

1 補間

最小二乗近似は目的の関数 f をよく近似していると言えるが、係数決定の為に f に関係する積分値を用いるので f についてある程度詳しい情報が必要である。一方で目的の関数 f が実験の結果や観測値についての関数である場合、 f のいくつかの点での値のみが分かっている事がしばしばある。そのような時でも”既知の点では正しい値を取る関数”を考える事ができる。

定義 1. 相異なる有限個の点 $x_1, \dots, x_n$ において f と一致する関数 f_n を f の $x_1, \dots, x_n$ における**補間**と言い、 $x_1, \dots, x_n$ をその**標本点**または**補間点**と言う。

明らかに f の $x_1, \dots, x_n$ における補間は一意ではない。(点 $(x_1, \dots, x_n)$ で値 $(f(x_1), \dots, f(x_n))$ を取る関数は無数にある。) 然しながら、補間がある種の関数の組の線形結合に限定するならば補間は唯一つに決定する事ができる。

定理 1. n 個の関数 $\{g_1, \dots, g_n\}$ の組が標本点 $x_1, \dots, x_n$ について、 n 個の n 次元ベクトル

$$\begin{pmatrix} g_1(x_1), \dots, f_1(x_n) \\ g_2(x_1), \dots, f_2(x_n) \\ \vdots \\ g_n(x_1), \dots, f_n(x_n) \end{pmatrix} \quad (1)$$

を一次独立にするとする。 $\{g_1, \dots, g_n\}$ の線形結合全体

$$\{g = c_1 g_1 + \dots + c_n g_n \mid c_i \in \mathbb{R}\}$$

の中で f の標本点 $x_1, \dots, x_n$ における補間は唯一つである。

例 1. $[a, b]$ の任意の $n + 1$ 個の標本点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ について、関数の組 $1, x, x^2, \dots, x^n$ は補間を一意に与える。

例 2. $[0, 2\pi]$ の $2n + 1$ 個の標本点 $0, \frac{\pi}{n}, \frac{2\pi}{n}, \dots, 2\pi$ について、三角関数の組 $\{1\} \cup \{\sin kx, \cos kx\}_{k=1, \dots, n}$ は補間を一意に与える。

1.1 多項式補間 (ラグランジュの補間公式)

特に

$$\{P_n = c_0 + c_1 x^1 + \dots + c_n x^n \mid c_i \in \mathbb{R}\}$$

上の、即ち n 次多項式による補間は次で与えることができる。

定理 2 (ラグランジュの補間公式). 関数 f と $n + 1$ 個の標本点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ に対し

$$P_n(x) := \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i^{(n)}(x)$$

とおけば, n 次多項式 $P_n(x)$ は f の補間になる. 即ち, 任意の x_i において $f(x_i) = P_n(x_i)$. 但し, $L_i^{(n)}(x)$ は次で与えられる多項式とする:

$$L_i^{(n)}(x) := \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

例 3. $[0, 2\pi]$ 上の正弦関数を標本点 $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi$ のラグランジュの補間公式により補間多項式を求める. 標本点の数が 5 であるから $n = 4$ である. 各 $f(x_i)$ は

$$\begin{aligned} f(x_0) &= f(0) = \sin 0 = 0 & f(x_1) &= f\left(\frac{\pi}{2}\right) = \sin \frac{\pi}{2} = 1 \\ f(x_2) &= f(\pi) = \sin \pi = 0 & f(x_3) &= f\left(\frac{3\pi}{2}\right) = \sin \frac{3\pi}{2} = -1 \\ f(x_4) &= f(2\pi) = \sin 2\pi = 0 \end{aligned}$$

となる. $f(x_i) \neq 0$ である i について $L_i^{(4)}(x)$ を求めれば

$$\begin{aligned} L_1^{(4)}(x) &= \frac{(x-0)(x-\pi)(x-\frac{3\pi}{2})(x-2\pi)}{(\frac{\pi}{2}-0)(\frac{\pi}{2}-\pi)(\frac{\pi}{2}-\frac{3\pi}{2})(\frac{\pi}{2}-2\pi)} \\ &= -\frac{8}{3\pi^4}x(x-\pi)(x-\frac{3\pi}{2})(x-2\pi) \\ &= -\frac{8}{3\pi^4}x^4 + \frac{12}{\pi^3}x^3 - \frac{52}{3\pi^2}x^2 + \frac{8}{\pi}x \\ L_3^{(4)}(x) &= \frac{(x-0)(x-\frac{\pi}{2})(x-\pi)(x-2\pi)}{(\frac{3\pi}{2}-0)(\frac{3\pi}{2}-\frac{\pi}{2})(\frac{3\pi}{2}-\pi)(\frac{3\pi}{2}-2\pi)} \\ &= -\frac{8}{3\pi^4}x(x-\frac{\pi}{2})(x-\pi)(x-2\pi) \\ &= -\frac{8}{3\pi^4}x^4 + \frac{28}{3\pi^3}x^3 - \frac{28}{3\pi^2}x^2 + \frac{8}{3\pi}x \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} P_4(x) &= \sum_{i=0}^4 f(x_i)L_i^{(4)}(x) \\ &= L_1^{(4)}(x) - L_3^{(4)}(x) \\ &= \frac{8}{3\pi^3}x^3 - \frac{8}{\pi^2}x^2 + \frac{16}{3\pi}x \end{aligned}$$

