

비선형 확률계수모형을 고려한 최적 열화시험 설계

김성준 · 배석주

한양대학교 산업공학과
서울 성동구 행당동 17 한양대학교

Optimal Degradation Experimental Design in Non-Linear Random Coefficients Models

Seong-joon Kim · Suk Joo Bae

Hanyang University Department of Industrial Engineering
Hanyang Univ., 17 haengdang-dong seongdong-gu, SEOUL, KOREA.

Abstract

In this paper we propose a method for designing optimum degradation test based on nonlinear random-coefficients models. We use the approximated expression of the Fisher information matrix for nonlinear random-coefficients models. We apply the simplex algorithm to the inverse of the determinant of Fisher information matrix to satisfy the D-optimal criterion. By comparison of the results from PDP degradation data, we suggest a general guideline to obtain optimum experimental design for determining inspection intervals and number of samples in degradation testing.

Key Word : Optimal Experimental Design, Degradation Test, Nonlinear Random Coefficients models

1. 서 론

급속도로 발전하는 기술은 제품의 신뢰도를 급격하게 향상시켰지만, 동시에 기존의 신뢰성 평가방법으로는 적절하게 대응할 수 없는 새로운 신뢰성 문제들을 양산하고 있다. 특히, 제품의 공정수준이 점차 나노 수준으로 스케일링되고 있어 새로운 시각에서 신뢰성을 고려

해야할 필요성이 대두되고 있는 실정이다. 대표적으로 반도체나 디스플레이 제품의 경우 적절하게 열화현상을 설명하지 못하는 경우가 발생하고 있다. 또한 이러한 제품들은 높은 신뢰도를 가지고 있으므로, 전통적인 수명시험이나 가속수명시험으로는 수명에 대한 정보를 얻어내는 것이 어렵거나 때로는 거의 불가능한 경우가 있다.

따라서 시간에 따른 제품 성능 특성치의 열화현상이 존재하는 제품에 대해서 열화시험 또는 가속열화시험(Accelerated Degradation Test, ADT)을 수행하는 분석법이 널리 사용되고 있다. 가속 열화시험은 고장시간에 대한 정보만을 제공하는 가속수명시험과 달리 열화곡선에 대한 정보를 제공하므로 제품의 열화 메커니즘을 이해하는데 도움이 되고, 제품의 신뢰성에 대한 다양한 정보를 제공한다. 하지만 가속열화시험을 수행함에 있어서 현실에서는 지속적인 제품 신뢰성의 개선요구와 급변하는 시장상황에 대응하기 위한 개발기간 단축 요구에 의해 제한된 시간과 자원을 가지고 고 신뢰도제품의 신뢰성을 평가해야만 하는 상반된 조건이 주어진 경우가 많다.

이에 대해 Bae and Kvam (2004)은 개체간 변동을 고려할 수 있고 유연한 구조를 표현할 수 있는 비선형 확률계수 모형을 제안하였고, Bae et al. (2008)은 비선형 확률계수 모형에 bi-exponential 모델을 열화곡선으로 채택하여 나노 수준에서 발생하는 디스플레이 제품의 열화 메커니즘에 적합한 모형을 제안하였다. 본 연구에서는 주어진 제약조건을 만족시키면서 비선형 확률계수가 고려된 열화모형 모수의 추정 오차를 최소화하는 최적 열화시험 설계법을 제안하고자 한다.

2. 본론

2.1 비선형 확률계수 모형 (Non-linear Random Coefficients Model)

비선형 확률계수 모형은 개체간의 가변성(inter-individual variability)을 효과적으로 반영할 수 있는 장점 때문에 약물 동태학(pharmacokinetics)과 경제학 뿐만 아니라 다양한 분야에서 반복 측정 자료(repeated measurement data)에 대한 효과적인 표현수단으로 널리 사용되고 있다(Pinhero and Bates, 1995). 또한 Bae et al. (2008)은 PDP의 구조에 기인한 열화현상이 2차반응을 거쳐 나타남을 bi-exponential 모형을 통해 보였다. 따라서 본 논문에서는 bi-exponential 모형을 열화모형으로 채택하여 비선형 확률계수모형에 적용하고자 한다.

일반적인 비선형 확률계수 모형의 표현방법으로서 i 번째 개체의 j 번째 관측 값에 대한 비선형 확률계수 모형은 다음과 같이 정의된다.

$$y_{ij} = f(\phi_i, t_{ij}) + \epsilon_{ij} \quad (1)$$

여기서 $i = 1, \dots, m$ 이고, $j = 1, \dots, n_i$ 이다. y_{ij} 는 i 번째 개체(individual)의 j 번째 반응변수(response)이고, t_{ij} 는 예측변수이다. $f(\cdot)$ 는 t_{ij} 와 모수 벡터 ϕ_i 에 대한 비선형 함수이고,

ϵ_{ij} 는 정규분포를 따르는 잡음항이다.

i 번째 개체에 대한 반응 모형은 \mathbf{y}_i 와 ϵ_i 를 각각 $(n_i \times 1)$ 의 크기를 갖는 반응변수 벡터와 개체 i 의 개체내(within-individual) 잡음항 벡터로 놓고, 모수 벡터를

$$\phi_i = \mathbf{A}_i \beta + \mathbf{B}_i \mathbf{b}_i, \quad \mathbf{b}_i \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{D}) \quad (2)$$

로 놓음으로써 개체내(within-individual) 변동과 개체간(inter-individual) 변동을 표현할 수 있게 된다. 모수벡터에서 β 는 고정 효과(fixed effects)에 대한 p 차 벡터이고, \mathbf{b}_i 는 랜덤 효과(random effects)에 대한 q 차 벡터이다. 그리고 \mathbf{A}_i 와 \mathbf{B}_i 는 각각 고정효과와 랜덤효과에 대한 $(p \times p)$, $(p \times q)$ 의 디자인 행렬(design matrix)이며, \mathbf{D} 는 랜덤효과에 대한 분산-공분산 행렬이다. 또한 각 개체 $i = 1, \dots, m$ 은 서로 독립이고, ϵ_i 는 *i.i.d* $N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_{n_i})$ 을 따르며 랜덤효과 \mathbf{b}_i 와 독립이라고 가정한다.

