

메타모델링 기반 구조 최적화 기법의 현재 연구 동향

Current Research Trends in Metamodeling Based Structural Optimization

1. 서론

하드웨어, 소프트웨어를 망라하는 전산해석 기술의 지속적인 발전에 힘입어 전산모사가 다루는 구조체 내지 시스템이 지속적으로 대형·복잡화되고 있으며, 이를 수용하는 설계모델 및 기법에 대한 수요 또한 매우 높다. 그러나 구배 기반 수치 최적화 기법에 의존하는 종래 최적설계 기법의 일반적 특성을 고려할 때, 고차원 설계변수와 복수 물리현상 연성으로 인해 발생하는 민감도 계산문제 등으로 인해 고도화된 해석모델을 설계기법에 적용하는 데에는 많은 어려움이 따른다. 이와 같은 한계성을 극복하고자 최근 메타 모델을 이용한 최적설계 기법이 그 대안으로 제안되고 있다(그림 1).

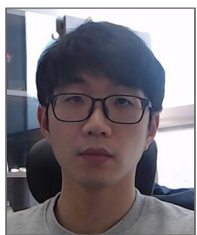
메타모델 혹은 대리모델은 복잡한 입력 값과 출력 값 간 관계를 상대적으로 단순한 함수로 근사하는 기법 일반을 통칭한다. 메타모델은 그 기저함수(basis function)에 따라 흔히 구분되며 최소 자승법을 이용한 간단한 저 차원 다항함수 회귀모델에서부터, 최근 인공지능 기술의 일환으로 대두된 인공 신경망(Artificial Neural Network)기반 비선형 회귀모델에 이르기까지 기법 간 복잡성의 차이는 있지만 모두 메타모델의 일부로 간주된다(Du 등, 2017). 입력-출력간 단순성을 그 핵심으로 하는 이와 같은 대리모델 기법은 다수의 물리 현상 및 서브 시스템으로 구성된 복잡한 시스템의 설계를 목적으로 하는 다분야 통합 설계에 성공적으로 적용되어 왔으며, 특히 복잡한 동역학계나 유체계를 근사하는데 사용되어 항공 분야 시스템 설계의 핵심 기술인 다분야 통합 설계(multidisciplinary design optimization; MDO)의 기반 이론으로 자리잡고 있다.

반면, 위상 최적설계 기법을 위시한 구조 최적화(structural optimization) 기법은 다차원, 연속 함수로 표상된 설계 공간을 최적화하는 기법으로 적층 제조 기술을 가장 잘 활용할 수 있는 설계방안으로 주목을 받고 있다. 최근 상기한 두 설계 기법의 장점을 통합하고자 대리모델 기법을 사용해 MDO의 특성을 구조 최적화에 도입하는 새로운 접근법들이 시도되고 있다. 본 기고에서는 이와 같은 메타모델 기반 구조 최적화 기법의 최근 연구동향을 보고하고, 이를 구현하기 위한 필요 요소에 대해 설명하고자 한다. 여담으로 본 고에서 소개되는 기법은 지난 전산구조공학회지를 통해 소개된 인공지능 기반 설계기법(유승화, 2022)에서 기술된 내용의 일부로도 볼 수 있으므로 관심있는 독자들은 해당 기사를 참고하기 바란다.



