

第6章 数値積分と数値微分

数値計算では，微分積分は，通常 離散的に与えられたデータを基に数値的に行われる．まず簡単な例を示そう．関数 $u(x)$ は，図 6.1 に示すように，等間隔の計算点 $\dots, x_{-1}, x_0, x_1, x_2, \dots$ における関数値 $\dots, u_{-1}, u_0, u_1, u_2, \dots$ で離散的 (discrete) に与えられるものとする． $u_i = u(x_i)$, ($i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)，計算点の間隔 $x_{i+1} - x_i = h = \text{const.}$ とする．これらの関数値を直線で結ぶことにすれば，区間 $x_0 < x < x_1$ 内の点 x における $u(x)$ の値は 1 次補間式

$$u(x) = \frac{x_1 - x}{h} u_0 + \frac{x - x_0}{h} u_1 + \frac{1}{2} (x - x_0)(x - x_1) u_0'' + \dots$$

から求められ，また微分値と点 x_0 から x までの積分値はこの式を微分または積分した次式から求められる．

$$u'(x) = \frac{u_1 - u_0}{h} + \frac{1}{2} (2x - x_0 - x_1) u_0'' + \dots$$

$$\int_{x_0}^x u(x) dx = \frac{x - x_0}{2} (u_0 + u(x)) - \frac{(x - x_0)^3}{12} u_0'' + \dots$$

数値微分の式は明らかで，また数値積分の式も後述の台形則より明らかである．この数値微分と数値積分の式は，任意の点 x に対するものであるが，通常用いられるものは次の計算点 $x = x_0, x_1$ に対するものである．

$$u_0' = u_1' = \frac{u_1 - u_0}{h} + O(h),$$

$$\int_{x_0}^{x_1} u(x) dx = \frac{1}{2} h (u_0 + u_1) + O(h^3)$$

これらの式は，[補間，微分，積分の厳密値]=[離散近似式]+[打ち切り誤差]という形で表されており，右辺の最後の部分は打ち切り誤差 (truncation error) と呼ばれ次のようにして求められる．すなわちこれらの式の

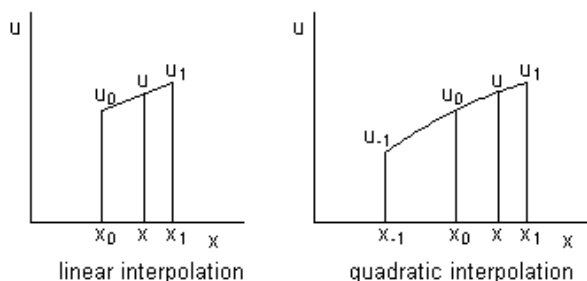


図 6.1: 離散関数の微分と積分

両辺に点 x_0 まわりの Taylor 展開

$$\begin{aligned} u(x) &= u_0 + (x-x_0)u'_0 + \frac{1}{2!}(x-x_0)^2 u''_0 + \frac{1}{3!}(x-x_0)^3 u'''_0 + \dots \\ u'(x) &= u'_0 + (x-x_0)u''_0 + \frac{1}{2!}(x-x_0)^2 u'''_0 + \dots \\ \int_{x_0}^x u(x)dx &= (x-x_0)u_0 + \frac{1}{2!}(x-x_0)^2 u'_0 + \frac{1}{3!}(x-x_0)^3 u''_0 + \frac{1}{4!}(x-x_0)^4 u'''_0 + \dots \\ u_i &= u_0 + ihu'_0 + \frac{1}{2!}(ih)^2 u''_0 + \frac{1}{3!}(ih)^3 u'''_0 + \dots \quad (i = 1, 2, \dots) \end{aligned}$$

を代入すれば, 1 次補間とそれに関連する式では u_0, u'_0 を含む項は両辺同じになり, それよりも高次の項が打ち切り誤差になる. 上式では u''_0 の項のみ残されそれ以降は省略されている. 打ち切り誤差は, 離散近似式を, ある項で打ち切った Taylor 展開式を基に導いたために生じた誤差と解釈することができ, 名称もこれに由来する. 打ち切り誤差の項に含まれる $x-x_0, x-x_1$ などは計算点の間隔 h の大きさの小さな値で, 打ち切り誤差はそれらの次数により $O(h^2), O(h^3)$ のように表され, その離散近似式はそれぞれ 2 次精度の式, 3 次精度の式と言われる.

次に離散的に与えられた 3 つの関数値 u_{-1}, u_0, u_1 を通る放物線を考えれば, 区間 $x_{-1} < x < x_1$ 内の点 x における $u(x)$ の値は 2 次補間式

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{1}{h^2} \left\{ \frac{1}{2}(x-x_0)(x-x_1)u_{-1} - (x-x_1)(x-x_0)u_0 + \frac{1}{2}(x-x_1)(x-x_0)u_1 \right\} \\ &\quad + \frac{1}{3!}(x-x_1)(x-x_0)(x-x_1)u'''_0 + \dots \end{aligned}$$

から求められ, また微分値と積分値は次式から求められる.

$$\begin{aligned} u'(x) &= \frac{1}{2h^2} \{ (2x-x_0-x_1)u_{-1} - 2(2x-x_1-x_0)u_0 + (2x-x_1-x_0)u_1 \} \\ &\quad + \frac{1}{3!} \{ (x-x_0)(x-x_1) + (x-x_1)(x-x_0) + (x-x_1)(x-x_0) \} u'''_0 + \dots \\ \int_{x_{-1}}^x u(x)dx &= \frac{(x-x_1)^2}{12h^2} \{ (2x-x_0-x_1)(u_{-1}+u_1) - 4(x-x_1-h)u_0 \} - \frac{(x-x_1)(x-x_1)}{2h} u_0 \\ &\quad + \frac{1}{4!}(x-x_1)^2(x-x_1)^2 u'''_0 + \dots \end{aligned}$$

また点 x が計算点の場合には次のようになる.

$$\begin{aligned} u'_0 &= \frac{1}{2h}(-u_{-1}+u_1) + O(h^2) \\ u'_1 &= \frac{1}{2h}(u_{-1}-4u_0+3u_1) + O(h^2) \\ \int_{-1}^1 u(x)dx &= \frac{1}{3}h(u_{-1}+4u_0+u_1) + O(h^4) \end{aligned}$$

離散近似式は一般に微分すると精度が下がり, 積分すると精度が上がる. 補間式の誤差は計算点に近づくにつれ減少し計算点ではゼロになる. また数値積分の誤差は, 上記のものは 1 区間のもので, 多区間では 1 次低くなる. 以下本章には, 第 1 節と第 2 節に数値積分, 第 3 節と第 4 節に数値微分について述べる. 第 1 節と第 3 節には多項式近似を基にした通常使われている公式を説明する. また第 2 節と第 4 節には前 2 章に述べた補間式ないし近似関数を積分または微分することによって得られたものを示す. その多くは, 普通の多項式近似を基にした公式が適用できないか, あるいは適用しても良い結果が期待できない場合に用いられるものである.

6.1 数値積分

数値積分 (numerical integration, numerical quadrature) は、定積分

$$\int_a^b u(x) dx$$

を数値的に行うものである。被積分関数 $u(x)$ は有界、一価で、適当に滑らかに繋ぐことのできる点列 u_i , ($i = 0, 1, 2, \dots, n$) として離散的 (discrete) に与えられ、また積分区間 $[a, b]$ は通常いくつかの小区間に分割され、各小区間ごとに数値積分が行われる。関数 $u(x)$ が不連続性¹を持つ場合には、区間の接点に不連続点があるように積分区間を分割すべきである。ここでは始めに不等間隔計算点にも適用できる未定係数法による数値積分について述べ、次に等間隔の場合にのみ適用できる Newton-Cotes 求積法について述べる。未定係数法ではその都度 連立 1 次方程式を解かなければならないが、等間隔の場合にはこの連立 1 次方程式の係数行列と定数ベクトルは既知になり、これを解けば Newton-Cotes 求積法の公式が導かれる。最後に Gauss-Legendre 求積法あるいは単に Gauss 法と呼ばれる方法について述べる。この方法では Legendre 多項式のゼロ点の u_i を用いなければならないが、少ない計算点で高精度の結果を得ることができる。

6.1.1 未定係数法による数値積分

関数 $u(x)$ が u_0, u_1, \dots, u_n で与えられるものとする。 $u_i = u(x_i)$, $x_0 = a < x_1 < \dots < x_n = b$ 。これらの $n+1$ 個のデータを通る n 次多項式 $p_n(x)$ は一意的に定まる。未定係数法は上記の定積分を多項式を積分することによって近似的に求めるものである。一般に n 次多項式は次のよう書くことができる。

$$p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$$

図 6.2 は、この多項式の定積分すなわち n 次曲線の下での面積が、高さ u_0, u_1, \dots, u_n にそれぞれ適切な幅 A_0, A_1, \dots, A_n を付与し、長方形の面積の和で表せることを示している。したがって次のように置くことができる。

$$\int_a^b p_n(x) dx = A_0p_n(x_0) + A_1p_n(x_1) + \dots + A_np_n(x_n) \tag{6.1}$$

この式が、常に成立するためには、すなわち多項式の未定係数 a_0, a_1, \dots, a_n の値によらず成立するためには、 $n+1$ 個の未定係数 a_0, a_1, \dots, a_n にかかる両辺の係数がそれぞれ等しくなければならない。これよ

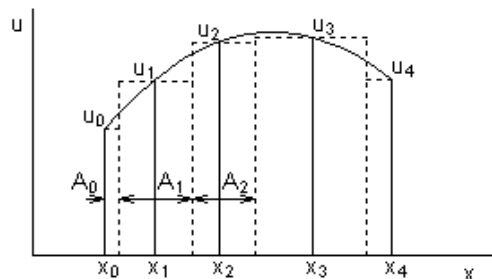


図 6.2: 未定係数法による数値積分

¹不連続性 (discontinuities) とは関数自身またはその 1, 2, ... 階微分が不連続になることであるが、離散データに対してはあいまいに使われる。

り次の $n+1$ 個の条件式が導かれる .

$$\begin{aligned} \int_a^b dx &= A_0 + A_1 + \cdots + A_n \\ \int_a^b x dx &= A_0 x_0 + A_1 x_1 + \cdots + A_n x_n \\ &\dots\dots\dots \\ \int_a^b x^n dx &= A_0 x_0^n + A_1 x_1^n + \cdots + A_n x_n^n \end{aligned} \quad (6.2)$$

ただし

$$\int_a^b dx = b-a, \quad \int_a^b x dx = \frac{b^2-a^2}{2}, \quad \dots, \quad \int_a^b x^n dx = \frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1}$$

である . 幅 A_0, A_1, \dots, A_n は , 式 (6.2) を書換えた次の連立 1 次方程式から求められる .