식 (1)과 (2)의 결과를 통해 모형의 모수를 추정할 수 있다. 랜덤효과 \mathbf{b} 는 미관측 요소이므로 반응변수 벡터 $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_1^T, \dots, \mathbf{y}_m^T)^T$ 에 대한 조건부 주변밀도함수(conditional marginal density)

$$p(\mathbf{y} | \beta, \mathbf{D}, \sigma^2) = \int p(\mathbf{y} | \mathbf{b}, \beta, \mathbf{D}, \sigma^2) p(\mathbf{b}) d\mathbf{b} \quad (3)$$

를 구해서 최대 우도 추정(maximum likelihood estimation)을 수행한다. 하지만 위치럼 함수 f 가 랜덤효과 \mathbf{b} 가 고려된 상태에서 비선형의 형태를 띠는 경우에는 적분식에 대한 닫힌 형태(closed-form)의 표현식이 존재하지 않으므로, 주변밀도함수 (3)를 추정하기 위해 근사방법(approximation method)을 사용해야만 한다. 이에 대해서 Bae and Kvam (2004)은 대수우도를 수치적으로 최적화 하는 여러 근사방법을 소개하였다.

본 연구에서는 비선형 확률계수 모형의 모수를 추정하기 위해 Lindstrom and Bates(LB) 알고리즘을 사용하였다.

2.2 비선형 확률계수 모형의 최적설계(Optimal Design of Nonlinear Random Coefficients model)

2.2.1 열화 시험 모형(Degradation Test Model)

열화 시험 모형은 비선형 확률계수 모형과 거의 동일한 구조를 가지고 있다. \mathbf{y}_i 를 N 개 중 i 번째 개체의 크기 n_i 인 관찰벡터라고 하자. 그리고 f 를 비선형 열화곡선 함수라고 하자. 그러면,

$$\mathbf{y}_i = f(\phi_i, \xi_i) + \epsilon_i (\sigma_{\cap} + \sigma_{slope} f(\phi_i, \xi_i))^2 \quad (4)$$

이다. 단, $\xi_i = (t_{i1}, t_{i2}, \dots, t_{i\epsilon_i})^T$ 은 i 번째 개체에서 어느 시점들을 측정점으로 할지 결정하는 열화시험계획 벡터이고, ϕ_i 는 식 (2)와 동일하게 i 번째 개체에 대한 모수벡터를 가법 모형(additive model)으로 나타낸다. 다만 랜덤효과 벡터 $b_i \sim N(0, D)$ 의 D 를 각각의 원소가 j 번째가 ω_j 인 대각행렬(diagonal matrix)로 정의한다. ϵ_i 는 $N(0, I_{n_i})$ 인 다변량 표준정규분포를 따른다. σ_{\cap} 와 σ_{slope} 는 각각 결합 분산 모형을 나타내기 위한 모수로서 $\sigma_{slope} = 0$ 일 때는 등분산 오차모형이고 $\sigma_{\cap} = 0$ 일 때는 변동계수(coefficient of variation) 오차모형을 나타낸다. 따라서 결합 분산모형을 표현하면 아래식과 같다.

$$V_c = \text{diag}(\sigma_{\cap} + \sigma_{slope} f(\phi_i, \xi_i))^2 \quad (5)$$

그리고 ϵ_i 는 각 개체간에 서로 독립이고, ϵ_i 와 b_i 도 서로 독립이다.

결과적으로, 최적 열화시험 계획을 구하기 위해서 추정해야할 모수를 Ψ 라고 하면,

$$\Psi^T = (\beta^T, \lambda^T) \quad (6)$$

이고, $\lambda^T = (\omega_1, \dots, \omega_p, \sigma_{intra}, \sigma_{slope})$ 는 열화모형 모수의 랜덤효과와 분산항을 표현하는 $(p+r)$ -벡터이다. 여기서 r 은 결합분산모형에서 두 모수중 하나만 사용되면 1(결합분산모형이 아닌 경우), 모두 사용되면 2로 놓는다. 본 연구에서는 $\sigma_{slope} = 0$ 인 등분산 오차모형만을 고려하기로 한다.

즉, 비선형 열화곡선 f 를 결정하고 그에 대한 모수를 추정하여 Ψ 를 얻게 되면, 제약조건을 고려한 열화시험계획을 설계할 준비가 되었다고 할 수 있다.

Ξ 를 열화시험계획이라고 하자. 총 N 개의 개체가 있으므로, $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N\}$ 이다. 그리고 모든 개체가 서로 다른 시험계획을 가지지 않고 Q 개의 기초 시험계획(elementary design, $Q \leq N$)을 가지고 있다고 하면, 각각의 기초 시험계획 ξ_q , $q = 1, 2, \dots, Q$ 는 n_q 개의 측정점 $(t_{q1}, t_{q2}, \dots, t_{qm_q})$ 를 가지며, 각각의 기초시험계획은 N_q 개의 개체에 대해서 실시된다. 따라서 최종적인 열화시험 계획은 다음과 같이 표현이 가능하다.

$$\Xi = \{[\xi_1, N_1]; [\xi_2, N_2], \dots, [\xi_Q, N_Q]\} \quad (7)$$

2.2.2 Fisher 정보 행렬(Fisher information matrix)

열화시험계획 Ξ 에 대한 Fisher 정보행렬은 다음과 같이 표현되는 $(2p+r) \times (2p+r)$ 대칭 행렬이다.

