Obliczenia Naukowe - L3

Piotr Maciejończyk

15 listopada 2023

1 Metoda bisekcji (połowienia)

Celem zadania było napisanie w języku Julia funkcji rozwiązującej równanie $f(x) = 0$ metodą bisekcji. Poniżej znajduje się opis tej metody:

1. **Wybór przedziału:** Wybierz początkowy przedział $[a, b]$, gdzie $f(a) \cdot f(b) < 0$.
2. **Obliczenie środka przedziału:** Oblicz środek przedziału jako $\frac{a+b}{2}$.
3. **Sprawdzenie znaku funkcji:** Oblicz $f(c)$, gdzie c to środek przedziału. Jeśli $f(c)$ i $f(a)$ mają przeciwne znaki, zastąp b przez c, w przeciwnym razie zastąp a przez c.
4. **Zmiana przedziału:** Powtórz proces w nowym przedziale zawierającym środek przedziału.
5. **Powtarzanie procesu:** Powtarzaj kroki 2-4 do uzyskania wystarczająco małego przedziału.

Powyższy opis jest matematycznie poprawny, lecz należy wziąć pod uwagę ograniczoną precyzję obliczeń komputera i odpowiednio zmodyfikować sposób obliczeń pewnych parametrów, np. środka przedziału i nie stosować do jego kalkulacji wzoru $\frac{a+b}{2}$. Moją implementację algorytmu bazowałem na poniższym pseudokodzie:

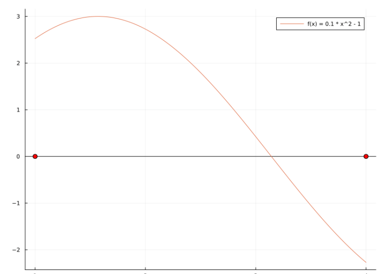
Algorithm 1 Metoda Bisekcji

```
function BISECTION(f, a, b, δ, ϵ)
    u ← f(a)
    v ← f(b)
    e ← b − a
    it ← 0
    error ← 0
    if sgn(u) = sgn(v) then
        error ← 1
        return a, u, it, error
    end if
    while true do
        it ← it + 1
        e ← e/2
        c ← a + e
        w ← f(c)
        if |e| < δ or |w| < ϵ then
            return c, w, it, error
        end if
        if sgn(w) ≠ sgn(u) then
            b ← c
            v ← w
        else
            a ← c
            u ← w
        end if
    end while
end function
```

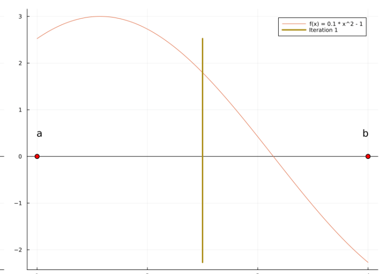
Jak można zauważyć powyżej, w funkcji obliczającej równanie $f(x) = 0$ metodą bisekcji, środek przedziału nie jest wyliczany ze średniej arytmetycznej parametrów a i b. Gdyby zaimplementować tę metodę w tę sposób, to z racji na ograniczoną precyzję obliczeń mogłoby dojść do sytuacji, w której $\frac{a+b}{2} \notin [a, b]$. Zatem lepszym sposobem jest dodanie do początku przedziału połowy jego długości za pomocą parametru $e = \frac{b-a}{2}$.

Kolejnym usprawnieniem jest zmiana sposobu sprawdzania znaku funkcji w przedziale. Stosowanie formuły $f(a) \cdot f(b) < 0$ może doprowadzić do problemu z under- lub overflowem. W ograniczonej precyzji, wykonywanie mnożenia na liczbach może prowadzić również do zaokrągleń, co znacząco może wpłynąć na wynik. Korzystanie z funkcji *signum* jest bezpieczniejsze i nie wprowadza błędów do obliczeń.

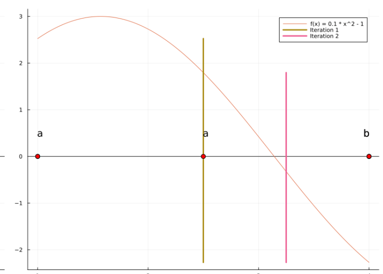
W celu lepszego zobrazowania działania powyższej metody stworzyłem wizualizację pierwszych kilku jej iteracji:



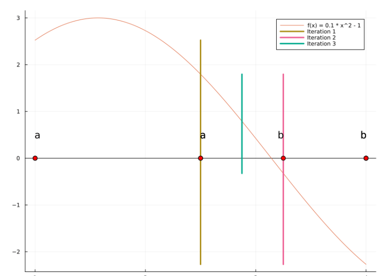
(a) Iteracja 0



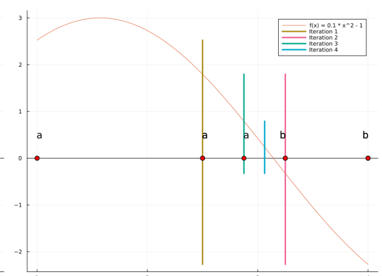
(b) Iteracja 1



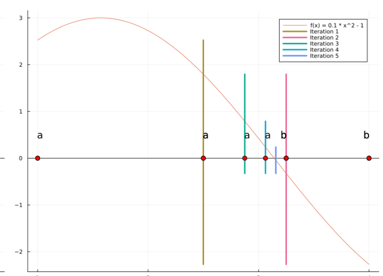
(c) Iteracja 2



(d) Iteracja 3



(e) Iteracja 4



(f) Iteracja 5

Rysunek 1: Wizualizacja działania metody bisekcji

2 Metoda Newtona (stycznych)

Metoda Newtona, znana również jako metoda stycznych, jest numeryczną techniką znajdowania przybliżonych miejsc zerowych funkcji $f(x) = 0$. Musi ona spełniać poniższe założenia:

