# 분자 동역학 방식을 사용한 전역 최적화 기법에 관한 연구

최 덕 기* · 김 재 윤**

(1998년 12월 23일 접수)

# A Study on the Global Optimization Technique Based upon Molecular Dynamics

Deok-Kee choi and Jae-Yoon kim

**Key Words:** Molecular Dynamics(분자 동력학), Optimization(최적화), Objective Function(목적 함수), Global Minimum(전역 최소값), Local Minimum(국부 최소값), Test Function(시도 함수), Design Variable(설계 변수).

**Abstract**

This paper addresses a novel optimization technique based on molecular dynamics simulation, which has been utilized for physical model simulation at various disciplines. In this study, objective functions are considered to be potential functions, which depict molecular interactions. Comparisons of typical optimization method such as the steepest descent and the present method for several test functions are made. The present method shows applicability and stability in finding a global optimum.

## 1. 서 론

최적화 이론을 연구하는 분야는 지난 수 십년 동안 지속적인 연구와 더불어 최근에 고성능 컴퓨터의 출현으로 급속히 발전한 분야이다. 최적화 이론은 여러 분야에서 다양한 형태로 적용되어 왔는데, 이러한 최적화 이론은 항공기 및 우주선의 설계, 건축물의 설계 등 공학적인 시스템을 최적화하여 최적의 설계를 하는데 이용되고 있다.[1,2]

최적화 이론의 적용은 목적 함수가 가지고 있는 전역, 또는 지역 최소값으로부터 전역 최소값을 찾아내는데 그 목적을 두고 있다.

전역 최적해를 찾는 방법 및 알고리듬에 대한 최근까지의 연구는 확률적인 개념의 포함 여부에 따라 추정통계론적 방법(stochastic method)과 결정론적 방법(deterministic method)으로 나누어 생각할 수 있다. 전자에 해당하는 확률적인 개념을 적용한 방법에는 진화 이론(evolution theory)을 이용한 유전자 알고리듬과 무작위 추적(random search)을 이용한 방법 그리고 금속재에 있어서 물리적인 현상을 이용하는 시뮬레이티드 어닐링(simulated annealing)등의 방법들이 있다.[3~5]

본 연구에서는 분자 동력학 기법(molecular dynamics technique)을 최적화 이론으로 적용함으로써 전역 최적해를 구하는 새로운 형태의 알고리듬을 제시한다. 분자 동력학 기법은 최근 컴퓨터 기술의 발달로 형성된 분야로 유한요소법과 같은 방법으로 풀기 어려운 파괴과정과 같은 현상들을 미시적인 관점에서 해석하고자 연구되기 시작했다.[6~11]

전형적인 분자 동력학 기법에서는 분자 상호간의 운동을 규정하는 포텐셜 에너지 함수를 이용하여 분자의 운동을 해석하나, 본 연구에서는 포텐샬 에너지 함수 대신 해석하고자 하는 목적 함수를 이용해서 해석하게 된다. 각 변

* 회원, 단국대학교 기계공학과
** 단국대학교 기계공학과 대학원

수에 대한 초기 데이터 생성 함수의 종류와 무작위로 추출된 초기 데이터의 수는 본 연구에서 제안하는 시뮬레이션의 수렴 정도와 속도에 영향을 미친다. 따라서 앞에 제시한 각 인자들을 시도 함수를 시뮬레이션 함으로써 정의하고, 또한 본 연구에서 제시하고 있는 방법으로부터 얻어진 결과를 최하향 경사 방법(steepest descent method)을 통해 얻어진 결과와 비교하여 본 연구에서 새롭게 제시하고 있는 분자 동력학 기법을 이용한 시뮬레이션의 타당성 및 가능성을 검토하여 보았다.

## 2. 이 론

### 2.1 분자 동력학

분자 동력학 기법은 분자사이의 인력 및 척력과 같은 상호작용을 다루는 포텐샬 에너지 함수와 분자 사이의 상호 작용하는 힘을 나타내는 식으로 정의될 수 있다. 분자 동력학 기법에서 사용되는 포텐샬 함수의 식은 다음과 같이 주어진다.

$$\phi = \sum_{i}^{N} \sum_{j>i} u_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \tag{1}$$

여기서 $\phi$는 포텐샬 에너지, N은 전체 분자수를 나타내며, $u_{ij}$는 포텐샬 에너지 함수를 나타내는데, 두 분자 사이에 상호 작용하는 two-body 포텐샬을 나타낸다.

