



Politechnika
Wrocławska

Metody numeryczne w fizyce

W11OPA-SM0060G

rok akademicki 2024/25

semestr letni

Wykład 7

Karol Tarnowski

karol.tarnowski@pwr.edu.pl

L-1 p. 221



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



Plan wykładu

- Różniczkowanie numeryczne
 - Pierwsza pochodna
 - Dokładność przybliżenia
 - Druga pochodna
 - Zastosowanie interpolacji wielomianowej

Na podstawie:

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

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna

- Wzór Taylora

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

- Pierwsza pochodna

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

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna - przykład

- Stosując wzór

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

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

$$\begin{aligned} f'\left(\frac{\pi}{4}\right) &\approx \frac{\cos\left(\frac{\pi}{4} + 0,01\right) - \cos\left(\frac{\pi}{4}\right)}{0,01} = \\ &= \frac{0,700\ 000\ 476 - 0,707\ 106\ 781}{0,01} = -0,710\ 630\ 501 \end{aligned}$$

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna - przykład

- Błąd wyznaczonej wartości

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

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

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

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

Różniczkowanie numeryczne

Pierwsza pochodna - przykład

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

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

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

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

Różniczkowanie numeryczne

Zmniejszanie kroku

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

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

- Zmniejszanie h powinno prowadzić do zwiększenia dokładności przybliżenia pochodnej

Różniczkowanie numeryczne

Zmniejszanie kroku

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{1}{12}h^2[f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)] = \\ &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{1}{6}h^2f'''(\xi) \end{aligned}$$

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

Różniczkowanie numeryczne

Druga pochodna - dokładność kwadratowa

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

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

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

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

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

Różniczkowanie numeryczne

Zastosowanie interpolacji wielomianowej

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

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

$$w(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

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

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

Różniczkowanie numeryczne

Zastosowanie interpolacji wielomianowej

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

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

$$w(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

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

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

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

Różniczkowanie numeryczne

Zastosowanie interpolacji wielomianowej - przykład

- dla $n = 2$ oraz $m = 1$

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

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

Podsumowanie

- Różniczkowanie numeryczne
 - Pierwsza pochodna
 - Dokładność przybliżenia
 - Druga pochodna
 - Zastosowanie interpolacji wielomianowej