

Matematičke metode u fizičkoj hemiji

Predavanje 6

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

Ojlerova metoda

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

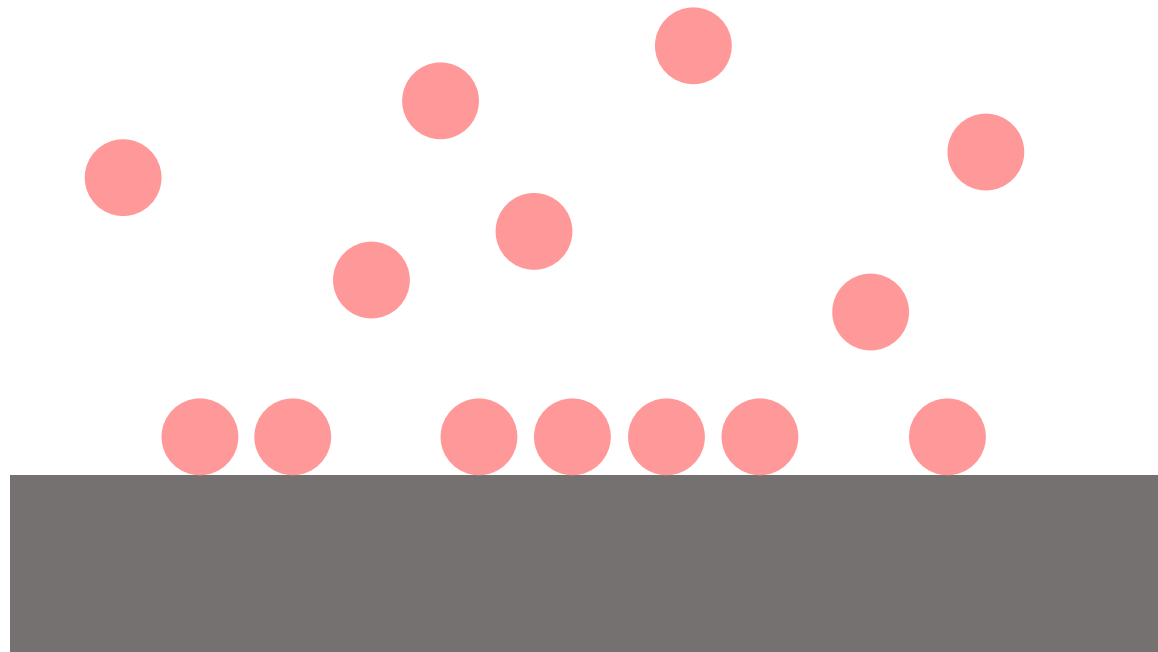
metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

Ojlerova metoda

Fizisorpcija gasa na čvrstoj površini



$$v = \frac{d\theta}{dt}$$

Prvi i drugi izvod

Prvi izvod: $f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$

Pretpostavka: funkcija je diferencijabilna, granična vrednost prikazana ovom jednačinom postoji.

Numeričko diferenciranje: izračunati izvod ove funkcije f , za određenu vrednost nezavisno promenljive x na osnovu poznatih vrednosti za f .

Drugi izvod: $f''(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(x + \Delta x) - f'(x)}{\Delta x}$

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

Ojlerova metoda

Metoda konačnih razlika

Beskonačno malu vrednost Δx zamenjujemo konačno malom vrednošću h .

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

Neka su a_1 i a_2 najbliže tačke tački a , tako da je $a_1 < a < a_2$.

$$f'(a) \approx \frac{f(a_2) - f(a_1)}{a_2 - a_1}$$

Primer

Pronaći izvod funkcije $f(x) = \sin(x)$ u tački $x = 0,5$ (u radijanima).

$$f'(0,5) = \cos(0,5) = 0,8775825619$$

h	$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$	$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$
$1 \cdot 10^{-1}$	0,8521693479	$2,5 \cdot 10^{-2}$
$1 \cdot 10^{-2}$	0,8751708279	$2,4 \cdot 10^{-3}$
$1 \cdot 10^{-3}$	0,8773427029	$2,4 \cdot 10^{-4}$
$1 \cdot 10^{-4}$	0,8775585892	$2,4 \cdot 10^{-5}$
$1 \cdot 10^{-5}$	0,8775801647	$2,4 \cdot 10^{-6}$
$1 \cdot 10^{-6}$	0,8775823222	$2,4 \cdot 10^{-7}$

Primer

Pronaći izvod funkcije $f(x) = \sin(x)$ u tački $x = 0,5$ (u radijanima).

$$f'(0,5) = \cos(0,5) = 0,8775825619$$

h	$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$	$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$
$1 \cdot 10^{-7}$	0,8775825372	$2,5 \cdot 10^{-8}$
$1 \cdot 10^{-8}$	0,8775825622	$-2,9 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-9}$	0,8775825622	$-2,9 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-11}$	0,8775813409	$1,2 \cdot 10^{-6}$
$1 \cdot 10^{-14}$	0,8770761895	$5,1 \cdot 10^{-4}$
$1 \cdot 10^{-15}$	0,8881784197	$-1,1 \cdot 10^{-2}$
$1 \cdot 10^{-16}$	1,1102230250	$-2,3 \cdot 10^{-1}$
$1 \cdot 10^{-17}$	0,0000000000	$8,8 \cdot 10^{-1}$

Primer

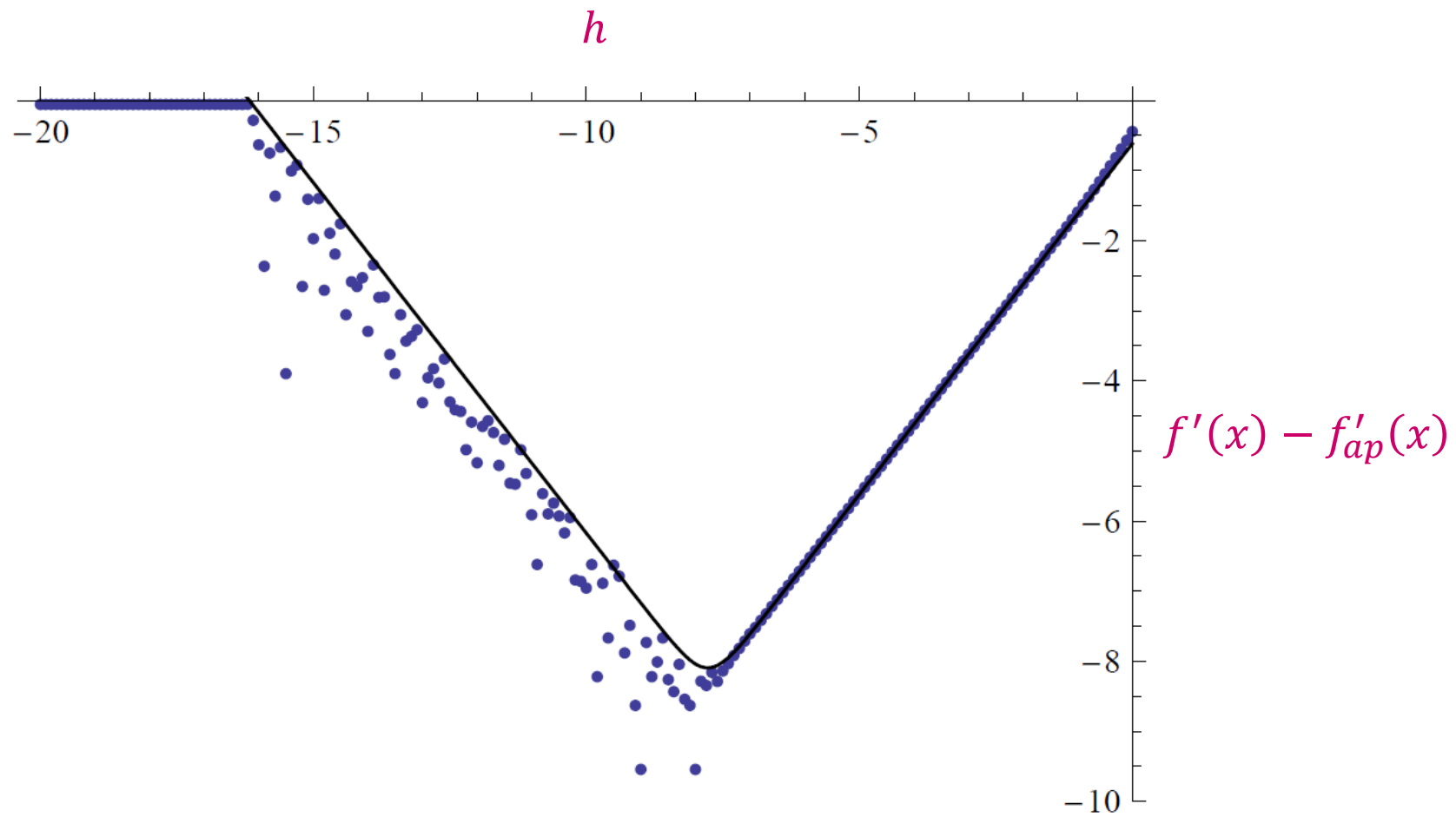
Pronaći izvod funkcije $f(x) = \sin(x)$ u tački $x = 0,5$ (u radijanima).

