대한기계학회논문집 A권, 제34권 제5호, pp. 541~547, 2010

< 학술논문 >
DOI:10.3795/KSME-A.2010.34.5.541

순차적 크리깅모델의 평균-분산 정확도 검증기법

이 태 희*†· 김 호 성*
* 한양대학교 기계공학부

Mean-Variance-Validation Technique for Sequential Kriging Metamodels

Tae Hee Lee*† and Hosung Kim*
* School of Mechanical Engineering, Hanyang Univ.

(Received August 19, 2009 ; Revised February 24, 2010 ; Accepted March 18, 2010)

Key Words : Accuracy(정확도), Kriging Metamodel(크리깅모델), Metamodel Validation(메타모델검증), Cross Validation(교차검증)

초록: 메타모델의 정확도를 엄밀하게 검증하는 것은 메타모델링에서 중요한 연구주제이다. k 점 선택교차검증기법이 많은 계산시간을 요구하면서도 메타모델의 정확도를 정략적으로 측정하지 못한다. 최근들어, 평균 $_0$ 기준이 메타모델의 정확도를 정량적으로 제공하기 위하여 제안되었다. 그러나 평균 $_0$ 검증 기준은 크리깅 메타모델이 부정확함에도 불구하고 일찍 수렴하는 경향이 있다. 따라서 본 연구에서는 최대엔트로피를 이용한 순차적 실험계획에서 크리깅모델의 평균과 분산을 이용한 정확도 평가기법을 제안한다. 이 제안한 기법은 평균 및 분산을 계산할 때 수치해석으로 구하는 것이 아니라 크리깅메타모델을 직접 적분하여 구하기 때문에 k 점 선택교차검증기법보다 효율적이며 정확하다. 제안한 기준은 실제 응답의 평균제곱오차의 경향과 매우 유사하여 순차적 실험계획의 수렴기준으로 사용할 수 있다.

Abstract: The rigorous validation of the accuracy of metamodels is an important topic in research on metamodel techniques. Although a leave-*k*-out cross-validation technique involves a considerably high computational cost, it cannot be used to measure the fidelity of metamodels. Recently, the mean$_0$ validation technique has been proposed to quantitatively determine the accuracy of metamodels. However, the use of mean$_0$ validation criterion may lead to premature termination of a sampling process even if the kriging model is inaccurate. In this study, we propose a new validation technique based on the mean and variance of the response evaluated when sequential sampling method, such as maximum entropy sampling, is used. The proposed validation technique is more efficient and accurate than the leave-*k*-out cross-validation technique, because instead of performing numerical integration, the kriging model is explicitly integrated to accurately evaluate the mean and variance of the response evaluated. The error in the proposed validation technique resembles a root mean squared error, thus it can be used to determine a stop criterion for sequential sampling of metamodels.

- 기호설명 -

$\hat{y}(\mathbf{x})$: 근사 모델
$y(\mathbf{x})$: 실제 모델

1. 서 론

시뮬레이션모델은 실제 모델의 물리적 현상을 수식으로 근사화한 모델로서, 현재 최적설계분야에 폭넓게 활용 되고 있다. 그러나 컴퓨터 성능의 지속적인 발전에도 불구하고 충격해석 모델이나 열유동해석 모델의 경우, 오랜 해석시간으로 인하여 전통적인 최적설계기법을 적용하는 것이 비효율적일 수 있다. 왜냐하면 전통적인 최적설계기법에서는 반복적인 해석이 필요하기 때문이다. 이런 문제를 해결하기 위해서 '시뮬레이션모델의 근사모델'인 메타모델(metamodel)을 최적설계과정에 활용하기 위한 연구가 활발히 진행되고 있다. 메타모델은 시뮬레이션 모델을 근사화한 수학식으로 표현한 모델이다. 메타모델과 관련된 연구는 크게 실험계획법(sampling strategy), 메타모델링 기법(metamodeling strategy), 그리고 정확도

† Corresponding Author, thlee@hanyang.ac.kr

평가기법(validation technique) 등의 세 가지 연구분야로 나뉜다.[1]

메타모델의 정확도를 평가하는 평가기법에 대한 연구는 메타모델 기반 최적설계의 정확성을 보장하기 위해 필요하다. 메타모델은 크게 회귀모델과 보간모델로 나뉜다. 회귀모델은 분산분석을 이용하여 정확도를 평가하지만, 보간모델은 분산분석을 통해 정확도를 평가할 수가 없다. 공학분야에 많이 알려진 보간모델인 크리깅모델의 검증기법으로는 교차검증법 (cross validation)이 주로 사용되고 있다.[2] 그러나 이 방법은 교차검증오차를 계산하기 위해 여러 번 모델을 생성하는 것이 요구되는 단점이 있다. 더욱이 교차검증법은 정량적으로 크리깅모델의 정확성을 나타내주지 못한다. 이러한 단점을 보완하기 위해서 최근에 크리깅모델의 평균을 이용한 정확도 평가기법이 제안되었다.[3] 하지만 이 방법도 다양한 예제에 적용해본 결과 조기에 수렴하는 문제점이 발견되었다.

