論 文

差分商列による逐次的数値微分算法*

長 嶋 秀 世** 福 田 　馨**

Abstract

A new algorithm for numerical differentiation is presented. It consists of first forming the divided differences $G_m(x_r)=\dfrac{F(x_r)-F(x_m)}{x_r-x_m}$ for each pair of data points, and then obtaining $F'(x_m)=G_m(x_m)$ by applying any known interpolation algorithm, such as Aitken-Neville algorithm.

The above method is shown to be algebraically equivalent to the known algorithms based on the Lagrangean interpolation polynomial. But this method is much simpler since it requires no special constants which appear in conventional differentiation formulae.

Higher order derivatives can also be obtained by repeated applications of this algorithm.

1. まえがき

計算機による数値微分は，積分とは異なりほとんどの場合与えられた関数そのものを解析的に微分できることから，あまり注目されていなかった．しかし，与えられた関数の微分が複雑でむずかしいときや，高階微分係数を得るとき，あるいは測定データを処理するときなどのように関数の値が離散的にしか与えられていない，すなわち，解析的に微分不可能な場合などには数値微分はなくてはならないものである．電子計算機の性能が飛躍的に向上した現在，数値微分は微分値を得る手段としても有効なものとなりつつある．

良く知られている数値微分公式には，分点が等間隔に与えられた場合の，前進差分法や中心差分法を用いた数値微分公式，あるいは Stirling，Everett および Bessel の補間公式を微分したものなどがある[1]．また，分点の間隔に依存しない公式として，Lagrange の補間多項式を微分したものなども使われている[1]．しかし，これらの方法では分点を増加させて精度の向上をはかる場合には，最初からやり直さなければならず，逐次的数値微分算法にはなり得ない．また，逐次的数値微分算法としては，誤差項を順次消去していく，Richardson の補外による数値微分公式[2]があるが，これは一般に分点を2倍ずつ増加させててやらなければならず，関数が具体的に与えられていない場合，すなわち分点が限られているときには，有効な逐次的数値微分算法とはならない．

本論では，新しい形の変換により差分商列を導入しこれを利用した逐次的数値微分算法を提案する．この場合，分点の増加に対して前に求めた値がそのまま利用でき，補正値が付加された形となり，より精度の高い微分値を得ることができる．また，ここで提案する数値微分法は，分点が等間隔に与えられた場合の前進および中心差分による数値微分公式や，分点の間隔に依存しない Lagrange の補間多項式を微分した数値微分公式などを含んでいる．

2. 差分商列

閉区間 I で微分可能な実数値関数 F が定義されており，I 上のお互いに異なる $n+1$ 個の点，x_0，x_1，…，x_n と，その点における関数値 $F(x_0)$，$F(x_1)$，…，$F(x_n)$ が与えられているものとする．ここに，これらの点は等間隔である必要はなく，またその順序については問わない．

ここで，前述の x_k における関数値を簡単に，

$$F(x_k)=f_k$$

* Iterative Algorithm for Differentiation Using Sequence of Divided Differences by Hideyo NAGASHIMA and Kaoru FUKUDA (Department of Electronics, Kogakuin University).

** 工学院大学電子工学科

と表わす．また，

$$x_j < x_k \ (j < k)$$

としても一般性を失うことはないので，以後この条件のもとで論議する．

いま，分点 x_m に対して，次の変換を行う．

$$Z_{m,i} = \frac{f_i - f_m}{x_i - x_m} \quad (x_0 \leq x_m \leq x_n,\ i \neq m) \tag{1}$$

上の定義式から，各分点に対して n 個の z の点列，すなわち，差分商列が得られる． **Fig. 1** は，この点列が分点 x_m より他の分点への勾配の変化の様子をあらわすことを示している．

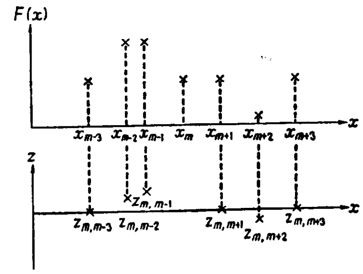


Fig. 1 The sequence of divided differences to x_m.