$$f \in C^2[a, b] \text{ oraz } f'(r) \neq 0.$$

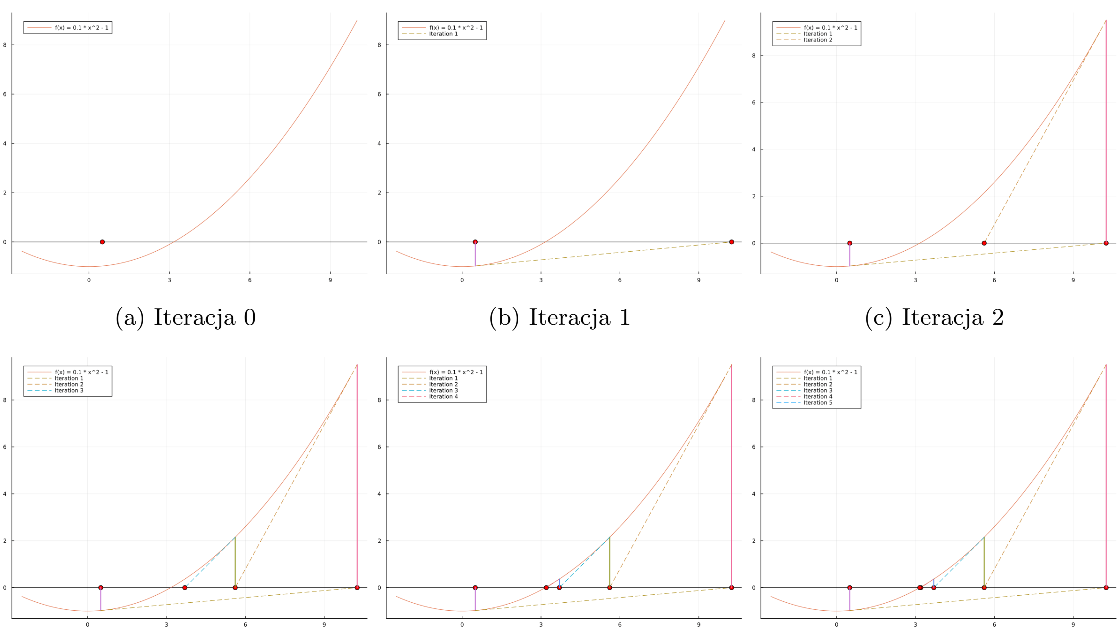
W skrócie, polega ona na wykonywaniu poniższych kroków.

1. Wybierz początkowy punkt przybliżenia x_0.
2. Oblicz dla tego punktu wartość funkcji $f(x_0)$
3. Oblicz pochodną funkcji w tym punkcie $f'(x_0)$.
4. Wykonaj iteracje, korzystając ze wzoru:

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

5. Powtarzaj krok 4, aż uzyskasz dostatecznie dokładne przybliżenie miejsca zerowego.

Innym sposobem na zrozumienie metody Newtona jest jej wizualizacja, która znajduje się poniżej:



(a) Iteracja 0 (b) Iteracja 1 (c) Iteracja 2

(d) Iteracja 3 (e) Iteracja 4 (f) Iteracja 5

Rysunek 2: Wizualizacja działania metody Newtona

Jak można zauważyć w Iteracji 0 na początku dobieramy punkt przybliżenia x_n. Następnie, obliczamy pochodną funkcji w tym punkcie. Miejscem przecięcia tej pochodnej z osią X jest nowo otrzymane przybliżenie x_{n+1} (Iteracja 1). W dalszych krokach iteracyjnie dobieramy w ten sposób nowe przybliżenia pierwiastka funkcji f.

Metoda Newtona jest skuteczna, gdy początkowe przybliżenie x_0 jest dostatecznie bliskie rzeczywistego miejsca zerowego i funkcja $f(x)$ oraz jej pochodna $f'(x)$ są dostępne i ciągłe w okolicy miejsca zerowego.

Moją implementację tej metody oparłem na poniższym pseudokodzie:

Algorithm 2 Metoda Newtona

```
function NEWTON(f, f', x0, δ, ϵ, M)
    v ← f(x0)
    error ← 0
    if |v| < epsilon then
        return x0, v, 0, error
    end if
    for k ← 1 to M do
        df = f'(x0)
        if |df| < epsilon then
            error ← 2
            return x0, v, k, error
        end if
        x1 ← x0 − v/df
        v ← f(x1)
        if |x1 − x0| < δ or |v| < ϵ then
            return x0, v, k, error
        end if
        x0 ← x1
    end for
    error ← 1
    return x0, v, M, error
end function
```

Trzeba pamiętać, że w tej metodzie pochodna funkcji zbliżająca się do zera w punkcie x_n oznacza tworzenie się prostej niemalże poziomej do osi X. Może to skutkować punktem przybliżenia znajdującym się bardzo daleko od szukanego przez nas miejsca zerowego funkcji.

