

## Nelder-Mead 심플렉스 알고리즘의 수렴에 관한 수치실험

### Numerical Experiment for the Properties of Nelder-Mead Simplex Algorithm Convergence

현 창 현\*                    이 병 기\*\*  
Hyun, Chang-Hun            Lee, Byeong-Ki

#### Abstract

To find the optimal solution as rapidly and exactly as possible with Nelder-Mead simplex algorithm, the present values of the reflection, expansion, contraction and/or shrink parameters of this algorithm are needed to be changed at appropriate time during the search process. The reflection parameter is selected in this study in order to be changed because reflection, expansion and contraction process can be simultaneously effected by only this parameter. Two independent indices for determining whether the present value of the reflection parameter of this algorithm should be changed or not during the search process are suggested in this study. Those indices were made of the equations of Nelder-Mead simplex algorithm's convergence criterion and Dennis-Wood's convergence criterion, respectively. It is appeared that the optimal solution can be find with smaller numbers of objective function evaluation than the original Nelder-Mead's one with fixed parameter when the those indices are used during the search process. and the more remarkable reduction effect of the number of an objective function evaluation can be obtained when the latter index is used.

키워드 : Nelder-Mead 심플렉스 알고리즘, 수렴, 반사계수  
Keywords : Nelder-Mead Simplex algorithm, Convergence, reflection parameter

#### 1. 서론

최적화 문제에서 함수의 값만을 이용하여 최적해를 탐색해나가는 직접 탐색법의 하나인 Simplex algorithm은 Spendley et al[1]이 처음 제안하였고, 1965년 Nelder-Mead[2]가 그것을 개량하여 발표하였다. 이 이후로 비선형 비구속 최적화 문제풀이에 가장 널리 사용되어오는 알고리즘들 중 하나가 되었다.[3] 그 후 수많은 연구자들에 의해서 다루어졌고, 그들 중에서 교과서 및 기타 문헌에 자주 인용되어 우리가 쉽게 접하게 되는 것으로는

Rekaritis et al[4], Dennis-Woods[5], Rao[6], J. C. LAGARIAS[7], 최영일[8]등을 들 수 있다.

Spendley et al이 제안한 알고리즘에는, 초기에 형성된 simplex를 진 탐색과정을 통하여 그대로 사용하였다. 이 심플렉스의 크기와 형태는 수렴에 지대한 영향을 끼치게 된다. Nelder-Mead는 심플렉스를 탐색과정 도중에 변경시키기 위해 반사, 확장, 축소, 수축과정을 추가하였다. 그러므로써, 더 빨리 정확히 수렴함을 보였다. 이런 반사, 확장, 축소, 수축과정에는 새로운 심플렉스를 형성하는 데 사용되는 매개변수들이 포함되어있다. 수렴이 잘 되는 한, 탐색 처음에 정해놓은 각 값들이 변경 없이 전 과정을 통해 사용된다.

최적화 문제마다 목적함수들의 형태가 다르고 심플렉스의 이동경로가 무수히 다르기 때문에 반사,

\* 강원대학교 기계·메카트로닉스공학부 교수

\*\* 강원대학교 대학원 기계공학과 석사과정

확장, 축소, 수축의 정도를 얼마만큼 수행함이 좋은지는 경우마다 달라진다. 이렇게 수시로 변경되는 상황에서 매개변수 값을 고정시켜 놓으면 상황 변화의 대응은 잘 안될 것임을 쉽게 짐작해볼 수 있다.

어떻게든 매개변수를 탐색과정의 도중의 상황에 적용하여 변경시키는 것이 수렴속도향상에 좋다는 것은 짐작할 수 있으나, 어떤 경우에 얼마만큼의 값으로 변경시켜야 하는지는 알 수 없었다.

이런 연구를 위해 최근에는 지나간 탐색과정에서의 자료를 활용하여 보면 어떻게 하는 생각들을 하게 되었다. 즉, 탐색과정 중 새로운 심플렉스를 형성하고자 할 때 그 시점 바로 전의 심플렉스 형태로부터 얻어진 일부 자료를 활용하는 것이다. 그 하나의 제안으로는 다음과 같다.

심플렉스의 기울어진 정도에 대한 정보를 이용하는 것이다. 즉, 심플렉스 각 꼭지점에서 그에 대응되는 목적함수 값을 계산한다. 그 후 그들 중 가장 큰 것과 가장 작은 것의 차이 값을 구하고 산출된 것을 가장 작은 것의 값으로 나눈다. 이 계산 결과 값은 기울어진 정도를 가늠할 수 있는 지표로 볼 수 있다. 이것을 새로운 심플렉스 형성을 위한 입력 자료로 사용한다는 것이다. 이 자료를 소위 퍼지 제어기에 넣어 처리한 후에 출력된 자료를 새로운 심플렉스의 형태를 결정짓는 매개변수의 값으로 사용한다는 것이다. 이런 식으로 탐색과정 중 수시로 매개변수 값을 변경시켜, 더욱 빨리 최적 값에 도달할 수 있도록 하는 연구가 있다.[9][10]

새로운 심플렉스를 형성하고자 할 때, 위의 언급된 연구들에서와 같이 지나간 탐색과정에서의 자료를 활용한 지표를 만들어 사용하면 좋은 것임은 알지만, 어떻게 의미 있는 지표를 만들어내고 어떻게 사용하느냐 하는 것은 쉬운 일이 아니다.

본 연구에서는 그런 지표로 다음 2개를 제안 한다. 그 하나는 탐색과정 중 어느 순간의 위치에서 형성된 심플렉스의 각 꼭지점에 대응하는 목적함수값들의 표준편차 값이다. 이 표준편차는 Nelder-Mead의 심플렉스 알고리즘에서 수렴판정 조건으로 채용하고 있는 식으로 표현되는 것과 동일하다.

또 다른 하나는 Dennis-Woods가 그의 연구에서 수렴판정 조건으로 채용하고 있는 식으로 표현되는 심플렉스의 크기를 제안한다.

이 두 지표는 알고리즘의 탐색과정에서 모두 함께 사용되어지는 것은 아니다. 전 과정을 통하여 한 종류의 지표만 독립적으로 사용할 수도 있고 또는 혼합하여 사용될 수도 있다. 본 연구에서는 한 종류만 독립적으로 사용하기로 한다.

