# NUMERICKÁ MATEMATIKA

WIKI SKRIPTUM FJFI [29. BŘEZNA 2024]

Obsah

# 1. Finitní metody

## 1.1. Přehled potřebných pojmů a vět.

**Definice 1.1.** (1) Vektorem rozumíme prvek prostoru $\mathbb{C}^{n,1}$.
Značení složek: $x_i^{(k)}$ je $i$-tá složka vektoru $\vec{x}^{(k)}$.
(2) Maticí typu $(m, n)$ rozumíme prvek prostoru $\mathbb{C}^{m,n}$.
Značení prvků: $[A]_{ij}$ je prvek v $i$-tém řádku a $j$-tém sloupci matice $A$.

**Definice 1.2.** Buď $A \in \mathbb{C}^{m,n}$. Potom matici $A^H = \bar{A}^T$ nazveme maticí hermitovsky sdruženou k matici A.

**Definice 1.3.** Buď $A \in \mathbb{C}^{n,n}$.
(1) Matice $A$ se nazývá normální, je-li $A^H A = AA^H$.
(2) Matice $A$ se nazývá hermitovská, je-li $A^H = A$.
(3) Matice $A$ se nazývá unitární, je-li $A^H A = I$.

**Definice 1.4.** (1) Hermitovská matice se nazývá symetrická, jsou-li všechny její prvky reálné.
(2) Unitární matice se nazývá ortogonální, jsou-li všechny její prvky reálné.

*Poznámka.* (1) Čtvercová matice $A$, která má všechny prvky reálné, je symetrická, právě když $A^T = A$.
(2) Čtvercová matice $A$, která má všechny prvky reálné, je ortogonální, právě když $A^T A = I$.
(3) Pojmy symetrické a ortogonální matice mají nepatrně jiný význam než loni: Tehdy byly tyto pojmy zavedeny pouze pro matice nad $\mathbb{R}$, nyní se však pohybujeme nad $\mathbb{C}$.

**Definice 1.5.** Buď $L = (l_{ij})$ čtvercová matice. Řekneme, že je dolní (levá) trojúhelníková, platí-li $l_{ij} = 0$ pro $j > i$. Buď $R = (r_{ij})$ čtvercová matice. Řekneme, že je horní (pravá) trojúhelníková, platí-li $r_{ij} = 0$ pro $i > j$.

**Věta 1.6.** Součin dolních (horních) trojúhelníkových matic je opět dolní (horní) trojúhelníková matice a diagonálními prvky tohoto součinu jsou součiny odpovídajících diagonálních prvků faktorů.

*Důkaz.* Důkaz provedeme pro případ dolních trojúhelníkových matic. Buďte $A = (a_{ij})$, $B = (b_{ij})$ dolní trojúhelníkové matice. Označme $C = (c_{ij}) = AB$. Potom platí

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \ldots + a_{in}b_{nj}. \tag{1}$$

Protože $a_{ii+1} = a_{ii+2} = \ldots = a_{in} = 0$ a $b_{1j} = b_{2j} = \ldots = b_{j-1j} = 0$, jsou v (1) nenulové nejvýše sčítance $j$-tý, $(j+1)$-ní, …, $i$-tý. Pro $j > i$ je tedy $c_{ij} = 0$ a matice $C$ je dolní trojúhelníková.
Druhá část tvrzení: Položíme-li v (1) $j = i$, dostaneme $c_{ii} = a_{ii}b_{ii}$. □

**Věta 1.7.** Inverzní matice k regulární dolní (horní) trojúhelníkové matici je opět dolní (horní) trojúhelníková matice a jejími diagonálními prvky jsou převrácené hodnoty původních diagonálních prvků.

*Důkaz.* Důkaz opět provedeme pouze pro případ dolní trojúhelníkové matice. Buď $A = (a_{ij})$ regulární dolní trojúhelníková matice. Označme $B = (b_{ij}) = A^{-1}$. Vyjděme ze vztahu $AB = I$. Zvolme si $j$-tý sloupec matice $B$ a rozepišme tento vztah po řádcích. Pro první řádek dostaneme $a_{11}b_{1j} = 0$. Protože regulární trojúhelníková matice musí mít všechny diagonální prvky nenulové, vyplývá odtud $b_{1j} = 0$. Další řádek:

$$a_{21} \underbrace{b_{1j}}_{=0} + \underbrace{a_{22}}_{\neq 0} b_{2j} = 0 \Rightarrow b_{2j} = 0$$

a tak to jde až do $(j-1)$-ního řádku. Pro $j$-tý řádek dostaneme

$$\underbrace{a_{j1}b_{1j} + a_{j2}b_{2j} + \ldots + a_{jj-1}b_{j-1j}}_{=0} + a_{jj}b_{jj} = 1 \Rightarrow b_{jj} = \frac{1}{a_{jj}}.$$

□

**Definice 1.8.** Buď $A = (a_{ij})$ čtvercová matice. Řekneme, že je silně regulární, jsou-li všechny její vedoucí hlavní minory nenulové, tj. platí-li

$$a_{11} \neq 0, \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \neq 0, \ \ldots, \ \det A \neq 0.$$

**Věta 1.9** (trojúhelníkový rozklad)**.** Každou silně regulární matici $A$ lze jediným způsobem vyjádřit ve tvaru $A = LDR$, kde $L$ je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále, $D$ diagonální matice a $R$ horní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále.

*Důkaz.* Jednoznačnost: Nechť má silně regulární matice $A$ dva různé trojúhelníkové rozklady $A = LDR = L'D'R'$. Z poslední rovnosti plyne $LD = L'D'R'R^{-1}$ a dále $L'^{-1}LD = D'R'R^{-1}$. Na levé straně této rovnice je podle vět 1.6 a 1.7 dolní a na pravé straně horní trojúhelníková matice, musí se tedy jednat o diagonální matici. Podle předpokladu mají matice $L'^{-1}L$ a $R'R^{-1}$ jedničky na diagonále, takže matice $L'^{-1}LD$ musí mít podle věty 1.6 tytéž diagonální prvky jako matice $D$. Je tedy $L'^{-1}LD = D$, to ale znamená, že $L'^{-1}L = I \Rightarrow L = L'$. Podobně zjistíme, že $R = R'$ a odtud ihned plyne i $D = D'$.

Existence: Matematickou indukcí podle řádu $n$ matice $A$. Pro $n = 1$ je rozklad triviální: $A = (a_{11}) = (1)(a_{11})(1)$. Nechť tvrzení platí pro matici typu $(n-1,\, n-1)$. Dokážeme, že platí i pro matici typu $(n,\, n)$. Buď

$$A = \begin{pmatrix} \hat{A} & \vec{v} \\ \vec{u}^T & \alpha \end{pmatrix} \tag{2}$$

silně regulární matice. Podle definice musí být i matice $\hat{A}$ silně regulární, a tak podle indukčního předpokladu existuje pro ni rozklad $\hat{A} = \hat{L}\hat{D}\hat{R}$. Hledejme rozklad matice $A$ ve tvaru

$$A = \begin{pmatrix} \hat{L} & \vec{o} \\ \vec{l}^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{D} & \vec{o} \\ \vec{o}^T & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{R} & \vec{r} \\ \vec{o}^T & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{L} & \vec{o} \\ \vec{l}^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{D}\hat{R} & \hat{D}\vec{r} \\ \vec{o}^T & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{L}\hat{D}\hat{R} & \hat{L}\hat{D}\vec{r} \\ \vec{l}^T\hat{D}\hat{R} & \vec{l}^T\hat{D}\vec{r} + \delta \end{pmatrix}.$$

Poslední matici porovnáme s maticí na pravé straně (2) a dostaneme $\vec{r} = \hat{D}^{-1}\hat{L}^{-1}\vec{v}$, $\vec{l}^T = \vec{u}^T\hat{R}^{-1}\hat{D}^{-1}$, $\delta = \alpha - \vec{l}^T\hat{D}\vec{r}$. Našli jsme tedy požadovaný rozklad matice $A$. □

**Věta 1.10** (počítání s blokovými maticemi)**.** Operace s blokovými maticemi lze provádět stejně jako s prvkovými maticemi, je-li rozdělení na bloky provedeno tak, aby dílčí operace měly smysl. Speciálně, při násobení blokových matic $A$, $B$ musí být v $i$-tém blokovém řádku matice $B$ tolik prvkových řádků, kolik je prvkových sloupců v $i$-tém blokovém sloupci matice $A$.

**Definice 1.11.** Čtvercové matice $A$, $B$ nazýváme podobné, jestliže existuje regulární matice $T$ taková, že platí $A = T^{-1}BT$.

*Poznámka.* Význam předchozí definice je následující: Buďte $\mathcal{X}$ báze lineárního prostoru $P$, $L$ lineární operátor na $P$ a označme $B = {}^{\mathcal{X}}L$ matici operátoru $L$ v bázi $\mathcal{X}$. Potom matice $A$ je podobná matici $B$, jestliže existuje taková báze $\mathcal{Y}$ prostoru $P$, že $A = {}^{\mathcal{Y}}L$. Matice $T$ z předchozí definice je tedy maticí přechodu
$T = {}_{\mathcal{X}}\mathbf{P}_{\mathcal{Y}}$.

**Tvrzení 1.12.** Podobné matice mají stejné charakteristické polynomy, a tudíž i stejná vlastní čísla, a k pevně zvolenému vlastnímu číslu $\lambda$ přísluší stejný počet lineárně nezávislých vlastních vektorů u obou matic.

*Důkaz.* První část tvrzení: Buďte $A$, $B$ dvě podobné matice, tj. nechť existuje taková regulární matice $T$, že $A = T^{-1}BT$. Potom

$$|A - \lambda I| = \left|T^{-1}BT - \lambda T^{-1}T\right| = \left|T^{-1}(B - \lambda I)T\right| = |T|^{-1}\,|B - \lambda I|\,|T| = |B - \lambda I|\,.$$

Druhá část tvrzení: Buďte $\lambda$ vlastní číslo matice $A$, $\vec{x}$ k němu příslušející vlastní vektor. Potom platí $A\vec{x} = \lambda\vec{x} \Leftrightarrow T^{-1}BT\vec{x} = \lambda\vec{x} \Leftrightarrow BT\vec{x} = \lambda T\vec{x}$. Druhá část tvrzení nyní vyplývá z toho, že je-li $T$ regulární matice, potom je soubor vektorů $\vec{x}^{(1)},\ \ldots,\ \vec{x}^{(n)}$ lineárně nezávislý právě tehdy, je-li lineárně nezávislý soubor $T\vec{x}^{(1)},\ \ldots,\ T\vec{x}^{(n)}$. □

*Poznámka.*

(1) Předchozí tvrzení neznamená nic jiného, než že vlastní čísla lineárního operátoru jsou dána jednoznačně, a to i co do násobností. Připomeňme, že násobnost vlastního čísla $\lambda$ jakožto kořene charakteristického polynomu se nazývá algebraická násobnost a počet lineárně nezávislých vlastních vektorů příslušejících k vlastnímu číslu $\lambda$ se nazývá geometrická násobnost.

(2) Připomeňme si větu 92 z lineární algebry: Lineární operátor na prostoru konečné dimenze nad tělesem $T$ je diagonalizovatelný právě tehdy, jsou-li všechny kořeny charakteristického polynomu prvky tělesa $T$ a je-li geometrická násobnost každého vlastního čísla tohoto operátoru rovna jeho algebraické násobnosti. Protože se pohybujeme nad tělesem $\mathbb{C}$, je první podmínka automaticky splněna.[1] V duchu definice 1.11 můžeme tedy větu přeformulovat takto: Matice je podobná nějaké diagonální matici, právě když jsou si algebraická a geometrická násobnost každého jejího vlastního čísla rovny. Zobecněním tohoto tvrzení je následující věta:

**Věta 1.13** (Jordan)**.** Buďte $\lambda_1, \ldots, \lambda_p$ všechna navzájem různá vlastní čísla matice $A \in T^{n,n}$. Potom je matice $A$ podobná blokově diagonální matici

$$\begin{pmatrix} J_1^{(1)} & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & J_{s_1}^{(1)} & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & J_1^{(p)} & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & J_{s_p}^{(p)} \end{pmatrix}$$

typu $(n, n)$, kde diagonální bloky $J_i^{(k)}$, $k \in \hat{p}$, $i \in \widehat{s_k}$ jsou tvaru

$$J_i^{(k)} = \begin{pmatrix} \lambda_k & & & \\ 1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & \lambda_k \end{pmatrix}$$

nebo speciálně $J_i^{(k)} = (\lambda_k)$. Přitom až na pořadí diagonálních bloků je tato matice dána jednoznačně.

