

수치해석 (2학기)

김상배 교수

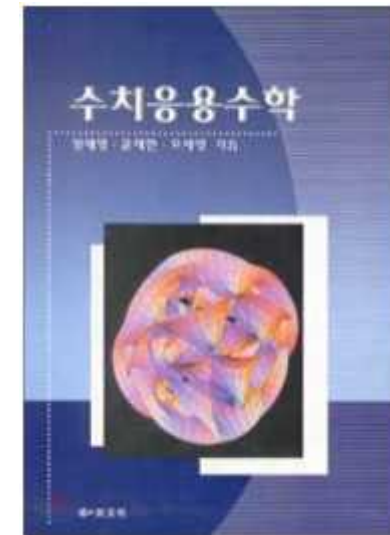
xxx@hnu.kr

<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

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

을 $x = a$ 에서 f 의 Taylor급수라 한다.

특히 $a = 0$ 일 때 f 의 Taylor급수를 특히 Maclaurin급수라 한다.

Taylor의 정리

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

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

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

한남대학교 수학과 김상배교수

[예제] e 의 값을 소수점이하 넷째자리까지 정확히 구하여라.

(풀이)

모든 x 에 대하여

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

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

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

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

소수점이하 4째자리까지 정확하려면

$$|R_n| < \frac{3}{(n+1)!} < 0.5 \times 10^{-4} = 0.00005 \text{ 이어야 하고}$$

$n = 8$ 이면 위 식을 만족하므로

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



제5장 근사함수

근사함수

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

$$\text{(예)} \quad e^x \approx 1 + x + \frac{1}{2!} x^2 + \frac{1}{3!} x^3 + \dots + \frac{1}{n!} x^n$$

근사함수의 이용

$$\text{(예)} \quad \int_1^2 \frac{1}{x^2} dx \approx \int_1^2 \left(-\frac{3}{4}(x-1) + 1\right) dx$$

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 사이의 “**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.

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

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

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

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,

$$\|f - g^*\| \leq \|f - g\|, \forall g \in V$$

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 $\{(x_i, y_i) \mid i = 0, 1, \dots, n\}$ 에 대하여 보간 조건

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

을 만족하는 함수 P_n 를 **보간함수**라고 한다. x_i 들을 **마디점**이라고 한다.

보간함수가 다항함수인 경우 특히 **보간다항식**이라고 한다.

보간함수 of 함수

주어진 마디점들 $\{x_i \mid i = 0, 1, \dots, n\}$ 과 함수 f 에 대하여 보간 조건

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

을 만족하는 함수 P_n 을 **함수 f 의 보간함수**라고 한다. 또는 함수 P_n 은

함수 f 를 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)

$i = 0, 1, \dots, n$ 에 대하여 정의된 함수

$$l_i(x) \stackrel{\text{정의}}{=} \frac{(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)}$$

는 x_0, x_1, \dots, x_n 들이 서로 다른 값이므로 $l_i(x_i) = 1, l_i(x_j) = 0, \text{for } j \neq i$ 임을 알 수 있다. l_i 함수들은 n 차 다항식이므로 함수

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

도 n 차 이하 다항식이고,

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

임을 확인할 수 있다. 즉 보간다항식의 존재성이 증명되었다.

유일성을 증명하기 위하여 $Q_n(x)$ 가 n 차 이하의 또 다른 보간다항식이라면, 다항식

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

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 n 차 이하의 다항식은 서로 다른 $n+1$ 개의 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

$$l_i(x) \stackrel{\text{정의}}{=} \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

를 **라그랑지 다항식(Lagrange polynomial)**이라 한다.

라그랑지 다항식 $l_i(x)$ 들의 일차결합으로 이루어진 보간다항식

$$P_n(x) \stackrel{\text{정의}}{=} \sum_{i=0}^n y_i l_i(x)$$

를 **라그랑지형 보간다항식**이라고 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

$$l_0(x) = \frac{(x-1)(x-2)}{(0-1)(0-2)}, \quad l_1(x) = \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)}, \quad l_2(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)}$$

이므로 2차 라그랑지 보간다항식은

$$\begin{aligned} P_2(x) &= \sum_{i=0}^2 f(x_i) l_i(x) \\ &= f(0) l_0(x) + f(1) l_1(x) + f(2) l_2(x) \\ &= (e^0 - 1) \frac{(x-1)(x-2)}{(0-1)(0-2)} + (e-1) \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)} + (e^2 - 1) \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)} \\ &= 0 + (e-1) \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)} + (e^2 - 1) \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)} \end{aligned}$$

$f(1.5)$ 의 근사값은

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

역급수형 보간다항식

다항식의 가장 보편적인 형태는 다음과 같은 **역급수형 보간다항식**이다.

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$$

보간 조건

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

을 만족하는 계수 a_i 들을 구하려면, 연립방정식

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

$$V\mathbf{a} = \mathbf{y}$$

을 풀어야 한다. 행렬 V 를 **Vandermonde 행렬**이라고 하는데, x_0, x_1, \dots, x_n 들이

서로 다르면, 행렬 V 는 역행렬이 존재하는 정칙행렬이 된다고 알려져 있다.

따라서 해가 존재하지만, 불량행렬이어서 정확한 해를 얻기가 어려운 점이 있다.

가장 효율적인 방법은 나중에 다루게 될 **뉴턴형 보간다항식**이다.

보간다항식 방식의 장단점

- 1) 라그랑지형 : 직관적. 수치미분과 수치적분에 유용.
점 하나를 추가하면 처음부터 다시 계산해야 하는 단점.
- 2) 뉴턴형 : 점 하나를 추가하면 처음부터 다시 계산할 필요없이 항 하나만 추가함.

Neville의 방법

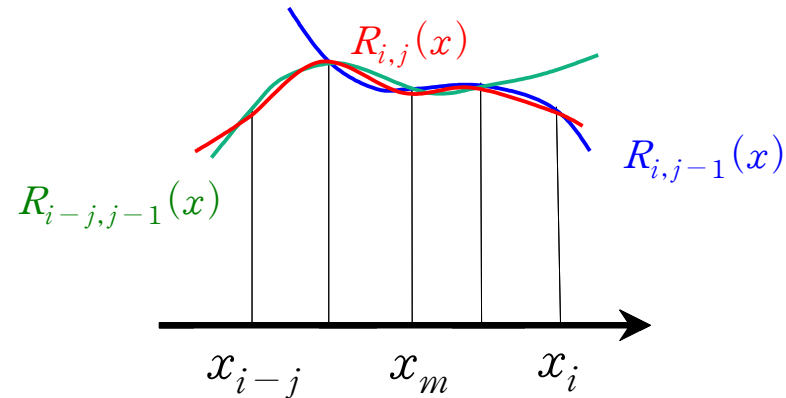
보간다항식 전체를 구하지 않고, 한 점에서의 근사값만을 구하는 경우, 라그랑지 방법을 사용하되 처음부터 다시 계산하지 않고, 최근 계산값들을 이용하여 새 근사값을 계산하는 일종의 반복법이다. $0 \leq j \leq i$ 를 만족하는 자연수 i, j 에 대하여 데이터 $\{(x_m, f(x_m)) \mid i-j \leq m \leq i\}$ 라그랑지 보간다항식을 $R_{i,j}(x)$ 이라고 하면,

$$R_{i,0}(x_i) = f(x_i) \quad \text{이고,}$$

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

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,

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

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.

				→ 차수 증가				
$f(x_0) = R_{0,0}$								
$f(x_1) = R_{1,0}$	$R_{1,1}$						마디점 증가	
$f(x_2) = R_{2,0}$	$R_{2,1}$	$R_{2,2}$						↓
$f(x_3) = R_{3,0}$	$R_{3,1}$	$R_{3,2}$	$R_{3,3}$					

[예제5.2]

마디점 $x_m = m + 1, \forall m = 0, 1, \dots, k$ 에서 함수 $f(x) = 1/x$ 의 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, \dots, x_n 에서 f 의 보간다항식이라면, $\forall x \in [a,b]$ 에 대하여,

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

을 만족하는 $\xi_x \in (a,b)$ 가 존재한다.