본 연구에서는 기존 평가기법의 정확하지 못할 뿐만 아니라 시간이 오래 걸리는 문제점을 개선하기 위해서 크리깅모델의 평균과 분산을 순차적 크리깅모델의 정확도 평가기법으로 제안한다. 크리깅모델이 정확해지면 크리깅모델의 평균과 분산이 실제모델의 평균과 분산에 수렴하게 될 것이다. 본 연구에서 사용한 순차적 실험계획법은 최대엔트로피 샘플링방법이다. 순차적으로 실험점을 하나씩 추가해 가면서 메타모델 검증 수학함수에 적용하여 기존의 평가방법과 비교한다.

2. 크리깅모델

크리깅모델에서 실제 응답함수는 평균에 해당하는 전역모델 $\mathbf{f}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$ 와 이것으로부터의 편차(deviation)를 나타낸 $\mathbf{z}(\mathbf{x})$ 의 합으로 가정하고 예측응답을 식 (1)과 같이 정의한다.[4]

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

식(1)에서 크리깅모델의 전역모델은 일반화된 최소제곱법(generalized least squared method)에 의해 추정한다. 이때, $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 는 회귀모델을 구성하는 함수이고 $\boldsymbol{\beta}$ 는 추정된 회귀모델의 계수이다. $\mathbf{z}(\mathbf{x})$ 는 편차를 나타내는 것으로, 평균이 0 이고 공분산이 아래와 같은 식 (2)로 표현한다.

$$Cov[\mathbf{z}(\mathbf{x}^i), \mathbf{z}(\mathbf{x}^j)] = \sigma^2 \mathbf{R}(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j, \boldsymbol{\theta}) \tag{2}$$

여기서 $\mathbf{z}(\mathbf{x})$ 의 공분산은 σ^2 과 상관행렬 $\mathbf{R}(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j, \boldsymbol{\theta})$ 의 곱으로 나타낼 수 있다.

상관행렬을 구성하는 상관함수 $\mathbf{R}(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j, \boldsymbol{\theta})$ 는 다음과 같이 가우시안 상관관계로 정의한다.[4]

$$\mathbf{R}(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j, \theta) = \exp[-\sum_{k=1}^{n_d} \theta_k \left|\mathbf{x}^i - \mathbf{x}^j\right|^2] \tag{3}$$

여기서 n_d 는 설계변수의 개수, $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \cdots, \theta_{n_d}]^{\mathrm{T}}$ 는 상관인자(correlation parameter)이다. 한편, 식 (1)의 크리깅모델은 다음과 같이 유도된다.

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\gamma}^* \tag{4}$$

여기서 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{F}^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y}$, $\boldsymbol{\gamma}^* = \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}})$ 로 표현된다. $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 는 예측점과 실험점들간의 상관관계를 나타내는 상관벡터로 식 (3)를 이용하여 나타내면 아래와 같다.

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}) = [\mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{x}^1), \mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{x}^2), \cdots, \mathbf{R}(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n)]^{\mathrm{T}} \tag{5}$$

크리깅모델이 구해지는 과정에서 평균제곱근오차(Mean Squared Error: MSE)는 다음과 같은 식으로 표현된다.

$$\mathrm{MSE} = \sigma^2\left(1 - [\mathbf{f}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \quad \mathbf{r}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}]\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \mathbf{F}^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{F} & \mathbf{R}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{r}(\mathbf{x})\end{bmatrix}\right) \tag{6}$$

3. 기존의 정확도 평가기법

3.1 추가실험이 필요한 정확도 평가기법

추가실험이 필요한 정확도 평가기법은 추가실험점을 선택하여 크리깅모델의 예측값과 시뮬레이션 결과를 통해 구한 참값과의 차이를 비교해서 오차를 평가하는 방법이다. 이러한 방법에는 평균제곱근오차(root mean squared error: RMS), 최대오차(maximum error: MAX), 평균오차(average error: AV) 그리고 결정계수(R^2)가 있다. 이때, 결정계수는 반응표면모델에서 쓰는 방법과 달리 크리깅모델에서 사용할 수 있는 방법이며, 크리깅모델이 많이 부정확한 경우 음수의 값이 나올 수 있다.

$$E_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{n_y}\sum_{i=1}^{n_y}(y_i - \hat{y}_i)^2}, \ i = 1, \cdots, n_y \tag{7}$$

$$E_{MAX} = \max\left|y_i - \hat{y}_i\right|, \ i = 1, \cdots, n_y \tag{8}$$

$$E_{AV} = \frac{1}{n_y}\sum_{i=1}^{n_y}\left|y_i - \hat{y}_i\right|, \ i = 1, \cdots, n_y \tag{9}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\frac{1}{n_y}\sum_{i=1}^{n_y}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} - \frac{\left(\sum_{i=1}^{n_y} y_i\right)}{n_y}} \tag{10}$$

평균제곱근오차, 평균오차, 결정계수 등은 설계영역 전체에서 크리깅모델의 정확도를 평가하기 위해 사용되는 방법이다. 반면에 최대오차는 크리깅모델의 국부적인 변화의 크기를 평가하는 기준이다. 평균제곱근오차, 평균오차, 최대오차는 0 으로 갈수록 크리깅모델이 정확하다는 것을 나타내며, 결정계수인 경우에는 1 에 가까울수록 메타모델이 정확하다는 것을 나타낸다.

