[수치해석] Interpolation

Fitting

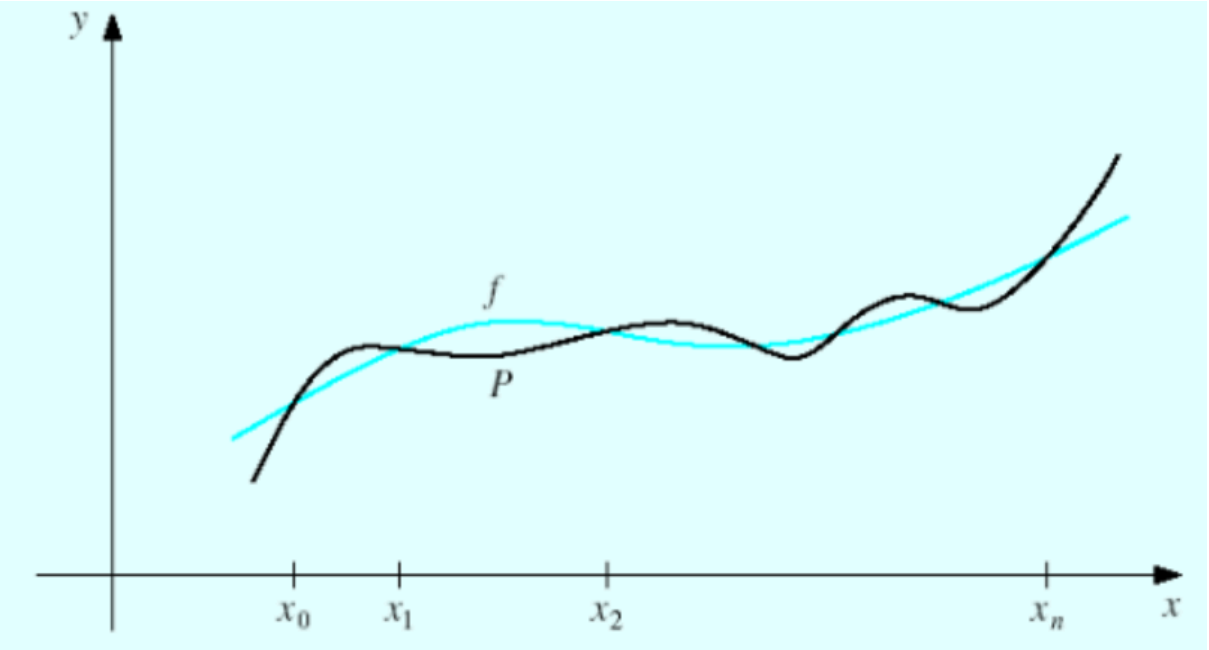
Exact Fitting: 특정 데이터를 모두 지나는 함수/곡선을 표현하는 방법.

1. **Extrapolation**: 데이터가 존재하지 않는 범위에서 값을 추정하는 것
2. **Interpolation**: 데이터가 존재하는 범위 내에서 값을 추정하는 것

Apporximation Fitting: 모든 데이터를 지나는 대신, **오차가 최소화되도록 하는 함수/곡선**을 찾는 방법

Weierstrass Approximation Theorem

> **주어진 연속 함수 $f(x)$에 대해 구간 전체에서 $||f(x) - P(x)|| < \epsilon$을 만족하도록 하는 다항식 $P(x)$가 항상 존재한다.**



Approximation error: $||f(x) - P(x)||$

그럼 이제 모든 데이터를 정확히 지나는 **다항식을 얻는 방법**에 알아보자.

Lagrange Interpolating Polynomial

실제 함수 f에 대해 $(x_0, f_0), (x_1, f_1), \ldots, (x_n, f_n)$ **데이터를 모두 지나는 n차 P(x)**를 얻고 싶은 상황을 생각해보자.

- (n+1)개의 데이터를 모두 지나는 n차 다항식은 단 하나 존재한다.

각 데이터에 대해 **Basis function**을 먼저 정의할 수 있다.

$$
\begin{aligned}
L_o(x) &= \frac{g_o(x)}{g_o(x_o)} \\
&= \frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_o-x_1)(x_o-x_2)\cdots(x_o-x_n)} \\
&= \begin{cases} 1, & x = x_o \\ 0, & x = x_1, x_2, \cdots, x_n \end{cases}
\end{aligned}
$$

$$
L_i(x) = \prod_{k=0, k\neq i}^{n} \left(\frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right)
$$

위 **Basis function**을 바탕으로 하나의 다항식을 얻을 수 있다.

$$P_n(x) = L_0(x)f_0 + L_1(x)f_1 + \ldots + L_n(x)f_n$$

- f_i: 함수값

이 방법으로 **Unique한 다항식**을 얻을 수 있지만 **너무 복잡하다는 단점**이 있다.

