MATEMATIČKE METODE U KEMIJI 2

1. Približni i točni brojevi (pogreške, zaokruživanje, …)
2. Nelinearne jednadžbe (numeričke metode njihova rješavanja)
3. Metode interpolacije funkcija
4. Numeričko diferenciranje
5. Numeričko integriranje
6. Optimizacijske metode
7. Teorija vjerojatnosti
8. Osnove statistike
9. Slučajne varijable
10. Statistički testovi
11. Regresijske metode

NELINEARNE JEDNADŽBE

UVOD

IZOLACIJA RJEŠENJA

METODA RASPOLAVLJANJA

NEWTON-RAPHSONOVA METODA (METODA TANGENTI)

METODA SEKANTE, METODA REGULA FALSI

METODA ITERACIJE (METODA UZASTOPNIH PRIBLIŽENJA)

NELINEARNE JEDNADŽBE

UVOD

analitičko i **numeričko** rješenje

- **linearna jednadžba** je jednadžba u kojoj je svaki član ili konstantan ili je jednak produktu konstante s **prvom potencijom varijable**
- takva jednadžba ekvivalenta je izjednačavanju polinoma prvog stupnja s nulom
- naziva se linearnom jer predstavlja **pravac** u Cartesiusovom koordinatnom sustavu
- uobičajeni oblik linearne jednadžbe je: $y = ax + b$

NELINEARNE JEDNADŽBE

UVOD

- nelinearne jednadžbe imaju članove koji nisu linearni

- većina **fizikalnih sustava** se ne ponaša linearno

-primjeri nelinearnih jednadžbi:

$$x^2 - 4 = 0$$

$$x^5 - x^4 + x^3 - x^2 + x - 1 = 0$$

$$x - \sin x = 0$$

- npr. toplinski kapacitet je ovisan o temperaturi i različit za različite temperaturne intervale, obično se opisuje funkcijama tipa: $C_v = a + bT + cT^2 + dT^{-2}$

- rješavaju se **iterativnim** postupkom (lat. *iterare* - ponoviti)

NELINEARNE JEDNADŽBE

- ukoliko je nelinearna jednadžba prilično komplicirana, obično nije moguće pronaći točna rješenja
- u određenim slučajevima jednadžba može sadržavati koeficijente koji su približni brojevi čime sam cilj pronalaženja točnih rješenja postaje besmislen

NEKE OD NUMERIČKIH METODA RJEŠAVANJA NELINEARNIH JEDNADŽBI:

IZOLACIJA RJEŠENJA

METODA RASPOLAVLJANJA (BISEKCIJE)

METODA *REGULA FALSI*

NEWTON-RAPHSONOVA METODA

NEWTON-RAPHSONOVA METODA – 1. MODIFIKACIJA

MEDIFICIRANA NEWTON-RAPHSONOVA METODA – METODA SEKANTI

METODA ITERACIJE (METODA UZASTOPNIH PRIBLIŽENJA)

NELINEARNE JEDNADŽBE

IZOLACIJA RJEŠENJA

-promatramo funkciju u intervalu [a,b] te svaka vrijednost za koju funkcija $f(x)$ poprima vrijednost nule naziva se nul-točkom funkcije

KAKO ZNAMO DA JE NUL-TOČKA UNUTAR INTERVALA [a,b]?

- općenito se može dogoditi da funkcija ima više nul-točaka ili da nema niti jednu nul-točku
- **ako je funkcija neprekidna u intervalu [a,b] i ako na rubovima intervala poprima vrijednosti suprotnog predznaka ($f(a) \cdot f(b) < 0$), onda u tom intervalu postoji barem jedna nul-točka!**
- ako je prva derivacija funkcije ($f(x)'$) stalnog predznaka u tom intervalu, onda je to i jedina nul-točka u tom intervalu.
- za procjenu intervala često se koriste: crtanje grafa funkcije, rješavanje pojednostavljenog modela, ...

NELINEARNE JEDNADŽBE

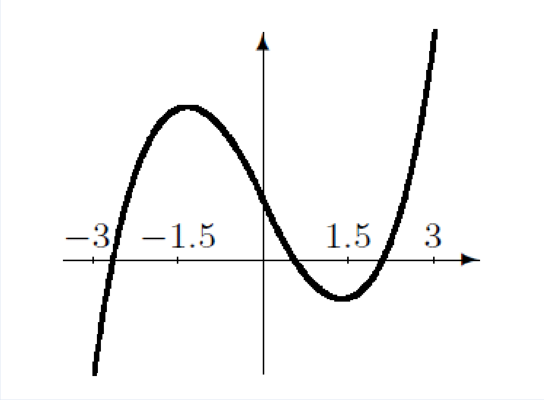
IZOLACIJA RJEŠENJA

- aproksimiranje izoliranih realnih rješenja sastoji se od:

(1) određivanja najmanjeg mogućeg segmenta [*a*,*b*] koji sadrži samo jedno rješenje

(2) poboljšavanja vrijednosti aproksimativnog rješenja do određene točnosti

Primjer. Nađi nul točke funkcije $f(x) = x^3 - 6x + 2$.



x	-3	-1.5	0	1.5	3
$\operatorname{sgn} f(x)$	-1	$+1$	$+1$	-1	$+1$

- na ovaj način smo separirali 3 intervala: $I_1 = [-3, -1.5],\ I_2 = [0, 1.5]$ i $I_3 = [1.5, 3]$.

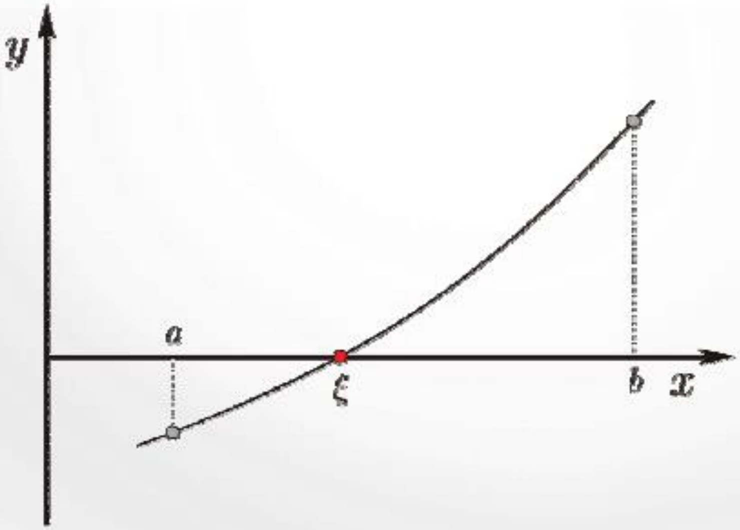
- s obzirom da imamo polinom trećeg stupnja, u svakom od intervala nalazi se po jedna nul-točka te ostalih nul-točki niti nema

