

크리깅 모델을 이용한 판의 최적설계

Optimization of the Plate Using Kriging Model

한오현*, 박정선(한국항공대학교)

1. 서 론

연료전지는 최근 급격한 전력 및 에너지 소비 증가에 따른 에너지 고갈 문제를 해결하고, 점점 심각해지는 환경 문제를 해결할 수 있는 유력한 해결책으로서 21세기 청정 에너지원으로 부각되고 있다. 연료전지는 연료에 포함된 수소와 공기 중 산소의 전기 화학적 반응으로 직접 전기에너지를 생산하는 고효율 발전시스템이다 [1].

연료전지에 대한 연구가 활발히 진행되면서 경제성과 효율성을 최대화하기 위하여 연료전지 스택에 대한 최적화가 매우 중요하게 여겨지게 되었다. 특히, 분리판은 연료전지 스택의 대부분을 차지하기 때문에 분리판의 부피와 무게를 줄이는 것이 중요시되면서 여러 최적화 기법이 적용되었다. 도함수를 이용하는 전통적인 최적화 방법으로는 점차 복잡해져 가는 대규모 조합의 최적화 문제와 제한조건이 많은 공학 문제들을 해결하는 데에 한계를 드러내게 되었다[2]. 이를 극복하고자 최적해의 전역성을 보장하고 동시에 불연속 변수의 적용이 쉬운 다양한 비도함수 알고리즘이 도입되었지만 수많은 반복해석에 따른 긴 해석시간으로 인해 실제 응용에는 많은 어려움이 있다. 이에 비도함수 알고리즘의 특성을 가지면서, 반복해석의 수를 최대한 줄일 수 있는 근사최적화기법인 반응표면법(Response surface method)과 크리깅(Kriging)이 최적화 기법에 적용되었다. 반응표면법은 1950년대에 Box와 Wilson에 의해 통계학 분야에서 처음으로 개발된 이후 화학, 공학 등에서 널리 응용되었다[3]. 그리고 크리깅은 지질통계학에서 사용되던 이론을 Sacks 등에 의해 컴퓨터 실험에 적합

하도록 수정하여 RSM과 같이 오차를 제거해 주는 근사최적화모델이다[4].

본 연구에서는 연료전지 분리판의 무게와 부피를 최소화하기 위하여, 중심합성계획법(Central composite method)에 의하여 반응표면을 생성한 반응표면법과 크리깅을 이용한 최적화 프로그램을 작성하여 연료전지의 분리판에 대한 최적화를 수행하고자 한다.

2. 이론적 배경

2.1 크리깅(kriging)

크리깅 모델은 기본적으로 실험점들에서의 오차가 서로 독립적이지 않고 서로 연관성을 가진다는 가정 하에서 시작된다. 만약, 최소 자승법에 의한 회귀모델을 생성하였을 경우 추정값 \hat{y} 가 실제값 사이에 큰 오차가 있다면 그 추정값에서 매우 가까운 지점에서의 추정값 또한 실제값 y 와 큰 오차를 가질 것이란 사실을 예상할 수 있을 것이다. 이것은 최소자승법에 의한 회귀모델 \hat{y} 가 통계적인 오차(systematic error)를 가지기 때문이다. 크리깅 모델에서는 확정론적인 응답을 회귀모델을 포함하는 임의 모델의 구현으로 처리하고 있다. 크리깅 모델의 일반적인 형태는 식 (1)과 같다.

$$y(x) = f(x) + Z(x) \quad (1)$$

식 (1)에서, $y(x)$ 는 우리가 알고자 하는 함수이며, $f(x)$ 는 주어진 실험 데이터를 이용해서

얻어낼 수 있는 전체 설계 영역에서의 전역모델(global model)이다. 이러한 전역모델은 반응표면모델과 유사한 다항함수(polynomial function)로 표현되며 많은 경우에 상수항으로 처리하고 있다. $Z(x)$ 는 평균이 0이고 분산이 σ^2 인 정규 분포를 따르며, 크리깅 모델이 각 데이터 점들을 $Z(x)$ 보간 할 수 있도록 국소적인 변동을 만들어내는 부분으로 응답모델의 불확실성을 나타내준다. 이를 통해 n 개의 실험 점을 적절하게 보간해 줄 수 있는 것이다. 식 (2)는 $Z(x)$ 의 공분산(covariance)을 나타낸다.

