

Global Homotopy Continuation 방식을 이용한 비선형 방정식의 해법

한경택 · 이강주 · 윤인섭 · 김화용

서울대학교 공과대학 화학공학과
(1991년 8월 2일 접수, 1991년 12월 12일 채택)

Application of Global Homotopy Continuation Method to Solutions of Nonlinear Equations

Kyung Taek Han, Kang Ju Lee, En Sup Yoon and Hwa Yong Kim

Department of Chemical Engineering, College of Engineering, Seoul National University
(Received 2 August 1991; accepted 12 December 1991)

요 약

비선형 방정식의 해를 구하기 위한 강력하고 효율적인 Global Homotopy Continuation 알고리즘을 구현하였다. 기존의 알고리즘을 조합적으로 평가하였으며 이를 근거로 새로운 알고리즘을 제시하였으며 비교적 비선형성이 크고 다중해를 갖는 예제에 대하여 성능 평가를 행하였다. 알고리즘의 가장 큰 특징으로는 해곡선 이탈을 방지할 수 있는 기법과 함께 곡물의 근사식에 기본적인 비교적 간단한 적분간격 제어와 신축성있는 수렴정의를 들 수 있다. 알고리즘은 지금까지의 것보다 해곡선 추적성능이 강력하고 우수하였으며 해곡선의 이탈을 쉽게 감지해냄으로써 허용가능한 최대의 적분간격으로 효율적으로 해를 구현할 수 있었다. 또한 이를 이용하여 Newton Homotopy의 성질을 파악한 결과 해곡선은 시작점의 선정에 의하여 척도의 변화(scaling)를 보였으며 해곡선의 형태는 임계점을 전후로 완전히 다른 행태를 보임을 알 수 있었다.

Abstract—An improved Homotopy continuation algorithm for solving nonlinear equations has been developed. The improvement in this algorithm is that in addition to the stepsize control based on approximate curvature of solution path, a technique for preventing the segment jumping is incorporated into stepsize control for the robust path tracking. The flexible convergence criteria based on the determinant of augmented Jacobian is incorporated into the algorithm and it yields more robust and efficient continuation algorithm. The algorithm is tested on several small, but highly nonlinear problems and the results are documented. Also, the characteristics of Newton Homotopy path on selection of starting point have been investigated.

1. 서 론

많은 화학공학의 설계와 해석문제는 많은 수의 비선형 방정식으로 표시되며 간단한 $n \times n$ 행렬의 형태, 즉 $F(X)=0$ 으로 표시할 수 있다. 그러므로 화학공정의 설계 및 해석문제는 $F(X)=0$ 을 만족하는 해인 X 벡터를

찾는 것으로 정의될 수 있다. 정의된 비선형 방정식의 일반적 해법으로 가장 널리 쓰이는 것으로는 Newton 방법 또는 유사 Newton(Quasi-Newton) 방법을 들 수 있으며 구하는 해 벡터는 다음과 같은 선형식으로 정의된다.

$$X^{k+1} = X^k - [J]^{-1} F(X) \quad (1)$$

계산과정은 일반적으로 해가 수렴 정의에 도달할 때까지 반복된다. 알려진 바와 같이 Newton 방법은 해 근처에서 빠른 2차 수렴특성을 보이는 반면 지엽적 수렴과 항상 해에 근사한 초기치를 제공하여야 한다는 단점을 안고 있다. 이러한 단점을 개선하기 위하여 Newton 방식 또는 유사 Newton 방식에 대한 많은 연구가 진행되어 왔다.

그 하나로 반복 계산 중의 역 자코비 행렬(inverse Jacobian)의 계산 부담을 줄이고 계산 효율을 향상시키기 위한 자코비 행렬 갱신(Jacobian update) 방식들을 들 수 있다. 이 방식들은 대부분 한번 계산된 자코비 행렬을 다음 반복 계산에 사용하기 위하여 적절한 값을 더하거나 빼냄으로써 정밀한 자코비 행렬 계산의 부담을 줄이고 효율을 향상시키기 위한 것이다. 그러나 이런 방식들은 행렬의 희소도(sparsity)가 심한 화학공정 문제에 대하여 행렬의 희소성을 상실시키며 열역학적으로도 전혀 일관성이 없는 경우가 많다. Lucia 등이 열역학적으로도 일관성이 있는 자코비 행렬 갱신 방식을 발표하여 그에 대한 신뢰성을 입증하였다. 그러나 대단위 화학공정에서의 이러한 유사 Newton 방식의 효율성에 대해서는 아직 미지수이다[14].

그 외로 Newton 방식의 수렴특성을 개선하기 위하여 수렴가능 영역을 넓히는 연구들이 수행되었다. 그 예로는 자코비 행렬의 특이점(singular point)을 극복하기 위한 Levenverg-Marquardt 방식과 Newton 방식에 steepest descent 방식을 도입하여 수정시킨 Powell의 방식, 그리고 trust region 방식을 들 수 있다[14]. 이러한 개선된 알고리즘들은 Newton 방법의 수렴가능 영역을 다소 확장시킨 하였으나 여전히 지엽적 수렴특성에 대한 개선은 이루어지지 못하였으며 초기치에 대한 부담 역시 크게 개선되지 못하였다. 이에 반해 화학공정 모델과 공정 자체가 복잡해짐에 따라 화학공학의 문제들을 풀기 위한 더욱 강력하고 효율적인 알고리즘의 필요성이 증대되었으며 때로는 수렴성이 항상 보장되는 알고리즘을 필요로 하게 되었다.

Homotopy continuation 방식은 이러한 필요성에 적절한 것으로 알려져 있다. 1980년 Allgower와 Georg[1]에 의하여 비선형 방정식 계의 해법에 효과적으로 적용될 수 있음이 밝혀짐으로써 널리 알려진 Homotopy continuation 방식은 80년대 이후 몇몇 화학공학자들에 의하여 화학공학 분야에 응용되어 오면서 비선형 방정식 계로 표현되는 화학공정의 문제의 해석을 위한 새로운 수학적 기법으로 여겨지게 되었다. Homotopy continuation 방식은 총괄적 수렴(global convergency)의 특성 뿐 아니라 다중해의 구현과 선택된 변수에 대한 방정

식계의 민감도 연구 등이 용이하다는 특징을 갖는다.

현재 널리 사용되는 예측-수정(Predictor-Corrector) 방식의 Homotopy continuation 방식의 기원은 Davidenko[3]로부터 찾을 수 있다. 그후 Allgower와 Georg는 회전점(turning point)을 극복하기 위해 differential-arc-length Homotopy continuation 방식을 도입하였다[1]. Homotopy continuation 방식에 대한 화학공학에의 응용성 및 원리 등은 Seydel과 Hlavacek[16], Wayburn[18] 등에 의해 잘 정리되어 있다. 지금까지 연구되어온 Homotopy continuation 방식에 대한 화학공학에의 적용성은 Homotopy 함수 자체의 성질 파악과 화학공학이 갖는 문제의 특성에 잘 부합된다고는 할 수 없다.

우선 화학공정을 표시하는 방정식 계가 제약조건을 갖는다는 것이다. 예를 들면 증류공정과 같은 문제에서 유량과 조성 등은 항상 0보다 크거나 같은 양수로 정의되어야 한다. 만일 음수의 값을 가진 조성 또는 유량에 대해서는 열역학적인 실패를 발생시키게 된다.

또한 해의 다중성을 파악하는 것도 해결해야 할 문제로 지적되고 있다. Seader[9, 14], Choi[2] 등이 밝힌 바와 같이 다항식으로 표시되지 않는 일반적인 비선형 방정식 계에 대해서는 다중해를 갯수로 예측할 수 있는 증명된 방법이 없다는 것이다. 그러나 일반적인 비선형 방정식 계로 표시되는 화학공정은 다중해를 가질 확률이 매우 높다. 그러므로 방정식 계가 가지는 다중해 역시 효율적으로 구현할 수 있는 알고리즘이 필요한 것으로 지적된다. 이외에 일반적으로 해곡선 추적시에 야기되는 해곡선 이탈 현상(segment jumping)에 대한 문제도 Homotopy continuation 방식을 적용함에 있어 해결해야 할 문제로 지적되고 있다.

