

論文

数値微分における最適刻み間隔の決め方とその応用*

泉 照 之**

Abstract

Differentiation is one of the useful operations in the information processing, but its numerical calculation may lead to noticeable error.

In this paper mean square error, which arises from transforming a tabulated function into a derived function in a certain closed interval, is taken into consideration. The truncation error is expressed in quadratic form on the coefficients of the K th-degree polynomial with which the tabulated function is approximated. Using this expression, the optimum interval for numerical differentiation which minimizes the total error, namely the truncation error and the round-off error, is determined.

As the application of the determining method of the optimum interval, the problem to determine the class interval for frequency distribution is discussed.

1. ま え が き

ディジタル計算機の普及にともない、数値微分は数値解析の分野だけでなく、各種データ処理においても盛んに用いられている。たとえば、パターン認識の特徴抽出過程において輪郭図形を一次元の曲率関数に変換する場合^{1),2)}、あるいは統計データ処理において累積分布関数から確率密度関数を求める場合などがある。このように、数値微分は有用な一次変換の一つである。しかし、雑音を含んだデータを取り扱う場合には、かなりの誤差が生じるので、数値微分の刻み間隔の選定には注意を要する。

これまでの数値微分の誤差に関する研究の多くは^{3),4)}、ある一点における微係数を求める際に生じる誤差について議論を行い、打ち切り誤差を高階の微係数で表わして、数値微分公式の最適刻み間隔を求めている。ところが先に述べた例の場合には、ある区間上での関数変換が同一な刻み間隔をもった数値微分公式で実行されることが多い。その場合、誤差評価は区間での2乗平均について検討されるべきである。この誤

差評価のもとで、すでに Wells⁵⁾らは最適刻み間隔が存在することを示し、その値を一つの被微分関数について求めている。しかし、これは任意の関数に適用できる一般的な方法ではない。

本論文は、微係数を求める際の最適刻み間隔の決め方を発展させて、ある区間における任意の関数の微分を、同一な刻み間隔の数値微分で実行したとき生じる誤差の2乗平均に注目して、それが最小になる刻み間隔の決め方について述べる。

まず、与えられた区間上での被微分関数の性質を多項式係数に反映させ、打ち切り誤差をその係数ベクトルに関する2次形式で表現している。そして、この打ち切り誤差と、被微分関数に含まれる雑音によって生じる丸め誤差とを考慮して、全誤差が最小になる刻み間隔を求める。

最後に、本法の具体的な応用例として、統計データ処理において問題になる度数分布の階級幅の決め方について述べる。

2. 理論的考察

刻み間隔 h の数値微分公式 $L(h)$ で、離散的な関数 f_i を微分すれば、性質の異なった二種類の誤差が生じる。すなわち、打ち切り誤差 e_t と丸め誤差 e_r である。前者は $L(h)$ が本来の微分公式 d/dx の近

* The Determination of Optimum Interval for Numerical Differentiation and Its Application by Teruyuki IZUMI (Mechanical Division, National Industrial Research Institute of Kyushu.)

** 九州工業技術試験所機械金属部

似であることに起因して、後者は f_i に含まれる雑音によって生じる。まず、2.1 で区間 $[0, 1]$ での $e_i = (L(h) - d/dx)g(x)$ の 2 乗平均を求める。ここで、 $g(x)$ は f_i から雑音成分を除いたもので、これについては 2.2 で述べる。そして、2.3 で最適刻み間隔を求める。なお、任意の区間 $[a, b]$ の関数 $g(x)$ の導関数は、 $g(x)$ を $[0, 1]$ に線形変換した後求めた導関数を $1/(b-a)$ 倍すれば同じになるので、区間は一般性を失うことなく $[0, 1]$ にできる。

2.1 打ち切り誤差

最初に、数値微分の $(2m+1)$ 点公式 $L_m(h)$ で、 $g(x)$ を数値微分したときの打ち切り誤差について述べる。 $L_m(h)$ はラグランジュの内挿公式より、

$$\left. \begin{aligned} L_m(h)g(x_i) &= \frac{1}{h} \sum_{n=1}^m A_{m,n} (g(x_{i+n}) - g(x_{i-n})) \\ A_{m,n} &= \frac{(-1)^n (m!)^2}{-n(m+n)!(m-n)!} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

