Numerické metody — numerické řešení nelineárních rovnic

Mirko Navara
http://cmp.felk.cvut.cz/~navara/
katedra kybernetiky FEL ČVUT
Karlovo náměstí, budova G, místnost 104a

https://moodle.fel.cvut.cz/courses/B4B01NUM

29. listopadu 2023

Obsah

4 NUMERICKÉ ŘEŠENÍ NELINEÁRNÍCH ROVNIC

4.1 Formulace problému

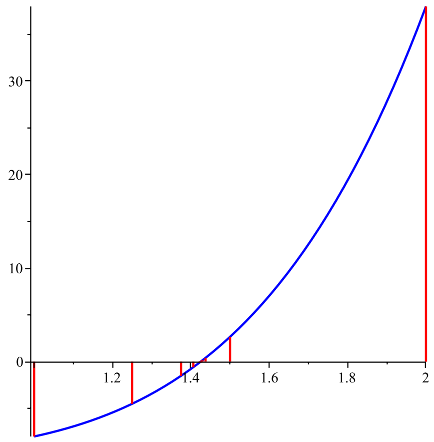
Úloha: Hledáme reálné řešení rovnice $f(x) = 0$, kde f je spojitá reálná funkce na intervalu $\langle a_0, b_0 \rangle$.
Nutno upřesnit:

Úloha: Hledáme reálné řešení rovnice $f(x) = 0$, kde f je spojitá funkce na intervalu $\langle a_0, b_0 \rangle$.
Přitom předpokládáme, že $f(a_0) \cdot f(b_0) < 0$ (tj. $f(a_0), f(b_0)$ mají opačná znaménka) a že f má v intervalu $\langle a_0, b_0 \rangle$ právě jeden kořen, $\overline{x}$. Řešení máme stanovit s danou přesností $\varepsilon > 0$, tj. máme najít nějakou hodnotu, která se nalézá v intervalu $\langle \overline{x} - \varepsilon, \overline{x} + \varepsilon \rangle$.
Tomu předchází **separace kořenů**, která není algoritmizovatelná.

4.2 Metoda půlení intervalu neboli bisekce

$$x_i = \frac{a_i + b_i}{2}$$

- je-li $f(x_i) \cdot f(a_i) < 0$, pak $a_{i+1} = a_i$, $b_{i+1} = x_i$,
- je-li $f(x_i) \cdot f(b_i) < 0$, pak $a_{i+1} = x_i$, $b_{i+1} = b_i$,
- je-li $f(x_i) = 0$, pak $\overline{x} = x_i$.



Podmínka ukončení:

$$\frac{b_i - a_i}{2} \leq \varepsilon \tag{3}$$

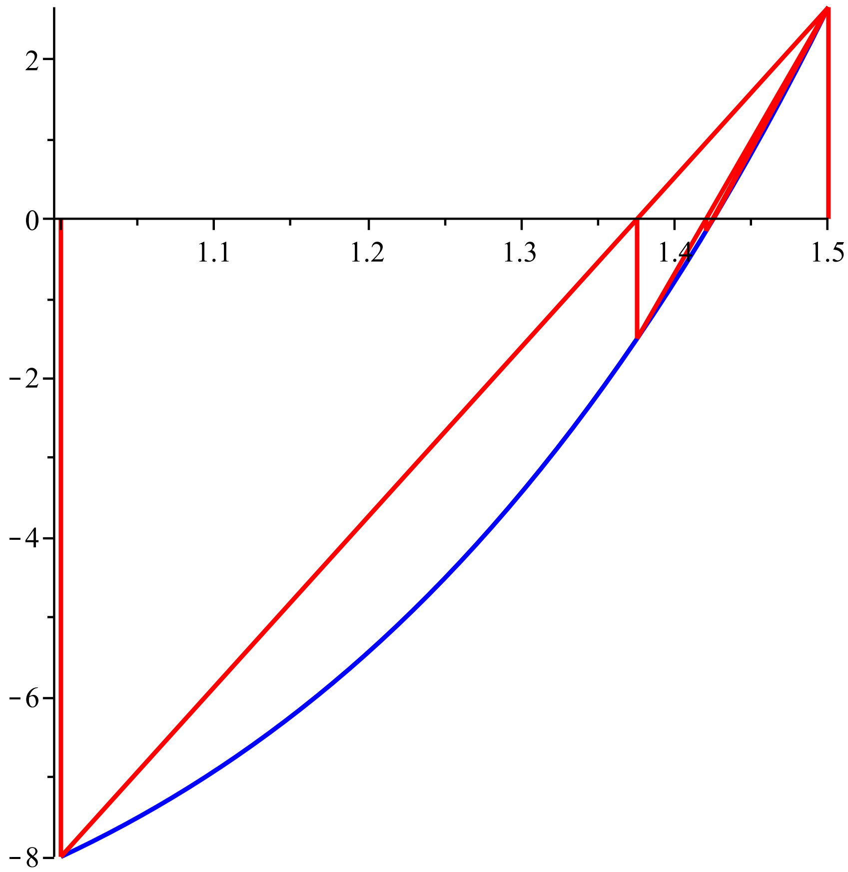
Konverguje vždy stejně rychle:
zpřesnění o 3 desetinná místa během 10 kroků

4.3 Metoda regula falsi

Interval $\langle a_i, b_i \rangle$ rozdělíme v poměru $\dfrac{|f(a_i)|}{|f(b_i)|}$, tj. sečnou dle (1), nový dělicí bod x_i je její nulové místo:

$$\frac{x_i - a_i}{x_i - b_i} = \frac{f(a_i)}{f(b_i)}\,,$$

$$x_i = \frac{a_i f(b_i) - b_i f(a_i)}{f(b_i) - f(a_i)}\,.$$



Typicky se od j-tého kroku jeden krajní bod intervalu nemění (např. pokud f'' nemění znaménko).

$$b_i - a_i \not\to 0$$

$$\lim_{i\to\infty} (b_i - a_i) \in \{|\overline{x} - a_j|, |\overline{x} - b_j|\}$$

Podmínka ukončení:

$$|f(x_i)| \le \delta \tag{4}$$

4.4 Univerzální odhad chyby

Taylorův rozvoj funkce f se středem x_i vyhodnotíme v bodě $\overline{x}$:

$$\underbrace{f(\overline{x})}_{0} = f(x_i) + (\overline{x} - x_i)\, f'(\theta_i)$$

pro nějaké $\theta_i \in I(x_i, \overline{x})$

$$\overline{x} - x_i = \frac{-f(x_i)}{f'(\theta_i)}$$

Pokud $\exists m_1 > 0\ \forall x \in I(x_i, \overline{x}) : m_1 \le |f'(x)|$,
přechodem k absolutním hodnotám dostaneme