본 연구에서는 화학공학 문제에 Homotopy continuation을 적용함에 있어 기존의 알고리즘을 종합 정리하고 화학공학의 문제에 효율적으로 적용될 수 있는 continuation 알고리즘을 개발하는 것에 그 목적이 있다. 이를 위하여 다음과 같은 요소들이 검토되었으며 이를 기본으로 Homotopy continuation method의 해곡선 추적(path-tracking) 성질을 고찰하였다.

- 해곡선 추적 알고리즘의 공식화(formulation)
- 효율성 향상을 위한 적분간격 제어기법
- 수렴정의식(convergence criteria)
- 해곡선 이탈 방지 전략
- 다중해를 위한 알고리즘의 고찰

2. Global Homotopy Continuation

Homotopy 함수 $h(x, t)$ 는 인위적 매개변수 t 에 의한 $f(x)$ 와 $g(x)$ 의 조합으로 정의된다.

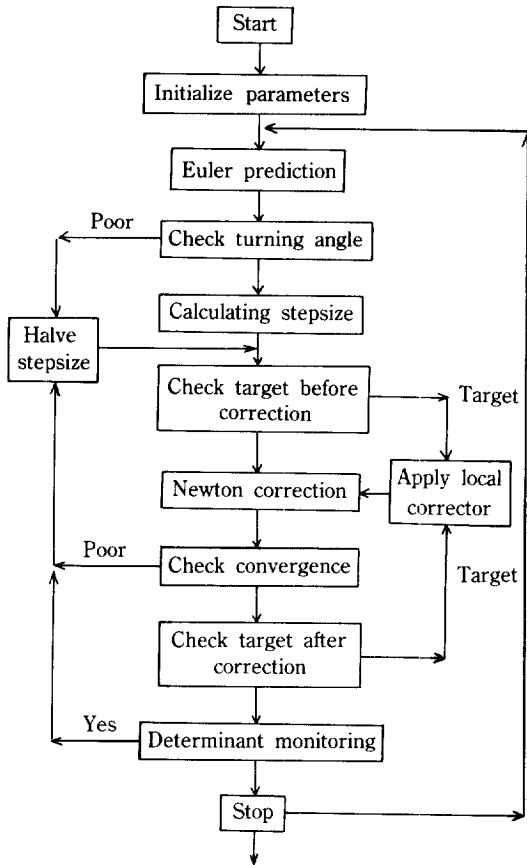


Fig. 1. Path tracking algorithm.

$$h(x, t) = tf(x) + (1-t)g(x) \quad (2)$$

여기에서 $f(x)$ 는 풀고자 하는 문제의 정의이며 $g(x)$ 는 간소화된 또는 이미 해를 알고 있는 함수로 정의된다. 즉 $t=0$ 일 때 $h(x, t)=g(x)$ 가 되며 $t=1$ 일 때 $h(x, t)=f(x)$ 가 되어 t 가 0에서 1까지 변화함에 따라 Homotopy 함수는 $g(x)$ 로부터 $f(x)$ 로 그 형태가 변화된다. 즉 $t=0$ 에서 이미 알고 있는 해로부터 출발하여 서서히 t 를 변화시킴으로써 $t=1$ 의 원하는 해를 구하는 수학적 기법으로 설명될 수 있다. Fig. 1에 개략적인 Homotopy continuation 방식을 나타내었다. $t=0$ 에서 $t=1$ 까지의 해곡선은 적절한 가정하에서 항상 보장된다[14].

$g(x)$ 의 형태는 이미 알고 있는 간단한 함수 형태이거나 적절한 선택된 것이어야 하는데 주로 다음과 같은 형태를 사용한다.

$g(x) = f(x) - f(x_0)$	Newton Homotopy
$g(x) = x - x_0$	Fixed point Homotopy
$g(x) = f'(x_0)(x - x_0)$	Affine Homotopy

각 Homotopy의 성질은 Seader[9, 14]와 Choi[2]에 의해 비교되었으며 Seader 등은 fixed point Homotopy를 사용하여 해의 다중성 구현을 위한 시작점 정의(starting point criteria)를 발표하였다. 그러나 Choi 등은 시작점 정의가 완전하지 못하며 fixed point Homotopy 보다는 Newton Homotopy가 일반적인 비선형 방정식 계에 더 적합하다는 보고를 하였다. Homotopy continuation 방식에서의 해곡선의 추적은 Homotopy 함수를 해곡선의 호의 길이로 미분하여 얻은 변형된 형태의 미분방정식을 적절한 방식의 예측수정 단계를 거침으로써 이루어지며 이러한 계산은 $t=1$ 에 도달할 때까지 계속된다.

다른 형태의 continuation method로 parametric continuation을 들 수 있다. 문제의 정의는 $f(x, p)=0$ 의 $n \times (n+1)$ 행렬식으로부터 시작되며 해곡선의 추적은 임의의 변수 p 를 continuation 변수로 선택하여 Homotopy continuation method와 같은 방식의 예측 및 수정 단계를 거쳐 수행된다. Parametric continuation은 Homotopy continuation과는 달리 continuation 변수가 인위적인 변수가 아닌 실제 변수로 선택됨으로써 해 곡선 전체가 $f(x, p)=0$ 의 해 벡터가 된다.

2-1. 예측 단계(Euler Prediction)

Newton Homotopy와 해 벡터 w 는 (3)과 (4)식과 같이 정의될 수 있다.

$$h(x, t) = f(x) - (1-t)f(x_0) \quad (3)$$

$$w = \begin{bmatrix} x \\ t \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1} \quad (4)$$

Homotopy 함수는 n 차원 공간에서 $n+1$ 개의 변수로 정의되며 이를 호의 길이 s 에 대해 미분하면 (5)식과 같은 초기치 미분방정식(IVP)의 형태를 갖는다.

$$\frac{dh}{ds} = \frac{\partial h}{\partial w} \frac{dw}{ds} = 0 \quad (5)$$

(5)식은 하나의 제약방정식 즉 호의 길이 조건식인 (6)식을 더하여 줌으로써 \mathbb{R}^{n+1} 공간에서 증강된 방정식 계로 정의할 수 있다.

$$\frac{dw^T}{ds} \frac{dw}{ds} = 1 \quad (6)$$

(5)와 (6)식을 행렬형태로 정의하면 다음과 같다.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w}(w^k) \\ \frac{dw^T}{ds}(s^k) \end{bmatrix} \frac{dw}{ds}(s^k) = e^{n+1} \quad (7)$$

여기에서 w^k 는 k 번째 continuation 단계의 해 벡터이며 s^k 는 k 번째 단계의 호의 길이로 정의된다. e^{n+1} 는 $n+1$ 번째 요소만 1의 값을 갖고 그 외에는 모두 0의 요소를 갖는 해 벡터로 정의된다. 해곡선 추적의 방향은 (8)식을 일관성있게 만족할 수 있도록 결정된다.

$$\frac{dw^T}{ds}(s^{k-1}) \frac{dw}{ds}(s^k) > 0 \quad (8)$$

(7)식에서의 (6)식의 역할은 방정식 계의 기울기 벡터 dw/ds 의 Euclidian norm을 표준화시키는 것이므로 (5)식을 미리 알고 있는 벡터로 대체하고 (6)식을 풀후 이를 다시 표준화하는 방식으로 해곡선의 추적에 필요한 기울기 벡터(tangent vector)를 얻을 수 있다. 기울기 벡터를 구하는 방식으로는 2가지 형태를 들 수 있는데, 그 첫째가 기본 단위(standard base) 벡터를 이용하는 방식으로 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w}(w^k) \\ (e^i)^T \end{bmatrix} V^k(s^k) = e^{n+1} \quad (9)$$

이 방식은 Rheinboldt 등이 처음 택한 방식으로 local parameter에 의한 continuation으로 정의된다[11]. 다른 방식으로는 Watson 등이 사용한 이전 단계의 기울기(previous tangent)를 이용하는 방식이다[17].