(증명)

만약 $(0 \leq \exists i \leq n) : x = x_i$ 이라면 $W(x) = 0$ 이 되고, P_n 은 f 의 보간다항식이므로 $f(x_i) = P_n(x_i)$ 이 되어 (1)은 성립한다.

따라서 $x \neq x_i (0 \leq \forall i \leq n)$ 로 가정하고, 다음 함수 $g(t)$ 를 정의하자.

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

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

$g(x) = 0$ 이므로 g 는 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 n 차와 $n + 1$ 차 다항식이므로 $P_n^{(n+1)}(t) \equiv 0$ 이고 $W^{(n+1)}(t) = (n + 1)!$ 이다. 그러므로 $t = \xi_x$ 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

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

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)

$$f^{(6)}(x) = -\cos x - \sin x \quad \text{(책오류수정) 참고 : Wolfram : 6th derivative of cos(x)+ sin(x)}$$

$$\text{이므로 } |f(x) - P_5(x)| = \frac{|\cos \xi + \sin \xi|}{6!} \prod_{k=0}^5 |x - x_k|, \quad \xi \in (0,1) \quad \text{이다.}$$

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

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

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

뉴턴형 보간다항식

마디점 x_0, x_1, \dots, x_k 에서 다음 형태의 다항식을 함수 f 의 뉴턴형 보간다항식이라고 한다.

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

뉴턴형 보간다항식에서는 마디점을 하나 추가할 경우, 기존데이터에 새로운 항 하나만 더 추가하여 계산하면 된다. 여기에서

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] \stackrel{\text{정의}}{=} a_k \quad \text{---(2)}$$

를 함수 f 의 분할차분(divided difference) 라고 한다. 더 일반적으로 마디점 $x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}$ ($0 \leq i \leq n - k$)에 대하여 $f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}]$ 로 표시한다.

[명제] 분할차분은 아래와 같이 순차적으로 구할 수 있다.

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

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

(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

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

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

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

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

으로부터 k 차 보간다항식

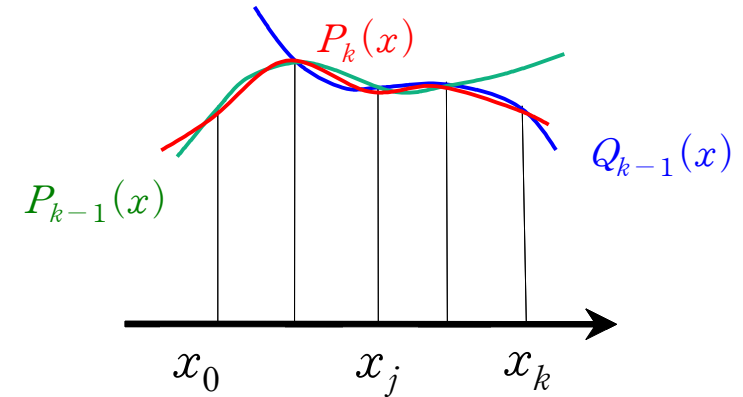
$$P_k(x) = \frac{x - x_0}{x_k - x_0} Q_{k-1}(x) - \frac{x - x_k}{x_k - x_0} P_{k-1}(x)$$

을 만들면

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

이 되고 P_k 의 최고차항의 계수 $a_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k]$ 은

$$\begin{aligned} f[x_0, x_1, \dots, x_k] &= \frac{Q_{k-1} \text{의 최고차항의 계수} - P_{k-1} \text{의 최고차항의 계수}}{x_k - x_0} \\ &= \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_k] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0} \quad \blacksquare \end{aligned}$$



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

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

로 쓸 수 있다.

분할차분표

x_i	$f[x_i]$	$f[,]$	$f[, ,]$	$f[, , ,]$	$f[, , , ,]^*$
x_0	$f[x_0]$	$f[x_0, x_1]$	$f[x_0, x_1, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]^*$
x_1	$f[x_1]$	$f[x_1, x_2]$	$f[x_1, x_2, x_3]$	$f[x_1, x_2, x_3, x_4]^*$	
x_2	$f[x_2]$	$f[x_2, x_3]$	$f[x_2, x_3, x_4]^*$		
x_3	$f[x_3]$	$f[x_3, x_4]^*$			
x_4^*	$f[x_4]^*$				

[예제 5.6] 함수 $f(x) = \sqrt{x}$ 의 함수표를 보간하는 뉴턴 분할차분형 다항식 $P_3(x)$ 를 구하라. 또한 $f(2.4) = 1.549193$ 을 추가하여 $P_4(x)$ 를 구하고, $x = 2.15$ 에서 각각 근사값을 구하여, 참값 $\sqrt{2.15} = 1.46628782 \dots$ 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	$f[x_i]$	$f[,]$	$f[,,]$	$f[,,,]$	$f[,,,,]^*$
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 뉴턴 분할차분형 다항식을 $P_3(x)$ 을 구하면

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

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

한 점을 추가한 4차 뉴턴 분할차분형 다항식 $P_4(x)$ 은

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

로 주어지고, $x = 2.15$ 에의 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, \dots, 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 f 의 보간다항식을 P_n 이라고 하면 함수

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

는 보간 조건에 의하여 $n+1$ 개의 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 $n+1$ 개 이면 $g^{(n)}$ 는 1개) 따라서

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

을 만족하는 ξ 가 (a, b) 안에 존재한다. 즉

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

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

균등분할

마디점들이 일정한 간격으로 주어진 **균등분할**인 경우, 즉

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

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

분할차분은 좀 더 간단히 계산될 수 있다.

전향차분

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

$$\Delta f_j = f_{j+1} - f_j$$

$$\Delta^k f_j = \Delta(\Delta^{k-1} f_j), \quad \forall k \geq 2$$

로 정의된다. ■

전향차분과 분할차분의 관계는 다음과 같다.

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

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

.....

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

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. 뉴턴형 보간다항식

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

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

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

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

$$\binom{s}{k} = \begin{cases} \frac{s(s-1)(s-2)\cdots(s-k+1)}{k!} = \frac{1}{k!} \prod_{i=0}^{k-1} (s-i) \\ 1, k=0 \end{cases}$$

뉴턴 전진차분형 보간다항식

식(1),(3)을 식(2)에 대입하면, 뉴턴 전진차분형 보간다항식

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!h^k} \Delta^k f_0 h^k k! \binom{s}{k} = \sum_{k=0}^n \binom{s}{k} \Delta^k f_0 = \sum_{k=0}^n \left(\prod_{i=0}^{k-1} \frac{s-i}{i+1} \right) \Delta^k f_0$$

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 뉴턴 전진차분형을

구하고 $P_3(2.15)$ 를 계산하여 참값 $\sqrt{2.15} = 1.46628782 \dots$ 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	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$
2.0	1.414213	0.034924	-0.000822	0.000056
2.1	1.449137	0.034102	-0.000766	
2.2	1.483239	0.033336		
2.3	1.516575			

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

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

이고, $P_3(2.15)$ 를 계산하면 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned}
 P_3(2.15) &= P_3(2 + 1.5 \times 0.1) \\
 &= 1.414213 + 0.034924 \binom{1.5}{1} - 0.000822 \binom{1.5}{2} + 0.000056 \binom{1.5}{3} \\
 &= 1.4662873
 \end{aligned}$$



후향차분

자연수 j 에 대하여 $f_j = f(x_j)$ 라 할 때, **후향차분**(backward difference)

$$\nabla f_j = f_j - f_{j-1}$$

$$\nabla^k f_j = \nabla (\nabla^{k-1} f_j), \quad \forall k \geq 2$$

로 정의된다. ■

뉴턴 후진차분형 보간다항식

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

■

Hermite 보간다항식

각 마디점에서, 함수값뿐만 아니라 고계도함수값까지도 보간하는 다항식. 즉 함수 f 와 서로 다른 마디점 $x_i (0 \leq i \leq n)$ 들과 자연수 $m_i (0 \leq i \leq n)$ 들이 주어졌을 때,

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

한남대학교 수학과 김상배교수

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) $H_3(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ 로 놓으면 위의 보간 조건은

$$a_0 + x_0a_1 + x_0^2a_2 + x_0^3a_3 = f(x_0)$$

$$a_1 + 2x_0a_2 + 3x_0^2a_3 = f'(x_0)$$

$$a_0 + x_1a_1 + x_1^2a_2 + x_1^3a_3 = f(x_1)$$

$$a_1 + 2x_1a_2 + 3x_1^2a_3 = f'(x_1)$$

이다. 위 연립방정식을 행렬을 이용하여 $Ay = b$ 로 표시된다.

