

SDS 알고리즘을 이용한 비선형 파라미터 최적화에 관한 연구

이영진, 장용훈, 이권순

* 동아대학교 전기공학과, ** 동주대학 전산정보처리과

A Study on Nonlinear Parameter Optimization Problem using SDS Algorithm

Young J. Lee, Young H. Jang, Kwon S. Lee

* Dept. of Electrical Eng., Dong-A University, ** Dept. of Computer Information, Dongju C

Abstract - This paper focuses on the fast convergence in nonlinear parameter optimization which is necessary for the fitting of nonlinear models to data. The simulated annealing(SA) and genetic algorithm(GA), which are widely used for combinatorial optimization problems, are stochastic strategy for search of the ground state and a powerful tool for optimization. However, their main disadvantage is the long convergence time by unnecessary extra works. It is also recognised that gradient-based nonlinear programming techniques would typically fail to find global minimum. Therefore, this paper develops a modified SA which is the SDS(Stochastic deterministic stochastic) algorithm can minimize cost function of optimal problem.

또한, 최근에는 이들 휴리스틱 알고리즘들을 복수의 탐색 알고리즘형태로 조합함으로써 탐색능력이 향상된다는 장점을 이용한 복수의 탐색 알고리즘도 여러 분야에서 적용이 시도되고 있다[1,2,4]. 예를 들면, GA는 최적해의 부근에서는 빠르게 접근하지만, 국소탐색능력이 약하다는 문제가 지적되고 있다. 이 문제를 해결하는 유효한 수법의 한가지가 휴리스틱 알고리즘과 GA를 조합하는 것이다. 즉, 전역적인 탐색을 GA로 수행하고 국소탐색을 휴리스틱 알고리즘으로 수행하는 방법이다.

본 연구에서는 초기값에 강인한 확률론적인 방법으로 목적함수를 최소화하다가 최적해 근방에서 불필요한 계산을 줄이기 위하여 결정론적인 방법으로 수렴을 가속화시킨다. 또한, 확률론적인 탐색법의 적용에 있어서 전역 탐색에 강인한 GA법과 국부탐색에서 더 강인한 SA법을 병합 적용함으로써 상호간의 장점을 최대한 활용하면서 보다 좋은 극소점을 찾아가도록 시도하는 확률론적인 방법의 SDS(Stochastic Deterministic Stochastic) 알고리즘을 개발하고자 한다.

1. 서 론

과학이나 공학 분야에서는 비용함수를 최적화하는 최적화 문제에 관한 연구들이 많이 진행되고 있다. 이들 최적화 문제의 궁극적 목표는 가급적 빠른 시간 내에 국소(local) 최적해가 아닌 전역(global) 최적해를 구하고자 하는 것이다. 그러나, 실제로 주어진 시간 내에 최적해를 구할 만큼 충분한 시간이 없을 경우 최적점을 찾기 위한 노력은 시간의 제약을 받을 뿐만아니라 문제의 규모나 특성에 따라 우리가 원하지 않는 준 최적해에 그치는 경우가 발생할 수도 있다. 또한, 전통적인 탐색 알고리즘을 이용하여 비선형 시스템 파라미터를 최적화하는 경우에는 실제값(real value)에 가까운 계수의 초기값을 요구하고 있으며, 그렇지 않은 경우 국소적인 극소값(Local minima)에 빠지거나 발산해버리기도 한다. 따라서, 이러한 초기치 및 전역 탐색문제를 해결하기 위하여 최근에 많은 Global Random Search Technique가 제안되었으며, GA(Genetic Algorithm)법과 SA(Simulated Annealing)법 및 TS(Tabu Search)와 같은 확률론적 탐색방법(stochastic search method)이 여러분야에서 성공적으로 적용되고 있다[1,2,3].

확률론적 최적화 알고리즘인 SA법이나 GA법 등이 궁극적으로 최소값에 수렴하는 장점을 갖고 있으나, 계산시간이 너무 막대하게 걸려서 실용적이지 못하다는 단점을 가지고 있다. 특히, SA법의 경우에는 실행속도를 빠르게 하기 위하여 적절한 초기온도(starting temperature)나 쿨링 스케줄(cooling schedule)등을 적절히 선택하여 보다 빠른 수렴특성을 얻을 수 있는 여러가지 방법들이 제시되고 있다.

