

Matematický ústav Slezské univerzity v Opavě

NUMERICKÉ METODY

RNDr. Karel Hasík, Ph.D.

Obsah

2	ÚVOD DO NUMERICKÉ MATEMATIKY	7
2.1	Rozdělení chyb	7
2.2	Zaokrouhlovací chyby	9
2.3	Celková chyba výpočtu	12
2.4	Chyba součtu, rozdílu, součinu a podílu	14
2.5	Dobře a špatně podmíněné úlohy	16
2.6	Stabilní algoritmy	17
2.7	Kontrolní otázky a cvičení	18
2.8	Výsledky	19
3	INTERPOLACE	20
3.1	Základní tvary interpolačního polynomu	23
3.1.1	Lagrangeův interpolační polynom	23
3.1.2	Newtonův interpolační polynom	24
3.2	Chyba polynomiální interpolace	28
3.3	Interpolace na ekvidistantní síti uzlů	31
3.4	Hermitův interpolační polynom	33
3.5	Splajnová interpolace	37
3.6	Kontrolní otázky a cvičení	44
3.7	Výsledky	45
4	METODA NEJMENŠÍCH ČTVERCŮ	47
4.1	Kontrolní otázky a cvičení	53
4.2	Výsledky	54
5	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ NELINEÁRNÍCH ROVNIC	55
5.1	Metoda prosté iterace	58
5.2	Newtonova metoda	60
5.3	Metoda sečen a regula falsi	64
5.4	Sturmova posloupnost	67
5.5	Kontrolní otázky a cvičení	71
5.6	Výsledky	72
6	NUMERICKÉ ŘEŠENÍ SYSTÉMŮ LINEÁRNÍCH ROVNIC	74
6.1	Metoda LU -rozkladu	76
6.2	Gaussova eliminační metoda	79
6.3	Iterační metody	82
6.3.1	Maticová norma	82

6.3.2	Jacobiova a Gaussova-Seidelova metoda	85
6.4	Kontrolní otázky a cvičení	90
6.5	Výsledky	92
7	NUMERICKÉ INTEGROVÁNÍ	93
7.1	Newtonovy-Cotesovy vzorce uzavřeného typu	94
7.2	Obdélníková metoda	96
7.3	Lichoběžníková metoda	97
7.4	Simpsonova metoda	100
7.5	Kontrolní otázky a cvičení	103
7.6	Výsledky	105
8	NUMERICKÉ METODY PRO ŘEŠENÍ OBYČEJNÝCH DIFEREN- CIÁLNÍCH ROVNIC	106
8.1	Cauchyho úloha	106
8.2	Princip numerických metod pro řešení ODR	107
8.3	Eulerova metoda	108
8.4	Modifikace Eulerovy metody	110
8.5	Metody typu Runge-Kutta	111
8.6	Picardova metoda postupných aproximací	113
8.7	Kontrolní otázky a cvičení	115
8.8	Výsledky	116

PŘEDMLUVA

Tento text představuje studijní oporu v rámci studia všech akreditovaných studijních programů v bakalářském a magisterském studiu na Matematickém ústavu Slezské univerzity v Opavě. Předpokládá se, že v dalších letech bude rovněž sloužit pro účely kombinovaného a distančního studia matematických oborů, jejichž akreditace se připravuje.

Náplň textu odpovídá potřebám výuky předmětu Numerické metody, který standardně běží ve třetím semestru studia v rozsahu dvou hodin týdně. V prezenčním studiu je přednáška doplněna ještě dvouhodinovým cvičením, kde se probraná látka aplikuje na konkrétní číselné příklady, které se řeší (často pomocí počítače) až k požadovanému výsledku.

Předpokladem pro úspěšné zvládnutí tohoto předmětu je absolvování základních kurzů z matematické analýzy a lineární algebry, které tvoří obecný základ pro pochopení metod a postupů zařazených do této studijní opory. Jedinou výjimku by snad mohla tvořit kapitola týkající numerického přístupu k řešení diferenciálních rovnic, se kterými se může čtenář setkat až později během studia.

Text je věnován základním numerickým metodám a protože odpovídající algoritmy pro realizaci těchto metod jsou poměrně jednoduché, nejsou zde uvedeny. Jejich konstrukci je věnován dostatečný prostor ve cvičeních.

Závěrem bych rád poděkoval všem, kteří mi pomohli při práci na přípravě této studijní opory. Především děkuji RNDr. Lence Kozákové, Ph.D. za možnost čerpat při psaní textu z materiálů, které při výuce tohoto předmětu využívala. Dále děkuji doc. RNDr. Kristíně Smítalové, CSc. za pečlivé přečtení a připomínky, jimiž přispěla ke zkvalitnění obsahu textu.

STRUČNÝ NÁHLED STUDIJNÍ OPORY

Tento studijní text si nekladl za cíl podat vyčerpávající přehled co největšího počtu používaných metod. Vždyť některá z témat, která jsou v textu pouze nastíněna, jako třeba splajnová interpolace nebo numerické metody pro řešení diferenciálních rovnic, by sama o sobě vystačila na jednosemestrální kurz. Snažili jsme se spíše uvést několik typických přístupů používaných při řešení úloh v každé oblasti.

Při výkladu problematiky jsme usilovali především o srozumitelnost zaváděných pojmů a ilustraci uváděných metod na příkladech. Tento přístup jsme se snažili udržet i za cenu toho, že v řadě případů jsme byli nuceni odvolat se na jinou literaturu, protože snaha o formálně dokonalé zdůvodnění všech faktů by byla v tomto případě kontraproduktivní.

V úvodní kapitole se zabýváme druhy chyb, které se mohou při řešení úloh numerickými prostředky vyskytnout. Je zde poukázáno na to, jak mohou tyto chyby ovlivnit, či případně zcela znehodnotit obdržený výsledek.

Další dvě kapitoly jsou pak věnovány problému aproximace. V první z nich se zabýváme tzv. interpolační aproximací a uvádíme způsob konstrukce některých typů funkcí, jejichž graf prochází danou množinou bodů. Druhá kapitola týkající se této problematiky pojednává o metodě nejmenších čtverců, která patří mezi nejpoužívanější aproximační metody, při kterých neusilujeme o to, aby sestrojená funkce procházela danými daty.

Čtvrtá kapitola je zaměřena na řešení nelineárních rovnic jedné proměnné. Kromě obecných metod, mezi které patří Newtonova metoda a metoda sečen, je zde větší pozornost věnována hledání kořenů polynomů pomocí sestrojení tzv. Sturmovy posloupnosti.

V další kapitole se seznámíte s některými metodami sloužícími k řešení systémů lineárních rovnic. Tyto metody jsou zde rozděleny do dvou skupin na metody přímé a iterační. Z přímých metod se zde věnujeme metodě LU-rozkladu a Gaussově eliminační metodě. Z iteračních metod jsou zde popsány Jacobiova a Gaussova-Seidelova metoda.

Předposlední kapitola je věnována numerickému integrování. Uvádíme v ní základní Newtonovy-Cotesovy vzorce pro výpočet integrálu, mezi které patří obdélníkové, lichoběžníkové a Simpsonovo pravidlo.

Závěrečná kapitola této studijní opory se týká numerického řešení obyčejných diferenciálních rovnic. Z řady metod, které patří do této problematiky, uvádíme Eulerovu metodu a Rungovu-Kuttovu metodu.

Ke každé z kapitol je připojen soubor otázek a cvičení umožňující čtenářům samostatně prověřit pochopení probrané látky.

2 ÚVOD DO NUMERICKÉ MATEMATIKY

... co by Vám měla přinést tato kapitola:

Při zkoumání reálných problémů a jejich následném řešení pomocí matematických prostředků většinou zjišťujeme, že nejsme schopni řešit tyto problémy v jejich původním rozsahu. Už při sestavování matematického modelu jsme nuceni původní problém zjednodušovat a brát v úvahu vliv pouze některých faktorů, protože jinak bychom obdrželi model, jehož analýza by byla neúměrně složitá. Dalších nepřesností se dopoušíme při volbě metody, kterou chceme použít k řešení sestaveného modelu. Jestliže poté dospějeme až ke konkrétnímu výpočtu, přesněji řečeno k realizaci příslušného algoritmu, zjišťujeme, že vstupní údaje bývají často zatíženy určitou chybou. Kromě toho je v průběhu výpočtu nutné zaokrouhlovat mezivýsledky, což je rovněž zdrojem nepřesností.

Souhrn všech výše uvedených faktorů způsobí pochopitelně rozdíl mezi obdrženým výsledkem a skutečným řešením původního problému. Takový výsledek má pro nás cenu jen tehdy, jestliže dovedeme odhadnout, jak velká je nepřesnost, které jsme se dopustili. Náplní této kapitoly je proto poukázat na obecná úskalí, která obnáší proces řešení úloh numerickou cestou. Větší pozornost bude přitom věnována zaokrouhlovacím chybám a dále pak dobré podmíněnosti úloh a stabilitě algoritmů. Pod posledními dvěma pojmy si může čtenář zatím představit jakousi "záruku" toho, že po ukončení výpočtu obdržíme dostatečně přesný výsledek.

2.1 Rozdělení chyb

Jak již bylo zmíněno v úvodu, při řešení daného problému provádíme jistá zjednodušení, a proto jsou chyby (nepřesnosti) nedílnou součástí řešení daného problému. Chyby můžeme rozdělit podle toho, v jaké oblasti vznikají.

- Chyby matematického modelu

Při snaze o popis nějakého reálného jevu vyvstává velmi často nutnost zanedbat některé skutečnosti, což vede k rozdílu mezi vytvořeným modelem a reálným stavem. Chyby tohoto druhu nazýváme chybami matematického modelu.

Příklad: Kalendář jako model tropického roku

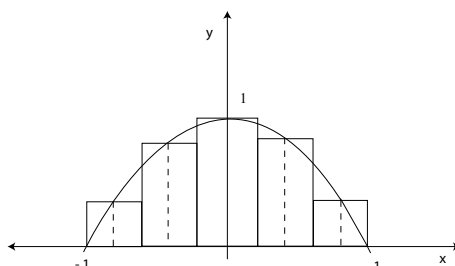
- **starořímský kalendář** měl dvanáct měsíců a jeho celková délka byla 355 dnů. Chyba tohoto kalendáře činila tedy 10 dnů. Pro vyrovnání tohoto rozdílu se vkládal na konec měsíce Februaria měsíc Mercedonius o 28-29 dnech. Pro vkládání Mercedonia neexistovalo žádné pravidlo a jeho vložení záviselo na rozhodnutí kněží.

- **juliánský kalendář** byl zaveden Juliem Caesarem na základě výpočtu alexandrijských astronomů, kteří stanovili délku roku na 365,25 dne. Kalendář měl dvanáct měsíců o celkové délce 365 dnů s tím, že každý čtvrtý rok bude mít o den více. Chyba tohoto kalendáře (jednalo se o zpoždění) činila jeden den za 128 let.
- **gregoriánský kalendář** byl zaveden papežem Řehořem XIII. v roce 1582, kdy nesoulad kalendáře s astronomickou skutečností byl již výrazně patrný. Délka roku při přesnějším vyjádření činí 365,2422 dne, což je asi o 11 minut a 14 sekund méně než předpokládá juliánský kalendář. Při úpravě kalendáře bylo vynecháno 10 dnů a stanoveno, že poslední rok století bude přestupný jen tehdy, když bude dělitelný číslem 400. Gregoriánský kalendář se předbíhá o 26 sekund ročně a pokud to čtenáře zajímá, je určeno, že rok 4840 n.l. nebude přestupný, přestože by podle pravidel měl být.
- Chyby vstupních údajů
Vstupní data jsou velmi často získávána pomocí různých měření, která jsou zatížena náhodnými chybami. Známe-li jejich velikost můžeme je brát při dalších výpočtech v úvahu.
Příklad: Zamítnutí heliocentrické hypotézy
V polovině 2. století př.n.l. se významný řecký astronom Hipparchos rozhodl prověřit heliocentrický model. Vyšel ze správného předpokladu, že pokud Země obíhá kolem Slunce, pak se musí v průběhu roku měnit poloha hvězd na nočním nebi (budou obíhat po elipsách). K ověření použil metodu paralaxy, ale žádný pohyb hvězd nenašel. Nelze jej totiž zaznamenat pouhým okem. Pro takové pozorování by hvězdy musely být k Zemi 200x blíže než je tomu ve skutečnosti. Chybný odhad vzdálenosti hvězd od Země lze považovat za chybu vstupních údajů (je ovšem obrovská). Tato měření vedla k zamítnutí heliocentrické hypotézy na 1700 let.
- Chyby numerické metody
Problémy z praxe lze často formulovat jako spojité úlohy. Jestliže tuto úlohu aproximujeme numerickou úlohou, která je diskrétní, vznikají chyby nazývané chybami metody. Např. při výpočtu určitého integrálu

$$\int_{-1}^1 (-x^2 + 1) dx$$

nahradíme obsah plochy pod grafem funkce $-x^2 + 1$ součtem obsahu předem daného počtu obdélníků (viz. obrázek 2.1). Bez znalosti chyby metody je obdržený výsledek prakticky bezcenný. Je proto velmi důležité u každé

metody nalézt odhad její chyby. Nalezení tohoto odhadu je bohužel velmi často mnohem náročnější než samotné řešení numerické úlohy.



Obr. 2.1

- **Zaokrouhlovací chyby**

Při výpočtech pracujeme s čísly zaokrouhlenými na určitý počet desetinných míst. Tyto chyby se mohou při výpočtu kumulovat nebo naopak navzájem rušit.

Příklad: Chceme-li v průběhu numerického výpočtu pracovat např. s číslem Π , jsme nuceni jej zaokrouhlit. V roce 2000 př.n.l. používali Babylóňané hodnotu $25/8=3,125$. Egypťané v té době používali hodnotu 3,16045. Archimedes stanovil pro jeho hodnotu rozmezí

$$3 + \frac{10}{71} < \Pi < 3 + \frac{10}{70}.$$

V roce 1615 nizozemský matematik Ludolf van Ceulen vyčíslil jeho hodnotu na 35 desetinných míst. Jeho početní výkon zaujal matematickou veřejnost natolik, že číslo Π nese jeho jméno.

2.2 Zaokrouhlovací chyby

Při numerických výpočtech (kalkulačka, počítače) se velmi často pracuje s aproximací \tilde{x} reálného čísla x . Proces nahrazení čísla x jeho aproximací nazýváme *zaokrouhlování*. Při zaokrouhlování se dopouštíme *zaokrouhlovacích chyb*. Následující definice udává dva způsoby, jak stanovit chybu aproximace.

Definice 2.1. Necht' x je přesná hodnota a \tilde{x} její aproximace.

Absolutní chybou (nepřesností) aproximace \tilde{x} nazýváme rozdíl $x - \tilde{x}$. Každé nezáporné číslo $\varepsilon(\tilde{x})$ takové, že

$$|x - \tilde{x}| \leq \varepsilon(\tilde{x}), \quad (2.1)$$

nazýváme *odhadem absolutní chyby*.

Relativní chybou aproximace \tilde{x} nazýváme podíl $\frac{x - \tilde{x}}{\tilde{x}}$. Každé nezáporné číslo $\delta(\tilde{x})$, pro které platí

$$\left| \frac{x - \tilde{x}}{\tilde{x}} \right| \leq \delta(\tilde{x}), \quad (2.2)$$

nazýváme *odhadem relativní chyby*.

Relativní chyba je nezávislá na volbě jednotky měřené veličiny x , což je jeden z důvodů, proč ji bereme za "míru přesnosti". Vztah (2.2) můžeme vyjádřit jako podíl

$$\delta = \frac{\varepsilon(\tilde{x})}{|x|}.$$

Je zřejmé, že

$$0 \leq \delta < 1,$$

proto se zejména v praxi relativní chyba vyjadřuje ve tvaru

$$\delta = \frac{100\varepsilon(\tilde{x})}{|x|} \%.$$

Následující příklad poukazuje na významnost relativní chyby.

Příklad 2.2. Necht' $x_1 = 0,32$, $x_2 = 0,08$ jsou přesné hodnoty a $\tilde{x}_1 = 0,32$, $\tilde{x}_2 = 0,08$ jsou jejich aproximace. Určete absolutní a relativní chybu těchto aproximací. Jsou aproximace \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 stejně hodnotná čísla?

Řešení. Absolutní chyby aproximací jsou

$$x_1 - \tilde{x}_1 = 0,02 \quad \text{a} \quad x_2 - \tilde{x}_2 = -0,02$$

a mají tedy, až na znaménko, stejnou velikost. Relativní chyby aproximací jsou

$$\left| \frac{x_1 - \tilde{x}_1}{x_1} \right| = 0,06, \quad \left| \frac{x_2 - \tilde{x}_2}{x_2} \right| = -0,2.$$

Rozdíl v relativních chybách ukazuje, že aproximace \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 nejsou stejně hodnotné. Tak by tomu bylo pouze v případě, že by tyto hodnoty byly konečným výstupem nějakého výpočtu, protože jejich absolutní chyba je stejná. Jestliže ale bude hodnot \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 dále použito jako dělitelů, potom se nejedná o stejně hodnotné aproximace, protože absolutní chyba čísla $1/x_1$ je několikanásobně menší než absolutní chyba čísla $1/x_2$.

Z hlediska způsobu zaokrouhlování rozlišujeme dva druhy zaokrouhlování:

- (i) "rounding", což je aritmetické zaokrouhlování,
- (ii) "chopping", tzv. odseknutí.

Pod aritmetickým zaokrouhlováním máme na mysli následující pravidla, která jsou čtenáři pravděpodobně již známa ze základní školy:

- pokud je první zanedbaná číslice menší než 5, ponechané číslice neměníme
- pokud je první zanedbaná číslice větší než 5, přičteme k první ponechané číslici jedničku
- pokud je první zanedbaná číslice rovna 5 a následuje po ní alespoň jedna nenulová číslice, přičteme k první ponechané číslici jedničku
- pokud je první zanedbaná číslice rovna 5 a po ní následují samé nuly, ponechanou číslici nezměníme pokud je sudá a přičteme k ní jedničku pokud je lichá

Při odseknutí jednoduše ponechané číslice neměníme a zanedbáme všechny číslice následující po té číslici, kterou jsme se rozhodli ponechat jako poslední.

Příklad 2.3. Zaokrouhlete oběma způsoby číslo 3, 5489635 na 3 desetinná místa.

Řešení.

- (i) "rounding": $3,5489635 \doteq 3,549$,
- (ii) "chopping": $3,5489635 \doteq 3,548$.

Pokud nebude v dalším textu uvedeno jinak, budeme používat vždy aritmetické zaokrouhlování. Při používání těchto pravidel absolutní chyba nepřesáhne nikdy

polovinu jednotky řádu poslední ponechané číslice. To nás vede k následující definici

Definice 2.4. Mějme dáno číslo x v desítkové soustavě v tzv. normovaném tvaru, tj.

$$x = 0.d_1d_2 \dots d_k d_{k+1} \dots \times 10^n.$$

Říkáme, že aproximace \tilde{x} čísla x má platnou j -tou číslici, jestliže platí

$$|x - \tilde{x}| \leq 0,5 \cdot 10^{n-j}. \quad (2.3)$$

Dále říkáme, že číslo x je správně zaokrouhleno, je-li každá číslice jeho aproximace platná.

Příklad 2.5. Určete počet platných míst aproximace $\tilde{x} = 3,1415$ čísla π .

Řešení. Dosadíme li do vztahu (2.3), dostaneme

$$|\pi - 3,1415| = |\pi - 0,31415 \times 10^1| = 0,000092653 \dots \leq 0,5 \times 10^{-3}.$$

Protože $n = 1$ a $n - j = 1 - j = -3$, dostáváme, že počet platných míst je $j = 4$. To ovšem znamená, že číslo π není správně zaokrouhleno na uvedený počet míst.

2.3 Celková chyba výpočtu

Předpokládejme, že hodnota

$$Y = F(x_1, \dots, x_n)$$

je jednoznačně určena hodnotami x_1, \dots, x_n . Funkční závislost F nahradíme numerickou metodou f ,

$$y = f(x_1, \dots, x_n).$$

Získáme tak teoretické řešení dané úlohy. Místo přesných hodnot $x_i, i = 1, \dots, n$, musíme velmi často používat jen jejich aproximace \tilde{x}_i ,

$$y' = f(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n).$$

Protože nelze všechny výpočty provádět úplně přesně (zaokrouhlování), bude se vypočtená hodnota

$$\tilde{y} = \tilde{f}(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)$$

lišit od hodnoty y' . Celkovou chybu výpočtu $Y - \tilde{y}$ lze pak vyjádřit jako součet jednotlivých dílčích chyb:

- Chyba metody: $Y - y = F(x_1, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_n)$.
- Primární chyba: $y - y' = f(x_1, \dots, x_n) - f(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)$.
- Sekundární chyby: $y' - \tilde{y} = f(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n) - \tilde{f}(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)$.

Primární chybu lze odhadnout pomocí následující věty.

Věta 2.6. *Necht' funkce $f(x_1, \dots, x_n)$ je spojitě diferencovatelná na množině*

$$G = \{x_i : |x_i - \tilde{x}_i| \leq \alpha_i, i = 1, \dots, n\}.$$

Pak

$$|f(x_1, \dots, x_n) - f(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)| \leq \sum_{i=1}^n A_i \alpha_i,$$

kde $A_i = \sup_G \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1, \dots, x_n) \right|, i = 1, \dots, n$.

Důkaz. Plyne z Lagrangeovy věty o střední hodnotě pro funkce n proměnných.

Poznámka 2.7.

- (i) Určit supremum parciálních derivací funkce f na množině G může být poměrně obtížné i pro nepřilíš složitou funkci. V praxi proto rozdíl

$$f(x_1, \dots, x_n) - f(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)$$

vyjadřujeme pomocí totálního diferenciálu $df(\tilde{x}, x)$, který má tvar

$$|f(x_1, \dots, x_n) - f(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)| \doteq df(\tilde{x}, x) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)(x_i - \tilde{x}_i).$$

a klademe

$$A_i = \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n) \right|.$$

Tento postup je ospravedlnitelný v případě "malých" změn funkce $f(x_1, \dots, x_n)$ na okolí bodu $(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)$.

- (ii) Odhad sekundární chyby lze provést po rozepsání algoritmu do konečné posloupnosti aritmetických operací.

2.4 Chyba součtu, rozdílu, součinu a podílu

Na základě věty 2.6 lze velmi jednoduše odvodit vztahy pro přibližné odhady chyb základních aritmetických operací.

- (i) **Součet:** V tomto případě má funkce f tvar $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ a pro její parciální derivace platí tedy vztahy $f_{x_1} = 1$, $f_{x_2} = 1$. Potom pro odhad absolutní chyby součtu dostáváme vztah

$$\varepsilon(\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2) = \varepsilon(\tilde{x}_1) + \varepsilon(\tilde{x}_2).$$

V důsledku toho má odhad relativní chyby součtu tvar

$$\delta(\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2) = \frac{\varepsilon(\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2|} = \frac{\varepsilon(\tilde{x}_1) + \varepsilon(\tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2|} = \frac{|\tilde{x}_1|\delta(\tilde{x}_1) + |\tilde{x}_2|\delta(\tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2|}.$$

- (ii) **Rozdíl:** Vztahy pro rozdíl se získají zcela obdobným postupem jako v případě součtu. Rozdíl bude pouze ve jmenovateli odhadu relativní chyby. Příslušné vztahy mají tvar

$$\varepsilon(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) = \varepsilon(\tilde{x}_1) + \varepsilon(\tilde{x}_2),$$

$$\delta(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) = \frac{|\tilde{x}_1|\delta(\tilde{x}_1) + |\tilde{x}_2|\delta(\tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2|}.$$

V případě, že jsou čísla \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 velmi blízká, vede to k nárůstu relativní chyby rozdílu ve srovnání s relativními chybami čísel \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 . V důsledku to znamená, jak uvidíme na příkladu, že při odčítání dvou velmi blízkých a správně zaokrouhlených čísel dochází k citelné ztrátě platných číslic.

- (iii) **Součin:** V tomto případě má funkce f tvar $f(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2$ a pro její parciální derivace platí tedy vztahy $f_{x_1} = x_2$, $f_{x_2} = x_1$. Pro odhad absolutní chyby součinu dostáváme tedy vztah

$$\varepsilon(\tilde{x}_1 \cdot \tilde{x}_2) = |x_2|\varepsilon(\tilde{x}_1) + |x_1|\varepsilon(\tilde{x}_2).$$

Odhad relativní chyby součinu je pak dán vztahem

$$\delta(\tilde{x}_1 \cdot \tilde{x}_2) = \frac{|x_2|\varepsilon(\tilde{x}_1) + |x_1|\varepsilon(\tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_1 \cdot \tilde{x}_2|} = \frac{\varepsilon(\tilde{x}_1)}{|\tilde{x}_1|} + \frac{\varepsilon(\tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_2|} = \delta(\tilde{x}_1) + \delta(\tilde{x}_2).$$

(iv) **Podíl:** V tomto případě má funkce f tvar $f(x_1, x_2) = x_1/x_2$ a pro její parciální derivace platí tedy vztahy $f_{x_1} = 1/x_2$, $f_{x_2} = -x_1/x_2^2$. Odhady absolutní a relativní chyby podílu mají tvar

$$\varepsilon\left(\frac{\tilde{x}_1}{\tilde{x}_2}\right) = \frac{\varepsilon(\tilde{x}_1)}{|\tilde{x}_2|} + \frac{|\tilde{x}_1|}{\tilde{x}_2^2} \varepsilon(\tilde{x}_2) = \frac{|x_2| \varepsilon(\tilde{x}_1) + |x_1| \varepsilon(\tilde{x}_2)}{\tilde{x}_2^2},$$

$$\delta\left(\frac{\tilde{x}_1}{\tilde{x}_2}\right) = \frac{|x_2| \varepsilon(\tilde{x}_1) + |x_1| \varepsilon(\tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_1 \cdot \tilde{x}_2|} = \frac{\varepsilon(\tilde{x}_1)}{|\tilde{x}_1|} + \frac{\varepsilon(\tilde{x}_2)}{|\tilde{x}_2|} = \delta(\tilde{x}_1) + \delta(\tilde{x}_2).$$

Příklad 2.8. Odhadněte chybu rozdílu $\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2$, jestliže $\tilde{x}_1 = 97,132$, $\tilde{x}_2 = 97,116$ a obě čísla mají stejný počet platných číslic.

Řešení. Rozdíl $\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2$ činí 0,016, což při absolutní chybě rozdílu $\varepsilon(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) = 0,5 \cdot 10^{-3} + 0,5 \cdot 10^{-3} = 0,001$ znamená, že výsledná hodnota má platnou pouze jednu číslici. Výpočet relativních chyb čísel \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 a jejich rozdílu dává $\delta(\tilde{x}_1) \doteq 0,5 \cdot 10^{-6}$, $\delta(\tilde{x}_2) \doteq 0,5 \cdot 10^{-6}$, $\delta(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) = \frac{0,001}{0,016} = 0,0625$.

Odhad relativní chyby rozdílu $\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2$ je tedy přibližně 12.500-krát větší než relativní chyby čísel \tilde{x}_1 , \tilde{x}_2 .

Příklad 2.9. Odhadněte chybu operace $f(x, y) = y \ln x$, použijete-li čísla $x^* = 1,25$, $y^* = 0,3125$, která jsou správně zaokrouhlena na uvedený počet míst.

Řešení. K odhadu chyby použijeme větu 2.6. Protože jsou uvedená čísla správně zaokrouhlena (všechny uvedené číslice jsou platné), platí

$$|x - \tilde{x}| = |x - 0,125 \times 10^1| \leq 0,5 \times 10^{-2} = \alpha_1,$$

$$|y - \tilde{y}| = |y - 0,3125| \leq 0,5 \times 10^{-4} = \alpha_2.$$

Nyní spočteme

$$A_1 = \left| \frac{\partial f}{\partial x}(\tilde{x}, \tilde{y}) \right| = \frac{y}{x}(\tilde{x}, \tilde{y}) = 0,25,$$

$$A_2 = \left| \frac{\partial f}{\partial y}(\tilde{x}, \tilde{y}) \right| = \ln x(\tilde{x}, \tilde{y}) = \ln 1,25 \doteq 0,223144.$$

Odhad celkové chyby výpočtu je

$$\begin{aligned} |f(x, y) - f(\tilde{x}, \tilde{y})| &\leq A_1 \alpha_1 + A_2 \alpha_2 \\ &\leq 0,25 \cdot 0,5 \cdot 10^{-2} + 0,223144 \cdot 0,5 \cdot 10^{-4} \\ &\leq 0,125 \cdot 10^{-2} + 0,111572 \cdot 10^{-4} \\ &\leq 0,12612 \cdot 10^{-2} \end{aligned}$$

2.5 Dobře a špatně podmíněné úlohy

Při řešení úloh numerickými prostředky postupujeme tak, že po sestavení algoritmu zadáme data a po jeho realizaci obdržíme vypočtené hodnoty. Můžeme tedy hovořit o postupu, který vstupním údajům přiřazuje údaje výstupní. Je-li toto přiřazení spojité zobrazení na množině vstupních údajů, říkáme, že numerická úloha je *korektní*. Tato vlastnost znamená, mimo jiné, jednoznačnost obdržených výsledků v závislosti na vstupních datech. Velká část nekorektních úloh jsou právě úlohy, které nejsou jednoznačně řešitelné. V dalším se budeme zabývat pouze nekorektními úlohami, které rozlišujeme na dobře a špatně podmíněné.

Řekneme, že korektní úloha je *dobře podmíněna*, jestliže malé změně vstupních údajů odpovídá malá změna řešení na výstupu. Podmíněnost korektních úloh charakterizujeme *číslem podmíněnosti úlohy* C_p , které je podílem relativní chyby na výstupu a relativní chyby na vstupu,

$$C_p = \frac{\text{relativní chyba výstupních údajů}}{\text{relativní chyba vstupních údajů}}.$$

Není přitom jednoznačně stanoveno, jaká hodnota čísla podmíněnosti je hraniční pro posouzení toho, zda úloha je dobře nebo špatně podmíněná. Je-li $C_p \approx 1$, je úloha dobře podmíněná. Pro dostatečně velká C_p (> 100) mluvíme o špatně podmíněné úloze. Je potřeba ještě zdůraznit, že podmíněnost úlohy nijak nesouvisí s tím, jaký jsme při řešení použili algoritmus, ale je to vlastnost úlohy samotné. Čili, u špatně podmíněné úlohy se budeme vždy potýkat s velkým rozdílem na výstupu při malé změně vstupu bez ohledu na námi navržený algoritmus řešení.

