Numerické riešenie nelineárnych rovníc

V tejto kapitole sa budeme zaoberať určovaním reálnych koreňov rovnice

$$f(x) = 0, \tag{1}$$

kde f je reálna funkcia reálnej premennej.
Číslo α, pre ktoré $f(\alpha) = 0$, nazývame koreňom rovnice $f(x) = 0$. Ak je funkcia f polynómom, nazývame rovnicu $f(x) = 0$ algebrickou rovnicou.
Na riešenie nelineárnych rovníc sú vypracované špeciálne metódy. Avšak u väčšiny rovníc dokážeme vypočítať iba približnú hodnotu koreňa α. Ak hľadáme koreň so zadanou presnosťou ε, znamená to, že chceme nájsť také x_n, že $|x_n - \alpha| < \varepsilon$.
Pri riešení rovnice (1) je vhodný nasledujúci postup:

1. Určíme počet koreňov rovnice pomocou grafického znázornenia.
2. Pre každý koreň α_i určíme interval (a_i, b_i) taký, že $\alpha_i \in (a_i, b_i)$ (separujeme korene), pričom $\alpha_i \in (a_i, b_i)$ je jediný koreň v intervale (a_i, b_i).
3. Použijeme približné metódy na výpočet koreňov.
4.
    - Ak je daná presnosť ε, proces ukončíme, keď je daná presnosť dosiahnutá.
    - Ak je daný počet iterácií, urobíme odhad absolútnej chyby vypočítaného koreňa.

Veta (Bolzanova)

Nech $A \subseteq \mathbb{R}$ a funkcia $f : A \to \mathbb{R}$ je spojitá na intervale $\langle a, b\rangle \subset A$, pričom platí $f(a) \cdot f(b) < 0$. Potom existuje aspoň jedno číslo $c \in (a, b)$ také, že $f(c) = 0$.

Dôsledok

Nech pre x_n platí

$$f(x_n - \varepsilon) \cdot f(x_n + \varepsilon) < 0.$$

Potom sa v intervale $(x_n - \varepsilon, x_n + \varepsilon)$ nachádza koreň α, teda x_n je riešenie úlohy s presnosťou ε. Tento test obyčajne nazývame $\pm\varepsilon$-test.

Poznámka. Rovnica $f(x) = 0$ môže mať v intervale (a, b) nulový bod aj v prípade, keď $f(a) \cdot f(b) > 0$. V tomto prípade je počet koreňov v intervale (a, b) párny.

Príklad

Rovnica $x^2 - 4 = 0$ má v intervale $(-3; 3)$ korene -2, 2, hoci $f(-3) \cdot f(3) > 0$.

Odhad chyby

Veta

Nech α je presná hodnota a x_n približná hodnota koreňa rovnice (1). Nech obe tieto hodnoty ležia v intervale (a, b) a $|f'(x)| \geq m > 0$ pre všetky $x \in \langle a, b \rangle$. Potom platí odhad

$$|x_n - \alpha| \leq \frac{|f(x_n)|}{m}. \tag{2}$$

Metóda polovičného delenia intervalu (bisekcie)

Predpokladajme, že rovnica $f(x) = 0$ má práve jeden koreň α v intervale (a, b). Definujme postupnosť intervalov $\langle a_n, b_n \rangle$, $n = 1, 2, \ldots$ predpisom:

1. $\langle a_0, b_0 \rangle = \langle a, b \rangle$.
2. Nech je definovaný interval $\langle a_n, b_n \rangle$, pričom $f(a_n) \cdot f(b_n) < 0$. Nech
$$c_n = (a_n + b_n)/2. \tag{3}$$
3. Ak je $f(c_n) = 0$, potom je c_n koreňom rovnice. Ak je $f(c_n) \neq 0$ a $f(a_n) \cdot f(c_n) < 0$, položíme $a_{n+1} = a_n$, $b_{n+1} = c_n$. Ak platí opačná nerovnosť, t. j. $f(a_n) \cdot f(c_n) > 0$, položíme $a_{n+1} = c_n$, $b_{n+1} = b_n$. Ak má postupnosť (c_n) konečný počet členov, jej posledný člen je koreňom rovnice $f(x) = 0$. Ak je postupnosť (c_n) nekonečná, potom má limitu a platí
$$\lim_{n \to \infty} c_n = \alpha.$$

   Pre odhad absolútnej chyby koreňa α platí $|c_n - \alpha| < \frac{b-a}{2^{n+1}}$.

Ak máme vypočítať koreň α s presnosťou $\varepsilon > 0$, ukončíme proces delenia intervalu, ak $|b_n - a_n| < 2\varepsilon$ a za aproximáciu koreňa α vezmeme číslo $(a_n + b_n)/2$.

