최적화의 어제와 오늘

(Retrospective on Optimization)

전문연구위원 김홍기

1. 서론

□ 이 논문은 NLP(nonlinear programming), MINLP(mixed-integer nonlinear programming), 동적 최적화(dynamic optimization) 및 불확실성 최적화(uncertainty optimization) 등의 최적이론의 응용되거나 연구된 전략에 대한 일반적인 개관을 제공하는데 목적을 두고 있다.

□ 최적화 문제의 형태는 크게 연속 변수와 이산 변수로 분류되고, 각 변수는 LP(linear programming), NLP, LCP(linear complementary problem), QP(quadratic programming), SP(semidefinite programming) 등으로 분류된다.

○ 최적화 문제는 대수식으로 표현된다. 이를테면 혼합 정수 프로그래밍(MIP : mixed integer programming)문제는 다음과 같이 표현된다.

Min Z = f(x, y) s.t. { h(x,y) = 0, g(x, y) <=0, x, y in $\{0,1\}^m$ }

여기서 f(x, y)는 목적함수이고, 방정식 h(x, y) = 0의 시스템의 수행을 설명하고, 부등식 g(x, y) <= 0은 제약조건을 나타낸다. 변수 x는 연속변수이고, y는 이산변수이다.

○ MIP 문제는 평형상태 모델로 볼 수 있다. 따라서 중요한 확장은 동적 모델의 경우이다. 이 모델이 이산 시간 모델이면 다중주기 최적 문제가 되고 연속 시간 모델이면 연립미분방정식을 가진 최적제어 문제가 된다.

□ 수학적 프로그래밍과 최적화는 처리 시스템 공학에 널리 사용된다. 그 이유는 이 분야의 문제가 가끔 많은 해를 가지므로 최적해를 구하기가 쉽지 않기 때문이다. 최적화는 기업이 경쟁력을 유지하는 주요 기술이 되어가고 있다.

○ 처리 설계 문제는 NLP와 MINLP 문제를 발생시키고 스케쥴링과 플래닝 문제는 LP와 MILP 문제를 일으킨다. 그 이유는 설계 문제는 비선형인 처리 모델의 예측에 의존하고 있고, 스케쥴링과 플래닝에 있어서 실제적 예측은 별로 중요하지 않기 때문이다.

○ 처리 시스템 공학에서 수학적 프로그래밍의 응용은 설계와 통합분야, 운용분야 및 제어분야에서 활용되어 오고 있다. 이들의 각 프로그래밍 방법은 최적화 알고리즘의 발전뿐 아니라 GAMS 및 AMPL와 같은 모델구축 기술의 출현에 의하여 촉진되어 오고 있다.

○ 이 논문은 처리 시스템 공학에서 연구를 위한 핵심 영역으로서 최적화 방법과 개념에 중점을 둔 것으로 결과적으로 특정 응용분야를 위한 상세한 최적화 모델의 보충 역할을 할 것이다.

2. 연속 변수의 최적화

□ 연속 변수 최적화는 이산변수가 없는 MIP를 생각할 수 있다. NLP의 중요 특성은 컨벡스(convex)의 존재 여부이다. 목적함수가 컨벡스이면 NLP는 컨벡스 가능영역을 가지고 이 가능영역에서 조건 함수도 컨벡스가 되고 선형이 될 것을 필요로 한다. NLP가 컨벡스 문제이면, 어떤 국부적 해도 NLP의 전체 해가 될 수 있다.

○ NLP의 목적함수와 제약함수가 선형이면 LP문제가 되고, 이를 풀기 위한 표준적 방법은 심플렉스(simplex)방법이다.

○ QP는 LP의 약간의 수정하여 얻어지고, 여기서 제약 조건 계수의 행렬이 양의 반확정이면 QP는 컨벡스이고 유일한 최소값을 갖는다. 컨벡스 QP는 유한 수의 단계로 해를 구할 수 있다.

□ NLP의 해를 위하여 먼저 SQP(successive quadratic programming)의 해를 이용한다. SQP 방법은 일반적으로 활동 집합에 대한 장벽(active set versus barrier)방법, 제2계 (second-order)정보 및 라인 탐색에 대한 신뢰영역(line search versus trust region)방법의 세 분류로 나누어진다.

○ 행동집합에 대한 장벽방법은 탐색 방향을 생성하는 데 있어서 한계와 부등식 제약 조건을 다룬다. 제2계 정보는 Newton 방식의 단계를 개발할 수 있는 여러 방법들과 문제 구조를 제공할 수 있다. 라인 탐색에 대한 신뢰영역 방법은 SQP 반복의 전체 수렴성을 강화한다.

