# 비선형 최적화 문제를 풀기 위한 Homotopy 방법

# A homotopy method for solving nonlinear optimization problems

한규식, 이대원, 이재욱
(우편번호 : 790-784) 경상북도 포항시 남구 효자동 산31번지
포항공과대학교 산업공학과
Email :swallow@postech.ac.kr

**Abstract**

기존의 도함수에 기초한 수치적 최적화 기법들(derivative-based optimization)은 비선형 최적화 문제를 풀기 위해 목적식의 1차 도함수의 정보를 이용하여 정류점(stable point)인 최적해를 찾아 나가는 방식을 취하고 있다. 그러나 이런 방법들은 목적식의 국부 최적해(local minimum)을 찾는 것은 보장하나, 전역 최적해(global minimum)를 찾는 데에는 실패할 경우가 많다. 국부 최적해와 전역 최적해는 모두 목적식의 1차 도함수가 '0'인 값을 가지는 특징이 있으므로, 국부 또는 전역 최적해를 구하는 구하는 과정은 목적식의 1차 도함수가 '0'인 해를 찾는 방정식 문제로 변환될 수 있다. 따라서 본 논문에서는 비선형 방정식의 해를 찾는데 좋은 성능을 보이는 Homotopy 방법을 이용하여 목적식의 1차 도함수에 관한 비선형 방정식을 풀고, 이를 통해 비선형 최적화 문제의 모든 국부 최적해를 찾아냄으로써 전역 최적화 문제를 해결하는 방법을 제안하고자 한다. 제안된 방법론을 다양한 전역 최적화 문제에 적용한 결과, 기존의 방법들에 비해 더 좋은 성능을 보임을 알 수 있었다.

***Keywords***: Derivative-based optimization, Nonlinear optimization, Nonlinear equation, Homotopy

## 1. 연구배경

공학, 자연과학 및 경영과학분야의 설계 및 모델링 문제를 해결하기 위해 많은 최적화 기법들이 연구, 개발되어 왔다. 최근에 와서는 컴퓨팅 기술의 발달로 규모가 큰 최적화 문제를 해결하는 것이 가능해져 전역 최적화에 대한 관심이 높아지고 있는 추세이다. 이런 추세에 발맞춰 전역 최적해를 보장하는 유전자 알고리즘(Genetic Algorithm, GA)이나 냉각 모사기(Simulated Annealing, SA) 등의 전역 최적화 기법이 개발되었으나, 수렴 속도가 너무 낮아 실제 문제의 해결에 있어서는 자주 사용되지 않는다. 그래서 여전히 대부분의 최적화 문제는 비선형 수리 계획법(nonlinear programming algorithm)을 이용한 국부 최적해를 찾는 전략을 사용하는데, 이는 1차 도함수의 정보를 사용, 정류점을 찾아 목적식의 해에 도달하는 방법을 이용함으로써 수렴 속도면에서 전역 최적화 기법보다 월등히 나은 성능을 보인다. 이 방법 역시 전역 최적해를 찾는데 실패하는 경우가 많아 이를 극복하기 위해 다중 시작점 전략(Multi-starting point strategy), 터널링(Tunneling) 기법 등이 함께 사용되고 있다. 그러나 이들도 전역 최적해를 항상 보장할 수 없으며, 찾는다 하더라도 찾기까지 상당히 많은 시간을 요구하게 된다.

따라서 본 논문에서는 전역 최적해를 효과적으로 찾으면서 시간을 적게 소요하는 새로운 최적화 기법으로서 Homotopy를 이용한 비선형 최적화 문제 해결 기법을 제안하고자 한다. 즉, 최적화 문제의 특징 중 하나인 목적식의 1차 도함수가 '0'이 된다는 성질과 본래 비선형 방정식을 해결하는데 사용되는 방법인 Homotopy 방법을 결합함으로써 보다 많은 정류점을 효과적으로 탐색하여 전역 최적해를 구하였다.

