

☒ 연구논문

비선형모형에서 최적실험계획법의 계산에 관한 연구
- 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘의 응용 -

강명욱

숙명여자대학교 통계학과

Computational Methods for Optimal Designs in Nonlinear
Models using the Simulated Annealing Algorithm

Myung-Wook Kahng

Dept. of Statistics, Sookmyung Women's University

Abstract

The criteria for construction of D-optimal design in nonlinear models are derived. The procedures for finding these optimal designs using the simulated annealing algorithm are presented. It is claimed that the advantages of this method are its ability to make the given data useful by adding new observations as well as to obtain a new set of appropriate data when the model and parameters are known. Research so far indicates that there has never been a case in which there is more than one independent variable but this method can be used for such cases. The result indicates the effectiveness of the method using simulated annealing algorithm for situations in which there are many independent variables and the ranges of design spaces are wide.

* 본 연구는 숙명여자대학교 96년도 교비연구비 지원에 의하여 수행되었음.

1. 서론

실험을 통하여 달성하고자 하는 목적 중의 하나는 실험의 결과에 대하여 영향을 미친다고 과학적으로 판단되는 원인들을 규명하는데 있다. 또한 유의적인 영향을 미치는 원인들이 어떠한 조건 또는 수준에서 가장 바람직한 결과를 얻을 수 있는가를 알아보는 것도 매우 중요하다. 왜냐하면 그 결과에 따라서 작업 표준이 설정되기도 하고 원료, 장치, 측정 방법 등을 선택하는 기준이 제공되기 때문이다. 이러한 실험의 목적을 달성하기 위해서는 실험을 실시하기 이전에 충분한 계획이 있어야 한다. 최적실험계획법(optimal design of experiments) 또는 최적계획법(optimal design)이란 가장 바람직한 결과를 얻기 위한 실험의 계획방법을 의미하는 것으로 해결하고자 하는 문제에 대하여 어떤 수준의 관측값을 취할 것인가를 결정하는 실험계획법이다. 예를 들어 우리는 추정에서 효율성의 최대화나 가설검정에서 검정력의 최대화를 목적으로 할 수 있다. 이와 같은 목적에 맞는 적절한 목적함수(objective function)를 결정하고 이를 최적화 시키는 독립변수들의 값을 알아내는 것이 최적실험계획법이다. 특정한 목적에 맞는 실험을 계획하기 위해서는 판정기준(criterion)이 있어야 하며 이 기준에 의하여 결정된 계획이 최적실험계획이다. 최적실험계획법에는 여러가지가 있고 그에 따른 판정기준도 각각 다르지만 여기에서는 가장 널리 사용되는 D-최적계획법(D-optimal design)의 개념과 판정기준을 다룬다.

지금까지 선형모형에서의 최적실험계획법은 많이 연구되었으나 비선형모형을 대상으로 한 연구는 거의 없었다. 비선형모형에서의 연구가 활발하지 못했던 가장 큰 이유는 선형모형에서와는 달리 판정기준이 되는 목적함수에 독립변수뿐만 아니라 추정요소하는 미지의 모수가 포함되어 있어서 최적화가 복잡하고 계산의 양도 많기 때문인데 이런 문제점들을 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘(simulated annealing algorithm)을 이용하여 최대한 해결하면서 비선형모형에 적용하여 보겠다. 특히 본 논문에서 제시하는 방법은 실험을 실시하기 이전에 미리 계획을 세워 적절한 자료를 얻고자 할 때 뿐만 아니라 기존의 자료가 부실하다고 판단되는 경우에 이 방법으로 몇 점의 관측값을 추가하여 기존의 자료와 더불어 유용한 자료로서 사용하고자 할 때에도 이용될 수 있을 것이다.

최적실험계획법에 대한 이론들, 특히 선형모형에서의 최적화에 관한 이론들은 1970년대 이전까지 많이 연구되었다. 그 당시 이 분야의 연구들은 최적성(optimality)에 관한 기준이 각각 다르고 이론적인 성격이 강했으며 실용성을 주장하는 학자들에게는 큰 흥미를 주지 못했다. 그러나 지난 20여년 동안 두 가지의 큰 발전이 있었는데 첫 번째는 여러가지 다양한 최적성의 판정기준들을 몇 가지의 공통된 수학적 특성에 따라 분류하여 일반적인 이론을 도출할 수 있었고 두 번째는 최적실험계획을 설계할 수 있는 여러가지 알고리즘이 개발되어 이 이론이 보다 실용적인 가치를 갖게 되었다. 최적실험계획법에 대한 이론들은 Fedorov(1972), Mitchell(1974) 등에 의해서 많은 발전을 이루어 왔고 1980년대에는 컴퓨터를 이용한 실용적인 면의 시도가 Lundy(1985), Lundy와 Mees(1986), Bohachevsky 외(1986), Haines(1987)에 의해서 이루어졌다.

