

論文

DOI:10.5139/JKSAS.2010.38.6.557

구속조건이 있는 문제의 적응 전역최적화 효율 향상에 대한 연구

안중기*, 이호일*, 이성만*

Efficient Adaptive Global Optimization for Constrained Problems

Joongki Ahn*, Ho-il Lee* and Sung-Mhan Lee*

ABSTRACT

This paper addresses the issue of adaptive global optimization using Kriging metamodel known as EGO(Efficient Global Optimization). The algorithm adaptively chooses where to generate subsequent samples based on an explicit trade-off between reduction of global uncertainty and exploration of the region of the interest. A strategy that saves the computational cost by using expectations derived from probabilistic nature of approximate model is proposed. At every iteration, a candidate test point that seems to be feasible/inactive or has little possibility to improve for minimum is identified and excluded from updating approximate models. By doing that the computational cost is saved without loss of accuracy.

초 록

본 논문은 Kriging 근사모델이 제공하는 확률정보를 이용하여 순차적으로 전역 최적해를 찾는 내용을 담고 있다. 적응 전역 최적화란 소수의 실험 점으로 구성된 근사모델의 예측 값과 불확실성을 고려하여 다음 실험 점을 찾고, 이를 이용하여 근사모델을 개선함으로써 순차적으로 해를 찾는 방식이다. 본 연구에서는 근사모델에서 도출한 기대값을 이용하여 개선시킬 필요가 없는 구속함수나 목적함수를 식별함으로써 계산효율을 증대시키는 기법을 제안한다. 다음 단계의 후보 실험점이 유용영역의 비활성일 가능성이 있을 경우 또는 목적함수를 개선시킬 가능성이 희박할 경우, 이 점은 근사함수를 개선하는 데 사용하지 않았다. 본 기법을 비선형성이 강한 시험문제에 적용한 결과, 제안하는 기법이 정밀도는 보장하면서 계산 효율을 증대시키는 것을 확인할 수 있었다.

Key Words : Global Optimization(전역 최적화), Kriging Metamodel(크리깅 근사모델), Efficient Global Optimization(EGO)

1. 서 론

현대의 공학문제들은 과거와 비교할 수 없을 정도로 복잡하고 많은 계산을 필요로 한다. 특히, 항공기나 유도무기와 같이 다분야의 학제가 밀접한 연성을 가지고 있는 문제는 CFD와 FEM등으

로 모델링한 공학도구를 이용하여 직접 해석하는 것이 근래의 추세이다. 그러나 고수준의 공학 도구를 이용할 경우, 하나의 설계점 만을 해석하는데도 많은 자원과 시간이 필요하다. 현대 전산기의 눈부신 발전을 감안하더라도 일반적으로 수십 회 이상의 해석이 필요한 최적화 문제에 CFD와 FEM모델을 직접 적용하는 것은 쉽지 않다.

이러한 어려움을 극복하기 위하여 근래에 대두된 방법이 근사모델 기반 최적화이다[1]. 초기 연구는 근사모델의 효율성을 높이기 위하여 실험 계획(DOE, Design Of Experiments)등을 연동하

† 2010년 2월 19일 접수 ~ 2010년 5월 12일 심사완료

* 정회원, 국방과학연구소

교신저자, E-mail : barona@gmail.com

대전 유성구 유성우체국 사서함 35호

여 근사모형을 만들고, 이를 이용하여 최적 설계 점을 찾는 방식으로 이루어 졌다. 근사모형을 최적화 문제에 보다 효율적으로 적용시키기 위하여 근사영역을 순차적으로 이동시켜 가면서 근사모형을 만들어 가는 순차적 근사최적화(SAO, Sequential Approximation Optimization)기법이 있다[2-3]. 근사영역을 이동시켜 가면서 해를 찾는 순차적 근사 최적화 기법과는 달리 적응(Adaptive) 근사최적화 기법은 전체 설계영역을 고정시킨 후, 국부적으로 관심 있는 영역에 설계점을 순차적으로 추가하여 근사모형을 개선함으로써 계산효율과 정확성을 담보하기 위한 방법이 있다. 이러한 연구의 효시로서 Jones[4] 등이 제안한 EGO(Efficient Global Optimization)기법이 있다. EGO는 크리깅 모델이 예측치의 평균과 분산을 제공해 주는 특성을 이용하여 순차적으로 최적해를 찾는 알고리즘이다. 소수의 실험 점으로 Kriging 근사모형을 만들고, 최소 값을 가질 가능성이 가장 높은 점을 찾아 원(original)함수를 순차적으로 개선하는 방식이다. EGO는 근사 값이 가장 작은 영역을 찾는 국부탐색과 모델의 불확실성이 높은 영역을 찾는 전역탐색의 성질을 동시에 가지고 있다. EGO는 비구속(unconstrained) 최적화 문제만 적용할 수 있기 때문에 Sasena[5]는 EGO에 구속조건을 고려하기 위한 다양한 방법을 시도하였다.

