

제14강(11장)

반응표면분석

- 11.1 반응표면분석이란?
- 11.2 최대경사법
- 11.3 이차 반응표면모형 적합을 위한
실용적인 실험계획
- 11.4 반응표면분석의 순서

| 제14강 반응표면분석

11.1 반응표면분석이란?

11.1 반응표면분석이란?

◆ 관심사

- 실험조건에서의 최적조건을 찾기보다 실험조건 주위의 관심영역 전체에서 최적조건을 찾고 싶다.
- 계량인자의 경우 회귀분석을 활용하여 최적 공정조건을 파악하고 싶다.

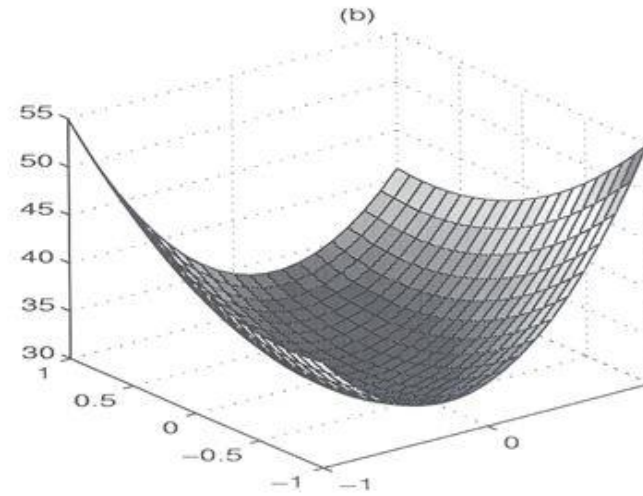
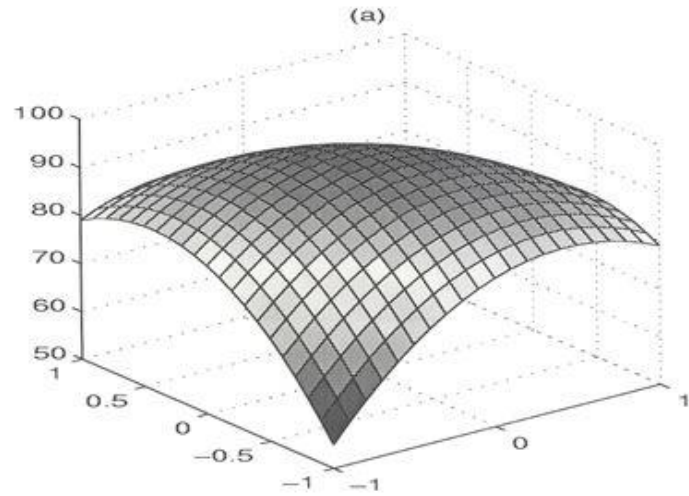
◆ 반응표면분석 3단계

- 단계 0 : 일부실험법으로 핵심인자 선별(교재 8, 9장)
- 단계 1 : 선별된 핵심인자들에 대한 축차적인 실험으로 최적조건 근처의 영역으로 이동 (최대경사법)
- 단계 2 : 최적조건 근처에서 이차모형을 가정하고 중심합성설계로 각 인자의 최적조건 찾고 재현

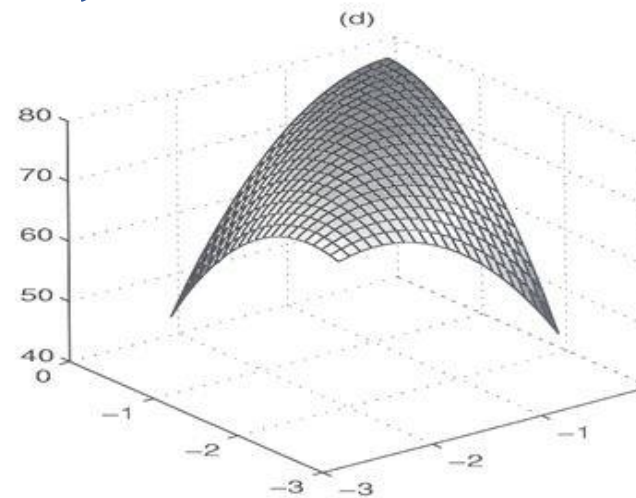
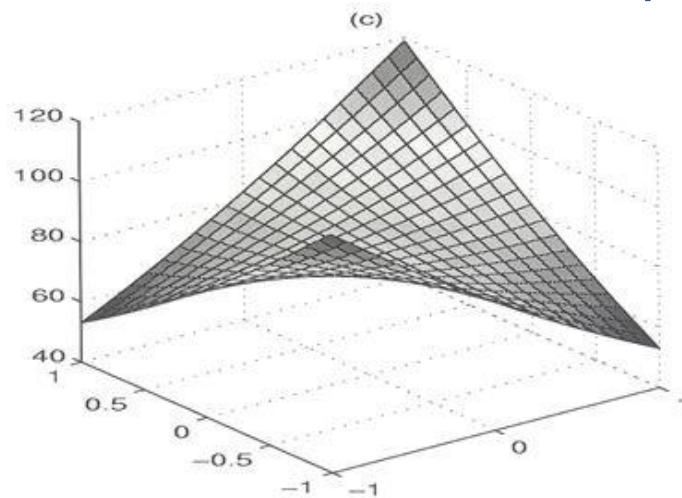
◆ 독립변수와 반응변수와의 관계 $\eta = f(t, T)$

- 독립변수 : 반응시간 t , 반응온도 T
- 반응변수 : 수율 y [앞의 $\eta = E(y)$]

11.1 반응표면분석이란?



