打ち切り誤差

- 計算を途中までで打ち切ることに生じる誤差
  - 無限級数の計算など.
  - 数値微分でもTaylor展開の次数を有限で打ち切ることで生じる

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2!}h^2 f''(x) + \frac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{1}{2!}hf''(x) + \frac{1}{3!}h^2 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!}h^3 f^{(4)}(x) + \cdots$$

数値微分の精度

- Taylor展開した近似値を組み合わせて打ち切り誤差の次数を高くすることで，数値微分の近似精度を高める．

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2!} h f''(x) - \frac{1}{3!} h^2 f^{(3)}(x) - \frac{1}{4!} h^3 f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h) \qquad \text{一次精度}$$

$$f(x \pm h) = f(x) \pm h f'(x) + \frac{1}{2!} h^2 f''(x) \pm \frac{1}{3!} h^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!} h^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{2}{3!} h^2 f^{(3)}(x) + \frac{2}{5!} h^4 f^{(5)}(x) + \cdots$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \qquad \text{二次精度}$$

より高次精度の数値微分

$$f(x)$$

$$f(x \pm h) = f(x) \pm hf'(x) + \frac{1}{2!}h^2 f''(x) \pm \frac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f(x \pm 2h) = f(x) \pm (2h) f'(x) + \frac{1}{2!}(2h)^2 f''(x) \pm \frac{1}{3!}(2h)^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!}(2h)^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

5つの式を組み合わせて，

$$f'(x) = a\, f(x+2h) + b\, f(x+h) + c\, f(x) + d\, f(x-h) + e\, f(x-2h) + O(h^4)$$

4次精度の数値微分近似式ができる．（a～eを求めることが課題）
さらに，2つの式を組み合わせれば6次精度の近似式ができる．

$$f(x \pm 3h) = f(x) \pm (3h) f'(x) + \frac{1}{2!}(3h)^2 f''(x) \pm \frac{1}{3!}(3h)^3 f^{(3)}(x) + \frac{1}{4!}(3h)^4 f^{(4)}(x) + \cdots$$

数値積分

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

区間$[a,b]$をN等分する． $h = \dfrac{b-a}{N}$

$$I_N = h\left[\frac{1}{2}f(a) + \sum_{n=1}^{N-1} f(x+nh) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

- Euler-Maclaurinの公式を用いて誤差を評価

$$I_N - I = c_2 h^2\left[f'(b) - f'(a)\right] + c_4 h^4\left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right]$$
$$+\cdots + c_{2k} h^{2k}\left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right] + O(h^{2k+2})$$

cはh, fに依存しない定数

数値積分の高次精度公式

$$I_N^{(1)} = \frac{I_N - \dfrac{I_{N/2}}{4}}{1 - \dfrac{1}{4}}$$

$$I_N^{(1)} - I = c_4^{(1)} h^4 \left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a) \right] + \cdots + c_{2k}^{(1)} h^{2k} \left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right] + O(h^{2k+2})$$

- Simpson則

$$I_N^{(1)} \sim \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{n=1}^{N/2-1} f(a+2nh) + 4 \sum_{n=1}^{N/2} f(a+(2n-1)h) \right]$$

数値積分の高次精度公式

- Richardson補外

$$I_N^{(k)} = \frac{I_N^{(k-1)} - \frac{I_{N/2}^{(k-1)}}{4^k}}{1 - \frac{1}{4^k}} \qquad k = 2,3,\cdots$$

関数の近似　Lagrange補間

- (x_1,y_1), (x_2,y_2),…,(x_N,y_N) のN点を通るN-1次の多項式によって関数近似する.

$$L_j(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_N)}{(x_j-x_1)(x_j-x_2)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_N)},\ j=1,\ldots,N$$

$$L_j(x_k) = \delta_{jk} = \begin{cases} 1, & j=k \\ 0, & j\neq k \end{cases}$$

$$P_N(x) = \sum_{n=1}^{N} y_n L_n(x)$$

補間関数によって微分や積分をおこなうことができる。

関数の近似　スプライン補間 (1)

- 近似関数s(x)は，区間 $[x_j,x_{j+1}]$ j=0,1,...,N-1で3次式
- $s(x_j)=f(x_j)=f_j$ (j=0,1,...,N)
- s(x), s'(x), s"(x) が区間$[x_0,x_N]$で連続

区間$[x_j, x_{j+1}]$で2階微分は

$$s''(x)=\frac{x_{j+1}-x}{x_{j+1}-x_j}s''_j+\frac{x-x_j}{x_{j+1}-x_j}s''_{j+1}\quad (x_j\le x\le x_{j+1})$$

2回積分して $s(x_j)=f_j$, $s(x_{j+1})=f_{j+1}$となるようにすると

$$s(x)=\frac{(x_{j+1}-x)^3}{6(x_{j+1}-x_j)}s''_j+\frac{(x-x_j)^3}{6(x_{j+1}-x_j)}s''_{j+1}\qquad (x_j\le x\le x_{j+1})$$

$$+\left(\frac{f_j}{x_{j+1}-x_j}-\frac{x_{j+1}-x_j}{6}s''_j\right)(x_{j+1}-x)+\left(\frac{f_{j+1}}{x_{j+1}-x_j}-\frac{x_{j+1}-x_j}{6}s''_{j+1}\right)(x-x_j)$$

関数の近似　スプライン補間 (2)

区間[x_{j-1}, x_j]と[x_j, x_{j+1}]で1階微分を考えると

$$s_j'(x) = -\frac{x_{j+1}-x_j}{6}\left(2s_j'' + s_{j+1}''\right) + \frac{f_{j+1}-f_j}{x_{j+1}-x_j} \quad (x_j \le x \le x_{j+1})$$

$$s_j'(x) = \frac{x_j - x_{j-1}}{6}\left(2s_j'' + s_{j-1}''\right) + \frac{f_j - f_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \quad (x_{j-1} \le x \le x_j)$$

上式より

$$s(x) = \left(x_j - x_{j-1}\right)s_{j-1}'' + 2\left(x_{j+1} - x_{j-1}\right)s_j'' + \left(x_{j+1} - x_j\right)s_{j+1}''$$
$$= 6\left(\frac{f_{j+1}-f_j}{x_{j+1}-x_j} - \frac{f_j - f_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}\right), \quad j = 1, 2, \ldots, N-1$$

境界条件として　s''_0, s''_N などを与える必要がある.