기존의 연구[4~6]는 EGO에 효율적으로 구속조건을 적용하기 위한 방법을 모색하기 위한 관점이었다. 반면 본 연구는 비활성(inactive)이거나 비가용(infeasible)영역에 있는 구속조건을 조기에 식별하여 최적화에서 제외함으로써 계산의 효율성을 증대시키는 방법을 제안하고 있다.

본 논문은 Audet[6] 등이 제안한 위반 기대값(Expected Violation)과 Ranjan[7]이 제안한 등고선 정보로부터 후보실험 점의 활성(active) 또는 비활성(inactive)여부를 판별하는 알고리즘을 구현하였다. 여기서 비활성으로 판단된 실험 점은 구속함수 근사모형을 개선시키는데 제외함으로써 계산횟수를 줄일 수 있었다. 나아가 후보실험점이 목적함수를 개선시킬 가능성이 있는 경우에만 다음 단계의 실험점을 사용하여 근사 목적함수를 개선시켰다. 근사모형에서 최적해는 비 민감도(non-gradient) 알고리즘인 DIRECT[8]를 이용하여 찾았다.

II. 적응 전역 최적화 기법

2.1 크리깅 메타모델

최소자승 기법 등을 통해 구성된 일반적인 근사모형들은 예측 값만을 제공해 주는데 비해,

Kriging과 같은 가우시안 과정(Gaussian process) 모델은 예측지점에서의 평균값과 분산(variance)을 포함하는 가우시안 분포를 제공한다. 여기서 모델의 분산이란 모델의 불확도를 표현하는 척도이다. 즉, 실험점들이 밀집해 있는 영역에서는 실험결과 사이의 상관관계가 높아 작은 분산, 즉 예측 값의 불확도가 낮은 결과 결과를 얻을 수 있다. 반면, 주변에 실험 점들이 적으면 상대적으로 예측값의 불확도는 높아지게 된다. 크리깅 모델은 다음과 같이 예측 값의 평균과 분산을 제공한다.

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_x^t \hat{\beta} + \mathbf{r}_x^t \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{F}\hat{\beta}) \quad (1)$$

$$\hat{\sigma}^2(\mathbf{x}) = \sigma_z^2(1 - \mathbf{r}_x^t \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}_x) \quad (2)$$

여기서 \mathbf{y} 는 n 개의 실험 점으로 구성된 열벡터이며, \mathbf{f} 와 $\hat{\beta}$ 는 q 차 다항식 형태로 표현되는 함수와 그 함수의 계수를 의미한다. \mathbf{F} 는 $f(\mathbf{x})$ 값을 요소로 하는 $n \times q$ 행렬이며, \mathbf{R} 은 실험점사이의 공간적인 관계를 표현하는 $n \times n$ 개의 상관행렬 상관함수 R 을 가지고 있다. 본 연구에서는 다음과 같은 가우시안 상관함수를 사용하였다.

$$R(x^i, x^j) = \exp\left[-\sum_{k=1}^n \theta_k |x_k^i - x_k^j|\right] \quad (3)$$

\mathbf{r}_x 는 기존 실험 점과의 예측 점과의 상관관계를 나타내는 열벡터이다.

$$\mathbf{r}_x = [R(\mathbf{x}, x_1), R(\mathbf{x}, x_2), \dots, R(\mathbf{x}, x_n)] \quad (4)$$

식(1)의 첫째항은 전체 해 공간을 근사화한 함수 구조(예를 들어 2차 또는 3차 다항식)를 가지게 된다. 식(1)의 두 번째 항은 평균이 0인 가우시안 과정으로서 모델의 국부적인 편차를 반영하는 성질을 가진다. 함수의 계수 $\hat{\beta}$ 는 식(5)로부터 계산되는 상수벡터이다.

$$\hat{\beta} = (\mathbf{F}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y} \quad (5)$$

여기서 x_k^i 는 i 번째 실험 점의 k 번째 차원에 해당하는 요소이다. θ_k 는 거리가 증가하면서 상관함수의 값이 얼마나 급격히 감소하는 가를 나타내는 척도로서 통계적인 추론방법에 의해 결정되는 상수이다. 상관함수 R 은 실험 점에서는 그 값이 1이 되며, 실험점간의 거리가 증가하면 0으로 수렴하게 된다. 식(2)에서 크리깅 모델의 오차를 나타내는 σ_z 는 θ_k 를 변수로 하여 최대우도추정(MLE: Maximum Likelihood Estimation)방식으로 구한다.

