数値解析 44－4
（1992．12．4）

数値微分の補外法の収束判定について

福井　義成
（株）東芝　総合情報システム部

本論文はm階微分 $f^{(m)}(x)$ の数値計算に補外法を適用した方法について述べたものである．微分点 x の近くの任意の点 $f(x_a)$ の計算が，可能であることを仮定する．ここでは数値微分に補外法を適用した場合の打ち切り誤差と丸め誤差を評価する．さらに，２つの誤差の関係から収束条件を導く．基礎となる微分公式には中点公式を用いる．補外の回数を重ねても，丸め誤差はあまり増大しない．丸め誤差は出発値の２５／１４倍を越えることはない．

Extrapolation for Numerical Differentiation

Yoshinari Fukui

TOSHIBA CORPORATION
Total Information and Systems Division
580-1, Horikawa-cho, Saiwai-ku, Kawasaki 210 JAPAN

We discuss the behavior of round-off error in an extrapolation process in order to obtain an accurate m-th derivative of f(x) under the condition for which f(x) can be computed at any points in the domain. The extrapolation process is applied to a central difference method, however, it is found that the round-off error does not increase so much, even if the number of iterations is quite large. The round-off error does not exceed 25/14 times of the maximum round-off error included in the starting values.

1．はじめに

m階微分 $f^{(m)}(x)$ の計算に補外法を適用した時の打切り誤差と丸め誤差を評価する[1]．1，2階微分については補外の例も示されているが[2,3,4,5,6,7,8]，丸め誤差についての詳しい報告はなされていない．基礎となる微分公式には中点公式を用いる．補外のためには高次の公式である必要はない（表1に中点公式の例を示す）．関数 $f(x)$ のm階微分 $f^{(m)}(x)$ を計算する場合，初期刻み幅を h_0 とし，補外を行い，打切り誤差の次数が高い値を順次求める．中点公式の打切り誤差は次のように表わされる.微分点 x の近くの任意の点 $f(x_a)$ の計算が，可能であることを仮定する．

$$[\text{数値微分公式}] = f^{(m)}(x) + \sum_{w=0}^{\infty} A_w h^{2w+2} \tag{1.1}$$

A_w は微分係数で決まる係数である．

表1．中点公式の例

m	中点公式	A_w
1	$\dfrac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$	$\dfrac{1}{(2w+3)!}f^{(2w+3)}(x)$
2	$\dfrac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$	$\dfrac{2}{(2w+4)!}f^{(2w+4)}(x)$
3	$\dfrac{f(x+2h)-2h(x+h)+2f(x-h)-f(x-2h)}{2h^3}$	$\dfrac{2^{2w+5}-2}{(2w+4)!}f^{(2w+5)}(x)$
4	$\dfrac{f(x+2h)-4f(x+h)+6f(x)-4f(x-h)+f(x-2h)}{h^4}$	$\dfrac{2^{2w+7}-8}{(2w+6)!}f^{(2w+6)}(x)$

補外の記号は $F^n{}_L$ のように表わし，n は刻み幅 h_0 から始めて，h_0 を 1/2 にした回数 $(h=h_0/2^n)$，L は補外回数を示す．$F^n{}_0$ の系列を初期系列値と呼ぶ．$F^n{}_0(n=0,1,2,\ )$ から出発し，補外の手順は表2のようになる[9,10,11]．

$$F^n{}_L = F^n{}_{L-1} + \frac{F^n{}_{L-1} - F^{n-1}{}_{L-1}}{4^L-1} \tag{1.2}$$

$F^n{}_L$ は $F^n{}_{L-1}$ を補正して得られる形になっている．ロンバーグ積分で n 回補外を行なうには関数計算を (2^n+1) 回行なう必要があるが，中点公式の数値微分では $(m+1)(n+1)$ 回ですむ．重複した点の関数計算を省略することにより，必要となる関数計算の回数はさらに減らすことができる．表1に示した中点公式では 2n+m+1 回で良い．従って，補外における関数計算の回数は問題にならない．この点が数値積分の補外法と大きく異なる．数値積分のように関数の計算点の増加による丸め誤差の累積もない．