2. 본 론

2.1 비선형 최적화문제

비선형 최적화 문제는 식 1과 같이 '주어진 목적 함수 $F(x)$ 를 최소 또는 최대로 하는 변수 x 를 구하라'는 문제로 정식화할 수 있는데, 변수 x 에 대하여 제약 조건(constraints)이 있는 경우와 제약 조건이 없는(unconstraints) 경우가 있으며, 그 제약 조건이나 목적함수가 선형(linear)인지 비선형(nonlinear)인지에 따라서 분류될 수 있다.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} F(x)^T F(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m f_i(x)^2 \quad (1)$$

여기서, $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m (m \geq n)$ 이고, 목적함수 $f_i(x)$ 는 구하고자 하는 변수 x 에 의한 $F(x)$ 의 i 번째 값이다. 그 중 비선형 문제의 해석 방법은 크게 구배법(Gradient Method)과 직접탐색법(Direct Search Method)의 두 종류로 분류할 수 있다. 구배법은 목적함수 $F(x)$ 의 도함수를 이용하여 최소값을 탐색해 가고, 직접탐색법은 도함수의 계산이 곤란한 경우 주어진 몇 개의 점에서 목적 함수값을 이용하여 최소값을 탐색해 가는 방법으로서 두 방법 모두 초기값 선정에 따른 최소값 수렴에 어려움이 있다.

또한, 구배법 등에서는 각 점에서 경사를 조사하여 최소점으로 탐색 경로가 결정되어 자칫 바라지 않는 극소점에 머무를 수가 있다. 이에 대한 해결책으

로 확률론적 탐색방법인 SA법 및 GA법 등이 제안되어 많은 연구가 진행되고 있다.

그러나, 이 방법들은 최소점에 수렴하는데 대단히 많은 계산량이 요구되므로 실용적이지 못하다는 단점을 갖고 있기 때문에 실행 속도를 빠르게 하기 위하여 여러 가지 개선책으로 개선해 보고 있지만 그다지 좋은 결과를 얻지 못하고 있다.

2.2 SDS 법

2.2.1 SA 법

SA법은 야금학 '담금질(metallurgical annealing)'의 유사성으로부터 시작되었는데, 야금학 기술에 의하면 담금질법은 금속을 거의 녹는점까지 가열한 후 서서히 실온 상태까지 냉각시키는 것을 말한다. 즉, annealing이란 고체 물리학에서 고체를 가열하여 고체의 모든 분자가 자유롭게 임의로 배치되어 있는 액체 상태에서 서서히 온도를 내려 냉각시키면 모든 분자격자가 낮은 기저 에너지상태(low energy ground state)에 가깝게 재배치가 되는 현상을 말한다.

이러한 SA법은 임의로 발생된 난수를 이용하여 주어진 확률내에서 탐색해나가는 방법으로서 전역탐색에 대단히 유리한 탐색방법으로 알려져 있다. 즉, 이 방법은 상반된 목적들로 조합된 목적함수(objective function)와 대단히 많은 자유도(degrees of freedom)를 갖는 문제를 해결하기 위한 것이다[1,3].

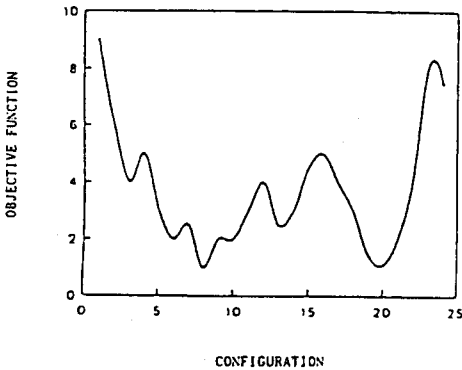


그림 1. Hypothetical objective function for a multivariate system with conflicting goals

2.2.2 GA 법

유전알고리즘은 자연 생태계의 적응 메커니즘을 기초로 한 확률적 탐색 알고리즘으로서 1970년 John Holland에 의해 정립된 최적화 알고리즘이다[1,3]. 즉, 자연계의 생물들이 자신들이 가진 우수한 인자들을 번식을 통하여 다음세대에 전달하는 생명체의 본질을 수학적 배경없이 컴퓨터상에서 최적화 문제의 해를 찾고자 하는 데 많이 이용되고 있다.

유전알고리즘은 초기 개체군(initial population)을 토대로 복제(reproduction), 교배(crossover), 그리고 돌연변이(mutation)과정을 거친다. 이때, 각 개체가 목적함수에 알맞은 정도를 나타내는 적합도(fitness)를 평가(evaluation)하여 확률적으로 우수한 적합도를 지닌 개체들을 선택하여 복제한 후 다음 세대로 진화한다.