$$f'(0,5) = \cos(0,5) = 0,8775825619$$

h	$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$	$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$
$1 \cdot 10^{-7}$	0,8775825372	$2,5 \cdot 10^{-8}$
$1 \cdot 10^{-8}$	0,8775825622	$-2,9 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-9}$	0,8775825622	$-2,9 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-11}$	0,8775813409	$1,2 \cdot 10^{-6}$
$1 \cdot 10^{-14}$	0,8770761895	$5,1 \cdot 10^{-4}$
$1 \cdot 10^{-15}$	0,8881784197	$-1,1 \cdot 10^{-2}$
$1 \cdot 10^{-16}$	1,1102230250	$-2,3 \cdot 10^{-1}$
$1 \cdot 10^{-17}$	0,0000000000	$8,8 \cdot 10^{-1}$

Primer

$$f'_{ap}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



Izbor h

Suviše velika vrednost $h \rightarrow$ loša aproksimacija $f'(x)$

Suviše mala vrednost $h \rightarrow$ numerička nestabilnot: $f'(x) \approx f'(x + h)$

Dve varijante metode konačnih razlika

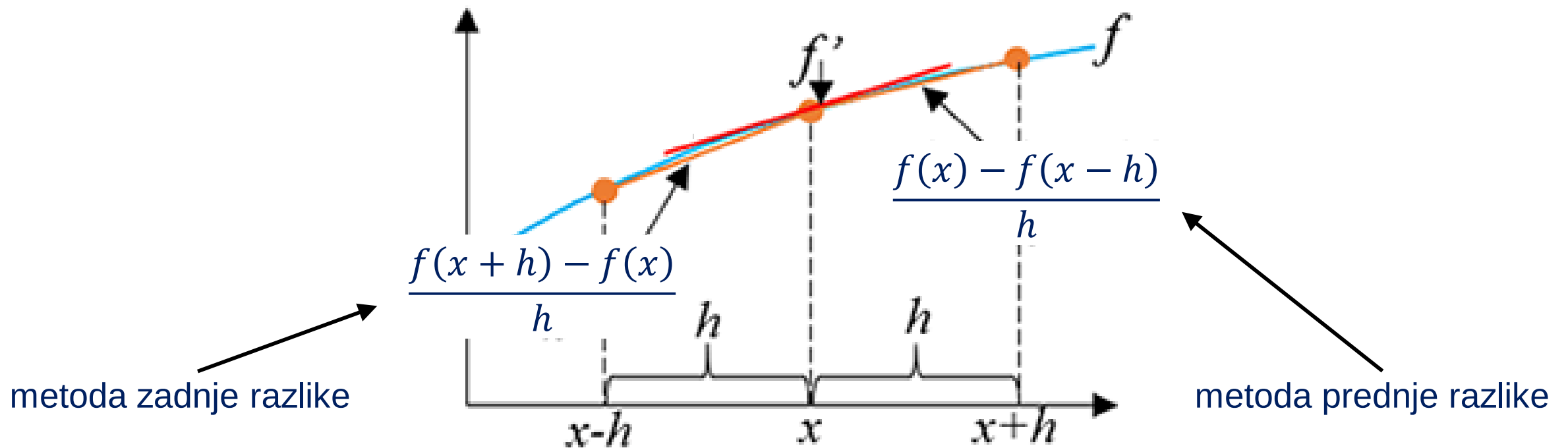
metoda prednje razlike:

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

metoda zadnje razlike:

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

Dve varijante metode konačnih razlika



Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

Ojlerova metoda

Simetrična metoda

Poznate su vrednosti $f(x + h)$ i $f(x)$: $f'(x) \approx \frac{f(x + h) - f(x)}{h}$

Poznate su vrednosti $f(x - h)$ i $f(x)$: $f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x - h)}{h}$

Poznate su vrednosti $f(x - h)$ i $f(x + h)$:

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

Primer

Pronaći izvod funkcije $f(x) = \sin(x)$ u tački $x = 0,5$ (u radijanima). $f'(0,5) = \cos(0,5) = 0,8775825619$

h	$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$	$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$
$1 \cdot 10^{-1}$	0,8761206554	$1,5 \cdot 10^{-3}$
$1 \cdot 10^{-2}$	0,8775679356	$1,5 \cdot 10^{-5}$
$1 \cdot 10^{-3}$	0,8775824156	$1,5 \cdot 10^{-7}$
$1 \cdot 10^{-4}$	0,8775825604	$1,5 \cdot 10^{-9}$
$1 \cdot 10^{-5}$	0,8775825619	$1,8 \cdot 10^{-11}$
$1 \cdot 10^{-6}$	0,8775825619	$-7,5 \cdot 10^{-12}$
$1 \cdot 10^{-7}$	0,8775825616	$2,7 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-8}$	0,8775824522	$-2,9 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-11}$	0,8775813409	$1,2 \cdot 10^{-6}$
$1 \cdot 10^{-13}$	0,8776313010	$-4,9 \cdot 10^{-5}$
$1 \cdot 10^{-15}$	0,8881784197	$-1,1 \cdot 10^{-2}$
$1 \cdot 10^{-17}$	0,0000000000	$8,8 \cdot 10^{-1}$

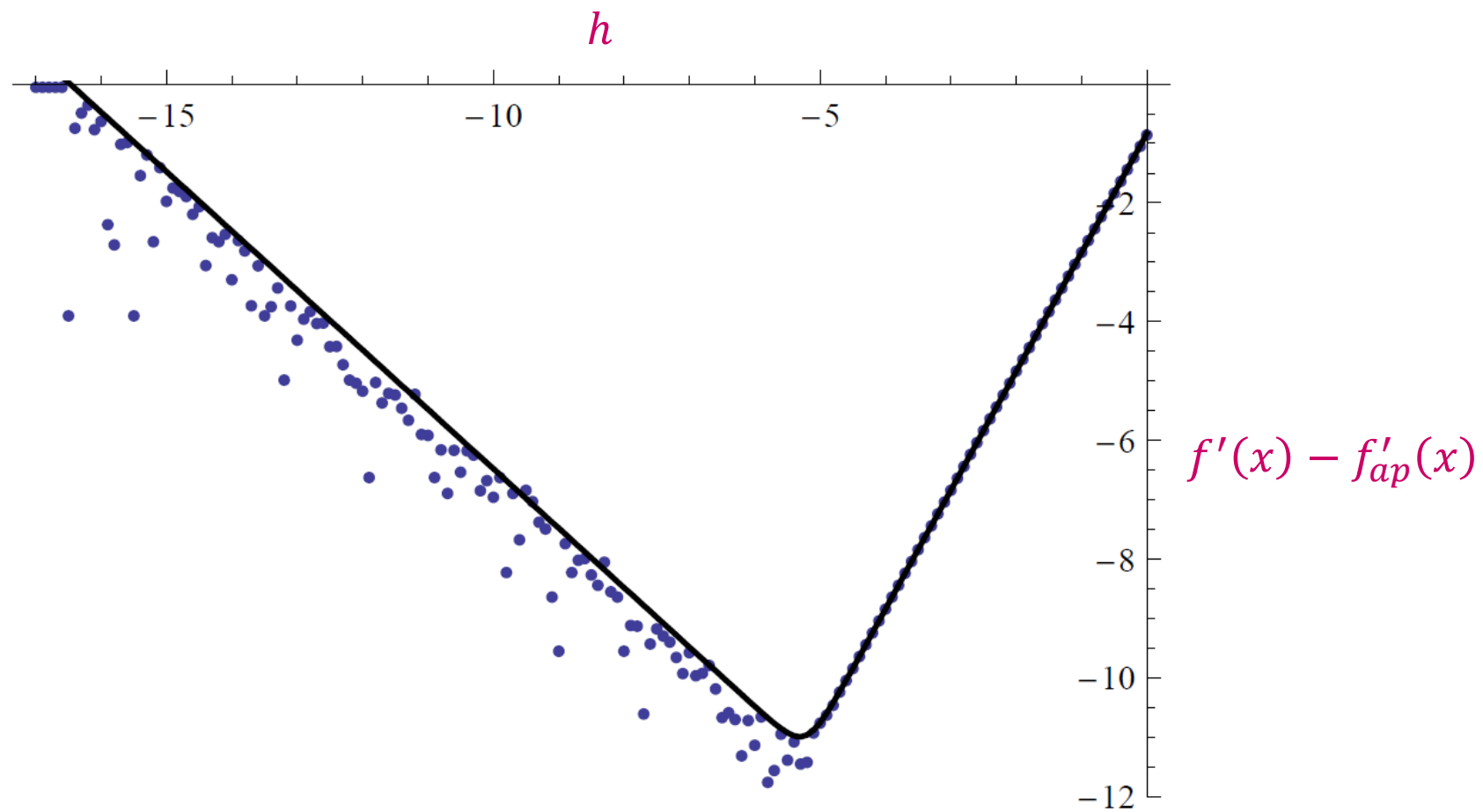
Primer

Pronaći izvod funkcije $f(x) = \sin(x)$ u tački $x = 0,5$ (u radijanima). $f'(0,5) = \cos(0,5) = 0,8775825619$

