總 說

화학공학 및 화학분야에의 통계학의 응용

실 험 계 획 법

박 종 철

경희대학교 공과대학 화학공학과

Application of Statistics in Chemical Engineering and Chemistry

Design of Experiment

Jong - Chul Park

Dept. of Chem. Eng., Kyunghee Univ. Seoul, Korea

Abstract

Application of statistics in the science and engineering field have been practiced extensively in various countries. However, it appears to be this practice is not common in Korea possibly due to the lack of knowledge and experience among the scientists and engineers.

Subjects such as experimental design, response surface methodology, optimization, evolutionary operation, model building and discrimination, decision theory etc. should attract enough interest from the people who are engaged in the fields of science and engineering.

This article of the experimental design is intended solely to show how statistics help chemical engineers.

실험계획법 (Design of Experiments)

공업통계부문에서 공학, 상업 및 과학에 종사하는 사람에게 가장 중요한 부문의 하나는 실험계획법일 것이다. 우리가 공장이나 실험실에서 제조 및 시설의 가동을 할때 공학적인 지식의 필요는 물론이거니와 이를 가동하는 방법이나 계획이 치밀해야만이 옳은 결과를 얻을 수 있을 것이다. 특히 연구나 개발분야에 종사하는 사람에게는 실험계획을 옳게하고 못하고에 따라서 실험을 정확하게 하여 시간 및 경비의 낭비를 막고 최단시일에 최대의 결과를 얻을 수 있는 능률의 극대화를 기해야 할것이다. 실험계획은 각분야에 따라서 많이 쓰여지는 방법이 있고보면 공학의 각분야, 산업 및 과학의 각분야에서 쓰이는 방법 또한 필요에 의해서 다르다. 여기서는 주로 공학분야 및 그밖의 것도 포함

해서 주요한것만 골라서 썼다.

§1 실 험

우리는 여러가지 목적으로 해서 중요한 실험을 하게 되는데 대략의 경우 여러가지 변수를 적당히 선택해서 중요한 변수를 여러단계에 걸쳐서 변화시켜서 얻어지는 결과를 효과또는 결과(Response)이라 한다. 이에는 반응의 수율, 불순물의 정도 또는 함량, 제조원가 등등이 있다. 여기서 우리가 얻으려는 회답은 다음의 여러가지 문제의 것일것이다.

(1) 어느 인자 또는 변수가 Response에 영향을 미칠것인가?

(2) 이러한 변수가 어떻게 Response에 영향을 미칠 것인가?

(3) 이러한 인자가 Response에 미치는 영향의 근본 이유?

물론 우리가 요구하는 문제의 해답이 이론적 또는 그밖의 이유로서 명확한 경우에 있어서는 별도이지마는 그렇지 않는 경우에 있어서는 오로지 실험으로 인해서만이 그 해답을 구할수 있다. 따라서 그 해답은 정확해야 하며 우리가 실험을 하였을 때 얻어지는 결과로서 그 문제의 해답을 줄수 있어야 할 것이다. 이러한 요소를 충족시키기 위해서 행하여지는 방도를 선택하기 위해서 우리는 실험계획을 하는데 여기에는 현재까지 여러가지 방식을 개발하여 시도하여서 적합도 여부를 여러가지 문제에 적응해보아서 얻은 결과를 종합해보기로 한다. 대략 실험계획은 (1) 및 (2)의 해답을 얻은 것을 목적으로 하고 있으며 시일및 경비의 관계로 해서 (3)의 해답을 얻지 않고 그치는 경우가 많다.

실험은 대략 다음의 단계로서 이루어진다.

(1) 사고

(2) 실험 계획

(3) 실험

(4) 결과의 분석 및 결론의 색출

이러한 단계를 거쳐서 어떠한 결론을 얻었을 때 그것만으로서 충분한 해답을 얻지 못할경우는 이러한 단계를 여러번 되풀이 하여야 한다. 그럴때 마다 필요치 않은 변수를 버리고, 새로운 변수를 부가 하거나 또 새로운 조건을 설정해야한다. 이러한 선정을 여러번 반복함으로서 우리가 원하는 문제해답을 얻을 수 있게 된다.

그러면 실험계획법이란 어떠한 것을 말하는 것인가? 우리는 통계학의 힘을 빌리지 않고 하나 하나의 변수를 독립적으로 변화시켜서 하는 방법을 흔히 사용해왔다. 예컨데 우리가 어떠한 화학반응에서 수율이 좋은 조건을 구하기 위해서 모든 변수는 일정하게 해두고 하나의 변수만을 변화시켜서 수율에 미치는 영향을 알아내었다. 예컨데 중요한 변수의 하나인 압력(X_1)을 일정히 해두고 온도를 100°C 에서 140°C 까지 10°C 간격으로 변화시키는 경우를 생각해보자. 이렇게 함으로서 얻은 수율중에서 가장 높은수율은 120°C 에서 였다

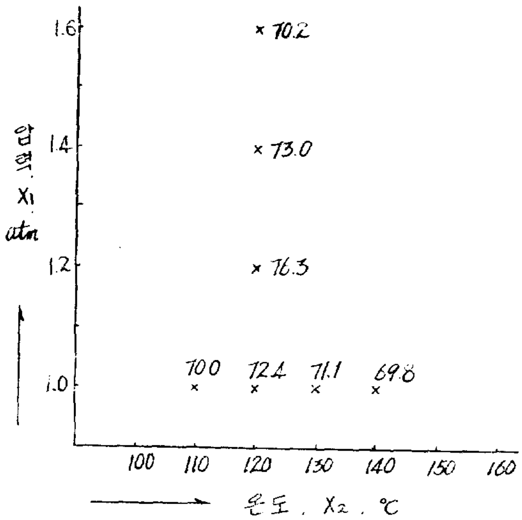

그림. 1

고 하면 다음은 온도를 일정히 한다음에 압력을 변화시킴으로서 얻어지는 수율의 변화를 살펴보자. 즉 일정한 압력, 1기압에서 온도변화에서 얻어진 가장 좋은 조건인 72.4라는 수율을 얻은 120°C 에서 변수를 일정히 한 다음에 압력을 0.2 atm 씩 변화 시켜서 얻어지는 결과를 보면 수율이 가장 좋은 76.3%이란 경우는 1.2 atm 에서 얻어진다.

따라서 이러한 방법에서 얻어진 결과는 120°C, 1.2 atm 에서 수율이 76.3이 된다는 결과를 얻었다. 여러변수중의 타변수를 일정히하고 그중하나만을 변화시켜 가는 방법을 고전적인 방법이라 할것 같으면 통계학을 활용한 방법은 즉 실험계획법을 이용한 방법이다. 첫번의 시도로서는 우선 온도는 110°C 및 120°C 를 택하고 압력을 1 및 1.2기압을 택해서 이들 4개의 조건에서 즉 (110°C, 1.0 atm), (120°C, 1.0 atm), (110°C, 1.2 atm), (120°C, 1.2 atm)에서 실험을 한 결과 얻어진 수율은 각각 71.1, 73.4, 72.2 및 75.3%이

될 것이다. 따라서 이 4점의 결과를 보아서 수율은 온도와 압력을 동시에 높이는 방법으로 조건을 이행시킴으로서 높은 수율을 얻을 수 있는 가능성이 있음을

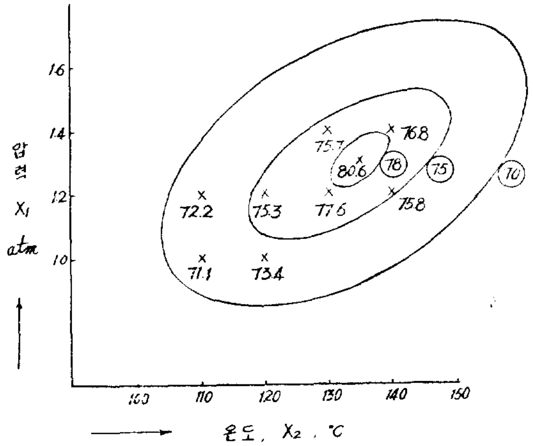

그림. 2

보여주고 있다. 따라서 다음의 실험은 수율이 증대될 수 있는 가능성이 있는 조건즉 (130°C, 1.2 atm), (130°C, 1.4 atm), (140°C, 1.2 atm), (140°C, 1.4 atm)에서 반응실험을 함으로서 이러한 조건에서 얻어진 수율은 77.6, 75.7, 75.8 및 76.8%이다. 첫번 및 두번째의 실험결과를 볼것 같으면 온도와 압력사이에서 상관관계(Interaction)가 있다는 것을 알수 있으며 이것은 변수 하나만을 변화 시켰을 경우에는 이를 알아내기가 곤란하다. 여기서 최적조건(Optimum Condition)은 두번째의 실험범위안에 있다는 직작이 감으로서 여기서 중심점(135°C, 1.3 atm)을 택해서 실험을 하게 되면 얻어진 수율 80.6%은 지금까지 행한 여러 실험중에서 가장 좋은 수율이다. 이는 앞에서 이야기한 즉 변수하나만을 변화시켰을 경우에는 최고의 수율을 나타내지 않았다는 것을 알수 있다.