## 2. 비선형 문제를 풀기 위한 기존의 방법론들

비선형 최적화 문제는 크게 비제약(Unconstrained) 최적화 문제와 제약(Constrained) 최적화 문제로 나눌 수 있는데, 이 중 본 논문에서 다루는 것은 비제약 최적화 문제이다. 이를 수학적 모형으로 바꿔 간단하게 표현하면,

$$Minimize\ f(x); x \in R^n \qquad (1)$$

와 같고, 위 식이 국부 또는 전역 최적해를 가지기 위한 필요 조건은

$$\nabla f(x) = 0 \qquad (2)$$

이를 풀기 위해 최대 경사법(Steepest Descent), 뉴튼

(Newton) 방법 등을 사용한다. 이런 방법들은 국부 최적해는 보장하지만, 전역 최적해의 탐색에는 효과적이지 않다. 이런 단점을 극복하기 위해 다중 시작점 전략 또는 터널링이 많이 쓰이는데, 다중 시작점 전략은 여러 임의의 점을 초기값으로 하여 국부 최적화 기법을 반복 사용함으로써 전역 최적해를 찾고자 하는 방법이다. 터널링은 해당 목적식 $f(x)$의 모든 정류점 $x_{eq}$에서 $|\partial f(x_{eq})/\partial x| < \infty$를 가정함으로써, $x_{eq}$에서 하나의 방향을 정하여 Perturbation $(\epsilon_i, |\epsilon_i| \ll 1)$을 주고 다시 기존 최적화 기법을 사용하면, $f(x)$의 다른 정류점으로 유한한 Time-step안에 수렴하게 된다는 원리에 바탕을 둔 것이다. 즉,

$$dx_i \big/ dt = \alpha(x_i - x_i^*)^{1/3} \tag{3}$$

위의 식에서 $\alpha$는 학습 구간(learning step length)을, $x_i^*$는 가장 마지막에 구한 국부 최적해를 의미한다. 그리고 $x_i = x_i^* + \epsilon_i$가 되도록 하면서 식(3)을 수치적으로 적분하면서 또 다른 국부 최적해를 찾아가는 방식이 터널링이다. 그러나 위의 두 방법들을 이용하더라도 전역 최적해를 찾는 것은 쉽지 않다.

### 3. 비선형 최적화 기법으로서의 Homotopy

본 논문에서는 기존의 방법보다 효과적으로 전역 최적해를 찾는 방법으로 Homotopy의 이용을 제안하고자 한다. Homotopy는 비선형 방정식에 대한 정보가 주어지지 않는 경우에 그 해를 찾는데 유용한데, 다음과 같은 방법으로 해를 구하게 된다. 상수 a에 대하여,

$$r : R^n \to R^n, r(x) = 0, \lambda \in R \tag{4}$$

$$\Rightarrow H(x, \lambda) = \lambda r(x) + (1 - \lambda)(x - a) = 0 \tag{5}$$

$$\lambda = 0; H(x, 0) = x - a = 0,$$

$$\lambda = 1; H(x, 1) = r(x) = 0$$

따라서 식(5)을 만족시키는 $(x, \lambda)$의 Zero path를 구하게 되면 $\lambda = 1$일 때의 x가 모두 본 문제 식(4)의 해가 되는 것이다. Zero Path의 모델링은 $(x, \lambda)$의 arc length를 나타내는 변수 s를 이용하여 다음과 같은 방법으로 이루어진다.

$$H(x(s), \lambda(s)) = 0 \quad for \quad ^\forall s \geq 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x} H(x, \lambda)\dot{x} + \frac{\partial}{\partial \lambda} H(x, \lambda)\dot{\lambda} = 0 \tag{6}$$

$$where \ (\dot{x}, \dot{\lambda}) = \left(\frac{dx}{ds}, \frac{d\lambda}{ds}\right), \ \|\dot{x}(s)\|^2 + \|\dot{\lambda}(s)\|^2 = 1$$