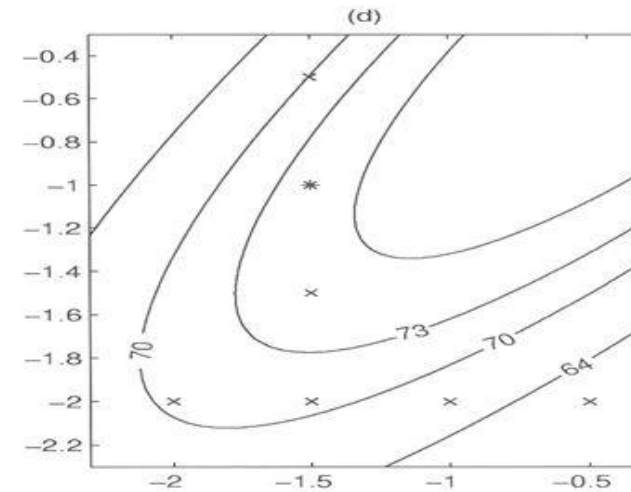
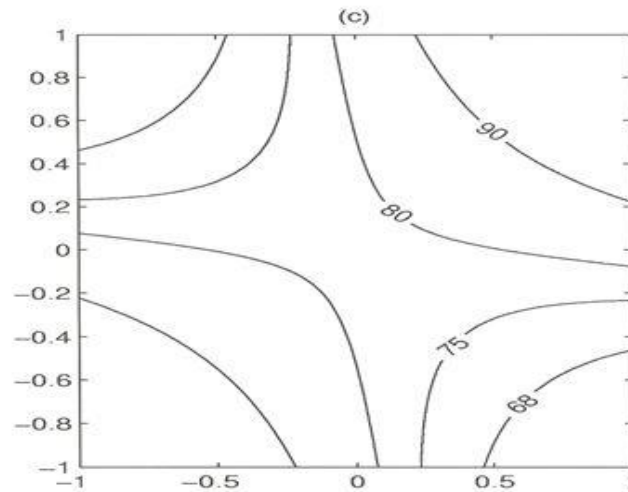
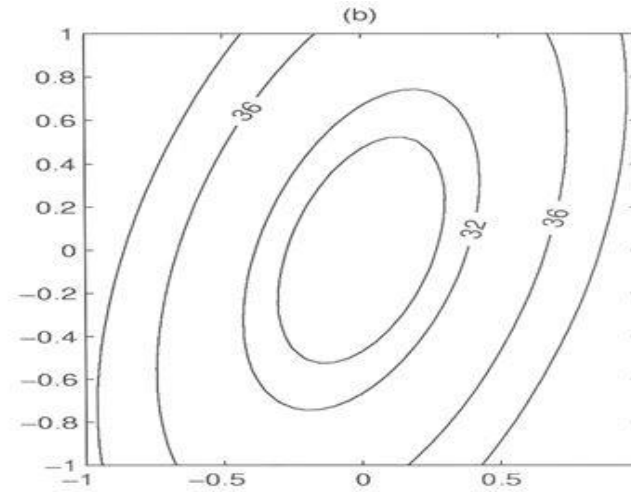
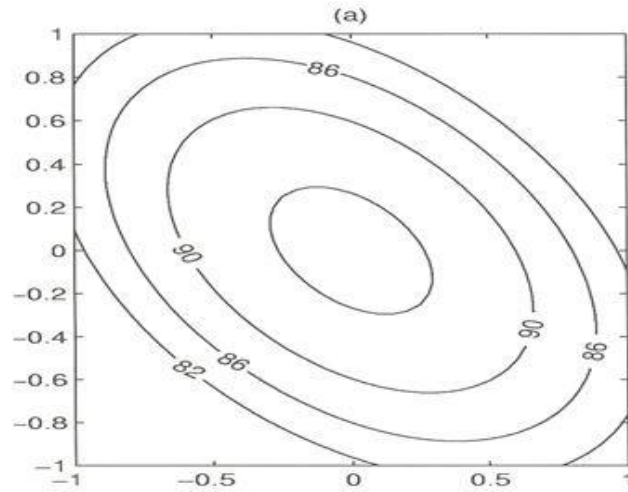
$$\eta = f(t, T)$$



(a) 산 (b) 사발 (c) 말안장 (d) 올라가는 능선

[그림 11-1] 반응표면의 네 가지 형태

11.1 반응표면분석이란?



(a) 산 (b) 사발 (c) 말안장 (d) 올라가는 능선

[그림 11-2] 등고선그림의 네 가지 형태

| 제14강 반응표면분석

11.2 최대경사법

11.2 최대경사법 (method of steepest ascent)

◆ 부호화

$$(30\text{분}, 40\text{분}) \equiv (-1, 1) \rightarrow x_1 = \frac{time-35}{5}$$

$$(160^{\circ}C, 180^{\circ}C) \equiv (-1, 1) \rightarrow x_2 = \frac{Temp-170}{10}$$

일차모형이 적절한지 보는 실험설계 : 2^2 요인배치 + 중심점인 (0,0)에서 3회 실험

<표 11-1> 수율 자료

원래 변수		부호화한 변수		반응 값
<i>time</i>	<i>Temp</i>	x_1	x_2	y
30	160	-1	-1	72.5
30	180	-1	1	74.2
40	160	1	-1	76.3
40	180	1	1	77.0
35	170	0	0	74.8
35	170	0	0	75.6
35	170	0	0	75.2

