

Monthly User Guide from JMP Korea

제 23호 (2019년 6월)

DOE in JMP(2) : Classical Design

* 본 Guide 는 매월 두 번째 화요일에 발행됩니다

(2018년 7월호부터는 JMP 14 Version 기준입니다)

** Monthly User Guide 지난 호는 다음 Site 를 참조하세요(https://www.jmp.com/ko_kr/newsletters.html)

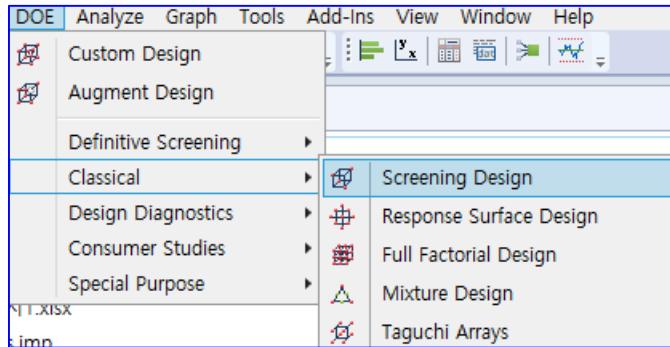
*** 본 Guide 의 내용과 관련한 문의는 ikju.Shin@jmp.com 으로 연락 바랍니다



DOE in JMP(2) : Classical Design

지난 달(2019년 5월)에 이어 이번 호에서는 실험 계획법(DOE : Design of Experiment) 시리즈 두 번째로, Classical Design에 대해 배워 보겠습니다. 일반적으로 분류되는 실험 계획법의 다섯 가지 종류에 대해 JMP에서는 Classical Design 또는 Textbook Design이라고 통칭하는 데, 그 중 세 가지(Screening Design, Full Factorial Design, Response Surface Design)에 대한 JMP 활용법을 배워 보겠습니다.

실험의 설계(Design) : DOE Platform



Classical

- Screening Design** Sift through many factors to find the few that have the most effect.
- Response Surface Design** Find the best response allowing quadratic effects (curvature).
- Full Factorial Design** Generate all possible combinations of the specified factor settings.
- Mixture Design** Optimize a recipe for a mixture of several ingredients.
- Taguchi Arrays** Make inner and outer arrays from signal and noise factors.

전통적 설계

- 선별 설계** 많은 요인에서 가장 큰 효과가 있는 몇 개 요인을 선별합니다.
- 반응 표면 설계** 곡면으로 표현하는 효과의 2차까지 허용하여 반응의 최적을 찾습니다.
- 완전 요인 설계** 지정된 요인의 모든 가능한 조합을 생성합니다.
- 혼합률 설계** 여러 성분의 혼합에 대한 최적 조합 레시피를 찾습니다.
- Taguchi 배열** 신호 및 잡음 요인에서 내측 및 외측 배열을 생성합니다.

Screening Design : 예제 1

1. 반응치 Y는 수율(Yield)이고(망대 특성), 2 수준의 연속형 인자 세 개, 2 수준의 범주형 인자가 네 개 있는 상황에 대해 Screening Design 방법으로 실험 설계를 하고자 한다고 가정.

2. DOE / Classical / Screening에 들어가서 아래와 같이 입력한다.

1) 반응치 Y의 이름을 입력하고 Goal에서 Maximize 선택

2) Factor Panel에서

-Add N Factors에 3 입력 후, Continuous 클릭한 뒤

-다시 Add N Factors에 4 입력 후, Categorical에서 2 Level을 선택한다.

The screenshot shows the 'Responses' section with 'Yield' as the response name, 'Maximize' as the goal, and 'Continuous' as the role. The 'Factors' section shows 7 factors: X1, X2, X3, X4, X5, X6, and X7. X1, X2, and X3 are continuous factors with values -1 and 1. X4, X5, X6, and X7 are categorical factors with values L1 and L2.

* 해상도란 교란의 구조, 즉 중요하지 않거나 미미한 영향력으로 판단되는 고차의 교호 효과를 다른 효과와 교란시킨 구조를 뜻한다. 예를 들어 2인자 교호 작용을 주 효과에 교란시키면 해상도가 3이 되고, 3인자 교호 작용이 주 효과에 교란되거나 2인자 교호 작용이 다른 2인자 교호 작용에 교란되면 해상도가 4가 된다.