여기서 $(\dot{x}, \dot{\lambda})$는 Zero path의 접선 벡터가 되며, nx(n+1) 행렬 $\left[\frac{\partial}{\partial x}H(x,\lambda) \ \frac{\partial}{\partial \lambda}H(x,\lambda)\right]$의 Null space가 된다. 이는 식(6)를 QR factorization을 이용하여 선형 미분방정식을 풀어서 구할 수 있다. 그리고 Zero path는 수치적으로 구하되 PC(Predictior-Corrector) 방법을 사용한다. 즉,

$$(x^p, \lambda^p) = (x, \lambda) + \varepsilon(\dot{x}, \dot{\lambda})$$

$$\|(x^+, \lambda^+) - (x^p, \lambda^p)\| = \min_{H(x,\lambda)=0} \|(x, \lambda) - (x^p, \lambda^p)\|$$

여기서 ε는 Perturbation 상수이다.

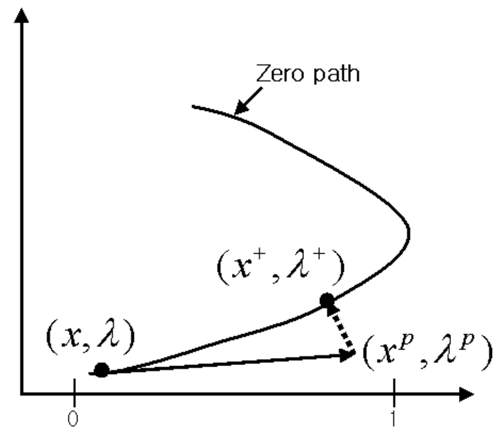


**그림 1.** PC을 이용한 Zero path의 생성

특별히 식(4)의 $(x - a)$가 $r(x_1)(x_1 \in R^n)$이고, $x_1$이 상수 벡터인 경우에는 전역 Homotopy라고 부르며, 해를 찾아가는 과정은 앞의 설명과 동일하다.

여기서 식(2)를 비선형 방정식으로 생각하여 전역 Homotopy를 적용시키면 기존의 수치적 방법보다 많은 정류점을 구할 수 있게 되어 전통적인 국부 최적해 기법보다 전역 최적해를 훨신 효과적으로 찾을 수 있게 되는 것이다. 다음의 예제는 주어진 구간에서 비선형 방정식의 해를 찾는데 있어서 전역 Homotopy가 사용되는 예이다.

$F: R^2 \rightarrow R^2$, $F(x) = (F_1(x), F_2(x))$

$$F_1 = 4x_1(-1+x_1^2+x_2^2)+16x_1(-1+2x_1^2)\left\{-2/3+(-1+2x_1^2)^2+(-1+2x_2^2)^2\right\}$$

$$F_2 = 4x_2(-1+x_1^2+x_2^2)+16x_2(-1+2x_2^2)\left\{-2/3+(-1+2x_1^2)^2+(-1+2x_2^2)^2\right\}$$

