



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

공학 박사 학위 논문

머신 러닝 알고리즘을 활용한 SCR System 의
성능 예측에 관한 연구

A Study on Performance Prediction using Machine Learning Algorithms
in Selective Catalyst Reduction System

울산대학교 일반대학원

기계공학과

김성훈

머신 러닝 알고리즘을 활용한 SCR System 의

성능 예측에 관한 연구

지도교수 임옥택

이 논문을 공학박사학위 논문으로 제출함

2024년 2월

울산대학교 일반대학원

기계공학과

김성훈

김 성 훈의 공학박사학위 논문을 인준함

심사위원 박 규 열 인

심사위원 임 옥 택 인

심사위원 오 석 영 인

심사위원 이 윤 호 인

심사위원 오 광 철 인

울 산 대 학 교 일 반 대 학 원

2024 년 2 월

국문 요약

머신 러닝 알고리즘을 활용한 SCR System 의 성능 예측에 관한 연구

울산대학교 일반대학원

기계공학과

김 성 훈

유럽, 미국, 일본 등 주요 자동차 선진국들은 내연기관 자동차에 대해 엄격한 환경 규제 제도를 시행 중이며, 특히, 질소산화물(Nitrogen oxide, 이후 NO_x)에 대한 규제가 더욱 강화될 것으로 전망된다. 본 연구에서는 디젤 차량의 NO_x 를 저감하기 위한 장치인 선택적 촉매환원장치(Selective catalytic reduction, 이후 SCR) 시스템내의 유동균일도(Uniformity Index, 이후 UI)에 영향을 미치는 주요 설계 인자에 대해 머신러닝 기법을 활용하여 최적설계방안을 연구하였다.

SCR 시스템의 최적 설계를 위한 주요 부품 별 영향인자를 파악하고 그 인자 간의 상호관계를 확인하기 위하여 통계학 기법을 도입한 연구를 진행하였다. 이 연구 결과를 근거로, 머신러닝 기법을 이용하여 SCR 시스템의 UI 를 최적화하기 위한 연구를 수행하였다.

SCR 시스템 성능에 미치는 주요 설계 인자는 우레아 인젝터-믹서간 거리, 배기가스 유입각도, 우레아 인젝터-믹서간 각도, 파이프 내측 믹서 회전방향 장착 각도, 믹서 블레이드 수, 믹서 블레이드 굽힘 각도, 믹서-SCR 시스템 촉매간 거리, SCR 시스템 콘 길이 등의 주효과를 파악하며, 통계기법을 통한 상호 인자 간의 관계성에 대해서 확인하였다. 그 결과,

통계학적 분석을 통한 UI에 영향을 미치는 인자별 신호 대 잡음비 및 평균에 대한 효과는 믹서 블레이드 수에 대한 효과가 가장 크며, SCR 시스템의 콘 길이가 그 다음 순임을 확인할 수 있었다.

머신러닝 기법들을 활용하여 메타모델을 생성하기 위한 최적 알고리즘 기법으로 앙상블 결정트리(Ensemble Decision Tree, EDT)와 크리깅(Kriging), 방사형 기본함수(Radial Basis Function, RBF)를 도입하였고, 정규화된 평균제곱근오차(Normalized Root Mean Square Error, Norm.RMSE), 평균제곱근오차(Root Mean Square Error, RMSE), 최대절대오차(Maximum Absolute Error, Max.Abs.Error)등 세가지 지표를 기반으로 검증하였다. 이 결과, 머신러닝 알고리즘 중 정확도가 가장 높은 크리깅(Kriging) 모델기반으로 메타모델이 생성되었고, 성능 최적화를 수행하여 예측된 결과는 CAE 수치해석 결과와 비교하여 99.83% 일치하는 것으로 확인되었다. 또한, 머신러닝 알고리즘을 활용함으로써, 기본 모델에 비해 SCR 시스템의 UI 성능이 1.44% 향상되었고 NO_x의 정화 효율이 30.95% 향상되었다. 이는 구조적 최적화를 통한 균일지수 성능 최적화의 중요성을 보여준다. 따라서 메타 모델을 사용하는 것이 기존 DOE 방법만큼 정확하고 설계 변수 기여도 분석을 가능하게 하여 효율적인 결과 분석을 용이하다고 할 수 있다. 본 연구 결과를 통해서 앞으로 개발되는 SCR 시스템의 성능예측에 사용될 수 있으며, 메타모델을 이용한 예측으로 해석 시간을 획기적으로 단축시킬 수 있을 것으로 예상된다.

감사의 글

지난 4 년동안 직장생활과 박사과정을 병행하면서 어려운 일들이 많았지만, 주변에 좋은 분들의 도움이 있어 잘 마무리할 수 있었던 것 같습니다. 이자리를 빌어 진심을 담아 감사의 인사를 드리고자 합니다.

박사과정을 선택할 수 있도록 길을 열어 주시고, 성과를 낼 수 있도록 모든 면에서 물심양면 지원해주신 세종그룹 박정길 총괄부회장님 정말 감사합니다. 박사과정 학업동안 내재화한 전문지식과 한층 더 성숙된 마음가짐으로 세종그룹의 발전에 기여할 수 있는 세종인으로 거듭날 수 있도록 더욱더 노력하겠습니다.

6 년간의 중국 주재원 생활을 하면서 부족함을 느끼고 지속적으로 학업에 갈망이 있었던 저에게 박사과정을 제안해주시고 공학박사로 성장할 수 있도록 끊임없이 채찍질해주신 임옥택 교수님 감사합니다.

동고동락하며 연구결과에 대해 같이 고민해주고 힘이 되어준 울산대학교 이세준 책임연구원님, 세종중앙연구소의 박영진 책임연구원님 이 고마움을 항상 간직하겠습니다.

마지막으로 4 년간의 기간동안 묵묵히 독박 육아를 책임져 준 아내님 정윤정, 저의 분신인 딸 김서연양, 항상 응원해주신 저의 어머니 정선자 여사님 정말 감사하고 박사학위 취득의 영광을 돌리고 싶습니다.

지면으로 미처 언급하지 못했지만 항상 격려해 주셨던 모든 분들께도 진심으로 감사하다는 말씀을 전합니다. 더욱더 진취적이며 정진하는 모습으로 성장해가는 존재가 될 수 있도록 항상 노력하겠습니다.

2024 년 2 월

김성훈 올림

목차

제 1 장 서론.....	12
1.1 연구배경.....	12
1.1.1 디젤 자동차 동향.....	12
1.1.2 환경규제 강화.....	14
1.1.3 머신러닝 연구동향.....	25
1.1.4 NOX 저감 연구동향.....	43
1.1.5 SCR 시스템 최적화 연구동향.....	50
제 2 장 연구 목적.....	53
제 3 장 실험 장치 및 연구 방법.....	55
3.1 최적화 방법.....	55
3.1.1 실험계획법(Design of Experimental).....	55
3.1.2 Taguchi.....	58
3.1.3 머신러닝 기법을 활용한 메타모델.....	65
3.2 실험장치.....	78
3.3 해석기법 정의.....	79
제 4 장 통계학 기법을 활용한 SCR 시스템 성능 최대화 및 주요 영향인자 분석.....	86
4.1 최적설계 및 주요인자 파악에 관한 통계기법 방법.....	86
4.1.1 프로세스 정의.....	86

4.1.2 설계변수 정의.....	88
4.1.3 Taguchi 직교배열을 이용한 최적설계.....	90
4.2 통계기법을 이용한 최적설계 결과 분석.....	95
제 5 장 메타모델을 활용한 SCR 시스템 성능 최대화 및 주요 영향인자 분석.....	102
5.1 최적설계 및 주요인자 파악에 관한 메타모델링 방법.....	102
5.1.1 프로세스 정의.....	102
5.1.2 메타모델을 이용한 최적설계.....	104
5.2 메타모델을 이용한 최적설계 결과 분석.....	126
5.2.1 메타모델 학습 및 최적화 예측결과.....	126
5.2.2 예측결과 검증.....	130
5.3 최적화 방법에 따른 결과 비교.....	131
제 6 장 요약 및 결론.....	135

그림 목차

Figure 1. (a) Particulate Matter (b) Nitrogen oxide reactions in atmospheric	13
Figure 2. Emission standards of Tier 1	15
Figure 3. Emission standards of Tier 1 for passenger cars and light-duty trucks.....	16
Figure 4. Emission standards of Tier 2.....	17
Figure 5. Emission standards of Tier 2(FTP-75)	17
Figure 6. Emission standards of Tier 3(FTP-75)	18
Figure 7. NMOG+NOx fleet average standards of EPA Tier 3	19
Figure 8. Japan diesel passenger cars emission standards	24
Figure 9. Diesel light commercial vehicles emission standards	25
Figure 10. Compare MuZero and reinforcement Learning Model	27
Figure 11. Keyword trend of graph neural network.....	28
Figure 12. The number of STEM doctoral graduates trends in the US and China	30
Figure 13. Difference between AI technology fields and AI non-technology fields.....	31
Figure 14. Changes neural network technology of learning cost.....	33
Figure 15. Safe Work Environment in the Intenseye's Computer Vision.....	34
Figure 16. Transition from model driven AI to data-driven AI.....	34
Figure 17. AI startup investment trend	37
Figure 18. Trend of AI startup investment size	37

Figure 19. Investment size and number.....	38
Figure 20. Trend of AI exit volume	39
Figure 21. Trust of AI.....	40
Figure 22. Number of AI Coordination Researchers Dedicated.....	41
Figure 23. Organic, fuel bound nitrogen compounds in solid fuels.....	46
Figure 24. The basic concept of NO _x storage and reduction mechanisms Source	48
Figure 25. Example of Taguchi DOE	58
Figure 26. Evaluation of the Distribution related Taguchi's Signal-to-Noise Ratio.....	63
Figure 27. Metamodeling Based Design optimization strategies.	66
Figure 28. Algorithm of Radial Basis Function.....	71
Figure 29. Example of Gaussian Radial Basis Function	72
Figure 30. Example of Multi-Layer Perceptron	73
Figure 31. Matrix Form of Polynomial Regression.....	74
Figure 32. Example of Polynomial Regression.....	75
Figure 33. Example of Decision Tree-based Ensemble Methods.....	76
Figure 34. Analysis Equipment System related Uniformity Index.....	78
Figure 35. Mesh Modeling Shape of CFD in SCR System.....	79
Figure 36. Example of CFD in SCR System.....	81
Figure 37. Comparison of UI NH ₃ Spray Time of Design Factors of Case 01 in CFD.....	83

Figure 38. Flowchart of the prediction process of the SCR system	87
Figure 39. Application of Taguchi's Orthogonal Matrix for 8 Factors 3 Levels.....	92
Figure 40. Design of the SCR system	94
Figure 41. Main Effect for the Signal-to-Noise Ratio.....	100
Figure 42. Main Effect for the Average.....	100
Figure 43. Optimization Process using the Metamodel.....	103
Figure 44. Recommendation of Testing Point related Parameter No.....	105
Figure 45. Function of PIAAnO Tool related Data Rearrange	107
Figure 46. Conception of MAXIMIN Criterion.....	107
Figure 47. Result of Optimization using Kriging Metamodel in PIAAnO Tool	129

표 목차

Table 1. European Emission Standards for passenger cars.....	20
Table 2. European Emission Standards for light commercial vehicles.....	21
Table 3. EURO-7 Proposal based on AGVES meeting.....	23
Table 4. AI System Performance Improvement Effect in Computer Vision Field	35
Table 5. Prediction of AI 2021 Report.....	42
Table 6. DOE methods synoptic table.....	57
Table 7. Taguchi designs synopic table	60
Table 8. Example of Taguchi arrays	60
Table 9. Commonly used metamodeling techniques.....	67
Table 10. Example of Difference of Multi-Layer Perceptron and Radial Basis Function	73
Table 11. Explanation and Type of EDT Methods.....	76
Table 12. Mesh Modeling Information of CFD in SCR System	79
Table 13. Boundary Conditions of CFD in the SCR System	82
Table 14. Comparison Result of UI-related NH3 Spray Time of Case 01 in CFD.....	84
Table 15. Basic Specifications of SCR System.....	88
Table 16. Basic Layout of SCR System	88
Table 17. Major Design Factors for Shape for SCR System.....	89
Table 18. Shape Characteristics of Major Design Factors for SCR System.....	90

Table 19. Application of 8 Factors 3 Levels for Each Main Design Factors in SCR System	91
Table 20. Data of Taguchi's Orthogonal Matrix for 8 Factors 3 Levels in SCR System	93
Table 21. Design of 27 Cases for Taguchi's Orthogonal Matrix in SCR System	94
Table 22. CFD Results of Taguchi's Orthogonal Matrix (Factors: 8EA, Levels: 3, L27)	96
Table 23. Response for the Signal-to-Noise Ratio	97
Table 24. ANOVA for the Signal-to-Noise Ratio	98
Table 25. Response for the Averages	98
Table 26. ANOVAs for the Averages	99
Table 27. Design Modeling of 1 st Train Data	108
Table 28. Design Modeling of 2 nd Train Data	111
Table 29. Design Modeling of 3 rd Train Data	113
Table 30. Design Modeling of 4 th Train Data	115
Table 31. Design Modeling of Test Data	118
Table 32. 1 st Train Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results	120
Table 33. 2 nd Train Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results	120
Table 34. 3 rd Train Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results	121
Table 35. 4 th Train Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results	122
Table 36. Test Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results	123
Table 37. CFD Results through Created Metamodel	124

Table 38. Accuracy Result of the Metamodels	128
Table 39. Result of CFD Compared to Metamodel Optimization.....	130
Table 40. Result of CFD Compared to Metamodel Optimization.....	131
Table 41. Design Modeling of Base Model and DOE Optimization, Metamodel Optimization	133
Table 42. Summary of Base Model, DOE Optimization and Metamodel Optimization ..	1333

제 1 장 서론

1.1 연구배경

1.1.1 디젤 자동차 동향

내연기관은 전기차, 하이브리드 및 청정 에너지 개발에 따른 영향을 받고 있지만, 디젤엔진은 다른 내연기관에 비해 높은 열효율, 연비, 안정성 및 운전 신뢰성 가지고 있기 때문에 여전히 세계의 주요 동력원 중 하나라고 평가받고 있다 [1, 2]. 특히 세계시장의 운송 부문에서 상당한 점유율을 차지하고 있다 [3, 4]. 그러나, 디젤 엔진은 입자상 물질(Particulate matter, PM) 및 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx)을 많이 배출하는 것으로도 잘 알려져 있다 [5]. 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx)은 물과 반응한 후 대기 중에 질산을 형성하여 산성비를 내리게 되며, 또한 오존, 오존층 파괴의 원인이다 [6, 7]. 또한 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx)은 대기 중 화학반응을 일으키는 미세먼지의 2 차 발생원 중 하나이며, 입자상 물질(Particulate matter, PM) 및 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx)로 인한 대기오염 과정은 Figure 1 에 정리되어 있다 [8].

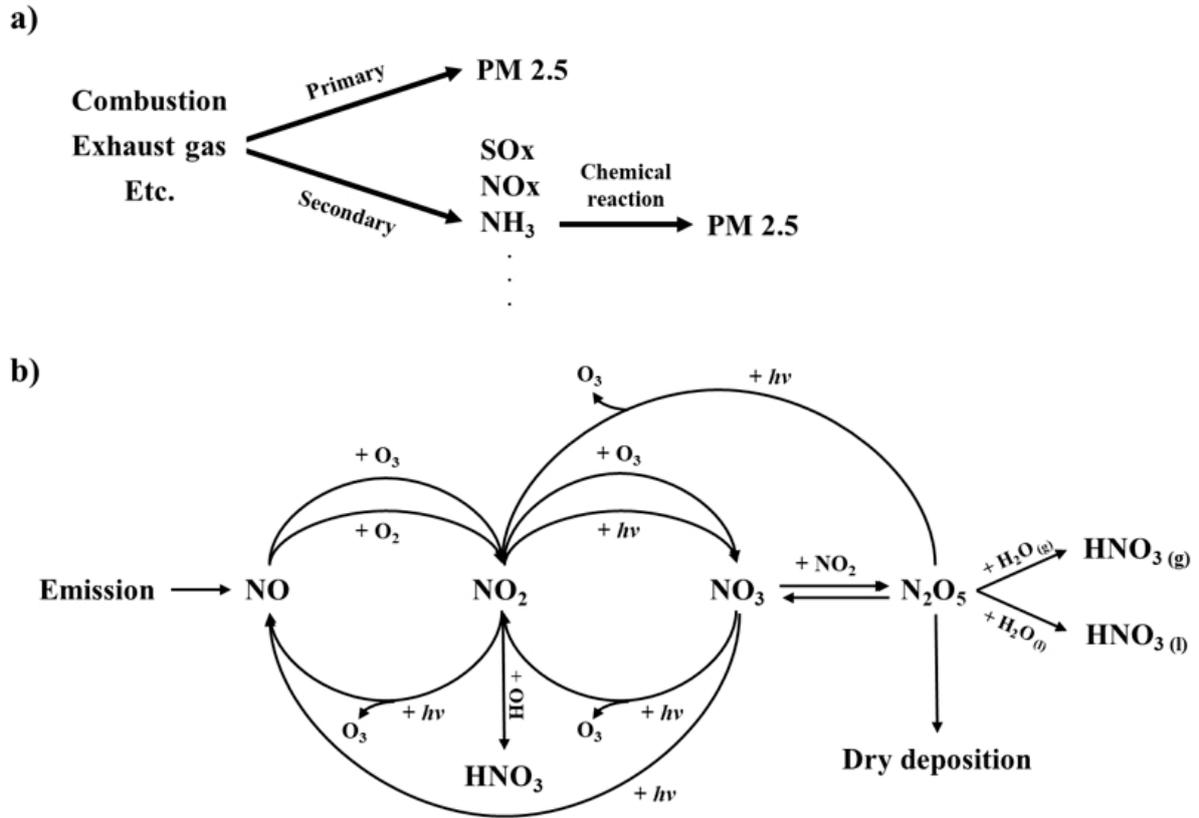


Figure 1. (a) Particulate Matter (b) Nitrogen oxide reactions in atmospheric

질소산화물(Nitrogen oxide, NOx) 배출은 산성비, 인간 질병 등을 통해 환경에 영향을 미치는 가장 해로운 매개 변수이며, 일산화탄소(Carbon monoxide, CO)와 일산화질소(Nitric oxide, NO)는 중요한 온실가스인 대류권 오존 형성의 주요 오염원이다 [9]. 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx)는 공기 중의 수증기와 상호작용하여 인간의 폐에 영향을 미치는 산을 형성하여 만성적인 질병을 유발하며, 만성 중독에서는 호흡기 점막의 염증성 질환, 근육과 심장의 약화, 신경 장애 등이 관찰된다 [10]. 자외선과 스펙트럼의 가시적인 부분에서 자연 배경 복사를 흡수함으로써 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx)는 대기 공기의 투명성을 감소시키고 광화학적 산화제와 오존으로 구성된 스모그인 광화학적 안개의 형성에 관여한다 [11, 12]. 오존은 폐 조직 손상 및 대부분의 취약 인구(어린이, 노인, 천식)에서 폐

기능 감소와 같은 부작용을 일으킬 수 있다. 또한 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx) 배출의 직접적인 영향은 온실 효과에 긍정적인 기여를 한다 [13].

따라서, 디젤엔진에서 배출되는 질소산화물(NOx)을 정화하는 장치가 필수적으로 요구되며, 그 기술은 계속해서 발전되도록 요구되어진다. 이러한 이유로 국가 및 지역 수준에서는 환경규제를 발표하여 연구자들에게 엔진자체의 개발과 촉매를 포함한 배기제어기술 및 대체연료 발굴을 촉구하고 있다 [14, 15].

1.1.2 환경규제 강화

현재 시행되고 있는 다양한 환경규제는 오염물질의 배출을 줄인다는 동일한 목적을 가지며, 각 국가 및 지역의 특수한 환경이나 관점에 따라 선택적으로 운영하고 있다. 주요 국가(USA, Europe, Japan)에서 시행하는 환경규제는 다음과 같이 정의하고 있다 [16].

미국은 자동차 배출 기준을 지속적으로 개정하여 세계적으로 엄격한 배출 기준을 적용하고 있다. 최근 배출 재고 보고서에서 EPA 는 1990-2018 년 동안 미국의 인위적 배출에서 관찰된 추세를 분석하였다. 보고서에 따르면 경형 차량은 59%를 차지하는 반면, 중형에서 중형 차량은 23%의 배출량을 배출한다 [17]. 세계의 엄격한 자동차 배출 표준은 1970 년 CAA 의 개정에서 시작되었다. 그 이후 EPA 는 초기에는 도로용 차량, 이후에는 농업 및 건설 장비와 같은 비도로 차량의 자동차 배기가스 배출 규제를 위해 지속적으로 노력해 왔다. 같은 해 EPA 는 신차가 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx), 일산화탄소(Carbon monoxide, CO) 및 탄화수소(Hydrocarbon, HC)의 배출 기준을 충족하도록 의무화하는 배출 기준을 제정하였다. 1990 년 CAA 가 자동차 배출가스 Tier 1 배출가스 기준에 이어 Tier 2 배출가스 기준과 Tier 3 배출가스 기준과 같이 강화된 기준을 도입하면서 미국 자동차 배출가스 기준의 역사에서 돌파구가 마련되었다.

Tier 1 배출 기준은 1991 년에 채택되었고 1994 년에서 1997 년 사이에 단계적으로 도입되었다. 이러한 배출 기준은 차량, 승객, 물품 및/또는 기타 액세서리의 무게로 구성된 차량중량등급(Gross Vehicle Weight Ratio, GVWR)이 8500 파운드인 모든 경량 차량(LDV)에 적용되었다. Tier 1 의 LDV 는 Figure 2 와 같이 분류되었다 [18]. Figure 3 은 연방 시험 절차 주기(FTP-75 시험 절차)에서 측정한 LDV 의 Tier 1 배출 기준을 요약한 것이다 [19]. 오염 물질 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx), 일산화탄소(Carbon monoxide, CO) 및 탄화수소(Hydrocarbon, HC), 입자상 물질(Particulate matter, PM), 총 탄화수소 함량(Total hydrocarbon, THC) 및 비메탄 탄화수소(Non-methane hydrocarbon, NMHC)에 대한 법정 한도가 명시되어 있다.

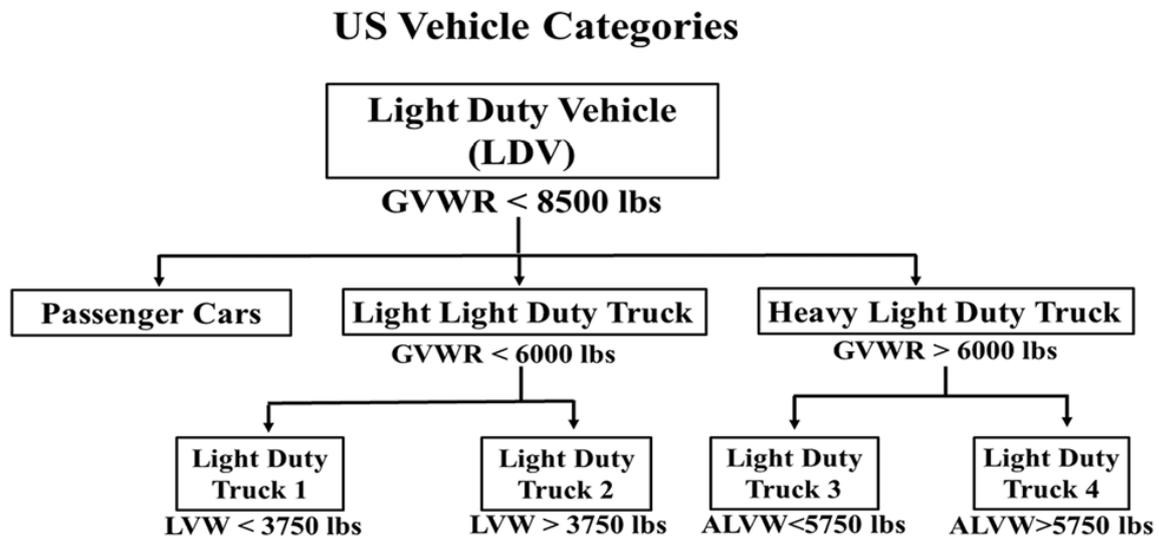


Figure 2. Emission standards of Tier 1

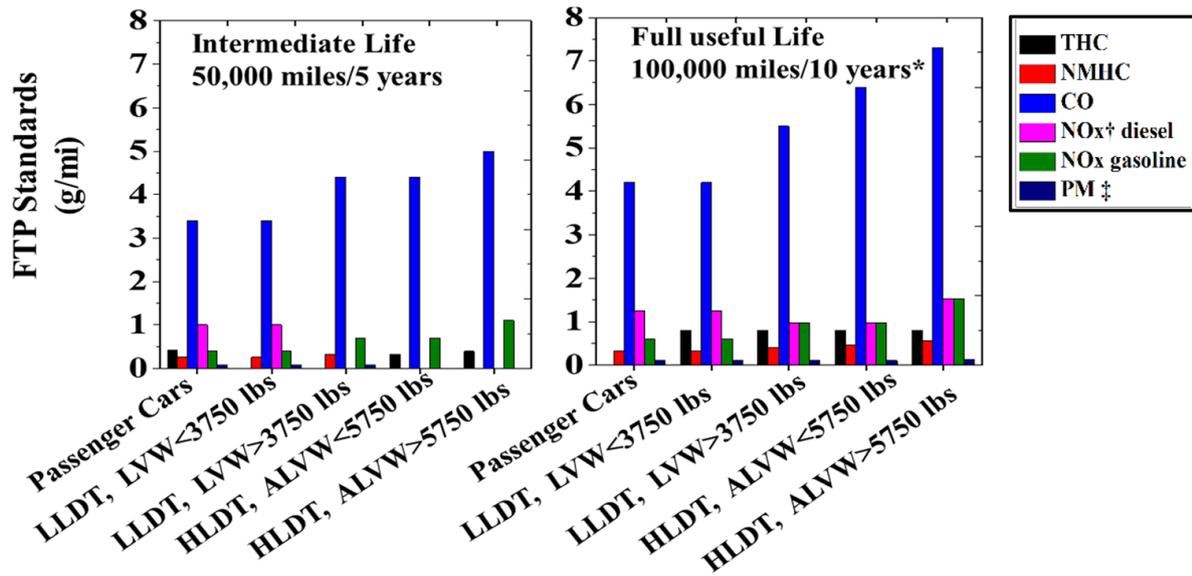


Figure 3. Emission standards of Tier 1 for passenger cars and light-duty trucks

Tier 2 배출 기준은 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx) 배출을 줄이는 데 초점을 두고 Tier 1 배출 기준 보다 엄격하게 업데이트 되었다. 차량중량등급 (Gross Vehicle Weight Ratio, GVWR)에 따라 Tier 2 에 분류된 차량 범주는 Figure 4 에 나와 있다 [20]. Tier 1 기준의 모든 차량 범주를 포함하는 것 외에도, Tier 2 배출 기준은 차량중량등급 (Gross Vehicle Weight Ratio, GVWR)이 8500 ~ 10,000 파운드인 개인 운송에 사용되는 중형 승용 차량(MDPV)을 포함하도록 더욱 확장되었다. Figure 5 는 FTP-75 에서 측정된 오염물질의 Tier 2 배출 기준을 보여준다 [21]. 자동차 제조업체는 전체적으로 bin5(= 0.07g/mi)에 정의된 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx) 배출을 충족해야 한다. 따라서 차량 평균이 0.07g/mi 보다 높은 차량은 bin5 인증을 받은 적절한 수의 차량을 판매하여 보상해야 한다.

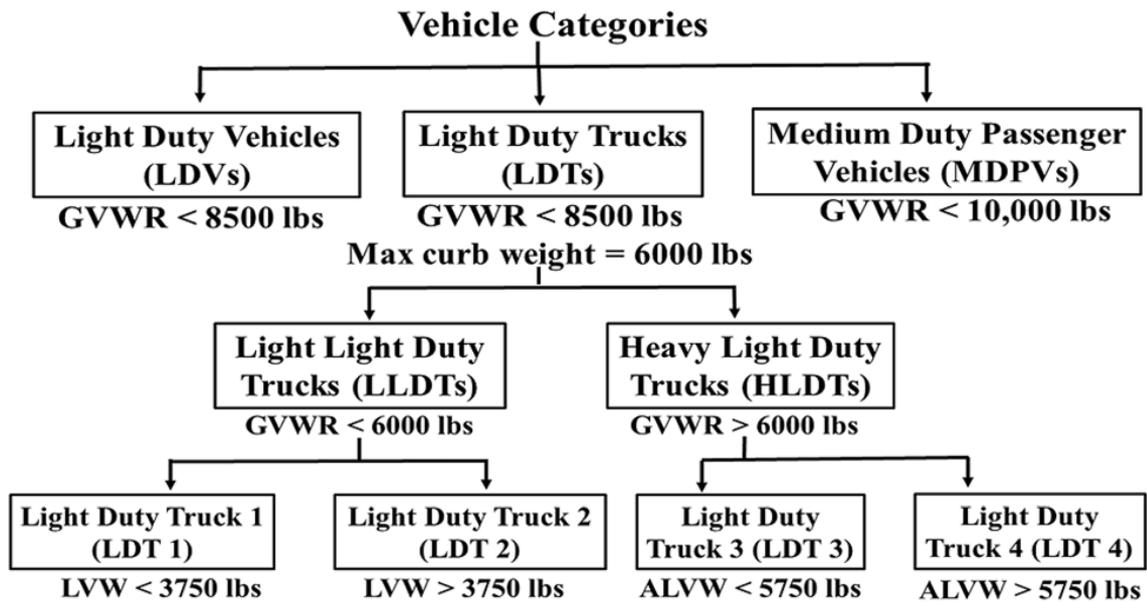


Figure 4. Emission standards of Tier 2

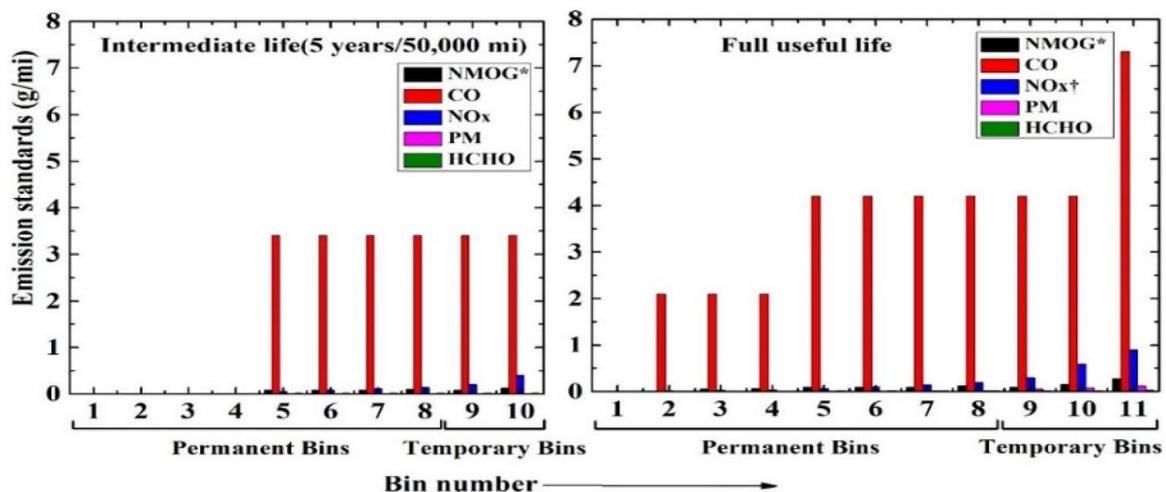


Figure 5. Emission standards of Tier 2(FTP-75)

Tier 3 배출 기준은 기존의 Tier 2 와 상당히 유사했으며, LDV, MDPV 및 일부 HDV 에 대한 MYs 2017-2025 에 대한 표준이 제안되었다. Figure 6 는 사용되는 연료 유형에 관계없이 모든 중량 범주의 차량에 적용할 수 있는 Tier 3 배출 표준을 나타낸다 [22]. 주요 변경 사항 중 하나는 비메탄 탄화수소(Non-methane hydrocarbon, NMHC) 및 질소산화물(Nitrogen oxide,

NOx)에 대한 개별 기준 대신 NMOG+NOx 와 차량의 차량 평균 기준 모두에 대한 통합 표준을 도입한 것이다. 또한 bin 의 이름은 mg/mi 단위로 측정된 NMOG+NOx 의 한계에 해당한다. Figure 7 은 FTP 및 SFTP 사이클에서 각각 평가된 NMOG+NOx 평균 한계를 보여준다 [23]. 또한, NMOG+NOx 에 대한 SFTP 표준 제한이 경량 및 중량 차량의 경우 모두 적용된다는 점에 주목할 필요가 있다.

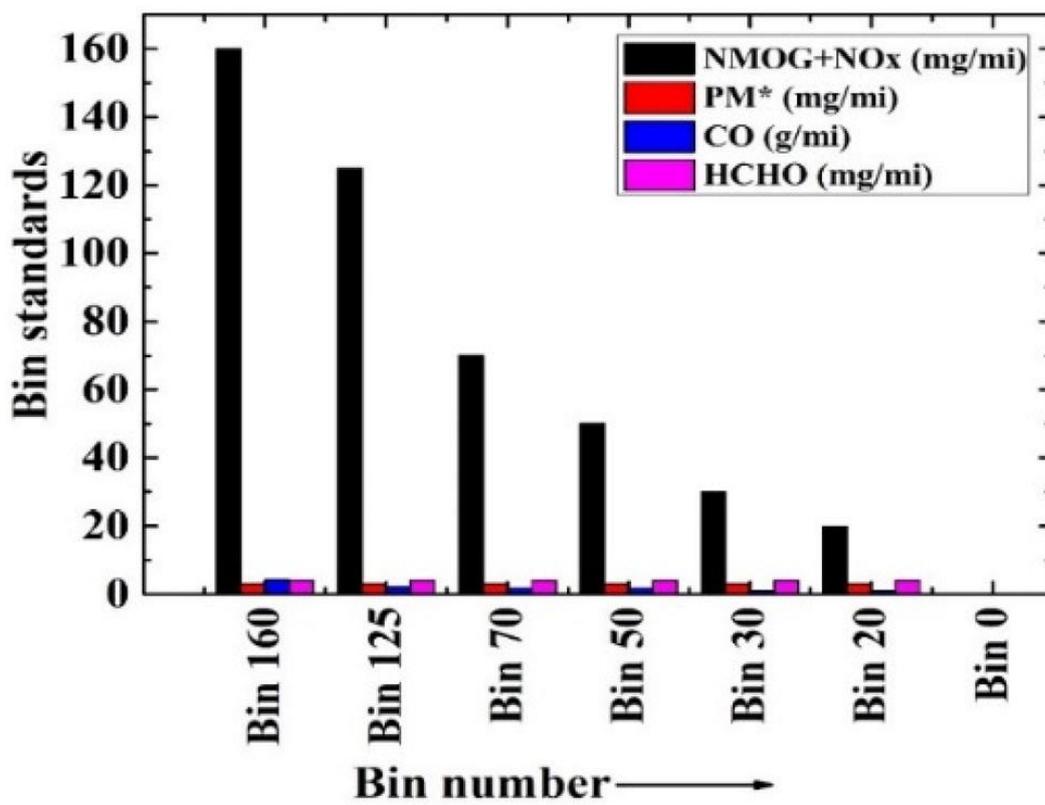


Figure 6. Emission standards of Tier 3(FTP-75)

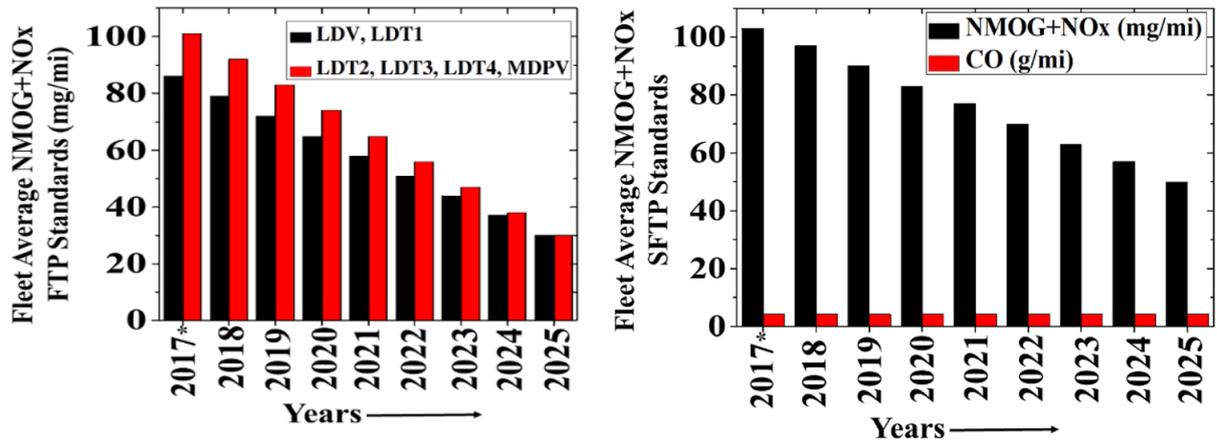


Figure 7. NMOG+NOx fleet average standards of EPA Tier 3

유럽의 환경규제는 유로 1 부터 유로 6 까지이며, LDV, HDV 및 비도로 이동식 기계에서 배출되는 배출량을 규제하고 있다. 단, 연료 종류가 다른 정의된 차량 범주마다 다른 배출 기준이 적용되며, Table 1, 2 와 같이 유로 배출 기준을 분류할 수 있다 [16]. 앞으로 더 엄격해지는 유로 7 환경규제는 Table 3 과 같다 [24].

