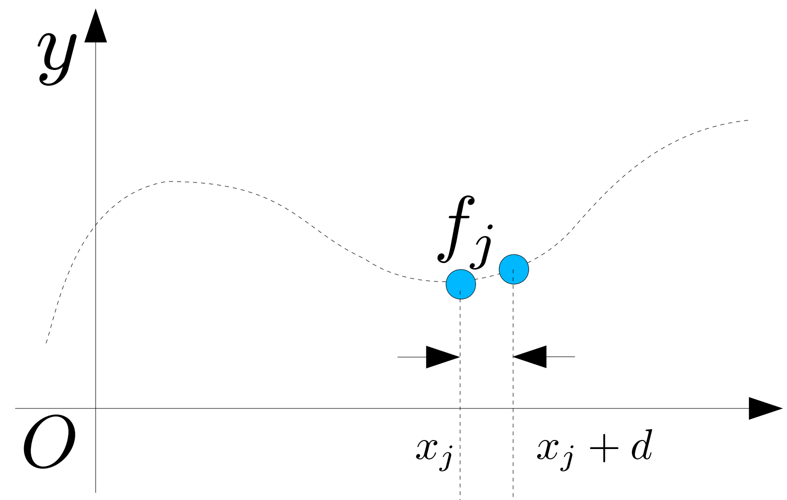
関数値の計算により導関数値を近似する数値微分と異なり、差分による微分の近似は、関数を表現する十分な数の分点を前提に分点における関数値を利用して導関数を近似します。

差分

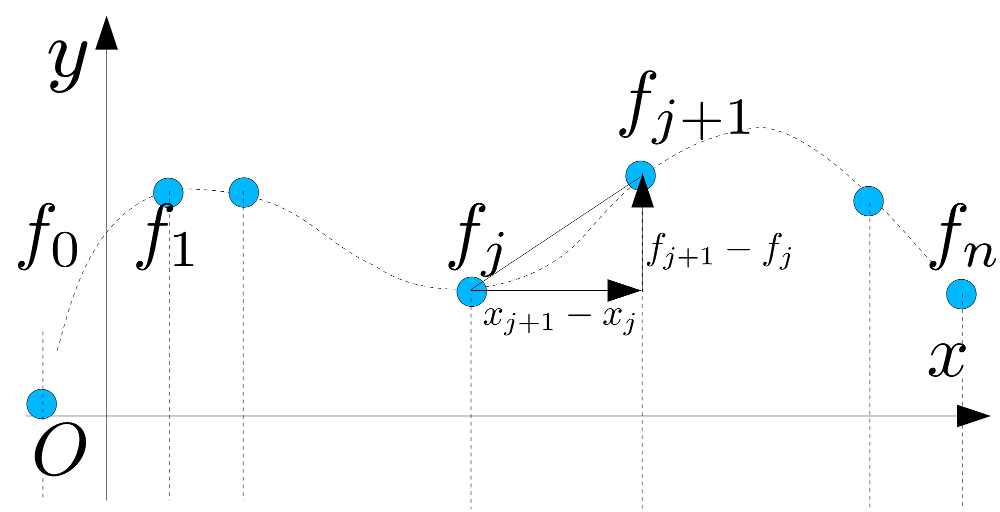
- 数値微分

$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_j+d)-f(x_j)}{d} \qquad d \to 0$$



- 差分(前進差分)

$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{x_{j+1}-x_j}$$

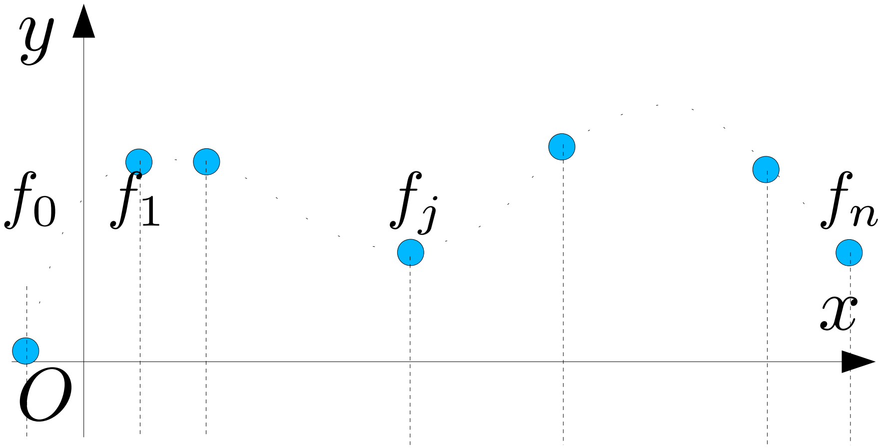


差分の前提となる分点を$x_1,\ldots,x_n$とし、分点毎に関数値$f(x_1),\ldots,f(x_n)$が与えられているなら、その各分点において差分による近似を考えることになります。

