메타모델 기반 다단계 최적설계에 대한 순차적 알고리듬

김강민* · 백석흠* · 홍순혁** · 조석수*** · 주원식†

A Sequential Algorithm for Metamodel-Based Multilevel Optimization

Kang-Min Kim, Seok-Heum Baek, Soon-Hyeok Hong, Seok-Swoo Cho and Won-Sik Joo

Key Words: Multilevel Optimization(다단계최적설계), Metamodeling(메타모델링), Iterative Design Algorithm(반복설계알고리듬), Feasible Domain(유용영역)

Abstract

An efficient sequential optimization approach for metamodel was presented by Choi et al [6]. This paper describes a new approach of the multilevel optimization method studied in Refs. [5] and [21-25]. The basic idea is concerned with multilevel iterative methods which combine a descent scheme with a hierarchy of auxiliary problems in lower dimensional subspaces. After fitting a metamodel based on an initial space filling design, this model is sequentially refined by the expected improvement criterion. The advantages of the method are that it does not require optimum sensitivities, nonlinear equality constraints are not needed, and the method is relatively easy to understand and use. As a check on effectiveness, the proposed method is applied to a classical cantilever beam.

1. 서 론

Newton과 Lebnitz 이래로 고전적인 최적화 이론은 미분과 깊은 관련이 있다. 그러나 실제적인 공학설계 응용(예를 들어 비선형 해석, 다분야 해석)에서는 미분이 가능하지 않는 최적설계 문제를 쉽게 만나게 된다. 일반적으로 미분이 가능하지 않는 함수의 최적설계는 근사최적설계기법(approximate optimization technique)[1-5]을 이용한다.

지난 10년 동안 근사화 방법(approximation method), 근사화기반 최적설계(approximation-based optimization)는 집중적인 관심을 이끌었다. 이 접근의 유형은 단순한 분석적 모델과 관련된 계산 집약적 함수로 근사된다. 단순 모델은 메타모델(metamodel)이라고 부른다. 그리고 메타모델을 구성하는 과정을 메타모델링(metamodeling)이라고 부른다. 이것은 최적설계문제의 다른 형태에 따라 샘플링(sampling), 모델 근사화(model approximaion), 모델검증(model validation), 설계공간탐색(design space exploration)에 관한 연구가 포함된다. 이 영역에서 문헌에 나타난 중요한 부분은 최동훈 등[6-9], 이태희 등[10-13], Wang과 Shan[14-16], Simpson 등[17-19]이 강조한 근사화 할 설계영역을 조절하는 방법; 유용영역의 근사화이다. 근사화의 목표는 적당한 비용으로 가능한 정확한 메타모델을 달성하는 것이다. 전체 설계영역에서 한번의 메타모델 생성만으로 주어진 시스템의 최적해를 찾는다는 것은 사실상 불가능하다. 메타모델을 이용한 최적해는 설계변수의 설계영역(design domain), 설계영역의 수준(level)에 크게 의존된다.

이러한 관점에서 메타모델의 최적해 정밀도를 향상시키기 위한 방법으로 다단계 최적설계(multilevel optimization)를 제안한다. 다단계 최적

† 회원, 동아대학교 기계공학과
E-mail : wsjoo@daunet.donga.ac.kr
TEL : (051)200-7641 FAX : (051)200-7656
* 회원, 동아대학교 대학원 기계공학과
** 회원, 부경대학교 산업과학기술연구소
*** 회원, 강원대학교 기계자동차공학부

설계는 적정한 수준 범위가 불명확한 경우 최초로 큰 수준 범위를 설정하고 메타모델을 이용한 최적해를 계산한다. 그 결과를 기초로 수준 범위를 재수정하여 재해석을 수행한다. 이러한 과정을 반복하는 것에 의해 최적해가 있다고 생각되어지는 최적해의 근방까지 수준 범위를 이동시켜가는 방법이다. 이 방법은 반복진행마다 수준범위의 비율과 메타모델의 정확도를 계산하여 효율적으로 메타모델을 관리하는 전략이다.

