

< 논문 >

## 평균제곱오차를 이용한 크리깅 근사모델의 오차 평가

주병현<sup>†</sup> · 조태민\* · 정도현\*\* · 이병채\*\*\*

(2006년 1월 24일 접수, 2006년 5월 23일 심사완료)

### An Error Assessment of the Kriging Based Approximation Model Using a Mean Square Error

Byeong-Hyeon Ju, Tae-Min Cho, Do-Hyun Jung and Byung-Chai Lee

**Key Words :** Computer Experiment(전산 실험), Kriging(크리깅), Mean Square Error(평균제곱오차), Sequential Sampling(순차적 실험계획)

#### Abstract

A Kriging model is a sort of approximation model and used as a deterministic model of a computationally expensive analysis or simulation. Although it has various advantages, it is difficult to assess the accuracy of the approximated model. It is generally known that a mean square error (MSE) obtained from the kriging model can't calculate statistically exact error bounds contrary to a response surface method, and a cross validation is mainly used. But the cross validation also has many uncertainties. Moreover, the cross validation can't be used when a maximum error is required in the given region. For solving this problem, we first proposed a modified mean square error which can consider relative errors. Using the modified mean square error, we developed the strategy of adding a new sample to the place that the MSE has the maximum when the MSE is used for the assessment of the kriging model. Finally, we offer guidelines for the use of the MSE which is obtained from the kriging model. Four test problems show that the proposed strategy is a proper method which can assess the accuracy of the kriging model. Based on the results of four test problems, a convergence coefficient of 0.01 is recommended for an exact function approximation.

#### 1. 서론

전산 실험(computer experiment)은 많은 연구 분야에서 점점 더 중요한 위치를 차지하고 있으며 컴퓨터의 발전과 함께 좀 더 복잡한 문제들을 다룰 수 있게 되었다. 그러나 컴퓨터가 발전함에 따라 모델의 복잡성도 크게 증가하여 한번의 해석을 위해 여전히 많은 시간이 요구되고 있다. 특히 최적설계와 같이 여러 번의 해석이 필요한 경우 해석 시간이 매우 증가하게 된다. 이런

문제점을 해결하기 위해 많은 근사모델이 제안되었다. 그 중 크리깅 모델은 설계변수가 많고 비선형성이 강한 문제에서 좋은 특성을 보이며 특히 설계공간에서 실험점에 대한 결과를 보간(interpolation)할 수 있다는 점에서 컴퓨터 모의 실험에 바탕을 둔 근사모델에 적합하다고 알려져 있다.<sup>(1)</sup>

크리깅 모델은 Sacks 등이 처음으로 지질통계학에서만 쓰이던 것을 전산실험에 적용하였으며 이에 적합한 순차적 실험계획법을 제안하였다.<sup>(2)</sup> 그러나 크리깅 모델에서 계산된 평균제곱오차(mean square error)는 통계적으로 정확한 신뢰구간을 계산하지 못하며 실제 값보다 작은 평균제곱오차를 주는 것으로 알려져 있다.<sup>(3)</sup> 이로 인해 모델의 정확성을 판단하는데 많은 어려움을 겪고 있으며 모델의 정확성을 판단하기 위해 선택된 점들을 이용하여 모델을 만든 뒤 한 점 또는 여러

† 책임저자, 회원, 한국과학기술원 기계공학과

E-mail : joobi@casad.kaist.ac.kr

TEL : (042)869-5034

\* 한국과학기술원 기계공학과

\*\* 자동차부품연구원

\*\*\* 회원, 한국과학기술원 기계공학과

점을 제거하여 크리깅 모델을 다시 만들고 이 근사모델의 값과 실제 값의 비교를 통해 모델의 정확성을 평가하는 교차검증 방법이 주로 사용되고 있다.<sup>(4,5)</sup> 그러나 이 경우 실험점의 개수만큼 크리깅 모델을 다시 만들어야 할 뿐만 아니라 신뢰할 만한 결과를 주지 못하는 것으로 알려져 있으며 결국 추가적인 실험점을 선택하여 모델의 정확도를 평가할 것을 제안하고 있다.<sup>(6)</sup> 그러나 계산 시간이 많이 걸리는 전산 실험의 경우 이런 방식으로 모델을 검증하기란 불가능하며 결국 크리깅 모델의 정확도를 평가하기 위해 평균제곱오차나 교차검증 방법을 사용해야 한다.

