Miriam Jańczak
numer albumu: 229761

26 listopada 2017
prowadzący: dr hab. Paweł Zieliński

Obliczenia naukowe

Lista 3

1 Metoda bisekcji

1.1 Opis problemu

Napisanie funkcji rozwiązującej równanie $f(x) = 0$ metodą bisekcji. Metoda bisekcji (połowienia przedziału) korzysta z własności Darboux dla funkcji ciągłej f. Mówi ona o tym, że jeżeli funkcja f jest ciągła w przedziale $[a, b]$ i zmienia znak (tj. $f(a)f(b) < 0$), to posiada ona zero w (a, b). Schemat działania metody bisekcji jest następujący. Jeśli $f(a)f(b) < 0$, to obliczane jest $c = \frac{1}{2}(a + b)$ i sprawdzane czy $f(a)f(c) < 0$. Jeżeli tak, to f ma zero w przedziale $[a, c]$, wtedy pod b zostaje podstawione c. W przeciwnym razie zachodzi $f(c)f(b) < 0$, wtedy pod a zostaje podstawione c. W ten sposób powstaje nowy przedział $[a, b]$, który jest dwa razy krótszy i zawiera zero funkcji f. Można więc na nim ponownie zastosować powyższe operacje. Warto zauważyć, że zastosowanie takiego schematu prowadzi do znalezienia nie wszystkich, lecz jednego zera funkcji f. Oczywiście, w momencie kiedy $f(a)f(c) = 0$, to $f(c) = 0$ i miejsce zerowe f zostało znalezione. W praktyce jednak, pojawiają się błędy zaokrągleń i otrzymanie $f(c) = 0$ jest mało prawdopodobne, dlatego za kryterium zakończenia obliczeń należy przyjąć wartość odpowiednio bliską zeru w danej arytmetyce.

1.2 Rozwiązanie

Działanie metody bisekcji przedstawia Algorytm 1.

Dane:

`f`	–	funkcja $f(x)$ zadana jako anonimowa funkcja (ang. anonymous function),
`a, b`	–	końce przedziału początkowego,
`delta, epsilon`	–	dokładności obliczeń,

Wyniki:

`(r,v,it,err)`	–	czwórka, gdzie
`r`	–	przybliżenie pierwiastka równania $f(x) = 0$,
`v`	–	wartość $f(r)$,
`it`	–	liczba wykonanych iteracji,
`err`	–	sygnalizacja błędu
		0 - brak błędu
		1 - funkcja nie zmienia znaku w przedziale [a,b]

Warto zauważyć tutaj kilka rzeczy. Po pierwsze, punkt środkowy c obliczany jest za pomocą

Algorytm 1: Metoda bisekcji

```
mbisekcji(f, a, b, delta, epsilon)
    u ← f(a)
    v ← f(b)
    e ← b − a
    it ← 0
    if sign(u) = sign(v) then
        return err 1
    while e > epsilon do
        it ← it + 1
        e ← e/2
        c ← a + e
        w ← f(c)
        if |e| < delta or |w| < epsilon then
            return c, w, it, 0
        if sign(w) ≠ sign(u) then
            b ← c
            v ← w
        else
            a ← c
            u ← w
```

instrukcji $c \leftarrow a + (b - a)/2$, co jest lepsze z numerycznego punktu widzenia (dodanie do poprzedniej wartości drobnej poprawki). Wykonanie instrukcji $c \leftarrow (a+b)/2$ mogłoby spowodować, że w ekstremalnych przypadkach punkt c znalazłby się poza przedziałem $[a, b]$. Po drugie, aby pozbyć się zbędnego mnożenia przy sprawdzeniu $f(a)f(c) < 0$, które mogłoby spowodować nadmiar lub niedomiar, zmianę znaku funkcji zbadano za pomocą nierówności $sign(w) \neq sign(u)$. Po trzecie, program uwzględnia trzy warunki zakończenia obliczeń. Warunek $e > epsilon$ mówi o tym, kiedy jeszcze jest możliwa iteracja w danym przedziale. Oprócz tego obliczenia są przerywane kiedy błąd jest dostatecznie mały ($abs(e) < delta$) lub gdy $f(c)$ jest dostatecznie bliskie zeru ($abs(w) < epsilon$).