Po znalezieniu takiego odległego punktu metoda może zacząć 'błądzić' i zwracać przybliżenia dalekie od rzeczywistej odpowiedzi. Zatem warto jest pamiętać o dodaniu parametru określającego maksymalną dozwoloną liczbę iteracji.

3 Metoda siecznych

Metoda siecznych to numeryczna technika znajdowania przybliżonych miejsc zerowych funkcji. Jest podobna do metody Newtona, ale zamiast wykorzystywać pochodną, korzysta z ilorazu różnicowego. Poniżej znajduje się uproszczony algorytm do obliczania kolejnych przybliżeń miejsca zerowego za pomocą tej metody:

1. Wybierz dwa początkowe przybliżenia x_0 i x_1.
2. Oblicz dla tych punktów wartości funkcji $f(x_0)$ oraz $f(x_1)$
3. Wykonuj iteracje, korzystając ze wzoru:

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

4. Powtarzaj krok 3, aż uzyskasz dostatecznie dokładne przybliżenie miejsca zerowego.

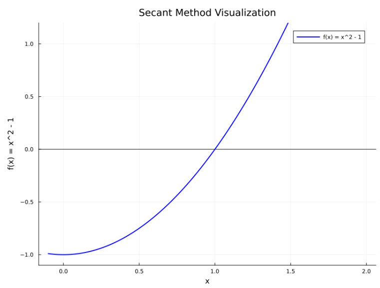
Metoda siecznych nie wymaga obliczania pochodnej funkcji, co czyni ją bardziej elastyczną w niektórych przypadkach. Jednakże, dla skuteczności metody, konieczne jest, aby początkowe punkty x_0 i x_1 były odpowiednio bliskie rzeczywistego miejsca zerowego. W przeciwnym wypadku metoda siecznych zachowuje się podobnie do metody Newtona i dobranie punktów zbyt odległych od rzeczywistego pierwiastka powoduje rozbieganie się kolejnych przybliżeń.

Poniżej znajduje się pseudokod mojej implementacji metody siecznych:

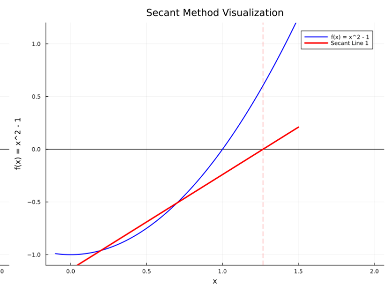
Algorithm 3 Metoda Siecznych

```
function SECANT(f, x0, x1, δ, ϵ, M)
    f0 ← f(x0)
    f1 ← f(x1)
    error ← 0
    for k ← 1 to M do
        if |f0| > |f1| then
            x0 ↔ x1
            f0 ↔ f1
        end if
        s = (x1 − x0)/(f1 − f0)
        x1 ← x0
        f1 ← f0
        x0 ← a − f0 · s
        f0 ← a
        if |x1 − x0| < δ or |f0| < ϵ then
            return x0, f0, k, error
        end if
    end for
    error ← 1
    return x0, f0, M, error
end function
```

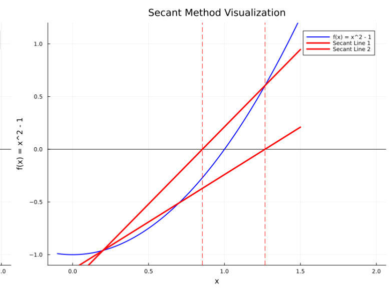
W celu lepszego zrozumienia metody siecznych, należy posłużyć się jej wizualizacją, którą umieściłem poniżej:



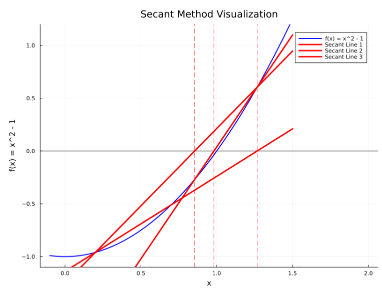
(a) Iteracja 0



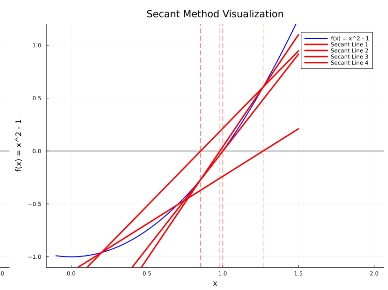
(b) Iteracja 1



(c) Iteracja 2



(d) Iteracja 3



(e) Iteracja 4

Rysunek 3: Wizualizacja działania metody siecznych

W Iteracji 1 wybieramy dwa początkowe przybliżenia x_0 oraz x_1, a następnie tworzymy prostą przechodzącą przez punkty $f(x_0)$ i $f(x_1)$. Miejscem przecięcia tej prostej oraz osi X nazywamy kolejną aproksymację szukanego przez nas miejsca zerowego.

