Journal of the
Military Operations Research
Society of Korea, Vol. 7, No. 1
June, 1981

多目的 反應函數들의 同時 最適化手法
(Simultaneous Optimization Techniques for Multi-purpose Response Functions)

朴 聖 炫 *

ABSTRACT

In many response surface optimization problems for industrial processes, there are more than two responses of interest, and we want to find the optimal levels of the factors that influence the responses. This paper is to propose how to set up the desirability functions to find the optimum for a given set of data, and to propose how to analyse the data and the desirability functions to determine an optimal operating condition for the factors. To implement the proposed method in practice, a FORTRAN computer program was written and explained. Finally, an industrial example is illustrated to explain the proposed technique and the source list of the computer program is attached for the users。

I. 序 論

여러개의 독립변수가 복합적인 작용을 하여 어떤 反應量을 생성해 낼 때에 독립변수들의 변화에 따라서 발생되는 반응량을 실험을 통하여 데이터(data)의 형태로서 얻고, 이 데이터를 분석하여 독립변수들과 반응량간의 함수관계를 규명하는 분석방법이 최근에 유용하게 活用되고 있다. 이러한 統計的方法을 反應表面分析(response surface analysis)이라고 흔히 부른다. 여기서 독립변수들(independent variables)은 반응에 영향을 주는 여러가지 要因(factor)들을 말하며 반응을 설명하는 변수라는 의미에서 說明變數(explanatory variables)라고도 한다. 일반적으로 이 독립변수들은 실험하는 사람에 의하여 임의로

* 서울大學校 自然大學

조절될 수 있는 것들이다. 예를들면 어떤 화학 반응에 있어서 그 반응량이 온도, 압력 및 시간의 변화에 따라서 달라진다고 하자. 그러면 여기에서는 온도, 압력 및 시간이 독립변수가 되고 이들의 변화에 따라서 영향을 받는 반응량을 종속변수(dependent variable) 또는 반응변수(response variable)라고 한다.

실제에 있어서 관심있는 반응변수의 수가 두개 이상인 경우가 많다. 예를들어 나일론실을 만드는 공정에서 이 나일론실의 強度가 관심있는 하나의 반응이라면 伸度나 染色度등도 또한 관심을 가져야 하는 반응이다. 반응변수가 하나뿐인 경우에 독립변수들의 어떤 조건에서 반응변수의 값인 반응량이 最適이 될 것인가에 대해서는 많은 연구가 이루어 졌으나, 반응변수가 여러개인 경우에 독립변수들의 最適條件을 찾는 方法은 硏究가 많이 이루어지지 않았다. 여기서 유의할 사항은 k개의 반응량이 있을때 각 반응량을 最適化시키는 독립변수들의 最適條件들이 모두 다를 수 있으며, 모든 반응량들을 만족시킬 수 있는 하나의 最適條件을 찾는 것은 그렇게 간단한 문제가 아니다.

k개의 반응변수로 인하여 k개의 目的이 있다고 하고, 데이터로부터 각 반응변수에 대한 반응함수(response function)를 추정하였다고 하자. 그러면 우리는 k개의 반응함수들로부터 k개의 目的을 만족시키는 독립변수들의 最適條件을 찾는 것이 문제이다. 이와같은 最適化問題는 최근에 활발히 연구되고 있으며 특히 Derringer & Suich(1), Harrington(2), Hartmann & Beaumont(3), Heller & Staats(4), Myers & Carter(5), Nicholson & Pullen(6) 등이 괄목한 기여를 했으며 저자도 이 방면에 관심을 갖고 몇편의 논문(7,8,9)을 발표한 바 있다.

이 논문에서는 여러개의 반응함수가 있는 多目的 반응관계가 있을 때 독립변수들의 最適條件을 찾는 方法을 제시하고 이를 간편히 실무에 응용할 수 있도록 FORTRAN 언어로 전산화시킨 프로그램을 소개하려고 한다.

Ⅱ. 模型設定과 接近方法

N개의 독립변수($x_1, x_2, \cdots, x_N$)의 변화에 따라서 영향을 받는 M개의 종속변수($\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_M$)가 있고 그들간의 함수관계

$$\eta_i = f_i\,(x_1, x_2, \cdots, x_N),\ i=1,2,\cdots,M \tag{1}$$

를 실험데이터로 부터 알아내기를 실험자가 원하고 있다 하자. 실제로 이 함수 f_i들은 매우 복잡한 형태를 가지고 있을지 모르며, 데이터로부터 추정하여 내기가 매우 어려울지도 모른다. 그러나 실험자가 흥미를 가지고 있는독립변수들의 어떤 좋은 흥미영역(region of interest)에서는 함수관계 (1)을 Taylor 급수로 전개하여 多項回歸模型(polynomial regression model)으로 대략적으로 적합이 가능함이 알려져 있다. 일반적으로 많이 사용되는 多項回歸는 二次 多項回歸模型으로

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^{N} \beta_i x_i + \sum_{i \leq j}^{N} \beta_{ij} x_i x_j \tag{2}$$

과 같이 표현되며 만약 독립변수의 수가 셋(N=3)이면 다음과 같다.

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{33} x_3^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3$$

식(2)를 데이터로부터 추정하기 위하여 i번째 반응변수에 대하여 n_i개의 데이터

$$(y_{ij},\ x_{1j}, x_{2j}, \cdots, x_{Nj}),\ j=1,2,\cdots,n_i$$

가 있다면 식(2)는

$$y_{ij} = \beta_0^{(i)} + \sum_{P=1}^{N} \beta_P^{(i)} x_{Pj} + \sum_{P \leq q}^{N} \beta_{Pq}^{(i)} \cdot x_{Pj} x_{qj} + \epsilon_{ij} \tag{3}$$

단, $i = 1, 2, \cdots, M$
$j = 1, 2, \cdots, n_i$

으로 표현되며, 여기서 y는 η의 측정치로서 오차 ϵ을 수반하며 ϵ는 기대치가 영이고 분산이 σ^2인 정규분포를 한다고 흔히 가정한다.

위의 식(3)을 식(1)의 형태로 표현하면

$$y_{ij} = f_i(x_{1j}, x_{2j}, \cdots, x_{Nj}) + \epsilon_{ij} \tag{4}$$

단, $i = 1, 2, \cdots, M$

$j = 1, 2, \cdots, n_i$

이 된다. 데이터로부터 重回歸分析(multiple regression analysis)에 의하여 i 번째 반응함수 f_i를 구하여 보면 이는 $\hat{y}_i$로 얻어지며 $\hat{y}_i$는

$$\hat{y}_i = b_0^{(i)} + \sum_{P=1}^{N} b_P^{(i)} x_P + \sum_{P \leq q}^{N} b_{Pq}^{(i)} x_P x_q \tag{5}$$

으로 쓰여진다. 여기서 $b_0^{(i)}$, $b_P^{(i)}$, $b_{Pq}^{(i)}$를 구하는 方法은 最小自乘法에 의하여

$$\underline{b}^{(i)} = \begin{pmatrix} b_0^{(i)} \\ b_1^{(i)} \\ \vdots \\ b_N^{(i)} \\ b_{11}^{(i)} \\ \vdots \\ b_{NN}^{(i)} \\ b_{12}^{(i)} \\ \vdots \\ b_{N,N-1}^{(i)} \end{pmatrix} = (X'X)^{-1}X'\underline{y}$$

이며 X와 $\underline{y}$는 각각 다음과 같다.

