

< 논문 >

크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화

신용식* · 이용빈** · 류제선*** · 최동훈†

(2005년 2월 18일 접수, 2005년 7월 31일 심사완료)

Sequential Approximate Optimization Using Kriging Metamodels

Yongshik Shin, Yongbin Lee, Je-Seon Ryu and Dong-Hoon Choi

Key Words : Kriging Model, Optimal Latin Hypercube Design, Sequential Approximate Optimization (순차적 근사최적화), Trust Region Algorithm (신뢰영역 알고리즘)

Abstract

Nowadays, it is performed actively to optimize by using an approximate model. This is called the approximate optimization. In addition, the sequential approximate optimization (SAO) is the repetitive method to find an optimum by considering the convergence of an approximate optimum. In some recent studies, it is proposed to increase the fidelity of approximate models by applying the sequential sampling. However, because the accuracy and efficiency of an approximate model is directly connected with the design area and the termination criteria are not clear, sequential sampling method has the disadvantages that could support an unreasonable approximate optimum. In this study, the SAO is executed by using trust region, Kriging model and Optimal Latin Hypercube design (OLHD). Trust region is used to guarantee the convergence and Kriging model and OLHD are suitable for computer experiment. Finally, this SAO method is applied to various optimization problems of highly nonlinear mathematical functions. As a result, each approximate optimum is acquired and the accuracy and efficiency of this method is verified by comparing with the result by established method.

1. 서론

최근의 최적설계 분야에서는 근사모델을 적용하여 최적화를 수행하려는 연구가 활발히 진행되고 있다. 이를 근사최적설계라 하며, 최적설계 문제를 풀기 위하여 필요한 해석에 소요되는 수치적, 시간적 비용의 부담을 줄이기 위하여 미지의 실제 함수를 적절한 근사함수로 대체하여 최적화를 수행하는 방법이다. 이는 컴퓨터 하드웨어 기술이 발전하고 있음에도 불구하고, 설계하고자 하는 시스템이 복잡해짐에 따라 해석에 드는 비용이 증가하고 있기 때문에 최적설계를 수행하기 위해 필수

불가결하게 선택된 방법이다. 그러나, 불충분한 해석 정보로 인하여 근사 최적해는 실제 최적해와 다를 수 있으며, 또한 한 번의 수행으로 실제 최적해에 수렴한다는 것은 불가능하다고 할 수 있다. 따라서, 근사 최적해의 수렴성을 판단하여 근사최적화를 반복 수행할 것인지를 결정하는 방법의 사용이 늘고 있다. 이처럼 반복하여 실제 최적해를 찾고자 하는 기법을 순차적 근사최적화 (Sequential Approximate Optimization, SAO) 기법이라고 한다.

근사최적설계에서의 근사모델에 관한 연구로는 도함수 기반의 근사모델 (gradient based approximate model)⁽¹⁾과 함수값에 기반한 근사모델 (function based approximate model)⁽²⁾이 있다. 전자는 설계변수에 관하여 목적함수와 구속조건의 도함수를 계산하여 근사화하는 방법이며, 후자는 데이터를 이용하여 시스템의 반응값을 전역적으로 근사화하는 방법^(3,4)이다. 하지만, 해석 데이터를 직접 이용하거나 CAE 소프트웨어에 접속하여 최적설계를 수행해야 되는 경우, 기존의 도함수에 기반한 최적

* 한양대학교 대학원 기계설계학과

** 한양대학교 대학원 기계설계학과

*** 한양대학교 최적설계신기술연구센터

† 회원, 한양대학교 최적설계신기술연구센터

E-mail : dhchoi@hanyang.ac.kr

TEL: (02)2290-0443, FAX: (02)2269-1710

화 방법으로는 최적설계를 수행할 수 없는 경우가 발생하기도 한다. 특히, 해석 모델링 특성상 잡음(noise)이나 비평활성(non-smoothness)이 존재하는 문제의 최적화를 수행해야 하는 경우가 빈번히 발생되고 있기 때문에 그에 적합한 방법으로 함수값에 기반한 근사모델이 많은 연구에 적용되고 있다.

함수값에 기반한 근사최적화 기법에 관련된 연구는 크게 3가지로 구분할 수 있다.⁽⁵⁾ 첫 번째는 실험계획법(Design of Experiment, DOE)을 통한 실험점 선정 방법에 대한 연구이고, 두 번째는 근사모델에 대한 연구이며, 세 번째는 순차적으로 근사모델을 관리하는 방법에 대한 연구이다.

우선, 실험계획법에 대한 연구는 최소의 실험 횟수로 최대의 정보를 얻는 것을 목적으로 다양한 방법들이 소개되고 있다. 이는 크게 임의의 오차(random error)의 존재유무에 따라 고전적인 실험계획법(Classical DOE)과 전산실험 계획법(Computer Experiments)으로 구분할 수 있다.⁽⁶⁾ 초기에는 주로 임의의 오차가 존재하는 물리적인 실험을 위한 실험계획법이 연구되었으며,⁽⁷⁾ 최근에는 컴퓨터 해석을 많이 이용함에 따라 임의의 오차가 존재하지 않는 확정론적인 전산실험 계획법⁽⁸⁾에 대해 많이 연구되고 있다.

다음으로, 근사모델에 대한 연구는 함수의 특성을 보다 더 정확하게 예측할 수 있는 근사모델의 형태를 정하는 것을 목적으로 진행되고 있다. 현재까지 많이 알려진 방법으로는 다항 회귀모델(Polynomial Regression Model, PR), 크리깅(Kriging), MARS(Multivariate Adaptive Regression Spline), RBF(Radial Basis Function), ANN(Artificial Neural Network) 등이 있다.⁽⁴⁾ Jin 등⁽⁹⁾은 근사모델 간의 비교에 대하여 연구하기도 하였다.

