

유전 알고리즘을 이용한 고분자 반응의 최적 시간 제어

윤창열(학), 장근수(정)
지능 자동화 연구센터, 포항공과대학교 화학공학과

Time Optimal Control of Polymerization By Genetic Algorithm

Chang Yeol Yoon, Kun Soo Chang
Automation Research Center, Dept. of Chemical Engineering POSTECH

서론

회분식 반응기 중에서 고분자 반응의 모사 및 제어는 복잡한 동특성 및 심한 비선형성 그리고 상태변수, 출력 변수를 측정하기가 어렵기 때문에 해석을 하거나 제어하기가 어려운 화공 시스템으로 알려져 있다. 그 중에서 메틸 메타아크릴레이트의 고분자 반응은 매우 많이 연구되어 왔고 특히 원하는 무게 평균 분자량과 전환율을 만족시키면서 반응 시간을 최소화하는 개루프 최적제어문제가 주로 연구되었다[1]. 이러한 최적 제어문제를 다루기 위해서 지금까지는 Pontryagin의 Minimum principle이나 Bellman이 고안한 Dynamic Programming 등의 기법이 주로 사용되었다[5]. 그러나 Minimum Principle은 식이 복잡해지면 적용하기 어려운 단점이 있고 Dynamic Programming은 문제의 크기가 커지면 소위 "the Curse of Dimensionality"의 문제점을 극복하지 못한다[3].

이러한 단점을 뛰어넘어 보다 강인한 방법으로 새롭게 대두되고 있는 것이 유전 알고리즘(Genetic Algorithm)이다. 유전 알고리즘은 자연의 선택적 유전학에서 개념을 따온 탐색 알고리즘이다. 다윈의 적자생존원칙은 부적합한 특성의 인자를 퇴화시키고 이전 세대의 생존방법을 함유한 지식의 탐색과 더불어 무작위의 정보 변태가 유전 알고리즘에 우수하고 빠른 탐색방법을 제공한다. 유전 알고리즘은 일반적인 최적화나 탐색방법과 다음과 같은 면에서 크게 네 가지의 차이점이 있다[4]. 첫째, 유전 알고리즘은 인자 자체를 이용하여 탐색하지 않고 인자 집합의 코드를 이용하여 탐색한다. 둘째, 유전 알고리즘은 한 점만을 이용하는 것이 아니고 동시에 여러 점을 이용하여 탐색한다. 셋째, 유전 알고리즘은 목적함수의 미분이나 그 외의 수학적 보조 지식을 필요로 하지 않고 단지 목적함수의 값만을 이용한다. 넷째, 유전 알고리즘은 인과적인(deterministic) 방법이 아니고 확률적인 전이를 이용한 방법이다. 이러한 특징을 바탕으로 한 유전 알고리즘은 매우 강인하고 효과적이며 최근에 정적(static) 최적화 문제, 예를 들어 스케줄링, 교통 문제(transportation problem) 등에 성공적으로 적용한 사례가 발표되고 있다. 반면 최적시간제어 문제로의 적용은 연구가 매우 드물었다[3].

본 연구에서는 1987년 Ponnuswamy[1] 등이 Minimum Principle을 이용하여 풀고 실험으로 확인한 메틸 메타아크릴레이트 고분자 반응의 최적 제어 문제를 유전 알고리즘을 이용하여 풀 수 있는 기법을 개발함으로써 유전 알고리즘의 강인성과 효율성을 보여주고 최적시간제어에의 적용 가능성을 보여줄 것이다.

이론

유전 알고리즘은 여러 개의 인자열을 이용하여 적절한 확률적인 전이방법으로 바라는 목적함수에 보다 적합한 인자를 선별하고 번식시켜 감으로써 보다 넓은 범위에서 최적화를 효과적이고 빠르게 수행한다. 이러한 동시성은 유전 알고리즘의 강인성을 보장해 주는 요인이기도 하다. 유전 알고리즘은 미분 값과 같은 보조지식이 전혀 필요하지 않다. 단지 보다 낮은 값을 효과적으로 찾아가기 위해서 각개 인자 열들의 목적 함수 값만을 필요로 한다. 유전 알고리즘은 탐색공간을 찾아가는 안내자 역할을 하는 도구으로써 무작위 선택이라는 확률적인 방법을 이용한다. 이것은 소위 단순한 무작위 탐색방법과는 다른 것으로 목적 함수의 개선을 위한 무작위 선택이다.

