

혼합물 생산공정을 위한 성분변수의 진화적 조업법

김치환¹ · 변재현^{2*}

¹SK Teletch / ²경상대학교 산업시스템공학부

An Evolutionary Operation with Mixture Variables for Mixture Production Process

Chi-Hwan Kim¹ · Jai-Hyun Byun²

¹Quality Control Team, SK Teletch, Chonan, 330-836

²Department of Industrial and Systems Engineering and Engineering Research Institute,
Gyeongsang National University, Jinju, 660-701

A mixture experiment is a special type of response surface experiment in which 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 process by systematically changing the levels of the process variables without jeopardizing the product. This paper presents an evolutionary operation procedure with mixture variables for large-scale mixture production process which can be beneficial to practitioners who should improve on-line mixture quality while maintaining the production amount of the mixture product.

Keywords: mixture experiment, evolutionary operation, simplex centroid design, mixture variables, mixture EVOP

1. 서론

휘발유, 페인트, 세제, 음료수 등과 같이 두 가지 이상의 성분을 혼합함으로써 제조되는 제품의 품질특성 또는 반응변수는 각 성분의 양이 아니라 각 성분의 상대적인 혼합비율에 의해 영향을 받게 되며 전체 성분들의 합은 항상 일정한 양이 된다 이와 같이 제품들의 특성을 최적화하는 성분들의 혼합비율을 찾는 실험을 요인실험이나 다른 반응표면실험과 구분하여 혼합물 실험(mixture experiment)이라 한다(Cornell, 2002; Myers and Montgomery, 1995).

혼합물 실험계획(mixture experimental design)은 일반적인 실험계획과 달리, 인자가 혼합물의 성분이나 구성요소이고 반응변수는 각 성분 비율의 함수이며 반응변수를 최적화하는 혼합비율을 찾기 위한 실험계획이다. 혼합물 실험은 성분의 합이 1(100%) 이하가 되어야 한다는 제약조건을 가

지므로 전체 실험영역은 심플렉스 형태가 되며, 각 꼭지점과 그에 대응하는 부분공간(선분 혹은 면)이 하나의 좌표축을 이루게 된다. 혼합물 실험계획은 이렇게 구성된 심플렉스의 각 꼭지점과 선분 혹은 면으로 제한되는 실험 공간 내에 실험점을 잡아 전체적인 반응표면의 형태와 혼합모형(mixture model)을 도출하는 데 중점을 두고 있다.

그러나 이렇게 실험실이나 파일럿 플랜트에서 구한 혼합물 실험의 최적조건이 실제 대규모 생산공장에서 항상 최적인 것은 아니며, 대량생산 공정에서 다시 최적조건을 탐색해야 하는 것이 일반적이다(Box and Draper, 1969). 그러므로 대규모의 실제 생산공정에서 최적 조건을 지속적으로 탐색하기 위한 방법이 필요하다 이를 위하여 새로운 공정이나 실제 생산현장에서 현재의 공정조건을 조금씩 변화시키면서 그 반응을 관찰하고 결과를 분석하여 새로운 최적조건을 찾아가는 방법이 유용하다 Box(1957)는

본 연구는 한국과학재단 지역대학우수과학자 육성지원연구과제번호: R05-2003-000-10445-0)의 지원으로 수행되었음.

* 연락저자 : 변 재현 교수, 660-701 경남 진주시 가좌동 900 경상대학교 산업시스템공학부, Fax : 055-762-6599,

E-mail : jbyun@nongae.gsnu.ac.kr

2003년 3월 접수; 2003년 11월 수정본 접수; 2003년 12월 게재 확정.

양산단계에서 공정을 계속하여 운용하면서 2^2 또는 2^3 요인배치법을 이용하여 공정조건을 체계적으로 조금씩 이동하면서 품질특성을 점진적으로 향상시켜 나가는 방법으로 진화적 조업법(evolutionary operation, EVOP) 절차를 제안하였다. EVOP의 구성요소는 사이클(cycle)과 단계(phase)이다. 현재의 공정조건을 중심점으로 하고 그 중심점 주변의 요인배치 실험점에서 각각 1번씩 실험을 하면 한 사이클이 끝난다. 충분한 횟수의 사이클 실험을 통하여 실험점들 간에 통계적으로 유의한 차이가 나타나면 한 단계가 끝나고, 이 단계에서 가장 나은 실험점을 중심점으로 삼아 다음 단계의 실험을 같은 방법으로 수행하게 된다.

혼합물 생산공정을 운영하는 기업의 관계자들은 아직 진화적 조업법에 관한 교육과 훈련을 받지 못하였기 때문에 생산공정의 개선된 조건을 탐색하는 데 있어서 그들이 갖고 있는 사전지식에만 의존하여 체계적이지 않은 방법을 이용하고 있다. 그 결과 개선된 조건을 파악하는 데에 장시간이 소요되는 경우가 많다. 본 논문에서는 혼합물 생산공정에 적용할 수 있는 성분변수의 최적조건을 구하기 위한 혼합물 진화적 조업법(mixture EVOP) 절차를 제시하고자 한다. 우선 실험점을 선택하는 방법을 제안한다. 혼합물 실험계획은 다른 종류의 실험계획법과 달리 심플렉스 형태의 한정된 실험영역을 가지고 있으며 선택한 실험점에서 인자 수준 즉, 좌표를 계산하는 방법이 특이하다. 따라서 2절에서는 혼합물 실험의 개념, 다른 실험계획과의 차이점 및 심플렉스 좌표시스템을 설명하였다. 혼합물 EVOP를 진행하기 위한 방법으로 중심점 기준 혼합물 EVOP (mixture EVOP with centroid)의 절차는 3절에서 제시하고, 예제를 통하여 시뮬레이션 결과를 보여준다. 4절에서는 각각의 성분들에 제약조건이 따르는 경우에 만일 3절에서 제시한 절차에 따라 구한 실험점이 제약조건을 벗어날 때 제약조건 내에 실험점이 들어오도록 실험점을 재설정하는 방법을 구하고, 5절에 본 논문의 결론을 제시한다.

2. 혼합물 실험의 개요 및 심플렉스 좌표 시스템

2.1 혼합물 실험의 개요

일반적으로 q 개의 성분(혹은 구성요소)으로 이루어진 혼합물에서 x_i 를 i 번째 성분의 비율이라 하면 이들 q 개의 성분은 다음과 같은 제약조건을 가진다.

