数値計算

京都大学大学院情報学研究科
大木 健太郎
連絡先： ohki@i.kyoto-u.ac.jp

第14回

- 関数近似

本日の内容

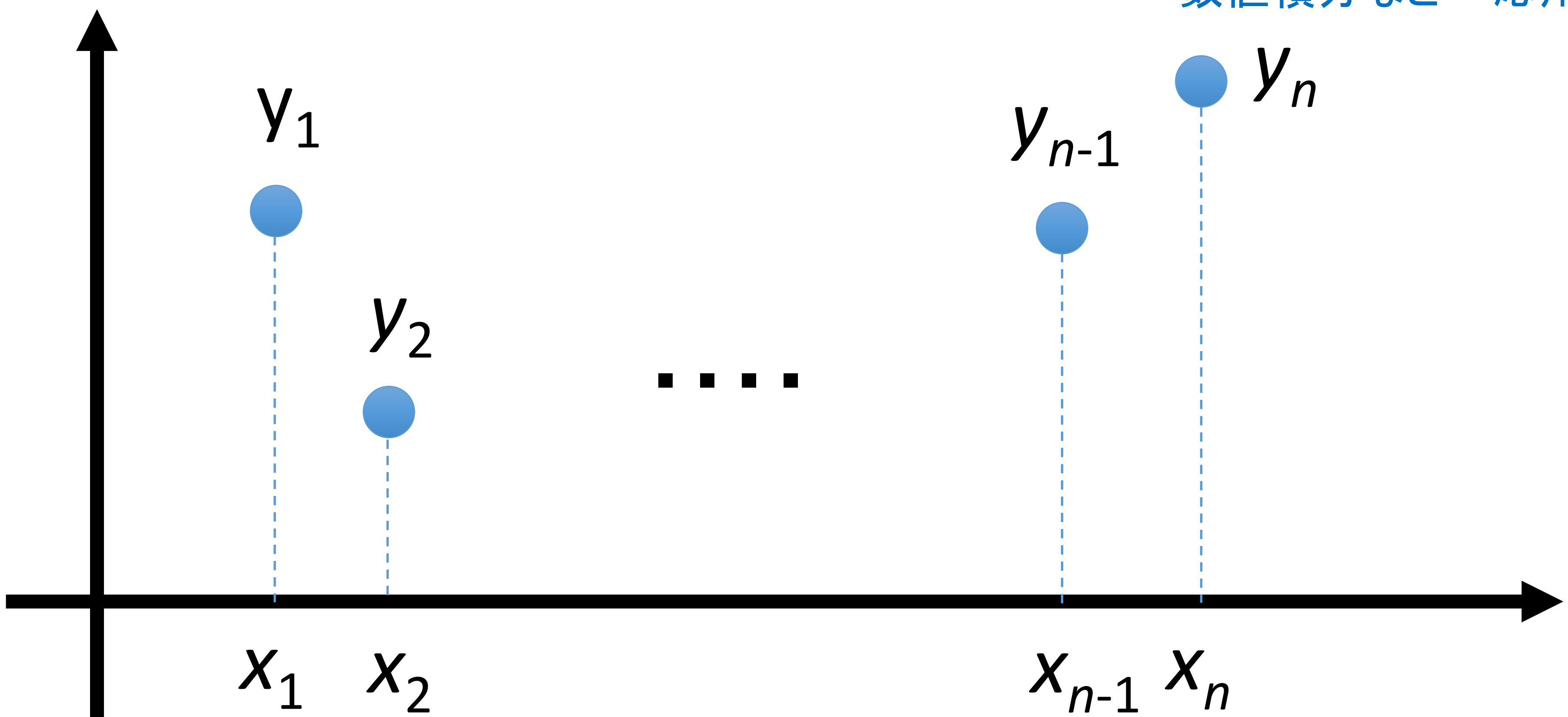
- 関数近似
  - 有限次数の近似多項式
  - 最小二乗近似
  - 直交多項式