이러한 평가기법은 보간모델의 정확도 평가기법으로 사용될 수는 있지만, 정확한 평가를 위해서 상당히 많은 추가실험점의 해석결과를 요구한다. 이것은 실제 해석시간이 오래 걸리는 공학 문제에 쓰기에는 수치적 부담이 큰 방법이다.

3.2 추가실험이 필요 없는 검증법

3.2.1 k 점선택교차법

현실적으로 적용이 가능한 검증기법이 요구됨에 따라서 k 점선택교차법이라는 정확도 평가기법이 제안되었다.[5] 교차법은 크리깅모델을 구성하기 위해 선택된 전체 실험점의 개수 m 을 크리깅 모델을 구성하기 위한 n_c 와 크리깅 모델의 오차를 평가하기 위한 검증점 n_v 로 나누고 실험점 n_c 를 이용하여 크리깅모델을 구성한 후 검증점 n_v 에 대하여 오차를 평가하는 방법이다. 이때, 오차를 평가하기 위한 검증점 n_v 의 개수는 k 와 같은 값이며 오차를 평가하기 위해 전체 실험점에서 k 점만큼 선택해야 하기 때문에 k 점선택교차법이라 한다. 이 중 많이 쓰이고 있는 1 점선택교차법의 식은 다음과 같다.

$$CV = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{Y}_{-i}(\mathbf{x}_i) - Y(\mathbf{x}_i))^2} \tag{11}$$

여기서 $Y(\mathbf{x}_i)$ 는 i 번째 실험점에서의 실제 응답값을 의미하고, $\hat{Y}_{-i}(\mathbf{x}_i)$ 는 i 번째 실험점만 제외하고 모델을 구성하여 구한 예측값이다.

이 방법의 가장 큰 장점은 검증을 위한 별도의 실험점을 선택하지 않고 이미 구한 실험점 중에서 일부를 이용하여 크리깅 모델의 정확도를 측정할 수 있다는 것이다. 그러나 k 를 어떻게 정하느냐에 따라 $m!/(k!(m-k)!)$ 만큼 다양한 조합의 수가 존재하며 k 의 선택이 커질수록 정확도 검증을 위한 계산비용은 현저하게 증가한다. 또한 근사화가 정확하게 된 모델임에도 불구하고 값이 수렴하지 못해서 부정확한 모델로 평가될 수 있다는 단점이 있다.

3.2.2 평균법

크리깅모델의 평균을 수치적인 적분이 아닌 정확한 적분을 통해 구한 다음, 순차적으로 실험점을 추가해 가면서 평균의 변화율이 일정한 값 이내로 들어오면 수렴한다고 판단하는 방법이다.[6] 이때 크리깅모델의 전역모델은 상수로 하면, 식은 다음과 같이 표현이 된다.

$$\begin{aligned} MEAN_0 &= \int_{l_D}^{u_D}\cdots\int_{l_1}^{u_1}\hat{Y}(\mathbf{x})\prod_{k=1}^{D}\frac{1}{u_k-l_k}dx_1\cdots dx_D \\ &= \hat{\beta} + \mathbf{J}_u^T\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}-\mathbf{F}\hat{\beta}) \end{aligned} \tag{12}$$

여기서

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_u &= \int_{l_D}^{u_D}\cdots\int_{l_1}^{u_1}\mathbf{r}(\mathbf{x})\prod_{k=1}^{D}\frac{1}{u_k-l_k}dx_1\cdots dx_D \\ &= \int_{l_D}^{u_D}\cdots\int_{l_1}^{u_1}[\prod_{k=1}^{D}\frac{e^{-\theta_k(x_k-s_k^1)^2}}{u_k-l_k},\cdots,\prod_{k=1}^{D}\frac{e^{-\theta_k(x_k-s_k^n)^2}}{u_k-l_k}]^T dx_1\cdots dx_D \end{aligned} \tag{13}$$

여기서 l_k 와 u_k 는 각각 크리깅모델의 하계와 상계를 나타낸다. 크리깅모델의 평균은 크리깅모델이 정확해짐에 따라서 실제 모델의 평균에 수렴하게 된다. 또한 이 방법은 k 점선택교차법에 비해서 계산시간이 적게 드는 장점이 있다. 하지만 크리깅모델이 정확해지기 전에 조기 수렴하는 문제점이 발견 되었다.

