多変数関数の数値解析*

――補間法の応用――

津 田 孝 夫**

Abstract

The previously developed algorithm of interpolation of functions of very many variables is considered in light of engineering applications. The problem is to mechanically recognize and eliminate ineffective parameters (variables) of the multivariable function, using a data set of function values. To assess the combinatorially many terms, the technique of Monte Carlo sampling is exploited, and an upper bound of resulting errors is estimated.

1. まえがき

以前，きわめて変数の多い多変数関数の補間法を開発した[1]．そこではむしろ，多変数関数を計算機という“まないた”にのせるためのいわば思想的な提案を行ない，具体的な応用については議論しなかった．そこで本稿では，1つの実際的な応用について考察しよう．

本研究の基調となるべき立場は，要約すると次のとおりである．1ないし数変数の関数に対しては有力な数値的方法がある．しかし，この変数の数を一けたまたはそれ以上増すと，問題としては質的に異なるものとなり，計算すべき対象が組合せ論に急増し，いわば天文学的多数となる．このような場合，対症療法的に，問題に応じて特別の技術を開発することはもちろん可能であろうが，一般論として，このような多変数関数のむずかしさを克服する思想的立場があってよいはずである．そこでこの一般的な考え方として，従来の決定論的な数値的手法を，ランダム・サンプリングの思想と“結婚”させ，その末裔は，そのような多変数の場合でも扱えるようにしようというのである．このような線に沿って，以下において議論を行なう．ランダム・サンプリングの導入は，必然的に確率的な不確定さが混入することを意味するが，しかし応用上，上のような考え方は今後も発展性を含むことが十分期待される．

2. 問題の設定

独立変数 $x_1, x_2, \cdots, x_k$（パラメータあるいはデータ点の座標ともいう）の一組の値に対し，一義的に関数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_k)$ の値（データともいう）が対応するものとする．実際にはこれらパラメータ間に相互依存性がある場合もあるが，ここではこれらパラメータは独立に指定できるものとする．添字 k はパラメータ数（次元数）を表わすが，k が1に対しはるかに大きいと，対象の関数がとりうる状態は組合せ論的多数であって，その関数の性状を把握することはほとんど不可能になる．このような変数の多い場合に対し，その中には寄与の少ないパラメータも含まれるであろうから，そのような有効でないパラメータを発見し，除去することにより問題を簡約化することが望ましい．これは，計算機を経済的に利用し，情報処理の効率の向上をはかるためにも必要であろう．ところで，この簡約化は自働的に，ある設定した基準に照らして行なわれる必要がある．

以上のような動機のもとに，以前に開発した多変数関数の補間法[1] の拡張を行なう．得られるアルゴリズムは，多パラメータ系の情報処理や多変数関数で表わされる制御対象のモデルの単純化や実験計画法の分野に利用しうると思われる．

本論にはいる前に，二，三の特徴について言及しておく．まず，われわれのアルゴリズムは，パラメータの変域の全体にわたる全域的判定を行なうものである．第二に，データは統計分布をすることを想定していない点である．このあとの方の特徴は，多変量解析における因子分析あるいはその変形に対し異なるものであって，因子分析法などではデータは統計分布をしており，多次元正規分布の仮設が理論の根底にある．

---

* Numerical Analysis of Multivariable Functions――An Application of the Interpolation Technique, by Takao Tsuda (Department of Electronics, Kyoto University)

** 京都大学工学部

3. 変動の指標

k 個のパラメータは有限であるから，それらは適当に規格化されていて $0 \leqq x_r \leqq 1$ $(r=1, 2, \cdots, k)$ とする．この変域 D (超立方体) にわたる対象関数の変動の指標 I_r $(r=1, 2, \cdots, k)$ は，一応

$$\int_D \left(\frac{\partial f}{\partial x_r}\right)^\alpha dV = I_r^\alpha \tag{1}$$

で定義できる．ここに α はある正の偶数で，たとえば $\alpha=2$ である．そこで，ε を別に与えた小さい正数とすると，

$$I_r < \varepsilon \tag{2}$$

を満たすパラメータ x_r は，“有効でないパラメータ”と呼んでよい．われわれはこのような有効でないパラメータを，与えられたデータを用いて機械的にさがすことを考えよう．

