기술기사

# 20세기에 이룩한 전산해석분야의 10가지 업적

김 선 훈*

## 1. 서 론

미국물리학회(American Institute of Physics)와 전기전자공학회(IEEE)가 공동으로 발행하고 있는 학술지인 *Computing in Science and Engineering*의 2000년 1/2월호에서 J. Dongarra와 F. Sullivan은 20세기에 과학과 공학기술의 개발과 응용에 가장 큰 영향을 준 10개의 알고리즘을 알아보는 것을 목표로 하여 "20세기에 이룩한 10가지 알고리즘(Top Ten Algorithms of the Century)"을 발표한 바 있다. 또한 2000년 5월에는 *SIAM News*에서 B.A. Cipra는 그 들이 정한 10개의 알고리즘에 대하여 간단하게 소개하였다. 이들이 선정한 10대 알고리즘은 다음과 같다. (1) Monte Carlo 방법, (2) Simplex 방법, (3) Krylov Subspace Iteration 방법, (4) Householder Matrix Decomposition, (5) Fortran Compiler, (6) QR 알고리즘, (7) Quicksort 알고리즘, (8) Fast Fourier Transform(FFT), (9) Integer Relation Detection 알고리즘, (10) Fast Multipole 알고리즘.

전산해석분야에서 활동하고 있는 연구자나 실무자들은 그들이 선정하여 발표한 10대 알고리즘들에 대하여 충분히 납득할 수 없었으며, 아주 중요한 사항들이 누락되어 있는 것으로 판단하였다. 또한 이들 10대 알고리즘에 포함되어 있는 Fortran Compiler에 대하여는 중요성은 인식하면서도 이것이 알고리즘에 포함되는 것을 이해할 수 없는 분위기였다. 따라서 전산해석분야에 가장 큰 영향을 끼친 것으로 판단되는 10개의 업적을 새롭게 선정하였다.

* 영동대학교 토목환경공학과 부교수

## 2. 본론

### 2.1 선정의 기본원칙

많은 다른 과학과 공학기술 분야는 물론이고 특별히 전산해석분야에 가장 큰 영향을 준 업적으로 새롭게 선정된 것들은 당초 선정되었던 알고리즘들 중에서 4개는 그대로 유지되었으며, 나머지는 모두 교체되었다.

새롭게 10개의 업적들을 선정하기 위하여 다음과 같은 몇 가지 기본 방침을 정하였다. 첫째 새롭게 선정된 업적들은 알고리즘(Algorithm)에 국한하지 않고, 수치방법(Numerical Method)까지 확장하여 정하였다. 알고리즘과 수치방법은 유한개의 단계를 수행함으로서 주어진 문제를 해결하는 수학적 과정이라는 점에서 차이점이 분명하지 않다. 그러나 일반적으로 알고리즘의 단계들은 매우 기본적인데 비하여 수치방법의 단계들은 더 많은 것을 포함하고 있다. 즉 한 가지 수치방법의 각 단계는 이미 알려진 여러 개의 알고리즘들로 구성되어 있다.

둘째 새로운 선정을 위하여 관련된 수치방법들은 물론이고 수치방법들의 족(Family)들까지 확대시켜 검토하였다. 이렇게 확대시킨 이유는 전산해석분야에 영향을 주는 수치방법들은 대다수가 독자 방법이 아니고 여러 방법들이 혼합하여 사용되기 때문이다.

셋째 전산역학분야에 가장 많은 영향을 주었는가는 그 방법의 중요성 보다는 현재 전산해석분야에 얼마나

많이 사용되어지고 있는 가로 판단하였다. 방법의 중요성을 판단하는 것은 매우 주관적이고 어렵기 때문에 객관적으로 판단하고자 하였다.

### 2.2 새로 선정된 10개의 수치방법

이러한 기본 원칙을 토대로 하여 다음과 같이 20세기에 이룩한 10개의 수치방법을 새롭게 선정하여 연대순으로 소개하였다.