Příklad 2.10. Rozhodněte, zda je systém lineárních rovnic ($Ax = b$)

$$\begin{aligned}x_1 + 1,01x_2 &= 2,01, \\1,01x_1 + 1,02x_2 &= 2,03,\end{aligned}$$

špatně podmíněně.

Řešení. Řešení daného systému je $x_1 = x_2 = 1$. Změníme-li vektor pravých stran $b = (b_1, b_2)^T$ o hodnotu $\Delta b = -0,01$, tj. řešíme nový systém ($Ax^* = b^*$)

$$\begin{aligned}x_1^* + 1,01x_2^* &= 2, \\1,01x_1^* + 1,02x_2^* &= 2,02,\end{aligned}$$

dostaneme nové řešení $x_1^* = 2, x_2^* = 0$.

Relativní změna na vstupu je

$$\left| \frac{b - b^*}{b} \right| = \frac{\sqrt{(-0,01)^2 + (-0,01)^2}}{\sqrt{2,01^2 + 2,03^2}} = 0,00495.$$

Relativní změna na výstupu je $(x = (x_1, x_2)^T)$

$$\left| \frac{x - x^*}{x} \right| = \frac{\sqrt{(1-2)^2 + (1-0)^2}}{\sqrt{1+1}} = 1.$$

Tedy

$$C_p = \frac{1}{0,00495} = 202,02 > 100.$$

Závěr: Úloha je špatně podmíněna.

2.6 Stabilní algoritmy

Při numerickém řešení úlohy může nastat situace, kdy obdržíme velký rozdíl na výstupu při malých změnách vstupních hodnot, a přesto se nemusí jednat o špatně podmíněnou úlohu. Tato skutečnost může být způsobena také tím, že navržený algoritmus je citlivý na změnu vstupních údajů. Kromě toho je zapotřebí vždy počítat s vlivem zaokrouhlovacích chyb, které mohou mít někdy za následek naprosté selhání navrženého výpočetního postupu. Z numerického hlediska je důležité, aby navrhované algoritmy byly

- málo citlivé na změnu vstupních údajů; v takovém případě hovoříme o *dobře podmíněném algoritmu*
- málo citlivé na vliv zaokrouhlovacích chyb; v takovém případě hovoříme o *numericky stabilním algoritmu*.

Pokud je vliv obou zmiňovaných faktorů na výstupní údaje malý, nazývá se příslušný algoritmus stabilní. Na následujícím příkladě ukážeme, že nepřesnost vypočtených výsledků může být způsobena volbou nevhodného (nestabilního) algoritmu.

Příklad 2.11. Posloupnost $p_n = (\frac{1}{3})^n$ generujeme rekurzivně

(i) $p_n = \frac{1}{3}p_{n-1}, p_0 = 1$ a $n \geq 1$,

(ii) $p_n = \frac{10}{3}p_{n-1} - p_{n-2}, p_0 = 1, p_1 = \frac{1}{3}$ a $n \geq 2$,

přičemž zaokrouhlujeme čísla v normovaném tvaru na pět platných míst. Rozhodněte, zda se jedná o stabilní algoritmy.

Řešení. Spočtěme prvních 8 členů posloupností.

n	$p_n = \left(\frac{1}{3}\right)^n$	$p_n = \frac{1}{3}p_{n-1}$	$p_n = \frac{10}{3}p_{n-1} - p_{n-2}$
0	$0,10000 \times 10^1$	$0,10000 \times 10^1$	$0,10000 \times 10^1$
1	$0,33333 \times 10^0$	$0,33333 \times 10^0$	$0,33333 \times 10^0$
2	$0,11111 \times 10^0$	$0,11111 \times 10^0$	$0,11110 \times 10^0$
3	$0,37037 \times 10^{-1}$	$0,37036 \times 10^{-1}$	$0,37000 \times 10^{-1}$
4	$0,12346 \times 10^{-1}$	$0,12345 \times 10^{-1}$	$0,12230 \times 10^{-1}$
5	$0,41152 \times 10^{-2}$	$0,41150 \times 10^{-2}$	$0,37660 \times 10^{-2}$
6	$0,13717 \times 10^{-2}$	$0,13717 \times 10^{-2}$	$0,32300 \times 10^{-3}$
7	$0,45725 \times 10^{-3}$	$0,45723 \times 10^{-3}$	$-0,26893 \times 10^{-2}$
8	$0,15242 \times 10^{-3}$	$0,15241 \times 10^{-3}$	$-0,92872 \times 10^{-2}$

Vidíme, že první rekurentní vztah je stabilní, kdežto druhý algoritmus je nestabilní.

2.7 Kontrolní otázky a cvičení

Cvičení 2.1. Určete nejmenší interval, v němž musí ležet výsledek, použijete-li přesných hodnot místo zaokrouhlených. Předpokládá se, že všechna čísla v následujících výpočtech jsou správně zaokrouhlena. (Při výpočtech zaokrouhlujte na šest desetinných míst.)

(i) $2,547 \cdot 1,25,$

(ii) $\frac{6,58}{0,128}.$

Cvičení 2.2. Necht' jsou čísla $x^* = 0,013$; $y^* = 0,24$ správně zaokrouhlena na uvedený počet míst. Spočtete $f(x, y) = x \sin y$ pro uvedené údaje a určete počet platných míst.

Cvičení 2.3. Určete nejmenší interval, v němž musí ležet výsledek operace

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1(x_2 + x_3),$$

použijete-li přesných hodnot místo zaokrouhlených. Předpokládá se, že všechna čísla $x_1^* = 0,2$; $x_2^* = 0,26$; $x_3^* = 0,75$ jsou správně zaokrouhlena.

Cvičení 2.4. Předpokládejte, že máte n správně zaokrouhlených čísel x_1, \dots, x_n na d_i míst. Chcete spočítat součet těchto n čísel na $d = \min d_i$ míst. Záleží na

tom, zda všechna čísla napřed zaokrouhlíte a pak sečtete, nebo napřed sečtete a pak zaokrouhlíte? Pokud ano tak proč?

Cvičení 2.5. Posloupnost $p_n = (\frac{1}{3})^n$ generujeme rekurzivně

(i) $p_n = \frac{5}{6}p_{n-1} - \frac{1}{6}p_{n-2}$, $p_0 = 1$, $p_1 = \frac{1}{3}$ a $n \geq 2$,

(ii) $p_n = \frac{5}{3}p_{n-1} - \frac{4}{9}p_{n-2}$, $p_0 = 1$, $p_1 = \frac{1}{3}$ a $n \geq 2$,

přičemž zaokrouhlujeme čísla v normovaném tvaru na pět platných míst. Rozhodněte, zda se jedná o stabilní algoritmy.

Cvičení 2.6. Pro libovolné přirozené číslo n , $n \leq 1$, sestrojte algoritmus, který pro libovolné body x_0, \dots, x_n a x dá výstup

$$P_{n+1} = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n).$$

Cvičení 2.7. Dokažte vztahy pro odhad absolutní chyby aritmetických operací a odvoďte vztahy pro relativní chyby.

2.8 Výsledky

Cvičení 2.1.

(i) $\langle 3, 17039; 3, 19711 \rangle$

(ii) $\langle 51, 166381; 51, 646119 \rangle$

Cvičení 2.2. $f(x, y) = 0,309 \times 10^{-2}$ a počet platných míst je $j = 1$

Cvičení 2.3. $f(x_1, x_2, x_3) \in \langle 0, 1496; 0, 2545 \rangle$

Cvičení 2.4. Napřed sečíst a pak zaokrouhlit.

Cvičení 2.5.

(i) stabilní

(ii) nestabilní

Cvičení 2.6. $P := (x - x_0)$; $i := k + 1$; While $P \neq 0$ and $i \leq n$ Do $P := P(x - x_i)$

3 INTERPOLACE

... co by Vám měla přinést tato kapitola:

Chceme-li využít numerického přístupu k řešení úloh pocházejících, řekněme, z diferenciálního či integrálního počtu, jsme téměř vždy nuceni sáhnout k nahrazení analytických prostředků, které zde byly využity. V těchto úlohách se totiž vyskytují veličiny, které nemohou být počítány aritmeticky. Jako příklad bychom mohli uvést výpočet hodnoty určitého integrálu dané funkce. Abychom mohli vůbec přistoupit k vlastnímu výpočtu hodnoty integrálu pomocí aritmetických operací, je nutné nejdříve nahradit integrovanou funkci jinou funkcí, která bude pro tyto účely vhodná. Potřeba nahradit složitou funkční závislost závislostí jednodušší nás přivádí k jedné ze základních úloh numerické matematiky: aproximovat danou funkci jinou funkcí.

V této kapitole se budeme zabývat interpolační aproximací, tj. interpolací, při které vycházíme z konečného počtu daných funkčních hodnot, a snažíme se sestavit funkci, která v těchto bodech nabývá stejných hodnot jako původní funkce. Ukážeme, že velmi vhodnou třídou funkcí, která vyhovuje našim účelům, jsou polynomy, a seznámíme se rovněž se způsobem konstrukce takových polynomů. Závěrečná část kapitoly je věnována splajnové interpolaci, která eliminuje některé nevýhody polynomiální interpolace.

Funkční závislost, kterou se snažíme postihnout, nemusí být vždy známá. Velmi často vycházíme z hodnot, které jsme získali měřením, popř. evidencí nejrůznějších údajů. Následující tabulka udává, jak se vyvíjel počet obyvatel města Opavy v letech 1996 - 2006.

Rok	1996	1998	2000	2002	2004	2006
Počet obyvatel (tis.)	63.725	63.294	62.558	61. 582	60.726	60.095

Při pohledu na údaje shromážděné obdobným způsobem si můžeme klást následující otázky. Jsme schopni nějakým způsobem odhadnout počet obyvatel v roce 2001? Jsme schopni předpovědět vývoj počtu obyvatel Opavy na několik let dopředu?

Některé odhady tohoto typu je možné získat, jestliže sestrojíme funkci procházející danými hodnotami. Dostáváme se tak k tématu interpolace, které bude obsahem následující kapitoly. Obecně lze interpolační úlohu formulovat takto:

Je dáno $n + 1$ hodnot y_0, y_1, \dots, y_n reálné funkce f v bodech x_0, x_1, \dots, x_n , tj. $y_i = f(x_i)$. Ve třídě funkcí $\psi(x; a_0, a_1, \dots, a_n)$ jedné proměnné x , které jsou cha-

rakterizovány hodnotami parametrů a_0, a_1, \dots, a_n , najděte funkci, pro kterou platí

$$\psi(x_i; a_0, a_1, \dots, a_n) = y_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Body (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, n$ grafu funkce f nazýváme uzly (někdy také póly, z čehož vychází pojem interpolace, který znamená doplnění, popř. nahrazení grafu funkce f mezi póly). V závislosti na tvaru funkce $\psi(x; a_0, a_1, \dots, a_n)$ hovoříme o interpolaci polynomiální, splajnové, trigonometrické, racionální, exponenciální apod. V dalším se budeme zabývat nejprve interpolací polynomiální.

Už v úvodním odstavci kapitoly jsme naznačili, že vhodnou třídou funkcí, pomocí nichž aproximujeme jiné funkce, jsou algebraické polynomy, tj. množina funkcí následujícího tvaru:

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0,$$

kde n je nezáporné celé číslo a a_0, a_1, \dots, a_n jsou reálné konstanty. Tyto funkce mají řadu analytických předností např. v tom, že se snadno derivují a integrují, přičemž výsledkem těchto operací jsou opět polynomy. Další výhodou spočívá v tom, že změní-li se měřítko proměnné, změní se jen koeficienty, ale ne samotný tvar aproximace.

Tyto výhody třídy polynomů by ovšem neměly žádnou váhu, kdybychom neměli k dispozici analytický podklad pro domněnku, že pomocí této třídy můžeme dosáhnout aproximace "dostatečné" přesnosti. Při každé aproximační metodě musíme mít na paměti, že míra zjednodušení musí být nastavena tak, abychom informace, které jsme měli k dispozici, ztráceli v co nejmenší možné míře. V opačném případě se dopouštíme zbytečných nepřesností. Uspokojivého výsledku dosáhneme tehdy, jestliže navržený postup umožňuje vypočtené hodnoty libovolně zpřesňovat na požadovanou mez. Z tohoto hlediska je pro nás klíčová následující věta.

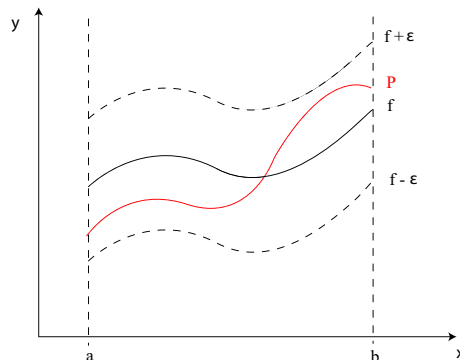
Věta 3.1. (*Weierstrassova věta o aproximaci*)

Je-li f spojitá funkce definovaná na intervalu $[a, b]$ a $\epsilon > 0$ je libovolné, pak existuje polynom $P(x)$ definovaný na intervalu $[a, b]$ takový, že platí

$$|f(x) - P(x)| < \epsilon$$

pro všechna $x \in [a, b]$.

Důkaz. Je možné nalézt např. v knize A. Ralstona [8]. Geometricky ilustruje význam této věty obrázek 3.1.



Obr. 3.1

Intuitivně si čtenář jistě dovede představit, že k dané množině bodů lze sestavit polynom, který jimi prochází. Dvěma body lze vést přímku (polynom prvního stupně), třemi parabolou popř. přímku atd. Ale dvěma body je také možné vést parabolou, přesněji řečeno nekonečně mnoho parabol, protože parabola není dvěma body jednoznačně určena. Tím před námi zároveň vyvstává otázka, za jakých podmínek a zda vůbec je možné nalézt právě jeden polynom procházející danými body. Odpověď na tuto otázku dává následující věta.

Věta 3.2. *Necht' jsou dány body (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, n$, takové, že $x_i \neq x_j$. Pak existuje jediný polynom $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$ nejvýše n -tého stupně s vlastností*

$$P_n(x_i) = y_i,$$

pro $i = 0, \dots, n$.

Důkaz. Z podmínky $P_n(x_i) = y_i$, pro $i = 0, \dots, n$, dostáváme soustavu $n + 1$ rovnic o stejném počtu neznámých, kterými jsou koeficienty a_0, a_1, \dots, a_n ve tvaru

$$\begin{aligned} a_n x_0^n + a_{n-1} x_0^{n-1} + \dots + a_1 x_0 + a_0 &= y_0 \\ a_n x_1^n + a_{n-1} x_1^{n-1} + \dots + a_1 x_1 + a_0 &= y_1 \\ &\vdots \\ a_n x_n^n + a_{n-1} x_n^{n-1} + \dots + a_1 x_n + a_0 &= y_n. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Determinant soustavy je tzv. Vandermondův determinant, který je nenulový pro navzájem různé body x_i , $i = 1, \dots, n$. Odtud vyplývá, že soustava má právě jedno řešení, což znamená, že existuje právě jeden polynom stupně nejvýše n splňující předepsané interpolační podmínky. \diamond

3.1 Základní tvary interpolačního polynomu

3.1.1 Lagrangeův interpolační polynom

Metoda určení interpolačního polynomu, kterou jsme použili v důkazu předchozí věty, se nazývá metoda neurčitých koeficientů. Pro praktické účely není příliš vhodná kvůli velké početní náročnosti při rostoucím n . Pro konstrukci interpolačního polynomu použijeme Lagrangeovu metodu. Podstata této metody spočívá v tom, že hledaný polynom nesestrojíme přímo, ale pomocí tzv. fundamentálních polynomů $l_i(x)$ $i = 0, \dots, n$, které mají stupeň n a platí pro ně

$$l_i(x_j) = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j. \end{cases}$$

Protože polynom $l_i(x)$ má kořeny $x_0, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{k+1}, \dots, x_{n-1}, x_n$, můžeme jej psát ve tvaru

$$l_i(x) = C_i(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_{n-1})(x - x_n),$$

který bude vyhovovat podmínce $l_i(x_i) = 1$, jestliže

$$C_i = \frac{1}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{k+1}) \dots (x_i - x_n)}.$$

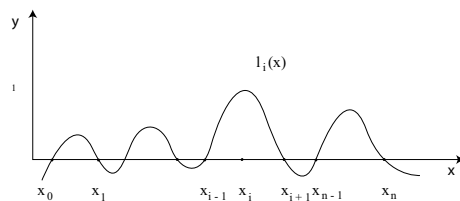
Dostali jsme

$$l_i(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{k+1}) \dots (x_i - x_n)}.$$

Hledaný polynom (viz. obr. 3.2), který nazýváme *Lagrangeův interpolační polynom* $L_n(x) = P_n(x)$, můžeme psát ve tvaru

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x), \quad (3.2)$$

neboť každý z fundamentálních polynomů nabývá nulové hodnoty ve všech daných uzlech kromě jednoho, ve kterém nabývá hodnoty 1. Znamená to, že hodnota jejich lineární kombinace v i -tém uzlu je určena pouze i -tým fundamentálním polynomem. Ostatní polynomy tuto hodnotu neovlivňují. Každý z nich byl sestrojen pouze proto, aby bylo zajištěno, že výsledná lineární kombinace nabude v i -tém uzlu předepsané hodnoty.



Obr. 3.2

Příklad 3.3. Sestrojte Lagrangeův interpolační polynom funkce $f(x)$ dané tabulkou

x_i	0	1	2	5
y_i	2	3	12	147

Řešení. Nejprve sestrojíme fundamentální polynomy:

$$l_0(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-5)}{(0-1)(0-2)(0-5)} = -\frac{1}{10}(x^3 - 8x^2 + 17x - 10),$$

$$l_1(x) = \frac{(x-0)(x-2)(x-5)}{(1-0)(1-2)(1-5)} = \frac{1}{4}(x^3 - 7x^2 + 10x),$$

$$l_2(x) = \frac{x(x-1)(x-5)}{2(2-1)(2-5)} = -\frac{1}{6}(x^3 - 6x^2 + 5x),$$

$$l_3(x) = \frac{x(x-1)(x-2)}{5(5-1)(5-2)} = \frac{1}{60}(x^3 - 3x^2 + 2x).$$

Dosadíme do vztahu (3.2)

$$\begin{aligned} L_3(x) &= 2 \cdot \left(-\frac{1}{10}(x^3 - 8x^2 + 17x - 10) \right) + 3 \cdot \frac{1}{4}(x^3 - 7x^2 + 10x) + \\ &\quad 12 \cdot \left(-\frac{1}{6}(x^3 - 6x^2 + 5x) \right) + 147 \cdot \frac{1}{60}(x^3 - 3x^2 + 2x) = \\ &= x^3 + x^2 - x + 2. \end{aligned}$$

3.1.2 Newtonův interpolační polynom

Lagrangeův interpolační polynom má v numerické matematice převážně teoretický význam. Využívá se např. při odvozování metod numerického derivování a integrování. Pro praktické účely však není příliš vhodný, protože při změně počtu uzlů je

nutné přepočítat všechny fundamentální polynomy $l_i(x)$. Mnohem vhodnější je použít následující způsob vyjádření, který ovšem vyžaduje zavedení pojmu poměrná diference.

Definice 3.4. Poměrnou diferencí k -tého řádu na množině bodů (x_i, f_i) , $i = 0, \dots, n$ definujeme rekurentně pomocí vztahů

$$f[x_i] = f_i, f[x_{i_0}, x_{i_1}] = \frac{f(x_{i_0}) - f(x_{i_1})}{x_{i_1} - x_{i_0}},$$

$$f[x_{i_0}, \dots, x_{i_k}] = \frac{f[x_{i_1}, \dots, x_{i_k}] - f[x_{i_0}, \dots, x_{i_{k-1}}]}{x_{i_k} - x_{i_0}}.$$

Věta 3.5. Interpolační polynom $P_n(x)$ určený body (x_i, f_i) , $i = 0, \dots, n$, můžeme zapsat ve tvaru

$$P_n(x) = f_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}). \quad (3.3)$$

Důkaz. Kvůli stručnosti zápisu je vhodné zavést označení

$$\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n).$$

Nechť $L_j(x)$ je Lagrangeův polynom určený body (x_i, y_i) , $i = 0, \dots, j$, $j \leq n$. Pak $L_n(x)$ lze vyjádřit ve tvaru

$$L_n(x) = L_0(x) + L_1(x) - L_0(x) + L_2(x) - L_1(x) + \dots + L_n(x) - L_{n-1}(x). \quad (3.4)$$

Spočtěme rozdíl

$$\begin{aligned} L_j(x) - L_{j-1}(x) &= \sum_{i=0}^j \frac{y_i \omega_{j+1}(x)}{(x - x_i) \omega'_{j+1}(x_i)} - \sum_{i=0}^{j-1} \frac{y_i \omega_j(x)}{(x - x_i) \omega'_j(x_i)} = \\ &= \frac{y_j \omega_{j+1}(x)}{(x - x_j) \omega'_{j+1}(x_j)} + \sum_{i=0}^{j-1} \frac{y_i}{(x - x_i)} \left[\frac{\omega_{j+1}(x)}{\omega'_{j+1}(x_i)} - \frac{\omega_j(x)}{\omega'_j(x_i)} \right]. \end{aligned}$$

Protože pro funkci $\omega_{j+1}(x)$ platí

$$\begin{aligned}\omega_{j+1}(x) &= \omega_j(x)(x - x_j), \\ \omega'_{j+1}(x) &= \omega_j(x) + (x - x_j)\omega'_j(x),\end{aligned}$$

je

$$\begin{aligned}L_j(x) - L_{j-1}(x) &= \\ &= \frac{y_j\omega_{j+1}(x)}{(x - x_j)\omega'_{j+1}(x_j)} + \sum_{i=0}^{j-1} \frac{y_i}{(x - x_i)} \left[\frac{\omega_j(x)(x - x_j)}{\omega'_{j+1}(x_i)} - \frac{\omega_j(x)}{\omega'_j(x_i)} \right] = \\ &= \frac{y_j(x - x_j)\omega_j(x)}{(x - x_j)\omega'_{j+1}(x_j)} + \sum_{i=0}^{j-1} \frac{y_i\omega_j(x)}{(x - x_i)} \left[\frac{(x - x_j)}{\omega'_{j+1}(x_i)} - \frac{1}{\omega'_j(x_i)} \right] = \\ &= \frac{y_j\omega_j(x)}{\omega'_{j+1}(x_j)} + \sum_{i=0}^{j-1} \frac{y_i\omega_j(x)}{(x - x_i)} \left[\frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)\omega'_j(x_i)} - \frac{1}{\omega'_j(x_i)} \right] = \\ &= \frac{y_j\omega_j(x)}{\omega'_{j+1}(x_j)} + \omega_j(x) \sum_{i=0}^{j-1} \frac{y_i}{(x - x_j)\omega'_j(x_i)} = \\ &= \omega_j(x) \sum_{i=0}^j \frac{y_i}{\omega'_{j+1}(x_i)} = \omega_j(x)f[x_0, \dots, x_j].\end{aligned}$$

Každý rozdíl $L_j(x) - L_{j-1}(x)$ pro $j = 0, 1, \dots, n$ lze tedy vyjádřit pomocí poměrné diference, tj.

$$L_j(x) - L_{j-1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{j-1})f[x_0, \dots, x_j].$$

Odtud a z (3.4) plyne, že interpolační polynom lze zapsat ve tvaru (3.3).

Poznámka 3.6. Interpolační polynom daný vztahem (3.3) se nazývá Newtonův interpolační polynom. Jedná se však jen o jinou formu zápisu interpolačního polynomu, protože podle věty 3.2 je interpolační polynom určen jednoznačně. Odlišné názvy Lagrangeův a Newtonův interpolační polynom se vztahují ke způsobu zápisu. Jedná se však o totožné polynomy.

Poznámka 3.7. Užíváme-li k výpočtu poměrných diferencí rekurentní vztah, pak je výhodné uspořádat výpočet do tabulky poměrných diferencí:

$$\begin{array}{ccccccc}
x_i & y_i & f[x_i, x_{k+1}] & f[x_i, x_{k+1}, x_{i+2}] & \dots & & \\
\hline
x_0 & \underline{y_0} & & & & & \\
& & > \underline{f[x_0, x_1]} & & & & \\
x_1 & y_1 & & > \underline{f[x_0, x_1, x_2]} & & & \\
& & > f[x_1, x_2] & & & & \\
x_2 & y_2 & & & \dots > \underline{f[x_0, \dots, x_n]} & & \\
& & & & & & \\
\vdots & \vdots & & > f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] & & & \\
& & > f[x_{n-1}, x_n] & & & & \\
x_n & y_n & & & & &
\end{array}$$

Příklad 3.8. Sestrojte Newtonův interpolační polynom funkce $f(x)$ dané tabulkou:

x_i	1	2	4	5
y_i	-1	4	-3	2

Řešení. Nejprve sestavme tabulku poměrných diferencí.

x_i	y_i	$f[x_i, x_{k+1}]$	$f[x_i, x_{k+1}, x_{i+2}]$	$f[x_i, x_{k+1}, x_{i+2}, x_{i+3}]$
1	<u>-1</u>			
		> <u>5</u>		
2	4		> <u>$-\frac{17}{6}$</u>	
		> $-\frac{7}{2}$		> <u>$\frac{17}{12}$</u>
4	-3		> <u>$\frac{17}{6}$</u>	
		> 5		
5	-2			

Uvedené diference jsme spočetli takto:

- Poměrné diference nultého řádu.
$$\begin{aligned}
f[x_0] &= y_0 = -1, \\
f[x_1] &= y_1 = 4, \\
f[x_2] &= y_2 = -3, \\
f[x_3] &= y_3 = 2.
\end{aligned}$$

- Poměrné diference prvního řádu.

$$f[x_0, x_1] = f[1, 2] = \frac{f[2] - f[1]}{2 - 1} = 4 + 1 = 5,$$

$$f[x_1, x_2] = f[2, 4] = \frac{f[4] - f[2]}{4 - 2} = \frac{-3 - 4}{2} = -\frac{7}{2},$$

$$f[x_2, x_3] = f[4, 5] = \frac{f[5] - f[4]}{5 - 4} = 2 + 3 = 5.$$

- Poměrné diference druhého řádu.

$$f[x_0, x_1, x_2] = f[1, 2, 4] = \frac{f[2,4] - f[1,2]}{4 - 1} = \frac{-\frac{7}{2} - 5}{3} = -\frac{17}{6},$$

$$f[x_1, x_2, x_3] = f[2, 4, 5] = \frac{f[4,5] - f[2,4]}{5 - 2} = \frac{5 + \frac{7}{2}}{3} = \frac{17}{6}.$$

- Poměrná diference třetího řádu.

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3] = f[1, 2, 4, 5] = \frac{f[2,4,5] - f[1,2,4]}{5 - 1} = \frac{\frac{17}{6} + \frac{17}{6}}{4} = \frac{17}{12}.$$

Dosadíme do vztahu (3.3).

$$\begin{aligned} P_3(x) &= -1 + 5(x - x_0) - \frac{17}{6}(x - x_0)(x - x_1) + \frac{17}{12}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &= -1 + 5(x - 1) - \frac{17}{6}(x - 1)(x - 2) + \frac{17}{12}(x - 1)(x - 2)(x - 4) \\ &= -1 + 5x - 5 - \frac{17}{6}(x^2 - 3x + 2) + \frac{17}{12}(x^3 - 7x^2 + 14x - 8) \\ &= \frac{17}{12}x^3 - \frac{51}{4}x^2 + \frac{100}{3}x - 23. \end{aligned}$$

3.2 Chyba polynomiální interpolace

Nyní se budeme zabývat otázkou, s jakou přesností aproximuje interpolační polynom P_n danou funkci v bodech různých od bodů $x_i, i = 0, \dots, n$. Zformulujeme nejdříve tvrzení, které udává vztah mezi poměrnou diferencí n -tého řádu a hodnotou n -té derivace v bodě $\xi \in (x_0, x_n)$. Z věty o střední hodnotě víme, že existuje $\xi \in (a, b)$, pro které platí

$$f'(\xi) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}.$$

Následující věta tento výsledek zobecňuje.

Věta 3.9. Předpokládejme, že $f(x) \in C^n[a, b]$ a $x_i, i = 0, \dots, n$ jsou navzájem různá čísla ležící v intervalu $[a, b]$. Pak existuje $\xi \in (a, b)$ takové, že

$$f^{(n)}(\xi) = n!f[x_0, \dots, x_n].$$

Důkaz. Označme $g(x) = f(x) - P_n(x)$. Protože polynom P_n a funkce f nabývají v bodech $x_i, i = 0, \dots, n$ stejné hodnoty, tj. $f(x_i) = P_n(x_i)$, má funkce alespoň $n + 1$ nulových bodů ležících v intervalu $[a, b]$. Podle zobecněné Rolleovy věty o střední hodnotě existuje číslo $\xi \in (a, b)$ takové, že $g^{(n)}(\xi) = 0$. Dostáváme

$$f^{(n)}(\xi) - P^{(n)}(\xi) = 0, \quad \text{neboli} \quad f^{(n)}(\xi) = P^{(n)}(\xi).$$

Protože $P_n(x)$ je polynom stupně n s vedoucím koeficientem $f[x_0, \dots, x_n]$, dostáváme

$$f^{(n)}(\xi) = P^{(n)}(\xi) = n!f[x_0, \dots, x_n].$$

Označme nyní chybu aproximace v bodech $x \neq x_i$ jako $E(x) = f(x) - P_n(x)$. Odhad hodnoty $E(x)$ udává věta

Věta 3.10. Předpokládejme, že $f(x) \in C^n[a, b]$ a $x_i, i = 0, \dots, n$ jsou navzájem různá čísla ležící v intervalu $[a, b]$. Pak ke každému $x^* \in [a, b]$ existuje číslo $\xi \in (a, b)$ takové, že

$$f(x^*) - P_n(x^*) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n).$$

Důkaz. Sestrojíme Newtonův interpolační polynom pro uzly x_i, \dots, x_i, x^* , tj. polynom stupně $n + 1$, který má tvar

$$P_{n+1}(x) = f_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, \dots, x_n, x^*](x - x_0) \dots (x - x_n).$$

Jelikož $P_{n+1}(x)$ je interpolační polynom také v bodě x^* , platí $f(x^*) = P(x^*)$ a zároveň

$$P_{n+1}(x^*) = P_n(x^*) + f[x_0, \dots, x_n, x^*](x^* - x_0) \dots (x^* - x_n).$$

Neboli

$$f_n(x^*) - P_n(x^*) = f[x_0, \dots, x_n, x^*](x^* - x_0) \dots (x^* - x_n),$$

což podle předchozí věty znamená, že

$$f_n(x^*) - P_n(x^*) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n).$$

Poznámka 3.11.