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b-a \\ (b^2-a^2)/2 \\ \vdots \\ (b^{n+1}-a^{n+1})/(n+1) \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

この方程式は係数行列が Vandermonde の行列式で , x_0, x_1, \dots, x_n の値がみな異なるから , A_0, A_1, \dots, A_n の値は一意的に決定できる . 数値積分の値は , 式 (6.3) から求めた A_0, A_1, \dots, A_n を次式に代入することによって求められる .

$$\int_a^b u(x) dx = A_0 u_0 + A_1 u_1 + \cdots + A_n u_n \quad (6.4)$$

次にこのようにして求めた積分値が n 次多項式 $p_n(x)$ を a から b まで積分したものであること , すなわち図 6.2 に示す u_0, u_1, \dots, u_n を通る n 次曲線の下 の面積であることを示す . 式 (6.4) の右辺は , $u_0 = p_n(x_0), u_1 = p_n(x_1), \dots, u_n = p_n(x_n)$ なる関係 , $p_n(x_i) = a_0 + a_1(x_i) + \cdots + a_n(x_i)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) なる関係 , 式 (6.2) を順に用い書換えていけば

$$\begin{aligned} \int_a^b u(x) dx &= A_0 p_n(x_0) + A_1 p_n(x_1) + \cdots + A_n p_n(x_n) \\ &= a_0(A_0 + A_1 + \cdots + A_n) + a_1(A_0 x_0 + A_1 x_1 + \cdots + A_n x_n) + \cdots + a_n(A_0 x_0^n + A_1 x_1^n + \cdots + A_n x_n^n) \\ &= a_0 \int_a^b dx + a_1 \int_a^b x dx + \cdots + a_n \int_a^b x^n dx \\ &= \int_a^b p_n(x) dx \end{aligned}$$

となるから明らかである .

上述の数値積分は通常 全積分区間に対してではなく , $n = 2 \sim 4$ 程度の小区間に対し適用されるものである . この方法は計算点が不等間隔の場合に用いられ , 等間隔の場合は次節の方法が用いられる . 次に参考までに A_i を求める簡単なプログラムを示す .

```

SUBROUTINE NUMINT(x,u,if,s)
DIMENSION x(0:if),u(0:if),A(0:4),x1(0:4)
REAL(8) v(5,6),wa(6)
w=x(if)-x(0)
FORALL(i=0:if)x1(i)=(x(i)-x(0))/w
DO i=1,5
  v(i,6)=1./FLOAT(i)
  IF(i==1)THEN; FORALL(j=1:5)v(1,j)=1.
  ELSE; FORALL(j=1:5)v(i,j)=x1(j-1)*v(i-1,j)
  ENDIF
ENDDO
det=1.; e=0.
CALL GAUSS(v,wa,5,6,det,e)
FORALL(i=0:if)A(i)=w*v(i+1,6)
s=0.
DO i=0,if
  s=s+A(i)*u(i)
ENDDO
ENDSUBROUTINE

! Solution of simultaneous linear equations by Gaussian elimination
SUBROUTINE GAUSS(a,wa,n,n1,det,e)
REAL(8) a(n,n1),wa(n1)
det=1.
e=MAX(e,1.E-5)
cycle_1: DO k=1,n; l=k
  w=a(k,k); IF(ABS(w)>e) GOTO 11
  l=k; 12 l=l+1; IF(l>n)STOP 5555
  w=a(l,k); IF(ABS(w)<=e) GOTO 12
  FORALL(j=k:n1)
    wa(j)=a(k,j); a(k,j)=a(l,j); a(l,j)=wa(j)
  ENDFORALL
  det=-det; 11 det=w*det
  FORALL(j=k+1:n1)a(k,j)=a(k,j)/w
  IF(k==n)CYCLE cycle_1
  FORALL(i=k+1:n,j=k+1:n1)a(i,j)=a(i,j)-a(i,k)*a(k,j)
ENDDO cycle_1
DO k=n,2,-1
  FORALL(i=1:k-1)a(i,n1)=a(i,n1)-a(i,k)*a(k,n1)
ENDDO
END

```

このプログラムは、図 6.2 を描くために作られたものである。計算を簡単にするために、始めに $a = x_0 \rightarrow 0$, $b = x_4 \rightarrow 1$ と置いている。配列 x_1 はその 0 から 1 までの新しい座標である。計算は桁落ちしないように倍精度で行っている。 s は数値積分。GAUSS は連立 1 次方程式を Gauss 消去法で解くサブルーチンで、 a, v は連立 1 次方程式の係数行列と右辺 \rightarrow 解を並べて記憶する配列。 $n_1 = n + 1$ 。なお wa は行の入れ替えに用いられる作業用の配列、 det は行列式、 e は対角要素の大きさの判定に用いられる小さい正数である。

6.1.2 Newton-Cotes 求積法

上述の未定係数法による数値積分における係数 A_0, A_1, \dots, A_n は等間隔計算点の場合には既知になる．
 $A_i = \alpha h a_i$ ($i = 0, 1, \dots, n$) , h は計算点の間隔 , α と a_i は次表ようになる .

n	α	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	
1	1/2	1	1						台形公式
2	1/3	1	4	1					Simpson 1/3 公式
3	3/8	1	3	3	1				Simpson 3/8 公式
4	2/45	7	32	12	32	7			
5	5/288	19	75	50	50	75	19		
6	1/140 (6/20)	41 (1	216 5	27 1	272 6	27 1	216 5	41 1)	(Weddle 公式)

Newton-Cotes 求積法では , 通常 積分区間 $[a, b]$ は多項式の次数 n の整数倍 N に等分割される . 計算点の間隔 $h = (b - a)/N$, $x_i = x_0 + ih$ ($i = 0, 1, 2, \dots, N$) , $x_0 = a$, $x_N = b$. この方法は , 関数 $u_i = u(x_i)$ の値が既知のときに利用できる .

最も簡単な $n = 1$ の台形公式 (梯形則 trapezoidal law) の場合には , 全区間にわたる積分は次のようになる .

$$\int_{x_0}^{x_N} u(x) dx = h \left(\frac{1}{2} u_0 + u_1 + u_2 + \dots + u_{N-1} + \frac{1}{2} u_N \right)$$

また $n = 2$ の Simpson 1/3 公式の場合には , 例えば $N = 7$ に対しては Simpson 3/8 公式を補い , 全区間にわたる積分は次のようになる .

$$\int_{x_0}^{x_N} u(x) dx = \frac{1}{3} h (u_0 + 4u_1 + 2u_2 + 4u_3 + u_4) + \frac{3}{8} h (u_4 + 3u_5 + 3u_6 + u_7)$$

次に Newton-Cotes 求積法の打ち切り誤差 (truncation error) について , Simpson の 1/3 公式を例に説明する . 関数 $u(x)$ の Taylor 展開

$$u(x) = u_0 + (x - x_0) u'_0 + \frac{1}{2!} (x - x_0)^2 u''_0 + \frac{1}{3!} (x - x_0)^3 u'''_0 + \frac{1}{4!} (x - x_0)^4 u^{(4)}_0 + \dots$$

を区間 $[x_0, x_2]$ で積分すれば次式が得られる .

$$\int_{x_0}^{x_2} u(x) dx = 2hu_0 + 2h^2 u'_0 + \frac{4}{3} h^3 u''_0 + \frac{2}{3} h^4 u'''_0 + \frac{4}{15} h^5 u^{(4)}_0 + \dots$$

この式は厳密なものである . 他方 区間 $[x_0, x_2]$ の Simpson 1/3 公式を Taylor 展開すれば次式が得られる .

$$\frac{1}{3} h (u_0 + 4u_1 + u_2) = 2hu_0 + 2h^2 u'_0 + \frac{4}{3} h^3 u''_0 + \frac{2}{3} h^4 u'''_0 + \frac{5}{18} h^5 u^{(4)}_0 + \dots$$

これら 2 つの式を比較すれば

$$\int_{x_0}^{x_2} u(x) dx = \frac{1}{3} h (u_0 + 4u_1 + u_2) - \frac{1}{90} h^5 u^{(4)}_0$$

この式の最後の項は 1 つの区間の Simpson 1/3 公式の打ち切り誤差である . 全区間にわたる Simpson 1/3 公式の打ち切り誤差はこの誤差に区間の数 $N = (b - a)/2h$ をかけたもので次のようになる .

$$e_t = -\frac{b-a}{180} h^4 u^{(4)}$$

Simpson 1/3 公式は 4 次精度で，その打ち切り誤差は $O(h^4)$ である．

次表は Newton-Cotes 求積法の打ち切り誤差をまとめて示したものである．

n	1	2	3	4	5
$-e_t$	$\frac{b-a}{12}h^2u''$	$\frac{b-a}{180}h^4u^{(4)}$	$\frac{b-a}{80}h^4u^{(4)}$	$\frac{2(b-a)}{945}h^6u^{(6)}$	$\frac{55(b-a)}{12096}h^6u^{(6)}$

Taylor 展開を基にしたこのような議論は，一般に 与えられたデータが十分滑らかで Taylor 級数が収束することを前提にしている²．上の表は次数 n が高く偶数のものが優れていることを示している．しかしながらこれはあくまで与えられたデータが十分滑らかな場合のことで，与えられたデータが不連続性を持つ場合ゆらぎを含む場合には，高次多項式は大きく波打つ虞があり，また n が偶数の Newton-Cotes 求積法は係数 A_i の変化が大きいので不連続性やゆらぎに敏感で大きい誤差をまねく虞がある．与えられたデータが十分滑らかでない場合には，上表の形式的精度とは反対に，実質的精度は低次で n 奇数のものの方が良いことになる．

問 滑らかな周期関数 $u(x)$ の 1 周期にわたる積分を Newton-Cotes 求積法で求めよ．

1 周期を偶数 N に等分割し Simpson 1/3 公式を用いれば次式が得られる．

$$\int_{x_0}^{x_N} u(x) dx = \frac{1}{3}h(2u_0 + 4u_1 + 2u_2 + 4u_3 + 2u_4 + \cdots + 2u_{N-2} + 4u_{N-1})$$

