

반응표면실험계획을 평가하기 위한 동적분위수그림

장대흥¹

¹부경대학교 통계학과

(2010년 1월 접수, 2010년 3월 채택)

요약

반응표면실험계획들을 평가하기 위한 방법으로서 전형적인 방법이 알파벳최적화이다. 그러나 이러한 알파벳최적화(D-, A-, G-, V-최적화 등)는 하나의 수치이므로 그 유용성에도 불구하고 반응표면실험계획들이 갖는 추정반응값 분산의 분포에 대한 정보에 한계를 갖는다. 이를 극복하고자 하는 대안으로서 그래픽 방법들이 있는데 우리는 그 중에 분위수그림을 애니메이션화한 동적분위수그림을 제안할 수 있고 이 동적분위수그림을 이용하여 반응표면실험계획들이 갖는 추정반응값분산의 분포를 서로 비교, 평가할 수 있다.

주요용어: 반응표면실험계획, 알파벳최적화, 동적분위수그림.

1. 서론

Myers와 Montgomery (2002)는 실험계획이 가져야할 좋은 성질로 10가지를 나열하고 있다. 이러한 성질들을 모두 만족하는 실험계획은 드물겠지만 우리는 복수개의 경쟁하는 실험계획들 중에 하나의 실험계획을 선택하기 위하여서는 실험계획들을 평가할 수 있는 기준이 필요하다. 가장 대중적인 기준이 알파벳최적화(D-, A-, G-, V-최적화 등)인데 이러한 알파벳최적화는 하나의 수치이므로 그 유용성에도 불구하고 반응표면실험계획들이 갖는 추정반응값분산의 분포에 대한 정보에 한계를 갖는다. 이를 극복하고자 하는 대안으로서 그래픽 방법들이 제안되었다. 실험계획들을 평가할 수 있는 그래픽 방법으로서 Giovannitti-Jensen과 Myers (1989)는 분산산포그래프(variance dispersion graph)를 처음으로 제안하였고 Khuri 등 (1996)은 분위수그림(quantile plot)을, Khuri (1997)는 분위수산포그래프(quantile dispersion graph)를, Zahran 등 (2003)은 FDS그림(fraction of design space plot)을 제안하였다. Jang과 Park (1993)은 분산산포그래프를 추정반응값분산 대신 추정반응값의 기울기분산에 대하여 적용하였고 Kim 등 (1996)은 분위수그림을 추정반응값의 기울기분산에 대하여 적용하였다. Khuri와 Lee (1998)는 분위수그림을 비선형모형에 적용하였고 Lee와 Khuri (1999, 2000)는 분위수산포그래프를 분산분석모형에 적용하였고 Robinson과 Khuri (2003)는 분위수산포그래프를 일반화선형모형에 적용하였고 Ozol-Godfrey 등 (2007)은 FDS그림을 일반화선형모형에 적용하였고 Mukhopadhyay와 Khuri (2008)는 분위수산포그래프를 다변량일반화선형모형에 적용하였다. Anderson-Cook 등 (2009)은 반응표면실험계획에 대한 평가와 비교에 대하여 일목요연하게 정리하였다.

본 논문에서는 Khuri 등 (1996)이 제안한 분위수그림을 애니메이션화한 동적분위수그림(animated quantile plot)를 제안하고자 한다. 2절에서는 동적분위수그림에 대하여 언급하고 3절에서는 수치 예를 보이고 4절에서는 결론을 내렸다.

¹(608-737) 부산광역시 남구 대연3동 599-1 부경대학교 통계학과, 교수. E-mail: dhjang@pknu.ac.kr

2. 동적분위수그림

반응표면분석 모형으로서 우리는 주로 다음과 같은 2차모형을 가정한다. 즉, 실험계획 변수 $\mathbf{x}' = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ 에서

$$\eta(\mathbf{x}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k \beta_{ij} x_i x_j$$

이고 행렬형태로 표현하면

$$\eta(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'_s \boldsymbol{\beta}$$