Príklad

Metódou polovičného delenia intervalu s presnosťou 0,005 vypočítajte reálny koreň rovnice $x^3 - x - 1 = 0$.

Máme $f(x) = x^3 - x - 1$. Naprv uskutočníme grafický odhad koreňov. Nech $h(x) = x + 1$, $g(x) = x^3$. Grafy týchto funkcií majú jeden spoločný bod, ktorého x-ová súradnica je z intervalu $(1; 2)$. Skutočne $f(1) \cdot f(2) < 0$, čo znamená, že v tomto intervale leží reálny koreň danej rovnice.
Teda $a_0 = 1$, $b_0 = 2$.

n	$a_n\ (f(a_n))$	$b_n\ (f(b_n))$	$c_n\ (f(c_n))$	$f(a_n) \cdot f(c_n)$
0	1 (–)	2 (+)	1,5 (+)	–
1	1 (–)	1,5 (+)	1,25 (–)	+
2	1,25 (–)	1,5 (+)	1,375 (+)	–
3	1,25 (–)	1,375 (+)	1,3125 (–)	+
4	1,3125 (–)	1,375 (+)	1,34375 (+)	–
5	1,3125 (–)	1,34375 (+)	1,32813 (+)	–
6	1,3125 (–)	1,32813 (+)	1,32032 (–)	+
7	1,32032 (–)	1,32813 (+)	1,32423	

Pretože $|1{,}32813 - 1{,}32032| < 2 \cdot 0{,}005$ a $f(1{,}32813) \cdot f(1{,}32032) < 0$, môžeme aproximovať koreň pomocou $c_6 = 1,32423$. Teda $\alpha \approx 1,32423$.

Newtonova metóda

Predpokladajme, že $\langle a, b \rangle$ je interval separácie, teda platí $f(a) \cdot f(b) < 0$ a v intervale $\langle a, b \rangle$ leží práve jeden koreň rovnice $f(x) = 0$.
Newtonovu metódu, nazývanú tiež metóda dotyčníc, môžeme použiť na riešenie rovnice $f(x) = 0$, ak je funkcia dvakrát diferencovateľná a buď konvexná na celom intervale $\langle a, b \rangle$ alebo konkávna na celom intervale $\langle a, b \rangle$.
Rovnica dotyčnice ku grafu funkcie $f(x)$ v bode x_n: $y - f(x_n) = f'(x_n)(x - x_n)$.
Ďalšiu aproximáciu x_{n+1} určíme ako priesečník dotyčnice s osou x (t. j. pri dosadení x_{n+1} za x položíme súčasne $y = 0$). Dostávame

$$-f(x_n) = f'(x_n)(x_{n+1} - x_n).$$

a z toho rekurentný vzorec

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

Veta

Nech na intervale $\langle a, b\rangle$ sú splnené nasledujúce podmienky:

1. $f(a) \cdot f(b) < 0$.
2. $f''(x)$ nemení znamienko na intervale $\langle a, b\rangle$.
3. Pre štartovací bod $x_0 \in \langle a, b\rangle$ platí $f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0$.

Potom postupnosť daná vzťahom

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

konverguje ku koreňu α rovnice $f(x) = 0$, teda platí $\lim\limits_{n\to\infty} x_n = \alpha$.

Ak navyše platí podmienka

4. $f'(x)$ nemení znamienko na intervale $\langle a, b\rangle$,

   môžeme na odhad presnosti používať vzťah $|x_n - \alpha| \leq \frac{|f(x_n)|}{m}$, kde $m \leq \min\limits_{x\in\langle a,b\rangle} |f'(x)|$.

STOP TEST:

1. Ak platí podmienka **4** a $\frac{|f(x_n)|}{m} < \varepsilon$, potom $\alpha \approx x_n$.
2. Ak neplatí podmienka **4** a $f(x_n - \varepsilon) \cdot f(x_n + \varepsilon) < 0$, potom $\alpha \approx x_n$.

Príklad

Newtonovou metódou vypočítajme reálny koreň rovnice $x^3 - x - 1 = 0$ s presnosťou 0,005.

