

최적설계를 위한 반응표면의 생성에 관한 연구

홍경진* · 전광기** · 조영석* · 최동훈*** · 이세정****

(1999년 2월 23일 접수)

A Study on the Construction of Response Surfaces for Design Optimization

Kyung-Jin Hong, Kwang-Ki Jeon, Young-Suk Cho, Dong-Hoon Choi and Se-Jung Lee

Key Words: Optimization(최적화), Response Surface Method(반응표면법), Design of Experiments(실험계획법), Approximation Model(근사 모델)

Abstract

Gradient-based optimization methods are inefficient in applications which require expensive function evaluations, and useless in applications where objective and/or constraint functions are 'noisy' due to modeling and cumulative numerical inaccuracy since gradient evaluation results cannot be reliable. Moreover, it is difficult to be integrated with commercial analysis software, and they cannot be employed when only experimental analysis results are available. In this research an optimization program based on a response surface method has been developed to overcome the aforementioned difficulties. Various methods for design of experiments and new proposed approximation models are implemented in the program. The effectiveness of the optimization program is tested on several test problems and results are discussed.

1. 서론

최근의 최적설계 경향은 다분야 통합 최적설계와 같이 설계하고자 하는 시스템이 복잡해지고 해석시 드는 시간적 수치적 비용이 증가하고 있으며, 상용 해석 소프트웨어나 실험 데이터를 이용한 최적설계에 대한 요구가 증가하고 있다. 그러나 민감도에 기반한 기존의 최적설계 기법으로는 위와 같은 문제를 효율적으로 처리할 수 없을 뿐만 아니라 해석시 노이즈가 존재하는 경우 최적해로의 수렴이 불가능하게 된다.

이러한 기존의 최적설계 기법의 어려움을 극복하기 위한 방법들 중의 하나가 반응표면법⁽¹⁾을 이용한 근사최적설계 기법이다. 반응표면법은 1951년 Box와 Wilson⁽²⁾에 의해 처음 소개되었다. 이후, 반응표면을 근사화 하기 위해 적절한 설계변수 집합을 선택하는 실험계획법에 대한 연구들⁽³⁻⁵⁾이 통계학에서 활발히 진행되어 왔으며, 최근에는 이 반응표면법을 공학에 적용하기 위한 많은 연구들⁽⁶⁻⁸⁾이 진행되고 있다.

이들 대부분의 연구는 반응표면의 근사 모델의 형태를 2차 함수로 가정하였는데, 이는 2차 함수가 매우 유연하여 다양한 함수의 모양을 표현할 수 있고, 근사 반응 함수의 계수를 구하기 쉬우며, 상당히 많은 연구에 의해 검증이 되었다는 장점 때문이었다. 그러나, 2차 함수 형태의 근사 모델은 비선형성이 큰 경우에는 정확한 반응표면을 얻을 수 없으며, 3차 이상의 고차 함수 형태를 사용하게 되면, 더 많은 실험 횟수가 필요하게 된다. 따라서, 보다 효율적인 근사 모델을 생

* 한양대학교 대학원 기계설계학과

** 대우자동차(주), 상용차 부문

*** 회원, 최적설계기술연구소, 한양대학교

E-mail : dhchoi@email.hanyang.ac.kr

TEL : (02)2290-0443 FAX : (02)2296-1710

**** 회원, 서울시립대학교, 정밀기계공학과

성하기 위한 연구가 진행되고 있지만 아직은 미흡한 상태이다.

1993년 Rikards⁽⁷⁾는 함수에 쓰일 다양한 형태의 항을 미리 데이터베이스화한 후 저장하여 두었다가 적당한 항들을 선택한 다음, 차례차례 항들을 소거해 나가는 방법을 제안하였고, 1994년 Kaufman, Guinta, Haftka 등⁽⁸⁾은 고속 민간 여객기의 날개 형상 최적설계에 반응표면법을 적용할 때, 근사 모델로서 2차 함수 형태를 포함한 4가지 형태를 각각 비교하여, 2차 함수와 증이차 텐서 곱(biquadratic tensor product)함수 형태가 적절함을 보였다.

본 논문에서는 반응표면법을 실제 공학적 최적화 문제에 적용하기 쉽도록 하기 위해, 다양한 실험계획법의 종류와 근사 모델의 형태를 사용자가 선택하여, 반응표면을 생성하고, 생성된 반응표면에 대하여 최적화 과정을 자동으로 수행하는 반응표면법 최적설계 프로그램을 개발하였다. 또한, 근사 반응 함수의 정확성을 높이기 위하여 근사 모델의 형태를 기존의 2차 함수의 형태에 단순 3차 항과 역수 항을 첨가한 새로운 형태를 제안하였다.

그리고, 본 논문에서 개발한 반응표면법 최적설계 프로그램의 유용성과 정확성을 검증하기 위해 몇 개의 최적설계 예제를 수행하였으며 그 결과를 비교, 고찰하였다.

2. 반응표면법

반응표면법은 관심 있는 반응이 여러 설계변수들에 의해 영향을 받을 때 설계변수에 대하여 반응표면을 근사 모델링하고 해석하기 위한 유용한 수학적, 통계적 기술들의 집합을 말한다. 반응표면법은 크게 근사 반응 함수를 생성하기 위한 최소자승법(least square method)과 변수선택법(variable selection method), 근사화된 함수를 평가하기 위한 분산분석(ANOVA), 그리고 반응치를 구하기 위해 설계 공간에 실험 점들을 선택하는 실험계획법(DOE)으로 나뉘어 진다.