이 되는데 여기서 $1 \times p$ 벡터 $\mathbf{x}'_s = (1, x_1, x_2, \dots, x_k, x_1^2, x_2^2, \dots, x_k^2, x_1 x_2, x_1 x_3, \dots, x_{k-1} x_k)$ 이고 $\boldsymbol{\beta}$ 는 $p \times 1$ 회귀계수 열벡터이다. p 는 회귀계수의 개수이다. X 를 모형행렬이라 하고 \mathbf{y} 를 반응변수 벡터라 하자. 그러면 최소제곱법에 의하여 회귀계수를 추정하면 $\mathbf{b} = (X'X)^{-1}X'\mathbf{y}$ 가 되고 추정회귀식은 $\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'_s \mathbf{b}$ 가 된다. \mathbf{x} 에서의 추정반응값분산은

$$\text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})] = \mathbf{x}'_s (X'X)^{-1} \mathbf{x}_s \sigma^2$$

이 된다. 이 추정반응값분산은 \mathbf{x} 에서의 추정회귀식의 정밀도를 판가름하는 수단이 된다. 그러면 실험 계획에서 실험점의 개수 N 을 고려한 추정반응값분산(scaled prediction variance; SPV)을 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{N}{\sigma^2} \text{Var}[\hat{y}(\mathbf{x})] = N \mathbf{x}'_s (X'X)^{-1} \mathbf{x}_s.$$

실험계획에서 원점으로부터의 거리(반지름)를 r 이라 하고 이 r 에서의 초곡면(hypersphere)을 $U_r = \{\mathbf{x} | \sum_{i=1}^k x_i^2 = r^2\}$ 라 하자. p 를 0과 1 사이의 실수라 하고 $Q_r(p)$ 를 p 에 대응되는 $\phi(\mathbf{x})$ 에 대한 분위수라 하자. 그러면 우리는 임의의 r 에 대하여 p 를 x -축으로 하고, 대응되는 $Q_r(p)$ 를 y -축으로 하는 분위수그림을 작성할 수가 있다. Khuri 등 (1996)이 제안한 분위수그림이란, 분석대상인 실험계획에 대하여 관심이 있는 여러 개의 거리 r 각각에 대한 분위수그림을 그린 후 하나의 그림으로 모아놓은 그림이다.

우리는 Khuri 등 (1996)이 제안한 분위수그림을 그리기 위해서는 여러 개의 거리 r 에 대한 분위수그림을 각각 그려야 한다. 또한 모든 거리에 대한 분위수 그림을 그릴 수는 없으므로 시행착오적으로 관심이 있는 거리들을 선택하여야 한다. 이 때 이러한 작업을 쉽게 동적(dynamic)으로 해결할 수 있는 하나의 그래픽 도구가 필요하다. 이 그래픽 도구가 분위수그림을 애니메이션화한 동적분위수그림(animated quantile plot)이다. pop-up 메뉴로 나타나는 슬라이드바를 이용하여 실험계획에서의 거리를 조정하면 동적으로 이 거리에 대응되는 분위수그림이 화면에 나타나 추정반응값분산의 분포를 알 수 있고 구조의 특징을 한 눈에 확인할 수 있다. 슬라이드바를 이용하여 선택된 거리 r 에 대응되는 U_r 상에서 충분한 개수(예로 1,000에서 10,000개)의 점들을 랜덤하게 선택하여 이 거리에 대한 분위수그림을 그린다. 슬라이드바를 좌우로 움직이며 추정반응값분산의 분포의 변화를 동적으로 확인할 수 있다. 복수개의 실험 계획을 비교하기 위해서 대상 실험계획들에 대한 동적분위수그림들을 한 화면에 나타내어 서로 비교해 보면 된다. 그러면 어떤 실험계획이 어떤 거리에서 더 좋은 지 동적으로 바로 비교, 평가할 수 있다.

3. 수치 예

이 절에서 언급되는 예들 중 앞의 두 개의 예들은 Khuri 등 (1996)이 제안한 분위수그림과 비교하기 위하여 이 논문에서 언급한 예들을 활용하였다. 세 개의 예들에서 언급되는 동적분위수그림들은 모두 R 통계패키지를 이용하여 작성되었다.

