

Noisy 한 CFD 결과에 대한 구속조건을 고려한 EGO 방법 연구

배 효 길, 권 장 혁*

한국과학기술원 항공우주공학과

A STUDY ON CONSTRAINED EGO METHOD FOR NOISY CFD DATA

H.G. Bae and J.H. Kwon*

Dept. of Aerospace Engineering, KAIST

Efficient Global Optimization (EGO) method is a global optimization technique which can select the next sample point automatically by infill sampling criteria (ISC) and search for the global minimum with less samples than what the conventional global optimization method needs. ISC function consists of the predictor and mean square error (MSE) provided from the kriging model which is a stochastic metamodel. Also the constrained EGO method can minimize the objective function dealing with the constraints under EGO concept. In this study the constrained EGO method applied to the RAE2822 airfoil shape design formulated with the constraint. But the noisy CFD data caused the kriging model to fail to depict the true function. The distorted kriging model would make the EGO deviate from the correct search. This distortion of kriging model can be handled with the interpolation($p=free$) kriging model. With the interpolation($p=free$) kriging model, however, the search of EGO solution was stalled in the narrow feasible region without the chance to update the objective and constraint functions. Then the accuracy of EGO solution was not good enough. So the three-step search method was proposed to obtain the accurate global minimum as well as prevent from the distortion of kriging model for the noisy constrained CFD problem.

Key Words : 크리깅 모델(kriging model), Efficient Global Optimization (EGO), Infill Sampling Criteria (ISC), Constrained EGO, Interpolation($p=free$) kriging model, Three-step 탐색법

기호설명(Nomenclature)

Y : 실제함수(true function)
 \hat{y} : 크리깅 모델(kriging model) 의 함수값
 \hat{s}^2 : 크리깅 모델 함수값의 평균제곱오차(MSE)
 f_{\min} : 실험점들의 측정값 중의 최소값
 ϕ : 표준정규분포의 확률밀도함수
 (probability density function, pdf)
 Φ : 표준정규분포의 누적분포함수
 (cumulative distribution function, cdf)
 EI : expected improvement 함수

1. 서 론

컴퓨터 성능의 향상과 더불어 전산유체역학(Computational Fluid Dynamics, CFD) 분야의 발전에 따라 설계분야에서 CFD 활용은 날로 커져가고 있다[1]. 하지만 컴퓨터 성능이 나날이 좋아지고 있지만 난류해석과 같은 고정밀도(high fidelity) CFD 해석과 같은 작업은 여전히 큰 계산비용을 필요로 한다. 이와 같은 계산부하가 큰 전산해석을 이용하여 전역 최적해를 효율적으로 구하기 위한 방법의 일환으로 Efficient Global Optimization (EGO) 방법이 개발되었다[3,4]. EGO 방법은 단순히 근사모델(surrogate 또는 metamodel)을 이용하여 실제 설계 공간을 근사하여 전역해를 구하는 것이 아니라 확률 개념을 도입하여 전역해가 존재할 가능성이 큰 지역을 지속적으로 탐색하는 방법이다. 이와 같은 EGO 방법은 측정오차가 없는 전산실험(computer experiment)용 크리깅 모델(kriging model) 또는 Design and Analysis of Computer Experiments; DACE[14]을 근간으로 고안되었다. 회귀식과 실제함수값 간의 편차들은 서

Received: June 27, 2012, Revised: December 12, 2012,

Accepted: December 14, 2012.

* Corresponding author, E-mail: jhkwon@kaist.ac.kr

DOI http://dx.doi.org/10.6112/kscfe.2012.17.4.032

© KSCFE 2012

로 독립적이지 않고 상관관계(correlation)를 가진다는 가정에서 출발한 크리깅 근사모델은 미지점(untried point)에 대한 함수값(평균)을 제공하는 것 뿐만 아니라 그 함수값이 가지는 평균제곱오차(mean square error; MSE)도 예측해 준다[12]. EGO 방법은 이런 정보를 이용하여 infill sampling criteria (ISC) 함수를 정의하고, 그 ISC 함수를 통하여 차기 실험점(infill sample)을 선택하게 된다[5]. 여러 ISC 함수 중 대표적인 ISC 함수로 국소탐색(exploitation) 성능과 전역탐색(exploration) 성능을 동시에 가지고 있는 expected improvement (EI)가 있다[3,4].

EGO 최적화 기법은 크게 두 단계로 나눌 수 있다[11]. 첫 번째 단계로 Latin hypercube design(LHD)과 같은 초기 실험점의 측정값을 이용하여 크리깅 모델을 생성하고, 두 번째 단계로 그 크리깅 모델을 활용하여 ISC 함수를 계산하게 된다. 최대 또는 최소 ISC 값을 가지는 미지점을 차기 실험점으로 선택하게 된다. 차기 실험점을 초기 실험점에 포함시켜 다시 크리깅 모델을 갱신하게 된다. 이런 반복작업을 종료조건이 만족될 때까지 수행하면서 전역 최적해를 찾게 된다[2].

초창기 EGO 방법은 불구속 문제(unconstrained problem)에 대해서만 연구 되었지만 최근에는 구속문제(constrained problem)에도 EGO 개념을 이용하여 유용영역(feasible region)의 최적해를 효율적으로 탐색하는 방법이 많이 연구되고 있다. 예를들면 구속조건을 만족할 확률과 EI 함수를 곱한 probability-adjusted EI 값이 최대가 되는 지점을 탐색하는 방법이 있고[4], EI를 목적함수로 놓고 expected violation (EV)을 구속함수로 취급하여 sequential unconstrained minimization technique(SUMT) 기법 중의 가장 강건한 방법인 Augmented Lagrange Multiplier (ALM)로 최적해를 구하는 방법이 있다[8]. 또한 ALM의 Lagrangian을 확률변수(random variable)로 전환하여 Lagrangian의 EI 함수를 유도하여 그 값이 최대가 되는 지점을 탐색하는 방법이 있다[7]. 마지막으로 ISC 함수를 목적함수로 놓고, 구속함수를 크리깅 모델로 근사하여 구속 최적화 문제를 DIRECT 기법[15]으로 직접 풀어주는 방법이 있다[6]. 본 논문에서는 위에 소개한 마지막 방법인 목적함수로 ISC 함수를, 구속함수로 크리깅 모델을 사용하여 ALM 방법으로 최적해를 탐색하였다.