Table 1. European Emission Standards for passenger cars

Stage	Date	CO	HC	HC+NOx	NOx	PM	PN
		g/km					
Diesel Engine							
Euro 1 ^b	Jul 1992	2.72(3.16)	-	0.97(1.13)	-	0.14(0.18)	
Euro 2, <i>IDI</i>	Jan 1996	1.0	-	0.7	-	0.08	
Euro 2, <i>DI</i>	Jan 1996 ^c	1.0	-	0.9	-	0.10	
Euro 3	Jan 2000	0.64	-	0.56	0.5	0.05	
Euro 4	Jan 2005	0.5	-	0.3	0.25	0.025	
Euro 5a	Sep 2009 ^d	0.5	-	0.23	0.18	0.005 ^h	
Euro 5b	Sep 2011 ^e	0.5	-	0.23	0.18	0.005 ^h	6.0 × 10 ¹¹
Euro 6	Sep 2014	0.5	-	0.17	0.08	0.005 ^h	6.0 × 10 ¹¹
Gasoline Engine							
Euro 1 ^b	Jul 1992	2.72(3.16)		0.97 (1.13)			
Euro 2	Jan 1996	2.2		0.5			
Euro 3	Jan 2000	2.30	0.20		0.15		
Euro 4	Jan 2005	1.0	0.10		0.08		
Euro 5	Sep 2009 ^d	1.0	0.1 ^f		0.06	0.005 ^{g,h}	
Euro 6	Sep 2014	1.0	0.1 ^f		0.06	0.005 ^{g,h}	6.0 × 10 ^{11g,i}

^a At the Euro 1–4 stages, passenger vehicles > 2,500 kg were type approved as Category N₁ vehicles

^b Values in brackets are conformity of production (COP) limits

^c Until 30 Sep 1999 (after that date DI engines must meet the IDI limits)

^d 2011.01 for all models

^e 2013.01 for all models

^f and NMHC = 0.068 g/km

^g Applicable only to vehicles using DI engines

^h 0.0045 g/km using the PMP measurement procedure

ⁱ 6.0×10¹² 1/km within first three years from Euro 6 effective dates

Table 2. European Emission Standards for light commercial vehicles

Stage	Date	CO	HC	HC+NOx	NOx	PM	PN	
		g/km						#/km
Diesel Engine								
N1, Class I ≤ 1305 kg	Euro 1	Oct 1994	2.72	-	0.97	-	0.14	
	Euro 2, <i>IDI</i>	Jan 1998	1.0	-	0.7	-	0.08	
	Euro 2, DI	Jan 1998 ^b	1.0	-	0.9	-	0.10	
	Euro 3	Jan 2000	0.64	-	0.56	0.5	0.05	
	Euro 4	Jan 2005	0.5	-	0.3	0.25	0.025	
	Euro 5a	Sep 2009 ^c	0.5	-	0.23	0.18	0.005 ^g	
	Euro 5b	Sep 2011 ^e	0.5	-	0.23	0.18	0.005 ^g	6.0 × 10 ¹¹
	Euro 6	Sep 2014	0.5	-	0.17	0.08	0.005 ^g	6.0 × 10 ¹¹
N1, Class II 1305- 1760 kg	Euro 1	Oct 1994	5.17	-	1.40	-	0.19	-
	Euro 2, <i>IDI</i>	Jan 1998	1.25	-	1.0	-	0.12	-
	Euro 2, DI	Jan 1998 ^b	1.25	-	1.30	-	0.14	-
	Euro 3	Jan 2001	0.80	-	0.72	0.65	0.07	-
	Euro 4	Jan 2006	0.63	-	0.39	0.33	0.04	-
	Euro 5a	Sep 2010 ^d	0.63	-	0.295	0.235	0.005 ^g	-
	Euro 5b	Sep 2011 ^e	0.63	-	0.295	0.235	0.005 ^g	6.0 × 10 ¹¹
	Euro 6	Sep 2015	0.63	-	0.195	0.105	0.005 ^g	6.0 × 10 ¹¹
N1, Class III > 1760 kg	Euro 1	Oct 1994	6.90		1.70	-	0.25	-
	Euro 2, <i>IDI</i>	Jan 1998	1.5		1.20	-	0.17	-
	Euro 2, DI	Jan 1998 ^b	1.5		1.60	-	0.20	-
	Euro 3	Jan 2001	0.95		0.86	0.78	0.10	-
	Euro 4	Jan 2006	0.74		0.46	0.39	0.06	-
	Euro 5a	Sep 2010 ^d	0.74		0.350	0.280	0.005 ^g	-
	Euro 5b	Sep 2011 ^e	0.74		0.350	0.280	0.005 ^g	6.0 × 10 ¹¹

	Euro 6	Sep 2015	0.74		0.215	0.125	0.005 ^g	6.0 × 10 ¹¹
N2	Euro 5a	Sep 2010 ^d	0.74		0.350	0.280	0.005 ^g	-
	Euro 5b	Sep 2011 ^e	0.74		0.350	0.280	0.005 ^g	6.0 × 10 ¹¹
	Euro 6	Sep 2015	0.74		0.215	0.125	0.005 ^g	6.0 × 10 ¹¹
Gasoline Engine								
N1, Class I ≤ 1305 kg	Euro 1	Oct 1994	2.72		0.97			
	Euro 2	Jan 1998	2.2		0.5			
	Euro 3	Jan 2000	2.30	0.20		0.15		
	Euro 4	Jan 2005	1.0	0.10		0.08		
	Euro 5	Sep 2009 ^c	1.0	0.1 ^h		0.06	0.005 ^{f,g}	
	Euro 6	Sep 2014	1.0	0.1 ^h		0.06	0.005 ^{f,g}	6.0 × 10 ^{11f,k}
N1, Class II 1305- 1760 kg	Euro 1	Oct 1994	5.17		1.40			
	Euro 2	Jan 1998	4.0		0.65			
	Euro 3	Jan 2001	4.17	0.25		0.18		
	Euro 4	Jan 2006	1.81	0.13		0.10		
	Euro 5	Sep 2010 ^d	1.81	0.13 ⁱ		0.075	0.005 ^{f,g}	
	Euro 6	Sep 2015	1.81	0.13 ⁱ		0.075	0.005 ^{f,g}	6.0 × 10 ^{11f,k}
N1, Class III > 1760 kg	Euro 1	Oct 1994	6.90		1.70			
	Euro 2	Jan 1998	5.0		0.80			
	Euro 3	Jan 2001	5.22	0.29		0.21		
	Euro 4	Jan 2006	2.27	0.16 ^j		0.11		
	Euro 5	Sep 2010 ^d	2.27	0.16 ^j		0.082	0.005 ^{f,g}	
	Euro 6	Sep 2015	2.27	0.16 ^j		0.082	0.005 ^{f,g}	6.0 × 10 ^{11f,k}
N2	Euro 5	Sep 2010 ^d	2.27	0.16 ^j		0.082	0.005 ^{f,g}	
	Euro 6	Sep 2015	2.27	0.16 ^j		0.082	0.005 ^{f,g}	6.0 × 10 ^{11f,k}

^a For Euro 1/2 the Category N₁ reference mass classes were Class I ≤ 1250 kg, Class II 1250-1700 kg, Class III > 1700 kg

^b Until 30 Sep 1999 (after that date DI engines must meet the IDI limits)									
^c Jan	2011		for		all				models
^d Jan	2012		for		all				models
^e Jan	2013		for		all				models
^f Applicable	only	to	vehicles	using	DI				engines
^g 0.0045	g/km	using	the	PMP	measurement				procedure
^{h>} And	NMHC	=			0.068				g/km
ⁱ And	NMHC	=			0.090				g/km
^j And	NMHC	=			0.108				g/km
^k 6.0×10^{12}	#/km	within first three years from Euro 6 effective dates							

Table 3. EURO-7 Proposal based on AGVES meeting

	NO _x	PN	PM	CO	HC	NH ₃	HCHO	N ₂ O ^(b)	CH ₄ ^(b)
Euro 6d (Gasoline)	60	PN ₂₃ = 6×10^{11} GDI only	4.5	1000	THC=100 NMHC=68	-	-	-	-
Euro 6d (Diesel)	80	PN ₂₃ = 6×10^{11}	4.5	500	HC+NO _x = 170	-	-	-	-
Euro 7	20- 30	PN ₁₀ = 1×10^{11}	2	400 ^(a)	NMOG 25- 45	10	5	10-20	10-20

Unit: Gas mg/km, PN #/km

(a) CO include in RDE, (b) N₂O + CH₄ < sum of individual limits

일본의 환경규제는 1962년에, 매연 및 매연법이 일본 최초로 산업의 분진, 이산화황(sulfur dioxide, SO₂) 및 매연 배출을 규제하는 오염 규제법으로 제정되었다. 1968년, 기존의 매연 및 매연법은 다른 발생원에서 배출되는 대기 오염 물질을 규제하는 대기 오염 규제법으로 개정되었다. 이러한 표준은 미국의 1970년 CAA에 따라 이루어졌으며 표준을 통과한 자동차에 대해 세금 감면 혜택이 주어졌다 [25]. 1978년 배기 가스 배출 표준은

탄화수소(Hydrocarbon, HC) 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx) 및 일산화탄소(Carbon monoxide, CO)의 평균 및 최대값에 대한 한계를 정규화 했다. 인구가 많은 도시에서 기존 차량의 질소산화물(Nitrogen oxide, NOx) 오염을 제한하기 위해 '자동차 NOx 법'을 채택했다. 이 법은 일부 구역에서 사용 중인 차량에서 오래된 대부분의 오염 차량을 제거하는 것을 목표로 했다. 입자상 물질(Particulate matter, PM) 관리 조항을 포함하기 위해 2000년 6월에 이 법에서 일부 개정이 이루어졌고 이 법은 '자동차 NOx & PM 법'으로 이름이 바뀌었다 [26]. Figure 8은 새로운 디젤 동력 승용차의 배기가스 배출 기준을 요약한 것이며, Figure 9은 새로운 디젤 연료 상용차의 배출 기준을 보여준다 [27].

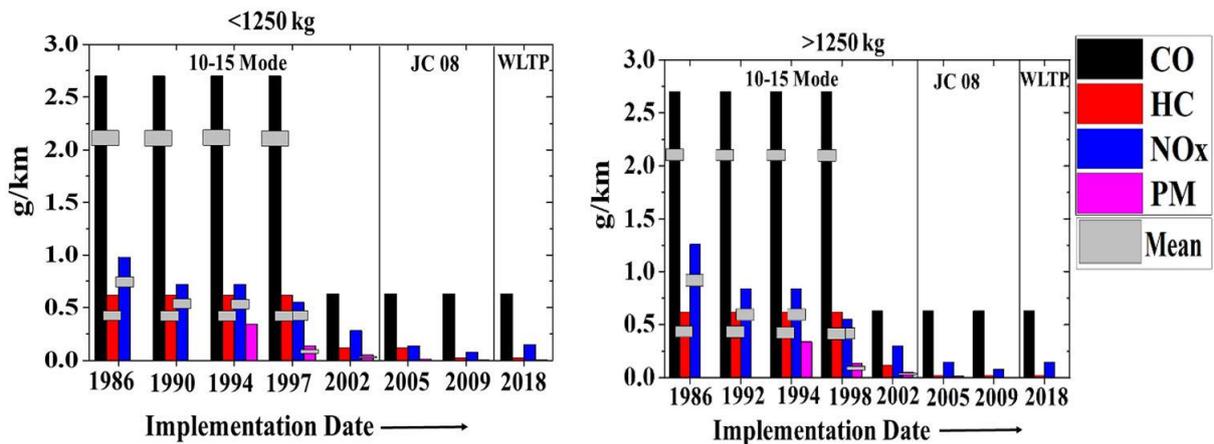


Figure 8. Japan diesel passenger cars emission standards

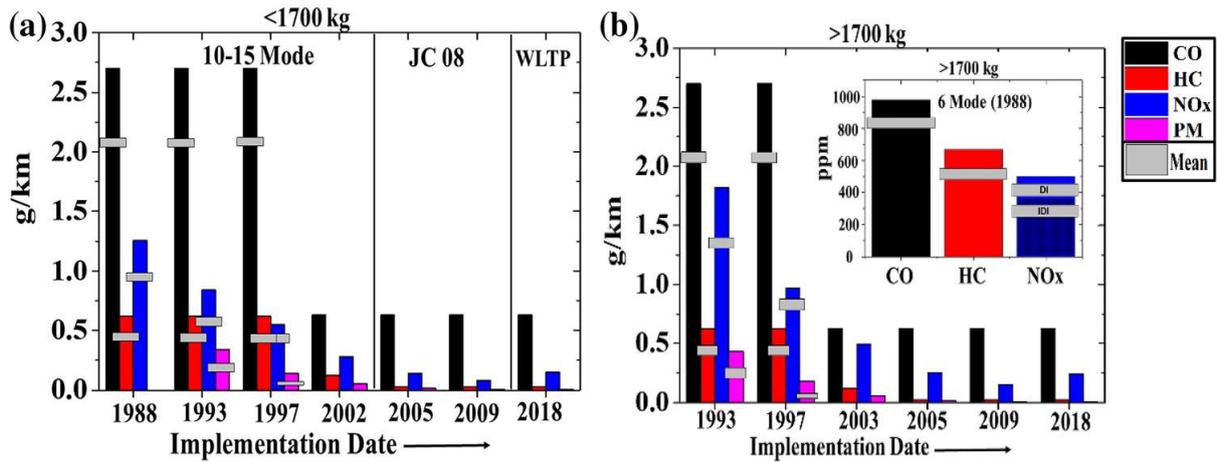


Figure 9. Diesel light commercial vehicles emission standards

1.1.3 머신러닝 연구동향

1) 기술 부문

AI 학습 및 추론에 요구되는 H/W 인프라의 투자 규모가 거대화 됨에 따라, AI 기술개발 분야의 이분화 현상이 가시적으로 드러날 것으로 예상된다. 기본 AI 프레임워크 개발 및 컴퓨팅 H/W 를 포함한 프레임워크 가용 서비스를 제공하는 기술이 개발되고, 개발된 AI 프레임워크를 통해 특정 부문에 적용하는 기술개발 분야로 이분화 되고 있다. 실제로 AI 산업계에서 글로벌 M&A 의 규모와 횟수가 기하급수적으로 증가하고 있어 전 세계적으로 빅테크 기업의 독점적 지배력에 대한 우려를 표하고 있는 동시에 AI 적용 서비스를 제공하는 중소 규모의 기업들의 수 역시 지속해서 증가하는 추세이다.

한글 맞춤형 Transformer 모형의 개발 및 배포가 가속화 추세이다. 국내 민간/공공내 다양한 조직에서 서비스 품질 개선, 시장 지배력 강화 등 각자의 목적을 달성하기 위해 한글 맞춤형 Transformer 모형 개발이 가속화되고 있다. ETRI 의 KorBERT 를 시작으로, SKT 의 KoBERT, 서울대의 KR-BERT, 삼성 SDS 의 KoreALBERT 등이 이미 공개되었으며, 최근 네이버(HyperClova), 카카오(KoGPT) 등 국내 빅테크 기업의 초거대 AI 모형 개발도 활발하게

진행되고 있다. 최근 과기정통부는 인공지능 최고위 전략서밋(AI Strategy Summit)를 통해 민관 협력을 통한 초거대 AI 생태계 활성화 추진방향 논의 중이다. Eleuther AI 의 시도와 유사하게 Transformer 기반의 초거대 AI 모델을 오픈소스로 배포하는 사례도 등장할 것으로 예상된다.

NLP(자연어처리) 연구의 새로운 지평을 연 자기지도학습(self-supervision)이 컴퓨터 비전 분야에서도 두각을 나타내고 있다. '21년 3월 Facebook AI 에서 발표한 SEER 는 13억 개의 파라미터를 가진 자기지도학습 모델으로, ImageNet 에서 84.2%의 정확도를 보이며 기존 모델들 대비 월등히 뛰어난 성과를 보인다. Transformer 는 음성인식(speech recognition)이나 3D 포인트 클라우드 (point cloud) 분류 문제에서도 뛰어난 성능을 가진다. Conformer 는 self-attention 과 CNN 을 결합함으로써 각각의 모델이 갖는 단점을 보완, 가장 낮은 수준의 단어 오류율(Word Error rates, WER)을 기록했다. 사전 학습된 Transformer 가 최근 기계학습 분야에서 가장 뛰어난 성능을 보여준 것은 맞지만, 학습이 제대로 이루어지면 CNN 과 다층퍼셉트론(MLP) 또한 transformer 와 비슷한 수준을 나타낸다. 강화학습(Reinforcement Learning) 연구는 게임을 통해 계속해서 발전 중이며, DeepMind 의 MuZero 는 알파고(AlphaGo), 알파고제로(AlphaGoZero), 알파제로(AlphaZero)를 잇는 강화학습 모델으로 바둑, 체스, 일본장기(Shogi)에서 알파제로와 동등한 수준의 성과를 보일 뿐만 아니라 Atari 벤치마크에서 가장 뛰어난 성능을 보여준다.

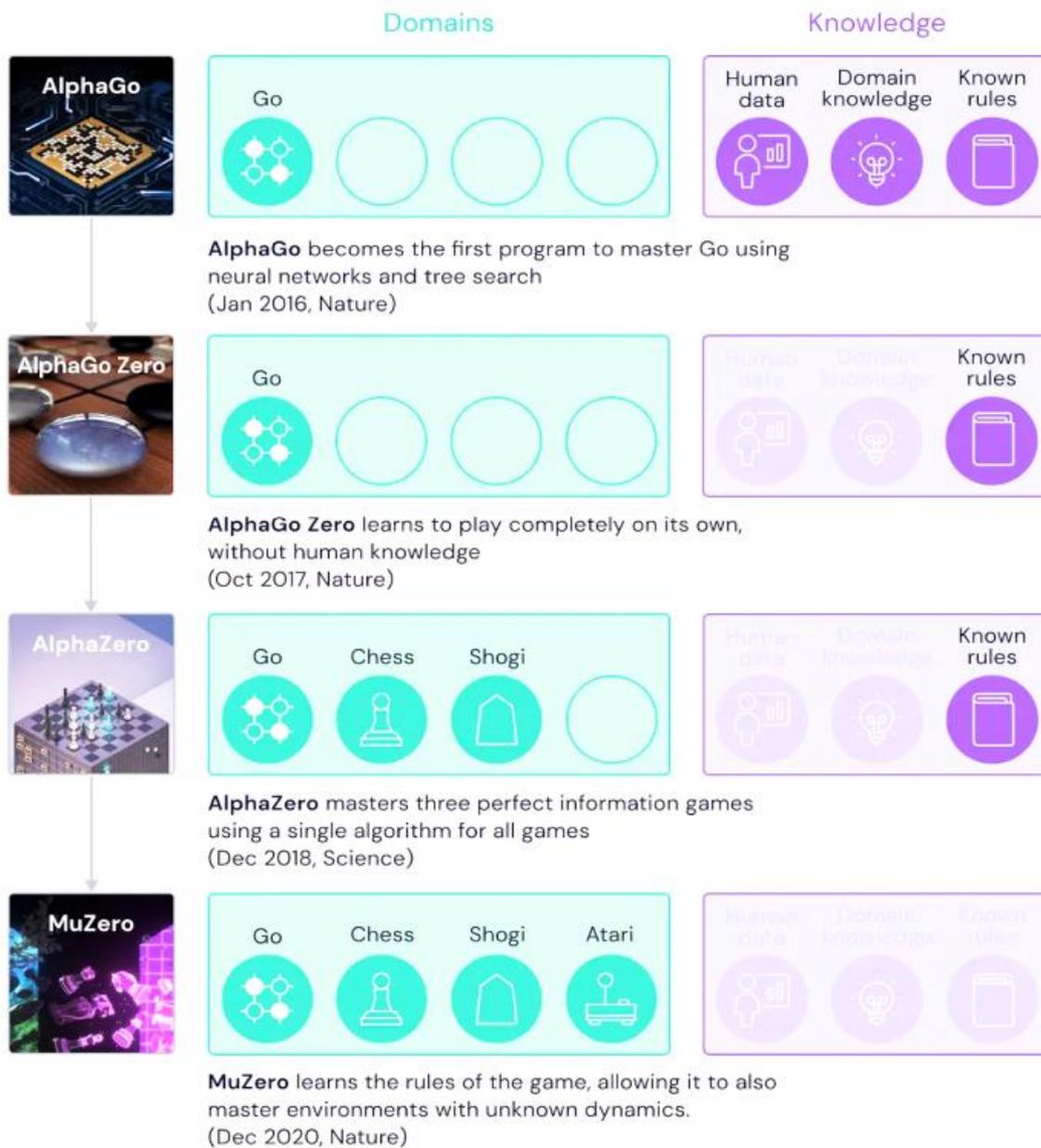


Figure 10. Compare MuZero and reinforcement Learning Model [28, 29]

대규모의 텍스트 데이터를 활용한 언어모형(language model)에 대한 각국의 언어별 수요가 크게 증가하면서, 다양한 개발과 검증 시도들이 이루어지고 있다. 한 종류의 언어를 학습한 결과가 다른 언어의 학습에도 정적인 영향을 미칠 것이라는 다중언어모형(multilingual model)의 가정이 실제로는 언어별 변동, 데이터 불균형 문제, 컴퓨팅 자원 공유로 어려움을 겪는 원인이 되는데, 구글에서는 모형의 규모와 용량을 유의미하게 증가시킨다면 해결될 수

있음을 증명했다. 한편, 건강·법·범죄·소설 등 다양한 영역에 대한 질의·응답 세트로 구성된 새로운 벤치마킹 질문인 Truthful QA 로 다양한 언어모형을 시험한 결과, 많은 양의 파라미터를 활용하는 LLM 이 상대적으로 작은 규모의 언어모형보다 낮은 성능을 보여 언어모형의 규모와 다중언어 학습에 대한 의구심을 남겼다. 정점 표현 학습(node representation learning)의 방법 중 한 가지인 그래프 신경망(GNN; Graph Neural Network)이 AI 연구의 변경에서 핵심으로 떠오르고 있다. 딥러닝 최고 권위 콘퍼런스인 ICLR(International Conference on Learning Representations)에서 '21 년도 GNN 은 4 번째로 많이 사용된 키워드였으며, '19 년에서 '20 년 사이에 가장 증가 폭이 큰 키워드에 해당했다.

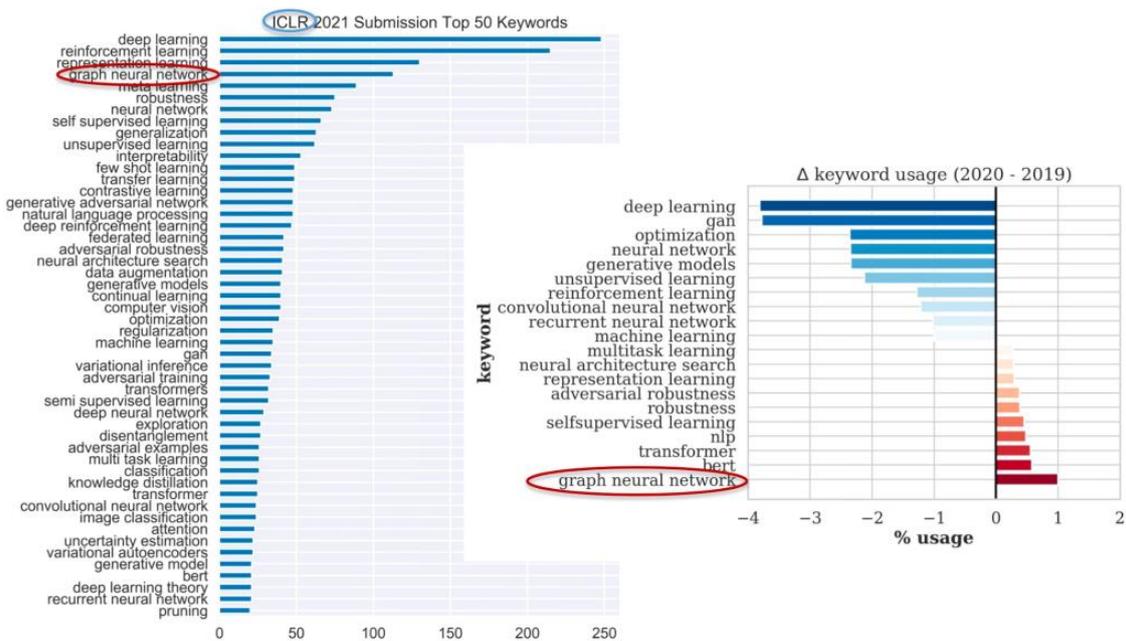


Figure 11. Keyword trend of graph neural network [28, 30]

GNN 의 부상은 복잡한 네트워크 기반이 자료 표현 방법이 실제 현실 세계의 문제를 해결하는데 뛰어난 성능을 보여주고 있기 때문인데, 특히 시스템 동역학과 교통모형 부문에서 대표적인 성능 향상이 있었음을 보여준다. 시스템 동역학 부문에서 GNN 은 공간을 분리된

셀(cell)로 구분하는 mesh-based simulation 에서 활용되는데, 이는 기존 방법에 비해 빠르고, 복잡한 동역학계를 더욱 쉽게 일반화할 수 있어 시스템 동역학 수준을 한 단계 올렸다고 평가받고 있다. 구글에서는 구글맵의 경로 서비스에서 GNN 을 활용해 예상 도착 시간을 예측하는 것이 더 좋은 성능을 보여 고객 만족도가 증가했음을 밝혔다. '19 년 말 구글이 Python 패키지인 JAX 를 소개한 이후, JAX 기반의 라이브러리(예: Flax, Haiku, Optax, Rlax, FedJAX 등)가 파생되면서 새로운 기계학습 생태계의 강자로 자리 잡는 중이다. JAX 의 경쟁력은 유명한 패키지인 numpy 와 유사한 구조로 개발되어 기존 사용자들의 유입이 쉽고, 벡터화, 병렬화, 즉석 컴파일링 (just-in-time compling) 등의 추가적인 장점에서 기인한다. PapersWithCode 에 따르면 JAX 프레임워크를 활용한 연구는 매월 1%에서 5% 비중까지 증가해, 그 활용도가 빠르게 성장하고 있음을 확인할 수 있다.

2) 인재 부문

학력인구 절벽과 AI 개발자 임금의 양극화로 인해 지방 중소기업의 AI 전문인력 고용이 더욱 어려워질 것으로 예상된다. 꾸준히 감소하는 학령인구에 비해 대학의 통폐합은 다양한 정치적, 지리적, 사회적 이유로 미진하여 수도권과 지방의 대학 학생 총원 편차가 심화될 것이며, 수도권에 위치한 빅테크를 중심으로 AI 개발자 임금이 가파르게 상승함에 따라 AI 전문인력의 대도시 집중현상이 가속화 중이다. 즉, 신규 공급의 부족과 기존 인력의 이탈로 지방 중소기업의 AI 전문인력은 더욱 어려워질 것으로 전망된다.

AI 연구 및 인재 부문에서 중국의 약진이 두드러진다. 1949 년에 설립된 중국과학원은 1980 년까지 단 한 개의 AI 연구 실적도 없었으나, 현재는 상위 25% 수준의 연구 실적을 가장 많이 발표하는 기관으로 부상하였으며, 뒤를 이어 칭화대와 북경대 또한 빠르게 성장 중이다. 중국은 지난 10 년간 고등교육에 대한 정부 지출을 2 배가량 늘렸으며, 그 결과 중국의 박사

졸업생은 40% 증가하였고, STEM 분야의 박사 졸업생은 '25 년 기준 미국의 2 배가 될 것으로 전망이다. '19 년 기준 중국 박사 졸업생의 43%는 세계적인 수준의 Double First Class 대학에서 배출되었는데, 이는 곧 박사 인력의 증가가 단순히 양적확대뿐만 아니라 질적 성장으로도 연결되는 것을 의미한다.

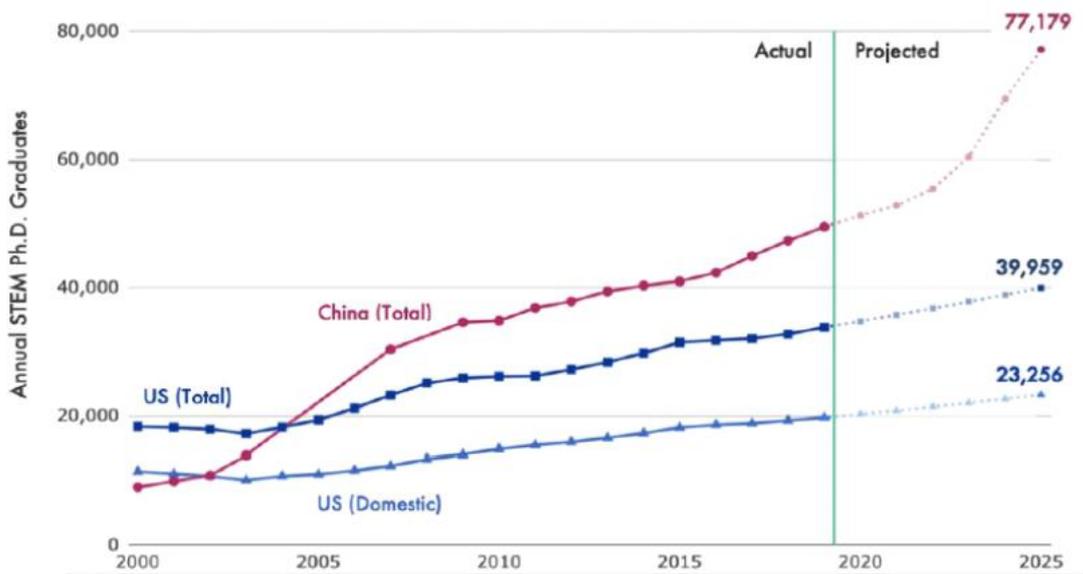


Figure 12. The number of STEM doctoral graduates trends in the US and China [28, 30]

칭화대와 북경대 기준 70%의 학부 졸업생이 대학원에 진출하며, 졸업 이후 해외에 나가서 공부하기를 원하는 비중은 16%에 불과하다. 타 국가 대비 인도와 브라질에서 AI 인재 채용이 빠르게 증가하고 있으며, 특히 인도에서는 여성 연구자의 참여가 확대되는 중이다. 인도에서 발간되는 AI 관련 논문에서 여성 연구자가 공동 저자로 참여하는 비중은 거의 30%로, 미국·영국(15%) 또는 중국(4%)에 비해 월등히 높은 것으로 나타난다. AI 연구의 탈민주화(de-democratization)가 진행되고, '12년부터 빅테크 기업은 그들 스스로 또는 일류 대학과의 산학 협력을 통한 연구를 늘려가고 있다. 이는 빅테크 기업이 제공 가능한 컴퓨팅 파워 역량에

기인한다. AI 기술 분야 인력과 AI 비 기술 분야 인력 사이의 성별·인종별 구성 차이가 존재한다. AI 비 기술 분야(생산·마케팅 등)와 비교하여 AI 기술 분야에서는 남성 인력과 아시아인의 비중이 높은 것으로 나타난다.

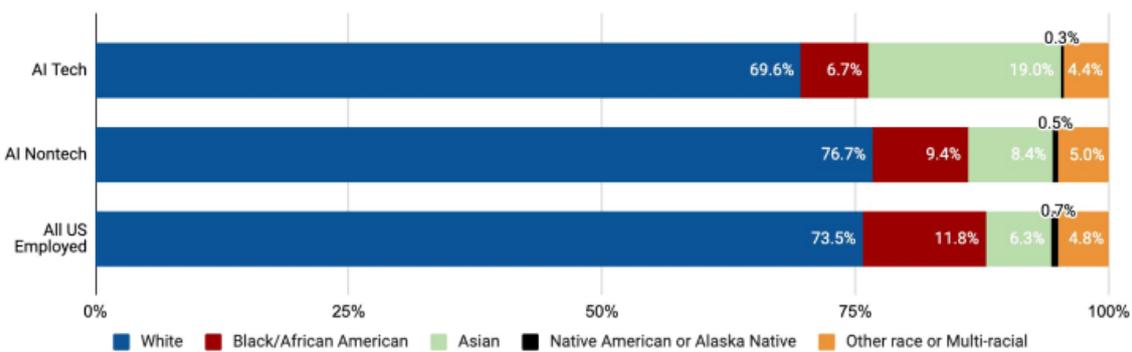
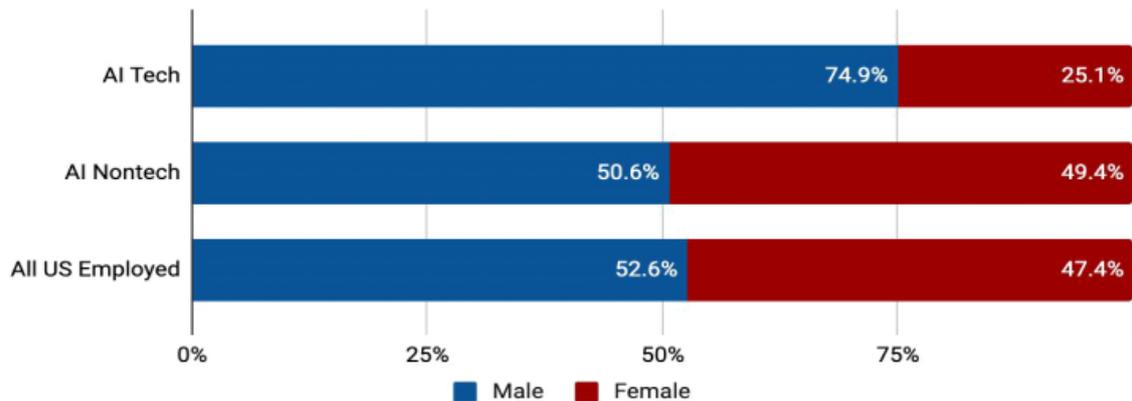


Figure 13. Difference between AI technology fields and AI non-technology fields [28, 30]

미국에서 AI 인력 수요·공급이 빠르게 증가하고 있다. 미국에서 AI 전문인력에 대한 수요가 급증함에 따라 컴퓨터과학(CS), 공학, 수학·통계학을 전공한 졸업생의 수 또한 빠르게 증가하고 있으며, 이들이 차지하는 비중은 전체 4 년제 대학 졸업생의 10.2%를 차지한다. '21 년이 되면서 사회적 거리두기 조치가 완화되었음에도 불구하고, 기술 분야의 재택근무 비중은 여전히 높다.

3) 산업 부문

MLOps의 핵심이 모형 중심(model-centric)에서 데이터 중심(data-centric)으로 옮겨가는 추세에 따라 효율적 학습 및 추론을 위한 데이터 전처리, 가공 기업의 성장세가 두드러질 것으로 예상된다. MLOps는 소프트웨어 개발과 운영의 합성어를 의미하는 DevOps와 유사한 개념으로, 단순히 ML 시스템만 개발하는 것뿐만 아니라 AI 프로젝트를 기획하고 테스트부터 배포까지의 운영 업무를 동시에 수행하는 것을 의미하며, DevOps와는 다르게 데이터의 지속적인 학습 업무가 추가된다. 2022년 부문별 국내 AI 전망 37 플랫폼 분야에서 IPO가 예상되며, 이를 통해 해당 분야의 유니콘 기업도 등장할 것으로 예상된다.

AI 기술 발전과 정부의 정책적 노력에 힘입어 국내에서도 산업 현장에서의 AI 도입이 활발해질 것으로 전망된다. 초기에는 AI 모형 고도화에 따른 학습 비용의 증가가 큰 부담이었으나, H/W 기술의 발전과 효율적인 데이터 처리방식에 의해 학습비용이 연 1/10로 감소되었다.

