1. naloga: Iskanje ničel funkcij in preprosta numerična integracija v 1D

Najpreprostejši postopki v numeričnih metodah so iskanje ničel funkcij v eni dimenziji. Ne obstaja metoda, ki bi sama poiskala *vse* ničle funkcije, konvergenca k ničli funkcije je vedno odvisna od začetnih vrednosti algoritma.

Najpreprostejši postopek bi seveda bil kar 'prečesavanje' funkcije s delitivijo definicijskega območja le-te na dovolj gosto mrežo točk x_i in iskanjem intervala:

$$f(x_{i+1}) \cdot f(x_i) < 0$$

kjer je v danem intervalu $[x_i, x_{i+1}]$ zagotovo liho število ničel. Ta interval lahko potem zopet razdelimo na drobnejše intervale in znova prečesemo itd.. dokler ne dosežemo željene natančnosti. Vendar je ta postopek zelo 'drag' z računskega stališča, posebej če je definicijsko območje funkcije zelo veliko. Poleg tega v splošnem ne vemo, ali so izbrani koraki dovolj majhni, da objamejo ničle funkcij. Tako takšno metodo kvečjemu kombiniramo z naprednejšimi, v fiziki pa poleg tega pogosto lahko vsaj nekoliko uganemo ustrezna območja glede na fizikalni problem, ki ga rešujemo.

Preprosta, a povsem uporabna metoda je t.i. metoda *bisekcije*, ki deluje na naslednji način:

1. Izberi interval $[a, b]$, kjer velja
$$f(a) \cdot f(b) < 0,$$
ta vsebuje vsaj eno ničlo.

2. Izberi točko na sredi intervala $x = (a + b)/2$. Če je
$$f(a) \cdot f(x) < 0$$
postavi $b = x$, drugače postavi $a = x$.

3. Ponavljaj prejšnji korak, dokler $|b - a| < \epsilon$, kjer je ϵ želena natančnost.

V vsakem koraku se interval zmanjša za polovico, kar je v splošnem dovolj hitra konvergenca za običajne potrebe. Število potrebnih korakov lahko tudi izračunamo $n = \log_2(|b-a|/\epsilon)$.

Zgornjo metodo lahko prevedemo tudi na *sekantno* metodo in metodo *regula falsi*, če predpostavimo, da je funkcija znotraj intervala dovolj pohlevna (skoraj linearna) in določimo novo točko x namesto z bisekcijo z linearno interpolacijo: skozi točki a in b potegnemo premico in pogledamo, kje seka koordinatno os.

Hitrejša metoda je Newton-Rhapsonova metoda, za katero pa moramo poleg funkcije $f(x)$ poznati tudi analitični izraz za njen odvod $f'(x)$. Metoda temelji na Taylorjevem razvoju:

$$f(x + \delta x) = f(x) + f'(x)\delta x + \dots$$

Če predpostavimo, da nam δx da želeni premik iz začetne točke v ničlo funkcije, in je torej $f(x + \delta x) = 0$ lahko izrazimo δx:

$$\delta x = -\frac{f'(x)}{f(x)},$$

kar velja točno le za premice, je pa morda dober približek tudi za našo funkcijo. Postopek je torej:

1. Izberi začetno točko x.
2. Izračunaj premik $\delta x = -\frac{f'(x)}{f(x)}$.
3. Postavi novo točko $x \to x + \delta x$.
4. Ponavljaj zgornja dva koraka dokler $|\delta x| < \epsilon$.

Čeprav je konvergenca te metode precej hitrejša od bisekcije, pa lahko tu zaidemo v težave, če naletimo na točko, kjer gre odvod funkcije proti ničli; tu nam metoda potem podivja, in gre interval proti neskončnosti. Tako je ta metoda pogosto kombinirana npr. z bisekcijo ki ji poda dodatno robustnost.

Z boljšimi interpolacijskimi približki za določitev nove točke so potem izvedene še *Riddersova metoda*, *Brentova metoda* ipd. , ki so še ustrezno hitrejše.

Drugo področje primerno za uvod v numerične metode v fiziki je numerična integracija funkcij v eni dimenziji. Tu je interpretacija preprosta: čim bolje bi radi določili ploščino pod dano funkcijo $f(x)$. V ta namen razdelimo interval integracije $[a, b]$ v mrežo N točk:

$$x_i = x_1 + h; \quad i = 1, \ldots, N; \quad x_1 = a, x_N = b$$

, pri čemer je korak $h = (b - a)/N$ konstanten. Preproste metode nato interpolirajo funkcijo $f(x)$ v točkah x_i in $f_i = f(x_i)$ s polinomi različnih redov (katerih analitične inegrale seveda poznamo).

Najpreprostejša je *trapezna metoda*, kjer je funkcija $f(x)$ med sosednjima točkama aproksimirana kar z premico (ploskev je torej trapez). Dobimo:

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx = h\left[\frac{1}{2}f_1 + \frac{1}{2}f_2\right],$$

oziroma za cel interval:

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,dx = h\left[\frac{1}{2}f_1 + f_2 + f_3 + \ldots + f_{N-1}\frac{1}{2}f_N\right].$$

Ta metoda je seveda točna le za premice, v splošnem je natančnost $O(h^3 f'')$.

Boljša formula, kjer je interpolacija točna do reda x^3, je *Simpsonova formula*:

$$\int_{x_1}^{x_3} f(x)\,dx = h\left[\frac{1}{3}f_1 + \frac{4}{3}f_2 + \frac{1}{3}f_3\right],$$

ki seveda potrebuje tri točke in je torej obsega interval dolžine $2h$. Za celoten interval jo potemtakem zlepimo v:

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)\,dx = h\left[\frac{1}{3}f_1 + \frac{4}{3}f_2 + \frac{2}{3}f_3 + \frac{4}{3}f_4 + \frac{2}{3}f_5 + \ldots + \frac{2}{3}f_{N-2} + \frac{4}{3}f_{N-1} + \frac{1}{3}f_N\right].$$

Obstajajo še nadaljnje formule za višje rede interpolacij, kot so *Bode-jeva formula* etc. Za integracijo bolj zahtevnih funkcij pa so razvite naprednejše metode, kot so kvadraturne formule, kjer mreža točk ni več konstantna temveč se prilagaja ekstremom in hitremu spreminjanju funkcij. Zgornje preproste formule so v numeričnih izraŭnih dodatno obdelane za pospešek konvergence in nato dobimo npr *Rombergov integracijski algoritem* in podobno.

Naloga:

- Z metodo bisekcije poišči ničle nekaj polinomov tretjega reda ter enačbe $x = 2\sin x$. Uporabi tudi kakšen naprednejši algoritem in primerjaj hitrost konvergence - za kriterij uporabi začetne parametre (interval ali točka) ter konvergenčni kriterij (ϵ).

- S trapezno in Simpsonovo metodo določi ploščino funkcije $1 - x^2$ v intervalu [-1,1] in funkcije $x^3 e^{-x}$ v intervalu od nič do neskončno. Kako dobro slednja konvergira k vrednosti gama funkcije, ki je tu 3!=6 ? Je to boljše ali slabše od $x^2 e^{-x}$? Zakaj?