여러 테스트 함수(test function)로 검증된 EGO 설계 프레임워크(framework)를 이용하여 실제 CFD 공력 최적화 문제인 RAE2822 익형설계를 수행하였다. 부드러운 함수형태인 테스트 함수와 달리 CFD 해석 결과는 noise(출력값의 지글거림)를 동반하게 된다. 대표적인 원인으로 크게 세가지를 들 수 있다. 첫째 물리공간을 이산화(discretization)하여 오차가 발생하는 경우와 둘째 강한 충격파와 경계층 박리와 같은 수치적으로 불안정한 현상에 의하여 CFD 결과가 수렴하지 않는 경우,

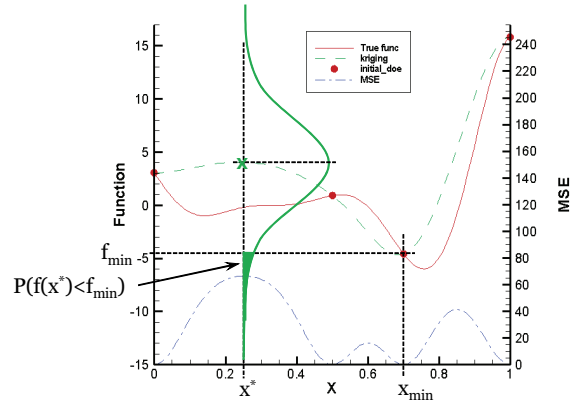


Fig. 1 Diagram for selecting the infill sample in the view of probability

마지막으로 잘못된 경계조건으로 인한 부정확한 해를 들 수 있다. 이런 noisy 한 CFD 결과는 크리깅 모델을 왜곡시켜 전역해 탐색에 어려움을 줄 수 있다. 따라서 본 논문에서는 noisy 한 CFD 데이터를 활용하면서 구속조건이 있는 RAE2822 익형 최적설계를 EGO 방법으로 해결하는 기법에 대하여 연구하였다. 참고로 본 논문에서 표현된 모든 목적함수는 최소해를 찾는 최소화 문제이다.

2. EGO 방법

2.1 EGO 개념

EGO 방법의 최적해 탐색의 원리에 대해 식(1)와 같은 한 개의 미지수(x)를 갖는 Forrester et al. 테스트 함수의 최소화 문제로 설명한다.

$$f(x) = (6x - 2)^2 \sin(12x - 4) \quad \text{with } 0 \leq x \leq 1 \quad (1)$$

Fig. 1의 붉은 실선은 실제함수 식 (1)을 나타내고, 초록색 dashed line은 초기 실험점(x=0, 0.5, 0.7, 1)으로 생성된 크리깅 함수이다. 파란색 dashdotted line은 크리깅 모델의 평균제곱오차(MSE)를 나타낸다. 즉 크리깅 함수값(평균값)이 가질 수 있는 불확실성(분산)의 정보이다. 현실에서는 붉은색 실선으로 표현된 실제함수의 방정식은 모르는 값이다. 우리는 단지 크리깅 모델로 실제함수를 예측할 수 밖에 없다. 따라서 현재까지 구한 가장 작은 최소값 f_{min} 은 4개의 실험점 중 X_{min} 값이다. 일반적인 근사모델 최적기법은 크리깅 모델의 최소값을 차기 실험점(infill sample)으로 선택한다. 하지만 EGO 방법에서는 근사모델의 함수값이 아닌 확률관점에서 차

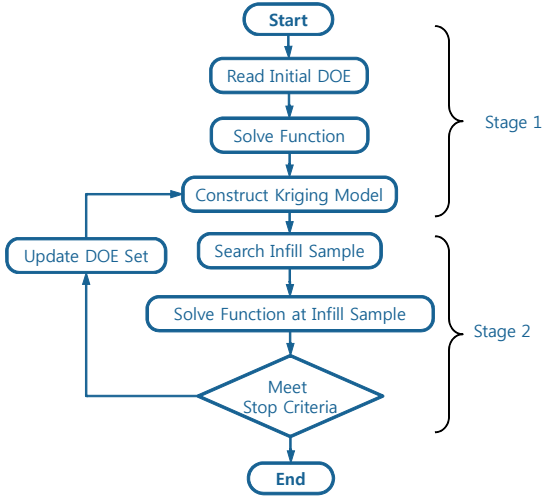


Fig. 2 EGO optimization flow chart

기 실험점을 선택한다. 이를테면 Fig. 1 에서 보듯이 X^* 위치의 크리깅 함수는 약 4 의 값을 가져 f_{\min} 보다 상당히 큰 값을 가지지만 X^* 위치에서 크리깅 모델의 MSE를 보면 약 70 으로 주변에 비해 큰 값을 가지고 있는 것을 알 수 있다. 따라서 X^* 위치에서 실제함수값이 분포할 것으로 예상되는 범위를 확률밀도함수(pdf)로 그릴 수 있다. 따라서 실제함수가 f_{\min} 보다 작을 확률은 초록색 영역의 면적이 되고 이를 수학적인 누적분포함수(cdf)로 계산할 수 있다. 이와 같이 모든 X 에 대하여 위에서 설명한 확률을 계산하여 그 확률이 제일 큰 지점을 차기 실험점으로 선택하게 된다. 이것이 EGO 방법의 핵심원리이다. 누적분포함수와 같이 차기 실험점을 선택하는데 이용되는 함수를 infill sampling criteria (ISC) 함수라 한다.

이와 같은 원리로 EGO 최적화는 Fig. 2 의 순서도처럼 초기 실험점(Design of Experiment; DOE)으로부터 크리깅 모델을 생성하고 차기 실험점을 탐색하는 과정을 반복하여 전역 최적해를 효율적으로 탐색하게 된다.