위 방식으로 얻은 다항식의 **Interpolation error**를 구해보자.

Error = $f(x) - P_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)u(x)$

- 모든 데이터 $(x_0, x_1, \ldots, x_n)$ 을 통과하기 때문에 해당 점에서는 0이 되도록 하기 위해 $(x - x_i)$ 항을 곱한다.
- $u(x)$: Error function

$$f(x) - P_n(x) - (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)u(x) = 0$$

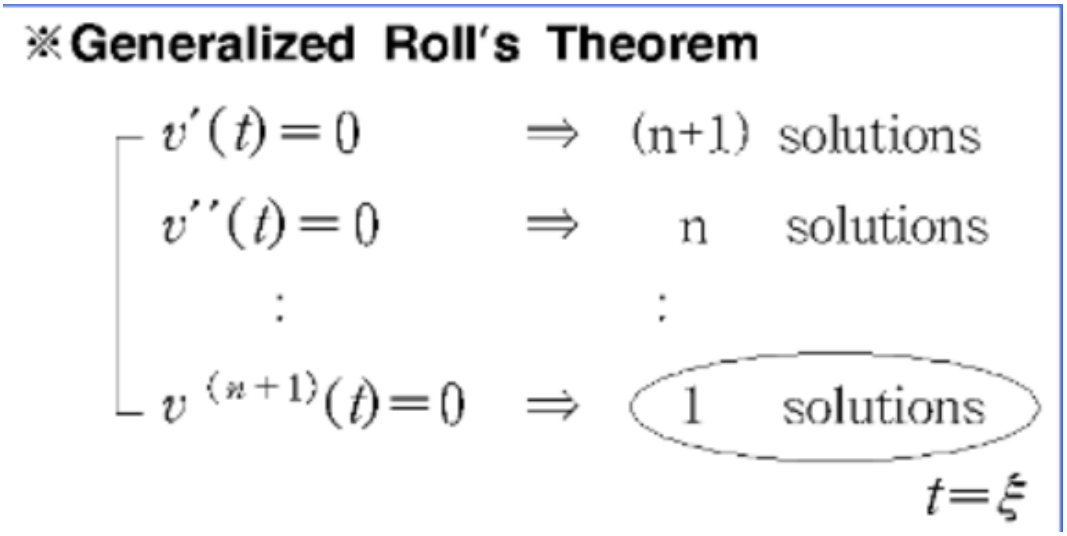
$v(t) = f(t) - P_n(t) - (t - x_0)(t - x_1) \cdots (t - x_n)u(x)$라고 하자.

- t가 변수, x는 상수 취급한다.

$v(t) = 0$은 **n+2개의 Solution**을 갖게 된다.

- $x_0 \sim x_n$의 n+1개의 Data point
- $t = x$
  - $v(x) = f(x) - P_n(x) - (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)u(x) = 0$

이제, $v(t)$를 t에 대해 (n+1)번 미분하자. 아래 정리에 의해 $v^{(n+1)}(t) = 0$**은 한 개의 Solution만을 갖는다.**



실제로 미분해보자.

$v^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - 0 - (n+1)!u(x) = 0$

- $(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$을 미분하면 $(n+1)!$
- $P(t)$는 n차 다항식이다.

위 식을 $u(x)$에 대해 정리할 수 있다.

$$u(x) = \frac{f^{(n+1)}(\epsilon)}{(n+1)!}$$

따라서 **원래의 Error**는 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$f(x) - P_n(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\frac{f^{(n+1)}(\epsilon)}{(n+1)!}$$

Difference

> **함수를 모르기 때문에 데이터로부터 미분값도 근사해야 한다. 이런 경우, Difference를 사용한다.**

Difference	정의	의미
Forward	$\nabla f_i = f_{i+1} - f_i$	한 칸 앞으로의 변화량
Backward	$\nabla f_i = f_i - f_{i-1}$	한 칸 뒤로의 변화량
Central	$\nabla f_{i+\frac{1}{2}} = f_{i+1} - f_i$	가운데 점 기준 변화량

Divided Difference

> **주어진 데이터만 가지고 기울기를 추측하는 방법**

1. First-order divided difference

$$f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}$$

- **평균값 정리**에 의해 $f[x_0, x_1] = f\prime(\xi_1)(x_0 \leq \xi_1 \leq x_1)$ 가 성립한다.

