

Numerické metody

Doc. RNDr. Libor Čermák, CSc. RNDr. Rudolf Hlavička, CSc.

Ústav matematiky
Fakulta strojního inženýrství
Vysoké učení technické v Brně

23. ledna 2006

Obsah

- 5 Řešení nelineárních rovnic
 - Úvod
 - Určení počáteční aproximace
 - Zpřesňující metody
 - Systavy nelineárních rovnic
 - Literatura

Kořeny nelineární rovnice $f(x) = 0$ obecně neumíme vyjádřit explicitním vzorcem. K řešení nelineární rovnice proto používáme iterační metody: z jedné nebo několika počátečních aproximací hledaného kořene x^* generujeme posloupnost x_0, x_1, x_2, \dots , která ke kořenu x^* konverguje. Pro některé metody stačí, když zadáme interval $\langle a, b \rangle$, který obsahuje hledaný kořen. Jiné metody vyžadují, aby počáteční aproximace byla k hledanému kořenu dosti blízko; na oplátku takové metody konvergují mnohem rychleji. Často proto začínáme s „hrubou“, avšak spolehlivou metodou, a teprve když jsme dostatečně blízko kořene, přejdeme na „jemnější“, rychleji konvergující metodu.

Abychom naše úvahy zjednodušili, omezíme se na problém určení reálného **jednoduchého kořene** x^* rovnice $f(x) = 0$, tj. předpokládáme, že $f'(x^*) \neq 0$. Budeme také automaticky předpokládat, že funkce $f(x)$ je spojitá a má tolik spojitých derivací, kolik je jich v dané situaci zapotřebí.

Obsah

- 5 Řešení nelineárních rovnic
 - Úvod
 - **Určení počáteční aproximace**
 - Zpřesňující metody
 - Soustavy nelineárních rovnic
 - Literatura

Počáteční aproximaci kořenů rovnice $f(x) = 0$ můžeme zjistit z grafu funkce $f(x)$: ručně, nebo raději pomocí vhodného programu na počítači, vykreslíme funkci $f(x)$ a vyhledáme její průsečíky s osou x .

Jinou možností je sestavení tabulky $[x_i, f(x_i)]$ pro nějaké dělení

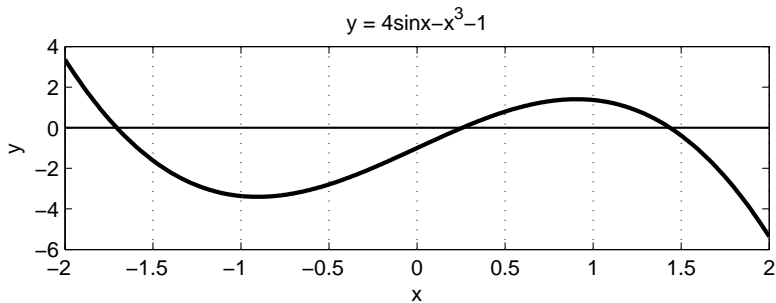
$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{i-1} < x_i < \dots < x_n = b$$

Zvoleného intervalu $\langle a, b \rangle$. Když ve dvou sousedních bodech tabulky nabývá funkce $f(x)$ hodnot s opačným znaménkem, tj. když $f(x_{i-1})f(x_i) < 0$, pak mezi body x_{i-1} a x_i leží reálný kořen rovnice $f(x) = 0$.

Příklad 5.1. Získáme hrubý odhad kořenů rovnice $f(x) = 0$, kde

$$f(x) = 4 \sin x - x^3 - 1.$$

Z obrázku 5.1 zjistíme, že existují tři kořeny: $x_1^* \in (-2, -1)$, $x_2^* \in (-1, 0)$ a $x_3^* \in (1, 2)$. \square



Obr. 5.1: Graf funkce $4 \sin x - x^3 - 1$

Na principu znaménkových změn je založena

Metoda bisekce známá také jako **metoda půlení intervalů**. Předpokládejme, že funkce $f(x)$ má v koncových bodech intervalu (a_0, b_0) opačná znaménka, tj. platí $f(a_0)f(b_0) < 0$. Sestrojíme posloupnost intervalů

$(a_1, b_1) \supset (a_2, b_2) \supset (a_3, b_3) \supset \dots$, které obsahují kořen. Intervaly (a_{k+1}, b_{k+1}) , $k = 0, 1, \dots$, určíme rekurzivně způsobem, který si nyní popíšeme.

Střed intervalu (a_k, b_k) je bod $x_{k+1} = \frac{1}{2}(a_k + b_k)$. Když $f(x_{k+1}) = 0$, pak $x_{k+1} = x^*$ je kořen a dál nepokračujeme. Pokud $f(x_{k+1}) \neq 0$, položíme

$$(a_{k+1}, b_{k+1}) = \begin{cases} (a_k, x_{k+1}), & \text{když } f(a_k)f(x_{k+1}) < 0, \\ (x_{k+1}, b_k), & \text{když } f(a_k)f(x_{k+1}) > 0. \end{cases} \quad (5.1)$$

Z konstrukce (a_{k+1}, b_{k+1}) okamžitě plyne $f(a_{k+1})f(b_{k+1}) < 0$, takže každý interval (a_k, b_k) obsahuje kořen. Po k krocích je kořen v intervalu $I_k := (a_k, b_k)$ délky

$$|I_k| = b_k - a_k = 2^{-1}(b_{k-1} - a_{k-1}) = \dots = 2^{-k}(b_0 - a_0).$$

Střed x_{k+1} intervalu (a_k, b_k) aproximuje kořen x^* s chybou

$$|x_{k+1} - x^*| \leq \frac{1}{2}(b_k - a_k) = 2^{-k-1}(b_0 - a_0). \quad (5.2)$$

Pro $k \rightarrow \infty$ zřejmě $|I_k| \rightarrow 0$ a $x_k \rightarrow x^*$.

Příklad 5.2. Metodu bisekce aplikujeme na rovnici z příkladu 5.1. Jako počáteční zvolíme interval $(a_0, b_0) = (1, 2)$. Připomeňme, že $f(1) > 0$, $f(2) < 0$. Proto také $f(a_k) \geq 0$, $f(b_k) \leq 0$ pro každé k . Posloupnost intervalů zaznamenáváme do tabulky.

k	a_k	b_k	x_{k+1}	$f(x_{k+1})$
0	1	2	1,5	< 0
1	1	1,5	1,25	> 0
2	1,25	1,5	1,375	> 0
3	1,375	1,5	1,4375	< 0
4	1,375	1,4375	1,40625	> 0
5	1,40625	1,4375	1,421875	

Po pěti krocích má interval (a_5, b_5) délku $2^{-5} = 0,03125$ a $x_6 = 1,421875$ aproximuje kořen s chybou nepřesahující $2^{-6} = 0,015625$. \square

Metoda bisekce konverguje pomalu: protože $10^{-1} \doteq 2^{-3,32}$, zpřesnění o jednu dekadickou cifru vyžaduje v průměru 3,32 kroku. Všimněte si, že rychlost konvergence vyjádřená vztahem (5.2) vůbec nezávisí na funkci $f(x)$. To proto, že jsme využívali pouze znaménka funkčních hodnot. Když tyto hodnoty (a případně také hodnoty derivací $f'(x)$) využijeme efektivněji, můžeme dosáhnout podstatně rychlejší konvergence. Takové „zpřesňující“ metody však konvergují pouze tehdy, když pro ně zvolíme dostatečně dobrou počáteční aproximaci. Vhodná počáteční aproximace bývá často určena právě metodou bisekce.

Obsah

- 5 Řešení nelineárních rovnic
 - Úvod
 - Určení počáteční aproximace
 - **Zpřesňující metody**
 - Soustavy nelineárních rovnic
 - Literatura

Snad nejznámější mezi nimi je

Newtonova metoda nebo-li **metoda tečen**. Jak je u iteračních metod zvykem, vyjdeme z počáteční aproximace x_0 a postupně počítáme x_1, x_2, \dots způsobem, který si teď vysvětlíme.