データと曲線フィッティング

与えられたデータから，尤もらしい関係式を与えたい

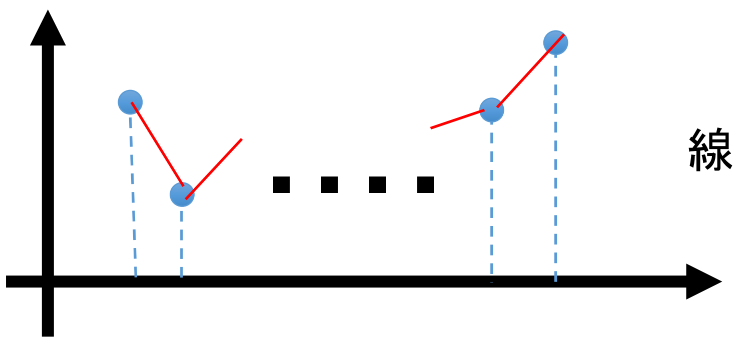
モチベーション：データのない箇所の推定値を知りたい

数値積分などへ応用



関数の近似

- 補間
  - 与えられたデータは正確であると仮定
  - 線形補間，Lagrange補間など



線形補間：データを直線で結ぶ補間法

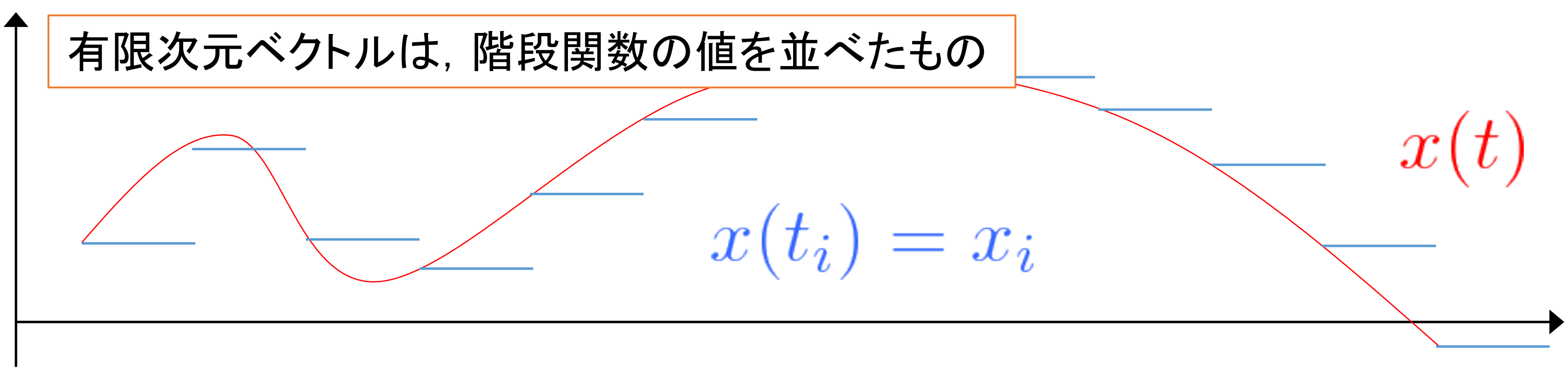
- 最小二乗法：
  - 与えられたデータには誤差があると仮定

関数とベクトル

- 関数はベクトル： 和とスカラー倍が定義できる

要素毎に和が定義される $\Rightarrow$ 関数$x, y : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ も同様

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \Rightarrow x(t) + y(t)$$



関数の測り方

- 関数の大きさを測る尺度: ノルムを利用

1. $\|x\| \geq 0, \forall x \in X$ かつ $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
2. $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|, \forall x \in X, \ \alpha \in \mathbb{C}$
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

- 関数間の類似度を測る尺度: 内積を利用

1. $\langle x, y \rangle = \overline{\langle x, y \rangle}, \forall x, y \in \mathbb{C}$
2. $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle \ , \forall x, y \in X, \ \alpha \in \mathbb{C}$
3. $\langle x_1 + x_2, y \rangle = \langle x_1, y \rangle + \langle x_2, y \rangle$
4. $\langle x, x \rangle \geq 0$ かつ等号は $x = 0$ のときのみ

よく用いる関数空間：Hilbert空間

- [*a*, *b*] 上の関数の集合に対し
  - 内積を次で定義

$$\langle u, v \rangle := \int_a^b u(x)v(x)dx$$

  - ノルムを次で定義（ノルムの公理を満たすことが確認できる）

$$\|u\|_2 := \sqrt{\langle u, u \rangle}$$

- ノルムが有界になる関数の集合は完備になる（Hilbert空間という）

“ノルム”の注意

- ノルムでゼロになる関数は，恒等的にゼロではない

（例）
$$u(x) = \begin{cases} 1, & x = \frac{a+b}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\|u\|_2^2 = \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\frac{a+b}{2}-\epsilon}^{\frac{a+b}{2}+\epsilon} u(x)dx = 0$$

$\Rightarrow$ $u = 0 \quad \text{a.e.}$ ほとんど至るところ（almost everywhere）でゼロ

ノルムとして使いたい尺度でゼロになる関数は，
ゼロとみなす

基本系と正規直交系

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \psi_j(x)$$ とする

- $\{\psi_j\}$ がノルム空間 $(X_\alpha, \|\cdot\|_\alpha)$ の基本系とは,

$$\forall f \in X_\alpha, \quad \lim_{n\to\infty} \inf_{c_j, j=1,2,\cdots} \|f - f_n\|_\alpha = 0$$

- $\{\psi_j\}$ がHilbert空間の正規直交系（ONS；orthonormal system）とは,

$$\langle \psi_i, \psi_j \rangle = \delta_{ij}$$

- 正規直交基底（ONB；orthonormal basis）とは，基本形かつ正規直交系

基本系の例: Weierstrassの定理

- 有限閉区間上の連続関数は，多項式でいくらでも近似できる.

