

Obliczenia naukowe - Lista 3

Wojciech Pakulski (250350)

1. Metody rozwiązywania równań nieliniowych

1.1 Metoda bisekcji

Korzystając z tej procedury zakładamy, że:

(1) f jest funkcją ciągłą w przeszukiwanym przez nas przedziale $[a, b]$

(2) $f(a) \cdot f(b) < 0$.

Posiłkuje się ona twierdzeniem Darboux, które mówi, że jeżeli funkcja ciągła ma na końcach przedziału domkniętego wartości różnych znaków, to wewnątrz tego przedziału, istnieje co najmniej jedno miejsce zerowe.

Zasada działania:

Szukamy miejsc zerowych ciągłej funkcji f na przedziale zamkniętym $[a, b]$, a jeśli spełniony jest warunek (2), to znaczy, że w tym przedziale jest co najmniej jedno miejsce zerowe.

Następnie obliczamy $x_1 = a + \frac{b-a}{2}$ i sprawdzamy, czy $f(a) \cdot f(x_1) < 0$:

- Jeśli tak, to miejsce zerowe znajduje się w przedziale $[a, x_1]$ i podstawiamy $b := x_1$
- Jeśli nie, to miejsce zerowe znajduje się w przedziale $[x_1, b]$, czyli podstawiamy $a := x_1$

Otrzymaliśmy nowy przedział $[a, b]$, który jest krótszy od poprzedniego, zawierający zero funkcji f . Teraz powtarzamy powyższe czynności, aż do momentu uzyskania zadanej dokładności epsilon \rightarrow warunek $|a - b| < \varepsilon$. Warunek trzeba tak zdefiniować, ponieważ inaczej błędy przybliżeń mogłyby spowodować, że warunek końca nigdy nie zostanie osiągnięty w arytmetyce zmiennoprzecinkowej IEEE-754.

Pseudokod:

Dane: $a, b, M, \delta, \varepsilon$

Wyniki: $k, r, f(r)$

$u \leftarrow f(a);$

$v \leftarrow f(b);$

$e \leftarrow b - a;$

if $\text{sgn}(u) = \text{sgn}(v)$ **then**

return error;

