Sprawozdanie

Obliczenia naukowe, lista 3

Aleksandra Malinowska, 244925, WPPT INF, semestr 5, listopad 2019

1. Wstęp

Sprawozdanie to zawiera analizę problemów oraz wyniki ich rozwiązań z zadań z listy nr 3 doktora Pawła Zielińskiego z przedmiotu Obliczenia naukowe. Wszystkie programy potrzebne do rozwiązania zadań zostały napisane w języku Julia.

2. Lista zadań

2.1. Zadania 1-3

2.1.1. Opis problemu

W zadaniach 1-3 należało zaimplementować funkcje lokalizujące pierwiastki równania $f(x) = 0$ trzema metodami: bisekcji, Newtona oraz siecznych. Funkcje należało zaimplementować według zadanej specyfikacji a następnie umieścić w module.

2.1.2. Rozwiązanie

Wszystkie przedstawione poniżej algorytmy pochodzą z książki „Analiza numeryczna" (D. Kincaid, W. Chaney).

2.1.2.1. Algorytm dla metody bisekcji

Metoda bisekcji, zwana również metodą połowienia przedziału, opiera się na twierdzeniu, że jeśli f jest funkcją ciągłą w przedziale $[a, b]$ i jeśli $f(a)f(b) < 0$, to ta funkcja musi mieć zero w (a, b). W metodzie tej bowiem obliczamy środek przedziału $c = ½(a + b)$, a następnie sprawdzamy, w którym z podprzedziałów (lewym – $[a, c]$, czy prawym – $[c, b]$) funkcja f zmienia znak, ponieważ oznacza to, że teraz w nim znajduje się zero tej funkcji. Czynności te powtarzamy dopóki nie znajdziemy pierwiastka równania.

Realizacja tego algorytmu w komputerze wymaga jednak wprowadzenia kilku poprawek. Ze względu na błędy zaokrągleń równość $f(c) = 0$ nie powinna stanowić kryterium zakończenia obliczeń. Aby uniknąć ryzyka nieskończonej pętli algorytmu zaimplementowana funkcja `mbisekcji(f,a,b,delta,epislon)` kończy obliczenia gdy błąd jest dostatecznie mały lub gdy $|f(c)| < \varepsilon$. Ponadto punkt środkowy c jest obliczany poprzez instrukcję $c = a + \frac{(b-a)}{2}$, żeby nie spowodować błędów wynikających z wykonywania obliczeń w komputerze ze skończoną precyzją. Ostatnim ulepszeniem algorytmu jest sprawdzanie warunku zmiany znaku funkcji przy pomocy nierówności $sgn(w) \neq sgn(v)$ zamiast $wv < 0$, dzięki czemu z łatwością omijamy zbędne mnożenie, które może spowodować niedomiar lub nadmiar.

2.1.2.2. Algorytm dla metody Newtona

Metoda Newtona, zwana również metodą stycznych, opiera się na *linearyzacji* funkcji, tzn. zastąpieniu jej funkcją liniową. W przypadku tej metody jest nią suma dwóch początkowych składników we wzorze Taylora, czyli

$$l(x) = f(c) + f'(c)(x - c).$$

Jest ona dobrym przybliżeniem f w pobliżu c, ponadto ma tę samą wartość i to samo nachylenie w punkcie c jak f. Wiedząc to konstruujemy styczną do wykresu funkcji f w punkcie bliskim zera i znajdujemy punkt, w którym ta styczna przecina oś x. Aby obliczyć kolejne przybliżenia r pierwiastka funkcji f wykorzystujemy następujący wzór:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \text{ dla } n \geq 0.$$

Realizacją tego algorytmu jest funkcja `mstycznych(f,df,x0,delta,epsilon,maxit)`, która na początku sprawdza, czy pochodna funkcji nie jest bliska 0 (jeśli tak funkcja kończy działanie z kodem błędu 2). Gdy nie jest to prawda algorytm według zadanego powyżej wzoru oblicza kolejne przybliżenia miejsca zerowego dopóki nie przekroczy podanej liczby maksymalnych iteracji (kończy działanie z kodem błędu 1) lub dopóki otrzymane przybliżenie nie będzie wystarczająco dokładne. Przypadku osiągnięcie zadanej dokładności, algorytm kończy działanie i zwraca otrzymany wynik.

