

Obliczenia naukowe

Prowadzący: dr hab. Paweł Zieliński

wtorek TN 7³⁰

Sprawozdanie 3

Weronika Jasiak

236733

1. Zadanie 1

1.1. Opis problemu

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

1.2. Rozwiązanie

Algorytm 1: Metoda bisekcji

Input: $(f, a, b, \delta, \varepsilon)$ gdzie:

- f - funkcja $f(x)$ zadana jako anonimowa funkcja
- a, b - końce przedziału początkowego
- δ, ε - dokładności obliczeń

Output: (r, v, it, err) , 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 $[a, b]$

MBISEKCJI $(a, b, \delta, \varepsilon)$

1. $r \leftarrow 0$
 2. $v \leftarrow 0$
 3. $it \leftarrow 0$
 4. $u \leftarrow f(a)$
 5. $w \leftarrow f(b)$
 6. $e \leftarrow b - a$
 7. **if** $\text{sgn}(u) = \text{sgn}(v)$
 8. **then return** $(r, v, it, 1)$
 9. **while** $e > \varepsilon$
 10. **do** $it \leftarrow it + 1$
 11. $e \leftarrow e / 2$
 12. $r \leftarrow a + e$
 13. $v \leftarrow f(r)$
 14. **if** $|e| < \delta$ **or** $|v| < \varepsilon$
 15. **then return** $(r, v, it, 0)$
 16. **if** $\text{sgn}(v) \neq \text{sgn}(u)$
 17. **then** $b \leftarrow r$
 18. $w \leftarrow v$
 19. **else** $a \leftarrow r$
 20. $u \leftarrow v$
 21. **return** $(r, v, it, 0)$
-

Niektóre fragmenty algorytmu bisekcji podane powyżej wymagają dodatkowego komentarza. Po pierwsze, punkt środkowy zazwyczaj obliczany jest ze wzoru $c = \frac{(a+b)}{2}$, jednak w tym przypadku został zmieniony na instrukcję $c \leftarrow a + \frac{(b-a)}{2}$. W obliczeniach numerycznych najlepiej obliczać nową wielkość poprzez dodanie do poprzedniej drobnej poprawki. Wynika to z tego, że w pewnych przypadkach skorzystanie z podstawowego wzoru może doprowadzić do otrzymania punktu środkowego, który będzie się znajdował poza przedziałem $[a, b]$. Po drugie, badając zmianę znaku wartości funkcji nie należy korzystać z nierówności $u * v < 0$, ponieważ wykonując dodatkowe działanie można doprowadzić do niedomiaru lub nadmiaru. Zamiast tego należy użyć nierówności $\text{sgn}(u) \neq \text{sgn}(v)$, co ograniczy możliwość wystąpienia niepożądanych efektów. Po trzecie, e będące oszacowaniem błędu pozwala w precyzyjny sposób określić warunek zakończenia obliczeń przez funkcję, umożliwia to

rozpatrzenie nawet patologicznych przypadków. Warunek $e > \varepsilon$ sprawdza czy w zadanym przedziale istnieje możliwość wykonania kolejnej iteracji, a warunki $|e| < \delta$ or $|v| < \varepsilon$ pozwalają oszacować czy uzyskano już dostatecznie mały błąd lub czy wartość funkcji w punkcie r jest dostatecznie bliska zeru.

2. Zadanie 2

2.1. Opis problemu

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

2.2. Rozwiązanie

Algorytm 2: Metoda Newtona

Input: (f, pf, x_0 , δ , ε , maxit) gdzie:

f, pf - funkcja $f(x)$ oraz pochodna $f'(x)$ zadane jako anonimowe funkcje

x_0 - przybliżenie początkowe

δ , ε - dokładności obliczeń

maxit - maksymalna dopuszczalna liczba iteracji

Output: (r, v, it, err), 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

MSTYCZNYCH (f, pf, x_0 , δ , ε , maxit)

1. $r \leftarrow x_0$

2. $v \leftarrow f(r)$

3. $it \leftarrow 0$

4. **if** $|v| < \varepsilon$

5. **then return** (r, v, it, 2)

6. **for** $it \leftarrow 1$ **to** maxit

7. **do** $x_1 \leftarrow r - (v / pf(r))$

8. $v \leftarrow f(x_1)$

9. **if** $|x_1 - r| < \delta$ or $|v| < \varepsilon$

10. **then return** (r, v, it, 0)