2.2 목적함수의 모델링

Jones[4]는 증가함수(Improvement Function)를 다음과 같이 정의하였다.

$$I(\mathbf{x}) = \max(y_{\min} - y(\mathbf{x}), 0) \tag{6}$$

$$y(\mathbf{x}) \sim N(\hat{y}, \sigma^2(\mathbf{x}))$$

여기서 y_{\min} 은 n번의 실험에서 구한 함수 값들 중에서 최소 값을 의미한다. 식(6)은 현재 알려진 최소 값(y_{\min})보다 더 작은 값을 가질 확률이 있는 근사모델의 값을 찾는 목적을 가지고 있다. 식(6)의 기대값을 취하면

$$E[I(\mathbf{x})] = \int_{-\infty}^{y_{\min}} (y_{\min} - y(x)) f(\mathbf{x}) dY \tag{7}$$

$$= (y_{\min} - \hat{y}(\mathbf{x})) \Phi\left(\frac{y_{\min} - \hat{y}(\mathbf{x})}{\hat{\sigma}(\mathbf{x})}\right) + \hat{\sigma}(\mathbf{x}) \phi\left(\frac{y_{\min} - \hat{y}(\mathbf{x})}{\hat{\sigma}(\mathbf{x})}\right)$$

여기서 Φ 와 ϕ 는 각각 표준정규분포의 누적분포 함수(cdf, cumulative distribution function)와 확률밀도함수(pdf, probability density function)를 의미하며, $\hat{\sigma}$ 는 식(2)의 근사모델 표준편차이다. 식(7)의 첫째항은 근사모델의 예측 값이 현재까지 알려진 최소 값보다 작으면 값이 증가하며, 둘째 항은 크리깅 모델의 오차가 큰 영역에서 큰 값을 가진다. 따라서 식(7)을 최대화시키는 문제는 국부적인 탐색과 전역적 탐색을 동시에 수행하는 문제로 바라볼 수 있다. 식(7)을 최대화시키는 점을 찾아 추가 실험점으로 근사모델을 개선하는 과정을 반복하면 최적 해에 수렴하게 된다.

2.3 구속조건 모델링

크리깅 모델의 특성을 이용하면 설계제한조건도 식(7)과 같은 확률적인 지표로 유도할 수 있다. Audet등[6]은 다음과 같은 위반 기대값(Expected Violation)을 유도하였다.

$$E[V(x)] = (\hat{g}(x) - z_0) \Phi\left(\frac{\hat{g}(x) - z_0}{\hat{\sigma}(x)}\right) + \hat{\sigma}(x) \phi\left(\frac{\hat{g}(x) - z_0}{\hat{\sigma}(x)}\right) \tag{8}$$

여기서 g 는 구속함수를 근사화한 근사모델 값이며, z_0 는 구속조건을 의미한다. 식(8)의 첫째항은 구속조건을 위반할 가능성이 높은 지점($\hat{g} > z_0$)에서 큰 값을 가지게 된다. 만일 실험점이 충분히 유용(feasible)한 영역 내에 존재하면 식(8)의 첫째항은 0이 된다. 둘째 항은 근사화한 구속함수가 불확실할수록(표준편차가 클수록) 증가한다.

2.4 적응 전역최적화 알고리즘 구현

본 연구에서는 식(7)과 (8)을 이용하여 적응최적화 알고리즘을 구현하여 여러 개의 구속조건이

있는 구속최적화 문제를 다룰 예정이다. 따라서 비구속 문제만을 다루는 식(7)의 EGO알고리즘을 직접 사용할 수 없다. 구속조건을 고려하기 위해 본 연구에서는 Augmented Lagrangian함수 L을 식(9)와 같이 구성하고 이를 최소화 시키는 문제로 만들었다.

$$L = -E[I(\mathbf{x})] + \sum_{j=1}^m [\lambda_j \psi_j + r_p \psi_j^2] \tag{9}$$

$$\psi_j = \max\left\{E[V], \frac{-\lambda_j^p}{2r_p}\right\}$$

여기서 m 은 구속조건 개수, λ 는 Lagrange multiplier, r_p 은 p번째 반복계산 단계에서 구한 penalty 계수이다. E[I]와 E[V]는 각각 식(7)과 식(8)로부터 구했다. 식(9)를 최소화시키는 해(x^*)를 찾으면, 이를 원 목적함수와 구속함수에 대입하여 각각의 근사모델을 개선한다. 이때 식(7)에 사용할 y_{\min} 은 별도의 최적화 모듈로부터 구한다.

