

第14章 補間と最小二乗法

変数 x の値が与えられたとき、関数 $f(x)$ の値を求めるにはどうするか、むかし—といっても、つい最近まで—は、適当な数表を引いて、必要ならば「補間」の計算を追加して、求めるのが普通であった。しかし、いまは違う。ポケットに入る計算機で、「関数キー」を押すだけで、平方根でも \sin でも \cos でも、たちどころに値が得られる。…

森口繁一「数値計算工学」(岩波書店)

14.1 補間と最小二乗法

一変数関数 $y = f(x)$ が n 個の点 $(x_1, f_1), (x_2, f_2), \dots, (x_n, f_n)$ を通過するものとする。ここで $f_i = f(x_i)$ の意味で用いる。また特に断らない限り、全ての x_i は相異なるものとし、 $x_i < x_j$ ($i < j$) とする。

関数 $f(x)$ が未知で、この n 個の通過点のみ与えられた時、 $f(x)$ に「近い」と思われる関数を創造するにはどうすればよいかを本章では考える。

誰でも簡単にかつ単純に思いつくのは、2点間を直線で結ぶというものである。この場合、一般に直線は2点間 $(x_i, f_i), (x_{i+1}, f_{i+1})$ 毎に全て異なる

$$l_i(x) = \frac{(x - x_i)f_{i+1} - (x - x_{i+1})f_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (14.1)$$

という直線(1次多項式)で与えられる。このように全ての点を通るように関数を創り、補間点の間を紡ぐことを補間(interpolation)と呼ぶ。この場合は $[x_1, x_n]$ 間を区分的に別々の1次多項式で補間している(1次 Spline 補間)ので、線形補間と呼ぶ。一次式ではなく、複数の3次多項式を滑らかに結合して区分的に補間するものを Cubic Spline 補間と呼ぶ。通常、Spline 補間と呼ばれるものはこの区分的3次多項式によるものである。

更に全ての点を通る $n-1$ 次の補間多項式を一つ導出することも可能である。この補間多項式を導出するのが、次に述べる Lagrange 補間、Newton 補間である。

これとは別に、全ての点を通過するのではなく、その近くを通る、利用者に都合の良い関数を創り出すのが最小二乗法と呼ばれるものである。普通は全ての点との距離の2乗和が最小になるように、パラメータを調節して関数を決定する。

最小二乗法は、実験や観測データのように、補間点に誤差を含んでいる時に有効に働くが、関数の「当てはめ」に無理があったり、誤差が極端に大きい場合には、説得力に欠ける結果を導くことにもなりかねない。

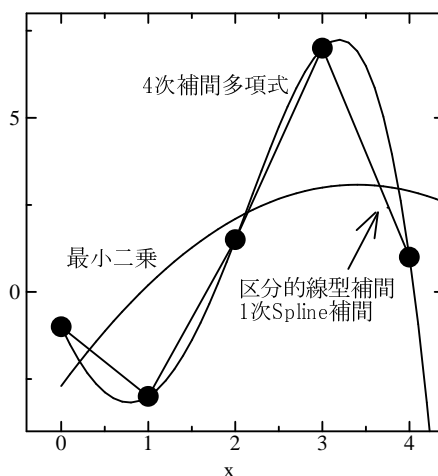


図 14.1: 1 次線型 (Spline 補間), 2 次式による最小二乗近似, 4 次補間多項式

14.2 連立一次方程式による $n - 1$ 次補間多項式の導出

n 個の点 $(x_1, f_1), (x_2, f_2), \dots, (x_n, f_n)$ を通る m 次多項式 $p_m(x) = \sum_{i=0}^m a_i x^i$ の係数 a_0, a_1, \dots, a_m は, n 個の線型方程式を満足する。ちょうど $m + 1 = n$ の時は

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \cdots & x_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \quad (14.2)$$

となる。ここで

$$V(x_1, x_2, \dots, x_n) = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \cdots & x_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{bmatrix}$$