마지막으로, 근사모델을 효과적으로 관리하여 문제의 최적해로 수렴시키기 위한 근사모델 관리 기법에 대해 연구되고 있다. 실제 모델을 이용하는 대신 근사모델을 이용하여 최적화를 수행하는 경우 그 차이에 의하여 실제와 다른 결과를 제공하는 경우가 생길 수 있다. 이를 해결하기 위하여 근사모델을 효과적으로 관리하기 위한 연구가 필연적으로 요구되고 있는 실정이다. 이에 대한 접근법은 크게 2가지로 구분할 수 있다. 하나는 2차 다항모델 등과 같이 고정된 충실도(fidelity)를 갖는 근사모델을 이용하는 대신 설계영역을 조절하는 방법이다. 이는 주로 설계자의 경험에 의하여 설계영역을 조절하는 방법을 사용하였으며, 수렴성이 설계자의 경험에 의존된다는 단점을 가지고 있다. 이동 제한 기법(move limit strategy)의 개념을 사용한 연구들은 순차적 근사최적화에 보다 효과

적이지만, 그 수렴성을 보장하기는 어렵다. 이와 같은 단점을 보완하기 위하여 최근에는 신뢰영역(trust region) 알고리즘을 적용하려는 시도가 수행되고 있다.⁽¹⁰⁻¹²⁾ 다른 하나는 비선형성을 잘 추정해 주는 크리깅 모델 등의 근사모델을 이용하는 방법이다. 이는 순차적으로 실험점들을 설계영역 내에서 좀 더 효과적으로 배치시켜 실험 횟수는 줄이면서 근사 성능을 향상시키는 방법이다.⁽¹³⁾ 하지만, 이 역시 수렴성을 보장할 수 없고, 실제 문제에 적용시 근사모델의 검증이 어렵기 때문에 종료조건이 명확하지 않고 사용자의 주관에 의존한다는 단점을 가지고 있다.

본 연구에서는 전산실험에 적합한 근사모델로 크리깅 모델을 사용하고, 근사화 영역을 조절함으로써 최적해로 수렴할 수 있도록 근사모델을 관리해 주는 신뢰영역 알고리즘의 개념을 적용하여 순차적 근사최적화를 수행하는 것을 목적으로 한다. 이때 실험계획법으로는 전산실험에서 충진(space-filling) 기법으로 많이 이용되고 있는 Optimal Latin Hypercube Design(OLHD)을 이용한다. 또한, 제한한 기법을 다양한 수학적 예제에 적용하여 근사 최적해를 구하고, 기존의 결과와 비교하여 정확성과 효율성을 검증하고자 한다.

2. 순차적 근사최적화의 구성

2.1 실험계획법

컴퓨터를 이용한 전산실험은 물리적인 실험과는 달리 임의의 오차가 존재하지 않는다. 즉, 동일한 입력 값에 대해 항상 같은 결과를 나타낸다. 따라서, 기존의 실험계획법과는 달리 설계영역을 고르고 빈틈없이 채우는 실험계획을 이용하는 것이 바람직한 것으로 알려져 있다.⁽¹⁴⁾ 이러한 실험계획법으로는 Latin Hypercube Design(LHD), 직교배열표(Orthogonal Array, OA) 등이 있다. 본 절에서는, LHD에 대해 소개하고자 한다.

2.1.1 Latin Hypercube Design (LHD)

LHD⁽¹⁵⁾는 설계변수 각 차원 내에서 실험점의 분포가 균등해 지도록 배치시키는 방법이다. 이는 실험점을 n 개의 행과 n_d 개의 열로 이루어진 행렬로 만들고 각 행을 실험점으로 배열하는 방법이다. 여기서 n 은 설계변수의 수준 수 이고, n_d 는 설계변수의 수이다. 각각의 열은 설계변수의 수준 $1, 2, \dots, n$ 이 임의로 배치되어 있는 조합이다. 따라서 1차원에 대해 투영시킬 경우, n 개의 수준이

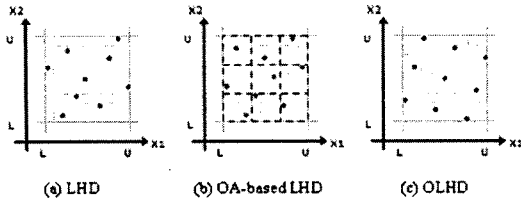


Fig. 1 Distribution of sampling points by various LHD

얻어지며, 각각의 설계변수에 대해 실험점이 중첩되지 않기 때문에 결정론적인 전산실험에 유리하다. 또한 각 설계변수의 수준을 임의로 배치해 주면 되기 때문에 쉽게 구현할 수 있고, 실험점의 수를 조절하는 것도 용이하다는 장점이 있다. 반면 실험점을 임의적으로 추출하므로 재현성이 떨어진다는 점과 추출된 실험점들이 설계영역에 고르게 분포되지 않을 수 있다는 점 등이 단점이다.

LHD의 이러한 단점을 보완하는 방법으로 기존의 실험계획법과 LHD를 결합한 OA-based LHD⁽¹⁶⁾와 Optimal LHD(OLHD)^(17,18) 등이 있다. OA-based LHD는 직교배열표와 결합한 방법으로, 임의로 추출된 LHD가 설계영역 내에 고르게 분포되지 않을 가능성을 줄일 수 있기 때문에 다차원의 설계영역에 많은 실험점을 추출하는 경우에 효율적이다. OLHD는 최적계획법과 결합한 방법으로 설계영역 내에 임의로 배치되는 실험점들을 제어하는 방법이다. 이를 위해 적절한 최적성 조건의 선정과 최적화된 실험점 세트를 어떻게 찾을 것인가에 대한 많은 연구가 이루어지고 있다.

2.2 메타모델 (Metamodel)

본 절에서는 순차적 근사최적화에 적용되고 있는 근사모델 중 가장 많이 사용되고 있는 다항 회귀모델과 크리깅 모델에 대해 설명한다.

2.2.1 다항 회귀모델

근사모델 생성에 있어서 대표적 방법으로 물리적 실험의 분석을 위해 많이 사용되는 회귀분석 모델이다. 공학분야에서 보통 많이 사용되는 2차 다항식 형태는 다음과 같다.

$$\hat{y} = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j<i}^k \beta_{ij} x_i x_j \quad (1)$$

여기서, x_i 는 설계변수의 값을, \hat{y} 는 예측값을 의미하고, β_i 와 β_{ii} 는 회귀계수이다. 이들은 예측된 값들의 편차제곱의 합을 최소화 하는 최소제곱법을 이용하여 계산한다. 이는 생성이 용이하고, 잡음을 완화시키는 효과가 있으므로 수치적 잡음이 있는 모델에 유리하게 사용된다. 그러나, 이러한 저차(low-order)의 함수로는 복잡한 형태의 비선형

함수를 정확히 표현하는 것이 불가능하며, 고차의 반응표면모델을 사용한다 하더라도 생성한 근사함수가 불안정하다는 단점이 있다.

2.2.2 Kriging 모델

Kriging 모델은 1951년 남아프리카 채광학자 D. G. Krige가 적용했던 경험적인 방법을 프랑스의 지질학자인 G. Matheron이 수학적으로 정립하면서 사용되기 시작하였다. 이후 크리깅 모델은 다양한 분야에 적용되고 있으며, 공학 분야에 적용된 것은 Sacks 등⁽¹⁴⁾에 의해서이다.