が補間多項式である, 実際標本点 $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi$ において

$$\begin{aligned} P_4(0) &= 0 = f(0) \\ P_4\left(\frac{\pi}{2}\right) &= \frac{1}{3} - 2 + \frac{8}{3} = 1 = f\left(\frac{\pi}{2}\right) \\ P_4(\pi) &= \frac{8}{3} - 8 + \frac{16}{3} = 0 = f(\pi) \\ P_4\left(\frac{3\pi}{2}\right) &= 9 - 18 + 8 = -1 = f\left(\frac{3\pi}{2}\right) \\ P_4(2\pi) &= \frac{64}{3} - 32 + \frac{32}{3} = 0 = f(2\pi) \end{aligned}$$

図 1: $[0, 2\pi]$ における正弦関数 (破線) と 3 次ミニマックス近似 (細かい破線) 及び標本点 $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi$ における補間多項式 P_4 (実線)

である.

定理 1 の証明. $L_i^{(n)}$ の定義より $i \neq j$ なる j について

$$\begin{aligned} L_i^{(n)}(x_i) &= \frac{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} = 1 \\ L_i^{(n)}(x_j) &= \frac{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \cdots (x_j - x_{i-1})(x_j - x_{i+1}) \cdots (x_j - x_j) \cdots (x_j - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} = 0 \end{aligned}$$

である事に注意すればよい. 上式より任意の x_j について

$$P_n(x_j) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i^{(n)}(x_j) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \delta_{i,j} = f(x_j)$$

□

補間では, 標本点以外での f の値は考慮されていない. しかしながら, 関数 f が十分な滑らかさを持つ時, 標本点以外での誤差も評価できる事がある. 特に多項式補間では次の様に一様ノルムを評価できる.

定理 3. f が $[a, b]$ で $n+1$ 回微分可能ならば $[a, b]$ 内の標本点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 上の補間多項式 P_n について次が言える:

任意の $x \in [a, b]$ について, ある $y \in [a, b]$ があって

$$f(x) = P_n(x) + \frac{1}{(n+1)!} F_n(x) f^{(n)}(y) \quad (2)$$

を満たす. 但し, $F_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$.

特に f が $[a, b]$ で C^{n+1} -級, 即ち, $n+1$ 回微分可能で $n+1$ 階導関数 $f^{(n)}$ に連続性があるならば, $\|f^{(n)}\|_\infty < \infty$ であるので, 定理より最大値ノルムに関して

$$\|f - P_n\|_\infty \leq \frac{(b-a)^{n+1}}{(n+1)!} \|f^{(n)}\|_\infty$$

の評価が得られる.

例 4. $[0, 2\pi]$ 上で $n+1$ 個の標本点を用いた正弦関数の補間について, $f^{(n)}(x) = (\sin x)^{(n)} = \sin(x + \pi n/2)$ より $\|f^{(n)}\|_\infty \leq 1$ であるので

$$\|f - P_n\|_\infty \leq \frac{(2\pi)^{n+1}}{(n+1)!}$$

例 3 では $n = 4$ であったので上式の右辺は小さくないが, n が大きくなれば急速に小さくなる.

定理 4 の証明. ある i について $x = x_i$ なる時, 式 (2) の両辺は共に 0 であるので明らか.

以下任意の i について $x \neq x_i$ とする. x を固定しておき, 関数 $h(t)$ を

$$h(t) := f(t) - P_n(t) - \frac{F_n(t)}{F_n(x)} (f(x) - P_n(x))$$

で定める. 特に $t = x$ なるとき,

$$h(x) = f(x) - P_n(x) - \frac{F_n(x)}{F_n(x)} (f(x) - P_n(x)) = 0$$

である事に注意する. また, 標本点上では, 即ちある i について $t = x_i$ なるときは $f(x_i) = P_n(x_i)$ かつ $F_n(x_i) = 0$ であるので $g(x_i) = 0$ となる.

