

비선형 유한요소법에서 선탐색 알고리즘의 적용에 의한 수렴속도의 개선

구 상 완*·김 낙 수†

(2002년 6월 28일 접수, 2003년 6월 20일 심사완료)

Improvement of Convergence Rate by Line Search Algorithm in Nonlinear Finite Element Method

Sangwan Koo and Naksoo Kim

Key Words: Line Search(선탐색), Backtracking Algorithm(역추적 알고리즘), Non-Linear FEM(비선형 유한요소법), Convergence Rate(수렴 속도)

Abstract

A line search algorithm to increase a convergence in Newton's method is developed and applied to nonlinear finite element analysis. The algorithm is based on the slack line search theory which is an efficient algorithm to determine initial acceleration coefficient, variable backtracking algorithm proposed by some researchers, and convergence criterion based on residual norm. Also, it is capable of avoiding exceptional diverging conditions. Developed program is tested in metal forming simulation such as forging and ring rolling. Numerical result shows the validity of the algorithm for a highly nonlinear system.

기호설명

- K** : 강성행렬(Stiffness matrix)
- K_T** : 접선강성행렬(Tangent stiffness matrix)
- R** : 잔류벡터(Residual vector)
- F** : 하중벡터(Load vector)
- U** : 변위벡터(Displacement vector)
- ΔU** : 변위증분벡터(Displacement increment vector)
- α** : 가속계수(Acceleration coefficient)
- s** : 기울기(Slope)

- $\|E_U\|$: 변위놈(Displacement norm)
- $\|E_F\|$: 잔여놈(Residual norm)
- ϵ_U : 변위놈 허용치(Displacement norm tolerance)
- ϵ_F : 잔여놈 허용치(Residual norm tolerance)
- ϵ_L : 선탐색 허용치(Line search tolerance)

1. 서론

유한요소법(finite element method)은 현상을 지배하는 미분방정식을 한정된 크기를 가진 요소로 이산화하여 근사해를 구하는 기법으로, 재료의 성형, 구조물의 변형, 유체의 이동 등의 해석에 광범위하게 활용되고 있다. 최근에는 해석영역이 점차 대형화되고 있어서 해석에 소용되는 시간을 단축하는 것이 중요한 문제로 대두되고 있다.

금속성형공정(metal forming process)과 같이 점

* 서강대학교 대학원 기계공학과
 † 책임저자, 회원, 서강대학교 기계공학과
 E-mail : nskim@ccs.sogang.ac.kr
 TEL : (02)705-8635 FAX : (02)707-0558

진적으로 새로운 변형 상태를 구하는 경우에는 수백 번에 이르는 시간 스텝(step)을 계산해야 하는 경우가 발생한다. 재료 또는 마찰에 의해 강성행렬이 비선형적으로 변할 경우에는 한 번의 시간 스텝(time step)에 대해 수립된 해를 찾기 위해 여러 번에 걸쳐 강성행렬을 계산하게 된다. 따라서 이와 같은 비선형 시스템(nonlinear system)의 유한 요소 해석에서는 해석에 소요되는 시간을 단축하는 것이 중요한 의미를 지닌다.

박근⁽¹⁾ 등은 해석영역을 몇 개의 부영역으로 분할하여 강성행렬의 크기를 줄임으로써 해석시간을 단축하였다. Sloan,⁽²⁾ Scott⁽³⁾은 절점(node) 또는 요소(element)의 번호를 변경하여 행렬의 계산 속도를 향상시켰다.

비선형 유한요소법에서는 해를 수립시키기 위해 뉴턴의 방법(Newton's method)을 많이 사용한다. 뉴턴의 방법은 초기치(initial guess)가 수립성에 영향을 주므로, Chung과 Wagoner,⁽⁴⁾ Yang,⁽⁵⁾ 등은 이전 뉴턴 스텝의 해를 보정하거나, 선형화된 재료의 가정을 통해 초기치를 구해 속도를 개선시키려는 연구를 수행하였다.

본 연구에서는 효과적인 선탐색 알고리즘(line search algorithm)을 개발하여 해석 속도를 개선시키는 데 목적을 두고 있다. 선탐색 알고리즘은 뉴턴의 방법에서 수립성을 보장하고, 수립 속도를 향상시키는 강력한 테크닉이다. 개발된 알고리즘에서는 시스템의 수립 특성을 가속 계수 결정에 활용하는 방식이 제안되었다. 알고리즘의 검증에 위해 2차원 단조 공정과 3차원 링압연 공정에 적용해 해석 결과를 비교하였다.

