ラグランジュ補間の誤差

- $f(x)$: 補間する対象の関数
- p_N(x): $f(x)$ の N 次のLagrange補間多項式
- $x_0 < x_2 < \cdots < x_n$

ラグランジュ補間の誤差

- このとき、ある $\xi \in (x_0, x_n)$ が存在して、

  $x \in (x_0,\ x_n)$ において

$$f(x) - p_N(x) = \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_N)$$

  が成り立つ

ラグランジュ補間の誤差評価の例

- sin(x)
  - sin(29°) = 0.484810
  - sin(30°) = 0.500000
  - sin(31°) = 0.515038

から sin(29.5°) を推定する

ラグランジュ補間の誤差評価の例（1次の補間多項式）

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1$$

$x_0 = 29°, x_1 = 30°, y_0 = \sin(29°), y_1 = \sin(30°)$ より

$$p_1(x) = \frac{x - 30}{-1} \sin(29°) + \frac{x - 29}{1} \sin(30°)$$

ラグランジュ補間の誤差評価の例 (1次の補間多項式)

$$
\begin{aligned}
p_1(29.5^\circ) &= \frac{-0.5}{-1}\sin(29^\circ) + \frac{0.5}{1}\sin(30^\circ) \\
&= \frac{1}{2}(\sin(29^\circ) + \sin(30^\circ)) \\
&\simeq 0.492405
\end{aligned}
$$

（有効精度6桁で計算）

ラグランジュ補間の誤差評価の例 (1次の補間多項式)

誤差評価を行うと

$$
\begin{aligned}
|\sin(29.5^\circ) - p_1(29.5^\circ)| &= \frac{|\sin\xi|}{2}\left(\frac{\pi}{180}\right)^2 \\
&\quad \times |(29.5-29)(29.5-30)| \\
&\le \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{180}\right)^2 |0.5 \times (-0.5)| \\
&\simeq 3.81 \times 10^{-5}
\end{aligned}
$$

小数第4位程度までは信用できそう

ラグランジュ補間の誤差評価の例 (2次の補間多項式)

$$p_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0 + \frac{(x-x_2)(x-x_0)}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)}y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2$$

$x_0 = 29°, x_1 = 30°, x_2 = 31°,$

$y_0 = \sin(29°), y_1 = \sin(30°), y_2 = \sin(31°)$ より

$$\begin{aligned} p_2(x) = &\frac{(x-30)(x-31)}{(-1)(-2)}\sin(29^\circ) + \frac{(x-31)(x-29)}{(-1)(1)}\sin(30^\circ) \\ &+ \frac{(x-29)(x-30)}{(2)(1)}\sin(31^\circ) \end{aligned}$$

ラグランジュ補間の誤差評価の例 (2次の補間多項式)

$$
\begin{aligned}
p_2(x) &= \frac{(-0.5)(-1.5)}{(-1)(-2)}\sin(29^\circ) + \frac{(-1.5)(0.5)}{(-1)(1)}\sin(30^\circ) \\
&\quad + \frac{(0.5)(-0.5)}{(2)(1)}\sin(31^\circ) \\
&= \frac{3}{8}\sin(29^\circ) + \frac{3}{4}\sin(30^\circ) - \frac{1}{8}\sin(31^\circ) \\
&\simeq 0.492424
\end{aligned}
$$

（有効精度6桁で計算）

ラグランジュ補間の誤差評価の例 (2次の補間多項式)