h	$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$	$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$
$1 \cdot 10^{-1}$	0,8761206554	$1,5 \cdot 10^{-3}$
$1 \cdot 10^{-2}$	0,8775679356	$1,5 \cdot 10^{-5}$
$1 \cdot 10^{-3}$	0,8775824156	$1,5 \cdot 10^{-7}$
$1 \cdot 10^{-4}$	0,8775825604	$1,5 \cdot 10^{-9}$
$1 \cdot 10^{-5}$	0,8775825619	$1,8 \cdot 10^{-11}$
$1 \cdot 10^{-6}$	0,8775825619	$-7,5 \cdot 10^{-12}$
$1 \cdot 10^{-7}$	0,8775825616	$2,7 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-8}$	0,8775824522	$-2,9 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-11}$	0,8775813409	$1,2 \cdot 10^{-6}$
$1 \cdot 10^{-13}$	0,8776313010	$-4,9 \cdot 10^{-5}$
$1 \cdot 10^{-15}$	0,8881784197	$-1,1 \cdot 10^{-2}$
$1 \cdot 10^{-17}$	0,0000000000	$8,8 \cdot 10^{-1}$

Primer

$$f'_{ap}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$



Primer

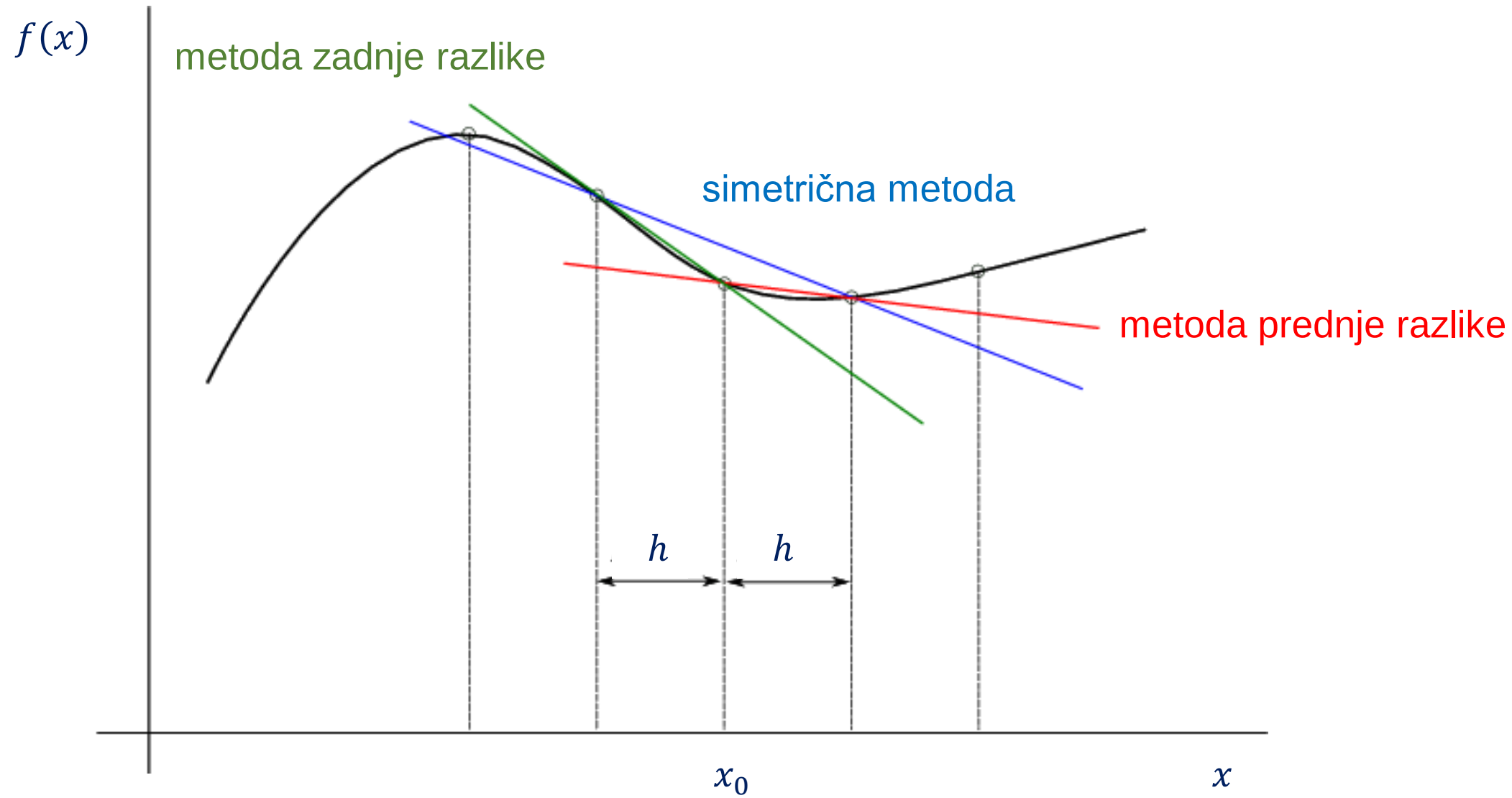
Pronaći izvod funkcije $f(x) = \sin(x)$ u tački $x = 0,5$ (u radijanima).

$$f'(0,5) = \cos(0,5) = 0,8775825619$$

metoda prednje razlike

simetrična metoda

h	$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$	$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$	$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$	$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$
$1 \cdot 10^{-1}$	0,8521693479	$2,5 \cdot 10^{-2}$	0,8761206554	$1,5 \cdot 10^{-3}$
$1 \cdot 10^{-2}$	0,8751708279	$2,4 \cdot 10^{-3}$	0,8775679356	$1,5 \cdot 10^{-5}$
$1 \cdot 10^{-3}$	0,8773427029	$2,4 \cdot 10^{-4}$	0,8775824156	$1,5 \cdot 10^{-7}$
$1 \cdot 10^{-4}$	0,8775585892	$2,4 \cdot 10^{-5}$	0,8775825604	$1,5 \cdot 10^{-9}$
$1 \cdot 10^{-5}$	0,8775801647	$2,4 \cdot 10^{-6}$	0,8775825619	$1,8 \cdot 10^{-11}$
$1 \cdot 10^{-6}$	0,8775823222	$2,4 \cdot 10^{-7}$	0,8775825619	$-7,5 \cdot 10^{-12}$
$1 \cdot 10^{-7}$	0,8775825372	$2,5 \cdot 10^{-8}$	0,8775825616	$2,7 \cdot 10^{-10}$
$1 \cdot 10^{-8}$	0,8775825622	$-2,9 \cdot 10^{-10}$	0,8775824522	$-2,9 \cdot 10^{-10}$



Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

Ojlerova metoda

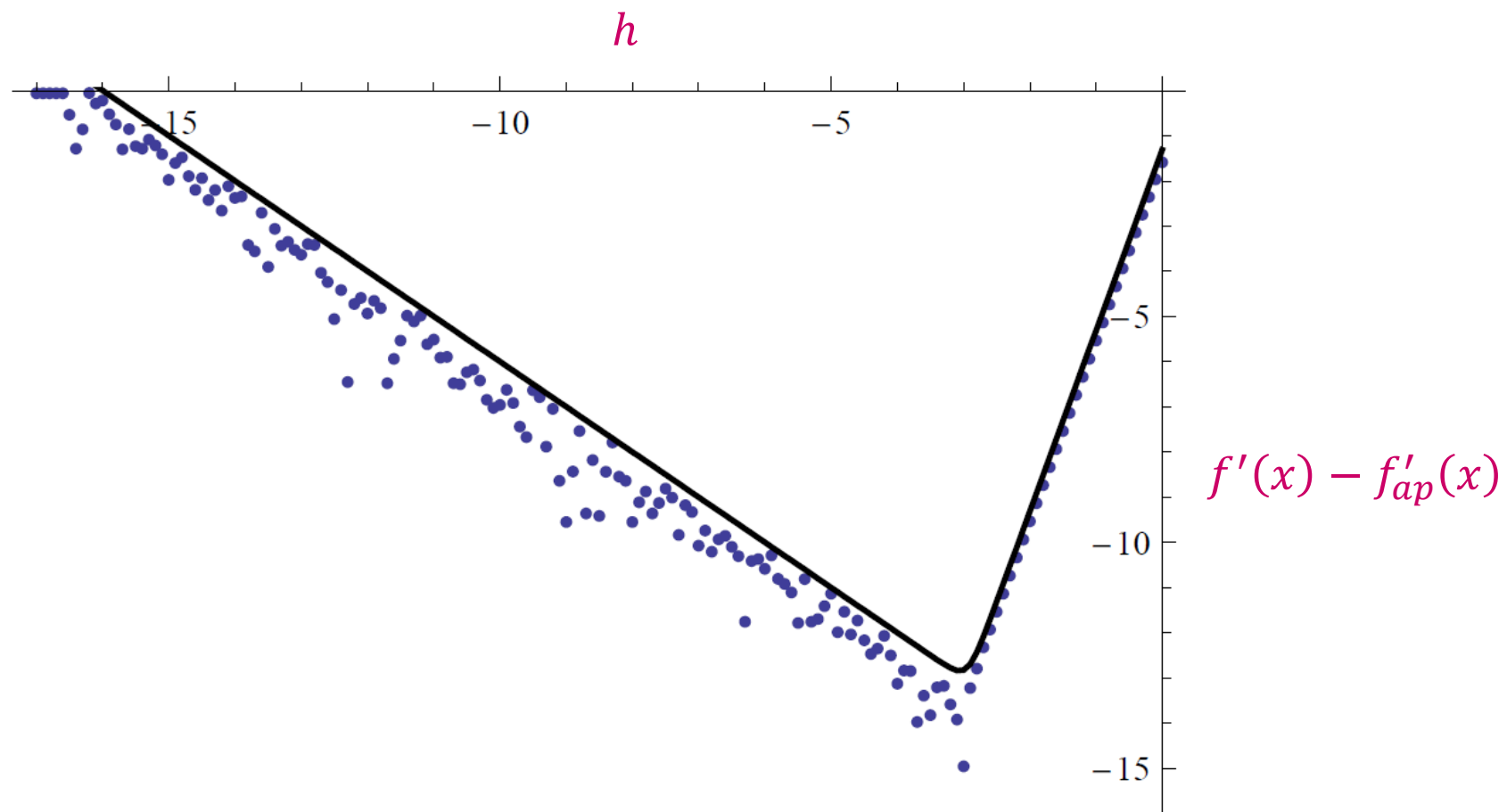
Metoda četri tačke

Poznate su vrednosti $f(x - 2h)$, $f(x - h)$, $f(x + h)$, $f(x + 2h)$.

$$f'(x) \approx \frac{f(x - 2h) - 8f(x - h) + 8f(x + h) - f(x + 2h)}{12h}$$

Primer

$$f'_{ap}(x) \approx \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h}$$



Numeričke metode

➤ **diferenciranje**

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ **integracija**

metoda pravougaonika

metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ **rešavanje diferencijalnih jednačina**

Ojlerova metoda

Drugi izvod

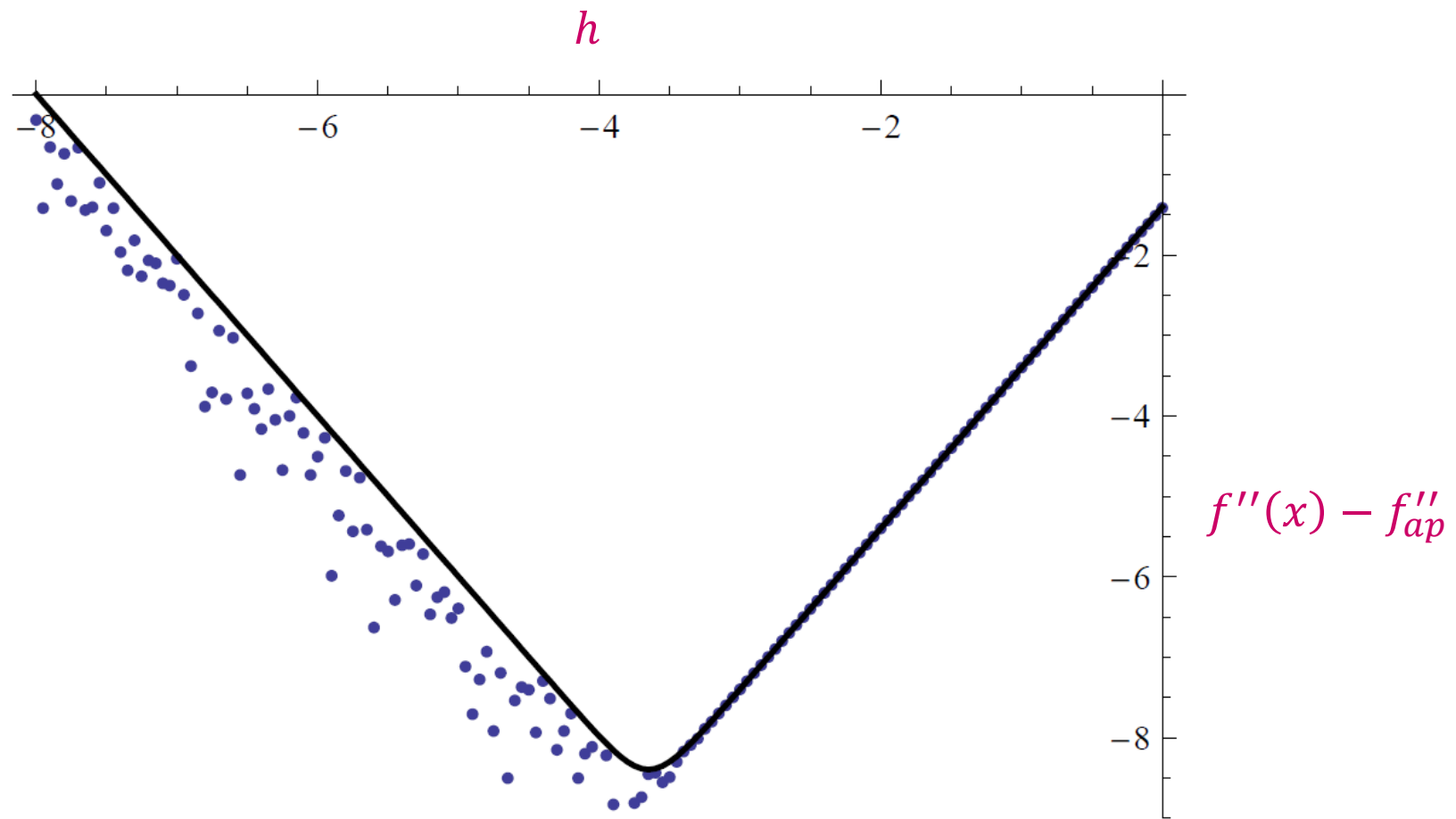
$$f''(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(x + \Delta x) - f'(x)}{\Delta x}$$

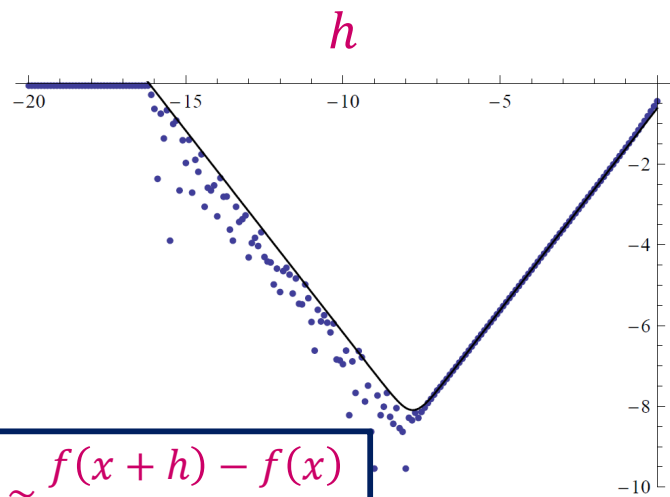
$$f''(x) \approx \frac{f'(x + h) - f'(x)}{h} \approx \frac{\frac{f(x + h) - f(x)}{h} - \frac{f(x) - f(x - h)}{h}}{h}$$