2. 비선형모형에서의 최적실험계획법

종속변수 y 와 q 개의 독립변수 x_1, x_2, \dots, x_q 의 n 개의 관측값에 대하여 다음과 같은 함수관계가 알려진 비선형모형을 생각하자.

$$y_i = f(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\theta}) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

여기서 $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iq})^T$ 이고 $f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\theta}) = (f(\mathbf{x}_1; \boldsymbol{\theta}), f(\mathbf{x}_2; \boldsymbol{\theta}), \dots, f(\mathbf{x}_n; \boldsymbol{\theta}))^T$ 라고 하면 위의 식은 다음과 같이 표현된다.

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\varepsilon} \tag{1}$$

선형모형에서와는 달리 대부분의 비선형모형에서는 독립변수의 수, q 와 모수의 수, p 가 일치할 필요가 없다. 모수 $\boldsymbol{\theta}$ 는 차수가 p 인 회귀계수벡터이며, $\boldsymbol{\varepsilon}$ 은 차수가 n 인 오차항벡터이고 평균 $E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0}$, 분산 $Var(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sigma^2 \mathbf{I}$ 인 정규분포를 따른다고 가정한다. 주어진 비선형모형 (1)에서의 함수 $f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\theta})$ 를 모수 $\boldsymbol{\theta}$ 의 최소제곱추정값 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 에 대하여 Taylor 급수전개를 하고 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 근방의 $\boldsymbol{\theta}$ 에 대하여 2차 이상 미분한 부분은 무시할 수 있다고 가정하면 비선형모형을 다음과 같이 선형화(linearization)할 수 있다.

$$f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\theta}) \cong f(\mathbf{X}; \hat{\boldsymbol{\theta}}) + \mathbf{V} \cdot (\boldsymbol{\theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}}) \tag{2}$$

여기서 \mathbf{V} 는 $\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}$ 일 때 $\partial f / \partial \boldsymbol{\theta}$ 값이고, 행렬 \mathbf{V} 가 선형모형의 독립변수 행렬과 같은 역할을 한다는 것을 알 수 있다. 따라서, 식 (2)는 선형모형의 특성을 가지므로 선형모형에서 적용한 방법을 그대로 사용할 수 있고 회귀계수의 최소제곱추정값 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 의 분산-공분산행렬은 $Var(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \sigma^2 (\mathbf{V}^T \mathbf{V})^{-1}$ 이다. 행렬의 크기를 측정하는 일반적인 기준은 행렬식(determinant)인데 $Var(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ 의 행렬식, $det[Var(\hat{\boldsymbol{\theta}})] = det[\sigma^2 (\mathbf{V}^T \mathbf{V})^{-1}]$ 의 값을 최소화하기 위해서는 $det(\mathbf{V}^T \mathbf{V})$ 를 크게 해야할 것이다. 따라서, $det(\mathbf{V}^T \mathbf{V})$ 의 값을 최대화하는 $x_{ij}(i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, q)$ 들을 자료로 선택하는 것이 바람직하다. 이와 같이 $det(\mathbf{V}^T \mathbf{V})$ 를 최대화하는 계획법이 D-최적계획법이다.

3. 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘

1970년대부터 컴퓨터의 활용으로 많은 학자들에 의해 최적실험계획법을 구하기 위한 알고리즘이 많이 개발되었다. 그 중 널리 알려진 알고리즘으로는 Fedorov(1972)가 제안한 Fedorov 알고리즘과 Mitchell(1974)이 제안한 Mitchell 알고리즘이 있다. Fedorov 알고리즘은 각 반복(iteration)에서 한 점에서만 변화를 주어 목적함수를 점검하는데 비해 Mitchell 알고리즘은 각 반복에서 여러 점을 동시에 변화시키면서 목적함수를 점검한다(Cook과 Nachtsheim, 1980). 1980년대에는 여러 학자들이 최적실험계획법을 구하는데 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘을 이용하기 시작했다.

