수치 미분 2

김 기 택
국민대학교 소프트웨어학부

근사식을 이용한 미분

- $f(x)$ 가 이산적으로 주어질 때, 근사식은 미분값을 계산하는 효과적인 수단이다.
    - **근사식을 직접 미분하여 $f(x)$ 의 미분값**을 구하는 아이디어이며, 데이터가 **등간격이 아닌 경우** 유한 차분식을 사용할 수 없을 때 특별히 유용하다.
- 근사식을 만드는 것은 앞서 강의한 보간에서 소개한 방법들을 활용한다.
- 종류
    - 다항식 근사
    - 3차 스플라인 근사

다항식 근사

- n 차의 다항식을 이용하는 간단한 아이디어로서,

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$$

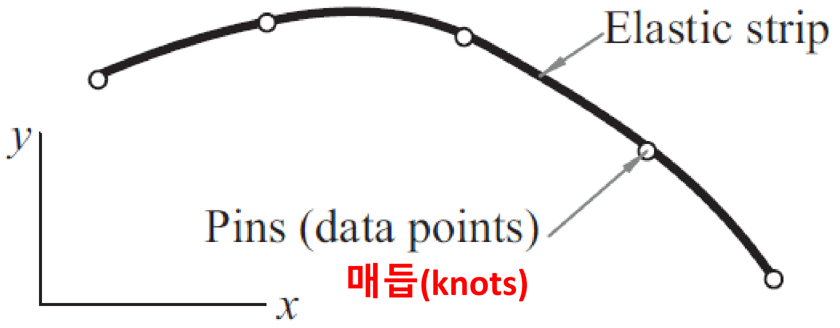
  - $n+1$ 개의 데이터를 가지고 n 차의 다항식을 근사하여 주어진 점에서 미분값을 계산한다.
  - 앞 장에서 지적하였듯이 근사값의 과도한 진동을 없애기 위해 6차 이하의 다항식을 사용하는 것이 바람직하다.
  - 이러한 한계점으로 인해 근사식은 통상 근처의 데이터 값과 만 관련이 있는 지역적인 값이 된다.

- 등간격의 데이터에 대해서는 유한 차분근사와 동일한 결과를 얻게 되며, 실제로 유한 차분식은 다항식 근사와 동일하다.

- 3장에서 소개된 최소자승법을 이용하면 진동으로 인한 문제를 피할 수 있다.
  - 근사하는 다항식의 차수를 데이터 수보다 작게 하면 최소자승법을 이용하여 곡선을 부드럽게 할 수 있다.
  - 다항식 계수를 찾게 되면 evalPoly 프로그램을 이용하여 쉽게 계산된다.

큐빅 스플라인 보간

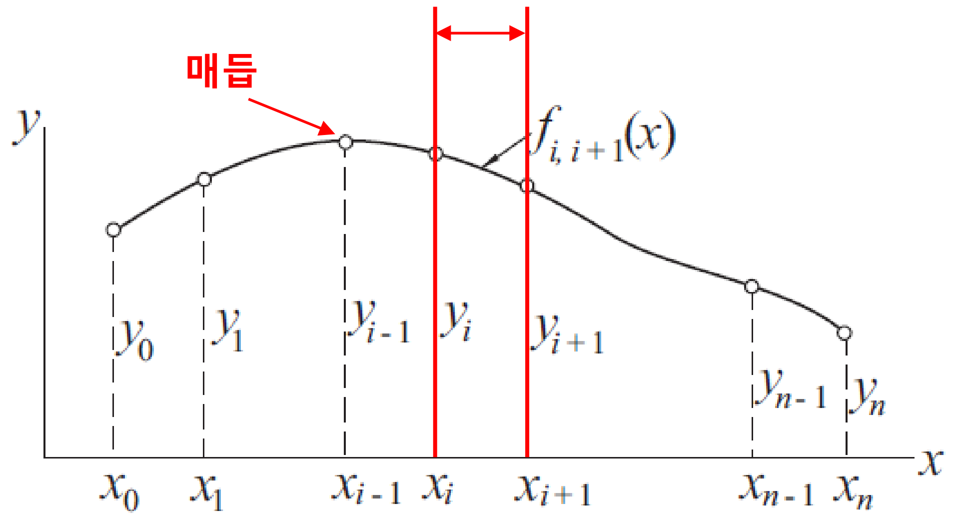
- 데이터 포인트가 많은 경우 큐빅 스플라인은 전역 보간을 위해 월등히 우수하다.
  - 데이터 포인트 사이에서 진동하는 경향이 적다는 점에서 다항식보다 **높은 강성**을 가진다 (stiff). – 진동이 거의 없다.
  - **스플라인(spline)**은 조선업에서 사용하던 얇고 탄력있는 막대이다. 자유로운 곡선을 그리기 위해 스플라인을 몇 군데 핀에 고정하고 휘어 곡선을 만들었다.