적용 예제는 2가지로 구성된다. 단순 외팔보에 대해 제안된 방법을 적용하여 이론해와 얻은 최적해를 비교하여 효율성을 설명한다. 산업 예제로 밴딩프레스 하부 다이프레임의 형상최적설계문제에 대해 적응성을 증명하였다.

2. 메타모델링 기법

2.1 메타모델 형태

이 절은 메타모델의 4가지 형태 (1) 반응표면모델(response surface model), (2) 크리깅 모델(kriging model), (3) 비모수회귀식(non-parametric regression), (4) 신경회로망(neural network)을 소개한다.

2.1.1 반응표면모델

반응표면모델은 전체 *n*개의 설계점들과 각각의 설계점들에 대해 관계가 있는 응답값을 알 수 있다고 가정한다. 반응표면법은 설계점에 기반한 입력변수와 응답변수 사이의 관계를 결정한다. 일반적인 반응표면모델은 이차다항식을 선호한다. 설계점 위치$\{x\}_i$에서 선형반응표면모델은 식 (1)과 같다.

$$y_i = [t]_i\{c\}+\epsilon,\ i=1,2,\dots,n \tag{1}$$

여기서 $[t]_i$는 i번째 실험점 위치에서 반응표면모델의 추정식의 가로벡터, $\{c\}=[c_1,c_2,\dots,c_p]^T$ 근사모델의 예측벡터이다. p는 예측변수의 총 개수, 회귀계수 $\{c\}$는 $\{c\}=([d]^T[d])^{-1}[d]^T\{y\}$로 계산된다.

2.1.2 크리깅 모델

크리깅 모델은 관심 있는 영역에서 응답함수를 얻기 위해 이미 값을 알고 있는 주위값들의 선형조합으로 그 값을 예측한다. 특히 공학에서 사용되는 크리깅 메타모델은 전산실험계획에 적합하도록 Sacks 등[22]에 의해 제안된 모델이다. 크리깅 모델 코드(in Matlab)로 잘 작성된 것은 인터넷 URL: www2.imm.dtu.dk/~hbn/dace/로부터 다운로드 할 수 있다.[23] 크리깅 모델은 식 (2)로 구성된다.

$$y(x)=f(x)+Z(x) \tag{2}$$

여기서 $f(x)$는 주로 다항함수로 표현되며 설계영역에서의 전역모델을 표현하며 일반적으로 가장 간단한 형태인 상수항 β로 취한다. $Z(x)$는 크리깅 메타모델이 각 데이터 점들을 보간할 수 있도록 국부적인 변동을 표현해주며 $Z(x)$의 공분산은 아래와 같이 주어진다.

$$Cov\left[Z(x^i),Z(x^j)\right]=\sigma^2R(\left[r(x^i,x^j)\right]) \tag{3}$$

여기서 R은 상관행렬이며, $R(x^i,x^j)$는 표본 데이터 내 임의의 두 점 x^i와 x^j사이의 상관함수이다. 상관함수 R은 설계자에 의해서 결정되는데 Sacks, Owen 등에 의해 여러 가지 함수가 소개되었다. 일반적으로 식 (4)로 표현되는 가우스 상관함수를 이용하여 크리깅 메타모델을 구성한다.

$$r(x_i,x_j)=\exp\left(-\sum_{k=1}^{M}\theta_k\left|x_k^i-x_k^j\right|^2\right) \tag{4}$$

여기서 M은 설계변수 개수이고, θ_k는 모델을 적합시키는데 사용되는 상관인자이다. x^i, x^j의 설계점들의 k개의 성분을 x_k^i와 x_k^j라고 한다. 이 같은 경우 독립상관변수는 좋은 결과들을 가진다. 설계자는 각각의 설계변수에 대해 독립상관변수 또는 다른 상관변수를 사용하여 정확한 값을 추정할 수 있다.

$$Z(x)=\sum_{i=1}^{N}\lambda_i r(x^i,x) \tag{5}$$

2.1.3 비모수회귀식

비모수회귀식(non-prarmetric regression, NPR)은 응답값이 고차의 비선형성인 경우 개선된 반응값을 제공한다. NPR의 실험계획은 중심합성법을