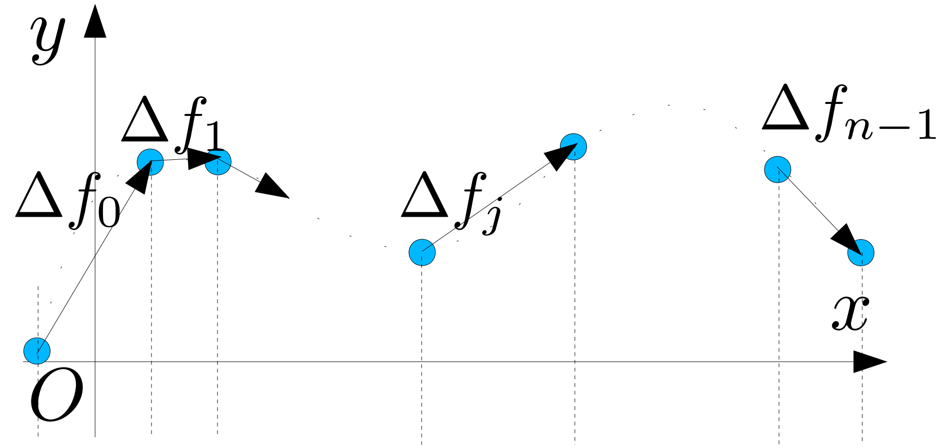
差分

- 差分近似

前進差分: $\left.\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \dfrac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{x_{j+1}-x_j}$



