



Fractional universal kriging metamodel

Muzaffer Balaban^{1*} , Berna Dengiz² 

¹Turkish Statistical Institution, 06100, Ankara, Turkey

²Başkent University, Engineering Faculty, Department of Industrial Engineering, 06790, Ankara, Turkey

Highlights:

- Validation of Fractional Universal Kriging metamodel for expensive simulation output modelling.
- Highly nonlinear input-output relation analysis of the experiments.
- Latin hypercube design and correlogram analysis for the experiment.

Keywords:

- Metamodel
- Ordinary Kriging
- Universal Kriging
- Fractional Universal Kriging
- Latin hypercube design

Article Info:

Research Article
Received: 12.05.2021
Accepted: 12.09.2021

DOI:

10.17341/gazimmfd.936374

Acknowledgement:

We are grateful to Prof. Dr. Fulya Altıparmak and Assoc. Prof. Dr. Ebru Angun for their valuable contributions to this study.

Correspondence:

Author: Muzaffer Balaban
e-mail:
balabanmuzaffer@gmail.com
phone: +90 535 507 4252

Graphical/Tabular Abstract

The Fractional Universal Kriging metamodel is an extension of the Universal Kriging metamodel proposed for situations where the drift function structure is unknown. It is proposed to use a power function of variables that can also take fractional values, instead of first and second order regression models as a drift function in the Fractional Universal Kriging metamodel. According to results given in Table A, considering the performance criteria of mean squared error, Ordinary Kriging metamodel for Adjiman function, Universal Kriging (quadratic drift) metamodel for Deckkers-Aarts function and Fractional Universal Kriging metamodel for all other test functions provide superior predictions on the validation data sets.

Table A. MSE of the kriging metamodels

Metamodel Name	Function Name	MSE
Ordinary Kriging	Adjiman	0.031
	Universal Kriging(quadratic)	7.5
Fractional Universal Kriging	Six-hump camel back	3.78
	Styblinski-Tang 1	49
	Zettl	5040
	Shubert	452.9
	Styblinski-Tang 2	345.1
	Michaelwicz	0.01783
	Rosenbrock	265504
	Schwefel	11093
	Isigami	7.71
	Perm	8.83E+08

Purpose: The main purpose is to validate proposed Fractional Universal Kriging metamodel performance to improve prediction quality of the kriging metamodels.

Theory and Methods:

The training and validation data sets were obtained by Latin hypercube design for each test function. After correlogram analysis, Ordinary Kriging, Universal Kriging and Fractional Universal Kriging metamodels were built. Then, performance measures of the metamodels were calculated on the validation data set.

Results:

Considering the Mean Squared Error and Maximum Squared Error performance measures, Ordinary Kriging metamodel for Adjiman function, Universal Kriging (quadratic drift) metamodel for Deckkers-Aarts function and Fractional Universal Kriging metamodel for all other test functions outperform others.

Conclusion:

Fractional Universal Kriging metamodel produce superior predictions when the input-output relationship of the simulation model can be explained by a power function that includes higher order effects different from the quadratic polynomial structure. So, Fractional Universal Kriging metamodel can be used instead of the simulation model when the input-output relationship is highly nonlinear and complex.



Kesirli üniversal kriging meta-modeli

Muzaffer Balaban^{1*} , Berna Dengiz² 

¹Türkiye İstatistik Kurumu, 06100, Ankara, Türkiye

²Başkent Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Endüstri Mühendisliği Bölümü, 06790, Ankara, Türkiye

Ö N E Ç I K A N L A R

- Maliyeti yüksek benzetim modeli için Kesirli Üniversal Kriging meta-modelinin geçerlenmesi
- Yüksek dereceli doğrusal olmayan girdi-çıkı analiz
- Latin hiperküp tasarımı ve korelogram analizi

Makale Bilgileri

Araştırma Makalesi

Geliş: 12.05.2021

Kabul: 12.09.2021

DOI:

10.17341/gazimmfd.936374

Anahtar Kelimeler:

Meta-model,
ordinary kriging,
üniversal kriging,
kesirli üniversal kriging,
latin hiperküp tasarım

ÖZ

Bu çalışmada, benzetim modeli ile veri üretmenin maliyetli olabileceği karmaşık yapıdaki problemler için benzetim modelinin yerine kullanılabilir Kriging tabanlı bir meta-model önerilmektedir. Üniversal Kriging (ÜK) meta-modelinin drift fonksiyonu yapısının bilinmediği durumlar için önerilen bu yeni model yapısında, ÜK meta-modelinde drift fonksiyonu olarak kullanılan birinci ve ikinci dereceden regresyon modelleri yerine, kesirli değerler de alabilen değişkenlerin bir güç fonksiyonu kullanılmıştır. Kesirli Üniversal Kriging (KÜK) meta-modeli olarak adlandırılan bu meta modelin kestirim gücü deneysel analizlerle incelenmiştir. Geçerleme analizleri Ortalama Hata Kare (OHK) ve Enbüyük Hata Kare (EHK) başarımları ölçütlerine göre KÜK meta-modellerinin üstün kestirim gücüne sahip olduğunu ortaya koymuştur. Böylece, benzetim modelinin girdi-çıkı ilişkisinin karesel polinomial durumdan farklı ve daha yüksek dereceden etkilerini de içeren bir güç fonksiyonu ile ifade edilebilir olması durumunda, KÜK meta-modelleri yeni bir meta-model yaklaşımı olarak önerilmektedir.

Fractional universal kriging metamodel

H I G H L I G H T S

- Validation of Fractional Universal Kriging metamodel for expensive simulation model
- High-order nonlinear input-output analysis
- Latin hypercube design and correlogram analysis

Article Info

Research Article

Received: 12.05.2021

Accepted: 12.09.2021

DOI:

10.17341/gazimmfd.936374

Keywords:

Metamodel,
ordinary kriging,
üniversal kriging,
fractional universal kriging,
latin hypercube design

ABSTRACT

In this study, a Kriging-based metamodel is proposed that can be used instead of the simulation model for complex problems where data generation with a simulation model may be costly. In this new model structure, which is proposed for cases where the drift function structure of the Universal Kriging meta-model is not known. A power function of the variables that can also take fractional values is used instead of the first and second order regression models used as the drift function in the Universal Kriging metamodel. The predictive power of this metamodel, which is called Fractional Universal Kriging metamodel, has been investigated by experimentally computational analysis. Validation analysis reveals that the Fractional Universal Kriging metamodels have superior predictive power with respect to Mean Squared Error and Maximum Squared Error performance measures. Thus, in the case that the input-output relationship of the simulation model can be expressed with a power function that includes the effects of higher order and different from the quadratic polynomial case, Fractional Universal Kriging metamodels are proposed as a new metamodel approach.

1. GİRİŞ (INTRODUCTION)

Günümüzde artan rekabet koşulları nedeniyle küresel anlamda büyüyen işletmeler ve onların büyüyen karmaşık ve stokastik yapıdaki problemleri, araştırmacıları benzetim tekniği ile model kurmaya ve benzetim eniyilemesi ile çözüm aramaya yönelmektedir. Çünkü bu tür sistemlerde gerçek sistemler üzerinde deney yaparak çözüm elde etmek olası değildir ve araştırmacılar gerçek sistem yerine benzetim modelini kullanırlar [1]. Benzetim modellerinin oldukça karmaşık olduğu durumlarda bu modellerin daha basit modellerine gereksinim duyulmaktadır [2]. Kleijnen [3] benzetim için meta-modeli “modelin modeli” olarak tanımlamıştır. Bir meta-model, bazı benzetim parametrelerini girdi olarak kullanan ve bir benzetim çıktısının bazı karakteristiklerini tahmin eden bir fonksiyondur [4]. Meta-modellere, duyarlılık analizinde, farklı girdi setleri için çıktılarının değişiminin gözlenmesinde örneğin farklı sistem tasarımlarının incelenmesi ve eniyileme işlemlerinde ihtiyaç duyulur. Genellikle birinci ve ikinci dereceden regresyon modellerini kullanan cevap yüzeyi yöntemleri meta-model olarak kullanılmaktadır [2, 5, 6]. Alternatif olarak radyal temelli fonksiyonlar, yapay sinir ağları ve kriging modelleri de meta-model olarak kullanılmaktadır [2, 7].