3. Specify Factors에서 Continue를 클릭하면 두 가지 유형의 실험 Type 중 하나를 선택해야 한다.

Choose Screening Type

Choose from a list of fractional factorial designs

Construct a main effects screening design

Continue

'Choose Screening Type'에서 fractional factorial design(부분 요인 배치법)을 실시할 것인지, 주 효과만을 Screening하는 실험을 할 것인지를 선택하게 되는데, 만약 fractional factorial design을 선택하였다면 아래와 같이 Design List에서 총 실험 수, Block Size 및 해상도(Resolution)* 등을 고려하여 실험 방법을 결정하여야 한다.

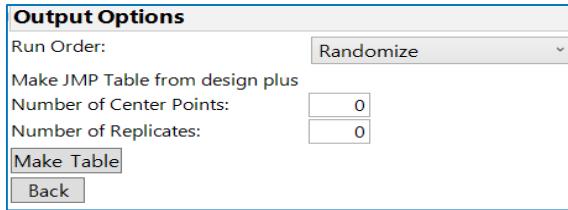
Design List

Choose a design by clicking on its row in the list.

Number Of Runs	Block Size	Design Type	Resolution
8		Fractional Factorial	- what is estimable
12		Plackett-Burman	3 - Main Effects Only
16		Fractional Factorial	3 - Main Effects Only
16	8	Fractional Factorial	4 - Some 2-factor interactions
16	4	Fractional Factorial	4 - Some 2-factor interactions
16	2	Fractional Factorial	4 - Some 2-factor interactions
32		Fractional Factorial	4 - Some 2-factor interactions
32	16	Fractional Factorial	4 - Some 2-factor interactions
32	8	Fractional Factorial	4 - Some 2-factor interactions
32	4	Fractional Factorial	4 - Some 2-factor interactions
32	2	Fractional Factorial	4 - Some 2-factor interactions
64		Fractional Factorial	5+ - All 2-factor interactions
64	32	Fractional Factorial	5+ - All 2-factor interactions
64	16	Fractional Factorial	5+ - All 2-factor interactions

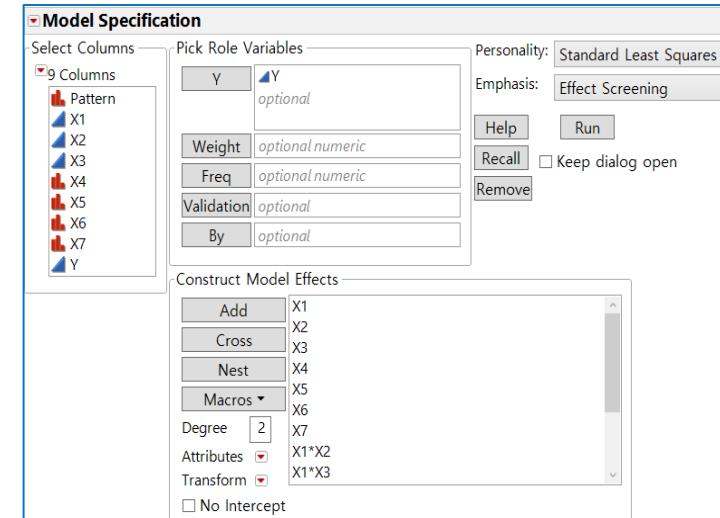
Screening Design : 예제 1

4. 16회 실험 Run을 가진 Fractional Factorial을 선택하고 'Continue'를 클릭하면, 아래와 같이 실험 순서(랜덤화 여부), 중심점 및 반복 실험 여부를 결정하게 된다. 아래와 같이 입력하고 'Make Table' 을 클릭하면

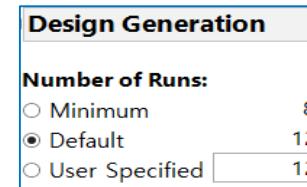


5. 실험을 할 수 있는 Data Table(실험 계획표)이 생성된다.
만약 실험 계획의 내용을 재확인하거나 수정을 하고자 한다면 왼쪽 상단의 Table Panel에서 DOE Dialog을 실행하면 된다

6. 실제 실험을 하고 난 뒤에 그 결과를 분석하기 위해서는, 실험 결과(여기서는 Yield)를 입력하고 난 뒤, 왼쪽 상단 Table Panel에서 Model을 실행하면 된다. 이는 Analyze / Fit Model을 실행한 결과와 동일하다



7. 앞의 3번에서 'Choose Screening Type'에서 main effect screening하는 실험을 선택하였다면 아래처럼 실험 Run 수를 결정하고 Make Design을 클릭하면 된다.