$$M_F(\Psi, \Xi) = \sum_{q=1}^Q N_q \times M_F(\Psi, \xi_q) \quad (8)$$

열화모형이 모수 ϕ 에 대해 비선형성을 가지기 때문에 대수우도함수 $l(\Psi; \mathbf{y})$ 에 대한 해석

적(analytical)인 표현이 존재하지 않는다. 따라서 기초 시험계획(elementary design) $M_F(\Psi, \xi_q)$ 에 대한 정보행렬은 열화모형에 대한 1차 테일러 급수 전개 (First-Order Taylor expansion)을 사용하여 다음과 같이 근사 표현이 가능하다(Retout et al, 2002).

$$M_F(\Psi, \xi) \cong \frac{1}{2} \begin{bmatrix} A(\mathbf{E}, \mathbf{V}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & B(\mathbf{E}, \mathbf{V}) \end{bmatrix} \quad (9)$$

여기서 $A(\mathbf{E}, \mathbf{V}), B(\mathbf{E}, \mathbf{V})$ 는 각각 고정효과(fixed effects), 랜덤효과(random effects)를 나타내는 부분행렬이다. 이 부분행렬들은 시험계획 ξ 에 대한 관찰값 벡터 \mathbf{y} 의 기대값 \mathbf{E} 와 분산 \mathbf{V} 에 의해 결정되는데, 부분행렬 \mathbf{A} 와 \mathbf{B} 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} \{A(\mathbf{E}, \mathbf{V})\}_{jk} &= 2 \frac{\partial \mathbf{E}^T}{\partial \beta_j} \mathbf{V}^{-1} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \beta_k}, \quad j, k = 1, \dots, p \\ \{B(\mathbf{E}, \mathbf{V})\}_{jk} &= \text{tr} \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \lambda_j} \mathbf{V}^{-1} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \lambda_k} \mathbf{V}^{-1} \right), \\ \text{where } j, k &= 1, \dots, (p+r) \end{aligned}$$

그리고 기대값 \mathbf{E} 와 분산 \mathbf{V} 는

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= E(\mathbf{y}) \cong f(g(\beta, \mathbf{0}), \xi) \\ \mathbf{V} &= \text{Var}(\mathbf{y}) \cong \begin{bmatrix} \frac{\partial g(\beta, \mathbf{0})}{\partial \mathbf{b}^T} \end{bmatrix} \mathbf{D} \begin{bmatrix} \frac{\partial g(\beta, \mathbf{0})}{\partial \mathbf{b}^T} \end{bmatrix}^T \\ &\quad + \text{diag}(\sigma_{\cap} + \sigma_{slope} \times f(g(\beta, \mathbf{0}), \xi))^2 \end{aligned}$$

로 쓸 수 있다.

2.2.3. 열화시험계획의 최적화(Optimization of Degradation Test)

본 논문에서는 열화시험계획을 최적화하기 위해 D-optimal Criterion을 채택하였다. 사전 정보(a priori)로서 모수 Ψ 가 주어지면, 잘 알려진바와 같이 Rao-Cramer의 하계(Lower bound)정리에 의해 Fisher 정보행렬의 행렬식(determinant)의 역수를 최소화 시킬 때 모수에 대한 추정량의 분산은 최소화 되며, 따라서 그 때의 열화시험계획 ξ_D 는 D-optimal이라고 한다:

$$\xi_D = \text{Arg}_{\xi} \min \left(\frac{1}{|M_F(\Psi, \xi)|} \right) \quad (10)$$

Fisher 정보행렬의 행렬식을 최소화하는 것은 모수의 점근적 신뢰영역(Confidence region)의 넓이를 최소화시키는 것과 같은 개념으로 생각할 수 있다(Retout and Mentre, 2003).

열화시험계획 ξ 의 효율성을 측정하기 위해 모수벡터 Ψ 의 차원에 대해서 표준화 시킨 설계척도(criterion) Φ 를 다음과 같이 정의한다:

$$\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}) = |M_F(\boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{\varepsilon})|^{(1/(2p+r))} \tag{11}$$

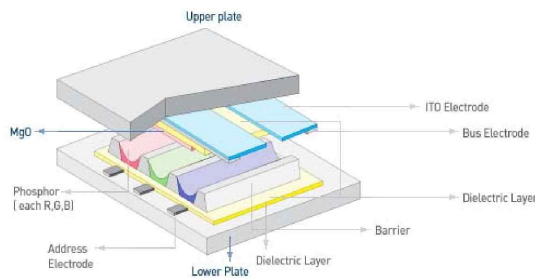
따라서 $\Phi(\boldsymbol{\varepsilon})$ 를 비교하여 최적열화시험 계획을 산출하게 된다. 본 논문에서는 열화시험계획의 최적화를 위해 Nelder and Mead(1965)가 제안한 Simplex function minimization algorithm을 Retout and Mentre(2003)가 구현한 최적화 함수를 사용하였다.

최적화를 수행하기 위해서 열화모형의 구조(structure)를 설정한다. 그리고 기초 시험계획(elementary design)의 수 Q 와 각 기초시험계획의 수 N_q , 그리고 각 기초시험계획마다 측정점의 개수 n_q , $q=1, \dots, Q$ 를 선정한 후에 초기 시험계획(initial design)을 정한다. 결과적으로 추정해야할 변수는 $Q-1$ 개의 기초시험계획의 시험 횟수(나머지 1개는 얻어진 결과로 추론 가능)와 총 측정점의 수 $\sum_{q=1}^Q n_q$ 이다. 즉, $\sum_{q=1}^Q n_q + Q-1$ 개의 꼭지점(vertex)을 가진 문제를 풀게 된다.

2.3 PDP 예제(PDP Example)

2.3.1. PDP의 열화 모형(Degradation model of PDP)

PDP(Plasma Display Panel)는 배경조명이 필요하지 않은 자기방출(self-emissive) 디스플레이이다. 뛰어난 화질과 넓은 시야각, 대형화가 용이한 장점을 바탕으로 디스플레이 시장을 선도하고 있으며, 최근에는<그림 1>에서 볼 수 있듯이 두 개의 기판(substrate) 사이에 3개의 전극(electrode)으로 이루어진 교류(AC) 방전형 PDP가 대부분의 상용제품을 이루고 있다.