- (i) Jestliže lze najít pro $(n + 1)$ -ní derivaci funkce f odhad $|f^{(n+1)}(x)| \leq M$ pro všechna $x \in \langle a, b \rangle$, je možné chybu aproximace ohraničit shora, tj. platí

$$|f(x^*) - P_n(x^*)| = \frac{M}{(n+1)!} |(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)|.$$

- (ii) protože odhad chyby závisí také na velikosti součinu $(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$, vzniká otázka, jak volit uzly x_i , aby maximální absolutní chyba byla co nejmenší. Je zřejmé, že veličina $|(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)|$ bude minimální, jestliže pro aproximaci funkční hodnoty funkce f v bodě x^* vybereme uzly, které jsou tomuto bodu nejbližší.

Příklad 3.12. S jakou přesností lze pomocí interpolačního polynomu vypočítat $\sqrt{115}$, jestliže vybereme za uzly body $x_0 = 100, x_1 = 121, x_2 = 144$.

Řešení. Funkce $f(x) = \sqrt{x}$, $x = 115$ a $n = 2$. Nejprve spočteme $(n + 1)$ -ní derivaci funkce $f(x)$.

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{1}{2}x^{-\frac{1}{2}}, \\ f''(x) &= -\frac{1}{4}x^{-\frac{3}{2}}, \\ f^{(3)}(x) &= \frac{3}{8}x^{-\frac{5}{2}}. \end{aligned}$$

Abychom určili hodnotu M_{n+1} , musíme najít $\max_{t \in [100, 144]} |f^{(3)}(t)|$. Protože třetí derivace je kladná klesající funkce na intervalu $[100, 144]$, nabývá svého maxima v levém krajním bodě daného intervalu. Dostáváme tedy

$$M_3 = \left| \frac{3}{8} \frac{1}{\sqrt{100^{\frac{5}{2}}}} \right| = 0,375 \cdot 10^{-5}$$

a odhad chyby je

$$\begin{aligned} |E(115)| &\leq \frac{0,375 \cdot 10^{-5}}{3!} \cdot |(115-100)(115-121)(115-144)| \\ &\leq 1,63125 \cdot 10^{-3}. \end{aligned}$$

3.3 Interpolace na ekvidistantní síti uzlů

V tomto článku budeme předpokládat, že body x_0, \dots, x_n jsou *ekvidistantní*, tj. existuje $h \neq 0$ tak, že

$$x_i = x_0 + ih.$$

Číslo h nazýváme *krok*. Jestliže uzlové body mají tuto vlastnost, je možné jí využít k získání jednodušších vztahů pro výpočet koeficientů Newtonova interpolačního polynomu. Využíváme přitom pojmu obyčejná diference.

Definice 3.13. Obyčejnou diferenci k -tého řádu na množině bodů (x_i, f_i) , $i = 0, \dots, n$ definujeme rekurentně pomocí vztahů

$$\Delta f_i = f_{k+1} - f_i, \quad i = 0, \dots, n-1,$$

$$\Delta^k f_i = \Delta^{k-1} f_{k+1} - \Delta^{k-1} f_i.$$

Na ekvidistantní množině uzlů lze totiž poměrné diference nahradit obyčejnými diferenciemi. Přesněji řečeno platí mezi nimi vztah daný větou.

Věta 3.14. Na ekvidistantní množině uzlů (x_i, f_i) , $i = 0, \dots, n$ platí

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{\Delta^n f_0}{n!h^n}.$$

Důkaz. Provádí se matematickou indukcí a lze jej ponechat čtenáři jako cvičení.

Zavedeme-li nyní novou proměnnou s vztahem $x = x_0 + sh$, můžeme rozdíl $x - x_i$ vyjádřit ve tvaru $x - x_i = x_0 + sh - (x_0 + ih) = (s - i)h$ a Newtonův interpolační polynom lze psát ve tvaru

$$P_n(x) = P_n(x_0 + sh) = f_0 + shf[x_0, x_1] + s(s-1)h^2f[x_0, x_1, x_2] + \dots \\ + s(s-1)\dots(s-n+1)h^n f[x_0, \dots, x_n].$$

Jestliže nyní využijeme vztahu mezi obyčejnou a poměrnou diferencí, dostáváme

$$P_n(x_0 + sh) = f_0 + s\frac{\Delta f_0}{1!} + s(s-1)\frac{\Delta^2 f_0}{2!} + \dots + s(s-1)\dots(s-n+1)\frac{\Delta^n f_0}{n!}.$$

Poznámka 3.15. O obdržení vztahů hovoříme jako o Newtonově interpolačním polynomu pro interpolaci vpřed.

Jestliže uvažujeme uzly v opačném pořadí, tj. jako posloupnost x_n, x_{n-1}, \dots, x_0 dostáváme interpolační polynom ve tvaru

$$P_n(x) = f_n + f[x_{n-1}, x_n](x - x_n) + \dots + f[x_0, \dots, x_n](x - x_n) \dots (x - x_1).$$

Zavedením nové proměnné $x = x_n + sh$ můžeme rozdíl $x - x_i$ vyjádřit ve tvaru $x - x_i = x_n + sh - (x_0 + ih) = (n + s - i)h$ a interpolační polynom dostáváme ve tvaru

$$P_n(x) = P_n(x_n + sh) = f_n + shf[x_{n-1}, x_n] + s(s+1)h^2f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] + \dots + s(s-1) \dots (s+n-1)h^n f[x_0, \dots, x_n]$$

a s využitím vztahu mezi obyčejnou a poměrnou diferencí dostáváme

$$P_n(x_n + sh) = f_n + s \frac{\Delta f_{n-1}}{1!} + s(s+1) \frac{\Delta^2 f_{n-2}}{2!} + \dots + s(s-1) \dots (s+n-1) \frac{\Delta^n f_0}{n!}.$$

Poznámka 3.16. Uvedené formule nazýváme Newtonovým interpolačním polynomem pro interpolaci vzad.

Schematicky můžeme znázornit použití formulí vpřed a vzad takto:

x_0	y_0				
		$\underline{\Delta y_0}$			
x_1	y_1		$\underline{\Delta^2 y_0}$		
		Δy_1		$\underline{\Delta^3 y_0}$	
x_2	y_2		$\Delta^2 y_1$		
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	$\dots \underline{\Delta^n y_0}$
x_{n-2}	y_{n-2}		$\Delta^2 y_{n-3}$		
		Δy_{n-2}		$\Delta^3 y_{n-3}$	
x_{n-1}	y_{n-1}		$\Delta^2 y_{n-2}$		
		Δy_{n-1}			
x_n	y_n				

Příklad 3.17. Aproximujte hodnotu Besselovy funkce v bodech 1,5 a 2,0 polynomem druhého stupně, jestliže máte k dispozici její hodnoty dané tabulkou:

x_i	1,0	1,3	1,6	1,9
y_i	0,7651977	0,6200860	0,4554022	0,2818186

Řešení. Po sestavení tabulky poměrných diferencí

x_i	y_i	$f[x_i, x_{k+1}]$	$f[x_i, x_{k+1}, x_{i+2}]$	$f[x_i, \dots, x_{i+3}]$
1,0	0,7651977			
		> -0,4837057		
1,3	0,6200860		> -0,1087339	
		> -0,5489460		> 0,0658784
1,6	0,4554022		> 0,0494433	
		> -0,5786120		
1,9	0,2818186			

vidíme, že pro výpočet přibližných hodnot Besselovy funkce v daných bodech použijeme různé polynomy. Z tvaru pro odhad chyby polynomiální interpolace totiž víme, že to, jaké použijeme uzly, ovlivňuje velikost chyby. Zatímco pro výpočet přibližné hodnoty v bodě 1.5 využijeme první tři uzly, pro výpočet přibližné hodnoty v bodě 2.0 bude vhodnější vynechat první uzel a použít tři zbývající. Zároveň je zřejmé, že v prvním případě bude výhodné vyjít z Newtonovy formule pro interpolaci vpřed, zatímco ve druhém případě použijeme formuli pro interpolaci vzad.

Poznámka 3.18. Při výpočtu přibližné hodnoty dané funkce nemusíme předem vědět, kolik diferencí bude zapotřebí, abychom dosáhli požadované přesnosti. Budou-li k dosažení potřebné přesnosti zapotřebí všechny údaje tabulky, pak není podstatný rozdíl v tom, kterou formuli pro výpočet využijeme. Ale je-li možné dosáhnout požadované přesnosti pomocí méně diferencí než máme k dispozici, pak na volbě interpolačního vzorce záleží. Z toho, co jsme řekli, plyne, že Newtonův vzorec pro interpolaci vpřed uplatníme zejména na začátku tabulky, zatímco Newtonův vzorec pro interpolaci vzad bude vhodné využít pro interpolaci na konci tabulky.

3.4 Hermitův interpolační polynom

V tomto odstavci se budeme zabývat hledáním interpolačního polynomu v případě, že jsou předepsány nejen funkční hodnoty funkce f v daných bodech, ale také hodnoty derivací funkce f . Přesněji lze problém formulovat takto:

jsou dána reálná čísla $x_i, i = 0, \dots, n$ a nezáporná celá čísla $m_i, i = 0, \dots, n$. Hermitův interpolační problém spočívá v tom, že je třeba najít polynom $H(x)$, který nabývá v bodech x_i stejných hodnot jako funkce f a její derivace až do řádu

m_i pro $i = 0, \dots, n$. Musí být tedy splněny podmínky

$$H(x_i) = f(x_i), \quad H'(x_i) = f'(x_i), \dots, H^{m_i}(x_i) = f^{m_i}(x_i), \quad i = 0, \dots, n.$$

Polynom $H(x)$ budeme hledat ve třídě polynomů stupně nejvýše $M = \sum_{i=0}^n m_i + n$, tj. stupeň je roven počtu podmínek sníženém o 1. Pokud jde o jednoznačnost určení tohoto polynomu, platí obdobná věta jako v případě Lagrangeovy interpolace.

Věta 3.19. Pro daná reálná čísla x_i , $i = 1, \dots, n$, taková, že $x_i \neq x_j$ a hodnoty f_i^k , $i = 1, \dots, n$, $k = 1, \dots, m_i$ existuje jediný polynom stupně nejvýše M , kde $M = \sum_{i=0}^n m_i + n$ takový, že jsou splněny podmínky

$$H(x_i) = f(x_i), \quad H'(x_i) = f'(x_i), \dots, H^{m_i}(x_i) = f^{m_i}(x_i),$$

pro $i = 0, \dots, n$.

Důkaz. Je obdobou důkazu věty 3.2.

Poznámka 3.20. Doposud se čtenář mohl setkat se dvěma speciálními případy Hermitova interpolačního problému.

- (i) $n = 0$, čili je dán bod x_0 a číslo m_0 . Výsledný polynom je známý čtenáři z matematické analýzy pod názvem Taylorův polynom.
- (ii) V případě, že $m_i = 0$ pro $i = 0, \dots, n$, tj. nejsou zadány hodnoty derivací, se samozřejmě jedná o Lagrangeovu interpolaci.

V dalším se nebudeme zabývat Hermitovým interpolačním problémem obecně. Uvedeme konstrukci Hermitova interpolačního polynomu pro případ, kdy jsou v bodech x_0, \dots, x_n známé funkční hodnoty f_0, \dots, f_n a hodnoty prvních derivací f'_0, \dots, f'_n . Interpolovat funkci f za těchto podmínek znamená najít polynom $H(x)$ tak, aby

$$H(x_i) = f_i, \quad H'(x_i) = f'_i, \quad i = 0, \dots, n. \quad (3.5)$$

Kladených podmínek je celkem $2n + 2$, a proto bude hledaný Hermitův polynom stupně nejvýše $2n + 1$. Tento polynom, podobně jako Lagrangeův, budeme hledat jako lineární kombinaci jistých polynomů ve tvaru

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^n f_i h_i(x) + \sum_{i=0}^n f'_i \hat{h}_i(x),$$

kde $h_i(x)$, $\hat{h}_i(x)$ jsou polynomy stupně nejvýše $2n + 1$. Idea konstrukce je obdobná jako u Lagrangeova interpolačního polynomu, kdy jsme ke každému uzlu sestrojili

fundamentální polynom, který zajišťoval, aby výsledná lineární kombinace nabývala v příslušném uzlu předepsané hodnoty. Nyní je nutné postihnout také předepsané hodnoty první derivace, a proto budeme ke každému uzlu konstruovat dva polynomy $h_i(x)$, $\hat{h}_i(x)$ s následujícími vlastnostmi:

$$h_i(x_j) = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j, \end{cases} \quad h'_i(x_j) = 0; \quad \hat{h}_i(x_j) = 0, \quad \hat{h}'_i(x_j) = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j. \end{cases}$$

Z předepsaných podmínek vyplývá, že polynom $h_i(x)$ má kořeny $x_0, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{k+1}, \dots, x_{n-1}, x_n$, přičemž všechny tyto kořeny jsou dvojnásobné. Jelikož se jedná o polynom stupně $2n + 1$, vyplývá odtud jeho tvar

$$h_i(x) = (A_i x + B_i)(x - x_0)^2 \dots (x - x_{i-1})^2 (x - x_{k+1})^2 \dots (x - x_n)^2.$$

Bez újmy na obecnosti můžeme polynom $h_i(x)$ psát ve tvaru

$$\begin{aligned} h_i(x) &= (a_i x + b_i) \frac{(x - x_0)^2 \dots (x - x_{i-1})^2 (x - x_{k+1})^2 \dots (x - x_n)^2}{(x_i - x_0)^2 \dots (x_i - x_{i-1})^2 (x_i - x_{k+1})^2 \dots (x_i - x_n)^2} = \\ &= (a_i x + b_i) l_i^2(x), \end{aligned}$$

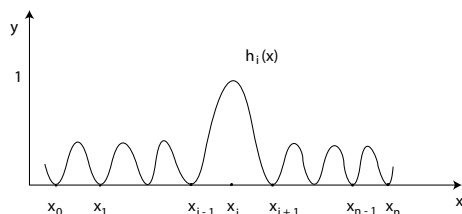
kde $l_i(x)$ jsou fundamentální polynomy nám známé z konstrukce Lagrangeova interpolačního polynomu. Koeficienty a_i, b_i určíme z podmínek $h_i(x_i) = 1, h'_i(x_i) = 0$. Jednoduchý výpočet, který lze přenechat čtenáři, dává

$$a_i = -2l'_i(x_i) \quad b_i = 1 + 2x_i l'_i(x_i).$$

Celkem má polynom $h_i(x)$ tvar

$$h_i(x) = (-2l'_i(x_i)x + 1 + 2x_i l'_i(x_i)) l_i^2(x).$$

Graficky je polynom $h_i(x)$ znázorněn na obr. 3.3.



Obr. 3.3

Polynom $\hat{h}_i(x)$ sestrojíme obdobným způsobem. Jedná se opět o polynom stupně $2n + 1$, který má kořeny x_0, \dots, x_n , přičemž s výjimkou kořene x_i se jedná o dvojnásobné kořeny. Předpokládaný tvar polynomu tedy je

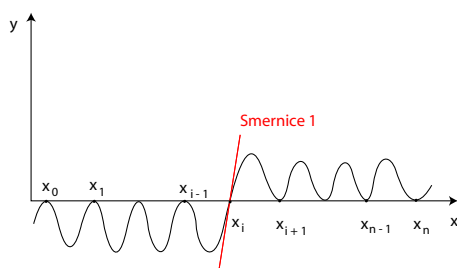
$$\hat{h}_i(x) = C_i(x - x_i)(x - x_0)^2 \dots (x - x_{i-1})^2(x - x_{i+1})^2 \dots (x - x_n)^2,$$

přičemž opět můžeme bez újmy na obecnosti psát

$$\hat{h}_i(x) = c_i(x - x_i)l_i^2(x).$$

Konstantu c_i určíme z podmínky $\hat{h}_i(x_i) = 1$, ze které vyplývá $c_i = 1$. Pro polynom $\hat{h}_i(x)$ (obr. 3.4) pak platí

$$\hat{h}_i(x) = (x - x_i)l_i^2(x).$$



Obr. 3.4

Na základě obdržených výsledků můžeme Hermitův interpolační polynom vyjádřit ve tvaru

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^n f_i(-2l_i'(x_i)x + 1 + 2x_i l_i'(x_i))l_i^2(x) + \sum_{i=0}^n f_i'(x - x_i)l_i^2(x).$$

Příklad 3.21. Sestrojte Hermitův interpolační polynom funkce $f(x)$ dané tabulkou

x_i	-1	1	2
f_i	4	5	3
f_i'	0,5	0,2	-0,4

Řešení. Nejdříve sestrojíme fundamentální polynomy:

$$l_0(x) = \frac{(x - 1)(x - 2)}{6}, \quad l_1(x) = -\frac{(x + 1)(x - 2)}{2}, \quad l_2(x) = \frac{(x + 1)(x - 1)}{3}.$$

a jejich derivace

$$l'_0(x) = \frac{1}{6}(2x - 3), \quad l'_1(x) = -\frac{1}{2}(2x - 1), \quad l'_2(x) = \frac{2x}{3}.$$

Hledaný interpolační polynom je tvaru

$$H_5(x) = 4\left(\frac{5}{6}x + \frac{8}{3}\right)\frac{(x-1)^2(x-2)^2}{36} + 5x\frac{(x+1)^2(x-2)^2}{4} + \dots$$

$$+ 0,5(x+1)\frac{(x-1)^2(x-2)^2}{36} + 0,2(x-1)\frac{(x+1)^2(x-2)^2}{4} + \dots,$$

kde výpočet členů na místě teček je ponechán čtenáři, jakož i případné další úpravy.

Také při odvozování chyby Hermitovy interpolace je možné postupovat zcela obdobným způsobem jako v případě Lagrangeovy interpolace. Dostáváme tak větu, kterou uvádíme bez důkazu.

Věta 3.22. Předpokládejme, že $f(x) \in C^{2n+1}\langle a, b \rangle$ a $x_i, i = 0, \dots, n$ jsou navzájem různá čísla ležící v intervalu $\langle a, b \rangle$. Pak ke každému $x^* \in \langle a, b \rangle$ existuje číslo $\xi \in (a, b)$ takové, že

$$f(x^*) - H_{2n+1}(x^*) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} (x-x_0)^2(x-x_1)^2 \dots (x-x_n)^2,$$

kde $H_{2n+1}(x)$ je Hermitův interpolační polynom splňující podmínky (3.5).

Poznámka 3.23. Pro odhad chyby při Hermitově interpolaci platí

$$|f(x) - H_{2n+1}(x)| \leq \frac{M_{2n+2}}{(2n+2)!} |(x-x_0)(x-x_1) \dots (x-x_n)|^2,$$

kde $M_{2n+2} = \max_{x \in \langle a, b \rangle} |f^{(2n+2)}(x)|$. Tento vztah je opět obdobou vztahu udávajícího odhad chyby při Lagrangeově interpolaci. Je zřejmé, že také zde má na velikost chyby vliv vzdálenost zvolených uzlů x_0, \dots, x_n od bodu x^* .

3.5 Splajnová interpolace

Nevýhodou polynomiální interpolace je skutečnost, že případná změna některého z uzlů má vliv na celkové chování aproximující funkce. Kromě toho už při relativně

nízkém počtu uzlů vykazují polynomy značnou míru oscilace. Nemusí být proto v řadě případů vhodným aproximačním nástrojem.

Alternativní přístup, který je možné použít, spočívá v rozdělení daného intervalu na několik podintervalů, přičemž na každém z nich konstruujeme obecně různý polynom aproximující danou funkci po částech. Takovými funkcemi jsou např. polynomiální splajny a jejich nejdůležitějším případem jsou kubické splajnové polynomy, stručněji nazývané kubické splajny. Při konstrukci po částech polynomiální funkce je potřeba zajistit v uzlových bodech, kde na sebe jednotlivé polynomy navazují, potřebnou hladkost, tj. spojitost derivací. Uvažujme pro jednoduchost tuto funkci

$$S(x) = \begin{cases} -x^3, & x < 0, \\ x^2, & x \geq 0. \end{cases}$$

Vidíme, že první derivace funkce S bude spojitá, zatímco druhá derivace je už nespojitou funkcí.

Při konstrukci kubického splajnu hledáme takové hodnoty prvních a druhých derivací splajnu v jeho uzlech, aby spojením jednotlivých částí splajnu vznikla funkce se spojitou druhou derivací na celém intervalu $[a, b]$.

Definice 3.24. Necht' je dána síť uzlů $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ s předepsanými hodnotami funkce f v bodech x_i . Kubickým splajnem (obr. 3.5) nazýváme funkci $S(x)$, která má následující vlastnosti:

- (i) $S(x)$ je kubickým polynomem $P_i(x)$ na každém intervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$,
- (ii) $S(x_i) = f(x_i)$ pro $i = 0, \dots, n$,
- (iii) $P_i(x_i) = P_{k+1}(x_i)$ pro $i = 1, \dots, n - 1$,
- (iv) $P'_i(x_i) = P'_{k+1}(x_i)$ pro $i = 1, \dots, n - 1$,
- (v) $P''_i(x_i) = P''_{k+1}(x_i)$ pro $i = 1, \dots, n - 1$.

Poznámka 3.25.

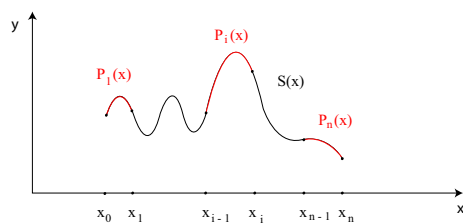
- (i) Z předchozí kapitoly víme, že k určení polynomu třetího stupně jsou zapotřebí čtyři podmínky, bez ohledu na to, zda se jedná o předepsané hodnoty funkce nebo její derivace. Splajn, který chceme sestavit, je tvořen n polynomy třetího stupně. K jeho konstrukci je tedy zapotřebí stanovit $4n$ podmínek. Funkční hodnoty funkce f předepisují každému polynomu P_i dvě hodnoty v krajních bodech intervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$, to je celkem $2n$ podmínek.

Požadavky na spojitost prvních a druhých derivací ve vnitřních uzlech sítě stanovují dalších $2n - 2$ podmínek. Jelikož žádné další podmínky stanoveny nejsou, obsahuje uvedená konstrukce dva volné parametry. V praxi bývají předepsané podmínky nejčastěji doplněny jednou z následujících dvojic podmínek:

- $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$.
- $S'(x_0) = f'(x_0), S'(x_n) = f'(x_n)$

Splňuje-li kubický interpolační splajn první dvojici podmínek nazývá se přirozený splajn, v případě druhé dvojice dodatečných podmínek hovoříme o úplném splajnu.

- (ii) Podotýkáme jen, že ačkoli kubický splajn nabývá v daných bodech stejných hodnot jako daná funkce, pro hodnoty první a druhé derivace už tomu tak není. V uzlových bodech je zaručena spojitost první a druhé derivace kubického splajnu, ale hodnoty těchto derivací jsou obecně různé od hodnot derivací aproximované funkce.



Obr. 3.5

Podmínky z definice kubického splajnu využijeme při jeho konstrukci. Na každém intervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$ bude splajn popsán polynomem třetího stupně, který budeme uvažovat ve tvaru

$$P_i(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3, \quad (3.6)$$

kde $i = 1, \dots, n$. Naším úkolem je odvodit vztahy pro výpočet koeficientů a_i, b_i, c_i a d_i , které určují jednotlivé polynomy P_i tvořící splajn S .

Dosažením hodnoty x_{i-1} do (3.6) dostaneme vztahy pro koeficienty a_i ,

$$P_i(x_{i-1}) = f_{i-1} = a_i. \quad (3.7)$$

Označme $h_i = x_i - x_{i-1}$. Z podmínky spojitosti, tj. $P_i(x_{i-1}) = P_{i-1}(x_{i-1})$, dostáváme

$$f_{i-2} + b_{i-1}h_{i-1} + c_{i-1}h_{i-1}^2 + d_{i-1}h_{i-1}^3 = f_{i-1}. \quad (3.8)$$

Spočteme první derivaci

$$P'_i(x) = b_i + 2c_i(x - x_{i-1}) + 3d_i(x - x_{i-1})^2.$$

Ze spojitosti první derivace, tj. $P'_i(x_{i-1}) = P'_{i-1}(x_{i-1})$, obdržíme vztah

$$b_i = b_{i-1} + 2c_{i-1}h_{i-1} + 3d_{i-1}h_{i-1}^2. \quad (3.9)$$

Nyní spočteme druhou derivaci

$$P''_i(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_{i-1}).$$

Ze spojitosti druhé derivace, tj. $P''_i(x_{i-1}) = P''_{i-1}(x_{i-1})$, získáme rovnost

$$2c_i = 2c_{i-1} + 6d_{i-1}h_{i-1}. \quad (3.10)$$

Ze vztahu (3.10) vyjádříme

$$d_{i-1} = \frac{2c_i - 2c_{i-1}}{6h_{i-1}} = \frac{c_i - c_{i-1}}{3h_{i-1}}. \quad (3.11)$$

Dosaďme (3.11) do (3.8) a vyjádříme b_{i-1} ,

$$b_{i-1} = \frac{f_{i-1} - f_{i-2}}{h_{i-1}} - \frac{h_{i-1}}{3}(c_i + 2c_{i-1}). \quad (3.12)$$

Do (3.9) dosadíme (3.11) a (3.12) a upravíme, tj.

$$3\left(\frac{f_i - f_{i-1}}{h_i} - \frac{f_{i-1} - f_{i-2}}{h_{i-1}}\right) = c_{i-1}h_{i-1} + 2c_i(h_{i-1} + h_i) + c_{k+1}h_i, \quad (3.13)$$

kde $i = 2, \dots, n$. Získali jsme tak systém $(n - 1)$ rovnic pro $(n - 1)$ neznámých c_i . Dříve než začneme tento systém řešit, je třeba si uvědomit, že

$$P''_1(x_0) = 2c_1 = 0 \quad \text{a tedy} \quad c_1 = 0.$$

Dále se v poslední rovnici soustavy objeví člen c_{n+1} . Opět klademe

$$c_{n+1} = 0.$$

Z druhé derivace v krajním bodě x_n , tj. $P_n''(x_n) = 2c_n + 6d_n h_n = 0$, dostáváme

$$d_n = -\frac{c_n}{3h_n}.$$

Pro určení koeficientů polynomů $P_i(x)$, které tvoří splajn $S(x)$, pracujeme se vztahy (3.7), (3.11), (3.12), (3.13).

Základní otázka, která nyní před námi vyvstala, je obdobná té, kterou jsme se zabývali u klasické polynomiální interpolace. Týká se toho, zda obdrženy systém rovnic má řešení, a pokud ano, zda je řešitelný jednoznačně. Odpověď na tuto otázku je kladná, ale potřebný aparát pro důkaz je potřeba hledat v lineární algebře. Důkaz následující věty je proto proveden s odkazem na příslušná tvrzení z lineární algebry.

Věta 3.26. *Pro funkci f , která je definovaná na $\langle a, b \rangle$, existuje jediný přirozený kubický splajn, tj. splajn splňující podmínky $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$.*

Důkaz. Aplikujeme-li okrajové podmínky, dostáváme

$$c_{n+1} = P_n''(x_n)/2 = 0, \quad P_0''(x_0) = 2c_1 + 6d_1(x_0 - x_0) = c_1 = 0.$$

Rovnice $c_1 = 0$, $c_{n+1} = 0$ tvoří společně s rovnicemi (3.13) soustavu $n + 1$ rovnic o $n + 1$ neznámých, kterou je možné zapsat ve tvaru $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, kde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & \dots & & \vdots \\ 0 & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_3 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & h_{n-1} & 2(h_{n-1} + h_n) & h_n \\ 0 & \dots & & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \left(\frac{a_3 - a_2}{h_2} - \frac{a_2 - a_1}{h_1} \right) \\ \vdots \\ 3 \left(\frac{a_{n+1} - a_n}{h_n} - \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} \right) \\ 0 \end{pmatrix}$$

a $\mathbf{x} = (\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_{n+1})^T$. Matice \mathbf{A} je ryze diagonálně dominantní matice, což na základě znalostí z lineární algebry zajišťuje jednoznačnost řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$.

Obdobné tvrzení, které platí pro úplný kubický splajn, uvádíme bez důkazu.

Věta 3.27. Pro funkci f , která je definovaná na $\langle a, b \rangle$, existuje jediný úplný kubický splajn, tj. splajn splňující podmínky $S'(x_0) = f'(x_0)$, $S'(x_n) = f'(x_n)$.

Příklad 3.28. Funkci $f(x) = \sin x$ interpolujte v bodech $x_0 = \frac{\pi}{2}$, $x_1 = \pi$, $x_2 = \frac{3\pi}{2}$, $x_3 = 2\pi$ přirozeným kubickým splajnem.

Řešení. Máme čtyři ekvidistantní uzly, proto $h_i = \frac{\pi}{2}$ pro $i = 1, 2, 3$. Hledáme 3 polynomy 3. stupně. Úkolem je najít 12 koeficientů:

$$\begin{aligned} a_1 \quad b_1 \quad c_1 \quad d_1 \\ a_2 \quad b_2 \quad c_2 \quad d_2 \\ a_3 \quad b_3 \quad c_3 \quad d_3. \end{aligned}$$

Nejprve spočteme funkční hodnoty

$$y_0 = 1, \quad y_1 = 0, \quad y_2 = -1, \quad y_3 = 0.$$

Sestavíme systém rovnic (3.13) s využitím rovnosti $c_1 = c_4 = 0$.