어닐링이란 경도가 큰 고체를 만들기 위한 물리적인 공정이다. 어떤 고체의 경도가 크면 그 고체의 에너지의 양은 적다고 한다. 따라서, 고체의 경도를 크게 하려면 그 고체를 액체상태가 될 때까지 높은 열을 가해서 녹인 후에 점차로 온도를 내려주면서 에너지의 양이 적어지도록 한다. Kirkpatrick 외(1982)가 메트로폴리스 알고리즘(Metropolis algorithm)에 기초를 둔 어닐링 알고리즘을 처음으로 사용하였고 그밖에 Lundy(1985), Bohachevsky 외(1986), Haines(1987) 등에 의하여 활발히 응용되었다.

시뮬레이티드 어닐링 알고리즘의 기본이 되는 메트로폴리스 알고리즘은 Metropolis 외(1953)에 의해 소개된 방법으로 고체의 상태를 연구하는데 이용되었는데 직접 실험을 하지 않고 몬테카를로(Monte Carlo) 방법을 통하여 에너지의 양이 가장 적은 때의 조건을 다음과 같은 과정의 반복을 통해 알아내도록 하였다. 현재 주어진 고체의 상태와 그 다음의 후보가 되는 고체의 상태의 에너지의 양을 비교하여 에너지의 양이 감소되면 새로운 상태를 받아들이고 증가되면 주어진 채택확률(acceptance probability)에 따라서 새로운 상태를 채택할 것인가 채택하지 않을 것인가를 결정하게 된다. 이러한 채택확률은 어닐링 공정에서의 온도와 같은 역할을 하는 제어모수(control parameter)에 의하여 결정되는데 처음에는 큰 값을 주고 차차 제어모수의 값을 조금씩 줄여나가면서 메트로폴리스 알고리즘을 반복해서 실시하여 어닐링 공정에서의 최소의 에너지 양을 가지는 상태에 대응하는 최적해(optimal solution)를 찾는 방법이다.

시뮬레이티드 어닐링 알고리즘은 세 가지의 구성요소로 이루어진다. 첫번째는 전이계획(perturbation scheme)으로서 현재상태에서 그 다음 상태를 구하는 방법이며 초기 단계에서는 전이를 많이 시켜주다가 전이시키는 양을 점차로 줄여서 말기단계에서는 미세한 변화를 주게 된다. 두번째는 제어모수와 목적함수값의 변화량의 함수인 채택확률이다. 전이계획에 의하여 상태가 전이됨에 따라 목적함수값이 목적에 맞게 변화하면 새로운 상태를 무조건 받아들이고 목적의 반대방향으로 변화한 때에도 변화량이 크면 받아들일 가능성을 작게 하고 변화량이 적으면 받아들일 가능성을 크게 한다. 이러한 가능성이 채택확률에 의해 정해지며 알고리즘이 진행됨에 따라 제어모수를 감소시켜 채택확률도 점차로 감소시킨다. 세번째는 제어모수를 언제 줄일 것인가 하는 기준인데 그 기준으로 평형상태(equilibrium state)를 정의하게 된다. 목적함수값이 평형상태에 도달했다고 판단되면 제어모수를 줄인다.

현재까지 선형모형을 대상으로 한 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘의 적용에 대한 많은 연구가 진행되었다. 특히 Haines(1987)는 다항회귀모형(polynomial regression model)과 2차모형(second-order model)에서의 최적실험계획을 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘을 이용하여 구하였는데 이 방법을 참고로 하여 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘을 비선형모형에서의 최적실험계획을 구하는데 적용하겠다.

선형모형은 목적함수에 모수가 포함되지 않으므로 모형을 알고 있지만 자료를 가지고 있지 않은 경우에도 최적실험계획법을 이용하여 적절한 자료를 만들어낼 수 있다 반면에 비선형모형은 목적함수에 모수가 포함되어 있으므로 목적함수를 계산할 때 모수에 대한 정보가 있어야 한다. 그러나 모형만을 알고 자료를 가지고 있지 않은 상태에서 모수에 대한 정보를 아는 경우는 드문 상황이라고 볼 수 있다. 따라서, 본 논문에서는 모형이 알려져 있고 일정한 정도의 자료를 가지고 있는 상황에서 이 자료를 이용하여 모수를 추정하고 좀 더 효과적인 실험의 결과를 위해서 최적실험계획법의 의해 몇 점의 관측값을 추가로 만들어 기존의 자료와 더불어 활용하는 방법을 제시하고자 한다. 이 절에서는 Haines(1987)가 제시한 알고리즘을 기초로 하는 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘의 비선형모형에서의 적용과 이 알고리즘의 세 가지 구성요소를 자세히 설명한다.

