Lagrange 補間

■ 補間多項式の表現

n 個のデータの組 (x_k, y_k) $(k = 1, \ldots, n)$ が与えられたときに,

$$P(x_k) = y_k \qquad (k = 1, \ldots, n) \tag{1}$$

を満たす $n-1$ 次多項式 $P(x)$ を**多項式補間**あるいは **Lagrange 補間**とよぶ．以下，標本点 x_k $(k = 1, \ldots, n)$ はすべて異なると仮定する．

このような $n-1$ 次以下の多項式 $P(x) = P_{n-1}(x)$ は一意的に存在する．実際,

$$P(x) = \sum_{j=0}^{n-1} a_j x^j \tag{2}$$

とおいてみると，$(a_0, \ldots, a_{n-1})$ に関する連立 1 次方程式

$$P(x_k) = \sum_{j=0}^{n-1} a_j {x_k}^j = f(x_k) \qquad (k = 1, \ldots, n) \tag{3}$$

の係数行列は，n 次 **Vandermonde 行列**

$$V_n(x_1, \ldots, x_n) = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & {x_1}^2 & \cdots & {x_1}^{n-1} \\ 1 & x_2 & {x_2}^2 & \cdots & {x_2}^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_n & {x_n}^2 & \cdots & {x_n}^{n-1} \end{bmatrix} \tag{4}$$

であり，その行列式 $\det V_n = \prod_{j>i}(x_j - x_i) \neq 0$ である．

補間多項式は

$$P(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) l_k(x), \qquad l_k(x) = \frac{\prod_{j\neq k}(x - x_j)}{\prod_{j \neq k}(x_k - x_j)}, \tag{5}$$

と表現できる．なぜなら，$l_k(x)$ は $n-1$ 次式で $l_k(x_j) = \delta_{kj}$ (Kronecker のデルタ) を満たすからである．式 (5) を **Lagrange 補間公式**と呼ぶ.

$$W(x) = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j) \tag{6}$$

とおくとき,

$$l_k(x) = \frac{W(x)}{(x - x_k)W'(x_k)} \tag{7}$$

が成り立つので，$P(x)$ は

$$P(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \frac{W(x)}{(x - x_k)W'(x_k)} \tag{8}$$

とも表現できる．

■ 計算法

標本点の (部分) 集合 $S = \{x_{i_1}, x_{i_2}, \ldots, x_{i_m}\}$ によって決まる $|S|-1$ 次補間多項式を $P[S](x)$ と書く．$P[S](x)$ は条件

$$P[S](x_{i_j}) = f(x_{i_j}) \qquad (j = 1, \ldots, m) \tag{9}$$

によって定まるので，S の要素の並べ方には依らない．$P[S](x)$ の 最高次 $(= |S|-1$ 次$)$ の係数を $C[S]$ と書くことにする．

つぎの関係式は，補間多項式の値を計算する際の基礎となる．$[S; x_j, x_k]$ は $[S \cup \{x_j, x_k\}]$ の略記である．

補題 1 $S \cap \{x_j, x_k\} = \emptyset$ ならば

$$P[S; x_j, x_k](x) = \frac{(x - x_j)P[S; x_k](x) - (x - x_k)P[S; x_j](x)}{x_k - x_j}, \tag{10}$$

$$C[S; x_j, x_k] = \frac{C[S; x_k] - C[S; x_j]}{x_k - x_j}. \tag{11}$$

[証明] (10) の右辺は $|S|+1$ 次以下の多項式であり，

- $x = x_i \in S$ なら，右辺 $= ((x_i - x_j)f(x_i) - (x_i - x_k)f(x_i))/(x_k - x_j) = f(x_i)$;
- $x = x_j$ なら，右辺 $= -(x_j - x_k)f(x_j)/(x_k - x_j) = f(x_j)$;
- $x = x_k$ なら，右辺 $= (x_k - x_j)f(x_j)/(x_k - x_j) = f(x_k)$.

したがって，右辺は $S \cup \{x_j, x_k\}$ から定まる $|S|+1$ 次補間多項式に一致する．(10) の $|S|+1$ 次の係数から (11) を得る． □

式 (10) に基づいた $P(x)$ の計算手順はいろいろあるが，次の **Neville 算法**がよく知られている．$S = \{x_{i_1}, x_{i_2}, \ldots, x_{i_m}\}$ のとき，$P[S](x)$ を $P[i_1, i_2, \ldots, i_m]$ と略記し，さらに，$i_1, i_2, \ldots, i_m$ が連続しているときには， $P[i_1 \sim i_m]$ と書く．

Neville 算法
$P[k] = f(x_k) \quad (k = 1, \ldots, n)$ とおき，$j = 1, \ldots, n-1$; $k = 1, \ldots, n-j$ に対して

$$P[k \sim k+j] = \frac{(x - x_{k+j})P[k \sim k+j-1] - (x - x_k)P[k+1 \sim k+j]}{x_k - x_{k+j}} \tag{12}$$

とする．$S = \{k, k+1, \ldots, k+j\}$ $(1 \le j \le n-1, 1 \le k \le n-j)$ に対する $P[S]$ が図 1 の三角配列の左上から順に縦方向に計算されていく． □

