

## 민감도법을 이용한 크리깅모델의 순차적 실험계획

이태희<sup>†</sup> · 정재준\* · 황인교\* · 이창섭\*

(2004년 6월 10일 접수, 2004년 10월 6일 심사완료)

### Sensitivity Approach of Sequential Sampling for Kriging Model

Tae Hee Lee, Jae Jun Jung, In Kyo Hwang, and Chang Seob Lee

**Key Words :** Kriging Model(크리깅모델), Sequential Sampling(순차적 실험계획법), Sensitivity Approach of Sequential Sampling(순차적 실험계획법의 민감도법)

#### Abstract

Sequential sampling approaches of a metamodel that sampling points are updated sequentially become a significant consideration in metamodeling technique. Sequential sampling design is more effective than classical space filling design of all-at-once sampling because sequential sampling design is to add new sampling points by means of distance between sampling points or prediction error obtained from metamodel. However, though the extremum points can strongly reflect the behaviors of responses, the existing sequential sampling designs are inefficient to approximate extremum points of original model. In this research, new sequential sampling approach using the sensitivity of Kriging model is proposed, so that new approach reflects the behaviors of response sequentially. Various sequential sampling designs are reviewed and the performances of the proposed approach are compared with those of existing sequential sampling approaches by using mean squared error. The accuracy of the proposed approach is investigated against optimization results of test problems so that superiority of the sensitivity approach is verified.

#### 1. 서론

현재까지 다양한 공학 해석 분야에서 사용되는 시뮬레이션 모델은 실제적인 공학적, 역학적 현상을 매우 정확하게 예측하는 수준에까지 이르렀다. 하지만 비선형 구조해석, 열 유체 유동해석, 충돌 해석과 같이 한번의 해석을 수행하는데 상당한 해석시간이 요구되는 경우에는 시뮬레이션 모델에 직접적으로 최적설계기법을 적용하는 것은 현실적으로 한계가 있다.

이러한 이유로 최적설계 과정에서 설계변수와 응답함수의 수학적 근사모델을 이용하여 긴 해석시간이 소요되는 시뮬레이션 모델을 대체함으로써 전체적인 최적설계과정의 효율을 높여주는 근사최적설계기법이 연구되었다. 이러한 근사최적설

계 분야에서 시뮬레이션 모델을 대체한 근사모델 즉, '모델의 모델'을 메타모델(metamodel)이라고 부른다. 메타모델과 관련한 주된 연구는 '막대한 해석시간이라는 한계를 극복하기 위해 희생된 시뮬레이션모델의 정확도(fidelity)를 어떻게 보상하느냐'이다. 이를 위해 메타모델에 적합한 실험계획법을 개발하는 연구가 진행되었다.

초기에는 결정적인 응답(deterministic response)들로부터 생성되는 메타모델의 특성 때문에 설계영역을 고르고 빈틈없이 채우는 충전실험계획법(space filling design)이 연구의 중심을 이루었다.<sup>(1-4)</sup> 충전실험계획법은 해석모델의 응답을 이용하지 않고, 한번에 모든 해석점들을 결정하는 이른바 '한번에 다같이(all at once)' 방식을 채택하고 있다. 이러한 이유로 충전실험계획법은 메타모델의 예측능이 좋지 않을 경우 해석점의 변경 및 메타모델의 재생성이 용이하지 않을 뿐 아니라 최적화 과정이 필요한 일부의 충전실험계획법은 샘플링수를 경우, 막대한 최적화 비용을 요구되는 문제가 있다.

최근에는 이러한 문제점을 해결하기 위해 설계

<sup>†</sup> 책임저자, 회원, 한양대학교 기계공학부  
E-mail : thlee@hanyang.ac.kr  
TEL: (02) 2290-0449, FAX (02) 2298-4634

\* 한양대학교 대학원 기계설계학과

자가 해석점을 특정한 기준에 따라 순차적으로 추가해 나가는 순차적 실험계획법(sequential sampling)이 제안되었다.<sup>(5-7)</sup> 하지만 기존의 순차적 실험계획법들은 메타모델의 통계적 예측 오차나 해석점들간의 거리를 채택기준으로 사용하기 때문에 실제 근사화 과정에서 중요한 극점(extremum point)을 효과적으로 근사화할 수 없었다. 그 결과 이러한 방법으로 생성된 메타모델은 실제 최적화 과정에서 최적해에 대한 정확한 예측성을 보장할 수 없는 측면이 있다.

따라서 본 연구에서는 응답함수의 특성을 효과적으로 반영하면서도 최적해에서의 정확성을 향상시키기 위해 크리깅모델(Kriging model)의 해석적 민감도를 이용하는 순차적 실험계획법의 민감도법을 제안한다. 이를 위해 해석적 방법으로 크리깅모델의 민감도를 유도하고, 제안된 방법의 우수성을 검증하기 위해 평균제곱오차(mean squared error: MSE)를 이용한 순차적 실험계획법의 결과와 비교하고자 한다. 제안된 순차적 실험계획법의 민감도법으로 생성한 크리깅모델을 이용하여 최적화를 수행한 뒤 구해진 최적해를 실제함수의 최적해와 비교하여 제안된 방법의 정확성을 입증 한다.

## 2. 크리깅모델

모델링 할 실제 함수는 평균에 해당하는 전역 모델  $f(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\beta}$  와 이것으로부터의 편차를 의미하는  $z(\mathbf{x})$  의 합으로 표현할 수 있다고 가정한다.