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{N1} & x_{11}^2 & \cdots & x_{N1}^2 & x_{11}x_{21} & \cdots & x_{N-1,1}\,x_{N1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & & x_{N2} & x_{12}^2 & \cdots & x_{N2}^2 & x_{12}x_{22} & & x_{N-1,2}\,x_{N2} \\ 1 & x_{13} & x_{23} & & x_{N3} & x_{13}^2 & & x_{N3}^2 & x_{13}x_{23} & & x_{N-1,3}\,x_{N3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 1 & x_{1n_i} & x_{2n_i} & & x_{Nn_i} & x_1^2{}_{n_i} & \cdots & x_N^2{}_{n_i} & x_{1n_i}x_{2n_i} & & x_{N-1,n_i}x_{Nn_i} \end{pmatrix}$$

$$\underline{y} = \begin{pmatrix} y_{i1} \\ y_{i2} \\ y_{i3} \\ \vdots \\ y_{in_i} \end{pmatrix}$$

위와같은 방법으로 M개의 $\hat{y}_i$을 모두 구한 다음 각각의 $\hat{y}_i$을 최대 또는 최소로 하는 $(x_1, x_2, \cdots, x_N)$의 값을 구할 수 있으나 이렇게 하여 얻은 M개의 $(x_1, x_2, \cdots, x_N)$의 최적조건이 모두 상이하게 되는 것이 보통이므로 다음과 같은 방법을 도입하기로 한다. 각각의 $\hat{y}_i$를 $\hat{y}_i$의 값에 따라서 $d_i (0 \leq d_i \leq 1)$로 변형시킨 다음 이 d_i들의 기하평균(geometric mean)과 조화평균(harmonic mean)을 사용하여 목표기대함수(desirability function)를 만든다.

기하평균으로부터 목표기대함수 D_1을

$$D_1 = (d_1 \times d_2 \times \cdots \times d_M)^{\frac{1}{M}} \tag{6}$$

으로 하고 조화평균으로부터

$$D_2 = \frac{M}{\frac{1}{d_1} + \frac{1}{d_2} + \cdots + \frac{1}{d_M}} = \frac{M d_1 \cdot d_2 \cdots\cdots d_M}{\sum_{i=1}^{M} \prod_{j \neq i}^{M} d_i} \tag{7}$$

으로 한다. 여기서 D_1과 D_2는 모두

$$0 \le D_1,\ D_2 \le 1$$

의 값이며 1이 되면 목표가 100% 충족된것이고 0이면 가장 바람직하지 않은 상태이다. 따라서 D_1과 D_2를 가장 크게 하는 (x_1, x_2, …, x_N)의 조건을 찾아야 한다. 여기서 D_1과 D_2를 동시에 둘 다 사용할 必要가 없으며 실험자가 둘 중에 하나만 선택하여 사용하면 좋다.

$\hat{y}_i$에 대응되는 d_i의 선정에 실험자는 주의를 기울여야 한다. $\hat{y}_i$가 바라는 목표에 달성되면 $d_i = 1$로 주고 그렇지 않으면 적절히 $0 < d_i < 1$로 하고, 원하지 않는 값을 가지게 되면 $d_i = 0$로 하여 목표기대함수를 만들어 주어야 한다. d_i를 작성하는 요령은 밑에 다시 설명하기로 하고 여기서 잠간 함수 D_i, $i = 1, 2$, 의 성질을 살펴보자.

① 만약 $d_i = 0$ $i = 1, 2, \cdots, M$, 가 되는 i가 하나라도 存在하면 $D_1 = D_2 = 0$가 된다. 즉 하나의 반응변수 $\hat{y}_i$가 부적당하여 $d_i = 0$ 값을 취하면 $D_1 = 0$, $D_2 = 0$가 되어서 목표기대함수가 가장 바람직하지 않은 값을 취한다. 따라서 이런 경우를 피하는 D_1 또는 D_2의 값을 갖는 독립변수의 값을 찾도록 하고 d_i들이 모두 영이 되지 않는 조건을 유도시킨다.

② d_i들간에 균형이 이루어 지면 이루어질수록 D_1, D_2의 값은 커진다. 즉 M= 3인 경우 $d_1 = d_2 = d_3 = \frac{1}{2}$이 $d_1 = d_2 = 0.9$, $d_3 = 0.1$ 보다 우수하다.

따라서 D_1과 D_2의 목표기대함수가 이상의 성질을 가짐으로 이 함수를 최대가 되게 함으로서 여러 반응변수들간에 가급적이면 균형을 유지하면서 동시에 最適化시킬 수 있는 독립변수들의 조건을 찾을 수 있으리라고 기대하는 것이다. Derringer 와 Suich (1)는 기하평균에 의한 D_1에 대하여 검토하였는데, M의 수가 커지면 기하평균의 값을 계산하는데 무리가 가며 d_i 값의 변화에 너무 예민하게 D_1이 변하므로 실제 응용에 있어서 문제점을 가지고 있는 것으로 판명되고 있다. 이 論文에서 제안된 조화평균에 의한 D_2는 이러한 단점을 보완한 좋은 방법이라고 생각되며, 이 논문에서는 이 두 방법을 比較檢討하고, 두 方法을 모두 전산화하여 실험자가 스스로 選擇하여 사용할 수 있도록 하여 놓았다.

다음으로 d_i를 설정하는 방법을 논의하여 보자.

單側變換 (one-sided transformation)

$\hat{y}_i$의 값이 커질수록 d_i의 값이 커져야 할 경우, 즉 $\hat{y}_i$를 최대로 하여야 할 경우에는 다음과 같이 변환한다. $\hat{y}_i$을 최소로 해야할 경우에는 $(-\hat{y}_i)$을 최대로 하는 경우로 생각하면 될 것이다.

$$d_i = \begin{cases} 0 & \hat{y}_i \le y_{i*} \\ \left(\dfrac{\hat{y}_i - y_{i*}}{y_i^* - y_{i*}}\right)^r & y_{i*} < \hat{y}_i < y_i^* \\ 1 & \hat{y}_i \ge y_i^* \end{cases} \tag{8}$$

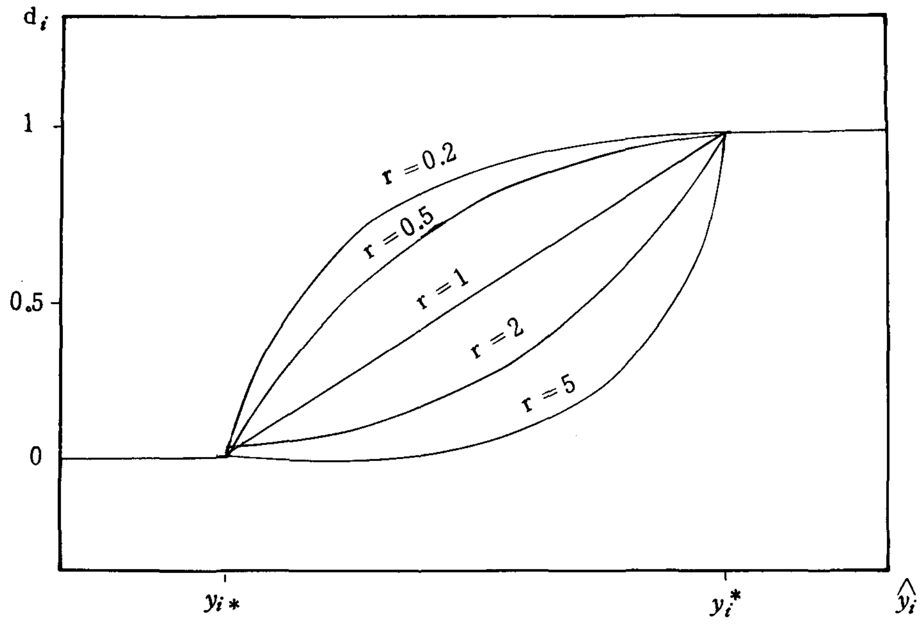
단, y_{i*} : $\hat{y}_i$의 최소 허용치

y_i^* : $\hat{y}_i$가 이 값 이상이면 만족스운 값.