ここで，得られた差分商列によって表わされる関数について考える．すなわち，

$$G_m(x_i) \equiv Z_{m,i} \tag{2}$$

ここで，

$$G_m(x) \equiv \frac{F(x) - F(x_m)}{x - x_m} \tag{3}$$

とすると，微分の定義により，

$$G_m(x_m) = Z_{m,m} = F'(x_m) \tag{4}$$

を得る．式（4）からわかるように，分点 x_m に対する差分商列によって，x_m に対して補間した値 $z_{m,m}$ はもとの関数 $F(x)$ の x_m における近似微分値となる．

3. 逐次的数値微分算法

従来の数値微分公式，すなわち，補間公式を作成して，それを分点において微分するという形のものでは分点を増加させて精度の向上をはかるためには，補間公式から作り直さなければならない．つまり，数値微分公式は分点数に対して各々独立に求めなければならないので，精度の逐次向上をはかるには大変不便である．そこで，前述のように，分点 x_m に対する差分商列を利用して x_m に対応する点 $z_{m,m}$ を補間によって求めると，この補間された点 $z_{m,m}$ は，もとの関数 $F(x)$ の x_m における近似微分値となる．すなわち，補間によって近似微分値が得られることに注意して新しい数値微分法を求める．

新しい逐次的数値微分算法は，与えられた差分商列の補間公式として，Aitken-Nevilleの逐次補間法を用いる．ここで，分点 x_m におけるもとの関数 $F(x)$ の微分値を求めるアルゴリズムを次のようにする．

Step（1） 与えられた $n+1$ 組のデータ $(x_r, F(x_r))$ を用いて，微分値を得ようとする分点 x_m に対する差分商列を作成する．

Step（2） 求められた差分商列を用いて，x_m に対応する点 $z_{m,m}$ の値を，Aitken-Neville の逐次補間法を用いて求める．このとき，得られた数値が所定の誤差内に収束するまで反復する．

ここに，Aitken-Neville の逐次補間法の効率を良くするために，Step（1），（2）の間に次のような Step（3）を入れてもよい．

Step（3） 得られた差分商列を，分点 x_m よりの距離の絶対値の小さいものより順になるように並らべ換える．絶対値が等しい場合には並らべ換えられた直前の分点 x_{r-1} に対する距離の符号の異なるものを先に選ぶ．

Fig. 2（次頁参照）は，データ点の数と，求められた近似微分値の精度との相関を示している．与えたデータ点の数は 20 点であり，実線は等間隔にデータが与えられた場合，破線は，不等間隔の場合である．丸め誤差は，1.0×10^{-18} であり，これは使用計算機 (NEAC 2200 モデル 300) の精度に関係している．

本アルゴリズムにより，n 個の差分商列を補間して近似微分値を求めたとすると，用いられた全データ点は $n+1$ 個となる．この近似微分値は，$n+1$ 個のデータ点により作成した Lagrange の補間多項式を分点で微分した値と同じになる．すなわち，$F(x)$ のLagrange の補間多項式を $P(x)$ とすると，

$$Z_{m,i} = \frac{P(x_i) - P(x_m)}{x_i - x_m} \tag{5}$$

となる．ここで，差分商列によって表わされた関数を考えると，式（3）より

$$G_m(x) = \frac{P(x) - P(x_m)}{x - x_m} \tag{6}$$

を得る．しかるに，$G_m(x)$ は，$P(x)$ より1次低い多項式であり，かつ式（2）を満足する．よって $G_m(x)$ は，差分商列 $z_{m,i}$ より作成した Lagrange 補間多項式にほかならない．したがって，ここで $x = x_m$ とし

