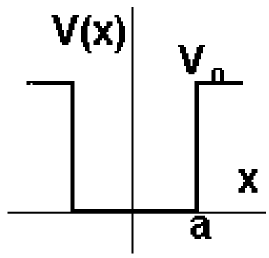
ROZWIĄZYWANIE RÓWNAŃ
(znajdowanie pierwiastków)

f(x)=0

(w ogólności równań nieliniowych)

<u>przykład:</u>
cząstka w jednowymiarowej prostokątnej, skończonej studni potencjału (mechanika kwantowa)



$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

poziomy energetyczne *E_i* znajdujemy rozwiązując uwikłane równania (dla stanów parzystych i nieparzystych) ***$\mathcal{F}(E)=0$***

$$\sqrt{\alpha E}\,tg(\sqrt{\alpha E}a)-\sqrt{\alpha(V_0-E)}=0$$
$$\sqrt{\alpha E}\,ctg(\sqrt{\alpha E}a)+\sqrt{\alpha(V_0-E)}=0$$
$$\alpha=\frac{2m}{\hbar^2}$$

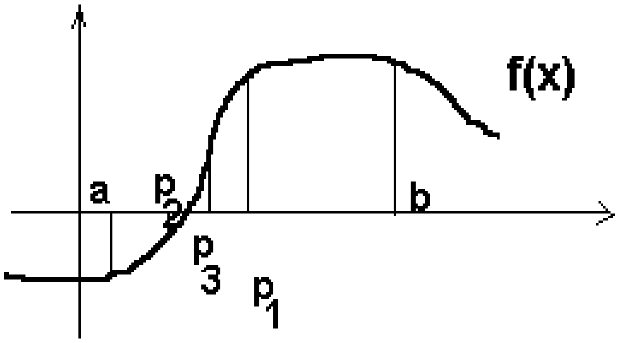
$$F(x)=0$$

Postępowanie iteracyjne:

x_k – kolejne przybliżenia do rozwiązania równania ***$F(x)=0$***

$$x_{n+1}=\Im(x_n,x_{n-1},\ldots,x_{n-k+1})$$

Metoda bisekcji



$p_1 = 1/2\,(a+b)$, ... $p_n = 1/2\,(p_{n-2} + p_{n-1})$

algorytm:

```
...
i:=1;
while i < N_max do
      begin
      p := a + (b-a)/2;
      if  ( fun(p)=0 )  or ( (b-a)/2 < epsilon ) then
            begin
            write( p, fun(p) );
            i := Nmax;
            end
      else
            i := i+1;
      if  f(a) f(p) > 0  then
            a := p
      else
            b := p;
      end;
...
```

zbieżność metody bisekcji - liniowa

$$\delta_{n+1} = \delta_n / 2$$

gdzie δ - przedział zawierający w kolejnym kroku zero funkcji;

jeśli ε jest żądaną tolerancją, to

(tolerancja – tzn. chcemy przybliżyć się do miejsca zerowego z dokładnością ε

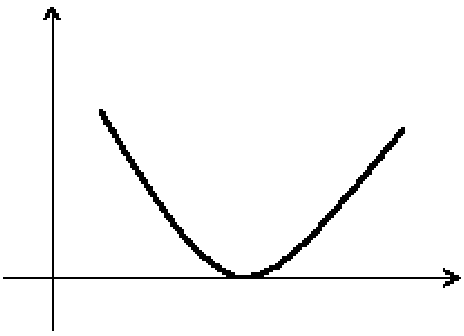
inaczej – chcemy zawęzić przedział, w którym jest miejsce zerowe do ε)

$$\varepsilon = \delta_0 / 2^n$$

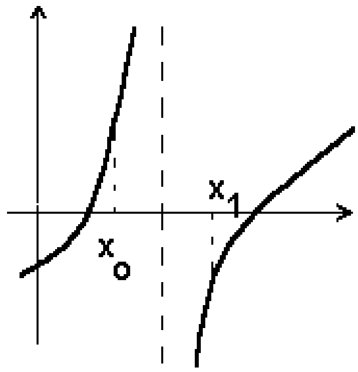
gdzie δ_o = (b-a)

