二階偏微分の非対角項における高精度数値差分法

森 渉　（森田加筆）

平成 31 年 11 月 29 日

多変数関数の高次偏微分を数値差分で求める場合、必要な計算点を最小限に留める工夫が可能である。ここでは、2 変数関数 $f(x,y)$ について、$(\partial^2 f/\partial x\partial y)$ を数値差分で求める方法を述べる。

1 変数関数の 4 点差分法を単純に拡張すると、$4\times 4=16$ 点の計算が必要であるが、精度を保ったまま 8 点で済ませせることができる。

1　二階偏微分の数値差分

2 変数テイラーの定理より、

$$
\begin{aligned}
&f(a+h_x,b+h_y)=f(a,b)\\
&+\hat{D}(h_x,h_y)f+\frac{1}{2!}\hat{D}^2(h_x,h_y)f+\frac{1}{3!}\hat{D}^3(h_x,h_y)f+\frac{1}{4!}\hat{D}^4(h_x,h_y)f+\frac{1}{5!}\hat{D}^5(h_x,h_y)f+\dots \qquad (1)
\end{aligned}
$$

但し、$\hat{D}(h_x,h_y)=h_x\dfrac{\partial}{\partial x}+h_y\dfrac{\partial}{\partial y}=\hat{X}+\hat{Y}$

$\hat{D}(h_x,h_y)$ について、以下の関係式が成り立つ。

$$\hat{D}^2(h_x,h_y)=\left(h_x\frac{\partial}{\partial x}+h_y\frac{\partial}{\partial y}\right)^2=h_x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+2h_yh_x\frac{\partial^2}{\partial y\partial x}+h_y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2} \qquad (2)$$

$$\hat{D}(ah_x,ah_y)=ah_x\frac{\partial}{\partial x}+ah_y\frac{\partial}{\partial y}=a\hat{D}(h_x,h_y) \qquad (a\text{ は定数}) \qquad (3)$$

$$\hat{D}^2(h_x,h_y)-\hat{D}^2(-h_x,h_y)=(\hat{X}+\hat{Y})^2-(-\hat{X}+\hat{Y})^2=4\hat{X}\hat{Y}=4h_xh_y\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} \qquad (4)$$

$$
\begin{aligned}
\hat{D}^4(h_x,h_y)-\hat{D}^4(-h_x,h_y)&=(\hat{X}+\hat{Y})^4-(-\hat{X}+\hat{Y})^4=8(\hat{X}^3\hat{Y}+\hat{X}\hat{Y}^3)\\
&=8\left(h_x^3h_y\frac{\partial^4}{\partial x^3\partial y}+h_xh_y^3\frac{\partial^4}{\partial x\partial y^3}\right) \qquad (5)
\end{aligned}
$$

1.1　2 点差分の拡張

$f(a\pm h_x,b\pm h_y)$ の 4 点から差分を求める。Eq. (1) より、

$$
\begin{aligned}
&f(a-h_x,b-h_y)=f(a,b)\\
&+\hat{D}(-h_x,-h_y)f+\frac{1}{2!}\hat{D}^2(-h_x,-h_y)f+\frac{1}{3!}\hat{D}^3(-h_x,-h_y)f+\frac{1}{4!}\hat{D}^4(-h_x,-h_y)f+\frac{1}{5!}\hat{D}^5(-h_x,-h_y)f+\dots\\
&=f(a,b)-\hat{D}(h_x,h_y)f+\frac{1}{2!}\hat{D}^2(h_x,h_y)f-\frac{1}{3!}\hat{D}^3(h_x,h_y)f+\frac{1}{4!}\hat{D}^4(h_x,h_y)f-\frac{1}{5!}\hat{D}^5(h_x,h_y)f+\dots
\end{aligned}
$$

これをもとに、$f(a\pm h_x,b\pm h_y)$ の和と差を求める。

$$f(a+h_x,b+h_y)+f(a-h_x,b-h_y)=2f(a,b)+2\frac{1}{2!}\hat{D}^2(h_x,h_y)f+2\frac{1}{4!}\hat{D}^4(h_x,h_y)f+\dots \tag{6}$$

$$f(a-h_x,b+h_y)+f(a+h_x,b-h_y)=2f(a,b)+2\frac{1}{2!}\hat{D}^2(-h_x,h_y)f+2\frac{1}{4!}\hat{D}^4(-h_x,h_y)f+\dots \tag{7}$$

