

유전자 기법과 시뮬레이티드 어닐링을 이용한 최적화

박 정 선* · 류 미 란**

Optimization Using Genetic Algorithms and Simulated Annealing

Jungsun Park, Miran Ryu

Key Words: Genetic algorithm(유전자 알고리즘), Simulated annealing(시뮬레이티드 어닐링)

Abstract

Genetic algorithm is modelled on natural evolution and simulated annealing is based on the simulation of thermal annealing. Both genetic algorithm and simulated annealing are stochastic method. So they can find global optimum values. For compare efficiency of SA and GA's, some function value was maximized. In the result, that was a little better than GA's.

1. 서 론

최적설계 기법은 주어진 제한조건을 만족하면서 목적함수가 최소가 되도록 설계변수를 선택하는 수학적인 기술이다. 최적설계는 대부분의 경우 많은 시간이 소요되므로 문제해결에 어려움이 있었는데, 이 같은 문제는 점차 컴퓨터 기술의 발전으로 인해서 해결될 수 있었다. 그러나 점차 복잡해져 가는 대규모 조합의 최적화 문제와 구속 조건이 많은 공학 문제들을 해결하는 데에는 전통적 최적화 방법이 한계를 보였다. 전통적 최적화 방법으로는 목적함수가 복잡한 경우에 수렴하는데 어려움이 있고, 또한 여러 개의 국부적(local) 최적해가 존재할 때는 구해낸 최적해가 전역적(global) 최적해인지 신뢰하기 힘들다.

그렇기에 이러한 경우의 문제들을 극복하기 위해서 여러 가지의 방법이 등장하였다. 특히

1960년대부터 다양한 최적화 문제를 해결하기 위하여 자연현상들을 흉내낸 알고리즘들이 개발되어 왔다. 이러한 알고리즘으로는 유전자 알고리즘(genetic algorithm), 진화 전략(evolution strategies), 시뮬레이티드 어닐링(simulated annealing), 타부탐색(tabu search)등이 있다. 이러한 알고리즘 중 우리는 유전자 알고리즘과 시뮬레이티드 어닐링을 사용하여 최적화하는 방법에 대해 연구하였다.

2. 유전자 알고리즘

2.1 유전자 알고리즘의 개요

Holland(1962)에 의해 처음 제안된 유전자 알고리즘은 생물 진화의 원리와 유전학에 바탕을 두고 있다. 우수한 형질을 가진 개체는 자연계에 잘 적응하여 살아 남고 그렇지 못한 개체는 도태되어 결국 우수한 자손들을 생성한다는 자연계의 법칙을 응용한 알고리즘이다.

*한국항공대학교 항공우주공학과

**한국항공대학교 대학원

2.2 유전 연산자

유전자 알고리즘은 고정된 길이의 이진 스트링을 염색체로 사용하여, 선택(selection), 교배(crossover), 변이(mutation)라는 세 가지 과정을 수행함으로써 최적화를 하는 알고리즘이다. 세 가지 요소는 유전자 알고리즘에서 가장 기본이 되는 연산자(operator)들이다.

2.2.1 선택(selection)

환경에 잘 적응한 개체들은 살아남고 적응하지 못한 개체들은 도태한다는 자연 선택(natural selection)현상을 모델링한 연산자이다.

선택은 적합도 함수에 의해 이루어지는데, 적합도 함수는 더 높은 개체들이 다음세대로 선택이 되도록 한다. 선택의 방법에도 여러 가지 모델들이 도입되었다. 일반적으로 널리 사용되는 선택방법으로는 엘리트 모델(elitism), 잔여 확률 표본 선택법, 균등 표본 선택, 경쟁(tournament) 선택, 룰렛 선택법(roulette selection)등이 있다.

2.2.2 교배(crossover)

선택된 염색체들의 스트링 일부를 서로 교환함으로써 새로운 개체를 형성하는 과정이다. 이 과정을 통해서 염색체들은 높은 적합도를 가질 수 있는 확률적 기회를 가지며, 수렴 속도를 가속화시켜주는 역할을 하게 된다. 교배에서도 수렴 속도를 제어하기 위한 여러 가지 방법들이 제시되었다. 단순 교배(simple crossover), 복수점 교배(multi-point crossover), 균일 교배(uniform crossover), 부분일치교배, 순서교배, 주기교배 등이 있다.