오 영 택

울산과학기술원 기계공학과 석박사통합과정



정 하 영

울산과학기술원 기계공학과 조교수

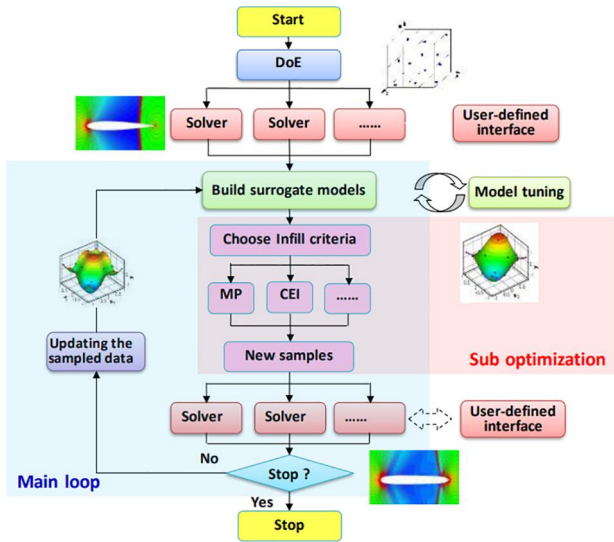


그림 1 메타모델을 이용한 최적설계 알고리즘 (Du 등, 2017)

2. 배경 이론

2.1 구조 최적화

구조 최적화 기법은 설계변수의 종류에 따라 크게 크기/형상/위상(size/shape/topology) 최적화로 구분되며(Dugré. A., 2014) 각각 구조체의 형상 매개변수(예: 보의 두께), 형상 표현 함수, 재료 분포 등을 설계변수로 사용한다(그림 2). 구조 최적화의 문제 정의는 목적함수와 제약함수로 구성되어 있으며, 아래와 같이 수식화된다.

$$\begin{aligned} \min_x & : f(u(x), x) \\ \text{s. t.} & : g_i(u(x), x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(u(x), x) = 0 \quad j = 1, \dots, n \\ & x^{lb} \leq x \leq x^{ub} \end{aligned} \quad (1)$$

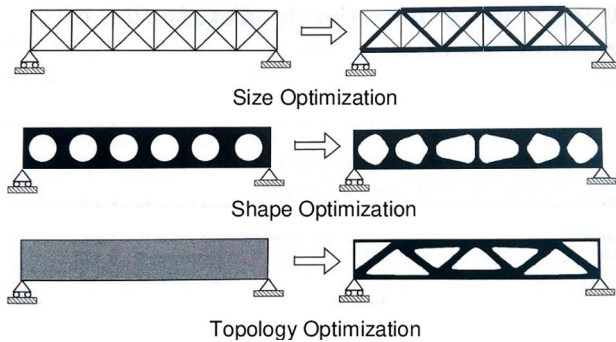


그림 2 Size optimization, shape optimization, topology optimization 비교 (Dugré. A., 2014)

최적설계는 m 개의 부등식 제약 g_i 과 n 개의 등가 제약 조건 h_j 하 목적함수 f 를 최소화하는 설계변수 x 를 찾는 것을 목적으로 한다. 설계과정에서 구조물의 거동을 표현하는 상 변수 $u(x)$ 는 보통 편미분 방정식(PDE)의 형태를 띠는 등가 제약식의 해로 표현되기 때문에 해당설계는 PDE-constrained optimization의 일부로도 볼 수 있다. 일반적으로 구조 최적설계 과정에서는 해석된 기계 시스템의 해석 해에 근거하여 점진적으로 더 우수한 설계를 도출하게 되는데, 이 과정에서 민감도 해석이 중요함은 잘 알려져 있다. 최근 민감도를 활용하지 않는 비구배기반 최적화 방법도 제한적으로 제안되고 있으나, 설계변수 차원의 제한 및 최적해에 대해 낮은 접근성이 그 한계로 지적되고 있어, 아직은 저 차원 설계 문제에 한정되어 있다(Sigmund, 2022). 따라서 시뮬레이션의 전산비용이 매우 높거나 설계변수와 목적함수 간의 명확한 관계를 도출할 수 없는 충돌 해석, 그리고 다물리 연성해석 등과 같이 구배의 계산이 용이하지 않은 경우에 메타모델 기법은 효과적인 대안이 될 수 있다.