2.1 최소 자승법

최소자승법은 반응표면법에서 어떤 시스템의 성능을 나타내는 회귀 모델의 회귀 계수를 추정

하는데 일반적으로 사용된다. 회귀 변수 벡터 \mathbf{x} 를 k 개의 설계변수들의 선형 항($\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$), 제곱 항($\xi_1^2, \xi_2^2, \dots, \xi_k^2$), 그리고 상호 작용 항($\xi_1\xi_2, \xi_1\xi_3, \dots, \xi_{k-1}\xi_k$) 등, 모두 m 개의 변수로 이루어진 벡터(x_1, x_2, \dots, x_m)로 정의하고, n 개의 실험점에 대한 반응치를 y_1, y_2, \dots, y_n , 시스템의 에러를 ϵ 로 정의하면, 중선형 회귀 모델은 식 (1)과 같이 표현될 수 있다.

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \quad (1)$$

여기서,

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}$$

이고, x_{ij} 는 i 번째 실험점에 대한 j 번째 회귀 변수이다.

회귀 계수들의 최소자승 추정치인 \mathbf{b} 는 다음의 최소자승함수 L 을 최소화함으로써 얻어진다.

$$L = \boldsymbol{\epsilon}^T \boldsymbol{\epsilon} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \quad (2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\beta}} \Big|_{\mathbf{b}} = -2\mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b} = 0 \quad (3)$$

$$\therefore \mathbf{b} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

따라서, 근사 회귀 모델은 다음과 같이 정의되며,

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X} \mathbf{b} \quad (4)$$

식 (4)를 스칼라로 표현하면 식 (5)과 같다.

$$\hat{y}_i = b_0 + \sum_{j=1}^m b_j x_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (5)$$

2.2 분산분석

최소자승법을 이용해 구한 근사 반응 함수에

대한 근사화의 정확성과 예측성 등을 평가하는 과정이 필요한데, 이러한 과정을 분산분석이라고 한다. 분산분석에는 크게 근사 반응 함수의 정확성을 평가하는 F-검정, 수정 R^2 (adjusted R^2), t-검정과 근사 반응 함수의 예측성을 평가하는 $R^2_{prediction}$ 등이 있다.⁽¹⁾

2.2.1 F-검정

F-검정은 반응 변수와 회귀 변수들간의 선형관계가 있는지를 검사한다.

$$F_0 = \frac{SS_R/m}{SS_E/(n-m-1)} \tag{6}$$

여기서,

$$SS_R = \mathbf{b}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} - \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2}{n},$$

$$SS_E = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \mathbf{b}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

만약 $F_0 > F_{\alpha, m, n-m-1}$ 이라면, 근사 반응 함수는 유의 수준 α 에 대하여 근사화가 잘 되었음을 보여준다.

2.2.2 수정 R^2

이 통계치는 실험점들에 대한 근사 반응 함수의 적합도를 나타낸다. 이 값은 0과 1사이의 값을 가지며, 1에 가까울수록 근사화가 잘 되었음을 의미한다. 수정 R^2 는 식 (7)과 같이 정의된다.

$$R^2_{adj} = 1 - \frac{SS_E/(n-p)}{S_{yy}/(n-1)} \tag{7}$$

여기서,

$$S_{yy} = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2}{n}, \quad p = m + 1$$

2.2.3 t-검정

이 통계치는 근사 반응 함수의 회귀 계수 각각의 가치를 결정하는 검정법이다.

$$t_0 = \frac{b_j}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 C_{jj}}} \tag{8}$$

여기서,

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{SS_E}{n-p},$$

$C_{jj} : (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ 의 b_j 에 해당하는 대각항.

만약 $|t_0| > t_{\alpha/2, n-m-1}$ 이라면, x_j 는 근사 반응 함수에서 중요한 기여를 한다고 본다.

2.2.4 $R^2_{prediction}$

이 통계치는 근사 반응 함수의 예측 능력을 나타내는 값으로서, 0과 1사이의 값을 가지며, 1에 가까울수록 근사화가 잘 되어 예측성이 뛰어난을 의미한다. $R^2_{prediction}$ 는 식 (9)과 같이 정의된다.

$$R^2_{pred} = 1 - \frac{PRESS}{S_{yy}} \tag{9}$$

여기서,

$$PRESS = \sum_{i=1}^n \left(\frac{e_i}{1-h_{ii}} \right)^2, \quad e_i = y_i - \hat{y}_i$$

이고, h_{ii} 는 행렬 \mathbf{H} 의 i 번째 대각행이며, \mathbf{H} 는 아래와 같다.

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \tag{10}$$

2.3 변수선택법

반응표면법에서 대개는 처음 가정한 함수 형태 그대로 어떤 항도 빠지지 않은 전체 모델로 근사화를 한다. 그러나, 어떤 경우에는 전체 모델의 일부분으로 이루어진 부분 모델이 더 나은 결과를 줄 수 있다. 변수선택법은 근사 모델로서 포함할 가장 좋은 항들을 규정하는 기법으로, 본문에서는 순차적 후방 소거법(stepwise backward elimination)을 사용하여, 우선 임의로 가정한 함수 형태의 전체 모델을 최소화승법으로 구한 다음, 각각의 항을 테스트하는 t-검정을 통하여 불필요한 항을 하나씩 소거하여 정확한 근사 반응 함수를 구하는 방법을 택했다. 즉 모든 항을 포함한 전체 모델에서 각각의 항에 대한 t-통계치를 구하

여, 그 값들 중에서 가장 작은 t -통계치가 기준이 되는 통계치인 T_{out} 보다 작으면 그 항을 소거한다. 그런 후에 다시 근사화를 수행하고 또 다시 t -검정을 한다. 이런 과정을 가장 작은 t -통계치가 T_{out} 보다 작지 않을 때까지 계속한다.