のように表わされる。この場合、 $x = x_i$ における e_i は、内挿公式の誤差⁹⁾

$$\varepsilon(x) = - \prod_{n=-m}^m (x - x_{i+n}) \frac{g^{(2m+1)}(\xi)}{(2m+1)!}$$

$$e_i = (-1)^{m+1} h^{2m} (m!)^2 \frac{g^{(2m+1)}(\xi)}{(2m+1)!} \quad (2)$$

となる⁹⁾。ここで、 ξ は区間 (x_{i-m}, x_{i+m}) 内のある適当な点である⁹⁾。いま、 $g(x)$ がつぎのような K 次多項式

$$g(x) = \sum_{k=0}^K a_k x^k \quad (3)$$

で表わされれば、

$$g^{(2m+1)}(x) = \sum_{k=2m+1}^K \frac{k!}{(k-2m-1)!} a_k x^{k-2m-1} \quad (4)$$

と書けるので、(2)式はつぎようになる。

$$e_i = (-1)^{m+1} h^{2m} (m!)^2 \sum_{k=2m+1}^K \binom{k}{2m+1} a_k \xi^{k-2m-1} \quad (5)$$

そこで、 $h^2 \ll 1$ で、 m が大きくないとすれば $\xi \doteq x_i$ となるので、(5)式の ξ を x とおいて、区間 $(0, 1)$ での e_i の 2 乗平均 $E_i = \int_0^1 e_i^2 dx$ を求めると、次式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} E_i &= a_m T_m a_m h^{4m}, \\ T_m(p, q) &= \frac{(m!)^4}{p+q-1} \binom{2m+p}{2m+1} \binom{2m+q}{2m+1}, \\ a_m &= (a_{2m+1}, a_{2m+2}, \dots, a_K). \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

これは、打ち切り誤差の 2 乗平均 E_i を、被微分関数の多項式係数ベクトル a_m に関する 2 次形式で示したものである。

つぎに、前進差分による数値微分公式 $L_d(h)$ の場合について述べる。 $L_d(h)$ による $g(x)$ の数値微分は

$$L_d(h)g(x_i) = \frac{1}{h} (g(x_{i+1}) - g(x_i)) \quad (7)$$

で表わされ、 e_i はつぎようになる。

$$e_i = h g^{(2)}(\xi) / 2! \quad (8)$$

同様な方法で E_i を求めると、次式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} E_i &= a_i T_i a_i h^2, \\ T_i(p, q) &= \frac{1}{p+q-1} \binom{1+p}{2} \binom{1+q}{2}, \\ a_i &= (a_2, a_3, \dots, a_K). \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

2.2 被微分関数の多項式近似

j を離散的な独立変数とみなすと、被微分関数 f_j ($j=1, 2, \dots, J$) は、 f_j の元になる未知関数 $f_u(x)$ とランダム雑音 n_j で、次式のように表わされる。

$$f_j = f_u(x_j) + n_j, \quad (j=1, 2, \dots, J). \quad (10)$$

ここで、 $x_j = j\Delta x$ で、 $J (= 1/\Delta x)$ は非常に大きな自然数である。また、 n_j は平均が 0 で、分散 σ^2 が既知な確率変数とする。与えられた f_j から次数 K の未知な $f_u(x)$ を正確に求めるのは決して容易ではない。そこで、ここでは (11) 式で f_j を直交展開して、展開係数 c_k から (12) 式のような多項式 $g(x)$ を求め、これから $f_u(x)$ を推定する。

$$c_k = \sum_{j=1}^J f_j G_k(x_j) \Delta x. \quad (11)$$

$$\sum_{k=0}^K c_k G_k(x) = \sum_{k=0}^K a_k x^k = g(x). \quad (12)$$

ここで、 $\{G_k(x)\}$ は区間 $[0, 1]$ で重み 1 の正規直交整式系であり、 $G_k(x)/\sqrt{2k+1}$ がヤコビの多項式とよばれる k 次多項式である⁹⁾。 $g(x)$ の次数 K は、 f_j に含まれている雑音 n_j のため大きな k の c_k は意味を持たないので、 n_j の分散 σ^2 との兼ね合いでつぎのように決める。まず f_j を、(12) 式の K 次多項式 $g(x)$ と、それに直交した