この式では偶数番目の点で Simpson 1/3 公式を継ぎ合わせているが，周期関数に対しては奇数番目の点で継ぎ合わせることも可能で，その式は次のようになる．

$$\int_{x_0}^{x_N} u(x) dx = \frac{1}{3}h(2u_1 + 4u_2 + 2u_3 + 4u_4 + 2u_5 + \cdots + 2u_{N-1} + 4u_N)$$

これら 2 つの式を平均すれば次式が得られる．

$$\int_{x_0}^{x_N} u(x) dx = h(u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + \cdots + u_{N-1})$$

これは台形公式のものと同じである．周期関数の 1 周期にわたる積分では， $n = n$ の高次の求積法を用いる式は継ぎ合わせる点を変えれば n 個得られ，それらを平均すれば最も高精度かつ妥当な積分の式が得られると考えられる．しかしこのようにして得られた式は，実は台形公式のものと同じになる．周期関数の 1 周期にわたる積分では，最も簡単な台形公式を用いることによって最良の結果が得られる．

6.1.3 Gauss-Legendre 求積法

区間 $[x_0, x_1]$ における台形公式では 2 つのデータ u_0 と u_1 を必要としたが，1 つのデータ $u(x_{1/2})$ に区間の幅 h をかけても同程度の結果が得られる．また区間 $[x_0, x_2]$ における Simpson 1/3 公式では 3 つのデータ u_0, u_1, u_2 を必要としたが，2 つのデータでも選ばれた点のものをういれれば更に良い結果が得られる．Gauss-Legendre 求積法ないしは Gauss 積分と呼ばれる方法は， $n + 1$ 次 Legendre 多項式の $n + 1$ 個の零点のデータを用いることにより， $2n + 1$ 次多項式相当の高精度の結果を得る方法である．この方法は，少ない計算量で高精度の結果が得られるので，数多くの数値積分を行わなければならない有限要素法で多用されている．またこの方法は 1 つのデータを得るのに膨大な計算を要する場合にも適している．

²滑らか (smooth) とは解析的すなわち関数自身とその無限階までの微分がすべて連続であること，十分滑らか (sufficiently smooth) とは必要な階数までの微分が連続であることをいうが，離散的データに対してはあいまいに使われる．

Legendre 多項式の零点の値をそのまま用いられるように，積分区間を $[-1, 1]$ に取る．区間 $[a, b]$ の積分は，予め変数変換

$$\tilde{x} = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x$$

を行い，区間 $[-1, 1]$ の積分に直される．

$$\int_a^b \tilde{u}(\tilde{x}) d\tilde{x} = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 u(x) dx$$

前述のように $n+1$ 個のデータ $u(x_i)$, ($i = 0, 1, \dots, n$) を通る n 次多項式は一意的に決まる．またこれらのデータを通る高次 $2n+1$ 次多項式 $p_{2n+1}(x)$ は一般に次のように表すことができる．

$$p_{2n+1}(x) = p_n(x) + a(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)q_n(x) \quad (6.5)$$

ただし a は任意定数， $q_n(x)$ は高次 n 次の多項式である．この式を区間 $[-1, 1]$ で積分すれば次式が得られる．

$$\int_{-1}^1 p_{2n+1}(x) dx = \int_{-1}^1 p_n(x) dx + \int_{-1}^1 a(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)q_n(x) dx \quad (6.6)$$

ここで x_0, x_1, \dots, x_n を $n+1$ 次の Legendre 多項式 $P_{n+1}(x)$ の零点に取り，また a を $a(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) = P_{n+1}(x)$ になるように置く．このとき式 (6.6) の右辺第 1 項は，式 (6.4) で書換え，更に式 (6.5) から得られる関係 $p_n(x_k) = p_{2n+1}(x_k)$, ($k = 0, 1, \dots, n$) を用いれば次のようになる．

$$\int_{-1}^1 p_n(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i p_{2n+1}(x_i)$$

また式 (6.6) の右辺第 2 項は，Legendre 多項式に関する公式

$$\int_{-1}^1 x^r P_m(x) dx = 0 \quad (r = 0, 1, \dots, m-1)$$

を用いればゼロになる．これより次の Gauss-Legendre 求積法の式が導かれる．

$$\int_{-1}^1 p_{2n+1}(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i p_{2n+1}(x_i) \quad (6.7)$$

ただし x_i は $n+1$ 次 Legendre 多項式の零点，また A_i は式 (6.3) を満足するように決定された係数で， x_i と A_i の値は次表のようになる．

n	x_i			A_i		
0	0			2.0		
1	$\pm .5773502$			1.0		
2	0	$\pm .7745966$.8888888	.5555555	
3	$\pm .3399810$	$\pm .8611363$.6521452	.3478548	
4	0	$\pm .5384693$	$\pm .9061798$.5688888	.4786288	.2369268
5	$\pm .2386191$	$\pm .6612093$	$\pm .9324695$.4679140	.3607616	.1713244

Gauss-Legendre 求積法による区間 $[a, b]$ の積分の打ち切り誤差は次のように見積もられる．

$$e_t = \frac{(b-a)^{2n+3}}{2n+3} \left[\frac{(n+1)!}{(n+2)(n+3)\cdots(2n+2)} \right]^2 \frac{u^{(2n+2)}}{(2n+2)!} \quad (6.8)$$

問 次の積分の値を上述の求積法で計算し精度を比較せよ .

$$I = \int_1^2 \frac{dx}{x^2} = 0.5$$

ここには 3 個 , 5 個 , 7 個のデータを用いる Simpson 1/3 公式 , 4 個のデータを用いる Simpson 3/8 公式 , 3 個のデータを用いる $n = 2$ の Gauss-Legendre 求積法などによる積分の結果を示す .

求 積 法	データ数	積分値	打切り誤差
trapezoidal (n=1)	7	.50115	+ .00115
Simpson 1/3 (n=2)	3	.50463	+ .00463
	5	.50042	+ .00042
	7	.50009	+ .00009
Simpson 3/8 (n=3)	4	.50219	+ .00219
	7	.49695	- .00305
Newton-Cotes (n=4)	5	.50014	+ .00014
Newton-Cotes (n=6)	7	.49556	- .00444
Gauss-Legendre (n=2)	3	.49988	- .00012
Gauss-Legendre (n=3)	4	.49999	- .00001

Gauss-Legendre 法による積分は次のように計算される .

$$I = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{dx}{(1.5+.5x)^2} = 2 \left(\frac{.55555}{(3-.77460)^2} + \frac{.88888}{3.^2} + \frac{.55555}{(3+.77460)^2} \right) = .49988$$

この問題の被積分関数は滑らかであるが x の減少とともに加速度的に値が増加する . Simpson 3/8 公式のデータ数 7 や Newton-Cotes 法の (n=6) はこれに追従できず誤差が大きくなるものと考えられる . Gauss-Legendre 法は一般に言われているように確かに少ないデータで高精度の結果が得られている .

6.2 各種補間式に基づく数値積分

前 2 章には , 離散的に与えられたデータ $u_i = u(x_i)$ を近似する関数 $u(x)$ を求める方法について述べた . この $u(x)$ は一般に積分可能で , これより各種の数値積分の式が導かれる . ここには Lagrange 補間多項式 , 各種のスプライン , または指数関数を用いた補間式に基づく数値積分について述べる .

6.2.1 Lagrange 補間多項式に基づく数値積分

第 1 節に述べた 3 つの数値積分は , いずれも Lagrange 補間多項式の全区間にわたる積分と等価なものである . 3 次の Lagrange 補間多項式は , コンピュータ以前の時代に数表作りに用いられたもので , ある条件下

では高い精度を示し特にその中央の区間ではそうである．3次 Lagrange 補間多項式は次のように書かれる．

$$u(x) = \sum_{k=0}^3 C_k^3(\xi) u_{i-1+k} \quad (6.9)$$

$$C_0^3(\xi) = -\frac{\xi(h_1-\xi)(h_1+h_2-\xi)}{h_0(h_0+h_1)(h_0+h_1+h_2)}, \quad C_1^3(\xi) = \frac{(h_0+\xi)(h_1-\xi)(h_1+h_2-\xi)}{h_0h_1(h_1+h_2)},$$

$$C_2^3(\xi) = \frac{(h_0+\xi)\xi(h_1+h_2-\xi)}{(h_0+h_1)h_1h_2}, \quad C_3^3(\xi) = -\frac{(h_0+\xi)\xi(h_1-\xi)}{(h_0+h_1+h_2)(h_1+h_2)h_2}$$

ただし $\xi = x - x_i$, $h_0 = x_i - x_{i-1}$, $h_1 = x_{i+1} - x_i$, $h_2 = x_{i+2} - x_{i+1}$ である．この式を直接積分しても良いが，ここでは次のように1次補間とそれを3次にする補正項の和で表した式を積分することにする．

$$u(x) = (1-\bar{\xi})u_i + \bar{\xi}u_{i+1} - \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})(1+\bar{h}_2-\bar{\xi})}{h_0(1+\bar{h}_0)(1+\bar{h}_0+\bar{h}_2)}u_{i-1} + \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})(1-\bar{h}_0+\bar{h}_2-\bar{\xi})}{h_0(1+\bar{h}_2)}u_i$$

$$+ \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})(\bar{h}_0-\bar{h}_2+\bar{\xi})}{h_2(1+\bar{h}_0)}u_{i+1} - \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})(\bar{h}_0+\bar{\xi})}{h_2(1+\bar{h}_2)(1+\bar{h}_0+\bar{h}_2)}u_{i+2}$$

ただし $\bar{\xi} = \xi/h_1$, $\bar{h}_0 = h_0/h_1$, $\bar{h}_2 = h_2/h_1$ である．この式を中央の区間 $[x_i, x_{i+1}]$ に対して積分すれば次の数値積分の式が得られる．

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx = \frac{1}{2}h_1(u_i + u_{i+1}) + \frac{1}{12}h_1 \left[-\frac{1+2\bar{h}_2}{h_0(1+\bar{h}_0)(1+\bar{h}_0+\bar{h}_2)}u_{i-1} \right. \\ \left. + \frac{1-2\bar{h}_0+2\bar{h}_2}{h_0(1+\bar{h}_2)}u_i + \frac{1+2\bar{h}_0-2\bar{h}_2}{h_2(1+\bar{h}_0)}u_{i+1} - \frac{1+2\bar{h}_0}{h_2(1+\bar{h}_2)(1+\bar{h}_0+\bar{h}_2)}u_{i+2} \right] \quad (6.10a)$$

