

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、補間を標本点と同数の (次に述べる意味で線形独立な) 関数の線形結合に限定するならば補間は唯一つに決定する。

定理 1. n 個の関数 $\{g_1, \dots, g_n\}$ の組を考える。標本点 $x_1, \dots, x_n$ の値の成す n 個の n 次元ベクトル

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

が一次独立であるならば、 $\{g_1, \dots, g_n\}$ 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 $\{1\} \cup \{\sin kx \mid k = 1, \dots, n\} \cup \{\cos kx \mid k = 1, \dots, n\}$ 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

$$\{P_n = c_0 + c_1 x^1 + c_2 x^2 + \dots + c_n x^n \mid c_i \in \mathbb{R}\}$$

上の、即ち高々 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：

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

例 3. $[0, 2\pi]$ 上の正弦関数を標本点 $x_0 = 0, x_1 = \frac{\pi}{2}, x_2 = \pi, x_3 = \frac{3\pi}{2}, x_4 = 2\pi$ 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

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

となるので,

$$P_4(x) = \sum_{i=0}^4 f(x_i) L_i^{(4)}(x) = L_1^{(4)}(x) - L_3^{(4)}(x).$$

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

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

よって

$$P_4(x) = L_1^{(4)}(x) - L_3^{(4)}(x) = \frac{8}{3\pi^3}x^3 - \frac{8}{\pi^2}x^2 + \frac{16}{3\pi}x$$

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

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

である.

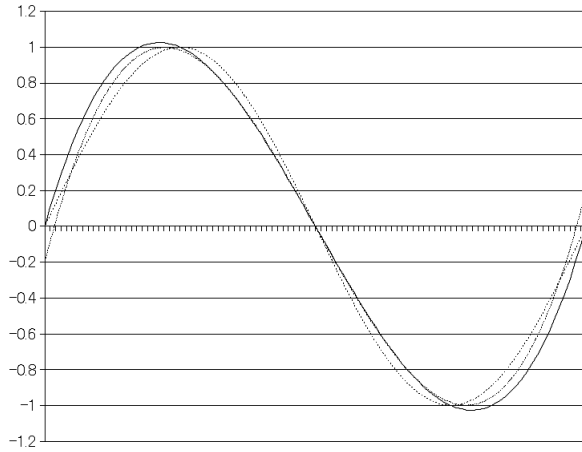


図 1: $[0, 2\pi]$ における正弦関数 (破線) と 3 次ミニマックス近似 (細かい破線) 及び標本点 $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi$ における補間多項式 P_4 (実線)

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

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

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 C^{n+1} -級ならば $[a, b]$ 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

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

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

特に $n+1$ 階導関数 $f^{(n+1)}$ の連続性から、 $\|f^{(n+1)}\|_\infty < \infty$ であるので、定理より最大値ノルムに関して

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

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、 $f^{(n+1)}(x) = (\sin x)^{(n+1)} = \sin(x + \pi(n+1)/2)$ より $\|f^{(n+1)}\|_\infty \leq 1$ 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、 $F_n(x_i) = 0$ であるので、式 (2) の両辺は共に $f(x_i)$ で明らか。

$\hat{x}$ を任意の i について $\hat{x} \neq x_i$ なる様にとって以下固定して考える。仮定より $F_n(\hat{x}) \neq 0$ であるから、関数 $h(t)$ を

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

で定めることができる。特に $x = \hat{x}$ なるとき、

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

である事に注意する。また、標本点上、即ちある i について $x = x_i$ なるときにも $f(x_i) = P_n(x_i)$ かつ $F_n(x_i) = 0$ であるので $h(x_i) = 0$ となる。

$\hat{x}$ がどの x_i と等しくない事を仮定しているので、 $h(x)$ は少なくとも $\{x_i\}_{i=0}^n \cup \{\hat{x}\}$ の $n+2$ 個の零点を持つ。これを昇順に並べたものを $(y_i^{(0)})_{i=0}^{n+1}$ 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 $h^{(1)}(y_i^{(1)}) = 0$ 。この様にして $i = 0, 1, \dots, n$ について $y_i^{(1)}$ を定めれば、 $y_i^{(1)} < y_{i+1}^{(1)} < y_{i+1}^{(0)}$ であるので $(y_i^{(1)})_{i=0}^n$ もまた昇順に並ぶ。即ち、

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

以下同様にして h の k 階導関数 $h^{(k)}$ の零点を考える事により、 $k = 2, \dots, n+1$ についても

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

なる $(y_i^{(k)})_{i=0}^{n+1-k}$ が存在する事が帰納的に示せる.

