Composites Research

Vol. 39, No. 5, 417-424 (2026)
DOI: http://dx.doi.org/10.7234/composres.2026.39.5.417
ISSN 2288-2103(Print), ISSN 2288-2111(Online)

Special Issue Paper

정규화 흐름 기반 잠재 공간 표현을 활용한 복합재 미시 구조의 대리모델링

김혜진* · 조해성*,**†

Surrogate Modeling of Composite Microstructures via Normalizing-Flow-Based Latent Representation

Hyejin Kim*, Haeseong Cho*,**†

ABSTRACT: This study presents a surrogate modeling framework for composite microstructures using a normalizing-flow-based latent representation. An autoencoder (AE) first compresses the high-dimensional stress responses of a representative volume element (RVE) into low-dimensional latent codes. A normalizing flow composed of invertible transformations then reparameterizes the unconstrained latent distribution into a structured reference distribution. A deep neural network (DNN) maps material and load parameters to the flow-aligned latent coordinates, from which the full-field stress response is reconstructed through the learned flow and decoder. Numerical experiments on two-dimensional fiber-reinforced RVEs under uniaxial monotonic loading demonstrate that the flow-structured latent representation improves surrogate accuracy while retaining efficient online prediction.

초 록: 본 연구에서는 정규화 흐름 기반 잠재 공간 표현을 활용하여 복합재 미시구조의 응력장을 예측하는 대리 모델 프레임워크를 제안한다. 먼저 오토인코더(autoencoder, AE)를 이용하여 대표 체적 요소의 고차원 응력 응답을 저차원 잠재 표현으로 압축한다. 이후 정규화 흐름을 적용하여 비제약 잠재분포를 구조화된 기준분포로 재매개변수화한다. 이어서 심층신경망이 재료 및 하중 매개변수를 정규화 흐름 기반의 구조화된 잠재 공간으로 매핑하고, 학습된 흐름과 디코더를 통해 전체 응력장을 복원한다. 단축 인장 조건의 2차원 섬유강화 RVE 수치 실험을 통해, 정규화 흐름으로 구조화된 잠재 표현이 효율적인 온라인 추론을 유지하면서 대리모델의 예측 정확도를 향상시킴을 확인하였다.

Key Words: 대리 모델(Surrogate model), 정규화 흐름(Normalizing flow), 잠재 공간(Latent space), 모델 차수 축소(Model-order reduction)

1. 서 론

섬유강화 복합재(fiber-reinforced composite)와 같은 이질 재료의 역학 거동은 미시-거시 스케일을 가로지르는 상호작용에 의해 결정되며, 본질적으로 멀티스케일 문제로 분류된다. 이때, 미시구조 내부의 국소 비선형성, 비등방성, 그리고 상 사이의 계면효과는 거시 응답에 직접적인 영향을 미친다. 전산 균질화(computational homogenization) 기

Received 31 May 2026, received in revised form 3 August 2026, accepted 13 October 2026

*Department of Aerospace Engineering, Jeonbuk National University
**Future Air Mobility Research Center, Jeonbuk National University
†Corresponding author (E-mail: hcho@jbnu.ac.kr)

법 중 대표적인 FE^2 정식화[1]는 미시와 거시 두 스케일을 결합하여 비선형 구성 거동을 정확하게 평가할 수 있는 기법으로 활용되어 왔다. 그러나 매 거시 가우스 점마다 대표 체적 요소(representative volume element, RVE)의 미시 경계치 문제를 반복적으로 풀어야 하므로, 비선형 또는 이력 의존 재료의 경우 계산 비용이 급격하게 증가하는 한계가 있다[2].

이러한 한계를 극복하기 위하여 모델 차수 축소(model order reduction, MOR) 기법이 활발히 연구되어 왔다. 적합 직교 분해(proper orthogonal decomposition, POD)와 축약 기저(reduced basis, RB) 방법과 같은 투영 기반 기법은 매개변수화된 환경에서 차원 축소를 가능하게 하지만[3], 하중 경로나 미시구조의 변화가 큰 경우 일반화 성능이 제한될 수 있다. 한편, 클러스터링 기반 축약 모델은 RVE를 응답 특성이 유사한 클러스터로 분할하여 미시 거동을 효율적으로 균질화하는 방식이다. 특히, 자기 일관 군집 해석(self-consistent clustering analysis, SCA)[4]과 그 적응형 변형인 적응형 자기 일관 군집 해석(adaptive self-consistent clustering analysis, ASCA)[5]은 국소화 현상과 이력 의존 거동을 효과적으로 포착하며, 계산 비용을 단축할 수 있음이 보고되었다.

최근에는 미시-거시 균질화 과정에서의 미시 응력장을 빠르게 예측하는 데이터 기반 대리모델(data-driven surrogate model) 연구가 활발히 진행되고 있다[6,7]. 심층 신경망(deep neural network, DNN)과 순환 신경망을 활용한 연구들은 비선형 또는 이력 의존 복합재의 균질화 응답을 효율적으로 학습할 수 있음을 보였으며[8,9], 트랜스포머 기반 아키텍처는 임의 미시구조에 대한 응력-변형률 응답 예측에도 적용되고 있다[10]. 그러나 이러한 데이터 기반의 방식은 대량의 학습 데이터를 요구할 수 있으며, 학습 영역 밖에서의 외삽 성능과 물리적 해석 가능성에 한계를 지닌다.

이에 따라 고차원 응력장을 저차원 잠재 표현으로 압축한 뒤 해당 잠재 공간(latent space)상에서 대리모델을 구성하는 잠재 공간 기반 접근이 주목받고 있다. 오토인코더(autoencoder, AE)는 고차원의 데이터를 압축하여 저차원 좌표계상에서의 대리모델 학습을 가능하게 한다[10]. 또한, 변분 오토인코더(variational autoencoder, VAE)[11]는 확률적 가우시안 인코더와 쿨백-라이블러(Kullback–Leibler, KL) 발산 항을 통해 잠재 분포를 사전 분포에 가깝게 정규화하며, 미시구조의 표현 및 응력장 예측 대리모델에 활용된 바 있다[13]. 한편, SCA에서의 방법론을 기반으로한 균등 크기 군집화는 RVE 내부에 공간적으로 일관된 도메인 인식 분할을 부여함으로써, 잠재 공간의 정합성과 일반화 성능을 향상시키는 전처리로 활용될 수 있다.