### 2.1 Finite Element Method

어떻게 유한요소법이 누락될 수 있었을까? 전산해석분야에 끼친 유한요소법의 중요성을 더 이상 이야기할 필요가 없으리라 생각한다.

유한요소법은 전산공학(Computational Engineering) 분야에서 가장 중요한 발명으로 평가되고 있다. 유한요소법은 변분수식에 기초한 편미분방정식의 근사해를 구하는 가장 일반적인 방법으로 설명할 수 있다.

이 방법은 1943년에 유명한 응용수학자인 R. Courant[1]에 의하여 처음 고안되었으나, 그 당시에는 컴퓨터 기술의 부족으로 인정받지 못하였다. 그 이후 1956년에 R.W. Clough를 비롯한 기술자들에 의하여 재탄생하게 되었다. Clough는 "유한요소(Finite Element)"라는 용어를 처음 만들어냈다.[2] 유한요소법의 초기 개발에 공헌한 학자들로는 O.C. Zienkiewicz, J. Argyris 등이 있다. 이에 대한 발전과정은 Oden,[3] Zienkiewicz[4] 등의 논문을 참고하면 알 수 있다.

유한요소법과 아주 밀접한 방법으로 한참 후에 개발된 경계요소법(Boundary Element Method)이 있다. 이 방법은 적분방정식기법과 유한요소법의 아이디어를 혼합하여 적용한 방법이다. 현대적 형태의 경계요소법을 최초로 도입한 논문은 1968년에 T.A. Cruse와 F. J. Rizzo[5]에 의해 발표된 바 있다. 경계요소법에 대한 발전과정은 Rizzo[6]의 논문에 자세히 설명되어 있다.

### 2.2 Iterative Linear Algebraic Solvers

전산해석분야의 거의 모든 문제에는 선형연립방정식($Ax=b$)의 해를 구하는 과정이 포함되어 있다. 연립방정식의 크기가 작거나 적절한 크기의 경우에는 Gauss Elimination방법과 같은 직접법(Direct Method)으로 해를 구하지만, 연립방정식의 크기가 10,000 이상이 되는 대형 시스템에서는 반복법으로 해를 구하는 것이 훨씬 효과적이다. 전산해석분야에서는 큰 규모의 연립방정식을 풀어야 하는 경우가 자주 발생하므로 반복선형해법은 매우 중요한 것으로 판단되었다.

대칭성(Symmetry)과 흩어짐(Sparseness)과 같은 특별한 형태를 갖는 행렬 A의 효율적인 반복계산방법이 지속적으로 개발되었다.

대칭행렬에 대해 반복법에 의하여 $Ax=b$의 해를 구하는 최초의 방법으로 1950년에 Hestenes와 Stiefel[7]에 의해 Krylov spaces의 방법과 Conjugate Gradient의 방법이 발표되었다. 그 이후로 이들 방법은 크게 발전하였고, 많은 새로운 반복법이 발표되었다. 1986년에 Saad와 Shultz에 의해 발표된 GMRES[8]는 비대칭행렬의 해를 반복법으로 구하는 대표적인 방법으로 오늘날 전산해석분야에서 널리 사용되어지고 있다.

### 2.3 Algebraic Eigenvalue Solvers

전산해석분야에서 자유진동문제나 좌굴문제를 접하게 될 때 표준형태의 고유치문제인 $Kd=\lambda d$와 일반화시킨 고유치문제인 $Kd=\lambda Md$가 자주 나타난다. 이 경우 행렬 $K$와 $M$은 크기가 크고 흩어짐을 갖는 특성을 자주 가지게 된다.

이들 두 가지 형태의 문제를 해결하는 강력한 방법은 1950년에 Lanczos[9]에 의해 처음 고안되었다. 약 10년 후에 J. G. F. Francis는 고유치를 계산하는 방법으로 잘 알려진 QR알고리즘[10]을 개발하였다. Lanczos방법은 소수의 극고유치쌍(Extreme Eigenpair)을 계산하는데 비하여 QR방법은 신속하게 크기가 작은 행렬의 모든 고유치 값을 찾아낼 수 있었기 때문에, 60년대와 70년대에 이르는 동안 QR방법이 대부분 사용되었다.

