〈 논문 〉

적응거리 조건을 이용한 순차적 실험계획의 민감도법

이 태 희† · 정 재 준*

(2005년 2월 23일 접수, 2005년 7월 18일 심사완료)

Sensitivity Approach of Sequential Sampling Using Adaptive Distance Criterion

Tae Hee Lee and Jae Jun Jung

Key Words : Adaptive Distance Criterion(적응 거리 조건), Kriging Model(크리깅모델), Sequential Sampling(순차적 실험계획법), Sensitivity Approach of Sequential Sampling(순차적 실험계획법의 민감도법)

Abstract

To improve the accuracy of a metamodel, additional sample points can be selected by using a specified criterion, which is often called sequential sampling approach. Sequential sampling approach requires small computational cost compared to one-stage optimal sampling. It is also capable of monitoring the process of metamodeling by means of identifying an important design region for approximation and further refining the fidelity in the region. However, the existing critertia such as mean squared error, entropy and maximin distance essentially depend on the distance between previous selected sample points. Therefore, although sufficient sample points are selected, these sequential sampling strategies cannot guarantee the accuracy of metamodel in the nearby optimum points. This is because criteria of the existing sequential sampling approaches are inefficient to approximate extremum and inflection points of original model. In this research, new sequential sampling approach using the sensitivity of metamodel is proposed to reflect the response. Various functions that can represent a variety of features of engineering problems are used to validate the sensitivity approach. In addition to both root mean squared error and maximum error, the error of metamodel at optimum points is tested to access the superiority of the proposed approach. That is, optimum solutions to minimization of metamodel obtained from the proposed approach are compared with those of true functions. For comparison, both mean squared error approach and maximin distance approach are also examined.

기호설명

n_d : 설계변수의 수
$\mathbf{x}_{pj} \in \mathbf{X}_p$: 현재의 메타모델을 구성하는 샘플링점
$\mathbf{x}_c \in R^{n_d}$: 민감도법에 의해 선택된 샘플링점
$\hat{y}(\mathbf{x})$: 크리깅 모델
$\bar{y}$: 현재 샘플링점들의 응답 평균

† 책임저자, 회원, 한양대학교 기계공학부
E-mail : thlee@hanyang.ac.kr
TEL: (02) 2220-0449, FAX (02) 2298-4634
* 한양대학교 대학원 기계설계학과

1. 서 론

최근의 급변하는 시장환경은 설계기간을 단축하면서 다목적, 고성능의 제품을 개발하는 것을 요구하고 있다. 이를 위해서는 역학적 현상을 모델링하고 이를 해석하는 수준에서 벗어나 제품설계과정에서부터 최적설계기법을 활용해야 한다. 그러나 비선형 구조해석, 열 유체 유동해석, 충돌해석과 같이 한 번의 해석을 수행하는데 상당한 시간이 요구되는 경우, 이러한 모델에 직접적으로 최적설계기법을 적용하는 것은 현실적으로 한계가 있다. 특히 최근에 많이 연구되고 있는 다분야통합최적설계(multidisciplinary design optimization)와

신뢰성기반최적설계(reliability-based design optimization) 등은 각각 시스템해석과 신뢰성 해석(reliability analysis)을 위해 많은 해석이 요구되기 때문에 최적화 과정의 부담은 가중될 수 밖에 없다. 이러한 이유로 최적설계 과정에서 필수적인 반복 해석과 민감도 해석 비용을 줄이면서 설계기한 내에 최적의 결과를 도출할 수 있는 설계방법론이 연구되기 시작했다.

메타모델은 이러한 문제의 한가지 해결방안으로 제시된 것으로 설계변수와 응답함수 사이의 관계를 간단하게 표현한 근사모델이다. 메타모델의 목적은 최적설계 과정에서 긴 해석 시간이 소요되는 해석 모델을 대체함으로써 전체적인 최적설계과정의 효율을 높이는 것이다. 메타모델과 관련된 핵심 연구 내용은 '좋은 메타모델을 얻기 위해서는 어떻게 샘플들을 선택해야 하는가,' '정확한 메타모델은 어떤 것인가,' '메타모델의 정확성을 어떻게 판단할 것인가'라는 세 가지 문제로 분류할 수 있다. 이것은 각각 샘플링(sampling), 메타모델, 검증(validation) 방법 등에 세 가지 연구 주제로 요약된다.

샘플링 방법은 전산실험(deterministic analysis and computer experiment)으로부터 생성되는 메타모델의 특성 때문에 설계영역을 고르고 빈틈없이 채우는 충진실험계획법(space filling design)이 연구되었다. 초기의 충진실험계획법은 응답정보를 이용하지 않고 모든 해석점들을 한번에 결정하는 '한 단계(one stage)' 방식을 사용하였다. 그 결과, 메타모델의 예측성능이 좋지 않을 경우 해석점의 변경 및 메타모델의 재생성이 용이하지 않았다. 또한 최적화 과정이 필요한 일부의 충진실험계획법은 샘플링 수가 많을 경우 최적화 비용이 많이 드는 문제점이 있다.