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

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

식 (2)의 제약으로 인해 성분 x_i 들은 서로 독립이 아니므로 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 수행된다. 이러한 실험영역은 $q=2$ 인 경우 대각선 선분으로 나타나고, $q=3$ 인 경우는 정삼각형, $q=4$ 일 때는 정사면체가 된다. 혼합물 실험을 위한 대표적인 배치 방법은 두 가지가 있다. Figure 1과 같이 심플렉스의 모든 영역에 실험점을 균일하게 배치하는 방법은 심플렉스 격자 배열법(simplex lattice design)이고, 꼭지점 외에 모서리, 면, 그리고 심플렉스의 중심에 실험점을 추가하여 배치한 Figure 2와 같은 배치 방법은 심플렉스 중심 배열법(simplex centroid design)이라고 부른다. 혼합물 실험계획의 주요 목적은 이러한 실험을 통해 혼합물 실험 데이터를 이용한 예측 모형과 반응표면의 형태를 추정하여 최적의 성분 비율을 구하는 데 있다.

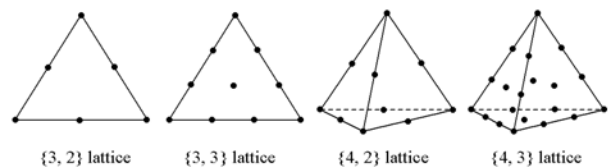


Figure 1. Simplex lattice designs.

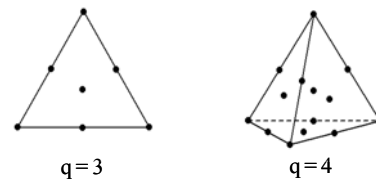


Figure 2. Simplex centroid designs.

2.2 심플렉스 좌표 시스템(Simplex Coordinate System)

수학적 의미에서 심플렉스는 식 (1)과 (2)를 만족시키는 점 (x_1, x_2, \dots, x_q) 의 집합 혹은 $(q-1)$ 차원에서 q 개의 꼭지점을 가지는 규칙적인 면으로 구성된 다면체로 정의되며 꼭지점의 수보다 차원의 수가 하나 작다. 반면 혼합물 실험에서 전체 실험영역인 심플렉스 공간은 꼭지점의 수와 성분의 수가 같은 특징을 가지고 있으며 좌표의 계산법에 있어 일반적인 차원의 좌표계산법과 차이가 있다. 본 논문에서는 Scheffe(1958)의 심플렉스 격자배열법에 이용되는 좌표계산법을 혼합물 EVOP를 위한 기본 좌표계산법으로 이용하기로 하였다.

Scheffe의 방법을 이용하면 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. 그리고 심플렉스 좌표에서 꼭지점의 수는 성분의 수와 같으므로 본 논문에서는 앞으로 q 개의 성분으로 구성된 q 차원

심플렉스 공간에서의 좌표를 q 차원 심플렉스 좌표라고 부르기로 한다. 예를 들어 $q=3$ 인 경우, 꼭지점의 수와 대응하는 선분의 수가 3인 3차원 심플렉스 좌표는 Figure 3과 같이 나타낼 수 있으며, 각 눈금은 꼭지점에서 대응하는 선분에 수직으로 그은 직선을 10등분한 것인데, 0.1 (10%)의 단위를 나타낸다. 각 꼭지점은 하나의 단일성분이 100%로 구성되는 순수혼합(pure blend)을 나타내며, 꼭지점에서 대응되는 선분에 수직으로 그은 선이 만나는 점은 두 개의 성분이 50%씩 혼합되는 2진 혼합(binary blend)을 나타낸다. 꼭지점에서 각 선분에 수직으로 그은 선들은 정삼각형의 무게중심(centroid)에서 교차하며, 이 무게 중심은 세 개의 성분을 1/3씩 동일하게 혼합하는 경우를 나타낸다.

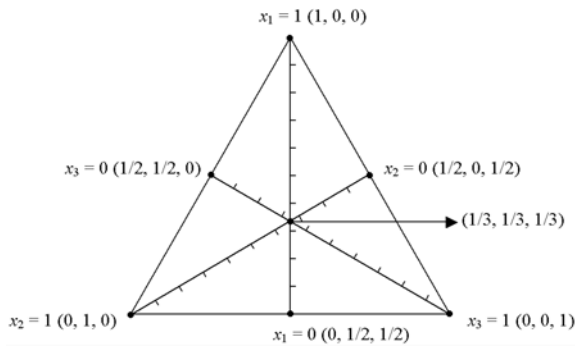


Figure 3. Three-dimensional simplex coordinate system.

$q=4$ 인 경우, 4차원 심플렉스는 Figure 4와 같이 정사면체로 나타낼 수 있으며, 각 꼭지점에서 대응하는 면(정삼각형)에 수직으로 그은 직선은 대응하는 면의 무게중심과 만나게 되고 하나의 축을 형성한다. 이 축들이 서로 교차하는 점은 정사면체의 무게중심이며 각 성분이 1/4씩 동일하게 혼합되는 조건이다. 3차원 심플렉스 공간에서와 마찬가지로 각 꼭지점은 순수혼합을 나타내며 두 꼭지점을 연결하는 선분은 2진 혼합, 세 점을 연결하는 정삼각형의 내부의 세 개의 성분들에 의한 혼합을 나타낸다(Myers and Montgomery, 1995).

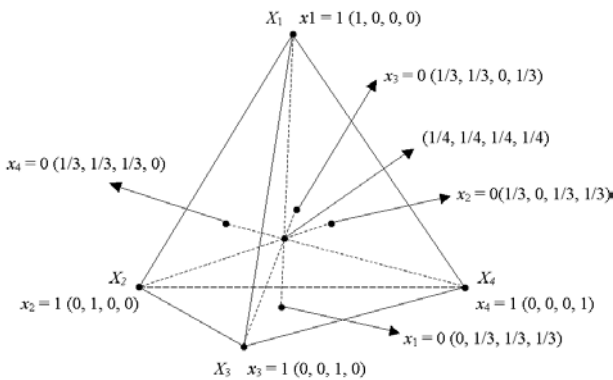


Figure 4. Four-dimensional simplex coordinate system.