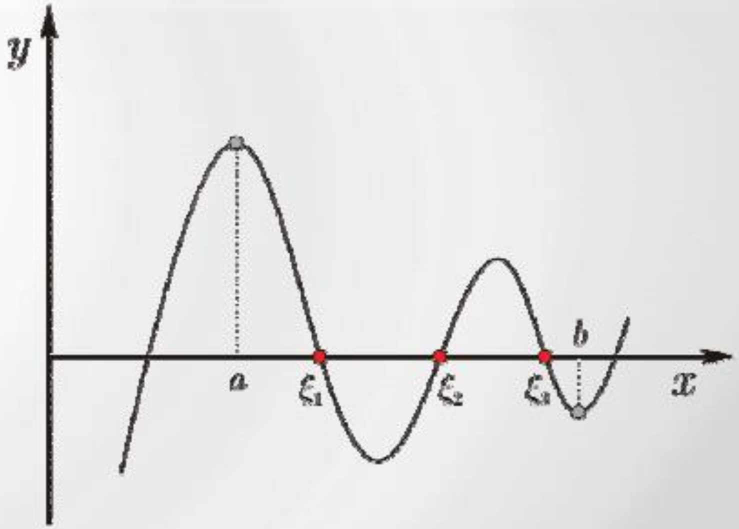
- **iteracijskim** postupkom povećavamo aproksimativno rješenje do "zadovoljavajuće" točnosti

NELINEARNE JEDNADŽBE

IZOLACIJA RJEŠENJA

- ukoliko na segmentu $[a, b]$ funkcija mijenja predznak tada mora postojati *barem jedno* rješenje ξ za koje vrijedi $a \leq \xi \leq b$



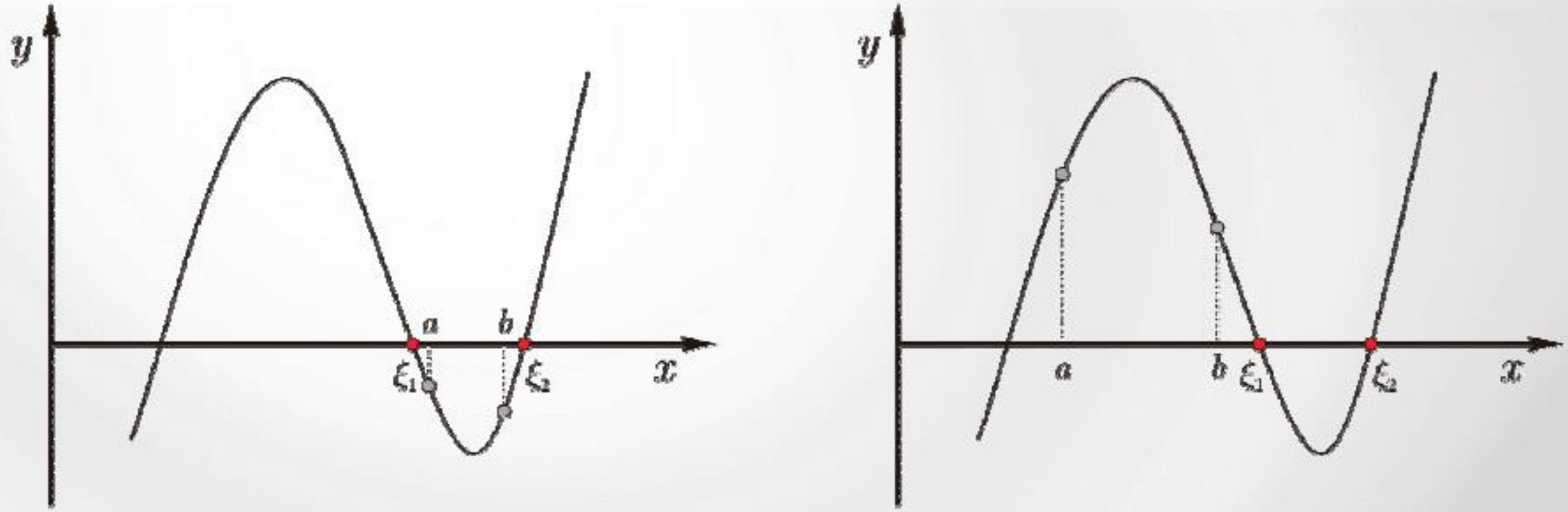


$$f(a) \cdot f(b) < 0$$

NELINEARNE JEDNADŽBE

IZOLACIJA RJEŠENJA

- ukoliko na segmentu $[a, b]$ funkcija ne mijenja predznak tada ne mora postojati niti jedno rješenje ξ koje se nalazi između a i b

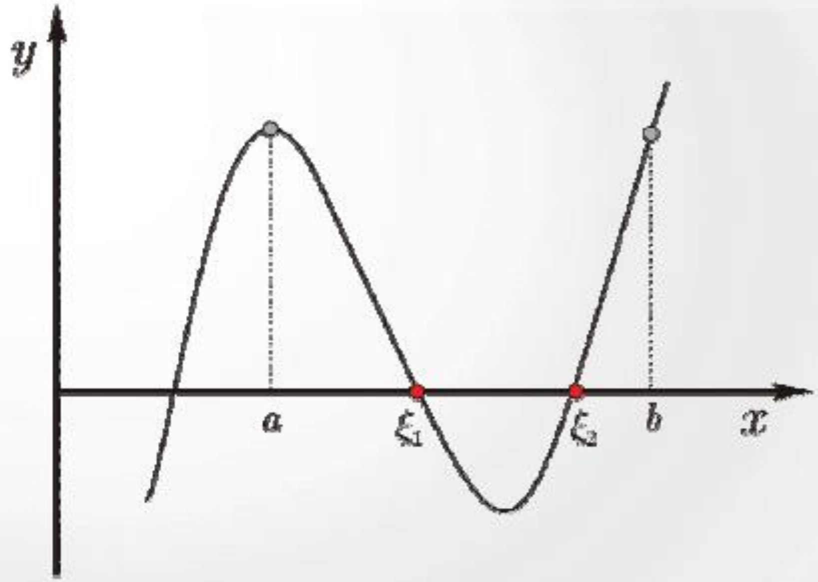


$$f(a) \cdot f(b) > 0$$

NELINEARNE JEDNADŽBE

IZOLACIJA RJEŠENJA

ukoliko na segmentu $[a, b]$ funkcija ne mijenja predznak tada mogu postojati jedno, dva ili više rješenja koje se nalaze između a i b



$$f(a) \cdot f(b) > 0$$

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA RASPOLAVLJANJA (BISEKCIJE)