실험계획법이 고전법에 비해서 유리한점은

1. 변수간의 상관관계(Interaction)를 측정할수 있다는 점.
2. 정밀도를 높인다.
3. 실험회수를 적게 해서 상호간의 비교를 가능케한다.
4. 많은 변수를 동시에 변화시킬수 있다.
5. 장차 실험은 어떤 방향으로 이행시켜서 하여야하나 하는 것을 표시한다.
6. 조건의 최적화를 할수 있다.
7. 경우에 따라서는 통계학적분석(Statistical Analysis)을 하지 않아도 된다.

§2. Factorial Design

2-1. 2^2 Design

실험계획중에서 가장 많이 쓰이는 것의 하나가 Factorial Design이다. 이것은 우리가 분산분석(Analysis of Variance)에서 1원배치 및 2원배치에 대해서 설명한 바와 같이 취급하는 변수의 수에 따라서 Factorial Design에도 여러가지 방법이 있다. 여기서 어떠한 한 조건하에서 얻어진 관측치를 실험단위(Experimental Unit)라 한다.

인자(Factor)라는 말은 우리가 어떠한 목적을 위헤서 한 실험에서 다음 실험으로 조건을 바꾸어서 갈경우의 그 조건이 가진 특수성을 말한다. 이를테면 화학반응에서의 온도, 압력, 공간속도 등을 말한다. 이는 공장을 비교 할때는 그 공장자체, 또는 조작하는 사람, 다른 원료등이 될수도 있다. 또 결과를 판단짓기 위해서 행하는 실험(Trials)에 사용한 모든 조건을 처리(Treatment)라 한다. 이 처리는 실험을 행할때의 주어진 조건의 조합을 말한다. 이러한 여러개의 다른 조건의 조합으로서 실험을 행하여서 거기서 얻어지는 결과를 숫자로 표시했을때 이를 결과(Response)라 한다. 이는 여러가지 조건을 바꾸어서 얻은 화학반응에서의 수율 또는 증유탑에서의 효율, 등등이 될수 있으며 요컨데 우리가 어떠한 목적하에서 계획된 실험을 행하였을때 얻어지는 결과를 뜻한다.

주어진 조건에서 다른 급수(Classes)에 속하는 것을 계급(Levels)이라 한다. 모든 실험에 있어서 그 정확성을 뚜렸이하고 또 재현성(Reproducibility)을 확실히 하기 위해서 되풀이하는 실험을 반복(Replication)이라 한다.

이러한 예로서 우리가 증류탑에 사용한 두종류의 충진물의 효율을 비교하는 경우를 생각해보기로 하자. 충진물로서는 Paul Ring과 Helicos Packing을 비교하기 위해서 3종류의 혼합물을 사용해서 행하는 실험을 위한 실험계획은 2계급(Levels)×3인자 (Factors)의 매우 간단한 Design이 될것이며 표에서 보는 바와같이 6번의 실험을 함으로서 각 조합(Combination)에서 효과 E_{11}, E_{21}, E_{12}, E_{22}, E_{13}, E_{23}을 구하는 하나의 실험단위를 이룬다. 이러한 것을 Factorial Design이라 한다.

	E_1	
	Paul Ring	Helicos
Mixture 1	E_{11}	E_{21}
〃 2	E_{12}	E_{22}
〃 3	E_{13}	E_{23}

이예와 동일한 것으로 어떠한 화학반응에 있어서 두개의 변수 또는 인자인 온도와 압력을 변화시켜서 결과인 수율(Yield)에 미치는 영향을 비교하기 위해서 행하는 실험을 위한 실험계획을 생각해보기로하자. 여기서 주효과 온도를 두계급 110°C 및 120°C로 변화시키고 압력을 역시 두 계급 1.0 atm 및 1.2 atm로 변화시켰을 때 생각할수 있는 Design은 표 1과 같은 것이며 이러한 것을 2×2 Factorial Design이라 한다. 여기서 효과가 두개 있으며, 온도 및 압력이고 온도 110°C, 및 120°C에서의 양자의 평균치의 차는 주효과 온도의 영향을 나타낼것이며 압력 1.0 및 1.2에서 두관측치의 평균의 양은 주효과 압력의 영향이 될 것이다.

상호관계(Interaction)는 대각을 이루는 값의 차의 정도를 말한다. 이 값이 크면 주효과란 별로 의미를 지니지 못한다.

표 1. 2×2 Factorial Experiment

		온 도, °C		
		110	120	평 균
압력,	1.0	(1) 71.1	*a* 73.4	72.3
atm	1.2	*b* 72.2	*ab* 75.3	73.7
평 균		71.7	74.4	

표 1은 2×2 Factorial Design에서 온도 및 압력의 조합에서 얻어진 처리를 각각 (1) *a*, *b*, 및 *ab*로 표시하기로 한다. (1)은 현재의 조건이고 이조건에서 온도 및 압력을 변화시켰을 때의 새로운 조건을 *a*, *b*, 및 *ab*로 표시한다.

여기서 계급은 둘(2)이며 낮은 계급은 온도에서 110°C이고 압력은 1.0 atm이며, 높은 계급은 온도에서 120°C이고 압력은 1.2 atm이다. 따라서 여기서 얻어지는 처리조합(Treatment Combination, TC)은 4가 된다. 같은 예로서 2^3 Factorial Design에서는 TC이 $2^3=8$개가 된다. 2^2의 경우는 평면에서 4각형으로 이 Design을 표시할 수 있고 2^3의 경우는 정6면체로서 이 Design을 표시할 수 있다.

기호 (1), *a*, *b*, 및 *ab*를 이용해서 두인자(*A*, *B*)의 높고 낮음을 +, −로 표시하며 표로 나타내면 표 2와 같이 되고 이를 4각형에다 나타내면 그림 3과 같이 된다.

표 2. 2^2 Factorial Design

	인 자 의	계 급	
기 호	*A*	*B*	*Y*
(1)	−	−	y_1
a	+	−	y_2
b	−	+	y_3
ab	+	+	y_4

여기서 −−는 양계급이 다 낮은 것을 표시하고 ++는 양계급이 다 높은 것을 의미한다. +−는 하나는 높고 하나는 낮다는 것을 표시함.