본 연구에서는 보다 효율적인 최적화를 위하여 ① 개선될 가능성이 희박한 지점의 목적함수, ② 유용영역의 비활성(inactive) 구속조건 및 ③ 활성(active)구속조건이더라도 충분한 정확도를 가지는 구속함수는 근사모델을 개선하지 않는 알고리즘을 구현하였다. 이를 위하여 본 연구에서는 Ranjan[7]이 제안한 등고선 추출기법을 일차원 함수형태로 변형하고 이를 활성함수(Activity Function)이라 부르기로 한다.

$$A = [\epsilon(x) - |g(x) - z_0|] \tag{10}$$

$$\text{for } g(x) \in (z_0 - \epsilon, z_0 + \epsilon)$$

$$= 0$$

$$\text{for } g(x) \in (-\infty, z_0 - \epsilon], [z_0 + \epsilon, \infty)$$

식(10)은 모델의 예측 값이 $z_0 \pm \epsilon$ 범위 내에 있을 경우에만 0이 아닌 값을 가지게 된다. 즉, 구속조건 근처에서만 0이 아닌 값을 가지고 구속조건에서 멀리 떨어진 영역에서는 0을 가지게 되는 구조이다. 여기서 $\epsilon(x) = 2\hat{\sigma}(x)$ 를 사용하였다. 식(10)의 기대값을 계산하면 다음과 같다.

$$E[A(x)] = (\hat{g} - z_0) \left[2\Phi\left(\frac{z_0 - \hat{g}}{\hat{\sigma}}\right) - \Phi\left(\frac{z_0^+ - \hat{g}}{\hat{\sigma}}\right) - \Phi\left(\frac{z_0^- - \hat{g}}{\hat{\sigma}}\right) \right] - \hat{\sigma} \left[2\phi\left(\frac{z_0 - \hat{g}}{\hat{\sigma}}\right) - \phi\left(\frac{z_0^+ - \hat{g}}{\hat{\sigma}}\right) - \phi\left(\frac{z_0^- - \hat{g}}{\hat{\sigma}}\right) \right] + \epsilon \left[\Phi\left(\frac{z_0^+ - \hat{g}}{\hat{\sigma}}\right) - \Phi\left(\frac{z_0^- - \hat{g}}{\hat{\sigma}}\right) \right] \tag{11}$$

편의상 $z^+ \equiv z + \epsilon$, $z^- \equiv z - \epsilon$ 으로 정의하였다. 식(11)의 첫째와 셋째 항은 국부적으로 모델의 예측 값이 구속조건인 z_0 와 근접할 때, 값을 가진다. 반면에 두 번째 항은 전역적으로 모델의 불확실성이 클수록 값을 가지게 된다. 따라서 E[A]는 공간상에서 원하는 등고선을 찾기 위한 용도로 사용된다.

식(9)를 최소화시키는 해(x^*)가 구속조건으로부터 충분히 떨어져 있으면 ($|\hat{g}(x^*) - z_0| \gg \epsilon$), 식(11)의 E[A]는 0이거나 0에 가까운 값을 가지게 된다. 이 경우에는 구속함수를 개선할 필요가 없다. 만일 해가 부정확한 근사모델의 구속조건에 근접하면 E[A]는 0보다 큰 값을 가지게 되어 원 구속함수를 정확도를 개선할 기회가 생기게 된다. 해가 구속조건으로부터 충분히 떨어져 있더라도 현재 해의 위치가 비유용 영역 내에 있다면 E[V]는 0보다 큰 값을 가지게 된다. 이때는 원구속함수를 개선할 필요가 있다. 정리하면, 해가 유용영역에 있으면서 구속조건으로부터 멀리 떨어져 있을 경우, 구속함수의 개선을 생략함으로써 불필요한 계산을 줄일 수 있게 되는 것이다.

E[I]함수를 사용하면 목적함수도 필요에 따라서 개선을 생략할 수 있다. 계산된 E[I]값이 0보다 작은 경우는 해에서의 예측 값이 현재까지 알려진 최소값(y_{min})보다 작으며, 근사모델의 불확실성을 감안하더라도 더 증가할 가능성이 없는 영역을 의미한다. 따라서 이 지점에서는 목적함수를 개선할 필요가 없는 것이다.

지금까지 기술한 내용을 종합하여 다음과 같은 적응최적화 알고리즘을 개발하였다.