이와 같이 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 성분들의 혼합을 의미한다. 이러한 심플렉스 공간 내에서 q 개의 성분들 중 한 성분의 증가(또는 감소)는 나머지 성분들의 감소(또는 증가)로 나타난다. 즉, 임의의 한 축 방향으로 Δ 만큼의 증가(감소)는 이 성분을 제외한 나머지 $(q-1)$ 개 성분들의 $\Delta/(q-1)$ 만큼의 감소(또는 증가)로 상쇄된다. 예를 들어, Figure 4의 좌표점 $(0, 1/3, 1/3, 1/3)$ 에서 x_1 의 좌표가 X_1 축의 꼭지점 방향으로 1/4만큼 증가하면, 나머지 변수들의 좌표는 $(1/4)/(4-1)=1/12$ 만큼 감소하여 $x_2=x_3=x_4=1/3-1/12=1/4$ 가 되므로 이동한 점의 좌표는 $(1/4, 1/4, 1/4, 1/4)$ 이 된다. 다른 예로, 꼭지점 $(0, 1, 0, 0)$ 에서 x_2 의 좌표가 X_2 축의 면 방향으로 1/4만큼 감소하면, 나머지 변수들인 x_1, x_3, x_4 의 좌표는 각각 $0+1/4 \times 1/3=1/12$ 가 되어, 이동되어 나타나는 점의 좌표는 $(3/4, 1/12, 1/12, 1/12)$ 이 된다.

3. 중심점 기준 혼합물 EVOP

3.1 기본 개념

Box에 의해 정립된 진화적 조업법은 제품의 불량 발생이나 수율 감소가 크게 발생하지 않을 정도로 현재 운영하고 있는 공정조건을 중심으로 공정변수의 수준을 조금씩 변화시키면서 최적 공정조건을 찾아가는 최적화 기법이며, 중심점을 포함하는 2^k 요인배치법에 기초하고 있다. 이러한 EVOP는 실험 영역 전체에 관한 반응 표면을 관심을 두기 보다는 최적 공정조건을 찾아가는 방향에 중점을 두고 있으며, 공정 엔지니어 또는 작업자가 이용하기 쉬운 것이 특징이다(Box and Draper, 1969). 중심점을 기준으로 하는 혼합물 EVOP는 이러한 EVOP의 개념을 혼합물 실험에 적용하기 위한 방법이다.

q 개의 성분으로 구성된 혼합물 실험계획의 실험 영역은 q 차원 심플렉스 공간이다. 따라서 혼합물 실험에 EVOP를 적용하기 위하여 기본적으로 동일한 형태의 축소된 q 차원 심플렉스를 이용하기로 한다.

3.2 실험점의 선정

혼합물 실험에 EVOP를 적용하기 위해서는 가장 먼저 실험점을 선정하는 기준이 필요하다. 일반적으로 x_1, x_2, \dots, x_q 의 q 개 성분으로 구성되는 혼합물 실험계획의 실험 가능 영역은 q 개의 꼭지점을 가지는 심플렉스 공간 내로 한정된다. 이러한 공간 내에서 혼합물 EVOP를 진행하기 위해 생성시킬 수 있는 실험점의 조합은 무수히 많다. 그러나

실험점의 배치를 용이하게 하고 생성된 실험점의 좌표를 손쉽게 계산할 수 있도록 하기 위하여 기본적인 실험점은 전체 실험공간의 각 축에 평행한 축을 가지는 동일한 형태의 축소된 심플렉스를 이용하여 생성하기로 한다 따라서 q 개의 성분으로 구성되는 q 차원 심플렉스 공간에서 혼합물 EVOP를 위해 생성되는 실험점은 현재의 표준 운영 공정조건을 중심으로 각 꼭지점까지 거리가 Δ 인 심플렉스가 되고 실험점의 수는 $(q+1)$ 개가 된다.

q 차원 심플렉스 공간에서 현재의 운영공정조건을 $P_0(x_1, x_2, \dots, x_q)$ 이라고 하면, 이 점을 무게중심으로 하여 Δ 만큼 떨어진 q 개의 꼭지점의 좌표는 다음과 같이 구할 수 있다

$$P_1 = \{x_1 + \Delta, x_2 - \Delta/(q - 1), \dots, x_q - \Delta/(q - 1)\}$$

$$P_2 = \{x_1 - \Delta/(q - 1), x_2 + \Delta, \dots, x_q - \Delta/(q - 1)\}$$

⋮

$$P_q = \{x_1 - \Delta/(q - 1), x_2 - \Delta/(q - 1), \dots, x_q + \Delta\} \quad (3)$$

여기서, $\Delta < 1$, $\sum x_i = 1$ 이다.

예를 들어 Figure 5와 같이 3개의 성분으로 구성되는 혼합물 실험에서 현재 운영하고 있는 공정조건을 무게중심 $P_0(x_1, x_2, x_3)$ 으로 하고, 각 꼭지점 방향으로 Δ 만큼 증가시켜 생성한 점 P_1, P_2, P_3 의 좌표는 다음과 같다.

$$P_1 = (x_1 + \Delta, x_2 - \Delta/2, x_3 - \Delta/2)$$

$$P_2 = (x_1 - \Delta/2, x_2 + \Delta, x_3 - \Delta/2)$$

$$P_3 = (x_1 - \Delta/2, x_2 - \Delta/2, x_3 + \Delta)$$

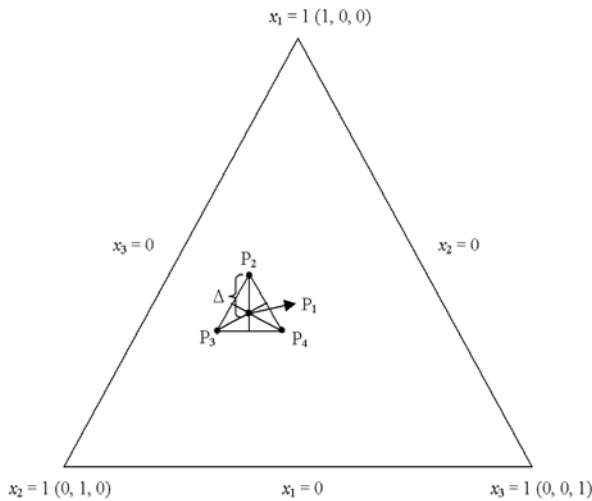


Figure 5. Generation of initial design points($q=3$).