Předpokládejme, že známe x_k a máme určit lepší aproximaci x_{k+1} . Uděláme to tak, že bodem $[x_k, f(x_k)]$ vedeme tečnu ke křivce $y = f(x)$ a průsečík tečny s osou x považujeme za x_{k+1} . Do rovnice tečny

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

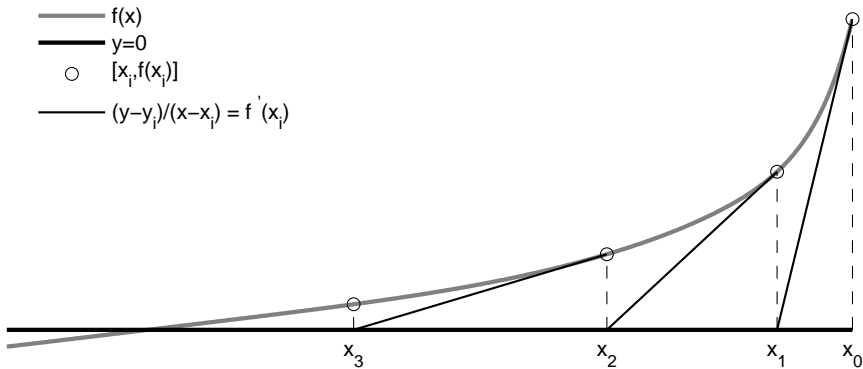
tedy dosadíme $y := 0$, vypočteme x a položíme $x_{k+1} := x$. Tak dostaneme předpis

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (5.3)$$

Výpočet ukončíme a x_{k+1} považujeme za dostatečně přesnou aproximaci kořene, pokud

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \varepsilon, \quad \text{případně} \quad |x_{k+1} - x_k| \leq \varepsilon |x_k| \quad \text{nebo} \quad |f(x_{k+1})| \leq \varepsilon, \quad (5.4)$$

kde ε je požadovaná přesnost. Tím sice není zaručeno, že také $|x_{k+1} - x^*| \leq \varepsilon$, je to ale obvyklý způsob, pomocí něhož iterace ukončíme. Tato tzv. **stop kritéria** jsou vhodná i pro další metody, které v tomto odstavci uvedeme.



Obr. 5.2: Newtonova metoda

Příklad 5.3. Newtonovou metodou určíme kladný kořen rovnice z příkladu 5.1. Zvolíme $x_0 = 2$. Výpočet ukončíme, když $|f(x_k)| < 10^{-5}$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$f(x_k)/f'(x_k)$	$x_k - x^*$
0	2	-5,362810	-13,66459	0,392460	0,563550
1	1,607540	-1,156877	-7,899490	0,146450	0,171089
2	1,461090	-0,143158	-5,966406	0,023994	0,024640
3	1,437096	-0,003653	-5,662524	0,000645	0,000646
4	1,436451	-0,000003			0,000000

Poslední sloupec vyžaduje znalost přesného řešení. To získáme provedením ještě jednoho kroku Newtonovy metody. Dá se ukázat, že $x^* \doteq x_5 = 1,43645032$ má všechny cifry platné. Požadovaná přesnost byla tedy dosažena ve čtvrtém kroku, $x_4 \doteq 1,43645$ má všechny cifry platné. \square

Konvergence Newtonovy metody. Necht' $e_k = x_k - x^*$ je chyba v k -tém kroku. Ukážeme si, jak souvisí s chybou e_{k+1} v kroku následujícím. Z Taylorova rozvoje $f(x^*)$ okolo x_k dostaneme

$$0 = f(x^*) = f(x_k) + (x^* - x_k)f'(x_k) + \frac{1}{2}(x^* - x_k)^2 f''(\xi),$$

kde ξ je nějaký blíže neurčený bod intervalu, jehož krajní body jsou x_k a x^* . Když rovnici dělíme $f'(x_k)$, dostaneme

$$-\frac{1}{2}(x^* - x_k)^2 \frac{f''(\xi)}{f'(x_k)} = \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} + (x^* - x_k) = x^* - \left[x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \right] = x^* - x_{k+1},$$

takže máme

$$e_{k+1} = \frac{1}{2} \frac{f''(\xi)}{f'(x_k)} e_k^2, \quad (5.5)$$

a když $x_k \rightarrow x^*$, pak

$$\frac{e_{k+1}}{e_k^2} \longrightarrow C, \quad \text{kde } C = \frac{1}{2} \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}.$$

Protože chyba e_{k+1} je úměrná druhé mocnině chyby e_k , říkáme, že Newtonova metoda **konverguje kvadraticky** nebo také, že je **druhého řádu**. Uved'me si přesnější definici:

Nechť x_0, x_1, x_2, \dots je posloupnost, která konverguje k x^* a $e_k = x_k - x^*$. Když existuje číslo p a konstanta $C \neq 0$ taková, že

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p} = C, \quad (5.6)$$

pak p se nazývá řád konvergence posloupnosti a C je chybová konstanta.

Speciálně říkáme, že

	lineární,		$p = 1$ a $C < 1$,
konvergence je	superlineární,	když	$p > 1$,
	kvadratická,		$p = 2$.

Řekneme, že daná metoda je řádu p , jestliže všechny konvergentní posloupnosti získané touto metodou mají řád konvergence větší nebo rovný p a nejméně jedna z těchto posloupností má řád konvergence rovný přesně p .

V blízkosti kořene platí: čím vyšší řád p , tím rychlejší konvergence, neboť

$$|e_{k+1}| \approx C|e_k|^p,$$

takže když $|e_k|$ je malé, pak $|e_{k+1}|$ je tím menší, čím je p větší.

Víme už, že když Newtonova metoda konverguje, pak rychlost konvergence $x_k \rightarrow x^*$ je alespoň kvadratická (pro některé funkce f může být i vyšší). Zbývá ještě zodpovědět otázku, za jakých podmínek je zaručeno, že konvergence vůbec nastane. Ukažme si to.

Předpokládejme, že v nějakém okolí I kořene platí

$$\frac{1}{2} \frac{f''(y)}{f'(x)} \leq m \quad \text{pro všechna } x \in I, y \in I.$$

Když $x_k \in I$, pak z (5.5) plyne $|e_{k+1}| \leq m|e_k|^2$ nebo-li $|me_{k+1}| \leq |me_k|^2$.

Opakováním této úvahy dostaneme

$$|me_{k+1}| \leq |me_k|^2 \leq |me_{k-1}|^4 \leq |me_{k-2}|^8 \leq |me_{k-3}|^{16} \leq \dots \leq |me_0|^r, \text{ kde } r = 2^{k+1}.$$

Když platí $|me_0| < 1$, pak jistě $|e_{k+1}| \rightarrow 0$ a tedy $x_{k+1} \rightarrow x^*$. Dokázali jsme tedy, že

Newtonova metoda vždy konverguje za předpokladu, že počáteční aproximaci zvolíme dostatečně blízko ke kořenu.

Dobrou počáteční aproximaci x_0 můžeme získat např. metodou bisekce. Vhodným spojením metody bisekce a Newtonovy metody lze sestavit **kombinovanou metodu**, která vždy konverguje, viz např. procedura `rtsafe` v [Numerical Recipes]. V blízkosti kořene se přitom uplatní jen Newtonova metoda, takže konvergence je rychlá.

