Numerické řešení nelineárních rovnic

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

http://math.feld.cvut.cz/nemecek/nummet.html

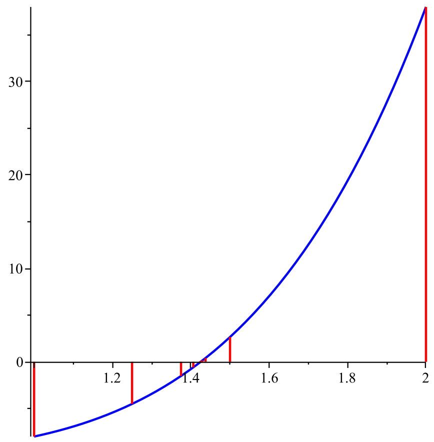
16. listopadu 2018

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.

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

- 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 $\overline{x} = x_i$.



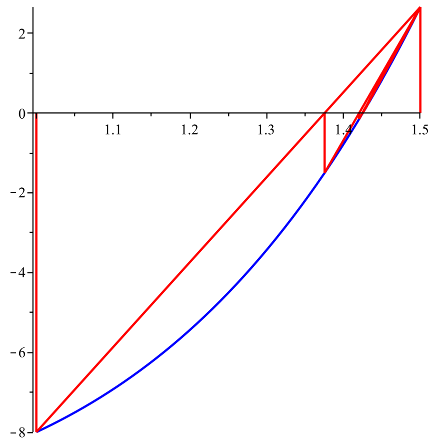
Podmínka ukončení: $\dfrac{b_i - a_i}{2} \le \varepsilon$

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

Interval $\langle a_i, b_i\rangle$ rozdělíme v poměru $\dfrac{|f(a_i)|}{|f(b_i)|}$:

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

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



Typicky se jeden krajní bod intervalu nemění (např. pokud f'' nemění znaménko).

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

$$\lim_{i\to\infty} (b_i - a_i) \in \{|\overline{x} - a_j|, |\overline{x} - b_j| : j \in \mathbb{N}_0\}$$

Podmínka ukončení: $|f(x_i)| \leq \delta$

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

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

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

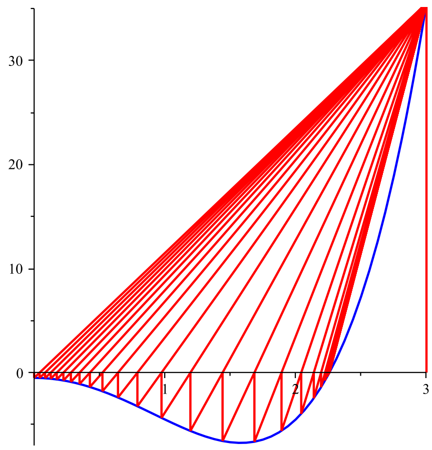
$$\exists m_1 > 0\ \forall x \in I(x_i, \overline{x}) : m_1 \leq |f'(x)|\,.$$

Pak

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

Větu nelze použít, neexistuje-li derivace nebo je-li kořene násobný (metoda stále může být použitelná).

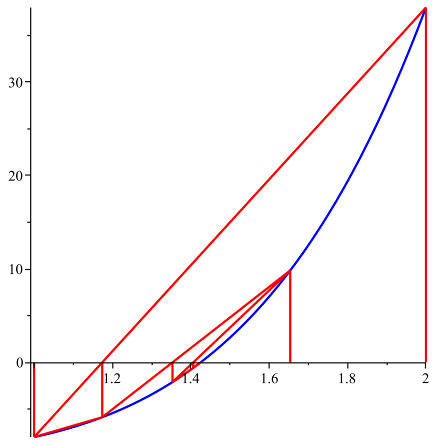
Metoda regula falsi konverguje rychleji, pokud zadaná funkce je (v okolí kořene) přibližně lineární.



Modifikace metody regula falsi: pro další výpočet vždy použijeme 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: $\quad |f(x_i)| \le \delta \quad$ nebo $\quad |x_i - x_{i-1}| \le \eta$

Konvergence bývá rychlejší, ale není zaručena.

Metody

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

Tečna 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: $\quad |f(x_i)| \le \delta \quad$ nebo $\quad |x_i - x_{i-1}| \le \eta$.

Konvergence bývá rychlejší, ale není zaručena.

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:

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

Pokud lze najít odhady

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

pak přechodem k absolutním hodnotám dostaneme

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

Věta: 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

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

Důsledek: Při splnění podmínky ukončení $|x_i - x_{i-1}| \leq \eta$ 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.
Není zaručena. Metoda může divergovat zejména při špatném počátečním odhadu.