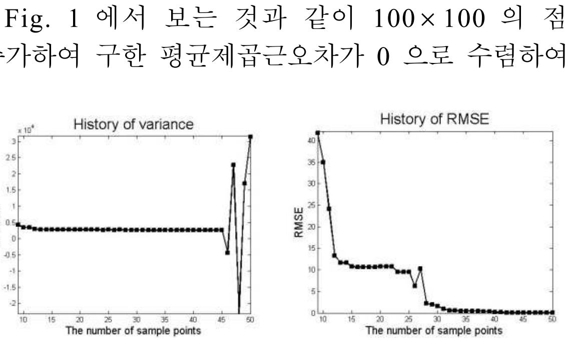
4. 평균과 분산을 이용한 평가법

4.1 평균과 분산

기존에 제안된 크리깅모델의 평가기법의 문제점은 효율적이지 못하거나 조기에 수렴하는 문제가 있다. 이러한 문제점을 극복하기 위해서 본 연구에서는 크리깅모델의 평균과 분산을 이용하여 정확도를 평가할 것을 제안한다.

처음에는 크리깅모델의 전역모델을 상수로 하여서 분산을 구해보았다. 수학예제에 대하여 분산을 구해보던 중에 크리깅모델이 정확해졌음에도 불구하고 상관행렬의 행렬식이 0 에 접근함에 따라서 분산을 계산하는 과정에서 수치적인 발산하였다.

Fig. 1 에서 보는 것과 같이 100×100 의 점을 추가하여 구한 평균제곱근오차가 0 으로 수렴하여서



(a) Variance (b) RMSE

Fig. 1 History plots of variance and RMSE

크리깅모델이 정확해졌음에도 불구하고 분산의 값이 수치적인 문제로 수렴하지 못하는 문제가 발생하였다.

본 연구에서는 수치적으로 강건하게 하기 위해서 크리깅모델의 전역모델을 2 차로 하여 평균과 분산을 쓸 것을 제안한다. 평균은 평균법의 경우와 같은 방법으로 수치적인 적분이 아닌 정확한 적분을 통해 구하며, 식은 다음과 같다.

$$
\begin{aligned}
\int \hat{y}(\mathbf{x})d\mathbf{x} &= \int\left(\mathbf{f}(\mathbf{x})^T\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}(\mathbf{x})^T\boldsymbol{\gamma}^*\right)d\mathbf{x} \\
&= \int_{x_{n_d}^L}^{x_{n_d}^U}\cdots\int_{x_1^L}^{x_1^U}\left[1 \quad x_1 \quad \cdots \quad x_n \quad x_1^2 \quad \cdots \quad x_n^2\right]\hat{\boldsymbol{\beta}}\,dx_1\cdots dx_{n_d} \\
&\quad + (\gamma_1^* + \gamma_2^* + \cdots + \gamma_{n_d}^*)\int_{x_1^L}^{x_1^U} r(\mathrm{x}_1)^T dx_1 \cdots \int_{x_{n_d}^L}^{x_{n_d}^U} r(\mathrm{x}_{n_d})^T dx_{n_d} \\
&= \left(\hat{\beta}_1\prod_{i=1}^{n_d}\left(x_i^U - x_i^L\right) + \cdots + \hat{\beta}_g\frac{1}{3}\left(x_{n_d}^{U^3} - x_{n_d}^{L^3}\right)\prod_{i=1}^{n_d-1}\left(x_i^U - x_i^L\right)\right) \\
&\quad + \sum_{i=1}^{m}\gamma\prod_{j=1}^{n_d}\int_{x_j^L}^{x_j^U} e^{-\theta\left(x_j - S_j^i\right)^2}dx_j
\end{aligned}
\tag{14}
$$

여기서 크리깅모델의 전역모델은 2 차모델로 선택하였고, m 은 실험점 개수, n_d 은 설계변수의 차원, 그리고 $g = (n_d + 1)(n_d + 2)/2$ 이다. 이 적분된 값을 설계영역 공간으로 나누면 평균이 된다.

$$
MEAN_2 = \frac{\int \hat{y}(\mathbf{x})d\mathbf{x}}{\prod_{i=1}^{n_d}\left(x_i^U - x_i^L\right)}
\tag{15}
$$

분산을 구하기 위해서 다음과 같이 적분한다.

$$
\begin{aligned}
\int \hat{y}(\mathbf{x})^2 d\mathbf{x} &= \int\left(\mathbf{f}(\mathbf{x})^T\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}(\mathbf{x})^T\boldsymbol{\gamma}^*\right)^2 d\mathbf{x} \\
&= \int\left(\left(\mathbf{f}(\mathbf{x})^T\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)^2 + 2\hat{\boldsymbol{\beta}}^T\mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{r}(\mathbf{x})^T\boldsymbol{\gamma}^* + \left(\mathbf{r}(\mathbf{x})^T\boldsymbol{\gamma}^*\right)^2\right)d\mathbf{x} \\
&= \sum_{i=1}^{g}\hat{\beta}_i\left(\hat{\beta}_1\prod_{i=1}^{n_d}\left(x_i^U - x_i^L\right) + \cdots + \hat{\beta}_g\frac{1}{4}\left(x_{n_d}^{U^4} - x_{n_d}^{L^4}\right)\prod_{i=1}^{n_d-1}\left(x_i^U - x_i^L\right)\right) \\
&\quad + 2\sum_{i=1}^{m}\gamma_i\sum_{j=1}^{g}\hat{\beta}_j\int_{x_j^L}^{x_j^U} f\left(x_j\right)e^{-\theta_j\left(x_j - S_i\right)^2}dx_j \\
&\quad + \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\gamma_i\gamma_j\prod_{l=1}^{n_d}\int_{x_l^L}^{x_l^U} e^{-\theta_l\left(x_l - S_i\right)^2}e^{-\theta_l\left(x_l - S_i\right)^2}dx_l
\end{aligned}
\tag{16}
$$

