# MATEMATIKA S STATISTIKO

UNIVERZITETNA ŠTUDIJSKA PROGRAMA LABORATORIJSKA BIOMEDICINA IN KOZMETOLOGIJA
1. LETNIK

# ODVOD

1. Definicija in pomen, lastnosti odvedljivih funkcij
2. Računanje odvodov, višji odvodi, parcialni odvodi
3. Lokalni ekstremi, Lagrangev izrek, gradient
4. Računanje limit, risanje grafov, globalni ekstremi
5. Izravnavanje podatkov, Newtonova metoda, numerično odvajanje

# ODVOD

Kako primerjamo hitrost spreminjanja funkcije glede s spremembo argumenta?

Diferenčni količnik

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

je povprečna hitrost spreminjanja funkcije $f$ na intervalu med $x0$ in $x1$.

'Trenutna' hitrost v času $x0$ je $df(x_0)=\lim\limits_{x\to x_0}\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$

$$f(x)=\sqrt{x},\quad x_0=2$$

$$df(2)=\lim_{x\to 2}\frac{\sqrt{x}-\sqrt{2}}{x-2}=\lim_{x\to 2}\frac{1}{\sqrt{x}+\sqrt{2}}=\frac{1}{2\sqrt{2}}$$

## FIZIKALNI POMEN

$x=x(t)$ pot v odvisnosti od časa $t$

$$\bar{x} = \frac{x(t_1)-x(t_0)}{t_1-t_0}$$ povprečna hitrost v času med $t_0$ in $t_1$

$$dx(t_0) = \lim_{t \to t_0} \frac{x(t)-x(t_0)}{t-t_0}$$ trenutna hitrost v $t_0$

$v(t)$ hitrost gibanja v času $t$ $\Longrightarrow$ $dv(t0)$ pospešek

$W(t)$ toplotna energija telesa v času $t$ $\Longrightarrow$ $dW(t0)$ toplotni tok

$Q(t)$ električni naboj na prevodniku v času $t$ $\Longrightarrow$ $dQ(t0)$ električni tok

## ANALITIČNI POMEN

$f$ naraščajoča na intervalu $I$, ki vsebuje točko $x0$ (tj. lokalno naraščajoča pri $x0$)

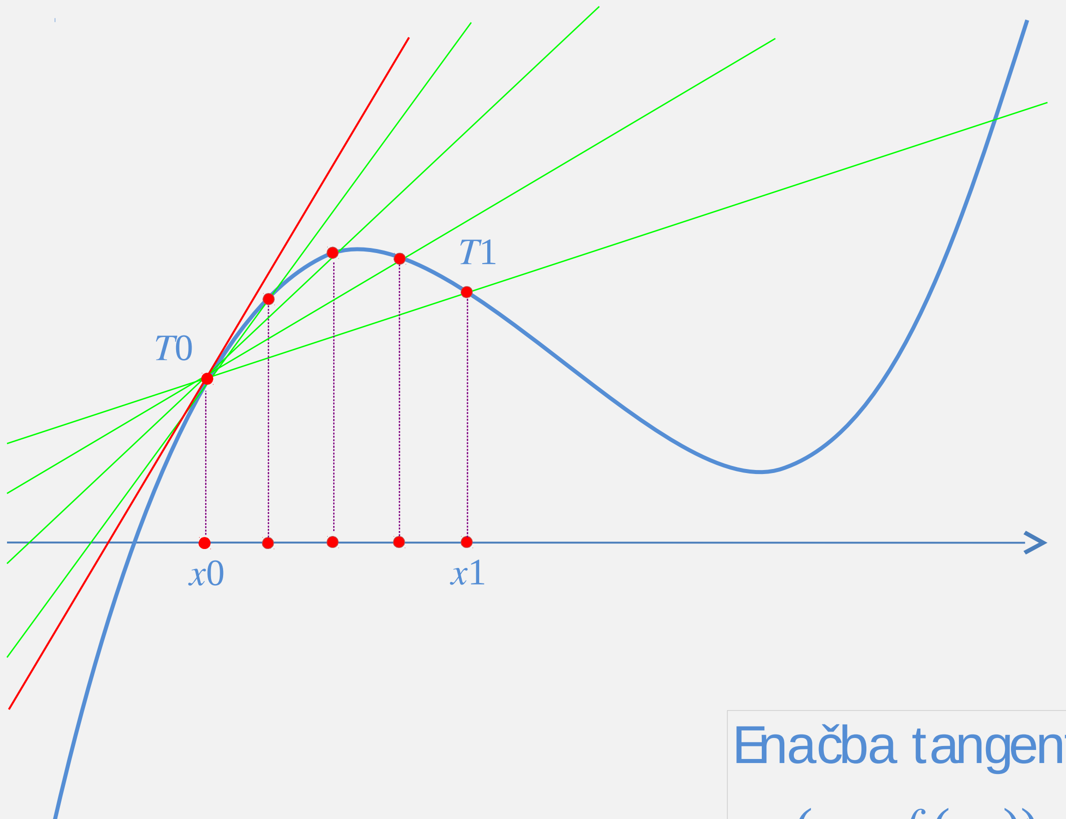
$$\Rightarrow \quad \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} \geq 0 \quad \text{za} \quad x \in I \qquad \Rightarrow \quad df(x_0) \geq 0$$

Podobno, če je $f$ lokalno padajoča okoli $x0$ $\quad \Rightarrow \quad df(x_0) \leq 0$

## GEOMETRIJSKI POMEN

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

je smerni koeficient premice, ki seka graf funkcije $f$ v točkah $T0(x0, f(x0))$ in $T1(x1, f(x1))$.




$df(x0)$ je smerni koeficient tangente na graf funkcije $f$ v točki $T0$.

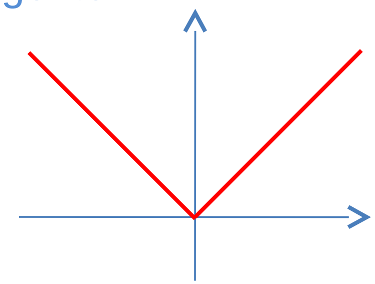
Enačba tangente na graf $f$ v točki $T_0$ :

$$(y-f(x_0))=df(x_0)\cdot(x-x_0)$$

## ODVEDLJIVOST

Funkcija $f$ je **odvedljiva** v točki $x_0$, če obstaja limita diferenčnega količnika $\lim\limits_{x\to x_0}\dfrac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$

Kjer je funkcija $f$ odvedljiva, je njen graf gladek. V teh točkah ima natančno določeno tangento.

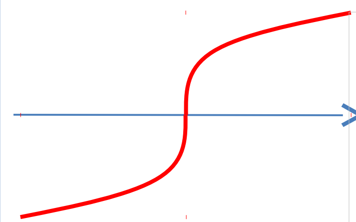


$$f(x)=|x|$$

$$\lim_{x\to 0^-}\frac{|x|-|0|}{x}=-1$$

$$\lim_{x\to 0^+}\frac{|x|-|0|}{x}=1$$

Leva limita se razlikuje od desne limite.

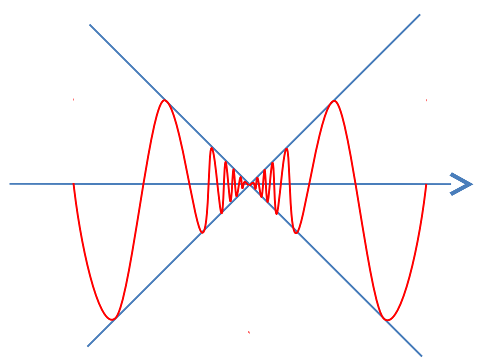


$$f(x)=\sqrt[3]{x}$$

$$\lim_{x\to 0}\frac{\sqrt[3]{x}-\sqrt[3]{0}}{x}=\lim_{x\to 0}\frac{1}{\sqrt[3]{x^2}}=\infty$$

tangenta v točki 0 je navpična

Diferenčni količnik gre proti neskončnosti.



$$f(x)=x\sin\frac{1}{x}$$

$$\lim_{x\to 0}\frac{x\sin\frac{1}{x}-0}{x}=\lim_{x\to 0}\sin\frac{1}{x}$$

Limita ne obstaja.

# ZVEZNOST IN ODVEDLJIVOST

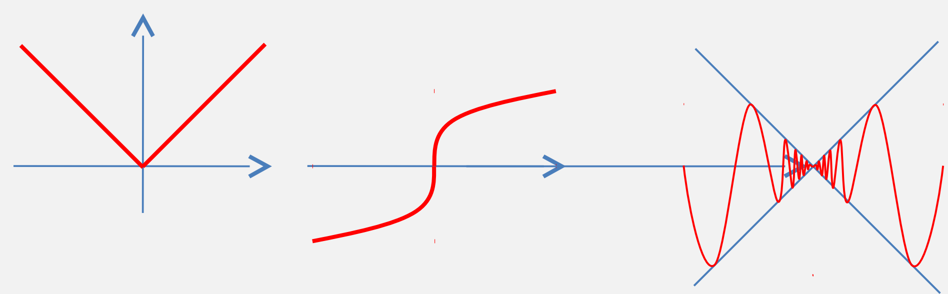
$$\lim_{x\to x_0}\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}=df(x_0)$$

$$\Rightarrow\quad \lim_{x\to x_0}\Big(f(x)-f(x_0)-df(x_0)\cdot\big(\cancelto{0}{x-x_0}\big)\Big)=0$$

$$\Rightarrow\quad \lim_{x\to x_0} f(x)=f(x_0)$$

V točkah, kjer je *f* odvedljiva, je tudi zvezna.