2.4 실험계획법

반응치를 구해야 하는 설계 공간상에서 적절한 점들을 선택하는 방법을 실험계획법이라 하는데, 반응표면법에서 실험점들의 선택은 반응표면 근사화의 정확도와 비용에 중요한 영향을 준다. 그러므로, 최소의 점을 선택하여 가장 정확한 근사 반응 함수를 생성할 수 있는 실험점들을 선택하는 것이 실험계획법의 가장 큰 관심사이다.

일반적으로 반응표면법에서 사용되는 실험계획법에는 무작위추출법(random design), 다원배치법(full factorial design), 중심합성계획법(CCD), Box-Benken 계획법, D-optimal 계획법 등이 많이 사용되고 있으나, 난수발생기를 사용하여 무작위로 점을 추출하는 무작위추출법과, 각각의 설계변수를 주어진 수준수로 나누어 이루어진 모든 격자점을 선택하는 다원배치법은 필요한 실험점들의 수가 너무 많아 해석 시간이 많은 문제의 경우 적용이 불가능하다. 이에 비해 중심합성계획법과 Box-Benken 계획법은 다원배치법에 비해 비교적 적은 실험 횟수로 반응표면의 곡면적 특성을 잘 나타낼 수 있는 장점이 있어 그동안 많은 연구에서 사용되어 왔다. 그러나 중심합성계획법과 Box-Benken 계획법의 경우 또한 설계변수가 증가함에 따라 요구되는 실험점의 개수도 상당히 증가하기 때문에 많은 설계변수들을 요구하는 다분야 통합 최적설계 문제 같은 경우에 매우 비효율적이 된다. 이에 대한 대안으로 최근에 활발히 연구되고 있는 실험계획법이 D-optimal 계획법이다. D-optimal 계획법은 특히 실험점의 개수를 설계자가 임의로 설정할 수 있으며, 근사 모델의 항 수의 1.5배에서 2배 정도의 적은 실험 횟수로도 만족할 만한 근사 반응 함수의 정확도를 얻을 수 있다는 장점이 있다. 실험계획에 대한 D-optimal 기준은 실험점에 관한 정보를 갖고 있는 X 에 대하여 $|X^T X|$ 을 최대화하는 실험점들을 선택하는 것이다. 이러한 선택은 근사 반응 함수에서 계수 추정시의 일반 분산뿐만 아니라 예측값의 최대 분산을 최소화시키고, 비정규적인

모양의 설계영역도 고려할 수 있다.⁽⁸⁾ 그러나, D-optimal 계획법은 국소 최적점이 많은 문제로서 전역해(global optimum)를 찾기 어려운 단점이 있다. 따라서 전역 최적화 알고리즘이 D-optimal 계획을 구현하기 위해 사용되고 있으며, Fedorov의 교환 알고리즘(Fedorov exchange algorithm)⁽⁹⁾과 유전자 알고리즘(genetic algorithm)⁽¹⁰⁾이 가장 많이 사용되고 있다.

3. 새로운 근사 반응함수의 제안

기존의 반응표면법에서 주로 사용한 근사 모델의 형태는 대부분 2차 함수였다. 본 논문에서는 이 근사 모델을 좀 더 개선하고자 2차 함수에 단순 3차 항과 단순 역수 항, 2차 역수 항을 더한 형태 등을 초기의 전체 모델로 삼아 최소자승법으로 근사화를 수행한 후, 변수선택법을 도입하여 더 좋은 근사 반응 함수를 생성하도록 하였다. 즉, 다양한 초기 전체 모델의 형태를 사용자가 선택할 수 있도록 5가지 형태로 나누었는데, 설계변수 x_i 가 2개인 경우의 예를 보면 다음과 같다.

- Model 1 : 2차 함수 형태

$$f(x) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1^2 + b_4x_1x_2 + b_5x_2^2$$

- Model 2 : 2차 함수 + 단순 3차 항 형태

$$f(x) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1^2 + b_4x_1x_2 + b_5x_2^2 + b_6x_1^3 + b_7x_2^3$$

- Model 3 : 2차 함수 + 단순 역수 항 형태

$$f(x) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1^2 + b_4x_1x_2 + b_5x_2^2 + b_6/x_1 + b_7/x_2$$

- Model 4 : 2차 함수 + 단순 3차 항 + 단순 역수 항 형태

$$f(x) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1^2 + b_4x_1x_2 + b_5x_2^2 + b_6x_1^3 + b_7x_2^3 + b_8/x_1 + b_9/x_2$$

- Model 5 : 2차 함수 + 단순 3차 항 + 2차 역수 항 형태

$$f(x) = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1^2 + b_4x_1x_2 + b_5x_2^2 + b_6x_1^3 + b_7x_2^3 + b_8/x_1 + b_9/x_2 + b_{10}/x_1^2 + b_{11}/x_1x_2 + b_{12}/x_2^2$$

설계변수 개수 k 에 대한 각각의 초기 전체 모

델의 항 수 N은 다음과 같다.

