数値微分

微分方程式の離散化などの場面では，$f'(a)$ の近似値を刻み幅 h の離散点での関数値 $f(a+jh)$ $(j=0,\pm 1,\ldots)$ から求める必要がある．離散点の位置 $x_k=a+j_kh$ $(k=1,\ldots,n)$ が与えられたとき，できるだけ大きな次数 p に対して

$$\sum_{k=1}^{n} w_k f(a+j_kh) = f'(a) + \mathrm{O}(h^p) \qquad (h \to 0) \tag{1}$$

が成立するように重み w_k を定めるのが普通である．

例 1 引き続く 3 点 $(n=3,\ j_1=-1,\ j_2=0,\ j_3=1)$ の場合，

$$\begin{aligned} f(a+h) &= f(a)+f'(a)h+f''(a)h^2/2!+f'''(a)h^3/3!+f^{(4)}(a)h^4/4!+\cdots, \\ f(a-h) &= f(a)-f'(a)h+f''(a)h^2/2!-f'''(a)h^3/3!+f^{(4)}(a)h^4/4!+\cdots \end{aligned}$$

と Taylor 展開されるので，

$$\begin{aligned} &w_1f(a-h)+w_2f(a)+w_3f(a+h) \\ &=(w_1+w_2+w_3)f(a)+(-w_1+w_3)f'(a)h+(w_1+w_3)f''(a)h^2/2! \\ &\quad +(-w_1+w_3)f'''(a)h^3/3!+(w_1+w_3)f^{(4)}(a)h^4/4!+\cdots \end{aligned}$$

となる．係数に着目して，

$$w_1+w_2+w_3=0, \quad -w_1+w_3=1/h, \quad w_1+w_3=0$$

から $w_1=-1/(2h),\ w_2=0,\ w_3=1/(2h)$ を得る．すなわち，

$$[-f(a-h)+f(a+h)]/(2h) = f'(a)+f'''(a)h^2/3!+\mathrm{O}(h^4). \tag{2}$$

これは，**中心差分近似**と呼ばれる．これに対し，$f'(a)$ の定義から見て自然な近似式

$$[f(a+h)-f(a)]/h = f'(a)+f''(a)h/2+\mathrm{O}(h^2) \tag{3}$$

は，**前進差分近似**と呼ばれる． □

差分近似式 (1) を使用するときには，丸め誤差の影響も考慮に入れる必要がある．例えば，$f(x)=\exp x$, $a=1.3$ について，$f'(a)$ を前進差分と中心差分で近似したときの誤差は図 1 のようになる．h を $h=1,1/2,1/4,\ldots$ のように小さくしていくとき，はじめのうちは誤差が減少するが，あるところから後はかえって増大する．

この挙動は，前進差分の場合，以下のように説明できる．微分を差分で置き換えたことによる誤差 (打ち切り誤差) は (3) で与えられる．一方，$f(a+h)$ や $f(a)$ の計算の際に生じる丸め誤差 δf は $|f(a)|\varepsilon_{\mathrm{M}}$ 程度 (ε_{M} はマシンエプシロンで，図 1 では $\varepsilon_{\mathrm{M}}=2^{-24}$) なの

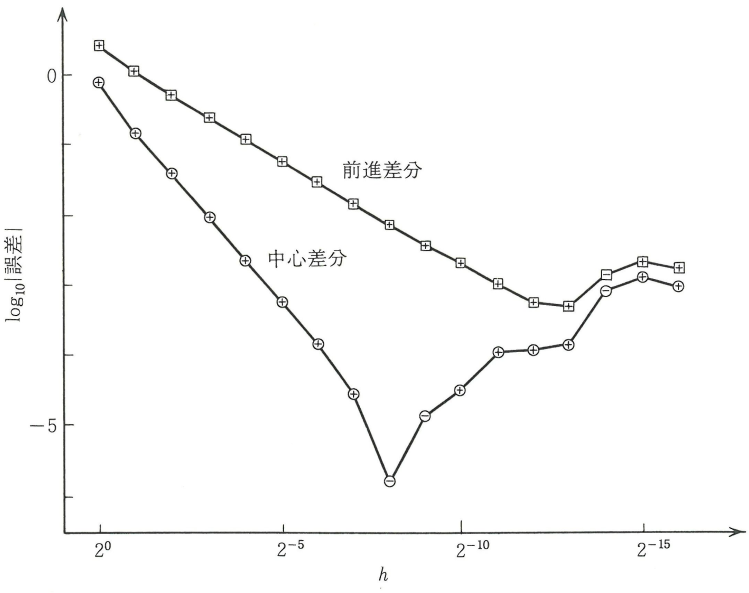

図 1: 前進差分 (□) と中心差分 (○) 近似による数値微分
$f(x) = \exp x$, $a = 1.3$ (2 進 24 桁 0 捨 1 入による)

で，前進差分近似に含まれる丸め誤差は $2\,\delta f/h \simeq 2|f(a)|\varepsilon_{\mathrm{M}}/h$ 程度である．両者をあわせて，誤差の大きさは，

$$E(h) = \frac{h|f''(a)|}{2} + \frac{2\,\delta f}{h} \simeq \frac{h|f''(a)|}{2} + \frac{2|f(a)|\varepsilon_{\mathrm{M}}}{h}$$

程度と抑えられる．$E(h)$ は h が

$$h_{\mathrm{opt}} = 2\sqrt{\delta f/|f''(a)|} \simeq 2\sqrt{|f(a)|\varepsilon_{\mathrm{M}}/|f''(a)|}$$

のとき最小値

$$E(h_{\mathrm{opt}}) = 2\sqrt{\delta f|f''(a)|} \simeq 2\sqrt{|f(a)f''(a)|\varepsilon_{\mathrm{M}}}$$

をとる．この式は，もし $f(a)$, $f''(a)$ が 1 程度の大きさなら，h_{opt} は $\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{M}}}$ 程度であって，前進差分近似の有効桁数は演算桁数の高々半分くらいであることを示している．

多変数関数 $f(\boldsymbol{x})$ ($\boldsymbol{x} = (x_j \mid j = 1, \ldots, n)$) の**勾配**

$$\nabla f = (\partial f/\partial x_j \mid j = 1, \ldots, n)$$

を求めるには，例えば，各座標軸方向に刻み幅 h_j を定め，

$$\partial f/\partial x_j \simeq [f(\boldsymbol{x} + h_j\boldsymbol{e}_j) - f(\boldsymbol{x})]/h_j$$

(ただし $\boldsymbol{e}_j$ は第 j 単位ベクトル) と近似する．このとき，$n+1$ 回の関数値計算で ∇f が計算される．

以上 (2013-10-18)

[この資料は，杉原正顯, 室田一雄，数値計算法の数理，10 章 (岩波書店, 1994) の記述に基づいて編集したものである．]