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\beta} + z(\mathbf{x}) \quad (1)$$

여기서  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  는 설계자가 정의하는 설계변수로 이루어진 회귀함수 벡터이며,  $\boldsymbol{\beta}$  는 미지의 계수이다.  $z(\mathbf{x})$  는 평균이 0 이고 공분산이 식 (2)와 같이 정의되는 확률과정(stochastic process)을 통해 구현된다.

$$\text{Cov}[z(\mathbf{x}^i), z(\mathbf{x}^j)]_{(1 \leq i \leq n) \times (1 \leq j \leq n)} = \sigma^2 \mathbf{R} \quad (2)$$

여기서  $\sigma^2$  는  $y(\mathbf{x})$  가 정규분포라고 가정할 때  $y(\mathbf{x})$  의 분산이며,  $\mathbf{R}$  은 두 해석점  $\mathbf{x}^i$  와  $\mathbf{x}^j$  사이의 상관관계를 나타내는 상관행렬(correlation matrix)로 다음과 같이 정의한다.

$$\mathbf{R} = [R(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j, \boldsymbol{\theta})]_{(1 \leq i \leq n) \times (1 \leq j \leq n)} \quad (3)$$

$$= \left[ \exp \left( - \sum_{k=1}^{n_d} \theta_k (x_k^i - x_k^j)^2 \right) \right]_{(1 \leq i \leq n) \times (1 \leq j \leq n)}$$

여기서  $n_d$  는 설계변수 개수이고, 미지수  $\theta_k (k=1, 2, \dots, n_d)$  는 해석점들간의 상관도를 결정하는 상관계수이다.

$n$  개의 해석점에 대한 시뮬레이션 응답값들을  $\mathbf{Y} = [y(\mathbf{x}^1), y(\mathbf{x}^2), \dots, y(\mathbf{x}^n)]^T$  라고 하면 식 (1)에 의해 다음과 같은 식이 성립한다.

$$\mathbf{Y} = \mathbf{F}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z} \quad (4)$$

여기서  $\mathbf{F}$  와  $\mathbf{Z}$  는 각각 다음과 같다.

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{x}^1)^T \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}^2)^T \\ \vdots \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}^n)^T \end{bmatrix} \quad \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} z(\mathbf{x}^1) \\ z(\mathbf{x}^2) \\ \vdots \\ z(\mathbf{x}^n) \end{bmatrix} \quad (5)$$

크리깅모델은 이들 데이터들로 생성되는 선형예측량(linear predictor)으로 다음과 같이 표현된다.

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{c}(\mathbf{x})^T \mathbf{Y} \quad (6)$$

크리깅모델을 구한다는 것은 평균제곱오차(mean squared error: MSE)를 최소로 하는 최량비편향 예측량(best linear unbiased predictor)을 구한다는 의미이다. 즉,

$$\min E[(\hat{y}(\mathbf{x}) - y(\mathbf{x}))^2] \quad (7)$$

이때 비편향조건은 다음과 같다.

$$E[\hat{y}(\mathbf{x})] = E[y(\mathbf{x})] \quad (8)$$

식 (6)의  $\mathbf{c}(\mathbf{x})$  를 구하는 것은 식 (8)을 제약조건으로 하는 식 (7)의 최소화 문제이므로 라그랑지안 승수 정리(Lagrangian multiplier theorem)를 이용하여 풀고 그 결과를 식 (6)에 대입하면 크리깅모델은 다음과 같이 유도된다.<sup>(7-9)</sup>

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}(\mathbf{x})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (9)$$

여기서  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  는 일반화된 최소제곱추정량(generalized least square estimator)으로  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Y}$  로 표현된다.  $\mathbf{r}(\mathbf{x})$  는 예측점(prediction point)과 해석점들간의 상관관계를 나타내는 상관벡터(correlation vector)로 식 (3)을 이용하여 나타내면 아래와 같다.

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^1) \\ R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^2) \\ \vdots \\ R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n) \end{bmatrix} \quad (10)$$

크리깅모델이 구해지면 통계적인 예측오차인 MSE 는 다음과 같은 식으로 표현된다.<sup>(7)</sup>

$$MSE = \sigma^2 \left( 1 - [\mathbf{f}(\mathbf{x})^T \mathbf{r}(\mathbf{x})^T] \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{F}^T \\ \mathbf{F} & \mathbf{R} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{r}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \right) \quad (11)$$

식 (2)와 식 (11)의 모수인 분산은 일반화된 최소제곱법을 이용하여  $n$  개의 데이터들로 추정된 분산(estimated variance)으로 대체할 수 있다.

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(Y - F\hat{\beta})^T R^{-1}(Y - F\hat{\beta})}{n} \quad (12)$$

크리깅모델을 나타내는 식 (9)에서 유일한 미지수는 식 (3)의 상관계수  $\theta_k$  이며 이것은 전역최적화 과정인 최우량추정법(maximum likelihood estimate: MLE)에 의해 구한다. 일반적으로 상관계수는 함수의 특성과 제약조건 범위에 따라 다양한 전역최적해를 가질 수 있다. 본 연구에서는 응답의 정규화를 통해 경험적 연구에서 얻은 최적화 범위를 사용하였으며, 로그 우량함수와 등가인 다음과 같은 우량함수를 이용하였다.

$$\begin{aligned} \text{Maximize } L(\theta) &= -|R|^{1/n} \hat{\sigma} \\ \text{subject to } 0 < \theta_k &\leq 5, \quad k=1, 2, \dots, n_d \end{aligned} \quad (13)$$

### 3. 기존의 순차적 실험계획법

#### 3.1 최대·최소 거리 방법

최대·최소거리 방법은 기존의  $l$  개의 해석점 집합  $X_p$  가 얻어진 상태에서  $m$  개의 새로운 해석점 집합  $X_c$  를 결정할 때, 기존 해석점의 위치는 동일하게 유지한 상태에서,  $X_A = X_p \cup X_c$  에 속하는 두 해석점 간의 최소거리를 최대화하는 해석점 집합을 구하는 방법이다.<sup>(6)</sup> 즉,

$$\max_{X_c} \left[ \min_{1 \leq s \leq m, 1 \leq j \leq l+m} d(x_A, x_A) \right] \quad (14)$$

여기서  $d(x_A, x_A)$  는  $x_A, x_A \in X_A (i, j = 1, \dots, l+m)$  를 만족하는 두 해석점의 거리를 나타낸다.