-**zatvorena metoda -**potrebno je odrediti segment [a , b] u kojem se nalazi rješenje jednadžbe i sve aproksimacije rješenja će biti unutar tog segmenta

- ako vrijedi $\boldsymbol{f(a) \cdot f(b) < 0}$ tada u segmentu postoji barem jedno rješenje jednadžbe $f(x) = 0$

1) pretpostavimo da je funkcija $f(x)$ neprekidna u intervalu [a , b] te da se u tom intervalu mijenja predznak funkcije **:** $\boldsymbol{f(a) \cdot f(b) < 0}$ **)**
2) **prepolovimo interval** i ako polovište nije nul-točka, **usredotočimo se na onu polovicu intervala na čijim rubovima funkcija mijenja predznak**
3) **ponavljamo postupak** na onu polovicu intervala na koju smo se usredotočili

ITERACIJA 1-3

- u trenutku kada je zadovoljen iteracijski kriterij koji smo si postavili (npr. $b_n - a_n < z$), prekidamo iteraciju

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA RASPOLAVLJANJA (BISEKCIJE)

metoda raspolavljanja - algoritam

- odrediti granice segmenta $\left[a = x_{\mathrm{d}}, b = x_{\mathrm{g}}\right]$ tako da vrijedi $f\left(x_{\mathrm{d}}\right) \cdot f\left(x_{\mathrm{g}}\right) < 0$
- odrediti polovište segmenta i izračunati vrijednost funkcije u toj točki

$$x_n = \frac{x_{\mathrm{d}} + x_{\mathrm{g}}}{2} \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

- ako je $f\left(x_{\mathrm{d}}\right) f\left(x_n\right) < 0$ tada se uzima $x_{\mathrm{d}} = x_{\mathrm{d}}, x_{\mathrm{g}} = x_n$
- ako je $f\left(x_{\mathrm{d}}\right) f\left(x_n\right) > 0$ tada se uzima $x_{\mathrm{d}} = x_n, x_{\mathrm{g}} = x_{\mathrm{g}}$
- ako je $f\left(x_{\mathrm{d}}\right) f\left(x_n\right) = 0$ tada je $\xi = x_n$ rješenje jednadžbe

NELINEARNE JEDNADŽBE

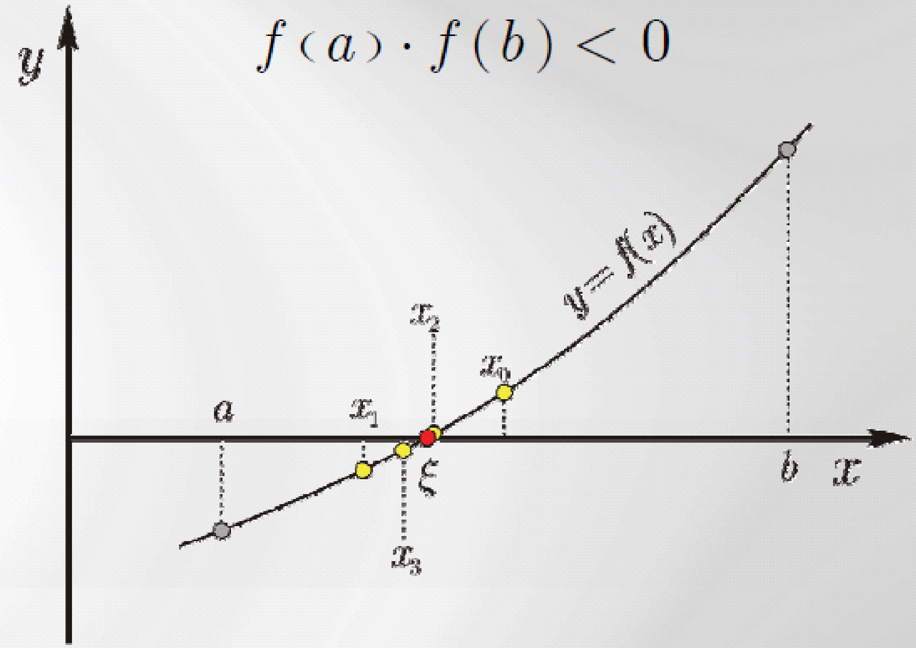
METODA RASPOLAVLJANJA (BISEKCIJE)

metoda raspolavljanja – algoritam

- izračunati apsolutnu ili relativnu pogrešku i usporediti je sa zadanom potrebnom točnošću

- maksimalna apsolutna pogreška metode raspolavljanja je

$$\Delta_{\text{maks}} = \frac{|b-a|}{2^n}$$



- pogreška se u svakom koraku smanjuje za faktor dva pa metoda raspolavljanja *konvergira linearno*

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA RASPOLAVLJANJA (BISEKCIJE)

- s obzirom da se svakom iteracijom interval prepolovi, **broj iteracija *n*** potreban da se **početni** interval $[a_0,b_0]$ smanji na **određeni** interval $[a_n,b_n]$ iznosi:

$$n = \frac{1}{\log(2)} \log\left(\frac{b_0 - a_0}{b_n - a_n}\right)$$

-**konvergencija je spora**, odnosno potreban je veliki broj iteracija da se postigne željena točnost (*npr. potrebno je 3 iteracije za povećanje točnosti za jedno decimalno mjesto*)

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA RASPOLAVLJANJA (BISEKCIJE)

metoda raspolavljanja – prednosti metode

- metoda uvijek konvergira
- nakon izoliranja rješenja samo se povećava točnost
- veličina pogreške je garantirana za svaki korak

metoda raspolavljanja – nedostaci metode

- može sporo konvergirati
- postoje slučajevi kada metoda ne radi, odnosno kada se ne može primijeniti (to nije problem metode raspolavljanja)
- ne radi u slučajevima kada je funkcija kontinuirana na intervalima (to nije problem metode raspolavljanja)

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA RASPOLAVLJANJA (BISEKCIJE)

PRIMJER 1: *Korištenjem algoritma bisekcije izračunaj nul-točku funkcije $f(x) = x^3 - 6x + 2$ na intervalu [0, 1,5].*

RIJEŠENJE: $f(a_n) = f(0) = 2 > 0$;

$f(b_n) = f(1,5) = -3,625 < 0$

$X_{n+1} = (a_n + b_n)/2$

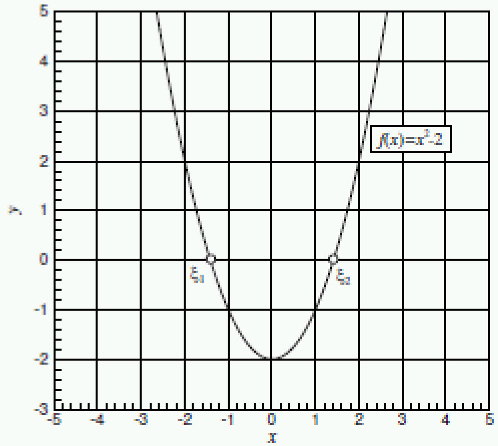
n	a_n	b_n	x_{n+1}	$\operatorname{sgn} f(x_{n+1})$	$(b_{n-1} + a_{n-1})/2$

- grešku u svakom koraku računamo po formuli: $\Delta_{\text{maks}} = \dfrac{|b-a|}{2^n}$

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA RASPOLAVLJANJA (BISEKCIJE)

PRIMJER 2: Metodom bisekcije pronađi pozitivnu nul-točku funkcije $f(x) = x^2 - 2$. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.