그러나 80년대 이후 크기가 큰 고유치 문제의 해결이 필요하게 되면서 Lanczos 알고리즘은 다시 출현하여 사용되어지고 있다.

### 2.4 Matrix Decomposition Methods

오늘날 사용되고 있는 많은 연립방정식의 해법은 대부분이 간단한 행렬의 곱으로 원래의 행렬을 나타내는 방법인 행렬의 분해(Matrix Decomposition)에 기초하여 이루어지고 있다.

여기서 간단한 행렬이란 diagonal, triangular, symmetric, skew-symmetric, orthogonal 등을 말한다.

Householders는 1951년부터 발표한 일련의 논문에서 행렬의 분해가 유용한 이유와 Factorization 알고리즘의 개발에 대하여 소개하였다. 1964년에 발표된 Householder의 교재는 이 분야의 유용한 서적으로 판단된다.

### 2.5 Finite Difference Methods for Wave Problems

전산해석의 발전 초기에는 파동문제로부터 발생되는 상미분방정식시스템을 고전적인 Euler 시간적분기법에 의하여 주로 해결하였다. 그러나 50년대 말에 파동문제를 직접 해결할 수 있는 특별한 방법의 개발이 필요하게 되었다.

그 당시 2가지 시간적분방법이 개발되었는데 하나는 1959년에 Newmark에 의해 개발된 방법이고, 또다른 하나는 1차의 Hyperbolic System의 해를 구하기 위하여 1960년에 고안된 Lax-Wendroff방법이다. Newmark에 의하여 개발된 방법은 오늘날에도 구조동력학 문제의 해결에 널리 사용되어지고 있으며, 후자의 방법은 이후에도 많은 발전된 방법들이 제안되었다. 1978년에 발표된 Hilber-Hughes-Taylor 방법은 Lax-Wendroff 방법을 개량시킨 방법의 예이다.

Hyperbolic문제와 Parabolic-hyperbolic 문제의 전산해석 해를 구하는데 있어 발생하는 중요한 문제점으로 불연속성을 포착하는 것인데, 특히 충격파를 포착하는 것이다. 그러나 고전적인 유한차분법(Finite Difference Method)을 사용하면 이러한 불연속성을 적절하게 해결할 수 없었다. S.K. Godunov는 이러한 문제점을 처음으로 인식하고 1959년에 유체동역학 문제에 대해 현재 잘 알려진 Godunov 방법을 제안하였다. 이 방법을 시작으로 van Leer(1974, 1982), Steger과 Warming(1979), Roe (1980) 등에 의하여 오늘날 널리 사용되고 있는 upwinding과 fluxsplitting 방법 등이 개발되었다.

이 방법의 유사방법으로 유한체적법(Finite Volume Method), 유한요소법(Finite Element Method) 등이 있다.

### 2.6 Nonlinear Algebraic Solvers

전산해석분야의 대부분의 문제는 비선형이다. 비선형연립방정식의 해결을 위해서는 공간적 및 시간적인 이산화과정이 필요하다. 큰 규모의 문제 해결에는 고전적인 비선형방정식의 해법인 Bisction, Secant, Newton 방법 등도 비효율적이다.

개선된 해법중의 하나로 QN(Quasi Newton) 방법이 있다. 1959년에 Davidon에 의해 처음으로 QN 방법이 제안되었으며,[15] Flectcher와 Powell에 의하여 발전되었다. 유명한 QN방법으로 1970년에 발표된 BFGS방법은 Broyden, Flechter, Goldfarb, Shanno 등이 독립적으로 개발되었다.