Pomocí náčrtku snadno ověříme, že Newtonova metoda konverguje, když jsou splněny tzv. **Fourierovy podmínky**:

- a) $f \in C^2\langle a, b \rangle$ a přitom $f(a)f(b) < 0$;
- b) f' a f'' nemění na intervalu $\langle a, b \rangle$ znaménko a $f'(x) \neq 0$ pro každé $x \in \langle a, b \rangle$;
- c) jako x_0 volíme ten z bodů a, b , v němž je $f(x_0)f''(x_0) > 0$.

Praktický význam však Fourierovy podmínky nemají, neboť pro velké $b - a$ obvykle tyto podmínky buďto neplatí nebo je neumíme snadno ověřit.

Metoda sečen. V každém kroku Newtonovy metody musíme počítat hodnotu $f(x_k)$ a derivaci $f'(x_k)$. Když vzorec pro výpočet derivace nemáme k dispozici, nebo když náklady spojené s výpočtem derivace jsou vysoké, můžeme derivaci aproximovat podílem

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

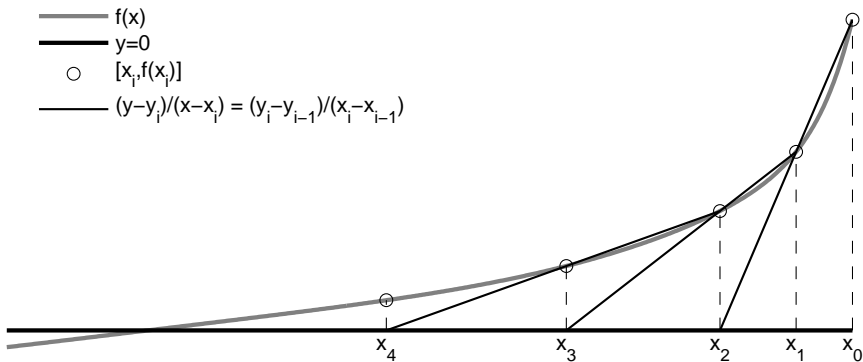
Tak dostaneme **metodu sečen**: zadáme dvě počáteční aproximace x_0, x_1 a počítáme x_2, x_3, \dots podle předpisu

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

Název metody vychází z její geometrické interpretace: x_{k+1} je x -ová souřadnice průsečíku přímky procházející body $[x_{k-1}, f(x_{k-1})]$ a $[x_k, f(x_k)]$ s osou x :

$$y = f(x_k) + \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}} (x - x_k) = 0 \quad \implies \quad x = x_{k+1}.$$

Protože tato přímka protíná graf funkce f , je to sečna, odtud metoda sečen. Všimněte si, že v každém kroku vyčíslujeme hodnotu funkce jen jednou: vypočteme $f(x_k)$, hodnotu $f(x_{k-1})$ převezmeme z předchozího kroku.



Obr. 5.3: Metoda sečen

Dá se odvodit, že rychlost konvergence metody sečen je řádu $p = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) \approx 1,618$, tedy poněkud nižší než u Newtonovy metody. Číslo $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0,618$ je tzv. poměr zlatého řezu. Toto magické číslo se znovu objeví v odstavci *jednorozměrná minimalizace*, kde si o něm řekneme trochu víc (viz poznámka o zlatém řezu).

Příklad 5.4. Metodou sečen určíme kladný kořen rovnice z příkladu 5.1. Zvolíme $x_0 = 1$, $x_1 = 2$. Výpočet ukončíme, když bude $|f(x_k)| < 10^{-5}$.

k	x_k	$f(x_k)$	$x_k - x^*$
0	1	1,365884	-0,436450
1	2	-5,362810	0,563550
2	1,202994	0,991513	-0,233456
3	1,327357	0,543420	-0,109094
4	1,478177	-0,246970	0,041726
5	1,431051	0,030349	-0,005400
6	1,436208	0,001370	-0,000242
7	1,436452	-0,000008	0,000001

Až do čtvrtého kroku (výpočet x_5) je konvergence poměrně pomalá. Teprve v posledních dvou krocích se plně uplatnila rychlá konvergence metody sečen.

□

Metoda sečen zaručeně konverguje, pokud zvolíme startovací hodnoty x_0 a x_1 dostatečně blízko ke kořenu x^* . To lze zajistit např. metodou bisekce. Další metodou, jak získat dobré startovací aproximace, je varianta metody sečen známá jako

Metoda regula falsi. Počáteční aproximace x_0 a x_1 se volí tak, aby $f(x_0)f(x_1) < 0$. Nová aproximace x_{k+1} se opět získá jako průsečík sečny s osou x . Sečna však tentokrát spojuje bod $[x_k, f(x_k)]$ s bodem $[x_\ell, f(x_\ell)]$, kde $\ell < k$ je největší index, pro který $f(x_\ell)f(x_k) < 0$. Výpočet tedy probíhá podle vzorce

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_\ell}{f(x_k) - f(x_\ell)} f(x_k), \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.8)$$

Přitom pro $k = 1$ je $\ell = 0$, a po výpočtu x_{k+1} určíme index ℓ takto:

když $f(x_{k+1})f(x_k) < 0$, pak $\ell = k$, v opačném případě se ℓ nemění.

Výhodou metody regula falsi je to, že podobně jako metoda bisekce vždy konverguje: interval I_k , jehož koncové body jsou x_k a x_ℓ , obsahuje kořen. Na rozdíl od metody bisekce však délka intervalu I_k nekonverguje k nule. Rychlost konvergence metody regula falsi je jen lineární. Metodu regula falsi (podobně jako metodu bisekce) proto používáme pouze pro získání dobré počáteční aproximace, pak přecházíme na rychlejší metodu.

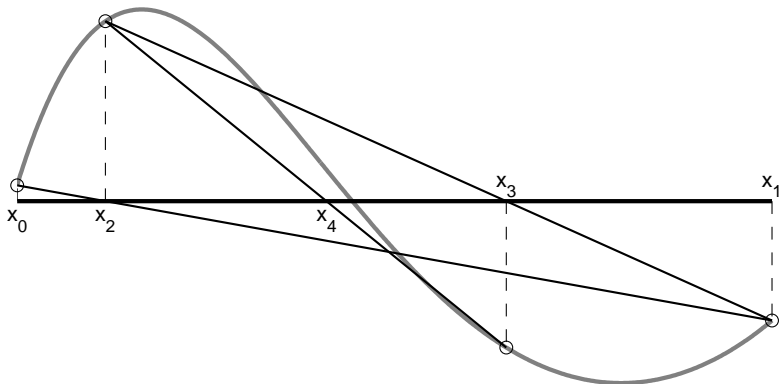
Příklad 5.5. Metodou regula falsi určíme kladný kořen rovnice z příkladu 5.1. Zvolíme $x_0 = 1$, $x_1 = 2$. Připomeňme, že $f(x_0) > 0$.

k	x_ℓ	x_k	x_{k+1}	$f(x_{k+1})$	$x_k - x^*$
1	1	2	1,202994	0,991513	-0,233456
2	2	1,202994	1,327357	0,543420	-0,109094
3	2	1,327357	1,389245	0,253012	-0,047205
4	2	1,389245	1,416762	0,108896	-0,019688
5	2	1,416762	1,428369	0,045283	-0,008081
6	2	1,428369	1,433156	0,018561	-0,003295
⋮					
14	2	1,436444	1,436448	0,000014	-0,000002
15	2	1,436448	1,436449	0,000006	-0,000001

Z tabulky je vidět, že počínaje druhým krokem $x_\ell = 2$. Dále je zřejmé, že do čtvrtého kroku (výpočet x_5) je přesnost metody regula falsi srovnatelná s přesností

metody sečen, viz příklad 5.4. V následujících krocích je už ale patrná lineární konvergence: podmínka $|f(x_k)| < 10^{-5}$ je splněna až pro x_{16} .

Všimněte si: délka intervalů $I_k = (x_k, 2)$ (pro $k \geq 2$) konverguje k číslu $2 - x^* \doteq 0,563550$.