*Poznámka.* Číslo $s_k$ v předchozí větě je geometrickou násobností vlastního čísla $\lambda_k$, zatímco součet počtu řádků, resp. sloupců všech bloků $J_i^{(k)}$, $i \in \widehat{s_k}$ je jeho násobností algebraickou. Zároveň samozřejmě platí $\sum_{k=1}^{p} s_k = n$.

**Definice 1.14.** Elementární úpravou provedenou v dané matici nazveme

- vynásobení všech prvků zvoleného řádku, resp. sloupce matice číslem $\alpha$,
- připočtení $\alpha$-násobků prvků zvoleného $j$-tého řádku, resp. sloupce k prvkům zvoleného $i$-tého řádku, resp. sloupce.

**Věta 1.15** (pravidlo o elementárních úpravách)**.** Provedeme-li na řádky, resp. sloupce matice $A$ konečnou posloupnost elementárních úprav, je výsledek ekvivalentní násobení matice $A$ zleva, resp. zprava maticí, která vznikne z jednotkové matice $I$ odpovídajícího rozměru stejnou posloupností elementárních úprav.

1.2. **Gaussova eliminační metoda.** Gaussova eliminační metoda je principiálně nejjednodušší a také nejpoužívanější metodou pro řešení soustav lineárních algebraických rovnic. Vyskytuje se celá řada modifikací této metody. Společným základním principem všech je převedení problému na řešení soustavy s trojúhelníkovou maticí.

---

[1] Zároveň to ovšem znamená, že matice, která má všechny prvky reálné, může mít imaginární vlastní čísla.

1.2.1. *Schéma jediného dělení.* Řešme soustavu

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= g_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= g_2 \\ &\ldots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n &= g_n \end{aligned} \tag{3}$$

s regulární maticí $A = (a_{ij})$. Převedení na soustavu s trojúhelníkovou maticí se provádí v $n$ krocích. V prvním kroku nejdříve vydělíme první rovnici prvkem $a_{11}$ (předpokládáme proto $a_{11} \neq 0$). Získáme rovnici tvaru

$$x_1 + b_{12}x_2 + \ldots + b_{1n}x_n = c_1, \tag{4}$$

kde $b_{1j} = \frac{a_{1j}}{a_{11}}$ pro $j = 2, \ldots, n$ a $c_1 = \frac{g_1}{a_{11}}$. Dále od $i$-té rovnice ($i = 2, \ldots, n$) odečteme $a_{i1}$-násobek rovnice (4), takže získáme soustavu $n-1$ rovnic o $n-1$ neznámých

$$\begin{aligned} a_{22}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{2n}^{(1)}x_n &= g_2^{(1)} \\ &\ldots \\ a_{n2}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{nn}^{(1)}x_n &= g_n^{(1)}, \end{aligned}$$

kde $a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - a_{i1}b_{1j}$ a $g_i^{(1)} = g_i - a_{i1}c_1$ pro $i, j = 2, \ldots, n$. Na tuto soustavu použijeme stejný postup ve druhém kroku (předpokládáme tedy $a_{22}^{(1)} \neq 0$). Analogicky postupujeme dále. Po $n$ krocích dojdeme k soustavě tvaru

$$\begin{aligned} x_1 + b_{12}x_2 + \ldots + b_{1n}x_n &= c_1 \\ x_2 + \ldots + b_{2n}x_n &= c_2 \\ &\ldots \\ x_n &= c_n. \end{aligned} \tag{5}$$

V $k$-tém kroku se pro $i, j = k+1, \ldots, n$; $k = 2, \ldots, n$ počítá

$$b_{kj} = \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}},\ c_k = \frac{g_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}},\ a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}b_{kj},\ g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}c_k.$$

Podmínkou proveditelnosti tohoto procesu — nazýváme ho přímý chod — je, aby $\forall k \in \hat{n}$ platilo $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$. Řešení soustavy je snadné:

$$x_n = c_n,\ x_k = c_k - (b_{kk+1}x_{k+1} + \ldots + b_{kn}x_n),$$

kde $k = n-1, n-2, \ldots, 1$. Výpočet řešení podle těchto vzorců se nazývá zpětný chod.

*Složitost.* Přímý chod: v každém kroku se provádí $n^2$ operací, neboť se zpracovává matice typu $(n, n)$. Složitost je tedy $O(n^3)$.

Zpětný chod: v každém kroku se provádí „skalárních součin", tj. $n$ násobení a sčítání. Složitost je tedy $O(n^2)$.

**Tvrzení 1.16.** Přímý chod Gaussovy eliminační metody je proveditelný (tj. $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$ pro všechna $k \in \hat{n}$) jen tehdy, je-li matice soustavy (3) silně regulární.

*Důkaz.* Označme $P = (A, G)$ rozšířenou matici soustavy (3). V prvním kroku přímého chodu se tato matice převede do tvaru

$$P^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & b_{12} & \ldots & b_{1n} & c_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \ldots & a_{2n}^{(1)} & g_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \ldots & a_{nn}^{(1)} & g_n^{(1)} \end{pmatrix}.$$

Podle pravidla o elementárních úpravách tedy platí $P^{(1)} = L^{(1)}P$, kde

$$L^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & \ldots & \ldots & 1 \end{pmatrix}.$$

Obecně v $k$-tém kroku matici

$$P^{(k-1)} = \begin{pmatrix} 1 & b_{12} & \dots & \dots & b_{1k} & \dots & b_{1n} & c_1 \\ & 1 & \dots & \dots & b_{2k} & \dots & b_{2n} & c_2 \\ & & \ddots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & b_{k-1k} & \dots & b_{k-1n} & c_{k-1} \\ & & & & a_{kk}^{(k-1)} & \dots & a_{kn}^{(k-1)} & g_k^{(k-1)} \\ & & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{nk}^{(k-1)} & \dots & a_{nn}^{(k-1)} & g_n^{(k-1)} \end{pmatrix}$$

převádíme do tvaru

$$P^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & b_{12} & \dots & b_{1k} & b_{1k+1} & \dots & b_{1n} & c_1 \\ & 1 & \dots & b_{2k} & b_{2k+1} & \dots & b_{2n} & c_2 \\ & & \ddots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & b_{kk+1} & \dots & b_{kn} & c_k \\ & & & & a_{k+1k+1}^{(k)} & \dots & a_{k+1n}^{(k)} & g_{k+1}^{(k)} \\ & & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{nk+1}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} & g_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

a tato úprava je ekvivalentní vynásobení matice $P^{(k-1)}$ zleva maticí

$$L^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & \frac{1}{a_{kk}^{(k-1)}} & & & \\ & & & -\frac{a_{k+1k}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} & 1 & & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & -\frac{a_{nk}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Nakonec takto získáme rozšířenou matici $P^{(n)} = (B, C)$ soustavy (5). Přitom zřejmě platí

$$P^{(n)} = \underbrace{L^{(n)} \dots L^{(1)}}_{\text{ozn. } L} P,$$

tj. $(B, C) = L(A, G) = (LA, LG)$. Odtud $B = LA$ neboli

$$\begin{pmatrix} 1 & b_{12} & \dots & b_{1k} \\ & 1 & \dots & b_{2k} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & \\ l_{21} & \frac{1}{a_{22}^{(1)}} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{k1} & l_{k2} & \dots & \frac{1}{a_{kk}^{(k-1)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \dots & a_{kk} \end{pmatrix}.$$

Přejdeme-li v této rovnici k determinantům, dostaneme

$$1 = \frac{1}{a_{11} a_{22}^{(1)} \dots a_{kk}^{(k-1)}} \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} \end{vmatrix},$$

tj.

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} \end{vmatrix} = a_{11} a_{22}^{(1)} \dots a_{kk}^{(k-1)}.$$

Matice soustavy tedy musí být silně regulární. □

1.2.2. *Schéma jediného dělení s hlavními prvky.* Podmínkou řešitelnosti soustavy (3) je $(\forall k \in \hat{n})(a_{kk}^{(k-1)} \neq 0)$. Případ, že některý z těchto prvků je přesně roven nule, je spíše výjimečný a není pro programátora nebezpečný, protože se projeví přetečením a výpočet se zastaví. Mnohem zákeřnější je případ, kdy některý z těchto prvků je v absolutní hodnotě malý vzhledem k ostatním koeficientům, s nimiž se v příslušné fázi výpočtu pracuje. V tomto případě se totiž koeficienty soustavy pro další krok získávají odečítáním velkých čísel, jejichž první cifry se shodují. Protože počítač počítá jen na pevný počet cifer, znamená to, že výsledek odečítání má menší počet platných cifer. Následující příklad ukazuje, jak může odečtením dvou velkých čísel s osmi platnými číslicemi vzniknout číslo s pěti platnými číslicemi:

$$\begin{array}{r} XXXXX.XXX \\ -XXXXX.XXX \\ \hline XX.XXXXXX \end{array}$$

Pokud je mezi prvky $a_{kk}^{(k-1)}$ malých prvků více, mohlo by se dokonce stát, že výsledek výpočtu nemá s řešením soustavy nic společného. Tento nedostatek odstraňuje schéma jediného dělení s hlavními prvky. Spočívá v tom, že se před zahájením prvního kroku celá matice soustavy prohledá a najde se její v absolutní hodnotě největší prvek $a_{ij}$. Ten se prohlásí za hlavní prvek v prvním kroku, tj. $i$-tá rovnice se jím vydělí a od zbývajících rovnic se odečte takový násobek vzniklé rovnice, aby koeficienty u $j$-té neznámé byly nulové. V dalším kroku se postupuje stejně pro soustavu zmenšenou o $i$-tou rovnici.

Algoritmus vyžaduje, aby v počítači byly vyhrazeny dva organizační celočíselné vektory o $n$ složkách, do nichž se zaznamenává, v jakém pořadí byly hlavní prvky vybírány. Zpětný chod se pak provádí v inverzním pořadí.

*Složitost.* Prohledáváme $n$-krát matici typu $(n,n) \Rightarrow O(n^3)$.

Daleko rychlejší — a praxe ukazuje, že téměř stejně účinné — je schéma jediného dělení s hlavními prvky v řádku/sloupci, kdy napřed najdeme v absolutní hodnotě největší prvek v 1. řádku (sloupci), prohlásíme ho za hlavní v 1. kroku atd. Místo dvou organizačních vektorů zřejmě postačí jeden.

*Složitost.* Prohledáváme $n$-krát pole o $n$ prvcích $\Rightarrow O(n^2)$.

1.2.3. *Kompaktní schéma.* Schéma jediného dělení a jeho modifikace umožňují řešit soustavu s více pravými stranami jen tehdy, jsou-li všechny pravé strany známy již v okamžiku, kdy se provádí přímý chod. To ale není vždy možné, např. proto, že další pravá strana závisí na řešení soustavy s předchozí pravou stranou. Označme $P = (A, G)$ rozšířenou matici soustavy (3). Z důkazu tvrzení 1.16 je zřejmé, že řešit soustavu Gaussovou eliminační metodou znamená v podstatě pouze nalézt takovou dolní trojúhelníkovou matici $L$, aby platilo

$$LP = P^{(n)}, \tag{6}$$

kde $P^{(n)} = (B, C)$ je rozšířená matice soustavy (5). Rovnici (6) můžeme rozepsat:

$$LA = B,\ LG = C. \tag{7}$$

Z první rovnosti vyplývá $A = L^{-1}B$, kde $L$ (a proto i $L^{-1}$) je dolní trojúhelníková matice a $B$ horní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále. Je-li matice $A$ soustavy silně regulární, potom je podle věty 1.9 matice $L$ dána jednoznačně, a tak vzhledem k (6) je i matice $P^{(n)}$ dána jednoznačně.

