3 関数の補間

関数近似では，もとの関数 $f(x)$ が与えられているものとして議論してきた．しかしながら，実際には離散的な点 x_i での値 $f(x_i)$ のみが与えられていることが多い．そうした離散的な点からその点の間の値を求める方法–**補間 (interpolation)**（または**内挿**ともいう）–を考える．

3.1 Lagrange 補間

いま，$n+1$ 個のデータの組 $(x_i, y_i), (i = 0, \ldots, n)$ が与えられたときに，x と y との間に $y = f(x)$ なる関数関係を見いだすことを考える．n 個の $y_i = f(x_i), (i = 0, \ldots, n)$ を満足するような関数 $f(x)$ はいくらでも考えることができるが，f を n 次多項式に限定するとそれは一意に決定される．たとえば，

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n \tag{3.1}$$

のように $f(x)$ を与えると，$n+1$ 組のデータを代入し $n+1$ 個の未知の係数 a_i に対する $n+1$ 本の方程式からなる連立一次方程式ができ，それから一意に解を求まる．しかしながら，こうした直接的な解法はデータ数が増えてきて次元が上がると逆行列を求める計算が複雑になってくる．

【練習問題 3-1】
$(x, y) = (1, 2), (2, 3), (3, 6)$ のように 3 点のデータが与えられているとき，これらのデータの点を補間する 2 次の多項式を求めよ．

そうした直接的な方法に代わって一般的に使われるのが，次に述べる Lagrange の補間公式である．n 次の補間多項式 $P(x)$ は次のような式によって与えられる．

$$P(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{\Pi_{j \neq k}(x - x_j)}{\Pi_{j \neq k}(x_k - x_j)} f(x_k) \tag{3.2}$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \frac{(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\cdots(x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)} f(x_k) \tag{3.3}$$

【練習問題 3-2】
上述と同じ $(1, 2), (2, 3), (3, 6)$ のデータの組が与えられているとき，これらのデータを補間する 2 次の多項式を Lagrange の補間公式を用いて求めよ．

3.2 Newton の補間公式

Lagrange の補間公式を実際に計算する際に，演算回数を減らす工夫がされる．ここではそれについて説明をする．

いま，$x_0, x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_N$ のときの値を，$f_0, f_1, \ldots, f_i, \ldots, f_N$ としたとき，次のように定義されるものを（n 次の) **差分商 (divided difference)** とよぶ．

$$f_1[x_0, x_1] = \frac{f_0 - f_1}{x_0 - x_1} \tag{3.4}$$

$$f_2[x_0, x_1, x_2] = \frac{f_1[x_0, x_1] - f_1[x_1, x2]}{x_0 - x_2} \tag{3.5}$$

$$\vdots$$

$$f_n[x_0,\ldots,x_n] \;=\; \frac{f_{n-1}[x_0,\ldots,x_{n-1}]-f_{n-1}[x_1,\ldots,x_n]}{x_0-x_n} \tag{3.6}$$

この差分商を用いることで，Lagrange の補間公式は次のように書き換えることができる．

$$\begin{aligned} P(x) \;=\; & P(x_0)+(x-x_0)f_1[x_0,x_1]+(x-x_0)(x-x_1)f_2[x_0,x_1,x_2]+ \\ & \cdots+(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{N-1})f_N[x_0,\ldots,x_N] \end{aligned} \tag{3.7}$$

ここで $P(x_0)=f_0$ である．このような形で多項式を求めるものを **Newton の補間公式**とよぶ．この多項式と Lagrange 補間公式で与えられる多項式とは当然，一致する．

【練習問題 3-3】

練習問題 3-1 で与えられる点に対して Newton の補間公式により多項式を求めてみよ．また，Lagrange 補間の式を直接に用いた場合と演算の回数を比較してみよ．

3.3 Newton の定差前進補間公式

与えられた点が，すべて等しい間隔 h（等差）で並んでおり，$x_n=x_0+nh$ と与えられるとき，Newton の補間公式をより簡単な形に書き換えることができる．まず，ここで以下の３種類の差分を示しておく．

$$\text{前進差分：}\quad \Delta f_n = f_{n+1}-f_n \tag{3.8}$$

$$\text{後退差分：}\quad \nabla f_n = f_n - f_{n-1} \tag{3.9}$$

$$\text{中心差分：}\quad \delta f_n = f_{n+1/2}-f_{n-1/2} \tag{3.10}$$

前進差分は一つ先の点の値と現在の点の値との差，後退差分は現在の点の値とひとつ前の点の値との差を表している．また，中心差分はその中間であり，$f_{n+1/2}$ と $f_{n-1/2}$ の値は直接には与えられないので，何らかの方法で補間して求めることが必要である．

