

STOICHIOMETRIC ALGORITHM에 GA를 접목시킨 열역학 프로그램 개발

이선희, 윤문규, 정재학*, 소원섭, 박진호, 서민교, 박진수, 김민수
 영남대학교 응용화학공학부
 (jhjung@yumail.ac.kr*)

Thermodynamic Program Development That use GA to STOICHIOMETRIC ALGORITHM

Sun Hee Lee, Mun Kyu Yoon, Jae Hak Jung*, Won Shoup So, Jin ho Park,
 Min Kyo Seo, Jin Soo Park, Min Su Kim
 School of Chemical Engineering & Technology, Yeungnam University
 (jhjung@yumail.ac.kr*)

서론

여러 가지 종류의 반도체 광소자들이 산업 및 일상생활 등의 여러 분야에서 다양하게 응용되어지고 있다. 이러한 광소자에 대한 수요를 충족시키는데 필요한 반도체 재료로는 GaAs나 InP와 같은 III-V족 화합물반도체와 ZnSe나 ZnS와 같은 III-VI족 화합물반도체 등 여러 가지가 있다. 현재 상업적으로 생산되는 대부분의 반도체 광소자들은 적외선으로부터 녹색의 파장영역에서 동작되고 있다. 동작 파장 영역을 청색이나 자외선 영역까지 확장한다면 가시광 전영역의 빛을 방출하는 광소자의 제조가 가능하여지므로 다양한 분야에서 더욱 큰 응용성을 가질 수 있을 것이다.

MHVPE공정을 열역학 전산 모사를 하여 평형상태에서의 기상종들의 ahff분을 등을 계산 하고, CaN(s) 박막의 deposition yield 예측할 수 있다. 그리고 이 결과를 토대로 해서 MHVPE 공정 영역을 예측하여 실제 실험에 필요한 비용 및 시간을 절감할 수 있다.

열역학 전산 모사에 있어서 화학평형을 계산하기 위한 다목적 알고리즘의 틀은 stoichiometric algorithm를 사용하였다. 화학반응을 수반하는 다상 혼합물의 평형을 수치해석적으로 계산하는 방법 중에 양론적(stoichiometric) 알고리즘이 있다.

stoichiometric 알고리즘은 평형 상태에서 system내에 독립적으로 존재할 수 있는 개개의 화학 반응식들을 먼저 구성하고, 각 화학 반응의 gibbs free energy 변화로부터 산출되는 반응평형상수들과 원소 및 화합물의 수지식들로부터 산출되는 반응평형상수들을 비교하여 허용오차범위 내에 들어올 때까지 반복 계산하여 평형 조성을 계산하는 방법이다. 선형화된 Gibbs free energy 함수를 필요로 하지 않고 dilute component의 영향도 고려될 수 있으면 또한 동일한 system에 대하여 nonstoichiometric algorithm 보다 일반적으로 적은 양의 메모리를 필요로 하는 장점이 있다. 하지만 이 방법에서는 값이 선형적으로 찾아들어간다. 한점으로부터 일정한 전이 규칙을 통해 다른 한점으로 이용하여 간다. 이러한 방법은 극값이 여러 개 존재할 때 초기 값의 설정에 따라 궁극적인 최적치가 아닌 지역적인 최적값으로 유도할 수 있는 위험성이 내포되어 있다. 그래서 동시에 여러 점을 이용하여 탐색하여 최적의 값을 찾는 GA를 사용하여 이를 보완하였다.

연구내용

본 연구에서 원소 및 화합물의 수지식들로부터 산출되는 반응평형상수를 구할 때 모든 경우의 수를 적용을 하기란 불가능한 일이기 때문에 최적의 해답을 낼 수 있는 GA를 이용하여 이 프로그램을 만들었다.