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

Primer

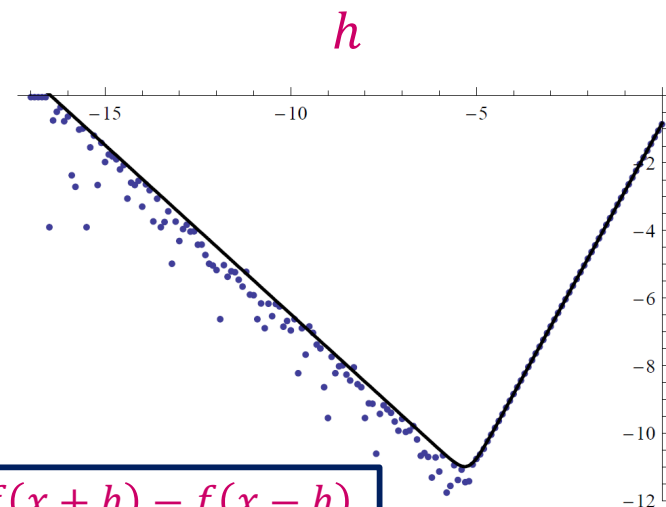
$$f''_{ap}(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$





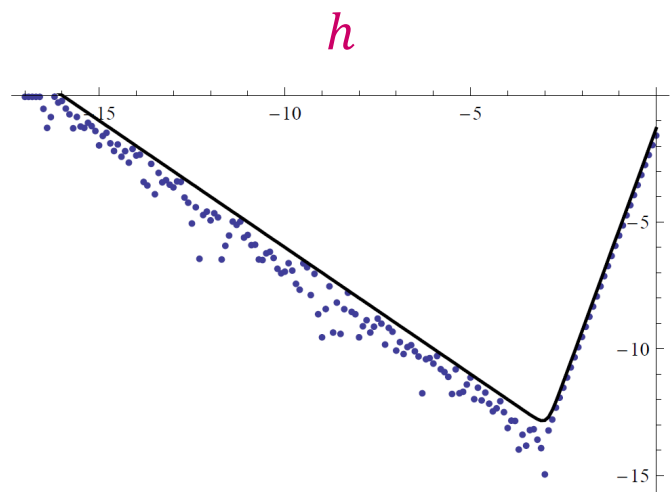
$$f'(x) - f'_{ap1}(x)$$

$$f'_{ap1}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



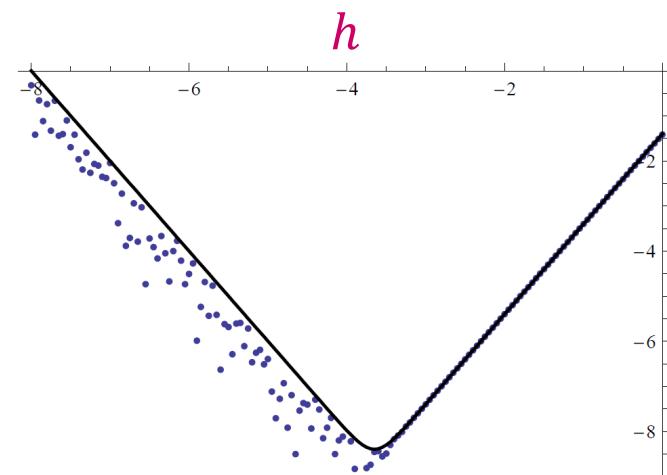
$$f'(x) - f'_{ap2}(x)$$

$$f'_{ap2}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$



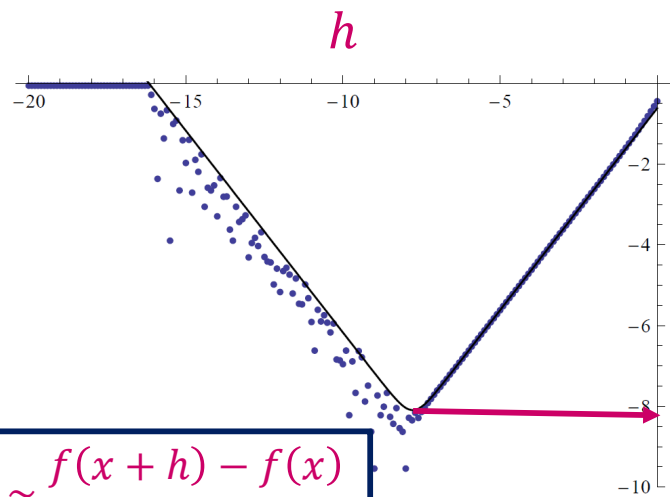
$$f'(x) - f'_{ap3}(x)$$

$$f'_{ap3}(x) \approx \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h}$$



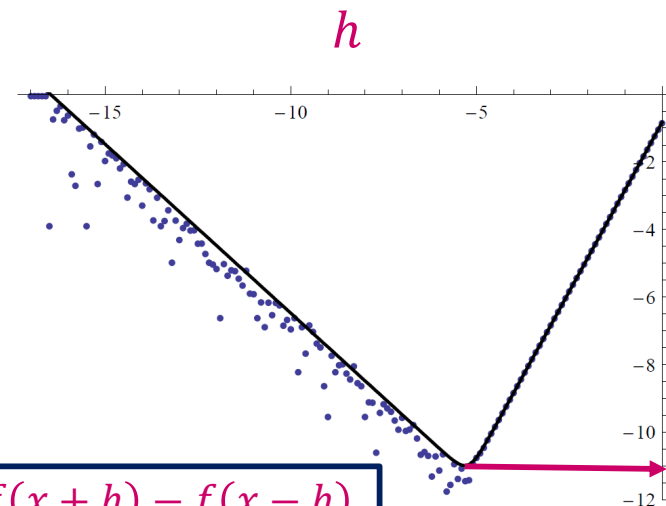
$$f''(x) - f''_{ap}(x)$$

$$f''_{ap}(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$



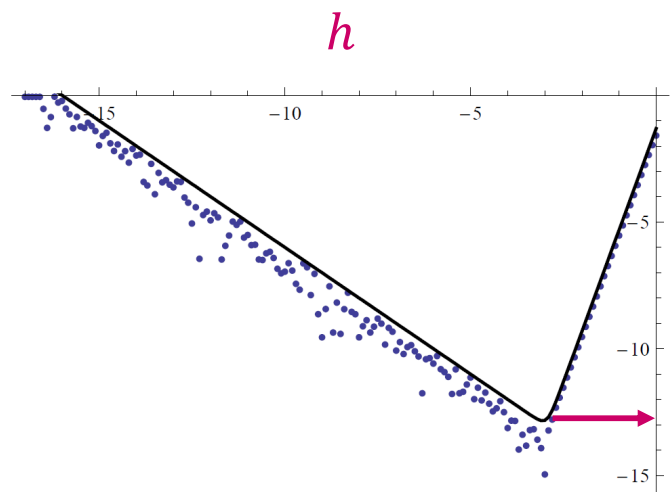
$$f'(x) - f'_{ap1}(x)$$

$$f'_{ap1}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



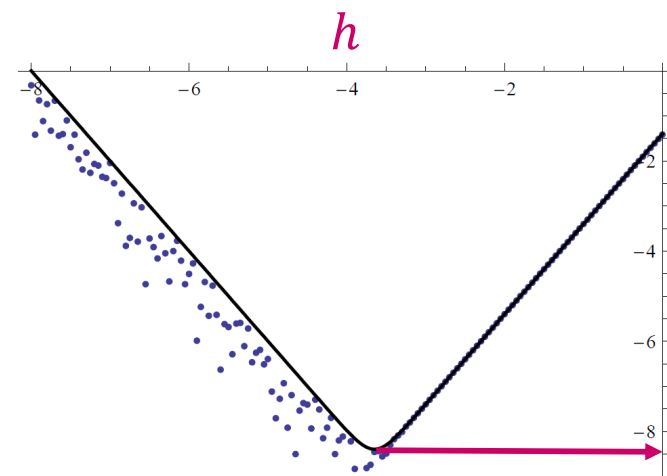
$$f'(x) - f'_{ap2}(x)$$

$$f'_{ap2}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$



$$f'(x) - f'_{ap3}(x)$$

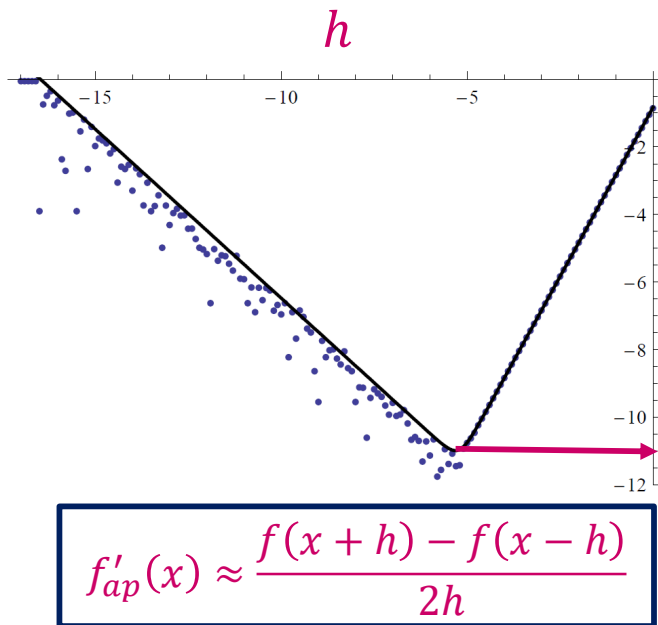
$$f'_{ap3}(x) \approx \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h}$$