포텐샬 에너지, $\phi$와 분자사이에 작용하는 힘, $\vec{F}$사이에는 다음과 같은 관계가 성립한다.

$$\vec{F}(\vec{r}_i) = -\nabla\phi(\vec{r}_i) \tag{2}$$

식 (2)는 포텐샬 에너지 함수로부터 얻어진 분자 사이에 상호 작용하는 힘으로 뉴톤의 운동 방정식에 대응될 수 있고, 해석적 방법에 의해 직접 풀기가 어렵기 때문에 수치해석적 방법을 이용하게 된다.

본 연구에서는 전역 최적화 해를 얻기 위해 분자 동력학의 기법을 이용했는데, 분자간의 상호 작용을 나타내는 포텐샬 에너지 함수 대신에 최적화 하려는 목적 함수를 분자 동력학에서의 포텐샬 에너지 함수로 간주하게 된다. 전형적인 분자 동력학 기법에서의 두 분자간의 포텐샬 모델링은 기본적으로 두 분자간 거리에 의해 발생되는 인력 및 척력과 같은 상호 작용을 다룬다. 그러나 분자 동력학 기법의 개념을 이용한 전역 최적화의 해를 얻어내는 알고리듬에서는 목적 함수가 가지고 있는 변수 개수만큼의 분자를 생성하며, 그 분자들은 실제 자연현상에 의존하는 인력과 척력이라는 직접적인 영향을 서로 주고받지 않고 다만 수학적 계산 과정에 있어 간접적으로 영향을 주고받는다.

분자들의 운동을 규정하는 뉴톤의 운동 방정식은 분자의 상호 작용을 나타내는 포텐샬 에너지 함수로부터 얻어질 수 있다.

초기 속도 및 가속도를 가지고 있는 N개의 분자가 있다고 가정하고, 임의의 분자를 $P_i$로 나타낼 때, $P_i$의 질량을 $m_i$라고 한다면, 임의의 분자 $P_i$의 운동은 다음과 같은 운동 방정식에 의해서 구현될 수 있다.

$$\vec{F}_i = m_i \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2}, \quad i = 1, 2, \ldots, N \tag{3}$$

식 (3)은 초기 위치와 속도를 가지고 있는 임의의 분자가 시간에 따라 변화된 새로운 위치와 속도를 얻게 해준다. 본 시뮬레이션에서는 식 (3)을 해석하는데 분자 동력학 분야에서 널리 알려진 Leap -Frog 알고리듬을 사용했다.

$$\vec{v}_{i,1/2} = \vec{v}_{i,0} + \frac{(\triangle t)}{2}\vec{a}_{i,0}, \tag{4}$$

$$\vec{v}_{i,k+1/2} = \vec{v}_{i,k-1/2} + (\triangle t)\vec{a}_{i,k}, \tag{5}$$

$$\vec{r}_{i,k+1} = \vec{r}_{i,k} + (\triangle t)\vec{v}_{i,k+1/2}, \tag{6}$$

여기서 $\triangle t$는 시간 간격을, $\vec{r}_{i,k}$, $\vec{v}_{i,k}$, $\vec{a}_{i,k}$는 각각 임의의 시간에서 임의의 분자 $P_i$의 위치, 속도, 가속도를 나타낸다.

(4~6)식 을 이용해서 뉴톤의 운동 방정식을 해석함으로써 시간에 따른 임의의 분자 $P_i$의 위치, 속도, 그리고 가속도를 구할 수 있다.

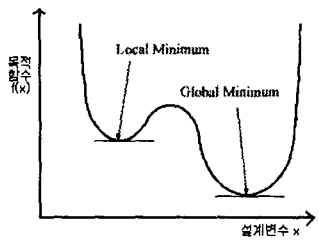


**Fig. 1** Representation of a global minimum and a local minimum.

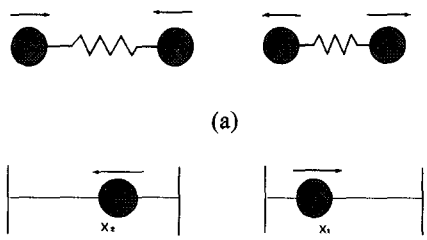


**Fig 2** Comparison of (a) the movement of molecules of typical molecular dynamics simulation and (b) that of an optimization using molecular dynamics technique ($x_1, x_2$ are design variables).