Necht' $i = 2$:

$$\begin{aligned} 3 \left(\frac{-1 - 0}{\frac{\pi}{2}} - \frac{0 - 1}{\frac{\pi}{2}} \right) &= c_1 \frac{\pi}{2} + 2c_2 \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \right) + c_3 \frac{\pi}{2}, \\ 2\pi c_2 + \frac{\pi}{2} c_3 &= 0. \end{aligned}$$

Necht' $i = 3$:

$$\begin{aligned} 3 \left(\frac{0 + 1}{\frac{\pi}{2}} - \frac{-1 - 0}{\frac{\pi}{2}} \right) &= c_2 \frac{\pi}{2} + 2c_3 \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \right) + c_4 \frac{\pi}{2}, \\ \frac{\pi}{2} c_2 + 2\pi c_3 &= \frac{12}{\pi} \end{aligned}$$

Vyřešíme soustavu dvou rovnic s neznámými c_2 a c_3 :

$$\begin{aligned} 0 &= 4\pi^2 c_2 + \pi^2 c_3, \\ 24 &= \pi^2 c_2 + 4\pi^2 c_3. \end{aligned}$$

Řešení této soustavy je

$$c_2 = -\frac{8}{5\pi^2} \quad \text{a} \quad c_3 = \frac{32}{5\pi^2}.$$

Další koeficienty získáme ze vztahu (3.7)

$$\begin{aligned} a_1 &= y_0 = 1, \\ a_2 &= y_1 = 0, \\ a_3 &= y_2 = -1. \end{aligned}$$

Ze vztahu (3.12) získáme koeficienty b_{i-1} :

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{y_1 - y_0}{h_1} - \frac{h_1}{3}(c_2 + 2c_1) = -\frac{26}{15\pi}, \\ b_2 &= \frac{y_2 - y_1}{h_2} - \frac{h_2}{3}(c_3 + 2c_2) = -\frac{38}{15\pi}, \\ b_3 &= \frac{y_3 - y_2}{h_3} - \frac{h_3}{3}(0 + 2c_3) = -\frac{2}{15\pi}. \end{aligned}$$

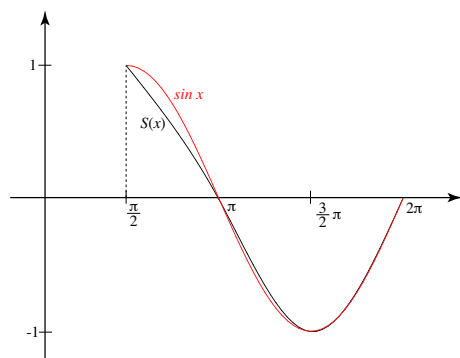
Koeficienty d_{i-1} získáme z (3.11):

$$\begin{aligned} d_1 &= \frac{c_2 - c_1}{3h_1} = -\frac{16}{15\pi^3}, \\ d_2 &= \frac{c_3 - c_2}{3h_2} = \frac{16}{3\pi^3}, \\ d_3 &= \frac{-c_3}{3h_3} = -\frac{64}{15\pi^3}. \end{aligned}$$

Dosazením do vztahu (3.6) dostaneme:

$$\begin{aligned} S_1(x) &= 1 - \frac{26}{15\pi}(x - \frac{\pi}{2}) - \frac{16}{15\pi^3}(x - \frac{\pi}{2})^3, \\ S_2(x) &= -\frac{38}{15\pi}(x - \pi) - \frac{8}{5\pi^2}(x - \pi)^2 + \frac{16}{3\pi^3}(x - \pi)^3, \\ S_3(x) &= -1 - \frac{2}{15\pi}(x - \frac{3\pi}{2}) + \frac{32}{5\pi^2}(x - \frac{3\pi}{2})^2 - \frac{64}{15\pi^3}(x - \frac{3\pi}{2})^3. \end{aligned}$$

Výsledný přirozený kubický splajn je:



$$S(x) = \begin{cases} S_1(x) & x \in \langle \frac{\pi}{2}, \pi \rangle \\ S_2(x) & x \in \langle \pi, \frac{3}{2}\pi \rangle \\ S_3(x) & x \in \langle \frac{3}{2}\pi, 2\pi \rangle \end{cases}$$

3.6 Kontrolní otázky a cvičení

Cvičení 3.1. Dokažte, že $\sum_{i=0}^n l_i(x) = 1$.

Cvičení 3.2. Necht' funkce $f(x)$ je spojitě diferencovatelná na intervalu $\langle x_0, x_1 \rangle$. Dokažte, že $f[x_0, x_1] = f'(c)$ pro nějaké $c \in \langle x_0, x_1 \rangle$.

Cvičení 3.3. Sestrojte Newtonův interpolační polynom:

(i)

x_i	-1	1	2	3
f_i	-4	0	5	20

(ii)

x_i	-2	0	1	2
f_i	-13	-1	8	43

Cvičení 3.4. Aproximujte hodnotu funkce $f = e^{x^2-1}$ v bodě $x = 1,25$ pomocí Lagrangeova polynomu 4. stupně a odhadněte chybu.

x_i	1	1,1	1,2	1,3	1,4
f_i	1	1,23368	1,55271	1,99372	2,61170

Cvičení 3.5. Užijte následujících hodnot ke konstrukci Lagrangeova polynomu a aproximujte hodnotu funkce $\sin x$ v bodě $x = 0,34$. Odhadněte chybu.

x_i	0,3	0,32	0,33	0,35
$\sin x_i$	0,29552	0,31457	0,32404	0,34290

Cvičení 3.6. Necht' $f(x) = 3xe^x - e^{2x}$. Aproximujte hodnotu $f(1,03)$ pomocí Hermitova interpolačního polynomu, jestliže uzlové body jsou $x_0 = 1$, $x_1 = 1,05$ a $x_2 = 1,07$. Odhadněte chybu.

Cvičení 3.7. Je funkce $f(x) = |x|$ splajn prvního stupně? Svou odpověď zdůvodněte.

Cvičení 3.8. Je daná funkce $S(x)$ kvadratický splajn? Svou odpověď zdůvodněte.

$$S(x) = \begin{cases} x, & -\infty < x \leq 1, \\ x^2, & 1 \leq x \leq 2, \\ 4, & 2 \leq x < \infty. \end{cases}$$

Cvičení 3.9. Rozhodněte, zda se jedná o kubický splajn s uzlovými body $-1, 0, 1, 2$.

$$S(x) = \begin{cases} 1 + 2(x + 1) + (x + 1)^3, & -1 \leq x \leq 0, \\ 3 + 5x + 3x^2, & 0 < x \leq 1, \\ 11 + 11(x - 1) + 3(x - 1)^2 + (x - 1)^3, & 1 < x \leq 2. \end{cases}$$

Cvičení 3.10. Nalezněte přirozený kubický splajn interpolující funkci danou tabulkou:

x_i	1	2	3	4	5
y_i	0	1	0	1	0

3.7 Výsledky

Cvičení 3.3.

(i) $x^3 - x^2 + x - 1$

(ii) $3x^3 + 4x^2 + 2x - 1$

Cvičení 3.4. $L_4(1, 25) = 1,75496$, $|E(1, 25)| \leq 2,4 \times 10^{-4}$

Cvičení 3.5. $L_3(0, 34) = 0,33348$, $|E(0, 34)| \leq 1,2 \times 10^{-6}$

Cvičení 3.6. $H_5(1, 03) = 0,80932362$, $|E(0, 34)| \leq 1,75 \times 10^{-10}$

Cvičení 3.7. Ano, funkce je spojitá.

Cvičení 3.8. Ne, funkce nemá spojitou derivaci.

Cvičení 3.9. Ne

Cvičení 3.10.

$$S_1(x) = -\frac{5}{7}(x-1)^3 + \frac{12}{7}(x-1)$$

$$S_2(x) = \frac{6}{7}(x-2)^3 - \frac{5}{7}(3-x)^3 - \frac{6}{7}(x-2) + \frac{12}{7}(3-x)$$

$$S_1(x) = -\frac{5}{7}(x-3)^3 + \frac{6}{7}(4-x)^3 + \frac{12}{7}(x-3) - \frac{6}{7}(4-x)$$

$$S_1(x) = -\frac{5}{7}(5-x)^3 + \frac{12}{7}(5-x)$$

4 METODA NEJMENŠÍCH ČTVERCŮ

... co by Vám měla přinést tato kapitola:

Námět této kapitoly bude stejný jako v předchozí kapitole věnované interpolaci. Budeme se opět zabývat otázkou aproximace dané funkce jinou funkcí s tím rozdílem, že nyní nebudeme usilovat o to, aby aproximující funkce procházela danými daty. Na první pohled by se mohlo zdát, že tento ústupek bude újmou na "kvalitě" výsledné aproximace. Uvidíme však, že existují dobré důvody pro takový postup. Seznámíme se s nejnámější a nejpoužívanější technikou využívanou pro hledání aproximačních funkcí neprocházejících danými daty, která nese název Metoda nejmenších čtverců.

Skutečnost, že v řadě případů jsou dané hodnoty funkce získané měřením, znamená, že jsou také zatíženy chybou měření. Snaha o přesné "kopírování" takových dat by tedy vlastně byla snahou o napodobování vzniklých chyb. V jiných případech zase povaha dat, znázorníme-li je graficky, umožňuje dobře odhadnout druh závislosti. Může být například zřejmé, že se jedná o závislost lineární, popř. exponenciální apod., ale v dané třídě funkcí není možné najít přímku, resp. exponenciálu procházející naměřenými hodnotami. Za těchto okolností by bylo kontraproduktivní trvat na sestrojení funkce procházející danými daty, protože výsledek by byl zřejmě velmi odlišný od původní měřené závislosti.

Sestrojení aproximující funkce, která neprochází danými daty, může mít naopak pozitivní efekt v tom smyslu, že vliv chyb, vzniklých měřením, bude do jisté míry eliminován. Podstata tohoto přístupu spočívá v nalezení kritéria pro posouzení "blízkosti" funkce vzhledem k naměřeným hodnotám. Je zřejmé, že není možné vycházet z prostého rozdílu funkčních hodnot a naměřených hodnot, protože při měření vnikají kladné i záporné odchylky, které se mohou navzájem eliminovat i když bylo měření zatíženo velkou chybou. Mnohem nadějnější je sečíst absolutní odchylky mezi naměřenými hodnotami a funkčními hodnotami. Nevýhoda tohoto přístupu je dána tím, že absolutní hodnota jako funkce není v nule diferencovatelná, což může být zdrojem značných komplikací. Tato nepříjemnost zcela vymizí, když pracujeme s druhými mocninami, tj. čtverci, odchylek mezi naměřenými hodnotami a funkčními hodnotami, protože v případě kvadratické závislosti problémy s hladkostí v nule odpadají. Vzniklou úlohu můžeme formulovat takto:

Předpokládejme, že reálná funkce $f(x)$ je definována v $n+1$ bodech x_0, \dots, x_n a že známe funkční hodnoty v těchto bodech $y_0 = f(x_0), \dots, y_n = f(x_n)$. Za

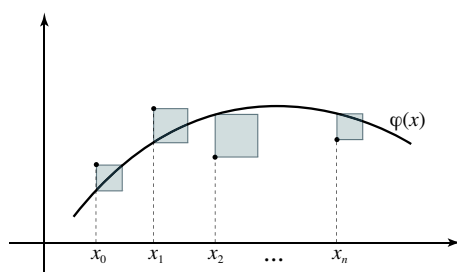
třídu aproximujících funkcí $\varphi(x)$ vezmeme množinu lineárních kombinací

$$\mathcal{T} = \{a_0\varphi_0(x) + \dots + a_k\varphi_k(x), a_i \in \mathbf{R}, i = 0, \dots, k\},$$

přičemž funkce $\varphi_i(x)$ jsou předem známy. Hledáme tedy koeficienty a_0, \dots, a_k lineární kombinace $a_0\varphi_0(x) + \dots + a_k\varphi_k(x)$ tak, aby funkce

$$S(a_0, \dots, a_k) = \sum_{i=0}^n (a_0\varphi_0(x_i) + \dots + a_k\varphi_k(x_i) - y_i)^2 \quad (4.1)$$

nabyla minimální hodnoty. Minimalizujeme tedy součet čtverců odchylek v bodech x_0, \dots, x_n , z čehož je odvozen název metody. Situaci názorně ilustruje obrázek 4.1.



Obr. 4.1

Definice 4.1. Funkci $\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \dots + a_k\varphi_k(x)$, pro kterou funkce S nabývá minimální hodnoty, nazýváme nejlepší aproximací funkce f na množině bodů x_0, \dots, x_n .

V dalším budeme předpokládat, že $k < n$, protože v opačném případě je možné úlohu řešit interpolací. Funkce $S(a_0, \dots, a_k)$ je funkcí $(k + 1)$ proměnných. Při hledání jejího minima postupujeme tak, jak je obvyklé v matematické analýze, tj. výraz

$$S(a_0, \dots, a_k) = \sum_{i=0}^n (a_0\varphi_0(x_i) + \dots + a_k\varphi_k(x_i) - y_i)^2 \quad (4.2)$$

derivujeme podle neznámých (a_0, \dots, a_k) a příslušné derivace položíme rovny nule. Dostáváme systém rovnic

$$\frac{\partial S}{\partial a_j} = 2 \sum_{i=0}^n (a_0\varphi_0(x_i) + \dots + a_k\varphi_k(x_i) - y_i)\varphi_j(x_i) = 0,$$

kde $j = 0, 1, \dots, k$, který lze jednoduše přepsat do tvaru

$$a_0 \sum_{i=0}^n \varphi_0(x_i) \varphi_j(x_i) + \dots + a_k \sum_{i=0}^n \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) = \sum_{i=0}^n \varphi_j(x_i) y_i,$$

$j = 0, \dots, k$.

Dříve než se budeme zabývat otázkou řešitelnosti obdržené soustavy rovnic, povšimněme si, že její koeficienty mají tvar $\sum_{i=0}^n \varphi_p(x_i) \varphi_q(x_i)$. Lze ukázat, a tento důkaz přenecháváme čtenáři jako cvičení, že pro libovolné dvě funkce φ_p, φ_q definované na množině bodů x_0, \dots, x_n splňuje číslo

$$\sum_{i=0}^n \varphi_p(x_i) \varphi_q(x_i) \stackrel{\text{ozn.}}{=} (\varphi_p, \varphi_q)$$

vlastnosti skalárního součinu. Za těchto okolností je matice naší soustavy rovnic, kterou můžeme s využitím zavedeného označení psát ve tvaru

$$\begin{aligned} a_0(\varphi_0, \varphi_0) + a_1(\varphi_1, \varphi_0) + \dots + a_k(\varphi_k, \varphi_0) &= (y, \varphi_0) \\ a_0(\varphi_0, \varphi_1) + a_1(\varphi_1, \varphi_1) + \dots + a_k(\varphi_k, \varphi_1) &= (y, \varphi_1) \\ &\vdots \\ a_0(\varphi_0, \varphi_k) + a_1(\varphi_1, \varphi_k) + \dots + a_k(\varphi_k, \varphi_k) &= (y, \varphi_k), \end{aligned} \tag{4.3}$$

tzv. Grammovou maticí.

Definice 4.2. Soustava lineárních rovnic (4.3) se nazývá normální soustava. Její determinant se nazývá Grammův determinant příslušný funkcím $\varphi_i(x)$.

Z lineární algebry je známé, že Grammův determinant je různý od nuly právě tehdy, když jsou funkce $\varphi_0(x), \dots, \varphi_k(x)$ lineárně nezávislé na množině bodů x_0, \dots, x_n . Připomeneme proto definici lineární závislosti funkcí.

Definice 4.3. Říkáme, že funkce $\varphi_0(x), \dots, \varphi_k(x)$ jsou lineárně závislé na množině bodů x_0, \dots, x_n , jestliže existují čísla a_0, \dots, a_k , z nichž alespoň jedno je různé od nuly, taková, že platí

$$a_0 \varphi_0(x_i) + \dots + a_k \varphi_k(x_i) = 0 \quad i = 0, \dots, n.$$

Na otázku řešitelnosti normální soustavy rovnic (4.3) dává odpověď věta

Věta 4.4. Necht' jsou funkce $\varphi_0(x), \dots, \varphi_k(x)$ lineárně nezávislé na množině bodů x_0, \dots, x_n . Pak má normální soustava jediné řešení a_0^*, \dots, a_k^* a funkce

$$a_0^* \varphi_0(x_i) + \dots + a_k^* \varphi_k(x_i) = 0 \quad i = 0, \dots, n$$

je nejlepší aproximací funkce f na množině bodů x_0, \dots, x_n .

Důkaz. Vzhledem k tomu, že funkce $\varphi_0(x), \dots, \varphi_k(x)$ jsou lineárně nezávislé na množině bodů x_0, \dots, x_n , vyplývá z vlastností Grammova determinantu jednoznačnost řešení soustavy (4.3). Ukážeme nyní, že pro a_0^*, \dots, a_k^* nabývá funkce $S(a_0, \dots, a_k)$ minimální hodnoty. Vypočteme veličinu

$$S(a_0^* + \Delta a_0, \dots, a_k^* + \Delta a_k), \quad \text{kde} \quad \sum_{i=j}^k |\Delta a_j| \neq 0$$

$$S(a_0^* + \Delta a_0, \dots, a_k^* + \Delta a_k) = \sum_{i=0}^n (y_j - [(a_0^* + \Delta a_0)\varphi_0(x_i) + \dots + (a_k^* + \Delta a_k)\varphi_k(x_i)])^2 =$$

$$\sum_{i=0}^n [y_j - (a_0^* \varphi_0(x_i) + \dots + a_k^* \varphi_k(x_i))]^2 + \sum_{i=0}^n [(\Delta a_0 \varphi_0(x_i) + \dots + \Delta a_k \varphi_k(x_i))]^2$$

$$- 2 \sum_{i=0}^n [y_j - (a_0^* \varphi_0(x_i) + \dots + a_k^* \varphi_k(x_i))] [(\Delta a_0 \varphi_0(x_i) + \dots + \Delta a_k \varphi_k(x_i))] =$$

$$\begin{aligned} S(a_0^*, \dots, a_k^*) & - 2 \{ \Delta a_0 [(y, \varphi_0) - a_0^*(\varphi_0, \varphi_0) - a_1^*(\varphi_1, \varphi_0) - \dots - a_k^*(\varphi_k, \varphi_0)] + \\ & + \Delta a_1 [(y, \varphi_1) - a_0^*(\varphi_0, \varphi_1) - a_1^*(\varphi_1, \varphi_1) - \dots - a_k^*(\varphi_k, \varphi_1)] + \\ & \vdots \\ & + \Delta a_k [(y, \varphi_k) - a_0^*(\varphi_0, \varphi_k) - a_1^*(\varphi_1, \varphi_k) - \dots - a_k^*(\varphi_k, \varphi_k)] \} + \\ & \sum_{i=0}^n [(\Delta a_0 \varphi_0(x_i) + \dots + \Delta a_k \varphi_k(x_i))]^2. \end{aligned}$$

Člen ve složených závorkách $\{ \}$ je roven nule, protože se vždy jedná o rozdíl pravé a levé strany rovnic normální soustavy. Poslední součet je kladné číslo, protože funkce $\varphi_0(x), \dots, \varphi_k(x)$ jsou lineárně nezávislé a $\sum_{i=j}^k |\Delta a_j| \neq 0$. Z uvedeného vyplývá, že

$$S(a_0^* + \Delta a_0, \dots, a_k^* + \Delta a_k) > S(a_0^*, \dots, a_k^*)$$

pro libovolné přírůstky proměnných a_i a to znamená, že funkce S nabývá v bodě (a_0^*, \dots, a_k^*) minimální hodnoty. \diamond

Příklad 4.5. Nalezněte polynom prvního stupně, který aproximuje funkci $f(x)$ danou tabulkou:

i	0	1	2	3
x_i	2	4	6	8
y_i	2	11	28	40

Řešení. Máme určit polynom $P_1(x) = a_0 + a_1x$. Nejprve sestavme odchylku reálných hodnot $f(x_i) = y_i$ od teoretických $P_1(x_i) = a_0 + a_1x_i$, tj.

$$O(a_0, a_1) = \sum_{i=0}^3 (a_0 + a_1x_i - y_i)^2,$$

ze které odvodíme systém normálních rovnic:

$$\begin{aligned} \frac{\partial O}{\partial a_0} &= 2 \sum_{i=0}^3 (a_0 + a_1x_i - y_i) = 0, \\ \frac{\partial O}{\partial a_1} &= 2 \sum_{i=0}^3 (a_0 + a_1x_i - y_i)x_i = 0. \end{aligned}$$

Upravíme tento systém:

$$\left. \begin{aligned} a_0 \sum_{i=0}^3 1 + a_1 \sum_{i=0}^3 x_i &= \sum_{i=0}^3 y_i, \\ a_0 \sum_{i=0}^3 x_i + a_1 \sum_{i=0}^3 x_i^2 &= \sum_{i=0}^3 x_i y_i. \end{aligned} \right\} (*)$$

Využitím zápisu pomocí skalárního součinu získáme jednodušší tvar:

$$\left. \begin{aligned} a_0(1, 1) + a_1(x, 1) &= (y, 1), \\ a_0(1, x) + a_1(x, x) &= (y, x). \end{aligned} \right\} (**)$$

Spočteme jednotlivé skalární součiny a přitom využijeme vlastnosti symetrie skalárního součinu:

$$\begin{aligned} (y, 1) &= 2 + 11 + 28 + 40 = 81, \\ (y, x) &= 2 \cdot 2 + 4 \cdot 11 + 6 \cdot 28 + 8 \cdot 40 = 4 + 44 + 168 + 320 = 536, \\ (1, 1) &= 1 + 1 + 1 + 1 = 4, \\ (x, 1) &= (1, x) = 2 + 4 + 6 + 8 = 20, \\ (x, x) &= (1, x^2) = 4 + 16 + 36 + 64 = 120. \end{aligned}$$

Algebraický systém má pak tvar:

$$\begin{aligned}a_0 \cdot 4 + a_1 \cdot 20 &= 81, \\ a_0 \cdot 20 + a_1 \cdot 120 &= 536.\end{aligned}$$

Řešením této soustavy je $a_0 = -12,5$ a $a_1 = 6,55$. Hledaný polynom je tedy tvaru $P_1(x) = 6,55x - 12,5$.

Poznámka 4.6. Vztah (**) lze velmi jednoduše rozšiřovat pro polynomy vyšších stupňů. Například pro polynom druhého stupně

$$P_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$$

má systém normálních rovnic tvar:

$$\begin{aligned}(y, 1) &= a_0(1, 1) + a_1(x, 1) + a_2(x^2, 1), \\ (y, x) &= a_0(1, x) + a_1(x, x) + a_2(x^2, x), \\ (y, x^2) &= a_0(1, x^2) + a_1(x, x^2) + a_2(x^2, x^2).\end{aligned}$$

Velmi často nastane případ, že matice soustavy je špatně podmíněná (tj. determinant je velmi blízký nule) a výsledky jsou zatíženy velkými chybami. Abychom se vyhnuli těmto obtížnostem, je výhodné pracovat s ortogonálním systémem funkcí.

Ortogonalní systém funkcí $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ na množině $\{x_0, \dots, x_n\}$ je takový systém lineárně nezávislých funkcí, pro který platí

$$(\varphi_i, \varphi_j) = 0, \quad \text{pro } i \neq j.$$

Použijeme-li takový systém v rámci metody nejmenších čtverců, pak matice systému normálních rovnic je diagonální a pro hledané koeficienty $a_j, j = 1, \dots, k$ platí

$$a_j = \frac{(f, \varphi_j)}{(\varphi_j, \varphi_j)}.$$

Ortogonalní systém funkcí lze zkonstruovat pomocí *Gramm-Schmidtova ortogonalizačního procesu*. Z numerického hlediska může být tento postup nestabilní. Návod na konstrukci ortogonálního systému polynomů dává následující věta.

Věta 4.7. Necht' na vektorovém prostoru všech polynomů s reálnými koeficienty je definován skalární součin na množině bodů $\{x_0, \dots, x_n\}$. Klademe $\varphi_{-1} = 0$, $\varphi_0 = 1$, $b_0 = 0$ a

$$\varphi_{k+1} = (x - a_k)\varphi_k - b_k\varphi_{k-1},$$

kde pro $k = 1, 2, \dots$ je

$$a_k = \frac{(x\varphi_k, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}, \quad b_k = \frac{(\varphi_k, \varphi_k)}{(\varphi_{k-1}, \varphi_{k-1})}.$$

Pak $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ je ortogonální systém polynomů.

Důkaz. Je možné nalézt v knize Z. Riečanové [9, str. 270-271]

4.1 Kontrolní otázky a cvičení

Cvičení 4.1. Metodou nejmenších čtverců určete polynom 2. stupně, který aproximuje funkci $f(x)$ danou tabulkou:

(i)

x_i	-1	1	3	5	7	9	11
f_i	3	-1	2	4	6	3	5

(ii)

x_i	-5	-3	-1	0	1	2	4
f_i	-60	-25	3	5	-1	-15	-67

(iii)

x_i	-3	-1	0	1	2	3
f_i	-12	0	3	4	3	0

Cvičení 4.2. Metodou nejmenších čtverců najděte rovnici tvaru $y = ae^{x^2} + bx^3$, která aproximuje funkci procházející body $[-1, 0]$, $[0, 1]$ a $[1, 2]$.

Cvičení 4.3. Metodou nejmenších čtverců určete funkci $g(x) = a \sin \pi x + b \cos \pi x$ aproximující funkci $f(x)$ danou tabulkou:

x_i	-1	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	1
y_i	-1	0	1	2	1

4.2 Výsledky

Cvičení 4.1.

(i) $1,535714 + 0,321429x$

(ii) $3,126519 - 3,380037x - 3,369318x^2$

(iii) $-x^2 + 2x + 3$

Cvičení 4.2. $a = \frac{1+2e}{1+2e^2}, b = 1$

Cvičení 4.3. $a = b = 1$

5 NUMERICKÉ ŘEŠENÍ NELINEÁRNÍCH ROVNIC

... co by Vám měla přinést tato kapitola:

Vyřešit nelineární rovnici znamená nalézt všechny nulové body dané funkce jedné proměnné. K numerickému výpočtu přistupujeme při řešení nelineárních rovnic poměrně často. Už při hledání kořenů polynomů narážíme na skutečnost, že vztahy pro jejich výpočet máme k dispozici jen pro polynomy nejvýše čtvrtého stupně. Kromě toho i v případech, kdy máme k dispozici vzorec pro výpočet kořenů, nemusí být takový vztah pro praktické účely vhodný. Je proto účelné věnovat pozornost takovým metodám, které nám umožní nalézt alespoň přibližnou hodnotu kořenů funkce. Náplní této kapitoly bude hledání reálných kořenů funkcí jedné proměnné.

Uvažujme rovnici

$$f(x) = 0, \quad (5.1)$$

kde $f(x)$ je "rozumná" funkce reálné proměnné. Budeme hledat reálná čísla \bar{x} , pro která platí $f(\bar{x}) = 0$. Taková čísla nazýváme *kořeny rovnice* (5.1). Pod pojmem numerické řešení rovnice můžeme rozumět

- číslo, které představuje přibližnou hodnotu kořene \bar{x}
- postup, který vede k nalezení čísla \bar{x}

V dalším budeme tento pojem užívat v prvním významu. Jeho druhý význam nahradíme obratem numerický výpočet. Budeme vycházet z předpokladu, že známe interval $\langle a, b \rangle$, ve kterém má rovnice (5.1) právě jeden kořen. Numerický výpočet kořene \bar{x} spočívá v konstrukci posloupnosti $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$ takové, že

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \bar{x}.$$

Za numerické řešení budeme považovat takový člen posloupnosti x_k , pro který platí

$$|x_k - \bar{x}| < \varepsilon,$$

tj. máme předem stanovenou velikost chyby. Je tedy nutné nalézt odhad výrazu $|x_k - \bar{x}|$, protože hodnotu \bar{x} lze obecně najít pouze přibližně. Efektivnost metody je pak dána rychlostí konvergence posloupnosti $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$ ke kořenu \bar{x} .

Teoretický základ pro naprostou většinu metod poskytuje věta z funkcionální analýzy známá pod názvem Banachova věta o pevném bodě. Udává postačující podmínku pro existenci tzv. pevného bodu funkce φ , pod kterým rozumíme takovou hodnotu proměnné x , pro kterou platí $\varphi(\bar{x}) = \bar{x}$.

Souvislost Banachovy věty s hledáním kořenů rovnice $f(x) = 0$ spočívá v tom, že nalezneme-li pevný bod funkce $\varphi(x)$, našli jsme zároveň také kořen této rovnice. Řešení rovnice $f(x) = 0$ odpovídá totiž pevnému bodu funkce $\varphi(x)$, jestliže platí

$$\varphi(x) = x - f(x).$$

Banachovu větu uvádíme pro případ reálné funkce reálné proměnné, což je pro naše potřeby postačující. Její platnost je ovšem mnohem obecnější.

Věta 5.1. (Banachova věta) *Necht' $\varphi: \langle a, b \rangle \rightarrow \langle a, b \rangle$. Necht' je funkce $\varphi(x)$ kontraktivní v $\langle a, b \rangle$, tj. existuje číslo $K \in \langle 0, 1 \rangle$ takové, že pro každou dvojici čísel $x_1, x_2 \in \langle a, b \rangle$, $x_1 \neq x_2$, platí*

$$|\varphi(x_1) - \varphi(x_2)| \leq K |x_1 - x_2|.$$

Pak existuje jediný pevný bod \bar{x} funkce $\varphi(x)$ (tj. platí $\varphi(\bar{x}) = \bar{x}$) v intervalu $\langle a, b \rangle$.