11. $r \leftarrow x$

12. **return** (r, v, it, 1)

3. Zadanie 3

3.1. Opis problemu

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

3.2. Rozwiązanie

Algorytm 3: Metoda siecznych

Input: $(f, x_0, x_1, \delta, \varepsilon, \text{maxit})$ gdzie:

f - funkcja $f(x)$ zadana jako anonimowa funkcja
 x_0, x_1 - przybliżenia początkowe
 δ, ε - dokładności obliczeń
 maxit - maksymalna dopuszczalna liczba iteracji

Output: $(r, v, \text{it}, \text{err})$, 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

MSIECZNYCH $(f, x_0, x_1, \delta, \varepsilon, \text{maxit})$

```
1.  $r \leftarrow x_0$ 
2.  $u \leftarrow x_1$ 
3.  $v \leftarrow f(r)$ 
4.  $w \leftarrow f(u)$ 
5.  $\text{it} \leftarrow 0$ 
6. for  $\text{it} \leftarrow 1$  to  $\text{maxit}$ 
7.   do  $x_1 \leftarrow r - (v / pf(r))$ 
8.     if  $v > w$ 
9.       then  $\text{exchange } r \leftrightarrow u$ 
10.         $\text{exchange } v \leftrightarrow w$ 
11.    $s \leftarrow (u - r) / (w - v)$ 
12.    $u \leftarrow r$ 
13.    $w \leftarrow v$ 
14.    $r \leftarrow r - v * s$ 
15.    $v \leftarrow f(r)$ 
16.   if  $|v| < \varepsilon$  or  $|u - r| < \delta$ 
17.     then return  $(r, v, \text{it}, 0)$ 
18. return  $(r, v, \text{it}, 1)$ 
```

Powyższy algorytm prezentuje metodę siecznych, w której to wykorzystano funkcję *exchange*, ma ona na celu przestawienie końców przedziału a i b , jeśli wymaga tego utrzymanie nierówności $|f(r)| \leq |f(u)|$. Dzięki temu, od drugiego kroku włącznie wartości bezwzględne w punktach x_n nie rosną.

4. Zadanie 4

4.1. Opis problemu

Wykorzystując wcześniej zaimplementowane metody wyznaczyć pierwiastek równania $\sin x - \left(\frac{1}{2}x\right)^2 = 0$ dla poniższych danych:

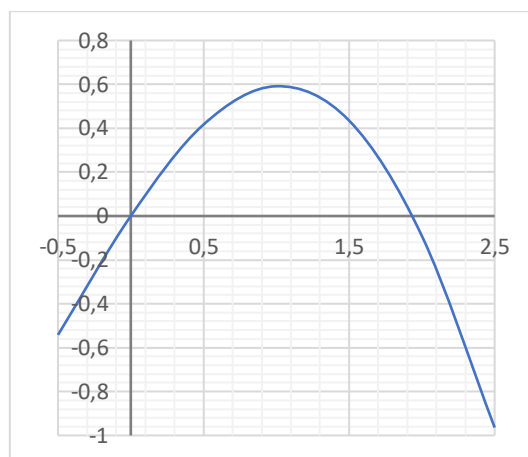
- metoda bisekcji z przedziałem początkowym $[1.5, 2]$ i $\delta = \frac{1}{2}10^{-5}$, $\varepsilon = \frac{1}{2}10^{-5}$,
- metoda Newtona z przybliżeniem początkowym $x_0 = 1.5$ i $\delta = \frac{1}{2}10^{-5}$, $\varepsilon = \frac{1}{2}10^{-5}$,
- metoda siecznych z przybliżeniem początkowym $x_0 = 1$, $x_1 = 2$ i $\delta = \frac{1}{2}10^{-5}$, $\varepsilon = \frac{1}{2}10^{-5}$.

4.2. Rozwiązanie

Korzystając z metod zaimplementowanych na potrzeby zadań 1-3 obliczono pierwiastki funkcji $f(x) = \sin x - \left(\frac{1}{2}x\right)^2$, której pochodną przedstawia funkcja $f'(x) = \cos x - \frac{1}{2}x$ dla zadanych danych.