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w}(w^k) \\ \frac{dw}{ds}(s^{k-1}) \end{bmatrix} V^k(s^k) = e^{n+1} \quad (10)$$

(9) 또는 (10)식에 의해 결정된 기울기 벡터는 (11)식에 의하여 단위 기울기 벡터(unit tangent vector)로 표준화된다.

$$\frac{dw}{ds}(s^k) = \frac{\sigma^k V^k}{\|V^k\|} \quad (11)$$

$\sigma^k = +1$ 또는 -1 을 가지며 $k \geq 1$ 에서 기울기 벡터의 방향은 (8)식과 연관되어 결정된다. 본 연구에서는 $k=0$ 에서는 (9)식을 $j=n+1$ 로 고정시킴으로써 기울기 벡터를 구하였으며 $k \geq 1$ 에서는 (10)식의 방식을 사용하였다.

해곡선 추적을 위한 다음 continuation 단계의 초기 해는 (12)식과 같이 정의된다.

$$w_0^{k+1} = w^k + \frac{dw}{ds}(s^k) \Delta s^k \quad (12)$$

여기에서 Δs^k 는 적분간격(stepsize)이다.

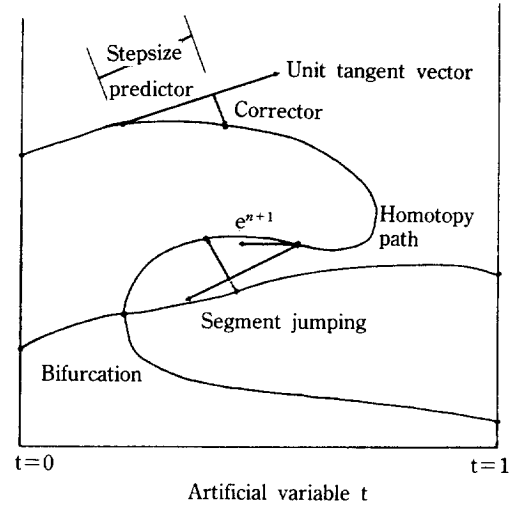


Fig. 2. Schematics of Homotopy continuation.

2-2. 수정 단계(Newton Correction)

해곡선 상에서 예측된 지점으로부터 좀 더 정확한 수렴지점을 찾기 위하여 Newton 방식의 correction을 행하였다. 만일 예측된 해가 해곡선에 충분히 가깝다면 수정 단계에서 해를 해곡선 위에 정확히 일치시킬 수 있다[4]. 수정단계는 (13)식과 같이 Newton 방식으로 행하여진다.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w}(w_i^{k+1}) \\ \frac{dw^T}{ds}(s^k) \end{bmatrix} \Delta w_i^{k+1} = \begin{bmatrix} -h(w_i^{k+1}) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

(13)식의 마지막 열벡터는 Homotopy 함수에 부가된 방정식으로 수렴단계가 전 단계의 기울기 벡터에 수직으로 행하여 지는 것을 의미한다. 수렴단계는 주어진 수렴정의식이 만족될 때까지 반복된다. 이외에 수렴단계에 지역적 변수방식(local parameter)으로 방정식을 부가할 수 있는데 이는 (13)식의 맨 아래 열벡터를 (14)식으로 치환하여 얻을 수 있다[11].

$$[e^i(w^{k+1} - w_0^{k+1})] = 0 \quad (14)$$

Fig. 2에서 보는 바와 같이 지역변수 방식의 부가 방정식은 Newton 수정 단계가 선택된 변수의 기본 단위(standard base) 벡터에 수직인 방향으로 이루어 진다는 기하학적 의미를 갖는다. 구해진 수정자는 다음과 같은 Newton 방식에 의하여 새로운 점을 계산한다.

$$w_{i+1}^{k+1} = w_i^{k+1} + \lambda \Delta w_i^{k+1} \quad (15)$$

w_{i+1}^{k+1} 는 수렴정도가 만족될 때 $k+1$ 단계의 해로 받아들이며 w 는 다음 단계의 예측을 위한 값으로 사용된다. 여기에서 λ 는 감쇄계수(damping factor)로 정의되며 Newton 방식에서는 $\lambda=1$, 수정된 Newton 방식에서는 $0<\lambda<1$ 의 값으로 정의된다.

2-3. 적분간격 제어(Stepsize Control)

Continuation에 있어서 적분간격(stepsize)의 결정은 그 계산 효율에 상당한 영향을 미친다. 적분간격이 너무 작게 결정되면 계산상 효율을 상실하게 되며 너무 크면 수정 단계의 실패를 유발하게 된다. 그러나 Rheinboldt [10] 등이 밝힌 바와 같이 continuation의 각 단계에서의 수렴가능 반경은 이전단계의 수렴반경으로부터 일반적으로 추정하는 것이 불가능하다. 이러한 이유로 아직까지도 적절한 전략은 나오지 못하고 있다. 지금까지 사용된 적분간격 결정법의 유형은 크게 두 가지인데 그 하나가 Deuffhard[5], Rheinboldt 등[11]이 사용한 방식으로 해곡선을 다항식으로 근사함으로써 적분간격을 결정하는 방식이다. 다른 하나는 Allgower[1], Seader 등[9]이 사용한 방식으로 해곡선의 회전각과 수정자의 오차 축소율(error contraction)에 기반한 적분간격 결정방식이다. 이외에 상당히 간단한 기법들도 소개되었는데 대부분 비효율적인 것으로 지적되고 있다. 최근에는 Rion과 Van Brunt[13]가 미분 기하(differential geometry)에 기본을 둔 2차 예측단계와 곡률(curvature)에 기반한 적분간격 결정법을 사용하였다.

2-4. 알고리즘의 구현

본 연구에서는 continuation 방식의 효율과 해곡선 추적성능을 극대화하기 위하여 다음과 같은 알고리즘들을 제시하였다.

2-4-1. 수정 단계에서의 불필요한 해 탐색을 방지하기 위한 기법

본 연구에서는 목표지점($t=0$, $t=1$)에서는 (13)의 방식을 그 이외의 지점에서는 (14)의 방식을 $j=n+1$ 로 고정하여 사용하였다. 이렇게 목표 지점에서 다른 형태의 수정자(corrector)를 사용한 것은 해곡선이 목표 지점을 통과하였을 때 해를 $t=1$ 또는 $t=0$ 에 정확히 일치시키기 위하여 행하여지는 과도한 탐색 단계를 거치지 않기 위해서이다.

2-4-2. 곡률의 근사식을 이용한 적분간격 제어기법
곡률에 대한 정의식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$K = \lim_{ds \rightarrow 0} \frac{\cos^{-1}[T(s)T(s+ds)]}{ds} \quad (16)$$

곡률 K 는 미분 기하에 근거하여 해곡선의 기준 단위

벡터(principle unit vector)와 기울기 벡터(tangent vector) 그리고 수직 벡터(binormal vector)에 연관되어 계산되어 진다. 그러나 ds 가 상당히 크지 않다면 곡률은 다음과 같은 근사식으로 표시할 수 있다.

$$K \approx \frac{\cos^{-1}[T(s)T(s+\Delta s)]}{\Delta s} \quad (17)$$

이 식에 의하여 결정된 $k+1$ 단계의 곡률로부터 $k+1$ 단계의 적분간격은 다음과 같이 표시될 수 있다.

$$\Delta s^{k+1} = \theta^{id}/K \quad (18)$$

θ^{id} 는 이상적인 회전각으로 라디안(Radian) 값으로 정의된다. (17)과 (18)식으로 표현되는 곡률과 적분간격은 근사식이기는 하나 회전각에 의해서만 결정되는 적분간격 보다는 훨씬 효율적으로 여겨진다. 즉 이전 단계의 적분간격의 크기를 감안하여 기울기 벡터의 변화량을 계산해 냄으로써 해곡선을 실제로 더욱 근사하게 표현할 수 있다.

