

1 最小二乗近似

定義 1. 高々 n 次の多項式の中で L^2 -ノルムの意味で f に最も近い多項式, 即ち

$$\|f - P\|_2 = \inf\{\|f - Q\|_2 \mid Q : \text{高々 } n \text{ 次の多項式}\}$$

を満たす多項式 P を f の n 次最小二乗近似式と言う.

閉区間 $[\alpha, \beta]$ 上の関数 f について, n 次最小二乗近似式 $P(x) = c_0 + c_1x^1 + c_2x^2 + \cdots + c_nx^n$ の係数 $(c_0, c_1, c_2, \dots, c_n)$ を具体的に求める方法について論じる.

1.1 正規方程式

$\mathbf{c} = (c_0, c_1, c_2, \dots, c_n) \in \mathbb{R}^{n+1}$ に対し, 多項式 $P_{\mathbf{c}}$ を $P_{\mathbf{c}}(x) := c_0 + c_1x^1 + c_2x^2 + \cdots + c_nx^n$ と置けば, 関係

$$\mathbb{R}^{n+1} \ni \mathbf{c} \leftrightarrow P_{\mathbf{c}} \in \{P : \text{高々 } n \text{ 次元多項式}\}$$

は一対一である¹. 高々 n 次元多項式全体の空間と係数空間 $\mathbb{R}^{n+1}$ を同一視し, 多項式 $P_{\mathbf{c}}$ と関数 f の距離 $\|f - P_{\mathbf{c}}\|_2$ を係数空間 $\mathbb{R}^{n+1}$ からの関数と捉え, 解析的アプローチにより最小二乗近似式を求めることができる.

定理 1. $n+1 \times n+1$ 次行列 $\mathbf{A} = (a_{i,j})$ と $n+1$ 次ベクトル $\mathbf{b} = (b_j)$ を

$$a_{i,j} := \int_{\alpha}^{\beta} x^{i+j} dx, \quad b_j := \int_{\alpha}^{\beta} x^j f(x) dx$$

と置く. このとき $n+1$ 次連立一次方程式 $\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{b}$ の解 $\mathbf{c} = (c_0, c_1, c_2, \dots, c_n)$ を係数に持つ多項式 $P_{\mathbf{c}}(x) := c_0 + c_1x^1 + c_2x^2 + \cdots + c_nx^n$ は f の n 次最小二乗近似式である.

連立一次方程式 $\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{b}$ を正規方程式と言う. 正規方程式の係数行列 $\mathbf{A}$ は関数 f に依存しない事に注意せよ. 係数行列は区間にのみ依存し,

$$a_{i,j} = \int_{\alpha}^{\beta} x^{i+j} dx = \left[\frac{1}{i+j+1} x^{i+j+1} \right]_{\alpha}^{\beta} = \frac{\beta^{i+j+1} - \alpha^{i+j+1}}{i+j+1}$$

で与えられる.

定理 1 の証明. 冒頭に述べたように係数空間から $P_{\mathbf{c}}$ と f の距離への関数を考えるが, L^2 -ノルムの定義より

$$\|f - P\|_2 = \sqrt{\int_{\alpha}^{\beta} (f(x) - P(x))^2 dx}$$

¹特にベクトル空間としても同型である

であるが、ノルムが最小である事とノルムの 2 乗が最小である事は同値であるから、簡単の為に

$$D : \mathbb{R}^{n+1} \ni \mathbf{c} \mapsto \|f - P_{\mathbf{c}}\|_2^2 \in \mathbb{R}$$

と置き、 $D(\mathbf{c})$ を最小にする $\mathbf{c} = (c_0, c_1, \dots, c_n)$ を探す。

$$D(c_0, c_1, \dots, c_n) \text{ の値は, } P_{\mathbf{c}}(x) = c_0 + c_1x^1 + c_2x^2 + \dots + c_nx^n = \sum_{i=0}^n c_ix^i$$

より,

$$\begin{aligned} D(c_0, c_1, \dots, c_n) &= \|f - P_{\mathbf{c}}\|_2^2 \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} (f(x) - \sum_{i=0}^n c_ix^i)^2 dx \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} f^2(x) - 2f(x) \sum_{i=0}^n c_ix^i + (\sum_{i=0}^n c_ix^i)^2 dx \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} f^2(x) dx - 2 \sum_{k=0}^n c_k \int_{\alpha}^{\beta} f(x)x^k dx + \sum_{0 \leq i, j \leq n} c_ic_j \int_{\alpha}^{\beta} x^{i+j} dx \\ &= b_0 - 2 \sum_{j=0}^n b_jc_j + \sum_{0 \leq i, j \leq n} a_{i,j}c_ic_j \end{aligned}$$

である。特に

$$a_{i,i} = \int_{\alpha}^{\beta} x^{2i} dx > 0$$

なる事に注意すれば D は 2 次の係数が正の 2 次関数であるから

$$D:\text{最小値} \Leftrightarrow \text{すべての } k \text{ について } \frac{\partial D}{\partial c_k} = 0$$