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

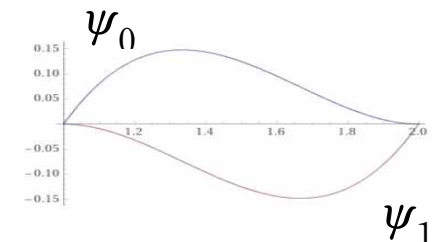
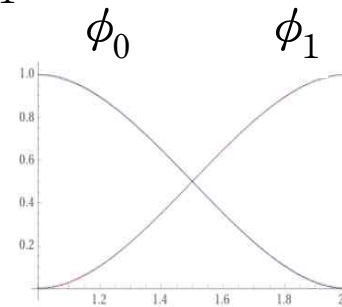
만약 $x_0 \neq x_1$ 이면 계수행렬 A 는 정칙임을 보일 수 있다. A 가 정칙이면 방정식 $Ay = b$ 는 유일한 근을 구할 수 있다.

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

$i = 0, 1, j = 0, 1$ 에 대하여,

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

(미분값1) $\psi_i(x_j) = 0, \psi_i'(x_j) = \delta_{ij}$



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

$$\phi_0(x_0) = (cx_0 + d)(x_0 - x_1)^2 = 1$$

$$\phi_0'(x_0) = c(x_0 - x_1)^2 + 2(cx_0 + d)(x_0 - x_1) = 0$$

로부터 c 와 d 를 구할 수 있다. 나머지도 같은 방법으로 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\phi_0(x) = \frac{(x - x_1)^2}{(x_0 - x_1)^3} [2(x_0 - x) + (x_0 - x_1)]$$

$$\phi_1(x) = \frac{(x - x_0)^2}{(x_1 - x_0)^3} [2(x_1 - x) + (x_1 - x_0)]$$

$$\psi_0(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)^2}{(x_0 - x_1)^2}$$

$$\psi_1(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_0)^2}{(x_1 - x_0)^2}$$



라그랑지형 Hermite 보간다항식

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

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

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

우선, 보간조건

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

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

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 ϕ_i, ψ_i 들은

$$\phi_i(x) = [1 - 2(x - x_i)l_i'(x_i)] l_i^2(x)$$

$$\psi_i(x) = [x - x_i] l_i^2(x)$$

($l_i(x)$ 는 위에서 정의하였던 라그랑지 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

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

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

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

뉴턴형 Hermite 보간다항식

중복이 허락된 마디점 $y_0 \leq y_1 \leq \dots \leq y_N$ 에 대하여 뉴턴형 Hermite 보간다항식

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

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

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

로 표시한다.

[예제 5.1] (뉴턴 형 Hermite 보간다항식)

마디점 x_0, x_0, x_1 에서 함수 f 의 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.

$$a_0 \equiv f[x_0] = f(x_0)$$

$$a_1 \equiv f[x_0, x_0] = f'(x_0)$$

$$a_2 \equiv f[x_0, x_0, x_1] = \frac{f[x_0, x_1] - f[x_0, x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{f[x_0, x_1] - f'(x_0)}{x_1 - x_0}$$



[정리 5.6]

만약 $f \in C^m[a, b]$ 이고 구간 $[a, b]$ 위의 마디점 $y_0 \leq y_1 \leq \dots \leq y_N$ 에서 중복된 점들이 모두 m 개 이하이면 함수 f 의 분할차분은 다음과 같이 주어진다.

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

[예제 5.12] 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

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

이므로

$$f[y_0, y_1] = f[0, 0] = f'(0) = 1$$

$$f[y_1, y_2] = f\left[0, \frac{\pi}{2}\right] = \frac{1-0}{\pi/2-0} = \frac{2}{\pi}$$

$$f[y_2, y_3] = f\left[\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] = f'\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$$

$$f[y_0, y_1, y_2] = \frac{2/\pi - 1}{\pi/2 - 0} = \frac{4}{\pi^2} - \frac{2}{\pi}$$

$$f[y_1, y_2, y_3] = \frac{0 - 2/\pi}{\pi/2 - 0} = -\frac{4}{\pi^2}$$

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

이 되어

$$H_3(x) = x + \left(\frac{4}{\pi^2} - \frac{2}{\pi}\right)x^2 + \left(\frac{4}{\pi^2} - \frac{16}{\pi^3}\right)x^2\left(x - \frac{\pi}{2}\right)$$

y_i	$f[y_i]$	$f[,,]$	$f[,,]$	$f[,,,]$
0	0	1	$4/\pi^2 - 2/\pi$	$4/\pi^2 - 16/\pi^3$
0	0	$2/\pi$	$-4/\pi^2$	
$\pi/2$	1	0		
$\pi/2$	1			



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

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

(풀이)

분할 차분표를 만들자

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

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.

k 차 스플라인

구간 $[a, b]$ 의 마디점 $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ 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 k 차 이하의 다항식

을 만족하면 k 차 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, d 를 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 $x = 2$ 에 3차 스플라인의 조건

$$S_1(2) = S_2(2) , S_1'(2) = S_2'(2) , S_1''(2) = S_2''(2)$$

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 a 는 임의의 수, $b = 6$, $c = 12$, $d = 9$ 이다. ■

k 차 스플라인 보간식

마디점 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 에 대하여, k 차 스플라인 함수 $S(x)$ 를 각 소구간 $[x_i, x_{i+1}]$ 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 k 차 이하의 다항식이므로 계수는 $(k+1)$ 개인데, 소구간이 n 개가 있으므로, k 차 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

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

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

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

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

$k=1$ 일 때는 추가 조건 없이 ($k-1=0$) 1차 스플라인 $S(x)$ 이 결정되며, $S(x)$ 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 $y_i = f(x_i), 0 \leq i \leq n$ 이다.

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

$k = 3$ 일 때는 추가 조건 ($k - 1 = 2$) 개를 추가하면 3차 스플라인 $S(x)$ 이 결정되는데 자연스럽게 매끈하다. 조건 2개 양 끝점에 하나씩 주는데, 아래 두 가지 방법이 주로 쓰인다. 4차 이상 스플라인이라도 장점이 없어, 보통 3차 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. 함수 $S(x)$ 의 2차 도함수의 연속성을 사용하면 마디점 x_i 에서

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

가 된다. 여기에서 자유경계조건은

$$z_0 = 0, \quad z_n = 0 \quad \text{--(1)}$$

으로 쓸 수 있다. 각 소구간 $[x_i, x_{i+1}]$, $0 \leq i \leq n-1$ 에서 스플라인 $S_i(x)$ 는 3차 다항식이므로 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 $S_i(x)$, $0 \leq i \leq n-1$ 를 얻는다.