2 Metoda Newtona

2.1 Opis problemu

Napisanie funkcji rozwiązującej równanie $f(x) = 0$ metodą Newtona. Metoda Newtona (stycznych) znajdująca zera funkcji opiera się na *linearyzacji funkcji*, tj. zastąpieniu f funkcją liniową. Jest nią suma dwóch początkowych składników we wzorze Taylora dla f. Zazwyczaj metoda Newtona jest szybsza od metod bisekcji i siecznych, gdyż jest zbieżność jest kwadratowa. W momencie gdy przybliżenia tworzone metodą Newtona są dostatecznie bliskie pierwiastka, staje się ona tak szybko zbieżna, że kilka przybliżeń pozwala osiągnąć maksymalną dokładność. Wadą tej metody jest jednak to, że nie zawsze jest zbieżna, dlatego często stosuje się ją w kombinacji z jakąś wolniejszą metodą, która jest już zbieżna globalnie. Inną wadą może być również konieczność liczenia pochodnej funkcji.

2.2 Rozwiązanie

Działanie metody Newtona przedstawia Algorytm 2.

Dane:

`f, pf`	–	funkcja $f(x)$ oraz pochodna $f'(x)$ zadane jako anonimowe funkcje,
`x0`	–	przybliżenie początkowe,
`delta, epsilon`	–	dokładności obliczeń,
`maxit`	–	maksymalna dopuszczalna liczba iteracji,

Wyniki:

`(r,v,it,err)`	–	czwórka, gdzie
`r`	–	przybliżenie pierwiastka równania $f(x) = 0$,
`v`	–	wartość $f(r)$,
`it`	–	liczba wykonanych iteracji,
`err`	–	sygnalizacja błędu 0 - metoda zbieżna 1 - nie osiągnięto wymaganej dokładności w `maxit` iteracji 2 - pochodna bliska zeru

Na początku działania algorytmu sprawdzane są warunki natychmiastowego zakończenia, gdy wartość funkcji dla przybliżenia początkowego jest dostatecznie bliska zeru - zwracany jest wynik oraz kiedy pochodna jest bliska zeru - niemożliwe jest wtedy zastosowanie metody. Następnie dla zadanej maksymalnej liczby iteracji wyznaczane są kolejne przybliżenia zera funkcji, które są dane rekurencyjnym wzorem $x_{n+1} := x_n - \dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ wynikającym bezpośrednio z definicji metody. Obliczenia są kończone kiedy znalezione zero mieści się w dokładności, bądź też odległość kolejnych przybliżeń jest dostatecznie mała. W przypadku nieotrzymania wyniku w zadanej liczbie iteracji zwracany jest błąd.

3 Metoda siecznych

3.1 Opis problemu

Napisanie funkcji rozwiązującej równanie $f(x) = 0$ metodą siecznych.

3.2 Rozwiązanie

Działanie metody siecznych przedstawia Algorytm 3.

Dane:

`f`	–	funkcja $f(x)$ zadana jako anonimowa funkcja,
`x0, x1`	–	przybliżenia początkowe,
`delta, epsilon`	–	dokładności obliczeń,
`maxit`	–	maksymalna dopuszczalna liczba iteracji,

Wyniki:

`(r,v,it,err)`	–	czwórka, gdzie
`r`	–	przybliżenie pierwiastka równania $f(x) = 0$,
`v`	–	wartość $f(r)$,

`it` – liczba wykonanych iteracji,
`err` – sygnalizacja błędu
0 - metoda zbieżna
1 - nie osiągnięto wymaganej dokładności w `maxit` iteracji

4 Wyznaczanie pierwiastka równania $\sin x - (\frac{1}{2}x)^2 = 0$

4.1 Opis problemu

Wyznaczanie pierwiastka równania $\sin x = -(\frac{1}{2}x)^2$ z użyciem metod:

(i) bisekcji (na przedziale początkowym $[1.5, 2.0]$),
(ii) Newtona (dla przybliżenia początkowego $x_0 = 1.5$),
(iii) siecznych (dla przybliżeń początkowych $x_0 = 1.0, x_1 = 2.0$).

Dla wszystkich metod zastosowano parametry dokładności $\delta = \frac{1}{2}10^{-5}$ oraz $\epsilon = \frac{1}{2}10^{-5}$.

4.2 Rozwiązanie

Zaimplementowano funkcję $f(x) = \sin x - (\frac{1}{2}x)^2$ oraz jej pochodną $f'(x) = \cos x - \frac{1}{2}x$ (potrzebną do poprawnego działania metody Newtona) i za pomocą metod stworzonych w zadaniach 1 – 3 znaleziono szukane miejsca zerowe. Za maksymalną dopuszczalną liczbę iteracji przyjęto 32.