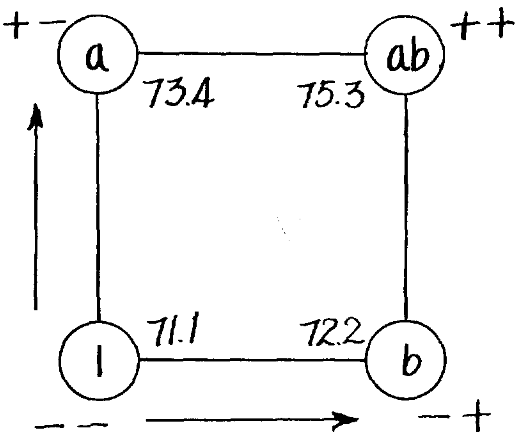

그림. 3 2^2 Factorial Design

이들의 각효과를 각처리에 나타난 숫자를 사용해서 또 부호 + 및 −를 부쳐서 계산하면 다음과 같이 한다. *y*는 각 처리조합(Treatment Combination, TC)의 조건하에서 나타나는 결과 (Response)로서 이를 각각 y_1, y_2, y_3 및 y_4로 표시했으며 이 Design에서는 관측치가 4임을 알수 있다. 이의 계산은 주효과(Main Effect)로서

$$A=\frac{1}{2}(-y_1+y_2-y_3+y_4)$$

$$B=\frac{1}{2}(-y_1-y_2+y_3+y_4)$$

또는

$$A=\frac{1}{2}(-(1)+a-b+ab)$$

$$B=\frac{1}{2}(-(1)-a+b+ab)$$

로도 표시할수 있다. 따라서 상관관계(Interaction) $A \times B$는

$$A\times B=\frac{1}{2}(y_1-y_2-y_3+y_4)$$

$$=\frac{1}{2}((1)-a-b+ab)$$ 가 된다.

이를 표1에 나와 있는 숫자를 대입해서 계산하면 아래와 같다.

주효과(Main Effect)

1. 온 도(T)

$$\frac{73.4+75.3}{2}-\frac{71.4+72.2}{2}$$

$$=\frac{1}{2}(73.4+75.3-71.1-72.2)$$

$$=\frac{1}{2}(5.4)=2.7$$

2. 압 력(P)

$$\frac{72.2+75.3}{2}-\frac{71.1+73.4}{2}$$

$$=\frac{1}{2}(72.2+75.3-71.1-73.4)$$

$$=\frac{1}{2}(3.0)=1.5$$

상관관계(Interaction)

$T \times P$

$$\frac{73.4-71.1}{2}-\frac{75.3-72.2}{2}$$

$$=\frac{1}{2}(73.4-71.1-75.3+72.2)$$

$$=\frac{1}{2}(-0.8)=-0.4$$

2-2. 2^nDesign

2^n에서 인자가 2단계만인 경우에는 2^2로 표시되며 n는 인자의 수를 표시한다. $2^3=8$의 경우는 8개의 조합을 나타내며 이의 처리조합(Treatment Combination)을 기호로 나타내면 다음과 같다.

여기서 (1)은 전체가 낮은 계급의 처리 조합을 나타내며 a에서 A는 높은 계급이고 B, C는 낮은 계급을 표시한다. 따라서 abc는 A, B 및 C가 다 높은 계급을 표시한다.

표 3 Treatment Combination

기 호	인 자 의 계 급		
	A	B	C
(1)	−	−	−
a	+	−	−
b	−	+	−
ab	+	+	−
c	−	−	+
ac	+	−	+
bc	−	+	+
abc	+	+	+

+는 높은 계급의 인자를 표시
−는 낮은 계급의 인자를 표시

이 Factorial Design의 이해를 촉진시키기 위해서 인자에 따른 각처리 마다 기호대신 정6면체의 각모에다 이 기호를 쓰고 그 계급에서 각각 높은 계급 및 낮은 계급을+ 및 −로서 표시함으로서 표3의 뜻을 쉽게 알 수 있다. (그림 4)

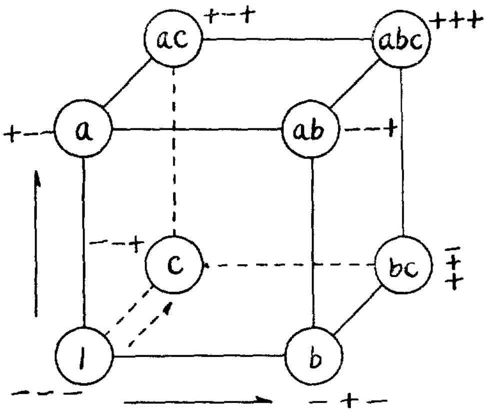

그림. 4 정육면체로 표시된 2^3 Factorial Design

이의 응용예의 하나로서 초화 과정에서의 수율을 실험실에서 연구하려는 경우를 생각해 보기로 한다. 초화에서 다음의 3가지 인자(Factor)가 중요한 영향을 미친다는 것을 알고 있다.

1. 초산 첨가 시간
2. 교반 시간
3. 잔유물의 영향

여기서 초산첨가시간, 교반시간은 초화수율에 영향을 미친다는 것은 대략 짐작이가나 매반응마다 반응이 끝이난후 이 반응물을 비우고 남는 잔유물을 조작의 편의상 완전히 씻어버리지 않고 다음의 뱃지 반응을 하는 것이 상례임으로 이 잔유물의 양이 다음 뱃지 반응의 수율에 어떠한 영향을 미치나 하는 것을 조사하려 한다.

따라서

A = 초산첨가물
2시간 = (1) 또는 (−)
7시간 = a 또는 (+)

B = 교반시간
$\frac{1}{2}$ 시간 = (1) 또는 (−)
4시간 = b 또는 (+)

C = 잔유물
잔유물이 없을 때 = (1) 또는 (−)
잔유물이 있을 때 = C 또는 (+)

이 결과를 표에다 나타내면

표 4.

		초화로 부터 얻은 % 수율			
		잔류물 무, (1)		잔류물 유, C	
		초산 첨가 시간		초산 첨가 시간	
		2시간	7시간	2시간	7시간
교	$\frac{1}{2}$시간	(1) 87.2	a 88.4	c 86.7	ac 89.2
반	4시간	b 82.0	ab 83.0	bc 83.4	abc 83.7

표 4에 나와 있는 관계와 그림 4를 비교해서 정 6면체에 각각해당 하는 인자는 계급을 표시하면 다음과 같다.

그림 5에서 보는 바와 같이 교반이라는 인자의 계급이 낮은 곳은 $\frac{1}{2}$시간이고 높은 곳은 4시간이다. 초산첨가시간에서도 낮은곳은 2시간이고 높은 곳은 7시간이다.

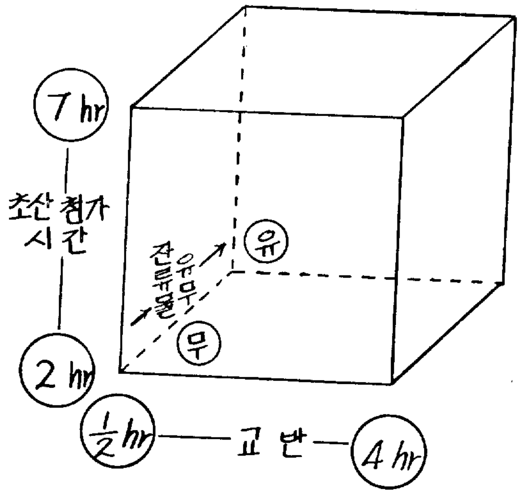

그림. 5 초화 반응에 있어서의 인자및 계급

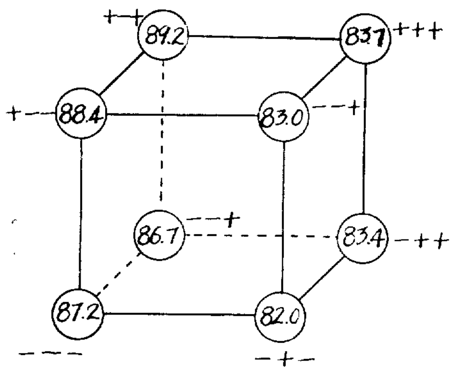

그림. 6 초화 반응에 있어서의 수율및 계급의 부호

표 3과 표 4로부터 우리는 각 인자의 주효과(Main Effect)를 계산하기 위해서 주효과 $A, B, C,$ 에서 $a, b, c,$ 로 표시되는 경우와 그렇지 않은 경우를 비교한다.