Důkaz. Bud' $x_0 \in \langle a, b \rangle$. Protože φ zobrazuje interval $\langle a, b \rangle$ do sebe, můžeme definovat

$$x_k = \varphi(x_{k-1}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.2)$$

Ukážeme, že posloupnost $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ je cauchyovská, tzn., že pro každé $\varepsilon > 0$ existuje $l \in \mathbb{N}$ takové, že pro každé $n_1, n_2 \geq l$ platí $|x_{n_1} - x_{n_2}| \leq \varepsilon$. Necht' $k > l$. Platí

$$\begin{aligned} |x_k - x_l| &= |x_k - x_{k-1} + x_{k-1} - x_{k-2} + \dots + x_{l+1} - x_l| \\ &\leq |x_k - x_{k-1}| + |x_{k-1} - x_{k-2}| + \dots + |x_{l+1} - x_l| \\ &\leq K |x_{k-1} - x_{k-2}| + K |x_{k-2} - x_{k-3}| + \dots + K |x_l - x_{l-1}| \\ &\leq K^2 |x_{k-2} - x_{k-3}| + K^2 |x_{k-3} - x_{k-4}| + \dots + K^2 |x_{l-1} - x_{l-2}| \\ &\leq \dots \leq K^k |x_1 - x_0| + K^{k-1} |x_1 - x_0| + \dots + K^l |x_1 - x_0| \\ &= (K^k + K^{k-1} + \dots + K^l) |x_1 - x_0| \\ &= K^l (K^{k-l} + K^{k-l-1} + \dots + K + 1) |x_1 - x_0| \\ &= K^l \frac{K^{k-l} - 1}{K - 1} |x_1 - x_0| \leq \frac{K^l}{1 - K} |x_1 - x_0|, \end{aligned}$$

protože $K < 1$. K danému $\varepsilon > 0$ lze najít přirozené číslo l tak, aby

$$\frac{K^l}{1 - K} |x_1 - x_0| \leq \varepsilon,$$

stačí vzít

$$l \geq \log \frac{\varepsilon(1-K)}{|x_1 - x_0|} \cdot \frac{1}{\log K}.$$

Posloupnost $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ je cauchyovská, a tedy konvergentní. Protože funkce $\varphi(x)$ je kontraktivní a tedy i spojitá, plyne ze vztahu (5.2) přechodem k limitě $k \rightarrow \infty$ rovnost $\varphi(\bar{x}) = \bar{x}$.

Předpokládejme, že funkce $\varphi(x)$ má druhý pevný bod \hat{x} . Potom

$$|\varphi(\bar{x}) - \varphi(\hat{x})| = |\bar{x} - \hat{x}|.$$

Na druhé straně $\varphi(x)$ je kontraktivní, tedy

$$|\varphi(\bar{x}) - \varphi(\hat{x})| \leq K |\bar{x} - \hat{x}| < |\bar{x} - \hat{x}|,$$

a to je spor. ◇

Důsledek 5.2. *Necht' $\varphi(x)$ je kontraktivní na $\langle a, b \rangle$ s koeficientem K . Necht' posloupnost $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ je definovaná vztahem (5.2). Pak platí*

$$|\bar{x} - x_k| \leq \frac{K^k}{1-K} |x_1 - x_0|, \quad (5.3)$$

$$|\bar{x} - x_k| \leq \frac{K}{1-K} |x_k - x_{k-1}|. \quad (5.4)$$

Poznámka 5.3.

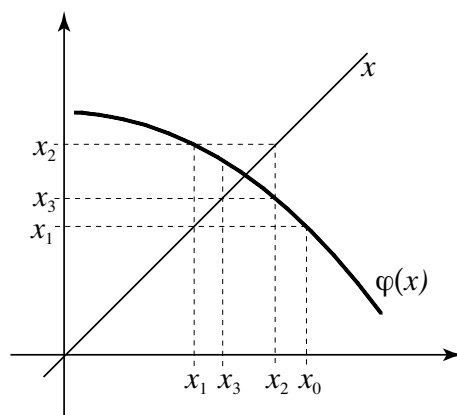
- (i) Kontraktivnost funkce $\varphi(x)$ znamená, že vzdálenost obrazů je menší než vzdálenost vzorů. Kontraktivnost je pro existenci pevného bodu podstatná.
- (ii) Banachova věta představuje obecný princip konvergence iteračních metod. Dá se použít v různých souvislostech, například pro rovnice diferenciální i integrální. Funkce $\varphi(x)$ je pak definována v prostoru vhodných funkcí.
- (iii) Vztah (5.3) lze použít jako kritérium pro zastavení výpočtu.
- (iv) Rychlost konvergence závisí na faktoru $\frac{K^k}{1-K}$, s klesajícím K rychlost konvergence narůstá.

5.1 Metoda prosté iterace

Řešit rovnici $\varphi(x) = x$ metodou prosté iterace znamená zvolit $x_0 \in \langle a, b \rangle$ a položit

$$x_{k+1} = \varphi(x_k). \quad (5.5)$$

Předpoklady Banachovy věty zaručují, že x_k je definováno pro každé k a posloupnost iterací konverguje ke kořenu \bar{x} . Graficky je situace znázorněna na obrázku 5.1



Obr. 5.1

Z praktického hlediska je ovšem obtížné ověřit kontraktivnost funkce $\varphi(x)$. Předpokládáme-li, že funkce $\varphi(x)$ má derivaci na daném intervalu, můžeme zformulovat tvrzení

Věta 5.4. *Necht' $\varphi(x)$ je diferencovatelná na $\langle a, b \rangle$. Necht' existuje reálné číslo K takové, že pro všechna $x \in \langle a, b \rangle$ platí $|\varphi'(x)| \leq K < 1$. Pak funkce $\varphi(x)$ je v $\langle a, b \rangle$ kontraktivní s koeficientem K .*

Důkaz. Podle Lagrangeovy věty o střední hodnotě pro každé $x, y \in \langle a, b \rangle$, $x > y$, existuje bod $\alpha \in (a, b)$ takový, že

$$\varphi(x) - \varphi(y) = \varphi'(\alpha)(x - y).$$

Tedy

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq |\varphi'(\alpha)| \cdot |x - y| \leq K|x - y|.$$

◇

Jestliže chceme použít metodu prosté iterace na řešení rovnice $f(x) = 0$, je nutné ji upravit na ekvivalentní rovnici, tj. na rovnici tvaru $\varphi(x) = x$, která bude

mít shodné kořeny. Tento postup není dán jednoznačně a závisí na konkrétním tvaru funkce f . Základním úkolem je provést úpravu tak, aby funkce $\varphi(x)$ byla kontraktivní, přičemž zároveň usilujeme o co nejmenší koeficient kontrakce.

Předpokládejme, že funkce $f(x)$ je diferencovatelná a platí

$$0 < c \leq f'(x) \leq d$$

všude v $\langle a, b \rangle$. V případě $f'(x) < 0$ bychom pracovali s funkcí $-f(x)$. Rovnice

$$x = x - \lambda f(x)$$

je ekvivalentní s rovnicí (5.1) a konstantu λ určíme tak, aby funkce $\varphi(x) = x - \lambda f(x)$ byla kontraktivní. Chceme, aby (viz. věta 5.4)

$$|\varphi'(x)| = |(x - \lambda f(x))'| \leq K < 1.$$

Bez absolutních hodnot to znamená, že

$$1 - K \leq \lambda c \leq \lambda f'(x) \leq \lambda d \leq 1 + K.$$

K tomu, aby tyto nerovnosti byly splněny, stačí položit

$$\lambda = \frac{2}{c + d}.$$

Dostáváme tak iterační vztah

$$x_{k+1} = x_k - \frac{2}{c + d} f(x_k).$$

Poznámka 5.5. Při rozhodování o zastavení iteračního procesu lze využít odhadu (5.3), resp. (5.4). Protože určení konstanty K může být velmi obtížné, používáme jednodušší podmínku

$$|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon, \tag{5.6}$$

kde $\varepsilon > 0$ je předem zvolené číslo. Splněním tohoto kritéria bohužel není zaručeno, že přesná hodnota kořene \bar{x} se od jeho aproximace x_k liší o méně než ε . Chceme-li se přesvědčit, že $|x_k - \bar{x}| < \varepsilon$, stačí vypočítat $f(x_k + \varepsilon)$ a $f(x_k - \varepsilon)$. Platí-li

$$f(x_k)f(x_k + \varepsilon) < 0,$$

resp.

$$f(x_k)f(x_k - \varepsilon) < 0,$$

je jisté, že kořen \bar{x} leží v intervalu $\langle x_k, x_k + \varepsilon \rangle$, resp. $\langle x_k - \varepsilon, x_k \rangle$, a tedy se od x_k nemůže lišit o více než ε .

Příklad 5.6. Na intervalu $\langle 1, 2 \rangle$ řešte rovnici $x^3 + 4x^2 - 10 = 0$ s přesností 10^{-5} . Kolik iterací je třeba provést? (Zaokrouhlujte na 6 desetinných míst.)

Řešení. I. způsob: Rovnici upravíme na tvar $x = \varphi(x) = x - \lambda f(x)$. Musíme určit λ tak, aby funkce $\varphi(x)$ byla kontraktivní. Spočteme $f'(x) = 3x^2 + 8x$. Derivace $f'(x)$ je na $\langle 1, 2 \rangle$ rostoucí a nabývá hodnot z intervalu $\langle 11, 28 \rangle$. Klademe $\lambda = \frac{2}{11+28} = \frac{2}{39}$ a

$$\varphi(x) = x - \frac{2}{39}(x^3 + 4x^2 - 10).$$

Zvolme $x_0 = 1,5$, potom:

$$\begin{aligned} x_1 &= 1,378205 \\ x_2 &= 1,367147 \\ x_3 &= 1,365522 \\ x_4 &= 1,365275 \\ x_5 &= 1,365237. \end{aligned}$$

Nyní můžeme výpočet zastavit, protože $|x_5 - x_4| = 0,6 \times 10^{-5} < 10^{-5}$. Protože

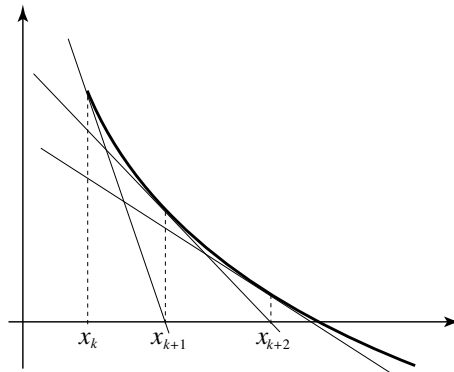
$$f(x_5) \cdot f(x_5 - \varepsilon) \doteq 0,115372 \times 10^{-3} \cdot (-0,4976) \times 10^{-4} < 0,$$

je jisté, že $|x_5 - \bar{x}| \leq \varepsilon = 10^{-5}$.

Závěr: Přibližná hodnota řešení rovnice je $x_5 = 1,365237$.

5.2 Newtonova metoda

Jedná se o jednu z neznámějších numerických metod pro hledání kořenů rovnice $f(x) = 0$. Její základní myšlenka má názornou geometrickou interpretaci (viz. obrázek 5.2) a je založena na tom, že průsečík tečny sestrojené ke grafu funkce v daném bodě x_k s osou x může být lepší aproximací hledaného kořene než x_k samotné. Vzhledem k tomu, že posloupnost aproximací je dána průsečíky tečen s osou x , používá se někdy pro tuto metodu název metoda tečen.



Obr. 5.2

Předpokládejme opět, že na intervalu $\langle a, b \rangle$ platí, že $f(a) \cdot f(b) < 0$ a $f'(x) \neq 0$ pro všechna $x \in \langle a, b \rangle$.

Nechť x_k je k -tá aproximace kořene \bar{x} . Rovnice tečny ke grafu funkce $f(x)$ v bodě x_k má tvar

$$y - f(x_k) = f'(x_k)(x - x_k).$$

Průsečík tečny s osou x je bod $x = x_{k+1}$, který je $(k + 1)$ -ní aproximací kořene. Dosadíme-li do rovnice tečny $y = 0$ a $x = x_{k+1}$, dostaneme tzv. *Newtonův vzorec* pro řešení nelineárních rovnic

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (5.7)$$

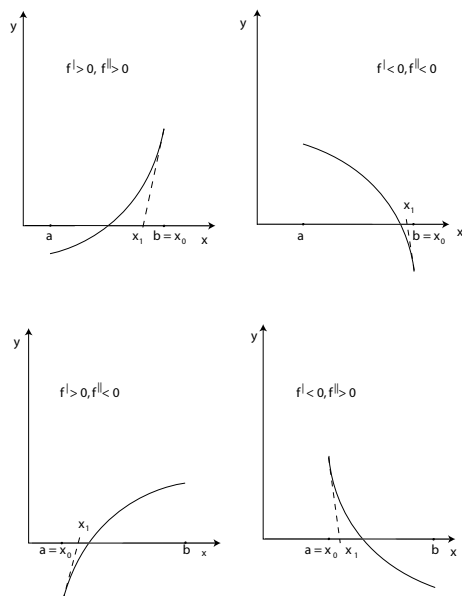
Za předpokladu, že funkce $f(x)$ je monotonní a konvexní či konkávní zároveň, lze zformulovat následující postačující podmínky pro konvergenci Newtonovy metody. Grafické znázornění možností, které mohou při volbě bodu x_0 ilustruje obr. 5.3.

Věta 5.7. *Nechť funkce $f(x)$ je dvakrát spojitě diferencovatelná na $\langle a, b \rangle$. Nechť $f'(x) \neq 0$, $f''(x) \neq 0$ pro všechna $x \in \langle a, b \rangle$. Nechť $f(a) \cdot f(b) < 0$. Klademe*

$$\begin{aligned} x_0 &= a, & \text{je-li } f'(x) \cdot f''(x) < 0, \\ x_0 &= b, & \text{je-li } f'(x) \cdot f''(x) > 0. \end{aligned}$$

Pak posloupnost iterací $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ definovaná vztahem (5.7) konverguje ke kořenu \bar{x} rovnice $f(x) = 0$.

Důkaz. Ze skutečnosti, že $f(a) \cdot f(b) < 0$ a diferencovatelnosti funkce $f(x)$, vyplývá existence kořenu $\bar{x} \in \langle a, b \rangle$. Nenulovost první derivace pak zaručuje, že je tento kořen jediný. Dokážeme případ, kdy $f'(x) > 0$, $f''(x) > 0$. V ostatních



Obr. 5.3

případech je postup obdobný. Podle věty máme položit $x_0 = b$. Chceme ukázat, že posloupnost $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ je klesající a zdola ohraničená kořenem \bar{x} . Máme

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = b - \frac{f(b)}{f'(b)}.$$

Jelikož $f(a) \cdot f(b) < 0$ a $f'(x) > 0$, je $f(b) > 0$ a dostáváme $x_1 < x_0$. Vzhledem k tomu, že funkce $f(x)$ splňuje na intervalu $\langle a, b \rangle$ předpoklady Lagrangeovy věty o střední hodnotě, dostáváme $f(\bar{x}) - f(b) = f'(c)(\bar{x} - b)$ pro nějaké $c \in (\bar{x}, b)$. Z čehož vyplývá

$$\bar{x} = b + \frac{f(\bar{x}) - f(b)}{f'(c)} = b - \frac{f(b)}{f'(c)}.$$

Protože $f'' > 0$ je f' rostoucí funkce a platí tedy $f'(c) < f'(b)$. Celkem

$$\bar{x} = b - \frac{f(b)}{f'(c)} = b - \frac{f(b)}{f'(b)} = x_1.$$

Ukázali jsme tedy, že $\bar{x} < x_1 < x_0$ jako první krok matematické indukce.

Jelikož x_1 leží vpravo od kořene \bar{x} , je $f(x_1) > 0$ a zcela analogicky jako v předchozím postupu lze ukázat, že z $\bar{x} < x_k < b$ plyne $\bar{x} < x_{k+1} < x_k$. Posloupnost $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ je tedy klesající a zdola ohraničená číslem \bar{x} , což znamená, že je konvergentní. Označme $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \alpha$. Ukážeme, že α je kořenem rovnice

(5.1). Vskutku

$$\alpha = \lim_{k \rightarrow \infty} x_{k+1} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \right) = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k - \frac{f\left(\lim_{k \rightarrow \infty} x_k\right)}{f'\left(\lim_{k \rightarrow \infty} x_k\right)} = \alpha - \frac{f(\alpha)}{f'(\alpha)}.$$

Odtud vyplývá, že $f(\alpha) = 0$ a vzhledem k jednoznačnosti kořene platí, že $\alpha = \bar{x}$. \diamond

Příklad 5.8. Metodou tečen nalezněte přibližnou hodnotu kořene rovnice

$$x - \cos x = 0$$

na intervalu $\langle 0, \frac{\pi}{2} \rangle$. Zaokrouhľte na 6 desetinných míst.

Řešení.

(i) Ověříme, zda kořen leží v daném intervalu:

$$\begin{aligned} f(a) \cdot f(b) &< 0 \\ (0 - \cos 0) \cdot \left(\frac{\pi}{2} - \cos \frac{\pi}{2} \right) &< 0 \\ (-1) \cdot \left(\frac{\pi}{2} - 0 \right) &< 0 \\ -\frac{\pi}{2} &< 0 \end{aligned}$$

Podmínka je splněna.

(ii) Určíme počáteční aproximaci x_0 podle věty 5.7. Spočteme první a druhou derivaci:

$$\begin{aligned} f'(x) &= 1 + \sin x \\ f''(x) &= \cos x \end{aligned}$$

Obě derivace jsou na intervalu $\langle 0, \frac{\pi}{2} \rangle$ kladné, proto $x_0 = b = \frac{\pi}{2}$.

(iii) Další aproximace spočteme podle vztahu (5.7), tj.

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - \cos x_k}{1 + \sin x_k}.$$

Postupně dostáváme:

$$\begin{aligned} x_1 &= 0,785398 \\ x_2 &= 0,739536 \\ x_3 &= 0,739085 \\ x_4 &= 0,739085. \end{aligned}$$

Přibližná hodnota kořene je $\bar{x} = 0,739085$.

5.3 Metoda sečen a regula falsi

Newtonova metoda je silný nástroj pro řešení nelineárních rovnic, avšak její nevýhodou je, že v každém iteračním kroku musíme počítat derivaci funkce $f(x)$, což je zpravidla obtížnější než výpočet $f(x)$ a vyžaduje více aritmetických operací. Proto v Newtonově vzorci nahrazujeme derivaci diferenčním podílem

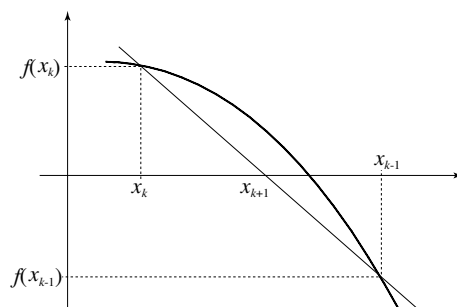
$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$$

a dostáváme tak iterační vzorec pro *metodu sečen*

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})}. \quad (5.8)$$

Geometrická interpretace metody sečen je následující:

Body $[x_k, f(x_k)]$ a $[x_{k-1}, f(x_{k-1})]$ vedeme sečnu. Její průsečík s osou x je $(k+1)$ -ní aproximací hledaného kořene. Označíme jej x_{k+1} . Tento postup opakujeme. Situace je znázorněna na obrázku 5.4.



Obr. 5.4

Nevýhodou metody sečen je skutečnost, že členy posloupnosti iterací $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ mohou "vyběhnout" z intervalu $\langle a, b \rangle$. V takovém případě se může stát, že obdržíme posloupnost, která sice konverguje, ale k jinému kořenu než jsme původně požadovali. Pokud jde o konvergenci metody samotné, závisí podstatně na volbě počátečních iterací x_0, x_1 .

Abychom zabránili tomu, že vypočtené iterace mohou ležet mimo uvažovaný interval, ve kterém hledáme kořen funkce $f(x)$, používáme následující modifikaci metody sečen nesoucí název *regula falsi*. Metoda regula falsi využívá princip metody půlení intervalu. Opět postupně zužujeme interval obsahující kořen rovnice.

Tentokrát dělícím bodem není polovina intervalu, ale průsečík sečny vedené body $[x_k, f(x_k)]$, $[x_i, f(x_i)]$ a osy x , kde bod x_i je určen tak, aby

$$f(x_i) \cdot f(x_k) < 0 \quad \text{a} \quad f(x_k) \cdot f(x_j) > 0$$

pro všechna j takové, že $i < j < k$. Iterační vztah metody regula falsi má tvar

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) \frac{x_k - x_i}{f(x_k) - f(x_i)}. \quad (5.9)$$

Ve srovnání s metodou sečen konverguje metoda regula falsi pomaleji. Na druhou stranu tato metoda konverguje pro každou spojitou funkci $f(x)$, jak udává následující věta, jejíž důkaz je možné nalézt např. v ([9, str. 320-322]). Diskuze o zastavení výpočtu je obdobná jako v poznámce 5.5.

Věta 5.9. *Nechť $f(x)$ je spojitá funkce na intervalu $\langle a, b \rangle$, $f(a) \cdot f(b) < 0$ a nechť $f(x)$ má v intervalu $\langle a, b \rangle$ právě jeden kořen. Pak posloupnost $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ definovaná vztahem (5.3) konverguje ke kořenu rovnice (5.1).*

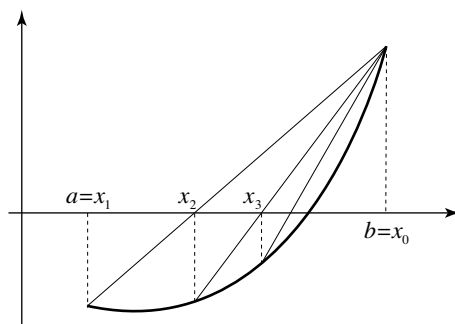
Je-li funkce $f(x)$ konvexní, resp. konkávní, na intervalu $\langle a, b \rangle$ a položíme-li

$$\begin{aligned} x_0 = b, x_1 = a, & \text{ je-li } f(x) \text{ konvexní,} \\ x_0 = a, x_1 = b, & \text{ je-li } f(x) \text{ konkávní,} \end{aligned}$$

pak $f(x_j)$ bude mít vždy stejné znaménko pro všechna $j = 1, 2, \dots$ a vztah (5.3) bude mít tvar

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) \frac{x_k - x_0}{f(x_k) - f(x_0)}.$$

Metodu ilustruje obrázek 5.5.



Obr. 5.5

Příklad 5.10. Řešte rovnici $x - \cos x = 0$ na intervalu $\langle 0, \frac{\pi}{2} \rangle$ metodou sečen a metodou regula falsi. Zaokrouhlujte na šest míst.

Řešení.

(i) Řešení metodou sečen

k	x_k	$f(x_k)$
0	0	-1
1	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$
2	0,611015	-0,20805
3	0,723270	$-0,263763 \times 10^{-1}$
4	0,739567	$0,806723 \times 10^{-2}$
5	0,739083	$-0,283964 \times 10^{-5}$
6	0,739085	$-0,302125 \times 10^{-9}$
7	0,739085	$0,222045 \times 10^{-15}$

(ii) Řešení metodou regula falsi. Výpočet se začne lišit u čtvrté iterace. $f(x_3)$ má stejné znaménko jako $f(x_2)$, proto

$$x_4 = x_3 - f(x_3) \cdot \frac{x_3 - x_1}{f(x_3) - f(x_1)}.$$

Výpočet opět zapíšeme do tabulky:

k	x_k	$f(x_k)$
0	0	-1
1	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2}$
2	0,611015	-0,20805
3	0,723270	$-0,263763 \times 10^{-1}$
4	0,737266	$-0,304346 \times 10^{-2}$
5	0,738878	$-0,347032 \times 10^{-3}$
6	0,739062	$-0,395164 \times 10^{-4}$
7	0,739082	$-0,449901 \times 10^{-5}$
8	0,739085	$-0,512211 \times 10^{-6}$
9	0,739085	$-0,583151 \times 10^{-7}$

Pro srovnání přidáváme hodnotu kořene vyjádřenou na vícedesetiných míst, která činí $\bar{x} = 0,7390851332151611$.

5.4 Sturmova posloupnost

V této kapitole se budeme zabývat stanovením počtu a lokalizací reálných kořenů polynomu

$$P(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n,$$

kde $a_i \in \mathbf{R}$ a $x \in \mathbf{C}$. Počet reálných kořenů určíme pomocí posloupnosti polynomů klesajících stupňů.

Bud' $P_1(x), P_2(x), \dots, P_m(x)$ posloupnost polynomů. Tuto posloupnost nazveme *Sturmovou posloupností* v intervalu (a, b) , jestliže

- $P_m(x) \neq 0$, pro každé $x \in (a, b)$.
- Pro každé $k = 2, \dots, m - 1$ je $P_{k-1}(\bar{x})P_{k+1}(\bar{x}) < 0$, kde \bar{x} je kořenem polynomu $P_k(x)$.

Označme znakem $W(\tilde{x})$ počet znaménkových změn ve Sturmově posloupnosti $\{P_i(x)\}_{i=1}^m$ v bodě \tilde{x} , přičemž ignorujeme nuly.

Věta 5.11. (Sturmova) *Je-li $P(a)$ a $P(b)$ různé od nuly, je počet různých reálných kořenů polynomu $P(x)$ v intervalu $\langle a, b \rangle$ roven číslu*

$$I_a^b = W(b) - W(a). \quad (5.10)$$

Důkaz. Je možné nalézt v knize [8].

Uvažujme posloupnost funkcí $P_i(x)$, $i = 1, \dots, m$ definovaných následujícím způsobem

$$\begin{aligned} P_1(x) &= P(x), \\ P_2(x) &= -P'(x), \\ P_{j-1}(x) &= Q_{j-1}(x)P_j(x) - c_jP_{j+1}(x), \quad j = 2, \dots, m-1, \\ P_{m-1} &= Q_{m-1}(x)P_m(x), \end{aligned} \quad (5.11)$$

kde c_j je libovolné kladné reálné číslo. Polynom $P_{j+1}(x)$ je záporně vzatý zbytek po dělení polynomu $P_{j-1}(x)$ polynomem $P_j(x)$. Konstruujeme posloupnost polynomů zmenšujících se stupňů. Poslední člen posloupnosti $P_m(x)$ je různý od nuly a je největším společným dělitelem polynomů $P_1(x)$ a $P_2(x)$. Jsou-li všechny reálné kořeny polynomu $P_1(x)$ jednoduché, pak $P_1(x)$ a $P_2(x)$ nemají společné reálné kořeny, a tedy $P_m(x)$ nemá reálné kořeny a takto vytvořená posloupnost je Sturmovou posloupností.

Nemá-li $P_m(x)$ konstantní znaménko v intervalu (a, b) , můžeme užít posloupnosti $\left\{ \frac{P_i(x)}{P_m(x)} \right\}_{i=1}^m$. Tato posloupnost je Sturmovou posloupností a hodnota I_a^b je stejná jak pro tuto posloupnost, tak i pro posloupnost definovanou vztahem (5.11).

Poznámka 5.12.

- (i) Má-li $P_m(x)$ reálný kořen, pak dělením polynomu $P_1(x)$ největším společným dělitelem $P_1(x)$ a $P_2(x)$ dostaneme polynom, který má všechny kořeny jednoduché.
- (ii) Je-li \bar{x} l -násobným kořenem polynomu $P(x)$, pak je $(l - 1)$ -násobným kořenem $P'(x)$.

Příklad 5.13. Určete počet různých reálných kořenů polynomu

$$P(x) = x^6 + 4x^5 + 4x^4 - x^2 - 4x - 4$$

a lokalizujte je.

Řešení. Užitím vztahů (5.11) posloupnost dostáváme:

$$\begin{aligned} P(x) = P_1(x) &= x^6 + 4x^5 + 4x^4 - x^2 - 4x - 4, \\ -P'(x) = P_2(x) &= -6x^5 - 20x^4 - 16x^3 + 2x + 4, \\ P_3(x) &= 4x^4 + 8x^3 + 3x^2 + 14x + 16, \\ P_4(x) &= -x^3 - 6x^2 - 12x - 8, \\ P_5(x) &= -17x^2 - 58x - 48, \\ P_6(x) &= x + 2. \end{aligned}$$

Polynom $P_6(x)$ je největším společným dělitelem polynomů $P(x)$ a $P'(x)$, proto $\bar{x} = -2$ je dvojnásobným kořenem polynomu $P(x)$. Tento polynom má však šest kořenů (reálné či komplexní). Uspořádejme další výpočty do tabulky.

x	$-\infty$	∞	0	$-\frac{3}{2}$	2
$P_1(x)$	+	+	-	+	+
$P_2(x)$	+	-	+	-	-
$P_3(x)$	+	+	+	-	+
$P_4(x)$	+	-	-	-	-
$P_5(x)$	-	-	-	+	-
$P_6(x)$	-	+	+	+	+
$W(x)$	1	4	3	2	4

Protože

$$W(\infty) - W(-\infty) = 4 - 1 = 3,$$

má polynom $P(x)$ tři různé reálné kořeny. Zbývající dva jsou tedy komplexní. Dále

$$W(0) - W(-\infty) = 3 - 1 = 2,$$

proto dva kořeny jsou záporné, jeden je -2 (dvojnásobný) a druhý leží v intervalu $\langle -\frac{3}{2}, 0 \rangle$, protože

$$W(0) - W\left(-\frac{3}{2}\right) = 3 - 2 = 1.$$

Zbývající kořen je kladný a leží v intervalu $\langle 0, 2 \rangle$, protože

$$W(\infty) - W(0) = 4 - 3 = 1 \quad \text{a}$$

$$W(2) - W(0) = 4 - 3 = 1.$$

Příklad 5.14. Určete počet různých reálných kořenů polynomu

$$P(x) = x^4 - 5x^3 + x^2 + 21x - 18$$

a lokalizujte je.

Řešení. Užitím vztahů (5.11) posloupnost dostáváme:

$$\begin{aligned} P(x) = P_1(x) &= x^4 - 5x^3 + x^2 + 21x - 18, \\ -P'(x) = P_2(x) &= -4x^3 + 15x^2 - 2x - 21, \\ P_3(x) &= 67x^2 - 262x + 183, \\ P_4(x) &= -x + 3. \end{aligned}$$

Polynom $P_4(x)$ je největším společným dělitelem polynomů $P(x)$ a $P'(x)$, proto $\bar{x} = 3$ je dvojnásobným kořenem polynomu $P(x)$. Tento polynom má čtyři kořeny (reálné či komplexní). Uspořádejme další výpočty do tabulky.

x	$-\infty$	∞	0	2	-1	-3
$P_1(x)$	+	+	-	+	-	+
$P_2(x)$	+	-	-	+	0	+
$P_3(x)$	+	+	+	-	+	+
$P_4(x)$	+	-	+	+	+	+
$W(x)$	0	3	1	2	1	0

Protože

$$W(\infty) - W(-\infty) = 3 - 0 = 3,$$

má polynom $P(x)$ tři různé reálné kořeny (čtvrtý kořen - násobnost). Dále

$$W(\infty) - W(0) = 3 - 1 = 2,$$

proto jsou dva kořeny kladné, jeden je 3 (dvojnásobný) a druhý leží v intervalu $\langle 0, 2 \rangle$, protože

$$W(2) - W(0) = 2 - 1 = 1.$$

Zbývající kořen je záporný a leží v intervalu $\langle -3, -1 \rangle$, protože

$$W(0) - W(-\infty) = 1 - 0 = 1 \quad \text{a}$$

$$W(-1) - W(-3) = 1 - 0 = 1.$$

Příklad 5.15. Určete počet různých reálných kořenů polynomu

$$P(x) = 12x^3 + 2x^2 + x - 3$$

a jejich znaménko.