Slika 2.3: Grafički prikaz funkcije $f(x) = x^2 - 2$

$f(a_0) = f(1) = -1 < 0$ i $f(b_0) = f(2) = 2 > 0$

Iteracija i	a_i	$f(a_i)$	b_i	$f(b_i)$	x_i	$\lvert a_i - b_i \rvert$
0	1	-1	2	2	1.5	1
1	1	-1	1.5	0.25	1.25	0.5
2	1.25	-0.4375	1.5	0.25	1.375	0.25
3	1.375	-0.109375	1.5	0.25	1.4375	0.125
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
12	1.41406	-0.000427	1.41431	0.000263	1.41418	0.000244
13	1.41418	-0.000008	1.41431	0.000263	1.41425	0.000122
14	1.41418	-0.000008	1.41425	0.000009	1.41422	0.000061

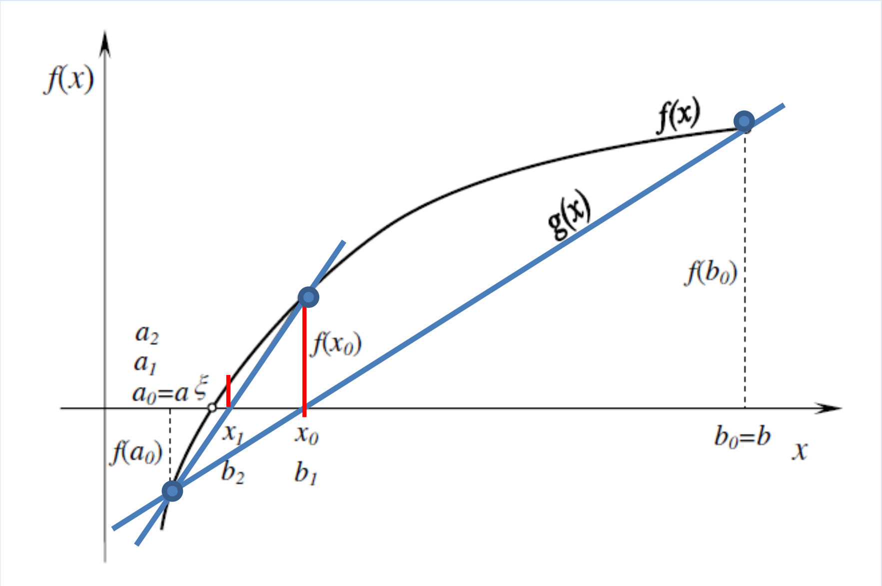
NELINEARNE JEDNADŽBE

REGULA FALSI – LINEARNA INTERPOLACIJA

- **odredimo interval [a,b]** unutar kojeg je **barem jedna nul točka funkcije** *f(x),* odnosno vrijedi ***f(a)·f(b)<0***

-ne tražimo polovište intervala kao kod metode bisekcije, nego **nelinearnu jednadžbu** *f(x)* **aproksimiramo pravcem g(x)** koji prilazi kroz točke (*a, f(a)*) i *(b, f(b)*) te **tražimo nul-točku pravca *g(x)*** koju ćemo označiti sa x_0

- nađeno rješenje predstavlja granicu novog intervala ([a, x_0] ili [x_0,b]) – *za izbor intervala vidi metodu bisekcije*



NELINEARNE JEDNADŽBE

REGULA FALSI – LINEARNA INTERPOLACIJA

- pomoću jednadžbe pravca kroz dvije točke i uvjeta *g(x)=0*, lako se izračuna nova granica intervala - **izvod**

$$x_0 = b_0 - \frac{b_0 - a_0}{f(b_0) - f(a_0)} f(b_0)$$

Jednadžba pravca kroz točke $T_1(x_1, y_1)$ i $T_2(x_2, y_2)$:

$$y - y_1 = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}(x - x_1)$$

- iteracijska formula:

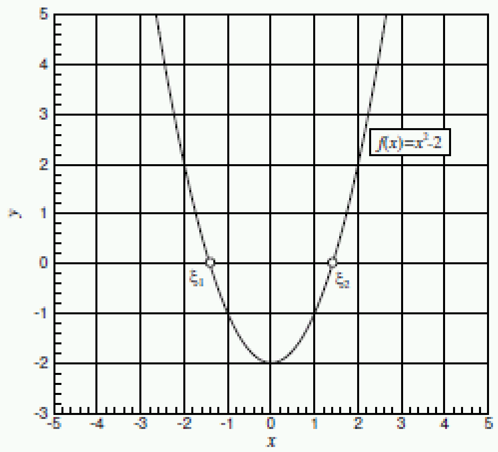
$$x_i = b_i - \frac{b_i - a_i}{f(b_i) - f(a_i)} f(b_i)$$

- kao i kod metode bisekcije, konvergencija je zagarantirana – **zatvorena metoda**
- nešto brže konvergira od metode bisekcije, ali ne daje nam direktnu procjenu greške

NELINEARNE JEDNADŽBE

REGULA FALSI – LINEARNA INTERPOLACIJA

PRIMJER 3: Metodom *regula falsi* pronađi pozitivnu nul-točku funkcije $f(x) = x^2 - 2$. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.



Slika 2.3: Grafički prikaz funkcije $f(x) = x^2 - 2$

$f(a_0) = f(1) = -1 < 0$ i $f(b_0) = f(2) = 2 > 0$

$$[a_0, b_0] = [1, 2]$$

$$x_0 = b_0 - \frac{b_0 - a_0}{f(b_0) - f(a_0)} f(b_0) = 2 - \frac{2-1}{2-(-1)} 2 = 1.333333$$

$$f(x_0) = f(1.333333) = -0.222222 < 0$$

S obzirom da je $f(x_0) < 0$ i $f(b_0) > 0$ rješenje se nalazi u podintervalu $[x_0, b_0] = [1.333333, 2]$

$$x_1 = b_0 - \frac{b_0 - a_0}{f(b_0) - f(a_0)} f(b_0) = 2 - \frac{2 - 1.333333}{2-(-0.222222)} 2 = 1.4$$

$$f(x_1) = f(1.4) = -0.04 < 0$$

$$f(x_1) f(b_1) = f(1.4) f(2) < 0$$

$$[a_1, b_1] = [1.4, 2]$$

NELINEARNE JEDNADŽBE

REGULA FALSI – LINEARNA INTERPOLACIJA

PRIMJER 3: Metodom *regula falsi* pronađi pozitivnu nul-točku funkcije $f(x) = x^2 - 2$. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.

