Politechnika Wrocławska

Metody numeryczne w fizyce

W11OPA-SM0060G

rok akademicki 2023/24

semestr letni

Wykład 6

Karol Tarnowski

karol.tarnowski@pwr.edu.pl

L-1 p. 220

unite! University Network for Innovation, Technology and Engineering

HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Evaluated by IEP INSTITUTIONAL EVALUATION PROGRAMME www.iep-qaa.org

Politechnika Wrocławska

Plan wykładu

- Różniczkowanie numeryczne
  - Pierwsza pochodna
  - Dokładność przybliżenia
  - Druga pochodna
  - Zastosowanie interpolacji wielomianowej
- Całkowanie numeryczne
  - Zastosowanie interpolacji wielomianowej
  - Wzór Newtona-Cotesa
  - Wzór trapezów
  - Wzór Simpsona

Na podstawie:

- D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna

- Wzór Taylora

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(\xi)$$

- Pierwsza pochodna

$$\boxed{f'(x) = \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] - \frac{1}{2}hf''(\xi)}$$

Politechnika Wrocławska

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna - przykład

- Stosując wzór

$$f'(x) = \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] - \frac{1}{2}hf''(\xi)$$

- Chcemy obliczyć przybliżoną wartość pochodnej funkcji cos(x) w punkcie x = π/4 dla h = 0,01 i oszacować błąd przybliżenia

$$f'\left(\frac{\pi}{4}\right) \approx \frac{\cos\left(\frac{\pi}{4} + 0{,}01\right) - \cos\left(\frac{\pi}{4}\right)}{0{,}01} =$$

$$= \frac{0{,}700\ 000\ 476 - 0{,}707\ 106\ 781}{0{,}01} = -0{,}710\ 630\ 501$$

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna - przykład

- Błąd wyznaczonej wartości

$$\left|\frac{1}{2}hf''(\xi)\right| = 0,005\left|\cos\xi\right| \leq 0,005$$

$$\xi \in \left(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4} + 0,01\right)$$

$$\left|\cos\xi\right| \leq 0,707\ 106\ 781$$

$$\left|\frac{1}{2}hf''(\xi)\right| = 0,005\left|\cos\xi\right| \leq 0,003\ 535\ 534$$

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna - przykład

$$\left|\frac{1}{2} h f''(\xi)\right| \le 0{,}003\ 535\ 534$$

$$f'\left(\frac{\pi}{4}\right) \approx -0{,}710\ 630\ 501$$

$$-\sin\left(\frac{\pi}{4}\right) = -0{,}707\ 106\ 781$$

$$f'\left(\frac{\pi}{4}\right) - \left[-\sin\left(\frac{\pi}{4}\right)\right] = -0{,}003\ 523\ 719$$

Różniczkowanie numeryczne

Zmniejszanie kroku

$$f'(x) = \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] - \frac{1}{2}hf''(\xi)$$

$$f'(x) = \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] + O(h)$$

- Zmniejszanie *h* powinno prowadzić do zwiększenia dokładności przybliżenia pochodnej

Różniczkowanie numeryczne

Zmniejszanie kroku

$$f = \operatorname{arctg}(x) \quad \text{dla} \quad x = \sqrt{2}$$

$$f'(x) = \frac{1}{x^2+1} \qquad f'\left(\sqrt{2}\right) = \frac{1}{x^2+1} = \frac{1}{3}$$

x	1,41421356237310e0
f(*x*)	9,55316618124509e-1

h	*f*(*x*+*h*)	*f*(*x*+*h*)-*f*(*x*)	(*f*(*x*+*h*)-*f*(*x*))/*h*
2^{-1}	1,08938363393987e0	1,34067015815356e-01	2,68134031630713e-1
2^{-2}	1,02972677195646e0	7,44101538319478e-02	2,97640615327791e-1
2^{-3}	9,94644389826101e-1	3,93277717015921e-02	3,14622173612737e-1
2^{-4}	9,75550948454817e-1	2,02343303303073e-02	3,23749285284917e-1
2^{-10}	9,55641989159854e-1	3,25371035345134e-04	3,33179940193418e-1
2^{-25}	9,55316628058617e-1	9,93410731453537e-09	3,33333328366280e-1
2^{-40}	9,55316618124812e-1	3,03201908025130e-13	3,33374023437500e-1
2^{-48}	9,55316618124511e-1	1,22124532708767e-15	3,43750000000000e-1
2^{-49}	9,55316618124510e-1	0,00000000000000e0	0,00000000000000e0