2. 이론

2.1 선탐색 알고리즘

뉴턴의 방법은 헤시안(Hessian) 행렬을 구성하여 증분해를 계산한 후, 가정한 값에 해를 계속 더해서 수립된 해를 구한다. 비선형 유한요소법에서는 헤시안 행렬은 접선강성행렬(tangent stiffness matrix)에 해당한다. 해석영역이 큰 경우는 접선강성행렬의 계산은 많은 시간을 필요로 한다. 따라서 BFGS(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno), DFP(Davidon-Fletcher-Powell)와 같은 준뉴턴(Quasi-Newton) 방법과 같이 접선강성행렬을 근사적으로 결정하는 방식을 사용하기도 한다.⁽⁶⁾

$$K_r \Delta U = R \quad (1)$$

새로운 해를 결정하기 위해 계산된 증분해를 이전 뉴턴의 방법의 해에 더할 때는 가속계수를 곱한다. 그 이유는 가속계수를 사용하지 않으면, 해가 수립되는 영역에 있지 않을 경우 발산하거나 느리게 수립할 수 있기 때문이다. 따라서, 가속계수를 선정하는 것은 해의 수립성을 보장하기 위해서도 필요하다.

$$U^{(i)} = U^{(i-1)} + \alpha \Delta U^{(i)} \quad (2)$$

식 (2)에서 첨자는 뉴턴의 방법의 횟수를 의미한다. 선탐색 알고리즘은 시행착오(trial and error) 방식으로 적절한 가속계수를 결정하는 것으로, 최적의 가속 계수는 기울기(slope)를 계산하여 그 값이 0이 되는 위치이다.⁽⁷⁾ 여기서 기울기는 식 (3)과 같이 하중 벡터(load vector)와 변위 증분 벡터(displacement increment vector)의 내적으로 구한다.

$$s(\alpha) = -R^T \Delta U \quad (3)$$

기울기는 가속 계수가 0일 때 음수의 값을 가지다가 가속계수가 커질수록 양수의 값으로 변화한다. Fig. 1은 가속계수에 따른 기울기의 변화를 보여주고 있다.

기울기가 0이 되는 위치를 정확히 찾는 가속계수는 접선강성행렬의 계산빈도를 높이므로, 최적점(optimum point)에 가까울 경우 수립되었다고 판단하는 것이 보다 효율적이다. 이러한 방법을 느슨한 선탐색(slack line search), 또는 부정확 선탐색(inexact line search) 방법이라고 부른다. 개발된 알고리즘은 느슨한 선탐색 방법에 기초하고 있다.

Crisfield⁽⁸⁾와 Bonet과 Wood⁽⁹⁾은 느슨한 선탐색 시 다음과 같은 기울기비(r)를 계산하여 기준치보다 작을 경우에 가속계수가 적절한 것으로 평가하였다.

$$r(\alpha) = \left| \frac{s(\alpha)}{s(0)} \right| \leq \epsilon_L \quad (4)$$

Crisfield는 선탐색 기준치(line search tolerance)로 0.8을 사용한 것에 비해 Bonet은 0.5를 사용하였다. 비선형성이 클 경우에는 발산하기 쉬우므로, 선탐색 기준치는 낮게 설정될 필요가 있다. 본 연구에서는 0.25를 사용하였다.

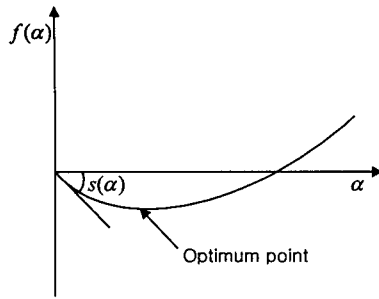


Fig. 1 Slope and Acceleration co

2.2 수렴 판정 기준

수렴 판정 기준은 뉴턴의 방법에서 해가 수렴되었는지 여부를 판정하기 위해 사용된다. 개발된 알고리즘에서는 식 (5)와 (6)의 수렴기준을 사용하였다.