이 지표의 크기가 이동 중 어느 이하가 되면 최적 점 부근에 도착하였음을 인식하고, 그 순간 매

개변수 값을 변경할 것이다. 이런 처리가 과연 수렴속도 향상에 효과가 있을 지 확인해보기 위해 우선 다음의 실험내용을 수행한다.

먼저, 시험함수를 18개 선정하고 각 시험함수에 대해서 지표의 크기를 매 순환 과정마다 계산한다. 그 값이 임의로 지정한 검사값-1이 되면 매개변수 값을 변경시킨다. 이 후 탐색과정을 계속하고 수렴판정조건 상한값에 도달해서 심플렉스 이동이 멈추게 됐을 때야 그 동안의 목적함수 계산수를 얻어낸다.

동일한 작업으로, 다시 임의로 지정한 검사값-2에서 매개변수 값을 변경을 했을 때 수렴판정조건상한값에 도달하기까지의 목적함수계산수를 얻어낸다. 이렇게 임의로 지정한 검사값들을 계속 감소시켜가면서 마지막에는 수렴판정조건 상한값과 같을 때 까지 동일한 작업을 한다.

이런 과정을 통하여, 기존의 방법보다, 본 연구에서의 제안처럼, 목적함수 최적점 근방에 심플렉스가 접근하면 바로 매개변수 값을 적절히 변경시키고 나서 계속 탐색 시켜나가면, 훨씬 적은 수의 목적함수 계산수로 수렴판정조건을 통과하게 됨, 즉 더 빨리 수렴함을 밝히려려고 한다.

다음 실험내용은, 위에 언급된 실험과정으로 만들어지는 최종 심플렉스 꼭지점의 수렴값과 그들에 대응되는 목적함수의 최종수렴값에 주목하고 그 값들을 채워하여 기록한다. 기록된 자료를 관찰해 봄으로써, 그들의 조밀한 정도 즉 정밀도는 주어진 수렴판정조건 상한값 범위 내에서 보장되지만 정확도는 그렇지 않음을 보이려 한다.

이렇게 두 내용의 실험을 통하여, 목적함수의 최종 수렴값에 대하여 정밀도와 정확도 모두를 적절한 수준에서 얻기 위해서는 다루어야 할 다음 문제를 제기하려고 한다.

## 2. 심플렉스의 이동속성

Nelder-Mead 심플렉스 알고리즘의 탐색과정 중에서 확장(Expansion)과정이 심플렉스를 크게 움직이게 하는 과정이라면, 축소(Contraction), 수축(Shrink)과정은 현재 심플렉스의 크기를 줄이는 과정이다. 수많은 실험을 통하여 다음을 알 수 있었다.

(1) 초기부터 최적 점 가까운 곳에 도달하기 전까지 과정에는 심플렉스가 최적 점을 향해 이동해야 하므로 확장과정이 축소, 수축과정보다 상대적으로 많이 일어난다.

(2) 초기부터 단 몇 번의 확장, 축소, 수축과정 반복과정으로도 최적점 근방으로 접근한다.[11] 즉, 알고리즘 수행에 필요한 목적함수계산의 대부분은

최적 점 근방에 도착한 심플렉스를 기초해서 이루어진다.

(3) 최적 점 근방에 도달하게 되면 심플렉스의 크기는 아주 작아진 상태이다. 그리고, 이후부터 매 순환과정 마다 새로이 형성되는 심플렉스의 크기는 변화가 완만하다.

(4) 최적점 근방부터는 확장과정 보다는 축소, 수축과정이 상대적으로 많이 일어난다. 이는 주어진 수렴판정조건을 만족시키기 위하여 심플렉스 크기가 줄어들어야 하기 때문이라 추정된다.

이상으로부터 다음 사실을 유추할 수 있다.

심플렉스가 최적점 주위에 도달하면, 그 크기를 가능한 빨리 축소시켜나가는 수렴속도를 높일 수 있다.

알고리즘에 내포된 이 속성을 잘 이용하려면, 구체적으로 다음을 알 수 있어야 한다.

첫째, 심플렉스 이동 중의 어느 위치가 목적함수의 최적 점 근방인지 알 수 있어야 하고,

둘째, 심플렉스의 크기를 빨리 줄여나기 위해서는 확장, 축소, 수축과정의 매개변수 값들을 구체적으로 어떤 값으로 변경 해주어야 하는 지 알아야 한다.

첫째 질문에 답하기 위해서 검사용 지표는 서론에서 언급한 것처럼 2종류이다.

즉, 지표를 나타내는 물리량으로는 기존알고리즘의 수렴판정조건과 동일한 식으로 사용하였다. 본 연구에서 다루는 수렴판정조건의 종류는 2가지이다. 첫 번째 것은 심플렉스의 각 꼭지점의 좌표 값으로 산출된 목적함수의 값들의 표준편차이며, 둘째 것은 Dennis-Woods가 제안한 것으로서 설계변수들로 이루어진 심플렉스 크기이다.

그 수식들은 다음과 같다.

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=0}^n \left( f(\mathbf{x}_i) - \frac{\sum_{i=0}^n f(\mathbf{x}_i)}{n+1} \right)^2}{n+1}} < \epsilon \quad (1)$$

$$(1/\Delta) \max_i | \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1 | \leq \epsilon, \quad (\text{단, } \Delta = \max(1, | \mathbf{x}_1 | )) \quad (2)$$

(단,  $f(\mathbf{x}_i)$ : 목적함수값,  $\epsilon$ : 허용오차,  $n$ : 설계변수의 개수,  $| \cdot |$ : Euclidean norm,  $\max_i$ : 현재 심플렉스 꼭지점들 중에서  $\mathbf{x}_1$ 와 꼭지점  $\mathbf{x}_i$ 의 거리 즉, Euclidean norm 중 가장 큰 값)

이들의 좌변식들을 사용하여 산출한 값을 검사를 위한 값을 이하 검사값이라 부르기로 한다. 이 값이 어느 이하(항목 3에 기술됨)가 되면 최적 점 근방에 도착하였다고 인식하고 바로 매개변수 값이

변경되도록 할 것이다.