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

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 보간 조건

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

을 사용하여 방정식 (2)를 풀면

$$c_i = \frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i}{6} z_{i+1}$$

$$d_i = c_i = \frac{y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} z_i$$

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

$$S'_{i-1}(x_i) = S'_i(x_i), \quad 1 \leq i \leq n-1$$

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

$$h_{i-1}z_{i-1} + u_i z_i + h_i z_{i+1} = \beta_i, \quad 1 \leq i \leq n-1 \quad \text{--(3)}$$

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

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

이 된다. 여기에서 h_i 는 양수이므로

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

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 3차 스플라인은 오직 하나만 존재한다고 결론 지을 수 있다. ■

[예제5.15] 함수 $f(x) = ((x/2 + \sin x) \sin x + 8)/2$ 를 마디점

$$x_k = kh, \quad 0 \leq k \leq 10, \quad h = 4\pi/10$$

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

주어진 함수를 보간하는 함수들 중에서 자연 3차 스플라인이 가장 매끄럽다.

그 이유는 다음 정리에서 알 수 있다.

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

$$\int_a^b S''(x)^2 dx \leq \int_a^b g''(x)^2 dx$$

이 성립한다. 여기서 $S(x)$ 는 마디점에서 f 를 보간하는 자연 3차 스플라인이다.

(증명)

만약 $u(x) \stackrel{\text{정의}}{=} g(x) - S(x)$ 로 놓으면, $g(x) = S(x) + u(x)$ 로부터

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

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

$$\int_a^b g''(x)^2 dx = \int_a^b S''(x)^2 dx + \int_a^b u''(x)^2 dx + 2 \int_a^b S''(x) u''(x) dx \quad \text{--(1)}$$

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,

$$\begin{aligned} \int_a^b S''(x) u''(x) dx &= [S''(x) u'(x)]_a^b - \int_a^b S'''(x) u'(x) dx \\ &= [0 - 0] - \int_a^b c_i u'(x) dx \\ &= - \sum_{i=0}^{n-1} c_i \int_{x_i}^{x_{i+1}} u'(x) dx \\ &= - \sum_{i=0}^{n-1} c_i [u(x_{i+1}) - u(x_i)] = 0 \end{aligned}$$

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

$$\int_a^b S''(x)^2 dx \leq \int_a^b g''(x)^2 dx \quad \blacksquare$$

(주목) 곡선 $y = f(x)$ 의 곡률은

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

이므로 자연 3차 스플라인은 다른 어떤 곡선보다 진동이 심하지 않다는 사실을 보여준다.

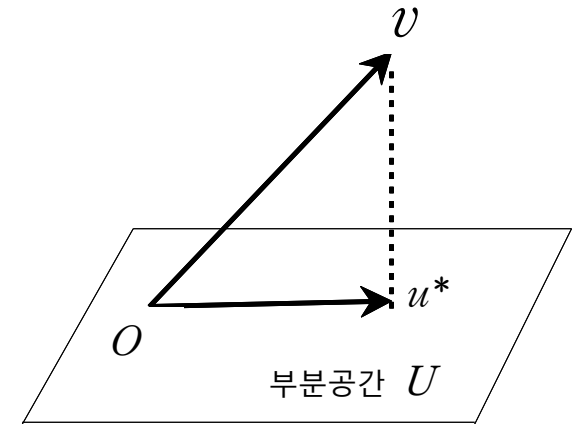
보간법은 주어진 마디점에서 함수값(또는 고계도함수)을 만족하는 쉬운함수(다항식)을 찾는 문제이지만, 함수를 근사하는 다른 방법으로 최적근사문제가 있다.

최적근사문제

벡터(함수) 공간 V 안의 벡터 v 와 부분공간 U 에 대하여,

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

을 만족하는 **최적근사벡터** $u^* \in U$ 을 찾아라.



주목 부분공간 U 가 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

$$\text{내적} : \langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) g(x) dx$$

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

로 주어질 때, f 와 부분공간 U 에 대하여,

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

을 만족하는 $g^* \in U$ 을 찾아라. 여기에서 g^* 를 **최소제곱 근사함수**라고 한다.

벡터의 직교

두 벡터 u, v 는 **직교한다.** \Leftrightarrow $\langle u, v \rangle = 0$

(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 $\langle u_1, u_2, \dots, u_n \rangle$ 는 직교집합이다.

정의
 $\Leftrightarrow \langle u_i, v_j \rangle = 0, \quad \forall i \neq \forall j$

정규직교집합

벡터들의 집합 $\langle u_1, u_2, \dots, u_n \rangle$ 는 정규직교집합이다.

정의
 $\Leftrightarrow \langle u_i, v_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \forall i, \forall j$

벡터와 집합의 수직

벡터 v 와 집합 W 은 직교한다. ($v \perp W$)

정의
 $\Leftrightarrow \langle v, w \rangle = 0, \quad \forall w \in W$

[정리5.9] (연속형,이산형 공통)

U 가 내적공간 V 의 부분공간이고 $v \in V$ 일 때,

$$(u^* \in U \text{가 } v \text{의 최소제곱근사함수}) \Leftrightarrow v - u^* \perp U$$

(\Rightarrow)

임의의 $u \in U$ 에 대하여, $u^* + u \in U$ 이므로, u^* 가 v 의 최소제곱근사함수이면,

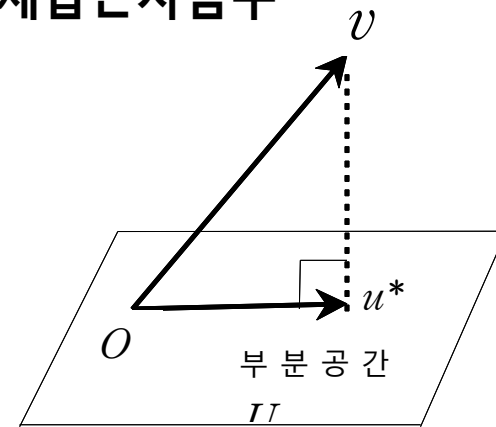
$$\|v - u^*\|^2 \leq \|v - (u^* + u)\|^2 \quad \text{--(1)}$$

이 성립한다. 여기에서

$$\begin{aligned} \|v - (u^* + u)\|^2 &= \|(v - u^*) - u\|^2 \\ &= \langle (v - u^*) - u, (v - u^*) - u \rangle \\ &= \|v - u^*\|^2 - 2 \langle v - u^*, u \rangle + \|u\|^2 \quad \text{--(2)} \end{aligned}$$

이므로 by (1),(2),

$$2 \langle v - u^*, u \rangle \leq \|u\|^2$$



를 얻는다. 임의의 실수 r 에 대하여 $ru \in U$ 이므로, u 대신 ru 를 대입하면,

$$2r \langle v - u^*, u \rangle \leq r^2 \|u\|^2$$

$$2 \langle v - u^*, u \rangle \leq r \|u\|^2$$

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

(\Leftarrow)

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

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

$$\langle v - u^*, u - u^* \rangle = 0$$

이므로

$$\begin{aligned} \|v - u\|^2 &= \|(v - u^*) - (u - u^*)\|^2 \\ &= \|v - u^*\|^2 - 2 \langle v - u^*, u - u^* \rangle + \|u - u^*\|^2 \\ &= \|v - u^*\|^2 + \|u - u^*\|^2 \\ &\geq \|v - u^*\|^2 \quad \blacksquare \end{aligned}$$

정규방정식(연속형)

U 가 내적공간 V 의 부분공간이고 $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ 를 기저로 갖는 경우, 어떤 $v \in V$ 의 U 안에 있는 최적 근사함수 $u^* \in U$ 를

