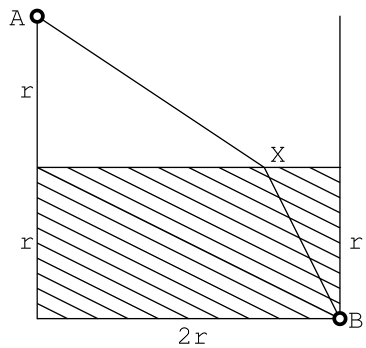
Seriál – Numerická matematika

Numerické řešení nelineárních rovnic

Cílem letošního seriálu je seznámit Tě s odvětvím matematiky, které se nazývá numerická matematika. Nebudeme zde budovat žádné velké matematické teorie, spíše se budeme snažit osvětlit si vše na příkladech.

Začneme drobnou poznámkou k četbě následujícího textu. Dnes se budeme zabývat řešením tzv. nelineárních rovnic. Začínáme fyzikálním příkladem, který motivuje další povídání a ukazuje, že naše zkoumání není samoúčelné. Pokud nemáš fyziku v lásce,[1] můžeš tento příklad bez obav přeskočit a přejít přímo k matematické formulaci úlohy. Na porozumění dalšího textu to nemá vliv.



Fyzikální motivace: Budeme řešit úlohu naznačenou na obrázku. Nádoba válcového tvaru o poloměru $r = 0{,}400m$ a výšce $h = 2r$ byla naplněna vodou do výšky $\frac{h}{2} = r$. Laserový paprsek vycházející z bodu A na horním okraji nádoby má dopadnout do protějšího bodu B na okraji dna. Do kterého bodu X na hladině vody jej musíme namířit? (Absolutní index lomu vody pro světlo He-Ne laseru je $n_2 = 1{,}331$, absolutní index lomu pro vzduch bereme jako $n_1 = 1$.)

Průchod světla vodní hladinou v bodě X proběhne podle zákonu lomu: $\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{n_2}{n_1} = n$. Zvolme souřadnicovou soustavu tak, aby svislá osa y procházela bodem A a vodorovná osa x bodem B. Vodorovná souřadnice bodu X musí splňovat rovnici $\sin^2\alpha = n^2\sin^2\beta$, $\quad \frac{x^2}{r^2+x^2} = \frac{n^2(2r-x)^2}{r^2+(2r-x)^2}$. Po úpravě a substituci $z = \frac{x}{r}$ dostaneme rovnici čtvrtého stupně

$$(n^2-1)z^4 - 4(n^2-1)z^3 + 5(n^2-1)z^2 - 4n^2 z + 4n^2 = 0,$$

když do této rovnice dosadíme za $n = 1{,}331$ dostaneme

$$f(z) = 0{,}771561z^4 - 3{,}086244z^3 + 3{,}857805z^2 - 7{,}086244z + 7{,}086244 = 0.$$

Abychom tedy vyřešili naši úlohu, musíme najít řešení algebraické rovnice čtvrtého stupně. U takové rovnice již nemá valného smyslu pokoušet se ji řešit přesně. Budeme se snažit nalézt její řešení přibližně, stačí nám ji totiž vyřešit s přesností, s jakou máme zadána fyzikální data. Přesnější řešení by nám stejně k ničemu nebyla.

Matematická formulace problému: Budeme hledat reálné kořeny rovnice $f(x) = 0$, kde x je reálná proměnná a $f(x)$ je v nějakém smyslu rozumná funkce. Pod funkcí f si můžeš konkrétně představit například polynom čtvrtého stupně $f(x) = a_4x^4+a_3x^3+a_2x^2+a_1x+a_0$, který nám dala fyzikální motivace. Jiným příkladem funkce f může být pro rovnici $x = \sin x + 1$ předpis $f(x) = \sin x + 1 - x$.

[1] nebo pokud je fyzika zde uvedená pro Tebe moc těžká

Poznámka: V nadpisu tohoto odstavečku hovoříme o řešení nelineárních rovnic. Rovnice lineární uvažujeme zvlášť. Řešení soustav lineárních rovnic je již jinou (na našem povídání nezávislou) kapitolou numerické matematiky, proto je nezahrnujeme.

Jednobodové iterační metody: Pod názvem „iterační metody“ se skrývají metody, při kterých konstruujeme postupně posloupnost čísel $x_0,\ x_1,\ x_2,\ x_3,\ \ldots$, které aproximují přesné řešení naší rovnice $f(x) = 0$. Přitom máme zadán předpis jak ze známé hodnoty x_i spočítat x_{i+1}, tj. předpis tvaru

$$x_{i+1} = F(x_i).$$

Postupujeme tak, že nejprve zvolíme za x_0 počáteční odhad kořene, z obdrženého výsledku spočítáme $x_1 = F(x_0)$, následně spočítáme $x_2 = F(x_1)$, $x_3 = F(x_2)$ atd.

Odvození iterační metody: Jednobodových iteračních metod můžeme vymyslet samozřejmě spoustu. Nejnázornější postup je přepsat si rovnici $f(x) = 0$ ekvivalentními úpravami na tvar $x = F(x)$ a pak hledaný předpis iterační metody zvolíme jako $x_{k+1} = F(x_k)$.

Příklad: Ukážeme si heuristické[2] odvození několika metod pro řešení rovnice $x^2 = 7$, což je vlastně hledání druhé odmocniny ze sedmi. Hledáme tedy řešení rovnice $f(x) = x^2 - 7 = 0$. Tuto rovnici si můžeme přepsat do tvaru $x = F(x)$ například tak, že k oběma stranám naší rovnice přičteme číslo x, dostaneme $x = x + x^2 - 7$, což dává vzoreček $x_{k+1} = x_k + x_k^2 - 7$. Obecněji můžeme nejprve $f(x) = 0$ vynásobit nějakou konstantou c a poté přičíst k oběma stranám číslo x, dostaneme $x = x + c(x^2 - 7)$, což dává pro každé c jinou metodu $x_{k+1} = x_k + c(x_k^2 - 7)$. Konečně můžeme postupovat úplně jinak a přepsat si naši rovnici na tvar $x = \frac{1}{2}(x + \frac{7}{x})$, z čehož můžeme získat vzoreček $x_{k+1} = \frac{1}{2}(x_k + \frac{7}{x_k})$.