또한 오차를 비교하기 위해 많은 문헌들에서 평균제곱근오차(root mean square error)를 이용하고 있는데 평균제곱근오차의 가장 큰 단점은 설계 영역 중 일부분에서 오차가 클 경우 이를 구별하지 못한다는 것이다. 즉 대부분의 설계영역에서 값이 정확하다 할지라도 설계영역의 일부분에서 값이 크게 다를 경우 이를 반영할 수 없는 단점이 있다. 그러므로 함수를 설계영역에서 정확하게 근사해야 하는 경우 식 (1)과 같이 최대오차를 사용하는 것이 바람직하다.

$$MAXERR_1 = \max_{\mathbf{x} \in D} |\hat{y}(\mathbf{x}) - y(\mathbf{x})| \quad (1)$$

여기에서  $\hat{y}(\mathbf{x})$  는 크리깅에 의해 근사된 모델이며  $y(\mathbf{x})$  는 실제 함수를 나타낸다. 이때  $D$  를 전체 설계영역이라 하면 이 식은 전체 설계영역 내에서 최대오차를 나타내며 이를 크리깅 모델의 검증 방법으로 사용하는 것이다. 이와 같은 오차를 도입하면 국부적인 오차가 매우 클 경우 이 효과들을 적절하게 반영할 수 있다. 즉 전반적으로 근사를 잘한다 하더라도 국부적으로 값이 크게 틀려지는 경우 이것은 나쁜 근사로 분류되게 된다.

이런 관점에서 오차를 비교할 경우 교차검증 방법은 모든 설계영역에서 값을 얻을 수 있는 것이 아니라 식 (2)와 같이 크리깅 모델에 대해 대표적인 오차만을 계산할 수 있다. 여기에서  $n_s$  는 크리깅 모델을 만드는데 사용된 실험점의 개수이다.

$$CV = \sqrt{\frac{1}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} (\hat{y}(\mathbf{x}_i) - y(\mathbf{x}_i))^2} \quad (2)$$

그러나 크리깅 모델에서 제공되는 평균제곱

오차의 경우 모든 영역에서 값을 계산할 수 있으며 식 (3)과 같이 표현할 때 식 (1)과 같은 의미가 된다.

$$MAXERR_2 = \max_{\mathbf{x} \in D} \sqrt{MSE(\hat{y}(\mathbf{x}))} \quad (3)$$

그러나 현재까지도 평균제곱오차는 단지 크리깅 근사모델의 불확실한 정도를 나타내는 지침 정도로 알려져 있으며 이를 크리깅 모델의 수렴 여부를 판단하기 위해 사용할 때 발생하는 문제점 및 이에 대한 해결책을 다룬 연구는 많이 부족한 실정이다. 또한 크리깅 모델에서 계산된 평균제곱오차를 실제 오차에 좀 더 가깝게 할 수 있는 방법에 대한 연구는 전무한 실정이다. 그러므로 본 논문에서는 평균제곱오차의 전반적인 특성을 파악하고 그 과정에서 발생하는 문제점을 순차적 실험계획법을 도입함으로써 해결하고 이를 적용함으로써 실제 오차에 좀 더 가까운 평균제곱오차를 얻을 수 있음을 수치예제를 통해 확인한다. 최종적으로 크리깅 모델이 실제 함수를 정확하게 근사할 수 있는 적절한 수렴상수를 제안하는 것을 목적으로 한다.

## 2. 크리깅 근사모델

### 2.1 크리깅 모델의 기본 이론

크리깅 모델은 식 (4)와 같이 전역적인 특성을 결정짓는  $\mathbf{f}^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\beta}$  와 이 값으로부터 편차를 나타내는  $Z(\mathbf{x})$  의 합으로 구성된다.

$$Y(\mathbf{x}) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\beta} + Z(\mathbf{x})$$

$$\text{where } \begin{cases} \mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), \dots, f_k(\mathbf{x})]^T \\ \boldsymbol{\beta} = [\beta_1, \dots, \beta_k]^T \end{cases} \quad (4)$$

여기에서  $Z(\mathbf{x})$  는 평균이 0 이고 설계점  $\mathbf{x}$  와  $\mathbf{w}$  에서  $Z(\mathbf{x})$  와  $Z(\mathbf{w})$  사이의 공분산이 식 (5)와 같은 확률적인 과정(stochastic process)을 통해 표현된다.

$$\text{Cov}(\mathbf{w}, \mathbf{x}) = \sigma^2 R(\mathbf{w}, \mathbf{x}) \quad (5)$$

여기에서  $\sigma^2$  은  $Y(\mathbf{x})$  를 정규분포로 가정했을 때  $Y(\mathbf{x})$  의 분산이다. 식 (4)와 (5)에서  $\boldsymbol{\beta}$  와  $\sigma^2$  은 주어진 정보에 의해 계산된다.

이를 위해 임의의  $S = \{\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N\}$  에 대해 전산 실험의 결과를  $\mathbf{y}_s = [y(\mathbf{s}_1), \dots, y(\mathbf{s}_N)]^T$  라 하자. 그러면  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  와  $\hat{\sigma}^2$  은 식 (6)에 의해 주어진다.