크리깅 모델은 전산실험 계획으로 얻어진 정보를 바탕으로 식 (2)와 같이 전역모델과 국부 편차의 합으로 구성된다.

$$y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + z(\mathbf{x}) \quad (2)$$

여기서, $y(\mathbf{x})$ 는 알고자 하는 미지의 함수이며, $f(\mathbf{x})$ 는 설계영역에서의 전역모델(global model)로 주로 다항함수(polynomial function)로 표현된다. 또한, $z(\mathbf{x})$ 는 편차(deviation)를 표현하며, 평균이 0이고 분산이 σ^2 인 정규분포를 따른다.

식 (2)에서 $z(\mathbf{x})$ 의 공분산(covariance) 행렬은 식 (3)과 같이 주어진다.

$$Cov[z(\mathbf{x}^i), z(\mathbf{x}^j)] = \sigma^2 \mathbf{R} [R(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j)], i, j = 1, \dots, n \quad (3)$$

여기서 \mathbf{R} 은 상관행렬(correlation matrix)이며 $R(\cdot, \cdot)$ 는 실험데이터 내에 있는 임의의 두 점 \mathbf{x}^i 와 \mathbf{x}^j 사이의 상관함수(correlation function)이다. 따라서, \mathbf{R} 은 대각 요소가 모두 1이고 크기가 $n \times n$ 인 대칭 행렬이며, \mathbf{R} 이 양정치 행렬(positive definite matrix)이 되도록 제안된 특정 상관함수들이 있다. 본 연구에서는 상관함수로, Gaussian 함수와 Exponential 함수의 일반적인 형태인,

$$R(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^j) = \prod_{k=1}^{n_k} \exp[-\theta_k |\mathbf{x}_k^i - \mathbf{x}_k^j|^{p_k}] \quad (4)$$

을 적용하였다. 여기서, $\theta_k > 0$ 와 $0 < p_k \leq 2$ 는 상관계수(correlation coefficient)이다.

이런 상관관계를 통해 $y(\mathbf{x})$ 의 최량 선형 비편향 추정량(Best Linear Unbiased Predictor) $\hat{y}(\mathbf{x})$ 는

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}'(\mathbf{x})\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}'(\mathbf{x})\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (5)$$

이 된다. 여기서, $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{F}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{y}$ 은 회귀계수 $\boldsymbol{\beta}$ 의 일반화된 최소제곱 추정량이고, $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 는 임의의 점 \mathbf{x} 와 실험데이터 간의 상관벡터이다.

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \{R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^1) \dots R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^n)\}' \quad (6)$$

마지막으로 상관인자 $\theta = [\theta_1 \dots \theta_{n_\theta}]'$ 와 $\mathbf{p} = [p_1 \dots p_{n_p}]'$ 를 결정함으로써 크리깅 모델을 결정하게 된다. 가장 적합한 추정값은 최대우도 추정법(maximum likelihood estimation)을 통해 결정된다. 즉, 아래의 우도 함수(likelihood function)를 최대화하는 상관인자를 산출한다.

$$\varphi(\theta, \mathbf{p}) = -\hat{\sigma}^2 |\mathbf{R}|^{1/n} \quad (7)$$

여기서 $\hat{\sigma}^2$ 는 σ^2 의 최대우도 추정량으로써 다음과 같다.

$$\hat{\sigma}^2 = (\mathbf{y} - \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}})\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}})/n \quad (8)$$

2.3 순차적 근사최적화 문제

일반적인 최적화 문제가 아래와 같을 때,

$$\begin{aligned} &\text{minimize } f(\mathbf{x}) \\ &\text{subject to } g_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j=1, \dots, n_c \\ &\quad x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, \quad i=1, \dots, n_d, \end{aligned} \quad (9)$$

근사최적화 문제는 다음과 같이 정의된다.

$$\begin{aligned} &\text{minimize } \tilde{f}(\mathbf{x}) \\ &\text{subject to } \tilde{g}_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j=1, \dots, n_c \\ &\quad x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, \quad i=1, \dots, n_d, \end{aligned} \quad (10)$$

여기서, \tilde{f} 와 \tilde{g} 는 각각 목적함수 f 와 구속조건 함수 g 의 근사함수이며, n_c 는 구속조건 함수의 개수를 나타낸다. 근사모델의 형태는 기존의 연구에서 많이 사용되는 선형 및 이차 함수 모델뿐만 아니라 임의의 모델이 가능하다고 본 연구에서는 정의한다. 그러나 이 경우 근사모델이 아무리 정확하더라도 한번의 근사화를 통해 최적화 문제를 계산하여 원래의 최적해에 수렴한다는 보장이 없다. 이에 대한 대안으로 순차적 근사최적화 방법이 있다. 이때 순차적 근사최적화 문제는 다음과 같이 정의된다.

$$\begin{aligned} &\text{minimize } \tilde{f}(\delta_k) \\ &\text{subject to } \tilde{g}_j(\delta_k) \leq 0, \quad j=1, \dots, n_c \\ &\quad \delta_k^L \leq \delta_k \leq \delta_k^U, \quad i=1, \dots, n_d, \end{aligned} \quad (11)$$

여기서, k 는 순차적 근사최적화에서 반복 실행 단계를 의미하며, $\delta_k = \tilde{x}_k^* - x_k$ 이며 \tilde{x}_k^* 는 k 번째 반복 실행 단계에서 계산된 근사 최적해를 의미한다. 결국 순차적 근사최적화 다음의 과정을 통해 수행된다. 먼저 임의의 설계영역에 대해 식 (11)과 같이 구성된 근사최적화 문제를 계산하여 근사 최적해를 구한다. 그리고, 여기서 얻은 결과를 바탕

으로 설계영역을 적절히 조절한다. 이제 다음 반복 실행 단계로 넘어가서 수정된 영역에 대해 근사 최적화를 수행한다. 이런 과정을 수렴조건이 만족될 때까지 반복하게 된다. 따라서, 순차적 근사최적화의 근사 최적해가 원래 최적화 문제의 최적해에 수렴하는가는 근사모델의 정확도와 근사최적화 문제가 수행되는 설계영역의 영향을 받게 된다.