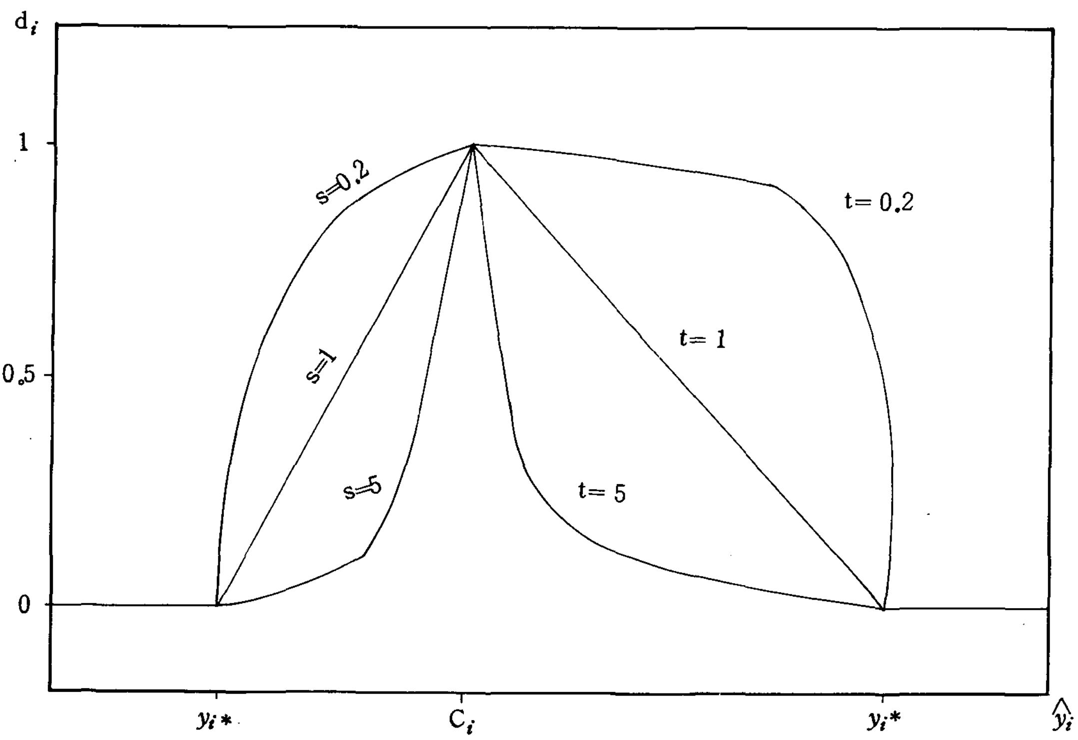
r : 임의의 지수 ($r > 0$)

실험자는 y_{i*}, y_i^*, r의 값을 주어야 하며 $\hat{y}_i$가 y_{i*} 이하이면 바람직하지 못하여 $d_i = 0$, $D_2 = 0$이 되게 한다. $\hat{y}_i$가 y_i^* 이상이면 실험자의 입장에선 충분히 좋은 반응량이며 $d_i = 1$로 하여 준다. r의 값은 임의로 실험자가 선택하여 주되 다음의 성질을 고려하여 결정하여야 한다. r의 의미를 이해하기 위하여 간단한 그래프를 그려보자.

〈그림 1〉에서 r의 값이 크면 $\hat{y}_i$의 값이 y_i^*에 상당히 접근하여야만 목표기대값 d_i가 커진다. 즉, $\hat{y}_i$의 값이 y_i^*에 상당히 가까워야 할 경우에는 r의 값을 크게 하여 주면 좋을 것이다. 반면에 $\hat{y}_i$의 값이 y_{i*}보다 약간 크기만 하면 좋다고 생각되면 r의 값을 작게



〈그림 1〉 r 의 값에 따른 d_i 의 變化



〈그림 2〉 s와 t에 따른 d_i 의 變化

잡아주어도 좋다. 이와같은 성질을 참고하여 실험자가 r 의 값을 적절히 선택하여 주어야 한다.

兩側變換(two-sided transformation)

$\hat{y}_i$ 이 무조건 큰 것이 좋은 것이 아니고, 너무 커도 안되고, 너무 작아도 안되며 가장 좋다고 생각되는 어떤 값 C_i를 가질 경우에는 다음과 같은 변환공식을 사용한다. 여기서 y_i^*는 최대허용치이고 y_{i*}는 최소허용치이며 s와 t는 영보다 큰 임의의 상수이다.

$$d_i = \begin{cases} \left(\dfrac{\hat{y}_i - y_{i*}}{C_i - y_{i*}}\right)^s, & y_{i*} \le \hat{y}_i \le C_i \\ \left(\dfrac{\hat{y}_i - y_i^*}{C_i - y_i^*}\right)^t, & C_i \le \hat{y}_i \le y_i^* \\ 0 & , \hat{y}_i < y_{i*} \text{ 또는 } \hat{y}_i > y_i^* \end{cases} \tag{9}$$

위의 변환방법을 설명하기 위하여 s, t의 변화에 따른 d_i 의 변화를 〈그림 2〉로 살펴보자.

〈그림 2〉에서 보는 바와 같이 $\hat{y}_i$의 값이 C_i 에서 아주 가까워야만 좋을 경우에는 s와 t 의 값을 크게 잡아 주고 그렇지 않아도 좋을 경우에는 s와 t를 작게 하여 준다. 특별한 要求事項이 없을 경우에는 s = t = 1로 하여 주면 좋을 것이다.

Ⅲ. 最適化手法과 그의 電算化

$\hat{y}_i$가 $x_1, x_2, \cdots, x_N$들의 연속함수이고, d_i들은 $\hat{y}_i$의 연속함수이며, D_1과 D_2가 d_i들의 연속함수이므로 결국 D_1과 D_2는 $x_1, x_2, \cdots, x_N$의 연속함수이다. 따라서 우리가 궁극적으로 찾고자 하는 것은 D_1 또는 D_2를 최대로 하는 $x_1, x_2, \cdots, x_N$의 값들이다. D_1과 D_2를 최대로 하는 $x_1, x_2, \cdots, x_N$ 의 값을 찾기 위하여 x_i들의 변화에 따른 D_1, D_2의 등고선(contour)표를 만들어 보면 도움이 될 것이다. 이와같은 작업은 컴퓨터에 의하여 이루어질 수 밖에 없으며, D_1 또는 D_2를 최대로 하는 x_i들의 값을 찾고 필요한 등고선을 그릴 수 있는 컴퓨터 프로그램을 작성하여 부록에 첨부하여 놓았다. 이 프로그램의 내용을 간단히 살펴보면 다음과 같다.

컴퓨터프로그램의 내용

① 프로그램의 구성

프로그램을 간단히 하기 위해 각각의 독립변수들의 값은 〔−1, 1〕의 구간에 있도록 선형변환(linear transformation)시켜 준다. 종속변수와 독립변수의 수는 9이하로 잡아준다. 그리고 $\hat{y}_i$을 구하기 위한 多項回歸模型은 二次(second order)로 취해 준다. 그리고 각 독립변수의 구간 〔−1, 1〕을 NN-1 등분하여 NN개의 점을 크기순으로 번호를 주어 배열 A에 저장한다. 즉 NN=21이면 A(1) = −1, A(2) = −0.9, A(3) = −0.8, …, A(21) = 1이 된다. 이 NN개의 점을 중심으로 프로그램이 짜여진다.