3.3 실험계획 및 절차

중심점 기준 혼합물 EVOP를 진행하기 위한 첫 번째 단

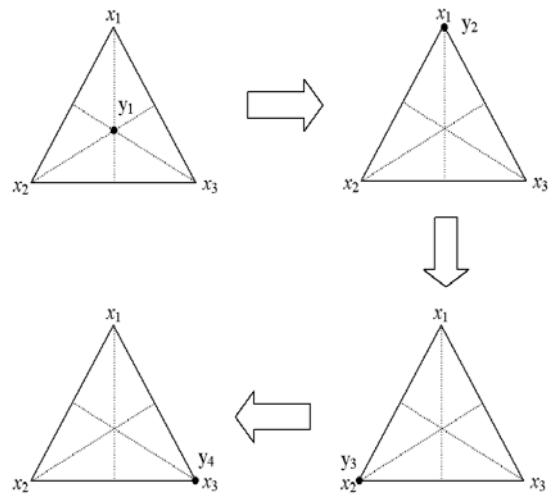


Figure 6. A cycle experiment.

계는 3.2절에서 설명한 바와 같이 초기 실험점을 생성하는 것이다. 여기서 중요한 것은 Δ 의 선정으로, 공정조건 변화로 인한 불량제품의 발생이나 수율 감소 등이 문제가 되지 않을 정도로 Δ 를 작게, 하지만 실험점들 간에 차이가 있을 때에 그 차이를 탐지할 수 있도록 큰 값으로 정한다. 한 사이클의 실험점 당 반복 횟수가 크면 Δ 를 작게 해도 되지만, 반복 횟수를 크게 할 수 없을 때에는 Δ 를 크게 하는 것이 필요하다. 형성된 초기 실험점을 이용하여, Box는 각 실험점에서 한 번의 실험을 통해 하나의 반응값을 얻으면 한 사이클(cycle) 실험이 완료된다고 정의하였다. 하지만 혼합물을 생산하는 양산공정을 대상으로 어떤 조건에서 한 번 실험하여 한 개의 데이터를 얻고, 그 다음 공정조건을 다시 설정하여 실험을 하려면 준비시간(set-up time)이 과도하게 소요된다. 그러므로 한 실험점에서 수회 실험을 하고, 그 다음 실험점에서 수회 실험을 하는 방식으로 실험을 하여 최종적으로 모든 실험점에서 수회 실험을 하였을 때 한 사이클 실험이 완료되었다고 정의하는 것이 보다 현실적이다. 이러한 실험방법은 물론 엄격한 의미의 랜덤화에는 위배가 되지만 실용적으로 이용할 수 있는 방법이다. 예를 들어 Figure 6에서 중심점과 3개의 꼭지점에서 각각 수회 실험을 하면 한 사이클의 실험이 완료되었다고 보는 것이다. Figure 6의 실험순서는 하나의 예시이며, 실제 실험순서는 랜덤하게 정하면 되겠다. 사이클 실험이 완료될 때마다 실험점들 간의 유의성을 검정하기 위하여 Table 1과 같이 일원배치의 형태로 반응값을 정리한다. 본 논문은 혼합물 생산공정에 필요한 성분 변수의 최적조건을 찾기 위한 것이므로 기존의 요인배치에 근거한 EVOP 분석 방법을 쓸 수가 없어서, 실험점들 간에 유의한 차이가 있는지를 파악하기 위하여 Table 2와 같이 일원배치 분산분석을 통하여 유의성 검정을 수행한다. Table 1에서 i 번째 실험점에서의 모평균을 p_i 라고 하면,

귀무가설 H_0 은 ‘각 실험점에서 반응값의 평균에 차이가 없다’는 의미로 $H_0: p_1=p_2=\dots=p_s$ 로 표현할 수 있다. 따라서 Table 2와 같은 분산분석표를 작성할 수 있고, $F_0 > F(\alpha, \phi_E; \alpha)$ 이면 귀무가설을 기각한다.

Table 1. experimental layout

rep.	experimental point					T
	P ₁	P ₂	P ₃	...	P _s	
1	y ₁₁	y ₂₁	y ₃₁		y _{s1}	
2	y ₁₂	y ₂₂	y ₃₂		y _{s2}	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	
m	y _{1m}	y _{2m}	y _{3m}		y _{sm}	
sum	T ₁	T ₂	T ₃	...	T _s	T
avg.	\bar{y}_1	\bar{y}_2	\bar{y}_3	...	\bar{y}_s	\bar{y}

Table 2. ANOVA Table

요인	SS	DF	MS	F ₀
P	SS _P	$\phi_P = s - 1$	SS _P / ϕ_P	$F_0 = V_P/V_E$
E	SS _E	$\phi_E = s(m - 1)$	SS _E / ϕ_E	
T	SS _T	$\phi_T = sm - 1$		

일원배치 분산분석을 통해 귀무가설 H_0 이 기각되면 한 단계(phase)의 실험을 마치고 가장 좋은 반응값을 가지는 실험점을 중심으로 하여 새롭게 실험점을 생성하는 다음 단계의 실험으로 넘어간다. 만약, 이러한 유의성 검정을 통해 H_0 이 기각되지 않으면, 이러한 사이클 실험을 다시 수행하여 유의성 검정을 하는 방법으로 H_0 이 기각될 때까지 여러 차례 사이클 실험을 반복한다. 수차례에 걸쳐서 사이클 실험을 수행했음에도 불구하고 H_0 이 기각되지 않으면, 사이클 실험의 진행여부를 결정하기 위해 실험의 목표달성 여부를 확인한다. 해당되는 단계에서 반응변수의 목표값을 상회하는 실험점이 있으면 가장 우수한 반응값