ノルム空間: 連続関数の集合とmaxノルム

$$(C([a,b]),\ \|\cdot\|_\infty)\quad \|u\|_\infty := \max_{x\in[a,b]} |u(x)|$$

多項式 $f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \psi_j(x), \quad \psi_j(x) := x^j$

$$\forall f \in C([a,b]),\ \forall \epsilon > 0,\ \exists n > 0;$$
$$\min_{c_j, j=1,2,\cdots} \|f - f_n\|_\infty < \epsilon$$

本日の内容

- 関数近似
  - 有限次数の近似多項式
  - 最小二乗近似
  - 直交多項式

有限次数の近似多項式

- Weierstrassの定理は，多項式が存在することしか述べてない
  $\Rightarrow$ 大きな次数の多項式にもなりうる
- 実際は適切な有限次元でとどめる必要がある

近似多項式問題のためのノルムの性質

i. 次の不等式を満たす正数 M_n が存在する

$$\|x^k\| \leq M_n, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

ii. $\sum_{k=0}^{n} b_k^2 = 1$ を満足する全ての $(b_0, b_1, \cdots, b_n)$ に対して,

$$0 < m_h \leq \left\| \sum_{k=0}^{n} b_k x^k \right\|$$

を満たす正の m_n が存在する

最良近似多項式の存在性

$$f_n(x) := a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

定理4.1

ノルムが先の条件（ i ），（ ii ）を満たすならば，

$$\forall f \in C([a,b]),$$

$$\inf_{a_0,\cdots,a_n} \|f - f_n\| = \min_{a_0,\cdots,a_n} \|f - f_n\|$$

※ 下限を達成するパラメータが存在

本日の内容

- ❖関数近似
  - ❖有限次数の近似多項式
  - ❖最小二乗近似
  - ❖直交多項式

最小二乗法

- 一次独立な関数の一次結合を考える

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \psi_j(x), \quad \|\psi_j\| = 1$$

- 関数 f を L_2 の意味で最小化するパラメータを探す

$$S_n := \| f - f_n \|_2^2$$

これを最小化したい

正規直交系の場合

- 正規直交系の場合は計算が簡単

$$S_n := \|f - f_n\|_2^2 = \langle f - f_n, f - f_n \rangle$$

$$= \|f\|_2^2 - 2\sum_{j=0}^{n} c_j \langle f, \psi_j \rangle + \sum_{j=0}^{n} c_j^2$$

$$= \sum_{j=0}^{n} (\underline{c_j - \langle f, \psi_j \rangle)})^2 + \|f\|_2^2 - \sum_{j=0} |\langle f, \psi_j \rangle|^2$$

$$\Rightarrow \quad c_j = \langle f, \psi_j \rangle$$

$$\Rightarrow \quad \hat{f}_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \langle f, \psi_j \rangle \psi(x)$$

最良近似

一次独立性のみを仮定

- 平方完成して整理

$$
\begin{aligned}
S_n &= \|f\|_2^2 - 2\sum_{j=0}^{n} c_j \underbrace{\langle f, \psi_j \rangle}_{b_j} + \sum_{i,j=0}^{n} c_i c_j \underbrace{\langle \psi_i, \psi_j \rangle}_{=:a_{ij}} \\
&= \|f\|_2^2 - 2c^\top b + c^\top A c \\
&= (Ac - b)^\top A^{-1} (Ac - b) + \|f\|_2^2 - b^\top A^{-1} b
\end{aligned}
$$

正規方程式

⇨ $Ac = b$

※ $A = A^\top > 0$ に注意

最小二乗近似

- 正規方程式(連立一次方程式)を解くと,

$$c = A^{-1}b$$

$$\Rightarrow \quad \hat{f}_n(x) = \sum_{j=0}^{n} (A^{-1}b)_j \psi_j(x)$$

条件数が悪いと，近似解の精度が悪くなる

条件数が悪くなる例：多項式

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \psi_j(x), \qquad \psi_j(x) = x^j$$

