第11章　「近似」という考え方(2/2)

前章では定積分の近似計算法を述べたが，そもそもそこで使用する初等関数も，現実には近似的に計算されたものでしかない。なぜなら，コンピュータではデータの素朴な操作 (bit 演算など) や四則演算しか実行できないからである。従って，これらの基本演算を組み合わせて，初等関数は実装されなければならない。その際には，どれだけ近似された関数が真の関数と「近い」か「遠い」かを定量的に表現する必要がある。即ち，通常の線型空間における点同士の「距離」と同じ性質をもつ量が，関数に対しても定義されなくてはならない。本章ではこの関数「空間」における距離，即ちノルム (norm) を導入し，合わせて内積 (inner product) も定義する。これによって関数どうしがベクトル同様，直交 (垂直に交わる) しているということが表現できるようになる。

11.1　有限次元の線型空間におけるノルムと内積

実数を成分とする n 次元線形空間 $\mathbb{R}^n$ は，次のような実数を成分とする n 次元ベクトル $\mathbf{x}$ の集合として定義される。

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix},\ x_i \in \mathbb{R}\ (i = 1, 2, \dots, n)$$

更に，二つのベクトル $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ 同士には，スカラー倍，加減算，内積が定義されている。

スカラー倍と加減算　$\alpha\mathbf{x} \pm \beta\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n\ (\forall\alpha, \beta \in \mathbb{R})$

内積　$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$

このうち，内積に基づいて，ベクトルの長さを規定する量，ノルム (2 ノルム，ユークリッドノルム)$\|\cdot\|_2$ が

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2} \tag{11.1}$$

のように定義される。このノルムに対しては次の 3 つの性質が成り立つ。

1. 正値性 ⋯ $\|\mathbf{x}\|_2 \geq 0$。かつ $\|\mathbf{x}\|_2 = 0$ は $\mathbf{x} = 0$ の時に限る。
2. スカラー倍の等式 ⋯ $\|\alpha\mathbf{x}\|_2 = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|_2$
3. 三角不等式 ⋯ $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|_2 \leq \|\mathbf{x}\|_2 + \|\mathbf{y}\|_2$

逆に，上記の 3 つの性質を満足しているベクトル引数・実数関数 $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ であれば，それは例外なくノルム (=長さ) として使用することができることになる。

以上は実数値のベクトル (実ベクトル) の線形空間についての復習であるが，ほとんど同じベクトルの定義，演算，ノルムが，複素 n 次元空間 $\mathbb{C}^n$ についても成立する。この場合，ベクトルは n 個の複素数成分から成立しているので，$\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ は

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \ \underline{x_i \in \mathbb{C}} \ (i = 1, 2, ..., n) \tag{11.2}$$

となるだけであり，スカラー量が複素数になる以外は，スカラー倍，加減算の定義は全く同じである。但し，内積だけは

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i \overline{y}_i \tag{11.3}$$

のように，複素共役を用いる必要がある。こうすることで 2 ノルムの定義は (11.1) 式と全く同じにできる。

11.2 関数空間における内積とノルム

以上述べたような有限次元空間における演算，内積，ノルムという概念は，ある領域 $D \subset \mathbb{C}$ において定義される，積分可能な複素関数 $f(z)$ についても規定できる。以下，このような関数の集合を $L^2(D)$ と書くことにし，領域内の単純曲線 $l \subset D$ を一つ固定して考えることにする。

L で積分可能な複素関数 f, g であれば，当然，任意の定数 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ に対して $\alpha f(z) \pm \beta g(z)$ も積分可能である。これをベクトルのスカラー倍，加減算同様 $\alpha f \pm \beta g$ と書くことにすれば，複素積分についても

$$\int_l (\alpha f \pm \beta g)(z) dz = \alpha \int_l f(z) dz + \beta \int_l g(z) dz \tag{11.4}$$