2. Second-order divided difference

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x1, x2] - f[x0, x1]}{x2 - x0}$$

$$= \frac{f_0}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{f1}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{f_2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

- 기울기의 차이의 평균 → 2차 미분과 비슷

3. N-order divided difference

$$f[x_0, ..., x_n] = \frac{f[x_1, ..., x_n] - f[x_0, ..., x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

$$= \frac{f_0}{(x_0 - x_1)...(x_0 - x_n)} + ... + \frac{f_n}{(x_n - x_0)(x_n - x_{n-1})}$$

- Second-order divided difference을 자연스럽게 확장한 것과 동일하다.

Newton’s Interpolation

> **실제 함수 f에 대해 $(x_0, f_0), (x_1, f_1), \ldots, (x_n, f_n)$ 데이터를 모두 지나는 n차 P(x)를 Divided Difference를 이용하여 Lagrange Interpolation보다 간단하게 구하는 방법**

아래 다항식이 공식이다.

$$P_n(x) = f_0 + (x - x_0)a_1 + (x - x_0)(x - x_1)a_2 + \cdots + (x - x_0)\cdots(x - x_{n-1})a_n$$

- 적절한 a_i를 구해서 함수값을 맞춘다.

Newton's Interpolation이 간단한 이유

기존 Data에 하나의 Data가 추가될 때, Lagrange처럼 L_i를 전부 새로 계산하는 대신 하나의 항을 하나만 추가하기만 하면 된다.

$$(x - x_0)\cdots(x - x_n)a_n$$

계수 구하는 방법

a_n을 예시로 알아보자.

$$P_n(x_n) - P_{n-1}(x_n) = (x_n - x_0)\cdots(x_n - x_{n-1})a_n$$

$P_n(x_n) = f_n$이기 때문에, 아래 공식처럼 변환할 수 있다.

$$f_n - P_{n-1}(x) = (x_n - x_0)\cdots(x_n - x_{n-1})a_n$$

$$=> a_n = \frac{f_n - P_{n-1}(x_n)}{(x_n - x_0)\cdots(x_n - x_{n-1})}$$

a_n이 **N-order Divided Difference와 동일한 것을 확인할 수 있다.**

따라서 아래와 같이 정리할 수 있다.

$$\begin{aligned} P_1(x) &= f_0 + (x - x_0)f[x_0, x_1] \\ &\vdots \\ P_n(x) &= f_0 + (x - x_0)f[x_0, x_1] + \cdots \\ &\quad + (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})f[x_0, \cdots, x_n] \end{aligned}$$

결국 각 $P_i(x) = P(x_i)$는 아래와 같이 행렬로 나타낼 수 있다.

- **식 * a = y**의 형태이다.
- **Linear equation을 푸는 것과 동일**해진다.

$$\begin{bmatrix} 1 & & \cdots & & 0 \\ 1 & x_1 - x_0 & & & \\ 1 & x_2 - x_0 & (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ 1 & x_k - x_0 & \cdots & \cdots & \prod_{j=0}^{k-1}(x_k - x_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ \\ \vdots \\ \\ a_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ \\ \vdots \\ \\ y_k \end{bmatrix}$$

Forward Difference version

Forward Differenec가 가능한 상황을 가정하면 더 쉽다.

각 데이터 포인트끼리 **동일한 간격**을 가진다.

- $h = x_{i+1} - x_i$
- $x_i = x_0 + i \cdot h$

이런 상황에선 미분이 더 쉽게 표현된다.

Derivation

n=1

$$a_1 = f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \frac{f_1 - f_0}{h} = \frac{1}{1!\,h}\Delta f_0$$

n=2

$$a_2 = f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$$

$$= \frac{\Delta f_1/h - \Delta f_0/h}{x_2 - x_0} = \frac{\Delta f_1 - \Delta f_0}{2h^2} = \frac{1}{2!\,h^2}\Delta^2 f_0$$

Newton's Interpolation도 더 쉽게 표현할 수 있다. a_n이 아래와 같이 정리된다.

$$a_n = f[x_0, \cdots, x_n] = \frac{f[x_1, \cdots, x_n] - f[x_0, \cdots, x_{n-1}]}{nh}$$

$$= \frac{1}{n!\,h^n}\Delta^n f_0$$

결국, **다항식** P_n 또한 아래와 같이 정리된다.

$$P_n(x) = f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \cdots + \frac{s(s-1)(s-n+1)}{n!}\Delta^n f_0$$

$$= \sum_{k=0}^{n}\binom{s}{k}\Delta^k f_0 \qquad (x = x_0 + sh)$$

Binomial coef.