예제 3.1: 요인의 개수가 $k = 3$ 일때 실험점의 개수가 18개이고 $\alpha = 1$ 이고 원점이 4개인 중심합성계획 CCD와 실험점의 개수가 16개이고 원점이 4개인 BBD(Box-Behnken design)를 비교하여 보자. 이 두 실험계획들을 서로 비교하기 위해서는 모든 실험계획점들이 반지름 $\sqrt{3}$ 인 구 안에 들어가도록 스케일링을 행하여야 한다. Khuri 등 (1996)에서는 4개의 거리 $r = 0.5, 0.7, 1.1, 1.7$ 에 대한 분위수그림 4개를 이용하여 CCD와 BBD를 비교하였다. 두 실험계획을 더 자세히 비교하기 위해서는 더 많은 거리가 필요하고 당연히 분위수그림도 증가하게 된다. 이 때 우리는 동적분위수그림을 이용하면 동적으로 두 개의 실험계획을 비교할 수가 있다. pop-up 메뉴로 나타나는 슬라이드바를 이용하여 실험계획에서의 거리를 조정하면 동적으로 이 거리에 대응되는 두 개의 분위수그림(CCD와 BBD에 대응되는 분위수그림)이 한 화면에 나타나 추정반응값분산의 분포들을 알 수 있고 구조의 특징을 한 눈에 확인할 수 있다. 슬라이드바를 좌우로 움직이며 추정반응값분산의 분포들의 변화를 동적으로 확인할 수 있어 어떤 실험계획이 어떤 거리에서 더 좋은 지 동적으로 바로 비교, 평가할 수가 있게 된다.

다음 그림 3.1~3.3은 CCD와 BBD를 비교할 때 결정적 단서가 될 수 있는 거리들에 대한 동적분위수그림 화면을 나타낸 그림들이다. 우리는 pop-up 메뉴로 나타나는 슬라이드바를 좌우로 움직이며 추정반응값분산의 분포들의 변화를 동적으로 확인하며 이러한 거리들을 찾아낼 수 있다. 그림 3.1에서 보는 것처럼 $r = 0 \sim 0.62$ 에서는 작은 차이지만 CCD가 BBD보다 우세하다. 그러나 $r = 0.62 \sim 1.01$ 에서는 우열을 가릴 수가 없다. 그림 3.2의 왼쪽 그림에서 보는 것처럼 p 가 작은 영역에서는 CCD가 더 우세하고 p 가 큰 영역에서는 BBD가 더 우세하다. 단 r 이 커지면서 조금씩 BBD가 CCD보다 우세하기 시작한다. $r = 1.01$ 이상에서는 BBD가 CCD보다 우세하다. 거리에 따라 CCD가 좋기도 하고 BBD가 좋기도 하나 전반적으로는 BBD가 더 좋은 실험계획이라는 결론에 도달하게 된다. 또한 CCD는 회전계획(rotatable design)이 되지 않으나 BBD는 거의 회전계획(nearly rotatable design)에 가까운 실험계획임을 알 수 있다.

예제 3.2: 요인의 개수가 $k = 2$ 일 때 실험점의 개수가 10개이고 $\alpha = 0.45$ 이고 원점이 2개인 중심합성계획 CCD와 실험점의 개수가 10개이고 실험점이 $(0.15, 0.25)$, $(-0.35, 0.40)$, $(-0.60, 0.85)$, $(-0.90, -0.10)$, $(-0.45, -0.15)$, $(-0.35, -0.90)$, $(-0.35, -0.90)$, $(0.45, -0.10)$, $(0.60, -0.15)$, $(0.65, -0.60)$ 인 실험계획 $D1$ 을 비교하여 보자. 이 두 실험계획들을 서로 비교하기 위해서는 모든 실험계획점들이 반지름 $\sqrt{2}$ 인 구 안에 들어가도록 스케일링을 행하여야 한다. Khuri 등 (1996)에서는 4개의 거리 $r = 0.8, 0.9, 1.1, 1.4$ 에 대한 분위수그림 4개를 이용하여 CCD와 $D1$ 을 비교하였다. 두 실험계획을 더 자세히 비교하기 위해서는 더 많은 거리가 필요하고 당연히 분위수그림도 증가하게 된다. 이 때 우리는 동적분위수그림을 이용하면 동적으로 두 개의 실험계획을 비교할 수가 있다. pop-up 메뉴로 나타나는 슬라이드바를 이용하여 실험계획에서의 거리를 조정하면 동적으로 이 거리에 대응되는 두 개의 분위수그림(CCD와 $D1$ 에 대응되는 분위수그림)이 한 화면에 나타나 추정반응값분산의 분포들을 알 수 있고 구조의 특징을 한 눈에 확인할 수 있다. 슬라이드바를 좌우로 움직이며 추정반응값분산의 분포들의 변화를 동적으로 확인할 수 있어 어떤 실험계획이 어떤 거리에서 더 좋은 지 동적으로 바로 비교, 평가할 수가 있게 된다.