を Vandermonde 行列と呼ぶ。

$x_i \neq x_j$ ($i \neq j$) であれば,

$$|V(x_1, x_2, \dots, x_n)| = \prod_{j=1, i>j}^n (x_i - x_j) \quad (14.3)$$

であるから, これは正則行列になる。従って, 必ず解 a_0, a_1, \dots, a_{n-1} が一意に定まる。

こうして求められた $n - 1$ 次補間多項式 $p_{n-1}(x)$ の打ち切り誤差 (理論誤差) は次の定理で与えられる。

定理 14.2.1 (補間多項式の打ち切り誤差)

元の関数 $y = f(x)$ が x_1, x_2, \dots, x_n を含む区間 I で n 階連続微分可能である時,

$$p_{n-1}(x) - f(x) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n) \quad (14.4)$$

を満足する $\xi \in I$ が存在する。

例題 14.2.2 (2 次の場合)

3 点 $(-2, -3)$, $(-1, 2)$, $(0, 1)$ を通る 2 次補間多項式を求める。この時の Vandermonde 行列及び補間多項式の係数 a_0, a_1, a_2 が満足する連立一次方程式は

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

となる。これを解くと

$$p_2(x) = 1 - 4x - 3x^2$$

という 2 次の補間多項式を得る。

例題 14.2.3

4 次の場合同様に、5 点 $(-2, -3)$, $(-1, 2)$, $(0, 1)$, $(3/2, 3)$, $(3, 4)$ を通る 4 次補間多項式を求める。結果のみ以下に示す。

Vandermonde Matrix

```

0  1.000e+00 -2.000e+00  4.000e+00 -8.000e+00  1.600e+01
1  1.000e+00 -1.000e+00  1.000e+00 -1.000e+00  1.000e+00
2  1.000e+00  0.000e+00  0.000e+00  0.000e+00  0.000e+00
3  1.000e+00  1.500e+00  2.250e+00  3.375e+00  5.062e+00
4  1.000e+00  3.000e+00  9.000e+00  2.700e+01  8.100e+01

```

Coefficients of p(x)

```

0  1.000000000000000089e+00
1  -9.04761904761904212e-01
2  1.07777777777777795e+00
3  7.000000000000000178e-01
4  -2.82539682539682480e-01

```

x	p(x)	f_i
-2.0000000000000000e+00	-2.99999999999999911e+00	-3.00000000000000000e+00
-1.0000000000000000e+00	2.00000000000000044e+00	2.00000000000000000e+00
0.0000000000000000e+00	1.00000000000000089e+00	1.00000000000000000e+00
1.5000000000000000e+00	3.00000000000000266e+00	3.00000000000000000e+00
3.0000000000000000e+00	4.00000000000001421e+00	4.00000000000000000e+00

連立一次方程式による補間多項式の係数を導出する方法は、補間点が増えて近接してくると Vandermonde 行列の 1 次独立性が薄れ、悪条件になるという難点がある。従って、実際には以下で述べる Lagrange 補間, Newton 補間によって補間多項式, 及びその値を計算することが望ましい。

問題 14.2.1

1. 補間点の x 座標値が全て相異なる時, Vandermonde 行列の行列式は式 (14.3) で表わされることを示せ。
2. $f(x) = 1/(x^2 + 1)$ の時, 閉区間 $[-5, 5]$ を等間隔に 6, 11, 21 分割した時, その時の 5 次, 10 次, 20 次補間多項式を求めよ。またその時の Vandermonde 行列の条件数はどのぐらいまで増大するか?

14.3 Lagrange 補間公式

n 点から $n-1$ 次の補間多項式を求めるには他にも方法があり, その一つが Lagrange 補間多項式である。これは次のように表現できる。

定理 14.3.1 (Lagrange 補間)

n 次多項式 $\psi(x)$ を

$$\psi(x) = \prod_{i=1}^n (x - x_i)$$

とする。このとき $n-1$ 次 Lagrange 多項式 $p_{n-1}(x)$ は次のように表現される。

$$\begin{aligned} p_{n-1}(x) &= \sum_{i=1}^n \frac{\psi(x)}{(x - x_i)\psi'(x_i)} f_i \\ &= \frac{(x - x_2)(x - x_3) \cdots (x - x_n)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3) \cdots (x_1 - x_n)} f_1 \\ &\quad + \frac{(x - x_1)(x - x_3) \cdots (x - x_n)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3) \cdots (x_2 - x_n)} f_2 \\ &\quad \vdots \\ &\quad + \frac{(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_1)(x_n - x_2) \cdots (x_n - x_{n-1})} f_n \end{aligned} \tag{14.5}$$

