Sprawozdanie z trzeciej listy zadań na laboratorium
Obliczenia Naukowe

Paweł Rubin

Listopad 2019

1 Równania nieliniowe

Dana jest funkcja $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$. Zajmiemy się problemem znalezienia takiej liczby r, dla której:

$$f(r) = 0 \tag{1}$$

Poniżej omówię trzy metody numeryczne, służące do jego rozwiązania.

2 Metody numeryczne rozwiązywania równań nieliniowych

Będziemy rozważać *metody iteracyjne*. Metody te konstruują ciąg przybliżeń $x_0, x_1, x_2, \ldots$ według reguły

$$x_{n+1} := \phi(x_n) \wedge \lim_{n\to\infty} x_n = r \tag{2}$$

Trzecia lista zadań skupia się na implementacji następujących trzech metod rozwiązywania równań nieliniowych:

- Metoda bisekcji
- Metoda Newtona
- Metoda siecznych

2.1 Metoda bisekcji

Metoda bisekcji, tudzież metoda równego podziału czy metoda połowienia, opera się na następującyn twierdzeniu:

Twierdzenie (Bolzana-Cauchy'ego)**.** *Jeżeli funkcja ciągła $f(x)$ ma na końcach przedziału domkniętego wartości różnych znaków, to wewnątrz tego przedziału, istnieje co najmniej jeden pierwiastek równania $f(x) + 0$.*

Aby można było zastosować metodę bisekcji, muszą być spełnione założenia:

1. funkcja $f(x)$ jest **ciągła** w przedziale domkniętym $[a, b]$
2. funkcja przyjmuje **różne znaki** na końcach przedziału: $f(a)f(b) < 0$

2.1.1 Algorytm

Przebieg algorytmu wygląda następująco:

1. Sprawdzenie, czy pierwiastkiem równania jest punkt $x_1 = \frac{a+b}{2}$, czyli czy $f(x_1) = 0$. Jeżeli tak, algorytm kończy działanie, a punkt x_1 jest szukanym miejscem zerowym.
2. W przeciwnym razie, dopóki nie osiągniemy żądanej dokładności, czyli dopóki $|a - b| > \epsilon$:
   (a) Ponownie wyznaczane jest x_1, dzieląc przedział $[a, b]$ na dwa mniejsze przedziały: $[a, x_1]$ i $[x_1, b]$.
   (b) Wybierany jest przedział o znaku przeciwnym niż x_1 i odpowiednio górny albo dolny kraniec przedziału przyjmuje wartość x_1, tj.
      i. Jeżeli $f(a)f(x_1) < 0$, to $b = x_1$.
      ii. Jeżeli $f(b)f(x_1) < 0$, to $a = x_1$.
3. Po osiągnięciu żądanej dokładności algorytm kończy działanie, a szukany pierwiastek równania wynosi $\frac{a+b}{2}$.

2.2 Metoda Newtona

Metoda Newtona, zwana również **metodą Newtona-Raphsona** lub **metodą stycznych**, to kolejny algorytm iteracyjny, którym się zajmiemy.
W metodzie Newtona przyjmuje się następujące założenia dla funkcji f:

1. W przedziale $[a, b]$ znajduje się dokładnie jeden pierwiastek.
2. Funkcja ma różne znaki na krańcach przedziału tj: $f(a)f(b) < 0$.
3. Pierwsza i druga pochodna funkcji mają stały znak w tym przedziale.

2.2.1 Algorytm

W pierwszym kroku metody wybierany jest punkt startowy x_1 (zazwyczaj jest to wartość a, b, 0 lub 1), z którego następnie wyprowadzana jest styczna w $f(x_1)$. Odcięta punktu przecięcia stycznej z osią OX jest pierwszym przybliżeniem rozwiązania (ozn. x_2).