다음 그림 3.4와 3.5는 CCD와 $D1$ 을 비교할 때 결정적 단서가 될 수 있는 4개의 거리에 대한 동적분위

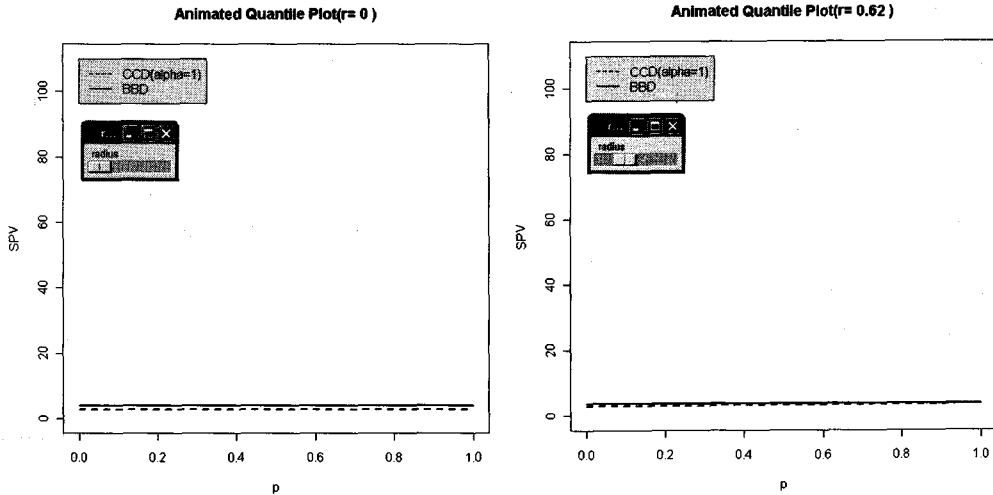


그림 3.1. CCD와 BBD 비교에서 $r = 0$ 와 $r = 0.62$ 에 대응되는 동적분위수그림들

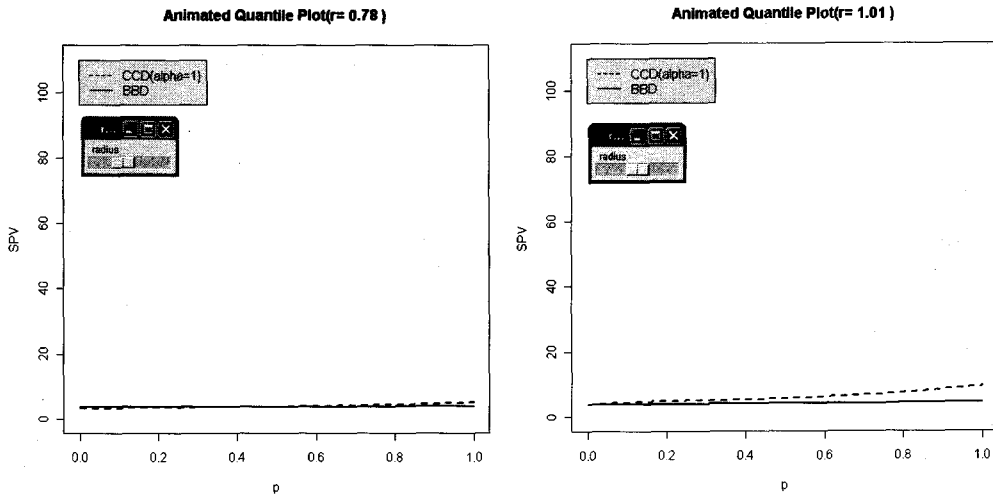


그림 3.2. CCD와 BBD 비교에서 $r = 0.78$ 과 $r = 1.01$ 에 대응되는 동적분위수그림들

수그림 화면을 나타낸 그림들이다. 우리는 pop-up 메뉴로 나타나는 슬라이드바를 좌우로 움직이며 추정반응값분산의 분포들의 변화를 동적으로 확인하며 이러한 거리들을 찾아낼 수 있다. $r = 0 \sim 0.41$ 에서는 작은 차이지만 CCD가 $D1$ 보다 우세하다. 그러나 $r = 0.41$ 이상에서는 $D1$ 이 CCD보다 우세하다. $r = 0.41 \sim 1.07$ 에서는 CCD와 $D1$ 의 분위수 최소값과 최대값이 비슷한 값을 갖는 경향을 띠나 분위수 구조는 아주 다름을 알 수 있다. $r = 1.07$ 이상에서는 CCD와 $D1$ 의 분위수 최소값은 비슷한 값을 갖는 경향을 띠나 분위수 최대값은 거리가 커질수록 점점 차이가 많이 나게 되는 경향을 띤다. 물론 CCD와 $D1$ 모두 비 회전계획임을 알 수 있다.

