

## 정규 심플렉스를 이용한 혼합물 성분변수의 진화적 조업법

김치환\* · 변재현\*\*

\* SK Teletech 품질관리 팀

\*\* 경상대학교 산업시스템공학부, 공학연구원

## Evolutionary Operation of Mixture Components Using Regular Simplex

Chi-Hwan Kim\* · Jai-Hyun Byun\*\*

\* Quality Control Team, SK Teletech

\*\* Department of Industrial and Systems Engineering  
and Engineering Research Institute, Gyeongsang National University

### Abstract

A mixture experiment is a special type of response surface experiment in which the factors are the ingredients or components of a mixture, and the response is a function of the proportions of each ingredient. Evolutionary operation is useful to improve on-line full-scale manufacturing processes by systematically changing the levels of the process variables without jeopardizing the product. This paper presents an evolutionary operation procedure for large-scale mixture production processes based on simplex search procedure, which can be beneficial to practitioners who should improve on-line mixture process quality while meeting the production schedule of the mixture product.

### 1. 서론

혼합물 실험(mixture experiment)은 일반적인 실험계획법과 달리, 인자가 혼합물의 성분이나 구성요소이고 반응은 각 성분의 비율의 함수이며, 성분의 최적 혼합비율을 찾는 것을 목적으로 한다. 혼합물 실험은 성분의 합이 1(100%)이하가 되어야 한다는 제약조건 가지므로 전체 실험영역은 심플렉스의 형태이며, 각 꼭지점과 대응하는 부분공간(선분 혹은 면)이 하나의 좌표축을 이루게 된다. 혼합물 실험은 성분의 수가 증가할수록 실험점의 수가 기하급수적으로 증가하며, 실제 생산공정에서 지속적으로 최적 공정조건 혹은 최적 혼합비율을 탐색하기보다 실험실이나 파일럿 플랜트에서 실험을 실행하기에 적합하다. 그러나 이렇게 실험실이나 파일럿 플랜트 실험에서 구한 최적조건이 실제 대규모 생산현장에서 항상 최적인 것은 아니며 양산에서 다시 최적조건을 탐색해야 하는 것이 일반적이다(Box and Draper, 1969). 본 논문은 혼합물을 생산하는 대규모의 양산공정에서 최적 조건을 지속적으로 탐색하기 위하여 현재의 공정조건을 조금씩 변화시키면서 그 반응을 관찰하고 결과를 분석하여 새로운 최적조건을 찾아가는 혼합물 진화적 조업법(evolutionary operation, EVOP)을 제시하고자 한다. 본 연구는 Kim and Byun(2003)이 제시한 중심점 기준 혼합물 EVOP 대신에 Spendley et al.(1962)이 제안한 정규심플렉스(regular simplex)에 근거하여 탐색 실험점의 수를 최소로 이용하는

혼합물 EVOP 절차를 제시하고자 한다.

### 2. 혼합물 실험의 개요 및 심플렉스 좌표시스템

휘발유, 페인트, 세제, 고분자 제품 등과 같이 두 가지 이상의 성분(component) 혹은 구성요소(ingredient)들을 혼합함으로써 제조되는 제품의 성능 혹은 반응은 각 성분의 혼합량이 아니라 각 성분의 상대적인 혼합비율에 의해 영향을 받게 되며 전체 성분들의 합은 항상 일정한 양이 되므로 이와 같은 제품들의 성능 혹은 반응을 최대 혹은 최소화 하는 성분들의 최적 혼합비율을 찾는 실험계획을 요인실험과 구분하여 혼합물 실험이라 한다(Cornell, 2002).

일반적으로  $q$ 개의 성분(혹은 구성요소)으로 이루어진 혼합물에서  $x_i$ 를  $i$ 번째 인자(성분)의 비율이라 하면 이들  $q$ 개의 성분에는 다음과 같은 제약조건이 따른다.

$$x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, q \quad (1)$$

$$\sum_{i=1}^q x_i = x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1 \quad (2)$$

식 (2)의 제약으로 인해 성분  $x_i$ 는 서로 독립이 아니며 일반적인 반응표면실험(response surface experiment)과 구분된다. 식 (1)과 (2)의 조건에 의해 혼합물 실험은 심플렉스(simplex)라고 하는  $(q - 1)$  차원에서  $q$ 개의 꼭지점을 가지는 정다면체의 실험영역에서 실험을 하게 되며  $q = 2$ 인 경우 실험영역은 대각선 선분으로 나타나고  $q = 3$ 인 경우는 정삼각형, <그림 1>과 같이  $q = 4$ 인 경우의 실험영역은 정사면체가 된다.