$$|\overline{x} - x_i| \le \frac{|f(x_i)|}{m_1}$$

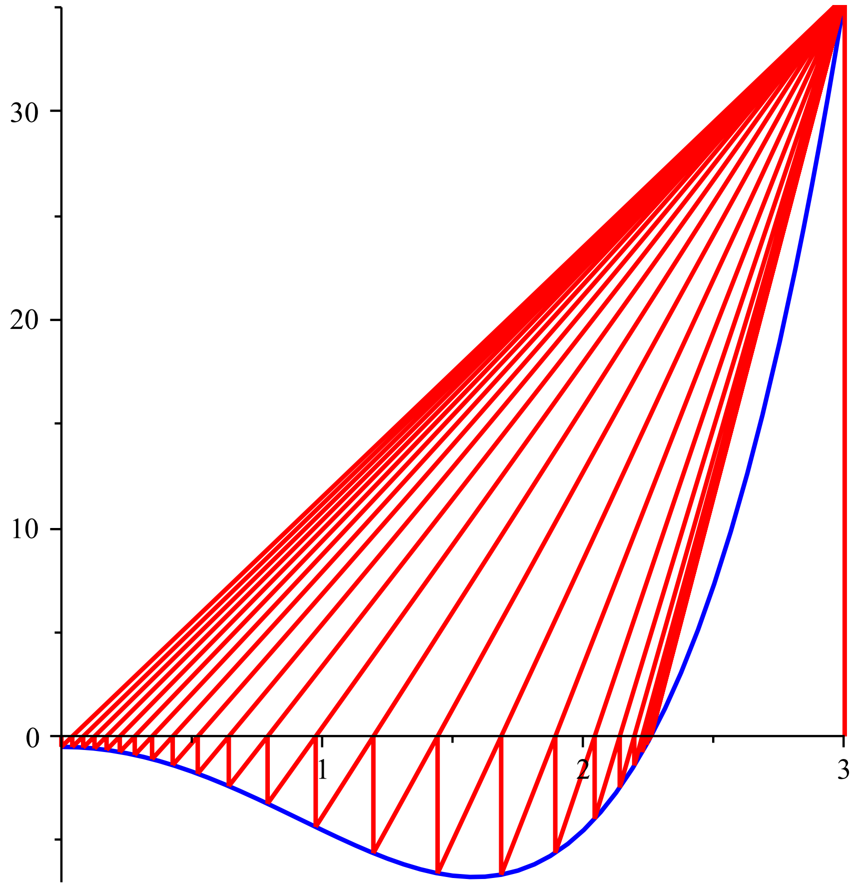
Věta 4.1 *Nechť funkce f má na intervalu $I(x_i, \overline{x})$ spojitou derivaci a*

$$\exists m_1 > 0\ \forall t \in I(x_i, \overline{x}) : m_1 \le |f'(t)|\,.$$

Pak

$$|\overline{x} - x_i| \le \frac{|f(x_i)|}{m_1} \le \frac{\delta}{m_1}\,.$$

Větu nelze použít, neexistuje-li derivace nebo je-li kořen násobný (metoda stále může být použitelná). Metoda regula falsi konverguje rychleji, pokud zadaná funkce je (v okolí kořene) přibližně lineární.

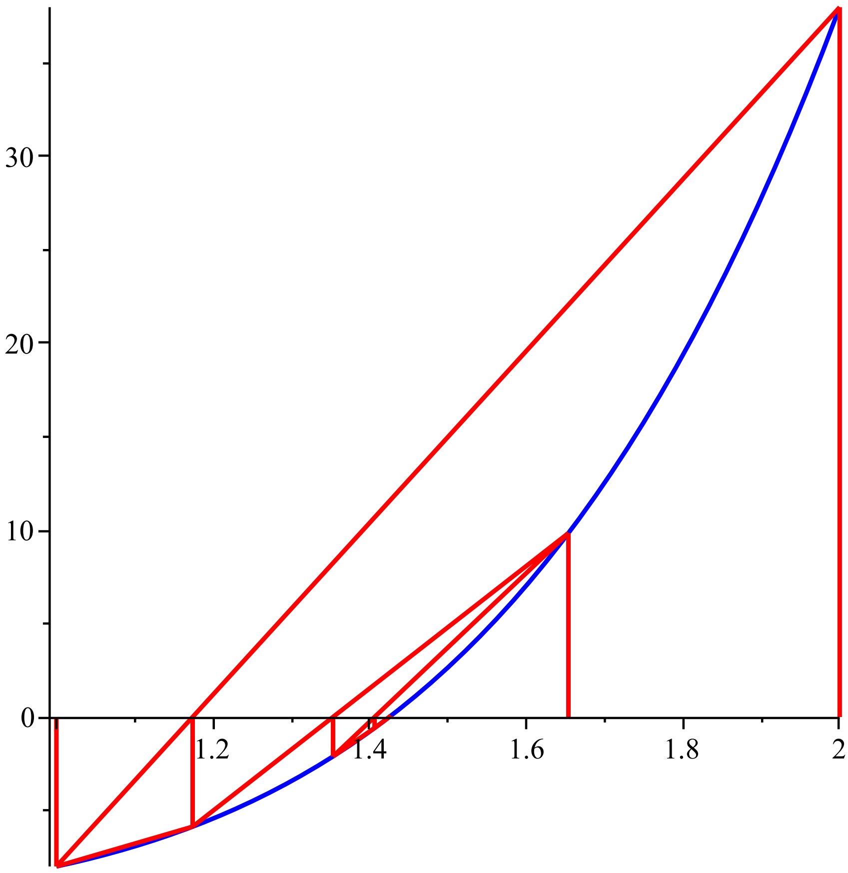


4.5 Metoda sečen

Modifikace metody regula falsi: pro další výpočet vždy použijeme vzorec (1) pro dva posledně vypočtené body:

$$x_0 = b_0, \qquad x_1 = a_0$$

$$x_i = \frac{x_{i-2} f(x_{i-1}) - x_{i-1} f(x_{i-2})}{f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}$$



Podmínka ukončení:

$$|f(x_i)| \leq \delta \tag{5}$$

nebo

$$|x_i - x_{i-1}| \leq \eta \tag{6}$$

Konvergence bývá rychlejší, ale není zaručena.

4.6 Newtonova metoda (metoda tečen)

Metody

- **jednobodové**
- **dvoubodové**
- **vícebodové**

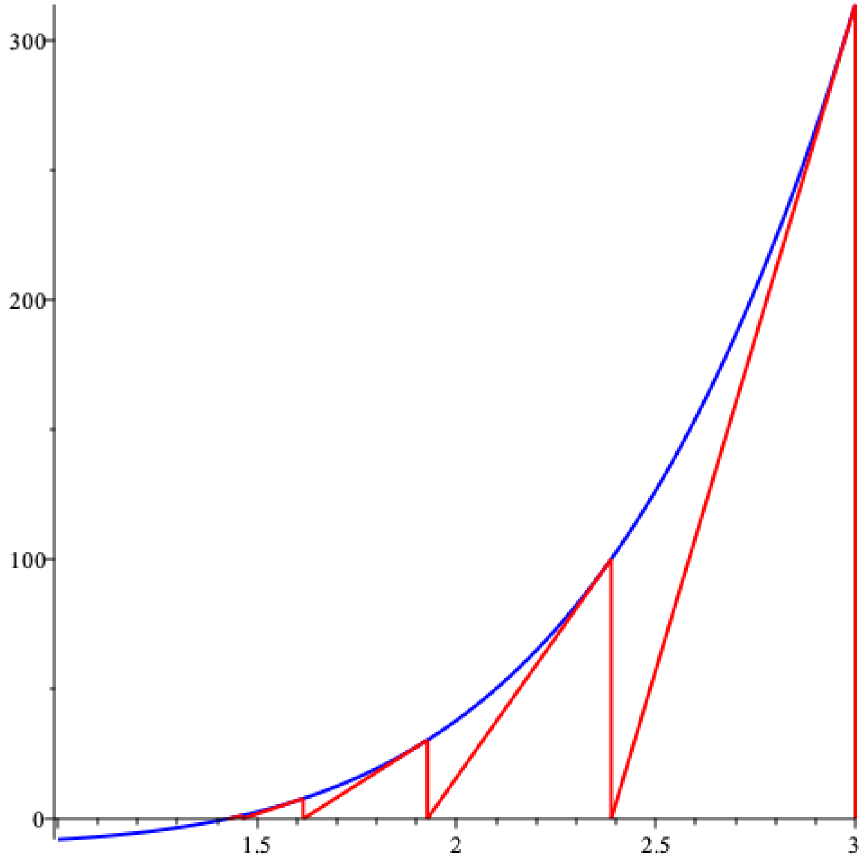
Tečna t_{i-1} ke grafu funkce f v bodě $\big(x_{i-1}, f(x_{i-1})\big)$:

$$t_{i-1}(x) = f(x_{i-1}) + (x - x_{i-1}) \cdot f'(x_{i-1}) \,,$$

x_i je její nulový bod:

$$x_i = x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})} \,.$$

Předpokládá existenci a **znalost** první derivace, nutno ošetřit případné přetečení nebo dělení nulou.