Obr. 5.4: Regula falsi

Steffensenova metoda se řídí předpisem

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{d_k}, \quad \text{kde} \quad d_k = \frac{f(x_k + f(x_k)) - f(x_k)}{f(x_k)} \quad (5.9)$$

je speciálně spočtená aproximace $f'(x_k)$ připomínající dopřednou diferenci:

$$f'(x_k) \approx d_k = \frac{f(x_k + h_k) - f(x_k)}{h_k}, \quad \text{kde} \quad h_k = f(x_k).$$

V každém kroku se funkce f vyhodnocuje dvakrát: kromě $h_k = f(x_k)$ se počítá ještě také $f(x_k + h_k)$. Oproti metodě sečen je tu jedno vyhodnocení funkce navíc. Na druhé straně lze ukázat, že rychlost konvergence Steffensenovy metody je stejná jako u Newtonovy metody, tedy kvadratická.

Metoda inverzní kvadratické interpolace. Metoda sečen používá dva předchozí body k získání dalšího, proč tedy nepoužít tři?

Body $[x_{k-2}, f(x_{k-2})]$, $[x_{k-1}, f(x_{k-1})]$ a $[x_k, f(x_k)]$ můžeme proložit parabolou $P_2(x)$ jako kvadratickou funkci proměnné x , a za další aproximaci x_{k+1} vybrat bod, v němž parabola protne x -ovou osu. Na tomto principu je založena **Müllerova metoda**. Potíž je v tom, že parabola nemusí x -ovou osu protnout, neboť kvadratická funkce nemusí mít reálné kořeny. Výpočet je proto třeba provádět v komplexní aritmetice, a to i v případě, že rovnice $f(x) = 0$ má jen reálné kořeny. Místo paraboly v proměnné x můžeme třemi body proložit parabolou $Q_2(y)$ v proměnné y , určenou interpolačními podmínkami

$$Q_2(f(x_{k-2})) = x_{k-2}, \quad Q_2(f(x_{k-1})) = x_{k-1}, \quad Q_2(f(x_k)) = x_k.$$

Tato parabola vždy protíná x -ovou osu, stačí zvolit $y = 0$. Proto jako další aproximaci volíme $x_{k+1} = Q_2(0)$. Tato metoda je známa jako **metoda inverzní kvadratické interpolace**. Její konvergence je superlineární řádu $p \approx 1,839$, viz [Heath].

Brentova metoda. Metoda inverzní kvadratické interpolace spolu s metodou sečen a metodou bisekce jsou základem populární **Brentovy metody**, viz např. [Moler], dále také program `zbrent` v [Numerical Recipes] nebo funkce `fzero` v MATLABu.

Předností Brentovy metody je to, že nepoužívá derivace funkce f , je spolehlivá, tj. zaručeně konverguje ke kořenu, a po několika počátečních krocích se chyba rychle zmenšuje, neboť rychlost konvergence je superlineární.

Startovací body x_0 a x_1 je třeba zvolit tak, aby $f(x_0)f(x_1) < 0$. Aproximace x_2 se určí metodou sečen. Necht' (a_1, b_1) je interval, jehož koncové body jsou x_0 a x_1 . Pak zřejmě $x_2 \in (a_1, b_1)$. Další aproximaci x_3 budeme hledat v kratším intervalu $(a_2, b_2) \subset (a_1, b_1)$, jehož jeden koncový bod je x_2 a druhý je ten z bodů a_1, b_1 , v němž má funkce f opačné znaménko než v x_2 , takže $f(a_2)f(b_2) < 0$ a (a_2, b_2) obsahuje kořen.

Při výpočtu x_3, x_4, \dots Brentova metoda používá jednu ze tří základních metod tak, aby nová aproximace $x_{k+1} \in (a_k, b_k)$. Dále se vybere interval $(a_{k+1}, b_{k+1}) \subset (a_k, b_k)$ obsahující kořen. Jedním z jeho koncových bodů je x_{k+1} , druhým je ten z bodů a_k, b_k , v němž má funkce f znaménko opačné než v x_{k+1} .

Při výpočtu x_{k+1} se přednostně použije metoda inverzní kvadratické interpolace, pokud takto získaná aproximace není dostatečně dobrá, zkusí se metoda sečen, a když ani ta nezabere, použije se jako záchrana metoda bisekce. Podrobnější popis Brentovy metody je uveden např. v [Moler], [Numerical Recipes].

Příklad 5.6. Budeme hledat kladný kořen rovnice z příkladu 5.1 a porovnáme jednotlivé metody podle počtu p_k kroků a počtu p_f vyhodnocení funkce f (u Newtonovy metody do p_f zahrneme také počet vyhodnocení derivace f'). Pro výpočet Brentovou metodou jsme použili upravený program `fzerotx`, viz [Moler].

Výpočet jsme zahájili takto: v metodě bisekce počáteční interval $(a_0, b_0) = (1, 2)$, v Newtonově a Steffensenově metodě $x_0 = 2$, v ostatních metodách $x_0 = 1$ a $x_1 = 2$. Použili jsme stop kritérium $|f(x_n)| < \varepsilon$. V tabulce jsou uvedeny hodnoty p_k/p_f pro několik tolerancí ε .

ε	10^{-3}	10^{-6}	10^{-9}	10^{-12}	10^{-15}
bisekce	9/11	19/21	29/31	39/41	49/51
regula falsi	10/12	17/19	25/27	33/35	40/42
sečny	6/8	7/9	8/10	8/10	9/11
Newton	4/8	5/10	5/10	6/12	6/12
Steffensen	4/8	5/10	6/12	6/12	7/14
Brent	6/7	7/8	7/8	8/9	8/9

Nejmenší p_k má Newtonova metoda, nejmenší p_f Brentova metoda. Z výpisu o průběhu výpočtu Brentovou metodou vyplývá, že se ani jednou nepoužila bisekce, proto tak skvělý výsledek. \square

Poznámka (O metodě prosté iterace). Předpokládejme, že funkce $g \in C\langle a, b \rangle$ splňuje tyto dvě podmínky:

$$(\alpha) \quad g(x) \in \langle a, b \rangle \quad \forall x \in \langle a, b \rangle,$$

$$(\beta) \quad \text{existuje číslo } q, 0 \leq q < 1, \text{ takové, že} \\ |g(x) - g(y)| \leq q|x - y| \quad \forall x, y \in \langle a, b \rangle.$$

Pak rovnice $x = g(x)$ má v $\langle a, b \rangle$ jediné řešení x^* a **posloupnost postupných aproximací** $x_{k+1} = g(x_k)$, $k = 0, 1, \dots$, konverguje k x^* pro každé $x_0 \in \langle a, b \rangle$. Bod $x^* = g(x^*)$ se nazývá **pevný bod** funkce g (zobrazuje x^* na sebe). Následuje náčrt důkazu.

- 1) Existence.** Z podmínky (α) plyne $g(a) \geq a$, $g(b) \leq b$, odtud $(a - g(a)) \cdot (b - g(b)) \leq 0$, takže v $\langle a, b \rangle$ leží kořen rovnice $x - g(x) = 0$.
- 2) Jednoznačnost.** Nechť pro $x^*, y^* \in \langle a, b \rangle$ platí $x^* = g(x^*)$, $y^* = g(y^*)$. Podle (β) $|x^* - y^*| = |g(x^*) - g(y^*)| \leq q|x^* - y^*|$, což je možné jedině když $x^* = y^*$.
- 3) Konvergence.** Podle (β) je $|x_k - x^*| = |g(x_{k-1}) - g(x^*)| \leq q|x_{k-1} - x^*|$. Opakováním této úvahy dostaneme nakonec $|x_k - x^*| \leq q^k|x_0 - x^*| \rightarrow 0$ pro $k \rightarrow \infty$, takže $x_k \rightarrow x^*$.