② 入力資料(input data)

첫번 카아드에 종속변수의 수(M), 독립변수의 수(N), NN을 차례로 3, 6, 8-9 열에 펀치한다. 다음 카아드부터 $\hat{y}_i$에 대한 최저계수를 다음과 같이 入力시킨다.

ⓐ $b_0, b_1, \cdots, b_N$을 한 카드에 8열씩의 간격으로 실수(real)형으로 펀치한다.

ⓑ $b_{11}, b_{12}, \cdots, b_{1N}, b_{22}, b_{23}, \cdots, b_{2N}, \cdots, b_{NN}$ 들을 각각 한 카아드에 하나씩 1열부터 실수형으로 펀치한다.

ⓒ y_{i*}, y_i^*, r, t, c_i의 값을 순서대로 11열씩 실수형으로 한 카아드에 펀치한다. 이 때 $\hat{y}_i$을 최대로만 하는 것이 좋을 경우 t의 값을 0으로 놓고 C_i는 비워 둔다.

위의 ⓐ, ⓑ, ⓒ의 入力을 M개의 종속변수에 대하여 차례로 $i=1, 2, \cdots$, M까지 계속한다.

③ 最適 x_i 의 발견과 등고선표의 작성 다음으로 $(x_1, x_2, \cdots, x_N)$의 어떤 값이 D_1또는 D_2를 최대로 하는가를 찾고 이해를 돕기 위한 등고선표를 그린다. 그 내용을 간단히 Flowchart로 그리면 〈그림 3〉과 같다.

④ 出力資料(output data)

다음과 같은 내용이 出力으로 얻어진다.

ⓐ D_1과 D_2에 대한 각각의 $(x_1, x_2, \cdots, x_N)$의 最適點(optimum point)

ⓑ 이 最適點에서의 $\hat{y}_i$ 와 d_i 들의 값

ⓒ D_1과 D_2의 값

ⓓ 두개의 독립변수에 대한 D_1과 D_2의 등고선표 그림. 이 때에 나머지 독립변수들은 最適水準으로 고정시킨다.

Ⅳ. 適用事例

이 例題의 데이터는 국내의 S타이어공업주식회사에서 얻은 것으로 이 회사에서는 현용 1100-20 산업용타이어의 주행성능을 높이기 위한 실험데이터이다. 실내 주행시험결과 타이어의 주행시간이 높지 않는 주요 이유로서 래디알벨트(radial belt)고무의 낮은 modulus와 스틸(steel) 접착력이 떨어지는 것과 타이어의 인장강도, 신도등이 충분치 않은 것으로 나타났다. 이들 物性에 가장 큰 영향을 미치리라고 판단되는 요인은 G300과 V130 이라는 배합약품으로서, 그 배합비율을 x_1, x_2로 잡아주고 위의 物性들을 좋게 하는 x_1과 x_2의 最適配合比率을 찾아주는 것이 목적이다. 따라서 독립변수와 반응변수는 다음과 같다.

독립변수: G300 = x_1

V130 = x_2

반응변수: y_1 = 300% modulus

y_2 = 스틸 접착력(steel adhesiveness)

y_3 = 인장강도(tensile strength)

y_4 = 신도(elongation)

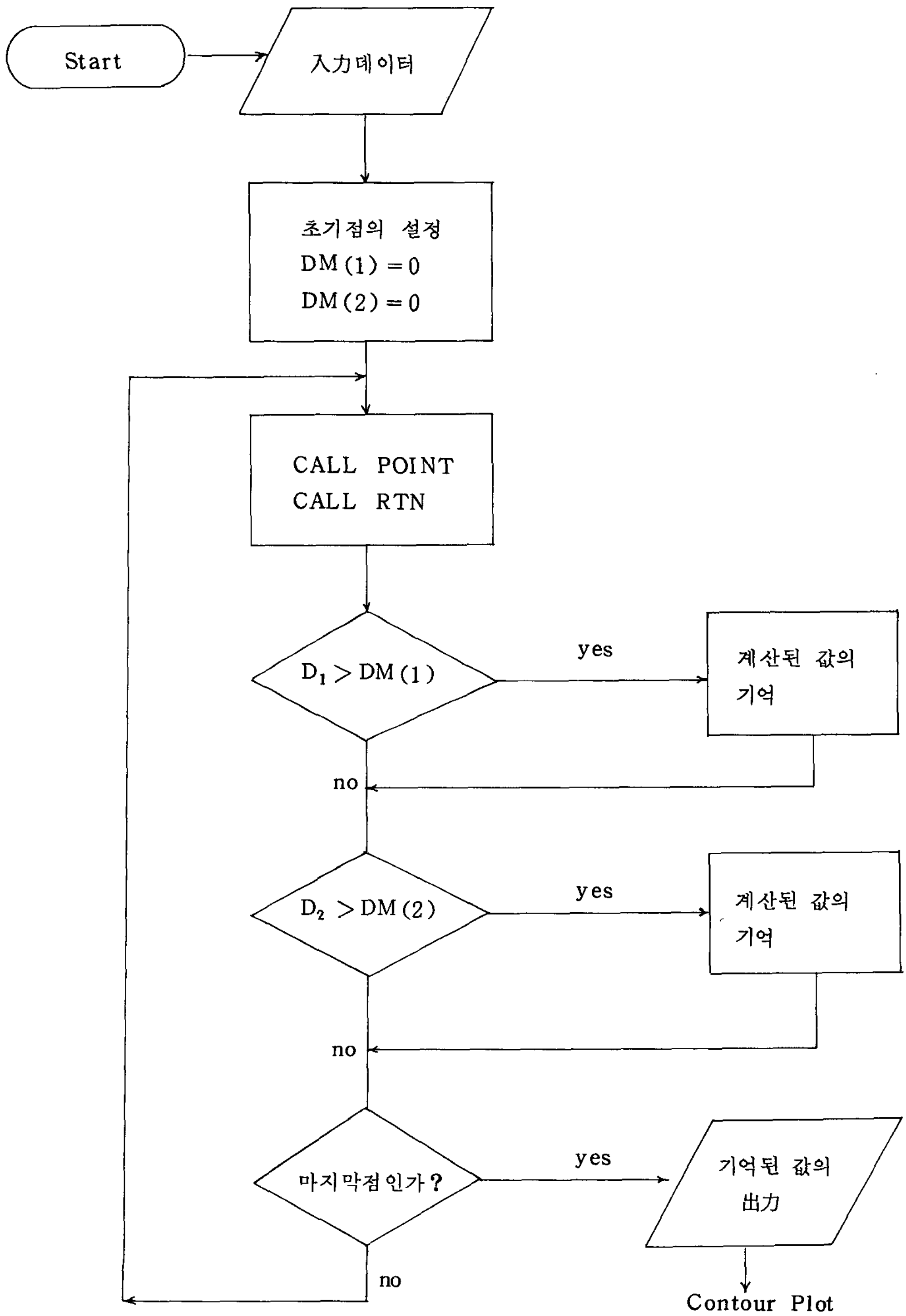
실험계획은 G300의 水準을 현재의 수준 a에서 2PHR을 감소시키고 증가시켜서 (a-2, a, a+2) = (-1, 0, 1)의 세수준으로 잡아주고, V130은 현재의 수준 b에서 1 PHR을 빼주고 더해 주어서 (b-1, b, b+1) = (-1, 0, 1)의 세수준으로 하여 3^2 요인실험(3^2 factorial experiment)으로 9개의 실험조건에서 데이터를 구하였다. 데이터는 표1, 2, 3, 4에 실려 있으며 統計的인 推定의 精度를 높여주기 위하여 3번씩 반복실험하였다.