2.2 Expected Improvement (EI)

EGO 방법에서 차기 실험점을 선택하기 위한 ISC 함수 중 대표적인 함수가 EI 함수이다[4]. 식 (2)와 같이 정의된 개선 함수(improvement function)의 기댓값(expected value)을 통계학적으로 계산하면 식(3)과 같은 EI 함수를 구할 수 있다. 이 EI 값이 최대가 되는 지점이 바로 차기 실험점이 된다.

$$I = \max \{0, (f_{\min} - Y(\mathbf{x}))\} \quad (2)$$

$$\max EI = \begin{cases} (f_{\min} - \hat{y})\Phi(z) + \hat{s}\phi(z) & \text{if } \hat{s} > 0 \\ 0 & \text{if } \hat{s} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

여기서 $z = (f_{\min} - \hat{y})/\hat{s}$ 이다.

EI의 첫째항이 큰 값을 가지게 되면 EGO 방법은 국소탐색(exploitation)을 하게 되고 두 번째항이 큰 값을 가지게 되면 전역탐색(exploration)을 하게 된다. EGO 최적화가 진행됨에 따라 EI값은 점점 '0'으로 수렴된다.

2.3 Generalized Expected Improvement (GEI)

EI 함수를 일반화한 형태인 GEI 함수가 있다[4]. GEI는 전역해 근방의 국소탐색보다 전역탐색(exploration)에 더 비중을 둔 ISC 함수이다. 크리깅 모델이 불확실할 때 GEI를 사용하면 해탐색 성능을 향상시킬 수 있다. 식 (5)의 GEI 함수에서 $g=1$ 이면 EI 함수와 같게 된다. 본 논문에서는 $g=2$ 를 사용하였다.

$$I^g = \max \{0, (f_{\min} - Y(\mathbf{x}))^g\} \quad (4)$$

$$\max E(I^g) = \hat{s}^g \sum_{k=0}^g (-1)^k \left(\frac{g!}{k!(g-k)!} \right) z^{g-k} T_k \quad (5)$$

여기서 $T_k = -\phi(z)z^{k-1} + (k-1)T_{k-2}$, $T_0 = \Phi(z)$, $T_1 = -\phi(z)$ 이다.

2.4 Watson & Barnes 2 (WB2)

본 논문에서 사용한 또 다른 ISC 함수로써 WB2 함수가 있다[5,17]. WB2는 식 (6)과 같이 크리깅 함수(\hat{y})와 EI 함수를 더한 형태로 이루어져 있다. 크리깅 함수에 '-1'을 곱하여 최대화 문제로 전환시켰다. 이 WB2 함수값이 최대가 되는 지점이 차기 실험점이 된다. WB2는 크리깅 함수를 내포하고 있기 때문에 EGO 최적화가 진행 되어도 WB2는 '0'으로 감소되지 않고, 중국에는 크리깅 모델만 남게된다. 따라서 WB2는 국소탐색(exploitation) 성능이 우수한 특징을 보인다.

$$\max WB_2 = \begin{cases} -\hat{y} + (f_{\min} - \hat{y})\Phi(z) + \hat{s}\phi(z) & \text{if } \hat{s} > 0 \\ 0 & \text{if } \hat{s} = 0 \end{cases} \quad (6)$$

2.5 Expected Feasibility (EF)

ISC 함수는 아니지만 EI 함수를 응용한 EF 함수가 있다[7]. 이는 식 (7)과 같은 등호구속조건(equality constraint)을 만족하는 설계영역을 찾기 위한 차기 실험점을 선택할 때 사용된다. EF 함수는 공차 ϵ 를 고려하여 식 (8)과 같이 정의되고 적분식

을 계산하면 식 (9)와 같이 전개할 수 있다. 식 (9)가 최대값을 갖는 지점을 선택하면 등호구속조건을 만족할 기댓값이 최대인 점이란 의미이다.

$$g(x) = z_0 \tag{7}$$

$$EF[\hat{g}(x)] = \int_{z_0-\epsilon}^{z_0+\epsilon} [\epsilon - |z_0 - g|] f_{\hat{g}} dg \tag{8}$$

$$EF[\hat{g}(x)] = (\hat{g} - z_0) \left[2\Phi\left(\frac{z_0 - \hat{g}}{\hat{s}}\right) - \Phi\left(\frac{z_0^+ - \hat{g}}{\hat{s}}\right) - \Phi\left(\frac{z_0^- - \hat{g}}{\hat{s}}\right) \right] - s \left[2\phi\left(\frac{z_0 - \hat{g}}{\hat{s}}\right) - \phi\left(\frac{z_0^+ - \hat{g}}{\hat{s}}\right) - \phi\left(\frac{z_0^- - \hat{g}}{\hat{s}}\right) \right] + \epsilon \left[\Phi\left(\frac{z_0^+ - \hat{g}}{\hat{s}}\right) - \Phi\left(\frac{z_0^- - \hat{g}}{\hat{s}}\right) \right] \tag{9}$$

여기서 $f_{\hat{g}}$ 는 g 의 확률밀도함수를 의미하고, $z_0^+ = z_0 + \epsilon$, $z_0^- = z_0 - \epsilon$ 이다. 통상 ϵ 는 구속함수 크리깅 모델 MSE의 제곱근의 두 배($\epsilon = 2\hat{s}$)를 사용한다.

3. 구속조건을 고려한 EGO 방법

구속조건을 해결하는 여러 constrained EGO 방법 중 본 논문에서 적용한 방법은 다음과 같다. 구속 최적화 문제가 식 (10) 처럼 목적함수 $f(x)$ 와 구속함수 $g(x)$ 로 주어져 있을 때 EGO 개념을 적용하기 위하여 목적함수를 EI 함수로 전환시키고 구속함수도 크리깅모델로 근사시킨다. 따라서 식 (11)과 같이 새롭게 정의된 구속 최적화 정식을 ALM 방법을 이용하여 식(12)의 불구속문제로 전환하게 된다. 식 (12)의 해를 전역 최적화 기법인 모의담금질법(Simulated Annealing)을 이용하여 구하게 된다.

