

論文

수치해 검증방법을 이용한 기호 연산 프로그램 성능 비교

양성욱*, 이상철**

Performance Comparison of Symbolic Manipulation Programs
using a Validation Method for Numerical Solution

Sung-Wook Yang* and Sang-Chul Lee**

ABSTRACT

We propose a rigorous and practical methodology to evaluate the performance of symbolic manipulation program such as Mathematica, Maple, and Maxima. First, we demonstrate an inverse method to construct the benchmark problems of an initial value problems. The benchmark problems associated with the discrete version of the Chebyshev polynomials provide a rigorous and objective measure to evaluate the performance of symbolic manipulation programs. We compare three symbolic manipulation programs, which are Mathematica, Maple and Maxima, using this methodology. The computation time, the used memory and the perturbation terms are chosen for comparison parameters.

Key Words : Inverse Method(역해석 기법), Benchmark Problem(벤치마크 문제), Chebyshev Polynomials(체비셰프 다항식), Error Analysis(오차 분석), Symbolic Manipulation(기호 연산)

1. 서 론

무인항공기의 공중 재급유 구현을 위한 운동방정식의 모델링이나[1] 연료의 슬러싱을 고려한 달탐사선의 동역학 모델링[2] 등과 같은 항공우주분야에서 사용하는 수학적 모델은 모델링 대상의 시간에 따른 거동 또는 변화 등을 예측하거나 설명할 수 있도록 도와준다. 선형과 비선형 운동방정식의 해를 구하기 위해 일반적으로 다양한 수치해석 방법이 사용되고 있다. 선형과 비선형 미분방정식의 정확한 해를 알고 있다면 수치해석 방법으로 구한 수치해의 정확도를 확인할 수 있으나, 대부분의 경우 정확한 해를 모르기 때문에

수치해의 정확도를 확인할 수 없다. 정확한 해를 모르는 선형과 비선형 미분방정식의 초기값 문제에 대해 수치해석 방법을 이용해 구한 수치해의 정확도를 검증하기 위한 방법으로 역해석 기법을 이용하여 벤치마크 문제를 구성하는 방법이 소개되었다[3]. 여기서 벤치마크 문제는 연속이고 미분가능한 정확한 해를 알고 있는 주어진 원래 미분방정식 초기값 문제에 가까운 새로운 문제를 지칭한다.

벤치마크 문제를 구성하는 과정에서 벤치마크 문제의 연속이고 미분가능한 정확한 해는 체비셰프 다항식(Chebyshev polynomials)의 순환관계를 이용하여 구할 수 있다. 이를 위해 Mathematica, Maple, Maxima 등과 같은 기호 연산 프로그램이 사용될 수 있다. 따라서, 벤치마크 문제의 정확한 해는 기호 연산 프로그램 성능의 영향을 받게 된다.

기호 연산 프로그램의 성능에 대한 관련 연구로서 Paul Zimmermann은 기호변수를 사용한

2015년 05월 01일 접수 ~ 2015년 05월 28일 심사완료
논문심사일 (2015.05.20. 1차)

* 한국항공대학교 대학원 항공우주 및 기계공학과

** 한국항공대학교 항공우주 및 기계공학부

연락처, E-mail : slee@kau.ac.kr

경기도 고양시 덕양구 항공대로 76

계산 시간은 Maple이 Mathematica 보다 약 4배 빠르다는 결과를 보였고[4], Wolfram Koepf는 보고서를 통해 다항식을 생성하거나 계산하는데 있어 Maple이 Mathematica 보다 약 10배 빠르다는 결과를 제시하였다[5].

본 논문에서는 벤치마크 문제를 상용 개인 컴퓨터를 이용해 구하였고, 벤치마크 문제를 구성을 통하여 기호 연산 프로그램의 성능을 비교하였다. 벤치마크 문제를 구성하기 위한 예제로는 이체문제(two body problem)와 오일러 운동방정식(Euler equations of motion)을 사용하였다. 벤치마크 문제의 정확한 해를 구하기 위한 기호 연산 프로그램으로 Mathematica, Maple, Maxima를 이용하였다. 기호 연산 프로그램의 성능을 비교하기 위해 메모리 사용량, 계산 시간, 벤치마크 문제의 perturbation 항을 비교하였다.

2. 벤치마크 문제의 구성

다음과 같은 각각의 $t_0 \leq t \leq t_f$ 에서의 1차와 2차 상미분방정식의 초기값 문제를 고려하자.

