電気 303/電情 303 数値解析 (8)

関数近似 (2)
線形補間と多項式補間

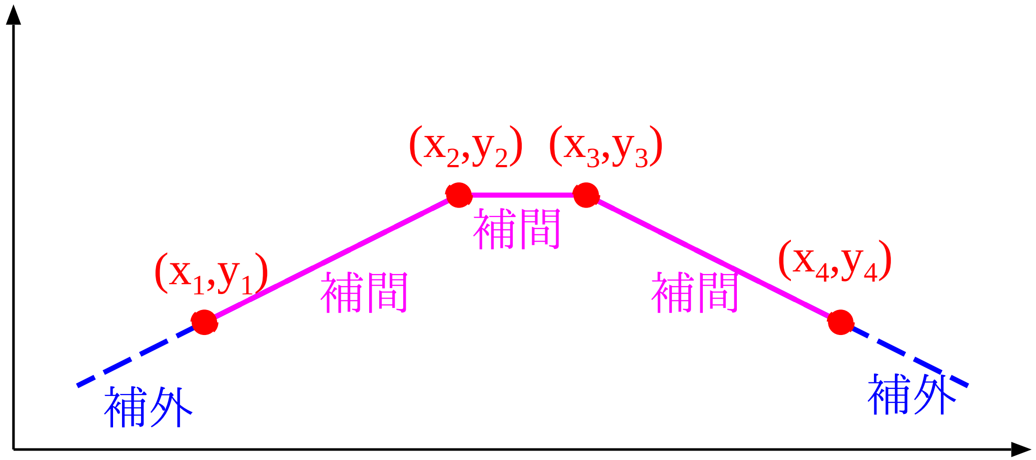
補間

- 補間とは, 関数 $f(x)$ が未知であるが, その n 個の点 $x_1, \ldots, x_n$ における値 $y_1, \ldots, y_n$ が知られているとき, $x_1, \ldots, x_n$ 以外の点における $f(x)$ の値を推測しようとすることをいう.
- この「推測」をグラフで表現すると, データ点を通過する直線あるいは曲線となる.

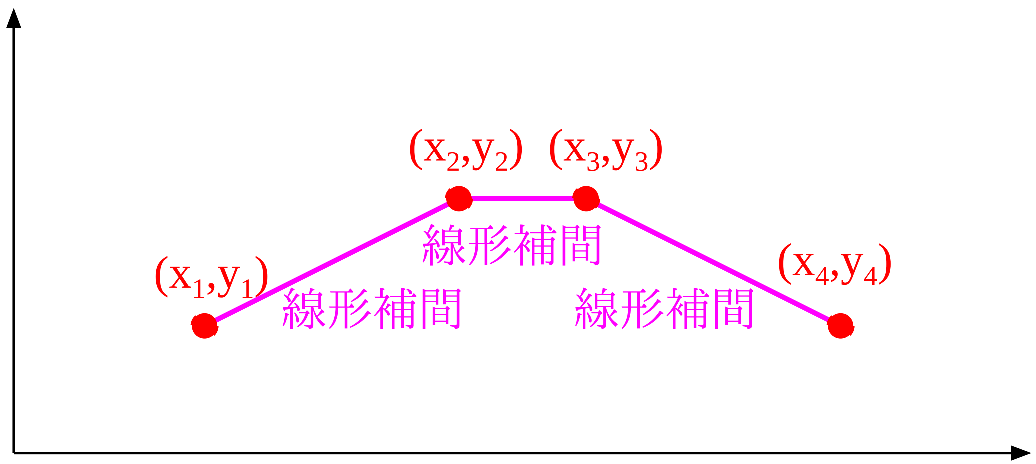
- 1次元の補間問題において,

$$\min\{x_1, \ldots, x_n\} \leq x \leq \max\{x_1, \ldots, x_n\}$$

となっているときに補間, そうでないときに補外と呼ぶ([伊理]).



- もっとも簡単な補間は線形補間．これは要するに「折れ線近似」である．
- 先ほどので例は，データ点のあいだの部分は線形補間になっている．

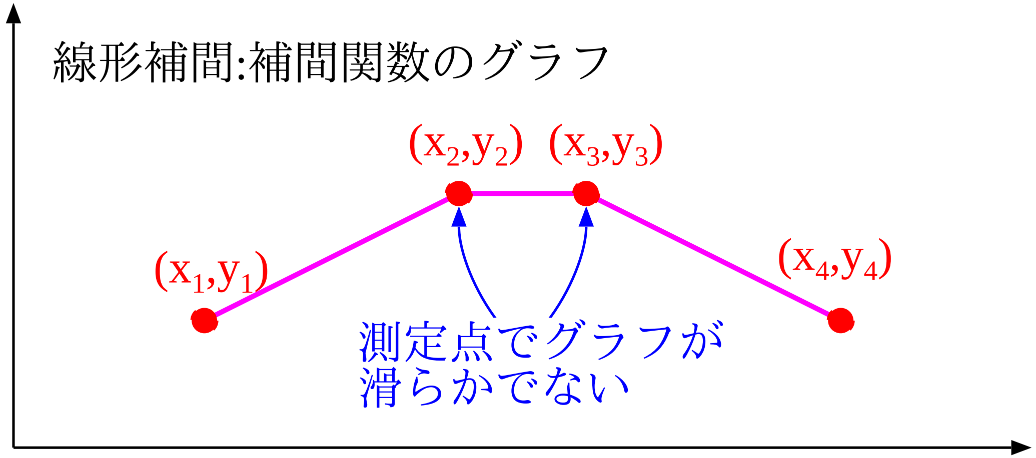


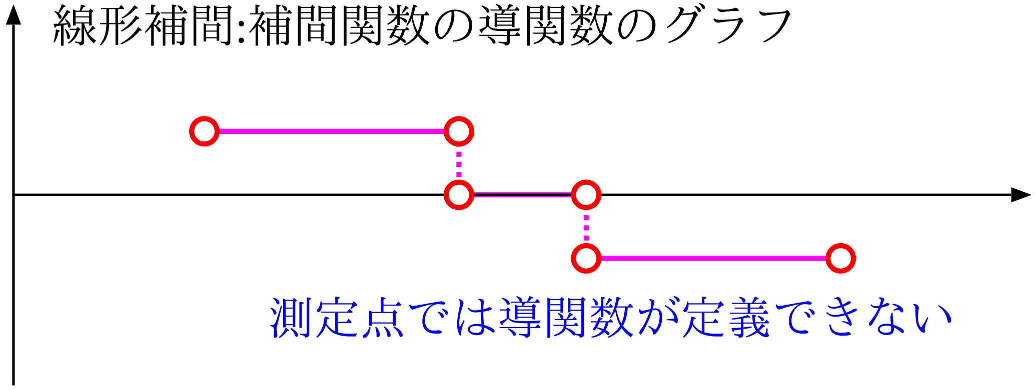
- 補間は関数近似の一種であるが, 厳密にはより狭義で, 補間データからグラフを描画するとデータ点を通過する直線あるいは曲線になることが, 狭義の補間の条件である.
- ただし, 一般的な関数近似の意味で「補間」という言葉が使われる場合こともある

- 誤差を含む実験データからグラフを作成する場合, 測定点の近くを通る直線あるいはなめらかな曲線を引くことが多い. これは狭義の補間ではない.
  - ▷ データ点を近似する直線を求めることを **線形回帰**あるいは**直線回帰** という.
  - ▷ データ点を近似する非線形関数を求めることを **非線形回帰回帰** という.