分点毎の関数値

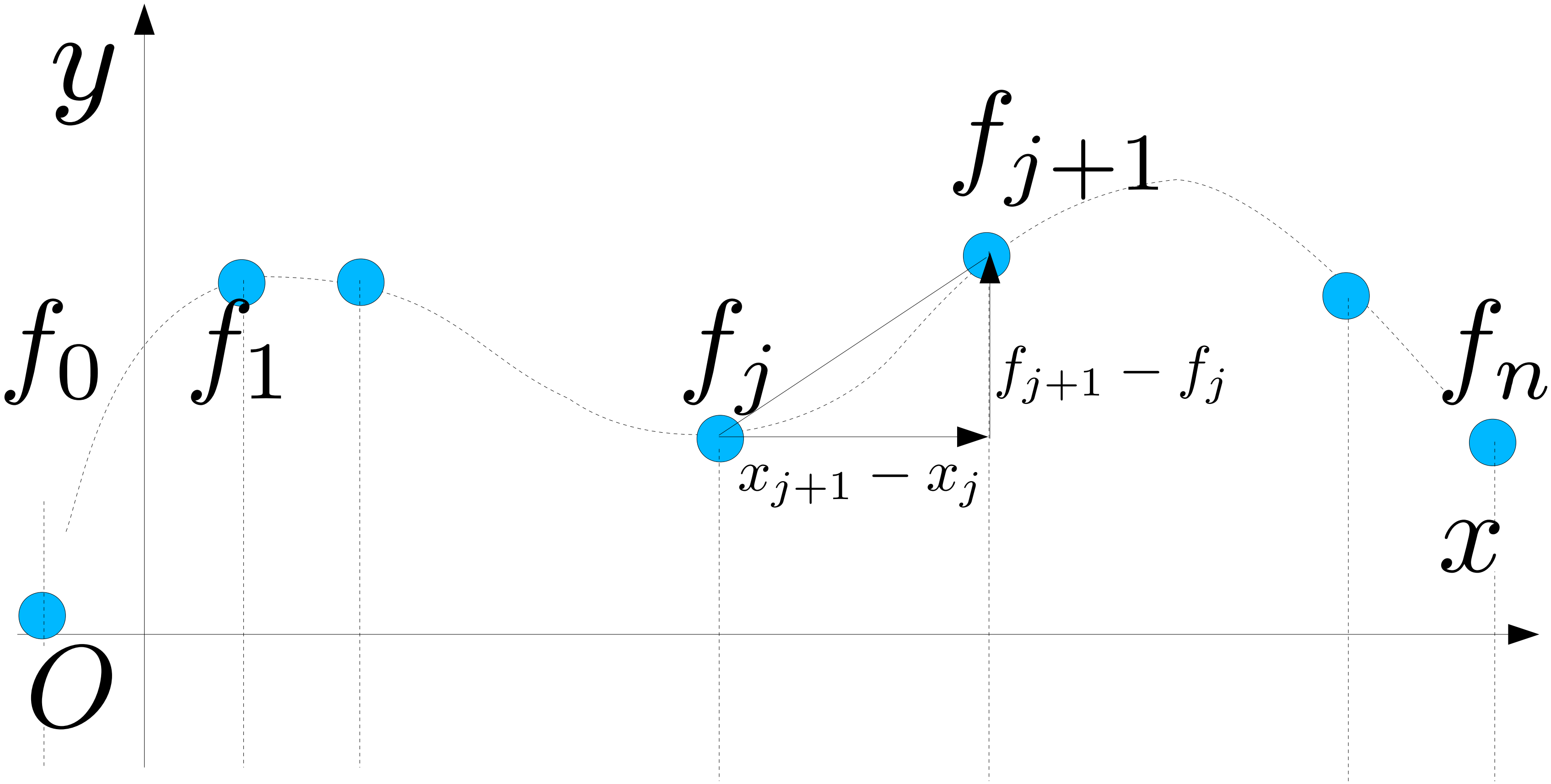


分点毎の差分値

差分の近似方法にもいくつか異なる方法が考えられます。
代表的なものとして、既に示した前進差分があります。
以下に後退差分・中心差分とともに例示します。

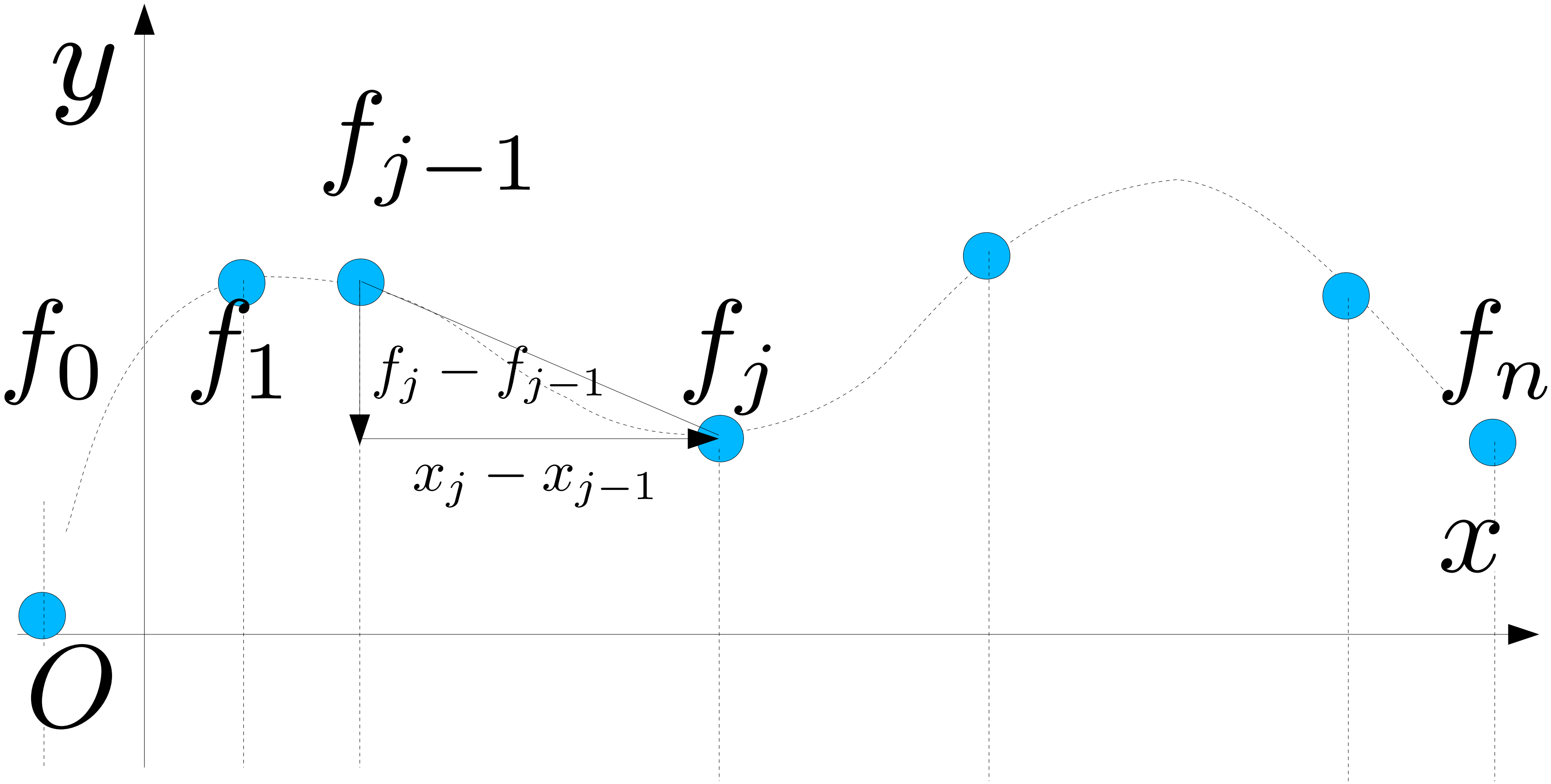
前進差分

$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{x_{j+1}-x_j}$$



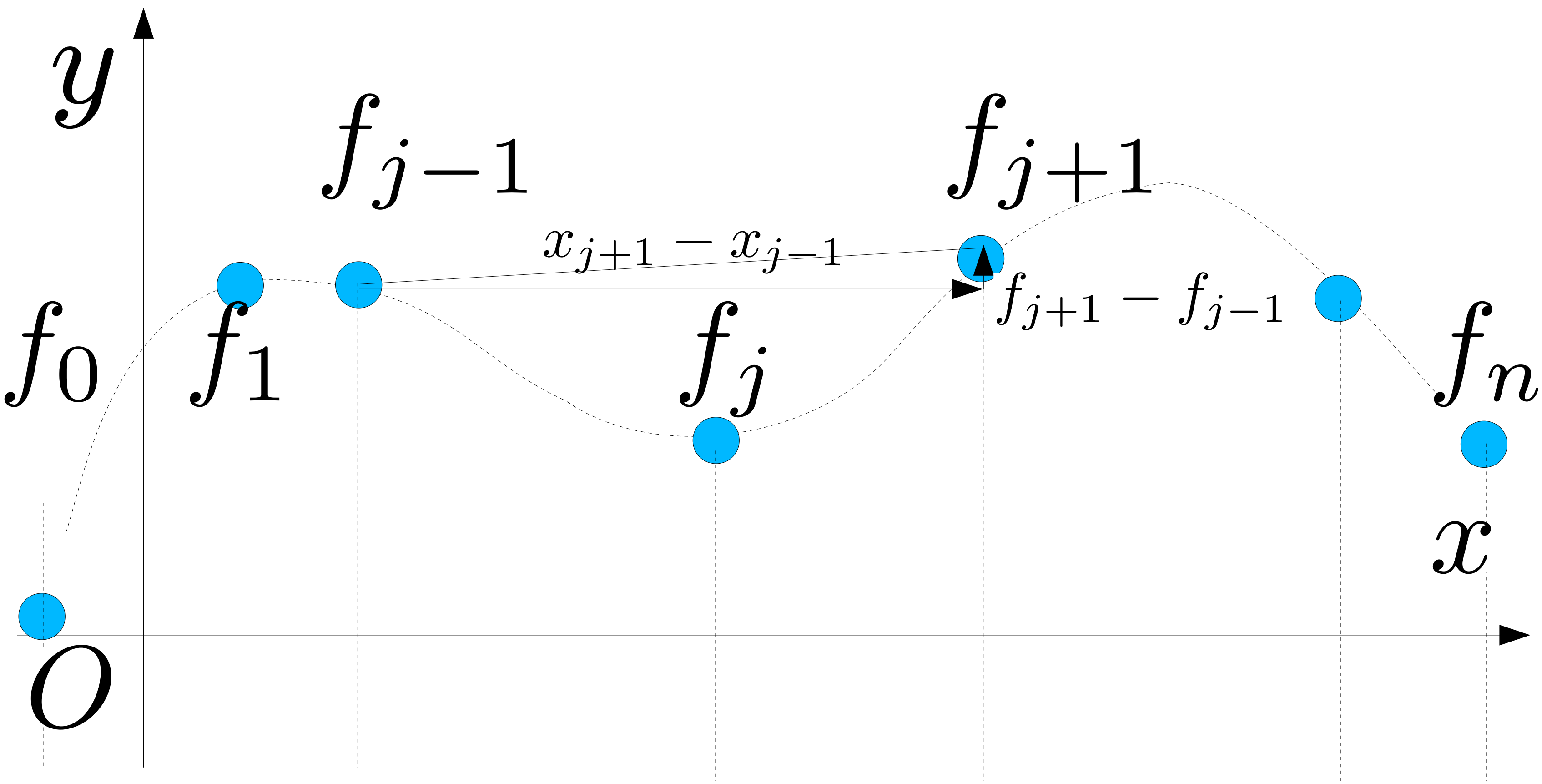
後退差分

$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_j)-f(x_{j-1})}{x_j-x_{j-1}}$$



中心差分

$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1}) - f(x_{j-1})}{x_{j+1} - x_{j-1}}$$