Screening Design : 예제 2

1. 실제 Screening Design 결과를 가지고 해석해 보자

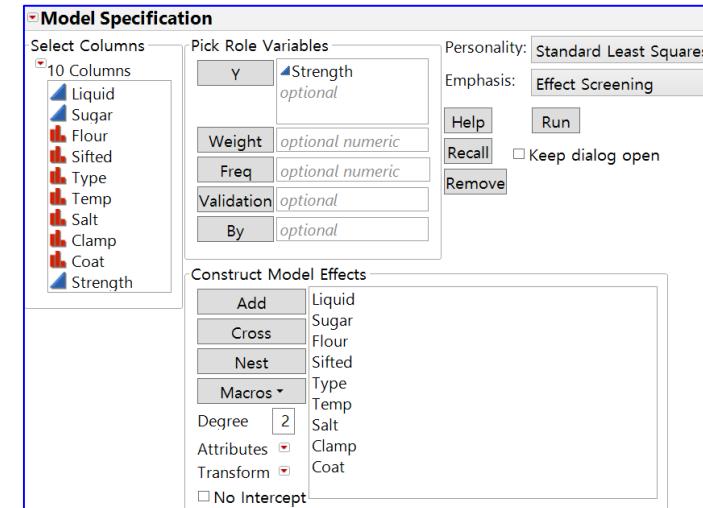
Sample Data : Help / Sample Data Library / Flrpaste.jmp

Data Table을 살펴보면 아홉 개 인자에 대해 실험한 결과임을 알 수 있다.

	Liquid	Sugar	Flour	Sifted	Type	Temp	Salt	Clamp	Coat	Strength
1	4	0	White	Yes	Water	Warm	No	Tight	Thick	17.4
2	4	0	White	Yes	Milk	Warm	Yes	Tight	Thin	8.2
3	4	0	Whole	No	Water	Cool	No	Loose	Thick	9
4	4	0	Whole	No	Milk	Cool	Yes	Loose	Thin	1.8
5	4	0.25	White	No	Water	Cool	Yes	Tight	Thick	9.3
6	4	0.25	White	No	Milk	Cool	No	Tight	Thin	6.1
7	4	0.25	Whole	Yes	Water	Warm	Yes	Loose	Thick	4.8
8	4	0.25	Whole	Yes	Milk	Warm	No	Loose	Thin	2.9
9	5	0	White	No	Water	Warm	No	Loose	Thin	9.1
10	5	0	White	No	Milk	Warm	Yes	Loose	Thick	4.3
11	5	0	Whole	Yes	Water	Cool	No	Tight	Thin	3.5
12	5	0	Whole	Yes	Milk	Cool	Yes	Tight	Thick	2.3
13	5	0.25	White	Yes	Water	Cool	Yes	Loose	Thin	11.2
14	5	0.25	White	Yes	Milk	Cool	No	Loose	Thick	3.7
15	5	0.25	Whole	No	Water	Warm	Yes	Tight	Thin	3.7
16	5	0.25	Whole	No	Milk	Warm	No	Tight	Thick	2.1

2. 좌측 Table Panel의 Model을 클릭하여 Model Specification 윈도우를 열어 확인해 보면 아홉 개 인자에 대해 Main Effect만을 Screening하고자 하는 실험임을 알 수 있다.

Run 을 실행하면

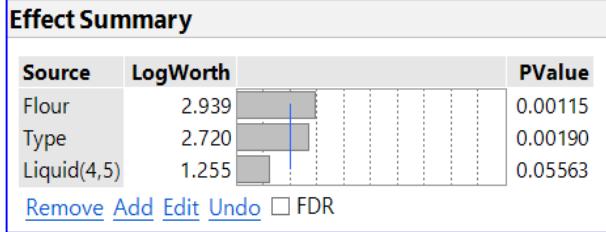


3. Effect Summary에서 각 인자별로 반응치 Y에 대한 효과를 확인할 수 있다.

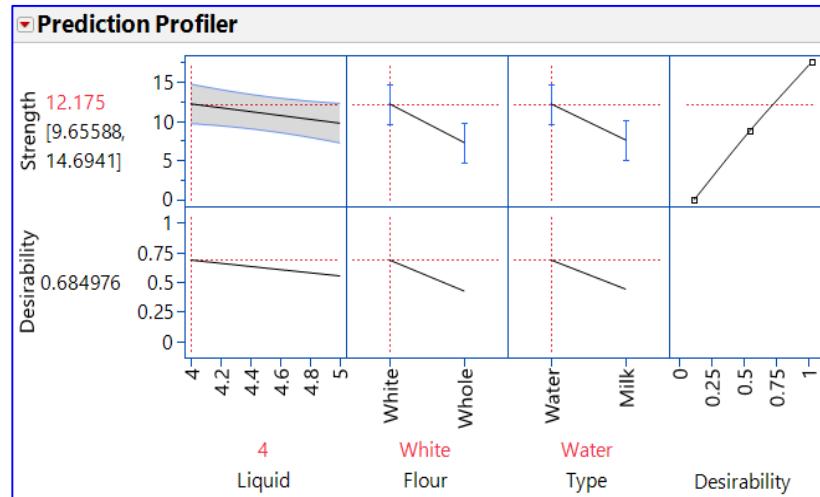
Source	LogWorth	PValue
Flour	2.045	0.00902
Type	1.915	0.01217
Liquid(4,5)	0.972	0.10655
Sugar(0,0.25)	0.527	0.29685
Sifted	0.360	0.43698
Salt	0.340	0.45754
Coat	0.253	0.55832
Clamp	0.226	0.59481
Temp	0.217	0.60727

