수치해석 (2학기)

김상배 교수

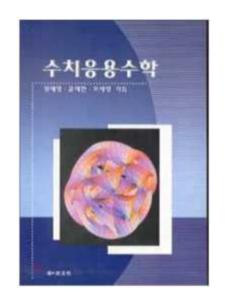
xxx@hnu.kr

http://sbk.hnu.kr/Lectures

010-XXXX-7867

문자메세지

카톡(공부내용 질문)



교과서: 수치응용수학, 정세영외2인, 경문사

수치해석: 해석학적으로 얻기 어려운 문제의 답을 수치적으로 근사값을 구하려는 연구.

예)

Input interpretation:

series
$$e^x$$
 point $x=0$

Series expansion at x=0:

$$1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \frac{x^5}{120} + O(x^6)$$

(converges everywhere)

Taylor 급수

함수 f(x) 가 x=a 에서 무한번 미분가능일 때 무한급수

$$f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f^{(3)}(a)}{3!}(x-a)^3 + \cdots$$

특히 a=0일 때 f의 Taylor급수를 특히 Maclaurin급수라 한다.

Taylor의 정리

함수 f(x) 가 x=a 을 포함하는 구간에서 (n+1) 번 미분가능하면,

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + R_n(x)$$

이고 $R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1}$ 가 되는 점 ξ 가 a 와 x 사이에 존재한다.

함수들의 멱급수 전개

Maclaurin 급수	수렴구간
$e^{x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{n}}{n!} = 1 + x + \frac{x^{2}}{2!} + \frac{x^{3}}{3!} + \cdots$	$-\infty < x < +\infty$
$\sin x = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \cdots$	$-\infty < x < +\infty$
$\cos x = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots$	$-\infty < x < +\infty$
$\ln(1+x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n+1} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$	$-1 < x \le 1$
$\tan^{-1} x = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \dots$	$-1 < x \le 1$
$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + \cdots$	$-1 < x \le 1$
$\sinh x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \cdots$	$-\infty < x < +\infty$
$\cosh x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(2n)!} = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \cdots$	$-\infty < x < +\infty$

[예제] e 의 값을 소수점이하 넷째자리까지 정확히 구하여라. (풀이)

모든 x에 대하여

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!} x^2 + \frac{1}{3!} x^3 + \cdots + \frac{1}{n!} x^n + \frac{e^c}{(n+1)!} x^{n+1}$$
, $(0 < c < x)$

이므로
$$x=1$$
 이면 $e=1+1+\frac{1}{2!}+\frac{1}{3!}+\cdots+\frac{1}{n!}+\frac{e^c}{(n+1)!}$ 이다.

$$c < 1$$
이므로 $|R_n| = \left| rac{e^c}{(n+1)!}
ight| = rac{e^c}{(n+1)!} < rac{e^1}{(n+1)!}$ 이다.

여기서
$$e < 3$$
 이므로 $|R_n| < \frac{3}{(n+1)!}$ 이다.

소수점이하 4째자리까지 정확하려면

$$|R_n| < rac{3}{(n+1)!} < 0.5 imes 10^{-4} = 0.00005$$
 이어야 하고

n=8 이면 위 식을 만족하므로

$$e \approx 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \cdots + \frac{1}{8!} \approx 2.7183$$
 이다.



제5장 근사함수

근사함수

어떤 함수와 가깝다고 여겨져서 그 함수를 대신하여 사용하는 함수를 근사함수 (approximation function)라고 한다.

(**Q**)
$$e^x \approx 1 + x + \frac{1}{2!} x^2 + \frac{1}{3!} x^3 + \cdots + \frac{1}{n!} x^n$$

근사함수의 이용

(4)
$$\int_{1}^{2} \frac{1}{x^{2}} dx \approx \int_{1}^{2} (-\frac{3}{4}(x-1)+1) dx$$

함수 $g(x)=-\frac{3}{4}(x-1)+1)$ 는 함수 $f(x)=\frac{1}{x^2}$ 의 근사함수 인데, f(1)=g(1), f(2)=g(2)이고 g(x)는 f(x)보다 "간편한" 1차 함수이다. (→사다리꼴공식)

노름의 이용

함수들 사이에의 "가까움", 즉 거리를 측정하는 방법으로 여러 가지 노름이 사용된다.

(예) f 가 구간 [a,b] 에서 연속 함수일 때, 함수간의 거리는 d(f,g) = ||f-g|| 로 측정하며, 함수의 노름의 예들은 다음과 같은 것들이 있다.

$$||f||_1 = \int_a^b |f(x)| w(x) dx$$

$$||f||_2 = \left(\int_a^b |f(x)|^2 w(x) dx\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$||f||_{\infty} = \max\{ |f(x)| : a \le x \le b \}$$

여기에서 $w(x)(\geq 0)$ 를 "가중함수"(weight function)라고 한다.

근사함수 찾기

주어진 함수 $f \in C[a,b]$ 와 $V(\subset C[a,b])$ 에 대하여, $||f-g^*|| \le ||f-g||, \, \forall \, g \in V$

을 만족하는 $g^* \in V$ 를 찾아라.

(예) 사다리꼴 공식도 함수공간의 특정 부분공간(예를 들어 1차함수들의 공간) V 안의 함수들 중에서 원래 함수와 제일 가까운 함수로 해석될 수 있다.

보간법 (사이를 보충한다)

주어진 점들과 함수값들을 만족하는 근사 함수를 정하는 방법.

보간함수 of 데이터

주어진 데이터 $\{(x_i,y_i)|i=0,1,\cdots,n\}$ 에 대하여 보간 조건

$$P_n(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$$

을 만족하는 함수 P_n 를 보간함수라고 한다. x_i 들을 마디점이라고 한다. 보간함수가 다항함수인 경우 특히 보간다항식이라고 한다.

보간함수 of 함수

주어진 마디점들 $\left\{x_i \mid i=0,1,\cdots,n\right\}$ 과 함수 f에 대하여 보간 조건

$$P_n(x_i) = f(x_i), i = 0, 1, \dots, n$$

을 만족하는 함수 P_n 을 함수 f의 보간함수라고 한다. 또는 함수 P_n 은 함수 f를 보간한다 라고도 한다.

(예) 다항식

$$p(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1$$

은 데이터 $\{(x_0,y_0),(x_1,y_1)\}$ 의 보간다항식이다.

[정리5.1] 마디점 $x_0, x_1, \dots x_n$ 이 서로 다른 값이면, 보간 조건

$$P_n(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$$

을 만족하는 n 차 이하의 다항식은 오직 하나 존재한다. (증명)

 $i=0,1,\cdots,n$ 에 대하여 정의된 함수

$$\ell_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

는 $x_0,x_1,\cdots x_n$ 들이 서로 다른 값이므로 $\ell_i(x_i)=1,\ \ell_i(x_j)=0,$ for $j\neq i$ 임을 알수 있다. ℓ_i 함수들은 n차 다항식이므로 함수

$$P_n(x) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{i=0}^n y_i \, \ell_i(x)$$

도 n차 이하 다항식이고,

$$P_n(x_k) = \sum_{i=0}^n y_i \, \ell_i(x_k) = y_k, \ \forall k = 0, 1, \dots, n$$

임을 확인할 수 있다. 즉 보간다항식의 존재성이 증명되었다. 유일성을 증명하기 위하여 $Q_n(x)$ 가 n차 이하의 또 다른 보간다항식이라면, 다항식

$$R_n(x) \stackrel{\text{def}}{=} P_n(x) - Q_n(x)$$

도 역시 n 차 이하의 다항식이고, $\forall k = 0, 1, \dots, n$,

$$R_{n}(x_{k}) = P_{n}(x_{k}) - Q_{n}(x_{k}) = y_{k} - y_{k} = 0,$$

이다. 대수학의 기본정리에 따르면, 영함수가 아닌 n차 이하의 다항식은 서로 다른 n+1개의 근을 가질 수 없으므로, $R_n(x)\equiv 0$ 이 되므로 유일성이 증명되었다.

라그랑지형 보간다항식

마디점들 x_i , $i=0,1,\dots,n$ 에 대하여 각각 정의된 함수

$$\ell_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

를 라그랑지 다항식(Lagrange polynominal)이라 한다.

라그랑지 다항식 $\ell_i(x)$ 들의 일차결합으로 이루어진 보간다항식

$$P_n(x) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=0}^n y_i \, \ell_i(x)$$

를 라그랑지형 보간다항식이라고 한다.

[예제5.1] 마디점 $\{0,1,2\}$ 에서 함수 $f(x)=e^x-1$ 의 2차 라그랑지 보간다항식을 구하고, f(1.5)의 근사값을 구하라.

(풀이) (컴퓨터 숙제 : P202 #5(3) f(0.25))

각 마디점에 대응하는 2차 라그랑지 다항식을 구하면

$$\ell_0(x) = \frac{(x-1)(x-2)}{(0-1)(0-2)} \text{, } \ \ell_1(x) = \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)} \text{, } \ \ell_2(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)} \text{.} \ \ell_2(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(x-1)} \text{.} \ \ell_2(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(x-1)} \text{.} \ \ell_2(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(x-1)} \text{.} \ \ell_2(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(2-$$

이므로 2차 라그랑지 보간다항식은

$$\begin{split} P_2(x) &= \sum_{i=0}^2 f(x_i) \; \ell_i(x) \\ &= f(0) \; \ell_0(x) + f(1) \; \ell_1(x) + f(2) \; \ell_2(x) \\ &= (e^0 - 1) \frac{(x-1)(x-2)}{(0-1)(0-2)} + (e-1) \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)} + (e^2 - 1) \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)} \\ &= 0 + (e-1) \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)} + (e^2 - 1) \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)} \end{split}$$

f(1.5)의 근사값은

$$\begin{split} f(1.5) &\approx P_2(1.5) \\ &= (e-1) \frac{(1.5-0)(1.5-2)}{(1-0)(1-2)} + (e^2-1) \frac{(1.5-0)(1.5-1)}{(2-0)(2-1)} \\ &= (e-1)(1.5)(0.5) + (e^2-1)(1.5)(0.5)/2 \approx 3.6846 \end{split}$$

멱급수형 보간다항식

다항식의 가장 보편적인 형태는 다음과 같은 멱급수형 보간다항식이다.

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

보간 조건

$$P_n(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$$

을 만족하는 계수 a_i 들을 구하려면, 연립방정식

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

$$Va = y$$

을 풀어야 한다. 행렬 V를 Vandermonde 행렬이라고 하는데, $x_0, x_1, \cdots x_n$ 들이 서로 다르면, 행렬 V는 역행렬이 존재하는 정칙행렬이 된다고 알려져 있다. 따라서 해가 존재하지만, 불량행렬이어서 정확한 해를 얻기가 어려운 점이 있다. 가장 효율적인 방법은 나중에 다루게 될 뉴톤형 보간다항식이다.

보간다항식 방식의 장단점

1) 라그랑지형 : 직관적. 수치미분과 수치적분에 유용.

점 하나를 추가하면 처음부터 다시 계산해야 하는 단점.

2) 뉴톤형 : 점 하나를 추가하면 처음부터 다시 계산할 필요없이 항 하나만 추가함.

Neville의 방법

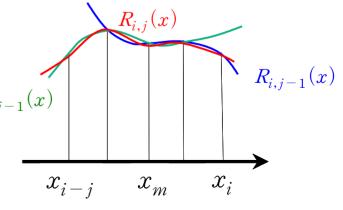
보간다항식 전체를 구하지 않고, 한 점에서의 근사값만을 구하는 경우, 라그랑지 방법을 사용하되 처음부터 다시 계산하지 않고, 최근 계산값들을 이용하여 새 근사 값을 계산하는 일종의 반복법이다. $0 \le j \le i$ 를 만족하는 자연수 i,j에 대하여 데이터 $\{(x_m,f(x_m)) \mid i-j \le m \le i\}$ 라그랑지 보간다항식을 $R_{i,j}(x)$ 이라고 하면,

$$R_{i,0}(x_i) = f(x_i)$$
 0] **1**,

$$R_{i,j}(x) = \frac{x - x_i}{x_{i-j} - x_i} R_{i-1,j-1}(x) + \frac{x - x_{i-j}}{x_i - x_{i-j}} R_{i,j-1}(x) \Big|_{R_{i-j,j-1}(x)}$$

임을 증명할 수 있다.

(증명)



한남대학교 수학과 김상배교수

1)
$$m=i-j$$
 일 때, $R_{i,j}(x_{i-j})=R_{i-1,j-1}(x_{i-j})=f(x_{i-j})$

2) i - j < m < i 일 때,

$$\begin{split} R_{i,j}(x_m) &= \frac{x_m - x_i}{x_{i-j} - x_i} R_{i-1,j-1}(x_m) + \frac{x_m - x_{i-j}}{x_i - x_{i-j}} R_{i,j-1}(x_m) \\ &= \frac{x_i - x_m}{x_i - x_{i-j}} f(x_m) + \frac{x_m - x_{i-j}}{x_i - x_{i-j}} f(x_m) \\ &= f(x_m) \end{split}$$

3)
$$m=i$$
 일 때, $R_{i,j}(x_i) = R_{i,j-1}(x_i) = f(x_i)$

 $R_{i,j}(x)$ 들은 $R_{i,j-1}(x)$ 들로부터 차수가 하나 올라간 다항식이고, 식을 정리하면,

$$R_{i,j}(x) = \frac{(x - x_{i-j})R_{i,j-1}(x) - (x - x_i)R_{i-1,j-1}(x)}{x_i - x_{i-j}}$$

이 된다.

$$\Rightarrow$$
차수증가 $f(x_0) = R_{0,0}$ $f(x_1) = R_{1,0} \ R_{1,1}$ 마디점증가 $f(x_2) = R_{2,0} \ R_{2,1} \ R_{2,2}$ \downarrow $f(x_3) = R_{3,0} \ R_{3,1} \ R_{3,2} \ R_{3,3}$

[예제5.2]

마디점 $x_m=m+1,\ \forall\ m=0,1,\cdots,k$ 에서 함수 f(x)=1/x의 보간다항식을 $P_k(x)$ 라고 하자. Neville 방법을 이용하여 $P_k(2.5),\ k=0,1,2,3$ 을 구하라. (풀이) (컴퓨터 숙제: p203 #13)

$$R_{i,0}(2.5) = f(x_i) = \frac{1}{x_i} = \frac{1}{i+1} \quad R_{0,0}(2.5) = \frac{1}{0+1} = 1.0 = P_0(2.5)$$

$$R_{1,1}(2.5) = [(2.5 - x_0)R_{1,0}(2.5) - (2.5 - x_1)R_{0,0}(2.5)]/(x_1 - x_0) = 0.25 = P_1(2.5)$$

$$R_{2,1}(2.5) = [(2.5 - x_1)R_{2,0}(2.5) - (2.5 - x_2)R_{1,0}(2.5)]/(x_2 - x_1) = 0.41\dot{6}$$

$$R_{2,2}(2.5) = [(2.5 - x_0)R_{2,1}(2.5) - (2.5 - x_2)R_{1,1}(2.5)]/(x_2 - x_0) = 0.375 = P_2(2.5)$$

$$R_{3,1}(2.5) = [(2.5 - x_2)R_{3,0}(2.5) - (2.5 - x_3)R_{2,0}(2.5)]/(x_3 - x_2) = 0.375$$

$$R_{3,2}(2.5) = [(2.5 - x_1)R_{3,1}(2.5) - (2.5 - x_3)R_{2,1}(2.5)]/(x_3 - x_1) = 0.40625$$

$$R_{3,3}(2.5) = [(2.5-x_0)R_{3,2}(2.5) - (2.5-x_3)R_{2,2}(2.5)]/(x_3-x_0) = 0.390625 = P_3(2.5)$$

[정리5.2] $f \in C^{n+1}[a,b]$ 이고 $P_n(x)$ 는 구간 [a,b]에서 서로 다른 마디점 x_0,x_1,\cdots,x_n 에서 f의 보간다항식이라면, $\forall x \in [a,b]$ 에 대하여,

$$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} W(x), \quad W(x) \equiv \prod_{i=0}^n (x - x_i) \quad --- \quad (1)$$

을 만족하는 $\xi_r \in (a,b)$ 가 존재한다.