둘째 질문 내용 즉, 가능한 빨리 심플렉스 체적을 줄이기 위한 설명을 해나가기 위해서는 우선 관계되는 확장, 축소, 수축과정의 매개변수들이 어떻게 연관되어있는지 살펴볼 필요가 있다.

$$\mathbf{x}_r = \bar{\mathbf{x}} + \rho(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{n+1}) = (1 + \rho)\bar{\mathbf{x}} - \rho \mathbf{x}_{n+1} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{exp} &= \bar{\mathbf{x}} + \xi(\mathbf{x}_r - \bar{\mathbf{x}}) = \bar{\mathbf{x}} + \rho\xi(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{n+1}) \\ &= (1 + \rho\xi)\bar{\mathbf{x}} - \rho\xi \mathbf{x}_{n+1} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{co} &= \bar{\mathbf{x}} + \gamma(\mathbf{x}_r - \bar{\mathbf{x}}) = \bar{\mathbf{x}} + \rho\gamma(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{n+1}) \\ &= (1 + \rho\gamma)\bar{\mathbf{x}} - \rho\gamma \mathbf{x}_{n+1} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\mathbf{x}_{ci} = \bar{\mathbf{x}} - \gamma(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{n+1}) = (1 - \gamma)\bar{\mathbf{x}} + \gamma \mathbf{x}_{n+1} \quad (6)$$

$$\mathbf{x}_i = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_i) / \delta \quad (\text{단, } \mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_1) \quad (7)$$

(단,  $\mathbf{x}_r$ : 반사점,  $\mathbf{x}_{exp}$ : 확장점,  $\mathbf{x}_{co}$ : 외부축소점,  $\mathbf{x}_{ci}$ : 내부축소점,  $\mathbf{x}_i$ : 수축점,  $\mathbf{x}_{n+1}$ : 목적함수값이 가장 큰 꼭지점이며,  $\mathbf{x}_1$ 는 목적함수값이 가장 작은 꼭지점이다.  $\bar{\mathbf{x}}$ :  $\mathbf{x}_{n+1}$ 을 제외한 모든 점들의 중심점.  $\rho$ : 반사계수,  $\xi$ : 확장계수  $\gamma$ : 축소계수,  $\delta$ : 수축계수)

eq.3~eq.7은 Nelder-Mead 심플렉스 알고리즘의 탐색과정 중에 사용되는 반사, 확장, 수축, 축소과정에 사용되는 식이다.

이 식들을 가만히 볼 때 만일  $\rho < 1$ 인 값으로 채택한다면, 수축과정을 반복할 때 최종축소( $\rho\gamma$ ) 계수가 작아지게 되므로,  $\rho=1$ 로 고정해놓고 매개변수 ( $\gamma$ ) 자체를 줄여서 심플렉스 크기를 줄이는 것과 같은 효과를 얻을 수 있다. 아울러 반사과정도  $\rho < 1$ 을 적용받아 소규모로 축소가 이루어지게 된다. 투영에 관련된 두 과정, 즉 eq.4, eq.5로 표현되는 과정이 직접적인 효과를 보게 된다.

그러면 적절한  $\rho$ 를 무슨 값으로 하느냐하는 문제가 남아있다. 이를 위해 본 연구에서는  $\rho=0.01$ 에서  $\rho=0.9$  사이에 있는 여러  $\rho$ 의 값들을 적용 실험하여보았다. 그 결과 0.01쪽으로 갈수록 최종수렴 값이 불안정하였고 0.9쪽으로 갈수록 수렴속도에 영향이 적었다. 그래서 최적의 값이라 하기에는 무리가 있지만  $\rho=0.1$ 이면, 본 연구에서 제안하는 방법이 수렴속도에 끼치는 영향을 고찰 논의하는 데는 있어서 충분하다고 판단하여 이 값을 채용하기로 하였다.

표 1. 실험에 사용된 시험함수

번호	시험함수 명	초기 시작점	최종수렴 목적함수값	최종수렴 설계변수값
1	Rosenbrock	-1.2, 1.0	0.0	1.0, 1.0
2	Freudenstein and Roth	0.5, -2.0	48.9842	11.41, -0.8968
3	Powell Badly Scaled	0.0, 1.0	0.0	$1.098 \cdot 10^{-5}$ , 9.106
4	Brown Badly Scaled	1.0, 1.0	0.0	$10^6$ , $2 \cdot 10^6$
5	Beale	1.0, 1.0	0.0	3.0, 0.5
6	Jennrich and Sampson	0.3, 0.4	0.0	0.2578, 0.578
7	Helical Valley	-1.0, 0.0, 0.0	0.0	1.0, 0.0, 0.0
8	Bard	1.0, 1.0, 1.0	$8.21487 \cdot 10^{-3}$	0.082, 1.133, 2.343
9	Gulf R. and D.	5.0, 2.5, 0.15	0.0	50.0, 25.0, 1.5
10	Box 3-Dimensional	0.0, 10.0, 20.0	0.0	1.0, 10.0, 1.0
11	Powell Singular	3.0, -1.0, 0.0, 1.0	0.0	0.0, 0.0, 0.0, 0.0
12	Wood	-3.0, -1.0, -3.0, -1.0	0.0	1.0, 1.0, 1.0, 1.0
13	Linear	1.0, 1.0, 1.0, 1.0	0.0	-1.0, -1.0, -1.0, -1.0
14	Biggs EXP6	1.0, 2.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0	$5.65565 \cdot 10^{-3}$	1.7, 17.6, -8.1, 5.1, 1.7, 10.4
15	Extended Rosenbrock	-1.2, 1.0, -1.2, 1.0	0.0	1.0, 1.0, 1.0, 1.0
16	Extended Powell Singular	3.0 -1.0, 0.0, 1.0	0.0	0.0, 0.0, 0.0, 0.0
17	Variably Dimensioned	-3.0, -7.0, -11.0, -15.0	0.0	1.0, 1.0, 1.0, 1.0
18	Brown almost-linear	0.5, 0.5	0.0	1.0, 1.0

3. 검사값종류에 따른 목적함수계산수 변화 실험

실험에 사용되는 목적함수들의 명칭, 설계변수의 초기 시작값, 최종 수렴된 목적함수값, 그때의 설계 변수값이 표 1에 정리되어있다. 이 자료는 문헌 [12]에서 인용한 것들로써 문헌 속에는 36개의 시험함수가 있지만 그들 중 최종 수렴값들이 명확히 기술된 것만 선택 하였다.

이 시험함수들을 대상으로 앞으로의 실험진행은 다음과 같은 방법으로 한다.