한편, 생성 모델 분야에서 확산 모델(diffusion model)[14]과 정규화 흐름(normalizing flow, NF)[15]은 복잡한 분포를 표현 가능한 잠재 공간으로 변환하는 새로운 가능성을 제시하였다. 이들 모두 단순한 기준분포와 복잡한 데이터분포 사이의 변환을 학습하지만, 변환 방식은 구분된다. 확산 모델은 일반적으로 데이터에 노이즈를 단계적으로 첨가하고 이를 반복적으로 제거하는 확률적 정방향 및 역방향 과정을 사용하며, 재료 분야에서는 결정 구조 및 미시구조의 생성 및 재구성에 적용되어 왔다[16-18]. 반면 NF는 야코비안 행렬식을 계산할 수 있는 가역 변환의 합성을 통해 두 분포 사이의 결정론적 양방향 매핑을 직접 학습한다. 따라서 순차적인 노이징 및 디노이징이 필요하지 않으며, 잠재 공간의 구조화와 역변환이 반복적으로 요구되는 대리모델에 적합하다.

본 연구에서는 복합재 미시구조의 응력장 예측을 위한 정규화 흐름 기반 잠재 공간 대리모델을 제안한다. 제안된 방법론은 다음 네 가지 핵심 요소로 구성된다. 첫째, 재료의 상별 균등 크기 K-평균 군집화를 통해 RVE 도메인에 공간적 일관성을 부여하는 도메인 인식 전처리를 수행한다. 둘째, AE를 이용하여 고차원 응력장을 저차원 잠재 표현으로 압축한다. 셋째, 정규화 흐름 기반 모델을 도입하여 복잡한 잠재 공간을 단순한 구조화된 분포로 정규화한다. 넷째, 심층 신경망을 통해 재료 및 하중 매개변수를 정규화된 잠재 공간으로 매핑한다. 이때, 2차원 단방향 섬유강화 복합재의 단축 인장 하중에 대해 수치해석 예제로 적용하였으며, 정규화 흐름 모델을 이용한 잠재 공간 정규화의 효용을 정량적으로 평가하였다.

2. 문제 정식화

복합재의 멀티스케일 모델링에서는 미시 구조 내부의 상간 상호작용과 거시 응답을 동시에 고려하여야 한다. 이때, FE^2 정식화[1]에서 거시 해는 RVE 내부에서 계산된 국소 응답에 의해 결정되며, 미시 기하와 재료 물성에 기반한 구성 거동의 균질화를 통해 도출된다. 본 장에서는 대리모델이 대체하고자 하는 미시 경계치 문제를 정의한 후, 대리모델 학습을 위한 입력 매개변수화 방법을 제시한다.

2.1 미시 경계치 문제

RVE의 도메인을 $\Omega \in \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ 또는 3)로 나타낸다. 이때, 준정적 평형 조건은 식 (1)과 같이 기술된다.

$$\nabla \cdot \sigma(\mathrm{x}) + \mathrm{b}(\mathrm{x}) = 0, \ \mathrm{x} \in \Omega, \tag{1}$$

$$\sigma(\mathrm{x}) = \mathbb{C}(\mathrm{x}) : \varepsilon(\mathrm{x}), \tag{2}$$

$$\varepsilon(\mathrm{x}) = \frac{1}{2}\left(\nabla u(x) + \nabla u^T(x)\right), \tag{3}$$

여기서, σ는 Cauchy 응력 텐서를, b는 체적력을 나타낸다. 응력-변형률 관계는 식 (2)와 같다. 이때, $\mathbb{C}(x)$는 4차 강성 텐서이며, ε는 변위장 u로부터 식 (3)과 같이 정의되는 미

소 변형률 텐서이다. 본 연구에서는 모재가 등방 경화를 갖는 탄소성 구성 거동[19], 섬유는 선형 탄성 거동을 따른다고 가정하였다. 또한, 두 상 사이의 계면은 완전 접합 조건을 만족하는 것으로 가정하였다. 거시 변형은 RVE의 상단 경계에 수직 변위를 부여하고 하단 경계를 고정하는 형태의 단축 인장 하중으로 인가되며, 본 연구의 검증 예제에서는 단축 인장 하중에 한정하여 고려하였다.

2.2 대리 모델을 위한 매개변수화

미시 경계치 문제의 고충실도 유한요소해석을 대체하기 위하여, 본 연구에서는 입력 벡터 $\xi \in \mathbb{R}^p$ 로부터 미시구조 RVE의 응력장 $\sigma(x)$로 매핑을 학습하는 데이터 기반 대리 모델을 구성하였다. 이때, 벡터 ξ는 미시구조의 물리적·기하적 정보를 포함하며, 구체적으로 각 상의 영률, 항복 강도 등 구성 거동을 결정하는 재료 물성 변수, 미시구조 각 상의 군집화 좌표와 같은 기하 정보, 미시구조에 적용되는 거시 변형 하중 조건을 포함한다. 따라서, 대리모델은 식 (4)와 같이 매개변수에서 응력장으로의 함수 매핑을 근사하도록 구성된다.

$$\sigma(x;\xi) \approx \hat{\sigma}(x) = f_{surrogate}(\xi), \tag{4}$$

이때, $f_{surrogate}$는 심층 신경망, 정규화 흐름의 잠재 변환, 그리고 디코더로 구성된 합성 모델이며, 각 구성요소와 학습 방법은 3장에서 상세히 기술한다.

