigma^2/N \\ Var(b_i) &= \sigma^2/(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2) \quad (i=1,2,\cdots,k) \\ Var(b_{ij}) &= \sigma^2/F \quad (i\neq j) \\ Var(b_{ii}) &= \sigma^2 e \quad (i=1,2,\cdots,k) \\ Cov(b_{ii},\, b_{jj}) &= \sigma^2 f \ (i\neq j) \end{aligned} \tag{2.9}$$

그 밖의 모든 공분산은 0.

3. 직교성과 회전성

3.1 직교성(orthogonality)

제2절에서 본 바와 같이 CCD2에서는 b_{ii}와 b_{jj} 사이의 공분산 $Cov(b_{ii}, b_{jj})$를 제외한 모든 공분산이 0이 된다. 그런데 식(2.3)의 $(X'X)^{-1}$행렬에서 만일 $f=0$이 되면 $(X'X)^{-1}$행렬은 대각선행렬이 되고 $Cov(b_{ii}, b_{jj})$도 0이 되게 된다. 이러한 성질을 직교성이라고 부른다. 식(2.5)와 식(2.7)에서 알 수 있는 것과 같이, $f=0$이 되려면

$$\alpha_1^2+\alpha_2^2 = \frac{\sqrt{FN}-F}{2} \tag{3.1}$$

가 성립해야 하며, 이것이 바로 CCD2가 직교계획이 되기 위한 조건이 된다.

그런데 $F=2^k$(일부실시법을 쓰는 경우에는 2^{k-p})이고 $N=F+T=F+4k+n_0$이므로 식(3.1)의 값은 k, p와 n_0에 따라 달라지게 된다. <표 1>에는 k, p, n_0의 여러 값에 대하여, CCD2가 직교성을 갖게 해주는 $\alpha_1^2+\alpha_2^2$의 값을 구하여 수록해놓았다.

<표 1> CCD2가 직교계획이 되기 위한 $\alpha_1^2+\alpha_2^2$의 값

n_0 \ $(k,\ p)$	(2, 0)	(3, 0)	(4, 0)	(5, 0)	(5, 1)	(6, 0)	(6, 1)	(7, 1)	(8, 2)
1	1.606	2.481	3.489	4.591	4.166	5.736	5.354	6.575	7.395
2	1.742	2.633	3.662	4.785	4.329	5.947	5.541	6.781	7.598
3	1.873	2.782	3.832	4.976	4.490	6.158	5.726	6.987	7.799
4	2.000	2.928	4.000	5.166	4.649	6.367	5.909	7.192	8.000
5	2.123	3.071	4.166	5.354	4.806	6.575	6.091	7.395	8.200

3.2 회전성(rotatability)

일반 선형회귀모형에서 추정된 반응 $\hat{y}$의 분산은

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

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. 여기에서 만일 $Var(\hat{y})$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. Box와 Hunter (1957)는 2차모형의 경우 회전성을 갖기 위한 조건이 다음과 같음을 증명하였다.

[R1] 모든 홀수차 적률은 0이어야 한다. 즉, 적어도 하나의 δ_i가 홀수일 때

$$\sum_{u=1}^{N} x_{1u}^{\delta_1} x_{2u}^{\delta_2} \cdots x_{ku}^{\delta_k} = 0$$

[R2] 짝수차 적률 사이에는 다음의 관계식이 성립하여야 한다.

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^4 = 3 \sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 x_{ju}^2 \quad (i \neq j)$$

이제 CCD2가 회전계획이 되기 위한 조건을 구해보자. 식(2.1)의 D를 확장한 일반적인 경우를 생각하면 된다. 홀수차 적률이 모두 0이 됨은 쉽게 알 수 있으며, 조건 [R2]에 있는 짝수차 적률은

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^4 = F + 2\alpha_1^4 + 2\alpha_2^4$$

$$\sum_{u=1}^{N} x_{iu}^2 x_{ju}^2 = F \quad (i \neq j)$$

이다. 따라서 조건 [R2]를 만족시키기 위해서는

$$F+2\alpha_1^4+2\alpha_2^4=3F$$

가 성립해야 한다. 그러므로 CCD2가 회전계획이 되기 위한 조건은

$$\alpha_1^4+\alpha_2^4=F \tag{3.2}$$

가 된다. 이 값은 중심점의 수(n_0)와는 관계가 없음을 알 수 있다.