위와 같이 구성된 곡률식과 적분간격식을 기본으로 적분간격은 다음과 같은 알고리즘으로 결정되어 진다.

```

IF(FIRST(k=0)) THEN
  SET Initial Variables and
    Initial Stepsize, Max & Min Value of Stepsize
    Ideal & Max Turning Angle
     $\Delta s^0$ ,  $\Delta s_{min}$ ,  $\Delta s_{max}$ ,  $\theta_{ideal}$ ,  $\theta_{max}$ 
ELSE
  CALCULATE K
  Determine  $\Delta s^{k+1}$  Based on K
    IF( $\Delta s^{k+1} < \Delta s_{max}$ )  $\Delta s^{k+1} = \max(\Delta s^{k+1}, \Delta s_{min})$ 
    IF( $\Delta s^{k+1} > \Delta s_{min}$ )  $\Delta s^{k+1} = \min(\Delta s^{k+1}, \Delta s_{max})$ 
ENDIF
IF(FAILURE IN CORRECTION .OR.  $\theta > \theta_{max}$  .OR.
  DETERMINANT MONITORING) THEN
   $\Delta s^k = \Delta s^{k-1}/2$ 
  GOTO Correction Step
ENDIF
  
```

알고리즘은 최대와 최소 허용 적분간격을 설정함으로써 적분간격이 지나치게 크거나 작아짐에 따른 계산의 효율 상실을 방지하였다. 최소와 최대 적분간격은 인위적 변수 t 가 0.000001 그리고 0.3을 넘지 않도록 매 단계 인위적 변수 t 의 기울기에 의하여 설정된다. 또한 최대 허용 회전각을 지정함으로써 해곡선의 극심한 회전으로 인한 해곡선 이탈현상을 방지하게 하였다.

2-4-3. 해곡선 이탈(Segment Jumping) 방지 전략

해곡선 추적에 있어 적분간격 결정만큼 중요한 것이 해곡선의 이탈(segment jumping)을 방지하는 것이다. 이러한 기법은 1990년 Choi에 의하여 맨처음 도입되었다[2]. Allgower[1]에 의하면 Homotopy 함수의 증강된 자코비 행렬 A의 행렬값(determinant) $\det A(w)$ 는 충분히 작은 적분간격으로 해곡선을 추적하는 경우 유연하고 연속적으로 변화하며 해 벡터가 추적 중인 해곡선이 아닌 다른 곡선으로 다가감에 따라 0에 가까운 값을 갖는다. 그러므로 해곡선 추적 중 0에 가까운 행렬값은 해곡선이 분기점(bifurcation point)에 접근해 있다는 증거이며 점차 0을 지나 음수로 가는 것은 분기점을 지나 다른 곡선을 추적하고 있음을 의미한다. 따라서 증강된 자코비 행렬의 행렬값의 변화량을 일정 비율로 조절한다면 해곡선을 정확히 추적하는데 도움이 될 수 있다.

본 연구에서는 Choi가 제안한 행렬값 제어(determinant monitoring)식을 개선하여 다음과 같은 해곡선 추적 정의를 사용하였다.

$$\frac{|\det A^{k+1} - \det A^k|}{\max(|\det A^{k+1}|, |\det A^k|)} < \varepsilon_{det} \quad (19)$$

행렬값 제어는 현 단계에서 계산된 행렬값의 변화량이 주어진 값보다 클 때 적분간격을 줄여줄 수 있는 역할을 함으로써 해곡선의 이탈 현상을 방지할 수 있다. 제안된 식은 Choi의 것과 비교 검토되었다. 이렇게 곡물에 기반한 적분간격 결정과 더불어 행렬값 제어(determinant monitoring)를 실행함으로써 가능한 최대의 적분간격으로 계산을 행하게 하였다.

2-4-4. 수렴정의식

수렴정의는 방정식 해법의 효율뿐 아니라 성능에 큰 영향을 미친다. 본 연구에서는 다음과 같은 수렴정의식을 사용하여 해곡선의 추적 알고리즘을 구성하였다.

(1) 수정 단계는 다음의 수렴조건을 만족할 때 수렴한 것으로 간주한다.

$$\|h(w_{i+1}^{k+1})\|_2 < \min(\varepsilon_{max}, \varepsilon_{min}) \quad (20)$$

$$\varepsilon_{max} = \varepsilon_{tol} / (\det A(w_0^{k+1}))^{1/n} \quad (21)$$

If $(|\det A(w_0^{k+1})| < 1)$ Then

$$\varepsilon_{min} = \varepsilon_{cur} |\det A(w_0^{k+1})|$$

Else

$$\varepsilon_{min} = \varepsilon_{cur} |\det A(w_0^{k+1})|^{1/n}$$

Endif

(2) 다음의 관계식을 만족할 때 해에 도달한 것으로 간주하고 지엽변수 형태의 수정자를 적용한다.

$$(1-t^{k+1})(1-t^k) < 0 \quad (22)$$

(3) 다음의 관계식을 만족할 때 또 다른 시작점에 도달한 것으로 간주하고 지엽변수 형태의 수정자를 적용한다.

$$t^{k+1} t^k < 0 \quad (23)$$

(4) 다음의 관계식을 만족할 때 회전점을 지난 것으로 간주한다.

$$(dt/ds)^{k+1}(dt/ds)^k < 0 \quad (24)$$

(5) 다음의 관계식을 만족할 때 해곡선은 무한대($t = +\infty$ or $-\infty$)로 행하는 것으로 간주한다.

$$\|(dw/ds)^{k+1} - (dw/ds)^k\| < \varepsilon_{inf} \quad (25)$$

(21)식에서 A는 증강된 방정식 계에 대한 자코비 행렬값으로 다음과 같은 근사식으로 구하여진다[1].

$$A(w_{i+1}^{k+1}) \approx \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial w}(w_i^{k+1}) \\ \frac{dw^T}{ds}(s^k) \end{bmatrix} \quad (26)$$

Homotopy continuation에 있어서 해곡선 추적의 수렴은 일반적으로 함수값의 Euclidian norm 또는 변수의 변화량이 일정수 보다 작은 경우로 정의한다. 그러나 Homotopy continuation에서 관심을 두는 해는 해곡선 자체가 아니라 $t=0$ 또는 $t=1$ 에서만 국한되므로 중간 해에 대해서는 수렴정의를 느슨히 하는 것이 효율적인 측면에서 우수한 것으로 지적된다. Continuation의 각 단계는 수정 단계를 거침으로써 이전단계의 수렴 오차가 현재의 계산에 영향을 주지 않는다[1]. 그러므로 $t=1$ 인 지점까지 수렴영역을 이끌고 갈 수 있다면 계산의 효율적인 측면에서 관심을 두는 해 지점을 제외한 다른 부분에서는 수렴정의를 신축성있게 조정할 필요가 있다. 체계적인 수렴정의식을 제안한 연구자들로는 Allgower와 Choi 등을 들 수 있다[1, 2]. 이들 모두는 증강된 자코비 행렬값에 기본을 하고 있는데 Allgower는 시작점의 행렬값을 사용하여 수렴정의를 하였다. 그러나 이 방식은 시작점의 분기점(bifurcation point, $\det A=0$) 근처에 위치하는 경우는 과중한 수렴정의로 효율을 완전히 상실한다. 또한 Choi는 각 수정 단계마다 $\det(A)^{1/n}$ 를 계산하여 수렴정의에 이용하였다. 그러나 이는 Newton Homotopy에 있어서 행렬값의 변화에 충분히 유연하게 대처하지 못하였다. 사례연구를 통하여 제안된 수렴정의식과 이들을 비교

Table 1. Performance evaluation of path tracking algorithm

	EX1		EX2		EX3		EX4		EX5		EX6	
	NR	MNR	NR	MNR	NR	MNR	NR	MNR	NR	MNR	NR	MNR
No. solution	9		4		12		2		2		5	
Starting point	(5, 5)		(2, 2)		(-0.5, -e)		(0, 0)		(2, 2)		(0.2, 0.2, 0.2, 0.2)	
No. step	45	47	20	22	94	98	24	24	10	10	46	46
No. corrector	100	139	39	44	183	213	42	45	16	17	89	107
No. failure	6	10	5	5	33	31	5	4	0	0	11	11
No. function	612	524	256	213	1195	1083	281	228	113	903	884	728
No. Jacobian	152	103	63	47	293	246	69	51	28	20	147	112
No. monitoring	2	1	1	1	6	5	0	0	0	0	5	4

*NR is Newton-Raphson Method

**MNR is Modified Newton-Raphson Method

검토하였다.