Jeśli to przybliżenie nie jest satysfakcjonujące, wówczas punkt x_2 jest wybierany jako nowy punkt startowy i wszystkie czynności są powtarzane. Proces jest kontynuowany, aż zostanie uzyskane wystarczająco dobre przybliżenie pierwiastka

Kolejne przybliżenia są dane rekurencyjnym wzorem:

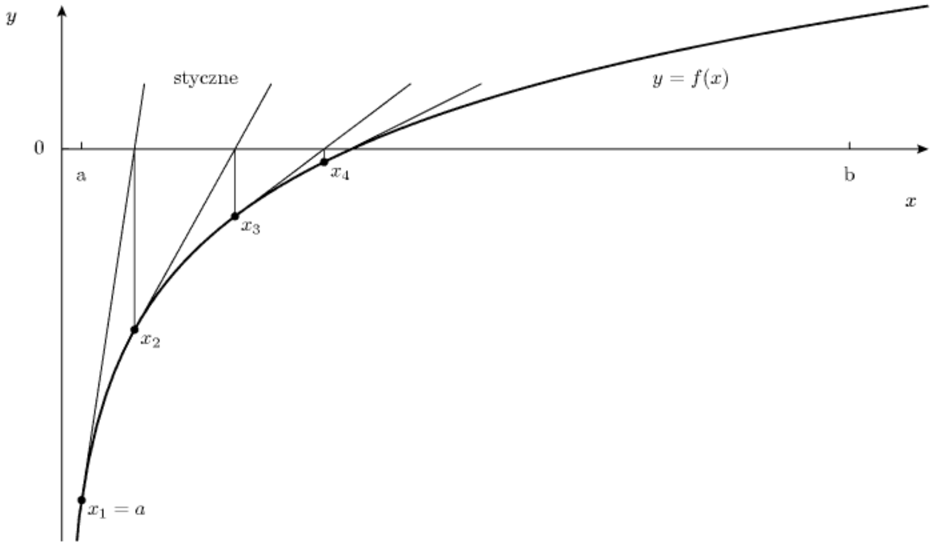
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{3}$$

Kończymy obliczenia, jeśli spełniony zostanie dowolny z poniższych warunków:

1. $|f(x_k)| \leqslant \epsilon$ - wartość funkcji w wyznaczonym punkcie jest bliska 0
2. $|x_{k+1} - x_k| \leqslant \epsilon$ - odległość pomiędzy kolejnymi przybliżeniami jest dość mała
3. $\frac{M}{2m}(x_k - x_{k-1})^2 \leqslant \epsilon$ - szacowany błąd jest dostatecznie mały
4. kryterium mieszane - punkty 1 i 2 jednocześnie

2.2.2 Ilustracja działania

Rysunek 1 przedstawia działanie metody Newtona w pierwszych czterech krokach.



Rysunek 1: Ilustracja działania metody Newtona, pokazane zostały cztery pierwsze kroki.

2.3 Metoda siecznych

Metoda siecznych (metoda Eulera) to kolejna metoda służaca do rozwiązywania równań nieliniowych - jest to algorytm interpolacji liniowej. Nazywana czasem bywa metodą cięciw.

2.3.1 Algorytm

Metoda polega na przyjęciu, że funkcja ciągła na dostatecznie małym odcinku w przybliżeniu zmienia się w sposób liniowy. Możemy wtedy na odcinku $[a, b]$ krzywą $y = f(x)$ zastąpić sieczną. Za przybliżoną wartość pierwiastka przyjmujemy punkt przecięcia siecznej z osią OX.

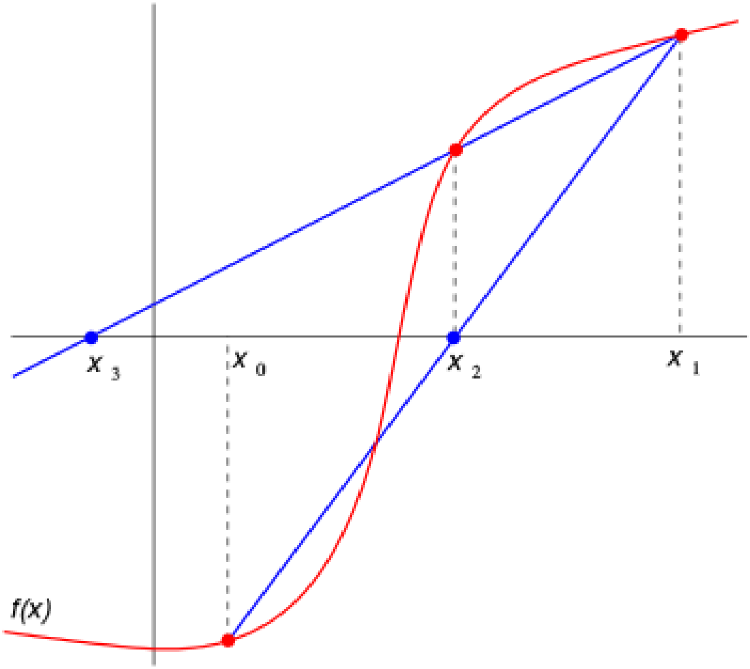
Metodę te można zapisać następującym wzorem rekurencyjnym:

$$\begin{cases} x_0 = a \\ x_1 = b \\ x_{n+1} = \frac{f(x_n)x_{n-1} - f(x_{n-1})x_n}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \end{cases}$$