今,

$$\frac{\partial D}{\partial c_k} = -2b_k + 2 \sum_{j=0}^n a_{k,j}c_j$$

であるから、 D の最小値を与える $(c_0, \dots, c_n)$ は $n+1$ 次元連立一次方程式

$$\begin{cases} a_{0,0}c_0 + a_{0,1}c_1 + \dots + a_{0,n}c_n = b_0 \\ a_{1,0}c_0 + a_{1,1}c_1 + \dots + a_{1,n}c_n = b_1 \\ \vdots \\ a_{n,0}c_0 + a_{n,1}c_1 + \dots + a_{n,n}c_n = b_n \end{cases}$$

の解である。 □

例 1. $[0, 2\pi]$ で正弦関数 $\sin x$ の 3 次最小二乗近似式を正規方程式を用いて求める。定数ベクトルは

$$b_0 = \int_0^{2\pi} \sin x dx = -[\cos x]_0^{2\pi} = 0$$

$$\begin{aligned}
b_1 &= \int_0^{2\pi} x \sin x \, dx \\
&= -[x \cos x]_0^{2\pi} + \int_0^{2\pi} \cos x \, dx \\
&= -2\pi + [\sin x]_0^{2\pi} = -2\pi \\
b_j &= \int_0^{2\pi} x^j \sin x \, dx \\
&= -[x^j \cos x]_0^{2\pi} + j \int_0^{2\pi} x^{j-1} \cos x \, dx \\
&= -(2\pi)^j + j \left([x^{j-1} \sin x]_0^{2\pi} - (j-1) \int_0^{2\pi} x^{j-2} \sin x \, dx \right) \\
&= -(2\pi)^j - j(j-1)b_{j-2}
\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{pmatrix} \frac{(2\pi)^1}{1} & \frac{(2\pi)^2}{2} & \frac{(2\pi)^3}{3} & \frac{(2\pi)^4}{4} \\ \frac{(2\pi)^2}{2} & \frac{(2\pi)^3}{3} & \frac{(2\pi)^4}{4} & \frac{(2\pi)^5}{5} \\ \frac{(2\pi)^3}{3} & \frac{(2\pi)^4}{4} & \frac{(2\pi)^5}{5} & \frac{(2\pi)^6}{6} \\ \frac{(2\pi)^4}{4} & \frac{(2\pi)^5}{5} & \frac{(2\pi)^6}{6} & \frac{(2\pi)^7}{7} \end{pmatrix} \mathbf{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ -2\pi \\ -(2\pi)^2 \\ -(2\pi)^3 + 6 \times (2\pi) \end{pmatrix}$$

を適当な方法で解けば, その解

$$c_0 \doteq -0.203312 \quad c_1 \doteq 1.908116 \quad c_2 \doteq -0.880158 \quad c_3 \doteq 0.093388$$

を係数に持つ 3 次多項式 $P(x) = 1.908116x - 0.880158x^2 + 0.093388x^3$ が $[0, 2\pi]$ での正弦関数の 3 次の最小二乗近似式である.

図 1: $[0, 2\pi]$ における正弦関数と $P(x) = -0.203312 + 1.908116x - 0.880158x^2 + 0.093388x^3$ のグラフ

問 1. $[-1, 1]$ で $\cos \pi x$ の 4 次最小二乗近似式を正規方程式を用いて求めよ.
後述の直行多項式系を用いて求めた値と比較せよ.

1.2 直交多項式系

$[\alpha, \beta]$ 上の高々 n 次元多項式関数全体の成す線形空間を V と置く. V は $L^2([\alpha, \beta])$ の有限次元部分空間 (特に閉でもある) である. V の直行基底を用いて V の元を表現する事により, f の最小二乗近似を求める事ができる.

定理 2. 各々高々 n 次の多項式 $P_0, \dots, P_n$ が直交している, 即ち,

$$(P_k, P_l) = \int_{\alpha}^{\beta} P_k(x) P_l(x) dx = \lambda_k \delta_{kl}$$

なる時,

$$\sum_{k=0}^n \frac{(f, P_k)}{\lambda_k} P_k$$

が最小二乗多項式になる.²

Proof. 直交性より $P_0, P_1, \dots, P_n$ は一次独立であるから, 任意の高々 n 次元多項式が $d_0 P_0 + d_1 P_1 + \dots + d_n P_n$ と書ける事に注意する.

直交性より

$$\begin{aligned} \|f - \sum_{k=0}^n d_k P_k\|_2^2 &= (f - \sum_{k=0}^n d_k P_k, f - \sum_{k=0}^n d_k P_k) \\ &= \|f\|_2^2 - 2 \sum_{k=0}^n d_k (P_k, f) + \sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^n d_k d_l (P_k, P_l) \\ &= \|f\|_2^2 - 2 \sum_{k=0}^n d_k (P_k, f) + \sum_{k=0}^n \lambda_k d_k^2 \end{aligned}$$

であるから

$$\tilde{D} : \mathbb{R}^{n+1} \ni (d_0, \dots, d_n) \mapsto \|f - \sum_{k=0}^n d_k P_k\|_2^2 \in \mathbb{R}$$

を最小にする為には

$$0 = \frac{\partial \tilde{D}}{\partial c_k} = -2(P_k, f) + 2\lambda_k d_k$$

□

幾つかの直行多項式系が知られている.