이 방법은 기존 해석점과 새롭게 추가될 해석점의 상대적 거리만을 선택기준으로 사용하기 때문에  $X_p$  로 생성한 메타모델의 응답정보를 새로운 해석점을 찾는데 이용할 수 없는 단점이 있다. 이를 보완하기 위해 메타모델을 구성하는 여러 설계변수들 간의 상대적 중요도에 따라 가중치를 부여하여 전체 설계변수들의 투영 성질을 고르게 하는 가중 최대·최소 거리 방법(maximin scaled distance approach)이 제안되었다.<sup>(5)</sup>

$$\begin{aligned} \max_{X_c} \left[ \min_{1 \leq s \leq m, 1 \leq j \leq l+m} d_s(x_A, x_A) \right] \\ \text{where } d_s(x, w) = \sqrt{\sum_{k=1}^n a_k (v_k - w_k)^2} \end{aligned} \quad (15)$$

여기서  $a_k$  는 설계변수들간의 상대적 가중치이며 크리깅모델이 사용될 경우 상관계수  $\theta_k$  가 가중치로 사용될 수 있다. 여기서 상관계수  $\theta_k$  가 작다는 것은 식 (3)에서 상관도가 크다는 것을 의미하고 이 설계변수는 응답함수와 비선형성이 약한 부드러운 곡선의 형태를 이룬다는 것을 나타낸다. 따

라서 이러한 설계변수는 다른 설계변수들보다 상대적으로 중요도가 낮으며 해석점을 다소 적게 분포시켜도 메타모델의 정확도는 저하되지 않는다는 의미를 갖는다.

#### 3.2 엔트로피 방법

엔트로피의 개념은 Shannon 에 의해 ‘정보의 양’ 을 정량화하기 위하여 처음으로 사용되었다.<sup>(10)</sup> 실험계획법에서의 엔트로피의 개념은 ‘엔트로피가 클수록 설계영역 내에 해석점들이 고르게 분포되어 있고, 이러한 해석점들이 가지는 응답함수에 대한 정보량은 많다’ 라는 의미이다.<sup>(3)</sup>

엔트로피를 이용한 순차적 실험계획법에서는 새로운 해석점들로부터 얻을 수 있는 정보의 양을 최대로 하는 해석점 집합  $X_c$  를 선택한다. 정보이론(information theory)에서 정규분포를 따르는 해석점들의 정보량은 상관행렬의 행렬식(determinant)으로 표현되므로 엔트로피 방법은 다음 식을 만족하는 해석점의 집합을 선택한다.

$$\max_{X_c} |R_A| \times |J^T R_A^{-1} J| \quad (16)$$

여기서  $R_A$  는 기존의 해석점 집합과 추가된 해석점 집합  $X_A = X_p \cup X_c$  로 구성되는 크리깅의 상관행렬이고  $J$  는  $J^T = [1, 1, \dots, 1]_{1 \times (l+m)}$  인 벡터이다.

#### 3.3 오차 방법

오차 방법은 오차가 가장 클 것으로 예상되는 위치에 새로운 해석점을 추가하여 메타모델을 생성해 나가므로써 메타모델의 오차를 점차 줄여나가는 방식이다.  $X_p$  로 생성한 크리깅모델이 제공하는 통계적 예측 오차인 평균제곱오차가 최대가 되는 실험점을 매 단계마다 추가하는 MSE 방법은 다음과 같다.<sup>(7)</sup>

$$\max_{X_c} MSE(x) \quad (17)$$

오차방법은 해석점 집합을 추가하는 것이 아니라 최대 예측오차가 발생할 것으로 예상되는 위치에 하나의 해석점  $x_c$  를 새롭게 추가하는 방식이다. 그러나 크리깅에서 제공하는 평균제곱오차는 두 해석점간의 거리의 함수이므로 이 방법 또한 실제적으로는 응답함수의 특성을 효과적으로 반영한다고 보기 어렵다.

한편 Sacks 는  $X_A = X_p \cup X_c$  로 생성한 크리깅모델의 평균제곱오차의 기대값을 최소화하는 해석점 집합  $X_c$  를 선택하는 적분평균제곱오차(integrated mean squared error: IMSE) 방법을 제안하기도 했다.<sup>(7)</sup> 즉,

$$\min_{X_c} \int MSE(x) dx \quad (18)$$

적분평균제곱오차는 전체 설계영역에서의 MSE 의 평균을 의미하며, 이 방법이 MSE 방법과 다른

점은 크리깁모델을 생성할 때 사용하는 해석점 집합의 차이에서 비롯된다. 즉, MSE 를 이용한 방법은 크리깁모델을 생성하는 과정에서  $\mathbf{X}_p$  만을 사용하지만 IMSE 를 이용하는 방법은  $\mathbf{X}_d$  를 사용하는 것이다. 하지만 이 방법은 평균제곱오차의 기대값을 구하기 위해 계산비용이 많이 소요되는 수치적분을 수행해야 한다는 단점이다.