### 2.2 최적화 이론

최적화는 설계 변수를 가지는 목적함수가 최소값 또는 최대값을 갖도록 설계 변수를 결정하는 것이다.

Fig. 1은 지역 최소값(local minimum)과 전역 최소값(global minimum)이 존재하는 모습을 보여주고 있는데, 본 시뮬레이션에서는 매 step에서 얻어진 목적함수의 값 들을 서로 비교 해봄으로서 전역 최소가 되는 점을 찾아 내게 되는데 Fig. 3은 이러한 과정을 거쳐서 전역 최소가 되는 때의 분자의 위치(설계 변수값)를 얻어내게 되고, 또한 그 때의 목적 함수의 값을 얻어내게 된다. 따라서 본 연구에서는 앞의 2.1절에서 간단히 기술한 분자 동력학 기법을 이용해서 전역 최적해를 찾는 새로운 전역 최적화 방법을 소개하고자 한다. 목적 함수의 설계 변수들은 각각 하나의 분자로 정의하고 분자의 운동은 뉴톤의 운동 방정식에 따르게되며 주어진 영역 안에서 자유롭게 움직이게 된다.

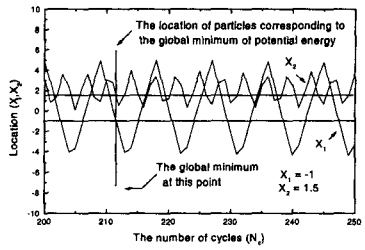


**Fig. 3** The location of particles corresponding to the global minimum of potential energy. $f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$

Fig. 2는 전형적인 분자 동력학에서의 분자의 운동과 본 연구에서 제시하고 있는 방법에서의 분자의 운동을 보여준다. Fig. 2(a)는 포텐샬 함수에 의한 전형적인 분자 동력학에서의 인력과 척력이 작용하는 분자의 운동을 나타낸다. Fig. 2(b)는 본 연구에서 제시하고 있는 방법에서의 분자의 운동으로 두 개의 설계 변수를 가지는 목적 함수를 포텐샬 에너지 함수 대신에 사용했을 때의 모습을 나타낸다. 그림 상에서는 두 분자가 서로 영향을 미치지 않고 각각 주어진 영역 내에서 움직이는 것으로 보여지는데, 두 분자의 움직임은 Fig. 2(a)에서처럼 물리적인 영향을 서로 주고받지 않는다. 단지 수식에 의한 영향을 서로 주고받으면서 주어진 영역 내에서 움직이게 된다. 이처럼 임의의 영역 내에서 운동을 하는 분자들의 연속적인 움직임 속에 분자들은 어느 순간에는 포텐샬 에너지가 전역 최소가 되는 위치에 있게 될 것으로 기대되는데, 그때의 분자의 위치와 포텐샬 에너지는 전역 최소가 되는 위치와 포텐샬 에너지의 전역 최소값을 나타내게 된다. 즉 포텐샬 에너지 함수를 대신한 목적함수의 전역 최소값과 그 때의 설계 변수 값을 나타내게 되는 것이다.

Fig. 3은 두 개의 설계 변수를 가지는 임의의 목적 함수에 대한 것으로 설계 변수에 상응하는 분자 $x_1$, $x_2$가 주어진 설계 영역 내에서 운동하면서 목적 함수의 전역 최적해와 그 때의 $x_1$, $x_2$값을 찾아내는 모습을 보여준다.