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\beta}} = (F^T R^{-1} F)^{-1} F^T R^{-1} \mathbf{y}_s \\ \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N} (\mathbf{y}_s - F \hat{\boldsymbol{\beta}})^T R^{-1} (\mathbf{y}_s - F \hat{\boldsymbol{\beta}}) \end{cases} \quad (6)$$

where  $\begin{cases} F = [\mathbf{f}(\mathbf{s}_1), \dots, \mathbf{f}(\mathbf{s}_N)]^T \\ R = [R(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j)]_{i,j} \quad 1 \leq i, j \leq N \end{cases}$

그러나  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  과  $\hat{\sigma}^2$  를 계산하기 전에 먼저 상관함수(correlation function)의 미지수인  $\theta_k$  를 결정해야 하며 이를 위해 최우량추정법(maximum likelihood estimation: MLE)에 의해 구성되는 식 (7)을 풀어야 한다. 여기에서  $n$  은 설계변수의 개수이다.

$$\begin{aligned} &\text{Minimize } L(\boldsymbol{\theta}) = |R|^{1/N} \hat{\sigma}^2 \\ &\text{subject to } 0 \leq \theta_k \leq 50 \quad k=1, \dots, n \end{aligned} \quad (7)$$

이를 바탕으로 크리깅 모델은 다음과 같이 표현된다.

$$\hat{y} = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}^T \hat{\boldsymbol{\alpha}}$$

where  $\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\alpha}} = R^{-1} (\mathbf{y}_s - F \hat{\boldsymbol{\beta}}) \\ \mathbf{r} = [R(\mathbf{s}_1, \mathbf{x}), \dots, R(\mathbf{s}_N, \mathbf{x})]^T \end{cases} \quad (8)$

또한 평균 제곱 오차는 다음과 같이 표현된다.

$$MSE(\hat{y}(\mathbf{x})) = \hat{\sigma}^2 \left\{ 1 - [\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \quad \mathbf{r}^T(\mathbf{x})] \begin{bmatrix} 0 & F^T \\ F & R \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \\ \mathbf{r}^T(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \right\} \quad (9)$$

이때 평균제곱오차는 설계점의 집합  $S$  에서 0 이 되는 특성을 가진다.

### 2.2 상관함수

크리깅 모델을 위한 상관함수는 다양하지만 여기에서는 가장 일반적으로 사용되는 가우스 상관함수만을 고려한다. 가우스 상관함수를 이용하면  $R(\mathbf{w}, \mathbf{x})$  는 식 (10)과 같이 표현된다.

$$R(\mathbf{w}, \mathbf{x}) = \prod_{j=1}^n R_j(d_j)$$

where  $\begin{cases} R_j(d_j) = e^{-\theta_j |d_j|^2} \\ d_j = w_j - x_j \end{cases} \quad (10)$

### 3. 크리깅 모델에서 MSE 의 특성

#### 3.1 MSE 를 이용한 오차의 평가

크리깅 모델에 대해 평균제곱오차의 특성을 파악하기 위해 식 (11)과 (12)의 수학 함수를 이용한다.<sup>(7,8)</sup> 각각에 대한 함수의 개형을 Fig. 1 에 나타내었다.

$$f = -x^3 + 0.7 \cos(10x + 8) - 1$$

$$x \in [-1.5, 1] \quad (11)$$

$$f = 2 + 0.01(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1) + 2(2 - x_2)^2 + 7 \sin(0.5x_1) \sin(0.7x_1x_2)$$

$$[x_1, x_2] \in [0, 5]^2 \quad (12)$$

수치 실험을 위해 1 차원 함수의 경우 등간격으로 실험점을 배치하며 2 차원 문제의 경우 균일 격자 모양으로 실험점을 배치한다. 이때 실험점의 수를 증가시켜 가며 최대오차를 비교해 보았다. 결과를 비교하기 위해 식 (1)과 (3)을 이용하며 1 차원 문제의 경우 구간을 100 개의 등간격으로 나누고 2 차원 문제의 경우 100×100 의 격자를 이용하여 최대오차를 평가하였다. 주어진 실험 함수들에 대한 최대오차를 Fig. 2 에 나타내었으며 y 축은 대수좌표계로 선택하였다.

$$MAXERR_1 = \max_{\mathbf{x} \in D} |\hat{y}(\mathbf{x}) - y(\mathbf{x})| \quad (1)$$

$$MAXERR_2 = \max_{\mathbf{x} \in D} \sqrt{MSE(\hat{y}(\mathbf{x}))} \quad (3)$$

Fig. 2 는 실험점의 수가 증가함에 따라 실제 오차와 크리깅 모델로부터 계산된 오차가 비슷한 경향을 보이고 있음을 보여준다. 물론 어느 정도 차이를 보이지만 크리깅 모델로부터 계산된 오차가 충분히 크리깅 모델의 수렴에 대한 지침으로 사용될 수 있는 것을 보여준다.