유전 알고리즘의 구조는 매우 간단하여 단지 인자코드를 복제하고 부분적으로 교배하는 것으로써 놀라운 탐색방법을 제공한다. 다시 말하면 유전 알고리즘은 몇 줄의 개체로부터 시작하여 세대를 거처가면서 재생산(reproduction), 교배(crossover), 그리고 돌연변이(mutation)라는 과정들을 거쳐 보다 나은 개체를 찾아가는 과정이다. 재생산이란 구세대의 인자가 적합성(목적 함수값)에 따라 선택되어져 새로운 세대의 인자로 바뀌어 가는 과정을 말한다. 이 때 더욱 적합한 인자는 더 많은 복제를 다음세대에 남기게 된다. 이렇게 우성인자가 다음 세대에 더욱 많은 자기 복제를 남는 것은 유전 알고리즘의 적자 생존 원칙을 표현하는 것이다. 교배는 다음과 같은 세 가지 과정으로 이루어져 있다. 우선 새롭게 재생산된 인자들이 무작위로 짝지어진다. 그리고 모든 인자열의 짝에서 잘리게 될 지점을 무작위로 선정한다. 주어진 교배확률에 의해 짝지어진 인자열들은 서로 바뀌어 새로운 인자열들을 만든다. 비록 교배의 과정은 무작위로 이루어지지만 재생산과 함께 사용되면 우성인자들의 특성을 혼합하고 정보교환을 하는 효과적인 수단이 된다. 세 번째 연산자는 돌연변이이다. 돌연변이는 인자열의 한 지점을 무작위로 지정하고 주어진 돌연변이가 발생할 확률에 따라 때때로 변이를 일으키는 단순한 작용을 한다. 이러한 변이는 국소적인(local) 극소값 또는 극대값을 전역적인(global) 최소값이나 최대값으로 오인하지 못하게 하여 국소적인 극값에 빠지지 않고 전역적인 최대값이나 최소값을 찾는 확률을 높여주는 구실을 한다[4].

실 험

회분식 free-radical 고분자 반응기의 최적시간제어 문제는 제어변수의 선택과 목적함수를 무엇으로 정의하는가에 따라서 다양하게 표현된다. 일반적으로 반응 온도, 개시제의 초기 농도 등이 제어변수로 이용된다. 이 변수들은 고분자반응의 속도와 고분자의 분자량에 영향을 끼친다. 밀도가 일정하다고 가정하고 활성 라디칼의 유사 정상상태(QSSA)를 가정하면 회분식 메틸 메타아크릴레이트의 고분자반응은 다음과 같은 물질 수지식으로 표현된다[1-2].

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} &= -k_d I \\ \frac{dM}{dt} &= -k_1 M I^{\frac{1}{2}} \\ \frac{d\mu_0}{dt} &= -k_4 k_d I + k_2 M I^{\frac{1}{2}} + k_3 S I^{\frac{1}{2}} \\ \frac{d\mu_2}{dt} &= (k_s S + k_m M) \lambda_2 + k_p \lambda_0 \lambda_2 + k_{ic} \lambda_1^2 \\ \lambda_0 &= (2fk_d / k_i)^{\frac{1}{2}} \\ \lambda_1 &= \frac{2fk_d I + (k_{pM} + k_m M + k_s S) \lambda_0}{k_m M + k_s S + k_p \lambda_0} \\ \lambda_2 &= \lambda_1 + (2k_p M \lambda_1) / (k_m M + k_s S + k_p \lambda_0) \end{aligned}$$

최소화시킬 목적함수는 다음과 같다.

$$J = \int_0^{t_f} dt + w_1 (M_{nd} - M_n)^2 + w_2 (X_d - X)^2$$

회분식 반응기의 경우 온도변화가 연속적으로 변하고 일정한 시간동안 변할 수 있는 온도의 한계를 고려하여야 한다. 따라서 인자열의 첫째 인자는 초기 온도를 유전 알고리즘이 무작위로 찾게 하고(30도에서 90도사이), 그 다음 인자부터는 앞의 온도에서 변하여 가는 온도차이를 일정한 범위 내에서(-2도에서 2도까지) 무작위로 찾아가도록 인자 열을 구성하였다. 이 때 시간은 5분 간격으로 하였고 전환율이 0.5가 되면 계산을 마치도록 하였다.