$$\|E_U\| = \frac{\|\Delta U^{(i)}\|}{\|U^{(i)}\|} \leq \epsilon_U \quad (5)$$

$$\|E_F\| = \frac{\|R^{(i)}\|}{\|R^{(0)}\|} \leq \epsilon_F \quad (6)$$

식 (5)는 변위놈(displacement norm)으로 뉴턴의 방법이 진행될수록 해가 변화되는 정도를 나타낸다. 변위놈은 해가 수렴되는 경향은 알려줄 수 있어도 해가 어느 정도 정확한지는 알 수 없다.⁽¹⁰⁾ 따라서, 실제 해와의 오차를 나타내는 잔여놈(residual norm)이 보다 중요한 의미를 지니고 있다. 잔여놈은 선탐색 알고리즘에서도 가속계수를 결정하는 지표로 활용되어지고 있다. 수렴판정치로는 변위놈은 10^{-5} , 잔여놈은 10^{-3} 를 사용하였다. 개발된 알고리즘에서는 식 (4)과 함께 식 (7)을 가속계수의 수렴 판정기준으로 사용하고 있다.

$$\frac{\|E_F(\alpha)\|}{\|E_F(0)\|} \leq \epsilon_L \quad (7)$$

2.3 초기 가속 계수의 결정

처음 선탐색을 실시할 경우 초기 가속계수로는 1을 사용하는 것이 일반적이다. 그 이유는 많은 경우에 가속계수가 1로 결정된 경우가 대부분이기 때문이다.⁽⁶⁾ 그러나, 비선형성이 큰 시스템(system)에서는 가속계수가 계속해서 낮게 결정되

어지는 경우가 자주 발생할 수 있다. 이것은 가속계수 결정을 위한 접선강성행렬의 계산 횟수를 증대시키게 된다. 따라서, 개발된 알고리즘에서는 수렴 경향성을 판단하여 초기 가속계수를 가변적으로 결정할 수 있도록 하였다. 개발된 알고리즘에서는 이전 뉴턴의 방법에서 결정된 가속계수를 초기 가속계수로 사용한다. 만일, 잔여놈이 줄어드는 경우에는 좀 더 높은 값으로 조정될 수 있도록 하였다.

$$\text{if } \|E_F\| \text{ converge, } \alpha_j^{(0)} = k\alpha_{j-1}^{(0)} \quad (8)$$

2.4 역추적 알고리즘

선택된 가속계수가 식 (4)와 같은 조건식을 위배한 경우에는 가속계수가 과도하게 예측된 것이므로 가속계수를 낮춘다. 가속계수를 너무 낮아지면 수렴속도가 매우 느려질 수 있다. 역추적 알고리즘(backtracking algorithm)은 제안된 가속계수가 발산시킬수 있을 경우 판단식에 의해 가속계수를 조절한다. Jeremic⁽¹¹⁾은 이전 가속계수에 0.5를 곱하여 새로운 가속계수를 결정하는 단순한 알고리즘을 사용하였다.

$$\alpha^{(i)} = 0.5\alpha^{(i-1)} \quad (9)$$

Esche 등⁽¹⁰⁾은 변위놈에 의존적으로 가속계수를 변화시켰으며, Bonet과 Wood⁽⁹⁾는 기울기를 이차함수로 근사하여 새로운 가속계수를 결정하였다.

Dennis와 Schnabel⁽¹²⁾은 그들의 저서에서 목적함수(objective function)를 이차함수 또는 삼차함수로 근사하여 가속계수를 결정하는 역추적 알고리즘을 기술하였다. 여기서 목적함수는 최소화되어야 할 함수를 말하며, 변위놈, 잔여놈, 또는 에너지 등이 사용되어질 수 있다. 에너지는 변분원리(variational principle)에 의해 다음과 같이 유도되어질 수 있다.

$$\Phi = \frac{1}{2} U^T K U - U^T F \quad (10)$$

Mori 등⁽¹³⁾은 식 (10)을 사용하여 가속계수를 이론적으로 결정하였다. 개발된 알고리즘에는 Jeremic, Bonet과 Wood, Dennis와 Schnabel의 방법이 적용되어 결과를 비교하였다.