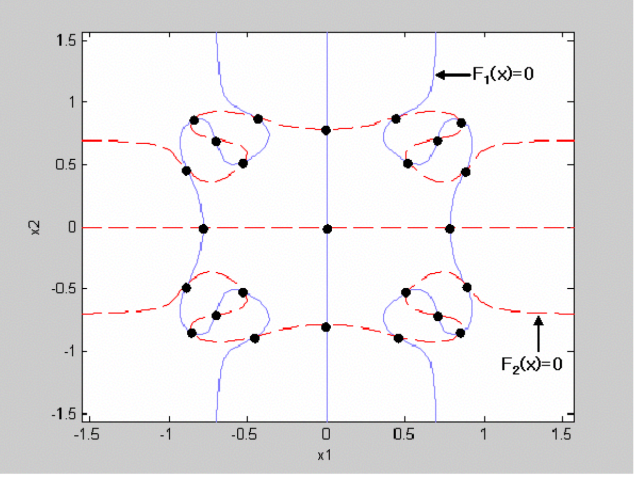


**그림2.** F(x)=0을 만족시키는 x의 분포

위의 그림은 우선 해를 구하기 전에 해가 어떤 형태로 존재하는지를 알아보기 위해 그린 그림이다. 위의 예에서는 총 25개의 해가 존재함을 알 수 있다. 이를 하나의 초기점 (1.5,1)을 사용하여 전역 Homotopy를 이용하면 **그림2.** 과 같이 25개의 해를 모두 찾을 수 있다. 예제에서 보는 것처럼 해의 분포가 복잡하게 이루어져 있는 경우, 기존의 수치적 방법으로는 구하기 어려우나 Homotopy를 이용하면 하나의 초기점으로도 모든 해를 구할 수 있게 된다.

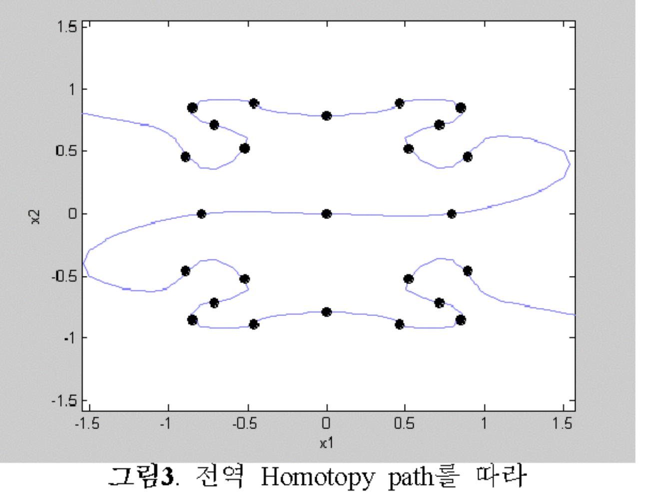


**그림3.** 전역 Homotopy path를 따라 예제의 해를 모두 찾은 모습

## 4. 수치예제 실험 결과

2절에서 전역 최적해를 찾는 방법으로 제안한 전역 Homotopy 방법의 성능을 평가하기 위하여 CA, GP ,RA, SH ,BR ,H3/6, Sqrn5/7/10 등 10가지의 벤치마킹 최적화 문제를 사용하여 다중 시작점 전략, 터널링 기법, 그리고 Homotopy 방법을 서로 비교, 분석하였다.

### 4.1 수치예제 설명

대부분의 최적화 문제 해결의 새로운 방법의 성능을 평가하기 위해 벤치마킹 문제가 사용된다. 본 논문에서 사용된 벤치마킹 문제에 대한 정보는 **표2.** 에 정리되어 있다.

### 4.2 실험 결과

**표1.**은 **표2.**에 있는 10개의 최적화 벤치 마킹 문제에 대하여 전역 Homotopy, 다중 시작점 전략, 터널링 등 3가지 방법으로 주어진 구간 내의 최적 전역해를 찾을 때 까지 반복된 총 함수 call 횟수의 평균을 정리해 놓은 것이다. 실험 결과, 전역 Homotopy 방법 역시 모든 벤치 마킹 문제에 대해서 전역 최적해를 찾아내었으며, 그 성능 역시 벤치마킹 문제의 복잡도에 관계없이 모두 평균함수 call 횟수 10번 이내에 전역 최적해를 찾아내는 것으로 보아 다른 두 가지 방법에 비해서 월등히 좋은 것으로 나타났다.

| 데이터 | 전역 Homotopy | 다중 시작점 전략 | 터널링 |
|---|---|---|---|
| CA | 1 | 11 | 21 |
| GP | 9 | 5 | 169 |
| RA | 4 | 96 | 133 |
| SH | 1 | 18 | 43 |
| BR | 1 | 6 | 6 |
| H3 | 1 | 3 | 9 |
| Sqrn5 | 1 | 62 | 244 |
| Sqrn7 | 1 | 45 | 154 |
| Sqrn10 | 1 | 19 | 76 |
| H6 | 1 | 2 | 14 |

