一般高次差分式の導出

安藤 芳晃

2023 年 6 月 28 日

1　一般式の導出

有限差分において、中心差分を用いたときの高次差分の一般的な式を導出する。

関数 $f(x)$ は $x=0$ のまわりで、次のようにテイラー展開できる。

$$f(x)=f(0)+f'(0)x+\frac{1}{2!}f''(0)x^2+\cdots=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}f^{(m)}(0)x^m \tag{1}$$

有限差分の離散化間隔を Δx とする。$x_{\pm n}=\pm(2n+1)\frac{\Delta x}{2}$ では

$$f(x_{\pm n})=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}f^{(m)}(0)(\pm1)^m\left(\frac{2n+1}{2}\right)^m\Delta x^m \tag{2}$$

従って、

$$\begin{aligned}f(x_{+n})-f(x_{-n})&=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}f^{(m)}(0)\{1-(\pm1)^m\}\left(\frac{2n+1}{2}\right)^m\Delta x^m\\&=2\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)!}f^{(2k+1)}(0)\left(\frac{2n+1}{2}\right)^{2k+1}\Delta x^{2k+1}\end{aligned} \tag{3}$$

級数を $k=K$ までとして、$p_n\equiv\frac{1}{2}\{f(x_{+n})-f(x_{-n})\}$ とおけば

$$\begin{bmatrix}p_0\\p_1\\\vdots\\p_K\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_{00}&a_{01}&\cdots&a_{0K}\\a_{10}&a_{11}&\cdots&a_{1K}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\a_{K0}&a_{K1}&\cdots&a_{KK}\end{bmatrix}\bullet\begin{bmatrix}f^{(1)}(0)\\f^{(3)}(0)\\\vdots\\f^{(2K+1)}(0)\end{bmatrix}=\mathbf{A}\bullet\begin{bmatrix}f^{(1)}(0)\\f^{(3)}(0)\\\vdots\\f^{(2K+1)}(0)\end{bmatrix} \tag{4}$$

$$a_{nk}=\frac{1}{(2k+1)!}\left(\frac{2n+1}{2}\right)^{2k+1}\Delta x^{2k+1} \tag{5}$$

ここから $\mathbf{B}=\mathbf{A}^{-1}$ として、行列 $\mathbf{B}$ の要素を b_{ij} とすれば

$$\begin{aligned}f'(0)&=b_{00}p_0+b_{01}p_1+\cdots+b_{0K}p_K\\&=\frac{b_{00}}{2}f(\tfrac{\Delta x}{2})-\frac{b_{00}}{2}f(-\tfrac{\Delta x}{2})+\frac{b_{01}}{2}f(\tfrac{3}{2}\Delta x)-\frac{b_{00}}{2}f(-\tfrac{3}{2}\Delta x)+\cdots\\&\quad+\frac{b_{0K}}{2}f(\tfrac{2K+1}{2}\Delta x)-\frac{b_{0K}}{2}f(-\tfrac{2K+1}{2}\Delta x)\end{aligned} \tag{6}$$

2　例

2.1　2 次精度 ($K=0$)

$K=0$ とすると、

$$a_{00}=\frac{\Delta x}{2}\quad\leftrightarrows\quad b_{00}=\frac{2}{\Delta x} \tag{7}$$

より、

$$f'(0)=\frac{f(\frac{\Delta x}{2})-f(-\frac{\Delta x}{2})}{\Delta x} \tag{8}$$

2.2　4 次精度 ($K = 1$)

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\Delta x & \frac{1}{3!}\frac{1}{2^3}\Delta x^3 \\ \frac{3}{2}\Delta x & \frac{1}{3!}\left(\frac{3}{2}\right)^3\Delta x^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\Delta x & \frac{1}{48}\Delta x^3 \\ \frac{3}{2}\Delta x & \frac{9}{16}\Delta x^3 \end{bmatrix} \tag{9}$$

より

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \frac{1}{(\frac{1}{2}\frac{9}{16} - \frac{3}{2}\frac{1}{48})\Delta x^4} \begin{bmatrix} \frac{9}{16}\Delta x^3 & -\frac{1}{48}\Delta x^3 \\ -\frac{3}{2}\Delta x & \frac{1}{2}\Delta x \end{bmatrix} = \frac{4}{\Delta x^4} \begin{bmatrix} \frac{9}{16}\Delta x^3 & -\frac{1}{48}\Delta x^3 \\ -\frac{3}{2}\Delta x & \frac{1}{2}\Delta x \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{9}{4}\frac{1}{\Delta x} & -\frac{1}{12}\frac{1}{\Delta x} \\ -\frac{6}{\Delta x^3} & \frac{2}{\Delta x^3} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{10}$$

従って、

$$f'(0) = \frac{9}{8}\frac{f(\frac{\Delta x}{2}) - f(-\frac{\Delta x}{2})}{\Delta x} - \frac{1}{24}\frac{f(\frac{3}{2}\Delta x) - f(-\frac{3}{2}\Delta x)}{\Delta x} \tag{11}$$