$$g_\perp(x) = \sum_{k=K+1}^{\infty} c_k G_k(x) \quad (13)$$

の和で次式のように表わされるとする。

$$f_j = g(x_j) + g_\perp(x_j), \quad (j=1, 2, \dots, J). \quad (14)$$

$\{G_k(x)\}$ は正規直交系であるので、(14) 式の両辺の 2 乗平均はつぎようになる。

$$\|f\|^2 = \sum_{k=0}^K c_k^2 + \sum_{k=K+1}^{\infty} c_k^2 \quad (15)$$

ここで、左辺の $\|f\|$ は f_j のノルムを示す。 k の大きい c_k は、 f_j が雑音を含んでいるため、(11) 式で意味のある値は得にくい。そこで、(15) 式の右辺の第

2項が σ^2 程度になるように、次式を満たす K を $q(x)$ の次数とする。

$$\sum_{k=0}^K c_k^2 \equiv \|f\|^2 - \sigma^2 \quad (16)$$

以上のことより、与えられた f_j から $\|f\|$ を予め計算しておけば、(11)式で c_k を逐次計算することによって、(16)式より K が、(12)式より $f_n(x)$ の近似である K 次多項式 $q(x)$ が求められる。なお、数値微分において、 f_j の高次成分は雑音と同じ影響を与えるので、(13)式の $q_n(x)$ を平均0分散 σ^2 の新しい雑音 n_j' とみなす。したがって、 f_j は次式のように表わされる。

$$f_j = q(x_j) + n_j', \quad (j=1, 2, \dots, J) \quad (17)$$

2.3 最適刻み間隔

数値微分公式 $L(h)$ で、雑音を含んだ関数を微分すれば誤差が生じる。ここでは、その誤差の区間 $[0, 1]$ での2乗平均 E に注目して、 E を最小にする $L(h)$ の最適刻み間隔 h^* を決める。 f_j ($j=1, 2, \dots, J$) から $L(h)$ の刻み間隔 h に応じてサンプルされたものを f_i ($i=1, 2, \dots, I(=1/h)$) とすれば、 E はつぎのように表わされる。

$$E = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I \left\{ L(h)f_i - \frac{d}{dx} f_n(x_i) \right\}^2 \quad (18)$$

この式の $\{ \}$ 内の第2項 $f_n(x)$ は現実を求めることができないので、これに近い (12) 式の $q(x)$ を使い、第1項の f_i に (17) 式を代入して計算すると、(18)式はつぎようになる。

$$E = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I \left\{ \left(L(h) - \frac{d}{dx} \right) q(x_i) \right\}^2 + \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I \{ L(h)n_i' \}^2 \quad (19)$$

ここで、 $\frac{1}{I} \sum_{i=1}^I \left(L(h) - \frac{d}{dx} \right) q(x_i) L(h)n_i'$ は、平均0の n_i' を線形結合した $L(h)n_i'$ が同様に平均0の確率変数となり、かつ、 $L(h)n_i'$ と $(L(h) - d/dx)q(x_i)$ が無相関なので無視している。(19)式の右辺第1項は2.1で述べた打ち切り誤差 E_t で、第2項は丸め誤差 E_r である。

まず、数値微分公式が $L_m(h)$ の場合に注目する。このとき、(19)式の E_t は $I \gg 1$ ならば (6) 式に一致し、 E_r は $L_m(h)n_i'$ の分散に相当する。ところで、(1)式で示すように $L_m(h)$ が線形演算子で、 n_i' が分散 σ^2 の独立な確率変数列とみなされるので、 $E_r = \sigma^2 \times (L_m(h) \text{ の係数の2乗和})$ となり、結局 E は

$$E = a_m T_m' a_m h^{4m} + 2 \sum_{n=1}^m A_{m,n} \sigma^2 \left(\frac{\sigma}{h} \right)^2 \quad (20)$$

と表わされる。そこで、 $dE/dh=0$ を満たす h^* を h^* とすれば、最適刻み間隔は次式より求められる。

$$h^* = \sigma^{1/(2m+1)} \left(\frac{\sum_{n=1}^m A_{m,n} \sigma^2}{m a_m T_m' a_m} \right)^{1/(2m+1)} \quad (21)$$