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

W tym zadaniu należało wyznaczyć pierwiastki równania (1) posługując się trzema powyżej omówionymi metodami. W treści zadania zostały podane także dokładne parametry, którymi trzeba było te metody wywołać, a mianowicie:

1. **Metoda bisekcji:** $a = 1.5$ oraz $b = 2.0$
2. **Metoda Newtona:** $x_0 = 1.5$
3. **Metoda siecznych:** $x_0 = 1.0$ oraz $x_1 = 2.0$
4. Dodatkowo, dla wszystkich tych wywołań przyjmujemy $\delta = \frac{1}{2} \cdot 10^{-5}$ oraz $\epsilon = \frac{1}{2} \cdot 10^{-5}$

W celu obliczenia pierwiastka równania (1) za pomocą metody Newtona trzeba było również obliczyć jej pochodną, która wynosi: $cos(x) - \frac{1}{2}x$. Wyniki prezentują się następująco:

	Metoda bisekcji	Metoda Newtona	Metoda siecznych
r	1.9337539672851562	1.933753779789742	1.933753644474301
v	-2.7027680138402843e-7	-2.2423316314856834e-8	1.564525129449379e-7
it	16	4	4
err	0	0	0

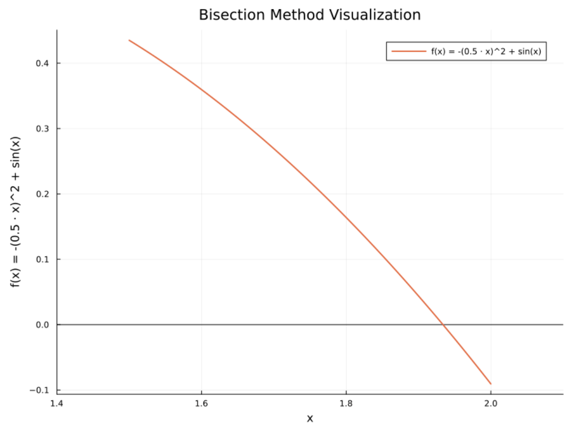
Tabela 1: Wyniki dla trzech metod iteracyjnych wyznaczania pierwiastka równania

Jak można zauważyć w Tabeli 1., wszystkie trzy metody zwróciły niemal identyczne przybliżenia (są one takie same do 6. miejsca po przecinku). W celu sprawdzenia prawidłowości otrzymanych wyników porównałem je z wartością obliczoną przez Wolfram Alpha, która wynosi: **1.93375**. Zatem wszystkie te metody bardzo dokładnie obliczyły jeden z pierwiastków równania (1).

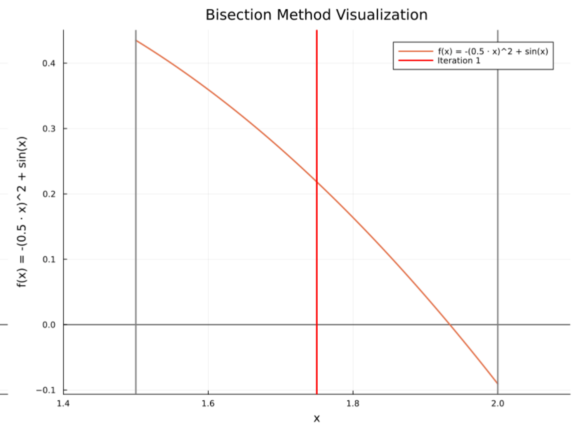
Warte podkreślenia jest liczba iteracji każdej z metod. Metoda Newtona oraz metoda siecznych potrzebowały na wykonanie zadania jedynie 4 iteracji, podczas gdy metoda bisekcji wykonała je w aż 16 iteracji. Potwierdza to, że metoda Newtona i siecznych mają większy wykładnik zbieżności od metody bisekcji, co znacząco wpływa na szybkość otrzymywania wyniku.

Trzeba jednak pamiętać, że każda z metod ma swoje wady i warto stosować je hybrydowo w zależności od konkretnego problemu i jego skomplikowania, aby zoptymalizować proces obliczania pierwiastków.

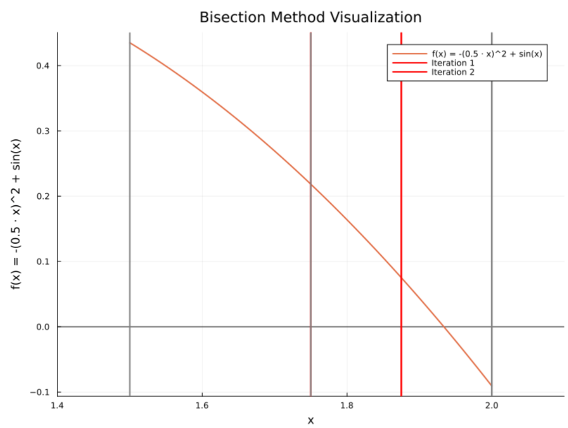
W celu lepszego zobrazowania moich wyników poniżej umieściłem graficzne iteracje wszystkich metod dla tego przykładu:



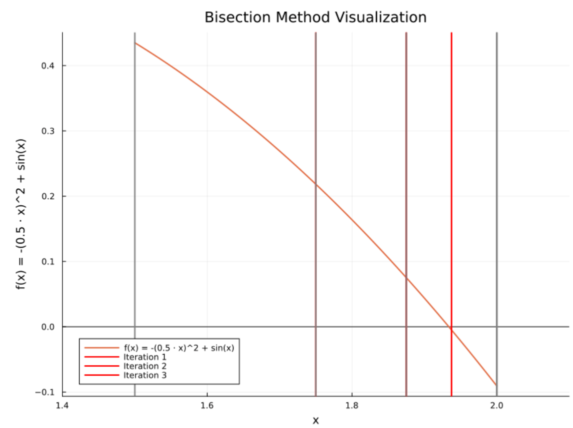
(a) Iteracja 0



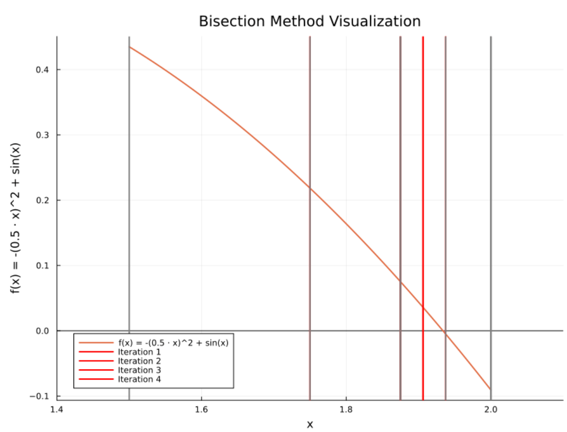
(b) Iteracja 1



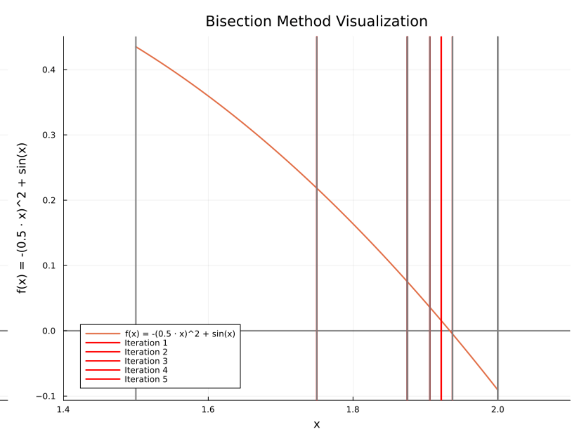
(c) Iteracja 2



(d) Iteracja 3

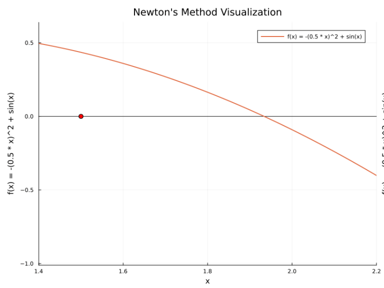


(e) Iteracja 4

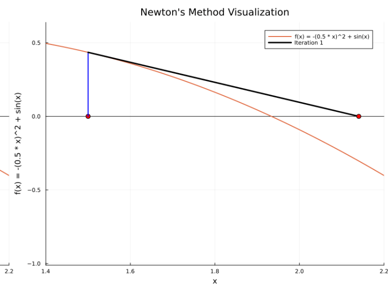


(f) Iteracja 5

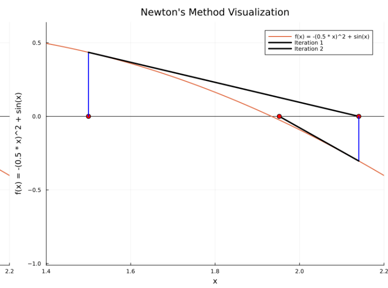
Rysunek 4: Wizualizacja działania metody bisekcji



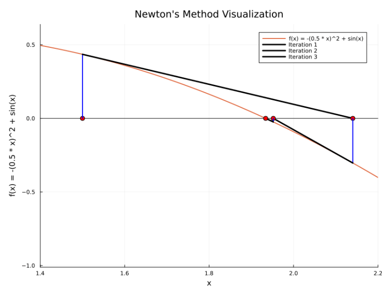
(a) Iteracja 0



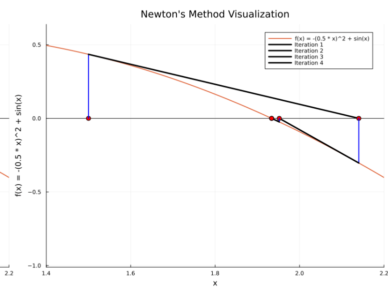
(b) Iteracja 1



(c) Iteracja 2

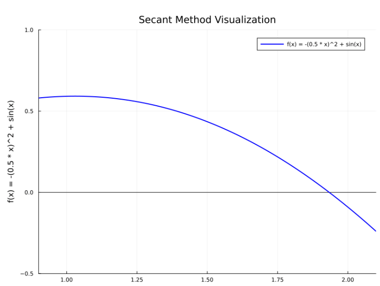


(d) Iteracja 3

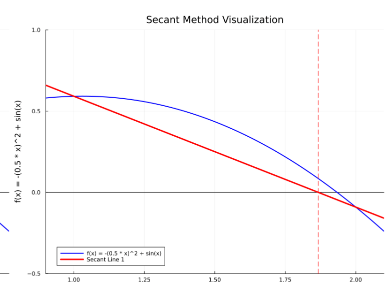


(e) Iteracja 4

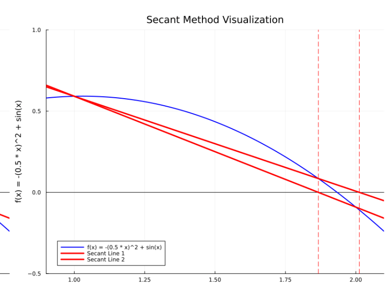
Rysunek 5: Wizualizacja działania metody Newtona