Řešení. Užitím vztahů (5.11) dostáváme posloupnost:

$$P(x) = P_1(x) = 12x^3 + 2x^2 + x - 3,$$

$$-P'(x) = P_2(x) = -36x^2 - 2x - 1,$$

$$P_3(x) = 91x + 43,$$

$$P_4(x) = -1.$$

Opět uspořádáme výpočet do tabulky.

x	$-\infty$	∞	0
$P_1(x)$	-	+	-
$P_2(x)$	-	-	-
$P_3(x)$	-	+	+
$P_4(x)$	-	-	-
$W(x)$	0	3	2

Protože

$$W(\infty) - W(-\infty) = 3 - 0 = 3,$$

má polynom $P(x)$ tři různé reálné kořeny. Dále

$$W(\infty) - W(0) = 3 - 2 = 1,$$

proto jsou dva kořeny záporné a zbývající je kladný (dvojnásobný).

5.5 Kontrolní otázky a cvičení

Cvičení 5.1. Dokažte, že je-li funkce kontraktivní v $\langle a, b \rangle$, pak je na tomto intervalu spojitá.

Cvičení 5.2. Pomocí Věty 5.4 dokažte, že funkce $g(x) = 2^{-x}$ má jediný pevný bod v intervalu $\langle \frac{1}{3}, 1 \rangle$. S přesností 10^{-4} najděte tento bod metodou přímé iterace.

Cvičení 5.3. Pro rovnici $3x^2 - e^x = 0$ určete funkci $\varphi(x)$ a interval $\langle a, b \rangle$, na kterém bude metoda prosté iterace konvergovat ke kladnému řešení dané rovnice. Řešení určete s přesností 10^{-5} .

Cvičení 5.4. Newtonovou metodou aproximujte kořen rovnice s přesností 10^{-4} :

(i) $x - 0,8 - 0,2 \sin x = 0, x \in \langle 0, \frac{\pi}{2} \rangle$

(ii) $x^3 + 3x^2 - 1 = 0, x \in \langle -4, 0 \rangle$

Cvičení 5.5. Aproximujte kořen rovnice $x^3 - x - 1 = 0, x \in \langle 1, 2 \rangle$ s přesností 10^{-5} metodou sečen a tečen.

Cvičení 5.6. Newtonovou metodou aproximujte s přesností 10^{-4} hodnotu x , která určuje bod na grafu funkce $f(x) = x^{-1}$ takový, že je nejbližší bodu $[2, 1]$.

Cvičení 5.7. Funkce $f(x) = \frac{4x-7}{x-2}$ má kořen v bodě $\bar{x} = 1.75$. Užijte Newtonovu metodu s počáteční aproximací:

(i) $x_0 = 1,95$

(ii) $x_0 = 3$

Výsledky graficky interpretujte.

Cvičení 5.8. Metodou regula falsi aproximujte hodnotu kořene s přesností 10^{-5} :

(i) $3x^2 - e^x = 0$

(ii) $x^2 + 10 \cos x = 0$

Cvičení 5.9. Určete počet různých reálných kořenů polynomu a lokalizujte je:

(i) $x^3 - 5x^2 + 9x - 5$

(ii) $8x^3 - 4x^2 - 18x + 9$

(iii) $8x^3 - 12x^2 - 2x + 3$

5.6 Výsledky

Cvičení 5.2. $x_0 = 1, x_{12} = 0,6412053, |g'(x)| \leq 0,551$

Cvičení 5.3. $\varphi(x) = \sqrt{\frac{1}{3}e^x}, \langle 0, 1 \rangle, x_0 = 0,5, x_{14} = 0,91001$

Cvičení 5.4.

(i) $x_3 = 0,9643339$

(ii) $x_3 = -0,65270365$

Cvičení 5.5. Tečny: $x_0 = 1, x_4 = 1,324718$

Sečny: $x_0 = 1, x_1 = 2, x_7 = 1,324717$

Cvičení 5.6. $[1,8667604; 0,53568738]$

Cvičení 5.7.

(i) $x_7 = 1,75$

(ii) diverguje

Cvičení 5.8.

(i) $x_0 = 0, x_1 = 1, x_7 = 0, 9100077$

(ii) $x_0 = 1, x_1 = 2, x_7 = 1, 968874$

50

Cvičení 5.9.

(i) 1 kladný reálný kořen v intervalu $\langle 0, 2 \rangle$

(ii) 3 různé reálné kořeny, $\langle 0, 1 \rangle, \langle 1, 2 \rangle, \langle -2, -1 \rangle$

(iii) 3 různé reálné kořeny, $\langle 0, 1 \rangle, \langle 1, 2 \rangle, \langle -1, 0 \rangle$

6 NUMERICKÉ ŘEŠENÍ SYSTÉMŮ LINEÁRNÍCH ROVNIC

... co by Vám měla přinést tato kapitola:

Úloha řešit systém lineárních rovnic se vyskytuje v nejrůznějších technických oblastech a v důsledku toho proniká do velmi mnoha matematických disciplín. Jedná se o jednu z nejčastěji se vyskytujících úloh numerické matematiky. Z teoretického hlediska je možné se při řešení této úlohy opřít o známé výsledky z lineární algebry, kde je otázka řešitelnosti soustav lineárních rovnic plně zodpovězena. Při numerickém přístupu k řešení soustav lineárních rovnic vyvstávají ovšem nové aspekty jako náročnost výpočtu, podmíněnost úloh nebo vliv zaokrouhlovacích chyb. Také tvar matice koeficientů má vliv na to, kterou metodu je vhodné, či spíše účelné k řešení použít.

V této kapitole se seznámíme se dvěma základními přístupy k řešení soustav lineárních rovnic. První z nich je založen na tzv. přímých metodách, které po konečně mnoha krocích dávají řešení. Do této skupiny metod patří např. čtenáři dobře známá Gaussova eliminační metoda. Druhou skupinou metod jsou metody iterační, které dávají řešení jako limitu posloupnosti vektorů.

V této kapitole budeme pracovat se systémem lineárních algebraických rovnic tvaru

$$Ax = b, \quad (6.1)$$

kde

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Předpokládejme, že A je komplexní (resp. reálná) čtvercová matice řádu n , x je vektor neznámých, b je reálný vektor. Pro úplnost uvádíme tvrzení týkající se řešitelnosti soustavy (6.1), známé též jako základní věta lineární algebry.

Věta 6.1. *Systém (6.1) má řešení právě tehdy, když hodnota matice A je rovna hodnotě rozšířené matice systému $(A|b)$.*

Je-li matice A regulární (tj. $\det A \neq 0$), má systém (6.1) jediné řešení $x = A^{-1}b$.

Z algebry je známo, že řešení systému (6.1) můžeme nalézt pomocí Cramerova

pravidla

$$x = \left(\frac{D_1}{D}, \dots, \frac{D_n}{D} \right)^T, \quad (6.2)$$

kde $D = \det A$ je determinant matice A a $D_j = \det A_j$ je determinant matice A_j , která vznikne z matice A tak, že její j -tý sloupec nahradíme sloupcem pravých stran b .

Z numerického hlediska je však Cramerovo pravidlo pro řešení soustavy (6.1) zcela nevhodné. Už pro relativně malé soustavy (o několika desítkách rovnic) by výpočet trval neúměrně dlouho, protože výpočet determinantů je časově extrémně náročný.

Numerické metody pro řešení systémů lineárních rovnic lze rozdělit do dvou skupin, na *metody přímé (konečné)* a *iterační*.

Přímými metodami rozumíme ty metody, které vedou k řešení po konečném počtu elementárních aritmetických operací. Jejich princip je založen na úpravě výchozí matice soustavy na matici trojúhelníkovou. Takto vzniklý systém lze pak jednoduše řešit. V případě, že by během výpočtu nedocházelo k zaokrouhlování, vedly by tyto metody k přesnému řešení dané soustavy. Přímé metody jsou vhodnější k řešení systémů, jejichž matice koeficientů je tzv. plná, což znamená, že má velmi málo nenulových prvků. Matice tohoto typu se vyskytují ve statistice, matematické fyzice apod. V dalším se budeme zabývat těmito přímými metodami:

- metoda LU -rozkladu,
- Gaussova eliminační metoda (GEM).

Iterační metody vycházejí z nějakého počátečního přiblížení k řešení a konstruují posloupnost aproximací, která konverguje k přesnému řešení. Iterační metody jsou vhodné zejména pro systémy s tzv. řídkou maticí. Pod tímto pojmem máme na mysli matici, která má velmi málo nenulových prvků (často jen na hlavní diagonále a na diagonálách s ní sousedících). Matice tohoto typu často vznikají při numerickém řešení parciálních diferenciálních rovnic. Mezi tyto metody patří:

- Jacobiho metoda,
- Gauss-Seidlova metoda,
- relaxační metoda,
- metoda největšího spádu.

6.1 Metoda LU -rozkladu

Princip *metody LU -rozkladu* (trojúhelníkový rozklad) spočívá v rozkladu čtvercové matice A řádu n na součin tzv. trojúhelníkových matic. Tento pojem vymezuje následující definice.

Definice 6.2. Jestliže jsou všechny prvky čtvercové matice U ležící pod hlavní diagonálou rovny nule, nazývá se matice U horní trojúhelníková matice. Jestliže jsou všechny prvky čtvercové matice L ležící nad hlavní diagonálou rovny nule, nazývá se matice L dolní trojúhelníková matice.

Základní myšlenka řešení systému (6.1) metodou LU -rozkladu spočívá v řešení dvou systémů s trojúhelníkovou maticí,

$$Ax = LUx = b.$$

Nejprve řešíme systém

$$Ly = b$$

s dolní trojúhelníkovou maticí a s pomocným vektorem neznámých y . Poté řešíme soustavu

$$Ux = y$$

s horní trojúhelníkovou maticí. Řešením této soustavy obdržíme řešení původního systému. Tato metoda nalezne uplatnění zejména, řešíme-li více systémů se stejnou maticí, ale různými pravými stranami.

Z teoretického hlediska je nutné zabývat se otázkou, za jakých podmínek lze najít rozklad matice A na trojúhelníkové matice. Odpověď nám dává následující věta.

Věta 6.3. Pro každou čtvercovou matici A , která má všechny hlavní subdeterminanty různé od nuly, existují dolní trojúhelníková matice L a horní trojúhelníková matice U takové, že

$$A = LU. \tag{6.3}$$

Tento rozklad je určen jednoznačně, jsou-li dány prvky na diagonále matice L nebo U .

Důkaz. Použijeme matematickou indukci. Dokážeme případ, kdy $l_{ii} = 1$, pro všechna $i = 1, 2, \dots, n$. Věta zřejmě platí pro $n = 1$. Předpokládejme, že platí

pro $n = k - 1$. Pro $n = k$ matici A vyjádříme ve tvaru

$$A_k = \begin{pmatrix} A_{k-1} & s \\ r & a_{kk} \end{pmatrix},$$

kde $s = (a_{1k}, a_{2k}, \dots, a_{k-1,k})^\top$ a $r = (a_{k1}, a_{k2}, \dots, a_{kk-1})$. Položme

$$L_k = \begin{pmatrix} L_{k-1} & 0 \\ x & 1 \end{pmatrix}, \quad U_k = \begin{pmatrix} U_{k-1} & y^\top \\ 0 & u_{kk} \end{pmatrix}.$$

Podle předpokladu jsou matice U_{k-1}, L_{k-1} regulární, jednoznačně určené a platí $L_{k-1}U_{k-1} = A_{k-1}$. Neznámé vektory x, y a prvek a_{kk} určíme tak, aby platilo $L_k U_k = A_k$. Tedy $L_{k-1}y^\top = s$, $U_{k-1}x^\top = r^\top$. Jedná se o dva systémy s trojúhelníkovou maticí, které mají jediné řešení $x = \bar{x}$, $y = \bar{y}$. Z podmínky $xy^\top + u_{kk} = a_{kk}$ plyne, že $u_{kk} = a_{kk} - \bar{x}\bar{y}^\top$. Tedy matice L_k, U_k jsou určeny jednoznačně.

Musíme ještě ukázat, že $u_{kk} \neq 0$. Platí $\det L_k = 1 \cdot \det L_{k-1}$, $\det U_k = u_{kk} \cdot \det U_{k-1}$, pak z podmínky

$$\det A_k = \det L_k \det U_k = u_{kk} \cdot \det L_{k-1} \det U_{k-1} \neq 0$$

plyne požadovaná nerovnost. \diamond

Poznámka 6.4. Jsou-li dány diagonální prvky matice L a $l_{ii} = 1$ pro všechna $i = 1, \dots, n$, tj.

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

hovoříme o *Doolittlově rozkladu*.

Příklad 6.5. Najděte řešení soustavy rovnic pomocí metody LU -rozkladu:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 - x_3 &= 3 \\ 2x_1 - x_2 + 3x_3 &= 0 \\ -x_1 - 2x_2 + x_3 &= -5 \end{aligned}$$

Řešení.

(i) Ověříme předpoklad věty 6.3:

$$\det A_1 = 1,$$

$$\det A_2 = \det \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} = -3,$$

$$\det A_3 = \det A = \det \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 3 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix} = 5.$$

(ii) Provedeme LU -rozklad matice A :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 3 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \quad LU = A$$

Roznásobíme

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ l_{21}u_{11} & l_{21}u_{12} + u_{22} & l_{21}u_{13} + u_{23} \\ l_{31}u_{11} & l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} & u_{13}l_{31} + l_{32}u_{23} + u_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 3 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Porovnáním koeficientů dostaneme

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & \frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & -3 & 5 \\ 0 & 0 & -\frac{5}{3} \end{pmatrix}.$$

(iii) Řešíme soustavu $Ly = b$,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & \frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

Řešením této soustavy je vektor $y = (y_1, y_2, y_3)^T = (3, -6, 0)^T$.

(iv) Řešíme soustavu $Ux = y$,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & -3 & 5 \\ 0 & 0 & -\frac{5}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -6 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Řešením této soustavy a tedy i původního systému je vektor $x = (x_1, x_2, x_3)^\top = (1, 2, 0)^\top$.

6.2 Gaussova eliminační metoda

Gaussova eliminační metoda (GEM) je jedna z nejrozšířenějších a nejstarších metod numerického řešení soustav lineárních algebraických rovnic. Princip Gaussovy eliminace spočívá v tom, že z původního systému $Ax = b$ dostáváme postupně ekvivalentní přidružené systémy

$$A^{(k)}x = b^{(k)},$$

kde $k = 0, 1, \dots, n-1$, $A^{(0)} = A$, $b^{(0)} = b$, které mají totéž řešení.

Předpokládejme, že máme vypočtený $(k-1)$ -ní systém $A^{(k-1)}x = b^{(k-1)}$. Přejít k systému $A^{(k)}x = b^{(k)}$ je možný právě tehdy, když $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$. Splnění tohoto předpokladu lze dosáhnout vhodnou výměnou rovnic. Proto tyto prvky nazýváme *hlavní prvky (pivoty)*. Poslední přidružený systém $A^{(n-1)}x = b^{(n-1)}$ je potom trojúhelníkový systém s regulární horní trojúhelníkovou maticí. Takovou soustavu řešíme od poslední rovnice tzv. *zpětnou substitucí*:

$$x_i = \frac{b_i^{(n-1)} - \sum_{k=i+1}^n a_{ik}^{(n-1)} x_k}{a_{ii}^{(n-1)}}, \quad i = n, n-1, \dots, 1.$$

Algoritmus GEM lze zapsat pomocí následujícího cyklu. Pro s od 1 do $n-1$ proved' tyto kroky:

- (i) Urči prvek $a_{rs}^{(s-1)} \neq 0$, $r = s, s+1, \dots, n$.
- (ii) Vyměň s -tý a r -tý řádek.
- (iii) Pro $i = s+1, s+2, \dots, n$ odečti násobek

$$l_{is} = \frac{a_{is}^{(s-1)}}{a_{ss}^{(s-1)}}$$

s -tého řádku od i -tého řádku. Výsledkem je systém $A^{(s)}x = b^{(s)}$.

Prvky l_{is} se nazývají *multiplikátory*.

Příklad 6.6. Gaussovou eliminační metodou řešte systém z příkladu 6.5.

Řešení. Sestavíme rozšířenou matici soustavy $(A|b)$,

$$(A|b) = (A^{(0)}|b^{(0)}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 3 \\ 2 & -1 & 3 & 0 \\ -1 & -2 & 1 & -5 \end{array} \right).$$

Vedoucí prvek je $a_{11}^{(0)} = 1$. Eliminujeme $a_{21}^{(0)}$ a to tak, že příslušný multiplikátor je

$$l_{21} = \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = 2.$$

Pak odečteme první rovnici od druhé. Totéž provedeme pro prvek $a_{31}^{(0)} = 3$, kde

$$l_{31} = \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = -1.$$

Dostaneme

$$(A^{(1)}|b^{(1)}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -3 & 5 & -6 \\ 0 & -1 & 0 & -2 \end{array} \right).$$

Dále je vedoucí prvek $a_{22}^{(1)} = -3$. Eliminujeme $a_{32}^{(1)}$ a to tak, že příslušný multiplikátor je

$$l_{32} = \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} = \frac{1}{3}$$

a rovnice opět odečteme,

$$(A^{(2)}|b^{(2)}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & -2 & -4 \\ 0 & 0 & 1 & 5 \end{array} \right).$$

Nyní řešíme systém $A^{(2)}x = b^{(2)}$ (zpětný chod), jehož řešením je vektor

$$x = (x_1, x_2, x_3)^T = (0.5, 2, 5)^T.$$

Příklad 6.7. Gaussovou eliminační metodou (se zaokrouhlováním na čtyři číslice) řešte lineární systém:

$$\begin{aligned}0,003x_1 + 59,14x_2 &= 59,17 \\ 5,291x_1 - 6,13x_2 &= 46,78\end{aligned}$$

Řešení. Zvolíme za vedoucí prvek (pivota) $a_{11} = 0,003$. Eliminujeme prvek $a_{21} = 5,291$. Odpovídající multiplikátor je

$$l_{21} = \frac{5,291}{0,003} = 1763,6\bar{6} \doteq 1764.$$

První krok GEM vede (vzhledem k zaokrouhlování na 4 čísla) na systém

$$\begin{aligned}0,003x_1 + 59,14x_2 &= 59,17, \\ -104300x_2 &= -104400.\end{aligned}$$

Řešením tohoto systému je $x_2 = 1,001$ a $x_1 = -10$. Tento systém má však přesné řešení $x^* = (10, 1)^\top$. Velká chyba při výpočtu x_1 je důsledkem malé chyby 0,001 při výpočtu x_2 , která je ovšem při výpočtu x_1 násobena faktorem ≈ 20000 .

Tento příklad ukazuje obtíže, které se mohou objevit v případě, že pivot a_{kk} je relativně malý vzhledem k ostatním prvkům a_{ij} , $k \leq i \leq n, k \leq j \leq n$. Nejjednodušší postup v tomto případě je vybrat v tomtéž sloupci prvek maximální v absolutní hodnotě, tj. určit p tak, aby

$$|a_{pk}| = \max_{i=k,\dots,n} |a_{ik}|$$

a vyměnit p -tou a k -tou rovnicí. Tomuto postupu se říká GEM s *částečným výběrem pivota*.

Řešení GEM s *úplným výběrem pivota* se provádí tak, že v každém kroku najdeme takové indexy p a q , aby

$$|a_{pq}| = \max_{i,j=k,\dots,n} |a_{ij}|,$$

tj. provádíme výběr pivota pro každý řádek a sloupec.

6.3 Iterační metody

Řešíme-li soustavu lineárních rovnic $Ax = b$ iterační metodou, začínáme s nějakou počáteční aproximací $x^{(0)}$ řešení x této soustavy a postupně generujeme posloupnost vektorů $x^{(k)}$, která konverguje k řešení x . Ve většině iteračních technik postupujeme tak, že systém $Ax = b$ převedeme na systém tvaru

$$x = Hx + h,$$

kde H je tzv. *iterační matice*. Poté, co je zvolena počáteční aproximace, je posloupnost vektorů konvergujících k řešení soustavy dána vztahem

$$x^{(k)} = Hx^{(k-1)} + h. \quad (6.4)$$

Rozdíl mezi iteračními technikami je tedy dán odlišným tvarem iterační matice H . Pokud jde o využití iteračních metod, zřídka jsou využívány k řešení systémů malé dimenze, protože v takových případech jsou přímé metody efektivnější. Pro rozsáhlé systémy, které mají vysoké procento nulových prvků v matici soustavy, však přinášejí tyto metody značné časové úspory.

Pro hlubší pochopení principu uvedených metod, ve vztahu k vlastnostem matice soustavy, je nutné zavést pojem maticové normy a uvést některé její vlastnosti. Předpokládáme přitom, že pojem vektorové normy je čtenáři známý z lineární algebry.

6.3.1 Maticová norma

Definice 6.8. Maticovou normou nazýváme reálnou funkci $\|\cdot\|$, která je definovaná na množině všech čtvercových matic řádu n a která má takové vlastnosti, že pro libovolné dvě matice A, B a libovolné reálné číslo α platí

- (i) $\|A\| \geq 0$, $\|A\| = 0$ právě když A je nulová matice,
- (ii) $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$,
- (iii) $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$,
- (iv) $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$.

Normu matice je možné zavést pomocí vektorové normy, jak ukazuje tato věta.

Věta 6.9. Necht' $\|\cdot\|$ je vektorová norma v \mathbf{R}^n , pak je vztahem

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

definována na množině všech čtvercových matic řádu n maticová norma, která se nazývá souhlasná s příslušnou vektorovou normou.

Důkaz tohoto tvrzení není obtížný, a proto jej ponecháváme čtenáři jako cvičení.

Poznámka 6.10. Příklady souhlasných norem:

(i) $\|x\| = \left(\sum_{j=1}^n |x_j|^2\right)^{\frac{1}{2}}$ a $\|A\| = \left(\sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}}$.

(ii) $\|x\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j|$ a $\|A\|_1 = \max_{j=1,\dots,n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$, kde $\|A\|_1$ se nazývá *sloupcová norma*.

(iii) $\|x\|_\infty = \max_{j=1,\dots,n} |x_j|$ a $\|A\|_\infty = \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$, kde $\|A\|_\infty$ se nazývá *řádková norma*.

Další pojem, který budeme potřebovat, je tzv. spektrální poloměr matice, úzce souvisí s pojmem vlastní hodnota matice.

Definice 6.11. Spektrální poloměr $\rho(A)$ matice A je definován vztahem

$$\rho(A) = \max |\lambda|,$$

kde λ je vlastní hodnota matice A .

Následující věta udává užitečný vztah mezi přirozenou maticovou normou a spektrálním poloměrem matice.

Věta 6.12. Je-li A reálná matice typu $n \times n$, potom

$$\rho(A) \leq \|A\|,$$

pro libovolnou souhlasnou maticovou normu $\|\cdot\|$.

Důkaz. Předpokládejme, že λ je vlastní hodnota matice a k ní příslušný vlastní vektor x má vlastnost $\|x\| = 1$. Tím jsme neučinili žádný předpoklad, který by byl újmou na obecnosti, protože ke každé vlastní hodnotě matice existuje vlastní vektor s touto vlastností (lze jej získat normováním). Protože $(A - \lambda E)x = 0$, tj. $Ax = \lambda x$, dostáváme pro libovolnou souhlasnou maticovou normu

$$|\lambda| = \|\lambda x\| = \|Ax\| \leq \|A\|\|x\| = \|A\|.$$

Ve výsledku dostáváme

$$\rho(A) = \max |\lambda| \leq \|A\|.$$

◇

K tomu, abychom mohli dokázat následující větu, budeme potřebovat pomocné tvrzení, které uvádíme bez důkazu. Ten je možné nalézt v [1].

Lemma 6.13.

(i) Jestliže pro spektrální poloměr matice A platí $\rho(A) < 1$, pak existuje inverzní matice k matici $E - A$ a platí

$$(E - A)^{-1} = E + A + A^2 + \dots$$

(ii) $\rho(A) < 1$ právě tehdy, když $\lim_{k \rightarrow \infty} A^k x = 0$ pro libovolné x .

Nyní můžeme zformulovat klíčovou větu týkající se konvergence iteračních technik daných vztahem

$$x^{(k)} = Hx^{(k-1)} + h.$$

Věta 6.14. Pro libovolnou počáteční aproximaci $x^{(0)}$ řešení soustavy $x = Hx + h$ konverguje posloupnost $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ daná vztahem

$$x^{(k)} = Hx^{(k-1)} + h.$$

k jedinému řešení soustavy $x = Hx + h$ právě tehdy když $\rho(H) < 1$.

Důkaz. Ze vztahu (6.4) dostáváme

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= Hx^{(k-1)} + h \\ &= H(Hx^{(k-2)} + h) + h \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= H^2 x^{(k-2)} + (H + E)h \\
&\quad \vdots \\
&= H^k x^{(0)} + (H^{k-1} + \dots H + E)h.
\end{aligned}$$

Z předpokladu $\rho(H) < 1$ dostáváme využitím předchozího lemmatu

$$\begin{aligned}
\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} &= \lim_{k \rightarrow \infty} H^k x^{(0)} + \lim_{k \rightarrow \infty} (H^{k-1} + \dots H + E)h \\
&= 0 \cdot x^{(0)} + (E - H)^{-1}h = (E - H)^{-1}h.
\end{aligned}$$

Dosazením do (6.4) lze ověřit, že $x = \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = (E - A)^{-1}h$ je řešení rovnice $x = Hx + h$. Jeho jednoznačnost je zřejmá.

Pro důkaz opačné implikace vycházíme z předpokladu, že posloupnost $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ konverguje k řešení x pro každé $x^{(0)}$. Z rovnice (6.4) vyplývá, že $x = Hx + h$, takže pro každé k platí

$$x - x^{(k)} = T(x - x^{(k-1)}) = \dots = T^k(x - x^{(0)}).$$

Odtud máme

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T^k(x - x^{(0)}) = \lim_{k \rightarrow \infty} (x - x^{(k)}) = 0.$$

Důsledkem předcházejících úvah je, že položíme-li $x^{(0)} = x - z$, kde z je libovolné, dostáváme

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T^k z = \lim_{k \rightarrow \infty} T^k(x - (x - z)) = 0,$$

což podle předcházejícího lemmatu znamená, že $\rho(H) < 1$. ◇

6.3.2 Jacobiova a Gaussova-Seidelova metoda

V tomto odstavci se seznámíme se dvěma nejpoužívanějšími iteračními metodami pro řešení systému lineárních rovnic. Už v předcházejícím odstavci jsme uvedli, že dané iterační techniky se liší tvarem iterační matice H ve vztahu (6.4). Odvodíme nejdříve tvar iterační matice pro Jacobiovu metodu. Předpokládejme opět, že matice A je regulární a zapišme ji ve tvaru

$$A = D + L + U, \tag{6.5}$$

kde D je diagonální matice, L je dolní trojúhelníková matice s nulovou diagonálou a U je horní trojúhelníková matice s nulovou diagonálou. Předpokládejme, že D

je regulární. Pokud má hlavní diagonála matice A nulový prvek, pak regularitu D dostaneme přerovněním řádků matice A . Soustavu (6.1) pak zapíšeme ve tvaru:

$$\begin{aligned}(D + L + U)x &= b \\ Dx &= -(L + U)x + b \\ x &= -D^{-1}(L + U)x + D^{-1}b.\end{aligned}$$

Označíme-li ve vztahu (6.4) $H = -D^{-1}(L + U)$ a $h = D^{-1}b$, získáme vztahy, kterými je určena *Jacobiova iterační metoda*, někdy také nazývaná *metoda postupných aproximací*.

Modifikací Jacobiovy metody dostaneme tzv. *Gauss-Seidelovu metodu*. Při výpočtu $(k + 1)$ -ní iterace neznámé x_j (j -tá složka vektoru $x^{(k+1)}$) použijeme už známé (spočítané) hodnoty (předchozí složky) $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{j-1}^{(k+1)}$. Proto se tato metoda někdy též nazývá *metoda postupných oprav*. Popišme tuto metodu podrobněji.

Označme j -tou složku vektoru $x^{(k)}$ symbolem $x_j^{(k)}$ a napišme soustavu (6.1) ve tvaru $\sum_{j=i}^n a_{ij}x_j = b_i$, kde $i = 1, \dots, n$. Abychom určili $x_1^{(k+1)}$, použijeme první rovnici tvaru

$$x_1^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{11}} \left(\sum_{j=2}^n a_{1j}x_j^{(k)} - b_1 \right). \quad (6.6)$$

Abychom vypočetli $x_2^{(k+1)}$, použijeme druhou rovnici, ale $x_1^{(k)}$ nahradíme hodnotou $x_1^{(k+1)}$, kterou jsme vypočetli z rovnice (6.6), tedy

$$x_2^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{22}} \left(a_{21}x_1^{(k+1)} + \sum_{j=3}^n a_{2j}x_j^{(i)} - b_2 \right).$$

Obecně

$$x_r^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{rr}} \left(\sum_{j=1}^{r-1} a_{rj}x_j^{(k+1)} + \sum_{j=r+1}^n a_{rj}x_j^{(i)} - b_r \right), \quad r = 1, \dots, n.$$

Zapíšeme-li A ve tvaru (6.5), pak

$$x^{(k+1)} = -D(Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)}) + D^{-1}b.$$

Tuto rovnici můžeme rozřešit vzhledem k $x^{(k+1)}$. Tedy

$$x^{(k+1)} = -(D + L)^{-1}Ux^{(k)} + (D + L)^{-1}b. \quad (6.7)$$

Označíme-li ve vztahu (6.4)

$$H = -(D + L)^{-1}U \quad \text{a} \quad h = (D + L)^{-1},$$

dostáváme Gauss-Seidelův iterační vzorec.