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 $P_n^{(n+1)}(x) \equiv 0$ である事に注意すれば,

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

である. 更に定義より 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, $F_n^{(n+1)}(y) \equiv (n+1)!$ であるから式を整理すれば定理の主張を得る. $\square$

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). $[0, 2\pi]$ 上の $2n$ 個の標本点 $0, \frac{\pi}{n}, \dots, \frac{(2n-1)\pi}{n} (x_i = \frac{i\pi}{n})$ について,

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

とおけば, g は周期 2π の周期関数 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:

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

定理 4 の証明. 記号 $A_k^n := \begin{cases} 1/2 & k = 0 \text{ or } n \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$ を使えば, 標本点 $\frac{l\pi}{n}$ において

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

ところで, $\frac{(j-l)\pi}{n} \notin 2\pi\mathbb{Z}$ で $\sum A_k^n \cos \frac{(j-l)k\pi}{n} = 0$, $\frac{(j-l)\pi}{n} \in 2\pi\mathbb{Z}$ で $\sum A_k^n \cos \frac{(j-l)k\pi}{n} = \sum A_k^n = n$ である.¹

¹和は全て 0 から n まで. $\frac{(j-l)\pi}{n} \notin 2\pi\mathbb{Z}$ の時は等比級数 $\sum_{k=0}^{n-1} e^{i\frac{(j-l)k\pi}{n}}$ の実部をつかって

$$\sum_{k=0}^n A_k^n \cos \frac{(j-l)k\pi}{n} = \operatorname{Re} \left(\sum_{k=0}^{n-1} e^{i\frac{(j-l)k\pi}{n}} \right) - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(j-l)\pi = \operatorname{Re} \left(\frac{1 - e^{i\frac{(j-l)\pi}{n}}}{1 - e^{i\frac{(j-l)\pi}{n}}} \right) - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(j-l)\pi$$

今 $0 \leq j, l < 2n$ から $-2n < j-l < 2n$ であるので $\frac{(j-l)\pi}{n} \in 2\pi\mathbb{Z}$ となるのは $j-l=0$ の時のみであり,

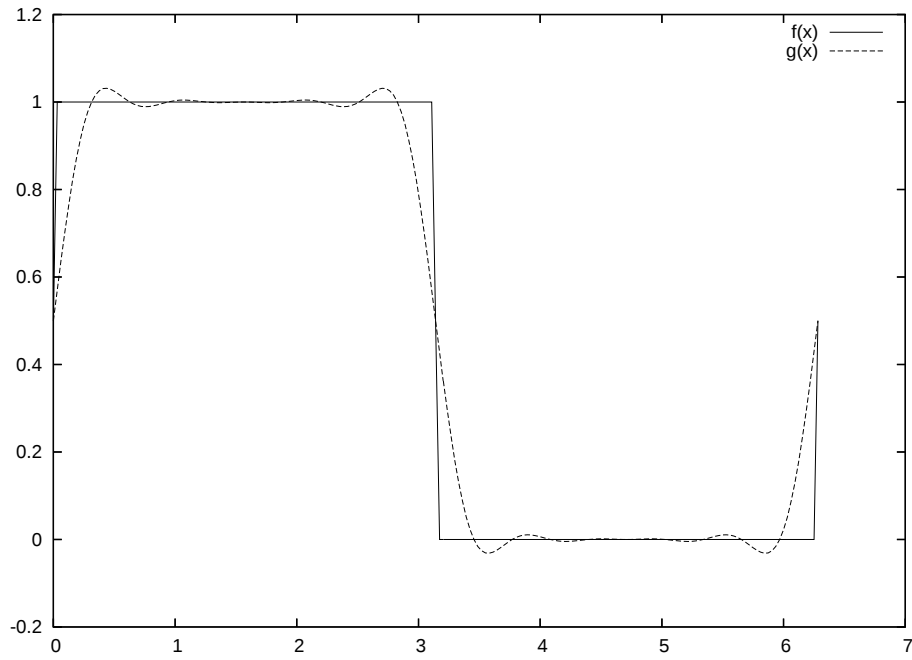
$$g\left(\frac{l\pi}{n}\right) = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{2n-1} f\left(\frac{j}{n}\pi\right) n \delta_j^l = f\left(\frac{l}{n}\pi\right)$$

□

例 5.

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x < \pi \\ 0.5 & \text{if } x = 0, \pi, 2\pi \\ 0 & \text{if } x > \pi \end{cases}$$

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



$\sin(j-l)\pi = 0$ であるから

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n A_k^n \cos \frac{(j-l)k\pi}{n} &= \operatorname{Re} \left(\frac{1 - \cos(j-l)\pi}{1 - \cos \frac{(j-l)\pi}{n} - i \sin \frac{(j-l)\pi}{n}} \right) - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(j-l)\pi \\ &= \operatorname{Re} \left(\frac{(1 - \cos(j-l)\pi)(1 - \cos \frac{(j-l)\pi}{n} + i \sin \frac{(j-l)\pi}{n})}{(1 - \cos \frac{(j-l)\pi}{n})^2 + (\sin \frac{(j-l)\pi}{n})^2} \right) - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(j-l)\pi \\ &= \frac{1}{2}(1 - \cos(j-l)\pi) - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(j-l)\pi = 0 \end{aligned}$$