### 2.3 분자 동력학 기법을 이용한 최적화에서의 시뮬레이션 조건

#### 2.3.1 충돌 현상을 이용한 제한 조건의 적용

최적화 문제는 보통 목적함수와 더불어 목적함수가 가지고 있는 각 변수들에 대한 제한 조

건(constraints)을 동시에 수반한다. 따라서 본 연구에서는 분자가 벽에 충돌하는 현상을 이용해서 제한 조건을 시뮬레이션에 적용하게 된다. 본 시뮬레이션에 있어서 설계 변수에 해당하는 분자는 설계 변수 공간 내에서 움직여야 하는데, 물리적인 현상을 포함하고 있지 않은 목적 함수의 영향을 받는 분자들은 시뮬레이션 중에 그 영역을 벗어난다. 따라서 그 분자들이 설계 변수 공간의 영역을 벗어나지 못 하도록 벽을 설정해 주었는데, 이것을 제한 조건으로 생각할 수 있다. 이때 분자들은 설계 변수 공간, 즉, 벽과 벽 사이를 오가면서 벽에 충돌하게 되는데, 다음의 식 (7)을 적용해서 분자들이 벽과의 충돌할 때의 상황을 해석하게 된다.

$$\overrightarrow{v_B'} - \overrightarrow{v_A'} = e(\overrightarrow{v_A} - \overrightarrow{v_B}) \tag{7}$$

여기서 $A$와 $B$ 분자에 있어서 $\overrightarrow{v_A}$, $\overrightarrow{v_B}$는 충돌 전 속도를 나타내고 $\overrightarrow{v_A'}$, $\overrightarrow{v_B'}$는 충돌 후 속도를 나타낸다. 여기서 $e$는 반발계수(the coefficient of restitution)를 나타낸다. 본 연구에서는 첨자 $A$에 해당하는 변수들을 설계 변수 공간 사이를 진동하는 분자로 가정하였고, 첨자 $B$에 해당하는 변수들은 분자가 충돌하게 되는 벽으로 가정하였다. 이때 $\overrightarrow{v_A}$, $\overrightarrow{v_A'}$는 분자가 벽과의 충돌 전후의 속도를 나타내고, $\overrightarrow{v_B}$, $\overrightarrow{v_B'}$는 벽의 속도를 나타내는데 그 값은 모두 0이다. 그리고 분자의 벽에 대한 충돌을 완전 탄성 충돌 ($e=1$)로 가정하였다. 따라서 제한 조건에 해당하는 벽에 분자들이 충돌 할 때의 상황을 해석함으로써 분자들이 주어진 영역을 벗어나는 것을 막을 수 있을 뿐만 아니라, 시뮬레이션 결과가 발산하는 오류를 막을 수 있게 된다.

### 2.3.2 온도 스케일링에 의한 분자 속도 제어

분자 상호작용의 물리적 의미를 포함하고 있지 않은 목적 함수는 분자 동력학 기법의 적용에 있어서 완전한 분자 시스템을 형성하지 못한다. 실제 포텐샬 함수를 사용할 때, 시스템으로부터 에너지의 출입이 없다면 시간의 점진적인 변화 속에서도 분자의 속도 및 온도는 일정

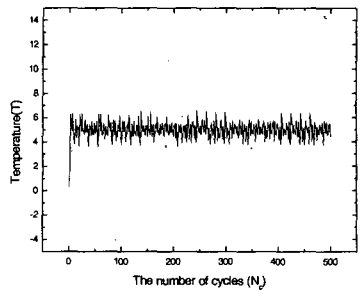


**Fig. 4** The constant temperature after setting the initial temperature (at $T=5$ ).

해야하나 목적함수는 이런 현상을 만족하지 않고 속도의 증가, 혹은 온도의 증가를 초래한다. 이와 같은 속도, 또는, 온도의 증가는 설계 변수의 공간 내에서 움직여야 하는 분자들이 그 공간을 벗어나도록 이끈다. 이처럼 분자들이 설계 변수의 공간으로부터 벗어나는 것을 막고 분자 시스템을 안정하게 유지하기 위해서 다음과 같은 온도 scaling에 의한 온도 보정 알고리듬을 첨가해야한다.

$$\vec{v}_{i,k+1/2} = \sqrt{\frac{T_0}{T(t)}}\,\vec{v}_{i,k-1/2} + (\triangle t)\,\vec{a}_{i,k}, \tag{8}$$

여기서, $T_0$는 초기 온도이고, $\vec{v}$는 분자의 속도, $\vec{a}$는 분자의 가속도를 나타낸다. $T(t)$는 다음과 같은 식으로 주어진다.

$$T(t) = \frac{1}{dN_a}\sum_i v_{i-1/2}^2 \tag{9}$$

여기서, $d$는 차원, $N_a$는 분자수를 나타낸다. 본 시뮬레이션에서는 차원과 분자수는 각각 1이다.