同様に，端の区間 $[x_0, x_1]$ に対して積分すれば次式が得られる．

$$\int_{x_0}^{x_1} u(x) dx = \frac{1}{2}h_0(u_0 + u_1) + \frac{1}{12}h_0 \left[-\frac{3+4\bar{h}_1+2\bar{h}_2}{(1+\bar{h}_1)(1+\bar{h}_1+\bar{h}_2)}u_0 \right. \\ \left. + \frac{1+4\bar{h}_1+2\bar{h}_2}{\bar{h}_1(\bar{h}_1+\bar{h}_2)}u_1 - \frac{1+2\bar{h}_1+2\bar{h}_2}{\bar{h}_1\bar{h}_2(1+\bar{h}_1)}u_2 + \frac{1+2\bar{h}_1}{\bar{h}_2(\bar{h}_1+\bar{h}_2)(1+\bar{h}_1+\bar{h}_2)}u_3 \right] \quad (6.10b)$$

ただしこの式では $\bar{\xi} = \xi/h_0$, $\bar{h}_1 = h_1/h_0$, $\bar{h}_2 = h_2/h_0$ である．特に等間隔 $h_0 = h_1 = h_2 = h$ の場合にはこれらの式は次のように簡単になる．

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx = \frac{h}{24}(-u_{i-1} + 13u_i + 13u_{i+1} - u_{i+2}) \quad (6.11a)$$

$$\int_{x_0}^{x_1} u(x) dx = \frac{h}{24}(9u_0 + 19u_1 - 5u_2 + u_3) \quad (6.11b)$$

また等間隔の場合の全体の数値積分の式は次のようになる．

$$\int_{x_0}^{x_N} u(x) dx = h \left\{ \frac{8}{24}u_0 + \frac{31}{24}u_1 + \frac{20}{24}u_2 + \frac{25}{24}u_3 + u_4 + u_5 + \cdots + u_{N-4} \right. \\ \left. + \frac{25}{24}u_{N-3} + \frac{20}{24}u_{N-2} + \frac{31}{24}u_{N-1} + \frac{8}{24}u_N \right\} \quad (6.11c)$$

この数値積分の式は中間部分は台形公式のものになり，また両端のところも台形公式に近く係数が大きく変化しないので，データに含まれるゆらぎの影響は比較的小さい．上記の不等間隔の式は係数があまり簡単とは言えないが，ゆらぎの影響については同様のことが言える．

6.2.2 スプラインに基づく数値積分

スプライン法については 4.3 節に詳しい説明がある．区間 $[x_i, x_{i+1}]$ の 3 次スプラインの式は 3 次多項式

$$S(x) = a_0(1-\alpha)^3 + a_1\alpha^3 + a_2(1-\alpha) + a_3\alpha \quad (6.12)$$

の未定係数 a_0, a_1, a_2, a_3 を区間の接点の条件 $S(x_i), S(x_{i+1}), S''(x_i), S''(x_{i+1})$ から決定することによって求められ，次のように書くことができる．

$$S(x) = \frac{\Delta x_i^2}{6} \left\{ (1-\alpha)^3 u_i'' + \alpha^3 u_{i+1}'' \right\} + (1-\alpha) \left(u_i - \frac{\Delta x_i^2}{6} u_i'' \right) + \alpha \left(u_{i+1} - \frac{\Delta x_i^2}{6} u_{i+1}'' \right) \quad (6.13)$$

ただし $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ ， $\alpha = (x - x_i) / \Delta x_i$ である．3 次スプラインは与えられたデータ u_i を通る区分的 3 次式で，接点上で 2 階微分まで連続である．上式は容易に積分することができ，次の区間 $[x_i, x_{i+1}]$ の数値積分の式が得られる．

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx &\doteq \Delta x \int_0^1 S(\alpha) d\alpha \\ &= \frac{\Delta x_i^3}{24} (u_i'' + u_{i+1}'') + \frac{\Delta x_i}{2} \left\{ \left(u_i - \frac{\Delta x_i^2}{6} u_i'' \right) + \left(u_{i+1} - \frac{\Delta x_i^2}{6} u_{i+1}'' \right) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \Delta x_i (u_i + u_{i+1}) - \frac{\Delta x_i^3}{24} (u_i'' + u_{i+1}'') \end{aligned} \quad (6.14)$$

u_i'' の求め方については 4.3.1 項参照．この式の右辺第 1 項は台形則，第 2 項はその補正項で，また打ち切り誤差はテイラー展開をもとに見積もれば， $\Delta x_i^5 u_i^{(4)} / 5!$ となる．

指数スプラインは，スプライン曲線が不自然に波打つ場合に用いられるもので，その式は 1 次式に単調な双曲線関数を重ねた

$$S(x) = a_0 \sinh((1-\alpha)\Delta x_i p_i) + a_1 \sinh(\alpha \Delta x_i p_i) + a_2(1-\alpha) + a_3\alpha$$

から作られ，次のように書くことができる．

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{1}{p_i^2 \sinh \Delta x_i p_i} \left\{ \sinh((1-\alpha)\Delta x_i p_i) u_i'' + \sinh(\alpha \Delta x_i p_i) u_{i+1}'' \right\} \\ &\quad + (1-\alpha) \left(u_i - \frac{1}{p_i^2} u_i'' \right) + \alpha \left(u_{i+1} - \frac{1}{p_i^2} u_{i+1}'' \right) \end{aligned} \quad (6.15)$$

ただし p_i は，スプライン曲線を梁に譬えたときに梁にかかる張力に相当するもので，各区間 Δx_i ごとの区分的定数値である．この式は容易に積分することができ，当該区間の数値積分の式は次のようになる．

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx \doteq \frac{1}{2} \Delta x_i (u_i + u_{i+1}) + \left(\frac{\cosh(\Delta x_i p_i) - 1}{p_i^3 \sinh(\Delta x_i p_i)} - \frac{\Delta x_i}{2p_i^2} \right) (u_i'' + u_{i+1}'') \quad (6.16)$$

u_i'' の求め方については 4.3.2 項参照．なお指数スプラインの打ち切り誤差を見積もることは無意味である．それはテイラー展開を基に評価すれば，波打つスプラインを積分したものが高精度で，指数スプラインを積分したものはスプラインとの差の面積に相当する誤差を含むことになるからである．スプラインに較べ波打ちを抑えた指数スプラインがより妥当なものとする立場とは相容れない．

実験データのようにばらつきのある多くのデータを区分的 3 次式で近似する最小 2 乗スプラインは，3 次スプラインと同じ式 (6.12) から出発し，次式で表される．

$$u(x) = \frac{1}{6} \Delta x_i^2 u_i'' (1-\alpha)^3 + \frac{1}{6} \Delta x_i^2 u_{i+1}'' \alpha^3 + a_2(1-\alpha) + a_3\alpha \quad (6.17)$$

ただし a_2, a_3 はこの式が区間 $[x_i, x_{i+1}]$ で与えられたデータを平均的に満足するよう最小 2 乗法によって求められる。 a_2, a_3, u_j'' の求め方については 4.4.1 参照。この式は容易に積分することができ、当該区間の数値積分の式は次のようになる。

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx \doteq \frac{\Delta x_i^3}{24} (u_i'' + u_{i+1}'') + \frac{1}{2} \Delta x_i (a_2 + a_3) \quad (6.18)$$

この式の誤差も評価し難い。

6.2.3 指数関数を用いた補間式に基づく数値積分

5.1.1 項に述べた指数関数を用いた補間式は、十分安定な補間法として知られ、境界に向かって急激に変化する関数もごく自然に近似できる。この補間式は次のように表される。

$$u(x) \doteq (1-\alpha)u_i + \alpha u_{i+1} + \frac{1}{R-1} \left(\frac{R^\alpha - 1}{R-1} - \alpha \right) \Delta^2 u_{i+1} \quad (6.19)$$

ただし $\alpha = (x-x_i)/h$, $\Delta u_{i+1/2} = u_{i+1} - u_i$, $\Delta^2 u_i = \Delta u_{i+1/2} - \Delta u_{i-1/2}$, $R = \Delta^2 u_{i+1} / \Delta^2 u_i$ である。この式を区間 $[x_i, x_{i+1}]$ で積分すれば次式が得られる。

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x) dx &\doteq h \left[\left(\alpha - \frac{\alpha^2}{2} \right) u_i + \frac{\alpha^2}{2} u_{i+1} + \frac{1}{R-1} \left(\frac{R^\alpha / \log R - \alpha}{R-1} - \frac{\alpha^2}{2} \right) \Delta^2 u_{i+1} \right]_0^1 \\ &= \frac{h}{2} \left[u_i + u_{i+1} + \frac{1}{R-1} \left(\frac{2}{\log R} - \frac{R+1}{R-1} \right) \Delta^2 u_{i+1} \right] \end{aligned} \quad (6.20a)$$

また区間 $[x_{i-1}, x_i]$ または $[x_{i+1}, x_{i+2}]$ で積分すれば次式が得られる。

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} u(x) dx \doteq \frac{h}{2} \left[3u_i - u_{i+1} + \frac{1}{R-1} \left(\frac{2}{R \log R} + \frac{R-3}{R-1} \right) \Delta^2 u_{i+1} \right] \quad (6.20b)$$

$$\int_{x_{i+1}}^{x_{i+2}} u(x) dx \doteq \frac{h}{2} \left[-u_i + 3u_{i+1} + \frac{1}{R-1} \left(\frac{2R}{\log R} - \frac{3R-1}{R-1} \right) \Delta^2 u_{i+1} \right] \quad (6.20c)$$

付録 Romberg 法

この数値積分法はほとんど使われていないが参考までに簡単に説明する。この方法は連続関数 $u(x)$ の定積分を逐次近似計算によって所定の精度まで求めるものである。その計算手順は次のようになる。

第 1 近似計算：第 1 近似値 $T_1^{(1)}$ は、積分区間を単一区間 $b-a = h_1$ として台形公式から求められる。

$$T_1^{(1)} = \frac{1}{2} h_1 \{u(x_0) + u(x_0 + h_1)\} = I + \frac{1}{12} (b-a) h_1^2 u''(x_0) + O(h^3) \quad (6.21)$$