- 注意:
  - ▷ 「測定点の近くを通る直線あるいはなめらかな曲線を引くこと」にも「補間」という言葉が使われることがある.
  - ▷ 誤差を含む実験データからグラフを作成する場合に狭義の補間をおこなうことは不適切であることが多い.

- 線形補間は折れ線による近似なので, 補間によって得られる関数は測定点において微分可能にならない. グラフで見ると, 測定点のところが「尖った」形になっている.


線形補間:補間関数のグラフ
(x1,y1)
(x2,y2)
(x3,y3)
(x4,y4)
測定点でグラフが
滑らかでない


線形補間:補間関数の導関数のグラフ
測定点では導関数が定義できない

- 線形補間も応用上有用なのだが, 補間関数の形状がやや複雑なため (データ点のあいだの区間ごとに直線を切り換える必要がある), 解析的な用途に用いるときには, 繁雑なことがある.

- 線形でない補間としては, 典型的には, 多項式による補間が用いられる.
- 補間に多項式を用いることの理論的根拠は, Weierstrass の多項式近似定理である.

- 定理 **(Weierstrass)**　関数 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ が区間 $[a,b]$ において連続なら f は多項式によって L_∞ の意味で任意の精度で近似できる．

- 先の定理の証明は解析学の範囲なので述べない. ■

- 多項式には,
  - ▷ 次数を十分大きく取れば, 有界閉集合における連続関数を, 任意の精度で近似できる
  - ▷ 計算が簡単

という好ましい特徴があるため, 数値解析では, 多項式補間がよく用いられる.

- 多項式補間には何種類もやり方がある.
- その多くは, 単一の多項式によって与えられたデータ点をおこなうものであり, 線形補間とは考え方が異なるが…
- 与えられたデータ点を通過する曲線の滑らかさを最重要視して多項式を構成する補間もあり, その典型的なものがスプライン補間と呼ばれるものである.

- スプライン補間についてはこの講義の最後に述べることとし, 当分は単一の多項式を用いた補間を取り扱う.

- 単一の多項式による補間の代表格で, もっとも基本的なのは, Lagrange 補間と呼ばれるものである.
- この講義では, まず Lagrange 補間について述べたあと, それ以外のいくつかの 補間法を紹介する.

Lagrange 補間

- n 個の実数の組 (データ点)

$$(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$$

が与えられ, $x_1, \cdots, x_n$ の中には同一の値のものはないと仮定する (関数の近似であれば, こうなっている筈である).

- $x_1, \cdots, x_n$ の中には同一の値のものはないという条件は，今後，暗黙のうちに何度も利用されるので，ここで改めて強調しておく．

- Lagrange 補間は，Lagrange 補間多項式と呼ばれる多項式を構成することによって関数近似をおこなう手法である．

- Lagrange 補間多項式は, n 個の点

$$(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$$

を通過する $n-1$ 次 (以下) の多項式である.

- Lagrange 補間多項式の定義において, 多項式の次数が指定されていることに注意.
- 「以下」という形容詞が付いている理由は, 多項式の係数が零となる場合を許容するからである.

▷ $n-1$ 次の多項式は,

$$a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n$$

という形をしている.

- $(a_1, \dots, a_n)$ をパラメータと見做し, この多項式がデータ点

$$(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$$

を通過するという条件を方程式の形で書き下すと…

▷ 以下のようになる.

$$a_1 x_1^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x_1 + a_n = y_1$$

$$\cdots$$

$$a_1 x_n^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x_n + a_n = y_n$$

- n 個のパラメータ $(a_1, \ldots, a_n)$ に関する n 個の方程式があるから，「Lagrange 補間多項式は一意的に定まるのではないか」という感じがするのではないかと思われる．

▷ 実際その通りで, Lagrange 補間多項式は一意的に定まる.

- Lagrange 補間多項式の構成は容易なので, Lagrange 補間多項式が一意的に定まること全体の数学的証明を試みるより, Lagrange 補間多項式を構成してしまった方が簡単である (一意性に関する議論は後回しにする).

- そこで, Lagrange 補間多項式の構成法について見てゆく.

- **2 点 (x_1, y_1), (x_2, y_2) を通る Lagrange 補間多項式:**
  - ▷ 2 点を通過する Lagrange 補間多項式は 1 次で．要するに 2 点を通過する直線である．構成法は以下の通り．

$$y_1 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} + y_2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

- 上記が1次の多項式であることは式から明らか.
- 与えられたデータ点を通過することは, 代入によって確認できる.
- 冒頭で述べた $x_1, \cdots, x_n$ の中に同一のものがないという条件により, 先の式で分母が零になることはない.

- **3 点** (x_1, y_1)**,** (x_2, y_2)**,** (x_3, y_3) **を通る Lagrange 補間多項式:**

  ▷ 3 点を通過する Lagrange 補間多項式は 2 次である. 構成法は以下の通り.

$$
\begin{aligned}
& y_1 \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} \\
+ & y_2 \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} \\
+ & y_3 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}
\end{aligned}
$$

- ▷ 上記が 2 次の多項式であることは式から明らか.
- ▷ 与えられたデータ点を通過することは, 代入によって確認できる.
- ▷ 冒頭で述べた $x_1, \cdots, x_n$ の中に同一のものがないという条件により, 先の式で分母が零になることはない.

- n 個の点 $\{(x_i, y_i) : 1 \le i \le n\}$ を通る **Lagrange 補間多項式:**

  ▷ n 個の点 $\{(x_i, y_i) : 1 \le i \le n\}$ を通る Lagrange 補間多項式は $n-1$ 次である. 構成法は以下の通り.

$$\sum_{i=1}^{n} y_i \frac{\prod_{j \ne i}(x - x_j)}{\prod_{j \ne i}(x_i - x_j)}$$

- 式がやや複雑であるが, これは n の項の和になっており, 各項の分母は数, 分子は $n-1$ 次の多項式なので ($j \neq i$ となっていることに注意), この多項式は $n-1$ 次である.

