Obliczenia naukowe

2017/2018

Prowadzacy: dr hab. Paweł Zieliński

czwartek TN, 11:15

Agata Jasionowska 229726

Laboratorium – Lista 3

1. Zadanie 1

1.1. Opis problemu

Implementacja funkcji rozwiązującej równanie f(x) = 0 metodą bisekcji.

1.2. Opis rozwiązania

Przebieg tej metody następuje zgodnie z widocznym Algorytmem 1.

Niektóre elementy pseudokodu warto uzupełnić dodatkowym komentarzem. Jako pierwszym ze spostrzeżeń można uczynić sposób obliczania punktu środkowego, czyli instrukcję: $r \leftarrow a + (b-a)/2$. Okazuje się, że w obliczeniach numerycznych o wiele lepszym rozwiązaniem jest obliczanie nowej wielkości poprzez niewielką poprawkę poprzedniej. Dlatego też wyżej wspomniane przypisanie nie ma postaci: $r \leftarrow (a+b)/2$. W pewnych przypadkach zastosowanie takiej konstrukcji mogłoby prowadzić do uzyskania wartości znajdującej się nawet poza przedziałem [a,b]. Drugą sprawą będzie sposób badania zmiany znaku wartości funkcji. Otóż wykorzystanie nierówności $fa \cdot fb < 0$ może prowadzić do nadmiaru lub niedomiaru spowodowanego mnożeniem. Zamiast tego skorzystano z $\operatorname{sgn}(fa) \neq \operatorname{sgn}(fb)$, unikając w ten sposób zbędnego działania. Ostatnim spostrzeżeniem będzie zwrócenie uwagi na warunki zakończenia obliczeń przez funkcję. Uwzględnia ona warunek $e > \epsilon$ (czy w zadanym przedziale możliwa jest kolejna iteracja), $|e| < \delta$ (gdy uzyskano już wystarczająco mały błąd) oraz $|v| < \epsilon$ (wartość funkcji w punkcie jest dostatecznie bliska zeru). Rozpatrywanie aż trzech kryteriów zakończenia pracy daje algorytmowi pewność w działaniu nawet dla przypadków patologicznych.

2. Zadanie 2

2.1. Opis problemu

Implementacja funkcji rozwiązującej równanie f(x) = 0 metodą stycznych (Newtona).

2.2. Opis rozwiązania

Działanie metody jest zgodnie z Algorytmem 2.

```
Algorytm 1: Metoda bisekcji
    Input : (f, a, b, \delta, \epsilon), gdzie:
                                  funkcja f(x) zadana jako anonimowa funkcja,
                                    końce przedziału początkowego,
                     \delta, \epsilon — dokładność obliczeń
    Output: (r, v, it, err), gdzie:
                                  przybliżenie pierwiastka równania f(x) = 0,
                                  wartość f(\mathbf{r}),
                           — liczba wykonanych iteracji,
                                  sygnalizacja błędu:
                    err
                                   0 — brak błędu,
                                   1 — funkcja nie zmienia znaku w przedziale [a, b].
 1 Function mbisekcji(a, b, \delta, \epsilon)
 2
         r \leftarrow 0
         \mathbf{v} \leftarrow 0
 3
         fa \leftarrow f(a)
         \mathsf{fb} \leftarrow \mathtt{f(b)}
         \mathsf{e} \leftarrow \mathsf{b} - \mathsf{a}
 6
         \mathsf{it} \leftarrow 0
 7
         if sgn(fa) = sgn(fb) then
 8
 9
          return (r, v, it, 1)
         \mathbf{end}
10
         while e > \epsilon do
11
              \mathsf{it} \leftarrow \mathsf{it} + 1
12
              e \leftarrow e/2
13
              r \leftarrow a + e
14
              v \leftarrow f(r)
15
              if |e| < \delta \lor |v| < \epsilon then
16
                  return (r, v, it, 0)
17
              \mathbf{end}
18
              if sgn(v) \neq sgn(fa) then
19
                   \mathsf{b} \leftarrow \mathsf{r}
20
21
                   \mathsf{fb} \leftarrow \mathsf{v}
              else
22
                   a \leftarrow r
\mathbf{23}
                   \mathsf{fa} \leftarrow \mathsf{v}
25
              end
         \mathbf{end}
26
27
         return (r, v, it, 0)
```

```
Algorytm 2: Metoda stycznych
    Input: (f, pf, x0, \delta, \epsilon, maxit), gdzie:
                   f, pf
                                   funkcja f(x) oraz f'(x) zadane jako anonimowe funkcje,
                                   przybliżenie początkowe,
                                   dokładność obliczeń,
                  maxit —
                                   maksymalna dopuszczalna liczba iteracji
    Output: (r, v, it, err), gdzie:
                     r — przybliżenie pierwiastka równania f(x) = 0,
                        — wartość f(\mathbf{r}),
                        — liczba wykonanych iteracji,
                  err — sygnalizacja błędu:
                               0 — metoda zbieżna,
                               1 — nie osiągnięto wymaganej dokładności w maxit iteracji,
                               2 — pochodna bliska zeru.
 1 Function mstycznych(f, pf, x0, \delta, \epsilon, maxit)
        r \leftarrow x0
 \mathbf{2}
        v \leftarrow f(r)
 3
        \mathsf{it} \leftarrow 0
 4
        if |pf(r)| < \epsilon then
         return (r, v, it, 2)
 6
        end
 7
        \mathbf{for} \ \mathsf{it} \leftarrow 1 \ \mathbf{to} \ \mathsf{maxit} \ \mathbf{do}
 8
             x \leftarrow r - (v/pf(r))
 9
             v \leftarrow f(x)
10
             \mathbf{if} \ |\mathsf{r} - \mathsf{x}| < \delta \vee |\mathsf{v}| < \epsilon \ \mathbf{then}
11
                 \mathsf{r} \leftarrow \mathsf{x}
12
                 return (r, v, it, 0)
13
             end
14
             \mathsf{r} \leftarrow \mathsf{x}
15
16
        end
        return (r, v, it, 1)
17
```