Metoda siecznych ma tę zaletę, że do wykonania interpolacji za jej pomocą niepotrzebna jest znajomość pochodnej danej funkcji, gdyż przybliżamy ją za pomocą powyższego wzoru. Aby metoda się powiodła dla każdego n musi zachodzić $f(x_n)f(x_{n-1}) < 0$, gdyż tylko wtedy sieczna przechodząca przez punkty $(x_n, f(x_n))$ i $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$ przecina oś OX. Metoda ta nie zawsze jest zbieżna.

2.3.2 Ilustracja graficzna

Rysunek 2 przedstawia dwie pierwsze iteracje metody siecznych.



Rysunek 2: Dwie pierwsze iteracje metody siecznych. Czerwona krzywa przedstawia funkcję f, a niebieskie linie to sieczne. W tym konkretnym przypadku metoda siecznych nie jest zbieżna.

3 Porównanie wyników uzyskanych poszczególnymi metodami

.
Sprawdźmy wyniki poszczególnych metod dla równania:

$$\sin x - \frac{1}{2}x^2 = 0 \tag{4}$$

Tabela 1 przedstawia wyniki wykonań każdej z metod.

metoda	x_0	$f(x_0)$	it	err
bisekcji	1.9337539672851562	-2.7027680138402843e-7	16	0
newtona	1.933753779789742	-2.2423316314856834e-8	4	0
siecznych	1.933753644474301	1.564525129449379e-7	4	0

Tabela 1: Wyniki

Warto zauważyć różnice w liczbie wykonanych iteracji - metoda bisekcji potrzebowała 16 iteracji w przeciwieństwie do pozostałych metod, które potrzebowały zaledwie 4 iteracje.

Przypomnijmy analizę przedstawioną na wykładzie:

metoda	zbieżność	wykładnik α	uwagi
bisekcji	globalna	1	stosować hybrydowo
Newtona	lokalna	2	konieczność liczenia $f'(x)$
siecznych	lokalna	$\frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$	

Tabela 2: Porównanie metod

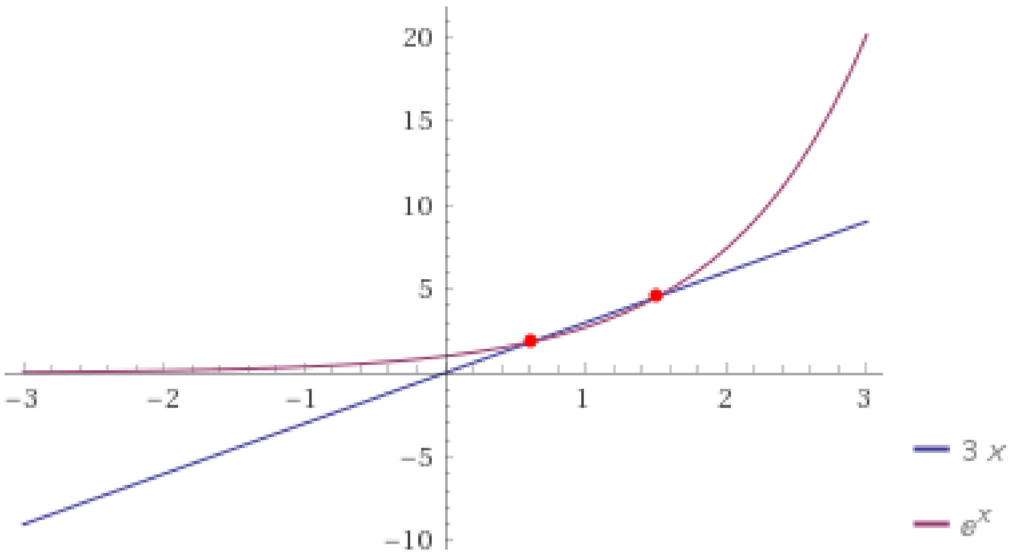
Można zatem dostrzec różnice w zbieżnościach poszczególnych metod.