○ 위의 분류를 이용한 SQP 형식의 NLP 해결자를 적용한 방법들은 IPOPT, LOQP, NPSOL, rSOP, SNOPT SOCS, SRQP 및 TRICE 등이 있다.

□ SQP 방법에 추가하여 여러 개의 NLP 해결자가 개발되고 대규모 문제에 적용되고 있다. 이런 방법들은 SQP 방법보다 더 많은 함수 계산을 필요로 하나 AMPL, CUET 또는 GAMS와 같은 최적화 모델링 플랫폼에 인터페이스될 때는 수행이 잘 된다.

○ NLP로부터 첨가 라그랑즈(augmented Lagrange)식으로 주어진 모델 해결을 위한 알고리즘으로 LANCELOT, MINOS, 그밖에 GRG, CONOPT, LCNLP 등이 있다.

□ 도함수의 정보가 요구되지 않는 최적화 전략이 있다. 이들 방법은 구현이 쉽다는 장점과 최적화문제에 대한 적은 선험지식을 갖는다. 대부분의 방법은 여러 다양성을 낳는 휴리스틱으로부터 유도된다.

○ 고전적인 방법으로서는 방향 탐색 방법, 공액 방향 방법, 심플렉스 및 콤플렉스 탐색, 적응 랜덤 탐색 방법, 등이 있다. 이들 모든 방법은 제약 조건이 없는 최소화를 위한 목적함수 값만을 요구하는 잘 정의된 탐색방법에 기초하고 있다.

○ 유전 알고리즘(Genetic Algorithm : GA)은 자신의 유전자 풀을 변경하는 것과 해의 모집단을 개선하는 것이 유사하다는 것에 기초하여 만든 것이다. 유전자 변경에 두 형태인 크로스오버(crossover)와 돌연변이가 사용된다. 크로스오버는 벡터 원소들의 임의의 스와핑(swapping)을 다루고 돌연변이는 벡터의 원소에 임의의 변수를 추가하는 것을 다룬다.

○ DFO(Derivative Free Optimization)는 심플렉스 방법의 확장인 다차

원 탐색 알고리즘에서 변수의 수가 증가할 때 실패하는 것을 극복하기 위하여 반사, 전개 및 단축의 단계를 결합한 것이다. 이 방법은 제약이 없는 문제 또는 단순 한계를 가진 최적문제에 적합하다.

3. 이산 최적화

□ 처리 시스템 공학에서 공정도에서의 유닛들의 발췌이거나 스케쥴링, 유닛의 수, 일괄의 순서열과 같은 이산적 결정들을 모델화하는 것이 필요하다. 전자는 0, 1으로 표현되고 후자는 정수 변수로 나타내어진다. 이 절에서는 NLP의 일반화 또는 MIP 문제의 특별한 경우를 다룬다.

□ MILP 방법은 심플렉스 LP 기반 분지 및 한계(Branch and Bound : BB) 방법에 크게 의존한다. 이 방법은 정수 공간이 트리의 각 노드에서 해결되는 완화된 LP의 부문제로 연속적으로 분할되는 트리 목록으로 구성된다.

○ MILP에서 최근의 경향은 브랜치 앤드 프라이스(Branch and Price)와 리프트 앤드 프로젝트(lift-and-project)와 같은 분지와 컷 방법이 있고 MILP에 대한 Johnson[2000]의 최근의 리뷰가 참고가 된다.

○ MILP는 LP 코드로 구축된다. 잘 알려진 것으로는 CPLEX, XPRESS, OSL 등이 있다. MILP문제는 NP-hard이므로 다수의 0-1 변수로 문제를 풀 때는 시간제한으로 운영하는 것이 가능하다.

□ MINLP 모델은 통합과 설계에서 또 플래닝과 스케쥴링 문제에서 발생한다. MINLP 문제에서 다음과 같은 NLP 부분문제가 고려될 수 있다.

○ NLP 완화 부분문제 (NLP1)

○ 고정된 변수에 대한 NLP 부분문제 (NLP2)

○ 고정된 변수에 대한 가능해 부분문제 (NLPF)

□ MILP에서 비선형 함수의 컨벡스는 NLP 부분문제의 해에서 유도되는 초평면(hyperplane)으로 대체함으로서 개척된다. 부분문제의 해에 따라 여러 방법이 있을 수 있다.

○ BB 방법은 먼저 연속 NLP 완화의 해결에 의하여 시작된다. 모든 이

산 변수가 정수 값을 가지면, 탐색은 중단되고 그렇지 않으면 정수변수의 공간에서 트리 탐색이 수행된다.