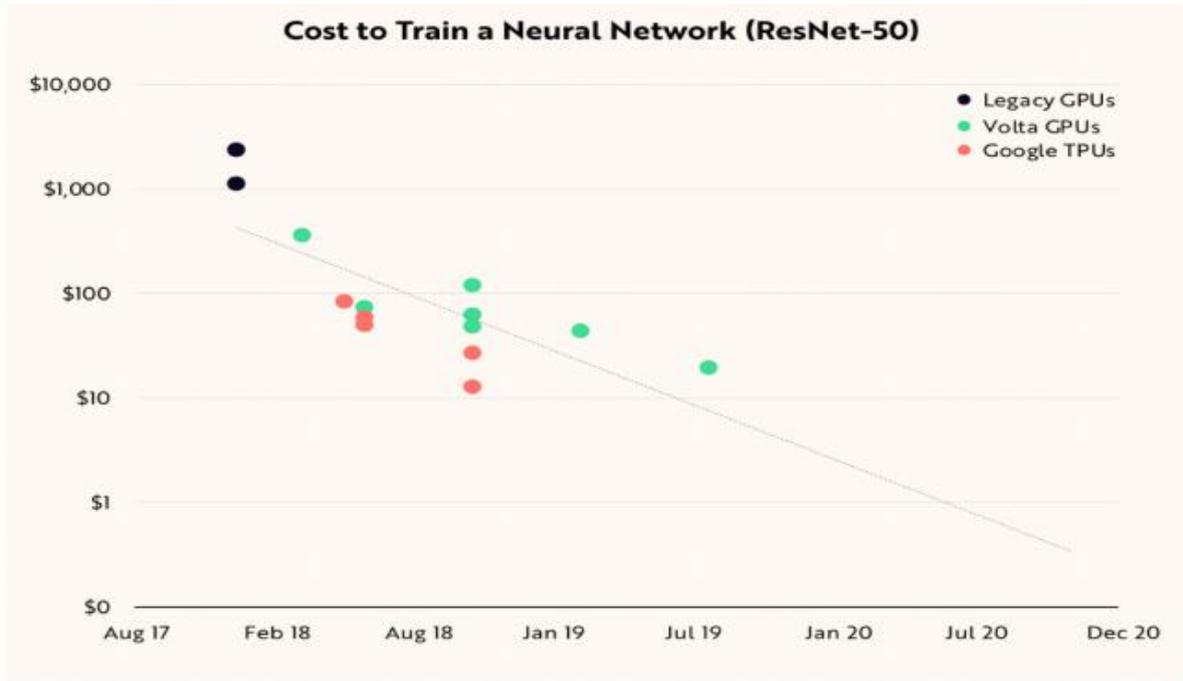


Figure 14. Changes neural network technology of learning cost [28, 31]

정부는 산업 내 AI 융합·확산을 위해 AI 융합 프로젝트(AI+X), AI 바우처 지원 사업 등을 추진 중이며, 최근 초거대 AI 모형 생태계 활성화를 통해 AI 실증 기반 구축에 노력하고 있다. 현재 AI 기술을 도입하지 않은 기업 중 24.5%가 향후 도입 의사를 나타낸 가운데, 공공·안전 부문의 도입 의사는 41.4%로 향후 AI 활용이 가장 활발할 것으로 예상하고 있다.

AI 기반 신약 개발 분야의 주요 기업 2 곳이 IPO 를 성공적으로 완료하며, 그들의 잠재성을 입증하였다. 영국의 Exscientia 는 '21 년 10 월 30 억 달러 이상의 가치로 NASDAQ IPO 에 성공하였으며, 이에 영국에서 GSK, AstraZeneca 다음으로 큰 제약회사로 도약하였다. 미국 유타 주에 위치한 Recursion Pharmaceuticals 는 '21 년 4 월, 4 억 3,600 만 달러의 가치로 NASDAQ IPO 에 성공했다. 다양한 산업 현장에서 AI 의 도입이 유의미한 효과를 보이고 있다. 실시간 컴퓨터 비전 기술이 근로자들의 안전한 업무 환경을 보장한다. Intenseye 의 컴퓨터

비전 모델은 그동안 사람이 실시간으로 관측하기 어려웠던 35 가지 유형의 환경보건안전(EHS) 사건을 학습하여 최근 3 년 동안 약 180 만 건의 위험 현장을 발견하였다.



Figure 15. Safe Work Environment in the Intenseye’s Computer Vision [28, 30]

영국은 국가 전력망에 Temporal Fusion Transformer 기술을 적용함으로써 전력 수요 예측 오차를 절반 아래로 감소시켰다. 그리스는 입국심사에 AI 시스템 Eva 를 도입함으로써 Covid-19 감염자 검출 정확도를 높였다. 모형 중심 AI 에서 데이터 중심 AI 로의 전환(from model-centric to data-centric AI) 되고 있다.

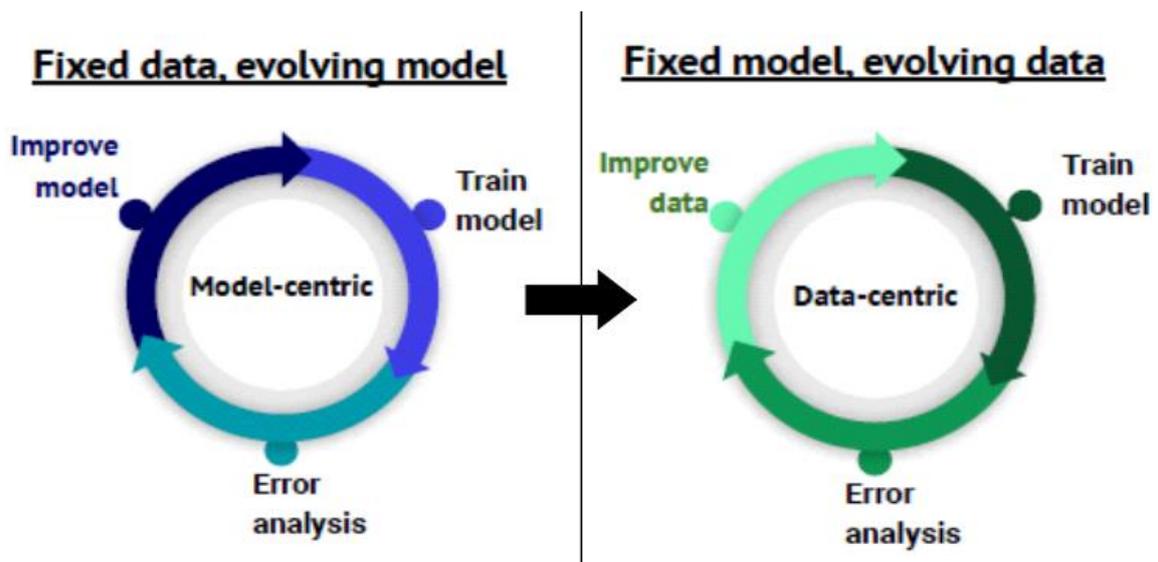


Figure 16. Transition from model driven AI to data-driven AI [28, 30]

최근 ML 연구자들은 AI 시스템의 성능을 높이기 위해 모형 또는 알고리즘의 개선보다 양질의 데이터를 지속해서 수집·구축하고 관리하는 것에 주목하고 있다. Andrew Ng(2021)은 일부 사례를 통해 데이터 중심의 접근 방법이 모형 중심의 접근 방법보다 정확도 면에서 더 효과적임을 발표하였다.

Table 4. AI System Performance Improvement Effect in Computer Vision Field

구분	강철 불량품 검출	태양광 패널 검사	표면 검사
기준 정확도 (baseline)	76.2%	75.68%	85.05%
모형 중심 개선 효과 (model-centric)	+0% (76.2%)	+0.04% (75.72%)	+0.00% (85.05%)
데이터 중심 개선 효과 (data-centric)	+16.9% (93.1%)	+3.06% (78.74%)	+0.40% (85.45%)

지난해 반도체 산업에서 가장 큰 화제가 되었던 NVIDIA와 Arm의 M&A는 여전히 진행 중이다. 400억 달러에 해당하는 NVIDIA의 Arm 인수 계획은 NVIDIA의 경쟁 기업, Arm 고객, 규제당국 등으로부터 많은 저항을 받으며 인수 완료 시점을 당초 예상했던 '22년 3월보다 6개월 연장된 '22년 9월까지로 결정하였다. Covid-19는 글로벌 반도체 공급망에 심각한 타격을 입힌 가운데, 유럽과 미국은 독자적인 생산망 구축 시도 중이다. Covid-19에 의한 사회통제(lockdown)와 전자제품 수요의 증가로 인해 반도체 주문부터 수령에 이르기까지 약 22주의 시간이 소요되었다. AI 기반 사이버보안 기업과 데이터 플랫폼·자동화 관련 기업의 성장세가 두드러진다. 지난 12개월간 CrowdStrike는 2배 이상 성장하여 시가총액이 600억

달러, 연간 수익(ARR) 13 억 달러를 기록하였다. 자동화 전문 기업 UiPath, 클라우드 데이터 플랫폼 기업 Snowflake, Kafka 기반 데이터 스트리밍 기업 Confluent 는 '21 년 1,380 억 달러의 공공 시장 가치를 창출하였다. 중국이 스마트시티에서의 AI 활용 분야에서 강세를 보이고 있다. Baidu, Alibaba, Sun Yat-sen 대학, 중국과학원은 2021 AI City Challenge 내 1 개 이상의 트랙에서 우승을 차지했으며, 해당 분야에서 중국의 경쟁력은 스마트시티와 컴퓨터 비전 분야에 대한 중국의 대규모 투자에 기인한다. Google 은 자사 서비스 및 소비자 애플리케이션 부문에 AI 기술의 적용 사례를 넓혀가고 있다. Gmail 에서 사용되는 Smart Reply 기능을 넘어서, AI 기반 문법 체크 기능이 Google Sheets, Docs, Slides 등에 적용되며, 특히 Sheets 에서는 맥락을 파악하여 자동으로 수식을 예측한다. Maps 에서는 AR(증강현실) 기술을 적용한 실내 네비게이션 기능뿐만 아니라 연료 소비량 및 탄소 배출량을 줄일 수 있는 경로를 안내하는 기능을 제공한다. 전 세계적으로 182 개 AI 유니콘 기업의 총 기업가치가 1.3 조 달러를 기록하고 있는 가운데, 기업 수와 시장 규모 면에서 미국이 타 국가 대비 우위를 보이고 있다. 미국의 AI 유니콘 기업 수는 103 개, 총 기업가치는 8,010 억 달러를 기록하였으며, 다음으로 중국, 영국, 이스라엘 순으로 나타난다. 미국 AI 스타트업으로 자금이 몰리고 있는 가운데, EU 와 영국 기업에 대한 투자도 빠른 성장세를 기록하고 있다.

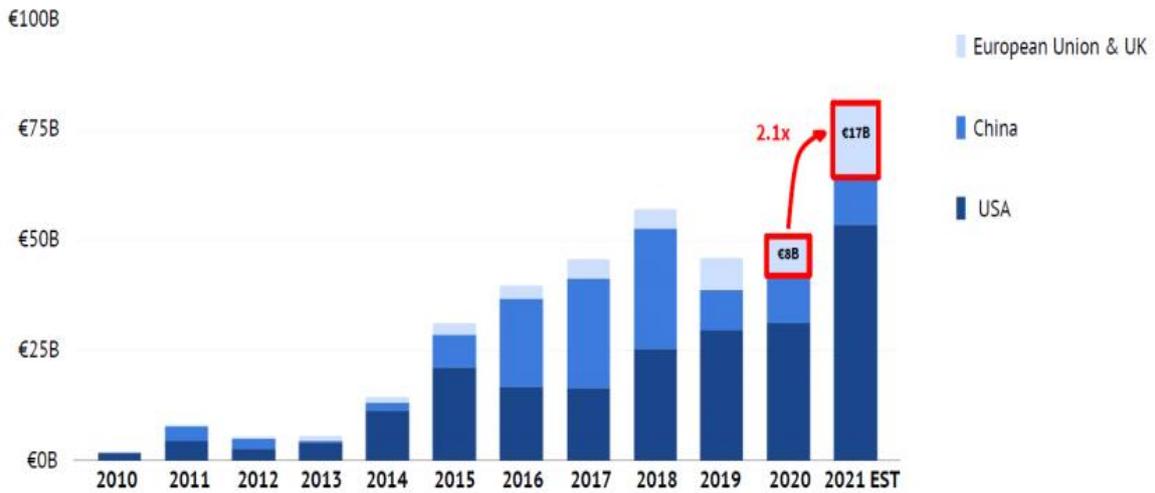


Figure 17. AI startup investment trend [28, 30]

1 억 달러 이상의 메가 라운드(Mega Round)가 보편화되고 있다. '21 년 2.5 억 달러 이상의 라운드는 전체 투자 규모의 48%를 기록하였으며, 이는 42%를 기록했던 전년 대비 증가한 수치이다.

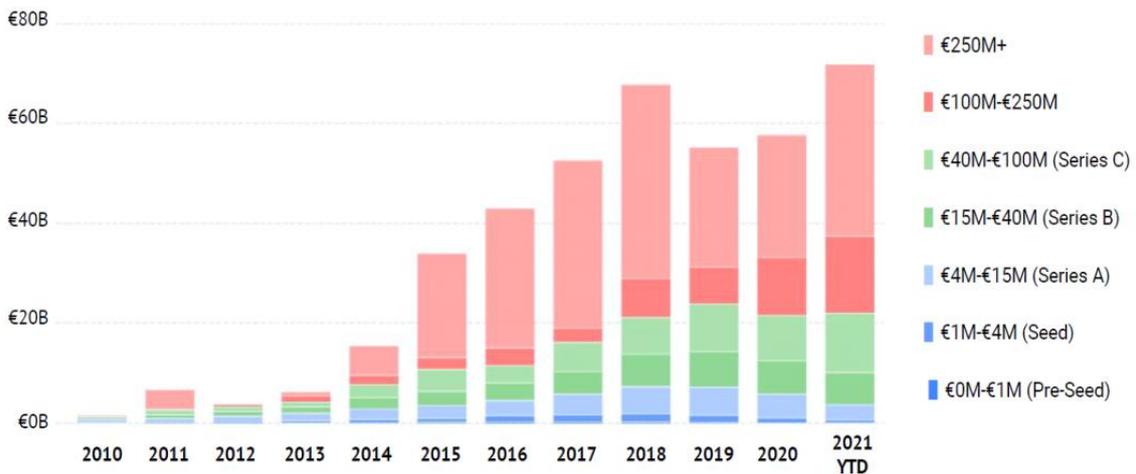


Figure 18. Trend of AI startup investment size [28, 30]

최근 12 년('10-'21 년) 동안 AI 산업에서 투자가 가장 많았던 분야는 기업형 소프트웨어(Enterprise Software) 분야이다. 데이터가 풍부한 헬스케어와 핀테크 분야 또한 많은 투자자의 관심을 받고 있다.

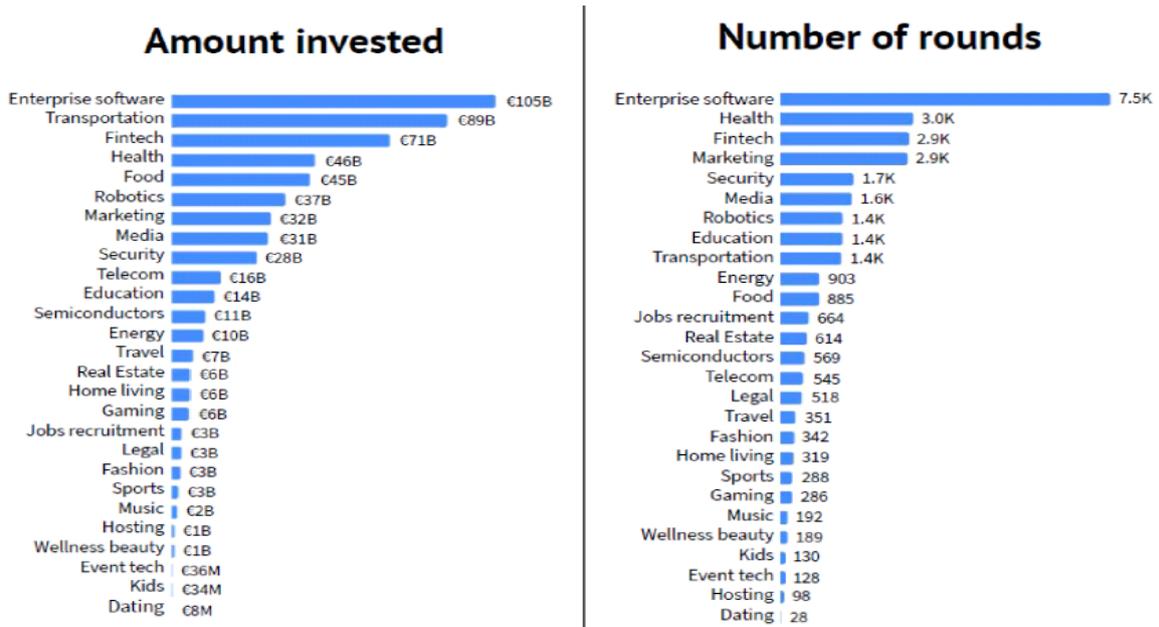


Figure 19. Investment size and number [29, 30]

최근 12 년('10-'21 년) 동안 AI 산업에서 총 2.3 조 달러 규모의 투자가 발생했다. 기업형 소프트웨어, 핀테크, 미디어, 교통, 식품 분야 순으로 투자가 많이 발생하였으며, 해당 분야의 총 투자 규모는 2 조 달러를 기록했다. AI 투자뿐만 아니라 exit 에서도 미국이 전 세계의 3 분의 2 를 차지하고 있으며, EU 와 영국이 거의 3 분의 1, 그리고 나머지를 중국이 차지했다.

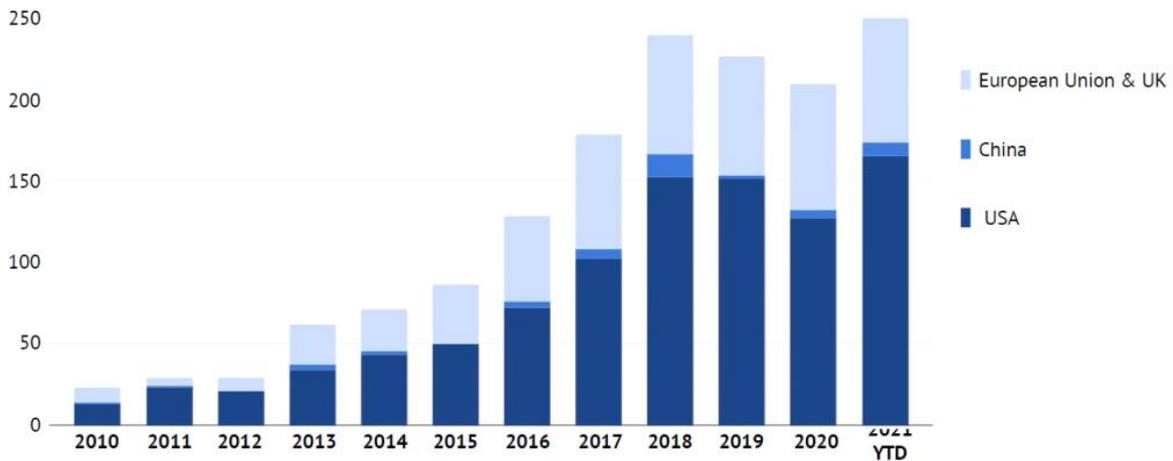


Figure 20. Trend of AI exit volume [28, 30]

4) 정치 부문

전 세계적으로 신뢰할 만한 AI의 중요성이 증대됨에 따라, 국내에서도 AI Safety를 전문으로 하는 기업이 등장하고 있다. AI Safety 전문기업 Anthropic과 마찬가지로 기술기반으로 AI 시스템의 안전성과 신뢰성을 높이기 위한 전문기업이 등장하고, 관련 시장이 새로 창출될 것으로 전망된다. EU의 AI 규제를 기초로 한 리스크 접근 방식의 다양한 인공지능 규제 법안이 발의되거나 가이드라인이 마련하였으며, '21년 4월 EU에서 AI 규제안을 발표한 이후로 AI 규제 입법에 대한 논의가 이전보다 활발해졌다. AI 기술이 고도화되고 상용화가 촉진될수록 해당 논의는 더욱 가속화될 것으로 전망이다. AI 기술의 빠른 변화와 적용 분야별 상이한 성격으로 인해 일반법의 형태로 입법이 추진되기보다는 자율규제 성격의 가이드라인으로 나올 가능성 존재한다.

Google의 AI 윤리 전문가 팀닛 게브루(Timnit Gebru)의 해고에 이어 AI 윤리 부서의 설립자인 마가렛 미첼(Margaret Mitchell)의 해고는 커뮤니티에 큰 충격을 줬다. 팀닛 게브루는 거대언어모형의 한계와 위험성에 대한 연구를 수행했으며, 이를 정리한 논문을 발표하기 전 Google AI 총괄 부사장인 제프 딘(Jeff Dean)으로부터 해고 통보를 받았다.

마가렛 미첼은 팀닛 게브루를 지지한 연구자 중 한 명이었으며, 해고 후 지난 8 월 오픈소스 AI 플랫폼 기업 Hugging Face 에 입사했다. ML 연구자의 대다수는 AI 안전(AI Safety)에 관한 연구가 지금보다 더 우선시될 필요가 있다고 응답했다. Cornell, Oxford, UPenn 이 최상위 ML 컨퍼런스에 게재된 524 명의 연구자를 대상으로 설문한 결과, 68%의 응답자가 AI 안전에 관한 연구가 더 우선시되어야 한다고 응답하였으며, 이는 49%를 기록한 '16 년의 결과보다 훨씬 높은 결과를 나타낸다. 민간 기업 중에서는 OpenAI, DeepMind, Google, Microsoft 가 공익적 목적에 맞게 잘 개발되고 있다고 인식되는 반면, Facebook, Tencent, Alibaba, Baidu 등은 상대적으로 낮은 인식 결과를 보인다.

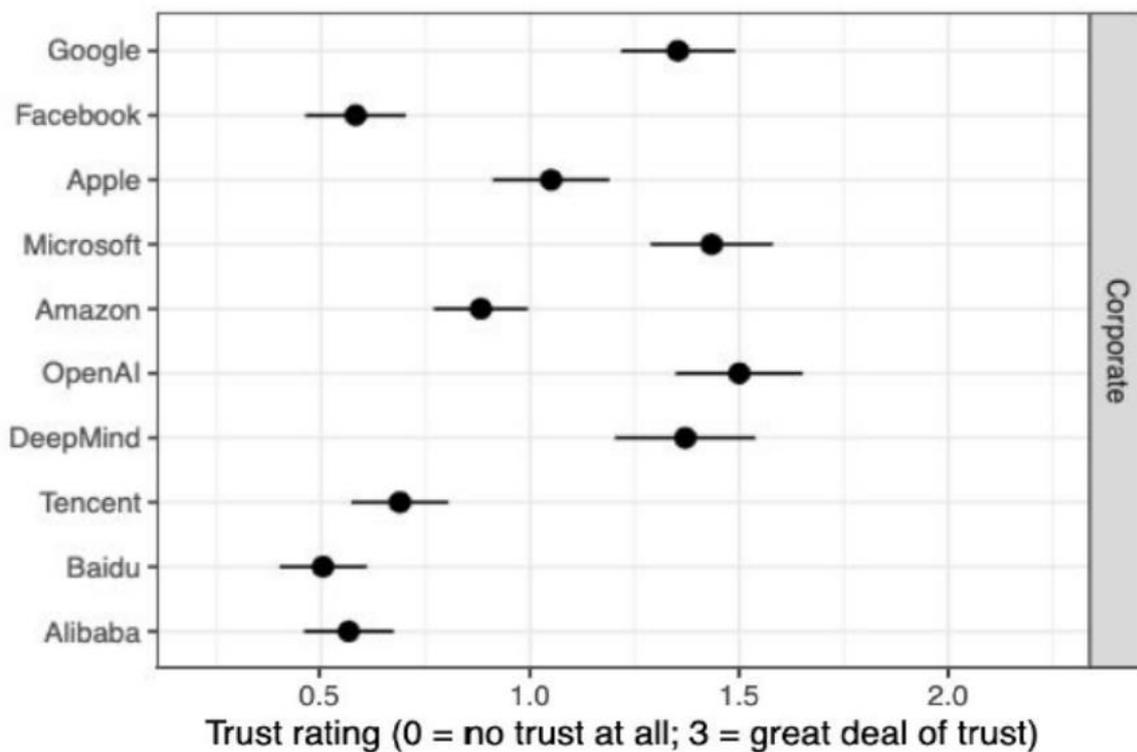


Figure 21. Trust of AI [28, 30]

AI 안전이 중요한 이슈임에도 불구하고, 7 개의 주요 기업에서 AI Alignment(AI 조정) 전담 연구자는 100 명이 채 되지 않는다. AI 조정은 점점 더 높은 성능을 가진 AI 시스템이 인간성(humanity)과 일치하는 목표를 갖도록 하는 방안을 탐색하는 연구 분야로, AI 안전에서 핵심적인 부분을 차지한다. DeepMind 가 40 명 규모의 AI 조정 전담팀을 보유하고 있음에도 불구하고, 전 세계 AI 연구 커뮤니티의 AI 조정 전담 연구자는 100 명 미만이다.

Number of team members working on AI Alignment

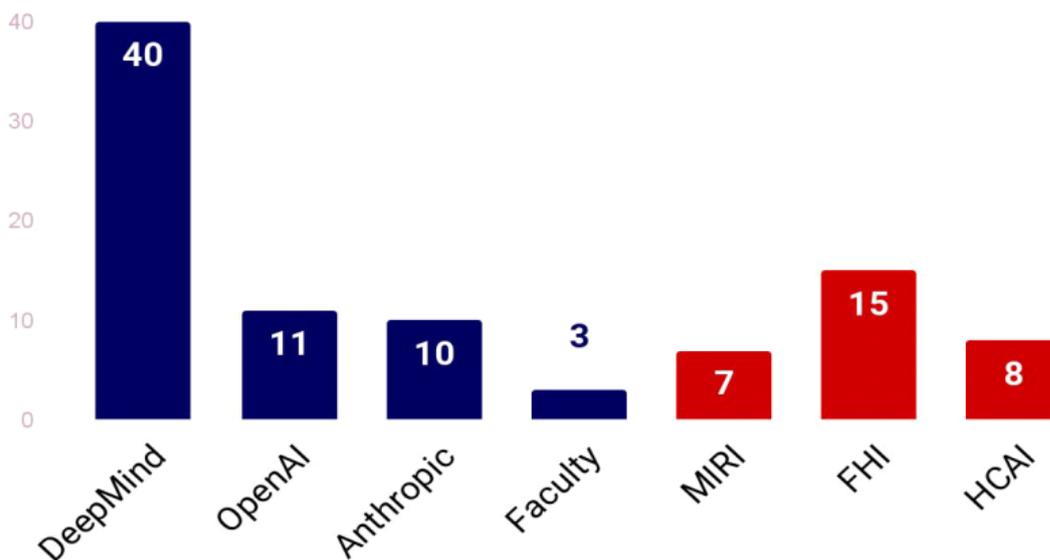


Figure 22. Number of AI Coordination Researchers Dedicated [28, 30]

GPT-3 를 만든 OpenAI 의 주요 연구자 중 다수는 OpenAI 를 떠나 새로운 AI 안전 전문 기업 Anthropic 으로 이직했다. Anthropic 은 AI 시스템의 안전성을 늘리기 위한 연구에 집중하고 있으며, 특히 거대 AI 모형의 신뢰성을 높이는 데 주력하고 있다. Eleuther AI 는 오픈소스를 통해 GPT 모형의 민주화를 시도했다. GPT-3 는 모형과 학습용 데이터를 공개했던 전신 모형(GPT-1, GPT-2)과는 다르게 Microsoft 와의 파트너십을 통해 상업용 API 형태로 접근을 제한한다. 이에 반대하는 연구 그룹 Eleuther AI 는 27 억 개의 파라미터를 보유하면서

GPT-3의 최소 성능에 준하는 모델 GPT-Neo를 개발했으며, '21년 1월에는 언어모형 학습을 위해 필요한 약 800GB 분량의 영어 텍스트 데이터셋 더파일(The Pile)을 무료 공개했다. '21년 4월 유럽연합 집행위원회(EC)는 신뢰 가능한 AI 생태계 구축을 위한 AI 규제안(AI Act)을 발표했다. 정부, 학계, 산업으로 대표되는 중국의 AI 주체는 오랫동안 AI 윤리에 관심을 갖고 있었으며, 윤리적 AI 시스템 설계를 위해 다양한 이니셔티브를 통해 AI 윤리 원칙 등을 발표했다. 그러나 대부분 실행 단계로 이어지지 못했으며, AI 윤리는 상위의 정치적 관심에 종속되는 경향을 보인다. 향후 일어날 것으로 예상되는 8가지 항목을 Table 5에 나타내었다.

Table 5. Prediction of AI 2021 Report

No.	예측 내용
1	World model 학습에 사용되는 순환신경망 모형을 transformer가 대체하고, 거대하고 풍부한 게임 환경에서 강화학습의 agent(학습 주체)가 인간 학습 성능을 넘어설 것
2	ASML의 시가총액 약 500조 원 달성
3	Anthropic이 범용인공지능(AGI) 연구의 세 번째 축으로서 GPT, Dota, AlphaGo와 비슷한 수준의 모형을 개발 및 공개할 것
4	AI 반도체 산업계에서 거대기술기업 또는 주요 반도체기업에 의해 Graphcore, Cerebras, SambaNova, Groq, Mythic 등의 AI 컴퓨터시스템 기업 합병 유행의 바람이 불 것
5	소규모 트랜스포머 모형(적은 수의 레이어 또는 파라미터로 구성)과 CNN을 섞은 하이브리드 모형이 ImageNet의 top-1 accuracy (CoAtNet-7, 90.88%, 2.44조개의 파라미터)에서 약 10배 정도 적은 파라미터만으로도 현재 최고 수준이 도달할 것
6	물상과학(Physical Science) 분야에서 DeepMind가 획기적인 연구 결과를 발표할 것
7	PapersWithCode의 측정 기준으로, JAX 프레임워크를 활용한 연구는 매월 1%에서 5% 비중까지 증가할 것

8	버티컬 부문(예: 개발자 툴, 생명과학 등)에 초점을 맞춘 로드맵을 가진 새로운 범용인공지능(AGI) 연구 기업이 큰 투자를 받아 등장할 것
---	--

1.1.4 NOx 저감 연구동향

1) NOx chemical reaction

대기중에 있는 질소산화물 중 가장 중요한 형태는 일산화질소(NO, Nitric oxide)와 이산화질소(Nitrogen dioxide, NO₂)이며, 이 둘을 합쳐서 질소산화물(Nitrogen oxide, NO_x)로 표현하기도 한다 [32]. 질소산화물은 주로 공기 중에서 질소가스(Nitrogen, N₂)가 분해되어서 생성되지만, 아주 강하게 결합하고 있는 두 개의 질소 원자를 원자상태로 쪼개는 것은 쉽지 않다. 내연기관의 연소에 따라 일산화질소가 주로 발생하는데, 대기 중에 방출되어 산화되면 이산화질소가 된다. 고농도의 활성 사슬 반응 중심의 가스 디젤의 연소실에서 생성되며, 이는 디젤 연료 방울이 증발하고 연소되는 부근에서 메탄 탄화수소의 파괴적인 변환, 산화 및 분해를 초래한다. 이러한 조건에서 질소산화물(Nitrogen oxide, NO_x)의 형성은 두 가지 주요 특징으로 특징지어진다. 첫째, 이 과정에서 결정적인 역할은 열 뿐만 아니라 활성 입자의 높은 국소 농도로 인한 반응의 연쇄 가속에 의해서도 수행된다. 둘째, 질소산화물의 형성 과정은 활성 입자 및 산소 소비의 경쟁과 밀접한 관련이 있다 [33]. 연소과정에서 NO_x 형성 반응은 열(Zeldovich), 신속(Fenimore), N₂O 경로, 연료 결합 질소 및 NNH 메커니즘은 디젤 연소에서 NO 형성에 대한 가장 일반적인 메커니즘으로 볼 수 있다 [34]. NO_x 형성 반응의 메커니즘을 이해하는 것은 NO_x 배출을 줄이려는 시도에 중요하다.

Zeldovich mechanism

NO_x 생성은 이 메커니즘에 의해 1700K 이상의 온도에서 발생합니다 [35]. 이 온도에서 질소(N₂)와 산소(O₂)는 Zeldovich 메커니즘으로 알려진 일련의 화학 단계를 통해 반응한다.

형성 속도는 온도에 따라 빠르게 증가한다. 이 열 NO_x 형성 메커니즘은 총 NO_x의 주요 원인으로 여겨진다. 열 NO_x 형성에 대한 기본 화학반응은 다음 반응식 (1)~(3)으로 설명된다.

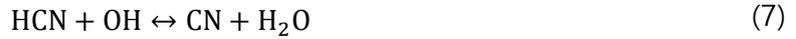
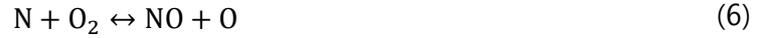


Hu 와 Huang [36]은 이론적으로 질소산화물(Nitrogen oxide, NO_x) 형성이 반응물의 농도와 온도라는 두 가지 요인에 직접적으로 의존한다는 것을 증명했다.

Prompt mechanism

NO_x 형성으로 이어지는 두 번째 메커니즘의 존재는 페니모어에 의해 처음 확인되었으며 "프롬프트 NO_x"라고 명명되었다. 저온, 연료가 풍부한 조건 및 체류 시간이 짧은 경우와 같은 일부 연소 환경에서 질소산화물(Nitrogen oxide, NO_x)가 상당히 많이 생성될 수 있다는 좋은 증거가 있다 [37, 38]. 프롬프트 NO_x는 풍부한 화염에서 가장 일반적이다. 프롬프트 NO_x는 탄화수소 구조에 대한 의존성 때문에 화학 연료에서 Thermal NO_x보다 더 민감하다. Miller와 Bowman[39]은 연소에서 질소산화물 생성의 메커니즘과 모델링을 연구하고 총 NO_x 생성량을 추정하기 위해서는 신속한 NO_x를 고려해야 한다고 언급했다. 이는 Ren과 Li[40]의 최근 연구에서도 확인되었다. 상기 NO_x는 일반적으로 다음과 같은 반응식 (6) 또는 (8)을 통해 형성된다.





여기서, CH와 CH₂는 프롬프트 NO_x를 형성에 중요한 기여를 하는데, 반응식 (4)~(5)을 통해 형성된다. HCN의 양은 탄화수소 라디칼의 농도가 증가함에 따라 증가하며 당량비가 증가함에 따라 증가한다. NO_x 생성은 당량비가 증가함에 따라 증가하다가 산소 부족으로 인해 피크에 도달하고 감소한다.

Fuel NO_x mechanism

Fuel NO_x는 연소 과정에서 연료에 화학적으로 결합된 질소가 과잉 산소와 결합할 때 생성된다. 디젤 연료에 함유된 질소 수준이 낮기 때문에 Fuel NO_x 유형은 디젤 연소에서 무시할 수 있다 [41]. 질소를 포함하는 첨가제(예: 피리딘, 피롤 등)를 추가하면 연료 NO_x가 더 많이 생성될 수 있다. 이는 N-N 결합에 비해 C-N 결합이 약하기 때문으로 볼 수 있다. 피리딘과 피롤의 C-N 결합은 Figure 23에 나타나 있다. 이러한 유형의 NO_x 형성의 주요 경로는 HCN, NH₃, NH 또는 CN과 같은 종을 포함하는 중간 질소 생성을 포함한다. 이 분자들은 산화되어 NO_x를 형성할 수 있다 [38].

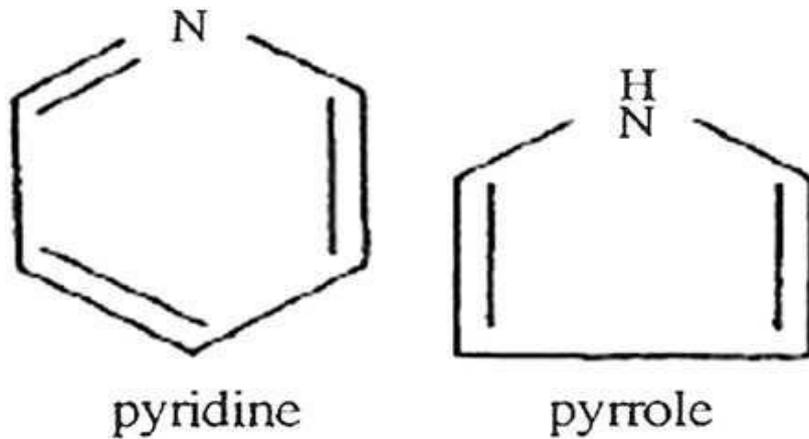


Figure 23. Organic, fuel bound nitrogen compounds in solid fuels.

N₂O pathway mechanism

N₂O 경로로 인한 NO_x 형성은 Fenimore 일산화질소(Nitric oxide, NO)와 비교하여 고압 및 희박 공연비 하에서의 연소 과정에서 또 다른 필수적인 메커니즘이며, Thermal NO 메커니즘과 관련된 NO_x 형성에 약간의 기여를 합니다 [42]. 이 메커니즘에서, N₂와 산소 원자 사이의 반응은 3 체 반응에 의해 아산화질소(Nitrous oxide, N₂O)를 형성한다.



여기서, 분자 M 은 이 반응을 수행하는 데 필요하다. 반응 (9)에서 형성된 아산화질소(Nitrous oxide, N₂O)는 반응하여 식 (10)에 표시된 일산화질소(Nitric oxide, NO)를 형성할 수 있다.



The NNH mechanism

연소 과정에서 화염 전면의 원자가 고농도인 조건에서 반응식 (11)은 NO 를 생성하는 데 크게 기여한다.



이 메커니즘은 N₂로부터 NNH 를 형성하기 위해 H 원자의 참여와 NNH 와 반응하기 위해 O 원자가 필요하다 [34].

2) NO_x reduction method

질소산화물(Nitrogen oxide, NO_x) 배출 저감방식은 NO_x trap 과 선택적 촉매 환원 방법이 널리 알려져 있다. NO_x 트랩은 산화 촉매(백금), 흡착 물질(BaO) 및 환원 촉매(로듐)로 구성되어 있다. 2 단계 메커니즘에 따라 흡착/재생 반응이 일어나며, Figure 24 에서 확인할 수 있다 [43].