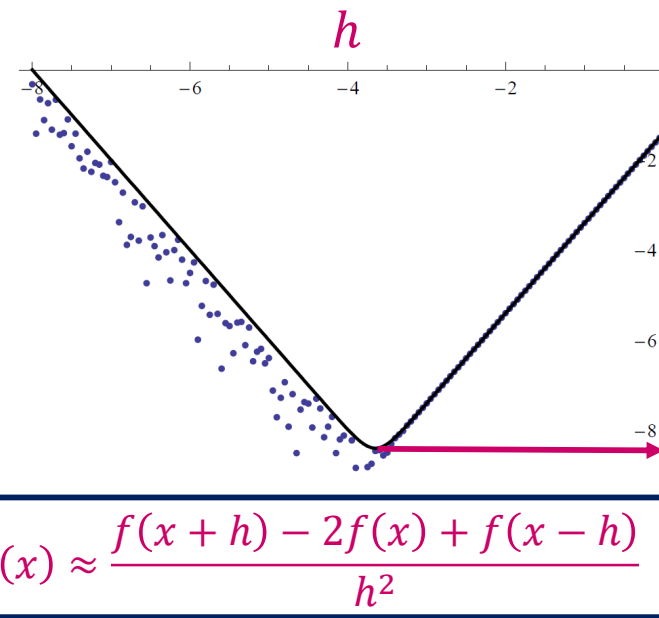
$$f''(x) - f''_{ap}(x)$$

$$f''_{ap}(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

Dve simetrične tačke



$$f'(x) - f'_{ap}(x)$$



$$f''(x) - f''_{ap}(x)$$

izvod višeg reda $\rightarrow$ veća greška

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

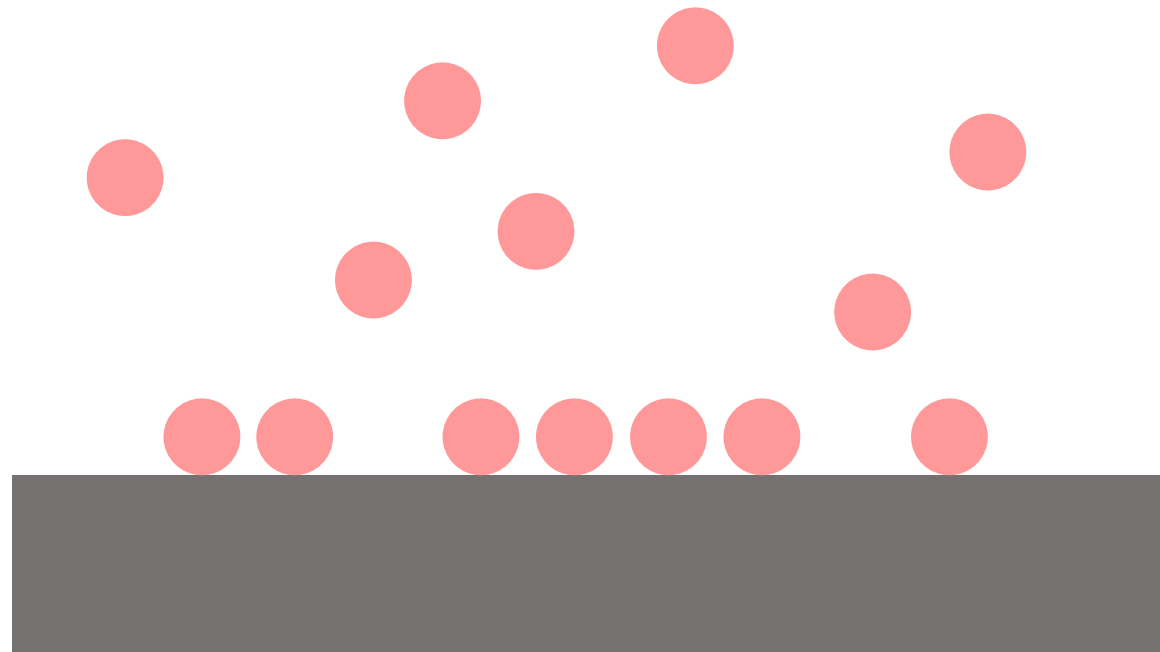
metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

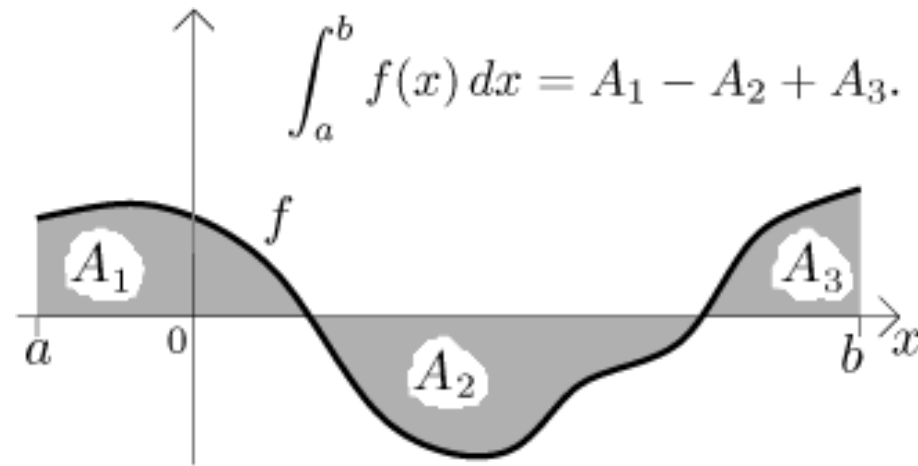
Ojlerova metoda

Fizisorpcija gasa na čvrstoj površini



$$\theta = \int_{t_1}^{t_2} v dt$$

Određeni integral



Integral funkcije $f(x)$ predstavlja površinu ispod krive, koja ima pozitivnu/negativnu vrednost u zavisnosti od toga da li je vrednost funkcije $f(x)$ u odgovarajućem intervalu veća ili manja od nule.