2.2 메타모델 및 크리깅 모델

메타모델 기법은 제한된 정보를 활용하여 설계변수와 시뮬레이션 응답 간의 관계를 간결한 수학적 표현으로 해석하여 예측 값을 생성하는 함수를 생성하는 기법을 이른다. 구조 최적설계 문제와 같이 반복적인 전산해석으로 인해 계산 비용이 상승하는 경우, 메타모델을 도입함으로써 분석의 효율성을 획기적으로 개선할 수 있다. 이 기법은 뉴럴 네트워크, 방사형 기저 함수, 다 변수 적응 회귀 스플라인 등의 다양한 대리모델 방법론을 포함하며, 복잡한 실제 함수를 효율적으로 모사하는 능력을 지니고 있다(Liu 등, 2017). 또한, Multi-Disciplinary Optimization(MDO)와 같이 복잡한 멀티피직스 문제 및 대규모 설계변수를 다루는 경우에 대리모델의 활용은 전산비용의 절감을 가능하게 한다.

본 고에서는 대리모델의 예시로서 크리깅 모델을 간단히 설명하고자 한다. 크리깅 모델은 사전 공분산이 가정된 확률 변수 x 와 관측값 y 을 토대로 구성되는 보간 모델로, 샘플링되지 않은 위치에서도 최적 선형 불편 예측(Best Linear Unbiased Prediction; BLUP)을 제공하는 기법이다. 특히, 가우스 과정(Gauss process)의 일종으로써 샘플 추가에 의한 모델의 지속적인 업데이트가 가능하여 시뮬레이션 상

고차원 응답 표면을 효율적으로 생성가능하기에 공학, 환경과학, 지리학 등 다양한 분야에서 응용되고 있다.

크리깅 모델 $Y(x)$ 는 실제함수의 경향을 묘사하는 전역함수 μ 와 평균이 0, 공분산이 $\tau^2 R$ 인 다변수 정규분포 함수 $M(x)$ 의 합으로 식 (2a)과 같이 표현된다. 정규분포 함수는 가우시안 분포를 따른 랜덤 노이즈라고도 볼 수 있으며, τ^2 는 process variance이다. 선형 크리깅 모델의 예시를 아래 식 (2a)에 나타내었다.

$$Y(x) = \mu + M(x) \equiv f^T \beta + M(x)$$

$$M(x) \sim N(0, \tau R(\theta, x)) \tag{2a}$$

이때 공분산 함수 R 은 커널과 그 하이퍼파라미터 θ 에 의해 정의되는 확률변수간 공분산 행렬이다. 대부분의 경우 커널은 랜덤 변수간 유클리드 거리에 대한 단조함수 형태로 가정된다. 크리깅 기법 하에서 주어진 샘플 데이터셋 $S = [s_1, s_2, \dots, s_n]$ 과 해당 관측치 $Y_s = [y(s_1), y(s_2), \dots, y(s_n)]$ 는 크리깅 모델의 realization(i.e., $M(s_i) = 0$)이라 간주된다. 이를 토대로 비편향 조건(unbiased constraint) 하 관측값-예측값 간 최대 유사성을 갖도록 하는 추정치(estimate)를 얻을 수 있다. 식 (2b)에 최대 우도법(Maximum Likelihood Estimation)에 기반해 계산된 예측 평균 \hat{y} 와 표준편차 $\hat{\sigma}$ 을 나타내었다.

$$\hat{y}(x) = f^T \beta_0 + \mathbf{r}(x)^T [\mathbf{R}]^{-1} (\mathbf{Y}_s - \mathbf{F} \beta_0)$$

$$\hat{\sigma}(x) = \tau^2 (1 - \mathbf{r}(x)^T [\mathbf{R}]^{-1} \mathbf{r}(x) + \delta^T \delta (\mathbf{1}^T [\mathbf{R}]^{-1} \mathbf{1})^{-1}) \tag{2b}$$

\mathbf{r} 과 \mathbf{F} 는 각각 샘플에서 계산되는 임의 랜덤변수와의 공분산값과 회귀변수 f 의 벡터이며, $\beta_0 = (\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{Y}$ 는 일반화된 최소자승 추정치(Generalized least squared estimate)이다. 하이퍼파라미터의 추가적인 최적화를 통해 크리깅 모델의 정확도를 향상할 수 있다.