최근에는 이러한 문제점을 해결하기 위해 한번에 모든 해석점을 결정하는 것이 아니라 하나 또는 다수의 해석점들을 특정한 기준에 따라 순차적으로 결정하는 순차적 실험계획법(sequential sampling)이 제안되었다.(1) 순차적 실험계획법은 효과적인 샘플링과 메타모델의 정확성 향상이라는 두 가지 목적을 동시에 달성하기 위해 개발된 방법이다. 지금까지 제안된 순차적 실험계획법으로는 크리깅모델의 예측오차를 이용하는 평균제곱오차(mean squared error: MSE)방법,(1) 기존 해석점들과의 최소거리를 최대로하는 해석점을 추가하는 최소거리최대화(maximin distance)방법,(2) 엔트로피를 가장 크게 하는 점을 순차적으로 찾아나가는 엔트로피(entropy)방법,(3) 설계영역의 적분평균제곱오차(integrated mean squared error)를 최대로 하는 해석점들을 추가하는 적분평균제곱오차 방법 등이 있다.(4) 이러한 순차적 실험계획법은 한번에 모든 해석점을 결정하는 큰 최적화 문제를 하나 또는 적은 수의 해석점 집합을 결정하는 작은 문제로 변환함으로써 계산비용을 현저히 줄일 수 있다는 장점이 있다.

그러나 대부분의 순차적 실험계획법이 채택하고 있는 선택기준은 기존 샘플링점들 사이의 거리에 강하게 의존하는 특징이 있다. 이로 인해 기존의 순차적 실험계획법은 충분한 개수의 샘플링점이 사용되었다 하더라도 샘플링점들이 극점에 근접해 있지 않으면 최적해의 정확성이 보장되지 않는 문제가 있다. 이러한 문제는 메타모델이 최적설계에서 근사모델로 이용될 때, 메타모델의 전역적인 정확성 못지 않게 최적해의 정확성도 중요하게 고려되어야 한다는 점에서 새로운 개념의 순차적 실험계획법을 개발하는 것이 필요하다.

최적해에 대한 우수한 예측성능을 가진 메타모델을 얻기 위해서는 극점에 가까운 점들이 메타모델 구성점으로 채택되어야 한다. 이를 위해 메타모델의 민감도를 이용하여 기존 해석점과 일정 거리를 유지하고 있는 근사적인 극점을 탐색한 뒤, 이 점들이 가지는 응답특성에 따라 해석점을 우선적으로 선택하는 순차적 실험계획법의 민감도 방법(sensitivity approach)이 제안되었다.(5) 그러나 선행 연구에서 제안된 민감도 방법은 다양한 특성을 가진 함수들에 대해서 강건하면서도 우수한 예측성능을 발휘하는데 한계가 있었다.

따라서 본 연구에서는 기존의 민감도법이 가지는 문제점을 해결하고, 다양한 함수의 근사화에서도 강건한 결과를 제공하기 위해 적응거리 조건을 이용한 민감도법을 제안한다. 공학문제의 다양한 특성을 반영할 수 있는 비선형 함수들을 검증함수로 채택하여 샘플링 개수에 따라 제안된 민감도 방법을 평균제곱오차 방법, 최소거리최대화 방법과 비교한다. 각각의 샘플링 방법으로 생성한 메타모델을 이용하여 최적화를 수행하고 최적해의 정확성을 비교함으로써 제안된 민감도 방법의 우수성을 검증한다.

2. 순차적 실험계획의 수정 민감도법

기존의 민감도 방법에서 메타모델의 극점은 격자배열 중에서 각 설계변수 축을 따라 민감도의 부호가 바뀌는 두 점을 찾고, 이 두 점의 중간점을 극점으로 선택하였다. 이러한 방식은 최적화가 필요없고 다수의 극점을 찾을 수 있다는 장점이 있지만, 설계변수가 증가하면서 계산비용이 기하급수적으로 증가하고, 극점의 정확도는 격자배열

의 간격에 의존하는 문제점이 있다.

수정 민감도법에서는 이러한 문제를 해결하기 위해 메타모델의 응답과 민감도를 이용하여 다수의 시작점에서 각각 민감도기반 최대최적화와 최소최적화를 수행하는 방식을 채택하였다.

$$\begin{aligned} &maximize\ \hat{y}(\mathbf{x})\ \ and\ \ minimze\ \ \hat{y}(\mathbf{x}) \\ &subject\ to\ 0 \le x_k \le 1\ \ (k = 1, 2, \cdots, n_d) \end{aligned} \tag{1}$$

이때 설계변수에 대해서는 0 과 1 사이로 정규화한 제약조건이 사용되었다. 또한 극점이 아님에도 불구하고 설계영역 경계로 수렴한 경우는 극점 집합에서 제외하였다.