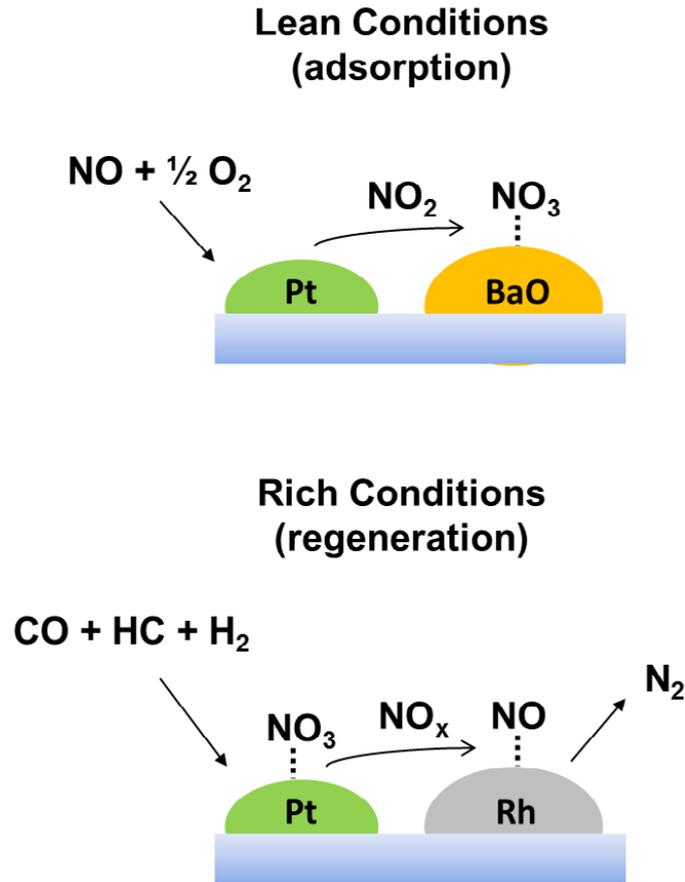


Figure 24. The basic concept of NO_x storage and reduction mechanisms Source

첫번째 메커니즘은 흡착반응으로 다음의 화학반응식과 함께 상세한 원리를 설명할 수 있다. 우선적으로 반응식 (12)와 같이 Pt 와 같은 산화 촉매에 의해 일산화질소(Nitric oxide, NO) 가 이산화질소(nitrogen dioxide, NO₂)로 산화되는데, NO_x 트랩은 NO 보다 NO₂ 포획에 더 효과적이기 때문이다 [44]. 고체 표면에 형성된 NO₂ 는 화학반응식(13)~(15)를 거쳐 화학적으로 안정한 질산염(Ba(NO₃)₂) 형태로 포획된다. NO_x 트랩의 흡착 용량은 BaO 크기에 따라 달라지며, 컨버터 출구에서 특정 NO_x 농도에 도달하면 재생반응이 활성화된다.





두번째 메커니즘은 재생반응이다. 반응식 (16) 과 같이 $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ 결합이 분해되면서 BaO 가 활성상태로 회복된다. 연료가 과농 상태로 전환되면 반응식 (17), (18)과 같이 탄화수소(Hydrocarbon, HC), 일산화탄소(Carbon monoxide, CO) 및 수소(Hydrogen, H_2)가 일산화질소(Nitric oxide, NO)와 반응하여 질소(Nitrogen, N_2), 이산화탄소(Carbon Dioxide, CO_2) 및 H_2O 를 형성한다. 따라서 재생반응으로 인하여 발생하는 NO 는 질소와 CO_2 , H_2O 로 변환되어 배출된다.



방식에 따라 LNT (Lean NO_x Trap), NAC (NO_x Adsorber Catalyst), DNT (DeNO_x Traps), NSC (NO_x Storage Catalysts), NSR (NO_x Storage Reduction)이 있다 [45].

NO_x 를 제거하기 위한 여러 기술이 연구되고 있지만, SCR system 은 NO_x 를 가장 표준적으로 제거하는 기술로 소개되고 있다 [46, 47]. SCR 은 촉매 반응으로 질소 산화물(NO_x)을 질소 분자(N_2) 및 물(H_2O)로 변환 및 배출한다. 일반적으로 촉매는 단일 금속 산화물, 혼합 금속 산화물, 담지 금속 산화물 및 금속 교환 제올라이트를 사용하고, 환원제로는 암모니아, 요소, 탄화수소 및 수소를 이용한다 [48]. 탄화수소를 사용한 촉매 환원은 HC-SCR 으로 명명되며, 암모니아(또는 요소)를 사용한 촉매 환원은 일반적으로 NH₃-SCR 으로

알려져 있다. 유해하고 부식성이 있는 NH₃의 취급을 피하기 위해, 수용액으로 취급하기 쉬운 요소를 사용한 촉매 환원은 Urea-SCR로 알려져 있다 [49]. 마지막으로 청정 환경 연료인 수소(H₂)를 사용한 촉매 환원은 H₂-SCR로 소개되며, 공기와의 연소 후 CO₂와 같은 2차 오염 물질을 유도하지 않고 H₂O만 생성한다 [50]. 따라서 NH₃, Urea, HC와 비교하여, H₂-SCR은 NO_x 제거에 대해 더 많은 관심을 받고 있다. 하지만 환원제의 보관 및 공급 등의 현실적인 활용방안에 있어서 Urea가 가장 안정성이 있기 때문에 다양한 산업군에서 NH₃-SCR 촉매 환원 방식이 활용되고 있다. 각각의 장치들은 메커니즘에 따라 장단점이 있으며, 상황에 따라 조합하거나 독립적으로 이용된다.

1.1.5 SCR 시스템 최적화 연구동향

상용화된 Urea-SCR 시스템의 성능을 최적화하기 위한 연구들이 활발히 이뤄지고 있다. 암모니아의 분사각을 배기가스 유동 방향으로 배치하면 초기 모델보다 16% UI 성능이 향상된다 [51]. 배기관에 장착된 믹서는 와류를 일으켜 배기가스와 암모니아의 효과적인 혼합을 수행할 뿐만 아니라 벽면 습윤을 지연시켜 가수분해 및 열분해 환경이 왕성하게 된다. 그 결과 초기 모델보다 17.95% UI 성능이 향상되었다 [52]. Ye et al. [53]은 3차원 시뮬레이션 모델을 개발하여 요소-수액 분사 시스템에서 생성되는 NH₃ 균일도와 전환율을 조사한 바 있으며, 혼합기의 영향이 크며, 이중 믹서의 사용으로 요소 전환율과 NH₃ 균일도 지수가 각각 169.5%, 136.4%의 현저한 증가를 보임을 알 수 있었다. 앞선 사례들을 통해서 Urea-SCR 시스템의 분사위치, 믹서위치 및 믹서형상 등의 구조 최적화를 통해 성능이 향상되었으며, 전통적인 실험 계획법이 사용되었음을 알 수 있다.

최근에는 메타모델을 이용한 성능 최적화 연구가 활발하게 이뤄지고 있다. 메타모델은 인공지능 기술을 기반하기 때문에 다양한 설계변수를 고려한 비선형적인 모델도 쉽게 최적화할 수 있으며, 앙상블 결정트리(Ensemble Decision Tree, EDT), Kriging, and 방사형 기본함수(Radial Basis Function, RBF) 등의 알고리즘으로 구성되어 있다. 비선형성 등 데이터의 특성에 따라 적절한 알고리즘을 선택하는 것이 중요하다 [54, 55]. 또한 다음과 같은 장점이 있다. 순차 샘플링을 통해 시료의 수를 최소화함으로써 수치해석에 소요되는 시간을 단축할 수 있으며 [56, 57], 기여도 분석을 수행하여 성능 향상에 효과적인 설계변수를 확인할 수 있다 [58]. 메타모델을 이용한 최적화 사례는 다양한 분야에서 이뤄지고 있으며 다음과 같다. Hoang et al [59]은 콘크리트 고속도로 교량의 Kriging 메타모델을 이용하여 지진취약도 해석을 연구하였다. Permanent magnet synchronous motor (PMSM)은 Kriging 과 MLP 알고리즘을 적용한 메타모델을 이용하여 형상 최적화를 진행하였다. 그 결과 Kriging 모델에서 1.3%, 다층뉴런신경망(Multi-Layer Perceptron, MLP)모델에서 2.2%의 토크 성능 향상뿐만 아니라 역기전력(EMF)에서도 4.3% 향상된 것으로 나타났다 [60]. Optimization assisted simulation integration software (OASIS) 최적화 도구를 사용하여 임펄스 터빈의 출력을 5.33% 향상시키고 분석 비용을 절감하였다 [61]. 본 연구에 사용된 최적화 소프트웨어 process integration automation and optimization (PIAnO)를 이용한 연구도 활발하게 이뤄지고 있으며 다음과 같은 사례들이 있다. 계류 시스템의 구조 설계 최적화에 따라 생산비용을 52% 이상 절감하는 데 도움이 되었으며 [62], wound-field synchronous machines (WFSMs)의 구조최적화에 따라 토크가 크게 향상(31.66%)되고 토크 리플이 감소하는 것으로 나타났다 [63].

다양한 사례들을 통해 최적화방법은 다양하며 주어진 상황에 따라 적절한 방법을 선택하여 최적의 결과를 얻을 수 있다는 것을 확인할 수 있다. 따라서 최적화방법론에 대한 배경지식은 엔지니어에게 반드시 필요하다고 할 수 있다.

제 2 장 연구 목적

본 연구에서는 다양한 최적화 방법을 이용하여 Selective catalytic reduction(SCR) 시스템의 정화 성능향상, 주요설계인자 분석 및 성능예측 프로세스를 구축하고자 한다. SCR 시스템을 설계하기 위해서는 성능에 영향을 미치는 변수들을 분석하여 반영해야 한다 [64, 65]. 또한 암모니아의 Uniformity index(UI)는 NO_x 정화효율과 촉매수명에 기여하기 때문에 SCR 시스템 성능의 평가지표로 적합하다고 할 수 있다 [66]. SCR 시스템에서 배기가스 중 NH₃의 농도가 낮으면 NO_x의 정화 효율이 저하되거나 반대로 NH₃의 농도가 과다하게 높아지면 시스템내의 고착화 현상 및 NH₃ 슬립현상이 발생되기 때문이다 [67].

최적화 방법에는 전술한 바와 같이 엔지니어의 경험을 바탕으로 검증하는 Trial and Error 방법, 통계적인 확률을 이용하는 실험계획법, 머신 러닝 알고리즘을 활용한 메타모델링 방법이 있다. 각각의 최적화 방법은 개발목적에 따라 장단점이 뚜렷하기 때문에 결과를 비교하여 활용하고자 한다. Trial and Error 방식은 엔지니어의 경험에 기대하여 하나의 설계위치를 선정하는 방식이다. 의사결정에 있어 단순하기 때문에 개발비용, 시간 측면에서 장점이 있지만, 설계변경 요구가 있을 경우 모든 과정을 새롭게 해야 하며 설계방향성을 분석하기 어려운 점이 있다. 실험계획법은 설계영역을 통계학적인 방법으로 구역을 나누어 Selective catalytic reduction 성능 결과를 수집한다 [59, 68]. 그리고 수집된 결과 중에서 가장 좋은 성능결과를 선택하게 된다. Trial and Error 방식보다는 개발비용, 시간이 많이 소요되지만 높은 확률로 최대성능을 찾을 수 있으며, 설계인자들의 상호 관계성을 일부 판단할 수 있다. 머신 러닝 알고리즘을 활용한 메타모델링 방법은 성능이 최대화가 되는 설계 위치를 찾을 뿐만 아니라, 가장 영향력이 큰 설계인자를 분석할 수 있다. 또한 설계영역 전체를 나타내는 메타모델이 있기 때문에, 원하는 설계 위치에서의 성능 값을 쉽게 예측할 수 있다.

메타모델은 실험계획법에 비해 초기 약 3 배 정도 시간, 비용이 발생하지만 확실한 최대 성능 위치를 찾을 수 있을 뿐만 아니라 설계 변수의 변화에 유연하게 성능지수를 예측 할 수 있다. 또한 한번 셋업한 메타모델은 다른 아이টে을 쉽게 적용할 수 있는 장점이 있어 실질적으로 시간과 비용측면을 고려하면 상당한 효과적인 감소가 될 것으로 예상된다.

제 3 장 실험 장치 및 연구 방법

3.1 최적화 방법

최적화는 설계에 적용할 수 있는 강력한 도구이며, 오늘날 다양한 이름으로 불리며 사용되고 있다. 최적화 문제를 올바르게 설정하는 것은 간단하지 않기 때문에 최적화 알고리즘의 작동 방식에 대한 지식을 갖는 것이 무엇보다 중요하다. 이론에 대한 더 나은 지식은 알고리즘 개발자들로부터 얻을 수 있으므로, 당면한 최적화 문제에 따라 더 나은 알고리즘을 선택할 수 있다.

3.1.1 실험계획법(Design of Experimental)

통계 실험 설계는 DOE의 기초가 되는 기본 아이디어와 함께 1920 년대에 Ronald Aylmer Fisher 경의 연구에서 탄생했다 [69]. 1951 년 RSM 을 개발한 Box 와 Wilson 에 의해 알려지게 되었다 [70]. 1980 년대에는 Genichi Taguchi 는 품질 개선 측면에서 중요성을 강조하였으며, 통계 실험 설계를 대중화에 상당한 영향을 미쳤다 [71, 72]. 최적화 이론에서 실험의 목적은 반응에 가장 영향력 있는 변수를 결정하는 것, 영향력 있는 제어 가능한 변수를 설정하는 위치를 결정하여 반응이 거의 항상 원하는 최적 값에 근접하도록 하고, 반응의 변동성이 작도록 하여 통제 불가능한 변수의 효과를 최소화하는 것이다 [73]. 따라서 실험의 목적은 본질적으로 최적화이며, 실험계획법(Design of Experimental, DOE)은 효율적으로 실험이 진행될 수 있도록 안내하는 데 사용되는 기법에 사용되는 이름이다. 실험계획법을 수행하려면 문제를 정의할 통해 변수선택 및 각 변수에 대한 범위를 설정해야 하며, 변수의 범위는 정성 이산형, 정량 이산형 및 양적 연속형 변수로 처리할 수 있고 양적 연속형 변수는 범위 내에서 이산화 한다 [74]. 실험 설계는 물리적 프로세스와 컴퓨터 시뮬레이션 모델에 모두 적용할 수 있다. 실험 설계는 수집할 데이터의 양을 최소화하면서 연구에서 얻은 정보의 양을

최대화하는 효과적인 도구이다. 실험계획법에는 일반적으로 실험 오차가 발생하는 데이터가 포함되며, 결과는 노이즈의 영향을 크게 받을 수 있다. 따라서 적절한 통계적 방법으로 데이터를 분석하는 것이 좋다. 실험 설계에서 통계 방법의 기본 원칙은 Replication, Randomization 및 Blocking 이다 [75]. Replication 은 보다 정확한 결과를 얻고 실험 오차를 추정하기 위해 실험을 반복하는 것이다. Randomization 는 실험이 수행될 랜덤 순서를 의미하며, 각각의 실험 조건은 서로 독립적이다. Blocking 은 알려진 체계적 편향 효과를 격리하고 주효과를 모호하게 하는 것을 방지하는 것을 목표로 한다. 이것은 실험들을 서로 유사한 그룹으로 배열함으로써 달성된다. 이러한 방식으로, 변동성의 원천들은 감소되고 정밀도가 향상된다. 실험 설계에서 실제 사용되는 주요 기술은 Table 6 에 실험 횟수 및 목표와 함께 요약되어 있다 [74]. 적합한 DOE 기법의 선택은 실험목적에 따라 다르다. 주효과에 대한 대략적인 추정치가 충분하다면 Plackett-Burman 방법이 바람직하다. 주효과와 일부 교호작용 효과를 보다 정확하게 계산해야 하는 경우 Fractional 또는 Full Factorial 방법이 더 좋다. 주요인에 초점을 맞추는 것이 목표라면 Latin square 또는 Randomized Complete Block Design 이 적합할 것이다. 노이즈 변수가 문제에 큰 영향을 미칠 수 있는 경우 상대적으로 저렴한 방법이 단점을 초래하더라도 Taguchi 방법이 제안된다. RSM 을 사용하려면 Box-Behnken, Full Factorial, Central Composite 또는 Space Filling Technique 기법을 선택해야 한다.

Table 6. DOE methods synoptic table

No.	구 분	내 용
1	FFD (Full Factorial Design)	<ul style="list-style-type: none"> · 인자가 2,3 수준 시 주로 사용 · 수준 증가 시 실험회수의 급격한 증가 · 실험회수 부담 시 OA 사용
2	CCD (Central Composite Design)	<ul style="list-style-type: none"> · 비교적 적은 회수로 2 차 반응표면 생성 · 회전성 만족
3	OA (Orthogonal Array)	<ul style="list-style-type: none"> · 직교성 만족 · 비교적 적은 실험회수 요구
4	LHD (Latin Hypercube Design)	<ul style="list-style-type: none"> · 인자수가 많은 경우 효율적 샘플링 · 자유로운 실험점 개수 및 수준 설정 · 모든 인자의 수준이 동일해야 함
5	OLHD (Optimal Latin Hypercube Design)	<ul style="list-style-type: none"> · 충전성과 투영성을 모두 고려 · 전역 최적화 필요 · 수치적 부담, 전역해 찾기 어려움
6	CVT (Centroidal Voronoi Tessellation)	<ul style="list-style-type: none"> · 충전성만 고려 · 설계영역 경계에 실험점 없음 · OLHD 대비 수치적 부담 적으나 Sobol 대비 큼 · 인자수가 증가하면 충전성이 급격히 나빠짐
7	SS (Sobol Sequence)	<ul style="list-style-type: none"> · 투영성만 고려 · OLHD, CVT 대비 수치적 부담이 없음 · 정해진 Sobol Sequence 를 초과하는 실험점 생성 불가(인자수 한계) · 인자수가 증가하여도 안정적인 투영성 유지

3.1.2 Taguchi

일본의 Genichi Taguchi 에 의해 품질 관리업무를 개선하기 위해 개발되었다 [76]. 이 방법은 통제 불가능한 요인의 변동에 덜 민감하도록 만들기 위해 통제 가능한 요인의 최적 값을 찾는 것과 관련이 있으며, Taguchi Robust Parameter 설계 문제라고 한다. Taguchi 방법은 mixed levels, highly fractional factorial designs 및 other orthogonal 설계를 기반으로 한다. 내부 배열은 제어 가능한 변수 설계영역이라 하며, 외부 배열은 노이즈 변수에 대해 선택된 설계라고 한다. Taguchi 설계에 대한 중요한 점은 이러한 방법으로 제어 가능한 변수와 노이즈 변수 간의 상호 작용에 대한 정보를 제공한다는 것이다. 이러한 상호 작용에 관한 정보는 실험설계에 있어서 매우 중요하다.

Figure 25 와 같이 5 개의 변수를 고려하여 내부 및 외부 배열에 대한 2-levels 완전 요인 실험 설계를 표현할 수 있다. 제어 가능한 변수($k_{in} = 3$) 와 제어 불가능($k_{out} = 2$)한 변수로 구성되어 있다.

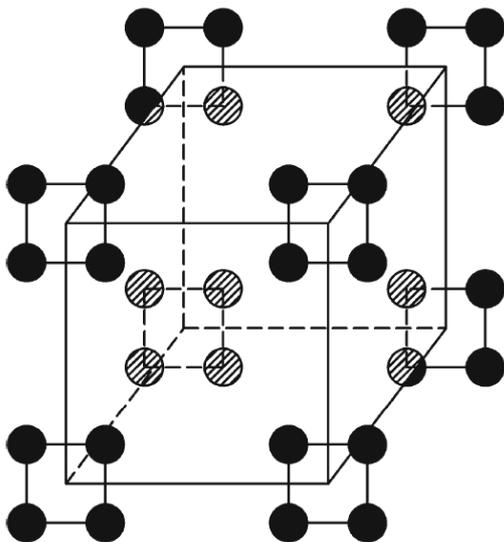


Figure 25. Example of Taguchi DOE

Taguchi 성능을 판별하는 기준으로 평균과 표준편차를 고려하지 않으며, 신호 대 신호대잡음비(Signal to noise, SN)라고 부르는 최대화해야 할 60 가지 이상의 성능 척도를 제안했다. 조사된 문제의 성격에 따라 적절한 비율을 선택할 수 있다.

- smaller-the-better: 반응 변수 최소화

$$SN_{stb} = -10\log_{10} E[y_i^2] \quad (19)$$

- larger-the-better: 반응 변수 최대화

$$SN_{ltb} = -10\log_{10} E\left[\frac{1}{y_i^2}\right] \quad (20)$$

- nominal-the-best: 반응 변수에 대한 목표 값을 찾을 때 사용

$$SN_{ntb} = -10\log_{10} \frac{E^2[y_i]}{E[(y_i - E[y_i])^2]} \quad (21)$$

Taguchi 방법에 따라 내부 배열과 외부 배열은 게시된 직교 배열 목록에서 선택한다. 파라미터의 수와 레벨의 수에 따라 어떤 배열을 사용할 것인지에 대한 제안은 Table 7 에 요약되어 있으며, L8 및 L9 Taguchi 배열은 Table 8 과 같이 정리할 수 있다.

Table 7. Taguchi designs synopic table

Number of variables	Number of levels			
	2	3	4	5
2, 3	L4	L9	LP16	LP25
4	L8	L9	LP16	LP25
5	L8	L18	LP16	LP25
6	L8	L18	LP32	LP25
7	L8	L18	LP32	L50
8	L12	L18	LP32	L50
9, 10	L12	L27	LP32	L50
11	L12	L27	N/A	L50
12	L16	L27	N/A	L50
13	L16	L27	N/A	N/A
14, 15	L16	L36	N/A	N/A
from 16 to 23	L32	L36	N/A	N/A
From 24 to 31	L32	N/A	N/A	N/A

Table 8. Example of Taguchi arrays

L8(2 levels)	Variables						
Experiment number	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7
1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	2	2	2	2
3	1	2	2	1	1	2	2
4	1	2	2	2	2	1	1
5	2	1	2	1	2	1	2
6	2	1	2	2	1	2	1
7	2	2	1	1	2	2	1
8	2	2	1	2	1	1	2
	Variables						

L9(3 levels)	X1	X2	X3	X4	
Experiment number					
1	1	1	1	1	
2	1	2	2	2	
3	1	3	3	3	
4	2	1	2	3	
5	2	2	3	1	
6	2	3	1	2	
7	3	1	3	2	
8	3	2	1	3	
9	3	3	2	1	
LP16(4 levels)	Variables				
Experiment number	X1	X2	X3	X4	X5
1	1	1	1	1	1
2	1	2	2	2	2
3	1	3	3	3	3
4	1	4	4	4	4
5	2	1	2	3	4
6	2	2	1	4	3
7	2	3	4	1	2
8	2	4	3	2	1
9	3	1	3	4	2
10	3	2	4	3	1
11	3	3	1	2	4
12	3	4	2	1	3
13	4	1	4	2	3
14	4	2	3	1	4
15	4	3	2	4	1
16	4	4	1	3	2

다구찌 방법은 직교 배열을 통계적 방식으로 사용하여 여러 변수의 효과를 동시에 탐색할 수 있게 한다. 특히 실험계획법(Design of experiments, DOE)은 해결하고자 하는 특정 인자의 문제에 대해 실험순을 계획하고 실험을 실시하는 기법이다. 실험계획법(Design of experiments, DOE)에서 Robust Design 으로 통칭되는 다구찌 방식을 적용하고자 하는 목적은 제어 가능한 인자로 제어할 수 없는 노이즈에 대한 강건한 설계를 적용하기 위함이다.

Figure 26 은 다구찌의 신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio, SNR)의 효율성 평가 및 분포를 보여주는 것이며 각 항목별 정의는 다음과 같다. Signal Factor 는 원하는 출력을 얻기 위하여 사용자에게 의해 정해지는 인자이다. 신호 인자에 따라 출력(Response)이 선형적인 비례 관계가 있다. 잡음 인자(Noise Factor)는 제어 가능하지 않은 인자로 품질 특성에 산포로 나타나게 된다. 잡음 인자는 품질 특성에 큰 영향을 주기 때문에 제어 인자(Control)의 수준 설정은 잡음 인자의 영향에 따라 결정되며 좋은 품질 특성을 기대하기 위해서는 잡음 인자의 영향력을 감소시켜야 한다. Control Factor 는 설계자가 자유롭게 변화시킬 수 있는 인자이다. 설계자가 자유롭게 그 중심치나 수준을 결정할 수 있는 변수를 말한다. 응답(Response)은 출력(Output)을 의미하며, 결과 특성에 따라 망대 특성(Large the Better Characteristics), 망목 특성(Nominal the Best Characteristics), 망소 특성(The Smaller the Better Characteristics)의 3 가지 분류로 나눌 수 있다.

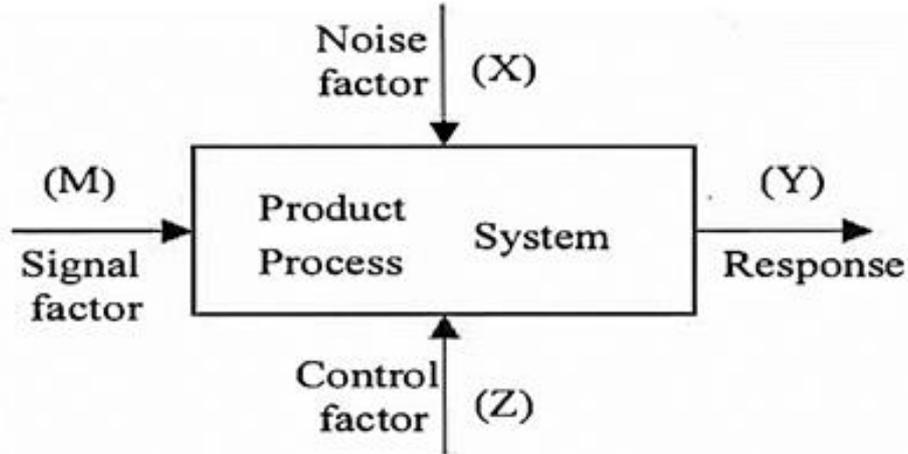


Figure 26. Evaluation of the Distribution related Taguchi's Signal-to-Noise Ratio

상기 내용에 언급했듯이, 최적 설계 과정에서 설계 대상의 설계 변수를 모두 이용해 설계를 진행하면, 설계 자유도가 증가하게 되고, 증가한 만큼 설계에 소요되는 비용과 시간 또한 증가하게 된다. 따라서 시간과 비용을 줄이기 위해 성능 변화에 주요한 기여를 하는 설계 변수만을 우선적으로 검토되는 인자를 주요 인자로 선정해야 한다. 신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio)에 대한 주효과(Main Effect)를 도출하기 위해서는 먼저 주요 설계 인자별 수준(Level)을 정하는 게 중요하다.

미니탭 프로그램에서는 각 반응 특성(Average, Signal-to-Noise Ratio, Standard Deviation)에 대한 반응 표를 계산한다. 예를 들어, 유저가 Signal-to-Noise Ratio 를 선택했으며 수준(Level)이 3 개(1 과 2 그리고 3)이고 각 수준에서 신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio) 4 개의 평균, 수준 2 에서 다른 신호대잡음비의 평균을 계산하며, 수준 3 또한 다른 신호대잡음비의 평균을 계산한다.

신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio)의 응답(Response)에 대한 분석 용어 정의는 아래와 같다. 델타(Delta)는 Factor 의 최대 특성 평균과 최소 평균의 차이를 구해 효과의 크기를 측정한 값이다. 순위(Ranking)는 델타값이 가장 큰 요인에 순위가 부여되고 델타값 다음으로

큰 요인에 순위 2 가 부여되는 방식으로 순위가 정해진다. 신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio)의 분산 분석(ANOVA)에 대한 분석 용어 정의는 다음과 같다. DF(Degree of Freedom)는 데이터 내 정보의 양이다. 일반적으로 실험의 관측치 수로 결정된다. Seq SS(Sequential Sum of Squares)는 모형의 여러 성분 에 대한 변동성의 측도이다. Minitab S/W 에서는 설계를 분석할 때 P-Value 을 계산하기 위해 Seq SS 를 사용하지 않는다. Adj SS(Adjusted Sum of Squares)는 모형의 여러 성분 에 대한 변동성의 측도이다. Minitab 에서는 항에 대한 P-Value 을 계산하기 위해 Adj SS 를 사용한다. Adj MS(Adjusted Mean Sum of Squares)는 Minitab S/W 에서는 항에 대한 P-Value 을 계산하기 위해 수정 평균 제곱합(Adj MS)을 사용한다. F 는 ANOVA Analysis Table 에서는 각 항에 대한 F-Value 이 나열된다. F-Value 는 검증 통계량으로 각 인자간의 연관성이 얼마나 있는지 확인하기 위해 사용한다. F-Value 가 크면 항이나 설계변수/인자들의 영향이 크다는 걸 의미한다. P 값은 ANOVA Analysis Table 에서는 각 항에 대한 P-Value 가 나열된다. P-Value 는 귀무 가설(Null Hypothesis)에 반하는 증거를 측정하는 확률이며, P-Value 가 작을수록 귀무 가설에 반하는 큰 영향의 설계변수/인자로 판명된다. $P\text{-Value} \leq 0.05$ 조건은 반응 특성과 항 간에 통계적으로 연관성이 있다는 결론이다. $P\text{-Value} \geq 0.05$ 은 반응 특성과 항 간에 통계적으로 연관이 없다는 결론을 내릴 수 없다. 0.05 의 수준이 의미하는 것은 계수가 0 이 아니지만 0 이라는 결론을 내릴 위험 확률이 5%라는 것을 의미한다.

3.1.3 머신러닝 기법을 활용한 메타모델

지난 몇 년 동안 메타 모델링 기술의 발전에 따라 활용방법에 대해 지속적으로 언급되고 있다. 특히 비용이 많이 발생하는 분석 및 시뮬레이션 프로세스를 간소화하기 위한 해결방법으로 근사 또는 메타 모델링 기술이 자주 사용된다. 설계 최적화에서 필수적인 강력한 도구가 될 수 있다.

1) 메타모델의 정의

단순한 분석 모델을 사용하여 계산 집약적인 기능을 근사화 하며, 분석모델은 메타모델이라 불리고, 메타모델을 만드는 과정은 메타모델링이라고 한다. 메타모델을 사용하면 최적화 방법을 적용하여 최적점을 찾을 수 있으며, 이를 Metamodel-based Design Optimization (MBDO)라고 한다. MBDO 방법은 독점적이고 비싼 해석 Tool 을 연결하는 것이 더 쉬우며, 병렬연산으로 많은 설계 지점에서 동일한 시뮬레이션을 실행하는 것을 포함하므로 단순하게 작동한다. 또한 메타모델은 전체 설계 공간을 만들며, 전체 설계 영역에 대해 분석되기 때문에 시뮬레이션에서 오류를 탐지하는 것이 더 쉬운 장점이 있다. Simpson et al. 은 인기 있는 샘플링 방법(실험 설계 방법), 근사 모델(메타 모델), 메타 모델링 전략 및 응용 프로그램 관련하여 집중적인 검토를 통한 메타모델 및 MBDO 에 관한 연구결과를 정리하였다 [77].

수년간 메타 모델링은 설계 엔지니어에게 의사결정 지원 역할을 제공한다는 것이 분명해졌으며, 메타모델링의 역할은 다음과 같다 [78]. 전체 설계 공간에 대한 전역 근사는 시험 및 해석 비용을 줄이기 위해 사용되며, 설계공간은 저렴한 운영 메타모델을 개발하여 설계문제에 대한 엔지니어들의 이해를 높이기 위한 도구로 이용된다. 설계 최적화 문제에 대한 높은 이해력을 바탕으로 설계 변수의 수와 검색 범위가 감소할 수 있으며, 특정 비효율적인 제약 조건이 제거될 수 있다. 단일 목표 최적화 문제라고 판단하였으나, 다중 목표

최적화 문제로 바꿔 생각해야 될 수도 있다. 또한 그 반대일 수도 있기 때문에, 메타모델은 더 정확한 최적화 문제의 해결도구로 이용할 수 있다.

2) 메타모델을 이용한 최적화 방법

최적화 절차는 Figure 27 와 같이 나타낼 수 있으며, (a)Sequential approach, (b)adaptive MBDO 및 (c)Direct sampling approach 3 가지 방법이 있다. 첫 번째 방법 Figure 27 (a)는 전통적인 접근법으로 글로벌 메타모델을 사용하여 고비용의 함수 대리모델로 사용하는 것이다. [79, 80, 81]. 두 번째 전략 Figure 27 b)는 루프에서 재샘플링 및 재모델화 전략을 결정하는 검증 또는 최적화를 포함한다 [82, 83, 84]. 세 번째 접근방식은 가장 최근에 개발된 것으로 메타 모델의 지침에 따라 최적을 향해 새로운 샘플 포인트를 직접 생성한다 [85, 86, 87]. 절차에 따라 완성된 메타모델내에서 설계목적에 가장 적합한 성능의 위치를 찾아 최적화한다. 절차는 간단하지만 각 과정에 이용되는 알고리즘 및 방법은 다양하고 설계 특성에 따라 유의해서 선택해야 좋은 결과를 얻을 수 있다.

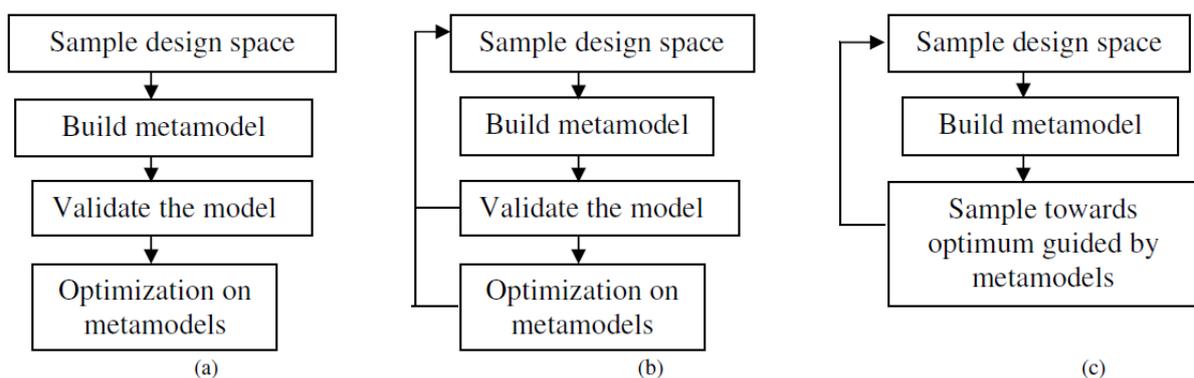


Figure 27. Metamodeling Based Design optimization strategies.

설계영역내에서 필요한 데이터를 추출하여 메타모델 알고리즘에 입력하여 설계목적에 가장 적합한 메타모델을 완성시키는 반복과정이 메타모델링이라고 한다. Table 9 는 (a)샘플링,

(b)메타모델 알고리즘, (c)메타모델 최적화 및 (d)모델검증에 따라 메타모델링 기법을 분류합니다 [77].

Table 9. Commonly used metamodeling techniques

(a) Sampling
1) Classic methods Factorial / Central composite / Box-Behnken / Alphabetical optimal / Plackett-Burman
2) Space-filling methods Simple Grids / Latin Hypercube / Orthogonal Arrays / Hammersley sequence / Uniform designs / Minimax and Maximin
3) Hybrid methods
4) Random or human selection
5) Importance Sampling
6) Directional Simulation
7) Discriminative sampling
8) Sequential or adaptive methods
(b) Metamodel Algorithm
1) Polynomial Linear / Quadratic / Higher
2) Splines Linear / Cubic / NURBS
3) Multivariate Adaptive Regression Splines (MARS)
4) Gaussian Process
5) Kriging
6) Radial Basis Functions (RBF)
7) Least Interpolating Polynomials
8) Artificial Neural Network (ANN)
9) Knowledge Base or Decision Tree
10) Support Vector Machine (SVM)

11) Hybrid models

(c) Model Fitting

- 1) (Weighted) Least Squares Regression
 - 2) Best Linear Unbiased Predictor (BLUP)
 - 3) Best Linear Predictor
 - 4) Log-likelihood
 - 5) Multipoint approximation (MPA)
 - 6) Sequential or adaptive metamodeling
 - 7) Back propagation (for ANN)
 - 8) Entropy (inf.-theoretic, for inductive learning on decision tree)
-

(d) Model validation

- 1) cross-validation method
 - 2) Root Mean Square Error (RMSE)
 - 3) Maximum Absolute Error (Max.Abs.Error)
 - 4) R square (R^2)
-

3) Sampling

고전적인 샘플링 방법은 설계 공간의 경계 주위에 표본 점을 분산시키고 설계 공간의 중심에 몇 개를 남기는 경향이 있으며 fractional factorial [80], central composite design(CCD) [88], Box-Behnken [80], alphabetical optimal [89, 90] 및 Plackett-Burman designs [80]으로 다양하게 소개 되어진다. Computational Analysis 의 경우 경계에 실험점을 집중 배치하는 것은 비효율적이거나 심지어 부적절할 수 있으며, 설계 공간을 채우는 경향이 있다 [91]. 따라서 실험적 설계가 공간을 메워야 한다는 결론을 얻을 수 있다 [92]. 문헌에서는 공간 채우기 샘플링 방법이 상대적으로 더 많이 사용된다고 알려져 있으며, 다음 orthogonal arrays [93], Latin Hypercube designs [94], Hammersley sequences [95] 및 uniform designs [96] 4 가지 유형이 있다. Latin Hypercube designs 는 1-D 투영에서만 균일한 반면 Hammersley

sequences 는 전체 공간에서 더 균일한 경향이 있는 것으로 나타났다. 또한 적절한 표본 크기는 근사할 함수의 복잡성에 따라 다르다. 그러나 일반적으로 더 많은 샘플 포인트는 더 많은 비용으로 기능에 대한 더 많은 정보를 제공한다. 저차 함수의 경우 특정 표본 크기에 도달한 후 표본의 수를 늘리면 근사 정확도에 크게 기여하지 않는다. 랜덤 샘플링 방법인 Monte Carlo Simulation (MCS) 방법은 비효율성과 상관없이 인기 있는 샘플링 방법이다. 몬테카를로 시뮬레이션 방법에서 개선된 importance sampling (IS)은 MCS 와 동일한 수준의 정확도를 나타낼 뿐만 아니라 효율성을 개선할 수 있는 잠재력을 가지고 있다[97]. 하지만 적절한 샘플링에 대한 기준을 설정하기 어렵기 때문에 순차적이고 적응적인 샘플링 방법이 제안되어져 왔고 최근 몇 년 동안 인기를 끌었다. Lin 은 새로운 샘플 포인트를 순차적으로 생성하기 위해 sequential exploratory experiment design (SEED) 방법을 제안했다 [98]. Sasena et al. 는 Bayesian method 을 사용하여 더 많은 시험점을 적응적으로 탐색했다 [99]. Wang 은 적응형 메타 모델링을 위해 inheritable Latin Hypercube designs 을 제안했다 [100]. Jin et al. 은 몇 가지 다른 순차 샘플링 방식을 비교한 결과, 순차적 샘플링 방법은 엔지니어가 제어할 수 있으며 1 차원적인 실험설계법과 같은 샘플링보다 더 효율적이라는 것을 발견했다 [101]. 특정 설계 문제에 대해서 엔지니어가 정의하는 유연한 순차 샘플링 방식을 설계할 수 있다.