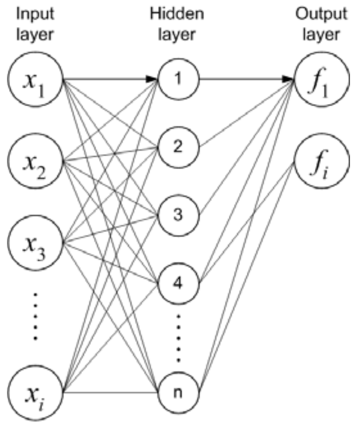

Fig. 1 Scheme of a recurrent neural network model

이용한다. NPR 알고리듬은 설계변수에 대한 반응값의고차의 비선형성을 지닌 정확하게 규정된 메타모델이다. NPR은 서포트벡터방법(support vector method, SVM) 기법의 일반적인 종류에 속한다. 이것은 데이터 그룹을 구별하기 위해 초평면(hyperplanes)을 사용하는 데이터 분류법이다. 이 방법의 특징은 초평면이 반응값을 추측할 수 있는 설계변수벡터의 부분집합을 분류하는데 사용된다는 것이다. 이 부분집합을 서포트벡터 집합이라고 부른다. 서포트벡터방법은 두 고유의 이점 때문에 선호한다. 첫째로, SVM 타입은, 적합을 보증하기 전에 커널지도에 의해 특정공간에서 설계변수의 입력공간으로 접근한다. 둘째로, 트레이닝 목적함수는 특정 공간에서 2차원이다. 따라서 QP(quadratic programming)기반 방법은 국부최소의 함정이 존재하는 해의 위험 없이 서포트벡터를 결정하는데 이용된다. 실험계획법으로부터 생성된 샘플점 $X=\{x_1, x_2, ...x_M\}$이면, x_i는 N차원벡터이고 설계변수로 표현된다. 목적함수는 아래의 식 (6)의 형태로 결정된다.

$$y = \langle w \cdot x \rangle + b \tag{6}$$

여기서 w는 가중치벡터, $\langle w \cdot x \rangle$는 w와 x의 내적을 의미한다. 일반적인 비모수회귀식의 경우 식 (7)과 같이 표현된다.

$$y = \sum_{i=1}^{N} (A_i - A_j^*) K(\overrightarrow{X_i}, \overrightarrow{X_j}) + b \tag{7}$$

여기서 $K(\overrightarrow{X_i}, \overrightarrow{X_j})$는 커널함수(kernel map)이고, A_i와 A_i^*는 라그랑지승수이다. 라그랑지승수를 결정하기 위해 가중치벡터 w는 적합된 표면의 오차지역 안에 설계점들이 위치하도록 최소화된다고 가정하고 시작한다.

2.1.4 신경회로망

신경회로망은 인간의 신경 세포를 인공적으로 모델링한 수리통계기법이다. 함수의 내삽을 위해 입력층(input layer), 은닉층(hidden layer), 출력층(output layer) 사이에 가중치를 부여하는 신경망을 구축한다.

Fig. 1에서 각각의 화살표에는 가중치(w)가 포함되어 있다. 도형은 신경계와 같은 세포로 불린다. 만약 입력층이 x_i라면, 은닉층은 함수 $g_j(x_i)$이고 출력값은 아래와 같다.

$$f_k(x_i) = K(\sum w_{jk} g_j(x_i)) \tag{8}$$

여기서 k는 미리 정의된 함수로 계단함수와 같은 전기적 뇌신호의 이진거동(binary behavior)을 얻기 위한 HT(hyperbolic tangent)나 지수기반 함수로 정의된다. 이 함수는 수학적으로 연속적이고 미분가능하다. 가중치(w_{jk})는 알려진 실험점과 내삽사이의 거리를 최소화하는 알고리듬(최소자승법)으로부터 결정된다. 이것을 신경망의 학습이라고 부른다. 오차는 학습에서 사용되지 않는 실험점들을 가지고 각각의 알고리듬의 반복계산으로 구할 수 있다. 이 방법은 근사모델의 구성을 위해 제한된 설계점의 수를 사용한다.