〈표 1〉 300% modulus(y_1) data

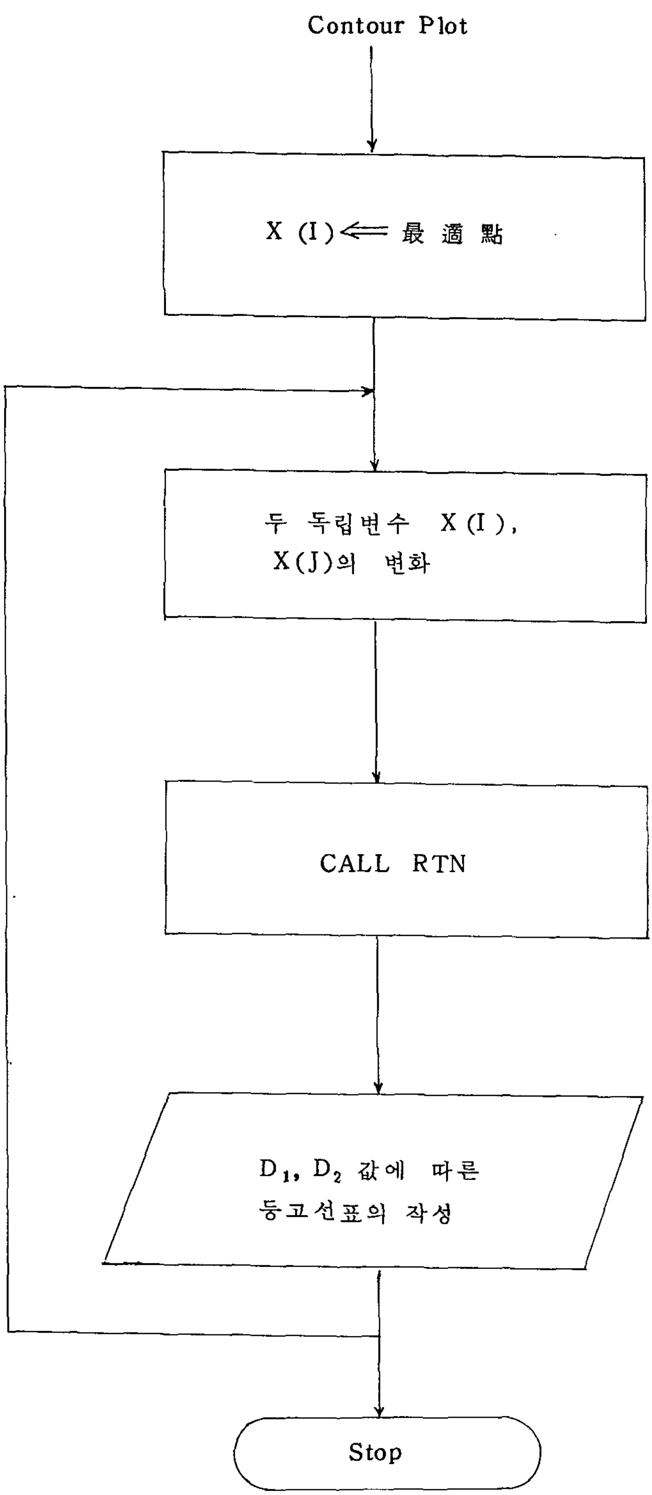
	$x_1=-1$ (a-2)	$x_1=0$ (a)	$x_1=+1$ (a+2)
$x_2=-1$ (b-1)	116	144	124
	118	131	125
	117	143	129
$x_2=0$ (b)	138	136	139
	140	143	146
	131	136	137
$x_2=+1$ (b+1)	139	143	139
	132	148	143
	133	152	152

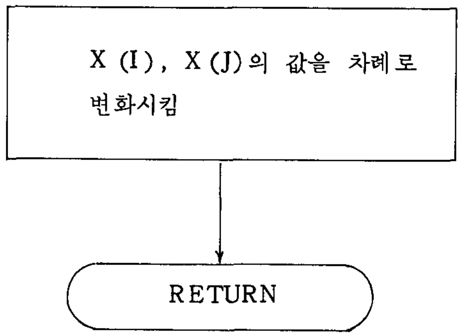
〈표 2〉 스틸접착력(y_2) data

	$x_1=-1$ (a-2)	$x_1=0$ (a)	$x_1=+1$ (a+2)
$x_2=-1$ (b-1)	79	84	83
	79	79	75
	74	73	78
$x_2=0$ (b)	65	76	85
	62	77	72
	67	78	67
$x_2=+1$ (b+1)	66	82	82
	67	80	79
	70	74	78

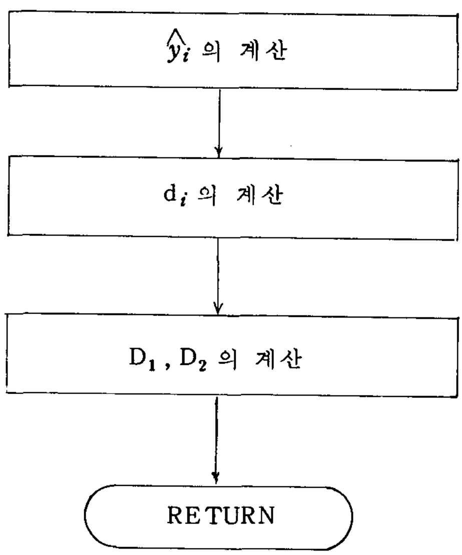


〈그림 3〉 Flowchart


Contour Plot
X (I) ⟸ 最 適 點
두 독립변수 X(I),
X(J)의 변화
CALL RTN
D₁, D₂ 값에 따른
등고선표의 작성
Stop



Subroutine RTN



Subroutine POINT

〈표 3〉 인장강도 (y_3) data

	$x_1=-1$ (a-2)	$x_1=0$ (a)	$x_1=+1$ (a+2)
$x_2=-1$ (b-1)	193	194	201
	187	169	190
	186	182	199
$x_2=0$ (b)	201	198	186
	184	210	185
	190	202	192
$x_2=+1$ (b+1)	202	190	197
	192	197	190
	202	195	191

〈표 4〉 신도(y_4) data

	$x_1=-1$ (a-2)	$x_1=0$ (a)	$x_1=+1$ (a+2)
$x_2=-1$ (b-1)	445	430	415
	440	420	435
	430	435	435
$x_2=0$ (b)	420	425	390
	400	425	400
	430	400	395
$x_2=+1$ (b+1)	400	365	400
	420	340	420
	430	395	355

위의 네개의 반응변수에 대하여 각각 x_1, x_2,에 대한 二次多項回歸模型을 최소자승법에 의하여 적합시키면 다음의 최저방정식을 얻는다. 이 모형들의 적합은 SPSS 라는 통계 Package를 사용하여 얻었다.

$$\hat{y}_1 = 144.148 + 7.444\,x_1 + 3.889\,x_2 - 3.555\,x_1^2 - 8.555\,x_2^2 - 0.250\,x_1 x_2$$

$$\hat{y}_2 = 75.000 - 1.444\,x_1 + 3.889\,x_2 + 4.667\,x_1^2 - 4.333\,x_2^2 - 2.667\,x_1 x_2$$

$$\hat{y}_3 = 194.444 + 3.056\,x_1 - 0.333\,x_2 - 2.166\,x_1^2 - 0.333\,x_2^2 - 3.500\,x_1 x_2$$

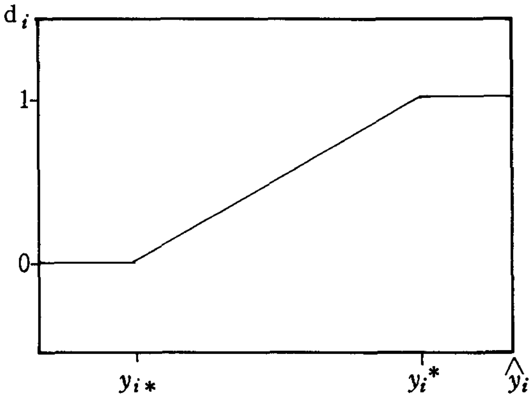
$$\hat{y}_4 = 402.406 - 20.000\,x_1 - 9.444\,x_2 + 2.223\,x_1^2 + 10.556\,x_2^2 - 3.750\,x_1 x_2$$

따라서 컴퓨터 入力으로 사용되는 최저계수들을 정리하여 보면 〈표5〉을 구할 수 있다.