Z predchádzajúceho už vieme, že $\alpha \in \langle 1; 2\rangle$. Bisekciou môžeme zúžiť tento interval. Keďže $f(1) \cdot f(1,5) < 0$, dostávame $\alpha \in \langle 1; 1{,}5\rangle$.
Keďže $f'(x) = 3\,x^2 - 1 > 0$ pre $x \in \langle 1; 1{,}5\rangle$, na intervale separácie je $m = \min\limits_{x \in \langle 1;1{,}5\rangle} |f'(x)| = 2$. Pre druhú deriváciu platí $f''(x) = 6\,x > 0$ na uvažovanom intervale a $f(1{,}5) > 0$, teda Newtonova metóda bude konvergovať k riešeniu rovnice z bodu $x_0 = 1{,}5$.

n	x_n	$f(x_n)$	$f'(x_n)$	$\frac{\lvert f(x_n)\rvert}{m} = \frac{\lvert f(x_n)\rvert}{2}$
0	1,5	$0,875$	$5,75$	$0,4375 > \varepsilon$
1	1,34783	$0,10068$	$4,44990$	$0,05034 > \varepsilon$
2	1,32520	$0,00205$	$4,26846$	$0,001025 < \varepsilon$

Keďže

$$|x_2 - \alpha| \leq \frac{|f(x_2)|}{m} < \frac{0{,}0021}{2} = 0{,}00105,$$

už po druhom kroku sme dosiahli požadovanú presnosť. Teda $\alpha \approx 1,32520$.

Metóda prostej iterácie

Hľadáme riešenie rovnice $f(x) = 0$ v intervale $\langle a, b\rangle$. Rovnicu $f(x) = 0$ vieme vždy prepísať na tvar

$$x = \varphi(x) \tag{4}$$

tak, aby platilo

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq \lambda |x - y|$$

pre $x, y \in \langle a, b\rangle$ a zároveň $\varphi(x), \varphi(y) \in \langle a, b\rangle$. Ak $\lambda \in (0, 1)$, potom λ sa nazýva koeficient kontraktívnosti. Ak $\lambda > 1$, bisekciou zmenšíme interval $\langle a, b\rangle$ tak, aby na novom intervale platilo $\lambda < 1$. Potom $\varphi : \langle a, b\rangle \to \mathbb{R}$ je kontraktívna funkcia na $\langle a, b\rangle$.

Nech funkcia φ je na $\langle a, b\rangle$ diferencovateľná. Potom podľa Lagrangeovej vety o strednej hodnote existuje $\xi \in (a, b)$ také, že

$$\varphi(x) - \varphi(y) = \varphi'(\xi)(x - y), \text{resp.} \frac{\varphi(x) - \varphi(y)}{x - y} = \varphi'(\xi)$$

Ak existuje kladné číslo M také, že $M = \max\limits_{x \in \langle a, b\rangle} |\varphi'(x)|$, tak pre $x \in \langle a, b\rangle$ platí

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq M|x - y|.$$

Ak je číslo $M < 1$, môžeme ho zobrať za koeficient kontraktívnosti, teda $\lambda = M$.

Veta

Nech $\varphi : \langle a, b\rangle \to \langle a, b\rangle$ je spojitá funkcia na $\langle a, b\rangle$. Nech existuje spojitá derivácia φ' na intervale (a, b) a číslo λ, $0 \le \lambda < 1$ také, že $|\varphi'(x)| \le \lambda$ pre ľubovoľné $x \in (a, b)$.
Potom iteračný proces

$$x_{n+1} = \varphi(x_n) \quad \text{pre} \quad i = 0, 1, \ldots \tag{5}$$

konverguje k jedinému koreňu α rovnice $x = \varphi(x)$ a platí odhad

$$|x_n - \alpha| \le \frac{\lambda}{1-\lambda}|x_n - x_{n-1}|, \quad n = 1, 2, \ldots. \tag{6}$$

Zo vzťahu (6) vyplýva, že iteračný proces pri zadanej presnosti ε ukončíme, keď platí $|x_n - x_{n-1}| < \frac{1-\lambda}{\lambda} \cdot \varepsilon$. Potom $\alpha \approx x_n$.

Príklad

Prostou iteračnou metódou vypočítajme reálny koreň rovnice $x^3 - x - 1 = 0$ s presnosťou 0,005.

Rovnica $x^3 - x - 1 = 0$ má jediný reálny koreň $\alpha \in (1;2)$. Danú rovnicu môžeme zapísať v tvare

$$x = \sqrt[3]{x+1} = \varphi(x), \text{teda } \varphi(x) = \sqrt[3]{x+1}$$

Dostávame

$$|\varphi'(x)| = |\frac{1}{3}(x+1)^{-2/3}| = \frac{1}{3\sqrt[3]{(x+1)^2}}, \qquad \max_{x\in\langle 1,2\rangle} |\varphi'(x)| = \frac{1}{3\sqrt[3]{4}} \approx 0,21.$$