4. 3^k요인계획 및 CCD1과의 효율성 비교

이 절에서는 반응표면 모형 안의 특정한 계수를 추정할 때의 효율성을 기준으로 하여 CCD2를 3^k요인계획 및 CCD1과 비교해본다. 이러한 비교 기준은 그 계수가 추정되는 정도(precision)와 필요한 실험횟수를 동시에 고려하는 것이다.

예를 들어 혼합2차계수(mixed quadratic coefficient) $\beta_{ij}(i\neq j)$를 추정하는 관점에서 두 실험계획 D_1과 D_2를 비교하려 한다 하자. D_1과 D_2에서 요구되는 실험점의 수를 각각 N_1과 N_2라 하면 D_2에 대한 D_1의 상대효율은 다음 식으로 주어진다(Myers(1976) 7.2절 참조).

$$E(D_1|D_2)=\frac{\{D_2\text{에서의}\quad Var(b_{ij})\}N_2}{\{D_1\text{에서의}\quad Var(b_{ij})\}N_1} \tag{4.1}$$

이 경우 비교가 공평하게 이루어지기 위해서 실험계획들은 2차적률 $\sum_{u=1}^{N}x_{iu}^2/N$의 값이 같도록 스케일링되어야 하며, 이를 위해서 다음의 스케일링 기준을 사용한다.

$$[i]=\frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}x_{iu}=0$$
$$[ii]=\frac{1}{N}\sum_{u=1}^{N}x_{iu}^2=1$$
$$(i=1,\ 2,\cdots,k) \tag{4.2}$$

4.1 혼합2차계수 $\beta_{ij}(i\neq j)$를 추정하는 관점에서의 비교

식(2.9)에 의해 CCD2에서 $Var(b_{ij})=\sigma^2/F$이다. 그런데 이것은 식(4.2)의 스케일링을 하기 전의 것이다. CCD2에서 $[ii]=(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)/(F+T)$이므로 $[ii]=1$을 만들기 위해서는 각각의 x_i열에 $g=\{(F+T)/(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)\}^{1/2}$를 곱해줘야 한다.

그런데 $Var(\underline{b})=\sigma^2(X'X)^{-1}$이므로 식(4.2)의 스케일링을 한 뒤의 $Var(b_{ij})$는 $(\sigma^2/F)\cdot(1/g^4)$ 즉 $(\sigma^2/F)\{(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)/(F+T)\}^2$이 된다. 3^k요인계획에 대해서도 같은 방식으로 생각할 수 있으므로, β_{ij}를 추정하는 관점에서 3^k요인계획에 대한 CCD2의 상대효율은 식(4.1)에 의해 다음과 같이 구해진다.

$$E(CCD2|3^k \text{요인계획}) = \frac{\frac{\sigma^2}{(4)(3^{k-2})}\left(\frac{4}{9}\right)(3^k)}{\frac{\sigma^2}{F}\left(\frac{F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2}{F+T}\right)^2(F+T)}$$

$$= \frac{F(F+T)}{(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^2} \tag{4.3}$$

식(4.3)으로부터 $E(CCD2|3^k$ 요인계획$)=1$ 일 조건 즉 CCD2가 3^k요인계획과 같은 정도로 효율적이기 위한 조건은

$$\alpha_1^2+\alpha_2^2 = \frac{\sqrt{F(F+T)}-F}{2} = \frac{\sqrt{FN}-F}{2} \tag{4.4}$$

임을 얻는다. 식(4.4)는 식(3.1)과 동일한 것이므로, 직교성을 갖는 CCD2가 3^k요인계획과 효율성이 같다는 것을 알 수 있다. 우리는 또한 식(4.3)으로부터 CCD2가 3^k요인계획보다 효율적일 조건은 $\alpha_1^2+\alpha_2^2 < (\sqrt{FN}-F)/2$이고 그 반대일 조건은 $\alpha_1^2+\alpha_2^2 > (\sqrt{FN}-F)/2$라는 것을 알 수 있다.

이번에는 CCD2와 CCD1의 효율성을 비교해보자. β_{ij}를 추정하는 관점에서 CCD1에 대한 CCD2의 상대효율은 다음과 같이 얻어진다.

$$E(CCD2|CCD1) = \frac{\frac{\sigma^2}{F}\left(\frac{F+2\alpha^2}{F+S}\right)^2(F+S)}{\frac{\sigma^2}{F}\left(\frac{F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2}{F+T}\right)^2(F+T)}$$

$$= \frac{(F+2\alpha^2)^2(F+T)}{(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^2(F+S)} \tag{4.5}$$

식(4.5)로부터 $E(CCD2|CCD1)>1$일 조건 즉 CCD2가 CCD1보다 효율적일 조건은

$$\alpha_1^2+\alpha_2^2 < \frac{1}{2}\left\{(F+2\alpha^2)\sqrt{\frac{F+T}{F+S}}-F\right\} \tag{4.6}$$

임을 얻게 된다.