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f_1(x, t), \quad x(t_0) = x_0 \\ f_1 &: R^N \times R \rightarrow R^N \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= f_2(x, \dot{x}, t), \quad x(t_0) = x_0, \quad \dot{x}(t_0) = \dot{x}_0 \\ f_2 &: R^N \times R^N \times R \rightarrow R^N \end{aligned} \quad (2)$$

식 (1)과 (2)에서 얻은 n 개의 수치해는 다음 식(3)과 같다.

$$x_1 = g(t_1), \quad x_2 = g(t_2), \quad \dots, \quad x_n = g(t_n) \quad (3)$$

여기서, $t_i = i\Delta t$ ($i=1, \dots, n$), Δt 는 시간의 일정한 간격이다.

식(3)의 수치해와 가까운 연속적이고 미분가능한 함수는 이산 체비셰프 다항식을 사용한 최소자승 근사법으로 구할 수 있다. $G(\bar{t})$ 가 m 개의 체비셰프 다항식을 기저 함수로 하는 선형 결합으로 이루어진 함수라고 하면 다음과 같다[3].

$$x = g(t) = G(\bar{t}) = \sum_{i=1}^m a_i T_i(\bar{t}) \quad (m \leq n) \quad (4)$$

여기서 a_i 는 계수, $T_i(\bar{t})$ 는 i 차 체비셰프 다항식, $\bar{t}(t) = (t - t_1)/\Delta t$ 을 나타낸다.

독립변수 $u_m = m$ ($m = 0, 1, \dots, N$) 이고 가중치 $w(u) = 1$ 이라고 하면 체비셰프 다항식은 다음과 같다[3,6].

$$T_n(u) = \sum_{m=0}^n (-1)^m C_n(n+m) C_m \frac{u!(N-m)!}{(u-m)!N!} \quad (5)$$

체비셰프 다항식이 갖는 이산 직교성을 이용하면 식 (4)에서의 계수 a_i 는 다음 식 (6)을 이용해 구해진다[3].

$$a_j = \frac{\sum_{i=1}^n x_i T_j(\bar{t}_i)}{\sum_{i=1}^n T_j(\bar{t}_i) T_j(\bar{t}_i)} \quad (1 \leq j \leq m) \quad (6)$$

여기서 x_i 는 식 (1), (2)에서 구해진 수치해이며, $T_j(\bar{t}_i)$ 는 j 차 체비셰프 다항식의 \bar{t}_i 에서의 값이다.

식 (4)에서 계수 a_i 와 체비셰프 다항식 $T_i(u)$ 를 이용해 $G(\bar{t}(t))$ 가 구해진다. $x = g(t) = G(\bar{t})$ 이므로 식 (1), (2)에서 얻은 수치해에 대해 연속적이고 미분가능한 함수인 $x_b(t)$ 를 얻을 수 있다. 하지만 $x_b(t)$ 는 식 (1), (2)를 정확하게 만족시키는 해가 아니므로 주어진 상미분방정식인 식 (1), (2)의 $x(t)$ 에 $x_b(t)$ 를 대입하면 양변이 같아지지 않는다. 이 때 시간에 대해 연속이면서 양변의 차이인 perturbation 항을 구할 수 있으며 일차 상미분방정식에서의 perturbation 항과 이차 상미분방정식의 perturbation 항을 각각 $e_1(t)$, $e_2(t)$ 라 하면 다음과 같다[3].

$$\begin{aligned} e_1(t) &= \dot{x}_b(t) - f_1(x_b(t), t) \\ e_2(t) &= \ddot{x}_b(t) - f_2(x_b(t), \dot{x}_b(t), t) \end{aligned} \quad (7)$$

식 (1)과 (2)에서 $f_1(x(t), t)$ 와 $f_2(x(t), \dot{x}(t), t)$ 가 주어지고, 식 (7)에서 $e_1(t)$, $e_2(t)$ 가 구해지므로 정확한 해가 $x_b(t)$ 인 일차와 이차 상미분방정식의 벤치마크 문제는 식 (8)과 (9)과 같다. [3]

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= f_1(x(t), t) + e_1(t), \quad t_0 \leq t \leq t_f \\ x(t_0) &= x_b(t_0) \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \ddot{x}(t) &= f_2(x(t), \dot{x}(t), t) + e_2(t), \quad t_0 \leq t \leq t_f \\ x(t_0) &= x_b(t_0), \quad \dot{x}(t_0) = \dot{x}_b(t_0) \end{aligned} \quad (9)$$

새로운 상미분방정식의 정확한 해석적 해인 $x_b(t)$ 를 구하기 위한 최소자승 근사법은 시간 구간의 양 끝부분에서는 일반적으로 좋지 않은 결과를 보인다. 이와 같은 문제를 보완하기 위해 기존의 구간보다 20 %증가된 구간을 사용하여 최소자승 근사법을 수행하였다[3].

