

数値微分の誤差†

永坂 秀子†† 福井 義成†††

従来、数値微分の誤差解析は、打ち切り誤差を中心としたものが大半であり、丸め誤差を考慮した誤差解析も、定性的なものが多く、定量的に扱った誤差評価式は、ほとんど1階微分に関するものに限られていた。また、誤差評価の対象となった数値微分公式も、限られた形のものであった。

本論文では、数値微分の誤差解析において、打ち切り誤差と丸め誤差を考慮し、両者の和が最小となる最適刻み幅とそのときの誤差の評価を行っている。与えられた数値微分公式について得られる最適刻み幅とそのときの誤差評価式は、微分階数と計算桁数によって、一般的に、あらわされており、次のようなことがいえる。

1. 最適刻み幅とそのときの数値微分の誤差は、関数 $f(x)$ と微分点 x に依存する。
2. 一般に、高次の数値微分公式（次数が高い公式は、多くの離散点が必要である）ほど、最適刻み幅は大きくなり、数値微分の誤差は小さくなる。
3. 高精度計算を行うと、数値微分の誤差は小さくなり、最適刻み幅も小さくなる。

1. ま え が き

一変数関数 $f(x)$ の離散点 $x_k (k=0, 1, 2, \dots)$ での関数値 $f(x_k)$ によって、 m 階導関数 $f^{(m)}(x)$ の値を計算する数値微分を考える。ここでは、微分点 x の近くの任意の点 x_0 において関数 $f(x_0)$ が、計算可能であると仮定する。微分点 x の近くの任意の点 x_0 における関数 $f(x_0)$ が、計算可能ではなく、ある与えられた点 x_f に対してだけ関数値が、与えられているような場合は、考えないこととする*。

離散点の数を一定にした数値微分公式の場合、無限桁計算であれば、離散点を近づければ近づけるほど、打ち切り誤差が小さくなり、誤差の小さい微分値を得ることができる。しかし、有限桁計算では、打ち切り誤差だけではなく、丸め誤差も入り、そのため、離散点を近づけても、限りなく誤差が小さくなることはない。適切な間隔の離散点を用いたとき、最も良い数値解が得られる。これらのことがらについての数値実験例は、1階微分に対しては、多くの報告がなされている²⁾⁻⁴⁾。本論文では、等間隔（刻み幅）の離散点を用いる数値微分公式に関して、有限桁で計算を行った場合の最適刻み幅とそのときの微分値の誤差評価式を、微分階数と近似の次数について一般化を行う。

† Error of Numerical Differentiation by HIDEKO NAGASAKA (Department of Mathematics, College of Science and Technology, Nihon University) and YOSHINARI FUKUI (NEC-TOSHIBA Information Systems, Inc.).

†† 日本大学理工学部数学科

††† 日電東芝情報システム(株)システム技術部

* このような場合はスプライン関数などのような区分的多項式近似によって数値微分を計算する方法等がある¹⁾。

2章において、等間隔の離散点を用いる数値微分公式の一般形を示す。3章において、関数 $f(x)$ の m 階微分 $f^{(m)}(x)$ を数値微分公式で近似した場合の打ち切り誤差の評価式を求める。4章において、 m 階微分 $f^{(m)}(x)$ を近似した数値微分公式で生じる丸め誤差を、丸め誤差の限界として評価する。5章において、打ち切り誤差と丸め誤差が、互いに打ち消し合わない場合の最適刻み幅とそのときの微分値の誤差の限界の評価式を求める。6章において、数値例を示す。

2. 数値微分公式

数値微分公式には、不等間隔の離散点における関数値を用いるものもあるが、ここでは、等間隔の離散点における関数値を用いる数値微分公式を考える。離散点の間隔（刻み幅）を h とする。2階微分の中点公式の場合は、

$$f''(x) \doteq \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}, \quad (2.1)$$

となる。 n 個の離散点を用いる m 階微分 $f^{(m)}(x)$ の数値微分公式は、一般に、次のようになる。

$$f^{(m)}(x) \doteq \frac{y}{h^m}, \quad y = \sum_{s=1}^n b_s f(x_s). \quad (2.2)$$

x_s と b_s は、離散点の数と配置によって決まる。(2.1) の場合は、 $x_1 = x-h$, $x_2 = x$, $x_3 = x+h$, $b_1 = b_3 = 1$, $b_2 = -2$, となる。