Pokusme se tedy nalézt přímo prvky matic $L^{-1}$ a $P^{(n)}$ na základě podmínky

$$P = L^{-1}P^{(n)}. \tag{8}$$

Pro jednoduchost zápisu označme

$$P = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} & a_{1n+1} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} & a_{nn+1} \end{pmatrix},$$

$$L^{-1} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix},\ P^{(n)} = \begin{pmatrix} 1 & r_{12} & \dots & r_{1n} & r_{1n+1} \\ & 1 & \dots & r_{2n} & r_{2n+1} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & r_{nn+1} \end{pmatrix}.$$

Ze vztahu (8) dostaneme

$$\begin{aligned} a_{ij} &= l_{i1}r_{1j} + l_{i2}r_{2j} + \ldots + l_{ij-1}r_{j-1j} + l_{ij} && \text{pro } i \geq j,\ i \in \hat{n}, \\ a_{ij} &= l_{i1}r_{1j} + l_{i2}r_{2j} + \ldots + l_{ii-1}r_{i-1j} + l_{ii}r_{ij} && \text{pro } i < j,\ j \in \widehat{n+1} \end{aligned}$$

a odtud plyne

$$\begin{aligned} l_{ij} = &\quad a_{ij} - (l_{i1}r_{1j} + l_{i2}r_{2j} + \ldots + l_{ij-1}r_{j-1j}) && \text{pro } i \geq j,\ i \in \hat{n}, \\ r_{ij} = &\quad \tfrac{1}{l_{ii}}[a_{ij} - (l_{i1}r_{1j} + l_{i2}r_{2j} + \ldots + l_{ii-1}r_{i-1j})] && \text{pro } i < j,\ j \in \widehat{n+1}. \end{aligned}$$

Při výpočtu prvků $l_{ij}$, $r_{ij}$ se doporučuje následující postup: Prvky se ukládají do jedné matice o $n$ řádcích a $n+1$ sloupcích, přičemž pod a na diagonálu rovnáme prvky matice $L^{-1}$ a nad diagonálu prvky matice $P^{(n)}$ (diagonální jedničky je totiž zbytečné zaznamenávat). Nejprve se vypočte první sloupec matice $L^{-1}$. Je zřejmé, že jeho prvky se získají pouhým opsáním prvního sloupce matice $P$. Pak se počítá první řádek matice $P^{(n)}$ tak, že se odpovídající prvky matice $P$ dělí hodnotou $l_{11}$ (ta je v tomto okamžiku již známa). Další postup znázorňuje schéma:

$$\begin{array}{ccccccl} l_{11} & r_{12} & r_{13} & \ldots & r_{1n} & r_{1n+1} & \leftarrow \ \text{2. krok} \\ l_{21} & l_{22} & r_{23} & \ldots & r_{2n} & r_{2n+1} & \leftarrow \ \text{4. krok} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & & & & \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & & & & \\ \text{1. krok} & \text{3. krok} & \text{5. krok} & & & & \end{array}$$

Obecný prvek $l_{ij}$ se tedy počítá tak, že se od prvku, který leží na stejném místě v matici $P$, odečte ,,skalární součin"doposud napočtených prvků v témže řádku a sloupci. Podobně prvek $r_{ij}$ se získá odečtením ,,skalárního součinu"doposud napočtených prvků v témže řádku a sloupci (kromě prvku $l_{ii}$) od prvku $a_{ij}$, ovšem rozdíl je třeba dělit $l_{ii}$. Při výpočtu na počítači je vhodné prvky $l_{ij}$ a $r_{ij}$ rovnat přímo na místa, kde byly odpovídající prvky $a_{ij}$, neboť ty už dále nebudou potřeba.

Po skončení výpočtu matic $L^{-1}$ a $P^{(n)}$ stačí jen vyřešit soustavu s rozšířenou maticí $P^{(n)}$, tj. provést zpětný chod, a soustava (3) je vyřešena. Chceme-li nyní řešit soustavu s novou pravou stranou $A\vec{x} = \vec{f}$, postupujeme takto: Podle (7) platí $A = L^{-1}B$. Máme tedy řešit soustavu $L^{-1}B\vec{x} = \vec{f}$, tj.

$$L^{-1}\vec{y} = \vec{f},\ \vec{y} = B\vec{x}.$$

To jsou dvě soustavy s trojúhelníkovými maticemi a ty lze řešit velmi rychle:

*Složitost.* $O(n^2)$.

### 1.3. **Modifikace Gaussovy eliminační metody pro soustavy se speciálními vlastnostmi.**

1.3.1. *Metoda faktorizace.* Řešme soustavu

$$\begin{array}{ccccccccccc} a_1x_1 & + & b_1x_2 & & & & & & & = & f_1 \\ c_2x_1 & + & a_2x_2 & + & b_2x_3 & & & & & = & f_2 \\ & & c_3x_2 & + & a_3x_3 & + & b_3x_4 & & & = & f_3 \\ & & & \ddots & & \ddots & & \ddots & & & \vdots \\ & & & & c_{n-1}x_{n-2} & + & a_{n-1}x_{n-1} & + & b_{n-1}x_n & = & f_{n-1} \\ & & & & & & c_nx_{n-1} & + & a_nx_n & = & f_n \end{array} \tag{9}$$

tak, že se pokusíme rovnou nalézt vzorce pro zpětný chod ve tvaru

$$x_k = \mu_k x_{k+1} + \varrho_k \tag{10}$$

pro $k = n-1,\ n-2,\ \ldots,\ 1$. Dosadíme-li do $i$-té rovnice soustavy (9), kde $i = 2,\ \ldots,\ n-1$, (tj. do ,,vnitřní"rovnice) za $x_{i-1}$ ze vztahu (10), dostaneme

$$c_i(\mu_{i-1}x_i + \varrho_{i-1}) + a_ix_i + b_ix_{i+1} = f_i$$

a odtud

$$x_i = \frac{-b_i}{c_i\mu_{i-1} + a_i}x_{i+1} + \frac{f_i - c_i\varrho_{i-1}}{c_i\mu_{i-1} + a_i}.$$

Porovnáním s (10) získáme

$$\mu_i = \frac{-b_i}{c_i\mu_{i-1} + a_i},\ \varrho_i = \frac{f_i - c_i\varrho_{i-1}}{c_i\mu_{i-1} + a_i}, \tag{11}$$

kde $i = 2, \ \ldots, \ n-1$. První rovnici soustavy (9) přepíšeme do tvaru

$$x_1 = -\frac{b_1}{a_1}x_2 + \frac{f_1}{a_1}.$$

Tento vztah opět porovnáme s (10) a dostaneme

$$\mu_1 = -\frac{b_1}{a_1},\ \varrho_1 = \frac{f_1}{a_1}.$$

Poslední rovnice soustavy (9) tvoří společně s rovnicí $x_{n-1} = \mu_{n-1}x_n + \varrho_{n-1}$ systém dvou rovnic o dvou neznámých $x_{n-1}$, $x_n$ a z něj vypočteme

$$x_n = \frac{f_n - c_n\varrho_{n-1}}{c_n\mu_{n-1} + a_n}.$$

Algoritmus lze ještě vylepšit: Položíme-li

$$c_1 = 0,\ b_n = 0, \tag{12}$$

potom (10) i (11) platí $\forall k \in \hat{n}$. Postup řešení soustavy (9) je tedy následující:

- inicializace (12),
- výpočet $\mu_i$, $\varrho_i$ pro $i = 1, \ \ldots, \ n$ podle (11),
- výpočet $x_i$ pro $i = n, \ n-1, \ \ldots, \ 1$ podle (10).

*Složitost.* Výborná: $O(n)$.

**Tvrzení 1.17.** Matice soustavy musí být silně reguární. Přitom platí

$$\det A_{kk} = \prod_{i=1}^{k}(c_i\mu_{i-1} + a_i),$$

kde klademe $c_1 = 0$.

*Důkaz.* Indukcí podle $k$: Pro $k = 1$ tvrzení zřejmě platí. Pro $k = 2$ je

$$\prod_{i=1}^{2}(c_i\mu_{i-1} + a_i) = a_1(-c_2\frac{b_1}{a_1} + a_2) = a_1a_2 - b_1c_2 = \det A_{22}.$$

Nechť tvrzení platí pro $k-1$. Dokážeme, že platí pro $k$:
Determinant matice $A_{kk}$ rozvineme podle posledního řádku/sloupce a máme

$$\det A_{kk} = a_k \det A_{k-1k-1} - c_kb_{k-1}\det A_{k-2k-2}. \tag{13}$$

Podle indukčního předpokladu je $\det A_{k-1k-1} = \det A_{k-2k-2}(c_{k-1}\mu_{k-2} + a_{k-1})$. Podle (11) je $b_{k-1} = -\mu_{k-1}(c_{k-1}\mu_{k-2} + a_{k-1})$. Oba tyto vztahy dosadíme do (13) a dostaneme

$$\det A_{kk} = \det A_{k-2k-2}[a_k(c_{k-1}\mu_{k-2} + a_{k-1}) + c_k\mu_{k-1}(c_{k-1}\mu_{k-2} + a_{k-1})] =$$

$$= \prod_{i=1}^{k-2}(c_i\mu_{i-1} + a_i)(c_{k-1}\mu_{k-2} + a_{k-1})(c_k\mu_{k-1} + a_k) = \prod_{i=1}^{k}(c_i\mu_{i-1} + a_i).$$

Je zřejmé, že kdyby matice soustavy nebyla silně regulární, dělili bychom v (11) nulou. □

1.3.2. *Choleskiho metoda (druhých odmocnin).* Řešme soustavu

$$A\vec{x} = \vec{f}, \tag{14}$$

kde matice $A$ je symetrická a silně regulární. Potom podle věty 1.9 lze matici rozložit ve tvaru $A = LDR$, odkud $A^T = R^T D^T L^T$. Ze symetrie matice $A$ a z jednoznačnosti rozkladu vyplývá, že $L = R^T$, tj. $A = R^T DR$. Zřejmě existuje diagonální matice $D_1$ taková, že $D = D_1^2$, přičemž každý prvek matice $D_1$ je buď reálný, nebo ryze imaginární. Proto platí

$$A = R^T D_1 D_1 R = S^T S, \tag{15}$$

kde $S = D_1 R$. Matice $S$ sice není dána jednoznačně, ale víme o ní tolik, že je horní trojúhelníková a že v každém jejím řádku jsou všechny prvky buď reálné, nebo ryze imaginární. Proto ji můžeme v počítači zobrazit jako reálné pole plus jeden logický vektor o $n$ složkách, kam si zaznamenáváme, které řádky jsou reálné a které ryze imaginární.

Dále budeme postupovat stejně jako u kompaktního schématu. Buďte $A = (a_{ij})$,

$$S = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \dots & s_{1n} \\ & s_{22} & \dots & s_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & s_{nn} \end{pmatrix}.$$

Podle (15) platí

$$\begin{aligned} a_{ii} &= s_{1i}^2 + s_{2i}^2 + \ldots + s_{ii}^2 && \text{pro } i \in \hat{n}, \\ a_{ij} &= s_{1i}s_{1j} + s_{2i}s_{2j} + \ldots + s_{ii}s_{ij} && \text{pro } i \in \hat{n},\ j = i+1,\ \ldots,\ n \end{aligned}$$

a odtud plyne

$$\begin{aligned} s_{ii} &= \sqrt{a_{ii} - (s_{1i}^2 + s_{2i}^2 + \ldots + s_{i-1i}^2)} && \text{pro } i \in \hat{n}, \\ s_{ij} &= \frac{1}{s_{ii}}[a_{ij} - (s_{1i}s_{1j} + s_{2i}s_{2j} + \ldots + s_{i-1i}s_{i-1j})] && \text{pro } i \in \hat{n},\ j = i+1,\ \ldots,\ n. \end{aligned} \tag{16}$$

Výpočet prvků $s_{ij}$ se provádí po řádcích. Je snadné si rozmyslet, že výrazy v kulatých závorkách ve vzorcích (16) jsou vždy reálné a že při výpočtu $s_{ii}$ je lhostejné, kterou odmocninu použijeme. Rovněž je zřejmé, že prvek $s_{ij}$ můžeme ihned po jeho vypočtení zapsat na místo, kde byl původně uložen prvek $a_{ij}$.

Vlastní řešení se provádí ve třech krocích:

(1) Najdeme rozklad (15) matice $A$ podle (16). Tím přejde soustava (14) ve tvar $S^T S\vec{x} = \vec{b}$, tj.
(2) $S^T\vec{y} = \vec{f}$ (soustava s dolní trojúhelníkovou maticí),
(3) $S\vec{x} = \vec{y}$ (soustava s horní trojúhelníkovou maticí).

1.4. **Inverze matice.** Ukážeme na příbuznost mezi úlohou řešit soustavu lineárních algebraických rovnic a úlohou nalézt inverzní matici. Buď $A$ regulární matice.

(1) Rovnici $A\vec{x} = \vec{b}$ vynásobíme zleva maticí $A^{-1}$ a tím získáme její řešení ve tvaru $\vec{x} = A^{-1}\vec{b}$.
(2) Označme $\vec{x}^{(1)},\ \ldots,\ \vec{x}^{(n)}$ sloupce matice $A^{-1}$. Protože platí $AA^{-1} = I$, musí platit $A(\vec{x}^{(1)},\ \ldots,\ \vec{x}^{(n)}) = (\vec{e}^{(1)},\ \ldots,\ \vec{e}^{(n)})$, tj. musí být splněno $n$ soustav lineárních algebraických rovnic $A\vec{x}^{(i)} = \vec{e}^{(i)}$, $i \in \hat{n}$, které se liší pouze pravou stranou.[2]

1.4.1. *Obecné eliminační schéma.* Buď $A$ regulární matice. Sestavme blokovou matici

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Tuto matici chceme převést na blokovou matici tvaru

$$\begin{pmatrix} I & ? \\ O & ? \end{pmatrix} \tag{18}$$

těmito úpravami:

- Řádky z horní poloviny (tj. řádky tvořené prvky matic $A$, $B$) se smějí násobit nenulovým číslem.