x がどの x_i とも等しくない事を仮定しているので, $h(t)$ は少なくとも $\{x_i\}_{i=0}^n \cup \{x\}$ の $n+2$ 個の零点を持つ. これを昇順に並べたものを $(y_0^{(0)})_{i=1}^{n+1}$ と書く. 即ち,

$$h(y_i^{(0)}) = 0 \text{ for } i = 0, 1, \dots, n+1, \quad y_i^{(0)} < y_{i+1}^{(0)} \text{ for } i = 0, 1, \dots, n.$$

f の微分可能性より, h も $n+1$ 回微分可能である. 特に $y_i^{(0)} < y_{i+1}^{(0)}$ で $h(y_i^{(0)}) = h(y_{i+1}^{(0)}) = 0$ なる事に注意すれば, ロルの定理より, h の導関数 $h^{(1)}$ が 0 になる点が区間 $(y_i^{(0)}, y_{i+1}^{(0)})$ に存在する. 即ち, 在る $y_i^{(1)} \in (y_i^{(0)}, y_{i+1}^{(0)})$ があって $h^{(1)}(y_i^{(1)}) = 0$.

これを $i = 0, 1, \dots, n$ について行えば, $y_i^{(1)} < y_{i+1}^{(0)} < y_{i+1}^{(1)}$ であるので,

$$h^{(1)}(y_i^{(1)}) = 0 \text{ for } i = 0, 1, \dots, n, \quad y_i^{(1)} < y_{i+1}^{(1)} \text{ for } i = 0, 1, \dots, n-1.$$

なる $(y_i^{(1)})_{i=1}^n$ が存在する.

以下帰納的に $k = 2, \dots, n+1$ について

$$h^{(k)}(y_i^{(k)}) = 0 \text{ for } i = 0, 1, \dots, n+1-k, \quad y_i^{(k)} < y_{i+1}^{(k)} \text{ for } i = 0, 1, \dots, n-k.$$

なる $(y_i^{(k)})_{i=1}^n$ が存在する.

特に $y = y_0^{(n+1)}$ とする. $h^{(n+1)}(y) = 0$ であるが, P_n は高々 n 次であるので $P_n^{(n+1)}(t) \equiv 0$, 定義より F_n が $n+1$ 次係数が 1 の $n+1$ 次多項式である事に注意すれば, $F_n^{(n+1)}(t) \equiv (n+1)!$ であるから

$$\begin{aligned} 0 &= h^{(n+1)}(y) \\ &= f^{(n+1)}(y) - P_n^{(n+1)}(y) - \frac{F_n^{(n+1)}(y)}{F_n(x)}(f(x) - P_n(x)) \\ &= f^{(n+1)}(y) - \frac{(n+1)!}{F_n(x)}(f(x) - P_n(x)) \end{aligned}$$

であり, 式を整理すれば定理を得る. □

1.2 三角関数による補間 (有限フーリエ変換)

定理 4 (有限フーリエ変換). $[0, \pi]$ 上の $2n+1$ 個の標本点 $0, \frac{\pi}{n}, \frac{2\pi}{n}, \dots, 2\pi$ について,

$$g(x) := \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx + b_k \sin kx) + \frac{1}{2}a_n$$

とおけば, g は f の補間になる. 即ち, 任意の x_i において $f(x_i) = g(x_i)$. 但し, a_k, b_k は次で与えられる:

$$\begin{aligned} a_k &:= \frac{1}{n} \left(\frac{1}{2}f(0) + \sum_{j=1}^{2n-1} f\left(\frac{j}{n}\pi\right) \cos \frac{jk\pi}{n} + \frac{1}{2}f(2\pi) \right) \\ b_k &:= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{2n-1} f\left(\frac{j}{n}\pi\right) \sin \frac{jk\pi}{n} \end{aligned}$$

例 5.

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x < \pi \\ 0.5 & \text{if } x = \pi \\ 0 & \text{if } x > \pi \end{cases}$$

を $n = 10$ で有限フーリエ変換して得られた三角関数による補間

定理 4 の証明. (略) 三角関数の選点直交性

$$\sum_{j=0}^{2n-1} \cos \frac{jk\pi}{n} \sin \frac{jl\pi}{n} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n-1} \sin \frac{j(k+l)\pi}{n} = 0$$

$$\sum_{k=0}^{2n-1} \cos \frac{jk\pi}{n} \cos \frac{jl\pi}{n} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{2n-1} \left\{ \cos \frac{j(k+l)\pi}{n} + \cos \frac{j(k-l)\pi}{n} \right\} = \begin{cases} 0 & \text{if } k \neq l \\ 2n & \text{if } k = l = 0 \\ n & \text{if } k = l \neq 0 \end{cases}$$

$$\sum_{j=0}^{2n-1} \sin \frac{jk\pi}{n} \sin \frac{jl\pi}{n} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{2n-1} \left\{ -\cos \frac{j(k+l)\pi}{n} + \cos \frac{j(k-l)\pi}{n} \right\} = \begin{cases} 0 & \text{if } k \neq l \\ 0 & \text{if } k = l = 0 \\ n & \text{if } k = l \neq 0 \end{cases}$$

を用いればよい.

□