식(1.2)와 식(3.1)을 식(4.5)에 대입하여 계산하면 1이라는 값이 나온다. 이로부터 직교CCD2는 직교CCD1과 같은 정도의 효율성을 갖는다는 것을 알 수 있다. 더욱이 직교CCD2는 3^k요인계획과 효율성이 같다는 것이 위에서 밝혀졌으므로, β_{ij}를 추정하는 관점에서 볼 때 3^k요인계획과 직교CCD1 및 직교CCD2는 모두 동일한 효율성을 갖는다. 또한 CCD2가 3^k요인계획과 직교CCD1보다 효율적일 조건은 $\alpha_1^2+\alpha_2^2$이 <표 1>에 기입되어 있는 값보다 작은 값을 갖는 것이다.

이번에는 CCD2와 회전성을 갖는 CCD1의 효율 비교를 생각해보자. 식(1.3)을 식(4.6)에 대입하면 알 수 있듯이, CCD2가 회전CCD1보다 효율적일 조건은

$$\alpha_1^2+\alpha_2^2 < \frac{1}{2}\left\{(F+2\sqrt{F})\sqrt{\frac{F+T}{F+S}}-F\right\} \tag{4.7}$$

이다. 예를 들어 $k=3$, $p=0$ (즉 $F=8$)인 경우 $m_0=1$개의 중심점을 사용하는 회전 CCD1 ($\alpha=1.682$)과 $n_0=1$개의 중심점을 사용하는 CCD2를 비교해보면 식(4.7)은

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 < 4.080 \tag{4.8}$$

이 된다. 회전성을 갖는 CCD2 중에서 식(4.8)을 만족시키는 실험계획은 쉽게 찾을 수 있다. 예를 들어 $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 1.627$인 CCD2는 식(3.2)를 만족시키므로 회전성을 가지며, $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = 3.647$로서 식(4.8)도 만족시키므로 회전CCD1보다 효율적이다. 구체적인 상대효율은 식(4.5)에 의하여

$$\frac{(8+2\sqrt{8})^2(8+13)}{\{8+(2)(3.647)\}^2(8+7)} = 1.116$$

으로 얻어진다.

4.2 순수2차계수 β_{ii}를 추정하는 관점에서의 비교

이번에는 순수2차계수(pure quadratic coefficient) β_{ii}를 추정하는 관점에서 CCD2의 효율성을 3^k요인계획 및 CCD1과 비교하는 문제를 생각하자. 여기서도 식(4.2)의 스케일링을 적용한다.

먼저 3^k요인계획에 대한 CCD2의 상대효율은 식(4.1)(b_{ij} 대신 b_{ii}를 넣은 것)에 의하여 다음과 같이 얻어진다.

$$E(CCD2|3^k\text{요인계획}) = \frac{\dfrac{\sigma^2}{(2)(3^{k-2})}\left(\dfrac{4}{9}\right)(3^k)}{\sigma^2 e\left(\dfrac{F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2}{F+T}\right)^2(F+T)}$$

$$= \frac{2(F+T)}{e(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^2} \tag{4.9}$$

여기서 분모의 e는 식(2.4), (2.6), (2.8)에 정의된 바와 같다.

CCD2에서 b_{ii}의 분산은 대단히 복잡하기 때문에 CCD2가 3^k요인계획보다 효율적일 조건이 β_{ij}를 추정하는 경우처럼 명백한 형태로 나타나지는 않으나, 다음과 같은 방식으로 비교할 수 있다. $k=3$인 경우 $F=8$개의 요인실험점과 $4k=12$개의 축점 및 $n_0=1$개의 중심점을 갖는 직교 CCD2 ($\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 1.217$)를 3^3요인계획과 비교해보면 식(4.9)의 값이 1.597로 나온다. 따라서, 이 직교CCD2가 3^3요인계획보다 훨씬 효율적임을 알 수 있다.