という等式が成立する。よって，f, g の内積を

$$(f, g) = \int_l f(z) \overline{g(z)}\, dz \tag{11.5}$$

と定義すれば，これによって 2 ノルム $\|f\|_2$ も

$$\|f\|_2 = \sqrt{(f, f)} = \sqrt{\int_l |f(z)|^2 dz} \tag{11.6}$$

と，有限次元の時と同様に内積に基づいて定義でき，ノルムとして必要な 3 つの性質も全て成り立つ。

以上，$L^2(D)$ も $\mathbb{C}^n$ 同様，線型空間としての性質を持つことが示された。

11.3　正規直交基底の座標成分の取り出し

内積とノルムが定義された線型空間においては，二つのベクトル (線型空間の要素) の内積がゼロになることを「直交している」と定義する。

また，ノルムが 1 となるベクトルを正規 (normalized) ベクトルと呼ぶ。任意の 0 でないベクトル $\mathbf{x}$ は

$$\mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|_2}$$

とすることで，$\mathbf{x}'$ は $\|\mathbf{x}'\|_2 = 1$ という正規ベクトルになる。

これら二つの性質を併せ持つベクトルの組を正規直交 (orthnormal) 基底 (base) と呼ぶ。

もし，n 個のベクトル $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_n$ が正規直交基底であれば

$$(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \tag{11.7}$$

という性質を持つ。もし $\mathbb{C}^n$ であれば，代表的な正規直交基底は

$$\mathbf{e}_i = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \leftarrow i \text{ 番目のみ } 1$$

となる。そしてこれによって座標系が決定され，(11.2) のようなベクトルの成分表示は

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i \mathbf{e}_i \tag{11.8}$$

となる。この時，各規定の係数 x_i は

$$x_i = (\mathbf{x}, \mathbf{e}_i) \tag{11.9}$$

と表現できる。逆に言えば，ベクトル $\mathbf{x}$ と各正規直交基底との内積が計算できれば，座標，即ち，その基底ベクトルに対応する成分 x_i が決定できることになる。

以上述べた正規直交基底と，それが決める座標系の考え方は，$L^2(D)$ のような無限次元線型空間にもそのまま適用できる。但し，$L^2(D)$ における基底は無限個の関数 $e_0(z), e_1(z), ..., e_n(z), ...$ で構成されることになるので，一般の関数 $f \in L^2(D)$ は

$$\begin{aligned} f(z) &= \sum_{i=0}^{\infty} (f, e_i) e_i(z) \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \left(\int_l f(z)\overline{e_i(z)} dz \right) \cdot e_i(z) \end{aligned} \tag{11.10}$$

のように，無限級数の形で表現しなければならない。これによって，一つの塊としてしか見えなかった関数 f が，各基底に付随する成分として離散的に表現することができ，

$$f = \begin{bmatrix} (f, e_0) \\ (f, e_1) \\ \vdots \\ (f, e_n) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

という無限次元ベクトルとして考えることができるようになるのである。

11.4 Gram-Schmidtの直交化

以上，見てきたように，正規直交基底が決まることで，線型空間における「成分」も決まることになる。では正規直交基底はどのように求めることができるのか？

一般に，どのようなベクトルであれ，一次独立 (どのベクトルも他のベクトルの定数倍と加減算の組み合わせで表現できない) なベクトルの組 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, ..., \mathbf{a}_n$ であれば，それは基底になる。無限次元の $L^2(D)$ であれば，$a_i(z) = z^i$ も基底となり得るので，正則関数の Maclaurin 展開 (8.12) は，この基底によって表現された座標系と言えるのである。

しかし，正規直交の性質 (11.7) が成立していないと，内積を (11.3) 式のような積和形式でシンプルに表現することはできなくなり，扱いが面倒になる。直交していない座標系は成分の分離が明確にならないことがあり，正規化されていないと余計な係数の定数倍が発生するので，扱いがさらに面倒になることがある。従って，時に応じては正規でも直交でもない単なる一次独立な基底を，正規直交化することが必要となる。これを具体的に実行する手順の一つに，Gram-Schmidt の直交化法がある。