end if

for $k \leftarrow 1$ **to** M **do**

$e \leftarrow e / 2;$

$c \leftarrow a + e;$

$w \leftarrow f(c);$

if $|e| < \delta$ **or** $|w| < \varepsilon$ **then**

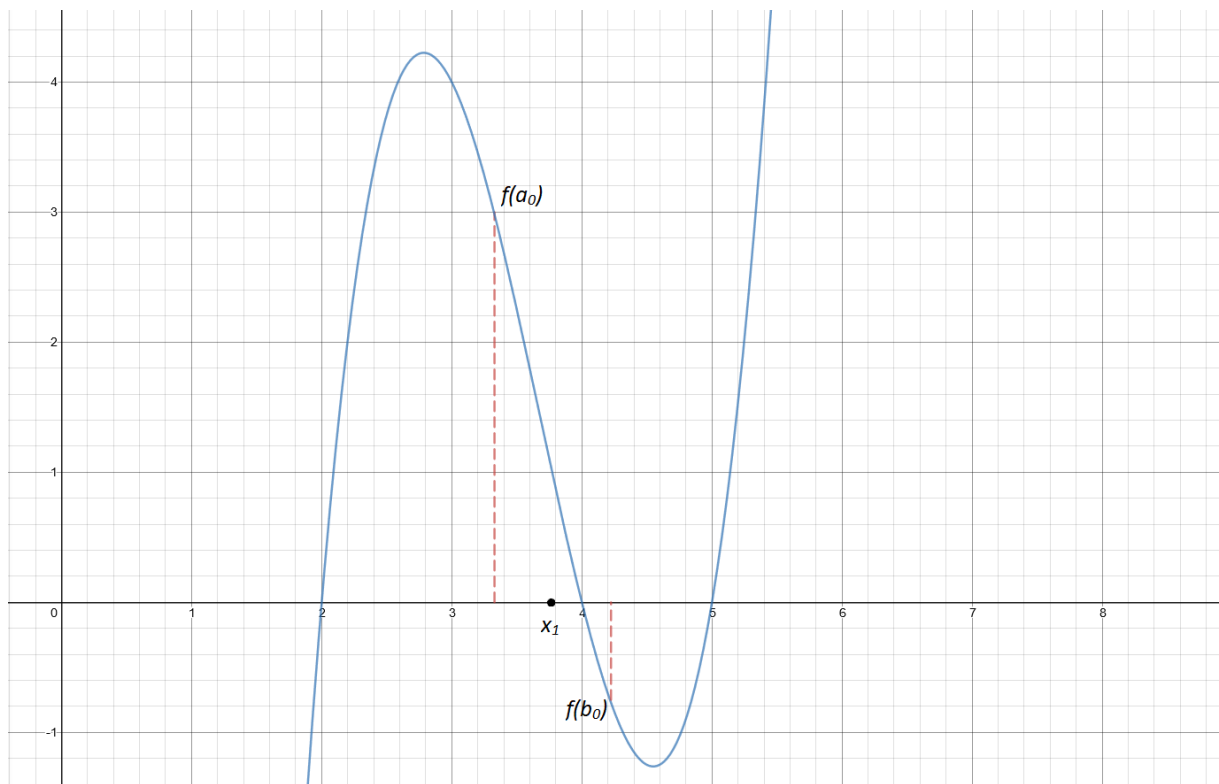
return k, c, w

end if

```

if  $\text{sgn}(w) = \text{sgn}(u)$  then
     $b \leftarrow c$ ;
     $v \leftarrow w$ ;
else
     $a \leftarrow c$ ;
     $u \leftarrow w$ ;
end if
end for

```



Wartym podkreślenia jest sposób w jaki liczymy punkt środkowy $[a, b]$. Liczymy różnicę $b-a$ i dodajemy ją do a . Jest to spowodowane tym, że jakbyśmy próbowali liczyć ten punkt jako: $\frac{a+b}{2}$, to punkt środkowy mógłby znajdować się poza przedziałem $[a, b]$. Powodem tego jest niedokładność obliczeń.

Miejsca zerowe obliczone tą metodą, uzyskujemy z dokładnością do $\varepsilon > 0$, jednak precyzyjną wartość zera funkcji można osiągnąć tylko w przypadku, gdy liczba iteracji będzie równa 1. Jak pisałem wyżej, jest to skutkiem licznych błędów zaokrągleń występujących w arytmetyce zmiennoprzecinkowej IEEE-754.

Kolejną wadą jest niski rząd zbieżności metody. Wynosi ona 1 (to znaczy, że z każdą iteracją błąd maleje liniowo). Przekłada się to na powolność wykonywania metody.

Inną rzeczą wartą zauważenia jest to, że tą metodą obliczymy tylko jedno miejsce zerowe na raz.

1.2 Metoda Newtona-Ralphsona

Korzystając z tej procedury zakładamy, że:

- (1) W przedziale $[a, b]$ znajduje się dokładnie jeden pierwiastek
- (2) Pierwsza i druga pochodna mają stały znak w przedziale $[a, b]$
- (3) $f(a) \cdot f(b) < 0$.

Zasada działania:

Szukamy miejsc zerowych funkcji f . Pierwszą czynnością jaką wykonujemy jest wybieranie punktu startowego x_0 . Z tego punktu prowadzimy styczną w $f(x_0)$. Współrzędna x_1 punktu przecięcia tej stycznej z osią OX , jest naszym pierwszym przybliżeniem miejsca zerowego. Czynność powtarzamy biorąc x_1 jako nasz nowy punkt startowy, aż do momentu uzyskania zadanej dokładności \rightarrow warunek przerwania $|x_1 - x_0| < \delta$ lub $|v| < \varepsilon$.

Pseudokod:

Dane: $x_0, M, \delta, \varepsilon$

Wyniki: $k, r, f(r)$

$v \leftarrow f(x_0)$;

if $|v| < \varepsilon$ **then**

return 0, x_0, v ;

end if

for $k \leftarrow 1$ **to** M **do**

$x_1 \leftarrow x_0 - v/f'(x_0)$;

$v \leftarrow f(x_1)$;