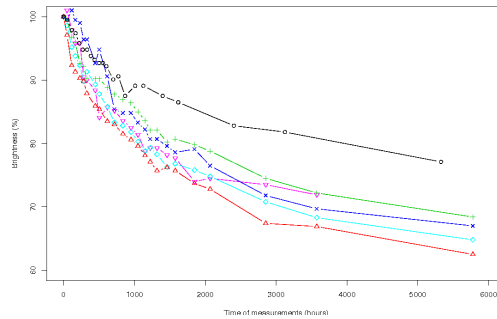
<그림 1> AC PDP의 구조

AC PDP의 작동원리는 상판과 하판 사이에 주입된 Ne, He, Ar 등으로 이루어진 바탕기체(buffer gas)와 형광체를 발광시키는 소량의 Xe 기체를 첨가한 혼합가스를 주입하고 전극에 전압을 인가하면 기체가 플라즈마 상태로 이온화되는데, 이 때 플라즈마의 전리현상으로 발생하는 진공 자외선(Vacuum Ultra Violet)이 형광체(빨강, 파랑, 초록)에 흡수되면서 나오는 가시광으로 빛을 표시한다.

AC PDP는 두 가지 유형의 휘도 열화현상을 갖는다.

첫 번째는 제조 공정상에서 가스를 주입할 때 소량의 불순물(O_2 , CO_2 , H_2)이 함께 주입되거나 구성 재료의 유리판, 금속 또는 산화물들로부터 불순물이 발생되는데, 이들이 MgO 보호막에 흡착되어 구동 전압을 높이고, 진공자외선의 강도를 약화시켜 효율을 떨어뜨린다. 이 때문에 PDP의 최종공정으로써 패널에 일정한 온도($60-70^\circ C$)를 유지하며 동시에 전압을 인가해 일정 시간동안 에이징(aging)을 실시하여 불순물을 제거하는 과정을 거치게 되는데, 이후에도 남아있는 미량의 불순물이 PDP의 휘도를 감소시키는 열화현상을 일으킨다.

두 번째는 형광체가 플라즈마 상태의 이온들과 충돌하여 발생하는 충격과 진공 자외선이 형광체에 닿으면서 생기는 충격으로 인해 PDP의 구동 기간 동안 지속적으로 휘도감소를 일으키는 것이다.



<그림 2> PDP의 열화 데이터

이러한 불순물 오염으로 인한 열화특성과 PDP 고유의 특성으로 인한 열화현상은 각각 사용시간에 따른 지수분포 형태로 표현할 수 있다. 따라서 형광체와 불순물에 대한 반응식을 다음의 bi-exponential 모형으로 표현이 가능하다.

$$y(t) = \phi_1 \exp(-\exp(\gamma_1)t) + \phi_2 \exp(-\exp(\gamma_2)t) + \epsilon_{ij}, \quad t \geq 0 \quad (12)$$

여기서 ϕ_1 과 ϕ_2 는 각각 불순물과 형광체의 초기비율을 나타낸다. 그리고 상수 γ_1 은 불순물의 열화율이고 γ_2 는 형광체의 열화율이다. 불순물에 의해서 제품구동 초기에는 휘도가 급격하게 감소하다가 일정기간이 지난 후에 불순물이 제거되고 나면, PDP 고유의 열화현상을 따르며 완만히 휘도가 감소하므로, $\gamma_1 \gg \gamma_2$ 으로 생각할 수 있다.

따라서 본 연구에서는 위의 bi-exponential 모형을 열화모형으로 설정하고, PDP 데이터를 기반으로 하여 최적 열화시험 설계를 수행하고자 한다.

2.3.2. 데이터 분석(Data Analysis)

분석의 대상이 되는 PDP의 열화 데이터는 <그림 2>와 같은 형태의 열화곡선을 가진다. 열화현상을 모형화 하기 위해서 일반적인 형태로서 모든 고정효과에 랜덤효과(random effect)를 가진 bi-exponential model을 사용하여 모형추정 절차를 거쳤다.

$$y_{ij}(t) = (\phi_1 + b_{1i})\exp[-\exp(\gamma_1 + b_{2i})t_j] + (\phi_2 + b_{3i})\exp[-(\gamma_2 + b_{4i})t_j] + \epsilon_{ij}, \quad t \geq 0 \tag{13}$$

최적 열화시험을 실시하기 위해 식 (4)에서 가정한 바와 같이 랜덤효과에 대한 분산-공분산 행렬은 대각행렬(diagonal matrix)이므로 본 연구에서는 모형추정에서 랜덤효과를 고려할 때 대각행렬에 대해서만 고려하였다. 우도비 검정에 대한 결과는 <표 1>에 나타나 있다.