Screening Design : 예제 2

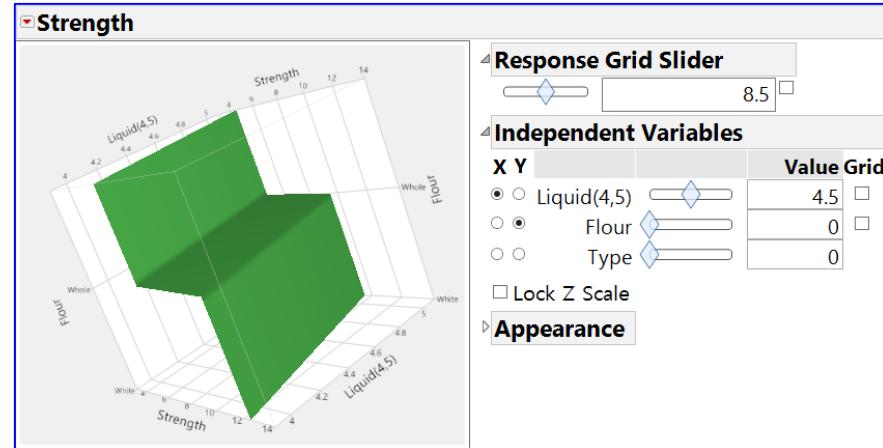
4. 유의하지 않는 인자를 하나씩 제거하고 난 뒤의 결과는 아래와 같다.



5. 또한, Prediction Profiler를 활용하여 X인자의 값 변화에 따른 Y값을 추정해 볼 수도 있을 것이다.



6. ▶ Response Strength / Factor Profiling / Surface Profiler를 활용할 수도 있다.



Full Factorial Design

Screening Design과 달리 인자의 모든 실험 조건의 조합에서 실험하는 것이 Full Factorial Design(완전 배치법)이다.

JMP에서는 실험 계획을 수립할 때 Design Window에서 반응치 Y 및 Factor의 값 등을 직접 입력하면서 할 수도 있지만, 반응치 Y 및 Factor에 대해 입력해야 할 내용을 미리 Table로 만들어 놓은 다음, Design Window에서 이를 불러와서(load) 실험 계획을 수립할 수도 있는 데, 이러한 방법을 포함하여 Full Factorial Design에 대해 학습해 보자.

1. Sample Data(1) : 반응치

[Help/Sample Data Library/Design Experiments/Reactor Response.jmp](#)

Response Name	Lower Limit	Upper Limit	Response Goal	Importance	
Percent ...	90	100	Maximize	1	

2. Sample Data(2) : 요인(Factor)

[Help / Sample Data Library / Design Experiments / Reactor Factors.jmp](#)

	Feed Rate	Catalyst	Stir Rate	Temperature	Concentration
1	10	1	100	140	3
2	15	2	120	180	6

3. Reactor Response.jmp 파일을 열어 놓은 상태에서 DOE / Classical / Full Factorial Design에 들어가서 ▼Full Factorial Design / Load Response를 클릭하고, Reactor Factors.jmp 파일을 열어 놓은 뒤 ▼Full Factorial Design / Load Factors를 클릭하면 아래와 같이 반응치와 인자에 대한 내용이 입력된다.

Responses				
Add Response ▾ Remove Number of Responses...		Goal	Lower Limit	Upper Limit
Percent Reacted	Maximize	90	100	1
Factors				
Continuous ▾ Categorical ▾ Remove Add N Factors 1				
Name	Role	Values		
Feed Rate	Continuous	10	15	
Catalyst	Continuous	1	2	
Stir Rate	Continuous	100	120	
Temperature	Continuous	140	180	
Concentration	Continuous	3	6	

4. Continue를 클릭한 다음 실험 순서, 중심점, 반복 실험 여부 등에 대한 선택 후 Make Table을 클릭하면 실험 계획표가 만들어진다.

2x2x2x2x2 Factorial

Output Options

Run Order: Randomize

Number of Runs: 32

Number of Center Points: 0

Number of Replicates: 0

Make Table

Full Factorial Design

5. 위의 실험 계획표에 따라 실험 실시한 결과를 가지고 분석해 보자.
해당 Sample Data는 아래에서 확인할 수 있다.