3. 미시구조 대리 모델 구축 방법론

본 장에서는 미시구조 RVE의 응력장 예측을 위한 통합 대리모델 프레임워크를 기술한다. 제안된 프레임워크는 (i) 균등 크기 군집화 기반 도메인 전처리, (ii) AE 기반 잠재 특징 추출, (iii) 정규화 흐름 기반 잠재 구조화, 그리고 (iv) 매개변수에서 잠재 공간으로의 심층 신경망 회귀로 구성된다. 이때, 오프라인 단계에서는 대리모델 학습을 수행하며, 온라인 단계에서는 학습된 대리모델을 통해 입력 매개변수로부터 응력장을 빠르게 추론한다. 제안된 프레임워크의 전체 개요를 Fig. 1에 도시하였다.

3.1 군집화 기반의 전처리

AE 학습에 앞서, 각 RVE의 공간 도메인에 대하여 상별로 균등 크기 K-평균 군집화를 적용하였다[5]. 이때, RVE 도메인 Ω를 N개의 격자를 갖도록 이산화한 뒤, 식 (5)와 같이 분할을 수행한다.

$$\Omega = \cup_{k=1}^{K} \Omega_k, |\Omega_k| = \frac{N}{K}, \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset \text{ for } i \neq j, \tag{5}$$

여기서, 각 군집 Ω_k는 동일한 요소 개수를 포함하며, RVE

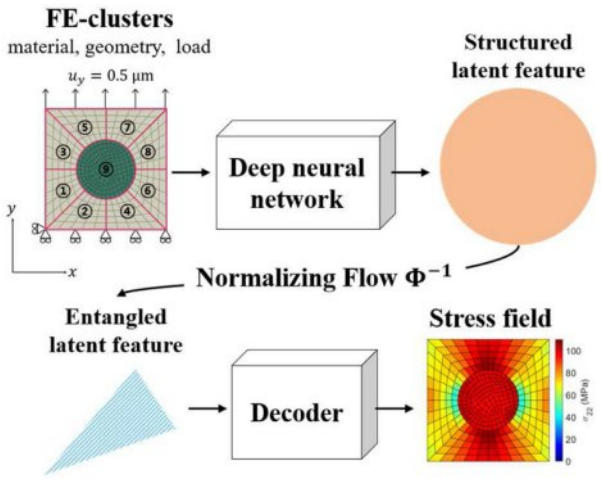


Fig. 1. Overview of the proposed framework

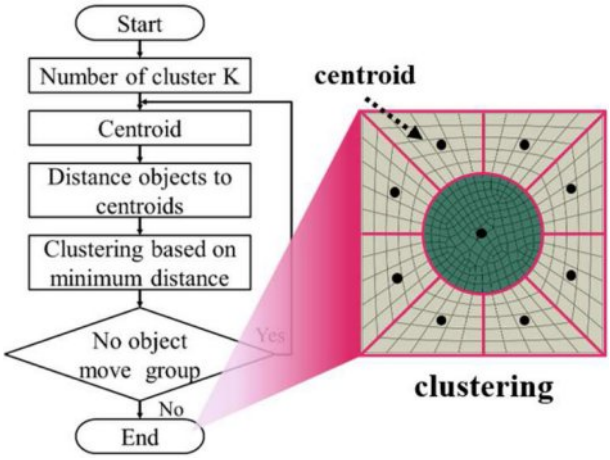


Fig. 2. Same-size K-means clustering of the RVE

내부의 국소 관심 영역을 정의한다. 또한, 군집화는 각 상에 대해 독립적으로 수행되어 모재와 섬유 영역이 분리된 후 각각 균등 크기 군집으로 분할된다. 본 연구에서 적용한 군집화에 대해 Fig. 2에 나타내었다. 응력장 $\sigma(x)$가 주어지면, AE의 입력은 식 (6)과 같이 각 군집에서의 응력 성분을 연결한 벡터로 구성된다.

$$x = [x_1, \ldots, x_K],\ x_k = \sigma(x)|_{\Omega_k} \in \mathbb{R}^{|\Omega_k|}, \tag{6}$$

이때, $m = d_\sigma \cdot |\Omega_k|$ 이며, d_σ는 응력 성분 수(2차원에서 3, 3차원에서 6)이다. 이러한 전처리는 잠재 공간의 정합성과 해석 가능성을 향상시켜 군집 내 분산을 축소하며, 인코더 입력을 고정 차원으로 유지시킨다. 또한, SCA 계열[4,5]에서 보인 바와 같이, 구조화된 도메인 분할은 이질 재료의 응력장 학습에 유리한 사전 정보로 작용할 수 있다.

3.2 잠재 공간 특징 추출

AE 구조는 응력 또는 변형률장의 국소 패턴과 본질적 가변성을 포착하는 데 효과적으로 활용되어 왔다[10,12]. 따라서 상용 해석 소프트웨어 ABAQUS[20]로부터 얻어진 고차원 응력장 $x \in \mathbb{R}^n$을 잠재 벡터 $z \in \mathbb{R}^d (d \ll n)$로 압축하기 위해 AE와 같은 차원 축소 네트워크를 사용하였다. 이때, 인코더 f_{enc}와 디코더 f_{dec}는 식 (7)과 같이 정의된다. θ_{enc}와 θ_{dec}는 학습 가능한 가중치이며, 네트워크는 식 (8)의 복원 손실을 최소화하도록 학습된다.

$$z = f_{enc}(x;\theta_{enc}),\ \hat{x} = f_{dec}(z;\theta_{dec}), \tag{7}$$

$$\mathcal{L}_{AE} = \frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\left\|x^{(i)} - \hat{x}^{(i)}\right\|_2^2, \tag{8}$$

3.3 정규화 흐름 기반 잠재 표현 구조화

AE는 응력장의 복원오차를 최소화하도록 학습되므로, 인코더에서 얻어진 잠재 표현 $z = f_{enc}(x)$의 분포는 명시적으로 제한되지 않는다. 이에 따라 잠재 공간의 구조가 비등방적이거나 차원 간 척도가 크게 다를 수 있다. 이러한 분포는 후속 매개변수 회귀의 학습 효율을 저하시킬 수 있다. 본 연구에서는 AE 잠재 표현을 회귀에 적합한 구조화된 기준공간으로 재매개변수화하기 위하여 affine coupling layer로 구성된 정규화 흐름 모델을 적용하였다.