예제 3.3: 요인의 개수가 $k = 3$ 일 때 실험점의 개수가 18개이고 $\alpha = 1$ 이고 원점이 4개인 중심합성계

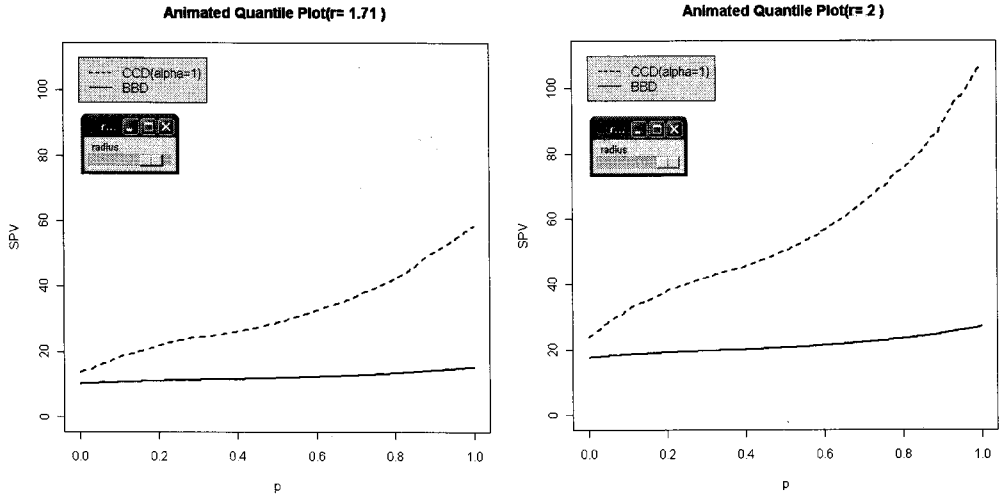


그림 3.3. CCD와 BBD 비교에서 $r = 1.71$ 과 $r = 2$ 에 대응되는 동적분위수그림들

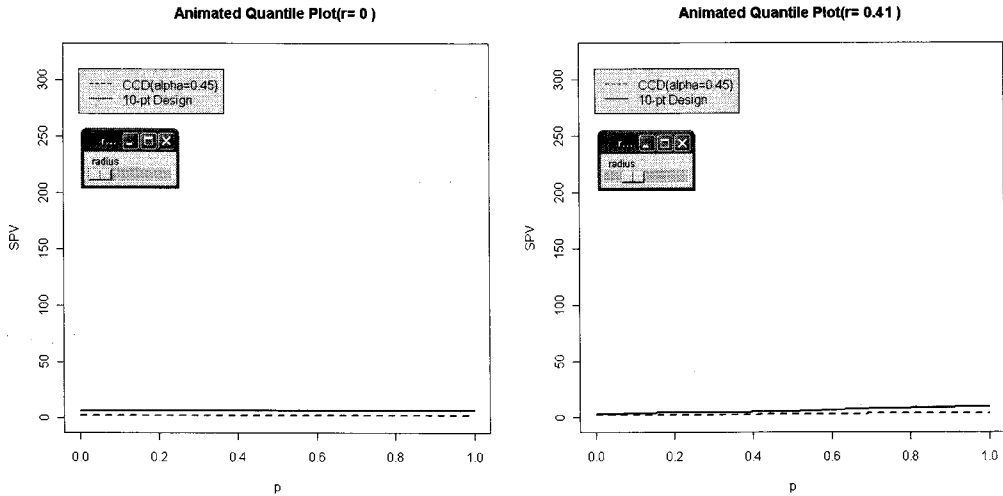


그림 3.4. CCD와 D_1 비교에서 $r = 0$ 와 $r = 0.41$ 에 대응되는 동적분위수그림들

확 CCD와 실험점의 개수가 18개이고 $\alpha = 8^{1/4}$ 이고 원점이 4개인 CCD를 비교하여 보자. 우리는 동적분위수그림을 이용하면 동적으로 두 개의 실험계획을 비교할 수가 있다. pop-up 메뉴로 나타나는 슬라이드바를 이용하여 실험계획에서의 거리를 조정하면 동적으로 이 거리에 대응되는 두 개의 분위수그림(CCD($\alpha = 1$)와 CCD($\alpha = 8^{1/4}$))에 대응되는 분위수그림이 한 화면에 나타나 추정반응값분산의 분포들을 알 수 있고 구조의 특징을 한 눈에 확인할 수 있다. 슬라이드바를 좌우로 움직이며 추정반응값분산의 분포들의 변화를 동적으로 확인할 수 있어 어떤 실험계획이 어떤 거리에서 더 좋은 지 동적으로 바로 비교, 평가할 수가 있게 된다.

다음 그림 3.6과 3.7은 CCD($\alpha = 1$)와 CCD($\alpha = 8^{1/4}$)를 비교할 때 결정적 단서가 될 수 있는 4개의 거리에 대한 동적분위수그림 화면을 나타낸 그림들이다. 우리는 pop-up 메뉴로 나타나는 슬라이드