これを数値例で見えていくことにする。

例題 14.3.2 (2 次の場合)

3 点 $(-2, -3)$, $(-1, 2)$, $(0, 1)$ を通る 2 次補間多項式を Lagrange 補間によって求めてみる。

$$\begin{aligned} p_2(x) &= \frac{(x - (-1))(x - 0)}{(-2 - (-1))(-2 - 0)} \cdot (-3) \\ &\quad + \frac{(x - (-2))(x - 0)}{(-1 - (-2))(-1 - 0)} \cdot 2 \\ &\quad + \frac{(x - (-2))(x - (-1))}{(0 - (-2))(0 - (-1))} \cdot 1 \\ &= 1 - 4x - 3x^2 \end{aligned}$$

となり、先の連立一次方程式によるものと一致する。

問題 14.3.1

補間点が同一であれば、式 (14.5) が Vandermonde 行列を使って解いた結果の Lagrange 多項式と同じものになることを示せ。

14.4 Newton 補間公式

Lagrange 補間多項式は、Vandermonde 行列を用いて求めるにしろ、式 (14.5) を使って求めるにしろ、補間点を更に追加しようとする、もう一度最初から計算し直す必要がある。この点を改良したアルゴリズムが Neville のアルゴリズムである。

$n = 5$ の時を例にして計算アルゴリズムを説明する。

まず初期系列 (initial sequence) として、 $f_{11}(x) := f_1, f_{21}(x) := f_2, f_{31}(x) := f_3, f_{41}(x) := f_4, f_{51}(x) := f_5$ を与えておく。これを 1 列目に配置し、線形補間 (14.1) して 2 列目の値 $f_{22}(x), f_{32}(x), f_{42}(x), f_{52}(x)$ を得ると

$$\begin{aligned} f_{22}(x) &= \frac{(x-x_1)f_{21}(x) - (x-x_2)f_{11}(x)}{x_2-x_1} \\ f_{32}(x) &= \frac{(x-x_2)f_{31}(x) - (x-x_3)f_{21}(x)}{x_3-x_2} \\ f_{42}(x) &= \frac{(x-x_3)f_{41}(x) - (x-x_4)f_{31}(x)}{x_4-x_3} \\ f_{52}(x) &= \frac{(x-x_4)f_{51}(x) - (x-x_5)f_{41}(x)}{x_5-x_4} \end{aligned}$$

となる。これにより、2 列目は 1 次多項式の形で表現できることになる。

この 2 列目の値を用いて更に「線形補間」を続ける。 $f_{22}(x)$ と $f_{32}(x)$ はどちらも (x_2, f_2) を通過するように生成されているので、 $(x_1, f_1), (x_3, f_3)$ の 2 点を通過するように「線形補間」を行って $f_{33}(x)$ を生成すると

$$f_{33}(x) = \frac{(x-x_1)f_{32}(x) - (x-x_3)f_{22}(x)}{x_3-x_1}$$

となる。同様にして以下の 3 列目の値 $f_{43}(x), f_{53}(x)$ も

$$\begin{aligned} f_{43}(x) &= \frac{(x-x_2)f_{42}(x) - (x-x_4)f_{32}(x)}{x_4-x_2} \\ f_{53}(x) &= \frac{(x-x_3)f_{52}(x) - (x-x_5)f_{42}(x)}{x_5-x_3} \end{aligned}$$

として生成する。この時、3 列目の $f_{i3}(x)$ ($i = 3, 4, 5$) はそれぞれ $(x_{i-2}, f_{i-2}), (x_{i-1}, f_{i-1}), (x_i, f_i)$ の 3 点を通過する 2 次多項式として表現できる (→ 演習問題 3)。

同様にして、4 列目の $f_{44}(x), f_{54}(x)$ を

$$\begin{aligned} f_{44}(x) &= \frac{(x-x_1)f_{43}(x) - (x-x_4)f_{33}(x)}{x_4-x_1} \\ f_{54}(x) &= \frac{(x-x_2)f_{53}(x) - (x-x_5)f_{43}(x)}{x_5-x_2} \end{aligned}$$