초산첨가시간의 효과(A)는 표 3의 A열에서 (−)로 표시된 경우와 (+)로 표시된 경우의 평균치의 차를 구하면 된다. 따라서

$$+ \text{ 의 경우 } \frac{1}{4}(88.4 + 83.0 + 89.2 + 83.7) = 86.1$$

$$- \text{ 의 경우 } \frac{1}{4}(87.2 + 82.0 + 86.7 + 83.4) = 84.8$$

고로, A 의 주효과 $= 86.1 - 84.8 = 1.3$

B, 및 C 의 주효과도 동일하게 계산된다. 이를 기호로 표시해서 일반화하면

높은 계급의 A 의 평균치

$$=\frac{1}{4}(a+ab+ac+abc)$$

낮은 계급의 A 의 평균치

$$=\frac{1}{4}((1)+b+c+bc)$$

$$A \text{ 의 주효과}=\frac{1}{4}(a+ab+ac+abc)$$
$$-\frac{1}{4}((1)+b+c+bc)$$

여기서 $\widehat{(1),}$ a, b, c 를 대수치로 생각해서 고쳐쓰면

$$A=\frac{1}{4}(abc+ab+ac-a-bc-b-c-(1))$$

동일하게

$$B=\frac{1}{4}(abc+ab+bc+b-ac-a-c-(1))$$

$$C=\frac{1}{4}(abc+ac+bc+c-ab-a-b-(1))$$

가 된다.

상관관계를 생각하면 A 와 B 간의 상관관계 AB 는 B 가 높은 계급에 있을때의 A 의 효과와 B 가 낮은 계급에 있을 때의 A 의 효과와의 차의 반임으로

B 가 높은 계급에 있을 때의 A 의효과

$$A_1=\frac{1}{2}(abc+ab)-\frac{1}{2}(bc+b)$$
$$=\frac{1}{2}(abc+ab-bc-b)$$

B 가 낮은 계급에 있을때의 A 의 효과

$$A_0=\frac{1}{2}(ac+a)-\frac{1}{2}(c+(1))$$
$$=\frac{1}{2}(ac+a-c-(1))$$

따라서 AB 간의 상관관계

$$A\times B=\frac{1}{2}[A_1-A_0]=\frac{1}{4}[(abc+ab-bc-b)$$
$$-(ac+a-c-(1))]$$
$$=\frac{1}{4}(abc+ab+c+(1)-ac-bc-a-b)$$

동일하게

$$A\times C=\frac{1}{4}(abc+ac+b+(1)-ab-bc-a-c)$$

$$B\times C=\frac{1}{4}(abc+bc+a+(1)-ab-ab-b-c)$$

상관관계 ABC 는 C 가 높은 계급에 있을 때와 낮은 계급에 있을 때의 상관 AB 사이의 차의 반이다.

$$ABC=\frac{1}{2}\Big[\frac{1}{2}(abc-bc-ac+c)$$
$$-\frac{1}{2}(ab-b-a+(1))\Big]$$
$$=\frac{1}{4}(abc-ab-ac-bc+a+b+c-(1))$$

이를 총활해서 알아보기쉽게 표로 나타내면 다음과 같다. (표 5)

표 5. 2^3 Factorial Design 에서 각효과를 계산하기 위한 정부 기호표

처리 / 효과	(1)	a	b	ab	c	ac	bc	abc
합계	+	+	+	+	+	+	+	+
A	−	+	−	+	−	+	−	+
B	−	−	+	+	−	−	+	+
AB	+	−	−	+	+	−	−	+
C	−	−	−	−	+	+	+	+
AC	+	−	+	−	−	+	−	+
BC	+	+	−	−	−	−	+	+
ABC	−	+	+	−	+	−	−	+

각 효과를 계산하기 위해서 사용하는 상(Devisor)은 2^k 이다.

즉 2^2 의 경우는 4가 되고 2^3 의 경우는 8이 된다.

2-3. Yates 의 계산법

인자가 적은 경우는 앞에서 설명한바와 같이 그 대로 계산할수 있으나 인자의 수가 많아지면 계산이 복잡해짐으로 이를 쉽게 편리하게 하기 위하여 만들어진 방법이 Yates 의 계산법이다(표 6).

수율에서 균일히 80을 뺌으로서 Coding 한 수자는 계산을 용이하게한다. (1)항에는 Response 항에 나와 있는 수의 처음 둘의 화 $7.2+8.4=15.6$ 을 기입하고 다음 둘의 화 $2.0+3.0=5.0$ 를 다음에 기입한다. 이와 같이 $6.7+9.2=15.9$ 및 $3.4+3.7=7.1$ 가 기입된다.

표 6 Yates의 방법에 의하는 효과(Effects) 및 평균자승(Mean Squares)의 계산방법

처리조합	Response=(수율−80)	(1)	(2)	(3)	S. S. =(3항의값)²/8
(1)	7.2	15.6	20.6	43.6=합계	
a	8.4	5.0	23.0	5.0=4A	3.125
b	2.0	15.9	2.2	−19.4=4B	47.045
ab	3.0	7.1	2.8	−2.4=4AB	0.720
c	6.7	1.2	−10.6	2.4=4C	0.720
ab	9.2	1.0	−8.8	0.06=4AC	0.045
bc	3.4	2.5	−0.2	1.8=4BC	0.405
abc	3.7	0.3	−2.2	−2.0=4ABC	0.500
합 계					52.560

다음은 이들 두수의 차를 구해서 기입한다. 즉

8.4−7.2=1.2, 3.0−2.0=1.0, 9.2−6.7=2.5, 3.7−3.4=0.3등이다.

(2)항은 (1)항에서 계산된다. 그 방법은 동일하며 15.6+5.0=20.6, 15.9+7.1=23.0, 1.2+1.0=2.2, 2.5+0.3=2.8 또 5.0−15.6=−10.6
7.1−15.9=−8.8, 1.0−1.2=−0.20, 0.3−2.5=−2.2 이다.

같은 계산 방식에 의해서 (3)항이 계산된다. 다음에는 계산된 (3)항의 자승을 $2^k=2^3=8$로서 나누면 S.S (Sum of Square)가 계산된다. 이들의 합계 52.560은 직접적으로 계산해서 얻은

$$7.2^2+8.4^2+\cdots\cdots+3.7^2-\frac{(43.6)^2}{8}$$

$$=290.18-237.68=52.56$$ 과 일치한다.

이 결과의 분산 분석을 하면

표 7. 표 6의 분산분석

분산의 근원	S.S		자유도		M.S.	
주 효 과						
초산첨가 시간(A)	3.125		1		3.125	
교반시간(B)	47.045		1		47.045	
잔유물의 영향(C)	0.720		1		0.720	
상 관 관 계						
AB	0.720		1		0.720	
AC	0.045	1.67	1	4	0.045	0.417
BC	0.405		1		0.405	
ABC	0.500		1		0.500	
합 계	52.560		7			

이표에 의거해서 우리는 분산분석을 할수 있다. 여기서 측정치를 각 Treatment에서 한번만 얻었음으로서 (Non-replicated experiment) 실험오차의 분산도를 알수 없다. 따라서 상관의 전부 또는 일부를 사용해서 오차 분산를 대용한다. 이때는 이반응에서 상관이 없다고 가정해야 하며 우리는 지금까지의 경험으로서 이 가정은 무리가 없으며 따라서 상관의 합계는 오차분산도를 대응할수 있다고 생각한다.

A에 대해서

$$F_A=\frac{3.125(1)}{0.417(4)}=7.5$$

$$F_{0.95}(1,4)=7.71$$

B에 대해서

$$F_B=\frac{47.045(1)}{0.417(4)}=112.7$$

C에 대해서

$$F_C=\frac{0.720(1)}{0.417(4)}=1.73$$

$$F_{0.95}(1,4)=7.71,\quad F_{0.90}(1,4)=4.54$$

결과적으로 수율에 영향을 주는 인자는 교반의 정도(B)가 매우 현저하여, 초산을 첨가하는 신간(A)도 경우에 따라서 영향을 미치며 반응으로 잔존하는 잔유물의 양은 초화반응의 수율에 별로 영향을 미치지 않는다는 것을 알수 있다. 따라서 첨가의 시간이 수율에 미치는 영향에 대해서는 좀더 연구를 하여서 이를 명확히 구명할 필요가 있을것 같다.