Iteracija i	a_i	$f(a_i)$	b_i	$f(b_i)$	x_i	$\lvert x_i - x_{i-1} \rvert$
0	1	-1	2	2	1.33333	-
1	1.33333	-0.222222	2	2	1.4	0.06666
2	1.4	-0.04	2	2	1.41176	0.011765
3	1.41176	-0.00692	2	2	1.41379	0.00202
4	1.41379	-0.001189	2	2	1.41414	0.00034
5	1.41414	-0.000204	2	2	1.4142	0.00006

NELINEARNE JEDNADŽBE

NEWTON-RAPHSONOVA METODA

- pretpostavimo da smo na neki način **odredili interval [*a*,*b*]** *(npr. u računalnoj kemiji je to recimo kristalna struktura uzeta kao početna struktura!)* u kome se nalazi nul-točka funkcije *f(x)*.

- nadalje, pretpostavimo da su **prva i druga derivacija funkcije definirane** u tom intervalu i imaju isti predznak za $a \leq x \geq b$, pa tako i za točku x_0 vrijedi $f(x_0)\,f''(x_0) > 0$

- izaberemo početnu točku x_0 te razvijemo funkciju u **Taylorov red** oko točke x_0 te zadržimo samo linearni član:

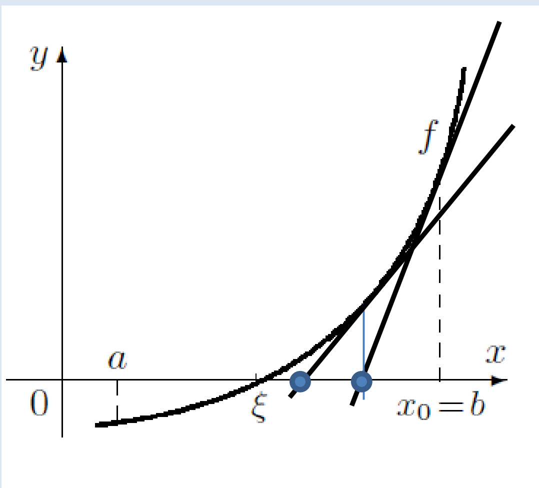
$$f_1(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$$

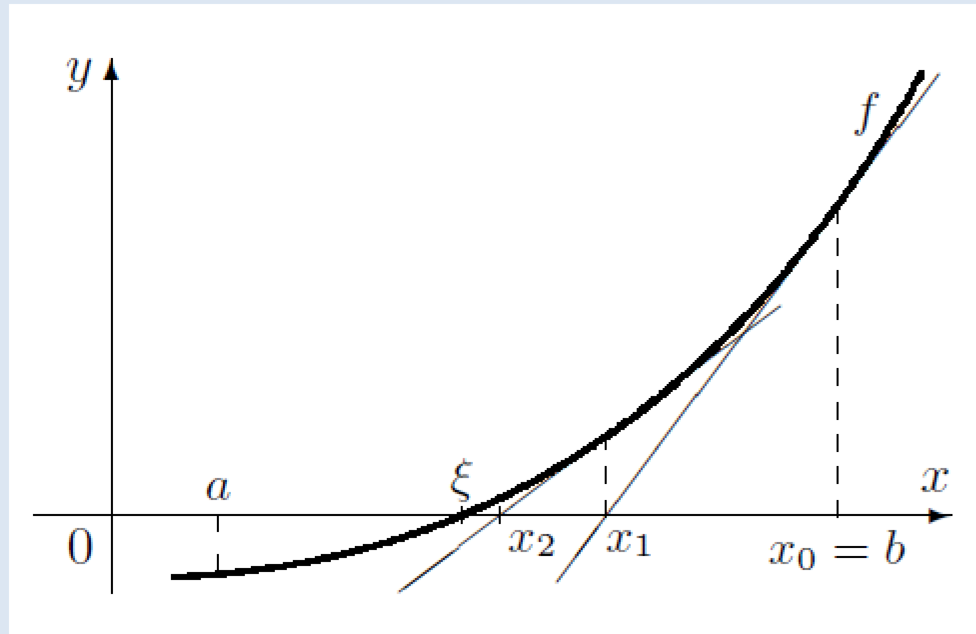
- dobivenu funkciju izjednačimo s nulom
- **tako dobivena funkcija (izjednačavanjem s nulom) predstavlja tangentu na graf funkcije *f(x)* u točki x_0**

- Slika – na slijedećem slideu!

NELINEARNE JEDNADŽBE

NEWTON-RAPHSONOVA METODA





- kao prvu aproksimaciju rješenja nul-točke uzmemo sjecište tangente s *x*-osi, odnosno

tražimo nul-točku pravca koji predstavlja tangentu

- tu točku nazivamo x_1 i tražimo ju po formuli:

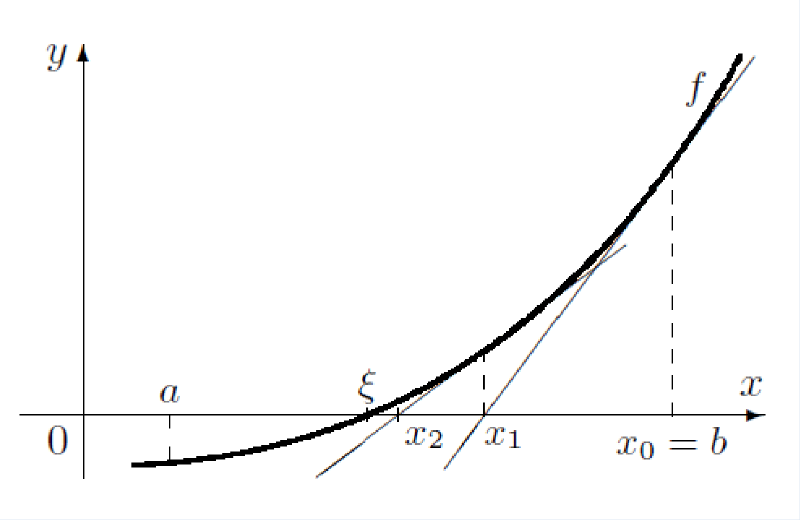
$$x_1 := x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

IZVOD !