Jak posuzovat vhodnost metody? Chyba metody: Každá úprava rovnice $f(x) = 0$ na tvar $x = F(x)$ nám dává jinou iterační metodu. V předcházejícím textu jsme viděli, že vzorečků $x_{k+1} = F(x_k)$, pomocí kterých z počátečního odhadu x_0 konstruujeme posloupnost $x_1,\ x_2,\ x_3, \ldots$, lze získat spoustu. Přirozenou otázkou však je, jak přesně prvky posloupnosti $x_0,\ x_1,\ x_2, \ldots$ aproximují přesné řešení naší úlohy, které budeme označovat α, tj. $f(\alpha) = 0$. Není totiž vůbec jasné (a také to často není pravda), proč by měly prvky získané posloupnosti být blízko přesného řešení α.

Definujme proto *chybu i-té iterace* vztahem $\varepsilon_i = \alpha - x_i$. Je vidět, že čím menší bude chyba, tím bude metoda lepší. Abychom mohli dát našemu povídání přesný rámec, zastavíme se u pojmů limity a derivace.

Pojem limity a derivace: Na tomto místě bychom chtěli osvětlit jeden pomocný pojem pro další vysvětlování. Čtenáři obeznámení s limitami a derivacemi mohou příslušné odstavce přeskočit. Ostatním ukážeme jen to potřebné, pro systematické studium těchto pojmů doporučujeme například středoškolské učebnice.

Limita posloupnosti: Mějme posloupnost $x_0,\ x_1,\ x_2, \ldots$. Řekneme, že číslo A je limitou této posloupnosti a píšeme $\lim_{n\to\infty} x_n = A$, pokud „vzdálenosti $|x_n - A|$ jsou čím dál menší“, přesněji pokud pro každé kladné ε libovolně malé najdeme přirozené číslo n_0

---

[2] Pod slovem „heuristické“ se skrývá označení, že uvedené (intuitivní) odvozování se zakládá více na názornosti a nezodpovídá přirozené otázky (chyba metody, rychlost konvergence, viz dále), které by si matematik kladl.

takové, že pro všechny členy naší posloupnosti s indexem větším než n_0, tj. pro členy $x_{n_0+1},\ x_{n_0+2},\ x_{n_0+3},\dots$, platí $|x_n - A| < \varepsilon$, tj. jsou blíž k A než je ε. Pomocí kvantifikátorů můžeme definici limity přepsat na tvar: $\lim\limits_{n\to\infty} x_n = A$ znamená totéž, co

$$(\forall\varepsilon > 0)\,(\exists n_0)\,(\forall n > n_0) \quad |x_n - A| < \varepsilon.$$

Derivace funkce: Mějme funkci $f(x)$ definovanou na intervalu (a, b). K této funkci můžeme přiřadit funkci, kterou nazýváme *derivací funkce* f a značíme $f'(x)$.

Na tomto místě není třeba psát, jakým způsobem derivaci definujeme a pro které funkce existuje. Spokojíme se s ujištěním, že existuje pro funkce, které jsme zde zatím měli a lze ji najít v tabulkách.

Máme-li funkci f, její derivaci f', obě definované na nějakém intervalu (a, b), a nějaký bod $c \in (a, b)$, pak je přímka $y = f(c) + f'(c)(x - c)$ tečnou ke grafu funkce f v bodě $[c, f(c)]$. Nakresli si obrázek.

Derivace polynomu: Derivace základních funkcí, jejich součtů, součinů, ... , můžeš nalézt v tabulkách. Zde si uvedeme jen vzoreček pro derivaci polynomu. Pro

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + a_{n-2}x^{n-2} + \cdots + a_2x^2 + a_1x^1 + a_0$$

je

$$f'(x) = n \cdot a_n x^{n-1} + (n-1)\cdot a_{n-1}x^{n-2} + (n-2)\cdot a_{n-2}x^{n-3} + \cdots + 2\cdot a_2x^1 + a_1.$$

Konvergence metody: Definujeme, že iterační metoda $x_{k+1} = F(x_k)$ je *konvergentní,* pokud $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = \alpha$, kde α je přesné řešení rovnice $f(x) = 0$.

Tím jsme přesně definovali, kdy metoda konverguje, tj. kdy prvky posloupnosti v jistém smyslu aproximují přesné řešení α. Pro praktické účely se hodí, když o metodě víme nejenom, že konverguje, ale máme odhadnutou i chybu k-té iterace ε_k. K tomu nám může posloužit následující věta.

Věta o konvergenci a odhadu chyby:[3]

Nechť F je funkce definovaná na intervalu (A, B) a nechť má na tomto intervalu i derivaci. Nechť (a, b) je interval obsažený i s krajními body v intervalu (A, B) a nechť v (a, b) platí nerovnost $|F'(x)| \le q < 1$, kde q je vhodná konstanta. Nechť přesné řešení α rovnice $f(x) = 0$ leží v intervalu (a, b) a nechť platí[4] $F(\alpha) = \alpha$. Zvolme počáteční odhad kořene α jako $x_0 \in (a, b)$ a pomocí vzorečku $x_{k+1} = F(x_k)$ zkonstruujme posloupnost $x_0,\ x_1,\ x_2,\dots$ Pak platí $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = \alpha$, tj. naše metoda je konvergentní. Navíc pro odhad chyby platí

---

[3]Tuto větu uvádíme bez důkazu, pokročilejší čtenář si ji může zkusit dokázat sám. Hlavní myšlenkou důkazu je využít větu o střední hodnotě, která říká, za výše užitých předpokladů na funkci F, že pro libovolné body $x, y \in (a, b)$ existuje bod $c \in (x, y)$, takový, že $F(x) - F(y) = F'(c)\cdot(x - y)$.