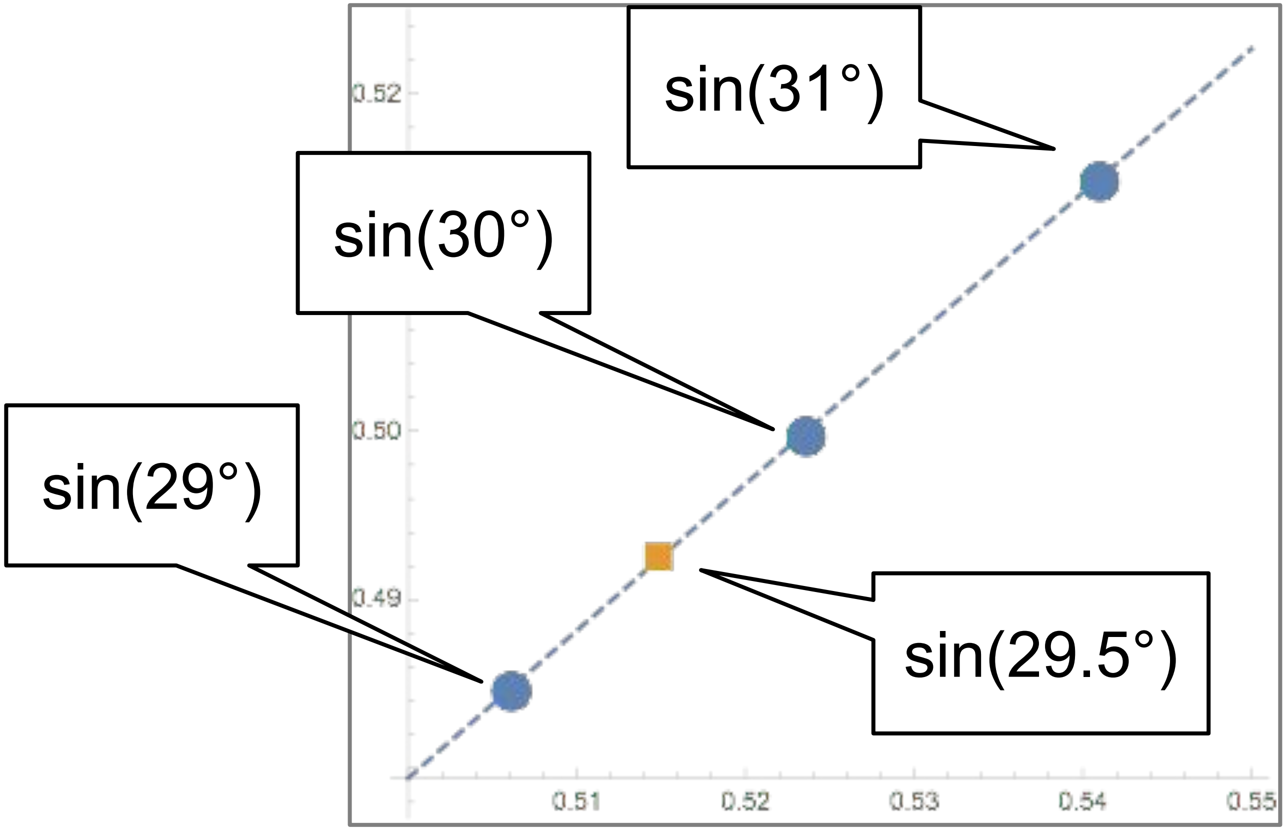
誤差評価を行うと

$$
\begin{aligned}
|\sin(29.5^\circ) - p_2(29.5^\circ)| &= \frac{|\cos\xi|}{3!}\left(\frac{\pi}{180}\right)^3 \Big|(29.5-29) \\
&\quad \times (29.5-30)(29.5-31)\Big| \\
&\le \frac{1}{6}\left(\frac{\pi}{180}\right)^3 |0.5\times(-0.5)\times(-1.5)| \\
&\simeq 3.32\times 10^{-7}
\end{aligned}
$$

ラグランジュ補間の誤差評価の例 (2次の補間多項式)

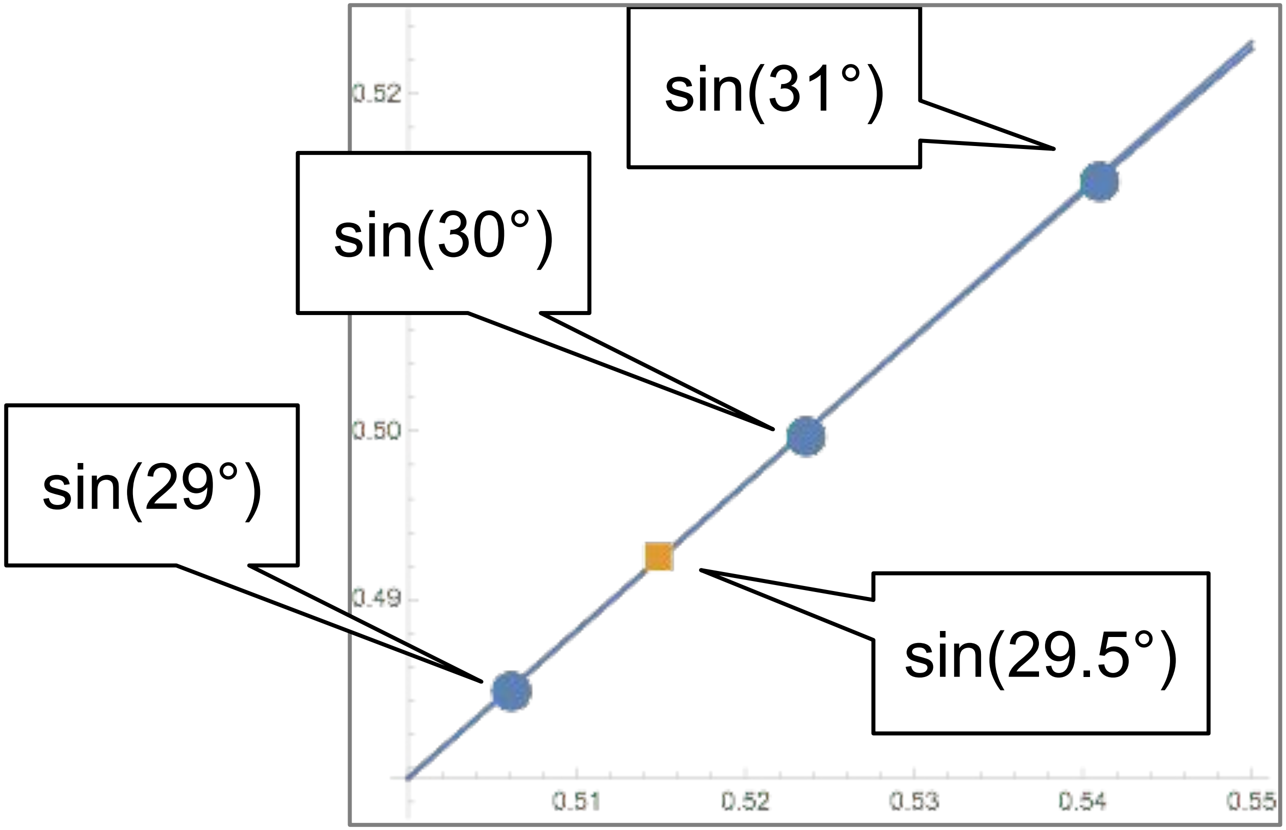
- 小数第6位程度までは信用できそう
  （先の近似値は小数第7位で四捨五入している点に注意）
- Mathematicaによる近似値は 0.4924235…
  （小数第7位で四捨五入すると6桁まで一致）

ラグランジュ補間の誤差評価の例



点線: $y = \sin(x)$

ラグランジュ補間の誤差評価の例



実線: $p_1(x)$ および $p_2(x)$ を重ねたもの

ルンゲの現象

- 補間点を等間隔に取り、補間多項式の次数を大きくしたとき、補間多項式の振動が大きくなる現象

ルンゲの現象：計算例

- $f(x) = 1/(1+25\,x^2)$
- [-1, 1] を N 等分
  - $x_j = -1 + 2\,j\,/N$ ($j = 0, 1, \ldots N$)
  - $f(x)$ を $p_N(x)$ で近似
- 図 3-6:
  - 破線: $y = f(x)$
  - 実線: $y = p_{10}(x)$