NELINEARNE JEDNADŽBE

NEWTON-RAPHSONOVA METODA

- dobivena točka x_1 koristi se kao početna u slijedećem koraku iteracije:



-općenito, koristimo formulu:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, \dots$$

NELINEARNE JEDNADŽBE

NEWTON-RAPHSONOVA METODA

Newton-Raphsonova metoda - prednosti metode

- prednost metode je da ako konvergira onda konvergira brzo

Newton-Raphsonova metoda - nedostaci metode

- budući da je otvorena metoda može divergirati za neke jednadžbe
- divergira u točkama infleksije
- u točkama gdje je prva derivacija funkcije jednaka nuli dolazi do dijeljenja s nulom
- može konvergirati u druga rješenja
- može oscilirati blizu minimuma ili maksimuma funkcije

PRIMJER 4: Newton-Raphsonovom metodom pronađi pozitivnu nul-točku funkcije $f(x) = x^2 - 2$. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.

$$x_1 := x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

$$f'(x) = 2x$$

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

- s obzirom da je rješenje jednadžbe √2, uzet ćemo kao prvu aproksimaciju $x_0=3$

$$x_1 = \frac{1}{2}\left(x_0 + \frac{2}{x_0}\right) = \frac{1}{2}\left(3 + \frac{2}{3}\right) = 1.83333$$
$$x_2 = \frac{1}{2}\left(x_1 + \frac{2}{x_1}\right) = \frac{1}{2}\left(1.83333 + \frac{2}{1.83333}\right) = 1.46212$$

Iteracija i	x_i	$\lvert x_i - x_{i-1}\rvert$
0	3	-
1	1.83333	1.16667
2	1.46212	0.371212
3	1.415	0.047123
4	1.41421	0.000785
5	1.41421	2.18e-7

NELINEARNE JEDNADŽBE

NEWTON-RAPHSONOVA METODA – 1. MODIFIKACIJA

-kod nekih funkcija je računanje vrijednosti prve derivacije funkcije u nekoj točki vrlo zahtjevno

- u slučaju takvih funkcija koristi se 1. modifikacija N.-R. metode, koja se bazira na aproksimaciji:

$$f'(x_i) = f'(x_0) \qquad (i = 1, 2, \ldots)$$

- tako iteracijska formula postaje:

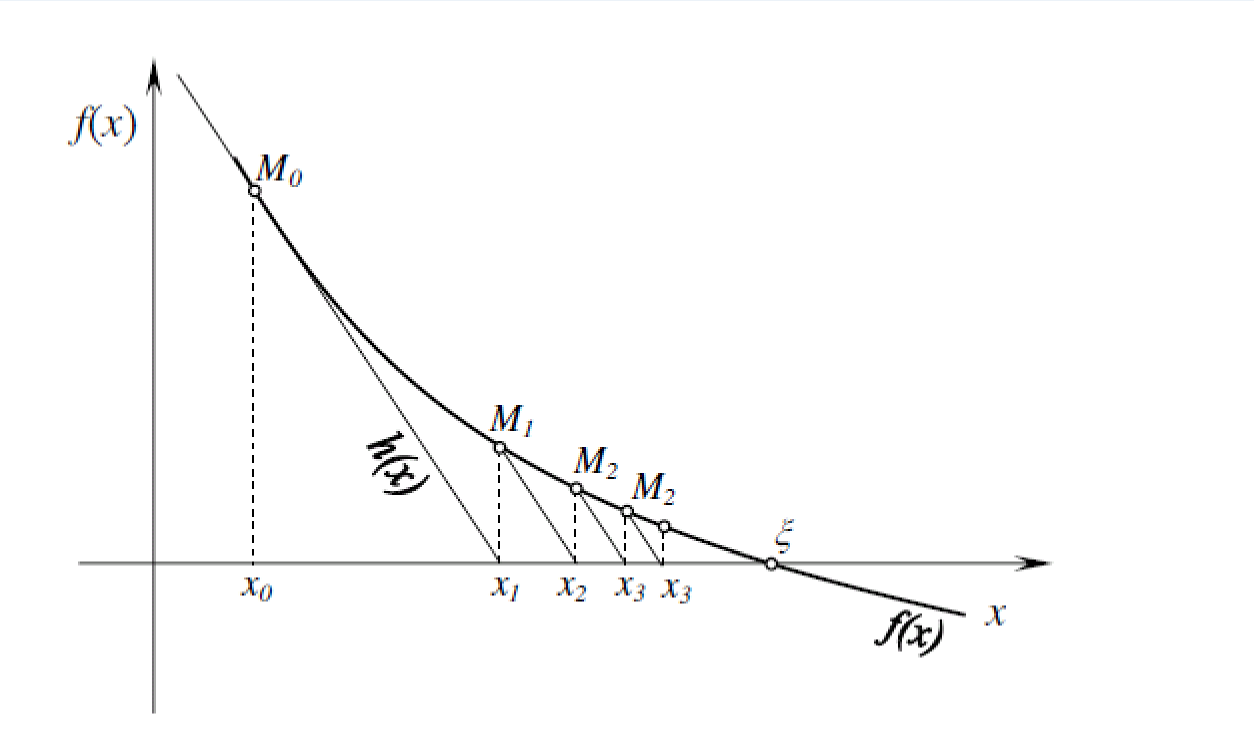
$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_0)}$$

- na ovaj način nije potrebno računati vrijednost prve derivacije funkcije u svakom iteracijskom koraku, već samo u prvom iteracijskom koraku

- ovaj algoritam **sporije konvergira** od klasične N-R metode, ali je **računski manje zahtjevan**

NELINEARNE JEDNADŽBE

NEWTON-RAPHSONOVA METODA – 1. MODIFIKACIJA



iteracijski kriterij: $|x_{i+1} - x_i| \leq \varepsilon_1$ i/ili $|f(x_{i+1})| \leq \varepsilon_2$

PRIMJER 5: prvom modifikacijom Newton-Raphsonove metode pronađi pozitivnu nul-točku funkcije $f(x) = x^2 - 2$. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.

$$x_1 := x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

$$f'(x) = 2x$$

- sada ćemo u svakom koraku koristiti formulu:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_0)} = x_i - \frac{x_i^2 - 2}{2x_0}$$

- *s obzirom da je rješenje jednadžbe √2, uzet ćemo kao prvu aproksimaciju* $x_0=3$

$$x_1 = x_0 - \frac{x_0^2 - 2}{2x_0} = 3 - \frac{3^2 - 2}{6} = 1.83333$$

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1^2 - 2}{2x_0} = 1.83333 - \frac{1.83333^2 - 2}{6} = 1.60648$$

Iteracija i	x_i	$\lvert x_i - x_{i-1} \rvert$
0	3	-
1	1.83333	1.16667
2	1.60648	0.226852
3	1.50968	0.096797
⋮	⋮	⋮
12	1.41437	0.000136
13	1.41429	0.000072

NELINEARNE JEDNADŽBE

MEDIFICIRANA NEWTON-RAPHSONOVA METODA – METODA SEKANTI

- s obzirom da kod N.R. metode računamo i vrijednost funkcije i vrijednost prve derivacije u svakom iteracijskom koraku, može biti otežavajuća okolnost u nekim slučajevima

- u tim slučajevi koriste se različite modifikacije N.R. metode, jedna od njih je i **metoda sekanti**

- pretpostavimo da smo na neki način odredili interval [*a,b*] u kome se može, ali i ne mora nalaziti nul-točka funkcije *f(x)*.