3. 메타모델을 이용한 구조 최적설계 예제

구조 최적화 기법에 메타모델을 사용한 사례는 다수 찾을 수 있으나, 본 고에서는 구조 최적화 기법 중에서도 가장 넓은 설계함수 공간을 사용하는 위상 최적설계 기법을 위주로 설명하고자 한다. 앞서 2.1장에서 서술된 바 있듯, 위상 최적설계 기법은 설계 도메인 내 재료의 분포를 설계하는 것을 그 목적으로 하고 있으며, 이로 인해 일반적인 대리모델에서 가정하는 설계변수의 차원보다 훨씬 높은 설계변수 차수를 가지는 것을 그 특징으로 한다. 또한, 매 반복마다 전산해석이 수행되어야 하는 만큼 전산비용에도 민감한 특징이 있다. 이와 같은 측면에서 볼 때 메타모델과 구조 최적설계의 결합을 위해서는 우선 설계 자유도를 최

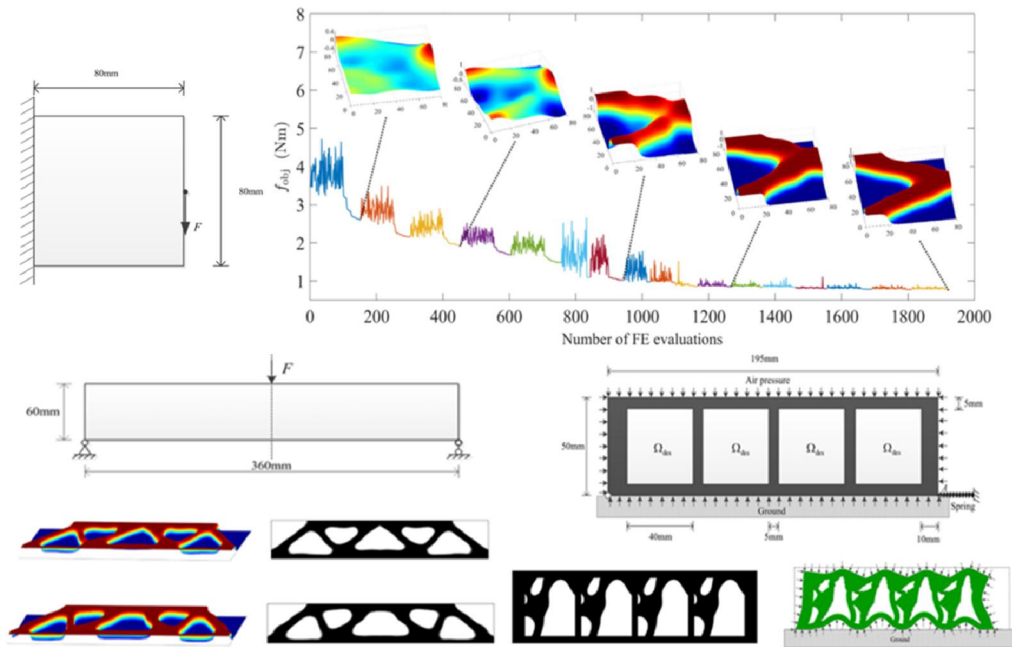


그림 3 크리깅 기반 비구배 위상 최적화(Luo 등, 2020)

대함으로써 유지하면서도 설계변수는 최소화하는 기법이 우선 선정되어야 하며, 이와 동시에 효율적인 전산실험 계획이 수행되어야 함은 자명하다.