민감도 방법에서는 샘플점들을 추가하는 매 단계마다 메타모델의 극점이 중복적으로 선택되는 것을 방지하기 위해 기존 샘플점과 일정거리를 유지하고 있는 극점들을 선별하는 거리조건을 사용하였다. 거리조건 d_ε 은 기존의 민감도 방법에서 설계영역의 10~20% 사이의 값으로 초기에 결정하였다. 그러나 이러한 고정 거리조건은 샘플링이 진행될수록 샘플점 사이의 거리가 좁아지기 때문에 거리조건을 위배하는 해석점들이 많아지는 문제점이 있다. 이것은 순차적으로 해석점을 추가해 나감에 따라 메타모델이 정확해지면 민감도 기준에 의해 선택된 해석점이 많아져야 한다는 점에서 합리적인 거리조건이라고 할 수 없다.

수정 민감도법에서는 이러한 문제점을 해결하기 위해 다음과 같은 거리조건을 제안한다.

$$\left\| \mathbf{x}_{ci} - \mathbf{x}_{pj} \right\| \ge \frac{1}{4m^{1/n_d}}\ \ \forall \mathbf{x}_{pj} (j = 1, 2, \cdots, m) \tag{2}$$

식 (2)에서 $1/(4m^{1/n_d})$ 의 의미는 현재의 m 개 샘플점들로 0 과 1 사이의 정규화된 설계영역을 격자배열로 채울 때, 최소 격자의 25%의 거리를 거리기준으로 채택한다는 의미이다. Fig. 1 은 설계변수가 2 개일 때의 25 개 샘플링 점들에 대한 거리 조건을 나타낸다. 식 (2)와 같이 정규 설계영역에서 해석점 개수의 함수로 표현된 거리조건을 사용하면 설계변수의 범위에 상관없이 거리조건을 적용할 수 있고, 샘플링이 진행됨에 따라 현재 샘플링 개수에 적합한 적응거리 조건(adaptive distance criterion)을 설정할 수 있다.

한편 응답 조건은 민감도와 거리 조건을 만족하는 다수의 해석점들이 존재할 때, 이러한 점들 중에서 응답의 절대값이 큰 점을 우선적으로 선택하기 위해 사용된 기준이었다. 하지만 이 기준은 응답의 평균이 0 에 가까운 함수에서만 효과적인 기준으로 사용될 수 있다. 따라서 수정된 응답기준은 다음과 같다.

$$\max\ \left| \hat{y}(\mathbf{x}_{ci}) - \bar{y} \right|,\ \ \bar{y} = \sum_{j=1}^{m} y_j / m \tag{3}$$

수정된 응답기준은 민감도 조건과 거리 조건을 만족하는 다수의 $\mathbf{x}_{ci}$ 중에서 응답 편차가 가장 큰 해석점 $\mathbf{x}_c$ 를 우선적으로 추가하는 방식이다.

마지막으로 순차적 실험계획법의 민감도 방법에서 메타모델의 극점이 없는 경우와 탐색된 극점이 기존의 극점과 일치하는 경우는 평균제곱오차를 최대로 하는 해석점 $\mathbf{x}_c^{new}$ 를 추가하였다. 그러나 평균제곱오차는 해석점의 개수가 적은 경우 메타모델의 부정확성으로 인해 설계영역의 경계에 과도하게 해석점을 분포시키는 경향이 있다. 또한 평균제곱오차는 메타모델 중에서도 크리깅모델에서만 제공되는 것이므로 다른 메타모델에 대해서는 민감도 방법을 적용할 수 없다는 문제점이 생긴다.

따라서 수정 민감도법에서는 평균제곱오차 방법을 최소거리최대화 방법으로 대체하였다.

Fig. 2 는 수정 민감도법의 순서도를 나타낸다.

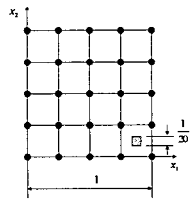


Fig. 1 Distance criterion of 25 sampling points on normalized space for two variables problem

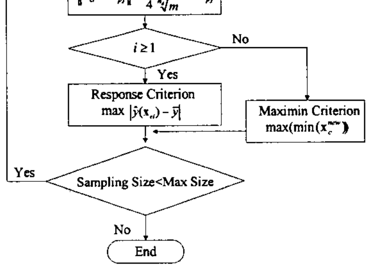


Fig. 2 Flowchart for sensitivity approach of sequential sampling

3. 크리깅모델

본 연구에서는 민감도 방법을 구현하기 위해 다양한 메타모델 중에서 비선형성이 강한 함수에 대해서 좋은 예측성능을 가진 크리깅모델을 사용하였다.

크리깅모델은 평균에 해당하는 전역모델 $\mathbf{f}(\mathbf{x})^T\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 와 편차를 의미하는 $\mathbf{r}(\mathbf{x})^T\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}-\mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}})$ 의 합으로 표현된다.(4)

$$\hat{y}(\mathbf{x})=\mathbf{f}(\mathbf{x})^T\hat{\boldsymbol{\beta}}+\mathbf{r}(\mathbf{x})^T\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}-\mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (4)$$

여기서 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 는 $\mathbf{x}$ 로 이루어진 회귀함수벡터이고, $\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{F}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y}$ 는 일반최소제곱추정량이다.