3. 사례연구 및 성능평가

제안된 알고리즘의 성능평가를 위하여 사례연구를 행하였다. 사례연구를 위한 예제는 비교적 비선형성이 심하고 다중해를 갖는 것으로 택하였다. 예제 1은 최적화 함수의 미분형태로 해들은 주어진 최적화 문제의 극대 혹은 극소점을 의미한다. 예제 3은 파동 방정식이며 예제 5와 7은 화학반응식을, 그리고 예제 7은 Inter-linked CSTR식을 나타내고 있다. 성능 평가는 다음의 사항들을 고려하여 행하였다.

목적하는 해를 위한

- 필요한 continuation 단계 수
- 수정 단계의 수정자 계산 수
- Continuation 단계의 실패 수
- 함수의 계산 수
- 자코비 행렬 계산 수

해곡선 추적을 위한 자코비 행렬은 수치적으로 섭동법(perturbation)을 통하여 구하였으며 수정 단계에서는 6개의 단계당 최대 허용 수정 인자수를 사용하였다. 이는 주로 수정된 Newton 방식을 고려하여 설정한 수이며 Newton 방식에서는 대부분 2-3개 정도의 수정자로 수렴정지가 만족되었다. Table 1은 6개의 예제들에 대한 결과를 나타내고 있다. 모두 1개의 시작점으로부터 모든 해를 찾을 수 있었던 것으로 최대 허용 회전각은 30도, 이상 회전각은 10도, 행렬 제어값은 0.5를 택하여 계산된 결과이다. NR 알고리즘은 Newton 방식을, MNR 알고리즘은 수정된 Newton 방식을 사용한 것이다. 수정된 Newton 방식은 (15)식에서 $\lambda = (0.5)^i$ 로 정하고 수정 첫단계의 자코비 행렬값을 다음 단계에서도 갱신하지 않고 재사용하는 방식으로 수정에 실패하는 경우는 감

쇄계수를 조정하여 다시 수정을 행하도록 하였다. 여기에서 i 는 감쇄 횟수(number of damping)를 나타내며 최대 허용 감쇄 횟수는 4를 사용하였다.

해곡선의 추적 성능은 Table 1에서 보는 바와 같이 대체적으로 MNR 방식이 NR 방식보다 우수한 성능을 보였다. MNR의 경우 전체 continuation 단계 수와 수정자 수는 다소 많았지만 자코비 행렬과 함수의 계산 수에서 NR 방식보다 효율적인 것으로 나타났다. MNR 알고리즘은 시작점이 분기점 근처에서 선택된 경우에도 안정적으로 해를 찾을 수 있었다.

3-1. 수렴정의식

앞서 기술한 바와 같이 해가 아닌 지점에서의 해곡선 추적에 있어서 수렴정의를 신축성 있게 조절하는 것은 계산효율에 지대한 영향을 미친다. 그러므로 해곡선 추적에 수렴정의를 신축성있게 적용하는 알고리즘이 필요하다. 이 알고리즘은 해곡선 추적이 실패하지 않도록 충분히 정밀해야 하며 효율을 극대화시킬 수 있도록 느슨하여야 한다. 이러한 면에서 행렬값에 의한 수렴정의는 충분히 효율적이라 할 수 있다[2]. 성능평가를 위한 수렴정의는 모두 행렬값 제어기법과 같이 구현되었다. 사용된 ϵ_{err} 값은 해 지점에서는 10^{-7} 그리고 이외의 지점에서는 10^{-4} 를 사용하였으며 ϵ_{tol} 값은 10^{-2} 을 사용하였다.

Table 2는 제안된 수렴정의식과 기존의 정의식의 성능 비교를 위한 것이다. Himmelbrau 함수를 택하여 성능평가를 행하였다. Set 1과 2는 해곡선이 분기점 근처를 지나도록 선택된 것이며, Set 3은 Newton Homotopy가 시작점의 선정에 대하여 변수값의 척도(scaling)가 달라진 것을 보이기 위한 예이다. Set 1은 $+t$ 방향과 $-t$ 방향을 모두 추적해야 9개의 해를 얻을 수 있는 경우로 시작점의 행렬값은 거의 0에 가까우며 그 이외의 지점에 대해서는 약 4000까지의 증가된 값을

Table 2. Comparison of convergence criteria for Himmelblau's function

	Allgower's				Choi's				Proposed(NR)			
	set 1		set 2	set 3	set 1		set 2	set 3	set 1		set 2	set 3
	+	-			+	-			+	-		
No. step	74	32	103	56	75	52	104	56	75	52	104	50
No. failure	37	13	72	8	37	13	67	8	32	13	67	8
No. corrector	223	137	405	167	119	127	364	121	114	70	357	125
No. function	1354	799	2377	928	1254	759	2227	740	901	527	2199	735
No. Jacobian	339	198	600	231	341	188	563	184	226	130	556	184
No. monitoring	32	7	45	3	32	7	34	3	27	7	34	4

*Positive t direction

**Negative t direction

Set 1(-1.15 -1.5), Set 2(3.5 2.1425), Set 3(20 20)

맞는다. Set 2는 시작점에서는 큰 행렬값을, 중간지점에서는 0에 가까운 행렬값을 보이는 예이며 Set 3은 Fig. 3에서 보는 바와 같이 9개의 해가 $t=0.998$ 과 $t=1.001$ 사이에 존재하는 심한 변수의 척도 변화를 보이는 예이다. Set 3의 경우 시작점이 더 큰 값으로 변하는 경우 이러한 현상은 더욱 두드러져 더 작은 구간에서 해를 갖는다. Newton Homotopy는 시작점의 선정에 대하여 변수의 척도가 변화하는데 수렴정의식은 이러한 현상을 적절히 감안할 수 있어야 한다. Set 3에 대하여 Allgower의 수렴정의도 9개의 해를 찾을 수 있었다. 그러나 행렬값 제어를 하지 않을 경우는 수렴에 실패하였으며 더욱 느슨히 ϵ_m 를 정하는 경우는 수렴에 실패하였다. 즉 수렴정의가 너무 느슨하게 결정됨으로써 해를 찾지 못하는 경우이다. 이러한 현상은 시작점에 따라 더욱 심화될 수 있으므로 적절한 방식으로 보상되어야 한다. 고정된 값의 최대 수렴정의를 보조로 갖는 경우는 이러한 현상을 어느 정도 보정할 수는 있지만 효율적인 면에서는 바람직하지 못하다. 또한 Set 1은 시작점의 행렬값이 거의 0에 접근함으로써 시작점의 초기 행렬값으로 수렴정의식을 구성한 Allgower 등의 수렴정의식으로는 계산의 효율성을 유지할 수 없다. 제안된 수렴정의식은 Choi의 수렴정의 단점을 보완함은 물론 분기점 근처에서는 엄밀한 수렴정의를, 해를 제외한 지점에서는 느슨한 수렴정의를 문제의 정의에 부합되게 조정함으로써 해곡선 추적의 효율성을 극대화하였다. 또한 시작점의 선정에 의한 변수의 척도 변화를 고려하여 (23)의 식을 최대 허용 수렴정의로 할 것을 제안하였다. Table 2에서 보는 바와 같이 제안된 수렴정의식이 우수한 성능을 보였다.