- 스플라인 곡선의 핀 사이에는 하중이 걸리지 않으므로 곡선의 형태는 3차 다항식이 된다.
  - 빔 이론에서 $d^4y / dx^4 = q / (EI)$ 이다. 하중이 0 이므로 $(q = 0)$ $y(x)$ 는 3차 다항식(cubic)이 된다.
- 핀에서 **기울기와 굽힘 모멘트(2차 도함수)가 연속적**이다.
  - 두개의 끝 핀에는 굽힘 모멘트가 없다. 굽힘 모멘트는 곡선의 2차 도함수이므로 스플라인 곡선 $y(x)$ 의 **2차 미분값은 끝점에서 0** 이다.
- 이와 같은 끝 조건은 빔에서 자연스럽게 발생하므로 결과 곡선을 **자연 입방 스플라인 (natural cubic spline)**이라 한다. 핀(데이터 포인트)을 스플라인의 **매듭(knots)**이라 한다.

스플라인 성질

- 큐빅 스플라인은 조각별 함수(piecewise function) 이다.
  - 한 구간(매듭과 매듭 사이)의 곡선은 다른 구간의 곡선과 매듭에서 **조각으로 이어 붙여져** 있다.
  - 매듭 i 와 $i+1$ 사이의 구간 곡선은 3차 다항식 $f_{i,i+1}(x)$ 로 표기한다.
  - $f_{0,1}(x), f_{1,2}(x), \ldots, f_{n-1,n}(x)$ 에서 n 개의 3차 다항식을 합치면 모두 계수가 다르다.



- 각 3차 다항식은 매듭에서 2차 도함수가 연속적이다.
  - 매듭 i 에서 스플라인의 2차 미분을 k_i 로 나타내면 2차 미분의 연속성은 다음과 같다.

$$f''_{i-1,i}(x_i) = f''_{i,i+1}(x_i) = k_i$$

  - 그러나 현재 단계에서는 다음을 제외하고는 k 값을 알 수 없다.

$$k_0 = k_n = 0$$

큐빅 스플라인의 계수 계산 (1)

- $f_{i,i+1}(x)$ 의 계수는 선형 임을 알고 있는 $f''_{i,i+1}(x)$ 에 대한 표현식부터 계산을 시작한다.
- Lagrange 2점 보간법을 사용하여, $f''_{i,i+1}(x) = k_i l_i(x) + k_{i+1} l_{i+1}(x)$
  - 여기서

$$l_i(x) = \frac{x\_x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} \qquad l_{i+1}(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

  - 그러므로

$$f''_{i,i+1}(x) = \frac{k_i(x - x_{i+1}) - k_{i+1}(x - x_i)}{x_i - x_{i+1}}$$

  - x 에 대해 두 번 적분하면,

$$f_{i,i+1}(x) = \frac{k_i(x - x_{i+1})^3 - k_{i+1}(x - x_i)^3}{6(x_i - x_{i+1})} + A(x - x_{i+1}) - B(x - x_i)$$

  - A, B 는 적분상수이다. 적분에서 발생하는 항은 $C\,x + D$ 로 나타나지만, 사용하기 편리하도록 $C = A - B, D = -Ax_{i+1} + Bx_i$ 로 표기함으로써 위식의 마지막 2개 항이 나타난다.

큐빅 스플라인의 계수 계산 (2)

- $f_{i,i+1}(x_i) = y_i$ 조건을 적용하면

$$\frac{k_i(x_i - x_{i+1})^3}{6(x_i - x_{i+1})} + A(x_i - x_{i+1}) = y_i$$

  - 그러므로,

$$A = \frac{y_i}{x_i - x_{i+1}} - \frac{k_i}{6}(x_i - x_{i+1})$$

- 비슷하게 $f_{i,i+1}(x_{i+1}) = y_{i+1}$ 조건을 적용하면,

$$B = \frac{y_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} - \frac{k_{i+1}}{6}(x_i - x_{i+1})$$