따라서 본 연구에서는 SCR 시스템의 성능향상을 위한 주요 설계변수 파악, 최적화를 위한 가장 효과적인 방법을 분석 제안하였다.

4) Metamodel

메타 모델링은 고전적인 Design of Experimental(DOE) 이론에서 발전되었다. 메타 모델의 종류는 Kriging [102], Neural Network [103], Radial Basis Function (RBF) [104], Multivariate

Adaptive Regression Splines (MARS) [105], Interpolating Polynomials [106] 및 Inductive learning [107]이 포함된다. 어떤 모델이 확실히 우수한지에 대한 결론은 없지만, 여러 연구를 통해 메타 모델링에 대한 특징을 확인할 수 있다.

Kriging

분석이 필요한 지점을 찾기 위해 이미 알고 있는 주위의 값들을 선형 조합으로 만들어 예측하는 통계학기법이다. 크리깅 대리 모델(Kriging Surrogate Model)은 전역모델과 편차항의 합으로 정의되며 식 (22)와 같다.

$$\hat{Y}(x) = f(x)^T \hat{\beta} + r(x)^T R^{-1} \{Y - F\hat{\beta}\} \quad (22)$$

전역모델은 최소제곱법(Generalized Least Squared Method)에 의해 추정된다. $f(x)$ 는 회귀 모델 함수이고 $\hat{\beta}$ 는 추정된 회귀 모델의 계수를 의미한다. 편차항은 상관 행렬 R 등으로 구성되며 가우스 상관 함수로 사용된다. 식 (23)은 가우스 상관 함수로 사용된 식이다.

$$R(\theta, x^i, x^j) = \exp(-\sum_{k=1}^d \theta_k (x_k^i - x_k^j)^2) \quad (23)$$

Radial Basis Function (RBF)

Radial Basis Function(RBF) Kernel 또는 Gaussian Kernel 이라고 불리며 다음과 같은 특성이 있다. 1 개의 입력(Input)층, 숨겨진(Hidden)층, 1 개의 출력(Output)층으로 구성된다. 출력층은 선형이며, 숨겨진 층과 입력 층 사이에는 가중치(Weight)가 없다. 숨겨진 층에서는 방사형 기반 함수가 사용되고, 거리 측정 방식을 통해 연산한다.

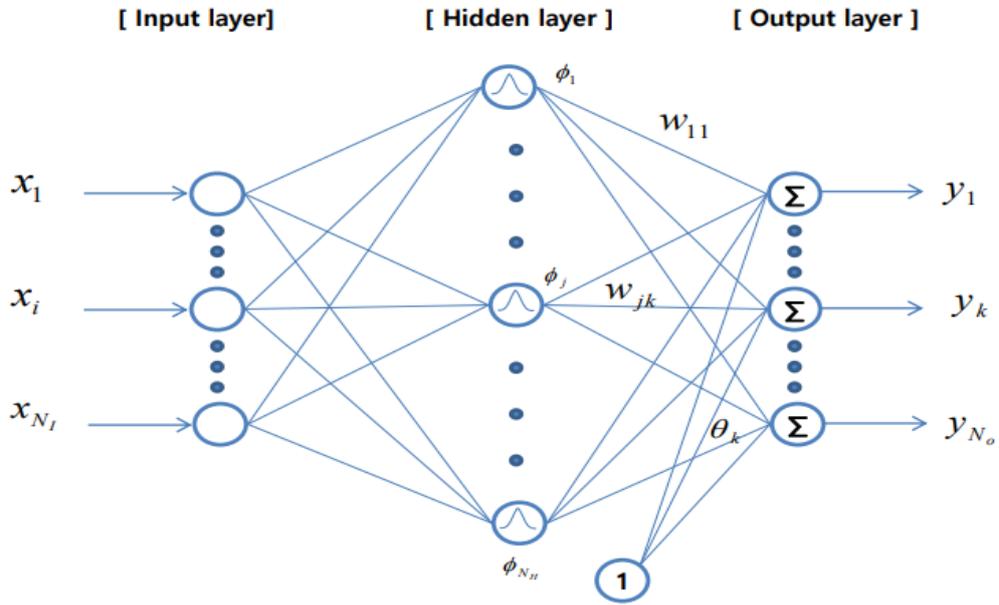


Figure 28. Algorithm of Radial Basis Function

Radial Basis Function(RBF)에서 식 (24)의 함수 f 는 실수이며, 식 (25)의 중심 μ 와 데이터 X 사이의 거리에 따라 달라지는 함수이다.

$$\phi_j = f(d_j) \tag{24}$$

$$d_j = \| X - \mu_j \| \tag{25}$$

d_j 는 유클리드 거리(Euclidean Distance)이며 X 와 중심 μ 사이의 거리를 나타낸다. 두 점 사이의 거리를 계산할 때 흔히 사용하는 방법이다. 또한 여기서 사용되는 함수 f 는 주로 Figure 29와 같은 가우시안 기반 함수를 사용한다.

- **Mean** $\mu_j = 0,$
- **Standard deviation** $\sigma_j = 0.2$

$$\phi(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2(0.2)^2}\right)$$

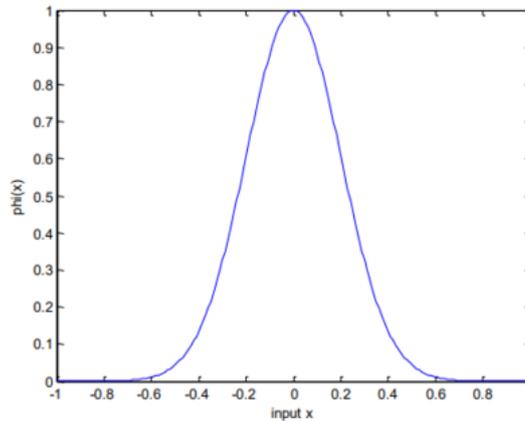


Figure 29. Example of Gaussian Radial Basis Function

Multi-Layer Perceptron (MLP)

Multi-Layer Perceptron(MLP)은 Perceptron 으로 이루어진 층 여러 개를 순차적으로 붙여 놓은 형태이며, Feed-Forward Deep Neural Network 이라고도 한다. Multi-Layer Perceptron(MLP)의 가장 기본이 되는 것은 하나의 Perceptron 이며, 인간으로 비유하면 하나의 뉴런이다. 실질적으로 각각의 Perceptron 을 겹겹이 층을 쌓아 놓은 것으로 보면 된다. 1 개의 층에서 2 개의 입력 층과 4 개의 숨겨진 층, 2 개의 출력층만 조절하여도 통제할 수 있는 가중치가 $12+8=20$ 개에 각 Perceptron 마다 Bias 까지 총 24 개의 조절 가능한 값이 있다. 단순히 설명하면, Multi-Layer Perceptron(MLP) 모델은 기본적으로 신경망을 모델링 한 것으로 이해하면 된다. Single-Layer Perceptron(SLP)은 여러 입력 값들이 있으면 각각에 대한 가중치들을 곱해서 모두 더해 준 것을 활성화 함수에 넣어주면 출력 값이 나오는 구조이다. 반면에 Multi-Layer Perceptron(MLP)는 숨겨진 층이 추가되면서 숨겨진 층에 있는 각각의 노드들에 가중치를 곱한 합을 출력 값으로 보면 된다. Figure 30 는 단계별 과정을 통해 아직 Multi-Layer Perceptron(MLP)의 초기 단계에서부터 완성 단계까지 하나의 과정을 보여준다.

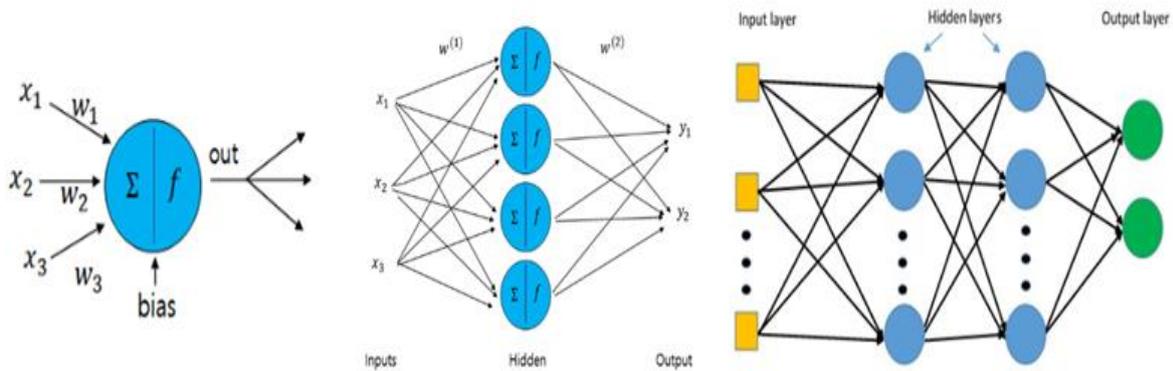


Figure 30. Example of Multi-Layer Perceptron

Table 10. Example of Difference of Multi-Layer Perceptron and Radial Basis Function

No.	구분	Multi-Layer Perceptron	Radial Basis Function
1	Similarity	Dot Product	Distance
2	No. of Layers	Two or More	Two
3	Learning	BP	BP
4	Nonlinear Function	Sigmoidal or Tanh Function	Gaussian Function
5	Output	Linear or Nonlinear	Linear
6	Weight Between Input and Hidden	Yes	No
7	No. of Weights for Two Layers	4	4
8	Convergence Speed	Slow	Fast

Table 10 은 Multi-Layer Perceptron 과 Radial Basis Function 과의 차이점을 보여주는 테이블로서 일반적으로 Multi-Layer Perceptron 은 전역 비선형 관계를 추정하고 Radial Basis Function 는 국부 비선형 관계를 추정한다.

Polynomial Regression (PR)

Polynomial Regression(PR)는 비선형 데이터를 학습하기 위해 선형 모델을 사용하는 기법으로 각 변수의 거듭 제곱을 새로운 변수로 추가하고 확장된 변수를 포함한 데이터셋에 선형 모델을 훈련시키는 것이다. PR 은 다음의 식 (26)와 같이 나타낼 수 있다.

$$y = \beta_0 + \beta_1x + \beta_2x^2 + \beta_3x^3 + \dots + \beta_nx^n + \varepsilon \quad (26)$$

여기서 y 는 종속 변수이고 β 는 0 에서 n 까지 시작하는 독립 변수 x 의 서로 다른 n 승에 대한 계수이다. 계산은 Figure 31 와 같이 행렬 형식으로 수행된다.

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^m \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^m \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \dots & x_3^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix},$$

Figure 31. Matrix Form of Polynomial Regression

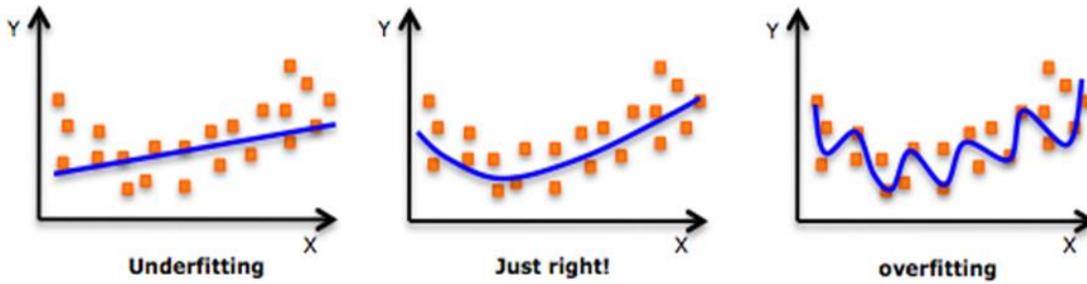


Figure 32. Example of Polynomial Regression

Figure 32 을 간단히 요약하면, 많은 공통 특성 중 일부 특성만 반영하여 너무 편향(Bias)하게 학습되어 새로운 데이터도 그냥 예측 해버리는 모델은 Underfitting 이며, 많은 공통 특성 이외에 국부적인 특성까지 반영하여 높은 변동(Variance)으로 학습되어 새로운 데이터에 대해서 예측하지 못하는 모델은 Overfitting 이다. Underfitting 모델은 예측 값들이 실제 값과 멀어져서 예측하며, Overfitting 모델은 학습된 것을 잘 예측하지만 학습되지 않은 것들은 학습된 것의 예측 값과는 멀어져서 낮은 값으로 예측하는 경향이 있다. 결국 Overfitting 한 그래프는 가운데 있는 그래프처럼 Smooth 한 곡선이 되기 위해서는 변동(Variance)을 낮춰야만 한다.

Ensemble of Decision Trees (EDT)

Ensemble of Decision Trees(EDT)는 일부의 입력 변수를 기반으로 목표 변수의 값을 예측하는 모델을 구성하는 것을 목표로 하는 데이터 마이닝에서 일반적으로 사용되는 방법론이다. 결정 트리에서도 노드의 수가 많으면 많을수록 과적합 문제가 발생하여 실험 데이터를 잘 예측할 수 없는 상황이 발생할 수 있으며, 이런 부정확성을 해결하기 위해 결정 트리에 앙상블 기법을 추가하여 사용하는 방식이다. Figure 33 는 Ensemble of Decision

Trees(EDT)의 한 예를 나타낸 것이며, Table 11 은 Ensemble of Decision Trees(EDT) 기법 중 주요 방법 몇 가지를 나열 한 것이다.

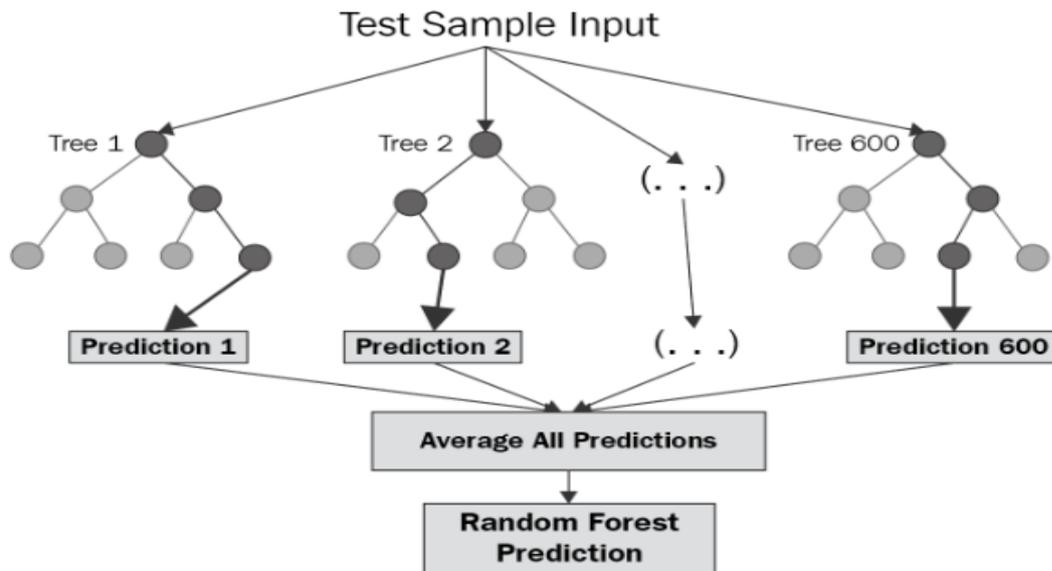


Figure 33. Example of Decision Tree-based Ensemble Methods

Table 11. Explanation and Type of EDT Methods

No.	EDT Methods	Explanation
1	Tree Bagging	다수의 bootstrap 데이터를 생성하고 각 bootstrap 데이터에 대한 예측 모델을 결합하여 최종 모델을 만듦
2	Random Forest	Bagging 과 Boosting 보다 많은 랜덤성을 주어 약한 weak learner 들을 생성하고 선형 결합하여 예측 모델 만듦
3	Extra Trees	Random Forest 와 거의 유사하나 Random Forest 는 분기점에서 우수 하위변수 선택하나, Extra Trees 는 랜덤하게 선택하여 예측 모델 만듦
4	Extra Gradient Boosting	Gradient Descent 을 응용하여 실제 값과 예측 값의 차이를 최소화하는 과정을 반복하여 예측 모델을 만듦

5	Hybrid EDT	1, 2, 3, 4 항목이 제공하는 모든 예측 값들의 평균으로 예측함
---	------------	--

5) Model Validation

메타모델은 프로세스의 알고리즘으로 사용되기 전에 검증되어야 한다. 모델 검증은 어려운 일이며, 다른 계산 모델의 검증 및 검증과 공통적인 과제를 공유한다 [108, 109]. Meckesheimer et al. 는 교차 검증 방법을 연구했다 [110]. 교차 검증이 모델을 평가하는 데 충분하지 않다는 점을 고려할 때 메타모델 검증에서 추가 포인트를 사용하는 것이 필수적이다. 검증을 위해 추가 포인트를 사용할 경우 모델 정확도를 측정하는 여러 가지 방법이 있다. 처음 두 가지 방법은 아래에 정의된 RMSE(루트 평균 제곱 오차)와 MAX(최대 절대 오차)이다:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2}{m}} \quad (27)$$

$$Max. Abs. Error = \max |y_i - \hat{y}_i|, i = 1, \dots, m \quad (28)$$

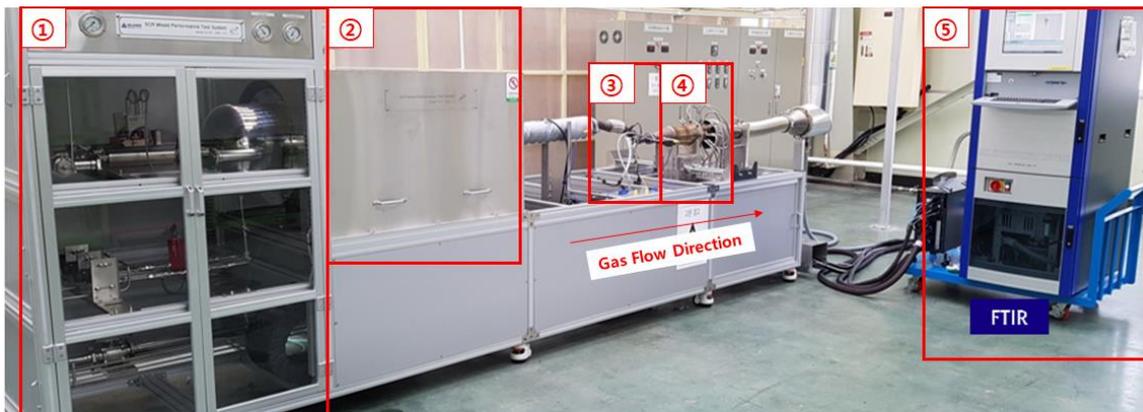
여기서 m 은 유효성 검사 점의 수이고 \hat{y}_i 는 관측된 값 y_i 에 대한 예측 값이다. RMSE 또는 Max.Abs.Error 값이 낮을수록 메타모델의 정확도가 높아진다. RMSE 는 모델의 전체 정확도를 측정하는 데 사용되며 Max.Abs.Error 는 모델의 로컬 정확도를 측정하는 데 사용된다. 또한 R 제곱 값을 사용할 수 있다.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2} \quad (29)$$

여기서 \bar{y} 는 유효성 검사점에서 관측된 값의 평균이다.

3.2 실험장치

SCR 분석 실험장치는 Figure 34 와 같이 엔진에서 발생하는 배기가스를 모사하는 장치부터 Urea 분사장치 및 배기가스 측정장치로 구성되어 있다. 실험 프로세스는 다음과 같다. 첫째, 제공된 배기유량(Q), 온도(T), 가스농도(NOx) 등 엔진 운전 조건(EOP, Engine Operating Point)을 설정한다. 둘째, 설정된 엔진 운전 조건에서 안정화가 되면 반응가스 NO 를 공급 후 SCR 전/후단 농도를 확인한다. 셋째, Urea 분사 후 SCR 전/후단 농도 확인 및 결과가 안정될 때까지 기다린다. 넷째, 촉매 후단의 19 개의 측정위치에서 순차적으로 NOx 농도를 측정한다. 다섯째, 측정이 완료되면 Urea 분사 종료하고 장비 및 배기분석계 내부의 잔여 가스제거를 위해 N2 가스로 정화시킨다.



NO	Equipment	Function	
1	Gas Input	시험용 압축 Air 및 반응 가스(NO, NO2) 공급 및 제어	
2	Gas Heating and Mixing	공급된 Air 및 반응가스(NO, NO2) 혼합 및 전기 Heater를 이용한 가열	
3	Injection Urea and Sensing Nox Concentration	Urea Nozzle을 통한 Urea 분사 (CAN 통신 제어) Nox 센서를 통한 농도확인 및 Feed-back 제어	
4	Sampling Gas	SCR 후단 19 Point 가스를 순차적 추출	
5	Gas Analyzer(FTIR)	19 Point 가스 분석을 통한 UI 측정	AVL SESAMi60

Figure 34. Analysis Equipment System related Uniformity Index

3.3 해석기법 정의

해석은 앞서 설명한 실험장치를 기반으로 모델을 구성하였으며, Table 12 과 같이 모델링 하였다. 격자(Mesh) 설정에 필요한 정보이며 Figure 35 은 격자 형상을 나타낸 것이다. 수년간의 경험상 유동해석에서 격자의 크기는 4mm 가 적절하다고 판단한다.

Table 12. Mesh Modeling Information of CFD in SCR System

<i>Mesh modelling information</i>							
Analysis Tool	Mesh Type	Volume (Total Mesh Quantity)	Base Mesh Size	Mesh Surface Size	Mesh Prism Layers	Number of Prism Layer	Thickness Fine Mesh
Star-CCM V12.04	+Polyhedral	1,041,308	4 mm	50~100% (Compared Base Mesh Size)	3	25% (Compared: 25% Base Thickness)	Surface Prism: 12.5%

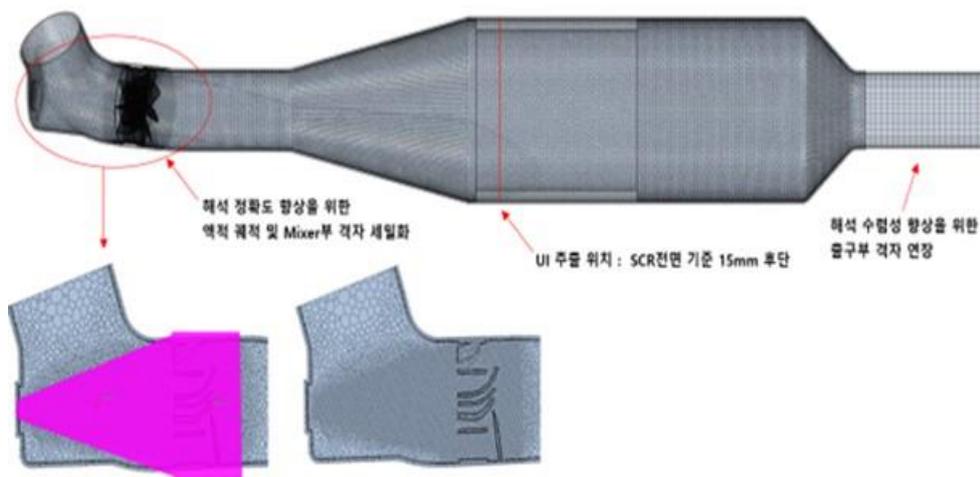


Figure 35. Mesh Modeling Shape of CFD in SCR System

수치해석은 SIEMENS 사의 STAR-CCM+를 이용하였으며, 모델링(Geometry)-격자(Mesh)-해(Solution)-결과(Result)의 과정으로 수행하였다. 촉매 입구를 통과하는 NH₃의 유동균일도(UI)는 촉매 수명과 NO_x 변환 효율, 화학적인 반응과 관련한 활성화 시간에 영향을 주는 중요한 지수이다. 유동균일도(UI)를 나타내는 지수로서 Weltens 등이 제안한 유동균일도(Uniformity Index, γ)가 사용되며, 식 (30)과 같이 나타낼 수 있다.

$$\gamma = 1 - \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^n \frac{\sqrt{(C_i - \bar{C})^2}}{\bar{C}} \quad (30)$$

n: SCR 촉매 총 셀의 개수, \bar{C} : SCR 촉매 단면적에서의 평균 농도, C_i: SCR 촉매격자 i에서의 국부 농도 γ 은 0과 1사에서 변하며, 클수록 더 나은 균일도를 나타내고 C_i는 속도 또는 각 촉매 관찰점의 농도를 나타낸다. \bar{C} 는 촉매 측정 단면의 평균 속도 및 농도를 의미하며 n은 관찰점의 수이다. Figure 36은 SIEMENS STAR-CCM+를 이용한 분사 해석시 계산과정을 나타낸 이미지이다.

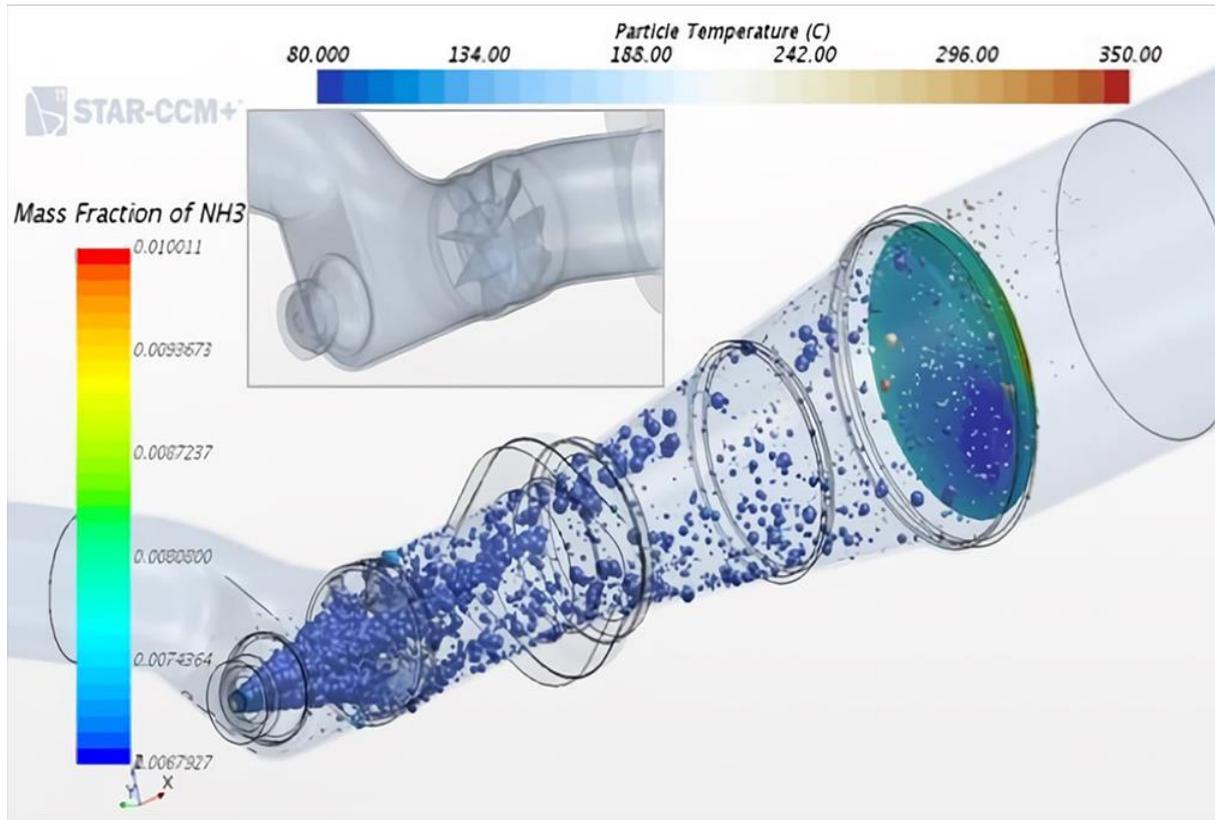


Figure 36. Example of CFD in SCR System

일반적으로 유동균일도(UI) 실험 평가시 EOP4,5 조건은 엔진의 High RPM 이며 Mass Flow of Exhaust Gas, Gas Temperature of Exhaust, Urea Injection, Injection Duration of Urea 등 또한 Max Value 을 토대로 진행하게 된다. 자동차 제조사마다 약간의 차이는 있지만, 일반적인 사항은 동일하다. RPM 이 높아질수록 SCR 시스템내 유동속도가 상승함에 따라 NH3 의 Mass Fraction 및 Particle Temperature 는 또한 증가하게 된다.

Table 13. Boundary Conditions of CFD in the SCR System

<i>Boundary conditions of CFD in the SCR System</i>				
No.	Classification	Design Factors	Unit	Value
1	Material	Shell Material in CFD Modeling	SUS	436 L
2		Mass Flow of Exhaust Gas	kg/h	316
3	SCR Inlet	Exhaust Gas Temp.	Max, °C	411
4	Condition	Turbo-Charger	Max, RPM	203,000
5		Engine RPM	RPM	3000
6		Adblue	mg/s	105
7	Urea Injection	Urea Injection	mg/Injection	30.6
8		Injection Duration	msec	81.6
9	SCR Outlet Condition	Pressure of Exhaust Gas	kPa	9.8

Geometrical and functional data of urea injector nozzle holes for the dosing of the SCR system

No.	Classification	Unit	Value
1	Injector Hole Number	No.	3
2	Hole Diameter	µm	120
3	Diameter at Hole Center Positions	mm	1.9
4	Circumferential Distribution	deg.	120
5	Static Mass Flow	kg/h	3.2

Parameters for CFD spray initialization

No.	Classification	Unit	Value
1	Equivalent Spray Type	Type	3 Hole Full Cone Spray
2	Cone Angle	deg.	7
3	Spray Angle	deg.	7
4	Estimated Initial Droplet Velocity	m/s	24
5	Droplet Diameter, SMD	µm	100

Table 13의 CFD의 해석 경계조건은 실험을 통해 측정된 값을 바탕으로 설정하였으며, 엔진 조건은 3,000RPM의 EOP5(EOP : Engine Operating Point)에 준하는 엔진 가동을 기준으로 설정하였다. 이때 배기가스 질량 유량은 316kg/h이며 배기가스 입구 온도는 411°C, 우레아(Urea) 1회 분사량은 30.6mg/Injection, 우레아(Urea) 분사 기간은 81.6ms, 배기가스 출구 압력은 9.8kPa로 설정하였다. 다만 CFD 모델상의 Shell 재질은 모두 SUS436L로 지정하여 수치해석을 진행하였다. 촉매는 다공성모델(Porous Model)을 이용하여 촉매 모델 특성을 구현하였으며, 촉매 담체의 용량은 3.0L, 셀 밀도는 600 cpsi이다. 우레아(Urea) 인젝터의 분무각, 분사압, 노즐 직경등의 조건은 상용 우레아(Urea) 인젝터 3홀 노즐을 기준으로 하였다.

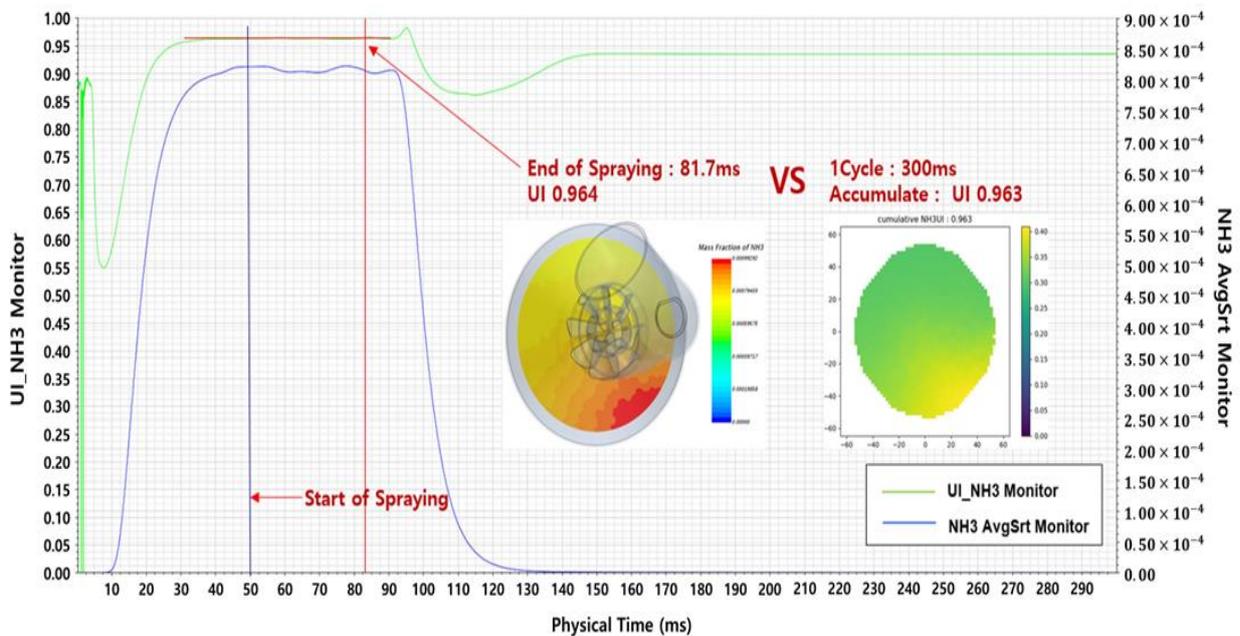
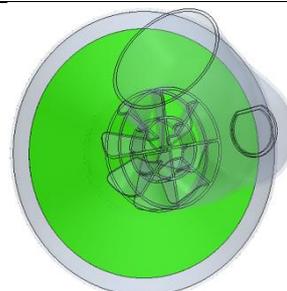
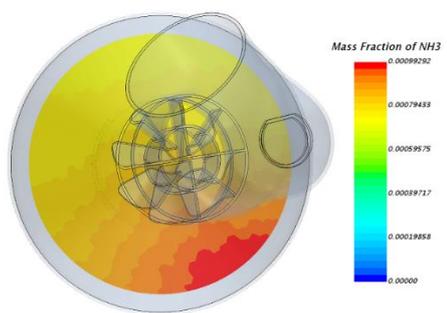
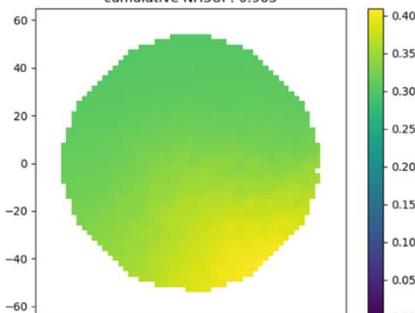


Figure 37. Comparison of UI NH3 Spray Time of Design Factors of Case 01 in CFD

Figure 37은 1회 유동해석에 소요되는 과정을 확인할 수 있으며, NH3 분사 후 300ms가 필요하다. 이러한 경우 유동해석시간이 2~3일 정도 소요된다. 따라서 Spray Time을 정의하여

1 회 유동해석시간을 줄여 효율성을 높이고자 하였다. Spray Time 은 Uniformity Index 값이 일정해지는 Start of Spraying 시점(50ms) 부터 변동이 생기기 전 End of Spraying 시점(81.7ms)까지를 정의한다. Figure 37 에 따르면 End of Spraying 시점 81.7ms 에서 NH3 UI 및 NH3 Mass Fraction 은 안정화 상태이며, 그 시점의 UI 는 0.964 이다. 그리고 1 Cycle 진행되는 300ms 동안의 NH3 UI 는 0.963 이다. 분사 시간(Time of Spraying)이 50ms 와 81.7ms, 300ms 일때 UI Value 는 동등한 값(50ms UI: 0.964, 81.7ms UI: 0.964, 300ms UI: 0.963)이 추출됨을 Table 14 과 같이 분석하였으며, 시간을 단축시켜 효율적인 평가가 될 수 있게 하였다.