여기서 기호들은 위의 평균에서와 동일하다. 이 적분된 식을 설계영역 공간으로 나눈 후, 평균의 제곱을 빼주면 분산이 된다.

$$
VAR = \frac{\int \hat{y}(\mathbf{x})^2 d\mathbf{x}}{\prod_{i=1}^{n_d}\left(x_i^U - x_i^L\right)} - MEAN_2^2
\tag{17}
$$

4.2 수렴기준

식 (13) 및 (15)로부터 구한 평균과 분산은 크리깅모델이 정확해짐에 따라서 실제모델의 평균과 분산의 값으로 수렴을 하게 된다. 그렇지만 공학문제에서 실제모델의 평균과 분산을 알 수가 없다. 그러므로 순차적 크리깅모델에 대하여 다음과 같이 평균과 분산의 변화율을 이용한 수렴기준을 제안한다.

$$
\begin{aligned}
MV_2 &= \left|\frac{MEAN_{2\mathrm{i}\text{-}1} - MEAN_{2i}}{MEAN_{2i}}\right| \times 100 \\
VV &= \left|\frac{VAR_{\mathrm{i}\text{-}1} - VAR_i}{VAR_i}\right| \times 100
\end{aligned}
\tag{18}
$$

여기서 $MEAN_{2i}, VAR_i$ 는 i 번째 실험점에서의 평균과 분산이고, $MEAN_{2i-1}, VAR_{i-1}$ 는 $i-1$ 번째 실험점에서의 평균과 분산이다. 정의된 두 값이 일정한 값 이하로 3 회 연속 나오면 수렴한다고 가정하고 여러 2 차원 수학예제에 적용하였다. 이 논문에서는 여러 수학예제에 대하여 0.1 을 기준으로 수렴여부를 판단한 결과, 수렴했을 때 크리깅모델의 100×100 의 점을 추가하여 구한 R^2 의 값이 비선형이 강한 수학예제의 경우에서도 0.969 이상 나오는 결과를 보였다. 그러므로 이 논문에서는 0.1 을 기준으로 수렴을 판단하였다.

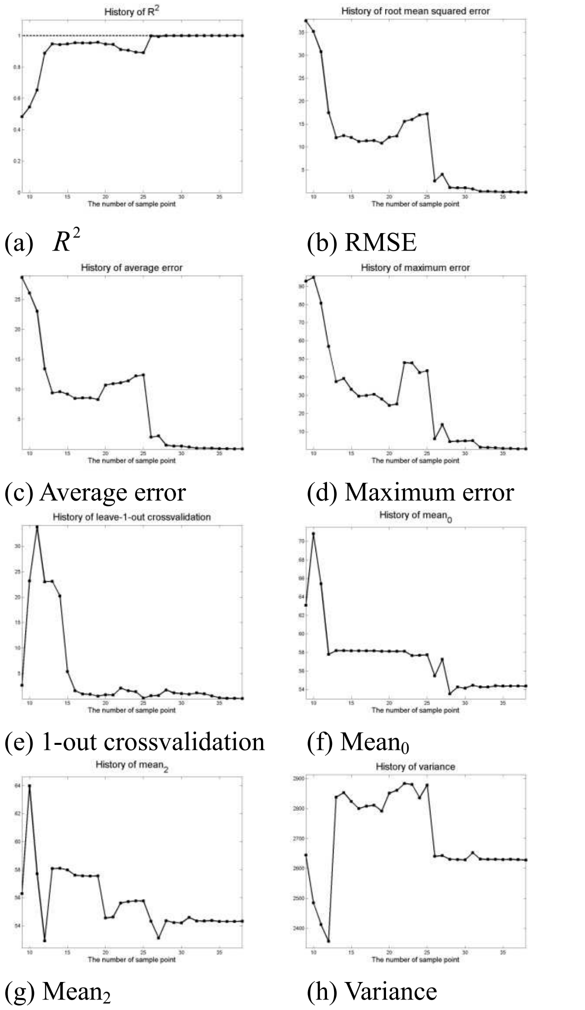
5. 예 제

제안한 방법의 우수성을 살펴보기 위해서 2 차원 비선형 수학함수에 대하여 3 수준 전조합실시법을 이용한 9 개의 초기 실험점들을 구성하였다. 그리고 순차적으로 최대엔트로피 샘플링방법을 사용하여 추가 실험점을 선택하고, 그 점에서의 응답값을 구해서 크리깅모델을 순차적으로 구성하였다. 제안한 기법과 기존의 평가방법인 평균제곱근오차, 평균오차, 최대오차, R^2 , 1 점선택교차법, 그리고 평균법과 비교해보았다. 이때 추가 실험점이 필요한 평가기법인 경우 모두 100×100 의 점을 추가하여 구하였다. 모든 수렴이력의 x 축은 실험점 갯수를 나타낸다.