Obecně jsme se otázkou konvergence iteračních metod zabývali v minulém odstavci. Nyní uvedem vztahy udávající odhad chyby při použití iteračních metod. Následující tvrzení je důsledkem věty 6.14.

Důsledek 6.15. *Je-li $\|H\| < 1$. Pak pro odhad chyby iterační metody dané vztahem (6.4) platí*

$$\|x^{(k)} - x\| \leq \frac{\|H\|}{1 - \|H\|} \cdot \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|,$$

kde $\|H\|$ je maticová norma přiřazená (souhlasná) s vektorovou normou $\|x\|$.

Jak víme z předchozího odstavce, nutnou a postačující podmínkou pro konvergenci iteračních metod je, aby spektrální poloměr iterační matice, resp. její norma, byl menší než 1. V praxi však může být výpočet těchto veličin značně komplikovanou záležitostí. Uvedeme proto jiná kritéria, která jsou snadněji ověřitelná. První z nich je založeno na dominanci diagonály matice soustavy $Ax = b$.

Definice 6.16. Matice A typu $n \times n$ se nazývá *diagonálně dominantní*, když platí

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n |a_{ik}| \quad \text{nebo} \quad |a_{jj}| > \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n |a_{kj}|$$

pro každé $i, j = 1, \dots, n$.

Lze poměrně snadno ukázat, obzvlášť pro Jacobiovu metodu, že platí následující věta

Věta 6.17. *Nechť je matice systému (6.1) diagonálně dominantní. Potom Jacobi-ova a Gauss-Seidelova metoda konvergují pro každou počáteční iteraci $x^{(0)}$.*

Důkaz. Nastíníme pouze myšlenku a podrobný důkaz přenecháváme čtenáři jako cvičení. Je nutné analyzovat tvar iterační matice H , která je tvořena maticemi L , D a U v závislosti na použité metodě. Je-li např. pro Jacobiovu metodu $H = -D^{-1}(L + U)$, lze snadno nahlédnout, že $\|H\|_\infty < 1$ právě na základě skutečnosti, že prvky na diagonále matice D převyšují v součtu prvků ležících v řádcích či

sloupcích matice $L + U$. ◇

V případě Gaussovy-Seidelovy metody je možné zformulovat další kritérium konvergence.

Věta 6.18. *Je-li matice A symetrická a pozitivně definitní, tak Gauss-Seidelova metoda konverguje pro každé $x^{(0)}$.*

Poznámka 6.19. Mohlo by se zdát, že Gaussova-Seidelova metoda je nadřazená Jacobiově metodě. Už jen proto, že vznikla modifikací Jacobiovy metody, která obnáší jisté vylepšení. Ačkoli ve "většině" případů tomu tak skutečně je, neplatí toto tvrzení obecně. Je možné sestavit příklady systémů rovnic, kdy Jacobiova metoda konverguje a Gaussova-Seidelova diverguje. Toto ovšem platí také naopak. Obecně také není známo, kterou metodu je vhodnější použít, i když v některých speciálních případech odpověď známe. Např. pro symetrickou pozitivně definitní matici A je, v případě konvergence obou metod, vhodnější Gaussova-Seidelova metoda, která pro tyto matice konverguje dvakrát rychleji.

Příklad 6.20. S přesností $\hat{\varepsilon} = 10^{-3}$ řešte Jacobiho a Gauss-Seidelovou metodou systém

$$\begin{aligned}10x_1 - 3x_2 + 4x_3 &= 5 \\2x_1 + 12x_2 - 8x_3 &= 3 \\4x_1 + 3x_2 - 16x_3 &= -1\end{aligned}$$

s počáteční aproximací $x^{(0)} = (1, 1, 1)^\top$.

Řešení.

- (i) Nejprve ověříme, zda je matice systému diagonálně dominantní. Tato matice je řádkově i sloupcově diagonálně dominantní.
- (ii) Jacobiova metoda.

Matici soustavy A rozepíšeme ve tvaru $A = D - (L + U)$, kde

$$D = \begin{pmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & -16 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad L + U = \begin{pmatrix} 0 & -3 & 4 \\ 2 & 0 & -8 \\ 4 & 3 & 0 \end{pmatrix}.$$

Určíme matici $H = -D^{-1}(L + U)$ a vektor $h = D^{-1}b$. Dostaneme iterační rovnici

$$x^{(k+1)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{3}{10} & -\frac{4}{10} \\ -\frac{1}{6} & 0 & \frac{2}{3} \\ \frac{1}{4} & \frac{3}{16} & 0 \end{pmatrix} x^{(i)} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{16} \end{pmatrix}.$$

Výpočet uspořádáme do tabulky:

i	$(x^{(i)})^\top$	$\ x^{(i)} - x^{(i-1)}\ $
0	(1, 1, 1)	
1	(0, 4, 0, 75, 0, 5)	0, 745897
2	(0, 525, 0, 516667, 0, 303125)	0, 0878142
3	(0, 53375, 0, 364583, 0, 290625)	0, 0462152
4	(0, 493125, 0, 354792, 0, 264297)	0, 0462152
5	(0, 500719, 0, 34401, 0, 252305)	0, 00468234
6	(0, 502281, 0, 33475, 0, 252182)	0, 00364371
7	(0, 499552, 0, 334408, 0, 250836)	0, 00278807
8	(0, 499988, 0, 333965, 0, 25009)	0, 000179792

Přibližná hodnota řešení s danou přesností je

$$x^{(8)} = (0, 499988, 0, 333965, 0, 25009)^\top.$$

Poznamenejme, že přesné řešení má hodnotu $x = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}\right)^\top$.

(iii) Gaussova-Seidelovou metoda.

Iterační předpis má tvar:

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= -\frac{1}{10} \left(-3x_2^{(i)} + 4x_3^{(i)} - 5 \right) \\ x_2^{(k+1)} &= -\frac{1}{12} \left(2x_1^{(k+1)} - 8x_3^{(i)} - 3 \right) \\ x_3^{(k+1)} &= \frac{1}{16} \left(4x_1^{(k+1)} + 3x_2^{(k+1)} + 1 \right) \end{aligned}$$

Výpočet uspořádáme do tabulky:

i	$(x^{(i)})^\top$	$\ x^{(i)} - x^{(i-1)}\ $
0	(1, 1, 1)	
1	(0, 4, 0, 85, 0, 321875)	0, 739023
2	(0, 62625, 0, 360208, 0, 286602)	0, 215802
3	(0, 493422, 0, 358831, 0, 253136)	0, 116694
4	(0, 506395, 0, 334358, 0, 251791)	0, 00354668
5	(0, 499591, 0, 334595, 0, 250134)	0, 00574607
6	(0, 500325, 0, 333369, 0, 250088)	0, 0000836751

Přibližná hodnota je $x^{(6)} = (0.500325, 0.333369, 0.250088)^\top$.

6.4 Kontrolní otázky a cvičení

Cvičení 6.1. Rozhodněte, zda jsou následující výroky pravdivé.

- (i) Jacobiho metoda je vždy konvergentní.
- (ii) Výběr pivota urychluje konvergenci Gaussovy eliminace.
- (iii) Konvergence Gauss-Seidlovoy metody závisí jen na počáteční aproximaci $x^{(0)}$.
- (iv) Platí-li u Jacobiovy a Gauss-Seidelovy metody $x^{(k)} = x^{(k+1)}$, pak jsme našli přesné řešení.

Cvičení 6.2. Metodou LU -rozkladu řešte následující systémy:

$$\begin{array}{l} 2x_1 + x_2 + 3x_3 = 2 \\ \text{(i)} \quad x_1 - 2x_2 + 5x_3 = 0 \\ 3x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} x_1 + x_2 - x_3 = 3 \\ \text{(ii)} \quad 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 0 \\ -x_1 - 2x_2 + x_3 = -5 \end{array}$$

Cvičení 6.3. Gaussovou eliminační metodou bez výběru pivota a se zaokrouhlováním na dvě číslice řešte lineární systémy: (Přesné řešení systémů je: $x = (1, -1, 3)^\top$)

$$\begin{array}{l} 4x_1 - x_2 + x_3 = 8 \\ \text{(i)} \quad 2x_1 + 5x_2 + 2x_3 = 3 \\ x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 11 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} 2x_1 + 4x_2 - x_3 = -5 \\ \text{(ii)} \quad x_1 + x_2 - 3x_3 = -9 \\ 4x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 \end{array}$$

Cvičení 6.4. Se zaokrouhlováním na 3 číslice řešte systém

$$0,03x_1 + 58,9x_2 = 59,2$$

$$5,31x_1 - 6,10x_2 = 47,0$$

- (i) Gaussovou eliminační metodou se zpětnou substitucí,
- (ii) Gaussovou eliminační metodou s výběrem pívota.

Cvičení 6.5. Se zaokrouhlováním na 3 číslice řešte systém

$$0,832x_1 + 0,448x_2 + 0,193x_3 = 1,00$$

$$0,784x_1 + 0,421x_2 - 0,207x_3 = 0,00$$

$$0,784x_1 - 0,421x_2 + 0,279x_3 = 0,00$$

- (i) Gaussovou eliminační metodou se zpětnou substitucí,
- (ii) Gaussovou eliminační metodou s výběrem pívota.

Cvičení 6.6. Určete první dvě iterace Jacobiovy a Gauss-Seidelovy metody pro počáteční aproximaci $x^{(0)} = 0$:

$$2x_1 - x_2 + x_3 = -1$$

(i) $3x_1 + 3x_2 + 9x_3 = 0$

$$3x_1 + 3x_2 + 5x_3 = 4$$

$$2x_2 + 4x_3 = 0$$

(ii) $x_1 - x_2 - x_3 = 0,375$

$$x_1 - x_2 + 2x_3 = 0$$

Cvičení 6.7. Upravte matici soustavy tak, aby byla zaručena konvergence Gauss-Seidelovy metody:

$$2x_1 - x_2 = -3$$

$$3x_1 + x_3 = -6$$

$$-2x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 2$$

6.5 Výsledky

Cvičení 6.1.

- (i) Ne
- (ii) Ne
- (iii) Ne
- (iv) Ano

Cvičení 6.2.

- (i) $y = \left(2, -1, -\frac{11}{5}\right)^\top$, $x = \left(-\frac{13}{14}, \frac{3}{2}, \frac{11}{14}\right)^\top$
- (ii) $y = (3, -6, 0)^\top$, $x = (1, 2, 0)^\top$

Cvičení 6.3.

- (i) $x = (1, 1, -0,95, 2, 8)^\top$
- (ii) $x = (1, -1, 3)^\top$

Cvičení 6.4.

- (i) $x = (30, 0, 0, 990)^\top$
- (ii) $x = (10, 0, 1, 00)^\top$

Cvičení 6.5.

- (i) Jacobiho metoda: $x^{(2)} = (-0,9, -1,9, 1,1)^\top$
Gauss-Seidlova metoda: $x^{(2)} = (-0,65, -1,75, 1,89)^\top$

- (ii) Metody nelze aplikovat.

Cvičení 6.6. Podmínky konvergence nejsou splněny. Soustavu můžeme vynásobit maticí A^\top . Tím získáme soustavu, jejíž matice je symetrická a pozitivně definitní. Tedy Gauss-Seidlova metoda konverguje.

$$\begin{array}{rclcl} 17x_1 & - & 6x_2 & - & 5x_3 & = & -28 \\ -6x_1 & + & 5x_2 & + & 8x_3 & = & 7 \\ -5x_1 & + & 8x_2 & + & 17x_3 & = & 2 \end{array}$$

7 NUMERICKÉ INTEGROVÁNÍ

... co by Vám měla přinést tato kapitola:

V praktických úlohách může před námi často vyvstat potřeba alespoň přibližného vyjádření hodnoty nějakého určitého integrálu. Mohou k tomu vést dva důvody. Prvním z nich je, že primitivní funkci nejsme schopni vyjádřit explicitně. Ale i v případech, kdy je možné získat explicitní tvar primitivní funkce, může být výsledná funkce vyjádřena složitými výrazy. V těchto a podobných případech určujeme daný určitý integrál přibližnými metodami.

Obsah této kapitoly úzce souvisí s kapitolou o interpolaci. Metody, se kterými se v ní seznámíme, jsou totiž založeny na nahrazení integrované funkce Lagrangeovým interpolačním polynomem. Obecně nesou tyto metody název Newtonovy-Cotesovy vzorce, přičemž náplní kapitoly je pojednat o nejužívanějších z nich, kterými jsou obdélníkové, lichoběžníkové a Simpsonovo (parabolické) pravidlo.

V této kapitole se budeme zabývat numerickými metodami výpočtu určitého integrálu

$$\int_a^b f(x) \, dx,$$

kde $a < b$ jsou reálná čísla, přičemž integrál vždy chápeme v Riemannově smyslu. Numerickým integrováním rozumíme tedy proces výpočtu bez použití primitivní funkce. V případě, že máme funkci $f(x)$ danou tabulkou, ztrácí pojem primitivní funkce smysl. I když známe analytický předpis pro funkci $f(x)$, může být výpočet primitivní funkce velmi složitý nebo zcela nemožný, např.

$$\int_a^b e^{-x^2} \, dx \text{ nebo } \int_a^b \frac{\log x}{x} \, dx.$$

Z definice určitého integrálu vyplývá, že za přibližnou hodnotu můžeme vzít některou hodnotu integrálního součtu pro dostatečně jemné dělení intervalu $\langle a, b \rangle$ (numerická kvadratura).

Druhý způsob je založený na aproximování integrandu $f(x)$ vhodnou funkcí, např. interpolačním polynomem, kterou umíme integrovat.

V praxi se velmi často kloubí oba tyto způsoby. Mezi metody využívající tento přístup patří *Newtonovy-Cotesovy kvadrurní vzorce*. Tyto vzorce dělíme do dvou skupin:

- (i) *uzavřeného typu*, kde krajní body intervalů bereme za uzlové body kvadratury,

- (ii) *uzavřeného typu*, kde uzlové body kvadratury jsou symetricky rozloženy kolem středu daného intervalu.

My se budeme zabývat Newtonovými-Cotesovými vzorci uzavřeného typu stupně $k = 0, 1, 2$.

7.1 Newtonovy-Cotesovy vzorce uzavřeného typu

Nechť je interval $\langle a, b \rangle$ rozdělen na ekvidistanční uzly, tj.

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b,$$

tedy krok $h = (b - a)/n$. Na každém podintervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$, $i = 1, \dots, n$, nahradíme integrand $f(x)$ Lagrangeovým polynomem $L_{i,k}$ stupně k , tedy

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) \, dx \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_{i,k}(x) \, dx.$$

Takto získáme *jednoduchý Newtonův-Cotesův vzorec stupně k* . Pak na celém intervalu $\langle a, b \rangle$ platí *složený Newtonův-Cotesův vzorec stupně k* , tj.

$$\int_a^b f(x) \, dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) \, dx \approx \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_{i,k}(x) \, dx.$$

K vyjádření chyby integrace $R_k(f)$ na intervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$ je potřeba znát vztah pro chybu interpolace. Za předpokladu, že funkce $f(x)$ je $(k + 1)$ -krát diferencovatelná, máme

$$\begin{aligned} R_{i,k}(f) &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) \, dx - \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_{i,k}(x) \, dx \\ &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{f^{(k+1)}(\eta_i)}{(k+1)!} (x - t_0)(x - t_1) \dots (x - t_k) \, dx, \end{aligned} \quad (7.1)$$

kde $\eta_i \in \langle x_{i-1}, x_i \rangle$, $t_0 = x_{i-1}$, $t_1 = x_{i-1} + l$, \dots , $t_k = x_{i-1} + kl = x_i$, jsou vnitřní uzlové body intervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$ potřebné pro konstrukci Lagrangeova polynomu $L_{i,k}(x)$. Tedy $l = \frac{x_i - x_{i-1}}{k}$. Dále je potřeba provést netriviální úvahy zvlášť pro k sudé, resp. liché, jejichž výsledkem je následující věta.

Věta 7.1. Existuje číslo $\eta_i \in \langle x_{i-1}, x_i \rangle$ takové, že pro chybu jednoduchého Newtonova-Cotesova vzorce k -tého stupně platí

$$R_{i,k}(f) = \frac{f^{(k+1)}(\eta_i)}{(k+1)!} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-t_0)(x-t_1)\dots(x-t_k) dx, \quad (7.2)$$

pro k liché a pro k sudé platí

$$R_{i,k}(f) = \frac{f^{(k+2)}(\eta_i)}{(k+2)!} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-t_0)^2(x-t_1)\dots(x-t_k) dx. \quad (7.3)$$

Při praktických výpočtech (odhadu chyby) ohraničíme číslo $f^{(m)}(\eta_i)$ hodnotou

$$M_{i,m} = \max_{x \in \langle x_{i-1}, x_i \rangle} |f^{(m)}(x)|,$$

kde $m = k + 1$, resp. $m = k + 2$.

Protože složený vzorec je součtem jednoduchých vzorců, je celková chyba integrace $\bar{R}_k(f)$ součtem dílčích chyb, tj.

$$\bar{R}_k(f) = \sum_{i=1}^n R_{i,k}(f). \quad (7.4)$$

Je-li funkce $f^{(m)}(x)$ spojitá na intervalu $\langle a, b \rangle$, pak existuje bod $\eta \in \langle a, b \rangle$ takový, že

$$\sum_{i=1}^n f^{(m)}(\eta_i) = n f^{(m)}(\eta). \quad (7.5)$$

Tohoto využijeme pro odvození celkové chyby integrace pro jednotlivé metody, přičemž $f^{(m)}(\eta)$ při praktických výpočtech (zejména odhadů) nahrazujeme číslem

$$\bar{M}_m = \max_{x \in \langle a, b \rangle} |f^{(m)}(x)|. \quad (7.6)$$

Poznámka 7.2. Numerický výpočet neurčitého integrálu $\int f(x) dx$ spočívá v nalezení funkce $g(x) = \int_{x_0}^x f(t) dt$. Tato úloha je ekvivalentní s Cauchyho počátečním problémem $g' = f(x)$, $g(x_0) = 0$. Metodám numerického řešení diferenciálních rovnic se budeme věnovat v další kapitole.

7.2 Obdélníková metoda

Funkci $f(x)$ nahradíme na každém podintervalu polynome 0-tého stupně (konstantou). Jedná se tedy o uzavřený Newtonův-Cotesův vzorec pro $k = 0$.

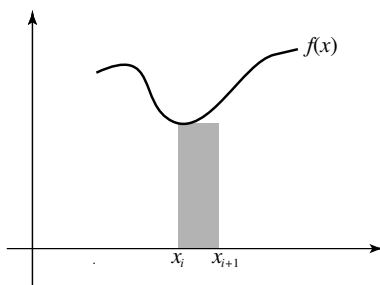
Na podintervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$ nahradíme integrand $f(x)$ polynome

$$L_{i,0} = f(x_{i-1}),$$

tedy

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) \, dx \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x_{i-1}) \, dx = f(x_{i-1})(x_i - x_{i-1}) = hf(x_{i-1}). \quad (7.7)$$

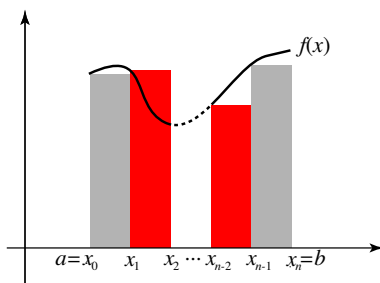
Dostáváme tak *jednoduché (elementární) obdélníkové pravidlo*. Určitý integrál je přibližně roven obsahu obdelníku, viz obrázek.



Na celém intervalu $\langle a, b \rangle$ pak platí,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \, dx &\approx \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_{i,0}(x) \, dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x_{i-1}) \, dx \\ &= \sum_{i=1}^n f(x_{i-1})(x_i - x_{i-1}) = h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1}). \end{aligned} \quad (7.8)$$

Vztah (7.8) nazýváme *složené obdélníkové pravidlo* (viz. následující obrázek).



K odvození chyby integrace využijeme vztahů (7.1), (7.4) a (7.5). Ve výpočtu použijeme substituci

$$\begin{aligned} h &= (b-a)/n, \\ x &= x_{i-1} + th, \quad \text{kde } t \in \langle 0, 1 \rangle, \\ dx &= h dt. \end{aligned}$$

Platí

$$\begin{aligned} \bar{R}_0(f) &= \int_a^b f(x) dx - h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1}) = \sum_{i=1}^n f'(\eta_i) \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) dx \\ &= \sum_{i=1}^n f'(\eta_i) h^2 \int_0^1 t dt = n f'(\eta) h^2 \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Pro odhad chyby platí

$$|\bar{R}_0(f)| \leq \bar{M}_1 n \frac{h^2}{2} = \bar{M}_1 \frac{(b-a)^2}{2n},$$

kde podle (7.6) je $\bar{M}_1 = \max_{x \in (a,b)} |f'(x)|$.

7.3 Lichoběžníková metoda

U lichoběžníkové metody (Newtonova-Cotesova vzorce 1. stupně) nahradíme na každém podintervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$ integrand $f(x)$ Lagrangeovým polynomem

$$L_{i,1}(x) = f(x_{i-1}) \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} + f(x_i) \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}},$$

$i = 1, \dots, n$.

Nejprve na intervalu $\langle x_{i-1}, x_i \rangle$ odvodíme jednoduché lichoběžníkové pravidlo. Označme

$$h = x_i - x_{i-1}. \tag{7.9}$$

Pak

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx &\approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_{i,1}(x) dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x_{i-1}) \frac{x - x_i}{-h} + f(x_i) \frac{x - x_{i-1}}{h} dx \\ &= \frac{f(x_{i-1})}{-h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_i) dx + \frac{f(x_i)}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) dx. \end{aligned}$$

Zavedeme substituci

$$\begin{aligned}x &= x_{i-1} + th, \quad \text{kde } t \in \langle 0, 1 \rangle, \\ dx &= h dt.\end{aligned}\tag{7.10}$$

Tedy

$$\begin{aligned}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx &\approx \frac{f(x_{i-1})}{-h} \int_0^1 (x_{i-1} + th - x_i) h dt + \frac{f(x_i)}{h} \int_0^1 (x_{i-1} + th - x_{i-1}) h dt \\ &= \frac{f(x_{i-1})}{-h} \int_0^1 h^2(t-1) dt + \frac{f(x_i)}{h} \int_0^1 th^2 dt \\ &= -f(x_{i-1})h \int_0^1 (t-1) dt + f(x_i)h \int_0^1 t dt \\ &= -f(x_{i-1})h \left[\frac{t^2}{2} - t \right]_0^1 + f(x_i)h \left[\frac{t^2}{2} \right]_0^1 \\ &= \frac{h}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)).\end{aligned}$$

Na celém intervalu $\langle a, b \rangle$ platí

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x) dx &= \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_{i,1}(x) dx \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{h}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)) \\ &= \frac{h}{2}[f(a) + 2 \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + f(b)],\end{aligned}\tag{7.11}$$

kde $a = x_0, b = x_n$.

Vztah (7.2) pro chybu integrace má pro jednoduché lichoběžníkové pravidlo tvar

$$R_{i,1}(f) = \frac{f''(\eta)}{2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1})(x - x_i) dx$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{f''(\eta)}{2} h^3 \int_0^t t(t-1) dt \\
&= \frac{f''(\eta)}{2} h^3 \left(\frac{-1}{6} \right) = -\frac{1}{12} h^3 f''(\eta),
\end{aligned}$$

přičemž jsme využili označení (7.9) a substituce (7.10). Chybu integrace lze tedy odhadnout takto

$$|R_{i,1}(f)| \leq \frac{1}{12} h^3 M_2.$$

Potom odhad chyby pro složené lichoběžníkové pravidlo je

$$|\bar{R}_1(f)| \leq n \frac{h^3}{12} \bar{M}_2 = \frac{\bar{M}_2}{12n^2} (b-a)^3.$$

Příklad 7.3. Řešte pomocí složeného lichoběžníkového pravidla

$$\int_0^3 x\sqrt{1+x^2} dx, \quad \text{pro } n=6$$

a odhadněte chybu.

Nejprve spočteme krok $h = \frac{b-a}{n} = \frac{3-0}{6} = \frac{1}{2}$. Pak určíme uzly a spočteme funkční hodnoty v uzlových bodech. Výpočet uspořádáme do tabulky:

i	x_i	$x_i\sqrt{1+x_i^2}$	$f(x_i)$
0	0		0
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\sqrt{1+\frac{1}{4}}$	$\frac{1}{4}\sqrt{5}$
2	1	$1\sqrt{1+1}$	$\sqrt{2}$
3	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}\sqrt{1+\frac{9}{4}}$	$\frac{3}{4}\sqrt{13}$
4	2	$2\sqrt{1+4}$	$2\sqrt{5}$
5	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}\sqrt{1+\frac{25}{4}}$	$\frac{5}{4}\sqrt{29}$
6	3	$3\sqrt{1+3^2}$	$3\sqrt{10}$

Nyní již můžeme dosadit do (7.11),

$$\begin{aligned}
\int_0^3 x\sqrt{1+x^2} dx &\approx \frac{h}{2} (f(x_0) + 2 \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)) \\
&= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2}\sqrt{5} + 2\sqrt{2} + \frac{3}{2}\sqrt{13} + 4\sqrt{5} + \frac{5}{2}\sqrt{29} + 3\sqrt{10} \right) \\
&\doteq 10,312202.
\end{aligned}$$

Pro odhad chyby musíme spočítat druhou derivaci funkce $f(x) = x\sqrt{1+x^2}$ a najít její maximum na intervalu $\langle 0, 3 \rangle$.

$$f''(x) = 3x(1+x^2)^{-\frac{1}{2}} - x^3(1+x^2)^{-\frac{3}{2}} = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \left(3 - \frac{x^2}{1+x^2} \right)$$

a

$$\max_{x \in \langle 0, 3 \rangle} f''(x) = f''(3) = \frac{63}{100} \sqrt{10} < 2$$

Odhad chyby je

$$|\bar{R}_1(f)| \leq \frac{2}{12 \cdot 6^2} (3-0)^2 = 0,125.$$

Spočteme-li integrál analyticky, dostaneme

$$\int_0^3 x\sqrt{1+x^2} \, dx = \left[\frac{1}{3} \sqrt{(1+x^2)^3} \right]_0^3 \doteq 10,20759.$$

Vidíme, že analytický výsledek leží v intervalu

$$(10,312202 - 0,125, 10,312202 + 0,125).$$

7.4 Simpsonova metoda

Simpsonova metoda nebo-li metoda parabol spočívá v nahrazení integrandu $f(x)$ na každém podintervalu polynomem druhého stupně.

Nejprve odvodíme *jednoduché Simpsonovo pravidlo*. Pro jednoduchost označme tento podinterval $\langle c, d \rangle$. K sestavení interpolačního polynomu druhého stupně je třeba znát tři body. Proto jako třetí bod vezmeme střed s intervalu $\langle c, d \rangle$. Označme

$$c = t_0, \quad s = t_1, \quad d = t_2,$$

pak

$$\begin{aligned} \int_c^d f(x) \, dx &\approx \int_c^d L_2(x) \, dx = \\ &= \int_{c=t_0}^{d=t_2} f(t_0) \frac{(x-t_1)(x-t_2)}{(t_0-t_1)(t_0-t_2)} \, dx + f(t_1) \frac{(x-t_0)(x-t_2)}{(t_1-t_0)(t_1-t_2)} \, dx \\ &\quad + f(t_2) \frac{(x-t_0)(x-t_1)}{(t_2-t_0)(t_2-t_1)} \, dx. \end{aligned}$$

Opět zavedeme substituci o označení

$$\begin{aligned} h &= t_1 - t_0, \\ x &= t_0 + th, \quad \text{kde } t \in \langle 0, 2 \rangle, \\ dx &= h dt. \end{aligned} \tag{7.12}$$

Tedy

$$\begin{aligned} \int_c^d f(x) dx &\approx \int_0^2 \left[\frac{f(t_0)}{2h^2} (t_0 + th - t_1)(t_0 + th - t_2) \right. \\ &\quad \left. - \frac{f(t_1)}{h^2} (t_0 + th - t_0)(t_0 + th - t_2) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{f(t_2)}{2h^2} (t_0 + th - t_0)(t_0 + th - t_1) \right] h dt = \\ &= \int_0^2 \frac{f(t_0)}{2h} (th - h)(th - 2h) dt - \int_0^2 \frac{f(t_1)}{h} (th)(th - 2h) dt \\ &\quad + \int_0^2 \frac{f(t_2)}{2h} (th)(th - h) dt \\ &= \frac{f(t_0)h}{2} \int_0^2 (t-1)(t-2) dt - hf(t_1) \int_0^2 t(t-2) dt + \frac{f(t_2)h}{2} \int_0^2 t(t-1) dt \\ &= \frac{h}{3} [f(t_0) + 4f(t_1) + f(t_2)]. \end{aligned}$$

Pro odvození *složeného Simpsonova pravidla* musíme tedy daný interval $\langle a, b \rangle$ rozdělit na $2n$ stejných částí. Podintervaly jsou $\langle x_{2i-2}, x_{2i} \rangle$ se středem $s_i = x_{2i-1}$, $i = 1, \dots, n$ a $h = \frac{b-a}{2n}$. Tedy

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \sum_{i=1}^n \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} L_{i,2}(x) dx = \frac{h}{3} \sum_{i=1}^n (f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})) \\ &= \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + f(x_{2n}) \right] \end{aligned} \tag{7.13}$$

K odhadnutí chyby jednoduchého pravidla použijeme vztah (7.3) a substituce (7.12), tedy

$$\begin{aligned} R_2(f) &= \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \int_c^d (x - t_0)^2 (x - t_1)(x - t_2) \, dx = \\ &= \frac{f^{(4)}(\eta)}{24} \int_0^2 t^2 (t - 1)(t - 2) \, dt = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\eta), \end{aligned}$$

pak pro odhad platí

$$|R_2(f)| \leq \frac{1}{90} h^5 M_4.$$

Odhad chyby pro složené Simpsonovo pravidlo je

$$|\bar{R}_2(f)| \leq \frac{n}{90} h^5 \bar{M}_4 = \frac{n}{90} \left(\frac{b-a}{2n} \right)^5 \bar{M}_4 = \frac{\bar{M}_4 (b-a)^5}{2.880 n^4}.$$

Příklad 7.4. Použijte Simpsonova pravidla k výpočtu integrálu

$$\int_0^{2\pi} x \sin x \, dx, \quad \text{pro } n = 8.$$

Nejprve spočteme krok h ,

$$h = \frac{2\pi}{2 \cdot 8} = \frac{\pi}{8}.$$

Pak spočteme uzly a funkční hodnoty v těchto bodech. Výsledky uspořádáme do tabulky.

x_{2i}	$f(x_{2i})$		x_{2i-1}	$f(x_{2i-1})$
$x_0 = 0$	0		$x_1 = \frac{\pi}{8}$	0,150279
$x_2 = \frac{\pi}{4}$	0,55536	*	$x_3 = \frac{3}{8}\pi$	1,08842
$x_4 = \frac{\pi}{2}$	1,570796	*	$x_5 = \frac{5}{8}\pi$	1,814033
$x_6 = \frac{3}{4}\pi$	1,66608	*	$x_7 = \frac{7}{8}\pi$	1,051956
$x_8 = \pi$	0	*	$x_9 = \frac{9}{8}\pi$	-1,352515
$x_{10} = \frac{5}{4}\pi$	-2,776802	*	$x_{11} = \frac{11}{8}\pi$	-3,990873
$x_{12} = \frac{3}{2}\pi$	-4,712389	*	$x_{13} = \frac{13}{8}\pi$	-4,716486
$x_{14} = \frac{7}{4}\pi$	-3,887523	*	$x_{15} = \frac{15}{8}\pi$	-2,254192
$x_{16} = 2\pi$	0			

V pravé části tabulky jsou funkční hodnoty v uzlových bodech s lichým inde-
xem (středů podintervalů) a ty jsou ve vztahu (7.13) čtyřikrát, hodnoty označené
hvězdičkou dvakrát a funkční hodnoty v koncových bodech jednou, ale ty jsou
nulové. Tedy

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\pi} x \sin x \, dx &\approx \frac{\pi}{24} \left[2 \sum_{i=1}^7 f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^8 f(x_{2i-1}) \right] \\
 &= \frac{\pi}{24} [2(-7,584478) + 4(-8,209378)] \\
 &\doteq -6,284032.
 \end{aligned}$$

7.5 Kontrolní otázky a cvičení

Cvičení 7.1. Aproximujte integrál

$$\int_0^{\pi/4} \sin x \, dx = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}$$

- (i) obdélníkovým pravidlem,
- (ii) lichoběžníkovým pravidlem,
- (iii) Simpsonovým pravidlem,

a odhadněte chybu výpočtu.