Obratno seveda ni res kot kažejo primeri zveznih in obenem neodvedljivih funkcij:



# RAČUNANJE ODVODOV

I. korak: funkcija odvod

Predpis $x \quad df(x)$ določa funkcijo $f : A \to \mathbb{R}$

točke, kjer je $f$ odvedljiva

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

odvod funkcije $f$

$$f(x) = \sqrt{x}$$

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{\sqrt{x+h} - \sqrt{x}}{h} = \lim_{h \to 0} \frac{x+h-x}{h(\sqrt{x+h} + \sqrt{x})} =$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{1}{\sqrt{x+h} + \sqrt{x}} = \frac{1}{2\sqrt{x}}$$

II. korak: računske operacije in sestavljanje

$$\left(f(x) \pm g(x)\right)' = f'(x) \pm g'(x)$$

$$\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)' = \frac{f'(x)\cdot g(x) - f(x)\cdot g'(x)}{g^2(x)}$$

$$\left(f(x)\cdot g(x)\right)' = f'(x)\cdot g(x) + f(x)\cdot g'(x)$$

$$f(g(x))' = f'(g(x))\cdot g'(x)$$

III. korak: odvodi osnovnih funkcij

$$(x^r)' = r x^{r-1}$$

$$(\ln x)' = \frac{1}{x}$$

$$(\arcsin x)' = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$(e^x)' = e^x$$

$$(\sin x)' = \cos x$$

$$(\operatorname{arctg} x)' = \frac{1}{1+x^2}$$

In še...

$$\left(\frac{1}{x}\right)' = -\frac{1}{x^2}$$

$$(\sqrt{x})' = \frac{1}{2\sqrt{x}}$$

$$(a^x)' = a^x \cdot \ln a$$

$$(\cos x)' = -\sin x$$

$$(\operatorname{tg} x)' = \frac{1}{\cos^2 x}$$

Na podlagi odvodov osnovnih funkcij in računskih pravil lahko rutinsko izračunamo odvod poljubne elementarne funkcije.

## VIŠJI ODVODI

$$(f')' = f''$$
$$(f'')' = f'''$$
$$\ldots$$

$$f(x) = x^3 - 2x + 4$$
$$f'(x) = 3x^2 - 2$$
$$f''(x) = 6x$$
$$f'''(x) = 6$$
$$f^{(4)}(x) = 0$$

$$f(x) = x \sin x$$
$$f'(x) = \sin x + x \cos x$$
$$f''(x) = \cos x + \cos x - x \sin x$$
$$= 2\cos x - x \sin x$$
$$f'''(x) = -2\sin x - \sin x - x \cos x$$
$$= -3\sin x - x \cos x$$
$$\ldots\ldots$$

S pomočjo višjih odvodov je mogoče natančneje opredeliti obnašanje funkcije.

## PARCIALNI ODVODI

Količino, ki je odvisna od več spremenljivk, pogosto obravnavamo kot funkcijo vsake spremenljivke posebej.

$$P = \frac{nRT}{V}$$

V plinski enačbi je tlak $P$ odvisen od spremembe temperature $T$ in volumna $V$.

Z naraščanjem temperature narašča tudi tlak, z naraščanjem volumna pa tlak upada.

$$P = \frac{nRT}{V}$$

$$P'(T) = \frac{nR}{V}$$

$P'_T$: odvod po spremenljivki $T$

$$P'(V) = -\frac{nRT}{V^2}$$

$P'_V$: odvod po spremenljivki $V$

$$f = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$ funkcija $n$ spremenljivk

$$f'_{x_i}(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_1, \ldots, x_i + h, \ldots, x_n) - f(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_n)}{h}$$

$i$ -ti parcialni odvod

Uporabljamo tudi oznako $$\frac{\partial f}{\partial x_i} = f'_{x_i}(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

$$f(x, y, z) = x \sin \frac{y}{z}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = f'_x(x, y, z) = \sin \frac{y}{z}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = f'_y(x, y, z) = x \left( \cos \frac{y}{z} \right) \cdot \frac{1}{z} = \frac{x}{z} \cos \frac{y}{z}$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = f'_z(x, y, z) = x \cdot \left( \cos \frac{y}{z} \right) \left( -\frac{y}{z^2} \right) = -\frac{xy}{z^2} \cos \frac{y}{z}$$

# ODVEDLJIVOST IN LOKALNI EKSTREMI

$f(x0)$ lokalni maksimum v notranjosti intervala definicije

$$\Rightarrow \quad \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} \geq 0 \quad \text{za } x < x_0 \quad \text{in} \quad \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} \leq 0 \quad \text{za } x > x_0$$

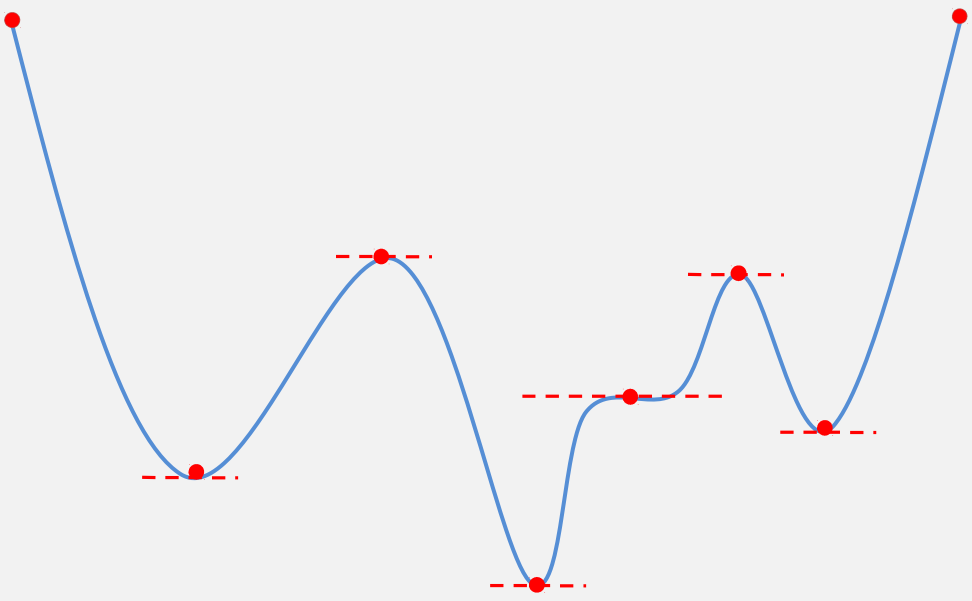
$f$ odvedljiva pri $x0$

$$\Rightarrow \quad \lim_{x \to x_0^-} \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} \geq 0 \quad \text{in} \quad \lim_{x \to x_0^+} \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} \leq 0$$

$$\Rightarrow \quad f'(x_0) = 0$$ (stacionarna točka)

Če ima odvedljiva funkcija lokalni ekstrem v notranjosti intervala, je tam njen odvod enak 0.

Opozorilo: premislek ne deluje, če je ekstrem na robu definicijskega območja.



Ekstremi so lahko na robu ali pa v notranjosti definicijskega območja.
Če je ekstrem v notranjosti, je tam stacionarna točka.

Stacionarna točka ni nujno lokalni ekstrem, lahko je tudi prevoj.

Lokalni ekstrem ni nujno tudi globalni ekstrem.

Kandidati za globalne ekstreme so stacionarne točke in točke na robu definicijskega območja.

# OKALNI EKSTREMI FUNKCIJ VEČ SPREMENLJIVK

$f(x_1,\ldots,x_n)$ lokalni ekstrem v notranjosti definicijskega območja

$\Rightarrow f(x_1,\ldots,x_n)$ je v vsaki smeri lokalni ekstrem

$$\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x_1} = \ldots = \frac{\partial f}{\partial x_n} = 0$$ vsi parcialni odvodi so enaki 0

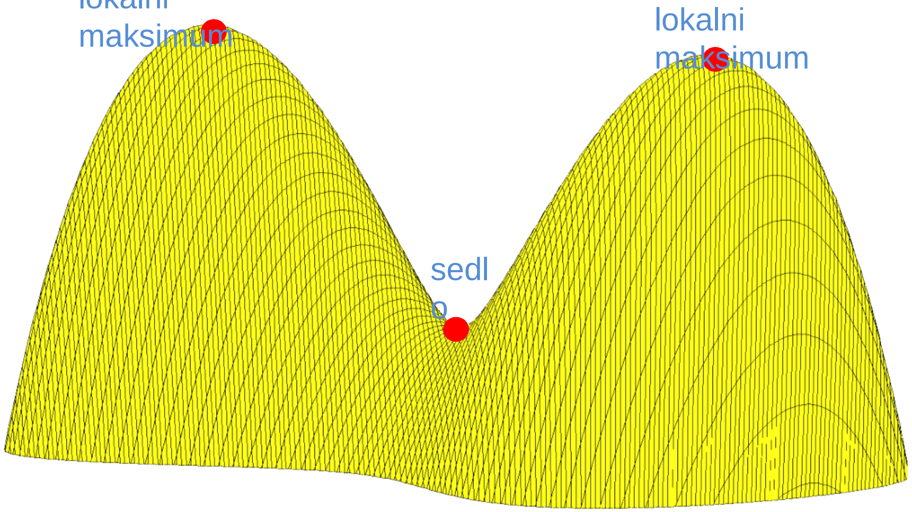
Kandidati za lokalne ekstreme so v stacionarnih točkah, tj. v točkah, kjer so vsi parcialni odvodi enaki 0

$$f(x,y) = 8xy - x^4 - 4y^2$$

$$\left.\begin{aligned} 8y - 4x^3 &= 0 \\ 8x - 8y &= 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow x = y = 0, -\sqrt{2}, +\sqrt{2}$$