11.2 최대경사법

R 실습

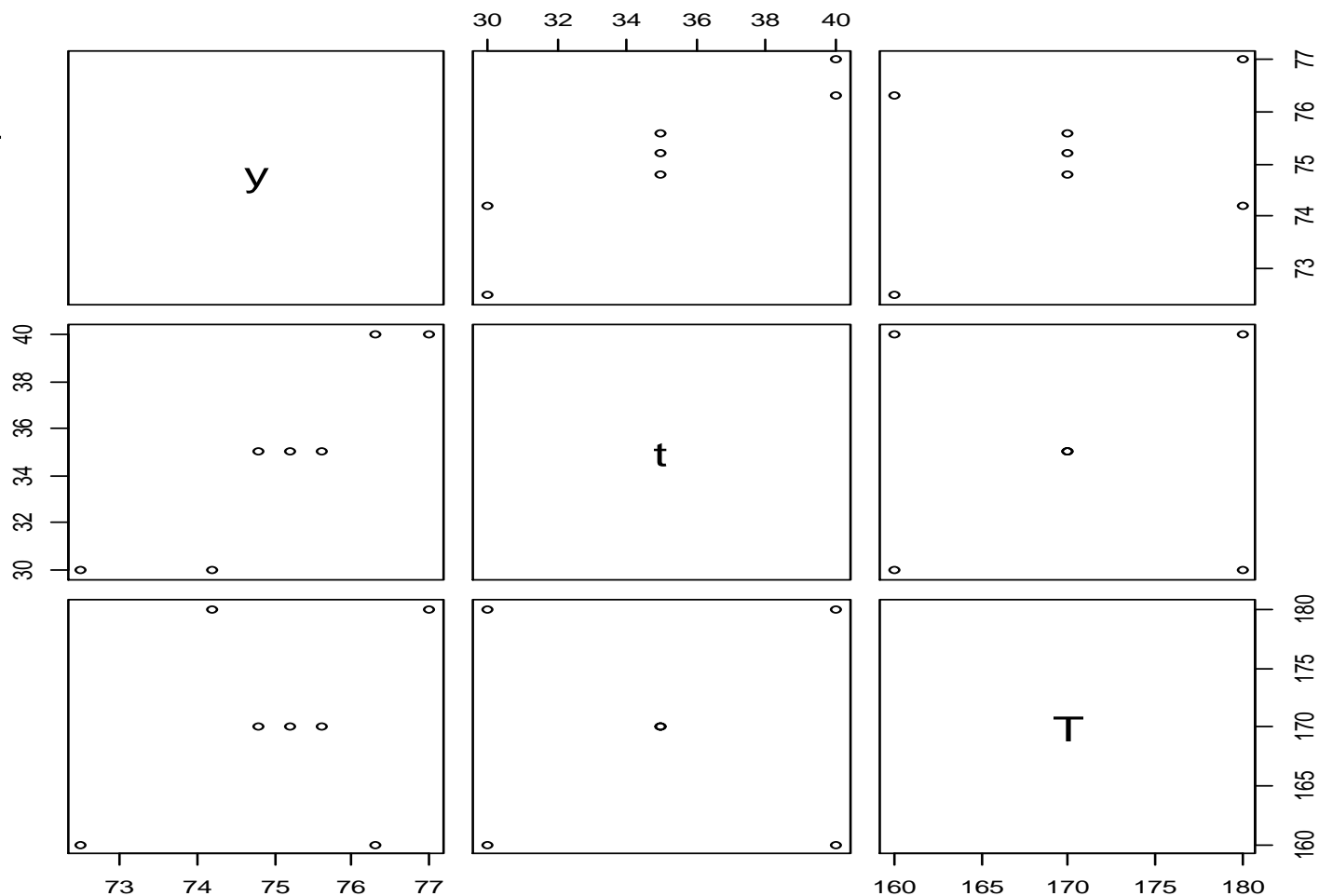
```
y <- c(72.5, 74.2, 76.3, 77, 74.8, 75.6, 75.2)
```

```
t <- c(30, 30, 40, 40, 35, 35, 35)
```

```
T <- c(160, 180, 160, 180, 170, 170, 170)
```

```
yield.data <- data.frame(y, t, T)
```

```
pairs(yield.data)
```



11.2 최대경사법

R 실습

```
c.t <- (t-35)/5
```

```
c.T <- (T-170)/10
```

```
reduced.model <- lm(y ~ c.t+c.T)
```

```
summary(reduced.model)
```

$$y = 75.0857 + 1.65x_1 + 0.6x_2$$

Call:

```
lm(formula = y ~ c.t + c.T)
```

Residuals:

1	2	3	4	5	6	7
-0.3357	0.1643	0.1643	-0.3357	-0.2857	0.5143	0.1143

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	75.0857	0.1510	497.201	9.82e-11	***
c.t	1.6500	0.1998	8.259	0.00117	**
c.T	0.6000	0.1998	3.003	0.03981	*

Signif. codes:

0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.3996 on 4 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.9508, Adjusted R-squared: 0.9261

F-statistic: 38.62 on 2 and 4 DF, p-value: 0.002425

11.2 최대경사법

R 실습

```
full.model <- lm(y ~ c.t*c.T)
```

```
summary(full.model)
```

Call:

```
lm(formula = y ~ c.t * c.T)
```

Residuals:

1	2	3	4	5	6	7
-0.08571	-0.08571	-0.08571	-0.08571	-0.28571	0.51429	0.11429

Coefficients:

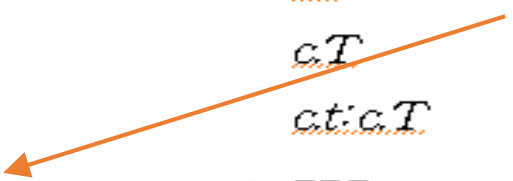
	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	75.0857	0.1360	551.990	1.31e-08	***
c.t	1.6500	0.1799	9.169	0.00274	**
c.T	0.6000	0.1799	3.334	0.04458	*
c.t:c.T	-0.2500	0.1799	-1.389	0.25890	

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.3599 on 3 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.97, Adjusted R-squared: 0.9401

F-statistic: 32.37 on 3 and 3 DE, p-value: 0.008725


$$y = 75.0857 + 1.65x_1 + 0.6x_2 - 0.25x_1x_2$$

11.2 최대경사법

R 실습

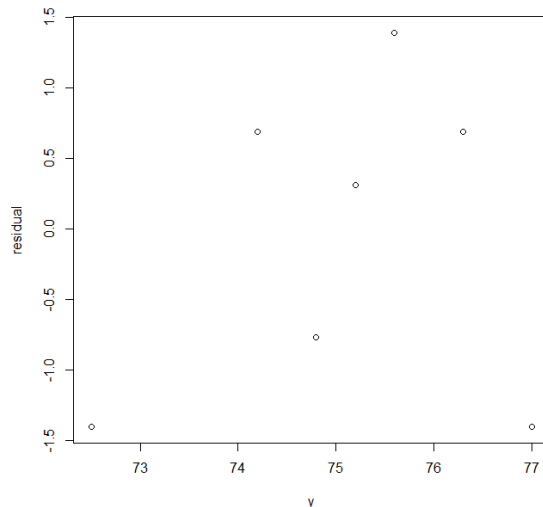
```
anova(reduced.model, full.model)
```

Analysis of Variance Table

Model 1: $y \sim ct + cT$

*Model 2: $y \sim ct * cT$*

	<u>Res.Df</u>	<u>RSS</u>	<u>Df</u>	<u>Sum of Sq</u>	<u>F</u>	<u>Pr(>F)</u>
1	4	0.63857				
2	3	0.38857	1	0.25	1.9301	0.2589