Na určenie približnej hodnoty koreňa α použijeme iteračný proces $x_{n+1} = \sqrt[3]{x_n + 1}, \quad i = 0, 1, \ldots$. Za začiatočnú hodnotu zvoľme napríklad $x_0 = 1{,}5$. Iteračný proces ukončíme, keď $|x_n - x_{n-1}| < \frac{1-\lambda}{\lambda} \cdot \varepsilon \approx 0,0188$.
Dostávame tieto iterácie:

n	x_n	$\lvert x_n - x_{n-1}\rvert$
0	1,5	
1	1,3572	$0,1428$
2	1,3308	$0,0264$
3	1,3259	$0,0049 < 0,0188$

Keďže $|x_n - x_{n-1}| < \frac{1-\lambda}{\lambda} \cdot \varepsilon$, môžeme s presnosťou aspoň 0,005 aproximovať koreň rovnice $x^3 - x - 1 = 0$ pomocou x_3. Teda $\alpha \approx 1{,}3259$.

Riešenie sústav nelineárnych rovníc

Budeme sa zaoberať niektorými numerickými metódami riešenia sústavy n nelineárnych rovníc o n neznámych

$$\overline{f}(\overline{x}) = \overline{0}, \tag{7}$$

kde $\overline{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n)^T$ je vektorová funkcia n nezávislých premenných x_1, x_2, ..., x_n. Túto sústavu môžeme v zložkách zapísať v tvare

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Budeme predpokladať, že vektorová funkcia $\overline{f}$ je definovaná na neprázdnej množine $G \subset \mathbb{R}^n$. Riešiť sústavu (7) znamená nájsť všetky také body $\overline{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)^T \in G$, pre ktoré platí $\overline{f}(\overline{\alpha}) = \overline{0}$. Bod $\overline{\alpha}$ nazývame riešením uvedenej sústavy. Separáciou vektora $\overline{\alpha}$ rozumieme určenie takej ohraničenej, uzavretej oblasti $D \subset G$, do ktorej patrí jediné riešenie $\overline{\alpha}$.

Newtonova metóda

Označme $\overline{f}'$ tzv. Jacobiovu maticu zobrazenia $\overline{f}$, potom

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

Ak pre každé $\overline{x} \in D$, je $\det(\overline{f}'(\overline{x})) \neq 0$, má daná sústava rovníc jediné riešenie. Ak $\overline{x}^{(k)}$ je k-tá iterácia vektora $\overline{\alpha}$, potom vektor $\overline{x}^{(k+1)}$ nájdeme použitím Taylorovej vety pre funkciu n premenných.

Pre názornosť uvedieme postup konštrukcie pre $n = 2$. Riešme túto sústavu rovníc

$$f_1(x, y) = 0,$$

$$f_2(x, y) = 0.$$

Použitím Taylorovej vety dostávame

$$f_i(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}) = f_i(x^{(k)}, y^{(k)}) +$$

$$+ \frac{\partial f_i(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial x}(x^{(k+1)} - x^{(k)}) + \frac{\partial f_i(\overline{x}^{(k)})}{\partial y}(y^{(k+1)} - y^{(k)}) + R_i,$$

kde $i = 1, 2$. V každej z rovníc zanedbáme zvyšky R_1, R_2 a $f_i(x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)})$. Ďalšiu aproximáciu dostaneme riešením sústavy lineárnych rovníc

$$\frac{\partial f_1(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial x}(x^{(k+1)} - x^{(k)}) + \frac{\partial f_1(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial y}(y^{(k+1)} - y^{(k)}) = -f_1(x^{(k)}, y^{(k)}),$$

$$\frac{\partial f_2(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial x}(x^{(k+1)} - x^{(k)}) + \frac{\partial f_2(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial y}(y^{(k+1)} - y^{(k)}) = -f_2(x^{(k)}, y^{(k)}).$$

Dostávame sústavu 2 lineárnych rovníc s neznámymi $(x^{(k+1)} - x^{(k)})$ a $(y^{(k+1)} - y^{(k)})$, ktorú môžeme riešiť napr. Cramerovým pravidlom.

Označme

$$W_1^{(k)} = \begin{vmatrix} -f_1(x^{(k)}, y^{(k)}) & \dfrac{\partial f_1(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial y} \\ -f_2(x^{(k)}, y^{(k)}) & \dfrac{\partial f_2(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial y} \end{vmatrix}, \quad W_2^{(k)} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial f_1(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial x} & -f_1(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ \dfrac{\partial f_2(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial x} & -f_2(x^{(k)}, y^{(k)}) \end{vmatrix},$$

$$W^{(k)} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial f_1(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial x} & \dfrac{\partial f_1(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial y} \\ \dfrac{\partial f_2(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial x} & \dfrac{\partial f_2(x^{(k)}, y^{(k)})}{\partial y} \end{vmatrix}.$$