3-2. 행렬값 제어

해곡선 추적에 있어서 효율성 만큼이나 중요한 것이 해곡선의 이탈 방식을 위한 기법이다. 지금까지는 이에

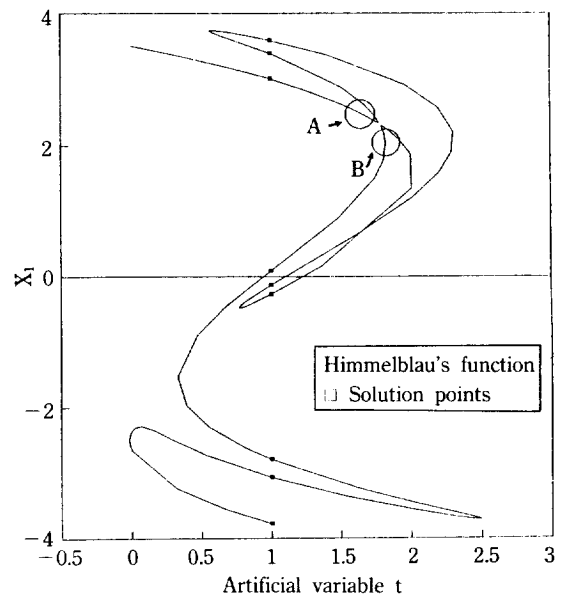


Fig. 3. Solution path.

대하여 연구가 되어 오지 못하고 그저 작은 적분간격으로 계산을 했을 뿐이다. 그러나 1990년 Choi 등이 행렬값의 제어 개념을 제시함으로써 해곡선 이탈 현상을 해석할 수 있게 되었다[2]. Choi 등은 2개의 허용 수정자와 행렬값 제어를 결합하여 극단적인 함수에 대하여 해곡선을 추적함으로써 행렬값 제어가 해곡선의 이탈 방식에 효과적임을 입증하였다. 그러나 제안된 제어 정의식은 계산상 비효율적이며 분기점으로 다가갈 때 보다 멀어질 때에 효율성을 더욱 상실하였다. 행렬값의 제어는 일부 극단적인 함수들을 제외하고는 1에 가까울수록 효율적인 면이 우수하였다. 이러한 결과는 분기점의 탐색 알고리즘이 일반적인 해곡선 이탈을 잘 감지할 수 있었기 때문이다. Fig. 3에서 보는 바와 같이

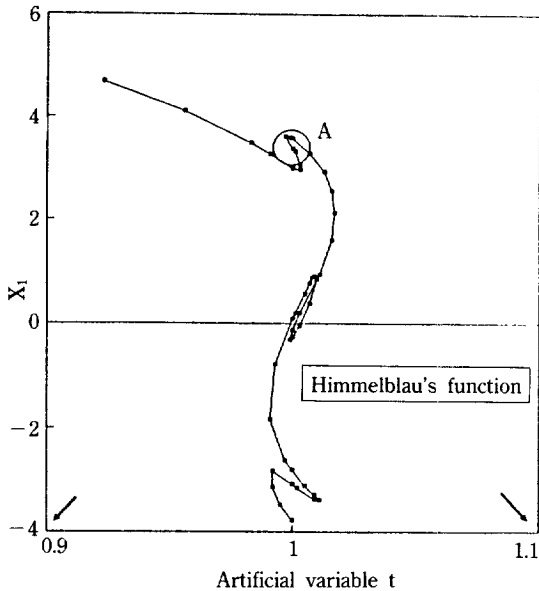


Fig. 4. Solution path.

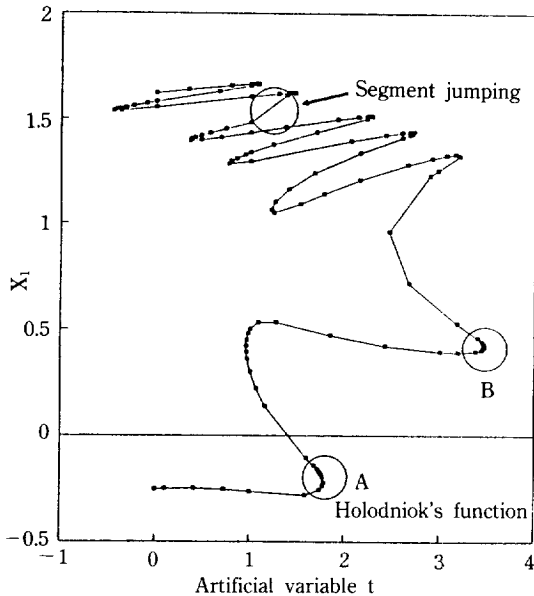


Fig. 5. Solution path.

A지점에서 B지점으로 해곡선의 추적 방향이 이탈될 경우 각 지점의 행렬값은 +에서 -로 바뀌게 된다. 정의에 의하면 이 경우 A와 B 사이에 분기점이 존재하여야 한다. 이 경우 탐색을 행하면 분기점은 찾을 수 없고 해곡선이 이탈한 것을 발견할 수 있다. 즉 적분간격을 줄임으로써 해곡선 이탈을 방지할 수 있는 것

Table 3. Solution comparison of Himmelblau's function

	Frantz & Van Brunt*	Rion & Van Brunt*	Proposed NR	Proposed MNR
No. step	40	34	45	47
No. corrector	127	103	100	139
No. failure	50	19	6	10
No. function	961	1147	612	524
No. Jacobian	222	106	152	103

*Data from Reference [13]

Table 4. Solution comparison of Holodniok's function

	Frantz & Van Brunt*	Rion & Van Brunt*	Proposed NR	Proposed MNR
No. step	99	89	133	140
No. corrector	275	234	279	316
No. failure	137	108	65	64
No. function	2994	2961	1774	1633
No. Jacobian	603	517	431	370

*Data from Reference [13]

이다. 이렇게 분기점의 탐색 알고리즘은 행렬값 제어 가 너무 극단적으로 행하여지는 것을 어느 정도 막을 수 있었다. Fig. 4의 A부분은 최대 허용 회전각 30도 이상에서는 1개의 해를 찾지 못하였다. 이러한 현상은 회전부분에서 해를 갖는 경우로 회전부에 해를 갖지 않는 경우와는 다르게 작은 적분간격으로 유연하게 회전부를 추적하여야 한다. 그러므로 최대 허용 회전각의 적절한 지정으로 적분간격을 축소함으로써 다른 해곡선으로의 이탈이 아닌 회전부의 유연하지 못한 해곡선 추적으로 야기될 수 있는 문제점을 극복할 수 있었다. Fig. 5는 Holodniok 함수로 행렬제어값 0.5 이상에서 해곡선의 이탈로 2개의 해를 찾지 못하였다. 이 경우 해곡선은 예측 지점에서 가장 가까운 해곡선 상의 한 점으로 수렴되므로 이러한 해곡선 이탈을 막기 위해서는 미리 적분간격을 축소하였어야 한다. 0.5 이하의 행렬값에서는 이를 적절히 행할 수 있었다. 또한 A와 B지점은 행렬값이 0에 근접함으로써 정밀한 수렴점의 적용되어 적분간격이 충분히 작아졌음을 보여주고 있다.