表2　補外の手順

$n \backslash L$	0	1	2	3	4	5	6	7
0	F^0_0	$F^n_L = F^n_{L-1} + \dfrac{F^n_{L-1} - F^{n-1}_{L-1}}{4^L - 1}$						
1	F^1_0	F^1_1						
2	F^2_0	F^2_1	F^2_2					
3	F^3_0	F^3_1	F^3_2	F^3_3				
4	F^4_0	F^4_1	F^4_2	F^4_3	F^4_4			
5	F^5_0	F^5_1	F^5_2	F^5_3	F^5_4	F^5_5		
6	F^6_0	F^6_1	F^6_2	F^6_3	F^6_4	F^6_5	F^6_6	
7	F^7_0	F^7_1	F^7_2	F^7_3	F^7_4	F^7_5	F^7_6	F^7_7

2．打切り誤差

(1.2) の打切り誤差を評価する．初期刻み幅を h_0 とすると，F^n_0 は (2.1) のようになる．また，F^n_L の打切り誤差 $E_t(n,L)$ は高次項は無視すると (2.2) のように評価できる．A_w は表1の通りである．

$$F^n_0 = f^{(m)}(x) + \sum_{w=0}^{\infty} A_w \left(\frac{h_0}{2^n} \right)^{2w+2} \tag{2.1}$$

$$E_T(n,L) \fallingdotseq \prod_{t=1}^{L} \frac{4^{t-L-1} - 1}{4^t - 1} A_L \left(\frac{h_0}{2^{n-L}} \right)^{2L+2} = (-1)^L A_L \left(\frac{h_0}{2^{n-L/2}} \right)^{2L+2} \tag{2.2}$$

3．丸め誤差限界

F^n_L の丸め誤差を $E_R(n,L)$，丸め誤差限界を $E_{RB}(n,L)$ とする．$E_{RB}(n,0)$ は F^n_0 の丸め誤差限界であるから，次の様に評価できる[1]．

$$|E_R(n,0)| \leqq E_{RB}(n,0) = \frac{(N-1)\ b\ |f(x)|}{(h_0/2^n)^m}\ c\ p^{-q} \tag{3.1}$$

N:関数の計算回数　b:微分公式の係数の絶対値最大の値　p:計算の基数 (p=2,16 等)
q:p進法による計算桁数　c={p:切捨ての場合,p/2:四捨五入の場合}

数値微分では初期系列値 F^n_0 に入っている丸め誤差が大きいため，F^n_L を (1.2) 式のように計算するときの丸め誤差は計算桁の最後の桁程度であり，無視できる．したがって，F^n_L の丸め誤差 $E_R(n,L)$ は次の様に評価できる．

$$E_R(n,L) \fallingdotseq \frac{4^L E_R(n,L-1)-E_R(n-1,L-1)}{4^L-1} \tag{3.2}$$

$E_R(n,L)$を$E_R(n,0)$で評価する．(3.2) から$E_R(n,L)$ は次の様に表わすことができる．

$$E_R(n,L)=\sum_{i=0}^{L} g_i(L)\,E_R(n-i,0) \quad (L \leqq n)$$

$$g_i(L)=\Big[\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq L-i}}^{L}(1-4^{i+j-L})\Big]^{-1} \quad (i=0,1,2,\ \ ,L)$$

$g_0(L)$ と $|g_i(L)|$ の値は次の様に評価できる．

$$g_0(L)=\Big[\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq L}}^{L}(1-4^{j-L})\Big]^{-1}=\prod_{j=1}^{L}\frac{1}{1-4^{-j}} < \frac{1}{1-\sum_{j=1}^{L}4^{-j}} = \frac{1}{1-(1-4^{-L})/3} < \frac{3}{2}$$

$$|g_i(L)| = \left|\frac{1-4^{i-L-1}}{1-4^i}\,g_{i-1}(L)\right| < \left|\frac{g_{i-1}(L)}{1-4^i}\right| \qquad \begin{array}{l}(i=1,2,\cdots,L)\\(L \leqq n)\end{array}$$