(증명)

(경우1) $(0 \le {}^{\exists}i \le n): x = x_i$

 $W\!(x) = 0$ 이고, P_n 은 f의 보간다항식이므로 $f(x_i) = P_n(x_i)$ 이 되어 (1)이 성립한다.

(경우2) $(0 \leq {}^{\forall}i \leq n), x \neq x_i$

다음 함수 g(t)를 정의하자.

$$g(t) = f(t) - P_n(t) - [f(x) - P_n(x)] \frac{W(t)}{W(x)} - - (2)$$

 f, P_n \in $C^{n+1}[a,b]$ 이므로 $g \in C^{n+1}[a,b]$ 이고, $g(x_k) = 0, \, \forall \, k = 0, 1, \cdots, n$ 이고

g(x) = 0 이므로 g는 구간 [a,b]에서 적어도 n+2 개의 서로 다른 실근을 갖는다.

따라서 Rolle의 정리에 의하여 도함수 g'는 구간 [a,b]에서 적어도 n+1 개의 서로 다른 실근을 갖는다. $g\in C^{n+1}[a,b]$ 이므로 $g'\in C^n[a,b]$ 이다. 다시 Rolle의 정리에 의하여 도함수 $g^{(2)}$ 은 구간 [a,b]에서 적어도 n 개의 서로 다른 실근을 갖는다. 이 과정을 반복하면, $g^{(2+(n-1))}$ 은 구간 [a,b]에서 적어도 n-(n-1) 개의 서로 다른 실근을 갖는다. 즉 $g^{(n+1)}(\xi_x)=0$ 을 만족하는 ξ_x 가 구간 (a,b) 안에 적어도 하나 존재한다. 식 (2)로부터

$$g^{(n+1)}(t) = f^{(n+1)}(t) - P_n^{(n+1)}(t) - [f(x) - P_n(x)] \frac{W^{(n+1)}(t)}{W(x)}$$

여기서 $P_n(t)$ 와 W(t)은 각각 n차와 n+1차 다항식이므로 $P_n^{(n+1)}(t)\equiv 0$ 이고 $W^{(n+1)}(t)=(n+1)!$ 이다. 그러므로 $t=\xi_r$ 를 대입하면,

$$g^{(n+1)}(\xi_x) = f^{(n+1)}(\xi_x) - [f(x) - P_n(x)] \frac{(n+1)!}{W(x)}$$

여기서 $g^{(n+1)}(\xi_x) = 0$ 이므로,

$$f^{(n+1)}(\xi_x) - [f(x) - P_n(x)] \frac{(n+1)!}{W(x)} = 0$$

이것을 정리하면 식(1)의 결론을 얻을 수 있다.

위 정리에 따르면 만약 $|f^{(n+1)}(\xi_x)| \leq M$ 을 만족하는 상수 M 이 존재한다면, 오차의 한계는

$$|f(x) - P_n(x)| \le \frac{M}{(n+1)!} |W(x)|, \quad W(x) \equiv \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

와 같이 구할 수 있다.

[예제5.3] 구간 [0,1]에 속하는 임의의 6개의 마디점에서 함수 $f(x) = \cos x + \sin x$ 의 보간다항식을 $P_5(x)$ 라 할 때, 오차 $|f(x)-P_5(x)|$, $x\in[0,1]$ 의 한계를 구하라. (풀이)

$$f^{(6)}(x) = -\cos x - \sin x$$
 (책오류수정) 참고 : Wolfram : 6th derivative of $\cos(x) + \sin(x)$ 이므로 $|f(x) - P_5(x)| = \frac{|\cos \xi + \sin \xi|}{6!} \prod_{k=0}^5 |x - x_k|, \xi \in (0,1)$ 이다.

여기서
$$|\cos\xi+\sin\xi|=|\sqrt{2}\sin(\xi+\pi/4)|\leq\sqrt{2}$$
,

$$\prod_{k=0}^{5} |x - x_k| \le 1, \ (0 \le x, x_k \le 1)$$

이므로
$$|f(x) - P_5(x)| = \frac{\sqrt{2}}{6!} \approx 0.001964$$

뉴톤형 보간다항식

마디점 x_0, x_1, \dots, x_n 에 대해, 아래 다항식을 함수 f의 뉴톤형 보간다항식이라 한다.

$$\begin{split} P_n(x) &= a_0 + a_1(x - x_0) \\ &+ a_2(x - x_0)(x - x_1) \\ &\cdots \\ &+ a_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) \\ &= \sum_{k=0}^n \ a_k \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i) \end{split}$$

뉴톤형 보간다항식에서는 마디점을 하나 추가할 경우, 기존데이터에 새로운 항하나만 더 추가하여 계산하면 된다. 여기에서

$$f[x_{0,}x_{1,}\cdots x_{k}]\stackrel{\mathrm{Map}}{=} a_{k}$$
 ---(2)

를 함수f의 분할차분(divided difference)라고 한다. 여기서 $f[x_0,x_1,\cdots x_n]\equiv a_n$ 는 $P_n(x)$ 의 최고차항 계수임을 알 수 있다. 일반적으로 마디점 $x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k}$ ($0\leq i\leq n-k$)들에 대하여 분할 차분을 $f[x_i,x_{i+1},\cdots,x_{i+k}]$ 로 표시한다.

[명제] 분할차분은 아래와 같이 순차적으로 구할 수 있다.

1)
$$f[x_i] = f(x_i), \ 0 \le \forall i \le n$$

2)
$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_k] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}$$

(증명)

정의(2)에 의하여 $f[x_0]=a_0$ 이고, 식(1)로부터 $P_n(x_0)=a_0$ 이다. 그러므로 보간조건 $f(x_0)=P_n(x_0)$ 로부터, $f[x_0]=f(x_0)$ 를 얻는다. 마디점 x_i 를 마디점 x_0 라고 해도 같은 논리가 성립하므로

$$f[x_i] = f(x_i), \quad 0 \le \forall i \le n$$

임을 알 수 있다. Neville 의 방법처럼, 데이터 $\left\{(x_m,f(x_m))\mid 0\leq m\leq k\right\}$ 에 대하여 k-1차 보간다항식

$$P_{k-1}(x_i) = f(x_i), i = 0, 1, \dots, k-1$$
 --- (1)

$$Q_{k-1}(x_i) = f(x_i), i = 1, 2, \dots, k$$
 --- (2)

으로부터 k 차 보간다항식

$$P_k(x) = \frac{x - x_0}{x_k - x_0} Q_{k-1}(x) - \frac{x - x_k}{x_k - x_0} P_{k-1}(x) \quad ---(3)$$

을 만들면

$$P_k(x) = f(x_j), j = 0,1, \dots, k$$

이 된다. 왜냐하면

i)
$$P_k(x_0) = (0) Q_{k-1}(x_0) - (-1) P_{k-1}(x_0)$$

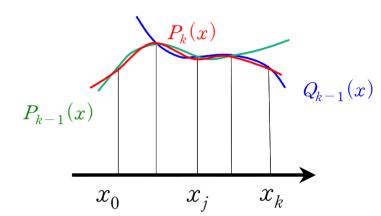
= $P_{k-1}(x_0) = f(x_0)$ by (1)

ii)
$$1 \le j \le k-1$$
에 대하여,

$$\begin{split} P_k(x_j) &= \frac{x_j - x_0}{x_k - x_0} Q_{k-1}(x_j) - \frac{x_j - x_k}{x_k - x_0} P_{k-1}(x_j) \\ &= \frac{x_j - x_0}{x_k - x_0} f(x_j) - \frac{x_j - x_k}{x_k - x_0} f(x_j) \quad \text{by (2)(1)} \\ &= f(x_i) \end{split}$$

iii)
$$P_k(x_k) = (1) Q_{k-1}(x_k) - (0) P_{k-1}(x_0)$$

= $Q_{k-1}(x_k) = f(x_k)$ by (2)



이기 때문이다. 한편 (3)으로부터, $P_k(x)$ 는 다음과 같다.

$$P_k(x) = \frac{1}{x_k - x_0} [(x - x_0)Q_{k-1}(x) - (x - x_k)P_{k-1}(x)]$$

따라서 $P_k(x)$ 의 최고차항의 계수 $f[x_0,x_1,\cdots,x_k]$ 은 다음 같이 주어짐을 알 수 있다.

$$\begin{split} f[x_0,x_1,\cdots,x_k] &= \frac{1}{x_k-x_0}(Q_{k-1}$$
의최고차항의계수 $-P_{k-1}$ 의최고차항의계수) \\ &= \frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0} \end{split}

[주의] 마디점 $x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}$ ($0 \le i \le n-k$)에 대하여도 같은 논리로,

$$f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \cdots, x_{i+k}] - f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

로 쓸 수 있다.

분할차분표

[예제5.6] 함수 $f(x) = \sqrt{x}$ 의 함수표를 보간하는 뉴톤 분할차분형 다항식 $P_3(x)$ 를 구하라. 또한 f(2.4) = 1.549193을 추가하여 $P_4(x)$ 를 구하고, x = 2.15에서 각각 근사값을 구하여, 참값 $\sqrt{2.15} = 1.46628782$ ··· 와 비교하여라. 숙제 p215#1-(2)

x 2.0 2.1 2.2 2.3 f(x) 1.414213 1.449137 1.483239 1.516575

(풀이) 주어진 값들에 대하여 분할차분표를 만들면 다음과 같다.

 x_i $f[x_i]$ f[,] f[,] f[,,] f[,,] f[,,] f[,,] 2.0 1.414213 0.34924 -0.04110 0.00933 -0.00333^* 2.1 1.449137 0.34102 -0.03830 0.00800 2.2 1.483239 0.33336 -0.03590^* 2.3 1.516575 0.32618 2.4 1.549193

위에서 * 표시는 추가된 항목을 표시한다. 먼저 3차 뉴톤 분할차분형 다항식을 $P_3(x)$ 을 구하면

$$\begin{split} P_3(x) &= 1.414213 + 0.34924(x-2.0) \\ &- 0.04110(x-2.0)(x-2.1) \\ &+ 0.00933(x-2.0)(x-2.1)(x-2.2) \end{split}$$

x = 2.15에의 근사값은 $f(2.15) \approx P_3(2.15) = 1.4662873$ 이다.

한 점을 추가한 4차 뉴톤 분할차분형 다항식 $P_4(x)$ 은

$$\begin{split} P_4(x) &= 1.414213 + 0.34924(x-2.0) \\ &- 0.04110(x-2.0)(x-2.1) \\ &+ 0.00933(x-2.0)(x-2.1)(x-2.2) \\ &- 0.00333(x-2.0)(x-2.1)(x-2.2)(x-2.3) \end{split}$$

로 주어지고, x=2.15에의 근사값은 $f(2.15)\approx P_4(2.15)=1.4662872$ 이다.

[정리5.3] 만약 $f \in C^n[a,b]$ 이고, 구간 [a,b] 안의 마디점 $x_{0,}x_{1,}\cdots,x_n$ 들 서로 다른 실수이면,

$$f[x_{0}, x_{1}, \dots, x_{n}] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi)$$

를 만족하면 ξ 가 (a,b) 안에 존재한다.

(증명)

마디점 x_0, x_1, \dots, x_n 에서 함수 f의 보간다항식을 P_n 이라고 하면 함수

$$g(x) \equiv f(x) - P_n(x)$$

는 보간 조건에 의하여 n+1개의 실근을 갖는다. 즉

$$g(x_0) = g(x_1) = \cdots = g(x_n) = 0$$

이다. Rolle 의 정리에 의하여 도함수 $g^{(1)}(x)$ 는 n 개의 실근을 갖는다. 또 다시 $g^{(2)}(x)$ 는 n-1 개의 실근을 갖고, 이 과정을 계속하여 $g^{(n)}(x)$ 는 1개의 실근을 갖는다. (참고 : $g^{(0)}$ 가 n+1개 이면 $g^{(n)}$ 는 1개) 따라서

$$g^{(n)}(\xi) = 0$$

을 만족하는 ξ 가 (a,b) 안에 존재한다. 즉

$$f^{(n)}(\xi) - P_n(\xi) = 0$$

$$\begin{split} f^{(n)}(\xi) &= \frac{d^n}{dx^n} (f[x_0, x_1, \cdots, x_n][(x-x_0)(x-x_1) \cdots (x-x_{n-1}) + (n-1) \text{ in } \text{ and }] \bigg|_{x=\xi} \\ &= \frac{d^n}{dx^n} (f[x_0, x_1, \cdots, x_n][x^n + (n-1) \text{ in } \text{ and }] \bigg|_{x=\xi} \\ &= n! \ f[x_0, x_1, \cdots, x_n] \quad \blacksquare \end{split}$$

균등분할

마디점들이 일정한 간격으로 주어진 균등분할인 경우, 즉

$$h = \frac{b-a}{n}$$

$$0 \le \forall k \le n, \ x_k = a + kh$$

분할차분은 좀 더 간단히 계산될 수 있다.

전향차분

자연수 j에 대하여 $f_j = f(x_j)$ 라 할 때, 전향차분(forward difference)

$$\begin{split} \varDelta f_j &= f_{j+1} - f_j \\ \varDelta^k f_j &= \varDelta (\varDelta^{k-1} f_j), \ \forall \, k \geq 2 \end{split}$$

로 정의된다. ■

전향차분과 분할차분의 관계는 다음과 같다.

$$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{1}{h} \Delta f_0$$

$$f[x_0,x_1,x_2] = \frac{f[x_1,x_2] - f[x_0,x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{\frac{\varDelta f_1}{h} - \frac{\varDelta f_0}{h}}{2h} = \frac{1}{2!\,h^2} \varDelta^2 f_0$$

.

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{1}{k! h^k} \Delta^k f_0$$
 ---(1)

분할점들이 더 일반적으로 $x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+n}$ 일 경우,

$$f[x_{j}, x_{j+1}, \dots, x_{j+k}] = \frac{1}{k!h^k} \Delta^k f_j$$

로 쓸 수 있다. 뉴톤형 보간다항식

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f[x_0, x_1, \dots, x_k] \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i) \quad ---(2)$$

에서 $x_i = x_0 + ih$ 이고, $x = x_0 + sh$ 로 놓으면,

$$\prod_{i=0}^{k-1} (x-x_i) = \prod_{i=0}^{k-1} h(s-i) = h^k \prod_{i=0}^{k-1} (s-i) = h^k k! \binom{s}{k} --- (3)$$

이 된다. 여기에서 조합기호 $\binom{s}{k}$ 는 다음과 같이 정의된 것이다.

뉴톤 전진차분형 보간다항식

식(1),(3)을 식(2)에 대입하면, 뉴톤 전진차분형 보간다항식

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!h^k} \Delta^k f_0 h^k k! \binom{s}{k} = \sum_{k=0}^n \Delta^k f_0 \binom{s}{k}$$

을 얻는다.