〈표 5〉 2차다항회귀식의 회귀계수

	b_0	b_1	b_2	b_{11}	b_{12}	b_{22}
y_1	144.148	7.444	3.889	−3.555	−0.250	−8.555
y_2	75.000	−1.444	3.889	4.667	−2.667	−4.333
y_3	194.444	3.056	−0.333	−2.166	−3.500	−0.333
y_4	402.406	−20.000	−9.444	2.223	−3.750	10.556

실험자가 원하는 것은 y_1과 y_2는 단측변환으로 최대화시키는 것이며 〈그림 4〉와 같이 d_i함수를 만들어 주었다.

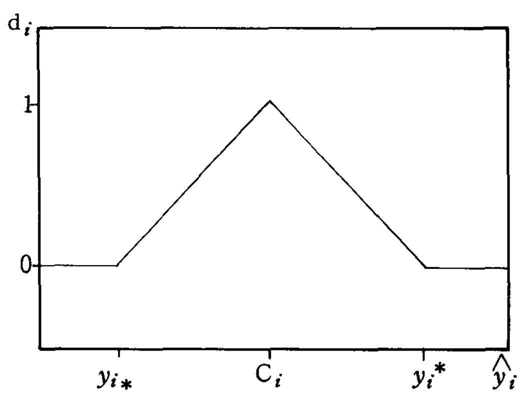


	y_{i*}	y_i^*
y_1 :	138	150
y_2 :	68	76

〈그림 4〉 y_1과 y_2의 **單側變換**

즉, 식(8)의 단측변환에서 $r=1$로 하여 주고 $y_{1*}=138$, $y_{2*}=68$, $y_1^*=150$, $y_2^*=76$으로 각각 잡아 주었다.

y_3와 y_4는 양측변환으로 식(9)에서 $s=t=1$로 하여 주고 y_{i*}, y_i^*, C_i, $i=1, 2$를 각각 〈그림 5〉에서와 같이 취해 주었다.



	y_{i*}	C_i	y_i^*
y_3 :	190	200	205
y_4 :	400	420	430

〈그림 5〉 y_3와 y_4의 **兩側變換**

부록에 실려있는 컴퓨터프로그램을 사용하여 D_1과 D_2를 각각 최대로 하는 (x_1, x_2)의 最適配合比率을 찾아보면 다음의 결과가 얻어진다.

D_1에 대하여

最 適 條 件 : $(x_1, x_2) = (-0.250, 0.100)$

$\hat{y}_i$와 d_i의 값 :

$\hat{y}_1=142.37$	$d_1=0.3645$
$\hat{y}_2=76.06$	$d_2=1.0000$
$\hat{y}_3=193.60$	$d_3=0.3595$
$\hat{y}_4=406.80$	$d_4=0.3400$

D_1 의 값 : $D_1=0.4594$

D_2에 대하여

最 適 條 件 : $(x_1, x_2) = (-0.250, 0.050)$

$\hat{y}_i$과 d_i의 값 :

$\hat{y}_1=142.24$	$d_1=0.3534$
$\hat{y}_2=75.87$	$d_2=0.9837$
$\hat{y}_3=193.57$	$d_3=0.3571$
$\hat{y}_4=407.15$	$d_4=0.3573$

x_1과 x_2의 변화에 따라서 D_1과 D_2의 변화를 살펴보기 위하여 등고선표를 그려보면 〈그림 6〉, 〈그림 7〉과 같다. Plotter 가 있으면 좀더 보기 좋은 등고선을 그릴 수 있으나 Plotter 가 준비되어 있지 않은 컴퓨터실에서는 이와같은 그림을 그려 대략적으로 D_1과 D_2의 변화추이를 살펴 볼 수 있다.

*표시는 최적점을 나타내고 D_i의 값이 0에서 0.1 사이이면 1로, 0.1에서 0.2 사이이면 2로, …, 그리고 0.8에서 0.9 사이이면 9로, 마지막으로 0.9에서 1사이이면 十로 표시하기로 하였다.

*	최 적 점
1	$0 < D \leq 0.1$
2	$0.1 < D \leq 0.2$
⋮	⋮
9	$0.8 < D \leq 0.9$
十	$0.9 < D < 1$

** CCNTOLR PLCTS CF D1 **

* CCNIOUR PLOIS OF D1 FCR X1 AND X2

```
  X1
   1.CC I   00034300000000000000000000000000000000000
   C.95 I   00034300000000000000000000000000000000000
   C.90 I   00034430000000000000000000000000000000000
   C.85 I   00034430000000000000000000000000000000000
   C.8C I   00034443000000000000000000000000000000000
   C.75 I   00034444000000000000000000000000000000000
   C.7C I   00034444300000000000000000000000000000000
   C.65 I   00024444420000000000000000000000000000000
   0.60 I   00003444430000000000000000000000000000000
   C.55 I   00003444443000000000000000000000000000000
   C.5C I   00003444444300000000000000000000000000000
   C.45 I   00003444444440000000000000000000000000000
   C.40 I   00002344444430000000000000000000000000000
   C.35 I   00000344444444300000000000000000000000000
   C.30 I   00000344444444300000000000000000000000000
   C.25 I   00000234444444442000000000000000000000000
   C.20 I   00000034444544443000000000000000000000000
   C.15 I   00000034444555444300000000000000000000001
   C. 0 I   00000003444555554444300000000000000000233
   C.05 I   00000034445555555444433000000000000233333
   C.0  I   00000001344455555555444430030030003044444
  -C.05 I   00000003444555555555544444444444444444443
  -C.10 I   00000000344455555555555544444444444444443
  -C.15 I   00000000034445555555555555555555554444443
  -0.20 I   00000000003444555555555555555555555444430
   C.25 I   00000000000344455555555*55555555555554442
   C.3C I   00000000000234445555555555555555555544300
  -0.35 I   00000000000033444555555555555555555443000
  -0.40 I   00000000000003344455555555555555554430000
  -C.45 I   00000000000000344445555555555554444300000
  -C.50 I   00000000000000003444444455554444443000000
  -0.55 I   00000000000000000334444444444443000000000
  -0.60 I   00000000000000000033444444443120000000000
  -0.65 I   00000000000000000000233333200000000000000
  -0.70 I   00000000000000000000000000000000000000000
   C.75 I   00000000000000000000000000000000000000000
  -C.80 I   00000000000000000000000000000000000000000
  -C.85 I   00000000000000000000000000000000000000000
  -C.90 I   00000000000000000000000000000000000000000
  -C.95 I   00000000000000000000000000000000000000000
  -1.00 I   00000000000000000000000000000000000000000
            ----+-------------------+-------------------+----
              -1.00                0.00                1.00   X
```