Rapponi 등(2019)은 차량의 충돌 안전성을 중점으로 한 위상 최적화 연구를 진행하였다. 충돌 안전성 해석은 복잡한 비선형성과 불연속성 때문에 민감도 해석이 용이하지 않아 전통적인 위상 최적화 기법이 적용되기 어려운 대표적인 예제로 알려져 있다. 해당 연구는 대표적인 외연함수 기반 설계 공간 축소 기법인 MMC(moving morphable components)를 이용함으로써 재료 분포와 복잡한 충돌 해석 간 응답 표면을 크리깅 모델로 근사하였으며, 다양한 선택 전략을 적용하여 최적 설계안을 도출하였다. 기존에 정립된 등가정하중 모델 대비 통계적으로 유사한 해를 얻을 수 있었을 뿐 아니라, 설계 과정에서 소요 탐색 회수가 크게 감소하는 효과를 확인하였다. 해당 기법의 설계공간은 전체 재료 분포를 랜덤 장으로 가정하고 이를 급수 전개(series expansion)의 일환인 Expansion Optimal Linear Estimator(EOLE) 기법으로 축소한 Luo 등(2020)에 의해 확장된 바 있다. 해당 기법은 단순한 외팔보 설계에서부터 복잡한 접촉 해석이 고려된 작동기 설계, 그리고 bifurcation이 고려된 박막 주름 억제해석(Luo 등, 2021)등 비선형성이 지배적인 문제에 이르기까지 그 범용성이 확인되었다

(그림 3).

최근 Oh 등(2023)은 해당 기법을 Voronoi 구조체로 확장함으로써 우수한 에너지 흡수 능력을 지닌 구조체를 자연 모사 재료를 설계한 바 있다. Voronoi tessellation 사용한 구조체 설계는 디자인 영역을 낮은 차원의 설계 변수로 나타낼 수 있는 이점이 있으나 동일한 형상변수에서도 상이한 성능을 보이는 확률론적 특성이 존재하여 이는 최적형상변수 선정에 어려움을 초래한다. 더불어, 에너지 흡수 능력은 탄성 및 소성 등 재료 특성 뿐 아니라 자체 접촉과 같은 구조적 비선형성이 고려되어야 하는 복잡한 문제이다. 해당 연구에서는 이를 극복하기 위해 구조체의 확률론적 특성이 고려된 확률론적 크리깅 모델과, 이를 이용한 베이지안 최적화를 사용하여 통계적으로 우수한 성능을 보이는 Voronoi 구조체의 설계변수와 이를 사용한 실제 구조체를 설계하였다(그림 4). 이는 복잡한 비결정적 설계변수를 효율적으로 고려하는 방법으로써의 메타모델 기반 최적 설계기법의 유용성을 보여준다.

이 외에도, Shin등(2022)은 자연에서 발견되는 거미줄의 구조를 모티브로 나노 스케일의 자연 영감 공명기를 설계에 메타모델을 적용하였다. 특히 전체 구조체 차원에 비해 매우 얇은 거미줄의 특성상, 모델링과 해석에 많은 시간이 소요되므로 효율적인 샘플링이 필수적이다(그림 5). 베이