우리는 앞에서도 이야기 한바 있지마는 실험이나 분

석에 수반되는 오차는 명확히 알아두어야 함으로서 유리한 경우가 허다하다. 따라서 실험계획을 할 때에는 이문제를 반드시 염두에 두어서 충실한 자료를 미리 수집해 두거나 또 그렇지 못할때는 이 자료를 얻을수 있을 방도를 강구해서 실험계획에 포함시켜두어야 할 것이다.

2-4. 2^n Factorial Design(반복의 경우)

Factorial Design 의 각 처리치의 반복이 있을 경우는 실험오차의 분산도를 계산할수 있고 또 그만큼 정확도는 증대한다. 따라서 이는 바람직한 경우가 많다. 만약 여기에 m 반복이 있었다고 하면 각치는 m 치의 화를 쓰며 계산은 전기한바대로 하며 계산된 효과는 m 로서 나눈다. 따라서 평균자승(Mean Squares) 또한 m 로서 나눈다.

화학반응에서 수율에 미치는 영향을 연구하기 위해서 다음의 3가지 변수를 가장 주요한 것으로 택해서 실험을 했을 경우를 생각해 보자.

변 수	범 위
1. 온 도(T)	160 및 180°F
2. 농 도(C)	20 및 40%
3. 촉 매(K)	1 및 2

여기서 실험계획으로는 2계단반복 Factorial Design 을 택했었다. 계산의 편의상 각변수는 다음의 Coding 을 했다.

	범 위
$X_1 = \dfrac{T-170}{10}$	-1 $+1$
$X_2 = \dfrac{C-30}{10}$	-1 $+1$
$X_3 = -1$ (촉매 1에 대해서) $= +1$ (촉매 2에 대해서)	-1 $+1$

표 8. Factorial Design 의 표시방법

T	C	K	X_1	X_2	X_3	1	2	3
160	20	1	−1	−1	−1	−	−	−
180	20	1	+1	−1	−1	+	−	−
160	40	1	−1	+1	−1	−	+	−
180	40	1	+1	+1	−1	+	+	−
160	20	2	−1	−1	+1	−	−	+
180	20	2	+1	−1	+1	+	−	+
160	40	2	−1	+1	+1	−	+	+
180	40	2	+1	+1	+1	+	+	+

주어진 변수에 대해서 Coding 된 기호를 써서 2^3 Factorial Design 를 표시하면 상기와 여히 세가지 방법으로 표시할수 있으나 우리는 전래와도 같이 3번째의 방식을 사용해서 실험결과를 표시하면 표 9와 같다.

표 9. 실험설계 및 그의 효과(반응수율값)

처리 \ 효과	1	2	3	y 반복측정치		y_i 평 균
1	−	−	−	59	61	60
2	+	−	−	74	70	72
3	−	+	−	50	58	54
4	+	+	−	69	67	68
5	−	−	+	50	54	52
6	+	−	+	81	85	83
7	−	+	+	46	44	45
8	+	+	+	79	81	80

이들의 각처리의 반복측정치의 평균치를 6면체의 각모퉁이에 상단및 하단의 위치에 해당하는 자리에 넣어서 표시하면 그림 7과 같이 되며, 이 6면체의 각 모퉁이에 처리번호를 쓰면 그림 8과 같이 된다.

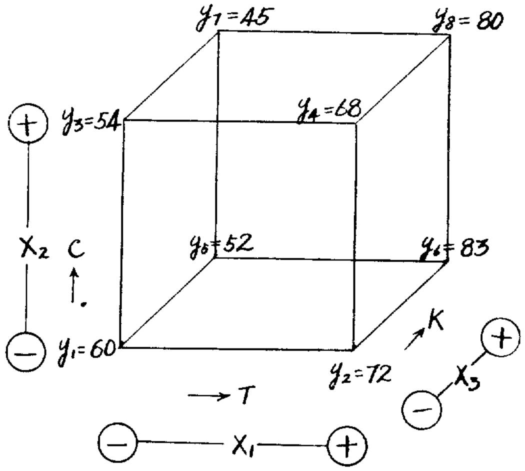

그림. 7

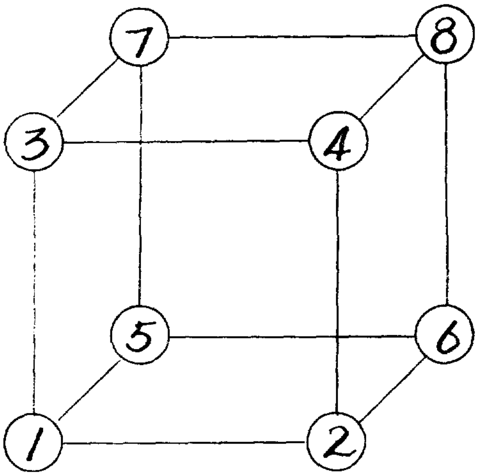

그림. 8

여기서 각주효과를 표시하면

1. X_1, 온도의 경우

	비교한 조건	
Δy_1	C	K
$y_2-y_1=72-60=12$	20	1
$y_4-y_3=68-54=14$	40	1
$y_6-y_5=83-52=31$	20	2
$y_8-y_7=80-45=35$	40	2

$\Delta y_{Avg1}=\frac{1}{4}(12+14+31+35)=23$

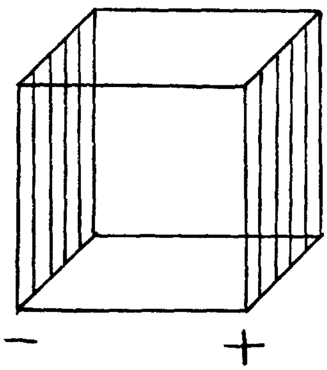

그림. 9

이 경우는 도 7및 8의 6면체에서 좌측과 우측의 양면을 비교하는 경우이다(그림 9).

2. X_2, 농도의 경우

	비교한 조건	
Δy_2	T	K
$y_3-y_1=54-60=-6$	160	1
$y_4-y_2=68-72=-4$	180	1
$y_7-y_5=45-52=-7$	160	2
$y_8-y_6=80-83=-3$	180	2

$\Delta y_{Avg2}=\frac{1}{4}(-6+-4+-7+-3)=-5$

이 경우는 6면체에서 상측과 하측의 양면을 비교한 경우이다(그림 10).

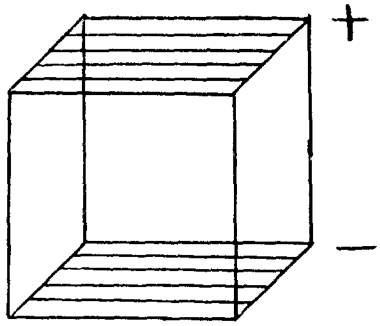

그림. 10

3. X_3, 촉매의 경우

	비교한 조건	
Δy_3	T	C
$y_5-y_1=52-60=-8$	160	20
$y_6-y_2=83-72=\ 11$	180	20
$y_7-y_3=45-54=-9$	160	40
$y_8-y_4=80-68=\ 12$	180	40

$\Delta y_{Avg3}=\frac{1}{4}(-8+11-9+12)=\frac{1}{4}(6)=1.5$

이 경우는 6면체에서 전면과 후면을 비교한 경우이다(그림 11).

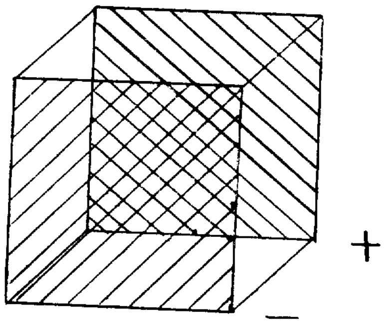

그림. 11

X_1, X_2, 의 경우 Δy 의 값은 동일한 방향임에도 불구하고, X_3 의 경우는 Δy 의 값이 온도에 따라서 −와 +의 방향으로 반대쪽의 경향을 보이고 있음에 우리는 온도와 촉매사이에 상관관계가 존재한다고 말할수 있다. 온도(T) 및 촉매(K)의 상관관계를 표시하기 위해 이를 TK 로 표시하고 농도(C)와 촉매(K)의 상관관계는 CK 로 표시한다(그림 12).