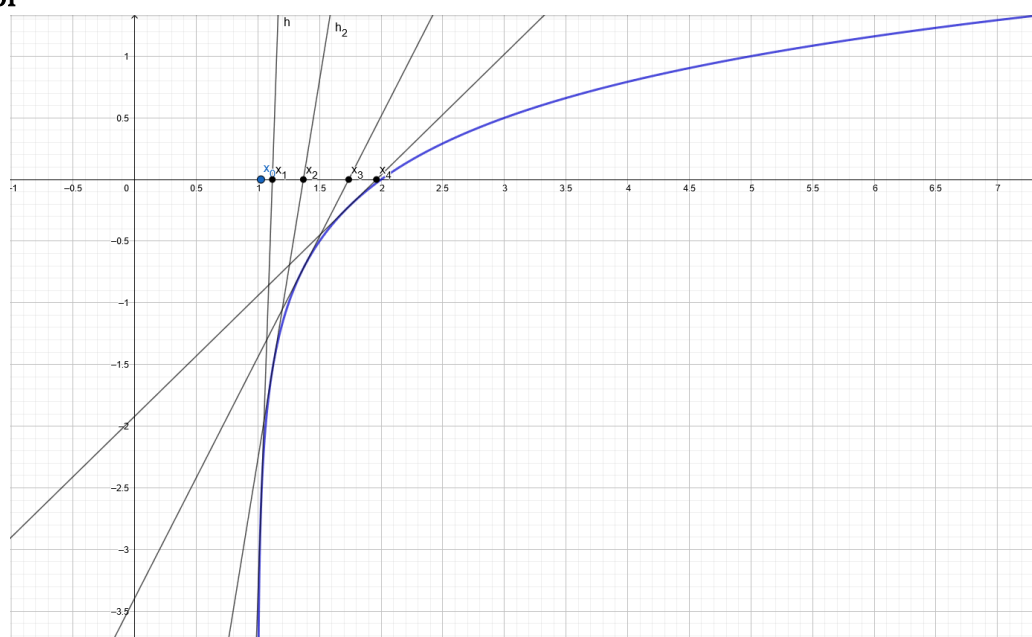
if $|x_1 - x_0| < \delta$ **or** $|v| < \varepsilon$ **then**

return k, x_1, v ;

end if

$x_0 \leftarrow x_1$;

end for



Przykładowe 4 iteracje przeprowadzone w GeoGebra dla $f(x) = \frac{1}{2} \log_2(x - 1)$ i $x_0 = 1.025$

W tej metodzie wykonujemy obliczenia dopóki wyniki nie będą wystarczająco dokładne, czyli:

- wartość funkcji w wyznaczonym punkcie będzie bliska 0: $|f| < \varepsilon$
- odległość pomiędzy kolejnymi przybliżeniami będzie dość mała: $|x_1 - x_0| < \delta$

Na ogół rząd zbieżności tej metody wynosi 2 (to znaczy, że z każdą iteracją błąd maleje kwadratowo). Sprawia to, że ta procedura jest bardzo szybka i wydajna (bardziej niż bisekcji). Rząd zbieżności spada do 1 tylko w wypadku pierwiastków wielokrotnych.

Jej minusem jednak jest to, że gdy wybrany punkt startowy znajduje się daleko od miejsca zerowego, metoda staje się rozbieżna i nie uzyskamy wyniku, dlatego ważne jest zdefiniowanie na danych wejściowych maksymalnej liczby iteracji. Do użycia tego algorytmu należy posiadać pochodną funkcji co też czasem może być problematyczne.

1.3 Metoda Eulera (siecznych)

Korzystając z tej procedury zakładamy, że:

- (1) Funkcja jest określona na przedziale $[a, b]$
- (2) Funkcja jest ciągła na przedziale $[a, b]$
- (3) Na granicach przedziału $[a, b]$ funkcja ma różne znaki

Zasada działania:

Obliczamy wartości funkcji w podanych punktach startowych. Następnie wyznaczamy sieczną przechodzącą przez te punkty (na wykresie) i obliczamy punkt przecięcia siecznej z osią OX. To jest nasz kandydat na pierwsze zero funkcji. Sprawdzamy, czy zostało osiągnięte zadane przybliżenie miejsca zerowego. Jeśli nie, to uaktualniamy dwa ostatnie przybliżenia i powtarzamy powyższe operacje w następnym obiegu pętli. Powtarzamy to do momentu osiągnięcia zdefiniowanego przybliżenia. Jeśli w zadanej liczbie iteracji nie udało się wyznaczyć wyniku, zwracamy błąd.