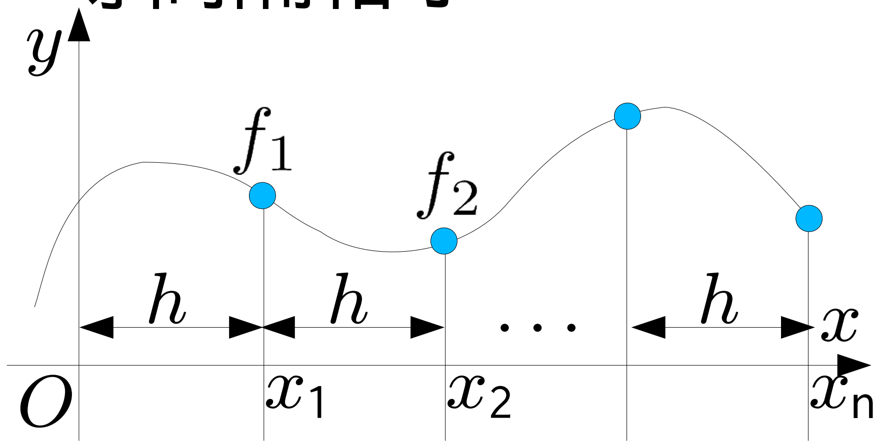


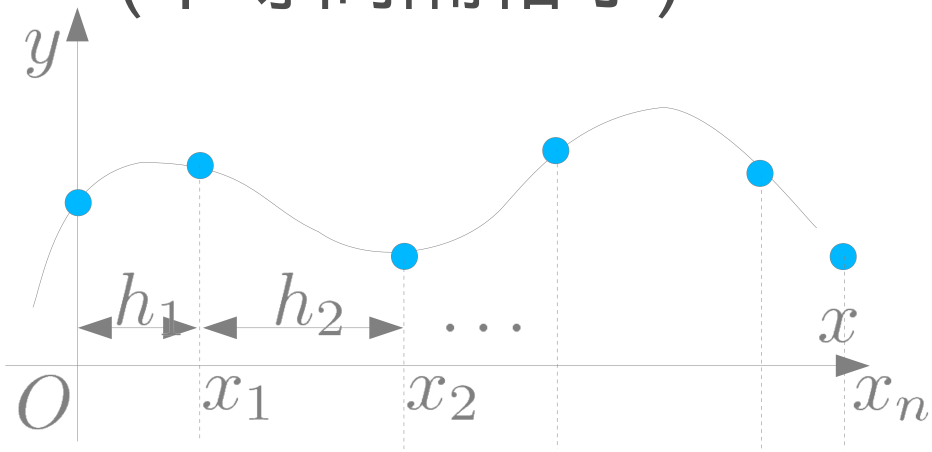
差分の近似方法にはそれぞれ特徴があり
近似の精度にも違いがあります。
その違いについて説明する前に分点の配置
に次の仮定を置きます。

これ以降（特に前置きの無い限り）分点は
等間隔に取られ、その間隔がhであるものと
します。

差分

- 等間隔格子　　　(不等間隔格子)





- 差分近似

前進差分：
$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{x_{j+1}-x_j} = \frac{f_{j+1}-f_j}{h}$$

後退差分：
$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_j)-f(x_{j-1})}{x_j-x_{j-1}} = \frac{f_j-f_{j-1}}{h}$$