2.2.3 변이(mutation)

선택과 교배 과정을 통해 얻을 수 없는 정보를 획득하는 과정이다. 적당한 확률(p_m)에서 이 변이 과정은 전역적인 탐색 효과를 나타내므로, 높은 적합도로의 수렴성을 매우 높게 해준다. 교배와 변이와 같은 연산자들은 유전자 알고리즘에서 집단의 다양성을 높이는 역할을 하게된다.

2.2.4 적합도 함수(fitness function)

각 개체들의 적합도를 평가하는 함수이다. 최적 문제의 성격에 따라 적합도 함수 자체가 목적 함수(objective function)가 될 수도 있으나 일반적으로는 일치하지 않는다. 문제들에 따라 개체들의 적합도로부터 요구되어지는 함수 값의 범위가 다르기 때문에 보통 정해진 구간 사이에서 함수값을 갖도록 표준화시킨다. 유전자 알고리즘에서 선택 기준으로 사용하는 표준화된 함수를 적합도 함수(fitness function)라고 한다.

3. 시뮬레이티드 어닐링

3.1 Metropolis Algorithm

시뮬레이티드 어닐링은 이름에서도 알 수 있듯이 물리적인 풀림(annealing)개념을 도입한 것이다.

풀림은 고체를 녹는 점 이상으로 가열한 후에 다시 서서히 조절하여 냉각시켜 매우 낮은 내부 에너지 상태의 결정 구조를 갖게 하는 방법이다.

풀림 과정에서 시스템의 에너지 변화는 다음과 같다. 열을 가해서 에너지를 끌어올린 다음, 에너지 변화 결과를 계산하는데, 에너지의 차($E_j - E_i$)가 0보다 작거나 같으면 상태 j 는 현재의 상태로 받아들여지고, 에너지의 차가 0보다 크면, 그 시스템은 식(1)에 의하여 새로운 상태로 전환될 수도 있고 그렇지 않을 수도 있다. 이 과정은 시스템이 안정된 상태로 진입될 때까지 지속적으로 매 온도 상태마다 행해진다.

$$\exp\left(\frac{E_i - E_j}{k_B T}\right) \quad (1)$$

여기서, k_B 는 볼츠만 상수이고, T 는 온도, E_i 는 현재상태의 에너지, E_j 는 다음상태의 에너지이다. 이것을 metropolis criterion이라 하고, 알고리즘을 metropolis algorithm이라 한다.

열적 평형은 볼츠만 분포(Boltzmann distribution)으로 특성지어진다.

$$P_T\{X=i\} = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right) \quad (2)$$

여기서, $Z(T) = \sum_i \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right)$

이 알고리즘에서 물리적인 변수요인들을 최적화 문제의 요소로 전환하면 Table 1과 같다.

Table 1 Transformation of physical and optimal terminology

Thermodynamic Simulation	Optimization
System States	Feasible Solutions
Energy	objective function
Change of State	Neighbouring Solution
Temperature	Control parameter

3.2 Simulated Annealing Algorithm

시뮬레이티드 어닐링은 국소적 최소해로부터의 천이(transition)가 가능한 목적함수를 무작위로 평가하여 최적해를 구하는데, 이때 함수는 앞에서 설명한 metropolis criterion에 의하여 평가된다.