ここで，$E_R(n,L)$ に対応する丸め誤差限界 $E_{RB}(n,L)$ を考えると次の様に評価できる．
(3.1) 式から初期系列値の丸め誤差限界は $E_{RB}(n-1,0)=2^{-m}E_{RB}(n,0)$ という関係があり，
これも利用する．

$$\begin{aligned}
E_{RB}(n,L) &= \sum_{i=0}^{L}|g_i(L)|\;E_{RB}(n-i,0) = \sum_{i=0}^{L}|g_i(L)|\,2^{-im}\;E_{RB}(n,0)\\
&< E_{RB}(n,0)\,g_0(L)\,\Big\{1+\sum_{i=1}^{L}\Big|\prod_{j=1}^{i}\frac{1}{1-4^j}\Big|\,2^{-im}\Big\}\\
&< E_{RB}(n,0)\,g_0(L)\,\Big\{1+\sum_{i=1}^{L}\frac{1}{(4^i-1)2^{im}}\Big\}\\
&< E_{RB}(n,0)\;\frac{3}{2}\;\Big(1+\frac{4}{21}\Big)=\frac{25}{14}\;E_{RB}(n,0)
\end{aligned} \tag{3.3}$$

(3.3) の評価は過大な評価にはなっていない．これは $g_0(L)$ が支配的な項だからである．
表３，４に$g_i(L)$と$\Sigma\ |g_i(L)|$の値を示す．

表3　$g_i(L)$の値

L	i	$g_i(L)$
0	0	1.000000000000000
1	0	1.333333333333333
1	1	-0.333333333333333
2	0	1.422222222222222
2	1	-0.444444444444444
2	2	0.022222222222222
3	0	1.444797178130512
3	1	-0.474074074074074
3	2	0.029629629629630
3	3	-0.000352733686067
4	0	1.450463049417298
4	1	-0.481599059376837
4	2	0.031604938271605
4	3	-0.000470311581423
4	4	0.000001383269357
5	0	1.451880901860521
5	1	-0.483487683139099
5	2	0.032106603958456
5	3	-0.000501665686851
5	4	0.000001844359143
5	5	-0.000000001352169

表4　$\Sigma\,|\,g_i(L)\,|$の値

m	L	$\sum_{i=0}^{L} \lvert g_i(L) \rvert$
1	0	1.000000000000000
1	1	1.500000000000000
1	2	1.650000000000000
1	3	1.689285714285714
1	4	1.699222689075630
1	5	1.701714217945243
1	6	1.702337556486615
1	7	1.702493419657873
2	0	1.000000000000000
2	1	1.416666666666667
2	2	1.534722222222222
2	3	1.565173059964727
2	4	1.572845476925338
2	5	1.574767331124905
2	6	1.575248029333429
3	0	1.000000000000000
3	1	1.375000000000000
3	2	1.478125000000000
3	3	1.504520089285714
3	4	1.511157677914916
3	5	1.512819508205878

25/14 = 1.7857142857142857142

4．収束条件

補外法の収束条件を考える．(2.2)の補正項 $(F^n{}_{L-1}-F^{n-1}{}_{L-1})\,/\,(4^L-1)$ が丸め誤差よりも小さくなってしまうと，補正の意味がなくなってしまう．丸め誤差自体は一般に評価が困難であるため，丸め誤差限界で収束判定を行なう．(4.1) 式を収束条件とする．

$$\frac{F^n{}_{L-1}-F^{n-1}{}_{L-1}}{4^L-1} < \frac{25}{14}\,E_{RB}(n,0) = \frac{25}{14}\,\frac{(N-1)\ b\ |f(x)|}{(h_0/2^n)^m}\ c\ p^{-q} \qquad (4.1)$$