今，一次独立な基底 $\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, ..., \mathbf{a}_n, ...$ が与えられているものとする。これより，正規直交基底 $\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_1, ..., \mathbf{q}_n, ...$ を次のようにして求める。

まず最初は

$$\mathbf{q}_0 = \frac{\mathbf{a}_0}{\|\mathbf{a}_0\|_2}$$

として普通に正規化のみ行って $\mathbf{q}_0$ を得る。次に，ベクトル $\mathbf{u}_1$ を

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{a}_1 - (\mathbf{a}_1, \mathbf{q}_0)\mathbf{q}_0$$

として求め，これを正規化して $\mathbf{q}_1$ を得る。つまり，$\mathbf{a}_1$ から $\mathbf{q}_0$ の成分のみを取り除いて直交する成分のみを残すのである。

これを一般の漸化式の形で書くと，$\mathbf{q}_k$ を求めるためには，既に $\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_1, ..., \mathbf{q}_{k-1}$ が求められており，これを用いて

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{a}_k - \sum_{i=0}^{k-1}(\mathbf{a}_k, \mathbf{q}_i)\mathbf{q}_i \tag{11.11}$$

$$\mathbf{q}_k = \frac{\mathbf{u}_k}{\|\mathbf{u}_k\|_2} \tag{11.12}$$

として計算を行う。

11.5 $L^2(D)$ における正規直交基底の例

関数空間 $L^2(D)$ における正規直交基底の具体例をここで示す。
$l = [0, 2\pi] \subset \mathbb{R}$ の時，

$$e_0(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, e_{2n-1}(\theta) = \frac{1}{\pi}\cos\theta, e_{2n}(\theta) = \frac{1}{\pi}\sin n\theta \tag{11.13}$$

は正規直交基底となる。
同じく，$l = [0, 2\pi] \subset \mathbb{R}$ の時，

$$e_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(n\theta\sqrt{-1}\right) \tag{11.14}$$

も正規直交基底となる。
Fourier 変換は，これらの正規直交基底に基づく関数の展開，Fourier 級数の形式を求めることを言う。

11.6 関数近似の考え方（まとめ）

賢明な読者はもうお分かりだろうが，結局，関数を基底という別の関数の組で正確に表現するためには無限級数で表現する必要があるので，これを有限資源のコンピュータで正確に実行することは一般には不可能なのである。従って，(11.10) 式のように表現された関数 $f(z)$ は

$$\tilde{f}_n(z) = \sum_{i=0}^{n}(f, e_i)e_i(z) \tag{11.15}$$

という有限級数の形で近似する他ない。当然，真の関数との差，即ち誤差が発生するので，実用上は，必要な誤差の許容度 $\varepsilon > 0$ を決めて

$$\|\tilde{f}_n - f\|_2 \leq \varepsilon$$

となる程度に n を大きく取ることで我慢する他ない。このように，無限級数を有限級数で打ち切ることによって元の関数に近い関数を求めることを関数近似と呼び，打ち切ったことによって発生する誤差を打切り誤差，あるいは理論誤差と呼ぶ。

コンピュータを用いて関数を計算するためにはこのような誤差の見積もりに基づいて有限級数の項数を決め，計算量をなるべく少なくする工夫を行って高性能化を図ることが必要となる。

練習問題

1. $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in \mathbb{C}^n$, $\alpha \in \mathbb{C}$ であるとき，次の等式が成立することを示せ。

   (a) $(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{z}) = (\mathbf{x}, \mathbf{y}) + (\mathbf{x}, \mathbf{z})$

   (b) $(\mathbf{x}, \alpha\mathbf{y}) = \overline{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$

2. 次のノルムの値を求めよ。

3. $l = [0, 1]$ である時，$a_i(x) = x^i$ という基底を正規直交化した結果得られる $q_0(x)$, $q_1(x)$, $q_2(x)$, ... を Gram-Schmidt の直交化法を用いて求めよ。また，正規直交になっていることも確認せよ。