中心差分：
$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1})-f(x_{j-1})}{x_{j+1}-x_{j-1}} = \frac{f_{j+1}-f_{j-1}}{2h}$$

差分近似の導出に必要なTaylor展開について説明します。
Taylor展開は関数の性質をある点x_0の周囲で再現する関数の置き換えるものです。

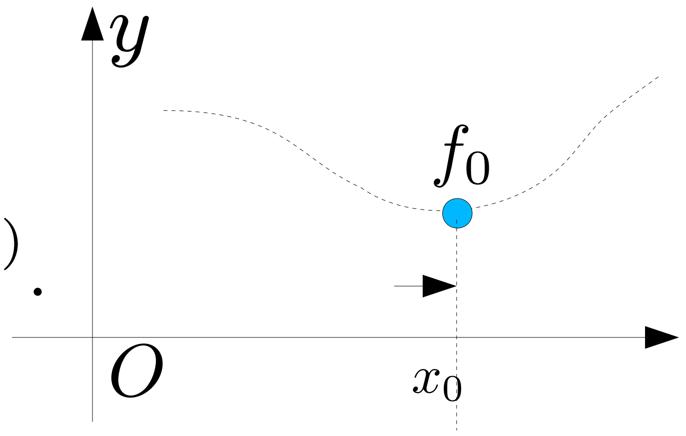
ここで「関数の性質」とは関数値と各階数の導関数値です。
ある関数fを特定の点x_0において同じ関数値同じ導関数値を持つ別の関数で置き換えます。

差分

- 関数fのx_0での関数値・導関数値が判っている

$$f(x_0) = f_0$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_0} = f_0',\ \left.\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=x_0} = f_0'', \ldots,\ \left.\frac{\mathrm{d}^n f}{\mathrm{d}x^n}\right|_{x=x_0} = f_0^{(n)}.$$



- fと同じ関数値・一階の導関数値を持つ1次多項式

$$f \fallingdotseq f_0 + f_0' \times (x - x_0)$$

$$\left. f_0 + f_0' \times (x - x_0) \right|_{x=x_0} = f_0$$

$$\left[f_0 + f_0' \times (x - x_0) \right]'_{x=x_0} = f_0'$$

fと関数値・導関数値が一致する1次多項式とfそのものとの違いを考えます。
関数と関数の差なので、その差も関数です。

差として得られる関数を$R(x)$とします。
これは$R(x)$の定義式ですので等号は厳密に成立します。

差分

- f と同じ関数値･一階の導関数値を持つ1次多項式との差: $R(x)$

$$f(x) - [f_0 + f_0' \times (x - x_0)] = R(x)$$

- $R(x)$はどんな関数だろうか

$$R(x) \equiv f(x) - [f_0 + f_0' \times (x - x_0)]$$

$$R(x) = \left[\frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} - f_0'\right](x - x_0)$$

$$= [f'(x') - f_0'](x - x_0) = f''(x'') \times (x - x_0)^2$$

式を成立させる$x_0 < x', x'' < x$ は存在する。

差分

- すなわちTaylor展開において

$$f(x) = f_0 + f_0' \times (x - x_0) + R(x)$$

となり、f を一次多項式で近似した残りが$R(x)$で、$R(x)$は$(x - x_0)$の二次多項式です。

同様に繰り返して、次式が得られます。

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^j + \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$$

関数の置き換えとして意味を持ち、例えば十分に大きいnで$R(x)$にあたる部分が小さくなる、あるいは$n = \infty$で$f(x)$と一致するためには条件が必要です。

差分法

- $f(x)$ の Taylor 展開を考える

$$f(x+h)=f(x)+f'(x)h+\frac{1}{2}f''(x)h^2+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x)h^n+O(h^{n+1})$$

- 前進差分: $\dfrac{f_{j+1}-f_j}{h}=f'(x)+O(h)$

$$\because f_{j+1}-f_j=\left(f+f'h+\frac{1}{2}f''h^2+O(h^3)-f\right)=f'h+O(h^2)$$

- 後退差分: $\dfrac{f_j-f_{j-1}}{h}=f'(x)+O(h)$

$$\because f_j-f_{j-1}=f-\left(f-f'h+\frac{1}{2}f''h^2+O(h^3)\right)=f'h+O(h^2)$$

差分法

- 中心差分 $\dfrac{f_{j+1}-f_{j-1}}{2h}=f'(x)+O(h^2)$

$$\begin{aligned}\because f_{j+1}-f_{j-1} &= \left(f+f'h+\frac{1}{2}f''h^2+O(h^3)\right)\\ &\quad -\left(f-f'h+\frac{1}{2}f''h^2+O(h^3)\right)\\ &= f'2h+O(h^3)\end{aligned}$$

cf. Taylor展開

$$f(x+h)=f(x)+f'(x)h+\frac{1}{2}f''(x)h^2+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x)h^n+O(h^{n+1})$$