[2] To je Gaussova metoda k nalezení inverzní matice popsaná v lineární algebře (věta 67).

- Ke všem řádkům se smějí přičítat násobky řádků opět z horní poloviny.

Tyto úpravy mají týž výsledek jako vynásebení matice (17) zleva maticí, která z jednotkové matice odpovídajícího rozměru vznikne stejnými úpravami. Vzhledem k našim omezením musí mít tato matice blokový tvar

$$\begin{pmatrix} X & O \\ Y & I \end{pmatrix},$$

kde blok $X$ má rozměr matice $A$ a blok $Y$ rozměr matice $C$. Má-li mít součin

$$\begin{pmatrix} X & O \\ Y & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} XA & XB \\ YA + C & YB + D \end{pmatrix}$$

tvar (18), musí platit

$$XA = I \Leftrightarrow X = A^{-1},\, YA + C = O \Leftrightarrow Y = -CA^{-1},$$

takže

$$XB = A^{-1}B,\, YB + D = D - CA^{-1}B. \tag{19}$$

Obecné eliminační schéma tedy slouží k výpočtu výrazů typu (19).

(1) Chceme-li počítat pouze $A^{-1}$, volíme $B = I$, $C = O$, $D = O$.
(2) Zvolíme-li $B = \vec{b}$, řeší schéma soustavu $A\vec{x} = \vec{b}$.
(3) Zvolíme-li $B = (I, \vec{b})$, řeší se obě úlohy najednou.
(4) Zvolíme-li $B = \vec{b}$, $C = -\vec{c}^T$, $D = d$, počítá se funkční hodnota lineární funkce (přesněji afinního zobrazení, resp. funkcionálu)

$$f(x_1, \ldots, x_n) = c_1x_1 + \ldots + c_nx_n + d$$

v bodě $\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n)^T$, který je řešením soustavy $A\vec{x} = \vec{b}$:

$$\begin{pmatrix} & & & b_1 \\ & A & & \vdots \\ & & & b_n \\ -c_1 & \ldots & -c_n & d \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} I & A^{-1}\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \\ \vec{o}^T & d + \sum_{i=1}^n c_ix_i \end{pmatrix}.$$

1.4.2. *Metoda ovroubení.* Má se ovroubit ubrus, aby se netřepil.

**Definice 1.18.** Řekneme, že matice $A_n = (a_{ij})$ vznikla z matice $A_{n-1}$ ovroubením, je-li

$$A_n = \begin{pmatrix} A_{n-1} & \vec{u}_n \\ \vec{v}_n^T & a_{nn} \end{pmatrix}. \tag{20}$$

Buď matice $A = (a_{ij})$ silně regulární. Výpočet $A^{-1}$ se při metodě ovroubení provádí v $n$ krocích. V $k$-tém kroku se předpokládá, že známe $A_{k-1}^{-1}$ a pomocí efektivních vzorců se počítá $A_k^{-1}$. Hledejme

$$A_n^{-1} = \begin{pmatrix} P_{n-1} & \vec{r}_n \\ \vec{q}_n^T & 1/\beta \end{pmatrix}.$$

Prvek v pravém dolním rohu je zřejmě nenulový, protože $A_{nn}^{-1} = \frac{1}{\det A}A_{nn}^{adj.}$, tj. je to nenulový násobek algebraického doplňku prvku $a_{nn}$ v (20). Platí

$$I = A_nA_n^{-1} = \begin{pmatrix} A_{n-1}P_{n-1} + \vec{u}_n\vec{q}_n^T & A_{n-1}\vec{r}_n + \frac{1}{\beta}\vec{u}_n \\ \vec{v}_n^TP_{n-1} + a_{nn}\vec{q}_n^T & \vec{v}_n^T\vec{r}_n + \frac{a_{nn}}{\beta} \end{pmatrix},$$

a proto dostáváme

$$A_{n-1}P_{n-1} + \vec{u}_n\vec{q}_n^T = I,\, A_{n-1}\vec{r}_n + \frac{1}{\beta}\vec{u}_n = \vec{o},$$
$$\vec{v}_n^TP_{n-1} + a_{nn}\vec{q}_n^T = \vec{o}^T,\, \vec{v}_n^T\vec{r}_n + \frac{a_{nn}}{\beta} = 1.$$

Z druhé rovnice vyjádříme

$$\vec{r}_n = -\frac{1}{\beta}A_{n-1}^{-1}\vec{u}_n \tag{21}$$

a tento vztah dosadíme do poslední rovnice:

$$\beta = a_{nn} - \vec{v}_n^TA_{n-1}^{-1}\vec{u}_n. \tag{22}$$

První rovnici vynásobíme zleva maticí $A_{n-1}^{-1}$:

$$P_{n-1} = A_{n-1}^{-1} - A_{n-1}^{-1}\vec{u}_n\vec{q}_n^T$$

a dosadíme do třetí rovnice:

$$\vec{o} = \vec{v}_n^T A_{n-1}^{-1} - \vec{v}_n^T A_{n-1}^{-1}\vec{u}_n\vec{q}_n^T + a_{nn}\vec{q}_n^T = \vec{v}_n^T A_{n-1}^{-1} + \underbrace{(a_{nn} - \vec{v}_n^T A_{n-1}^{-1}\vec{u}_n)}_{\beta}\vec{q}_n^T.$$

Odtud

$$\vec{q}_n^T = -\frac{1}{\beta}\vec{v}_n^T A_{n-1}^{-1}, \tag{23}$$

$$P_{n-1} = A_{n-1}^{-1} + \frac{1}{\beta}A_{n-1}^{-1}\vec{u}_n\vec{v}_n^T A_{n-1}^{-1}. \tag{24}$$

Hledané vzorce jsou (22), (21), (23) a (24).

Při výpočtu na počítači se nejprve spočítá $A_1^{-1} = (\frac{1}{a_{11}})$ a pak se postupně vypočítává $A_2^{-1},\ \ldots,\ A_n^{-1}$. Máme pracovní pole

| | |
|---|---|
| $A_{n-1}^{-1}$ | $a_{1n}$<br>$\vdots$<br>$a_{1n-1}$ |
| $a_{n1}\ldots a_{nn-1}$ | $a_{nn}$ |

a navíc potřebujeme dva $(n-1)$-složkové vektory $\beta$ a $\gamma$. Výpočet matice $A_n^{-1}$ sestává ze tří kroků:

- Spočtou se pomocné hodnoty

$$\begin{pmatrix}\beta_1\\ \vdots\\ \beta_{n-1}\end{pmatrix} = -A_{n-1}^{-1}\vec{u}_n = -A_{n-1}^{-1}\begin{pmatrix}a_{1n}\\ \vdots\\ a_{n-1n}\end{pmatrix},$$

$$(\gamma_1,\ \ldots,\ \gamma_{n-1}) = -\vec{v}_n^T A_{n-1}^{-1} = -(a_{n1}\ldots a_{nn-1})A_{n-1}^{-1}.$$

- Spočte se číslo $\beta$ podle jednoho ze vztahů

$$\beta = a_{nn} + a_{n1}\beta_1 + \ldots + a_{nn-1}\beta_{n-1},$$

$$\beta = a_{nn} + \gamma_1 a_{1n} + \ldots + \gamma_{n-1}a_{n-1n}.$$

  Měli bychom provést oba výpočty, abychom ověřili chyby vzniklé zaokrouhlováním.
- Dosavadní hodnoty na místech o indexech $(i,\ j)$, kde $i,\ j \in \widehat{n-1}$, se opraví o $\frac{\beta_i\gamma_j}{\beta}$, neboť v souladu s (24) platí

$$P_{n-1} = A_{n-1}^{-1} + \frac{1}{\beta}\begin{pmatrix}\beta_1\\ \vdots\\ \beta_{n-1}\end{pmatrix}(\gamma_1\ldots\gamma_{n-1}).$$

  Na místo s indexem $(n,\ n)$ se dosadí $\frac{1}{\beta}$. Na místa o indexech $(i,\ k)$, kde $i \in \widehat{n-1}$ se dosadí $\frac{\beta_i}{\beta}$. Na místa o indexech $(k,\ j)$, kde $j \in \widehat{n-1}$ se dosadí $\frac{\gamma_j}{\beta}$.

# 2. Iterační metody řešení soustav lineárních algebraických rovnic

## 2.1. Úvod.

### 2.1.1. *Pojem limity v lineární algebře.*

**Definice 2.1.** Řekneme, že posloupnost vektorů $\{\vec{x}^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$, $\vec{x}^{(k)} = (x_1^{(k)},\ \ldots,\ x_n^{(k)})^T$, konverguje k vektoru $\vec{x} = (x_1,\ \ldots,\ x_n)^T$ a píšeme $\vec{x}^{(k)} \to \vec{x}$ nebo $\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = \vec{x}$, platí-li

$$(\forall i \in \hat{n})(\lim_{k\to\infty} x_i^{(k)} = x_i).$$

Řekneme, že posloupnost matic $\{A^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ typu $(m,\ n)$, $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})$, konverguje k matici $A = (a_{ij})$ typu $(m,\ n)$ a píšeme $A^{(k)} \to A$ nebo $\lim_{k\to\infty} A^{(k)} = A$, platí-li

$$(\forall i \in \hat{n})(\forall j \in \hat{m})(\lim_{k\to\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}).$$

*Poznámka.* Přestože tato definice vypadá na první pohled jinak než definice limity posloupnosti v metrickém prostoru z matematické analýzy, jsou obě definice v daném případě ekvivalentní, jak za chvíli dokážeme. Nejprve však zavedeme následující značení norem na $\mathbb{C}^{n,1}$:

$$\|\vec{x}\|_{\mathrm{I}} = \max_{i\in\hat{n}} |x_i| \quad \text{(maximová norma)},$$

$$\|\vec{x}\|_{\mathrm{II}} = \sum_{i=1}^{n} |x_i| \quad \text{(součtová norma)},$$

$$\|\vec{x}\|_{\mathrm{III}} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2} \quad \text{(eukleidovská norma)}.$$

**Věta 2.2.** Buďte $\{\vec{x}^{(k)}\}$ posloupnost vektorů v $\mathbb{C}^{n,1}$, $\vec{x} \in \mathbb{C}^{n,1}$.

(1) Je-li $\vec{x}^{(k)} \to \vec{x}$, potom v každé normě platí $\left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right\| \to 0$.
(2) Platí-li v některé normě $\left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right\| \to 0$, potom $\vec{x}^{(k)} \to \vec{x}$.

*Důkaz.* (1) Z definice 2.1 je zřejmé, že platí

$$\left(\vec{x}^{(k)} \to \vec{x}\right) \Rightarrow \left(\left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right\|_{\mathrm{I}} \to 0\right).$$

Protože jsou všechny normy $\mathbb{C}^{n,1}$ ekvivalentní, platí pro libovolnou normu $\left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right\| \leq K \left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right\|_{\mathrm{I}} \to 0$.

(2) Z ekvivalence norem $\mathbb{C}^{n,1}$ a z definice maximové normy plyne

$$(\forall i \in \hat{n}) \left(\left|x_i^{(k)} - x_i\right| \leq \left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right\|_{\mathrm{I}} \leq K \left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right\| \to 0\right).$$

□

**Definice 2.3.** Normou na prostoru čtvercových matic $n$-tého řádu $\mathbb{C}^{n,n}$ nazýváme zobrazení $\|\ \| : \mathbb{C}^{n,n} \to \mathbb{R}^+$, které splňuje tyto vlastnosti:

(1) $(\forall A \in \mathbb{C}^{n,n})(\|A\| \geq 0) \wedge (\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = \vec{0})$,
(2) $(\forall \lambda \in \mathbb{C})(\forall A \in \mathbb{C}^{n,n})(\|\lambda A\| = |\lambda|\, \|A\|)$,
(3) $(\forall A,\ B \in \mathbb{C}^{n,n})(\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|)$,
(4) $(\forall A,\ B \in \mathbb{C}^{n,n})(\|AB\| \leq \|A\| \,.\, \|B\|)$.