つぎに、 $L_4(h)$ の場合における h^* を (7), (9) 式より同様に求めると、次式が得られる。

$$h^* = \sigma^{1/2} \left(\frac{2}{a_4 T_4' a_4} \right)^{1/4} \quad (22)$$

3. 実験結果

まず、2.1で述べた打ち切り誤差の計算法の妥当性を確かめる。そのため、Fig. 1に示すような $T_7(x)$ ($=64x^7 - 112x^5 + 56x^3 - 7x$) と、 $P_5(x)$ ($=63x^5 - 70x^3 + 15x$) を多項式 $q(x)$ の例として用いる。デジタル計算機を用いて、これらの多項式を3点公式 ($L_3(h)$) と5点公式 ($L_5(h)$) でいろいろな h に対して数値微分を行い、区間 $[0, 1]$ での打ち切り誤差の2乗平均を求めた。そして対数目盛の Fig. 2(次頁参照)に、 $q(x)$ と m の組合せを変えた4種類の実験値をプロットした。なお、 $q(x)$ の有効桁数は丸め誤差が生じないように十分大きくしている。一方、Fig. 2の4本の直線は (6) 式の $E_t = a_m T_m' a_m h^{4m}$ を示している。この図から理論値と実験値は、実用的範囲である $h < 0.07$ において、よく一致していることがわかる。しかし、 h が大きくなれば両者の差が生じ、これは、同じ m に対して次数の高い $T_7(x)$ の方が大きい傾向にある。

つぎに、被微分関数 f_j として有効桁数5の $\sin 2\pi x$ と3桁の $T_7(x)$ を例にとり、数値微分誤差を最小にする最適刻み間隔を求める。これらの f_j を3点公式と5点公式で数値微分を行い、それから生じた誤差の2乗平均 E を各 h に対して求めると、

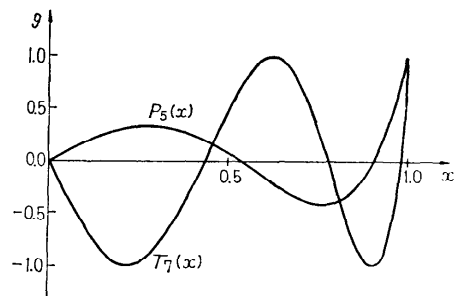
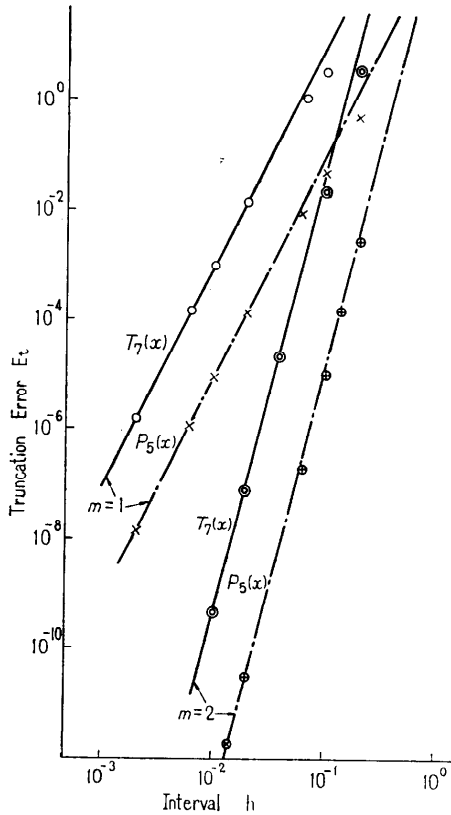
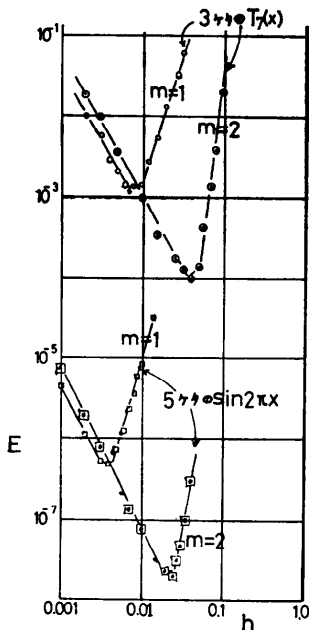


Fig. 1 Two polynomials used in the experiment.