해석점들 사이의 상관관계는 일반적으로 다음과 같은 가우시안(Gaussian) 상관함수가 사용된다.

$$R(\mathbf{x}^i,\mathbf{x}^j,\boldsymbol{\theta})=\exp\left(-\sum_{k=1}^{n_d}\theta_k(x_k^i-x_k^j)^2\right) \quad (5)$$

일반최소제곱추정법(generalized least square estimation)에서 가중치는 상관행렬 $\mathbf{R}$ 의 역행렬이 사용되며, 편차는 가중치가 부여된 잔차 $\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}-\mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}})$ 와 해석점들 사이의 상관관계를 나타내는 상관벡터 $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 의 선형조합으로 표현된다. 이때 편차항이 해석점들에 대해서 크리깅 모델의 응답과 실제응답 $\mathbf{Y}$ 를 일치시키기 때문에 크리깅 모델이 보간(interpolation)특성을 가지게 된다.

$\mathbf{F}$ 는 m 개의 해석점에서 회귀함수벡터들로 정의되는 확장설계행렬(expanded design matrix)이다.

상관벡터 $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 는 예측점 $\mathbf{x}$ 와 해석점 $\mathbf{x}^i$ 사이의 상관관계를 나타낸다. 크리깅모델에서 상관벡터의 의미는 예측점에 가까운 해석점에 대해서는 높은 가중치를, 먼 해석점에 대해서는 낮은 가중치를 부여하는 방식으로 예측값을 얻는다는 것을 나타낸다.

크리깅 모델의 미지수 $\boldsymbol{\theta}$ 는 다음과 같은 최우량추정법(maximum likelihood estimation)에 의해 구한다.

$$\begin{aligned}&Maximize\ \ L(\boldsymbol{\theta})=-|\mathbf{R}|^{1/m}\hat{\sigma}\\&Subject\ to\ \ 0<\theta_k\le\theta_{ub},\ \ k=1,2,\cdots,n_d\end{aligned} \quad (6)$$

이때 분산의 추정량은 $\hat{\sigma}^2=(\mathbf{Y}-\mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}})^T\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}-\mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}})/m$ 이다.

크리깅모델의 해석적 민감도는 식 (4)를 예측점에 대해서 미분함으로써 구할 수 있다.(5)

$$\frac{d\hat{y}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}}=\frac{d\mathbf{f}(\mathbf{x})^T}{d\mathbf{x}}\hat{\boldsymbol{\beta}}+\frac{d\mathbf{r}(\mathbf{x})^T}{d\mathbf{x}}\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}-\mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (7)$$

크리깅 모델의 예측오차인 평균제곱오차는 다음과 같이 주어진다.

$$MSE=\hat{\sigma}^2\left(1-[\mathbf{f}(\mathbf{x})^T\ \mathbf{r}(\mathbf{x})^T]\begin{bmatrix}\mathbf{0}&\mathbf{F}^T\\\mathbf{F}&\mathbf{R}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{f}(\mathbf{x})\\\mathbf{r}(\mathbf{x})\end{bmatrix}\right) \quad (8)$$

평균제곱오차는 분산 추정량과 예측점 $\mathbf{x}$ 의 함수이지만 m 개의 샘플링점으로 크리깅 모델이 구성되고 나면 분산 추정량 $\hat{\sigma}^2$ 은 상수이므로 결국 평균제곱오차는 기존 해석점과 예측점 사이의 거리 그리고 가중치에 해당하는 $\boldsymbol{\theta}$ 에 지배적인 영향을 받게 된다. 이러한 평균제곱오차를 이용한 순차적 실험계획법은 통계적으로 오차가 가장 클 것으로 예상되는 위치에 새로운 해석점을 추가해 나감으로써 메타모델의 오차를 점차 줄여나가는 방식이다.

4. 예 제

본 연구에서는 제안된 민감도법의 우수성을 검증하기 위해 다양한 특성을 가진 수학함수들에 대해서 평균제곱오차 방법, 최소거리최대화 방법의 결과와 비교하였다.

크리깅모델을 생성하는데 필요한 상관파라미터의 최적화 범위는 크리깅모델의 예측성능을 결정하는 중요한 인자이다. 본 연구에서는 샘플점들을 0 과 1 사이의 영역으로 정규화 한 뒤, 이것을 다시 한번 샘플점과 응답의 평균 및 표준편차로 정규화하여 크리깅 모델을 생성하였다. 따라서 다양한 함수들에 대해서 샘플링과 응답값들은 일정한 범위를 형성하기 때문에 경험적으로 도출된 상관파라미터의 범위를 설정하는 것이 가능하다. 여기서 사용된 상관파라미터의 범위는 $\boldsymbol{\theta}\in[0.001,5]^{n_d}$ 이다.

초기 샘플링 방법 및 샘플링 개수는 순차적 실험계획법의 최종 결과에 직접적인 영향을 미칠 수 있기 때문에 최소거리최대화 방법의 특성을 유지하고 각 순차적 실험계획법의 특성을 최대한 발휘하도록 하기 위해서 9 개의 격자배열(grid sampling) 방법을 채택하였다.