**Definice 2.4.** Norma $\|\ \|_M$ na $\mathbb{C}^{n,n}$ se nazývá souhlasná s normou $\|\ \|_V$ na $\mathbb{C}^{n,1}$, jestliže platí

$$(\forall A \in \mathbb{C}^{n,n})(\forall \vec{x} \in \mathbb{C}^{n,1})(\|A\vec{x}\|_V \leq \|A\|_M \,.\, \|\vec{x}\|_V).$$

**Definice 2.5.** Normu $\|\ \|_M$ na $\mathbb{C}^{n,n}$ nazýváme normou generovanou (přidruženou) normou (normě) $\|\ \|_V$ na $\mathbb{C}^{n,1}$, jestliže platí

$$(\forall A \in \mathbb{C}^{n,n})(\forall \vec{x} \in \mathbb{C}^{n,1})(\|A\|_M = \max_{\|\vec{x}\|=1} \|A\vec{x}\|_V).$$

*Poznámka.* Norma generovaná je normou souhlasnou. Definice generované normy je v souhlase s definicí normy spojitého lineárního zobrazení z matematické analýzy, pouze zde vystupuje maximum místo suprema. Je tomu tak proto, že jde o supremum spojité funkce na kompaktní množině.

*Důkaz.* (1) Kompaktnost: Množina $\{\ \vec{x} \in \mathbb{C}^{n,1}\ |\ \|\vec{x}\| = 1\ \}$ je uzavřená a omezená, neboť je hranicí koule $B(\vec{o}, 1)$ a hranice každé množiny je uzavřená. Množina v lineárním prostoru konečné dimenze je kompaktní, právě když je omezená a uzavřená.

(2) Spojitost: Zobrazení $\vec{x} \mapsto \|A\vec{x}\|$ je kompozicí dvou zobrazení $A : \vec{x} \mapsto A\vec{x}$ a $\|\ \| : \vec{y} \mapsto \|\vec{y}\|$. Spojitost zobrazení $A$ byla dokázána v matematické analýze. Dokážeme, že zobrazení $\|\ \|$ je spojité, a to dokonce stejnoměrně:
Chceme dokázat, že

$$(\forall \varepsilon \in \mathbb{R}^+)(\exists \delta \in \mathbb{R}^+)(\forall \vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{C}^{n,1})(\|\vec{x} - \vec{y}\| < \delta \Rightarrow |\ \|\vec{x}\| - \|\vec{y}\|\ | < \varepsilon).$$

Pro každé dva vektory $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{C}^{n,1}$ můžeme bez újmy na obecnosti předpokládat, že $\|\vec{x}\| \geq \|\vec{y}\|$. Platí-li $\|\vec{x} - \vec{y}\| < \delta$, můžeme tedy psát

$$|\ \|\vec{x}\| - \|\vec{y}\|\ | = \|\vec{x}\| - \|\vec{y}\| = \|\vec{x} - \vec{y} + \vec{y}\| - \|\vec{y}\| \leq \|\vec{x} - \vec{y}\| + \|\vec{y}\| - \|\vec{y}\| = \|\vec{x} - \vec{y}\| < \delta.$$

Nyní stačí položit $\delta = \varepsilon$.

□

2.1.2. *Princip iteračních metod.* Je dána soustava $A\vec{x} = \vec{f}$, kde $A$ je regulární. V iteračních metodách konstruujeme iterační posloupnost vektorů $\{\vec{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$. Má-li matice $A$ příznivé vlastnosti, konverguje tato posloupnost k řešení soustavy $\vec{x}^*$. Výchozí vektor $\vec{x}^{(0)}$ této posloupnosti se volí libovolně (nejvýhodnější ovšem je zvolit za $\vec{x}^{(0)}$ nějakou aproximaxi $\vec{x}^*$). Další členy posloupnosti se vypočítávají ze vztahu

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + H^{(k+1)}(\vec{f} - A\vec{x}^{(k)}), \tag{25}$$

kde $\{H^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ je vhodně zvolená posloupnost matic. Vektor $\vec{f} - A\vec{x}^{(k)}$ nazýváme reziduum. Navíc chceme, aby platilo

$$(\forall k \in \mathbb{N})(\vec{x}^* = \vec{x}^* + H^{(k)}(\vec{f} - A\vec{x}^*)).$$

Odečtením této rovnice od (25) získáme výraz pro chybu $k$-té aproximace

$$\begin{aligned}\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^* &= \vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}^* + H^{(k)}A(\vec{x}^* - \vec{x}^{(k-1)}) = (I - H^{(k)}A)(\vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}^*) = \\ &= (I - H^{(k)}A)(I - H^{(k-1)}A)(\vec{x}^{(k-2)} - \vec{x}^*) = \ldots = \\ &= \underbrace{(I - H^{(k)}A)(I - H^{(k-1)}A)\ldots(I - H^{(1)}A)}_{\text{ozn. } T^{(k)}}(\vec{x}^{(0)} - \vec{x}^*).\end{aligned}$$

Právě jsme dokázali následující větu:

**Věta 2.6.** Iterační posloupnost $\{\vec{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ konverguje k řešení soustavy $A\vec{x} = \vec{f}$ při libovolné volbě $\vec{x}^{(0)}$ právě tehdy, když platí

$$\lim_{k\to\infty} T^{(k)} = O.$$

*Poznámka.* Iterační metody se vyznačují odolností vůči chybám vzniklým zaokrouhlováním. Tato samoopravná schopnost je dána tím, že dojde-li v při výpočtu jistého vektoru $\vec{x}^{(k)}$ iterační posloupnosti k chybě, můžeme na tento vektor pohlížet jako na výchozí člen $\vec{x}^{(0)}$ nové iterační posloupnosti.

2.1.3. *Nestacionární metody.* Iterační metody se dělí na stacionární, kde je posloupnost matic $\{H^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ konstantní, a nestacionární. Příkladem metody nestacionární budiž metoda řízené relaxace (nevyžaduje se, následující věta však bude užitečná i dále).

**Věta 2.7.** U soustavy lineárních alebraických rovnic s regulární maticí lze rovnice vždy přerovnat tak, aby diagonální prvky byly nenulové.

*Důkaz.* Plyne z definice determinantu

$$\det A = \sum_{\pi \in S_n} \text{sgn}\ \pi.\ a_{\pi(1)1} \ldots a_{\pi(n)n} \tag{26}$$

a z toho, že determinant regulární matice je různý od nuly. Potom totiž musí být alespoň jeden sčítanec v (26) nenulový, tj. $(\exists \pi \in S_n)(a_{\pi(1)1} \dots a_{\pi(n)n} \neq 0)$. Proto stačí dát na první místo $\pi(1)$-tou rovnici, na druhé $\pi(2)$-tou atd. □

Předpokládejme, že matice soustavy $A\vec{x} = \vec{f}$ má na diagonále jedničky. Z definice rezidua je zřejmé, že je-li $j$-tá složka rezidua nulová, je splněna $j$-tá rovnice soustavy. Označme $i$ index v absolutní hodnotě největší složky rezidua $\vec{f} - A\vec{x}^{(k)}$. (Je-li jich více, je jedno, kterou zvolíme.) Chceme, aby reziduum v následující iteraci $\vec{f} - A\vec{x}^{(k+1)}$ mělo $i$-tou složku rovnou nule, tj. aby platilo

$$f_i - (a_{i1}x_1^{(k+1)} + \dots + a_{ii-1}x_{i-1}^{(k+1)} + x_i^{(k+1)} + a_{ii+1}x_{i+1}^{(k+1)} + \dots + a_{in}x_n^{(k+1)}) = 0,$$

a proto klademe

$$\begin{gathered} x_i^{(k+1)} = f_i - (a_{i1}x_1^{(k)} + \dots + a_{ii-1}x_{i-1}^{(k)} + a_{ii+1}x_{i+1}^{(k)} + \dots + a_{in}x_n^{(k)}) = \\ = x_i^{(k)} + [f_i - (a_{i1}x_1^{(k)} + \dots + a_{ii-1}x_{i-1}^{(k)} + x_i^{(k)} + a_{ii+1}x_{i+1}^{(k)} + \dots + a_{in}x_n^{(k)})], \\ x_j^{(k+1)} = x_j^{(k)} \text{ pro } j \neq i. \end{gathered}$$

Porovnáním první z těchto dvou rovnic s (25) zjistíme, že příslušná matice $H^{(k+1)}$ má v $i$-tém řádku na $i$-tém místě jedničku a na ostatních místech nuly. Z druhé rovnice pak vyplývá, že všechny ostatní řádky matice $H^{(k+1)}$ jsou nulové. Z toho je zřejmé, že pro $k \neq l$ budou matice $H^{(k)}$, $H^{(l)}$ obecně různé.

2.2. **Stacionární metody.** Dále se budeme zabývat pouze stacionárními metodami, neboť jsou algoritmicky výhodnější a jejich chování lze snáze analyzovat.

2.2.1. *Konvergence iterační posloupnosti.* Protože ve stacionárních metodách platí $(\forall k \in \mathbb{N})(H^{(k)} = H)$, znamená to, že $(\forall k \in \mathbb{N})(T^{(k)} = (I - HA)^k)$ a kritérium konvergence z věty 2.6 přechází ve tvar

$$\lim_{k\to\infty} (I - HA)^k = O.$$

**Věta 2.8.** Buď $A \in \mathbb{C}^{n,n}$. Potom platí

$$\lim_{k\to\infty} A^k = O \Leftrightarrow \varrho(A) < 1,$$

kde $\varrho(A)$ je spektrální poloměr matice $A$.

*Důkaz.* Podle Jordanovy věty existuje regulární matice $C$ a blokově diagonální matice

$$J = \begin{pmatrix} J_1 & & \\ & \ddots & \\ & & J_s \end{pmatrix}, \; J_i = \begin{pmatrix} \lambda & & & \\ 1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & \lambda \end{pmatrix},$$

tak, že $A = C^{-1}JC$. Odtud $A^k = C^{-1}J^kC$, takže $A^k \to O \Leftrightarrow J^k \to O$. Zřejmě platí

$$J^k = \begin{pmatrix} J_1^k & & \\ & \ddots & \\ & & J_s^k \end{pmatrix}.$$

Na cvičení se matematickou indukcí dokazovalo, že

$$J_i^k = \begin{pmatrix} \lambda^k & & & & \\ \binom{k}{1}\lambda^{k-1} & \lambda^k & & & \\ \binom{k}{2}\lambda^{k-2} & \binom{k}{1}\lambda^{k-1} & \lambda^k & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \binom{k}{p-1}\lambda^{k-p+1} & \binom{k}{p-2}\lambda^{k-p+2} & \binom{k}{p-3}\lambda^{k-p+3} & \dots & \lambda^k \end{pmatrix},$$

kde $p$ je rozměr bloku $J_i$ a pro $i > k$ klademe $\binom{k}{i} = 0$. Odtud je zřejmé, že platí $J_i^k \to 0 \Leftrightarrow |\lambda| < 1$. $\square$

**Důsledek 2.9.** Iterační posloupnost (25) konverguje při libovolné volbě $\vec{x}^{(0)}$ právě tehdy, je-li $\varrho(I - HA) < 1$.

**Věta 2.10.** Buď $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ a nechť alespoň v jedné normě $\mathbb{C}^{n,n}$ platí $\|A\| < 1$. Potom $A^k \to O$.

*Důkaz.* Ze čtvrté vlastnosti maticové normy vyplývá $\left\|A^k\right\| \leq \|A\|^k$. $\square$

**Důsledek 2.11.** Nechť v některé maticové normě platí $\|I - HA\| < 1$. Potom iterační posloupnost (25) konverguje při libovolné volbě $\vec{x}^{(0)}$.

**Věta 2.12.** Absolutní hodnota každého vlastního čísla matice (spektrální poloměr) je nejvýše rovna její libovolné normě.

2.2.2. *Metoda postupných aproximací.* Rovnici $A\vec{x} = \vec{f}$ přepíšeme do tvaru

$$\vec{o} = \vec{f} - A\vec{x}$$

a k oběma stranám rovnosti přičteme $\vec{x}$. Vzniklou rovnost oindexujeme takto:

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + I(\vec{f} - A\vec{x}^{(k)}). \tag{27}$$

Porovnáním s (25) zjistíme, že při metodě postupných aproximací je $H = I$.

*Konvergence.* Posloupnost (27) konverguje pro každou volbu $\vec{x}^{(0)} \Leftrightarrow \varrho(I - A) < 1$, postačující podmínka je $\|I - A\| < 1$.

**Lemma 2.13.** Je-li $\varrho(B) < 1$, potom je matice $I - B$ regulární.

*Důkaz.* Buď $\varrho(B) < 1$. Na cvičení se dokazovalo, že k libovolné čtvercové matici $B$ existují unitární matice $\Omega$ a horní trojúhelníková matice $R$ tak, že $B = \Omega^H R\, \Omega$. Matice $B$ je tedy podobná trojúhelníkové matici $R$, takže diagonální prvky matice $R$ jsou vlastními čísly matice $B$. Podle předpokladu jsou všechny tyto prvky v absolutní hodnotě menší než 1. Z toho vyplývá, že $I - R$ je horní trojúhelníková matice, jejíž všechny diagonální prvky jsou nenulové. Protože ale platí $I - B = = \Omega^H \Omega - \Omega^H R\, \Omega = \Omega^H (I - R)\, \Omega$, musí být matice $I - B$ regulární. $\square$

*Poznámka.* Předchozí lemma zjednodušeně řečeno říká, že matice, která „se příliš neliší” od jednotkové matice, je regulární.