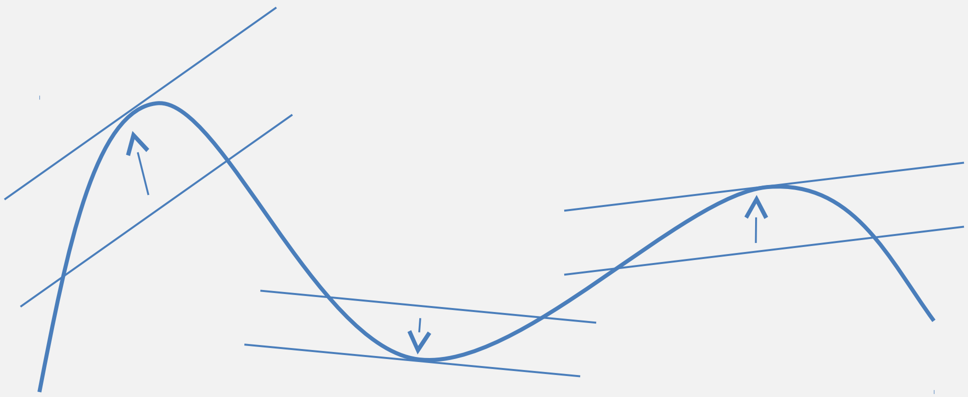
Stacionarne točke:

$$(0,0,0), (-\sqrt{2},-\sqrt{2},4), (\sqrt{2},\sqrt{2},4)$$



# LAGRANGEV IZREK

Iz definicije odvoda sledi približna formula $f(x+h)\approx f(x)+f'(x)\cdot h$

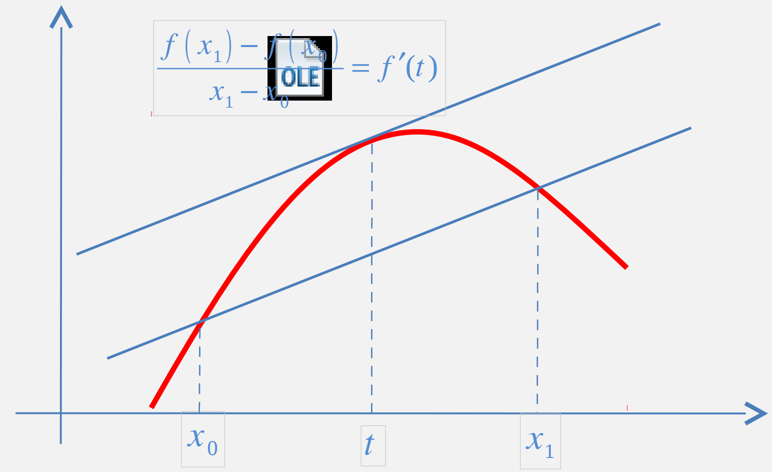


Ali obstaja tudi točna formula?

Za vsako sekanto lahko najdemo vzporedno tangento (npr. povprečna hitrost na danem časovnem intervalu je vedno enaka hitrosti v nekem vmesnem trenutku).

Za odvedljivo funkcijo $f$ velja: med vsakim parom točk $x0,x1$ obstaja vsaj en tak $t$, da je

$$f'(t)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$



Za točki $x$ in $x+h$ dobimo:

$f(x+h) = f(x) + f'(t)\cdot h$ za nek $t$ med $x$ in $x+h$

Posledice:

$f' = 0$ na $[a,b]$ $\Rightarrow$ $f$ je konstantna na $[a,b]$

$f' = g'$ na $[a,b]$ $\Rightarrow$ $f = g + C$ za neko konstanto $C$

$$\left(\ln(5x)\right)' = \frac{1}{5x}\cdot 5 = \frac{1}{x} = (\ln x)'$$

$$\Rightarrow \quad \ln(5x) = \ln x + C \qquad C = \ln 5$$

# PREDZNAK ODVODA IN NARAŠČANJE FUNKCIJE

$f' \geq 0$ na $[a,b]$ $\Rightarrow$ za $x_0 \leq x_1$ velja $f(x_1) = f(x_0) + (x_1 - x_0)\cdot f'(t) \geq f(x_0)$

$f' \geq 0$ na $[a,b]$ $\Rightarrow$ $f$ je naraščajoča na $[a,b]$.

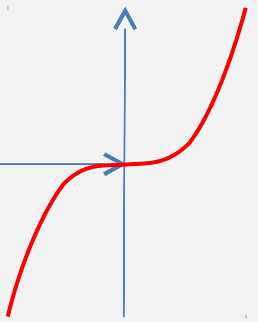
$f' \leq 0$ na $[a,b]$ $\Rightarrow$ $f$ je padajoča na $[a,b]$.

$f' > 0$ na $[a,b]$ $\Rightarrow$ za $x_0 < x_1$ velja $f(x_1) = f(x_0) + (x_1 - x_0)\cdot f'(t) > f(x_0)$

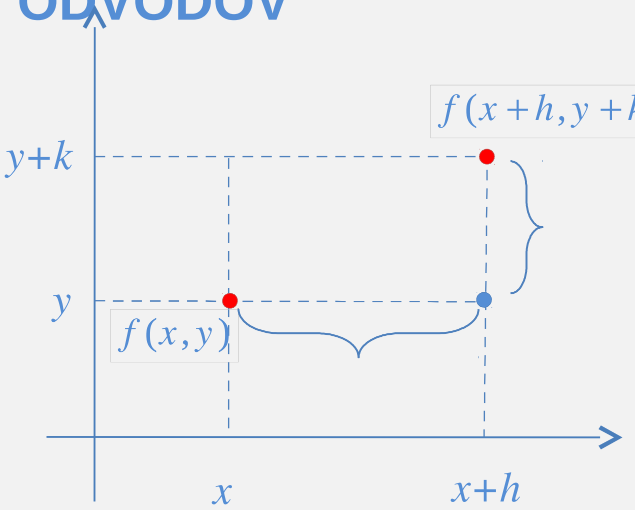
$f' > 0$ na $[a,b]$ $\Rightarrow$ $f$ je strogo naraščajoča na $[a,b]$.

$f' < 0$ na $[a,b]$ $\Rightarrow$ $f$ je strogo padajoča na $[a,b]$.

Obratno ne velja: $f(x)=x^3$ strogo narašča okoli 0, vendar je $f'(0)=0$.



# GEOMETRIČNI POMEN PARCIALNIH ODVODOV




$$f(x+h,y+k)-f(x,y)=$$

$$=\left(f(x+h,y+k)-f(x+h,y)\right)+\left(f(x+h,y)-f(x,y)\right)$$

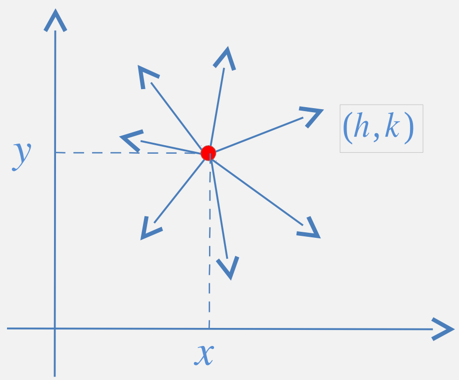
$$\approx\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)\cdot h+\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)\cdot k$$

$$f(x+h,y+k)\approx f(x,y)+\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)\cdot h+\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)\cdot k$$

Če se temperatura spremeni za $\Delta T$, volumen pa za $\Delta V$, potem se tlak idealnega plina spremeni za približno

$$\Delta P\approx\frac{nR}{V}\times\Delta T-\frac{nRT}{V^2}\times\Delta V$$

Sprememba vrednosti funkcije v smeri $(h,k) \approx \frac{\partial f}{\partial x}\cdot h+\frac{\partial f}{\partial y}\cdot k=\underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial x},\frac{\partial f}{\partial y}\right)\cdot(h,k)}_{\text{skalarni produkt}}$

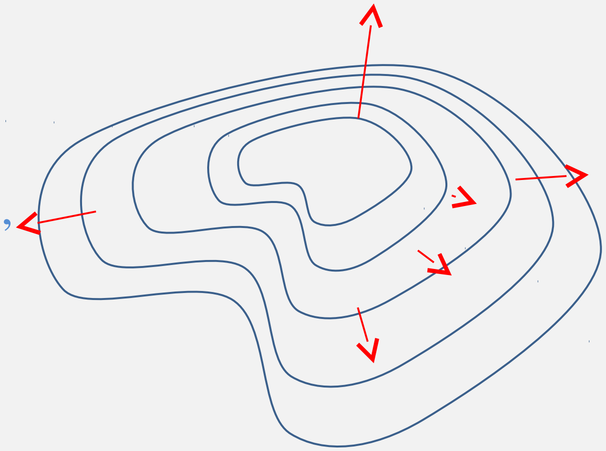



Skalarni produkt je največji, če vektorja kažeta v isto smer.

Skalarni produkt je nič, če sta vektorja pravokotna.

$\left(\frac{\partial f}{\partial x},\frac{\partial f}{\partial y}\right)$ je vektor, ki v vsaki točki kaže v smer najhitrejšega naraščanja funkcije $f(x,y)$.

Nivojnice funkcije $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ so krivulje, ki povezujejo točke, v katerih ima $f$ isto vrednost (izohipse, izobate, izoterme,...). Podane so z enačbami $f(x1,\ldots,xn)=c$.



$$\operatorname{grad} f = \left( \frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

gradientni vektor

Gradientni vektor je pravokoten na nivojnico, ki gre skozi dano točko. Njegova velikost je sorazmerna s hitrostjo naraščanja vrednosti funkcije.

Gradient določa polje smeri, ki je v vsaki točki pravokotno na nivojnice.