Model 1 : $N=1+2k+k(k-1)/2$

Model 2 : $N=1+3k+k(k-1)/2$

Model 3 : $N=1+3k+k(k-1)/2$

Model 4 : $N=1+4k+k(k-1)/2$

Model 5 : $N=1+5k+k(k-1)$

위에 나타난 5가지 초기 전체 모델 모두에 대해 앞에서 설명한 실험계획법을 모두 사용할 수 있는 것은 아니다. 즉, 중심합성계획법이나 Box-Benken 계획법은 주로 2차 함수 형태를 대상으로 만들어진 방법이기 때문에, 수준수가 많지 않고 내부적으로 결정되는 실험점의 수가 많지 않아 모델 4나 모델 5에 적용하기 어렵다. 그러므로, 중심합성계획법이나 Box-Benken 계획법은 모델 1에서부터 모델 3까지만 적용하는 것이 바람직하고, 모델 4나 모델 5에 대해서는 실험점의 수를 임의로 설계자가 정할 수 있고, 각 설계변수들의 수준수가 풍부한 Fedorov의 교환 알고리즘을 이용한 D-optimal 계획법이나 유전자 알고리즘을 이용한 D-optimal 계획법을 사용하는 것이 바람직하다. 또한, 역수 항을 포함한 근사 모델의 경우, 설계변수가 0 근처에서는 무한대로 발산하는 좋지 못한 결과를 초래하기 때문에, 설계 영역이 0을 포함하거나, 0 근처에서는 역수 항을 포함한 모델을 사용하지 않는 것이 바람직하다.

제안된 근사 모델의 검증을 위하여 식 (11)의 함수를 근사화하고자 한다.

$$f(x_1, x_2) = 4 + 2x_1^2 + x_2^3 + \frac{50}{x_1^2} - \frac{12}{x_1x_2} + \frac{43}{x_2^3},$$

$$1 \leq x_i \leq 5, \quad i = 1, 2$$

(11)

식 (11)은 2차 항, 3차 항, 2차 역수 항이 포함되어 있으므로, 본 논문에서 제안한 근사 모델 중 모델 5를 이용하여 근사화를 수행하였으며, 실험계획법은 D-optimal 계획법을 사용하였고, 실험점의 수는 20개를 선택하였다. 또한 근사화 후에 변수선택법 적용한 경우와 적용하지 않은 경우를 비교하였다. 근사화된 결과는 다음과 같다.

변수선택법을 적용한 경우 ($\alpha=0.05$)

● Fedorov의 교환 알고리즘

$$\tilde{f}(x_1, x_2) = 4 + 2x_1^2 + x_2^3 + \frac{50}{x_1^2} - \frac{12}{x_1x_2} + \frac{43}{x_2^3}$$

● 유전자 알고리즘

$$\tilde{f}(x_1, x_2) = 4 + 2x_1^2 + x_2^3 + \frac{50}{x_1^2} - \frac{12}{x_1x_2} + \frac{43}{x_2^3}$$

변수선택법을 적용하지 않은 경우

● Fedorov의 교환 알고리즘

$$\tilde{f}(x_1, x_2) = 4 + 8.54 \times 10^{-8}x_1 - 6.56 \times 10^{-7}x_2$$

$$+ 2x_1^2 - 1.06 \times 10^{-10}x_1x_2 + 1.21 \times 10^{-7}x_2^2$$

$$+ 1.20 \times 10^{-10}x_1^3 + x_2^3 + 1.34 \times 10^{-7} \frac{1}{x_1}$$

$$- 2.12 \times 10^{-6} \frac{1}{x_2} + \frac{50}{x_1^2} - \frac{12}{x_1x_2} + \frac{43}{x_2^3}$$

● 유전자 알고리즘

$$\tilde{f}(x_1, x_2) = 4 - 1.83 \times 10^{-8}x_1 + 3.59 \times 10^{-8}x_2$$

$$+ 2x_1^2 - 6.25 \times 10^{-12}x_1x_2 - 7.57 \times 10^{-9}x_2^2$$

$$- 1.82 \times 10^{-10}x_1^3 + x_2^3 - 2.00 \times 10^{-8} \frac{1}{x_1}$$

$$+ 1.19 \times 10^{-7} \frac{1}{x_2} + \frac{50}{x_1^2} - \frac{12}{x_1x_2} + \frac{43}{x_2^3}$$

위의 근사 반응 함수에서 보듯이 본 논문에서 제안된 근사 모델을 이용한 후 변수선택법을 적용하여 필요 없는 항을 소거하였을 때 원래 함수와 동일한 근사 반응 함수를 얻을 수 있었다. 그러나 변수선택법을 적용하지 않았을 경우 비록 그 계수가 작다고 하나 필요 없는 항이 존재하여 근사 반응 함수의 정확성을 감소시키게 된다. 따라서 기존의 반응표면법에서 근사 모델로 가장 많이 사용되고 있는 2차 함수로 설계자가 요구하는 정확도를 얻을 수 없을 경우 본 논문에서 제안된 모델을 이용한 후 변수선택법을 적용하면, 보다 정확한 근사 반응 함수를 얻을 수 있다.

4. 반응표면법을 이용한 최적설계

4.1 최적설계 프로그램의 구조도

본 논문에서는 그 동안 연구되어 온 다양한 실험 계획법과 본 논문에서 제안된 근사 모델을 사

용자가 직접 선택하여, 근사화 및 최적화를 자동으로 수행할 수 있는 반응표면법 최적설계 프로그램을 개발하였으며 그 구조도를 Fig. 1에 도시하였다. 전체적인 구조는 크게 실험계획법의 종류와 근사 모델을 선택할 수 있는 입력 모듈, 실험계획법 모듈, 해석 코드과의 직접 접속을 위한 접속 모듈, 근사 반응 함수 생성 모듈, 분산분석 모듈, 변수선택법 모듈, 그리고 최적설계 모듈로 이루어져 있다.

실험계획법으로는 중심합성계획법, Box- Benken 계획법과 D-optimal 계획법을, 근사 모델로 앞에서 설명된 다섯 가지 모델을 설계자가 선택할 수 있도록 하였으며, 근사화된 함수를 최적설계하기 위한 최적설계 모듈로 범용 최적설계 프로그램인 ADS⁽¹¹⁾를 접속하였다.