²一般論で言えば, ヒルベルト空間 $L^2([\alpha, \beta])$ 上の有限次元部分空間 V への射影が存在する事に対応する. (これは更に閉部分空間への射影の存在にまで拡張できる.) 故に最小二乗近似式は一意的である.

例 2. [ルジャンドル関数]

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 & P_1(x) &= x \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) & P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \\ P_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \end{aligned}$$

一般に

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$

は $L^2([-1, 1])$ で直交する. ($\lambda_k = \frac{2}{2k+1}$)

問 2. ルジャンドル関数が $L^2([-1, 1])$ で直交する事を示せ.³

例 3. $[-1, 1]$ で例 2 の直交形を用いて $f(x) = \cos \pi x$ の 4 次最小二乗多項式を求める.

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \cos \pi x \, dx &= 0 \\ \int_{-1}^1 x \cos \pi x \, dx &= 0 \\ \int_{-1}^1 x^2 \cos \pi x \, dx &= \left[\frac{1}{\pi} x^2 \sin \pi x \right]_{-1}^1 - \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 x \sin \pi x \, dx \\ &= \left[\frac{2}{\pi^2} x^2 \cos \pi x \right]_{-1}^1 - \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \cos \pi x \, dx = -\frac{4}{\pi^2} \\ \int_{-1}^1 x^3 \cos \pi x \, dx &= 0 \\ \int_{-1}^1 x^4 \cos \pi x \, dx &= \left[\frac{1}{\pi} x^4 \sin \pi x \right]_{-1}^1 - \frac{4}{\pi} \int_{-1}^1 x^3 \sin \pi x \, dx \\ &= \left[\frac{4}{\pi^2} x^3 \cos \pi x \right]_{-1}^1 - \frac{12}{\pi^2} \int_{-1}^1 x^2 \cos \pi x \, dx \\ &= -\frac{8}{\pi^2} - \frac{12}{\pi^2} \left(-\frac{4}{\pi^2} \right) = -\frac{8}{\pi^2} \left(1 - \frac{6}{\pi^2} \right) \end{aligned}$$

であるから,

$$\begin{aligned} (f, P_0) &= \int_{-1}^1 \cos \pi x \, dx = 0 \\ (f, P_1) &= \int_{-1}^1 x \cos \pi x \, dx = 0 \\ (f, P_2) &= \frac{1}{2} \left(3 \int_{-1}^1 x^2 \cos \pi x \, dx - \int_{-1}^1 \cos \pi x \, dx \right) = -\frac{6}{\pi^2} \end{aligned}$$

³ ヒント: $n > m$ の時 P_n と x^m が直行する事を示せ.

$$\begin{aligned}
(f, P_3) &= \frac{1}{2} \left(5 \int_{-1}^1 x^3 \cos \pi x \, dx - 3 \int_{-1}^1 x \cos \pi x \, dx \right) = 0 \\
(f, P_4) &= \frac{1}{8} \left(35 \int_{-1}^1 x^4 \cos \pi x \, dx - 30 \int_{-1}^1 x^2 \cos \pi x \, dx + 3 \int_{-1}^1 \cos \pi x \, dx \right) \\
&= -\frac{35}{\pi^2} \left(1 - \frac{6}{\pi^2} \right) + \frac{15}{\pi^2} = \frac{210}{\pi^4} - \frac{20}{\pi^2}
\end{aligned}$$

よって最小二乗多項式は

$$\begin{aligned}
\sum_{k=0}^4 \frac{(f, P_k)}{\lambda_k} P_k(x) &= \frac{5}{2} \left(-\frac{6}{\pi^2} \right) P_2(x) + \frac{9}{2} \left(\frac{210}{\pi^4} - \frac{20}{\pi^2} \right) P_4(x) \\
&= \frac{5}{2} \left(-\frac{6}{\pi^2} \right) \frac{1}{2} (3x^2 - 1) + \frac{9}{2} \left(\frac{210}{\pi^4} - \frac{20}{\pi^2} \right) \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3) \\
&= \frac{315}{8} \left(\frac{105}{\pi^4} - \frac{10}{\pi^2} \right) x^4 - \frac{15}{2\pi^2} (3x^2 - 1) - \frac{135}{4} \left(\frac{105}{\pi^4} - \frac{10}{\pi^2} \right) x^2 + \frac{27}{8} \left(\frac{105}{\pi^4} - \frac{10}{\pi^2} \right) \\
&= \frac{315}{8} \left(\frac{105}{\pi^4} - \frac{10}{\pi^2} \right) x^4 - \frac{135}{4} \left(\frac{105}{\pi^4} - \frac{28}{3\pi^2} \right) x^2 + \frac{27}{8} \left(\frac{105}{\pi^4} - \frac{70}{9\pi^2} \right) \\
&\doteq 2.548204x^4 - 4.463902x^2 + 0.978326
\end{aligned}$$

図 2: $[-1, 1]$ における $\cos \pi x$ と $Q(x) = 2.548204x^4 - 4.463902x^2 + 0.978326$ のグラフ