그림 1.은 $I_0 = 0.05$ 의 경우 $M_{nd} = 500000$, $X_d = 0.5$ 를 만족하는 온도의 궤적을 찾아가는 과정에서 각 세대의 가장 좋은 인자의 목적함수값과 수 평균 분자량을 나타낸 것이다. 이때 한 세대의 수는 50개로 하였으며 교배 확률(Pc)은 0.6, 돌연변이 확률(Pm)은 0.001로 하였다. 열 일곱 번째 세대, 즉 900번의 계산 결과 목적함수는 47851.4에서 329.3으로 감소하였다. 그림 2.는 이렇게 구한 온도의 궤적이며, 그림 3.은 구한 온도궤적을 이용하여 수식모델로부터 구한 공정 모사의 결과를 보여준다.

결과 및 토론

본 연구에서는 고분자 반응에서 시간을 최소화하는 온도궤적을 구하는 최적제어 문제를 풀기 위해 유전 알고리즘을 이용한 기법을 개발하였다. 고분자 반

용의 최적온도제어를 위해서는 물리적으로 실현가능한 온도범위 내에서 궤적을 찾아가도록 만들어 주는 것이 중요하다. 초기조건의 적절한 선택에 크게 영향을 받던 기존의 방법들과는 달리 유전알고리즘은 30도에서 90도 사이에서 어려움 없이 최적의 온도궤적을 찾아가감을 확인할 수 있었다. 앞으로 지금까지 수식의 복잡함 또는 심한 비선형성으로 인하여 쉽게 풀지 못하였던 최적제어문제를 유전 알고리즘을 이용하면 효과적으로 풀 수 있을 것이라고 기대할 수 있다.

참고 문헌

1. Saty R.Ponnuswamy, Sirish L. Shah and Costas A.Kiraparissides, *Ind. Eng. Chem. Res.* 1987, 26, 2229-2236.
2. Ray, W.H., *Can J. Chem. Eng.* 1967, 45, 356.
3. Z. Michalewicz and C. Janikow, *Computers Math. Applic.* 1992, 12, 83-94.
4. D.E.Goldberg, "Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning", Addison Wesley, 1989.
5. B. Bojkov and R. Luss, *Ind. Eng. Chem. Res.* 1994, 6, 1486-1492

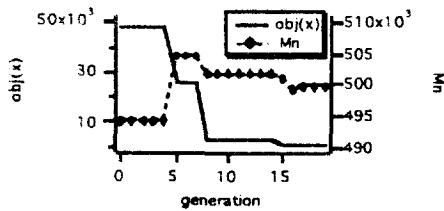


그림 1. 최적 온도 궤적을 찾아가는 과정 (인자수 50, Pc = 0.6, Pm = 0.001)

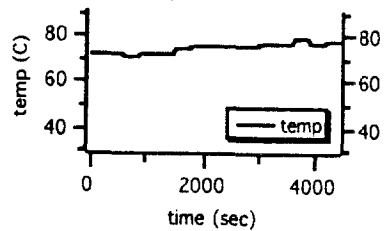


그림 2. 유전 알고리즘을 이용하여 구한 온도 궤적 ($t_f=4441$ sec)

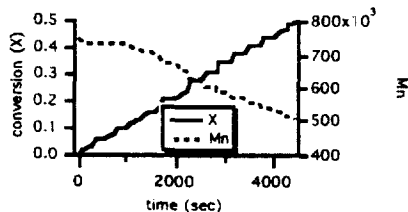


그림 3. 구해진 온도 궤적을 이용하여 모사한 결과