Sample Data : Help / Sample Data Library / Design Experiments /
Reactor 32 Runs.jmp

6. Analyze / Fit Model에 직접 들어가서 실험 결과를 분석해 보자.

1) Construct Model Effects의 모든 내용을 제거(Remove)하고,
Select Columns에서 Feed Rate ~ Concentration까지 다섯 개의 인자를
선택한 다음 (주효과와 모든 2차의 교호 작용까지 포함하여 모델을
추정하기 위하여)

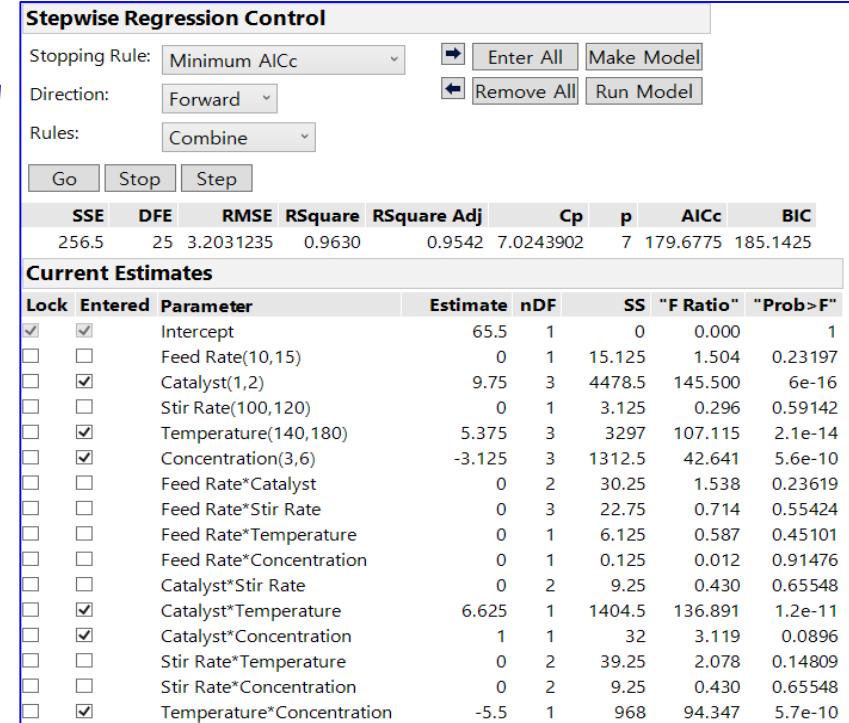
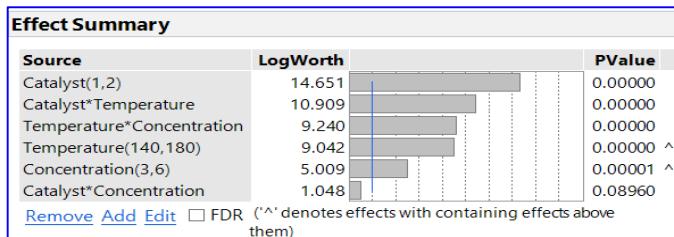
2) Construct Model Effects의 Macros에서 Factorial to Degree를
선택하고(하단 Degree의 숫자는 2)

3) Personality에서 Stepwise 선택 후 Run 클릭

4) Stopping Rule에서 Minimum AICc 선택 후 Go를 클릭하면 우측과 같이
RMSE, RSquare, (Mallow) CP, AICc, BIC 등의 통계량과 함께 유의한 효과를
선별한 결과가 Display된다.

7. 상단 우측의 Run Model을 클릭하면 아래와 같은 분석 결과가 Display된다.

1) Effect Summary : 모델에 포함된 각 인자의 유의성이 P Value로 표현된다.



Full Factorial Design

2) Lack of fit : 오차에 대한 설명으로 전체 오차의 대부분이 Pure Error(순수 오차)임을 알 수 있다.

Lack Of Fit				
Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Ratio
Lack Of Fit	1	0.50000	0.5000	0.0469
Pure Error	24	256.00000	10.6667	Prob > F
Total Error	25	256.50000		0.8304
			Max RSq	0.9631

3) Summary of Fit : 모델 전체에 대한 요약된 설명이다.