▷ 先の多項式が与えられたデータ点を通過することを確認する.

▷ **第 1 項** $y_1 \dfrac{\prod_{j\neq 1}(x - x_j)}{\prod_{j\neq 1}(x_1 - x_j)}$:

◇ $x = x_1$ を上式に代入すると y_1 となる.

◇ $x = x_j$ $(j \neq 1)$ を上式に代入すると, 分子に $(x_j - x_j)$ という項が含まれるから, 零となる.

▷ **第 2 項** $\quad y_2 \dfrac{\prod_{j\neq 2}(x - x_j)}{\prod_{j\neq 2}(x_1 - x_j)}$**:**

◇ $x = x_2$ を上式に代入すると y_2 となる.

◇ $x = x_j$ $(j \neq 2)$ を上式に代入すると, 分子に $(x_j - x_j)$ という項が含まれるから, 零となる.

▷ 以下同様に…

▷ 第 n 項 $\quad y_n \dfrac{\prod_{j \neq n}(x - x_j)}{\prod_{j \neq n}(x_1 - x_j)}$:

- ◇ $x = x_n$ を上式に代入すると y_n となる.
- ◇ $x = x_j$ $(j \neq n)$ を上式に代入すると, 分子に $(x_j - x_j)$ という項が含まれるから, 零となる.

- ▷ 冒頭で述べた $x_1, \cdots, x_n$ の中に同一のものがないという条件により, これら式で分母が零になることはない.

- 我々は, Lagrange 補間多項式が存在することを, すでに直接それを構成することによって確認していたが, n 個の点 $\{(x_i, y_i) : 1 \leq i \leq n\}$ を通る $n-1$ 次の多項式がこれ以外にないということは確認していなかった.

- これについては, 次の定理が成り立つ.

- 定理:
  Lagrange 補間多項式は一意的に定まる.

- **証明:**
  - $P_a(x)$ と $P_b(x)$ がともに n 個の点 $\{(x_i, y_i) : 1 \le i \le n\}$ を通過する $n-1$ 次以下の多項式とする.

▷ すると, $P_a(x) - P_b(x)$ は, n 個の点

$$\{x_1, \ldots, x_n\}$$

で零となる多項式で, $\{x_1, \ldots, x_n\}$ の中には共通のものはなかったから,

$$(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

で割り切れる.

- ▷ $P_a(x) - P_b(x)$ は $n-1$ 次以下の多項式, $(x-x_1)\cdots(x-x_n)$ は n 次 の多項式だから, 後者が前者を割り切るということは, $P_a(x) - P_b(x) = 0$ であることを意味する. ■

- 次に, Lagrange 補間を区間 $[a, b]$ で定義された連続関数 f の近似と解釈したとき, Lagrange 補間多項式がもとの関数 f をどの程度うまく近似できるかという問題に関して, いくつか事実を述べる.
- 証明は繁雑なので省略する.

- L_k を, 区間 $[a,b]$ において k 個の標本点を定め, 関数 f から k 個の標本点における関数値を用いて Lagrange 補間多項式を定める作用素とする.
- L_k は線形作用素であることが示せる (証明略).

- f から L_k によって作られる Lagrange 補間多項式を $L_k f$ と書く.
- 問題となるのは, 作用素の系列 $(L_k)_{k\in\mathbb{N}}$ が与えられたとき, $L_k f$ が k を大きく取れば f に近付くかどうか, ということである.

- 関数の定義域を区間 $[a,b]$ とし, $(L_k)_{k\in\mathbb{N}}$ を, 区間 $[a,b]$ におけるある k 個の標本点の取り方に対応した Lagrange 補間作用素の系列とすると, $(L_k)_{k\in\mathbb{N}}$ によって一様近似できない連続関数が存在することが証明できる (証明略).

- 逆に, 連続関数 f を固定した場合には, 標本点の取り方をうまく定めることで, それを一様近似するような列 $(L_k)_{k\in\mathbb{N}}$ を作ることができる (証明略).

- f を n 回以上連続微分可能な関数とする．L_n を n 個の標本点 $(x_1, \ldots, x_n)$ に対応した Lagrange 補間多項式を作る作用素とし，$W = \prod_{k=1}^{n}(x - x_k)$ とする．このとき，以下が成り立つ

$$\|f - L_n f\|_\infty \leq \frac{\|f^{(n)}\|_\infty \|W\|\infty}{n!}$$

([杉原, 室田]; 証明略)

- f が解析関数であっても, 標本点の取り方を等間隔としてしまうと, n をいくら大きく取っても $L_n f$ が f に近付かないことがある．これを Runge の現象という．標本点の取り方を工夫すれば, この問題を改善することができる ([杉原, 室田]; 証明略)

- Lagrange 補間は, データ点のあいだの関数値をうまく近似できるか否かという観点では, 必ずしも高性能とは言えないが, 構成が簡単で後の講義で述べる数値積分との相性が良いので, グラフを描くためのツールというよりは解析のためのツールとして利用される.

Newton 補間

- Lagrange 補間には, その計算法が数値計算の誤差に弱いという問題がある.

- 展開に

$$\frac{\prod_{j\neq i}(x-x_j)}{\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)}$$

のかわりに

$$(x-x_1),(x-x_1)(x-x_2),\ldots$$

を使うことにより, この問題は緩和される.

- 計算法については改めて述べるが，このようにして補間多項式を得る手段を **Newton 補間**と呼ぶ．

- Newton 補間というのは, 補間多項式を得るための計算法の名称であって, 最終的に得られる補間多項式は Lagrange 補間多項式と同一である.

- 続いて, 計算法について見てゆく.

- 関数 $f(x)$ が以下のように定義されているものとする.

$$
\begin{aligned}
f(x) &= c_0 \\
&\quad + c_1(x - x_1) \\
&\quad + \cdots \\
&\quad + c_{n-1}(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})
\end{aligned}
$$

- x に $x_1, x_2, \ldots, x_n$ を代入すると…
  - ▷ $f(x_1) = c_0$
  - ▷ $f(x_2) = c_0 + c_1(x_2 - x_1)$
  - ▷ $\ldots$
  - ▷ $f(x_n) = c_0 + \displaystyle\sum_{i=1}^{n-1} c_i \prod_{j=1}^{i}(x_n - x_j)$

- 記号の便宜上, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq k \leq n$ に対し,

$$a_{ik} = \begin{cases} 1, & k = 1, \\ \prod_{j=1}^{k-1}(x_i - x_j), & 2 \leq k \leq i, \\ 0, & \text{それ以外} \end{cases}$$

とする.