Table 14. Comparison Result of UI-related NH3 Spray Time of Case 01 in CFD

Spray Time	81.7 ms	300 ms
Simulation Model for Case 01		
CFD Results		
	Velocity UI: 0.982 NH ₃ UI: 0.964	Velocity UI: 0.982 NH ₃ UI: 0.963
Analysis		
Time of CFD	1 day	2 to 3 days

균일 지수와 NO_x 정화 효율은 식 (31)~(33)와 같이 상관관계가 있기 때문에, 수치해석을 통해 계산된 UI 값에 따른 NO_x 정화효율을 판단할 수 있다. 따라서 본연구에서는 UI 성능을 최대화한 최적모델의 정화효율을 비교하여 성능향상에 대한 더욱 정확한 분석을 하고자 한다.

$$\begin{aligned} &\text{Final UI output} \\ &= 1 - \left(\frac{(0.5/19)}{\text{Average NO}_x \text{ purification efficiency} \times \text{Distribution sum of NO}_x \text{ purification efficiency}} \right) \end{aligned} \quad (31)$$

$$\text{NO}_x \text{ purification efficiency} = \left(\frac{\text{Front - end NO}_x - \text{Back - end NO}_x}{\text{Front - end NO}_x} \right) \times 100 \quad (32)$$

$$\begin{aligned} &\text{Distribution sum of NO}_x \text{ purification efficiency} \\ &= \sum_1^{19} \sqrt{(\text{Point NO}_x \text{ purification efficiency} - \text{Average NO}_x \text{ purification efficiency})^2} \end{aligned} \quad (33)$$

제 4 장 통계학 기법을 활용한 SCR 시스템 성능 최대화 및 주요 영향인자 분석

4.1 최적설계 및 주요인자 파악에 관한 통계기법 방법

4.1.1 프로세스 정의

전통적 통계 분석 방법인 Taguchi 기법을 통해 우레아(Urea) 분사시 SCR 시스템의 유동 균일도(UI)에 영향을 미치는 SCR 시스템의 주요 설계인자에 관한 연구를 진행하였다. SCR 시스템의 유동 균일도에 영향을 미치는 주요 설계 인자는 우레아 인젝터와 믹서간 거리, 배기가스 유입 각도, 우레아 인젝터와 믹서간 각도, 파이프 내측 믹서 회전 방향 장착 각도, 믹서 블레이드 수, 믹서 블레이드 굽힘 각도, 믹서와 SCR 시스템 촉매간 거리, SCR 시스템 콘 길이등 8 개의 주요 설계 인자별 주효과도 파악을 통해 상관 관계를 정립하였다.

Figure 38 는 본 연구에서 제안한 SCR 시스템의 주요 성능 예측 프로세스 개발에 관한 개발 흐름도이다. 가장 먼저 연구 목적 (Object Research of Study), 연구 제약 요인 (Constraint Factors of Study), 중점 관리 요인 분석 (Main Control Factors) 및 잡음 요인 분석 (Noise Factors)을 통하여 방향성 설정을 정확하게 해야 한다. 방향설정이 완료되면 실험설계(Design of experiments, DOE)방법 중 하나인 Taguchi's parameter design 법을 통하여 설계범위내의 실험조건을 생성한다. 생성된 직교배열표는 신호대잡음비(Signal to noise ratio, SNR)를 분석하여 설계변수들의 민감도를 분석할 수 있다. 민감도 분석을 통해 각각의 설계변수들의 상호 관계를 파악할 수 있으나, 성능향상에 기여하는 정도는 판단이 어렵고 실제로 해석 또는 시험결과를 확인해야 한다. 생성된 배열의 모든 실험점들을 평가하여 가장 성능이 좋은 지점을 최적점이라 판단한다. 여기서 문제점은 생성된 실험점은 개별 위치에서의 결과만을

나타내기 때문에 가장 좋은 성능을 나타내는 결과라 하더라도 설계변수내에서 최적점이라고 판단할 수 없다. 따라서 메타모델을 이용한 설계 전역에 대한 예측이 가능한 방법을 검토하고자 한다.

Machine Learning Modeling 은 대리모델(Surrogate Modeling) 또는 메타모델이라 불리며 설계영역에 존재하는 각각의 모든 성능 값을 표현할 수 있는 방법이다. 따라서 메타모델을 생성하고, 완성된 메타모델을 이용하여 최적점을 탐색하여 예측할 수 있다.

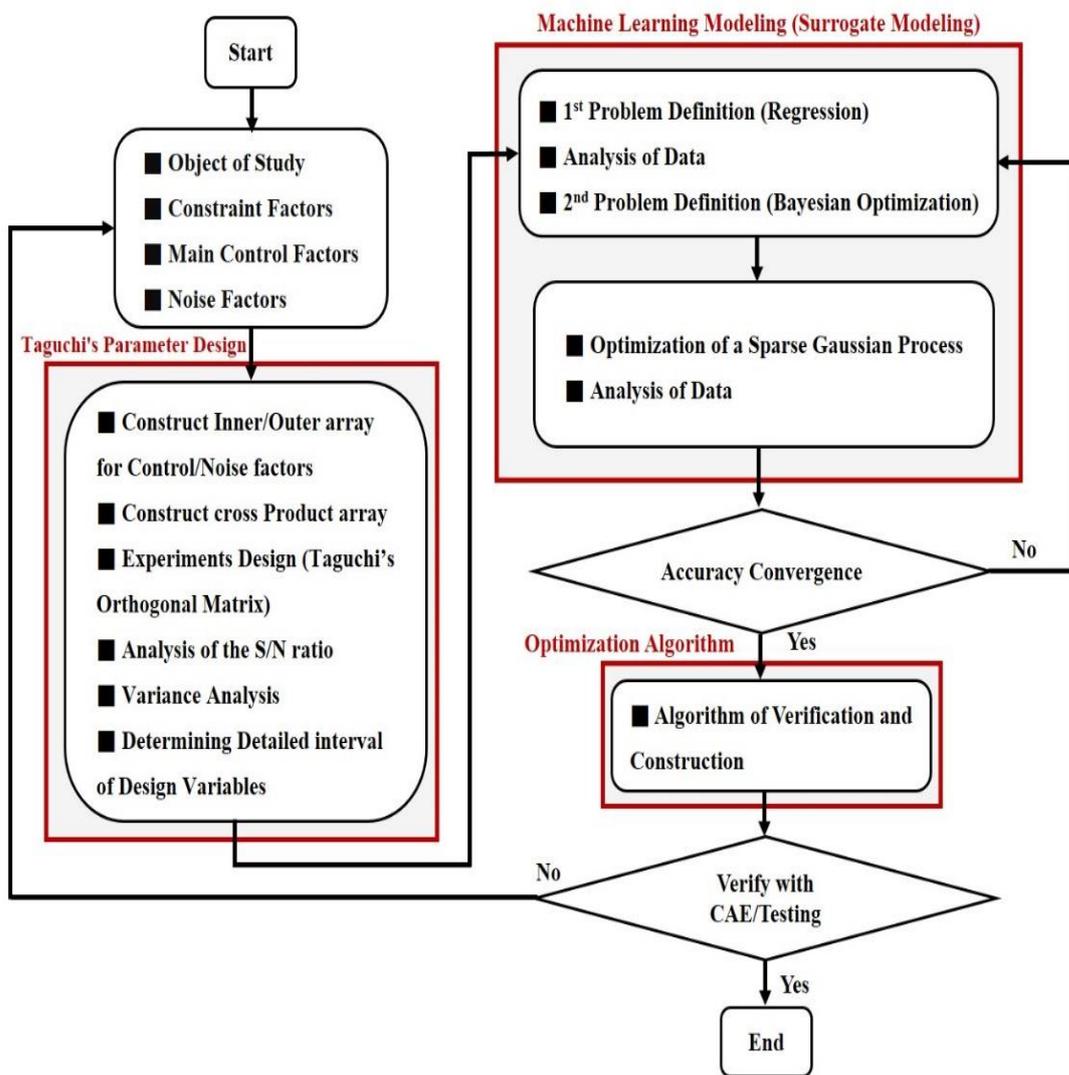


Figure 38. Flowchart of the prediction process of the SCR system

4.1.2 설계변수 정의

SCR 시스템 설계에서 고려해야 할 인자는 다음과 같이 무수히 많으며 우레아 슬립율, 우레아 디파짓, NO_x 정화율, 유동균일도, SCR 시스템내 압력 및 온도 분포 등이 있다. 본 연구에서는 유동의 흐름에 직접적인 영향을 미치는 형상에 관련된 설계인자를 주요 설계변수로 고려하고자 한다. SCR 시스템의 초기 설계 사양은 Table 15 에 정의되어 있으며, 레이아웃은 Table 16 과 같다.

Table 15. Basic Specifications of SCR System

No.	Classification	Specifications	Remarks	
1	SCR Catalyst (3.0L)	Diameter × Length	Passenger Diesel Engine Type	
2		Cell Density		($\Phi 132.1 \times 116.8$), 2BRICK
3		Wall Thickness		600 cpsi
4		Wash-Coat Thickness		3.5 mil
5	Mixer	Blade No.		8
		External Diameter	$\Phi 54$	

Table 16. Basic Layout of SCR System

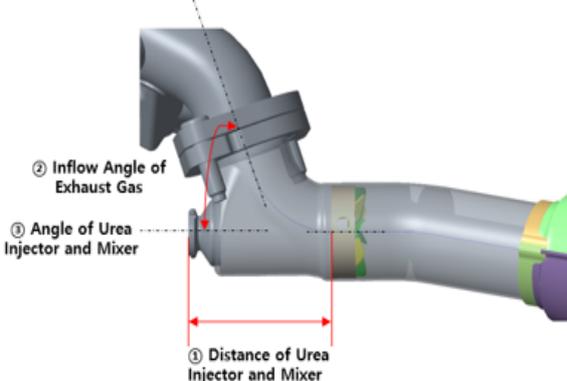
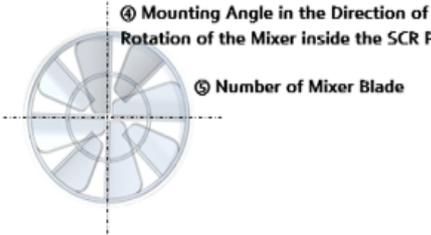
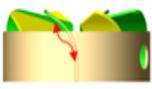
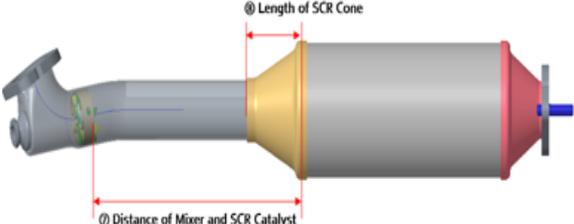
No.	Classification	System Layout	Remarks
1	SCR System		Passenger Diesel Engine Type
2	Inlet of SCR System		
3	Mixer	  Top View Side View	

SCR 시스템의 형상 최적화를 위한 설계변수 정의는 Table 17 과 같으며, 우레아 인젝터와 믹서간 거리, 배기가스 유입각도, 우레아 인젝터와 믹서간 각도, 파이프 내측 믹서 회전방향 장착 각도, 믹서 블레이드 수, 믹서 블레이드 굽힘 각도, 믹서와 SCR 시스템 촉매간 거리, SCR 시스템 콘 길이이다. Table 18 는 각 설계변수의 위치 및 형상에 따른 상세역할을 설명한다.

Table 17. Major Design Factors for Shape for SCR System

No.	Major Design Factors	Unit	Remarks
1	Distance of Urea Injector and Mixer	mm	Determination of 3Levels for each Factor
2	Inflow Angle of Exhaust Gas	deg.	
3	Angle of Urea Injector and Mixer	deg.	
4	Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe	deg.	
5	Number of Mixer Blade	No.	
6	Bending Angle of Mixer Blade	deg.	
7	Distance of Mixer and SCR Catalyst	mm	
8	Length of SCR Cone	mm	

Table 18. Shape Characteristics of Major Design Factors for SCR System

No.	Major Design Factors	Detailed Description
1	Distance of Urea Injector and Mixer	 <p>② Inflow Angle of Exhaust Gas</p> <p>③ Angle of Urea Injector and Mixer</p> <p>① Distance of Urea Injector and Mixer</p>
2	Inflow Angle of Exhaust Gas	
3	Angle of Urea Injector and Mixer	
4	Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe	 <p>④ Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe</p> <p>⑤ Number of Mixer Blade</p>
5	Number of Mixer Blade	
6	Bending Angle of Mixer Blade	 <p>⑥ Bending Angle of Mixer Blade</p>
7	Distance of Mixer and SCR Catalyst	 <p>④ Length of SCR Cone</p> <p>⑦ Distance of Mixer and SCR Catalyst</p>
8	Length of SCR Cone	

4.1.3 Taguchi 직교배열을 이용한 최적설계

본 연구에서는 설계변수가 3 개 이상이기 때문에 부분 배치 설계(Fractional Factorial Design) 방법이 적용 가능하며, 실험 수를 줄여 모든 인자에 관한 분석을 할 수 있는 장점이 있다. 또한 실험 결과에 따른 요인 변동의 계산과 분산분석이 쉽다. 각 인자에 대해 효과를 파악할 때 타

인자의 영향에 관하여 특이점 발생은 없으며, 인자에 따른 정확한 실험 배치가 가능하다. Table 19 는 실험 계획법을 적용하여 8 개의 설계 인자와 3 수준으로 나타낸 것이다. 수준의 범위는 SCR 시스템 실험적 경험을 바탕으로 정의하였다.

Table 19. Application of 8 Factors 3 Levels for Each Main Design Factors in SCR System

No.	Major Design Factors	Unit	3 Levels		
			1 Level	2 Level	3 Level
1	A : Distance of Urea Injector and Mixer	mm	95	85	75
2	B : Inflow Angle of Exhaust Gas	deg.	114	109	104
3	C : Angle of Urea Injector and Mixer	deg.	115	110	105
4	D : Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe	deg.	10	0	-10
5	E : Number of Mixer Blade	No.	8	6	4
6	F : Bending Angle of Mixer Blade	deg.	125	120	115
7	G : Distance of Mixer and SCR Catalyst	mm	187	167	147
8	H : Length of SCR Cone	mm	186	166	146

Figure 39 는 Table 19 의 정의에 따라 직교배열표를 제작한 것이다. L27 은 실험으로 3 수준인 인자들을 13 개까지 배치할 수 있다는 의미이며, 본 연구에서는 정의된 설계변수 8 개 까지만 표현되었다. 따라서 각각의 변수가 가지는 3 수준수에 따라 1~3 으로 표현되었다. Table 20 는 실제 설계범위를 직교배열표에 매칭하여 입력한 것이다.

MINITAB - 제목 없음

파일(F) 편집(E) 데이터(A) 계산(C) 통계분석(S) 그래프(G) 편집기(D) 도구(T) 창(W) 도움말(H)

워크시트 2 ***

↓	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8
	A	B	C	D	E	F	G	H
1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	2	2	2	2
3	1	1	1	1	3	3	3	3
4	1	2	2	2	1	1	1	2
5	1	2	2	2	2	2	2	3
6	1	2	2	2	3	3	3	1
7	1	3	3	3	1	1	1	3
8	1	3	3	3	2	2	2	1
9	1	3	3	3	3	3	3	2
10	2	1	2	3	1	2	3	1
11	2	1	2	3	2	3	1	2
12	2	1	2	3	3	1	2	3
13	2	2	3	1	1	2	3	2
14	2	2	3	1	2	3	1	3
15	2	2	3	1	3	1	2	1
16	2	3	1	2	1	2	3	3
17	2	3	1	2	2	3	1	1
18	2	3	1	2	3	1	2	2
19	3	1	3	2	1	3	2	1
20	3	1	3	2	2	1	3	2
21	3	1	3	2	3	2	1	3
22	3	2	1	3	1	3	2	2
23	3	2	1	3	2	1	3	3
24	3	2	1	3	3	2	1	1
25	3	3	2	1	1	3	2	3
26	3	3	2	1	2	1	3	1
27	3	3	2	1	3	2	1	2
28								

결과: 워크시트 2

Taguchi 설계

Taguchi 직교 배열 설계

L27(3**8)

요인: 8

실행: 27

열 L27(3**13) 배열

1 2 3 4 5 6 7 8

Figure 39. Application of Taguchi's Orthogonal Matrix for 8 Factors 3 Levels

Table 20. Data of Taguchi's Orthogonal Matrix for 8 Factors 3 Levels in SCR System

No.	A	B	C	D	E	F	G	H
	Distance of Urea Injector and Mixer (mm)	Inflow Angle of Exhaust Gas (deg.)	Angle of Urea Injector and Mixer (deg.)	Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe (deg.)	Number of Mixer Blade (No.)	Distance of Mixer and SCR Catalyst (deg.)	Distance of Mixer and SCR Catalyst (mm)	Length of SCR Cone (mm)
Case 1	95	114	115	10	8	125	187	186
Case 2	95	114	115	0	6	120	187	166
Case 3	95	114	115	-10	4	115	187	146
Case 4	95	109	110	10	8	125	167	166
Case 5	95	109	110	0	6	120	167	146
Case 6	95	109	110	-10	4	115	167	186
Case 7	95	104	105	10	8	125	147	146
Case 8	95	104	105	0	6	120	147	186
Case 9	95	104	105	-10	4	115	147	166
Case 10	85	109	105	10	6	115	187	186
Case 11	85	109	105	0	4	125	187	166
Case 12	85	109	105	-10	8	120	187	146
Case 13	85	104	115	10	6	115	167	166
Case 14	85	104	115	0	4	125	167	146
Case 15	85	104	115	-10	8	120	167	186
Case 16	85	114	110	10	6	115	147	146
Case 17	85	114	110	0	4	125	147	186
Case 18	85	114	110	-10	8	120	147	166
Case 19	75	104	110	10	4	120	187	186
Case 20	75	104	110	0	8	115	187	166
Case 21	75	104	110	-10	6	125	187	146
Case 22	75	114	105	10	4	120	167	166
Case 23	75	114	105	0	8	115	167	146
Case 24	75	114	105	-10	6	125	167	186
Case 25	75	109	115	10	4	120	147	146
Case 26	75	109	115	0	8	115	147	186
Case 27	75	109	115	-10	6	125	147	166

1) 구조설계 모델제작

Table 20 과 같이 설계된 직교배열표를 기준으로 27 개의 실험점에 대한 각각의 구조 설계모델을 제작하였으며, 완성된 총 27 개의 설계 디자인을 Table 21 에 정리하였다. 기존 초기모델은 Figure 40 와 같으며, 각각의 설계변수 항목이 정의되어 있다. CATIA 를 이용하였으며, 각각의 변수가 변경될 때 상호간의 간섭이 없도록 하였다.

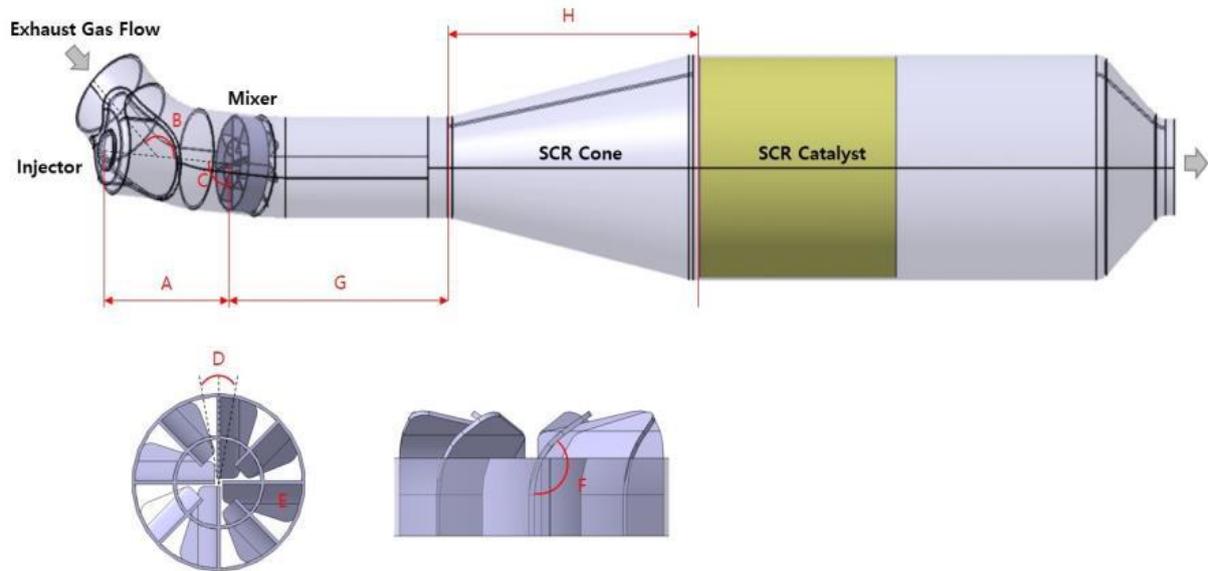
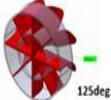
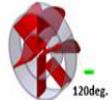
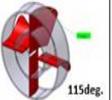
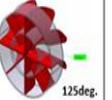
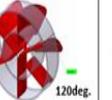
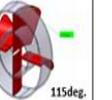
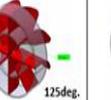
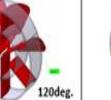
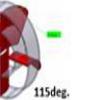
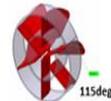
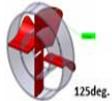
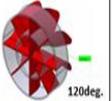
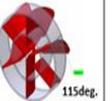
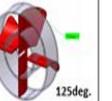
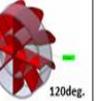
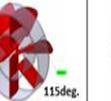
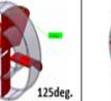
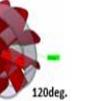
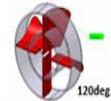
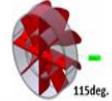
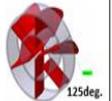
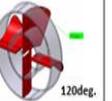
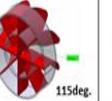
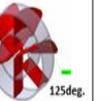
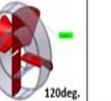
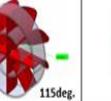
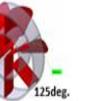
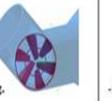
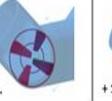
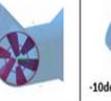
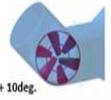
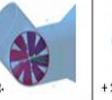
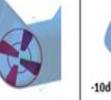
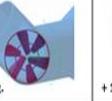


Figure 40. Design of the SCR system

Table 21. Design of 27 Cases for Taguchi's Orthogonal Matrix in SCR System

Design related Shape and Layout of SCR System (Factors Type : A, B, C, G, H)								
Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6	Case 7	Case 8	Case 9
Case 10	Case 11	Case 12	Case 13	Case 14	Case 15	Case 16	Case 17	Case 18
Case 19	Case 20	Case 21	Case 22	Case 23	Case 24	Case 25	Case 26	Case 27

Design related Bending Angle of Mixer Blade (Factors Type : F)								
Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6	Case 7	Case 8	Case 9
 125deg.	 120deg.	 115deg.	 125deg.	 120deg.	 115deg.	 125deg.	 120deg.	 115deg.
Case 10	Case 11	Case 12	Case 13	Case 14	Case 15	Case 16	Case 17	Case 18
 115deg.	 125deg.	 120deg.	 115deg.	 125deg.	 120deg.	 115deg.	 125deg.	 120deg.
Case 19	Case 20	Case 21	Case 22	Case 23	Case 24	Case 25	Case 26	Case 27
 120deg.	 115deg.	 125deg.	 120deg.	 115deg.	 125deg.	 120deg.	 115deg.	 125deg.

Design related Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe and Number of Mixer Blade (Factors Type : D,E)								
Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6	Case 7	Case 8	Case 9
 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.	 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.	 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.
Case 10	Case 11	Case 12	Case 13	Case 14	Case 15	Case 16	Case 17	Case 18
 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.	 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.	 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.
Case 19	Case 20	Case 21	Case 22	Case 23	Case 24	Case 25	Case 26	Case 27
 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.	 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.	 + 10deg.	 0deg.	 -10deg.

4.2 통계기법을 이용한 최적설계 결과 분석

Table 22 는 27 개 모델링에 대한 유동해석 결과이며, 미니탭 프로그램을 활용하여 다구찌 설계의 신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio)에 대한 반응과 평균에 대한 반응, 분산 분석(ANOVA)을 통해 검증을 진행하였다.

Table 22. CFD Results of Taguchi's Orthogonal Matrix (Factors: 8EA, Levels: 3, L27)

A	Distance of Urea Injector and Mixer (mm)
B	Inflow Angle of Exhaust Gas (deg.)
C	Angle of Urea Injector and Mixer (deg.)
D	Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe (deg.)
E	Number of Mixer Blade (No.)
F	Angle of Mixer and SCR Catalyst (deg.)
G	Distance of Mixer and SCR Catalyst (mm)
H	Length of SCR Cone (mm)

Ave.	Std.	SN Ratio	Velocity	NH3 UI	H	G	F	E	D	C	B	A	No.
0.97	0.01273	-0.23886	0.98	0.96	186	187	125	8	10	115	114	95	Case01
0.96	0.03111	-0.33428	0.99	0.94	166	187	120	6	0	115	114	95	Case02
0.91	0.11031	-0.90526	0.99	0.83	146	187	115	4	-10	115	114	95	Case03
0.97	0.01131	-0.2297	0.98	0.97	166	167	125	8	10	110	109	95	Case04
0.96	0.02899	-0.32886	0.98	0.94	146	167	120	6	0	110	109	95	Case05
0.93	0.08839	-0.69396	0.99	0.87	186	167	115	4	-10	110	109	95	Case06
0.97	0.01556	-0.25729	0.98	0.96	146	147	125	8	10	105	104	95	Case07
0.98	0.01909	-0.21795	0.99	0.96	186	147	120	6	0	105	104	95	Case08
0.94	0.07778	-0.62888	0.99	0.88	166	147	115	4	-10	105	104	95	Case09
0.97	0.02828	-0.27011	0.99	0.95	186	187	115	6	10	105	109	85	Case10
0.92	0.0997	-0.78643	0.99	0.85	166	187	125	4	0	105	109	85	Case11
0.97	0.01414	-0.23912	0.98	0.96	146	187	120	8	-10	105	109	85	Case12
0.97	0.02121	-0.26768	0.99	0.96	166	167	115	6	10	115	104	85	Case13
0.92	0.09617	-0.7859	0.99	0.85	146	167	125	4	0	115	104	85	Case14
0.98	0.00707	-0.22025	0.98	0.97	186	167	120	8	-10	115	104	85	Case15
0.97	0.02334	-0.29077	0.98	0.95	146	147	115	6	10	110	114	85	Case16
0.94	0.07849	-0.62501	0.99	0.88	186	147	125	4	0	110	114	85	Case17
0.97	0.01131	-0.24756	0.98	0.96	166	147	120	8	-10	110	114	85	Case18

0.93	0.08344	-0.6545	0.99	0.87	186	187	120	4	10	110	104	75	Case19
0.98	0.00707	-0.19356	0.98	0.97	166	187	115	8	0	110	104	75	Case20
0.96	0.0297	-0.32464	0.99	0.94	146	187	125	6	-10	110	104	75	Case21
0.93	0.08273	-0.65833	0.99	0.87	166	167	120	4	10	105	114	75	Case22
0.97	0.01131	-0.2297	0.98	0.97	146	167	115	8	0	105	114	75	Case23
0.97	0.02334	-0.24596	0.99	0.96	186	167	125	6	-10	105	114	75	Case24
0.93	0.0799	-0.66431	0.99	0.88	146	147	120	4	10	115	109	75	Case25
0.97	0.00849	-0.22932	0.98	0.97	186	147	115	8	0	115	109	75	Case26
0.97	0.01909	-0.27157	0.98	0.96	166	147	125	6	-10	115	109	75	Case27

Table 23. Response for the Signal-to-Noise Ratio

Level	A	B	C	D	E	F	G	H
1	-0.3858	-0.3945	-0.3926	-0.4197	-0.7114	-0.4121	-0.3814	-0.4473
2	-0.4148	-0.4126	-0.3987	-0.4146	-0.2835	-0.3961	-0.4067	-0.402
3	-0.4261	-0.4195	-0.4353	-0.3924	-0.2317	-0.4184	-0.4385	-0.3773
Delta	0.0403	0.025	0.0426	0.0273	0.4797	0.0222	0.0571	0.07
Ranking	5	7	4	6	1	8	3	2

Table 23 은 각 수준에서 각 인자별 신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio)에 대한 응답(Response)을 보여준다. 델타 순위는 설계 변수의 최대 평균과 최소 평균의 차이 값이며, 크기가 커질수록 영향력이 크다고 할 수 있다. 믹서 블레이드의 수(E)는 0.4797 의 값으로 가장 높은 델타 순위이며, SCR 콘의 길이(H), 믹서와 SCR 축매간의 거리(G), 우레아 인젝터와 믹서간 각도(C), 우레아 인젝터와 믹서간의 거리(A), 파이프 내측 믹서 회전방향 장착각도(D), 배기가스 유입각도(B) 및 믹서 블레이드의 굽힘 각도(F), 델타 값은 각각 0.07, 0.0571, 0.0426, 0.0403, 0.0273, 0.025 및 0.0222 이다.

Table 24. ANOVA for the Signal-to-Noise Ratio

Classification	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
A	2	0.00779	0.00779	0.003896	1.7	0.232
B	2	0.003	0.003	0.0015	0.65	0.541
C	2	0.00957	0.00957	0.004784	2.09	0.175
D	2	0.00379	0.00379	0.001894	0.83	0.466
E	2	1.24757	1.24757	0.623785	272.04	0
F	2	0.00237	0.00237	0.001185	0.52	0.612
G	2	0.01475	0.01475	0.007374	3.22	0.083
H	2	0.02268	0.02268	0.011342	4.95	0.032
Residual Error	10	0.02293	0.02293	0.02293		
Total	26	1.33445				

Table 24 는 각 수준에서 각 인자별 신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio)에 대한 분산 분석(ANOVA)을 한 결과를 보여준다. E 와 H 의 P 값은 0.05 미만으로 응답 특성과 변수 사이에 통계적 상관 관계가 있음을 의미한다. E 와 H 의 F 값도 Table 24 와 같이 A, B, C, D, F, G 의 값보다 크다. 각 모델의 다른 구성 요소의 변동성은 조정된 제공 합 값을 알면 계산할 수 있으며, 설계 변수 및 매개 변수의 영향이 크다는 걸 알 수 있다.

Table 25. Response for the Averages

Level	A	B	C	D	E	F	G	H
1	0.9588	0.9581	0.9583	0.9557	0.9278	0.9566	0.9591	0.9529
2	0.9562	0.9563	0.9574	0.9562	0.9684	0.9577	0.9569	0.9573
3	0.9551	0.9557	0.9542	0.9581	0.9738	0.9558	0.9541	0.9598
Delta	0.0037	0.0024	0.0041	0.0023	0.0459	0.0019	0.005	0.0068
Ranking	5	6	4	7	1	8	3	2

각 수준에서 각 설계 변수의 평균에 대한 응답은 Table 25 와 같다. 믹서 블레이드의 수(E)는 0.0459 의 값으로 델타 순위가 가장 높고 SCR 콘의 길이(H), 믹서와 SCR 촉매간의 거리(G), 우레아 인젝터와 믹서간의 각도(C), 우레아 인젝터와 믹서간의 거리(A), 파이프 내측 믹서 회전방향 장착각도(D), 배기가스 유입각도(B) 및 믹서 블레이드의 굽힘 각도(F) 순으로, 델타 값은 각각 0.0068, 0.005, 0.0041, 0.0037, 0.0024, 0.0023 및 0.0019 이다.

Table 26. ANOVAs for the Averages

Classification	DF	Seq SS	Adj SS	Adj MS	F	P
A	2	0.000066	0.000066	0.000033	1.89	0.202
B	2	0.000028	0.000028	0.000014	0.8	0.478
C	2	0.000084	0.000084	0.000042	2.42	0.139
D	2	0.000027	0.000027	0.000014	0.78	0.484
E	2	0.011354	0.011354	0.005677	326.16	0
F	2	0.000016	0.000016	0.000008	0.47	0.64
G	2	0.000113	0.000113	0.000057	3.25	0.082
H	2	0.000215	0.000215	0.000108	6.18	0.018
Residual Error	10	0.000174	0.000174	0.000017		
Total	26	0.012077				

Table 26 은 분산 분석(ANOVA)의 평균을 정리하였으며, 설계 변수 H 는 0.018 로 가장 작은 P 값을 가지면 설계 변수 G 가 그 다음이다.

이러한 설계 변수의 P 값은 0.05 보다 낮으며 이는 유의 수준에서 통계적으로 유의하다는 걸 의미한다. P 값이 0.05 보다 작거나 같으면, 변수간에 유의한 연관성이 통계적으로 있다는 결론을 내릴 수 있다. 0.05 의 값은 사실과 다른 결론을 내릴 확률이 5%라는 것을 의미한다.

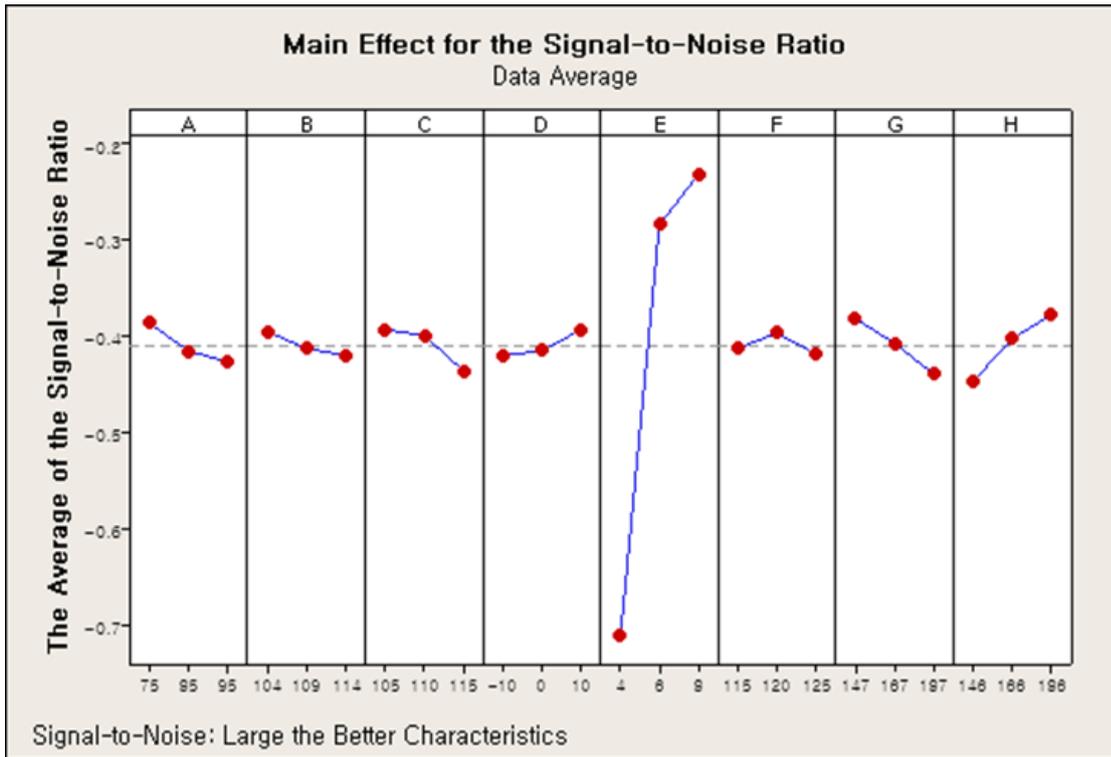


Figure 41. Main Effect for the Signal-to-Noise Ratio

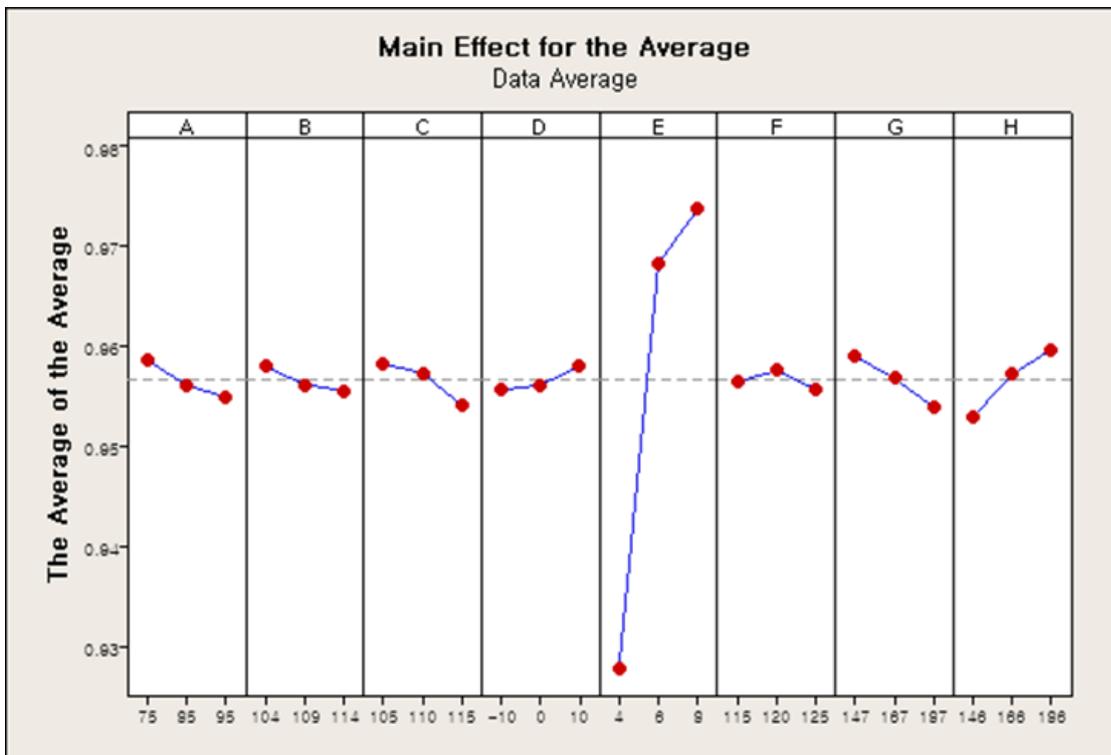


Figure 42. Main Effect for the Average

Figure 41 은 각 설계 변수의 신호대잡음비(Signal-to-Noise Ratio)가 해당 수준에 미치는 주효과를 보여주는 것이며 Figure 42 은 각 설계 변수의 평균에 대한 주효과를 나타낸 것이다. Figure 41 을 보면, 신호대잡음비에 대한 주효과도는 ϵ 가 신호대잡음비에 대한 가장 큰 영향을 미친다는 것을 나타낸다. 평균적으로 ϵ 의 8 을 사용한 실험 런의 신호대잡음비가 ϵ 의 4 을 사용한 실험 런보다 월등히 높다. 추후 설계에 유리한 방향이 아닌 결과로 추출되는 ϵ 의 4 는 제외할 것이다. Figure 42 의 결과 또한 Figure 41 와 유사한 경향과 결과가 도출되었으며 설계 변수 ϵ 가 평균에 대한 주효과에 가장 큰 영향을 미친다는 걸 알 수 있다. 주효과도는 각 설계 변수가 신호대잡음비, 평균 및 표준 편차를 포함하여 응답 특성에 얼마나 많은 영향을 미치는지 보여준다. 선이 수평이 아닌 경우 주효과가 존재하며, 설계 변수별 수준들이 특성에 서로 다른 영향을 미친다는 것을 알 수 있다. 표시된 점을 잇는 선의 기울기가 가파를 수록 주효과도의 크기는 커진다.