- 각 상수를 원식에 대입하여 각 세그먼트의 3차 다항식 함수를 구한다.

$$f_{i,i+1}(x) = \frac{k_i}{6}\left[\frac{(x - x_{i+1})^3}{x_i - x_{i+1}} - (x - x_{i+1})(x_i - x_{i+1})\right] - \frac{k_{i+1}}{6}\left[\frac{(x - x_i)^3}{x_i - x_{i+1}} - (x - x_i)(x_i - x_{i+1})\right]$$
$$+ \frac{y_i(x - x_{i+1}) - y_{i+1}(x - x_i)}{x_i - x_{i+1}} \qquad (3.10)$$

큐빅 스플라인의 계수 계산 (3)

- 내부 매듭에서 스플라인의 2차 도함수 k_i 는 경사 연속 조건 $f'_{i-1,i}(x_i) = f'_{i,i+1}(x_i)$ 에서 구한다. 여기서 $i = 1, 2, \dots, n-1$ 이다. (점이 n 개면 구간은 $n - 1$ 개)
  - 1차 도함수 연속 조건을 적용한 후 식을 정리하면, 양끝점 제외

$$k_{i-1}(x_{i-1} - x_i) + 2k_i(x_{i-1} - x_{i+1}) + k_{i+1}(x_i - x_{i+1})$$

$$= 6\left(\frac{y_{i-1} - y_i}{x_{i-1} - x_i} - \frac{y_i - y_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}\right), \qquad i = 1, 2, \dots, n-1 \qquad (3.11)$$

  - 식 (3.11)는 삼중 대각 행렬을 가지기 때문에 앞서 방정식을 푸는 LUdecomp3 모듈을 사용하면 경제적으로 풀 수 있다.

- 만약 데이터 포인트가 h 간격으로 균등하게 하면 $x_{i-1} - x_i = x_i - x_{i+1} = -h$ 이므로 식은 다음과 같이 단순화 된다.

$$k_{i-1} + 4k_i + k_{i+1} = \frac{6}{h^2}(y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}) \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \qquad (3.12)$$

3차 스플라인 근사

$$k_{i-1}(x_{i-1}-x_i)+2k_i(x_{i-1}-x_{i+1})+k_{i+1}(x_i-x_{i+1})$$
$$=6\left(\frac{y_{i-1}-y_i}{x_{i-1}-x_i}-\frac{y_i-y_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\right),\qquad i=1,2,\dots,n-1\qquad(3.11)$$

- 3차 스플라인은 강건함(stiffness)으로 인해 근사로 많이 사용되고, 미분하기에도 용이하다.

- 첫번째 과정은 식 (3.11)을 풀어서 매듭에서 스플라인의 이차 미분을 구하는 것이다.
  - 이 과정은 3.3 절의 cubicSpline 모듈의 curvature 함수를 이용하면 되며, 1차, 2차 미분은 다음과 같이 계산한다.

$$f'_{i,i+1}(x)=\frac{k_i}{6}\left[\frac{3(x-x_{i+1})^2}{x_i-x_{i+1}}-(x_i-x_{i+1})\right]-\frac{k_{i+1}}{6}\left[\frac{3(x-x_i)^2}{x_i-x_{i+1}}-(x_i-x_{i+1})\right]+\frac{y_i-y_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\qquad(5.10)$$

$$f''_{i,i+1}(x)=k_i\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}-k_{i+1}\frac{x-x_i}{x_i-x_{i+1}}\qquad(5.11)$$

  - 이 식은 식 (3.10)을 미분하여 얻은 것이다.

$$f_{i,i+1}(x)=\frac{k_i}{6}\left[\frac{(x-x_{i+1})^3}{x_i-x_{i+1}}-(x-x_{i+1})(x_i-x_{i+1})\right]-\frac{k_{i+1}}{6}\left[\frac{(x-x_i)^3}{x_i-x_{i+1}}-(x-x_i)(x_i-x_{i+1})\right]$$
$$+\frac{y_i(x-x_{i+1})-y_{i+1}(x-x_i)}{x_i-x_{i+1}}\qquad(3.10)$$

예제 5.4

주어진 데이터를 이용하여 (1) 해당 점 근처 3개의 데이터를 이용한 다항식 근사, (2) 모든 데이터를 포함하는 자연 3차 스플라인 근사를 사용하여 $f'(2)$ 와 $f''(2)$ 를 계산하라.