여기서는 온도를 조절하는 패러미터 c 를 도입한다. 그러면 acceptance probability는 다음과 같다.

$$P_c\{\text{accept } j\} = \begin{cases} 1 & \text{if } f(j) \leq f(i) \\ \exp\left(\frac{f(i) - f(j)}{c}\right) & \text{if } f(j) > f(i) \end{cases} \quad (3)$$

목적함수를 구해가면서 최적해를 찾는 과정에

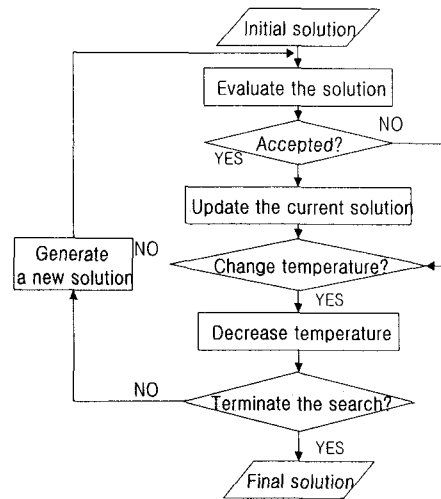


Fig. 1 Flowchart of a standard simulated annealing algorithm

있어서 시뮬레이티드 어닐링의 경우 목적함수 값이 향상되는 방향과, 퇴보하는 방향 모두가 탐색 경로에 포함이 되며 c (control parameter)값이 0에 가까울수록 가치 퇴보는 점점 적게 허용이 되며 c 값이 0이 되면 결국 가치 퇴보는 전혀 허용되지 않는다. 이것은 시뮬레이티드 어닐링이 국부적 탐색방법에서 자주 범하기 쉬운 국부적 최소화를 어떻게 벗어나는지를 보여준다. 가치 퇴보는 $\exp\left(\frac{f(i) - f(j)}{c}\right)$ 값과 $[0, 1]$ 사이의 난수를 비교하여 적용시킨다. 또한 매개변수 c 의 선택에 따라 수렴속도가 변하는 것을 알 수 있다.

비록 이 방법은 최적해를 구하기 위해서는 매우 많은 함수를 평가해야 되는 단점을 가지고 있으나, 나쁜 구속 조건(ill-conditioned)의 함수에서도 높은 정확성을 가지고 전역적 최적해를 구해낼 수 있다는 강한 장점을 지니고 있다.

이러한 시뮬레이티드 어닐링은 다음과 같은 몇 가지 특성을 나타낸다.

1) 함수나 구속 조건 평가에 있어 불연속적 성질을 도입하기 때문에, 수렴이나 천이 같은 특징들이 함수의 연속성에 영향을 받지 않는다.

2) 수렴은 feasible 영역의 convexity 상태에 영향을 받지 않는다.

3) 설계 변수가 반드시 양일 필요가 없다.

4. 제한 조건

유전자 알고리즘과 시뮬레이티드 어닐링은 기본적으로 제한 조건이 없는 문제를 최적화하도록 구성되어 있다. 그러므로 제한 조건이 있는 문제는 제한 조건이 없는 문제로 변환되어야 한다. 제한 조건이 없는 문제로의 변환은 벌점 함수(penalty function)의 개념을 도입하여 변환할 수 있다. 즉, 제한 조건의 위반 정도에 따라 벌점(penalty)을 부과하고, 이 벌점을 유사 목적 함수(pseudo-objective function)에 반영함으로써 제한 조건이 없는 문제로 변환하는 것이다.

$$F = f + \sum_{i=1}^m R_i \Phi(g_i(X)) \quad (4)$$

여기서

F : 유사목적함수(pseudo-objective function)

f : 목적함수(objective function)

R_i : 벌점 패러미터(penalty parameter)

Φ : 벌점 함수(penalty function)

$$\Phi(g) = \langle g \rangle^2$$

$$\langle g \rangle = \begin{cases} g & \text{if } g > 0 \\ 0 & \text{if } g \leq 0 \end{cases}$$

$g_i(X)$: 제한 조건(constraint condition)

m : 제한 조건 수

그런데, 유전자 알고리즘은 최대화 문제만을 다루기 때문에 최소화 문제에서는 목적함수를 최대화하는 다른 목적함수로 바꾸어 주어야 한다. 이것은 목적함수에 -를 붙임으로 해결할 수 있다.

$$\min F \Leftrightarrow \max -F \quad (5)$$

5. 예제 및 결과

5.1 함수의 최적화

본 연구에서는 복합재료 구조물을 최적화하기에 앞서 임의의 함수를 유전자 알고리즘과 시뮬레이티드 어닐링을 사용하여 최대화하였다.