[4]Funkci F jsme vždy konstruovali tak, aby (alespoň na intervalu (a, b)) řešení rovnice $f(x) = 0$ bylo také řešením rovnice $F(x) = x$.

$$|\varepsilon_k| = |x_k - \alpha| \leq q^k |x_0 - \alpha|.$$

Příklad: Ukážeme si aplikaci předcházející věty na vyšetření konvergence a chyby jedné metody pro výpočet druhé odmocniny ze sedmi (viz příklad dříve). Máme tedy danou funkci $f(x) = x^2 - 7 = 0$ a uvažujme metodu příslušnou funkci $F(x) = x - \frac{1}{4}(x^2 - 7)$, tj. metodu $x_{k+1} = x_k - \frac{1}{4}(x_k^2 - 7)$.

Funkce F je polynom, takže je definovaná a má derivaci pro všechna reálná čísla. Interval (A, B) proto můžeme brát jako $(-\infty, +\infty)$. Jelikož platí $2^2 = 4$, $3^2 = 9$, tak $\sqrt{7}$ určitě leží v intervalu $(2, 3)$. Za interval (a, b) zkusme proto vzít interval $(2, 3)$. Nyní si spočítám derivaci funkce F, dle výše uvedeného vzorce pro derivaci polynomu dostáváme: $F'(x) = 1 - \frac{1}{2}x$. Na intervalu $(2, 3)$ platí, že $|F'(x)| \leq \frac{1}{2} < 1$. Tj. zvolíme-li $q = \frac{1}{2}$, budeme mít splněny všechny předpoklady věty.

Tudíž pro libovolné $x_0 \in (2, 3)$ budou iterace konvergovat, chyba k-té iterace je odhadnuta[5] jako

$$|\varepsilon_k| = |x_k - \sqrt{7}| \leq \left(\tfrac{1}{2}\right)^k |x_0 - \sqrt{7}|.$$

Uvědomíme-li si nyní, že počáteční odhad x_0 i $\sqrt{7}$ leží v intervalu $(2, 3)$, můžeme výraz $|x_0 - \sqrt{7}|$ odhadnout délkou intervalu $(2, 3)$, což je číslo $3 - 2 = 1$. Celkem tedy máme pro chybu $k-$té iterace odhad $\varepsilon_k \leq \left(\frac{1}{2}\right)^k$.

Jak dlouho počítat? Naším cílem je většinou spočítat řešení s jistou přesností. Chceme-li například výsledek s chybou menší než $\frac{1}{1000}$, je dobré vědět, který člen v námi sestrojené posloupnosti $x_0,\ x_1,\ x_2,\ x_3, \ldots$ již s takovou přesností aproximuje výsledek.

Předcházející příklad nám dává přímo odhad chyby. V takovém případě již máme v podstatě vyhráno. Chceme-li najít takové x_k, aby $|x_k - \sqrt{7}| < \frac{1}{1000}$, pak stačí zjistit, pro která k je odhad chyby $\left(\frac{1}{2}\right)^k < \frac{1}{1000}$. Snadno nahlédneme, že k zaručení poslední nerovnosti nám stačí již $k = 10$. Tj. stačí spočítat 10 iterací a máme jistotu, že náš výsledek má požadovanou přesnost.

Metoda tečen: Na závěr našeho povídání se zmíníme o jedné dobré metodě, která se nazývá metoda tečen. Je dána předpisem $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ a nalezne uplatnění pro takové funkce, které mají ve zkoumaném intervalu nenulovou derivaci. Této metodě se říká metoda tečen (také Newtonova-Raphsonova), neboť její idea je následující: Pro danou $i-$tou iteraci x_i konstruujeme tečnu ke grafu funkce f v bodě $[x_i, f(x_i)]$. Průsečík této tečny s přímkou x označíme jako x_{i+1}. Nakresli si obrázek a zkus si sám odvodit dle popsaného postupu předpis této metody $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$.

Vícebodové iterační metody: Čtenář si zajisté dokáže představit i metody, při kterých $k + 1$. iteraci nepočítáme jen pomocí $k-$té iterace, ale i iterací předcházejících, tj. máme vzoreček typu $x_{k+1} = G(x_k,\ x_{k-1},\ x_{k-2}, \ldots)$, kde G je funkce j proměnných. K jejímu užití musíme zadat j prvních odhadů $x_0,\ x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_{j-1}$. Můžeme rovněž konstruovat dvě posloupnosti aproximující přesné řešení naší úlohy, jedna bude kořen odhadovat shora a druhá zdola. Takovými metodami jsou například metoda *regula falsi* (někdy se nazývá metoda sečen) a metoda *půlení intervalů*. Filosofie těchto metod je jednoduchá. V každém

---

[5] α je přesné řešení naší rovnice, tj. $\sqrt{7}$.

kroku máme vždy dva odhady kořene α, dejme tomu čísla x_i a y_i, takové, že naše funkce má v těchto odhadech opačné znaménko. Pak následující iteraci spočítáme u metody půlení intervalů jako střed intervalu (x_i, y_i), u metody regula falsi jako průsečík přímky procházející body $[x_i, f(x_i)]$, $[y_i, f(y_i)]$ s osou x. Za x_{i+1} a y_{i+1} vezmeme spočítaný bod a ten z bodů x_i, y_i, aby opět funkce f měla v bodech x_{i+1}, y_{i+1} opačné znaménko. Nakresli si obrázek a odvoď příslušné vzorce. Samozřejmě, pokud nastane případ $f(x_i) = 0$ nebo $f(y_i) = 0$, nemusíme dále počítat, neboť jsme kořen právě našli.