GA란 자연도태(natural selection)와 자연 유전학(natural genetics)의 역학에 기초를 둔 유전 알고리즘(Genetic Algorithm)은 J. Holland (1975)에 의해 도입되었고 자연계의 적응과 진화를 인공적으로 modeling할 수 있도록 개발되어졌다. 이 유전알고리즘은 여러 개의 peak를 가진 탐색공간(multimodal search space)에서 병렬탐색을 하기 때문에 잘못된 피크를 타올 확률을 낮추어 줄 수 있다. 또한 최적해에 대한 발견속도를 증가시키고 복잡한 탐색공간에서 지역 최적해에서 벗어나는 것을 도와주기 때문에 효율적이고 강건한 검색 기법으로 주목을 받고 있는 최적화 기법이다.

이 유전 알고리즘은 게임이론에서부터 기계설계까지 다양한 응용에서 널리 사용되어지고 있다. Goldberg(1978a, 1987b)는 천연가스 pipeline 최적화 문제에 유전 알고리즘을 적용한 바가 있으며, Krishnakumar and Goldberg(1992)는 제어시스템에 대한 최적화에 유전 알고리즘을 적용한바있다.

유전 알고리즘은 인공 개체에 집단 속에서 적자의 생존을 수행하며 매 세대마다 새로운 개체의 집단을 부모집단의 유전자 재조합과 돌연변이에 의해 재생하는 구조를 이루고 있다. 이러한 구조는 확률적인 기원의 결과로부터 기인하는 전역탐색 기법을 이룰 수 있기 때문에 전통적인 최적화 알고리즘의 큰 단점 중의 하나인 지역 탐색을 극복할 수 있다. 그러나 이 방법은 단순한 무작위 탐색 방법이 아니고 높은 성능 향상 확률을 가지고 탐색 공간의 새로운 영역을 탐험하기 위해 빠르고 효과적으로 과거의 정보를 활용하게 된다. 이러한 유전 알고리즘의 순서도는 그림 1에 나타내었다.

본 연구에서는 stoichiometric 알고리즘에서 한점으로부터 일정한 전이 규칙을 통해 다른 한점으로 이용한 부분을 GA를 사용하여 계산하도록 하였다. 기존의 프로그램에 사용되어진 것은 탐색 방향 결정 규칙을 사용하면서 하나의 위치에서 다음 위치로 이동한다. 이로 인해 극점이 여러 개가 존재할 경우 가장 최적의 값을 찾지 못하는 경우가 생긴다. 이 문제를 해결하기 위해 동시에 여러 점을 이용하여 탐색하여 최적의 값을 찾는 GA를 사용한 것이다.

처음에는 stoichiometric 알고리즘을 이용하여 첫 번째 값을 구한 다음 값을 구할 때 GA를 이용하여 10개의 값이 임의로 생성하여 값이 구해진다. 이러한 이유는 처음으로 프로그램이 돌아갈 때는 mole이 실제 실험에 사용되어진 mole이 들어가서 계산되어지기 때문에 그 다음 값으로 변화할 때에 GA를 사용하도록 하였다.

하나의 mole값으로 10개의 임의의 mole값을 생성시킨 뒤 목적함수로 각 화학 반응의 gibbs free energy 변화로부터 산출되는 반응평형상수들에 원소 및 화합물의 수지식들로부터 산출되는 반응평형상수들을 뺀 값을 이용하였다.

한번의 들어가는 mole의 개수가 최대 50개가 된다. 이에 gene을 50개, 집단의 크기를 10개로 하였다. 50개의 gene 속에 각각의 원소에 대한 mole이 들어가게 된다. 이 때 차수의 수가 커서 같은 gene 속에 넣기가 힘들었다. 그래서 다른 gene으로 만들어 나중에 계산할 때 다시 합쳐지도록 하였다.

gene 속에는 개개의 값들이 들어가기 때문에 각각의 값들 모두가 교배가 이뤄 져야 한다. 그러기 위해서 하나의 gene 속에 있는 값을 이진수를 만들어 새로운 gene을 만들었다. 그리고 교배를 시킨 다음 다시 10진수로 만들어 그 값을 사용하도록 하였다.(그림2참고) 차수로 만들어진 또한 각각의 수가 이진수가 되어 교배를 한 다음 다시 십진수 형태로 만들어 주었다. random으로 수를 만들 때와 교배를 시킨 다음에는 50개의 mole 합이 1이 되도록 하였다.