Místo podmínky (β) můžeme pro $g \in C^1\langle a, b \rangle$ použít silnější podmínku

$$(\beta') \quad |g'(x)| \leq q < 1 \quad \forall x \in \langle a, b \rangle.$$

Podle věty o střední hodnotě totiž $g(x) - g(y) = g'(\xi)(x - y)$, kde ξ leží mezi x a y , takže pro $x, y \in \langle a, b \rangle$ podle (β') je

$$|g(x) - g(y)| = |g'(\xi)| \cdot |x - y| \leq q|x - y|, \text{ tj. platí } (\beta).$$

Všimněte si, že pro $\langle a, b \rangle = \langle x^* - \delta, x^* + \delta \rangle$ je platnost podmínky (α) důsledkem platnosti podmínky (β) : $|g(x) - x^*| = |g(x) - g(x^*)| \leq q|x - x^*| < |x - x^*|$, tj. když $|x - x^*| \leq \delta$, pak také $|g(x) - x^*| \leq \delta$.

Přibližný výpočet kořene x^* rovnice $x = g(x)$ podle formule $x_{k+1} = g(x_k)$ se nazývá **metoda prosté iterace** nebo také **metoda postupných aproximací**.

Podmínky (α) a (β) nebo (β') jsou postačující pro konvergenci této metody. Vhodnou úpravou rovnice $f(x) = 0$ na tvar $x = g(x)$ můžeme dostat řadu různých konkrétních metod. Tak třeba pro $g(x) = x - f(x)/f'(x)$ dostaneme Newtonovu metodu.

Rychlost konvergence posloupnosti postupných aproximací $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ závisí na chování funkce g v bodě x^* . Jsou-li splněny podmínky (α) a (β) nebo (β') , a má-li g dostatečný počet spojitých derivací, dají se dokázat následující tvrzení.

- Pokud $g'(x^*) \neq 0$, je řád konvergence roven jedné a platí $|x_{k+1} - x^*| \leq q|x_k - x^*|$.
- Pokud $g'(x^*) = 0$ a $g''(x^*) \neq 0$, je řád konvergence roven dvěma.

- Obecně, pokud jsou derivace $g^{(s)}(x^*) = 0$, $s = 1, 2, \dots, r - 1$, a $g^{(r)}(x^*) \neq 0$, konvergence je řádu r .

Pro Newtonovu metodu $g'(x) = f(x)f''(x)/(f'(x))^2$, tj. $g'(x^*) = 0$, takže konvergence $x_k \rightarrow x^*$ je řádu alespoň dva (což potvrzuje nám již známý výsledek). Dá se také dokázat, že když $|g'(x^*)| > 1$, pak pro $x_0 \neq x^*$ posloupnost postupných aproximací k x^* konvergovat nemůže. \square

Příklad 5.7. Nelineární rovnice $f(x) = x^2 - 2x - 3 = 0$ má kořeny $x^* = -1$ a $x^* = 3$. Prozkoumáme konvergenci ke kořenu $x^* = 3$ pro několik iteračních funkcí g .

1. $g(x) = (x^2 - 3)/2$, $g'(x) = x$, $|g'(3)| = 3$, pro $x_0 \neq 3$ konvergence nenastane.

2. $g(x) = \sqrt{2x + 3}$, $g'(x) = 1/\sqrt{2x + 3}$, $|g'(3)| = 1/3$, lineární konvergence nastane např.

pro libovolné x_0 z intervalu $\langle 2, 4 \rangle$, neboť v něm $|g'(x)| \leq 1/\sqrt{7}$.

3. $g(x) = 2 + 3/x$, $g'(x) = -3/x^2$, $|g'(3)| = 1/3$, lineární konvergence nastane např. pro

libovolné x_0 z intervalu $\langle 2, 4 \rangle$, neboť v něm $|g'(x)| \leq 3/4$.

4. $g(x) = (x^2 + 3)/(2x - 2)$, $g'(x) = 2(x^2 - 2x - 3)/(2x - 2)^2$, $g'(3) = 0$, $g''(3) = 1/2$, kvad-

ratická konvergence nastane např. pro x_0 z intervalu $\langle 2,5; 3,5 \rangle$, v němž $|g'(x)| < 0,39$,

jak snadno zjistíme. Ověřte, že tato iterační funkce odpovídá Newtonově metodě. \square

Poznámka (O násobných kořenech). Řekneme, že kořen x^* rovnice $f(x) = 0$ má **násobnost q** , jestliže funkce $g(x) = f(x)/(x - x^*)^q$ je v bodě x^* definována a kořen v něm už nemá, tj. když $0 < |g(x^*)| < \infty$. Jestliže má funkce $f(x)$ v okolí kořene x^* spojitě derivace až do řádu q včetně, pak $f^{(j)}(x^*) = 0$, $j = 0, 1, \dots, q - 1$.

Některé z doposud uvedených metod lze použít také pro nalezení násobných kořenů, konvergence však bývá pomalejší. Tak třeba Newtonova metoda konverguje jen lineárně s chybovou konstantou $C = (q - 1)/q$.

Když očekáváme, že rovnice $f(x) = 0$ může mít násobné kořeny, je vhodné využít toho, že funkce $u(x) = f(x)/f'(x)$ má pouze jednoduché kořeny. Místo rovnice $f(x) = 0$ tedy řešíme rovnicí $u(x) = 0$. \square

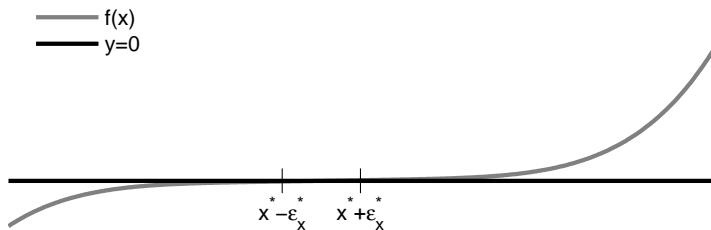
Poznámka (O dosažitelné přesnosti). Necht' x_k je aproximace jednoduchého kořene rovnice $f(x) = 0$. Pomocí věty o střední hodnotě dostaneme

$$f(x_k) = f(x_k) - f(x^*) = f'(\xi)(x_k - x^*),$$

kde ξ je nějaký bod ležící mezi x_k a x^* . Předpokládejme, že při výpočtech pracujeme jen s přibližnými hodnotami $\tilde{f}(x_k) = f(x_k) + \delta_k$, přičemž $|\delta_k| \leq \delta$. Pak nejlepší výsledek, kterého můžeme dosáhnout, je $\tilde{f}(x_k) = 0$. V tom případě $|f(x_k)| \leq \delta$, takže

$$|x_k - x^*| = \frac{|f(x_k)|}{|f'(\xi)|} \leq \frac{\delta}{|f'(\xi)|} \approx \frac{\delta}{|f'(x^*)|} =: \varepsilon_x^*,$$

pokud se f' v blízkosti kořene příliš nemění. Vypočítat x^* s menší chybou než ε_x^* nelze. Proto se ε_x^* nazývá **dosažitelná přesnost kořene x^*** . Všimněte si: když je velikost směrnice $|f'(x^*)|$ v kořenu x^* malá, je dosažitelná přesnost ε_x^* velká, viz obr. 5.5. V takovém případě je výpočet kořene x^* **špatně podmíněný problém**.