Kriging yöntemi coğrafi-istatistikleri modelleme ve enterpolasyon amacıyla geliştirilmiştir [8, 9]. Kriging yönteminde her kestirim noktası için uygun varyogram veya korelogram modeli kullanılarak yeniden hesaplanan ağırlıkların doğrusal bileşimi olarak kestirim değerleri elde edilir. Sacks vd. [10] Kriging meta-modelini ilk kez belirli, Van Beers ve Kleijnen [11] ise olasılıklı benzetim modelleri için kullanmışlardır. Daha sonra Biles vd. [1] kısıtlı benzetim eniyilemesinde uygulamışlardır. Diğer meta-modeller kriging meta-modelleri ile karşılaştırıldığında daha zayıf kestirim vermektedir [12]. Kriging meta-modelleri en iyi, yansız ve bütün doğrusal kestirim yöntemleri içinde en küçük OHK'ya sahip kestirimcidir [11-13]. Kriging meta-modelleri, genel modellerdir [6, 10, 13] ve doğrusal ve doğrusal olmayan fonksiyonlara uygunluk sağlarlar [13]. Martin ve Simpson [14] kriging meta-modellerinin birçok farklı ve karmaşık cevap yüzey fonksiyonları için uygun bir seçim olduğunu belirtmektedirler.

Bu çalışmada ilk kez önerilen kesirli dereceden üslü drift fonksiyonlu ÜK meta-modeli, kısaca “Kesirli Ünsel Kriging (KÜK)” meta-modeli olarak adlandırılmıştır. KÜK meta-modeli, ÜK meta-modelinin drift fonksiyonu yapısının bilinmediği durumlar için önerilmiş bir uzantıdır. ÜK meta-modelinde drift fonksiyonu olarak kullanılan birinci ve ikinci dereceden regresyon modelleri yerine, KÜK'te kesirli değerler de alabilen değişkenlerin bir güç fonksiyonunun kullanılması önerilerek daha karmaşık benzetim modelleri yerine kullanılması amaçlanmıştır.

Bir modelde girdi seti ile çıktı seti arasındaki ilişki her zaman doğrusal veya karesel drift fonksiyonları ile

açıklanamamaktadır. Bu durumda daha yüksek dereceli drift fonksiyonlarına ihtiyaç vardır. Bu nedenle, bu çalışmada, sistem davranışlarını daha iyi tahmin edebilen meta-modeller kurabilmek için KÜK modeli önerilmiştir. Önerilen KÜK meta-modellerinin uygunluğu, iki ve üç değişkenli Adjiman, Deckkers-Aarts, Altı hörgüçlü deve sırtı, 2 boyutlu Styblinski-Tang, Zettl, Shubert, 3 boyutlu Styblinski-Tang, Michaelwicz, Rosenbrock, Schwefel, Isgami ve Perm test problemleri üzerinde değerlendirilerek Ordinary Kriging (OK), doğrusal ve karesel drift fonksiyonlu ÜK meta-modelleri ile karşılaştırılmıştır. Karşılaştırmalarda Ortalama Hata Kare (OHK) ve Enbüyük Hata Kare (EHK) ölçütleri dikkate alınmıştır. Geçerleme sonuçlarına göre; bu çalışmada önerilen KÜK meta-modelinin, Adjiman ve Deckkers-Aarts hariç dikkate alınan tüm test problemleri için OK ve ÜK meta-modellerine göre daha başarılı kestirim yapabildiği gösterilmiştir. Böylece, benzetim modelinin girdi-çıkıtı ilişkisinin karesel polinomial yapıdan farklı ve daha yüksek dereceden ilişkileri de içeren bir güç fonksiyonu ile açıklanabilir olması durumunda, KÜK meta-modellerinin benzetim modeli yerine önerilmektedir. Bu yazıda, KÜK meta-modelinin geçerliliği, iki ve üç boyutlu test problemleri üzerinde matematiksel ve istatistiksel incelemeler ile araştırılmış ise de üç ve üçten büyük boyutlu problemlerde de kullanılabilirliği üzerinde bir kısıtlama yoktur.

Makalenin ikinci bölümünde, kriging meta-modellerin matematiksel açıklamalarına yer verilmiştir. Üçüncü bölümde, önerilen KÜK meta-modeli, dördüncü bölümünde deney tasarımı ve KÜK meta-modelinin geçerleme çalışmaları açıklanmıştır. Beşinci bölümünde, önerilen KÜK meta-modeli 12 test probleminde uygulanarak hesaplamalı analizler yapılmıştır. Altıncı bölüm ise sonuçların değerlendirilmesine ayrılmıştır.

2. KRİGİNG META-MODELLERİ (KRİGİNG METAMODELS)

Bütün meta-modellerin amacı; $Z(\mathbf{x})$ rastsal süreç, $\mathbf{x} \in D$ ve $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)'$, $\mathbf{x}_i = (x_{1i}, \dots, x_{ki})' \forall i = 0, \dots, n$ gözlem noktaları için $\mathbf{Z} = (z(\mathbf{x}_1), \dots, z(\mathbf{x}_n))'$ olmak üzere yeni bir $\mathbf{x}_0 \in D$ noktası için $Z(\mathbf{x}_0)$ 'ın kestirim değeri olan $\hat{Z}(\mathbf{x}_0)$ 'ın bulunmasıdır.

Kriging yönteminde her yeni nokta için kestirimler, deney verilerine uygun varyogram veya korelogram modeli kullanılarak yeniden hesaplanan ağırlıkların doğrusal bileşimi olarak elde edilir. Kriging, ölçülen noktalar arasındaki istatistiki ilişkilere dayalı olduğundan sadece bir tahmin yüzeyi oluşturmaya yarayan bir teknik değil, aynı zamanda kestirim değerlerinin kesinliği ve doğruluğu hakkında da ölçüler sağlamaktadır. Bütün doğrusal kestirimciler arasında en küçük OHK'lı yansız tahmin edicidir. Literatürde kullanılan birçok Kriging türü vardır [9-11, 15, 16]. Kriging meta-modelleri yapısı gereği kesin kestirimcidir ve eğitim verisi olarak kullanılan tüm deney noktaları için sıfır hatalı kestirim değeri üretir [12, 17]. Kriging meta-modelleri, cevaplardaki değişimleri kapsayan,

yeterli sayıda deneysel veriden elde edilen farklı korelogram modelleri seçenekleri kullanabilirler. Model kurmadaki bu alternatifler nedeniyle esnek modellerdir [13, 14]. Bu çalışmada önerilen KÜK meta modelinin kestirim başarısını, literatürde yaygın olarak kullanılan OK ve ÜK meta-modelleri ile karşılaştırılarak dikkate alınan performans ölçütlerine göre incelenmiştir.

2.1. Varyogram ve Korelogram Analizi (Variogram and Correlogram Analysis)

$Z(\mathbf{x})$ rastsal sürecinde her iki gözlem değeri $Z(\mathbf{x}_i), Z(\mathbf{x}_i + h)$ arasındaki varyogram değeri Eş. 1 ile tahmin edilir [8].

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} (Z(\mathbf{x}_i) - Z(\mathbf{x}_i + h))^2 \quad (1)$$

Burada h gözlemler arasındaki uzaklık operatörü olup, $N(h)$ ise $Z(\mathbf{x}_i), Z(\mathbf{x}_i + h)$ gözlem çiftlerinin sayısıdır [18]. $Z(\mathbf{x}_i), Z(\mathbf{x}_i + h)$ gözlemleri arasındaki kovaryogram değerinin tahmini aşağıda Eş. 2 ve Eş. 3 ile verilmektedir.

$$\hat{c}(h) = \frac{1}{N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} (Z(\mathbf{x}_i) - \mu)(Z(\mathbf{x}_i + h) - \mu) \quad (2)$$

$$\hat{\gamma}(h) = \hat{c}(0) - \hat{c}(h) \quad (3)$$

Kriging ağırlıklarının hesaplanmasında varyogram veya kovaryogram yerine korelogram değerleri de kullanılmaktadır. Bu durumda, iki gözlem değeri $Z(\mathbf{x}_i), Z(\mathbf{x}_i + h)$ arasındaki korelogram Eş. 4 ile tahmin edilir.

$$\hat{r}(h) = \frac{\hat{c}(h)}{\hat{c}(0)} \quad (4)$$

Burada $\hat{r}(h)$ korelogram ve $\hat{c}(0)$ ise sürecin varyansının tahmin değerleridir. Her bir kestirim noktasında Kriging

ağırlıklarının hesaplanabilmesi için uygun bir teorik korelogram modelinin seçilmesi gereklidir. Teorik korelogram modeli deneysel korelogram verilerine uygun olmalıdır. Literatürde en çok kullanılan teorik korelogram modelleri aşağıda verilmektedir [10, 19]. Teorik korelogram modelleri Öklit uzaklığına göre Şekil 1'de görülmektedir.

$$\text{Gausyen Model} : r(h) = \exp\left(-\left(\frac{h}{\theta}\right)^2\right)$$

$$\text{Üstel Model} : r(h) = \exp\left(-\frac{h}{\theta}\right)$$

$$\text{Doğrusal Model} : r(h) = \max(1 - \theta h, 0)$$

2.2. Ordinary Kriging (Ordinary Kriging)

OK, ortalaması bilinen ancak yerel olarak değişen ve varyogram fonksiyonu bilinen durağan durumları ifade etmektedir. OK, konumsal istatistiklerin modellenmesinde kullanılır [9, 20]. $Z(\mathbf{x})$ için varsayılan model yapısı aşağıda Eş. 5 ile verilmektedir. Burada, μ süreç ortalamasını, $\varepsilon(\mathbf{x})$ ise beklenen değeri sıfır olan hata terimini göstermektedir.

$$Z(\mathbf{x}) = \mu + \varepsilon(\mathbf{x}) \quad (5)$$

OK kestirim modeli Eş. 6 ile ağırlık değerleri kısıtı ise Eş.7 ile verilmektedir.