Newton's Interpolation의 Error를 정리하면 다음과 같다.

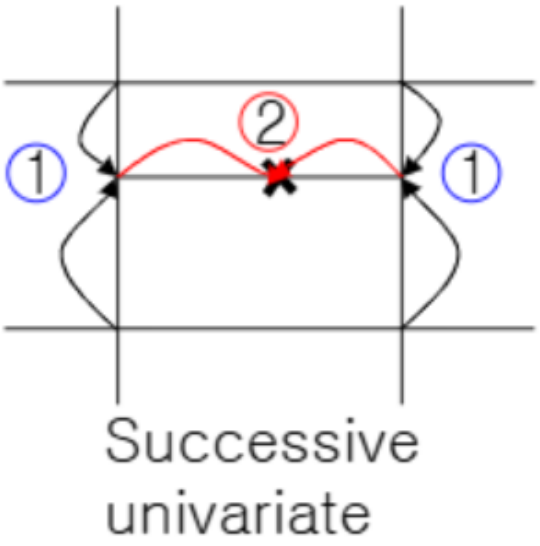
$$E(x) = \binom{s}{n+1} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi) = 0(h^{n+1}), \qquad x_0 \le \xi \le x_n$$

$$\cong \binom{s}{n+1} \Delta^{n+1} f_0$$

Interpolate of Multivariate Function

1. Successive univariate polynomial

> **한 변수에 대해 Interpolation을 반복하여 다변수 Interpolation을 구현하는 방법**



특징

- 구현 쉬움
- 다변수 형태를 정확히 반영하지 못하는 경우가 있음

Bilinear interpolation

> **가로(X) 방향과 세로(Y) 방향으로 두 번 보간하여 (X, Y) 값을 예측하는 방법**

주변 4개의 점을 이용하여 하나의 점을 예측한다.

예측하고자 하는 점: (x, y), Q_{11}: (x_1, y_1), Q_{21}: (x_2, y_1), Q_{12}: (x_1, y_2), Q_{22}: (x_2, y_2) 일 때 동작은 다음과 같다.

1. y_1의 x 방향으로 R_1을 구한다.
   - $R_1 = \frac{x-x_1}{x_2-x_1}Q_{21} + \frac{x_2-x}{x_2-x_1}Q_{11}$
2. y_2의 x 방향으로 R_2를 구한다.
   - $R_2 = \frac{x-x_1}{x_2-x_1}Q_{22} + \frac{x_2-x}{x_2-x_1}Q_{12}$
3. y 방향으로 Interpolation을 한다.
   - $(x, y) = \frac{y_2-y}{y_2-y_1}R_1 + \frac{y-y_1}{y_2-y_1}R_2$

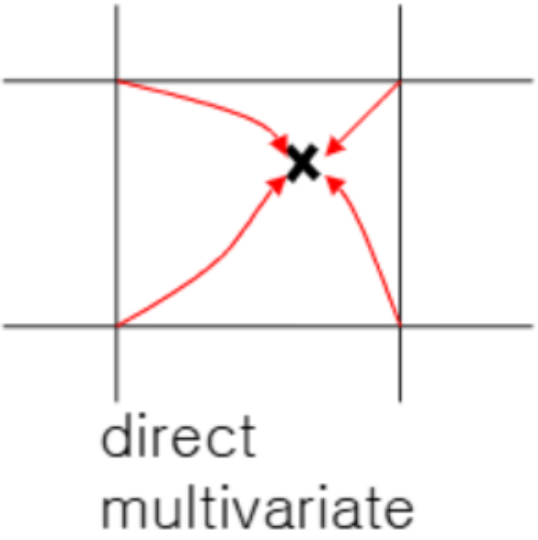
Bicubic interpolation

> **주변 16개의 Pixel을 사용해서 예측하는 방법**

- Bilinear interpolation에 비해 훨씬 부드러운 결과를 얻을 수 있다.
- Bilinear interpolation에서는 Weight가 1차이지만 Bicubic interpolation은 Weight가 3차이다.