Obr. 5.5: Dosažitelná přesnost kořene

Podobná úvaha pro kořen násobnosti q dává dosažitelnou přesnost

$$\varepsilon_x = \left(\frac{\delta \cdot q!}{f^{(q)}(x^*)} \right)^{1/q}.$$

Exponent $1/q$ je příčinou toho, že výpočet násobného kořene je obecně špatně podmíněná úloha. Tak třeba pro $f(x) = x^q$ je $x^* = 0$ kořen násobnosti q a $\varepsilon_x = \delta^{1/q}$. Pro $q = 15$ a $\delta = 10^{-15}$ dostaneme $\varepsilon_x = 0,1!$ \square

Poznámka (O kořenech polynomů). Polynom $p_n(x)$ stupně n má n obecně komplexních kořenů. Pro výpočet jednoduchých reálných kořenů funkce $f(x) = p_n(x)$ lze použít libovolnou z dosud uvedených metod. O tom, jak se vypořádat s případnými násobnými kořeny, pojednává výše uvedená poznámka. Pro výpočet komplexních kořenů lze použít např. Newtonovu metodu, v níž jako počáteční aproximaci volíme komplexní číslo.

Pokud nás zajímají všechny kořeny polynomu, tak po nalezení reálného kořene x^* polynom $p_n(x)$ dělíme členem $x - x^*$. Tak dostaneme polynom $p_{n-1}(x) = p_n(x)/(x - x^*)$ stupně $n - 1$ a dále hledáme jeho kořeny. Když je x^* komplexní kořen, pak je kořenem také komplexně sdružené číslo \bar{x}^* . V tom případě dělíme $p_n(x)$ kvadratickým polynomem $(x - x^*)(x - \bar{x}^*)$, jehož koeficienty jsou reálná čísla. Tak dostaneme polynom $p_{n-2}(x)$ stupně $n - 2$ s reálnými koeficienty a pokračujeme hledáním jeho kořenů.

Pro výpočet kořenů polynomů jsou navrženy také speciální, velmi efektivní metody, o nichž lze získat informace např. v [Stoer, Bulirsch]. \square

Obsah

- 5 Řešení nelineárních rovnic
 - Úvod
 - Určení počáteční aproximace
 - Zpřesňující metody
 - **Soustavy nelineárních rovnic**
 - Literatura

Mnohé z metod určených pro řešení jedné nelineární rovnice lze zobecnit na řešení soustav nelineárních rovnic. Bohužel to neplatí pro metodu bisekce ani pro metodu regula falsi. A co je ještě horší: pro soustavy nelineárních rovnic není známa žádná univerzální metoda, která by dokázala spolehlivě určit dostatečně dobrou počáteční aproximaci řešení. Uspokojivou počáteční aproximaci proto musíme odhadnout. Pomoci nám může znalost konkrétního problému, který na řešení nelineární soustavy vede. Odhad řešení lze někdy získat také na základě pomocných výpočtů provedených za zjednodušujících předpokladů, například tak, že nelineární problém aproximujeme vhodným problémem lineárním.

Uvažujme tedy soustavu n nelineárních rovnic o n neznámých

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \end{aligned} \quad \text{nebo-li} \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (5.10)$$

kde

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Řešením soustavy (5.10) je každý číselný vektor \mathbf{x}^* , pro který $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.

V tomto odstavci budeme automaticky předpokládat, že funkce $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ je spojitá a má tolik spojitých derivací, kolik je jich v dané situaci zapotřebí.

Newtonova metoda a její modifikace. Pro $n = 1$ lze Newtonovu metodu odvodit také z Taylorova rozvoje

$$0 = f(x^*) = f(x_k) + (x^* - x_k)f'(x_k) + \text{chyba} \doteq f(x_k) + (x^* - x_k)f'(x_k)$$

tak, že přibližnou rovnost nahradíme rovností a místo x^* píšeme x_{k+1} , tj. počítáme

$$f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) + f(x_k) = 0, \quad k = 0, 1, \dots$$

Podobně lze pomocí Taylorovy formule v n dimenzích odvodit Newtonovu metodu pro soustavu (5.10),

$$\mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{o}, \quad (5.11)$$

kde $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ je **Jacobiova matice** funkce $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, tj.

$$\mathbf{f}'(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Výpočet organizujeme tak, že nejdříve vyřešíme soustavu lineárních rovnic

$$\mathbf{f}'(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \quad \text{a pak určíme} \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k. \quad (5.12)$$

Když je matice $\mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)$ regulární, můžeme lineární soustavu rovnic vyřešit metodami popsanými v kapitole *řešení soustav lineárních rovnic*, (je-li $\mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)$ singulární, je třeba metodu vhodně modifikovat, popř. výpočet jako neúspěšný ukončit). Pro velké n a řídkou matici $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ lze efektivně použít iterační metody (\mathbf{x}_k je dobrá počáteční aproximace, navíc \mathbf{x}_{k+1} není třeba počítat příliš přesně, neboť je to jen mezivýsledek na cestě k nalezení \mathbf{x}^*).

Newtonova metoda konverguje, pokud je počáteční aproximace \mathbf{x}_0 dostatečně blízko kořene \mathbf{x}^* . Rychlost konvergence je kvadratická, tj. existuje okolí $O(\mathbf{x}^*)$ bodu \mathbf{x}^* a konstanta C taková, že

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq C \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 \quad \forall \mathbf{x}_k \in O(\mathbf{x}^*).$$

Pro ukončení iterací použijeme některé ze stop kriterií

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| < \varepsilon, \quad \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| < \varepsilon \|\mathbf{x}_k\|, \quad \text{nebo} \quad \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1})\| \leq \varepsilon, \quad (5.13)$$

kde ε je zadaná přesnost. Tato kritéria jsou obecně použitelná také pro další metody, které si v této kapitole uvedeme.

V každém kroku Newtonovy metody je třeba řešit soustavu lineárních rovnic (5.11), což pro velké n představuje značný objem výpočtů. Navíc je třeba v každém kroku vypočítat n^2 složek $\partial f_i(\mathbf{x}_k)/\partial x_j$ matice $\mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)$. To může být také velmi obtížné v případě, že parciální derivace nejsou určeny jednoduchými vzorci. Proto se někdy postupuje tak, že se $\mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)$ přepočítává jen občas, např. každých m kroků, tj. \mathbf{x}_{k+1} počítáme podle

$$\mathbf{f}'(\mathbf{x}_p)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{0}, \quad k = p, p+1, \dots, p+m-1, \quad p = 0, m, 2m, \dots$$

V takovém případě je účelné rozložit matici $\mathbf{f}'(\mathbf{x}_p)$ pomocí LU rozkladu na součin dolní trojúhelníkové matice \mathbf{L}_p a horní trojúhelníkové matice \mathbf{U}_p ,

$$\mathbf{f}'(\mathbf{x}_p) = \mathbf{L}_p \mathbf{U}_p.$$

Tato náročná operace se provede jen pro $k = 0, m, 2m, \dots$. Aproximaci \mathbf{x}_{k+1} pak dostaneme řešením dvou soustav lineárních rovnic s trojúhelníkovými maticemi,

$$\mathbf{L}_p \mathbf{y} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_k), \quad \mathbf{U}_p \mathbf{d}_k = \mathbf{y}, \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k.$$

Pro $k \notin \{0, m, 2m, \dots\}$ tedy provádíme jen „laciné“ zpětné chody.