NF 모델은 식 (9)와 같이 연속적인 가역 함수 Φ를 이용하여 AE의 잠재 공간 $z_T = z \in \mathbb{R}^d$을 정규화된 잠재 공간 $z_0 = \tilde{z} \in \mathbb{R}^d$으로 변환한다(Fig. 3). 이때, 변수 변환을 통해 T개의 흐름에 대한 로그 형태로 나타내면 식 (10)과 같이 정의할 수 있으며, 식 (11)과 같은 negative log-likelihood의 손실함수를 최소화하여 학습한다.

$$z_0 \sim p_0(z_0),\ z = z_T = \Phi^{-1}(z_0), \tag{9}$$

$$\log p(z) = \log p_0(z_0) - \sum_{t=1}^{T}\log\left|\det\frac{\partial\Phi_t^{-1}}{\partial z_{t-1}}\right|, \tag{10}$$

$$\mathcal{L}_{NF} = -\frac{1}{N}\sum_{N\in\mathcal{D}}\log p(z), \tag{11}$$

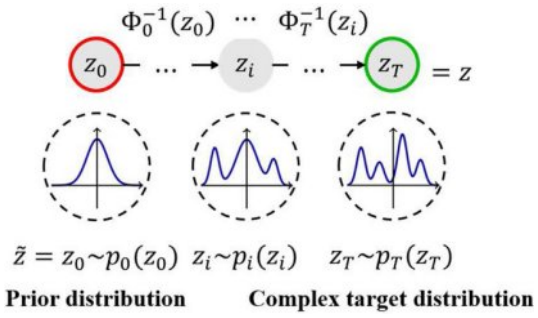


Fig. 3. Normalizing flow model

여기서, 각 가역 함수 Φ는 affine coupling layer로 구성되며, 입력을 두 부분으로 분할한 후 한 부분을 이용하여 다른 부분의 scale 및 translation을 계산한다. 이 구조는 야코비안 행렬식을 해석적으로 계산할 수 있으므로 효율적인 우도학습과 정확한 역변환이 가능하다. 학습된 모델의 역변환 Φ^{-1}은 정규화된 잠재 공간을 AE 디코더 입력 잠재 공간으로 복원하는 데 사용된다.

3.4 잠재 공간으로의 신경망 매핑

매개변수 기반 예측을 위해, 재료, 기하, 하중 매개변수 벡터 $\xi \in \mathbb{R}^p$를 정규화 흐름 모델을 통해 구조화된 잠재 표현 $\tilde{z} \in \mathbb{R}^d$로 매핑하는 심층 신경망을 학습하였다(식 (12)). 예측된 잠재 표현 $\tilde{z}$은 학습된 흐름의 역변환 Φ^{-1}을 통해 AE 잠재 공간으로 변환된 후, 디코더를 거쳐 식 (13)과 같이 응력장으로 복원된다. 이때, 심층 신경망은 정규화 흐름 모델을 통해 얻어진 잠재 표현 $\tilde{z}^{(i)} = \Phi(z^{(i)})$를 회귀 목표로 하여 식 (14)의 손실 함수를 최소화하도록 학습된다.

$$\tilde{z} = f_{DNN}(\xi;\theta_{DNN}), \tag{12}$$

$$\hat{\sigma}(x) = f_{dec}\left(\Phi^{-1}(\tilde{z})\right), \tag{13}$$

$$\mathcal{L}_{reg} = \frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\left\|\hat{\tilde{z}}^{(i)} - \tilde{z}^{(i)}\right\|_2^2, \tag{14}$$

3.5 정규화 흐름 기반 잠재 표현 적용에 따른 비교 분석

본 연구에서는 NF 기반 잠재 구조의 영향을 분리하여 평가하기 위해 AE와 AE-NF를 비교하였다. AE 모델은 입력 매개변수를 비제약 AE 잠재 공간에 직접 회귀하는 반면, AE-NF 모델은 AE 잠재 공간을 정규화 흐름의 구조화된 잠재 공간 구조에 재매개변수화한 후 해당 잠재 공간의 분포로 회귀한다. 두 모델에 동일한 학습 데이터, AE 및 매개변수-잠재 심층신경망 구조와 학습 조건을 적용함으로써, 정규화 흐름의 잠재 공간의 구조화 유무가 응력장 예측 성능에 미치는 효과를 비교하였다.

4. 수치 해석 예제

본 장에서는 제안된 프레임워크의 정확도와 계산 효율을 2차원 단방향 섬유강화 RVE의 단축 인장 수치 해석 예제에 대해 정량적으로 비교 분석하였다. 대리 모델 구축을 위한 학습 데이터와 해석 시간 측정은 Intel i7-8700 CPU 4코어에서 ABAQUS/Standard[20]로 유한요소 해석을 수행하였으며, 재료 물성에 따른 학습 케이스를 구성하였다. 본 프레임워크는 Python 3.9 환경에서 PyTorch 1.12 및 TensorFlow-GPU 2.4 라이브러리를 사용하여 구현하였으며, 모든 학습과 추론은 NVIDIA RTX 3090 GPU에서 수행하였다.