ただし I は積分の厳密な値、残りの項は打ち切り誤差で、この近似値の精度は $O(h^2)$ である。

第 2 近似計算：第 2 近似値 $T_1^{(2)}$ は、積分区間を 2 等分し (計算点の間隔 $h_2 = (b-a)/2$) 同様に台形公式から求められる。

$$T_1^{(2)} = \frac{1}{2} h_2 \{u(x_0) + 2u(x_0 + h_2) + u(x_0 + 2h_2)\} = I + \frac{1}{12} (b-a) h_2^2 u''(x_0) + O(h^3) \quad (6.22)$$

$T_1^{(1)}, T_1^{(2)}$ から打ち切り誤差の大きさは計算点の間隔の 2 乗 h^2 によることが分かる。今この誤差の大きさが h^2 に比例するものとし、1 次外挿によって $h^2 \rightarrow 0$ に相当するより高い精度の積分値を求めれば

$$T_2^{(2)} = \frac{1}{3} (4T_1^{(2)} - T_1^{(1)}) = I + O(h^3) \quad (6.23)$$

この積分値はまた，積分領域にわたって u'' がほぼ一樣になるものとして，式 (6.21) と (6.22) から $O(h^2)$ の打ち切り誤差の項を消去したものである．

第 3 近似計算：第 3 近似値 $T_1^{(3)}$ は，積分区間を $2^2 = 4$ 等分し（計算点の間隔 $h_3 = (b-a)/4 = h_2/2$ ），台形公式から求められる．

$$\begin{aligned} T_1^{(3)} &= \frac{1}{2}h_3\{u(x_0)+2u(x_0+h_3)+2u(x_0+2h_3)+2u(x_0+3h_3)+u(x_0+4h_3)\} \\ &= I + \frac{1}{12}(b-a)h_3^2u''(x_0) + O(h^3) \end{aligned} \tag{6.24}$$

また $T_1^{(2)}, T_1^{(3)}$ から 1 次外挿によって $h^2 \rightarrow 0$ に相当するより高い精度の積分値 $T_2^{(3)}$ を求めれば

$$T_2^{(3)} = \frac{1}{3}(4T_1^{(3)} - T_1^{(2)}) = I + O(h^3) \tag{6.25}$$

更に $T_2^{(2)}, T_2^{(3)}$ から 1 次外挿によって $h^3 \rightarrow 0$ に相当する更に高い精度の積分値 $T_3^{(3)}$ を求めれば

$$T_3^{(3)} = \frac{2^3T_2^{(3)} - T_2^{(2)}}{2^3 - 1} = I + O(h^4) \tag{6.26}$$

第 k 近似計算：第 k 近似値 $T_1^{(k)}$ は，積分区間を 2^{k-1} 等分し（計算点の間隔 $h_k = (b-a)/2^{k-1} = h_{k-1}/2$ ），台形公式から求められる．

$$\begin{aligned} T_1^{(k)} &= \frac{1}{2}h_k\{u(x_0)+2u(x_0+h_k)+2u(x_0+2h_k)+\cdots+u(x_0+2^{k-1}h_k)\} \\ &= I + \frac{1}{12}(b-a)h_k^2u''(x_0) + O(h^3) \end{aligned} \tag{6.27}$$

また $T_1^{(k-1)}, T_1^{(k)}$ から 1 次外挿によって $h^2 \rightarrow 0$ に相当するより高い精度の積分値 $T_2^{(k)}$ を求めれば

$$T_2^{(k)} = \frac{2^2T_1^{(k)} - T_1^{(k-1)}}{2^2 - 1} = I + O(h^3) \tag{6.28}$$

更に $T_2^{(k-1)}, T_2^{(k)}$ から 1 次外挿によって $h^3 \rightarrow 0$ に相当する更に高い精度の積分値 $T_3^{(k)}$ を求め，同様の 1 次外挿を次々に行い積分値 $T_k^{(k)}$ までを求める．

$$T_m^{(k)} = \frac{2^m T_{m-1}^{(k)} - T_{m-1}^{(k-1)}}{2^m - 1} = I + O(h^{m+1}) \quad (2 < m \leq k) \tag{6.29}$$

以上 計算した積分の近似値を表に纏めれば次のようになる．

近 似	$m=1$	2	3	...	$k-1$	k
1	$T_1^{(1)}$					
2	$T_1^{(2)}$	$T_2^{(2)}$				
3	$T_1^{(3)}$	$T_2^{(3)}$	$T_3^{(3)}$			
⋮	⋮	⋮	⋮			
$k-1$	$T_1^{(k-1)}$	$T_2^{(k-1)}$	$T_3^{(k-1)}$...	$T_{k-1}^{(k-1)}$	
k	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$...	$T_{k-1}^{(k)}$	$T_k^{(k)}$

この計算は $|T_k^{(k)} - T_{k-1}^{(k)}| < \epsilon$ のときに収束したものと判定され， $T_k^{(k)}$ が求める積分値になる．ただし ϵ は十分小さい正数である．

6.3 差分法と数値微分

差分式 (finite-difference formulas) は Taylor 級数または多項式をもとに作ることができるが, ここには後者について述べる. 一般に 1 次式からは 1 階の差分式を 1 次精度で作ることができる. 2 次式からは 1 階の差分式を 2 次精度で, 2 階の差分式を 1 次精度で作ることができる. また n 次多項式からは k 階の差分式を $n-k+1$ 次精度で作ることができる. ここにはまず不等間隔計算点に対する Lagrange 補間多項式を不等間隔計算点に対して定義された差分を導入して簡潔に表現し, これから任意点における数値微分の式を導く. それから計算点における数値微分の式を導く. 最後に等間隔計算点に対する計算点における数値微分の式すなわち周知の差分式をまとめて示す. 以下には, 1 次のものから順に 4 次のものまで説明する.

6.3.1 1 次式に基づく数値微分

1 次補間公式は

$$u(x) = (1-\alpha)u_i + \alpha u_{i+1} + \frac{1}{2}\alpha(\alpha-1)h^2 u_i'' + \dots$$

のようになる. ただし $h = x_{i+1} - x_i$, $\alpha = (x - x_i)/h$, 最後の項は打ち切り誤差である. この式を微分すれば $d/dx = (1/h)d/d\alpha$ であるから次式が得られる.

$$u'(x) = \frac{1}{h}(-u_i + u_{i+1}) + (\alpha - \frac{1}{2})hu_i'' + \dots \quad (6.30)$$

この式の誤差は一般に $O(h)$ であるが $\alpha = 1/2$ の時には $O(h^2)$ になる. なお 2 階微分は 0 になり精度不足で無意味である. $\alpha = 0$ の点 x_i , $\alpha = 1$ の点 x_{i+1} では

$$u'_i = u'_{i+1} = \frac{1}{h}\Delta u_{i+1/2} + O(h), \quad u'_i = \frac{1}{h}\Delta u_{i-1/2} + O(h) \quad (6.31)$$

ただし後者の式では $h = x_i - x_{i-1}$ である.

6.3.2 2 次式に基づく数値微分

2 次補間公式は 1 次補間とそれを 2 次にする補正項の和で表せば

$$u(x) = u_i + \alpha\tilde{\Delta}u_{i+1/2} + \frac{1}{2!}\alpha(\alpha-1)\tilde{\Delta}^2u_i + \frac{1}{3!}(\alpha+m^-)\alpha(\alpha-1)h^3u_i''' + \dots$$

のようになる. 不等間隔の場合の 1 階と 2 階の差分を次のように定義する.

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}u_{i-1/2} &= \frac{u_i - u_{i-1}}{m^-}, & \tilde{\Delta}u_{i+1/2} &= u_{i+1} - u_i, & \tilde{\Delta}u_{i+3/2} &= \frac{u_{i+2} - u_{i+1}}{m^+}, & \dots \\ \tilde{\Delta}^2u_i &= \frac{2}{m^-+1}(\tilde{\Delta}u_{i+1/2} - \tilde{\Delta}u_{i-1/2}), & \tilde{\Delta}^2u_{i+1} &= \frac{2}{1+m^+}(\tilde{\Delta}u_{i+3/2} - \tilde{\Delta}u_{i+1/2}), & \dots \end{aligned}$$

ただし $h = \Delta x_{i+1/2}$, $m^- = \Delta x_{i-1/2}/h$, $m^+ = \Delta x_{i+3/2}/h$ である. 上式を微分すれば次式が得られる.

$$u'(x) = \frac{1}{h}\left\{\tilde{\Delta}u_{i+1/2} + \frac{1}{2!}(2\alpha-1)\tilde{\Delta}^2u_i\right\} + \frac{1}{3!}\{(\alpha+m^-)(2\alpha-1) + \alpha(\alpha-1)\}h^2u_i''' + \dots \quad (6.32a)$$

$$u''(x) = \frac{1}{h^2}\tilde{\Delta}^2u_i + \frac{1}{3}(3\alpha+m^- - 1)hu_i''' + \dots \quad (6.32b)$$

これらの式の誤差は 1 階微分では $O(h^2)$, 2 階微分では $O(h)$ である . これより $\alpha = 0$ の中心差分の式は次のようになる .