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } g(x) \leq 0 \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} \max EI(x) \\ \text{s.t. } \hat{g}(x) \leq 0 \end{aligned} \tag{11}$$

$$\min L(x, \beta, r_g) = -EI(x) + \sum_{j=1}^m (\beta_j \psi_j + r_g \psi_j^2) \tag{12}$$

$$\text{with } \psi_j = \max \left[\hat{g}_j(x), -\frac{\beta_j}{2r_g} \right]$$

여기서 m 은 구속조건 수, β_j 는 Lagrange multiplier, r_g 는 penalty multiplier 이다[16]. 식 (11)을 간단히 EI&g로 표기하고, EI 대신 WB2를 사용한 것을 WB2&g로 표기한다.

검증 목적으로 EGO 방법을 이용하여 식 (13)과 같은 두

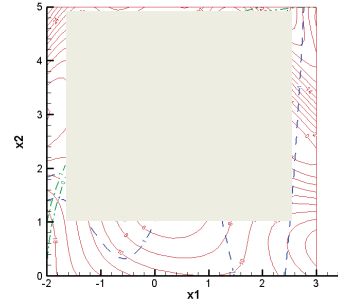


Fig. 3 EGO optimization flow chart

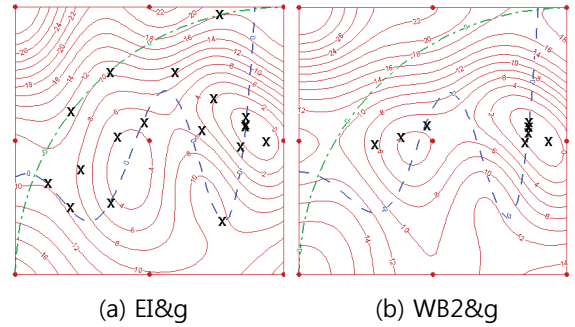


Fig. 4 EGO solution explorations of constrained test function

개의 구속함수로 이루어진 테스트 함수[8]의 전역해를 구해보았다.

Fig. 3은 유용영역(회색 부분)과 실제 전역해 ($f(2.29051, 2.76544) = -1.23149$)의 위치(검은 점)를 나타낸 것이다. Fig. 4는 초기실험점(붉은 점) 9개를 시작으로 EI&g 방법과 WB2&g 방법으로 탐색한 실험점을 나타낸 것이다. 18회의 샘플링만으로도 목적함수와 구속함수를 잘 표현하면서 전역해 근처를 집중적으로 탐색하는 것을 알 수 있었다.

$$\begin{aligned} \min f(x) &= 2 + 0.01(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \\ &\quad + 2(2 - x_2)^2 + 7\sin(0.5x_1)\sin(0.7x_1x_2) \tag{13} \\ \text{s.t. } g_1(x) &= \sin\left(\frac{5x_1}{2}\right) - \frac{((x_1 - 5)^2 - 2)(x_2 - 1)}{20} + 1 \leq 0 \\ g_2(x) &= (x_1 - 3)^2 + x_2^2 - 25 \leq 0 \end{aligned}$$

4. 구속조건이 있는 RAE2822 최적설계

구속 테스트 함수로 검증된 EGO 방법을 실제 CFD 문제에 적용해 본다.

4.1 최적화 문제 정의

2차원 RAE2822 익형의 항력 최소화 문제에 constrained

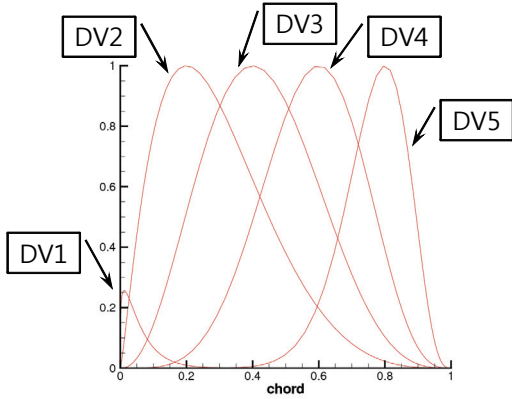


Fig. 5 Hicks-Henne bump functions

EGO 방법을 적용해 본다. 해석조건은 Mach 0.73, AOA 2.79°의 Euler 해석을 KFLOW[10]로 수행하였고, 익형의 윗면은 식 (14) 및 Fig. 5와 같은 5개의 Hicks-Henne bump 함수를 이용하여 표현하고 함수의 weighting factor 인 β_k 를 설계변수로 설정하였다. 설계변수 당 1.E-4 만큼 증분을 입력하여 목적함수의 절대값 변화가 제일 큰 설계변수를 평가하는 민감도 해석을 거쳐 5개의 설계변수 중 2개만 선택(DV2 & DV3)하여 전역최적해를 EGO 방법으로 탐색해 보았다. 설계변수의 범위는 $-0.01 \leq \beta_k \leq 0.01$ 이다.

$$y_u^{new} = y_u + \sum_{k=1}^5 \beta_k f_k(x) \quad (14)$$

$$f_k(x) = \begin{cases} x^{0.25}(1-x)e^{-20x} & k = 1 \\ \sin^3(\pi x^{\ln(0.5)/\ln(x_k)}) & k = 2,3,4,5 \end{cases} \quad (15)$$

최적화 정식은 아래 식 (16,17)과 같이 항력계수를 목적함수로 하고, 양력계수를 초기 양력계수 보다 크게 하는 구속조건을 갖는 문제로 정식화 하였다.

$$\min C_d \quad (16)$$

$$s.t. g = 1 - \frac{C_l}{C_{l0}} \leq 0 \quad (17)$$

여기서 $C_{l0} = 0.86$ 이다.