補正項の丸め誤差限界$E_{RC}(n,L-1)$は (4.2) 式の様に評価できる．

$$E_{RC}(n,L-1)=\frac{E_{RB}(n,L-1)+E_{RB}(n-1,L-1)}{4^L-1}$$
$$<\frac{25\ \{E_{RB}(n,0)+E_{RB}(n-1,0)\}}{14\ (4^L-1)}=\frac{25(1+2^{-m})E_{RB}(n,0)}{14\ (4^L-1)} \qquad (4.2)$$

５．数値例

計算は適当な初期刻み幅 h_0 から始めて，収束条件を満足するまで補外を行なう．補外の手順は互いに独立であるため，使用した初期刻み幅 h_0 が小さすぎたときは，逆に刻み幅を２倍，４倍と大きくして補外を行い，収束条件を満足するところを求めればよい．

２つの数値例の表４，表５は上から$F^n{}_L$，相対誤差，絶対誤差，補正項の値，$E_{RB}(n,L)$，$E_{RC}(n,L-1)$ の値を表示してある．計算はすべて２進補数表示の０捨１入で行なっている．関数値は２進６３桁で計算し，２進２７桁に丸めている．

（例１） $f(x)=e^x(x=1)$ の２階微分の例を表５に示す$(h_0=4)$．

（例２） $f(x)=\sin x$ $(x=0.015625)$の１階微分の例を表６に示す$(h_0=0.0625)$．

６．むすび

中点公式を用いた数値微分に補外法を適用した場合の打ち切り誤差と丸め誤差限界を評価し，２つの誤差の関係から収束条件を導いた．ロンバーグ積分とは異なり，数値微分では補外の回数を重ねても，丸め誤差限界はあまり増大しない．丸め誤差限界は出発値の 25/14 倍を越えることはない．25/14≒1.785 であり，２進法では誤差が高々１ビット分増大するだけである．補正項の絶対値がこの丸め誤差限界よりも小さく場合を収束判定条件とする．数値例からもこの収束判定条件でほぼ誤差が最小になる所をとらえていることが分かる．計算は適当な初期刻み幅 h_0 から始めて，収束条件を満足するまで補外を行なう．補外の手順は互いに独立であるため，使用した初期刻み幅 h_0 が小さすぎたときは，逆に刻み幅を２倍，４倍と大きくして補外を行い，収束条件を満足するところを求めればよい．

参考文献

[1]永坂，福井：数値微分の誤差，情報処理学会論文誌，Vol.22,No.5,pp.411-416,(1981).
[2]ﾍﾝﾘｯﾁ,P.一松，平本，本田訳：数値解析の基礎，培風館，pp.239-242,(1972).
[3]Phillips,G.M.,Taylor,P.J.:Theory and Application of Numerical Analysis, Academic Press, pp.125-129, (1973).
[4]Johnson,L.W.,Riess,R.D.:Numerical Analysis, Addison-Wesley,pp.253-257,(1977).
[5]Ralston,A.,Rabinourity,P.: A First Cource in Numerical Analysis,second edition,McGraw-Hill,pp.93-95,(1978).
[6]Gerald,C.F.:Applied Numeical Analysis,second edition,Addison-Wesley, pp.201-204,(1978).
[7]Conte,S.D. and Boor,C.:Elementary Numerical Analysis,third edition, McGraw-Hill, pp.333-339,(1980).
[8]Stoer,J. and Bulirsch,R.:Introduction to Numerical Analysis, Springer-Verlag, pp.136-141,(1980).
[9]永坂秀子：計算機と数値解析，朝倉書店，pp.163-165,190-199,(1980).
[10]森，名取，鳥居：数値計算，岩波書店，pp.121-124,(1982).
[11]福井義成：日本応用数理学会平成4年度年会研究発表予稿集，pp.71-72,(1992).