Pseudokod:

Dane: $a, b, M, \delta, \varepsilon$

Wyniki: $k, r, f(r)$

$f_a \leftarrow f(a);$

$f_b \leftarrow f(b);$

for $k \leftarrow 1$ **to** M **do**

if $|f_a| > |f_b|$ **then**

$a \leftrightarrow b;$

$f_a \leftrightarrow f_b;$

end if

$s \leftarrow \frac{b-a}{f_b-f_a};$

$b \leftarrow a;$

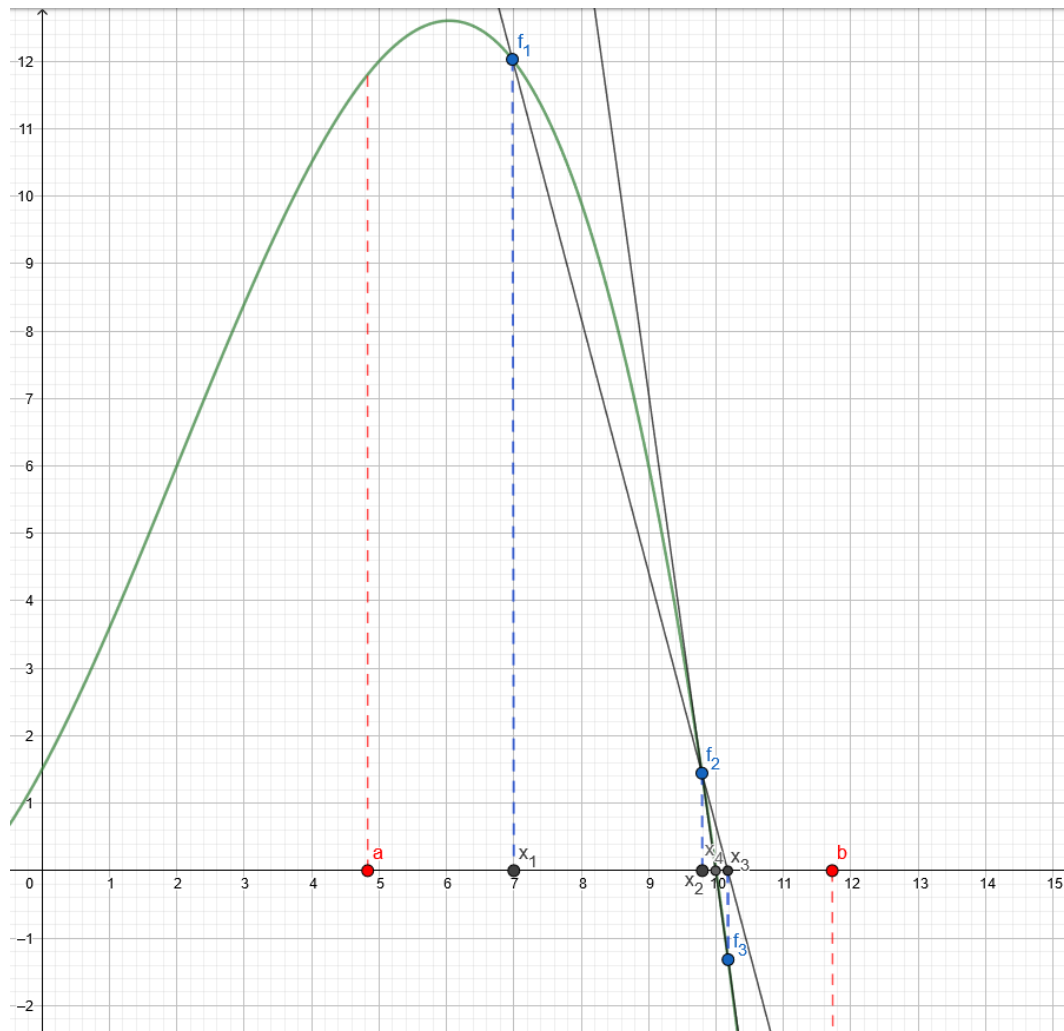
$f_b \leftarrow f_a;$

$a \leftarrow a - f_a s;$

```

fa ← f(a);
if |b-a| < δ or |fa| < ε then
    return k, a, fa;
end if
end for

```



Przykładowe 2 iteracje przeprowadzone w GeoGebrze dla $f(x) = -\frac{1}{20}(x - 10)(x + 1)(x + 3)$, $x_1 = 7$ i $x_2 = 9.8$

Dużą zaletą tej metody jest to, że do działania nie potrzebuje znać pochodnej funkcji, gdyż jej wartość jest przybliżana za pomocą ilorazu różnicowego:

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

Z tego powodu potrzebne nam dwa punkty początkowe na wejściu. Porównując graficznie tę metodę, do metody Newtona to różni się tylko zastąpieniem stycznej do krzywej, sieczną.

