1　不等間隔格子の二次精度差分

本ドキュメントでは, NumRu::Derivative で定義される threepoints_O2nd_deriv で用いる不等間隔格子の二次精度差分についてまとめる．この差分は極端に不等間隔ではないデータに対して二次精度の差分を与えるものである.

今, 関数 $f(x)$ を, 数列 $x_n(x_0, x_1, ..., x_i, ..., x_n)$ 上に離散化する.

$$f_i \equiv f(x_i) \tag{1.1}$$

$$t \equiv f(x_{i+1} - x_i) \tag{1.2}$$

$$s \equiv f(x_i - x_{i-1}) \tag{1.3}$$

ここで, s と t はほぼ同じオーダーの値である場合を想定して議論を進める.

ここで, $f(x)$ を各格子点近傍にてテイラー展開する.

$$f(x_{i+1} - x_i) = tf'(x_i) + \frac{t^2}{2}(x_i) + O(t^3) \tag{1.4}$$

$$f(x_{i-1} - x_i) = -sf'(x_i) + \frac{s^2}{2}(x_i) + O(s^3) \tag{1.5}$$

ここで, $f'(x_i), F''(x_i)$ はそれぞれ x_i における f の x に関する一階および二階の微分項, $O(t^3)$ は t^3 のオーダーの値を表す．両式から f'' の項を消去するために, $s^2\times$(1.4) - $t^2\times$(1.5) を計算すると,

$$s^2 f_{i+1} + (t^2 - s^2) f_i - t^2 f_{i-1} = (s^2 + st^2) f'(x_i) + s^2 O(t^3) + t^2 O(s^3) \tag{1.6}$$

となる．上式を変形して

$$fracs^2 f_{i+1} + (t^2 - s^2) f_i - t^2 f_{i-1} st(s+t) = f'(x_i) + \frac{O(s^2t^3) + O(t^2s^3)}{st(s+t)} \tag{1.7}$$

$$= O(t^2), \tag{1.8}$$

$$\tag{1.9}$$

これより, 2 次精度差分の公式は

$$f'(x_i) = \frac{s^2 f_{i+1} + (t^2 - s^2) f_i - t^2 f_{i-1}}{st(s+t)} \tag{1.10}$$

と書くことができる.