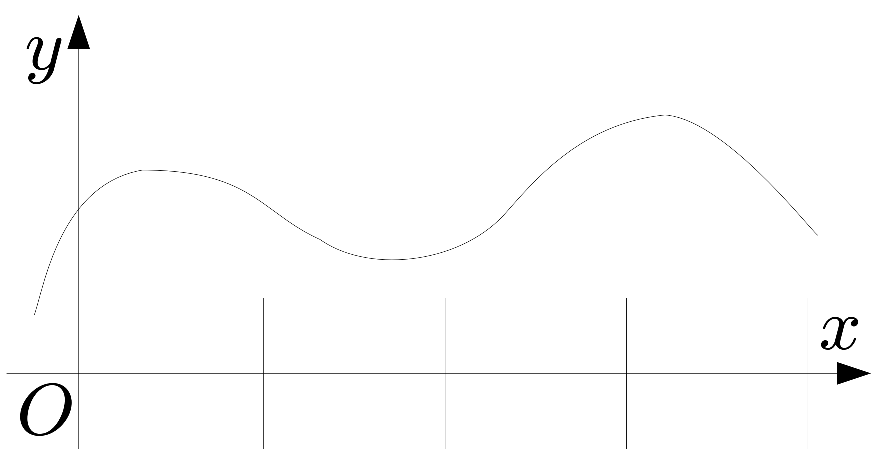
差分

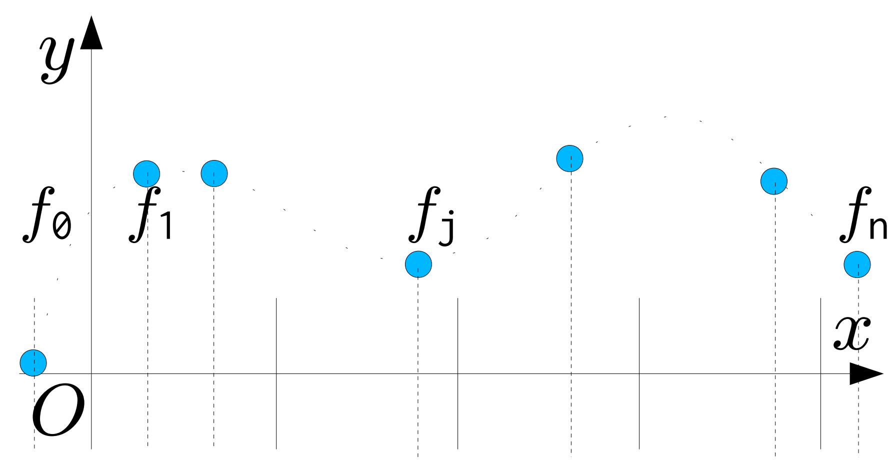
- 差分近似

前進差分： $$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{x_{j+1}-x_j}$$

後退差分： $$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_j)-f(x_{j-1})}{x_j-x_{j-1}}$$

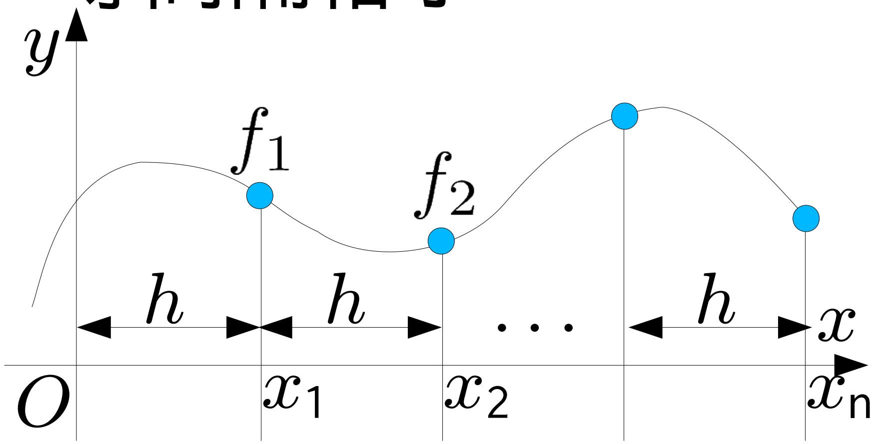
中心差分： $$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1})-f(x_{j-1})}{x_{j+1}-x_{j-1}}$$

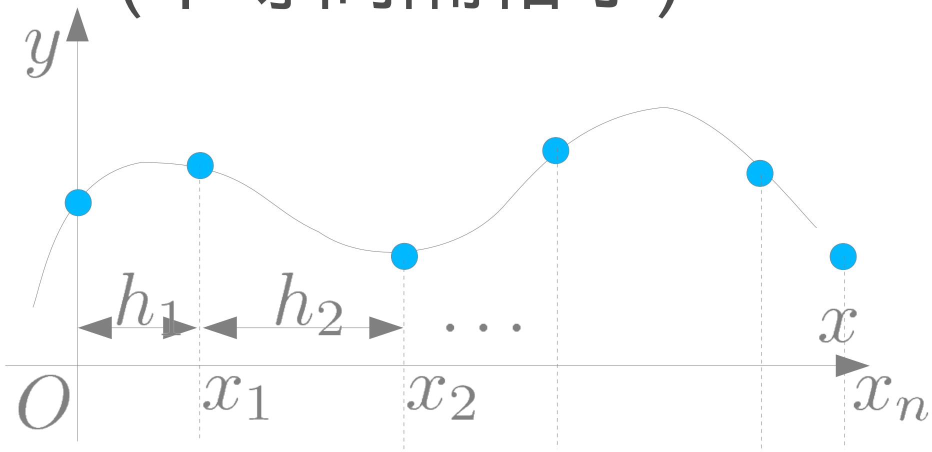




差分

- 等間隔格子　　　　　　　　(不等間隔格子)





- 差分近似

前進差分：
$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1})-f(x_j)}{x_{j+1}-x_j} = \frac{f_{j+1}-f_j}{h}$$