3. 예제 및 결과

3.1 이체 문제 (Two Body Problem)

이체 문제에 대한 결과를 확인하기 위해 사용된 예제는 다음과 같다.

$$\ddot{x} = -\frac{x}{(\sqrt{x^2+y^2})^3}, \ddot{y} = -\frac{y}{(\sqrt{x^2+y^2})^3}$$

$$x(0) = 0.5, \dot{x}(0) = 0$$

$$y(0) = 0, \dot{y}(0) = \sqrt{0.75}/0.5$$

$$0 \leq t \leq 2\pi$$
(10)

우선 룬게-쿠타 4차 방법(Runge-Kutta 4th order method)을 사용하여 식 (10)의 수치해를 얻는다. 수치해는 20% 증가된 구간을 사용해 121개를 구하며, 이 때 시간 간격 Δt 는 $2.4\pi/121$ sec 이다.

연속이고 미분가능한 함수 $x_b(t), y_b(t)$ 는 구해진 수치해로부터 12차 체비셰프 다항식을 사용해 만들어지며, 구해진 함수는 벤치마크 문제의 정확한 해가 된다. $x_b(t), y_b(t)$ 를 식 (10)에 대입함으로써 perturbation 항인 $e_x(t), e_y(t)$ 가 구해진다.

$$e_x(t) = \ddot{x}_b(t) + \frac{x_b(t)}{(\sqrt{x_b^2(t)+y_b^2(t)})^3}$$

$$e_y(t) = \ddot{y}_b(t) + \frac{y_b(t)}{(\sqrt{x_b^2(t)+y_b^2(t)})^3}$$
(11)

3.2 오일러 운동 방정식

오일러 운동 방정식에 대한 결과를 확인하기 위해 사용된 예제는 다음과 같다.

$$\dot{x}_1 = x_2 x_3$$

$$\dot{x}_2 = -0.51 x_3 x_1$$

$$\dot{x}_3 = -x_1 x_2$$

$$x_1(0) = 0, x_2(0) = 1, x_3(0) = 1$$
(12)

식 (12)의 정확한 해석적 해는 다음과 같은 자코비안 타원 함수(Jacobian elliptic function)이다.

$$x_1(t) = sn(t|0.51)$$

$$x_2(t) = dn(t|0.51)$$

$$x_3(t) = cn(t|0.51)$$
(13)

식 (13)의 자코비안 타원 함수는 1/4 주기(Quarter period) K 를 갖으며, 상기된 문제의 경우 K 는 1.8626408023 32738 ... 이다. 1/4 주기 K 를 이용하여 초기 시간 구간은 $(0, 4K)$ 이 된다. 오일러 운동 방정식에 대해서 룬게-쿠타 4차 방법(Runge-Kutta 4th order method)을 이용해 수치해를 구한 뒤, 체비셰프 12차 다항식을 이용해 연속이고 미분가능한 함수 $x_{b_1}(t), x_{b_2}(t), x_{b_3}(t)$ 를 만든다.

3.3 예제 결과

Figure 1은 주어진 이체 문제에 대해 허용오차에 따른 수치해와 정확한 해석적 해와의 오차 추이를 나타낸 것이고, Fig. 2는 벤치마크 문제에 대해 허용오차에 따른 수치해와 정확한 해석적 해와의 오차 추이를 나타낸 것이다. Table 1은 Figs. 1과 2의 결과를 수치로 나타낸 것이다. Figure 3은 주어진 이체 문제에 대해 허용오차에 따른 수치해와 정확한 해석적 해와의 오차 추이를 나타낸 것이고, Fig. 4는 벤치마크 문제에 대해 허용오차에 따른 수치해와 정확한 해석적 해와의 오차 추이를 나타낸 것이다. Table 2는 Figs. 3과 4의 결과를 수치로 나타낸 것이다. 이때 구성된 벤치마크 문제의 수치해를 구하기 위해서 Matlab의 ode45[7]를 사용하였다.