상관관계 (2 인자)

$T\times K$

촉 매	온 도 효 과
1	$\frac{1}{2}[(72-60)+(68-54)]=13$
2	$\frac{1}{2}[(83-52)+(80-45)]=33$

$$T\times K=\frac{1}{2}(33-13)=10$$

또는 $T\times K=\frac{1}{4}[(80+83+54+60)-(45+68+52+72)]$
$=10$

$C\times K$

온 도	촉 매 효 과
20	$\frac{1}{2}[(52-60)+(83-72)]=1.5$
40	$\frac{1}{2}[(45-54)+(80-68)]=1.5$

$$C\times K=\frac{1}{2}(1.5-1.5)=0$$

$T\times C$

온 도	농 도 효 과
160	$\frac{1}{2}[(72-60)+(83-52)]=21.5$
180	$\frac{1}{2}[(68-54)+(80-45)]=24.5$

$$T\times C=\frac{1}{2}(21.5-24.5)=\frac{1}{2}(-3)=-1.5$$

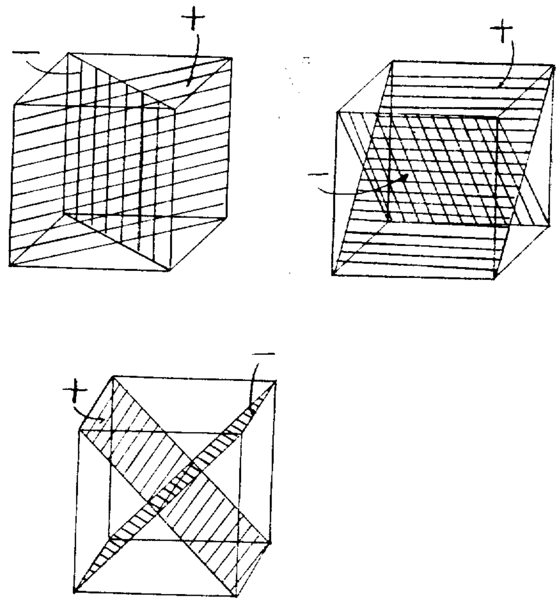

그림. 12

상관관계 (3 인자)

$T\times C\times K$

촉 매 1

$$\frac{1}{2}[(y_4-y_3)-(y_2-y_1)]$$
$$=\frac{1}{2}[(68-54)-(72-60)]=\frac{1}{2}(14-12)=1$$

촉 매 2

$$\frac{1}{2}[(y_8-y_7)-(y_6-y_5)]$$
$$=\frac{1}{2}[(180-45)-(83-52)]=\frac{1}{2}(35-31)=2$$

$$T\times C\times K=\frac{1}{2}(2-1)=\frac{1}{2}$$

이 결과를 종합하면 다음표와 같다.

주 효 과	효 과
온 도(T)	23.0
농 도(C)	−5.0
촉 매(K)	1.5

상관관계

$T\times C$	1.5
$T\times K$	10.0
$C\times K$	0.0
$T\times C\times K$	0.5

이 결과를 보면 온도의 효과는 현저하며 또 상관관계에서는 온도와 촉매의 상관관계가 크다는 것을 알수 있다. 즉 160°F 에서는 촉매 1이 유효했으나 180°F 에서는 촉매 2가 유효하다. 따라서 우리는 온도와 촉매관계에 대해서 좀더 연구조사를 해서 이를 구명해야 할 것이다.

K	촉매 2	48.5	81.5
	촉매 1	57.0	70.0
	온도	160°F	180°F
		T	

2^2 및 2^3 의 경우에 대해서는 각각 예를 들어서 설명했으나 이의 차수가 올라감에 따라서 실험의 수도 따라서 증가하고 각주효과 및 상관관계를 구하기 위한 분산분석도 복잡해져간다. 즉, $2^4=16$, $2^5=32$, $2^6=64$ 등등으로 해서 실험수는 증가 한다.

2^4 의 경우 주효과를 A, B, C, D 라하면 각 TC 는 표 10과 같이 표시 할수 있다.

표 10. 2^4 Factorial Design

		D_1		D_2	
		C_1	C_2	C_1	C_2
A_1	B_1	(1)	c	d	cd
	B_2	b	bc	bd	bcd
A_2	B_1	a	ac	ad	acd
	B_2	ab	abc	abd	$abcd$

이 경우 실험은 16이 되며 각실험을 반복 하면32회가 필요하다. 실험을 한번하기 위해서 시간과 경비가 많이드는 경우에는 이 실험계획을 완료하기 위해서는 많은 경비와 오랜시일이 필요하게 된다. 따라서 경우에 따라서는 이중의 중요한 부분만을 택해서 주효과의 영향을 찾아내기 위하여 하는 실험을 Fractional Factorial Design 이라 한다(차장참조). n 차원의 Design 의 분산분석은(표 11)

표 11. n 차원의 Factorial Design 의 분산분석

변동의 근원	자유도		S.S.	M.S.
주효과				
A	1			
B	1			
C	1	n		
$\vdots$	$\vdots$			
$\vdots$	$\vdots$			
상관관계				
2인자 상관				
$A\times B$	1			
$A\times C$	1			
$A\times D$	1	$\frac{1}{2}n(n=1)$		
$B\times C$	1			
$\vdots$	$\vdots$			
3인자 상관				
$A\times B\times C$	1			
$A\times B\times D$	1			
$A\times C\times D$	1	$\frac{1}{6}n(n-1)(n-2)$		
$B\times C\times D$	1			
$\vdots$	$\vdots$			
TC 합계		2^n-1		
잔여(=오차)		$2^n(m-1)$		
전체 합계		$m2^n-1$		

이러한 고차원의 Factorial Design 의 상세한 계산방법 및 분산분석법에 대해서는 전문서적을 참조해주기 바라며 그 개념과 방법은 전술한 경우와 동일하다. 또 인자가 두개만이 않인 경우 즉, 3^2, 3^3, … 4^2, 4^3, … 또는 $2\times3\times4$, $5\times3\times4$ … 등의 경우도 생각할 수 있으며 이런 경우 또한 여기서는 언급치 않겠다.

2-5. Confounding

우리가 실험을 하는데는 여러가지 변수를 취급해야 한다. 이를 계통적으로 조리있게 연구하기 위해서 실험계획법을 사용하나 대략의 경우 우리가 연구할려는 주요한 변수와 그렇지못한 변수가 있다. 또 이러한 것을 서로 대조 비교해서 중요한 변화도가 있는 것을 찾으려할 때 우리가 택하는 실험계획법에서 할수있는 비교는 한도가 있다. 따라서 우리는 중요치않는 변수와 그의 비교는 우리가 행하는 중요한 변수의 비교나 연구에 영향을 미치지 않겠금 해야 할 것이다. 이를 우리는 Confounding 이라 한다. 이를 예를 들어서 설명

하면 다음과 같다.

앞에서 제시한 예(표 4 및 그림 5)에서 우리가 이 실험을 행하기 위해서 사용한 반응물 원료가 모든 실험(이 경우는 8실험)에서 동일해서 원료의 품질에 차이가 없을것 같으면 실험에서 우리가 구할려는 각각 변수의 효과를 적절히 구할수 있을 것이다. 그러나 만약 이들의 원료가 어떠한 이유로서 동일한것을 공급할 수 없어서 실험에서 부득기 2가지의 원료를 사용하고 또 각각 다른 원료를 사용해서 4번의 실험을 했었다 하면 즉 (1) a, c, ac 및 b, ab, bc, abc 였다면 교반의 영향(1/2 시간 및 4시간의 경우)은 두 원료의 차이에서 오는 효과에 겹쳐서 나타나게 된다(즉 Confound 했다). 따라서 이를 다음과 같이 표시할수있다.

원 료 1	원 료 2
(1)	$b+X$
a	$ab+X$
c	$bc+X$
ac	$abc+X$

여기서 각 처리조합(TC)을 나타내는 것에 원료의 차이에서 오는 효과 X가 합친 상기의 두 가지 경우로 나눌수가 있다. 이 경우 우리가 각 주효과의 영향을 비교하기 위해서 하는 계산에서 X가 어떻게 영향을 미치는가 하는 것을 알아볼 필요가 있다.