4.3 Wyniki

Wyniki działania metod przedstawia Tabela 4.

4.4 Wnioski

Powyższy przykład dobrze ukazuje różnicę w liczbie wykonanych iteracji dla poszczególnych metod. Metoda bisekcji potrzebowała aż szesnastu iteracji żeby znaleźć miejsce zerowe z podaną dokładnością, z kolei metoda Newtona i siecznych odpowiednio czterech i pięciu. Takie wyniki odzwierciedlają teoretyczną zbieżność tych metod. Metoda bisekcji posiada bowiem zbieżność liniową, metoda Newtona ma kwadratowy współczynnik zbieżności, a metoda siecznych zbiega nadliniowo (≈ 1.62). Analizując dane mogłoby się zdawać, że metoda bisekcji jest nie tylko metodą najwolniejszą, ale i najmniej dokładną, co jednak jest zbyt śmiałym wnioskiem. Bardziej można powiedzieć, że jest „najstabilniejsza” ze wszystkich metod, znalazła bowiem ona wartość nie tyle najbliższą zeru, co wskazanej dokładności (niewątpliwą zaletą jest również to, że jest ona zbieżna globalnie i o ile końce przedziału początkowego faktycznie będą miały różne znaki to zawsze zbiegnie do zera funkcji). Dzięki temu, że metody Newtona i siecznych zbiegały szybciej niż metoda bisekcji w tym wypadku osiągnęły większą dokładność i ostatecznie znalazły się bliżej rzeczywistego zera, jednak dla innych funkcji, czy choćby inaczej dobranych przedziałów, okaże się że nie zawsze tak jest.

5 Punkt przecięcia wykresów funkcji $y = 3x$ i $y = e^x$

5.1 Opis problemu

Znalezienie, przy użyciu metody bisekcji, wartości zmiennej x, dla której przecinają się wykresy funkcji $y = 3x$ oraz $y = e^x$.

Algorytm 2: Metoda Newtona

`mstycznych`(f, p_f, x_0, $delta$, $epsilon$, $maxit$)
  $v \leftarrow f(x_0)$
  if $|v| < epsilon$ **then**
    return $x_0, v, 0, 0$
  if $|p_f(x_0)| < epsilon$ **then**
    return err 2
  for $it \leftarrow 1$ **to** $maxit$ **do**
    $x_1 \leftarrow x_0 - (v/p_f(x_0))$
    $v \leftarrow f(x_1)$
    if $|x_1 - x_0| < delta$ ***or*** $|v| < epsilon$ **then**
      return $x_1, v, it, 0$
    $x_0 \leftarrow x_1$
  return err 1

Algorytm 3: Metoda siecznych

`msiecznych`(f, x_0, x_1, $delta$, $epsilon$, $maxit$)
  $f_{x_0} \leftarrow f(x_0)$
  $f_{x_1} \leftarrow f(x_1)$
  for $it \leftarrow 1$ **to** $maxit$ **do**
    if $|f_{x_0}| > |f_{x_1}|$ **then**
      $x_0 \leftrightarrow x_1$
      $f_{x_0} \leftrightarrow f_{x_1}$
    $s \leftarrow (x_1 - x_0)/(f_{x_1} - f_{x_0})$
    $x_1 \leftarrow x_0$
    $f_{x_1} \leftarrow f_{x_0}$
    $x_0 \leftarrow x_0 - (f_{x_0} \cdot s)$
    $f_{x_0} \leftarrow f(x_0)$
    if $|x_1 - x_0| < delta$ ***or*** $|f_{x_0}| < epsilon$ **then**
      return $x_0, f_{x_0}, it, 0$
  return err 1

5.2 Rozwiązanie

Łatwo zauważyć, że problem sprowadza się do rozwiązania równania $e^x - 3x = 0$, czyli znalezienia miejsc zerowych funkcji $f(x) = e^x - 3x$. W tym celu zaimplementowana została funkcja f, a także skorzystano z metody bisekcji stworzonej w zadaniu pierwszym. Jako dokładności obliczeń przyjęte zostały zadane $\delta = 10^{-4}$ oraz $\epsilon = 10^{-4}$. Przedziały początkowe wyznaczono w sposób eksperymentalny oparty na oszacowaniu wartości funkcji. W tym celu posłużono się wykresem przedstawionym na rysunku 1. Zostały wybrane przedziały $[0, 1]$ oraz $[1, 2]$.