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

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

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

여기에서 $\forall i = 1, 2, \dots, n$ 에 대하여

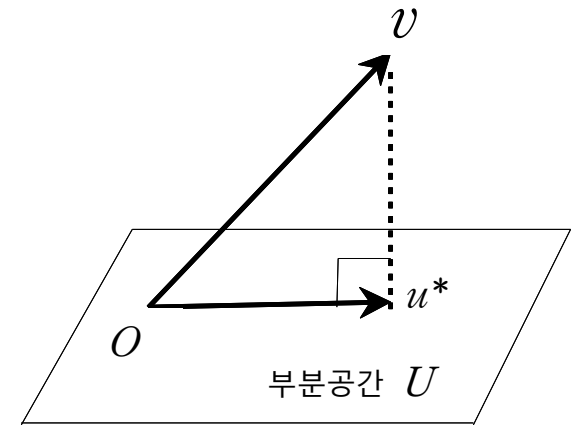
$$\langle v - u^*, u_i \rangle = 0$$

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

$$\iff \langle \sum_{j=1}^n a_j u_j, u_i \rangle = \langle v, u_i \rangle$$

$$\iff \sum_{j=1}^n a_j \langle u_j, u_i \rangle = \langle v, u_i \rangle$$

$$\iff \sum_{j=1}^n \langle u_i, u_j \rangle a_j = \langle v, u_i \rangle \text{ 이다.}$$



a_j 들에 관한 선형연립방정식

$$\sum_{j=1}^n \langle u_i, u_j \rangle a_j = \langle v, u_i \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

이

$$Aa = b$$

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 A 는 대칭이고 정칙임을 보일 수 있다. 따라서 정규방정식은 유일한 해를 갖는다. 따라서 근사함수 u^* 를 유일하게 결정할 수 있다.

[정리 5.10] U 가 내적공간 V 의 부분공간이고 $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ 를 정규직교기저로 갖는 경우, 어떤 $v \in V$ 의 U 안에 있는 최적 근사함수 $u^* \in U$ 는

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

와 같이 얻을 수 있다.

(증명)

$\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ 들 정규직교기저이면 $\langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij}$ 이므로

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

가 되므로 정규방정식은 $Aa = b$ 의 해 $a = [a_j]$ 는 $a = b$ 로 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

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

을 사용하라.

(풀이 1)

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

$$p(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 = \sum_{i=0}^3 c_i x^i$$

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

$$\forall i = 0, 1, 2, 3,$$

$$\langle p-f, x^i \rangle = 0$$

$$\langle \sum_{j=0}^3 c_j x^j - f, x^i \rangle = 0$$

$$\sum_{j=0}^3 \langle x^j, x^i \rangle c_j = \langle f, x^i \rangle$$

그러므로 정규방정식은

$$\sum_{j=0}^3 \langle x^j, x^i \rangle c_j = \langle \sin x, x^i \rangle, \quad i = 0, 1, 2, 3$$

이다. 내적을 계산하면,

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

이다. 이 방정식을 풀면

$$c_0 = 0, c_1 = 195/2 \sin 1 - 150 \cos 1,$$

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

로 구할 수 있다.

(풀이 2) 정규직교기저

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

를 Π_3 의 기저로 사용하면 [정리5.10]에 따라 p^* 는

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

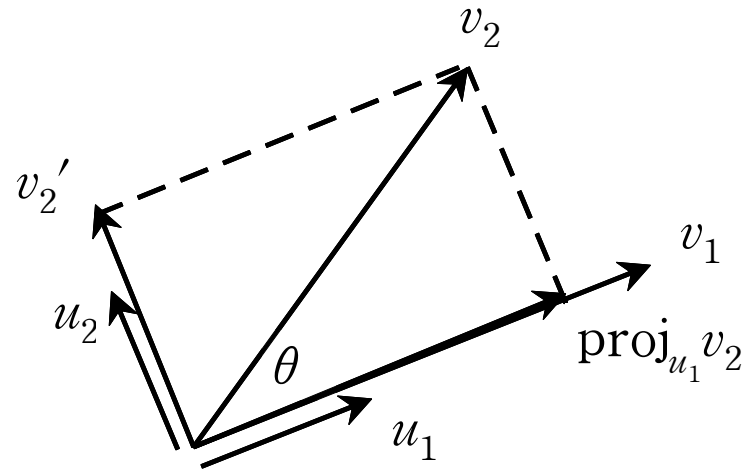
$$b_i = \langle \sin x, p_i(x) \rangle, i = 0, 1, 2, 3$$

로 주어진다. b_i 들을 계산하면 다음과 같다.

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

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

정규직교기저(그람-슈미트 과정)



$$\text{proj}_{u_1} v_2 = (\|v_2\| \cos\theta) u_1 = (\|v_2\| \|u_1\| \cos\theta) u_1 = \langle v_2, u_1 \rangle u_1$$

$$v_1' = v_1, \quad u_1 = \frac{v_1'}{\|v_1'\|}$$

$$v_2' = v_2 - \langle v_2, u_1 \rangle u_1, \quad u_2 = \frac{v_2'}{\|v_2'\|}$$

$$v_3' = v_3 - \langle v_3, u_1 \rangle u_1 - \langle v_3, u_2 \rangle u_2, \quad u_3 = \frac{v_3'}{\|v_3'\|}$$

...

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

(풀이)

$$v_1' = v_1 = 1$$

$$\|v_1'\| = \left(\int_{-1}^1 (1)(1)dx \right)^{1/2} = \sqrt{2}, \quad u_1 = \frac{v_1'}{\|v_1'\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$v_2' = v_2 - \langle v_2, u_1 \rangle u_1 = x - \left(\int_{-1}^1 x \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) dx \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) = x$$

$$\|v_2'\| = \left(\int_{-1}^1 x x dx \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad u_2 = \frac{v_2'}{\|v_2'\|} = \frac{x}{\sqrt{2/3}} = \sqrt{\frac{3}{2}} x$$

$$v_3' = v_3 - \langle v_3, u_1 \rangle u_1 - \langle v_3, u_2 \rangle u_2$$

$$= x^2 - \left(\int_{-1}^1 x^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) dx \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) - \left(\int_{-1}^1 x^2 \left(\sqrt{\frac{3}{2}} x \right) dx \right) \left(\sqrt{\frac{3}{2}} x \right) = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$\|v_3'\| = \left(\int_{-1}^1 \left(x^2 - \frac{1}{3} \right)^2 dx \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{8}{45}}, \quad u_3 = \frac{v_3'}{\|v_3'\|} = \frac{(x^2 - 1/3)}{\sqrt{8/45}} = \sqrt{\frac{45}{8}} \left(x^2 - \frac{1}{3} \right) \quad \blacksquare$$

자료맞추기 (예:이산형 최소제곱법)

함수 $f(x)$ 를 모르고 관측을 통하여 얻은 $f(x_i)$ 들의 근사값 $y_i (1 \leq i \leq m)$ 만 주어졌을 때 적당한 의미에서 x 와 y 의 관계를 가장 잘 나타내는 근사함수 $g(x)$ 를 찾아내는 것을 **자료맞추기**라고 한다.

이 경우 함수 $g(x)$ 는 자료 $\{(x_i, y_i) \mid 1 \leq i \leq m\}$ 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 **과정보체계**이다.