Potom

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = \frac{W_1^{(k)}}{W^{(k)}} \Rightarrow x^{(k+1)} = x^{(k)} + \frac{W_1^{(k)}}{W^{(k)}},$$

$$y^{(k+1)} - y^{(k)} = \frac{W_2^{(k)}}{W^{(k)}} \Rightarrow y^{(k+1)} = y^{(k)} + \frac{W_2^{(k)}}{W^{(k)}}.$$

Iteračný proces ukončíme, keď

$$\|\overline{x}^{(k+1)} - \overline{(k)}\| = \max\{|x^{(k+1)} - x^{(k)}|, |y^{(k+1)} - y^{(k)}|\} < \varepsilon.$$

Príklad

Urobme 3 iterácie Newtonovej metódy z bodu $(x^{(0)}, y^{(0)}) = (0,0)$ *a určme chybu pre sústavu nelineárnych rovníc*

$$x^2 + 4x - y^2 - 2y - 1 = 0,$$
$$x^2 + 5y - 4 = 0.$$

Riešenie. Máme $f_1(x,y) = x^2 + 4x - y^2 - 2y - 1, \quad f_2(x,y) = x^2 + 5y - 4.$

$$W(x,y) = \begin{vmatrix} 2x+4 & -2y-2 \\ 2x & 5 \end{vmatrix}, \quad W_1(x,y) = \begin{vmatrix} -x^2 - 4x + y^2 + 2y + 1 & -2y-2 \\ -x^2 - 5y + 4 & 5 \end{vmatrix}$$

$$W_2(x,y) = \begin{vmatrix} 2x+4 & -x^2 - 4x + y^2 + 2y + 1 \\ 2x & -x^2 - 5y + 4 \end{vmatrix}.$$

Pre $x^{(0)} = 0, \; y^{(0)} = 0$ dostávame

$$W^{(0)} = \begin{vmatrix} 4 & -2 \\ 0 & 5 \end{vmatrix} = 20, \quad W_1^{(0)} = \begin{vmatrix} 1 & -2 \\ 4 & 5 \end{vmatrix} = 13, \quad W_2^{(0)} = \begin{vmatrix} 4 & 1 \\ 0 & 4 \end{vmatrix} = 16.$$

Dostávame
$x^{(1)} = 0 + \frac{13}{20} = 0,65;$
$y^{(1)} = 0 + \frac{16}{20} = 0,8.$

k	$x^{(k)}$	$y^{(k)}$
0	0	0
1	0,65	0,8
2	0,63609	0,71911
3	0,637108	0,71881

Chyba je
$\max\{|x^{(3)} - x^{(2)}|, |y^{(3)} - y^{(2)}|\} =$
$\max\{0,001018;\; 0,0003\} =$
$0,001018.$

Aproximácia funkcií

V tejto kapitole sa budeme zaoberať aproximáciou, t. j. náhradou funkcie $f : A \to \mathbb{R}$ pomocou funkcie $g : A \subset B \to \mathbb{R}$. Funkciu g zvolíme podľa toho, čo vieme o funkcii f. Funkcia f môže byť zadaná napríklad funkčnými hodnotami v $n+1$ bodoch alebo je príliš zložitá a na riešenie danej úlohy (napríklad výpočet určitého integrálu) nevhodná. Funkciu g obyčajne hľadáme v tvare

$$g(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i \cdot g_i(x).$$

Za funkcie g_i, $i = 0, 1, \dots, n$ berieme väčšinou funkcie 1, x, x^2, x^3, ..., alebo funkcie 1, $\cos \frac{\pi x}{l}$, $\sin \frac{\pi x}{l}$, ..., $\cos \frac{n\pi x}{l}$, $\sin \frac{n\pi x}{l}$. Koeficienty c_i určujeme na základe nejakého vhodného kritéria. Podľa voľby kritéria dostávame určitý typ aproximácie. Budeme sa zaoberať týmito typmi aproximácie:

a) Interpolácia pomocou Lagrangeovho polynómu.

b) Aproximácia metódou najmenších štvorcov.

Interpolácia

Nech funkcia f je zadaná svojimi funkčnými hodnotami v $n+1$ bodoch, t. j. tabuľkou hodnôt

x	x_0	x_1	x_2	$\ldots$	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$\ldots$	$f(x_n)$

Základnou úlohou interpolácie pomocou polynómov je určiť polynóm P najmenšieho možného stupňa tak, aby pre $i = 0, 1, \ldots, n$ platilo

$$f^{(j)}(x_i) = P^{(j)}(x_i), \quad j = 0, 1, \ldots, r_i - 1.$$

Budeme sa zaoberať aproximáciami, kde $r_i = 1$ pre $i = 0,\ 1,\ \ldots,\ n$, t. j. hľadáme polynóm P najviac n-tého stupňa s vlastnosťou

$$f(x_i) = P(x_i), \quad i = 0, 1, \ldots, n. \tag{8}$$

Lagrangeov interpolačný polynóm

Funkciu f zadanú v $n+1$ bodoch aproximujeme pomocou polynómu tvaru

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \cdot g_i(x) \tag{9}$$

tak, aby platilo

$$L_n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n. \tag{10}$$

Body x_i nazývame uzlovými bodmi.