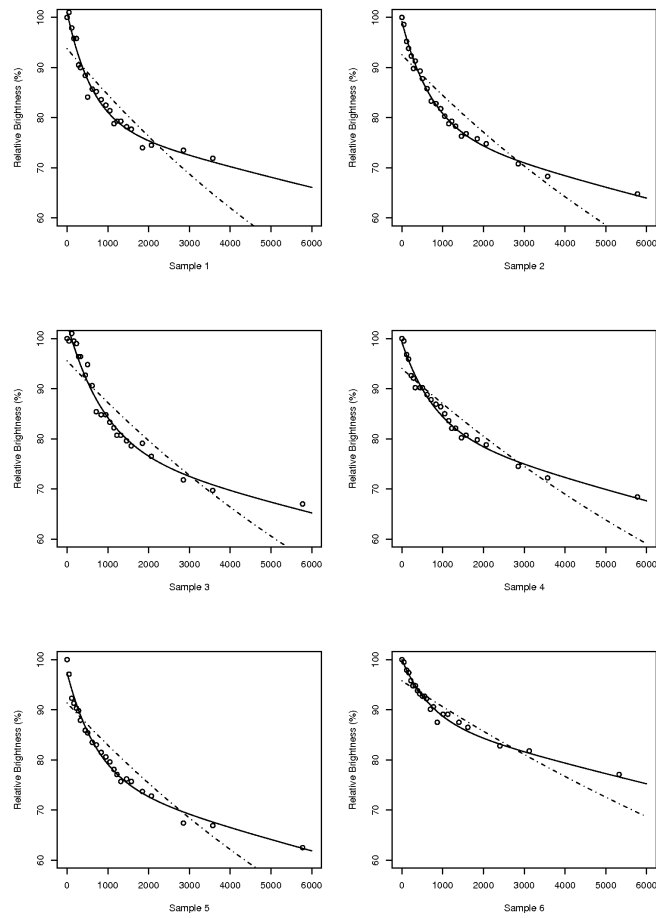
<표 1> 유의한 랜덤효과에 대한 우도비 검정

No.	Random Effects	d.f.	Test	LRT Statistics	p - value
1	(b_1, b_2, b_3, b_4)	9			
2	(b_1, b_2, b_4)	8	1 vs. 2	26.9257	<.0001
3	(b_1, b_3, b_4)	8	1 vs. 3	35.4926	<.0001
4	(b_2, b_3, b_4)	8	1 vs. 4	26.9258	<.0001
5	(b_1, b_2, b_3)	8	1 vs. 5	7.6928	0.0055
6	(b_1, b_3)	7	1 vs. 6	7.6929	0.0214
7	(b_2, b_4)	7	1 vs. 7	26.9260	<.0001
8	(b_1, b_2)	7	1 vs. 8	68.5792	<.0001
9	(b_3, b_4)	7	1 vs. 9	35.4883	<.0001

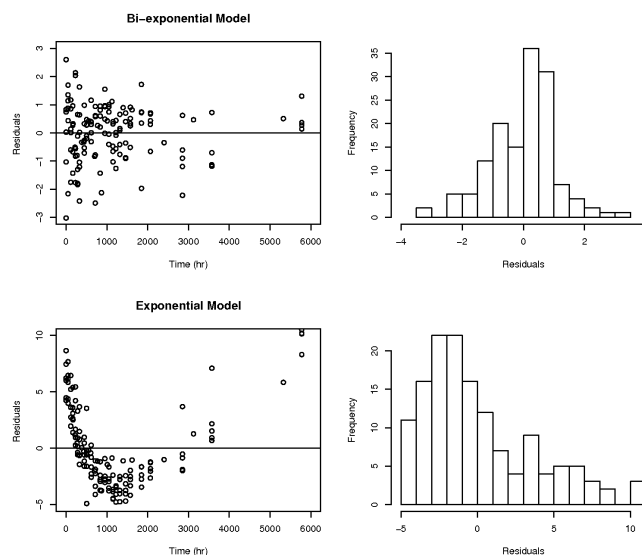
우도비 검정 결과 모든 고정효과(fixed effects)에 랜덤효과(random effects)를 고려하는 것이 가장 우수한 모형인 것으로 나타났다. 따라서 최종 비선형 랜덤효과를 고려한 bi-exponential 열화모형은 다음과 같다.

$$y_{ij}(t) = (19.4794 + b_{1i})\exp[-\exp(-6.6001 + b_{2i})t_j] + (80.5244 + b_{3i})\exp[-\exp(-10.365407 + b_{4i})t_j] + \epsilon_{ij} \tag{14}$$

이고, $(b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}, b_{4i})'$ 은 평균이 0이고 분산-공분산 행렬이 $\text{Diag}(4.2091^2, 0.1515^2, 3.9719^2, 0.1426^2)$ 인 다변량 정규분포를 따른다. 그리고 $\hat{\sigma}^2 = 1.1491$ 이다. 최종 모형을 단순 지수(exponential) 열화 모형과 비교하여 <그림 3>에 나타났다. 점선으로 표시된 단순 지수(exponential) 모형에 비해서 실선으로 표시한 bi-exponential 모형이 정확하게 실제 열화 현상을 설명하고 있음을 알 수 있다. 평균 상대오차(Average Relative Error) $|y - \hat{y}|/y$ 를 구해보면, 각각 3.4550×10^{-2} 과 9.7576×10^{-3} 으로 랜덤효과를 고려한 bi-exponential 모형이 오차가 훨씬 적음을 알 수 있다. <그림 4>의 잔차분석을 통해서도 랜덤효과를 고려한 bi-exponential 모형의 적합 우수성을 확인할 수 있다.



<그림 3> Bi-exponential(실선) 모형과 exponential(점선) 모형의 PDP 데이터 적합 결과



<그림 4> 모형(위:bi-exponential,아래:exponential)에 대한 잔차(Residual)와 히스토그램(Histogram)

2.3.3 최적 열화시험 설계(Optimal Degradation Test Design)

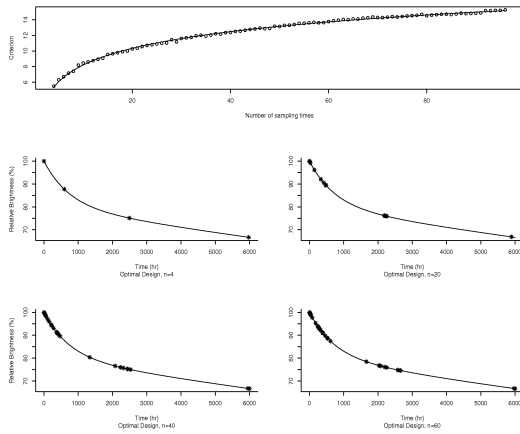
본 연구는 열화현상의 비선형성과 개체내의 변동을 효과적으로 반영할 수 있는 확률계수 모형의 모수를 정확하게 추정하는 것에 목적이 있다. 하지만 열화모형의 복잡성으로 인해 해석적인(analytical) 접근과 다양한 설계변수를 고려하여 시험계획을 결정하는 것은 난해한 문제이다. 따라서 본 연구에서는 다양한 설계변인에 대해서 최적 설계척도(Optimal Criterion)를 비교함으로써 최적설계에 대한 방법론을 고찰하고자 한다.

