

Pracownia metod numerycznych w chemii, ćwiczenie nr 3.

Celem ćwiczenia jest zapoznanie się z różniczkowaniem i oraz szacowaniem błędów tej operacji.

Ćwiczenia

1. Wyprowadź wzory na pierwszą, drugą, trzecią i czwartą pochodną funkcji Gaussa

$$f(x) = \exp(-x^2/2)$$

Uruchom program `gnuplot` i zdefiniuj w nim funkcję Gaussa oraz jej pierwszą, drugą, trzecią i czwartą pochodną. Przykładowo:

```
gnuplot> f(x)=exp(-0.5*x*x)
```

Pochodne można oznaczyć np. jako `fp`, `fb`, `ft`, `f4` (od `prim`, `bis`, `tris`; niestety grecki liczebnik porządkowy `tetrakis` też zaczyna się na `t`).

2. Zdefiniuj w programie `gnuplot` przybliżenie pierwszej pochodnej przy pomocy ilorazu różnicowego odpowiednio prawego oraz symetrycznego (potraktuj je jako funkcje `x` i `h`):

$$\bar{f}'_+(x; h) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$
$$\bar{f}'_s(x; h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Przykładowo, jeżeli iloraz prawy niesymetryczny oznaczymy `fp1(x,h)`:

```
gnuplot> fp1(x,h)=(f(x+h)-f(x))/h
```

Wykreśl na jednym wykresie iloraz różnicowy prawy, symetryczny oraz dokładną pierwszą pochodną funkcji Gaussa dla `h=0.5` (wartość ta jest na pewno za duża na różniczkowanie numeryczne ale dla mniejszej nie byłoby widać różnic na wykresie). Przykładowo, jeżeli iloraz odpowiednio prawy i symetryczny będą zdefiniowane jako odpowiednio `fp1(x,h)` i `fp2(x,h)`, polecenie wygląda tak:

```
gnuplot> plot [-5:5] fp1(x,0.5),fp2(x,0.5)
```

Jeżeli wykres analitycznej pierwszej pochodnej wygląda zupełnie inaczej to najprawdopodobniej został popełniony błąd w wyprowadzaniu wzoru na pierwszą pochodną.

3. Narysuj wykresy bezwzględnych wartości różnic pomiędzy wartościami odpowiednio prawego oraz symetrycznego ilorazu różnicowego a wartościami pierwszej pochodnej obliczonymi z wzory analitycznego. Podobnie jak w poprzednim punkcie, ilorazy różnicowe liczymy dla `h=0.5`. Nałóż na ten wykres wykresy drugiej i trzeciej pochodnej funkcji Gaussa. Co można zaobserwować?

4. Wykreśl zależność bezwzględnych wartości różnic pomiędzy przybliżonymi i analitycznymi wartościami pochodnej w funkcji długości kroku h dla $x=1$, w przedziale $h=[0.01,1]$. Uwaga: gnuplot wymaga, żeby zmienna objaśniająca czyli w tym przypadku h nazywała się x . Aby lepiej zaobserwować zależności błędu od h ustaw skalę logarytmiczną na obu osiach poprzez

```
gnuplot> set logscale
```

Skalę logarytmiczną usuwa się poprzez

```
gnuplot> unset logscale
```

Jak zależy od h błąd w przypadku ilorazu prawego a jak w przypadku symetrycznego?

Dla zainteresowanych: można wykonać trójwymiarowy wykres błędu jako funkcji jednocześnie x i h (które wtedy musi nazywać się y) korzystając z polecenia `splot` programu `gnuplot`.

5. Korzystając z wzoru Taylora, oszacuj analitycznie błędy ilorazu prawego i symetrycznego. Porównaj wykresy tych analitycznych oszacowań z wykresami rzeczywistych błędów z poprzedniego punktu (najlepiej umieścić wszystko na jednym wykresie). Następnie oszacowania sprawdź z formułami trójpunktowymi podanymi w załączniku (G. Engeln-Müllges, F. Uhlig, Numerical Algorithms with Fortran, str. 355).
6. Zdefiniuj iloraz różnicowy symetryczny stanowiący przybliżenie drugiej pochodnej, który jest dany wzorem:

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

Podobnie jak dla pierwszej pochodnej porównaj wykres tego ilorazu z analityczną drugą pochodną oraz wykreśl i przeanalizuj jego błąd w funkcji h .

Ocena ćwiczenia nr 3 z metod numerycznych:

Podaj swoją ocenę następujących aspektów ćwiczenia w skali 0 – 5:

Aspekt	Twoja ocena
Atrakcyjność tematu	
Precyzja sformułowania instrukcji	
Komunikatywność prowadzącego	
Możliwość zrealizowania w przewidzianym czasie	

Jeżeli masz inne uwagi, wpisz je poniżej.

Ocena ćwiczenia nr 3 z metod numerycznych:

Podaj swoją ocenę następujących aspektów ćwiczenia w skali 0 – 5:

Aspekt	Twoja ocena
Atrakcyjność tematu	
Precyzja sformułowania instrukcji	
Komunikatywność prowadzącego	
Możliwość zrealizowania w przewidzianym czasie	

Jeżeli masz inne uwagi, wpisz je poniżej.

Ocena ćwiczenia nr 3 z metod numerycznych:

Podaj swoją ocenę następujących aspektów ćwiczenia w skali 0 – 5:

Aspekt	Twoja ocena
Atrakcyjność tematu	
Precyzja sformułowania instrukcji	
Komunikatywność prowadzącego	
Możliwość zrealizowania w przewidzianym czasie	

Jeżeli masz inne uwagi, wpisz je poniżej.