3.4 교차검증 방법

메타모델을 실제 공학 문제에 적용할 때, 메타모델의 정확성을 확인하기 위해 새로운 해석점을 추가한다는 것은 현실적으로 많은 제약이 따른다. 이런 이유로 기존의 해석점들로부터 하나 또는 그 이상의 해석점을 제외하고 메타모델을 만든 후, 제외된 해석점에서의 예측값을 참값과 비교하여 메타모델의 정확성을 평가하는 방법이 연구되었는데 이것이 교차검증방법(cross validation approach)이다. 해석점의 추가없이 메타모델의 정확성을 평가하기 위해 사용된 이 방법을 메타모델의 예측오차를 평가하는 기준으로 채택한 것이 순차적 실험계획법에서의 교차검증 방법이다.

1 개의 미리 얻어진 해석점 집합  $\mathbf{X}_p$  에 대해서 1 번 교차검증을 실행하여 나온  $\mathbf{x}_c$  에 대한 교차검증오차의 평균(mean of cross validation error)은 다음과 같이 표현된다.<sup>(5)</sup>

$$error(\mathbf{x}_c) = \sqrt{\frac{1}{l} \sum_{j=1}^l (\hat{y}_{-j}(\mathbf{x}_c) - \hat{y}(\mathbf{x}_c))^2} \quad (19)$$

여기서  $\hat{y}_{-j}(\mathbf{x}_c)$  는  $j$  번째 해석점  $\mathbf{x}_p$  를 포함시키지 않은 메타모델의  $\mathbf{x}_c$  에 대한 예측값이며  $\hat{y}(\mathbf{x}_c)$  는 1 개의 모든 해석점을 이용하여 구성된 메타모델의  $\mathbf{x}_c$  에 대한 예측값이다. 교차검증방법은 교차검증오차의 평균이 가장 크게 되는 새로운 해석점  $\mathbf{x}_c$  를 구하는 방법이기 때문에 그 개념이 MSE 방법과 유사하다고 할 수 있다. 그러나 이 방법은 샘플링 수가 많을 때, 크리깁모델을 생성하기 위해 1 번의 전역최적화 과정을 거쳐야하기 때문에 계산비용이 다른 방법에 비해 증가한다는 단점이 있다.

4. 민감도법을 이용한 순차적 실험계획

4.1 크리깁모델의 민감도

크리깁의 해석적 민감도는 식 (9)를  $\mathbf{x}$  에 대해서 미분함으로써 구한다.  $q$  개의 함수로 이루어진  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  는 Table 1 과 같이 정의되고,  $d\mathbf{f}(\mathbf{x})/d\mathbf{x}$  는 Table 2 와 같이 유도된다.

Table 1 Regression function vectors

Function type	Regression vector	$q$
Constant	$\mathbf{f}(\mathbf{x})=1$	1
Linear	$\mathbf{f}(\mathbf{x})^T = [1, x_1, x_2, \dots, x_{n_d}]$	$n_d + 1$
Quadratic	$\mathbf{f}(\mathbf{x})^T = \{1, x_1, x_2, x_1x_2, \dots, x_{n_d}^2\}$	$\frac{(n_d+1)(n_d+2)}{2}$

Table 2 Sensitivity of regression function vectors

Type	Sensitivity of regression function vector
Constant	$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = \mathbf{I}_{n_d+1}$
Linear	$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = \mathbf{I}_{n_d+1} \mathbf{I}_{n_d \times n_d}$
Quadratic	$\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = \mathbf{I}_{n_d+1} \mathbf{I}_{n_d \times n_d} \mathbf{J}_{n_d \times (q-n_d-1)}$
	$\mathbf{J}_{2 \times 3} = \begin{bmatrix} 2x_1 & x_2 & 0 \\ 0 & x_1 & 2x_2 \end{bmatrix}$ for $n_d = 2$ $\mathbf{J}_{3 \times 6} = \begin{bmatrix} 2x_1 & x_2 & x_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1 & 0 & 2x_2 & x_3 & 0 \\ 0 & 0 & x_1 & 0 & x_2 & 2x_3 \end{bmatrix}$ for $n_d = 3$

상관벡터  $\mathbf{r}(\mathbf{x})$  에 대한 민감도는 식 (10)을 이용하면 아래와 같다.

$$\frac{d\mathbf{r}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} -2\theta_1(x_1 - x'_1)R(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{0}) \\ -2\theta_2(x_2 - x'_2)R(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{0}) \\ \vdots \\ -2\theta_n(x_n - x'_n)R(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{0}) \end{bmatrix}_{n_d \times (1 \leq i \leq n)} \quad (20)$$

Table 2 와 식 (20)의 결과를 이용하면 크리깁에 대한 해석적 민감도를 구할 수 있다.

$$\frac{d\hat{y}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \hat{\boldsymbol{\beta}} + \frac{d\mathbf{r}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (21)$$

4.2 순차적 실험계획법의 민감도법

민감도를 이용한 순차적 실험계획법의 가장 두드러진 특징은 기존의 방법에서 고려하지 않았던 메타모델의 민감도를 이용함으로써 실제함수의 극점을 효과적으로 표현할 수 있다는 것이다. 이를 위해 본 연구에서 채택한 민감도 방법의 선택 기준은 다음과 같다.

$$\mathbf{x}_c = \frac{\mathbf{x}^+ + \mathbf{x}^-}{2}$$

$$s.t. \frac{d\hat{y}(\mathbf{x}^+)}{dx_k} \cdot \frac{d\hat{y}(\mathbf{x}^-)}{dx_k} < 0 \quad (22)$$

$$(k = 1, 2, \dots, n_d)$$

여기서  $\mathbf{x}^+$  와  $\mathbf{x}^-$  는 메타모델의 다양한 극점을 찾기 위해서 설계영역을 격자배열로 나누었을 때,  $k$  차원을 따라서  $\mathbf{x}_c$  에서 가장 가까운 상하 격자