5.3 Wyniki

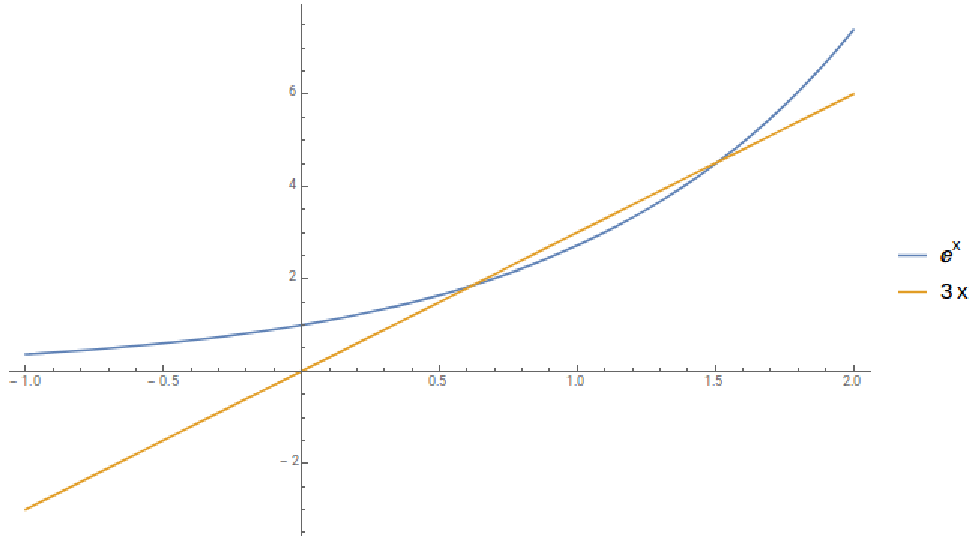
Otrzymane rozwiązania prezentuje Tabela 5. Znalezione punkty przecięcia to 0.619140625 i 1.5120849609375.

5.4 Wnioski

Głównym problemem w wyznaczeniu punktów przecięcia się wykresów funkcji $y = 3x$ i $y = e^x$ metodą bisekcji jest wybór przedziałów początkowych. Posiadając pewne umiejętności analitycz-

Metoda	Miejsce zerowe (x_0)	Wartość funkcji ($f(x_0)$)	Liczba iteracji	Błąd
Bisekcji	1.933 753 967 285 156 2	$-2.702\,768\,013\,840\,284\,3 \cdot 10^{-7}$	16	0
Newtona	1.933 753 779 789 742	$-2.242\,331\,631\,485\,683\,4 \cdot 10^{-8}$	4	0
Siecznych	1.933 753 940 501 514 5	$-2.348\,710\,312\,904\,955\,8 \cdot 10^{-7}$	5	0

Tabela 4: Miejsca zerowe funkcji $f(x) = \sin x - (\frac{1}{2}x)^2$ obliczone za pomocą danych metod.



Rysunek 1: Wykresy funkcji $3x$ oraz e^x wykonane w programie *Wolfram Alpha*

ne można spodziewać się obecności dwóch takich punktów w stosunkowo niewielkiej odległości od zera. Ciężej jednak szybko stwierdzić gdzie dokładnie należałoby odpowiednich przedziałów szukać. Uwagę zwraca fakt, że długość wybranych przedziałów jest niewielka, co może świadczyć o tym że do ich znalezienia była potrzebna dość dobra znajomość przebiegu funkcji $f(x) = e^x - 3x$ lub co najmniej kilka eksperymentów. W tym wypadku posłużono się wykresem, jednak ciężej byłoby znaleźć odpowiednie przedziały gdyby takiego narzędzia zabrakło. Kandydatem na przedział początkowy mógłby być przecież np. $[0, 2]$, na którego końcach funkcja nie zmienia znaku. Można jednak zauważyć, że przy rozsądnie dobranych przybliżeniach początkowych znajomość w miarę ogólnego przebiegu funkcji f pozwala dużo łatwiej zastosować metodę siecznych czy metodę Newtona, które w tym wypadku okazują się zbieżne.

