

1 内積空間と射影定理

(実) 線形空間 W において $(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ で

1. $(u, \alpha v + \beta w) = \alpha(u, v) + \beta(u, w)$
2. $(u, v) = (v, u)$
3. $(u, u) \geq 0$

を満たすものを内積と呼ぶ. 内積は $\|u\| := \sqrt{(u, u)}$ によってノルムを与える.

命題 1 (Schwarz の不等式). $(u, v) \leq \|u\|\|v\|$

定理 1. W を内積空間, V をその完備部分空間とすると $w \in W$ について

$$\|w - v\| = \inf_{u \in V} \|w - u\|$$

を満たす $v \in V$ が唯一つ定まる. 更に $w - v$ は V と直交する.

Proof. 一般に

$$\|(w - u) - (w - u')\|^2 + \|(w - u) + (w - u')\|^2 = 2\|w - u\|^2 + 2\|w - u'\|^2$$

$u, u' \in V$ について $\frac{u+u'}{2} \in V$ なので

$$\|u - u'\|^2 \leq 2\|w - u\|^2 + 2\|w - u'\|^2 - 4\|w - \frac{u+u'}{2}\|^2 \leq 2\|w - u\|^2 + 2\|w - u'\|^2 - 4 \inf_{v \in V} \|w - v\|^2$$

$u_n \in V$ を

$$\lim_n \|w - u_n\| = \inf_{u \in V} \|w - u\|$$

なるものとする.

$$\|u_n - u_m\|^2 \leq 2\|w - u_n\|^2 + 2\|w - u_m\|^2 - 4 \inf_{v \in V} \|w - v\|^2$$

より u_n はコーシー列である. 完備性より存在する極限が求めるもの. 一意性も同様に与えられる
直交性は $\beta \in \mathbb{R}$ について

$$\|w - (v + \beta u)\|^2 = \|w - v\|^2 - \beta(w - v, u) + \beta^2\|u\|^2$$

が成り立つ事から従う. □

1.1 例

1.1.1 L^2

$f, g \in C([a, b])$ において

$$(f, g) := \int_a^b f(x)g(x) dx$$

は内積を与える. この内積の誘導するノルム

$$\|f\|_2 := \sqrt{(f, f)} = \sqrt{\int_a^b f(x)^2 dx}$$

を L^2 -ノルムと呼ぶ.

1.1.2

$f, g \in C_b(\mathbb{R})$ において

$$(f, g) := \int f(x)g(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$

は内積を与える.

もっと一般に $h \geq 0$ で $\int h(x) dx = 1$ なるもの (定数ではこの条件を満たさないことに注意) は

$$(f, g) := \int f(x)g(x)h(x) dx$$

によって内積を与える.

2 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 次最小二乗近似多項式と言う.

閉区間 $[\alpha, \beta]$ 上の関数 f について, n 次最小二乗近似多項式 $P(x) = c_0 + c_1x^1 + c_2x^2 + \cdots + c_nx^n$ 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.

2.1 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 $\mathbb{R}^{n+1} \ni \mathbf{c} \mapsto \|f - P_{\mathbf{c}}\|_2 \in \mathbb{R}$ と捉え, 解析的アプローチにより最小二乗近似多項式を求めることができる.

定理 2. $(n+1) \times (n+1)$ 次行列 $A = (a_{i,j})$ 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 $A\mathbf{c} = \mathbf{b}$ 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 次最小二乗近似多項式である.

連立一次方程式 $A\mathbf{c} = \mathbf{b}$ を正規方程式と言う. 正規方程式の係数行列 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.

¹特にベクトル空間としても同型である

定理 2 の証明. 冒頭に述べたように係数空間から P_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

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

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 2 乗を対応させる関数を

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

と置き, $D(\mathbf{c})$ を最小にする $\hat{\mathbf{c}} = (\hat{c}_0, \hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)$ を探す.

$D(c_0, c_1, \dots, c_n)$ の値は, $P_c(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + \dots + c_nx^n = \sum_{i=0}^n c_i x^i$ より, $a_{i,j}, b_i$ を使って

$$\begin{aligned} D(c_0, c_1, \dots, c_n) &= \|f - P_c\|_2^2 \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} (f(x) - \sum_{i=0}^n c_i x^i)^2 dx \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} f^2(x) dx - 2 \sum_{j=0}^n b_j c_j + \sum_{0 \leq i, j \leq n} a_{i,j} c_i c_j \end{aligned}$$