## POVZETEK

Odvod je limita diferenčnega količnika.
Odvod meri spreminjanje funkcije, hitrost, smerni koeficient,...
Funkcijo odvod računamo z uporabo računskih pravil
Odvedljivost ima za posledico zveznost.
Lokalni ekstremi so v stacionarnih točkah.
Lagrangev izrek.
Če je odvod funkcije na intervalu negativen/nič/pozitiven, potem je funkcija padajoča/konstantna/naraščajoča.
Geometrični pomen parcialnih odvodov, gradient.

## UPORABA ODVODA

Računanje limit
Natančno risanje grafov
Ekstremi funkcij ene in več spremenljivk
Izravnananje numeričnih podatkov
Newtonova metoda za reševanje enačb
Numerično odvajanje

# RAČUNANJE LIMIT

Računamo $\lim\limits_{x\to a}\dfrac{u(x)}{v(x)}$ pri pogoju $u(a)=v(a)=0$ (nedoločena oblika $\frac{0}{0}$).

Iz $\dfrac{u(x)}{v(x)}=\dfrac{u(x)-u(a)}{v(x)-v(a)}=\dfrac{\frac{u(x)-u(a)}{x-a}}{\frac{v(x)-v(a)}{x-a}}$ sledi $\lim\limits_{x\to a}\dfrac{u(x)}{v(x)}=\dfrac{u'(a)}{v'(a)}$.

Če pa kvocient odvodov ni definiran, potem velja:

$$\lim_{x\to a}\frac{u(x)}{v(x)}=\lim_{x\to a}\frac{u'(x)}{v'(x)}$$

L'Hospitalovo pravilo

$$\lim_{x\to\pi}\frac{\sin x}{x^2-\pi^2}=\frac{\cos\pi}{2\pi}=-\frac{1}{2\pi}$$

$$\lim_{x\to 0}\frac{1-\cos x}{x^2}=\lim_{x\to 0}\frac{\sin x}{2x}=\lim_{x\to 0}\frac{\cos x}{2}=\frac{1}{2}$$

L'Hospitalovo pravilo lahko uporabimo tudi za računanje $\lim\limits_{x\to\infty}\dfrac{u(x)}{v(x)}$ ter za računanje $\lim\limits_{x\to a}\dfrac{u(x)}{v(x)}$, ko je $\lim\limits_{x\to a}u(x)=\lim\limits_{x\to a}v(x)=\infty$.

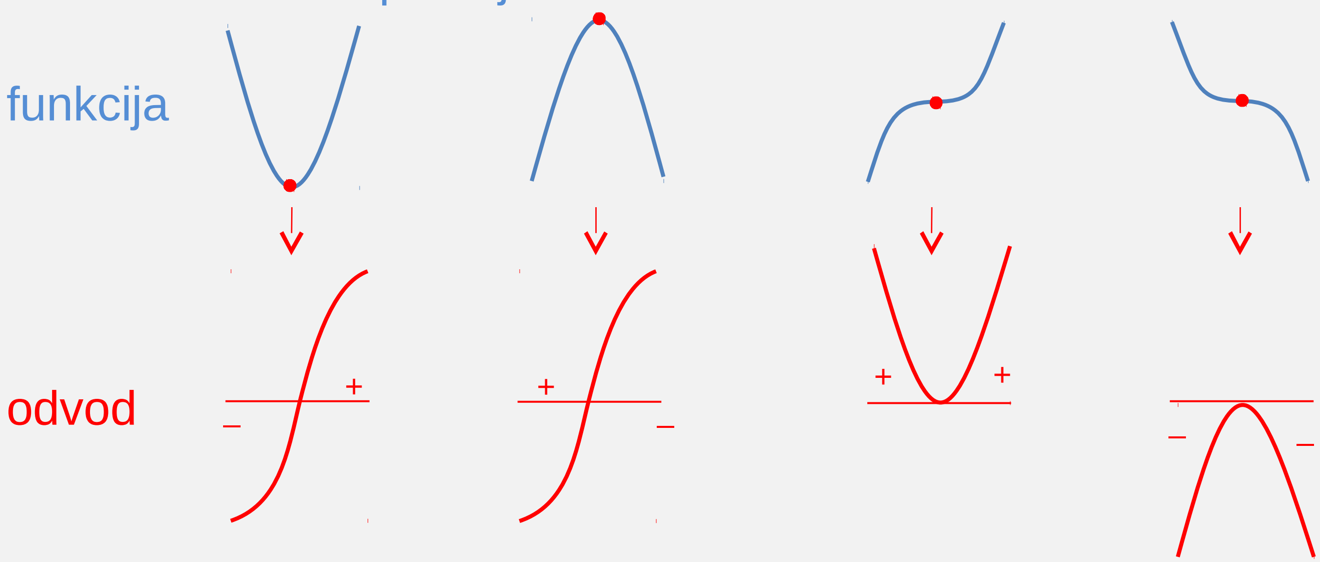
# RISANJE GRAFOV

1. **Definicijsko območje**: določimo na podlagi lastnosti osnovnih funkcij.

2. **Obnašanje na robu**: trend (pole, asimptote) izrazimo s pomočjo limit; pri računanju si pomagamo z L'Hospitalovim pravilom.

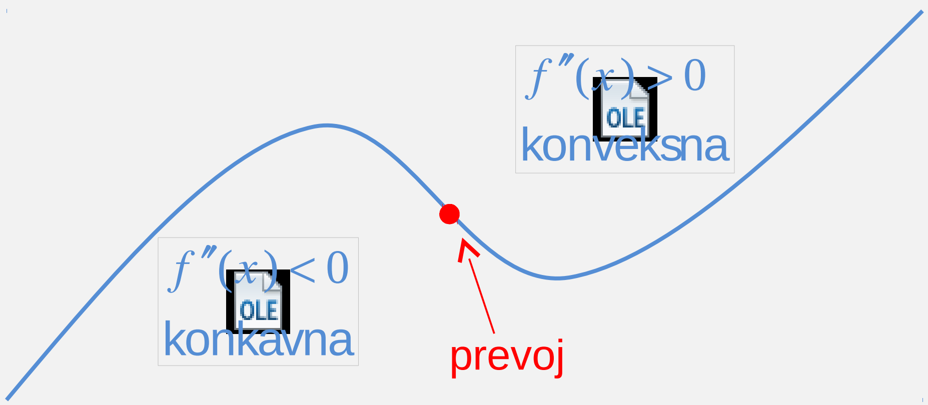
3. **Ničle**: določimo s pomočjo raznih (točnih ali približnih) metod za reševanje enačb.

4. **Naraščanje in padanje, ekstremi**: funkcijo odvajamo; kjer je odvod pozitiven, funkcijske vrednosti naraščajo, kjer je negativen padajo. V ničlah odvoda so lokalni ekstremi ali prevoji.




Če vrednosti odvoda pri prehodu čez ničlo spremenijo predznak, je v stacionarni točki lokalni ekstrem. Če se predznak ne spremeni, je v stacionarni točki prevoj.

5. **Ukrivljenost**: kjer je drugi odvod pozitiven, je graf konveksen, kjer je negativen, je graf konkaven. Prevoji so točke, kjer graf spremeni ukrivljenost, torej ničle drugega odvoda, pri katerih drugi odvod spremeni predznak.




6. **Periodičnost in simetrije**: odvod periodične funkcije je periodičen; odvod sode funkcije je lih, odvod lihe pa sod.

Nariši graf funkcije $f(x)=\dfrac{\ln^2 x}{x}$

Definicijsko območje: $(0,+\infty)$

$\lim\limits_{x\to 0}\dfrac{\ln^2 x}{x}=+\infty$ navpična asimptota (pol) $x=0$

$\lim\limits_{x\to\infty}\dfrac{\ln^2 x}{x}=\lim\limits_{x\to\infty}\dfrac{2\ln x\cdot\frac{1}{x}}{1}=\lim\limits_{x\to\infty}\dfrac{2\ln x}{x}=\lim\limits_{x\to\infty}\dfrac{2\frac{1}{x}}{1}=0$ vodoravna asimptota $y=0$

Ničle funkcije, 1. in 2. odvoda:

$f(x)=0\Rightarrow x=1$

$f'(x)=\dfrac{\ln x(2-\ln x)}{x^2}$

$f'(x)=0\Rightarrow x=1$ ali $x=e^2\approx 7.38$

min $(1,0)$, max $(7.38,0.54)$

$f''(x)=\dfrac{2\ln^2 x-6\ln x+2}{x^3}$

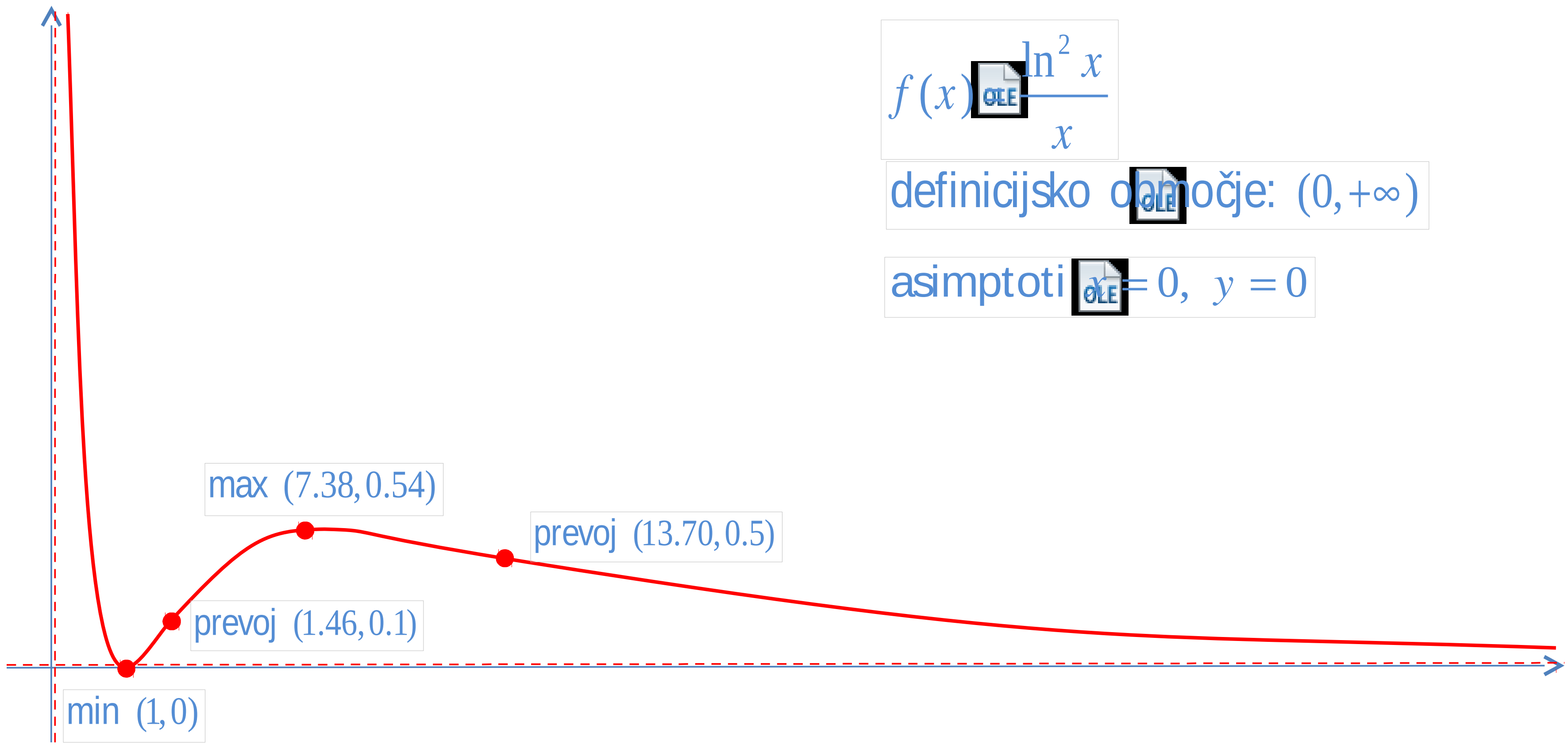
$f''(x)=0\Rightarrow \ln x=\dfrac{3\pm\sqrt{5}}{2}\Rightarrow x\approx 1.46$ ali $x\approx 13.70$

prevoja $(1.46,0.1)$, $(13.70,0.5)$

$$f(x) = \frac{\ln^2 x}{x}$$

definicijsko območje: $(0, +\infty)$

asimptoti $x = 0, \quad y = 0$



# GLOBALNI EKSTREMI

Globalni ekstrem je lahko…

- → v notranjosti območja → v stacionarni točki (če je funkcija odvedljiva)
- → na robu območja → funkcija odvisna od manj spremenljivk (rob tvorijo točke/krivulje/ploskve/...)

Vedno premislimo, ali funkcija sploh zavzame ekstrem!

Določi globalne ekstreme funkcije $f(x) = x\sqrt{1-x^2}$

Definicijsko območje je $[-1,1]$, $f$ je zvezna $\Rightarrow$ zavzame maksimum in minimum

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

$$f'(x) = 0 \Rightarrow x_{1,2} = \pm\frac{\sqrt{2}}{2}$$

Kandidati za ekstreme: robne točke -1,+1; stacionarne točke $-\frac{\sqrt{2}}{2}, +\frac{\sqrt{2}}{2}$

$f(-1) = f(1) = 0,$ $\quad f(-\frac{\sqrt{2}}{2}) = -\frac{1}{2},$ $\quad f(\frac{\sqrt{2}}{2}) = \frac{1}{2}$

minimum maksimum

Poišči ekstreme funkcije $f(x,y)=2x2+xy-y2-2x+4y$ na trikotniku z oglišči $A(0,1)$, $B(3,4)$, $C(-1,4)$.

$$\begin{aligned} f'_x &= 4x + y - 2 \\ f'_y &= x - 2y + 4 \end{aligned} \Rightarrow \left.\begin{aligned} 4x + y - 2 &= 0 \\ x - 2y + 4 &= 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{aligned} x &= 0 \\ y &= 2 \end{aligned}$$

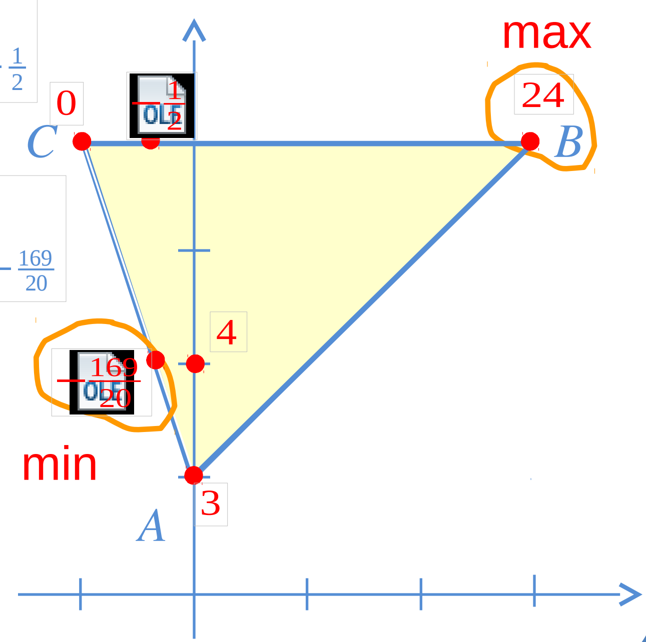
stacionarna točka $T1(0,2)$; $f(0,2)=4$.

$$\overline{AB}: \; y = x + 1, \; x \in [0,3] \Rightarrow \begin{aligned} f &= 2x^2 + x + 3 \\ f' &= 4x + 1 \quad \Rightarrow f' \neq 0 \text{ za } x \in [0,3] \end{aligned}$$

$$\overline{BC}: \; y = 4, \; x \in [-1,3] \Rightarrow \begin{aligned} f &= 2x^2 + 2x \\ f' &= 4x + 2 \quad \Rightarrow T_2(-\tfrac{1}{2}, 4), \; f(-\tfrac{1}{2}, 4) = -\tfrac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\overline{CA}: \; y = -3x + 1, \; x \in [-1,0] \Rightarrow \begin{aligned} f &= -10x^2 - 7x + 3 \\ f' &= -20x - 7 \quad \Rightarrow T_3(-\tfrac{7}{20}, \tfrac{41}{20}), \; f(-\tfrac{7}{20}, \tfrac{41}{20}) = -\tfrac{169}{20} \end{aligned}$$

$A: \; f(0,1) = 3$ $B: \; f(3,4) = 24$ $C: \; f(-1,4) = 0$



# IZRAVNAVANJE NUMERIČNIH PODATKOV

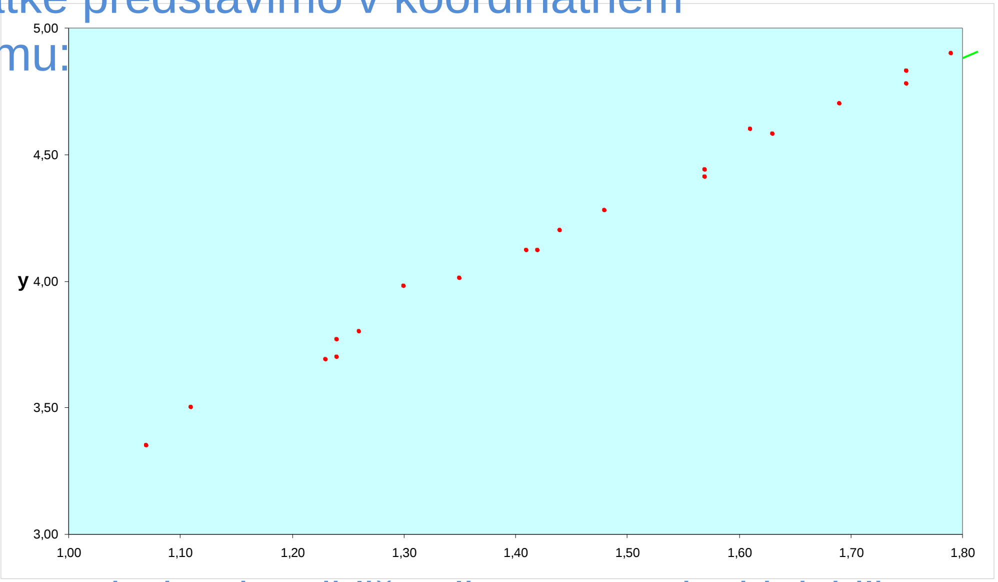
Naloga: iz tabele numeričnih podatkov $(xi,yi)$ določi funkcijsko zvezo $y=f(x)$, ki se s temi podatki najbolje ujema.

| x | y |
|---|---|
| 1,07 | 3,35 |
| 1,11 | 3,50 |
| 1,23 | 3,69 |
| 1,24 | 3,70 |
| 1,24 | 3,77 |
| 1,26 | 3,80 |
| 1,30 | 3,98 |
| 1,35 | 4,01 |
| 1,41 | 4,12 |
| 1,42 | 4,12 |
| 1,44 | 4,20 |
| 1,48 | 4,28 |
| 1,57 | 4,41 |
| 1,57 | 4,44 |
| 1,61 | 4,60 |
| 1,63 | 4,58 |
| 1,69 | 4,70 |
| 1,75 | 4,78 |
| 1,75 | 4,83 |
| 1,79 | 4,90 |

V tabeli so podane vrednosti količine $y$ v odvisnosti od $x$.

a. Določi ustrezno funkcijsko zvezo $y=f(x)$.
b. Oceni vrednost $y$ pri $x=1.5$ (interpolacija).
c. Oceni vrednost $y$ pri $x=2$ (ekstrapolacija).