개발된 프로그램은 반응표면법의 특성을 살리기 위하여, 두 가지 방식으로 작동하게 된다. 첫 번째 방식은 설계자가 해석 코드를 본 프로그램에 직접 접속할 수 있는 경우로, 이 경우 설계자가 미리 실험계획법의 종류와 근사 모델의 종류를 선택하기만 하면 자동으로 최적설계까지 수행하게 된다. 두 번째 방식은 실험 또는 외부 상용 프로그램과 같이 해석 코드를 직접 접속할 수 없

는 경우로, 이 경우 설계자는 먼저 실험계획법의 종류를 선택하게 되고, 실험계획법을 통해 해석이 필요한 실험점들을 받게 된다. 각 실험점에 대한 해석 값을 설계자가 프로그램에 입력하고, 근사 모델의 종류를 선택하면, 최적설계를 수행하고 최적 값을 출력하게 된다. 따라서 본 프로그램은 수치 해석 뿐만 아니라 컴퓨터 시뮬레이션이나 실험에도 잘 적용될 수 있는 장점을 가지고 있다.

4.2 Schittkowski No. 309의 최적설계

개발된 프로그램의 효용성을 검증하기 위하여 Schittkowski 예제⁽¹²⁾들 중에서, 309번 문제에 대해 최적설계를 수행하였다. 이 문제는 설계변수가 2개이고 구속조건이 없는 최적화 문제로 식 (12)과 같다.

$$\text{Minimize } f(x_1, x_2) = 1.41x_1^4 - 12.76x_1^3 - 51.93x_1 + 24.37 + (x_2 - 3.9)^2 \quad (12)$$

$$\text{subject to } 1 \leq x_i \leq 5, \quad i = 1, 2$$

이 문제의 실제 최적값은, $\mathbf{x}^* = (3.483, 3.9)$ 에서 $f^* = -3.982$ 이다.

본 논문에서 개발된 반응표면법 최적설계 프로그램을 이용하여 식 (12)에 대해 근사 반응 함수를 생성하고 최적설계를 수행하였다. 생성된 근사 반응 함수의 정확성을 평가하기 위해 설계 영역에 대하여 임의의 실험점을 뽑아내고, 이들 점에 대하여 실제 함수와 근사 반응 함수의 평균 오차 (E_{avg}), RMS 오차 (E_{rms})와 최대오차 (E_{max})를 계산하였다. 이들 오차는 아래와 같이 정의된다.

$$E_{avg} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} |y_i - \hat{y}_i| \quad (13)$$

$$E_{rms} = \sqrt{\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (14)$$

$$E_{max} = \text{MAX}_i [|y_i - \hat{y}_i|] \quad (15)$$

여기서, ℓ 은 설계 영역 안에서 임의로 선택한 실험점의 개수이다. 본 논문에서 제안한 다섯 가지 모델에 대하여 근사 반응 함수를 생성하고 각

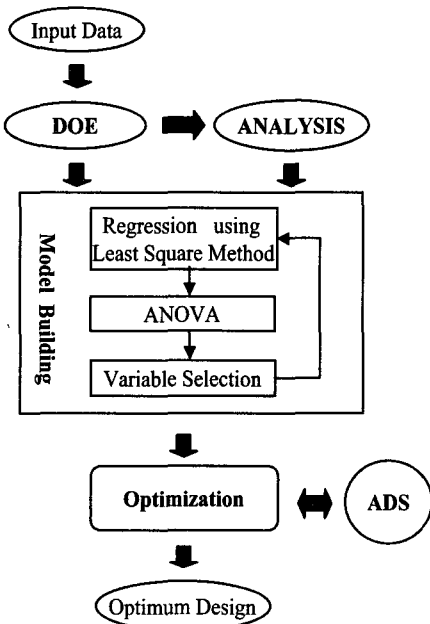


Fig. 1 Structure of the response surface method program

함수에 대하여 분산분석과 오차를 평가하여 Table 1에 수록하였다.

근사 반응 함수를 생성하기 위한 실험점을 가지고 계산된 수정 R^2 (R^2_{adj})와 $R^2_{prediction}$ 은 모델 1을 제외한 나머지 모델에서 1에 근접한 값을 주어 주어진 실험점들에 대하여 근사화가 잘 되었음을 볼 수 있다. 그러나 근사 반응 함수를 생성하기 위해 사용된 실험점들이 아닌 임의의 실험점들에 대하여 실제 함수와의 오차를 살펴보면, 모델 4와 5를 제외한 나머지 모델들의 오차가 매우 큰 것으로 보아 이들 모델은 부정확한 근사 모델임을 알 수 있다.

Table 1 Response model using D-optimal design
(a) Fedorov exchange algorithm.

Model	D-optimal (20 Points)		Random Data (20 Points)		
	R^2_{adj}	R^2_{pred}	E_{avg}	E_{rms}	E_{max}
1	0.993	0.988	6.018	8.731	21.697
2	0.995	0.990	3.159	4.034	9.416
3	1.000	1.000	4.633	6.336	14.55
4	0.999	0.999	0.926	1.430	3.682
5	1.000	1.000	0.462	0.878	3.269

(b) Genetic algorithm.