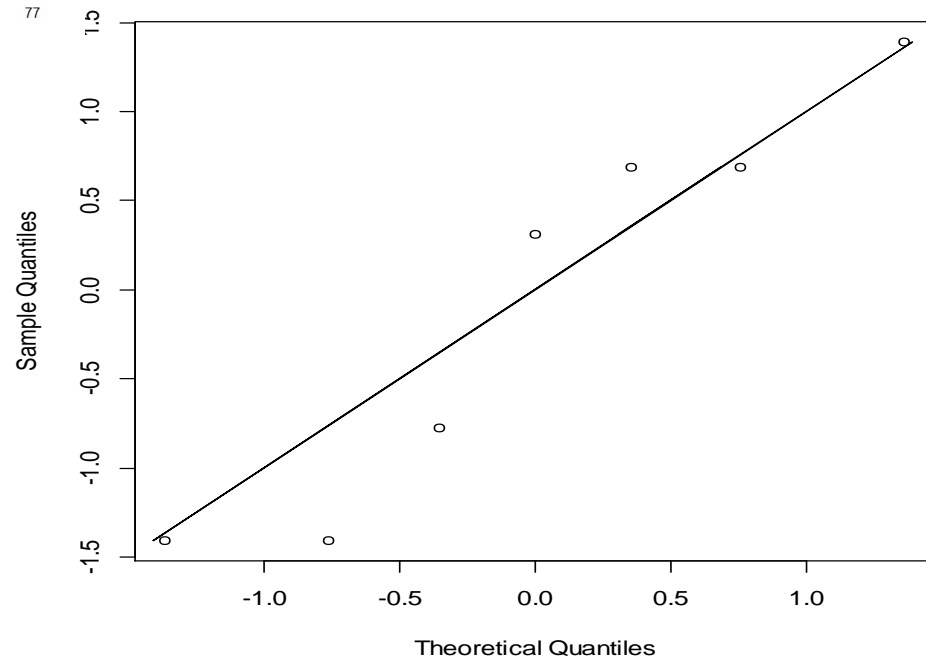
```
residual <- rstandard(reduced.model)
```

```
plot(y, residual)
```

```
qqnorm(residual)
```

```
lines(residual, residual)
```

Normal Q-Q Plot



최종 모델: $y = 75.0857 + 1.65x_1 + 0.6x_2$

11.2 최대경사법

<표 11-1> 수율 자료

원래 변수		부호화한 변수		반응 값	곡면성? 평균=75 VS 평균=75.2
<i>time</i>	<i>Temp</i>	x_1	x_2	y	
30	160	-1	-1	72.5	}
30	180	-1	1	74.2	
40	160	1	-1	76.3	
40	180	1	1	77.0	
35	170	0	0	74.8	}
35	170	0	0	75.6	
35	170	0	0	75.2	

11.2 최대경사법

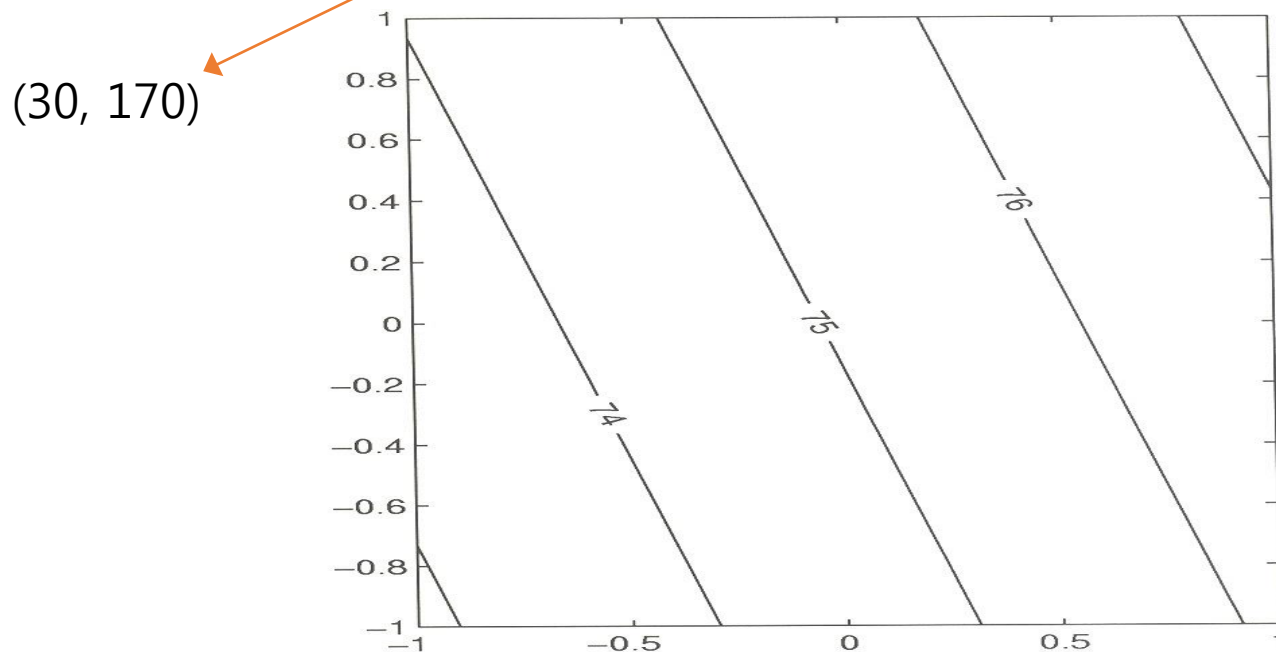
◆ 최대경사법(method of steepest ascent)

추정된 회귀식 $\hat{y} = 75.00 + 1.65x_1 + 0.6x_2$

x_1 방향으로 1.65 단위의 증가할 때 방향으로 1.65

x_2 방향으로 0.6 단위 증가시킴 ($0.6/1.65=0.364$)