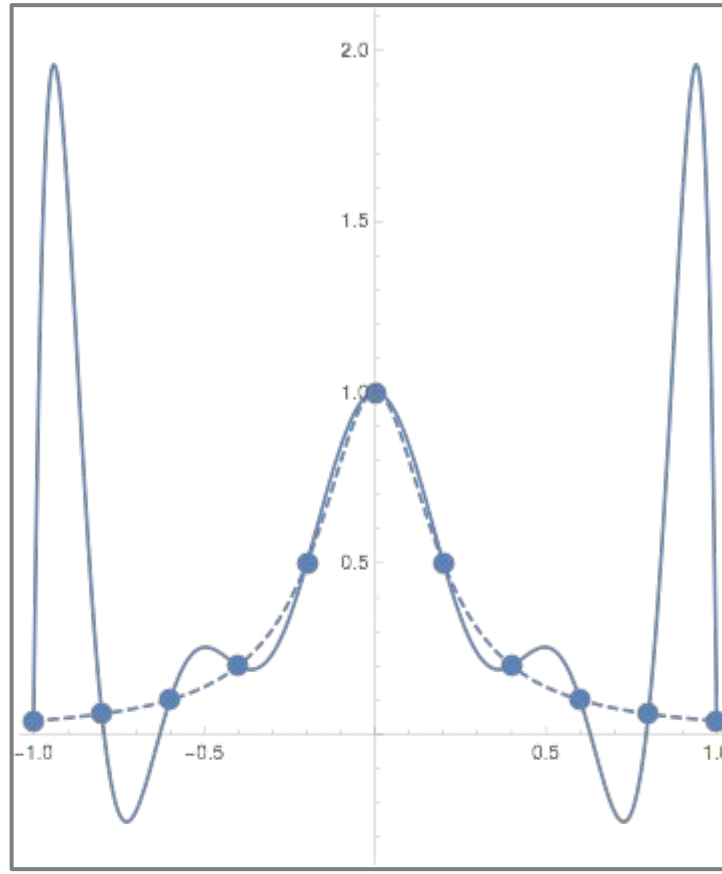


図 3-6

ルンゲの現象

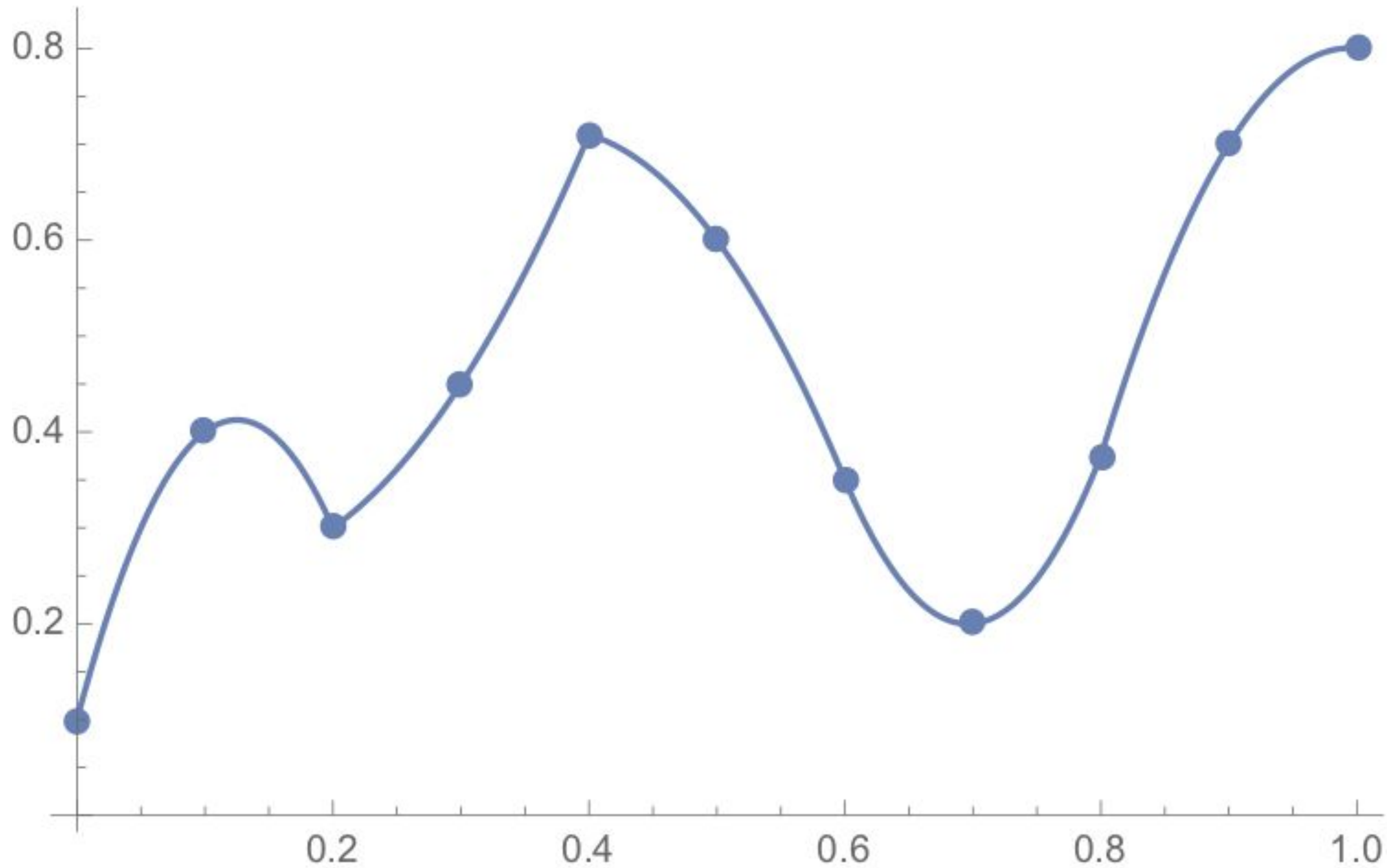
$$\lim_{n\to\infty}\left(\max_{-1\leq x\leq 1}|f(x)-p_N(x)|\right)=\infty$$

補間多項式の振動を抑えるための対策（例）:

- 補間多項式の次数を低次にとどめる
- 補間点を等間隔ではなく、振動を抑えるような取り方にする

3-3 スプライン補間 (Spline interpolation)

区分的に2次のラグランジュ補間を適用した例



スプライン補間のアイデア

- xy平面上に$N+1$個の異なる点が与えられたとする
- 隣り合う点のx座標に関するN個の閉区間に分割する
- 各区間ごとに区分的に関数を定義する（3次多項式⇒3次のスプライン補間）
- 隣り合う区間の境界で1階および2階の微分係数が等しくなるよう関数を滑らかに接続する

問題設定

Given: xy 平面上の点

$$(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_N, y_N), \qquad x_0 < x_1 < \cdots < x_N$$

