Matematičke metode fizike III

Larisa Zoranić

2023/24

Bilješke s predavanja

Literatura

[1] Morten Hjorth-Jensen: *Computational Physics*, University of Oslo, 2007, 2010, 2015.

[2] V. Hari i dr: *Numerička analiza*, skripta, Sveučilište u Zagrebu PMF, 2004.

[3] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery: *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, SE, Cambridge University Press, USA, 2002.

[4] Leandra Vranješ Markić: *Matematiče metode fizike 1*, skripta, Sveučilište u Splitu PMFST, 2009.

2 Numeričko deriviranje

Na satu ćemo uvesti osnove formule za računanje derivacija prvog, drugog i višeg reda. Primjena numeričkih derivacija će se koristiti u ostalim algoritmima, na primjer u računanju običnih i parcijalnih diferencijalnih jednadžbi.
Numeričku derivaciju koristimo kada nam nije dostupan analitički izraz za derivaciju, već tražimo derivaciju diferencijabilne funkcije f na nekom skupu točaka, korištenjem samo vrijednosti funkcije f u zadanim točkama. Također, uključujemo pretpostavku da kroz tablične vrijednosti funkcije f prolazi neprekidno derivabilna funkcija.

Numeričko deriviranje daje aproksimaciju derivacije funkcije izračunatu pomoću vrijednosti funkcije u konačno mnogo točaka. Krenimo od opće definicije derivacije. Funkcija $f : D \to R$ je derivabilna u točki x_0 ako za $x_0 \in D$ postoji limes:

$$\lim_{\overrightarrow{x \to x_0}} \frac{f(x_0) - f(x)}{x_0 - x} = \lim_{\overrightarrow{h \to 0}} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \frac{df(x)}{dx}|_{x=x_0} = f'(x_0) \tag{2.1}$$

Definiciju 2.1 izrazimo preko konačnih razlika ili konačnih diferencija:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{2.2}$$

Numerički izraz za derivaciju može se definirati odabirom različitih točaka u okolini za koju računamo derivaciju. Vrijede forme koje su sve numerički ekvivalentne:

- $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ - derivacija unaprijed,
- $f'(x) \approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h}$ - derivacija unazad,
- $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ - centralna derivacija,

Primijetimo da će numerički izraz biti točniji što je razlika h manja. Međutim, u praksi, optimalni izbor koraka h definiraju dva suprotstavljena faktora.

Formula numeričkog deriviranja se temelji na dijeljenju razlike između vrijednosti funkcije i razlike njenih argumenata u dvije bliske točke. Ove razlike mogu biti vrlo mali brojevi, te njihovim djeljenjem se može dobiti nestabilni ili netočni rezultat. Ako je korak h puno mali, rješenje može biti nestabilno, budući da dijelimo s vrijednosti koja je blizu (ili jednaka) numeričkom zapisu nule. Također, svaki zapis broja u računalu nosi grešku zaokruživanja. Ako su razlike rede veličine ove greške, rezultat koji dobijemo nije točna ni smislena vrijednost.

Osim toga, često koristimo podatke dobivene mjerenjem, koji sadrže eksperimentalnu grešku. U takvim slučajevima, moramo pažljivo procijeniti optimalan izbor točaka i koraka h kako bismo dobili dobar rezultat.

Općenito, točnost i preciznost rezultata definiraju se procjenom numeričke greške. Za numeričku derivaciju, procjena greške se obično provodi pomoću Taylorovog razvoja.
Promotrimo Taylorov razvoj funkcije $f(x+h)$ oko $f(x)$:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2!} + \frac{h^3 f'''(x)}{3!} + \frac{h^4 f''''(x)}{4!}... \tag{2.3}$$

Izrazimo derivaciju prvog reda:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{2.4}$$

Vrijednost funkcije se aproksimira zanemarujući određene doprinose, tako da gornji izraz u sebi sadrži grešku diskretizacije ili grešku odsjecanja (engl. truncation error). Ova greška se naziva i greška aproksimacije, budući da numerički izraz je aproksimacija (procjena) realne matematičke veličine. Procjena greška je definirana s prvim članom u Taylorovom razvoju koji smo zanemarili:

$$O(h) = \frac{hf''(\xi)}{2!} \approx h \tag{2.5}$$

pri čemu je vrijednosti ξ neka $[\xi \in x, x+h]$, a greška je funkcija odabira koraka h.