- $\{x_1, \ldots, x_n\}$ の中には共通のものはなかったから, $a_{ii} \neq 0$ である.
- $A = (a_{ik})_{1\leq i\leq n, 1\leq k\leq n}$ とする. A は下三角行列で, 対角要素が零ではないので正則である.
- $x = (c_0, \ldots, c_{n-1})^T$ とおく.

- $f(x_i) = y_i$ $(i = 1, \ldots, n)$ となるように f を定める問題を考える.
- $b = (y_1, \ldots, y_n)^T$ とおくと, $f(x_i) = y_i$ $(i = 1, \ldots, n)$ となるように f を定める問題は, 連立一次方程式

$$Ax = b$$

を解く問題に帰着され, A は正則だから, これは解ける.

- このようにして $n-1$ 次の補間多項式を得る計算法を **Newton 補間**と呼ぶのだが…
- 得られた多項式は n 個のデータ点を通る $n-1$ 次以下の多項式となっており，先に見たように Lagrange 補間多項式は一意的だったから，Newton 補間によって得られた多項式は Lagrange 補間多項式と一致する．

- Newton 補間によるが Lagrange 補間多項式の計算では, Lagrange 補間多項式の定義であらわれていた多数回の除算が, 連立一次方程式を解くことに, 置き換わっている. 除算は数値計算の誤差の影響を受けやすいので, このようにすることで, 数値計算の誤差の悪影響が緩和されることが期待できる.

Hermite 補間

- Lagrange 補間 (および Newton 補間) で得られた多項式は, 標本点の取り方によっては, 標本点間における関数値の脈動が激しい多項式となる. しかし, n 個の標本点を通る $n-1$ 次の多項式は一意的に定まるため, 多項式の次数をこのままにした場合には, これを改善する余地はない.

- Lagrange 多項式より高い次数の多項式を用いることで, この「脈動」を抑えることを考える.
- 具体的には, 標本点において, 関数 f と関数値およびその 1 階の導関数の値を一致させることを考える.

- 区間 $[a, b]$ において少なくとも 1 階微分可能な関数 $f(x)$ を多項式によって近似したい.

- n 個の相異なる点

$$\{x_1, \ldots, x_n\}$$

において, $f(x)$ の値

$$f(x_1), \ldots, f(x_n)$$

と, その導関数 $f'(x)$ の値

$$f'(x_1), \ldots, f'(x_n)$$

が与えられているものとする.

- $2n$ 個の方程式を解くということは, 未知数が $2n$ 個必要である. すなわち, $2n-1$ 次の多項式 (係数は零次の項も含めて $2n$ 個) を使えば, 目的は達成される筈である.

- Lagrange 補間で用いた

$$p_i(x) = \frac{\prod_{j\neq i}(x - x_j)}{\prod_{j\neq i}(x_i - x_j)}, \quad i = 1, \ldots, n$$

を用いて, $i = 1, \ldots, n$ に対し, 以下の多項式を定義する.

$$h_i(x) = (p_i(x))^2 \left(1 - 2p_i'(x_i)(x - x_i)\right),$$

$$k_i(x) = (p_i(x))^2 (x - x_i)$$

- 多項式

$$h_i(x) = (1 - 2p_i'(x_i)(x - x_i))$$

において, $(x - x_i)$ の係数

$$2p_i'(x_i)$$

は p' の点 x_i における値であり, 定数である.
よって, $h_i(x)$ は $2n-1$ 次の多項式である.

- 定義から, $k_i(x)$ も $2n-1$ 次の多項式である.

- 代入して計算すると, $h_i(x)$ は以下を満たすことが確認できる.

$$h_i(x_j) = \begin{cases} 1, & j = i, \\ 0, & j \neq i, \end{cases},$$

$$h_i'(x_j) = 0$$

- 同じく代入して計算すると, $k_i(x)$ は以下を満たすことが確認できる.

$$k_i(x_j) = 0,$$

$$k_i'(x_j) = \begin{cases} 1, & j = i, \\ 0, & j \neq i, \end{cases}$$

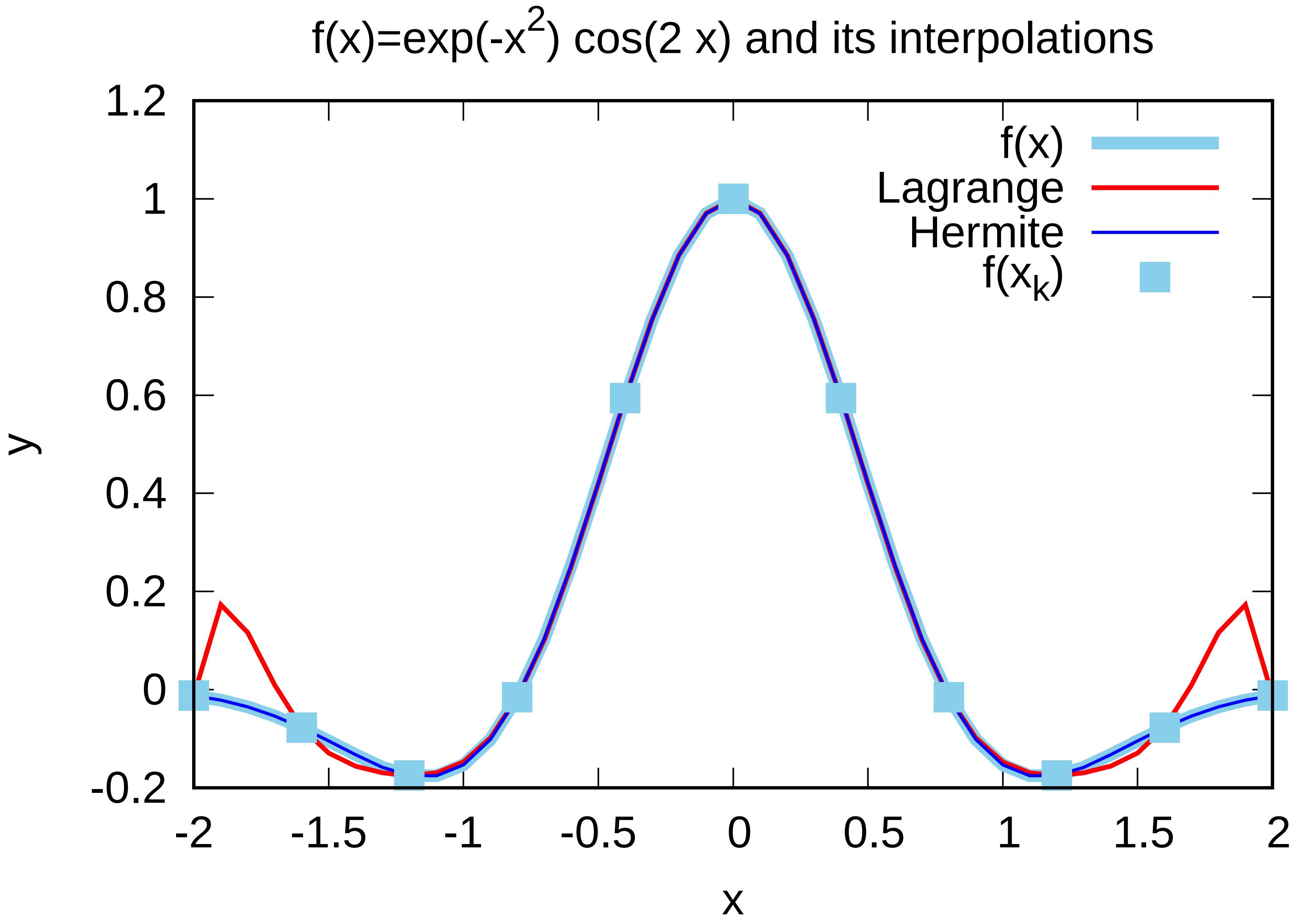
- したがって, 以下のようにすると $\{x_1, \ldots, x_n\}$ において f およびその導関数と値が一致する $2n-1$ 次多項式が得られる．これが Hermite 補間多項式である.