Podmínka ukončení:

$$|f(x_i)| \le \delta \tag{7}$$

nebo

$$|x_i - x_{i-1}| \le \eta \tag{8}$$

Konvergence bývá rychlejší, ale není zaručena.

4.6.1 Odhad chyby Newtonovy metody

Taylorův rozvoj funkce f se středem x_{i-1} vyhodnotíme v bodě x_i:

$$f(x_i) = \underbrace{f(x_{i-1}) + (x_i - x_{i-1})\, f'(x_{i-1})}_{0} + \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})^2\, f''(\xi_i)\,,$$

kde $\xi_i \in I(x_i, x_{i-1})$. Dosadíme do univerzálního odhadu:

$$\overline{x} - x_i = \frac{-f(x_i)}{f'(\theta_i)} = \frac{-f''(\xi_i)}{2f'(\theta_i)}\,(x_i - x_{i-1})^2\,, \qquad \theta_i \in I(x_i, \overline{x})\,.$$

Pokud lze najít odhady

$$\begin{aligned} \exists M_2\ \forall x \in I(x_i, x_{i-1}): &\qquad |f''(x)| \le M_2 \\ \exists m_1 > 0\ \forall x \in I(x_i, \overline{x}): &\qquad |f'(x)| \ge m_1 \end{aligned}$$

pak přechodem k absolutním hodnotám dostaneme

$$|\overline{x} - x_i| \le \frac{M_2}{2m_1}\,(x_i - x_{i-1})^2 \tag{9}$$

Odhad chyby Newtonovy metody

Věta 4.2 *Nechť $\overline{x}$ je* **jednoduchý** *kořen funkce f, která má na intervalu $I(x_i, x_{i-1}, \overline{x})$ (kde x_i je výsledek jednoho kroku Newtonovy metody aplikované na odhad x_{i-1}) spojitou druhou derivaci. Nechť existují reálná čísla M_2, $m_1 > 0$ taková, že*

$$\begin{aligned} \forall x \in I(x_i, \overline{x}): &\quad |f'(x)| \geq m_1 \\ \forall x \in I(x_i, x_{i-1}): &\quad |f''(x)| \leq M_2 \end{aligned}$$

Pak platí odhad chyby (9)

$$|\overline{x} - x_i| \leq \frac{M_2}{2m_1} (x_i - x_{i-1})^2$$

Důsledek 4.1 *Při splnění podmínky ukončení (8) $|x_i - x_{i-1}| \leq \eta$ dostáváme odhad chyby*

$$|\overline{x} - x_i| \leq \frac{M_2}{2m_1} \eta^2$$

Jednoduché pravidlo: pokud Newtonova metoda konverguje a aproximace se nachází v blízkosti kořene, v každém kroku se zhruba zdvojnásobí počet míst za desetinnou čárkou, která jsou správně vypočtená.

Správně: pokud je chyba mnohem menší než 1 a absolutní hodnoty první a druhé derivace funkce f jsou přibližně stejně velké, pak činitel $\frac{M_2}{2m_1}$ můžeme zanedbat a pravidlo platí, neboť

$$|\overline{x} - x_i| \approx (x_i - x_{i-1})^2 \approx (\overline{x} - x_{i-1})^2$$

Pokud se však poměr $\frac{M_2}{2m_1}$ hodně liší od jednotky, pravidlo nemůžeme použít.

4.6.2 Konvergence Newtonovy metody

Není zaručena. Metoda může divergovat zejména při špatném počátečním odhadu.

Předpoklad: f'' je spojitá v okolí **jednoduchého** kořene $\overline{x}$.
Pak $f'(\overline{x}) \neq 0$ a f' je spojitá v okolí $\overline{x}$
$\Longrightarrow$ lze najít uzavřené okolí I bodu $\overline{x}$ takové, že

$$\begin{aligned} \exists m_1 > 0 \; \forall x \in I: &\quad |f'(x)| \geq m_1 \\ \exists M_2 \; \forall x \in I: &\quad |f''(x)| \leq M_2 \end{aligned}$$

Nechť $x_{i-1} \in I \setminus \{\overline{x}\}$.
Taylorův rozvoj funkce f se středem x_{i-1} vyhodnotíme v bodě $\overline{x}$:

$$\underbrace{f(\overline{x})}_{0} = f(x_{i-1}) + (\overline{x} - x_{i-1})\, f'(x_{i-1}) + \tfrac{1}{2}(\overline{x} - x_{i-1})^2\, f''(\xi_i)\,,$$

kde $\xi_i \in I(\overline{x}, x_{i-1})$. Odečteme

$$0 = f(x_{i-1}) + (x_i - x_{i-1})\, f'(x_{i-1})$$

$$\begin{aligned} 0 &= (\overline{x} - x_i)\, f'(x_{i-1}) + \tfrac{1}{2}(\overline{x} - x_{i-1})^2\, f''(\xi_i) \\ \overline{x} - x_i &= -\frac{f''(\xi_i)}{2f'(x_{i-1})} (\overline{x} - x_{i-1})^2 \\ \frac{\overline{x} - x_i}{(\overline{x} - x_{i-1})^2} &= -\frac{f''(\xi_i)}{2f'(x_{i-1})} \\ \frac{|\overline{x} - x_i|}{(\overline{x} - x_{i-1})^2} &\leq \frac{M_2}{2m_1} \\ \frac{|\overline{x} - x_i|}{|\overline{x} - x_{i-1}|} &\leq \frac{M_2}{2m_1} |\overline{x} - x_{i-1}| \end{aligned}$$

Konvergence Newtonovy metody

Pro x_{i-1} dostatečně blízko $\overline{x}$:

$$\begin{aligned} \frac{M_2}{2m_1}\,|\overline{x}-x_{i-1}| &\leq q \\ \frac{|\overline{x}-x_i|}{|\overline{x}-x_{i-1}|} &\leq q \end{aligned}$$

pro nějaké (předem dané) $q<1$, tj. chyba se v jednom kroku zmenší v poměru aspoň q a metoda konverguje.