**Lemma 2.14** („geometrická řada matic”)**.** Buď $\varrho(B) < 1$. Potom platí

$$(I - B)^{-1} = I + B + B^2 + \ldots + B^k + \ldots,$$

tj. označíme-li $S_m = I + B + B^2 + \ldots + B^m$, potom $S_m \overset{m\to\infty}{\longrightarrow} (I - B)^{-1}$.

*Důkaz.* Zřejmě platí $S_m(I - B) = I - B^{m+1}$. Matice $I - B$ je podle předchozí lemmy regulární, a tak můžeme tento vztah zprava vynásobit maticí $(I - B)^{-1}$. Dostaneme $S_m = (I - B)^{-1} - B^{m+1}(I - B)^{-1}$. Zlimicením získáme tvrzení. $\square$

**Věta 2.15.** Buď $\|\ \|$ libovolná norma $\mathbb{C}^{n,1}$ a nechť $\|\ \|$ značí i touto normou generovanou normu $\mathbb{C}^{n,n}$. Je-li $\|I - A\| < 1$, potom platí

$$\left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^*\right\| \leq \|I - A\|^k \left( \left\|\vec{x}^{(0)}\right\| + \frac{\left\|\vec{f}\right\|}{1 - \|I - A\|} \right).$$

*Důkaz.* Označme $B = I - A$. Potom podle (27) platí $\vec{x}^{(k)} = B\vec{x}^{(k-1)} + \vec{f} = = B(B\vec{x}^{(k-2)} + \vec{f}) + \vec{f} = B^2\vec{x}^{(k-2)} + B\vec{f} + \vec{f} = B^2\vec{x}^{(k-2)} + (B + I)\vec{f} = = B^3\vec{x}^{(k-3)} + (B^2 + B + I)\vec{f} = \ldots = B^k\vec{x}^{(0)} + (B^{k-1} + B^{k-2} + \ldots + B + I)\vec{f}$.

Pro přesné řešení platí $A\vec{x}^* = \vec{f}$, takže

$$\vec{x}^* = A^{-1}\vec{f} = (I - B)^{-1}\vec{f} = (I + B + B^2 + \ldots)\vec{f}.$$

Z předchozích dvou vztahů plyne

$$\begin{aligned}\left\|\vec{x}^{(k)}-\vec{x}^{*}\right\| &= \left\|B^k\vec{x}^{(0)}-(B^k+B^{k+1}+B^{k+2}+\ldots)\vec{f}\right\| \leq \\ &\leq \left\|B^k\right\|\left(\left\|\vec{x}^{(0)}\right\|+\left\|I+B+B^2+\ldots\right\|\left\|\vec{f}\right\|\right) \leq \\ &\leq \left\|B^k\right\|\left(\left\|\vec{x}^{(0)}\right\|+(\|I\|+\|B\|+\left\|B^2\right\|+\ldots)\left\|\vec{f}\right\|\right) \leq \\ &\leq \|B\|^k\left(\left\|\vec{x}^{(0)}\right\|+(1+\|B\|+\|B\|^2+\ldots)\left\|\vec{f}\right\|\right) = \|B\|^k\left(\left\|\vec{x}^{(0)}\right\|+\frac{\left\|\vec{f}\right\|}{1-\|B\|}\right).\end{aligned}$$

□

*Poznámka.* Na každou stacionární iterační metodu lze pohlížet jako na metodu postupných aproximací aplikovanou na soustavu $HA\vec{x}=H\vec{f}$.

*Důkaz.* Postupujme stejně jako na začátku: $\vec{o}=H\vec{f}-HA\vec{x}$ a odtud

$$\vec{x}^{(k+1)}=\vec{x}^{(k)}+I(H\vec{f}-HA\vec{x})=\vec{x}^{(k)}+H(\vec{f}-A\vec{x}).$$

□

*Poznámka.* V následujících dvou odstavcích budeme symbolem $(\vec{x},\vec{y})$ označovat standardní skalární součin na $\mathbb{C}^{n,1}$. Připomeňme, že pro tento skalární součin platí $(\vec{x},\vec{y})=\vec{y}^H\vec{x}$.

2.2.3. *Jacobiho metoda (prosté iterace).* Jednotlivé rovnice soustavy $A\vec{x}=\vec{f}$ přepíšeme tak, že z první vyjádříme $x_1$, ze druhé $x_2$ atd. Získané rovnice oindexujeme takto:

$$\begin{array}{lccccccc} x_1^{(k+1)} & = & & -\frac{a_{12}}{a_{11}}x_2{}^{(k)} & -\frac{a_{13}}{a_{11}}x_3{}^{(k)} & - \;\ldots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n{}^{(k)} & +\frac{f_1}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} & = & -\frac{a_{21}}{a_{22}}x_1{}^{(k)} & & -\frac{a_{23}}{a_{22}}x_3{}^{(k)} & - \;\ldots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}}x_n{}^{(k)} & +\frac{f_2}{a_{22}} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ x_n^{(k+1)} & = & -\frac{a_{n1}}{a_{nn}}x_1{}^{(k)} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}}x_2{}^{(k)} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}}x_3{}^{(k)} & - \;\ldots & & +\frac{f_n}{a_{nn}} \end{array}$$

To je ovšem po složkách rozepsaný vztah $\vec{x}^{(k+1)}=(I-D^{-1}A)\vec{x}^{(k)}+D^{-1}\vec{f}$, kde

$$D=\begin{pmatrix}a_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & a_{nn}\end{pmatrix}.$$

Odtud vyplývá $\vec{x}^{(k+1)}=\vec{x}^{(k)}+D^{-1}(\vec{f}-A\vec{x})$, takže $H=D^{-1}$.

*Konvergence.* Jacobiho metoda konverguje při každé volbě $\vec{x}^{(0)} \Leftrightarrow \varrho(I-D^{-1}A)<1$, postačující podmínka je $\left\|I-D^{-1}A\right\|<1$. Vezmeme-li maximovou normu, přejde poslední vztah ve

$$\max_{i\in\hat{n}}\sum_{j=1,\;j\neq i}^{n}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right|<1 \Leftrightarrow (\forall i\in\hat{n})\left(\sum_{j=1,\;j\neq i}^{n}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right|<1\right) \Leftrightarrow (\forall i\in\hat{n})\left(\sum_{j=1,\;j\neq i}^{n}|a_{ij}|<|a_{ii}|\right).$$

Matice, pro které platí poslední nerovnost, nazýváme maticemi s převládající diagonálou. Jacobiho metoda tedy konverguje pro všechny matice s převládající diagonálou.

**Definice 2.16.** Hermitovská, resp. symetrická matice $A$ se nazývá pozitivně definitní, jestliže pro každý vektor, resp. každý reálný vektor $\vec{x}\neq\vec{o}$ platí $(A\vec{x},\vec{x})>0$.

**Věta 2.17.** (1) Všechna vlastní čísla pozitivně definitní matice jsou kladná.
(2) Má-li hermitovská matice všechna vlastní čísla kladná, potom je pozitivně definitní.

*Důkaz.* (1) Buďte $A$ pozitivně definitní matice, $\lambda$ její libovolné vlastní číslo a $\vec{x}$ libovolný k němu příslušející vlastní vektor. Vztah $A\vec{x}=\lambda\vec{x}$ vynásobíme skalárně vektorem $\vec{x}$ a dostaneme

$$\underbrace{(A\vec{x},\vec{x})}_{>0}=\lambda\underbrace{(\vec{x},\vec{x})}_{>0}\Rightarrow\lambda>0.$$

(2) Buď $A$ hermitovská matice, jejíž všechna vlastní čísla jsou kladná. Na cvičeních se dokazovalo, že pro každou normální (a tím spíše hermitovskou) matici $A$ existuje unitární matice $\Omega$ a diagonální matice $D$ tak, že $A = \Omega^H D\, \Omega$. Označíme-li $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ vlastní čísla matice $A$, potom

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Buď $\vec{x} \neq \vec{o}$. Potom $(A\vec{x}, \vec{x}) = \vec{x}^H A\vec{x} = \vec{x}^H \Omega^H D\, \Omega\vec{x}$. Označme $\vec{y} = \Omega\vec{x}$. Je $\vec{y} \neq \vec{o}$, protože jinak by byl vektor $\vec{x}$ netriviálním řešením homogenní soustavy s regulární maticí, a platí

$$(A\vec{x}, \vec{x}) = \vec{y}^H D\vec{y} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left|y_i\right|^2 > 0,$$

neboť všechny sčítance v sumě jsou nezáporné a alespoň jeden z nich je jistě kladný.

□

**Věta 2.18.** Buď $A$ hermitovská matice s kladnými diagonálními prvky. Potom Jacobiho metoda pro soustavu $A\vec{x} = \vec{f}$ konverguje při každé volbě $\vec{x}^{(0)}$ právě tehdy, jsou-li obě matice $A$, $2D - A$ pozitivně definitní.

*Důkaz.* Dokážeme pouze nutnost podmínky. Důkaz opačné implikace se provede stejně, ale v opačném pořadí. Označme

$$P = \begin{pmatrix} \sqrt{a_{11}} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{a_{nn}} \end{pmatrix}.$$

Je tedy $P^2 = D$. Dále platí $I - D^{-1}A = P^{-1}(I - P^{-1}AP^{-1})P$, tedy matice $I - D^{-1}A$ je podobná matici $I - P^{-1}AP^{-1}$. Tato matice je zřejmě hermitovská, a má proto všechna vlastní čísla reálná. Podle předpokladu je $\varrho(I - D^{-1}A) < 1$, a tak jsou tato čísla z intervalu $(-1, 1)$.

Buď $\lambda$ vlastní číslo matice $I - D^{-1}A$. Potom existuje vektor $\vec{x} \neq \vec{o}$ takový, že $(I - D^{-1}A)\vec{x} = \lambda\vec{x}$, takže $D^{-1}A\vec{x} = (1 - \lambda)\vec{x}$. Vlastní čísla matice $D^{-1}A$ jsou tedy z intervalu $(0, 2)$. Protože platí $D^{-1}A = P^{-1}(P^{-1}AP^{-1})P$, znamená to, že matice $P^{-1}AP^{-1}$ je pozitivně definitní.

Buď $\vec{x} \neq \vec{o}$. Potom

$$(A\vec{x}, \vec{x}) = \vec{x}^H A\vec{x} = \vec{x}^H PP^{-1}AP^{-1} \underbrace{P\vec{x}}_{\text{ozn. } \vec{y}} = \vec{y}^H P^{-1}AP^{-1}\vec{y} = ((P^{-1}AP^{-1})\vec{y}, \vec{y}).$$

Stejně jako v důkaze předchozí věty dostaneme $\vec{y} \neq \vec{o}$. Podle definice 2.16 je tedy poslední výraz kladný a matice $A$ je pozitivně definitní.

Obdobně postupujeme i při důkazu pozitivní definitnosti matice $2D - A$:

Buďte opět $\lambda$ vlastní číslo matice $I - D^{-1}A$ a $\vec{x}$ příslušný vlastní vektor. Potom $(2I - D^{-1}A)\vec{x} = (1+\lambda)$, a tak jsou všechna vlastní čísla matice $2I - D^{-1}A$ z intervalu $(0, 2)$. Protože platí $2I - D^{-1}A = P^{-1}(2I - P^{-1}AP^{-1})P$, znamená to, že matice $2I - P^{-1}AP^{-1}$ je pozitivně definitní.

