0.1　追記事項・課題14について

模範解答、というか出題者による解説。

> **もんだい**
>
> $f(x) = \cos\cos\cos x$ の区間 $[0, 4]$ における導関数の値を計算し、解析解と比較する。
> また、点 $x = 2$ における導関数の値と解析解の値を比較し、数値微分における幅 Δ の大きさと誤差との関係を調べ、考察する。

0.1.1　解析解

解析的に求めた導関数は、

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= -\sin\cos\cos(x)\sin\cos(x)\sin(x) &\quad (1)\\
f''(x) &= -\cos\cos\cos(x)\sin\cos(x)\sin(x)\sin\cos(x)\sin(x)\\
&\quad +\sin\cos\cos(x)\cos\cos(x)\sin(x)\sin(x)\\
&\quad -\sin\cos\cos(x)\sin\cos(x)\cos(x) &\quad (2)
\end{aligned}
$$

自分で出題しといて何だがめんどくさい。

0.1.2　差分式の原理

この課題で使用を指示したのは次の2式：

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= \frac{f(x+\Delta)+f(x)}{\Delta} &\quad (3)\\
&= \frac{f(x+\Delta)-f(x-\Delta)}{2\Delta} &\quad (4)
\end{aligned}
$$

それぞれ前進差分、中心差分。

この式に登場する $f(x \pm \Delta)$ をテイラー展開してみると、

$$
\begin{aligned}
f(x\pm\Delta) &= f(x) \pm f'(x)\Delta \mp \frac{1}{2}f''(x)\Delta^2 \pm O(\Delta^3)\\
\longrightarrow \frac{f(x+\Delta)-f(x)}{\Delta} &= f'(x) - \frac{1}{2}f''(x)\Delta + O(\Delta^2) &\quad (5)
\end{aligned}
$$

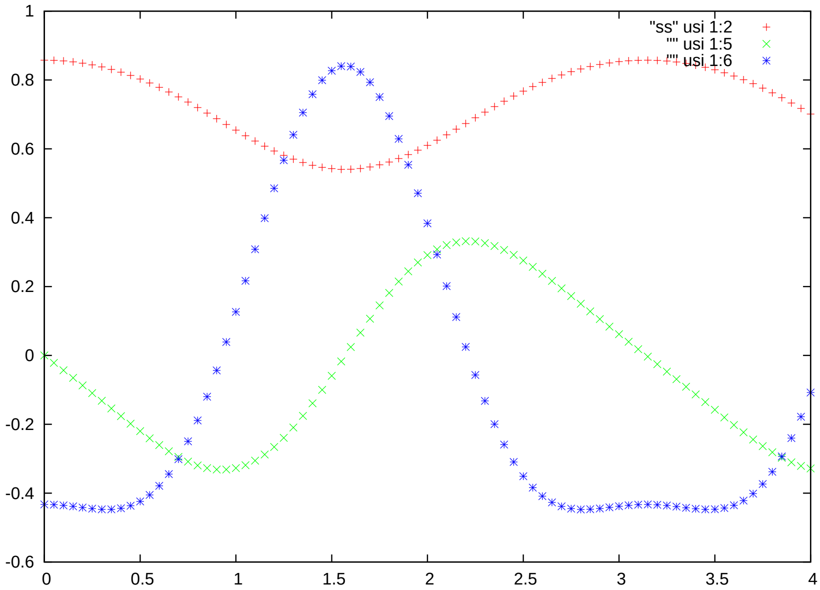

図 1: 赤：f, 緑：f', 青：f''

$$\frac{f(x+\Delta)-f(x-\Delta)}{2\Delta} = \frac{2f'(x)\Delta+\frac{1}{3}f'''(x)\Delta^3+O(\Delta^5)}{2\Delta} = f'(x)+\frac{1}{6}f'''(x)\Delta^2+O(\Delta^4) \quad (6)$$

$f(x)$ の項が打ち消し合うのはどちらも同じだが、中心差分ではそれに加えて偶数階 (2 階、4 階、...) の項が消える。よって、前進差分では最大の誤差項が Δ のオーダーなのに対し、中心差分では Δ^2 となる。ゆえに中心差分ではより大きな Δ で前進差分と同等の精度が得られる。¡/p¿

¡p¿

また、前進差分の誤差項は f'' に比例するが、誤差のグラフを書いてみるとその形は実際に f'' と同じになる。

0.1.3 離散化幅と桁落ち

課題 (2) での Δ と誤差の関係は、両対数グラフ上で直線的に「落ちて上がる」グラフになる。「落ちる」速度は誤差の最大項の次数 (前進差分では Δ^1 なので傾き 1)、「上がる」速度は桁落ちの速度で Δ^{-1} になる。前進差分と中心差分では誤差の最大項の次数が異なり、後者は前者の 2 倍の速度で減少する。