중심점 (0, 0)을 기준으로 $\Delta = (1, 0.364)$ 만큼씩 증가시킴



[그림 11-3] $\hat{y} = 75 + 1.65x_1 + 0.6x_2$ 의 등고선 그림

11.2 최대경사법

<표 11-2> 최대경사법 실험 결과 y 와 예측치 \hat{y}

(0, 0) +	(x_1, x_2)	(t, T)	y (\hat{y})
	Δ	(40, 173.6)	77.1 (> 76.87)
	2 Δ	(45, 177.3)	77.9 (> 78.74)
	3 Δ	(50, 180.9)	80.9 (> 80.61)
	4 Δ	(55, 184.6)	78.0 (< 82.47)

제14강 반응표면분석

11.3 이차 반응표면모형 적합을 위한 실용적인 실험계획

11.3 이차 반응표면모형 적합을 위한 실용적인 실험계획

- T : 마감온도
- C : 냉각온도 $\rightarrow y$: 비닐봉지의 접착력
- P : 폴리에틸렌 첨가제의 양

- 각각의 범위 : $(100^{\circ}C, 140^{\circ}C), (5^{\circ}C, 15^{\circ}C), (0.5\%, 1.7\%)$

$$x_1 = \frac{T-120}{20}, \quad x_2 = \frac{C-10}{5}, \quad x_3 = \frac{P-1.1}{0.6}$$

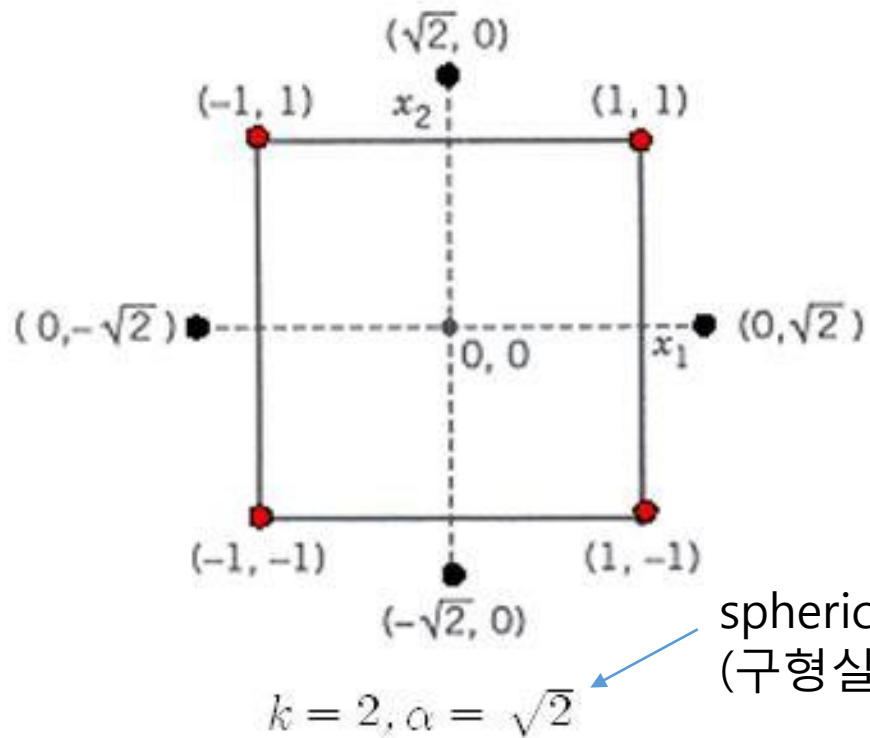
- 반응값 y 에 대한 2차 다항모형

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^3 \beta_i x_i + \sum_{i=1}^3 \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^2 \sum_{j=i+1}^3 \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad \text{--- (11.2)}$$

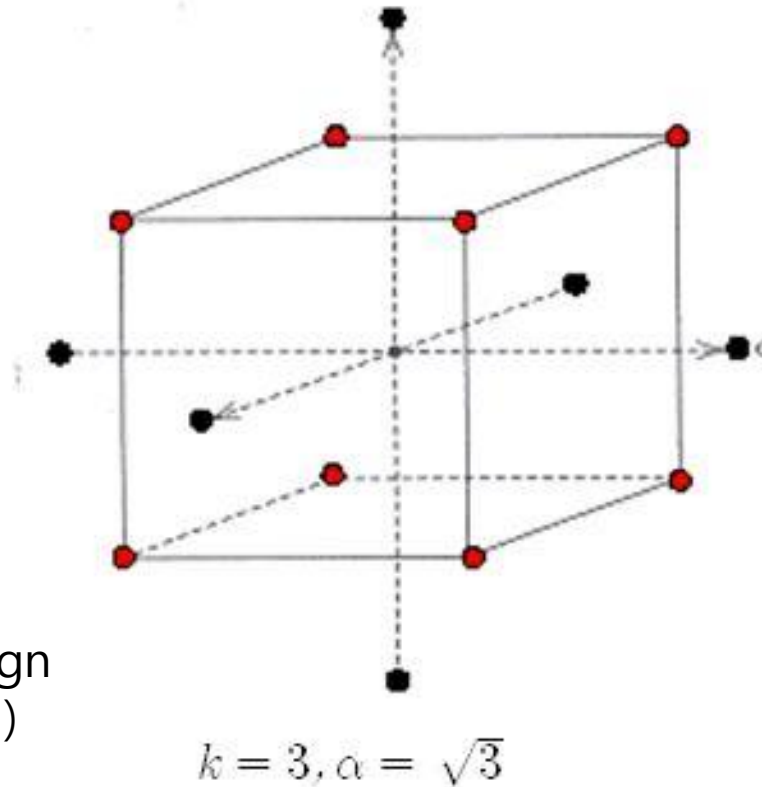
11.3 이차 반응표면모형 적합을 위한 실용적인 실험계획

◆ 중심합성계획(CCD: Central Composite Design)

2^n 상자점+중심점+축점(axial points)



spherical design
(구형실험계획)



<그림 11-4> 중심합성계획 그림 예

11.3 이차 반응표면모형 적합을 위한 실용적인 실험계획

<표 11-3> 중심합성계획 예 ($k = 3$ 인 경우)

