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 $(c_0,c_1,c_2,\ldots,c_n)$ を具体的に求める方法について論じる.

1.1 正規方程式

$\mathbf{c}=(c_0,c_1,c_2,\ldots,c_n)\in\mathbb{R}^{n+1}$ 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

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

と置く. このとき $n+1$ 次連立一次方程式 $\mathbf{Ac}=\mathbf{b}$ の解 $\mathbf{c}=(c_0,c_1,c_2,\ldots,c_n)$ 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 $\mathbf{Ac}=\mathbf{b}$ 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 $\mathbf{c}=(c_0,c_1,\ldots,c_n)$ を探す.

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

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

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 $(c_0,\ldots,c_n)$ は $n+1$ 次元連立一次方程式

$$\left\{\begin{array}{lllll}
a_{0,0}c_0 & +a_{0,1}c_1 & +\cdots & +a_{0,n}c_n & =b_0 \\
a_{1,0}c_0 & +a_{1,1}c_1 & +\cdots & +a_{1,n}c_n & =b_1 \\
 & & & & \vdots \\
a_{n,0}c_0 & +a_{n,1}c_1 & +\cdots & +a_{n,n}c_n & =b_n
\end{array}\right.$$

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

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

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

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

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

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.

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 $P_0, \ldots, P_n$ 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]

[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.

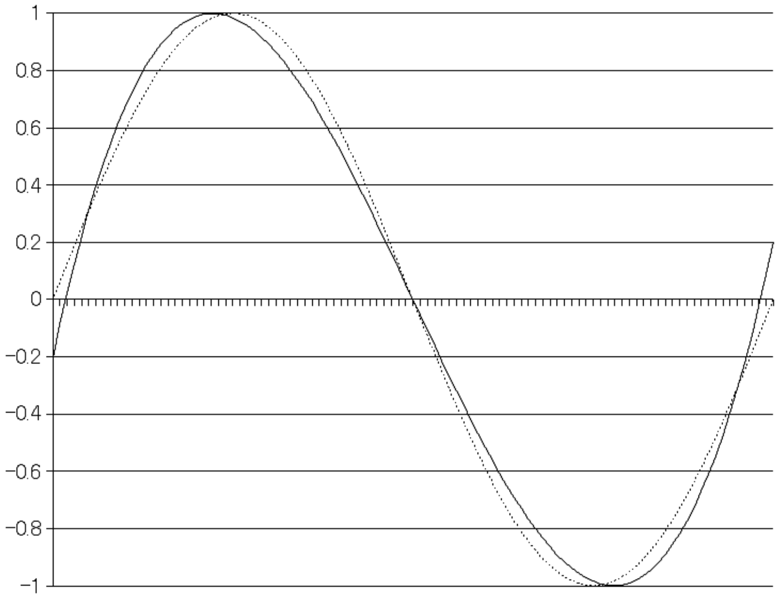

図 1: $[0, 2\pi]$ における正弦関数と $P(x) = -0.203312 + 1.908116x - 0.880158x^2 + 0.093388x^3$ のグラフ

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 $d_0P_0 + d_1P_1 + \cdots + d_nP_n$ と書ける事に注意する.

直交性より

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

であるから

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

を最小にする為には

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

□

幾つかの直行多項式系が知られている.

例 2. [ルジャンドル関数]

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

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．($\lambda_k = \dfrac{2}{2k+1}$)

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．

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

であるから，

$$\begin{aligned}
(f, P_0) &= \int_{-1}^{1} \cos \pi x \, dx = 0 \\
(f, P_1) &= \int_{-1}^{1} x \cos \pi x \, dx = 0 \\
(f, P_2) &= \frac{1}{2}(3\int_{-1}^{1} x^2 \cos \pi x \, dx - \int_{-1}^{1} \cos \pi x \, dx) = -\frac{6}{\pi^2} \\
(f, P_3) &= \frac{1}{2}(5\int_{-1}^{1} x^3 \cos \pi x \, dx - 3\int_{-1}^{1} x \cos \pi x \, dx) = 0 \\
(f, P_4) &= \frac{1}{8}(35\int_{-1}^{1} x^4 \cos \pi x \, dx - 30\int_{-1}^{1} x^2 \cos \pi x \, dx + 3\int_{-1}^{1} \cos \pi x \, dx) \\
&= -\frac{35}{\pi^2}\left(1 - \frac{6}{\pi^2}\right) + \frac{15}{\pi^2} = \frac{210}{\pi^4} - \frac{20}{\pi^2}
\end{aligned}$$

[3] ヒント:部分積分を使え． また $k < n$ のとき，適当な多項式 Q_n で $\frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^n = (x^2-1)^{n-k}Q_n(x)$ なる事 (帰納法で示せる) より $x = -1,\ 1$ で $\frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^n$ は 0 になる．

よって最小二乗多項式は

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

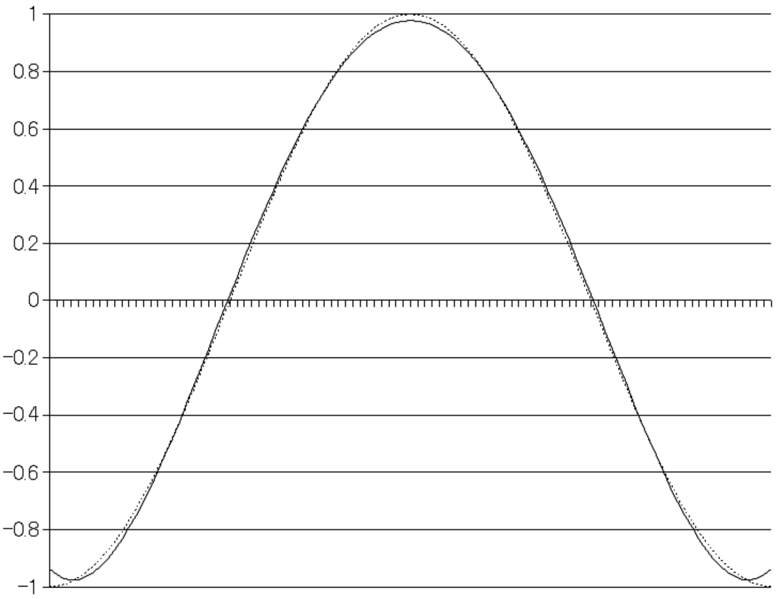

図 2: $[-1,1]$ における $\cos\pi x$ と $Q(x)=2.548204x^4-4.463902x^2+0.978326$ のグラフ