- potrebne su **dvije** početne aproksimacije

- povučemo sekantu kroz te dvije točke (x_0, f(x_0) i x_1, f(x_1))

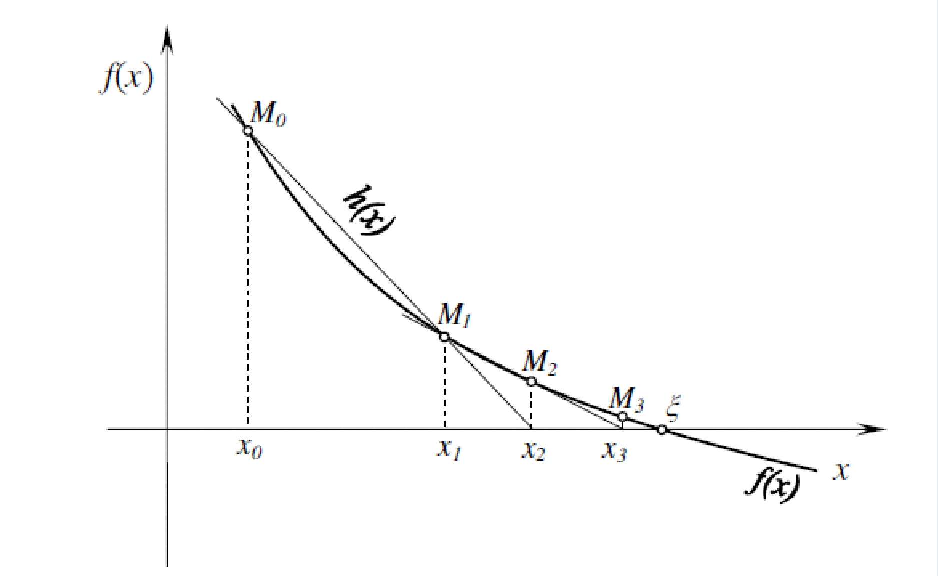
- sjecište sekante s osi *x* daje nam slijedeću aproksimaciju x_2

$$x_2 = \frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)}$$

- uvjet je da $f(x_1) \neq f(x_0)$

NELINEARNE JEDNADŽBE

MEDIFICIRANA NEWTON-RAPHSONOVA METODA – METODA SEKANTI



- linearno konvergira te se može smatrati i varijantom metode bisekcije

- općenita formula: **IZVOD**

$$x_{n+1} = \frac{x_{n-1} f(x_n) - x_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}, \qquad f(x_n) \neq f(x_{n-1}),\ n = 1, 2, \ldots$$

PRIMJER 6: Metodom sekanti pronađi pozitivnu nul-točku funkcije $f(x) = x^2 - 2$. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.

- *kao početne aproksimacije uzet ćemo* $x_0=4$ *i* $x_1=3$

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} f(x_1) = 3 - \frac{3-4}{7-14} 7 = 2$$

$$x_3 = x_2 - \frac{x_2 - x_1}{f(x_2) - f(x_1)} f(x_2) = 2 - \frac{2-3}{2-7} 2 = 1.6$$

Iteracija i	x_i	$f(x_i)$	x_{i+1}	$f(x_{i+1})$	$\lvert x_{i+1} - x_i \rvert$
0	4	14	3	7	1
1	3	7	2	2	1
2	2	2	1.6	0.56	0.4
3	1.6	0.56	1.444444	0.086412	0.155556
4	1.44444	0.086412	1.41606	0.005221	0.028386
5	1.41606	0.005221	1.41423	0.000055	0.001825
6	1.41423	0.000055	1.41421	3.6e-8	0.00002

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA ITERACIJE (METODA UZASTOPNIH PRIBLIŽENJA)

metoda iteracije (metoda uzastopnih približenja)

- jedna od najvažnijih metoda u određivanju numeričkih rješenja jednadžbi
- pretpostavimo da imamo jednadžbu $f(x) \equiv y = 0$ gdje je $f(x)$ kontinuirana funkcija kojoj je potrebno odrediti realna rješenja
- tu jednadžbu treba na neki način preurediti u

$$x = \varphi(x)$$

- potrebno je odrediti nultu aproksimaciju rješenja x_0 te ga uvrstiti u desni član jednadžbe

$$x_1 = \varphi(x_0)$$

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA ITERACIJE (METODA UZASTOPNIH PRIBLIŽENJA)

metoda iteracije (metoda uzastopnih približenja)

- nakon toga se x_1 uvrsti u desni član jednadžbe i dobiva se x_2

$$x_2 = \varphi(x_1)$$

- ponavljanjem tog postupka, dobije se niz brojeva

$$x_n = \varphi(x_{n-1}) \qquad n = 1, 2, \ldots$$

- ukoliko vrijedi $|\varphi'(x)| < 1$ za $a < x < b$ tada će postupak konvergirati bez obzira na početnu vrijednost $x_0 \in [a, b]$

PRIMJER 7: Metodom iteracije (metodom uzastopnih rješenja) pronađi pozitivnu nul-točku funkcije ***f(x) = x²* – *x* − *2***. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.

- najprije treba f(x) preurediti u oblik x=g(x), tu postoji nekoliko mogućnosti:

$$x = x^2 - 2 \qquad g(x) = x^2 - 2$$

$$x = \pm\sqrt{x+2} \qquad g(x) = \pm\sqrt{x+2}$$

$$x = 1 + \frac{2}{x} \qquad g(x) = 1 + \frac{2}{x}$$

$$x = x - \frac{x^2 - x - 2}{2x - 1} \qquad g(x) = x - \frac{x^2 - x - 2}{2x - 1}$$

- neće uvijek nužno konvergirati!

PRIMJER 7: Metodom iteracije (metodom uzastopnih rješenja) pronađi pozitivnu nul-točku funkcije $f(x) = x^2 - x - 2$. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.

- uzmimo oblik: $x = x^2 - 2$ $\qquad g(x)=x^2 - 2$

- za početnu aproksimaciju uzmemo $x_0=3$

$$
\begin{aligned}
x_1 &= g(x_0) = 3^2 - 2 = 7 \\
x_2 &= g(x_1) = 7^2 - 2 = 47 \\
x_3 &= g(x_2) = 47^2 - 2 = 2207 \\
&\dots
\end{aligned}
$$

- divergira!