수학함수들은 다양한 공학문제의 특성을 반영할 수 있는 함수들로 채택하였으며, 그 식과 그림은 각각 Table 1 과 Fig. 3 에 나타내었다.

총 샘플링 개수는 검증함수의 비선형성, 국부최적해의 개수에 따라 2 차 반응표면모델(response surface model)을 만들기 위한 샘플링 개수(saturated point) 즉, $n_s=(n_d+1)(n_d+2)/2$ 의 1.5 배에서 9 배 범위에서 선택되었다. Table 2 는 채택된 검증함수의 국부최적해의 개수와 총 샘플링 개

수를 나타낸다.

메타모델의 정확성은 3600 개의 격자 배열 샘플링 점에서 실제값과 메타모델의 값을 비교함으로써 평가하였다. 사용된 오차 비교 방법은 다음과 같은 평균제곱근오차와 최대오차이다.

$$RMS\,error = \sqrt{\frac{1}{n_v}\sum_{i=1}^{n_v}(\hat{y}(\mathbf{x}_i) - y(\mathbf{x}_i))^2} \tag{9}$$

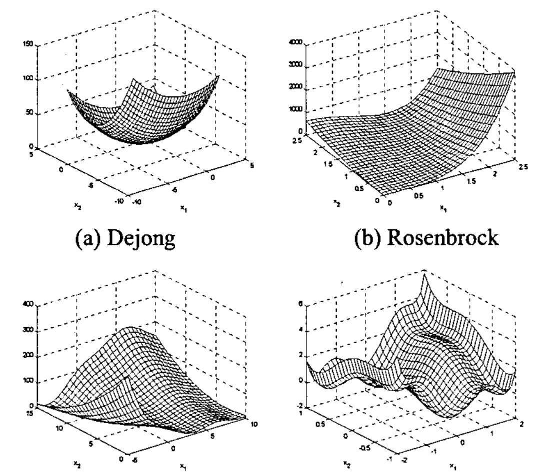
$$Max\,error = max\left|\hat{y}(\mathbf{x}_i) - y(\mathbf{x}_i)\right| \quad i = 1,2,\cdots,n_v \tag{10}$$

여기서 $n_v = 3600$ 이다.

검증함수 중 Dejong 함수는 국부최적해가 하나이고 비선형성이 약한 다항함수이다. Rosenbrock 함수는 경계로 갈수록 함수값의 변화가 급격하고 최적해 주위에서 평활면이 존재하여 최적해를 찾기 어려운 최적화 검증함수이다. Branin 함수는 동일한 함수값을 갖는 3 개의 국부최적해가 불규칙적으로 배열된 함수이다. Six-hump camelback 함수는 원점에 대해서 점대칭을 이루면서 2 개의 국부최적해와 2 개의 전역최적해 그리고 2 개의 극점을 갖는 비선형성이 강한 함수이다.

Table 1 Test functions

Function	Equation
Dejong	$f = \sum_{i=1}^{n_d} x_i^2$
Rosenbrock	$f = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$
Branin	$f = (x_2 - 5.1\frac{x_1^2}{4\pi^2} + \frac{5x_1}{\pi} - 6)^2 + 10(1 - \frac{1}{8\pi})\cos(x_1) + 10$
Six-hump camelback	$f = (4 - 2.1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3})x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2$



(a) Dejong (b) Rosenbrock

(c) Branin (d) Sixhump camelback

Fig. 3 3-D plot of Test functions

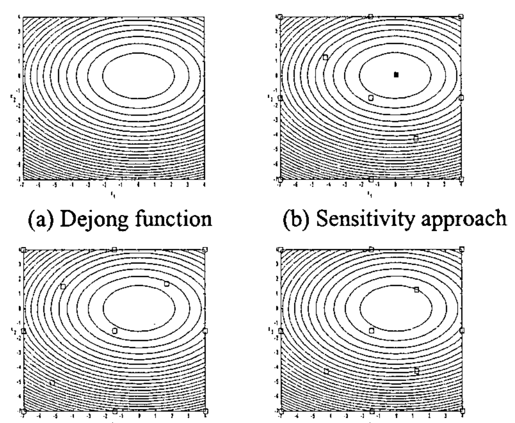
Fig. 4~11 은 다양한 수학함수들에 대한 세 가지 방법의 샘플링 결과를 바탕으로 크리깅모델의 등고선 그림(contour plot)을 나타낸 것이다. 여기서 민감도 방법에서 민감도 기준에 의해서 선택된 점만 ■로 표시하고 평균제곱오차 방법과 최소거리 최대화 방법에 의해 선택된 점, 그리고 초기 샘플링 점은 모두 □로 표시하였다.

세 가지 방법에 의해 생성한 메타모델들이 하나의 최적해를 갖는 Dejong 함수에서는 비교적 유사한 예측성능을 보임을 알 수 있다. 하지만 제안된 방법은 다른 방법과 달리 최적해에 가까운 해석점이 샘플점으로 선택된 특징이 있다.