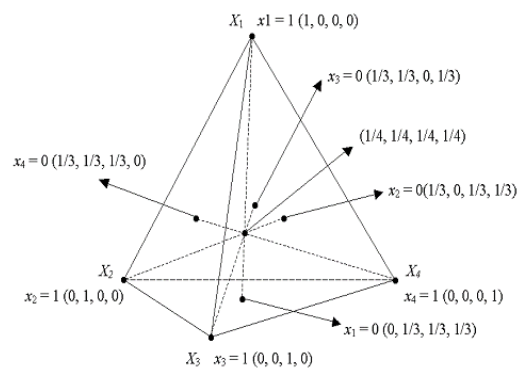


그림 1. 4차원 심플렉스 좌표

혼합물의 혼합비율은 심플렉스 공간에서 좌표로 나타낼 수 있으며 이러한 좌표는 각 꼭지점에서 대응하는 선분 혹은 면의 중심에 직선을 그어  $X_i$  축을 형성하고 이것을  $n$ 등분함으로써 만들 수 있다. 각 꼭지점은 하나의 단일성분 100%로 구성되는 순수혼합(pure blend)을 나타내며, 2개의 선분의 중심은 그 선분을 연결하는 2개의 성분이 50%씩 혼합되는 2진 혼합(binary blend)을 나타낸다. 일반적으로  $q$ 개의 성분으로 구성되는 혼합물 실험의 실험영역은  $q$ 개의 꼭지점, 축 및 면을 가진  $q$ 차원 심플렉스 공간을 형성한다.  $q$ 개의 각 꼭지점은 순수혼합을 나타내며 대응되는 선분 혹은 면은  $(q - 1)$ 개의 성분들이 동일한 비율로 혼합된다. 이러한 심플렉스 공간 내에서  $q$ 개의 성분들 중 한 성분의 증가나 감소, 즉 임의의 한 축에서의 증가나 감소치  $\Delta$ 는 이 성분을 제외한 나머지  $(q - 1)$ 개 성분들의 감소나 증가치  $\Delta/(q - 1)$ 로 상쇄된다.

### 3. 정규 심플렉스 EVOP를 이용한 혼합물 EVOP

혼합물 생산공정에 이용하기 위하여 정규 심플렉스 EVOP를 이용하면, 성분의 수와 차원의 수가 같다는 특징이 있다. 즉, 성분의 수와 실험점의 수가 동일하므로 정규 심플렉스 EVOP를 혼합물 실험에 적용할 경우 인자 혹은 성분의 수가 많더라도 적은 실험점으로 무난하게 EVOP를 진행할 수 있는 장점이 있다.

혼합물 실험에 정규 심플렉스 EVOP의 개념을 적용하여 EVOP를 진행하기 위해서 먼저 최초의 실험점을 생성하는 방법을 설명한다.  $q$ 개의 성분으로 구성되는 혼합물의 심플렉스 공간은  $q$ 차원 초공간(hyperspace)이고, 하나의 꼭지점에 대응되는  $(q - 1)$ 차원 부분공간(subspace)은  $(q - 1)$ 개의 꼭지점을 가지는 정다면체라 볼 수 있다. 따라서, 임의의 꼭지점  $P_i$ 와 이 꼭지점에 대응하는 나머지  $(q - 1)$ 개의 꼭지점으로 구성된 정다면체의 부분공간을 고려해보면, 이들 임의의  $(q - 1)$ 개의 꼭지점은 동일한 부분공간 위에 놓여 있고 꼭지점  $P_i$ 만이 이 부분공간을 벗어나 있으므로 임의의  $x_i$ 좌표가  $(q - 1)$ 개의 꼭지점에서 동일하게 나타나고 꼭지점  $P_i$ 에서만 다르게 나타남을 알 수 있다. 따라서 꼭지점  $P_i(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_q)$ 와 부분공간의 중심을 연결하는 선을  $X_i$  축이라 하고 그 거리를  $h$ 라 하면 각 좌표의 합, 즉 성분의 총합이 일정하므로  $P_i$ 와 나머지 꼭지점들의 좌표는 다음 좌표행렬의 각 행을 이용하여 구할 수 있다 :