비단조(Non-monotonic) 특성의 비선형성을 가지는 비선형문제의 해결방안으로는 Arclength이 방법이 있다. 수학자들은 이 방법을 흔히 연속방법(Continuation Method)이라고 부르고 있다. Arclength방법은 G.A. Wempner[16]와 E. Riks[17]에 의하여 처음 제안되었다.

### 2.7 Fast Fourier Transform(FFT)

전산해석분야에서 주로 사용되고 있는 스펙트럴방법들은 Discrete Fourier Transform이 이용되고 있다. 이 방법에서 가장 중요한 과정은 $N$점에서 함수 값이 주어졌을 때 함수의 첫 번째 $N$ Fourier계수를 계산하는 것이다.

Fourier계수의 직접 계산은 $O(N^2)$차수의 유동점연산(Floating-Point Operation)을 필요로 한다. 그러나 FFT 알고리즘을 사용하면 이와 같은 계산을 단지 $O(N\log N)$ 차수의 연산으로 수행할 수 있다.

FFT방법은 1965년에 IBM의 J.W. Cooley와 프린스톤대학교의 J.W. Turkey에 의하여 개발되었다. 이 방법은 발표된 당시에는 신호처리분야에 커다란 영향을 주었으며, 그 이후 전산해석분야를 비롯한 관련 분야의 발전에 매우 중요한 영향을 주었다.

### 2.8 Nonlinear Programming

Dongarra와 Sullivan에 의하여 선정된 Simplex방법은 선형목적함수와 선형부등제한식을 갖는 최적화문제인 Linear Programming에 적합한 방법으로 잘 알려져 있다. 그러나 전산역학분야에서 접하게 되는 대부분의 최적화문제들은 비선형목적범함수(Nonlinear Objective Functional)를 가지고 있다.

이러한 형태의 가장 간단한 문제로는 이차목적함수와 선형제한식을 가지는 Quadratic Programming(QP)으로서 전산해석분야에서 널리 접할 수 있다. 예를 들어 탄성접촉문제 또는 소성문제 등이 이에 속한다. 이보다 더 복잡한 문제의 경우는 QP문제의 연속으로 해

결할 수 있기 때문에 이들 문제는 매우 중요한 역할을 한다.

Nonlinear Programming에 대한 초기 연구는 Goldfarb (1969),[19] Murtagh와 Sargent(1969),[20] McCormick(1970), Fletcher(1971), Murray(1971) 등에 의하여 수행되었다. 큰 규모의 최적화문제의 해법은 Griffith와 Stewart(1961), Murtagh와 Saunders(1978) 등에 의하여 발표된 바 있다.

### 2.9 Soft Computing

전산해석은 기본적으로 편미분방정식이론, 이론역학, 수치해석, 범함수해석 등과 같이 엄격하면서 고전적인 수학원리에 기초를 두고 있다. 그러나 80년대초부터 소위 "Soft Computing"방법이라고 불리우는 전산해석의 새로운 형식이 출현하였다. 이 방법의 형식은 엄격한 수학원리 보다는 오히려 발견적 접근법(Heuristic Approach)에 기초하고 있으며, 인공지능(Artificial Intelligence)의 개념을 도입하게 만들었다. "Soft Computing"방법의 개념은 처음에는 많은 의구심을 받았음에도 불구하고 여러 문제의 해결에 놀랄만한 결과를 내는 것으로 판명되고 있으며, 전산해석분야의 여러 영역에서 폭넓게 활용되고 있다.

Neural Network, Genetic Algorithm, Fuzzy Logic 등 3가지의 주요 기법이 전산해석분야에 중요한 영향을 미쳤다. 이들 세 방법 모두 일반적인 최적화기법으로 고려될 수 있으나, 완전히 다른 방법들에 기초하고 있다.