3. Zadanie 3

3.1. Opis problemu

Implementacja funkcji rozwiązującej równanie f(x) = 0 metodą siecznych (Eulera).

3.2. Opis rozwiązania

Przebieg tej metody następuje zgodnie z Algorytmem 3.

```
Algorytm 3: Metoda siecznych
    Input: (f, \times 0, \times 1, \delta, \epsilon, \text{maxit}), \text{gdzie}:
                                   funkcja f(x) zadana jako anonimowa funkcja,
                  x0, x1
                                   przybliżenia początkowe,
                                   dokładność obliczeń,
                                  maksymalna dopuszczalna liczba iteracji
                   maxit
    Output: (r, v, it, err), gdzie:
                              przybliżenie pierwiastka równania f(x) = 0,
                              wartość f(\mathbf{r}),
                              liczba wykonanych iteracji,
                              sygnalizacja błędu:
                               0 — metoda zbieżna,
                               1 — nie osiągnięto wymaganej dokładności w maxit iteracji.
 1 Function msiecznych(f, x0, x1, \delta, \epsilon, maxit)
        \mathsf{a} \leftarrow \mathsf{x0}
        b \leftarrow x1
 3
        fa \leftarrow f(a)
 4
        fb \leftarrow f(b)
        it \leftarrow 0
 6
        for it \leftarrow 1 to maxit do
 7
            if |fa| > |fb| then
 8
                 swap(a, b)
 9
10
                 swap(fa, fb)
            end
11
            s \leftarrow (b-a)/(fb-fa)
12
            b \leftarrow a
13
             \mathsf{fb} \leftarrow \mathsf{fa}
             a \leftarrow a - (fa \cdot s)
15
            fa \leftarrow f(a)
16
            if |fa| < \epsilon \lor |b-a| < \delta then
17
                 return (a, fa, it, 0)
18
            end
19
        end
20
        return (a, fa, it, 1)
\mathbf{21}
```

W widocznym Algorytmie 3 wartym podkreślenia jest cel zastosowania funkcji swap. Przestawia ona końce przedziału a i b, gdy utrzymanie $|f(a)| \leq |f(b)|$ tego wymaga. Dlatego też, począwszy od drugiego kroku, wartości bezwzględne funkcji w kolejnych punktach są nierosnące.

4. Zadanie 4

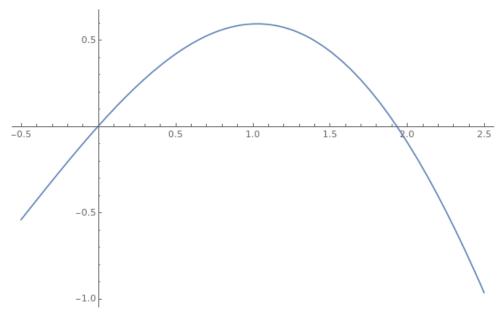
4.1. Opis problemu

Przy użyciu metod zaprogramowanych w poprzednich zadaniach wyznaczenie pierwiastka równania $\sin(x) - (\frac{1}{2}x)^2 = 0$ dla poniższych danych:

- 1. Metodą bisekcji z przedziałem początkowym [1.5,2], $\delta=\frac{1}{2}10^{-5},\ \epsilon=\frac{1}{2}10^{-5};$ 2. Metodą Newtona z przybliżeniem początkowym $x_0=1.5,\ \delta=\frac{1}{2}10^{-5},\ \epsilon=\frac{1}{2}10^{-5};$ 3. Metodą siecznych z przybliżeniem początkowym $x_0=1,\ x_1=2,\ \delta=\frac{1}{2}10^{-5},\ \epsilon=\frac{1}{2}10^{-5}.$

4.2. Opis rozwiązania

Zastosowano metody utworzone w zadaniach 1-3 wraz z zaimplementowaną funkcją f(x) = $\sin(x) - (\frac{1}{2}x)^2$ oraz jej pochodną $pf(x) = \cos(x) - \frac{1}{2}x$ (niezbędną przy korzystaniu z metody stycznych). Miejsca zerowe zadanej funkcji widoczne są na Rysunku 1.



Rysunek 1: Wykres funkcji $\sin(x) - (\frac{1}{2}x)^2 = 0$.

4.3. Wyniki

Uzyskane rezultaty widoczne są w Tabeli 1.

podpunkt	x_0	$f(x_0)$	liczba iteracji
1.	1.9337539672851562	$-2.7027680138402843 \times 10^{-7}$	16
2.	1.933753779789742	$-2.2423316314856834 \times 10^{-8}$	4
3.	1.9337509005356321	$3.783706985283075 \times 10^{-6}$	4

Tabela 1: $\sin(x) - (\frac{1}{2}x)^2 = 0$ dla danych z zadania.

4.4. Wnioski

Przykład funkcji podanej w tym zadaniu pokazuje różnice w liczbie iteracji wykonywanych przez każdą z trzech metod wyznaczania pierwiastków równań. Funkcja metody bisekcji wykonała ich najwięcej, bo aż 17, aby uzyskać wynik z zadaną dokładnością. O wiele lepiej radzą tu sobie funkcje siecznych oraz stycznych - wymagana precyzja została osiągnięta już po 4 przebiegach. Uzyskane rezultaty znajdują swoje potwierdzenie w teoretycznej zbieżności wyżej wymienionych metod. Otóż posortowanie według tego współczynnika daje w efekcie następującą kolejność metod: Newtona (kwadratowo), siecznych (≈ 1.62 , nadliniowo) oraz bisekcji (liniowo). Przeprowadzenie analizy otrzymanych w Tabeli 1 wyników mogłoby prowadzić do śmiałego wniosku, iż ostatnia z nich jest nie tylko najwolniejsza, ale także najmniej dokładna. Bardziej trafnym jest jednak zauważenie, że zwrócona przez metodę bisekcji wartość jest najbliższa zadanej dokładności (przez co można by nazwać ją najbardziej "stabilną" z wszystkich badanych). W przypadku dwóch pozostałych — zbiegały one szybciej, co doprowadziło finalnie do osiągnięcia większej dokładności oraz obliczenia pierwiastka najbliższego rzeczywistemu. Warto mieć na uwadze, iż wybór odmiennej funkcji bądź przedziałów skutkować może uzyskaniem zupełnie innych rezultatów.

5. Zadanie 5

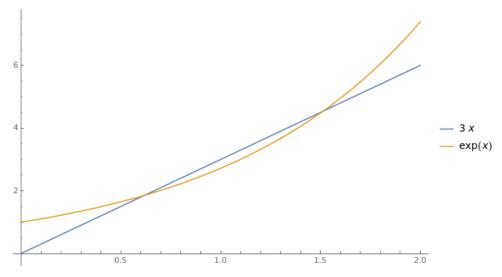
5.1. Opis problemu

Wyznaczenie przy pomocy metody bisekcji wartości zmiennej x, dla której następuje przecięcie wykresów funkcji y=3x oraz $y=\exp(x)$ dla dokładności $\delta=10^{-4},\ \epsilon=10^{-4}$.

5.2. Opis rozwiązania

W celu rozwiązania zadania zastosowano metodę mbisekcji utworzoną w zadaniu 1. Aby określić miejsce przecięcia zadanych funkcji należy znaleźć taki punkt, dla którego przyjmują one identyczną wartość dla tego samego argumentu, czyli $f(x) = 3x - \exp(x)$.

Najprostszym sposobem określenia przedziałów początkowych będzie analiza wykresu obu funkcji. Z Rysunku 2 wywnioskować można, iż poszukiwane wyniki znajdą się w przedziałach [0.0, 1.0] oraz [1.0, 2.0].