점을 나타낸다. 즉, 각 설계변수에 대해서 민감도의 부호가 바뀌는 격자점을 찾고 이 격자점들의 중앙값을 근사적인 극점으로 간주하였다. 이러한 극점 선택 방법은 극점의 정확성이 나누어진 격자의 간격에 좌우된다는 단점이 있지만 전역 최적화 과정이 필요하지 않고, 다양한 극점을 탐색할 수 있다는 장점이 있다. 한편 메타모델의 정확성이 보장되지 않는 초기 샘플링 단계에서는 민감도의 신뢰성이 떨어지고, 두 개 이상의 극점이 존재하지 않을 경우, 반복적으로 같은 극점이 선택되는 것을 방지하기 위하여 기존 해석점들과의 거리를 보조적인 선택기준으로 다음과 같이 설정하였다.

$$\begin{aligned}
 &x_c = \frac{x^+ + x^-}{2} \\
 &s.t. \frac{d\hat{y}(x^+)}{dx_k} \cdot \frac{d\hat{y}(x^-)}{dx_k} < 0 \\
 &\quad \|x_c - x_{p_j}\| \geq d_c
 \end{aligned} \tag{23}$$

여기서  $x_c$  는 민감도 방법에 의해 선택된 해석점이고,  $x_{p_j}$  는  $x_{p_j} (j=1,2,\dots,l) \in X_p$  를 만족하는 기존의 해석점이다. 식 (23)의 의미는 근사적인 극점을 민감도의 부호가 바뀌는 점으로 찾은 뒤, 거리 기준  $d_c$  을 적용하여 이 해석점이 기존 해석점과 일정 거리를 유지하고 있으면 다음 단계의 메타모델링 구성점으로 채택한다는 것을 나타낸다. 만약 이 조건을 만족하는 해석점이 존재하지 않는다면 MSE 방법에 의해 해석점을 추가하도록 하였다.

한편 민감도 방법에서 발생할 수 있는 문제 중의 하나는 ‘극점이 다수 개일 때 어떤 해석점을 우선적으로 선택해야 하는가’ 인데, 이것을 위해 메타모델의 응답 절대값이 가장 큰 값을 갖는 해석점을 우선적으로 선택함으로써 전역최적해를 우선적으로 찾으려 하였다. 이 기준은 문제에 따라 최소화 문제에서는 메타모델의 응답값이 작은 값을, 최대화 문제에서는 메타모델의 응답값이 큰 값을 갖는 해석점을 선택하는 기준으로 변경될 수 있다. 이와 같은 응답기준은 메타모델에 대한 추가 해석점의 기여도를 극대화시킬 뿐 아니라 전역 최적해 주위에서의 정확성을 향상시키는 효과를 나타낸다.

추가되어야 할 해석점이 선택되고 나면 현재의 샘플링 개수가 설계자가 정의한 샘플링 개수와 일치하는지를 살피고, 이 조건을 만족하지 않으면 앞의 과정을 반복하여 민감도법에 의한 순차적 실험계획을 수행한다.

Fig. 1은 본 연구에서 제안한 순차적 실험계획법의 순서도이다.

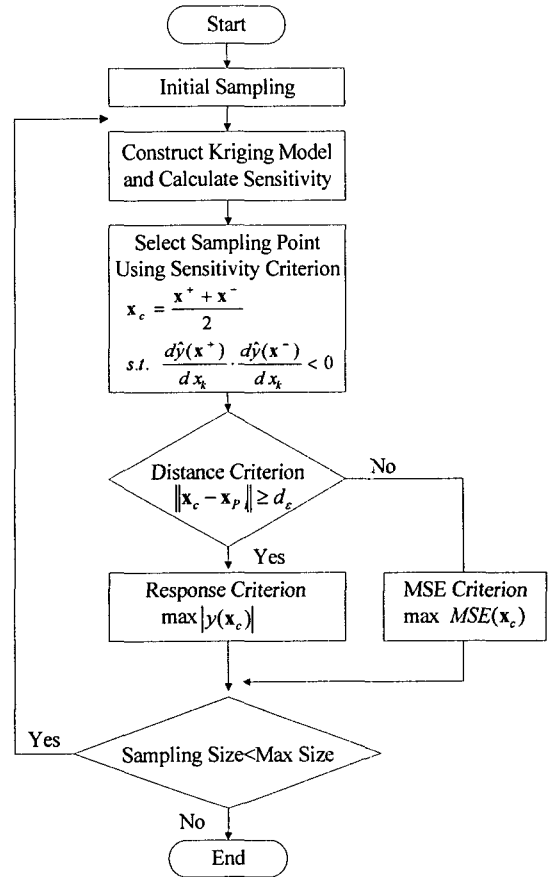


Fig. 1 Flowchart for sensitivity approach of sequential sampling

### 5. 예 제

본 연구에서는 제안된 민감도 방법의 우수성을 검증하기 위해 여러 가지 수확함수에 대해 기존의 MSE 방법과 격자매열(grid sampling) 방법의 결과를 비교하였다. 1 차원 문제에 대한 검증함수로는 다양한 국부최적해를 가지는 비선형 함수를 채택하였으며, 2 차원 문제에서는 비선형성이 매우 강한 Peaks 함수와 Haupt 함수, 그리고 최적화 알고리즘의 검증함수로 자주 사용되는 Rosenbrock 함수를 채택하였다.

Table 3 은 검증함수식과 설계변수들의 범위를 나타낸다.