2. Direct multivariate polynomial

> **다변수 다항식을 이용하여 직접 해결하는 방법**



특징

- 정확도 증가
- 계산 비용 커짐

주어진 y = f(x)에서 **y를 생성하는 x를 찾고 싶은 경우**에는 역함수를 이용한다.

하지만 **역함수를 찾기 어려울 때**는 아래 방법을 이용할 수 있다.

Inverse Interpolation

> **f(x)를 근사하는 Interpolation polynomial을 만들고 그 다항식을 거꾸로 풀어서 x를 얻는법**

1. f(x)를 Newton's Polynomial을 이용하여 근사했다.

$$f(x) \cong P_n(x) = f_i + (x - x_i) f[x_i, x_{i+1}]$$
$$+ (x - x_i)(x - x_{i+1}) f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$$
$$\vdots$$
$$+ (x - x_i) \cdots (x - x_{i+n-1}) f[x_i, \cdots, x_{i+n}]$$

2. 가장 먼저 First-order divided difference의 x에 대해 정리하자.

Solve for x

$$x = \frac{f(x) - f_i - \{(x - x_i)(x - x_{i+1}) f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] + \cdots\}}{f[x_i, x_{i+1}]} + x_i$$

1st approximation

$$x_1 = \frac{f(x) - f_i}{f[x_i, x_{i+1}]} + x_i$$

x_1을 구하기 위해서 2차 이상의 항은 무시한다.

3. (2)에서 x_1을 구했기 때문에 x_1을 이용하여 Second-order divided difference를 x에 대해 정리한다.

$$x_2 = \frac{f(x) - f_i - (x_1 - x_i)(x_1 - x_{i+1}) f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]}{f[x_i, x_{i+1}]} + x_i$$

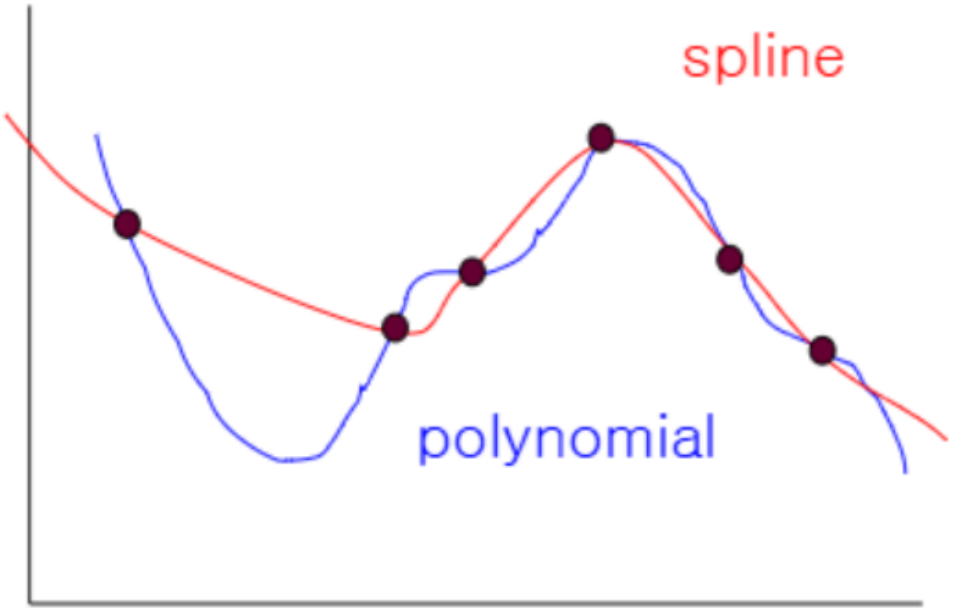
4. 위 과정을 수렴할 때까지 반복한다.

안정적이고 좋은 예측을 위한 Interpolation 기법에 대해서도 살펴보자.