- 多項式による正規方程式

$$Ac = b$$

$$a_{ij} = \langle \psi_i, \psi_j \rangle = \frac{1}{i+j+1}\left(b^{i+j+1} - a^{i+j+1}\right)$$

$$b_i = \langle \psi_i, f \rangle$$

n が大きくなると，行列 A の条件数が悪くなる

条件数を改善：直交多項式

- Gram-Schmidtの直交化

$$
\begin{aligned}
p_0 &= \frac{\psi_0}{\|\psi_0\|_2} \\
q_k &= \psi_k - \sum_{j=0}^{k-1} \langle \psi_k, p_j \rangle p_j \\
p_k &= \frac{q_k}{\|q_k\|_2}
\end{aligned}
$$

直交多項式

$$\{p_k\}_{k=0}^{n}$$

L^2 ノルムの意味で最適な近似多項式

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \tilde{c}_k p_n(x) \quad \tilde{c}_k = \langle p_k, f \rangle$$

密度関数を用いた内積·ノルム

- 有限次元の正定値対称行列 P を用いた内積

$$\langle x, y\rangle_P := x^\top P y = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_i y_j P_{ij}, \quad x, y \in \mathbb{R}^n$$

- 正定値対称行列の関数版

$$P(\cdot,\cdot) : [a,b]\times[a,b] \to \mathbb{R}$$

$$P(x,y) = P(y,x), \ \iint_a^b f(x)P(x,y)f(y)dxdy > 0, \ \forall f : \|f\|_2 \neq 0$$

- 内積·ノルム

$$\langle f, g\rangle_P := \iint_a^b f(x)P(x,y)g(y)dxdy, \ \|f\|_P := \sqrt{\langle f, f\rangle_P}$$

よく用いる密度関数

- 対角行列の関数版

$$P(x, y) = w(x)\delta(x - y)$$

- 関数 *w* の条件

$$\begin{cases} w(x) > 0, \quad \forall x \in [a, b] \\ \displaystyle\int_a^b x^k w(x) dx < \infty, \ \forall k \in \mathbb{N} \end{cases}$$

密度関数を用いた正規直交多項式

- Gram-Schmidt の直交化

$$p_0 = \frac{\psi_0}{\|\psi_0\|_w}$$

$$q_k = \psi_k - \sum_{j=0}^{k-1} \langle \psi_k, p_j \rangle_w p_j$$

$$p_k = \frac{q_k}{\|q_k\|_w}$$

直交多項式

$$\{p_k\}_{k=0}^{n}$$

重み付き L^2 ノルムの意味で最適な近似多項式

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \tilde{c}_k p_n(x) \quad \tilde{c}_k = \langle p_k, f \rangle_w$$

直交多項式展開

- 定められた内積における直交多項式:　$\{p_k\}_{k=0}^{\infty}$

- 直交多項式展開

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k p_k(x), \quad c_k = \langle p_k, f \rangle_w$$

n 次で打ち切ると, L_2 ノルムによる *f* の最良近似多項式

非直交関数が嬉しくない例

- 次数を変えると係数を計算し直す必要がある

$$f(x) = \sin(x), \quad x \in [0, \pi]$$

$$f_1(x) = \frac{2}{\pi} + 0 \times x$$

異なる

$$f_2(x) = \frac{12(\pi^2 - 10)}{\pi^3} - \frac{60(\pi^2 - 12)}{\pi^4} x + \frac{60(\pi^2 - 12)}{\pi^5} x^2$$

直交多項式の場合

- 直交多項式

$$
\begin{cases}
p(x) = 1 \\
p_1(x) = x - \frac{1}{2}\pi \\
p_2(x) = x^2 - \pi x + 16\pi
\end{cases}
$$

- 増やした次数分だけ計算すればよい

$$f(x) = \sin(x), \quad x \in [0, \pi]$$

$$f_1(x) = c_0 p_0(x) + c_1 p_1(x)$$

$$f_2(x) = c_0 p_0(x) + c_1 p_1(x) + c_2 p_2(x)$$

本日の内容

- 関数近似
  - 有限次数の近似多項式
  - 最小二乗近似
  - 直交多項式

様々な直交多項式

- 密度関数 *w* と定義域によってバリエーション

$$
\begin{cases}
\langle p_i, p_j \rangle_w = \delta_{ij}\lambda_i, \quad \lambda_i > 0 \\
p_0(x) = \mu_0 > 0
\end{cases}
$$