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna - dokładność kwadratowa

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + \frac{1}{3!}h^3 f'''(\xi_+)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) - \frac{1}{3!}h^3 f'''(\xi_-)$$

$$f(x+h) - f(x-h) = 0 + 2hf'(x) + 0 + \frac{1}{3!}h^3 \left[f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-) \right]$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{1}{12}h^2 \left[f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-) \right] =$$

$$= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{1}{6}h^2 f'''(\xi)$$

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

Politechnika Wrocławska

Różniczkowanie numeryczne

Druga pochodna - dokładność kwadratowa

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + \frac{1}{3!}h^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(IV)}(\xi_+)$$

$$f(x) = f(x)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) - \frac{1}{3!}h^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(IV)}(\xi_-)$$

$$f(x+h) - 2f(x) + f(x-h) = h^2 f''(x) + \frac{1}{12}h^4 f^{(IV)}(\xi)$$

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

Różniczkowanie numeryczne

Zastosowanie interpolacji wielomianowej

$$f(x) = \underbrace{\sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x)}_{p(x)} + \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) w(x)$$

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \qquad w(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

$$f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x) + \frac{1}{(n+1)!}\left[f^{(n+1)}(\xi) w'(x) + w(x) \frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi) \right]$$

$$w'(x) = \sum_{j=0}^{n} \left[\prod_{i=0, i\neq j}^{n} (x - x_i) \right]$$

Różniczkowanie numeryczne

Zastosowanie interpolacji wielomianowej

- Gdy *x* jest jednym z węzłów ($x = x_m$)

$$w'(x) = \sum_{j=0}^{n}\left[\prod_{i=0,i\neq j}^{n}(x-x_i)\right] \qquad w(x) = \prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

$$w'(x_m) = \prod_{i=0,i\neq m}^{n}(x_m-x_i)$$

$$f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)l_i'(x) + \frac{1}{(n+1)!}\left[f^{(n+1)}(\xi)w'(x) + w(x)\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi)\right]$$

$$f'(x_m) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)l_i'(x_m) + \frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)\prod_{i=0,i\neq m}^{n}(x_m-x_i)$$

Różniczkowanie numeryczne

Zastosowanie interpolacji wielomianowej - przykład

- dla n = 2 oraz m = 1

$$l_0(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\frac{x-x_2}{x_0-x_2},\qquad l_1(x)=\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\frac{x-x_2}{x_1-x_2},\qquad l_2(x)=\frac{x-x_0}{x_2-x_0}\frac{x-x_1}{x_2-x_1},$$

$$l_0'(x)=\frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)},\quad l_1'(x)=\frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)},\quad l_2'(x)=\frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.$$

$$f'(x_1)=f(x_0)\frac{x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+f(x_1)\frac{2x_1-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}+$$
$$+f(x_2)\frac{x_1-x_0}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}+\frac{1}{6}f'''(\xi)(x_1-x_0)(x_1-x_2)$$

Całkowanie numeryczne

Zastosowanie interpolacji wielomianowej

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p(x)\,dx$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b p(x)\,dx = \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\,l_i(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b l_i(x)\,dx$$

$$l_i(x) = \prod_{j=0,\, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

$$A_i = \int_a^b l_i(x)\,dx$$

Jeżeli węzły są równoodległe, to powyższy wzór nazywamy wzorem Newtona-Cotesa

Całkowanie numeryczne

Wzór trapezów

Całkowanie z wykorzystaniem interpolacji wielomianowej dla przypadku n = 1 sprowadza się do wzoru trapezów ($x_0 = a$, $x_1 = b$)

$$l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x - b}{a - b} \qquad l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - a}{b - a}$$