Figures 1-4와 Table 1-2의 결과에서 볼 수 있듯이 벤치마크 문제의 정확한 해와 수치해와의 오차 추이가 주어진 원래 문제에 대한 정확한 해와 수치해의 오차 추이와 유사함을 알 수 있다. 이는 벤치마크 문제를 이용한 수치해의 오차 분석을 통해 수치해석 방법에 필요한 최적의 파라미터와 수치해석 방법을 이용해 구해진 수치해의 오차에 대한 정보를 얻을 수 있음을 알 수 있다.

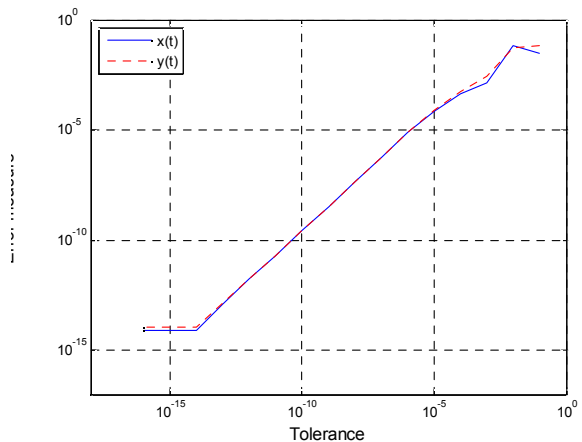


Fig. 2 Error Measure vs. Tolerance of Original Problem (Two Body Problem)

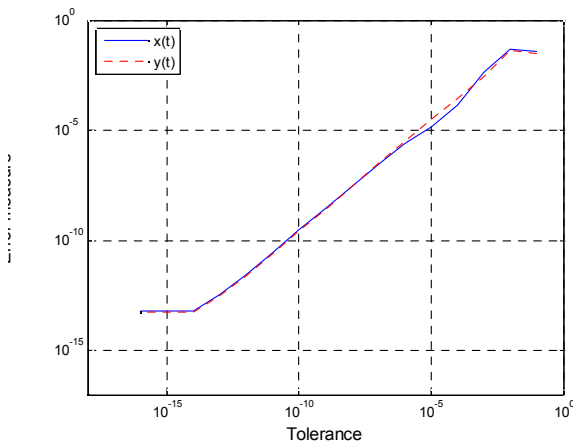


Fig. 3 Error Measure vs. Tolerance of the Benchmark Problem (Two Body Problem)

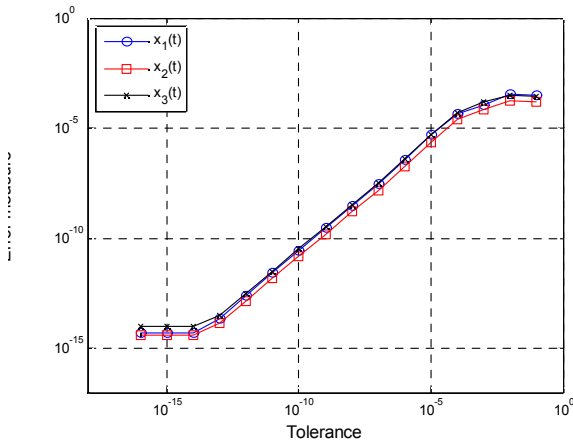


Fig. 4 Error Measure vs. Tolerance of Original Problem (Euler Equations of Motion)

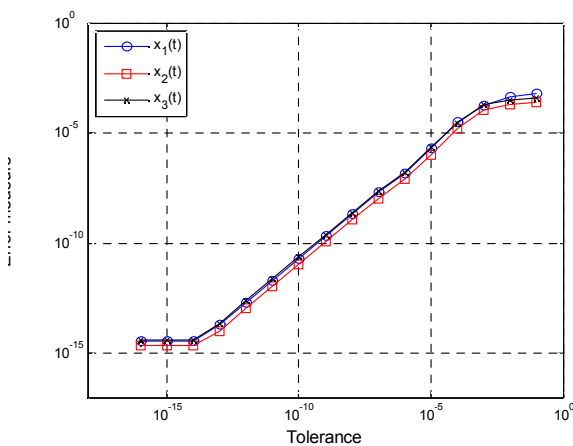


Fig. 5 Error Measure vs. Tolerance of Benchmark Problem (Euler Equations of Motion)