$$Cov[Z(x^i), Z(x^j)] = \sigma^2 R [R(x^i, x^j)] \quad (2)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, n$$

여기서, R 은 상관행렬(correlation matrix)이며 $R(x^i, x^j)$ 는 실험 데이터 내 임의의 두 점 x^i 와 x^j 사이의 상관함수이다. R 은 대칭이며, 대각 요소가 모두 1인 ($n \times n$)의 양정행렬이다. 본 연구에서는 식 (3)과 같은 Gaussian 상관함수를 사용하였다[5].

$$R(x^i, x^j) = \prod_{k=1}^n \exp(-\theta_k |x_k^i - x_k^j|) \quad (3)$$

2.2 반응표면법

반응표면법이란 여러 수치 값들이 복합적으로 작용함으로써 어떤 반응변수에 영향을 주고 있을 때, 이러한 반응의 변화가 이루는 반응표면에 대한 통계적인 분석방법을 말한다.

2.2.1 반응표면 생성

반응표면(response surface)은 여러 개의 설계변수 x_1, x_2, \dots, x_k 가 복합적인 작용을 함으로써 어떤 반응변수 y 에 영향을 주고 있을 때, 이러한 반응의 함수관계를 적절한 수

학식으로 표현한 것을 말한다. 실제로는 이러한 함수관계가 존재하는 경우는 극히 드물며, 설계변수와 반응변수와의 관계를 정확하게 표현하는 것은 거의 불가능하다. 일반적으로 반응표면 생성 시 사용되는 회귀모델로는 식 (4)의 1차 회귀모델(first order regression model)과 식 (5)의 2차 회귀모델(second order regression model)이 있다[6].

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i \quad (4)$$

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i \leq j} \beta_{ij} x_i x_j \quad (5)$$

2.2.2 반응표면법에 의한 최적화

초기에 설계변수의 영역을 전체 영역으로 설정한 후 한 번의 반응표면을 생성하여 최적화를 시킬 수도 있지만, 이는 이론적으로 가능하며, 실제로 이 경우에 가정된 회귀후보모델들이 적절하지 않거나 설계변수가 많고, 실제 함수관계가 복잡할 경우에는 정확한 반응표면을 생성하는 것 자체가 불가능하다. 따라서 일반적으로 반응표면법에 의한 최적화의 경우 작은 흥미영역에서 출발하여 점차적으로 흥미영역을 옮겨가면서 최적화를 수행함으로써 방향성과 지역성이 추가되는 탐색기법이다. 단, 흥미영역에서 생성된 회귀모델의 가정은 모든 영역에서 만족할 필요는 없으며, 단지 흥미영역 내에서만 만족하면 된다. 본 연구에서는 중심합성계획법을 이용하여 설계 변수의 전체 영역에 대해 2차 회귀모델에 대한 반응표면을 생성한 후 최적점을 찾고 이 최적점을 중심점으로 하는 적절한 흥미영역의 범위를 재설정한 후 새로운 반응표면을 생성하여 최적화를 수행하였다. 이런 과정이 반복이 되다 적절한 수렴조건에 따라 프로그램은 정지하게 되며, 최적화 과정에서 신뢰구간(confidence interval)을 적용하여 최적해의 정확성을 높일 수 있다[6].