Věta 4.3 *Nechť funkce f má spojitou druhou derivaci v okolí **jednoduchého** kořene $\overline{x}$. Pak Newtonova metoda konverguje v nějakém okolí kořene $\overline{x}$.*

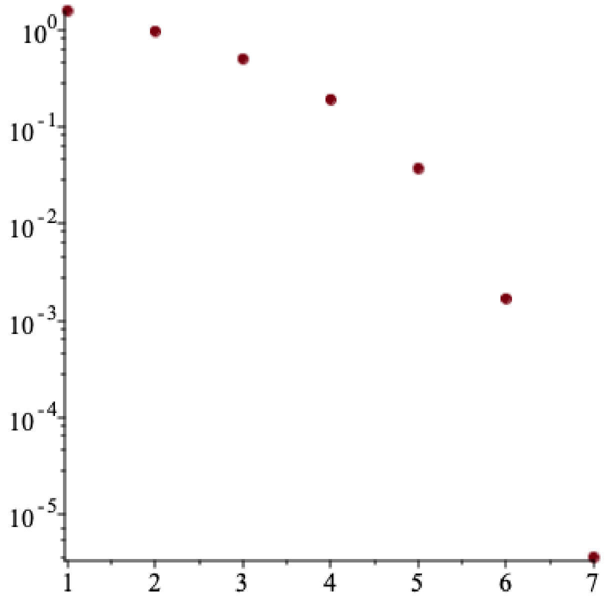
4.6.3 Náhrada derivace numerickým odhadem

Alternativou je numerický výpočet derivace, který zde lze začlenit do metody.
Výpočtu dalších funkčních hodnot se vyhneme použitím posledních dvou vypočtených, $f(x_{i-1})$, $f(x_{i-2})$; derivaci nahradíme směrnicí sečny:

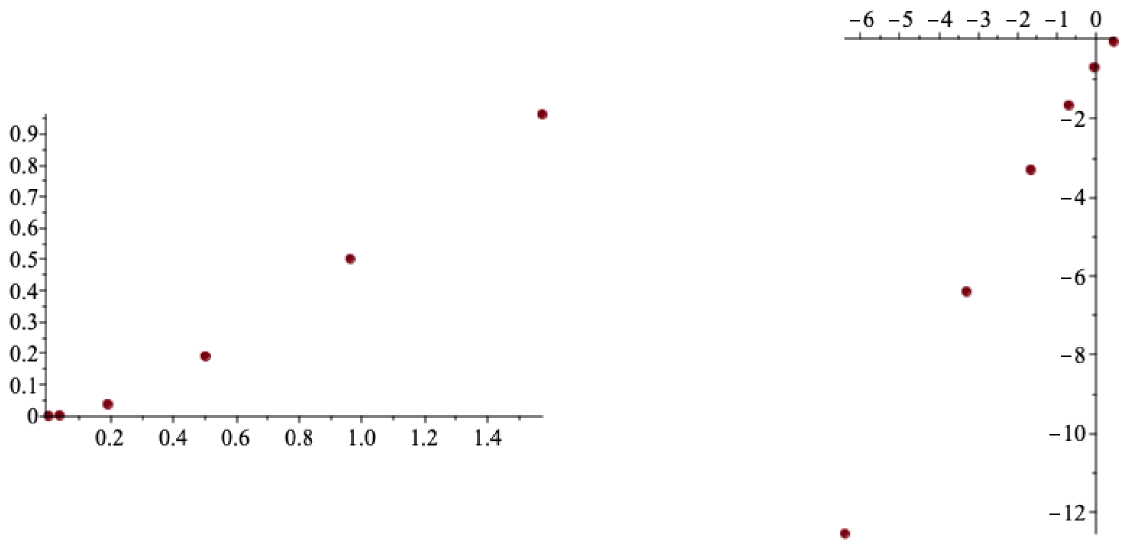
$$\begin{aligned} f'(x_{i-1}) &\approx \frac{f(x_{i-1})-f(x_{i-2})}{x_{i-1}-x_{i-2}} \\ x_i &= x_{i-1}-\frac{f(x_{i-1})}{\frac{f(x_{i-1})-f(x_{i-2})}{x_{i-1}-x_{i-2}}} = \frac{x_{i-2}f(x_{i-1})-x_{i-1}f(x_{i-2})}{f(x_{i-1})-f(x_{i-2})} \end{aligned}$$

Nic nového pod sluncem: metoda sečen (ale myšlenka byla správná).

4.7 Konvergence a její rychlost (řád metody)



Závislost logaritmu chyby na kroku pro Newtonovu metodu



Chyba v posledním kroku (svisle) a v předposledním kroku (vodorovně) pro Newtonovu metodu; vlevo lineární měřítko, vpravo logaritmické
(skutečná chyba je nahrazena rozdílem posledních dvou iterací)

Konvergence závisí na

$$L(1) := \lim_{i\to\infty} \frac{|\overline{x} - x_i|}{|\overline{x} - x_{i-1}|}\,.$$

Platí:
$L(1) < 1 \implies$ metoda konverguje,
$L(1) > 1 \implies$ metoda diverguje.

Rychlost konvergence závisí na **řádu metody**,

$$p = \lim_{i\to\infty} \frac{\ln|\overline{x} - x_i|}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|}\,.$$

Poznámka 4.1 *Vyneseme-li body* $(|\overline{x} - x_i|, |\overline{x} - x_{i-1}|)$ *v logaritmických souřadnicích, má řád metody význam směrnice asymptoty v* $(-\infty, -\infty)$.

Věta 4.4 *Nechť metoda řešení rovnice* $f(x) = 0$ *řádu* p *dává za výsledek posloupnost aproximací* x_i*,* $i \in \mathbb{N}$*, konvergující ke kořeni* $\overline{x}$*. Nechť* $r > 0$*,*

$$L(r) := \lim_{i\to\infty} \frac{|\overline{x} - x_i|}{|\overline{x} - x_{i-1}|^r} \,. \tag{10}$$

Pak
$r < p \implies L(r) = 0\,,$
$r > p \implies L(r) = \infty\,,$
$r = p \implies L(r) = L(p)$ *může (ale nemusí) existovat a může být konečná a nenulová.*

Důkaz. Limitu zlogaritmujeme:

$$\ell(r) := \ln L(r) = \lim_{i\to\infty} \ln \frac{|\overline{x} - x_i|}{|\overline{x} - x_{i-1}|^r} = \lim_{i\to\infty} \left(\ln|\overline{x} - x_i| - \underbrace{r \ln|\overline{x} - x_{i-1}|}\right).$$

Nezmění se, pokud vyznačený výraz vynásobíme výrazem $\frac{\ln|\overline{x}-x_i|}{p \ln|\overline{x}-x_{i-1}|} \to 1$ (limita součtu/součinu je součet/součin limit, pokud všechny výrazy jsou definovány, což dodatečně ověříme).

$$\begin{aligned} \ell(r) &= \lim_{i\to\infty} \left(\ln|\overline{x} - x_i| - \overbrace{r\,(\ln|\overline{x} - x_{i-1}|)\,\frac{\ln|\overline{x} - x_i|}{p \ln|\overline{x} - x_{i-1}|}}\right) \\ &= \lim_{i\to\infty} \underbrace{(\ln|\overline{x} - x_i|)}_{\to -\infty} \underbrace{\left(1 - \frac{r}{p}\right)}_{V_r} . \end{aligned}$$

$r < p \implies V_r > 0,\ \ell(r) = -\infty,\ L(r) = \exp(\ell(r)) = 0\,,$
$r > p \implies V_r < 0,\ \ell(r) = \infty,\ L(r) = \exp(\ell(r)) = \infty\,,$
$r = p \implies V_r = V_p = 0\,,$ může existovat konečná limita $\ell(r)$ a konečná limita $L(r) = \exp(\ell(r)) > 0$.
(Zpětně vidíme, že předpoklady o existenci limit součtů a součinů nenarušily platnost výsledků.) □

Řád metody se obvykle zavádí jako takové r, pro které limita (10) existuje, je konečná a nenulová. Není to však návod, jak řád vypočítat nebo odhadnout z experimentu. To neumožňuje přímo ani zde použitá definice, protože je v ní použit neznámý kořen $\overline{x}$. Bez něj se však lze obejít:

Věta 4.5 *Nechť metoda řešení rovnice* $f(x) = 0$ *dává za výsledek posloupnost aproximací* x_i*,* $i \in \mathbb{N}$*, konvergující ke kořeni* $\overline{x}$ *a*

$$L(1) = \lim_{i\to\infty} \frac{|\overline{x} - x_i|}{|\overline{x} - x_{i-1}|} < 1\,.$$

Pak řád metody je

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\ln|x_{i+1} - x_i|}{\ln|x_i - x_{i-1}|}\,,$$

pokud limita existuje.