Cvičení 7.2. Následující integrály vypočítejte lichoběžníkovým pravidlem. Vý-
sledky porovnejte s přesnými hodnotami.

$$(i) \int_1^2 \ln x \, dx,$$

$$(ii) \int_0^{0,1} x^{1/3} \, dx,$$

$$(iii) \int_0^{\pi/3} (\sin x)^2 \, dx.$$

Cvičení 7.3. Vypočtěte integrály z předcházejícího cvičení pomocí Simpsonova pravidla. Proveďte srovnání výsledků.

Cvičení 7.4. Použijte složené lichoběžníkové pravidlo pro výpočet integrálů:

$$(i) \int_0^3 x \sqrt{1+x^2} \, dx, \quad n=6,$$

$$(ii) \int_0^1 \sin \pi x \, dx, \quad n=6,$$

$$(iii) \int_0^1 x^2 \exp x \, dx, \quad n=8.$$

Získané aproximace porovnejte s přesnými hodnotami.

Cvičení 7.5. Vypočtěte integrály z předcházejícího cvičení pomocí Simpsonova pravidla. Proveďte srovnání výsledků.

Cvičení 7.6. Uvažujte integrál $\int_0^{\pi/4} \tan x \, dx$.

(i) Vypočtěte jeho hodnotu pomocí složeného lichoběžníkového pravidla pro $n = 4$ a $n = 8$.

(ii) Odhadněte chybu obou výpočtů a proveďte srovnání vypočtených hodnot s přesnými hodnotami.

(iii) Určete hodnotu n , pro kterou bude výsledek dosahovat přesnosti 10^{-8} .

7.6 Výsledky

Cvičení 7.1.

- (i) 0,30055887, chyba 0,00766565,
- (ii) 0,27768018, chyba 0,01521303,
- (iii) 0,29293264, chyba 0,00003942.

Cvičení 7.2.

- (i) 0,34657,
- (ii) 0,023208,
- (iii) 0,39270.

Cvičení 7.3.

- (i) 0,38583,
- (ii) 0,032296,
- (iii) 0,30543.

Cvičení 7.4.

- (i) 10,3122,
- (ii) 0,62201,
- (iii) 0,72889.

Cvičení 7.5.

- (i) 10,20751,
- (ii) -6,284027,
- (iii) 0,7182830.

Cvičení 7.6.

- (i) 0,3497582; 0,3473746,
- (ii) 0,0101; 0,0025,
- (iii) 4019 a větší.

8 NUMERICKÉ METODY PRO ŘEŠENÍ OBYČEJNÝCH DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC

... co by Vám měla přinést tato kapitola:

Diferenciální rovnice jsou jedním z nejčastějších matematických prostředků, které používáme k popisu nejrozmanitějších procesů z oblasti fyziky, biologie, ekonomie a řady dalších oborů. Z velkého množství diferenciálních rovnic, které slouží k popisu těchto procesů, však dovedeme explicitně řešit jen velmi malou část z nich. Jsme proto nuceni velmi často využívat pro řešení diferenciálních rovnic přibližných metod.

V této kapitole se budeme nejdříve věnovat těm přibližným metodám, které řadíme mezi numerické přibližné metody. Pomocí těchto metod hledáme numerické řešení jen na zvolené množině bodů v daném intervalu. Interpolací z těchto hodnot pak můžeme najít přibližné hodnoty řešení také pro ostatní body ze zvoleného intervalu. Jedná se o Eulerovu polygonální metodu a metodu Runge-Kuttovu. V závěru kapitoly je pak popsána analytická přibližná metoda, která nese název Picardova metoda postupných aproximací. Jejím zařazením jsme se vlastně dopustili určité nepřesnosti, protože se nejedná o klasickou numerickou metodu. Má však úzkou spojitost s větou o jednoznačnosti řešení, a proto považujeme její zařazení do této kapitoly za užitečné.

8.1 Cauchyho úloha

V tomto odstavci se budeme zabývat numerickými metodami pro obyčejné diferenciální rovnice 1. řádu s počáteční podmínkou, tj. budeme řešit *Cauchyho úlohu*.

Nechť G je podmnožina euklidovského prostoru \mathbf{R}^2 , buď f reálná funkce definovaná na G . Cauchyho úloha pro obyčejné diferenciální rovnice 1. řádu má tvar

$$\begin{aligned}y' &\equiv \frac{dy}{dx} = f(x, y), \\y(x_0) &= y_0,\end{aligned}\tag{8.1}$$

kde $[x_0, y_0] \in G$.

Připomeňme nejprve větu o existenci a jednoznačnosti řešení Cauchyho úlohy.

Věta 8.1. Picard-Lindelöfova věta. *Nechť funkce $f(x, y)$ je spojitá na množině $M = \{(x, y) : |x - x_0| \leq a, |y - y_0| \leq b\}$, kde $a, b \in \mathbf{R}^+$. Nechť je funkce*

$f(x, y)$ lipschitzovská vzhledem k y , tzn. že existuje konstanta $L > 0$ taková, že pro každé $[x, y_1], [x, y_2] \in M$ platí

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|.$$

Pak existuje právě jedno řešení počátečního problému (8.1) definované na intervalu $\langle x_0 - \alpha, x_0 + \alpha \rangle$, kde

$$\alpha = \min \left\{ a, \frac{b}{m} \right\},$$

přičemž $m = \max_M |f(x, y)|$.

8.2 Princip numerických metod pro řešení ODR

V tomto odstavci se budeme zabývat principem numerických metod pro obyčejnou diferenciální rovnici 1. řádu.

Při numerickém řešení Cauchyho úlohy na intervalu $\langle a, b \rangle$ postupujeme tak, že zvolíme konečnou množinu bodů $x_i, i = 1, 2, \dots, n$, takových, že

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Tuto množinu nazýváme *sít'* a její prvky *uzly*. *Krokem* sítě v uzlu x_i nazveme rozdíl

$$h_i = x_{i+1} - x_i, \quad i = 0, 1, \dots, n-1.$$

Pro ekvidistantní uzly máme tzv. *rovnoměrnou (pravidelnou) sít'*.

Nechť v každém uzlu najdeme vhodným postupem (numerickou metodou) aproximaci y_i přesné hodnoty $y(x_i)$. Množinu hodnot y_0, \dots, y_n nazýváme *numerické řešení pro danou sít'*.

Při konstruování numerických metod vycházíme z přírůstku zobrazení

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i = y_i + h_i \cdot S(x_i, y_i, h_i), \quad (8.2)$$

kde $S(x_i, y_i, h_i) = \frac{\Delta y_i}{h_i}$ je směrnice přímky určená body $(x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1})$, proto funkci S nazýváme *přírůstkové zobrazení* nebo *směrová funkce*.

Metodu danou vztahem (8.2) nazýváme *jednokroková metoda*, protože počítaná hodnota y_{i+1} závisí jen na y_i .

Při numerickém řešení se dopouštíme kromě zaokrouhlovacích chyb i chyb způsobených diskretizací úlohy. Tyto chyby posuzujeme lokálně i globálně.

Globální (akumulovanou) diskretizační chybou v uzlu x_i nazýváme rozdíl

$$e_i = y(x_i) - y_i.$$

Globální chyba je výsledkem diskretizačních chyb z předcházejících kroků. Je to tedy celková chyba po i -tém kroku způsobená metodou.

Chybu způsobenou diskretizací v jednom kroku nazýváme *lokální diskretizační chyba*. Je to nepřesnost, s jakou splňují hodnoty přesného řešení $y(x)$ v uzlech sítě rekurentní vztah (8.2).

Nechť $z(x)$ je přesné řešení úlohy

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dx} &= f(x, y), \\ y(x_{i-1}) &= y_{i-1},\end{aligned}$$

pak pro lokální chybu platí

$$d_i = z(x_i) - y_i.$$

Základní vlastnost, kterou požadujeme od každé numerické metody je, aby při zmenšování kroku, tj. $\max_i(h_i) \rightarrow 0$, posloupnost numerických řešení konvergovala k přesnému řešení. Kvůli jednoduchosti se v dalším omezíme na numerické metody s konstantním krokem.

Říkáme, že numerická metoda je *konvergentní*, když pro libovolnou počáteční úlohu (8.1) má numerické řešení vlastnost

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ (n \rightarrow \infty)}} y_n = y(x)$$

pro všechny $x \in (a, b)$, kde $h = (x - x_0)/n$.

Rychlost konvergence je pak charakterizována řádem metody.

8.3 Eulerova metoda

Eulerova metoda je nejjednodušší jednokrokovou metodou. (Budeme pracovat s ekvidistantními uzly.) Vychází z názorné geometrické představy - aproximace integrální křivky (graf řešení y) diferenciální rovnice

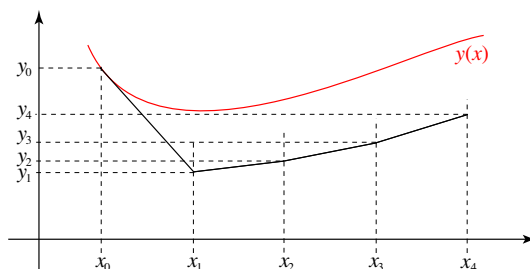
$$\frac{dy}{dx} = f(x, y),$$

lomenou čarou s vrcholy (x_i, y_i) , $i = 0, 1, \dots, n$. Za směrnici k_i úsečky dané body (x_i, y_i) , (x_{i+1}, y_{i+1}) vezmeme tečnu k integrální křivce v bodě (x_i, y_i) . Dostáváme

$$k_i = S(x_i, y_i, h) = y'(x_i) = f(x_i, y_i)$$

a podle (8.2) máme

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i). \quad (8.3)$$



Vztah (8.3) pro Eulerovu metodu můžeme také získat aproximací hodnoty y_{i+1} Taylorovým polynomem funkce y v bodě x_i . Pro dvakrát spojitě diferencovatelnou funkci y dostáváme

$$y_{i+1} = y_i + hy'_i + \frac{1}{2}h^2y''(\xi),$$

kde $\xi \in \langle x_i, x_{i+1} \rangle$. Poslední člen zanedbáme, zároveň získáme lokální chybu Eulerovy metody

$$d_i = \frac{1}{2}h^2y''(\xi) = O(h^2).$$

Příklad 8.2. Řešte pomocí Eulerovy metody diferenciální rovnici

$$\begin{aligned} y' &= \cos x - y, \\ y(0) &= 1, \end{aligned}$$

na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ pro $n = 4$.

Řešení. Nejprve určíme krok $h = \frac{1-0}{4} = \frac{1}{4}$ a uzly sítě, $x_0 = 0$, $x_1 = x_0 + h = 0,25$, $x_2 = x_1 + h = 0,5$, $x_3 = 0,75$, $x_4 = 1$. Nyní můžeme podle vztahu (8.3) vypočítat numerické řešení pro danou síť, tj.

$$y_{i+1} = y_i + 0,25(\cos x_i - y_i), \quad i = 0, 1, 2, 3.$$

Výpočet uspořádáme do tabulky, přičemž v posledním sloupci jsou hodnoty odpovídající přesnému řešení $y(x) = \frac{1}{2}(\cos x + \sin x + e^{-x})$:

i	x_i	y_i	$y(x_i)$
0	0	1	1
1	0,25	1	0,997559
2	0,5	0,992228	0,981769
3	0,75	0,963567	0,942847
4	1	0,905597	0,874826

8.4 Modifikace Eulerovy metody

K dosažení lepších výsledků je nutné použít jinou směrovou funkci, která bude lépe vystihovat průběh derivace $y'(x)$. Integrujeme-li diferenciální rovnici $y' = f(x, y)$ na intervalu $\langle x_i, x_{i+1} \rangle$, dostaneme

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx.$$

Předpokládejme, že $y(x_{i+1}) \approx y_{i+1}$ a $y(x_i) \approx y_i$, pak porovnáním se vztahem (8.2) dostáváme

$$S(x_i, y_i, h_i) = \frac{1}{h_i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx.$$

Použijeme-li k výpočtu určitého integrálu různé numerické metody, získáme různé modifikace.

Použijeme-li obdelníkovou metodu (otevřený Newton-Cotesův vzorec), pak

$$S(x_i, y_i, h) = \frac{1}{h} h f\left(x_i + \frac{h}{2}, y\left(x_i + \frac{h}{2}\right)\right).$$

Protože neznáme přesnou hodnotu $y\left(x_i + \frac{h}{2}\right)$, použijeme Eulerovu metodu k výpočtu její aproximace,

$$y\left(x_i + \frac{h}{2}\right) = y_i + \frac{h}{2} f(x_i, y_i).$$

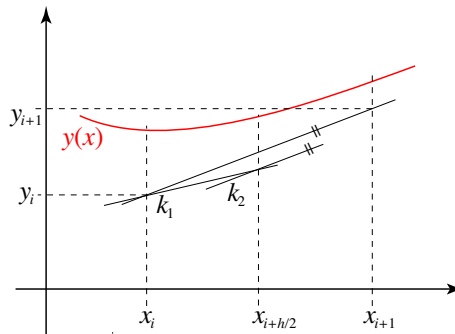
Označme

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i), \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_1\right), \end{aligned}$$

pak dostaneme modifikovanou Eulerovu metodu ve tvaru

$$y_{i+1} = y_i + h k_2.$$

Geometrická interpretace (směrová funkce je rovna derivaci ve středu intervalu $\langle x_i, x_{i+1} \rangle$):



Použijeme-li k integraci lichoběžníkové pravidlo, dostaneme *Euler-Cauchyho metodu*

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}h(k_1 + k_2),$$

kde

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i), \\ k_2 &= f(x_i + h, y_i + hk_1). \end{aligned}$$

8.5 Metody typu Runge-Kutta

Runge-Kuttovy metody jsou jedny z nejdůležitějších jednokrokových metod. Do této skupiny patří již zmíněná Eulerova metoda i její modifikace. Z výše uvedených úvah plyne, že směrovou funkci lze získat jako lineární kombinaci různých směrnic počítaných ve vhodně zvolených bodech intervalu $\langle x_i, x_{i+1} \rangle$, tj.

$$S(x_i, y_i, h) = w_1 k_1 + \dots + w_s k_s,$$

kde

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i), \\ k_n &= f\left(x_i + \alpha_n h, y_i + \sum_{j=1}^{n-1} \beta_{nj} k_j\right), \quad n = 2, \dots, s. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Konstanty $w_n, \alpha_n, \beta_{nj}$ určujeme tak, že požadujeme rovnost mezi prvními $p + 1$ členy Taylorova rozvoje směrové funkce $S(x_i, y_i, h)$ a prvními $p + 1$ členy Taylorova rozvoje rozdílu $y(x_{i+1}) - y(x_i)$. Takto získáme jednokrokovou metodu řádu p .

Nejčastěji používaná metoda je metoda Runge-Kutta 4. řádu. Pro její jeden krok platí rekurentní vztahy

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_i, y_i), \\k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + k_1 \frac{h}{2}\right), \\k_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + k_2 \frac{h}{2}\right), \\k_4 &= f(x_i + h, y_i + k_3 h)\end{aligned}$$

a

$$\begin{aligned}S &= \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\y_{i+1} &= y_i + hS.\end{aligned}$$

Poznamenejme, že tuto metodu lze získat jako modifikaci Eulerovy metody, použijeme-li k výpočtu určitého integrálu $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx$ Simpsonovo pravidlo.

Tato metoda je poměrně přesná. Nevýhodou je, že v každém kroku musíme čtyřikrát počítat hodnotu funkce f .

Příklad 8.3. Řešte Cauchyho úlohu z příkladu 8.2 metodou Runge-Kutta 4. řádu.

Řešení. První krok metody provedeme podrobně:

$$\begin{aligned}k_1 &= f(0, 1) = 0 \\k_2 &= f\left(\frac{1}{8}, 1\right) = -0,00780233 \\k_3 &= f\left(\frac{1}{8}, 0,999025\right) = -0,00682704 \\k_4 &= f\left(\frac{1}{4}, 0,998293\right) = -0,0293808.\end{aligned}$$

Tedy

$$\begin{aligned}y_1 &= y_0 + h \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\y_1 &= 1 + 0,25 \cdot \frac{1}{6}(-0,2111512 - 2 \cdot 0,00780233 - 2 \cdot 0,00682704 - 0,0293808) \\y_1 &= 1 - 0,25 \cdot 0,00977326 \\y_1 &= 0,997557\end{aligned}$$

Zbytek výpočtu zapíšeme do tabulky:

i	x_i	y_i	$y(x_i)$	$\{k_1, k_2, k_3, k_4\}$
0	0	1	1	{0, -0,00780233, -0,00682704, -0,0293808}
1	0,25	0,997557	0,997559	{-0,0286443, -0,0634685, -0,0591155, -0,105195}
2	0,5	0,981765	0,981769	{-0,104182, -0,157779, -0,151079, -0,212306}
3	0,75	0,94284	0,942847	{-0,211151, -0,275449, -0,267412, -0,335684}
4	1	0,874816	0,874826	

Srovnáme-li výsledky s Eulerovou metodou, vidíme, že metoda Runge-Kutta dává přesnější výsledky.

8.6 Picardova metoda postupných aproximací

S *Picardovou posloupností* se setkáváme při důkazu věty o existenci a jednoznačnosti řešení počátečního problému

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y), \\ y(x_0) &= y_0.\end{aligned}$$

Těchto aproximací lze také využít k určení přibližného, tj. numerického řešení. Picardova posloupnost je určena vztahem

$$y_n(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y_{n-1}(t)) dt. \quad (8.5)$$

Z důkazu věty o existenci a jednoznačnosti dále plyne, že $\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = y(x)$, kde $y(x)$ je partikulární (přesné) řešení. Omezíme-li se na prvních n členů posloupnosti, dostaneme přibližnou hodnotu $y_n(x)$, která je tím přesnější, čím větší je index n .

Dále se dá dokázat, že je-li L Lipschitzova konstanta, je-li $|f(x, y)| \leq M$ na oboru $\Omega = \langle x_0 + \alpha \rangle \times \langle y_0 - b, y_0 + b \rangle$, pak pro $L\alpha < 1$, $\alpha = \min\{a, \frac{b}{M}\}$ platí odhad

$$|y(x) - y_k(x)| \leq \frac{M\alpha(\alpha L)^k}{k!(1 - \alpha L)}.$$

Věta 8.4. *Funkce $f(x, y_1, \dots, y_n)$ splňuje na $(n+1)$ -uzavřeném oboru Ω Lipschitzovskou podmínku vzhledem k y_1, \dots, y_n , jsou-li na oboru Ω ohraničeny všechny*

parciální derivace podle y_i , tj. existuje $L > 0$ tak, že pro každé $P \in \Omega$ platí

$$\left| \frac{\partial f(P)}{\partial y_i} \right| \leq L, \quad i = 1, \dots, n.$$

Příklad 8.5. Řešte Picardovou metodou postupných aproximací diferenciální rovnici $y' = y^3$, s počáteční podmínkou $y(0) = 1$, v bodě $x = 0,2$.

Pro jednotlivé aproximace dostaneme vztahy

$$\begin{aligned} y_1(x) &= y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y_0) \, dt = 1 + \int_0^x 1^3 \, dt = 1 + x, \\ y_2(x) &= y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y_1) \, dt = 1 + \int_0^x (1+t)^3 \, dt = 1 + \left[\frac{(1+t)^4}{4} \right]_0^x \\ &= 1 + \frac{(1+x)^4}{4} - \frac{1}{4} = \frac{(1+x)^4}{4} + \frac{3}{4}, \\ y_3(x) &= y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y_2) \, dt = 1 + \int_0^x \left(\frac{(1+t)^4}{4} + \frac{3}{4} \right)^3 \, dt \\ &= 1 + \frac{1}{64} \int_0^x ((1+t)^4 + 3)^3 \, dt = \left| \begin{array}{l} \text{S: } (1+t) = z, \\ \quad \quad \quad dt = dz \end{array} \right| = \dots \\ &= 1 + \frac{1}{64} \left[\frac{(1+t)^{13}}{13} + (1+t)^9 + \frac{27}{5}(1+t)^5 + 27(1+t) \right]_0^x \\ &= \frac{1}{64} \left(\frac{(1+x)^{13}}{13} + (1+x)^9 + \frac{27}{5}(1+x)^5 + 27(1+x) \right) \\ &\quad + 0,478125. \end{aligned}$$

Omezíme-li se na třetí aproximaci, dostaneme $y_3(0,2) \doteq 1,286606$.

Pro každé $x \in \langle 0, 0,2 \rangle$, pro každé $y \in \langle \frac{2}{3}, \frac{4}{3} \rangle$ je

$$\begin{aligned} a &= 0,2, \quad b = \frac{1}{3}, \\ |f(x, y)| &= |y^3| \leq \left(\frac{4}{3} \right)^3 = \frac{64}{27} = M, \\ f'_y &= 3y^2 \leq 3 \left(\frac{4}{3} \right)^2 = \frac{16}{3} = L, \\ \alpha &= \min \left\{ 0,2, \frac{5}{36} \right\} = \frac{5}{36}. \end{aligned}$$

Tedy pro každé $x \in \langle 0, 0, 2 \rangle$ je příslušná absolutní chyba

$$|y(x) - y_3(x)| = \frac{\frac{64}{27} \cdot \frac{5}{36} \left(\frac{5}{36} \cdot \frac{16}{3}\right)^3}{3! \left(1 - \frac{5}{36} \cdot \frac{16}{3}\right)} \leq 0,08602.$$

8.7 Kontrolní otázky a cvičení

Cvičení 8.1. Eulerovou polygonální metodou aproximujte řešení následujících počátečních problémů:

- (i) $y' = \left(\frac{y}{x}\right)^2 + \frac{y}{x}; \quad 1 \leq x \leq 1,2; \quad y(1) = 1; \quad h = 0,1;$
- (ii) $y' = \sin x + \exp(-x); \quad 0 \leq x \leq 1; \quad y(0) = 0; \quad h = 0,5;$
- (iii) $y' = \frac{1}{x}(y^2 + y); \quad 1 \leq x \leq 3; \quad y(1) = -2; \quad h = 0,5;$
- (iv) $y' = -xy + \frac{4x}{y}; \quad 0 \leq x \leq 1; \quad y(0) = 1; \quad h = 0,25;$

Cvičení 8.2. Uvažujte počáteční problém

$$y' = \frac{2}{x}y + x^2 \exp^x; \quad 1 \leq x \leq 2; \quad y(1) = 0; \quad h = 0,1;$$

který má přesné řešení $y(x) = x^2(\exp x - e)$:

- (i) Použijte Eulerovu metodu k aproximaci řešení a obdržené hodnoty srovnejte s přesnými hodnotami.
- (ii) Na základě obdržených hodnot proveďte lineární interpolaci hodnot $y(1,04); y(1,55); y(1,97)$.
- (iii) Vypočítejte velikost kroku h , která zaručuje, že obdržíme výsledky s přesností 10^{-1} .

Cvičení 8.3. Příklady z cvičení 8.1 řešte metodou Runge-Kutta 4.řádu.

Cvičení 8.4. Uvažujte počáteční problém daný ve cvičení 8.2.

- (i) Použijte modifikovanou Eulerovu metodu k aproximaci řešení a obdržené hodnoty srovnejte s přesnými hodnotami.
- (ii) Na základě obdržených hodnot proveďte lineární interpolaci hodnot $y(1,04); y(1,55); y(1,97)$.

- (iii) Použijte Runge-Kuttovu metodu 4. řádu k aproximaci řešení a obdržené hodnoty srovnajte s přesnými hodnotami.
- (iv) Na základě obdržených hodnot proveďte po částech kubickou Hermitovu interpolaci hodnot $y(1,04)$; $y(1,55)$; $y(1,97)$.

Cvičení 8.5. Picardovou metodou postupných aproximací řešte počáteční problém

$$y' = xy^2 + 1; \quad y(0) = 0.$$

Vypočítejte přibližnou hodnotu řešení v bodě $x = 0,5$ a určete odhad chyby. Omezte se na druhou aproximaci.

8.8 Výsledky

Cvičení 8.1.

i	x_i	y_i
(i) 1	1,1	1,2
2	1,2	1,4281

i	x_i	y_i
(ii) 1	0,5	0,5
2	1,0	1,04298

i	x_i	y_i
(iii) 1	1,5	-1,0
2	2,0	-1,0
3	2,5	-1,0
4	3,0	-1,0

i	x_i	y_i
(iv) 1	0,25	1,0000
2	0,50	1,1875
3	0,75	1,4601
4	1,0	1,7000

Cvičení 8.2.

i	x_i	y_i	$ y(x_i) - y_i $
1	1,1	0,271828	0,07409
5	1,5	3,18744	0,7802
6	1,6	4,62080	1,100
9	1,9	11,7480	2,575
10	2,0	15,3982	3,285

(i)

x	aproximace	$y(x)$	chyba
1,04	0,108731	0,119986	0,01126
1,55	3,90412	4,78864	0,8845
1,97	14,3031	17,2793	2,976

(ii)

(iii) $h < 0,00064$ **Cvičení 8.3.**

i	x_i	y_i
1	1,1	1,21405
2	1,2	1,46302

(i)

i	x_i	y_i
1	0,5	0,521489
2	1,0	1,09531

(ii)

i	x_i	y_i
1	1,5	-1,5
2	2,0	-1,33594
3	2,5	-1,25246
4	3,0	-1,20209

(iii)

i	x_i	y_i
1	0,25	1,093750
(iv) 2	0,50	1,294851
3	0,75	1,511425
4	1,0	1,692287

Cvičení 8.4.

i	x_i	y_i
1	1,1	0,3423771
(i) 5	1,5	3,936429
6	1,6	5,678886
9	1,9	14,23738
10	2,0	18,57879

(ii) $y(1,04) \approx 0,1369508$, $y(1,55) \approx 4,807658$, $y(1,97) \approx 17,27637$.

i	x_i	y_i
1	1,1	0,3459091
(iii) 5	1,5	3,967585
6	1,6	5,720854
9	1,9	14,32286
10	2,0	18,68283

(iv) $y(1,04) \approx 0,1199692$, $y(1,55) \approx 4,788508$, $y(1,97) \approx 17,27900$.

Cvičení 8.5. 0,5156; 0,0509.

Literatura

- [1] Burden, R.L., Faires, J.D. *Numerical Analysis*, PWS-KENT Boston 1985.
- [2] Děmidovič, B.P., Maron, I.A. *Základy numerické matematiky*, SNTL Praha 1966.
- [3] Fajmon, B., Růžičková, I. *Matematika 3*,
<http://www.umat.feec.vutbr.cz/~fajmon/bma3/matematika3.pdf>.
- [4] Havel, V., Holenda, J., *Lineární algebra*, SNTL Praha 1984.
- [5] Horová, I., *Numerické metody*, PřF MU Brno 1999.
- [6] Cheney, W., Kincaid, D. *Numerical Mathematics and Computing*, Brooks/Cole Publish. Company, California 1985.
- [7] Kubíček, M., *Numerické algoritmy řešení chemicko-inženýrských úloh*, SNTL Praha 1983.
- [8] Ralston, A., *Základy numerické matematiky*, Academia Praha 1978.
- [9] Riečanová, Z. a kolektiv, *Numerické metody a matematická statistika*, Alfa Bratislava 1987.
- [10] Segethová, J., *Základy numerické matematiky*, Karolinum Praha 1998.
- [11] Škrášek, J., Tichý, Z., *Základy aplikované matematiky I*, SNTL Praha 1989.
- [12] Škrášek, J., Tichý, Z., *Základy aplikované matematiky II*, SNTL Praha 1986.
- [13] Škrášek, J., Tichý, Z., *Základy aplikované matematiky III*, SNTL Praha 1990.
- [14] Vitásek, E., *Numerické metody*, SNTL Praha 1987.