○ OA(Outer-Approximation)는 NLP 부분문제들인 NLP2와 MILP 마스터 문제가 반복 사이클에서 연속적으로 해결이 될 때 발생한다. 따라서 이 알고리즘은 주요 반복 사이클의 수행으로 구성된다.

○ GBD(Generalized Benders Decomposition)방법은 OA방법과 유사하다. 차이점은 MILP 마스터 문제의 정의에 따라 발생한다. GBD 방법에서 부등식이 반복적으로 활성화되고 집합은 무시된다.

○ ECP(Extended cutting plane)은 컷팅 플랜 알고리즘의 확장으로 NLP 부분문제와 알고리즘을 사용하지 않는 방법이다. 이 방법은 예측 점에서 가장 방해되는 제약조건을 연속적으로 추가하여 MIP문제의 반복해에 의존한다.

○ LP/NLP 기반 분지 및 한계 방법은 분지 및 컷 방법과 그 정신에 있어서 유사하다. 이 방법은 초기 NLP 부분문제의 해에 의하여 시작된다.

□ MINLP 방법의 확장으로서는 다음과 같은 것이 있다.

○ 이차의 마스터 문제

○ OA에서 마스터 문제의 차수의 축소

○ 부등식을 다루는 것

○ 논컨벡시티(nonconvexity)를 다루는 것

□ MINLP 문제를 풀기위한 컴퓨터 코드의 수는 아직은 적다. 모델링 시스템 GAMS에서 가능한 MINLP 해결자로서는 DICOPT 프로그램이 존재한다.

○ 그 밖에 SQP 알고리즘에 기반하고 AMPL에서 이용 가능한 MINLP_BB, 전체 최적화 능력을 구현한 BARON등이 있다. $\alpha - ECP$는 확장된 컷팅 플랜 방법을 구현한 것이고 MINOP는 OA와 GBD 방법을 구현한 것이다.

4. 동적 최적화

☐ DAOP(Differential-algebraic Optimization Problem)는 변분법(variational method)이나 본래의 연속 시간문제를 이산 문제로 변경하는 이산화의 수준을 응용함으로써 풀 수 있다. 이전의 해결 전략은 최적을 위한 고전적 변분 조건을 해결하는데 초점을 두고 있다. 반면에 연속 시간 공식을 이산화하는 방법은 이산화 수준에 따라 두 범주로 나누어진다. 하나는 제어 프로필만을 이산화하는 것(부분 이산화)이고, 다른 하나는 상태와 제어 프로필을 이산화하는 것(전체 이산화)이다.

○ 부분 이산화 문제는 동적 프로그래밍 또는 비선형 프로그래밍 전략의 응용으로 풀 수 있다. 전체 이산화 문제는 역시 NLP 전략을 응용하고 DAE시스템을 푼다. 여기서는 변분법, 동적 최적화 문제의 부분 이산화 방법 및 DAOP의 전체 이산화 방법에 대하여 서술한다.

☐ 변분법은 Pontryagin's 최대값 원리로부터 얻어진 최적을 위한 제 1계 필요조건의 해에 기초한다. 이 공식은 단일 슈팅(shooting), 불변 임베딩(embedding), 다중 슈팅을 포함하는 다수의 표준 방법으로 풀 수 있는 BVP(Boundary Value Problem)로 이르게 된다.

☐ 부분 이산화 전략은 DAOP 안에 있는 제어 프로필의 이산화로 생각할 수 있다. 여기에는 동적 프로그래밍과 비선형 프로그래밍이 있다.

○ 동적 최적화 문제를 풀기 위한 IDP(Iterative Dynamic Programming)는 작은 문제에 국한된다. 그러나 이 방법은 간격이 넓은 해 그리드(solution grid)를 만들면 효율적이 될 수 있다. 만일 그리드가 잘 선택되면, 전체 최적조건을 얻을 확률은 높아진다.

○ 부분 이산화 문제는 연쇄 방법 또는 제어 벡터 매개 변수화라고도 하는데 제어 변수만을 이산화한다. 주어진 초기 조건과 제어 매개 집합에서 DAE시스템은 각 반복에서 미분 대수 방정식 해결자에 의하여 해를 구한다.