Důkaz. Jelikož

$$\left|\frac{\overline{x} - x_i}{\overline{x} - x_{i-1}}\right| \to L(1) < 1\,,$$

tak pro nějaké $\delta > 0$ a všechna dostatečně velká i je

$$\left|\frac{\overline{x} - x_i}{\overline{x} - x_{i-1}}\right| < 1 - \delta\,,$$

$$-(1 - \delta) < \frac{\overline{x} - x_i}{\overline{x} - x_{i-1}} < 1 - \delta\,.$$

To dovoluje omezit výraz

$$\frac{|x_i - x_{i-1}|}{|\overline{x} - x_{i-1}|} = \frac{|(\overline{x} - x_{i-1}) - (\overline{x} - x_i)|}{|\overline{x} - x_{i-1}|} = \left|\frac{\overline{x} - x_{i-1}}{\overline{x} - x_{i-1}} - \frac{\overline{x} - x_i}{\overline{x} - x_{i-1}}\right| = \left|1 - \underbrace{\frac{\overline{x} - x_i}{\overline{x} - x_{i-1}}}_{\in\langle -(1-\delta), 1-\delta\rangle}\right| \in \langle \delta, 2 - \delta\rangle$$

a poměr logaritmů

$$\frac{\ln |x_i - x_{i-1}|}{\ln |\overline{x} - x_{i-1}|} = \frac{\ln\left(|\overline{x} - x_{i-1}|\, \dfrac{|x_i - x_{i-1}|}{|\overline{x} - x_{i-1}|}\right)}{\ln |\overline{x} - x_{i-1}|} =$$

$$= 1 + \frac{\ln \overbrace{\dfrac{|x_i - x_{i-1}|}{|\overline{x} - x_{i-1}|}}^{\in\langle\delta, 2-\delta\rangle}}{\ln \underbrace{|\overline{x} - x_{i-1}|}_{\to 0}} = 1 + \frac{\overbrace{\ln \dfrac{|x_i - x_{i-1}|}{|\overline{x} - x_{i-1}|}}^{\in\langle \ln\delta, \ln(2-\delta)\rangle}}{\underbrace{\ln |\overline{x} - x_{i-1}|}_{\to -\infty}} \to 1\,.$$

Stejně (substitucí $i := i + 1$) dokážeme, že

$$\frac{\ln |x_{i+1} - x_i|}{\ln |\overline{x} - x_i|} \to 1$$

a dostaneme

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\ln |x_{i+1} - x_i|}{\ln |x_i - x_{i-1}|} = \lim_{i\to\infty} \underbrace{\frac{\ln |x_{i+1} - x_i|}{\ln |\overline{x} - x_i|}}_{\to 1}\, \underbrace{\frac{\ln |\overline{x} - x_{i-1}|}{\ln |x_i - x_{i-1}|}}_{\to 1}\, \frac{\ln |\overline{x} - x_i|}{\ln |\overline{x} - x_{i-1}|} =$$

$$= \lim_{i\to\infty} \frac{\ln |\overline{x} - x_i|}{\ln |\overline{x} - x_{i-1}|} = p\,.$$

□

4.7.1 Řád Newtonovy metody

Věta 4.6 *Nechť funkce f má nenulovou spojitou druhou derivaci v okolí* jednoduchého *kořene $\overline{x}$. Pokud Newtonova metoda konverguje k $\overline{x}$, je řádu 2.*

Důkaz.

$$\overline{x} - x_i = -\frac{f''(\xi_i)}{2 f'(\theta_i)}\, (\overline{x} - x_{i-1})^2\,,$$

kde $\xi_i \in I(\overline{x}, x_{i-1})$, $\theta_i \in I(x_i, \overline{x})$. Přejdeme k absolutním hodnotám a zlogaritmujeme:

$$\ln |\overline{x} - x_i| = 2\, \ln |\overline{x} - x_{i-1}| + \ln \frac{|f''(\xi_i)|}{2\, |f'(\theta_i)|}\,,$$

$$\frac{\ln |\overline{x} - x_i|}{\ln |\overline{x} - x_{i-1}|} = 2 + \frac{\ln \frac{|f''(\xi_i)|}{2\, |f'(\theta_i)|}}{\ln |\overline{x} - x_{i-1}|} \to 2\,,$$

neboť čitatel posledního zlomku konverguje ke konstantě $\ln \dfrac{|f''(\overline{x})|}{2\, |f'(\overline{x})|} \in (0, \infty)$ a jmenovatel k $-\infty$. □

4.7.2 Řád metody regula falsi

Věta 4.7 *Metoda regula falsi je 1. řádu, pokud druhá derivace funkce f nemění na uvažovaném intervalu znaménko.*

Důkaz. Taylorův rozvoj se středem $\overline{x}$ dává v x_{i-1}

$$f(x_{i-1}) = \underbrace{f(\overline{x})}_{0} + (x_{i-1} - \overline{x})\, f'(\theta_i)\,,$$

kde $\theta_i \in I(\overline{x}, x_{i-1})$. Pokud x_{i-1} není kořen,

$$\frac{f(x_{i-1})}{x_{i-1}-\overline{x}} = f'(\theta_i) \neq 0$$

s limitou

$$\lim_{i\to\infty} \frac{f(x_{i-1})}{x_{i-1}-\overline{x}} = \lim_{i\to\infty} f'(\theta_i) = f'(\overline{x}) \neq 0\,.$$

(Předpoklady věty a metody regula falsi nepřipouštějí násobný kořen.)
BÚNO: Horní mez intervalu se nemění, dolní ano,

$$\begin{aligned}
\forall i \in \mathbb{N} : b_i = b, a_{i+1} = x_i < \overline{x}\,,\\
x_i = \frac{a_i\, f(b) - b\, f(a_i)}{f(b)-f(a_i)} = \frac{x_{i-1}\, f(b) - b\, f(x_{i-1})}{f(b)-f(x_{i-1})}\,,\\
\overline{x} - x_i = \frac{(\overline{x}-x_{i-1})\, f(b) - (\overline{x}-b)\, f(x_{i-1})}{f(b)-f(x_{i-1})} =\\
= (\overline{x}-x_{i-1}) \left(\frac{f(b)}{f(b)-f(x_{i-1})} - \frac{\overline{x}-b}{f(b)-f(x_{i-1})} \cdot \frac{f(x_{i-1})}{\overline{x}-x_{i-1}} \right)\,,\\
\ln(\overline{x}-x_i) = \ln(\overline{x}-x_{i-1}) + \ln\left(\frac{f(b)}{f(b)-f(x_{i-1})} - \frac{\overline{x}-b}{f(b)-f(x_{i-1})} \cdot \frac{f(x_{i-1})}{\overline{x}-x_{i-1}} \right)\,.
\end{aligned}$$