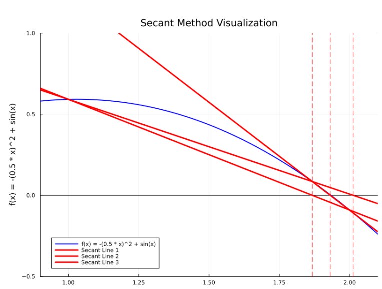
(a) Iteracja 0



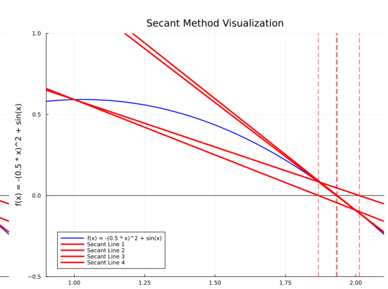
(b) Iteracja 1



(c) Iteracja 2



(d) Iteracja 3



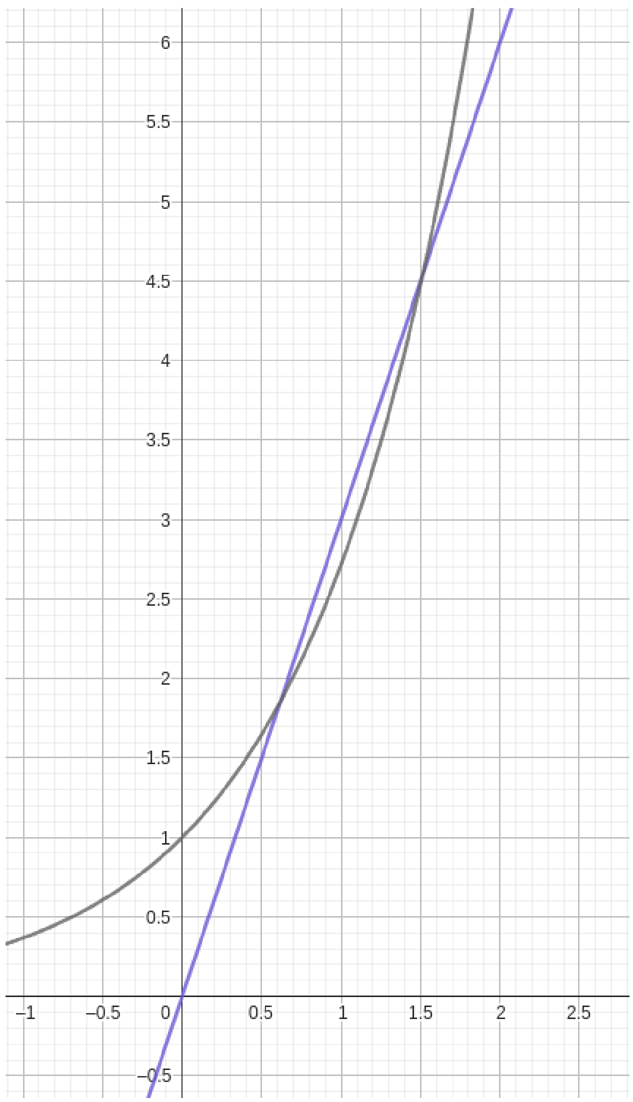
(e) Iteracja 4

Rysunek 6: Wizualizacja działania metody siecznych

5 Wyznaczanie pierwiastków równania $3x - e^x = 0$ (2)

W tym zadaniu należało wyznaczyć, posługując się metodą bisekcji, wartości zmiennej x, dla których funkcje $y_1 = 3x$ i $y_2 = e^x$ przecinają się (przy parametrach $\delta = 10^{-4}$ oraz $\epsilon = 10^{-4}$). Sprowadziłem to zadanie do obliczenia pierwiastków równania (2).

W procesie dobierania odpowiedniego przedziału dla tego zadania, postanowiłem skorzystać z programu GeoGebra, aby przyjrzeć się, gdzie mniej więcej te funkcje mogą się przecinać:



Rysunek 7: Wykresy dla funkcji $y_1 = 3x$ i $y_2 = e^x$

Jak można zauważyć, pierwszy pierwiastek mieści się w przedziale [0, 1], a drugi w przedziale [1, 2] i dokładnie z takimi wartościami przedziałów uruchomiłem metodę bisekcji. Wyniki przedstawiłem w Tabeli 2., poniżej:

Przedział	r	v	it	err
[0, 1]	**0.619**140625	9.066320343276146e-5	9	0
[1, 2]	**1.5120**849609375	7.618578602741621e-5	13	0

Tabela 2: Wyniki dla metody bisekcji

W celu sprawdzenia dokładności moich wyników porównałem je z wynikami wykalkulowanymi przez Wolfram Alpha: **0.619061** oraz **1.51213** (pogrubione cyfry w tabeli odpowiadają podanym wartościom).