Rosenbrock 함수는 응답값의 변화가 작은 평활영역과 응답 변화가 급격한 가장자리 영역을 동시에 갖는 함수이다. 평균제곱오차 방법과 최소거리최대화 방법은 이러한 함수 특성과 관계없이 단순히 설계영역을 샘플점으로 고르게 채우고 있는 것을 볼 수 있다. 하지만 적응거리를 이용한 민감도 방법은 민감도 기준에 의해 선택된 점들이 실제 Rosenbrock 함수의 평활면에 해당하는 $x_2 = x_1^2$ 의 곡선을 따라 분포하고 있는 특징이 있다. 이러한 결과는 민감도 조건에 의해서 근사적인 극점이 연속적으로 선택되었기 때문이다.

Table 2 Number of local minima and total sample points

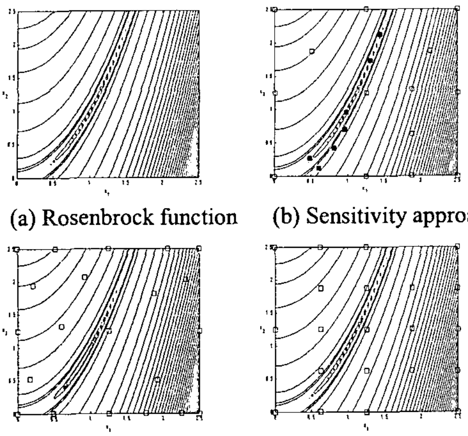
Function	Number of local minimum	Total sample size
Dejong	1	12
Rosenbrock	1	21
Branin	3	24
Six-hump camelback	4	54



(a) Dejong function (b) Sensitivity approach

(c) MSE approach (d) Maximin approach

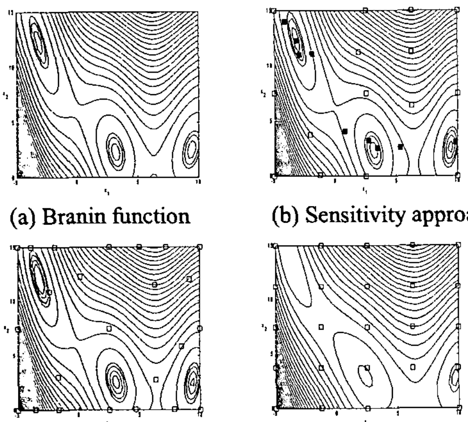
Fig. 4 Contour plots of Dejong function and its Kriging models by each sampling approach



(a) Rosenbrock function (b) Sensitivity approach

(c) MSE approach (d) Maximin approach

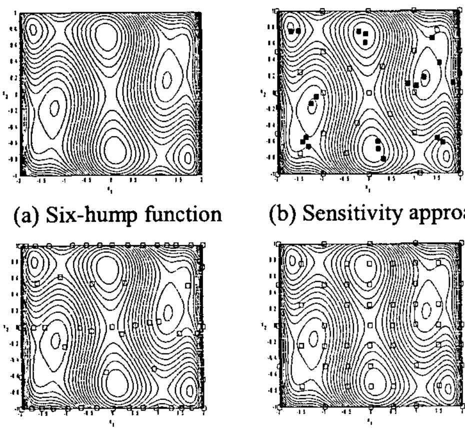
Fig. 5 Contour plots of Rosenbrock function and its Kriging models by each sampling approach



(a) Branin function (b) Sensitivity approach

(c) MSE approach (d) Maximin approach

Fig. 6 Contour plots of Branin function and its Kriging models by each sampling approach



(a) Six-hump function (b) Sensitivity approach

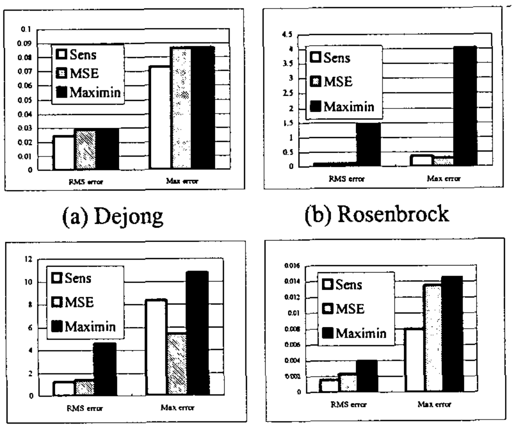
(c) MSE approach (d) Maximin approach

Fig. 7 Contour plots of six-hump camelback function and its Kriging models by each sampling approach

Branin 함수는 최소거리최대화 방법이 두 개의 최적해 주위에서 많은 오차를 나타내는 것을 볼 수 있다. 평균제곱오차 방법은 세 개의 최적해를 정확하게 예측하고 있지만 최적해에서 등고선 개수가 차이가 있기 때문에 메타모델값과 실제함수값은 다소 차이가 있을 것으로 판단된다. 민감도 방법은 샘플점들을 곡률의 변화가 적은 부분에 분포시키지 않고 최적해 주위에 집중적으로 분포시킴으로써 최적점들의 위치와 함수값을 효과적으로 근사화하고 있음을 알 수 있다.