Model	D-optimal (20 Points)		Random Data (20 Points)		
	R^2_{adj}	R^2_{pred}	E_{avg}	E_{rms}	E_{max}
1	0.980	0.974	6.297	7.639	16.203
2	0.999	0.998	2.412	2.752	4.203
3	0.993	0.989	4.890	5.909	9.408
4	0.999	0.999	0.851	0.960	1.920
5	1.000	1.000	0.340	0.371	0.515

Table 2 Optimization results for Schittkowski
No. 309

Model	Fedorov exchange algorithm		Genetic algorithm	
	\mathbf{x}^*	f^*	\mathbf{x}^*	f^*
1	(2.07, 3.61)	0.68	(2.22, 5.00)	1.63
2	(3.17, 3.68)	-3.22	(3.24, 4.17)	-3.47
3	(3.10, 3.90)	-2.97	(2.85, 4.32)	-1.64
4	(3.45, 3.87)	-3.98	(3.45, 3.79)	-3.96
5	(3.49, 3.89)	-3.99	(3.51, 3.92)	-3.98

Table 2는 다섯가지 모델에 대하여 최적설계를 수행한 결과를 나타낸 도표이다. 예상했던 바와 같이 모델 4와 모델 5는 거의 정확한 최적설계점으로 수렴하였지만, 나머지 모델들은 근사 모델의 부정확성으로 인하여 최적해에 도달하지 못하였다.

4.3 Schaffer 함수의 최적설계

여기서는 노이즈가 많은 Schaffer 함수를 반응 표면법을 이용해 최적설계를 수행한 결과를 보이고자 한다. 이 문제는 변수가 2개이고, 구속 조건이 없는 최적화 문제로서, 이 문제의 함수 형태와 최적화 정식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} &\text{Minimize } f(x_1, x_2) \\ &= (x_1^2 + x_2^2)^{0.25} [\sin^2\{50(x_1^2 + x_2^2)^{0.1}\} + 1.0] \\ &\text{subject to} \\ &-50 \leq x_i \leq 100, \quad i=1, 2 \end{aligned} \tag{16}$$

여기서, 실제 최적값은 $\mathbf{x}^* = (0, 0)$ 에서 $f^* = 0$ 이다. 이 함수의 실제 모양은 Fig. 2와 같이 노이즈가 상당히 많음을 알 수 있다. 이와 같이 노이즈가 많은 함수의 경우, 기존의 도함수에 기초한 최적화 방법으로는 방향 탐색이 제대로 되지 못하여, 최적해로의 수렴이 불가능하게 된다.

이 문제에 대하여 실험계획법으로는 중심합성 계획법과 D-optimal 계획법을, 근사 모델로는 설계영역에 0이 존재하므로, 모델 1과 모델 2를 사용하여 근사 최적화를 수행하였고, 그 결과를 Table 3에 수록하였다. 중심합성계획법의 경우 중

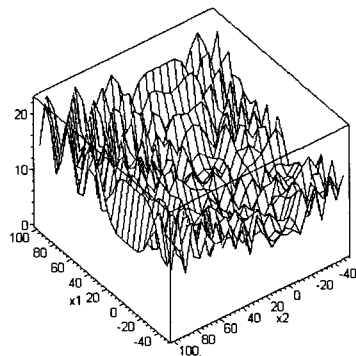
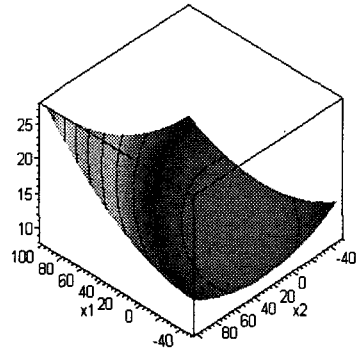


Fig. 2 Schaffer function

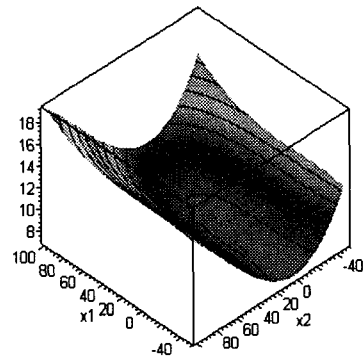
심점의 개수를 2로 설정하였다.

Table 3(a)은 비교를 위해 동일한 개수의 실험 점을 주어 중심합성계획법과 D-optimal 계획법을 수행한 후, 두 가지 모델에 대하여 최적화를 수행한 결과이다. 중심합성계획법의 경우 두 가지 모델 모두 실제 최적해로 수렴하지 못 하였으며, D-optimal 계획법의 경우에는 모델 1의 경우 Fedorov의 교환 알고리즘이 실제 최적해에 수렴 하였으며, 유전자 알고리즘의 경우 거의 근접한 최적해를 주었다. 그러나 모델 2의 경우에는 모델 1에 비해 최적해에 많이 벗어나 있는 것을 볼 수 있다. Table 3(b)는 실험점의 수를 20개로 늘 리고 D-optimal 계획법을 사용하여 반응표면 최적 화를 수행한 것으로, 모델 1의 경우 실제 최적값에 더욱 가까운 최적값을 보이고 있으나, 모델 2의 경우 실험점의 수가 10개일 때와 별다른 차이 를 보이지 않고 있다. 이는 실제 Schaffer 함수 차체가 2차 함수 형태를 보이고 있어, 모델 1로 충분한 근사화가 가능하며, 고차 함수를 모델로 사용할 경우, 노이즈에 의해 근사 반응 함수가 실제 함수에 대해 크게 왜곡될 수 있기 때문이다. Fig. 3은 Schaffer 함수를 실험점의 수를 20개로 설정한 Fedorov의 교환 알고리즘을 사용하여, 모델 1과 모델 2에 대하여 각각 근사화를 수행한

후 근사 반응표면을 도시한 그림이다. 그림에서 보듯이 모델 1의 경우 실제 Schaffer 함수와 비슷한 경향을 보여주고 있으나, 모델 2의 경우 실제 Schaffer 함수와 비교해 볼 때 왜곡된 형상을 보여주고 있다.



(a) Model 1



(b) Model 2

Fig. 3 Response surface approximations for Schaffer function

Table 3 Optimization results for RSM
(a) Comparisons between DOEs (n=10).