- ① 소수의 실험점을 이용하여 Latin Hypercube등으로 실험계획을 수행한다.
- ② 목적함수와 구속함수에 대해 초기 크리깅모델을 구성한다.
- ③ 비 민감도 최적화알고리즘을 이용하여 근사모델의 해(x^*)를 구한다.

$$\begin{aligned} \min \hat{y}(x) \\ \text{s.t. } g_i(x) \leq z_{0,i} \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (12)$$

- ④ E[(x^*)]와 E[A(x^*)]을 계산한다.
- ⑤ E[I]가 0보다 클 경우, 원 목적함수 $y(x^*)$ 을 계산하여 근사모델을 개선하고, $y_{min} = y(x^*)$ 으로 치환한다.
- ⑥ E[A]나 E[V]가 0보다 클 경우, 원 구속함수 $g(x^*)$ 를 계산하여 근사모델을 개선한다.
- ⑦ 비 민감도 최적화알고리즘을 이용하여 식(9)의 Augmented Lagrangian함수 L을 최소화시키는 새로운 실험점 x_{new} 를 구한다.

$$\min L(x) \quad (13)$$

- ⑧ E[(x_{new})]와 E[A(x_{new})]을 계산한다.
- ⑨ L(x_{new})이 0보다 클 경우, 원 목적함수 $y(x_{new})$ 을 계산하여 근사모델을 개선한다.
- ⑩ E[A]나 E[V]가 0보다 클 경우, 원 구속함수 $g(x_{new})$ 을 계산하여 근사모델을 개선한다.
- ⑪ Lagrange multiplier λ 와 penalty 계수 r_p 를 계산한다.
- ⑫ 단계③을 돌아가서 해(x^*)가 수렴할 때까지 반복계산을 수행한다.

일반적으로 EGO는 비구속조건을 가진 목적함수를 이용하여 최소값을 찾으므로 식(13)에서 직접 최소값(y_{min})을 찾는다. 그러나 본 논문에서 구성한 목적함수 Augmented Lagrangian, L은 목적함수와 구속조건이 하나로 치환되어 있기 때문에 최적화 과정에서 비유용 영역의 최적 해를 제공할 수도 있다. 이 경우, 비유용 영역의 최소값은 유용영역의 최소값보다 더 작은 값이 되기 때문에 다음 계산에서는 E[I]함수를 개선시킬 여지가 희박하다. 본 연구에서는 이러한 문제를 해결하기 위하여 단계③을 도입하였다. 이 단계에서는 근사모델의 목적함수와 구속조건을 직접 이용하여 최적해를 구했다. 근사모델의 해를 구하기 위하여 사용한 최적화 방법으로는 비민감도 기반 최적화 알고리즘인 DIRECT를 사용하였다.

정리하면, 식(12)는 근사모델에서 국부 해를 찾아 최소 값을 제공해주며, E[I]함수가 포함된 식(13)은 전역적으로 해가 될 가능성이 있는 곳을 탐색하여 근사모델을 개선하는 역할을 수행한다.

III. 예 제

전역최적화 연구에 많이 사용되는 시험함수(test function)를 사용하여 개발한 알고리즘을 검증 하였다. 전역최적화에 많이 사용되는 시험함수는 일반적으로 비선형성 강하고, 여러 개의 국부 최적해가 있거나 유용영역이 여러 개 존재하는 까다로운 문제들로 일반적인 공학문제에서는 잘 나타나지 않는 현상들을 모사해 주고 있다.

3.1 Six-hump camelback 함수

이 문제는 구속함수는 하나이지만 유용영역이 몇 개의 영역으로 나누어져 있어 전역 최적화 성능을 확인하기에 적합한 문제다.

$$\begin{aligned} \min y(x) &= (x_1 - 2)^2 + (x_2 + 1)^2 - 3; \\ \text{s.t. } g_1(x) &= \\ & (4 - 2.1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3})x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2 \leq 0 \\ & -2 \leq x_1 \leq 2, -1 \leq x_2 \leq 1 \end{aligned} \quad (14)$$

Latin Hypercube로 구성한 15개의 초기 실험 점을 이용하여 근사모형을 만들었다. 그림 1은 수렴한 이후, 목적함수와 구속함수들의 근사공간을 나타낸 것이다. 등고선은 목적함수, 음영으로 표시된 부분은 비유용영역의 구속조건 $g_1 = 0$ 이다. 사각점(■)들은 최초 근사모형을 만들기 위해 구성한 15회의 실험점이며, 원형점(●)들은 반복계산단계에서 목적함수를 개선하기 위해 구한 6개의 실험점이다. 별표(☆)는 전역해이다.