전진차분표

보간다항식에 필요한 전진차분표는 분할차분표에서 있었던 나눗셈이 필요없다.

x_{j}	$\Delta^0 f$	Δf	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$	$\Delta^4 f$
x_0	$f(x_0)$	Δf_0	$\Delta^2 f_0$	$\Delta^3 f_0$	$\Delta^4 f_0^*$
x_1	$f(x_1)$	Δf_1	$\Delta^2 f_1$	$\Delta^3 f_1^*$	
x_2	$f(x_2)$	Δf_2	$\Delta^2 f_2^*$		
x_3	$f(x_3)$	Δf_3^*			
x_{4}^{*}	$f(x_4)^*$				

[예제5.7] 함수 $f(x) = \sqrt{x}$ 의 함수표를 보간하는 다항식 $P_3(x)$ 의 뉴톤 전진차분형을 구하고 $P_3(2.15)$ 를 계산하여 참값 $\sqrt{2.15} = 1.46628782\cdots$ 와 비교하여라. (풀이) 숙제 p217#19-(1)

 $x = 2.15, x_0 = 2.0, s = 1.5, h = 0.1$ 이고 전진차분표는 다음과 같다.

x_{j}	$\Delta^0 f$	Δf	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$
2.1 2.2	_	0.034102	-0.000822 -0.000766	0.000056

따라서 뉴톤 전진차분형 다항식 $P_3(x) = P_3(x_0 + sh)$ 는

$$\begin{split} P_3(x) &= P_3(x_0 + sh) \\ &= 1.414213 + 0.034924 \binom{s}{1} - 0.000822 \binom{s}{2} + 0.000056 \binom{s}{3} \end{split}$$

이고, $P_3(2.15)$ 를 계산하면 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{split} P_3(2.15) &= P_3(2+1.5\times0.1) \\ &= 1.414213 + 0.034924 \binom{1.5}{1} - 0.000822 \binom{1.5}{2} + 0.000056 \binom{1.5}{3} \\ &= 1.4662873 \end{split}$$

후향차분

자연수 j에 대하여 $f_i = f(x_i)$ 라 할 때, 후향차분(backward difference)

$$\begin{split} \nabla f_j &= f_j - f_{j-1} \\ \nabla^k f_j &= \nabla \left(\nabla^{k-1} f_j \right), \ \forall \, k \geq 2 \end{split}$$

로 정의된다. ■

뉴톤 후진차분형 보간다항식

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{-s}{k} \nabla^k f_n$$

Hermite 보간다항식

각 마디점에서, 함수값뿐만아니라 고계도함수값까지도 보간하는 다항식. 즉 함수 f와 서로 다른 마디점 $x_i(0 \le i \le n)$ 들과 자연수 $m_i(0 \le i \le n)$ 들이 주어졌을 때,

$$H^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i), (0 \le j \le m_i - 1, 0 \le i \le n)$$
 ---(1)

을 만족하는 $N(=m_0+m_1+\cdots+m_n-1)$ 차 이하의 다항식 H(x)를 Hermite 보간다항식이라고 한다.

[예제 5.9] 다음을 만족하는 3차 Hermite 보간 다항식 $H_3(x)$ 를 구하여라.

$$x_0 \neq x_1, \ H_3(x_j) = f(x_j), \ H_3'(x_j) = f'(x_j), \ j = 0, 1$$

(풀이1) $H_3(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$ 로 놓으면 위의 보간 조건은

$$\begin{aligned} a_0 + x_0 a_1 + x_0^2 a_2 + x_0^3 a_3 &= f(x_0) \\ a_1 + 2x_0 a_2 + 3x_0^2 a_3 &= f'(x_0) \\ a_0 + x_1 a_1 + x_1^2 a_2 + x_1^3 a_3 &= f(x_1) \\ a_1 + 2x_1 a_2 + 3x_1^2 a_3 &= f'(x_1) \end{aligned}$$

이다. 위 연립방정식을 행렬을 이용하여 Ay = b로 표시된다.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & x_0^3 \\ 0 & 1 & 2x_0 & 3x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 0 & 1 & 2x_1 & 3x_1^2 \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f'(x_0) \\ f(x_1) \\ f'(x_1) \end{bmatrix}$$

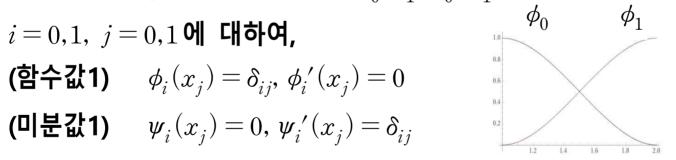
만약 $x_0 \neq x_1$ 이면 계수행렬 A는 정칙임을 보일 수 있다. A가 정칙이면 방정식 Ay = b는 유일한 근을 구할 수 있다.

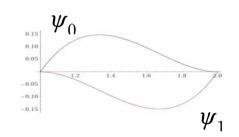
(풀이2 : 라그랑지형) 3차 보간다항식 $\phi_0, \phi_1, \psi_0, \psi_1$ 들이

$$i=0,1,\ j=0,1$$
에 대하여,

(함수값1)
$$\phi_i(x_i) = \delta_{ij}, \phi_i'(x_i) = 0$$

(미분값1)
$$\psi_i(x_i) = 0, \psi_i'(x_i) = \delta_{ii}$$





을 만족하면 다음 3차 보간다항식 $H_3(x)$ 은 보간조건 (1)을 만족함을 알 수 있다.

$$H_{\!3}(x) = f(x_0) \; \phi_0(x) + f(x_1) \; \phi_1(x) + f'(x_0) \; \psi_0(x) + f'(x_1) \; \psi_1(x)$$

이제 $\phi_0,\phi_1,\psi_0,\psi_1$ 를 구하자. $\phi_0(x_1)=\phi_0{}'(x_1)=0$ 이므로 x_1 은 ϕ_0 의 중근이므로

$$\phi_0(x) = (cx+d)(x-x_1)^2$$

로 표시된다. 남은 두 조건

$$\begin{split} \phi_0(x_0) &= (cx_0 + d)(x_0 - x_1)^2 = 1 \\ \phi_0{}'(x_0) &= c(x_0 - x_1)^2 + 2(c_0x_0 + d)(x_0 - x_1) = 0 \end{split}$$

로부터 c와 d를 구할 수 있다. 나머지도 같은 방법으로 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\begin{split} \phi_0(x) &= \frac{(x-x_1)^2}{(x_0-x_1)^3} [2(x_0-x) + (x_0-x_1)] \\ \phi_1(x) &= \frac{(x-x_0)^2}{(x_1-x_0)^3} [2(x_1-x) + (x_1-x_0)] \\ \psi_0(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)^2}{(x_0-x_1)^2} \\ \psi_1(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_0)^2}{(x_1-x_0)^2} \end{split}$$

라그랑지형 Hermite 보간다항식

예를 들어, 모든 자연수 $m_i = 2$ 인 경우, Hermite 보간 조건

$$H_{2n+1}^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i), j = 0, 1, i = 0, 1, \dots, n$$

을 만족하는 2n+1차 이하의 다항식 $H_{2n+1}(x)$ 을 구하려면, 우선, 보간조건

$$\phi_i(x_j) = \delta_{ij}, \ \phi_i{}'(x_j) = 0 \ \ \text{for} \ \ 0 \le i \le n, \ \ 0 \le j \le n$$
 $\psi_i(x_j) = 0, \ \psi_i{}'(x_j) = \delta_{ij} \ \ \text{for} \ \ 0 \le i \le n, \ \ 0 \le j \le n$

을 만족하는 기저함수들 ϕ_i, ψ_i 을 구하여

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \phi_i(x) + \sum_{i=0}^{n} f'(x_i) \psi_i(x)$$

와 같이 기저함수들의 일차결합으로 구할 수 있다. 그런데 $\phi_i, \, \psi_i$ 들은

$$\begin{split} \phi_i(x) &= [1-2(x-x_i)\ell_i^{'}(x_i)]\,\ell_i^2(x) \\ \psi_i(x) &= [x-x_i]\,\ell_i^2(x) \end{split}$$

($\ell_i(x)$ 는 위에서 정의하였던 랑그랑지 다항식) 와 같이 구할 수 있다고 한다.

[예제] (라그랑지 형) (숙제) p228 #3(2)

$$f(x) = \sin x, x_0 = 0, x_1 = \frac{\pi}{2}$$
 인 경우에,

$$f(x_0) = f'(x_1) = 0, f(x_1) = f'(x_0) = 1$$

3차 Hermite 보간 다항식은

$$H_3(x) = \phi_1(x) + \psi_0(x) = \frac{x^2}{(\pi/2)^3} \left[2(\frac{\pi}{2} - x) + \frac{\pi}{2} \right] + \frac{x(x - \pi/2)^2}{(\pi/2)^2}$$

이다. 그러므로 $f(\pi/6) = \sin(\pi/6) = 0.5$ 의 근사값은

$$H_3(\pi/6) = \frac{(7+2\pi)}{27} = 0.49197$$

뉴톤형 Hermite 보간다항식

중복이 허락된 마디점 $y_0 \leq y_1 \leq \cdots \leq y_N$ 에 대하여 뉴톤형 Hermite 보간다항식

$$H(x) = \sum_{k=0}^{N} a_k \prod_{i=0}^{k-1} (x - y_i)$$

의 계수 $a_k(0 \le k \le N)$ 는 유일하게 결정되는데, a_k 를 확장된 분할차분이라 하고, 보통의 분할차분처럼

$$a_k = f[y_0, y_1, \cdots, y_k]$$

로 표시한다.

[예제 5.1] (뉴톤형 Hermite 보간다항식)

마디점 x_0, x_0, x_1 에서 함수 f의 보간다항식

$$p(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_0)$$

이 보간조건

$$p(x_0) = f(x_0), p'(x_0) = f'(x_0), p(x_1) = f(x_1)$$

을 만족하는 보간다항식이라면 a_0, a_1, a_2 는 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{split} a_0 &\equiv f[x_0] = f(x_0) \\ a_1 &\equiv f[x_0, x_0] = f'(x_0) \\ a_2 &\equiv f[x_0, x_0, x_1] = \frac{f[x_0, x_1] - f[x_0, x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{f[x_0, x_1] - f'(x_0)}{x_1 - x_0} \end{split}$$

[정리 5.6]

만약 $f \in C^m[a,b]$ 이고 구간 [a,b] 위의 마디점 $y_0 \le y_1 \le \cdots \le y_N$ 에서 중복된 점들이 모두 m개 이하이면 함수 f의 분할차분은 다음과 같이 주어진다.

$$f[y_0,y_1,\;\cdots\;,y_k] = \begin{cases} \frac{f[y_1,y_2,\;\cdots\;,y_k] - f[y_0,y_1,\;\cdots\;,y_{k-1}]}{y_k - y_0} & y_0 \neq y_k \\ \frac{f^{(k)}(y_0)}{k!}, & y_0 = y_k \end{cases}$$

[예제5.12] 마디점 $0, \frac{\pi}{2}$ 에서 함수값과 도함수값을 이용하여 함수 $f(x) = \sin x$ 의 Hermite 보간다항식 $H_3(x)$ 를 분할차분을 이용하여 구하라. (풀이)

마디점을 중복하여
$$y_0=0,\ y_1=0,\ y_2=\frac{\pi}{2},\ y_3=\frac{\pi}{2}$$
 로 놓으면

$$f(0) = 0, f'(0) = 1, f(\frac{\pi}{2}) = 1, f'(\frac{\pi}{2}) = 0$$

이므로

$$\begin{split} f[y_0,y_1] &= f[0,0] = f'(0) = 1 \\ f[y_1,y_2] &= f[0,\frac{\pi}{2}] = \frac{1-0}{\pi/2-0} = \frac{2}{\pi} \\ f[y_2,y_3] &= f[\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}] = f'(\frac{\pi}{2}) = 0 \\ f[y_0,y_1,y_2] &= \frac{2/\pi-1}{\pi/2-0} = \frac{4}{\pi^2} - \frac{2}{\pi} \\ f[y_1,y_2,y_3] &= \frac{0-2/\pi}{\pi/2-0} = -\frac{4}{\pi^2} \\ f[y_0,y_1,y_2,y_3] &= \frac{-4/\pi^2 - (4/\pi^2 - 2/\pi)}{\pi/2-0} = \frac{4}{\pi^2} - \frac{16}{\pi^3} \end{split}$$

이 되어

$$H_{3}(x) = x + \left(\frac{4}{\pi^{2}} - \frac{2}{\pi}\right)x^{2} + \left(\frac{4}{\pi^{2}} - \frac{16}{\pi^{3}}\right)x^{2}\left(x - \frac{\pi}{2}\right)$$

[예제5.13] 다음 조건을 만족하는 Hermite 보간다항식을 분할차분표를 이용하여 구하라.

x	f(x)	f'(x)	f''(x)
$1 \\ 2$	2 6	3 7	8

(풀이)

분할 차분표를 만들자

x	f(x)	f[,]	f[,,]	f[,,,]	f[,,,,]
$\frac{1}{2}$	2 6	$f'(1) = 3$ $f[x_0, x_1] = 4$ $f'(2) = 7$ $f'(2) = 7$	$\frac{1}{3}$ $f''(2)/2!$	2 1 $= 4$	- 1

그러므로 4차 Hermite 보간 다항식은

$$H_4(x) = 2 + 3(x-1) + (x-1)^2 + 2(x-1)^2(x-2) - (x-1)^2(x-2)^2$$

이다 ■

(숙제) p229 #9 $H_4(x)$ 구하기

다항식은 계산하기 편한 함수이지만 차수가 높아지면 진동이 심하고 진동폭이 매우 크게 되어 오차를 줄이지 못한 경우가 있다. 이러한 단점을 해결하는 방법으로 조각다항식을 사용한다.

조각다항식(스플라인)

전체구간을 소구간으로 나누어 각 소구간에서 정의된 저차다항식들이 마디점에서 매끄럽게 연결되도록 조건을 주어 만든 함수를 조각다항식(또는 스플라인(spline))이라고 한다.

k차 스플라인

구간 [a,b]의 마디점 $a=x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 에 대하여, 함수 S(x)가 두 조건

(1)
$$S \in C^{(k-1)}[a,b]$$

(2) S(x)는 각 소구간 $[x_{i-1},x_i]$ 에서 k차 이하의 다항식

을 만족하면 k차 스플라인이라 한다. 즉 이웃하는 소구간의 경계인 마디점에서 양쪽 다항식의 (k-1)계 도함수값이 일치하도록 연결한다.

스플라인 보간법

주어진 함수와 마디점에서 함수값이 일치하는 스플라인 함수를 찾아 보간한다.