<표 2> 측정점 수에 따른 모수의 변동계수(CV)와 설계척도(개체 수 10으로 고정)

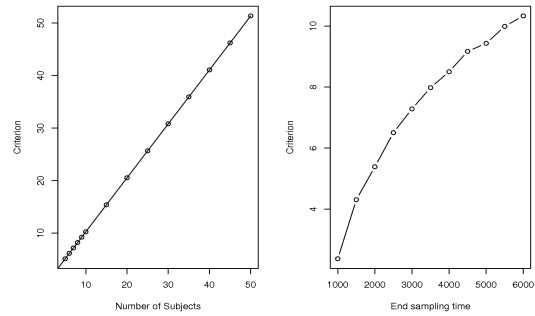
# of sampling times		4	20	40	60
E x p e c t e d C V (%)	ϕ_1	6.77	4.69	4.15	3.90
	γ_1	2.41	2.02	1.96	1.93
	ϕ_2	1.60	1.12	0.99	0.93
	γ_2	1.43	1.31	1.24	1.21
	ω_1	92.79	64.94	59.12	55.89
	ω_2	59.25	49.06	47.74	46.94
	ω_3	84.22	66.56	60.71	57.03
	ω_4	50.47	50.24	48.34	47.51
	σ^2	26.02	5.51	3.71	2.98
Criterion		5.49	10.27	12.39	13.79

2.3.4 설계변수에 따른 최적 설계.

열화시험을 실시할 때 연속적으로 열화량이 측정되지 않는 한 개체당 실험계획의 측정점의 개수와 측정 개체 수 또는 시험 종료시간은 값이 크면 클수록 필연적으로 통계적인 측면에서 우수한 속성을 가지게 된다. 하지만 그 개수와 측정점을 늘려서 설계척도를 증가 시키는데는 한계가 있다.



<그림 5> 측정점의 개수와 설계척도의 관계와 각 측정점 개수(n=4,20,40,60)에 따른 최적 열화시험 계획



<그림 6> 측정개체의 수(왼쪽)와 시험 종료 시간(오른쪽)의 설계척도와와의 관계 (개체당 측정점의 수는 20으로 고정)

먼저 <표 2>를 보면, 측정점의 개수를 늘려감에 따라 추정모수와 그 분산의 비인 변동계수(Coefficient of Variation)는 초기에 급격하게 감소하나 일정 개수를 초과하면 그 감소 폭은 점차 작아지는 것을 확인할 수 있다. <그림 5>에서 설계척도(Criterion)가 측정점의 개수에 따라 로그함수 형태로 증가하므로 측정점의 수에 의해 열화시험 설계를 개선하는 것은 한계가 있음을 알 수 있다.

<표 3>과 <그림 6>을 보면 개체수와 시험 종료시간에 따른 추정모수에 대한 변동계수와 설계척도의 변화를 확인할 수 있다. 개체수에 따라 정비례하거나 시험 종료시간에 따라서 로그함수 형태로 설계척도가 증가한다. 본 연구의 분석대상인 PDP의 경우 1000~2000시간 사이에서 열화곡선의 변곡점이 발생하는데, 변곡점 발생시간보다 시험종료시간이 추정 모수의 정확성이 급격하게 나빠지는 것을 확인할 수 있다. 특이할 점은 개체 내 가변성 (within-individual variability), 즉 σ^2 에 대한 변동계수는 시험 종료시간에 크게 영향을 받지 않음을 알 수 있는데, 이는 주어진 데이터는 정확하게 모형추정이 가능하나 그것이 실제 열화현상을 정확하게 추정하는 것과는 별개라는 사실을 시사한다.

이렇게 시험 측정점의 개수와 시험 개체 수 그리고 시험 종료시간에 따른 최적 설계척도를 비교하여 보았다. 하지만 본 연구에서 대상으로 삼은 PDP와 같은 제품은 고가임과 동시에 제품의 개발시간이 빠르기 때문에 개체 수와 시험 종료시간은 설계변수라기 보다는 주어진 제약조건에 가깝다. 따라서 주어진 여건에서 취할 수 있는 최대한의 설계변수 값을 취하여 최적시험설계를 위한 조건으로서 고려하는 것이 타당할 것으로 판단된다. 동시에 본 연구를 통해 알려진 설계변수와 설계척도의 관계를 이용하여 주어진 현실여건이 열화설계를 실시하는데 타당한 조건인지에 대한 의사결정의 도구로서 활용하는 방안도 강구할 수 있을 것이다.

<표 3> 개체의 수와 시험 종료시간에 따른
 모수의 변동계수(CV)와 설계척도(측정점은 20개로 고정).

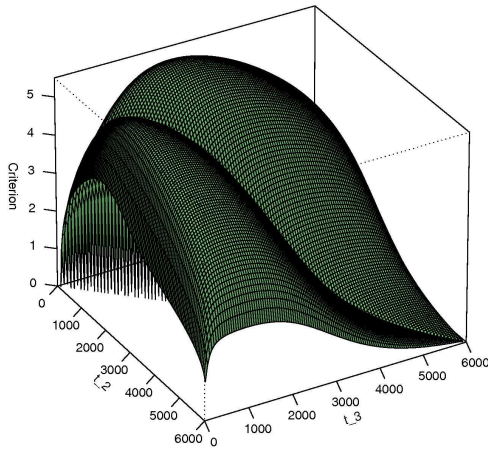
		# of subjects				Termination time			
		5	10	20	40	1000	2000	3000	4000
E x p e c t e d C V (%)	ϕ_1	6.63	4.69	3.31	2.34	151.0	25.33	10.38	6.87
	γ_1	2.86	2.02	1.43	1.01	15.33	3.64	2.43	2.16
	ϕ_2	1.59	1.12	0.79	0.56	36.58	6.15	2.53	1.66
	γ_2	1.85	1.31	0.92	0.66	56.01	7.77	2.80	1.77
	ω_1	91.84	64.94	45.92	32.47	91.07	77.99	76.74	74.30
	ω_2	69.38	49.06	34.69	24.53	52.72	49.99	49.45	48.85
	ω_3	94.133	66.56	47.07	33.28	96.90	81.52	79.92	76.97
	ω_4	71.05	50.24	35.53	25.12	233.2	83.26	63.26	56.01
	σ^2	7.79	5.51	3.90	2.76	5.38	5.42	5.43	5.46
Criterion		5.13	10.27	20.54	41.09	2.37	5.38	7.28	8.50