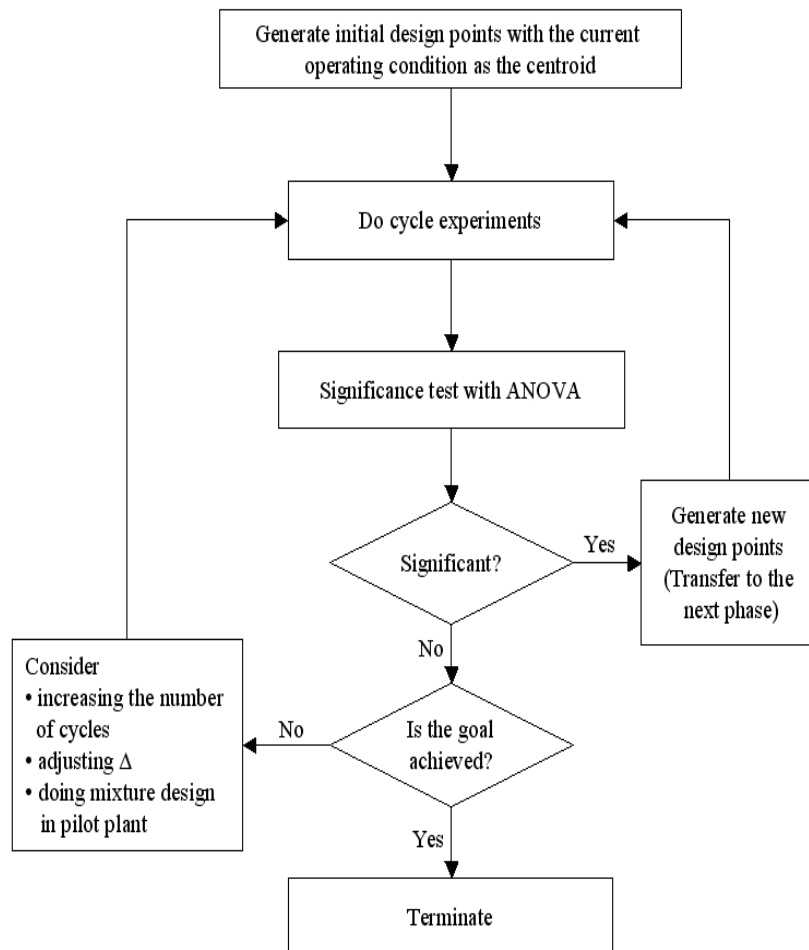


Figure 7. Flow chart of mixture EVOP with centroid.

을 가지는 실험점(공정조건)을 최적으로 삼고 실험을 종료한다. 만약 해당 단계의 모든 실험점에서 반응값이 목표값에 미달되면, 다음의 방법을 순차적으로 고려한다 (1) 사이클의 횟수를 더 늘린다. 사이클의 반복 횟수를 늘리면 H_0 을 기각할 수 있는 가능성이 커진다 한 사이클의 반복 횟수를 크게 하는 방법을 이용할 수도 있다 (2) Δ 값을 증가 혹은 감소시킴으로써 실험점들 간의 간격을 확대하거나 축소하는 조정을 통해 EVOP를 진행한다. Δ 값의 조정은 공정 운영자들이 쉽게 이용할 수 있도록 현재 값의 2배로 확대하거나 0.5배로 축소하는 방법을 쓰는 것이 편리하다. (3) 파일럿 플랜트를 대상으로 넓은 범위의 영역을 포괄적으로 탐색할 수 있는 일반적인 혼합물 실험을 수행한다. 이와 같은 과정을 순서대로 나타내면 Figure 7과 같다.

실험의 진행과정에서 향상된 조건의 실험점이 이전의 실험점으로 돌아가는 현상이 나타날 수 있으나 이러한 현상은 앞서 설명한 Δ 값의 변화를 통해 실험점을 재배치하여 실험을 진행하면 피할 수 있다.

3.4 예제

지금까지 설명한 혼합물 EVOP의 수행 방법을 Myers and Montgomery(1995)의 습식 에칭(wet chemical etching) 실험을 통하여 예시하기로 한다. 습식 에칭은 반도체 산업에서 경화공정에 들어가기 전 실리콘웨이퍼의 후면에서 세 가지 산(acid)이 혼합됨으로써 수행된다. 구성성분은 x_1 -질산(nitric acid), x_2 -염산(hydrochloric acid), x_3 -인산(phosphoric acid)이고, 이들의 구성비율의 총합은 1이며, 실험자는 반응변수인 etch rate의 증가에 이들의 어떤 성분조합이 좋은지를 알고자 한다. Myers and Montgomery는 수정된 심플렉스 격자배열법(augmented simplex lattice design)을 선택하여 실험을 실시하였으며 실험을 통해 얻은 데이터를 실험계획 소프트웨어인 Design Expert를 이용하여 분석한 후 혼합모형을 추정하였다. 그 결과 적합된 특수 3차모형(special cubic model)은 다음과 같다.

$$\hat{y} = 550.2x_1 + 344.7x_2 + 268.3x_3 + 689.5x_1x_2 - 9.0x_1x_3 + 58.1x_2x_3 + 9243.3x_1x_2x_3 \quad (4)$$

식 (4)를 토대로 오차항의 분포가 $\epsilon \sim N(0, 0.3^2)$ 임을 가정하고 MS Excel을 이용한 시뮬레이션을 통해 각 실험점당 반응값이 10개씩 생성되던 한 사이클 실험이 완료되었다고 하고 중심점 기준 혼합물 EVOP를 수행하기로 하였다. Myers and Montgomery의 실험 결과 나타난 3차원 반응표면 그래프의 최대 etch rate 값이 831.6이므로, 본 예에서는 etch rate 값이 832 이상 되는 최적 성분조합을 찾는 것을 목표로 하였다. 첫 번째 단계(phase 1)의 중심점(centroid point, CP)인 현재의 운영공정조건은 $(x_1, x_2, x_3) = (0.55, 0.2, 0.25)$ 라고 가정하고, $\Delta = 0.02$ 로 설정하여 식 (3)을 통해 나머지 3개 실험점의 좌표를 구하였다. 각 실험점별로 사이클실험을 통하여 10개씩의 데이터를 얻은 다음 Minitab을 이용하여 실험점들 간에 유의한 차가 있는지 유의성 검정을 하였다. 실험점들 간에 유의한 차가 있는 것으로 나타나면 가장 높은 etch rate를 가지는 실험점을 새로운 중심점으로 하여 다음 단계의 실험을 진행하였다. 유의한 차이가 없으면 사이클실험을 1회씩 증가하여 유의성 검정을 다시 수행하는 방법으로 각 단계에서 사이클실험을 총 8회까지 시도해 보기로 하였다.