Aproximace funkcí, interpolace

V dalším povídání se budeme zabývat aproximací funkcí. Jedná se o problém, jak aproximovat danou funkci $f(x)$ pomocí funkce nějakého speciálního tvaru. Takový problém řeší experimentátoři z mnoha vědních disciplín. Většinou dostanou výsledky v podobném tvaru, jako v následující motivaci.

Obchodní motivace: Ve městě Kocourkov stával hypermarket a jeho vedoucí Libor zpozoroval, že denní tržby v obchodě závisejí na venkovní teplotě. Několik dní jev pozoroval a výsledky si zapsal do tabulky:

teplota [ve ^{o}C]	-5	0	5	10	20	25
tržba [v mil. korun]	0.3	0.5	1	2	5	11

Na další den se chtěl pečlivě připravit, a tak bedlivě sledoval předpověď počasí, aby mohl odhadnout tržbu. Ve zprávách se však dozvěděl, že má být 15^{o}C, což v tabulce nebylo. Liborek posmutněl, co teď?

Matematická formulace problému: Nechť $f(x)$ je funkce, kterou chceme aproximovat pomocí třídy funkcí[6] $\{g_n(x),\ n = 0,\ 1,\ \ldots\}$ Předpokládejme, že naši funkci $f(x)$ budeme aproximovat jako tzv. lineární kombinaci funkcí $g_n(x)$, tj. ve tvaru

$$f(x) \approx a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + \cdots + a_m g_m(x) = g(x), \tag{$*$}$$

kde $a_i,\ i = 0,\ 1,\ \ldots,\ m$ jsou konstanty. Ústředním bodem problému aproximace je kritérium pro volbu konstant a_i. O tom však až dále.

Funkci $f(x)$ můžeme mít zadanou buď jen v některých bodech $x_1,\ \ldots,\ x_p$ (tj. tabulkou jako v motivačním příkladu, body $x_1,\ \ldots,\ x_p$ pak nazýváme uzly aproximace), nebo na nějakém intervalu (a, b). Pro jednoduchost se budeme zabývat jen prvním případem, kdy známe funkční hodnoty pouze v konečně mnoha bodech.

Nyní rozlišíme dva typy aproximací:

• *interpolační aproximace*: Konstanty jsou voleny tak, že v bodech $x_i,\ i = 1,\ \ldots,\ p$ souhlasí hodnoty aproximační funkce[7] $g(x)$ s hodnotami funkce $f(x)$.

---

[6] $g_n(x)$ jsou většinou nějaké jednoduché, speciální a známé funkce — v našem povídání to budou polynomy.

[7] Tvar funkce $g(x)$ je uveden ve vztahu $(*)$.

• *aproximace metodou nejmenších čtverců neboli aproximace v průměru*: Účelem je minimalizovat součet čtverců rozdílů mezi $f(x)$ a $g(x)$ v bodech $x_i,\ i=1,\ \dots,\ p$, tj. chceme minimalizovat výraz:

$$(f(x_1)-g(x_1))^2+(f(x_2)-g(x_2))^2+(f(x_3)-g(x_3))^2+\dots+(f(x_p)-g(x_p))^2\,.$$

Poznámka: Situace může být mnohem složitější. Předně, pokud máme funkci $f(x)$ zadanou na nějakém intervalu (a,b) (a aproximací se snažíme najít její vhodné přiblížení pomocí „jednodušších" funkcí), použijeme další rozšířený typ aproximace — tzv. Čebyševovu aproximaci. Ta se snaží o minimalizaci maximální hodnoty chyby $|f(x)-g(x)|$ na intervalu (a,b). Tato myšlenka nás v konečném důsledku vede k tzv. Čebyševovým polynomům. S nimi se mohli naši starší řešitelé seznámit v 8. sérii ročníku 1997/1998. Čebyševův polynom nabývá v absolutní hodnotě nejmenší maximální hodnoty mezi všemi polynomy stejného stupně n a stejného koeficientu u členu x^n.

U metody nejmenších čtverců lze v obecném případě uvažovat každý člen $(f(x_i)-g(x_i))^2$ s jinou váhou. Těmito zobecněními se nebudeme dále zabývat, ve zbytku dnešního povídání se zaměříme na první typ aproximace — interpolaci.

Lagrangeova interpolace: Nechť máme dány funkční hodnoty $f(x_i)$ v tabulkových bodech (uzlech) $x_i,\ i=1,\ \dots,\ p$. Tuto funkci budeme aproximovat funkcí g, která nabývá v tabulkových bodech stejné hodnoty jako funkce $f(x)$ a která je polynom. Funkci $g(x)$ tedy budeme hledat ve tvaru (srovnej s tvarem $(*)$)

$$g(x)=f(x_0)g_0(x)+f(x_1)g_1(x)+f(x_2)g_2(x)+\dots+f(x_p)g_p(x),$$

kde funkce $g_i(x)$ jsou polynomy.

Definujeme chybu aproximace jako funkci $E(x)$ splňující

$$E(x)=f(x)-g(x). \qquad (**)$$

Naším cílem je zařídit, aby

$$E(x_i)=0,\ \text{pro}\ i=1,\ \dots,\ p.$$

Dále bychom chtěli najít vyjádření pro chybu $E(x)$, které nám umožní přibližně určit chybu pro hodnoty argumentu $x\neq x_i,\ i=1,\ \dots,\ p$, tj. pro hodnoty, pro které bychom chtěli naši interpolaci užívat.

