

Kriging 보간법을 사용한 개선된 차원감소법

Improving Dimension Reduction Method Using Kriging Interpolation

최 주 호* · 최 창 현**

Choi, Joo-Ho · Choi, Chang-hyun

ABSTRACT

In this paper, an Improved Dimension Reduction(IDR) method is proposed for uncertainty quantification that employs Kriging interpolation technique. It has been acknowledged that the DR method is accurate and efficient for assessing statistical moments and reliability due to the sensitivity free feature. However, the DR method has a number of drawbacks such as instability and inaccuracy for problems with increased nonlinearity. In this paper, improved DR is implemented by three steps. First, the Kriging interpolation method is used to accurately approximate the responses. Second, $2N+1$ and $4N+1$ ADOEs are proposed to maintain high accuracy of the method for UQ analysis. Third, numerical integration scheme is used with accurate but free response values at any set of integration points of the surrogate model.

Keywords: Dimension Reduction Method, Kriging Interpolation

1. 서론

보통 설계자는 설계목적에 맞게 제품의 설계요소들을 결정하게 된다. 그리고 생산된 제품이 이 설계 요소를 만족시켰을 때 사용목적에 맞는 제품이 생산된다. 하지만 설계시의 의도와 달리 생산된 제품의 성능은 변동을 갖는다. 그 이유는 제품을 설계하고 생산하는 과정에서 설계요소 및 생산과정에 불확실성이 존재하기 때문이다. 이러한 불확실성은 제품에 사용된 재료의 물리적 성질, 측정오차, 제품 생산 과정에서 발생하는 가공오차, 생산 환경의 변화 등의 요인들로 인해 발생된다. 이러한 요인을 잡음인자라 하고 최근 산업현장에서 설계자가 설계 시 부터 불확정성을 고려한 설계를 통해 잡음인자에 대한 제품의 품질의 영향을 줄이기 위한 노력을 하고 있다. 기존에는 안전율을 적용하여 불확실성을 보상하였으나 최근에는 확률적인 기법을 이용하여 설계변수의 불확정성을 고려하고 생산된 제품의 품질을 실패확률로 정량화하고 있다. 이 정량화 방법으로는 크게 추출법과 급속 확률 적분법이 있으며 추출법에는 몬테카를로 추출법, 중요도 추출법, 모멘트법이 속하고 급속 확률 적분법에는 FORM(First Order Reliability Method), SORM(Second Order Reliability Method) 등이 속한다. 가장 좋은 방법은 몬테카를로 추출법이지만 만족할만한 정확도를 얻기 위해서는 시행 횟수를 크게 잡아야 하므로 경제성이 떨어진다는 단점이 있다. 모멘트법은 시스템 응답 함수의 통계적 모멘트 값들과 이를 이용한 확률분포의 정보를 통해 해당 시스템의 실패확률을 계산하는 방법이다. 모멘트법을 사용하기 위해 필요한 시스템의 입력 변수에 대한 통계적 모멘트를 계산해야 하는데 적은 시행 횟수로 몬테

* 정희원 · 한국항공대학교 항공우주 및 기계공학부 교수 Email: jhchoi@hau.ac.kr

** 학생희원 · 한국항공대학교 항공우주 및 기계공학부 석사과정 Email: julycan@nate.com

카를로 추출법과 같은 정확도를 얻기 위해서 차원감소법을 사용하고 있다. 본 논문에서는 Kiring 보간법과 Axial 실험계획법을 이용하여 차원감소법을 개선한 방법을 사용한다. 이를 이용하여 더 정확한 값을 구할 수 있다.

