

7 数値微分，数値積分

赤外線や紫外・可視吸収スペクトル，NMR スペクトル，液クロやガスクロのチャートなどを解析する際に，必ずしもよく知られた関数形にあてはまらない曲線の微分や積分を求める必要が生じる場合がある。ここでは，そのような場合に用いる数値微分・数値積分の原理を学び，Excel を用いて実際の計算を行う。

この節では主に次の書物を参考にした。

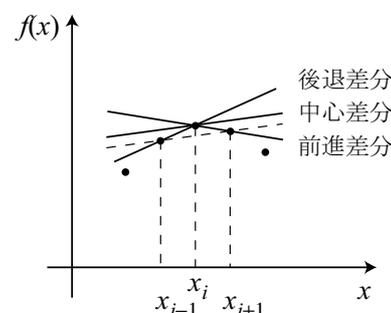
- 平田光穂，須田精二郎，竹本宜弘，『パソコンによる数値計算』，朝倉書店，東京，1982
- 趙 華安，『Excel による数値計算法』，共立出版，東京，2000

7.1 差分（数値微分）

関数 $f(x)$ を x で微分する。

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - F(x)}{\Delta x} \quad (7.1)$$

微分の定義は Δx を無限小にする操作を含んでいるが，一定間隔ごとの x における関数 $f(x)$ の値についての離散的なデータしかない場合，このような極限をとることはできない。そこで，微分の近似として差分を用いる。



7.1.1 前進差分近似

関数を Taylor 展開してみる。

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \dots \quad (7.2)$$

h は十分小さいが有限（無限小ではない）の正の値をもつとする。 $h^2 \ll h$ だから， h の 2 乗以上の項を無視して式変形すると，次の前進差分近似公式が得られる。

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (7.3)$$

7.1.2 後退差分近似

関数の Taylor 展開は，次のようなものも考えられる。

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(x) + \dots \quad (7.4)$$

同じく h の 2 乗以上の項を無視して式変形すると次の後退差分近似公式が得られる。

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad (7.5)$$

7.1.3 中心差分近似

今度は， h の 2 乗項まで考慮にいれ， h の 3 乗以上の項を無視することにする。(7.2) 式と (7.4) 式の差をとると， h の 2 乗項はキャンセルされてしまう。

$$f(x+h) - f(x-h) \approx 2hf'(x) \quad (7.6)$$

この式を変形すると，次の中心差分近似公式が得られる。

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (7.7)$$

ちなみに，二階微分の中心差分近似公式は次のようになる。各自で確かめてみる。

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \quad (7.8)$$

7.2 Excel による差分計算の例

ここでは，解析的に微分可能な関数を用いて差分計算の例を示し，近似の精度について考える。

$$f(x) = \sin x \quad (7.9)$$

$$f'(x) = \cos x \quad (7.10)$$

この関数について， $0 \leq x \leq \pi$ の範囲で $h = \pi/100$ として計算してみる。

Excel 2007

1. Web ページから，微分説明用の CSV ファイルをダウンロードし，Excel で開く。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	h	x	f(x)	f'(x)	前進	差の二乗	後退	差の二乗	中心	差の二乗
2										
3	差の二乗平均									
4	前進									
5										
6	後退									
7										
8	中心									
9										

2. 課題提出用のファイル名で，Excel 形式で保存する。これ以降，こまめに上書き保存すること。
3. ワークシートの下タブ (bibun) をダブルクリックし，ワークシート名を「微分説明」とする。
4. A2 は数式「=PI()/100」を入力。
[Excel 関数の説明] 「PI」は， π の数値を返す関数で，引数はないがカッコ「()」は必要である。
5. B2 は数値「0」を入力，B3 は「=B2+\$A\$2」とする。
6. B3 を B4:B102 の範囲にコピーすれば，0.1 刻みで $0 \sim \pi$ までの範囲の数列ができる。このように計算したとき，B102 は正確に π の値になるだろうか？
7. C 列と D 列は，B 列を x の値として参照して適当な数式を入れる (例えば C2 は「=SIN(B2)」)。
8. E 列は前進差分。E2 は「=(C3-C2)/\$A\$2」で，これを E3:E101 にコピー & ペーストする (E102 は意味がない)。
9. G 列は後退差分。G3 は「=(C3-C2)/\$A\$2」で，これを G4:G102 にコピー & ペーストする (G2 は意味がない)。
10. I 列は中心差分。I3 は「=(C4-C2)/2/\$A\$2」で，これを I4:I101 にコピー & ペーストする (I2, I102 は意味がない)。
11. 3 つの差分近似公式の精度を比較するためグラフを描いてみる。
 - (i) [Ctrl] キーを押しながら，マウスのクリックで，B 列，D 列，G 列，E 列，I 列を選択
 - (ii) メニュー [挿入] [グラフ] グラフの種類は「散布図」，形式は右下の折れ線を選ぶ [完了]。
 - (iii) グラフでは違いがあまりわからない。
12. 今度は，それぞれ，差の二乗の平均を計算する。
 - (i) F2:F101 は E 列と D 列の差の 2 乗を計算 (F2 なら「=(E2-D2)^2」で「^2」は二乗の意味)。
 - (ii) H3:H102 は G 列と D 列の差の 2 乗を計算。
 - (iii) J3:J101 は I 列と D 列の差の 2 乗を計算。