i z góry znamy ilość iteracji $$n = \log_2 \frac{\delta_0}{\varepsilon}$$

- **metoda nieskuteczna dla pierwiastków wielokrotnych**

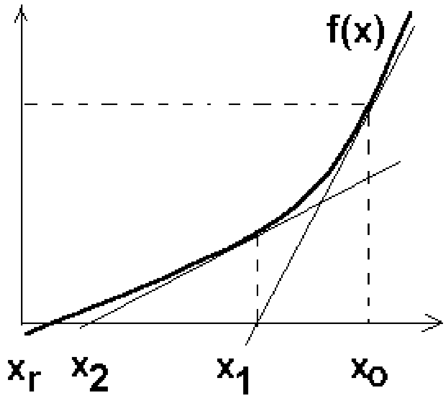


oraz



Metoda Newtona-Raphsona

(metoda stycznej)



startujemy z punktu x_o ;

równanie stycznej w x_o

$$y(x) = f^{/}(x_o)\,(x - x_o) + f\,(x_o)$$

następne przybliżenie do x_r w punkcie,

w którym y=0

$$x_1 = x_o - \frac{f(x_o)}{f^{/}(x_o)}$$

powtarzając tę konstrukcję

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f^{/}(x_k)}$$

aż

- $|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$ **lub**
- $\dfrac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_{k+1}|} < \varepsilon$ **lub**
- $|f(x_k)| < \varepsilon$

- **metoda szybko zbieżna**

metoda jest zawsze zbieżna do x_r jeśli:

- **w [x_o, x_r] nie ma innych pierwiastków,**
- **znak $f^{//}$ jest taki sam jak znak $f^{/}$**

<u>Tw.</u>

Jeśli $f \in C^2[a, b]$ **i** $x_r \in [a,b]$
takie, że $f(x_r) = 0$ **oraz** $f^{/}(x_r) \neq 0$ **,**
to istnieje takie $\delta > 0$, że
sekwencja $\{x_i\}_{i=1}^{\infty}$ **jest kwadratowo zbieżna do** x_r
dla dowolnego $x_o \in [x_r - \delta, x_r + \delta]$

(uwaga: istnieje, tzn. może być dowolnie małe)

<u>dowód</u>

oznaczmy błędy przybliżenia w krokach *n* i *n+1*

przez $e_n = x_n - x_r$ **i** $e_{n+1} = x_{n+1} - x_r$ **,**

$$e_{n+1} = e_n - \frac{f(x_n)}{f^{/}(x_n)} = \frac{e_n f^{/}(x_n) - f(x_n)}{f^{/}(x_n)}$$

z rozwinięcia w szereg Taylora

$$0 = f(x_r) = f(x_n - e_n) = f(x_n) - e_n f^{/}(x_n) + \frac{1}{2} e_n^{\ 2} f^{//}(\xi_n)$$

zatem

$$e_{n+1} = \frac{1}{2}\left(\frac{f^{//}(\xi_n)}{f^{/}(x_n)}\right) e_n^{\ 2}$$

wyrażenie w nawiasie jest pewną funkcją c(δ) przedziału początkowego δ,
biorąc maksymalną wartość $f^{//}$ i minimalna $f^{/}$ w δ, oraz zakładając, że w n-tym kroku $e_n < \delta$, mamy

$$e_{n+1} = c(\delta) e_n^{\ 2} \le \delta \cdot c(\delta) e_n = \rho e_n$$

dla $C(\delta)$ – uniezależnionego od *n*

ponieważ δ można wybrać dowolnie małe

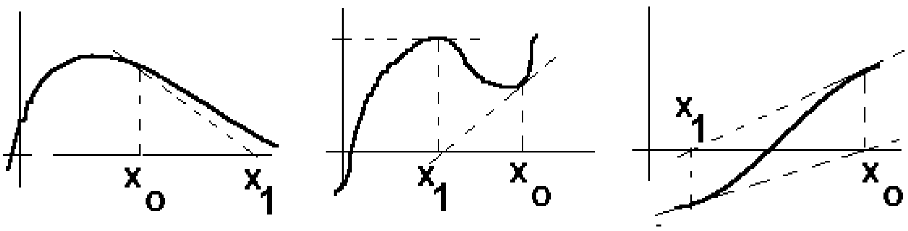
zatem $\delta \cdot c(\delta) = \rho < 1$ **i**

$$|e_n| \leq \rho^n |e_0|$$ **=>** $$\lim_{n\to\infty} \rho^n = 0$$ **=>** $$\lim_{n\to\infty} e_n = 0$$