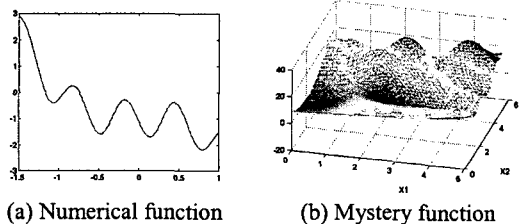
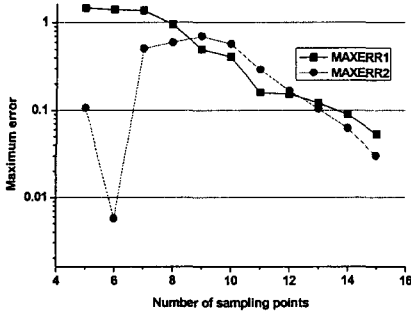
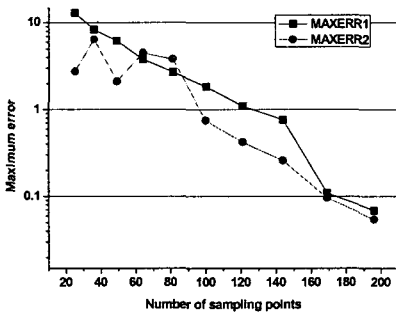


Fig. 1 Plots of test functions



(a) Maximum errors for the numerical function



(b) Maximum errors for Mystery function

Fig. 2 Comparison of Maximum errors in case of no sequential sampling methods

Table 1 Error assessments using MSE for the numerical function

	Multiplied by 1000	Original	Divided by 1000
MSE	$1.1417 \times 10^4$	0.0114	$1.1417 \times 10^{-8}$

그러나 이와 같은 경향에도 불구하고 실제 수렴 상수를 결정하기 쉽지 않은 이유는 식 (9)가 함수의 크기에 따라 달라질 수 있다는 것이다. 이는 식 (9)에서 알 수 있듯이 평균제곱오차에  $\hat{\sigma}^2$  이 곱해져 있기 때문이다. 여기에서  $\hat{\sigma}^2$  은  $y_s$  의 영향을 받게 되며 이로 인해 함수의 크기에 따라 오차가 영향을 받게 된다. 한 예로 식 (11)의 함수에 대해 1000 을 곱한 경우와 1000 으로 나눈 경우에 대해 5 개의 점을 사용한 크리깅 근사모델의 평균제곱오차를 Table 1 에 나타내었다. 물론 세 경우 모두 실제 함수와 크리깅 모델의 상대적인 개형은 같다. 그러나 이와 같은 차이가 나는 것은 크리깅 근사모델에서 계산된 평균제곱오차가 실제 함수의 크기에 영향을 받기 때문이다. 이와 같은 문제는 실제 크리깅 근사모델의 오차를 평가할 때

Table 2 Error assessments using MMSE

	Multiplied by 1000	Original	Divided by 1000
MMSE	0.0024	0.0024	0.0024
$\hat{\sigma}^2$	$4.6819 \times 10^{-6}$	4.6819	$4.6819 \times 10^6$

매우 중요하게 작용할 수 있다. 그 이유는 실제 함수에 대한 개형 및 크기를 모르는 상태에서 수렴상수를 어떤 값으로 고정시키는 것은 수렴에 대한 잘못된 판단을 가져올 수 있기 때문이다. 한 예로 Table 1 을 참고하여 수렴상수를 0.001 로 설정하였다면 1000 으로 나눈 경우는 실제 상대적인 오차가 크더라도 수렴한 것으로 판단될 것이기 때문이다. 또한 1000 이 곱해진 경우는 상대적으로 함수값이 거의 같다 하더라도 크게 계산되는 평균제곱오차로 인해 과도한 실험점을 필요로 하게 된다. 그러므로 함수를 근사할 때 오차의 개념은 함수의 크기를 고려한 상대오차의 개념에서 접근하는 것이 타당하며 이를 고려할 수 있는 새로운 방법이 요구된다.

3.2 새로운 오차 평가 방법의 제안

앞에서도 언급하였듯이 크리깅 근사모델에서 계산된 평균제곱오차를 크리깅 근사모델의 정확도를 판단하는데 사용하기 위해서는 제기된 문제점이 해결 되어야 한다. 이와 같은 문제를 해결하기 위해 MMSE(Modified Mean Square Error)인 식 (13) 을 제안한다.

$$MMSE(\hat{y}(x)) = \frac{MSE(\hat{y}(x))}{\hat{\sigma}^2} = \left\{ 1 - \begin{bmatrix} \mathbf{f}^T(x) & \mathbf{r}^T(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & F^T \\ F & R \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{f}^T(x) \\ \mathbf{r}^T(x) \end{bmatrix} \right\} \quad (13)$$