Find: $y = S(x)$: 3次のスプライン (spline)

$S(x)$ は区間 $[x_j, x_{j+1}]$ ($j = 0, 1, \ldots N$-1) で $S(x) = S_j(x)$ で区分的に定義される

$$S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j \quad (3.16)$$

$$(j = 0, 1, \ldots, N - 1)$$

スプラインの条件

1. 曲線 $y = S(x)$ は連続で、点 (x_j, y_j) $(j = 0, 1, \ldots, N - 1)$ をすべて通る
2. 各区間の境界 $x = x_j$ $(j = 1, \ldots, N - 1)$ で $y = S(x)$ の1階および2階微分係数が等しい

スプラインの条件

$S_j(x)$ に関する条件: (1) より

$$S_j(x_j) = y_j \qquad (j = 0, 1, \ldots, N-1) \qquad (3.17a)$$

$$S_j(x_{j+1}) = y_{j+1} \qquad (j = 0, 1, \ldots, N-1) \qquad (3.17b)$$

$S_j(x)$ に関する条件: (2) より

$$S'_j(x_{j+1}) = S'_{j+1}(x_{j+1}) \qquad (j = 0, 1, \ldots, N-2) \qquad (3.17c)$$

$$S''_j(x_{j+1}) = S''_{j+1}(x_{j+1}) \qquad (j = 0, 1, \ldots, N-2) \qquad (3.17d)$$

a_j, b_j, c_j, d_j の決定

$x = x_j$ における S(x) の2階微分係数を

$$u_j = S''(x_j) \quad (j = 0, 1, \ldots, N-1) \tag{3.18}$$

と表す

以下、x_j, y_j, u_j を基に、a_j, b_j, c_j, d_j を求める

b_j の決定

$$S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j\,(x - x_j)^2 + c_j\,(x - x_j) + d_j \quad (3.16)$$

より　$S''_j(x) = 6\,a_j(x - x_j) + 2\,b_j$，これより

$$S''_j(x_j) = 2\,b_j = u_j \quad (j = 0, 1, \ldots, N - 1) \qquad (3.19)$$

ゆえに

$$b_j = u_j / 2 \quad (j = 0, 1, \ldots, N - 1) \qquad (3.20)$$

a_j の決定

$S''_j(x) = 6\,a_j(x - x_j) + 2\,b_j$ より

$$S''_j(x_{j+1}) = 6\,a_j(x_{j+1} - x_j) + 2\,b_j = u_j \;(j = 0, 1, \ldots, N - 1) \quad (3.21)$$

よって

$$a_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{6(x_{j+1} - x_j)} \quad (3.22)$$

スプラインの条件の確認

$$S''_j(x_j) = 2\,b_j = u_j \quad (j = 0, 1, \ldots, N-1) \qquad (3.19)$$

$$S''_j(x_{j+1}) = 6\,a_j(x_{j+1} - x_j) + 2\,b_j = u_j \qquad (3.21)$$

より

$$S''_j(x_{j+1}) = S''_{j+1}(x_{j+1}) \quad (j = 0, 1, \ldots, N-2) \qquad (3.17d)$$

が満たされることに注意

d_j の決定

$$S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j \quad (3.16)$$

$$S_j(x_j) = y_j \qquad (j = 0, 1, \ldots, N - 1) \quad (3.17a)$$

より

$$d_j = y_j \qquad (j = 0, 1, \ldots, N - 1) \quad (3.23)$$

c_j の決定

$$S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j \quad (3.16)$$

$$S_j(x_{j+1}) = y_{j+1} \qquad (j = 0, 1, \ldots, N - 1) \qquad (3.17b)$$

より $a_j(x_{j+1} - x_j)^3 + b_j(x_{j+1} - x_j)^2 + c_j(x_{j+1} - x_j) + d_j = y_{j+1}$

a_j, b_j, d_j を代入して

$$c_j = \frac{y_{j+1} - y_j}{(x_{j+1} - x_j)} - \frac{1}{6}(x_{j+1} - x_j)(2u_j + u_{j+1}) \qquad (3.23)$$

連立1次方程式の導出

$$S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j\,(x - x_j)^2 + c_j\,(x - x_j) + d_j \quad (3.16)$$

を $S'_j(x_{j+1}) = S'_{j+1}(x_{j+1})$ $(j = 0, 1, \ldots, N - 2)$ (3.17c) に代入

$$S'_j(x_{j+1}) = 3a_j(x_{j+1} - x_j)^2 + 2b_j\,(x_{j+1} - x_j) + c_j$$

$S'_{j+1}(x_{j+1}) = c_{j+1}$ より

$$3a_j(x_{j+1} - x_j)^2 + 2b_j\,(x_{j+1} - x_j) + c_j = c_{j+1}\,(j = 0, 1, \ldots, N - 2) \quad (3.26)$$

連立1次方程式の導出

式 (3.26) に b_j (3.20), a_j (3.22), c_j (3.25) を代入すると

$$
\begin{aligned}
&(x_{j+1} - x_j)u_j + 2(x_{j+2} - x_j)u_{j+1} + (x_{j+2} - x_{j+1})u_{j+2} \\
&= \frac{1}{6}\left\{ \frac{y_{j+2} - y_{j+1}}{x_{j+2} - x_{j+1}} - \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} \right\}
\end{aligned}
$$

(j = 0, 1, … , N - 2) (3.27)

連立1次方程式の導出

式 (3.27) を $j = 0, 1, \ldots, N - 2$ の順に並べると

$$
\begin{aligned}
&h_0 u_0 + 2(h_0 + h_1)u_1 + h_1 u_2 = v_1 \\
&h_1 u_1 + 2(h_1 + h_2)u_2 + h_2 u_3 = v_2 \\
&\qquad\vdots \\
&h_{N-2} u_{N-2} + 2(h_{N-2} + h_{N-1})u_{N-1} + h_{N-1} u_N = v_{N-1}
\end{aligned}
\tag{3.28}
$$

$$
\begin{aligned}
&h_j = (x_{j+1} - x_j) && (j = 0, 1, \ldots, N-1) \\
&v_j = 6\left\{\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}}\right\} && (j = 1, 2, \ldots, N-1)
\end{aligned}
\tag{3.29}
$$