3. 打ち切り誤差

関数 $f(x)$ の m 階微分 $f^{(m)}(x)$ を計算する (2.2) の数値微分公式の打ち切り誤差の絶対値 $E_T(h)$ は、

関数 $f(x)$, 微分点 x , 数値微分公式が決まれば, 刻み幅 h だけの関数となる. $E_T(h)$ は, h の高次項の影響が無視でき, 第 1 項で近似できると仮定すると,

$$E_T(h) \doteq |a f^{(i+m)}(x)| h^i, \quad (3.1)$$

と評価できる. i と a は, 離散点の数と配置によって決まる. (2.1) の場合は, 次のようになる.

$$E_T(h) \doteq \frac{1}{12} |f^{(4)}(x)| h^2. \quad (3.2)$$

4. 丸め誤差

(2.2) の数値微分公式で, m 階微分 $f^{(m)}(x)$ を計算する場合の丸め誤差を評価する. 丸め誤差は, 打ち切り誤差のように, 誤差そのものを直接に評価することは, 一般に困難であるため, 誤差の上限を評価する.

浮動小数点表示における実数 A の丸め誤差は, 次のように考えられる. 実数 A を q 桁の p 進数で近似した場合の丸め誤差 R は,

$$\left. \begin{aligned} |R| &\leq |A| \cdot \{c \cdot p^{-q}\}, \\ c &= \begin{cases} p: \text{切り捨ての場合} \\ p/2: (p/2-1) \text{ 捨 } p/2 \text{ 入の場合} \end{cases} \end{aligned} \right\} (4.1)$$

と評価できる^{5),6)}.

(2.2) で数値微分を計算するときに入る丸め誤差には,

- (a) 分子の $y = \sum_{s=1}^n b_s f(x_s)$ の計算で入る丸め誤差
 (b) 分母の h^m の計算で入る丸め誤差
 (c) 除算で入る丸め誤差
- がある. 分子の y の計算で入る相対丸め誤差の限界 \tilde{R}_s は, 次のようになる.

$$\tilde{R}_s \doteq \frac{(n-1) \max_s |b_s \cdot f(x_s)|}{|y|} \cdot c \cdot p^{-q}. \quad (4.2)$$

分母の h^m の計算で入る相対丸め誤差の限界 \tilde{R}_m は, 次のようになる.

$$\tilde{R}_m \doteq m \cdot c \cdot p^{-q} \quad (4.3)$$

除算で入る相対丸め誤差の限界 \tilde{R}_d は, 次のようになる.

$$\tilde{R}_d \doteq c \cdot p^{-q} \quad (4.4)$$

\tilde{R}_m と \tilde{R}_d は, 乗除算の丸め誤差であり, 計算結果の値 ($h^m, f^{(m)}(x)$) が, 桁落ちを起すことはない. したがって, 浮動小数点表示での相対丸め誤差の限界 \tilde{R}_m, \tilde{R}_d は, それぞれ, 丸め誤差の単位の m 倍, 1 倍の程度である. しかし, \tilde{R}_s は, 加減算の丸め誤差であり,

計算結果の値 (y) が, 桁落ちを起す. したがって, 浮動小数点表示での相対丸め誤差の限界 \tilde{R}_s は, y が桁落ちを起した分だけ, 丸め誤差の単位の $(n-1)$ 倍よりも増幅され, \tilde{R}_s は, \tilde{R}_m や \tilde{R}_d よりも大きくなる (さらに, 数値微分では, 必ず $n > m$ である). したがって, 浮動小数点表示で計算される数値微分の丸め誤差の限界は, 分子の y の計算で入る丸め誤差の限界によって決まる*.