설계공간(DV2 & DV3)을 등간격 9x9로 나누어 총 81회의 CFD 해석을 통하여 설계공간(design space)과 전역해(붉은 삼각형)를 Fig. 6에 그려 보았다. 전역해는 기울기 기반 상용 최적설계 프로그램인 DOT[13]를 통하여 계산된 값을 표시하였다. 항력계수인 목적함수 보다 양력계수로 구성된 구속함수의

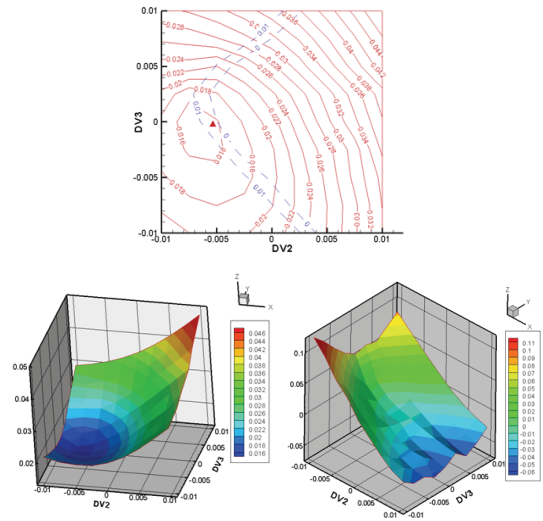


Fig. 6 Design space by 9x9 CFD analyses(f:objective function, g:constraint) and true global optimum(red triangle)

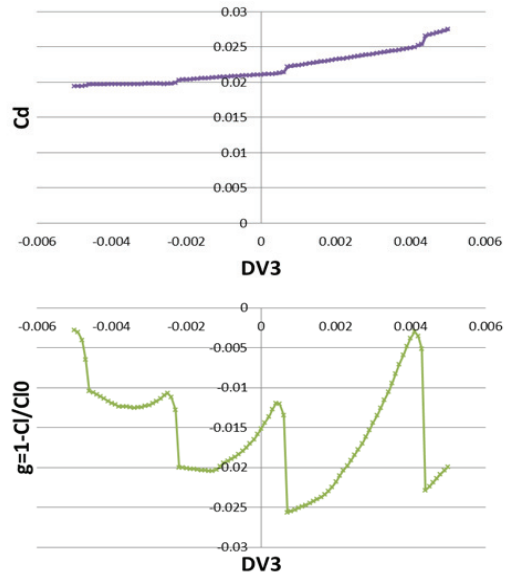


Fig. 7 Changes of drag coefficient and constraint according to the design variable DV3

기울기 변화가 심하여 국소해(local minimum)에 빠질 우려가 있다.

4.2 Noisy 경향 파악 및 Constrained EGO 방법 문제점

좀 더 자세한 분석을 위하여 $-0.005 \leq DV3 \leq 0.005$ 를 100 등분하여 해석한 결과를 Fig. 7에 나타내었다. 항력계수와

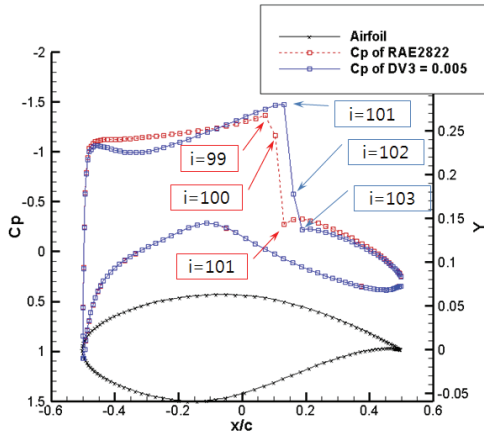


Fig. 8 Shock movement of RAE2822 by the upper surface deformation

구속함수 그래프가 동일 지점에서 급격하게 변하는 양상을 보이고 있는데 이는 설계변수의 변화에 따라 익형 윗면에 발생된 충격파가 점차 이동하기 때문이다. Fig. 8과 같은 충격파가 점점 이동하다 어느 순간 충격파를 표현한 격자가 i=99, 100, 101에서 i=101, 102, 103으로 옮겨갈 때 공력계수의 noisy 성분이 발생한다. 특히 유동흐름에 나란한 항력계수보다 수직인 양력계수가 더 큰 영향을 받게된다.

이런 noisy 한 특성을 가지고 있는 RAE2822 구속문제에 대하여 constrained EGO 방법인 EI&g 방법과 WB2&g 방법으로 전역해를 탐색해 보았다. 초기 실험점은 13개(corner 4개, LHD 9개)로 하였고, 종료조건은 Table 1의 예와 같이 세 가지로 하였다. 첫째 Relative EI 값이 0.0005 보다 작은 경우가 ‘설계변수 수 + 1회’ 만큼 발생하면 EGO 최적화가 종료된다 [18]. 두 번째 f_{min} 주위(설계공간의 1%)에 한 개의 차기 실

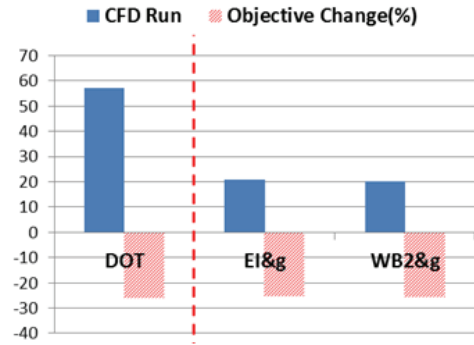


Fig. 9 Comparisons of CFD run and objective function change

험점이 더 샘플링 되면 종료한다. 이 조건은 국소탐색 성능이 우수한 WB2 ISC를 위한 것이다. 마지막으로 EGO 알고리즘이 동일점을 샘플링하면 더 이상 전역해를 찾을 수 없다고 판단하여 EGO 최적화를 종료한다. 또한 EGO 설계의 효율성을 비교하기 위한 DOT는 modified feasible direction 방법[9]으로 해를 탐색하였고 수렴조건과 위반공차는 Table 1의 a)에 기술하였다.

식(19)에서 $p=2$ 를 사용하는 Gauss 상관함수인 interpolation($p=2$) 크리깅 모델로 EGO 전역해를 구해 보았다. 그로 인한 결과를 DOT와 비교하여 Fig. 9에 나타내었다. DOT는 총 57회의 CFD 해석을 통하여 최적해를 찾았지만 EGO 방법을 이용한 EI&g($p=2$)와 WB2&g($p=2$)는 각각 21회, 20회의 CFD 계산 결과만으로 DOT가 달성한 목적함수 감소율(-25.97%)에 준하는 감소율을 각각 -25.26%, -25.69% 달성하였다. 또한 탐색된 설계변수로 RAE2822 표면의 압력계수를 그려보면 Fig.10과 같이 DOT 결과와 거의 일치함을 알 수 있다.

