# 多変数関数の補間について†

市 田 浩 三†† 清 野 武††

**Abstract**

The problem of numerical interpolation of multivariable functions, when their values are assumed to be given on discrete lattice points, has been solved by the Monte Carlo method, for the number of lattice points increases exponentially with the number of dimensions. This paper describes a variant of nonlinear interpolation to give a more stable algorithm.

## 1. まえがき

1変数の補間式は数値解析の本に述べられてはいるが，2変数以上については非常に少ない．多変数の場合の補間式を1変数の拡張形として書き表わすのは容易であるが，計算すべき項の数が変数の数とともに指数関数的に増大するため，現在の計算機でも時間がかかりすぎて不経済であり，また実際上不可能になることも多い．そこでランダム・サンプリングの考えを用いて解く方法が考えられてきた[1),2),3)]．多変数の問題では通常高い精度を必要としない場合が多いので，この考え方は興味あると同時に実用的でもあると思われる．非線形補間においては係数に負のものが存在するため，この“負の確率”をどのように扱うかがモンテカルロ法の1つの問題点であった[1),3),4)]．文献3）では係数を正と負に分けて，それぞれの絶対値に比例した確率でサンプリングを行なう方法を考えたのであったが，変数の数が非常に多くなると精度が悪くなるので，本稿ではそれを避ける方法について考察する．これは“負の確率”の1つの取り扱い方として他の問題にも適用可能と思われる．

## 2. 非線形補間

多変数関数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_k)$ の値が領域 $D$ 内（超立方体と仮定する）で次のような $\prod_{r=1}^{k}(n_r+1)$ 個の異なったデータ点の座標において与えられているものとする．

$$x_r = x_r^{(0)}, x_r^{(1)}, \cdots, x_r^{(n_r)} \quad (r=1, 2, \cdots, k).$$

このとき $D$ 内の任意の点における $f(x_1, x_2, \cdots, x_k)$ の値を補間によって求めることが問題である．補間式として次の多項式を考える．

$$f(x_1, \cdots, x_k) = \sum_{i_1=0}^{n_1} \cdots \sum_{i_k=0}^{n_k} L(x_1, \cdots, x_k;\ i_1, \cdots, i_k) \times f(x_1^{(i_1)}, \cdots, x_k^{(i_k)}). \qquad (1)$$

ここで

$$L(x_1, \cdots, x_k;\ i_1, \cdots, i_k) = \prod_{r=1}^{k} L(x_r, i_r) = \prod_{r=1}^{k} \frac{\Delta(x_r, i_r)}{\omega_r}. \qquad (2)$$

$$\Delta(x_r, i_r) = (-1)^{i_r} \begin{vmatrix} \varphi_0(x_r) & \cdots & \varphi_n(x_r) \\ \varphi_0(x_r^{(0)}) & \cdots & \varphi_n(x_r^{(0)}) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_0(x_r^{(i_r-1)}) & \cdots & \varphi_n(x_r^{(i_r-1)}) \\ \varphi_0(x_r^{(i_r+1)}) & \cdots & \varphi_n(x_r^{(i_r+1)}) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_0(x_r^{(n_r)}) & \cdots & \varphi_n(x_r^{(n_r)}) \end{vmatrix}, \qquad (3)$$

$$\omega_r = \Delta(x_r^{(i_r)}, i_r) \qquad (4)$$

である．$i \neq j$ に対して $x_r^{(i)} \neq x_r^{(j)}$ と仮定しているから $\omega_r$ は零でない．また $\varphi_j(x)$ は $x$ の $j$ 次の多項式である．（1）式が与えられたデータ点を通る多項式であることは容易に確かめることができる．3）では（1）式を次のように係数の正負に応じて

$$f(x_1, \cdots, x_k) = \Sigma' \cdots \Sigma' L'(x_1, \cdots, x_k;\ i_1, \cdots, i_k) \times f(x_1^{(i_1)}, \cdots, x_k^{(i_k)}) - \Sigma'' \cdots \Sigma'' L''(x_1, \cdots, x_k;\ i_1, \cdots, i_k) \times f(x_1^{(i_1)}, \cdots, x_k^{(i_k)}) \qquad (5)$$

と書き表わした．ここで $\Sigma' \cdots \Sigma'$ および $\Sigma'' \cdots \Sigma''$ はそれぞれ係数 $L$ が正の項と負の項の和を示している．（5）式のように表わしたときの $L', L''$ は正であるからこれを確率と関係づけるために次の2つの量 $\mathcal{L}'$,