- (iv) データが共通して存在する 3~101 行目のみに着目することにして, A5 には F3:F101 の平均, A7 には H3:H101 の平均, A9 には J3:J101 の平均を入れる (「AVERAGE」を使う)
- (v) 中心差分が, 前進差分や後退差分に比べて精度がよいことがわかる。

7.3 数値積分

x_0 から x_n まで, h 間隔に $(n+1)$ 個のデータ点があり, $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ がわかっているとして, 次の定積分を計算したい。

$$I = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \tag{7.11}$$

7.3.1 台形法

$f(x_i)$ と $f(x_{i+1})$ を直線で結んで近似する。個々の区間は台形になるので, 面積が簡単に計算できる。

$$J_i = \frac{h}{2} (f(x_i) + f(x_{i+1})) \tag{7.12}$$

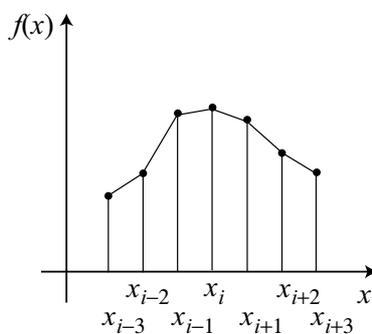
すると, 全範囲の積分は次のように書ける。

$$I = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} J_i \tag{7.13}$$

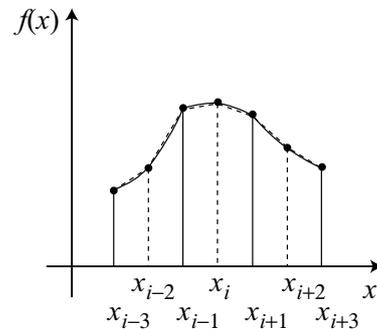
したがって, 全体の積分は次のように計算できる。

$$I = \frac{h}{2} \left(f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right) \tag{7.14}$$

カッコの中は, はじめと終わりの点はそのまま, 途中の点は 2 倍して和をとることになる。これを台形公式という。



台形法



(i は奇数 $2j+1$)

シンブソン法

7.3.2 シンプソン法

$f(x_{i-1}), f(x_i), f(x_{i+1})$ の 3 点を 2 次関数で結んで近似する。 n が偶数である必要がある。

$$f(x) = ax^2 + bx + c \tag{7.15}$$

$$K_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} (ax^2 + bx + c)dx = \left[\frac{a}{3}x^3 + \frac{b}{2}x^2 + cx \right]_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \tag{7.16}$$

ただし, $x_{i-1} = x_i - h$ であり, また $x_{i+1} = x_i + h$ なので次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} K_i &= \frac{a}{3} \left((x_i + h)^3 - (x_i - h)^3 \right) + \frac{b}{2} \left((x_i + h)^2 - (x_i - h)^2 \right) + c \left((x_i + h) - (x_i - h) \right) \\ &= \frac{2a}{3} (3hx_i^2 + h^3) + 2bhx_i + 2ch \\ &= \frac{h}{3} (6ax_i^2 + 2ah^2 + 6bx_i + 6c) \end{aligned} \tag{7.17}$$

また、次の関係に注意する。

$$f(x_{i-1}) = a(x_i - h)^2 + b(x_i - h) + c \quad (7.18)$$

$$f(x_i) = ax_i^2 + bx_i + c \quad (7.19)$$

$$f(x_{i+1}) = a(x_i + h)^2 + b(x_i + h) + c \quad (7.20)$$

ここで、次のような計算を行う。

$$f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1}) = 6ax_i^2 + 2ah^2 + 6bx_i + 6c \quad (7.21)$$

これは (7.17) 式の 3 行目のカッコ内と同じなので、 K_i が次のように書けることになる。

$$K_i = \frac{h}{3} (f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1})) \quad (7.22)$$