2. Porównanie metod wyznaczania pierwiastków równań nieliniowych

Zadanie czwarte polegało na wyznaczeniu pierwiastka równania:

$$\sin x - \left(\frac{1}{2}x\right)^2 = 0$$

Użyć do tego mieliśmy metod:

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

Wyniki przeprowadzonych obliczeń:

Metoda	Miejsce zerowe x_0	Wartość funkcji $f(x_0)$	Liczba iteracji	Błąd
Bisekcji	1.9337539672851562	-2.7027680138402843e-7	16	0
Newtona	1.933753779789742	-2.2423316314856834e-8	4	0
Siecznych	1.933753644474301	1.564525129449379e-7	4	0

Zwróćmy uwagę ile iteracji potrzebowała metoda bisekcji, żeby znaleźć miejsce zerowe zadanej funkcji, aż 16. Jest to 4 razy więcej, niż pozostałe dwie. Tu widzimy wpływ rzędu zbieżności na liczbę potrzebnych iteracji. Który w przypadku pierwszym wynosił 1, a pozostałych dwóch prawie 2.

Wszystkie metody bardzo dobrze przybliżyły wartość pierwiastka funkcji, ale pamiętajmy, że metoda Newtona i metoda siecznych nie zadziałają dla każdego przypadku.

3. Wyznaczanie współrzędnej x punktu przecięcia się funkcji f i g metodą bisekcji

W tym zadaniu mieliśmy wyznaczyć wartość zmiennej x , dla której przecinają się wykresy funkcji $f(x) = 3x$ i $g(x) = e^x$ z dokładnością obliczeń: $\delta = 10^{-4}$, $\varepsilon = 10^{-4}$.

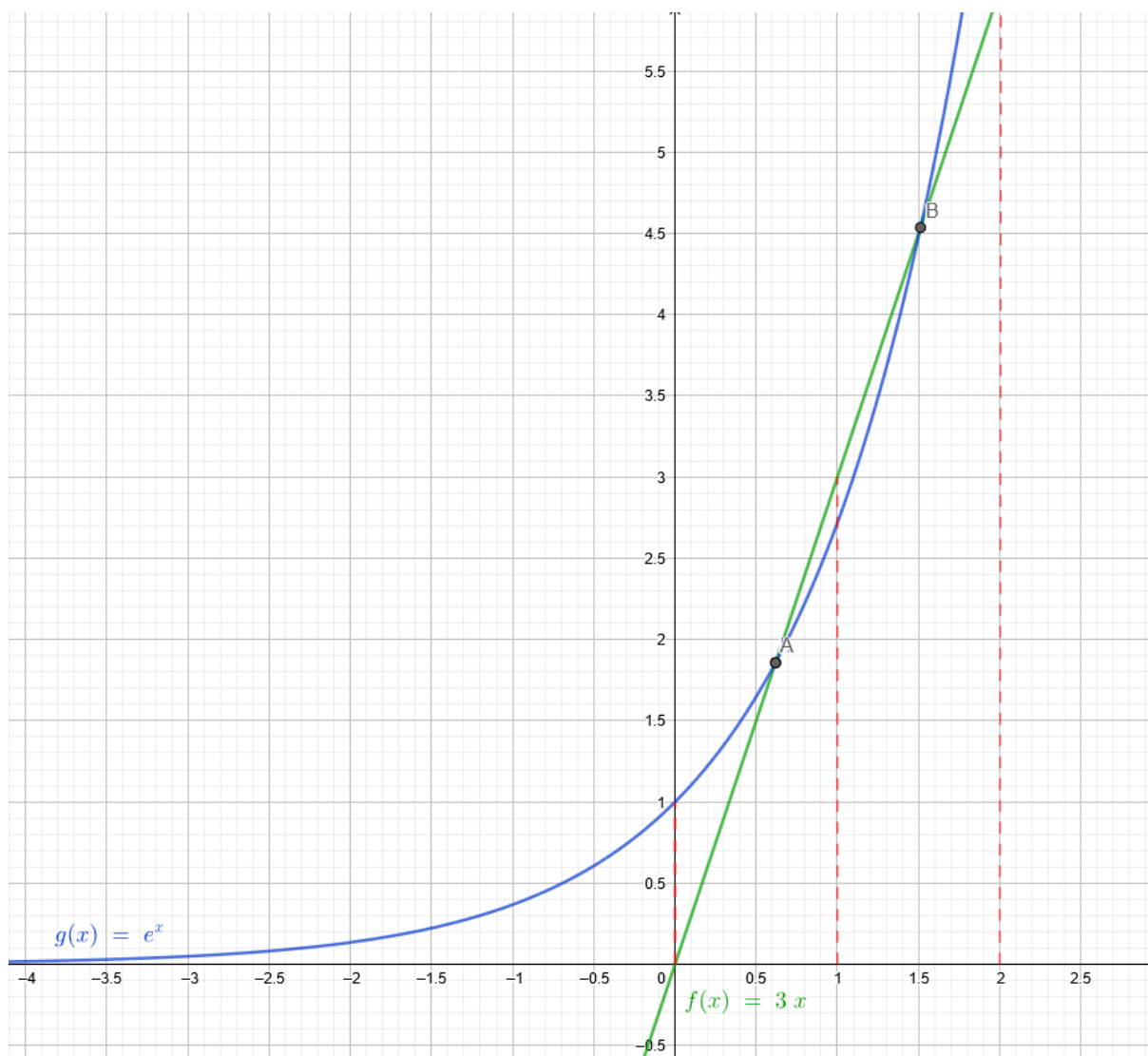
Nasz poszukiwany wynik, będzie rozwiązaniem równania $3x = e^x$, więc jeśli chcemy zastosować metodę bisekcji, to musimy znaleźć miejsce zerowe funkcji $e^x - 3x$.