3. 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화의 구성

반응 표면 모델로서 크리깅 모델은 비선형성을 잘 표현해 줄 수 있을 뿐만 아니라, 실험점들을 추가하여 모델의 충실도를 높일 수 있다는 장점이 있다. 하지만, 근사모델을 구성하고자 하는 영역이 지나치게 넓을 경우 근사화의 정확도와 효율성이 떨어진다. 그러므로, 여기에 영역을 적절히 조절해 줌으로써 근사모델을 효과적으로 관리하기 위해 신뢰영역 알고리즘을 도입하고자 한다.

먼저 본 연구에서 적용되는 실험계획법으로서 OLHD의 최적화와 메타모델로서 크리깅 모델의 구성에 대하여 소개한다. 다음으로, 신뢰영역 알고리즘을 이용한 근사모델 관리 기법의 일반적인 절차에 대해 설명을 한다. 마지막으로, 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화의 순서도와 종료조건에 대하여 기술하고자 한다.

3.1 OLHD의 생성 방법

주어진 설계영역에서 고르게 분포하는 실험점을 선택하기 위해 OLHD를 이용한다. 본 연구에서는 Maximin 조건을 이용하고자 한다. 이는 두 실험점 간 거리들 중 가장 작은 값을 최대화하는 것으로, Morris와 Mitchell은 이를 하나의 식으로 표현한 ϕ_p 조건을 제안하였다.

$$\min \phi_p = \left[\sum_{i=1}^s J_i d_i^{-p} \right]^{1/p} \quad (12)$$

여기서, d_i 는 두 실험점 간의 거리이고, J_i 는 동일한 거리를 갖는 실험점 쌍의 개수이며, p 는 양의 정수이다. 만약 p 가 충분히 크다면, 이는 Maximin 조건과 동일하게 된다.

한편, OLHD를 구하기 위한 다양한 방법들이 연구되고 있고,⁽¹⁷⁾ 최근에 유전알고리즘 등을 이용한 방법에 대해 많이 연구되고 있다. 본 연구에서는 OLHD를 구하기 위해 매우 작은 집단을 취급하는 마이크로 유전알고리즘(μ -GAs)⁽¹⁹⁾을 이용하였다.

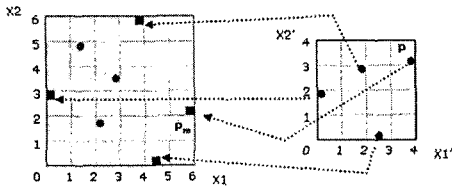


Fig. 2 Mapping new LHD points to the design space

유전자 형태는 이산변수를 다루는 이진 스트링을 이용하였다. 재생산으로는 경쟁선택(tournament selection)을 이용하였고, 교배연산으로는 균등교배(uniform crossover)를, 그리고 돌연변이 연산은 이용하지 않았고, 모집단 생성은 임의의 생성을 이용하였으며, 엘리트 전략을 이용하였다.

순차적 근사최적화가 진행되면서, 설계영역이 조절됨에 따라 새로운 영역에 대해 새로운 추가 실험점들을 선택하게 된다. 이를 위하여 Inherited Optimal LHD⁽⁵⁾를 이용하였다. 이는 설계영역이 변함에 따라서 기존의 정보를 최대한 이용하기 위해 기존의 점을 상속하면서, 추가로 실험점을 선택하는 방법이다. Fig. 2는 2개의 설계변수에서 임의의 영역에 대해 3개의 실험점이 상속되는 경우를 보여주고 있다.

3.2 크리깅 상관계수 및 최적값 추정

2장에서 설명된 크리깅 모델을 완성하기 위해서는 식 (7)의 최적화 문제를 해결해야 한다. 본 연구에서는 앞 절의 OLHD와 동일한, 마이크로 유전 알고리즘과 상용 S/W인 DOT⁽¹⁹⁾의 BFGS 방법을 사용하였다. 이때 DOT에서 사용한 파라미터는 다양한 형태의 문제에 대해 비교적 강건한 해를 얻을 수 있도록 디폴트 값을 이용했다.

우선, 최적의 상관계수를 결정하기 위해 설계변수의 개수에 대하여 두 미지의 벡터 θ 와 p 가 구성되며, 식 (7)이 최대화되는 값을 구하게 된다. 이를 통해 크리깅 모델이 결정된다.

다음으로, 결정된 크리깅 모델에 대한 추정값을 산출함으로써 조절된 신뢰영역에서의 최적해를 탐색한다. 즉, 결정된 상관함수에 대해 새로운 지점 x 와 기존 관측지점과의 상관벡터 r 를 결정하여 크리깅 추정량 $\hat{y}(x)$ 을 산출하고, 위의 두 최적화 알고리즘에 의하여 최적해를 탐색하게 된다.

3.3 신뢰영역 알고리즘

식 (13)과 같은 구속조건이 없는 최적화 문제가 있다고 하자.

$$\min_{x \in \Omega} f(x) \quad (13)$$

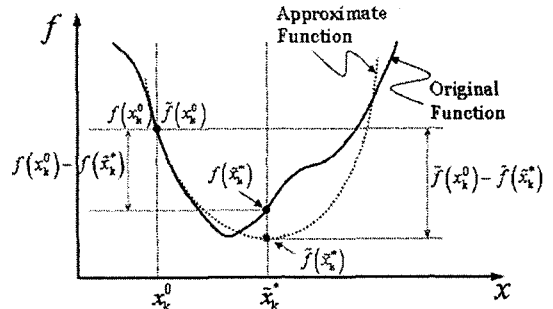
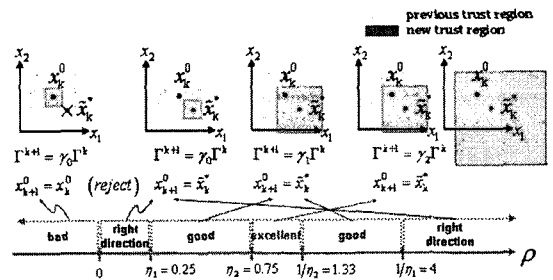


Fig. 3 Trust region ratio



$$\eta_1 = 0.25, \eta_2 = 0.75, \gamma_0 = 0.25, \gamma_1 = 1, \gamma_2 = \begin{cases} 1 & \text{if } \|x_k^0 - x_k^*\| < \Gamma^k \\ 2 & \text{if } \|x_k^0 - x_k^*\| = \Gamma^k \end{cases}$$

Fig. 4 Trust region concept

여기서 $f: R^{n_s} \rightarrow R$ 이며, Ω 는 설계영역이다. 신뢰영역 알고리즘에서 근사모델 정도(accuracy)를 측정하기 위해 신뢰영역 비(trust region ratio, ρ_k)

$$\rho^k = \frac{\Delta_{act}^k}{\Delta_{pred}^k} = \frac{f(x_k^0) - f(x_k^*)}{\tilde{f}(x_k^0) - \tilde{f}(x_k^*)} \quad (14)$$

를 이용한다. 신뢰영역 비는 Fig. 3에서 보는 바와 같이 근사 최적해의 예측 감소량에 대한 실제 감소량의 비로 계산된다.