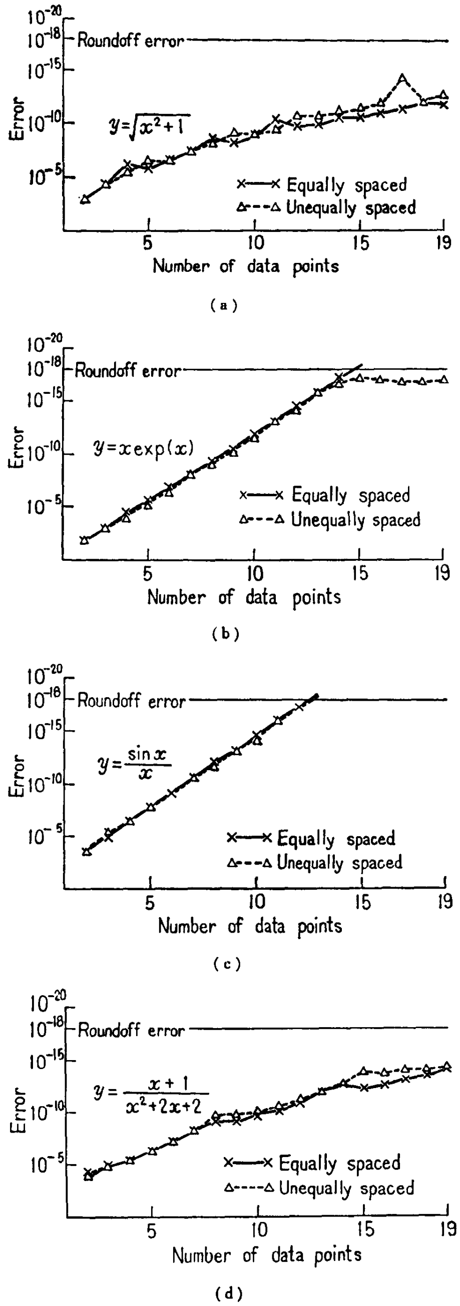


Fig. 2 The relation between accuracy and number of data points in first derivatives.

た値 $P'(x_m)=G_m(x_m)$ は，$x_{m,i}$ より Lagrange 補間(たとえば，Aitken-Neville の逐次補間法等) によって，$x=x_m$ に対して得られる値と正確に一致する．

ただし，これは差分商列の補間公式として，Lagrange の補間多項式に基礎をおくものを用いたためであって，他の種類の補間公式 (例えば Spline 関数による補間) を用いた場合には，また異なったものとなる．また，本アルゴリズムは，分点を増加させる時，具体的に Lagrange の補間多項式を作成する必要もなく，等間隔に分点が与えられた時に微分値を得るための係数列も必要としない．したがってこの方法は，従来の方法よりもさらに計算機に適した逐次的数値微分算法である．

4. 高階微分

差分商列を用いることにより，近似微分値が得られることは前述した．ここでは，差分商列によって求められた近似微分値を利用して，さらに高階の近似微分値も求められることを示す．

作成された差分商列と，それによって求められた近似微分値を新たなデータ点として，この点に対する差分商列を再び作成することを基本にしている．すなわち，差分商列の差分商列を考える．この手続きを n 回繰り返したものを，n 次の差分商列とする．