2.5 수렴반경에 의한 가속계수의 보정

뉴턴의 방법은 반복해가 수렴반경(convergence

radius)에 들어왔을 경우 이차적으로 수렴되어지는 특성을 지니고 있다. 역추적 알고리즘으로 가속계수를 조절하는 이유는 해가 수렴반경 안에 있지 않기 때문이다. 수렴반경에 오게 되면 가속계수는 1로 계속 결정되어도 발산하지 않는다. 따라서 본 연구에서는 수렴반경은 잔여놈에 비례하는 것으로 가정하여 알고리즘에 다음과 같은 보정 루틴을 추가하였다.

$$\text{if } \|E_r\| < c \cdot \varepsilon_r, \quad \alpha = 1 \quad (11)$$

식 (11)에서 c 는 비례상수로 10에서 100까지 변화하는 값으로 결정될 수 있다.

수렴반경은 초기 가속계수를 결정하는 데도 사용된다. 초기 가속계수는 식 (8)에 의해 우선적으로 결정되지만, 수렴반경 안에 들어왔을 경우에 대해서만 초기 가속계수로 1을 사용하는 완전한 뉴턴의 방법(full Newton's method)을 사용하게 된다. 그리고 수렴반경에 가까운 경우에 대해서도 1보다 작은 초기 가속계수로 보정되어질 수 있도록 하였다.

2.6 예외 상황의 보정

뉴턴의 방법에서 선탐색 알고리즘을 적용하였어도 해가 발산되는 상황이 나타날 수 있다. 이와 같은 경우에는 직접반복법(direct iteration)으로 해를 보정한다. 또한, 역추적 알고리즘에 의해 결정된 최소 가속계수보다도 작아진 경우에도 직접반복법을 사용한다. 직접반복법에서는 매 스텝(step)마다 계산된 변위 벡터를 변경하지 않고 새롭게 강성행렬을 구하여 해를 수렴시킨다.

$$U_j = K(U_{j-1})^{-1}F \quad (12)$$

직접반복법에서는 변위놈이 수렴판정 기준으로 사용된다. 변위놈이 정해진 기준치 이하로 내려오게 되면, 뉴턴의 방법을 다시 시작한다.

2.7 알고리즘의 구조

가속계수의 결정 단계는 다음과 같은 3단계로 나뉘질 수 있다.

- (1) 가변적인 초기 가속 계수의 결정.
- (2) 초기 가속 계수가 실패한 경우, 역추적 알고리즘에 의한 가속계수의 보정.
- (3) (2)에서 결정된 가속계수에 대해 수렴반경과 고려될 수 있는 경우에 보정.

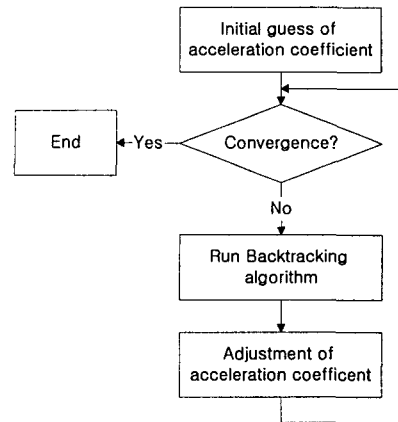


Fig. 2 Flowchart for the line search algorithm

이와 같은 단계로 결정된 가속계수가 선탐색 수렴기준을 만족하는 경우에 대해 선탐색 루프(loop)를 종료한다. 만일 결정된 가속계수가 최소 설정치 보다 작을 경우에는 직접반복법을 수렴시킨다. Fig. 2는 개발된 선탐색 알고리즘의 순서도를 보여주고 있다.

3. 적용 결과

3.1 해석 조건

개발된 프로그램은 강소성 유한요소법에 기초한 2D 단조 해석 프로그램인 DEFTEM과 상용화된 3D 링압연 프로그램인 SHAPE-RR에 적용되었다. 해석에 사용한 CPU는 Athlon이며, Fortran 77로 프로그래밍하여 Compaq Visual Fortran Compiler로 컴파일되었다. 각 케이스(case)는 두 번씩 소요 시간을 측정해 평균값을 사용하였다. 테스트에 사용된 알고리즘의 종류는 다음과 같다.