[예제 5.14] 다음 함수 S(x)가 3차 스플라인이 되도록 a,b,c,d를 정하라.

$$S(x) = \begin{cases} x^3 + 1 & , x \in [1,2] \\ a(x-2)^3 + b(x-2)^2 + c(x-2) + d, x \in [2,3] \end{cases}$$

(풀이) 각 구간의 함수를

$$S_1(x) = x^3 + 1$$

 $S_2(x) = a(x-2)^3 + b(x-2)^2 + c(x-2) + d$

로 정의하면 도함수들이

$$S_1'(x) = 3x^2, \ S_1''(x) = 6x$$

$$S_2'(x) = 3a(x-2)^2 + 2b(x-2) + c, \ S_2''(x) = 6a(x-2) + 2b$$

이 된다. 마디점 x=2에 3차 스플라인의 조건

$$S_1(2) = S_2(2)$$
 , $S_1^{\prime\prime}(2) = S_2^{\prime\prime}(2)$, $S_1^{\prime\prime\prime}(2) = S_2^{\prime\prime\prime}(2)$

을 적용하면

$$2^{3} + 1 = S_{1}(2) = S_{2}(2) = d$$
$$3 \times 2^{2} = S_{1}'(2) = S_{2}'(2) = c$$
$$6 \times 2 = S_{1}''(2) = S_{2}''(2) = 2b$$

을 얻는다. 그러므로 a는 임의의 수, b=6, c=12, d=9이다.

k차 스플라인 보간식

마디점 $a=x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 에 대하여, k차 스플라인 함수 S(x)를 각소구간 $[x_i,x_{i+1}]$ 에 제한하여 만든 함수를 $S_i(x)$ 라 하고 또 $h_i=x_{i+1}-x_i$ 라 하자. 각 $S_i(x)$ 는 해당 소구간에서 k차 이하의 다항식이므로 계수는 (k+1)개인데, 소구간이 n 개가 있으므로, k차 스플라인 함수 S(x)는 총 n(k+1) 개의 미지수를 가지고 있다. 한편, S(x)는 (n-1) 개의 내부 마디점 x_1,x_2,\cdots,x_{n-1} 에서 조건

 $S \in C^{(k-1)}[a,b]$ 를 만족하므로, 다음 k(n-1)개의 조건

$$S_{i-1}^{(j)}(x_i) = S_i^{(j)}(x_i), 0 \le j \le k-1, \ 1 \le i \le n-1$$

이 만족되어야 한다. 따라서 총 n(k+1)-k(n-1)=n+k개의 조건이 추가되면 S(x)는 유일하게 결정된다. 여기에 $k\geq 1$ 인 경우 (n+1)개의 보간 조건

$$S(x_i) = f(x_i), 0 \le i \le n$$

을 준다면, (n+k)-(n+1)=(k-1)개의 추가 조건을 줄 수 있다.

k=1일 때는 추가 조건 없이(k-1=0) 1차 스플라인 S(x)이 결정 되며, S(x)는 전 구간에서 연속이고, 각 소구간 $[x_i,x_{i+1}]$ 에서 두 점 (x_i,y_i) , (x_{i+1},y_{i+1}) 을 지나는 직선은

$$S_{\!i}(x) = y_i + (x - x_i) \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

로 주어진다. 여기서 $y_i = f(x_i), 0 \le i \le n$ 이다.

k=2 일 때는 추가 조건 (k-1=1) 개이므로 구간의 양끝 중 한쪽만 조건을 주게되어 비대칭적이고, 1차 도함수가 연속이므로 1차 스플라인보다 매끄럽지만, 2차 도함수가 불연속이므로 충분히 매끄럽지는 못하다.

k=3 일 때는 추가 조건 (k-1=2) 개를 추가하면 3 차 스플라인 S(x) 이 결정되는데 자연스럽게 매끈하다. 조건 2 개 양 끝점에 하나씩 주는데, 아래 두 가지 방법이 주로 쓰인다. 4 차 이상 스프라인이라도 장점이 없어, 보통 3 차 스플라인이 많이 사용된다.

고정 3차 스플라인

2개의 추가 조건으로 고정 경계 조건

$$S'(x_0) = f'(x_0), S'(x_n) = f'(x_n)$$

을 준 3차 스플라인이다.

자연 3차 스플라인

2개의 추가 조건으로 자유 경계 조건

$$S''(x_0) = 0, \ S''(x_n) = 0$$

을 준 3차 스플라인이다.

자연 3차 스플라인의 존재성과 유일성

지금부터 $0 \leq \forall i \leq n$ 에 대하여,

$$y_i \equiv f(x_i), \quad z_i \equiv S''(x_i), \quad h_i \equiv x_{i+1} - x_i$$

로 놓자. 2 계도함수S''(x)의 연속성을 사용하면 마디점 x_i 에서

$$S''_{i-1}(x_i) = z_i = S''_{i}(x_i)$$
 , $1 \leq {}^{\forall}i \leq n-1$

가 된다. 여기에서 자유경계조건은

$$z_0 = 0, z_n = 0$$
 --(1)

으로 쓸 수 있다. 각 소구간 $[x_i,x_{i+1}], 0 \leq i \leq n-1$ 에서 스플라인 $S_i(x)$ 는 3차다항식이므로 2계 도함수인 $S''_i(x)$ 은 두 점 $(x_i,z_i), (x_{i+1},z_{i+1})$ 을 지나는 직선

$$S''_{i}(x) = \frac{z_{i+1}}{h_{i}}(x-x_{i}) + \frac{z_{i}}{h_{i}}(x_{i+1}-x)$$

로 주어진다. 이것을 두 번 적분하면 원래 함수 $S_i(x)$, $0 \leq \forall i \leq n-1$ 를 얻는다.

$$S_i(x) = a_i(x-x_i)^3 + b_i(x_{i+1}-x)^3 + c_i(x-x_i) + d_i(x_{i+1}-x)$$
 -- (2)

여기에서 $a_i=z_{i+1}/(6h_i), b_i=z_i/(6h_i)$ 이다. c_i 와 d_i 를 정하기 위하여 함수 S(x)의 연속성과 보간조건

$$\begin{cases} S_i(x_i) = y_i \\ S_i(x_{i+1}) = y_{i+1} \end{cases}, \quad 0 \leq \forall i \leq n-1$$

을 사용하여 방정식 (2)를 풀면

$$c_{i} = \frac{y_{i+1}}{h_{i}} - \frac{h_{i}}{6} z_{i+1}$$

$$d_{i} = \frac{y_{i}}{h_{i}} - \frac{h_{i}}{6} z_{i}$$

와 같이 c_i 와 d_i 를 구할 수 있다. (2)에서 도함수 S'(x)의 연속성

$$S'_{i-1}(x_i) = S'_i(x_i), \ 1 \le {}^{\forall}i \le n-1$$

을 부과하면 (n-1) 개의 미지수 $z_1, z_2, \cdots \cdots z_{n-1}$ 를 갖는 연립일차방정식

$$h_{i-1}z_{i-1} + u_iz_i + h_iz_{i+1} = \beta_i$$
, $1 \le \forall i \le n-1$ --(3)

을 얻는다. 여기서 $u_i=2(h_{i-1}+h_i),\; \beta_i=\omega_i-\omega_{i-1},\; \omega_i=6(y_{i+1}-y_i)/h_i$ 이다.

위 식을 행렬 형태로 쓰면

$$\begin{bmatrix} u_1 & h_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ h_1 & u_2 & h_2 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & h_2 & u_3 & h_3 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & h_{n-3} u_{n-2} h_{n-2} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{n-2} u_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ z_{n-2} \\ z_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \beta_{n-2} \\ \beta_{n-1} \end{bmatrix}$$

와 같이 z_i 들에 대한 연립일차방정식이 된다. 여기에서 h_i 는 양수이므로

$$|u_i| = 2(h_{i-1} + h_i) > \begin{cases} |h_1|, & i = 1 \\ |h_{1-1}| + |h_i|, & 2 \le i \le n-2 \\ |h_{n-2}|, & i = n-1 \end{cases}$$

이 성립한다. 그러므로 행렬의 대각성분의 절대값이 그 행의 나머지 성분들의 절대값의 합보다 크므로 강대각지배행렬이다. 강대각지배행렬은 정칙행렬임이 증명되어 있다. 그러므로 위 행렬 방정식은 유일한 해를 가진다. 따라서 자연 3차스플라인은 오직 하나만 존재한다고 결론지을 수 있다. ■

[예제5.15] 함수
$$f(x) = ((x/2 + \sin x)\sin x + 8)/2$$
 를 마디점 $x_k = kh, 0 \le k \le 10, h = 4\pi/10$

에서 보간하는 자연 3차스프라인 그래프를 그려 보아라. (컴퓨터 숙제) ■

주어진 함수를 보간하는 함수들 중에서 자연 3차스플라인이 가장 매끄럽다. 그 이유는 다음 정리에서 알 수 있다.

[정리5.7] 마디점 $a=x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 에서 함수 $f \in C^2[a,b]$ 를 보간하는 임의의 함수 $g \in C^2[a,b]$ 에 대하여

$$\int_{a}^{b} S^{\prime\prime}(x)^{2} dx \le \int_{a}^{b} g^{\prime\prime}(x)^{2} dx$$

이 성립한다. 여기서 S(x)는 마디점에서 f를 보간하는 자연 3차 스플라인이다. (증명)

만약
$$u(x) = g(x) - S(x)$$
 로 놓으면, $g(x) = S(x) + u(x)$ 로부터

$$g''(x)^2 = [S''(x) + u''(x)]^2$$

$$g''(x)^2 = S''(x)^2 + 2u''(x)S''(x) + u''(x)^2$$

$$\int_{a}^{b} g''(x)^{2} dx = \int_{a}^{b} S''(x)^{2} dx + \int_{a}^{b} u''(x)^{2} dx + 2 \int_{a}^{b} S''(x) u''(x) dx --(1)$$

각 소구간 $[x_i,x_{i+1}]$ 에서 S(x)는 3차 다항식이므로 S'''(x)는 상수(예를들어, c_i)이다. 자연 스플라인 조건 S''(a)=0, S''(b)=0 을 이용하여.

$$\int_{a}^{b} S''(x) u''(x) dx = [S''(x) u'(x)]_{a}^{b} - \int_{a}^{b} S'''(x) u'(x) dx$$

$$= [0-0] - \int_{a}^{b} c_{i} u'(x) dx$$

$$= -\sum_{i=0}^{n-1} c_{i} \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} u'(x) dx$$

$$= -\sum_{i=0}^{n-1} c_{i} [u(x_{i+1}) - u(x_{i})] = 0$$

그러므로 (1)에서

$$\int_{a}^{b} g''(x)^{2} dx = \int_{a}^{b} S''(x)^{2} dx + \int_{a}^{b} u''(x)^{2} dx$$

따라서

$$\int_{a}^{b} S^{\prime\prime}(x)^{2} dx \leq \int_{a}^{b} g^{\prime\prime}(x)^{2} dx$$

(주의) 곡선 y = f(x)의 곡률은

$$\frac{|f''(x)|}{[1+f'(x)^2]^{3/2}}$$

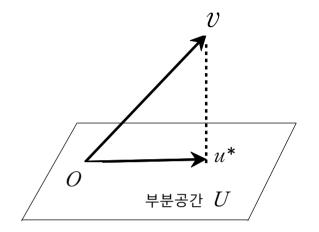
이므로 자연 3차 스플라인은 다른 어떤 곡선보다 진동이 심하지 않다는 사실을 보여준다. 보간법은 주어진 마디점에서 함수값(또는 고계도함수)을 만족하는 쉬운함수(다항식)을 찾는 문제이지만, 함수를 근사하는 다른 방법으로 최적근사문제가 있다.

최적근사문제

벡터(함수) 공간 V안의 벡터 v와 부분공간 U에 대하여,

$$||v - u^*|| \le ||v - u||, \quad \forall u \in U$$

을 만족하는 최적근사벡터 $u^* \in U$ 을 찾아라.



주목 부분공간 U가 유한차원일 때는 u^* 가 항상 존재한다. 일반적으로 u^* 를 찾는 일은 어렵지만, 내적이 정의된 벡터공간에서는 최적근사문제가 선형연립방정식의 근을 구하는 문제로 귀착된다. 부분공간의 기저를 잘 선택하면 선형연립방정식의 계수행렬이 근을 쉽게 구할 수 있는 특별한 형태로 만들 수 있다.

최소제곱 근사문제(연속형 함수문제)

내적공간인 함수공간 C[a,b]에서 내적과 노름이

내적 :
$$< f,g> = \int_a^b f(x) g(x) dx$$

노름 : $||f|| = < f,f>^{1/2} = \left(\int_a^b |f(x)|^2 dx\right)^{1/2}$

로 주어질 때, f와 부분공간 U에 대하여,

$$||f - g^*|| \le ||f - g||, \ \forall g \in U$$

을 만족하는 $g^* \subset U$ 을 찾아라. 여기에서 g^* 를 최소제곱 근사함수라고 한다.

벡터의 직교

두 벡터 u,v는 직교한다. \Leftrightarrow < u,v>=0

(예) 함수 x, x^2 는 공간 C[-1,1] 에서 직교한다.

왜냐하면
$$\langle x, x^2 \rangle = \int_{-1}^{1} (x) (x^2) dx = 0$$
 이기 때문이다.

직교집합

벡터들의 집합 $< u_1, u_2, \cdots, u_n >$ 는 직교집합이다.

정의
$$< u_i, v_j > = 0$$
 , $\forall i \neq \forall j$

정규직교집합

벡터들의 집합 $< u_1, u_2, \cdots, u_n >$ 는 정규직교집합이다.

정의
$$< u_i, v_j > = \delta_{ij}, \forall i, \forall j$$

벡터와 집합의 수직

벡터 v와 집합 W은 직교한다. ($v \perp W$)

정의
$$\Leftrightarrow$$
 $< v, w >= 0$, $\forall w \in W$

[정리5.9] (연속형,이산형 공통)

U가 내적공간 V의 부분공간이고 $v \in V$ 일 때,

($u^* \in U$ 가 v의 최소제곱근사함수) $\iff v - u^* \perp U$

(⇒)

임의의 $u \in U$ 에 대하여, $u^* + u \in U$ 이므로, u^* 가 v의 최소제곱근사함수

이면,

$$||v - u^*||^2 \le ||v - (u^* + u)||^2$$
 --(1)

이 성립한다. 여기에서

$$||v - (u^* + u)||^2 = ||(v - u^*) - u||^2$$

$$= \langle (v - u^*) - u, (v - u^*) - u \rangle$$

$$= ||v - u^*||^2 - 2 \langle v - u^*, u \rangle + ||u||^2 - (2)$$

이므로 by (1),(2),

$$2 < v - u^*, u > \le ||u||^2$$

를 얻는다. 임의의 실수 r에 대하여 $ru \in U$ 이므로, u대신 ru를 대입하면,

$$2r < v - u^*, u > \le r^2 ||u||^2$$

 $2 < v - u^*, u > < r ||u||^2$

이다. 여기에서 $r \rightarrow 0$ 이면 $< v - u^*, u >= 0$, 즉 $v - u^* \perp U$ 이다.