Dzięki kwadratowej zbieżności, jeśli

$$|x_n - x_r| \leq 10^{-k}$$ **to** $$|x_{n+1} - x_r| \leq 10^{-2k}$$

Przykłady przypadkowego braku zbieżności w metodzie Newtona-Raphsona



gdy nie jest łatwo znaleźć *f'(x)* lub gdy *f (x)* dana jest w postaci stablicowanej, *f'(x)* wyznaczamy numerycznie → <u>metoda siecznych</u>

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

można pokazać, że

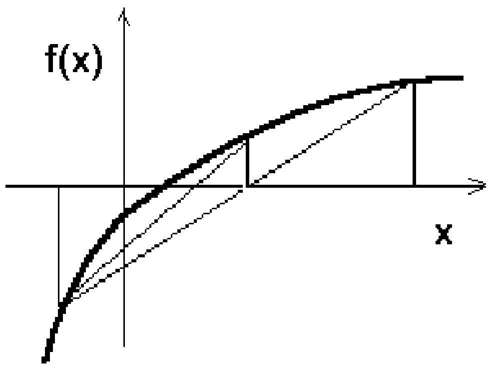
$$|e_{n+1}| \le c|e_n||e_{n-1}|$$

co w konsekwencji prowadzi do

$$|e_{n+1}| \le c|e_n|^{\alpha} \qquad \text{gdzie} \qquad \alpha = \tfrac{1}{2}(1+\sqrt{5})$$

Inna wersja metody siecznych:

bisekcja sieczną (***regula falsi***)

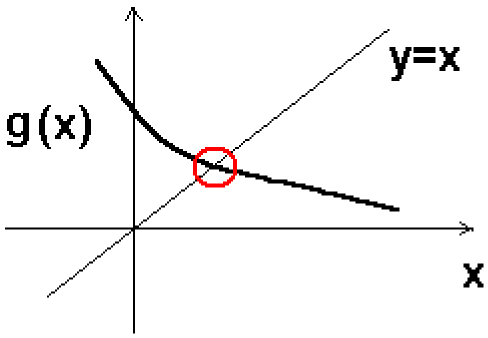


Metody iteracyjne punktu stałego

problem $f(x) = 0$ można sprowadzić do

$$g(x) = x \quad \text{gdzie} \quad g(x) = f(x) + x$$

startujemy z x_o **,**



$g(x_o) \rightarrow x_1, \quad g(x_1) \rightarrow x_2, \; ..$

$g(x_{n-1}) \rightarrow x_n$

o warunkach istnienia punktu stałego mówi
<u>twierdzenie:</u>

Jeśli $g \in C[a,b]$ **i** $g(x) \in [a,b]$ **dla wszystkich** $x \in [a,b]$ **to** g **ma punkt stały w** $[a,b]$**.**

dowód:
jeśli ***g(a)=a*** **lub** ***g(b)=b*** **to oczywiste.**
Jeśli nie, to zachodzi ***g(a)>a i g(b)<b*** **.**
Definiując ***h(x)=g(x)-x***, **funkcję ciągłą na [a,b] mamy**

$$h(a)=g(a)-a > 0 \quad i \quad h(b)=g(b)-b < 0$$

z twierdzenia o wartości średniej wynika, że musi istnieć

p **w [a,b], taki, że**

$$g(p)-p = 0$$

a zatem jest to punkt stały dla funkcji ***g(x).***

....

Jesli dodatkowo pochodna $g'(x)$ **istnieje na [a,b] i**

$$\forall_{x\in[a,b]} |g'(x)| < 1$$

to istnieje dokładnie jeden taki punkt ***p*** **, i dla dowolnego** p_o **w [a,b] , iteracja**