하지만 탐색된 실험점과 목적함수/구속함수의 크리깅 모델

Table 1 Results summary of EGO three-step search methods for the constrained RAE2822 optimization

		DOT	EF+EI+EI&g	EF+EI+WB2&g	EF+GEI+WB2&g	EF+GEI+EI&g
Stop Criteria	REI<0.0005 ^{b)}	a)				v
	One Sample within Tolerance ^{c)}		v	v	v	
	Search for the Same Sample					
No. of Initial DOE		57	13			
No. of Infill Sample			11	11	14	15
No. of Total Sample			24	24	27	28
Initial Objective		2.10640E-2				
Designed Objective		1.55930E-2	1.60560E-2	1.60560E-2	1.57600E-2	1.56500E-2
Change(%)		-25.97	-23.78	-23.78	-25.18	-25.70
Constraints $g(x)$ ^{e)}		9.97691E-4	1.04651E-4	1.36047E-4	4.10465E-4	7.56977E-4
Design Variables	DV2	-5.34488E-3	-4.17985E-3	-4.17711E-3	-4.81828E-3	-5.26192E-3
	DV3	-2.66506E-4	-1.50395E-3	-1.50798E-3	-9.89150E-4	-1.78514E-4

a) DOT Convergence : Absolute change of objective = 2.1064E-6, Relative change of objective = 1.0E-3

b) Relative EI : $\max EI / \text{abs}(Y_{\min} - Y_{\max}) < 0.0005$ and meet this criterion (no. of design variable+1) times

c) One sample is located within 1% design space of the current best optimum

e) Violation tolerance = 1.0E-3

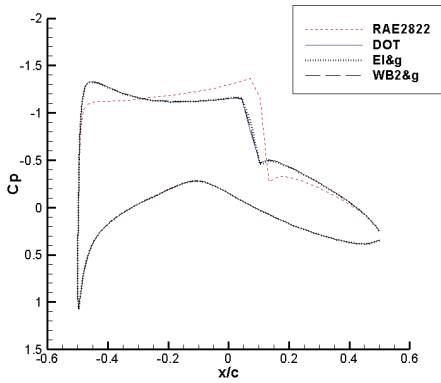


Fig. 10 Pressure coefficient comparison between the constrained EGO methods using interpolation(p=2) kriging model and DOT result

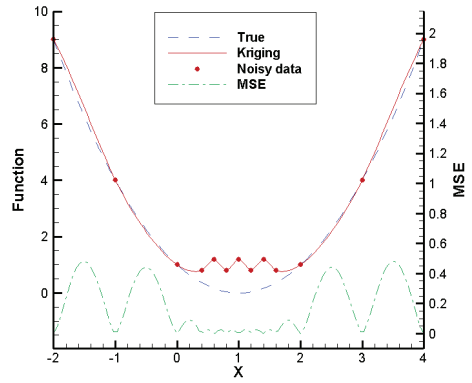


Fig. 12 Interpolation(p=free) kriging model for the arbitrary noisy data

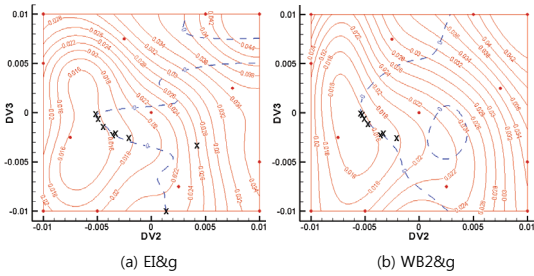


Fig. 11 Solution explorations of constrained EGO methods using interpolation(p=2) kriging model (red dot : initial DOE, X : infill sample, solid line : objective, dotted line : constraints)

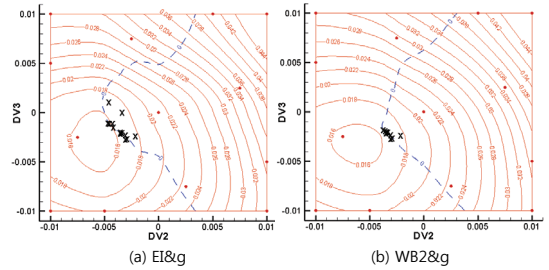


Fig. 13 Solution explorations of constrained EGO methods using interpolation(p=free) kriging model (red dot : initial DOE, X : infill sample, solid line : objective, dotted line : constraints)

을 그려보면 Fig. 11처럼 실제 설계공간과 많이 왜곡된 크리깅 모델이 생성됨을 확인할 수 있다. 이는 noisy 한 CFD 결과를 그대로 사용하여 Gauss 상관함수로 크리깅 모델을 생성하였기 때문이다. 따라서 EGO 방법에 의하여 전역해를 탐색하였다기 보다 무작위선택(random sampling)에 의해 해가 탐색되었다고 말할 수 있다.

4.3 Interpolation(p=free) 크리깅 모델 도입

이런 noisy 한 CFD 데이터로 인한 크리깅 모델의 왜곡을 방지하고자 interpolation(p=free) 크리깅 모델을 도입하였다. 즉 식(19)의 상관계수 θ 뿐만 아니라 상관함수의 지수 p를 미지수로 놓고 최대우도추정법(MLE)으로 변수값을 추정하여 생성한 크리깅 모델이다. 검증을 위하여 식 (18)과 같은 한 개의

Table 2 Arbitrary noisy data

x	-2.0	-1.0	0.0	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	2.0	3.0	4.0
y	9.0	4.0	1.0	0.8	1.2	0.8	1.2	0.8	1.2	0.8	1.0	4.0	9.0

미지수(x)로 이루어진 함수에 Table 2과 같이 임의로 만든 noisy 데이터를 삽입하여 크리깅 모델을 생성하였다.

$$y = (x - 1)^2 \tag{18}$$

$$R(\theta, \mathbf{s}^{(i)}, \mathbf{s}^{(j)}) = \prod_{k=1}^{ndv} \exp(-\theta_k |s_k^{(i)} - s_k^{(j)}|^p) \tag{19}$$

여기서 R은 상관함수, θ 는 상관계수, s는 실험점 좌표, ndv는 설계변수 수를 의미한다.