X_1	X_2	X_3	y
-1	-1	-1	7.6
1	-1	-1	7.9
-1	1	-1	8.9
1	1	-1	7.1
-1	-1	1	10.2
1	-1	1	7.8
-1	1	1	11.9
1	1	1	8.3
0	0	0	11.5
0	0	0	11.2
0	0	0	13.8
0	0	0	10.7
0	0	0	11.0
0	0	0	10.9
0	0	0	10.8
-1.682	0	0	6.0
1.682	0	0	7.9
0	-1.682	0	7.3
0	1.682	0	5.0
0	0	-1.682	9.8
0	0	1.682	

rotatable design
(회전가능 실험계획)

$$\alpha = F^{1/4} = 8^{1/4}$$



제14강 반응표면분석

11.4 반응표면분석의 순서

11.4 반응표면분석의 순서

(1) 실험계획 단계

(2) 실험자료의 반응표면분석 단계

(3) 최적화 단계

(1) 실험계획 단계

- 2수준 요인배치법(혹은 일부실시법) 이용
 - 최대경사법 활용
 - 중심합성계획 수립

11.4 반응표면분석의 순서

(1) 실험계획 단계

(2) 실험자료의 반응표면분석 단계

실험자료를 잘 설명할 수 있는
적절한 모형 결정

(3) 최적화 단계

(2) 실험자료의 반응표면분석 단계

- 이차모형으로부터 모형 단순화
 - 모형의 진단(오차의 독립성, 정규성, 등분산성 점검)
 - 후보 모형의 반응표면과 등고선 그림 그리기

11.4 반응표면분석의 순서

(1) 실험계획 단계

(2) 실험자료의 반응표면분석 단계

(3) 최적화 단계

(3) 최적화 단계

- 반응변수의 예측치(반응표면)를 최적화시키는 최적조건을 관심영역에서 찾음

11.4 반응표면분석의 순서

R 실습

```
adh <- c(7.6, 7.9, 8.9, 7.1, 10.2, 7.8, 11.9, 8.3, 11.5, 11.2, 13.8, 10.7, 11, 10.9, 10.8, 6, 7.9, 7.3, 5, 9.8)
```

```
f.temp <- c(-1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1.682, 1.682, 0, 0, 0, 0)
```

```
c.temp <- c(-1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1.682, 1.682, 0, 0)
```

```
additive <- c(-1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1.682, 1.682)
```

```
adh.data <- data.frame(adh, f.temp, c.temp, additive)
```

```
install.packages('rsm')
```

```
library(rsm)
```

```
so <- rsm(adh~SO(f.temp, c.temp, additive), data=adh.data) # second order
```

```
summary(so)
```