(⇐)

임의의 $u \in U$ 에 대하여, $u - u^* \in U$ 이므로,

$$v - u^* \perp u - u^*$$

 $< v - u^*, u - u^* > = 0$

이므로

$$\begin{split} ||v - u||^2 &= ||(v - u^*) - (u - u^*)||^2 \\ &= ||v - u^*||^2 - 2 < v - u^*, u - u^* > + ||u - u^*||^2 \\ &= ||v - u^*||^2 + ||u - u^*||^2 \\ &\geq ||v - u^*||^2 \quad \blacksquare$$

정규방정식(연속형)

U가 내적공간 V의 부분공간이고 $\left\{u_1,u_2,\cdots,u_n\right\}$ 를 기저로 갖는 경우, 어떤 v $\in V$ 의 U안에 있는 최적 근사함수 u^* $\in U$ 를

$$u^* = \sum_{j=1}^n a_j u_j$$

로 놓자. 그러면 미지수 a_i 들을 구하기 위하여 [정리5.9]의 결과를 이용하자.

$$v - u^* \perp U \iff \langle v - u^*, u_i \rangle = 0, \ \forall i = 1, 2, \cdots, n$$

여기에서 $\forall i=1,2,\cdots,n$ 에 대하여

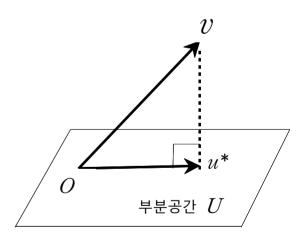
$$< v - u^*, u_i > = 0$$

$$\Leftrightarrow \langle u^*, u_i \rangle = \langle v, u_i \rangle$$

$$\Leftrightarrow < \sum_{i=1}^{n} a_i u_i, u_i > = < v, u_i >$$

$$\Leftrightarrow \Sigma_{j=1}^n a_j < u_j, u_i > = < v, u_i >$$

$$\Leftrightarrow \Sigma_{j=1}^n < u_i, u_j > a_j = < v, u_i > 0$$



 a_i 들에 관한 선형연립방정식

$$\Sigma_{j=1}^{n} < u_{i}, u_{j} > a_{j} = < v, u_{i} >, i = 1, 2, \cdots, n$$

$$Aa = b$$

로 놓을 수 있는데, 이것을 정규방정식(연속형)이라고 한다. 단

$$A = [\langle u_i, u_j \rangle]_{n \times n}$$

$$a = [a_j]_{n \times 1}$$

$$b = [\langle v, u_j \rangle]_{n \times 1}$$

이다. 행렬 A는 대칭이고 정칙임을 보일 수 있다. 따라서 정규방정식은 유일한 해를 갖는다. 따라서 근사함수 u^* 를 유일하게 결정할 수 있다.

[정리 5.10] U가 내적공간 V의 부분공간이고 $\left\{u_{1,}u_{2,},\cdots,u_{n}\right\}$ 를 정규직교기저로 갖는 경우, 어떤 v \in V 의 U안에 있는 최적 근사함수 u^* \in U는

$$u^* = \sum_{i=1}^n \langle v, u_i \rangle u_i$$

와 같이 얻을 수 있다.

(증명)

 $\{u_{1,}u_{2,}\,\cdots,u_{n}\}$ 들 정규직교기저이면 $<u_{i,}u_{j}>=\delta_{ij}$ 이므로 $A=\left[<u_{i,}u_{j}>
ight]_{n\times n}=I_{n\times n}$

가 되므로 정규방정식은 Aa=b의 해 $a=[a_j]$ 는 a=b로 주어진다.

[예제 5.17] 구간 [-1,1]에 정의된 함수 $f(x)=\sin x$ 의 3차다항함수들의 공간 Π_3 내의 최소제곱함수 $p{\in}\Pi_3$ 을 구하여라. 내적은

$$< f,g> = \int_{-1}^{1} f(x) g(x) dx$$

을 사용하라.

(풀이 1)

 $B_1 = \left\{1, x, x^2, x^3 \right\}$ 를 Π_3 의 기저로 사용하면 p를

$$p(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 = \sum_{i=0}^{3} c_i x^i$$

와 같이 표시할 수 있다. p가 f에 가장 가까우면, $(p-f)\perp \Pi_3$ 이다. 즉

$$egin{aligned} orall \, i &= 0, 1, 2, 3, & = 0 \ &< \Sigma_{j=0}^3 \, c_j x^j - f, \, x^i > = 0 \ & \Sigma_{i=0}^3 < x^j, x^i > c_i = < f, \, x^i > \end{aligned}$$

그러므로 정규방정식은

$$\Sigma_{j=0}^{3} < x^{j}, x^{i} > c_{j} = < \sin x, x^{i} >, i = 0, 1, 2, 3$$

이다. 각 내적들을 계산하여 연립선형방정식을 얻는다.

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 2/3 & 0 & 2/5 \\ 2/3 & 0 & 2/5 & 0 \\ 0 & 2/5 & 0 & 2/7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2(\sin 1 - \cos 1) \\ 0 \\ -6\sin 1 + 10\cos 1 \end{bmatrix}$$

이 방정식을 풀면 p(x)의 계수들

$$c_0 = 0$$
, $c_1 = 195/2 \sin 1 - 150 \cos 1$, $c_2 = 0$, $c_3 = -315/2 \sin 1 + 245 \cos 1$

로 구하여 근사해 p(x)를 얻는다.

$$p(x) = (195/2\sin 1 - 150\cos 1)x + (-315/2\sin 1 + 245\cos 1)x^3$$

(풀이 2) 정규직교기저

$$\begin{split} B_2 &= \left\{ p_0(x), p_1(x), p_2(x), p_3(x) \right\} \\ &= \left\{ 1/\sqrt{2} \,,\, \sqrt{3/2} \, x,\, \sqrt{45/8} \, (x^2 - 1/3),\, \sqrt{175/8} \, (x^3 - 3/5 \, x) \right\} \end{split}$$

를 Π_3 의 기저로 사용하면 [정리5.10] 에 따라 p(x)는

$$p(x) = b_0 p_0(x) + b_1 p_1(x) + b_2 p_2(x) + b_3 p_3(x)$$

$$b_i = \langle \sin x, p_i(x) \rangle, i = 0, 1, 2, 3$$

로 주어진다. b_i 들을 계산하면 다음과 같다.

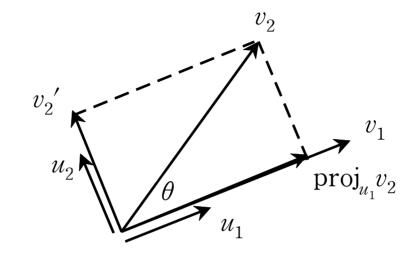
$$b_0 = 0, \ b_1 = \sqrt{6} \, (\sin 1 - \cos 1),$$

$$b_2 = 0, \ b_3 = \sqrt{14} \, (-9 \sin 1 + 14 \cos 1)$$

그리하여 근사함수 p(x)는 다음과 같이 주어진다.

$$p(x) = \sqrt{6} (\sin 1 - \cos 1) \sqrt{3/2} x$$
$$+ \sqrt{14} (-9\sin 1 + 14\cos 1) \sqrt{175/8} (x^3 - 3/5 x)$$

정규직교기저(그램-슈미트 과정)



$$\mathrm{proj}_{u_1} v_2 = (\| v_2 \| \cos \theta \,) \, u_1 = (\| v_2 \| \, \| u_1 \| \cos \theta \,) u_1 = < v_2, u_1 > \, u_1$$

$$v_{1}{'}=v_{1}\text{, }u_{1}=\frac{{v_{1}}{'}}{\|v_{1}{'}\|}$$

$$v_2' = v_2 - < v_2, u_1 > u_1 \text{,} \quad u_2 = \frac{{v_2}'}{\|v_2'\|}$$

$$v_3' = v_3 - < v_3, u_1 > u_1 - < v_3, u_2 > u_2 \quad \text{,} \quad u_3 = \frac{v_3'}{\|v_3'\|}$$

. . . .

[예제5.18] 기저 $B_1 = \left\{1, x, x^2\right\}$ 를 정규직교화 하라. (풀이)

$$\begin{split} v_1' &= v_1 = 1 \\ \|v_1'\| &= \left(\int_{-1}^1 (1)(1) dx\right)^{1/2} = \sqrt{2} \quad , \quad u_1 = \frac{v_1'}{\|v_1'\|} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ v_2' &= v_2 - < v_2, u_1 > u_1 = x - \left(\int_{-1}^1 x \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) dx\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = x \\ \|v_2'\| &= \left(\int_{-1}^1 x \, x \, dx\right)^{1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}} \quad u_2 = \frac{v_2'}{\|v_2\|} = \frac{x}{\sqrt{2/3}} = \sqrt{\frac{3}{2}} \, x \\ v_3' &= v_3 - < v_3, u_1 > u_1 - < v_3, u_2 > u_2 \\ &= x^2 - \left(\int_{-1}^1 x^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) dx\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) - \left(\int_{-1}^1 x^2 \left(\sqrt{\frac{3}{2}} \, x\right) dx\right) \left(\sqrt{\frac{3}{2}} \, x\right) = x^2 - \frac{1}{3} \\ \|v_3'\| &= \left(\int_{-1}^1 (x^2 - \frac{1}{3})^2 dx\right)^{1/2} = \sqrt{\frac{8}{45}} \quad , \quad u_3 = \frac{v_3'}{\|v_2\|} = \frac{(x^2 - 1/3)}{\sqrt{8/45}} = \sqrt{\frac{45}{8}} \, (x^2 - \frac{1}{3}) \end{split}$$

자료맞추기 (예:이산형 최소제곱법)

함수 f(x)를 모르고 관측을 통하여 얻은 $f(x_i)$ 들의 근사값 $y_i(1 \leq i \leq m)$ 만주어졌을 때 적당한 의미에서 x와 y의 관계를 가장 잘 나타내는 근사함수 g(x)를 찾아내는 것을 자료맞추기라고 한다.

이 경우 함수 g(x)는 자료 $\left\{(x_i,y_i)\,|\,1\leq i\leq m\right\}$ 를 정확히 만족하지 않고, g(x)의 유형은 관측이나 경험에 의한 직관에 의하여 주어진다. 보간법에서는 변수들의 개수와 자료(또는 조건)들의 개수가 동일한 것에 비하여, 자료맞추기에서는 g(x)를 결정하기 위하여 찾는 변수들의 개수보다 자료의 개수가 일반적으로 훨씬 많다. 즉 자료맞추기 문제는 과정보체계이다.

이산형 최소제곱 문제

어떤 자료 $\left\{(x_i,y_i)\,|\,1\leq i\leq m\right\}$ 와 일차독립인 어떤 함수들 $\left\{\phi_j\,|\,1\leq j\leq n\right\}$ 이 주어졌을 때 $(m\geq n)$, $^\forall g(x)=z_1\phi_1(x)+\dots+z_n\phi_n(x)$ 에 대하여 $\Sigma_{i=1}^m|g^*\left(x_i\right)-y_i|^2\leq \Sigma_{i=1}^m|g(x_i)-y_i|^2$ 한남대학교 수학과 김상배교수

을 만족하는 함수 $g^*(x) = z_1^* \phi_1(x) + \dots + z_n^* \phi_n(x)$ 를 구하는 것을 (이산형) 최소제곱 문제라 하고, 함수 $g^*(x)$ 를 (이산형) 최소제곱 함수라고 한다.

이 문제는 오차(error)함수

$$E(z) \stackrel{\text{Res}}{=} \Sigma_{i=1}^m [z_1 \phi_1(x_i) + \dots + z_n \phi_n(x_i) - y_i]^2$$

의 최소값을 구하는 문제로 볼 수 있고, E(z)의 최소값을 구하기 위하여는 미분이 0이 되는 사실을 이용한다. 즉 $\nabla E(z)=0$ 을 다시 쓰면

$$\frac{\partial E}{\partial z_k} = 0, \quad 1 \le {}^{\forall} k \le n$$

이다. 그러므로 $1 \leq {}^{\forall} k \leq n$ 에 대하여,

$$\begin{split} & \Sigma_{i=1}^{m} \, 2\big[\,z_{1}\phi_{1}(x_{i}) + \dots + z_{n}\phi_{n}(x_{i}) - y_{i}\,\big]\,\phi_{k}(x_{i}) = \frac{\partial E}{\partial z_{k}} = 0 \\ \Leftrightarrow & \Sigma_{i=1}^{m} \,\left[\,\Sigma_{j=1}^{n}\phi_{j}(x_{i})\,\,z_{j} \, - y_{i}\,\right]\,\phi_{k}(x_{i}) = 0 \\ \Leftrightarrow & \Sigma_{i=1}^{m} \,\phi_{k}(x_{i})\,\big[\,\Sigma_{j=1}^{n}\phi_{j}(x_{i})\,\,z_{j}\,\big] \, = \Sigma_{i=1}^{m}\phi_{k}(x_{i})\,y_{i} \end{split}$$

여기서 $a_{ij}=\phi_{j}(x_{i})$ 로 놓고, 위 방정식을 다시 쓰면

$$\sum_{i=1}^m a_{ik} \left[\sum_{j=1}^n a_{ij} \; z_j \;
ight] \; = \sum_{i=1}^m a_{ik} y_i$$
 , $1 \leq {}^orall k \leq n$

이 되고, 이 선형방정식을 정규방정식(이산형) 이라 한다.

$$A^{T}Az = A^{T}b$$
 --(1)

여기서

$$A = [a_{ij}]_{m \times n}, \quad b = [y_i]_{m \times 1}$$

이산 최소제곱 문제 (벡터적 접근)

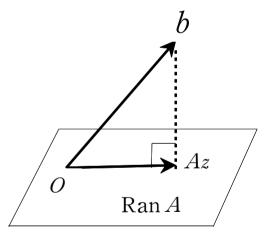
일차독립인 어떤 함수들 $\left\{\phi_i \,\middle|\, 1 \leq i \leq n\right\}$ 이 주어졌을 때, 함수

$$g(x) = z_1 \phi_1(x) + \dots + z_n \phi_n(x)$$

가 만약 자료 $\{(x_i,y_i) \mid 1 \leq i \leq m\}$ 들을 모두 만족한다면,

$$z_1 \phi_1(x_i) + \dots + z_n \phi_n(x_i) = y_i, \ 1 \le {}^{\forall} i \le m$$

이 성립해야 하고, 이것은 선형연립방정식



$$\begin{aligned} Az &= b \\ A &= \left[a_{ij}\right]_{m \times n} \;, \;\; a_{ij} = \phi_j(x_i) \\ b &= \left[y_i\right]_{m \times 1} \end{aligned}$$

로 표시할 수 있다. $m \geq n$ 이면 일반적으로는 해가 존재하지 않는다, 즉,

$$b \not \in \operatorname{Ran} A$$

이다. $\operatorname{Ran} A$ 에서 b 에 가장 가까운 벡터 Az를 찾으면, by [정리5.9] , 그것은

$$(b-Az) \perp \operatorname{Ran} A$$

일 때 성립한다. 즉 (b-Az)가 A의 모든 열벡터와 수직이다. 즉,

$$A_1^T(b-Az) = 0, A_2^T(b-Az) = 0, \dots, A_n^T(b-Az) = 0$$

그러므로

$$A^{T}(b-Az)=0$$

이 성립하고 이것은

$$A^T A z = A^T b$$

라고 하는 정규방정식이 된다.

[예제 5.22] 다음 표의 최소제곱 일차식 $p(x) = z_1 + z_2 x$ 을 구하라.