시뮬레이션 결과는 Table 3과 같이 요약된다. 단계 13 (phase 13)에서 처음으로 목표값 832를 넘는 실험점 P2 (0.42, 0.34, 0.24)를 구할 수 있었으며 이에 따라 실험을 종료할 수도 있었지만, 이후 더 나은 최적 성분조합을 구해 보기 위해 실험을 계속 진행해 보기로 하였다. 단계 14에서 $\Delta = 0.02$ 로 하여 사이클 실험을 통해 각 실험점에서 10개의 반응값을 얻은 다음 검정을 한 결과 p-value가 0.351로 아직 유의한 차가 없는 것으로 나타났다. 따라서 Figure 7의 순서도에 따라 사이클 실험을 1회 추가하여 유의성 검정을 진행한 결과 단계 15에서 p-value가 0.014로 유의수준 0.05보다 작기 때문에 실험점들 간에 유의한 차가 있는 것으로 판정하였다. 하지만 중심점 CP(0.42, 0.24, 0.24)에서 etch rate의 평균값이 가장 크므로 Δ 값의 증감을 통해 실험점들 간의 간격을 확장 또는 축소하여 실험을 진행해 보기로 하였다. 단계 16은 Δ 값을 0.04로 하였을 때의 결과를 보여주고 있으며, p-value가 0.002로 실험점들 간에 유의한 차가 있는 것으로 판정되었으나 여전히 중심점 CP(0.42, 0.34, 0.24)에서 가장 나은 평균 반응값을 나타내고 있다. 실험점들 간 간격을 좁히기 위하여 Δ 값을 0.01로 하여 실험을 진행한 결과는 단계 17~단계 20에 걸쳐 나타나 있다. 단계 17에서 중심점의 평균 반응값보다 더 나은 평균 반응값을 가지는 실험점 P3(0.415, 0.335, 0.250)을 구할 수 있었으나 p-value가 0.472로 실험점들 간에 유의한 차는 없는 것으로 판정되었다. 사이클 실험을 1회씩 증가시켜가며 실험을 진행한 결과, 사이클실험을 4회 수행한 단계 20에서 p-value가 0.048로 실험점들 간에 유의한 차가 있는 것으로 나타났다. 가장 나은 평균 반응값을 가지는 실험점 P3(0.415, 0.335, 0.250)을 다음 단계인 단계 21의 중심점으로 삼고 실험을 진행한 후 p-value를 살펴보면 0.66으로 실험점들 간에 유의한 차가 없는 것으로 나타났다. 이에 따라 앞서와 마찬가지로 사이클 실험을 1회씩 증가시켜가며 단계 28까지 총 8회의 사이클 실험을 진행하였으나, 실험점들 간에 유의한 차가 없는 것으로 나타났기 때문에 실험을 종료하기로 하였다. 따라서 본 시뮬레이션 결과 가장 좋은 평균 반응값을 가지는 성분조합은 단계 21~단계 28의 실험점 P2(0.410, 0.345, 0.245)로, $x_1 =$

Table 3. Simulation results of the mixture EVOP

Phase	Point	X1	X2	X3	Y-bar	New CP
1	CP	0.55	0.20	0.25	770.47	O
	P1	0.57	0.19	0.24	768.28	
	P2	0.54	0.22	0.24	774.65	
	P3	0.54	0.19	0.27	768.64	
	Delta	0.02	F-value	135.2	P-value	
2	CP	0.54	0.22	0.24	784.82	O
	P1	0.56	0.21	0.23	775.30	
	P2	0.53	0.24	0.23	795.70	
	P3	0.53	0.21	0.26	778.88	
	Delta	0.02	F-value	129.79	P-value	
3	CP	0.53	0.24	0.23	794.47	O
	P1	0.55	0.23	0.22	788.91	
	P2	0.52	0.26	0.22	806.13	
	P3	0.52	0.23	0.25	793.94	
	Delta	0.02	F-value	74.09	P-value	
4	CP	0.52	0.26	0.22	805.25	O
	P1	0.54	0.25	0.21	795.95	
	P2	0.51	0.28	0.21	811.43	
	P3	0.51	0.25	0.24	802.64	
	Delta	0.02	F-value	38.8	P-value	
5	CP	0.51	0.28	0.21	814.85	O
	P1	0.53	0.27	0.20	804.10	
	P2	0.50	0.30	0.20	816.73	
	P3	0.50	0.27	0.23	813.22	
	Delta	0.02	F-value	42.05	P-value	
6	CP	0.50	0.30	0.20	815.48	O
	P1	0.52	0.29	0.19	809.12	
	P2	0.49	0.32	0.19	817.15	
	P3	0.49	0.29	0.22	818.10	
	Delta	0.02	F-value	14.89	P-value	
7	CP	0.49	0.29	0.22	818.74	O
	P1	0.51	0.28	0.21	811.03	
	P2	0.48	0.31	0.21	821.30	
	P3	0.48	0.28	0.24	816.27	
	Delta	0.02	F-value	14.31	P-value	
8	CP	0.48	0.31	0.21	821.49	O
	P1	0.50	0.30	0.20	815.44	
	P2	0.47	0.33	0.20	822.58	
	P3	0.47	0.30	0.23	823.70	
	Delta	0.02	F-value	14.46	P-value	
9	CP	0.47	0.30	0.23	823.90	O
	P1	0.49	0.29	0.22	819.03	
	P2	0.46	0.32	0.22	826.94	
	P3	0.46	0.29	0.25	822.76	
	Delta	0.02	F-value	12.10	P-value	
10	CP	0.46	0.32	0.22	825.53	O
	P1	0.48	0.31	0.21	822.00	
	P2	0.45	0.34	0.21	826.11	
	P3	0.45	0.31	0.24	827.21	
	Delta	0.02	F-value	4.72	P-value	

Table 3. Simulation results of the mixture EVOP (계속)