11.4 반응표면분석의 순서

R 실습

Call:

```
rsm(formula = adh ~ SO(ftemp, ctemp, additive), data = adh.data)
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	11.48010	0.47714	24.0602	3.5e-10	***
ftemp	-1.14023	0.31655	-3.6020	0.004832	**
ctemp	0.12379	0.31655	0.3911	0.703951	
additive	1.08166	0.31655	3.4170	0.006580	**
ftemp:ctemp	-0.41250	0.41362	-0.9973	0.342140	
ftemp:additive	-0.56250	0.41362	-1.3600	0.203714	
ctemp:additive	0.21250	0.41362	0.5138	0.618580	
ftemp^2	-0.86180	0.30811	-2.7970	0.018891	*
ctemp^2	-1.14458	0.30811	-3.7148	0.004010	**
additive^2	-1.21527	0.30811	-3.9442	0.002756	**

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Multiple R-squared: 0.8553, Adjusted R-squared: 0.7252

F-statistic: 6.57 on 9 and 10 DE, p-value: 0.003462

$$\begin{aligned}\hat{y} = & 11.48 - 1.14x_1 + 0.124x_2 + 1.082x_3 \\ & - 0.412x_1x_2 - 0.563x_1x_3 + 0.213x_2x_3 \\ & - 0.862x_1^2 - 1.145x_2^2 - 1.215x_3^2\end{aligned}$$

11.4 반응표면분석의 순서

R 실습

Analysis of Variance Table

Response: adh

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
EQ(f.temp, c.temp, additive)	3	33.947	11.3156	8.2678	0.004622
TWI(f.temp, c.temp, additive)	3	4.254	1.4179	1.0360	0.418045
EQ(f.temp, c.temp, additive)	3	42.725	14.2417	10.4057	0.002032
Residuals	10	13.686	1.3686		
Lack of fit	5	7.058	1.4116	1.0648	<u>0.473364</u>
Pure error	5	6.628	1.3257		

Stationary point of response surface:

f.temp	c.temp	additive
-0.9569289	0.2907445	0.6919118

Eigenanalysis:

\$values

[1] -0.6064174 -1.2442090 -1.3710191

\$vectors

	[,1]	[,2]	[,3]
f.temp	0.8054522	-0.3223798	-0.49731076
c.temp	-0.3957858	-0.9171663	-0.04647109
additive	-0.4411353	0.2342588	-0.86632699

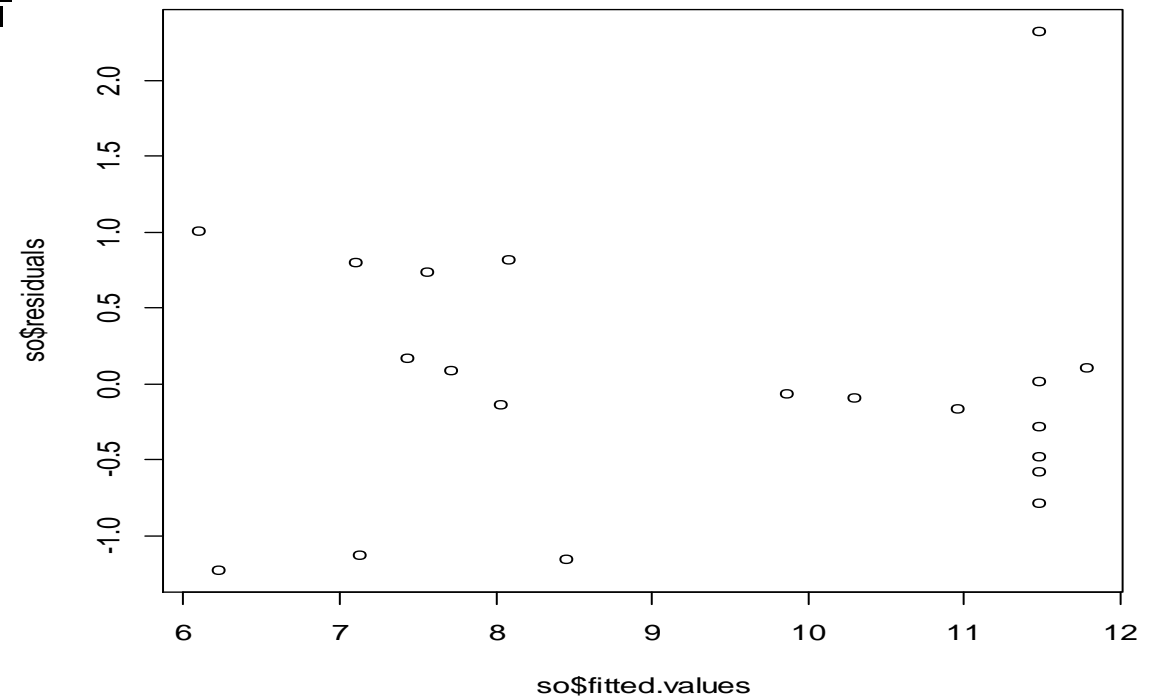
11.4 반응표면분석의 순서

R 실습

적합시킨 모형

$\hat{y} = 11.48 - 1.14x_1 + 0.124x_2 + 1.082x_3$ <- 선형
- $-0.412x_1x_2 - 0.563x_1x_3 + 0.213x_2x_3$ <- 교호작용
- $-0.862x_1^2 - 1.145x_2^2 - 1.215x_3^2$ <- 제곱

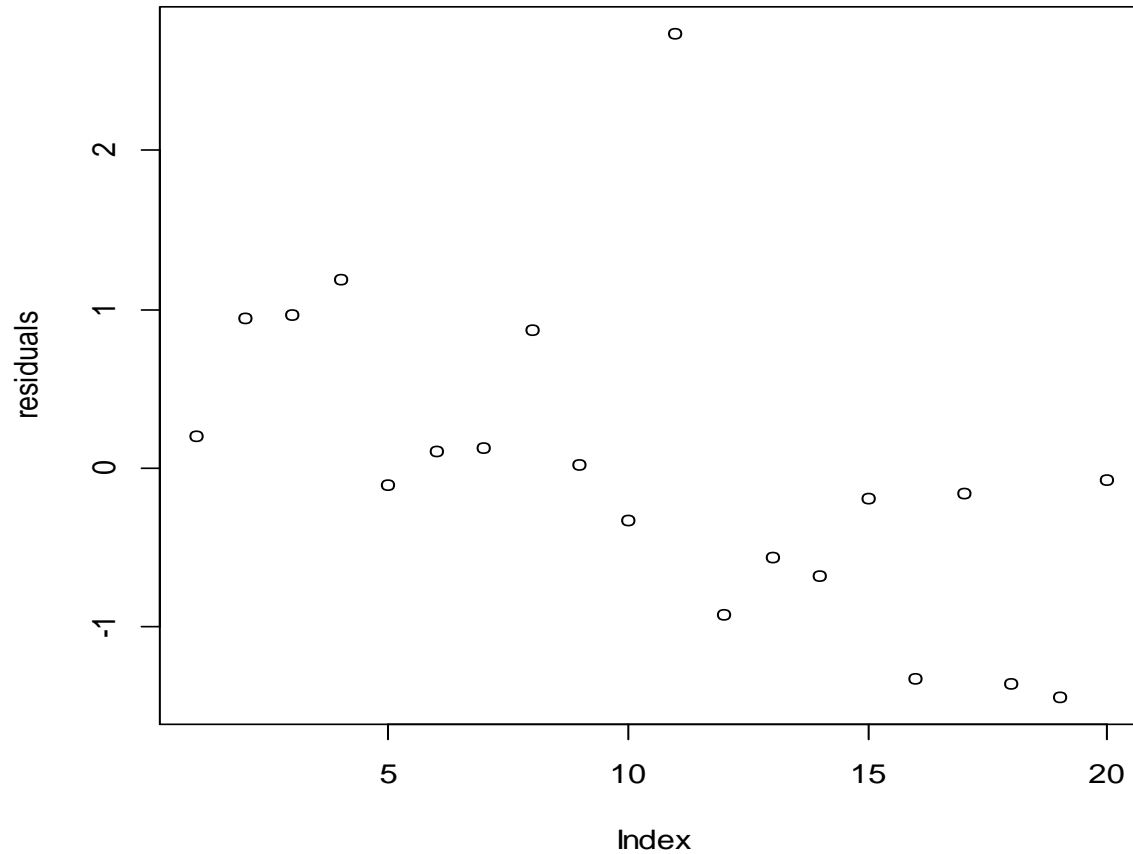
plot(so\$fitted.values, so\$residuals)



11.4 반응표면분석의 순서

R 실습

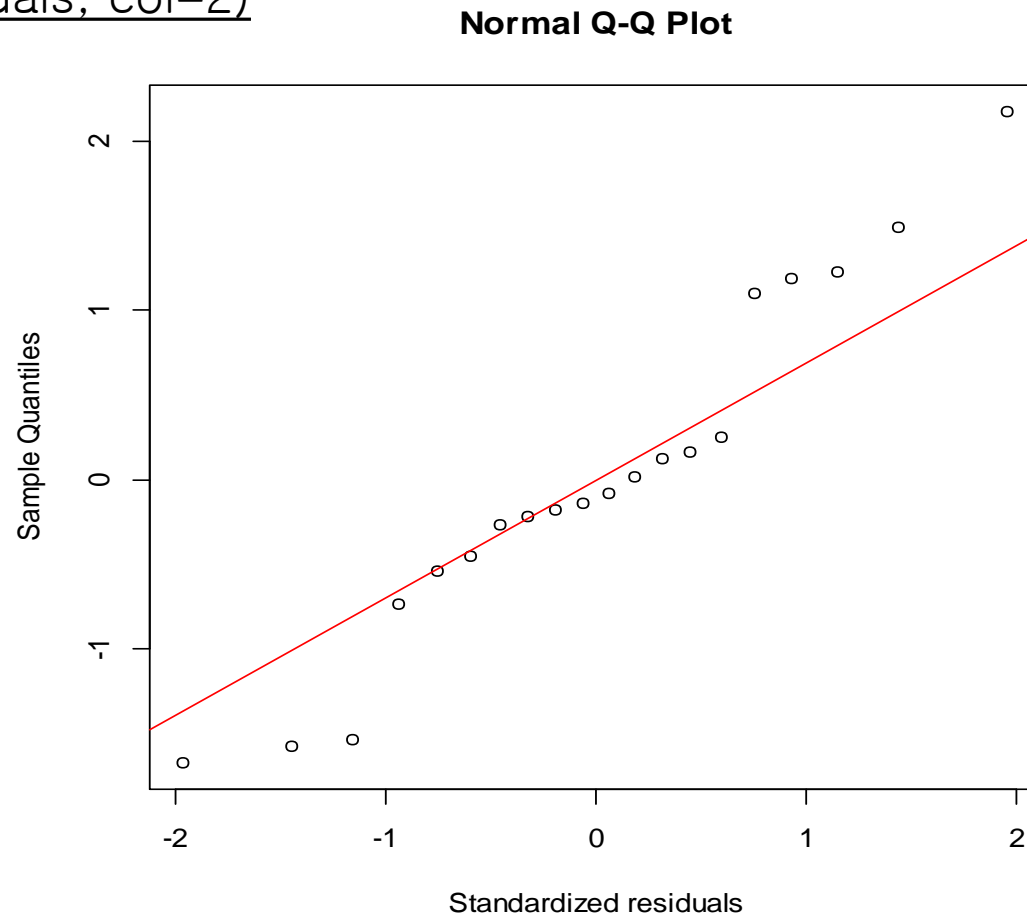
plot(scale(so\$residuals), ylab="residuals") # 표준화한 잔차의 plot



11.4 반응표면분석의 순서

R 실습

