

# Znajdowanie miejsc zerowych funkcji metodą Newtona

Michał Saturczak

Informatyka Stosowana, Akademia Górniczo-Hutnicza

Metody Numeryczne

5 kwietnia 2024

# 1 Wstęp teoretyczny

Metoda Newtona, znana również jako metoda Newtona-Raphsona, jest potężnym narzędziem numerycznym stosowanym do znajdowania pierwiastków funkcji jednej zmiennej. Metoda ta polega na iteracyjnym wyznaczaniu kolejnych przybliżeń miejsca zerowego funkcji.

Dla danego przybliżenia  $x_i$ , kolejne przybliżenie  $x_{i+1}$  jest obliczane za pomocą wzoru:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (1)$$

gdzie  $f(x_i)$  to wartość funkcji w punkcie  $x_i$ , a  $f'(x_i)$  to wartość pochodnej funkcji w punkcie  $x_i$ .

Obliczenia są kontynuowane do momentu, gdy spełniony jest warunek zbieżności, który w tym przypadku jest określony jako  $|x_{i+1} - x_i| > 10^{-6}$ . Oznacza to, że obliczenia są kontynuowane, dopóki wartość o jaką przesuwa się przybliżenie miejsca zerowego jest większa od  $10^{-6}$ .

Pochodną funkcji w punkcie  $x$  można obliczyć za pomocą ilorazu różnicowego w przód, który jest zdefiniowany jako:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (2)$$

gdzie  $h$  to mała wartość, która jest używana do aproksymacji pochodnej.

## 2 Problem

Problem składał się z następującej liście zadań:

- Wykonano program obliczający miejsce zerowe funkcji za pomocą metody Newtona. Przyjęto początkowe stężenie składników A i B jako  $2 \text{ mol/cm}^3$ , początkową wartość  $[D] = 1$  i stałą reakcji  $K = 0.25 \text{ cm}^3/\text{mol}$ . Za warunek zakończenia iteracji przyjęto krok metody mniejszy od  $10^{-6}$ .
- Przygotowano program, który oblicza stężenia równowagowe dla  $[A]_0 = [B]_0 = c_0$  w zakresie od 2 do  $10 \text{ mol/dm}^3$ . Program wypisuje dane, które posłużą do utworzenia wykresu  $[D] = [D](c_0)$  i  $[B] = [B](c_0)$ . Wartość  $[B]$  obliczono z wyrażenia:  $[B] = [B]_0 - [D]$ .
- Zidentyfikowano, że oczyszczenie otrzymanej mikstury będzie najłatwiejsze, gdy stężenie  $[D] = [B]$ . Określono wartość  $c_0$ , dla której można to osiągnąć.
- Dla  $c_0 = 2$  przygotowano tabelę zawierającą: położenia kolejnych przybliżeń, krok metody, wartość funkcji oraz wartość jej pierwszej pochodnej. Wykonano obliczenia i tabele dla różnych początkowych wartości  $[D]$  w zakresie od 0 do 2. Analizowano, jak ilość wymaganych operacji i przebieg działania metody zależą od wybranego miejsca początkowego.