Buď $\vec{x} \neq \vec{o}$. Potom

$$((2D - A)\vec{x}, \vec{x}) = \vec{x}^H(2D - A)\vec{x} = \vec{x}^H PP^{-1}(2D - A)P^{-1} \underbrace{P\vec{x}}_{\text{ozn. } \vec{y}} =$$

$$= \vec{y}^H(2P^{-1}P^2P^{-1} - P^{-1}AP^{-1})\vec{y} = ((2I - P^{-1}AP^{-1})\vec{y}, \vec{y}).$$

Přitom opět $\vec{y} \neq \vec{o}$, takže podle definice 2.16 je poslední výraz kladný. Matice $2D - A$ je tedy pozitivně definitní. □

2.2.4. *Gaussova-Seidelova metoda.* V Jacobiho metodě se všechny složky vektoru $\vec{x}^{(k+1)}$ počítají ze složek vektoru $\vec{x}^{(k)}$. Vzniká přirozená otázka, zda by se (alespoň v některých případech) nedosáhlo zlepšení, kdyby se při tomto výpočtu použily již známé složky vektoru $\vec{x}^{(k+1)}$. Touto úvahou dospějeme ke vzorcům

$$\begin{array}{rcl} a_{11}x_1^{(k+1)} + a_{12}x_2{}^{(k)} + \ldots + a_{1n}x_n{}^{(k)} & = & f_1 \\ a_{21}x_1^{(k+1)} + a_{22}x_2^{(k+1)} + \ldots + a_{1n}x_n{}^{(k)} & = & f_2 \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1}x_1^{(k+1)} + a_{n2}x_2^{(k+1)} + \ldots + a_{nn}x_n^{(k+1)} & = & f_n \end{array}$$

Jak tyto vztahy zapsat vektorově? Ponechme si matici $D$ z předchozího odstavce a navíc definujme

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \ldots & 0 \end{pmatrix}, \; R = \begin{pmatrix} 0 & \ldots & -a_{1n-1} & -a_{1n} \\ & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & 0 & -a_{n-1n} \\ & & & 0 \end{pmatrix}.$$

Potom zřejmě platí $A = -L + D - R$ a $(-L + D)\vec{x}^{(k+1)} - R\vec{x}^{(k)} = \vec{f}$, takže

$$\vec{x}^{(k+1)} = (D - L)^{-1}R\vec{x}^{(k)} + (D - L)^{-1}\vec{f}.$$

Do této rovnice dosadíme $R = D - L - A$ a dostaneme

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + (D - L)^{-1}(\vec{f} - A\vec{x}^{(k)}),$$

odkud porovnáním s (25) plyne $H = (D - L)^{-1}$.

*Konvergence.* Platí $I-(D-L)^{-1}A = I-(D-L)^{-1}[(D-L)-R] = (D-L)^{-1}R$. Metoda tedy konverguje při libovolné volbě $\vec{x}^{(0)} \Leftrightarrow \varrho((D - L)^{-1}R) < 1$, postačující podmínkou je $\left\|(D - L)^{-1}R\right\| < 1$.

**Tvrzení 2.19.** Gaussova-Seidelova metoda konverguje pro matice s převládající diagonálou.

**Věta 2.20.** Je-li matice soustavy pozitivně definitní, pak Gaussova-Seidelova metoda konverguje při libovolné volbě $\vec{x}^{(0)}$.

*Důkaz.* Buď $A$ pozitivně definitní matice a nechť $A = -L + D - R$. Podle definice je matice $A$ hermitovská, takže $(-L + D - R)^H = -L + D - R$. Protože $A^H = \overline{A}^T$, musí nutně platit $L = R^H$. Chceme dokázat, že $\varrho((D - R^H)^{-1}R) < 1$. Buďte $\lambda$ vlastní číslo matice $(D - R^H)^{-1}R$, $\vec{x}$ k němu příslušející vlastní vektor. Vztah $(D - R^H)^{-1}R\vec{x} = \lambda\vec{x}$ vynásobíme zleva maticí $D - R^H$ a dostaneme

$$R\vec{x} = \lambda(D - R^H)\vec{x} = \lambda(A + R)\vec{x} = \lambda A\vec{x} + \lambda R\vec{x}.$$

Odtud po skalárním vynásobení vektorem $\vec{x}$ plyne

$$(R\vec{x}, \vec{x}) = \lambda \underbrace{(A\vec{x}, \vec{x})}_{\text{ozn. } p} + \lambda(R\vec{x}, \vec{x}).$$

Podle definice 2.16 je $p > 0$. Položme $(R\vec{x}, \vec{x}) = a + \mathrm{i}b$, kde $a, b \in \mathbb{R}$. Potom

$$\lambda = \frac{a + \mathrm{i}b}{p + a + \mathrm{i}b}, \; |\lambda|^2 = \frac{a^2 + b^2}{(p + a)^2 + b^2}.$$

Dále platí $p = (A\vec{x}, \vec{x}) = ((-R^H + D - R)\vec{x}, \vec{x}) = -(R^H\vec{x}, \vec{x}) + \underbrace{(D\vec{x}, \vec{x})}_{\text{ozn. } d} - (R\vec{x}, \vec{x}) = = d - (\vec{x}, R\vec{x}) - (a + \mathrm{i}b) = d - \overline{(R\vec{x}, \vec{x})} - (a + \mathrm{i}b) = d - (a - \mathrm{i}b) - (a + \mathrm{i}b) = d - 2a$.

Máme dokázat, že $|\lambda|^2 < 1$. Pozitivně definitní matice má všechny diagonální prvky kladné, neboť $[A]_{ii} = (A\vec{e}^{(i)}, \vec{e}^{(i)}) > 0$. Odtud plyne $d > 0$, protože

$$d = (D\vec{x}, \vec{x}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} |x_i|^2 .$$

Je tedy $(p + a)^2 = p^2 + 2pa + a^2 = p(p + 2a) + a^2 = pd + a^2$, a tak $|\lambda|^2 < 1$. □

*Poznámka.* Gaussova-Seidelova metoda je stejně časově náročná jako Jacobiho metoda. Paměťové nároky jsou menší: Nově vypočítanými složkami vektoru $\vec{x}^{(k+1)}$ můžeme ihned přepisovat složky původní, takže je nemusíme ukládat do zvláštního pole. Obecně Gaussova-Seidelova metoda nekonverguje rychleji než Jacobiho metoda.

2.2.5. *Superrelaxační metoda (Succesive OverRelaxation method).* Výpočet vektoru $\vec{x}^{(k+1)}$ v Gaussově-Seidelově metodě můžeme chápat jako složený z $n$ dílčích kroků, přičemž v $i$-tém kroku se $i$-tá složka vektoru $\vec{x}^{(k)}$ opraví o tolik, aby byla splněna $i$-tá rovnice soustavy, tj. $x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \Delta x_i^{(k)}$, kde

$$\Delta x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}}(f_i - a_{i1}x_1^{(k+1)} - \ldots - a_{ii-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{ii}x_i^{(k)} - \ldots - a_{in}x_n^{(k)}).$$

Položme si otázku, zda bychom nedostali lepší metodu, kdybychom ke každé složce připočítávali jen konstantní násobek tohoto výrazu, tj. $x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega\Delta x_i^{(k)}$, kde $\omega \in \mathbb{R}$. Potom $\forall i \in \hat{n}$ platí

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}}(f_i - a_{i1}x_1^{(k+1)} - \ldots - a_{ii-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{ii}x_i^{(k)} - \ldots - a_{in}x_n^{(k)}),$$

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} = a_{ii}x_i^{(k)} + \omega(f_i - a_{i1}x_1^{(k+1)} - \ldots - a_{ii-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{ii}x_i^{(k)} - \ldots - a_{in}x_n^{(k)}),$$

$$\omega a_{i1}x_1^{(k+1)} + \ldots + \omega a_{ii-1}x_{i-1}^{(k+1)} + a_{ii}x_i^{(k+1)} =$$

$$= (1-\omega)a_{ii}x_i^{(k)} - \omega a_{ii+1}x_{i+1}^{(k)} - \ldots - \omega a_{in}x_n^{(k)} + \omega f_i.$$

To je ale po složkách rozepsaný vektorový vztah

$$-\omega L\vec{x}^{(k+1)} + D\vec{x}^{(k+1)} = (1-\omega)D\vec{x}^{(k)} + \omega R\vec{x}^{(k)} + \omega\vec{f},$$

kde matice $L$, $D$ a $R$ mají stejný význam jako v předchozím odstavci. Vynásobíme-li tento vztah zleva maticí $(D-\omega L)^{-1}$, dostaneme

$$\vec{x}^{(k+1)} = \underbrace{(D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega R]}_{\text{ozn. } \mathcal{L}_\omega}\vec{x}^{(k)} + \omega(D-\omega L)^{-1}\vec{f},$$

odkud po dosazení $R = D - L - A$ plyne

$$\vec{x}^{(k+1)} = [I - \omega(D-\omega L)^{-1}A]\vec{x}^{(k)} + \omega(D-\omega L)^{-1}\vec{f} =$$

$$= \vec{x}^{(k)} + \omega(D-\omega L)^{-1}(\vec{f} - A\vec{x}^{(k)}).$$

Je tedy $H = \omega(D-\omega L)^{-1}$. Při $\omega = 1$ přechází SOR v metodu Gaussovu-Seidelovu.

*Konvergence.* Platí $I - HA = I - \omega(D-\omega L)^{-1}(-L + D - R) = I - (D-\omega L)^{-1}[D - \omega L + (\omega-1)D - \omega R] = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega R] = \mathcal{L}_\omega$.

Označme $\varrho_\omega$ spektrální poloměr matice $\mathcal{L}_\omega$. Superrelaxační metoda konverguje pro libovolnou volbu $\vec{x}^{(0)} \Leftrightarrow \varrho_\omega < 1$, postačující podmínka je $\|\mathcal{L}_\omega\| < 1$.

*Poznámka.* Je třeba nalézt nejvýhodnější hodnotu parametru $\omega$, potřebujeme tedy nějaké kritérium, abychom mohli rozhodnout, která ze dvou iteračních metod je lepší a která horší.

Za lepší ze dvou metod považujeme tu, jejíž matice $I - HA$ má menší spektrální poloměr. Důvod je následující: Nechť je dána iterační metoda $\vec{x}^{(k+1)} = B\vec{x}^{(k)} + \vec{g}$. Pro přesné řešení musí platit $\vec{x}^* = B\vec{x}^* + \vec{g}$. Odečtením těchto dvou vztahů dostaneme

$$\vec{x}^{(k+1)} - \vec{x}^* = B(\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^*) = B^2(\vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}^*) = \ldots = B^{k+1}(\vec{x}^{(0)} - \vec{x}^*).$$

Protože platí $B^{k+1} = T^{-1}J^{k+1}T$, kde $J$ a $T$ jsou příslušné matice z Jordanovy věty, je zřejmé (viz též důkaz věty 2.8), že $B^k$ konverguje k nulové matici stejně rychle jako $(\varrho(B))^k \to 0$.

**Definice 2.21.** (1) Elementární permutační maticí $I_{ij} \in \mathbb{C}^{n,n}$ nazýváme matici, která vznikne z jednotkové matice $I \in \mathbb{C}^{n,n}$ záměnou $i$-tého a $j$-tého řádku (sloupce).

(2) Permutační maticí nazveme matici, která je součinem libovolného počtu elementárních permutačních matic.

*Poznámka.* (1) Elementární permutační matice je symetrická a ortogonální:

$$I_{ij} = I_{ij}^T = I_{ij}^{-1}.$$

Z toho plyne, že každá permutační matice je ortogonální.

(2) Násobení libovolné matice $A$ zleva, resp. zprava maticí $I_{ij}$ odpovídajícího rozměru je ekvivalentní prohození $i$-tého a $j$-tého řádku, resp. sloupce matice $A$. Indukcí získáme toto tvrzení:

Provedeme-li libovolnou permutaci řádků, resp. sloupců matice $A$, je výsledek ekvivalentní násobení matice $A$ zleva, resp. zprava permutační maticí odpovídajícího rozměru, která vznikne z $I$ stejnou permutací řádků, resp. sloupců.

(3) Předchozí definice permutační matice je sice snadno zapamatovatelná, není z ní však na první pohled zřejmé, odkud se vzalo pojmenování této matice. Uveďme si proto jinou, s předchozí zřejmě ekvivalentní definici:

Permutační maticí nazveme takovou matici $P = (p_{ij})$, pro kterou existuje permutace $\pi \in S_n$ tak, že

$$p_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{když } \pi(i) = j, \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$

**Definice 2.22.** Čtvercová matice $A$ se nazývá slabě cyklická s indexem 2, existuje-li permutační matice $P$ taková, že matice $PAP^T$ je blokového tvaru

$$\begin{pmatrix} O & M_1 \\ M_2 & O \end{pmatrix}, \tag{28}$$

kde diagonální bloky jsou čtvercové matice.

*Poznámka.* Matice je slabě cyklická s indexem 2, lze-li ji simultánní (tj. stejnou) permutací řádků a sloupců převést na blokový tvar (28).

**Definice 2.23.** Buď $A = -L + D - R$. Matice $A$ se nazývá dvoucyklická, je-li matice $D^{-1}(L+R)$ slabě cyklická s indexem 2. Dvoucyklická matice se nazývá shodně uspořádaná, jestliže vlastní čísla matice $\alpha D^{-1}L + \frac{1}{\alpha}D^{-1}R$ nezávisejí na volbě čísla $\alpha \neq 0$.