Rysunek 2: Wykres funkcji y = 3x oraz $y = \exp(x)$.

5.3. Wyniki

Poniższa tabela prezentuje otrzymane rozwiązania:

przedział	x	liczba iteracji
$ \begin{bmatrix} 0.0, 1.0 \\ 1.0, 2.0 \end{bmatrix} $	$0.619140625 \\ 1.5120849609375$	9 13

Tabela 2: Miejsca zerowe $f(x) = 3x - \exp(x)$ obliczone z pomocą metody bisekcji.

5.4. Wnioski

Ważnym czynnikiem wpływającym na pomyślne znalezienie pierwiastków funkcji metodą bisekcji jest umiejętny dobór przedziału początkowego. Należy zwrócić uwagę, iż w tym przypadku uruchomienie jej dla przedziału [0.0, 2.0] zwróci błąd związany z niezmiennością znaku. Jednak po wyszczególnieniu [0.0, 1.0] i [1.0, 2.0] znalezienie miejsc zerowych f(x) nie nastręcza problemów. Pomocna w czynności wyboru startowego przedziału może być na przykład analiza wykresu funkcji, którą zastosowano w rozwiązaniu tego problemu. Zadanie okazałoby się jednak znacznie trudniejsze, gdyby takie rozwiązanie nie było dostępne. W związku ze stosunkowo niewielką długością przedziałów, niezbędna byłaby dobra znajomość przebiegu zadanej funkcji bądź przeprowadzenie wielu eksperymentów.

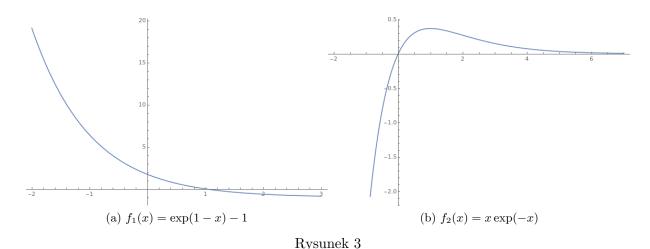
6. Zadanie 6

6.1. Opis problemu

Znalezienie pierwiastków funkcji $f_1(x) = \exp(1-x) - 1$ oraz $f_2(x) = x \exp(-x)$ przy pomocy metod: bisekcji, stycznych oraz siecznych z dokładnością obliczeń $\delta = 10^{-4}$, $\epsilon = 10^{-4}$. Należy zadbać o dobór odpowiedniego przedziału oraz przybliżeń początkowych.

6.2. Opis rozwiązania

W rozwiązaniu zadania zastosowano metody mbisekcji, msiecznych oraz mstycznych, utworzone w zadaniach 1-3. Rozpoczęto od przeprowadzenia analizy wykresów (Rysunek 3) zadanych funkcji w celu określenia najlepszych parametrów.



6.3. Wyniki

Ze wzorów oraz wykresów funkcji f_1 oraz f_2 z łatwością odczytać można prawidłowe rozwiązania, którymi są odpowiednio x=1.0 oraz x=0.0. Poniższe dwie tabele (3 i 4) prezentują

rozwiązania dla trzech metod obliczania pierwiastków równań dla różnych danych początkowych, zaś Tabela 5 — rezultaty eksperymentów z wartością początkową x_0 dla metody stycznych.

metoda	początkowe dane	x	f(x)	liczba iteracji
bisekcji	[a,b] = [0.1, 1.2]	0.999 993 896 484 374 8	6.103534251789 $\times10^{-6}$	14
bisekcji	[a, b] = [-0.1, 1.4]	1.000006103515625	$-6.103496998477453 \times 10^{-6}$	14
bisekcji	[a, b] = [0.0, 150]	0.9999990463256836	$9.536747711536009 \times 10^{-7}$	21
bisekcji	[a, b] = [-3.0, 3.0]	1.0	0.0	2
Newtona	$x_0 = 0.3$	0.9999999866969493	$1.3303050661050975 \times 10^{-8}$	4
siecznych	$x_0 = -0.4, \ x_1 = 1.3$	1.0000026160714057	-2.6160679837961 $\times10^{-6}$	7
siecznych	$x_0 = -2.0, \ x_1 = 2.0$	1.0000063854903036	$-6.385469916381226 \times 10^{-6}$	23

Tabela 3: $f_1(x) = \exp(1-x) - 1$.