Jelikož $\lim\limits_{i\to\infty} f(x_{i-1}) = f(\overline{x}) = 0$, limita jmenovatele

$$\lim_{i\to\infty} (f(b) - f(x_{i-1})) = f(b) \neq 0\,,$$

$$\begin{aligned}
\lim_{i\to\infty} \ln\left(\frac{f(b)}{f(b)-f(x_{i-1})} - \frac{\overline{x}-b}{f(b)-f(x_{i-1})} \cdot \frac{f(x_{i-1})}{\overline{x}-x_{i-1}} \right) =\\
= \ln\left(1 - \frac{\overline{x}-b}{f(b)} \cdot f'(\overline{x})\right)\,,
\end{aligned}$$

což je konstanta, která po vydělení $\ln(\overline{x}-x_{i-1})$ dává limitu 0, takže

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\ln(\overline{x}-x_i)}{\ln(\overline{x}-x_{i-1})} = 1\,.$$

□

metoda	řád	podmínka
bisekce	nedef. (~ 1)	
regula falsi	1	druhá derivace nemění znaménko
sečen	$(1+\sqrt{5})/2 \doteq 1.6$	jednoduchý kořen
Newtonova	2	jednoduchý kořen

Metoda bisekce nekonverguje monotónně, takže nemá řád, ale kdybychom místo skutečných chyb použili ve vzorci jejich horní odhady, dostali bychom

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\ln(b_i - a_i)}{\ln(b_{i-1}-a_{i-1})} = \lim_{i\to\infty} \frac{\ln(b_{i-1}-a_{i-1}) - \ln 2}{\ln(b_{i-1}-a_{i-1})} = 1\,,$$

což je podobná situace jako u metod 1. řádu.

4.8 Kombinace startovacích a zpřesňujících metod

Kombinace dvou metod – **startovací** a **zpřesňující**.
Výpočet zahájíme startovací metodou, od níž se požaduje zaručená konvergence, byť třeba pomalá (např. metoda bisekce nebo regula falsi). Ta vlastně jen vylepší separaci kořene.
Poté zkusíme uplatnit zpřesňující metodu, která by měla rychleji konvergovat a urychlit tak zpřesnění nalezeného odhadu (např. Newtonova metoda). Její konvergence nebývá zaručena, ale můžeme se vrátit ke startovací metodě.

4.9 Metoda prosté iterace (MPI)

Rovnici $f(x) = 0$ převedeme na ekvivalentní tvar $\varphi(x) = x$, např. $\varphi(x) = f(x) + x$.
Počáteční odhad x_0, $\quad x_i = \varphi(x_{i-1})$.
Podmínka ukončení: $\quad |x_i - x_{i-1}| < \eta$.

Tvrzení 4.1 *Pokud MPI konverguje k $\tilde{x}$ a φ je v $\tilde{x}$ spojitá, pak $\varphi(\tilde{x}) = \tilde{x}$, $f(\tilde{x}) = 0$.*

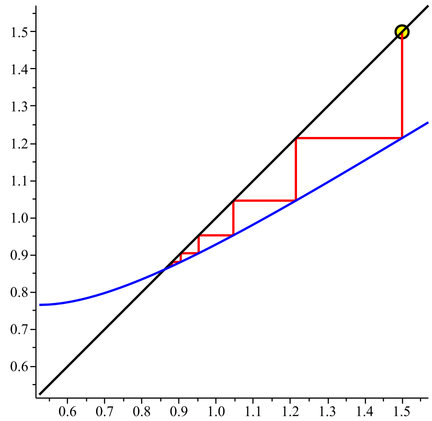
Důkaz.

$$\varphi(\tilde{x}) = \varphi\Big(\lim_{i\to\infty} x_i\Big) = \lim_{i\to\infty} \varphi(x_i) = \lim_{i\to\infty} x_{i+1} = \lim_{i\to\infty} x_i = \tilde{x}\,.$$

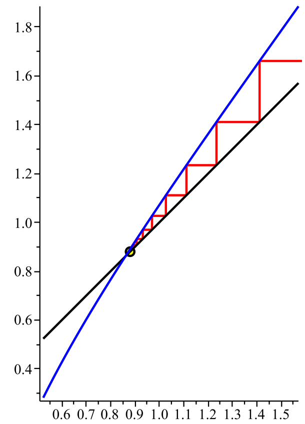
□

Příklad použití MPI

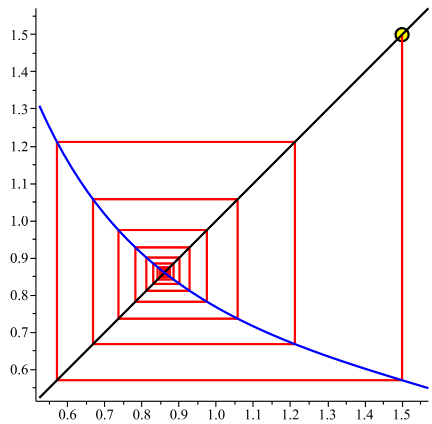
Příklad 4.1 *Hledáme nejmenší kladné řešení rovnice $f(x) = 0$, kde $f(x) = x - \operatorname{cotg} x$.*
$f(\frac{\pi}{4}) = \frac{\pi}{4} - 1 < 0, \quad f(\frac{\pi}{2}) = \frac{\pi}{2} > 0 \quad \Longrightarrow \quad \overline{x} \in (\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2})$
Zvolíme $\varphi(x) = \lambda f(x) + x$, kde $\lambda \neq 0$; podmínka ukončení pro $\eta = 0.001$.
Vyzkoušíme $\lambda \in \{-0.2, 0.2, -0.65, -0.8\}$.



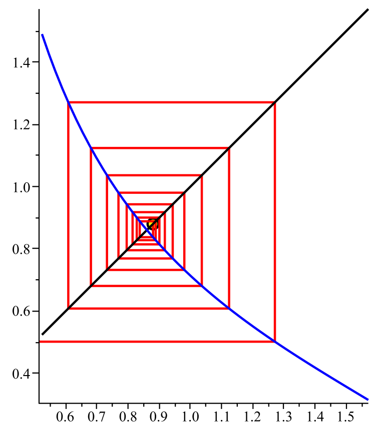
$x_{i+1} = 0.8\,x_i + 0.2\operatorname{cotg} x_i$,
$x_0 = 1.5$,
konverguje monotónně



$x_{i+1} = 1.2\,x_i - 0.2\operatorname{cotg} x_i$,
$x_0 = 0.88$
diverguje monotónně



$x_{i+1} = 0.35\,x_i + 0.65\operatorname{cotg} x_i$,
$x_0 = 1.5$,
konverguje nemonotónně



$x_{i+1} = 0.2\,x_i + 0.8\operatorname{cotg} x_i$,
$x_0 = 0.88$,
diverguje nemonotónně

4.9.1 Kontraktivní funkce

Definice 4.1 *Řekneme, že funkce φ je na intervalu I **kontraktivní** (s koeficientem q), jestliže*

$$\exists q < 1 \ \forall u, v \in I : |\varphi(u) - \varphi(v)| \leq q \cdot |u - v| \,.$$

kontraktivita $\implies$ spojitost

Věta 4.8 (Postačující podmínka pro kontraktivitu) *Nechť funkce φ má na intervalu I spojitou derivaci a existuje $q < 1$ takové, že*

$$\forall x \in I : |\varphi'(x)| \leq q \,.$$

Pak φ je na I kontraktivní s koeficientem q.