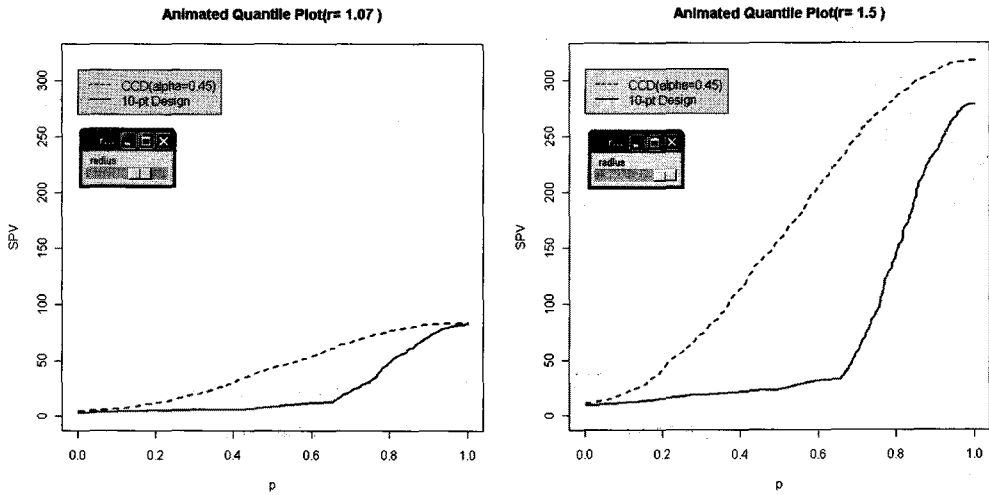


그림 3.5. CCD와 D_1 비교에서 $r = 1.07$ 과 $r = 1.5$ 에 대응되는 동적분위수그림들

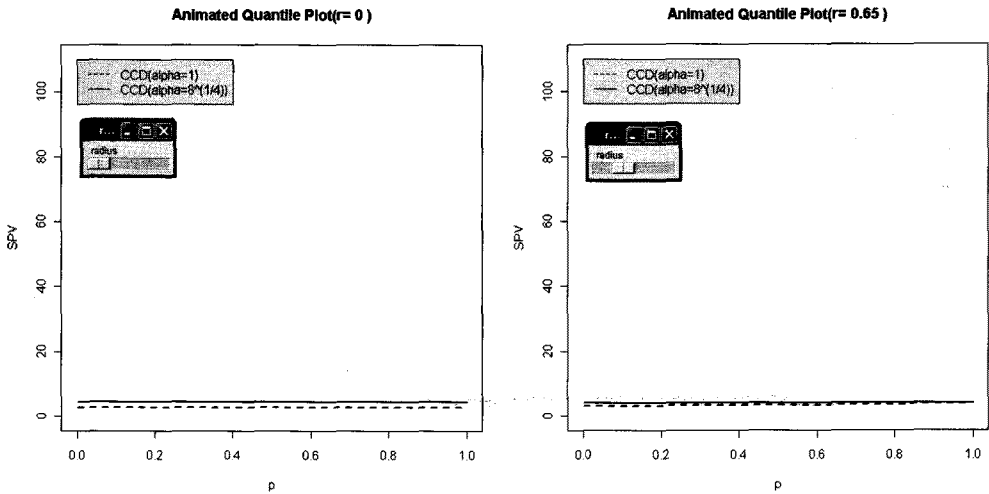


그림 3.6. $CCD(\alpha = 1)$ 과 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 비교에서 $r = 0$ 와 $r = 0.65$ 에 대응되는 동적분위수그림들

비를 좌우로 움직이며 추정반응값분산의 분포들의 변화를 동적으로 확인하며 이러한 거리들을 찾아낼 수 있다. $r = 0 \sim 0.65$ 에서는 작은 차이지만 $CCD(\alpha = 1)$ 가 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 보다 우세하다. 그러나 $r = 0.65 \sim 1.09$ 에서는 우열을 가릴 수가 없다. p 가 작은 영역에서는 $CCD(\alpha = 1)$ 가 더 우세하고 p 가 큰 영역에서는 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 가 더 우세하다. 