4.3. Wyniki

Dla poszczególnych metod otrzymano następujące wyniki (Wykres 1., Tabela 1.)



Wykres 1. Wykres funkcji $f(x) = \sin x - \left(\frac{1}{2}x\right)^2$

metoda	x_0	$f(x_0)$	liczba iteracji
bisekcji	1.9337539672851562	$-2.7027680138402843 * 10^{-7}$	16
Newtona	1.933930573929843	$-2.2423316314856834 * 10^{-8}$	4
siecznych	1.9337509005356321	$3.783706985283075 * 10^{-6}$	4
Wolfram Alpha	1.9337537628270212533		

Tabela 1. Wyniki otrzymane dla $\sin x - \left(\frac{1}{2}x\right)^2 = 0$ oraz wcześniej zadanych danych

4.4. Wnioski

Dokonując porównania trzech metod - bisekcji, Newtona oraz siecznych pierwszą rzeczą, która zwraca na siebie uwagę jest różnica w liczbie wykonanych iteracji potrzebnych do wyznaczenia pierwiastków równania. Funkcja zaimplementowana dla metody bisekcji potrzebowała ich najwięcej, aby uzyskać wynik z wcześniej określoną dokładnością. Natomiast dwie pozostałe metody wykonały czterokrotnie mniej iteracji. Badając teoretyczną zbieżność wyżej wymienionych metod otrzymujemy następujące rezultaty: metoda Newtona jest zbieżna kwadratowo, natomiast metoda siecznych jest zbieżna nadlinowo, a metoda bisekcji jest zbieżna liniowo. Zatem uzyskane wyniki znajdują potwierdzenie również w teorii. Można więc wyciągnąć wnioski, iż trzecia z metod jest najwolniejsza i najmniej dokładna, jednak bardziej trafne jest stwierdzenie, że metoda bisekcji jest najbliższa zadanej dokładności. Pozostałe dwie metody zbiegały szybciej, co przełożyło się na większą dokładność i obliczenie pierwiastka, który jest najbliższy rzeczywistości. Gdy zmienimy funkcję, przedział lub dokładność możemy uzyskać odmienne rezultaty.

5. Zadanie 5

5.1. Opis problemu

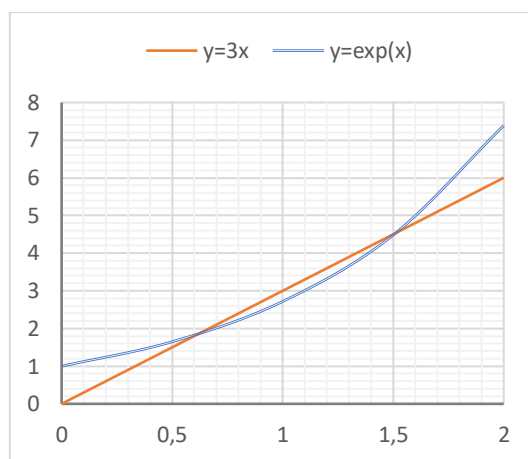
Wyznaczenie przy pomocy metody bisekcji wartości zmiennej x , dla której przecinają się wykresy funkcji $y = 3x$ i $y = e^x$ z dokładnością obliczeń $\delta = 10^{-4}$, $\varepsilon = 10^{-4}$.

5.2. Rozwiązanie

W celu rozwiązania zadania skorzystano z metody bisekcji zaimplementowanej na potrzeby zadania 1. Aby wyznaczyć punkt przecięcia dwóch funkcji należy znaleźć taki punkt, w którym funkcje przyjmują tę samą wartość dla tego samego argumentu:

$$\begin{cases} y = 3x \\ y = e^x \end{cases} \rightarrow 3x = e^x \rightarrow 3x - e^x = 0.$$

Wyznaczając przedziały początkowe należy sprawdzić przebieg obu funkcji, którego graficzna wizualizacja znajduje się poniżej.



Wykres 2. Wykres funkcji $y = 3x$ i $y = e^x$.