3.1 전이계획

기존 자료의 표본의 크기가 n 이고 추가하고자 하는 관측값의 수를 m 이라고 하자 흥미영역 R 내에서 m 개의 점, $\mathbf{x}_i (i=1, 2, \dots, m)$ 을 선택하여 \mathbf{x}_{iw} 라고 하고 \mathbf{x}_{iw}^T 를 행으로 하는 $m \times q$ 행렬을 \mathbf{X}_w 라고 한다. \mathbf{x}_{iw} 를 선택하는 방법은 흥미영역 R 내에서 난수를 추출하여도 좋고, 이미 알려져 있는 정보가 있다면 그것을 이용하여도 좋을 것이다. 그 다음 단계로 각각의 \mathbf{x}_{iw} 점을 다음과 같은 전이계획을 적용하여 그 다음 후보상태인 \mathbf{x}_{il} 을 생성하고 \mathbf{x}_{il}^T 를 행으로 하는 행렬 \mathbf{X}_l 을 만든다.

$$\mathbf{x}_{il} = \mathbf{x}_{iw} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\xi}_i, \tag{3}$$

여기서 $\mathbf{A} = \text{diag}[a_1, a_2, \dots, a_q]$, $\boldsymbol{\xi}_i = (\xi_{i1}, \xi_{i2}, \dots, \xi_{iq})^T$ 이며 $a_j (0 < a_j \leq 1, j=1, 2, \dots, q)$ 는 전이계수(perturbation coefficient)로 다음 후보상태로의 최대 이동량을 나타내고 ξ_i 는 $(-t_j, t_j)$ 구간에서 추출되는 균일분포난수(uniform random number)벡터이며, $t_j = (b_j - a_j) / 2$ 이고 a_j 와 $b_j (j=1, 2, \dots, q)$ 는 각각 j 번째 독립변수에 대한 흥미영역의 상한값과 하한값이다. 알고리즘의 초기단계에는 전이를 많이 시키다가 점차로 전이계수 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_q)^T$ 를 줄여나가면서 전이의 양을 감소시킨다.

3.2 채택확률

목적함수를 ϕ 라고 정의하면 두 상태 X_w 와 X_l 의 목적함수값의 차이는 $\Delta\phi = \phi(X_l) - \phi(X_w)$ 이 되고 채택확률은 Aarts와 Korst(1989: p. 15), Haines (1987) Bohachevsky 외(1986), Lundy와 Mees(1985)에서와 같이

$$P_c[X_l \text{를 채택}] = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta\phi \geq 0 \\ \exp(-\Delta\phi/c) & \text{if } \Delta\phi < 0 \end{cases} \quad (4)$$

로 정의하며 c 는 제어모수로 양수이다. 따라서, $\Delta\phi$ 이 0보다 크거나 같으면 X_l 을 받아들이며 $\Delta\phi$ 이 0보다 작으면 $\Delta\phi$ 를 이용하여 채택확률 P_c 를 구한 후, 0과 1사이의 구간에서 추출한 난수와 P_c 를 비교하여 P_c 가 크면 l 상태를 받아들이고 추출한 난수가 크면 w 상태를 받아들이지 않는다.

시뮬레이티드 어닐링 알고리즘이 다른 알고리즘과 다른 점은 D-최적계획법의 경우에 비록 목적함수값이 현재값보다는 작아져도 채택확률을 도입해서 작아진 값을 받아들일 수 있는 기회를 주므로 최대값이 아닌 국부최대값(local maximum value)을 벗어날 수 있도록 하여 최대값(global maximum value)에 도달할 가능성을 높인다는 것이다. 처음에 제어모수 c 을 크게 주었을 때는 목적함수값이 우리의 목적과 반대방향으로 변화한 상태를 받아들일 가능성이 높지만 c 를 줄여나가게 되면 점차로 이 가능성이 줄어들게 된다.