Spline Interpolation

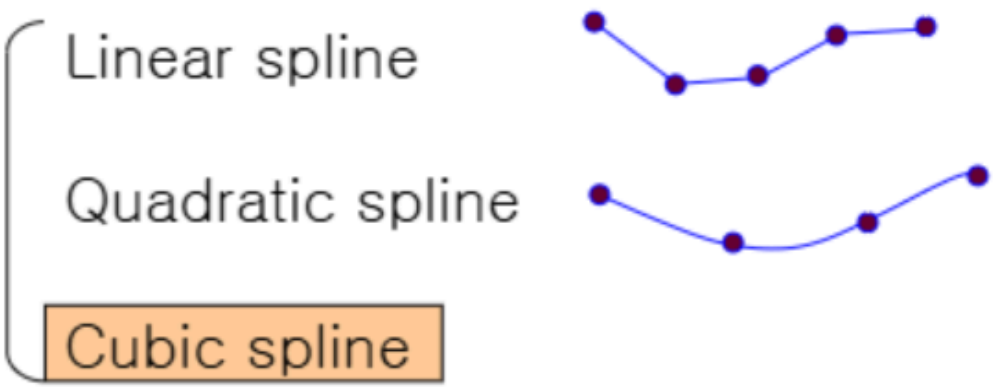
> **Spline을 이용하여 Polynomial interpolation에 비해 안정적이고 정확한 곡선을 만드는 방법**

데이터 포인트 간의 각 간격마다 다항식을 다르게 설정하여 연결하는 방법이다.



여러 종류의 **Spline**이 있다.

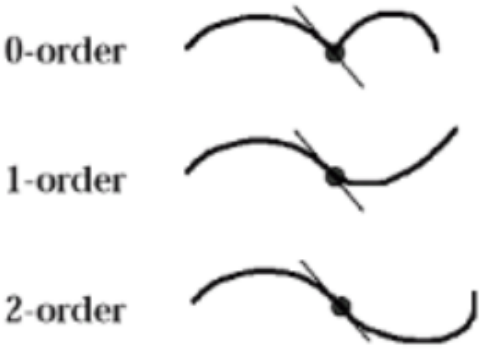
- Spline은 각 간격마다의 다항식이 어떻게 연결되어야 하는지를 정한다.



- $f'_{i-1}(x_i) = f'_i(x_i)$
- $f''_{i-1}(x_i) = f''_i(x_i)$

- Cubic spline은 각 **Data점에서 기울기와 곡률까지 같도록** 한다.

Continuity 관점에서 보면 **Linear - 0 order / Quadratic - 1 order / Cubic - 2 order** 와 대응된다.



Cubic spline interpolation

Cubic의 경우 각 간격에 **3차 다항식을 사용**한다.

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

데이터가 (n+1)개라면 구간은 n개이다.

- 각 구간마다 미지수가 4개이므로 미지수는 총 4n개이다.
- 4n개의 미지수를 구하기 위해선 4n개의 식이 필요하다.

"**구간마다 구간의 양 끝 값이 같다.**"와 "**연결되는 구간의 각 2차 기울기와 각 1차 기울기가 연결**되어야 한다."는 조건으로 **4n-2개의 식**을 얻을 수 있다.

1) $f_i(x_i) = y_i, \quad i = 0,1,\cdots,n-1$ (n)

2) $f_i(x_{i+1}) = y_{i+1}, \quad i = 0,1,\cdots,n-1$ (n)

3) continuity of f'

$f'_{i-1}(x_i) = f'_i(x_i), \quad i = 1,2,\cdots,n-1$ (n−1)

4) continuity of f"

$f''_{i-1}(x_i) = f''_i(x_i), \quad i = 1,2,\cdots,n-1$ (n−1)

따라서 **2개의 식을 추가**로 얻기 위해, **Boundary condition을 추가하는 여러 방법**이 있다.

Method 1 : $f''_0(x_0) = 0,\ f''_{n-1}(x_n) = 0$ natual cubic

Method 2 : $f''_0(x_0) = f''_0(x_1),\ f''_{n-1}(x_{n-1}) = f''_{n-1}(x_n)$

Method 3 : $f''_1(x_1) = \frac{f''_0(x_0) + f''_2(x_2)}{2},\ f''_{n-1}(x_{n-1}) = \frac{f''_{n-2}(x_{n-2}) + f''_{n-1}(x_n)}{2}$

- 방법 1: 양 끝 구간을 **직선**으로 만든다.

- 방법 2: 양 끝 구간의 곡률을 상수 → **양 끝을 포물선**으로 부드럽게 만든다.
- 방법 3: x_0, x_1, x_2에서 2계 도함수의 변화율(기울기)이 일정 → 첫 번째에서 두 번째 구간까지를 **하나의 3차 곡선**으로 잇는다.