신뢰영역 비에 따른 근사화의 정도 판단 및 설계변수의 범위 조절은 Fig. 4와 같이 수행한다. 이때 이동 제한량 조절 상수 $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$ 와 신뢰영역 비 평가 상수 η_1, η_2 는 설계자가 선정토록 한다. 본 연구에서는 이들의 값으로 Fletcher⁽¹⁰⁾의 값을 이용하였다.

구속조건이 존재하는 일반적인 최적화 문제의 경우에 신뢰영역 비를 평가하기 위하여 목적함수와 구속조건 함수들을 하나의 범함수(functional)로 만들 필요가 있다. 따라서, L_1 완전 벌칙 함수(L_1 exact penalty function)를 사용하면, 구속조건이 있는 최적화 문제에도 적용할 수 있다.

$$\tilde{L}_1(\delta_k) = \tilde{f}(\delta_k) + r \sum_{j=1}^{n_g} \max\{0, \tilde{g}_j(\delta_k)\} \quad (15)$$

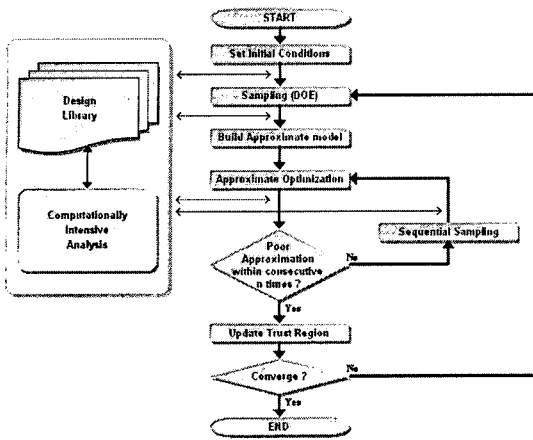


Fig. 5 Flow chart of SAO using Kriging metamodels

여기서, \tilde{f} 와 \tilde{g}_j 는 목적함수와 j 번째 부등식 구속조건의 근사함수를, r 은 벌칙계수를, n_c 는 부등식 구속조건의 개수를 나타낸다. 따라서, 국부 최적해로 수렴하게 된다면, L_1 값은 실제 문제의 최적치와 일치하게 된다.

3.4 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화의 흐름도

먼저 실험계획법을 통해 얻어진 데이터를 이용하여 근사모델을 구성한 다음, 얻어진 근사모델을 이용하여 근사최적화를 수행한다. 다음으로 신뢰영역 알고리즘을 이용하여 근사모델을 평가하고, 다음 단계에서의 새로운 신뢰영역을 결정한다. 이때 신뢰영역이 축소된다면 순차적 실험계획법을 적용하여 근사모델의 충실도를 향상시킨 다음 다시 근사최적화를 수행한다. 이런 과정을 신뢰영역 축소가 연속적으로 발생할 때까지 수행하고, 이후 신뢰영역을 조절해 준다. 이의 전반적인 흐름도는 Fig. 5와 같다.

3.5 순차적 근사최적화의 종료조건

본 연구에서는 순차적 근사최적화의 수렴조건을 아래와 같이 설정하였다.

$$\rho_k < \epsilon_1 \tag{16}$$

$$|f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k-1})| < \epsilon_2 \tag{17}$$

$$\frac{|f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k-1})|}{\max(|f(\mathbf{x}_k)|, \tau_1)} < \epsilon_3 \tag{18}$$

$$\rho_k = \rho_{k-1} \text{ and } \frac{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\|}{\max(\|\mathbf{x}_k\|, \tau_2)} < \epsilon_4 \tag{19}$$

여기서, $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4$ 와 τ_1, τ_2 는 1보다 작

은 임의의 양수이다. 식 (16)는 k 번째 신뢰영역의 크기가 설계자가 정한 ϵ_1 보다 작을 경우 수렴을 한다는 조건이다. ϵ_1 이 충분히 작으면 근사화 된 반응표면 모델의 도함수는 유한 차분법으로 계산된 도함수와 같다고 가정할 수 있다. 식 (17)은 목적함수 값이 변하지 않으면 수렴한 것으로 가정하며, 식 (18)은 목적함수의 상대 변화량이 ϵ_3 보다 적은 경우 수렴한 것으로 가정한다는 조건이다. 마지막으로 식 (19)은 k 번째 신뢰영역이 $(k-1)$ 번째 신뢰영역과 동일한 상태에서 설계변수의 상대 변화량이 ϵ_4 보다 적은 경우 수렴을 판단하는 조건으로, 신뢰영역이 변하지 않은 상태에서 설계변수 값도 변하지 않았다면, 반응표면 모델은 동일하기 때문이다. 이 경우 k 번째 근사 최적해는 $(k-1)$ 번째 근사 최적해와 동일한 값을 제공한다. 위의 세 식 (17), (18) 그리고 (19)은 설계자가 정한 반복횟수 N 번 동안 연속적으로 만족할 때 수렴하는 것으로 고려하게 된다. 본 연구에서는 수렴조건인 파라미터 값으로 $\epsilon_1 = 10^{-4}, \epsilon_2 = 10^{-3}, \epsilon_3 = 10^{-3}, \epsilon_4 = 10^{-3}, \tau_1 = 0.1, \tau_2 = 0.1$, 그리고 반복횟수 $N=2$ 를 이용하여 수행하였다.

4. 적용 예제

본 연구에서 제안한 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화 기법을 검증하기 위하여 비선형성이 강한 수학적 모델에 적용해 보았다. 비선형성이 강한 예제는 최적해 부근에서 완만한 특성을 보이는 문제와 국부 최적해가 많은 다봉인 문제이다. 제안한 방법(SAO_krig)의 유용성을 보이기 위하여, 기존에 제안된 방법으로서 순차적 근사최적화에서 2차 회귀모델을 이용한 방법(SAO_PR)과 고정된 전체 영역에서 Maximin 조건을 이용하여 순차적으로 크리깅 모델을 향상시키는 방법(Mm_krig)을 비교해 보았다.