3.3 평형상태

시뮬레이티드 어닐링 알고리즘은 메트로폴리스 알고리즘의 반복이고 알고리즘이 진행됨에 따라 제어모수 c 를 줄여 나간다고 언급했다. 따라서, c 를 언제, 어떻게 줄일 것인가 하는 기준을 정해야 한다. 전이계수 α 와 제어모수 c 를 고정한 후에 앞 절에서 설명한 전이계획과 채택확률을 적용하여 상태를 전이시키면 처음에는 목적함수값의 변동이 매우 급격하다가 나중에는 변동추세가 점차로 감소하여 평형상태에 도달하게 되는데 이러한 평형상태를 정의하기 위해 변동의 추세를 측정할 수 있는 기준이 필요하다. 물론 이러가지의 평형상태를 생각할 수 있으나 본 논문에서는 다음 식을 평형상태의 판정기준으로 정의한다.

$$|(M - \log_{10} d_{N+1})/M| < 0.5 \cdot \alpha^* \quad (5)$$

여기서 $M = \sum_{k=1}^N \log_{10} d_k / N$

N : 평형상태에 도달하기 전까지 계산된 목적함수값의 개수

d_k : k 번째로 계산된 목적함수값

$$a^* = \sum_{j=1}^q a_j / q, \quad a_j : \text{각 독립변수에 해당하는 전이계수}$$

이다. 식 (5)의 구간 안에 상당수의 전이가 포함되면 평형상태에 도달했다고 판단하고 제어모수 c 를 줄인다. c 를 줄이는 과정은 평형상태내에서 목적함수값이 감소되었는데도 채택된 전이수의 비율 v 이 0.5정도가 될 때까지 계속한다. 여기서 v 를 0.5정도로 유지하는 이유는 목적함수값이 원하지 않는 방향으로 변화했음에도 불구하고 채택되는 확률이 절반정도가 되도록 하여 국부최대값 또는 국부최소값을 벗어날 수 있는 기회를 만들기 위해서이다.

3.4 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘

지금까지 언급한 전이계획, 채택확률, 평형상태를 기본으로 하여 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘을 다음의 다섯 단계로 정리할 수 있다.

- (1) $s=0$ 으로 하고 초기값 $x_i (i=1, 2, \dots, m)$ 을 흥미영역 R 에서 추출하여 x_{iw} 이라 놓는다. $a_0 = 1$ 로 놓고 c_0 은 큰 값을 취한다.
- (2) $a = a_s, c = c_s$ 으로 놓고 식 (3)을 이용해서 그 다음점, x_{i1} 을 구한 후에 판정기준에 맞는 목적함수값을 구한다. 식 (4)의 채택확률을 이용하여 점을 전이시키다가 식 (5)의 평형상태에 이르게 되면 다음 단계로 간다.
- (3) $0.4 \leq v \leq 0.6$ 이면 단계 (4)로 가고 그렇지 않으면 $c_s = c_s + \Delta c_s$ 로 놓고 다시 단계(2)로 간다. Δc_s 는 v 의 값을 고려해서 v 가 0.6보다 큰 경우에는 목적함수값이 원하지 않는 방향으로 변화한 전이를 너무 많이 채택하게 되므로 그 다음 c_s 가 $c_s \times 0.3 < c_s + \Delta c_s < c_s \times 0.99$ (Aarts와 Korst, 1989: p. 59) 정도를 유지하도록 c 를 감소시켜서 채택되는 비율을 낮추고 v 가 0.4보다 작은 경우에는 목적함수값이 원하지 않는 방향으로 변화한 전이를 너무 적게 채택하게 되므로 그 다음 c_s 가 현재의 c 와 직전 c 의 중간값을 갖도록 증가시켜서 채택되는 비율을 높인다.
- (4) $r_j (j=1, 2, \dots, q)$ 를 각 독립변수 x_j 값의 유효자리의 최소단위라고 할 때 $a_s \leq u$ ($u = (r_1/t_1, r_2/t_2, \dots, r_q/t_q)^T$)이면 $s=f$ 로 하고 단계 (5)로 가고 그렇지 않으면 $a_s = a_s + \Delta a_s, c_s = c_s + \Delta c_s$ 로 놓고 $s=s+1$ 로 하여 단계 (2)로 간다. Δa_s 는 그 다음 a_{s-1} 가 $0.5 \times a_s < a_{s+1} < 0.8 \times a_s$ 정도가 되도록 하는 것이 수렴속도를 빠르게 하는 것으로 나타났다.

- (5) 채택확률을 0으로 고정하고 $\alpha_f = \mathbf{u}$ 로 놓고 충분히 전이시켜 목적함수값이 거의 변화하지 않는다고 판단되면 알고리즘을 종료하고 현재의 x_{iw} ($i=1, 2, \dots, m$)가 최적실험계획이 된다.