2.1.2.3. Algorytm dla metody siecznych

Metoda siecznych jest pewną modyfikacją metody Newtona. Istotną wadą metody Newtona jest bowiem obliczanie wartości pochodnej funkcji f, której zera szukamy. W metodzie siecznych zamiast pochodnej wykorzystujemy *iloraz różnicowy*, który wynika wprost z definicji pochodnej. Tym samym otrzymujemy nowy wzór

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

dla $n > 0$, który wykorzystujemy do obliczania kolejnych przybliżeń pierwiastka funkcji f. W interpretacji graficznej zastępujemy styczne siecznymi, stąd różnica w nazwie.

Implementacją tej metody jest funkcja `msiecznych(f,x0,x1,delta,epsilon,maxit)`, która na początku oblicza wartości $f(x_0)$ oraz $f(x_1)$, a następnie rozpoczyna działanie pętli, której maksymalna liczba iteracji jest określona przez parametr `maxit`. Pętlę tę rozpoczyna sprawdzenie warunku $|f(x_0)| > |f(x_1)|$. W przypadku spełnienia warunku następuje zamiana wartości zmiennych, aby zapewnić to, że moduły wartości funkcji w punktach x_n nie rosną. Następnie algorytm oblicza kolejne przybliżenia pierwiastka funkcji f tak długo, aż odległość między kolejnymi przybliżeniami jest mniejsza od `delta` lub wartość funkcji dla tego przybliżenia jest mniejsza od `epsilon`. Gdy jeden z tych warunków zostanie spełniony algorytm zwraca wynik, w przeciwnym wypadku kończy działanie z kodem błędu 1.

2.2. Zadanie 4

2.2.1. Opis problemu i rozwiązanie

W tym zadaniu należało użyć funkcji ze stworzonego modułu `Pierwiastki` do obliczenia pierwiastka równania $\sin(x) - \left(\frac{1}{2}x\right)^2 = 0$ trzema metodami: (1) bisekcji, (2) Newtona oraz (3) siecznych z podanymi parametrami wejściowymi w każdym przypadku.

Rozwiązaniem zadania jest program, który wywołuje odpowiednie funkcje z modułu `Pierwiastki` z odpowiednimi parametrami, a następnie wypisuje wyniki. Parametr maksymalnej liczby iteracji został ustawiony na 50, ponieważ nie został określony w zadaniu. W programie tym obliczenia zostały wykonane w arytmetyce Float64.

2.2.2. Wyniki

Wyniki działania programu znajdują się w tabeli poniżej.

Metoda	x_0	$f(x_0)$	Iteracje	Błąd
bisekcji	1.9337539672851562	-2.7027680138402843e-7	16	0
Newtona	1.933753779789742	-2.2423316314856834e-8	4	0
stycznych	1.933753644474301	1.564525129449379e-7	4	0