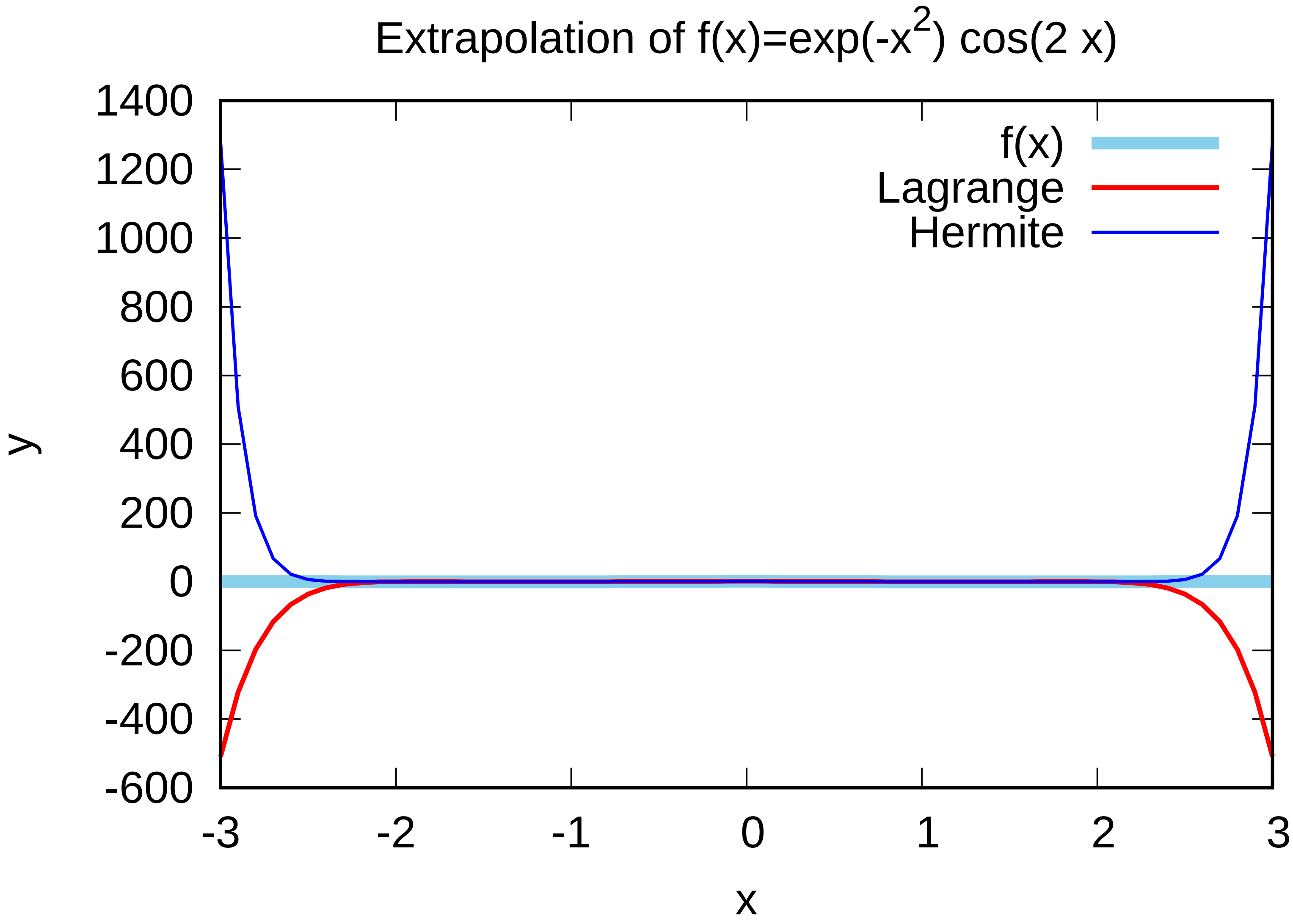
$$q_{2n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) h_i(x) + \sum_{i=1}^{n} f'(x_i) k_i(x)$$

- Hermitte 補間多項式を求めることを Hermite 補間という ([杉原, 室田]).
- Hermite 補間多項式の近似誤差は, Lagrange 補間多項式と同様の方法により評価できるが, 詳細は略す ([斎藤], [杉原, 室田]).