2.2 다단계 최적설계

메타모델 기반 최적설계에 대한 최적해의 정밀도는 메타모델의 정밀도에 영향을 받는다. 또한 메타모델의 정밀도는 설계변수의 설계영역, 설계영역의 수준 수에 크게 의존한다.

정확한 최적해를 얻기 위해서는 최적해가 포함되어진 설계영역 범위를 설정하고 확인하는 과정이 필요하다. 또한, 메타모델은 설계영역의 수준범위 내에서의 회귀식이기 때문에 수준범위(level range) 구간을 좁게 하는 경우가 근사모델의 정확도를 향상시킨다.

수준범위를 좁게 하기 위해서는 동일한 설계영역에 수준 수)를 많게 하거나, 동일 수준 수에서 수준범위를 좁게 하는 방법이 있다. 그러나 후자의 경우 좁은 설계영역에서 최적해가 수준 범위

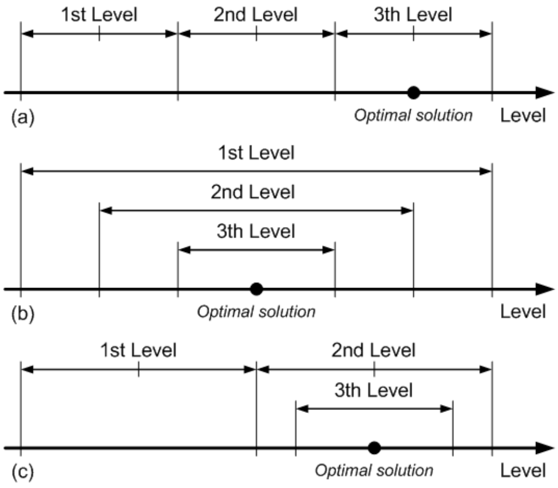

Fig. 2 Concept of mutlilevel analysis

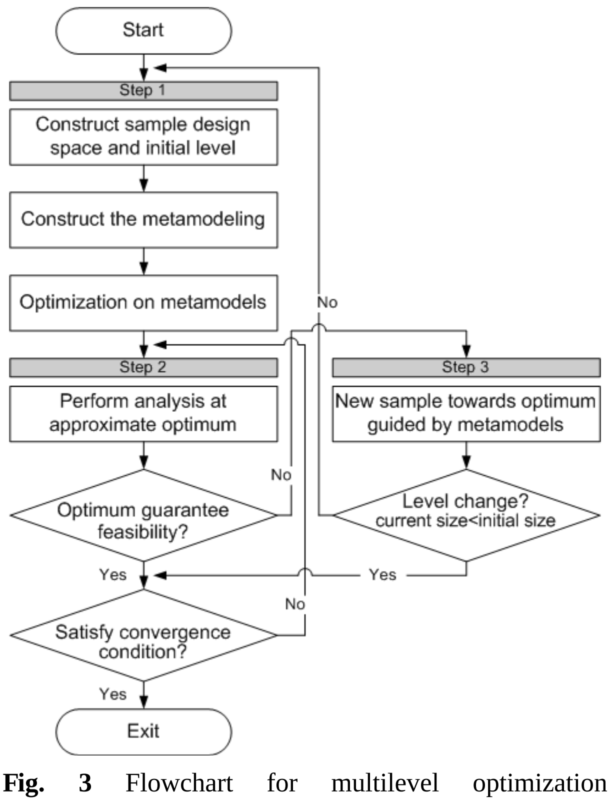

Fig. 3 Flowchart for multilevel optimization algorithm

바깥에 있을 가능성이 있고 전역 최적해(또는 지역 최적해)를 벗어날 가능성이 있다.

본 논문은 메타모델을 이용해서 확실히 정밀도가 높은 최적해를 얻기 위해 Fig. 2의 개념도와 같은 세 경우를 고려해 보자.