6 Miejsce zerowe funkcji $f_1(x) = e^{1-x} - 1$ i $f_2(x) = xe^{-x}$

6.1 Opis problemu

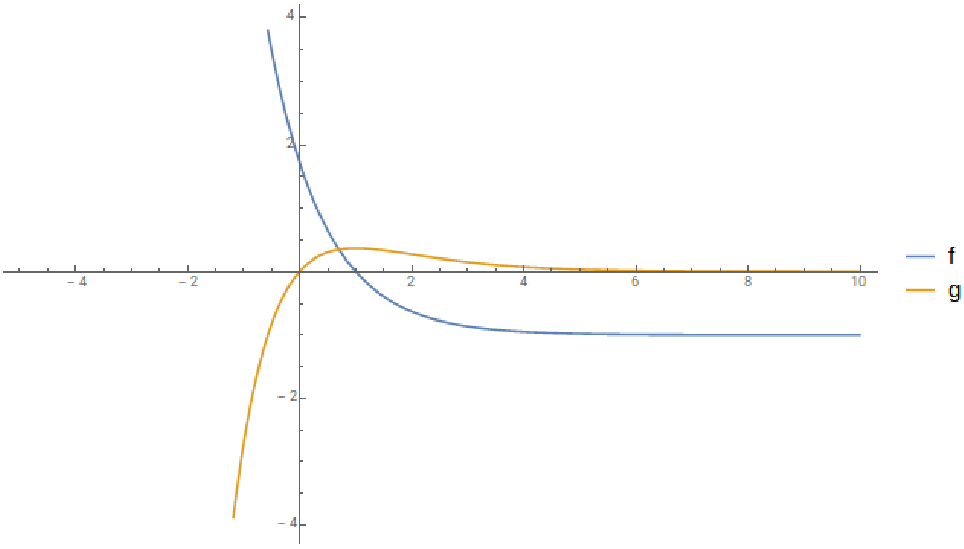
Znalezienie pierwiastków funkcji $f_1(x) = e^{1-x} - 1$ oraz $f_2(x) = xe^{-x}$ przy pomocy metod bisekcji, stycznych oraz siecznych z dokładnością obliczeń $\delta = 10^{-5}$ oraz $\epsilon = 10^{-5}$.

6.2 Rozwiązanie

Zaimplementowano podane funkcje oraz wyliczono ich pochodne (potrzebne w metodzie Newtona). W celu znalezienia pierwiastków zostały wykorzystane metody stworzone w zadaniach 1 – 3. Przeprowadzona została analiza funkcji f_1 i f_2, które zostały przedstawione na wykresie 2. Na tej podstawie wybrano odpowiednie parametry mające na celu ukazanie właściwości poszczególnych metod oraz przykładów ich złego stosowania.

	x_0	x_1
Przedział	$[0, 1]$	$[1, 2]$
Wartość	0.619140625	1.5120849609375
Niedokładność $\|f(x_i)\|$	$9.066320343276146 \cdot 10^{-5}$	$7.618578602741621 \cdot 10^{-5}$
Liczba iteracji	9	13

Tabela 5: Miejsca zerowe funkcji $f(x) = e^x - 3x$ obliczone za pomocą metody bisekcji.



Rysunek 2: Wykresy funkcji $f(x) = e^{1-x} - 1$ oraz $g(x) = xe^{-x}$ wykonane w programie *Wolfram Alpha*

6.3 Wyniki

Podczas analizy równania funkcji f_1 i f_2 niemal natychmiast nasuwają się poprawne rozwiązania – 1 dla f_1 oraz 0 dla f_2. Większą uwagę poświęcono jednak pewnym eksperymentom związanym z zastosowaniem metod, niż uzyskaniu tylko poprawnych wyników, i tak Tabela 6 zawiera wyniki działania metody bisekcji dla różnych przedziałów początkowych, Tabela 7 wyniki uzyskane za pomocą metody Newtona dla różnych przybliżeń początkowych x_0 i wreszcie Tabela 8 wyniki metody siecznych dla różnych przybliżeń x_0 i x_1.