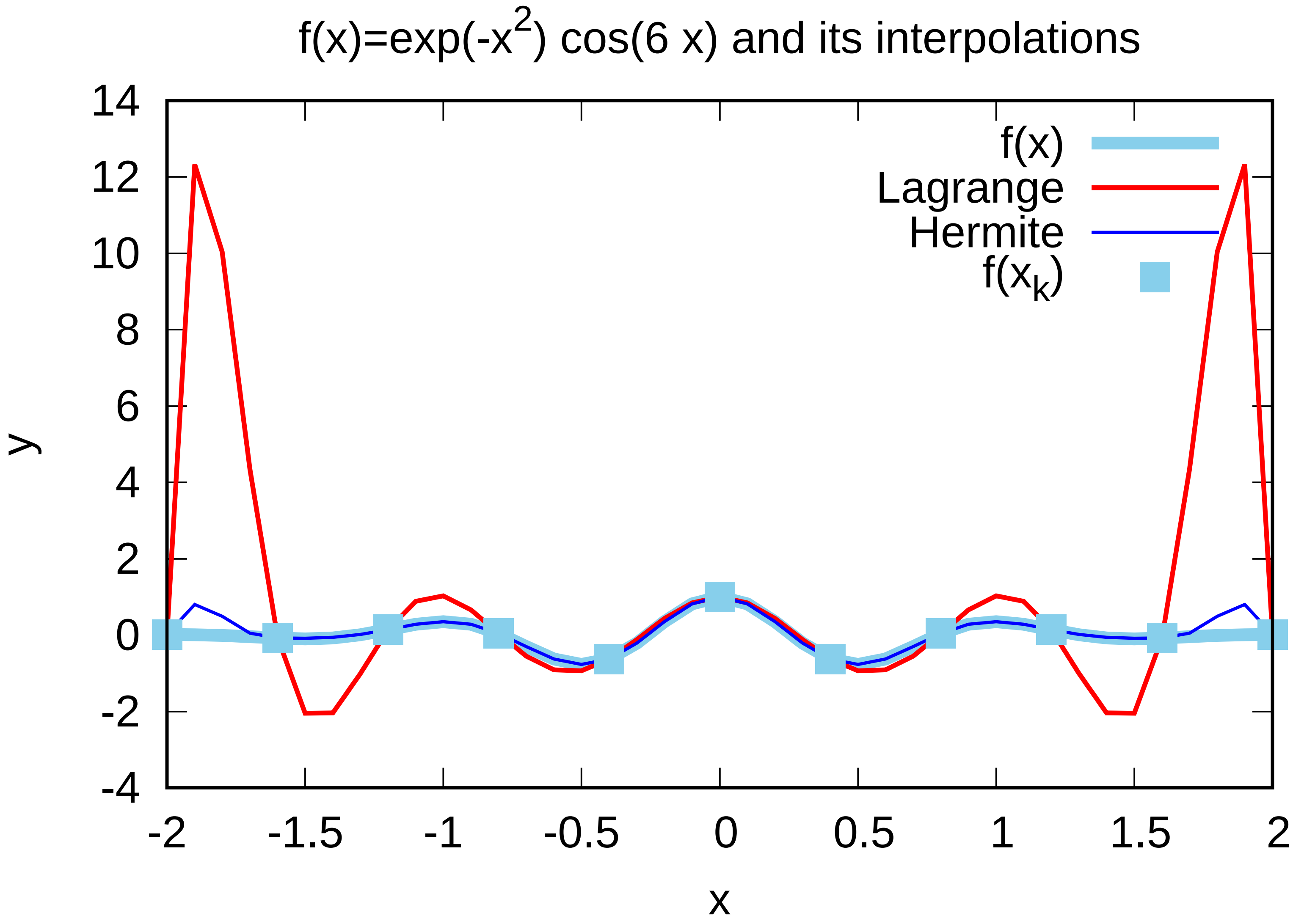
多項式補間の数値例

- $e^{-x^2}\cos 2x$ および $e^{-x^2}\cos 6x$ を区間 $[-2,2]$ において Lagrange 補間および Hermite 補間した例を次ページに示す.
- 標本点は 11 点で, 等間隔とした.
- $e^{-x^2}\cos 2x$ については, 区間 $[-2,2]$ の外部で関数と補間多項式を比較した.


f(x)=exp(-x2) cos(2 x) and its interpolations
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
y
-2
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5
2
x
f(x)
Lagrange
Hermite
f(xk)



Extrapolation of f(x)=exp(-x^2) cos(2 x)
1400
1200
1000
800
600
400
200
0
-200
-400
-600
y
-3
-2
-1
0
1
2
3
x
f(x)
Lagrange
Hermite



f(x)=exp(-x^2) cos(6 x) and its interpolations
f(x)
Lagrange
Hermite
f(x_k)
y
x
14
12
10
8
6
4
2
0
-2
-4
-2
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5
2

- 標本点では関数とその補間多項式の値は一致する.
- Lagrange 補間の, 区間の境界の近くで関数値からの乖離が発生するという欠点は Hermite 補間では緩和されている.
- Lagrange 補間, Hermite 補間とも, 補外に関する性能は悪い.

- 関数の脈動と比較して標本点が少ない場合には, 関数とその補間多項式の値との標本点以外の点における値の乖離が大きくなる.
- とはいえ, 数値計算の誤差の問題があるため, 標本点を無闇に多くするわけにはいかない(特に Hermite 補間多項式).
- 標本点以外の点における近似精度については, 線形補間の方が良いこともある.

スプライン補間

- Lagrange 補間と Hermite 補間には, 多項式の次数が高いという問題と, 標本点以外で関数値と補間多項式の値に大きな乖離が発生することがあるという問題があった.
- 線形補間にはこのような問題はないが, 一方で微分可能でないという問題がある.

- 線形補間の良さを踏襲しつつ補間関数を微分可能にしようというのがスプライン補間の考え方.

- 線形補間では, 区間 $[x_{k-1}, x_k]$ における補間直線と区間 $[x_k, x_{k+1}]$ は別物であった.
- スプライン補間では, 区間 $[x_{k-1}, x_k]$ と区間 $[x_k, x_{k+1}]$ とで, 相異なる多項式を用いて補間をおこなう.
- 以下の議論の典拠は [杉原, 室田], [斎藤].

- 以下の議論では, n 個の標本点

$$x_1 < x_2 < \cdots < x_n$$

と, その点における標本値

$$(y_1, y_2, \ldots, y_n)$$

が与えられているものとする.

- Lagrange 補間 や Hermite 補間では,

$$\{x_1, \ldots, x_n\}$$

には共通のものがなければよかったが, スプライン補間では, これらが小さい方から順に並べられている必要がある.

- 先に述べた通り, 全データに対して単一の補間多項式を構成したLagrange 補間 Hermite 補間と異なり, スプライン補間では, 各区間で 1 個ずつ, 全体で $n-1$ 個の補間多項式が作られる.

- 有限個の点 $x_1 < x_2 < \cdots < x_n$ が与えられ, 区間 $[x_k, x_{k+1}]$ $(1 \leq k \leq n-1)$ において f が m 次の多項式となるとき, f は区分的 m 次多項式という.
- $(m-1)$ 階までの導関数が全領域で連続となる区分的 m 次多項式を, m 次スプラインという.

- n 個の標本点

$$\{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$$

に対し, x_k における値が y_k となるような m 次スプラインによる補間を m 次スプライン補間という.

- 応用上は, 3 次のスプラインがよく用いられる.

- そこで, 以下では, 3 次のスプライン補間の構成法について見てゆく.