Obecné určení polynomů $g_i(x)$ je snadné. Protože chceme, aby chyba v tabulkových bodech byla nezávisle na funkci $f(x)$ nulová, víme z $(**)$, že musí být $g_i(x_i)=1$, pro $i=1,\ \dots,\ p$ a $g_i(x_j)=0$ vždy, když $i\neq j$. Jelikož $g_i(x)$ je polynom, obsahuje činitele

$$(x-x_1)\cdot(x-x_2)\cdots(x-x_{i-1})\cdot(x-x_{i+1})\cdots(x-x_p)$$

a protože $g_i(x_i)=1$, můžeme psát

$$g_i(x)=\frac{(x-x_1)\cdot(x-x_2)\cdots(x-x_{i-1})\cdot(x-x_{i+1})\cdots(x-x_p)}{(x_i-x_1)\cdot(x_i-x_2)\cdots(x_i-x_{i-1})\cdot(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_p)}.$$

Vyšší derivace: V minulém dílu seriálu jsme se zmínili o pojmu derivace funkce. Řekli jsme si, že k dané funkci $h(x)$ lze v případě, že je nějakým způsobem rozumná, přiřadit funkci $h'(x)$, kterou nazveme derivací funkce $h(x)$. Když teď nalezneme derivaci funkce $h'(x)$, dostaneme funkci $(h')'(x)$, kterou zkráceně značíme $h''(x)$ nebo $h^{(2)}(x)$ a nazýváme druhá derivace funkce $h(x)$. Derivací druhé derivace dostaneme třetí derivaci, atd. Obecně n-násobným derivováním funkce $h(x)$ dostaneme n-tou derivaci funkce $h(x)$, kterou značíme $h^{(n)}(x)$.

V minulém odstavci jsme jen chtěli uvést pojem n-té derivace, který se vyskytuje v následující pasáži o chybě Lagrangeovy interpolace. Čtenáře, který by se chtěl s vyššími derivacemi seznámit blíže, odkazujeme na jiné texty. Zdůrazněme zde jen, že ne každá funkce má derivaci a i když ji má, nemusí být definována na stejné množině jako původní funkce. Druhou derivaci opět nemá každá funkce, která má první derivaci apod. Pro „pěkné“ funkce lze derivaci nalézt v tabulkách, například pro polynom můžeš spočítat n-tou derivaci, použiješ-li n-krát vzoreček z minulého dílu seriálu.

Chyba Lagrangeovy interpolace: Vztah pro chybu Lagrangeovy interpolace zde uvedeme bez důkazu:[8] Mějme nějaký bod x, pro který chceme určit velikost chyby $E(x)$. Označme nejmenší interval, který obsahuje x a spolu s ním všechny body $x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_p$, jako interval $\langle c, d\rangle$. Pak existuje takový bod $\xi \in (c, d)$, že pro chybu Lagrangeovy aproximace platí:

$$E(x) = (x - x_1) \cdot (x - x_2) \cdots (x - x_p) \frac{f^{(p)}(\xi)}{p!}$$

(hodnota bodu ξ je však závislá na x. Pro různá x mohou být odpovídající ξ různá).

Užití interpolace: Interpolace nám nemusí sloužit jen k určení hodnot funkce mimo body, kde hodnotu známe (to se hodilo hlavně před nástupem počítačů, kdy byly mnohé funkce dány jen tabulkově a výpočet mimo tyto body byl často nejrychlejší pomocí interpolace), ale je to v podstatě základní pilíř pro odvození mnoha metod v jiných oblastech matematiky.[9] Některé takové aplikace si ještě ukážeme.

Interpolace s ekvidistantními[10] uzly: Nyní se budeme zabývat případem, kdy tabulkové body $x_1,\ \ldots,\ x_p$ jsou od sebe vzdáleny vždy o stejnou délku $h > 0$, tj. platí $x_{j+1} - x_j = h$, pro $j = 1,\ \ldots,\ p - 1$.

Diference vpřed: Mějme funkci f, bod x z jejího definičního oboru. Definujme k-tou diferenci vpřed s krokem h v bodě x funkce f pomocí rekurentního předpisu

$$\Delta_h^k f(x) = \Delta_h^{k-1} f(x + h) - \Delta_h^{k-1} f(x),$$

kde za nultou diferenci vpřed bereme přímo funkční hodnotu

$$\Delta_h^0 f(x) = f(x).$$

[8] Čtenář znalý základů matematické analýzy se může o důkaz pokusit sám. Napovíme mu, že se využije tzv. Rollova věta.

[9] Pro zdatnější čtenáře poznamenáváme, že se jedná o různé metody numerického derivování, numerické kvadratury, numerického integrování diferenciálních rovnic, ...

[10] Přívlastkem ekvidistantní se vyjadřuje, že tabulkové body jsou od sebe stejně vzdáleny.

Tedy například

$$\Delta_h^1 f(x) = f(x+h) - f(x),$$

$$\Delta_h^2 f(x) = \Delta_h^1 f(x+h) - \Delta_h^1 f(x) = f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x).$$

Obecně můžeme k-tou diferenci vyjádřit nerekurentně ve tvaru

$$\Delta_h^k f(x) = \sum_{j=0}^{k} (-1)^{k-j} \binom{k}{j} f(x+jh).$$

Ověření tohoto vztahu ponecháváme do 5. úlohy seriálové série. Jak by čtenáře mohlo napadnout, existují též zpětné diference (a centrální diference), ale o nich se zde již nebudeme zmiňovat. O diferencích zde píšeme proto, že se pomocí nich dají pro ekvidistantní tabulkové hodnoty zapisovat interpolační vzorce. Jako příklad si uvedeme tzv. Newtonův vzorec pro interpolaci vpřed

$$f(x_1 + hm) = f(x_1) + \binom{m}{1}\Delta_h^1 f(x_1) + \binom{m}{2}\Delta_h^2 f(x_1) + \binom{m}{3}\Delta_h^3 f(x_1) + \cdots + \binom{m}{p}\Delta_h^p f(x_1),$$

kde $m \in \mathbb{N}_0$ a symbolem $\binom{m}{j}$ značíme pro $j \leq m$ obvyklé kombinační číslo, pro $j > m$ pokládáme $\binom{m}{j} = 0$. Laskavý čtenář sám nahlédne souvislost tohoto vzorce se vztahem pro Lagrangeovu interpolaci. Pomůckou Ti může být vztah dokazovaný v 5. úloze seriálové série.
Jedna aplikace interpolace, inverzní interpolace: Na závěr si ukážeme jednu aplikaci interpolace na řešení nelineárních rovnic, které jsme vyšetřovali v prvním dílu seriálu. Mějme tedy funkci $y = f(x)$, jejíž kořen (nebo kořeny) chceme najít a předpokládejme, že známe její hodnoty v řadě bodů, takže máme

x	x_1	x_2	x_3	$\ldots$	x_p
$y = f(x)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	$\ldots$	$f(x_p)$