表5　f（x）＝eˣ（x=1）の２階微分の例（$h_0=4$）

0	8.93914878D 00						
	2.28852906D 00						
	6.22086696D 00						
	0.						
	5.06319446D-09						
	0.						
1	3.75421321D 00	2.02590138D 00					
	3.81097859D-01	-2.54712533D-01					
	1.03593139D 00	-6.92380451D-01					
	-1.72831185D 00						
	2.02527778D-08	2.86914353D-08					
	8.43865744D-09						
2	2.95249245D 00	2.68525219D 00	2.72920892D 00				
	8.61612710D-02	-1.21509251D-02	4.01985101D-03				
	2.34210617D-01	-3.30296388D-02	1.09270880D-02				
	-2.67240256D-01	4.39567207D-02					
	8.10111114D-08	1.14765741D-07	1.24329553D-07				
	3.37546297D-08	9.56381176D-09					
3	2.77538681D 00	2.71635160D 00	2.71842489D 00	2.71825370D 00			
	2.10077488D-02	-7.10091918D-04	5.26280993D-05	-1.03471735D-05			
	5.71049818D-02	-1.93022996D-03	1.43058006D-04	-2.81265338D-05			
	-5.90352118D-02	2.07329393D-03	-1.71175079D-04				
	3.24044446D-07	4.59062965D-07	4.97318212D-07	5.07185636D-07			
	1.35018519D-07	3.82552470D-08	9.86742483D-09				
4	2.73246861D 00	2.71816254D 00	2.71828327D 00	2.71828103D 00	2.71828115D 00		
	5.21902344D-03	-4.38850147D-05	5.28778887D-07	-2.93495740D-07	-2.49641094D-07		
	1.41867766D-02	-1.19291838D-04	1.43737004D-06	-7.97804138D-07	-6.78594848D-07		
	-1.43060684D-02	1.20729208D-04	-2.24794661D-06	1.07171489D-07			
	1.29617778D-06	1.83625186D-06	1.98927285D-06	2.02874255D-06	2.03868736D-06		
	5.40074076D-07	1.53020988D-07	3.94696993D-08	9.94481640D-09			
5	2.72182274D 00	2.71827412D 00	2.71828157D 00	2.71828154D 00	2.71828154D 00	2.71828154D 00	
	1.30262806D-03	-2.83706526D-06	-9.61498298D-08	-1.07113491D-07	-1.07113491D-07	-1.07113491D-07	
	3.54091019D-03	-7.71194293D-06	-2.61362335D-07	-2.91164657D-07	-2.91164657D-07	-2.91164657D-07	
	-3.54862213D-03	7.43865968D-06	-2.69640059D-08	1.98682149D-09	3.78719639D-10		
	5.18471113D-06	7.34500743D-06	7.95709139D-06	8.11497018D-06	8.15474945D-06	8.16471371D-06	
	2.16029630D-06	6.12083953D-07	1.57878797D-07	3.97792656D-03	9.96425886D-09		
6	2.71916199D 00	2.71827507D 00	2.71827513D 00	2.71827504D 00	2.71827501D 00	2.71827501D 00	2.71827501D 00
	3.23792344D-04	-2.48622808D-06	-2.46430076D-06	-2.49719174D-06	-2.50815540D-06	-2.50815540D-06	-2.50815540D-06
	8.80158846D-04	-6.75826862D-06	-6.69866397D-06	-6.78807094D-06	-6.81787326D-06	-6.81787326D-06	-6.81787326D-06
	-8.86917114D-04	6.35782875D-08	-1.02179391D-07	-2.54780639D-08	-6.37996933D-09	-1.59382384D-09	
	2.07388445D-05	2.93800297D-05	3.18283655D-05	3.24598807D-05	3.26189978D-05	3.26588548D-05	3.26688240D-05
	8.64118522D-06	2.44833581D-06	6.31515189D-07	1.59117062D-07	3.98570354D-08	9.96912541D-09	