☐ 전체 이산화 문제는 DAE시스템의 모든 변수를 이산화하고 SQP알고리즘으로 풀 수 있는 대규모의 비선형 프로그래밍을 생성한다. 이들 방법

에서 DAE시스템은 모든 반복에서 해결되는 것이 아니고 최적점에서만 해결되는 동시 방법이 된다. 동시 방법은 상태 변수 제약조건을 가진 문제와 입력 영역에서 발생하는 불안정성을 가진 시스템에 이점을 갖는다. 상태변수를 이산화하는데 다중 슈팅과 유한 요소 상에서 병치(collocation)의 두 가지의 방안이 존재한다.

○ 다중 슈팅법에서는 시간은 P 단계로 이산화되고 제어 변수들은 각 단계에서 제어 매개의 유한 집합을 사용하여 매개변수화 된다. DAE 시스템은 각 단계에서 해결되고 상태변수의 값은 추가된 미지의 것으로 선택된다.

○ 병치법에서는 연속시간 문제는 유한 요소 상에 다항식 계로서 프로필 근사에 의하여 NLP로 전환된다. 다항식으로는 라그랑즈 보간 다항식, Hermite Simpson collocation, 단항식 등이 사용되고 있고 이들 모든 표현은 Runge-Kutta 식과 단항식에서 파생되는 것이 바람직하다.

○ 병치법을 사용한 동적 최적화의 응용으로서는 일괄 처리 최적화, 비선형 모델 예측 제어, 그레이드 전환 및 처리 변환 및 반응기 설계와 통합 등이 있다.

□ 동적 최적화의 확장으로 이산 의사결정, 다중 단계 동적 시스템, 최적제어 문제의 정확성에 관한 방법들이 존재한다.

○ 동적 시뮬레이션과 최적화문제에서 이산적 사건의 모델링이 중요시되고 있다. 이들 사건들의 시뮬레이션은 조건에서 변화를 감시하고 상태 방정식에서 변화를 인도하는 불연속 함수에 의하여 시작된다. 이들 변화는 보조 조건의 사용으로 또는 이진 의사결정 변수로서 재구성된다. 보조 조건은 장벽 방법을 통하여 재구성될 수 있다.

○ 대형의 동적 최적화 문제를 해결하는 능력과 이산 의사결정의 모델은 다중 동적 시스템의 통합을 허용한다. 여기서 운영에 관한 여러 다른 동적 단계가 각 동적 단계에서의 개별 모델로서 고려된다. 다중 단계 최적화의 해로서는 동시 설계와 운영 및 다중 제품 일괄 플랜트의 스케쥴링에 관한 연구가 존재한다.

○ 동적 최적화에 관한 연구로서는 NLP 조건을 일관성 있게 만들 수 있음을 보여주는 연구가 있고 안정성 문제에 대한 논문도 발표되고 있다.

5. 불확실성 하에 최적화

□ 앞의 모든 최적화문제는 본질적으로 결정적이다. 그러나 실세계에서 최적화 응용은 상당히 불확실하다. 불확실을 고려하지 않는 것은 결정적 모델의 해가 비 최적화 또는 있을 수 없는 의사결정으로 이끄는 결점을 갖는다.

○ OR분야에서 선형 스토케스틱 최적화 문제의 공식과 해에 관한 상당수의 이론적 연구가 발표되고 있다.

○ 확률적 표현을 가진 결정적 모델의 확장은 스토케스틱 프로그래밍 모델이 된다. 가장 일반적인 선형 모델은 두 단계의 스토케스틱 LP이다.

○ 이 문제는 다음과 같은 이유로 중요하다.
- 이것은 변수와 제약조건의 확률적 확장이라는 점에서 다중 단계 모델의 대표적이기 때문이다.
- 이것은 다중 단계 문제에 대한 주요 구조적 구성요소이고 다중 단계 LP를 풀기위하여 사용되는 내포형 분해(nested decomposition) 알고리즘을 위한 주요 부분문제이기 때문이다.

○ 다중 단계 스토케스틱 LP(MSLP)의 연구는 결정적 LP방법의 개발과 병행하여 발전되어왔다. 초기의 연구는 세미나 수준이었고 많은 의문점이 미해결이었다. 최근의 연구로는 Benders 기반 분해 전략이 사용된다.

○ 컴퓨터의 발전에 따라 최근의 이 분야의 발전은 2단계 스토케스틱 선형 프로그래밍 문제를 Benders 기반 방식을 써서 푸는데 있어왔다.

○ 내포형 분해 방법으로부터 다중 단계 문제에 대한 확장은 개념적으

로 간단하다. 그러나 다중 단계 문제는 컴퓨터상의 비용 면에서 어려운 일이다. 다중 단계 해법은 일반적으로 2단계 해법을 포함하는 내포형 분해 전략에 의존한다. 따라서 2단계 해법은 개선될 여지를 갖는다.