최대우도추정법으로 변수값을 추정하여 p=1.6884, $\theta=0.2989$ 을 가지는 크리깅 모델이 생성되었고 Fig. 12에 나타난 것처럼 noisy 한 데이터를 전부 지나면서도 실제함수의 개형은 유지되고 있는 것을 볼 수 있다. MSE는 약 0.4 정도의 작은 값을 보이고 있다. 실험점에서 MSE가 '0'인 특성은 유지되고 있다. 따라서 interpolation(p=free) 크리깅 모델을 사용하여 EGO 최적화 과정 중 상관함수의 지수(p)도 최대우도추정법으로 추정하면서 EGO 최적화를 수행하였다. 그 결과 Fig. 13과 같이 목적함수와 구속함수의 왜곡이 많이 감소되고, 해 탐색

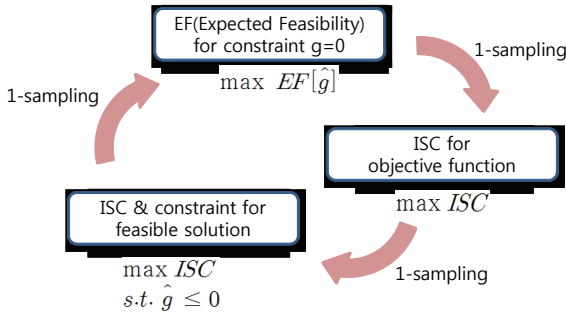


Fig. 14 Diagram of three-step search method

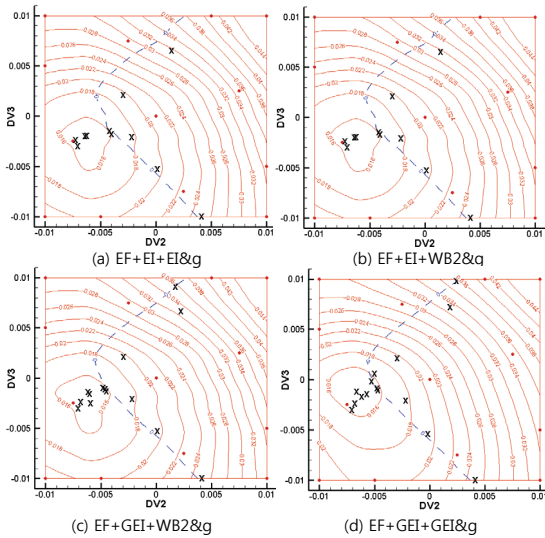


Fig. 15 Results of three-step search method with diverse combinations

도 전역해 주변에 집중되어 있음을 알 수 있다.

하지만 추가적인 문제점이 발견되었다. Fig. 13을 자세히 살펴보면 목적함수와 구속함수의 개형이 Fig. 6의 실제함수와 차이남을 알 수 있고, 해 탐색도 협소한 유용영역에만 국한되어(stall) 목적함수와 구속함수의 갱신에 전혀 기여를 하지 못한 것을 알 수 있다. 따라서 해의 정확도도 감소하였다.

4.4 Three-step 탐색법

이런 문제를 해결하기 위하여 본 논문에서는 ‘Three-step’ 탐색법을 제안한다. 이 방법은 Fig. 14 도식과 같이 먼저 구속 조건의 경계를 잘 표현하기 위하여 최대 EF 함수를 가지는 차기 실험점 한 개를 선택한다. 이를 포함하여 크리깅 모델을 갱신한 뒤, 이번에는 불구속 문제의 목적함수의 최소해를 찾기 위하여 ISC 함수(EI 또는 GEI)를 이용하여 차기 실험점 한 개를 선택한다. 이를 포함하여 다시 크리깅 모델을 갱신한

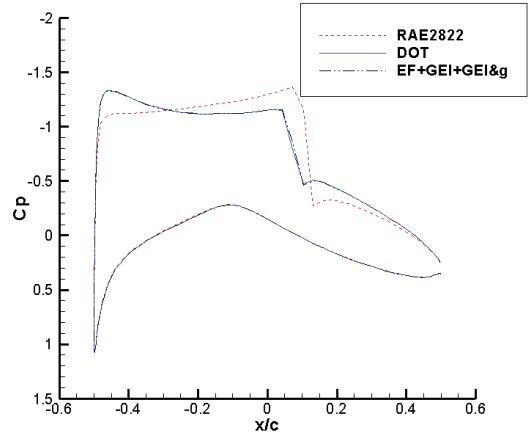


Fig. 16 Pressure coefficient comparison between three-step search EGO methods((d)EF+GEI+GEI&g) using interpolation(p=free) kriging model and DOT result

뒤, 마지막으로 구속함수를 고려한 유용영역 측면에서 차기 실험점을 기존 constrained EGO 방법으로 선택한다. 이와 같은 three-step 탐색을 종료조건이 만족할 때까지 사이클릭(cyclic) 하게 수행하게 된다.

이의 결과를 Fig. 15에 나타내었다. 목적함수와 구속조건의 크리깅 함수가 실제함수와 유사하면서도 전역해 근처를 집중해서 탐색하는 것을 알 수 있다. Table 1에 나타낸 것처럼 DOT가 필요로 한 CFD 계산횟수의 절반정도의 계산횟수로도 DOT가 달성한 목적함수 감소율을 달성한 것을 알 수 있다. 특히 이 중 (d)EF+GEI+GEI&g 조합으로 얻은 크리깅 모델이 제일 실제함수와 근사하였고, 목적함수 감소율 또한 -25.7%로 기울기 기반 최적설계인 DOT 결과와 거의 일치된 결과를 보였다. 이는 크리깅 모델이 불확실할 때 EI 보다 전역탐색(exploration) 성능이 강화된 GEI를 이용하여 보다 더 넓은 지역을 탐색하였기 때문이다.