Obliczenia przeprowadzimy na dwóch przedziałach:

(1) $[0, 1]$

(2) $[1, 2]$

Poniżej wykres:



Wykres przedstawiający przecięcie się wykresów funkcji $f(x)$ i $g(x)$ w GeoGebrze

Wyniki przeprowadzonych obliczeń:

Miejsce zerowe	Wartość x	Liczba iteracji	Przedział
x_0	0.619140625	9	[0, 1]
x_1	1.5120849609375	13	[1, 2]

Porównując wyniki z wykresem aproksymacja jest dobra. Problemem jednak jest to, że żeby wyznaczyć punkty przecięcia podanych funkcji potrzebny jest nam chociaż jakiś podstawowy przebieg zmienności funkcji. Inaczej duży problem by sprawiało wyznaczenie przedziałów, w których znajdują się nasze szukane punkty. Jeśli wybralibyśmy jakiś przedział, na którego końcach funkcja nie zmieniałaby znaku (np. [0, 2]), albo nie znajdowałoby się tam żadne miejsce zerowe to procedura bisekcji nie zwróciłaby nam wyniku.

W tym wypadku lepiej byłoby zastosować metodę stycznych lub siecznych, gdyż one nie wymagają podania przedziału początkowego.

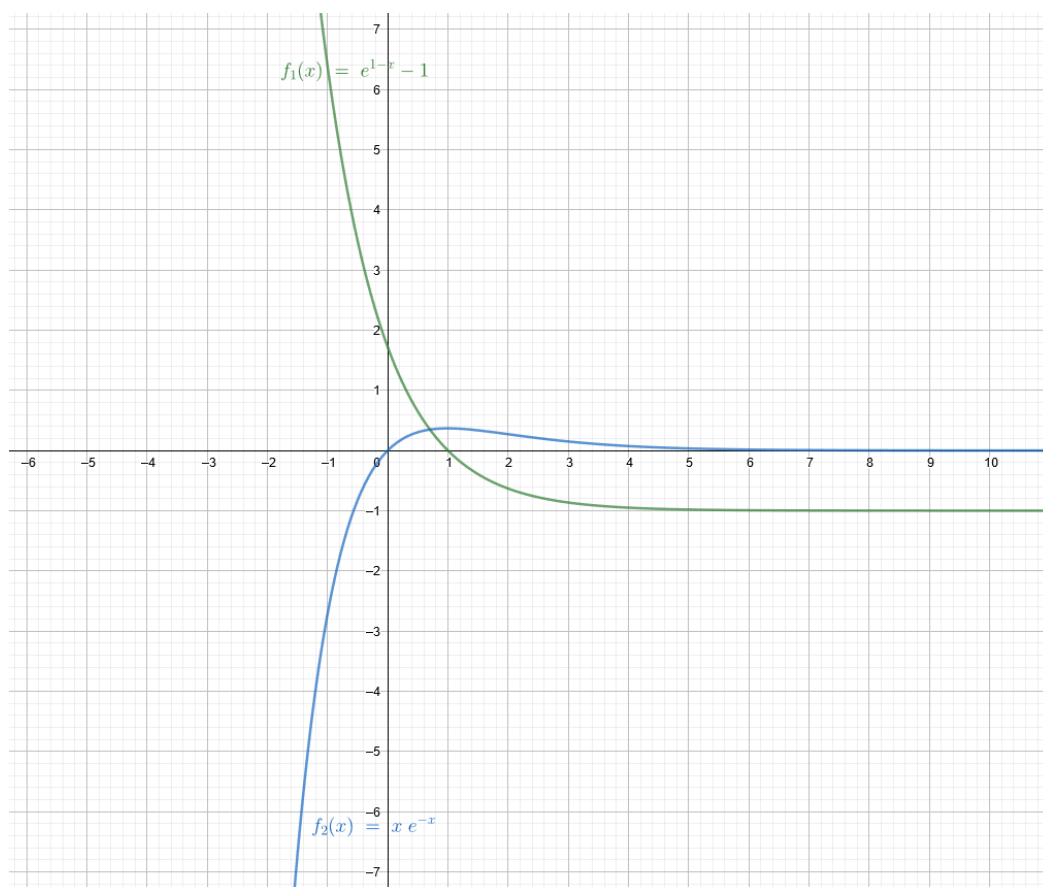
4 Dobieranie odpowiednich danych początkowych do obliczenia miejsc zerowych funkcji

W tym zadaniu należało wykorzystać wszystkie trzy wymienione wcześniej metody do obliczenia zer funkcji:

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