(a) 설계영역을 최적해가 존재한다고 예측되어지는 영역의 주변으로 이동시키면서 해석을 수행하는 방법

(b) 최초로 넓은 설계영역으로 해석을 수행하고, 그 결과를 기초로 수준범위를 수정하여 다시 재해석을 수행하는 방법

(c) 양자 (a)과 (b)를 조합시키는 방법이다. 설계영역의 중간 위치를 이동 시킨 후, 수준범위를 더 좁게 설정한다면 정밀도가 좋은 근사식을 작성할 수 있고 최적해의 정밀도도 향상된다.

이상과 같은 관점에서 설계영역의 수준범위를 수정하고 좁혀가면서 최적해를 얻는 방법을 다단계 최적설계(multilevel optimization)라고 한다. 다단계 해석의 개념을 포함한 최적설계 알고리듬은 Fig. 3에 나타낸다. 다단계 최적설계를 이용한 최적해는 두 가지 중요한 이점이 있다. 첫째, 설계변수의 적정한 수준 범위가 불명확한 경우 넓은 수준범위를 설정할 수 있다. 둘째, 한번 구한 최적해에 대해서도 더욱더 수준범위를 좁게 하여 재해석하는 것에 의해 메타모델의 정밀도, 즉 최적해의 정밀도를 향상시킨다.

3. 외팔보 예제

3.1 외팔보 문제

외팔보의 형상최적설계 문제에 대해 다단계 최적설계를 수행한다. 외팔보는 보의 끝단에 하중을 받고 전체 단면의 최대굽힘응력(maximum bending stress)이 일정한 완전응력보(fully stress beam) 또는 일정강도보(beam of constant strength)로 가정한다.[11,12] 이러한 완전응력보는 응력 제약조건에 최소질량 설계와 질량 제약조건에 최대강성 설계의 형상을 나타낸다. 본 논문의 외팔보의 장방형 단면에 대한 완전응력보의 이론적인 최적형상(전단응력에 대한 이론적인 형상은 무시됨)은 식 (9)-(11)과 Fig. 4로 나타낸다.

보의 높이 : $$y=\sqrt{\frac{6W(L-x)}{b\sigma_b}} \tag{9}$$

보의 끝단 높이 : $$h_0=\sqrt{\frac{6WL}{b\sigma_b}} \tag{10}$$

최대 처짐량 : $$\delta_{\max}=\frac{8W}{bE}\left(\frac{L}{h_0}\right)^3 \tag{11}$$

여기서 σ_b는 허용응력, b는 판폭으로서 일정하다.

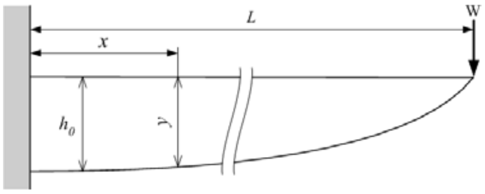

Fig. 4 Optimal shape of fully stress beam

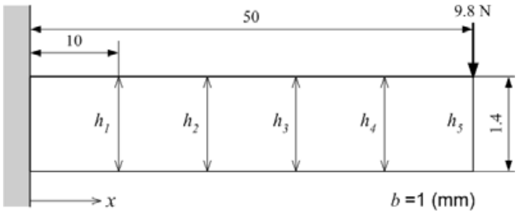

Fig. 5 Design domain with five design variable

Table 1 Design variable and their level(first step)

Range	h_1 (mm)	h_2 (mm)	h_3 (mm)	h_4 (mm)	h_5 (mm)
Lower bound	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
Upper bound	1.4	1.4	1.4	1.4	1.4

Table 2 Theoretical solution for fully stress beam

Area (mm^2)	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
45.47	1.252	1.084	0.885	0.626	0

최적설계문제는 보의 전체길이가 50 mm이고 구속부분의 높이가 1.4 mm, 보의 끝단에 9.8 N의 집중하중이 가해지고 있는 외팔보의 최소질량설계이다. 설계변수는 보의 구속부분으로부터 10 mm 간격으로 분할한 각 단면의 높이 h_i이다. 보의 폭은 1 mm로 일정하다. Fig 5는 보의 형상과 설계변수를 나타낸 것이다.