Funkcie g_i zvolíme tak, aby platilo $g_i(x_j) = \begin{cases} 1, & \text{pre } i = j, \\ 0, & \text{pre } i \neq j. \end{cases}$ Keďže $g_i(x_j) = 0$ pre $j \neq i$, dostávame

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

kde C_i je reálna konštanta, ktorú vypočítame z podmienky $g_i(x_i) = 1$, t. j.

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

Potom polynóm $L_n(x)$ má tvar

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{(x - x_0)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n)}{(x_i - x_0)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)} \cdot f(x_i).$$

Príklad 1

Nahraďte funkciu pomocou Lagrangeovho polynómu a vypočítajte približnú hodnotu funkcie f v bode $x = 3$, ak sú zadané hodnoty funkcie $f : \langle 1, 4\rangle \to \mathbb{R}$ tabuľkou:

x	1	2	4
$f(x)$	2	3	11

Pre $n = 2$ máme

$$L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \cdot f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \cdot f(x_1) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \cdot f(x_2).$$

Vzhľadom na zadané hodnoty dostávame

$$L_2(x) = \frac{(x - 2)(x - 4)}{(1 - 2)(1 - 4)} \cdot 2 + \frac{(x - 1)(x - 4)}{(2 - 1)2 - 4)} \cdot 3 + \frac{(x - 1)(x - 2)}{(4 - 1)(4 - 2)} \cdot 11 = x^2 - 2x + 3.$$

Pre $x = 3$ dostávame

$$L_2(3) = \frac{(3-2)(3-4)}{(1-2)(1-4)} \cdot 2 + \frac{(3-1)(3-4)}{(2-1)(2-4)} \cdot 3 + \frac{(3-1)(3-2)}{(4-1)(4-2)} \cdot 11 = 6.$$

Metóda najmenších štvorcov

Nech namerané tabuľkové hodnoty (x_i, y_i), $i = 0, 1, \dots, n$ sú vyjadrením závislosti x a y, kde x_i sú zvolené hodnoty pri ktorých sme robili merania a y_i je nameraná hodnota funkcie $f(x)$ v bode x_i, $i = 0, 1, \dots, n$. O závislosti medzi x a y predpokladajme, že má tvar

$$y = \varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_k\varphi_k(x),$$

kde $a_0, a_1, \dots, a_k \in \mathbb{R}$ sú neznáme konštanty.
Z množiny všetkých lineárnych funkcií

$$V_k = \{a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_k\varphi_k(x),\ a_i \in \mathbb{R}\}$$

chceme nájsť tú, ktorá najpresnejšie aproximuje funkciu zadanú pomocou tabuľky jej nameraných hodnôt. Určíme také reálne koeficienty a_0, a_1, $\dots$, a_k, pre ktoré je hodnota funkcie

$$S(a_0, a_1, \dots, a_k) = \sum_{i=0}^{n} [\varphi(x_i) - y_i]^2$$

minimálna. Koeficienty a_0, a_1, $\dots$, a_k určíme riešením sústavy rovníc

$$\frac{\partial S}{\partial a_j} = 0, \qquad j = 0, 1, \dots, k.$$

Odvodíme sústavu rovníc pre prípad $k = 1$, teda $\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x)$.

$$S(a_0, a_1) = \sum_{i=0}^{n} [a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) - y_i]^2,$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 2\sum_{i=0}^{n} [a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) - y_i] \cdot \varphi_0(x_i),$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 2\sum_{i=0}^{n} [a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) - y_i] \cdot \varphi_1(x_i).$$

Tieto parciálne derivácie sa rovnajú nule práve vtedy, ak platí:

$$a_0 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_0(x_i)\varphi_0(x_i) + a_1 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_1(x_i)\varphi_0(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i\varphi_0(x_i),$$

$$a_0 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_0(x_i)\varphi_1(x_i) + a_1 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_1(x_i)\varphi_1(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i\varphi_1(x_i).$$

Odvodíme sústavu rovníc pre prípad $k = 2$:

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + a_2\varphi_2(x_i)$$

$$S(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=0}^{n}[a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + a_2\varphi_2(x_i) - y_i]^2,$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 2\sum_{i=0}^{n}[a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + a_2\varphi_2(x_i) - y_i] \cdot \varphi_0(x_i),$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 2\sum_{i=0}^{n}[a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + a_2\varphi_2(x_i) - y_i] \cdot \varphi_1(x_i),$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_2} = 2\sum_{i=0}^{n}[a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + a_2\varphi_2(x_i) - y_i] \cdot \varphi_2(x_i).$$

Tieto parciálne derivácie sa rovnajú nule práve vtedy, ak platí:

$$a_0 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_0(x_i)\varphi_0(x_i) + a_1 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_1(x_i)\varphi_0(x_i) + a_2 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_2(x_i)\varphi_0(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i\varphi_0(x_i),$$

$$a_0 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_0(x_i)\varphi_1(x_i) + a_1 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_1(x_i)\varphi_1(x_i) + a_2 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_2(x_i)\varphi_1(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i\varphi_1(x_i),$$

$$a_0 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_0(x_i)\varphi_2(x_i) + a_1 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_1(x_i)\varphi_2(x_i) + a_2 \cdot \sum_{i=0}^{n} \varphi_2(x_i)\varphi_2(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i\varphi_2(x_i).$$

Príklad 3

Polynómom prvého a druhého stupňa aproximujme funkciu, danú tabuľkou

x_i	0,2	0,3	0,5	0,7	0,8	1	1,1
y_i	3,45	3,54	4,1	4,35	4,6	5,05	5,14

.

Uvažujme najprv aproximáciu pomocou lineárnej funkcie

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x.$$

Máme $\varphi_0 = 1$, $\varphi_1 = x$. Teoretická sústava rovníc má tvar

$$a_0 \sum_{i=0}^{n} 1 \cdot 1 + a_1 \sum_{i=0}^{n} 1 \cdot x_i = \sum_{i=0}^{n} 1 \cdot y_i,$$

$$a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i \cdot 1 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i \cdot x_i = \sum_{i=0}^{n} x_i \cdot y_i.$$

Po dosadení hodnôt z tabuľky dostávame

$$7a_0 + 4{,}6a_1 = 30{,}23,$$

$$4{,}6a_0 + 3{,}72a_1 = 21{,}231.$$

Riešením tejto sústavy je $a_0 = 3{,}03135$, $a_1 = 1{,}9588$, teda

$$\varphi(x) = 3{,}03135 + 1{,}9588x.$$

Podobne postupujeme pri aproximácii pomocou funkcie

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2.$$

Uvažujeme

$$\varphi_0 = 1,\ \varphi_1 = x,\ \varphi_2 = x^2.$$

Dostávame sústavu rovníc

$$a_0 \sum_{i=0}^{n} 1 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 = \sum_{i=0}^{n} y_i,$$

$$a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^3 = \sum_{i=0}^{n} x_i y_i,$$

$$a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^3 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^4 = \sum_{i=0}^{n} x_i^2 y_i.$$

Potom pre zadané tabuľkové hodnoty dostávame

$$7a_0 + 4{,}6a_1 + 3{,}72a_2 = 30{,}23,$$

$$4{,}6a_0 + 3{,}72a_1 + 3{,}42a_2 = 21{,}231,$$

$$3{,}72a_0 + 3{,}42a_1 + 3{,}186a_2 = 17{,}8265.$$

Riešením sústavy dostávame $a_0 = 3{,}4033$, $a_1 = 0{,}61756$, $a_2 = 0{,}9586$.
Potom $\varphi(x) = 3{,}4033 + 0{,}61756x + 0{,}9586x^2$.

Numerický výpočet určitého integrálu

Budeme sa zaoberať numerickými metódami výpočtu

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

kde $a < b$ sú reálne čísla a predpokladáme, že funkcia $f : \langle a, b\rangle \to \mathbb{R}$ je integrovateľná na $\langle a, b\rangle$. Interval $I = \langle a, b\rangle$ rozdelíme na n intervalov rovnakej dĺžky uzlovými bodmi

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b,$$

kde $x_i = x_0 + i \cdot h$, $i = 0, 1, \ldots, n$ a $h = \dfrac{x_n - x_0}{n} = \dfrac{b-a}{n}$ je konštantný krok. Nech pre prirodzené čísla s a n_1 platí $n = s \cdot n_1$. Budeme uvažovať len prípady $s = 1$, t. j. $n = n_1$ a $s = 2$, t. j. $n = 2\,n_1$. Z vlastností určitého integrálu dostávame

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_0}^{x_0+sh} f(x)\,\mathrm{d}x + \int_{x_0+sh}^{x_0+2sh} f(x)\,\mathrm{d}x + \cdots + \int_{x_0+(n_1-1)sh}^{x_n} f(x)\,\mathrm{d}x. \tag{11}$$

Uvedieme tzv. elementárne vzorce, vzťahujúce sa na interval $\langle x_0, x_0 + sh\rangle$. Vzorce sa dajú získať napríklad integrovaním interpolačných polynómov.