대리모델의 예측값 $\hat{\sigma}$은 ABAQUS 참조해 σ와 다음의 성능지표로 비교하였다. 상대 L^2 오차는 식 (15)와 같이 정의된다. 참조해가 0 또는 매우 작은 값의 경우 상대 오차는 수치적으로 불안정할 수 있어, 식 (16)과 같이 참조해의 최대 절대값을 기준으로 사용한 정규화된 절대 오차(%)를 정의하였으며, RVE 영역 내 오차의 공간 분포를 시각화하는 지표로 활용된다. 평가 점 N_e개에 대한 평균 제곱근 오차(root mean square error, RMSE)와 결정계수 R^2 값은 식 (17) 및 식 (18)로 정의되며, 예측 결과의 성능 평가 지표로 활용된다.

$$\epsilon_{L^2} = \frac{\|\hat{\sigma}-\sigma\|_2}{\|\sigma\|_2}, \tag{15}$$

$$e_{norm}(x) = \frac{|\hat{\sigma}(x)-\sigma(x)|}{\max_{x\in\Omega}|\sigma(x)|} \times 100\ (\%), \tag{16}$$

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N_e}\sum_{i=1}^{N_e}(\hat{\sigma}_i - \sigma_i)^2}, \tag{17}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_e}(\sigma_i-\hat{\sigma}_i)^2}{\sum_{i=1}^{N_e}(\sigma_i-\bar{\sigma})^2}, \tag{18}$$

4.1 2차원 단방향 복합재 문제 정의

본 예제의 미시구조 RVE는 Fig. 4(a)와 같이 한 변의 길이 L=10 μm 인 정사각형 단위 셀 내부에 반경 R=2.5 μm의 단일 원형 섬유가 매립된 형태이며, 섬유 분율은 V_f=20%로 적용하였다. 모재는 영률 E_m=η_1 GPa, 항복 강도 Y_m=η_2 MPa, 항복 변형률 ε_Y=0.01, 경화 계수 E_t=1 GPa, 포아송비 ν_m=0.33을 갖는 등방 경화 탄소성[19]을, 섬유는 영률 E_f=10 GPa, 포아송비 ν_f=0.33의 선형 탄성 거동을 따른다고 가정하였으며, 두 상은 완전 접합 조건을 만족하는 것으로 가정하였다.

이때, Fig. 4(b)와 같이 상별 균등 크기 K-평균 군집화를 RVE에 적용하여 총 9개의 군집(모재에서 8 군집, 각 25 요소, 섬유에서 1 군집, 각 183 요소)으로 분할하였다. 모재의 군집은 섬유 주위로 대칭 방사 형태를 이루도록 형성되었다.

미시구조 RVE는 평면 변형 사변형 요소 383개와 절점 404개로 이산화하였다. 이때, 하중 조건으로는 RVE 상단 경계에 수직 변위 u_y=0.5 μm를 부여하고 하단 경계는 고정하는 단축 인장 하중만을 적용하였으며, 거시 단축 인장 변형률이 0에서 약 5%에 도달하도록 적용하였다. 또한, 모재의 영률 $\eta_1 \in [2, 6]$ GPa와 항복 강도 $\eta_2 \in [20, 60]$ MPa에 대하여 Latin Hypercube 표본 추출을 통해 122개의 케이스를 생성하였다. 이때, 10개의 케이스를 임의로 선택하여 학습에 포함하지 않고 검증 케이스로 적용하였으며, 나머지 112개의

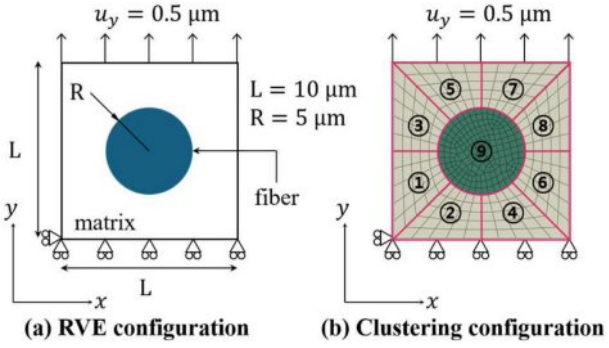


Fig. 4. Configuration and clustering of the 2D unit cell RVE

Table 1. Network architectures and training hyperparameters of the AE and NF models

	Latent network type	
	AE	NF
Architecture	Matrix: [25-256-256-128-64-32-2] Fiber: [183-150-100-75-50-25-10-2]	NF: [ActNorm-Invertible1×1Conv-affine coupling layer(128-128-128-128)]×3
Training parameter	Epochs: 5,000 Learning rate: 1×10^{-5}	Epochs: 1,000 Learning rate: 1×10^{-4}
Performance (R^2)	0.999	0.999

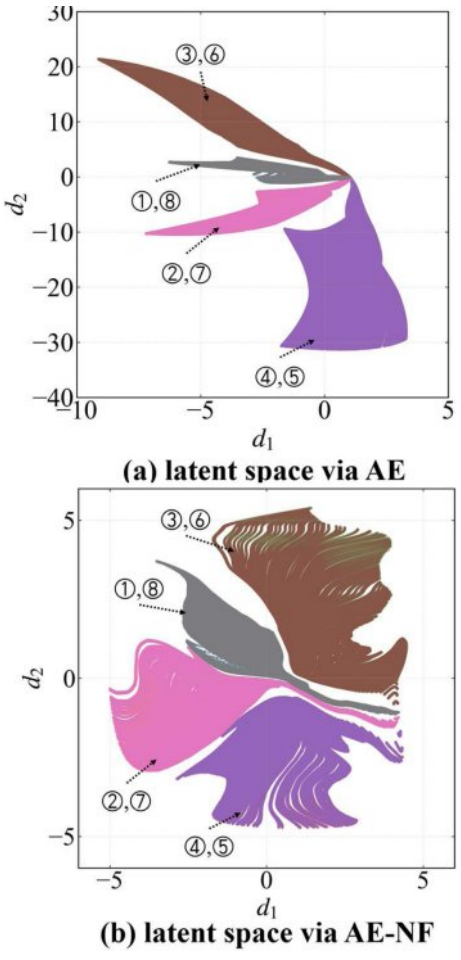


Fig. 5. Comparison of latent feature distribution

케이스를 훈련 케이스로 활용하여 모델 학습을 수행하였다.