4 Wyznaczanie punktu przecięcia dwóch funkcji za pomocą metody bisekcji

Aby wyznaczyć punkt przecięcia dwóch funkcji $f(x)$ oraz $g(x)$ należy znaleźć rozwiązanie równania:

$$f(x) - g(x) = 0 \tag{5}$$

Sprawdźmy działanie analizowanych metod na przykładzie funkcji $f(x) = e^x$ i $g(x) = 3x$.



Rysunek 3: Funkcje f oraz g i ich punkty przecięcia

Równanie, którego rozwiązania będziemy szukać to:

$$e^x - 3x = 0 \tag{6}$$

Z rysunku 3 weźmy przedziały $[0.0, 1.0]$ oraz $[1.0, 2.0]$. Obliczenia będziemy wykonywać z dokładnościami $\epsilon = 10^{-4}$ i $\delta = 10^{-4}$.

Tabela 3 przedstawia wyniki obliczeń przeprowadzonych za pomocą metody bisekcji.

	przedział	wartość	liczba iteracji
x_0	$[0.5, 1.0]$	0.619140625	9
x_1	$[1.0, 2.0]$	1.5120849609375	13

Tabela 3: Wyniki

Zauważmy, że do poprawnego wyznaczenia punktów przecięcia konieczna jest znajomość przebiegu analizowanych funkcji. W przeciwnym wypadku znalezienie rozwiązania może okazać się bardzo trudne.

5 Wykorzystanie metod na życiowym przykładzie

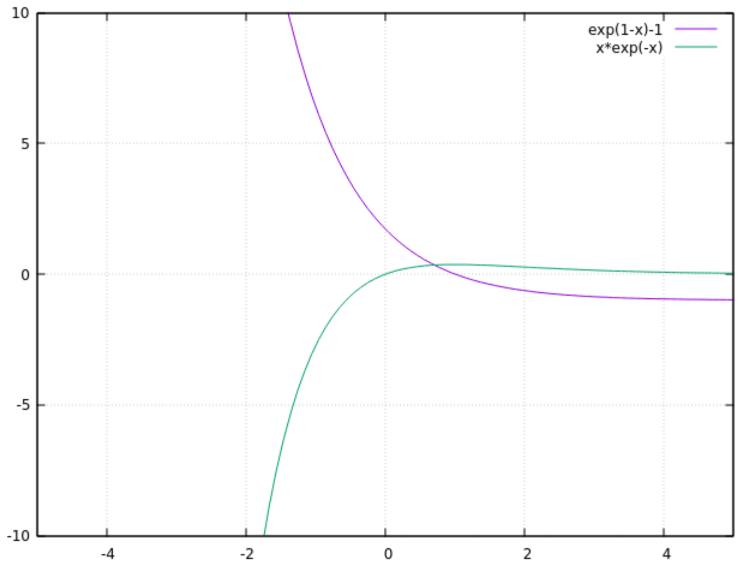
Skorzystajmy z przedstawionych wyżej metod do znalezienia miejsc zerowych następujących dwóch funkcji:

$$f_1(x) = e^{1-x} - 1 \tag{7}$$

oraz

$$f_2(x) = xe^{-x} \tag{8}$$

Spójrzmy jak wyglądają funkcje 7 i 8 na wykresie:



Rysunek 4: Przebieg funkcji 7 oraz 8

Spodziewamy się, że wyniki to odpowiednio 1 dla f_1 oraz 0 dla f_2. Przeprowadźmy jednak eksperymenty na różnych przedziałach.

f	$[a, b]$	r	$f(r)$	it	err
f_1	$[0.0, 2.0]$	1.0	0.0	1	0
f_1	$[0.5, 1.5]$	1.0	0.0	1	0
f_1	$[-21.0, 37.0]$	1.0000014305114746	-1.4305104514278355e-6	22	0
f_2	$[-0.5, 0.5]$	0.0	0.0	1	0
f_2	$[-3.14, 2.79]$	-2.746582031524841e-6	-2.7465895752480566e-6	15	0
f_2	$[-21.0, 37.0]$	9.5367431640625e-6	9.536652215026002e-6	20	0

Tabela 4: Metoda bisekcji

Warto zauważyć, że niedokładny przedział to duża liczba wykonanych iteracji oraz nie zawsze poprawny wynik.