Fig. 2 Truncation error E_t vs. interval h .Fig. 3 Total error E vs. interval h .Table 1 Comparison of h_{gmin} with h^*

数値微分公式	$m=1$	$m=2$
関数 f_j の性質		
有効桁数 5 の $\sin 2\pi x$	$h_{gmin}=0.0036$ $h^*=0.0032$	$h_{gmin}=0.022$ $h^*=0.0212$
有効桁数 3 の $T_7(x)$	$h_{gmin}=0.0075$ $h^*=0.0071$	$h_{gmin}=0.038$ $h^*=0.0354$

Fig. 3 のようになった。それぞれの曲線において、有効桁数が少ないため h の小さいところで丸め誤差が生じ、そして、誤差 E を最小にする刻み間隔 h_{gmin} が存在する。一方、 f_j に含まれる雑音の分散 σ^2 を有効桁数から推定して、2. で述べた方法に従って (21) 式より h^* を計算すると、それぞれ Table 1 のようになった。これらは、Fig. 3 から求めた h_{gmin} とほぼ一致している。

以上、(21) 式から求めた h^* が最適刻み間隔であることを確認したが、つぎに、 f_j から近似された多項式 $q(x)$ の次数 K に対する、 h^* の安定性について調べる。Fig. 4 は、 k の上限 K を決める (16) 式を無視して、有効桁数 5 の $\sin 2\pi x$ を多項式で逐次近似させる過程で、その都度 h^* をプロットしたものである。この図は、近似多項式の次数 K を無制限に増せば、 h^* が小さくなり真値 (h_{gmin}) から離れることを示している。この理由として、大きな k の $G_k(x)$ が正確に求めにくく、また、 Δx が 0.001 と有限であったため正確な c_k が (11) 式より得られないためと考えられる。しかし、Fig. 4 に見られるように h^* の安定領域は、 $m=1$ のとき $K=7\sim 12$ 、 $m=2$ のとき $K=9\sim 12$ となりかなり広い。よって、(16) 式より決め

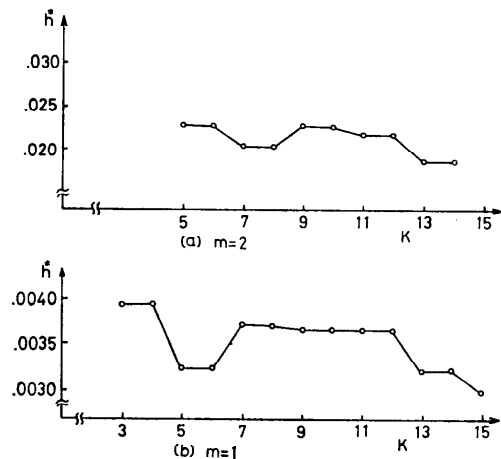


Fig. 4 The change of the optimum interval with degree of polynomial approximation.

られる K に基づく Table 1 の h^* はかなり信頼性がある。

4. 度数分布作成への応用

度数分布は、ある階級幅に属するデータ数の、標本の大きさ N に対する比で表わされる。(正確には相対度数分布と呼ばれるが、ここでは単に度数分布という。) また、これは累積分布関数を $L_A(h)$ で数値微分して得られる確率密度関数と同じものである。すなわち、階級幅が数値微分公式の刻み間隔 h に相当する。

多くの場合、階級幅はどの階級に対しても同一である。特に、Fig. 5 に示すような不規則信号の振幅に関する度数分布を、簡単なハードウェアで測定する場合²⁾には、同一な階級幅が望ましい。このとき、階級幅すなわち刻み間隔 h は、累積分布関数の大局的性質(たとえば多項式係数)と、 N が有限なために生じる雑音成分とを考慮して最適な値を決める必要がある。その場合、度数分布を観測する場合に誤差の2乗平均が問題になる点に注目すれば、 h の最適性の規範は、当然、累積分布関数を数値微分したとき生じる誤差の2乗平均の最小化にある。