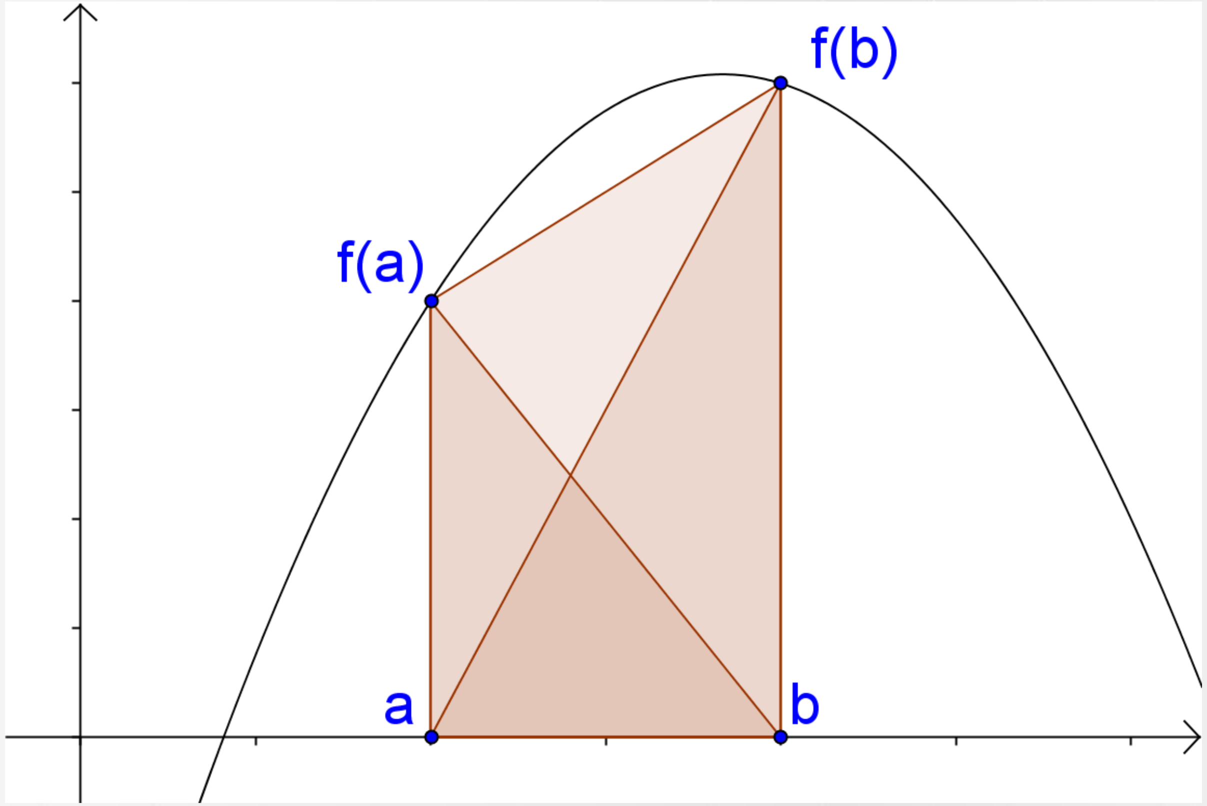
$$A_0(x) = \int_a^b \frac{x - b}{a - b} dx = \frac{1}{2}(b - a) \qquad A_1(x) = \int_a^b \frac{x - a}{b - a} dx = \frac{1}{2}(b - a)$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{1}{2}(b - a)\left[f(a) + f(b)\right]$$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{2}(b - a)\left[f(a) + f(b)\right] - \frac{1}{12}(b - a)^3 f''(\xi)$$