分子 y の丸め誤差 R_s は, 次のようになる.

$$R_s \doteq (n-1) \max_s |b_s \cdot f(x_s)| \cdot c \cdot p^{-q}. \quad (4.5)$$

n 個の $f(x_s)$ の指数部が同じ程度になるほど, h が充分小さくなれば, 最も大きい $|f(x_s)|$ を $|f(x)|$ で代用しても, 丸め誤差の限界の評価には, 充分である. $b = \max_s |b_s|$ とおくと, 次のようになる.

$$R_s \doteq (n-1) \cdot b \cdot |f(x)| \cdot c \cdot p^{-q}. \quad (4.6)$$

R_s は, 数値微分公式, 関数 $f(x)$, 微分点 x , 計算の方式**と計算桁数を決めれば, 定数になる. したがって, 数値微分の丸め誤差の限界 $E_R(h)$ は, 刻み幅 h だけの関数となり,

$$E_R(h) \doteq \frac{(n-1) \cdot b \cdot |f(x)|}{h^m} \cdot c \cdot p^{-q}, \quad (4.7)$$

と評価できる.

5. 最適刻み幅とそのときの誤差の限界

打ち切り誤差の絶対値 $E_T(h)$ は, 微分階数 m , 関数 $f(x)$, 微分点 x , 数値微分公式を決めると, 刻み幅 h だけの関数となり, $E_T(h)$ は h に関して増加関数である. 丸め誤差の限界 $E_R(h)$ も, 微分階数 m , 関数 $f(x)$, 微分点 x , 数値微分公式, 計算の方式と桁数を決めると, 刻み幅 h だけの関数となり, $E_R(h)$ は h に関して減少関数となる. 打ち切り誤差と丸め誤差が, 打ち消し合わないとして, 数値微分公式の誤差の限界 $E(h)$ は,

$$E(h) = E_T(h) + E_R(h), \quad (5.1)$$

となる. 打ち切り誤差と丸め誤差の絶対値が, 同程度で, 異符号の場合, 両者がたまたま打ち消し合い, (5.1) よりも誤差が小さくなることがある (数値例を参照). しかし, (5.1) よりも誤差が大きくなることはない. $E(h)$ は, 微分階数 m , 関数 $f(x)$, 微分点 x , 数値微分公式, 計算の方式と桁数を決めると, 刻み幅 h のみの関数となる. $E(h)$ を最小にする h は, $E(h)$

* 後に挙げる数値例は, この評価方法が妥当であることを示している.

** たとえば, 2進法で 0 捨 1 入など.

の形から、 $h > 0$ の範囲では、一意的に定まり、

$$\frac{dE(h)}{dh} = 0, \tag{5.2}$$

を満足する h である。この h を最適刻み幅 h_{opt} とする。また、相対誤差の限界を $\tilde{E}(h) = E(h) / |f^{(m)}(x)|$ ($f^{(m)}(x) \neq 0$) とすると、 h_{opt} , $E(h_{opt})$, $\tilde{E}(h_{opt})$ は、次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} h_{opt} &\doteq \alpha \left| \frac{f(x)}{f^{(i+m)}(x)} \right|^{\frac{1}{i+m}} \cdot p^{-\frac{1}{i+m}q}, \\ E(h_{opt}) &\doteq \beta |f^{(i+m)}(x)| \cdot \left| \frac{f(x)}{f^{(i+m)}(x)} \right|^{\frac{i}{i+m}} \cdot p^{-\frac{i}{i+m}q}, \\ \tilde{E}(h_{opt}) &\doteq \beta \left| \frac{f^{(i+m)}(x)}{f^{(m)}(x)} \right|^{\frac{i}{i+m}} \cdot p^{-\frac{i}{i+m}q}, \\ \alpha &= \left| \frac{b \cdot m \cdot (n-1) \cdot c}{a \cdot i} \right|^{\frac{1}{i+m}}, \\ \beta &= \frac{i+m}{m} |a| \cdot \left| \frac{b \cdot m \cdot (n-1) \cdot c}{a \cdot i} \right|^{\frac{i}{i+m}}. \end{aligned} \right\} \tag{5.3}$$