이산형 최소제곱 문제

어떤 자료 $\{(x_i, y_i) \mid 1 \leq i \leq m\}$ 와 일차독립인 어떤 함수들 $\{\phi_j \mid 1 \leq j \leq n\}$ 이 주어졌을 때 $(m \geq n)$, $\forall g(x) = z_1\phi_1(x) + \dots + z_n\phi_n(x)$ 에 대하여

$$\sum_{k=1}^m |y_k - g^*(x_k)|^2 \leq \sum_{k=1}^m |y_k - g(x_k)|^2$$

한남대학교 수학과 김상배교수

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

이 문제는 오차함수

$$E(z) \stackrel{\text{정의}}{=} \sum_{k=1}^m [y_k - (z_1 \phi_1(x_k) + \dots + z_n \phi_n(x_k))]^2$$

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

$$\frac{\partial E}{\partial z_i} = 0, \quad 1 \leq \forall i \leq n$$

이다. 그러므로 $1 \leq \forall i \leq n$ 에 대하여,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^m 2[y_k - (z_1 \phi_1(x_k) + \dots + z_n \phi_n(x_k))] [-\phi_i(x_k)] &= \frac{\partial E}{\partial z_i} = 0 \\ \Leftrightarrow \sum_{k=1}^m [y_k - (z_1 \phi_1(x_k) + \dots + z_n \phi_n(x_k))] \phi_i(x_k) &= 0 \\ \Leftrightarrow \sum_{k=1}^m \phi_i(x_k) \left(\sum_{j=1}^n \phi_j(x_k) z_j \right) &= \sum_{k=1}^m \phi_i(x_k) y_k \end{aligned}$$

위 방정식을 다시 쓰면 선형방정식인 **정규방정식(이산형)**

$$A^T A z = A^T b \quad \text{--(1)}$$

을 얻는다. 여기서

$$A = [a_{kj}]_{m \times n}, \quad a_{kj} = \phi_j(x_k)$$

$$b = [b_k]_{m \times 1}, \quad b_k = y_k$$

이산 최소제곱 문제 (벡터적 접근)

일차독립인 어떤 함수들 $\{\phi_i \mid 1 \leq i \leq n\}$ 이 주어졌을 때, 함수

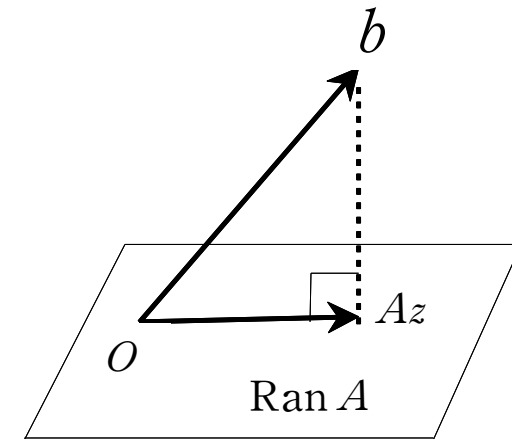
$$g(x) = z_1 \phi_1(x) + \dots + z_n \phi_n(x)$$

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

$$z_1 \phi_1(x_i) + \dots + z_n \phi_n(x_i) = y_i, \quad 1 \leq \forall i \leq m$$

이 성립해야 하고, 이것은 선형연립방정식

$$Az = b$$



$$A = [a_{ij}]_{m \times n}, \quad a_{ij} = \phi_j(x_i)$$

$$b = [b_i]_{m \times 1}, \quad b_i = y_i$$

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

$$b \notin \text{Ran}A$$

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

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

일 때 성립한다. 즉 $(b - Az)$ 가 A 의 모든 열벡터와 수직이다. 즉,

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

그러므로

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

이 성립하고 이것은

$$A^T Az = A^T b$$

라고 하는 정규방정식이 된다.

[예제 5.22] 다음 표의 최소제곱 일차식 $p(x) = z_1 + z_2x$ 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)

$p(x) = z_1 + z_2x$ 가 위 점들 $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, 10$ 을 만족한다면,

$$z_1 + z_2x_i = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10$$

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 $A^T Az = A^T y$ 은 근사해를

제공한다. 정규방정식의 좌변 행렬은

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

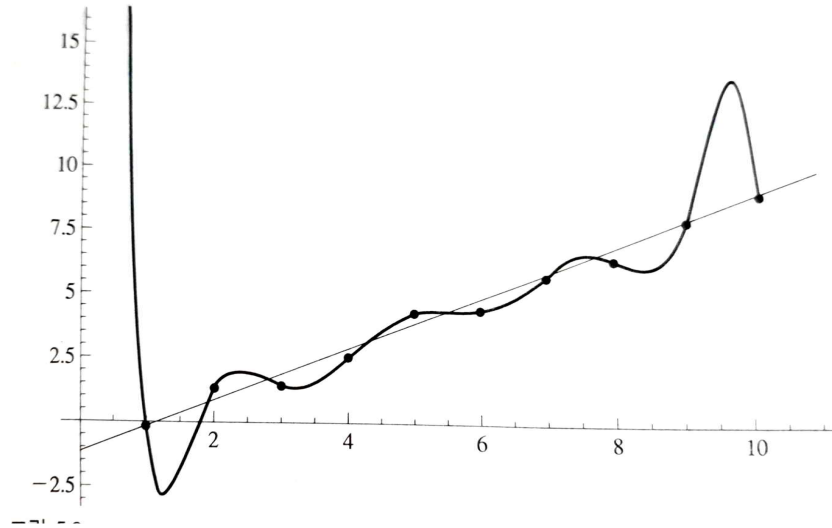
이고 우변 상수벡터는

$$A^T y = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{10} a_{i1} y_i \\ \sum_{i=1}^{10} a_{i2} y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{10} 1 \times y_i \\ \sum_{i=1}^{10} x_i y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 44.94 \\ 331.7 \end{bmatrix}$$

이다. 정규방정식 $A^T A z = A^T y$ 를 풀면

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

최소제곱 일차식은 $F(x) = -1.14133 + 1.02461 x$ 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

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

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 $A^T Az = A^T y$ 은 근사해를 제공한다. 정규방정식의 좌변 행렬은

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

우변 상수벡터는

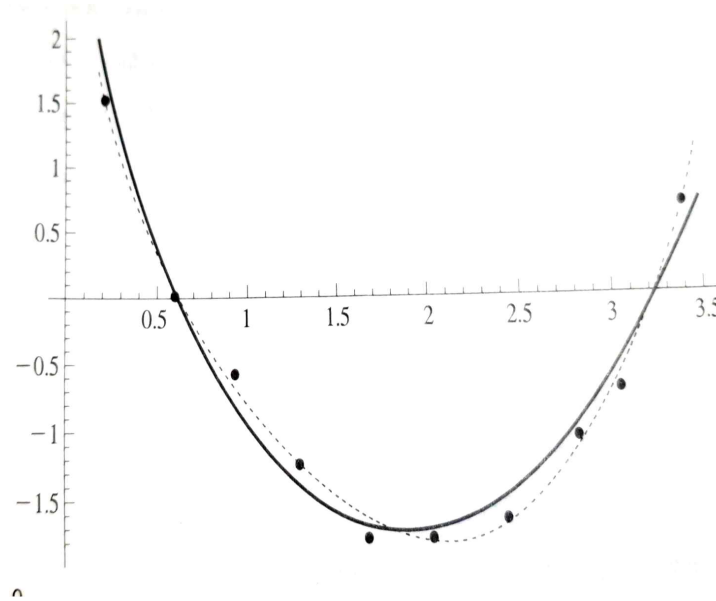
$$A^T y = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{10} a_{i1} y_i \\ \sum_{i=1}^{10} a_{i2} y_i \\ \sum_{i=1}^{10} a_{i3} y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -55.6917 \\ -6.96838 \\ -1.27225 \end{bmatrix}$$

로 주어진다. 정규방정식 $A^T A z = A^T y$ 를 풀어 z 를 구하면

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

이므로 최소제곱근사 함수(점선 그래프)는 다음과 같다.

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



(참고로 실선 그래프는 최소제곱 5차다항함수)

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. $h > 0$ 일 때 **전향수치미분식**(forward difference formula), $h < 0$ 일 때 **후향수치미분식**(backward difference formula)라고 한다.

수치미분식의 오차

테일러의 정리를 사용하면

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

을 얻고 이것을 정리하면

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

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

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

로 표시한다. $O(h)$ 는 h 와 0 으로 가는 속도가 같다는 의미이다.

중앙수치미분식

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

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

를 얻고, 첫식에서 두 번째 식을 빼면, 홀수항만 남아,

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

을 얻는다. 여기에서 $f'(x)$ 에 대하여 풀면

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!}f^{(3)}(x) - \frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x) - \dots \quad \text{---(1)} \\ &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \end{aligned}$$

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

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

을 얻는다.