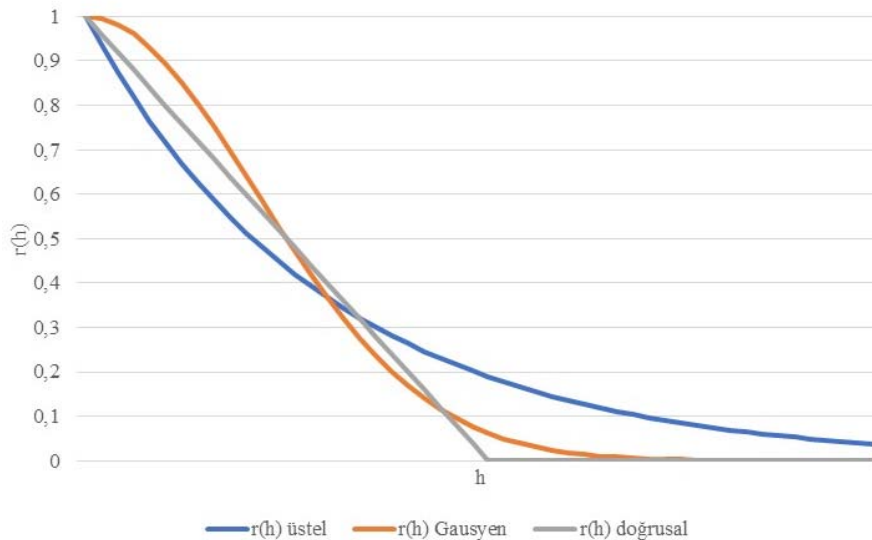
$$\hat{Z}(\mathbf{x}_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{x}_i) \quad (6)$$

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \quad (7)$$

Kestirim ağırlıklarını bulmak için Eş. 8 kullanılır.

$$\lambda_0 = R_0^{-1} \mathbf{r}_0 \quad (8)$$

OK eşitliklerinde kullanılan matris ve vektörler aşağıda verilmektedir. Buradaki, m değeri Lagrange değeridir.



Şekil 1. Öklit uzaklığına göre korelogram modelleri (Correlogram models according to Euclidean distance)

$$R_0 = \begin{bmatrix} R & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}' & 0 \end{bmatrix},$$

$$R = \begin{bmatrix} 1 & r(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \dots & r(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ r(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & 1 & \dots & r(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & r(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \dots & 1 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{r}_0 = (r(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_0), r(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_0), \dots, r(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_0), 1)',$$

$$\boldsymbol{\lambda}_0 = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n, m)'$$

$$\mathbf{1} = (1, \dots, 1)'$$

Yeni \mathbf{x}_0 noktası için OK kestirim değeri Eş. 9'da verildiği gibi değer vektörleri çarpımından elde edilir.

$$\hat{Z}(\mathbf{x}_0) = \boldsymbol{\lambda}' \mathbf{Z} \quad (9)$$

2.3. Üniversal Kriging (Universal Kriging)

ÜK, ortalaması bilinmeyen ancak fonksiyon yapısı bilinen, varyogram fonksiyonu bilinen, durağan olmayan durumları ifade etmektedir. ÜK, konumsal istatistiklerin modellenmesinde yaygın olarak kullanılır [9]. $Z(\mathbf{x})$ için varsayılan model yapısı Eş. 10 ile verilmektedir.

$$Z(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}) + \varepsilon(\mathbf{x})$$

$$\mu(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^b \beta_j f_j(\mathbf{x}) \text{ ve } f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_b(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in D \quad (10)$$

Burada, $f_j(\mathbf{x})$ drift fonksiyonunu ve b drift fonksiyonu sayısını gösterir. Doğrusal ortalama fonksiyonu ve karesel ortalama fonksiyonu sırasıyla aşağıda verilmektedir. Genellikle ÜK modelleri oluşturulurken Eş. 11 ve Eş. 12 ile verilen doğrusal ve karesel drift fonksiyonları kullanılır.

$$\mu(\mathbf{x}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i \quad (11)$$

$$\mu(\mathbf{x}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k \beta_{ij} x_i x_j \quad (12)$$

En iyi yansız doğrusal kestirimci Eş. 13 ile verildiği gibidir.

$$\hat{Z}(\mathbf{x}_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{x}_i) \quad (13)$$

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \quad (14)$$

Kestirim ağırlıklarını bulmak için Eş. 15 kullanılır.

$$\boldsymbol{\lambda}_u = R_u^{-1} \mathbf{r}_u \quad (15)$$

Eşitliklerde kullanılan matris ve vektörler aşağıda verilmektedir. Buradaki, m_1, \dots, m_b, m_0 değerleri Lagrange değerleridir.

$$F = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_b(x_1) & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_n) & \dots & f_b(x_n) & 1 \end{bmatrix},$$

$$R_u = \begin{bmatrix} R & F \\ F' & 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{r}_u = (r(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_0), r(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_0), \dots, r(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_0), f_1(\mathbf{x}_0), \dots, f_b(\mathbf{x}_0), 1)',$$

$$\boldsymbol{\lambda}_u = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n, m_1, \dots, m_b, m_0)'$$

Yeni bir \mathbf{x}_0 noktası için ÜK kestirim edicisi Eş. 16'da verilmektedir.

$$\hat{Z}(\mathbf{x}_0) = \boldsymbol{\lambda}' \mathbf{Z} \quad (16)$$

3. KESİRLİ ÜNİVERSAL KRİGİNG META-MODELİ (FRACTIONAL UNIVERSAL KRIGING METAMODEL)

Bu çalışmada, durağan olmayan süreçlerin modellenmesinde Kriging meta-modelinde kullanılan doğrusal ve karesel drift fonksiyonlu ÜK modellerinin yetersiz kaldığı problemler için KÜK adı verilen yeni bir meta-model önerilmektedir. Girdi seti ile çıktı seti arasındaki ilişki her zaman doğrusal veya karesel drift fonksiyonları ile açıklanamadığı durumda daha yüksek dereceli drift fonksiyonlarına gereksinim olacaktır. Burada, ÜK meta-modelinde drift fonksiyonu olarak birinci ve ikinci dereceden regresyon modelleri yerine, kesirli değerler de alabilen değişkenlerin bir güç fonksiyonunun kullanılması önerilmiştir.

Genel olarak k değişkenli bir problem üzerinde çalışılırken, ÜK ağırlıklarını belirlemede kullanılan korelogram matrisinin boyutu, doğrusal drift fonksiyonu için $(n+k+1)$ $(n+k+1)$, karesel drift fonksiyonu için $(n+2k+k(k-1)/2+1)$ $(n+2k+k(k-1)/2+1)$ 'dir. Önerilen KÜK meta-modeli hesaplamalarında kullanılan varyogram, kovaryogram ve korelogram matrislerinin boyutu $(n+k+1)$ $(n+k+1)$ 'dir. Kriging ağırlıkları bu nedenle kolay hesaplanabilmektedir. Ayrıca drift fonksiyonunun kesirli dereceden değer alabilmesi de karmaşık sistemlerin veya problemlerin benzetim çıktıklarına uygun kriging meta-modelinin seçilmesinde esneklik sağlamaktadır. Drift fonksiyonunun kesirli dereceden olması durumunda girdi değişkenleri negatif değerli ise özel bir kodlama modeliyle dönüştürülmelidir. Bu çalışmada önerilen KÜK meta-modelinin amacı benzetimde girdi-çıkıtı ilişkisini en iyi şekilde temsil edecek en uygun meta-modelin kurulmasını sağlamaktır.