2.2.3. Wnioski

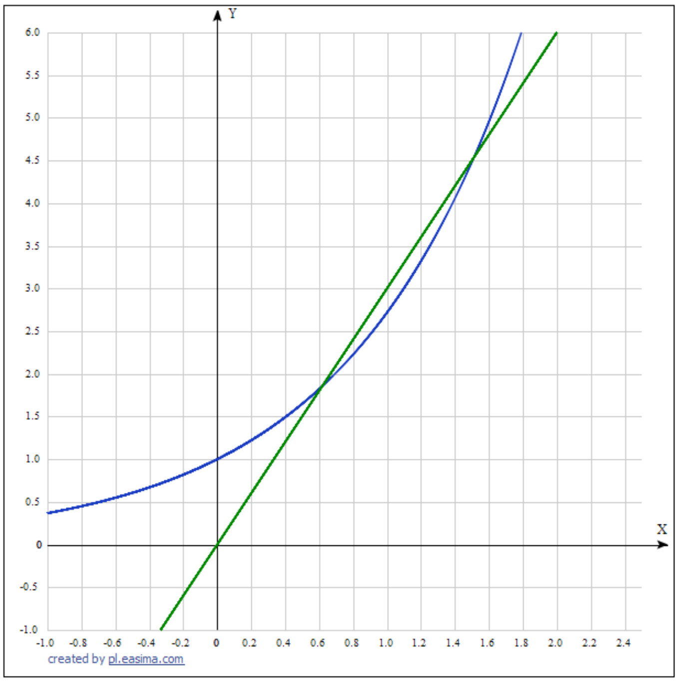
W tabeli powyżej widać, że każda z metod poprawnie oblicza pierwiastek równania z zadaną dokładnością. Metoda bisekcji robi to znacznie wolniej od pozostałych, wynika to jednak z jej kwadratowej zbieżności. Metoda Newtona jest natomiast zbieżna liniowo, a metoda stycznych – nadliniowo. Metodę bisekcji można jednak uznać za najstabilniejszą, ponieważ otrzymane dzięki niej wyniki są najbliższe podanej na wejściu dokładności. Z drugiej strony metody stycznych i siecznych wyznaczyły pierwiastki najbliższe rzeczywistej wartości pierwiastka tego równania.

2.3. Zadanie 5

2.3.1. Opis problemu i rozwiązanie

Problemem tego zadania było znalezienie metodą bisekcji wartości zmiennej x, dla której przecinają się wykresy funkcji $y = 3x$ oraz $y = e^x$ zgodnie z wymaganą dokładnością.

Zadanie to sprowadza się do obliczenia pierwiastków równania $3x - e^x = 0$. W zadaniu nie jest jednak podany przedział, na którym należy wykonać obliczenia, można to jednak wywnioskować z przedstawionego poniżej wykresu obu funkcji.



Ryc. 1 Wykres funkcji $y = 3x$ (zielony) oraz $y = e^x$ (niebieski)

Wyraźnie widać, że oba miejsca zerowe znajdują się w przedziale [0.4,1.8], metoda bisekcji wymaga jednak by wartości funkcji na końcach przedziałów były innego znaku, dlatego musimy szukać miejsc zerowych kolejno w dwóch przedziałach [0.4,0.8] oraz $[1.4, 1.6]$.

Program, który jest rozwiązaniem zadania, zawiera funkcję `printZerosBisect(a,b)`, która uruchamia funkcję `mbisekcji` dla przedziału $[a, b]$, a następnie wyświetla otrzymane wyniki. Wszystkie obliczenia zostały wykonane w arytmetyce Float64.

2.3.2. Wyniki

Wyniki działania programu znajdują się w tabeli poniżej.

Przedział	$\boldsymbol{x}$	$\boldsymbol{f(x)}$	**Iteracje**	**Błąd**
$[\mathbf{0.4, 0.8}]$	`0.619140625`	`9.066320343276146e-5`	`10`	`0`
$[\mathbf{1.4, 1.6}]$	`1.512109375`	`3.868007140983565e-5`	`9`	`0`

2.3.3. Wnioski

Analizując zawartość powyższej tabeli oraz wykresu przedstawionego w rozdziale 2.3.1 możemy stwierdzić, że otrzymane wyniki są poprawne. Dodatkowo poprawne wyznaczenie przedziałów, na których wykonano metodę bisekcji pozwoliło na znalezienie pierwiastka z dużą dokładnością w małej liczbie iteracji.