Richardson이 외삽법

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

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!} f^{(3)}(x) - \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(x) - \dots \\ &= \frac{(x+h) - f(x-h)}{2h} + a_2 h^2 + a_4 h^4 + \dots \quad \text{---(2)} \end{aligned}$$

이다. 여기서 f 와 x 가 고정되었다고 가정하고, h 에 대한 함수

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

를 정의하자. 식 (2)로부터

$$\begin{aligned} \phi(h) &= f'(x) - a_2 h^2 - a_4 h^4 - \dots \\ \phi\left(\frac{h}{2}\right) &= f'(x) - a_2 \left(\frac{h}{2}\right)^2 - a_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 - \dots \end{aligned}$$

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

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

이 된다. 여기에서 $f'(x)$ 에 대하여 풀면

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

을 얻는다.

2계도함수의 수치미분식

테일러 급수로부터 얻은 두 식

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

의 양변을 더하면,

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

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 $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ 와 가중함수 $w(x) (\geq 0)$ 가 주어졌을 때, 정적분

$$I[f] \equiv \int_a^b f(x) w(x) dx$$

의 근사값

$$Q[f] \equiv \sum_{j=0}^n w_j f(x_j)$$

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 정밀도는 다음 조건을 만족하는 자연수 n 이다.

- (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.

뉴턴-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, $Q[f] = I[p_n]$

달힌 뉴턴-코트 구적법

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

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

위에서 $l_i(x)$ 는 n 차 라그랑지 다항식이다. 따라서 닫힌 뉴턴-코트 구적법은

$$\begin{aligned} Q[f] &= I[p_n] \\ &= \int_a^b p_n(x) w(x) dx \\ &= \int_a^b \left[\sum_{i=0}^n f(x_i) l_i(x) \right] w(x) dx \\ &= \sum_{i=0}^n \left[\int_a^b l_i(x) w(x) dx \right] f(x_i) \\ &= \sum_{i=0}^n w_i f_i \end{aligned}$$

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

닫힌 뉴턴-코트 구적법의 종류

가중치 함수 $w(x) \equiv 1$ 와 $n = 1, 2, 3, 4$ 에 대한 뉴턴-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.

$$\begin{aligned} (1) \quad (n = 1) \quad \int_0^1 f(x) dx &\approx \frac{1}{2} (f(0) + f(1)) \\ &= \frac{1}{2} (1.00000 + 0.72159) = 0.86079 \end{aligned}$$

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

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

$$= 1.31440$$

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

$$+ 32f(\frac{3}{4}) + 7f(1)] = 1.30859$$

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

$$\text{즉 } Q[f] = I[p_n]$$

보간구적법의 정밀도 ($\geq n$)

마디점들 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 에서 함수 $f(x)$ 를 보간하는 n 차 이하 다항식이 $p_n(x)$ 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

$$\begin{aligned} E[f] &= I[f] - Q[f] \\ &= I[f] - I[p_n] \\ &= I[f - p_n] \end{aligned}$$

그러므로

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

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

[예제 6.3] (미정계수법)

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

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

(풀이) 정밀도가 n 이 되기 위하여서는

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

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 **복합수치적분법**이 흔히 사용된다.

- (1) 구간 $[a, b]$ 를 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 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

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} h [f(x_{i-1}) + f(x_i)] \\ &= \frac{1}{2} h [f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\ &= \frac{1}{2} h [f(a) + f(b)] + h \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \equiv T(f, h) \end{aligned}$$

복합 Simpson 공식

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

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

[예제 6.4] $f(x) = 2 + \sin(2\sqrt{x})$ 일 때, $\int_1^6 f(x)dx$ 의 근사값을 복합사리꼴 공식과 복합 Simpson 공식을 이용하여 각각 구하여라. 구간은 10 등분하라. (풀이)

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

$$\begin{aligned} T(f, 1/2) &= \frac{1}{2}h [f(x_0) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{2} [f(1) + 2f(1.5) + \dots + 2f(5.5) + f(6)] \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{2} [f(1) + f(6)] + \frac{1}{2} [f(1.5) + \dots + f(5.5)] \\ &\approx 8.19385457 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} S(f, 1/2) &= \frac{1}{3}h[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)] \\ &= \frac{1}{3} \frac{1}{2} [f(1) + 4f(1.5) + 2f(2) + \cdots + 4f(5.5) + f(6)] \\ &= \frac{1}{3} \frac{1}{2} [f(1) + f(6)] + \frac{1}{3} \frac{2}{2} [f(2) + f(3) + \cdots + f(5)] \\ &\quad + \frac{1}{3} \frac{4}{2} [f(1.5) + f(2.5) + \cdots + f(5.5)] \\ &\approx 8.18301550 \quad \blacksquare \end{aligned}$$

[숙제] p312 #1 (4) 복합사다리꼴($n=10$),

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

정밀도 n 의 보간구적법(복습)

가중함수 $w(x)$ 와 $(n+1)$ 개의 마디점 x_0, x_1, \dots, x_n 이 주어지면 아래와 같은 보간다항식을 사용하는 보간구적법은 정밀도가 최소한 n 임을 보였다.

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

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

Gauss구적법 (정밀도 $(2n+1)$)

함수 $q(x)$ 가 n 차 이하의 모든 다항식에 직교하는 영함수가 아닌 함수라면, $q(x)$ 의 근들을 마디점 x_0, x_1, \dots, x_n 이 주는 구적법을 **Gauss구적법**이다.

가우스구적법의 정밀도는 다음 정리에서 증명하는 것처럼 $(2n+1)$ 가 된다.

[정리 6.6] 정밀도 $(2n+1)$ 의 Gauss구적법

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

(증명)

함수 $f(x)$ 가 $(2n+1)$ 차 이하인 임의의 다항식이라 하자. 그러면

$f(x) = p(x)q(x) + r(x)$ 를 만족하는 n 차 이하의 다항식 $p(x)$ 와 $r(x)$ 가 존재한다. 모든 $i = 0, 1, \dots, n$ 에 대하여, $q(x_i) = 0$ 이므로 $f(x_i) = r(x_i)$ 가

성립한다. 한편 $q(x)$ 는 n 차 이하의 모든 다항식에 직교하므로

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

그러므로

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

$$\begin{aligned}
&= \int_a^b r(x) w(x) dx \\
&= \sum_{i=0}^n w_i r(x_i) \quad (\text{이유: 정밀도 } n \text{ 이므로}) \\
&= \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) \quad (\text{이유: } f(x_i) = r(x_i))
\end{aligned}$$

그러므로 구적법 (1)은 정밀도 $(2n + 1)$ 을 갖는다. ■

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

(증명)

먼저 $\langle q, 1 \rangle = 0$ 이므로

$$\int_a^b q(x)(1) w(x) dx = 0 \quad (\text{주목 : } w(x) \geq 0)$$

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

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

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

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

로 정의하면 곱한 함수 $p(x)q(x)$ 는 항상 양수값을 갖든지, 항상 음수값을 갖게 된다. 그러므로

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

이다. 이것은 k 차 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 $\{1, x, x^2, \dots\}$ 을 그램-슈미트 방법으로 정규 직교화 한 기저
 $\{q_0(x), q_1(x), q_2(x), \dots\}$

의 원소를 **Legendre다항식**이라고 한다. 이 Legendre다항식의 근을 마디점으로 사용하는 Gauss구적법을 특히 **Gauss-Legendre 구적법**이라고 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 $\{1, x, x^2\}$ 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 $n=1$ 인 경우라서 정밀도가 $(2n+1) = 3$ 이 된다. 즉 3차 다항식까지는 구적법이 참값을 준다. 이 사실을 이용하여 w_0, w_1 을 구해 보자.