본 시뮬레이션에서는 (8)식과 (9)식을 이용하여 분자 시스템의 온도를 일정하게 유지함으로써 분자의 속도를 제어하게 되고 결국에는 분자가 주어진 설계 변수 영역 내에서 운동을 하는 분자 시스템을 안정하게 유지시켜준다.

Fig. 4는 온도 scaling 알고리듬을 첨가하고 난 후의 시간에 따른 시스템의 온도를 보여주고 있다. 분자 시스템의 온도를 일정하게 ($T=5$) 놓고 시뮬레이션 했을 때의 결과를 보

여주고 있다.

2.3.3 초기값을 생성하는 무작위 추출 과정

분자의 운동에 있어서의 초기값은 그 시뮬레이션의 수렴성 및 수렴속도 등에 영향을 미친다. 설계 변수에 해당하는 분자들에 대한 초기값의 선택은 전역 최소값으로 수렴 또는 지역 최소값으로 수렴을 좌우할 뿐만 아니라, 해를 찾아내는 속도에도 영향을 미친다. 분자들의 초기 위치, 속도, 그리고 가속도에 대한 초기값을 생성하기 위해서는 무작위 추출 과정을 거치는데, 이때 무작위 추출 함수를 사용한다. 본 연구에서는 초기값의 무작위 추출 과정에 있어서 컴퓨터 상에서 라이브러리로 제공하는 랜덤 함수(random function)와 무작위 추출 함수로 잘 알려진 다음의 세 개의 확률 밀도 함수만을 다루었다.

$$g(x,s)=\frac{1}{\sqrt{2\pi s}}e^{-(x-x_0)^2/(2s)} \tag{10}$$

$$g(x,s)=\frac{s}{\pi[(x-x_0)^2+s^2]} \tag{11}$$

$$g(x,s)=\frac{1}{2\pi(|x-x_0|+s)\ln(1+1/s)} \tag{12}$$

여기서 $s=x_{\max}-x_{\min}$ 이다.

식 (10), (11), (12)은 각각 Gaussian 확률 밀도 함수, Cauchy 확률 밀도 함수, 그리고 Very fast Re-annealing 확률 밀도 함수를 나타낸다.

여기서 $x_0$는 최적화 하려는 설계 변수에 대한 사용자 정의에 의해서 이루어지는 값으로 본 연구에서는 $x_0=0$으로 놓았다.

분자 동력학 기법을 이용한 전역 최적화 해를 찾는 시뮬레이션에 있어서 수렴성을 높여주기 위해 고려해야 할 조건들이 있는데, 그것은 시간 간격의 설정, 초기 데이터를 생성하는 무작위 함수의 선택, 초기 위치에 대한 데이터 수의 설정이다. 시간 간격의 설정은 중요한 부분으로, 만약 큰 값을 가지게 되면, 시뮬레이션은 오차의 누적으로 인한 부정확한 값을 생성해 낸다. 또한 시간 간격이 작다면 수렴성은 좋아지나 수렴 속도가 늦어진다. 따라서 적당한

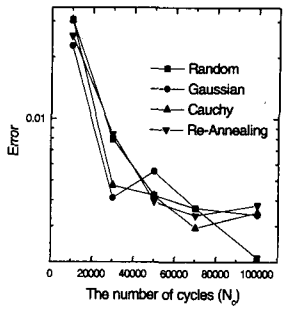


**Fig. 5** Error versus the number of cycles when four different randomization functions are used with Eq.(14).

시간 간격을 잡는 것은 중요하다. 본 시뮬레이션에서는 시간 간격에 따라 여러 차례에 걸쳐 얻어진 경험을 바탕으로 수렴율이 좋은 시간 간격( $\Delta t=0.001\sim0.01$)을 선택했다.