KÜK model varsayımları genelde ÜK ile aynıdır. Sadece ortalama ve drift fonksiyonu yapısı farklı olup Eş. 17 ve Eş. 18'de verildiği gibidir.

$$\mu(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^b \beta_j f_j(\mathbf{x}) \quad (17)$$

$$\mu(x_i) = \sum_{j=1}^k \beta_j x_{ij}^p \text{ her } i \text{ için ve } 0 < p \leq P, p \neq 1 \quad (18)$$

P 'nin büyüklüğü meta-modelin geçerliliğinin araştırılması aşamasında kesinleştirilir. Daha iyi çözüm bulana kadar p değeri artırılarak modelin geçerlemesi yapılır. Tahmin ağırlıklarını bulmak için Eş. 19 kullanılır.

$$\boldsymbol{\lambda}_u = R_u^{-1} \mathbf{r}_u \quad (19)$$

Burada kullanılan matris ve vektörler aşağıda verilmektedir.

$$F = \begin{bmatrix} x_{11}^p & \dots & x_{1k}^p & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1}^p & \dots & x_{nk}^p & 1 \end{bmatrix},$$

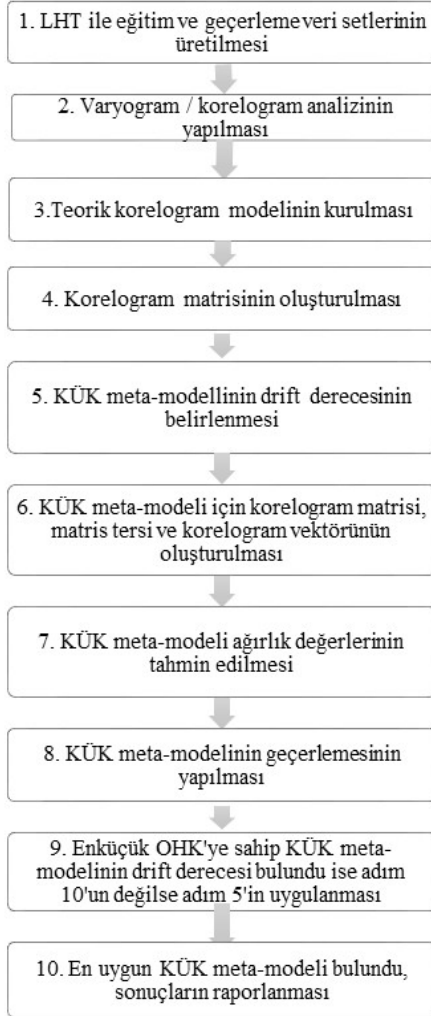
$$R_u = \begin{bmatrix} R & F \\ F' & 0 \end{bmatrix},$$

$\mathbf{r}_u = (r(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_0), r(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_0), \dots, r(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_0), x_{01}^p, \dots, x_{0k}^p, 1)'$
ve $\boldsymbol{\lambda}_u = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n, m_1, \dots, m_b, m_0)'$.

Yeni \mathbf{x}_0 noktası için KÜK kestirimcisi Eş. 20'de ile elde edilir.

$$\hat{\mathbf{Z}}(\mathbf{x}_0) = \boldsymbol{\lambda}' \mathbf{Z} \quad (20)$$

KÜK meta-modelinin kurulma aşamalarını içeren akış şeması Şekil 2 ile verilmektedir.



Şekil 2. KÜK meta-modeli akış şeması
(Flow chart of FUK metamodel)

4. DENEY TASARIMI VE META-MODEL (EXPERIMENTAL DESIGN AND METAMODEL)

Deney tasarımı benzetimin ilk ve en önemli aşamasıdır [21]. Modelin hangi girdi seti için çalıştırılacağı bu aşamada belirlenir. Kriging için genellikle Latin hiperküp tasarım (LHT) gibi alan doldurma yöntemleri kullanılır. Benzetim çalışmalarında (özellikle stokastik benzetimde) deney verileri benzetim modelinin karmaşıklığı ve boyutu nedeniyle yüksek maliyetli olduğundan makul sayıda deneyle çalışmak oldukça önemlidir. Ancak, kriging

ağırlıkları konumsal ilişkiyi gösteren varyogram, kovaryogram veya korelogram modellerini kullanarak hesaplandığından dolayı bu analizleri yapacak yeterli sayıda deney verisine gereksinim duyulmaktadır. Literatürdeki çalışmalarda kabul edilebilir sayıda deney ile çalışılmıştır. Örneğin; Simpson vd. [22] ortogonal diziliş ile elde edilen 25 deneyi eğitim veri seti olarak, 25 farklı deneyi de kriging modellerinin geçerlemesinde kullanmışlardır. Van Beers ve Kleijnen [11] stokastik benzetimde OK ile iki farklı uygulama yapmışlardır. Birinci uygulamada, LHT ile elde edilen 20 deneyi eğitim veri seti olarak, 5 deneyi de çapraz geçerleme için kullanmışlardır. İkinci uygulamada ise yine aynı tasarım yöntemi ile elde ettikleri 21'lik veri setini eğitim için, 4'lük veri setini ise çapraz geçerleme için kullanmışlardır. Van Beers ve Kleijnen [12] 36 deneyi eğitim veri setinde, 10 deneyden oluşan bağımsız bir veri setini ise geçerleme için kullanmışlardır. Biles vd. [1] araştırmalarında OK meta-modeli kurmak için 20 deneyi LHT uyarınca yapmışlardır. Zekarifar vd. [23] ise (s,S) stok sistemi probleminde kriging meta-modeli kurmak için LHT ile 20 deney yapmışlardır. Ancak araştırmalarında meta-model geçerlilik analizi uygulamamışlardır. Çalışmamızda önerilen KÜK metamodeli kurmak için rastsal oluşturulan birçok LHT arasından enbüyük toplam uzaklığa sahip olan LHT tasarımı seçilmiştir.

4.1. Latin Hiperküp Tasarım (Latin Hypercube Design)

Benzetim sonuçlarını en iyi şekilde tahmin edecek uygun kriging meta-modelinin kurulabilmesi için LHT gibi yüzey doldurma yöntemlerinden cevap yüzeyinde homojen dağılım sağlayabilecek bir yöntemle faktör aralıklarında tasarım yapılmalıdır. LHT, Mc Kay vd. [24] tarafından geliştirilmiştir. Her faktörün alacağı değer düzeyi tasarımda bir kez yer alır. Tüm faktörler aynı sayıda düzeye sahiptir. Düzey sayısı kadar deney tasarlanır. Bu tasarımda düzeylerin permutasyonu rastsal olarak belirlenir. Kleijnen [6], LHT'nin kriging için en uygun tasarım olduğunu belirtmektedir.

LHT'lerin rastsal oluşturulması iki problem yaratabilmektedir. Birinci problem girdi değişkenlerinin çok yüksek korelasyona sahip olabilmesidir. İkincisi ise, deney bölgesinde geniş alanların incelenmesi mümkün olmayabilmektedir. Bu problemleri gidermek için literatürde birkaç çalışma yapılmıştır [25]. Owen [26] ve Tang [27] ortogonal diziliş dayalı LHT'leri önermişlerdir. Owen [28] girdi değişkenleri arasındaki korelasyonları enküçükmeyi sağlamıştır. Tang [29] ise girdi değişkenlerinden kaynaklanan yüksek dereceli etkiler arasındaki korelasyonu dikkate alarak bu yaklaşımı genişletmiştir. Ye [30] tüm girdi değişkenlerinin sıfır korelasyona sahip olduğu ortogonal sütuna dayalı LHT'ler için farklı bir yaklaşım önermiştir. Çalışmamızda ise yukarıda da belirtildiği gibi rastsal olarak oluşturulmuş birçok LHT arasından enbüyük toplam uzaklığa sahip tasarım kullanılmıştır.