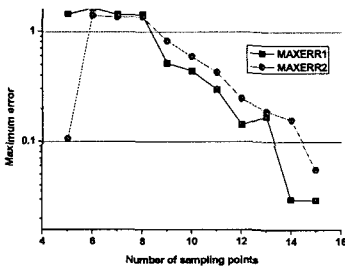
식 (13)은 식 (9)에서  $\hat{\sigma}^2$  으로 평균제곱오차를 나눈 것이다. 식 (6)에서 알 수 있듯이  $\hat{\sigma}^2$  은  $y_s$  의 영향으로 인해 함수의 크기에 따라 값이 크게 달라지게 되며 이런 효과를 없애기 위해 MMSE 와 같이 실제 함수의 크기에 영향을 받지 않는 새로운 오차의 평가 방법을 제안하였다. MMSE 를 이용하여 Table 1 을 다시 구성하면 Table 2 와 같다. Table 2 에서 알 수 있듯이 MMSE 는 모든 문제에 대해 같은 오차를 보이며 이를 통해 상대적인 크기를 고려할 수 있는 지침임을 알 수 있다.

3.3 순차적 실험계획법의 적용

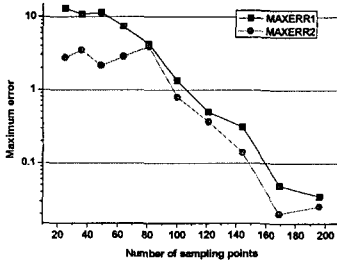
3.1 절의 결과는 실험점의 개수가 증가하면서 크

리깅 모델에서 계산된 오차가 실제의 오차를 어느 정도 반영하고 있다는 것을 보여 준다. 그러나 대부분의 크리깅 근사모델을 구성하는 과정에서 근사모델의 정확성을 가능한 증가시키기 위해 임의적으로 실험점을 추가하는 대신 순차적 실험계획법에 의해 실험점을 추가한다. 다양한 순차적 실험계획법이 있지만 본 논문에서 제안된 MMSE를 계산하기 위해 평균제공오차가 최대한 곳을 찾아야 한다. 이를 고려하여 식 (14)를 만족하는 곳에 실험점을 추가하는 순차적 실험계획법을 적용하여 오차들의 변화를 살펴본다. 각각의 함수에 대해 초기 실험점은 각각 1 차원 문제의 경우 5 개의 등간격으로 배치하고 2 차원 문제의 경우 25 개의 균일격자로 배치한 뒤 순차적 실험계획법을 사용하여 실험점을 증가시켜 가며 최대오차의 변화를 살펴보았다. 그 결과는 Fig. 3 과 같고 순차적 실험계획법을 도입함으로써 좀더 빠르게 최대오차가 감소하는 경향을 확인할 수 있다.

$$\max_{x \in D} \text{MSE}(\hat{y}(x)) \quad (14)$$



(a) Maximum errors for the numerical function



(b) Maximum errors for the Mystery function

Fig. 3 Comparison of Maximum errors in case of applying a sequential sampling method

#### 4. 수치 예제

##### 4.1 개요

수치해석의 목적은 3 장에서 언급된 내용을 좀더 다양한 함수에 대해서 확인하고 평균제공오차를 이용하여 크리깅 근사모델의 수렴 여부를 판단할 수 있는 기준을 제시하는데 있다. 사용하는 예제를 Table 3 에 제시하였으며 함수의 개형은 Fig. 4 와 같다.  $f_2$  를 제외한 함수들은 참고문헌을 참고하였다.<sup>(7,9)</sup> 앞에서 제안된 MMSE 와 순차적 실험계획법을 다양한 문제에 적용하여 실제 오차와의 차이에 대해 평가한다. 이 때 MMSE 는 오차를 제공한 값이며 상대적인 크기를 고려할 수 있게  $\hat{\sigma}^2$  으로 나누었으므로 실제 함수와의 차이를 계산하는 경우도  $\hat{\sigma}$  로 나누어 비교한다. 이를 정리하면 식 (15) 및 (16)과 같다. 즉, 실제 오차는 식 (15)를 사용하며, 크리깅 모델에서 계산된 오차는 식 (16)을 이용하게 된다.

$$\text{MAXERR}_1^* = \max_{x \in D} \frac{1}{\hat{\sigma}} |\hat{y}(x) - y(x)| \quad (15)$$

$$\text{MAXERR}_2^* = \max_{x \in D} \sqrt{\text{MMSE}(\hat{y}(x))} \quad (16)$$

비교를 위해 실험점의 수를 균일하게 증가시키는 경우와 순차적 실험계획법을 사용하는 경우로 나누어 수치실험을 수행하며 실험점의 개수는 3.1 절에서와 마찬가지로 설계변수가 1 개인 경우 5 개부터 시작하고 2 개인 경우 25 개부터 시작한다. 각각의 함수에 대한 최대오차를 실험점의 개수에 따라 Fig. 5 에서 Fig. 8 에 나타내었다.