(2) $f_2(x) = x e^{-x}$

z dokładnością obliczeń: $\delta = 10^{-5}, \varepsilon = 10^{-5}$.



Wykres funkcji $f_1(x)$ i $f_2(x)$ wygenerowany w GeoGebra

Spróbujmy przeprowadzić badanie dla różnych przedziałów oraz wartości początkowych.

4.1 Metoda bisekcji

Zacznijmy od metody bisekcji. Wyniki przeprowadzonych obliczeń dla obu funkcji:

Funkcja	Przedział	Miejsce zerowe x_0	Wartość funkcji od x_0	Liczba iteracji	Błąd
$f_1(x)$	[0.0, 2.0]	1.0	0.0	1	0
$f_1(x)$	[0.0, 1.5]	1.0000076293945312	-7.6293654275305656e-6	16	0
$f_1(x)$	[-1.5, 100.0]	1.0000004768371582	-4.768370445162873e-7	20	0
$f_2(x)$	[-0.75, 0.75]	0.0	0.0	1	0
$f_2(x)$	[-0.75, 0.3]	9.155273437531721e-6	9.155189618883698e-6	14	0
$f_2(x)$	[-41.7, 13.25]	-8.034706116407985e-6	-8.034770673169709e-6	21	0

Zauważmy, że dokładny wynik jesteśmy w stanie otrzymać tylko, gdy liczba iteracji jest równa 1, czyli miejsce zerowe jest idealnie po środku początkowego przedziału.

Umiejętne wybranie przedziału korzystając z metody bisekcji jest bardzo ważne, bo od niego zależy ilość wykonanych iteracji podczas liczenia miejsca zerowego.

4.2 Metoda Newtona

Teraz zbadamy zależność dobranego przybliżenia początkowego od liczby operacji dla metody stycznych, ustalając maksymalną liczbę iteracji na 30.