6.4 Wnioski

Przedział	r	$f(r)$	Liczba iteracji
		f_1	
$[0.0, 1.5]$	1.000 007 629 394 531 2	$-7.629\,365\,427\,530\,565\,610^{-6}$	16
$[0.5, 3.0]$	0.999 992 370 605 468 8	$7.629\,423\,635\,080\,457 \cdot 10^{-6}$	16
$[-4.0, 4.0]$	1.0	0.0	3
$[0.0, 100.0]$	0.999 999 046 325 683 6	$9.536\,747\,711\,536\,009 \cdot 10^{-7}$	22
$[-10.0, 2000.0]$	1.000 001 803 040 504 5	$-1.803\,038\,878\,978\,036 \cdot 10^{-6}$	27
		f_2	
$[-0.5, 1.0]$	$-7.629\,394\,531\,25 \cdot 10^{-6}$	$-7.629\,452\,739\,132\,958 \cdot 10^{-6}$	16
$[-0.25, 1.5]$	$-7.629\,394\,531\,25 \cdot 10^{-6}$	$-7.629\,452\,739\,132\,958 \cdot 10^{-6}$	15
$[-1.0, 6.0]$	$-3.814\,697\,265\,625 \cdot 10^{-6}$	$-3.814\,711\,817\,567\,984 \cdot 10^{-6}$	18
$[-1.5, 100.0]$	49.25	$2.010\,958\,004\,139\,294 \cdot 10^{-20}$	1
$[-5.0, 1000.0]$	497.5	$4.318\,056\,675\,122\,884 \cdot 10^{-214}$	1

Tabela 6: Miejsca zerowe f_1 i f_2 obliczone za pomocą metody bisekcji.

x_0	r	$f(r)$	Liczba iteracji	Błąd
		f_1		
-1.0	0.999 992 265 477 659 4	$7.734\,552\,252\,003\,368 \cdot 10^{-6}$	5	0
0.0	0.999 998 435 889 210 1	$1.564\,112\,013\,019\,425\,3 \cdot 10^{-6}$	4	0
1.0	1.0	0.0	0	0
2.0	0.999 999 981 006 100 2	$1.899\,390\,000\,836\,831\,4 \cdot 10^{-8}$	5	0
5.0	0.999 999 642 709 568 2	$3.572\,904\,956\,339\,329 \cdot 10^{-7}$	54	0
7.0	0.999 999 948 416 536 2	$5.158\,346\,505\,496\,07 \cdot 10^{-8}$	401	0
8.0	—	—	—	1
13.0	—	—	—	2
		f_2		
-2.0	$-1.425\,500\,682\,806\,244 \cdot 10^{-9}$	$-1.425\,500\,684\,838\,296 \cdot 10^{-9}$	7	0
-1.0	$-3.064\,249\,341\,646\,176\,4 \cdot 10^{-7}$	$-3.064\,250\,280\,608\,723\,3 \cdot 10^{-7}$	5	0
0.0	0.0	0.0	0	0
0.5	$-3.064\,249\,341\,646\,176\,4 \cdot 10^{-7}$	$-3.064\,250\,280\,608\,723\,3 \cdot 10^{-7}$	5	0
1.0	—	—	—	2
2.0	14.398 662 765 680 003	$8.036\,415\,344\,217\,211 \cdot 10^{-6}$	10	0
5.0	15.194 283 983 439 15	$3.827\,247\,505\,782\,987 \cdot 10^{-6}$	9	0
100.0	100.0	$3.720\,075\,976\,020\,836\,3 \cdot 10^{-42}$	0	0

Tabela 7: Miejsca zerowe f_1 i f_2 obliczone za pomocą metody stycznych.

x_0	x_1	r	$f(r)$	Liczba iteracji	Błąd
			f_1		
-1.0	2.0	1.000 000 931 014 659 4	$-9.310\,142\,259\,355\,558 \cdot 10^{-7}$	7	0
0.5	3.0	0.999 999 880 105 412 6	$1.198\,945\,944\,747\,009\,7 \cdot 10^{-7}$	6	0
-3.0	4.0	0.999 992 473 479 983 3	$7.526\,548\,341\,019\,179 \cdot 10^{-6}$	1500	0
-2.0	6.0	5.229 263 398 675 002	$-0.985\,436\,886\,192\,525\,5$	5	0
10.0	100.0	—	—	—	1
			f_2		
-1.0	0.5	$3.201\,418\,966\,654\,486 \cdot 10^{-7}$	$3.201\,417\,941\,746\,310\,4 \cdot 10^{-7}$	7	0
-0.25	1.5	$5.662\,892\,187\,393\,383 \cdot 10^{-7}$	$5.662\,888\,980\,559\,498 \cdot 10^{-7}$	7	0
2.0	6.0	14.386 737 398 698 989	$8.126\,090\,442\,139\,71 \cdot 10^{-6}$	12	0
10.0	20.0	20.000 908 081 048 88	$4.118\,752\,554\,492\,817 \cdot 10^{-8}$	1	0
-2.0	100.0	100.0	$3.720\,075\,976\,020\,836\,3 \cdot 10^{-42}$	1	0

Tabela 8: Miejsca zerowe f_1 i f_2 obliczone za pomocą metody siecznych.