Table 1. Comparison Result between Original Problem and Benchmark Problem (Two Body Problem)

	Original Problem	Benchmark Problem
Tolerance	10^{-14}	10^{-14}
Error Measure (Unit: $\times 10^{-14}$)	$x: 0.848$ $y: 1.102$	$x: 6.666$ $y: 5.379$

Table 2. Comparison Result between Original Problem and Benchmark Problem (Euler Equations of Motion)

	Original Problem	Benchmark Problem
Tolerance	10^{-14}	10^{-14}
Error Measure (Unit: $\times 10^{-14}$)	$x_1: 4.842$ $x_2: 4.066$ $x_3: 9.779$	$x_1: 3.561$ $x_2: 2.301$ $x_3: 4.166$

3.4 기호연산 프로그램 비교

Mathematica, Maple, Maxima의 성능을 비교하기 위해 이체 문제, 오일러 운동 방정식을 사용해 perturbation 항을 구하여 비교하였다. 체비셰프 다항식의 차수에 따른 모든 시간구간의 perturbation의 크기는 제곱 평균(root mean squares)을 이용해 구해졌다. 사용된 메모리를 비교하기 위해 체비셰프 다항식의 주어진 차수까지의 집합을 계산하는 시간과 사용된 메모리의 크기를 비교하였다. 이 과정에서 모든 프로그램은 기호 변수만을 사용하였고, 정밀도는 프로그램들이 제공하는 최고 정밀도를 사용하여 결과를 얻었다.

이 때, 체비셰프 다항식의 집합이 32차를 넘어가게 되면 이를 표시하기 위해 프로그램 창에서 사용되는 메모리가 운영체제에서 사용가능한 메모리를 초과하기 때문에 31차까지의 체비셰프 다항식 집합을 사용하였다.

Figures 5와 6은 이체 문제의 perturbation 항의 크기를 체비셰프 다항식의 차수에 대해 나타낸 것이고, Figs. 7-9는 오일러 운동 방정식의 섭동의 크기를 체비셰프 다항식의 차수에 대해 나타낸 것이다. Figures 5-9는 Mathematica의 perturbation 항의 크기에 대해 비교한 것이다. Figures 10과 11은 체비셰프 다항식의 집합을 구하기 위해 소요된 계산 시간과 메모리의 크기를 체비셰프 차수에 대해 나타낸 것이다.

Figures 5-9는 이체 문제와 오일러 운동 방정식의 perturbation 항이 같음을 보이고 있다. 이는 본 논문에서 소개된 3개의 기호 연산 프로그램 중 어느 것을 사용하더라도 같은 perturbation 항을 얻게 된다는 것을 보이고 있다.

Figure 10은 체비셰프 다항식의 차수에 대한 계산 시간을 보여주고 있다. Figure 10에서 볼 수 있듯이 Mathematica가 Maple, Maxima 보다 계산하는데 시간이 더 걸리는 것을 확인할 수 있다. Figure 11은 체비셰프 다항식의 차수에 대한 사용된 메모리를 보여주고 있다. Figure 11에서 볼 수 있듯이 Mathematica가 Maple 보다 계산하는데 메모리가 더 많이 사용됨을 확인할 수 있다. 이 때, 사용된 메모리를 구하기 위한 명령어가 없는 관계로 Maxima의 사용된 메모리에 관한 결과는 제외시켰다.

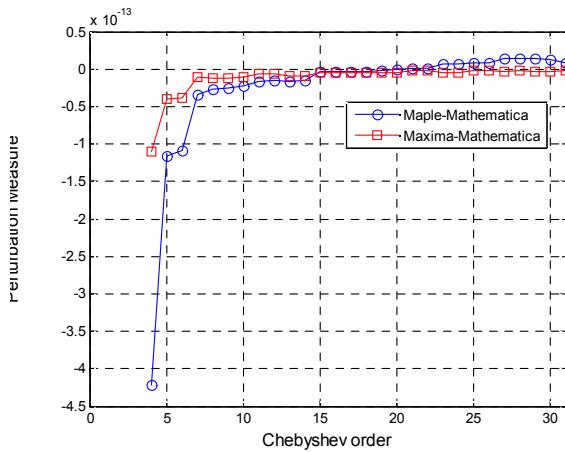


Fig. 6 Perturbation Comparison between three programs (Two Body Problem $x(t)$)