4.2 잠재 공간 분석

구축한 AE와 NF의 모델에 대한 구조 및 모델 성능에 대해 Table 1에 정리하였다. 이때, AE는 대칭 구조이므로 인코더에 대하여 나타내었으며, NF의 기준 분포는 logistic 분포로 적용하였으며, 일반적인 activation normalization, Invertible 1×1 convolution, affine coupling layer를 갖는 블록[15]에서의 3개 층으로 적층하여 구성되도록 적용하였다.

식 (6)과 같이 각 상에서 정의된 군집화된 응력 데이터를 AE의 인코더에 입력하여 2차원 잠재 공간($d = 2$)으로 압축하였다. 모재에서의 군집화된 응력 학습 데이터 전체에 대한 잠재 분포를 Fig. 5에 도시하였으며, 미시구조의 대칭성이 잠재 공간에 그대로 보존됨을 확인하였다. 즉, 거울 대칭 쌍을 이루는 군집들이 잠재 공간상에서 공통 영역의 잠재 공간으로 투영되고, 이를 통해 두 잠재 표현 모두 섬유 기하의 좌우 대칭성에 부합하는 등가 특징을 추출함을 알 수 있다. 다음으로, 두 인코더의 잠재 표현은 정성적으로 상이하게 나타났다. AE의 잠재 공간은 $d_1 \in [-10, 4]$, $d_2 \in [-40, 30]$ 의 비등방 영역에 분포하며(Fig. 5(a)), 이는 잠재 스케일에 대한 사전 제약이 부재한 결과로 해석된다.

이러한 잠재 표현을 구조화하기 위하여, 정규화 흐름 모델을 인코더 출력에 적용하였다. 이때, AE-NF의 잠재 분포(Fig. 5(b))는 $[-6, 6]^2$ 정도의 근사 등방 영역에 분포하였으며, 군집 쌍 구조는 정규화 흐름 모델 적용 전과 동일하게 보존됨을 확인하였다. 이때, 정규화 흐름 모델의 도입은 AE 잠재 공간의 차원별 척도를 균일화하여 비등방성을 완화하고, 군집 간 구분 가능성을 회복시키는 두 가지 효과를 동시에 확인할 수 있다.

4.3 대리 모델 성능 비교

입력 매개변수-잠재 공간을 매핑하는 심층 신경망은 5개 은닉 층, 각 층당 128개 뉴런의 단일 구조로 고정하였으며, 300 epoch의 동일한 학습 조건하에서 앞서 훈련한 잠재 공간으로부터 학습한 대리 모델의 성능을 비교하였다. 이때, 결정계수 R^2는 AE-NF에서 AE를 사용한 경우보다 우수함을 확인하였으며, 각 잠재 공간 모델을 적용한 대리 모델의 추론 시간, 정확도 지표 R^2, 심층 신경망 학습 시간을 Table 2에 정리하였다.

이를 통해 인코더를 고정한 상태에서 NF 모델 기반의 잠재 공간 구조화를 추가하면 R^2가 향상됨을 확인하였다. 특히, AE의 R^2는 0.970에서 NF 모델 결합 후 AE-NF에서 0.990으로 향상되었다. 이를 통해, NF 모델에 의해 정규화된 잠재 공간이 후속 심층 신경망 회귀에 유리하게 작용함을 알 수 있다.

반면, 정규화 흐름 모델을 적용한 AE-NF의 학습 시간은 정규화 흐름을 적용하지 않은 AE보다 약 4배 증가하였다. 그러나 제안된 대리모델의 주요 적용 대상인 멀티스케일 해석에서는 미시 RVE 해석이 거시 적분점에서 하중 증분과 비선형 반복마다 반복적으로 수행된다. 따라서 전체 미시 해석 비용은 RVE 호출 횟수에 비례하여 증가하는 반면, 학습된 대리모델은 각 RVE 경계조건 또는 재료 매개변수에 대한 응답을 신속하게 추론할 수 있다. AE-NF를 통해 학습된 대리 모델에서의 한 케이스당 추론 시간은 30.9 ms로, ABAQUS 해석시간 61 s의 약 0.051%에 해당하며 계산 속도를 약 1,974배 향상시켰다. 따라서 다수의 적분점과 증분에서 RVE 응답을 반복적으로 요구하는 멀티스케일 해석에서는 증가된 오프라인 학습 비용보다 향상된 예측 정확도와 누적 온라인 계산비용 절감의 이점이 더 클 수 있다. 다만, 본 연구에서는 제안한 대리 모델을 실제 거시-미시 결합 해석 루프에 직접 적용하지 않았으므로, 계산 내의 데이터 전달, 배치 추론, 거시 평형 반복 및 미시 이력변수 갱신을 포함한 전체 멀티스케일 계산 효율은 향후 연구에서 추가로 검증할 필요가 있다.

4.4 예측 정확도 비교

미시구조 RVE의 응력장 예측 성능은 제안된 AE-NF 대리모델을 통해 학습에 포함되지 않은 임의의 검증 케이스인 (η_1, η_2) = (4.714 GPa, 47.14 MPa)에서 평가하였다. Fig. 6은 거시 변형률이 각각 1%, 5%에서의 ABAQUS 참조 응력장, 제안된 대리모델의 예측, 상대 오차를 비교하여 나타낸다. 이때, 대리모델은 모재-섬유 계면을 가로지르는 공간적 응력 구배와 섬유 경계 부근의 응력 집중 영역을 충실히 재현함을 확인하였다. 또한, 거시 변형률이 각각 1%, 5%에서의 정량적 오차 지표는 Table 3에 정리하였다. 예측된 응력장에 대한 상대 L^2 오차는 최대 0.004 이하로, 정규화된 절대 오차는 최대 0.69% 이하로 도출되었다. 또한 R^2가 0.99 이상으로 도출되어 섬유-모재 계면의 응력 집중 영역을 포함하여 전체 응력장이 높은 정확도로 예측됨을 확인하였다.