5.1 Branin 함수

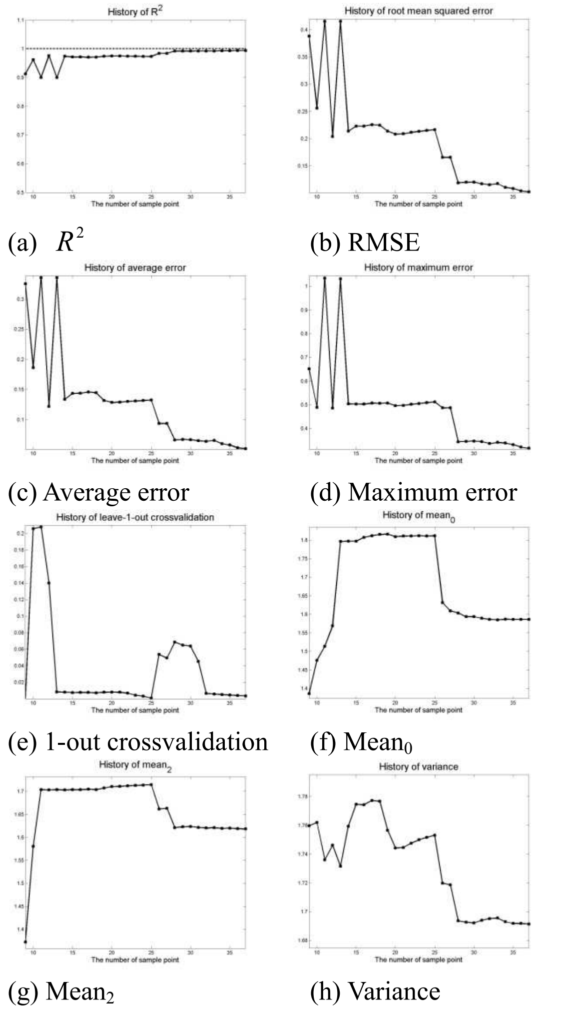
Branin 함수는 3 개의 전역최적점을 갖고 있는 함수로 비선형성이 큰 함수이며 식 (19)로 표현된다.

$$
\begin{aligned}
f(x) &= (x_2 - 5.1(x_1/2\pi)^2 + 5x_1/\pi - 6)^2 \\
&\quad + 10(1 - 1/8\pi)\cos x_1 + 10 \\
&x_1 \in [-5,10], \quad x_2 \in [0,15]
\end{aligned}
\tag{19}
$$



(a) R^2 (b) RMSE
(c) Average error (d) Maximum error
(e) 1-out crossvalidation (f) Mean_0
(g) Mean_2 (h) Variance

Fig. 2 Convergence histories of validation criteria for Branin function



(a) R^2 (b) RMSE
(c) Average error (d) Maximum error
(e) 1-out crossvalidation (f) Mean_0
(g) Mean_2 (h) Variance

Fig. 3 Convergence histories of validation criteria for three hump camel back function

순차적으로 실험을 하면서 제안된 수렴기준으로 순차적 크리깅모델의 수렴여부를 판단한 결과 실험점 38 개에서 수렴하는 것으로 나타났으며, Fig. 2 는 수렴이력을 보여준다. 이 경우, 기존에 제안된 평균법만 갖고 수렴여부를 판단하면, 실험점 16 개에서 수렴하는 것으로 판단이 되어서, 조기에 수렴하는 것으로 나타난다. 왜냐하면 실험점 16 개에서의 크리깅모델은 아직 부정확하기 때문이다.

또한 1 점선택교차법을 이용하여 수렴여부를 판단하면, 모델이 충분히 정확해졌음에도 불구하고 값이 계속 변화하고 있어서 수렴여부를 판단할 수가 없다. 그렇지만, 제안된 모델의 2 차 반응표면모델은 R^2 이 0.999 이상이다. 또한 실험점을 추가하여 구한 오차검증기법들의 변화경향성과 비교를 하여보면, 제안된 분산의 경우가 다른 방법에 비해서 경향성을 잘 표현해주고 있다. 그러므로 Branin 함수에 대해서 모델의 변화를 잘 표현해주며, 수렴여부 또한 정확하게 판단하게 해주는 방법은 제안된 평균과 분산을 통한 검증기법이다.