<그림 6 > D_1 의 등고선표

** CONTOUR PLOTS OF D2 **

```
* CONTOUR PLOTS OF D2 FOR X  AND X1

 X1
   1.00 I    0002210000000000000000000000000000000000
   0.95 I    0002320000000000000000000000000000000000
   0.90 I    0002331000000000000000000000000000000000
   0.85 I    0002332000000000000000000000000000000000
   0.80 I    0002333100000000000000000000000000000000
   0.75 I    0002333200000000000000000000000000000000
   0.70 I    0001333310000000000000000000000000000000
   0.65 I    000 33432 000000000000000000000000000000
   0.60 I    0000234432000000000000000000000000000000
   0.55 I    0000234433100000000000000000000000000000
   0.50 I    0000234443210000000000000000000000000000
   0.45 I    0000 34444320000000000000000000000000000
   0.40 I    0000123444432000000000000000000000000000
   0.35 I    0000023444433200000000000000000000000000
   0.30 I    0000023444443320000000000000000000000000
   0.25 I    0000013344444332100000000000000000000000
   0.20 I    0000002344444433221000000000000000000000
   0. 5 I    000000 3444444432 000000000000000000000
   0.10 I    0000000234444444443311 0000000000000001 2
   0.05 I    000000023444454444333 32  00000000000001 2233
   0.0  I    0000000123444555444433322211111111222333333
  -0.05 I    00000000133445555544444333333333333133333
   0.10 I    0000000002344455555444444433333444444332
  -0.15 I    00000000012344455555554444444444444444433
  -0.20 I    000000000023344455555555544444444444443320
  -0.25 I    0000000000023344455555*5555555444444444431 0
  -0.30 I    000000000000 2234444555555555554444443200
  -0.35 I    0000000000000 22344444455555554444444432 000
  -0.40 I    00000000000000123344444444444444444433 0000
   0.45 I    00000000000000012333444444444444444433210000 0
  -0.50 I    0000000000000000002233334444444441 332 000000
   0.55 I    00000000000000000012233333333332210000000 0
  -0.60 I    0000000000000000000001222222222211000000000
   0.65 I    0000000000000000000000001111111000000000000
  -0.70 I    00000000000000000000000000000000000000000
  -0.75 I    00000000000000000000000000000000000000000
  -0.80 I    00000000000000000000000000000000000000000
   0.85 I    00000000000000000000000000000000000000000
   0.90 I    00000000000000000000000000000000000000000
   0.95 I    00000000000000000000000000000000000000000
   1.00 I    00000000000000000000000000000000000000000
             ----+---------------------+---------------------+-----
               -1.00                  0.00                  1.00    X2
```

〈그림 7 〉 D_2 의 등고선표

구하여진 최적조건은 D_1 에 대해서는 (x_1, x_2) = (−0.250, 0.100)이고 D_2에 대해서는 (x_1, x_2) = (−0.250, 0.050)으로 밝혀졌는데 x_1 의 좌표는 D_1과 D_2에 대해서 −0.250으로 밝혀지고 x_2의 좌표는 각각 0.100과 0.050으로 큰 차이를 주고 있지 않다. 실제로 x_1 에 대해서는 (−1, 0, 1) = (a−2, a, a+2)로 변환시켜 주었으므로 −0.250은 a − $\frac{1}{8}$에 해당하며, x_2 에 대해서는 (−1, 0, 1) = (b−1, b, b+1)로 변환시켜 주었으므로 0.100은 b + 0.1에 해당한다. 따라서 현재의 공정조건 (a, b)보다는 (a − $\frac{1}{8}$, b + 0.1)이 좀더 만족스러운 조건을 제시할 수 있으리라는 결론을 얻은 것이다. 이 새로운 조건하에서 y_1, y_2, y_3, y_4 의 예측치는 각각 142.37, 76.06, 193.60, 406.80으로 계산되었다.

V. 結 論

이 論文은 관심있는 反應이 여러개 있고, 따라서 多目的인 工程最適化實驗에 있어서 實驗者가 원하는 독립변수(반응변수)들의 最適條件을 統計的인 模型設定을 통하여 찾는方法을 제시하여 주고 있다. 硏究室의 實驗者나 現場의 技術者들이 깊은 理論的인 배경이 없이도 使用하기 편리하도록 FORTRAN Program을 作成하여 이를 부록에 실어 놓았다. 현장의 기술자나 연구실의 硏究者들이 하나의 간단한 工程最適化手法으로 많이 活用하여 주기를 기대하며 여기에 실린 예제가 많은 參考가 되기를 기대한다.

參 考 文 獻

1. Derringer, G. and Suich, R., "Simultaneous Optimization of Several Response Variables," Journal of Quality Technology, Vol. 12, No. 4, , PP. 214-219, 1980.
2. Harrington, E.C. Jr., "The Desirability Function," Industrial Quality Control, Vol. 21, No. 10, PP. 494-498, 1965.
3. Hartmann, N.E. and Beaumont, R.A., "Optimum Compounding by Computer," Journal of the Institute of the Rubber Industry, Vol. 2, No. 6, PP. 272-275, 1968.
4. Heller, N.B. and Staats, G. E., "Response Surface Optimization when Experimental Factors are Subject to Costs and Constraints," Technometrics, Vol. 15, PP. 113-123, 1973.
5. Myers, R.H. and Carter, W. H., "Response Surface Techniques for Dual Response Systems," Technometrics, Vol. 15, PP. 301-318, 1973.
6. Nicholson, T.A.J. and Pullen, R.D., "Statistical and Optimization Techniques in the Design of Rubber Compounds," Computer Aided Design, Vol. 1, PP. 39-47, 1969.
7. PARK, S.H., "An Application of Response Surface Experiments to Control the Quality of Industrial Products: Model Fitting and Prediction of Responses," Proceedings of International Conference on Quality Control, Tokyo, 1978.
8. 박성현, "統計的 多變量反應表面分析에 의한 工程最適化手法과 그의 電算化", 한국화학공학회지, Vol. 18, pp. 503-512, 1980.
9. PARK, S.H., "Empirical Process Optimization through Response Surface Experiments and Model Building," 한국품질관리학회지, Vol. 8, pp. 3-7, 1980.