(5.3) を評価式 I とする。 h_{opt} のときの $E_T(h_{opt})$ と $E_R(h_{opt})$ の関係は、次のようになる。

$$E_T(h_{opt}) : E_R(h_{opt}) = m : i. \tag{5.4}$$

さらに、概算の評価を導く。普通に使われる数値微分公式と丸めの方法 (2進法0捨1入) では、表1に示す通り、 α と β は、1~3の程度である。ここでは、誤差の限界が、計算桁に対して、どの程度かを考えているので、 $\alpha \sim 1, \beta \sim 1$ として、(5.3) から α, β を省い

表1 数値微分公式のパラメータ α, β

Table 1 Parameter α, β of numerical differentiation formulas.

m	i	m	α	β
1	1	2	1.41	1.41
	2	2	1.14	0.655
	4	4	1.71	1.45
2	2	3	2.63	1.15
	4	5	2.76	1.95
	6	7	2.72	2.93
3	2	4	1.78	1.32
	4	6	1.94	1.93
4	2	5	2.56	1.65
	4	7	2.57	2.55

表2 評価式IIによる h_{opt}

Table 2 h_{opt} in eq. (5.7)

$m \backslash i$	1	2	3	4
1	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/4q}$	$p^{-1/2q}$
2	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/4q}$	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/2q}$
3	$p^{-1/4q}$	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/2q}$
4	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/2q}$	$p^{-1/2q}$

表3 評価式IIによる $\tilde{E}(h_{opt})$ (精度桁数)

Table 3 $\tilde{E}(h_{opt})$ in eq. (5.7) (significant digits)

$m \backslash i$	1	2	3	4
1	$\frac{1}{2}q$	$\frac{2}{3}q$	$\frac{3}{4}q$	$\frac{4}{5}q$
2	$\frac{1}{3}q$	$\frac{2}{4}q$	$\frac{3}{5}q$	$\frac{4}{6}q$
3	$\frac{1}{4}q$	$\frac{2}{5}q$	$\frac{3}{6}q$	$\frac{4}{7}q$
4	$\frac{1}{5}q$	$\frac{2}{6}q$	$\frac{3}{7}q$	$\frac{4}{8}q$

ても、差支えないとすると、次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} h_{opt} &\doteq \left| \frac{f(x)}{f^{(i+m)}(x)} \right|^{\frac{1}{i+m}} \cdot p^{-\frac{1}{i+m}q}, \\ E(h_{opt}) &\doteq |f^{(i+m)}(x)| \cdot \left| \frac{f(x)}{f^{(i+m)}(x)} \right|^{\frac{i}{i+m}} \cdot p^{-\frac{i}{i+m}q}, \\ \tilde{E}(h_{opt}) &\doteq \left| \frac{f^{(i+m)}(x)}{f^{(m)}(x)} \right|^{\frac{i}{i+m}} \cdot p^{-\frac{i}{i+m}q}. \end{aligned} \right\} \tag{5.5}$$

さらに、次の条件を満足している場合を考える。

$$\left. \begin{aligned} \left| \frac{f(x)}{f^{(i+m)}(x)} \right|^{\frac{1}{i+m}} &\sim 1, \\ \left| \frac{f^{(i+m)}(x)}{f^{(m)}(x)} \right| \cdot \left| \frac{f(x)}{f^{(i+m)}(x)} \right|^{\frac{i}{i+m}} &\sim 1. \end{aligned} \right\} \tag{5.6}$$

このとき、 h_{opt} と $\tilde{E}(h_{opt})$ は、次のようになる。

$$h_{opt} = p^{-\frac{1}{i+m}q}, \quad \tilde{E}(h_{opt}) = p^{-\frac{i}{i+m}q}. \tag{5.7}$$

(5.7) を評価式IIとする (表2, 表3参照)。

6. 数値例

図1~5は、刻み幅 2^{-M} ごとの相対誤差を示す。横軸には、刻み幅 h が 2^{-M} の形で目盛られ、縦軸に

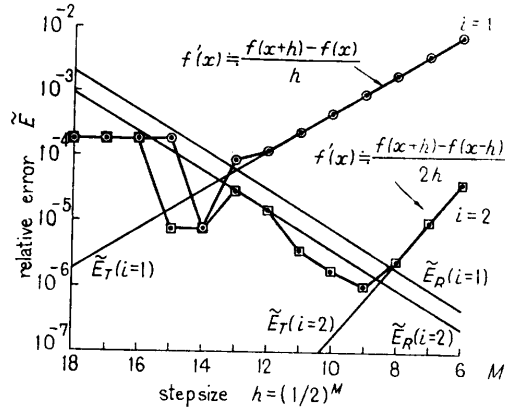


図1 $f(x)=e^x$ の $f'(1)$ の相対誤差

Fig. 1 Relative error for the first derivative $f'(1)$ of $f(x)=e^x$.