補題 1 に基づく上のような計算法では，各 x に対して加減算 n^2 回，乗算 n^2 回，除算 $n^2/2$ 回程度を要するので，x の多くの値に対する補間値が必要な場合には，計算の手間 (や丸め誤差) を考慮して補間多項式の適当な表現式を求めておいた方が効率がよい．

表式 (2) の係数 a_j を求めておけば，Horner 法によって n 回の乗算で $P(x)$ が計算できる．係数 a_j は n 次 Vandermonde 行列 V_n を係数とする連立 1 次方程式の解として定められるのであるが，その方程式から a_j を精度良く計算するのは難しいという重大な問題点がある．

$$
\begin{array}{ccccccccc}
P[1] & & & & & & & & \\
 & \searrow & & & & & & & \\
P[2] & \rightarrow & P[1,2] & & & & & & \\
 & \searrow & & \searrow & & & & & \\
P[3] & \rightarrow & P[2,3] & \rightarrow & P[1,2,3] & & & & \\
 & \searrow & & \searrow & & \searrow & & & \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & & \ddots & & \\
 & \searrow & & \searrow & & & & \searrow & \\
P[n] & \rightarrow & P[n-1,n] & \rightarrow & P[n-2,n-1,n] & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & P[1,2,\cdots,n]
\end{array}
$$

図 1: Neville 算法

そこで，基底関数を取り直して，

$$P(x) = P[1 \sim n](x) = \sum_{j=0}^{n-1} c_j R_j(x), \qquad R_j(x) = \prod_{i=1}^{j} (x - x_i) \tag{13}$$

と展開する．この形を**Newton 補間公式**と呼ぶ．あらかじめ係数 c_j を計算しておけば，x が与えられるごとに Horner 法と類似の算法

$$b_0 = c_{n-1}; \qquad b_j = b_{j-1}(x - x_{n-j}) + c_{n-1-j} \ (j = 1, \ldots, n-1) \tag{14}$$

によって $n-1$ 回の乗算で $P(x) = b_{n-1}$ を計算できる．この算法の方が式 (2) の形に比べて丸め誤差の影響を受けにくいという利点がある．

Newton 補間公式 (13) の係数 $(c_0, \ldots, c_{n-1})$ は以下のように計算できる．$R_j(x_k) = 0$ $(k \le j)$ であるから，$1 \le m \le n$ を満たす任意の m に対して，同じ係数 c_j を用いて

$$P[1 \sim m](x) = \sum_{j=0}^{m-1} c_j R_j(x) \tag{15}$$

と展開できることがわかる．とくに，この表式の x^{m-1} の係数を比べて

$$c_{m-1} = C[1 \sim m] \tag{16}$$

であるから，補題 1 の式 (11) から次のような計算法が得られる．

Neville 型算法

$C[k] = f(x_k) \quad (k = 1, \ldots, n)$ とおき，$j = 1, \ldots, n-1$; $k = 1, \ldots, n-j$ に対して

$$C[k \sim k+j] = \frac{C[k \sim k+j-1] - C[k+1 \sim k+j]}{x_k - x_{k+j}} \tag{17}$$

とする (この右辺を**差分商**という)．このとき，$c_{j-1} = C[1 \sim j]$ $(j = 1, \ldots, n)$ である．□

■ 近似度

補間多項式 $P(x)$ の近似誤差 $f(x) - P(x)$ を考える．区間 $[-1, 1]$ 上で考えることとし，区間 $[-1, 1]$ で連続な関数の全体を $\mathrm{C}[-1, 1]$ と表す．$f \in \mathrm{C}[-1, 1]$ に対して

$$\|f\|_\infty = \max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x)|$$

とおくと，相対誤差の大きさは $\|f - P\|_\infty / \|f\|_\infty$ で表される．

等間隔補間　等間隔の n 個の標本点 $x_k = -1 + 2(k-1)/(n-1)$ $(k = 1, \ldots, n)$ のとき，相対誤差（の最悪値）は

$$\sup_{f \in \mathrm{C}[-1,1]} \frac{\|f - P\|_\infty}{\|f\|_\infty} \ \approx \ 2^n \tag{18}$$

程度の大きさになる[1]．

Chebyshev 補間　Chebyshev 多項式 $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$ の零点

$$x_k = \cos \theta_k, \qquad \theta_k = (2k-1)\pi/(2n) \quad (k = 1, \ldots, n) \tag{19}$$

を標本点とする補間多項式 $P(x)$ は

$$P(x) = (1/2) a_0 T_0(x) + \sum_{j=1}^{n-1} a_j T_j(x), \tag{20}$$

$$a_j = (2/n) \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \cos(j\theta_k) \qquad (j = 0, 1, \ldots, n-1) \tag{21}$$

で与えられる．これを **Chebyshev 補間**と呼ぶ．このとき，相対誤差（の最悪値）は

$$\sup_{f \in \mathrm{C}[-1,1]} \frac{\|f - P\|_\infty}{\|f\|_\infty} \ \approx \ \frac{2}{\pi} \log n \tag{22}$$

程度の大きさになる．等間隔補間に比べて Chebyshev 補間の方が精度がよい．

[この資料は，杉原正顯, 室田一雄，数値計算法の数理，9 章 (岩波書店, 1994) の記述に基づいて編集したものである．]

以上 (2013-10-25)

[1] 式 (18), (22) は厳密な書き方ではない．