x	1.5	1.9	2.1	2.4	2.6	3.1
$f(x)$	1.0628	1.3961	1.5432	1.7349	1.8423	2.0397

[(1)번 풀이] 근처 3개 데이터를 이용한 다항식 근사를 이용한 풀이

근사식은 2.0 에 가장 가까운 3점 $x = 1.9, 2.1, 2.4$ 을 지나는 다항식 $P_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 이 된다. 최소자승법의 계수를 구하는 식 (3.22)

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \end{bmatrix}$$

이 식에 주어진 데이터를 대입하면

$$\begin{bmatrix} 3 & 6.4 & 13.78 \\ 6.4 & 13.78 & 29.944 \\ 13.78 & 29.944 & 65.6578 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.6742 \\ 10.0571 \\ 21.8385 \end{bmatrix}$$

예제 5.4 (continued)

위 식을 풀면

$$\mathbf{a} = [-0.7714 \quad 1.5075 \quad -0.1930]^T$$

근사식의 미분은 $P_2'(x) = a_1 + 2a_2x$ 와 $P_2''(x) = 2a_2$ 이다. 따라서,

$$f'(2) \approx P_2'(x) = 1.5075 + 2(-0.1930)(2) = 0.7355$$
$$f''(2) \approx P_2''(2) = 2(-0.1930) = -0.3860$$

예제 5.4 (continued)

$$f'_{i,i+1}(x) = \frac{k_i}{6}\left[\frac{3(x-x_{i+1})^2}{x_i - x_{i+1}} - (x_i - x_{i+1})\right] - \frac{k_{i+1}}{6}\left[\frac{3(x-x_i)^2}{x_i - x_{i+1}} - (x_i - x_{i+1})\right] + \frac{y_i - y_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}$$

[(2)번 풀이] 매듭에서 스플라인의 2차 미분을 구해야 하는데 식 (5.10) 과 (5.11) 에서 미분값을 계산할 수 있다. 첫번째 과정은 다음의 간단한 프로그램으로 수행할 수 있다. 이 프로그램은 3차 스플라인의 계수, k_i 를 계산하는 것이다.

$$f''_{i,i+1}(x) = k_i \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} - k_{i+1}\frac{x - x_i}{x_i - x_{i+1}}$$

```
## example5_4
from cubicSpline import curvatures
from LUdecomp3 import *
import numpy as np
xData = np.array([1.5,1.9,2.1,2.4,2.6,3.1])
yData = np.array([1.0628,1.3961,1.5432,1.7349,1.8423, 2.0397])
print(curvatures(xData,yData))
```

k_0 부터 k_5 를 포함하는 출력은

```
[ 0.      -0.4258431      -0.37744139      -0.38796663      -0.55400477      0. ]
```

k_0	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5

예제 5.4 (continued)

$x=2$ 가 매듭 1 과 2 사이에 위치하므로, $i=1$ 로 하고 식 (5.10) 과 (5.11)을 이용하여 계산한다.

$$f'(2) \approx f'_{1,2}(2) = \frac{k_1}{6}\left[\frac{3(x-x_2)^2}{x_1-x_2}-(x_1-x_2)\right]-\frac{k_2}{6}\left[\frac{3(x-x_1)^2}{x_1-x_2}-(x_1-x_2)\right]+\frac{y_1-y_2}{x_1-x_2}$$

$$=\frac{(-0.4258)}{6}\left[\frac{3(2-2.1)^2}{-0.2}-(-0.2)\right]-\frac{(-0.3774)}{6}\left[\frac{3(2-1.9)^2}{-0.2}-(-0.2)\right]+\frac{1.3961-1.5432}{-0.2}=0.7351$$

$$f''(2) \approx f''_{1,2}(2) = k_1\frac{x-x_2}{x_1-x_2}-k_2\frac{x-x_1}{x_1-x_2}=(-0.4258)\frac{2-2.1}{-0.2}-(-0.3774)\frac{2-1.9}{-0.2}=-0.4016$$

1번 해법과 2번 해법은 4자리 유효숫자에서 달라지며 $f''(2)$ 의 값은 훨씬 빠르게 차이가 난다. 이런 점은 예상 가능한 결과이다. 미분의 차수가 높아지면 계산 정확도는 낮아진다. 이 두가지 결과 중 어떤 것이 정확한지 판단하는 것은 실제 함수의 형태를 모르면 불가능하다. 이 문제에서는 데이터를 $f(x)=x^2e^{-\frac{x}{2}}$ 에서 만들었기 때문에 정확한 값은 $f'(2)=0.7358, f''(2)=-0.3679$ 이며, 1번 풀이 방법에서 보다 정확한 값을 얻었다.