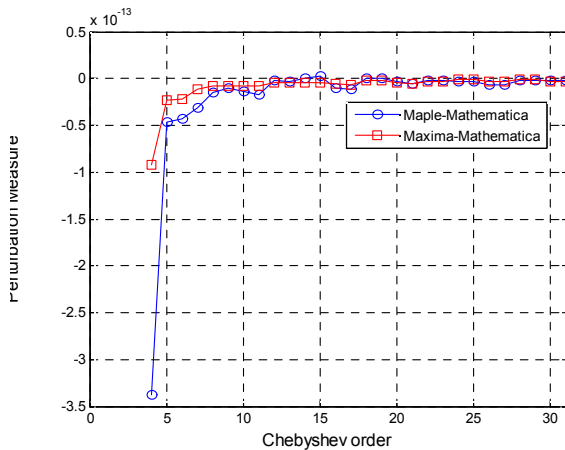


Fig. 7 Perturbation Comparison between three programs (Two Body Problem $y(t)$)

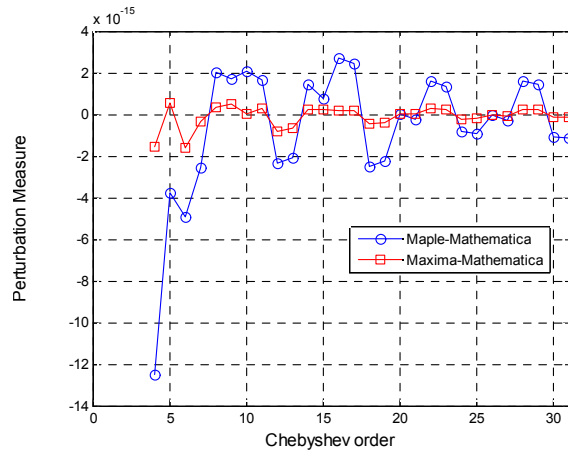


Fig. 8 Perturbation Comparison between three programs (Euler Equations of Motion $x_1(t)$)

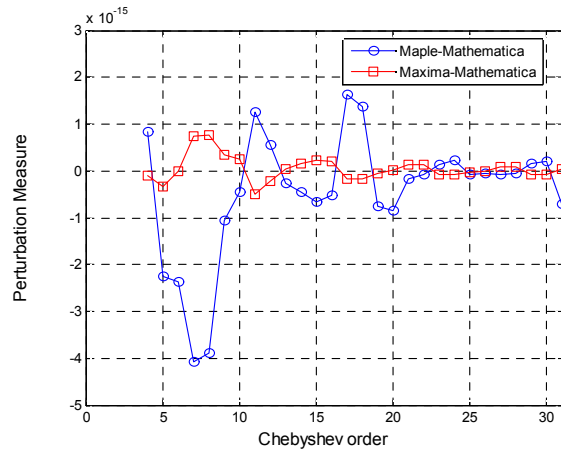


Fig. 9 Perturbation Comparison between three programs (Euler Equations of Motion $x_2(t)$)

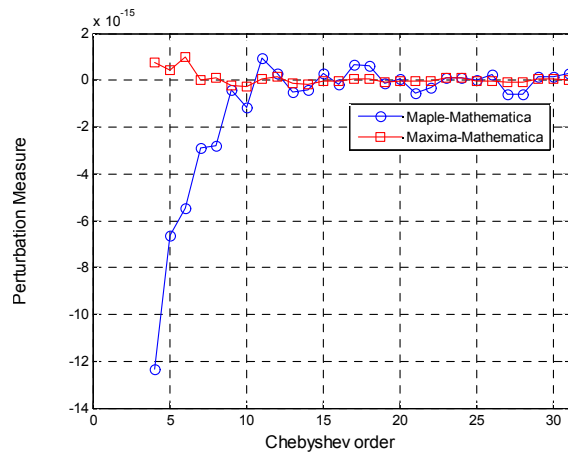


Fig. 10 Perturbation Comparison between three programs (Euler Equations of Motion $x_3(t)$)