4.2. Meta-Modelin Geçerliliği (Validation of Metamodel)

Meta-modeller, modelin yerine kullanılmadan önce hassas hesaplama gerektiren süreçler için geçerliliğinin gösterilmesi

gereklidir. Model yerine kullanılacak meta-modelin türünün seçimi ilk adımdır. Bir meta-modelin geçerliliği ya deney noktalarındaki kestirim doğruluğu ya da model kurulurken kullanılmayan yeni noktalar için yapılan kestirim doğruluğunun hesaplanması ile gösterilir [14]. Simpson [31] çalışmasında Kiging meta-modelinde, modelin geçerlemesi için rassal olarak belirlenen bağımsız veri setinin kullanılmasını önermiştir. Bu çalışmada da bu yöntem tercih edilmiştir. Aşağıda Eş. 21 ve Eş. 22 ile yaygın kullanılan iki başarımlı ölçütü verilmektedir. Burada $Z(\mathbf{x}_i)$ deney değerini, $\hat{Z}(\mathbf{x}_i)$ meta-modelden elde edilen kestirim değerini, $\bar{Z} = \mu$ ise deney değerlerinin ortalamasını göstermektedir.

$$OHK = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Z(\mathbf{x}_i) - \hat{Z}(\mathbf{x}_i))^2 \quad (21)$$

$$EHK = \text{enb}_{i=1, \dots, n} \{ (Z(\mathbf{x}_i) - \hat{Z}(\mathbf{x}_i))^2 \} \quad (22)$$

5. UYGULAMA: TEST PROBLEMLERİ VE KESİRLİ ÜNİVERSAL KRİGİNG META-MODELİ

(APPLICATION: TEST PROBLEMS AND FRACTIONAL UNIVERSAL KRIGING METAMODEL)

Çalışmanın bu bölümünde, KÜK meta-modeli literatürden alınan 12 adet iki ve üç değişkenli test fonksiyonları için Şekil 2’de verilen akış şemasının adımları izlenerek kurulmuş ve başarımları OK ve ÜK meta-modellerine göre incelenmiştir. Test problemleri sırasıyla; Adjiman, Deckkers-Aarts, Altı hörgüçlü deve sırtı, iki boyutlu Styblinski–Tang, Zettl, Shubert, üç boyutlu Styblinski–Tang, Michaelwicz, Rosenbrock, Schwefel, Isigami ve Perm fonksiyonlarıdır [32, 33]. Bu fonksiyonlar karmaşık cevap yüzeyine sahip oldukları için seçilmiştir.

Geçerleme analizlerinde kullanılan test fonksiyonları ve özellikleri aşağıda verilmektedir:

Test problemi 1: Adjiman fonksiyonu Eş. 23 ile verilmiştir. Adjiman fonksiyonunun yüzey gösterimi Şekil 3’te görülmektedir. Fonksiyonun birçok yerel ancak bir genel en küçük çözümü vardır.

$$f(x) = \cos(x_1) \sin(x_2) - \frac{x_1}{(x_2^2 + 1)} \quad (23)$$

$$-1 \leq x_1 \leq 2, -1 \leq x_2 \leq 1$$

Test problemi 2: Deckkers-Aarts fonksiyonu Eş. 24 ile verilmiştir. Deckkers-Aarts fonksiyonunun yüzey gösterimi Şekil 4’te verilmiştir. Fonksiyon birçok yerel ve iki genel en küçük çözüme sahiptir.

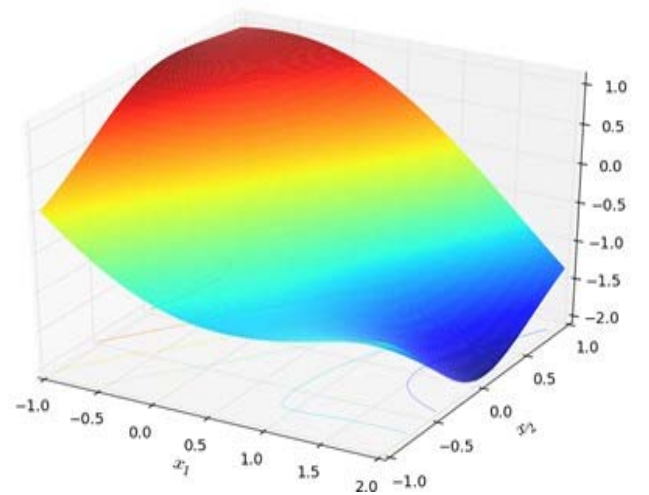
$$f(x) = 10^{-5} (10^5 x_1^2 + x_2^2 - (x_1^2 + x_2^2)^2 + 10^{-5} (x_1^2 + x_2^2)^4) \quad (24)$$

$$-20 \leq x_1, x_2 \leq 20$$

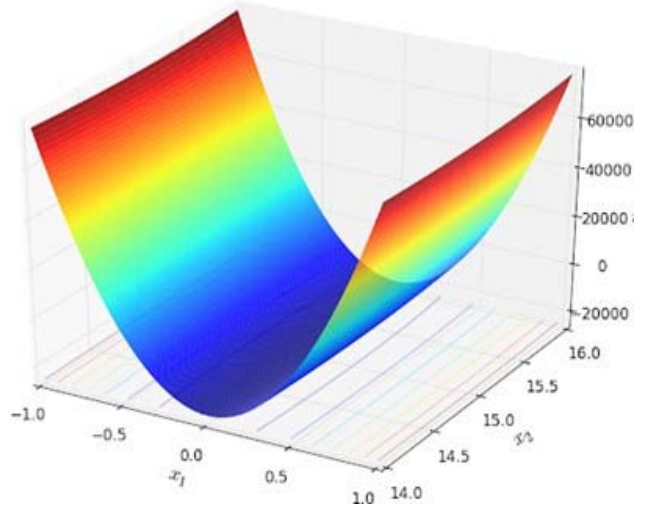
Test problemi 3: Altı hörgüçlü deve sırtı fonksiyonu Eş. 25 ile verilmiştir. Fonksiyonunun yüzey gösterimi Şekil 5’te görülmektedir. Fonksiyonunun altı yerel en küçük çözümü vardır, bunların ikisi geneldir.

$$f(x) = \left(4 - 2.1x_1^2 + \frac{1}{3}x_1^4 \right) x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2 \quad (25)$$

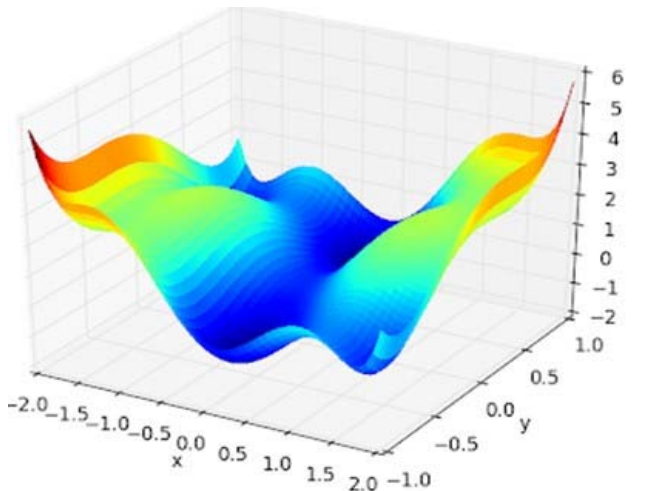
$$-3 \leq x_1 \leq 3, -2 \leq x_2 \leq 2$$



Şekil 3. Adjiman fonksiyonu (Adjiman function)



Şekil 4. Deckkers-Aarts fonksiyonu (Deckkers-Aarts function)

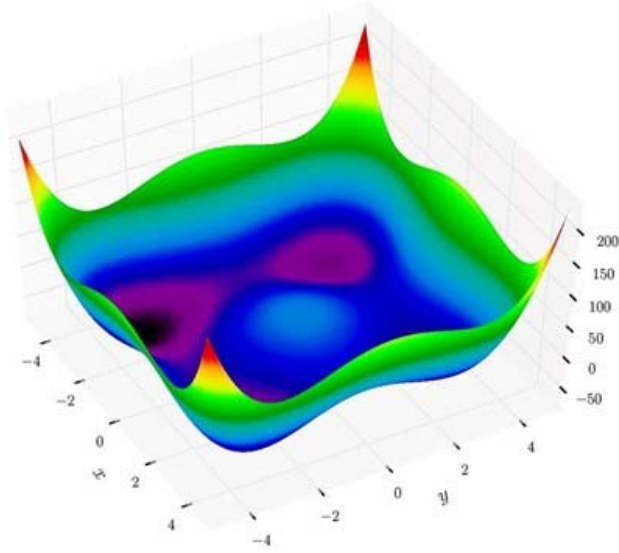


Şekil 5. Altı hörgüçlü deve sırtı fonksiyonu (Six hump camel back function)

Test problemi 4: Styblinski–Tang fonksiyonu aşağıda Eş. 26 ile verilmektedir. Styblinski–Tang fonksiyonunun yüzey fonksiyonu gösterimi Şekil 6’da görülmektedir. Fonksiyonu birçok yerel ancak bir genel en küçük çözüme sahiptir.

