数值微分的计算

北京师范大学物理系　彭芳麟　梁颖

数值微分的算法

泰勒展开公式

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+O(h^2)$$

一阶导数前差公式

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

一阶导数后差公式

$$f'(x)=\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$

一阶导数中心差分公式

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

二阶导数的近似公式

$$f''(x)=\frac{f'(x+h)-f'(x)}{h}=\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$$

数值差分指令（diff）

$$dx \approx \Delta x;$$

$$\frac{dy}{dx} \approx \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

差分可作微分的近似

差商可作导数的近似

语法格式

Y=diff(X)

Y=diff(X,n)

Y=diff(X,n,dim)

X: 代表矢量，矩阵，列阵

n: 计算n阶差分

dim：矩阵或列阵的维度

例

```
>>a=[1,4,5,-2];
>>diff(a)                          %矢量的差分是后项减前项
ans = 3 1 -7

>>b = [0.95013,    0.48598;        %定义矩阵b
       0.23114,    0.8913;
       0.60684,    0.7621 ];
>> diff(b)                         %对矩阵b求差分默认对列矢量作差分
ans = -0.71899     0.40532
       0.3757     -0.1292
>> diff(b,2)                       %计算b的二阶差分
ans =  1.0947    -0.5345
>> diff(b,1,2)                     %计算b的行矢量的一阶差分
ans =  -0.4642
        0.6602
        0.1553
```

计算梯度（gradient）

内部元素用一阶导数的中心差分公式计算
端点元素用前差公式或后差公式作计算

语法

FX=gradient(F)	%矢量的梯度就是它的一阶导数
[FX,FY]=gradient(F)	%矩阵的梯度是两个方向的偏导数FX, FY
[FX,FY,FZ,...]=gradient(F)	%列阵的梯度是各个方向的偏导数FX, FY, FZ,
[...]=gradient[F,h]	%各个方向的点的间距为h≠1
[...]=gradient[F,h1,h2,...]	%各个方向的点的间距为h1, h2, . . .

```
>> a  = [1,  5,  4,  2,  7;          %定义矩阵a
          2,  1,  8,  3,  4]

>> [px,py]=gradient(a)

px = 4   1.5  -1.5  1.5  5           %行向量方向的偏导数,第一个元素4=5-1
     -1   3     1    -2    1         %第二个元素1.5=[(5-1)+(4-5)]/2,其余类推

py = 1  -4   4   1  -3               %列向量方向的偏导数
     1  -4   4   1  -3
```

离散拉普拉斯算符（del2）

二维的del2的定义为

$$L=\frac{\Delta u}{4}=\frac{1}{4}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}+\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}y^2}\right)$$

矩阵L的内部元素是

$$L_{i,j}=\frac{1}{4}(u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1})-u_{i,j}$$

在矩形网格的边缘则使用三次方的外推法来使用这个公式。

对有N个变量的多元函数u(x, y, z, ...)，定义为

$$L=\frac{\Delta u}{2N}=\frac{1}{2N}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}+\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}y^2}+\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+\cdots\right)$$

语法

del2(U) %默认点的间距为1

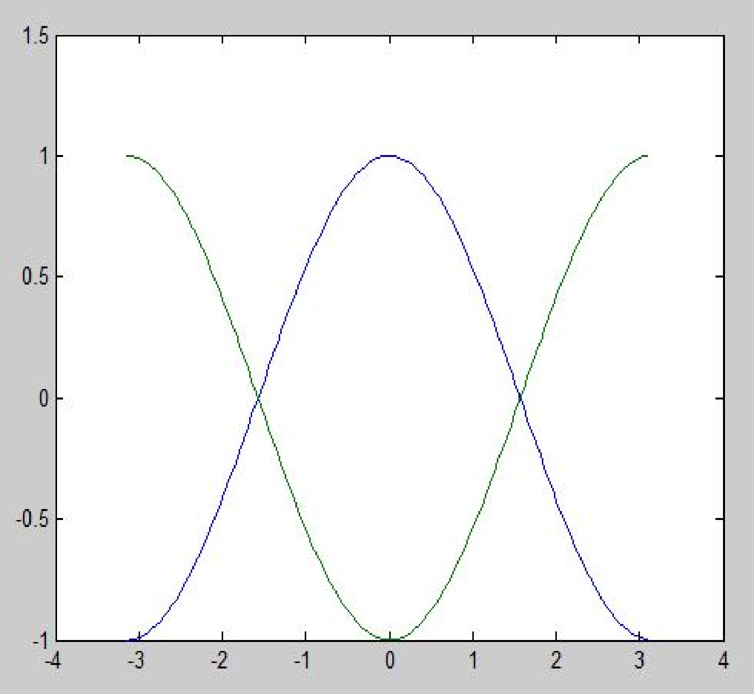
del2(U,h) %点的间距为h

del2(U,h1,h2,...hN) % h1, h2, . . 对应于不同维度的点间距

计算一元函数二阶导数

例： 已知cos(x)''=-cos(x)，比较用del2求cos(x)的二阶导数图形与cos(x)的图形。

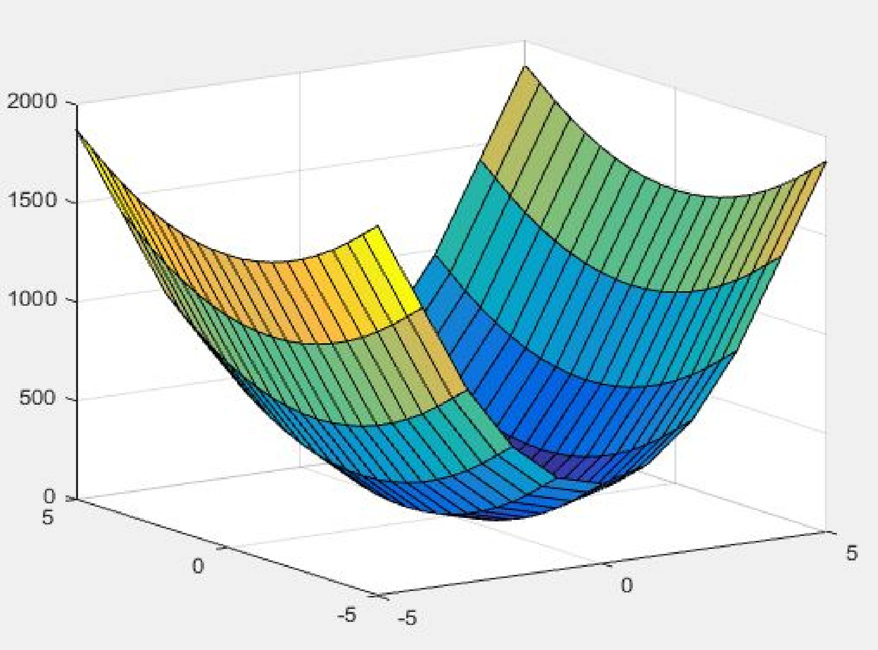
```
>> h=0.05;
>> x=[-pi:h:pi];
>> y=cos(x);
>> z=4*del2(y,h);
>> plot(x,y,x,z)
```



例：计算二元函数u的拉普拉斯量，其中 $u=\frac{1}{3}(x^4+y^4)$

用del2作数值计算如下

```
>> h= 0.25;
>> [x,y]=meshgrid(-5:h:5);  %构造xy平面数据网格
>> U=1/3.*(x.^4+y.^4);      % u离散化得到矩阵U
>> L=4*del2(U,h);
>> surf(x,y,L)
>> grid on
```



这个图形与 $\Delta u(x,y)=4x^2+4y^2$ 的图形一致?

思考

谢谢！