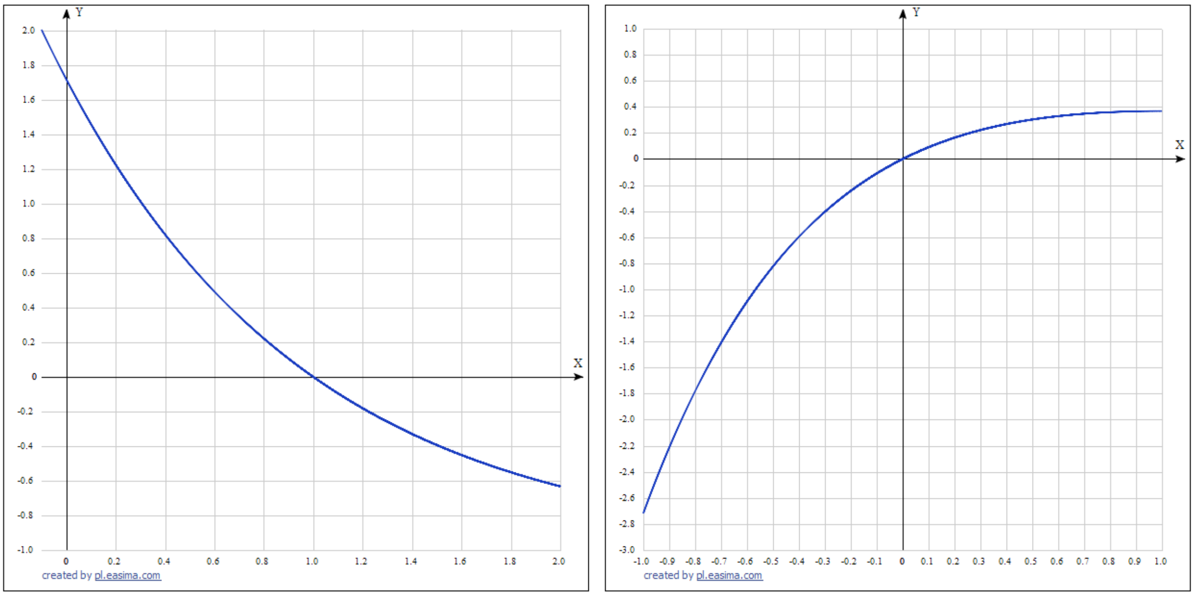
2.4. Zadanie 6

2.4.1. Opis problemu

W tym zadaniu należało znaleźć miejsca zerowe dwóch funkcji f_1 oraz f_2 za pomocą metod bisekcji, Newtona i siecznych. Wartości δ oraz ε zostały podane w zadaniu, natomiast przedziały oraz przybliżenia początkowe należało wyznaczyć samodzielnie.

2.4.2. Rozwiązanie

Do poprawnego wyznaczenia przedziałów i punktów początkowych należy przyjrzeć się wykresom funkcji podanych w zadaniu.



Ryc. 2 Wykresy funkcji $f_1(x) = e^{1-x} - 1$ (z lewej) oraz $f_2(x) = xe^{-x}$ (z prawej).

Na ich podstawie zostały wyznaczone różne dane testowe, dla których następnie zostały uruchomione funkcje z modułu `Pierwiastki`. Liczba maksymalnych iteracji `maxit = 1000`.

2.4.3. Wyniki

Wyniki działania programu dla metody bisekcji znajdują się w tabeli poniżej.

Przedział	x	$f(x)$	Iteracje	Błąd
f_1				
[0.8,1.2]	1.0	0.0	1	0
[-1.7,2.4]	1.0000091552734374	-9.155231528001906e-6	15	0
[0.9,10.0]	0.9999929428100586	7.05721484339783e-6	19	0
[-50.1113,2.884]	0.9999982233762745	1.7766253037621027e-6	22	0
f_2				
[-1.0,1.0]	0.0	0.0	1	0
[-0.1,10.0]	5.722045898346813e-7	5.722042624166823e-7	19	0
[-2.0,5.0]	-7.62939453125e-6	-7.629452739132958e-6	17	0
[-17.323,24.675]	9.474754335020789e-6	9.474664564476359e-6	21	0

Wyniki dla metody Newtona zawiera poniższa tabela.

x_0	x	$f(x)$	Iteracje	Błąd
f_1				
-1.0	0.9999922654776594	7.734552252003368e-6	5	0
0.0	0.9999984358892101	1.5641120130194253e-6	4	0
1.1	0.99999999991094	8.905987058938081e-11	3	0
2.0	0.9999999810061002	1.8993900008368314e-8	5	0
6.0	0.9999999573590406	4.264096031825204e-8	147	0
8.0	NaN	NaN	1000	1
15.0	15.0	-0.9999991684712809	0	2
f_2				
-1.0	-3.0642493416461764e-7	-3.0642502806087233e-7	5	0
-0.4	-1.8440313309425922e-8	-1.844031364947108e-8	4	0
0.0	0.0	0.0	1	0
1.0	1.0	0.36787944117144233	0	2
6.0	14.97432014974184	4.699833827208111e-6	8	0
8.0	14.636807965014	6.438155219843286e-6	6	0
15.0	15.0	4.588534807527386e-6	0	2