4. 計算法

パラメータ $x_1, x_2, \cdots, x_k$ は独立であるから，データは格子空間上に分布する．上の (1) 式の値を推定する方法は2つ考えられる．第一には，(a) 対象関数をデータから構成した解析関数 (たとえばラグランジュ補間公式) でおきかえ，この導関数の α 乗を D の格子空間で平均する (D 内で積分する)． あるいはこの方法と違って，(b) データから，まずデータ点上の $\partial f/\partial x_r$ を構成する． このようにしてデータ点での $(\partial f/\partial x_r)^\alpha$ がわかるから，これを D の任意の点に補間し，D 内で積分する．

次に述べる理由により，方法 (a) は不適当で，方法 (b) がよい．文献 1) と同様の記号を用いて説明する．

方法 (a) の解析関数として，文献 1) の (5) 式を考えると

$$f = \sum_i L_i f_i \tag{3}$$

である．ここで添字 i は格子点 $(x_1^{(i_1)}, \cdots, x_k^{(i_k)})$ を指す．右辺の内容からわかるように，データ f_i に重み L_i を乗じて全格子点について和をとると，任意の点への補間ができる．重み L_i は，補間をしたい点の座標の関数であって， たとえば $\alpha=2$ とすると (1) 式は

$$I_r^2 = \sum_{i,j} J(i, j; r) f_i f_j, \tag{4}$$

$$J(i, j; r) \equiv \int_D \frac{\partial L_i}{\partial x_r}\frac{\partial L_j}{\partial x_r} dV \tag{5}$$

の形になる．ここで添字 i と j は，それぞれ $(i_1, \cdots, i_k)$ と $(j_1, \cdots, j_k)$ の略記である． 文献 1) と同じく $\forall f_i > 0$ としても一般性を失わない． (4) 式の右辺の大きさを評価したいが，多変数の場合にはこれは大変な項数から成る．そこでこれを項別に順に計算しないで，ランダム・サンプリングで推定しよう．ところが $J(i, j; r)$ の符号は，データ点が異なると一定せず，そのため (4) 式の右辺を次のように一定符号の部分和に分ける必要が生ずる[2]．すなわち，

$$I_r^2 = \sum' J'(i, j; r) f_i f_j - \sum'' J''(i, j; r) f_i f_j \tag{6}$$

ただし

$$J(i, j; r) = J'(i, j; r) \quad [J(i, j; r) > 0 \text{ のとき}],$$
$$-J(i, j; r) = J''(i, j; r) \quad [J(i, j; r) < 0 \text{ のとき}]$$

とした．$f=$一定という特別な場合を考えると明らかなように，

$$\sum' J'(i, j; r) - \sum'' J''(i, j; r) = 0 \tag{7}$$

という関係がある．(7)式の意味するところは，サンプリング回数を増すと，(6) の第1グループ (右辺第1項) からのサンプル数と第2グループ(右辺第2項) からのサンプル数が次第に接近することである．この場合のわずかの統計的不均衡と，ひき算のけた落ちがきいて，実際計算してみると意味のある値は求まらない．以上の理由から，方法 (a) は不適当である．一方，方法 (b) ではこのような難点は避けられる．

文献1) の (7) 式の記号を使うと，データ点 $(x_1^{(i_1)}, \cdots, x_k^{(i_k)})$ における $\partial f/\partial x_r$ は

$$\frac{\partial f}{\partial x_r} = \sum_{s=0}^{n} \left[\frac{\partial L(s; r)}{\partial x_r}\right]_{x_r = x_r^{(i_r)}} \cdot f(x_1^{(i_1)}, \cdots, x_{r-1}^{(i_{r-1})}, x_r^{(s)}, x_{r+1}^{(i_{r+1})}, \cdots, x_k^{(i_k)}) \tag{8}$$

で与えられることがわかる．上式は，格子点上の $\partial f/\partial x_r$ は $(n+1)$ 個のデータから構成できることを示す．そこでこのようにしてえた F^α を F_i^α と書くと

$$\left.\begin{aligned} I_r^\alpha &= \int_D F^\alpha dV = \textstyle\sum_i K_i F_i^\alpha, \\ K_i &= \int_D L_i dV \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