Table 3 Test functions

Function	Equation
Numerical function 1	$f_1 = -x^3 + 0.7 \cos(10x + 8) - 1$ $-1.5 \leq x \leq 1$
Numerical function 2	$f_2 = 2x^2 \sin(x - 5) + 3 \cos(7x)$ $1.2 \leq x \leq 5.2$
Peaks function	$f_3 = 3(1 - x_1)^2 \exp(-x_1^2 - (x_2 + 1)^2) - 10(\frac{x_1}{5} - x_1^3 - x_2^2) \times$ $\exp(-x_1^2 - x_2^2) - \frac{1}{3} \exp((-x_1 + 1)^2 - x_2^2)$ $[x_1, x_2] \in [-3, 3] \times [-3, 3]$
Haupt function	$f_4 = x_1 \sin(4x_1) + 1.1x_2 \sin(2x_2)$ $[x_1, x_2] \in [0, 4] \times [0, 4]$
Rosenbrock function	$f_5 = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ $[x_1, x_2] \in [-2, 2] \times [-2, 2]$

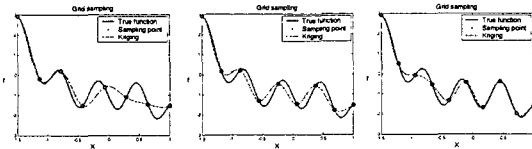


Fig. 2 Kriging models of  $f_1$  by 8, 9 and 10th grid sampling points

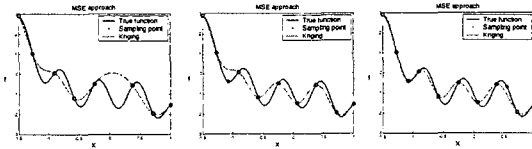


Fig. 3 Kriging models of  $f_1$  by 8, 9 and 10th sequential MSE points

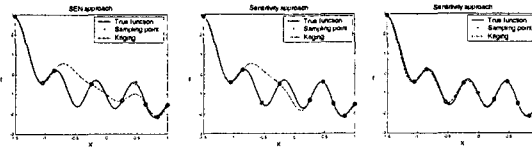


Fig. 4 Kriging models of  $f_1$  by 8, 9 and 10th sequential sensitivity points

1 차원 예제의 경우 초기 샘플링은 3 개, 총 샘플링 개수는 10 개로 하였고 거리 기준  $d_e$  은 0.2 이다. Peaks 함수와 Haupt 함수에 대해서는 초기 샘플링 16 개, 최종 샘플링 36 개로 하였고, Rosenbrock 함수의 경우는 초기 샘플링 4 개, 최종 샘플링은 16 개로 하였다. 이때 거리 기준  $d_e$  은 Peaks 함수, Haupt 함수, Rosenbrock 함수 각각에 대해서 0.8, 0.45, 0.85 로 설정하였다.

평가 기준은 다음과 같은 평균제곱근 오차(root

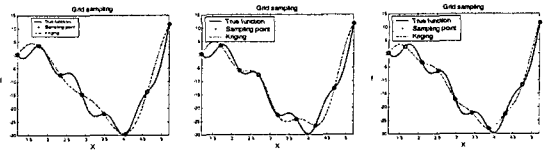


Fig. 5 Kriging models of  $f_2$  by 8, 9 and 10th grid sampling points

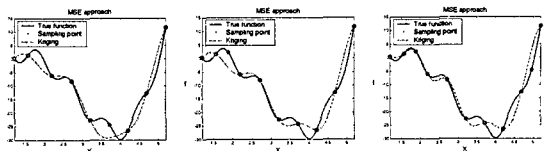


Fig. 6 Kriging models of  $f_2$  by 8, 9 and 10th sequential MSE points

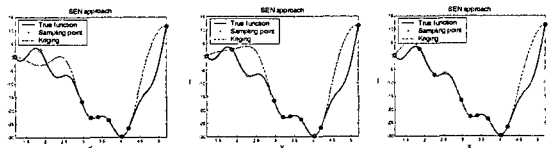


Fig. 7 Kriging models of  $f_2$  by 8, 9 and 10th sequential sensitivity points

mean squared error)  $E_{rms}$ , 평균오차(average error)  $E_{avg}$ , 최대오차(max error)  $E_{max}$  로 하였다.

$$E_{rms} = \sqrt{\frac{1}{n_v} \sum_{i=1}^{n_v} (\hat{y}(x_i) - y(x_i))^2}$$

$$E_{avg} = \frac{1}{n_v} \sum_{i=1}^{n_v} |\hat{y}(x_i) - y(x_i)| \quad (24)$$

$$E_{max} = \max |\hat{y}(x_i) - y(x_i)| \quad i=1,2,\dots,n_v$$

여기서  $n_v$  는 크리깁모델의 정확성을 검증하기 위한 해석점의 개수로 2 차원 문제의 경우, 격자배열로써  $n_v = 3600$  이다.

Fig. 2~Fig. 7 은 1 차원 수학함수에 대하여 격자배열, MSE 방법, 민감도 방법으로 8, 9, 10 개까지의 실험계획을 수행한 결과를 바탕으로 크리깁모델을 생성한 것이다. 두 가지 수학함수에 대해서 제안된 민감도 방법이 MSE 방법과 격자배열 샘플링보다 국부최소값과 전역최소값을 효과적으로 근사화함을 확인할 수 있었다.

Fig. 8~Fig. 10 은 Peaks, Haupt, Rosenbrock 함수들의 실제함수와 순차적 실험계획법의 결과 및 등고선 그림(contour plot)을 나타낸 것이다. 이때 응답기준은 다중 국부점을 갖는 Peaks 함수와 Haupt 함수에 대해서는 메타모델의 응답 절대값이 큰값을 갖는 실험점을 선택하였고, 설계영역 내부에 하나의 최적해가 존재하는 Rosenbrock 함수는 메타모델의 응답이 최소가 되는 실험점을 우선적으로 선택하였다.