제 5 장 메타모델을 활용한 SCR 시스템 성능 최대화 및 주요

영향인자 분석

5.1 최적설계 및 주요인자 파악에 관한 메타모델링 방법

5.1.1 프로세스 정의

메타모델을 이용한 최적설계는 실험설계법을 이용하여 필요한 실험점을 수집하고 메타모델의 정확성을 높이는 반복적인 학습이 필요한 방법이다. 본 연구의 SCR 시스템의 메타모델을 이용한 최적화프로세스 과정은 Figure 43 과 같다. 단계별 항목의 정의는 다음과 같다. Formulation of optimization 은 주요 설계 변수들에 대한 설계 문제파악 및 분석 (목적함수와 구속함수 파악) 한다. Sampling 은 실험계획법을 이용하여 메타모델을 구성하는 실험점을 찾는 과정이며, PIDOTECH 에서 개발한 MLO(Multi-Start Local Optimization)와 EDT(Ensemble of Decision Trees)를 이용한 QBC(Query-by-Commitment)와 MMDS(Multiple Maximum Distance Sampling) 기법을 사용한다.

Make design models using CATIA 의 항목은 실험계획법에 의해 구성된 실험점들을 3D 모델로 제작하는 과정이며 CFD Analysis using STAR-CCM+는 완성된 모델에 대하여 CFD 수행하여 성능 확인 과정이다. Generate Metamodel 은 실험점들에 대한 결과값을 입력하여 메타모델을 만드는 과정이다. Accuracy Convergence 1 에서는 Norm. RMSE(Normalized Root Mean Square Error) 지표를 이용하여 예측 결과와 실제 결과가 얼마나 일치하는지 비교 분석한다. 엔지니어가 요구하는 정확도를 만족 할 경우 Predicting the optimal design 과정에서 성능이 최대화라고 예상되는 설계 값을 추출한다. CFD Analysis for Optimum Design 은 최적 설계안에 대한 CFD 해석을 진행하며, Accuracy Convergence 과정에서 예상된

최적결과와 실제 수행된 CFD 결과를 비교한다. 메타 모델을 사용한 최적화 과정을 10 단계의 순으로 정한 목적은 관련 논문 및 일반적인 기업체내 연구 목적의 프로젝트를 수행하는 과정을 기준으로 진행되는 점을 반영하였다.

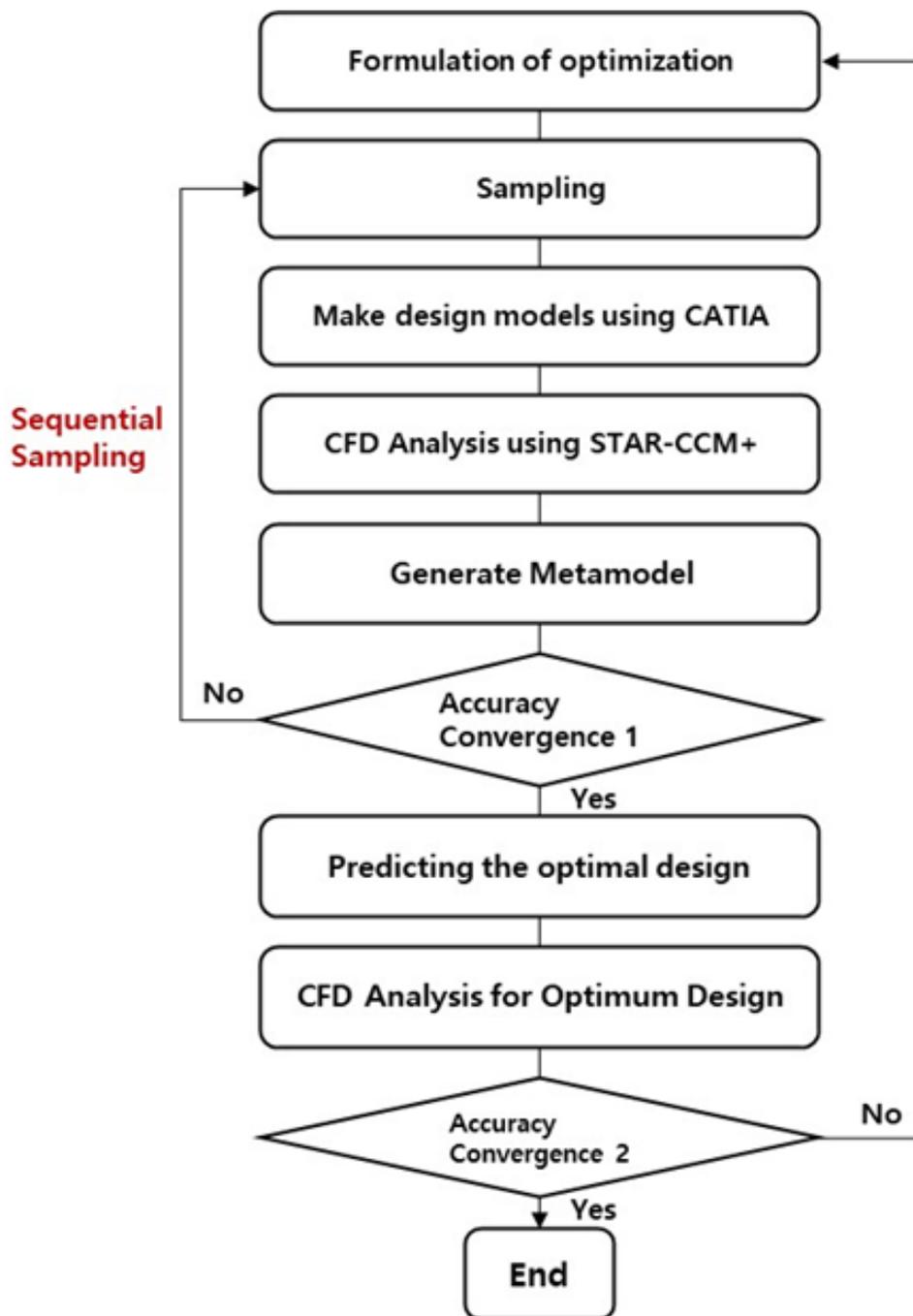


Figure 43. Optimization Process using the Metamodel

5.1.2 메타모델을 이용한 최적설계

1) Sampling

다구찌 직교배열 최적화설계에서 생성한 27 개 데이터를 활용하기 위해 19 개의 학습데이터(Train Data)와 8 개의 시험데이터(Test Data)로 재배치하여 첫번째 학습을 진행하였다. 총 3 번의 반복(Iteration) 샘플링을 진행하여, 최적 메타 모델 생성하였다.

필요한 최소 실험점은 PIAAnO Tool 개발 제조업체인 PIDOTECH 제안에 따라 아래와 같은 방식으로 정의하고자 한다. 식 (34)는 완전 이차 다항식 모델(Full Quadratic Polynomial Model) 생성에 필요한 최소 실험점 수에 대한 모델링이다.

$$\hat{y}(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i x_i + \sum_{i=1}^n \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{n-1} \times \sum_{j=i+1}^n \times \beta_{ij} x_i x_j \quad (34)$$

식 (35)는 이차 다항식 모델을 생성하는데 필요로 하는 최소한의 실험점 개수이다.

$$nSAT=(ndv+1)(ndv+2)/2 \quad (35)$$

nSAT 는 실험점의 수이며, ndv 는 인자의 수를 의미한다. 인자의 수에 따라 Figure 44 와 같이 하늘색 영역의 실험 회수를 추천하며 아래 식 (36), (37)은 인자의 수에 따른 계산법이다.

$$\text{설계변수개수}(ndv)\text{가 } 10 \text{ 이하}=1.5 \times nSAT \quad (36)$$

$$\text{설계변수개수}(ndv)\text{가 } 10 \text{ 이상}=10 \times nSAT \quad (37)$$

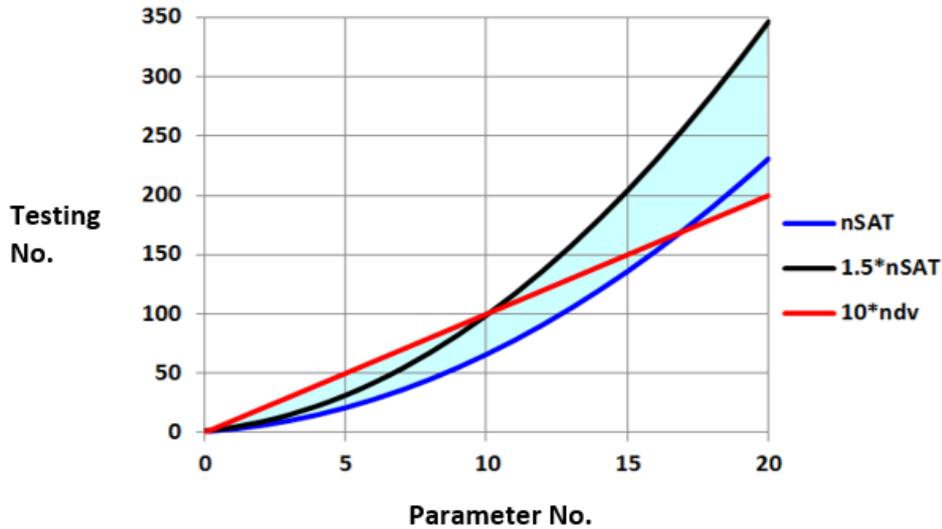


Figure 44. Recommendation of Testing Point related Parameter No.

본 연구에서 설계 인자가 8 개임을 감안하면, 총 실험수는 최소 67.5 개가 되며 80 개 정도의 실험을 한다는 가정하에 메타 모델 구성을 위한 시험 데이터를 전체 실험 개수의 10% 수준인 8 개로 설정하였다. Figure 45 는 PIAAnO Tool 의 Rearrange 기능을 사용하여 27 개의 직교 배열 데이터의 분배되는 과정을 나타낸 것이다. 특히, Figure 46 은 데이터간의 최소 거리를 최대화하는 개념을 적용하는 MAXIMIN Criterion 원리를 보여주는 것이다. 공간충진성을 고려해 최소의 데이터로 최대한 데이터를 극대화하며, 최적 메타 모델을 생성하기 위한 실험점 확실성은 이 원리를 이용하여 데이터 배열을 구성한다. 다만, 아래와 같은 종료 조건에 대한 가이드가 없을시 무한 반복 횟수를 진행해야 하는 바 사용자가 객관적이고 현실적인 종료 조건을 정하는 것이 중요하다. 실험 종료 조건으로 아래와 같이 설정하고자 한다. Norm. RMSE(Normalized Root Mean Square Error) 값이 30% 이하이며, Max.Abs.Error 값이 0.01 이하 조건을 만족할 경우 메타모델이 정확하다고 판단한다. 또한 연속된 3 번 이상의 반복에서 메타 모델 개선이 없을 경우 실험 종료 조건으로 간주한다. Norm.

RMSE(Normalized Root Mean Square Error), Max.Abs.Error 는 아래와 같이 수식 (38), (39) 으로 정의한다.

$$\mathit{Norm. RMSE} = \frac{\mathit{RMSE}}{Q_3 - Q_1} = \frac{\sqrt{\frac{1}{n_{test}} \sum (y - \hat{y})^2}}{Q_3 - Q_1} \quad (38)$$

n_{test} 는 실험점 수이며, y 는 수치 해석에서 계산한 성능 값이다. \hat{y} 는 메타 모델을 통해 예측한 성능 값이며, Q_3 및 Q_1 은 3 사 분위수 및 1 사 분위수이다.

$$\mathit{Max. Abs. Error} = \mathit{Max}[y_1 - \hat{y}_1, \quad y_2 - \hat{y}_2, \quad \dots, y_8 - \hat{y}_8] \quad (39)$$

추가적으로 학습 메타 모델중의 최종 선정된 메타 모델의 해석 검증과의 매칭율이 필요 한 바 아래와 같은 식 (40)로 검증하고자 한다.

$$\mathit{Maching Ratio} (\%) = \frac{y}{\hat{y}} \times 100 \quad (40)$$

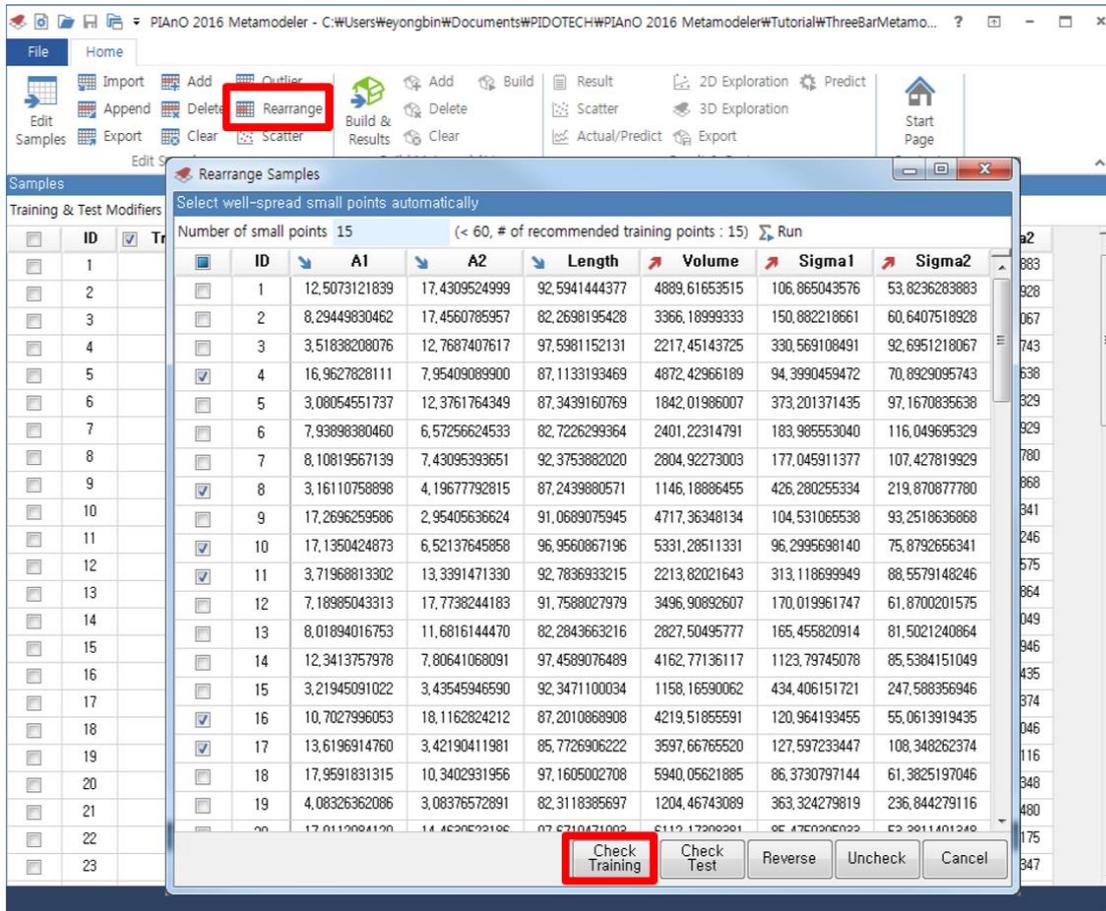


Figure 45. Function of PIAO Tool related Data Rearrange

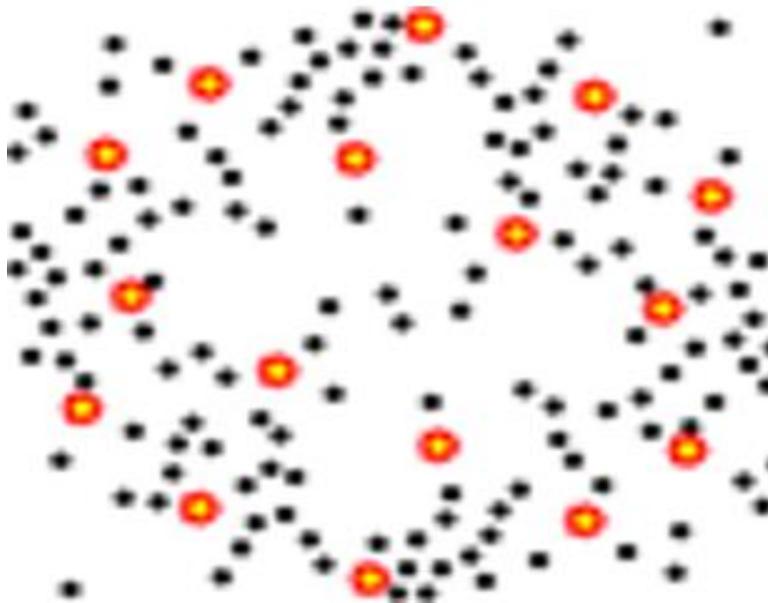
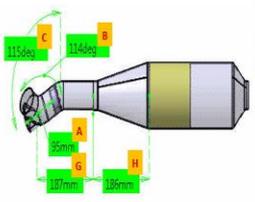
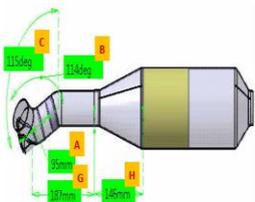
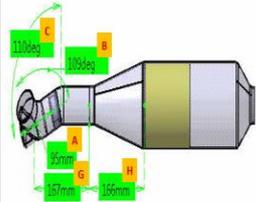
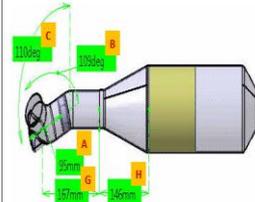
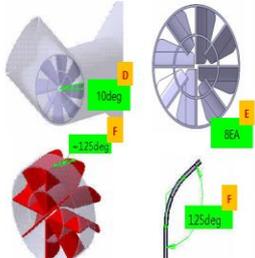
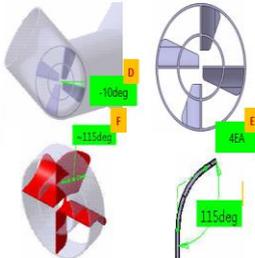
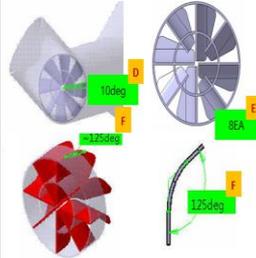
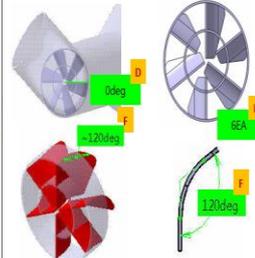


Figure 46. Conception of MAXIMIN Criterion

2) 구조설계 모델제작

Table 27, Table 28, Table 29, Table 30, Table 31 은 생성된 메타 모델 수치를 기반으로 SCR 시스템을 모델링한 이미지를 보여준다. 각 생성된 메타 모델 수치를 기반으로 SCR 시스템을 모델링을 해야만 각 메타 모델에서 구하고자 하는 유동균일도(Uniformity, UI)의 수치 해석을 진행 할 수 있다.

Table 27. Design Modeling of 1st Train Data

Design Parameter of 1st Train Data	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 1st Train Data	Case 5	Case 6	Case 7	Case 8
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 1st Train Data	Case 9	Case 10	Case 11	Case 12
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 1st Train Data	Case 13	Case 14	Case 15	Case 16
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 1st Train Data	Case 17	Case 18	Case 19
A, B, C, G, H			
D, E, F			

Table 28. Design Modeling of 2nd Train Data

Design Parameter of 2 nd Train Data	Case 20	Case 21	Case 22	Case 23
A, B, C, G, H				
D, E, F				
Design Parameter of 2 nd Train Data	Case 24	Case 25	Case 26	Case 27
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 2nd Train Data	Case 28	Case 29	Case 30	Case 31
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 2nd Train Data	Case 32	Case 33	Case 34	Case 35
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 2nd Train Data	Case 36	Case 37	Case 38	Case 39
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Table 29. Design Modeling of 3rd Train Data

Design Parameter of 3rd Train Data	Case 40	Case 41	Case 42	Case 43
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 3rd Train Data	Case 44	Case 45	Case 46	Case 47
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 3rd Train Data	Case 48	Case 49	Case 50	Case 51
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 3rd Train Data	Case 52	Case 53	Case 54	Case 55
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Table 30. Design Modeling of 4th Train Data

Design Parameter of 4th Train Data	Case 60	Case 61	Case 62	Case 63
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 4th Train Data	Case 64	Case 65	Case 66	Case 67
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 4th Train Data	Case 68	Case 69	Case 70	Case 71
A, B, C, G, H				
D, E, F				

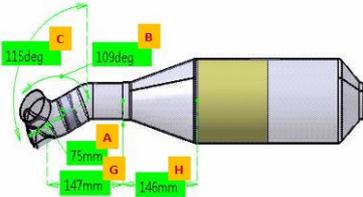
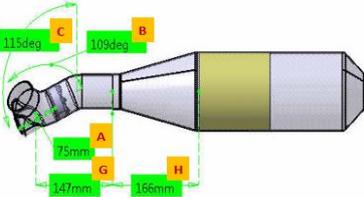
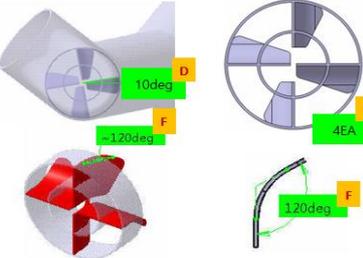
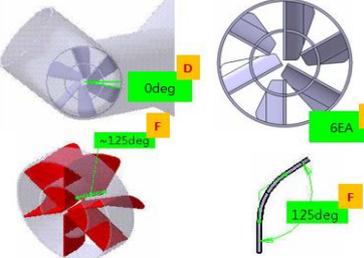
Design Parameter of 4th Train Data	Case 72	Case 73	Case 74	Case 75
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Design Parameter of 4th Train Data	Case 76	Case 77	Case 78	Case 79
A, B, C, G, H				
D, E, F				

Table 31. Design Modeling of Test Data

Design Parameter of Test Data	Case 1	Case 2	Case 3
A, B, C, G, H			
D, E, F			

Design Parameter of Test Data	Case 4	Case 5	Case 6
A, B, C, G, H			
D, E, F			

Design Parameter of Test Data	Case 7	Case 8
A, B, C, G, H		
D, E, F		

3) 해석결과

Table 32. 1st Train Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results

No.	A	B	C	D	E	F	G	H	NH3 UI
Case 01	95	114	115	10	8	125	187	186	0.964
Case 02	95	114	115	-10	4	115	187	146	0.833
Case 03	95	109	110	10	8	125	167	166	0.966
Case 04	95	109	110	0	6	120	167	146	0.943
Case 05	95	109	110	-10	4	115	167	186	0.867
Case 06	95	104	105	0	6	120	147	186	0.962
Case 07	85	109	105	0	4	125	187	166	0.851
Case 08	85	109	105	-10	8	120	187	146	0.963
Case 09	85	104	115	10	6	115	167	166	0.955
Case 10	85	104	115	0	4	125	167	146	0.853
Case 11	85	104	115	-10	8	120	167	186	0.970
Case 12	85	114	110	10	6	115	147	146	0.951
Case 13	85	114	110	-10	8	120	147	166	0.964
Case 14	75	104	110	10	4	120	187	186	0.874
Case 15	75	104	110	0	8	115	187	166	0.973
Case 16	75	104	110	-10	6	125	187	146	0.943
Case 17	75	114	105	0	8	115	167	146	0.966
Case 18	75	114	105	-10	6	125	167	186	0.956
Case 19	75	109	115	0	8	115	147	186	0.968

Table 33. 2nd Train Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results

No.	A	B	C	D	E	F	G	H	NH3 UI
Case 20	95	104	115	10	4	125	187	146	0.894
Case 21	79.11	112.13	106.63	3.87	7	122.24	152.07	158.89	0.966
Case 22	92.33	108.93	113.6	-9.33	7	122.25	170.47	158	0.967

Case 23	78.35	108.47	108.4	-8.54	6	116.98	170.45	166.11	0.965
Case 24	77.93	105.93	106.05	4	6	122.13	148.65	172.39	0.964
Case 25	89.92	110.41	112.17	9.15	6	115.27	153.42	165.26	0.963
Case 26	75	114	105	10	4	125	187	146	0.906
Case 27	90.6	104.4	107.58	0.83	5	118.87	173.93	177.7	0.957
Case 28	80.37	109.27	107.07	-7.37	4	120.66	185.4	179.87	0.916
Case 29	94.05	113.49	105.67	-0.92	6	124.04	183.44	182.53	0.916
Case 30	81.93	113.53	107.74	-6.93	4	118.73	148.4	149.64	0.931
Case 31	89.8	110.6	113.63	2.72	5	124.67	162.73	178.54	0.951
Case 32	76.18	112.24	106.76	-0.59	5	120.29	163.23	171.88	0.954
Case 33	77.35	108.12	112.65	6.49	6	117.35	184.65	181.29	0.962
Case 34	82.05	109.3	111.47	9.99	5	123.23	182.28	157.76	0.944
Case 35	82.06	109.29	109.12	-8.82	6	115	170.53	155.41	0.961
Case 36	84.41	106.35	113.24	6.47	7	119.89	156.41	183.65	0.969
Case 37	85.59	110.47	114.41	5.29	4	118.53	160.13	150.71	0.918
Case 38	90.29	111.06	110.29	8.82	5	116.77	172.88	178.03	0.952
Case 39	92.65	104.01	106.76	-6.47	7	118.49	147.01	167.16	0.968

Table 34. 3rd Train Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results

No.	A	B	C	D	E	F	G	H	NH3 UI
Case 40	75.00	107.13	109.38	6.25	8	121.31	174.50	171.00	0.975
Case 41	84.33	104.33	111.84	7.47	7	121.10	170.19	180.83	0.970
Case 42	94.00	111.83	110.93	-7.88	8	118.33	160.34	183.84	0.973
Case 43	87.66	109.34	112.34	-1.44	6	116.43	184.86	172.18	0.961
Case 44	93.54	112.13	114.74	5.95	5	124.45	165.67	160.41	0.947
Case 45	87.32	110.40	106.93	-4.01	7	121.29	174.20	185.27	0.971
Case 46	78.24	105.72	111.10	6.62	7	120.40	164.60	153.32	0.966
Case 47	81.87	105.79	106.20	2.93	7	117.65	185.81	171.87	0.970
Case 48	93.98	110.13	112.46	-2.90	8	119.14	181.93	152.67	0.968

Case 49	76.49	107.40	107.80	4.20	7	118.87	155.80	181.46	0.973
Case 50	92.45	110.15	105.30	-8.39	5	124.13	149.92	176.13	0.959
Case 51	79.66	104.73	112.55	10.00	4	124.67	155.59	174.99	0.939
Case 52	85.92	109.93	110.61	-0.67	5	115.93	149.56	172.15	0.958
Case 53	94.73	107.80	106.27	1.41	4	121.33	147.74	150.81	0.930
Case 54	94.73	107.33	105.50	2.02	6	116.87	159.27	154.05	0.960
Case 55	86.73	106.41	108.80	-8.81	5	120.13	161.13	185.17	0.955
Case 56	90.78	112.20	110.46	9.60	5	116.82	173.40	160.13	0.949
Case 57	82.90	112.70	108.34	3.33	4	123.89	149.87	170.53	0.933
Case 58	79.40	106.99	105.41	9.60	5	119.00	176.06	183.88	0.954
Case 59	87.27	106.32	107.20	9.06	8	119.01	154.99	150.81	0.968

Table 35. 4th Train Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results

No.	A	B	C	D	E	F	G	H	NH3 UI
Case 60	95.00	104.15	115.00	-9.59	4	115.00	185.37	186.00	0.907
Case 61	80.30	109.09	110.93	1.54	6	118.65	168.55	167.33	0.963
Case 62	79.77	108.36	112.59	-8.52	7	125.00	151.87	164.69	0.965
Case 63	92.74	107.05	105.00	-4.13	6	119.74	180.55	149.48	0.955
Case 64	91.91	106.28	109.43	-1.43	6	125.00	163.50	158.92	0.958
Case 65	81.89	109.38	105.55	2.72	4	119.40	181.67	157.55	0.912
Case 66	78.50	107.82	110.45	-8.00	5	122.52	171.27	185.73	0.956
Case 67	75.21	107.54	111.39	10.00	8	123.73	187.00	150.13	0.970
Case 68	92.47	114.00	109.20	1.30	7	116.23	187.00	163.95	0.967
Case 69	75.12	107.91	105.98	4.40	6	116.00	181.99	186.00	0.967
Case 70	80.99	104.00	109.27	9.23	4	115.00	182.54	164.13	0.919
Case 71	82.85	110.64	114.97	1.46	8	115.44	147.00	146.00	0.962
Case 72	75.25	106.40	115.00	-10.00	6	123.69	168.34	164.43	0.960
Case 73	89.27	109.79	113.13	-4.23	5	117.72	166.33	176.41	0.953
Case 74	75.00	109.68	113.21	2.79	6	120.27	183.22	171.52	0.961

Case 75	95.00	112.46	112.34	9.54	5	125.00	183.33	172.67	0.944
Case 76	89.98	112.41	107.63	-3.03	6	121.32	170.63	164.14	0.962
Case 77	85.41	114.00	111.84	6.03	7	123.98	161.83	161.77	0.964
Case 78	95.00	106.40	108.55	-1.02	8	120.07	167.55	175.93	0.972
Case 79	81.39	111.45	109.64	-2.66	5	120.34	147.00	156.92	0.954

Table 36. Test Data for Optimal Creation of Metamodel including NH3 UI Results

No.	A	B	C	D	E	F	G	H	NH3 UI
Case 1	95	114	115	0	6	120	187	166	0.941
Case 2	95	104	105	10	8	125	147	146	0.960
Case 3	95	104	105	-10	4	115	147	166	0.880
Case 4	85	109	105	10	6	115	187	186	0.950
Case 5	85	114	110	0	4	125	147	186	0.880
Case 6	75	114	105	10	4	120	167	166	0.874
Case 7	75	109	115	10	4	120	147	146	0.875
Case 8	75	109	115	-10	6	125	147	166	0.956

Table 37. CFD Results through Created Metamodel

No. (Test Data)	CFD Results	No. (1 st Train Data)	CFD Results	No. (2 nd Train Data)	CFD Results	No. (3 rd Train Data)	CFD Results	No. (4 th Train Data)	CFD Results
Case 1	0.941	Case 1	0.964	Case 20	0.894	Case 40	0.975	Case 60	0.907
Case 2	0.960	Case 2	0.833	Case 21	0.966	Case 41	0.970	Case 61	0.963
Case 3	0.88	Case 3	0.966	Case 22	0.967	Case 42	0.973	Case 62	0.965
Case 4	0.95	Case 4	0.943	Case 23	0.965	Case 43	0.961	Case 63	0.955
Case 5	0.88	Case 5	0.867	Case 24	0.964	Case 44	0.947	Case 64	0.958
Case 6	0.874	Case 6	0.962	Case 25	0.963	Case 45	0.971	Case 65	0.912
Case 7	0.875	Case 7	0.851	Case 26	0.906	Case 46	0.966	Case 66	0.956
Case 8	0.956	Case 8	0.963	Case 27	0.957	Case 47	0.970	Case 67	0.970
		Case 9	0.955	Case 28	0.916	Case 48	0.968	Case 68	0.967
		Case 10	0.853	Case 29	0.916	Case 49	0.973	Case 69	0.967
		Case 11	0.97	Case 30	0.931	Case 50	0.959	Case 70	0.919
		Case 12	0.951	Case 31	0.951	Case 51	0.939	Case 71	0.962
		Case 13	0.964	Case 32	0.954	Case 52	0.958	Case 72	0.960
		Case 14	0.874	Case 33	0.962	Case 53	0.930	Case 73	0.953
		Case 15	0.973	Case 34	0.944	Case 54	0.960	Case 74	0.961

		Case 16	0.943	Case 35	0.961	Case 55	0.955	Case 75	0.944
		Case 17	0.966	Case 36	0.969	Case 56	0.949	Case 76	0.962
		Case 18	0.956	Case 37	0.918	Case 57	0.933	Case 77	0.964
		Case 19	0.968	Case 38	0.952	Case 58	0.954	Case 78	0.972
				Case 39	0.968	Case 59	0.968	Case 79	0.954

Table 37 은 실험데이터 8 개와 학습데이터의 메타 모델 생성을 위한 79 개의 케이스별 모델링을 통해 유동균일도(Uniformity Index, UI)을 요약한 결과이며, 순차적으로 메타모델을 생성 및 정확도 평가에 이용된다.

5.2 메타모델을 이용한 최적설계 결과 분석

5.2.1 메타모델 학습 및 최적화 예측결과

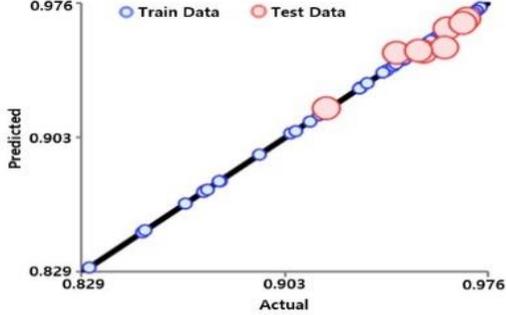
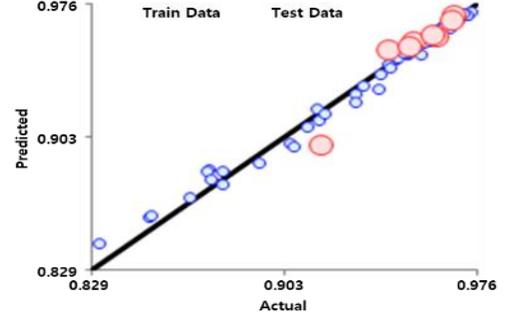
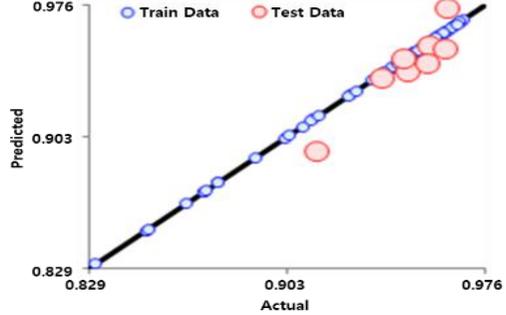
메타 모델의 최적화 과정의 결과를 정리하면 Table 38 과 같다. Plot 은 메타 모델의 정확도를 의미하는 그래프로서 Y 축은 예측 결과이며, X 축은 실제 수치 해석 결과이다. 예측결과와 실제결과를 비교하여 성능지표들이 계산되고 낮을수록 좋은 성능을 나타낸다. 메타모델을 구성하는 알고리즘은 ensemble decision tree, Kriging, radial basis function 3 가지로 정의되었다. 메타 모델의 정확도는 Train(파란색) 및 Test(빨간색) 데이터가 모두 일치하고 결과가 선형 그래픽 패턴일수록 메타 모델의 정확도는 상승하게 된다. 또한 수치적으로, Norm. RMSE(%)와 Max.Abs.Error 는 메타 모델의 정확도를 결정하는데 사용된다. Table 38 의 결과를 보면, RBFi 메타 모델의 Norm. RMSE(%) 값은 82.5%이다. 예측 성능이 세가지 메타 모델에 따라 각기 다른 결과가 도출되었음을 확인할 수 있었다. EDT 메타 모델의 Norm. RMSE(%)는 57.0%이며 RBFi 메타 모델 결과(82.5%)보다 우수하다. 그러나 EDT 메타 모델에서는 오차값이 줄어 들었지만 최대 절대차값(Max.Abs.Error)은 여전히 0.02 로 약 2%의 오차율을 의미한다. 실증적으로 오차율이 1% 이상이면 실제 시험 결과와 차이가 발생할 수 있다. 따라서 본 연구에서의 최적화는 Kriging 알고리즘을 사용하여 메타 모델을 구성하여 수행하였다. 최종 선택된 Kriging 모델을 이용하여 UI 성능 최대화를 만족하는 최적화를 진행한 결과는 Figure 47 에 정리되어 있다. 초기모델 대비 Uniformity Index 성능은 1.9% 향상되었으며, 성능향상에

따른 각 설계변수의 변경범위도 확인할 수 있다. 결과에 따르면 D (Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe), E (Number of Mixer Blade) 설계변수가 가장 많이 변경되었으며, E 설계변수는 상한 범위가 더 증가한다면 성능최대화에 더 도움될 것으로 분석된다.