요소 단위 충실도를 추가로 확인하기 위하여, 모재 내부

Table 2. Comparison of performance for each model

	Latent network type	
	AE	AE-NF
R^2	0.970	0.990
Inference time (ms)	0.6	30.9
Training time (s)	5,653	21,631

Table 3. Comparison of error metrics at arbitrary test case

	Error metrics			
Macro strain	ε_{L^2}	$max(e_{norm})$ (%)	RMSE	R^2
1%	0.004	0.690	0.182	0.998
5%	0.001	0.228	0.073	0.999

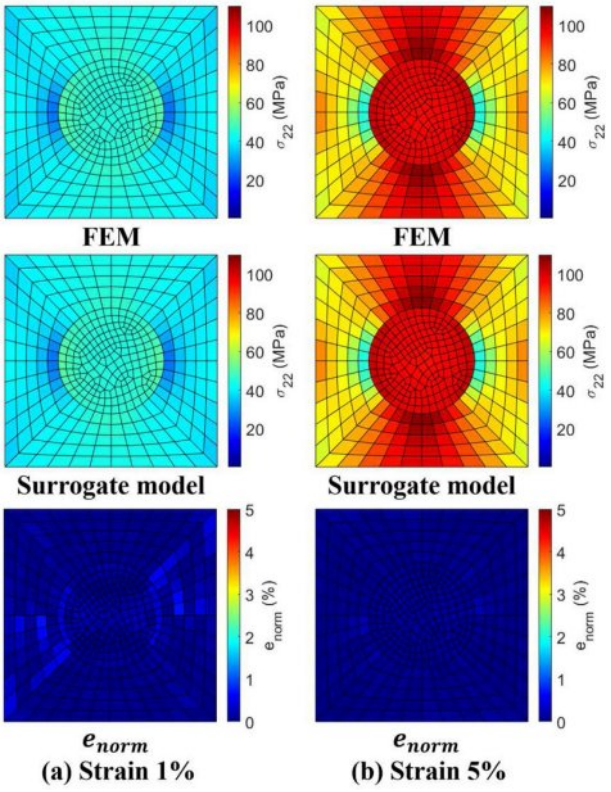


Fig. 6. Comparison of σ_{22} stress field

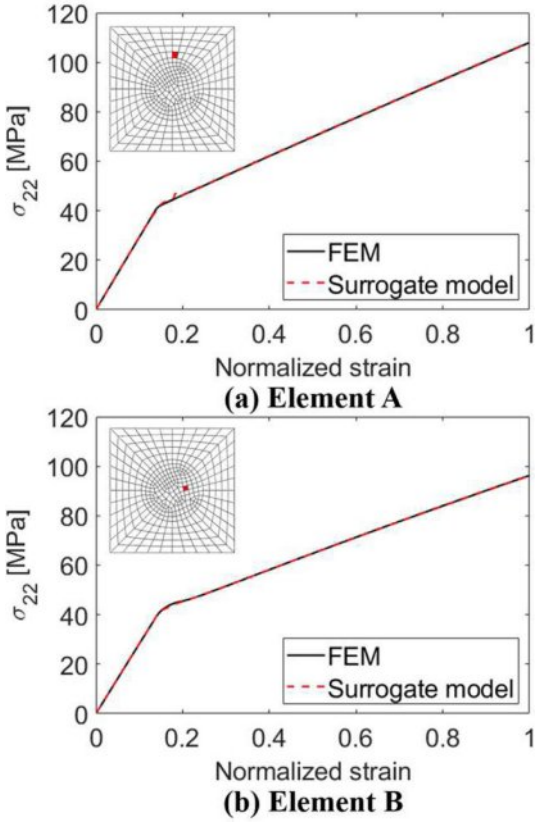


Fig. 7. Comparison of stress-strain curve at arbitrary element

(요소 A), 섬유 내부 (요소 B)에 대한 응력-변형률 곡선 비교 결과를 Fig. 7에 도시하였다. 이때, RMSE는 각각 0.21, 0.11로, 모두 낮은 RMSE값이 도출됨을 확인하였다. 이를 통해 군집별 예측이 미시구조 RVE 전체에 걸쳐 통계적으로 일관됨을 확인하였다. 또한, 계산 비용 측면에서, AE-NF 접근법을 적용한 대리 모델에서의 추론 시간(t_{pred}=0.03 s)과 동일 사례에 대한 ABAQUS 해석 시간(t_{ABAQUS}=61 s)을 비교하였으며, 약 99.9%의 절감을 확인하였다.

5. 결 론

본 연구에서는 복합재 미시구조의 응력장을 예측하기 위한 정규화 흐름 모델 기반 잠재 공간 구조화를 적용한 대리모델 프레임워크를 제안하였다. 제안된 프레임워크는 상별 균등 크기 군집화로 RVE 도메인에 공간적 일관성을 부여하는 도메인 인식 전처리, 차원 축소 네트워크 기반 응력장 압축, 정규화 흐름 모델을 이용한 잠재 공간 구조화, 그리고 매개변수에서 정규화된 잠재 공간으로의 심층 신경망 매핑으로 구성된다.

2차원 단방향 섬유강화 RVE의 단축 인장 수치 해석 예제를 통해 제안 프레임워크의 정확도, 잠재 공간 정규화 효과, 그리고 계산 효율을 정량적으로 평가하였다. 그 결과, 제안된 대리모델은 0.004 이하의 낮은 상대 L^2 오차를 보였으며, 전체 응력장을 비교 시, 결정계수 R^2는 0.99 이상의 높은 정확도를 달성함을 확인하였다. 또한, 정규화 흐름 모델은 복잡한 잠재 분포를 보다 단순한 기준 분포로 구조화함으로써 심층 신경망 회귀에 유리한 조건을 제공하였다. 한편, 한 케이스 해석을 위한 계산 비용 측면에서는 제안한 대리모델이 0.03 s 이내로 예측되어 해석 프로그램 대비 약 99.9% 절감할 수 있음을 확인하였다.