초산첨가시간의 영향은

$$\frac{1}{4}[(ab+X)+(abc+X)+a+ac]$$
$$-\frac{1}{4}[(b+X)+(bc+X)+(1)+c]$$

이며 여기서 X는 상쇄가 된다. 동일하게

상관관계는

A(초산첨가 시간) $\times$ B(교반)은

$$\frac{1}{4}[(abc+X)+(ab+X)+(1)+c]$$
$$-\frac{1}{4}[(bc+X)+(b+X)+ac+a]$$

로 되어서 X는 역시 상쇄가 된다.

따라서 우리는 3인자 상관관계 $A\times B\times C$의 경우를 제하고는 원료의 차이(이것을 Blocks이라 한다)에서 오는 영향을 상쇄할수 있게 된다. 이경우 3인자 상관관계는 우리가 문제시할 정도로 중요한 것이 되지 못한다.

또 이밖에 시간의 경과에 따라서 제품의 질이나 분석의 결과가 조금씩 달라져 간다는등의 경우에도 이러한 변화에 의한 영향을 없이하기 위해서 Design을 해서 이의 효과를 Confounding 시켜야할경우가 많다. 그러기 위해서 우리는 Blocks을 만들어서 비교하는 방법을 쓰기로 한다.

§3. Fractional Factorial Experiment

Factorial Design에서 차원의 수가 커짐에 따라서 실험회수가 증가해가며 따라서 경비와 시간이 커져간다는 것을 전술하였다. 그러나 우리가 필요로하는 중요한 주인자의 효과 및 이들중 중요한것 얼마의 상관관계는 Factorial Design에 나와 있는 전체의 실험을 하지않고 그중의 일부분만을 택해서 함으로해서 우리가 필요로하는 정보를 구할수 있는 경우가 많다.

특히 경우에 따라서는 우리가 알고자하는 것은 고도의 정밀도를 요구하지 않는 경우도 있다. 또 그간의 경험이나 지식으로 해서 이미 알고 있는 부분도 있고 보니 우리가 필요로하는 정보를 찾아 내기위해서 Factorial Design의 일부분만을 취해서 실험을 하여서 충족할 경우도 있다. 또한 산업이나 공학부문에서는 우리가 구하는 최적조건을 찾기위해서 처음부터 넓은 범위를 덮은 많은 실험을 해야하는 실험계획이 필요한 것이 아니고 최적조건이 있을 가능한 방향을 제시해주는 간단한 실험을 여러번 되풀이 함으로서 우리의 목적을 달성하는 경우가 많다. 이에 겸해서 실험한번을 하기 위해서 소요되는 시간과 경비를 생각해보았을 때 실험회수를 가급적 줄인다는 것은 극히 중요한 문제가 된다. 이와같은 이유로 해서 Factorial Design 전체를 택하지 않고 그중의 일부분만을 택해서 하는 Fractional Factorial Design이 필요로 하는 경우가 많다.

3-1. 2^{k-p} Design

Full Factorial Design이 아닌 Fractional Factorial Design을 하는 방법으로서 처음에 2^3 Factorial Design에서의 2^{3-1}을 생각해보기로하자. 이 경우 이를 2^3의 Design에서 반씩둘로 나누어 쓸수 있다.

즉 전체의 8개의 처리조합을 4개씩 해서 둘로 분리해서 표시할수 있다는 것이다.

이때 ●으로 표시한 조와 ○으로 표시한 딴조로 구별한다(표 12 및 그림 13을 참조). 이를 각 ●및 ○로 표시된 부분을 나누어서 쓰면 표 13과 같이 된다. 이와

표 12.

A	B	C	
−	−	−	○
+	−	−	●
−	+	−	●
+	+	−	○
−	−	+	●
+	−	+	○
−	+	+	○
+	+	+	●

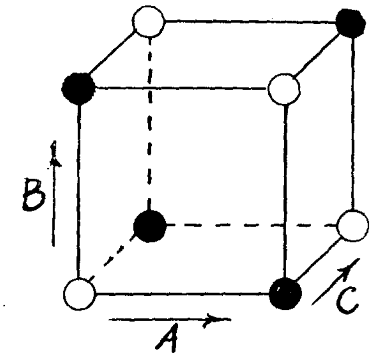

그림. 13 Fractional Factorial Design

같이 나누면 우리는 이 Design 에서는 8의 반인 4개의 실험으로 그치게 된다.

표 13. 2^{3-1} Fractional Factorial Design

● 의 부문			○ 의 부문		
A	B	C	A	B	C
+	−	−	−	−	−
−	+	−	+	+	−
−	−	+	+	−	+
+	+	+	−	+	+

또 다시 말할것 같으면 Full Design 을 두개의 Block 으로 나누었다고 할수 있으며 한 Block 이 각각의 Fractional Factorial Design 에 해당한다.

여기에서 A, B, C 의 기호를 보면 ●의부분에서 $C=A\times B$ 이고 ○의 부분에서는 $C=-A\times B$ 로 되여있다. 이와 동일하게 ● 에서 각각 $A=B\times C$, $B=A\times C$ 이고, ○에서 $A=-B\times C$, $B=-A\times C$ 이다. ● 와 ○ 부분에서 각각 다음의 주효과와 상관관계의 배합을 비교할수 있다.

(1) 평균 및 $A\times B\times C$
(2) A 및 $B\times C$
(3) B 및 $A\times C$
(4) C 및 $A\times B$

이의 계산법은 Factorial Design 의 경우와 같으며 다음에는 2^{4-1} 의 경우에 대해서 설명하기로 한다.

3-2. 2^{4-1} Design

4개의 주효과 (변수)를 연구하기 위해서 이 경우는 8번의 실험을 해야한다. Design 의 방법은 A, B, C 의 변수에 대해서는 2^3 Design 의 경우와 동일하게 − + 부호를 쓰며 D 의 변수는 $D=A\times B\times C$ 로서 얻어지는 부호를 쓴다. 이렇게 해서 얻은 Design 은 2^4 의 Full Design 의 반이 된다. 나머지반은 D 의 부호를 바꾸어서 얻어지는 Design 이다. 이 양 Design 을 합하면 2^4 의 전 Design 과 같아진다(표 14).

표 14. 2^{4-1} Fractional Factorial Design

실험횟수 \ 변수	A	B	C	D	Y
1	−	−	−	−	y_1
2	+	−	−	+	y_2
3	−	+	−	+	y_3
4	+	+	−	−	y_4
5	−	−	+	+	y_5
6	+	−	+	−	y_6
7	−	+	+	−	y_7
8	+	+	+	+	y_8

A 의 주효과$=\frac{1}{4}[-y_1+y_2-y_3+y_4-y_5+y_6-y_7+y_8]$

AB 와 CD 의 상관관계

$$=\frac{1}{4}(y_1-y_2-y_3+y_4+y_5-y_6-y_7+y_8)$$

이밖의 B, C 의 주효과 및 (AC, BD) 및 (AD, BC)

의 상관관계도 동일하게 계산하면 된다. 다음에 이의 예를 들어서 설명하기로 한다. 새로이 건설된 공장의 조작에서 여과작업에 여러가지 난점이 생겼다. 딴곳에 있는 공장의 같은 조작에서는 이러한 문제가 없었으며, 단지 이 새공장에서 새로운 여과기를 사용했을 때 여과시간이 길어졌으며 이에 대한 대책으로서 다음의 여러가지 변수를 생각할수 있다.

A. 사용하는물

상수도의 물을 사용해봤는데 우물물이 수질면에서 딴공장의 것과 비슷하다. 따라서 두종류의 물을 비교해볼 필요성이 있다.

B. 원　료

새공장에서 만들어진 원료와 딴공장에서 만들어진 원료의 비교.

C. 여과액의 온도

여과를 쉽게 하기위해서 액의 온도를 약간 올려서 해본다.

D. 체재시간

여과를 하기전에 여과물을 탱크에서 교반하는데 이때의 체재시간을 느린다.

E. 순환(Recycle)

새공장의 공정에서는 반응의 전환을 증가시키기 위해서 순환과정을 도입하였다. 따라서 이의 영향을 살피기 위해서 순환을 중단했을 때와 계속했을 때을 비교한다.