- (A) 변위놈에 의해 가속계수를 점진적으로 결정
- (B) 초기 가속계수가 1로 설정되어 있으며, 역추적 알고리즘을 사용
 - B1 : Jeremic
 - B2 : Bonet and Wood
 - B3 : Dennis and Schnabel
- (C) 본 연구를 통해 개발된 알고리즘
 - C1 : Jeremic

C2 : Bonet and Wood
 C3 : Dennis and Schnabel

알고리즘 A는 변위 놈에 따라 가속계수를 점진적으로 증가시키지만, 역추적 알고리즘을 사용하지 않아 발산되는 경우에 보정할 수 없다. 알고리즘 B는 기존의 선탐색 알고리즘으로 초기 가속계수로 1을 사용하며, 역추적 알고리즘으로 결정된 가속계수를 보정한다. 이에 비해 본 연구를 통해 개발된 알고리즘 C는 알고리즘 B와 마찬가지로 역추적 알고리즘을 가지고 있고, 가변적으로 초기 가속계수를 결정하는 것이 특징이다. 계산 시간 측정에 사용한 각 케이스(case)별 특징은 Table 1에 나타내었다.

3.2 해석 결과

각 알고리즘별 해석에 소요된 시간을 측정하여 Table 2에 비교하였다. 여기서 (*)로 표시된 것들은 해당 케이스(case)에서 가장 빠른 속도를 나타낸 알고리즘이다. 알고리즘 A에 비해서는 알고리즘 B와 C가 20~50% 정도 계산 속도가 향상된 것을 확인할 수 있다. 따라서 점진적으로 가속계수를 증가시키는 것보다 높은 가속계수를 시도한 후, 부적절한 경우 역추적 알고리즘으로 보정하는 것이 보다 효율적이라고 할 수 있다.

Case 1에서 Case 3까지 해당되는 2D 해석의 경우에는 알고리즘 B가 알고리즘 C에 비해 계산 속도가 비슷하거나 약간 빠른 것으로 측정되었다. 2D 해석에서는 가속계수가 거의 1로 결정되었기 때문에 초기 가속계수를 1로 시도하는 알고리즘 B가 우세했던 것으로 판단된다.

3D 해석에 해당하는 Case 4, 5, 6에서는 알고리즘 B와 C가 계산시간이 거의 같거나 알고리즘 C가 약간 빠른 것으로 측정되었다. 그 이유는 가속계수가 대부분 1로 결정되었으나, 낮게 결정되는 상황도 나타났기 때문이다.

Case 7에서는 알고리즘 B에 비해 알고리즘 C가 17% 빠른 것으로 측정되었고, Case 8의 경우에도 알고리즘 C가 빠른 계산 속도를 보였다. Case 7과 Case 8은 가속계수가 진동하거나 낮게 결정되는 많이 발생한 경우로, 가변적인 초기 가속계수 결정 방식이 접선강성행렬의 계산 빈도를 줄여준 것으로 판단된다.

역추적 알고리즘은 케이스에 따라 알고리즘 사

Table 1 Description of each case

예 제	설 명
Case 1	100 meshes, 40 steps, axisymmetric, 2-D, DEFTEM
Case 2	200 meshes, 50 steps, plain strain, 2-D, DEFTEM
Case 3	236 meshes, 70 steps, axisymmetric, 2-D, DEFTEM
Case 4	504 meshes, 500 steps, 3-D, SHAPE-RR
Case 5	656 meshes, 300 steps, 3-D, SHAPE-RR
Case 6	672 meshes, 250 steps, 3-D, SHAPE-RR
Case 7	528 meshes, 250 steps, 3-D, SHAPE-RR
Case 8	756 meshes, 270 steps, 3-D, SHAPE-RR

Table 2 Computation time for each case(sec.)

예 제	A	B1	B2	B3	C1	C2	C3
Case 1	3.89	2.45	2.45	2.44(*)	2.45	2.47	2.41
Case 2	10.84	5.32	5.60	5.24(*)	5.27	5.46	5.49
Case 3	26.97	14.56	14.57	14.5(*)	14.55	14.9	14.7
Case 4	1464	1644	1340	1504	1511	1339(*)	1438
Case 5	1861	1516	1586	1430	1503	1552	1429(*)
Case 6	993	766	810	787	764(*)	790	770
Case 7	505	432	525	475	358(*)	493	465
Case 8	2268	1364	1351	1362	1357.6	1340(*)	1348

이의 속도 편차가 다르게 나타났다. 역추적 알고리즘 중에 가장 빠른 속도를 보인 경우가 많은 것 Case 1, 2, 3, 5에 해당하는 Dennis와 Schnabel의 알고리즘이었다. 그러나, 3D 해석에서는 다른 알고리즘도 케이스에 따라서는 가장 빠른 성능을 보일 때가 있어서 어느 알고리즘이 우수하다고 할 수는 없었다.