2.3.5 최적 시험설계의 비교

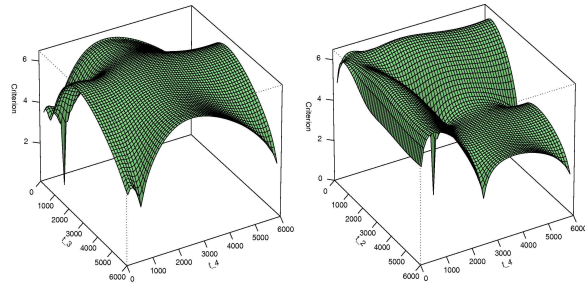
본 절에서는 Simplex Algorithm을 적용한 최적시험설계와 격자탐색(Grid Search)을 이용한 최적설계를 비교하고자 한다. 비교의 용이성을 위해서 열화시험설계는 기초실험계획의 수와 개체의 수를 $Q=1$, $N_{q=1}=10$, 시험종료시간은 6000시간으로 고정하고, 측정점의 수가 $n_{q=1}=4$, $n_{q=1}=5$ 인 경우에 대해서 각각 실시하였다.

먼저, $n_q=4$ 인 경우에 격자 탐색(Grid search)에서 측정시점 t_1 과 t_4 는 모든 최적시험설계에서 항상 포함되는 0시간과 6000시간으로 고정하고 나머지 가운데 두 시점을 탐색하였다. 격자탐색을 통해 14,161개의 시험설계의 설계척도를 평가하여 찾은 최적 열화시험설계는 $Grid\mathbf{E}_4 = \{(0,600,2500,6000),10\}$ 로서 이 때의 설계척도 $Grid\phi_4$ 는 5.496이다.

Simplex 알고리즘을 수행하여 얻은 최적실험 설계는 $sim\mathbf{E}_4 = \{(0,600.72,2497.94,5999.99),10\}$ 로서 이 때의 설계척도는 $sim\phi_4=5.496$ 으로 격자탐색을 통해 얻은 최적해와 동일한 결과를 얻었다. 실제로는 미세한 차이가 발생하였으나 격자의 간격설정과 Simplex 알고리즘의 종료조건에 따른 무시 가능한 오차로 여겨진다. <그림 7>을 보면 측정시점에 따라서 설계척도가 변화하는 양상을 관찰할 수 있다. 그림 상에는 두 최적설계가 있는 것으로 보이지만, 격자탐색 과정에서 두 측정점이 교차하면서 생기는 현상으로 실제로는 하나의 최적설계점이 존재한다. <그림 7>을 통해서 알 수 있듯이 측정 점의 수가 4개일 때는 단순한 설계공간의 구조를 가지고 있다.



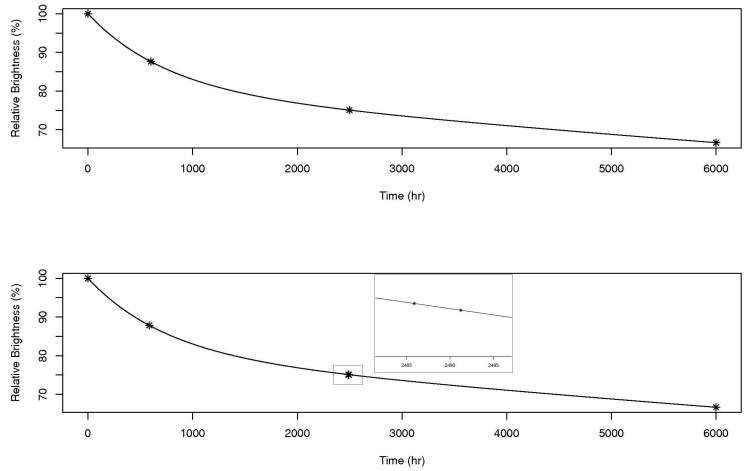
<그림 7> 측정시점의 개수가 4일 때의 열화시험 설계공간. (간격을 50으로 설정)



<그림 8> 측정시점의 개수가 5일 때의 열화시험 설계공간. (간격을 100으로 설정) $t_2 = 600$ 으로 고정했을 때 t_3, t_4 의 설계공간(왼쪽)과 $t_3 = 2500$ 으로 고정했을 때 t_2, t_4 의 설계공간(오른쪽)

따라서 좀 더 복잡한 경우인 $n_q = 5$ 일 때를 살펴보자. 이전과 마찬가지로 처음과 마지막 측정시점을 0시간과 6000시간으로 고정하고 중간 3개 시점에 대한 격자탐색을 실시하였다. 격자의 간격을 100으로 설정하고 실시한 탐색에서 총 205,379개 시험설계의 설계척도를 평가하였으며, 그 결과 최종적으로 $Grid \mathbf{E}_5 = \{(0, 600, 2500, 2500, 6000), 10\}$ 의 시험설계를 얻었다. 이때의 설계척도 $Grid \Phi_5$ 는 6.495이다. Simplex 알고리즘을 수행하여 얻은 최적시험설계는 $sim \mathbf{E}_5 = \{(0, 586.55, 2485.89, 2491.24, 5999.98), 10\}$ 로, 이 때의 설계척도는 $sim \Phi_5 = 6.495$ 이다. 역시 격자탐색을 통해 얻은 최적설계 결과와 동일한 값을 얻을 수 있다. 격자탐색의 경우 격자의 간격이 다소 넓은 점을 감안하여 $Grid \mathbf{E}_5$ 을 초기 설계로 입력한 후 Simplex 알고리즘을 다시 수행하여 최적설계를 도출하여 보았으나, 더 이상 설계척도의 개선이 없었으므로 최종적으로 최적열화시험설계임을 확인할 수 있다.