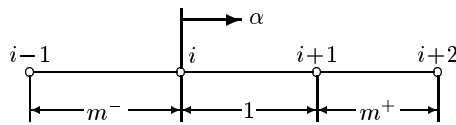
$$u'_i = \frac{1}{h} \left(\tilde{\Delta} u_{i+1/2} - \frac{1}{2} \tilde{\Delta}^2 u_i \right) + O(h^2) \tag{6.33a}$$

$$u''_i = \frac{1}{h^2} \tilde{\Delta}^2 u_i + O(h) \tag{6.33b}$$

また補正項の $\tilde{\Delta}^2 u_i$ の代わりに $\tilde{\Delta}^2 u_{i+1}$ を用いれば次の片側差分の式を導くことができる .

$$u'_i = \frac{1}{h} \left(\tilde{\Delta} u_{i+1/2} - \frac{1}{2} \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} \right) + O(h^2) \tag{6.33c}$$

$$u''_i = \frac{1}{h^2} \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + O(h) \tag{6.33d}$$



6.3.3 3 次式に基づく数値微分

3 次補間公式は , 上の 2 次補間式とそれを 3 次にする補正項の和で表せば

$$u(x) = u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha (\alpha - 1) \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (\alpha + m^-) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right\} + \frac{1}{4!} (\alpha + m^-) \alpha (\alpha - 1) (\alpha - 1 - m^+) h^4 u_i^{(4)} + \dots$$

のようになる . ただし 3 階差分は次のように定義される .

$$\tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} = \frac{3}{m^- + 1 + m^+} (\tilde{\Delta}^2 u_{i+1} - \tilde{\Delta}^2 u_i)$$

ここで補正項を簡単に求める方法について説明する . 補正項は補間式を 3 次にするために α の 3 次式で , 3 階微分したときに 2 次補間の部分はゼロになるので , 補正項は $\partial^3 u / \partial x^3$ を近似するものでなければならない . また $\alpha = -m^- , 0 , 1$ でゼロでなければならない . したがって

$$a \cdot \frac{1}{2} \alpha (\alpha - 1) (\alpha + m^-) \cdot \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2}$$

のように置かれる . ただし a は未定係数で , $u((1+m^+)h) = u_{i+2}$ なる条件から , すなわち u_{i+2} の係数が 1 になるように決定される .

$$a \cdot \frac{1}{2} (1+m^+) m^+ (m^- + 1 + m^+) \cdot \frac{3}{m^- + 1 + m^+} \frac{2}{1+m^+} \frac{1}{m^+} = 1$$

これより $a = 1/3$. このようにして導かれた式が 3 次の Lagrange 補間多項式そのものであることは , 4 点 $u_{i-1}, u_i, u_{i+1}, u_{i+2}$ を通る 3 次多項式の唯一性から明らかである . 次に打ち切り誤差は , 点 $x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}$ でゼロになる α の 4 次式であるから因数 $(\alpha + m^-) \alpha (\alpha - 1) (\alpha - 1 - m^+)$ を持つ . またその係数は , 3 次補間式の両辺に Taylor 展開を代入し , $h^4 u_i^{(4)}$ の項の α^4 の係数を比較すれば , 左辺は $(1/4!) h^4 u_i^{(4)}$ となり右辺の補間公式に関する部分には該当項がなく , 打ち切り誤差の α^4 の係数がこれに釣合うべきであるから , 左辺と同じものになる . これから出てくる他の式の補正項と打ち切り誤差も同様にして求めることができる .

上の 3 次補間公式を微分すれば次式が得られる .

$$u'(x) = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2!} (2\alpha - 1) \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3!} C(\alpha) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right\} + \frac{1}{4!} \{ (\alpha + m^-) \alpha (\alpha - 1) + C(\alpha) (\alpha - 1 - m^+) \} h^3 u_i^{(4)} + \dots \quad (6.34a)$$

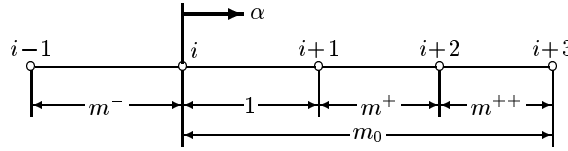
$$u''(x) = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (3\alpha + m^- - 1) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right\} + \frac{2}{4!} \{ C(\alpha) + (3\alpha + m^- - 1) (\alpha - 1 - m^+) \} h^2 u_i^{(4)} + \dots \quad (6.34b)$$

$$u'''(x) = \frac{1}{h^3} \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4} (4\alpha + m^- - 2 - m^+) h u_i^{(4)} + \dots \quad (6.34c)$$

ただし $C(\alpha) = \alpha(\alpha - 1) + (\alpha + m^-)(2\alpha - 1)$ である . 上式の誤差は 1 階微分では $O(h^3)$, 2 階微分では $O(h^2)$ である . 特に $\alpha = 0$ の式は次のようになる .

$$u'_i = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} - \frac{1}{2!} \tilde{\Delta}^2 u_i - \frac{1}{3!} m^- \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right\} + O(h^3) \quad (6.35a)$$

$$u''_i = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (m^- - 1) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right\} + O(h^2) \quad (6.35b)$$



次に片側差分の式を 3 次 Lagrange 補間多項式を書換えた次式から求めることにする .

$$u(x) = u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha (\alpha - 1) \left(\tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{\alpha - 1 - m^+}{3} \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} \right) + O(h^4)$$

ただしここで追加された記号は上と同様に次のように定義されたものである .

$$\tilde{\Delta} u_{i+5/2} = \frac{1}{m^{++}} (u_{i+3} - u_{i+2}), \quad \tilde{\Delta}^2 u_{i+2} = \frac{2}{m^+ + m^{++}} (\tilde{\Delta} u_{i+5/2} - \tilde{\Delta} u_{i+3/2}),$$

$$\tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} = \frac{3}{m_0} (\tilde{\Delta}^2 u_{i+2} - \tilde{\Delta}^2 u_{i+1})$$

また $m^{++} = (x_{i+3} - x_{i+2})/h$, $m_0 = 1 + m^+ + m^{++}$ である . 上式を微分すれば次式が得られる .

$$u'(x) = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2!} (2\alpha - 1) \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{1}{3!} C_1(\alpha) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} \right\} + O(h^3) \quad (6.36a)$$

$$u''(x) = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{1}{3} (3\alpha - 2 - m^+) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} \right\} + O(h^2) \quad (6.36b)$$

$$u'''(x) = \frac{1}{h^3} \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} + O(h) \quad (6.36c)$$

ただし $C_1(\alpha) = \alpha(\alpha - 1) + (2\alpha - 1)(\alpha - 1 - m^+)$ である . $\alpha = 0$ と置けば次の片側差分の式が得られる .

$$u'_i = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} - \frac{1}{2!} \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{1}{3!} (1 + m^+) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} \right\} + O(h^3) \quad (6.37a)$$

$$u''_i = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} - \frac{1}{3} (2 + m^+) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} \right\} + O(h^2) \quad (6.37b)$$

6.3.4 4次式に基づく数値微分

4次補間公式は3次補間式とそれを4次にする補正項の和で表せば次のようになる。

$$u(x) = u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha (\alpha - 1) \left[\tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (\alpha + m^-) \left\{ \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4} (\alpha - 1 - m^+) \tilde{\Delta}^4 u_i \right\} \right] \\ + \frac{1}{5!} (\alpha + m^{--} + m^-) (\alpha + m^-) \alpha (\alpha - 1) (\alpha - 1 - m^+) h^5 u_i^{(5)} + \dots$$

ただし

$$\tilde{\Delta} u_{i-3/2} = \frac{1}{m^{--}} (u_{i-1} - u_{i-2}), \quad \tilde{\Delta}^2 u_{i-1} = \frac{2}{m^{--} + m^-} (\tilde{\Delta} u_{i-1/2} - \tilde{\Delta} u_{i-3/2}), \\ \tilde{\Delta}^3 u_{i-1/2} = \frac{3}{m_{-2}} (\tilde{\Delta}^2 u_i - \tilde{\Delta}^2 u_{i-1}), \quad \tilde{\Delta}^4 u_i = \frac{4}{\bar{m}} (\tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} - \tilde{\Delta}^3 u_{i-1/2})$$

また $m^{--} = (x_{i-1} - x_{i-2})/h$, $m_{-2} = m^{--} + m^- + 1$, $\bar{m} = m_{-2} + m^+$ である。上式を微分すれば次式が得られる。

$$u'(x) = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2!} (2\alpha - 1) \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3!} C(\alpha) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right. \\ \left. + \frac{1}{4!} ((\alpha + m^-) \alpha (\alpha - 1) + C(\alpha) (\alpha - 1 - m^+)) \tilde{\Delta}^4 u_i \right\} + O(h^4) \quad (6.38a)$$

$$u''(x) = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (3\alpha + m^- - 1) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right. \\ \left. + \frac{1}{12} (C(\alpha) + (3\alpha + m^- - 1) (\alpha - 1 - m^+)) \tilde{\Delta}^4 u_i \right\} + O(h^3) \quad (6.38b)$$

$$u'''(x) = \frac{1}{h^3} \left\{ \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4} (4\alpha + m^- - 2 - m^+) \tilde{\Delta}^4 u_i \right\} + O(h^2) \quad (6.38c)$$

$$u^{(4)}(x) = \frac{1}{h^4} \tilde{\Delta}^4 u_i + O(h) \quad (6.38d)$$

また $\alpha = 0$ の中心差分の式は次のようになる。

$$u'_i = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} - \frac{1}{2!} \tilde{\Delta}^2 u_i - \frac{1}{3!} m^- \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4!} m^- (1 + m^+) \tilde{\Delta}^4 u_i \right\} + O(h^4) \quad (6.39a)$$

$$u''_i = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (m^- - 1) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} - \frac{1}{12} (m^- + (m^- - 1) (1 + m^+)) \tilde{\Delta}^4 u_i \right\} + O(h^3) \quad (6.39b)$$

$$u'''_i = \frac{1}{h^3} \left\{ \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4} (m^- - 2 - m^+) \tilde{\Delta}^4 u_i \right\} + O(h^2) \quad (6.39c)$$

上記の4次補間公式で $\tilde{\Delta}^4 u_i$ の代わりに $\tilde{\Delta}^4 u_{i+1}$ を用いれば、次の数値微分の式が得られる。

$$u'(x) = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2!} (2\alpha - 1) \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3!} C(\alpha) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right. \\ \left. + \frac{1}{4!} ((\alpha + m^-) \alpha (\alpha - 1) + C(\alpha) (\alpha - 1 - m^+)) \tilde{\Delta}^4 u_{i+1} \right\} + O(h^4) \quad (6.40a)$$

$$u''(x) = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (3\alpha + m^- - 1) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right. \\ \left. + \frac{1}{12} (C(\alpha) + (3\alpha + m^- - 1) (\alpha - 1 - m^+)) \tilde{\Delta}^4 u_{i+1} \right\} + O(h^3) \quad (6.40b)$$

$$u'''(x) = \frac{1}{h^3} \left\{ \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4} (4\alpha + m^- - 2 - m^+) \tilde{\Delta}^4 u_{i+1} \right\} + O(h^2) \quad (6.40c)$$

$$u^{(4)}(x) = \frac{1}{h^4} \tilde{\Delta}^4 u_{i+1} + O(h) \quad (6.40d)$$

また $\alpha = 0$ の差分式は次のようになる .

$$u'_i = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} - \frac{1}{2!} \tilde{\Delta}^2 u_i - \frac{1}{3!} m^- \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4!} m^- (1+m^+) \tilde{\Delta}^4 u_{i+1} \right\} + O(h^4) \quad (6.41a)$$

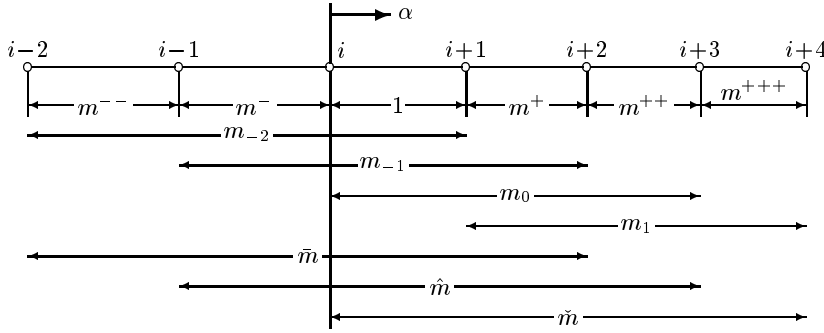
$$u''_i = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (m^- - 1) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} - \frac{1}{12} (m^- + (m^- - 1)(1+m^+)) \tilde{\Delta}^4 u_{i+1} \right\} + O(h^3) \quad (6.41b)$$

$$u'''_i = \frac{1}{h^3} \left\{ \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4} (m^- - 2 - m^+) \tilde{\Delta}^4 u_{i+1} \right\} + O(h^2) \quad (6.41c)$$

ここで新たに使われた記号は次のように定義されたものである .