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	-0.17	1.42	1.56	2.74	4.45	4.59	6.12	6.62	8.30	9.31

(풀이)

위 점들을 지나는 가장 적합한 1차식 $p(x) = z_1 + z_2 x$ 을 구하려면 오차(error) 함수

$$E(z_1,z_2) = \varSigma_{i\,=\,1}^{10} [z_1 + z_2 x_i - y_i\,]^2$$

을 최소화하는 z_1, z_2 를 구해야 한다. 그러므로

$$\frac{\partial E}{\partial z_1} = 0, \frac{\partial E}{\partial z_2} = 0$$

이 되는 z_1, z_2 를 구하자.

$$\begin{split} & \varSigma_{i=1}^{10} \, 2[z_1 + z_2 x_i - y_i] = \frac{\partial E}{\partial z_1} = 0 \\ & \varSigma_{i=1}^{10} \, 2x_i [z_1 + z_2 x_i - y_i] = \frac{\partial E}{\partial z_2} = 0 \end{split}$$

$$\begin{split} & \left\{ \begin{split} & \Sigma_{i=1}^{10} [z_1 + z_2 x_i - y_i] = 0 \\ & \left\{ \Sigma_{i=1}^{10} x [z_1 + z_2 x_i - y_i] = 0 \\ & \left\{ \Sigma_{i=1}^{10} [z_1 + x_i \ z_2] = \Sigma_{i=1}^{10} \ y_i \\ & \Sigma_{i=1}^{10} [x_i z_1 + x_i^2 z_2] = \Sigma_{i=1}^{10} x_i y_i \end{split} \right. \end{split}$$

$$egin{bmatrix} egin{bmatrix} egin{aligned} egin{aligned\\ egin{aligned} egi$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{10} \end{bmatrix}$$

여기에서

$$A^T A z = A^T y$$

$$A^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_{10} \end{bmatrix}, \ y^T = [y_1, y_2, \cdots, y_{10}]$$

한편, 벡터적 접근으로 한다면 1차식 $p(x)=z_1+z_2x$ 이 마디점들 $(x_i,y_i), i=1,2,\cdots,10$ 을 만족한다면,

$$z_1 + z_2 x_i = y_i, i = 1, 2, \dots, 10$$

이어야 한다. 이것을 행렬 형태로 쓰면

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{10} \end{bmatrix}$$

$$Az = y$$

이 된다. 이것은 해가 존재하지 않지만, 정규방정식 $A^TAz = A^Ty$ 은 근사해를 제공한다. 정규방정식의 좌변 행렬은

$$A^{T}A = \begin{bmatrix} 10 & \Sigma_{i=1}^{10} x_{i} \\ \Sigma_{i=1}^{10} x_{i} & \Sigma_{i=1}^{10} x_{i}^{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 & 55 \\ 55 & 385 \end{bmatrix}$$

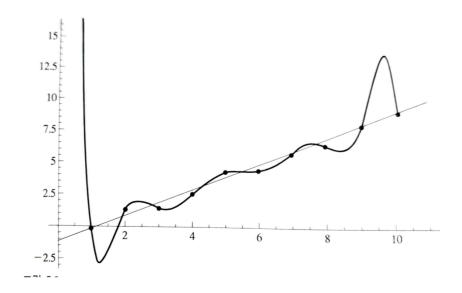
이고 우변 상수벡터는

$$A^{T}y = \begin{bmatrix} \Sigma_{i=1}^{10} a_{i1} y_{i} \\ \Sigma_{i=1}^{10} a_{i2} y_{i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_{i=1}^{10} 1 \times y_{i} \\ \Sigma_{i=1}^{10} x_{i} y_{i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 44.94 \\ 331.7 \end{bmatrix}$$

이다. 정규방정식 $A^TAz = A^Ty$ 를 풀면

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -1.14133 \\ 1.02461 \end{bmatrix}$$

최소제곱 일차식은 F(x) = -1.14133 + 1.02461x 이다.



[예제 5.23] 다음 데이터의 최소제곱근사식을

$$p(x) = z_1 e^x + z_2 \ln x + z_3 \sin x$$

로 구하여라.

x_i	0.24	0.61	0.96	1.32	1.71	2.04	2.39	2.80	3.01	3.38
y_i	1.48	-0.04	-0.51	-1.14	-1.72	-1.71	-1.64	-1.03	-0.65	0.63

(풀이)

기저함수들을
$$\phi_1(x)=e^x$$
, $\phi_2(x)=\ln x$, $\phi_3(x)=\sin x$ 로 놓으면
$$p(x)=z_1\phi_1(x)+z_2\phi_2(x)+z_3\phi_3(x)$$

이 되고, y = p(x)가 위 점들을 만족한다면

$$z_1\phi_1(x_i) + z_2\phi_2(x_i) + z_3\phi_3(x_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, 10$$

이어야 한다. 이것을 행렬 형태로 쓰면

$$\begin{bmatrix} \phi_{1}(x_{1}) & \phi_{2}(x_{1}) & \phi_{3}(x_{1}) \\ \phi_{1}(x_{2}) & \phi_{2}(x_{2}) & \phi_{3}(x_{2}) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{1}(x_{10}) & \phi_{2}(x_{10}) & \phi_{3}(x_{10}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{1} \\ z_{2} \\ z_{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{1} \\ \vdots \\ y_{10} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} e^{x_{1}} \ln x_{1} & \sin x_{1} \\ e^{x_{2}} \ln x_{2} & \sin x_{2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ e^{x_{10}} \ln x_{10} & \sin x_{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{1} \\ z_{2} \\ z_{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{1} \\ \vdots \\ y_{10} \end{bmatrix}$$

$$Az = y$$

이 된다. 이것은 해가 존재하지 않지만, 정규방정식 $A^TAz = A^Ty$ 은 근사해를 제공한다. 정규방정식의 좌변 행렬은

$$A^{T}A = \begin{bmatrix} \Sigma_{i=1}^{10} (e^{x_i})^2 & \Sigma_{i=1}^{10} e^{x_i} \ln x_i & \Sigma_{i=1}^{10} e^{x_i} \sin x_i \\ \Sigma_{i=1}^{10} (\ln x_i) e^{x_i} & \Sigma_{i=1}^{10} (\ln x_i)^2 & \Sigma_{i=1}^{10} \ln x_i \sin x_i \\ \Sigma_{i=1}^{10} (\sin x_i) e^{x_i} & \Sigma_{i=1}^{10} (\sin x_i) \ln x_i & \Sigma_{i=1}^{10} (\sin x_i)^2 \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} 1779.3 & 91.224 & 28.1437 \\ 91.224 & 7.67262 & 1.57713 \\ 28.1437 & 1.57713 & 4.42187 \end{bmatrix}$$

우변 상수벡터는

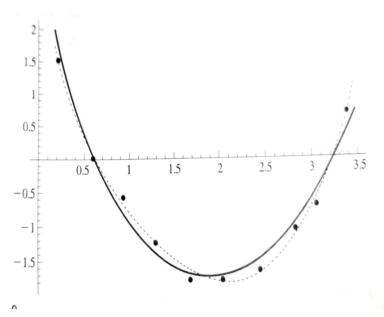
$$A^{T}y = \begin{bmatrix} \Sigma_{i=1}^{10} a_{i1} y_{i} \\ \Sigma_{i=1}^{10} a_{i2} y_{i} \\ \Sigma_{i=1}^{10} a_{i3} y_{i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -55.6917 \\ -6.96838 \\ -1.27225 \end{bmatrix}$$

로 주어진다. 정규방정식 $A^TAz = A^Ty$ 를 풀어 z를 구하면

$$z^{T} = [0.0558935, -1.31225, -1.27225]$$

이므로 최소제곱근사 함수(점선 그래프) 는 다음과 같다.

$$g(x) = 0.056 e^x - (1.3) \ln x - (1.3) \sin x$$



(참고로 실선 그래프는 최소제곱 5차다항함수)

[특별 예제] 다음 데이터에 대한 최적함수 $(x-c_1)^2+(y-c_2)^2=r^2$ 을 구하라.

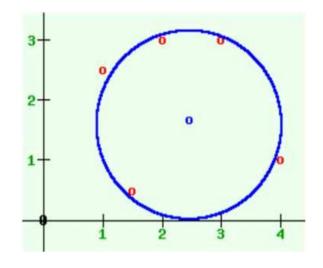
x_i	1.0	1.5	2.0	3.0	4.0
\boldsymbol{y}_i	2.5	0.5	3.0	3.0	1.0

(풀이)

최적의 c_1, c_2, γ 을 구하기 위하여 원의 방정식을 다음과 같이 선형방정식으로 변형한다.

$$(x-c_1)^2 + (y-c_2)^2 = r^2$$

$$2xc_1 + 2yc_2 + r^2 - c_1^2 - c_2^2 = x^2 + y^2$$



여기서 $c_3=r^2-c_1^2-c_2^2$ 로 놓으면, c_1,c_2,c_3 에 대하여 선형인 방정식

$$(2x)c_1 + (2y)c_2 + (1)c_3 = (x^2 + y^2)$$

을 얻는다. 이 방정식이 표에서 주어진 점들을 만족하다면 다음 선형방정식을 얻을 수 있다.

$$\begin{bmatrix} 2 & 5 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \\ 4 & 6 & 1 \\ 6 & 6 & 1 \\ 8 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.25 \\ 2.5 \\ 13.0 \\ 18.0 \\ 17.0 \end{bmatrix}$$

위 방정식에 대응하는 정규방정식

$$\begin{bmatrix} 129 & 89 & 23 \\ 89 & 102 & 20 \\ 23 & 20 & 5 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} 318.00 \\ 258.75 \\ 57.75 \end{bmatrix}$$

을 풀면 계수 c_1, c_2, c_3 을 구하고

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.46 \\ 1.60 \\ -6.17 \end{bmatrix}$$

최적의 원의 방정식은

$$(x-2.46)^2 + (y-1.6)^2 = c_1^2 + c_2^2 - c_3 = 2.46^2 + 1.6^2 - 6.17$$

 $(x-2.46)^2 + (y-1.6)^2 = (1.56)^2$

제6장 수치미분과 수치적분

수치미분식

수치미분은 미분방정식을 수치적으로 푸는데 중요한 역할을 한다. 함수 f(x)의 1계도함수에 대한 수치미분은

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

로써 f'(x)의 근사값을 구할 수 있다. h>0일 때 전향수치미분식(forward difference formula), h<0일 때 후향수치미분식(backward difference formula) 라고 한다.

수치미분식의 오차

테일러의 정리를 사용하면

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(\xi), \quad {}^{\exists} \xi \in (x, x+h)$$

을 얻고 이것을 정리하면

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2}hf''(\zeta), \quad {}^{\exists}\zeta = (x, x+h)$$

여기에서 $-h f''(\zeta)$ 를 절단오차(truncation error)라 하고,

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)$$

로 표시한다. O(h)는 h와 0으로 가는 속도가 같다는 의미이다.

중앙수치미분식

절단오차가 더 정확한 $O(h^2)$ 인 수치미분 공식을 유도해 보자. 테일러 급수로부터

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{1}{2} h^2 f''(x) + \frac{1}{3!} h^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!} h^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \frac{1}{2} h^2 f''(x) - \frac{1}{3!} h^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!} h^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

를 얻고, 첫식에서 두 번째 식을 빼면, 홀수항만 남아,

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{2}{3!}h^3f^{(3)}(x) + \frac{2}{5!}h^5f^{(5)}(x) + \cdots$$

을 얻는다. 여기에서 f'(x)에 대하여 풀면

$$f'(x) = \frac{(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!}f^{(3)}(x) - \frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x) - \cdots$$

$$= \frac{(x+h)-f(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

이 된다. 그리하여 f'(x)의 근사값을 구하는 중앙수치미분식(central difference formula)

$$f'(x) \approx \frac{(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

을 얻는다.

Richardson이 외삽법

절단오차가 더 정확한 $O(h^4)$ 인 수치미분 공식을 유도해 보자. 식(1)로부터

$$f'(x) = \frac{(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!}f^{(3)}(x) - \frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x) - \cdots$$

$$= \frac{(x+h)-f(x-h)}{2h} + a_2h^2 + a_4h^4 + \cdots \qquad ---(2)$$

이다. 여기서 f와 x가 고정되었다고 가정하고, h에 대한 함수

$$\phi(h) = \frac{(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

를 정의하자. 식 (2)로부터

$$\phi(h) = f'(x) - a_2 h^2 - a_4 h^4 - \cdots$$

$$\phi\left(\frac{h}{2}\right) = f'(x) - a_2 \left(\frac{h}{2}\right)^2 - a_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 - \cdots$$

을 얻는다. h^2 항을 소거하기 위하여 $\phi(h)-4\phi\left(\frac{h}{2}\right)$ 를 계산하면

$$\phi(h) - 4\phi\left(\frac{h}{2}\right) = -3f'(x) - \frac{3}{4}a_4h^4 - \cdots$$

이 된다. 여기에서 f'(x)에 대하여 풀면

$$f'(x) = -\frac{1}{3}\phi(h) + \frac{4}{3}\phi\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{3}{4}a_4h^4 + \cdots$$
$$= -\frac{1}{3}\phi(h) + \frac{4}{3}\phi\left(\frac{h}{2}\right) + O(h^4)$$

을 얻는다.

2계도함수의 수치미분식

테일러 급수로부터 얻은 두 식

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{1}{2} h^2 f''(x) + \frac{1}{3!} h^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!} h^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \frac{1}{2} h^2 f''(x) - \frac{1}{3!} h^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!} h^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

의 양변을 더하면,

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + 2\frac{1}{2!}h^2f''(x) + 2\frac{1}{4!}h^4f^{(4)}(x) + \cdots$$

을 얻고, f''(x) 관하여 풀면,

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{2}{4!}h^2f^{(4)}(x) - \dots$$

$$= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

을 얻는다. 그리하여 오차 $O(h^2)$ 를 갖는 2계 도함수 f''(x)의 근사값을 구하는 중앙수치미분식(central difference formula)

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$$

을 얻는다.

(숙제) p297#3 (1),(2)

수치적분의 필요성

정적분 $\int_0^1 e^{x^2} dx$ 는 적분값이 존재하지만, 그 값을 구하는 해석학적인 방법을 찾을 수 없다. 따라서 정적분의 근사값을 구하기 위하여 수치적 방법이 필요하다.

수치적분법

구적 마디점 $a=x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 가 주어졌을 때, 정적분

$$I[f] \equiv \int_{a}^{b} f(x) \, dx$$

의 근사값

$$Q[f] \equiv \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

을 구하는 것을 수치적분법(Numerical Integration) 또는 구적법(Quadrature Rule)이라고 하고,

 $E[f] \equiv I[f] - Q[f]$

을 구적법의 오차라고 한다.

구적법의 종류

미정계수법 : 특정 정밀도가 되도록 가중치를 구하는 일차연립방정식을 푼다.

보간구적법 : 보간함수의 적분값으로 근사값을 주는 경우

Newton-Cotes 구적법 : 마디점들이 동일한 간격인 보간구적법

Gauss-Legendre 구적법 : 마디점들이 Legendre 다항식(정규직교기저함수)의 근.

구적법의 정밀도

구적법 Q[f]의 <mark>정밀도</mark>는 다음 조건을 만족하는 자연수 n이다.

- (1) n 차 이하의 모든 다항식 $p_n(x)$ 에 대하여 $E[p_n]=0$
- (2) $E[p_{n+1}] \neq 0$ 인 (n+1)차 다항식 $p_{n+1}(x)$ 이 존재한다.

뉴톤-코트 (Newton-Cote) 구적법

함수 f(x)의 적분값을, 동일한 간격의 마디점들 위의 f(x) 값들을 보간하는 보간다항식 $p_n(x)$ 의 적분값으로, 근사하는 구적법이다. 즉, $Q[f] = I[p_n]$

닫힌 뉴톤-코트 구적법

적분구간의 양끝점들이 마디점에 포함되어 있는 경우에 닫힌 뉴톤-코트 구적법 이라고 한다. 등간격($h=\frac{b-a}{n}$) 마디점들 $a=x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 에서 함수 f(x)을 보간하는 n차 이하의 다항식 $p_n(x)$ 는 다음과 같다.

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x)$$

위에서 $\ell_i(x)$ 는 n 차 라그랑지 다항식이다. 따라서 닫힌 뉴톤-코드 구적법은

$$Q[f] = I[p_n]$$

$$= \int_a^b p_n(x) dx$$

$$= \int_a^b \left[\sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x) \right] dx$$

$$= \sum_{i=0}^n \left[\int_a^b \ell_i(x) dx \right] f(x_i)$$

$$= \sum_{i=0}^n w_i f_i$$

위에서 $f_i=f(x_i)$, $w_i=\int_a^b\ell_i(x)\,dx$ 이다.