Důkaz. $|\varphi(u) - \varphi(v)| = \left| \int_v^u \varphi'(x) \, \mathrm{d}x \right| \leq \int_v^u |\varphi'(x)| \, \mathrm{d}x \leq \int_v^u q \, \mathrm{d}x = q \cdot |u - v| \,.$ □

4.9.2 Věta o pevném bodě

Věta 4.9 (Banachova věta o pevném bodě pro reálné funkce) *Nechť φ je funkce kontraktivní s koeficientem $q < 1$ na nějakém uzavřeném intervalu $I = \langle a, b \rangle$ taková, že zobrazuje I do I. Pak rovnice $\varphi(x) = x$ má v intervalu I právě jedno řešení $\overline{x}$. To dostaneme MPI s libovolnou počáteční hodnotou $x_0 \in I$. Odhad chyby:*

$$|\overline{x} - x_i| \leq \frac{q}{1 - q} \, |x_i - x_{i-1}| \,.$$

Důkaz.
- Existence řešení:

φ zobrazuje I do I
$\psi(x) = \varphi(x) - x$ je ψ v a nezáporná a v b nekladná; je spojitá, a tedy má v I nulový bod; ten je řešením rovnice $\varphi(x) = x$.

- Jednoznačnost řešení: Předpokládejme další řešení $\overline{\overline{x}} \in I$. Pak

$$|\overline{x} - \overline{\overline{x}}| = |\varphi(\overline{x}) - \varphi(\overline{\overline{x}})| \leq q \cdot |\overline{x} - \overline{\overline{x}}| \qquad \implies \qquad \overline{\overline{x}} = \overline{x}$$

- Konvergence MPI k řešení:

$$|\overline{x} - x_i| = |\varphi(\overline{x}) - \varphi(x_{i-1})| \leq q \cdot |\overline{x} - x_{i-1}| \leq \ldots \leq q^i \cdot |\overline{x} - x_0| \to 0 \,.$$

- Odhad chyby:

$$\begin{aligned} |\overline{x} - x_i| &\leq q \cdot |\overline{x} - x_{i-1}| = q \cdot |(\overline{x} - x_i) + (x_i - x_{i-1})| \\ &\leq q \cdot |\overline{x} - x_i| + q \cdot |x_i - x_{i-1}| \,, \end{aligned}$$

$$|\overline{x} - x_i| \leq \frac{q}{1 - q} \, |x_i - x_{i-1}| \,.$$

□

Koeficient kontrakce q je horním odhadem

$$L(1) = \lim_{i \to \infty} \frac{|\overline{x} - x_i|}{|\overline{x} - x_{i-1}|} < 1 \,,$$

což je kritérium konvergence použité u předchozích metod.

4.9.3 Optimalizace MPI

Jak rovnici $f(x) = 0$ převést na ekvivalentní tvar $\varphi(x) = x$ takový, že MPI rychle konverguje?
Možné řešení:

$$\varphi(x) = x + \lambda f(x)\,,$$

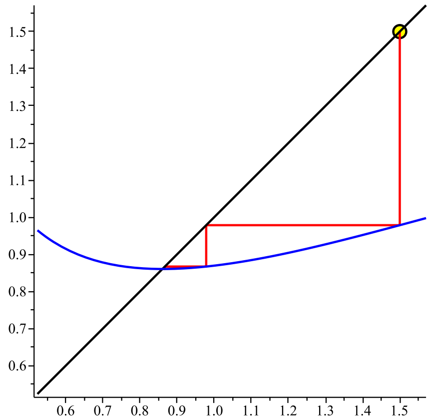
kde $\lambda \neq 0$ a

$$\varphi'(x) = 1 + \lambda f'(x)$$

je malá.

Příklad 4.2 (pokračování Př. 4.1) $f'(x) = 2 + \operatorname{cotg}^2 x \in \langle 2, 3\rangle \implies \lambda \in \langle -\frac{1}{2}, -\frac{1}{3}\rangle\,,$
$-1/f'(0.86) \approx -0.365 \implies \lambda = -0.365\,,$

$$\varphi(x) = 0.635\,x + 0.365 \operatorname{cotg} x\,.$$



$x_{i+1} = 0.635\,x_i + 0.365 \operatorname{cotg} x_i,\ x_0 = 1.5$
konverguje monotónně a rychle

4.9.4 Řád metody prosté iterace

Věta 4.10 *Nechť MPI konverguje k $\overline{x}$. Nechť p je nejmenší přirozené číslo, pro které $\varphi^{(p)}(\overline{x}) \neq 0$, a $\varphi^{(p)}$ je spojitá v nějakém okolí bodu $\overline{x}$. Pak řád metody je p.*

Důkaz. Taylorův rozvoj funkce φ se středem $\overline{x}$ vyhodnotíme v x_{i-1}:

$$\underbrace{\varphi(x_{i-1})}_{x_i} = \underbrace{\varphi(\overline{x})}_{\overline{x}} + \frac{1}{p!}\,(x_{i-1} - \overline{x})^p\,\varphi^{(p)}(\xi_{i-1})\,,\ \text{kde } \xi_{i-1} \in I(\overline{x}, x_{i-1})\,,$$

$$\frac{\ln|\overline{x} - x_i|}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|} = \frac{\ln\left|\dfrac{1}{p!}\,(x_{i-1} - \overline{x})^p\,\varphi^{(p)}(\xi_{i-1})\right|}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|} =$$

$$= \frac{p\,\ln|\overline{x} - x_{i-1}|}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|} - \underbrace{\frac{\ln p!}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|}}_{\to 0} + \underbrace{\frac{\ln|\overbrace{\varphi^{(p)}(\xi_{i-1})}^{\to\varphi^{(p)}(\overline{x})\neq 0}|}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|}}_{\to 0} \to p\,.$$

□

Poznámka 4.2 *Nejčastěji je $\varphi'(\overline{x}) \neq 0$, takže MPI je řádu 1. Nemusí to však být vždy, např. Newtonova metoda je speciálním případem MPI.*

Zrychlení konvergence MPI

Nápad: V každém kroku zvolíme jiný koeficient λ_i tak, aby $\varphi'(x_i) = 0$, tj.

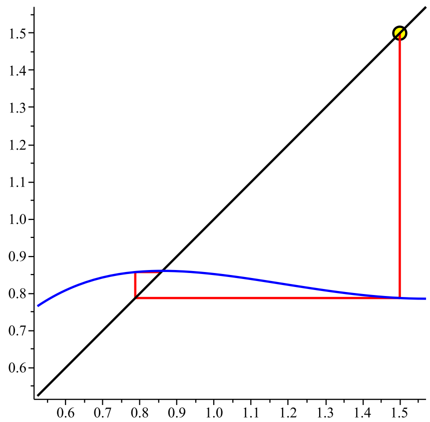
$$\lambda_i = -\frac{1}{f'(x_i)}\,,$$

Dostaneme

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

což je Newtonova metoda (jako speciální případ MPI); ta je (obvykle) řádu 2, zatímco MPI (obvykle) řádu 1.