외팔보의 설계에 대해 완전응력보의 식 (9)-(11)을 적용하면 각 단면의 높이는 식 (12)가 된다. 이러한 형상을 이론적인 최적해로서 다단계 최적설계 결과와 비교 및 검토하기 위해 사용한다.

$$y = \sqrt{0.0392(50-x)} \tag{12}$$

또한, 완전응력보의 최대굽힘응력(모든 단면이 동일)은 150 MPa이고 이 값을 최적설계 계산에 대한 제약조건으로 사용한다.

1단계로서 최적형상을 완전히 예상할 수 없어서 모든 설계변수의 설계영역은 동일 수준범위로

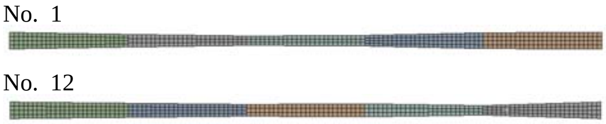

Fig. 6 Finite element model of cantilever beam

Table 3 Optimal solution of the first level

Type	Area (mm^2)	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
RSM	60.902	1.2153	1.2698	1.0659	1.247	1.1845
Kriging	55.38	1.0153	1.138	1.1227	1.0518	1.0202
Non-parametric	54.467	1.0966	1.0845	1.0728	0.972	1.0416
Neural network	51.437	1.1285	1.0328	0.9558	0.8168	1.0196

Table 4 Analysis of variance for the first step at the x=30 mm

Design variable		Sum of squares	DOF	Variance	F-ratio	Contribution ratio(%)
h_1	Linear	40708.5	1	9487.9	129.73	42.755
	Quadratic	6309.3	1	6542.5	89.46	29.483
h_2	Linear	2189.5	1	3180.6	43.49	14.333
	Quadratic	3103.6	1	2769.8	37.87	12.481
h_3	Linear	0	1	34.8	0.48	0.158
	Quadratic	9.5	1	35.1	0.48	0.158
h_4	Linear	0	1	34.9	0.48	0.158
	Quadratic	16.4	1	35.1	0.48	0.158
h_5	Linear	0	1	34.9	0.48	0.158
	Quadratic	35.1	1	35.1	0.48	0.158
Error		1170.1	16	1170.1		
Total		52355.8	26			100

설정한다. Table 1은 설계변수와 수준값을 나타낸다. 중심합성법에 의해 27개의 실험점을 생성하여 유한요소해석을 수행하였다. 외팔보의 유한요소해석과 메타모델 생성은 ANSYS Design Xplorer[11]환경에서 수행하였다. 외팔보의 유한요소 분할은 길이 방향으로 130등분, 높이 방향으로 4등분 하였다. 사용한 요소는 4절점 평면응력 요소이다. Fig. 6은 유한요소모델의 생성된 예를 나타낸다. 최적설계문제는 외팔보의 질량을 최소화하면서 각 설계변수의 위치에서 최대굽힘응력이 150 MPa이하가 되도록 한다. 거동제약조건은 각 설계변수 위치에서 최대굽힘응력에 대한 메타모델을 이용한다. 문제의 정식화는 식 (13)과 같다.

$$\begin{aligned} &\text{Minimize} \quad A_i \\ &\text{Subject to} \quad y(h_i) \le 150 \text{ MPa} \\ &\qquad h_{lower} \le h_i \le h_{upper}, \quad i = 1, \cdots, 5 \end{aligned} \tag{13}$$

Table 5 Design variable and their level(second step)

Range	h_1 (mm)	h_2 (mm)	h_3 (mm)	h_4 (mm)	h_5 (mm)
Lower bound	1.25	1.04	0.7	0.4	0.2
Upper bound	1.4	1.16	1	0.7	0.4

Table 6 Optimal solution for the second step

Type	Area (mm^2)	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
RSM	48.26	1.3293	1.1237	0.8835	0.6349	0.3093
Kriging	48.115	1.3287	1.1146	0.8489	0.6752	0.2883
Non-parametric	47.743	1.3145	1.1045	0.869	0.6259	0.3228
Neural network	48.843	1.3089	1.1503	0.9845	0.6345	0.2123