$$p_n = g(p_{n-1})$$

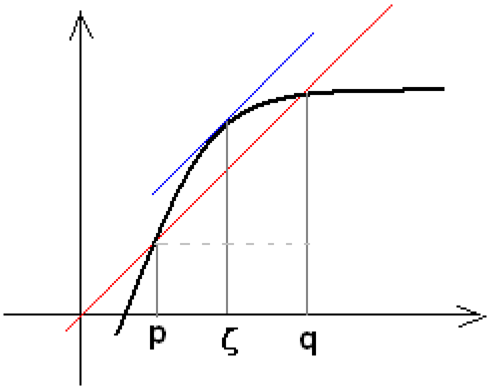
jest zbieżna do ***p*****.**

<u>Dowód:</u>

1. (istnienie jednego punktu stałego)
załóżmy, że istnieją dwa $p \neq q$ **,**

$$|p-q| = |g(p)-g(q)| \text{ ,}$$

z tw. o wartości średniej



$$|g(p)-g(q)| = |g'(\xi)||p-q| \leq k|p-q| < |p-q|$$

dla *k < 1* , co daje sprzeczność.

2. (zbieżność)

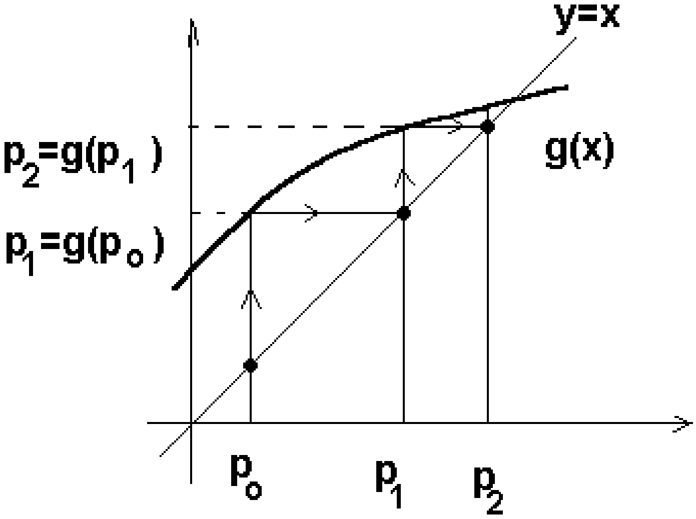
$$|p_n - p| = |g(p_{n-1}) - g(p)| = |g^{/}(\xi)||p_{n-1} - p| \le k|p_{n-1} - p|$$

to

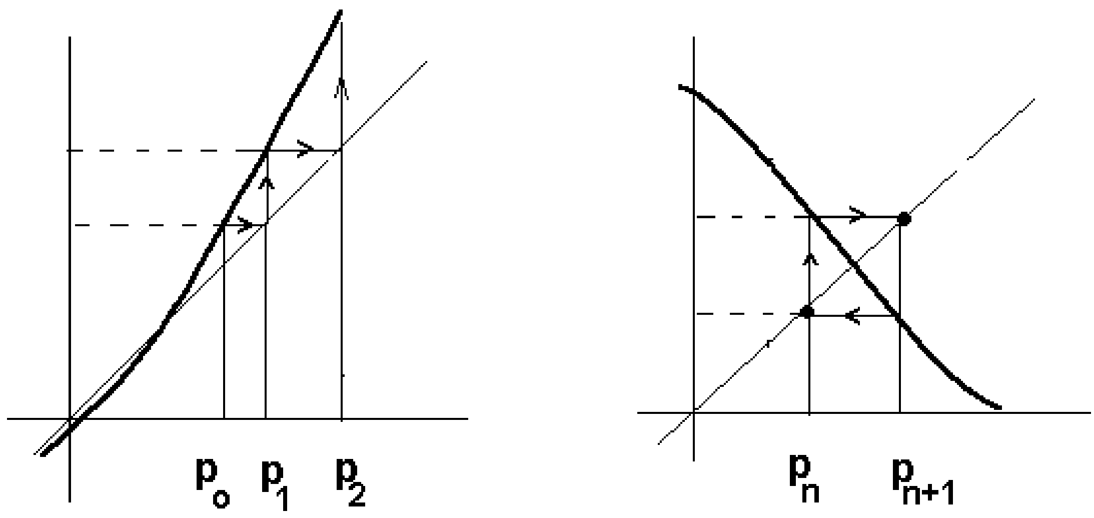
$$|p_n - p| \le k^n |p_o - p|$$

zatem dla *k < 1*

$$\lim_{n\to\infty} |p_n - p| \le \lim_{n\to\infty} k^n |p_o - p| = 0 \quad .$$



przykłady braku zbieżności


p_o
p_1
p_2
p_n
p_{n+1}