Newtonova metoda jako speciální případ MPI



$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$, $x_0 = 1.5$
konverguje nemonotónně a rychle

4.9.5 Kritéria pro výběr metody řešení rovnic

- **jednobodové**, např. MPI (která je v jistém smyslu univerzální jednobodovou metodou), Newtonova metoda,
- **dvoubodové**, např. bisekce, regula falsi, metoda sečen,
- **vícebodové**.

Z programátorského hlediska:

- **nevyžadující derivaci**, např. bisekce, regula falsi, metoda sečen a *obvykle* MPI (záleží na zvoleném iteračním vzorci),
- **vyžadující znalost první derivace**, např. Newtonova,
- **vyžadující znalost vyšších derivací**.

Podle konvergence dělíme metody řešení rovnic na

- **vždy konvergentní**, např. bisekce a regula falsi,
- **ostatní**, např. Newtonova, metoda sečen, MPI.

4.10 Podobné úlohy

4.10.1 Hledání násobných kořenů

- V okolí kořene *sudé násobnosti* funkce nemění znaménko, takže nelze použít metody bisekce a regula falsi.

- Metoda sečen a Newtonova metoda jsou sice použitelné pro hledání násobných kořenů, ale jejich konvergence je pak prvního řádu.

- V metodě prosté iterace záleží pouze na použitém iteračním vzorci, nikoli na násobnosti kořene původní rovnice.

1. metoda: Najdeme (všechny) kořeny funkce f' a vyzkoušíme, zda některý z nich je kořenem funkce f. Tam, kde má f kořen sudé násobnosti, má f' kořen liché násobnosti a mění znaménko.

Hledání násobných kořenů

2. metoda: Uvažujme funkci $h(x) = \frac{f(x)}{f'(x)}$ (kde „odstraníme odstranitelné nespojitosti").

Tvrzení 4.2 *Nechť $\overline{x}$ je k-násobný kořen funkce f, v jehož okolí má f spojitou derivaci řádu k. Pak $\overline{x}$ je jednoduchým kořenem funkce $h = f/f'$.*

Důkaz. Definice k-násobného kořene říká, že $f^{(j)}(\overline{x}) = 0$ pro $j < k$ a $f^{(k)}(\overline{x}) \neq 0$. Opakovaným užitím l'Hospitalova pravidla odvodíme nenulovou limitu

$$\lim_{x\to\overline{x}} \frac{f(x)}{(x-\overline{x})^k} = \lim_{x\to\overline{x}} \frac{f'(x)}{k\,(x-\overline{x})^{k-1}} = \ldots = \lim_{x\to\overline{x}} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} \neq 0\,.$$

Tedy podíl prvních dvou výrazů je definován a je jednotkový,

$$\lim_{x \to \overline{x}} \frac{f(x)}{(x-\overline{x})^k} \cdot \frac{k\,(x-\overline{x})^{k-1}}{f'(x)} = 1\,,$$

tím dostáváme pro funkci h limitu

$$\lim_{x \to \overline{x}} \frac{h(x)}{x-\overline{x}} = \frac{1}{k} \neq 0\,.$$

V poslední limitě konverguje jmenovatel k nule, musí k ní tedy konvergovat i čitatel, takže $\lim_{x\to\overline{x}} h(x) = 0$ a $\overline{x}$ je kořenem funkce h. Nenulová je podle l'Hospitalova pravidla též $\lim_{x\to\overline{x}} h'(x)$, takže $\overline{x}$ je jednoduchý kořen funkce h. $\square$

Pokud funkce f má pouze kořeny konečné násobnosti, pak funkce h má tytéž kořeny, ale jednoduché (není však spojitá).

4.10.2 Řešení algebraických rovnic neboli hledání kořenů polynomů

Speciální případ rovnice $f(x) = 0$, kde f je polynom.

Věta 4.11 (Odhad polohy kořenů polynomu) *Všechny (komplexní) kořeny rovnice*

$$\sum_{i=0}^{n} a_i\, x^i = 0$$

mají absolutní hodnotu nejvýše

$$1 + \frac{\max\bigl(|a_0|, \ldots, |a_{n-1}|\bigr)}{|a_n|}\,.$$

4.10.3 Řešení rovnic v komplexním oboru

Metoda bisekce a metoda regula falsi jsou závislé na úplném uspořádání reálných čísel $\Longrightarrow$ ve větší dimenzi nepoužitelné.

Metoda sečen a Newtonova metoda jsou použitelné pro komplexní kořeny.

Pro nalezení komplexních kořenů může být nutný počáteční odhad s nenulovou imaginární částí.

4.10.4 Řešení soustav rovnic

Newtonova metoda má i zobecnění pro soustavy nelineárních rovnic; pak místo derivace pracujeme s jacobiánem a místo dělení jej potřebujeme invertovat, čímž se jednak zvyšuje složitost výpočtu, jednak vznikají problémy s body, v nichž je jacobián singulární. Podmínky konvergence jsou opět složitější než v reálném případě.

Metoda prosté iterace je použitelná i v prostorech větší (konečné) dimenze. Zajištění kontraktivity použitého zobrazení může být problém.

Kvůli obtížím se zajištěním konvergence se pro řešení soustav rovnic často používají metody založené na jiných principech než v jednodimenzionálním případě.

Dodatek: Přehled značení

Popis je zjednodušený a nemusí být přesný, podrobnosti jsou v textu. Značení použité jen lokálně zde není uvedeno.

Značení specifické pro tuto kapitolu

f ... funkce, jejíž kořeny hledáme; řešíme rovnici $f(x) = 0$
$\langle a_0, b_0 \rangle$ ... počáteční interval, ve kterém hledáme kořeny (výsledek separace kořenů)
$\overline{x}$ ... přesné řešení; $f(\overline{x}) = 0$
$x_0, x_1, x_2, \ldots$ ... posloupnost odhadů řešení
ε ... požadovaná přesnost řešení (v argumentu, $|x_i - \overline{x}| \leq \varepsilon$)
δ ... požadovaná přesnost funkční hodnoty ($|f(x_i)| \leq \delta$)
η ... hodnota pro podmínku ukončení podle rozdílu posledních odhadů ($|x_i - x_{i-1}| \leq \eta$)
q ... (převážně) koeficient kontrakce u kontraktivního zobrazení
r ... řád metody
φ ... iterační funkce v metodě prosté iterace s předpisem $x_i = \varphi(x_{i-1})$

Značení používané podobně v celém předmětu

$I(\ldots)$ ... nejmenší interval obsahující čísla (body) v závorce, např. $I(x_0, \ldots, x_{n-1}) = [\min_i x_i, \max_i x_i]$
M_j ... horní odhad absolutní hodnoty j-té derivace funkce, $|f^{(j)}| \leq M_j$ na použitém intervalu
m_j ... dolní odhad absolutní hodnoty j-té derivace funkce, $|f^{(j)}| \geq m_j$ na použitém intervalu

Literatura

[Navara, Němeček] Navara, M., Němeček, A.: *Numerické metody.* ČVUT, Praha, dotisk 2005.

[Knuth] Knuth, D.E.: *Fundamental Algorithms.* Vol. 1 of *The Art of Computer Programming,* 3rd ed., Addison-Wesley, Reading, MA, 1997.

[Num. Recipes] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P.: *Numerical Recipes (The Art of Scientific Computing).* 3rd edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2007. `http://www.nrbook.com/a/bookcpdf.php`

[Handbook Lin. Alg.] Hogben, L. (ed.): *Handbook of Linear Algebra.* Chapman & Hall/CRC, Boca Raton/London/New York, 2007.