すると、全範囲の積分は次のように書ける。

$$I = \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \sum_{j=0}^{(n/2)-1} K_{2j+1} \quad (7.23)$$

つまり、奇数番目を中心にした K_i をすべてたし合わせることになる。(7.22) 式と (7.23) 式をまとめる。

$$I = \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4 \sum_{k=1}^{n/2} f(x_{2k-1}) + 2 \sum_{k=1}^{(n/2)-1} f(x_{2k}) + f(x_n) \right) \quad (7.24)$$

カッコの中は、はじめと終わりの点はそのままで、奇数番目は 4 倍、偶数番目は 2 倍して和をとることになる。これをシンプソンの公式という。

7.4 Excel による積分計算の例

ここでは、解析的に積分可能な関数を用いて台形法とシンプソン法による数値積分の例を示し、近似の精度について考える。

$$f(x) = \sin x \quad (7.25)$$

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx = [-\cos x]_0^{\pi/2} = 1 \quad (7.26)$$

この関数について、 $n = 100, h = \pi/200$ として計算してみる。

Excel 2007

- 準備

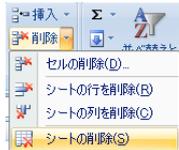
1. Web ページから積分説明用の CSV ファイルをダウンロードし、Excel で開く。

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	x0		i	x	f(x)	台形用	シンプソン用	
2	xn							
3	n							
4	h							
5								
6	積分							
7	解析							
8	台形							
9	シンプソン							
10								
11	差							
12	台形							
13	シンプソン							

2. 「ホーム」タブ 「セル」グループ 「書式」の右の で「シートの整理」の「シートの移動またはコピー」を選択し、移動先ブック名は「微分説明」のあるファイル(課題提出用ファイル)、「挿入先」は「(末尾に移動)」で「コピーを作成する」をチェックせずに「OK」。



ちなみに、新しいワークシートを挿入する場合は、「ホーム」タブ 「セル」グループ 「挿入」の右の で「シートの挿入」。ワークシートを削除したいときには、「ホーム」タブ 「セル」グループ 「削除」の右の で「シートの削除」。



3. ワークシートの名前を「sekibun」から「積分説明」に変更。以下の操作は「積分説明」ワークシートで行う。
 4. B1には数値「0」、B2には数式「=PI()/2」、B3には数値「100」。
 5. B4には「=(B2-B1)/B3」。
 6. B7には、式で計算した積分値を Excel の数式で計算する。
 7. C2は数値「0」、C3には「1」を入力し、フィルを用いて C4:C102のセルに 2 ~ 100 の数値をうめる。
 8. D2は「=B1」、D3は「=D2+\$B\$4」、そして D4:D102に D3をコピー & ペーストする。
 9. E2:E102には、D列の値を x として $f(x)$ を計算する。
- 台形法
 1. F2:F102は、台形法の公式である (7.14) 式のカッコの中を計算するための数列を入れる。
 - (i) F2は「=E2」。
 - (ii) F3は「=2*E3」。
 - (iii) F4:F101はF3をコピー & ペースト。
 - (iv) F102は「=E102」。
 2. B8に台形法による積分の結果を求める。F2:F102の和(「SUM」を使う)に $h/2$ をかければよい ($h/2$ もセル参照で求める)。
 - シンプソン法
 1. G2:G102は、シンプソン法の公式である (7.24) 式のカッコの中を計算するための数列を入れる。
 - (i) G2は「=E2」。
 - (ii) G102は「=E102」。
 - (iii) G3は「=IF(MOD(C3,2)=1,4*E3,2*E3)」。
 - (iv) F4:F101はF3をコピー & ペースト。

関数「IF」の引数(カッコの中)は、コンマで区切られた3つの部分からなる。

はじめの部分は条件で、この場合は「MOD(C2,2)が1に等しい」(「MOD(C2,2)」はC2の値を2で割った余り)。

次は条件が成立する場合に行う計算(処理)で、この場合は「関数値を4倍する(奇数

番目)」。

次は条件が成立しない場合の計算(処理)で、この場合は「関数値を2倍する(偶数番目)」。

2. B9 に Simpson 法による積分の結果を求める。G2:G102 の和(「SUM」を使う)に $h/3$ をかければよい($h/3$ もセル参照で求める)。

- 台形法と Simpson 法の比較

1. B12 には台形法と解析的结果の差の絶対値を表示する。つまり、「=ABS(B8-B7)」。

[Excel 関数の説明] 「ABS」は絶対値を求める関数。

2. B13 には Simpson 法と解析的结果の差の絶対値を表示する。
-