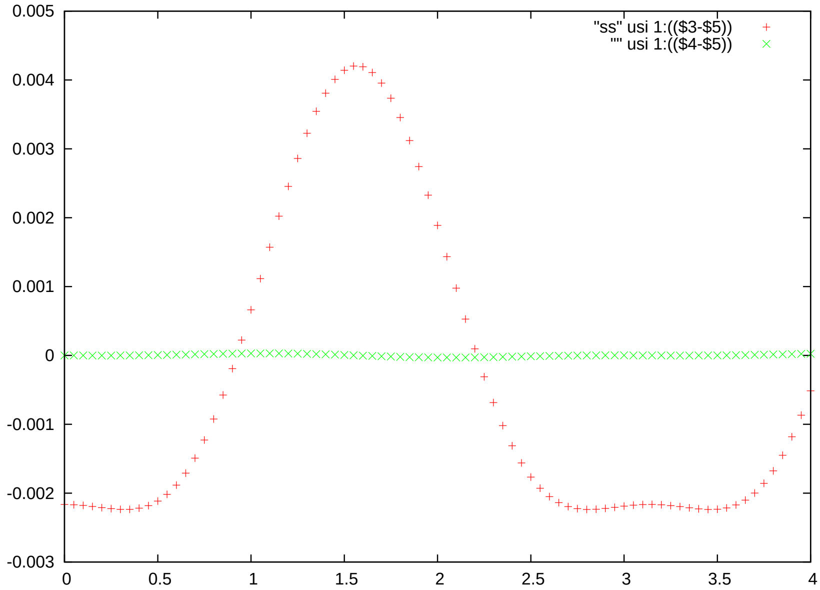

図 2: 解析解との差のグラフ（赤：前進差分, 緑：中心差分）

しかし桁落ちによる誤差の増加の様子はどちらの方法でもあまり変わらない。桁落ちの発生は差分 (分子) の大きさで決まるからである。素早く減少すればそれだけ早くに桁落ちが起こる。

とはいえ、Δ が大きい場合は桁落ちによる誤差はわずか ($1/\Delta$ が小さいから) なので、中心差分の方がやっぱりおいしい。

なお、計算に用いる実数型変数のサイズを変えると「上がる」部分の様子が変わる。有効数字が増えると上昇が起きる時期が遅れるので、このことからも「上がり」は桁落ちが原因であろう事が推測できる。

0.1.4　ldexp 関数

math.h には ldexp という関数がある。機能は次の通り：double 型データ d, int 型データ i について、

$$
\begin{aligned}
d &= B \times 2^E \\
\longrightarrow \mathrm{ldexp}(d, i) &= d \times 2^i \\
&= B \times 2^{E+i}.
\end{aligned}
$$

指数部分を直接いじることで実数型データの「2 の冪乗倍」を正確に計算している。

微分計算時の割算にこの関数を使えば除算そのものによる誤差は最小になるはずである。つまり、$\Delta = 2^{-i} = \mathrm{ldexp}(1, -i)$ とし、除算を $\mathrm{ldexp}(df, i)$ とする。10 の冪乗で直接除算する (div10) のと、2 の冪乗で ldexp を用いる (ldexp) のを比べると、除算による誤差は極めてわずかに見える。

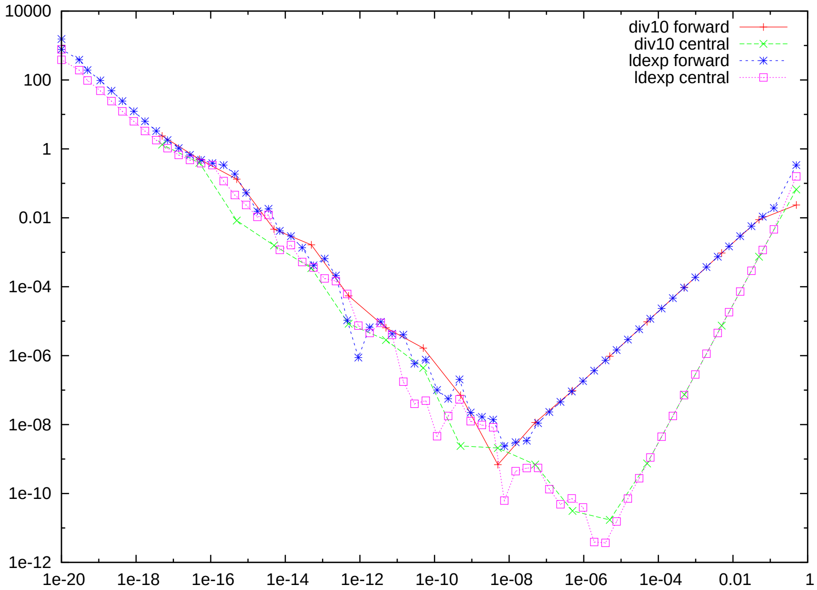

図 3: $x = 2$ での誤差の変遷

0.2 差分式いろいろ

差分式の仕組を理解すれば、好きなだけ誤差の次数を減らした式を自分で構成できる。また、1 階導関数だけでなく、2 階・3 階やそれ以上の高階導関数を求める差分式も自由自在にイケる。