○ 개념적으로 비선형 스토케스틱 문제는 선형의 경우와 유사하다. 스토케스틱 혼합 정수 문제의 확장은 더욱 어려운 일이다.

□ 처리 시스템 공학에서는 처리의 유연성을 평가하고 최적화하기 위한 방법을 개발하는데 집중되어 왔다. 이들의 주요 목표는 불확실성 하에 비선형 최적화 문제 특히 설계문제를 다루는데 있었다.

○ 이 분야에서 제안되는 방법은 크게 두 부류로 나눌 수 있다. 하나는 결정적인 것으로 매개 변수의 불확실성을 기대 편차의 한계에 따라 나타내려는 것이고 다른 하나는 스토케스틱인 것으로 확률분포 함수를 통하여 불확실성을 나타내려는 것이다.

○ 불확실성 매개변수의 특정집합 상에서 유연성을 평가하는 문제는 유연성 테스트라고 하고 Max-Min-Max 최적화 문제가 된다. 일반적으로 유연성을 양적으로 측정하는 문제는 유연성 인덱스 문제라 하고 그 방법은 여러 문헌에서 존재한다.

○ 임계점이 정점에 대응한다는 가정에 의존하지 않고 유연성 인덱스를 계산하는 방법의 하나는 활동 집합 전략을 사용하는 것이다. 이들 활동 집합은 Kuhn-Tucker 조건을 만족하는 비영인 승수의 모든 부분집합에 의하여 정의된다.

○ 불확실성 하에서의 비선형 최적화 문제를 위하여 제1단계의 변수인 설계변수의 선택이 포함하므로 그 문제는 유연성 테스트를 만족하거나 유연성 인덱스를 최대화 하는 것이다.

○ DSNLP문제는 이산 확률을 가진 불확실성하에 문제로서 해석된다. 이것은 또한 다중주기 문제이고 유연성 있는 화학 공장의 최적 설계에 매우 중요하다.

○ 유연성 평가를 위한 스토케스틱 방법은 결합 확률분포 함수의 사용에 대한 아이디어에 의존한다. 이것은 주어진 제어 변수를 만족하는 제약조건이 조작될 수 있는 확률을 결정하기 위하여 가능해 영역에서 통합된다. 최근의 스토케스틱 리뷰는 Pistikopolus[2003]에서 찾아 볼 수 있다.

6. 결론

□ 수학적 프로그래밍의 구성, 해 및 분석의 연구는 많은 발전을 해 오고 있다. 1980년대 선형프로그래밍 기법을 넘어서 공학문제의 최적화는 이득이 없는 흥미꺼리에 지나지 않았다. 현재의 최적화 문제는 설계, 정체성, 제어, 예측, 스케쥴링 및 플래닝을 포함하는 처리 시스템 공학의 모든 영역에 기본이 되었다.

□ 이 논문은 과거 25년간 개발되고 응용된 최적화 방법에 대한 성과를 개관한 것이다.

○ 첫째는 연속 변수 최적화의 방법들을 개관하고 미분의 개념이 있거나 없는 비선형 프로그래밍의 발전을 조사한 것이다.

○ 다음으로는 혼합 정수 프로그래밍 방법들을 조사하고 MINLP의 알고리즘과 그의 확장을 망라한다. 이 두 영역에 관련된 것은 최적화와 미분 -대수 모델이다 이들 문제는 연쇄 및 동시 방법을 통하여 처리 공학에서 자주 흔히 다루는 문제이다.

○ 마지막으로 불확실성하에서 최적화의 기본문제를 다루는 방법들이 조사되었다.

◁ 전문가 제언 ▷

□ 이 논문에서는 처리 시스템 공학의 입장에서 NLP, MINLP, 동적 최적화 및 불확실성하에 최적화 문제의 현재 까지 개발되고 연구된 내용의 리뷰를 제공하고 있다.

□ 비록 공학적인 입장에서 개관하였으나 수학적 프로그래밍의 입장에서 볼 때의 일반화 이론의 발전 과정의 일부로 볼 수도 있다. 따라서 지금까지의 최적화이론의 발전 과정을 개관한다는 점에서 매우 의의가 있으며 최적화 이론을 연구하려는 연구자 뿐 아니라 최적화 시스템 개발자도에게 많은 도움을 줄 것으로 여겨진다.

□ 최적화 이론의 발전을 위하여서는 이 논문을 바탕으로 하여 Grossmann과 Biegler가 연구한 '최적화에 대한 미래 전망'(Future perspective on optimization)을 아울러 참조하는 것이 크게 도움이 되리라고 본다.