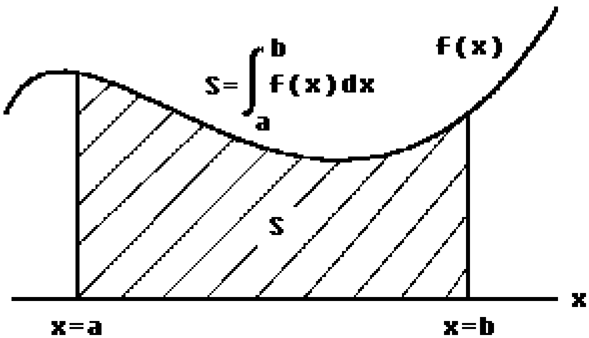
Předpokládejme dále, že $f(x)$ má v intervalu $\langle x_1, x_p \rangle$ inverzní funkci, kterou označíme g, tj. $x = g(y)$. Nalezení hodnoty $g(0)$ je tedy ekvivalentní s nalezením kořene funkce $f(x)$. Abychom hodnotu $g(0)$ přibližně určili, napíšeme si předcházející tabulku ve tvaru

y	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	$\ldots$	$f(x_p)$
$x = g(y)$	x_1	x_2	x_3	$\ldots$	x_p

Nyní je již postup nasnadě — provedeme interpolaci takto získané funkce g v tabulkových bodech $f(x_1), \ldots, f(x_p)$, kde $x_1, \ldots, x_p$ jsou funkční hodnoty v těchto bodech a dostaneme kýženou aproximaci kořene funkce f, jako aproximaci hodnoty $y(0)$. Uvedený postup si můžeš vyzkoušet při řešení 6. úlohy seriálové série.

Numerická kvadratura

V závěrečném povídání seriálu se budeme zabývat numerickým výpočtem obsahů ploch pod grafem funkce. Budeme mít zadanou funkci $f(x)$, pro jednoduchost kladnou a spojitou na intervalu $\langle a, b\rangle$, naším cílem bude spočítat obsah plochy ohraničené osou x, přímkami $x = a$, $x = b$ a grafem funkce $f(x)$ (viz vyšrafovaná plocha na obrázku).



Velikost této plochy označujeme symbolem

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

a nazýváme určitým integrálem funkce f na intervalu $\langle a, b\rangle$.

Obecně, máme-li libovolnou spojitou funkci na intervalu $\langle a, b\rangle$, definujeme určitý integrál z funkce f na intervalu $\langle a, b\rangle$ jako obsah plochy v polorovině nad osou x, která je ohraničena grafem funkce f, osou x a přímkami $x = a$, $x = b$, od které odečteme obsah plochy v polorovině pod osou x ohraničené grafem funkce f, osou x a přímkami $x = a$, $x = b$. Pro kladné funkce f zde samozřejmě nedostáváme žádný rozpor s předchozí definicí.

S pojmem integrálu se setkáme skutečně na každém rohu (ve fyzice, technice, chemii, biologii, ...), příklad z fyziky uvádí následující motivace.

Fyzikální motivace: Liborek tlačí svůj vozík ze silnice do garáže. Jelikož je silnice nerovná, působí během svého pochodu na vozík různou silou, která je ve vzdálenosti x metrů od silnice rovná $\frac{7-x}{2+x}$ Newtonu. Jakou práci během své 5 metrů dlouhé cesty vykonal?

Zde nám fyzika přímo říká, že hledaná práce je rovna obsahu plochy pod grafem funkce $f(x) = \frac{7-x}{2+x}$ na intervalu $\langle 0, 5\rangle$, tj. $W = \int_a^b \frac{7-x}{2+x}\,\mathrm{d}x$. Nyní ovšem vyvstává matematická otázka, jak danou plochu spočítat.

Matematická teorie integrálu: Existuje spousta metod, jak integrály počítat přesně, bohužel však tyto metody nepokryjí všechny funkce, které se v aplikacích vyskytují. Naším cílem bude ukázat si, jak se dají integrály počítat přibližně. Dříve než tak učiníme, napíšeme si několik základních vlastností integrálu:

• $\int_a^b f(x)+g(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x+\int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x$, kde f, g jsou funkce mající integrál na intervalu (a,b), tj. integrál ze součtu funkcí je roven součtu integrálů z těchto funkcí, což není nic překvapivého.

• $\int_a^c f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x + \int_b^c f(x)\,\mathrm{d}x$, kde f je funkce mající integrál na intervalu $\langle a,b\rangle$ a $c \in (a,b)$, tj. plocha pod grafem funkce f v intervalu $\langle a,b\rangle$ je rovna součtu ploch pod grafem této funkce v intervalech $\langle a,c\rangle$ a $\langle c,b\rangle$.

• $\int_a^b k \cdot f(x)\,\mathrm{d}x = k \cdot \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$, kde k je reálná konstanta, tj. konstantu lze vytýkat před integrál.

