

Matematičke metode u fizičkoj hemiji

Predavanje 7

Numeričke greške

- greška skraćivanja
- greška zaokruživanja

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

Razvoj funkcije u Tejlorov red

$$x = x_0 + h$$

Tejlorov red:
$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(x - x_0)^i}{i!} f^{(i)}(x_0)$$

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \frac{h^1}{1!} f'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(x_0) + \frac{h^3}{3!} f'''(x_0) + \frac{h^4}{4!} f^{(iv)}(x_0) + \dots$$

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

Razvoj funkcija u Tejlorov red

funkcije: $f(x - 2h)$, $f(x - h)$, $f(x + h)$, $f(x + 2h)$

$$f(x_0 - 2h) = f(x_0) - \frac{(2h)^1}{1!} f'(x_0) + \frac{(2h)^2}{2!} f''(x_0) - \frac{(2h)^3}{3!} f'''(x_0) + \frac{(2h)^4}{4!} f^{(iv)}(x_0) + \dots$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - \frac{h^1}{1!} f'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(x_0) - \frac{h^3}{3!} f'''(x_0) + \frac{h^4}{4!} f^{(iv)}(x_0) + \dots$$

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \frac{h^1}{1!} f'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(x_0) + \frac{h^3}{3!} f'''(x_0) + \frac{h^4}{4!} f^{(iv)}(x_0) + \dots$$

$$f(x_0 + 2h) = f(x_0) + \frac{(2h)^1}{1!} f'(x_0) + \frac{(2h)^2}{2!} f''(x_0) + \frac{(2h)^3}{3!} f'''(x_0) + \frac{(2h)^4}{4!} f^{(iv)}(x_0) + \dots$$

Metoda konačnih razlika

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

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right| \leq \frac{h}{2} \max_{x \in [a, a+h]} f''(x)$$

Simetrična metoda

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

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \right| \leq \frac{h^2}{6} \max_{x \in [a, a+h]} f'''(x)$$

Metoda četri tačke

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

$$\left| f'(a) - \frac{f(a-2h) - 8f(a-h) + 8f(a+h) - f(a+2h)}{12h} \right| \leq \frac{h^4}{18} \max_{x \in [a, a+h]} f^{(v)}(x)$$

Drugi izvod

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

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{2h} \right| \leq \frac{h^2}{12} \max_{x \in [a, a+h]} f'''(x)$$

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 srednje tačke

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

$$n = 1 \quad \left| \int_a^b f(x)dx - f(a_{1/2})(b-a) \right| \leq \frac{7}{24} (b-a)^3 \max_{x \in [a,b]} f''(x)$$

$$\left| \int_a^b f(x)dx - I_{\text{mst}} \right| \leq \frac{7}{24} (b-a)h^2 \max_{x \in [a,b]} f''(x)$$

Metoda trapeza

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

$$\left| \int_a^b f(x)dx - I_{\text{trap}} \right| \leq \frac{5}{12} (b-a)h^2 \max_{x \in [a,b]} f''(x)$$

Simpsonova metoda

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

$$\left| \int_a^b f(x)dx - I_{\text{sim}} \right| \leq \frac{49}{2880} (b-a)h^4 \max_{x \in [a,b]} f^{(iv)}(x)$$

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

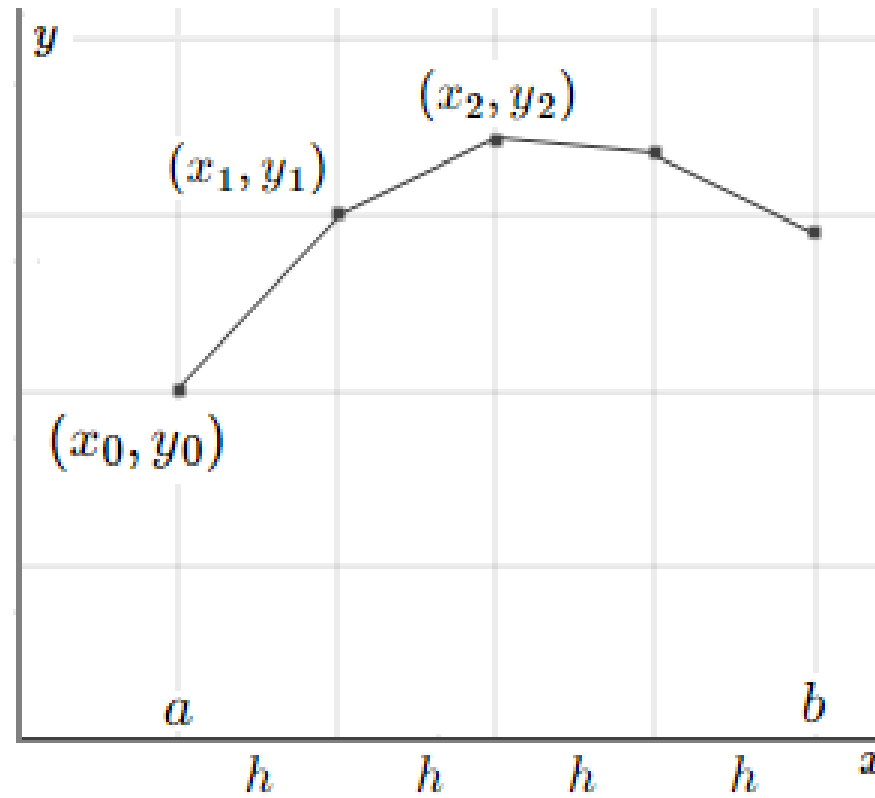
Ojlerova metoda

tačna vrednost: $y(x_{i+1}) = y(x_i) + \frac{h}{1!} y'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \dots$

približna vrednost: $y_{i+1} \approx y_i + hf(x_i, y_i)$

greška: $y(x_{i+1}) - y_{i+1} = [y(x_i) - y_i] + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \dots$

Ojlerova metoda



akumulacija greške