2.1 Numerička derivacija prvog reda

Opći oblik derivacije funkcije se može izraziti na način:

$$f_2'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h) \tag{2.6}$$

pri čemu funkcija $O(h)$ sadrži sve članove koje smo zanemarili, te argument koji definira veličinu greške aproksimacije ($O(h)$ opisuje da je greška reda veličine h). U $f_2'(x)$ broj 2 označava da se za izračun koriste dvije točke.

Red greške definira da će vrijednost funkcije $f_2'(x)$ odgovarati točnoj vrijednosti za funkcije ovisne o prvoj potenciji x (linearne funkcije).
Pogledajmo dva primjera:

$$f(x) = a + bx \Rightarrow f' = b$$

$$f(x) = a + bx^2 \Rightarrow f' = 2bx + bh$$

Geometrijska interpretacija derivacije - slika na satu

Točnost rješenja se može poboljšati uvođenjem više točaka. Napišimo Taylorov razvoj za točke $x+h$ i $x-h$:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2!} + \frac{h^3 f'''(x)}{3!} + \frac{h^4 f''''(x)}{4!} \ldots \tag{2.7}$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2!} - \frac{h^3 f'''(x)}{3!} + \frac{h^4 f''''(x)}{4!} \ldots \tag{2.8}$$

Oduzimanjem ovih dviju relacija dobije se izraz:

$$f_3'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \tag{2.9}$$

Gornja aproksimacija ima red greške ovisan o h^2 te će dati točan rezultat za kvadratične funkcije na intervalu $[-h, h]$. U izračunu $f_3'(x)$ se koriste tri točke, sredina intervala za koju se definira vrijednost derivacije $f'(x)$, te točke u okolini $f(x+h)$ i $f(x-h)$.

Sličnim postupkom može se definirati izraz za prvu derivaciju sa 5 točaka na intervalu $[-2h, 2h]$:

$$f_5'(x) = \frac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h} + O(h^4) \tag{2.10}$$

U praksi se izbjegava korištenje složenijih numeričkih izraza koji zahtijevaju više numeričkih operacija. Numerička derivacija prvog reda najčešće se računa koristeći izraz $f_2'(x)$.

2.2 Numerička derivacija drugog reda

Zbrajanjem relacija

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2!} + \frac{h^3 f'''(x)}{3!} + \frac{h^4 f''''(x)}{4!}... \tag{2.11}$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2 f''(x)}{2!} - \frac{h^3 f'''(x)}{3!} + \frac{h^4 f''''(x)}{4!}... \tag{2.12}$$

može se dobiti izraz za drugu derivaciju:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2) \tag{2.13}$$

Zadatak 2.1.

Napisati program koji računa prvu i drugu derivaciju e^x za različite vrijednosti x i vrijednosti koraka h.

a) Izračunajte prvu derivaciju e^x za različite vrijednosti $x = 0.5, 1.5, 2.5$ i vrijednosti koraka $h = 10^{-1}, 10^{-4}, 10^{-6}$:

   (a) koristeći formule za derivaciju unaprijed, derivaciju unazad i centralnu derivaciju. Usporedite i diskutirajte rezultate.

   (b) koristeći formule za $f_2'(x), f_3'(x), f_5'(x)$. Usporedite i diskutirajte rezultate.

b) Izračunajte drugu derivaciju e^x za različite vrijednosti $x = 0, 1, 2..10$ i vrijednosti koraka $h = 10^{-1}...10^{-6}$.

   (a) Napravite tablični ispis rezultata gdje su retci vrijednost x, a stupci vrijednosti koraka h. Tablica neka uključuje vrijednosti $d^2e^x/dx^2 = e^x$, te grešku izraženu preko apsolutne vrijednosti razlike između vrijednosti koje smo računali preko forme za numeričku derivaciju i vrijednosti e^x.

   (b) Za vrijednosti $x = 1, 5, 10$ i sve vrijednosti h, izračunati grešku. Nacrtati u log-log skali graf greška-h. Graf možete nacrtati korištenjem Excela, Gnuplota ili pyton skripte. Vrijednosti možemo izraziti preko logartima s bazom 10 ili pri crtanju grafa odabrati logaritamsku skalu. Raspravite točnost rezultata ovisno o odabiru koraka h.