スプラインの境界条件

- 未知変数: $u_j\,(j = 0, \ldots N)$　$N + 1$ 個
- 式 (3.28) の方程式: $N - 1$ 個
- このままでは u_j が一意に定まらない
- そこで、曲線の両端の点 $(x_0, y_0), (x_N, y_N)$ に対し、
  それぞれ境界条件を1つずつ付加する

スプラインの境界条件

- ここでは、曲線の傾きの変化率（S(x) の2階微分係数）が 0 に等しくなるようにする

$$S''(x_0) = S''(x_N) = 0 \tag{3.30}$$

$$S''_0(x_0) = S''_{N-1}(x_N) = 0 \tag{3.31}$$

- 「自然スプライン (natural spline)」
- 式 (3.18) $u_j = S''(x_j)$ より $u_0 = u_N = 0$

スプラインの境界条件

3重対角
(tridiagonal) 行列

連立方程式 (3.28) を行列で表すと

$$\begin{pmatrix} 2(h_0+h_1) & h_1 & & & \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & h_{N-3} & 2(h_{N-3}+h_{N-2}) & h_{N-2} \\ & & & h_{N-2} & 2(h_{N-2}+h_{N-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix}$$
$$= {}^t\begin{pmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_{N-2} & v_{N-1} \end{pmatrix}$$

(3.32)

$$h_j = (x_{j+1} - x_j)u_j \qquad (j = 0, 1, \ldots, N-1)$$
$$v_j = 6\left\{\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}}\right\} \qquad (j = 1, 2, \ldots, N-1)$$

(3.29)

スプライン補間のアルゴリズム

入力: $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$,　　$x_0 < x_1 < \cdots < x_N$

出力: $S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j (x - x_j)^2 + c_j (x - x_j) + d_j$

$(j = 0, \dots, N - 1)$ （もしくは (a_j, b_j, c_j, d_j) の組）

1. $u_0 \leftarrow 0; u_N \leftarrow 0; h_0 \leftarrow x_1 - x_0;$
2. for $j \in [1..N\text{-}1]$ do

$$h_j \leftarrow x_{j+1} - x_j; \quad v_j \leftarrow 6\left\{\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}}\right\};$$

スプライン補間のアルゴリズム

3. 連立1次方程式 (3.32) を解き、解 $u_1, \ldots, u_{N\text{-}1}$ を求める;
4. for $j \in [0..N\text{-}1]$ do

$$a_j \leftarrow \frac{u_{j+1} - u_j}{6(x_{j+1} - x_j)}; \qquad b_j \leftarrow \frac{u_j}{2};$$

$$c_j \leftarrow \frac{y_{j+1} - y_j}{(x_{j+1} - x_j)} - \frac{1}{6}(x_{j+1} - x_j)(2u_j + u_{j+1}); \qquad d_j \leftarrow y_j;$$

5. return $\{S_j(x) \mid j = 0, \ldots, N - 1\}$;
（もしくは $\{(a_j, b_j, c_j, d_j) \mid j = 0, \ldots, N - 1\}$）