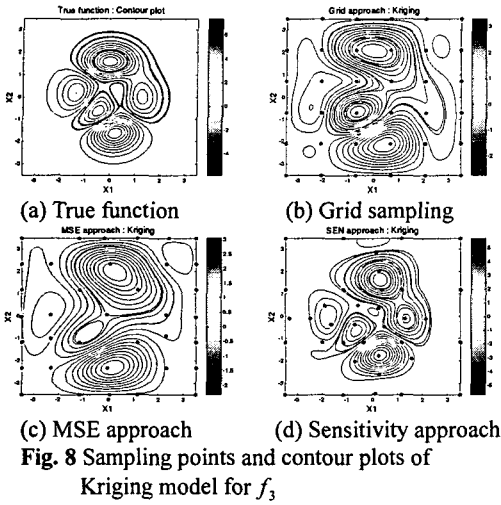


Fig. 8에서 MSE 방법과 격자배열 샘플링이 실제 함수의 특성을 심하게 왜곡하고 있는 것에 반해, 제안된 방법은 5 개의 국부최적해를 효과적으로 근사화하고 있음을 알 수 있다. 이러한 결과는 Peak 함수가 비교적 국부최적해들이 이웃해 있는 함수이기 때문에 Fig. 8의 (c)에서처럼 단순히 해석점을 고르게 분포시키는 것만으로는 국부적인 응답 특성을 효과적으로 근사화할 수 없다는 것을 나타낸다.

Fig. 9에서는 MSE 방법과 민감도 방법이 유사한 결과를 얻었으며 두 방법 모두 격자배열 샘플링보다는 우수한 예측성을 보였다.

Fig. 10에서는 MSE 방법과 민감도 방법이 격자 배열의 근사화보다는 우수하지만 실제함수와는 다소 차이가 있음을 볼 수 있다. 이것은 경계로 갈수록 함수값의 변화가 급격하지만 최적해 주위에서 협소한 평활면이 존재하는 Rosenbrock 함수의 특성으로 인해 근사화가 다소 어렵기 때문이다.

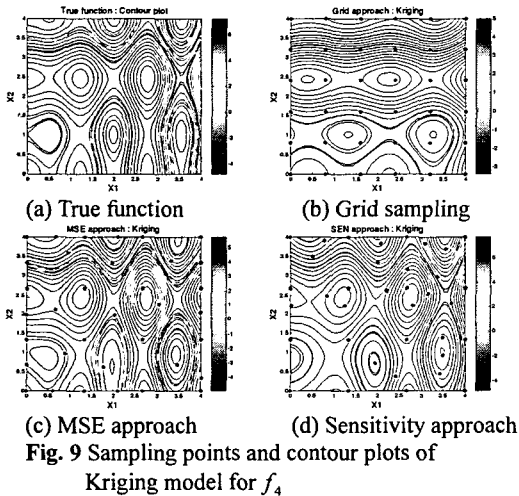
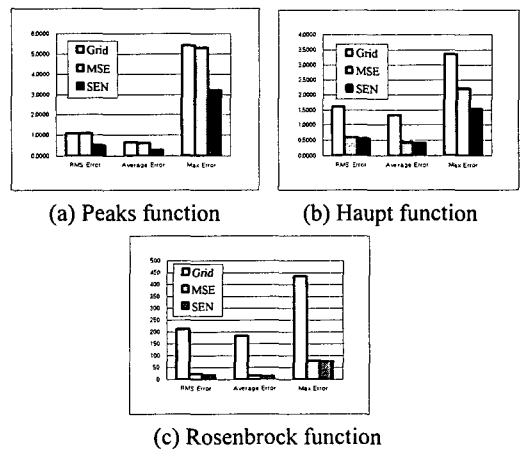
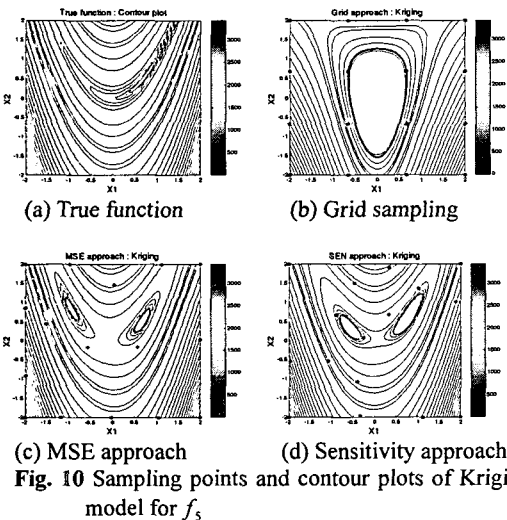


Fig. 11은 Peaks 함수, Haupt 함수, Rosenbrock 함수에 대해 세가지 방법의 정량적인 비교를 위해 3600 개의 해석점에 대한 예측오차를 도시한 것이다. 검증함수의 모든 경우에서 같은 샘플링 개수에 대해 제안된 민감도법이 우수한 성능을 보임을 알 수 있다. 이러한 결과는 제안된 방법이 적은 수의 샘플링으로 다른 두 방법과 비슷한 정확성을 가진 크리깅모델을 확보할 수 있다는 의미이기도 하다. 샘플링 개수는 메타모델링에서 해석 횟수를 의미하므로 순차적으로 크리깅모델을 만드는 과정에서 적은 수의 해석을 요구한다는 사실은 제안된 민감도 방법이 다른 두 방법보다 효율적이라고 말할 수 있다.