Předpoklad: f má spojitou druhou derivaci 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

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

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

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

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

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

Definice: Nechť metoda řešení rovnice $f(x) = 0$ dává za výsledek posloupnost aproximací x_i, $i \in \mathbb{N}$, konvergující ke kořeni $\overline{x}$. Pokud existuje

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

nazývá se **řád metody**.

Poznámka: Vyneseme-li body $(|\overline{x} - x_i|, |\overline{x} - x_{i-1}|)$ v logaritmických souřadnicích, má řád metody význam směrnice asymptoty v $(-\infty, -\infty)$.
Konvergence metody je možná pouze pro $p \geq 1$; pro $p = 1$ může nastat jen tehdy, je-li

$$\lim_{i\to\infty} \frac{|\overline{x} - x_i|}{|\overline{x} - x_{i-1}|}$$

nejvýše 1, zaručena je, pokud tato limita je ostře menší než 1.

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

$$L(r) := \lim_{i\to\infty} \frac{|\overline{x} - x_i|}{|\overline{x} - x_{i-1}|^r} \tag{2}$$

- je 0 pro $0 < r < p$,
- je ∞ pro $r > p$,
- může (ale nemusí) existovat a být konečná a nenulová pouze pro $r = p$.

Důkaz: Limitu zlogaritmujeme:

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

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)

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

- Pro $0 < r < p$ má závorka kladnou limitu, $\ell(r) = -\infty$, což odpovídá $L(r) = 0$.
- Pro $r > p$ má závorka zápornou limitu, $\ell(r) = \infty$, což odpovídá $L(r) = \infty$.
- Pro $r = p$ má závorka nulovou limitu; může existovat konečná limita $\ell(r)$, v tom případě je $L(r)$ kladná a konečná.

(Zpětně vidíme, že předpoklady o existenci limit součtů a součinů nenarušily platnost výsledků.)

Poznámka: Řád metody se obvykle zavádí jako takové r, pro které limita (2) 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: Nechť metoda řešení rovnice $f(x) = 0$ dává za výsledek posloupnost aproximací x_i, $i \in \mathbb{N}$, konvergující ke kořeni $\overline{x}$ a

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

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:

$$\frac{\ln|x_i - x_{i-1}|}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|} = \frac{\ln\left(|\overline{x} - x_{i-1}|\,\frac{|x_i - x_{i-1}|}{|\overline{x} - x_{i-1}|}\right)}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|} = 1 + \frac{\ln\frac{|x_i - x_{i-1}|}{|\overline{x} - x_{i-1}|}}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|}. \tag{3}$$

V čitateli je výraz

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

v němž absolutní hodnota členu $\dfrac{\overline{x} - x_i}{\overline{x} - x_{i-1}}$ konverguje ke $q < 1$. Pro libovolné $\varepsilon \in (0, 1-q)$ a dostatečně velká i je

$$0 < 1 - q - \varepsilon \le \left|1 - \frac{\overline{x} - x_i}{\overline{x} - x_{i-1}}\right| \le 1 + q + \varepsilon < 2.$$

Logaritmus tohoto čísla je omezený a v (3) ho dělíme $\ln|\overline{x} - x_{i-1}| \to -\infty$, limita zlomku je 0 a celého výrazu 1. Stejně dokážeme, že

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

a dostaneme

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

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

Věta: 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:

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

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

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

Poslední člen konverguje ke konstantě $c = \ln \dfrac{|f''(\overline{x})|}{2\,|f'(\overline{x})|} \in (0, \infty)$, ostatní k $-\infty$, takže

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\ln|\overline{x} - x_i|}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|} = 2 - \lim_{i\to\infty} \frac{c}{\ln|\overline{x} - x_{i-1}|} = 2\,.$$

Věta: 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.

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.

Rovnici $f(x) = 0$ převedeme na ekvivalentní tvar $\varphi(x) = x$,
např. $\varphi(x) = f(x) + x$

Počáteční odhad x_0,

$$x_i = \varphi(x_{i-1})\,.$$

Podmínka ukončení:

$$|x_i - x_{i-1}| < \eta\,.$$

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

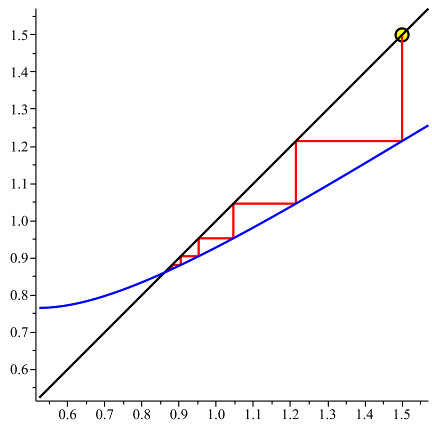
Důkaz:

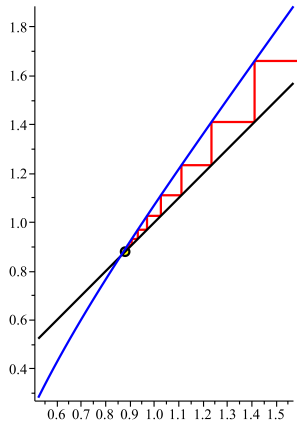
$$\varphi(\tilde{x}) = \varphi\Big(\lim_{i\to\infty} x_i\Big) = \lim_{i\to\infty} \varphi(x_i) = \lim_{i\to\infty} x_{i+1} = \lim_{i\to\infty} x_i = \tilde{x}\,.$$

Hledáme nejmenší kladné řešení rovnice $f(x) = 0$, kde $f(x) = x - \operatorname{cotg} x$.