Soft Computing 개념은 1940년대부터 시작된 것으로 판단되고 있으며, Neural Network는 McCulloch와 Pitts, Genetic Algorithm은 Holland, Fuzzy Logic은 Zadeh 등이 초기 연구를 발표하였다(Fuzzy Logic의 경우 일부에서는 부처에 의해 고안되었다는 의견도 있다.). 1960년대와 1970년대에 컴퓨터기술자들에 의하여 많은 진전이 이루어졌으며, 1980대초부터 전산해석분야에 Soft Computing 방법이 적용되기 시작하였다.[21)~23)]

### 2.10 Multiscale Methods

전산해석분야에서 다루는 많은 문제들은 1개 이상의 길이 척도(Length Scale)를 포함하고 있다. 그리고 어떤 경우에는 서로 다른 길이 척도가 복잡하게 서로서로 상호작용하기도 한다. 이들은 2가지 단계로 발생하기도 한다. 즉, 고려하는 현상이 micro 규모와 macro 규모 모두를 포함하는 물리적 단계(2개의 예로 Aeroacoustics과 Fracture Mechanics가 있음)와 하나의 축척에서 좋지않은 해답이 다른 축척에서 정확성을 떨어뜨리는 원인이 되는 수치적 단계가 있다. 이러한 문제들을 겨냥하여 나온 방법을 Multiscale Method라고 부르고 있다.

가장 유명한 Multiscale Method로는 단지 $O(N)$연산을 필요로 하는 반복선형연립방정식의 해법으로 간주할 수 있는 Multigrid방법이다. 이 방법은 A. Brandt가 1977년에 개발하였다.[24)] 다른 방법으로 Wavelet이 있다. Wavelet은 이미 1909년에 A. Haar에 의하여 최초로 제안된 바 있으나, 오늘날 사용되는 형태의 수식화작업은 1985년 이후에 S. Mallat,[25)] Y. Meyer와 I. Daubechies 등에 의해 수행되었다.

Multiscale Method에 대한 연구는 아직도 매우 활발하다. 대표적인 방법으로 T. J. R. Hughes에 의해 최근에 제안된 Variational Multiscale Method,[26)] J. M. Melenk와 I. Babuska가 제안한 Partition of Unity Method,[27)] J. T. Oden 그룹에서 제안한 Hierarchical Modeling 방법[28)] 등이 있다. 이들 방법에 대한 연구들은 매우 희망적인 결과를 줄 것으로 기대되고 있다.

## 3. 맺음말

20세기 중반 컴퓨터의 출현은 전산해석이라는 새로운 학문분야를 탄생시켰으며, 컴퓨터 기술의 급격한 발전은 전산해석분야의 커다란 발전을 이루게 하였다. 본고에서는 20세기에 발표된 수많은 전산해석방법들 가운데 현재 가장 많이 사용되고 학문적인 발전에 영향을 준 10개의 전산해석방법을 선정하여 간단하게 검토해 보았으며, 이들 방법에서 가장 중요한 논문들을 소개하였다. 그동안 전산해석분야의 발전에 커다란 영향을 미친 전산해석방법들에 대한 충분한 분석을 통하여 21세기에 새롭게 탄생할 또다른 전산해석방법을 기대해 본다.

## 후 기

본고는 국제전산역학회(International Association for Computational Mechanics) 소식지 2001년 9월호에 실린 기사를 참조하여 작성하였습니다.

