Matematično fizikalni seminar

Iskanje ničel funkcij in preprosta numerična integracija v 1D

Teodor Jovanovski, 28241125
Profesor: doc. dr. Miha Muškinja
Marec, 2025

1 Uvod

Najpreprostejši postopki v numeričnih metodah so iskanje ničel funkcij v eni dimenziji. Ne obstaja metoda, ki bi sama poiskala *vse* ničle funkcije, konvergenca k ničli funkcije je vedno odvisna od začetnih vrednosti algoritma.

Najpreprostejši postopek bi seveda bil 'prečesavanje' funkcije z delitvijo definicijskega območja le-te na dovolj gosto mrežo točk x_i in iskanjem intervala:

$$f(x_{i+1}) \cdot f(x_i) < 0$$

kjer je v danem intervalu $[x_i, x_{i+1}]$ zagotovo liho število ničel. Ta interval lahko potem zožimo z razdelimo na drobnejše intervale in znova prečešemo itd., dokler ne dosežemo željene natančnosti. Vendar je ta postopek zelo 'drag' z računskega stališča, posebej če je definicijsko območje funkcije zelo veliko. Poleg tega sploh ne vemo, ali so izbrani koraki dovolj majhni, da obdajamo ničle funkcij. Tako takšno metodo kvečjemu kombiniramo z naprednejšimi, v fiziki pa poleg tega pogosto lahko vsaj nekoliko uganemo ustrezna območja glede na fizikalni problem, ki ga rešujemo.

Preprosta, a povsem uporabna metoda je t.i. metoda **bisekcije**, ki deluje na naslednji način:

1. Izberi interval $[a, b]$, kjer velja

   $$f(a) \cdot f(b) < 0,$$

   ta vsebuje vsaj eno ničlo.

2. Izberi točko na sredi intervala $x = (a + b)/2$. Če je

   $$f(a) \cdot f(x) < 0$$

   postavi $b = x$, drugače postavi $a = x$.

3. Ponavljaj prejšnji korak, dokler $|b - a| < \epsilon$, kjer je ϵ želena natančnost.

V vsakem koraku se interval zmanjša za polovico, kar je v splošnem dovolj hitra konvergenca za običajne potrebe. Število potrebnih korakov lahko tudi izračunamo $n = \log_2(|b - a|/\epsilon)$.

Zgornjo metodo lahko prevedemo tudi na **sekantno metodo** in metodo **regula falsi**, če predpostavimo, da je funkcija znotraj intervala dovolj pohlevna (skoraj linearna) in določimo novo točko x namesto z bisekcijo z linearno interpolacijo: skozi točki a in b potegnemo premico in pogledamo, kje seka koordinatno os.
Drugo področje primerno za uvod v numerične metode v fiziki je numerična integracija integracija funkcij v eni dimenziji. Tu je interpretacija preprosta:

čim bolje bi radi določili ploščino pod dano funkcijo $f(x)$. V ta namen razdelimo interval integracije $[a, b]$ v mrežo N točk:

$$x_i = x_1 + i \cdot h; \quad i = 1, \ldots, N; \quad x_1 = a, x_N = b,$$

pri čemer je korak $h = (b - a)/N$ konstanten. Preproste metode nato interpolirajo funkcijo $f(x)$ v točkah x_i in $f_i = f(x_i)$ s polinomi različnih redov (katerih analitične integrale seveda poznamo).

Najpreprostejša je **trapezna metoda**, kjer je funkcija $f(x)$ med sosednjima točkama aproksimirana kar z premico (ploščev je torej trapez). Dobimo:

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\, dx = h \left[\frac{1}{2} f_1 + \frac{1}{2} f_2 \right],$$

oziroma za cel interval:

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)\, dx = h \left[\frac{1}{2} f_1 + f_2 + f_3 + \cdots + f_{N-1} + \frac{1}{2} f_N \right].$$

Ta metoda je seveda točna le za premice, v splošnem je natančnost $O(h^3 f'')$. Boljša formula, kjer je interpolacija točna do reda x^3, je **Simpsonova formula**:

$$\int_{x_1}^{x_3} f(x)\, dx = h \left[\frac{1}{3} f_1 + \frac{4}{3} f_2 + \frac{1}{3} f_3 \right],$$

ki seveda potrebuje tri točke in je torej obsega interval dolžine $2h$. Za celoten interval jo potemtakem zlepimo v:

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)\, dx = h \left[\frac{1}{3} f_1 + \frac{4}{3} f_2 + \frac{2}{3} f_3 + \frac{4}{3} f_4 + \frac{2}{3} f_5 + \cdots + \frac{2}{3} f_{N-2} + \frac{4}{3} f_{N-1} + \frac{1}{3} f_N \right].$$

Nalogi:

- Z metodami bisekcije in regula falsi poišči ničle nekaj polinomov tretjega reda in primerjaj z analitičnimi vrednostmi (uporabi npr. Cardano formula). Uporabi tudi kakšen naprednejši algoritem, na primer algoritme v NumPy (`numpy.roots`) ali SciPy (`scipy.optimize.brentq`, `Wijngaarden-Dekker-Brent` metoda, ena najboljših) in primerjaj hitrost konvergence.