で、肝心の仕組の方だが、連立方程式の応用である。関数 $f(x+\Delta)$ のテイラー展開

$$f(x+\Delta) = f(x) + f'(x)\Delta + f''(x)\frac{\Delta^2}{2} + \ldots \tag{7}$$

は、$f^{(n)}(x)$ を変数、$\Delta^n/n!$ を係数とした線形方程式とみなせる。$\{f^{(n)}(x)\}$ のうちいくつかを消去したい場合は、Δ が異なる式を連立させ、消した

い変数のみを考えて連立方程式を解けばよい。このとき、連立方程式のパラメータは左辺値 $f(x+\Delta)$ の乗数である。

例えば前進差分では式を 2 つ用いて変数 $f(x)$ を消している。中心差分では、式を 2 つで変数を 2 つ $(f(x), f''(x))$ 消しているが、これは対称性により全ての偶数階項が一度に消えるからである。同様にして全ての奇数階項を消すこともできる：

$$\frac{f(x+\Delta)-2f(x)+f(x-\Delta)}{\Delta^2} = f''(x)+\frac{1}{12}f''''(x)\Delta^2+O(\Delta^4) \tag{8}$$

これは 2 階微分の近似を与える。

この式を、次の式から引く：

$$\frac{f(x+2\Delta)-2f(x)+f(x-2\Delta)}{4\Delta^2} = f''(x)+\frac{4}{12}f''''(x)\Delta^2+O(\Delta^4) \tag{9}$$

$$\begin{aligned} & \frac{f(x+2\Delta)-4f(x+\Delta)+6f(x)-4f(x-\Delta)+f(x-2\Delta)}{4\Delta^2} \\ = \; & \frac{3}{12}f''''(x)\Delta^2+O(\Delta^4) \\ f''''(x) \sim \; & \frac{f(x+2\Delta)-4f(x+\Delta)+6f(x)-4f(x-\Delta)+f(x-2\Delta)}{\Delta^4} \end{aligned}$$

こんな感じでイモヅル式に高階導関数の近似が得られる。

中心差分形式の高階導関数

何となく勘づいた人もいるかもしれないが、中心差分の形をした高階導関数の差分式の係数は 2 項係数になる。あらわに書けば、

$$f^{(N)}(x) \sim \frac{1}{\Delta^N}\sum_{i=0}^{N}(-1)^i {}_N C_i f\left(x+(N/2-i)\Delta\right). \tag{10}$$

この事実を説明してみよう。

まず、1 階微分を与える中心差分の式を次のように書く：

$$f'(x) \sim \frac{f\left(x+\frac{\Delta}{2}\right)-f\left(x-\frac{\Delta}{2}\right)}{\Delta} \tag{11}$$

$$= \frac{\uparrow_{\Delta/2}-\downarrow_{\Delta/2}}{\Delta}f(x) \tag{12}$$

ここで、記号 $\uparrow_{\Delta/2}$ は $\uparrow_{\Delta/2}\ f(y)\ =\ f(y+\Delta/2)$ の変換を、$\downarrow_{\Delta/2}$ は $\downarrow_{\Delta/2}$ $f(y)=f(y-\Delta/2)$ の変換を行う「演算子」であるとする[1]。これらは一方が他方の逆演算子、すなわち $\downarrow_{\Delta/2}\uparrow_{\Delta/2} f(y) =\uparrow_{\Delta/2}\downarrow_{\Delta/2} f(y) = f(y)$ であり、また可換である。すると、次の形の式に対して二項定理が成り立つ：

$$\frac{\left(\uparrow_{\Delta/2}-\downarrow_{\Delta/2}\right)^N}{\Delta^N}f(x) \quad = \quad \frac{1}{\Delta^N}\sum_{i=0}^{N}(-1)^i{}_NC_i\left(\uparrow_{\Delta/2}\right)^{N-i}\left(\downarrow_{\Delta/2}\right)^i f(x)$$

さて、

$$D_{\Delta/2} := \frac{\uparrow_{\Delta/2}-\downarrow_{\Delta/2}}{\Delta} \tag{13}$$

で「微分演算子」を定義すると、先の式はまさしく高階微分を与える。すなわち

$$\begin{aligned} f^{(N)}(x) &\sim D_{\Delta/2}^N f(x) \qquad (14)\\ &= \left(\frac{\uparrow_{\Delta/2}-\downarrow_{\Delta/2}}{\Delta}\right)^N f(x) \qquad (15)\\ &= \frac{1}{\Delta^N}\sum_{i=0}^{N}(-1)^i{}_NC_i\left(\uparrow_{\Delta/2}\right)^{N-i}\left(\downarrow_{\Delta/2}\right)^i f(x) \qquad (16)\end{aligned}$$

そして、

$$\left(\uparrow_{\Delta/2}\right)^{N-i}\left(\downarrow_{\Delta/2}\right)^i f(x) = f\left(x+(N-i)\Delta/2-i\Delta/2\right) = f\left(x+(N/2-i)\Delta\right) \tag{17}$$

が成り立つことから、確かに前述の二項係数の式が成り立っている。

[1]「写像」の方がより適切かもね