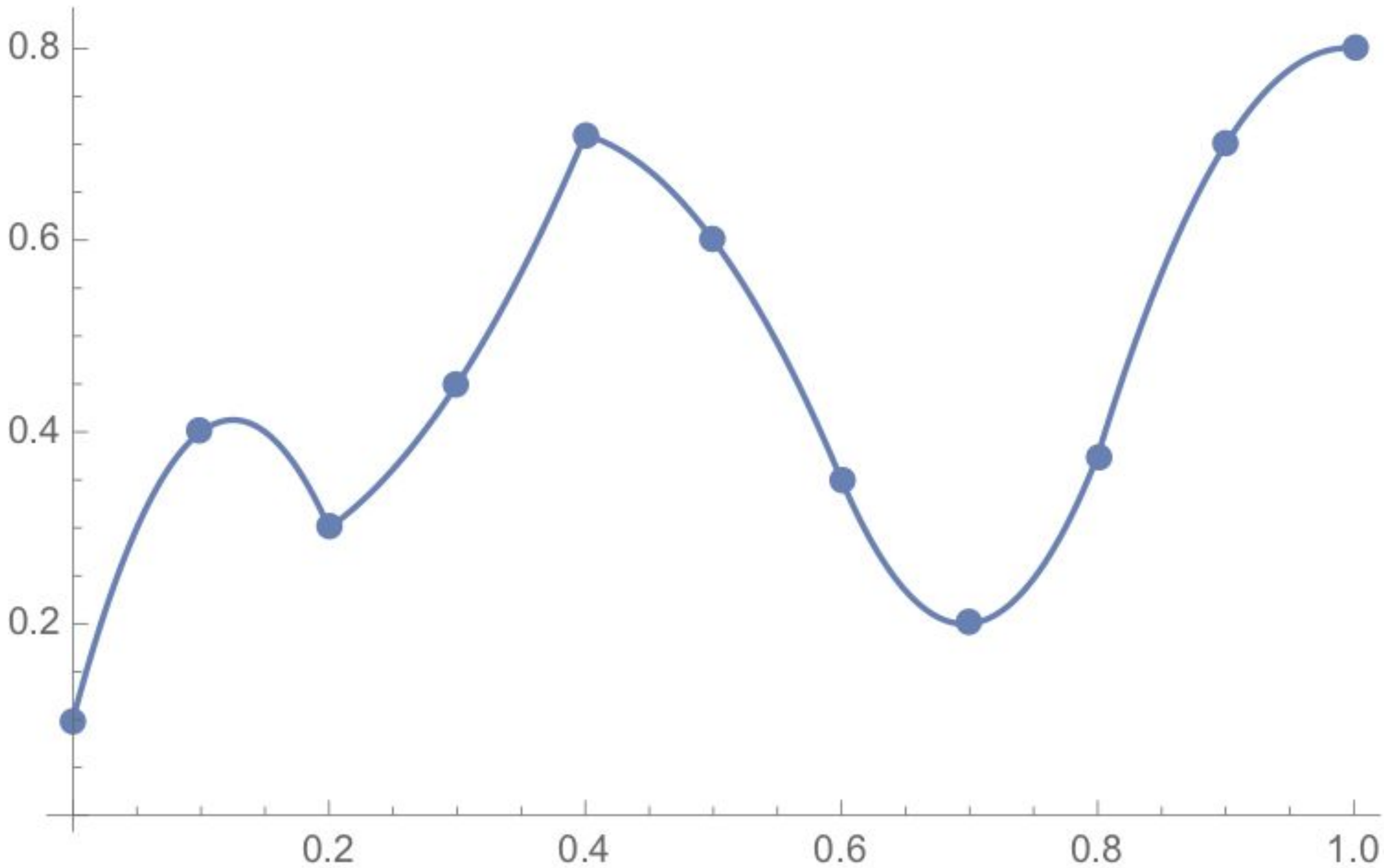
スプラインの境界条件の変形

- 定義域の両端での曲線の傾きを指定する

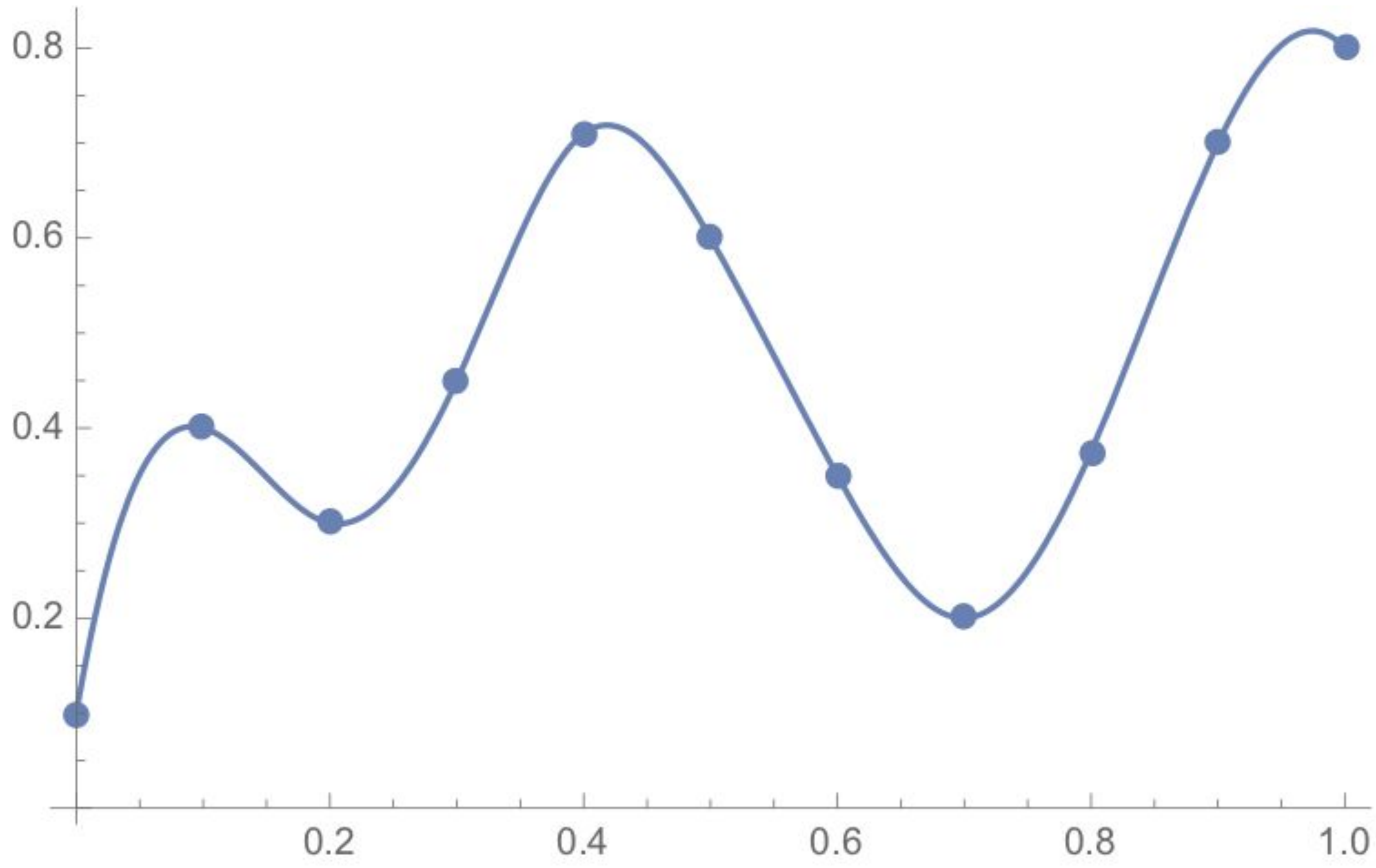
$$S'(x_0) = \alpha, \quad S'(x_N) = \beta \tag{3.33}$$

- この場合、連立1次方程式 (3.32) を一部修正する

区分的に2次のラグランジュ補間を適用した例



3次スプライン補間の例



スプライン補間の精度

定理

- 領域: $a \leqq x \leqq b$
- Given: $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_N, y_N)$

  $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_N = b$
- $h = \max_{0 \leq j \leq N-1} (x_{j+1} - x_j)$
- $f(x)$: すべての点 (x_j, y_j) を通る関数