表 14.1: 5 点 4 次補間多項式を求める Neville のアルゴリズム

x_1	$f_{11}(x)$								
		\searrow							
x_2	$f_{21}(x)$	\rightarrow	$f_{22}(x)$						
		\searrow		\searrow					
x_3	$f_{31}(x)$	\rightarrow	$f_{32}(x)$	\rightarrow	$f_{33}(x)$				
		\searrow		\searrow		\searrow			
x_4	$f_{41}(x)$	\rightarrow	$f_{42}(x)$	\rightarrow	$f_{43}(x)$	\rightarrow	$f_{44}(x)$		
		\searrow		\searrow		\searrow			
x_5	$f_{51}(x)$	\rightarrow	$f_{52}(x)$	\rightarrow	$f_{53}(x)$	\rightarrow	$f_{54}(x)$	\rightarrow	$f_{55}(x) = p_4(x)$

として生成し、更に 5 列目の $f_{55}(x)$ を

$$f_{55}(x) = \frac{(x - x_1)f_{54}(x) - (x - x_5)f_{44}(x)}{x_5 - x_1}$$

とする。この最後の $f_{55}(x)$ は、補間点全てを通過する 4 次多項式として表現できるので、 $p_4(x) = f_{55}(x)$ となっている。

以上をまとめると、計算は表 14.1 のように進展していくことになる。

一般に、 n 個の補間点 $(x_1, f_1), (x_2, f_2), \dots, (x_n, f_n)$ を全て通過する $n - 1$ 次補間多項式 $p_{n-1}(x)$ を得るための Neville のアルゴリズムは次のようになる。

アルゴリズム 34 (Neville のアルゴリズム)

1. $f_{j1}(x) := f_j$ ($j = 1, 2, \dots, n$) とする
2. $i = 1, 2, \dots, n$ において以下の計算を行う。

$$\begin{array}{ccc} f_{i-1,j-1}(x) & & \\ & \searrow & \\ f_{i,j-1}(x) & \rightarrow & f_{ij}(x) \end{array}$$

$$f_{ij}(x) := \frac{(x - x_{i-j+1})f_{i,j-1}(x) - (x - x_i)f_{i-1,j-1}(x)}{x_i - x_{i-j+1}} \quad (j = 1, 2, \dots, i) \quad (14.6)$$

計算を進めていくと、

$$f_{nn}(x) = p_{n-1}(x) \quad (14.7)$$

となる。

Neville のアルゴリズムの例を以下に示す。

例題 14.4.1 (2 次の場合)

3 点 $(-2, -3), (-1, 2), (0, 1)$ を通る 2 次補間多項式を Neville のアルゴリズムを用いて求める。

-2	-3			
-1	2	↘	→	$5x + 7$
0	1	↘	→	$-x + 1$
			↘	$-3x^2 - 4x + 1$

問題 14.4.1

上記の例に、補間点 $(1, 3)$ が追加された時の補間多項式 $p_3(x)$ を求めよ。

14.5 最小二乗法

m 個の補間点 $(x_1, f_1), \dots, (x_m, f_m)$ が与えられているとする。先の多項式補間ではこれら全ての点を通るように補間式を定めたが、必ずしも全ての点を通る必要がない場合もある。例えば、実験や観測の結果をプロットし、理論式との整合性を調べる場合、実験値は大概ある程度の誤差を含んでおり、理論式とは一致しないことが多い。従って、理論式のグラフは補間点（実験値）の近傍を通過していれば良く、補間点そのものと一致する必要はない。このような時に使用されるのが最小二乗法 (least square method) である。

n 個の関数の組 $\phi_1(x), \phi_2(x), \dots, \phi_n(x)$ が与えられた時、これらの関数の線形結合

$$q_n(x; c_1, c_2, \dots, c_n) = \sum_{i=1}^n c_i \phi_i(x)$$

を求める。

ここで関数 $Q_n(c_1, c_2, \dots, c_n)$ を

$$Q_n(c_1, c_2, \dots, c_n) = \sum_{k=1}^m |q_n(x_k; c_1, c_2, \dots, c_n) - f_k|^2$$