닫힌 뉴톤-코트 구적법의 종류

n = 1, 2, 3, 4 에 대한 뉴톤-코트 구적법은 다음과 같다.

(1) (n=1) 사다리꼴 공식

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{1}{2}h(f_{0} + f_{1}), \quad h = b - a$$

(2) (n=2) Simpson 공식

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{1}{3}h(f_0 + 4f_1 + f_2), \quad h = \frac{b - a}{2}$$

(3) (n = 3) Simpson 3/8 공식

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{3}{8}h(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3), \quad h = \frac{b - a}{3}$$

(4) (n = 4) Boole 공식

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{2}{45}h(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4), \quad h = \frac{b-a}{4}$$

[예제 6.1] 적분 $\int_0^1 (1+e^{-x}\sin(4x))dx$ 의 근사값을 위 4가지 구적법을 이용하여 구하라.

(풀이) $f(x) = (1 + e^{-x}\sin(4x))$ 라 하자.

(1)
$$(n = 1)$$

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{2}(f(0) + f(1))$$
$$= \frac{1}{2}(1.00000 + 0.72159) = 0.86079$$

(2)
$$(n = 2)$$

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{3} \frac{1}{2} (f(0) + 4f(\frac{1}{2}) + f(1))$$
$$= \frac{1}{3} (1.00000 + 4 \times 1.55152 + 0.72159)$$
$$= 1.32128$$

(3)
$$(n = 3)$$
 $\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{3}{8} \frac{1}{3} (f(0) + 3f(\frac{1}{3}) + 3f(\frac{2}{3}) + f(1))$
= 1.31440

(4)
$$(n = 4)$$
 $\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{2}{45} \frac{1}{4} [7f(0) + 32f(\frac{1}{4}) + 12f(\frac{1}{2}) + 32f(\frac{3}{4}) + 7f(1)] = 1.30859$

한편 $\int_0^1 f(x)dx$ 의 참값은 $1.30825060 \cdots$ 이므로 n=4을 사용하는

Boole 공식의 근사값이 가장 정확함을 알 수 있다. ■

[숙제] Boole공식의 값을 컴퓨터로 계산하여라.

[예제 6.2] Simpson 3/8 공식에 대한 정밀도를 계산하라. (풀이)

$$[a,b] = [0,3]$$
로 두자. Simpson 3/8 공식

$$Q[f] = \frac{3}{8}h(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$$

으로부터,

$$I[1] = 3 = \frac{3}{8}(1+3+3+1) = Q[1]$$

$$I[x] = \frac{9}{2} = \frac{3}{8}(0+3+6+3) = Q[x]$$

$$I[x^2] = 9 = \frac{3}{8}(0+3+12+9) = Q[x^2]$$

$$I[x^3] = \frac{81}{4} = \frac{3}{8}(0+3+24+27) = Q[x^3]$$

$$I[x^4] = \frac{243}{5} \neq \frac{99}{2} = \frac{3}{8}(0+3+48+81) = Q[x^4]$$

따라서 Simpson 3/8 공식의 정밀도는 3이다. ■

보간구적법

마디점들 $a=x_0< x_1< \cdots < x_n=b$ 이 임의로 주어졌을 때, 함수 f(x)를 보간하는 n 차 이하 다항식 $p_n(x)$ 의 적분값으로 f(x)의 적분값을 근사하는 방법. 즉 $Q[f]=I[p_n]$

보간구적법의 정밀도 $(\geq n)$

마디점들 $a=x_0< x_1< \cdots < x_n=b$ 에서 함수 f(x)를 보간하는 n 차 이하 다항식 이 $p_n(x)$ 이면 [정리 5.2]에서

$$f(x) = p_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} W(x), \quad W(x) \equiv \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

로 주어졌다. 그러므로 구적법의 오차는

$$E[f] = I[f] - Q[f]$$

$$= I[f] - I[p_n]$$

$$= I[f - p_n]$$

그러므로

$$E[f] = \int_{a}^{b} \frac{f^{(n+1)}(\xi_{x})}{(n+1)!} W(x) dx$$

여기에서 원래 함수 f(x)가 n차 이하 다항식이라면 $f^{(n+1)}(x)\equiv 0$ 이므로 E[f]=0 이다. 그러므로 Q[f]=I[f], 즉 구적법의 정밀도가 적어도 n이 된다.

[예제 6.3] (미정계수법)

임의의 마디점들 $a=x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 주어졌을 때, 다음 구적법 Q[f]의 정밀도가 n이 되도록 가중치 w_0, w_1, \cdots, w_n 의 값을 구하라.

$$\int_a^b f(x) dx = I[f] \approx Q[f] = \sum_{j=0}^n w_j f(x_j)$$

(풀이) 정밀도가 n이 되기 위하여서는

$$Q[x^k] = I[x^k], \quad k = 0, 1, \dots, n$$

이므로 미지수를 w_0, w_1, \dots, w_n 로 갖는 일차연립방정식

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & x_2^n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I[1] \\ I[x] \\ I[x^2] \\ \vdots \\ I[x^n] \end{bmatrix}$$

을 얻을 수 있다. 이 연립방정식을 풀면 가중치를 구할 수 있다. ■

복합수치적분법

구적법에서 마디점을 늘리면 정밀도는 높아지지만, 구적법 만들기는 더 어려워진다. 따라서 다음과 같이 구간을 나누어, 소구간에 구적법을 적용하는 복합수치적분법이 흔히 사용된다.

- (1) 구간 [a,b]를 $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ 로 소구간으로 분할한다.
- (2) 각 소구간 $[x_{i-1}, x_i]$ 에 비교적 낮은 정밀도의 구적법을 적용하여 근사값을 구한다.

(3) 각 소구간에서 구한 근사값을 합한다.

복합사다리꼴 공식

우선 $w(x)\equiv 1$ 을 사용한다. 구간 [a,b]를 n 등분한 소구간 $[x_{i-1},x_i]$ 에 사다리꼴공식을 적용하면

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \frac{1}{2}h[f(x_{i-1}) + f(x_i)]$$

이다. 위에서 h=(b-a)/n 이다. 각 소구간의 적분값을 합하면

$$\begin{split} \int_{a}^{b} f(x)dx &= \Sigma_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} f(x)dx \\ &= \Sigma_{i=1}^{n} \frac{1}{2} h [f(x_{i-1}) + f(x_{i})] \\ &= \frac{1}{2} h [f(x_{0}) + 2f(x_{1}) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_{n})] \\ &= \frac{1}{2} h [f(a) + f(b)] + h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{i}) &\equiv T(f, h) \end{split}$$

한남대학교 수학과 김상배교수

복합 Simpson공식

우선 $w(x)\equiv 1$ 을 사용한다. 구간 [a,b]를 2n 등분한 소구간 $[x_{2i-2},x_{2i}]$ 에 Simpson 공식을 적용하면

$$\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)dx = \frac{1}{3}h[f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})]$$

이다. 위에서 h = (b-a)/(2n) 이다. 각 소구간의 적분값을 합하면

$$\begin{split} \int_{a}^{b} f(x)dx &= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)dx \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{3} h[f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})] \\ &= \frac{1}{3} h[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\ &= \frac{1}{3} h[f(a) + f(b)] + \frac{2}{3} h\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + \frac{4}{3} h\sum_{i=1}^{n} f(x_{2i-1}) &\equiv S(f, h) \end{split}$$

[예제 6.4] $f(x)=2+\sin(2\sqrt{x})$ 일 때, $\int_1^{\circ}f(x)dx$ 의 근사값을 복합사리꼴 공식과 복합 Simpson 공식을 이용하여 각각 구하여라. 구간은 10 등분하라. (풀이)

(1) 복합사다리꼴
$$(n = 10, h = \frac{6-1}{10} = \frac{1}{2})$$

$$T(f,1/2) = \frac{1}{2}h[f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{2}[f(1) + 2f(1.5) + \cdots + 2f(5.5) + f(6)]$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{2}[f(1) + f(6)] + \frac{1}{2}[f(1.5) + \cdots + f(5.5)]$$

$$\approx 8.19385457$$

(2) 복합Simpson (
$$n=5$$
, $h=\frac{6-1}{2\times 5}=\frac{1}{2}$)

$$S(f,1/2) = \frac{1}{3}h[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

$$= \frac{1}{3}\frac{1}{2}[f(1) + 4f(1.5) + 2f(2) + \cdots + 4f(5.5) + f(6)]$$

$$= \frac{1}{3}\frac{1}{2}[f(1) + f(6)] + \frac{1}{3}\frac{2}{2}[f(2) + f(3) + \cdots + f(5)]$$

$$+ \frac{1}{3}\frac{4}{2}[f(1.5) + f(2.5) + \cdots + f(5.5)]$$

$$\approx 8.18301550$$

[숙제] p312 #1 (4) 복합사다리꼴(n=10),

(1) 컴퓨터숙제 (2) 지필숙제 Wolframalpha에서 적분값을 계산하여 비교

정밀도 n의 보간구적법(복습)

(n+1) 개의 마디점 x_0, x_1, \cdots, x_n 이 주어지면 아래와 같은 보간다항식을 사용하는 보간구적법은 정밀도가 최소한 n 임을 보였다.

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) \, --- \, (1)$$

with
$$w_i = \int_a^b \prod_{(j=0,j\neq i)}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j} dx$$

Gauss구적법 (정밀도 (2n+1))

함수 q(x)가 영함수가 아닌 n차 이하의 모든 다항식에 직교하는 함수라면, q(x)의 근들을 마디점 x_0,x_1,\cdots,x_n 이 주는 구적법을 Gauss구적법이다. 가우스구적법의 정밀도는 다음 정리에서 증명하는 것처럼 (2n+1)가 된다.

[정리 6.6] 정밀도 (2n+1)의 Gauss구적법

마디점들 x_0, x_1, \cdots, x_n 이, 영함수가 아닌 n차 이하의 모든 다항식에 직교하는, (n+1)차 다항함수 q(x)의 근들로 주어지면, 이 구적법 (1)은 정밀도(2n+1)가 된다.

(증명)

함수 f(x)가 (2n+1)차 이하 다항식이라면 f(x)=p(x)q(x)+r(x)를 만족하는 n차 이하 다항식 p(x)와 r(x)가 존재한다. 그런데, $q(x_i)=0$, $\forall i=0,1,\cdots,n$ 이므로 $f(x_i)=r(x_i)$ 가 성립한다. 한편 p(x)의 차수는 n이고, q(x)는 n차 이하 다항식에 직교하므로

$$0 = \langle p, q \rangle = \int_a^b p(x) q(x) dx$$

그러므로

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b [p(x)q(x) + r(x)] dx$$

$$=\int_a^b r(x)\,dx$$
 $=\sum_{i=0}^n w_i\,r(x_i)$ since $r(x)$ 의 차수가 n , 정밀도 n $=\sum_{i=0}^n w_i\,f(x_i)$ since $f(x_i)=r(x_i)$

따라서 구적법 (1)은 정밀도 (2n+1)을 갖는다.

[정리 6.7] 내적 $< f,g> = \int_a^b f(x)g(x)dx$ 이 주어졌을 때, n차 이하의 모든 다항식과 직교하는 (n+1)차 다항식 q(x)는 구간 (a,b)에서 (n+1)개의 서로 다른 실근을 갖는다.

(증명)

먼저 <q,1>=0이므로

$$\int_{a}^{b} q(x)(1) dx = 0$$

q(x)는 구간 (a,b)에서 적어도 한번 부호가 변한다. 왜냐하면 q(x)가 한가지부호만 가지면 적분값이 영이 나올 수가 없기 때문이다. 이제 q(x)가 구간(a,b)에서 $k(\leq n)$ 번 부호가 변한다고 가정하자. 그러면 어떤 k개의 마디점

$$a = t_0 < t_1 < \cdots < t_k < b = t_{k+1}$$

들이 존재하여, q(x)가 각 마디점을 전후로 부호가 변한다고 하자. 여기서

$$p(x) \equiv (x - t_1)(x - t_2) \cdots (x - t_k)$$

로 정의하면 곱한 함수 p(x)q(x)는 항상 양수값을 갖든지, 항상 음수값을 갖게된다. 그러므로 $< p,q> = \int_a^b p(x)\,q(x)\,dx \neq 0$

이다. 이것은 k차 다항식 p(x)가 q(x)와 직교한다는 가정에 어긋난다. 그러므로 q(x)가 구간(a,b)에서 적어도 (n+1)번 부호가 변한다. 한편 q(x)는 (n+1)차 다항식이므로 부호가 (n+1)번 보다 더 많이 변할 수는 없다. 그러므로 연속인 q(x)는 구간(a,b)에서 (n+1)개의 실근을 갖는다.

Gauss-Legendre 구적법

다항식 $\left\{1,x,x^2,\ \cdots\ \right\}$ 을 그램-슈미트 방법으로 정규 직교화 한 기저 $\left\{q_0(x),q_1(x),q_2(x),\ \cdots\ \right\}$

의 원소를 Legendre다항식이라고 한다. 이 Legendre다항식의 근을 마디점으로 사용하는 Gauss구적법을 특히 Gauss-Legendre 구적법이라고 한다.

[예제 6.7] 다음 Gauss구적법의 마디점 x_0, x_1 과 가중치 w_0, w_1 를 구하여라.

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

(풀이)

그램-슈미트 방법을 써서 $\left\{1,x,x^2
ight\}$ 에 대응하는 직교다항식들을 구하면,

$$q_0(x) = 1, \ q_1(x) = x, \ q_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$

들이다. 따라서 $q_2(x)=0$ 의 근

$$x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \ x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

이 구적법의 마디점들이 된다. $q_2(x)$ 는 [정리6.6]에서 (n+1)차 다항식이므로 n=1인 경우라서 정밀도가 (2n+1)=3이 된다. 즉 3차 다항식까지는 구적법이 참값을 준다. 이 사실을 이용하여 w_0,w_1 을 구해 보자.

$$\int_{-1}^{1} 1 \, dx = w_0 1 + w_1 1$$

$$\int_{-1}^{1} x \, dx = w_0 x_0 + w_1 x_1$$

이므로

$$\begin{split} 2 &= w_0 + w_1 \\ 0 &= w_0 (-1/\sqrt{3}\,) + w_1 (1/\sqrt{3}\,) \end{split}$$

이 되어 $w_0 = w_1 = 1$ 을 얻는다.

적분구간 [a,b]에서 Gauss구적법 계산하기

변수변환

$$t = \frac{x-1}{-1-1}a + \frac{x+1}{1+1}b , (-1 \le x \le 1)$$
$$= \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x$$

를 사용하면

$$\begin{split} \int_{a}^{b} f(t)dt &= \int_{-1}^{1} f(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x) \frac{b-a}{2} dx \\ &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x) dx \\ &\approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^{m} w_{i} f(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_{i}) \end{split}$$

와 같이 [a,b] 위의 적분을 [-1,1] 위의 적분으로 대치하고 (m+1) 개의 마디점을 사용하는 Gauss-Legendre 구적법을 적용할 수 있다.

한남대학교 수학과 김상배교수

[예제] 2점 가우스 구적법을 사용하여 $\int_1^5 (-x^3+3x)dx$ 의 값을 구하여라.