ここで，前進差分を考えることとし，差分商の式 (**??**) は次のように書き直すことができる．

$$f_n[x_0,\cdots,x_n] \;=\; \frac{1}{n!h^n}\Delta^n f_0 \tag{3.11}$$

これを用いて，Newton の補間公式 (**??**) を書き換えると次のようになる．

$$P(x) \;=\; f_0+(x-x_0)\frac{1}{h}\Delta f_0+\cdots+(x-x_0)\cdots(x-x_{N-1})\frac{\Delta^N f_0}{N!h^N} \tag{3.12}$$

ただし，

$$\Delta^2 f_n=\Delta(\Delta f_n)=\Delta f_{n+1}-\Delta f_n,\;\; \Delta^n=\Delta^{n-1}f_{n+1}-\Delta^{n-1}f_n \tag{3.13}$$

である．ここで，x_n が等間隔であることから $x(s)=x_0+hs$ とおくと，

$$P(x) \;=\; f_0+s\Delta f_0+\cdots+\frac{s(s-1)\cdots(s-N+1)}{N!}\Delta^N f_0 \tag{3.14}$$

となる．これを **Newton の定差前進補間公式**とよぶ．

【練習問題 3-4】

前問と同じく $(1,2),(2,3),(3,6)$ のデータの組が与えられているとき，これらのデータから補間多項式を Newton の定差前進補間公式を用いて求めてみよ．また前問と同様に演算回数の比較をしてみよ．

3.4　スプライン補間

これまで述べてきた多項式補間は，$N+1$ 点で与えられた値を用いて，全区間 $[x_0, x_N]$ を単一の N 次多項式で補間するものであった．それに対して，各小区間 $[x_{k-1}, x_k]$ を $(m-1)$ 階まで導関数が全域で連続な m 次多項式を m 次スプラインとよび，与えられたデータの組み (x_k, y_k) に対して

$$S(x_k) \quad = \quad y_k \qquad (k = 0, \cdots, n) \tag{3.15}$$

を満たす m 次スプライン $S(x)$ による補間を m 次**スプライン補間 (spline interpolation)** という．

ここでは広く使われる 3 次スプライン補間 $S(x)$ について式を示す．$S(x)$ は各小区間 $[x_{k-1}, x_k]$ において

$$\begin{aligned} S(x) \quad = \quad & y_{k-1}\frac{(x_k - x)^2\{2(x - x_{k-1}) + h_k\}}{h_k^3} \quad + \quad y_k\frac{(x - x_{k-1})^2\{2(x_k - x) + h_k\}}{h_k^3} \\ + \quad & d_{k-1}\frac{(x_k - x)^2(x - x_{k-1})}{h_k^2} \quad - \quad d_k\frac{(x - x_{k-1})^2(x_k - x)}{h_k^2} \end{aligned} \tag{3.16}$$

として定義される．ただし，d_k は x_k における導関数の値 $S'(x_k)$ とし，$h_k = x_k - x_{k-1}$ である．この式では各 x_k の左右での 1 階導関数の値は常に $S'(x_k - 0) = S'(x_k + 0)$ が成り立つ．ここでの未知数は $d_k \quad (k = 0, \cdots, n)$ で $n+1$ 個ある．ここで，$S(x)$ に対して 2 階導関数が連続性を持つことを求めると $S''(x_k - 0) = S''(x_k + 0) \quad (k = 1, \cdots, n-1)$ により $n+1$ 変数に対する $n-1$ 本の連立一次方程式が得られる．未知数に対する制約式が 2 本不足しているため，両端点での導関数の値が既知の場合には,

$$\text{条件 I}: d_1 = S'(x_1 + 0), \quad d_N = S'(x_N - 0) \tag{3.17}$$

既知ではない場合には,

$$\text{条件 II}: S''(x_1 + 0) = S''(x_N - 0) = 0 \tag{3.18}$$

の条件を与えて連立方程式を解くことが通常行われる．

スプライン補間により得られる曲線は，物理的には弾性のある鋼板を各点で支持したときに，歪みエネルギ—長さ方向に曲率の 2 乗を積分した値に比例–が最小となる形状に等しくなる．スプラインという用語も，もとは製図などで用いた曲線を形作るための薄板を意味している．