단 r 이 커지면서 조금씩 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 가 $CCD(\alpha = 1)$ 보다 우세하기 시작한다. $r = 1.09$ 이상에서는 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 가 $CCD(\alpha = 1)$ 보다 우세하다. 거리에 따라 $CCD(\alpha = 1)$ 가 좋기도 하고 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 가 좋기도 하나 전반적으로는 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 이 더 좋은 실험계획이라는 결론에 도달하게 된다. 또한 $CCD(\alpha = 1)$ 는 회전계획이 되지 않으나 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 는 회전계획임을 알 수 있다.

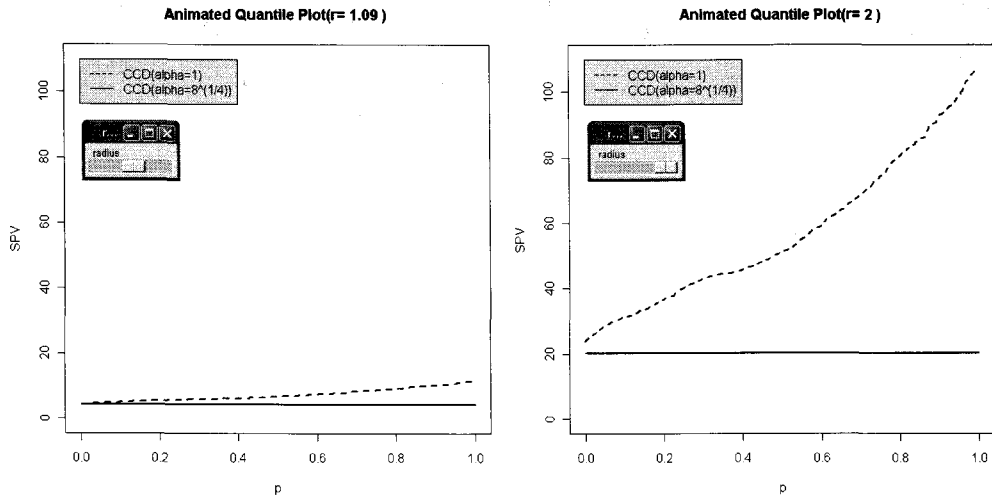


그림 3.7. $CCD(\alpha = 1)$ 과 $CCD(\alpha = 8^{1/4})$ 비교에서 $r = 1.09$ 와 $r = 2$ 에 대응되는 동적분위수그림들