Summary of Fit	
RSquare	0.96304
RSquare Adj	0.95417
Root Mean Square Error	3.203123
Mean of Response	65.5
Observations (or Sum Wgts)	32

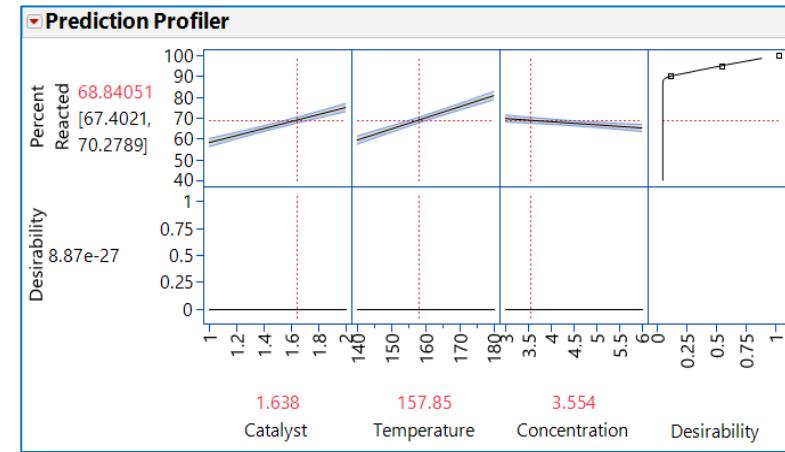
4) Analysis of Variance(분산 분석) : F값(모델에 의해 설명되는 변동 / 오차 변동)이 매우 크므로 모델은 적절하다고 할 수 있다.

Analysis of Variance				
Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Ratio
Model	6	6683.5000	1113.92	108.5689
Error	25	256.5000	10.26	Prob > F
C. Total	31	6940.0000		<.0001*

5) Parameter Estimates : 개별 효과의 유의성에 대한 내용이다. 이를 요약한 것이 위의 1)번의 Effect Summary이다.

Parameter Estimates				
Term	Estimate	Std Error	t Ratio	Prob> t
Intercept	65.5	0.566238	115.68	<.0001*
Catalyst(1,2)	9.75	0.566238	17.22	<.0001*
Temperature(140,180)	5.375	0.566238	9.49	<.0001*
Concentration(3,6)	-3.125	0.566238	-5.52	<.0001*
Catalyst*Temperature	6.625	0.566238	11.70	<.0001*
Catalyst*Concentration	1	0.566238	1.77	0.0896
Temperature*Concentration	-5.5	0.566238	-9.71	<.0001*

8. ▶ Response Percent Reacted / Factor Profiling / Profiler를 활용하여 X인자의 값 변화에 따른 Y값을 추정해 볼 수 있다.



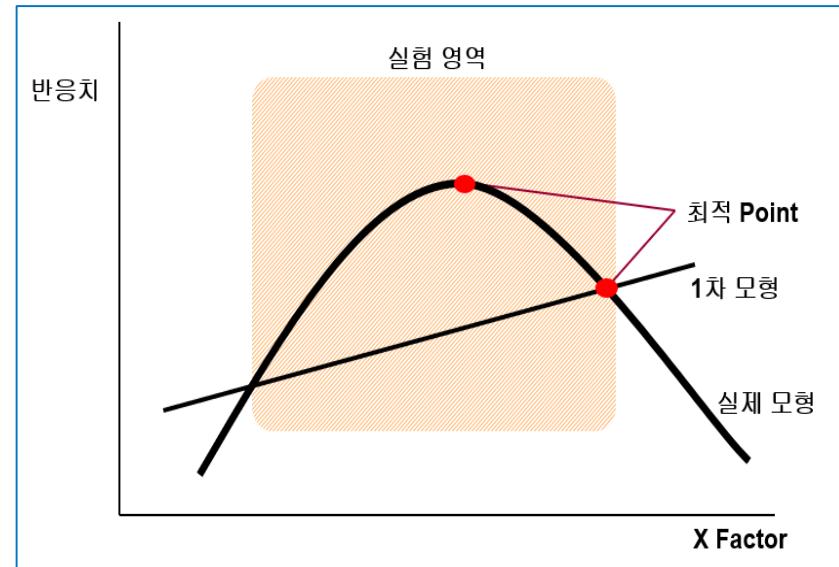
Response Surface Design

앞에서 설명한 부분 배치법을 포함한 Screening 실험 및 Full Factorial 실험은 많은 유용성을 가지고 있음에도 불구하고 본질적으로는 인자와 반응치(결과) 간의 인과 관계를 모델링하여 최적화(Optimization)하는 것이 목적이 아니라 반응치에 보다 더 많은 영향을 미치는 주요 인자를 선별(Screening)하는 것을 주요 목적으로 하는 실험이다.