4. 결 론

비선형 유한요소 해석에 효율적인 새로운 선탐색 알고리즘을 개발하였다. 알고리즘의 특징은 다음과 같다.

- (1) 초기 가속계수를 수렴 경향에 따라 가변적

으로 결정한다.

(2) 기울기비와 잔여놈(residual norm)을 선택해서 수렴 기준으로 사용한다.

(3) 수렴반경을 고려하여 가속계수를 보정하는 루틴을 가지고 있다.

(4) 결정된 가속계수가 최소 설정치보다 작은 경우와 발산하는 경우에는 직접반복법으로 해를 보정한다.

개발된 알고리즘을 유한요소 해석 프로그램에 적용한 결과 변위놈에 기초에 점진적으로 가속시키는 알고리즘에 비해서는 20~50%의 속도향상이 있었다. 그리고 가속계수가 1로 결정되는 경우가 대부분인 경우에는 기존의 초기 가속계수를 1로 하는 알고리즘과 비슷한 속도를 보였다. 그러나 가속계수가 낮게 결정되는 상황이 많이 발생하는 경우에는 기존의 알고리즘에 비해 빠른 속도를 나타내었다. 따라서 본 연구를 통해 개발된 가속계수 결정 알고리즘은 비선형성이 큰 시스템일수록 보다 효과적이라고 할 수 있다.

후 기

본 논문 연구는 서강대학교 산업기술연구소의 지원에 의해 수행되었습니다.

참고문헌

- (1) Park, K. and Yang, D. Y., 1998, "Domain Decomposition using substructuring Method and Parallel Computation of the Rigid-Plastic Finite Element analysis," *Transactions of Korean Society for Technology of Plasticity*, pp. 474~480.
- (2) Sloan, S. W. and Randolph M. F., 1983, "Automatic Element Reordering for Finite Element Analysis with Frontal Solution Schemes," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 19, pp. 1153~1181.
- (3) Scott, J. A., 1999, "On Ordering Elements for a Frontal Solver," *Commun. Numer. Meth. Engng*, Vol. 15, pp 309~325.
- (4) Chung, K. and Wagoner, R. H., "Numerical Improvement of Viscoplastic, Non-linear Finite Element Analysis," *Int. J. Mech. Sci.*, Vol. 29, pp. 45~49.
- (5) Yang, D. Y., Chung, W. J. and Shim, H. B., 1990, "Rigid-Plastic Finite Element Analysis of Sheet Metal Forming Process with Initial Guess Generation," *Int. J. Mech. Sci.*, Vol. 32, No. 8, pp. 687~708.
- (6) Bathe, K. J., 1996, *Finite Element Procedures*, Prentice Hall, pp. 754~761.
- (7) Arora, J. S., 1989, *Introduction to Optimum Design*, McGraw-Hill, pp. 288~289.
- (8) Crisfield, M. A., 1995, *Non-linear Finite Element Analysis of Solids and Structures*, Vol. 1, John Wiley, pp. 254~265.
- (9) Bonet, J. and Wood, R. D., *Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis*, Cambridge University Press, pp. 186~187.
- (10) Esche, S. K., Kinzel, G. L. and Altan, T., 1997, "Issues in convergence improvement for non-linear finite element programs," *International Journal for Numerical methods in Engineering*, Vol. 40, pp. 4577~4594.
- (11) Jeremic, B., 2001, "Line Search Techniques for Elasto-Plastic Finite Element Computations in Geomechanics," *Commun. Numer. Mech. Engng*, Vol. 17, pp. 115~125.
- (12) Dennis, Jr, J. E. and Schnabel, R.B., 1983, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, pp. 126~129.
- (13) Mori, K. and Yoshimura, H., 1982, "Three-Dimensional Rigid-Plastic Finite Element Method Using Diagonal Matrix for Large-Scale Simulation of Metal-Forming Process," *International Journal of Mechanical Science*, pp. 1821~1834.