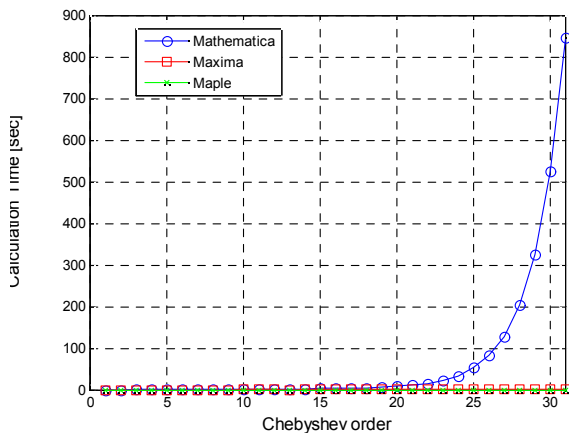


Fig. 11 Performance Comparison between three programs (Calculation Time)

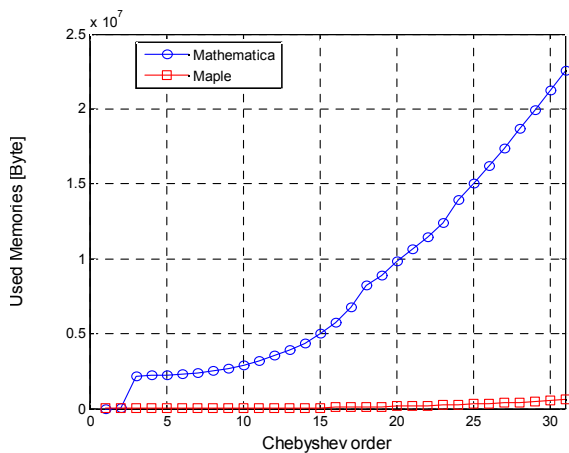


Fig. 12 Performance Comparison between three programs (Used Memory)

4. 결 론

본 논문에서는 미분방정식의 초기값 문제에 대한 벤치마크 문제를 구성하였고, 상용 개인 컴퓨터를 이용하여 구성된 벤치마크 문제는 수치해의 정확도와 수치해석 방법을 위한 최적의 파라미터에 대한 정보를 준다는 것을 보였다.

또한, 벤치마크 문제의 구성을 통하여 기호연산 프로그램의 성능을 비교할 수 있는 실용적인 방법을 제시하였다. 벤치마크 문제의 perturbation 항이 같다는 가정 하에 순환관계를 이용한 체비셰프 다항식을 기호 변수로 계산하는 시간과 사용된 메모리는 기호 연산 프로그램의 성능을 나타낼 수 있는 척도로 사용할 수 있다. 본 논문에서는 계산 시간과 사용된 메모리에 대해 기호연산 프로그램인 Mathematica와 Maple,

Maxima에 대한 기호 연산 성능의 비교 결과를 보였다. 3장에서 보인 비교 결과는 Mathematica가 Maple, Maxima에 비해 체비셰프 다항식의 집합을 계산하기 위해 더 많은 시간과 메모리가 소요됨을 알 수 있다. 이 결과는 기호 연산 프로그램 사용자들에게 Mathematica가 기호 연산에 있어 단점이 있음을 보여주고 있다.

참고문헌

- 1) 장지은, 이상중, 유혁, "공중재급유를 위한 상대운동방정식 유도 및 검증", 한국항공우항학회지, 제21권, 제4호, 2013. pp. 1-10.
- 2) 심상현, 김광진, 이상철, 고상호, 류동영, 주광혁, "달 탐사선의 동역학 모델링 및 관성 모멘트 추정에 관한 연구", 한국항공우항학회지, 제18권, 제4호, 2010, pp. 30-37.
- 3) Junkins, J. L., Lee, S., "Validation of Finite Dimensional Approximate Solutions for Dynamics of Distributed Parameter Systems", *Journal of Guidance, Control and Dynamics*, Vol. 18, No. 1, 1995, pp. 87-95.
- 4) Zimmermann, P., "A Comparison of Maple V.3 and Mathematica 2.2.2", <http://www.loria.fr>, Sep., 1994.
- 5) Koepf, W., "Efficient Computation of Orthogonal Polynomials in Computer Algebra", *Konard-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin*, Technical Report SC 95-42, 1995.
- 6) Mason, J. C., Handscomb, D.C., "Chebychev Polynomials", Chapman & Hall/CRC, 2003.
- 7) Matlab : Mathematics user's manual, The Mathworks Inc., 2008.