그림 2는 원함수공간을 보여준다. 그림 1의 근사함수 공간과 비교하면 구속함수의 형태가 많이 차이가 나고 있다. 본 연구에서 제안한 적응 최적화 알고리즘이 최소의 실험점을 해 근처에서 집중적으로 배치함으로써 계산의 효율성과 정확도를 보장하는 구조를 가지고 있기 때문이다.

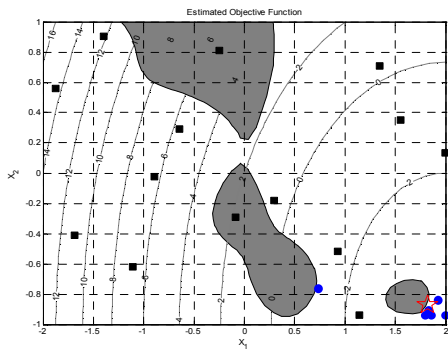


그림 1. 근사함수의 목적함수, 구속함수 및 실험점

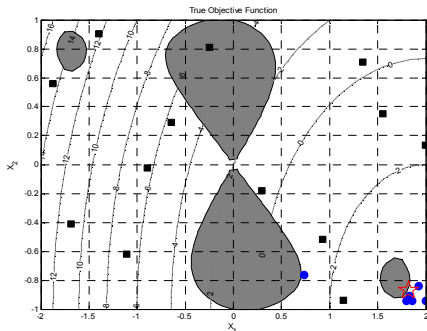


그림 2. 원함수의 목적함수, 구속함수 및 실험점

표 1. 원함수 및 근사함수 계산 결과

	DIRECT (원함수 이용)	적응최적화 (근사함수 이용)
최적해(x_1^*, x_2^*)	1.81537, -0.87539	1.79839, -0.89489
목적함수, y_{\min}	-2.9504	-2.9483
구속함수 g_i	-5.3709e-6	-3.9771e-5

표 2. 근사모형 개선 횟수

근사모형 개선기회	근사모형 개선 횟수	
	목적함수 y	제한함수 g_1
16	6	12

DIRECT[8]를 이용한 원함수 최적화 결과와 개발한 적응 최적화 기법을 이용한 근사함수 최적화 결과를 표 1에 나타내었다. 목적함수의 경우, 0.08%이내의 정확도를 보였다. DIRECT는 원함수를 15,000회 계산하여 최소값을 찾은 결과이다.

표 2는 근사함수 개선횟수를 나타내고 있다. 최초 15회의 실험횟수를 제외한 총 16회의 모델 개선 기회 중 목적함수는 단지 6회만 모델을 개선하였다. 나머지 10회는 단계⑤와 ⑨의 절차로부터 목적함수를 개선시킬 필요가 없다고 판단하고 생략한 결과이다. 구속함수는 16회중 12회만 계산하여 4회를 생략할 수 있었다. 단계⑥과⑩의 절차로부터 실험점이 비유용 영역에 있거나 비활성인 경우 모델개선을 생략했기 때문이다.

3.2 Mystery 함수

제안한 알고리즘의 효율성을 확인하기 위하여 구속조건이 2개인 문제를 풀어보았다. Mystery 함수는 2차원 공간에서 3개의 국부최적해가 존재하며 그중 하나가 전역해이다. 본 연구에서는 구속조건이 있는 문제를 다루기 위하여 다음과 같은 구속조건을 가정하고 문제를 구성하였다.

$$\begin{aligned} \min y(x) \\ \text{s.t. } g_1(x) &= \\ & \sin\left(\frac{5x_1}{2}\right) - \frac{(x_1 - 5)^2(x_2 - 1)}{20} + 1 \leq 0 \\ g_2(x) &= -(x_1 - 2)^2 - x_2 - 6 \leq 0 \\ & -2 \leq x_1 \leq 3, 0 \leq x_2 \leq 5 \end{aligned} \quad (15)$$

여기서 목적함수는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} y(x) &= 2 + 0.01(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \\ & + 2(2 - x_2) + 7\sin(0.5x_1)\sin(0.1x_1x_2) \end{aligned} \quad (16)$$

