중심합성 계획법(central composite design, CCD)

# 1. 중심합성 계획법의 이론적 배경

중심합성 계획법(central composite design, CCD)은 반응 표면 설계(Respons Surface Methodology, RSM)에서 널리 사용되는 실험 설계 방법 중 하나입니다. CCD는 반응 변수와 독립 변수들 간의 비선형 관계를 탐색하고, 최적화하기 위한 2차 회귀 모델(Second-Order Regression Model)을 적합하는 데 특히 유용합니다.

## 1.1 CCD의 구성 요소

CCD는 세 가지 주요 구성 요소로 이루어집니다:  
1. \*\*2수준 요인 실험(Factorial or Fractional Factorial Design)\*\*: 기본적인 실험 설계로, 각 독립 변수에 대해 상한(고수준)과 하한(저수준)에서 실험을 수행합니다. 이 단계에서는 선형 효과와 상호작용 효과를 평가할 수 있습니다.  
2. \*\*축점(Axial Points)\*\*: 각 독립 변수의 중심점에서 멀리 떨어진 지점에서 실험을 수행하여, 비선형 효과(2차 효과)를 평가할 수 있도록 합니다. 축점은 중심점에서 일정한 거리(알파, α 값)로 떨어져 있습니다.  
3. \*\*중앙점(Center Points)\*\*: 모든 독립 변수의 중간 값에서 수행되는 실험으로, 실험의 반복성과 비선형성을 평가하기 위해 사용됩니다.

## 1.2 CCD의 종류

CCD는 구성 방식에 따라 몇 가지 유형으로 나눌 수 있습니다:  
1. \*\*구형 CCD(Spherical CCD)\*\*: 축점이 구의 표면에 위치하도록 설정하는 디자인입니다. 이 경우, α 값은 √k (k는 요인의 수)로 설정됩니다. 이 설계는 대칭성을 유지하며, 전체 실험 공간을 균등하게 탐색할 수 있습니다.  
2. \*\*적재형 CCD(Face-Centered CCD)\*\*: 축점이 요인의 고수준과 저수준의 경계에 위치합니다. 즉, α 값이 1로 설정됩니다. 이 설계는 실험 공간의 경계에 대한 정보를 집중적으로 탐색하는 데 유리합니다.  
3. \*\*정사각형 CCD(Cubic CCD)\*\*: 축점이 정사각형의 모서리에 위치하는 디자인입니다. 이 경우, 실험 공간을 탐색하는 데 균형을 잡지만, 일부 축점이 실험 범위 밖으로 벗어날 수 있습니다.

# 2. 중심합성 계획법의 수학적 모델

CCD는 2차 회귀 모델(Quadratic Regression Model)을 적합하기 위해 설계됩니다. 이 모델은 반응 변수 y와 독립 변수 x₁, x₂, ..., xₖ 사이의 관계를 수학적으로 표현하며, 다음과 같은 일반적인 형태를 가집니다:

y = β₀ + Σβᵢxᵢ + Σβᵢᵢxᵢ² + Σβᵢⱼxᵢxⱼ + ε  
여기서:  
- y는 반응 변수입니다.  
- xᵢ는 독립 변수입니다.  
- β₀는 절편입니다.  
- βᵢ는 각 독립 변수의 1차 효과를 나타내는 회귀 계수입니다.  
- βᵢᵢ는 각 독립 변수의 2차 효과를 나타내는 회귀 계수입니다.  
- βᵢⱼ는 독립 변수 간의 상호작용 효과를 나타내는 회귀 계수입니다.  
- ε는 오차 항입니다.

이 모델을 통해 실험 데이터로부터 독립 변수들이 반응 변수에 미치는 비선형 영향을 분석하고, 최적화된 조합을 찾아낼 수 있습니다.

# 3. 중심합성 계획법의 적용 과정

CCD를 적용하기 위해서는 다음과 같은 단계를 거칩니다:

## 3.1 실험 계획 수립

1. \*\*요인 선택\*\*: 실험에서 분석하고자 하는 독립 변수(요인)들을 선택합니다. 예를 들어, 온도, 시간, 압력 등이 될 수 있습니다.  
2. \*\*수준 결정\*\*: 각 요인에 대한 실험 수준(고수준, 저수준, 중심점)을 설정합니다. 이때, 축점의 위치를 결정하기 위해 α 값도 설정합니다.  
3. \*\*실험 매트릭스 작성\*\*: CCD를 기반으로 실험 매트릭스를 작성합니다. 이 매트릭스는 요인의 모든 조합에 대한 실험 조건을 포함합니다.

# 4. 실제 사례: 화학 공정에서의 중심합성 계획법 적용

## 4.1 사례 개요

한 화학 공정에서 촉매 농도, 반응 시간, 반응 온도가 최종 제품의 수율에 미치는 영향을 분석하고 최적화하려고 합니다. 목표는 최적의 조건에서 최대 수율을 달성하는 것입니다.

## 4.2 실험 계획 수립

- \*\*요인 선택\*\*: 촉매 농도(X1), 반응 시간(X2), 반응 온도(X3)를 선택합니다.  
- \*\*수준 결정\*\*: 각 요인에 대해 고수준(+)과 저수준(-)을 설정하고, 중심점(0)과 축점(α)을 추가로 설정합니다.  
 - 촉매 농도: 0.5%(-), 1.5%(0), 2.5%(+)  
 - 반응 시간: 1시간(-), 3시간(0), 5시간(+)  
 - 반응 온도: 100℃(-), 150℃(0), 200℃(+)  
- \*\*α 값 설정\*\*: 구형 CCD를 사용하여 α 값을 √3 ≈ 1.732로 설정합니다.

## 4.3 실험 수행

설계된 매트릭스에 따라 실험을 수행하고, 각 조건에서 수율(%)을 측정합니다.

## 4.4 모델 적합화

수집된 데이터를 사용하여 2차 회귀 모델을 적합합니다. 이 모델을 통해 요인 간의 상호작용과 비선형 효과를 분석합니다.

y = β₀ + β₁X₁ + β₂X₂ + β₃X₃ + β₁₁X₁² + β₂₂X₂² + β₃₃X₃² + β₁₂X₁X₂ + β₁₃X₁X₃ + β₂₃X₂X₃ + ε

## 4.5 반응 표면 분석

모델을 사용하여 3D 표면 플롯과 등고선 플롯을 작성하여, 반응 표면의 최적점을 탐색합니다. 분석 결과, 반응 온도 180℃, 반응 시간 4시간, 촉매 농도 1.8%에서 최대 수율(예: 95%)을 달성할 수 있다는 결론을 도출할 수 있습니다.

# 5. 결론

중심합성 계획법(central composite design, CCD)은 반응 표면 설계에서 매우 중요한 역할을 합니다. CCD는 독립 변수들이 반응 변수에 미치는 비선형 효과를 효율적으로 분석할 수 있도록 하며, 이를 통해 최적화된 조건을 찾을 수 있습니다. CCD는 다양한 산업 분야에서 공정 최적화, 제품 개선, 연구 개발 등에 광범위하게 활용되고 있으며, 체계적인 접근을 통해 실험 자원을 효율적으로 활용하면서도 신뢰성 높은 결과를 얻을 수 있습니다.