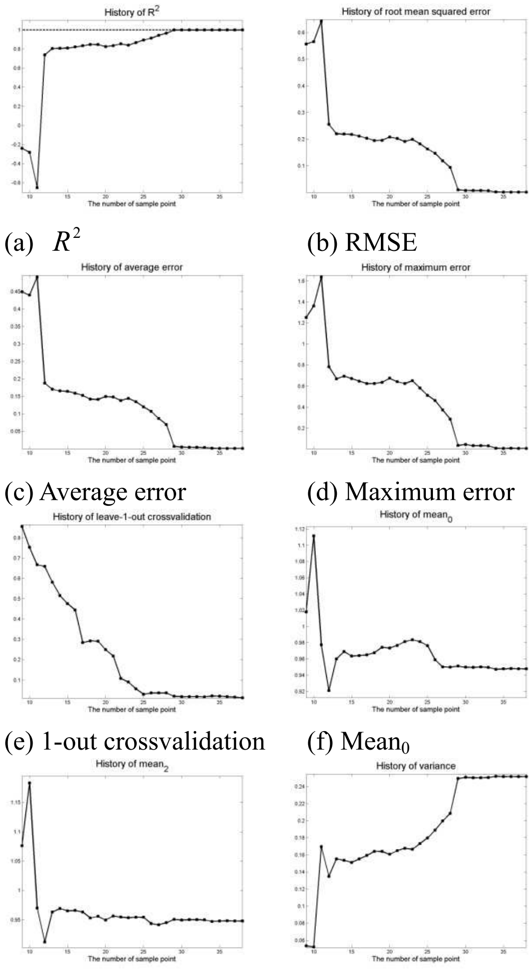
5.2 Three hump camel back 함수

Three hump camel back 함수의 특징은 1 개의 전역최적점과 2 개의 국부최적점을 갖고 있으며, 3 개의 웨이브를 갖고 있다.

$$Y = 2x_1^2 - 1.05x_1^4 + x_1^6/6 - x_1x_2 + x_2^2$$
$$x_1 \in [-2,2],\quad x_2 \in [-1.5,1.5] \tag{20}$$

순차적으로 실험을 하면서 제안된 수렴기준으로 수렴여부를 판단한 결과 실험점 37 개에서 수렴하는 것으로 나타났으며, Fig. 3 은 수렴이력을 보여준다.

이 경우, 기존에 제안된 평균법만 갖고 수렴여부를 판단하면, 실험점 25 개에서 수렴하는 것으로 나타난다. 또한 1 점선택교차법을 이용하여 수렴여부를 판단하면, 실험점 25 개에서 가장 작은 값을 가졌다가 커지며, 33 개부터 37 개에서는 값이



(a) R^2 (b) RMSE
(c) Average error (d) Maximum error
(e) 1-out crossvalidation (f) Mean_0
(g) Mean_2 (h) Variance

Fig. 4 Convergence histories of validation criteria for Griewangk function

25 개에서의 값보다 크며, 값도 지속적으로 작아지고 있다. 따라서 1 점선택법으로는 이 함수에서의 수렴여부를 판단하기가 어렵다.

그러나 제안된 전역모델을 2 차로 해서 구한 평균과 분산에 의해서 수렴여부를 판단하게 되면, 수렴한 모델의 R^2 이 0.993 이상이다. 또한 실험점을 추가하여 구한 오차검증기법들의 변화경향성과 비교하여보면, 제안된 분산의 경우가 다른 방법에 비해서 경향성을 잘 표현해주고 있다.

5.3 Griewangk 함수

Griewangk 함수의 특징은 하나의 전역최적점을 갖고 있고, 웨이브형태의 식 (20)의 함수이다.

$$Y = 1 + x_1^2/4000 + x_2^2/4000 - \cos(x_1)\cos(x_2)/\sqrt{\pi}$$
$$-2 \le x_1 \le 6,\ -2 \le x_2 \le 2 \tag{21}$$

순차적 실험계획에서 제안된 기준으로 수렴여부를 판단한 결과 실험점 38 개에서 Fig. 4 와 같이 수렴하는 것으로 나타났다. 평균법인 경우에는 실험점 33 개에서 수렴을 한다.

또한 실험점을 추가하여 구한 평가기법의 변화경향에 비추어 봤을 때, 기존의 평균법은 모델의 변화를 잘 표현해주지 못하고 있다. 1 점선택교차법인 경우에는 모델의 변화이력을 비교적 잘 표현해주고 있으나, 여전히 수렴여부를 판단하는 정확한 기준을 제시해주지 못하고 있다. 왜냐하면 값이 많이 작은 것도 아니고, 변화율이 작은 것도 아니기 때문이다.