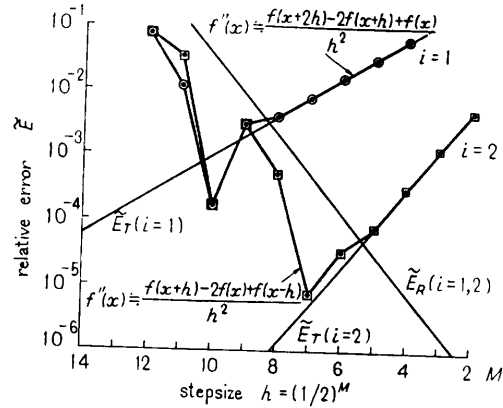


図2 $f(x)=e^x$ の $f''(1)$ の相対誤差

Fig. 2 Relative error for the second derivative $f''(1)$ of $f(x)=e^x$.

表4 関数 $f(x)=e^x$ の (5.7) による h_{opt} と $\tilde{E}(h_{opt})$
Table 4 h_{opt} and $\tilde{E}(h_{opt})$ in eq. (5.7) for $f(x)=e^x$

m	i	h_{opt}	$\tilde{E}(h_{opt})$
1	1	$8.63 \times 10^{-3} = 2^{-13.5}$	8.63×10^{-3}
	2	$1.95 \times 10^{-3} = 2^{-9}$	3.81×10^{-3}
2	1	$1.95 \times 10^{-3} = 2^{-9}$	1.95×10^{-3}
	2	$9.29 \times 10^{-3} = 2^{-4.75}$	8.63×10^{-3}

は、相対誤差がとられている。数値例は、すべて2進補数表示 27 ビット 0 捨 1 入で計算している。関数値は、63 ビットで計算し、28 ビット目を 0 捨 1 入して、27 ビットにしている。

(1) 評価式IIがあてはまる例

関数 $f(x)=e^x(x=1.0)$ の1階微分(打ち切り誤差のオーダー $i=1, 2$) の数値例を図1に示す。相対打ち切り誤差の絶対値 $\tilde{E}_T(h)$ と相対丸め誤差の限界 $\tilde{E}_R(h)$ も図示してある。

$f(x)=e^x$ は、 $f^{(j)}(x)=f(x)(j=1, 2, 3, \dots)$ となるので、(5.6) を満足しており、評価式IIがよくあてはまる例である(表4を参照)。刻み幅 h を小さくすると、最適刻み幅に到達するまでは、相対誤差 $\tilde{E}(h)$ が相対打ち切り誤差 $\tilde{E}_T(h)$ とよく一致している。 $i=1$ の場合は、 $i=m$ であり、(5.4) から、 $\tilde{E}_T(h_{opt})=\tilde{E}_R(h_{opt})$ であるから、相対誤差が最小となるのは、 $\tilde{E}_T(h)$ と $\tilde{E}_R(h)$ の線の交点付近である。 $h=2^{-14}$ で相対誤差が目立って小さくなっているのは、打ち切り誤差と丸め誤差が異符号となり、誤差同志がたまたま打ち消し合って、誤差が小さくなったものである。この現象は、打ち切り誤差と丸め誤差の絶対値が、ほぼ等しくなる h_{opt} の近くだけで起る。

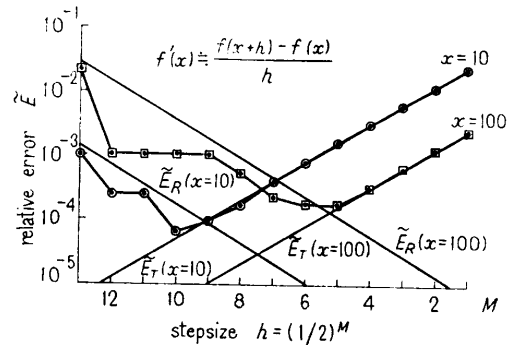


図3 $f(x)=\log x$ の $f'(x)$ の相対誤差 ($i=1$)

Fig. 3 Relative error for the first derivative $f'(x)$ of $f(x)=\log x$.