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_i & \dots & x_q \\ x_1+h & x_2 & x_3 & \dots & x_i-h & \dots & x_q \\ x_1 & x_2+h & x_3 & \dots & x_i-h & \dots & x_q \\ x_1 & x_2 & x_3+h & \dots & x_i-h & \dots & x_q \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_i-h & \dots & x_q+h \end{pmatrix} \quad (3)$$

여기서 주의해야 할 점은 현재의 표준 운영 공정  $P_i$ 를 심플렉스 공간의 어느 꼭지점에 할당하는가에 따라 나머지 실험점들의 좌표가 다르게 되며,  $h$ 값의 변화에 따라 실험 영역의 확대와 축소가 이루어진다. 예를 들어  $q = 4$ 인 경우, 즉, 4개의 성분으로 구성된 혼합물을 고려할 때, 이 혼합물 실험의 전체 실험 공간은 정사면체가 되며, 정규 심플

렉스 EVOP를 위해 생성시켜야 할 실험점의 수는 4개이다. 따라서 현재의 표준 운영 공정  $P_3(x_1, x_2, x_3, x_4)$ 을  $X_3$ 축의 꼭지점으로 하고 꼭지점과 대응하는 다면체와의 거리를  $h$ 로 하여 나머지 3개의 실험점을 생성하면 <그림 2>와 같다.

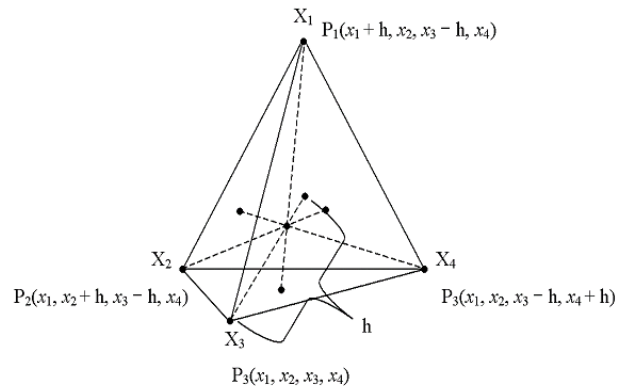


그림 2.  $X_3$ 축을 기준으로 한 실험점의 생성

혼합물 실험에서 정규 심플렉스 EVOP를 진행하기 위한 첫 번째 단계는 좌표행렬을 이용하여 첫 실험점을 생성하는 것이다. 꼭지점에서 대응하는 부분공간까지의 거리  $h$ 의 폭은 불량이나 수율의 감소에 영향을 미치지 않을 정도의 작은 값으로 정해 주어야 하며, 생성한 각 실험점에서 반복실험을 거쳐 반응값을 얻은 다음 일원배치 분산분석을 통해 실험점들 간의 유의성을 검정한다. 유의성 검정을 통해 실험점들 간에 유의한 차이가 있다고 판단되면, 반응값의 평균이 가장 나쁜 실험점을 기각하고 나머지  $(q - 1)$ 개의 꼭지점으로 이루어진 부분공간의 중심을 지나며, 이동 거리가  $2h$ 가 되도록 대칭 이동시킨다. 즉, 실험점  $P_1, P_2, \dots, P_q$ 의 좌표를  $C_1, C_2, \dots, C_q$ 라 하고  $P_i$ 가 기각된 후 생성되는 새로운 실험점  $P_i'$ 의 좌표를  $C_i'$ 이라 하면 새로운 실험점의 좌표는 다음의 식으로 구할 수 있다.

$$C_i' = \frac{2}{q-1} (C_1 + C_2 + \dots + C_{i-1} + C_{i+1} + \dots + C_q) - C_i \quad (4)$$

$P_1 = (x_1 + h, x_2 - h, x_3), P_2 = (x_1, x_2, x_3), P_3 = (x_1, x_2 - h, x_3 + h)$ , 일 때, 새로운 실험점  $P_2'$ 의 좌표 계산은 다음과 같이 계산할 수 있다 :

$$\begin{aligned} P_2'(x_1) &= 2/(3 - 1)\{(x_1 + h) + x_3\} - x_1 = x_1 + h \\ P_2'(x_2) &= 2/(3 - 1)\{(x_2 - h) + (x_2 - h)\} - x_2 = x_2 - 2h \\ P_2'(x_3) &= 2/(3 - 1)\{(x_3 + h) + x_3\} - x_3 = x_3 + h \\ \rightarrow P_2' &= (x_1 + h, x_2 - 2h, x_3 + h) \end{aligned}$$