Three-step 탐색법((d)EF+GEI+GEI&g)의 정확도를 물리량 측면에서 살펴보기 위하여 Fig.16과 같이 익형 주위의 압력 계수를 비교해 본 결과, 기울기 기반 최적설계인 DOT 결과와 거의 일치된 압력계수 선도를 볼 수 있다. 또한 Fig.17과 같이 three-step 탐색법으로 설계된 익형은 앞전 곡률반경이 작아져 앞전에서 압력강하(pressure peak)를 초기 형상보다 더 크게 만들어 주었지만 앞전을 지나 시위의 50% 까지 곡률반경이 커짐으로써 유속이 느려지고 압력회복이 천천히 이루어져 충격파를 약화시킬 수 있었다.

5. 결론

구속조건을 고려한 EGO 방법을 부드러운 테스트 함수에

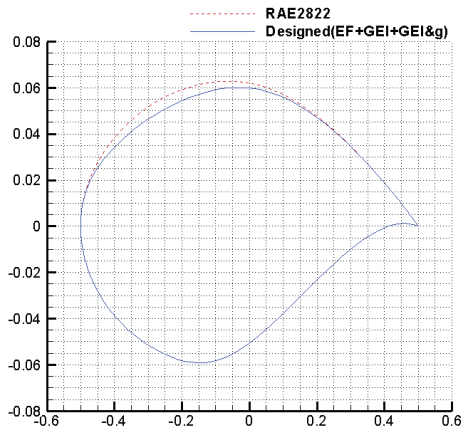


Fig. 17 Comparison between RAE2822 airfoil and the designed airfoil by three-step search method((d)EF+GEI+GEI&g)

적용했을 경우 크리깅 모델이 실제함수를 잘 묘사하면서 전역해를 정확히 탐색하였지만 noisy 한 CFD 데이터에 constrained EGO 방법(EI&g, WB2&g)을 적용하면 크리깅 모델의 왜곡을 초래하게 된다. 크리깅 모델의 왜곡을 방지하기 위하여 interpolation(p=free) 크리깅 모델을 도입하였지만 이로 인하여 EGO 해 탐색이 협소한 유용영역에 국한되어 해의 정확도가 감소되는 부작용이 발생되었다. 이에 three-step 탐색법을 제안하여 크리깅 모델의 왜곡을 방지하면서도 전역해의 정확도도 향상된 결과를 얻을 수 있었다.

참고문헌

- [1] 2009, Ball, D., "Recent Applications of CFD to the Design of Boeing Commercial Transports," *HPC User Forum*, Roanoke, VA.
- [2] 2011, Bae, H.G. and Kwon, J.H., "Airfoil Shape Design Using EGO Methods," *2011 KSAS spring conference*, pp.754-761.
- [3] 1998, Jones, D.R., Schonlau, M. and Welch, W.J., "Efficient Global Optimization of Expensive Black-Box Functions," *Journal of Global Optimization*, Vol.13, No.4, pp.445-492.
- [4] 1997, Schonlau, M., "Computer Experiments and Global Optimization," *A thesis for Doctor of Philosophy in Statistics*, Waterloo, Ontario, Canada.
- [5] 2000, Sasena, M.J., Papalambros, P.Y. and Goovaerts, P., "Metamodeling Sampling Criteria in a Global Optimization Framework," *8th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization*, AIAA 2000-4921.
- [6] 2001, Sasena, M.J., Papalambros, P.Y. and Goovaerts, P., "The Use of Surrogate Modeling Algorithms to Exploit Disparities in Function Computation Time within Simulation-Based Optimization," In the Fourth World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization.
- [7] 2009, Bichon, B.J., Mahadevan, S. and Eldred, M.S., "Reliability-Based Design Optimization using Efficient Global Reliability Analysis," *50th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference*, California.
- [8] 2010, Ahn, J., Lee, H., Lee, S., "Efficient Adaptive Global Optimization for Constrained Problems," *J. of KSAS*, Vol. 38, No.6, pp.557-563.
- [9] 1983, Vanderplaats, G.N., "A robust Feasible Directions algorithm for design synthesis," *AIAA 83-0938*, 24th Structures, Structural Dynamics and Materials Conference, Lake Tahoe, NV.
- [10] 2001, Sung, C.H., Park, S.H. and Kwon, J.H., "Multigrid Diagonalized ADI Method for Compressible Flows," *AIAA 2001-2556*.
- [11] 2001, Jones, D.R., "A Taxonomy of Global Optimization Methods Based on Response Surfaces," *Journal of Global Optimization*, Vol.21, pp.345-383.
- [12] 2007, Lee, T.H. and Jung, J.J., "Chapter 16. Kriging Metamodel Based Optimization," *Optimization of Structural and Mechanical Systems*, Jasbir S Arora, World Scientific.
- [13] 1999, DOT(Design Optimization Tools) User Manual Version 5.0, Vanderplaats Research & Development, Inc.
- [14] 1989, Sacks, J., Welch, W.J., Mitchell, T.J. and Wynn, H.P., "Design and Analysis of Computer Experiments," *Statistical Science*, Vol.4, No.4, pp.409-435.
- [15] 1993, Jones, D.R., Perttunen, C.D. and Stuckman, B.E., "Lipschitzian optimization without the lipschitz constant," *Journal of Optimization Theory and Applications*, Vol.79, No.1, pp.157-181.
- [16] 2009, Venkataraman, P., *Applied Optimization With Matlab Programming*, 2nd Edition, John Wiley & Sons, pp.349-353.
- [17] 1995, Watson, A.G. and Barnes, R.J., "Infill sampling criteria to locate extremes," *Mathematical Geology*, Vol.27, No.5, pp.589-608.
- [18] 2006, Huang, D., Allen, T.T., Notz, W.I. and Zeng, N., "Global Optimization of Stochastic Black-Box Systems via Sequential Kriging Meta-Models," *Journal of Global Optimization*, Vol.34, Issue3, pp.441-466.