비교 방법으로는 각 방법으로 구한 근사 최적해 값과 종료조건에 만족할 때까지의 실제 함수호출(function call) 횟수를 택했다. 종료조건은 앞 절에서 언급한 값으로 모두 동일하게 적용하였다. 물론 종료조건에 따라 최종 결과가 달라질 수도 있지만, 효율성과 해의 정확성간에 적절한 균형을 이루도록 고려하여, 각 방법에 동일하게 적용하였다. 또 크리깅을 이용한 경우에 초기 OA-based OLHD를 생성하기 위하여 설계변수 개수의 3배만큼의 실험점을 추출하였으며, 반복과정에서는 수

준수를 설계변수의 개수만큼 증가시켜 Inherited LHD를 생성하였다. 반면, 2차 다항 회귀 모델을 이용한 경우, 모델을 구성하기 위해 필요한 실험 점의 개수, 즉 $(n_{dv} + 1)(n_{dv} + 2)/2$ 만큼의 실험 점을 이용하였다.

본 연구에서 순차적 근사최적화 문제를 풀기 위한 최적화 모듈은 앞 절의 마이크로 유전알고리즘과 상용 소프트웨어인 DOT의 BFGS 방법을 사용하였다. 이 역시 DOT의 파라미터 값은 디폴트 값을 이용하였다. 또한, 모든 수치적인 알고리즘은 C언어로 구현하였다.

4.1 비선형성이 크고 최적해 부근에서 완만한 함수

설계영역의 가장자리 부근에서 급격하게 값이 증가하는 반면 설계영역의 중심부, 특히 최적해 근처에서는 아주 완만한 굴곡을 가지는 형태의 함수로서, 함수의 최적값을 유추하는 것은 비교적 쉽지만 최적점의 위치를 정확하게 찾아내기는 어려운 특성의 함수들이다.

4.1.1 Goldstein and Price Function (GP)

본 함수의 최적화 문제는

$$\begin{aligned} \min. \quad & f(\mathbf{x}) = [1 + (x_1 + x_2 + 1)^2(19 - 14x_1 + 3x_1^2 - 14x_2 + 6x_1x_2 + 3x_2^2)] \\ & \times [30 + (2x_1 - 3x_2)^2(18 - 32x_1 + 12x_1^2 - 48x_2 - 36x_1x_2 + 27x_2^2)] \\ \text{s.t.} \quad & -2 \leq x_1, x_2 \leq 2 \end{aligned} \quad (20)$$

와 같으며, 이에 대한 3차원 투시도를 그린 결과는 Fig. 6과 같다.

Table 1은 GP 함수에 대한 요약과 순차적 근사 최적화 방법에 대한 결과를 보여주고 있다. 우선 GP 함수에 대하여 세 가지 방법에 대한 초기점은 (0, 0)으로 동일하였으며, 실제 최적값은 (0, -1)에서 3이다. 순차적 근사최적화를 수행한 결과, SAO_Krig 방법과 SAO_PR 방법은 모두 실제 최적값에 근사하며, Mm_Krig 방법을 적용한 결과보다 정확한 결과를 제공하고 있다.

또한, Fig. 7에서는 근사최적화 과정을 보여주고 있는데, 함수호출 횟수가 SAO_Krig 방법에서 가장 적었으며, 다음으로 SAO_PR 방법이 많고, Mm_Krig 방법을 적용한 결과에서 가장 많은 함수 호출이 필요로 했음을 알 수 있다. 특히 Mm_Krig 방법의 경우, 최적점 근처까지는 다른 방법과 비슷하게 도달했지만, 실제 최적점으로 빠르게 수렴하지 못 했음을 알 수 있다.

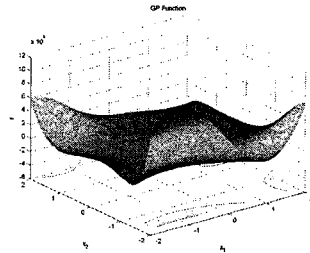


Fig. 6 Perspective plot of GP

Table 1 Summaries and optimization results of GP

	True Opt.	SAO_Krig	SAO_PR	Mm_Krig
x1	0	-0.00025	0.00099	-0.00355
x2	-1	-0.99970	-0.99838	-1.03863
obj	3	3.00007	3.00103	3.67856

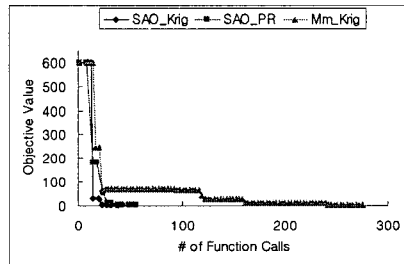


Fig. 7 Plot of objective value vs. the number of function calls in GP

4.1.2 Branin Function (BR)

BR 함수의 최적화 문제는

$$\begin{aligned} \min. \quad & f(\mathbf{x}) = a(x_2 - bx_1^2 + cx_1 - d)^2 + e(1 - g)\cos(x_1) + e \quad (21) \\ \text{where} \quad & a = 1, b = \frac{5.1}{4\pi^2}, c = \frac{5}{\pi}, d = 6, e = 10, g = \frac{1}{8\pi} \\ \text{s.t.} \quad & -5 \leq x_1 \leq 10, 0 \leq x_2 \leq 15 \end{aligned}$$

와 같으며, Fig. 8에 투시도가 제시되어 있다.

Table 2는 BR 함수에 대한 요약과 순차적 근사 최적화 방법에 대한 결과를 보여주고 있다. 세 가지 방법에 대한 초기점은 (2.5, 7.5)로 동일하였으며, 실제 최적값은 (-3.141592, 12.275), (3.141592, 2.275) 그리고 (9.424776, 2.475)에서 0.39789이다. 순차적 근사최적화를 수행한 결과, 모든 방법에서 실제 최적값과 유사한 근사 최적값을 제공하고 있음을 알 수 있다.

Fig. 9는 근사최적화 과정에서 발생하는 함수호출의 횟수를 보여주고 있다. 여기에서 SAO_Krig 방법과 SAO_PR 방법에서 유사한 결과를 보여주고 있으며, Mm_Krig 방법을 적용한 결과에서 가장 많은 함수호출이 이루어졌음을 알 수 있다.