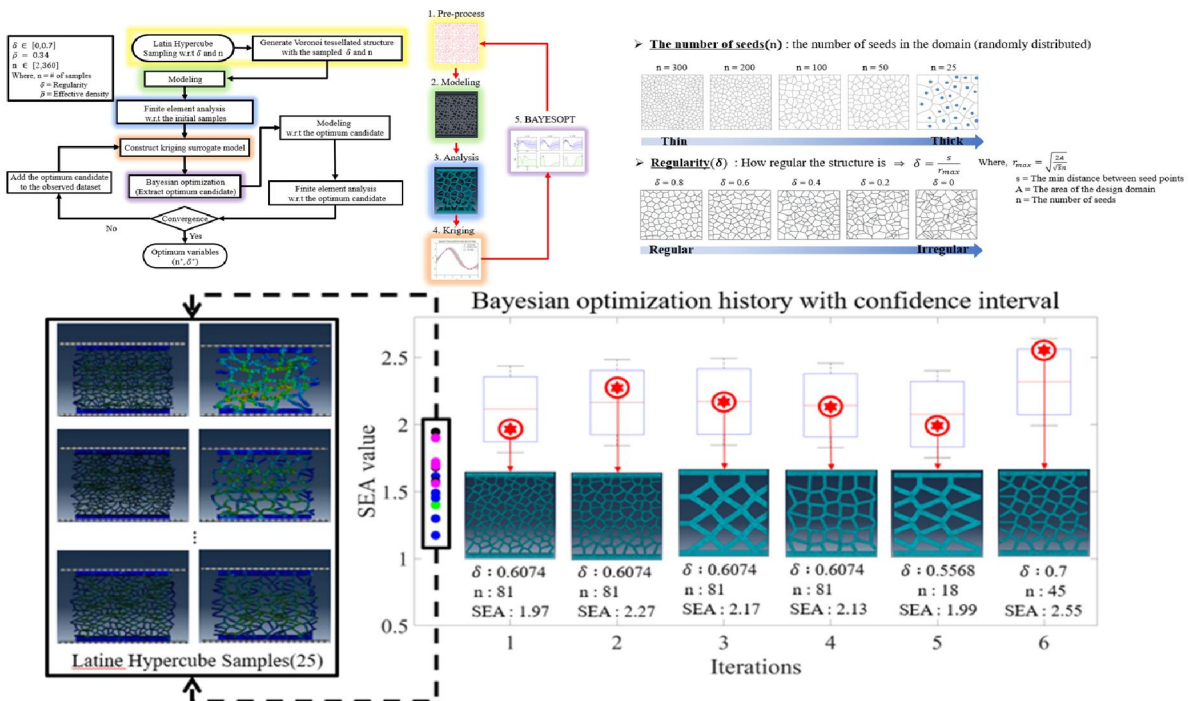


그림 4 비결정적 데이터를 고려한 메타모델 기반 비구배기반 최적화(오영택, 2023)

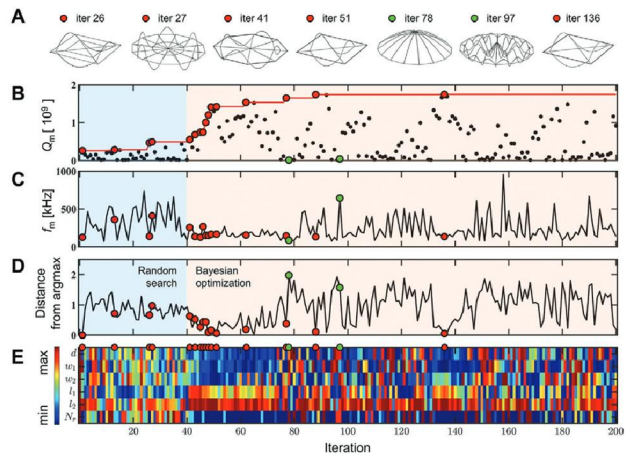
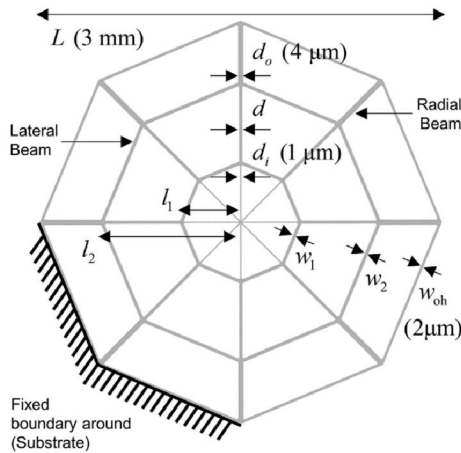


그림 5 거미줄 나노 공명기 비구배 기반 형상 최적화(Shin 등, 2022)

지만 최적화를 통해 전통적인 방식으로는 도출하기 어려웠던 독특한 구조체 디자인을 성공적으로 설계하였으며, 이는 메타모델 기반의 최적화 방법이 복잡한 공학 문제에 대하여 창의적인 해결방안을 제시할 수 있음을 시사한다.