유전알고리즘의 장점으로써는 전역적 영역에서의 해를 구하기 때문에 극소점(local minima)에 빠지지 않고 평가(evaluation)단계에서 적합도 함수(fitness function)를 목적함수에 알맞게 설정을 하게 되면 기존의 최적화 알고리즘보다 우수한 해를 찾을 수가 있으며, 무엇보다도 수학적 모델링을 위한 계산시간을 줄일 수가 있다.

2.2.3 SDS 법

본 논문에서 제안한 SDS 알고리즘은 크게 세 부분으로 구성되어 있으며, 첫 번째 단계는 거의 어느 초기값에 대하여도 발산하지 않는 전역탐색 알고리즘을 이용하여 확률론적인 방법으로 임의의 초기값으로부터 어느 정도 최소점 부근까지의 해를 구한다. 그러나, 이 방법의 계속 적용은 최소점 근처에서 엄청난 양의 계산을 요구하므로 막대한 비용이 소요된다. 그러므로, 두 번째 단계에서는 다변수 비선형 함수의 최소점을 찾기 위하여 Fletcher와 Reeves 알고리즘과 같이 Steepest Descent법과 Conjugate Gradient법 등에 의하여 탐색하므로써 최소점을 찾는다. 그러나, 여기서 얻은 값이 최소점(Global Minimum)이라기 보다 극소점(Local Minimum)에 머무를 수가 있으므로, 세 번째 단계에서 극소점에서 보다 높은 에너지로의 이동을 통하여 최소점을 찾을 수 있도록 전역탐색 및 국부탐색을 병행하는 확률론적인 탐색을 실시하였다.

2.3 시뮬레이션 결과 및 토의

2.3.1 Missing Data를 갖는 극히 난해한 계수 추정 문제

우리는 Missing Data를 갖는 화학적 질량 - 작용 원리(Chemical Mass-action Principle)나 보존법칙(Conservation Law)으로 잘 정의되는 세포 동역학(Cellular Kinetics)에 의하여 암세포에 침투하는 단핵 세포에 관한 수학적 모델에 SDS법과 순수 GA법 및 IMSL을 적용하여 초기치 문제와 계산시간적 측면에서 비교분석해보고자 한다. 이에 관한 수학적 모델은 다음 수식 3과 같이 5개의 비선형 미분방정식과 3개의 대수방정식으로 구성되어 있으며, 이에 관한 실험 데이터는 참고문헌[5]를 참조하기 바란다.

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= -\frac{x_1}{\tau_1} + u_1 \\ \frac{dx_2}{dt} &= -\frac{x_2}{\tau_1} + u_1 \\ \frac{dx_3}{dt} &= -\frac{x_3}{\tau_3} - \delta_1 x_3 + u_2 \\ \frac{dx_4}{dt} &= -\frac{x_4}{\tau_4} + \delta_2 x_3 \\ \frac{dx_5}{dt} &= b x_5 \ln\left(\frac{k}{x_5}\right) - \text{kill } x_5 \\ u_1 &= 43 \quad \text{at } 0.25 < t < 0.5 \\ &= 3 \quad \text{at } t > 1 \quad : \text{ LMF-a} \\ u_2 &= \frac{a_2 \cdot x_1}{k_2 + x_1} \quad : \text{ CGF} \\ \delta_2 &= \delta_{20} + \bar{u} \tanh[\beta(x_2 - x_{20})] : \text{ LMF-b} \end{aligned} \quad (3)$$

$$kill = \frac{a_4 \cdot X_4}{k_4 + X_4}$$

본 모델은 17개의 불완전한 데이터(Incomplete Data)를 갖는 측정값으로부터 9개의 파라미터를 추정하는 문제로서 극히 풀기 어려운 문제로 알려져 있다. 추정하고자 하는 9개의 계수는 벡터 형태로 아래와 같다.

$$\theta = [\tau_1, \tau_3, \delta_1, \delta_3, k_2, \beta, X_{20}, a_4, k_4]^T \quad (4)$$

2.3.2 시뮬레이션 결과 및 토의

제안한 SDS 알고리즘을 본 모델에 적용하여 본 결과 우수한 특성을 갖고 있음을 입증할 수 있었다. 우선 본 모델은 추정하고자 하는 파라미터가 9개나 되므로 적당한 초기값을 선정하는데는 한계가 있다. 그러나, 본 알고리즘은 임의의 추측된 초기값에 대하여도 좋은 수렴 특성을 보였다. 또한, 파라미터 평면(Parameter Space)에서 RSS(Residual Sum of Squares)로 구성된 면이 너무 평탄하여, 즉, 최소점이 깊게 하나만 존재하는 것이 아니라 많은 극소점들이 존재하는 본 모델의 특성상 쉽게 최적값을 구하기란 대단히 어렵다고 판단된다. 암세포에 침투하는 단핵세포에 관한 수학적인 모델에 각각의 알고리즘을 적용하였을 때의 계산시간 비교는 표 1과 같다. GA법을 적용시에 개체수는 약 40개, 돌연변이 확률은 1~50[%]로 변동 적용하였으며, 교배확률은 35[%]로 하였다.