- step 1. 소스코드 내용에 우선 수렴판정조건의 허용오차를  $10^{-8}$ 으로 고정시킨다.
- step 2. 검사용 수치값을  $10^0$ 으로 놓는다.
- step 3. 탐색과정의 진행도중에 eq.1 또는 eq.2로 표현된 지표 값을 계산한다.
- step 4. 이 값을 위의 검사용 수치값과 비교하여 만족이 되면  $\rho$ 값을 0.1로 변경시키고 탐색과정을 반복한다.
- step 5. 수렴판정조건  $10^{-8}$ 를 만족시키면 멈춘다.
- step 6. 그동안 목적함수의 계산횟수를 출력한다.
- step 7. 이상의 방법으로 검사값을  $10^{-1}$ 씩 감소시키면서  $10^{-8}$ 이 될 때까지 반복한다.

■ 실험 및 고찰-1 : (검사값식이 eq.1경우)

표 2는 위의 실험법으로 시행하여 얻은 eq.1 로 기술된 검사값의 크기에 따른 목적함수계산수를 나타낸다. 왼쪽 행의 번호는 표 1의 시험함수 번호이며, 상단의 수치는 검사값이다.

검사값이  $10^{-8}$ 인 경우는, 2차 수렴판정조건의 허용오차 역시  $10^{-8}$ 이므로  $\rho$ 의 값은 변경 없다.(함수 3, 9번 제외) 2차 수렴판정조건의 허용오차는 3번과 9번 함수를 제외한 모든 함수에  $10^{-8}$ 을 적용하였다. 이 값으로 충분히 진해를 얻을 수 있다. 그러나, 3번과 9번 시험함수 경우는  $10^{-12}$ 을 허용오차로 적용해야 진해를 얻을 수 있어서 이 값을 택했다.

표 2를 살펴보면, 일반적으로 심플렉스 크기가 클수록 함수계산수가 작아지고 있다. 함수계산수가 가장 많이 감소된 경우는 3번으로 621에서 69로 552나 감소했다. 그리고, 18번 함수는 59에서 31로 가장 적게 감소되었다. 이것은 함수마다  $\rho$ 값 변화의 영향이 다르다는 것을 뜻한다.

4번 함수의 경우는 허용오차가  $10^{-8}$ 일 때는 168이지만  $10^0$ 일 때는 279로 오히려 증가하였다. 이렇게 감소하다가  $10^0$ 에서 증가하는 경향을 보이는 함수로는, 4번, 6번, 12번, 14번, 16번, 17번 함수가 그러하다.

1번 함수의 경우  $10^{-8}$ 의 158부터 감소를 하다가  $10^{-5}$ 과  $10^{-3}$ 에서 144로 동일한 결과가 나왔다. 게다가  $10^{-8}$ 의 158부터  $10^{-2}$ 의 117까지 41회 감소하지만,  $10^{-2}$ 의 117에서  $10^{-1}$ 의 52회로 65나 감소되었다. 6번 함수도  $10^{-8}$ 에서부터  $10^{-2}$ 까지 18감

표 2. 검사값 eq.1에 따른 함수계산수

번호	검사값												
	$10^0$	$10^{-1}$	$10^{-2}$	$10^{-3}$	$10^{-4}$	$10^{-5}$	$10^{-6}$	$10^{-7}$	$10^{-8}$				
1	40	52	117	144	137	144	152	153	153				
2	37	55	58	65	70	75	78	87	90				
4	279	235	239	247	251	257	263	269	268				
5	32	38	42	49	53	62	65	70	73				
6	70	56	149	153	157	165	168	167	167				
7	59	116	113	155	172	180	188	196	201				
8	65	69	72	81	88	157	168	174	186				
10	95	103	102	106	124	213	222	228	234				
11	110	131	141	154	157	186	198	207	210				
12	140	133	148	235	247	253	269	257	281				
13	92	118	121	109	115	122	130	144	148				
14	156	132	223	177	301	319	323	342	637				
15	135	136	293	317	312	496	593	601	612				
16	130	105	116	122	141	185	212	237	245				
17	249	188	206	208	332	344	359	368	378				
18	31	31	36	42	47	51	55	58	59				
번호	$10^0$	$10^{-1}$	$10^{-2}$	$10^{-3}$	$10^{-4}$	$10^{-5}$	$10^{-6}$	$10^{-7}$	$10^{-8}$	$10^{-9}$	$10^{-10}$	$10^{-11}$	$10^{-12}$
3	69	75	78	123	136	164	173	218	292	387	448	582	621
9	79	92	95	138	148	149	159	155	168	182	525	535	541

표 3. 검사값 eq.2에 따른 함수계산수

번호	검사값												
	$10^0$	$10^{-1}$	$10^{-2}$	$10^{-3}$	$10^{-4}$	$10^{-5}$	$10^{-6}$	$10^{-7}$	$10^{-8}$				
1	28	67	157	164	180	192	206	208	222				
2	25	54	66	72	94	106	115	136	138				
4	23	158	188	187	201	209	225	232	246				
5	30	52	62	77	82	104	109	129	133				
6	35	66	101	158	171	185	195	205	212				
7	53	136	200	222	245	261	276	294	305				
8	58	77	99	213	247	264	275	307	312				
10	50	92	119	270	275	293	321	333	352				
11	102	167	190	322	344	392	493	551	630				
12	107	142	286	313	327	349	379	403	427				
13	115	141	157	176	202	226	238	263	294				
14	221	251	373	435	815	840	1215	1248	1279				
15	155	138	350	642	661	683	732	753	777				
16	104	170	248	381	414	483	503	668	721				
17	95	155	381	399	427	443	446	486	509				
18	31	56	53	72	79	95	98	116	127				
번호	$10^0$	$10^{-1}$	$10^{-2}$	$10^{-3}$	$10^{-4}$	$10^{-5}$	$10^{-6}$	$10^{-7}$	$10^{-8}$	$10^{-9}$	$10^{-10}$	$10^{-11}$	$10^{-12}$
3	46	70	242	486	710	689	696	700	715	736	735	752	759
9	78	97	147	175	193	602	657	675	676	689	715	728	742

소하였지만,  $10^{-2}$ 부터  $10^{-1}$  사이에 93이나 감소되었다.

$10^{-8}$  때의 목적함수 계산수와  $10^0$  때의 목적함수 계산수 차이를 18개 각 시험함수에 대해서 산출한 다음 18로 나누어 본 결과 평균 189회 감소되었음을 알 수 있다.

■ 실험 및 고찰-2 : (검사값식이 eq.2경우)

표 3에서 왼쪽 행의 번호는 표 1의 시험함수 번호와 동일하며, 상단의 수치는 검사값이고, eq.2로 계산했다.