- $S(x)$ を, これから構成しようとしている区分的 3 次多項式とする.
- スプライン補間は補間であるから,

$$S(x_1) = y_1$$

$$\cdots$$

$$S(x_n) = y_n$$

でなければならない.

- 開区間 (x_k, x_{k+1}) $(1 \leq k \leq n-1)$ では $S(x)$ は多項式だから, $S'(x)$ は連続である.

- よって, 区間の端点における $S(x)$ の必要な階数までの右微分と左部分が一致すれば, $S(x)$ によってスプライン補間が達成される.
- 我々は 3 次のスプライン補間を構成しようとしているので, $S(x)$ の 1 階と 2 階の右導関数と左導関数を一致させなければならない.

- 1 階微分については, $S'(x_k) = d_k$ とし, d_k を未知数とする方程式を解けばよい (具体的な形は後述).

- 区間 $[x_k, x_{k+1}]$ においてスプライン補間の「部品」を 構成するには, 2 個の 標本点

$$\{(x_k, y_k), (x_{k+1}, y_{k+1})\}$$

に関する Hermite 補間多項式 を用いる. $n = 2$ のとき Hermite 補間多項式の次数は $2n - 1 = 3$ だから, 次数は合っている.

- どの区間について計算しても同じことなので,

$$\{(x_1, y_1), (x_2, y_2)\}$$

を取り挙げ, 区間 $[x_1, x_2]$ における Hermite 補間を考える.

- 2 点に関する Lagrange 補間多項式を $l(x)$ とする．この場合，Lagrange 補間は $n - 2 = 1$ だから線形補間であり，

$$
\begin{aligned}
p_1(x) &= (x - x_2)/(x_1 - x_2), \\
p_2(x) &= (x - x_1)/(x_2 - x_1), \\
l(x) &= y_1 p_1(x) + y_2 p_2(x)
\end{aligned}
$$

である．

- $\delta = x_2 - x_1$ とおき h_1, h_2, k_1, k_2 を求めると,

$$
\begin{aligned}
h_1(x) &= \frac{1}{\delta^3}(x - x_2)^2(\delta + 2(x - x_1)), \\
h_2(x) &= \frac{1}{\delta^3}(x - x_1)^2(\delta - 2(x - x_2)), \\
k_1(x) &= \frac{1}{\delta^2}(x - x_1)(x - x_2)^2, \\
k_2(x) &= \frac{1}{\delta^2}(x - x_1)^2(x - x_2),
\end{aligned}
$$

となる.

- y_1, y_2, d_1, d_2 を用いて Hermite 補間多項式を求めると,

$$y_1 h_1(x) + y_2 h_2(x) + d_1 k_1(x) + d_2 k_2(x)$$

となる．その x_1 における右微分は d_1, x_2 における左微分は d_2 である.

- 区間 $[x_2, x_3]$ 以降でも同様に操作をおこなう. 区間 $[x_2, x_3]$ の左端 x_2 における補間多項式の右微分は d_2 で, $[x_1, x_2]$ の右端 x_2 における補間多項式の左微分と一致するから, 1 階の導関数は連続である. $d_1, d_2, \ldots, d_n$ はまだ決まっていない.

- $m = 3$ だから, 2 階の導関数も全領域で連続でなければならない. ここから d_k を定める.

- この補間多項式の x_1 における右 2 階微分と x_2 における左 2 階微分はそれぞれ

$$6\frac{(y_2 - y_1)}{\delta^2} - 4\frac{d_1}{\delta} - 2\frac{d_2}{\delta},$$

$$-6\frac{y_2 - y_1}{\delta^2} + 2\frac{d_1}{\delta} + 4\frac{d_2}{\delta}$$

である.

- $\delta_1 = x_2 - x_1$, $\delta_2 = x_3 - x_2$ とおき, $[x_2, x_3]$ において同様の計算をした後に, x_2 における左右からの 2 階導関数の値を等号で結んで整理すると, 以下のようになる.

$$\begin{aligned} \frac{d_1}{\delta_1} + 2\left(\frac{1}{\delta_1} + \frac{1}{\delta_2}\right) d_2 + \frac{d_3}{\delta_2} \\ = 3\left(\frac{y_2 - y_1}{\delta_1^2} + \frac{y_3 - y_2}{\delta_2^2}\right) \end{aligned}$$

- $\delta_k = x_{k+1} - x_k \ (1 \le k \le n-1)$ とおいて全区間について同様の計算をおこない,

$$\gamma_k = \frac{1}{\delta_{k-1}} + \frac{1}{\delta_{k+1}} \, (2 \le k \le n-1),$$

$$\mu_k = \frac{1}{\delta_k} \, (1 \le k \le n),$$

$$\nu_k = \frac{y_k - y_{k-1}}{\delta_{k-1}^2} + \frac{y_{k+1} - y_k}{\delta_k^2} \, (2 \le k \le n-1)$$

とする.

- すると，解くべき方程式を，次ページように連立１次方程式として纏めることができる．

$$
\begin{pmatrix}
\mu_1 & \gamma_2 & \mu_2 & & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & & \\
& & \mu_{n-1} & \gamma_{n-1} & \mu_{n-1} &
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} \nu_2 \\ \vdots \\ \nu_{n-1} \end{pmatrix}
$$

- この連立1次方程式は, n 個の変数に対して方程式が $n-2$ 個なので, 解は一意ではない.
- 解を一意にするために, 上記に式を2個追加して解を求めることが普通である. やり方は何通りかあるが…

- たとえば, 補間したい関数 f が既知で微分可能のとき,

$$f'(x_1) = S'(x_1 + 0),$$
$$f'(x_n) = S'(x_n - 0)$$

とする方法が知られている.

- これ以外に,

$$S''(x_1 + 0) = S''(x_n - 0) = 0$$

とする方法知られている.

- なお, 上記において, $+0$ は右極限, -0 は左極限をあらわしている.

Scilab におけるスプライン補間

- Scilab でスプライン補間をおこなう関数は何種類かある．この講義では, `interp`, `smooth`, `splin` を取り上げる．

- **interp:**　関数 `interp` は, $x = (x_1, \ldots, x_n)$ における関数値 $y = (y_1, \ldots, y_n)$ とその導関数値 $dy = (y'_1, \ldots, y'_n)$ および補間関数値を計算したい点のデータ $z = (z_1, \ldots, z_m)$ を受け取り, z におけるスプライン補間関数値を返す.