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta} u_{i+5/2} &= \frac{1}{m^{++}} (u_{i+3} - u_{i+2}), & \tilde{\Delta}^2 u_{i+2} &= \frac{2}{m^+ + m^{++}} (\tilde{\Delta} u_{i+5/2} - \tilde{\Delta} u_{i+3/2}) \\ \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} &= \frac{3}{m_0} (\tilde{\Delta}^2 u_{i+2} - \tilde{\Delta}^2 u_{i+1}), & \tilde{\Delta}^4 u_{i+1} &= \frac{4}{\hat{m}} (\tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} - \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2}) \end{aligned}$$

また $m^{++} = (x_{i+3} - x_{i+2})/h$, $\hat{m} = m^- + m_0$ である .



次に片側差分の式を 4 次 Lagrange 補間多項式を書換えた次式から求めることにする .

$$u(x) = u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha (\alpha - 1) \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{\alpha - 1 - m^+}{3} (\tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} + \frac{\alpha - m_0}{4} \tilde{\Delta}^4 u_{i+2}) \right\} + O(h^5)$$

ここで新たに使われた記号も上と同様に定義される .

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta} u_{i+7/2} &= \frac{1}{m^{+++}} (u_{i+4} - u_{i+3}), & \tilde{\Delta}^2 u_{i+3} &= \frac{2}{m^{++} + m^{+++}} (\tilde{\Delta} u_{i+7/2} - \tilde{\Delta} u_{i+5/2}), \\ \tilde{\Delta}^3 u_{i+5/2} &= \frac{3}{m_1} (\tilde{\Delta}^2 u_{i+3} - \tilde{\Delta}^2 u_{i+2}), & \tilde{\Delta}^4 u_{i+2} &= \frac{4}{\tilde{m}} (\tilde{\Delta}^3 u_{i+5/2} - \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2}) \end{aligned}$$

また $m^{+++} = (x_{i+4} - x_{i+3})/h$, $\tilde{m} = 1 + m_1$ である . 上式を微分すれば次式が得られる .

$$u'(x) = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2!} (2\alpha - 1) \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{1}{3!} C_1(\alpha) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} + \frac{1}{4!} (\alpha(\alpha - 1)(\alpha - 1 - m^+) + C_1(\alpha)(\alpha - m_0)) \tilde{\Delta}^4 u_{i+2} \right\} + O(h^4) \quad (6.42a)$$

$$u''(x) = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{1}{3} (3\alpha - 2 - m^+) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} + \frac{1}{12} (C_1(\alpha) + (3\alpha - 2 - m^+)(\alpha - m_0)) \tilde{\Delta}^4 u_{i+2} \right\} + O(h^3) \quad (6.42b)$$

$$u'''(x) = \frac{1}{h^3} \left\{ \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} + \frac{1}{4} (4\alpha - 3 - 2m^+ - m^{++}) \tilde{\Delta}^4 u_{i+2} \right\} + O(h^2) \quad (6.42c)$$

$$u^{(4)}(x) = \frac{1}{h^4} \tilde{\Delta}^4 u_{i+2} + O(h) \quad (6.42d)$$

$\alpha = 0$ の片側差分の式は次のようになる .

$$u'_i = \frac{1}{h} \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} - \frac{1}{2!} \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{1}{3!} (1+m^+) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} - \frac{1}{4!} (1+m^+) m_0 \tilde{\Delta}^4 u_{i+2} \right\} + O(h^4) \quad (6.43a)$$

$$u''_i = \frac{1}{h^2} \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} - \frac{1}{3} (2+m^+) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} + \frac{1}{12} (1+m^+ + (2+m^+) m_0) \tilde{\Delta}^4 u_{i+2} \right\} + O(h^3) \quad (6.43b)$$

$$u'''_i = \frac{1}{h^3} \left\{ \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2} - \frac{1}{4} (3+2m^+ + m^{++}) \tilde{\Delta}^4 u_{i+2} \right\} + O(h^2) \quad (6.43c)$$

以上不等間隔の場合の数値微分の式を , 不等間隔の場合の差分を用いコンパクトに表示した . これらの式は , 基になる Lagrange 補間多項式の表現が多様性を持つので , 多様な表示が可能である . 次に不等間隔の差分式の例をいくつか示す . 2 次補間公式から得られる式 (6.33a) , (6.33b) は u_j の 1 次式の形に書換えれば次のようになる .

$$u'_i = \frac{1}{h_{i-1} + h_i} \left\{ \frac{h_{i-1}}{h_i} (u_{i+1} - u_i) + \frac{h_i}{h_{i-1}} (u_i - u_{i-1}) \right\} + O(h^2)$$

$$u''_i = \frac{2}{h_{i-1} + h_i} \left\{ \frac{1}{h_i} (u_{i+1} - u_i) - \frac{1}{h_{i-1}} (u_i - u_{i-1}) \right\} + O(h)$$

ただし $h_i = x_{i+1} - x_i$ である . これらの式は広く使われている不等間隔の差分式である . 他の式も同様に書換えることができるが , 3 次以上の補間公式から得られる式は簡単なものにはならない . 例えば 3 次補間公式に基づく 1 階微分の片側差分の式は次のようになる .

$$u'_i = \frac{1}{h_0} \left\{ \frac{h_i (h_i + h_{i+1})}{(h_{i+1} + h_{i+2}) h_{i+2}} (u_{i+3} - u_{i+2}) - \frac{h_i}{h_{i+1}} \left(2 + \frac{h_{i+2}}{h_i + h_{i+1}} + \frac{h_i + h_{i+1}}{h_{i+1} + h_{i+2}} \right) (u_{i+2} - u_{i+1}) \right. \\ \left. + \left(\frac{h_0}{h_i} + 2 + \frac{h_{i+2}}{h_i + h_{i+1}} \right) (u_{i+1} - u_i) \right\} + O(h^3)$$

ただし $h_0 = h_i + h_{i+1} + h_{i+2}$ である .

6.3.5 差分式

上記の不等間隔の場合の数値微分の式は , 等間隔の場合には $m^- = m^- = m^+ = \dots = 1$ となるので簡単になり , 以下に示す周知の差分式になる .

$$u'_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{h} + O(h), \quad u'_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + O(h)$$

$$u'_i = \frac{1}{2h} (u_{i-2} - 4u_{i-1} + 3u_i) + O(h^2), \quad u'_i = \frac{1}{2h} (-u_{i-1} + u_{i+1}) + O(h^2),$$

$$u'_i = \frac{1}{2h} (-3u_i + 4u_{i+1} - u_{i+1}) + O(h^2)$$

$$u'_i = \frac{1}{6h} (-2u_{i-1} - 3u_i + 6u_{i+1} - u_{i+2}) + O(h^3)$$

$$u'_i = \frac{1}{6h} (-11u_i + 18u_{i+1} - 9u_{i+2} + 2u_{i+3}) + O(h^3)$$

$$u'_i = \frac{1}{12h} (u_{i-2} - 8u_{i-1} + 8u_{i+1} - u_{i+2}) + O(h^4)$$

$$u'_i = \frac{1}{12h} (-3u_{i-1} - 10u_i + 18u_{i+1} - 6u_{i+2} + u_{i+3}) + O(h^4)$$

$$u'_i = \frac{1}{12h} (-25u_i + 48u_{i+1} - 36u_{i+2} + 16u_{i+3} - 3u_{i+4}) + O(h^4)$$

$$u_i'' = \frac{1}{h^2}(u_{i-2} - 2u_{i-1} + u_i) + O(h), \quad u_i'' = \frac{1}{h^2}(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) + O(h^2),$$

$$u_i'' = \frac{1}{h^2}(u_i - 2u_{i+1} + u_{i+2}) + O(h)$$

$$u_i'' = \frac{1}{h^2}(2u_i - 5u_{i+1} + 4u_{i+2} - u_{i+3}) + O(h^2)$$

$$u_i'' = \frac{1}{12h^2}(-u_{i-2} + 16u_{i-1} - 30u_i + 16u_{i+1} - u_{i+2}) + O(h^4)$$

$$u_i'' = \frac{1}{12h^2}(11u_{i-1} - 20u_i + 6u_{i+1} + 4u_{i+2} - u_{i+3}) + O(h^3)$$

$$u_i'' = \frac{1}{12h^2}(35u_i - 104u_{i+1} + 114u_{i+2} - 56u_{i+3} + 11u_{i+4}) + O(h^3)$$

$$u_i''' = \frac{1}{h^3}(-u_{i-1} + 3u_i - 3u_{i+1} + u_{i+2}) + O(h)$$

$$u_i''' = \frac{1}{h^3}(-u_i + 3u_{i+1} - 3u_{i+2} + u_{i+3}) + O(h)$$

$$u_i''' = \frac{1}{2h^3}(-u_{i-2} + 2u_{i-1} - 2u_{i+1} + u_{i+2}) + O(h^2)$$

$$u_i''' = \frac{1}{2h^3}(-3u_{i-1} + 10u_i - 12u_{i+1} + 6u_{i+2} - u_{i+3}) + O(h^2)$$

$$u_i''' = \frac{1}{2h^3}(-5u_i + 18u_{i+1} - 24u_{i+2} + 14u_{i+3} - 3u_{i+4}) + O(h^2)$$

$$u_i^{(4)} = \frac{1}{h^4}(u_{i-2} - 4u_{i-1} + 6u_i - 4u_{i+1} + u_{i+2}) + O(h^2)$$

$$u_i^{(4)} = \frac{1}{h^4}(u_{i-1} - 4u_i + 6u_{i+1} - 4u_{i+2} + u_{i+3}) + O(h)$$

$$u_i^{(4)} = \frac{1}{h^4}(u_i - 4u_{i+1} + 6u_{i+2} - 4u_{i+3} + u_{i+4}) + O(h)$$