となり，文献 1) の思想を踏襲して (10) 式の和を

$$I_r^\alpha = \sum' K_i' F_i^\alpha - \sum'' K_i'' F_i^\alpha \tag{11}$$

のように，2つの正項の部分和に分ける。(11)式の重

み K_i は，補間点の座標に依存した L_i と異なって定数で，

$$\sum' K_i' - \sum'' K_i'' = 1 \qquad (12)$$

の関係がある．(12)式は重要な特徴であって，(7)式と対比されるべきである．文献 1) において補間法が成功したのは，その (14) 式の関係によることを想起すると，上の (12) 式を用いれば，方法 (a) の際問題となった難点は避けられることがわかる．そこで，前もって

$$\sum' K_i' + \sum'' K_i'' \equiv \kappa \qquad (13)$$

を算出しておけばよく，この計算は，文献 1) の (15) 式の $\mathcal{L}$ の計算と本質的に同じである．そういうわけで計算法の詳細は略すが，補間法の場合の $\mathcal{L}$ が補間点の座標だけでなくデータ点の格子構造に依存したのに対し，κ は格子構造だけに依存する．

以上の計算法を要約すると次のとおりである．

(1°) 直交関数を用いて補間公式を作る．すなわち $F^\alpha = \sum_i L_i F_i^\alpha$．この公式自体は，ランダム・サンプリングと無関係である．

(2°) その公式を D で積分する．すなわち，$I_r^\alpha = \sum K_i F_i^\alpha$．この多重積分をモンテカルロ法で推定する．しかもサンプリングの仕方としては，以前の補間法の場合と同じである．(12) 式をみよ．

(3°) (2°) で用いた F_i^α は，データ点上の F^α の値であって，$(n+1)$ 個のデータ f から直接計算できる．この段階ではサンプリングの誤差はない．

5. 必要なサンプル・サイズの推定

任意の点での F^α を，補間公式 $\sum_i L_i F_i^\alpha$ を用いて推定することを考える．その場合の分散 σ^2 が問題となる．元来，この分散の値は，異なる補間点に対しては異なるはずであるが，この分散の上界は，付録に示すように補間点に無関係な形でえられる．一方，I_r^α は F^α を D 上で積分して求める．この積分操作を F^α の算術平均とみなすと，I_r^α の分散は分散 σ^2 の平均である．しかるに，上述のように σ^2 の上界は，すべての補間点に共通にとれるから，分散 σ^2 の上界は I_r^α の分散の上界でもある．分散 σ^2 の上界をできるだけ小さく（したがって精密に）見つもることは大変むずかしい．この上界の推定は，本論文としてはかなり本質的であるが，冗長となることを避けるため，

Table 1 Number of datas required to estimate the measure of variations I_r

k	n	α	σ/α	N	$(n+1)^k$
20	2	2	1/100	25×10^4	10^{10}
20	2	2	5/100	1×10^4	10^{10}
20	2	2	1/10	0.25×10^4	10^{10}
30	1	2	1/100	15×10^4	10^9
30	1	2	5/100	0.6×10^4	10^9
30	1	2	1/10	0.15×10^4	10^9

その導出は付録として記載しておく．それによると

$$\sigma^2 \lesssim 2k(n+1-1/n)\,\mathrm{Max}\,(F^{2\alpha})/N \qquad (14)$$

が成り立ち，最大値は D 内の最大値を指す．もし F^α が 1 のオーダの数であると，**Table 1** の結果が得られる．ここで，σ は I_r^α の誤差限界（のめやす）であるから σ/α が I_r の誤差限界を与える．(2) 式の ε の値が σ/α より大きいときは判定可能で，そうでないときは誤差のため判定できない．これらの関係から逆に，判定基準 ε を定めると必要なサンプル・サイズがきまる．**Table 1** の $(n+1)^k$ は格子点の総数であるが，もし実用上少々の誤差を許せば，非常にわずかのデータ数で判定が可能であり，ランダム・サンプリングの効果の著しいことがわかる．同表の数 N は必要とする F_i の数で，データ f_i としてはこの $(n+1)$ 倍が必要である．

導出の過程から明らかなように，**Table 1** に示される上界は十分安全側の推定値である．したがって実際には，1,000 個程度のデータがあれば，10%以下の平均変動率しかもたないパラメータを認定し除去できるかと思われる．この程度の数は，総格子点数に比しいわば無限小にも近く，計算機でかんたんに扱える．重要なことは，必要なデータ点の一組を，対象関数とは無関係に，あらかじめ準備しておくことができる．このようなわけで，異なる判定基準 ε の値に対し，データ点の座標を計算機のメモリに作表しておき，計算機はこれら座標点にだけについてデータを検査すれば，無効パラメータの判定ができる．この意味において，序文で述べたとおり，本論文のアルゴリズムは実験計画との関連を生ずる．