새로운 실험점을 생성한 뒤, 반복 실험을 거쳐 앞서 기각되지 않은  $(q - 1)$ 개의 실험점에서의 반응값과 함께 유의성 검정을 한다. 만약 유의성 검정을 통해 유의한 것으로 판단되면 반응값의 결과가 가장 열악한 실험점을 기각하고 대칭 이동시켜 새로운 실험점을 생성한다. 만약, 유의성 검정을 통해 '각 실험점에서의 반응값들 간에 차이가 없다'라는 결론이 나오면, 실험의 진행여부를 결정하기 위해 목표달성 여부를 확인한다. 먼저, 현재의 실험점

에서 반응값이 실험의 목표로 정한 목표값을 상회한다면 중심점을 추가하여 실험을 진행하고, 데이터 분석을 통해 가장 우수한 반응값을 가지는 실험점을 최적 공정조건으로 간주하고 실험을 종료한다. 만약 현재의 실험점에서 반응값이 목표값에 미달한다면, 다음의 두 가지 방법을 고려한다. 첫 번째 방법은 해당 혼합물 실험과 관계된 사람들이 모여 충분한 논의를 통해  $h$ 값을 증가 혹은 감소시킴으로써 실험점들간의 간격을 확대하거나 축소하는 조정을 통해 EVOP를 진행하는 방법이다. 두 번째는 새로운 실험영역에서 혼합물 EVOP를 시도하거나, 아니면 파일럿 플랜트를 대상으로 넓은 범위의 영역을 탐색할 수 있는 일반적인 혼합물 실험을 수행하는 방법이다. 실험을 진행하다 보면 때로는 각각된 실험점으로 되돌아오는 경우가 발생할 수 있으며, 이런 경우 앞서 유의성 평가 후의 대처방법과 마찬가지로 실험점들의 제조정을 통해 실험을 진행하도록 한다. 지금까지의 설명을 순서도로 나타내면<그림 3>과 같다.

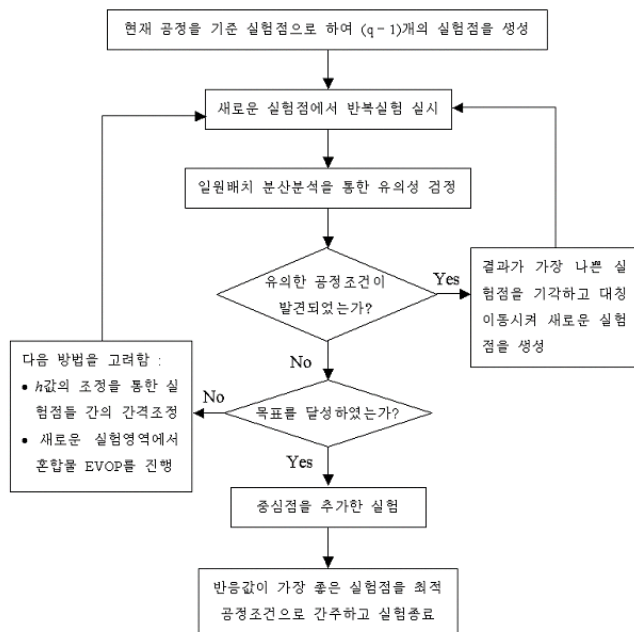


그림 3. 정규 심플렉스 EVOP를 이용한 혼합물 EVOP의 순서도

#### 4. 제약조건이 있는 경우 실험 절차

일반적으로 혼합물 실험은 각 성분의 비율과 성분 비율의 전체 합에 있어 제약조건을 가진다. 성분  $x_i$ 의 하한과 상한을 각각  $L_i$ 와  $U_i$ 라 하면, 이러한 제약조건을 가진 혼합물 실험의 형태는 다음과 같이 일반화 할 수 있다(Cornell, 2002) :

$$\sum_{i=1}^q x_i = x_1 + x_2 + \dots + x_q \leq 1 \quad (5)$$

$$0 \leq L_i \leq x_i \leq U_i \leq 1, \quad i = 1, 2, \dots, q \quad (6)$$

제약조건은 각 성분 비율이 하한만으로 제약되는 경우, 상한만으로 제약되는 경우, 상·하한 모두에 의해 제약되는 경우로 나눌 수 있으며, 어떤 경우든 실험 가능 영역은 감소한다. 이렇게 제한된 실험영역에서 혼합물 실험을 진행하는 경우에는 제약