위에서 언급한 네 개의 초기값 생성 함수 중에서 가장 수렴성이 좋은 초기값을 생성하는 함수를 선택하기 위해 다음 두 개의 예제 함수를 가지고 시뮬레이션을 해보았다.

$$f(x_1,x_2,x_3)=\frac{1}{1+(x_1-x_2)^2}+Sin\left(\frac{1}{2}\pi x_2x_3\right)+\exp\left[-\left(\frac{x_1+x_3}{x_2}-2\right)^2\right] \tag{13}$$

$$f(x_1,x_2,x_3,x_4)=[10(x_2-x_1^2)]^2+(1-x_1)^2+10(x_2+x_4-2)^2+0.1(x_2-x_4)+90(x_4-x_3^2)^2+(1-x_3)^2 \tag{14}$$

그리고 네 개의 무작위 추출 함수를 사용해서 반복(cycle)수에 따른 목적 함수의 최적해에 대한 오차를 가지고 비교해 보았다. Fig. 5, 6은 각각 세 개, 네 개의 설계 변수를 가지고 있는 (13), (14)의 예제 함수들을 통해서 얻어진 결과를 나타낸다. Fig. 5, 6으로부터 Cauchy의 확률 밀도 함수가 좋은 결과를 주고 있음을 확인할 수 있다. 따라서 Cauchy의 확률 밀도 함수가 다른 무작위 함수에 비해 더 좋은 초기값을 무작위로 생성해 냄을 알 수 있었고, 이후의 모든 시뮬레이션에서는 무작위 추출 과정에서 Cauchy의 확률 밀도 함수를 사용했다.

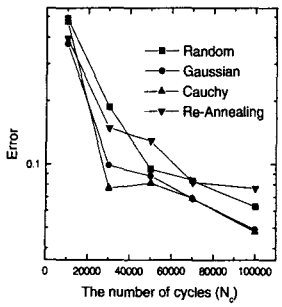


**Fig. 6** Error versus the number of cycles when four different randomization functions are used with Eq. (15).

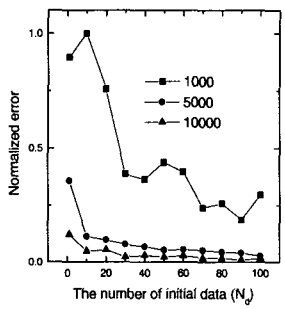


**Fig. 7** Normalized error versus the number of initial data for various numbers of cycles with equation (14).

2.3.4 초기 데이터 수의 설정

수치해석적 방법에 의해서 해를 얻고자 할 때 초기 데이터의 수가 많을수록 좋은 결과를 얻을 확률은 높을 것이다. 따라서 적당한 초기 데이터의 수를 설정할 필요가 있는데, 본 연구에서는 분자의 초기 위치에 대한 적당한 초기 데이터의 수를 설정하기 위해 두 개의 예제 목적 함수를 가지고 시뮬레이션을 해 보았다. Cauchy 확률 밀도 함수를 사용할 때, 반복(cycle)수에 대해서 초기 데이터 수에 따른 이미 알려진 목적 함수의 최적해에 대한 normalizing 시킨 오차를 가지고 비교해 보았다. Fig. 7, 8에서 볼 수 있듯이 초기 데이터 수가 많을수록 수렴성이 좋은 경향을 나타내고 있음을 알 수 있다. 그러나 초기 데이터의 수와 수렴속도는 반비례관계에 있으므로 적당한 값을 결정해야 하는데, 예제 함수를 가지고 시뮬레이션한 결과 수렴 속도와 경제성을 고려할 때

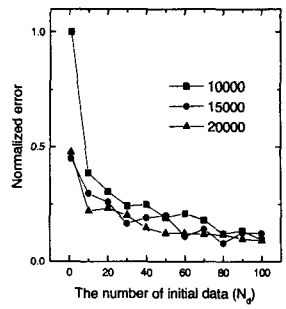


**Fig. 8** Normalized error versus the number of initial data for various numbers of cycles with Eq. (15).

**Table 1** Comparison of the results from the steepest descent method with the molecular dynamics technique with the various test functions.

| Method \ Equation | (14) | (15) |
|---|---|---|
| | Success rate | |
| Steepest descent method | 5% | 0% |
| Molecular dynamics technique | 100% | 85% |

초기 데이터 수는 40개 정도가 가장 적당함을 알 수 있었다.[13]