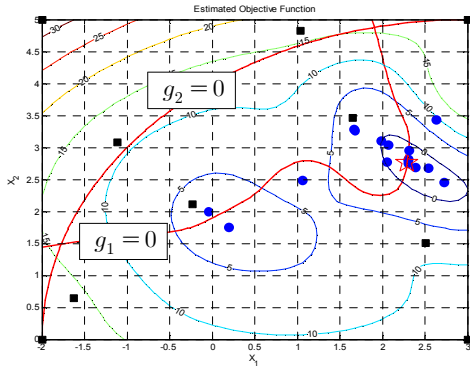


그림 3. 근사 목적함수, 구속·조건 및 실험점

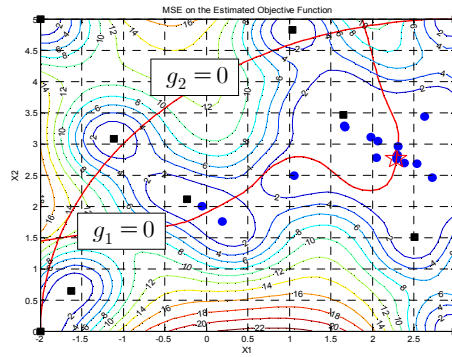


그림 5. 근사 목적함수의 평균 최소제곱오차

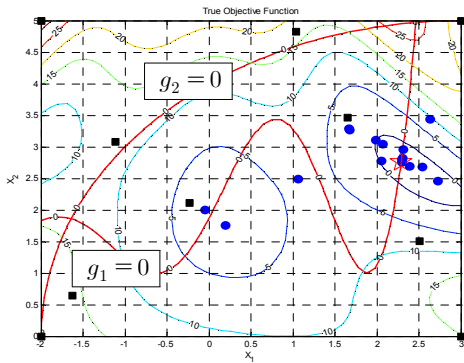


그림 4. 원함수의 목적함수, 구속조건 및 실험점

표 3. 원함수 및 근사함수 계산 결과

	DIRECT (원함수 이용)	적응최적화 (근사함수 이용)
최적해 (x_1^*, x_2^*)	2.29052, 2.76532	2.29046 2.76478
목적함수, y_{min}	-1.23149	-1.23148
구속함수 g_1	-9.2163e-7	-4.4905e-6
구속함수 g_2	-16.8496	-16.8530

그밖의 영역에서는 두 함수의 형태가 차이가 나고 있다.

그림 5는 수렴한 이후, 근사 목적함수의 평균 최소제곱오차(MSE, Mean Squared Error)를 보여주고 있다. 실험점이 밀집해 있는 해 부근에서 오차가 거의 없는 것을 알 수 있다. 즉, 최적화 과정에서 원 함수 전체는 근사하지 않았지만 최적해 부근에서는 높은 정확도를 가지도록 집중적으로 근사모델을 개선한 것을 알 수 있다.

표 3은 DIRECT로 원함수를 계산한 결과와 제안한 적응 전역최적화 기법으로 계산한 결과를 보여주고 있다. DIRECT에서는 최적해를 찾기 위해 원함수를 15,000회 계산했다. 표 3에서 목적함수와 구속함수 g_1 은 $1e-5$ 단위까지 정확도를 보여주고 있다. 반면 구속함수 g_2 는 $1e-1$ 까지만 정확도를 보여주고 있는데, 이는 최적 해에서 g_2 가 비활성이어서 근사모델을 개선할 필요가 없었기 때문이다.

표 4에서 보듯이 목적함수는 18회의 개선 기회 중 16회만 모델을 개선하였다. 후보 실험 점에서의 E[I]값이 0을 가져 최소값을 개선할 가능성이 없다고 판단(단계 ⑤)하였거나, 모델 값이 충분히 정확하다고 판단(단계 ⑨)하였기 때문이다.

Latin Hypercube로 구성한 6개의 실험 점과 각 변수의 최대 최소값을 포함한 10개의 실험점을 이용하여 목적함수와 두 개의 구속함수에 대한 근사모델을 구성한 다음 ③~⑫의 과정을 18회 반복하였다.

그림 3은 수렴한 이후, 목적함수와 구속함수들의 근사모델을 나타낸 것이다. 등고선은 목적함수이며, 하단과 상단에 각각 구속함수 $g_1 = 0$ 인 조건, $g_2 = 0$ 인 조건이 있다. 사각형의 점(■)들은 최초 근사모델을 만들기 위해 구성한 10회의 실험점이며, 원형점(●)들은 반복계산단계에서 목적함수를 개선하기 위해 구한 16개의 실험점이다. 이 문제는 좌우에 두 개의 국부 해를 가지고 있다. 전역 해는 별표(☆)이나 좌측의 국부해 부근 $[x_1=0, x_2=2]$ 에서 해를 찾기 위해 추가로 2회의 근사모델 개선이 이루어진 것을 알 수 있다. 그림 4는 원함수공간을 보여준다. 그림 3과 비교하면 해 부근에서는 원함수와 근사함수가 유사하고