† A note on interpolation of multivariable functions, by Kozo ICHIDA and Takeshi KIYONO (Department of Information Science, Faculty of Engineering, Kyoto University)

†† 京都大学工学部情報工学教室

$\mathcal{L}''$ を計算しておく.

$$\left.\begin{aligned}\mathcal{L}'=\Sigma'\cdots\Sigma' L'(x_1,\cdots,x_k;\ i_1,\cdots,i_k)=\frac{\mathcal{L}+1}{2}\\ \mathcal{L}''=\Sigma''\cdots\Sigma'' L''(x_1,\cdots,x_k;\ i_1,\cdots,i_k)=\frac{\mathcal{L}-1}{2}\end{aligned}\right\}. \tag{6}$$

$$\mathcal{L}=\prod_{r=1}^{k}\sum_{j=0}^{n_r}|L(x_r,i_r)|. \tag{7}$$

計算の手続きは次の通りである. まず変数 $x_1$ について確率 $|L(x_1,i_1)|/\sum_{j=0}^{n_1}|L(x_1,j)|$ に従って $i_1$ をえらぶ. ($i_1$ は $0,1,\cdots,n_1$ のいずれかである.) これは一様乱数によって容易に実行できる. 他の変数 $x_2,\cdots,x_k$ についても同様にそれぞれ $i_2,\cdots,i_k$ をえらぶ. そして

$$L(x_1,\cdots,x_k;\ i_1,\cdots,i_k)=\prod_{r=1}^{k}L(x_r,i_r) \tag{8}$$

の符号の正負に応じて $\mathcal{L}'f(x_1^{(i_1)},\cdots,x_k^{(i_k)})$ を加えるか $\mathcal{L}''f(x_1^{(i_1)},\cdots,x_k^{(i_k)})$ を引くか, のいずれかを行なう. すなわち点 $(x_1,\cdots,x_k)$ における $f$ の値を

$$f(x_1,\cdots,x_k)=\frac{\mathcal{L}'}{N'}\Sigma' f(x_1^{(i_1)},\cdots,x_k^{(i_k)}) -\frac{\mathcal{L}''}{N''}\Sigma'' f(x_1^{(i_1)},\cdots,x_k^{(i_k)}) \tag{9}$$

によって推定するのである. ここで $N',N''$ はそれぞれ和 $\Sigma'$ と $\Sigma''$ における項の数を示すものとする.

## 3. 組み合わせサンプリング法

(5)式のように係数の正, 負に応じて別々に和を求めたのは, もし(1)式を用いて各項をランダムにえらんで平均値を求めたのでは分散が大きすぎて容易に収束しないからであった[1]. このように係数を分けることによって一応の解決をみたのであるが, $k$ が非常に大きくなると (たとえば 30 以上) (5) 式の $\mathcal{L}',\mathcal{L}''$ が大きくなり ((7) 式参照), 同じオーダーの大きな数字を引き算する結果有効数字が失なわれ, 不安定になり精度も悪くなる. また分散も $\mathcal{L}',\mathcal{L}''$ とともに増大する. そこでこの困難を避ける方法を考えよう.

今, $x_s=x_s^{(i_s)}(s=1,2,\cdots,k,s\neq r)$ に固定して変数 $x_r$ について考える. $x_r=x_r^{(j)}$ に対する $f$ の値を $f(j)$ と略記すると

$$f(x_r)=\sum_{j=0}^{n_r}L(x_r,j)f(j) \tag{10}$$

となる. これは $x_r$ 以外の変数を固定したときの $x_r$ に関する1次元の Lagrange 補間式である. 上の方法では $L(x_r,j)$ が正のものと負のものに分けて和を求めたために有効数字が失なわれる問題が生じた. そこで次のようなサンプリング法を考える. (10)式において係数 $L(x_r,j)$ が正のときの $j$ が $j_1,\cdots,j_m$, 負のときのそれが $j_{m+1},\cdots,j_{n_r+1}$ となったとする. (10)式は

$$f(x_r)=\sum_{t=1}^{m}|L(x_r,j_t)|f(j_t)-\sum_{t=m+1}^{n_r+1}|L(x_r,j_t)|f(j_t) \tag{11}$$