Table 39 에서는 각 설계변수가 성능향상에 얼마나 기여했는지 나타내고 있다. E (Number of Mixer Blade) 설계변수는 상한범위까지 변경이 많이 되었으며, 실제로 성능향상에 가장 많은 기여를 한 것으로 나타난다. 반면 F (Angle of Mixer and SCR Catalyst) 설계변수는 변경폭은 작지만 성능향상에 22% 기여한 것으로 나타난다.

따라서 최적화 및 기여도분석 결과를 종합적으로 봤을 때, E (Number of Mixer Blade) 설계변수는 절대적으로 성능향상에 중요하다고 할 수 있다. 부수적으로 D (Mounting Angle in the Direction of Rotation of the Mixer inside the SCR Pipe), F (Angle of Mixer and SCR Catalyst) 설계변수 또한 성능향상에 중요하다.

Table 38. Accuracy Result of the Metamodels

Ranking No.	Algorithm	Plot	Norm.RMSE(%)	RMSE	Max.Abs.Error
1	KRG		28.5%	0.004	0.008
2	EDT		57.0%	0.008	0.020
3	RBFi		82.5%	0.011	0.021

	No.	Parameter	Convergence History	Changes after Optimal Design	Low Limit	Initial Value	Optimal Value	Rate of Change for Design Parameter	Upper Limit
Design Parameter	1	A		Decrease	75.00	85.00	80.42	-5.4%	95.00
	2	B		Decrease	104.00	109.00	107.38	-1.5%	114.00
	3	C		Decrease	105.00	110.00	108.02	-1.8%	115.00
	4	D		Increase	-10.00	0.00	5.67	28.4%	10.00
	5	E		Increase (Close to Upper Limit)	4.00	6.00	8.00	33.3%	8.00
	6	F		Increase	115.00	120.00	121.21	1.0%	125.00
	7	G		Decrease	147.00	167.00	163.97	-1.8%	187.00
	8	H		Increase	146.00	166.00	171.03	3.0%	186.00
	No.	Name of Objective Function	Convergence History	Changes after Optimal Design	Importance	Initial Value	Optimal Value	Rate of Change for Objective Function	Maximum/Minimum/Target
Objective Function	1	NH3_UI		Improvement	1.00	0.95641	0.97461	1.9%	↑

Figure 47. Result of Optimization using Kriging Metamodel in PIAAnO Tool

Table 39. Result of CFD Compared to Metamodel Optimization

No.	Major Design Parameters	Contribution Analysis [%]
1	A: Distance between Urea Injector and Mixer	4
2	B: Inflow Angle of Exhaust Gas	7
3	C: Angle of Urea Injector and Mixer	0
4	D: Mounting Angle of Mixer	19
5	E: Number of Mixer Blade	100
6	F: Bending Angle of Mixer Blade	22
7	G: Distance of Mixer and SCR Cone	0
8	H: Length of SCR Cone	3

5.2.2 예측결과 검증

최적화 프로세스의 마지막으로 메타모델을 이용한 예측결과는 실제 분사 해석을 통해 상호간의 결과를 검증해야 한다. Table 40 은 메타모델 기준으로 도출된 각 설계 변수의 값을 기준으로 예측 결과와 CFD 를 실제 계산했을 때 결과를 비교한 것이다. 성능 최적화 예측 결과값은 0.97461 이며 실제 CFD 결과는 0.97293 이다. 검증결과 99.83% 일치하는 것으로 나타났다. 따라서 생성한 Kriging 알고리즘의 메타모델은 매우 정확하며, 메타모델을 이용한 최적화 방법은 신뢰성을 가지고 사용할 수 있다는 판단을 할 수 있다.

Table 40. Result of CFD Compared to Metamodel Optimization

No.	Major Design Parameters	Unit	Value	NH ₃ UI	
				Prediction	CFD
1	A: Distance between Urea Injector and Mixer	mm	80.42		
2	B: Inflow Angle of Exhaust Gas	deg.	107.38		
3	C: Angle of Urea Injector and Mixer	deg.	108.02		
4	D: Mounting Angle of Mixer	deg.	5.67	0.97461	0.97293
5	E: Number of Mixer Blade	No.	8		
6	F: Bending Angle of Mixer Blade	deg.	121.21		
7	G: Distance of Mixer and SCR Cone	mm	163.97		
8	H: Length of SCR Cone	mm	171.03		
Matching Rate (%)				99.83	

5.3 최적화 방법에 따른 결과 비교

Table 41 과 같이 베이스 모델, DOE 최적화 모델, 메타모델의 최적화 모델의 실제 설계 모델링을 통해 분사해석을 진행하였다. 베이스 모델은 Trial and Error 방식으로 엔지니어의 경험으로 선정된 모델이며, DOE 최적화 모델은 다구찌 직교배열을 이용하여 얻은 결과이다. 마지막으로 메타모델의 최적화 모델은 Kriging 알고리즘을 사용하여 생성한 메타모델에서 성능최대화 지점을 찾은 결과이다. 베이스 모델, DOE 최적화 모델, 메타 모델의 최적화 모델의 이 세가지 모델에서 각각 파이프 길이와 SCR 콘 길이와 관련된 설계 변수 G 와 H 는 증가하는 방향으로 변경된다. G 의 경우, 베이스 모델의 값은 147mm 이며 DOE 최적화시 187mm, 메타 모델 최적화시 163.97mm 로 증가한다. H 의 경우, 베이스 모델의 값은 146mm 이며 DOE 최적화시 166mm, 메타 모델 최적화시 171.03mm 로 증가한다. 다만 믹서

블레이드(F)의 굽힘 각도는 감소하는 방향으로 변경된다. F 의 경우, 베이스 모델의 값은 125 도이며, DOE 최적화시에는 115 도, 메타 모델 최적화시에는 121.208 도로 감소한다. DOE 최적화(0.973499)뿐만 아니라 메타 모델 최적화(0.972931)에서도 베이스 모델(0.959639) 대비 유동균일도(Uniformity Index, UI)가 개선되었다. 따라서 DOE 및 메타 모델 최적화 방법 모두 유동균일도(Uniformity Index, UI) 성능을 향상시키는 목적을 달성하였다.

Table 41. Design Modeling of Base Model and DOE Optimization, Metamodel Optimization

Base Model	DOE Optimization	Metamodel Optimization
NH ₃ UI: 0.959639	NH ₃ UI: 0.973499	NH ₃ UI: 0.972931

Table 42. Summary of Base Model, DOE Optimization and Metamodel Optimization

Classification	Base Model	DOE Optimization	Metamodel Optimization
Results of Optimization	0.959639	0.9734991(1.44% ↑)	0.972931(1.38% ↑)
Data Quantity	1	27	87
Contribution	N/A	N/A	E > F > D
Prediction	N/A	N/A	Predictable

Table 42에서는 최적화방법을 비교하였고 최적화 결과, 데이터 양, 기여도 및 예측 결과를 언급하였다. 베이스 모델은 실험을 통해 하나의 데이터만을 평가하여 설계했기 때문에 비용 및 시간 측면에서는 가장 효율적이다. 다만 결과에 대한 신뢰성 및 분석 측면에서는 많이 부족하다. DOE 최적화는 다구찌 직교 배열에 의해 생성된 27 개의 실험점을 DOE 방법에 의한 최적화 기법을 이용한 것이며, 모든 직교 배열 설계에 의한 실험점을 평가한 후 결과에서 가장 높은 성능 값이 선택된다. DOE 방법은 베이스모델보다는 전반적인 설계영역을 포괄하지만, 일부 결과이기 때문에 최적화 결과에 대한 불확실성이 있으며 기여와 예측을 파악하는 것이 불가능하다. 메타모델 최적화 방법은 순차 샘플링 방식으로 찾은 87 개의 실험점을 이용하여 최적화된 메타모델을 생성하고, 생성된 메타 모델 내에서 최대 성능 포인트를 예측한다. 따라서 설계 변수 전 범위에 대해 비교하여 결과를 예측할 수 있으며, 설계변수의 기여도를 분석할 수 있다. 이러한 장점을 잘 활용하면 불필요한 수치 해석과 실험을 피할 수 있어 시간과 비용을 절감할 수 있다.

DOE와 메타 모델 최적화는 서로 다른 방법이지만 둘 다 베이스 모델에 비해 향상된 성능을 가지고 있어 SCR 시스템에서 UI 성능을 향상시키기 위한 방법으로 볼 수 있다.

분석 및 결과 활용 측면에서 DOE 최적화 및 베이스 모델보다 메타 모델 최적화 방법이 더욱 효과적인 것으로 판단된다.

제 6 장 요약 및 결론

본 연구에서는 유동 균일지수 성능을 극대화하기 위한 선택적 촉매환원 시스템의 구조적 최적화 방법을 개발하였다. 첫번째 방법으로 실험계획법을 이용하여 유동 균일지수 성능 최대화 및 주요 파라미터를 분석하였다. 다만 설계 영역의 경계선에서 확률적인 방법을 이용하기 때문에 파라미터와 성능 향상의 기여도 분석 및 성능 예측에 어려움이 있다. 두번째 방법에서는 실험계획법에 메타모델을 적용하여 설계 범위 전 영역에 대한 최적설계를 하여 첫번째 방법의 한계점을 해결하였다. 각각 특징이 다르지만 상황에 따라 최적화방법을 선택적으로 사용할 수 있다는 것을 이번 연구로 확인하게 되었다.

통계학 기법을 활용한 실험계획법은 selective catalytic reduction 시스템의 설계인자에 대해 민감도 분석하여 중요도를 판단할 수 있었다. 설계 인자별 신호대잡음비 및 평균에 대한 효과는 혼합기 블레이드 개수(E)는 델타 순위가 0.459 로 가장 높고, 그 다음으로 SCR 콘(H)의 길이, 혼합기 및 SCR 촉매(G)의 거리, 요소 분사기 및 혼합기(C)의 각도, 요소 분사기 및 혼합기(A)의 거리, 배기가스(B)의 유입 각도, SCR 파이프(D) 내부의 혼합기의 회전 방향의 장착 각도, 혼합기 블레이드(F)의 벤딩 각도가 0.0068, 0.05, 0.041, 0.0037, 0.0024, 0.0023, 0.0019 의 델타 값을 확인할 수 있다. 믹서 날개수와 콘길이의 P-Value 는 0.05 보다 작으므로 통계적으로 유의한 수준이다. 따라서 selective catalytic reduction 시스템에서는 배기가스와 NH₃ 가스를 혼합해주는 믹서장치의 블레이드 개수가 가장 중요하다고 할 수 있다. 다만 민감도 분석은 설계인자들 정보만을 기반으로 중요도는 참고만 할 수 있다. 또한 실험계획법에 의해 선택된 실험점들 중에서 기본모델 UI 성능(0.959639) 보다 1.44%(0.9734991) 향상된 성능최대화 결과를 찾을 수 있었다.

메타모델을 이용한 최적화는 민감도분석 뿐만 아니라 성능최대화에 설계인자들이 각각 얼마나 기여했는지 수치적으로 나타내는 기여도분석을 통해 판단할 수 있었다. 기여도

우선순위는 혼합기 블레이드 개수(E), 혼합기의 각도(C), 혼합기의 회전 방향의 장착 각도(D)이며, 100%, 22%, 19% 값을 가진다. 또한 메타모델을 이용한 성능최대화 결과는 기본모델 UI 성능(0.959639) 보다 1.38%(0.972931)의 향상되었음을 확인할 수 있었다. 결론적으로 본 연구의 최적화 결과 기본모델에 비해 UI 성능을 1.44% 향상시킴으로써 NO_x의 정화 효율이 30.95% 향상되었음을 확인할 수 있었다.

이러한 연구결과는 차량 종류 및 신규개발에 따른 배기계의 형태가 계속 변경되는 산업구조상 중요한 정보라고 할 수 있다. 또한 급격하게 줄어드는 개발기간을 고려했을 때 정확성이 확보되는 메타모델을 이용한 최적화 예측 프로세스의 확보가 매우 중요하다는 것을 확인할 수 있다. 예측 프로세스를 이용할 경우 변경되는 설계인자의 값만 입력한다면 1~2 초내에 성능결과를 예측할 수 있으며, 기존의 예측모델 해석검증기간 1 일에 비교하면 비약적인 시간단축을 확보할 수 있게 된다.

본 연구를 이용하여 향후 관련 연구를 수행하는 연구자들에게 다양한 형태의 selective catalytic reduction 시스템을 개발하는 과정에서 NO_x 저감 성능향상 및 분석에 유용한 예측 개발에 사용 될 수 있으며, 한번 셋업한 메타모델은 다른 개발 아이템의 설계변수를 쉽게 적용할 수 있는 장점이 있어 실질적으로 시간과 비용측면을 고려하면 다방면의 상당한 효과적인 감소가 될 것으로 판단된다.

Abbreviations

C	Carbon
CO	Carbon Monoxide
HC	Hydrocarbon
NO	Nitric oxide
NO ₂	nitrogen dioxide
NO _x	Nitrogen oxide
PM	Particulate Matters
N ₂	Nitrogen
CO ₂	Carbon Dioxide
SO ₂	sulfur dioxide
NMHC	Non-methane hydrocarbon,
THC	Total hydrocarbon
LNT	Lean NO _x Trap
DPF	Diesel particulate filter
EGR	Exhaust gas recirculation
SCR	Selective Catalytic Reduction
UI	Uniformity Index
EDT	Ensemble of Decision Trees
RBFi	Radial Basis Function Interpolation
RBFr	Radial Basis Function Regression
PR	Polynomial Regression

RMSE	Root Mean Squared Error
Norm.RMSE	Normalized Root Mean Squared Error
Max.Abs.Error	Maximum Absolute Error
DOE	Design of Experiments
MLO	Multiple-start Local Optimization
QBC	Query-by-Commitment
MMD	Multiple Maximum Distance Sampling
CFD	Computational Fluid Dynamics
MLE	Maximum Likelihood Estimation
GP	Gaussian Process
GVWR	Gross Vehicle Weight Ratio

참고문헌

1. Zhang, Z., Dong, R., Lan, G., Yuan, T., & Tan, D. (2023). Diesel particulate filter regeneration mechanism of modern automobile engines and methods of reducing PM emissions: A review. *Environmental Science and Pollution Research*, 30(14), 39338-39376.
2. Ji, C., Zhao, D., Li, X., Li, S., & Li, J. (2014). Nonorthogonality analysis of a thermoacoustic system with a premixed V-shaped flame. *Energy conversion and management*, 85, 102-111.
3. Wu, T., Shen, Q., Xu, M., Peng, T., & Ou, X. (2018). Development and application of an energy use and CO₂ emissions reduction evaluation model for China's online car hailing services. *Energy*, 154, 298-307.
4. Park, K., Hong, C. H., Oh, S., & Moon, S. (2014). Numerical prediction on the influence of mixer on the performance of urea-SCR system. *International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering*, 8(5), 998-1004.
5. Skalska, K., Miller, J. S., & Ledakowicz, S. (2010). Trends in NO_x abatement: A review. *Science of the total environment*, 408(19), 3976-3989.
6. Oh, I., Yoo, W. J., & Yoo, Y. (2019). Impact and interactions of policies for mitigation of air pollutants and greenhouse gas emissions in Korea. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 16(7), 1161.

7. Kim, H. S., Kasipandi, S., Kim, J., Kang, S. H., Kim, J. H., Ryu, J. H., & Bae, J. W. (2020). Current catalyst technology of selective catalytic reduction (SCR) for NO_x removal in South Korea. *Catalysts*, 10(1), 52.
8. Xiao, B., Niu, D., Guo, X., & Xu, X. (2015). The impacts of environmental tax in China: a dynamic recursive multi-sector CGE model. *Energies*, 8(8), 7777-7804.
9. Lopatin, O. P. (2020, April). Phenomenology of nitrogen oxides formation in a gas-diesel engine. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1515, No. 4, p. 042009). IOP Publishing.
10. Pérez, J., Lumbreras, J., Rodríguez, E., & Vedrenne, M. (2017). A methodology for estimating the carbon footprint of waste collection vehicles under different scenarios: Application to Madrid. *Transportation Research Part D: Transport and Environment*, 52, 156-171.
11. Skryabin, M. L. (2020). Features of theoretical models of hardening of piston aluminum alloys in aqueous electrolytes. In *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science* (Vol. 421, No. 7, p. 072012). IOP Publishing.
12. Lammel, G., & Graßl, H. (1995). Greenhouse effect of NO_x. *Environmental Science and Pollution Research*, 2, 40-45.
13. Tan, D., Wu, Y., Lv, J., Li, J., Ou, X., Meng, Y., ... & Zhang, Z. (2023). Performance optimization of a diesel engine fueled with hydrogen/biodiesel with water addition based on the response surface methodology. *Energy*, 263, 125869.

14. Zhang, Y., Lou, D., Tan, P., Hu, Z., & Fang, L. (2022). Effect of SCR downsizing and ammonia slip catalyst coating on the emissions from a heavy-duty diesel engine. *Energy Reports*, 8, 749-757.
15. Singh, S., Kulshrestha, M. J., Rani, N., Kumar, K., Sharma, C., & Aswal, D. K. (2023). An overview of vehicular emission standards. *Mapan*, 38(1), 241-263.
16. Inventory of U.S. Greenhouse Gas Emissions and Sinks: 1990–2018, United States Environmental Protection Agency, 430-R-20–002, (2020).
17. <https://www.epa.gov/emission-standards-reference-guide/vehicleweight-classifications-emission-standards-reference-guide>
18. <http://nepis.epa.gov/Exe/ZyPDF.cgi?Dockey=P100O9ZL.pdf>
19. <https://www.epa.gov/emission-standards-reference-guide/vehicle-weightclassifications-emission-standards-reference-guide>
20. <https://nepis.epa.gov/Exe/ZyPDF.cgi/P100SMQA.PDF?Dockey=P100SMQA.PDF>
21. <https://www.epa.gov/greenvehicles/light-duty-vehicle-emissions#standards>
22. www.gpo.gov/fdsys/pkg/FR-2014-04-28/pdf/2014-06954.pdf
23. https://commission.europa.eu/index_en
24. Nishimura, H. (Ed.). (1989). *How to conquer air pollution: a Japanese experience*. Elsevier.
25. Central Environment Council, Ministry of Environment, Government of Japan, (2005).
26. <https://dieselnet.com/standards/jp/index.php>
27. Fattah, I. R., Masjuki, H. H., Liaquat, A. M., Ramli, R., Kalam, M. A., & Riazuddin, V. N. (2013). Impact of various biodiesel fuels obtained from edible and non-edible oils on

- engine exhaust gas and noise emissions. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 18, 552-567.
28. 김경훈, & 노희용. (2021). 2021 년 AI 주요 이슈 및 전망: State of AI Report 2021 를 중심으로. *KISDI Primum Report*, 2021(10), 1-40.
 29. Schrittwieser, J., Antonoglou, I., Hubert, T., Simonyan, K., Sifre, L., Schmitt, S., ... & Silver, D. (2020). MuZero: Mastering Go, chess, shogi and Atari without rules. *DeepMind*, December, 23.
 30. Benaich, N., & Hogarth, I. (2020). State of AI report. London, UK.[Google Scholar].
 31. Stanford, D. A. W. N. (2020). Deep Learning Benchmark (DAWNBench). Retrieved July, 9.
 32. Lopatin, O. P. (2020, April). Chemistry of the process of formation of nitrogen oxides in the combustion chamber of gas-diesel. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1515, No. 5, p. 052004). IOP Publishing.
 33. Varatharajan K. Effect of antioxidant additives on NOx emissions from a jatropha biodiesel fuelled di diesel engine 2012.
 34. Hoekman, S. K., & Robbins, C. (2012). Review of the effects of biodiesel on NOx emissions. *Fuel Processing Technology*, 96, 237-249.
 35. Hu B, Huang Y. Theoretical analysis of lowest limits of NOx formation of methane-air mixtures. *Power and Energy Engineering Conference (APPEEC) 2011:1-6 Asia-Pacific. Wuhan2011*.
 36. Fenimore C. Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames. *Elsevier*; 373-80.

37. Fluent I. Prompt NO_x formation. 2001-11-29.
38. Miller JA, Bowman CT. Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science* 1989;15: 287–338.
39. Ren Y, Li X. Numerical simulation of the soot and NO_x formations in a biodiesel-fuelled engine. *SAE Technical Paper* 2011:01–1385.
40. Hoekman SK, Robbins C. Review of the effects of biodiesel on NO_x emissions. *Fuel Processing Technology* 2012;96:237–49.
41. Gardiner WC. *Gas-phase combustion chemistry*. Springer Verlag; 2000.
42. P. Barbaro and C. Bianchini: 'Catalysis for sustainable energy production'; 2009, 393–438, Weinheim, Wiley-VCH.
43. Yan, J. (Ed.). (2015). *Handbook of Clean Energy Systems, 6 Volume Set (Vol. 5)*. John Wiley & Sons.
44. Catalysis in Diesel engine NO_x aftertreatment a review
45. Current Catalyst Technology of Selective Catalytic Reduction (SCR) for NO_x Removal in South Korea
46. Tripathi, G.; Dhar, A.; Sadiki, A. Recent Advancements in After-Treatment Technology for Internal Combustion Engines—An Overview. In *Advances in Internal Combustion Engine Research*; Springer: Singapore, 2018; pp. 159–179. ISBN 978-981-10-7574.
47. Fu, M.; Li, C.; Lu, P.; Qu, L.; Zhang, M.; Zhou, Y.; Yu, M.; Fang, Y. A review on selective catalytic reduction of NO_x by supported catalysts at 100–300 C—Catalysts, mechanism, kinetics. *Catal. Sci. Technol.* 2014, 4, 14–25.

48. De-NOx SCR SYSTEM PaNOxTM. Available online: [http://www.worldpanasia.com/japan/catalog/PANOx% 20CATALOG.pdf](http://www.worldpanasia.com/japan/catalog/PANOx%20CATALOG.pdf) (accessed on 1 November 2019).
49. Liu, Z.; Li, J.; Woo, S.I. Recent Advances in the Selective Catalytic Reduction of NOx by Hydrogen in the Presence of Oxygen. *Energy Environ. Sci.* 2012, 5, 8799–8814.
50. Jeong, S.; Kim, H.; Kim, H.; Kwon, O.; Park, E.; Kang, J. Optimization of the Urea Injection Angle and Direction: Maximizing the Uniformity Index of a Selective Catalytic Reduction System. *Energies* 2020, 14, 157.
51. Park, K.; Hong, C.H.; Oh, S.; Moon, S. Numerical Prediction on the Influence of Mixer on the Performance of Urea-SCR System. *World Acad. Sci. Eng. Technol. Int. J. Mech. Aerosp. Ind. Mechatron. Eng.* 2014, 8, 972–978.
52. Ye, J.; Lv, J.; Tan, D.; Ai, Z.; Feng, Z. Numerical analysis on enhancing spray performance of SCR mixer device and heat transfer performance based on field synergy principle. *Processes* 2021, 9, 786.
53. Kim, S.E.; Yoo, Y.M. Optimization of a Permanent Magnet Synchronous Motor for e-Mobility Using Metamodels. *Appl. Sci.* 2022,12, 1625.
54. You, Y.-M. Optimal Design of PMSM Based on Automated Finite Element Analysis and Metamodeling. *Energies* 2019, 12, 4673.
55. Chung, I.B.; Lee, Y.B.; Choi, D.H. Global metamodeling using sequential and adaptive sampling with two criteria for global exploration and local exploitation. *Korean Soc. Mech. Eng.* 2020, 170–175.

56. Shin, Y.S.; Lee, Y.B.; Ryu, J.S.; Choi, D.H. Sequential approximate optimization using kriging metamodels. *Korean Soc. Mech. Eng.* 2005, 29, 1199–1208.
57. Woo, S.H.; Ha, Y.C.; Yoo, J.W.; Josa, E.; Shin, D.H. Chassis Design Target Setting for a High-Performance Car Using a Virtual Prototype. *Appl. Sci.* 2023, 13, 844.
58. Hoang, P.H.; Phan, H.N.; Nguyen, D.T.; Paolacci, F. Kriging Metamodel-Based Seismic Fragility Analysis of Single-Bent Reinforced Concrete Highway Bridges. *Buildings* 2021, 11, 238.
59. You, Y.M. Multi-Objective Optimal Design of Permanent Magnet Synchronous Motor for Electric Vehicle Based on Deep Learning. *Appl. Sci.* 2020, 10, 482.
60. Woldemariam, E.T.; Lemu, H.G.; Wang, G.A. CFD-Driven Valve Shape Optimization for Performance Improvement of a Micro Cross-Flow Turbine. *Energies* 2018, 11, 248.
61. Park, H.R.; Jung, S.J. Design and Automated Optimization of an Internal Turret Mooring System in the Frequency and Time Domain. *J. Mar. Sci. Eng.* 2021, 9, 581.
62. Chai, W.; Lipo, T.; Kwon, B.I. Design and Optimization of a Novel Wound Field Synchronous Machine for Torque Performance Enhancement. *Energies* 2018, 11, 2111.
63. Skipper Jr, R. A. (2007). Sir Ronald Aylmer Fisher. In *Philosophy of Biology* (pp. 37-48). North-Holland.
64. Mehdi, G.; Zhou, S.; Zhu, Y.; Shah, A.H.; Chand, K. Numerical Investigation of SCR Mixer Design Optimization for Improved Performance. *Processes* 2019, 7, 168.
65. Jiao, Y.; Zheng, Q. Urea Injection and Uniformity of Ammonia Distribution in SCR System of Diesel Engine. *Appl. Math. Nonlinear Sci.* 2020, 5, 129–142.

66. Wardana, M.; Oh, K.; Lim, O. Investigation of Urea Uniformity with Different Types of Urea Injectors in an SCR System. *Catalysts* 2020, 10, 1269.
67. Antony, J. *Design of Experiments for Engineers and Scientists*; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, 2014.
68. Introduction of PIAAnO. Available online: <http://www.pidotech.com> (accessed on 1 April 2018).
69. Lenth, R. V. (2010). Response-surface methods in R, using rsm. *Journal of statistical Software*, 32, 1-17.
70. Karna, S. K., & Sahai, R. (2012). An overview on Taguchi method. *International journal of engineering and mathematical sciences*, 1(1), 1-7.
71. Taguchi, G., & Phadke, M. S. (1989). *Quality engineering through design optimization*. In *Quality control, robust design, and the Taguchi method* (pp. 77-96). Boston, MA: Springer US.
72. Montgomery, D. C. (2017). *Design and analysis of experiments*. John Wiley & sons.
73. Emerson, R. W., & Cavazzuti, M. (2017). *Design of Experiments. Design for Six Sigma: a practical approach through innovation*.
74. NIST/SEMATECH (2006). NIST/SEMATECH e-handbook of statistical methods. <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/>.
75. Taguchi, G., & Wu, Y. (1980). *Introduction to off-line quality control*. Nagoya: Central Japan Quality Control Association.

76. Simpson, T. W., Peplinski, J., Koch, P. N. and Allen, J. K., 2001, "Metamodels for Computer-Based Engineering Design: Survey and Recommendations," *Engineering with Computers*, 17(2), 129-150.
77. Ullman, D. G., 2002, "Toward the Ideal Mechanical Engineering Design Support System," *Research in Engineering Design*, 13, 55-64.
78. Gu, L., 2001, "A Comparison of Polynomial Based Regression Models in Vehicle Safety Analysis," in: Diaz, A. (Ed.), 2001 ASME Design Engineering Technical Conferences - Design Automation Conference, ASME, Pittsburgh, PA, September 9-12, DAC-21063.
79. Myers, R. H. and Montgomery, D., 1995, *Response Surface Methodology: Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, John Wiley and Sons, Inc., Toronto.
80. Li, B., Shiu, B.-w. and Lau, K.-j., 2001, "Fixture Configuration Design for Sheet Metal Laser Welding with a Two-Stage Response Surface Methodology," in: ASME 2001 Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference, ASME, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, September 9-12, DETC2001/DAC-21096.
81. Wang, G. G., Dong, Z. and Aitchison, P., 2001, "Adaptive Response Surface Method - A Global Optimization Scheme for Computationintensive Design Problems," *Journal of Engineering Optimization*, 33(6), 707-734.
82. Dennis, J. E. and Torczon, V., 1996, "Managing Approximation Models in Optimization," In: Alexandrov, N. and Hussaini, M. Y. (Editors), *Multidisciplinary Design Optimization: State of the Art*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia.

83. Schonlau, M. S., Welch, W. J. and Jones, D. R., 1998, "Global Versus Local Search in Constrained Optimization of Computer Models," In: Flournoy, N., Rosenberger, W. F. and Wong, W. K. (Editors), *New Development and Applications in Experimental Design*, Institute of Mathematical Statistics, pp. 11-25.
84. Wang, L., Shan, S. and Wang, G. G., 2004, "Mode-Pursuing Sampling Method for Global Optimization on Expensive Black-box Functions," *Journal of Engineering Optimization*, 36(4), 419-438.
85. Shan, S. and Wang, G. G., 2005, "An Efficient Pareto Set Identification Approach for Multi-objective Optimization on Black-box Functions," *Transactions of the ASME, Journal of Mechanical Design*, 127, 866-874.
86. Shan, S. and Wang, G. G., 2005, "Failure Surface Frontier for Reliability Assessment on Expensive Performance Function," *Transactions of ASME, Journal of Mechanical Design*, in production.
87. Chen, W., 1995, *A Robust Concept Exploration Method for Configuring Complex System*, Ph.D. Dissertation Thesis, Mechanical Engineering, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA.
88. Mitchell, T. J., 1974, "An Algorithm for the Construction of "DOptimal" Experimental Designs," *Technometrics*, 16(2), 203-210.
89. Giunta, A. A., Balabanov, V., Haim, D., Grossman, B., Mason, W. H., Watson, L. T. and Haftka, R. T., 1997, "Multidisciplinary Optimization of a Supersonic Transport Using Design of Experiments theory and Response Surface Modeling," *Aeronautical Journal*, 101(1008), 347-356.

90. Sacks, J., Welch, W. J., Mitchell, T. J. and Wynn, H. P., 1989, "Design and Analysis of Computer Experiments," *Statistical Science*, 4(4), 409-435.
91. Jin, R., Chen, W. and Simpson, T. W., 2001, "Comparative Studies of Metamodeling Techniques Under Multiple Modeling Criteria," *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 23(1), 1-13.
92. Taguchi, G., Yokoyama, Y. and Wu, Y., 1993, *Taguchi Methods: Design of Experiments*, American Supplier Institute, Allen Park, Michigan.
93. Ye, K. Q., Li, W. and Sudjianto, A., 2000, "Algorithmic Construction of Optimal Symmetric Latin Hypercube Designs," *Journal of Statistical Planning and Inferences*, 90, 145-159.
94. Kalagnanam, J. R. and Diwekar, U. M., 1997, "An Efficient Sampling Technique for Off-Line Quality Control," *Technometrics*, 39(3), 308-319.
95. Fang, K. T., Lin, D. K. J., Winker, P. and Zhang, Y., 2000, "Uniform Design: Theory and Application," *Technometrics*, 39(3), 237-248.
96. Au, S. K. and Beck, J. L., 1999, "A new adaptive importance sampling scheme for reliability calculations," *Structural Safety*, 21, 135-158.
97. Lin, Y., 2004, *An Efficient Robust Concept Exploration Method and Sequential Exploratory Experimental Design*, Ph.D. Dissertation Thesis, Mechanical Engineering, Georgia Institute of Technology, Atlanta, 780pp.
98. Sasena, M., Parkinson, M., Goovaerts, P., Papalambros, P. and Reed, M., 2002, "Adaptive Experimental Design Applied to An Ergonomics Testing Procedure," in: *ASME 2002 Design Engineering Technical Conferences and Computer and Information in*

- Engineering Conference, ASME, Montreal, Canada, September 29-October 2, DETC2002/DAC-34091.
99. Wang, G. G., 2003, "Adaptive Response Surface Method Using Inherited Latin Hypercube Design Points," Transactions of ASME, Journal of Mechanical Design, 125, 210-220.
 100. Jin, R., Chen, W. and Sudjianto, A., 2002, "On Sequential Sampling for Global Metamodeling for in Engineering Design," in: ASME 2002 Design Engineering Technical Conferences and Computer and Information in Engineering Conference, Montreal, Canada, September 29-October 2, DETC2002/DAC-34092.
 101. Cressie, N., 1988, "Spatial Prediction and Ordinary Kriging," Mathematical Geology, 20(4), 405-421.
 102. Papadrakakis, M., Lagaros, M. and Tsompanakis, Y., 1998, "Structural Optimization Using Evolution Strategies and Neural Networks," Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 156(1-4), 309-333.
 103. Fang, H. and Horstemeyer, M. F., 2006, "Global Response Approximation With Radial Basis Functions," Journal of Engineering Optimization, 38(4), 407-424.
 104. Friedman, J. H., 1991, "Multivariate Adaptive Regressive Splines," The Annals of Statistics, 19(1), 1-67.
 105. De Boor, C. and Ron, A., 1990, "On Multivariate Polynomial Interpolation," Constructive Approximation, 6, 287-302.
 106. Langley, P. and Simon, H. A., 1995, "Applications of Machine Learning and Rule Induction," Communications of the ACM, 38(11), 55-64.

107. Oberkampf, W. L. and Trucano, T. G., 2000, "Validation Methodology in Computational Fluid Dynamics," in: Fluids 2000, Denver, CO, June 19-22, AIAA 2000-2549.
108. Roache, P. J., 1998, Verification and Validation in Computational Science and Engineering, Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico, 446 pp.
109. Meckesheimer, M., 2001, A Framework For Metamodel-Based Design: Subsystem Metamodel Assessment and Implementation Issues, Ph. D. Dissertation Thesis, Industrial Engineering, The Pennsylvania State University, University Park, 266 pp.
110. Kazmierski, B.; Kapusta, J. The importance of individual spray properties in performance improvement of a urea-SCR system employing flash-boiling injection. Appl. Energy 2023, 329, 120217.

Abstract

A Study on Performance Prediction using Machine Learning Algorithms in Selective Catalyst Reduction System

Graduate School, University of Ulsan

Dep. of Mechanical Engineering

SungHun Kim

The significance of the selective catalytic reduction system in vehicles increases in line with the high standards of emission control and enhanced selective catalytic reduction efficiency. This study aims to improve the performance of the selective catalytic reduction system through optimization methods. The existing methods for the design and performance improvement of selective catalyst reduction systems tend to be inefficient, due to layout changes that require modification when mounting a vehicle based on previously designed models. There are some factors that can affect the design of the diesel engine selective catalyst reduction system that can be identified by applying an optimized design. The objective function is defined as the ammonia uniformity index, and the design parameters are defined in relation to the pipe length and mixer related to the chemical reaction of the urea solution. The Taguchi orthogonal array design is used with the eight factors and three levels of the main design factors. The distance of the urea injector, the distance of the mixer, the inflow angle of the exhaust gas, the angle of the urea injector,

the angle of the mixer, the mounting angle in the direction of rotation of the mixer inside the selective catalyst reduction pipe, the number of mixer blades, the bending angle of the mixer blade are identified as the eight major factors involved. These factors can also be considered manufacturing factors and can be established through machine learning. Machine learning has the advantage of being more efficient compared to other methods in determining the relationship between the data for each mutual factor. Machine learning can help in reducing processing time, which can further decrease the cost of the design analysis and improve the performance of the selective catalyst reduction system. This study shows that the results are statistically significant as the p values of the mixer blade number and cone length are lower than 0.05.

Machine learning is used in this study to deal with the reduction in the design period and major performance improvement of the selective catalyst reduction system. Three metamodel algorithms, namely, ensemble decision tree, Kriging, and radial basis function, are employed to develop the metamodel. The accuracy of the metamodel is verified based on three indicators: the normalized root mean square error, root mean square error, and maximum absolute error. The metamodel is generated using the Kriging model, which has the highest accuracy among the algorithms, and optimization is also performed. The predicted optimization results are confirmed by computational fluid dynamics numerical analysis with a 99.83% match. The ammonia uniformity index is improved by 1.38% compared to the base model, and it can be said that the NO_x purification efficiency is improved by 30.95%. Consequently, optimizing the uniformity index performance through structural optimization is of utmost importance. Furthermore, this study reveals that the

design variables related to the mixer play a crucial role in the performance. Therefore, using the metamodel to optimize the selectively catalytic reduction system's structure should be considered significant. Finally, in the future, the analysis model can be validated using test equipment based on the findings of this study.