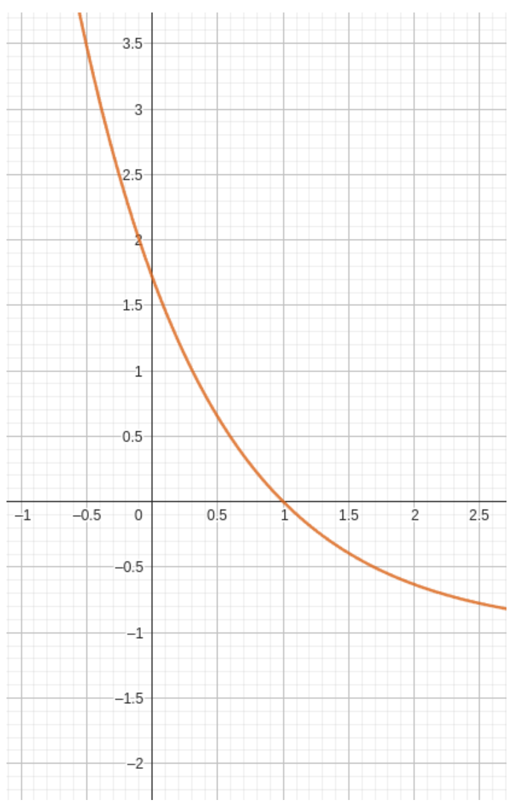
Otrzymane wyniki są bardzo dokładne i stanowią dobre przybliżenie faktycznych miejsc zerowych równania (2). Ważnym wnioskiem, który trzeba wyciągnąć z tego zadania, jest potrzeba znajomości zachowań funkcji, dla których chcemy obliczyć miejsca zerowe. Bez odpowiedniej analizy, trudno jest dobrać odpowiednie przedziały, a co za tym idzie - obliczyć przybliżenia wszystkich pierwiastków.

6 Miejsca zerowe funkcji $f_1 = e^{1-x} - 1$ (3) oraz $f_2 = x \cdot e^{-x}$ (4)

W zadaniu 6. należało znaleźć miejsca zerowe funkcji o równaniach (3) oraz (4) za pomocą metod bisekcji, Newtona oraz siecznych, gdzie $\delta = 10^{-5}$, $\epsilon = 10^{-5}$.

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

W celu dobrania odpowiednich parametrów dla wszystkich metod najpierw sprawdziłem jak dokładnie wygląda wykres funkcji f_1:



Rysunek 8: Wykres funkcji $f_1 = e^{1-x} - 1$

Jak można zauważyć na Rysunku 8., funkcja f_1 posiada tylko jedno miejsce zerowe i osiąga je dla $x = 1$. Znając wykres powyższej funkcji postanowiłem jako parametry przyjąć:

1. **Metoda bisekcji:** $a = 0.0$ oraz $b = 3.0$ (specjalnie przyjąłem przedział niesymetryczny, aby metoda nie skończyła się już na pierwszej iteracji)
2. **Metoda Newtona:** $x_0 = 0.0$ (patrząc na wykres funkcji, dla $x < 1$ jest ona bardzo stroma i jej przecięcie z osią X dążą do miejsca zerowego w miejscu $x = 1$)
3. **Metoda siecznych:** $x_0 = 0.0$ oraz $x_1 = 2.0$

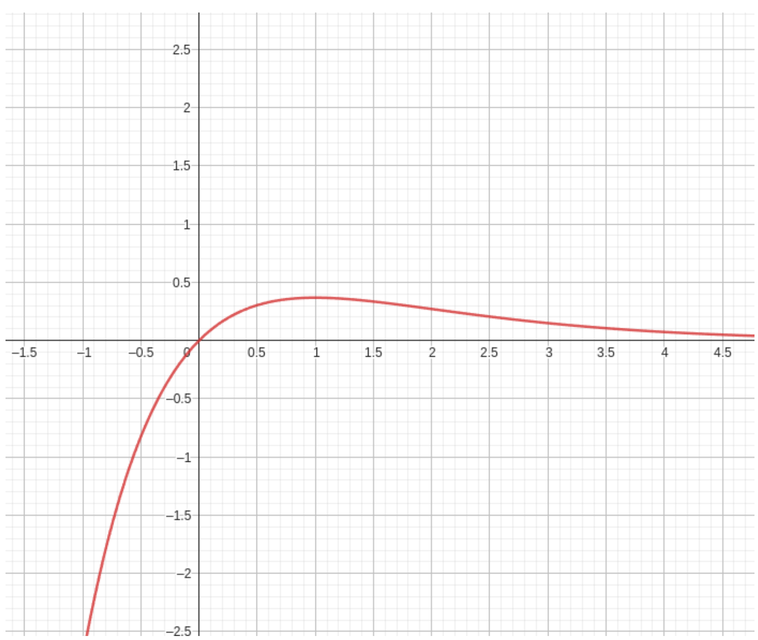
	Metoda bisekcji	Metoda Newtona	Metoda siecznych
r	1.0000076293945312	0.9999984358892101	1.0000017597132702
v	-7.6293654275305656e-6	1.5641120130194253e-6	-1.7597117218937086e-6
it	17	4	6
err	0	0	0