と表わすことができる. ここで補間式の性質より

$$\sum_{t=1}^{m}|L(x_r,j_t)|-\sum_{t=m+1}^{n_r+1}|L(x_r,j_t)|=1 \tag{12}$$

であることに注意しておく. まず $|L(x_r,j_{m+1})|$ に着目する. もし $|L(x_r,j_1)|\geqq 2|L(x_r,j_{m+1})|$ であれば

$$\begin{aligned}f(x_r)=&\{|L(x_r,j_1)|-2|L(x_r,j_{m+1})|\}f(j_1)\\&+|L(x_r,j_{m+1})|[2f(j_1)-f(j_{m+1})]\\&+\sum_{t=2}^{m}|L(x_r,j_t)|f(j_t)\\&-\sum_{t=m+2}^{n_r+1}|L(x_r,j_t)|f(j_t)\end{aligned} \tag{13}$$

の形にする. もし $|L(x_r,j_1)|<2|L(x_r,j_{m+1})|$ であって $|L(x_r,j_1)|+|L(x_r,j_2)|\geqq 2|L(x_r,j_{m+1})|$ であれば $|L(x_r,j_{m+1})|=|L(x_r,j_{m+1}')|+|L(x_r,j_{m+1}'')|$ に分けて $|L(x_r,j_1)|\geqq 2|x_r,j_{m+1}')|$, $|L(x_r,j_2)|\geqq 2|L(x_r,j_{m+1}'')|$ とできるから

$$\begin{aligned}f(x_r)=&\{|L(x_r,j_1)|-2|L(x_r,j_{m+1}')|\}f(j_1)\\&+|L(x_r,j_{m+1}')|[2f(j_1)-f(j_{m+1})]\\&+\{|L(x_r,j_2)|-2|L(x_r,j_{m+1}'')|\}f(j_2)\\&+|L(x_r,j_{m+1}'')|[2f(j_2)-f(j_{m+1})]\\&+\sum_{t=3}^{m}|L(x_r,j_t)|f(j_t)\\&-\sum_{t=m+2}^{n_r+1}|L(x_r,j_t)|f(j_t)\end{aligned} \tag{14}$$

のように書く. ここで $|L(x_r,j_{m+1}')|,|L(x_r,j_{m+1}'')|$ は上の条件を満足する適当な正数である. またもし, $|L(x_r,j_1)|+|L(x_r,j_2)|<2|L(x_r,j_{m+1})|$ で $|L(x_r,j_1)|+|L(x_r,j_2)|+|L(x_r,j_3)|\geqq 2|L(x_r,j_{m+1})|$ であれば $|L(x_r,j_{m+1})|$ を3つの正数に分けて同様の操作を行なう. 以上のようにして $|L(x_r,j_{m+1})|$ に対する操作がすめば $|L(x_r,j_{m+2})|,\cdots,|L(x_r,j_{n_r+1})|$ についても同様の手続きを行なう. そして, 例えば

$$\begin{aligned}f(x_r)=&\{|L(x_r,j_1)|-2|L(x_r,j_{m+1})|\}f(j_1)\\&+|L(x_r,j_{m+1})|[2f(j_1)-f(j_{m+1})]\\&+\{|L(x_r,j_2)|-2|L(x_r,j_{m+2})|\}f(j_2)\end{aligned}$$

$$+|L(x_r, j_{m+2})|[2f(j_2)-f(j_{m+2})]$$
$$+\cdots+|L(x_r, j_{n_r+1})[2f(j_{m-1})-f(j_{n_r+1})]$$
$$+|L(x_r, j_m)|f(j_m) \quad (15)$$

と表わせたと仮定する．(15)式において $\{|L(x_r, j_1)|-2L(x_r, j_{m+1})|\}$, $|L(x_r, j_{m+1})|$, …, $|L(x_r, j_m)|$ は非負で(12)式よりその和は1である．したがって，これらを確率と考えることができ，その確率に従って，$f(j_1)[2f(j_1)-f(j_{m+1})]$ などを計算して，その平均値で $f(x_r)$ の値を推定するわけである．以上要するに負の係数の項は正の係数の項と組み合わせて係数が正になるようにしてサンプリングを行なうのである．次に(12)式が(15)式のような形に書き表わせるための条件を考えよう．このためには

$$\sum_{t=1}^{m}|L(x_r, j_t)|\geqq 2\sum_{t=m+1}^{n_r+1}|L(x_r, j_t)| \quad (16)$$