4. 적용예

비선형모형과 자료가 주어진 경우 좀 더 효과적인 실험의 결과를 위하여 기존의 자료에 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘을 이용한 최적실험계획법에 의하여 몇 점의 추가할 관측값을 선택하는 방법을 실험에 적용한다.

다음에 주어진 모형은 촉매제를 투여해서 복합화합물을 단순화합물로 분해하는 화학공정에서 유도된 것이다. 화합물이 분해되는 속도는 여러가지 요인에 의해서 달라질 수 있는데 특히 촉매제의 부분압력에 의하여 영향을 받는다고 한다.

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \frac{\theta_1 \theta_3 (x_2 - x_3 / 1.632)}{1 + \theta_2 x_1 + \theta_3 x_2 + \theta_4 x_3}$$

독립변수 x_1 는 수소의 부분압력, x_2 는 n화펜탄의 부분압력이고 x_3 는 이성펜탄의 부분압력(단위: psia)이다. 종속변수는 1시간에 촉매제 1그램에 대해 생성된 이성펜탄의 무게(단위: g)를 비율(단위: hr^{-1})로 나타낸 것으로서 기존의 자료는 <표 1>에 수록하였다(Bates와 Watts, 1988: p. 271).

< 표 1 > 화학공정 자료

case	X_1	X_2	X_3	Y	case	X_1	X_2	X_3	Y
1	205.8	90.9	37.1	3.541	13	297.3	142.2	10.5	5.686
2	404.8	92.9	36.3	2.397	14	314.0	146.7	157.1	1.193
3	209.7	174.9	49.4	6.694	15	305.7	142.0	86.0	2.648
4	401.6	187.2	44.9	4.722	16	300.1	143.7	90.2	3.303
5	224.9	92.7	116.3	0.593	17	305.4	141.1	87.4	3.054
6	402.6	102.2	128.9	0.268	18	305.2	141.5	87.0	3.302
7	212.7	186.9	134.4	2.797	19	300.1	83.0	66.4	1.271
8	406.2	192.6	134.9	2.451	20	106.6	209.6	33.0	11.648
9	133.3	140.8	87.6	3.196	21	417.2	83.9	32.9	2.002
10	470.9	144.2	86.9	2.021	22	251.0	294.4	41.5	9.604
11	300.0	68.3	81.7	0.896	23	250.3	148.0	14.7	7.754
12	301.6	214.6	101.7	5.084	24	145.1	291.0	50.2	11.590

X_1 : 수소의 부분압력(psia)

X_2 : n화펜탄의 부분압력(psia)

X_3 : 이성펜탄의 부분압력(psia)

Y : 반응비율(hr^{-1})

<표 1>에서의 자료를 기초로 하여 $x_1 \in [100, 500]$, $x_2 \in [50, 300]$, $x_3 \in [10, 160]$ 을 각 독립변수의 범위를 하였고 모수의 최소제곱추정값은 $\hat{\theta}_1 = 35.971$, $\hat{\theta}_2 = 0.0708$, $\hat{\theta}_3 = 0.0376$, $\hat{\theta}_4 = 0.1664$ 다. 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘을 이용한 최적실험계획법에 의해서 구해진 추가할 관측값은 <표 2>에 제시하였다. $m = 0$ 인 경우, 즉 기존 자료의 목적함수값을 보면 1.8368×10^6 인데 비해서 단 한 점이 추가되기만 하여도 목적함수값이 14.9871×10^6 으로 증가된 것을 볼 수 있고 추가되는 관측값의 수가 늘어날수록 목적함수값도 증가하고 있음을 알 수 있다.

< 표 2 > 추가할 관측값 및 목적함수값

m	추가할 관측값 (X_1, X_2, X_3)	목적함수값 ($\times 10^6$)
0		1.8368
1	(100, 300, 10)	14.9871
2	(100, 300, 10), (100, 101, 10)	96.2279
3	(100, 300, 10), (100, 300, 10), (100, 101, 10)	180.5383
4	(100, 300, 10), (100, 300, 10), (100, 101, 10), (100, 300, 93)	332.8562
5	(100, 300, 10), (100, 300, 10), (100, 103, 10), (100, 300, 93), (100, 50, 10)	508.0784