다만, 제안된 프레임워크는 학습된 매개변수 영역 내에서는 우수한 일반화 성능을 보였으나, 형상 변경, 하중 조건 변경 등과 같은 영역 밖 외삽 성능에 대한 검증은 추가적으로 수행될 필요가 있다. 향후 연구에서는 본 프레임워크의 3차원 임의 분포 복합재 및 이력 의존 순환 하중 조건으로의 확장을 수행하고 회귀모형에 따른 대리모델의 학습 강건성을 분석할 계획이다.

후 기

본 연구는 2025년도 산업통상부 및 한국산업기술기획평가원(RS-2025-02653438) 및 2026년 정부(기후에너지환경부)의 재원으로 한국에너지기술평가원의 지원을 받아 수행한 연구입니다(RS-2026-25529252, 해상풍력 핵심부품 AX 고도화를 위한 데이터 기반 통합설계, 해석 중견기업 특화 인력양성).

REFERENCES

1. Feyel, F., and Chaboche, J.-L., "FE² Multiscale Approach for Modelling the Elastoviscoplastic Behaviour of Long Fibre SiC/Ti Composite Materials," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 183, No. 3, 2000, pp. 309-330.
2. Fish, J., Wagner, G.J., and Keten, S., "Mesoscopic and Multiscale Modelling in Materials," *Nature Materials*, Vol. 20, No. 6, 2021, pp. 774-786.
3. Yvonnet, J., and He, Q.-C., "The Reduced Model Multiscale Method (R3M) for the Non-linear Homogenization of Hyperelastic Media at Finite Strains," *Journal of Computational Physics*, Vol. 223, No. 1, 2007, pp. 341-368.
4. Liu, Z., Bessa, M.A., and Liu, W.K., "Self-consistent Clustering Analysis: An Efficient Multi-scale Scheme for Inelastic Heterogeneous Materials," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 306, 2016, pp. 319-341.
5. Ferreira, B.P., Andrade Pires, F.M., and Bessa, M.A., "Adaptivity for Clustering-based Reduced-order Modeling of Localized History-dependent Phenomena," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 393, 2022, p. 114726.
6. Jin, J., "Kriging Surrogate Model-Based Multidisciplinary Design Optimization for an Interceptor Missile," *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, Vol. 27, 2026, pp. 2505-2519.
7. Nam, H., Yoo, H., Kim, H., and Kim, K.H., "Corrected Multi-Fidelity Surrogate Model Based on Deep Neural Networks for Predicting Aerodynamic Loads of Missile," *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, Vol. 27, 2026, pp. 190-206.
8. Ghavamian, F., and Simone, A., "Accelerating Multiscale Finite Element Simulations of History-dependent Materials Using a Recurrent Neural Network," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 357, 2019, p. 112594.
9. Mozaffar, M., Bostanabad, R., Chen, W., Ehmann, K., Cao, J., and Bessa, M.A., "Deep Learning Predicts Path-dependent Plasticity," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 116, No. 52, 2019, pp. 26414-26420.
10. Pitz, E., and Pochiraju, K., "A Neural Network Transformer Model for Composite Microstructure Homogenization," *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, Vol. 134, 2024, p. 108622.
11. Kingma, D.P., and Welling, M., "Auto-Encoding Variational Bayes," arXiv preprint arXiv:1312.6114, 2013.
12. Vlassis, N.N., and Sun, W.C., "Geometric Learning for Computational Mechanics Part II: Graph Embedding for Interpretable Multiscale Plasticity," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 404, 2023, p. 115768.
13. Generale, A.P., Robertson, A.E., Kelly, C., and Kalidindi, S.R., "Inverse Stochastic Microstructure Design," *Acta Materialia*, Vol. 271, 2024, p. 119877.
14. Ho, J., Jain, A., and Abbeel, P., "Denoising Diffusion Probabilistic Models," *Proceedings of the 34th Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, Vancouver, Canada, Dec. 2020, pp. 6840-6851.
15. Papamakarios, G., Nalisnick, E., Rezende, D.J., Mohamed, S., and Lakshminarayanan, B., "Normalizing Flows for Probabilistic Modeling and Inference," *Journal of Machine Learning Research*, Vol. 22, No. 57, 2021, pp. 1-64.
16. Pakornchote, T., Choomphon-anomakhun, N., Arrerut, S., Atthapak, C., Khamkaeo, S., Chotibut, T., and Bovornratanaraks, T., "Diffusion Probabilistic Models Enhance Variational Autoencoder for Crystal Structure Generative Modeling," *Scientific Reports*, Vol. 14, No. 1, 2024, p. 1275.
17. Hoffman, N., Diniz, C., Liu, D., Rodgers, T., Tran, A.V., and Fuge, M., "GrainPaint: A Multi-scale Diffusion-based Generative Model for Microstructure Reconstruction of Large-scale Objects," *Acta Materialia*, Vol. 288, 2025, p. 120784.
18. Lyu, X., and Ren, X., "Microstructure Reconstruction of 2D/3D Random Materials via Diffusion-based Deep Generative Models," *Scientific Reports*, Vol. 14, No. 1, 2024, p. 5041.
19. Simo, J.C., and Hughes, T.J.R., Computational Inelasticity, Interdisciplinary Applied Mathematics, Vol. 7, Springer-Verlag, New York, USA, 1998.
20. Dassault Systèmes Simulia Corp. Abaqus Analysis User's Manual, Version 6.14. Providence, RI: Dassault Systèmes Simulia Corp., 2014.