2.3.5 최하향 경사법과의 비교

본 시뮬레이션의 타당성 및 가능성을 검증하기 위해서 최하향 경사법에 의해서 얻어진 결과값을 가지고 비교를 해 보았다. 초기값을 생성하는 함수로는 앞에서 검증된 바와 같이 Cauchy의 확률 밀도 함수를 사용했고, 분자 위치에 대한 초기 데이터의 수는 40으로 설정했다. Table.1에서의 결과는 두 개의 예제 함수를 20번에 걸쳐 실행 시켰을 때의 해를 구하는 성공률을 본 연구에서 제시하고 있는 방법과 최하향 경사법과 비교하여 보여주고 있다.

Table 1의 결과로부터 최하향 경사법은 20번에 걸친 시뮬레이션 결과 거의 최적해를 찾아내지 못하고 있음을 알 수 있다. 최하향 경사법을 이용한 결과를 보면 삼각함수나 log함수, 그리고 지수 함수 등이 목적함수 내에 포함되어

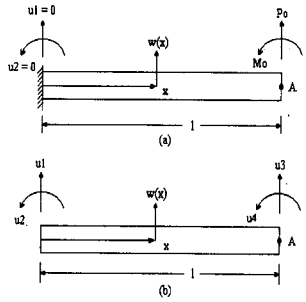


**Fig. 9** A cantilever beam is subjected to an end force $P_0$ and an end moment $M_0$.[1]

있는 경우에 최적해를 구하는 빈도가 낮은 것으로 나타났으며, 또한 설계 변수의 개수가 많을수록 최적해를 구하는 성공률이 낮게 나타났다. 그러나 본 연구에서 제시하고 있는 방법은 목적함수에 삼각함수, log함수, 그리고 지수 함수의 포함여부에 관계없이 최적해를 거의 100% 찾아냄을 알 수 있다.

## 3. 분자 동력학 기법을 사용한 최적화의 예

이번에는 지금까지의 결과를 토대로 분자 동력학 기법을 이용한 최적화 방법을 적용하여 공학 예제 문제를 해석해 보았다.

Fig. 9에서 보여지는 바와 같이 외팔보의 끝단에서 힘 $P_0$와 모멘트 $M_0$가 작용할 때 외팔보의 끝단 A에서의 처짐량과 기울기를 구하는 문제이다. Fig. 9(b)와 같은 유한 요소 모델을 이용했을 때 수직 방향의 변위 $w(x)$는 다음과 같이 표현되어진다.

$$w(x)=\{N_1(x)N_2(x)N_3(x)N_4(x)\}\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix} \tag{15}$$

여기서, $N_i(x)$는 형상 함수(shape function)로 다음과 같이 나타내어진다.

**Table 2** Comparison of the results from steepest descent method and the molecular dynamics technique.

| | Steepest descent method | MD technique |
|---|---|---|
| $x_1$ | 1.333333 | 1.332896 |
| $x_2$ | 2.499999 | 2.501008 |
| Minimum f | -3.166667 | -3.166661 |

$$\begin{aligned}N_1(x) &= 2a^3-3a^2+1\\ N_2(x) &= (a^3-2a^2+a)l\\ N_3(x) &= 2a^3+3a^2\\ N_4(x) &= (a^3-a^2)l\end{aligned} \tag{16}$$

또한, $a=x/l$이고, $u_1$, $u_2$, $u_3$, $u_4$ 빔의 끝단에서의 처짐과 기울기로 다음과 같은 포텐샬 에너지 함수($F$)로 나타내어지는데, 보의 포텐샬 에너지를 최소화 시켜 $A$지점에서의 처짐과 기울기를 구할 수 있다.

$$F=\frac{1}{2}\int_0^1 EI\left(\frac{d^2w}{dx^2}\right)^2 dx-P_0u_3-M_0u_4 \tag{17}$$

$E$는 탄성계수, $I$는 면적 관성 모멘트를 나타내며, $x_1=u_3$, $x_2=u_4l$, $P_0l^3/EI=1$, $M_0l^3/EI=2$라 하면 최종적으로 (19)식이 얻어진다.

$$f=6x_1^2-6x_1x_2+2x_2^2-x_1-2x_2 \tag{18}$$

여기서 $x_1=u_3$, $x_2=u_4l$, 그리고, $f=Fl^3/EI$를 나타낸다.