$i=2$ の場合は、 $m=1$ であるため、(5.4) で $E_T(h_{opt}): E_R(h_{opt})=1:2$ となり、誤差が最小となるのが、 $\tilde{E}_T(h)$ と $\tilde{E}_R(h)$ の線の交点より左にずれている。この例の場合、打ち切り誤差と丸め誤差が、たまたま打ち消し合い、誤差が小さくなる現象は、起っていない。

関数 $f(x)=e^x(x=1.0)$ の2階微分 ($i=1, 2$) の数値例を図2に示す。この例も、(5.6) の条件を満足しており、評価式IIがよくあてはまっている(表4を参照)。

$i=1$ の $h=2^{-10}$ のときと、 $i=2$ の $h=2^{-7}$ のときは、打ち切り誤差と丸め誤差が、打ち消し合って、誤差が小さくなっている。

(2) 評価式IIより誤差が大きくなる例

関数 $f(x)=\log x(x=10.0, 100.0)$ の1階微分 ($i=1$) の数値例を図3に示す。この例は、(5.6) の条件を満足していないので、評価式IIは、あてはまらない。

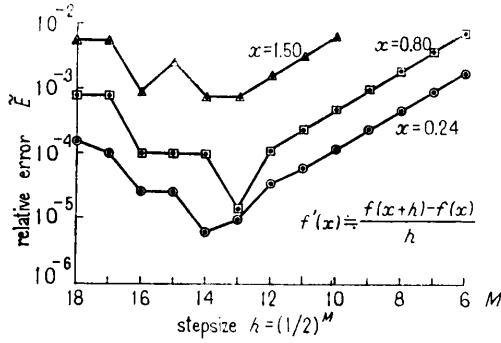


図4 $f(x)=\sin x$ の $f'(x)$ の相対誤差 ($i=1$)
 Fig. 4 Relative error for the first derivative $f'(x)$ of $f(x)=\sin x$.

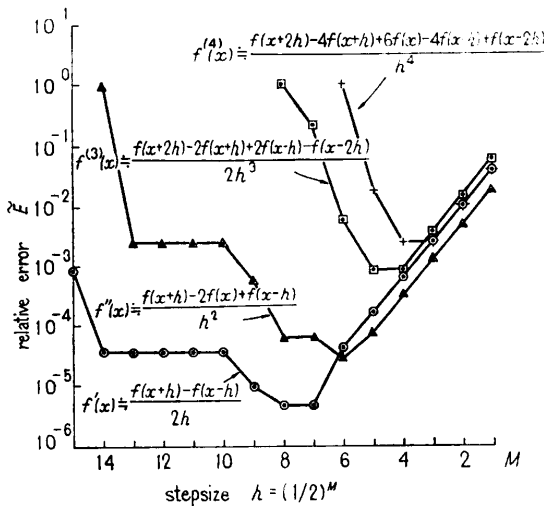


図5 $f(x)=\sin x$ の $f'(1.5), f''(1.5), f'''(1.5), f''''(1.5)$ の相対誤差 ($i=2$)
 Fig. 5 Relative error for $f'(1.5), f''(1.5), f'''(1.5)$ and $f''''(1.5)$ of $f(x)=\sin x$ ($i=2$).