표 1. 파라미터 탐색 시간 비교

알고리즘	CPU Time[sec]	RSS	비 고
SDS	33.49	4.35799	
GA	81.89	7.28300	
IMSL	-	-	발산하여 해를 구하지 못함.

이상의 간단한 예에서 기존의 일반적인 결정론적 알고리즘이 다른 두 확률론적 알고리즘보다 계산시간에서 월등한 차이를 보이고 있지만, 9개나 되는 초기 추정값을 선정함에 있어서 참값의 약 10[%] 편차 이내의 값을 제외하고는 발산하므로 해를 구하는데 거의 불가능한 반면, SDS 알고리즘으로는 모든 초기값에 대하여 최소값으로 수렴함은 물론이거니와 계산시간 역시 순수 확률론적 방법보다 훨씬 줄일 수 있음을 알 수 있었다. 이상과 같이 시뮬레이션 해 본 결과 제안된 알고리즘과 순수 GA법 및 IMSL을 사용한 경우의 최종적인 평가는 표 2와 같다.

표 2. 제안된 알고리즘의 특성비교

알고리즘 항 목	SDS	GA	SA	IMSL
계산시간	빠르다	느리다	아주 느리다	빠르다
추정 정밀도	상당히 정밀하다	때에 따라 정밀하지 못하다	때에 따라 정밀하지 못하다	때에 따라 정밀하지 못하다
초기값에 대한 강인성	강인하다	강인하다	강인하다	초기값에 따라 발산

3. 결 론

이상의 예로부터 알 수 있듯이 제안한 SDS알고리즘은 초기치 문제로 풀기 어려운 문제를 해결함에 있어서는 상당히 좋은 결과를 나타내고 있다. 이러한 사례는 비선형 파라미터 추정문제에서 항상 발생하는 문제중의 하나로서 수렴특성을 향상시키면서도 초기치 문제에도 강인성을 나타낼 수 있으므로, 비선형 최적화문제에서 우수한 성능을 보일 것으로 기대하고 있다.

최근 들어서는 로봇트 제어와 같은 최적제어(optimal control)분야에도 SA 및 GA법등이 상당히 많이 적용되고 있으며, 그 우수성이 다소 인정을 받고 있는 실정이다[4,6]. 따라서, 향후 본 알고리즘의 우수성을 보다 객관적으로 입증하기 위하여 최적제어분야에도 적용하고자 하며, 이를 on-line시스템으로도 구현해보고자 한다.

(참 고 문 헌)

- [1] S. W. Mahfoud, D. E. Goldberg, "Parallel Recombinative Simulated Annealing: A Genetic Algorithm", Parallel Computing, 21, pp. 1-28, 1995.
- [2] K. P. Wong, Y. W. Wong, "Thermal Generator Scheduling using Hybrid Genetic/Simulated-Annealing Approach", IEEE Proc.-Gener. Transm. Distrib., Vol. 142, No. 4, pp. 372-380, 1995.
- [3] Zbigniew Michalewicz, "Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs," Springer-Verlag, 1994.
- [4] K. C. Tan, Y. Li, D. J. Murray-Smith and K. C. Sharman, "System Identification and Linearisation using Genetic Algorithms with Simulated Annealing", Proc. 1st IEE/IEEE Int. conf. on GA in Eng. Syst. Innovations and Appl., Sheffield, Sept. 1995.
- [5] 이권순, R. R. Mohler, "A Mathematical Model of Mononuclear Cells Infiltrating into Tumors," 한국자원개발연구소 연구보고, 제 16 권, 제 1 호, pp. 163-174, 1992.
- [6] D. P. Kwok, Fang Sheng, "Genetic Algorithm and Simulated Annealing for Optimal Robot Arm PID Control", Proc. of the First IEEE Conf. on Evolutionary Computation, Vol. 2, pp. 707-713, 1994.