Podatke predstavimo v koordinatnem sistemu:




Zveza med $x$ in $y$ je približno linearna. Kako bi dobili enačbo premice, ki se tem podatkom najbolje prilega?

Enačba premice $y=A+Bx$ je odvisna od parametrov $A$ in $B$. Ustreznost parametrov preskusimo na množici podatkov $(xi,yi)$, $i=1,2,\ldots,n$, s pomočjo testne funkcije

$$F(A,B)=\left((A+Bx_1)-y_1\right)^2+\left((A+Bx_2)-y_2\right)^2+\ldots+\left((A+Bx_n)-y_n\right)^2$$
$$=\sum_{i=1}^{n}\left((A+Bx_i)-y_i\right)^2$$

Če so vsi podatki na premici $y=A+Bx$, potem je $F(A,B)=0$. V splošnem primeru iščemo vrednosti $A$ in $B$, pri katerih testna funkcija zavzame minimum.

Lastnosti funkcije $F$:

$F$ je zvezna in odvedljiva za vse $(A,B)$ $\mathbb{R}$2

Ko gre $A,B \rightarrow \infty$ narašča $F$ čez vsako mejo, zato $F$ zavzame minimum na $\mathbb{R}$2

Ker $\mathbb{R}$2 nima robnih točk, je minimum $F$ v stacionarni točki.

$$F(A,B)=\sum_{i=1}^{n}\left((A+Bx_i)-y_i\right)^2$$

Testna funkcija po kriteriju najmanjših kvadratov

$$F'_A(A,B)=\sum_{i=1}^{n}2\cdot\left((A+Bx_i)-y_i\right)$$

$$F'_B(A,B)=\sum_{i=1}^{n}2\cdot\left((A+Bx_i)-y_i\right)\cdot x_i$$

$$\left.\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n}2\cdot\left((A+Bx_i)-y_i\right)&=0\\ \sum_{i=1}^{n}2\cdot\left((A+Bx_i)-y_i\right)\cdot x_i&=0\end{aligned}\right\}\Longrightarrow\left.\begin{aligned}n\cdot A+\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)\cdot B&=\left(\sum_{i=1}^{n}y_i\right)\\ \left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)\cdot A+\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)\cdot B&=\left(\sum_{i=1}^{n}x_iy_i\right)\end{aligned}\right\}$$

Dobljeni sistem dveh linearnih enačb in dveh neznank ima natanko eno rešitev, ki ustreza globalnemu minimumu testne funkcije.

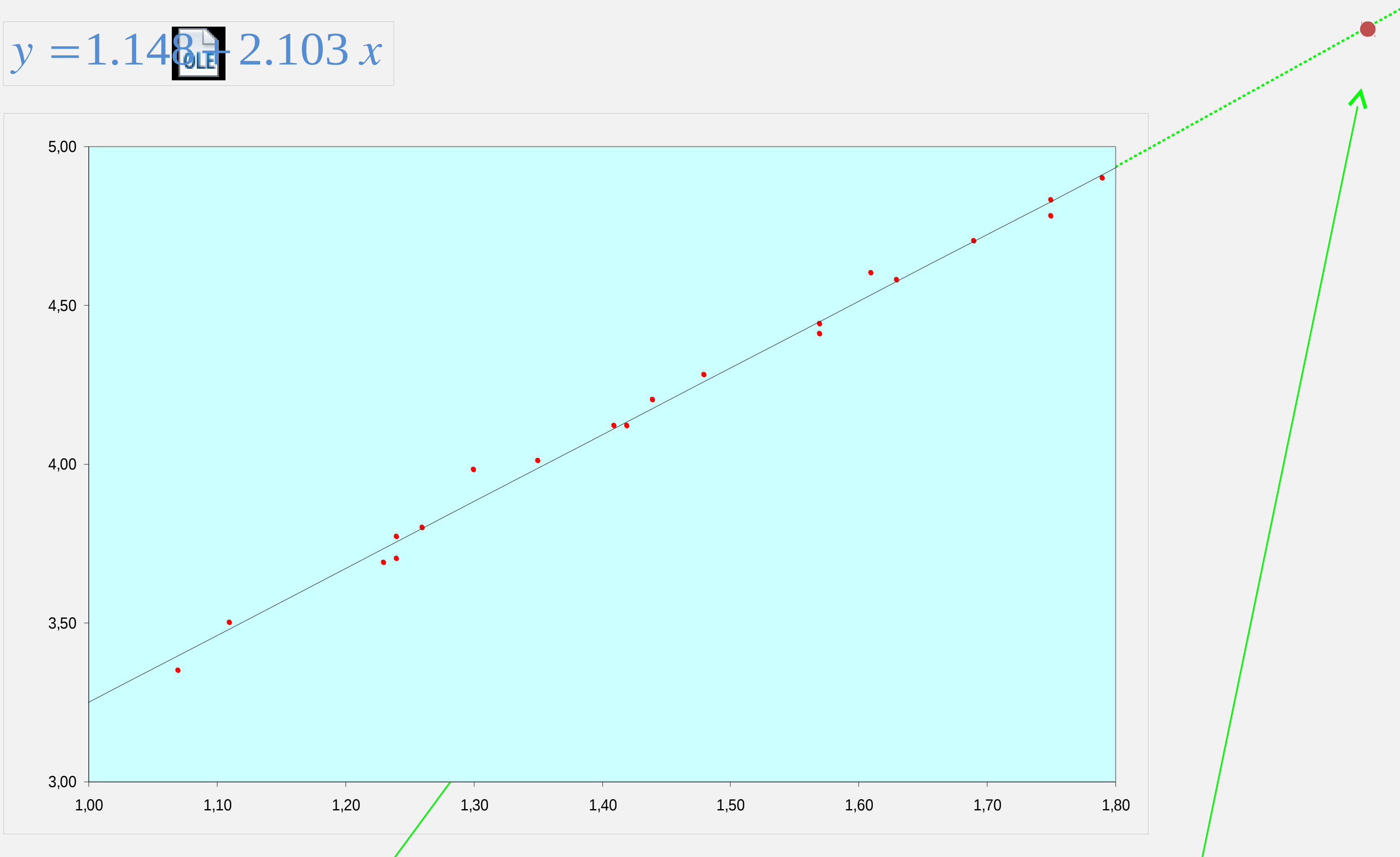
| x | y |
|---|---|
| 1,07 | 3,35 |
| 1,11 | 3,50 |
| 1,23 | 3,69 |
| 1,24 | 3,70 |
| 1,24 | 3,77 |
| 1,26 | 3,80 |
| 1,30 | 3,98 |
| 1,35 | 4,01 |
| 1,41 | 4,12 |
| 1,42 | 4,12 |
| 1,44 | 4,20 |
| 1,48 | 4,28 |
| 1,57 | 4,41 |
| 1,57 | 4,44 |
| 1,61 | 4,60 |
| 1,63 | 4,58 |
| 1,69 | 4,70 |
| 1,75 | 4,78 |
| 1,75 | 4,83 |
| 1,79 | 4,90 |

| $i$ | $x_i$ | $y_i$ | $x_i^2$ | $x_i y_i$ |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 1,07 | 3,35 | 1,1890 | 3,5845 |
| 2 | 1,11 | 3,50 | 1,2321 | 3,8850 |
| 3 | 1,23 | 3,69 | 1,5129 | 4,5387 |
| 4 | 1,24 | 3,70 | 1,5376 | 4,5880 |
| 5 | 1,24 | 3,77 | 1,5376 | 4,6748 |
| 6 | 1,26 | 3,80 | 1,5876 | 4,7880 |
| 7 | 1,30 | 3,98 | 1,6900 | 5,1740 |
| 8 | 1,35 | 4,01 | 1,8225 | 5,4135 |
| 9 | 1,41 | 4,12 | 1,9881 | 5,8092 |
| 10 | 1,42 | 4,12 | 2,0164 | 5,8504 |
| 11 | 1,44 | 4,20 | 2,0736 | 6,0480 |
| 12 | 1,48 | 4,28 | 2,1904 | 6,3344 |
| 13 | 1,57 | 4,41 | 2,4649 | 6,9237 |
| 14 | 1,57 | 4,44 | 2,4649 | 6,9708 |
| 15 | 1,61 | 4,60 | 2,5921 | 7,4060 |
| 16 | 1,63 | 4,58 | 2,6569 | 7,4654 |
| 17 | 1,69 | 4,70 | 2,8561 | 7,9430 |
| 18 | 1,75 | 4,78 | 3,0625 | 8,3650 |
| 19 | 1,75 | 4,83 | 3,0625 | 8,4525 |
| 20 | 1,79 | 4,90 | 3,2041 | 8,7710 |
| | 28,91 | 83,76 | 42,6977 | 122,9859 |

$$\begin{cases} 20A + 28.91B = 83.76 \\ 28.91A + 42.70B = 122.99 \end{cases}$$

$$A = 1.148$$
$$B = 2.103$$

$y = 1.148 + 2.103\,x$




interpolirana vrednost: $f(1.5)=4.303$

ekstrapolirana vrednost: $f(2)=5.354$

V praksi sistem

$$\left.\begin{aligned} n\cdot A+\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)\cdot B&=\left(\sum_{i=1}^{n}y_i\right)\\ \left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)\cdot A+\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)\cdot B&=\left(\sum_{i=1}^{n}x_iy_i\right)\end{aligned}\right\}$$

rešujemo takole:

Obe enačbi delimo z $n$ in vpeljemo oznake:

$$\left.\begin{aligned} A+\overline{x}\cdot B&=\overline{y}\\ \overline{x}\cdot A+\overline{x^2}\cdot B&=\overline{xy}\end{aligned}\right\}$$

$\overline{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i$ povprečje argumentov

$\overline{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i$ povprečje funkcijskih vrednosti

$\overline{x^2}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i^2$ povprečje kvadratov argumentov

$\overline{xy}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_iy_i$ povprečje produktov

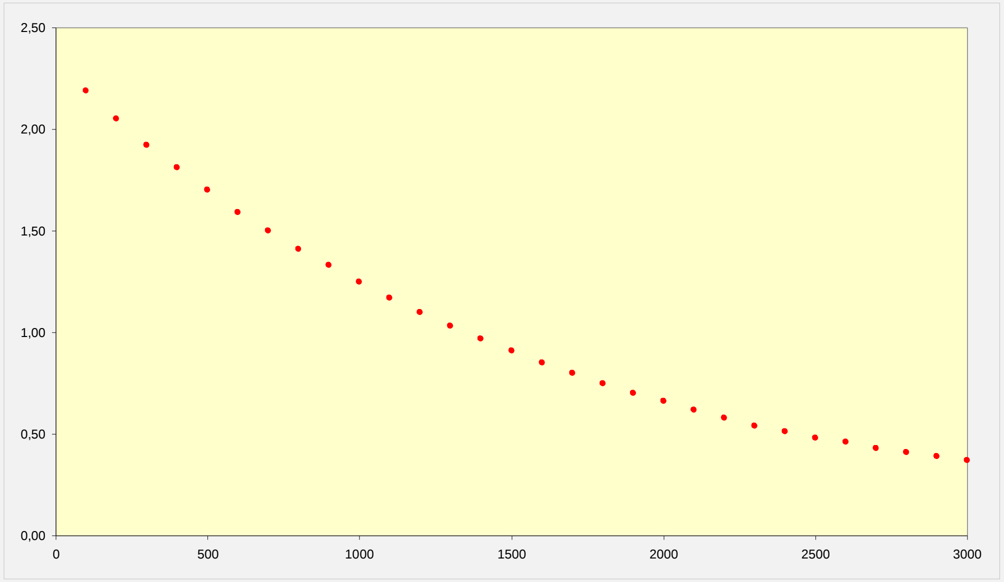
$$B=\frac{\overline{xy}-\overline{x}\cdot\overline{y}}{\overline{x^2}-\overline{x}\cdot\overline{x}}$$

$$A=\overline{y}-B\cdot\overline{x}$$

# NELINEARNE ZVEZE

V tabeli je predstavljena kinetika razpada N2O5 v raztopini CCl4. *c* je koncentracija N2O5 po preteku *t* sekund.

| t(s) | c (mol/ l) | t(s) | c (mol/ l) |
|---|---|---|---|
| 100 | 2,19 | 1600 | 0,85 |
| 200 | 2,05 | 1700 | 0,80 |
| 300 | 1,92 | 1800 | 0,75 |
| 400 | 1,81 | 1900 | 0,70 |
| 500 | 1,70 | 2000 | 0,66 |
| 600 | 1,59 | 2100 | 0,62 |
| 700 | 1,50 | 2200 | 0,58 |
| 800 | 1,41 | 2300 | 0,54 |
| 900 | 1,33 | 2400 | 0,51 |
| 1000 | 1,25 | 2500 | 0,48 |
| 1100 | 1,17 | 2600 | 0,46 |
| 1200 | 1,10 | 2700 | 0,43 |
| 1300 | 1,03 | 2800 | 0,41 |
| 1400 | 0,97 | 2900 | 0,39 |
| 1500 | 0,91 | 3000 | 0,37 |



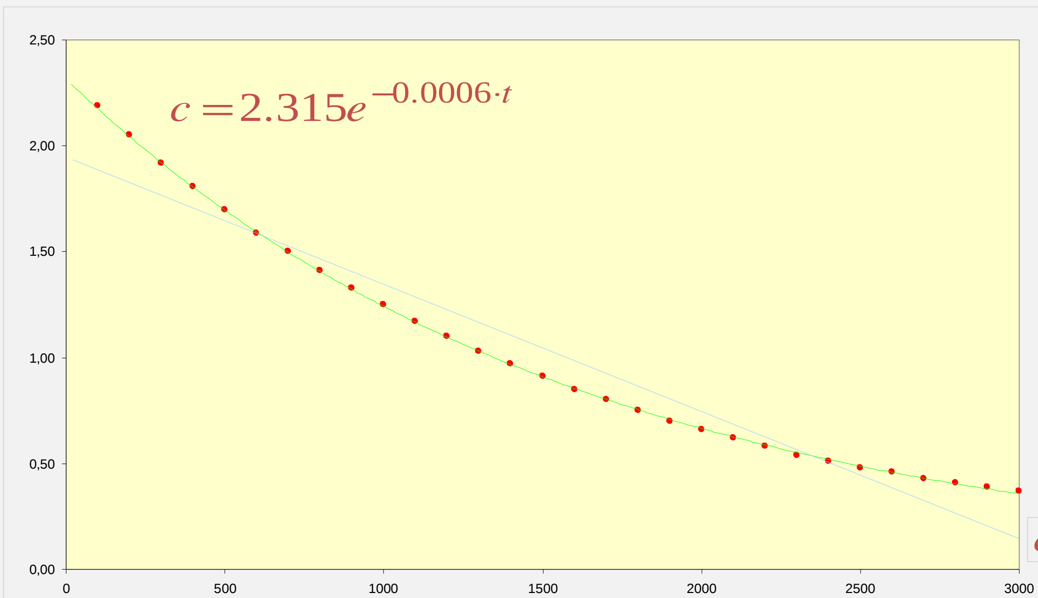
Funkcijska zveza ni linearna, temveč eksponentna: $c = Ae^{Bt}$

Računanje s testno funkcijo $F(A,B) = \sum_{i=1}^{n} \left( Ae^{Bt_i} - y_i \right)^2$
bi bilo zamudno, zato raje lineariziramo.

$\ln c = \ln A + Bt$ (zveza med logaritmom koncentracije in časom je linearna)

Vpeljemo novo količino $c' = \ln c$ in uporabimo prejšnje formule.

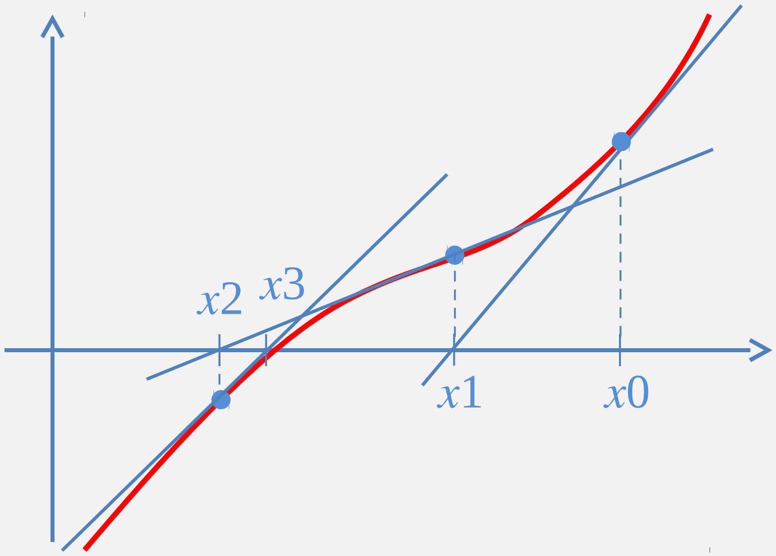
Dobimo:




$c = 1.9475 - 0.0006 \cdot t$

## NEWTONOVA METODA ZA REŠEVANJE ENAČB

Pri reševanju enačbe $f(x)=0$ izberemo približek $x0$ in izračunamo točko kjer tangenta na graf $f(x)$ pri $x0$ seka absciso. Dobljeno vrednost označimo z $x1$ in vzamemo za naslednji približek ter ponovimo postopek...




Enačba tangente: $y = f(x_0) + f'(x_0)\cdot(x - x_0)$

Ničla: $0 = f(x_0) + f'(x_0)\cdot(x - x_0) \Rightarrow x_1 = x_0 - \dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

$x_2 = x_1 - \dfrac{f(x_1)}{f'(x_1)}$, $x_3 = x_2 - \dfrac{f(x_2)}{f'(x_2)}, \ldots$

Zaporedne približke za rešitev enačbe $f(x)=0$ dobimo s formulo:

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

# RAČUNANJE KORENOV

$\sqrt{a}$ je rešitev enačbe $x^2 - a = 0$

$f(x) = x^2 - a$ $\longrightarrow$ $x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^2 - a}{2x_n} = \frac{x_n^2 + a}{2x_n}$

Npr., za $a = 10$ dobimo $x_{n+1} = \frac{x_n^2 + a}{2x_n}$. Iteracijo lahko začnemo z $x = 1$.