と表せる. 特に

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

なる事に注意すれば D は $(c_k$ についての) 2 次の係数が正の 2 次関数であるから

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

今,

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

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

$$\begin{aligned} b_0 &= \int_0^{2\pi} \sin x dx = -[\cos x]_0^{2\pi} = 0 \\ b_1 &= \int_0^{2\pi} x \sin x dx \\ &= -[x \cos x]_0^{2\pi} + \int_0^{2\pi} \cos x dx \\ &= -2\pi + [\sin x]_0^{2\pi} = -2\pi \\ b_j &= \int_0^{2\pi} x^j \sin x dx \\ &= -[x^j \cos x]_0^{2\pi} + j \int_0^{2\pi} x^{j-1} \cos x dx \\ &= -(2\pi)^j + j \left([x^{j-1} \sin x]_0^{2\pi} - (j-1) \int_0^{2\pi} x^{j-2} \sin x dx \right) \\ &= -(2\pi)^j - j(j-1)b_{j-2} \end{aligned}$$

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。

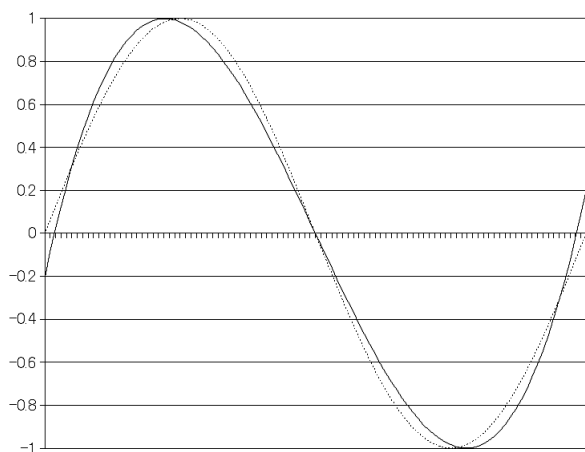


図 1: $[0, 2\pi]$ における正弦関数と $P(x) = -0.203312 + 1.908116x - 0.880158x^2 + 0.093388x^3$ のグラフ

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。後述の直交多項式系を用いて求めた値と比較せよ。

2.2 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 の直交基底を用いて 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 3. 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、

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

が内積から自然に誘導されるノルム $\|\cdot\|$ に関する n 次の最良近似多項式になる。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。) 特に最小二乗近似式は一意である。

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

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

であるから

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

を最小にする為には

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

を満たせば良い。 □

2.3 直交多項式系

n を固定した時、高々 n 次多項式の張る空間の完全直交系には任意性があるが、各次数の多項式の無限系列

$$P_0, P_1, P_2, \dots$$

で、任意の n 対し $P_0, P_1, \dots, P_n$ が高々 n 次多項式の張る空間の完全直交系となるものは内積が与えられる毎に (スカラー倍を除いて) 一意に決まる。

[−1,1] 区間における積分 $\int_{-1}^1 f(x)g(x) dx$ で内積については次が言える;

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. 上述の直交多項式の一意性を示せ.

問 3. 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.

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

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.

k	0	1	2	3	4	5	6	7
$\int_{-1}^1 x^k \cos \pi x dx$	0	0	$-\frac{4}{\pi^2}$	0	$-\frac{8}{\pi^2} + \frac{48}{\pi^4}$	0	$-\frac{16}{\pi^2} + \frac{240}{\pi^4} - \frac{1440}{\pi^6}$	0

であるから,

$$(f, P_0) = \int_{-1}^1 \cos \pi x dx = 0$$

$$(f, P_1) = \int_{-1}^1 x \cos \pi x dx = 0$$

$$(f, P_2) = \frac{1}{2} \left(3 \int_{-1}^1 x^2 \cos \pi x dx - \int_{-1}^1 \cos \pi x dx \right) = -\frac{6}{\pi^2}$$

$$(f, P_3) = \frac{1}{2} \left(5 \int_{-1}^1 x^3 \cos \pi x dx - 3 \int_{-1}^1 x \cos \pi x dx \right) = 0$$

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

よって最小二乗多項式は

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

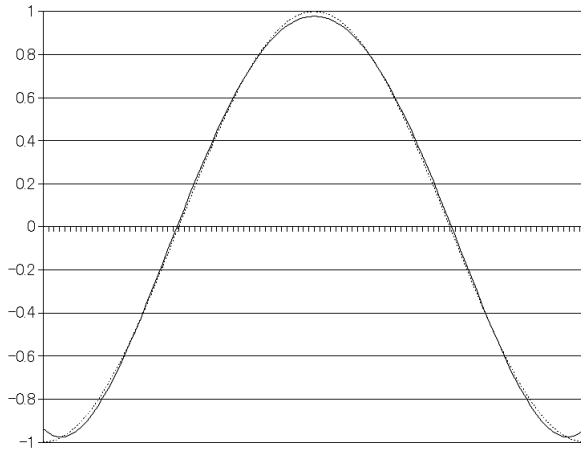


図 2: $[-1, 1]$ における $\cos \pi x$ と $Q(x) = 2.548204x^4 - 4.463902x^2 + 0.978326$ のグラフ