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i) \quad (26)$$

$$-5 \leq x_1, x_2 \leq 5$$

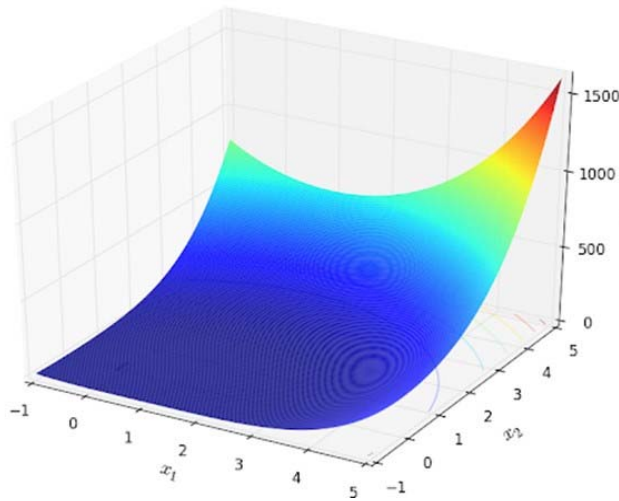


Şekil 6. Styblinski–Tang fonksiyonu (Styblinski–Tang function)

Test problemi 5: Zettl fonksiyonu Eş. 27 ile verilmiştir ve yüzey gösterimi ise Şekil 7’de gösterildiği gibidir. Bu fonksiyon birçok yerel ancak bir genel en küçük çözüme sahiptir.

$$f(x) = 0.25x_1 + (x_1^2 - 2x_1 + x_2^2)^2 \quad (27)$$

$$-5 \leq x_1, x_2 \leq 10$$



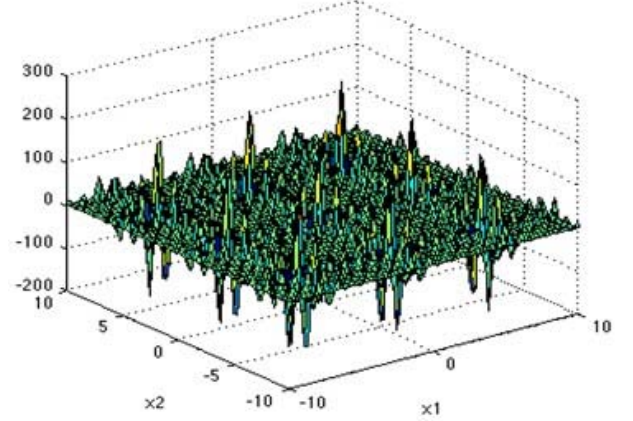
Şekil 7. Zettl fonksiyonu (Zettl function)

Test problemi 6: Shubert fonksiyonu Eş. 28 ile verilmiştir. Shubert fonksiyonunun yüzey gösterimi Şekil 8’de

gösterilmiştir. Fonksiyon 18 genel ve 760 yerel en küçük çözüme sahiptir.

$$f(x) = \left(\sum_{i=1}^5 \cos((i+1)x_1 + i) \right) \left(\sum_{i=1}^5 \cos((i+1)x_2 + i) \right) \quad (28)$$

$$-10 \leq x_1, x_2 \leq 10$$



Şekil 8. Shubert fonksiyonu (Shubert function)

Test problemi 7: Üç boyutlu Styblinski–Tang fonksiyonu Eş. 29 ile verildiği gibidir.

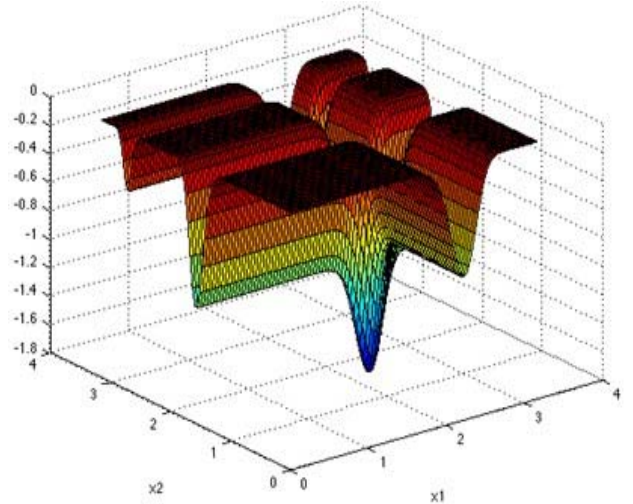
$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i) \quad (29)$$

$$-5 \leq x_i \leq 5, 1 \leq i \leq 3$$

Test problemi 8: Michaelwicz fonksiyonu Eş. 30 ile verilmiştir. Bu fonksiyonun birçok yerel ve bir genel en küçük çözümü vardır. Üç boyutlu görünümü Şekil 9 ile gösterilmektedir.

$$f(x) = - \sum_{i=1}^k \sin(x_i) \left(\sin\left(\frac{ix_i^2}{\pi}\right) \right)^{2m} \quad (30)$$

$$0 \leq x_i \leq \pi, 1 \leq i \leq 3, m = 10$$

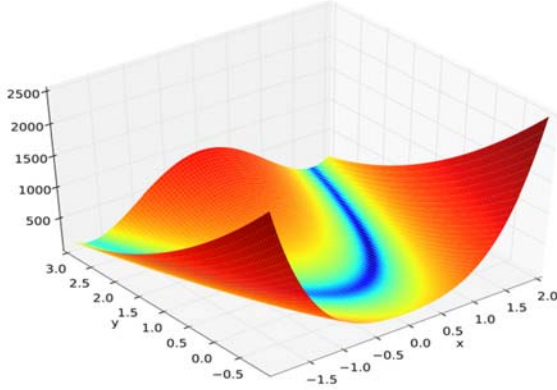


Şekil 9. Michaelwicz fonksiyonu (Michaelwicz function)

Test problemi 9: Rosenbrock fonksiyonu Eş. 31 ile verilmiştir. Fonksiyon bir genel en küçük çözüme sahiptir ve dar, parabolik bir vadide şeklinde yapısı vardır. Çözümü zor bir problemidir. Üç boyutlu görünümü Şekil 10 ile verilmektedir.

$$f(x) = \sum_{i=1}^2 (100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2) \quad (31)$$

$$-2 \leq x_i \leq 2, 1 \leq i \leq 3$$



Şekil 10. Rosenbrock fonksiyonunu (Rosenbrock function)

Test problemi 10: Schwefel fonksiyonu Eş. 32 ile verilmiştir.

$$f(x) = \sum_{i=2}^3 ((x_i - 1)^2 + (x_1 - x_i^2)^2) \quad (32)$$

$$0 \leq x_i \leq 10, 1 \leq i \leq 3$$

Test problemi 11: Ishigami fonksiyonu [33] Eş. 33 ile verilmiştir. Görüldüğü gibi fonksiyon, doğrusal ve monoton olmayan bir yapıdadır.

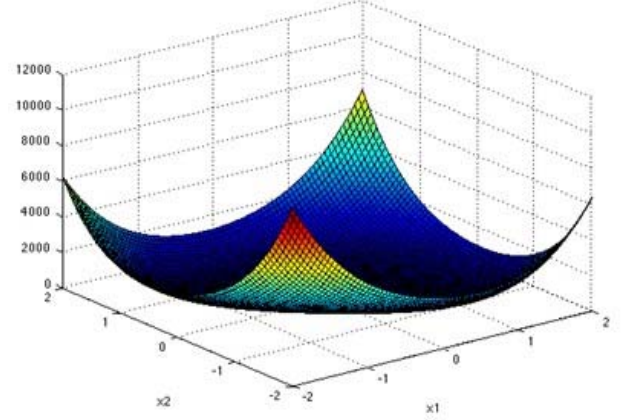
$$f(x) = \sin(x_1) + 0.7\sin^2(x_2) + 0.1x_3^2\sin(x_1) \quad (33)$$

$$-\pi \leq x_i \leq \pi, 1 \leq i \leq 3$$

Test problemi 12: Perm 0, d, β fonksiyonu Eş. 34 ile verilmiştir. Bu fonksiyonda $k=3$ ve $\beta=10$ olarak ele alınmıştır. Perm fonksiyonu çanak görünümündedir ve birçok yerel ancak bir genel en küçük çözüme sahiptir. Yüzey gösterimi Şekil 11 ile verilmektedir.

$$f(x) = \sum_{i=1}^k (\sum_{j=1}^k (j + \beta)(x_j^i - \frac{1}{j}))^2 \quad (34)$$

$$-k \leq x_i \leq k, 1 \leq i \leq k$$



Şekil 11. Perm 0, d, β fonksiyonu (Perm function)

KÜK meta-modellerinin kurulmasında kullanılan her bir test problemi için girdi değişken sayısı, eğitim veri seti boyutu ve kullanılan korelogram modeli (Bölüm 4.2) Tablo 1'de, OHK ve EHK değerleri ise Tablo 2 ve Tablo 3'de verilmektedir.