2. 차원감소법

2.1. 가법분해방법(Additive decomposition methods)을 이용한 차원감소법

일반적인 시스템 응답함수의 m 차 통계적 모멘트는 다음과 같은 계산된다.

$$E(Y^m(X)) = \int \dots \int_{-\infty}^{+\infty} Y_m(X) \cdot f_X(X) dX \quad (1)$$

하지만 위 식에서 다중적분은 매우 어렵다. 따라서 이 문제를 해결하기 위해 차원감소법에서는 가법분해방법을 사용하여 다중적분을 다 변수 일차적분으로 바꾼다. 가법분해방법은 다음 식으로 정의된다.

$$Y(X_1, \dots, X_N) \cong Y_a(X_1, \dots, X_N) = \sum_{j=1}^N Y(\mu_1, \dots, \mu_{j-1}, X_j, \mu_{j+1}, \dots, \mu_N) - (N-1)Y_a(\mu_1, \dots, \mu_N) \quad (2)$$

식(2)를 식(1)에 대입하여 정리 하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} E(Y^m(X)) &\cong E \left\{ \left[\sum_{j=1}^N Y(\mu_1, \dots, \mu_{j-1}, X_j, \mu_{j+1}, \dots, \mu_N) - (N-1)Y_a(\mu_1, \dots, \mu_N) \right]^m \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\sum_{j=1}^N Y(\mu_1, \dots, \mu_{j-1}, X_j, \mu_{j+1}, \dots, \mu_N) - (N-1)Y_a(\mu_1, \dots, \mu_N) \right]^m \cdot f_{X_j}(x_j) dx_j \end{aligned} \quad (3)$$

식(3)의 적분을 수행하면 m 차 통계적 모멘트를 구할 수 있다.

2.2. 모멘트 구적법(Moment-based quadrature rule)

식(3)을 일차적분하기 위해 Rahman은 모멘트 구적법을 사용하였다. 입력변수의 통계적 정보를 가진 선형 시스템 식을 풀어서 적분점과 가중치를 구할 수 있다. 입력변수에 대한 저차와 고차 모멘트의 선형관계식은 다음과 같다.

$$\begin{bmatrix} \mu_{j,n-1} & -\mu_{j,n-2} & \mu_{j,n-3} & \dots & (-1)^{n-1} \mu_{j,0} \\ \mu_{j,n} & -\mu_{j,n-1} & \mu_{j,n-2} & \dots & (-1)^{n-1} \mu_{j,1} \\ \mu_{j,n+1} & -\mu_{j,n} & \mu_{j,n-1} & \dots & (-1)^{n-1} \mu_{j,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \mu_{j,2n-2} & -\mu_{j,2n-3} & \mu_{j,2n-4} & \dots & (-1)^{n-1} \mu_{j,n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{j,1} \\ r_{j,2} \\ r_{j,3} \\ \vdots \\ r_{j,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_{j,n} \\ \mu_{j,n+1} \\ \mu_{j,n+2} \\ \vdots \\ r_{j,2n-1} \end{bmatrix} \quad (4)$$

하지만 모멘트 구적법은 비선형성이 적은 문제에만 적용할 수 있고 비선형이 큰 문제에 대해서는 특이현상 문제가 발생한다.

3. 개선된 차원감소법

본 논문에서는 차원감소법을 개선하기 위해 세가지 부분을 사용하였다. 일차원 문제를 근사화 하기 위해 Kriging 보간법을 사용하였고 보간을 위한 샘플점의 위치를 Axial 실험계획법을 사용하여 입력변수의 분포에 따라 적절하게 선택하였다. 그리고 생성된 메타모델을 Adaptive Simpson rule을 사용하여 수치적분을 수

행하여 모멘트를 구했다.

3.1. Axial 실험계획법

Kriging 근사화를 하기 위해서 선정하는 $2N+1, 4N+1$ 개의 샘플점의 위치에 따라서 생성된 메타모델의 정확도가 달라지기 때문에 샘플점의 위치를 선정하는 것은 매우 중요하다. 본 논문에서는 입력변수의 분포에 따라 $2N+1$ 일 때는 $\pm 2\sigma(0.054, 0.946\%)$ 에 해당하는 위치를 선정하였고 $4N+1$ 일 때는 $\pm 2.4\sigma(0.01, 5.39, 94.61, 99.99\%)$ 에 해당하는 위치를 선정하였다.