DOE	Model 1		Model 2	
	\mathbf{x}^*	f^*	\mathbf{x}^*	f^*
CCD	(-50, -50)	13.93	(-50, -50)	13.93
D-optimal (F.E.A.)	(0, 0)	0	(-0.94, 7.21)	4.74
D-optimal (G.A.)	(3, 0)	2.20	(-8.72, -0.59)	5.83

(b) Comparisons between D-optimal designs (n=20).

Model	Fedorov exchange algorithm		Genetic algorithm	
	\mathbf{x}^*	f^*	\mathbf{x}^*	f^*
1	(0, 0)	0	(-0.01, 0)	0.09
2	(2.80, -0.08)	3.29	(-8.84, -0.78)	5.88

Table 4 Comparison of the optimization results between direct ADS and RSM

Initial values	Direct ADS		RSM	
	\mathbf{x}^*	f^*	\mathbf{x}^*	f^*
(50, 50)	(47.99, 47.99)	8.24	(0, 0)	0
(10, 10)	(9.93, 9.93)	3.75	(0, 0)	0
(-10, -10)	(-9.93, -9.93)	3.75	(0, 0)	0

Schaffer 함수를 반응표면법을 이용하지 않고 기존의 도함수에 기초한 최적화 방법을 사용하여 직접 최적화를 수행한 결과와 비교하여 Table 4에 수록하였다. 여기서 사용한 최적화 방법은 범용 최적설계 프로그램인 ADS 내에 있는 BFGS 방법(Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno Method)이다. 예상한 바와 같이 기존의 도함수에 기초한 최적화 방법으로는 초기점 근처의 국소 최적점에 빠지는 것을 볼 수 있다. 반면 반응표면법을 이용해 근사 반응 함수를 만든 후 최적화를 수행한 결과 초기점에 상관없이 실제 최적해에 수렴한 결과를 확인 할 수 있었다.

4.4 ADAMS 현가장치 모델의 최적설계

반응표면법을 이용하면, 기존의 최적화 방법으로는 불가능했던 실험데이터나 상용 해석 소프트웨어를 이용한 최적설계를 효과적으로 수행 수 있다. 이 절에서는 범용 동역학 해석 소프트웨어인 ADAMS내에 있는 Fig. 4의 현가장치 모델⁽¹³⁾에 대하여 ADAMS 내부의 최적화 모듈인 DOT⁽¹⁴⁾에 의해 직접 최적화한 결과와 반응표면법을 이용한 최적화한 결과를 비교해 보이도록 한다.

여기에서 다루고자 하는 슛/롱암식 전방 현가장치(short-long arm type front suspension system) 모델은 하부 컨트롤 암(lower control arm), 상부 컨트롤 암(upper control arm), 타이로드(tie rod), 속 압쇼버(shock absorber), 몸체(body) 등으로 구성되어 있으며, 이 모델을 통해, 바퀴가 상하 운동을 할 때, 요구되는 토우 곡선(toe curve)에 대한 설계변수의 영향을 고찰하고, 요구되는 토우

곡선을 얻기 위한 기구학적 위치를 결정하고자 한다. 목적함수는 토우 곡선의 요구되는 반응과 실제 반응의 오차 제곱의 평균으로 정의되고, 2개의 설계변수로는 타이 로드와 스티어링 랙(steering rack)과의 접점의 y좌표와 상부 컨트롤 암과 몸체와의 접점의 y좌표로 설정하였다. 이 문제는 구속조건이 없고 목적함수를 최소화하는 최적화 문제이다.

설계변수 (x_1, x_2) 에 대한 초기치를 (460, 715)으로, 설계변수의 상/하한치는 $440 \leq x_1 \leq 480$, 와 $710 \leq x_2 \leq 720$ 로 설정하고, ADAMS 내부의 최적화 모듈인 DOT의 BFGS 방법으로 최적화를 수행한 결과는 다음과 같다.

$$f^* = 2.26 \times 10^{-4}, \text{ at } \mathbf{x}^* = (469.14, 710.13)$$

이 현가장치 모델을 반응표면법을 이용한 최적설계를 수행하기 위하여 실험계획법으로는 Fedorov의 교환 알고리즘과 유전자 알고리즘을 각각 이용한 D-optimal 계획법으로 20개의 실험점을 선택하였으며 근사 모델로는 모델 1과 모델 5를 사용하였고, Table 5에 그 결과를 수록하였다.

두 가지 모델 모두 최적해에 가까운 값으로 수렴하였고, Fedorov의 교환 알고리즘이나 유전자 알고리즘에 의한 결과의 차이는 무시할 수 있을 정도임을 볼 수 있다. 이는 목적함수로 설정한 토우 곡선의 요구되는 반응과 실제 반응의 오차 제곱의 평균이 설계 영역 안에서 설계변수에 대하여 2차 식으로 근사화 하여도 충분한 정확도를 얻을 수 있기 때문이라 생각된다.