スプライン補間の精度

- $f(x)$: すべての点 (x_j, y_j) を通る関数

  $y_j = f(x_j) \quad (j = 0, \ldots, N)$

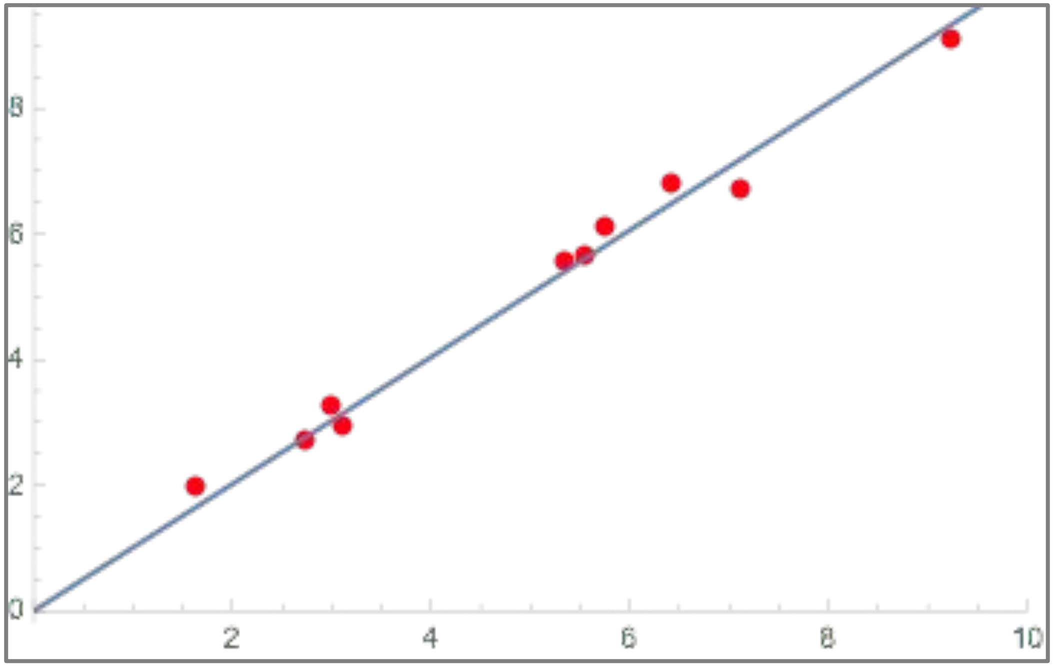
このとき、自然スプライン $S(x)$ と $f(x)$ の誤差は次式で評価される: h^2 に比例

$$
\begin{aligned}
|f(x) - S(x)| &\leq \frac{13}{48} \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(2)}(\xi)| \cdot h^2 \quad (a \leq x \leq b) \\
&= O(h^2)
\end{aligned}
\tag{3.34}
$$

3-4 最小2乗法 (Least-squares method)

最小2乗法のアイデア

与えられたデータ（点）があるモデル（関数）に従うと仮定し、データになるべくフィットするモデルを求める



最小2乗法の原理

- データは次のモデルに従うと仮定:

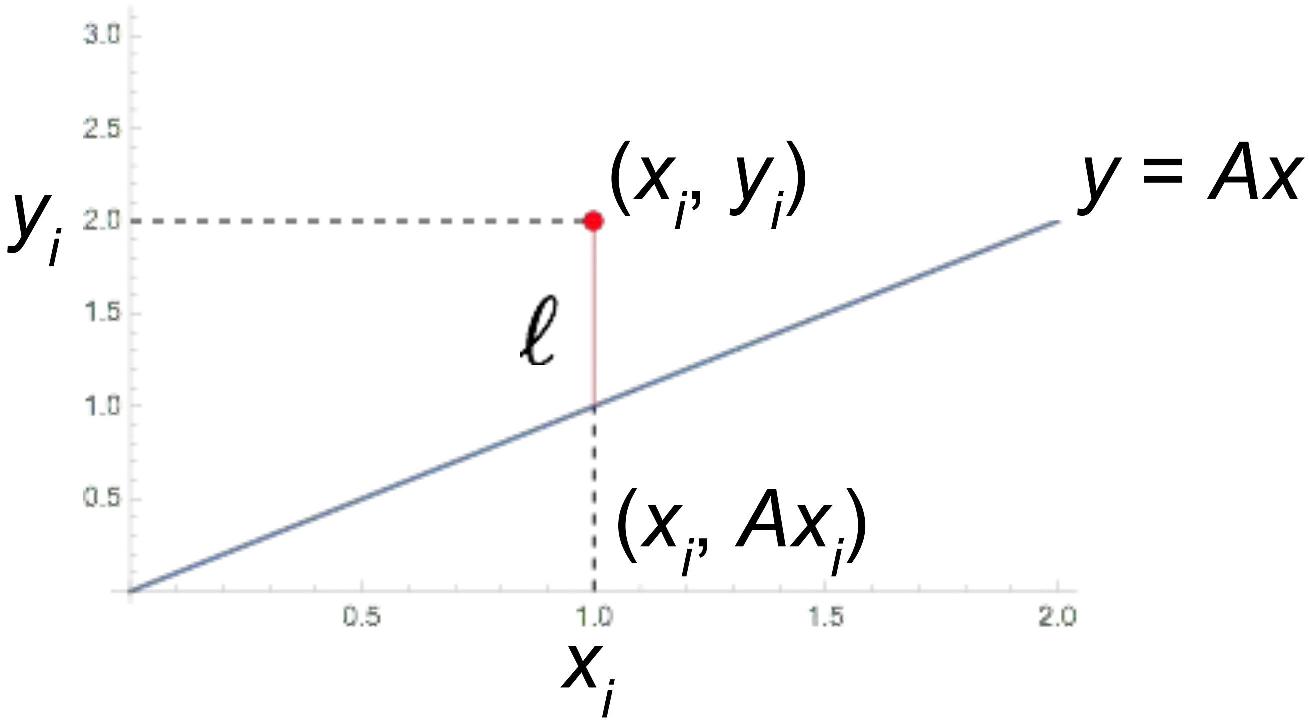
  $y = A\,x$ (A はスカラー, x の1次関数) (3.36)

- データ: (x_i, y_i) $(i = 0, 1, \ldots, N)$
- このとき

$$\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 \tag{3.37}$$

  を最小にする A を求める

最小2乗法の原理



l: 点 (x_i, y_i) から直線 $y = Ax$ に降ろした垂線の長さの2乗和を最小にする A を $\tilde{A}$ で表す

最小2乗法の原理

- データの誤差の前提:
  互いに独立で、標準偏差が一定の正規分布に従う

最適値の計算方法

$$\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 \tag{3.37}$$

を最小にする $\tilde{A}$ を求める:そこで

$$\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 - \sum_{i=1}^{N}(y_i - \tilde{A}x_i)^2 \tag{3.38}$$

を考える

最適値の計算方法

$$\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 - \sum_{i=1}^{N}(y_i - \tilde{A}x_i)^2 \tag{3.38}$$

は、$A = \tilde{A}$ でない限り正．そこで

$$p = \sum_{i=1}^{N} x_i^2, \quad q = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i$$