Six-hump camelback 함수에 대해서는 검증함수가 매우 비선형적임에도 불구하고 세 가지 방법 모두 우수한 예측성능을 보임을 알 수 있다. 민감도방법의 결과는 6 개의 극점들 근처에 민감도 기준에 의해 샘플점들이 위치해 있고 그 외의 설계영역은 충진개념으로 샘플점들이 채워져 있는 특징을 볼 수 있다. 반면 평균제곱오차 방법은 샘플점들이 특정 설계변수의 경계에 과도하게 분포되어 있는 특징을 보이는데, 이것은 매 단계마다 식 (5)의 상관파라미터 θ_1이 θ_2보다 매우 크게 추정되기 때문이다. θ_1이 θ_2보다 크다는 것은 상관도의 정의에 따라 x_2 방향보다 x_1방향으로 응답이 비선형적이라는 것을 의미하고, 이것은 평균제곱오차가 x_1축을 따라 큰 값을 갖게 하는 결과를 낳기 때문이다. 이러한 결과는 샘플링 개수가 적을 경우, 메타모델의 예측성능을 떨어뜨릴 수 있는 가능성이 있다.

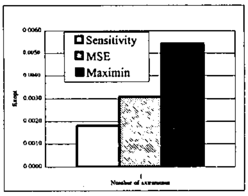
Fig. 8 은 여러 가지 함수들에 대한 각각의 샘플링 방법의 정량적인 비교를 위해 메타모델의 평균제곱근 오차와 최대 오차를 도시한 것이다.



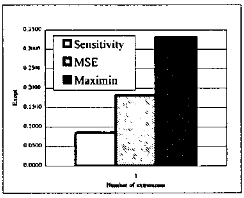
(a) Dejong (b) Rosenbrock

(c) Branin (d) Six-hump camelback

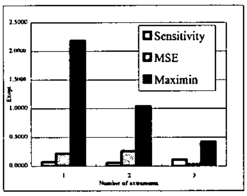
Fig. 8 Prediction errors of Kriging models obtained from sensitivity, MSE approach and maximin distance approach



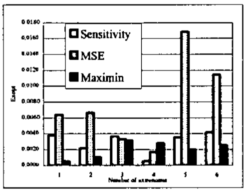
(a) Dejong



(b) Rosenbrock



(c) Branin



(d) Six-hump camelback

Fig. 9 Comparison of optimum error

여기서 식 (9)의 평균제곱근 오차는 메타모델의 전역적인 정확성을 반영하는 지표이고, 식 (10)의 최대 오차는 국부적인 정확성을 나타내는 지표이다. 대부분의 검증함수에 대해서 민감도 방법이 가장 전역적인 정확성이 뛰어난 것으로 나왔다. 하지만 국부적인 정확성에 있어서는 Branin 함수에 대해서 평균제곱오차 방법과 최소거리최대화 방법보다 큰 오차를 가지는 것으로 나왔다. 이러한 이유는 민감도 방법의 특성 상, 응답 변화가 큰 영역이라 할지라도 그 영역이 극점이 아니면 적은 샘플점들이 분포되므로 이러한 영역에서는 국부적인 오차가 클 수 있기 때문이다. 하지만 이러한 영역의 오차는 최적화 결과에 대한 영향력이 작기 때문에 민감도 방법은 이러한 곳에 분포시킬 샘플링점들을 극점 주위에 분포시켜 최적해의 정확성을 높이는 것이다.

지금까지는 일반적으로 행해지는 오차비교 방법을 통해 민감도 방법, 평균제곱오차 방법, 최소거리최대화 방법을 비교하였다. 하지만 메타모델의 궁극적인 목적이 최적설계과정에서 시뮬레이션 모델을 대체하는 것이므로 메타모델을 이용하여 구해진 최적화 결과의 정확성이 각 방법의 우수성을 검증하는 중요한 비교기준으로 사용되어야 한다.

메타모델의 최적화 결과와 실제 최적해의 거리를 최적해의 정확성을 평가하는 기준으로 채택하였다.

$$E_{xopt} = \left\| \hat{\mathbf{x}}^{opt} - \mathbf{x}^{opt} \right\| \tag{11}$$

Fig. 9 는 메타모델의 최적해 오차 E_{xopt} 를 도시한 것이다. 이때 가로축은 각 함수의 최적해 및 극점의 개수를 나타낸다.