예를 들어 2 수준(Level) 실험인 Screening 실험 또는 Full Factorial 실험을 하게 되면, 선형 모델링(Linear Modeling)밖에 할 수 없는 제약으로 인해 실제의 최적 Point를 정확히 찾을 수 없게 된다.

이러한 단점을 보완하기 위하여 중심점(Center Point) 및 축점(Axial Point) 등에서 실험을 추가하여 인자와 반응치 간의 곡률(Curvature) 효과를 추정하여 그 관계를 최적화하고자 하는 실험이

반응 표면 실험(Response Surface Design)이다.



Response Surface Design

1. Full Factorial Design의 경우와 마찬가지로 반응치 Y 및 Factor에 대해 미리 만들어 놓은 Table을 Design Window에서 불러와서(load) 실험 계획을 수립해 보자.

1) Sample Data(1) : 반응치

[Help / Sample Data Library / Design Experiments / Bounce Response.jmp](#)

	Response Name	Lower Limit	Upper Limit	Response Goal	Importance
1	Stretch	350	550	Match Target	1

2) Sample Data(2) : 요인(Factor)

[Help / Sample Data Library / Design Experiments / Bounce Factors.jmp](#)

	Silica	Sulfur	Silane
1	0.7	1.8	40
2	1.7	2.8	60

2. Bounce Response.jmp 파일을 열어 놓은 상태에서 DOE / Classical / Response Surface Design에 들어가서 ▶Response Surface Design / Load Response를 클릭하고, Reactor Factors.jmp 파일을 열어 놓은 뒤 ▶Response Surface / Load Factors를 클릭하면 반응치와 인자에 대한 내용이 입력된다.

3. 그런 다음 실시하고자 하는 반응 표면 실험의 종류를 선택하면 된다

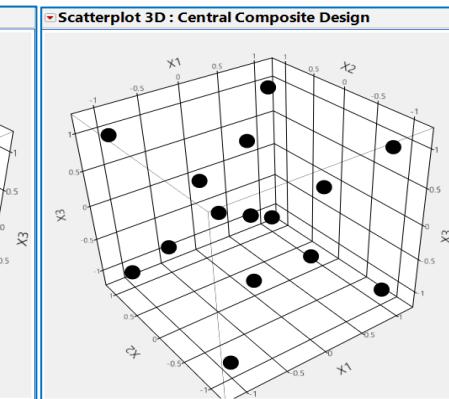
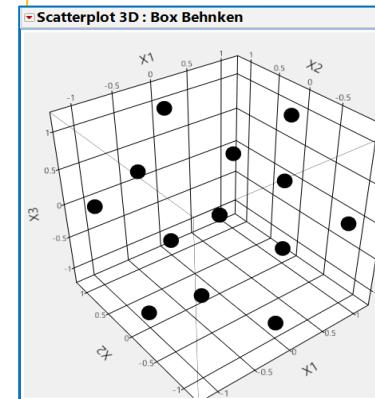
3 Factors

Choose a Design

Number	Block	Center	Design Type
15	3		Box-Behnken
16	2		Central Composite Design
20	6		CCD-Uniform Precision
20	6	6	CCD-Orthogonal Blocks
23		9	CCD-Orthogonal

optional item

반응 표면 실험은 중심점(Center Point)에서의 실험 횟수, 축점(Axial Point)의 위치 등에 따라 몇 가지 세부적인 종류로 구분되는 데, 많이 활용되는 Box-Behnken 실험과 중심 합성법(Central Composite Design)을 간략히 살펴보자. 아래는 3개 인자에 대해 각각 두 가지 방법으로 설계한 실험 구조를 Scatterplot 3D Graph로 나타낸 것이다. Box Behnken 실험은 각 요인에 대해 3 수준의 실험점을 가지며 육면체(Cube)의 꼭지점에서는 실험이 이루어지지 않는다. 중심 합성법은 각 요인에 대해 일반적으로 5 수준의 실험점을 가진다.