Lichobežníková metóda

Uvažujme prípad $s = 1$, teda interval $\langle x_0, x_0 + h\rangle = \langle x_0, x_1\rangle$. Na tomto intervale budeme aproximovať funkciu $f(x)$ Lagrangeovým polynómom prvého stupňa

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \cdot f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \cdot f(x_1).$$

$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x$ je teda nahradený obsahom lichobežníka so základňami $f(x_i)$, $f(x_{i+1})$ a výškou h, teda

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2} \cdot [f(x_i) + f(x_{i+1})].$$

Toto je elementárny vzorec tzv. lichobežníkovej metódy.
Súčtom elementárnych vzorcov dostávame:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx L(n) = \frac{h}{2} \cdot \left[f(a) + f(b) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right]. \qquad (12)$$

Horný odhad chyby je

$|R_L(n)| \leq \frac{b-a}{12} M_2 h^2$, resp. $|R_L(n)| \leq \frac{(b-a)^3 M_2}{12n^2}$, kde $M_2 \geq \max_{x\in\langle a,b\rangle} |f''(x)|$.

Simpsonova metóda

V prípade $s = 2$ (n je párne) bude interval $\langle x_0, x_0 + 2h\rangle = \langle x_0, x_2\rangle$. Ak na tomto intervale budeme aproximovať funkciu $f(x)$ Lagrangeovým polynómom druhého stupňa s uzlovými bodmi x_0, x_1 a x_2, dostaneme približnú hodnotu

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_{x_0}^{x_2} L_2(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\cdot[f(x_0) + 4\,f(x_1) + f(x_2)].$$

Toto je elementárny vzorec tzv. Simpsonovej metódy. Zovšeobecnenie:

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_{x_i}^{x_{i+2}} L_2(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\cdot[f(x_i) + 4\,f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})].$$

Sčítaním vyššie uvedených základných vzorcov dostávame

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx S(n) = \frac{h}{3}\cdot\left[f(a) + f(b) + 4\cdot\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1}) + 2\cdot\sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i})\right].$$

Označme M_4 horný odhad $|f^{(4)}(x)|$ na intervale $\langle a, b\rangle$: $M_4 \geq \max\limits_{x\in\langle a,b\rangle} |f^{(4)}(x)|$.

Horný odhady chyby pre Simpsonovu metódu pre krok h, resp. pre počet delení n:

$$|R_S(n)| \leq \frac{b-a}{180} M_4 h^4, \quad \text{resp.} \quad |R_S(n)| \leq \frac{(b-a)^5 M_4}{180 n^4}. \tag{13}$$

Príklad

Vypočítajme pomocou lichobežníkovej metódy a Simpsonovej metódy, s presnosťou $\varepsilon = 0{,}01$

$$\int_0^1 \mathrm{e}^{x^2}\,\mathrm{d}x.$$

Riešenie. Na určenie kroku h (počtu delení n) použijeme vzťahy (13). Pre $f(x) = \mathrm{e}^{x^2}$ je

$$\max_{0\le x\le 1} |f''(x)| \le 6\mathrm{e} = M_2, \quad \text{resp.} \quad \max_{0\le x\le 1} |f^{(4)}(x)| \le 76\mathrm{e} = M_4.$$

Po dosadení do vzťahov pre horné odhady a po porovnaní s presnosťou ε dostávame pre lichobežníkovú metódu $n > 11{,}66$ a pre Simpsonovu metódu $n > 3{,}27$.

Teda pre lichobežníkovú metódu môžeme zvoliť $n = 12$, čiže $h = 1/12$. Dostávame

$$L(12) = \int_0^1 \mathrm{e}^{x^2}\,\mathrm{d}x \approx \frac{1}{12}\left[\frac{\mathrm{e}^0 + \mathrm{e}^1}{2} + \mathrm{e}^{(1/12)^2} + \cdots + \mathrm{e}^{(11/12)^2}\right] \approx 1{,}4658.$$

Pre Simpsonovu metódu pri $n = 4$, $h = 0{,}25$ dostávame hodnotu

$$S(4) = \frac{0{,}25}{3}\left[\mathrm{e}^0 + \mathrm{e}^1 + 4(\mathrm{e}^{(0{,}25)^2} + \mathrm{e}^{(0{,}75)^2}) + 2\mathrm{e}^{(0{,}5)^2}\right] \approx 1{,}4637.$$