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

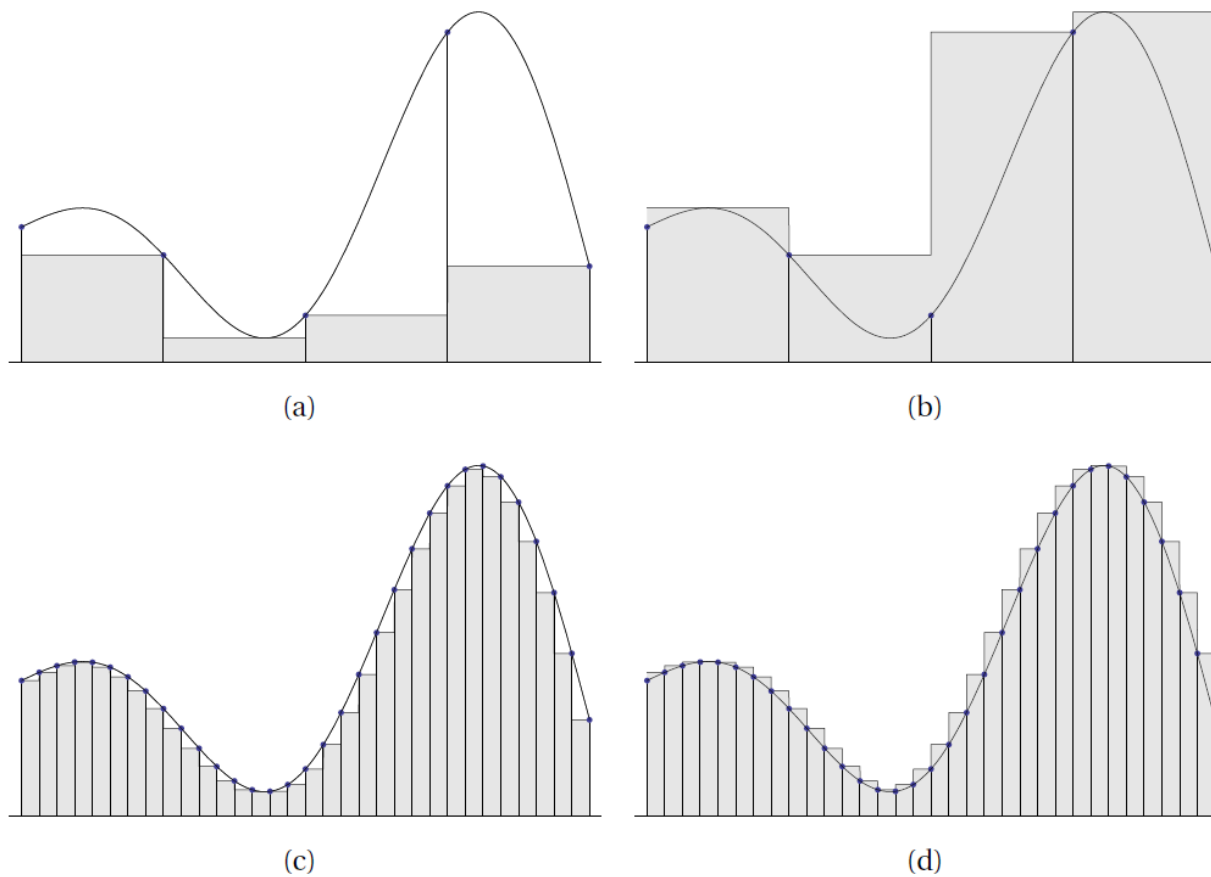
metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

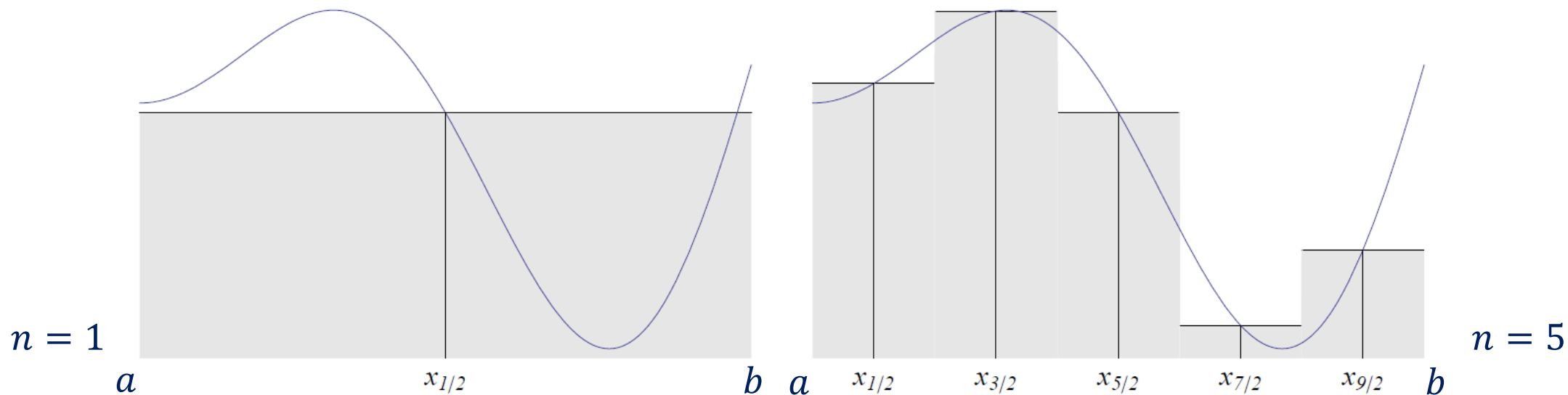
Ojlerova metoda

Rimanova suma



Rimanova suma: što je manji korak, preciznija je vrednost izračunatog integrala.

Metoda srednje tačke



n predstavlja broj podintervala, a h je veličina koraka.

$$\int_a^b f(x) dx \approx I_{\text{mst}} = h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1/2})$$

$$x_{i-1/2} = \frac{x_i - x_{i-1}}{2} = a + h \left(i - \frac{1}{2} \right)$$

Primer

Pronaći integral funkcije $f(x) = \cos x$ u intervalu od 0 do 1 (u radijanima).

$$I = \int_0^1 \cos x \, dx = \sin 1 - \sin 0 \approx 0,8414709848$$

h	I_{mst}	$I - I_{\text{mst}}$
0,500000	0,85030065	$-8,8 \cdot 10^{-3}$
0,250000	0,84366632	$-2,2 \cdot 10^{-3}$
0,125000	0,84201907	$-5,5 \cdot 10^{-4}$
0,062500	0,84160796	$-1,4 \cdot 10^{-4}$
0,031250	0,84150523	$-3,4 \cdot 10^{-5}$
0,015625	0,84147954	$-8,6 \cdot 10^{-6}$
0,007813	0,84147312	$-2,1 \cdot 10^{-6}$
0,003906	0,84147152	$-5,3 \cdot 10^{-7}$
0,001953	0,84147112	$-1,3 \cdot 10^{-7}$
0,000977	0,84147102	$-3,3 \cdot 10^{-8}$

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

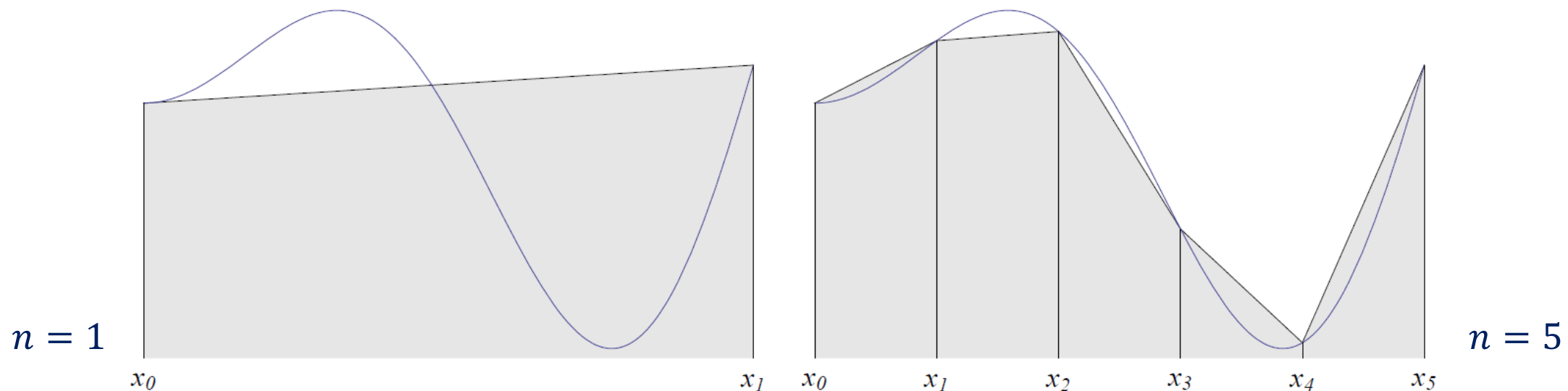
metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

Ojlerova metoda

Metoda trapeza



n predstavlja broj podintervala, a h je veličina koraka.

$$\int_a^b f(x) dx \approx I_{\text{trap}} = \sum_{i=1}^n \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} h = h \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right]$$

Primer

Pronaći integral funkcije $f(x) = \cos x$ u intervalu od 0 do 1 (u radijanima).

$$I = \int_0^1 \cos x \, dx = \sin 1 - \sin 0 \approx 0,8414709848$$

h	I_{mst}	$I - I_{\text{mst}}$
0,500000	0,82386686	$1,8 \cdot 10^{-2}$
0,250000	0,83708375	$4,4 \cdot 10^{-3}$
0,125000	0,84037503	$1,1 \cdot 10^{-3}$
0,062500	0,84119705	$2,7 \cdot 10^{-4}$
0,031250	0,84140250	$6,8 \cdot 10^{-5}$
0,015625	0,84145386	$1,7 \cdot 10^{-5}$
0,007813	0,84146670	$4,3 \cdot 10^{-6}$
0,003906	0,84146991	$1,1 \cdot 10^{-6}$
0,001953	0,84147072	$2,6 \cdot 10^{-7}$
0,000977	0,84147092	$6 \cdot 10^{-8}$