표 2와 같이, 수렴판정조건의 허용오차는  $10^{-12}$ 을 적용한 3번과 9번 함수를 제외한 모든 함수는  $10^{-8}$ 을 적용하였다.

표 3를 살펴보면, 전체적으로 심플렉스 크기가 클수록 수렴되기까지의 목적함수계산수가 감소한다. 목적함수계산수가 가장 많이 감소되는 경우는 14번으로 1279에서 221로 1058나 감소했다. 반면, 18번 경우는 127에서 31로 가장 적게 감소되었다.  $10^{-8}$ 때의 목적함수 계산수와  $10^0$  때의 목적함수계산수 차이를 18개 각 시험함수에 대해서 산출한 다음 18로 나누어 본 결과 평균 380회 감소되었음을 알 수 있다. 189회인 eq.1의 경우 보다 크다. 평균 감소 회수가 크다는 의미는  $\rho$ 값의 변경 영향이 알고리즘에 영향을 많이 받는다는 의미이다. 즉, 본 실험을 통하여 지표를 eq.1로 표현되는 목적함수값의 표준편차를 이용하는 것 보다 지표를 eq.2로 표현되는 심플렉스의 크기를 이용한 것이  $\rho$ 값 변경 영향을 많이 받아서 목적함수 계산수 감소가 훨씬 크다.

#### 4. 최종 수렴값 정확도검사 필요성

위 2 실험을 통하여, 최종 수렴되기까지의 목적함수계산수는 검사 값이 큰 곳에서 매개변수를 변경할수록 적어지는 것을 알 수 있었다. 하지만 그 검사수치가 어떤 값보다 더 큰 때에 매개변수를 변경하게 되면 오히려 증가한다는 사실도 알 수 있었다. 즉, 문제마다 다른 이 최적의 검사 값을 찾아내고 그 위치에서 매개변수 값을 변경시킨다면 목적함수의 계산 수를 최소로 할 수 있음을 알 수 있다.

앞에서 매개변수들 중  $\rho$ 를 변경에 사용하기로 하였다. 이  $\rho$ 값이 변경되면 심플렉스의 모양이 변경되고 이 달라진 모양을 바탕으로 반사, 확장, 축소 또는 수축작용을 하며 계속 이동하여 탐색을 멈출 때 까지 심플렉스의 체적도 감소되어나가서 최종 심플렉스의 꼭지 점들은 서로 조밀하게 모여 있게 된다. 한편 이런 조밀한 심플렉스의 꼭지점에 대응하는 목적함수 값들 역시 조밀하게 된다.

즉, 심플렉스의 체적이 감소되어나가면, eq.2의 심플렉스크기를 지표로 하든지, 목적함수값의 표준편차를 의미하는 eq.1을 지표로 하든지 간에 최종수렴 설계변수값들은 서로 조밀하게 되어가고, 최종수렴되는 목적함수값들 역시 조밀하게 되어 간다. 이들 최종 수렴 값들(즉, 목적함수값과 설계변수값)의 조밀함의 정도는 알고리즘에 주어진 수렴판정조건의 상한값에 의해서 결정된다. 다시 말해서, 이 상한값만 같으면 탐색과정의 어디서부터  $\rho$ 값을 변경시키며 진행하든지에는 영향을 받음 없이, 각

최종 수렴값들에 대한 동일한 조밀함 즉 정밀도가 보장된다.

그런데  $\rho$ 값을 변경시키는 위치가 다르면, 주어진 수렴판정조건을 만족시켜서 탐색이 끝날지라도 심플렉스 최종위치는 일반적으로 서로 다르게 나타났다. 그 이유로는 변경위치에서부터 탐색이 끝나는 때까지 각 경우의 심플렉스의 이동 가능경로가 무수히 많기 때문에 쉽게 추정할 수 있다. 그래서 탐색과정의 어디서부터  $\rho$ 값을 변경시키느냐하는 문제는 최종수렴값(목적함수값과 설계변수값)의 정밀도와는 직접 관계는 없으나, 최종 멈춤 위치와 진해(표 1에 기술되어있음)와의 차이 즉 최종 수렴값(즉, 목적함수값과 설계변수값)의 정확의 정도에는 영향을 주어 관찰해 볼 필요가 있다.

그런 이유로 다음과 같이, 검사값 종류에 따른 최종 수렴 값의 정확도를 실험한다.

#### 5. 검사값 종류에 따른 최종 수렴 값의 정확도

본 연구에 사용되고 있는 시험함수는 18개이다. 그중에서 2개에 대해서만 상세하게 본 항목 5에서 다룰 것이다. 나머지 함수들은 표 4에 그 결과만 정리하여 놓는다.

향후 자주 인용되는 eq.1, eq.2는 앞의 항목-2에 있는 식으로써 검사값 두 종류를 나타낸다.

#### ■ 실험 및 고찰-3 : eq.1과 Rosenbrock 함수의 수렴

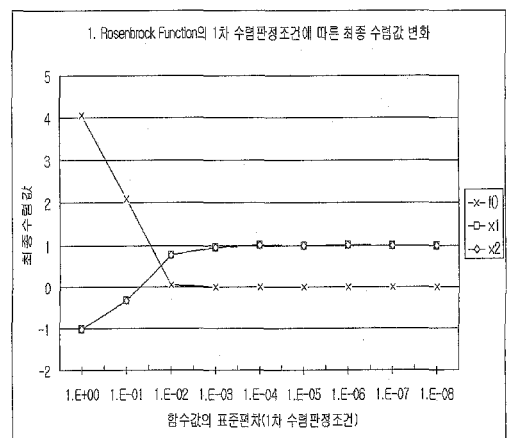


그림 1. 검사값(eq.1)에 따른 최종 수렴값 변화

그림 1은 Rosenbrock Function에 대해 최종 수렴값들을 그래프에 옮겨놓은 것이다. 가로 축은 검사값을 나타낸다. 목적함수의 표준편차를 의미하는 eq.1을 사용하여 계산되었다. 세로축은, 검사값을  $10^0 \sim 10^{-8}$ 으로 하였을 때의 최종 수렴된 목적함수 최소값 및 그 때의 설계변수값을 나타낸다.(여기서 의미하는 목적함수 최소값은, 최종 심플렉스의 꼭지점들에 해당되는 목적함수의 값들 중에서 가장 낮은 값을 뜻한다.)