**표2.** 실험 결과

## 5. 결론 및 토의

본 논문에서는 비선형 최적화 문제에서 전역 최적해를 찾는 새로운 방법을 제안하였다. 즉, 그레디언트(Gradient) 방법이나 뉴튼(Newton) 방법 등 전통적 도함수 기반의 국부 최적화 기법이 하나의 국부 최적해로만 수렴하는 약점을 보완하기 위하여, 비선형 방정식의 해결에서 뛰어난 성능을 보이는 Homotopy 방법을 1차 도함수의 정보와 결합함으로써 하나의 초기값으로도 많은 정류점을 구하여 기존의 방법보다 전역 최적해에의 수렴 가능성을 높인 방법을 제시하였다. 제안한 방법을 최적화 벤치

**표2. 최적화 벤치 마킹 문제에 관한 정보**

| 데이터 | 차원 | 구간 | 최소값 | 최적해 |
|---|---|---|---|---|
| CA | 2 | $-3 < x_1 < 3$, $-2 < x_2 < 2$ | -1.0316 | (0.0898,-0.7126) |
| GP | 2 | $-2 < x_1, x_2 < 2$ | 3 | (0,-1) |
| RA | 2 | $-2 < x_1, x_2 < 2$ | -2 | (0,0) |
| SH | 2 | $-10 < x_1, x_2 < 10$ | -186.7309 | (-0.8003,-1.4251) |
| BR | 2 | $-5 < x_1 < 10$, $0 < x_2 < 15$ | 0.3979 | (9.42,2.475) |
| H3 | 3 | $0 < x_1, x_2, x_3 < 10$ | -3.86 | (0.115,0.555,0.852) |
| Sqrn5 | 4 | $0 < x_1, x_2, x_3, x_4 < 10$ | -10.14 | (4,3.998,3.991,3.996) |
| Sqrn7 | 4 | $0 < x_1, x_2, x_3, x_4 < 10$ | -10.39 | (4.009,4.001,4.007) |
| Sqrn10 | 4 | $0 < x_1, x_2, x_3, x_4 < 10$ | -10.53 | (3.995,4.005,4,3.996) |
| H6 | 6 | $0 < x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6 < 1$ | -3.32 | (0.201,0.15,0.477,0.275,0.312,0.657) |

마킹 문제에 적용한 결과 10개의 문제에서 모두 전역 최적해를 찾아 성능면에서 더 낳은 성능을 보였음을 알 수 있었다. 본 논문에서 제안한 Homotopy을 통한 비선형 문제의 최적화 기법은 많은 정류점을 찾는다는 사실에서 전통적인 최적화 기법으로는 찾기 힘든 안장점(saddle point)을 Homotopy 방법으로 쉽게 찾을 수 있다는 점을 유추해 볼 수 있다.

한편, Homotopy 방법은 초기값에 따라 찾아내는 정류점의 위치와 그 개수가 달라지게 된다. 따라서 초기값의 적합한 설정에 대한 체계적 연구가 추후에 이루어야져야 할 것으로 생각된다.

## 참고 문헌

[1] Jaewook Lee, Hsiao-Dong, "Constructive Homotopy Methods for Finding All or Multiple DC Operating Points of Nonlinear Circuits and Systems," IEEE Trans. Circuits and Systems - I:Fundamental Theory And Applications, vol. 48, No. 1, January 2001.

[2] A. Dyess, E. Chan, H. Hofmann, W. Horia, Lj. Trajkovic, "Simple Implementations of Homotopy Algorithms For Finding DC Solutions Of Nonlinear Circuits", Computing Research Association Distributed Mentor Project and National Science Foundation

[3] Jorge Nocedal, Stephen J. Wright, "Numerical Optimaization", New York, NY: Springer, 1999

[4] J.D.Lambert, "Numerical methods for ordinary diferential equations: the initial value problem." New York, NY: John Wiley, 1991

[5] J. Barhen, V.Protopopescu, and D. Reister, TRUST: A deterministic algorithm for global optimization, Science, vol. 276, pp. 1094-1097, 1997.