3.2. Kriging 보간법

Kriging 방법은 프랑스의 지질수학자인 Georges Matheron이 1950년대 남아프리카의 채광학자 D.G.Krige가 적용했던 경험적인 방법을 수학적으로 정립하면서 사용되기 시작하였다. 지질 통계학분야에서 출발한 Kriging 모델이 공학분야에 적용되기 시작한 것은 1989년 Sacks 등이 컴퓨터 실험에 적합하도록 수정하여 적용하면서 부터이다. Sacks는 지질 통계학에서 Kriging이 variogram을 사용해 국부적인 부분을 묘사하던 것을 공분산 함수(covariance function)로 표시하였다. 일반적인 Kriging 모델은 전역모델 $f(x)$ 과 국소변형 $Z(x)$ 을 이용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$y(x) = f(x) + Z(x) \quad (5)$$

전역모델 $f(x)$ 는 일반적으로 상수항으로 처리되며, $Z(x)$ 는 평균이 0이고 분산이 σ^2 인 정규분포를 따른다. $Z(x)$ 의 공분산 식은 다음과 같이 표현된다.

$$Cov[Z(x^i), Z(x^j)] = \sigma^2 R[x^i, x^j] \quad i, j = 1, \dots, n \quad (6)$$

σ^2 은 random process의 분산을 의미하고 $R(x^i, x^j)$ 은 임의의 두 점 $(x^i, x^j \quad i, j = 1, \dots, n)$ 사이의 상관함수(correlation function)이다. R은 상관행렬(correlation matrix)로서 상관함수 값을 열성분으로 하는 대각성분이 1인 대칭행렬이다. 상관행렬을 양정치 행렬이 되도록 하는 상관함수들이 제안되어 있는데 그중에서 변수들 간의 관계가 해석적이고 반응표면이 매끄러운 것으로 잘 알려져 있는 Gaussian 함수를 사용하였다. Gaussian 상관함수식은 다음과 같다.

$$R(x^i, x^j) = \exp \left[- \sum_{k=1}^n \theta_k |x_k^i - x_k^j|^2 \right] \quad (7)$$

θ_k 는 설계변수들 사이의 상관관계를 나타내는 상관인자(correlation parameter)로서 θ_k 값이 작을수록 매끄러운 형태의 보간이 된다. 일반적으로 θ_k 값을 구하기 위해서 최우량 추정법(Maximum likelihood Estimate)을 사용한다. 하지만 최우량 추정법의 경우 생성된 모델의 형상이 균일하지 못하였다. 따라서 본 논문에서는 상관행렬의 대각항을 기준으로 삼각항을 정규분포로 가정하여 상관행렬의 항을 결정하였다. 상관함수가 결정되면 다음과 같은 근사모델을 구성할 수 있다.

$$\hat{y} = \hat{\beta} + r^T(x) R^{-1} (y - f \hat{\beta}) \quad (8)$$

여기서

$$r^T(x) = [R(x, x^1), R(x, x^2), \dots, R(x, x^n)], \quad \hat{\beta} = (F^T R^{-1} F)^{-1} F^T R^{-1} y$$

이다.

3.3. Adaptive Simpson Rule

수치적분 방식의 정확도를 높이기 위해서는 충분한 만큼의 적분점의 개수가 필요하다. Rahman은 모멘트

구적법을 제안하였지만 모멘트 구적법은 고차 모멘트를 구하기 위해서는 많은 적분점을 필요로 하게 된다. 또한 모멘트의 차수가 증가하면 식(4)는 특이현상 문제가 발생한다. 따라서 본 논문에서는 시스템 반응함수가 비선형적이거나 입력변수가 매개변수 식인 경우에도 사용할 수 있는 Adaptive Simpson rule을 사용하였다. 이 적분방법 또한 정확도를 높이기 위해 충분한 개수의 적분점을 필요로 한다. 따라서 본 논문에서는 Kriging 보간법을 통해 생성된 메타모델을 시스템 응답함수로 사용하여 실제 시스템의 수행없이 충분한 적분점을 얻을 수 있다.

4. 적용예제

본 연구에서는 개선된 차원감소법의 효율성을 보여주기 위해 5가지 예제를 수행하였다.