Rosenbrock Function의 진해는 설계변수값이 (1.0, 1.0)일 때, 목적함수 값이 0임이 알려져 있다. 검사값을 2차 수렴판정조건과 같은  $10^{-8}$ 을 적용한 실험에서는 이론적인 진해와 동일한 값으로 수렴됨을 볼 수 있다. 이때 목적함수 계산수는 표 2에서 볼 수 있듯이 158회 요구된다.

검사값을  $10^0$ 로 적용하면 목적함수값이 4, 설계변수값은 -1로 수렴하여 진해와 많이 차이가 난다. 이때 목적함수 계산수는 표 2에 보듯이 40회로 검사값을  $10^{-8}$ 을 적용한 경우의 158보다 118회나 감소는 하나 진해로 수렴되지 않고 있다고 즉 정확도가 많이 떨어진다고 할 수 있다. 검사값이  $10^{-2}$  이하에서는 수렴값 정확도 변화가 적다. 표 2에서 보면, 이 때의 목적함수 계산수는 117이므로 41회 더 적은 회수로 진해에 수렴 하는 것을 확인할 수 있다.

■ 실험 및 고찰-4 : eq.2와 Rosenbrock 함수의 수렴

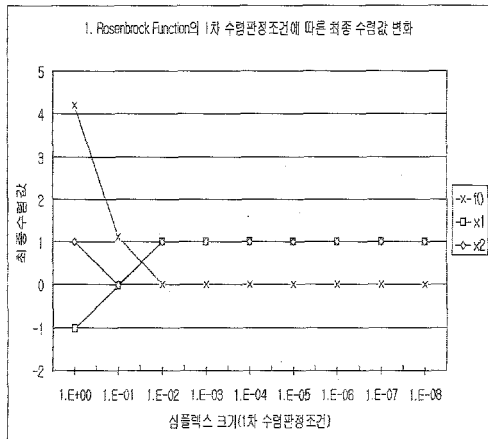


그림 2. 검사값(eq.2)에 따른 최종 수렴값 변화

그림 2에서의 검사값은 eq.2로 심플렉스의 크기를 나타내었다. 세로축은 이런 검사값을  $10^0 \sim 10^{-8}$

으로 하였을 때, 최종 수렴된 목적함수 최소값 및 설계변수값을 나타낸다.

검사수치를  $10^{-2}$ 이하로 하면 진해와 같은 결과를 얻을 수 있었다. 표 3을 참고하면, 검사값이  $10^{-8}$ 일 때, 목적함수 계산수는 222회이고,  $10^{-2}$ 일 때 157이다. 검사값을  $10^0$ 로 하면 목적함수값이 4.3, 설계변수값은 (-1.0, 1.0)로 수렴하는 것을 알 수 있다. 표 3에서 보듯이 이 때 목적함수 계산수는 28회로 허용오차가  $10^{-8}$ 일 때 222보다 194회나 감소했으나 최종 결과는 진해로 수렴되지 않았다.

검사값이  $10^{-2}$ 이하부터는 수렴값 정확도 변화가 적다. 이 위치에서  $\rho$ 값 변경시키면, 이동정지까지의 목적함수 계산수는 157회로,  $\rho$ 값을 변경 없이 계산한 목적함수 계산수 222회 보다 65회 적게 됨을 확인할 수 있다.

검사값 계산을 eq.1로 적용했을 경우, 41회 적게 목적함수계산으로 진해가 보장된다. 검사값 계산을 eq.2로 적용했을 경우는 65회 적게 목적함수 계산이 필요하다. 따라서 Rosenbrock Function의 경우 eq.1의 검사값을 적용했을 때 보다 eq.2로 검사값을 적용했을 때 목적함수 계산수는 24회 더 감소한 것을 알 수 있다.

■ 실험 및 고찰-5 : eq.1과 Freudenstein and Roth함수의 수렴

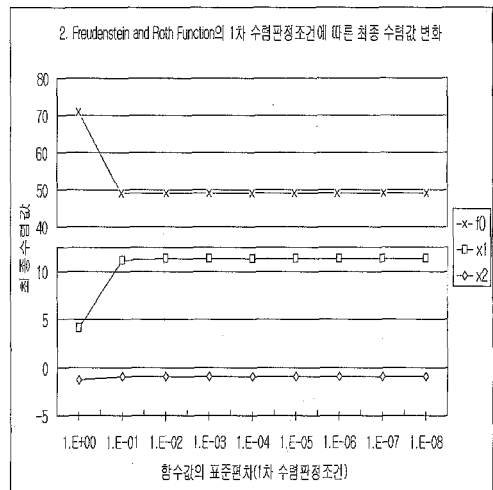


그림 3. 검사값(eq.1)에 따른 최종 수렴값 변화

그림 3은 Freudenstein and Roth Function의 검사값에 따른 최종 수렴값 변화를 나타낸다. 검사값

을 목적함수값의 표준편차로 하고  $10^0 \sim 10^{-8}$ 까지 변경하면서 최종 수렴한 목적함수 최소값 및 설계변수값의 변화를 나타낸다.

Freudenstein and Roth Function의 진해는 설계변수가 (11.41, -0.8968)일 때, 목적함수값이 48.9842으로 수렴한다. 이를 얻기위한 목적함수 계산수는 표 2을 참고하면 90회이다.

그림 3을 보면, 검사값  $10^{-1}$ 이하에서 수렴값 정확도변화가 적다. 검사값을  $10^{-1}$ 이하 어느 곳에서  $\rho$ 값을 변경시켜도 최종 수렴된 결과는 차이가 거의 없다는 것이다.

표 2을 참고하면, 검사값이  $10^{-1}$ 일 때, 수렴되기까지의 목적함수 계산수는 55회이다.  $\rho$ 값을 변경 없이 탐색한 결과의 목적함수 계산수 90보다 35회 더 적은 목적함수계산으로 진해에 수렴 하는 것을 확인할 수 있다.