後退差分：
$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_j)-f(x_{j-1})}{x_j-x_{j-1}} = \frac{f_j-f_{j-1}}{h}$$

中心差分：
$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{j+1})-f(x_{j-1})}{x_{j+1}-x_{j-1}} = \frac{f_{j+1}-f_{j-1}}{2h}$$

差分法

- $f(x)$ の Taylor 展開を考える

$$f(x+h)=f(x)+f'(x)h+\frac{1}{2}f''(x)h^2+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x)h^n+O(h^{n+1})$$

- 前進差分: $$\frac{f_{j+1}-f_j}{h}=f'(x)+O(h)$$

  後退差分: $$\frac{f_j-f_{j-1}}{h}=f'(x)+O(h)$$

  中心差分: $$\frac{f_{j+1}-f_{j-1}}{2h}=f'(x)+O(h^2)$$

$$\because f_{j+1}-f_{j-1}=\left(f+f'h+\frac{1}{2}f''h^2+\frac{1}{3!}f'''h^3+O(h^4)\right)$$
$$-\left(f-f'h+\frac{1}{2}f''h^2-\frac{1}{3!}f'''h^3+O(h^4)\right)=2f'h+O(h^4)$$

差分法

- 高階(2階)導関数の差分近似

前進差分: $f''(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f'(x+h) - f'(x)}{h}$

$$\fallingdotseq \frac{\frac{f(x+2h)-f(x+h)}{h} - \frac{f(x+h)-f(x)}{h}}{h} = \frac{f_{j+2} - 2f_{j+1} + f_j}{h^2}$$

後退差分: $\cdots = \frac{f_j - 2f_{j-1} + f_{j-2}}{h^2}$

中心差分: $\cdots = \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{h^2}$

$$\text{, or} \quad f'' \fallingdotseq \frac{f'(x+h) - f'(x-h)}{2h} \cdots \fallingdotseq \frac{f_{j+2} - 2f_j + f_{j-2}}{4h^2}$$

差分法

- 2階導関数の差分近似精度
  1階導関数同様、Taylor展開を考える

$$f(x+h)=f(x)+f'(x)h+\frac{1}{2}f''(x)h^2+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x)h^n+O(h^{n+1})$$

前進差分:

後退差分:

$$\frac{f_{j+2}-2f_{j+1}+f_j}{h^2}=f''(x)+O(h)$$

中心差分:

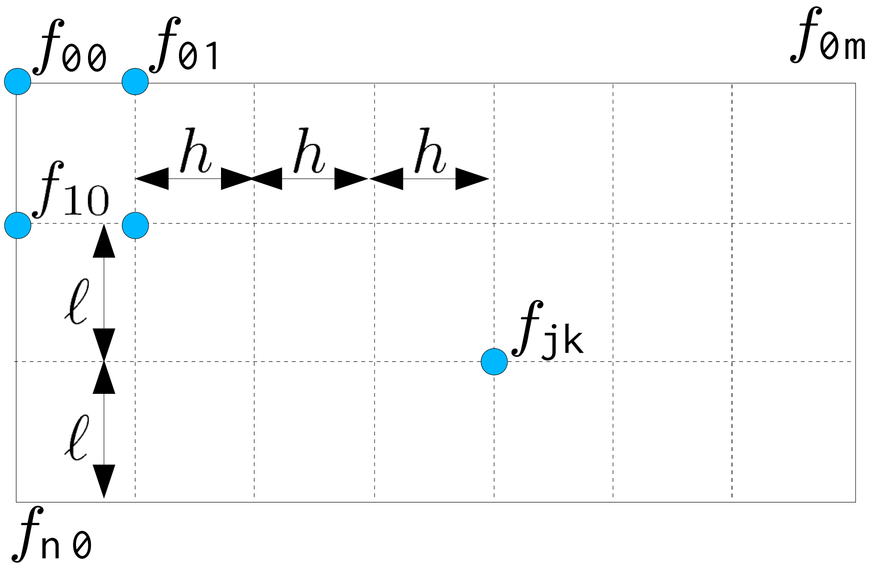
$$\frac{f_j-2f_{j-1}+f_{j-2}}{h^2}=f''(x)+O(h)$$

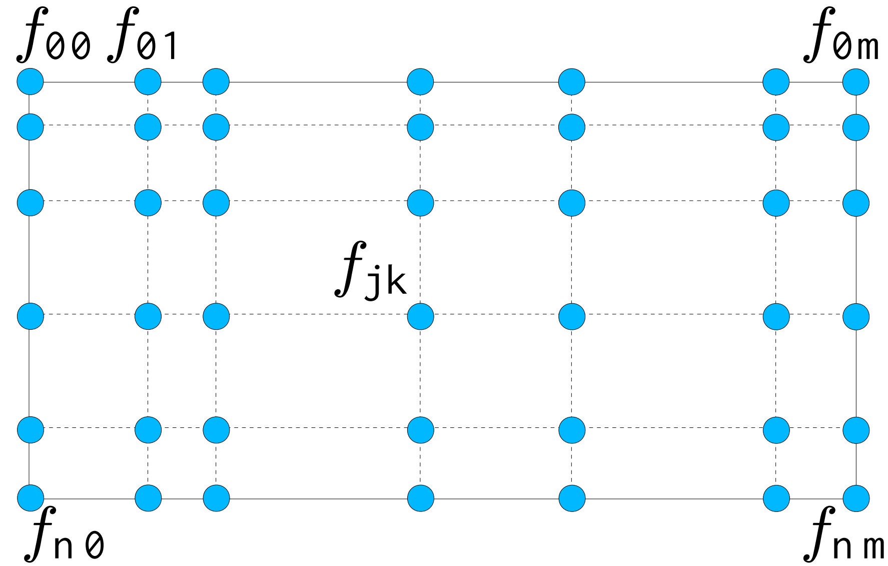
$$\frac{f_{j+1}-2f_j+f_{j-1}}{h^2}=f''(x)+O(h^2)$$