Parciální derivace v Jacobiově matici $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$ se často aproximují pomocí diferenčních podílů,

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \approx \Delta_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{h}) := \frac{f_i(x_1, \dots, x_j + h_j, \dots, x_n) - f_i(\mathbf{x})}{h_j},$$

kde $h_j \neq 0$ jsou vhodně zvolené parametry, $\mathbf{h} = (h_1, h_2, \dots, h_n)^T$. Pro malé $h_j > 0$ je $\Delta_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{h})$ standardní aproximace $\partial f_i(\mathbf{x})/\partial x_j$ dopřednou diferencí. Matice $\mathbf{\Delta}(\mathbf{x}, \mathbf{h})$ s prvky $\Delta_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{h})$ je aproximací Jacobiové matice $\mathbf{f}'(\mathbf{x})$. Když tedy v (5.11) nahradíme $\mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)$ pomocí $\mathbf{\Delta}(\mathbf{x}_k, \mathbf{h}_k)$, dostaneme **diskretizovanou Newtonovu metodu**

$$\mathbf{\Delta}(\mathbf{x}_k, \mathbf{h}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{o}. \quad (5.14)$$

Zobecněnou metodu sečen dostaneme, když za j -tou složku $h_j^{(k)}$ vektoru \mathbf{h}_k dosadíme $h_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - x_j^{(k)}$ (pro $n = 1$ je pak rovnice (5.14) totožná s předpisem (5.7)) a **zobecněnou Steffensenovu metodu** obdržíme, když položíme $h_j^{(k)} = f_j(\mathbf{x}_k)$ (pro $n = 1$ je pak rovnice (5.14) totožná s předpisem (5.9)). Řád konvergence obou metod je stejný jako v jedné dimenzi, tj. 1,618 pro metodu sečen a 2 pro Steffensenovu metodu. Metoda sečen potřebuje dvě dostatečně dobré počáteční aproximace \mathbf{x}_0 a \mathbf{x}_1 .

Příklad 5.8. Newtonovou metodou určíme kořeny soustavy rovnic

$$\begin{aligned} f(x, y) &= x^3 - xy^2 - 1 = 0, \\ g(x, y) &= y^3 - 2x^2y + 2 = 0. \end{aligned}$$

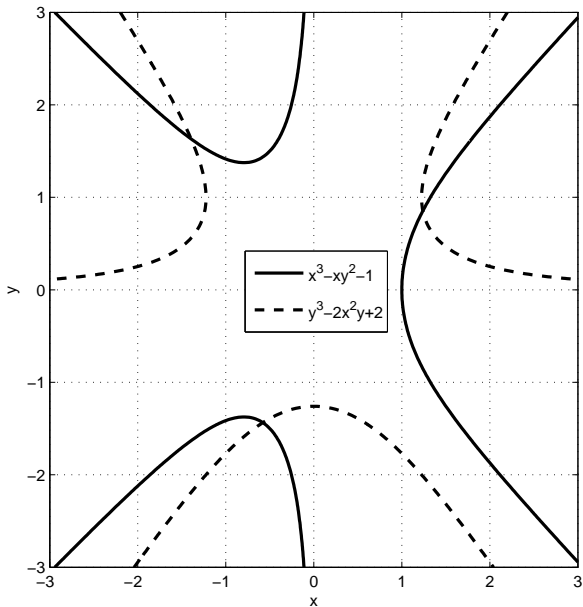
Podle (5.12) určíme $\mathbf{x}_{k+1} \equiv (x_{k+1}, y_{k+1})^T$ takto:

$$\begin{pmatrix} f_x(x_k, y_k) & f_y(x_k, y_k) \\ g_x(x_k, y_k) & g_y(x_k, y_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -f(x_k, y_k) \\ -g(x_k, y_k) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_k + a_k \\ y_k + b_k \end{pmatrix}.$$

Soustavu rovnic je výhodné vyřešit pomocí Crammerova pravidla, tj.

$$a_k = -\frac{D_x}{D}, \quad b_k = -\frac{D_y}{D},$$

kde $D = f_x g_y - f_y g_x$, $D_x = f g_y - f_y g$, $D_y = f_x g - f g_x$,
přičemž hodnoty všech funkcí se počítají v bodě $[x_k, y_k]$.



Obr. 5.6: Soustava dvou nelineárních rovnic

Z obrázku 5.6 zjistíme, že soustava má celkem tři kořeny. Vybereme si třeba ten, který leží ve čtverci $\Omega := \{[x, y] \mid -2 \leq x \leq -1, 1 \leq y \leq 2\}$, a jako počáteční aproximaci zvolíme $x_0 = -1, y_0 = 1$. Výpočet ukončíme, když

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1})\|_{\infty} = \max\{|f(x_{k+1}, y_{k+1})|; |g(x_{k+1}, y_{k+1})|\} < 10^{-5}.$$

Výpočet je zaznamenán v následující tabulce (f_k a g_k označuje hodnotu v bodě $[x_k, y_k]$).

k	x_k	y_k	f_k	g_k	$x_k - x^*$	$y_k - y^*$
0	-1	1	-1	1	0,394069	-0,631182
1	-1,5	2	1,625	1	-0,105931	0,368818
2	-1,379562	1,673966	0,240186	0,318968	0,014507	0,042784
3	-1,392137	1,629879	0,000193	0,012219	0,001932	-0,001303
4	-1,394072	1,631182	-0,000005	-0,000018	-0,000002	0,000000
5	-1,394069	1,631182	-0,000000	-0,000000	0,000000	0,000000

Všimněte si, že v blízkosti kořene je konvergence velmi rychlá. Přesné řešení jsme aproximovali pomocí \mathbf{x}_5 . $x_5 = -1,39407$ a $y_5 = 1,63118$ mají všechny cifry platné.



Zvýšení spolehlivosti metod Newtonova typu. Newtonova metoda a její varianty nemusejí konvergovat, když startujeme daleko od řešení. Je však možné přijmout jistá opatření, která oblast konvergence těchto metod podstatně rozšíří. Nejjednodušší je použít **tlumenou Newtonovu metodu**, ve které se Newtonův (nebo aproximovaný Newtonův) krok \mathbf{d}_k počítá jako obvykle, ale pak se jako další aproximace bere $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$, kde λ_k je číselný parametr. Daleko od řešení bývá krok \mathbf{d}_k nespolehlivý, mnohdy příliš velký, a tak se můžeme pokusit vybrat λ_k tak, aby \mathbf{x}_{k+1} byla lepší aproximace řešení než \mathbf{x}_k . Jedním ze způsobů, jak toho dosáhnout, je sledovat $\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)\|_2$ a zajistit, aby v každé iteraci délka vektoru $\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ dostatečně poklesla. Parametr λ_k je také možné určit minimalizací funkce $\varphi(\lambda) = \|\mathbf{f}(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{d}_k)\|_2$ (minimalizaci se věnuje následující kapitola). Ať už parametr λ_k volíme jakkoliv, v blízkosti řešení vždy stačí brát $\lambda_k = 1$ a dosáhnout tak řádu konvergence netlumené metody.

Poněkud komplikovanější, avšak mnohem spolehlivější, je **Newtonova metoda s lokálně omezeným krokem**, ve které $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k$ a krok \mathbf{d}_k dostaneme minimalizací funkce $\varphi(\mathbf{d}) = \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}\|_2$ na oblasti $\|\mathbf{d}\|_2 \leq \Delta_k$, kde Δ_k je vhodně volený parametr.

Podrobnější (a mnohé další) informace k tomuto tématu čtenář najde ve specializované literatuře, např. v [Nocedal].

Metoda prosté iterace. V mnoha významných aplikacích se řeší nelineární soustava

$$\mathbf{x} = \mathbf{a} + h\varphi(\mathbf{x}), \quad (5.15)$$

kde \mathbf{a} je číselný vektor a h je malé kladné číslo. Položíme-li $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{a} - h\varphi(\mathbf{x})$, můžeme soustavu $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ vyřešit Newtonovou metodou nebo některou z jejích modifikací. V případě úlohy (5.15) se však přímo nabízí jiný, velmi jednoduchý postup, který si teď popíšeme. Označíme-li $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{a} + h\varphi(\mathbf{x})$, dostáváme úlohu

$$\text{určit } \mathbf{x}^* \text{ splňující } \quad \mathbf{x}^* = \mathbf{g}(\mathbf{x}^*). \quad (5.16)$$

Bod \mathbf{x}^* se nazývá **pevný bod** zobrazení $\mathbf{g}(\mathbf{x})$.