■ 실험 및 고찰-6 : eq.2와 Freudenstein and Roth함수의 수렴

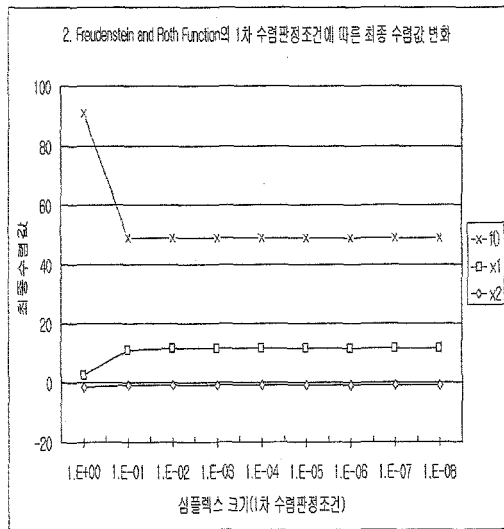


그림 4. 검사값(eq.2)에 따른 최종 수렴값 변화

그림 4는 Freudenstein and Roth Function의 검사값에 따른 최종 수렴값 변화를 나타낸다. 검사값으로 eq.2가 적용 되었고  $10^0 \sim 10^{-8}$ 까지 변경하면서 최종 수렴한 목적함수최소값 및 설계변수값의 변화를 나타낸다. 그림 4를 보면, 검사값이  $10^{-1}$ 이하 모든 경우에서 최종 수렴된 값은 진해와 거의 같은 목적함수 값이 48, 설계변수는 (11, -0.8) 수렴하는 것을 볼 수 있다.

표 3를 참고하면, 검사값이  $10^{-1}$ 일 때 목적함수 계산수는 54회이다.

따라서 검사값  $10^{-1}$ 를 만족시킨 심플렉스에 반사계수  $\rho$ 값을 0.1 변경하면, 진해와 같은 결과를 얻을 수 있고  $\rho$ 값을 변경 없이 계산한 목적함수계산수 138회 보다 84회 적게 목적함수계산을 하는 것을 알 수 있다.

검사값을 목적함수값의 표준편차로 적용했을 경우, 진해를 보장하면서 35회 적게 목적함수계산이 이루어졌다. 검사값으로 eq.2의 심플렉스 크기를 적용했을 경우 진해를 보장하면서 84회 적게 목적함수 계산이 이루어졌다. 따라서 앞의 Rosenbrock Function의 경우와 같이 Freudenstein and Roth Function경우도 목적함수값의 표준편차를 적용했을 때 보다 eq.2의 심플렉스 크기로 검사값을 적용했을 때 목적함수 계산수가 49회 더 감소하였다.

6. 실험 및 고찰의 종합 검토

본 연구에 사용되고 있는 시험함수는 18개이다. 이들에 대한 실험 및 고찰-1~6을 통하여 검사값 크기값에 따라서 최종 수렴값(즉, 최종의 목적함수값과 설계변수값)의 정확성이 변화됨을 그림 1~4에 보인 바와 같이 알 수 있었다. 그리고 목적함수 계산수도 달라짐을 표 2, 3에 기술된 바와 같이 알 수 있었다. 즉, 검사값이 클수록 목적함수 계산회수는 감소하지만, 최종 수렴값과 진해사이에 오차가 많았다. 반면, 검사값이 작을수록 수렴결과는 진해에 가깝지만 수렴하기까지 목적함수 계산수가 증가했다. 따라서, 본 항목에 다루고 있는 함수 2개에 대해서는 그림 1~4에서 소위 최적의 검사값이 대략 얼마인지 눈으로 볼 수 있다.

여기서 최적검사 값이란 목적함수값과 설계변수값의 수렴값과 진해사이에 오차가 작으면서도 동시에 검사값 크기가 가능한 큰 곳을 뜻한다.

상황은 이렇지만, 그 곳에서  $\rho$ 값을 변경하면, 대략적인 진해를 보장받을 수 있고 동시에 목적함수 계산회수를 최대한 감소시킬 수 있음도 알 수 있다. 대략으로 추정된 값이므로 향후 이론적 근거를 제시하여 정확한 값 산출이 요구되는 사항이다. 표 4는 모든 18개 시험함수에 대해서 정리하여 나타낸 것이다. 검사값의 종류는 eq.1, 2로 표현되는 두 가지로 나뉘는 잘 알고 있다. 그 아래의 수치 값들은 두 종류에 대해 최소의 목적함수계산수로 진해를 얻을 수 있는 검사 값들이다. 위에서도 언급된 것처럼 대략적인 수치다.

본 연구에서는 어떤 시험함수하나에 대해서, 여러 검사 값을 실험자가 미리 정해놓고 각각에 대해서 최종수렴값들을 기록한다음 대략의 최적검사값이 어떤 값인가를 그래프상에서 눈으로 보고 정하고



표 4. 진해를 보장하는 최대 검사값 및 그 종류에 따른 목적함수 계산수와 감소수

번호	진해를 보장하는 최대의 검사값		목적함수 계산수 1		10 <sup>-8</sup> 때의 목적함수 계산수 2		감소된 목적함수 계산수	
	표준편차	심플렉스 크기	표준편차	심플렉스 크기	표준편차	심플렉스 크기	표준편차	심플렉스 크기
1	10 <sup>-2</sup>	10 <sup>-2</sup>	117	157	158	222	41	65
2	10 <sup>-1</sup>	10 <sup>-1</sup>	55	54	90	138	35	48
3	10 <sup>-11</sup>	10 <sup>-4</sup>	582	710	621	759	39	49
4	10 <sup>-2</sup>	10 <sup>-4</sup>	239	201	286	246	47	45
5	10 <sup>-1</sup>	10 <sup>-1</sup>	38	52	73	133	35	81
6	10 <sup>-2</sup>	10 <sup>-2</sup>	149	101	167	212	18	111
7	10 <sup>-1</sup>	10 <sup>-1</sup>	116	136	210	305	94	169
8	10 <sup>-5</sup>	10 <sup>-3</sup>	157	213	186	312	29	99
9	10 <sup>-10</sup>	10 <sup>-5</sup>	525	602	541	742	16	140
10	10 <sup>-5</sup>	10 <sup>-3</sup>	213	270	234	352	21	82
11	10 <sup>-1</sup>	10 <sup>-1</sup>	131	167	210	630	79	463
12	10 <sup>-3</sup>	10 <sup>-2</sup>	235	286	281	427	46	141
13	10 <sup>-3</sup>	10 <sup>-2</sup>	109	157	148	294	39	137
14	10 <sup>-8</sup>	10 <sup>-4</sup>	637	815	637	1279	0	464
15	10 <sup>-5</sup>	10 <sup>-3</sup>	496	642	612	777	116	135
16	10 <sup>-7</sup>	10 <sup>-1</sup>	237	170	245	721	8	551
17	10 <sup>-4</sup>	10 <sup>-2</sup>	332	381	378	509	49	128
18	10 <sup>-4</sup>	10 <sup>-2</sup>	47	53	59	127	12	74
평 균							약 40	약 166