다음으로 CCD1에 대한 CCD2의 상대효율은

$$E(CCD2|CCD1) = \frac{\sigma^2 e_1\left(\dfrac{F+2\alpha^2}{F+S}\right)^2(F+S)}{\sigma^2 e\left(\dfrac{F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2}{F+T}\right)^2(F+T)}$$

$$= \frac{e_1(F+2\alpha^2)^2(F+T)}{e(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)^2(F+S)} \tag{4.10}$$

로 얻어진다. 여기서 e_1은 CCD1에 관련된 값으로서

$$e_1 = \frac{(k-1)FS - 4(k-1)F\alpha^2 + 2(M-2k+2)\alpha^4}{2\alpha^4\{kFS - 4kF\alpha^2 + 2(M-2k)\alpha^4\}}$$

이다. $k=3$, $p=0$인 경우 $n_0=1$, $\alpha_1=0.800$, $\alpha_2=1.357$인 직교CCD2와 $m_0=1$, $\alpha=1.215$인 직교CCD1을 비교해보자. 식(4.10)의 값을 계산해보면 1.741로 나와 CCD2가 훨씬 더 효율적이라는 것을 말해준다. 또 하나의 예로 역시 $k=3$, $p=0$인 경우 중심점을 두 개씩 사용하는 회전CCD2 ($n_0=2$, $\alpha_1=1$, $\alpha_2=1.627$)와 회전CCD1 ($m_0=2$, $\alpha_1=1.682$)을 식(4.10)에 의해 비교해보면 $E(CCD2|CCD1)=1.429$로 얻어져 역시 CCD2가 더 효율적임을 알 수 있다.

4.3 1차계수 β_i를 추정하는 관점에서의 비교

4.1절의 시작 부분에서와 같은 방식으로 논의할 수 있다. 식(2.9)에 의해 CCD2에서 $Var(b_i)=\sigma^2/(F+2\alpha_1^2+2\alpha_2^2)$인데, $[ii]=1$이 되도록 스케일링을 한 뒤의 $Var(b_i)$는 여기에 $1/g^2$을 곱한 것이므로 $\sigma^2/(F+T)$가 된다. 같은 방법으로 구해보면,
스케일링 뒤의 $Var(b_i)$는 3^k요인계획의 경우 $\{\sigma^2/(2)(3^{k-1})\}(2/3)=\sigma^2/3^k$이며 CCD1의 경우에는 $\{\sigma^2/(F+2\alpha^2)\}\{(F+2\alpha^2)/(F+S)\}=\sigma^2/(F+S)$이다. 따라서 식(4.1)(b_{ij} 대신 b_i를 넣은 것)에 의하여 상대효율을 구하면 $E(CCD2|3^k$ 요인계획)과 $E(CCD2|CCD1)$의 값이 모두 1로 나온다. 이것은 1차계수 β_i를 추정하는 관점에서 CCD2와 CCD1 및 3^k요인계획의 효율성이 축점의 위치와 중심점의 수에 관계없이 모두 동일하다는 것을 말해준다.

5. 결론

본 논문에서는 축점의 위치가 두 개의 수에 의하여 지정되는 중심합성계획을 제시하고 이것을 CCD2라 불렀으며, 이 계획의 성질을 연구하였다. 반응표면모형 안의 회귀계수들의 추정량들의 분산과 공분산을 구했고, CCD2가 직교계획과 회전계획이 되기 위한 조건들을 찾아냈으며, 회귀계수들을 추정하는 관점에서 CCD2의 효율성을 CCD1 및 3^k요인계획과 비교하였다.

이 CCD2는 각 독립변수의 7개의 다른 수준에서 관찰한 결과가 되므로 CCD1에서보다 수준이 더 다양하며, CCD1과 같이 대칭성을 유지하고 있어서 실제로 사용하기에 편리하다. CCD2를 사용할 경우 축점을 정해주는 두 수인 α_1과 α_2의 값을 선택하는 것이 중요한데, 이것은 직교성과 회전성 등 그때그때 중요시되는 기준과 어느 회귀계수를 효율적으로 추정하는 것이 중요한가 하는 것 등을 고려하여 결정하면 될 것이다.

참고문헌

[1] 박성현(1995). 「현대실험계획법」 (증보판), 민영사.
[2] Box, G.E.P. and Hunter, J.S.(1957). Multifactor experimental design for exploring response surfaces, *Annals of Mathematical Statistics*, 28, 195-241.

[3] Box, G.E.P. and Wilson, K.B.(1951). On the experimental attainment of optimum conditions, *Journal of the Royal Statistical Society,* B13, 1-45.

[4] Khuri, A.I. and Cornell, J.A.(1996). *Response Surfaces : Designs and Analyses* (2nd ed.), Marcel Dekker, Inc.

[5] Myers, R.H. (1976). *Response Surface Methodology*, Blacksburg, VA : Author (distributed by Edwards Brothers, Ann Arbor, MI).

[2002년 9월 접수, 2002년 10월 채택]