であればよい．(12)式によって(16)式は

$$\sum_{t=1}^{m}|L(x_r, j_t)|\geqq 2\Big(\sum_{t=1}^{m}|L(x_r, j_t)|-1\Big).$$

$$\therefore\quad \sum_{t=1}^{m}|L(x_r, j_t)|\leqq 2.$$

$$\therefore\quad \sum_{t=1}^{n_r+1}|L(x_r, j_t)|\leqq 3. \quad (17)$$

すなわち補間式の係数の絶対値の和が3以下のときに上のような操作を行なうことができる．$n_r$ の値があまり大きくないときには通常これは可能である[5]．また係数の絶対値が大きいときは，補間式が大きく振動する可能性があるので，そのときは全体の区間を小区間に分けて，各小区間で別の補間式を考えるのがよいと思われる．スプライン関数を用いると係数の絶対値の和は小さいので利用できることがある．

以上の手続きを各変数について行なえばよく，計算方法は3)のときと同様に行なうことができる．（もちろん(9)式のような引き算はでてこない．また分散も小さい．）ただし，ある1組の乱数によって $k$ 個の変数のうち $s$ 個の変数 $x_{r_1}, \cdots, x_{r_s}$ に $2f^{(r)}-f^{(r')}(=2f_r-f_{r'}$ と書く）なる量を計算することが必要になったとすれば，それに対してもとの多変数関数では次の $2^s$ 個のデータ（その1組の乱数に対する関数値に対応する）を計算することになる．

$$f=2^s f_{r_1\cdots r_s}-2^{s-1}(f_{r_1\cdots r_{s-1}r_s'}+f_{r_1\cdots r_{s-2}r_{s-1}'r_s}$$
$$+\cdots+f_{r_1'r_2\cdots r_s})+2^{s-2}(f_{r_1\cdots r_{s-2}r_{s-1}'r_s'}$$
$$+\cdots)-\cdots+(-1)^{s-1}2(f_{r_1r_2'\cdots r_s'}+\cdots$$
$$+f_{r_1'\cdots r_{s-1}'r_s})+(-1)^s f_{r_1'\cdots r_s'}. \quad (18)$$

従って $s$ が小さければ，すなわち負の係数の絶対値の和が小さければ，1回のサンプリングに対する関数値の計算回数は少ない．

誤差は $N$ をサンプリング回数とすると

$$\sigma=\left[\frac{1}{N}\mathrm{Var}\ f(\xi_1,\cdots,\xi_k)\right]^{1/2} \quad (19)$$

で与えられる．ここで $(\xi_1,\cdots,\xi_k)$ は1組の乱数を示す．$2f(r)-f(r')$ は $f(r)$ と $f(r')$ を1：2に外分した点であり（(18)式の $f$ も外分点であることは明らかであろう），その点を利用して補間を行なっていると考えることができるから，線形補間の場合に Hammersley[1] が与えた式がこの場合にも成り立つ．（2)参照）すなわち grad $f$ が一様に有界であれば

$$\sigma<\left[\left(\frac{1}{2}+\log k\right)\frac{M}{2N}\right]^{1/2} \quad (20)$$

が成り立ち，標準偏差は次元数 $k$ の増加に対し非常にゆるやかにしか増加しない．

## 4. 例　　題

多変数関数

$$f(x_1,\cdots,x_{50})=\exp\left(\frac{1}{50}\sum_{i=1}^{50}x_i\right) \quad (21)$$

の値が $x_i=0.0,\ 0.5,\ 1.0 (i=1,2,\cdots,50)$ においてデータとして与えられたとして補間によって領域内($0\leqq x_i\leqq 1,\ i=1,2,\cdots,50$) の任意の点における関数値を

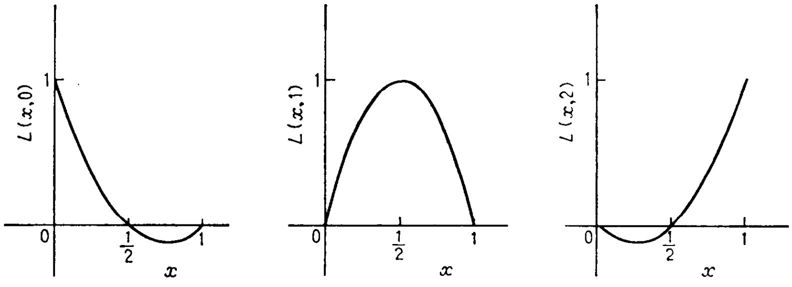


図1　補間係数のグラフ
Fig. 1 Graphs of coefficients of interpolation.