表6　f (x) = s i n　x　(x=0.015625) の1階微分の例 (h_0=0.0625)

0	9.99227099D-01						
	-6.50912506D-04						
	-6.50833050D-04						
	0.						
	9.31284679D-10						
	0.						
1	9.99715202D-01	9.99877900D-01					
	-1.62750481D-04	-3.22897706D-08					
	-1.62730614D-04	-3.22858290D-08					
	1.62700811D-04						
	1.86256936D-09	2.79385404D-09					
	9.31284679D-10						
2	9.99837250D-01	9.99877930D-01	9.99877930D-01				
	-4.06876202D-05	-2.48380985D-09	-2.48380985D-09				
	-4.06826536D-05	-2.48350665D-09	-2.48350665D-09				
	4.06826534D-05	1.98682149D-09					
	3.72513872D-09	5.58770808D-09	6.14647888D-09				
	1.86256936D-09	5.58770808D-10					
3	9.99867760D-01	9.99877930D-01	9.99877930D-01	9.99877930D-01			
	-1.01737679D-05	-2.48380985D-09	-2.48380985D-09	-2.48380985D-09			
	-1.01725260D-05	-2.48350665D-09	-2.48350665D-09	-2.48350665D-09			
	1.01700425D-05	0.	0.				
	7.45027744D-09	1.11754162D-08	1.22929578D-08	1.25856472D-08			
	3.72513872D-09	1.11754162D-09	2.92689471D-10				
4	9.99875396D-01	9.99877945D-01	9.99877945D-01	9.99877945D-01	9.99877945D-01		
	-2.53599047D-06	1.24191705D-08	1.24191705D-08	1.24191705D-08	1.24191705D-08		
	-2.53568091D-06	1.24176545D-08	1.24176545D-08	1.24176545D-08	1.24176545D-08		
	2.54561505D-06	9.93410743D-10	2.36526368D-10	5.84359262D-11			
	1.49005549D-08	2.23508323D-08	2.45859155D-08	2.51712945D-08	2.53193609D-08		
	7.45027744D-09	2.23508323D-09	5.85378941D-10	1.48066438D-10			
5	9.99877304D-01	9.99877937D-01	9.99877937D-01	9.99877937D-01	9.99877937D-01	9.99877937D-01	
	-6.28408985D-07	4.96768034D-09	4.96768034D-09	4.96768034D-09	4.96768034D-09	4.96768034D-09	
	-6.28332277D-07	4.96707394D-09	4.96707394D-09	4.96707394D-09	4.96707394D-09	4.96707394D-09	
	6.35782875D-07	-4.96705371D-10	-1.18263184D-10	-2.92179631D-11	-7.28306998D-12		
	2.98011097D-08	4.47016646D-08	4.91718311D-08	5.03425890D-08	5.06387218D-08	5.07129722D-08	
	1.49005549D-08	4.47016646D-09	1.17075788D-09	2.96132876D-10	7.42503253D-11		
6	9.99877810D-01	9.99877982D-01	9.99877982D-01	9.99877982D-01	9.99877982D-01	9.99877982D-01	9.99877982D-01
	-1.21707653D-07	4.96766214D-08	4.96766214D-08	4.96766214D-08	4.96766214D-08	4.96766214D-08	4.96766214D-08
	-1.21692796D-07	4.96705575D-08	4.96705575D-08	4.96705575D-08	4.96705575D-08	4.96705575D-08	4.96705575D-08
	1.68879827D-07	2.98023223D-09	7.09579104D-10	1.75307779D-10	4.36984199D-11	1.09166016D-11	
	5.96022195D-08	8.94033292D-08	9.83436622D-08	1.00685178D-07	1.01277444D-07	1.01425944D-07	1.01463097D-07
	2.98011097D-08	8.94033292D-09	2.34151577D-09	5.92265752D-10	1.48500651D-10	3.71523606D-11	