1, 5.5, 3.659090, 3.196005, 3.162455,
3.162277

(3.162277 2=9.99999582)

$\sqrt[r]{a}$ je rešitev enačbe $x^r - a = 0$

$f(x) = x^r - a$ $\longrightarrow$ $x_{n+1} = \frac{(r-1)(x_n)^r + a}{r(x_n)^{r-1}}$

Npr., za $\sqrt[4]{17}$ dobimo $x_{n+1} = \frac{3(x_n)^4 + 17}{4(x_n)^3}$

1, 5, 3.784, 2.916439, 2.358658, 2.092880, 2.033273, 2.030548, 2.030543

(2.030543 4=16.99999380)

2, 2.03125, 2.030543 Dober začetek je zlata vreden!

Določi prostornino enega mola CO2 pri temperaturi 50oC in pritisku 20 atmosfer.

Pri teh pogojih se CO2 ne obnaša kot idealni plin z enačbo *pV=nRT*, zato potrebujemo Van der Waalsovo korekcijo:

$$\left(p + a\frac{n^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

*a* ~ interakcija med molekulami, *b* ~ velikost molekule

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \Rightarrow (pV^2 + a)(V - b) - RTV^2 = 0$$

(enačba 3. stopnje za *V*)

$$f(V) = pV^3 - (bp + RT)V^2 + aV - ab$$

$$f'(V) = 3pV^2 - 2(bp + RT)V + a$$

$$V_{n+1} = V_n - \frac{f(V_n)}{f'(V_n)}$$

*p*=20 · 1.013 · 105 Pa = 2 026 000 Pa

*T*=323 K

*a*CO2=0.3643 Jm3/mol2

*b*CO2=4.269 · 10 -5 m3/mol

*R*=8.314 J/mol K

Kot začetni približek vzamemo prostornino po enačbi idealnega plina *pV=nRT*

$$V_0 = \frac{8.314 \times 323}{2026000} = 0.0013254 \qquad V_1 = 0.0012274 \qquad V_2 = 0.0012266$$

Prostornina je 1.23 litra.

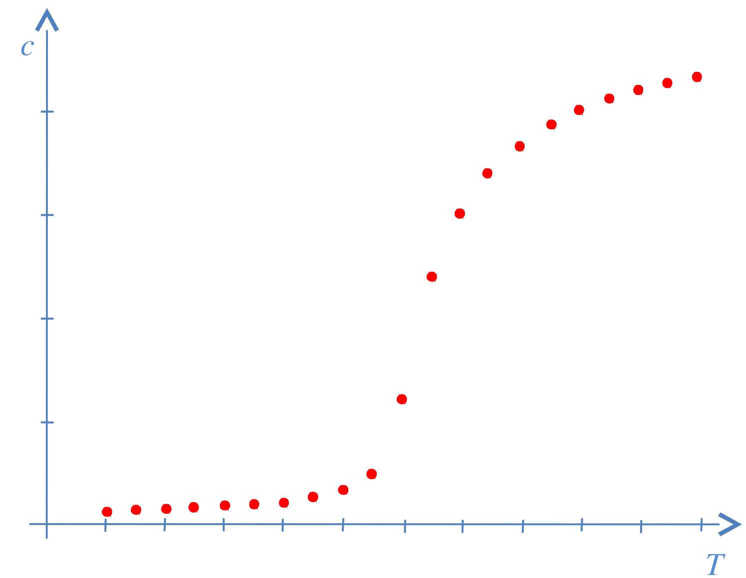
# NUMERIČNO ODVAJANJE

Koncentracijo $c$ merimo v odvisnosti od temperature $T$. Prevojna točka ustreza temperaturi, pri kateri pride do reakcije.

Kako bi iz izmerjenih vrednosti funkcije $(x_i, y_i)$ določili točke prevoja?

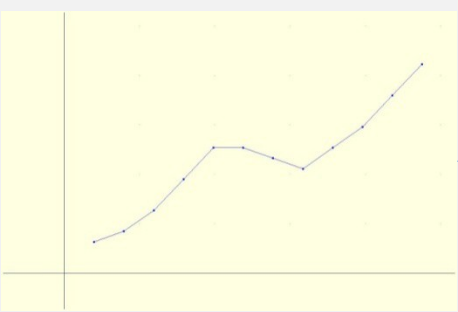
Prevoji so točke, v katerih drugi odvod spremeni predznak, zato potrebujemo neko oceno za odvod.

| $T$ | $c$ |
|---|---|
| 1 | 0.145 |
| 1.5 | 0.150 |
| 2 | 0.160 |
| 2.5 | 0.175 |
| 3 | 0.190 |
| 3.5 | 0.210 |
| 4 | 0.232 |
| 4.5 | 0.276 |
| 5 | 0.342 |
| 5.5 | 0.502 |
| 6 | 1.217 |
| 6.5 | 2.405 |
| 7 | 2.990 |
| 7.5 | 3.400 |
| 8 | 3.664 |
| 8.5 | 3.856 |
| 9 | 3.990 |
| 9.5 | 4.110 |
| 10 | 4.200 |
| 10.5 | 4.270 |
| 11 | 4.330 |

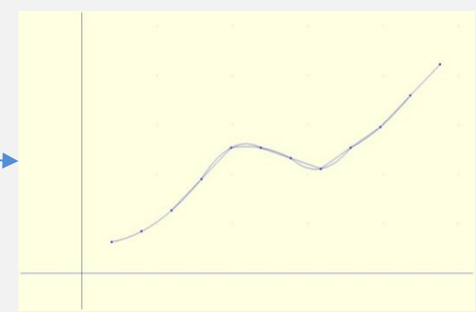



Če poznamo obliko funkcije, jo določimo s pomočjo metode najmanjših kvadratov in dobljeno funkcijo odvajamo analitično.

V splošnem poiščemo polinom, ki gre skozi nekaj zaporednih točk in ga potem odvajamo. Vrednosti odvoda lahko izračunamo ... podatkov.



odsekoma linearna



odsekoma kvadratična

Formule se poenostavijo, če so točke na enakomernih razdaljah (npr. $h$).

za dve zaporedni točki

$$y_0' \approx \frac{y_1 - y_0}{h}$$

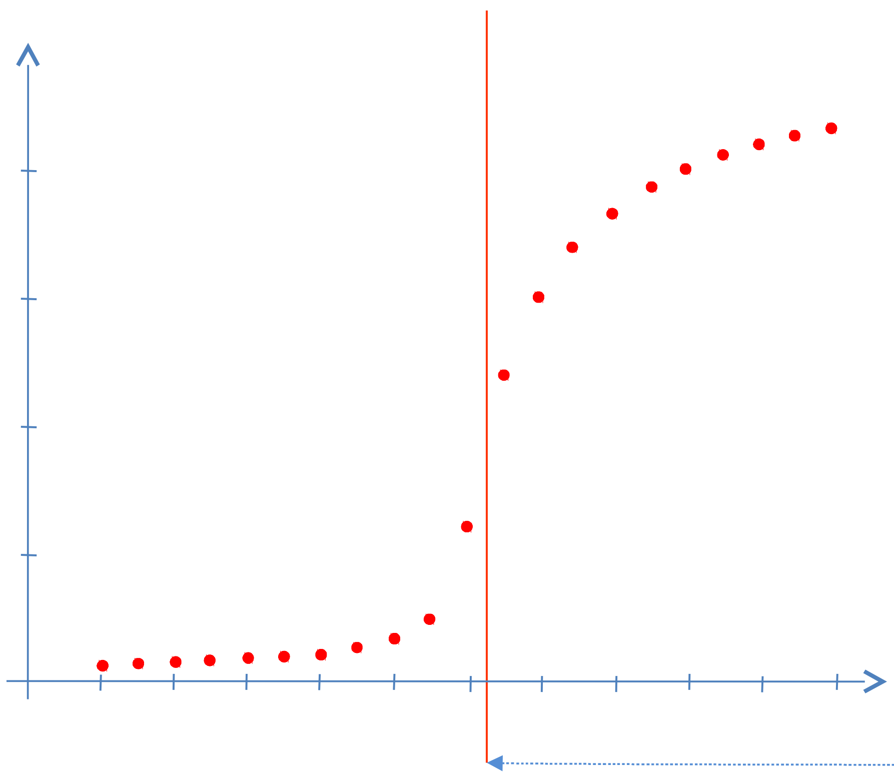
za tri zaporedne točke

$$y_1' \approx \frac{y_2 - y_0}{2h}$$

za pet zaporednih točk

$$y_2' \approx \frac{y_0 - 8y_1 + 8y_3 - y_4}{12h}$$

Numerično odvajanje je zelo občutljivo na napake v podatkih.



| $T$ | $y$ | $y_i' \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$ |
| --- | --- | --- |
| 1 | 0.145 | |
| 1.5 | 0.150 | 0.015 |
| 2 | 0.160 | 0.015 |
| 2.5 | 0.175 | 0.030 |
| 3 | 0.190 | 0.035 |
| 3.5 | 0.210 | 0.042 |
| 4 | 0.232 | 0.066 |
| 4.5 | 0.276 | 0.110 |
| 5 | 0.342 | 0.226 |
| 5.5 | 0.502 | 0.875 |
| 6 | 1.217 | 1.903 |
| 6.5 | 2.405 | 1.773 |
| 7 | 2.990 | 0.995 |
| 7.5 | 3.400 | 0.674 |
| 8 | 3.664 | 0.456 |
| 8.5 | 3.856 | 0.326 |
| 9 | 3.990 | 0.244 |
| 9.5 | 4.110 | 0.210 |
| 10 | 4.200 | 0.160 |
| 10.5 | 4.270 | 0.130 |
| 11 | 4.330 | |

| $y_i'' \approx \frac{y_{i+1}' - y_{i-1}'}{2h}$ |
| --- |
| 0.015 |
| 0.020 |
| 0.012 |
| 0.031 |
| 0.068 |
| 0.160 |
| 0.765 |
| 1.677 |
| 0.898 |
| -0.908 |
| -1.099 |
| -0.539 |
| -0.348 |