2.3 접촉해석

접촉 문제는 변형이 작고 마찰이 없는 접촉에서부터 비탄성의 대변형을 갖는 마찰이 있는 일

반적인 접촉에 이르기까지 다양하다. 시간 t 에서 접촉된 물체가 N 개라 가정하면, 각각의 물체 $L(L=1, \dots, N)$ 에 대해 접촉된 전체 면적을 tS_c 라 하면, 시간 t 에서 N 개의 물체에 대한 가상일의 원리는 식(6)과 같이 주어진다.

$$\sum_{L=1}^N \left\{ \int_{V} {}^t\tau_{ij} \delta e_{ij} dV \right\} = \sum_{L=1}^N \left\{ \int_{V} \delta u_i {}^t f^B dV + \int_{S_f} \delta u_i {}^s f_i^s dS \right\} + \sum_{L=1}^N \int_{S_c} \delta u_i {}^c f_i^c dS \quad (6)$$

식(6)의 우변에서 마지막 항이 접촉력에 의한 일을 나타낸 것이다. 접촉력 효과는 외부에서 가해진 견인력 (traction)의 영향에 포함된다. 접촉 견인력의 요소들은 ${}^c f_i^c$ 로 나타내지고 면적 tS_c 에 작용한다. 외부 견인력은 ${}^s f_i^s$ 로 나타내지고 면적 tS_f 에 작용한다[7].

3. 연료전지 분리판의 최적화

3.1 구조해석 모델형상 및 경계조건

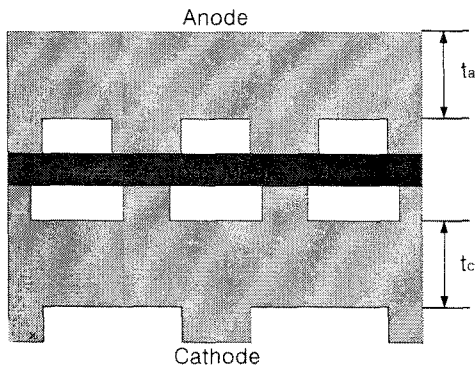


Fig. 1 Configuration of the model for structural analysis

해석에 사용된 모델은 Fig. 1과 같이 단위전지의 일부를 모델링한 것으로 모델의 하단은 고정시키고, 양쪽 끝단은 대칭 경계조건을 적용하였다. 하중조건은 Anode의 상단에서 균일한 분포하중 10기압이 작용한다고 가정하였다. 연료

전지 분리판에 사용된 재료의 물성치는 탄성계수(E)는 4.8GPa이고, 푸아송비(ν)는 0.2이며, Porous media를 구성하는 재료의 구조적 물성치는 압축 실험에 의해서 얻어졌으며, Porous media를 구성하는 재료의 응력-변형률 선도는 Fig. 2와 같다.

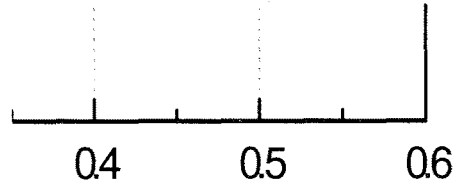


Fig. 197 Stress-Strain diagram of porous media

분리판과 Porous media가 서로 맞닿아 있는 부분은 다른 구속조건 없이 외부의 체결에 의한 평면에 수직압력을 받아 접촉되어 있는 것으로 접촉 요소를 사용하여 해석하였다. 접촉 조건을 나타내기 위해서 2차원 접촉요소를 사용하였으며, 이 접촉 요소는 강체 대 변형체 접촉 상태를 나타낸다. 이는 목표면이 되는 분리판이 접촉이 되는 Porous media에 비하여 상대적으로 매우 강하기(Rigid) 때문이다. 구조해석은 범용 해석 프로그램인 ANSYS를 사용수행하였다[8].

3.2 연료전지 분리판의 최적화

본 연구에서는 연료전지 분리판의 일부에 대하여 중심합성법에 의해 생성된 반응표면을 이용하여 최적화를 수행하였다. 연료전지 분리판의 최적설계에서 목적함수는 단위전지의 단위 길이 당 무게로 설정하였으며, 제한조건은 구조해석 시의 응력으로 설정하였으며, 설계변수는 단위전지의 두께와 채널의 크기를 설정하였다. 따라서 이를 정식화하면 식 (7)과 (8)로 나타낼 수 있으며, 제한조건과 설계변수의 범위는 Table 1과 같다.