5.3. Wyniki

Dla metody bisekcji otrzymano następujące wyniki (Tabela 2., Tabela 3.).

przedział	x	$f(x)$	liczba iteracji
[0.0, 1.0]	0.619140625	$9.066320343276146 \cdot 10^{-5}$	9
[1.0, 2.0]	1.5120849609375	$7.618578602741621 \cdot 10^{-5}$	13

Tabela 2. Wyniki otrzymane dla funkcji $f(x) = 3x - e^x$ oraz wcześniej zadanych danych przy wykorzystaniu metody bisekcji

x	0.6190612867359451122
x	1.5121345516578424739

Tabela 3. Wyniki otrzymane dla funkcji $f(x) = 3x - e^x$ oraz wcześniej zadanych danych, obliczone przy pomocy Wolfram Alpha

5.4. Wnioski

Dobór przedziału początkowego jest bardzo istotny przy wyznaczaniu pierwiastków funkcji metodą bisekcji. Wywołanie funkcji dla przedziału $[0.0, 2.0]$ zwróci kod błędu $errr = 1$ oznaczający brak zmiany znaku funkcji w zadanym przedziale. Jednak gdy ten przedział zostanie rozbity na dwa podprzedziały - $[0.0, 1.0]$ i $[1.0, 2.0]$ nie zostanie zwrócony błąd. Wykres funkcji umożliwia w prosty sposób wyznaczenie konkretnych zakresów jednak, gdyby taka opcja nie byłaby dostępna, to znacznie utrudniłoby określenie przedziałów. Należałoby wtedy wykonać szereg eksperymentów lub poznać dokładny przebieg zadanej funkcji.

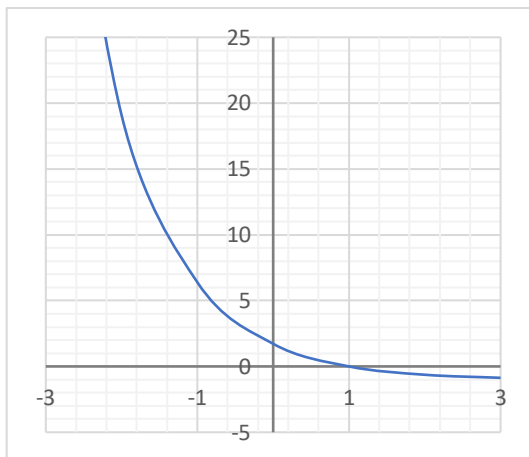
6. Zadanie 6

6.1. Opis problemu

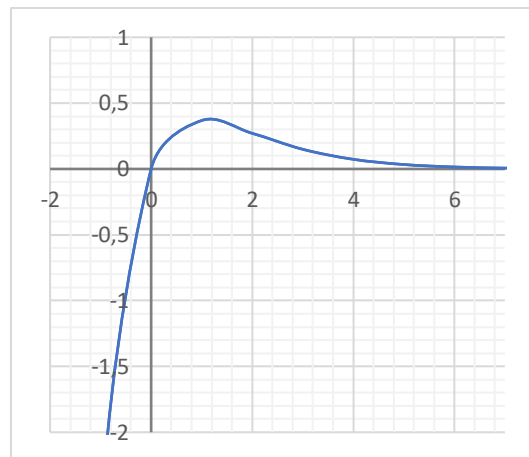
Znalezienie miejsc zerowych funkcji $f_1(x) = e^{1-x} - 1$ oraz $f_2(x) = xe^{-x}$ przy pomocy metod: bisekcji, Newtona i siecznych z dokładnością obliczeń $\delta = 10^{-5}$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Należy zadbać o dobór odpowiedniego przedziału i przybliżenia początkowego.

6.2. Rozwiązanie

Korzystając z metod zaimplementowanych na potrzeby zadań 1-3 wyznaczono miejsca zerowe funkcji $f_1(x) = e^{1-x} - 1$ oraz $f_2(x) = xe^{-x}$ zadaną dokładnością obliczeń. Wyznaczając odpowiednie przedziały i przybliżenia skorzystano z interpretacji graficznej funkcji.



a) $f_1(x) = e^{1-x} - 1$



b) $f_2(x) = xe^{-x}$

Wykres 3. Wykresy funkcji

6.3. Wyniki

Dla wcześniej zaimplementowanych metod otrzymano następujące wyniki (Tabela 4., Tabela 5.).

