2. 数値微分法.

数値微分が必要になる場合として、次の2つが考えられる。

- 関数が与えられていて、その微分を近似的に計算する。（数値微分の精度が十分で、かつ、計算速度が数値微分の方が早い場合など。）
- 離散的な点の上で離散的なデータしかわかっていない関数の微分を近似的に計算する。（偏微分方程式の数値解を求めたい時など。）

数値微分の公式は補間多項式の微分から導くことが出来る。

$$f(x) = p_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_{n,i}(x)\, f_i \;, \qquad L_{n,i}(x) := \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

例) 3 つのデータ点 x_{-1}, x_0, x_1 を使った2階微分 $f''(x)$ の数値微分公式.

$$f(x) = p_2(x) + \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x-x_{-1})(x-x_0)(x-x_1)$$

補間多項式

$$p_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_{-1}-x_0)(x_{-1}-x_1)}f_{-1} + \frac{(x-x_{-1})(x-x_1)}{(x_0-x_{-1})(x_0-x_1)}f_0 + \frac{(x-x_{-1})(x-x_0)}{(x_1-x_{-1})(x_1-x_0)}f_1$$

補間多項式を微分する。

$$\begin{aligned} f''(x) = p_2''(x) &+ \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(3x-x_{-1}-x_0-x_1) && \approx O(\Delta x) \\ &+ 2\frac{d}{dx}\left[\frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}\right]\frac{d}{dx}\left[(x-x_{-1})(x-x_0)(x-x_1)\right] && \approx O(\Delta x^2) \\ &+ \frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}\right](x-x_{-1})(x-x_0)(x-x_1) && \approx O(\Delta x^3) \end{aligned}$$

$$p_2''(x) = \frac{2}{(x_{-1}-x_0)(x_{-1}-x_1)}f_{-1} + \frac{2}{(x_0-x_{-1})(x_0-x_1)}f_0 + \frac{2}{(x_1-x_{-1})(x_1-x_0)}f_1$$

この公式は1次精度である。ただし、データ点 x_i を等間隔にし、この公式を中点 $x = x_0$ で使うと $O(\Delta x)$ の誤差が打ち消し2次精度になる。

数値微分の公式を、Taylor展開を利用して求めることも出来る。この方法は、有限差分近似を求める場合などにも使われる。
データ点（差分点abscissas）が等間隔に並んでいる場合には、次の様になる。

まず、関数 $f(x)$ をx_i の周りでTaylor展開する。

$$
\begin{aligned}
f_{i+2} &= f(x_i) + f'(x_i)2h + \frac{1}{2!}f''(x_i)(2h)^2 + \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)(2h)^3 + \frac{1}{4!}f^{(4)}(x_i)(2h)^4 + O(h^5) \\
f_{i+1} &= f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2!}f''(x_i)\ h^2 + \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)\ h^3 + \frac{1}{4!}f^{(4)}(x_i)\ h^4 + O(h^5) \\
f_i &= f(x_i) \\
f_{i-1} &= f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{1}{2!}f''(x_i)\ h^2 - \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)\ h^3 + \frac{1}{4!}f^{(4)}(x_i)\ h^4 + O(h^5) \\
f_{i-2} &= f(x_i) - f'(x_i)2h + \frac{1}{2!}f''(x_i)(2h)^2 - \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)(2h)^3 + \frac{1}{4!}f^{(4)}(x_i)(2h)^4 + O(h^5)
\end{aligned}
$$

ただし、 $f_i := f(x_i),\ f_{i+1} := f(x_i + h),\ f_{i+2} := f(x_i + 2h)$
$f_{i-1} := f(x_i - h),\ f_{i-2} := f(x_i - 2h),$

色々な差分を試してみる。

$$
f_1 - f_{-1} = 2f'(x_i)\,h + \frac{2}{3!}f^{(3)}(x_i)\,h^3 + O(h^5) \longrightarrow f'(x_i) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + O(h^2)
$$

課題2-1) n次補間多項式の Lagrange form と Newton form からそれぞれ、
１階微分の数値微分の公式を導け。

課題 2-2) 等間隔のデータ点 の場合に以下のような１階微分 f’(x) の
数値微分公式を求めよ。(Maple を利用してみよ。)

a) 2次精度の前進，後退および中心差分公式。

b) 3次精度の公式。

c) 4次精度の中心差分公式。

課題 2-3) 等間隔の5つのデータ点を使った2階微分 $f''(x)$ の数値微分
公式を誤差の項も含めて求めよ。

課題 2-4) 指数関数 e^x の x=1 での数値微分の値を、2次および4次精度
の中心差分公式を使って、等間隔データ点の場合について
計算せよ。データ点の間隔を$\Delta x = 10^{-n}$ とした時、相対誤差
がそれぞれ $O(\Delta x^2)$、と $O(\Delta x^4)$ で減少して行くか確かめよ。
(これを確かめるために、対数プロットを作ってみよ。)
ただし、n は1 から32まで変化させてみるものとする。