$$\frac{f_{j+2}-2f_j+f_{j-2}}{4h^2}=f''(x)+O(h^2)$$

差分法

- 偏微分方程式の差分法





- 前進差分の例

$$\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x=x_k,\, y=y_j} \fallingdotseq \frac{f(x_{k+1}, y_j) - f(x_k, y_j)}{x_{k+1} - x_k}, \qquad \frac{f_{jk+1} - f_{jk}}{h}$$

差分法

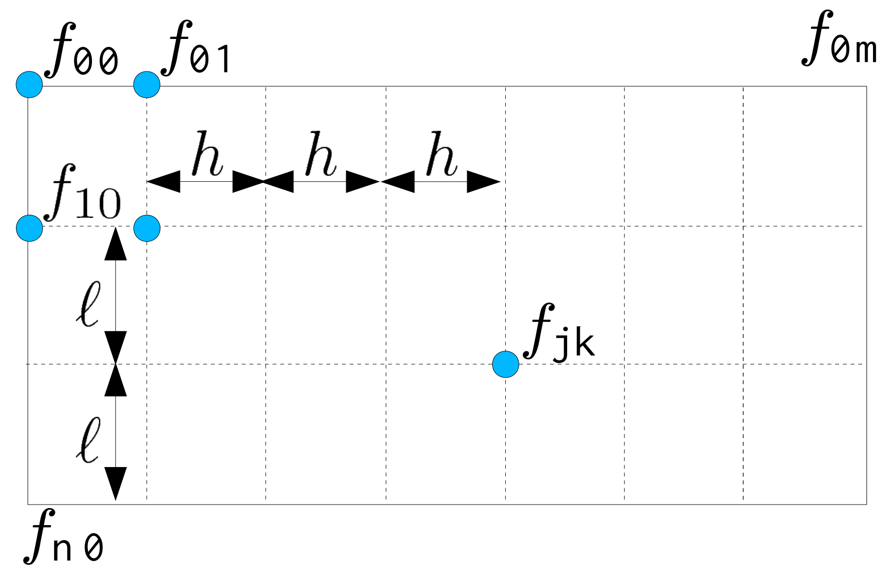
- 1階偏導関数の差分近似

$$\frac{f_{jk+1}-f_{jk}}{h}, \frac{f_{jk}-f_{jk-1}}{h} \in \left\{\frac{\partial f}{\partial x}+O(h)\right\}$$

$$\frac{f_{j+1k}-f_{jk}}{\ell}, \frac{f_{jk}-f_{j-1k}}{\ell} \in \left\{\frac{\partial f}{\partial y}+O(\ell)\right\}$$

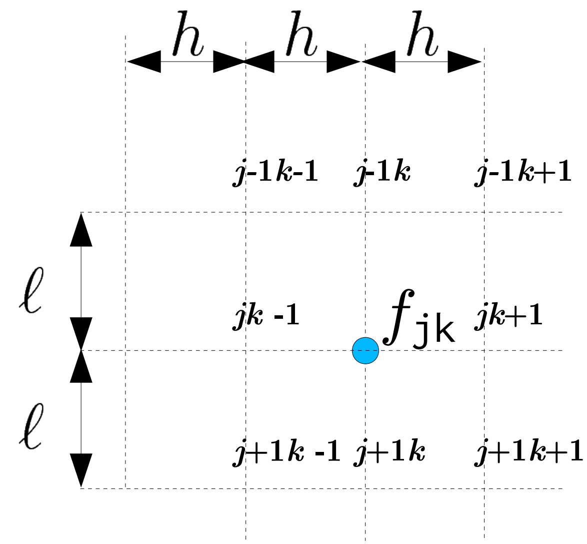
$$\frac{f_{jk+1}-f_{jk-1}}{2h}=\frac{\partial f}{\partial x}+O(h^2)$$

$$\frac{f_{j+1k}-f_{j-1k}}{2\ell}=\frac{\partial f}{\partial y}+O(\ell^2)$$



差分法

- 2階偏導関数の差分近似



$$\frac{f_{\mathrm{jk+1}}-2f_{\mathrm{jk}}+f_{\mathrm{jk\text{¡}1}}}{h^2}=\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+O(h^2)$$

$$\frac{f_{\mathrm{j+1k}}-2f_{\mathrm{jk}}+f_{\mathrm{j\text{¡}1k}}}{\ell^2}=\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}+O(\ell^2)$$

$$\frac{f_{\mathrm{j+1k+1}}-f_{\mathrm{j+1k\text{¡}1}}-f_{\mathrm{j\text{¡}1k+1}}+f_{\mathrm{j\text{¡}1k\text{¡}1}}}{4h\ell}=\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}+O(h^2,h\ell,\ell^2)$$

- ∵2変数関数のTaylor展開

$$f(x+h,y+\ell)=\sum_{n=0}^{m-1}\frac{1}{n!}\left(h\frac{\partial}{\partial x}+\ell\frac{\partial}{\partial y}\right)^n f+O((h+l)^m)$$