예제 5.5

다음 데이터에서 $f'(0)$ 와 $f'(1)$ 을 계산하라.

x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4
$f(x)$	1.9934	2.1465	2.2129	2.1790	2.0683	1.9448	1.7655	1.5891

[풀이] 이 문제는 데이터의 수가 많으므로 3장의 최소자승법 프로그램을 이용하여 최적의 근사 다항식을 계산한다. 프로그램은 3번 실행되어 다음의 결과를 얻게 된다. (예제 3.12 풀이법 참조)

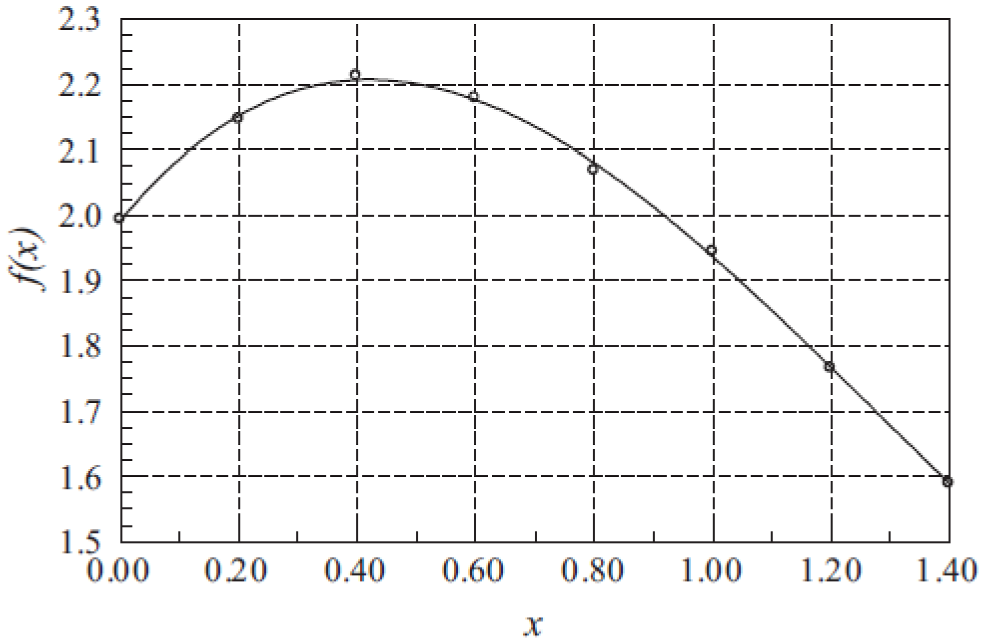
```
Degree of polynomial ==> 2
Coefficients are:
[ 2.0261875 0.64703869 -0.70239583]
Std. deviation = 0.0360968935809

Degree of polynomial ==> 3
Coefficients are:
[ 1.99215 1.09276786 -1.55333333 0.40520833]
Std. deviation = 0.0082604082973

Degree of polynomial ==> 4
Coefficients are:
[ 1.99185568 1.10282373 -1.59056108 0.44812973 -0.01532907]
Std. deviation = 0.00951925073521
```

가장 우수한 결과 (n = 3)

예제 3.12 참조
polyFit 모듈의 polyFit, stdDev 함수 이용

예제 5.5 (continued)

계산 결과 3차 다항식이 가장 우수한 결과를 보여준다. 그 결과를 가지고 데이터와 근사 다항식의 그래프를 그려 보았다. 근사식은 만족스럽게 보인다.



$f(x)$ 를 다항식으로 근사하면 다음과 같다.

$$f(x) \approx a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

그리고

$$f'(x) \approx a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2$$

따라서

$$f'(0) \approx a_1 = 1.093$$

$$f'(1) = a_1 + 2a_2 + 3a_3 = 1.093 + 2(-1.553) + 3(0.405) = -0.798$$

일반적으로 잡음이 많은 데이터를 미분하는 것은 근사식을 사용하는 것이 바람직하다. 이 문제는 $f(x) = (x+2)/\cosh x$ 에 임의의 잡음이 더해진 데이터가 사용되었으며 따라서 $f'(x) = [1 + (x+2)\tanh x]/\cosh x$ 이며, 정확한 값은 $f'(0) = 1.000$ 과 $f'(1) = -0.833$ 이다.