3.5　最小二乗法

Lagrange 補間においては，データ組の点（標本点）を通過する補間多項式を求めたが，データに誤差が含まれているなどの理由で，標本点を必ずしも通過することが必要とされないことも考えられる．そうした統計的な考え方を導入して観測された標本点の背後の関数を推定する手法として代表的なのが最小二乗法である．

最小二乗法とは，誤差の重みつき総和 χ^2（カイ二乗）を最小にするように推定する関数 $F(x)$ を求める手法である．

$$\chi^2 \quad = \quad \sum_i (f_i - F(x_i))^2 w_i \tag{3.19}$$

ここで，f_i は x_i でのデータ値，w_i はそこでの関数のフィッティングのずれに対する重みを意味している．w_i が小さい場合にはずれが大きくても許容されやすく，w_i が大きい場合にはずれが大きいと χ^2 の値に大きく影響する．

いま，$F(x)$ は独立な関数の和

$$F(x) = \sum_{n=0}^{M-1} a_n R_n(x) \tag{3.20}$$

として与え，その係数を求める．ただし，係数の数 M はフィットすべき点の数 N よりも小さいものとする．簡単な例として，

$$F(x) \quad = \quad \sum_{n=0}^{M-1} a_n x_n \tag{3.21}$$

で考えてみる．これに対して，χ^2 を最小化する係数を求めるには，

$$\begin{pmatrix} A_{0,0} & \cdots & A_{0,j} & \cdots & A_{0,M-1} \\ A_{1,0} & \cdots & A_{1,j} & \cdots & A_{1,M-1} \\ \wr & & \wr & & \wr \\ A_{i,0} & \cdots & A_{i,j} & \cdots & A_{i,M-1} \\ \wr & & \wr & & \wr \\ A_{M-1,0} & \cdots & A_{M-1,j} & \cdots & A_{M-1,M-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \wr \\ a_i \\ \wr \\ a_{M-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \wr \\ b_i \\ \wr \\ b_{M-1} \end{pmatrix} \tag{3.22}$$

ただし，

$$A_{m,n} \quad = \quad \sum_{i=1}^{N} w_i x_i^{m+n} \quad = \quad w_1 x_1^{m+n} + w_2 x_2^{m+n} + \cdots + w_N x_N^{m+n} \tag{3.23}$$

$$b_m \quad = \quad \sum_{i=1}^{N} w_i f_i x_i^{m} \quad = \quad w_1 f_1 x_1^{m} + w_2 f_2 x_2^{m} + \cdots + w_N f_N x_N^{m} \tag{3.24}$$

によって定まる連立一次方程式の解として，各多項式の係数 a_i を求めることができる．

ここで，第 i 番目のデータに対する重み w_i として，そのデータのばらつきの分散 σ^2 が与えられるとき，

$$w_i \quad = \quad \frac{1}{\sigma^2} \tag{3.25}$$

ととることをする．これによる，分散 σ^2 の大きなデータの重みは小さく，逆に分散の小さなデータの重みが大きくなり，重みの大きさに応じてフィッティングが評価される．これにより得られる χ^2 の分布は自由度 N の χ^2 分布と呼ばれる分布に従う．χ^2 とは平均 0，分散 1 の正規分布から抽出されたデータ $X_1, X_2, \cdots, X_N$ としたときの

$$Y \quad = \quad \sum_{i=1}^{N} X_i^2 \tag{3.26}$$

の分布である．χ^2 についての内容は詳しくは統計の教科書を参考にして欲しい．

フィッティングに用いる多項式の次数を上げると評価関数の χ^2 の値を小さくしていくことが可能であるが，あまり大きな次元をとることはむしろ不自然となる．どのくらいの次元を使うのがよいか，という問題に対しては，評価基準としてパラメータの数 N を用いて，$\chi^2 + 2N$ とする**赤池の情報量基準 (AIC: Akaike's Information Criterion)** がよく用いられる．

【練習問題 3-5】

いま，以下のような４点を二次式で最小二乗法で関数推定せよ．

点番号	x_i	f_i	σ
1	0.0	1.0	0.5
2	1.0	2.0	0.9
3	2.0	3.0	0.1
4	3.0	-2.0	0.5