Table 3 Test functions for numerical examples

Test function	
Numerical function 1	$f_1 = -\sin(x) - \exp(x/100) + 10$ $x \in [0, 10]$
Numerical function 2	$f_2 = x_1^4 + x_2^4$ $x \in [-4, 4]^2$
Haupt function	$f_3 = x_1 \sin(4x_1) + 1.1x_2 \sin(2x_2)$ $[x_1, x_2] \in [0, 4]^2$
Rosenbrock function	$f_4 = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ $[x_1, x_2] \in [-2, 2]^2$

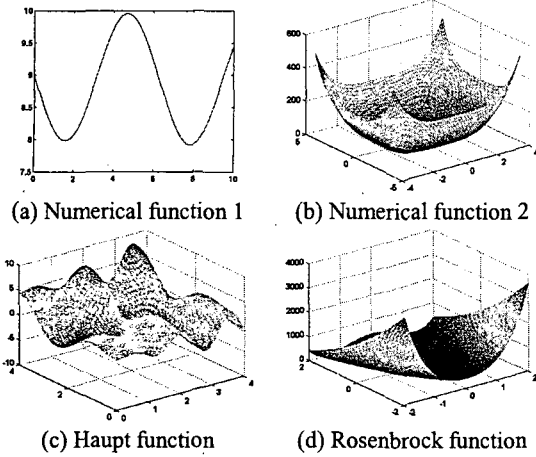
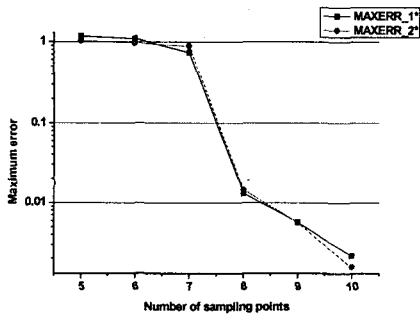
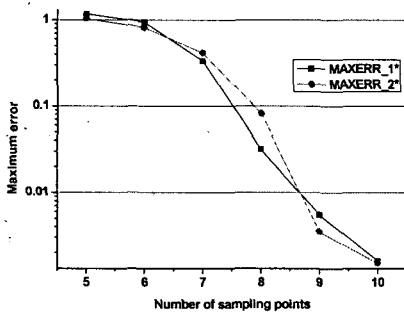


Fig. 4 Plots of test functions



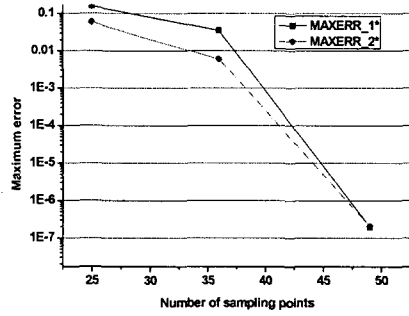
(a) In case of applying no sequential sampling methods



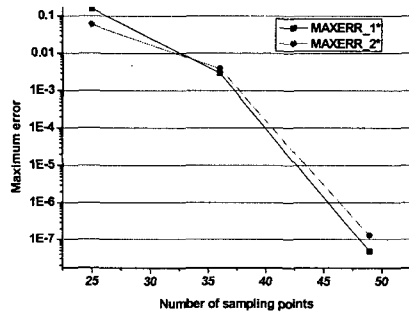
(b) In case of applying a sequential sampling method

Fig. 5 Comparison of Maximum errors for the numerical function 1

Fig. 5는 1 차원 함수에 대한 것으로 실제 오차와 크리깅 모델로부터 계산된 오차는 순차적 실험계획의 적용에 상관없이 잘 일치하는 것을 알 수 있다.



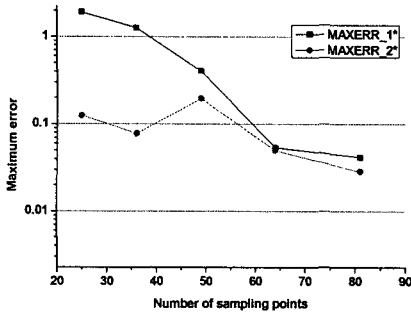
(a) In case of applying no sequential sampling methods



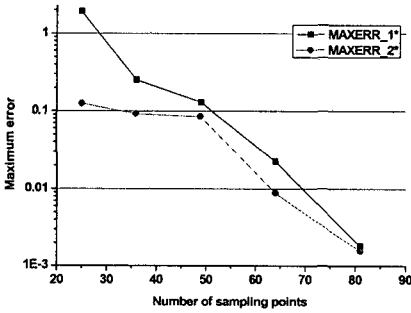
(b) In case of applying a sequential sampling method