F. 가성소다의 첨가 속도

여과를 하기전에 침전을 이르키기 위해서 용액에 가성소다를 첨가하는데 새로운 공정에서는 구공정보다 속도가 빠르다. 따라서 이를 늦추어서 비교한다.

G. 여과포의 종류

새공정에서 사용한 여과포의 종류는 딴공장에서 사용한 것과 동종류의 것이기는 하나 공급원이 다른 신형임에 딴공장의 것과 비교한다.

이러한 7가지의 변수를 전부 조사연구하기에는 막대한 수의 실험을 해야함에 시일과 경비가 많이든다는 문제가 있다. 따라서 우리는 Fractional Factorial Design으로 적은 실험수로서 중요한 변수를 찾아 낼려고 한다. 이 Design에서 −를 정상적인것 (새공장에서의 조건)이고 +는 비교하기 위해서 변화시킨 공정의 조건을 뜻한다.

	−	+
(A) 사용하는 물	상수도	우물
(B) 원료	새공장	딴공장
(C) 여과온도	낮음	높음
(D) 체재시간	적다	길다
(E) 순환	있음	없음
(F) NaOH 첨가속도	빠르다	느리다
(G) 여과포	새것	딴공장것

이 Design은 2^{7-4}이며

$$D=A\times B\times C,\ E=A\times B,\ F=A\times C,\ G=B\times C$$

에 의해서 얻어진 Design에 따라서 실험을 하여서 얻은 여과시간은 다음 표 15와 같다.

표 15. 2^{7-4} Fractional Factorial Design 및 그의 Response

	A	B	C	D	E	F	G	Y 여과시간 min
1	−	−	−	−	+	+	+	68.4
2	+	−	−	+	−	−	+	77.7
3	−	+	−	+	−	+	−	66.4
4	+	+	−	−	+	−	−	81.0
5	−	−	+	+	+	−	−	78.6
6	+	−	+	−	−	+	−	41.2
7	−	+	+	−	−	−	+	68.7
8	+	+	+	+	+	+	+	38.7

각 주효과 및 상관관계의 계산은 다음과 같음. 즉

$$l_A=\frac{1}{4}[-68.4+77.7-66.4+81.0-78.6+41.2-68.7+38.7]=-10.9$$

l_B, l_C, l_D, l_E, l_F, l_G, 도 동일하게 계산하여 이를 열기하면 다음과 같이 된다.

물	$l_A=A+B\times E+C\times F+D\times G=-10.9$
원료	$l_B=B+A\times E+C\times G+D\times F=-2.8$
온도	$l_C=C+A\times F+B\times G+D\times E=-16.6$
체재시간	$l_D=D+C\times E+B\times F+A\times G=0.5$
순환	$l_E=E+A\times B+C\times D+F\times G=3.2$
NaOH 첨가속도	$l_F=F+A\times C+B\times D+E\times G=-22.8$
여과포	$l_G=G+B\times C+A\times D+E\times F=-3.4$

이 계산결과로서 보면 l_A, l_C 및 l_F는 딴것과 비해서 크다.

따라서 인자 A, C 및 F의 영향이 크다는 것을 알수

있다. 그러나 상관관계와 각 주인자와의 관계를 알기 위해서 이 Design에서 각 부호를 바꾸어서 실험을 했더니 다음과 같은 결과를 얻었다(표 16).

표 16. 2^{7-4} Fractional Factorial Design 및 그의 Response (표 15의 부호를 바꾼것)

	A	B	C	D	E	F	G	Y_2 여과시간
1	+	+	+	+	−	−	−	66.7
2	−	+	+	−	+	+	−	65.0
3	+	−	+	−	+	−	+	86.4
4	−	−	+	+	−	+	+	61.9
5	+	+	−	−	−	+	+	47.8
6	−	+	−	+	+	−	+	59.0
7	+	−	−	+	+	+	−	42.6
8	−	−	−	−	−	−	−	67.6

이 결과에서 주효과 및 상관관계의 계산을 하면,

$$l_A' = -A + B\times E + C\times F + D\times G = 2.5$$
$$l_B' = -B + A\times E + C\times G + D\times F = 5.0$$
$$l_C' = -C + A\times F + B\times G + D\times E = -15.8$$
$$l_D' = -D + C\times E + B\times F + A\times G = 9.2$$
$$l_E' = -E + A\times B + C\times D + F\times G = -2.3$$
$$l_F' = -F + A\times C + B\times D + E\times G = 15.6$$
$$l_G' = -G + B\times C + A\times D + E\times F = -3.3$$

두 Design에서 얻은 결과를 계산함으로서 얻은 $l_A, \cdots l_G$ 및 $l'_A \cdots l_G'$의 화 및 차를 구함으로서 전체 Design (Aggregate Design)의 값을 얻을수 있다. 즉

$$A = -6.7 \quad B\times E + C\times F + D\times G = -4.2$$
$$B = -3.9 \quad A\times E + C\times G + D\times F = 1.1$$
$$C = -0.4 \quad A\times F + B\times G + D\times E = -16.2$$
$$D = -4.4 \quad C\times E + B\times F + A\times G = 4.9$$
$$E = 2.8 \quad A\times B + C\times D + F\times G = 0.5$$
$$F = -19.2 \quad A\times C + B\times D + E\times G = -3.6$$
$$G = 0.1 \quad B\times C + A\times D + E\times F = -3.4$$

이 계산 결과에서 우리는 인자 F는 주효과가 −19.2로서 가장크며 상관관계에서는 $A\times F + B\times G + D\times E$가 −16.2로서 가장 큰 값을 준다는 것을 알었다. 즉 인자 F는 타인자와 분리가 되어서 현저함을 나타내었으며, 주인자중에서 다음으로 A의 효과가 −6.7로나와 있으며, 따라서 주효과는 A 및 F이고 이의 상관관계가 가장 현저하다는 것을 알수있다. 이 상관관계를 살피기 위해서 하기표(표 17)를 참조하면 이 두인자

표 17. 물(A)과 NaOH 첨가속도(F)와의 상관관계

		물(A)	
		상수도(−)	우 물(+)
NaOH의 첨가속도 (F)	느리다(+)	65.4	42.6
	빠르다(−)	68.5	78.0

사이에 상관관계가 존재한다는 것을 알수 있다. 여기서 $B\times G$ 및 $D\times E$의 상관관계도 존재할 수 있다. 그러나 여기서는 주인자 A, F 및 이의 상관관계 $A\times F$가 가장 현저한 것 같으며 문제는 물을 우물물을 사용하고 NaOH의 첨가속도를 서서히 했을때 여과시간이 줄어진다는 것이다. 이를 새공장에서 딴 변수를 그냥두고 이 두인자만 변화 시켰더니 여과시간이 40분 내외로 줄어들었음에 이 문제는 해결이 되었다.

실험계획법에는 이밖에 Randomized Block, Latin Square, Nested Design 등등이 있는데 이들은 여기에 포함시키지않았다. 또 실험계획법의 연장으로 변수가 여러개 있고 Interaction이 많은 경우에는 Response Surface Methodology에 의한 방법을 써야한다. 이 방법을 사용하면 각각 경우에 대해서 수식의 Model을 얻을 수 있고, Model을 사용해서 Optimization을 할 수 있게 된다, 이것 또한 여기서는 기술치않고 따로이 했다.

Reference

Box, G. E. P., Hunter, J. S., *Technometrics* **3**, 331 and 449 (1961).

Box, G. E. P., Hunter, W. G., *Technometrics*, **7**, 23 (1965).

Box, G. E. P., Wilson, K. B., *J. Ray Statist Soc. B*, **13**, 1 (1951).

Finch, R. W., Van Winkle, M., *Industrial and Engineering Chemistry* **3**, 106 (1964).

Box, G. E. P., Hunter, J. S., *Technometrics*, **3**, Aug. 1971.

Davies, O. L.: The Design and Analysis of Industrial Experiments.

Bennett, C. A., Franklin, N. L.: Statistical Analysis in Chemistry and the Chemical Industry.