Całkowanie numeryczne

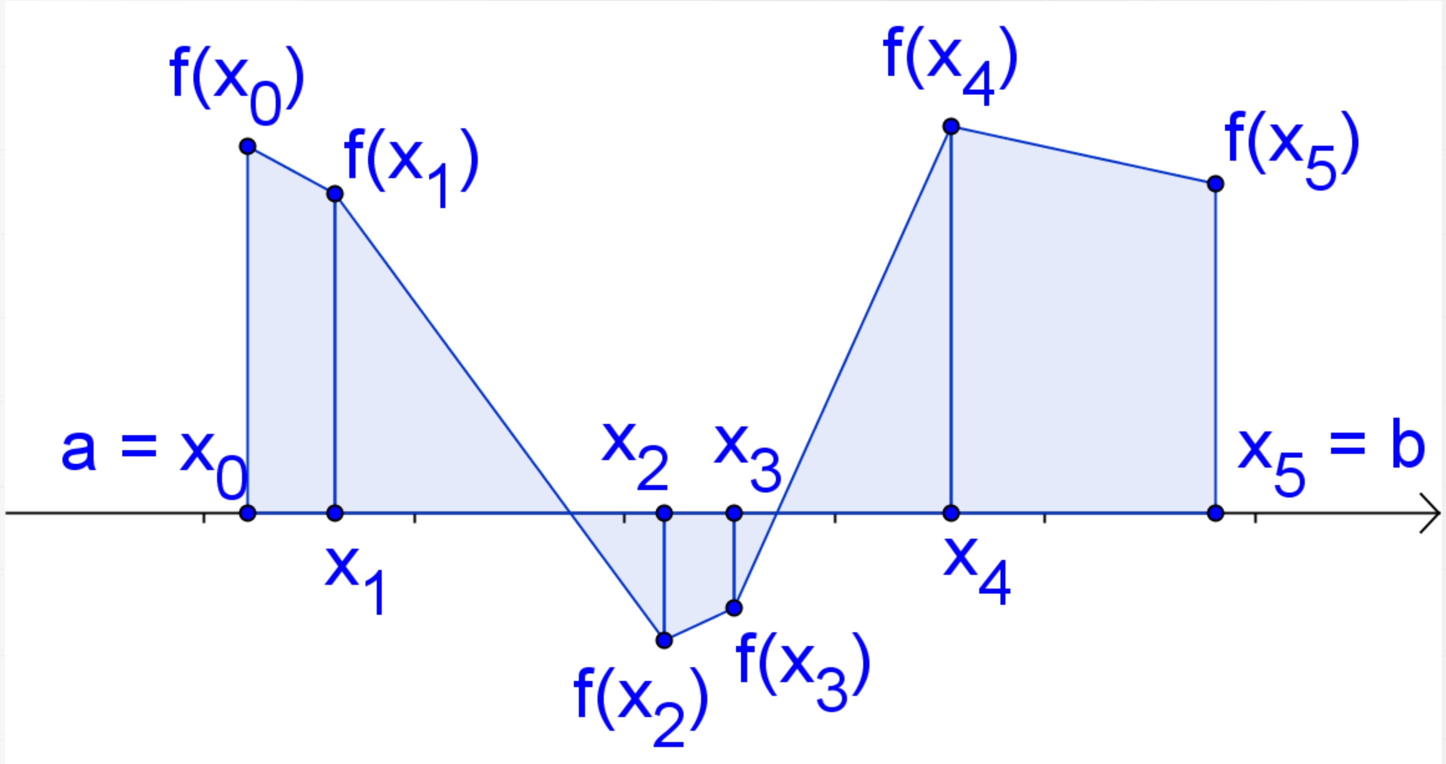
Wzór trapezów



$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{1}{2}(b-a)\left[f(a)+f(b)\right]$$

Całkowanie numeryczne

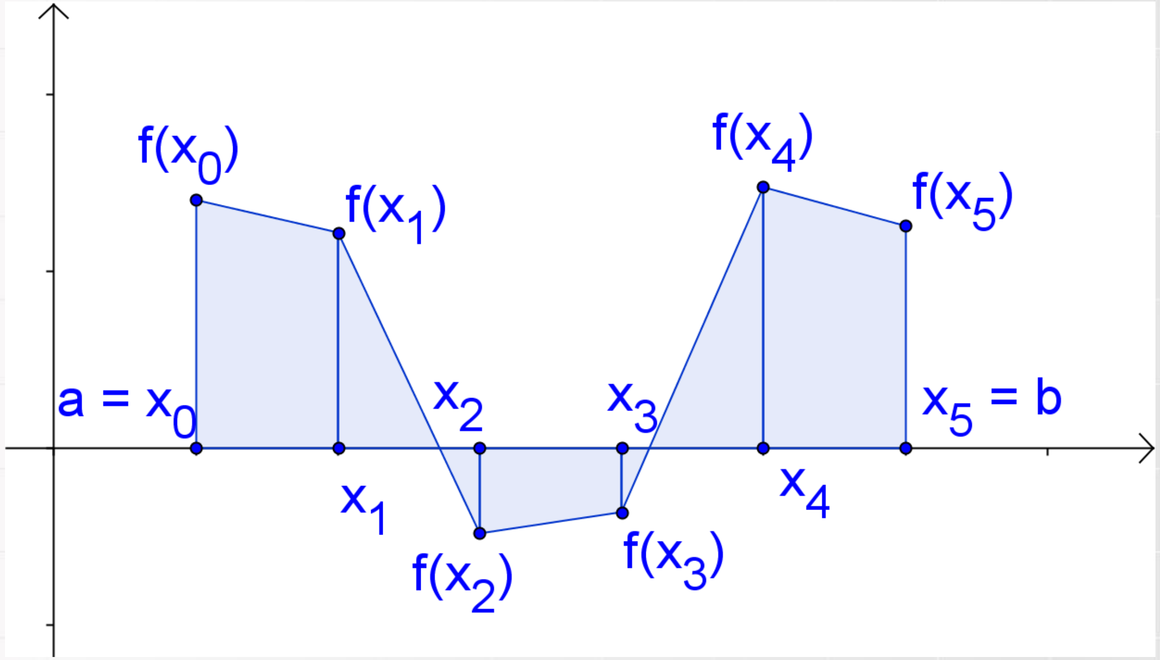
Złożony wzór trapezów



$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \approx \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1} - x_i)\left[f(x_i) + f(x_{i+1})\right]$$