조건의 타당성을 파악하고 실험점의 계산을 쉽게 하기 위하여 pseudocomponents를 이용하여 좌표점을 구하는 것이 일반적이다. 그러나, 본 논문의 정규 심플렉스 EVOP를 이용한 혼합물 EVOP는 pseudocomponents를 이용한 실험점의 재계산 과정을 거칠 필요 없이 생성한 각 실험점이 주어진 제약조건에 위배되는지의 여부만을 검토하고, 실험 가능 영역을 벗어날 경우 새로운 실험점을 생성하는 과정을 거쳐 전체적인 EVOP를 진행한다. 생성한 실험점이 실험 가능 영역을 벗어나면 새로운 실험점을 생성해야 하므로, 앞서 소개한 정규 심플렉스 EVOP를 이용한 혼합물 EVOP에 대해 실험점이 제약조건을 벗어날 경우의 대처 방법을 알아보기로 한다.

정규 심플렉스를 이용한 혼합물 EVOP는 실험점에 대응하는 부분공간의 중심을 기준으로 하여 대칭 이동되는 실험점의 좌표를 구하여 새로운 실험점을 생성한다. 이 방법은 Nelder와 Mead(1965)가 Spendley et al.(1962)의 정규 심플렉스를 수정한 것으로, 심플렉스의 형태가 반드시 정다각형 또는 정다면체가 되는 것은 아니므로 비정규 심플렉스(non-regular simplex) 탐사법이라고 한다.  $q$ 개의 성분으로 구성되는 혼합물 EVOP에서 실험점을  $P_1, P_2, \dots, P_q$ , 이들의 좌표를  $C_1, C_2, \dots, C_q$ 라 하면, 이들 중 대칭 이동된 임의의 실험점  $P_i'$ 이 실험 가능 영역을 벗어날 경우, 제약조건에 위배되지 않는 새로운 점을 생성하기 위해서 다음의 공식을 이용한다.

$$C_i' = \frac{1+d}{q-1} (C_1 + C_2 + \dots + C_{i-1} + C_{i+1} + \dots + C_q) - d \cdot C_i, \quad d > 0 \quad (7)$$

$d = 1$ 인 경우 식 (7)은 정규 심플렉스 EVOP에서 이용된 식 (4)와 동일하게 되므로  $d$ 의 값은 1을 기준으로 하며, 만약  $P_1, P_2, \dots, P_{i-1}, P_{i+1}, \dots, P_q$ 를 기준으로  $P_i$ 를 대칭 이동시켜 생성한 실험점  $P_i'$ 이 실험 가능 영역을 벗어나면  $0 < d < 1$ 인  $d$ 값을 식 (7)에 입력하여 새로운  $P_i'$ 의 좌표를 구한다.

예를 들어 다음과 같은 상황을 생각해보자.  $q = 3$ 이고 제약조건이 다음과 같다고 가정한다 :

$$0.300 \leq x_1 \leq 0.400$$

$$0.485 \leq x_2 \leq 0.585$$

$$0.120 \leq x_3 \leq 0.220$$

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1$$

정규 심플렉스 EVOP를 이용하여 혼합물 EVOP를 진행하는 도중 <그림 4>와 같이 실험점  $P_2(0.33, 0.52, 0.15)$ 를 기각,  $P_2'(0.35, 0.48, 0.17)$ 으로 대칭 이동시켰을 때 실험점  $P_2'$ 의 좌표를 살펴보면  $P_2'$ 의  $x_2$ 좌표가 제약조건을 벗어나 있음을 알 수 있다. 따라서 새로운 실험점을 생성하기 위해 식 (7)을 이용,  $d$ 값을 변화시켜 가며  $P_2''$ 의 좌표를 구해보면  $d = 0.7$ 일 때  $P_2''$ 의 좌표가  $(0.347, 0.486, 0.167)$ 로 모두 제약 조건 안에 들어오고 있으므로,  $P_2''(0.347, 0.486, 0.167)$ 을 새로운 실험점으로 하여 혼합물 EVOP를 진행해 나간다. 만약 성분의 제약조건으로 인해 실험가능 영역이 아주 좁거나 참고 할만한 표준 운영 공정을 알 수 없을 경우, 첫 실험점들은 제약조건들의 중심을 기준으로 다음 식을

이용하여 실험점을 생성시킨 다음 실험을 진행하는 것이 좋다.