6. むすび

まえがきで述べた一般的方法の一つの具体例を以上において論じてきたのであるが，このような考え方はいろいろの対象におしひろめることができるように思われる．少々の誤差を許し，適当に“さぼる”が，そ

のかわり手速く判定をくだすことが可能となるのであって，実際逐一きちょうめんにあますところなく計算する場合に比し，わずかな計算時間ですむことは，補間法に関しては験証ずみである．変数の数が大きい場合は，これからの問題であり，実際的要求も増しつつあるから，多変数関数の数値解析も何らかの意味で新しい転進を要求されるのであって，本論文はそのささやかな1つの努力であることを申し述べて本稿を終わることにする．

謝 辞

本論文に建設的な批判を寄せて下さった島崎真昭氏に感謝します．清野教授，坂井教授の日ごろのご支援に深く謝する次第です．

参 考 文 献

1) T. Tsuda & K. Ichida: Nonlinear Interpolation of Multivariable Functions by the Monte Carlo Method, Journal of the ACM, Vol. 17, No. 3, pp. 420-425 (1970).
2) J. M. Hammersley & D.C. Handscomb: **Monte Carlo Methods,** Methuen & Co. Ltd., London (1964), Chapter 12〔とくに (12・2・13) 式以降を見よ〕.

付録 (14) 式の導出

文献 1) の方法に従って関数 $F(x_1, \cdots, x_k)$ を補間するとき，第1群の和に対する分散 $(\sigma')^2$ の上界を求める．

$$(\sigma')^2 = N^{-1}\,\mathrm{var}\,F \tag{A1}$$

であって，ここに

$$\mathrm{var}\,F = \sum pF^2 - (\sum pF)^2, \tag{A2}$$

$$p = p(i_1, \cdots, i_k) = p(i_1;1)\cdots p(i_k;k)\delta, \tag{A3}$$

$$\delta = \delta(i_1, \cdots, i_k) = \begin{cases} \mathcal{L}/\mathcal{L}' & (\text{第1群のデータ点に対し}) \\ 0 & (\text{第2群のデータ点に対し}) \end{cases} \tag{A4}$$

である．δ は，第2群のデータ点を消すためのいわば消滅演算子である．ところで，

$$\mathrm{var}\,F \equiv v_k = \Sigma^{(1)} p^{(1)}[p(0;m)\delta_0 F_0{}^2 + \cdots + p(n;m)\delta_n F_n{}^2] - (\Sigma^{(1)} p^{(1)} g)^2 \tag{A5}$$

と書ける．ただし

$$g = p(0;m)\delta_0 F_0 + \cdots + p(n;m)\delta_n F_n, \tag{A6}$$

$$\left.\begin{aligned} &0 \leqq p(r;m) \leqq 1 \ (r=1, 2, \cdots, m), \\ &\sum_{j=1}^{n} p(j;m)1. \end{aligned}\right\} \tag{A7}$$

ここで $F_0, \cdots, F_n$ は，第 m 軸に着目して，この軸上で $x_m = x_m{}^{(0)}, \cdots, x_m{}^{(n)}$ という値をとるデータ点のデータ値をシンボリックに書いたものである．$\Sigma^{(1)}$ で表わされる和は，第 m 軸以外のすべての軸の座標に対する和で，$p^{(1)}$ という重みつきの $(k-1)$ 次元空間の格子点に関する和であるとみなしうる．(A4) の $\delta_1, \cdots, \delta_n$ と δ との間の関係は，ちょうど $F_1, \cdots, F_n$ と F の間の関係と同じで，第 m 軸上に沿って第1群のデータ点と第2群のデータ点とを区別することを考えているのである．

$$p(r;m) + p(s;m) \leqq 1 \ (r \neq s) \tag{A8}$$

という関係から，次式が導かれる．

$$\begin{aligned} &p(r;m)[1-p(r;m)](\delta_r F_r)^2 \\ &\quad + p(s;m)[1-p(s;m)](\delta_s F_s)^2 \\ &\quad - 2p(r;m)p(s;m)(\delta_r F_r)(\delta_s F_s) \\ &\leqq [1-p(r;m)-p(s;m)][(\delta_r F_r)^2 + (\delta_s F_s)^2] \\ &\quad + p(r;m)p(s;m)(\delta_r F_r - \delta_s F_s)^2. \end{aligned} \tag{A9}$$