```
residuals <- rstandard(so) # 잔차를 표준화함  
qqnorm(residuals, xlab="Standardized residuals")  
qqline(residuals, col=2)
```



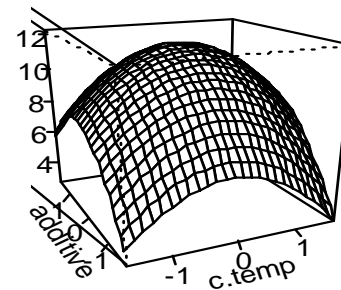
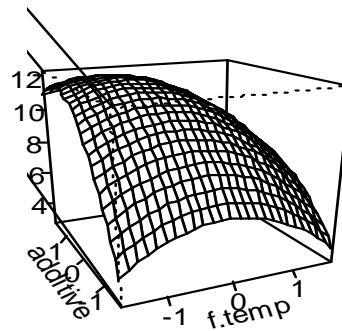
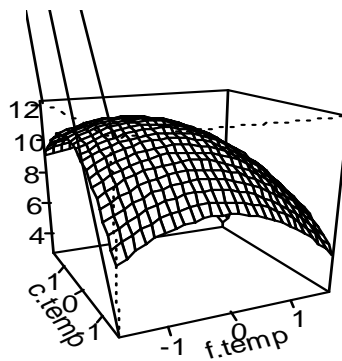
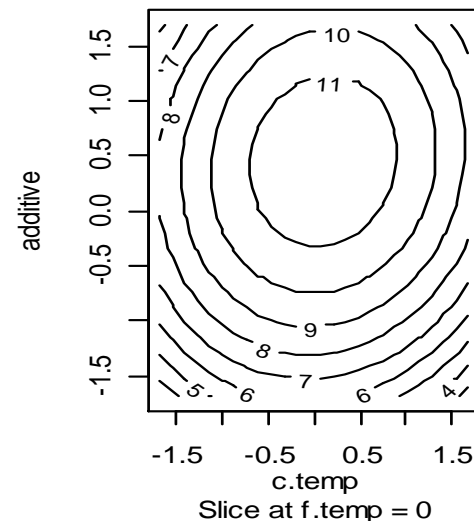
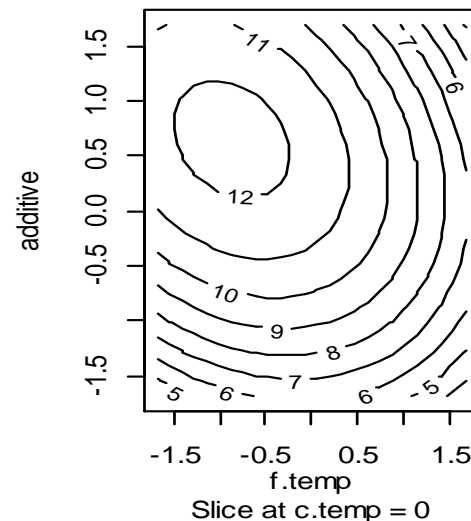
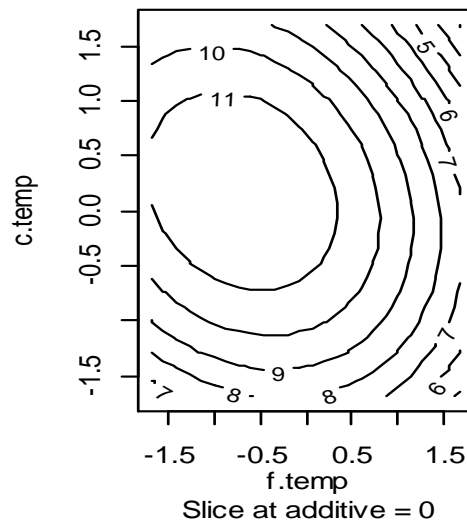
11.4 반응표면분석의 순서

R 실습

```
par(mfrow=c(2,3))
```

```
contour(so, ~ f.temp+c.temp+additive)
```

```
persp(so, ~ f.temp+c.temp+additive)
```



11.4 반응표면분석의 순서

R 실습

최적 조건

`f,temp(=x1)`의 경우 -0.938 (원래의 scale로 환산하면 101.2348)

`c,temp(=x2)`의 경우 0.226 (원래의 scale로 환산하면 11.1306)

`additive(=x3)`의 경우 0.682 (원래의 scale로 환산하면 1.5093)

이때 y의 예측값은 12.454가 나온다.

다음 시간 안내

제15강 (1~11장)

1강-14강(1장-11장) 요약