Zaobserwujmy, że gdy wybierzemy przedział symetrycznie oddalony od właściwego miejsca zerowego, otrzymamy rozwiązanie już po jednej iteracji.

Sprawdźmy teraz jak poradzi sobie **metoda Newtona**. Niech *maxit* wynosi 64.

f	x_0	r	$f(r)$	it	err
f_1	0.99	0.9999999987583194	1.2416805361681327e-9	2	0
f_1	0.5	0.9999999998878352	1.1216494399945987e-10	4	0
f_1	-42.0	0.9999999998780821	1.2191803122618694e-10	47	0
f_2	0.1	-1.4906619716777104e-8	-1.490661993898442e-8	3	0
f_2	0.5	-3.0642493416461764e-7	-3.0642502806087233e-7	5	0
f_2	11.0	14.272123938290518	9.040322779745372e-6	3	0

Tabela 5: Metoda Newtona

Algorytm będzie próbował znaleźć miejsce zerowe, podążając w kierunku zbiegania funkcji do zera. Niepoprawnie dobrane przybliżenie początkowe skutkuje niepoprawnym wynikiem.

Przeprowadźmy teraz eksperyment z użyciem **metody siecznych**. Ponowie, ustalmy $maxit = 64$.

f	x_0	x_1	r	$f(r)$	it	err
f_1	0.9	1.2	0.9999974589012286	2.5411019999310724e-6	3	0
f_1	0.0	2.0	1.0000017597132702	-1.7597117218937086e-6	6	0
f_1	-21.0	37.0	36.999999983821084	-0.9999999999999998	1	0
f_2	0.1	0.2	-1.387555849546545e-7	-1.3875560420776818e-7	4	0
f_2	0.0	2.0	0.0	0.0	1	0
f_2	-21.0	37.0	37.0	3.1572276215253042e-15	1	0

Tabela 6: Metoda siecznych

Warto zauważyć wpływ dobrania początkowych przybliżeń na wynik końcowy. Niepoprawnie dobrane wartości skutkują w złych wynikach. Widać to doskonale na przykładzie funkcji f_2, która zbiega do zera.

Najważniejszym krokiem w wykorzystaniu owych metod jest odpowiednie dobranie wartości początkowych, które muszą być możliwie bliskie rzeczywistemu rozwiązaniu.

Metoda Newtona - eksperymenty z przybliżeniem początkowym

Co się stanie, gdy w **metodzie Newtona** dla f_1 wybierzemy $x_0 \in (1, \infty]$? Czy dla f_2 możemy wybrać $x_0 = 1$? Co stanie się, gdy dla f_2 wybierzemy $x_0 > 1$?

Tabela 7 przedstawia wyniki eksperymentów.

f	x_0	r	$f(r)$	it	err
f1	1.2	0.999999974143462	2.585653846587377e-8	3	0
f1	2.0	0.9999999810061002	1.8993900008368314e-8	5	0
f1	5.0	0.9999996427095682	3.572904956339329e-7	54	0
f2	1.2	14.974320149741843	4.699833827208103e-6	8	0
f2	2.0	14.398662765680003	8.036415344217211e-6	10	0
f2	5.0	15.194283983439147	3.827247505782993e-6	9	0
f2	1.0	NaN	NaN	NaN	2

Tabela 7: Różne wartości początkowe dla **metody Newtona**

Gdy dla funkcji 7 wybierzemy $x_0 > 1$, **metoda Newtona** poradzi sobie z obliczeniem miejsca zerowego, ale im dalsze przybliżenie tym więcej iteracji wykona algorytm.

Oddalanie się od rzeczywistego miejsca zerowego w przypadku funkcji 8 skutkuje w błędnych wynikach końcowych, ponieważ funkcja zbiega do zera i algorytm podąża za kierunkiem zbiegania.

Dla przybliżenia początkowego $x_0 = 1$ algorytm zwraca błąd, ponieważ $f_2'(1) = 0$, ergo styczna będzie równoległa do osi OX - wyznaczenie miejsca zerowego w tym przypadku nie jest możliwe.