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

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

이므로

$$2 = w_0 + w_1$$

$$0 = w_0(-1/\sqrt{3}) + w_1(1/\sqrt{3})$$

이 되어 $w_0 = w_1 = 1$ 을 얻는다. ■

적분구간 $[a, b]$ 에서 Gauss구적법 계산하기

변수변환

$$\begin{aligned} t &= \frac{x-1}{-1-1}a + \frac{x+1}{1+1}b, \quad (-1 \leq x \leq 1) \\ &= \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x \end{aligned}$$

를 사용하면

$$\begin{aligned} \int_a^b f(t) dt &= \int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x\right) \frac{b-a}{2} dx \\ &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x\right) dx \\ &\approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^m w_i f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_i\right) dx \end{aligned}$$

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

복합 Gauss-Legendre 구적법

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

$$\int_a^b f(t) dt \approx \sum_{j=1}^n \left(\frac{t_j - t_{j-1}}{2} \sum_{i=0}^m w_i f\left(\frac{t_j + t_{j-1}}{2} + \frac{t_j - t_{j-1}}{2} x_i\right) dx \right)$$
$$= \frac{h}{2} \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=0}^m w_i f\left(\frac{t_j + t_{j-1}}{2} + \frac{h}{2} x_i\right) dx \right)$$

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

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

$$y(a) = \alpha$$

을 초기값 문제라고 한다.

[예제] 다음 초기값 문제를 풀어라.

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

(풀이) 미분방정식의 양변을 적분하면,

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

을 얻는다. 적분 상수 c 를 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

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

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

초기값문제는

$$y_0 = \alpha$$

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

와 같이 수치적을 풀 수 있다. 다음 방법을 **오일러방법**이라고 한다.

$$y_0 = \alpha$$

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

한남대학교 수학과 김상배교수

[예제] 다음 초기치문제의 정확한 해가 $y = \frac{1}{1+x^2}$ 임을 보이고, 오일러 방법 ($n = 10$) 을 이용하여 초기값문제

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

$$y(0) = 1$$

의 근사값을 구하고, 정확한 해와 비교하여라.

[숙제] $y' = \frac{1}{x^2} - \frac{y}{x} - y^2, \quad 1 \leq x \leq 2$

$$y(1) = -1$$

$$\text{참해 : } y = -\frac{1}{x}$$

Taylor 방법

초기값 문제

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

$$y(a) = \alpha$$

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

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

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

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

이다. Taylor 방법은 위에서 마지막 항을 잘라버리고,

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + h y'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \dots + \frac{h^n}{n!} y^{(n)}(x_i)$$

한남대학교 수학과 김상배교수

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

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

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

.....

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

[예제] 초기값문제

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

에 $h = 0.1$ 와 3차 Taylor 방법을 이용하여 $y(0.1)$ 과 $y(0.2)$ 의 근사값을 구하여라.

(풀이) $y' = x + y$

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow y_1 &= y(x_0) + h(x_0 + y_0) + \frac{h^2}{2}(1 + x_0 + y_0) + \frac{h^3}{6}(1 + x_0 + y_0) \\ &= 1 + 0.1(0 + 1) + \frac{(0.1)^2}{2}(1 + 0 + 1) + \frac{(0.1)^3}{6}(1 + 0 + 1) \\ &\approx 0.11033 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow y_2 &= y(x_1) + h(x_1 + y_1) + \frac{h^2}{2}(1 + x_1 + y_1) + \frac{h^3}{6}(1 + x_1 + y_1) \\
&= y_1 + 0.1(0.1 + y_1) + \frac{(0.1)^2}{2}(1 + 0.1 + y_1) + \frac{(0.1)^3}{6}(1 + 0.1 + y_1) \\
&= 1.24278 \quad \blacksquare
\end{aligned}$$

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

2차 Runge-Kutta법

초기값 문제

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

$$y(a) = \alpha$$

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

이라 하고, 마디점들을

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

로 놓자. 2차 Runge-Kutta법

$$k_1 = hf(x_i, y_i)$$

$$k_2 = hf(x_i + \alpha h, y_i + \beta k_1)$$

$$y_{i+1} = y_i + ak_1 + bk_2 \quad \text{--} (*)$$

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

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

이므로

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
y''' &= \frac{d}{dx}(f_x + f_y f) \\
&= \left(\frac{d}{dx} f_x\right) + \left(\frac{d}{dx} f_y\right) f + f_y \left(\frac{d}{dx} f\right), \text{ by 곱의 미분} \\
&= \left(\frac{\partial f_x}{\partial x} \frac{dx}{dx} + \frac{\partial f_x}{\partial y} \frac{dy}{dx}\right) + \left(\frac{\partial f_y}{\partial x} \frac{dx}{dx} + \frac{\partial f_y}{\partial y} \frac{dy}{dx}\right) f \\
&\quad + f_y \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx}\right), \text{ by 연쇄법칙} \\
&= f_{xx} + f_{xy} f + (f_{yx} + f_{yy} f) f + f_y (f_x + f_y f) \\
&= f_{xx} + f_{xy} f + f_{yx} f + f_{yy} f^2 + f_y f_x + f_y^2 f \\
&= f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_x f_y + f_y^2 f
\end{aligned}$$

그러므로

$$\begin{aligned}
y(x_{i+1}) &= y(x_i) + h f + \frac{h^2}{2} (f_x + f f_x) \\
&\quad + \frac{h^3}{6} (f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_x f_y + f_y^2 f) + O(h^4) \text{ ---(***)}
\end{aligned}$$

한남대학교 수학과 김상배교수

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

$$k_1 = hf(x_i, y_i)$$

$$k_2 = hf(x_i + h, y_i + k_1)$$

$$y_{i+1} = y_i + (k_1 + k_2)/2$$

을 얻는다.

4차 Runge-Kutta 법

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

복잡한데 결론적으로 4차 Runge-Kutta법은 다음과 같다.

$$k_1 = h f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = h f(x_i + h/2, y_i + k_1/2)$$

$$k_3 = h f(x_i + h/2, y_i + k_2/2)$$

$$k_4 = h f(x_i + h, y_i + k_3)$$

$$y_{i+1} = y_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6$$

[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

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

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

을 **경계값 문제**라고 한다.

유한차분법

구간 $[a, b]$ 를 n 등분하여 $h = \frac{b-a}{n}$ 이라 하고, 마디점들을

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

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.

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = f\left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right), \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

경계조건 $y_0 = \alpha, y_n = \beta$ 를 이용하면, 일반적으로는 $(n-1)$ 개의 비선형 연립방정식이 된다. 하지만, $f(x, y, y')$ 이 선형(y 와 y' 에 대하여 1차이고, 그 계수들이 x 만의 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)

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

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

$$\frac{y_0 - 2y_1 + y_2}{h^2} - 1.25y_1 = 1.25^2$$

$$\frac{y_1 - 2y_2 + y_2}{h^2} - 1.50y_2 = 1.50^2$$

$$\frac{y_2 - 2y_3 + y_4}{h^2} - 1.75y_3 = 1.75^2$$

정리하면

$$y_0 - (2 + 1.25h^2)y_1 + y_2 = 1.25^2 h^2$$

$$y_1 - (2 + 1.50h^2)y_2 + y_2 = 1.50^2 h^2$$

$$y_2 - (2 + 1.75h^2)y_3 + y_4 = 1.75^2 h^2$$

이되고, 행렬 형식으로 쓰면

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

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.

$$\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} - 4(\sin x_i) \frac{y_{i-1} - y_{i+1}}{2h} - 4(\cos x_i)y_i = -\sin x_i$$

$$(2 - 4h \sin x_i)y_{i-1} + (-4 - 8h^2 \cos x_i)y_i + (2 + 4h \sin x_i)y_{i+1} = -2h^2 \sin x_i \quad \blacksquare$$

[숙제] 경계값 문제

$$y'' - y' + 2y = \cos x - \sin x, \quad 0 < x < \pi/2$$

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

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