適切な評価は、評価式Iで行わなければならない。関数 $f(x)=\log x$ は、 $f'(x)=1/x$ となり、 x の値によって、 $f'(x)$ は大きく変動する。評価式Iは、次のようになる。

$$h_{opt} \doteq \alpha x \sqrt{\log x} \cdot 2^{-\frac{27}{2}},$$

$$\tilde{E}(h_{opt}) \doteq \beta \sqrt{\log x} \cdot 2^{-\frac{27}{2}}.$$

表5と図3から、評価式IIはあてはまらないが、評価式Iはよく一致している。

(3) 評価式IIよりも誤差が大きくなったり、小さくなったりする例

関数 $f(x)=\sin x$ ($x=0.24, 0.80, 1.50$) の1階微分 ($i=1$) の数値例を図4に示す。評価式Iは、次の

表5 関数 $f(x)=\log x$ の h_{opt} と $\tilde{E}(h_{opt})$ ($m=1, i=1$)
 Table 5 h_{opt} and $\tilde{E}(h_{opt})$ for $f(x)=\log x$ ($m=1, i=1$).

estimation	h_{opt}	$\tilde{E}(h_{opt})$	
eq. (5.3)	$x=10$	$1.85 \times 10^{-3} \doteq 2^{-9.97}$	1.85×10^{-4}
	$x=100$	$2.61 \times 10^{-2} \doteq 2^{-5.28}$	2.61×10^{-4}
eq. (5.7)		$8.63 \times 10^{-5} \doteq 2^{-13.5}$	8.63×10^{-5}

表6 関数 $f(x)=\sin x$ の h_{opt} と $\tilde{E}(h_{opt})$ ($m=1, i=1$)
 Table 6 h_{opt} and $\tilde{E}(h_{opt})$ for $f(x)=\sin x$ ($m=1, i=1$).

estimation	h_{opt}	$\tilde{E}(h_{opt})$	
eq. (5.3)	$x=0.24$	$1.22 \times 10^{-4} \doteq 2^{-13}$	2.98×10^{-5}
	$x=0.80$	$1.22 \times 10^{-4} \doteq 2^{-13}$	1.25×10^{-4}
	$x=1.50$	$1.22 \times 10^{-4} \doteq 2^{-13}$	1.72×10^{-3}
eq. (5.7)		$8.63 \times 10^{-5} \doteq 2^{-13.5}$	8.63×10^{-5}

表7 関数 $f(x)=\sin x$ の h_{opt} と $\tilde{E}(h_{opt})$ ($i=2, x=1.5$)
 Table 7 h_{opt} and $\tilde{E}(h_{opt})$ for $f(x)=\sin x$ ($i=2, x=1.5$).

estimation	m	h_{opt}	$\tilde{E}(h_{opt})$
eq. (5.3)	1	$5.37 \times 10^{-3} \doteq 2^{-7.53}$	1.45×10^{-3}
	2	$2.44 \times 10^{-2} \doteq 2^{-4.38}$	9.92×10^{-3}
	3	$7.15 \times 10^{-2} \doteq 2^{-3.80}$	2.13×10^{-2}
	4	$1.13 \times 10^{-1} \doteq 2^{-3.14}$	3.22×10^{-2}
eq. (5.7)	1	$1.95 \times 10^{-3} \doteq 2^{-9}$	3.81×10^{-4}
	2	$9.29 \times 10^{-3} \doteq 2^{-4.76}$	8.63×10^{-3}
	3	$2.36 \times 10^{-2} \doteq 2^{-4.4}$	5.60×10^{-2}
	4	$4.41 \times 10^{-2} \doteq 2^{-4.5}$	1.95×10^{-2}

ようになる。

$$h_{opt} = \alpha \cdot 2^{-13.5}, \quad \tilde{E}(h_{opt}) \doteq \beta \cdot |\tan x| \cdot 2^{-13.5}$$

表6と図4から、評価式IIはあてはまらないが、評価式Iはよく一致している。

(4) 微分階数によって、評価式IIがあてはまる場合とあてはまらない場合がある例

関数 $f(x)=\sin x$ ($x=1.5 \doteq \pi/2$) の m 階微分 ($m=1, 2, 3, 4; i=2$) の数値例を図5に示す。評価式Iは、それぞれ