이와 더불어 대리모델의 회귀 분석에 초점을 둔 연구 또한 진행되고 있다. 일례로, Mi Xiao 등(2022)은 Functionally Graded Cellular Structure(FGCS)의 실제 제조 가능성을 제고하기 위한 방안으로 연속적이며 부드러운 변화를 가지는 멀티스케일 구조설계를 위해 크리깅 모델을 사용하는 것을 제안하였다. 불연속 적인 셀룰러 구조 내의 개별 유닛 셀들을 개별 샘플로 간주하고 이를 크리깅 모델의 보간 기법으

로 자연스럽게 연결한 것으로 기존의 기법 대비 전산비용이 낮아지면서도 기법이 단순한 장점이 있다(그림 6).

위의 연구 외에도 메타모델을 전제하는 MDO 플랫폼을 이용하여 상기한 위상 최적설계, gradient 연성의 어려움을 해결한 사례도 있기에 간단히 소개한다. Chung 등(2019)과 Giubert 등(2023)은 대표적인 MDO 플랫폼인 OpenMDAO 내에 구현된 MAUD architecture를 이용하여 위상 최적설계를 수행하는 방안을 제안하였으며, 모듈식 아키텍처를 활용함으로써 토폴로지 최적화에 대한 접근성이 향상될 뿐 아니라 복잡한 다물리 구조체도 용이하게 설계할 수 있음을 확인하였다.

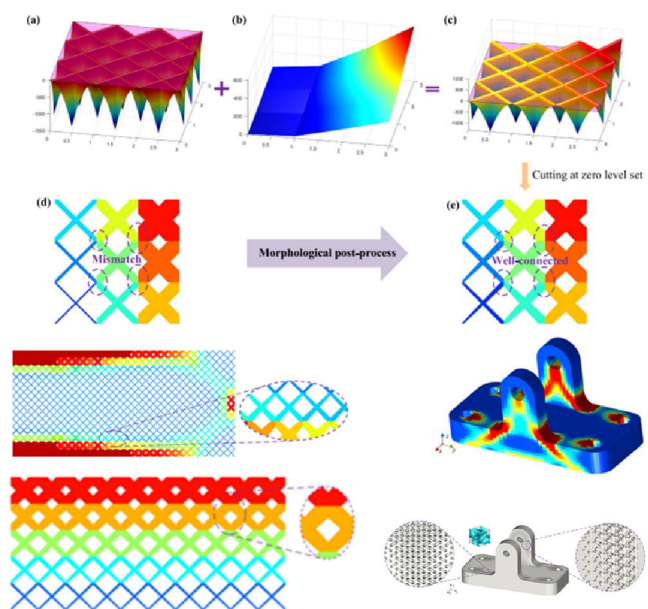
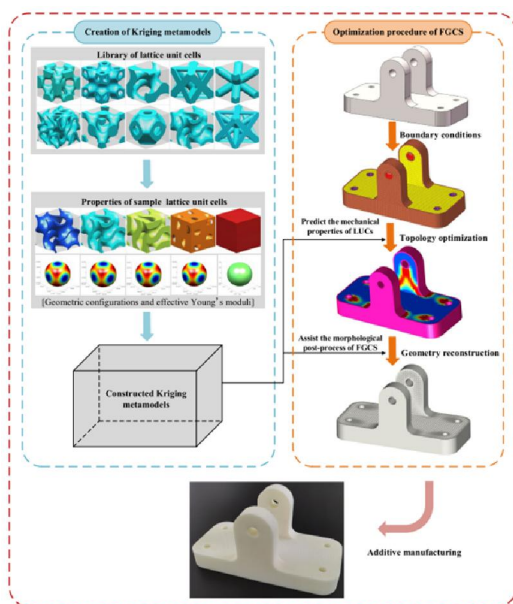


그림 6 FGCS 구조체 연결성 향상을 위한 메타모델 기반 후처리 프로세스(Xiao 등, 2022)