Integrál z polynomu: Není naším cílem zde budovat teorii přesného výpočtu integrálu, k tomu čtenáře odkazujeme na literaturu o matematické analýze a integrálním počtu, pro naše účely si zde jen uvedeme vzoreček pro integrál z polynomu

$$f(x) = c_n x^n + c_{n-1}x^{n-1} + c_{n-2}x^{n-2} + \cdots + c_2x^2 + c_1x^1 + c_0.$$

Zavedeme-li si pro polynom $f(x)$ tzv. primitivní funkci předpisem

$$F(x) = \frac{c_n}{n+1}x^{n+1} + \frac{c_{n-1}}{n}x^n + \frac{c_{n-2}}{n-2}x^{n-1} + \cdots + \frac{c_2}{3}x^3 + \frac{c_1}{2}x^2 + c_0x,$$

platí

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = F(b) - F(a).$$

Uzavřené Newtonovy-Cotesovy kvadraturní vzorce: Nechť n je přirozené číslo, uvažujme interval $\langle a,b\rangle$. Budeme hledat přibližnou hodnotu integrálu $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ ve tvaru

$$\sum_{j=0}^{n} H_j \cdot f(a+jh), \qquad \text{kde } h = \frac{b-a}{n},$$

tj. v intervalu $\langle a,b\rangle$ vezmeme $n+1$ bodů $a,\ a+h,\ a+2h,\ a+3h,\ \dots,\ a+(n-1)h,\ a+nh=b$, a sečteme funkční hodnoty v těchto bodech přenásobené konstantami H_j, $j=0,\ \dots,\ n$. Integrál $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ můžeme tedy vyjádřit ve tvaru

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} H_j \cdot f(a+jh) + E(f), \tag{$*$}$$

kde $E(f)$ je chyba našeho vzorce (rozdíl přesné a přibližné hodnoty). Je jasné, že vzoreček bude mít praktického užitku, pokud chyba $E(f)$ bude malá.

Zbývá nám samozřejmě ještě určit velikost koeficientů H_j, $j=0,\ \dots,\ n$. Na jejich volbě samozřejmě bude záviset chyba metody.

Označme pro jednoduchost $x_j = a + jh$, $j = 0, \ldots, n$, pak si můžeme vztah $(*)$ přepsat do tvaru

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} H_j \cdot f(x_j) + E(f). \tag{$**$}$$

Koeficienty H_j, $j = 0, \ldots, n$, budeme přitom volit tak, aby vzoreček $(**)$ byl přesný pro polynomy stupně nejvýše n. Dostaneme pak tzv. uzavřené Newtonovy-Cotesovy vzorce.
Vzorce pro koeficienty H_j, $j = 0, \ldots, n$: Koeficienty H_j, $j = 0, \ldots, n$, chceme volit tak, aby vzoreček $(**)$ byl přesný pro polynomy stupně nejvýše n, proto uvažujme Lagrangeovu interpolaci pro funkci $f(x)$ v bodech x_j, $j = 0, \ldots, n$. Z minulého dílu seriálu víme, že platí

$$f(x) = f(x_0)g_0(x) + f(x_1)g_1(x) + f(x_2)g_2(x) + \cdots + f(x_n)g_n(x) + E(x), \tag{\#}$$

kde

$$g_i(x) = \frac{(x - x_0)\cdot(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})\cdot(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n)}{(x_i - x_0)\cdot(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})\cdot(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n)}$$

a chyba aproximace $E(x)$ se dá vyjádřit ve tvaru

$$E(x) = (x - x_0)\cdot(x - x_1)\cdots(x - x_n)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!},$$

kde $\xi \in (a, b)$. Z (#) snadno vidíme, že (využíváme jen těch vlastností integrálu, které jsme uvedli v seriálu, tak se následujících úprav nemusíš bát, i když se s pojmem integrálu setkáváš poprvé)

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b f(x_0)g_0(x) + f(x_1)g_1(x) + f(x_2)g_2(x) + \cdots + f(x_)g_n(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b E(x)\,\mathrm{d}x,$$

což po drobné úpravě dává vztah

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n}\left(\int_a^b g_j(x)\,\mathrm{d}x\right) f(x_j) + \int_a^b E(x)\,\mathrm{d}x,$$

což je však vzoreček tvaru $(**)$, když za koeficienty H_j, $j = 0, \ldots, n$, a chybu $E(f)$ vezmeme čísla

$$H_j = \int_a^b g_j(x)\,\mathrm{d}x,\ j = 0, \ldots, n, \qquad E(f) = \int_a^b E(x)\,\mathrm{d}x. \tag{\#\#}$$

Chyba kvadraturních vzorců: Vzoreček (##) udával chybu $E(f)$ ve tvaru

$$E(f) = \int_a^b E(x)\,\mathrm{d}x.$$

Čtenář, který je hlouběji obeznámen z pojmem integrálu, si může zkusit dokázat, že pro sudé n existuje takové $\omega \in (a,b)$, že

$$E(f) = \frac{f^{(n+2)}(\omega)}{(n+2)!} \int_a^b x \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdots (x - x_n)\,\mathrm{d}x, \qquad (\%)$$

pro liché n existuje zase takové $\omega \in (a,b)$, že

$$E(f) = \frac{f^{(n+1)}(\omega)}{(n+1)!} \int_a^b (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdots (x - x_n)\,\mathrm{d}x. \qquad (\%\%)$$

Koeficienty pro uzavřené Newtonovy-Cotesovy kvadraturní vzorce: V předcházejícím odstavci jsme našli vzoreček pro výpočet chyby uzavřených Newtonových-Cotesových vzorců, nyní se podíváme, jak číselně spočítat koeficienty H_j, $j = 0,\ \ldots,\ n$.

Nechť $n = 1$, pak chceme spočítat koeficienty H_0 a H_1. Ze vzorečku (##) vidíme, že platí

$$H_0 = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}\,\mathrm{d}x, \qquad H_1 = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}\,\mathrm{d}x.$$

S využitím vzorečku pro integrál z polynomu uvedeného na začátku tohoto dílu seriálu dostaneme $H_0 = H_1 = \frac{b-a}{2}$, tj. pro $n = 1$ má uzavřený Newtonův-Cotesův kvadraturní vzorec tvar

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2} \cdot (f(a) + f(b)) + E(f),$$

což je tzv. lichoběžníkové pravidlo.