지금까지 예를 이용하여 점검한 바에 따르면 새로운 관측값을 최적실험계획법을 사용하여 추가하면 기존에 있는 자료와 더불어 목적에 맞는 효율적인 자료로 이용할 수 있게 된다. 선형모형에서의 최적실험계획법과 비교해 볼 때 선형모형에서 최적실험계획법을 이용하여 자료를 얻을 때는 대부분 독립변수에 대한 흥미영역의 극값이 나오는 경우가 많은데 비하여 예에서 볼 수 있듯이 비선형모형에서는 극값이 나오는 경우도 물론 있지만 상한값이나 하한값으로 일관하는 것이 아니라 중간의 값에서 취해지는 경우도 있다는 것이 특이한 점이라 할 수 있다.

5. 결론

본 논문에서는 선형모형에 주로 적용되어왔던 최적실험계획법을 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘을 응용하여 비선형모형에서의 D-최적계획법의 도출방법을 제시하였고 모형과 모수에 대한 정보가 있고 자료를 새로 얻고자 할 때 이 방법을 이용하면 준

더 적절한 자료를 얻을 수 있을 뿐 아니라 기존의 자료가 부실하다고 판단되는 경우에 이 방법을 이용하여 몇 점의 관측값을 추가하면 기존의 자료를 잘 활용할 수 있다는 것에 대하여 논의하였다.

이 방법이 독립변수가 한 두개이면서 유효자리의 최소단위가 작지 않고 흥미영역의 범위가 좁을 경우에는 효율성이 그다지 높지 않더라도 독립변수가 많고 유효자리의 최소단위가 작고 흥미영역의 범위가 넓은 경우에는 다른 방법들에 비해서 효율성이 크다고 할 수 있다. 다만, 이 방법으로 최적실험계획법을 구할 때 한번의 시행으로 항상 최적값을 구할 수 있는 것은 아니므로 몇 번의 시행을 거친 후에 그 중에서 가장 최적적인 것을 최종적인 자료로 사용하는 것이 바람직하다.

지금까지 연구되어온 것을 보면 독립변수의 수가 두개이상인 경우는 전무하였으나 본 논문에서 제시한 방법은 독립변수가 두개 이상인 경우에도 사용할 수 있다. 앞으로 시뮬레이티드 어닐링 알고리즘을 개선하여 수렴속도를 증가시킨다면 여러 분야에서 실제의 문제를 해결하는데 활용이 가능하리라 판단된다.

참고문헌

- [1] Aarts, E.H.L. and Korst, J.H.M.(1989), *Simulated Annealing and Boltzmann Machines : A Stochastic Approach to Combinatorial Optimization and Neural Computing*, John Wiley and Sons: New York.
- [2] Bates, D.M. and Watts, D.G.(1988), *Nonlinear Regression Analysis and Its Applications*, John Wiley and Sons: New York.
- [3] Bohachevsky, I.O., Johnson, M.E., and Stein, M.L.(1986), "Generalized Simulated Annealing for Function Optimization," *Technometrics*, Vol. 28, pp. 209-217.
- [4] Cook, R.D., and Nachtsheim, C.J.(1980), "A Comparison of Algorithms for Constructing Exact D-Optimal Designs," *Technometrics*, Vol. 22, pp. 315-324.
- [5] Fedorov, V.V.(1972), *Theory of Optimal Experiments*, Academic Press: New York.
- [6] Haines, L.M.(1987), "The Application of the Annealing Algorithm to the Construction of Exact Optimal Design for Linear-Regression Models," *Technometrics*, Vol. 29, pp. 439-447.
- [7] Kirkpatrick, S., Gelatt, C., D. and Vecchi, M.P.(1982), "Optimization by Simulated Annealing," *Science*, Vol. 220, pp. 671-680
- [8] Lundy, M.(1985), "Applications of the Annealing Algorithm to Combinatorial Problems in Statistics," *Biomertika*, Vol. 72, pp. 191-198.
- [9] Lundy, M. and Mees, A.I.(1986), "Convergence of an Annealing Algorithm," *Mathematical Programming*, Vol. 34, pp. 111-124.
- [10] Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller and Teller(1953), "Equation of State

Calculations by Fast Computing Machines," *Journal of Chemical Physics*, Vol 21, pp. 1087-1092.

- [11] Mitchell, T.J.(1974), "An Algorithm for Construction of D-Optimal Experimental Designs," *Technometrics*, Vol. 16, pp. 203-210.