PRIMJER 7: Metodom iteracije (metodom uzastopnih rješenja) pronađi pozitivnu nul-točku funkcije $f(x) = x^2 - x - 2$. Zaustavi iteraciju kada apsolutna vrijednost razlike dva uzastopna rješenja bude manja od 10^{-4}.

- uzmimo oblik: $x = \pm\sqrt{x+2}$ $\qquad g(x) = \pm\sqrt{x+2}$

- za početnu aproksimaciju uzmemo $x_0=3$

$$x_1 = g(x_0) = \sqrt{3+2} = 2.236$$
$$x_2 = g(x_1) = \sqrt{2.236+2} = 2.058$$
$$x_3 = g(x_2) = \sqrt{2.058+2} = 2.0014$$
$$x_4 = g(x_3) = \sqrt{2.014+2} = 2.0004$$

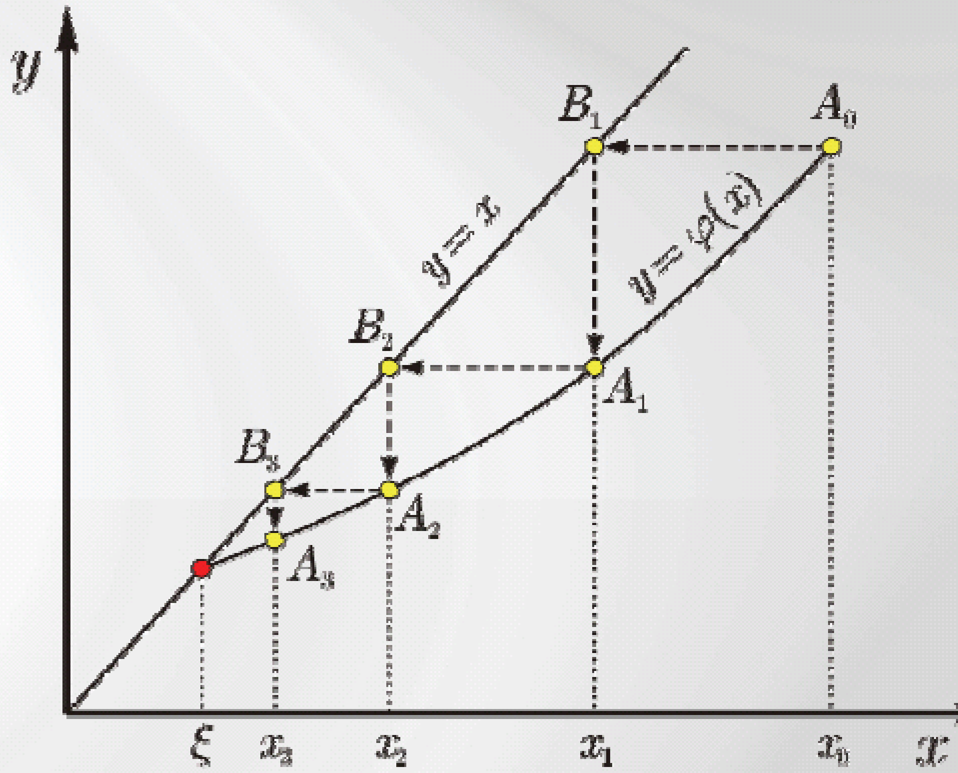
- konvergira!

NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA ITERACIJE (METODA UZASTOPNIH PRIBLIŽENJA)

metoda iteracije (metoda uzastopnih približenja)

- *stepenasta metoda* sukcesivnih aproksimacija
- ako je derivacija $\varphi'(x)$ pozitivna



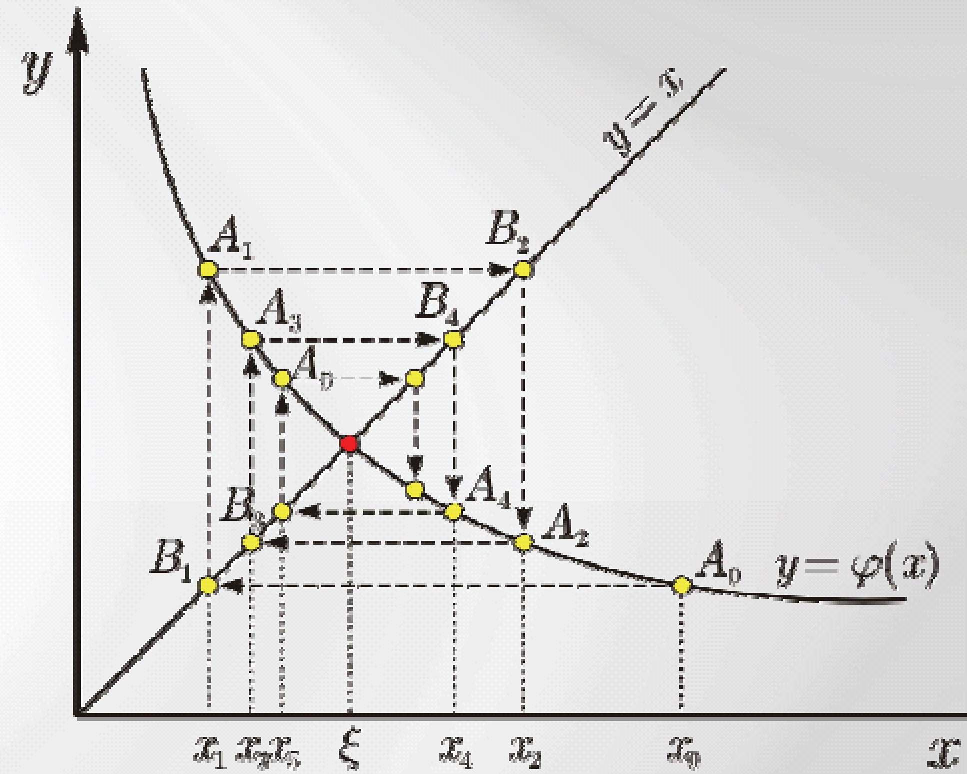
NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA ITERACIJE (METODA UZASTOPNIH PRIBLIŽENJA)

metoda iteracije (metoda uzastopnih približenja)

- *spiralna metoda* sukcesivnih aproksimacija

- ako je derivacija $\varphi'(x)$ negativna



NELINEARNE JEDNADŽBE

METODA ITERACIJE (METODA UZASTOPNIH PRIBLIŽENJA)

metoda iteracije (metoda uzastopnih približenja)

- ukoliko se dvije sukcesivne aproksimacije x_{n-1} i x_n poklapaju do određene točnosti ε tada ne mora vrijediti da se ξ i x_n poklapaju do iste točnosti