**Fig. 11** Prediction errors of Kriging models obtained by grid sampling, MSE approach and sensitivity approach

Table 4 Optimization results of Kriging model

Functions		Sampling	$x_1^{opt}$	$x_2^{opt}$	$E_{xopt}$
$f_3$	Max	Grid sampling	0.0198	2.0767	0.4895
		MSE approach	0.2347	2.0059	0.4802
		Sensitivity approach	0.2915	1.6334	0.2964
		True function	-0.0014	1.5877	
	Min	Grid sampling	0.4766	-2.1421	0.5777
		MSE approach	0.1542	-2.3010	0.6833
		Sensitivity approach	0.2966	-1.7407	0.1384
		True function	0.2262	-1.6215	
$f_4$	Max	Grid sampling	3.3009	4.0000	0.2512
		MSE approach	3.4815	3.9054	0.1095
		Sensitivity approach	3.5418	4.0000	0.0147
		True function	3.5519	3.9889	
	Min	Grid sampling	2.2526	2.4334	0.5193
		MSE approach	2.5000	2.4002	0.2772
		Sensitivity approach	2.7570	2.4394	0.0224
		True function	2.7714	2.4566	
$f_5$	Min	Grid sampling	0.0029	-0.0146	1.4225
		MSE approach	0.6735	0.4822	0.6121
		Sensitivity approach	0.7500	0.5000	0.5590
		True function	1.0000	1.0000	

Table 4 는 순차적 실험계획법으로 얻은 크리깅 모델을 이용하여 Peaks 함수, Haupt 함수, Rosenbrock 함수들에 대해 최적화를 수행한 결과와 실제 함수의 최적해를 나타낸 것이다. 구해진 최적해와 실제 최적해의 거리를 최적해의 정확성을 평가하는 기준으로 채택하였다.

$$E_{xopt} = \|\hat{x}^{opt} - x^{opt}\| \quad (25)$$

다수의 극부점을 갖는 Peaks 함수와 Haupt 함수는 각각 최대 전역최적해와 최소 전역해의 결과만을 나타내었다. Table 4 의 결과는 제안된 민감도법이 최적해의 위치를 예측하는 성능면에서도 두 방법보다 모든 경우에서 우수함을 입증하고 있다.

### 6. 결론

크리깅모델의 민감도를 이용한 새로운 순차적 실험계획법을 제안하였으며 검증함수들을 이용하여 MSE 방법보다 우수한 예측성능을 가졌음을 입증하였다. 제안된 방법이 우수한 예측성능을 보이는 이유는 크리깅모델의 민감도 정보를 이용하여 근사적인 극점을 탐색하는 개념과 충전개념을 적절히 혼용하고 최적화하려는 함수의 특성을 반영하는 응답기준 등을 제시함으로써 효과적인 근사화가 가능해졌기 때문이다. 이것은 단지 설계영역

을 고르게 채우는 MSE 방법을 비롯한 다른 순차적 실험계획법에서 시도되지 않은 새로운 개념으로써 진정한 의미의 응답 기반 실험계획법(response based sampling design)이라고 할 수 있다.

### 후기

이 연구는 한국과학재단 지정 한양대학교 최적설계신기술연구센터의 지원과 해양수산부 특정 연구 과제인 '심해저 집광시스템 및 채광운용기술 개발'과제의 일부분으로 수행되었습니다.

### 참고문헌

- (1) Koehler, J.R. and Owen, A.B., 1996, "Computer Experiments," in Ghosh, S. and Rao, C.R., eds, *Handbook of Statistics*, Vol. 13, pp. 261~308, Elsevier Science, New York.
- (2) McKay, M.D., Beckman, R.J. and Conover, W.J., 1979, "A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code," *Technometrics*, Vol. 21, No. 2, pp. 239~245.
- (3) Shewry M.C. and Wynn H.P., 1987, "Maximum entropy sampling," *Journal of Applied Statistics*, Vol. 14, No. 2, pp. 165~170.
- (4) Simpson, T.W., Lin, D.K.J. and Chen, W., 2001, "Sampling Strategies for Computer Experiments: Design and Analysis," *International Journal of Reliability and Application*, Vol. 2, No. 3, pp. 209~240.
- (5) Jin, R., Chen, W. and Sudjianto, A., 2002, "On Sequential Sampling for Global Metamodeling in Engineering Design," *Proceedings of DETC'02 ASME 2002 Design Engineering Technical Conferences And Computers and Information in Engineering Conference*, DETC2002/DAC-32092.
- (6) Johnson, M.E., Moore, L.M. and Ylvisaker, D., 1990, "Minimax and Maximin Distance Designs," *Journal of Statistical Planning and Inference*, Vol. 26(2), pp. 131~148.
- (7) Sacks, J., Welch, W.J., Mitchell, T.J. and Wynn, H.P., 1989, "Design and Analysis of Computer Experiments," *Statistical Science*, Vol. 4, No. 4, pp. 409~435.
- (8) Ryu, J.S., Kim, M.S., Cha, K.J., Lee, T.H. and Choi, D.H., 2002, "Kriging Interpolation Methods in Geostatistics and DACE Model," *KSME International Journal*, Vol. 16, No. 5, pp. 619~632.
- (9) Lee, T.H., Lee, C.J. and Lee, K.K., 2002, "Shape Optimization of a CRT based on Response Surface and Kriging Metamodels," *Trans. of KSME*, Vol. 9, No. 1, pp. 85~92.
- (10) Shannon, C.E., 1948, "A Mathematical Theory of Communication," *Bell System Technical Journal*, Vol. 27, pp. 379~423, pp. 623~656.