제안된 알고리즘의 기본 성능을 문헌의 자료와 종합 비교하였다. 비교된 자료는 Rion 등이 구현한 알고리즘으로 미분기법에 근거하여 2차 예측단계와 곡률을 이용한 적분간격을 사용한 것이다[13]. 적분간격의 계산은 제안된 것과 같은 근사식이 아닌 정밀한 곡률 계산을 근거로 하였으며 이 알고리즘은 고전방식의 Brunt 알고리즘과 비교되었다. Table 4에서 보는 바와 같이 수정자의 숫자는 다소 많지만 함수와 자코비 행렬 계산수는 훨씬 작았다. 이는 분리공정과 같은 열역학 계

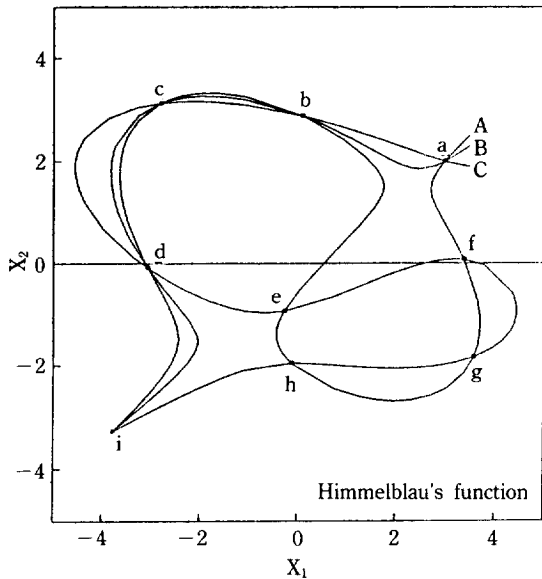


Fig. 6. Variation of solution path.

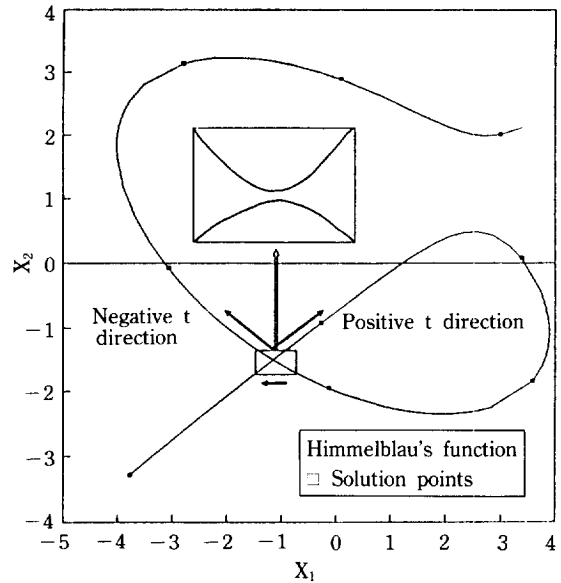


Fig. 8. Solution path.

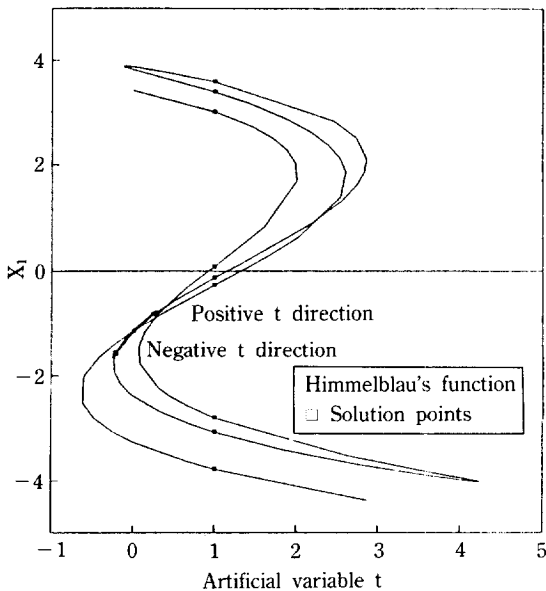


Fig. 7. Solution path.

산과 연관되는 화학공학의 문제를 감안하면 훨씬 효율적이라고 여겨진다.

3-3. 해곡선의 성질

개발된 알고리즘을 이용하여 시작점을 변화시키며 Newton Homotopy의 해곡선의 형태를 추적하였다. 그 결과 해곡선은 시작점의 선정에 대하여 인위적인 변수

t 의 척도 변화를 나타내었으며 임계점이 존재하여 해곡선의 형태가 임계점을 전후하여 크게 변화하였다. Fig. 6은 A(3.5 2.5), B(3.5 2.3), C(3.5 1.9)의 시작점에 대하여 Himmelblau 함수의 해곡선 변화를 나타낸 것이다. 이 곡선들은 (3.5 2.4121), (3.5 2.1488)에서 정확도 10^{-4} 로 임계점을 가짐을 알 수 있었다. A곡선은 9개의 해를 a-f-g-h-e-b-c-d-i의 순으로, B는 5개, C는 a-b-c-d-e-f-g-h-i의 순으로 해를 찾을 수 있었다. 이 결과는 x_2 만을 변화시켜 얻은 결과로 x_1 을 조작하는 경우 다른 형태의 해곡선을 나타낸다. 이는 Fig. 7과 8에도 잘 나타나 있다. 이들은 Table 2의 Set 1에 대한 결과로 해곡선은 t 의 +방향으로는 5개의 해를 -방향으로는 4개의 해를 찾을 수 있었다. 이러한 현상은 해의 다중성의 구현과 제약조건에 대한 해곡선의 추적에 도움을 줄 수 있다. 임계점은 주어진 정확도 내에서 해곡선의 분기점(bifurcation point)으로 간주되고 이 점 주변의 해곡선은 시작점을 적절히 변화시켜 추적함으로써 분기 이전 혹은 분기 후의 해곡선을 모두 추적할 수 있다. Kuno와 Seader[9]가 제안한 다중해 모듈을 하나의 해곡선을 추적함으로써 찾을 수 있는 시작점 정의는 다차원(multi-dimensional) 함수에 적용하기 어렵고 1, 2차원 함수에 마저 완전하지 못하다[2]는 것을 감안할 때 여러 개의 해곡선을 적절히 선택하여 해곡선을 추적하여 다중해를 구현하는 것이 더 효율적인 것으로 판단된다. Fig. 9는 3차원의 함수로 실제로 5개의 해를 갖는 것으로 알려져 있는 함수에 대하여 다중해를 구현한 것이다. Kubicek 등[8]이 함수에 대하여 continuation 변수의 적분간격을

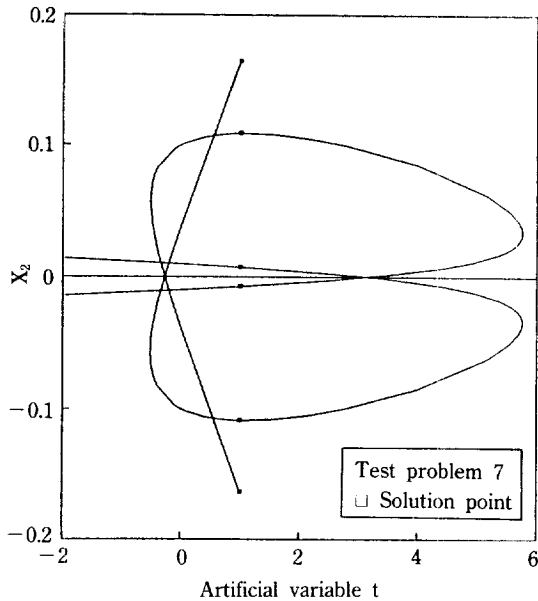


Fig. 9. Solution path.

일정하게 고정시켜 continuation을 행하였다. 그 결과 그는 모두 5개의 해를 발견한 것으로 보고하였다. 그러나 본 연구에서 개발된 알고리즘을 적용하여 $(-1 \ -0.1 \ -0.1)$ 과 $(1 \ 0.1 \ 0.1)$ 두 개의 시작점으로부터 해곡선을 추적한 결과 5개의 해 이외에 1개의 해가 더 존재함을 알 수 있었다. 이 결과는 Allgower의 해곡선 추적 알고리즘이 해곡선 추적 중 이탈현상을 보였음을 입증하는 것으로 본 연구에 의하여 제시된 해곡선 추적 알고리즘이 충분히 강력하다는 것을 보여주는 결과라 하겠다.