4.1. 예제 1

다음의 비선형 예제를 사용하였다.

$$Y(X_1, X_2) = \frac{1}{1 + X_1^4 + 2X_2^2 + 5X_2^4} \quad (9)$$

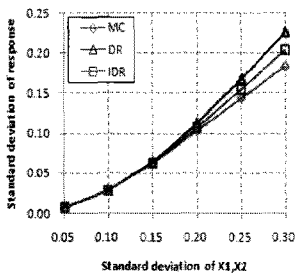
여기서 $X_j \rightarrow N(0, \sigma^2)$, $j = 1, 2$ 는 두 변수는 독립적인 관계이고 평균이 0이고 편차가 σ^2 인 분포를 따른다. 비교를 위해 MCS는 100,000번을 수행하였다. 샘플점의 개수는 차원감소법(DR)과 개선된 차원감소법(IDR)에서 각각 $2N+1$ 개를 사용하여 수행하였다. Fig.1(a)은 입력값의 표준편차의 변화에 대한 반응값의 표준편차를 비교한 결과를 보여주고 있다.

4.2. 예제 2

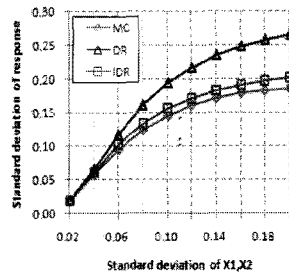
다음의 비선형 예제를 사용하였다.

$$Y(X_1, X_2) = \exp\left(-\frac{1}{1 + 100X_1^2 + 2X_2^2 + X_1^2 X_2^2}\right) \quad (10)$$

여기서 $X_j \rightarrow N(0, \sigma^2)$, $j = 1, 2$ 는 두 변수는 독립적인 관계이고 평균이 0이고 편차가 σ^2 인 분포를 따른다. 비교를 위해 MCS는 100,000번을 수행하였다. 샘플점의 개수는 차원감소법(DR)과 개선된 차원감소법(IDR)에서 각각 $2N+1$ 개를 사용하여 수행하였다. Fig.1(b)는 입력변수의 표준편차의 변화에 대한 반응값의 표준편차를 비교한 결과를 보여주고 있다.



(a) 식(9)에 의한 결과



(b) 식(10)에 의한 결과

Fig. 1 입력값의 표준편차 변화에 대한 반응값의 표준편차 변화

4.3. 예제 3

$$Y(X_1, X_2, X_3) = 3X_1^2 - X_1X_2 + X_1X_3 + X_3^3 \quad (11)$$

여기서 세 변수는 독립적인 관계이고 평균이 0.918이고 표준편차가 0.210인 와이블 분포를 따른다. 개선된 차원감소법(IDR)에서 각각 2N+1개를 사용하여 수행하였다. 입력변수의 평균과 표준편차로부터 구한 확률 밀도 함수(Marginal probability density function)는 $f_{X_j}(x_j) = 5x_j^4 \exp(-x_j^5)$ 이다. 표 1은 반응값의 통계적 모멘트를 비교한 결과를 보여주고 있다.

표 1 Statistical moments (m_1, m_2) of Y

Statistical moments	Numerical integration	DR	IDR
m_1	3.5553	3.5553	3.5552
m_2	14.523	14.519	14.584

4.4. 예제 4

$$Y(X_1, X_2, X_3) = X_1^2 X_2^2 + 2X_3^4 \quad (12)$$

문헌에 게재된 예제와 동일한 식(12)을 이용하였다. 여기서 세 변수는 독립적인 관계이고 평균이 1.0이고 표준편차가 0.1인 로그노말 분포를 따른다. 표 2는 반응값의 통계적 모멘트를 비교한 결과를 보여주고 있다.