Table 3 Optimization results of Kriging model

Function		Sampling Strategy	$\hat{x}_1^{opt}$	$\hat{x}_2^{opt}$	E_{xopt}
Dejong	Min	Maximin	0.0049	-0.0023	0.0054
		MSE	-0.0028	0.0013	0.0031
		Sensitivity	-0.0010	-0.0015	0.0018
		True optimum	0.0000	0.0000	
Rosenbrock	Min	Maximin	1.1426	1.3000	0.3322
		MSE	0.9160	0.8389	0.1817
		Sensitivity	1.0377	1.077	0.0857
		True optimum	1.0000	1.0000	
Branin	Min	Maximin	-3.9187	14.3134	2.1815
		MSE	-3.2241	12.0759	0.2156
		Sensitivity	-3.1592	12.3353	0.0628
		True optimum	-3.1415	12.2750	
	Min	Maximin	2.3592	2.9603	1.0400
		MSE	3.0780	2.5261	0.2590
		Sensitivity	3.1453	2.3278	0.0529
		True optimum	3.1415	2.2750	
	Min	Maximin	9.7381	2.7524	0.4185
		MSE	9.4012	2.4708	0.0240
		Sensitivity	9.4477	2.5755	0.1031
		True optimum	9.4248	2.4750	
Six-hump camelback	Min	Maximin	-0.0892	0.7089	0.0005
		MSE	-0.0887	0.7063	0.0064
		Sensitivity	-0.0892	0.7089	0.0037
		True optimum	-0.0898	0.7126	
	Min	Maximin	0.0894	-0.7105	0.0010
		MSE	0.0845	-0.7086	0.0066
		Sensitivity	0.0894	-0.7105	0.0021
		True optimum	0.0898	-0.7126	
	Min	Maximin	-1.7029	0.7925	0.0031
		MSE	-1.7003	0.7962	0.0033
		Sensitivity	-1.7029	0.7925	0.0037
		True optimum	-1.7036	0.7961	
	Min	Maximin	1.7036	-0.7966	0.0028
		MSE	1.704	-0.7945	0.0016
		Sensitivity	1.7036	-0.7966	0.0005
		True optimum	1.7036	-0.7961	
	Max	Maximin	1.2332	0.1641	0.0020
		MSE	1.2306	0.1791	0.0168
		Sensitivity	1.2332	0.1641	0.0035
		True optimum	1.2302	0.1623	
	Max	Maximin	-1.2336	-0.1647	0.0025
		MSE	-1.2275	-0.1734	0.0114
		Sensitivity	-1.2336	-0.1647	0.0042
		True optimum	-1.2302	-0.1623	

Table 3 은 Fig. 9 의 결과를 얻기 위해 사용된 크리깅 모델의 최적해와 실제 함수의 최적해를 나타낸 것이다. 이때 최적해는 최적해 근처에서 민감도기반 최적화를 수행하여 얻은 것이다.

Branin 함수에 대해서 큰 국부적인 오차를 나타내었던 민감도 방법이 최적해의 예측성능 면에서는 다른 두 방법보다 월등히 우수하게 나타난 것을 확인할 수 있다.

Six-hump camelback 함수에 대해서는 전반적으로 최소거리최대화 방법이 최적해를 가장 정확하게 예측하는 것을 알 수 있다.

하지만 전반적으로 민감도 방법이 다른 두 방법보다 최적해의 예측성능면에서 우수한 성능을 발휘하는 것으로 나타났다.

5. 결 론

적응 거리 조건을 이용한 순차적 실험계획법의 민감도법을 제안하였다. 다양한 공학문제의 특성을 반영하는 검증함수들에 대해 제안된 순차적 실험계획법과 평균제곱오차 방법 그리고 최소거리최대화 방법을 서로 비교하였다. 그 결과, 메타모델의 전역적인 정확성 면에서 제안된 방법이 다른 두 방법보다 전반적으로 우수한 메타모델을 생성할 수 있는 실험계획법임을 검증하였다. 다만 극점이 아니면서 함수값 변화가 큰 영역을 갖는 함수들에 대해서는 민감도 방법이 메타모델의 국부적인 오차를 다소 크게 발생시키는 것으로 나타났다. 하지만 적응 거리 조건을 이용한 민감도방법은 최적해 주위에 보다 많은 샘플점들을 분포시킴으로써 최적해의 정확성 보장할 수 있는 우수한 샘플링 방법임을 보였다.

이러한 결과는 민감도 방법이 메타모델의 응답정보와 민감도 정보를 이용하여 근사적으로 전역 최적해를 탐색하고, 극점이 존재하지 않을 때는 최소거리최대화 방법을 통해 설계영역을 충진함으로써 함수의 곡률과 특성을 효과적으로 반영할 수 있었기 때문이다. 따라서 민감도 방법은 기존의 설계영역을 고르게 채우는 개념에서 개발된 평균제곱오차 방법과 최소거리최대화 방법보다 샘플링 과정에서 응답특성을 적극적으로 반영하는 진정한 의미의 응답 기반 실험계획법(response based sampling approach)이라고 할 수 있다.

후 기

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

참고문헌

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

(2) 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.

(3) Shewry, M. C. and Wynn, H.P., 1987, "Maximum Entropy Sampling," *Journal of Applied Statistics*, Vol. 14, No. 2, pp. 165~170

(4) 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.

(5) 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 A*, Vol. 28, No. 11, pp. 1760~1767.