metoda	początkowe dane	x	f(x)		liczba iteracji
bisekcji	[a, b] = [-0.4, 0.7]	$-4.5776367187399074 \times 10^{-6}$	-4.577657673545798	$\times 10^{-6}$	16
Newtona	$x_0 = 0.4$	$-8.878980981560664 \times 10^{-6}$	-8.879059818213929	$\times 10^{-6}$	4
siecznych	$x_0 = -1.0, \ x_1 = 0.3$	$9.44134425373555 \times 10^{-6}$	9.441255115175028	$\times 10^{-6}$	23
siecznych	$x_0 = 10, \ x_1 = 20$	20.00090808104888	4.118752554492817	$\times 10^{-8}$	1

Tabela 4: $f_2(x) = x \exp(-x)$.

x_0	x	f(x)	liczba iteracji	błąd		
		f_1				
1.5	0.9999999984736215	$1.5263785790864404\times10^{-9}$	4	0		
2.5	0.9999934982589662	$6.501762170207925 \times 10^{-6}$	6	0		
4.0	0.9999999995278234	$4.721765201054495 \times 10^{-10}$	21	0		
5.5	0.9999998543788339	$1.4562117667260566\times10^{-7}$	89	0		
7.5	0.9999994332744109	$5.667257496622113 \times 10^{-7}$	662	0		
9	_	_	_	2		
	f_2					
1.0		<u>—</u>	_	2		
2.0	14.398662765680003	$8.036415344217211 \times 10^{-6}$	10	0		
5.0	15.194283983439147	$3.827247505782993 \times 10^{-6}$	9	0		
10.0	14.380524159896261	$8.173205649825554 \times 10^{-6}$	4	0		
50.0	50.0	$9.643749239819589 \times 10^{-21}$	0	2		

Tabela 5: Metoda Newtona dla $f_1(x) = \exp(1-x) - 1$ oraz $f_2(x) = x \exp(-x)$.

6.4. Wnioski

Zestawienie wyników z Tabel 3, 4 oraz 5 widocznych powyżej pozwala na wyciągnięcie kilku wniosków. Otóż metoda bisekcji nie ma żadnych ograniczeń związanych z przebiegiem zadanej funkcji oraz jej pochodnej (w przeciwieństwie np. do metody Newtona). Niezależnie od przesunięć przedziału względem poprawnego pierwiastka wylicza wynik w tym samym tempie zależnym od konkretnej wielkości przedziału (uzasadnia to fakt, iż metoda ta polega na sukcesywnym dzieleniu przedziału na pół). Dodatkowo warto zauważyć, że wybranie takie przedziału, w którym szukany pierwiastek leży dokładnie w jego środku prowadzi do uzyskania dokładnego rozwiązania. Dla f_1 metoda jest zbieżna nawet przy przedziałach o dużym rozmiarze, potrzebując jednak wtedy znacznie większej liczby iteracji. W przypadku drugiej z funkcji takie przedziały stanowią już jednak niebezpieczeństwo - działanie zakończyć się może po jednym kroku w wyniku osiągnięcia wartości dostatecznie bliskiej zeru, mimo iż będzie ona bardzo odległa od pierwiastka

rzeczywistego.

Metoda stycznych najlepiej radzi sobie z wyznaczaniem pierwiastka, gdy kluczem jest szybkość — ze wszystkich badanych metod zwracała ona rozwiązanie po najmniejszej liczbie wykonanych iteracji. Nie oznacza to jednak, że jest najlepszym wyborem w każdej sytuacji — należy brać pod uwagę jej ograniczenia, nakładane przez konieczność obliczania pochodnej funkcji. Niebezpieczeństwo stanowi moment, gdy funkcja staje się niemal stała, przez co pochodna osiąga wartość bliską zero. W przypadku f_1 przyjmowanie kolejno coraz wyższych wartości początkowych poczynając od 1.0 sprawia, że gwałtownie wzrasta liczba iteracji potrzebnych do pomyślnego wykonania obliczeń, aż do momentu, w którym metoda staje się rozbieżna (dla $x_0 = 8.0$ stale niewystarczająca była wartość maxit rzędu 10^{10}). Z kolei rezultat przekazania do funkcji f_2 wartości początkowej równej 1.0 nie jest niczym zaskakującym — otrzymywany błąd wynika oczywiście z pochodnej równej zero. Każda wartość przybliżenia początkowego większa niż 1.0 powoduje uzyskanie rezultatu odległego od faktycznego pierwiastka.

W funkcji metody siecznych wybranie zbyt dużych wartości przybliżeń sprawiało, że obliczenia wykonane na bliskich sobie wartościach powodowały szybkie zakończenie działania ze względu na osiągnięcie założonej precyzji. Analogicznie do metody stycznych opisanej wyżej, metoda siecznych dla odległych od faktycznego pierwiastka przybliżeń początkowych nie jest w stanie zwrócić rzeczywistego zera.