Do rozwiązywania problemu użyto poniższych funkcji napisanych w języku C++:

```
// Definicja funkcji
double function(double D, void *params)
{
    double c0 = *(double *)params;
    double K = 0.25;

    return (D / pow((c0 - D), 2)) - K;
}

// Implementacja metody Newtona
double newtonMethod(double c0, std::ofstream &file)
{
    int iter = 0, max_iter = 100;
```

```

double D = 0.5, D0, abs, tol = 1e-6;
double h = tol / 10; // krok iloczynu różnicowego

do
{
    iter++;
    D0 = D;
    double derivative = (function(D0 + h, &c0) - function(D0, &c0)) / h; // obliczanie pochodnej
    D = D0 - function(D0, &c0) / derivative;
    abs = fabs(D - D0);
    file << iter << "\t" << D << "\t" << abs <<
    "\t" << function(D, &c0) << "\t" << derivative << std::endl;
} while (abs > tol && iter < max_iter);

return D;
}

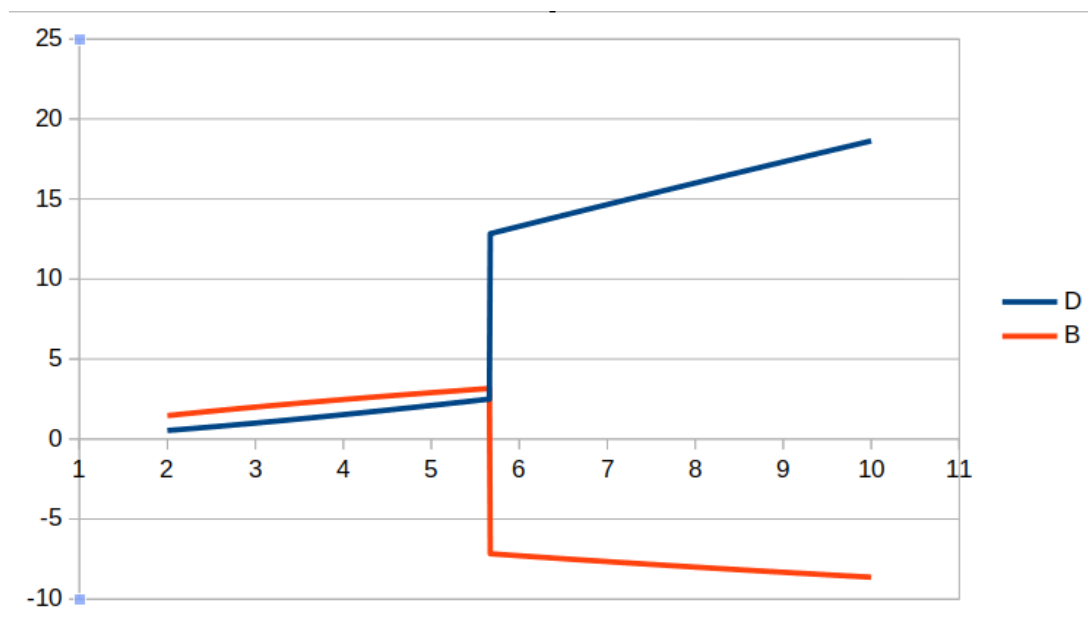
```

## 3 Wyniki

### 3.1 Przykładowa seria wyników

c0	D	B
2	0.535898	1.4641
2.01	0.54013	1.46987
2.02	0.544371	1.47563
2.03	0.548621	1.48138
2.04	0.552881	1.48712
2.05	0.55715	1.49285
2.06	0.561429	1.49857
2.07	0.565717	1.50428
2.08	0.570014	1.50999
2.09	0.574321	1.51568
2.1	0.578637	1.52136
2.11	0.582962	1.52704
2.12	0.587296	1.5327
2.13	0.591639	1.53836
2.14	0.595991	1.54401
2.15	0.600352	1.54965
2.16	0.604722	1.55528
2.17	0.609101	1.5609
2.18	0.613489	1.56651
2.19	0.617886	1.57211
2.2	0.622291	1.57771
2.21	0.626705	1.58329
2.22	0.631128	1.58887
2.23	0.63556	1.59444
2.24	0.64	1.6
2.25	0.644449	1.60555
2.26	0.648906	1.61109
2.27	0.653372	1.61663

### 3.2 Wykres wartości $D$ i $B$ dla iteracji $c_0$



### 3.3 Wartość $c_0$ gdy $D = B$

```
Compiling and running
Wartość c0, dla której [D] = [B] to: 4.94066e-324
```

## 4 Wnioski

Metoda Newtona to potężne narzędzie do znajdowania miejsc zerowych funkcji, oferujące szybką zbieżność i prostotę implementacji, szczególnie dla funkcji wielomianowych. Niemniej jednak, metoda ta nie jest wolna od potencjalnych problemów.

Jednym z głównych wyzwań jest konieczność obliczania pochodnej funkcji, co może być trudne dla niektórych funkcji. W przypadku tych laboratoriów, pochodna była obliczana za pomocą iloczynu różnicowego w przód, co może prowadzić do błędów numerycznych, szczególnie dla małych wartości  $h$ .

Dodatkowo, metoda Newtona jest wrażliwa na początkowy punkt startowy. Jeżeli wartość początkowa jest bliska miejscu, gdzie pochodna funkcji jest równa zero, metoda może nie zbiegać. W kontekście tych laboratoriów, wartość  $c_0$ , dla której  $[B] = [D]$ , okazała się być bardzo mała, bliska zero. To mogło prowadzić do problemów z zbieżnością metody Newtona, ponieważ wartość pochodnej w takim punkcie mogła być bardzo duża.

Podsumowując, metoda Newtona oferuje szybką zbieżność i jest łatwa do zaimplementowania dla wielomianów, ale może prowadzić do błędów numerycznych, szczególnie przy obliczaniu pochodnej za pomocą iloczynu różnicowego. Dodatkowo, wybór punktu startowego ma kluczowe znaczenie dla zbieżności metody. W kontekście tych laboratoriów, wybór małej wartości  $c_0$  mogłoby prowadzić do problemów z zbieżnością.