Maximize

$$f(x_1, x_2) = 21.5 + x_1 \cdot \sin(4\pi x_1) + x_2 \cdot \sin(20\pi x_2) \quad (6)$$

Subject to

$$-3.0 \leq x_1 \leq 12.1 \quad (7)$$

$$4.1 \leq x_2 \leq 5.8 \quad (8)$$

유전자 알고리즘은 교배확률(p_c)은 0.25, 돌연변이 확률(p_m)은 0.01을 사용하여 100세대까지 최대화하였고, 시뮬레이티드 어닐링은 초기온도를 5.0으로 설정하여 최대화하였다.

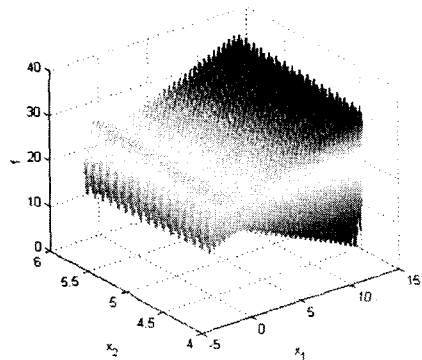


Fig. 2 Graph of the function f

함수를 최대화한 결과는 Fig. 3과 Fig. 4와 같다.

그림에서 보는 것처럼 유전자 알고리즘을 사용

하여 함수 최대화한 것은 45세대에서 38.3295로 수렴하였고, 시뮬레이티드 어닐링은 4번의 온도 변화후 38.650299의 해를 얻었다. 그렇지만 시뮬레이티드 어닐링은 한번의 온도변화를 하기 전에 많은 함수를 평가하게 되기 때문에 최적화 하는데 소요되는 시간은 유전자 알고리즘과 거의 같았다.

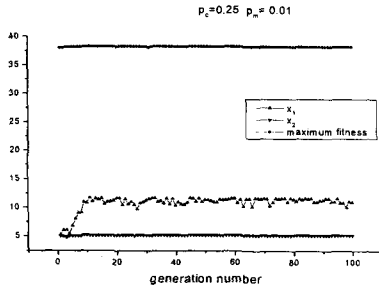


Fig. 3 Result of genetic algorithm

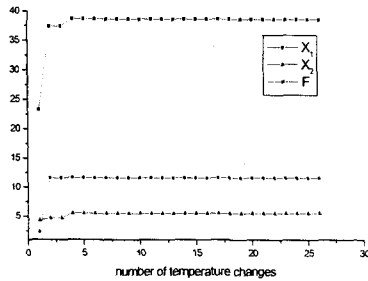


Fig. 4 Result of simulated annealing

5.2 복합재료 구조물의 최적화

다음 그림과 같은 조건의 복합재료 구조물을 최적화하였다. 하중은 $L = 500 \text{ mm}$, $W = 200 \text{ mm}$ 인 외팔 평판에 그림 1과 같이 오른쪽 끝단에 집중 하중 $P = 2000 \text{ N}$ 이 가해지는 경우를 고려하고, 적층 각도는 모두 0° 로 설정하였다.

Fig. 5에서 A_i 는 적층판의 면적, t_i 는 적층판의 두께를 나타낸다. 그리고 해석의 효율성을 위해서 대칭 조건으로 수치 예제의 절반만을 4개의 8절점 쉘 요소(8-node shell element)로 해석하였다. 요소 번호(1, 2, 3, 4)는 그림1에서와

같다. 목적 함수(F)는 복합재료 구조물의 부피를 최소화하도록 설정하였다. 그리고 제한 조건으로는 하중이 가해지는 절점에서의 처짐과 Tsai-Wu 파손기준을 사용하였다.