$m=1$ のとき、

$$h_{opt} \doteq 1.14 |\tan x|^{\frac{1}{3}} \cdot 2^{-9},$$

$$\tilde{E}(h_{opt}) \doteq 0.655 |\tan x|^{\frac{2}{3}} \cdot 2^{-18},$$

$m=2$ のとき、

$$h_{opt} \doteq 2.63 \cdot 2^{-6.75}, \quad \tilde{E}(h_{opt}) \doteq 1.15 \cdot 2^{-13.5},$$

$m=3$ のとき、

$$h_{\text{opt}} \doteq 1.78 |\tan x|^{\frac{1}{5}} \cdot 2^{-5.4},$$

$$\tilde{E}(h_{\text{opt}}) \doteq 1.32 |\tan x|^{\frac{2}{5}} \cdot 2^{-10.8},$$

$m=4$ のとき,

$$h_{\text{opt}} \doteq 2.56 \cdot 2^{-4.5}, \quad \tilde{E}(h_{\text{opt}}) \doteq 1.65 \cdot 2^{-9},$$

となる。微分階数が $m=1, 3$ のときは, h_{opt} と $\tilde{E}(h_{\text{opt}})$ が x の関数になっている。表7と図5から, $m=1, 3$ の場合, 評価式IIはあてはまらないが, 評価式Iはよく一致している。しかし, $m=2, 4$ の場合, h_{opt} と $\tilde{E}(h_{\text{opt}})$ が x の関数になっておらず, 評価式Iは, 評価式IIに微分階数と数値微分公式によって決まる定数 α, β を乗じた形になっている。この α, β は, たかだか1~3の程度であるので, 2つの評価式は, ほぼ同じであるとみなせる。図5の $m=2, 4$ の数値例は, 表7の評価式Iでも, 評価式IIでも充分であることを示している。

7. むすび

打ち切り誤差と丸め誤差の両者を考慮した数値微分公式の誤差評価式を得ることができた。この誤差評価式は, 微分階数と数値微分公式および計算桁数に対して, 一般化されている。

数値微分の誤差は, 関数, 微分点, 数値微分公式, 計算桁数によって決まる。数値微分の誤差を小さくするためには, 刻み幅を最適の値に取ればよいが, 評価式Iの結果よりも, 誤差を小さくすることはできない。誤差をさらに小さくするためには, 次のようにする必要はある。

1. 計算桁数を一定にした場合は, 数値微分公式の近似の次数を上げる。このとき, 一般的に, 最適刻み幅は, 大きくなる。(近似の次数を上げるには, 離散

点を増す必要がある。)

2. 数値微分公式を一定にした場合は, 計算桁数を多くする。このとき, 最適刻み幅は, 小さくなる。

最適刻み幅と誤差の限界の評価式は, 数値実験の結果とよく一致しており, 丸め誤差限界の評価が妥当であることを示している。

関数 $f(x)$ の高階微分の変動が大きい場合は, 概算の評価式IIが適用できる。評価式IIは, 上記(1), (2)の傾向を示しているので, 数値微分公式に対する最適刻み幅, 微分値の誤差の目安となる。

謝辞 本研究の機会を与えていただいた東芝平野菅保氏に深謝いたします。

参考文献

- 1) Abramowitz, Stegun: Handbook of Mathematical Functions, Dover, p. 914 (1965).
- 2) 山内, 森口, 一松編: 電子計算機のための数値計算法I, 培風館, pp. 90-95 (1965).
- 3) Ralston, A.: A First Course in Numerical Analysis, McGraw-Hill, pp. 76-83 (1965).
- 4) Phillips, G. M. and Taylor, P. J.: Theory and Applications of Numerical Analysis, Academic Press, pp. 120-129 (1973).
- 5) Yamashita, S.: On the Error Estimation in Floating-Point Arithmetic, 学位論文 (1973).
- 6) 山下真一郎: 浮動小数点演算における誤差評価について, 情報処理, Vol. 15, No. 12, pp. 935-939 (1974).
- 7) 永坂秀子, 福井義成: 数値微分の精度, 数理解析研究所講究録250, 京都大学数理解析研究所, pp. 13-35 (1975).
- 8) Samuel D. Conte, Carl de Boor: Elementary Numerical Analysis, Third Edition, pp. 284-293 (1980).

(昭和55年10月15日受付)

(昭和56年2月19日採録)