Wyniki dla metody siecznych przedstawia tabela poniżej.

x_0	x_1	x	$f(x)$	Iteracje	Błąd
f_1					
-2.0	-1.0	0.999999927401123	7.259887957467015e-8	8	0
-1.3	-0.8	0.999997394836639	2.6051667545434753e-6	7	0
0.1	1.3	0.9999999935820667	6.41793329592133e-9	5	0
-2.0	6.0	5.6042543962200835	-0.989990837907685	3	0
-100.0	-10.0	-10.0	59873.14171519782	1	0
f_2					
-2.0	-1.0	-6.982568902521766e-6	-6.982617658960467e-6	7	0
-1.3	-0.8	-4.277093437019623e-8	-4.2770936199549096e-8	7	0
0.1	1.3	2.4829988427991286e-7	2.48299822627088e-7	5	0
-2.0	6.0	14.812321857602736	5.466552122239313e-6	12	0
-100.0	-10.0	-10.0	-220264.65794806718	1	0

2.4.4. Wnioski

W pierwszej z powyższych tabel widać, że metoda bisekcji wyznacza pierwiastek równania z zadaną dokładnością niezależnie od poprawnie wybranego przedziału. Dodatkowo wybranie przedziału z miejscem zerowym w jego środku skutkuje natychmiastowym znalezieniem pierwiastka. Dla innych przedziałów metoda ta również znajduje poprawne wyniki, a liczba iteracji jest akceptowalnie mała. Stąd można wyprowadzić wniosek, że metoda ta jest globalnie zbieżna, a wybrany przedział nie ma na nią wpływu.

Kolejna tabela przedstawia wyniki dla metody Newtona, których analiza pozwala stwierdzić, że jest ona znacznie szybsza od metody bisekcji. Liczba iteracji, po których zwracany jest wynik nie przekracza 10, natomiast przy metodzie bisekcji oscyluje wokół 20. Widać również, że poprawnie wybrany punkt początkowy ma wyraźny wpływ na szybkość obliczeń. Gdy dla f_1 wybierzemy $x_0 > 1$ na początku zauważymy poprawę dokładności wyników, jednak coraz bardziej oddalając się od 1 można zauważyć znaczny wzrost liczby iteracji oraz otrzymanie błędnych wyników. Gdy powtórzymy to działanie dla f_2 zauważymy, że otrzymane pierwiastki są zupełnie niezbliżone do poprawnego wyniku. Natomiast gdy w f_2 wybierzemy $x_0 = 1$ program natychmiast zakończy działanie ze względu na to, iż pochodna w tym punkcie jest zbyt bliska 0. Prowadzi to do wniosków, że metoda Newtona jest szybsza od metody bisekcji (co wynika z jej zbieżności), jednak staje się bardzo niedokładna przy złym wyborze punktu początkowego.

Ostatnia z powyższych tabel dotyczy metody siecznych. Widać w niej, że wybranie złych punktów początkowych prowadzi do otrzymania wyników zupełnie niezgodnych z rzeczywistością. Stąd wniosek, że metoda siecznych po otrzymaniu punktów początkowych zbyt odległych od rzeczywistej wartości pierwiastka nie jest w stanie osiągnąć wartości wystarczająco zbliżonej do podanej dokładności w wyniku czego zwraca wynik bardzo odległy od faktycznego. Jednak po otrzymaniu poprawnych punktów początkowych staje się ona szybsza od metody bisekcji, podobnie jak metoda Newtona.

3. Podsumowanie

Przeprowadzone eksperymenty miały na celu bliższe zapoznanie się z trzema metodami wyznaczania pierwiastka równania $f(x) = 0$ oraz wyszczególnienie przypadków, w których metody te zawodzą bądź są szczególnie przydatne.