とおき、係数 c_1, c_2, \dots, c_n は

$$\min_{\{c_1, c_2, \dots, c_n\}} Q_n(c_1, c_2, \dots, c_n) \quad (14.8)$$

となるように定める。さすれば全ての補間点 (x_k, f_k) において

$$\frac{\partial Q_n(c_1, c_2, \dots, c_n)}{\partial c_i} = 0$$

を満足すればよいことになる。従って最終的には

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^m \phi_1^2(x_k) & \sum_{k=1}^m \phi_1(x_k)\phi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \phi_1(x_k)\phi_n(x_k) \\ \sum_{k=1}^m \phi_2(x_k)\phi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \phi_2^2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \phi_2(x_k)\phi_n(x_k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^m \phi_n(x_k)\phi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \phi_n(x_k)\phi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \phi_n^2(x_k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^m f_k \phi_1(x_k) \\ \sum_{k=1}^m f_k \phi_2(x_k) \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^m f_k \phi_n(x_k) \end{bmatrix} \quad (14.9)$$

を解くことで得られる。

特に

$$\phi_i(x) = x^{i-1} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

であれば式 (14.9) は

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{k=1}^m x_k & \cdots & \sum_{k=1}^m x_k^{n-1} \\ \sum_{k=1}^m x_k & \sum_{k=1}^m x_k^2 & \cdots & \sum_{k=1}^m x_k^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^m x_k^{n-1} & \sum_{k=1}^m x_k^n & \cdots & \sum_{k=1}^m x_k^{2(n-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^m f_k \\ \sum_{k=1}^m f_k x_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^m f_k x_k^{n-1} \end{bmatrix} \quad (14.10)$$

となる。

例題 14.5.1 (2 次の場合)

3 点 $(-2, -3)$, $(-1, 2)$, $(0, 1)$ を通る 2 次の最小二乗多項式を求めると、その時の連立一次方程式は

$$\begin{bmatrix} 3 & -3 & 5 \\ -3 & 5 & -9 \\ 5 & -9 & 17 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \\ -10 \end{bmatrix}$$

となる。これと解くと先の例題と同様に

$$c_1 = 1, \quad c_2 = -4, \quad c_3 = -3$$

を得る。

問題 14.5.1

1. 最小二乗法のアルゴリズムのうち、係数 c_0, c_1, \dots, c_n を満足する連立一次方程式 (14.9) を導出せよ。
2. $n = m$ の時、最小二乗法による多項式と Lagrange 補間による多項式が一致することを示せ。

14.6 自然な 3 次スプライン補間

前述の Neville のアルゴリズムの 2 列目は、全ての補間点 $(x_1, f_1), (x_2, f_2), \dots, (x_n, f_n)$ を通過する、区分的一次補間式 $l_1(x), l_2(x), \dots, l_{n-1}(x)$ を与えている。しかしこれは補間点において連続 $l_i(x_{i+1}) = l_{i+1}(x_{i+1})$ ではあるものの、角ばって繋がっているだけである。実用的には区分的に補間しつつも、「滑らか」に接続したいことも多い。

区分的に次数の高い補間多項式 $q_i(x)$ を与えることで、補間点を滑らかに接続する補間のうち、本節では自然な 3 次スプライン補間 (Natural cubic spline interpolation) を紹介する。スプライン補間 $S(x)$ は全区間において

$$S(x) = \begin{cases} q_1(x) & (x \in [x_1, x_2]) \\ q_2(x) & (x \in [x_2, x_3]) \\ \vdots & \\ q_{n-1}(x) & (x \in [x_{n-1}, x_n]) \end{cases} \quad (14.11)$$

と表現される。

条件は以下の通りである。条件2によって、滑らかさを保証していることに注意せよ。

1. 各小区間 $[x_i, x_{i+1}] (i = 1, 2, \dots, n-1)$ ごとに、端点を通過する3次多項式 $q_i(x)$ を与える。即ち、

$$\begin{aligned} q_i(x_i) &= f_i = S(x_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \\ q_i(x_{i+1}) &= q_{i+1}(x_{i+1}) \quad (i = 1, 2, \dots, n-2) \end{aligned}$$