Úlohu (5.16) se pokusíme vyřešit metodou prosté iterace: zvolíme počáteční aproximaci \mathbf{x}_0 a počítáme

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (5.17)$$

a doufáme, že takto generovaná **posloupnost postupných aproximací** \mathbf{x}_k konverguje k \mathbf{x}^* . Postačující podmínky konvergence udává následující

Věta (O konvergenci metody prosté iterace). Necht' Ω je uzavřená oblast, ve které má funkce \mathbf{g} parciální derivace a splňuje tyto dvě podmínky:

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \in \Omega \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \\ \text{b)} \quad & \|\mathbf{g}'(\mathbf{x})\| \leq q < 1 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \end{aligned} \tag{5.18}$$

Pak v Ω existuje jediný pevný bod \mathbf{x}^* zobrazení \mathbf{g} a posloupnost postupných aproximací získaná předpisem (5.17) k němu konverguje pro libovolnou počáteční aproximaci $\mathbf{x}_0 \in \Omega$. Přitom

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq q \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|,$$

tj. rychlost obecně jen lineární konvergence závisí na q . \square

Vraťme se zpět k úloze (5.15). Když má funkce $\varphi(\mathbf{x})$ v okolí kořene \mathbf{x}^* ohraničené parciální derivace, pak pro dostatečně malé h a pro \mathbf{x}_0 dosti blízké k \mathbf{x}^* posloupnost postupných aproximací

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{a} + h\varphi(\mathbf{x}_k), \quad k = 0, 1, \dots$$

konverguje k \mathbf{x}^* . (Snadno se ověří, že v tom případě lze aplikovat předchozí větu, když zvolíme $O(\mathbf{x}^*) = \{\mathbf{x} \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \delta\}$, kde $\delta > 0$ je dostatečně malé číslo.)

Příklad 5.9. Metodou prosté iterace určíme řešení soustavy rovnic

$$\begin{aligned}x &= 0,2 + 0,1(-xy^2 + 3x), \\y &= 0,6 + 0,1(-x^2y^3 - 2y)\end{aligned}$$

v oblasti $\Omega = \{[x, y] \mid 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$. Nejdříve ověříme, že funkce

$$g_1(x, y) = 0,2 + 0,1(-xy^2 + 3x), \quad g_2(x, y) = 0,6 + 0,1(-x^2y^3 - 2y)$$

splňují podmínky (5.18).

Protože pro $[x, y] \in \Omega$ platí

$$0 \leq 0,2 + 0,1(-xy^2 + 3x) \leq 1, \quad 0 \leq 0,6 + 0,1(-x^2y^3 - 2y) \leq 1,$$

tj. $[g_1(x, y), g_2(x, y)] \in \Omega$, podmínka a) je splněna.

Abychom ověřili podmínku b), vyjádříme si Jacobiovu matici

$$\mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial g_1(x, y)}{\partial y} \\ \frac{\partial g_2(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial g_2(x, y)}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,1y^2 + 0,3 & -0,2xy \\ -0,2xy^3 & -0,3x^2y^2 - 0,2 \end{pmatrix}$$

a odhadneme např. v $\|\cdot\|_\infty$ normě

$$\|\mathbf{g}'(\mathbf{x})\|_\infty = \max\{|-0,1y^2 + 0,3| + |-0,2xy|; |-0,2xy^3| + |-0,3x^2y^2 - 0,2|\}.$$

Zřejmě

$$\|\mathbf{g}'(\mathbf{x})\|_\infty \leq \max\{0,3 + 0,2; 0,2 + 0,5\} = 0,7 \quad \text{pro } \mathbf{x} = [x, y] \in \Omega,$$

takže podmínka b) je splněna pro $q = 0,7$.

Výpočet zahájíme třeba z počáteční aproximace $x_0 = y_0 = 0$ a pro ukončení iterací použijeme stop kritérium

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\|_\infty = \max\{|x_{k+1} - x_k|; |y_{k+1} - y_k|\} < 10^{-5}.$$

Výpočet je zaznamenán v následující tabulce.










k	x_k	y_k	$x_k - x_{k-1}$	$y_k - y_{k-1}$	$x_k - x^*$	$y_k - y^*$
0	0	0			-0,275892	-0,499211
1	0,2	0,6	0,2	0,6	-0,075892	0,100789
2	0,252800	0,479136	0,052800	-0,120864	-0,023092	-0,020075
3	0,270036	0,503470	0,017236	0,024334	-0,005856	0,004259
⋮						
8	0,275882	0,499209	0,000025	-0,000009	-0,000010	-0,000001
9	0,275889	0,499211	0,000007	0,000002	-0,000003	0,000000









Přesné řešení jsme aproximovali pomocí \mathbf{x}_{15} . $x_9 = 0,27589$ a $y_9 = 0,49921$ mají všechny cifry platné. \square







Poznámka. Když $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{T}\mathbf{x} + \mathbf{c}$ je lineární funkce, pak $\mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \mathbf{T}$. Pokud $\|\mathbf{T}\| < 1$, pak jsou postačující podmínky (5.18) splněny pro každé \mathbf{x} , takže $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}^*$ pro libovolnou počáteční aproximaci \mathbf{x}_0 . Tento výsledek jsme dokázali v kapitole *řešení soustav lineárních rovnic*.

Obsah

- 5 Řešení nelineárních rovnic
 - Úvod
 - Určení počáteční aproximace
 - Zpřesňující metody
 - Soustavy nelineárních rovnic
 - Literatura

-  I.S. Berezin, N.P. Židkov: *Číselnyje metody I,II*, Nauka, Moskva, 1962.
-  G. Dahlquist, G. Å Björk: *Numerical Methods*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1974.
-  M. Fiedler: *Speciální matice a jejich použití v numerické matematice*, SNTL, Praha, 1981.
-  D. Hanselman, B. Littlefield: *Mastering MATLAB 7*, Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2005.
-  G. Hämmerlin, K. H. Hoffmann: *Numerical Mathematics*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
-  M. T. Heath: *Scientific Computing. An Introductory Survey*, McGraw-Hill, New York, 2002.
-  I. Horová, J. Zelinka: *Numerické metody*, učební text Masarykovy univerzity, Brno, 2004.
-  J. Kobza: *Splajny*, učební text Palackého univerzity, Olomouc, 1993.
-  J. Klapka, J. Dvořák, P. Popela: *Metody operačního výzkumu*, učební text, FSI VUT Brno, 2001.

-  J. H. Mathews, K. D. Fink: *Numerical Methods Using MATLAB*, Pearson Prentice Hall, New Jersey, 2004.
-  MATLAB: *Mathematics*, Version 7, The MathWorks, Inc., Natick, 2004.
-  G. Meurant: *Computer Solution of Large Linear Systems*, Elsevier, Amsterdam, 1999.
-  S. Míka: *Numerické metody algebry*, SNTL, Praha, 1985..
-  C. B. Moler: *Numerical Computing with MATLAB*, Siam, Philadelphia, 2004.
<http://www.mathworks.com/moler>.
-  J. Nocedal, S. J. Wright: *Numerical Optimization, Springer Series in Operations Research*, Springer, Berlin, 1999.
-  A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri: *Numerical Mathematics*, Springer, Berlin, 2000.
-  W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling: *Numerical Recipes in Pascal, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.

-  P. Přikryl: *Numerické metody matematické analýzy*, SNTL, Praha, 1985.
-  A. R. Ralston: *Základy numerické matematiky*, Academia, Praha, 1973.
-  K. Rektorys: *Přehled užité matematiky I,II*, Prometheus, Praha, 1995.
-  J. Stoer, R. Bulirsch: *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, New York, 1993.
-  E. Vitásek: *Numerické metody*, SNTL, Praha, 1987.
-  W. Y. Yang, W. Cao, T. S. Chung, J. Morris: *Applied Numerical Methods Using Matlab*, John Willey & Sons, New Jersey, 2005.