Response Surface Design

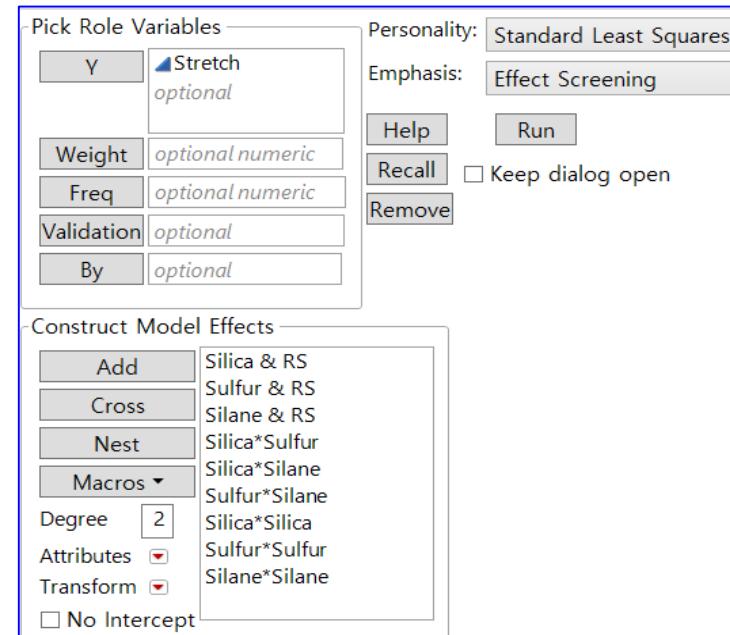
4. Box Behnken 실험을 선택하고 난 뒤, 실험 순서(랜덤화), 중심점에서의 실험 횟수, 반복 실험 횟수 등에 대해 결정한 다음 'Make Table'을 클릭하여 실험 Table을 완성한다.

5. 위의 실험 계획표에 따라 실험 실시한 결과를 가지고 분석해 보자. 해당 Sample Data는 아래에서 확인할 수 있다.

[Help / Sample Data Library / Design Experiments / Bounce Data.jmp](#)

	Pattern	Silica	Sulfur	Silane	Stretch
1	0--	1.2	1.8	40	422
2	0++	1.2	2.8	60	392
3	--0	0.7	1.8	50	570
4	++0	1.7	2.8	50	433
5	000	1.2	2.3	50	398
6	000	1.2	2.3	50	394
7	-+0	0.7	2.8	50	285
8	+-0	1.7	1.8	50	260
9	0+-	1.2	2.8	40	278
10	0-+	1.2	1.8	60	351
11	-0-	0.7	2.3	40	451
12	000	1.2	2.3	50	396
13	+0-	1.7	2.3	40	372
14	-0+	0.7	2.3	60	474
15	+0+	1.7	2.3	60	394

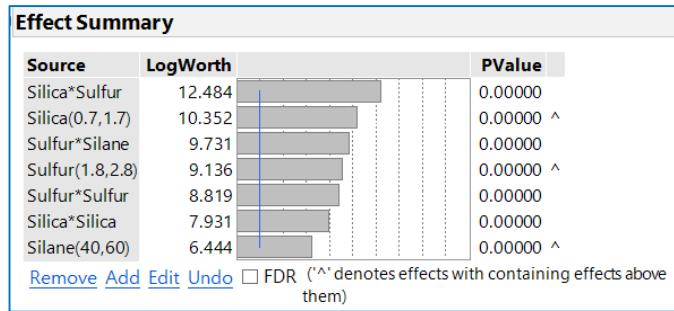
6. Table Panel의 'Model'을 실행하면 아래와 같이 'Construct Model Effects'에 곡률 효과를 추정할 수 있는 반응 표면(RS : Response Surface) 실험으로 모델이 설계되어 있음을 알 수 있다.



Response Surface Design

7. Run을 클릭한 뒤 Effect Summary에서 유의하지 않는 효과를 제거한 뒤의 결과는 아래와 같다.

1) Effect Summary



2) Lack of Fit

Lack Of Fit

Source	DF	Sum of Squares		F Ratio
		Mean Square	Prob > F	
Lack Of Fit	5	12.230769	2.44615	0.6115
Pure Error	2	8.000000	4.00000	Prob > F
Total Error	7	20.230769		0.7158
			Max RSq	0.9999

3) Parameter Estimates

Parameter Estimates

Term	Estimate	Std Error	t Ratio	Prob> t
Intercept	396.15385	0.816669	485.08	<.0001*
Silica(0,7,1,7)	-40.125	0.601052	-66.76	<.0001*
Sulfur(1,8,2,8)	-26.875	0.601052	-44.71	<.0001*
Silane(40,60)	11	0.601052	18.30	<.0001*
Silica*Sulfur	114.5	0.850016	134.70	<.0001*
Sulfur*Silane	46.25	0.850016	54.41	<.0001*
Silica*Silica	26.480769	0.882103	30.02	<.0001*
Sulfur*Sulfur	-35.51923	0.882103	-40.27	<.0001*

8. ▼ Prediction Profiler / Optimization and Desirability / Maximize Desirability를 선택하여 최적의 조건을 확인할 수 있다