〈부록〉 最適條件을 찾는 컴퓨터 Program

```
C     THIS PROGRAM IS FOR SIMULTANEOUS OPTIMIZATION OF SEVERAL RESPONSE
C     VARIABLES.
C
C**** READ THE GIVEN DATA.
      COMMON BO(9),B1(9,9),B(9,9,9),YM(9),YYM(9),R(9),T(9),C(9),M,N,NN
      COMMON X(9),D(9),DA(2),Y(9),DD2(9)
      DIMENSION A(41),XX(2,9),AP(41,41),DM(2),DD(9),DDD(9),YY(9),
     *YYY(9),CHAR(12)
      INTEGER P(9),Q,E(9)
      DATA AP/1681*' '/,E/1,2,3,4,5,6,7,8,9/
      DATA CHAR/'1','2','3','4','5','6','7','8','9','+','*','0'/
      READ(1,100) M,N,NN
      DO 1 K=1,M
      READ(1,200) BO(K),(B1(K,I),I=1,N)
      DO 2 I=1,N
      DO 2 J=I,N
    2 READ(1,210) B(K,I,J)
    1 READ(1,300,END=999) YM(K),YYM(K),R(K),T(K),C(K)
      DO 3 I=1,NN
    3 A(I)=-1.+2.*(I-1.)/(NN-1.)
C**** CALCULATE D1 AND D2 AT EACH POINT.
      DO 4 I=1,N
    4 P(I)=1
      DM(1)=0
      DM(2)=0
      Q=N
   10 CONTINUE
    8 IF(P(Q).GT.NN) GO TO 20
      Q=N
      CALL POINT(N,A,P,X)
      CALL RTN
```

```
      IF(DM(1).LT.DA(1)) GC TC 11
      GC TC 12
   12 CCNTINUE
      IF(DM(2).LT.DA(2)) GC TC 13
      GC TC  4
   11 DM(1)=DA(1)
      DC 22 I=1,N
   22 XX(1,I)=X(I)
      DC 33 K= ,M
      DDD(K)=D(K)
   33 YYY(K)=Y(K)
      GC TC 12
    3 DM(2)=DA(2)
      DC 23 I=1,N
   23 XX(2,I)=X(I)
      DC 34 K=1,M
      DD(K)=D(K)
   34 YY(K)=Y(K)
   14 CCNTINUE
      P(Q)=P(Q)+1
      GC TC 10
   20 CCNTINUE
      IF(Q.EQ.1) GC TC 30
      P(Q)=
      Q=Q-1
      P(Q)=P(Q)+1
      IF(P(Q).GT.NN) GC TC  C
      GC TC  C
   30 CCNTINUE
      WRITE(3,  0)
      WRITE(3,320) (E(I),I=1,M)
      IN=C
      WRITE(3,330) IN,(BC(K),K=1,M)
      DC 66 IN= ,N
```

```
   66 WRITE(3,??0) IN,(B'(K,IN),K=1,M)
      DO 77 IN=1,N
      DO 77 IM=IN,N
   77 WRITE(3,?40) IN,IM,(B(K,IN,IM),K=1,M)
      WRITE(3,?00) DM(1)
      DO 7 I=1,N
    7 WRITE(3,500) I,XX(1,I)
      DO 8 K=1,M
    8 WRITE(3,600) K,DDD(K),K,YYY(K)
      WRITE(3,700) DM(2)
      DO 9 I=1,N
    9 WRITE(3,500) I,XX(2,I)
      DO 1000 K=1,M
 1000 WRITE(3,600) K,DD(K),K,YY(K)
C**** CONTOUR PLOTS
      WRITE(3,740)
      DO 2000 K=1,2
      WRITE(3,750) K
      N1=N 1
      DO 2000 I=1,N
      I1=I+1
      DO 2000 J=I1,N
      WRITE(3,900) K,I,J,I
      DO 3000 JI=1,N
 3000 X(JI)=XX(K,JI)
      DO 4000 KK=1,NN
      II=NN KK+1
      X(I)=A(II)
      L?=II
      DO 5000 L=1,NN
      X(J)=A(L)
      L2=L
      CALL RTN
      ZD=DA(K)
```

```
      ZE=KI/10.
      IF((ZA.LE.ZD).AND.(ZD.LT.ZB)) AP(L1,L2)=CHAR(KI)
   55 CONTINUE
      IF(CA(K).GE.DM(K)) AP(L1,L2)=CHAR( )
      IF(ZD.EQ.0.) AP(L ,L2)=CHAR( 2)
 5000 CONTINUE
      PPI=-A(KK)
      WRITE(3,8 0) PPI,(AP(II,JJ),JJ=1,NN)
 4000 CONTINUE
      WRITE(3,910) J
 2000 CONTINUE
  100 FORMAT(3(1X,I2))
  200 FORMAT( CF8. )
  210 FORMAT(F7.3)
  300 FORMAT(5F . )
    0 FORMAT( H // CX,'*****',59X,'*****'/ 0X,'*****  SIMULTANEOUS',T3 ,
     *'OPTIMIZATION OF SEVERAL RESPONSE VARIABLES  *****'/ 0X,'*****',
     *59X,'*****'////)
  320 FORMAT(5X,'TABLE 1. REGRESSION COEFFICIENTS'/3X,'Y',9(18,3X)/)
  330 FORMAT(6X,'B',I1,1X,9F11.3/)
  340 FORMAT(6X,'B',2I1,9F11.3/)
  400 FORMAT(///5X,'TABLE2. OPTIMUM COMPOUND AND PREDICTED PROPERTIES'//
     */5X,'MAXIMUM COMPOSITE DESIRABILITY,D  =',F 0.8)
  500 FORMAT(/ 0X,'X',I ,' =',F6.3)
  600 FORMAT(/10X,'D',I1,' =',F10.8,5X,'Y',I1,' =',F15.3)
  700 FORMAT(///5X,'MAXIMUM COMPOSITE DESIRABILITY, D2 =',F10.3)
  740 FORMAT(1H1///50X,'**** CONTOUR PLOTS ****'//60X,'*** MEAN OF *,1,2
     *,...9,+,***'/60X,'* REPRESENTS THE POINT OF MAXIMUM D-VALUE'/60X,'
     *  REPRESENTS THE POINTS WHERE D HAS'/60X,'THE VALUE BETWEEN 0.0 AN
     *D 0. '/60X,'2 REPRESENTS THE POINTS WHERE D HAS'/60X,'THE VALUE BE
     *TWEEN 0.1 AND 0.2'/60X,'AND SO ON'/)
  750 FORMAT(//35X,'** CONTOUR PLOTS OF D',I1,' **'//)
  900 FORMAT(40X,'* CONTOUR PLOTS OF D',I1,' FOR X',I1,' AND X',I1//40X,
     *'X',I )
```

```
  810 FCRMAT(41X,F5.2,1X,'I',3X,41A1)
  9_0 FCRMAT(47X,50('-')/T97,'X',I1)
  999 STCP
      END
```

```
      SUBRCUTINE POINT(N,A,P,X)
      INTEGER P(9)
      DIMENSICN A(41), X(9)
      DC 100 I=1,N
  100 X(I)=A(P(I))
      RETURN
      END
```

```
      SUBRCUTINE RTN
      CCMMON B0(9),B1(9,9),B(9,9,9),YM(9),YYM(9),R(9),T(9),C(9),M,N,NN
      CCMMCN X(9),D(9),DA(2),Y(9),DD2(9)
      DC 50 K=1,M
      Y(K)=B0(K)
      DC 40 I=1,N
      Y(K)=Y(K)+B1(K,I)*X(I)
      DC 40 J=I,N
      Y(K)=Y(K)+B(K,I,J)*X(I)*X(J)
   40 CCNTINUE
      IF(T(K).NE.0.) GC TC 60
      IF(Y(K).LE.YM(K)) D(K)=C.
      IF(Y(K).LT.YYM(K).AND.Y(K).GT.YM(K)) D(K)=((Y(K)-YM(K))/(YYM(K)-
     *YM(K)))**R(K)
      IF(Y(K).GE.YYM(K)) D(K)=_.
      GC TC 50
   60 CCNTINUE
```

```
      IF(Y(K).GE.YM(K).AND.Y(K).LE.C(K))
     * D(K)=((Y(K)-YM(K))/(C(K)-YM(K)))**R(K)
      IF(Y(K).GT.C(K).AND.Y(K).LE.YYM(K))
     * D(K)=((Y(K)-YYM(K))/(C(K)-YYM(K)))**T(K)
      IF(Y(K).LT.YM(K).OR.Y(K).GT.YYM(K)) D(K)=0
      GO TO 50
   50 CONTINUE
      DD1=1.
      DO 70 K=1,M
   70 DD1=DD1*D(K)
      DA( )=DD **( ./M)
      IF (DD1.NE.O.) GO TO 80
      DA(2)=0.
      GO TO 9
   80 AD2=O.
      DO 90 K= ,M
      DD2(K)=DD1/D(K)
   90 AD2=AD2+DD2(K)
      DA(2)=M*DD1/AD2
   91 RETURN
      END
```