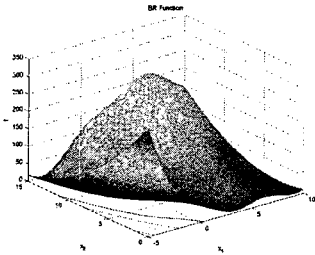


Fig. 8 Perspective plot of BR

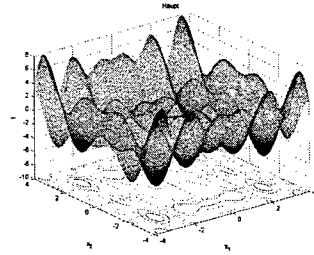


Fig. 10 Perspective plot of Haupt function

Table 2 Summaries and optimization results of BR

	True Opt.	SAO_Krig	SAO_PR	Mm_Krig
x1	-	9.42517	9.42344	9.42516
x2	-	2.47814	2.47721	2.47496
Obj	0.39789	0.39790	0.39791	0.39789

Table 3 Summaries and optimization results of Haupt function

	True Opt.	SAO_Krig	SAO_PR	Mm_Krig
x1	-	-2.77176	2.77111	-2.77225
x2	-	-2.45650	0.00034	-2.47135
obj	-5.40820	-5.40813	-2.76018	-5.40686

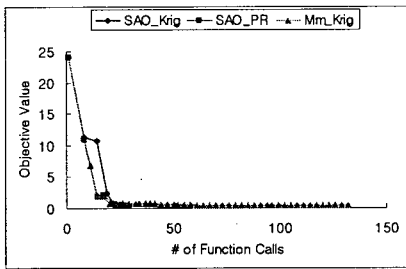


Fig. 9 Plot of objective value vs. the number of function calls in BR

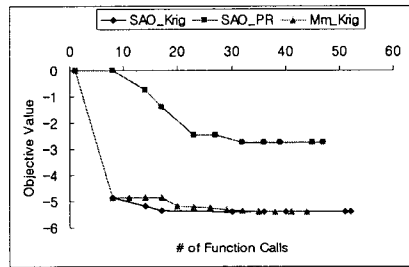


Fig. 11 Plot of objective value vs. the number of function calls in Haupt function

4.2 비선형성이 크고 국부 최적해가 많은 함수 설계영역 전반에 걸쳐 복잡한 형상을 보여주고 있고, 특히 봉우리가 많이 존재하기에 많은 국부 최적해를 갖고 있는 형태의 함수로써, 국부 최적점을 찾기는 쉽지만, 전역 최적점을 찾아내기 어려운 특성을 가진 함수들이다.

4.2.1 Haupt Function

본 함수의 최적화 문제는

$$\begin{aligned} \min. \quad & f(x_1, x_2) = x_1 \sin(4x_1) + 1.1x_2 \sin(2x_2) \quad (22) \\ \text{s.t.} \quad & -4 \leq x_i \leq 4, \quad i = 1, 2 \end{aligned}$$

와 같다. 이 함수는 설계영역에서 4개의 최적값을 갖고 있으며, 다봉인 함수이다. Fig. 10은 Haupt 함수의 투시도를 나타내고 있다.

Table 3은 Haupt 함수에 대한 요약과 순차적 근사 최적화 방법에 대한 결과를 보여주고 있다. 초기 점은 (0,0)으로 동일하며, 전역 최적값은 4개로 -5.40814이다. 순차적 근사최적화를 수행한 결과, SAO_Krig 방법과 Mm_Krig 방법은 유의한 결과를 보이고 있으며, SAO_PR 방법은 국부 최적해에 수

렴했음을 확인 할 수 있다.

Fig. 11의 근사최적화 과정에서는 SAO_Krig 방법이 다른 방법보다 조금 더 많은 함수호출 결과를 보이고 있으나 그 차이는 미미하다고 판단되며, 세 방법 모두 함수호출에 있어 유사한 결과를 보이고 있다고 할 수 있다.

4.2.2 Rastrigin Function

이 함수의 최적화 문제는

$$\begin{aligned} \min. \quad & f(x) = x_1^2 + x_2^2 - \cos 18x_1 - \cos 18x_2 \quad (23) \\ \text{s.t.} \quad & x_{1,2} \in [-1, 1] \end{aligned}$$

와 같으며, 그 투시도는 Fig. 12와 같이 매우 복잡한 형태를 나타내는 함수이다.

Table 4는 Rastrigin function 함수에 대한 요약과 순차적 근사최적화 방법에 대한 결과를 보여주고 있다. 순차적 근사최적화를 위하여 적용한 초기점은 (0.5, 0.5)이며, 실제 최적값은 (0, 0)에서 -2이다. 순차적 근사최적화를 수행한 결과, SAO_Krig 방법과 Mm_Krig 방법은 전역 최적해에 수렴하였으며, SAO_PR 방법은 국부 최적해에 수렴했음을 볼 수 있다.

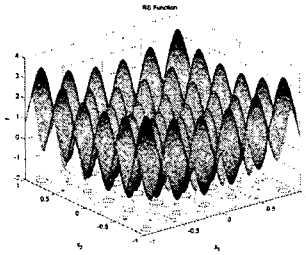


Fig. 12 Perspective plot of Rastrigin function

Table 4 Summaries and optimization results of Rastrigin function

	True Opt.	SAO_Krig	SAO_PR	Mm_Krig
x1	0	-0.00001	-0.34689	0.00000
x2	0	-0.00003	-0.00002	0.00000
obj	-2	-2.00000	-1.87890	-2.00000

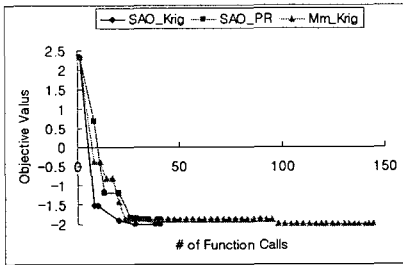


Fig. 13 Plot of objective value vs. the number of function calls in Rastrigin function

Fig. 13에서의 근사최적화 과정을 살펴보면, 함수 호출의 횟수에 있어서는 SAO_Krig 방법과 SAO_PR 방법에서는 유사한 결과를 보여주고 있으며, Mm_Krig 방법을 적용한 결과보다 적은 함수 호출을 필요로 하는 것을 알 수 있다.

5. 결 론

본 연구는 크리깅 모델과 신뢰영역 알고리즘의 개념을 이용하여 근사최적화를 수행하는 순차적 근사최적화를 구현하기 위하여 순차적 근사최적화의 연구동향을 분석하였고, 이를 토대로 다음과 같은 연구를 수행하였다.

(1) 실험계획법으로는 최근 전산실험에서 널리 사용되고 있는 LHD를 적용하여 최적계획법과 직교배열표(OA)를 접목한 OA-based OLHD를 구현하였다. 이외에 새로운 설계영역 내에 기존의 실험점이 포함되는 경우 사용하는 Inherited OLHD도 구현하였다.