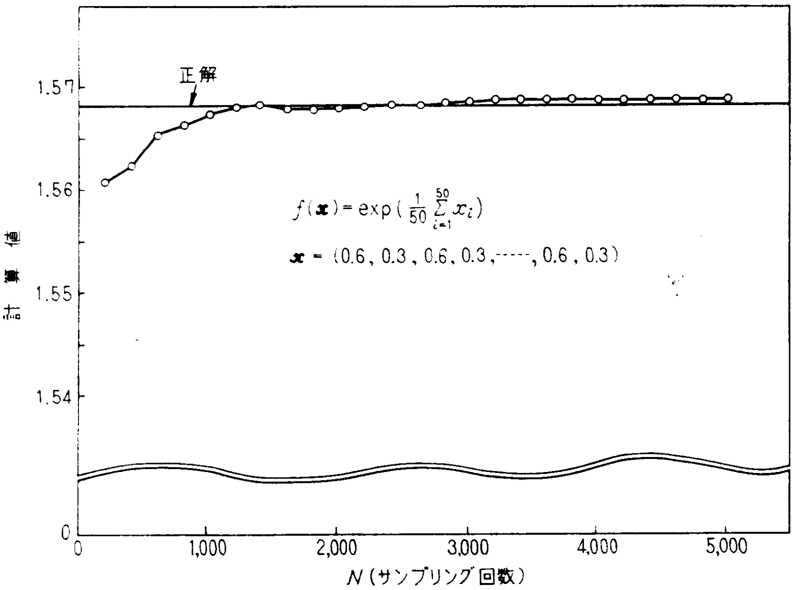


図 2 例題の計算結果
Fig. 2 Calculated result of example.

求める.

各変数について3点が与えられているので，各々の変数に関しては2次式を用いることにする．このとき係数は，(2)～(4)式より

$$\left.\begin{aligned} L(x,0)&=(2x-1)(x-1)\\ L(x,1)&=4x(1-x)\\ L(x,2)&=x(2x-1)\end{aligned}\right\}\qquad(22)$$

となる．ただし，変数を代表的に $x$ で表わしている．$L(x,0)$，$L(x,1)$ および $L(x,2)$ のグラフを図1に示す．$0\leqq x\leqq 1/2$ のときは，$L(x,2)$ が負であるから

$$\begin{aligned} f(x)=&\,|L(x,0)|f(0)+\{|L(x,1)|\\ &-2|L(x,2)|\}f\left(\frac{1}{2}\right)\\ &+|L(x,2)|\left[2f\left(\frac{1}{2}\right)-f(1)\right]\end{aligned}\qquad(23)$$

と表わせる．($1/2\leqq x\leqq 1$ のときも同様である.) (22)式より $|L(x,2)|\leqq 1/8$ であるから(18)式の $s$ が $m$ より大きくなる確率は

$$P[s>m]<8^{-m}\qquad(24)$$

となり，たとえば $m=6$ とすると

$$P[s>6]<8^{-6}\simeq 10^{-5.4}\qquad(25)$$

であるから，このような $s$ は実現不可能と見なして捨てることができる．すなわち線形補外[2)]の場合と同様，計算時間の短縮と分散の減少をはかることができる．点 $(0.6, 0.3, 0.6, 0.3, \cdots, 0.6, 0.3)$ における計算結果を図2に示す．上の議論により $s>6$ なる $s$ は捨てている．

## 5. むすび

多変数関数の補間について考察し，変数が非常に多くなっても精度を落さないために，係数が負の項を正の項と組み合わせてサンプリングを行なう方法について述べた．例題のように $3^{50}\simeq 10^{24}$ のデータから $10^3$～$10^4$ のデータをサンリングすることによって3～4桁の有効数字が得られたことは注目すべきことであろう．このような方法は他にも応用の可能性があると思われる．

### 参考文献


1) Hammersley, J. M.: Monte Carlo methods for solving multivariable problems, Ann. New York Acad. Sci. 86 (1960), pp. 844—874.
2) Tsuda, T. & H. Matsumoto: A note on linear extrapolation of multivariable functions by the Monte Carlo method, Journal of the ACM, Vol. 13 (1966), pp. 143—150.
3) Tsuda, T. & K. Ichida: Nonlinear interpolation of multivariable functions by the Monte Carlo method, Journal of the ACM, Vol. 17 (1970), pp. 420—425.
4) Halton, J. H.: An interpretation of negative probability, Proc. Camb. Phil. Soc. 62 (1966) pp. 83—86.
5) Karpov, K. A.: Tables of Lagrange interpolation coefficients, Pergamon Press, Oxford, (1965).


(昭和47年6月26日受付)