Minimize : $F = \sum_{i=1}^n \gamma_i A_i l_i$
 (7)

(γ, A : 재료의 비중량, 단면적)

Subject to : $G = \frac{\sigma}{\sigma_{max}} - 1 \leq 0$
 (8)

Table 1 Constraints of the model

	Stress(MPa)	Thickness(mm)	
		t_c	t_a
Min.		0.3	0.3
Max.	6.7831	1.5	1.5

4. 결과 및 분석

Table 2 Optimization results of the model

	Initial value	RSM	Kriging
Weight($10^{-3}N$)	6.1931	4.8893	4.6469
t_c (mm)	1.5000	1.4324	1.4826
t_a (mm)	1.5000	0.7464	0.5435

반응표면법 및 크리깅을 이용한 최적화의 결과를 Table 2에 나타내었다. 반응표면법의 경우 54번의 유한요소해석을 수행하는 동안 목적함수와 cathode, anode의 분리판의 두께는 각각 $4.8893 \times 10^{-3}N$ 과 1.4324mm, 0.7464mm로 수렴하였고, 크리깅의 경우 49번의 유한요소 해석을 수행하는 동안 목적함수와 cathode, anode의 분리판의 두께는 각각 $4.6469 \times 10^{-3}N$ 과 1.44826mm, 0.5435mm로 수렴하였다. 초기 모델과 비교할 때 연료전지 분리판의 무게는 반응표면법과 크리깅이 각각 약 21.37%, 24.97%, 분리판의 전체 두께는 각각 15.35%, 18.20%가 감소하였다.

4. 결 론

본 연구에서는 연료전지의 경량화와 소형화를 위해서, 최근 많은 연구가 진행중인 반응표면법과 크리깅을 이용한 최적화 프로그램을 작성하여 연료전지의 분리판에 대한 최적화를 수행하였다. 반응표면을 생성하기 위하여 2차 회귀 모델을 선택하였으며, 회귀 상수를 구하기 위한

추출점은 중심합성법을 이용하여 구하였다. 최적화 수행 결과 무게와 분리판의 전체 두께가 크리깅이 더 좋은 값을 도출하였다. 이는 반응표면법 모델의 특성상 비선형성이 강한 모델에는 적용하기가 힘들며 크리깅은 반응표면모델을 보완해 주는 모델이기 때문이다. 따라서 연료전지 분리판의 설계에 있어서 크리깅을 이용하여 분리판의 두께와 채널의 크기에 관한 최적화를 수행하면 좀 더 작고 가벼운 연료전지 설계가 이루어질 수 있다고 사료된다.

후 기

본 연구는 한국에너지기술연구원 연료전지연구센터의 지원과 과학기술부 21세기 프론티어사업(스마트무인기술개발사업단)의 지원으로 이루어졌으며, 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

- 1) G & G Services Parsons, Inc., "Fuel Cell Handbook," U. S. Department of Energy Office of Fossil Energy, 5th, 2000, pp. 3-1~3-8.
- 2) Box, G. and Wilson, K., "On The Experimental Attainment of Optimum Condition," Journal of Royal Statical Society, Der.B., Vol. 13, 1951, pp. 1-45.
- 3) Myers, R., Khuri, A. and Carter, W., 1989, "Response Surface Methodology: 1966 - 1988," Technometrics, Vol. 31, No. 2, pp. 137-157.
- 4) J. Sacks, W. J. Mitchell, H. P. Wynn, "Design and analysis of Computer Experiments", Statistical Science, Vol.4 ,No.4 , 1989, pp. 409-435.
- 5) T. W. Simpson, T. M. Mauery, J. J. Mistree, "Kriging Models for Global Approximations in Simulation-Based Multidisciplinary Design Optimization", AIAA Journal, Vol. 39, No.12, 2001, pp. 2233-2241.
- 6) Yoon, J. H., "Structural Optimum Design by the Response Surface Method," 2003, pp. 3-10.
- 7) K. J. Bathe, "Finite Element Procedures," Prentice-Hall International, Inc., 1996, pp. 622-628.
- 8) Ansys Inc, "Ansys Theory Reference," 1994, pp. 14-191~14-200.