Dikkate alınana test fonksiyonları için meta-modellerinin OHK başarımlarına göre karşılaştırmaları Tablo 2 ile verilmektedir. Burada, Adjiman fonksiyonu için OK, Deckkers-Aarts fonksiyonu için ÜK (karesel drift) meta-modelleri daha iyi, Michaelwicz fonksiyonu için ise tüm Kriging meta-modelleri benzer başarı gösterirken diğer tüm test fonksiyonları için KÜK meta-modellerinin çok daha iyi başarımlar gösterdiği (tahmin ürettikleri) görülmektedir. Örneğin, altı hörgüçlü deve sırtı problemi için KÜK meta-modelinin OHK değeri 3,78 iken ÜK (karesel driftli) meta-modelinde 222,84, ÜK (doğrusal driftli) meta-modelinde 311,66, OK meta-modelinde ise 473,02'tür. Benzer şekilde, Styblinski-Tang 1 problemi için KÜK meta-modelinin OHK değeri 49 iken ÜK (karesel driftli) meta-modelinde 1209, diğer meta-modellerde ise 1950'nin üzerindedir. Schwefel probleminde ise benzer şekilde, KÜK meta-modelinin OHK

Tablo 1. Test problemleri için seçilen korelogram modelleri (Selected correlogram models for the test problems)

Fonksiyon Adı	Girdi Değişkeni Sayısı	Eğitim Veri Sayısı	Korelogram Modeli
Adjiman	2	26	$r(h) = \exp(-(h/1.71)^3)$
Deckkers-Aarts	2	26	$r(h) = \exp(-h/28.77)$
Altı hörgüçlü deve sırtı	2	26	$r(h) = \exp(-(h/3.7)^2)$
Styblinski-Tang 1	2	26	$r(h) = \exp(-h/7.38)$
Zettl	2	26	$r(h) = \exp(-(h/11.04)^2)$
Shubert	2	26	$r(h) = \exp(-h/18.2)$
Styblinski-Tang 2	3	25	$r(h) = \exp(-h/11.4)$
Michaelwicz	3	25	$r(h) = \exp(-h/1.577)$
Rosenbrock	3	36	$r(h) = \exp(-h/4.2)$
Schwefel	3	26	$r(h) = \exp(-(h/7.8)^2)$
Isigami	3	28	$r(h) = \exp(-h/6.98)$
Perm	3	28	$r(h) = \exp(-h/6.19)$

değeri 11093 olup diğer meta-modeller arasında en küçük OHK'ya sahip ÜK (karesel driftli) meta-modelinin değeri ise 191215 olup yaklaşık 17 katı kadar büyüktür.

Test fonksiyonları için kriging meta-modellerinin EHK başarımlarını ölçütüne göre karşılaştırmaları Tablo 3'de verilmektedir. Adjiman fonksiyonu için OK, Isıgami fonksiyonu için ÜK (doğrusal drift), Deckkers-Aarts, Zettl, Michaelwicz, Rosenbrock fonksiyonları için ÜK (karesel drift) ve diğer tüm test fonksiyonları için KÜK meta-

modellerinin EHK değerleri bakımından daha iyi olduğu görülmektedir. Örneğin, altı hörgüçlü deve sırtı probleminde KÜK meta-modelinde EHK değeri 54,61 olup OK, ÜK (doğrusal drift) ve ÜK (karesel drift) 'nın EHK değerlerinin (10980,32, 6857,83 ve 4776,88) en küçüğünün yaklaşık 1/88'i kadardır. Tüm test problemleri için seçilen KÜK meta-modellerinin diğer kriging meta-modellerine göre başarımları $(OHK_m - OHK_k) / OHK_k * 100$ göreceli sapma yüzdesi dikkate alınarak da incelenmiş ve sonuçlar Tablo 4'te verilmiştir. Formüldeki OHK_m karşılaştırılan meta-modelin

Tablo 2. Kriging meta-modellerin OHK değerleri (The MSE values of Kriging metamodels)

Fonksiyon Adı	Model geçерleme için deney sayısı	KÜK (p)	OHK			
			OK	ÜK*	ÜK**	KÜK
Adjiman	71	6	0,031	0,791	1,047	0,055
Deckkers-Aarts	73	2	1231,6	1231,5	7,5	8
Altı hörgüçlü deve sırtı	71	8	473,02	311,66	222,84	3,78
Styblinski-Tang 1	71	6	1970	1950	1209	49
Zettl	71	2	99544	83135	5312	5040
Shubert	73	2	453,1	456,7	477,8	452,9
Styblinski-Tang 2	71	8	4294	4400	5022	345,1
Michaelwicz	68	3	0,01865	0,01874	0,01793	0,01783
Rosenbrock	70	0,5	351263	316745	351199	265504
Schwefel	73	4,5	993855	557897	191215	11093
Isıgami	73	4	8,39	8,35	8,49	7,71
Perm	73	4	2,8E+09	2,9E+09	1,5E+09	8,83E+08

* Doğrusal drift, ** Karesel drift

Tablo 3. Kriging meta-modellerinin EHK değerleri (The Maximum Squared Error values of Kriging metamodels)

Fonksiyon Adı	Model geçерleme için deney sayısı	KÜK (p)	EHK			
			OK	ÜK*	ÜK**	KÜK
Adjiman	71	6	0,528	24,222	31,078	1,98
Deckkers-Aarts	73	2	15 640	15791	402	439
Altı hörgüçlü deve sırtı	71	8	10 980,32	6 857,83	4776,88	54,61
Styblinski-Tang 1	71	6	42 934	37 485	19062	529
Zettl	71	2	2 838 571	2 319 252	155 709	179 437
Shubert	73	2	5 346,9	5 382,5	5504,6	5250,2
Styblinski-Tang 2	71	8	63 858,7	67 769,6	52568,2	4090,9
Michaelwicz	68	3	0,7474	0,8099	0,7316	0,7549
Rosenbrock	70	0,5	9 154 074	6 582 970	4 106 256	8 403 749
Schwefel	73	4,5	10 501 424	11 357 844	3029480	293753
Isıgami	73	4	136,87	134,01	172,46	183,74
Perm	73	4	3,8259E+10	37151020516	10292670628	31170992514

* Doğrusal drift, ** Karesel drift

Tablo 4. KÜK meta-modelinin diğer kriging meta-modellerine göre sapma yüzdesi (The percent deviation of FUK metamodel from other kriging meta-models)

Fonksiyon Adı	$(OHK_m - OHK_k) / OHK_k * 100$		
	OK	ÜK*	ÜK**
Adjiman	0	2438	3261
Deckkers-Aarts	16226	16224	0
Altı hörgüçlü deve sırtı	14185	9552	6875
Styblinski-Tang 1	3953	3912	2388
Zettl	194445	160684	560
Shubert	0	1	6
Styblinski-Tang 2	1144	1175	1355
Michaelwicz	3	5	1
Rosenbrock	32	19	32
Schwefel	8859	4929	1624
Isıgami	9	8	10
Perm	220	226	70

* Doğrusal drift, ** Karesel drift

OHK değeridir. OHK_k ise KÜK meta-modelinin OHK değeridir. Tablo 4'te test problemlerinin %83,3'ünde OK, ÜK (doğrusal drift) ve ÜK (karesel drift) meta-modellerinin KÜK meta-modeline göre çok yüksek sapma yüzdesine sahip olduğu görülmektedir. Bu sonuçlara göre Adjiman ve Shubert fonksiyonları için OK, Deckkers-Aarts fonksiyonu için ÜK (karesel drift) ve diğer tüm test fonksiyonları için KÜK meta-modellerinin daha iyi çözüm ürettikleri görülmektedir. Örneğin, altı hörgüçlü deve sırtı problemi için KÜK meta-modeli karesel driftli ÜK meta-modelinden % 6875 daha iyi bir tahmin modelidir. Bu oran Styblinski–Tang 1 için % 2388, Styblinski–Tang 2 için %1144 ve Schwefel için ise % 1624'dür.

Altı hörgüçlü deve sırtı, Styblinski–Tang, Zettl, Schwefel ve Perm fonksiyonları için KÜK meta-modelinin diğer kriging meta-modellerine göre çok daha iyi kestirim yapabildiği görülmektedir. Bu fonksiyonlar diğer fonksiyonlara göre girdi/çıkıtı ilişkisi bakımından karmaşık ve zor fonksiyonlardır. KÜK meta-modeli asıl karmaşık ve zor fonksiyonlar için önerilmiştir. Sonuç olarak, KÜK meta-modeli ile karmaşık ve zor problemler için girdi-çıkıtı ilişkisinin çok daha iyi açıklandığı, diğer bir deyişle çok daha iyi kestirim yapılabildiği ve böylece hedeflenen amacın sağlandığı görülmüştür.