上式を $r \neq s$ のあらゆる可能な場合について辺々加え合わせ，

$$\begin{aligned} &\sum_{r \neq s}[1-p(r;m)-p(s;m)](\delta_r F_r)^2 \\ &= \sum_r \sum_{s \neq r}[1-p(r;m)](\delta_r F_r)^2 \\ &\quad - \sum_r \sum_{s \neq r} p(s,m)(\delta_r F_r)^2 \\ &= (n-1)\sum_r [1-p(r;m)](\delta_r F_r)^2, \end{aligned}$$

$$g^2 = \sum_r p(r;m)^2(\delta_r F_r)^2 + \sum_{r \neq s} p(r;m)p(s;m)(\delta_r F_r)(\delta_s F_s)$$

に注意すると，次の関係が導かれる．

$$\begin{aligned} &2n\sum_r p(r;m)(\delta_r F_r)^2 \\ &\leqq 2(n-1)\sum_r p(r;m)^2(\delta_r F_r)^2 \\ &\quad + 2g^2 + 2(n-1)\sum_r(\delta_r F_r)^2 \\ &\quad + \sum_{r,s} p(r;m)p(s;m)(\delta_r F_r - \delta_s F_s)^2. \end{aligned} \tag{A10}$$

さらに，$\delta_r{}^2 = (\mathcal{L}/\mathcal{L}')\delta_r$ であることに注意して (A10) を (A5) に用いると，

$$\begin{aligned} v_k &< v_{k-1} \\ &\quad + (\mathcal{L}'/\mathcal{L})\Sigma^{(1)} p^{(1)}\left[\left(1-\frac{1}{n}\right)\sum_r p(r;m)^2(\delta_r F_r)^2\right. \\ &\quad + \left(1-\frac{1}{n}\right)\sum_r(\delta_r F_r)^2 \end{aligned}$$

$$+(2n)^{-1}\sum_{r,s}p(r;\ m)p(s;\ m)(\delta_r F_r-\delta_s F_s)^2\Big] \tag{A11}$$

がえられる．ここに

$$v_{k-1}=\sum^{(1)}p^{(1)}g^2-(\sum^{(1)}p^{(1)}g)^2 \tag{A12}$$

であって，(A12) の和 $\sum^{(1)}$ は $(k-1)$ 次元空間のすべての格子点についてとる和である．そこでは，第2群に属する格子点は，g に含まれる δ 演算子で消される．一方

$$(\mathcal{L}'/\mathcal{L})\sum^{(1)}p^{(1)}\sum_r p(r;\ m)^2(\delta_r F_r)^2<\mathrm{Max}\,(F^2),$$

$$(\mathcal{L}'/\mathcal{L})\sum^{(1)}p^{(1)}\sum_r(\delta_r F_r)^2<(n+1)\,\mathrm{Max}\,(F^2),$$

$$(\mathcal{L}'/\mathcal{L})\sum^{(1)}p^{(1)}\sum_{r,s}p(r;\ m)p(s;\ m)\cdot(\delta_r F_r-\delta_s F_s)^2<(\mathcal{L}/\mathcal{L}')\,\mathrm{Max}\,(F^2)$$

という関係があるから，(A11) は

$$v_k<v_{k-1}+(n+1-1/n)\,\mathrm{Max}\,(F^2) \tag{A13}$$

となる．ただし，$\mathcal{L}/\mathcal{L}'\approx 2$ であることを用いている．v_k と v_{k-1} をそれぞれの上限 V_k と V_{k-1} でおきかえ，(A13) を異なる k に対しくり返し用い，$k\gg 1$ とすると，結局

$$V_k\lesssim k(n+1-1/n)\,\mathrm{Max}\,(F^2) \tag{A14}$$

が得られる．この (A14) の右辺は，(A1) の var F の1つの上界を与える．$(\sigma')^2\sim(\sigma'')^2$ であるから，この上界の2倍が本文 (14) 式に用いてある．

(昭和46年5月13日受付)