Całkowanie numeryczne

Złożony wzór trapezów



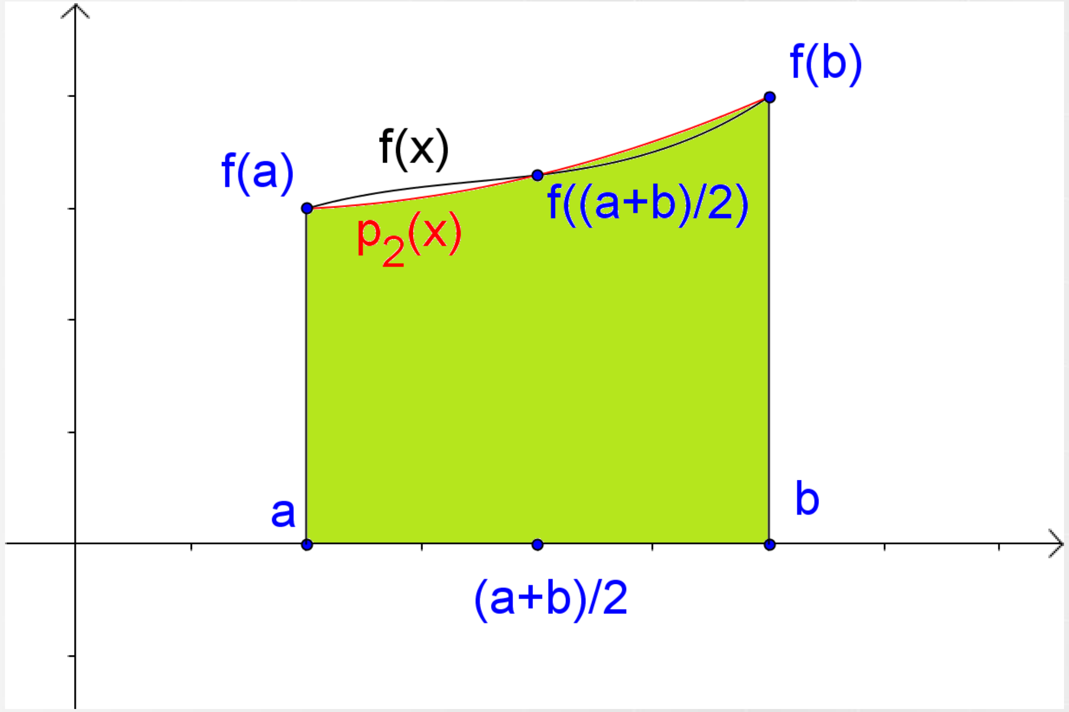
$$x_i = a + ih$$

$$h = \frac{(b-a)}{n}$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}h\sum_{i=0}^{n-1}\left[f(x_i)+f(x_{i+1})\right] = h\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

Całkowanie numeryczne

Wzór Simpsona



$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{6}(b-a)\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]-\frac{1}{2880}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi)$$

Politechnika Wrocławska

Całkowanie numeryczne

Złożony wzór Simpsona

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{6}(b-a)\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

$$x_i = a + ih \qquad (0 \le i \le 2n)$$

$$h = \frac{(b-a)}{2n}$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx \approx$$

$$\approx \frac{1}{3}h\sum_{i=0}^{n-1}\left[f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2})\right]=$$

$$=\frac{1}{3}h\left[f(x_0)+4\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{2i+1})+2\sum_{i=1}^{n-2}f(x_{2i+2})+f(x_{2n})\right]$$

Politechnika Wrocławska

Podsumowanie

- Różniczkowanie numeryczne
  - Pierwsza pochodna
  - Dokładność przybliżenia
  - Druga pochodna
  - Zastosowanie interpolacji wielomianowej
- Całkowanie numeryczne
  - Zastosowanie interpolacji wielomianowej
  - Wzór Newtona-Cotesa
  - Wzór trapezów
  - Wzór Simpsona