Fig. 6 Comparison of Maximum errors for the numerical function 2

Fig. 6은 2 차원 수확함수  $f_2$ 에 대한 것으로 실제 오차와 크리깅 모델로부터 계산된 오차는 순차적 실험계획법의 적용에 상관없이 거의 비슷한 경향을 보이는 것을 알 수 있다. 또한 순차적 실험계획을 적용할 경우 실험점의 수가 증가함에 따라 좀더 낮은 오차를 가지는 것을 알 수 있다. Fig. 7은 Haupt 함수에 대한 것으로 Fig. 6과 비슷한 경향을 보인다. 특히 순차적 실험계획법을 적용한 경우 훨씬 더 좋은 수렴특성을 보이며 두 오차도 더 비슷한 경향을 보이는 것을 알 수 있다. Fig. 8은 Rosenbrock 함수에 대한 것으로 이전과 마찬가지로 순차적 실험계획법을 적용한 경우가 수렴이 훨씬 빠르며 두 오차 사이의 경향도 실험점의 개수가 증가함에 따라 더 유사한 것을 알 수 있다. 특히 모든 수치예제에 대해 함수의 크기가 다름에도 불구하고 거의 비슷한 수준의 오차를 주는 것은 본 논문에서 제안된 방법이 함수의 크기에 상관없이 적용할 수 있다는 것을 보여준다.



(a) In case of applying no sequential sampling methods



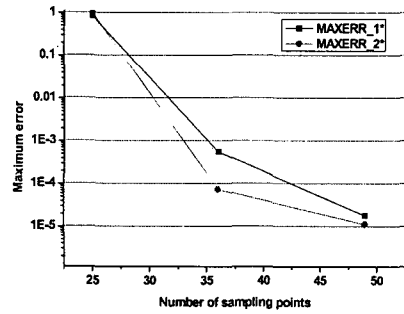
(b) In case of applying a sequential sampling method

Fig. 7 Comparison of Maximum errors for the Haupt function

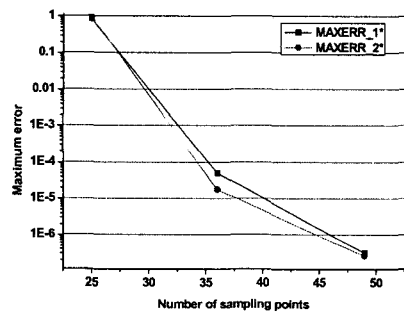
순차적 실험계획법의 사용 유무에 따른 오차평가의 정확성을 좀더 정량적으로 비교하기 위해 식 (17)을 이용하여 실제 최대오차와 크리깅 모델에서 계산된 최대오차의 차이를 평가한다. 이때 계산에 포함되는 실험점은 충분히 수렴이 된 상태만을 포함한다. 이를 위해 실험점의 개수가 가장 많은 것을 기준으로 2 개의 실험점을 내림차순으로 포함시켰다. 이 경우 대부분 실제 최대오차 및 크리깅 모델에서 계산된 최대오차 모두 0.1 보다 작게 된다. 이와 같이 한 이유는 충분히 수렴된 값을 이용하지 않을 경우 평균제곱근오차는 실험점이 적을 경우 발생하는 큰 오차에 의해 좌우될 것이기 때문이다.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (MAXERR_{1i}^* - MAXERR_{2i}^*)^2} \quad (17)$$

이 식을 바탕으로 계산된 평균제곱근오차의 값을 Table 4 에 나타내었다. 이 표에서 3 번째 열은 등간격 또는 균일 격자로 실험점을 배치한 경우이고 4 번째 열은 순차적 실험계획법을 적용한 경우이다.



(a) In case of applying no sequential sampling methods



(b) In case of applying a sequential sampling method

Fig. 8 Comparison of Maximum errors for the Rosenbrock function

Table 4 RMSE between grid and sequential sampling

	$n$	Basic sampling	Sequential sampling
Numerical function 1	$n = 2$	$4.313 \times 10^{-4}$	$1.416 \times 10^{-3}$
Numerical function 2	$n = 2$	$2.058 \times 10^{-2}$	$7.041 \times 10^{-4}$
Haupt function	$n = 2$	$9.645 \times 10^{-3}$	$9.769 \times 10^{-3}$
Rosenbrock function	$n = 2$	$3.392 \times 10^{-4}$	$2.257 \times 10^{-5}$

이 표로부터 최대오차가 0.1 보다 작은 경우 실제 최대오차와 크리깅 모델에서 계산된 최대오차는 순차적 실험계획의 적용여부에 상관없이 잘 일치하고 있는 것을 알 수 있다.

#### 4.2 결과에 대한 고찰

4 종류의 함수에 대해 수치실험을 수행한 결과 전반적으로 실험점의 개수가 증가하면서 두 최대오차 사이의 경향이 비슷해 지는 것을 확인할 수 있었다. 특히 순차적 실험계획법을 적용할 경우

수렴속도가 향상되는 것을 확인하였다. 또한 제안된 MMSE 는 함수의 크기에 상관없이 균일한 오차를 제공하므로 수렴상수를 설정하는데 적절하다고 할 수 있다.