すでに階級の数 $M(\propto 1/h)$ と N の関係を示す経験則はあるが²⁾、これは N に対する M の下限を表わす程度で十分とは言えない。そこで、2. で述べた方法を応用して、度数分布を作成するときの最適階級幅、最適階級数を求める。

Fig. 5 は、平均 0.5、標準偏差 $1/6$ の正規分布をもつ母集団から、乱数が単位時間に1個の割合で発生させたときの不規則信号 $y(t)$ を示している。この場合、累積分布関数は、 $y(t) \leq x$ なる時間を合計して、これ

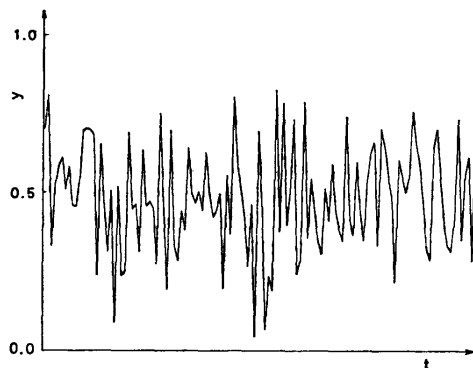


Fig. 5 Random signal having normal distribution for a mean of 0.5 and a standard deviation of $1/6$.

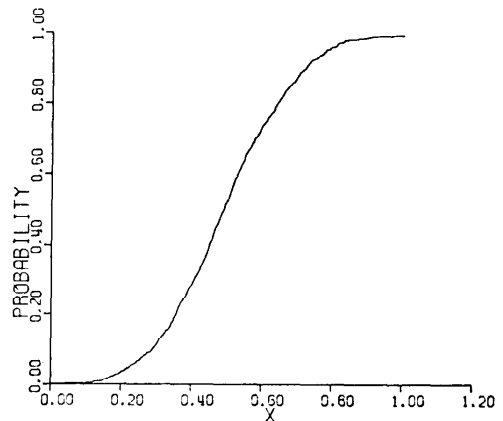


Fig. 6 Cumulative distribution function of the random signal $y(t)$ on a sample size $N = 1,000$.

を標本の大きさ N に相当する全観測時間で除したものである。Fig. 6 は $N=1,000$ における累積分布関数 f_j ($j=1, 2, \dots, 400$) を示し、これに含まれる雑音 n_j の平均標準偏差 σ は約 0.0082 であった。この f_j を $L_A(h)$ で数値微分して度数分布を作る場合、最適階級幅 h^* は、 f_j より求めた a_k ($=a_2, a_3, \dots, a_K$) を (22) 式に代入してあらかじめ計算された次式より得られる。

$$h^* = 0.605\sqrt{\sigma} \quad (23)$$

Fig. 7 (次頁参照) はいろいろな h に対する度数分布である。(a) は、 $h^*=0.054$ に近い $h=0.055$ における度数分布で、同図の (b) の h が小さ過ぎる例や、(c) の h が大き過ぎる例に比べて、滑らかな曲線の正規分布 $(1/\sqrt{2\pi(1/6)^2})\exp(-(x-0.5)^2/(2 \cdot (1/6)^2))$ に近いことを示している。

また、 N が変化しても、累積分布関数 f_j に含まれる n_j の平均標準偏差が $\sigma = \sigma_0/\sqrt{N}$ になるだけで、 f_j の大局的性質は不変なので、(23) 式はそのまま使用できる。ここで、 σ_0 は単位標本数 ($N=1$) 当りの標準偏差である。数種の N に対する σ の実験値から外挿すると、 $\sigma_0=0.26$ となった。さらに、(23) 式は f_j の定義区間が $(0, 1)$ に基づいて導かれているので、最適階級数 M は $1/h^*$ となり、標本の大きさ N とつぎの関係で結ばれる。