とおき、$p > 0$ とすると

$$\left(A - \frac{q}{p}\right)^2 - \left(\tilde{A} - \frac{q}{p}\right)^2 \geq 0 \tag{3.39}$$

が導かれる

最適値の計算方法

任意の A に対して

$$\left(A-\frac{q}{p}\right)^2-\left(\tilde{A}-\frac{q}{p}\right)^2 \geq 0 \qquad (3.39)$$

が成り立つには

$$\tilde{A}=\frac{q}{p}=\sum_{i=1}^{N} x_i y_i \Bigg/ \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \qquad (3.40)$$

が成り立たなければならない

式 (3.39) の等号が成り立つのは $A=\tilde{A}$ の場合のみ

最適値の計算方法（修正）

$$\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 \tag{3.37}$$

を最小にする $\tilde{A}$ を求める:そこで

$$\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 + \sum_{i=1}^{N}(y_i - \tilde{A}x_i)^2 \tag{3.38'}$$

を考える

最適値の計算方法（修正）

$$\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 + \sum_{i=1}^{N}(y_i - \tilde{A}x_i)^2 \geq 0 \qquad (3.38)'$$

が成り立つ：そこで

$$p = \sum_{i=1}^{N} x_i^2, \quad q = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i$$

とおき、$p > 0$ とすると

$$\left(A - \frac{q}{p}\right)^2 + \left(\tilde{A} - \frac{q}{p}\right)^2 \geq 0 \qquad (3.39)'$$

が導かれる

最適値の計算方法（修正）

任意の A に対して

$$\left(A-\frac{q}{p}\right)^2+\left(\tilde{A}-\frac{q}{p}\right)^2 \geq 0 \qquad (3.39)'$$

を最小にするためには

$$\tilde{A}=\frac{q}{p}=\sum_{i=1}^{N} x_i y_i \Big/ \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \qquad (3.40)$$

とおけばよい

式 (3.39)' の等号が成り立つのは $A=\tilde{A}$ の場合のみ

最適値の計算方法

$\tilde{A}$ は

$$\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 \tag{3.37}$$

を極小にする条件

$$\frac{d}{dA}\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 = 2\left\{A\sum_{i=1}^{N}x_i^2 - \sum_{i=1}^{N}x_i y_i\right\} = 0 \tag{3.41}$$

からも導かれる

2つの未定係数を含む場合

- データは次のモデルに従うと仮定:

$$y = A x + B \tag{3.42}$$

- データ: (x_i, y_i) $(i = 0, 1, \dots, N)$
- このとき

$$E(A, B) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - A x_i - B)^2 \tag{3.43}$$

  を最小にする A, B を求める

2つの未定係数を含む場合

E を極小にする条件:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial A} &= 2\left\{A\sum_{i=1}^{N}x_i^2 + B\sum_{i=1}^{N}x_i - \sum_{i=1}^{N}x_i y_i\right\} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial B} &= 2\left\{A\sum_{i=1}^{N}x_i + BN - \sum_{i=1}^{N}y_i\right\} = 0\end{aligned} \qquad (3.44)$$

2つの未定係数を含む場合

連立1方程式 (3.44) を解くと

$$\tilde{A} = \left\{ N \sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} y_i \right\} \Bigg/ \left\{ N \sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i \right)^2 \right\}$$

$$\tilde{B} = \left\{ \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \sum_{i=1}^{N} y_i - \sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \right\} \Bigg/ \left\{ N \sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i \right)^2 \right\} \tag{3.45}$$

が、それぞれ A, B の最適値として求まる

線形最小2乗法

- データは次のモデルに従うと仮定:

$$y = A_1 f_1(x) + A_2 f_2(x) + \cdots + A_M f_M(x) \tag{3.46}$$

- データ: (x_i, y_i) $(i = 0, 1, \ldots, N)$
- $f_i(x)$: 互いに1次独立な x の関数 $(i = 0, 1, \ldots, N)$
- A_i: 未知定数 $(i = 0, 1, \ldots, M)$

線形最小2乗法

- このとき

$$E(A_1, A_2, \ldots, A_M) = \sum_{j=1}^{N} \left(y_j - \sum_{i=1}^{M} A_i f_i(x_j) \right)^2 \tag{3.47}$$

を最小にする A_i ($i = 0, 1, \ldots, M$) を求める

線形最小2乗法

E を極小にする条件:

$$\frac{\partial E}{\partial A_k} = -2\sum_{j=1}^{N}\left\{f_k(x_j)\left(y_j - \sum_{i=1}^{M} A_i f_i(x_j)\right)\right\} = 0$$

$(k = 1, 2, \dots, M)$　　(3.48)

を満たす A_i の組を求めればよい:

$$\sum_{i=1}^{M}\tilde{A}_i\left(\sum_{j=1}^{N} f_k(x_j) f_i(x_j)\right) = \sum_{j=1}^{N} y_j f_k(x_j) \qquad (3.49)$$

線形最小2乗法

$$p_{k,i} = \sum_{j=1}^{N} f_k(x_j) f_i(x_j)$$
$$q_k = \sum_{j=1}^{N} y_j f_k(x_j) \tag{3.50}$$

とおくと、$p_{k,i}$, q_k は (x_i, y_i) から計算できる

式 (3.49) は $\displaystyle\sum_{i=1}^{M} p_{k,i}\tilde{A}_i = q_k \quad (k = 1, 2, \ldots, M)$ (3.51)

線形最小2乗法

すなわち、$\tilde{A}_i$ に関する連立1次方程式

$$
\begin{aligned}
&p_{1,1}\tilde{A}_1 + p_{1,2}\tilde{A}_2 + \cdots + p_{1,M}\tilde{A}_M = q_1 \\
&p_{2,1}\tilde{A}_1 + p_{2,2}\tilde{A}_2 + \cdots + p_{2,M}\tilde{A}_M = q_2 \\
&\cdots\cdots \\
&p_{M,1}\tilde{A}_1 + p_{M,2}\tilde{A}_2 + \cdots + p_{M,M}\tilde{A}_M = q_M
\end{aligned}
\tag{3.52}
$$

を解くことで、係数の最適値が求まる

第3章のまとめ

- 曲線の推定（補間法）
    - ラグランジュ(Lagrange)補間
    - スプライン(Spline)補間
    - 最小二乗法