4. 결론

분위수그림을 애니메이션화한 동적분위수그림은 실험계획에서의 거리를 연속적으로 변경시키며 동적으로 분위수그림을 구현하여 볼 수 있는 그래픽 도구이다. 이 동적분위수그림을 이용하여 우리는 반응표면실험계획들이 갖는 추정반응값분산의 분포들을 서로 비교, 평가할 수 있다.

참고문헌

- Anderson-Cook, C. M., Borror, C. M. and Montgomery, D. C. (2009). Response surface design evaluation and comparison, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **139**, 629–641.
- Giovannitti-Jensen, A. and Myers, R. H. (1989). Graphical assessment of the prediction capability of response surface designs, *Technometrics*, **31**, 159–171.
- Jang, D. and Park, S. (1993). A measure and a graphical method for evaluating slope rotatability in response surface designs, *Communications in Statistics-Theory and Methods*, **22**, 1849–1863.
- Khuri, A. I. (1997). Quantile dispersion graphs for analysis of variance estimates of variance components, *Journal of Applied Statistics*, **24**, 711–722.
- Khuri, A. I., Kim, H. J. and Um, Y. (1996). Quantile plots of the prediction variance for response surface designs, *Computational Statistics and Data Analysis*, **22**, 395–407.
- Khuri, A. I. and Lee, J. (1998). A graphical approach for evaluating and comparing designs for nonlinear models, *Computational Statistics and Data Analysis*, **27**, 433–443.
- Kim, H., Um, Y. and Khuri, A. I. (1996). Quantile plots of the average slope variance for response surface designs, *Communications in Statistics-Simulation and Computation*, **25**, 995–1014.
- Lee, J. and Khuri, A. I. (1999). Graphical technique for comparing designs for random models, *Journal of Applied Statistics*, **26**, 933–947.
- Lee, J. and Khuri, A. I. (2000). Quantile dispersion graphs for the comparison of designs for a random two-way model, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **91**, 123–137.
- Mukhopadhyay, S. and Khuri, A. I. (2008). Comparison of designs for multivariate generalized linear models, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **138**, 169–183.
- Myers, R. H. and Montgomery, D. C. (2002). *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization using Designed Experiments*, 2nd ed., Wiley, New York.

- Ozol-Godfrey, A., Anderson-Cook, C. M. and Robinson, T. J. (2007). Fraction of design space plots for generalized linear models, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **138**, 203–219.
- Robinson, K. S. and Khuri, A. I. (2003). Quantile dispersion graphs for evaluating and comparing designs for logistic regression models, *Computational Statistics and Data Analysis*, **43**, 47–62.
- Zahran, A., Anderson-Cook, C. M. and Myers, R. H. (2003). Fraction of design space to assess the prediction capability of response surface designs, *Journal of Quality Technology*, **35**, 377–386.

Animated Quantile Plots for Evaluating Response Surface Designs

Dae-Heung Jang¹

¹Department of Statistics, Pukyong National University

Abstract

The traditional methods for evaluating response surface designs are alphabetic optimality criteria. These single-number criteria such as D-, A-, G- and V-optimality do not completely reflect the prediction variance characteristics of the design in question. Alternatives to single-numbers summaries include graphical displays of the prediction variance across the design regions. We can suggest the animated quantile plots as the animation of the quantile plots and use these animated quantile plots for comparing and evaluating response surface designs.

Keywords: Response surface designs, alphabetic optimality, animated quantile plots.

¹Professor, Department of Statistics, Pukyong National University, 599-1 Daeyeon-dong, Nam-gu, Busan 608-737, Korea. E-mail: dhjang@pknu.ac.kr