그렇지만, 제안된 평균과 분산을 이용하여 수렴여부를 판단해보면, 수렴한 모델의 R^2 이 0.999 이상이 나와서 모델이 정확하게 수렴되는 것으로 나타났다. 기존의 평균의 이력과 비슷하게 제안된 평균의 이력도 모델의 변화이력을 잘 표현해주지 못하고 있는 반면에, 분산의 경우에는 모델의 변화이력을 잘 표현해주고 있다. 그러므로 이 함수에 대해서는 분산의 수렴이력이 모델의 변화이력을 잘 표현해주고, 제안된 평가기법에

Table 1 Comparison of predicted value and real value of each function

Function	Measures	True value	Predicted value
Griewangk	mean	0.98	0.95
	variance	0.25	0.25
	R^2	-	0.9999
Three hump camel back	mean	1.58	1.62
	variance	1.65	1.69
	R^2	-	0.9939
Branin	mean	54.31	54.31
	variance	2626.69	2627.85
	R^2	-	0.9999

Table 2 Comparison of calculation time (unit :sec)

Sample Points	mean_0	mean_2	var.	leave-1-out
9	0.03	0.24	0.17	0.09
10	0.01	0.01	0.03	0.03
:	:	:	:	:
35	0.01	0.01	0.18	0.2
36	0.01	0.01	0.19	0.2
37	0.01	0.01	0.2	0.22
38	0.01	0.01	0.21	0.22
Total	0.19	0.39	3.18	3.45
Ratio	1	2.11	17.03	18.49

의해서 수렴여부를 판단하면, 가장 정확하게 모델의 수렴을 판단해주는 것으로 나타났다.

이상에서 구한 3 가지 함수의 수렴한 크리깅모델의 평균과 분산을 실제함수의 평균과 분산과 비교하여 Table 1 에 나타내었다.

5.2 효율성

효율성을 비교하기 위해서, Pentium core2duo 3.0GHz 컴퓨터에서 계산하는데 걸린 시간을 이용하였고, 그 결과를 Table 2 에 표현하였다. 여기서 비율(ratio)은 기존에 제안된 평균의 계산시간을 1 로 하였을 때 다른 평가기법의 총 계산시간을 비율로 나타낸 것이다. 효율성 측면에서 평가를 해보면, 가장 빠른 방법이 기존에 제안된 평균법이며, 그 다음이 제안된 평가기법인 평균과 분산에 의한 것이고, 가장 오래 걸리는 방법은 1 점선택교차법이다.

6. 결 론

본 연구에서는 순차적으로 실험점을 추가하는 크리깅모델의 평균과 분산을 이용하여 정확도를 평가하는 방법을 제안하였다. 제안된 방법을 3 가지 대표적인 비선형함수에 적용하여서 기존의 평가기법들과 비교를 하였다. 이때 초기 실험점으로는 3 수준의 전조합실시법을 이용한 9 개의 점을 선택하였고, 순차적인 실험계획법으로는 최대엔트로피 샘플링기법을 사용하였다. 기존의 평가기법인 평균법, 1 점선택교차법과 제안된 평가기법을 비교하였다. 크리깅모델이 평균법에 의해서 조기 수렴하는 경우와 1 점선택교차법에 의해서 수렴여부를 판단하기 어려운 경우에도 제안된 평가기법은 명확하게 수렴여부를 판단할 수 있었다. 또한 효율성 측면에서는 기존의 평균법이 가장 좋은 방법으로 나타났다. 그렇지만, 제안된 평가기법과 기존의 평균법과의 계산시간차이는 크지 않다.

제안된 평균을 구하는 과정에서 문제점이 없었지만, 분산을 구하는 과정에서는 문제점이 발견되었다. 실험점을 추가됨에 따라 크리깅모델의 상관행렬의 행렬식이 0 에 근접하게 됨에 따라 분산을 구하는 과정에서 수치적인 문제가 발생하였다. 이 문제를 해결하기 위해서 전역모델을 2 차로 하여 전역모델이 상수였을 때보다 수치적으로 강건해졌지만, 근본적으로 문제를 해결하지 못하였다. 따라서 상관행렬의 행렬식이 0 에 근접하더라도 분산을 정확하게 구할 수 있는 방법에 대한 연구가 필요하다. 또한 다변수 문제의 경우 설계점 증가에 따른 계산성능의 분석 및 고찰도 요구된다.

참고문헌

(1) Won, J., Choi, C. and Choi, J., 2009, “Improved Dimension Reduction Method (DRM) in Uncertainty Analysis Using Kriging Interpolation,” *Journal of Mechanical Science and Technology*, Vol. 23 (5), pp. 1249~1259.

(2) Mitchell, T. J. and Morris, M. D., 1992, “Bayesian Design and Analysis of Computer Experiments: Two Examples,” *Statistica Sinica*, Vol. 2 (2), pp.359~379.

(3) Byun, H. S., Jung, J. J. and Lee, T. H., 2007, “Validation Technique of Kriging Model Using Integrated Mean Squared Errors and Responses,” 7th World Congress on Structural Multidisciplinary Optimization, pp.1246~1266.

(4) 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,” *Journal of Mechanical Science and Technology*, Vol. 16 (5), pp. 619~632.

(5) Jin, R., Chen, W. and Sudjianto, A., 2002, “On Sequential Sampling for Global Metamodeling in Engineering Design,” Proceeding of DETC'02 ASME 2002 Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference, DETC2002/DAC-32092.

(6) Jung, J. J., 2007, “Multiplicative Decomposition Method for Accurate and Efficient Reliability Analysis,” 7th World Congress on Structural Multidisciplinary Optimization, pp.1246~1266.