식 (19)을 시뮬레이션 한 결과는 다음과 같다.

본 연구에서 제시하고 있는 방법으로 두 개의 공학 문제를 풀어 보았다. 그 결과는 이미 알려진 해와 비교해 보았을 때, 거의 오차 없이 일치함을 알 수 있었다.

## 4. 결 론

본 연구에서는 분자 동력학 기법을 이용해서 전역 최적해를 구하는 방법을 처음으로 제시했는데, 분자동역학 기법의 최적화 이론에 적용함에 있어 설정해 주어야하는 요소들의 결정, 최하향 경사법과의 시뮬레이션 결과 비교, 그리고 물리적인 의미를 가지고 있는 공학 문제의 해석을 통해서 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

(1) 분자에 대한 초기 데이터를 생성하는 무작위 추출 과정에서 사용되는 무작위 추출 함수의 설정은 시뮬레이션 결과에 영향을 미친다. 본 논문에서 검토된 무작위 추출 함수는 Cauchy의 확률밀도 함수임을 알 수 있었다.

(2) 분자의 초기 위치에 대한 초기 데이터 수에 따라서 영향을 받는 본 시뮬레이션에서는 여러 차례의 시뮬레이션을 시행하여 적당한 초기 데이터의 수를 결정하였다. 그 결과 해석하고자 하는 함수에 따라 조금은 차이가 있지만 가장 적당한 초기 데이터의 수를 확정할 수 있었다.

(3) 분자 동력학 기법을 이용한 전역 최적화 방법을 통해서 얻어진 결과와 최하향 경사법을 이용해서 얻어진 결과의 비교를 통하여 본 연구에서 제시하고 있는 방법의 타당성과 가능성을 보였다.

## 참고 문헌


(1) Rao, Singiresu S., 1996, *Engineering and Optimization; Theory and Practice*, A Wiley-Interscience Publication.

(2) Haftka, R T., G ü rdal,Z. and Kamat M.P. 1990, *Elements of Structural Optimization*, Kluwer Academic Publish-ers, Netherlands.

(3) Goldberg, D. E., 1989, *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*, Addison-Wesley Publishing Company.

(4) Vesa Starck, 1996, "Implementation of Simulated Annealing Optimization Method for APLAC Circuit Simulator," Helsinki University of Technology.

(5) Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., Jr., M. P. Vecchi, 1983, "Optimization by Simulated Annealing," Science, Vol 220, pp. 671～680.

(6) Rapaport, D. C., 1995, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge university press.

(7) Ercolessi, Furio, 1997, *The Molecular Dynamics Primer, International School for Advanced Studies*, Trieste, Italy.

(8) 최덕기, 신현제, 1997, "Mode I 에서의 다양한 균열형태를 가진 시편의 응력확대계수에 대한 분자 동역학적 해석," 대한기계학회 추계학술대회논문집, pp.150～154.

(9) 최덕기, 김지운, 1998, "Mode I 에서의 응력확대계수에 대한 3차원 분자 동역학을 이용한 슈퍼컴퓨터 시뮬레이션 해석," 한국항공우주학회 춘계학술대회 논문집, pp. 298～301

(10) Choi, D. K., Kim, J. W., 1998,"Calculation of Stress Intensity Factors Using Three-Dimensional Molecular Dynamics Simulation," METALS AND MATERIALS, Vol. 4, No. 4, pp. 920～924

(11) Choi, D. K., Kim, J. W., 1998, "A Study on Distribution of Plastic Region near a Crack Tip Using Three-Dimensional Molecular Dynamics Simulation," METALS AND MATERIALS, Vol.4, No.4, pp. 925～930.

(12) 김수광, 조동우, 1998, "새로운 전역 최적화 방법으로서의 영재교육 알고리듬의 제안 및 비교 평가," 대한기계공학회 논문집 A편, 제22권, 제9호, pp. 1684～1698.

(13) 최덕기, 김재윤, "분자 동력학 기법을 이용한 최적화 방법에 관한 연구," 대한자동차공학회 추계학술대회 논문집, Vol 1, pp. 247～252.