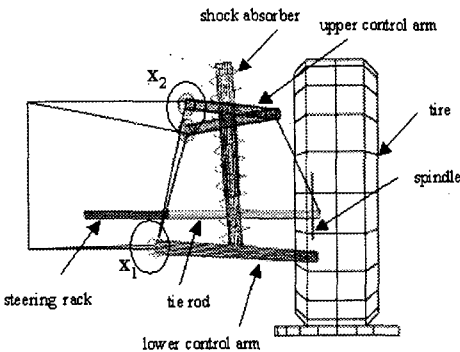


Fig. 4 ADAMS suspension model

Table 5 Optimization result for suspension

Model	D-optimal(F.E.A.)		D-optimal(G.A.)	
	\mathbf{x}^*	$f^*(\times 10^3)$	\mathbf{x}^*	$f^*(\times 10^3)$
1	(472.5, 710.0)	9.76	(469.5, 710.0)	0.17
2	(469.5, 710.0)	0.17	(468.6, 710.0)	0.02

5. 결론

본 논문에서는 다양한 실험계획법과 근사 모델의 형태를 사용자가 선택하여 근사화 및 최적화를 자동으로 수행하는 반응표면법 최적설계 프로그램을 구현하였다. 실험계획법으로 기존에 많이 사용되어 왔던 중심합성계획법과 Box-Benken 계획법 뿐 만 아니라 임의의 실험점의 개수의 선택이 가능하고, 적은 실험 횟수로도 만족할 만한 근사 반응 함수의 정확도를 제공하는 D-optimal 방법을 Fedorov의 교환 알고리즘과 유전자 알고리즘을 적용하여 개발하였다. 근사 모델로는 기존의 근사 모델로 가장 많이 사용되어 왔던 2차 함수에 더하여, 3차 및 역수 항을 추가시킨 새로운 모델을 제안하였다. 또한 근사화 후 근사 반응 함수의 정확성을 향상시키기 위하여 변수선택법을 적용하여 각각의 근사 모델에 대하여 보다 정확한 근사화된 함수를 만들 수 있었다. 특히 본 논문에서 개발된 프로그램은 기존의 반응표면법 프로그램과는 달리 범용적으로 사용할 수 있도록 개발되었다. 설계자가 해석 코드를 가지고 있을 때는 반응표면법 최적설계 프로그램과의 직접 접속을 통해 바로 최적해를 얻을 수 있으며, 실험이나 상용 프로그램을 사용할 경우 본 프로그램이 제공하는 다양한 실험계획법을 통해 실험점을 얻은 후 그 실험점에 대해 해석값을 입력하여주면 바로 최적해를 구할 수 있다.

본 프로그램을 이용하여 수치적인 예제를 수행한 결과 아래와 같은 결론을 얻을 수 있었다.

비선형성이 큰 문제의 경우 기존의 2차 함수로는 충분치 못한 정확성을 주는 반면에 2차 및 3차, 역수 항으로 이루어진 근사 모델의 경우 보다 정확한 근사 반응 함수를 생성할 수 있었으며 이를 통해 보다 나은 최적설계 값을 얻을 수 있었다. 그러나 노이즈가 많고 비선형성이 크지 않은 문제의 경우 2차 함수가 보다 정확한 근사 반응 함수를 생성하였으며 이는 노이즈에 의한 근사 반응 함수의 왜곡성이 고차 함수의 경우 더욱 크게 나타나고 있기 때문이다. 또한 노이즈가 많은 함수의 경우 실험 횟수를 늘려줌으로써, 근사화의 정확성을 향상시킬 수 있음을 볼 수 있었다. 따라서, 위와 같은 경우를 고려하여 본 논문에서 개발한 반응표면법 최적설계 프로그램이 제

공하는 다양한 실험계획법과 근사 모델을 사용하여 최적설계를 수행한다면 보다 효율적인 설계를 할 수 있으리라 생각된다.

후 기

이 연구는 한국과학재단 지정 최적설계신기술 연구센터의 연구비 지원으로 수행되었습니다.

참고문헌

- (1) Myers, R. H. and Montgomery, D. C., 1995, *Response Surface Methodology - Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, John Wiley & Sons, New York.
- (2) Box, G. E. P. and Wilson, K. B., 1951, "On the Experimental Attainment of Optimum Conditions," *Journal of the Royal Statistical Society, Series B.*, 13, pp. 1~14.
- (3) Box, M. J. and Draper, N. R., 1971, "Factorial Designs, the |XX| Criterion and Some Related Matters," *Technometrics*, 13, pp. 731~742.
- (4) Mitchell, T. J., 1974, "An Algorithm for the Construction of D-optimal Designs," *Technometrics*, 20, pp. 203~210.
- (5) Nguyen, N. K. and Miller, F. L., 1992, "A Review of Some Exchange Algorithms for Construction Discrete D-optimal Designs," *Computational Statistics & Data Analysis*, North-Holland. 14, pp. 489~498.
- (6) Roux, W. J., Stander Nielen and Haftka, R. T., 1996, "Response Surface Approximations for Structural Optimization," AIAA Paper 96-4042, AIAA/NASA/ISSMO, *Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization*, 6th, Bellevue, WA, Sept. 4-6
- (7) Rikard, R., 1993, "Elaboration of Optimal Design Model for Objects from Data of Experiments," In Pederson, P. (ed) *Optimal Design with Advanced Materials*, Amsterdam, Elsevier, pp. 148~162.
- (8) Guinta, A. A., Dudley, J. M., Narducci, R., Grossman, B., Haftka, R. T. and Mason, W. H., 1994, "Noisy Aerodynamic Response and Smooth

- Approximations in HSCT Design," HPCCP related papers, Virginia Polytechnic Institute and State University.
- (9) Miller, A. J. and Nam-ky Nguyen, 1994, "A Fedorov Exchange Algorithm for D-optimal Designs," Applied Statistics, 43, No.4, pp. 669~678.
- (10) Michalewicz, Z., 1996, Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York.
- (11) Vanderplaats, G. N., 1985, "ADS - A FORTRAN Program for Automated Design Synthesis," NASA CR 172460.
- (12) Schittkowski, K., 1987, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, New York
- (13) ADAMS Seminar Series-DOE and Optimization using ADAMS/View 8.0, Mechanical Dynamics Inc., Ann Arbor, MI
- (14) Vanderplaats, G. N., 1995, DOT - Design Optimization Tools Users Manual, Vanderplaats Research & Development, Inc.