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

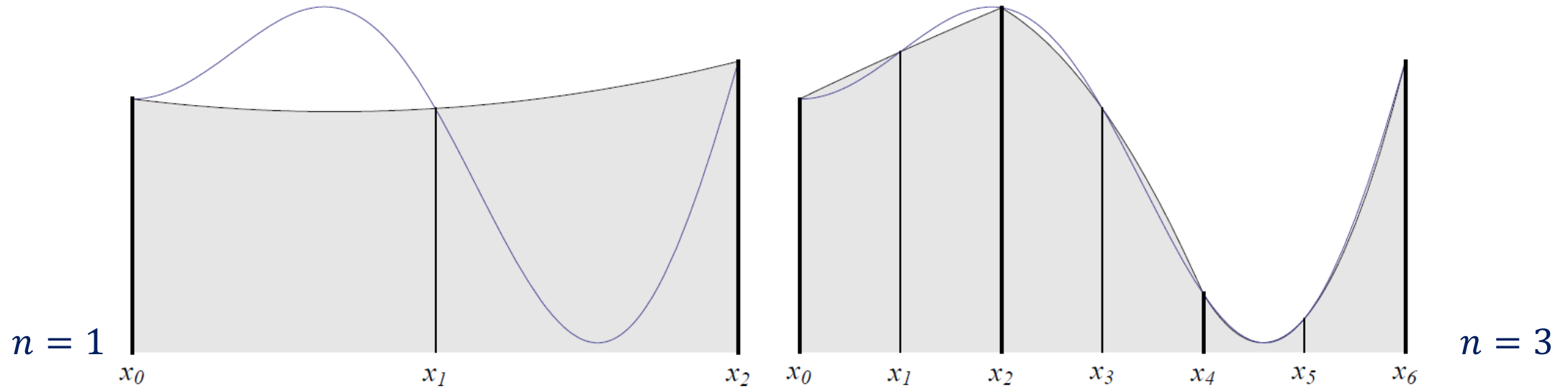
metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

Ojlerova metoda

Simpsonova metoda



Parabola unutar svakog intervala.

$$\int_a^b f(x) dx \approx I_{\text{sim}} = \frac{h}{3} \left[f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i-1}) \right]$$

Primer

Pronaći integral funkcije $f(x) = \cos x$ u intervalu od 0 do 1 (u radijanima).

$$I = \int_0^1 \cos x \, dx = \sin 1 - \sin 0 \approx 0,8414709848$$

h	I_{mst}	$I - I_{\text{mst}}$
0,500000	0,84177209	$-3,0 \cdot 10^{-4}$
0,250000	0,84148938	$-1,8 \cdot 10^{-5}$
0,125000	0,84147213	$-1,1 \cdot 10^{-6}$
0,062500	0,84147106	$-8 \cdot 10^{-8}$
0,031250	0,84147099	$-1 \cdot 10^{-8}$
0,015625	0,84147099	$-1 \cdot 10^{-8}$
0,007813	0,84147098	0
0,003906	0,84147098	0
0,001953	0,84147098	0
0,000977	0,84147098	0

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

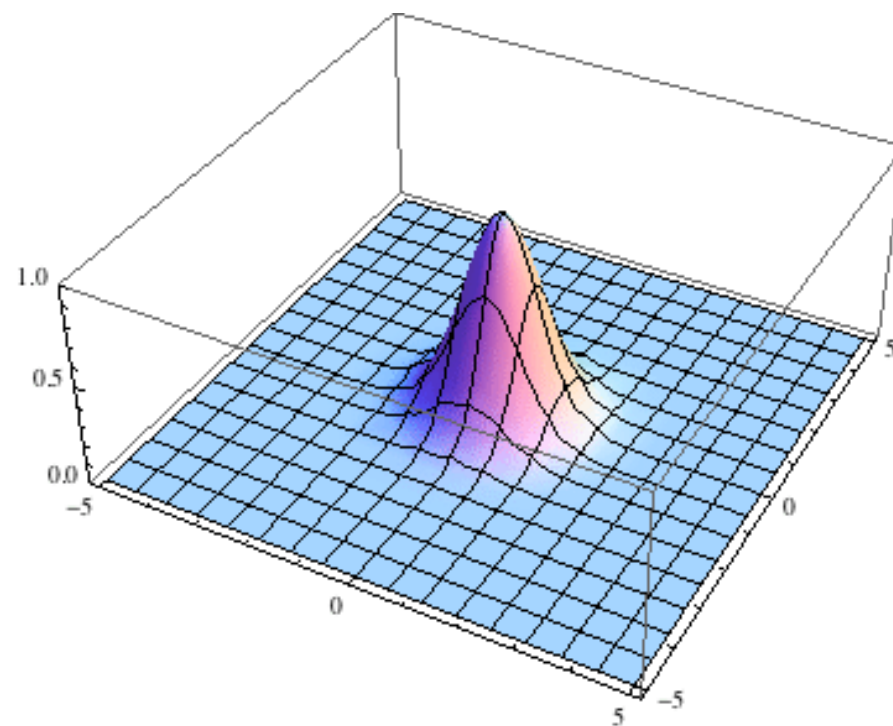
metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ **rešavanje diferencijalnih jednačina**

Ojlerova metoda

Propagacija talasne funkcije



$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ **rešavanje diferencijalnih jednačina**

Ojlerova metoda

Ojlerova metoda

metoda za rešavanje običnih diferencijalnih jednačina prvog reda

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

Poznata vrednost x_0 u tački y_0 , traži se vrednost x_n u tački y_n .

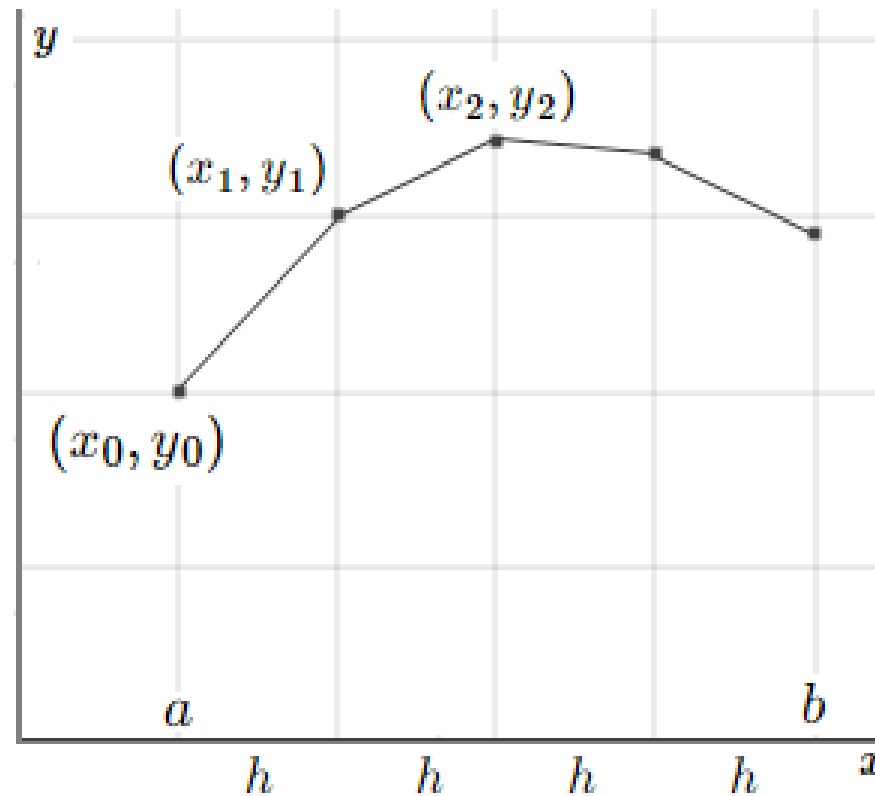
$$x_i - x_{i-1} = h$$

$$\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{\Delta y}{\Delta x} \approx \frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

$$y_1 \approx y_0 + (x_1 - x_0)f(x, y)$$

Ojlerova metoda

$$y_1 \approx y_0 + hf(x, y)$$



Numeričke metode

➤ diferenciranje

prvi izvod – metoda konačnih razlika

prvi izvod – simetrična metoda

prvi izvod – metoda četiri tačke

drugi izvod

➤ integracija

metoda pravougaonika

metoda trapeza

Simpsonova metoda

➤ rešavanje diferencijalnih jednačina

Ojlerova metoda