を満足する。

2. $S(x)$ は全区間において2階連続微分可能。即ち、各補間点において

$$2\text{-}(a): q'_i(x_{i+1}) = q'_{i+1}(x_{i+1}) = S'(x_{i+1}) \quad (i = 1, 2, \dots, n-2)$$

$$2\text{-}(b): q''_i(x_{i+1}) = q''_{i+1}(x_{i+1}) = S''(x_{i+1}) \quad (i = 1, 2, \dots, n-2)$$

を満足する。

3. 端条件 $S''(x_1) = 0, S''(x_n) = 0$ を満足する。(「自然な」3次スプライン補間の条件)

三条件を全て満足するよう、 $S(x)$ を構成してみよう。

まず、条件2-(b)と3より、 $S''(x)$ は x_2, x_3, \dots, x_{n-1} で連続であるから、 $q''_i(x)$ は補間点 $(x_2, S''(x_2)), (x_3, S''(x_3)), \dots, (x_{n-1}, S''(x_{n-1}))$ を通過する一次補間になるので

$$\begin{aligned} q''_1(x) &= \frac{(x-x_1)S''(x_2) - (x-x_2)S''(x_1)}{x_2-x_1} = \frac{(x-x_1)S''(x_2)}{x_2-x_1} \\ &\vdots \\ q''_i(x) &= \frac{(x-x_i)S''(x_{i+1}) - (x-x_{i+1})S''(x_i)}{x_{i+1}-x_i} \\ &\vdots \\ q''_{n-1}(x) &= \frac{(x-x_{n-1})S''(x_n) - (x-x_n)S''(x_{n-1})}{x_n-x_{n-1}} = -\frac{(x-x_n)S''(x_{n-1})}{x_n-x_{n-1}} \end{aligned} \tag{14.12}$$

となる。 $q''_i(x)$ を2回不定積分し、2つの積分定数を条件1から決定すると

$$\begin{aligned} q_1(x) &= \frac{S''(x_2)}{6} \left\{ \frac{(x-x_1)^3}{x_2-x_1} + (x_2-x_1)(x_1-x) \right\} + \frac{x_2-x}{x_2-x_1} f_1 + \frac{x-x_1}{x_2-x_1} f_2 \\ &\vdots \\ q_i(x) &= \frac{S''(x_i)}{6} \left\{ \frac{(x_{i+1}-x)^3}{x_{i+1}-x_i} + (x-x_{i+1})(x_{i+1}-x_i) \right\} \\ &\quad + \frac{S''(x_{i+1})}{6} \left\{ \frac{(x-x_i)^3}{x_{i+1}-x_i} + (x_i-x)(x_{i+1}-x_i) \right\} \\ &\quad + \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} f_i + \frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i} f_{i+1} \\ &\vdots \\ q_{n-1}(x) &= \frac{S''(x_{n-1})}{6} \left\{ \frac{(x_n-x)^3}{x_n-x_{n-1}} + (x-x_n)(x_n-x_{n-1}) \right\} + \frac{x_n-x}{x_n-x_{n-1}} f_{n-1} + \frac{x-x_{n-1}}{x_n-x_{n-1}} f_n \end{aligned} \tag{14.13}$$

となる (→ 演習問題 4)。これにより, 2 階微係数 $S''(x_2), \dots, S''(x_{n-1})$ さえ決定できれば, 全ての $q_i(x)$ が決まることが分かる。

最後に残った条件 2-(a) より,

$$q'_i(x_{i+1}) = \frac{S''(x_i)}{3}(x_{i+1} - x_i) + \frac{S''(x_{i+1})}{3}(x_{i+1} - x_i) + \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}$$

$$q'_{i+1}(x_{i+1}) = -\frac{S''(x_{i+1})}{3}(x_{i+2} - x_{i+1}) - \frac{S''(x_{i+2})}{3}(x_{i+2} - x_{i+1}) + \frac{f_{i+2} - f_{i+1}}{x_{i+2} - x_{i+1}}$$

であるから,

$$\left\{ \begin{array}{l} q'_1(x_2) = q'_2(x_2) \\ \vdots \\ q'_i(x_{i+1}) = q'_{i+1}(x_{i+1}) \\ \vdots \\ q'_{n-1}(x_{n-1}) = q'_n(x_{n-1}) \end{array} \right.$$