표 4. 근사모델 개선 횟수

근사모델 개선기회	근사모델 개선 횟수		
	목적함수 y	제한함수 g_1	제한함수 g_2
18	16	11	2

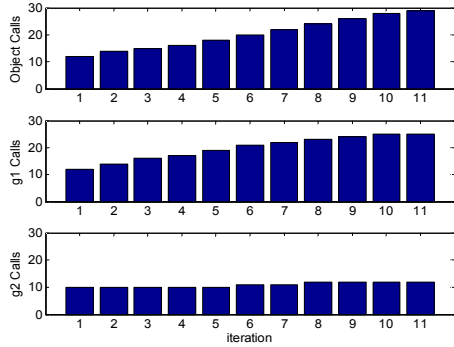


그림 6. 함수 개선횟수 (위로부터 목적함수, g_1 및 g_2 구속함수)

구속함수 g_1 은 11회만 모델을 개선하였다. 나머지 7회는 후보 실험점이 비활성이거나 충분히 정확하다고 판단(단계 ⑥과 ⑩)되었기 때문에 개선을 생략하고 이전단계의 근사모델을 사용하였다. 비활성 구속함수인 g_2 는 최초 10회 계산 이후 초기에 2회만 근사모델을 개선하였다. 매 반복 시, $E[A]$ 및 $E[V]$ 결과가 0값을 나타내었기 때문이다. 즉, 다음 실험점이 구속조건과 충분히 멀리 떨어져 있고($E[A]=0$), 유용 영역 내($E[V]=0$)에 들어와 있기 때문이었다.

그림 6은 각 반복 계산단계에서 근사모델의 누적 개선회수를 보여주고 있다. 근사모델을 개선하기 위해 목적함수가 가장 많은 횟수로 함수를 호출하였으며, 비활성인 g_2 구속조건이 가장 적은 함수 계산횟수를 보였다.

본 연구에서 제안한 적응최적화 알고리즘을 두 예제에 적용한 결과, 제안한 알고리즘이 정확도는 보장하면서 최적화 과정에서 불필요한 근사모델 개선회수를 감소시킬 수 있다는 것을 알 수 있었다. 제안한 알고리즘은 목적함수와 구속함수에 같이 적용할 수 있었으며, 특히 비활성인 구속조건인 경우, 불필요한 근사모델 개선을 최소화시키는 장치를 마련함으로써 계산효율을 증대시킬 수 있었다.

IV. 결 론

본 연구는 소수의 실험 점으로 Kriging모델을 만들고, 여기서 해가 될 가능성이 가장 높은 지

점을 찾아 다음 실험점으로 선정하는 방식의 적응 최적화 알고리즘에 기반을 두고 있다. 본 연구에서는 제안하는 알고리즘은 근사모델에서 제공해주는 확률정보를 이용하여 개선이 불필요한 목적함수나 구속조건 근사모델의 개선을 최소화함으로써 많은 계산 량을 필요로 하는 기존의 전역최적화의 단점을 극복하였다. 본 연구결과는 CFD나 FEM등으로 모델링되어 해석에 많은 자원과 시간을 필요로 하는 항공기 최적설계 등의 문제에 효율적으로 활용될 수 있을 것으로 판단된다.

참고문헌

- 1) Simpson T. W., et. al. "Approximation Methods in Multidisciplinary Analysis and Optimization: A Panel Discussion", *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 27, 2004, pp. 302-313.
- 2) 구요천, 전용희, 김유신, 이동호, "반응면과 크리깅기법을 이용한 설계공간 타당성 향상", *한국항공우주학회지*, 33(3), 2005, pp. 32~38.
- 3) 임종빈, 노영희, 박정선, "크리깅을 이용한 개선된 확률론적 최적화 알고리즘", *한국항공우주학회지*, 34(9), 2006, pp. 33~44.
- 4) Jones, D. R., Schonlau, M., and Welch, W., "Efficient Global Optimization of Expensive Black-Box Functions", *Journal of Global Optimization*, Vol. 13, 1998, pp. 455-492.
- 5) Sasena M., Mj., "Flexibility and Efficiency Enhancements for Constrained Global Optimization with Kriging Approximation", *PhD Dissertation*, University of Michigan, Ann Arbor, 2002.
- 6) Audet et. al. "A Surrogate-Model-Based Method for Constrained Optimization", *Proc. 8th AIAA/NASA/USAF/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Anal. ad Opt.* paper AIAA-2000-4891, 2000.
- 7) Ranjan, P., and Michailidis, G., "Sequential Experiment Design for Contour Estimation from Complex Computer Codes", *Technometrics*, Vol. 50, No. 4, 2008, pp. 527~541.
- 8) Bjorkman, M., and Holmstrom K., "Global Optimization Using the DIRECT algorithm in Matlab", *Advanced Modeling and Optimization*, Vol. 1(2), 1999.