ここで，次の漸化式で与えられる関数について考える．

$$G_m{}^1(x)=\frac{F(x)-F(x_m)}{x-x_m} \qquad (7)$$

$$G_m{}^{n+1}(x)=\frac{G_m{}^n(x)-G_m{}^n(x_m)}{x-x_m} \qquad (8)$$

ここに，上つきの添字 $n+1$ は，結果的に $n+1$ 次の差分商列を表わす．

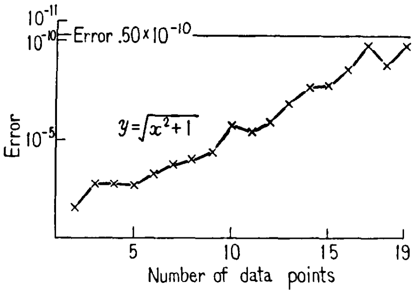
上式 (8) において，x_m に対して補間した値は，

$$G_m{}^n(x_m)=\frac{F^{(n)}(x_m)}{n!} \qquad (9)$$

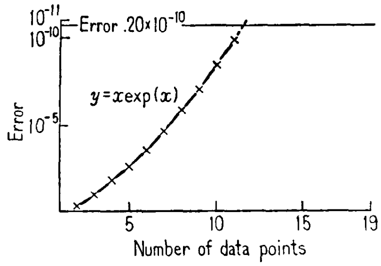
となり，x_m に対する n 次の差分商列において，同一の分点 x_m に対して補間をおこない，求められた値に n の階乗を乗じた値は，もとの関数 $F(x)$ の x_m における n 階の近似微分値となる．

Fig. 3 (次頁参照) は，2次の差分商列を補間して求めた2階の近似微分値の精度とデータ点の数との相関関係を示している．データは等間隔で 20 点与えられており，1次の差分商列の補間によって求められた微分値の誤差が，誤差として表示してある．

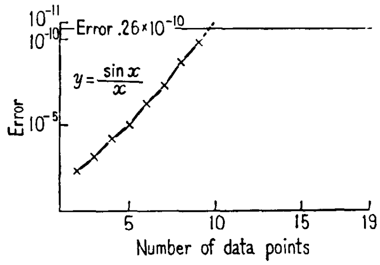
高階数値微分のアルゴリズムにおいても，1階の微分値を求めるアルゴリズムを繰り返すだけであり，高階数値微分における Bickley の関係式によりあらわさ



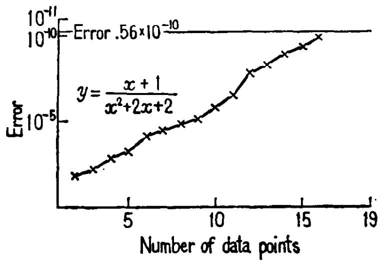
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig. 3 The relation between accuracy and number of data points in second derivatives.

れる係数列を記憶する必要はない．また，分点間隔が一定である必要もないので，汎用性に富む，有効なアルゴリズムである．

5. むすび

本論文では，与えられたデータから差分商列を作り，これを補間することにより新しい数値微分公式を求めた．

この方法は，従来の数値微分公式，例えば分点を等間隔としたときの前進差分，および中心差分による数値微分公式や，与えられた分点の間隔が等しくない場合の Lagrange の補間多項式を微分した数値微分公式などをすべて含んでいる．

また，これに逐次補間公式を適用することにより，新しい逐次的数値微分算法を得た．これは分点を増加させながら，より精度の高い近似微分値を得ようとするもので，最近の電子計算機に適した数値微分公式である．

次に，n 次の差分商列を補間することにより，n 階の近似微分値が求められることを示した．この方法を用いると，従来のように Bickley の関係式や Lagrange の補間多項式などを用いる必要がなく，また使用するデータ点を増加させるという意味で，精度を任意に向上させることができることからも，電子計算機に適した高階数値微分公式である．

最後に，この差分商列を補間するものとしては，その他，種々の補間公式（例えば，Spline 関数による補間公式など）が考えられるが，これは別の機会に述べる．

謝辞　日頃よりご指導頂く工学院大学の奥野治雄教授に深謝いたします．

参考文献

1) A. Ralston: A First Course in Numerical Analysis, McGRAW-HILL, New York, 76 (1965).
2) L. F. Richardson and J. A. Gaunt: The Deferred Approach to the Limit, Trans. Roy. Soc. London (1927).

(昭和52年10月18日受付)
(昭和53年3月30日再受付)