- 例えば, $x = (0, \pi/4, \pi/2, 3\pi/4, \pi)$ において $\sin x$ の値を使ってスプライン補間をおこない, 0 から 0 から 3 まで 0.1 刻みで関数値を評価するときには, 次のようにする (計算結果をテキストとして資料に記しても得られる情報はあまりないので, 計算結果は省略している; 以下同じ).

```
x=[0 %pi/4 %pi/2 3*%pi/4 %pi];
y=sin(x);
dy=cos(x);
z=0:0.1:3;
val=interp(z,x,y,dy);
```

- **smooth:**　関数 `smooth` も標本点からスプライン補間をおこない, 補間点における関数値を返すが, x と y のペアを 2 行 n 列の行列にして与える点と (導関数は不要), 「0.1 刻みで関数値を計算」などのように刻みを与える点, 返却値は 2 行 m 列の行列で, 第 1 列に x 軸上で取られた点の値, 第 2 列に補間関数値が入る点が異なる.

- たとえば, 先ほどと同じ x, y について, x 軸上で 0.9 刻みで補間関数値を計算したいときには次のようにする.

```
x=[0 %pi/4 %pi/2 3*%pi/4 %pi];
y=sin(x);
val=smooth([x;y],0.9);
```

- **splin:**　関数 `splin` は, 与えられた標本点からスプライン関数を生成し, その標本点におけるスプライン関数の導関数を返す．使用例は省略する．

- Scilab のオンラインマニュアルの Interpolation の項を見ると, これ以外にもスプライン補間に対応する関数があるのがわかるが, この講義ではこれ以上述べない.

各種補間多項式の比較

- これまで, 線形補間, Lagrange 補間, Hermite 補間, スプライン補間の 4 種類の補間について解説して来た.
- 改めて, 例によってこれらを比較する.

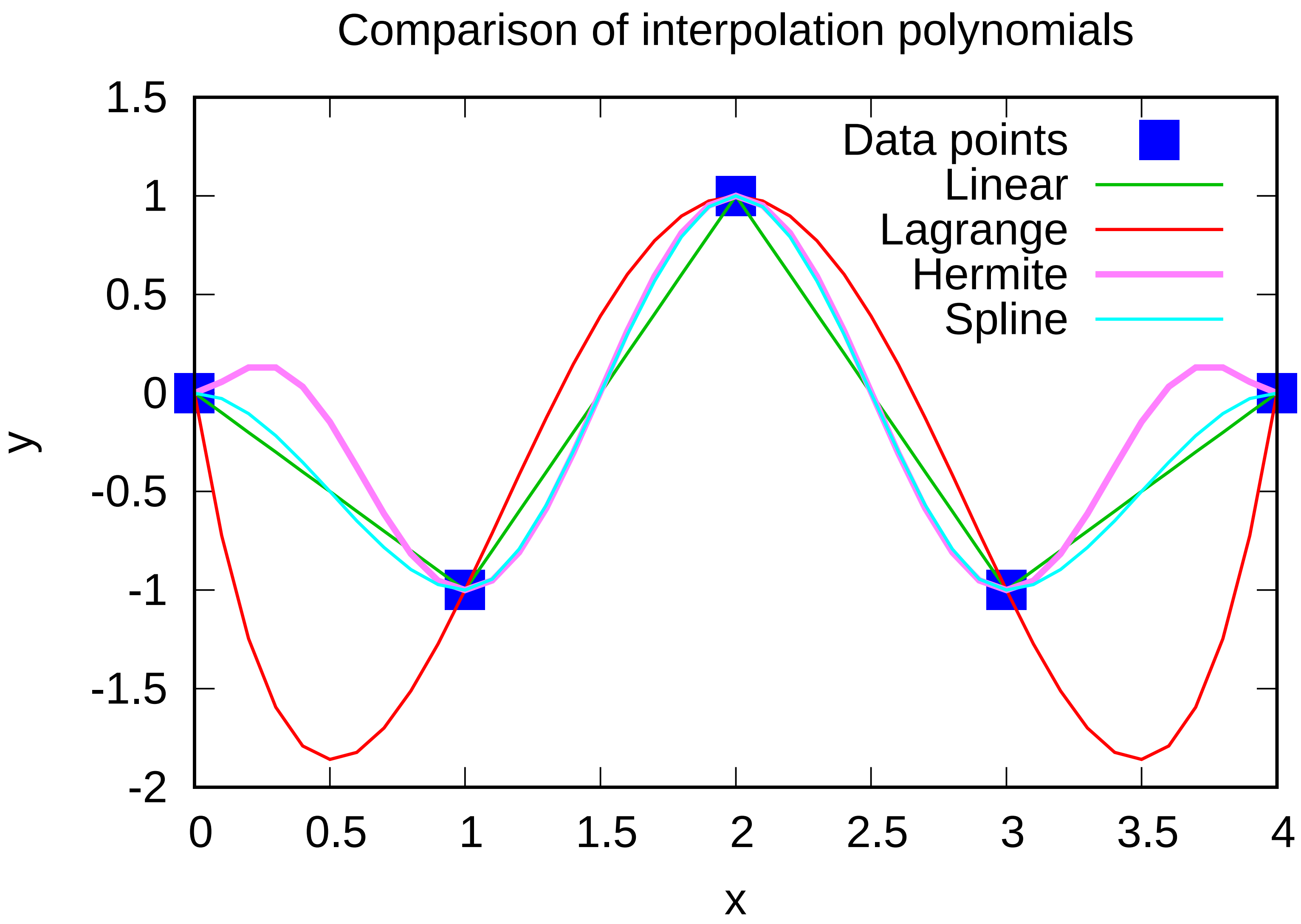
- データ点の x 座標と対応する $f(x)$, Hermite 補間とスプライン補間では $f'(x)$ の値が, 以下の表に与えられていたものとする.

x 座標	0	1	2	3	4
$f(x)$	0	-1	1	-1	0
$f'(x)$	0	0	0	0	0

このデータに対して⋯

- ▷ データ点
  - ▷ 線形補間
  - ▷ Lagrange 補間
  - ▷ Hermite 補間
  - ▷ スプライン補間 (3 次)

によって得られた補間関数のグラフを重ね書きすると, 次ページのようになる.


Comparison of interpolation polynomials
Data points
Linear
Lagrange
Hermite
Spline
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-2
y
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
x

- このグラフから, 次のようなことが読み取れる:

- 線形補間にもっともグラフが近いのは3次のスプライン補間である.
- Hermite 補間のグラフはスプライン補間のそれに近いが, x 軸の両端側で相対的に大きな脈動が発生している.
- Lagrange 補間ではデータ点のあいだの脈動が大きく, x 軸の両端側でそれが顕著である.

- これらはあくまで例ではあるが，線形補間，Lagrange 補間，Hermite 補間，スプライン補間の 4 種類の特徴をよく表している．