4. 결론 및 제언사항

화학공정의 모사 및 해석에 핵심적인 역할을 하는 비선형 방정식의 해를 위한 강력하고 효율적인 global Homotopy continuation 알고리즘을 구현하였다. 개발된 알고리즘에서는 해곡선 추적의 안정성과 효율성을 향상시키기 위하여 해곡선 이탈을 방지할 수 있는 기법과 함께 곡물의 근사식에 기반한 비교적 간단한 적분간격 제어와 신축성있는 수렴정의 등을 제시하였다. 개발된 알고리즘은 기존의 알고리즘과 비교한 결과 해곡선 추적 성능이 강력하고 우수하였으며 해곡선의 이탈을 쉽게 감지해냄으로써 허용가능한 최대의 적분간격과 수렴정의로 효율적으로 해를 구현할 수 있었고 정확한 해곡선의 형태를 파악할 수 있었다. 또한 이를 이용하여 Newton Homotopy의 성질을 파악한 결과 해곡선은

시작점의 선정에 의하여 척도의 변화(scaling)를 보였으며 해곡선의 형태는 임계점을 전후로 완전히 다름을 알 수 있었다. 이러한 해곡선의 형태변화에 대한 연구는 지금까지 Homotopy continuation 방식을 적용함에 있어 문제시 되어 오던 다중해에 대한 수렴특성을 규명할 수 있게 함으로써는 비선형 방정식 계의 다중해의 구현은 물론 Homotopy continuation 방식의 일반적인 적용에 도움이 될 수 있다. 다중해 구현에 있어 주어진 함수의 시작점을 적절히 변화시켜 해를 구현하는 방식이 주어진 방정식 계의 다중해를 구현하는데 효과적인 것으로 여겨진다.

현재 개발된 알고리즘을 계산상 난해한 증류공정에 적용 중이며 이를 통하여 다탑증류 공정의 구조적인 특성을 해석하고 있다. 앞으로 global Homotopy를 좀 더 널리 사용하고 해를 얻기 어려운 계에 효율적으로 적용하기 위하여 해곡선 자체에 대한 특징은 물론 다중해의 존재를 증명하고 구현할 수 있는 수리적인 연구가 필요한 것으로 생각된다.

감 사

본 연구는 대림엔지니어링의 연구비 지원으로 수행한 연구결과의 일부입니다.

APPENDIX

Test problems

1. Himmelblau's Function[13]

$$\begin{aligned} 2X_1^3 + 2X_1X_2 - 21X_1 + X_2^2 - 7 &= 0 \\ X_1^2 + 2X_1X_2 + 2X_2^3 - 13X_2 - 11 &= 0 \end{aligned}$$

2. Choi's Function[2]

$$\begin{aligned} X_1 + 5X_2(X_2 - 1)(X_2 + 1) &= 0 \\ X_2 - 5X_1(X_1 - 1)(X_1 - 1) &= 0 \end{aligned}$$

3. Holodniok's Function[8]

$$\begin{aligned} 0.5\text{SIN}(X_1X_2) - X_2/4\pi - X_1/2 &= 0 \\ (1 - 0.25\pi)(e^{2X_1} - e) + eX_2/\pi - 2eX_1 &= 0 \end{aligned}$$

4. From Reference[8]

$$\begin{aligned} X_1^2 - 2X_2 + 1 &= 0 \\ X_1 + 2X_2^2 - 3 &= 0 \end{aligned}$$

5. From Reference[8]

$$\begin{aligned} X_1^2 - X_2 - 1 &= 0 \\ (X_1 - 2)^2 + (X_2 - 0.5)^2 - 1 &= 0 \end{aligned}$$

6. Inter-linked CSTR[7]

$$\begin{aligned} (1 - \lambda)X_3 - X_1 + \text{Da}(1 - X_1)\text{EXP}(X_2/(1 + X_2/\gamma)) &= 0 \\ (1 - \lambda)X_4 - X_2 + \text{BDa}(1 - X_1)\text{EXP}(X_2/(1 + X_2/\gamma)) \\ - \beta X_2 &= 0 \\ X_1 - X_3 + \text{Da}(1 - X_3)\text{EXP}(X_4/(1 + X_4/\gamma)) &= 0 \end{aligned}$$

$$X_2 - X_4 + BDa(1 - X_3) \exp(X_4/(1 + X_4/\gamma)) - \beta X_4 = 0$$

$$\lambda = 1000, B = 22, Da = 0.04, \beta = 2, \gamma = 0.8$$

7. From Reference[8]

$$X_1^2 - X_3^2 - 3328(1 - (X_1 + X_2)^2) = 0$$

$$X_2(X_2 - X_3) - 14.89(1 - (X_1 + X_2)^2) = 0$$

$$X_3(X_1 + X_3) - 2.085(X_2 - X_3)(X_1 - X_3) = 0$$

NOMENCLATURE

A	: augmented Jacobian
J	: Jacobian of given function
K	: curvature
V	: tangent vector
e	: standard base vector
f	: given function
h	: Homotopy function
s	: arclength
t	: artificial variable
w	: independent variable vector of Homotopy function
x	: independent variable vector of given function

Greek Letters

Δs	: stepsize
θ^{id}	: ideal turning angle
σ	: tracking direction
λ	: damping factor

Superscripts

k	: continuation step
j	: column vector index
n+1	: column index of artificial variable

Subscripts

i	: Newton iteration index
0	: prediction or starting point

REFERENCES

- Allgower, E. and Georg, K.: *SIAM Review*, **22**, 28 (1980).
- Choi, S. H.: Ph. D. Dissertation, Univ. of Missouri-Rolla(1990).
- Davidenko, D.: *Dokl. Akad. Nauk USSR*, **88**, 601 (1953).
- Den Heijer, C. and Rheinboldt, W. C.: *SIAM J. Numer. Anal.*, **18**, 925(1981).
- Deufhard, P.: *Numer. Math.*, **33**, 115(1979).
- Dold, A. and Eckmann, B.: "Lecture Note in Mathematics-Numerical 6. Solution of Nonlinear Equations", Springer-Verlag, New York(1981).
- Kubicek, M. and Marek, M.: "Computation Methods in Bifurcation Theory and Dissipative Structures", Springer-Verlag, New York(1983).
- Kubicek, M. and Holodniok, M.: *Numer. Funct. Anal. and Optimiz.*, **3**, 223(1981).
- Kuno, M. and Seader, J. D.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **27**, 1320(1988).
- Rheinboldt, W. C.: "Numerical Analysis of Parameterized Nonlinear Equations", John Wiley & Sons, New York(1986).
- Rheinboldt, W. C. and Burkardt, J. V.: *ACM Trans. Math. Soft.*, **9**, 215(1983).
- Rheinboldt, W. C.: *SIAM J. Numer. Anal.*, **17**, 221 (1980).
- Rion, W. L. and Brunt, V. V.: *Comput. Chem. Eng.*, **14**, 889(1990).
- Seader, J. D.: "Recent Developments in Methods for Finding All Solutions to General Systems of Nonlinear Equations", in Proc. of Conf. on Foundations of Computer Aided Process Design(1989).
- Shacham, M.: "Recent Developments in Solution Techniques of Systems of Nonlinear Equations", in Proc. of Conf. on Foundations of Computer Aided Process Design(1984).
- Seydel, R. and Hlavacek, V.: *Chem. Eng. Sci.*, **42**, 1281(1987).
- Watson, L. T., Billups, S. C. and Morgan, A. P.: *ACM Trans. Math. Soft.*, **13**, 281(1987).
- Wayburn, T. L.: "A Review of Continuation Methods and Their Application to Separation Problems", in CAST Newsletter, Summer(1989).
- 고흥철 : 박사학위 논문, 서울대학교(1989).

1. Allgower, E. and Georg, K.: *SIAM Review*, **22**, 28