(풀이)
$$f(x) = -x^3 + 3x$$
 일 때

$$\begin{split} \int_{1}^{5} f(x)dx &= \frac{5-1}{2} \int_{-1}^{1} f(\frac{5+1}{2} + \frac{5-1}{2}x)dx \\ &= 2 \int_{-1}^{1} f(2x+3)dx \\ &\approx 2 \left[w_{0} f(2\frac{-1}{\sqrt{3}} + 3) + w_{1} f(2\frac{1}{\sqrt{3}} + 3) \right] \\ &= 2 \left[f(1.8453) + f(4.1547) \right] \\ &= 2 \left[-0.7476 - 59.2524 \right] \\ &= -120 \end{split}$$

- 109 -

복합 Gauss-Legendre 구적법

적분 구간 [a,b]를 n 등분 한다음 각 소구간에 Gauss-Legendre 구적법을 적용하면 복합 Gauss-Legendre 구적법을 만들 수 있다.

$$\begin{split} \int_a^b f(t)dt &\approx \varSigma_{j=1}^n \bigg(\frac{t_j - t_{j-1}}{2} \varSigma_{i=0}^m \ w_i f(\frac{t_j + t_{j-1}}{2} + \frac{t_j - t_{j-1}}{2} x_i \,) \bigg) \\ &= \frac{h}{2} \varSigma_{j=1}^n \bigg(\varSigma_{i=0}^m \ w_i f(\frac{t_j + t_{j-1}}{2} + \frac{h}{2} x_i \,) \bigg) \end{split}$$
 여기서 $h = \frac{b-a}{n}, \ t_j = a+j \ h, \ (0 \leq j \leq n)$

[숙제] p322 #7 (2) Gauss-Legendre구적법, 마디점 2개인 경우 WolframAlpha 의 값과 비교

#9 (1) 복합 Gauss-Legendre구적법, 마디점 2개인 경우, 10등분 WolframAlpha 의 값과 비교

제7장 미분방정식의 수치해법

초기값 문제

다음 미분방정식과 초기조건

$$y' = f(x,y), x \in [a,b]$$

 $y(a) = \alpha$

을 초기값 문제라고 한다.

[예제] 다음 초기값 문제를 풀어라.

$$y'(x) = \sin(x), \ y(\frac{\pi}{3}) = 2$$

(풀이) 미분방정식의 양변을 적분하면,

$$y(x) = -\cos(x) + c$$

을 얻는다. 적분 상수 c를 정하기 위하여 초기조건을 사용하면

$$2 = -\cos(\pi/3) + c$$

그러므로 c=2.5 이고, 구하는 해는

$$y(x) = 2.5 - \cos(x)$$

이다.

오일러 방법

구간
$$[a,b]$$
를 n 등분하여 $h=\frac{b-a}{n}$ 이라 하고, 마디점들을 $x_i=a+i\,h,\;i=0,1,\;\cdots\;,n$

로 놓고, $y_i=y(x_i)$ 라고 놓자. 도함수 y'에 대하여 전향수치미분식을 사용하면 초기값문제는 $y_0=lpha$

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i, y_i), i = 0, 1, \dots, n$$

와 같이 수치적을 풀 수 있다. 다음 방법을 오일러방법이라고 한다.

$$y_0 = \alpha$$

 $y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i), i = 0, 1, \dots, n$

[예제] 다음 초기치문제의 정확한 해가 $y = \frac{1}{1 + x^2}$ 임을 보이고, 오일러 방법

(n=10)을 이용하여 초기값문제

$$y' = -2xy^2, 0 \le x \le 2$$

 $y(0) = 1$

의 근사값을 구하고, 정확한 해와 비교하여라.

[숙제]
$$y' = \frac{1}{x^2} - \frac{y}{x} - y^2$$
, $1 \le x \le 2$ $y(1) = -1$ 참해 : $y = -\frac{1}{x}$

Taylor 방법

초기값 문제

$$y' = f(x,y), x \in [a,b]$$

 $y(a) = \alpha$

가 유일한 해를 갖고 $y^{(n+1)}(x)$ 가 존재하고 연속임을 가정하자. 구간 [a,b]를 n 등분하여 $h=\frac{b-a}{n}$ 이라 하고, 마디점들을

$$x_i = a + ih$$
, $i = 0, 1, \dots, n$

로 놓자. Taylor 정리에 의하여, $\exists \, \xi \in (x_i, x_{i+1})$:

$$\begin{split} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + h \, y'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \, \cdots \\ &+ \frac{h^n}{n!} y^{(n)}(x_i) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} y^{(n+1)}(\xi) \end{split}$$

이다. Taylor 방법은 위에서 마지막 항을 잘라버리고,

$$y(x_{i+1}) pprox y(x_i) + h \, y'(x_i) + rac{h^2}{2!} y''(x_i) + \; \cdots \; + rac{h^n}{n!} y^{(n)}(x_i)$$
 한남대학교 수학과 김상배교수

을 사용한다. 여기에서 $y'(x_i), y''(x_i), \cdots, y^{(n)}(x_i)$ 는 y'=f(x,y)를 이용하여 다음과 같이 구할 수 있다.

$$y'(x_i) = f(x_i, y(x_i))$$
$$y''(x_i) = \frac{d}{dx} f(x, y) \Big|_{(x_i, y(x_i))}$$

.

$$y^{(n)}(x_i) = \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} f(x,y) \Big|_{(x_i,y(x_i))}$$

[예제] 초기값문제

$$y' = x + y, \ y(0) = 1$$

에 h=0.1와 3차 Taylor 방법을 이용하여 y(0.1)과 y(0,2)의 근사값을 구하여라.

(풀이)
$$y' = x + y$$

$$\Rightarrow y'' = \frac{d}{dx}(x+y) = 1+y' = 1+x+y$$

$$\Rightarrow y''' = \frac{d}{dx}(1+x+y) = 1+y' = 1+x+y$$

$$\begin{split} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + h \, y'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) \\ &= y(x_i) + h \, (x_i + y_i) + \frac{h^2}{2} (1 + x_i + y_i) + \frac{h^3}{6} (1 + x_i + y_i) \end{split}$$

$$x_0 = 0, \ y(x_0) = 1$$

$$\Rightarrow y_1 = y(x_0) + h(x_0 + y_0) + \frac{h^2}{2}(1 + x_0 + y_0) + \frac{h^3}{6}(1 + x_0 + y_0)$$

$$= 1 + 0.1(0 + 1) + \frac{(0.1)^2}{2}(1 + 0 + 1) + \frac{(0.1)^3}{6}(1 + 0 + 1)$$

$$\approx 0.11033$$

$$\Rightarrow y_2 = y(x_1) + h(x_1 + y_1) + \frac{h^2}{2}(1 + x_1 + y_1) + \frac{h^3}{6}(1 + x_1 + y_1)$$

$$= y_1 + 0.1(0.1 + y_1) + \frac{(0.1)^2}{2}(1 + 0.1 + y_1) + \frac{(0.1)^3}{6}(1 + 0.1 + y_1)$$

$$= 1.24278 \qquad \blacksquare$$

[숙제] $y'=x^2$, y(0)=1, h=0.02 5차 Taylor 방법으로 풀어라.

2차 Runge-Kutta법

초기값 문제

$$y' = f(x,y), x \in [a,b]$$

 $y(a) = \alpha$

가 유일한 해를 갖고 연속임을 가정하자. 구간 [a,b]를 n 등분하여 $h=rac{b-a}{n}$

이라 하고, 마디점들을

$$x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, n$$

로 놓자. 2차 Runge-Kutta법

$$\begin{split} k_1 &= h \, f(x_i, y_i) \\ k_2 &= h \, f(x_i + \alpha \, h, \, y_i + \beta k_1) \\ y_{i+1} &= y_i + \alpha \, k_1 + b \, k_2 \, \text{ -- (*)} \end{split}$$

을 구성하는데, (*)를 Taylor급수로 전개하였을 때와 비슷하도록, 실수 α, β, a, b 를 정하여 보자. k_1, k_2 를 (*)에 대입하고 Taylor급수를 전개하면,

$$y_{i+1} = y_i + ah f(x_i, y_i) + bh f(x_i + \alpha h, y_i + \beta k_1)$$

여기서

$$\begin{split} f(x_i + \alpha h, \ y_i + \beta k_1) &= f(x_i, y_i) + (\alpha h f_x + \beta k_1 f_y) \\ &+ \left(\frac{(\alpha h)^2}{2!} f_{xx} + \frac{2(\alpha h \beta k_1)}{2!} f_{xy} + \frac{(\beta k_1)^2}{2!} f_{yy} \right) + O(h^3) \end{split}$$

이므로

$$\begin{split} y_{i+1} &= y_i + ah \, f + bh \, \left[\, f + \left(\, \alpha h f_x + \beta \, (hf) \, f_y \, \right) \right. \\ & + \left(\frac{\alpha^2 h^2}{2} f_{xx} + \alpha h \beta \, (hf) f_{xy} + \frac{\beta^2 \, (hf)^2}{2} f_{yy} \right) + O(h^3) \, \right] \\ &= y_i + h \, (a+b) \, f + h^2 \, (b\alpha f_x + b\beta f f_y) \\ & + h^3 b \left(\frac{\alpha^2}{2} f_{xx} + \alpha \beta f f_{xy} + \frac{\beta^2}{2} f^2 f_{yy} \right) + O(h^4) \, \text{---(**)} \end{split}$$

한편, $y(x_{i+1})$ 를 x_n 근방에서 Taylor급수를 전개하면,

$$y(x_{n+1}) = y(x_i) + h y'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + O(h^4)$$

여기에서

$$y' = f(x,y)$$

$$y'' = \frac{d}{dx}f(x,y) = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{dx}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} = f_x + f_y f$$

그러므로 $y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf + \frac{h^2}{2} (f_x + ff_x) + \frac{h^3}{6} (f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_xf_y + f_y^2f) + O(h^4) ---(***)$

이 된다. 식 (**)과 식(***)을 비교하면,

$$a+b=1$$
$$b\alpha = b\beta = 1/2$$

이 된다. 위 식을 만족하는 a,b,α,β 는 여러 가지가 있으나,

$$a = b = 1/2$$
, $\alpha = \beta = 1$

을 택하여 2차 Runge-Kutta법

$$\begin{aligned} k_1 &= h \, f(x_i, y_i) \\ k_2 &= h \, f(x_i + h, y_i + k_1) \\ y_{i+1} &= y_i + (k_1 + k_2)/2 \end{aligned}$$

을 얻는다.

4차 Runge-Kutta 법

가장 많이 사용하는 4차 Rung-Kutta법은 오차가 $O(\hbar^5)$ 인데, 유도하려면 매우

복잡한데 결론적으로 4차 Runge-Kutta법은 다음과 같다.

$$\begin{split} k_1 &= h \, f(x_i, y_i) \\ k_2 &= h \, f(x_i + h/2, \, y_i + k_1/2) \\ k_3 &= h \, f(x_i + h/2, \, y_i + k_2/2) \\ k_3 &= h \, f(x_i + h, \, y_i + k_3) \\ y_{i+1} &= y_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6 \end{split}$$

[예제] 초기값문제
$$y'=x-y,\ 0\leq x\leq 1$$
 $y(0)=1$

에 대하여 2차 Rung-Kutta방법 (n=10) 이용하여 구하고, 참해 $y=2e^{-x}+x-1$ 와 비교하여라.

[숙제] 4차 Rung-Kutta방법

경계값 문제

다음 미분방정식과 초기조건

$$y'' = f(x,y,y'), x \in [a,b]$$

 $y(a) = \alpha, y(b) = \beta$

을 경계값 문제라고 한다.

유한차분법

구간
$$[a,b]$$
를 n 등분하여 $h=\frac{b-a}{n}$ 이라 하고, 마디점들을 $x_i=a+i\,h,\;i=0,1,\;\cdots\;,n$

로 놓고, $y_i=y(x_i)$ 라고 놓자. 도함수 y'와 2계도함수 y''를 각각

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}$$
$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2}$$

로 근사하면, 미분방정식은 차분방정식이 된다.

$$\frac{y_{i+1}-2y_i+y_{i-1}}{h^2}=f(x_i,y_i,\frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2h}) \text{ , } i=1,2,\cdots,n-1$$

경계조건 $y_0 = \alpha, y_n = \beta$ 를 이용하면, 일반적으로는 (n-1)개의 비선형 연립방정식이 된다. 하지만, f(x,y,y')이 선형(y와 y'에 대하여 1차이고, 그 계수들이 x만의 함수인 경우)으로 주어지면 그 차분방정식이 선형연립방정식이 되어 Gauss소거법이나 Jacobi 반복법 등으로 근사해를 구할 수 있다.

[예제] 경계값 문제

$$y'' - xy = x^2$$

 $y(1) = 2, y(2) = 1$

의 근사값을 유한차분법((n=4)으로 구하여라.

(풀이)

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{2-1}{4} = 0.25$$
 of Ch.

마디점 $\left\{x_0,x_1,x_2,x_3,x_4\right\}=\left\{1.0,1.25,1.50,1.75,2.0\right\}$ 에 대하여 차분방정식을 구하면

$$\begin{split} \frac{y_0 - 2y_1 + y_2}{h^2} - 1.25 \, y_1 &= 1.25^2 \\ \frac{y_1 - 2y_2 + y_2}{h^2} - 1.50 \, y_2 &= 1.50^2 \\ \frac{y_2 - 2y_3 + y_4}{h^2} - 1.75 \, y_3 &= 1.75^2 \end{split}$$

정리하면

$$\begin{aligned} y_0 - (2 + 1.25 h^2) y_1 + y_2 &= 1.25^2 h^2 \\ y_1 - (2 + 1.50 h^2) y_2 + y_2 &= 1.50^2 h^2 \\ y_2 - (2 + 1.75 h^2) y_3 + y_4 &= 1.75^2 h^2 \end{aligned}$$

이되고, 행렬 형식으로 쓰면

$$\begin{bmatrix} -2 - 1.25h^2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 - 1.50h^2 & 1 \\ 0 & 1 & -2 - 1.75h^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.25^2h^2 - y_0 \\ 1.50^2h^2 \\ 1.75^2h^2 - y_4 \end{bmatrix}$$

이 된다. 위 선형연립방정식을 Gauss소거법으로 풀면

$$y_1 = 1.4049, y_2 = 1.0173, y_3 = 0.8656$$

을 얻는다. ■

[숙제] 경계값 문제

$$y'' - xy = 1, \ 0 < x < 1$$

 $y(0) = 1, \ y(1) = 2$

의 근사값을 유한차분법((n=4)으로 구하여라.

[예제] 경계값 문제

$$y'' + 4(\sin x)y' - 4(\cos x)y = -\sin x$$
$$y(0) = 0, y(\pi/2) = 1$$

의 근사값을 유한차분법((n=5)으로 구하여라. 참해 $y=\sin x$ 와 비교하라. (풀이)

주어진 미분방정식을 차분방정식으로 바꾸면 다음과 같다.

$$\begin{split} \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} - 4\left(\sin x_i\right) \frac{y_{i-1} - y_{i+1}}{2h} - 4\left(\cos x_i\right) y_i &= -\sin x_i \\ (2 - 4h\sin x_i) y_{i-1} + (-4 - 8h^2\cos x_i) y_i + (2 + 4h\sin x_i) y_{i+1} &= -2h^2\sin x_i \end{split}$$

[숙제] 경계값 문제
$$y'' - y' + 2y = \cos x - \sin x \;,\; 0 < x < \pi/2$$

$$y(0) = 1,\; y(\pi/2) = 0$$

의 근사값을 유한차분법(n=5)으로 구하여라. 참해 $y=\cos x$ 와 비교하라.