이와 같은 결과를 바탕으로 크리깅 모델에서 계산된 오차는 순차적 실험계획법과 함께 사용할 경우 실제 오차를 예측하는데 충분히 이용될 수 있는 것을 알 수 있다. 물론 이론적으로 수렴이 확실히 보장되는 것은 아니지만 수렴상수를 적절히 설정함으로써 크리깅 모델의 근사의 정확도를 설계자가 결정할 수 있다. 이에 대한 한가지 예로 여기에서 사용된 모든 예제들에 대해 크리깅 모델로부터 계산된 최대오차가 0.1 보다 작을 경우 실제 최대오차와 크리깅 모델로부터 계산된 최대오차는 비슷한 경향을 보인다. 만약 정확한 근사가 요구되는 함수의 경우 수렴상수를 0.01 정도로 낮게 설정한다면 실제오차도 이 정도의 수준을 유지할 것으로 예상된다. 이 경우 사용된 수치예제에 대해 대응하는 샘플링의 개수는 Haupt 함수의 경우 70 개 정도이며 Rosenbrock 함수의 경우 30 개 정도이다. 만약 근사의 정확도가 크게 요구되지 않는 경우라면 좀 더 큰 수렴상수를 사용할 수 있을 것이고 이에 따라 사용되는 실험점의 개수를 조절할 수 있을 것이다.

## 5. 결 론

본 논문에서는 크리깅 근사모델과 관련하여 근사된 모델의 정확도를 평가하기 위해 크리깅 모델에서 계산된 평균제곱오차를 사용하였다. 일반적으로 알려져 있듯이 크리깅 근사모델에 얻어진 평균제곱오차는 통계적으로 정확한 값을 예측할 수는 없지만 순차적 실험계획법, 특히 평균제곱오차가 최대인 곳에 실험점을 추가하는 방법을 적용할 경우 근사의 수렴속도가 훨씬 향상되는 것을 확인하였다. 또한 함수의 크기에 영향을 받지 않는 새로운 오차평가 방법인 MMSE 를 제안함으로써 함수의 크기에 상관없이 균일한 최대오차를 얻을 수 있는 것을 확인하였다. 뿐만 아니라 순차적 실험계획법을 위해 계산된 최대 평균제곱오차를 그대로 수렴평가에 사용할 수 있으므로 교차검증 방법과 같이 추가적인 비용이 들지 않는 장점도 있다.

그러나 적절한 수렴 상수를 결정하는 것에는 좀더 많은 연구가 필요할 것으로 생각되며 본 연구에서 제안하는 수렴상수는 근사의 정밀도가 크

게 요구되는 경우 0.01, 근사의 정밀도가 낮아도 되는 경우 0.05 이다. 이는 설계자의 관점에 따라 달라질 수 있으며 수렴 상수를 낮게 설정할수록 좀 더 정확한 근사가 가능하겠지만 그에 따라 실험점의 수가 증가하게 되므로 적절한 조절이 요구된다.

## 후 기

이 연구는 자동차부품연구원의 연구 과제인 '신뢰성 확률해석 기법의 효율성 및 적용성 향상을 위한 연구'의 지원으로 수행되었습니다.

## 참고문헌

- (1) Jin, R., Chen, W. and Simpson, T. W., 2001, "Comparative Studies of Metamodeling Techniques Under Multiple Modeling Criteria," *Struct Multidisc Optim*, Vol. 23, pp. 1~13.
- (2) 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.
- (3) Currin, C., Mitchell, T., Morris, M. and Ylvisaker, D., 1991, "Bayesian Prediction of Deterministic Functions, with Applications to the Design and Analysis of Computer Experiments," *Journal of the American Statistical Association*, Vol. 86, pp. 953~963.
- (4) Welch, W. J. and Sacks, J., 1991, "A System for Quality Improvement via Computer Experiments," *Commun. Statist.-theory meth.*, Vol. 20, pp. 477~495.
- (5) Meckesheimer, M., Booker, A. J., Barton, R. R. and Simpson, T. W., 2002, "Computationally Inexpensive Metamodel Assessment Strategies," *AIAA*, Vol. 40, No. 10, pp. 2053~2060.
- (6) Etman, L. F. P., 1994, *Design and analysis of computer experiments: The method of Sacks et al*, Engineering Mechanics report WFW 94.098, Eindhoven University of Technology
- (7) Lee., T. H., Jung., J. J., Hwang, I. K. and Lee, C. S., 2004, "Sensitivity Approach of Sequential Sampling for Kriging model," *Trans. of KSME*, Vol. 28, No. 11, pp. 1769~1767
- (8) Martin, J. D. and Simpson, T. W., 2003, "A Study on the Use of Kriging Models to Approximate Deterministic Computer Models," *Proceedings of DETC'03 ASME 2003 Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*, DETC2003/DAC-48762
- (9) Sasena, M. J., Papalambros, P., and Goovaerts, P., 2002, "Exploration of Metamodeling Sampling Criteria for Constrained Global Optimization," *Eng. Opt.*, Vol. 34, pp. 263~278.