Obdobně pro $n = 2$ můžeme odvodit tzv. Simpsonovo pravidlo ve tvaru

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{6} \cdot \left(f(a) + 4 \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) + E(f).$$

Uzavřený Newtonův-Cotesův vzorec pro $n = 3$ si můžeš obdobným způsobem zkusit odvodit v 8. úloze seriálové série.

Otevřené kvadraturní vzorce: Čtenáře by mohlo napadnout, že kromě

Newtonových-Cotesových kvadraturních vzorců by mohly existovat i vzorce otevřené. Je tomu skutečně tak, jsou to kvadraturní vzorce tvaru

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=1}^{n-1} H_j f(x_j) + E(f),$$

tj. na rozdíl od uzavřených vzorců nebereme v úvahu hodnoty funkce f v krajních bodech intervalu $\langle a,b \rangle$, kde H_j jsou volena tak, že tento vzorec je přesný pro polynomy stupně nejvýše $n-2$ (v případě sudého n jsou přesné pro polynomy až do stupně $n-1$). Chybu těchto vzorců lze opět vyjádřit pomocí vztahů analogických vzorcům (%), (%%). (Čtenář, který je hlouběji obeznámen s pojmem integrálu, si může zkusit tyto vzorce odvodit, jako 9. úlohu seriálové série.)

Složené kvadraturní vzorce: Myšlenka složených kvadraturních vzorců je jednoduchá. Na intervalu $\langle a, b\rangle$ uvažujme $m+1$ bodů (m je přirozené) $y_0 = a,\ y_1,\ \dots,\ y_{m-1},\ y_m = b$, pak můžeme dle základních vlastností integrálu psát

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{y_0}^{y_1} f(x)\,\mathrm{d}x + \int_{y_1}^{y_2} f(x)\,\mathrm{d}x + \int_{y_2}^{y_3} f(x)\,\mathrm{d}x + \cdots + \int_{y_{m-1}}^{y_m} f(x)\,\mathrm{d}x.$$

Nyní na každém z intervalů (y_{i-1}, y_i), $i = 1, \dots, m$, můžeme použít jeden z odvozených („jednoduchých“) kvadraturních vzorců a dostaneme složený kvadraturní vzorec.

Uvažujme nyní $n = 1$ a rozdělme interval $\langle a, b\rangle$ na m podintervalů délky $h = \frac{b-a}{m}$, tj. v předcházejícím bereme $y_i = a + ih$, $i = 0, \dots, m$. Použijeme-li nyní v každém z intervalů (y_{i-1}, y_i), $i = 1, \dots, m$, uzavřený Newtonův-Cotesův vzorec pro $n = 1$, dostaneme lichoběžníkové pravidlo:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx h\cdot\Big(\frac{1}{2}f(a) + f(a+h) + f(a+2h) + \cdots$$

$$\cdots + f(a+(m-2)h) + f(a+(m-1)h) + \frac{1}{2}f(a+mh)\Big).$$

Chyba je pak daná výrazem

$$E(f) = -\frac{(b-a)^3}{12m^2}f''(\omega) = \frac{(b-a)h^2}{12}f''(\omega), \quad \text{kde } \omega \in (a, b).$$

Rozdělíme-li si (pro m sudé) interval $\langle a, b\rangle$ na $\frac{m}{2}$ podintervalů délky $\frac{2(b-a)}{m}$ a použijeme-li na každém podintervalu uzavřený Newtonův-Cotesův vzorec pro $n = 2$, dostaneme Simpsonovo pravidlo ve tvaru

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}(f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + 2f(a+4h) + \cdots$$

$$\cdots + 4f(a+(m-3)h) + 2f(a+(m-2)h) + 4f(a+(m-1)h) + f(b)),$$

kde $h = \frac{b-a}{m}$. Chyba je dána výrazem

$$E(f) = -\frac{(b-a)^5}{180m^4}f^{(4)}(\omega) = -\frac{(b-a)h^4}{180}f^{(4)}(\omega).$$

Vidíme, že (za předpokladu omezenosti čtvrté derivace funkce f) lze udělat chybu libovolně malou. Stačí zvolit dostatečně velké m, tzn. stačí rozdělit interval $\langle a, b\rangle$ na dostatečně mnoho podintervalů. Stejný výsledek (za předpokladu omezenosti druhé derivace funkce f) dostaneme i pro lichoběžníkové pravidlo.

Závěr: V letošním seriálu jsme se zabývali některými elementy numerické matematiky. Mohl sis všimnout, že je to ta část matematiky, která nastupuje v okamžiku, když chceme zjistit číselné výsledky příkladů vzešlých z různých odvětví praxe. Je to proto důležitá část matematiky. Výsledky uvádí sice pouze přibližně, ale to není důvod nad ní ohrnovat nos. Málokterý příklad z praxe má totiž přesný výsledek. Navíc, má-li úloha přesný výsledek rovný například číslu π, stále si toto číslo člověk představí jen jako 3,14 a malý kousek.

Řešíme-li složitější úlohy z praxe (fyzikální, technické, …) mohou být neznámými rovnic složitější matematické objekty než jen čísla — například funkce, množiny v prostoru, … , numerická matematika i v tomto případě rozvinula bezpočet metod, jak úlohy řešit. Pokud chceme tyto problémy řešit tak, abychom dostali výsledky uspokojující lidi z praxe, již se bez prostředků této partie matematiky neobejdeme. Nezaslouží si proto žádné opovržení, vždyť pomáhá stavět mosty, letadla, turbíny, vlaky, auta, domy, ponorky, …