Phase	Point	X1	X2	X3	Y-bar	New CP
11	CP	0.45	0.31	0.24	827.98	O
	P1	0.47	0.30	0.23	824.74	
	P2	0.44	0.33	0.23	829.56	
	P3	0.44	0.30	0.26	827.14	
	Delta	0.02	F-value	4.1	P-value	0.013
12	CP	0.44	0.33	0.23	828.24	O
	P1	0.46	0.32	0.22	825.98	
	P2	0.43	0.35	0.22	828.73	
	P3	0.43	0.32	0.25	831.07	
	Delta	0.02	F-value	4.72	P-value	0.007
13	CP	0.43	0.32	0.25	830.89	O
	P1	0.45	0.31	0.24	828.96	
	P2	0.42	0.34	0.24	832.69	
	P3	0.42	0.31	0.27	828.36	
	Delta	0.02	F-value	4.61	P-value	0.008
14 N=1	CP	0.42	0.34	0.24	832.22	
	P1	0.44	0.33	0.23	829.67	
	P2	0.41	0.36	0.23	830.99	
	P3	0.41	0.33	0.26	831.40	
	Delta	0.02	F-value	1.13	P-value	0.351
15 N=2	CP	0.42	0.34	0.24	831.86	O
	P1	0.44	0.33	0.23	828.91	
	P2	0.41	0.36	0.23	830.78	
	P3	0.41	0.33	0.26	831.64	
	Delta	0.02	F-value	3.76	P-value	0.014
16	CP	0.42	0.34	0.24	832.46	
	P1	0.46	0.32	0.22	826.89	
	P2	0.40	0.38	0.22	829.11	
	P3	0.40	0.32	0.28	830.86	
	Delta	0.04	F-value	6.09	P-value	0.002
17 N=1	CP	0.420	0.340	0.240	831.01	
	P1	0.430	0.335	0.235	831.63	
	P2	0.415	0.350	0.235	832.46	
	P3	0.415	0.335	0.250	832.98	
	Delta	0.01	F-value	0.86	P-value	0.472
18 N=2	CP	0.420	0.340	0.240	831.13	
	P1	0.430	0.335	0.235	831.64	
	P2	0.415	0.350	0.235	831.92	
	P3	0.415	0.335	0.250	832.90	
	Delta	0.01	F-value	1.16	P-value	0.331
19 N=3	CP	0.420	0.340	0.240	831.29	
	P1	0.430	0.335	0.235	831.27	
	P2	0.415	0.350	0.235	832.05	
	P3	0.415	0.335	0.250	833.08	
	Delta	0.01	F-value	2.57	P-value	0.057
20 N=4	CP	0.420	0.340	0.240	831.37	O
	P1	0.430	0.335	0.235	831.23	
	P2	0.415	0.350	0.235	832.06	
	P3	0.415	0.335	0.250	832.91	
	Delta	0.01	F-value	2.70	P-value	0.048

Table 3. Simulation results of the mixture EVOP (계속)

Phase	Point	X1	X2	X3	Y-bar	New CP
21 N=1	CP	0.415	0.335	0.250	832.28	
	P1	0.425	0.330	0.245	831.44	
	P2	0.410	0.345	0.245	832.85	
	P3	0.410	0.330	0.260	831.80	
	Delta	0.01	F-value	0.54	P-value	
22 N=2	CP	0.415	0.335	0.250	832.05	
	P1	0.425	0.330	0.245	831.56	
	P2	0.410	0.345	0.245	832.96	
	P3	0.410	0.330	0.260	831.88	
	Delta	0.01	F-value	0.92	P-value	
23 N=3	CP	0.415	0.335	0.250	832.30	
	P1	0.425	0.330	0.245	831.62	
	P2	0.410	0.345	0.245	832.81	
	P3	0.410	0.330	0.260	831.64	
	Delta	0.01	F-value	1.3	P-value	
24 N=4	CP	0.415	0.335	0.250	832.23	
	P1	0.425	0.330	0.245	831.76	
	P2	0.410	0.345	0.245	832.91	
	P3	0.410	0.330	0.260	831.57	
	Delta	0.01	F-value	1.78	P-value	
25 N=5	CP	0.415	0.335	0.250	832.06	
	P1	0.425	0.330	0.245	831.85	
	P2	0.410	0.345	0.245	832.97	
	P3	0.410	0.330	0.260	831.70	
	Delta	0.01	F-value	2.07	P-value	
26 N=6	CP	0.415	0.335	0.250	832.09	
	P1	0.425	0.330	0.245	831.74	
	P2	0.410	0.345	0.245	832.90	
	P3	0.410	0.330	0.260	831.68	
	Delta	0.01	F-value	2.33	P-value	
27 N=7	CP	0.415	0.335	0.250	832.14	
	P1	0.425	0.330	0.245	831.81	
	P2	0.410	0.345	0.245	832.85	
	P3	0.410	0.330	0.260	831.76	
	Delta	0.01	F-value	2.17	P-value	
28 N=8	CP	0.415	0.335	0.250	832.08	
	P1	0.425	0.330	0.245	831.81	
	P2	0.410	0.345	0.245	832.66	
	P3	0.410	0.330	0.260	831.79	
	Delta	0.01	F-value	1.63	P-value	
29	CP	0.410	0.345	0.245	832.67	
	P1	0.420	0.340	0.240	831.03	
	P2	0.405	0.355	0.240	831.48	
	P3	0.405	0.340	0.255	832.21	
	Delta	0.01	F-value	0.66	P-value	
30	CP	0.410	0.345	0.245	832.63	
	P1	0.430	0.335	0.235	830.75	
	P2	0.400	0.365	0.235	831.03	
	P3	0.400	0.335	0.265	832.49	
	Delta	0.02	F-value	0.93	P-value	
31	CP	0.4100	0.3450	0.2450	832.69	
	P1	0.4150	0.3425	0.2425	832.38	
	P2	0.4075	0.3500	0.2425	832.12	
	P3	0.4075	0.3425	0.2500	832.96	
	Delta	0.005	F-value	0.18	P-value	

41%, $x_2=34.5%$, $x_3=24.5%$ 이며, 이때의 평균 etch rate는 832.66이다. 다음으로 최적성분조합인 (0.410, 0.345, 0.245)를 중심으로 실험점의 간격을 조정하여 반응값의 변화를 살펴보았으며, 그 결과는 단계 29~단계 31에 나타나 있다. 단계 29~단계 31의 p-value들이 모두 유의수준 0.05보다 높아 실험점들 간에 유의한 차가 없음을 알 수 있으며, 특히 단계 31의 평균 반응값들을 살펴보면 이들 간에 거의 차이가 없음을 알 수 있는데 이것은 이들 범위에서의 반응표면의 형태가 완만함을 의미한다. 단계 31에 나타난 성분조합 외에 (0.405, 0.34, 0.255), (0.415, 0.335, 0.25), (0.42, 0.34, 0.24)에서 평균 반응값이 크게 나타남을 알 수 있는데, 이러한 결과를 요약해 보면 실험의 목표인 etch rate 832 이상을 확보할 수 있는 성분조합의 범위는 다음과 같음을 알 수 있다.

$$\begin{aligned} 0.405 &\leq x_1 \leq 0.420 \\ 0.335 &\leq x_2 \leq 0.345 \\ 0.240 &\leq x_3 \leq 0.255 \end{aligned}$$