Eq. (6) と (7) の差を $F(h_x,h_y)$ とする。

$$\begin{aligned}
F(h_x,h_y) &= f(a+h_x,b+h_y)+f(a-h_x,b-h_y)-(f(a-h_x,b+h_y)+f(a+h_x,b-h_y)) \quad (8)\\
&= 2\frac{1}{2!}(\hat{D}^2(h_x,h_y)-\hat{D}^2(-h_x,h_y))f+2\frac{1}{4!}(\hat{D}^4(h_x,h_y)-\hat{D}^4(-h_x,h_y))f+\dots\\
&= 4h_xh_y\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}f+2\frac{1}{4!}8(h_x^3h_y\frac{\partial^4}{\partial x^3\partial y}+h_xh_y^3\frac{\partial^4}{\partial x\partial y^3})f+O(h^6)
\end{aligned}$$

$$\therefore \quad \frac{\partial^2}{\partial x\partial y}f=\frac{F(h_x,h_y)}{4h_xh_y}+O(h^2) \tag{9}$$

ただし、変位 h_x と h_y は同オーダー h として、誤差の次数を $O(h^n)$ と表した。

1.2 4 点差分の拡張

上と同様に、図 1 の 8 点から差分を求める。$F(2h_x,2h_y)$ について

$$\begin{aligned}
F(2h_x,2h_y) &= 4(2h_x)(2h_y)\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}f+2\frac{1}{4!}8((2h_x)^3 2h_y\frac{\partial^4}{\partial x^3\partial y}+(2h_x)(2h_y)^3\frac{\partial^4}{\partial x\partial y^3})f+\dots\\
&= 16h_xh_y\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}f+16*2\frac{1}{4!}8(h_x^3h_y\frac{\partial^4}{\partial x^3\partial y}+h_xh_y^3\frac{\partial^4}{\partial x\partial y^3})f+\dots
\end{aligned}$$

よって、$16F(h_x,h_y)-F(2h_x,2h_y)$ をとって第二項を消すことができる。

$$\begin{aligned}
16F(h_x,h_y)-F(2h_x,2h_y) &= 16*4h_xh_y\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}f-16h_xh_y\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}f+\dots\\
&= 48h_xh_y\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}f+\dots
\end{aligned}$$

$$\therefore \quad \frac{\partial^2}{\partial x\partial y}f=\frac{16F(h_x,h_y)-F(2h_x,2h_y)}{48h_xh_y}+O(h^4) \tag{10}$$

ただし、

$$F(h_x,h_y)=f(a+h_x,b+h_y)+f(a-h_x,b-h_y)-(f(a-h_x,b+h_y)+f(a+h_x,b-h_y)) \tag{8}$$

$$F(2h_x,2h_y)=f(a+2h_x,b+2h_y)+f(a-2h_x,b-2h_y)-(f(a-2h_x,b+2h_y)+f(a+2h_x,b-2h_y)) \tag{11}$$

交差微分 $(\partial^2 f/\partial x\partial y)$ は、Eq. (10) によって 8 点の数値微分で求められる。誤差のオーダー $O(h^4)$ は 4 点差分を 2 回行った結果と同等である。後者では x, y それぞれに対して 4 点差分を行うので、全部で 16 点の計算が必要で、Eq. (10) は半分の計算量で済む。

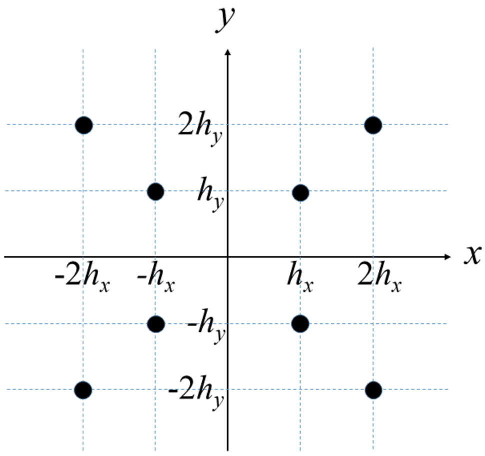

図 1: 数値差分の点の配置。黒丸の 8 点から導出できる。