Minimize

$$F = 2 \sum_{i=1}^n A_i \cdot X_i \cdot t_i \quad (9)$$

Subject to

$$4 \leq X_i \leq 80 \quad (10)$$

$$C_1 = \frac{W}{W_{\max}} - 1 \leq 0 \quad (11)$$

$$C_2 = \sum_{i=1}^n TWF(i) - 1 \leq 0 \quad (12)$$

여기서 $A_i = 12,500 \text{ mm}^2$, $t_i = 0.125 \text{ mm}$, X_i = 요소 당 적층수, W 는 하중이 가해진 절점에서의 처짐, W_{\max} 는 하중이 가해진 절점에서의 최대 제한 처짐, $TWF(i)$ 는 Tsai-Wu 파손기준, n 은 요소 개수

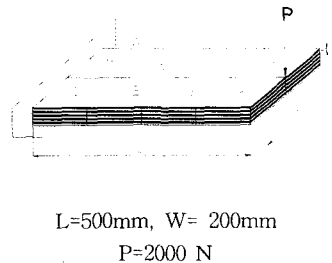


Fig. 5 Composite Structure

유전자 알고리즘은 교배확률 0.5, 돌연변이 확률 0.05를 사용하여 200 세대까지 실행하였고, 시뮬레이티드 어닐링은 초기온도를 500으로 설정하고 실행하였다. 그 결과 유전자 알고리즘은 89세대에서 수렴하였다. 유전자 알고리즘과 시뮬레

이티드 어닐링의 결과는 Table 2 에 나타내었다.

참고문헌

Table 2 Result of composite structure

	적층수				목적함수 부피(mm^3)
	1	2	3	4	
GA	28	25	20	14	271,875
SA	24	18	6	20	212,500

위의 결과에서 유전자 알고리즘의 목적함수가 시뮬레이티드 어닐링의 목적함수보다 큼을 알 수 있다. 그렇지만 시뮬레이티드 어닐링의 경우 유전자 알고리즘과는 다르게 적층수가 3번째 요소에서 갑자기 줄었다가, 4번째 요소에서 갑자기 많아짐을 보인다. 확인결과 시뮬레이티드 어닐링이 경계조건을 위반하는 경우가 발생하였다. 이러한 현상이 발생하는 것은 벌점 패러미터의 값을 적절하게 사용하지 못하였기 때문이다.

결론

본 연구에서는 유전자 알고리즘과 시뮬레이티드 어닐링을 사용하여 단순 함수와 복합재료 구조물을 최적화하여 보았다.

함수를 최적화한 결과는 유전자 알고리즘과 시뮬레이티드 어닐링 모두 최적화 값이 비슷함을 알 수 있다. 그러나 유전자 알고리즘은 45세대에서 값이 수렴하였고, 시뮬레이티드 어닐링은 4번의 온도 변화만에 수렴하였다. 그리고 최적값도 유전자 알고리즘에 비하여 약간 더 좋은 값을 나타낸다. 따라서 단순한 함수를 최적화하는데는 유전자 알고리즘보다는 시뮬레이티드 어닐링이 좋을 수 있다.

그렇지만 복합재료 구조물을 최적화 하여본 결과 단순히 보이는 결과는 유전자 알고리즘보다 시뮬레이티드 어닐링의 목적함수 값이 좋지만 경계조건을 위반하는 경우가 발생하였으므로 시뮬레이티드 어닐링이 최적화는 제대로 된 최적화가 아니다.

- (1) David E. Goldberg, 1989, *Genetic Algorithms in Search, Operation, and Machine Learning*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
- (2) Zbigniew Michalewicz, 1996, *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*, Springer-Verlag, Inc.
- (3) Emile Aarts, Jan Korst, 1989, *Simulated Annealing and Boltzmann Machines*, John Wiley & Sons, Inc.
- (4) Toda M., R. Kubo, and N. Sait, 1983, *Statistical Physics*, Springer-Verlag, Inc.
- (5) Kirkpatrick. s., Gelatt, and Vecchi, 1983, "Optimization by Simulated Annealing," *Science* 220, pp. 671-680.
- (6) Cerny. V., "Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: and efficient simulation algorithm," *Journal of Optimization Theory and Applications* 45, pp. 41-51.
- (7) D. T. Pham and D. Karaboga, 2000, *Intelligent Optimisation Techniques*, Springer-Verlag, Inc.