$q$ 차원 심플렉스 공간에서 제약조건들의 중심을  $P_0(x_1, x_2, \dots, x_q)$ 라고 하면, 이 점을 중심으로 하여  $\Delta$ 만큼 떨어진  $q$ 개의 꼭지점의 좌표는 다음과 같이 구할 수 있다 :

$$\begin{aligned} P_1 &= \{x_1 + \Delta, x_2 - \Delta/(q - 1), \dots, x_q - \Delta/(q - 1)\} \\ P_2 &= \{x_1 - \Delta/(q - 1), x_2 + \Delta, \dots, x_q - \Delta/(q - 1)\} \\ &\vdots \\ P_q &= \{x_1 - \Delta/(q - 1), x_2 - \Delta/(q - 1), \dots, x_q + \Delta\} \end{aligned} \quad (8)$$

여기서,  $\Delta < 1$ ,  $\sum x_i = 1$ 이다.

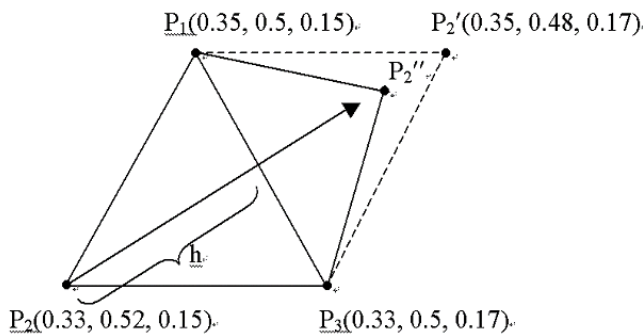


그림 4. 제한영역을 벗어날 경우 실험점 생성 예

## 6. 결론

혼합물 생산 공정에서 생산을 수행해 가면서 최적 성분조합을 찾기 위한 최적 탐색 방법으로 정규 심플렉스 EVOP를 이용한 혼합물 EVOP의 진행 절차를 제시하였다. 혼합물 EVOP를 진행하는 도중에 어떤 실험점이 실험가능영역을 벗어나면 비정규 심플렉스를 이용하여 실험점을 조정하여 실험을 진행하는 방법에 대해서도 살펴보았다. 일반적인 혼합물 실험이 실험점의 선정과 혼합모형의 도출을 위해 복잡한 계산 과정을 거치는 것과 대조적으로 혼합물 EVOP는 앞서 살펴보았듯이 실험점의 생성이나 계산과정이 복잡하지 않으므로 사용자가 쉽게 이용할 수 있다. 또한 실험점의 수는 첫 실험점 성분 수와 동일하고 기각되는 실험점에 따라 추가되는 실험점은 1개 이므로 성분 수의 증가하더라도 실험점의 수가 큰 폭으로 증가하지 않는다. 따라서 실험을 진행하기에 큰 부담이 없으며 실험가능 영역 전체에 걸쳐 최적조건을 능동적으로 탐색할 수 있다는 장점이 있다. 그러므로 혼합물 생산 공정을 운영하는 업체에서 제품생산을 위한 최적 공정 조건을 탐색하거나, 변화된 생산 환경에 최적인 공정조건을 탐색하고자 할 경우에 유용하게 쓸 수 있을 것으로 생각된다.

## 참고문헌

- Box, G. E. P. and Draper, N. R.(1969), *Evolutionary Operation*, John Wiley & Sons, NY.  
Cornell, J. A.(2002), *Experiments with Mixtures, Designs, Models, and the Analysis of*

- Mixture Data, 3rd Ed.*, John Wiley & Sons, NY.  
Kim, C. H. and Byun, J. H. (2003), An Evolutionary Operation with Mixture Variables for Mixture Production Process, *Journal of Korean Institute of Industrial Engineers*, 29(4), 334-344.  
Myers, R. H. & Montgomery, D. C.(1995), *Response Surface Methodology, Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, John Wiley & Sons, NY.  
Nelder, J. A. and Mead, R. (1965), The Nelder-Mead Simplex Procedure for Function Minimization, *The Computer Journal*, 7, 308-313.  
Spendley, W., Hext, G. R., and Himsworth, F. R. (1962), Sequential Application of Simplex Designs in Optimization and EVOP, *Technometrics*, 4, 441-461.