$f(\frac{\pi}{4}) = \frac{\pi}{4} - 1 < 0, \quad f(\frac{\pi}{2}) = \frac{\pi}{2} > 0 \quad \Longrightarrow \quad \overline{x} \in (\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2})$

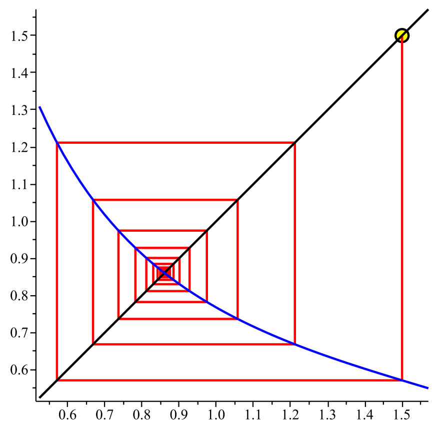
Zvolíme $\varphi(x) = \lambda f(x) + x$, kde $\lambda \neq 0$; podmínka ukončení pro $\eta = 0.001$.
Vyzkoušíme $\lambda \in \{-0.2, 0.2, -0.65, -0.8\}$.

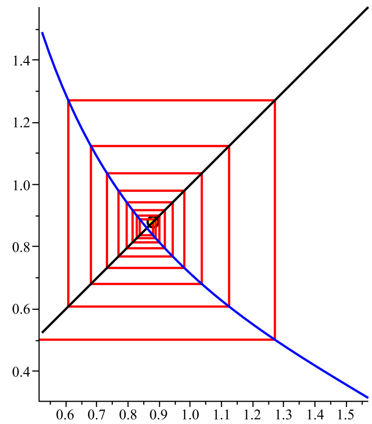




$x_{i+1} = 0.8\,x_i + 0.2\operatorname{cotg} x_i$,
$x_0 = 1.5$,
konverguje monotónně

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

Definice: 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: (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:

$$|\varphi(u) - \varphi(v)| = \left| \int_v^u \varphi'(x)\,dx \right| \leq \int_v^u |\varphi'(x)|\,dx \leq \int_v^u q\,dx = q \cdot |u - v| \,.$$

Věta: (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:

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

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

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

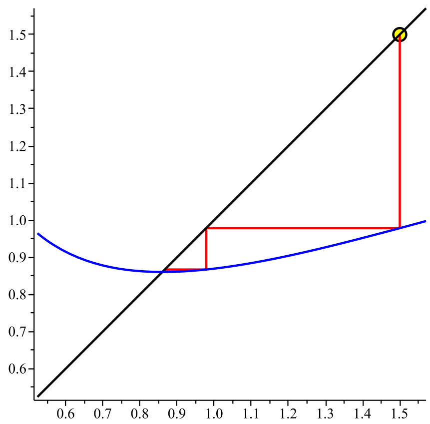
kde $\lambda \neq 0$ a

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

je malá.

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

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



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

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

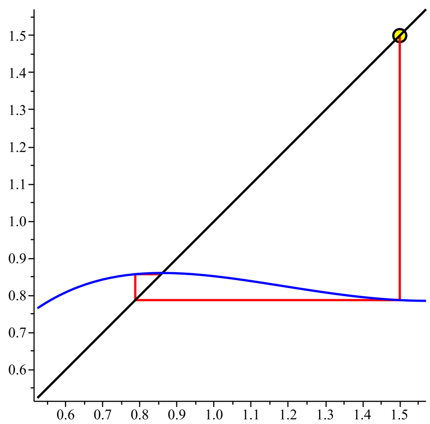
Nápad: V každém kroku zvolíme v jiný koeficient λ_i tak, aby $\varphi'(x_i) = 0$, tj.

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

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.



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

- **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.
- 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.

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

Tvrzení: 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.

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

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

Věta: (Odhad polohy kořenů polynomu) Všechny (komplexní) kořeny rovnice

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

mají absolutní hodnotu nejvýše

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

Metoda bisekce a metoda regula falsi jsou závislé na úplném uspořádání reálných čísel $\implies$ 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.

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.