Table 7 Design variable and their level(third step)

Range	h_1 (mm)	h_2 (mm)	h_3 (mm)	h_4 (mm)	h_5 (mm)
Lower bound	1.28	1	0.87	0.62	0.26
Upper bound	1.29	1.2	0.89	0.63	0.3

Table 8 Optimal solution for the third step

Type	Area (mm^2)	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
RSM	47.413	1.2842	1.1055	0.8854	0.6253	0.2816
Kriging	47.689	1.2875	1.1331	0.8837	0.6266	0.2759
Non-parametric	47.5	1.2855	1.11	0.8866	0.6246	0.2863
Neural network	48.843	1.3089	1.1503	0.9845	0.6345	0.2123

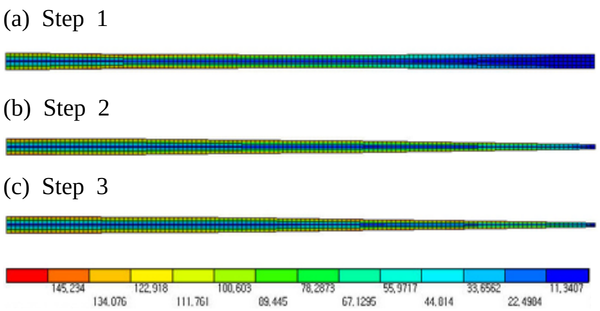

Fig. 7 Step-wise positioning and stress distribution for optimal shape

Table 3은 1단계 최적설계 결과를 나타낸다. Table 2는 식 (12)를 이용하여 이론적인 완전응력보의 질량과 각 설계변수 위치에 대응하는 높이를 표시한 것이다. 질량에 대해 얻은 최적해와 이론적인 최적해의 오차는 13.2%이다. 또한 각 설계변수 위치에서 얻은 최대굽힘응력에 대한 분산분석을 수행한다. 예를 들면, Table 4는 x=30 mm에서의 분산분석 결과이다. 설계변수의 민감도를 1차 성분, 2차 성분을 F-비로 기여도를 표시한다. 1단계 최적화 계산에 의해 얻어진 설계변수 중 h_4와 h_5는 설정한 수준범위내의 하한값이 되므로 설정된 수준범위 외부에 최적해가 존재할 가능성이 있다. (본 예제의 경우 미리 완전응력보의 이론적 결과값으로 판단할 수 있다.) 이러한 설계변수의 수준범위를 하한 방향으로 이동시켜 다시 해석함으로서 최적해인 완전응력보의 형상에 접근한다.

2단계-3단계는 1단계에서의 최적해를 기초로 설계영역의 수준범위를 재설정한다. 하한을 나타내는 h_4 및 h_5와 근접한 h_2 및 h_3에 대하여 재설정하고 각 설계변수의 수준범위를 좁게 한다. Table 5-8은 재설정한 설계영역 수준과 최적해를 나타낸다.

Fig 7은 각 단계의 최적형상에 대한 응력해석 결과이다. 목적함수(질량)에 대한 완전응력보의 이론해와 3단계 최적화 계산의 오차는 4%이다. 이러한 오차 원인은 해석모델에서 보의 끝단 부근인 40 mm와 50 mm사이에 설계변수를 설정하지 않았기 때문이다. 완전응력보의 끝단 형상과 비교해서 설계변수는 이 사이에서 크게 변화하고 있어 끝단 형상에 설계변수를 추가시키는 방법에 의해 오차를 줄일 수 있다.

4. 결 론

적용된 예제의 결론을 요약하면, 최적설계 결과를 예상할 수 없고 설계변수의 범위 설정이 어려운 경우 다단계 해석을 이용해서 최적해 결과를 재 반영하며 설계영역의 수준범위를 이동시키는 것으로 정밀도가 좋은 최적해를 얻을 수 있다.

참고문헌

(5) Vanderplaats, G. N., Yang, Y. J., and Kim, D. S., 1990, "Sequential Linearization Method for Multilevel Optimization," *AIAA Journal*, Vol. 28, No. 2, pp. 290-295.