Funkcja	Początkowe x_0	Miejsce zerowe	Wartość funkcji	Liczba iteracji	Błąd
$f_1(x)$	0.99	0.9999999987583194	1.2416805361681327e-9	2	0
$f_1(x)$	-2.0	0.999999999251376	7.48623385504743e-11	7	0
$f_1(x)$	3.0	0.9999999710783241	2.892167638712806e-8	9	0
$f_1(x)$	9.0	-	-	-	1
$f_2(x)$	-0.01	-9.801990000010284e-9	-9.801990096089293e-9	2	0
$f_2(x)$	-1.0	-3.0642493416461764e-7	-3.0642502806087233e-7	5	0
$f_2(x)$	0.01	-1.0202010000017587e-8	-1.0202010104098596e-8	2	0
$f_2(x)$	1.0	-	-	-	2
$f_2(x)$	2.0	14.398662765680003	8.036415344217211e-6	10	0

Możemy zaobserwować, że jak dla $f_1(x)$ wybieraliśmy początkowe aproksymacje z obu stron miejsca zerowego, to oba doprowadzały nas do poprawnego przybliżenia końcowego. Jednak ten sam zabieg przy $f_2(x)$ powoduje problem, ponieważ dla $x > 1$ wartości tej funkcji zbiegają do 0 (co widać na wykresie). Metoda stycznych szuka wtedy miejsca zerowego, w kierunku zbiegania funkcji do 0, co nie pozwala obliczyć prawidłowego miejsca zerowego, ponieważ dla naszego x wartość funkcji jest na tyle bliska zera, że algorytm uznaje je jako pierwiastek.

Dla pierwszej funkcji gdy $x_0 \in (1, \infty)$ ilość iteracji (zgodnie z intuicją) zwiększyła się.

Dla drugiej funkcji w przypadku, gdy $x_0 = 1$ występuje błąd ponieważ $f_2'(1) = 0$, wobec czego styczna będzie równoległa do osi OX, co uniemożliwia wyznaczenie kolejnego punktu przecięcia.

Na podstawie wyników, znów możemy wywnioskować, że odpowiednie dobranie przybliżenia początkowego jest w stanie zmniejszyć liczbę potrzebnych iteracji, żeby obliczyć miejsce zerowe funkcji.

4.3 Metoda siecznych

Teraz zbadamy zależność dobranego przybliżenia początkowego od liczby operacji dla metody siecznych, ustalając maksymalną liczbę iteracji na 30.

Funkcja	Początkowe x_0	Początkowe x_1	Miejsce zerowe	Wartość funkcji	Liczba iteracji	Błąd
$f_1(x)$	0.0	0.5	0.9999998133327657	1.8666725165594755e-7	5	0
$f_1(x)$	1.5	2.0	1.0000034269838276	-3.4269779555229363e-6	5	0

$f_1(x)$	-10.0	-5.5	0.9999998310288395	1.6897117482983504e-7	15	0
$f_2(x)$	-0.1	-0.01	-9.42098181330557e-6	-9.421070568621977e-6	2	0
$f_2(x)$	-1.0	-0.9	-3.304447675535891 e-8	-3.304447784729637e-8	7	0
$f_2(x)$	-10.0	-0.6	-1.8112061236315096 e-6	-1.8112094041021026 e-6	17	0
$f_2(x)$	-1.0	0.5	-1.1737426154042664 e-6	-1.1737439930768023e-6	7	0
$f_2(x)$	-1.0	2.0	14.310428368676307	8.72393778926339e-6	15	0
$f_2(x)$	5.0	10.0	14.836777722716038	5.3432918524983584e-6	7	0

Podobnie jak w metodzie Newtona, obliczenia na funkcji pierwszej nie sprawiają żadnych problemów niezależnie od danych wejściowych. Zależna od nich jest tylko liczba iteracji, która zwiększa się im bardziej punkty początkowe oddalone są od miejsca zerowego.

Dla funkcji drugiej ponownie zauważamy, że jej przebieg sprawia, że jeśli któryś z punktów początkowych jest > 1 to wynik będzie niepoprawny, ponieważ dla $x > 1$ wartości tej funkcji zbiegają do 0, a dla naszego x wartość funkcji jest na tyle bliska zera, że algorytm uznaje je jako pierwiastek.

4.4 Podsumowanie

Metoda stycznych i metoda siecznych potrafią szukać miejsc zerowych funkcji nieliniowych znacznie efektywniej (w mniejszej liczbie iteracji), niż metoda bisekcji. Jednak są bardziej wrażliwe na warunki początkowe, ponieważ źle dobrane parametry wejściowe mogą doprowadzić do błędu lub otrzymania złych wyników.

Z powodu, że żadna z metod nie jest idealna, najbezpieczniej jest użyć wolniejszej metody (np. metody bisekcji), żeby najpierw zawęzić obszar zbieżności, a potem zastosować metodę Newtona lub siecznych w celu szybkiego znalezienia miejsca zerowego.