4. 제약조건이 있는 경우 실험 절차

혼합물 제품을 생산하는 공정에서 각 성분의 비율과 성분 비율의 전체 합에 있어 제약조건을 가지는 경우가 많다. 성분 x_i 의 하한과 상한을 각각 L_i 와 U_i 라 하면, 이러한 제약조건을 가진 혼합물 실험의 형태는 다음과 같이 일반화할 수 있다(Myers and Montgomery, 1995).

$$\sum_{i=1}^q x_i = x_1 + x_2 + \dots + x_q \leq 1 \quad (7)$$

$$0 \leq L_i \leq x_i \leq U_i \leq 1, \quad i = 1, 2, \dots, q \quad (8)$$

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 제약조건의 타당성을 파악하고 실험점의 좌표를 쉽게 계산하기 위하여 의성분(pseudocomponents)을 이용하는 것이 좋다(Cornell, 2002). 그러나 본 논문의 중심점 기준 혼합물 EVOP는 의성분을 이용한 실험점의 재계산 과정을 거치지 않는다. 단지 생성한 각 실험점이 주어진 제약조건을 위반하는지의 여부만을 검토하고, 실험 가능영역을 벗어날 경우에는 새로운 실험점을 생성하는 과정을 거쳐 EVOP를 진행한다. 어떤 실험점이 실험 가능영역을 벗어날 때, 실험점의 재생성은 중심점을 기준으로 실험 영역을 벗어나는 실험점까지의 거리 Δ 를 축소하는 방법을 이용한다. 예를 들어, 현재의 표준 공정조건이 Figure 8의 (1)에 있는 실험점 CP(x_1, x_2, x_3)이고 이를 중심으로 삼고 실험점 P_1, P_2, P_3 를 생성시켰을 때의 좌표가 다음과 같다고 가정하자.

$$P_1=(x_1 + \Delta, x_2 - \Delta/2, x_3 - \Delta/2)$$

$$P_2=(x_1 - \Delta/2, x_2 + \Delta, x_3 - \Delta/2)$$

$$P_3=(x_1 - \Delta/2, x_2 - \Delta/2, x_3 + \Delta)$$

여기서, $\Delta < 1$, $\sum x_i \leq 1$

실험점 P_2 가 실험 가능영역을 벗어나 있으므로 중심점을 기준으로 X_2 축 방향으로 $\Delta/2$ 만큼 진행시켜 <Figure 8>의 (2)와 같이 다음의 좌표를 갖는 실험점 P_2' 을 새롭게 생성할 수 있다.

$$P_2' = (x_1 - \Delta/4, x_2 + \Delta/2, x_3 - \Delta/4)$$

만일 P_2' 가 여전히 실험 가능영역을 벗어나면 X_2 축 방향으로 $(\Delta/2)/2 = \Delta/4$ 만큼 진행시킨 실험점을 이용한다.

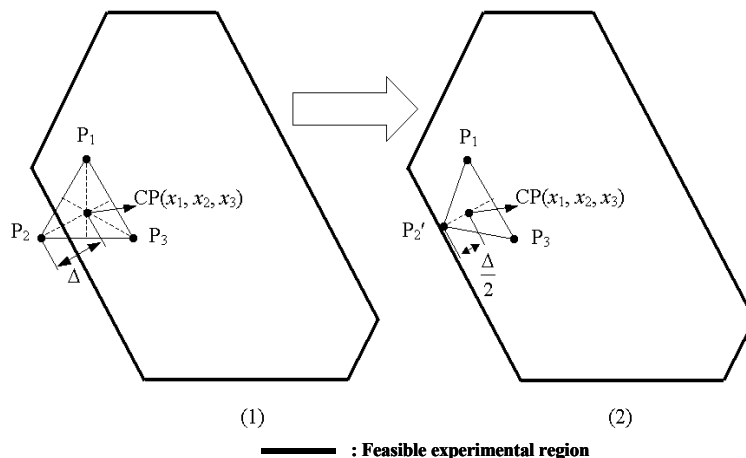


Figure 8. Generation of a new design point when a constraint is violated.

이런 식으로 새로 생성된 실험점이 실험 가능 영역에 들어오도록 한다.

5. 결 론

본 논문에서는 혼합물 생산공정에 적용하기 위한 혼합물 진화적 조업법(mixture EVOP) 절차를 제시하였다. 혼합물 EVOP를 진행하기 위한 방법으로 중심점 기준 혼합물 EVOP(mixture EVOP with centroid)의 절차를 제시하고, 예제를 통하여 시뮬레이션 결과를 보여 주었다. 그리고 실험 영역에 제약이 있고 어떤 실험점이 제약조건을 위반할 경우에 혼합물 EVOP를 진행하는 도중에 실험 영역을 축소하여 실험을 진행할 수 있는 방법도 제시하였다. 일반적인 혼합물 실험이 실험점의 선정과 혼합모형의 도출을 위해 복잡한 계산 과정을 거치는 것과 대조적으로 혼합물 EVOP는 실험점의 생성이나 계산과정이 복잡하지 않아서 공정 운영자가 쉽게 이용할 수 있다. 또한 중심점 기준 혼합물 EVOP의 단계(phase)당 실험점의 수가 (성분의 수+1)개이므로 성분의 수가 증가하더라도 실험점의 수가 크게 증가하지 않는다. 따라서 공정운영자가 실험을 진행하기에 큰 부담이 없다. 그러므로 본 연구의 결과는 대량 혼합물 생

산공정에서 성분변수의 최적조건을 탐색하거나 알려지지 않은 어떤 요인 때문에 최적 공정조건이 변화하는 제조환경에 적극적으로 대처하고자 할 경우에 유용하리라 생각된다. 본 연구의 한계점은 혼합물 생산공정의 성분변수만을 대상으로 한 진화적 조업법 절차를 제공한다는 것이다. 혼합물 생산공정에서 성분변수 외에 공정변수(process variable)도 함께 고려한 연구가 추후 필요하다고 본다.

참고문헌

- Box, G. E. P. (1957), Evolutionary Operation: A Method for Increasing Industrial Productivity, *Applied Statistics*, **6**, 81-101.
- 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 Edition*, John Wiley & Sons, NY.
- Myers, R. H. and Montgomery, D. C.(1995), *Response Surface Methodology, Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, John Wiley & Sons, NY.
- Scheffe, H. (1958), Experiments with Mixtures, *Journal of the Royal Statistical Society, B*, **20**, 344-366.