따라서 본 연구에서 적용한 열화모형에 대해서 Simplex 알고리즘은 최적열화시험 설계에 대한 올바른 해답을 제시하고 있음을 알 수 있다. 본 최적 열화시험설계에서 특이할 점은 <그림 5>와 <그림 9>에서처럼 측정시점의 수가 증가하더라도 일정한 위치에 군집하여 시험설계가 형성된다는 것이다. 이러한 현상은 열화모형의 기울기가 변화하는 지점과 무관하지 않은 것으로 파악된다.



<그림 9> n_q 가 4(위)와 5(아래)일 때의 최적열화시험 설계

<표 4>Simplex 알고리즘과 격자탐색을 통해 구한 설계척도의 비교

Design	Elementary Design		Criterion Φ
	ξ	n_q	
$Grid \ E_4$	{0, 600, 2500, 6000}	4	5.496
$\sim E_4$	{0, 600.72, 2497.94, 5999.99}	4	5.496
$Grid \ E_5$	{0, 600, 2500, 2500, 6000}	5	6.495
$\sim E_5$	{0, 586.55, 2485.89, 2491.24, 5999.98}	5	6.495

5. 결론(Conclusion)

진보된 기술의 발전은 많은 제품의 제조공정을 나노수준으로 낮추었으며, 이에 따라 기존의 제품에서는 문제되지 않던 요인들이 나노수준에서는 새로운 신뢰성 요소로 부각됨에 따라 제품의 열화현상 또한 기존의 모델로는 충분히 설명되지 않는 경우가 증가하고 있다. 본 연구에서 대상으로 삼은 PDP를 비롯한 연료전지와 2차전지 등의 많은 제품에서 이러한 새로운 열화현상이 관찰되고 있으며, 이에 대한 열화모형의 설정과 신뢰성 평가를 위한 시험 계획에 대한 필요성이 증대되고 있다.

따라서 본 연구를 통해서 새롭게 나타나는 제품의 열화현상을 반영할 수 있는 확률계수를 고려한 비선형 열화모형을 소개하고, Simplex 알고리즘을 적용하여 모형추정 오차를 최소화하는 최적 시험설계방법을 고찰하여 보았다. 하지만 다양한 설계변인과 모형의 복잡성으로 인해 본 연구에서 다루지 못한 추구 연구과제가 남아있다. 먼저, 본 연구에서 정성적으

로 다른 설계변수와 최적설계변수에 대한 시험설계 과정을 목적함수 설정을 통해 정량적으로 설계하는 것이 첫 번째 과제가 될 것이다. 또한 기초 실험설계(Elementary design)의 수를 1개로 제한한 본 연구의 경우를 확장하여 여러 개의 기초 실험설계가 있는 경우를 비롯한 좀 더 일반적인 경우에 대한 최적실험설계를 고려할 수 있을 것이다. 그리고 궁극적으로 모형의 확률계수와 스트레스 수준의 관계를 규명하여 비선형 확률계수 모형으로 표현되는 열화현상을 가진 제품의 신뢰성을 평가할 수 있는 일반화된 프레임워크를 구현하는 것이 최종적인 목표가 될 수 있을 것이다.

참고문헌

- [1] Bae, S. J. and Kvam, P. H. (2004). A Nonlinear Random Coefficients Model for Degradation Testing. *Technometrics*, Volume 46, No. 4, 460-469.
- [2] Bae, S. J., Kim, S.-J., Kim, M. S., Lee, B. J., and Kang, C. W. (2008). Degradation Analysis of Nano-Contamination in Plasma Display Panels. *IEEE Transactions on Reliability*, Volume 57, No. 2, 222-229.
- [3] Soh, H., Lee, S.M., Moon, S.K. and Kim, Y.C. (2004). Gasification from Surface during Discharging and Thermal Process in Plasma Display Panel(PDP). *Korean Chem. Eng. Res.*, Volume 42, No. 6, pp. 716-721.
- [4] Pinheiro, J.C. and Bates, D.M. (1995). Approximations to the log-likelihood function in the nonlinear mixed-effects model. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, Volume 4, No. 1, pp. 12-35.
- [5] Pinheiro, J.C. and Bates, D.M. (2000). *Mixed-Effects models in S and S-PLUS*. Springer.
- [6] Lindstrom, M.J. and Bates, D.M. (1990). Nonlinear mixed effects models for repeated measures data. *Biometrics*, Volume 46, pp. 673-687.
- [7] Retout, S., Mentre, F. and Bruno, R. (2002). Fisher information matrix for non-linear mixed-effects models : evaluation and application for optimal design of enoxaparin population pharmacokinetics. *Statistics in medicine*, Volume 21, pp. 2623-2639.
- [8] Retout, S., Dufful, S. and Mentre, F. (2001). Development and implementation of the population Fisher information matrix for the evaluation of population pharmacokinetic designs. *Comptuer Methods and Programs in Biomedicine*, Volume 65, pp. 141-151.
- [9] Mentre, F., Mallet, A. and Baccar, D. (1997). Optimal design in random-effects regression modes. *Biometrika*, Volume. 84, No. 2, pp. 429-442.
- [10] Retout, S. and Mentré, F. (2003). Optimisation of individual and population designs using Splus. *Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics*, Volume 30, pp. 417-443.

- [11] Nelder, J.A. and Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization. The Computer Journal, Volume 7, No. 4, pp. 308–313.
- [12] Yu, H.F. and Chiao, C.H. (2002). An Optimal Designed Degradation Experiment for Reliability Improvement. IEEE Transactions on Reliability, Volume 51, No. 4, pp. 427–433.