결론

각 화학 반응의 gibbs free energy 변화로부터 산출되는 반응평형상수들과 원소 및 화합물의 수치식들로부터 산출되는 반응평형상수들을 비교하여 허용오차범위 내에 들어올 때까지 반복 계산하여 최적의 평형 조성을 계산한다. 여기서의 GA를 한 부분 조성의 변화에 대해서만 작용한다. 조성을 일정하게 더하거나 빼주는 방식이 아니라 여러 개의 변수들을 사용하여 계산되어진다. 이들 변수들은 초기값에 의존하여 10개가 만들어지고 그 후에 반복할 때는 유전알고리즘의 의해 변화되어진 변수가 이용되게 되는 것이다. 조성을 입력하여 각 온도에 따른 조성의 변화를 예측할 수 있으며, 시뮬레이션 한 값과 실험값을 비교하여 한 온도에서 이 반응이 평형상태에 도달하였는지도 예측할 수 있다. 또한 먼저 시뮬레이션을 하여 어떠한 물질이 생성되는가는 예측할 수 있으면 실험에 필요한 비용 및 시간을 절약하게 된다.

감사의 글

본 연구는 영남대학교 연구조교 지원에 의해 이루어진 것이며, 연구조교 장학금을 지급해주신 영남대학교에 감사드립니다. 또한 도와주신 교수님을 비롯해 많은 연구실의 선배님들께 감사를 드립니다.

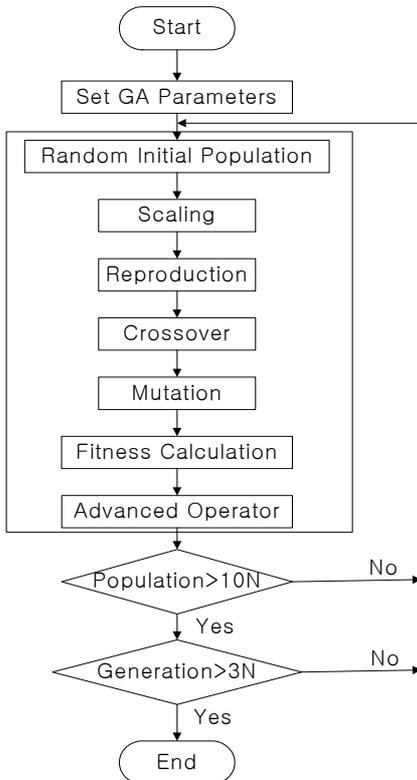


그림 1. 최적화를 수행하기 위한 유전 알고리즘의 순서도

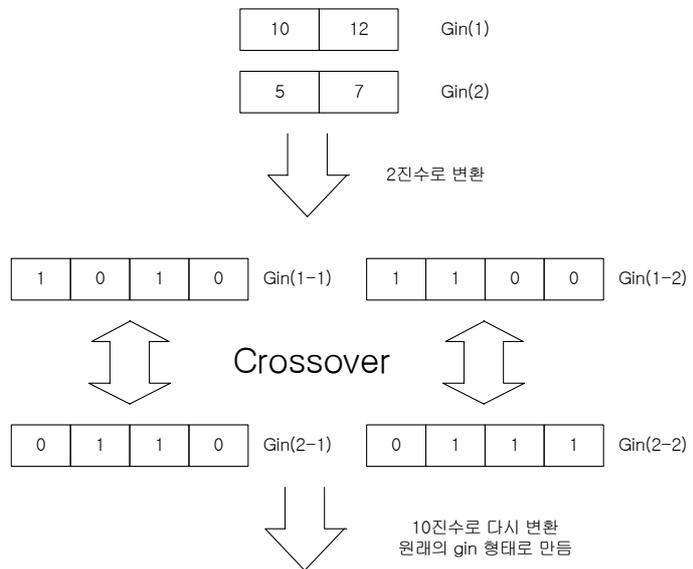


그림 2. 교배형태