(2) 근사모델로서 크리깅 모델과 다항회귀 모델

을 생성하는 프로그램을 구현하였다.

(3) 순차적 근사최적화를 위한 신뢰영역 개념을 이용한 근사모델 관리 기법을 구현하였다. 만약 구속조건이 있는 최적화 문제에 적용하기 위해 L_1 완전 벌칙 함수를 이용할 수 있다.

(4) 근사 모델을 관리하기 위해 영역을 조절하는 방법과 순차적 실험계획법을 결합한 방법을 구현하였다.

(5) 개발된 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화 방법을 비선형성이 강한 예제에 적용하여 정확성과 유효성을 증명하였다.

위와 같은 연구를 토대로 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 기존의 설계영역을 고르게 채우는 순차적 실험계획과 크리깅 모델을 이용한 근사최적화 방법에 비해 본 연구에서 제안한 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화 방법이 최적해를 찾는 데에 있어 보다 정확하고 효율적인 방법이다.

(2) 본 연구에서 제안한 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화 방법과 2차 회귀모델을 이용한 순차적 근사최적화 방법은 비선형성이 강하지만 최적해 부근이 완만한 함수에 대해서는 최적해의 정확도와 효율성 측면에서는 유사한 결과를 보여주었다.

(3) 비선형성이 강하고 국부최적해가 많은 함수에 대해 적용한 결과, 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화 방법은 전역 최적해에 근사하는 최적해를 제공한 반면, 2차 회귀모델을 이용한 경우에는 국부 최적해를 찾아주고 있음을 확인할 수 있었다.

따라서, 본 연구에서 제안한 크리깅 모델을 이용한 순차적 근사최적화 방법은 비선형성이 강하면서 최적해 부근이 완만한 함수나 국부 최적해가 많은 함수에 대하여 기존의 방법보다 좋은 근사최적해를 제공함은 물론 효율성 면에서도 보다 탁월한 결과를 제공한다는 사실을 알 수 있었다.

후 기

본 연구는 한국과학재단 지정 최적설계신기술연구센터의 지원으로 수행되었습니다. 이에 감사를 드립니다.

참고문헌

(1) Schmit, L. A. and Farshi, B., 1974, "Some Approximation Concepts for Structural Synthesis,"

- AIAA Journal*, Vol. 12, No. 5, pp. 692~699.
- (2) Healy, M. J., Kowalik, J. S. and Ransay, J. W., 1974, "Airplane Engine Selection by Optimization on Surface Fit Approximation," *Journal of Aircraft*, Vol. 12, No. 7, pp. 593~599.
 - (3) Roux, W. J., Stander Nielen and Haftka, R. T., 1998, "Response Surface Approximations for Structural Optimization," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 42, pp. 517~534.
 - (4) Simpson, T. W., Peplinski, J., Koch, P. N. and Allen, J. K., 2001, "Metamodels for Computer Based Engineering Design: Survey and Recommendations," *Engineering with Computers*, Vol. 17, No. 2, pp. 129~150.
 - (5) Wang, G. G., 2003, "Adaptive Response Surface Method Using Inherited Latin Hypercube Design Points," *Transactions of the ASME*, Vol. 125, pp. 210~220.
 - (6) Giunta, A. A., Wojtkiewicz Jr., S. F. and Eldred, M. S., 2003, "Overview of Modern Design of Experiments Methods for Computational Simulations," *41th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV, AIAA*, Jan 6-9, 2003, AIAA-2003-0649.
 - (7) Myers, R. H. and Montgomery, D. C., 1995, *Response Surface Methodology - Process and Product Optimization Using Designed Experiments*, John Wiley & Sons, NY.
 - (8) Koehler, J. R. and Owen, A. B., 1996, "Computer Experiments," In: Ghosh, S., Rao, C. R. (Des.), *Handbook of Statistics, 13: Design and Analysis of Experiments*, North-Holland, Amsterdam, pp. 261~308.
 - (9) Jin, R., Chen, W. and Simpson, T. W., 2001, "Comparative Studies of Metamodeling Techniques under Multiple Modeling Criteria," *Journal of Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 23, No. 1, pp. 1~13.
 - (10) Fletcher, R., 1987, *Practical Method of Optimization*, John Wiley & Sons, Chichester.
 - (11) Rodriguez, J. F., Renaud, J. E. and Watson, L. T., 1998, "Trust Region Augmented Lagrangian Methods for Sequential Response Surface Approximation and Optimization," *ASME Journal of Mechanical Design*, Vol. 120, pp. 58~66.
 - (12) Hong, K. J., Kim, M. S. and Choi, D. H., 2001, "Efficient Approximation Method for Constructing Quadratic Response Surface Model," *KSME International Journal*, Vol. 15, No. 7, pp. 876~888.
 - (13) Jin, R., Chen, W. and Sudjianto A., 2002, "On Sequential Sampling for Global Metamodeling in Engineering Design," *Proceeding of DETC'02 ASME 2002 Design Engineering Technical Conferences And Computers and Information in Engineering Conference*, DETC2002/DAC-32092.
 - (14) Sacks, J., Welch, W. J., Mitchell, T. J. and Wynn, H. P., 1989, "Design and Analysis of Computer Experiments," *Statistical Science*, Vol. 4, No. 4, pp. 409~435.
 - (15) McKay, M.H., Beckman, R.J. and Conover, W.J., 1979, "A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code," *Technometrics*, Vol. 21, No. 2, pp. 239~245.
 - (16) Tang, B., 1993, "Orthogonal Array-Based Latin Hypercubes," *Journal of the American Statistical Association*, Vol. 88, No. 424, pp. 1392~1397.
 - (17) Park, J. S., 1994, "Optimal Latin-hypercube Designs for Computer Experiments," *Journal of Statistical Planning and Inference*, Vol. 39, pp. 95~111.
 - (18) Morris, M. D. and Mitchell, T. J., 1995, "Exploratory Designs for Computational Experiments," *Journal of Statistical Planning and Inference*, Vol. 43, pp. 281~402.
 - (19) Kim, J. H., Lee, J. S., Lee, H. J. and Koo, B. H., 2003, "Applications of Micro Genetic Algorithms to Engineering Design Optimization," *Transactions of the KSME A*, Vol. 27, No. 1, pp. 158~166.
 - (20) Vanderplaats, G. N., 1995, *DOT - Design Optimization Tools User Manual*, Vanderplaats Research & Development, Inc.