$$M = 3.24\sqrt{N} \quad (24)$$

以上、数値微分の最適刻み間隔の決め方の一応用として、度数分布を作成する際に重要な階級幅の選び方について述べた。具体例として、正規分布を取り扱っ

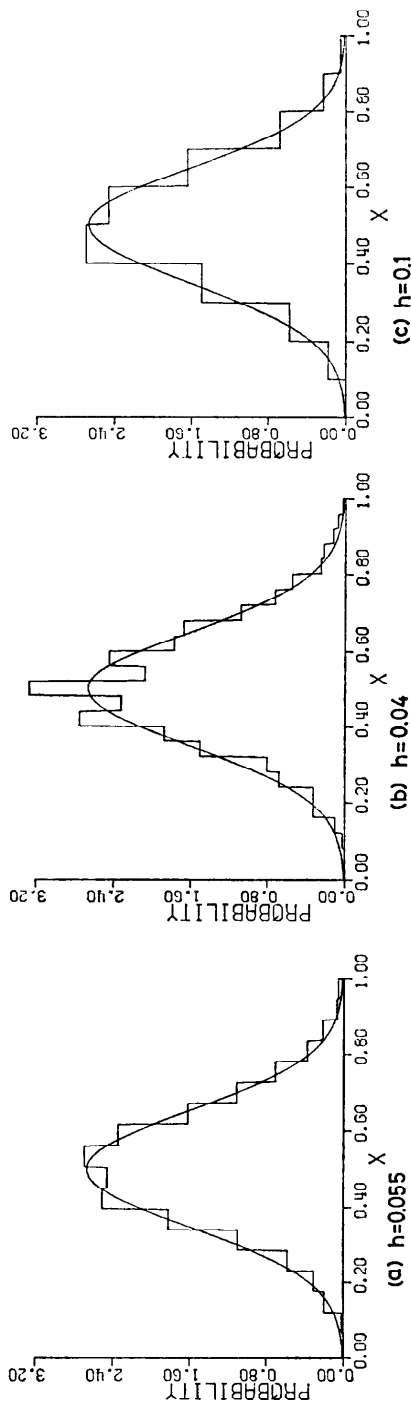


Fig. 7 Frequency distributions for different values of the class interval h .

たが、他の分布でも同様に (24) 式に相当する式を求めることができる。

5. むすび

区間 $[0, 1]$ で与えられた関数の微分を、同一な刻み間隔の数値微分公式で実行したとき生じる誤差の 2 乗平均に注目した。まず、打ち切り誤差を被微分関数の多項式係数ベクトルに関する 2 次形式で簡単に表現した。これは実験結果とよく一致したが、次数の高い関数において h の大きい所で差異が生じる傾向があった。つぎに、この打ち切り誤差と、被微分関数に含まれる雑音によって生じる丸め誤差とを考慮して、全誤差を最小にする最適刻み間隔 h^* の決め方について述べた。この方法によって計算した h^* は、実験より求めた誤差を最小にする刻み間隔とほぼ一致した。また、この h^* は、打ち切り誤差が正確に表わせる範囲で、かなりの信頼性があることを実験的に確認した。

さらに、本法が統計データ処理における度数分布の最適階級幅の決め方にも適用できることを述べ、標本の大きさに対する階級数の関係を示した。

終りに、有益な御助言を賜った佐賀大学中村政俊助教授に深く感謝します。

参考文献

- 1) J. R. Bennett & J. S. Macdonald: On the Measurement of Curvature in a Quantized Environment, IEEE Trans., Vol. C-24, No. 8, pp. 803~820 (1975).
- 2) 安居院, 加藤, 永平: 輪郭図形の曲率エネルギーによる特徴抽出, 昭和 50 年電気学会全国大会, No. 1435.
- 3) 山内他編: 電子計算機のための数値計算法 I, p. 92, 培風館 (1965).
- 4) Kopal: Numerical Analysis, p. 104, Wiley.
- 5) E. Wells, M. Negin & M. Shapiro: Effect of Truncation and Sample Rate on Derivative Algorithms, D.E.C.U. S. Proc., Fall, pp. 133~135 (1970).
- 6) 末岡: 級数および直交関数系, p. 202, コロナ社.
- 7) W. F. Caldwell, G. A. Korn, V. R. Latorre & G. R. Peterson: A Precision Amplitude-Distribution Amplifier, IRE Trans., Vol. EC-9, No. 2, pp. 252~255 (1960).
- 8) 依田: 工業数学便覧(下巻), p. 113, 日刊工業新聞社.
- 9) 赤坂: 数値計算, pp. 21~28, コロナ社.

(昭和 51 年 2 月 14 日受付)

(昭和 52 年 1 月 12 日再受付)