표 2 Statistical moments of Y

	Exact	Zhao&Ono		IDR
		5 Point	7 Point	
μ	3.1431	3.1430	3.1430	3.1428
σ	0.9296	0.9277	0.9277	0.9272
$\sqrt{\beta_1}$	1.1537	1.1428	1.1453	1.1501
β_2	5.6397	5.5440	5.6479	5.6764

4.5. 예제 5

$$Y(X_1, X_2, X_3, X_4) = \arccos \left(\frac{x_1 + \frac{1}{2}(x_2 + x_3)}{x_4 - \frac{1}{2}(x_2 + x_3)} \right) \quad (13)$$

Fortini 클러치라고 알려진 예제로서 Greenwood와 Chase를 비롯한 많은 문헌에서 다루어져 왔다. 접촉각도(contact angle)는 서로 독립적이며 각 설계변수는 정규분포를 따른다. 각 입력변수의 평균과 편차는 표 3과 같다. 비교를 위해 MCS는 100,000번을 수행하였다. 표 4는 반응값의 통계적 모멘트를 비교한 결과를 보여주고 있다.

표 3 Component variables of overrunning clutch assembly of Y

	x_1	x_2	x_3	x_4
μ	55.29	22.86	22.86	101.6
σ	0.0793	0.0043	0.0043	0.0793

표 4 Statistical moments of Y

	MCS	Zhao&Ono		IDR
		5 Point	7 Point	
μ	0.1219	0.1219	0.1219	0.1219
σ	0.0118	0.0117	0.0117	0.0117
$\sqrt{\beta_1}$	-0.3147	-0.1491	-0.1491	-0.1498
β_2	3.2789	3.0605	3.0608	3.0662

5. 결론

본 논문에서는 개선된 차원감소법을 제시하였다. 그리고 기존의 차원감소법과 비교하여 정확성, 효율성, 그리고 안정성을 검증하였다. 또한 기존의 선행연구에서 수행했던 예제를 통하여도 검증을 수행하였다. 기존의 차원감소법은 반응값의 정확도를 높이기 위해 더 많은 적분점을 필요하고 계다가 적분점이 증가하게 되면 비효율적이며 특이현상 문제가 발생하였다. 이것을 개선하기 위해서 세가지 부분으로 구성된 개선된 차원감소법을 제시했다. Kriging 보간법을 통해 반응 함수를 근사화 하였으며 생성된 메타모델의 정확도를 높이기 위해 axial 실험계획법을 사용하여 입력 변수의 분포에 따라서 $2N-1$ 인 경우 $\pm 2\sigma$ (0.054, 0.946%)를 $4N+1$ 인 경우는 $\pm 2.4\sigma$ (0.01, 5.39, 94.61, 99.99%)로 샘플점의 위치를 정하였다. Apative simpson rule을 사용하여 수치적분을 수행하였으며 또한 메타모델을 사용하였기 때문에 실제 반응함수의 수행없이 적분에 필요한 충분한 적분점을 제공하여 적분의 정확도를 높였다.

참고문헌

- 최현석, 이상훈, 광병만 (2004) 다수준 실험계획법을 이용한 비정규 분포의 신뢰도 계산 방법, 대한기계학회 가재도, 권장혁 (2004) Kriging 방법을 이용한 2차원 날개 형상 최적설계에 대한 연구, 한국전산유체공학회 주병현, 조민태, 정도현, 이병채 (2006) 평균제곱오차를 이용한 크리깅 근사모델의 오차 평가, 대한기계학회 구요천, 전용희, 김유신, 이동호 (2005) 반응면기법과 크리깅 기법을 이용한 설계공간의 타당성 향상, 한국 항공우주학회
- Rahman, S., Xu, H., (2004) A Generalized Dimension-Reduction Method for Multidimensional Integration in Stochastic Mechanics, *International Journal for Numerical Method in Engineering*, Vol. 61, pp. 1992~2019.
- Rahman, S., Xu, H., (2004) A Univariate Dimension-Reduction Method for Multi-Dimensional Integration in Stochastic Mechanics, *Probabilistic Engineering Mechanics*, Vol. 19, pp.393~408.
- Yang-Gang, Zhao., Tetsuro, Ono., (2001) Moment methods for structural reliability, *Structural Safety*, Vol. 23, pp.47~75.
- Sacks, J., Welch, W. J., Mitchell, T. J., Wynn, H. P., (1989) Design and Analysis of Computer Experiments, *Statistical Science*, Vol. 4, pp.409~435.