直交多項式	$[a, b]$	$w(x)$	λ_n
$P_n(x) = \frac{1}{2^n (n!)} \frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n,$	$[-1, 1],$	$1,$	$2/(2n+1),$
$T_n(x) = \frac{(-1)^n 2^n (n!)}{(2n!)} \sqrt{1-x^2} \frac{d^n}{dx^n}(1-x^2)^{n-1/2},$	$[-1, 1],$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}},$	$\pi/2$
$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n),$	$[0, \infty),$	$e^{-x},$	1
$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2},$	$(-\infty, \infty),$	$e^{-x^2},$	$\sqrt{\pi}2^n n!$

直交多項式の用途

- 補間問題に使いやすい（次回の講義）
- 数値積分に使いやすい
- 物理学の固有関数として現れる
  - 量子力学における水素原子のハミルトニアン

直交多項式の性質

- 直交多項式の零点は全て[*a*, *b*]内の単根
- 3項漸化式で表せる(次ページ)
- 最高次数の係数が正の直交多項式の列

$$p_n(x),\ \ p_{n-1}(x), \cdots\ ,\ \ p_0(x)$$

  は区間 [*a*, *b*] においてSturm列をなす

3項漸化式

- 直交多項式には次の3項漸化式(three term recurrence relation)が成り立つ（Lanczos過程）

$$
\begin{aligned}
p_k(x) =& (\alpha_k x + \beta_k) p_{k-1}(x) - \gamma_k p_{k-2}(x), \quad k = 1, 2, \cdots \\
p_{-1}(x) =& 0
\end{aligned}
$$

各係数は,

$$
\alpha_k = \frac{\mu_k}{\mu_{k-1}}, \quad \beta_k = -\frac{\alpha_k \langle x p_{k-1}, p_{k-1} \rangle_w}{\lambda_{k-1}}, \quad \gamma_k = \frac{\mu_k \mu_{k-2} \lambda_{k-1}}{\mu_{k-1}^2 \lambda_{k-2}}
$$

μ_k は直交多項式 p_k の最高次係数

3項漸化式：無限次行列表示

- 3項多項式の書き換え：Jacobi 行列

$$x \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0 & c_0 & & \\ b_0 & a_1 & c_1 & \\ & b_1 & a_2 & \ddots \\ & & b_2 & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

※ 正規直交多項式の場合

$$x \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & & \\ b_0 & a_1 & b_1 & \\ & b_1 & a_2 & \ddots \\ & & b_2 & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

直交多項式に関する参考文献

- G. Szego: *Orthogonal Polynomials*, 4th ed., American Mathematical Society (1981)
- B. Simon: *Szego's Theorem and Its Descendants: Spectral Theory for L^2 Perturbations of Orthogonal Polynomials*, Princeton University Press(2010)
- 青本 : 直交多項式入門, 数学書房 (2013)
- 伏見，赤井: 復刊 直交関数系 増補版，共立出版 (2011)

本日の内容

- ❖関数近似
  - ❖有限次数の近似多項式
  - ❖最小二乗近似
  - ❖直交多項式
- ❖講義で扱えなかった問題

講義で扱えなかった発展的内容例

- 精度保証付き数値計算
  - 大石: 精度保証付き数値計算, コロナ社 (2000)
  - 中尾, 渡辺: 実例で学ぶ精度保証付き数値計算, サイエンス社 (2011)
- 分散アルゴリズム: 大規模な計算の分割法
  - Lynch: *Distributed Algorithm*, Morgan Kaufmann (1997)
- Fourier変換: 信号処理や画像処理などの基本ツール
  - Pinsky: *Introduction to Fourier and Wavelets*, American Mathematical Society (2009)
- 量子アルゴリズム: 量子計算機を用いた数値計算
  - 連立一次方程式
    - Aran, Hassidim, and Lloyd: “Quantum algorithm for linear systems equations,” *Physical Review Letters*, vol. 103, 150502 (2009)
    - Cai, Weedbrook, Su, Chen, Gu, Zhu, Li, Liu, Lu, and Pan: “Experimental quantum computing to solve systems of linear equations,” *Physical Review Letters*, vol. 110, 230501 (2012)
  - Fourier 変換
    - Nielsen, Chuang: 量子コンピュータと量子通信 II, オーム社 (2005)

最新の内容を知るために

- Pre-printサーバー（無料で利用できる“査読なし”の電子冊子）
  - 数理系：http://arxiv.org/list/math.NA/recent
  - コンピュータ科学系：http://arxiv.org/list/cs.NA/recent
  - 査読がないため，正しさは不明（学術雑誌収録済みのものもあるので，それらは間違っている可能性は低い）
- Impact Factor や Eigen Factor の高い雑誌は，よく参照される（学術）雑誌なので，調べてみるとよい（必ずしもこれが良い指標ではないので，注意）