- S trapezno in Simpsonovo metodo, pa tudi s kakšno 'vgrajeno' v SciPy (ali podobno), določi ploščino funkcije $1 - x^2$ v intervalu $[-1, 1]$ in funkcije $x^3 e^{-x}$ v intervalu od nič do neskončno (kaj pomeni tu neskončno - kaj lahko vzameš?). Kako dobro slednja konvergira k vrednosti gama funkcije, ki je tu $3! = 6$?

2 Iskanje ničel

Za to domačo nalogo sem se odločil poiskati ničle naslednjih treh polinomov:

$$p_1 = 2x^3 + 3x^2 - 4x + 5$$

$$p_2 = -x^3 + \frac{1}{2}x^2 + 7x - 3$$

$$p_3 = 3x^3 - 5x + 2$$

Naloge sem se najprej lotil z iskanjem vseh intervalov, v katerih funkcija (polinom) spremeni predznak. Dobil sem naslednje intervale:

Tabela 1: Intervali, ki jih je algoritem našel za vse tri polinome.

Polinom	Intervali
p_1	[-3,-2.5]
p_2	[-3, -2.5], [0, 0.5], [2.5, 3.0]
p_3	[-1.96, -1.45], [0.08, 0.59], [0.59, 1.1]

V tabeli 1 vidimo, da ima vsak polinom vsaj eno realno ničlo. Moja naloga je bila, da najdem vse realne ničle za vse polinome.

Za polinom p_1:

Interval	Bisekcija	Iteracije	Regula falsi	Iteracije	vgrajena funkcija *roots*
[-3,-2.5]	-2.624820	25	-2.624819	100	-2.624819

Za polinom p_2:

Interval	Bisekcija	Iteracije	Regula falsi	Iteracije	vgrajena funkcija *roots*
[-3,-2.5]	-2.615243	25	-2.615244	100	-2.615243
[0, 0.5]	0.426663	25	0.426664	10	0.426664
[2.5, 3]	2.688579	25	2.688579	19	2.688579

Za polinom p_3:

Interval	Bisekcija	Iteracije	Regula falsi	Iteracije	vgrajena funkcija *roots*
[-1.5, -1]	-1.45742710	25	-1.45742710	30	-1.45742710
[0, 0.5]	0.45742711	25	0.45742710	28	0.45742710
[0.5, 3]	0.99999999	25	1	23	1

Iz tega zelo omejenega izbora polinomov bi lahko sklepali, da je metoda bisekcije hitrejša od metode regula falsi, čeprav je treba priznati, da v nobenem od teh primerov metoda bisekcije ne divergira. Kar se tiče natančnosti metod, se zdi, da je metoda regula falsi na splošno natančnejša od metode bisekcije, čeprav je to na račun tega, da je potrebnih več iteracij. V zgornji tabeli sem izpustil eno podrobnost, ki jo je treba dodati, in sicer da je vrednost, ki jo poda metoda, odvisna od začetnega intervala, ki ji je dodeljen. Na primer, za p_3 je metoda bisekcije dala pravilno vrednost 1, ko je bil dan nekoliko drugačen interval.

3 Numerična Integracija

V drugem delu domače naloge je treba poiskati ploščino pod dvema funkcijama z uporabo trapezne in Simpsonove metode.

3.1 $1 - x^2$

Točna vrednost je 4/3.

Metoda	Vrednost	Napaka
Trapezna	1.3332	0.00013333
Simpsonova	1.3333	2.2204e-16
Vgrajena integral()	1.3333	0

3.2 $x^3 e^{-x}$

Točna vrednost je $3! = 6$.

Metoda	Vrednost	Napaka
Trapezna	6	5.2052e-08
Simpsonova	6	2.0771e-07
Vgrajena integral()	6	8.8818e-15

Za numerično integracijo do neskončnosti sem kot mejno točko izbral x = 50, po kateri sem domneval, da je napaka zanemarljiva, kar se je izkazalo za res.

4 Zaključek

Pri tej domači nalogi sem imel dve nalogi: numerično poiskati ničle funkcij in numerično integrirati funkcije. Tako kot prej sem vse to opravil v programu MATLAB.

Sprva sem mislil, da bo ta domača naloga zahtevnejša od prve, vendar to ni bilo res. Zaradi razpoložljivosti vnaprej napisane kode za iskanje intervalov, bisekcije in regula falsi je bila moja naloga skoraj trivialna. Integracija se je izkazala za lažje izvedljivo kot iskanje ničel, kar je dobrodošlo glede na to, kako težavno se je bilo učiti integrale.

Vse metode, uporabljene za numerične izračune, so se izkazale za zanesljive, tudi če upoštevamo napake, ki jih prinašajo. Bisekcija je zanesljiva in hitra metoda, čeprav z nekoliko večjo napako. Regula falsi je natančnejša, vendar zahteva več časa. Simpsonova metoda se je v primerjavi s trapezno metodo presenetljivo dobro izkazala. Vsi ti rezultati kažejo na dejstvo, da je treba pazljivo izbrati metodo, ki je najprimernejša za obravnavano nalogo, kar zagotovo dobro počnejo že integrirane funkcije MATLAB-a.