6. SONUÇLAR (CONCLUSIONS)

Analitik modellerle çözümü zor olan veya mümkün olmayan problemlere çözüm arayışı içinde olan araştırmacıların benzetim ile modellemeye ve özellikle benzetim eniyilemesine olan ilgileri sürekli olarak artmaktadır. Bu nedenle benzetim hem hizmet sektöründe hem de imalat sektöründe sistemlerin modellenmesi için sıklıkla kullanılan bir modelleme tekniğidir. Meta-model ise modelin modeli olarak benzetim modeli ile deneyler yapmanın maliyetinin yüksek olduğu durumlarda; girdi-çıkıtı ilişkisini veren bir özet model olarak benzetim modelleri yerine kullanılmaktadır.

Bu çalışmada girdi seti ile çıkıtı seti arasındaki ilişkinin doğrusal veya karesel drift fonksiyonları ile açıklanamadığı durumlar için KÜK meta-modeli önerilmiştir. KÜK meta-modeli daha yüksek dereceli drift fonksiyonları kullanan bir model olup ÜK meta-modelinin bir uzantısıdır. KÜK meta-modelinde kesirli değerler de alabilen değişkenlerin bir güç fonksiyonu kullanılmaktadır.

Önerilen KÜK meta-modelinin başarısı OK, doğrusal ve karesel drift fonksiyonlu ÜK meta-modellerine göre, iki ve üç boyutlu test fonksiyonları üzerinde değerlendirilmiş, matematiksel ve istatistiksel analizler ile sonuçlar ortaya konmuştur. Analiz sonuçlarına göre, OHK başarımlarını ölçütü dikkate alındığında, Adjiman ve Deckkers-Aarts test problemleri hariç olmak üzere diğer problemlerin tamamında KÜK meta-modelinin üstün bir performans ile daha iyi kestirim yapabildiği gösterilmiştir. Az sayıda veri ile kurulabilen, kestirim başarısı yüksek olan KÜK meta-modeli gerek belirli gerekse rassal benzetim modellerinin eniyilemesinde veya duyarlılık analizinde daha kaliteli çözümler üretmemize olanak verecek özelliklere sahiptir.

Gelecek çalışmalarda, girdi değişkeni sayısının daha fazla olduğu durumlar için, örneğin üç ve üçten büyük boyutlu problemler için KÜK meta-modelinin kullanılabilirliği ile ilgili analizler, eniyileme algoritmaları ile bütünleştirilmiş benzetim eniyilemesi konusunda araştırmalar yapmanın değerli olacağı düşünülmektedir.

TEŞEKKÜR (ACKNOWLEDGEMENT)

Bu çalışmanın tamamlanması sürecinde yaptıkları değerli katkılar için Prof. Dr. Fulya Altıparmak ve Doç. Dr. Ebru Angun'a teşekkürü borç biliriz.

KAYNAKLAR (REFERENCES)

1. Biles, W.E., Kleijnen, J.P.C., Van Beers, W.C.M., Van Nieuwenhuyse, I., Kriging metamodeling in constrained simulation optimization: an explorative study, Proceedings of the 2007 Winter Simulation Conference, 355-362, 2007.
2. Barton, R.R., Simulation metamodels, Proceedings of the 1998 Winter Simulation Conference, 167-174, 1998.
3. Kleijnen, J.P.C., Regression metamodels for generalizing simulation results, IEEE Transactions on systems, man and cybernetics, SMC-9, 2, 93-96, 1979.
4. Barton, R.R., Tutorial: simulation metamodeling, Proceedings of the 2015 Winter Simulation Conference, 1765-177, 2015
5. Myers, R.H., Montgomery D.C. and Anderson-Cook, C.M., Response surface Methodology, 3. ed., John Wiley & Sons, Inc, New York, USA, 689, 2009.
6. Kleijnen, J.P.C., Kriging metamodeling in simulation: a review, European Journal of Operational Research, 192, 707-716, 2009.
7. Simpson T.W., Peplinski J.D., Koch P.N., Allen J.K., On the use of statistics in design and the implications for deterministic computer experiments, Proceedings of DETC'97, 1997 ASME Design Engineering Technical Conferences, Sacramento, California, September 14-17, 1997.
8. Matheron, G., Principles of geostatistics, Economic Geology, 58, 1246-1266, 1963.
9. Cressie, N.A.C., Statistics for Spatial Data, A Wiley-Interscience publication, New York, 1993.
10. Sacks, J., Welch, W.J., Mitchell, T.J., Wynn, H.P., Design and analysis of computer experiments, Statistical Science, 4, 409-435, 1989.
11. Van Beers, W., Kleijnen, J.P.C., Kriging for interpolation in random simulation, Journal of the Operational Research Society, 54, 255-262, 2003.
12. Van Beers W., Kleijnen, J.P.C., Kriging interpolation in simulation: a survey, Technical report, Department of Information Management, Tilburg University, 2004.
13. Simpson, T., Mauery, T.M., Korte, J.J., Mistree, F., Kriging models for global approximation in simulation-based multidisciplinary design optimization. AIAA Journal, 39 (12), 2233-2241, 2001.
14. Martin, J.D., Simpson, T., On the use of kriging models to approximate deterministic computer models, Proceedings of DETC'04, 1-12, 2004.

15. Mehdad, E., Kleijnen, J.P.C., Efficient global optimisation for black-box simulation via sequential intrinsic Kriging, *Journal of the Operational Research Society*, 1-13, 2018.
16. Balaban, M., Dengiz, B., Lognormal ordinary kriging metamodel in simulation optimization, *Operations Research and Applications: An International Journal (ORAJ)*, 5 (1), 1-12, 2018.
17. Chen, V.C.P., Tsui, K.L., Barton, R.R., Allen, J.K., A review of design and modeling in computer experiments, *Handbook of Statistics*, 22, 231–261, 2003.
18. Myers, D.E., On variogram estimation, *The frontiers of statistical scientific theory & industrial applications*, 2, 261-266, 1991.
19. Mitchell, T.J., Morris, M.D., Bayesian design and analysis of computer experiments: two examples. *Statistica Sinica*, 2, 359–379, 1992.
20. Journel, A.G. and Huijbregts C.J., *Mining Geostatistics* Academic Press, London, UK, 1978.
21. Jin, R., Chen, W., Sudjianto A., On Sequential Sampling for Global Metamodeling in Engineering Design, *ASME 2002 Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference Montreal, Canada, September 29th October, 1-11, 2002.*
22. Simpson, T., Mauery, T.M., Korte, J.J., Mistree, F., Kriging models for global approximation in simulation-based multidisciplinary design optimization, *AIAA Journal*, 39 (12), 2233-2241, 2001.
23. Zakerifar, M., Biles, W.E., Evans, G.W., Kriging metamodeling in multiple-objective simulation optimization, *Simulation*, 87 (10), 843-856, 2011.
24. Mc Kay, M.G.D., Beckman, R.J., Conover, W.J., A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code, *Technometrics*, 21, 239–245, 1979.
25. Joseph, V.R., Hung, Y., Orthogonal-maximin Latin hypercube designs, *Statistica Sinica*, 18, 171- 186, 2008.
26. Owen, A.B., Orthogonal arrays for computer experiments, integration and visualization, *Statistica Sinica*, 2, 439-452, 1992.
27. Tang, B., Orthogonal array-based Latin hypercubes. *Journal of the American Statistical Association*, 88, 1392-1397, 1993.
28. Owen, A.B., Controlling correlation in Latin hypercube samples, *Journal of the American Statistical Association*, 89, 1517-1522, 1994.
29. Tang, B., Selecting Latin hypercubes using correlation criteria, *Statistica Sinica*, 8, 965-977, 1998.
30. Ye, K.Q., Orthogonal column Latin hypercubes and their application in computer experiments, *Journal of the American Statistical Association*, 93, 1430-1439, 1998.
31. Simpson, T., Comparison of response surface and kriging models in the multidisciplinary design of an aerospike nozzle, *ICASE Report No. 98-16, NASA/CR-1998-206935*, 1998.
32. Jamil, M., Yang, X.S., A literature survey of benchmark functions for global optimization problems, *Int. Journal of Mathematical Modeling and Numerical Optimization*, 4 (2), 150–194, 2013.
33. Ishigami, T. Homma, T., An importance quantification technique in uncertainty analysis for computer models, *In Uncertainty Modeling and Analysis, Proceedings, IEEE*, 398-403, 1990.