metoda	dane	x	$f(x)$	liczba iteracji
bisekcji	[0.0, 2.0]	1.0	0.0	1
bisekcji	[0.1, 1.2]	0.9999938964843748	$6.103534251789 * 10^{-6}$	14
bisekcji	[-0.1, 1.4]	1.000006103515625	$-6.103496998477453 * 10^{-6}$	14
bisekcji	[0.0, 150.0]	0.9999990463256836	$9.536747711536009e * 10^{-7}$	21
bisekcji	[-3.0, 3.0]	1.0000076293945312	$-7.6293654275305656 * 10^{-6}$	18
bisekcji	[0.5, 1.5]	1.0	0.0	1
Newtona	10.0	NaN	NaN	10000000
Newtona	0.3	0.9998368817969892	$1.330305066105097 * 10^{-8}$	4
Newtona	1.0	1.0	0.0	0
siecznych	20.0, 30.0	30.0	-0.999999999997456	2
siecznych	-0.4, 1.3	1.0000026160714057	$-2.6160679837961 * 10^{-6}$	7
siecznych	-2.0, 2.0	1.0000063854903036	$-6.385469916381226 * 10^{-6}$	23
siecznych	0.5, 1.5	10000036016822276	$-3.601675741538024 * 10^{-6}$	9

Tabela 4. Wyniki uzyskane dla funkcji $f_1(x) = e^{1-x} - 1$

metoda	dane	x	$f(x)$	liczba iteracji
bisekcji	$[-1.0, 1.0]$	0.0	0.0	1
bisekcji	$[-0.4, 0.7]$	$-4.5776367187399074 * 10^{-6}$	$-4.577657673545798 * 10^{-6}$	16
bisekcji	$[-0.5, 0.5]$	0.0	0.0	1
Newtona	3.0	13.708750863460901	$5.594878975694858 * 10^{-6}$	10
Newtona	0.4	-0.002984204697790982	$-8.879059818213929 * 10^{-6}$	4
Newtona	-0.25	-0.0023809523809523794	$-5.655500822785036 * 10^{-6}$	3
siecznych	5.0, 10.0	14.836777722716038	$5.3432918524983584 * 10^{-6}$	7
siecznych	-1.0, 0.3	$9.44134425373555 * 10^{-6}$	$9.441255115175028 * 10^{-6}$	23
siecznych	10.0, 20.0	20.00090808104888	$4.118752554492817 * 10^{-8}$	1
siecznych	-0.5, 0.5	$9.199793768455145 * 10^{-6}$	$9.199709132639079 * 10^{-6}$	12

Tabela 5. Wyniki uzyskane dla funkcji $f_2(x) = xe^{-x}$

6.4. Wnioski

Metoda bisekcji niezależnie od przesunięć przedziału względem pierwiastka funkcji wylicza wynik w tempie zależnym od wielkości przedziału. Wybranie takiego przedziału, w którym szukany pierwiastek leży dokładnie po środku powoduje otrzymanie dokładnego rozwiązania. W przypadku funkcji $f_1(x) = e^{1-x} - 1$ metoda ta jest zbieżna również dla przedziałów o dużym zakresie, jednak powoduje to wykonanie większej ilości iteracji.

Metoda Newtona może powodować przedwczesne zakończenie działania algorytmu, gdy w nieodpowiedni sposób zostanie dobrane przybliżenie początkowe. Wartość będzie wtedy dostatecznie bliska zeru pomimo, że będzie ona bardzo odległa od rzeczywistego pierwiastka funkcji. Metoda ta zwraca jednak rozwiązanie wykonując najmniejszą liczbę iteracji, zatem najlepiej z niej skorzystać gdy kluczem jest szybkość. Z kolei kolejne ograniczenie stanowi konieczność wyliczenia pochodnej funkcji.

Metoda siecznych przy wybranej zbyt dużej wartości przybliżeń wykonywała działania na bliskich sobie wartościach, co powodowało szybkie zakończenie działania algorytmu z powodu osiągnięcia założonej precyzji. Metoda ta dla przybliżeń początkowych, które są bardzo odległe od faktycznego pierwiastka nie potrafi zwrócić zera rzeczywistego.

Zarówno metoda siecznych jak i Newtona zależne są od przybliżenia początkowego, jeśli jest ono źle dobrane może spowodować zwrócenie pierwiastka, który nie jest miejscem zerowym. Spowodowane jest to wartością funkcji, która jest mniejsza od zadanej dokładności.