## 참 고 문 헌

1. R. Courant, "Variational Methods for the Solution of Problems of Equilibrium and Vibration," *Bull.*

*Amer. Math. Soc.*, 4, 1943, pp.1~23
2. R. W. Clough, "The Finite Element Methods in Plane Stress Analysis," *in Proc. 2nd ASCE Conf. on Electronic Computation*, Pittsburgh, PA, 1960.
3. J. T. Oden, "Finite Elements : An Introduction," *in Handbook of Numerical Analysis, Vol.II, Finite Element Methods(P. G. Ciarlet and J. L. Lions, eds.)* Part 1, 1991, pp.3~12
4. O. C. Zienkiewicz, "Origins, Milestones and Directions of the Finite Element Method - A Personel View," *Arch. Comput. Meth. Engng.*, 2, 1995, pp.1~48
5. T. A. Cruse and F. J. Rizzo, "A Direct Formulation and Numerical Solution of the General Transient Elastodynamic Problem I," *J. Math. Anal. Appl.*, 22, 1968, pp.244~259
6. F. J. Rizzo, "The Boundary Element Method, Some Early History. A Personal View," *in Boundary Elements in Structural Analysis(D. E. Beskos, ed.), ASCE*, New York, 1989, pp.1~16
7. M. R. Hestenes and E. Stiefel, "Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear System," *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 49, 1952, pp.409~436
8. Y. Saad and H. Shultz, "GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear System," *SIAM J. Sci. Statist. Comput*, 7, 1986, pp.856~869
9. C. Lanczos, "An Iteration Method for the Solution of the Eigenvalue Problem of Linear Differential and Integral Operators," *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 45, 1950, pp.255~281
10. J. G. F. Francis, The QR Transformation: A Unitary Analogue to the LR Transformation, Parts I and II, *Computer J.* 4, 1961, pp.256~272 & 332~345
11. A. S. Householder, *The Theory of Matrices in Numerical Analysis*, Dower, New York, 1964
12. N. M. Newmark, "A Method of Computation for Structural. Dynamics," *ASCE J. Engng. Mech. Div.*, 1959, pp.67~94
13. P. D. Lax and B. Wendroff, "System of Conservation Laws," *Pure Appl. Math.*, 13, 1960, pp. 217~237
14. S. K. Godunov, "Finite Difference Method for Numerical Computation of Discontinuous Solutions of the Equations of Fluid Dynamics," *Mat. Sb.*, 47, 1959, pp.271~306
15. W. C. Davidon, "Variable Metric Methods for Minimization," *A.E.C. Res. & Develop.* Report ANL-5990, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, 1959
16. G. A Wempner, "Discrete Approximations Related to Nonlinear Theories of Solids," *Int. J. Solids Struct.*, 7, 1971, pp.1581~1599
17. E. Riks, "The Application of Newton's Method to the Problem of Elastic Stability," *J. Appl Mech.*, 39, 1972, pp.1060~1066
18. J. W. Cooley and J. W. Tukey, "An Algorithm for the Machine Calculation of Fourier Series," *Math. of Comput.*, 19, 1965, pp.297~301
19. D. Goldfarb, "Extension of Davidon's Variable Metric Method to Under Linear Inequality and Equality Constraints," *SIAM J. Appl. Math.*, 17, 1969, pp.739~764
20. B. A. Murtagh and R. H. W. Sargent, "A Constrained Minimization Method with Quadratic Convergence," *in Optimization(R. Fletcher, ed.)*, Academic Press, London, 1969. pp.215~246
21. D. Goldberg, *Genetic Algorithms*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1989
22. R. R. Yager and B. Bouchon-Meunier, *Fuzzy Logic and Soft Computing*, World Scientific, Singapore, 1995
23. B. Widrow and M. Lehr, "30 Years of Adaptive Neural Networks: Perception, Madeline and Back-propagation," *Proc. IEEE*, 78, 1990, pp.1415~1442
24. A. Brandt, "Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary Value Problems," *Math. of Comput*, 31, 1977, pp.333~390
25. S. Mallat, "Multiresolution Approximation and Wavelets," *Trans. Amer. Math. Soc.*, 315, 1989, pp.69~88
26. T. J. R. Hughes, "Multiscale Phenomena: Green's Functions, the Dirichlet-to-Neumann Formulation, Subgrid Scale Models, Bubbles and the Origins of Stabilized Methods," *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 127, 1995, pp.387~401

27. J. M. Melenk and I. Babuska, "The Partition of Unity Finite Element Method : Basic Theory and Applications," *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 139, 1996, pp.289~314

28. T. I. Zohdi, J. T. Oden and G. J. Rodin, "Hierarchical Modeling of Heterogeneous Bodies," *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng*, 138, 1996, pp. 273~298