Tabela 3: Wyniki otrzymane dla f_1

Wyniki (pod względem dokładności rozwiązań, jak i liczby iteracji dla każdej z metod) są bardzo podobne do tych z zadania nr 4. Wszystkie metody zwracają bardzo przybliżone do siebie wyniki oraz ponownie można zauważyć, że metoda bisekcji jest najwolniejsza pod względem liczby wykonanych iteracji.

b) $f_2 = x \cdot e^{-x}$

Tak samo jak dla poprzedniego podpunktu, tutaj również skorzystałem z graficznej reprezentacji funkcji w postaci jej wykresu do analizy jej miejsc zerowych:



Rysunek 9: Wykres funkcji $f_2 = x \cdot e^{-x}$

Jak można zauważyć na Rysunku 9., funkcja f_2 posiada tylko jedno miejsce zerowe i osiąga je dla $x = 0$. Znając wykres powyższej funkcji postanowiłem jako parametry przyjąć:

1. **Metoda bisekcji:** $a = -1.0$ oraz $b = 5.0$ (specjalnie przyjąłem przedział niesymetryczny, aby metoda nie skończyła się już na pierwszej iteracji)
2. **Metoda Newtona:** $x_0 = -4.0$
3. **Metoda siecznych:** $x_0 = -4.0$ oraz $x_1 = -2.5$

	Metoda bisekcji	Metoda Newtona	Metoda siecznych
r	7.62939453125e-6	-1.5586599258811135e-6	-7.459018131178007e-8
v	7.62933632381113e-6	-1.5586623553037713e-6	-7.459018687547542e-8
it	18	9	11
err	0	0	0

Tabela 4: Wyniki otrzymane dla f_2

Liczba iteracji dla metody Newtona i siecznych jest większa, co spowodowane jest tym, że funkcja f_2 jest bardzo stroma dla x ujemnych, przez co obie te metody długo szukają miejsca zerowego.

W dalszej części zadania należało przeprowadzić eksperymenty dla metody Newtona dla podanych wartości x_0 dla obu funkcji. Poniżej zamieściłem wyniki dla wybranych $x_0 \in (1, \infty)$ dla f_1:

x_0	r	v	it	err
1.1	0.99999999991094	8.906009263398573e-11	3	0
3.14	0.9999999789312943	2.1068705891025274e-8	10	0
5.0	0.9999996427095682	3.572904956339329e-7	54	0
15.0	15.0	-0.9999991684712809	1	2

Tabela 5: Wyniki otrzymane dla wybranych $x_0 \in (1, \infty)$ dla f_1

Jak można zauważyć, dla $x_0 \in (1, \infty)$ funkcja f_1 potrzebuje coraz więcej iteracji, aby zwrócić odpowiednie przybliżenie miejsca zerowego. Dzieje się tak, ponieważ dla x dążącego do nieskończoności funkcja f_1 'wypłaszcza' się i pochodne zaczynają przypominać linie poziome. Efektem jest znaczne oddalenie się od miejsca zerowego dla już pierwszego przecięcia pochodnej z osią X, a jako, że dla $x < 1$ funkcja jest bardzo stroma, to 'wrócenie' do miejsca zerowego trwa długo. Dla wartości $x_0 = 15$ pochodna przyjmuje już prawie 0, przez co zwrócony jest błąd równy 2.

Podobny eksperyment wykonujemy dla funkcji f_2:

x_0	r	v	it	err
1.0	1.0	0.36787944117144233	1	2
1.1	14.272123938290509	9.040322779745447e-6	3	0
3.14	14.873395233124342	5.163885949051925e-6	10	0
5.0	14.118053159563352	1.0432351956139508e-5	9	2
15.0	15.0	4.588534807527386e-6	0	0

Tabela 6: Wyniki otrzymane dla wybranych $x_0 \in \{1\} \cup (1, \infty)$ dla f_2

Dla $x_0 = 1$ pochodna funkcji $f_2'(x) = -e^{-x} \cdot (x-1)$ przyjmuje wartość 0 (jest ona równoległa do osi X), stąd error jest równy 2 i metoda kończy działanie. Dla $x_0 > 1$ wykres funkcji 'wypłaszcza' się i oddalamy się coraz bardziej od miejsca zerowego. Metoda kończy działanie relatywnie szybko, ponieważ bardzo łatwo jest w ten sposób spełnić warunek $|v| < \epsilon$.

Wnioski nasuwają się same: podczas analizowania funkcji pod kątem ich miejsc zerowych trzeba bardzo precyzyjnie dobierać parametry, aby znaleźć odpowiednie przybliżenia pierwiastków. Wszystkie te trzy metody są bardzo precyzyjne, jeśli takie odpowiednie parametry uda się znaleźć.

Każda z metod ma swoje wady i zalety. Metoda bisekcji jest o wiele wolniejsza niż pozostałe i trzeba znać przedział, w którym znajduje się miejsce zerowe funkcji. Jednakże, gdy znamy takowy przedział, to umiejętnie znajduje przybliżenia miejsc zerowych. Metoda Newtona i metoda siecznych są znacznie szybsze, lecz łatwo można natrafić na problemy podczas ich stosowania (np. pochodna w metodzie Newtona zbiegająca do zera).

Zatem umiejętna analiza problemu oraz hybrydowe podejście do znajdywania miejsc zerowych gwarantuje zadowalające wyniki.