4. 결론

복잡한 설계-거동간 관계를 단순화시킬 수 있다는 점에서 Metamodel Based Design Optimization(MBDO)에 대한 연구는 다양한 분야에서 꾸준히 이루어져 오고 있다. 특히 해석에 소요되는 시간 및 전산 자원이 비대하여 최적화 과정에서 부담이 되거나, 설계안과 구조 거동간 비선형성이 지배적인 경우 대리모델을 이용한 비구배 해석은 큰 효과를 가지고 있는 것으로 판단된다. 더불어, MDO 소프트웨어 프레임워크와 구조 해석 기법간 시너지를 위한 요소 기술로써 또한 대리모델이 필요한 것으로 여겨지나, 아직 대리모델링 과정에서 설계 차수의 한계가 존재하여 확장성이 제약되는 한계가 있어, 차원 축소, 병렬화 등 전산 해석 제반에 대한 기법의 지속적인 연구가 필요하다.

참고문헌

1. Du, X., Amrit, A., Thelen, A. S., Leifsson, L. T., Zhang, Y., Han, Z. H., & Koziel, S. (2017). Aerodynamic Design of a Rectangular Wing in Subsonic Inviscid Flow by Direct and Surrogate-based Optimization. In 35th AIAA Applied Aerodynamics Conference (p. 4366).
2. Dugré, A. (2014). A design process using topology optimization applied to flat pressurized stiffened panels (Doctoral dissertation, École Polytechnique de Montréal).
3. Sigmund, O. (2011). On the usefulness of non-gradient approaches in topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 43, 589-596.
4. 유승화 (2022) 데이터 기반 소재 및 구조 최적화 방법 소개, 전산구조공학회지, 제35권 제1호.
5. Wang, G. G., & Shan, S. (2006). Review of metamodeling techniques in support of engineering design optimization. In *International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference* (Vol. 4255, pp. 415-426).
6. Liu, J., Song, W. P., Han, Z. H., & Zhang, Y. (2017). Efficient aerodynamic shape optimization of transonic wings using a parallel infilling strategy and surrogate models. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 55, 925-943.
7. Luo, Y., Xing, J., & Kang, Z. (2020). Topology optimization

using material-field series expansion and Kriging-based algorithm: An effective non-gradient method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 364, 112966.

8. Y. Luo, J. Xing, Z. Kang, J. Zhan, M. Li. (2021). Uncertainty of membrane wrinkling behaviors considering initial thickness imperfections., *International Journal of Solids and Structures*, 191-192 264-277.
9. Y. Oh, H. Chung (2023) Design of Bio-inspired Material with High Energy Absorption Capability Using Bayesian Optimization and Voronoi Tessellation., *WCSMO-15 2023*, Jun 05-09, 2023, Cork, Ireland.
10. Raponi, E., Bujny, M., Olhofer, M., Aulig, N., Boria, S., & Duddeck, F. (2019). Kriging-assisted topology optimization of crash structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 348, 730-752.
11. Shin, D., Cupertino, A., de Jong, M. H., Steeneken, P. G., Bessa, M. A., & Norte, R. A. (2022). Spiderweb nanomechanical resonators via bayesian optimization: inspired by nature and guided by machine learning. *Advanced Materials*, 34(3), 2106248.
12. Liu, X., Gao, L., Xiao, M., & Zhang, Y. (2022). Kriging-assisted design of functionally graded cellular structures with smoothly-varying lattice unit cells. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 390, 114466.
13. Xiong, F., Ren, C., Mo, B., Li, C., & Hu, X. (2023). A new adaptive multi-fidelity metamodel method using meta-learning and Bayesian deep learning. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 66(3), 58.
14. Chung, H., Hwang, J. T., Gray, J. S., & Kim, H. A. (2019). Topology optimization in OpenMDAO. *Structural and multidisciplinary optimization*, 59, 1385-1400.
15. Guibert, A. T., Hyun, J., Neofytou, A., & Kim, H. A. (2023). Implementation of a plug-and-play reusable level-set topology optimization framework via COMSOL Multiphysics. In *AIAA SCITECH 2023 Forum* (p. 1675). 