これらの式の打ち切り誤差は一般には多項式の次数を j 、微分の階数を n とすれば $O(h^{j-n+1})$ になる。しかしながら例外もあり、例えば 2 階差分の 2 つめの式では誤差が 1 次小さくなる。これは式 (6.32b) を見れば明らかで、等間隔 $\alpha = 0$ の場合には打ち切り誤差の第 1 項めがゼロになるからである。中心差分では対称性によりこのようなことが起きるのである。なお大きい係数を持つ式は不安定性を招くおそれのあることに注意しなければならない。

6.4 各種補間公式に基づく数値微分

前 2 章に述べた補間公式ないしは近似関数は一般に微分可能で、これより各種の数値微分公式を導くことができる。ここには Newton 前進補間公式などの差分形補間公式、スプライン、指数関数を用いた補間式に基づく数値微分について述べる。数値微分の式の精度は補間式よりも 1 ランク下がり、不連続性も顕在化してくる。指数スプラインや指数関数を用いた補間式に基づく微分は不安定性を緩和する目的で、また最小 2 乗スプラインに基づく微分はばらつきのあるデータに対して用いられる。ここまでの記述で十分と思うが、以下に数値微分の式を一通り示すことにする。これらの式の使用に際しては式に誤りがないとはいえないので、十分にチェックすることをお奨めする。

6.4.1 差分形補間公式に基づく数値微分

Newton の補間公式は，等間隔の場合に使用されるもので，等間隔の Lagrange 補間公式と見かけは違いますが等価なものである．これに関してはすでに片側差分として前項に述べた．このタイプの数値微分としては Stirling 補間公式に基づくものが知られている．4 次の補間公式

$$u(x) = u_i + \alpha \frac{\Delta u_{i+1/2} + \Delta u_{i-1/2}}{2} + \frac{1}{2!} \alpha^2 \Delta^2 u_i + \frac{1}{3!} \alpha (\alpha^2 - 1) \frac{\Delta^3 u_{i+1/2} + \Delta^3 u_{i-1/2}}{2} + \frac{1}{4!} \alpha^2 (\alpha^2 - 1) \Delta^4 u_i + O(h^5) \quad (-1/2 \leq \alpha \leq 1/2)$$

を微分すれば次式が得られる．

$$u'(x) = \frac{1}{h} \left\{ \frac{\Delta u_{i+1/2} + \Delta u_{i-1/2}}{2} + \alpha \Delta^2 u_i + \frac{1}{6} (3\alpha^2 - 1) \frac{\Delta^3 u_{i+1/2} + \Delta^3 u_{i-1/2}}{2} + \frac{1}{12} \alpha (2\alpha^2 - 1) \Delta^4 u_i \right\} + O(h^4) \quad (6.44a)$$

$$u''(x) = \frac{1}{h^2} \left\{ \Delta^2 u_i + \alpha \frac{\Delta^3 u_{i+1/2} + \Delta^3 u_{i-1/2}}{2} + \frac{1}{12} (6\alpha^2 - 1) \Delta^4 u_i \right\} + O(h^3) \quad (6.44b)$$

$$u'''(x) = \frac{1}{h^3} \left\{ \frac{\Delta^3 u_{i+1/2} + \Delta^3 u_{i-1/2}}{2} + \alpha \Delta^4 u_i \right\} + O(h^2) \quad (6.44c)$$

$$u^{(4)}(x) = \frac{1}{h^4} \Delta^4 u_i + O(h) \quad (6.44d)$$

また特に $\alpha = 0$ の場合には次のようになる．

$$u'_i = \frac{1}{h} \left\{ \frac{\Delta u_{i+1/2} + \Delta u_{i-1/2}}{2} - \frac{1}{6} \frac{\Delta^3 u_{i+1/2} + \Delta^3 u_{i-1/2}}{2} \right\} + O(h^4) \quad (6.45a)$$

$$u''_i = \frac{1}{h^2} \left(\Delta^2 u_i - \frac{1}{12} \Delta^4 u_i \right) + O(h^3) \quad (6.45b)$$

$$u'''_i = \frac{1}{h^3} \frac{\Delta^3 u_{i+1/2} + \Delta^3 u_{i-1/2}}{2} + O(h^2) \quad (6.45c)$$

中間点 $x_{i+1/2}$ に対しては，4 次の Bessel 補間公式

$$u(x) = \frac{u_i + u_{i+1}}{2} + \left(\alpha - \frac{1}{2}\right) \Delta u_{i+1/2} + \frac{1}{2!} \alpha (\alpha - 1) \frac{\Delta^2 u_i + \Delta^2 u_{i+1}}{2} + \frac{1}{3!} \alpha (\alpha - 1) \left(\alpha - \frac{1}{2}\right) \Delta^3 u_{i+1/2} + \frac{1}{4!} (\alpha^2 - 1) \alpha (\alpha - 2) \frac{\Delta^4 u_i + \Delta^4 u_{i+1}}{2} + O(h^5) \quad (0 \leq \alpha \leq 1)$$

を微分し， $\alpha = 1/2$ と置けば次式が得られる．

$$u'_{i+1/2} = \Delta u_{i+1/2} - \frac{1}{4} \Delta^3 u_{i+1/2} + O(h^4) \quad (6.46a)$$

$$u''_{i+1/2} = \frac{\Delta^2 u_i + \Delta^2 u_{i+1}}{2} - \frac{5}{24} \frac{\Delta^4 u_i + \Delta^4 u_{i+1}}{2} + O(h^3) \quad (6.46b)$$

$$u'''_{i+1/2} = \Delta^3 u_{i+1/2} + O(h^2) \quad (6.46c)$$

$$u^{(4)}_{i+1/2} = \frac{\Delta^4 u_i + \Delta^4 u_{i+1}}{2} + O(h) \quad (6.46d)$$

6.4.2 スプラインに基づく数値微分

3次スプラインは区分的3次曲線で接点で関数とその2階微分までが連続になる．6.2.2項に示した3次スプラインの式(6.13)を微分すれば次式が得られる．

$$u'(x) = \frac{\Delta x_i}{2} \{-(1-\alpha)^2 u_i'' + \alpha^2 u_{i+1}''\} - u_i + \frac{\Delta x_i}{6} u_i'' + u_{i+1} - \frac{\Delta x_i}{6} u_{i+1}'' \quad (6.47a)$$

$$u''(x) = (1-\alpha)u_i'' + \alpha u_{i+1}'' \quad (6.47b)$$

ただし $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$, $\alpha = (x - x_i)/\Delta x_i$, u_j'' の求め方については4.3.1項を参照されたい．

指数スプラインは3次スプラインの不安定性をある程度改善したものである．6.2.2項に示した指数スプラインの式(6.15)を微分すれば次式が得られる．

$$u'(x) = \frac{1}{p_i \sinh \Delta x_i p_i} \{ -\cosh((1-\alpha)\Delta x_i p_i) u_i'' + \cosh(\alpha \Delta x_i p_i) u_{i+1}'' \} \\ - \frac{1}{\Delta x_i} \left(u_i - \frac{1}{p_i^2} u_i'' \right) + \frac{1}{\Delta x_i} \left(u_{i+1} - \frac{1}{p_i^2} u_{i+1}'' \right) \quad (6.48a)$$

$$u''(x) = \frac{1}{\sinh \Delta x_i p_i} \{ \sinh((1-\alpha)\Delta x_i p_i) u_i'' + \sinh(\alpha \Delta x_i p_i) u_{i+1}'' \} \quad (6.48b)$$

ただし p_i はスプライン曲線にかかる張力で, 0 ならば3次スプライン, ∞ ならば折れ線になる．適当の値を指定するものもあるが, 4.3.2項のものは区間ごとの値が状況に応じ自動的に決まるようになっている． u_j'' の求め方については4.3.2項を参照されたい．

最小2乗スプラインはばらつきのある多数のデータに適用できるものである．6.2.2項に示した最小2乗スプラインの式(6.17)を微分すれば次式が得られる．

$$u'(x) = \frac{\Delta x_i}{2} \{ -(1-\alpha)^2 u_i'' + \alpha^2 u_{i+1}'' \} + \frac{1}{\Delta x_i} (-a_2 + a_3) \quad (6.49a)$$

$$u''(x) = (1-\alpha)u_i'' + \alpha u_{i+1}'' \quad (6.49b)$$

ただし a_2, a_3 はこの式が区間 $[x_i, x_{i+1}]$ で与えられたデータを平均的に満足するように最小2乗法によって求められる． a_2, a_3 と u_j'' の求め方はやや複雑で, その求め方と FORTRAN プログラムについては4.4.1項を参照されたい．

6.4.3 指数関数を用いた補間式に基づく数値微分

関数値が境界に向かって急激に変化する場合には, 境界のところに指数関数を用いた式を用いることによって, ごく自然にこのような関数を近似することができる．6.2.3項に述べた指数関数を用いる補間公式(6.19)を微分すれば次式が得られる．

$$u'(x) = \frac{1}{\Delta x} \left[\Delta u_{i+1/2} + \frac{1}{R-1} \left(\frac{\log R}{R-1} R^\alpha - 1 \right) \Delta^2 u_{i+1} \right] \quad (6.50a)$$

$$u''(x) = \frac{1}{\Delta x^2} \frac{(\log R)^2}{(R-1)^2} R^\alpha \Delta^2 u_{i+1} \quad (6.50b)$$

この式は曲率比 $R = \Delta^2 u_{i+1} / \Delta^2 u_i < 0, \approx 0, 1, \rightarrow \infty$ では使えないが, 関数値が急激に変化する境界ではこのようにはならない．なお境界は $i-1, \alpha = -1$ または $i+2, \alpha = 2$ にあるものとする．これらの数値微分の式は境界の近傍にのみ用いられることが多い．