をまとめて整理すると

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{x_3 - x_1}{3} S''(x_2) + \frac{x_3 - x_2}{6} S''(x_3) = \frac{f_3 - f_2}{x_3 - x_2} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \\ \vdots \\ \frac{x_{i+1} - x_i}{6} S''(x_i) + \frac{x_{i+2} - x_i}{3} S''(x_{i+1}) + \frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{6} S''(x_{i+1}) = \frac{f_{i+2} - f_{i+1}}{x_{i+2} - x_{i+1}} - \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i} \\ \vdots \\ \frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{6} S''(x_{n-2}) + \frac{x_n - x_{n-2}}{3} S''(x_{n-1}) = \frac{f_n - f_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} - \frac{f_{n-1} - f_{n-2}}{x_{n-1} - x_{n-2}} \end{array} \right.$$

となる。特に,

$$a_i := \frac{x_{i+1} - x_i}{6}$$

$$b_i := \frac{x_{i+2} - x_i}{3}$$

$$c_i := \frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{6}$$

$$d_i := \frac{f_{i+2} - f_{i+1}}{x_{i+2} - x_{i+1}} - \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}$$

と置くと

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-3} & b_{n-3} & c_{n-3} \\ & & & a_{n-2} & b_{n-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S''(x_2) \\ S''(x_3) \\ \vdots \\ S''(x_{n-2}) \\ S''(x_{n-1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-3} \\ d_{n-2} \end{bmatrix} \quad (14.14)$$

を得る。この連立一次方程式を $[S''(x_2) S''(x_3) \dots S''(x_{n-1})]^T$ について解き, (14.13) に代入すると, 全ての $q_i(x)$ が決定される。

問題 14.6.1

3 点 $(-2, -3)$, $(-1, 2)$, $(0, 1)$ を通る自然な 3 次スプライン補間を求めよ。

演習問題

1. Newton 補間公式を用いて, 4 点 $(1, 2)$, $(2, -1)$, $(3, 6)$, $(4, 3)$ を通過する補間多項式 $p_3(x)$ を求めたい。この時, 次の間に答えよ。

(a) 以下の Newton 補間計算のための表の (1)~(5) を埋め, $p_3(x)$ を求めよ。

x_i	$f_{i1}(x)$	$f_{i2}(x)$	$f_{i3}(x)$	$f_{i4}(x)$
1	2			
2	-1	(1)		
3	6	(2)	(3)	
4	3	$-3x + 15$	(4)	(5)

- (b) $p_3(x)$ を Lagrange 補間公式を用いて計算する手順を述べ, 上記で求めた結果と一致することを確認せよ。
2. 4 点 $(-1, 3)$, $(0, 2)$, $(1, -1)$, $(2, 4)$ を全て通過する一変数関数 $f(x)$ があるとする。この時, $f(0.5)$ の近似値を補間多項式を求めることで得たい。次の問いに答えよ。
- (a) この 4 点を通過する 3 次の補間多項式を $p_3(x)$ とする。 $p_3(0.5)$ の値を求めよ。
- (b) この 4 点に, 更に 1 点 $(-2, 0)$ が追加された場合, 4 次の補間多項式 $p_4(x)$ を得ることが出来る。この時, $p_4(0.5)$ の値を求めよ。
3. Neville のアルゴリズムによって生成された各 $f_{ij}(x)$ は, $(x_{i-j+1}, f_{i-j+1}), (x_{i-j+2}, f_{i-j+2}), \dots, (x_i, f_i)$ を通過する $j-1$ 次多項式として表現できることを証明せよ。
4. 自然な 3 次スプライン $S(x)$ を導出する過程のうち, (14.12) から (14.13) を導く計算を詳細に解説せよ。(Hint: 不定積分を二回行った際に出る積分定数 C_1, C_2 についての 2 次元連立一次方程式を, 条件 1 から導いて C_1, C_2 について解く。)

参考図書

多項式補間については, 数値微分・積分, 常微分方程式等で利用するため, 大抵の数値計算のテキストに本程度程度の記述はある。より詳細を知りたいければ, 主として数値積分, 常微分方程式の数値計算について論じているものを選ぶと良いだろう。

なお, 本章のスプライン補間についての記述は

スプライン関数とその応用

市田浩三・吉本富士市

教育出版

1979 年

を参照した。他にも応用も含めて幅広い記述があるので参考にされたい。