있지만 실시간으로 검사를 해야하는 실제상황에서는 그럴 수 없음은 자명하다. 즉, 우선적으로, 최적이든 아니든 검사값 자체를 실시간에서 정하기 위한 방법이 연구되어야 하고, 그 다음 그것들 중에서 최적의 것을 찾아내는 연구가 향후 이루어져야 한다. 목적함수 계산수 1은 진해를 얻으려 할 때 최소 필요한 목적함수 계산수를 의미한다. 목적함수 계산수 2는 검사값이 수렴판정조건에 허용오차와 동일할 때 즉, 10<sup>-8</sup>때의 계산수를 나타낸다. 표 4를 살펴보면, 검사값으로 eq.1의 표준편차를 사용하였을 때의 가장 많이 감소한 경우는 116회 감소한 15번 함수이고, 가장 적게 감소한 경우는 14번 함수로 감소가 일어나지 않았다.

한편, eq.2를 나타내는 심플렉스 크기를 검사값으로 사용하였을 때의 가장 많이 감소한 함수는 551회 감소한 16번 함수이고, 가장 적게 감소한 함수는 4번 함수로 45회 감소가 일어났다. eq.1의 표준편차를 사용한 경우는 감소된 목적함수 계산수는 평균 40회다. eq.2를 나타내는 심플렉스 크기를 검사값으로 사용한 경우의 감소된 목적함수 계산수는 평균 166회다.

즉, eq.1로 표현되는 목적함수값의 표준편차로 검사값을 적용한 경우 보다 eq.2의 심플렉스의 크기로 했을 경우가 적은 수의 목적함수 계산수로 진

해를 보장받을 수 있다. 결론적으로 보다 빠르게 진해를 수렴하고 있다.

## 7. 결 론

본 연구에서는 Nelder-Mead 심플렉스 최적화 알고리즘속에서 고정값으로 전 탐색과정에 사용되는 매개변수의 값을, 지나간 탐색과정에서의 자료를 바탕으로 만든 지표를 근거로 하여, 탐색도중에 적절히 변경시켜 사용함에 의해서 최적해를 보다 빠르고 정확히 구할 수 있음을 18개 시험함수를 대상으로 실험을 통하여 제시하였다.

매개변수값 변경 판단의 시점으로는 탐색과정 중에 심플렉스의 위치가 최적해 근방에 있을 때로 하였다. 최적해 근방인지의 판단에 사용되는 지표는 2개의 형태를 제안하였다. 그리고, 그 값의 크기와 실험을 위해 임의로 정한 근방검사용 검사값과 비교해서 근방여부를 결정지었다. 이 지표중 하나는 탐색과정중의 어느 순간의 위치에서 형성된 심플렉스의 각 꼭지점에 대응하는 목적함수값들의 표준편차 값이다. 구체적 형태는 Nelder-Mead의 심플렉스 알고리즘에서 수렴판정조건으로 채용하고 있는 식으로 표현되는 것이고, 또 다른 하나는 Dennis-Woods가 그의 연구에서 수렴판정 조건으로 채용하고 있는 식으로 표현되는 심플렉스의 크

기이다. 변경되는 매개변수는 Nelder-Mead의 심플렉스 알고리즘에서 반사과정용의 것 ( $\rho$ )에 국한시켰고 그 값은 0.1로 하였다.

이상과 같은 작업을 통하여, 전자의 지표를 적용한 경우 보다 후자의 지표를 사용했을 경우가, 더 적은 수의 목적함수 계산수만으로도, 진해(true solution)로 수렴한다는 사실을 알 수 있었다.

그리고 최적해 근방검사용 값 중 어느 것이 최적인 지를 탐색과정 실시시간에서 정하는 방법을 찾아내는 일이 바로 해결되어야할 과제들 중의 하나로 사료된다.

### 참 고 문 헌

- [1] Spendley, W., G. R. Hext, and F. R. Himsworth, "Sequential Application of Simplex Designs in Optimisation and Evolutionary Operation," *Technometrics*, Vol.4, pp.441~461, 1962.
- [2] Nelder, J. A. and R. Mead, "A Simplex Method for Function Minimization," *Computer J.*, Vol.7, pp.308~313, 1965.
- [3] Yen, J. C. Liao, B. Lee, D. Randolph, "A Hybrid Approach to Modeling Metabolic Systems Using a Genetic Algorithm and Simplex Method," *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics*, vol 28, no 2, April 1998.
- [4] J. Swann, W.H., *Direct Search Methods*, in W. Murray(Ed.), *Numerical Methods for Unconstrained Optimization*, Academic Press, London, 1972.
- [5] J. E. Dennis, Jr. and D. J. Woods, *Optimization on microcomputers : The simplex algorithm*, in *New Computing Environments: Microcomputers in Large-Scale Computing*, A. Wouk, ed., Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 1987, 116~122.
- [6] S. S. Rao, *Engineering optimization*, 3rd ed, Wiley, New York, 1996.
- [7] J. C. LAGARIAS, J. A. REEDS, M. H. WRIGHT, AND P. E. WRIGHT, "Convergence properties of the NelderMead simplex algorithm in low dimensions", AT&T Bell Laboratories, Tech. Rep. April 1996
- [8] 최영일, 현창현, "Nelder-Mead, Dennis-Woods Method와 MATLAB의 FMINS의 비교실험", 산업기술연구(강원대학교 산업기술연구소 논문집), 제19집, 1999
- [9] Mohamed B. Trabia와 Xiao Bin Lu, "A Fuzzy Adaptive Simplex Search Optimization Algorithm", *ASME, J. Mech. Design*, June, Vol. 123, pp.216~225, 2001.
- [10] 현창현, 이병기, "퍼지 simplex search 알고리즘을 이용한 동력 스크류 효율의 최적설계", 산업기술연구(강원대학교 산업기술연구소 논문집), 제22집 A호, 2002.
- [11] Jeffrey C. Lagarias, James A. Reeds, Margaret H. Wright, Paul E. Wright, "Convergence Properties of the Nelder-Mead Simplex Algorithm in Low Dimensions". *SIAM Journal on Optimization*, Vol 9, NO. 1, pp. 112~147, 1996
- [12] More, J. J., B. S. Garbow, and K. E. Hillstrom, "Testing Unconstrained Optimization Software," *ACM Trans. Math. Software*, Vol.7, pp.17~41, 1981.