*Poznámka.* Matice je shodně uspořádaná, jestliže se spektrum (Jacobiho) matice $D^{-1}(L+R)$ nezmění po vynásobení prvků pod diagonálou číslem $\alpha$ a prvků nad diagonálou číslem $\alpha^{-1}$.

**Věta 2.24.** Má-li matice slabě cyklická s indexem 2 vlastní číslo $\mu$, potom má i vlastní číslo $-\mu$.

*Důkaz.* Matice slabě cyklická s indexem 2 je podle definice podobná blokové matici (28). Má tedy i stejný charakteristický polynom

$$\begin{vmatrix} \lambda I_1 & -M_1 \\ -M_2 & \lambda I_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} I_1 & O \\ \frac{1}{\lambda}M_2 & I_2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \lambda I_1 & -M_1 \\ -M_2 & \lambda I_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda I_1 & -M_1 \\ O & -\frac{1}{\lambda}M_2M_1 + \lambda I_2 \end{vmatrix} =$$

$= \lambda^{s_1 - s_2}|\lambda^2 I_2 - M_2M_1|$, kde $I_1$ je jednotková matice typu $(s_1,\, s_1)$ a $I_2$ jednotková matice typu $(s_2,\, s_2)$. Poslední výraz má ovšem tu vlastnost, že když je nulován pro $\lambda = \mu$, je nulován i pro $\lambda = -\mu$. □

**Věta 2.25.** Buď $A$ dvoucyklická shodně uspořádaná a nechť $\omega \neq 0$.

(1) Buď $\lambda \neq 0$ vlastní číslo matice $\mathcal{L}_\omega$ a nechť číslo $\mu$ splňuje rovnici

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = \omega^2\mu^2\lambda. \tag{29}$$

Potom $\mu$ je vlastní číslo (Jacobiho) matice $D^{-1}(L+R)$.

(2) Buď $\mu$ vlastní číslo (Jacobiho) matice $D^{-1}(L+R)$ a nechť $\lambda$ splňuje rovnici (29). Potom $\lambda$ je vlastní číslo matice $\mathcal{L}_\omega$.

Je-li navíc $A$ pozitivně definitní, potom jsou všechna vlastní čísla $\mu$ Jacobiho matice reálná, $|\mu| < 1$ (tj. $\varrho(D^{-1}(L+R)) < 1$) a SOR konverguje pro libovolnou volbu $\vec{x}^{(0)} \Leftrightarrow \omega \in (0,\, 2)$.

Definujme

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu_0^2}},$$

kde $\mu_0 = \varrho(D^{-1}(L-R))$. Pak $1 \leq \omega_0 < 2$, $\varrho_\omega$ je klesající funkcí $\omega$ v intervalu $(0,\, \omega_0\rangle$ a pro $\omega \in \langle\omega_0,\, 2)$ platí $\varrho_\omega = \omega - 1$.

*Důkaz.* (1) Buďte $\lambda \neq 0$ vlastní číslo matice $\mathcal{L}_\omega$, $\vec{x}$ k němu příslušející vlastní vektor. Potom platí $(D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega R]\vec{x} = \lambda\vec{x}$. Tuto rovnici vynásobíme zleva maticí $D-\omega L$ a dostaneme $[(1-\omega)D+\omega R]\vec{x} = \lambda(D-\omega L)\vec{x}$, odkud $\omega(R+\lambda L)\vec{x} = (\lambda+\omega-1)D\vec{x}$. Tento vztah vynásobíme zleva maticí $\frac{1}{\sqrt{\lambda}\omega}D^{-1}$, kde $\sqrt{\lambda}$ značí libovolnou komplexní druhou odmocninu z $\lambda$. Potom

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda}}D^{-1}R + \sqrt{\lambda}D^{-1}L\right)\vec{x} = \underbrace{\frac{\lambda+\omega-1}{\sqrt{\lambda}\omega}}_{\text{ozn. } \mu}\,\vec{x}.$$

Číslo $\mu$ je tedy vlastním číslem matice $\sqrt{\lambda}D^{-1}L + \frac{1}{\sqrt{\lambda}}D^{-1}R$. Protože je matice $A$ shodně uspořádaná, musí být $\mu$ též vlastním číslem matice $D^{-1}L + D^{-1}R$. Tato matice je ovšem slabě cyklická s indexem 2 (matice $A$ je dvoucyklická), a tak je jejím vlastním číslem i $-\mu$.

(2) Pro $\lambda \neq 0$, $\omega \neq 0$ se bod 2 dokáže analogicky. Pro $\lambda = 0$ připadá podle (29) v úvahu jen $\omega = 1$ a tehdy SOR přechází v Gaussovu-Seidelovu metodu, tj. $\mathcal{L}_\omega = (D-L)^{-1}R$. Máme dokázat, že $(\exists\vec{x} \neq \vec{o})((D-L)^{-1}R\,\vec{x} = \vec{o})$, tedy že matice $(D-L)^{-1}R$ je singulární. Z definice matice $R$ je zřejmé, že $R$ je singulární, a tak musí být singulární i $(D-L)^{-1}R$.

Položme $\omega = 1$. Potom (29) přejde v $\lambda^2 = \mu^2\lambda$, pro $\lambda \neq 0$ je tedy $\lambda = \mu^2$. Odtud $\varrho((D-L)^{-1}R) = (\varrho(D^{-1}(L+R)))^2$, takže Gaussova-Seidelova metoda konverguje, právě když konverguje Jacobiho metoda. Buď nyní $A$ pozitivně difinitní. Potom Gaussova-Seidelova metoda konverguje při libovolné volbě $\vec{x}^{(0)}$. To ovšem — jak jsme právě dokázali — znamená, že pro libovolné $\vec{x}^{(0)}$ konverguje i Jacobiho metoda, takže musí být $\varrho(D^{-1}(L+R)) < 1$.

Platí

$$D^{-1}(L+R) = D^{-\frac{1}{2}}[D^{-\frac{1}{2}}(L+R)D^{-\frac{1}{2}}]D^{\frac{1}{2}},$$

tj. matice $D^{-1}(L+R)$ je podobná matici $D^{-\frac{1}{2}}(L+R)D^{-\frac{1}{2}}$. Protože je matice $A$ pozitivně definitní, musí být podle definice 2.16 hermitovská. Z definice hermitovské matice je zřejmé, že hermitovská je potom i matice $L+R$ a tím pádem i matice $D^{-\frac{1}{2}}(L+R)D^{-\frac{1}{2}}$. Každá hermitovská matice má všechna vlastní čísla reálná, a tak má všechna vlastní čísla reálná i matice $D^{-1}(L+R)$.

Přepišme (29) do tvaru

$$\lambda^2 + [2(\omega-1) - \omega^2\mu^2]\lambda + (\omega-1)^2 = 0. \tag{30}$$

Každé vlastní číslo $\lambda$ matice $\mathcal{L}_\omega$ je tedy kořenem kvadratické rovnice s reálnými koeficienty. Odtud ihned vyplývá:

(1) Je-li $\lambda$ imaginární vlastní číslo $\mathcal{L}_\omega$, je jím i $\overline{\lambda}$ a platí $\lambda\overline{\lambda} = (\omega-1)^2$, takže $|\lambda| = \sqrt{\lambda\overline{\lambda}} = |\omega-1|$.
(2) Je-li $\lambda_1$ reálné vlastní číslo $\mathcal{L}_\omega$, je jím i $\lambda_2$ takové, že $\lambda_1\lambda_2 = (\omega-1)^2$. Bez újmy na obecnosti potom platí např. $\lambda_2 \leq |\omega-1| \leq \lambda_1$.

Nutnou podmínkou pro konvergenci metody při libovolné volbě $\vec{x}^{(0)}$ je tedy $\omega \in (0, 2)$, neboť jinak by některé vlastní číslo matice $\mathcal{L}_\omega$ muselo mít absolutní hodnotu větší nebo rovnu jedné. Z bodu 1 plyne, že jsou-li všechna vlastní čísla matice $\mathcal{L}_\omega$ imaginární, potom $\varrho_\omega = |\omega-1|$. Z bodu 2 plyne, že má-li matice $\mathcal{L}_\omega$ alespoň jedno vlastní číslo reálné, potom platí $\varrho_\omega = \max\{|\lambda| \mid \lambda \in \sigma(\mathcal{L}_\omega) \cap \mathbb{R}\}$. Naším cílem je vhodně vyjádřit $\varrho_\omega$ v tomto druhém případě. Omezíme se tedy na reálné kořeny rovnice (29) a $\omega \in (0, 2)$.

Vztah (29) tentokrát přepíšeme takto:

$$\frac{\lambda+\omega-1}{\omega} = \pm\mu\sqrt{\lambda}.$$

Tuto rovnici řešme graficky. Jejími reálnými kořeny jsou $\lambda$-ové souřadnice průsečíků přímky $y = \frac{1}{\omega}(\lambda+\omega-1)$ s parabolou $y = \pm\mu\sqrt{\lambda}$. Přímka prochází bodem $[1, 1]$, parabola prochází počátkem a je tím otevřenější, čím je $|\mu|$ větší. Pro pevné $\omega$ získáme $\varrho_\omega$ jako větší z $\lambda$-ových souřadnic průsečíků přímky s parabolou při volbě $\mu_0 = \varrho(D^{-1}(L+R))$, tj. v případě, kdy je parabola nejotevřenější.

S rostoucím $\omega$ se bude $\varrho_\omega$ zmenšovat — přímka se bude naklánět v záporném smyslu až do chvíle, kdy se stane tečnou paraboly; tehdy položme $\omega = \omega_0$. Pro $\omega > \omega_0$ přímka s parabolou žádné průsečíky nemá a všechna vlastní čísla matice $\mathcal{L}_\omega$ jsou imaginární, tj. platí $\varrho_\omega = |\omega-1|$; ovšem jen do meze $\omega = \omega_1$, kdy se přímka dotkne paraboly ,,vpravo"od bodu $[1, 1]$. Potom ale zřejmě $\varrho_\omega > 1$, takže metoda nemůže konvergovat při každé volbě $\vec{x}^{(0)}$.

Nyní určíme $\omega_0$ tak, že položíme diskriminant rovnice (30) roven nule:

$$4(\omega-1)^2 - 4(\omega-1)\omega^2\mu_0^2 + \omega^4\mu_0^4 - 4(\omega-1)^2 = 0, \qquad \omega^2\mu_0^2 - 4\omega + 4 = 0,$$

$$\omega_{1,\,2} = \frac{4 \pm \sqrt{16-16\mu_0^2}}{2\mu_0^2} = 2 \cdot \frac{1 \pm \sqrt{1-\mu_0^2}}{\mu_0^2} = \frac{2\mu_0^2}{\mu_0^2(1 \mp \sqrt{1-\mu_0^2})}.$$

Protože musí $\omega_0 \in (0,\,2)$, dostáváme

$$\omega_0 = \frac{2}{1+\sqrt{1-\mu_0^2}}.$$

□

## 3. Částečný problém vlastních čísel

Máme nalézt jedno, popřípadě několik zpravidla v absolutní hodnotě největších vlastních čísel a případně i odpovídající vlastní vektory.

**3.1. Mocninná metoda.** Zvolíme $\vec{x}^{(0)}$ tak, aby $e_1^T\vec{x}^{(0)} \neq 0$. Konstruujeme posloupnosti

$$\varrho_k = \vec{e}_1^T A\vec{x}^{(k)},\ \vec{x}^{(k+1)} = \frac{1}{\varrho_k}A\vec{x}^{(k)}. \tag{31}$$

Zřejmě platí

$$\vec{x}^{(k+1)} = \frac{1}{\varrho_k\varrho_{k-1}}A^2\vec{x}^{(k-1)} = \ldots = \frac{1}{\varrho_k\varrho_{k-1}\cdots\varrho_0}A^{k+1}\vec{x}^{(0)}. \tag{32}$$

Dále, dosadíme-li první výraz v (31) do druhého výrazu tamtéž, obdržíme

$$\vec{x}^{(k+1)} = \frac{1}{e_1^T A\vec{x}^{(k)}}A\vec{x}^{(k)}. \tag{33}$$

Vynásobíme-li tuto rovnici zleva vektorem $e_1^T$, dostaneme

$$(\forall k \in \mathbb{N})(e_1^T\vec{x}^{(k)} = 1). \tag{34}$$

1. Nechť $A$ má v absolutní hodnotě největší jediné vlastní číslo $\lambda_1$ s algebraickou i geometrickou násobností rovnou 1. Potom podle Jordanovy věty existuje regulární matice $T$ tak, že platí

$$A = T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1 & & \\ & J_2 & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T.$$

Odtud s využitím (34) a (32) plyne

$$\varrho_k = e_1^T A\vec{x}^{(k)} = \frac{e_1^T A\vec{x}^{(k)}}{e_1^T\vec{x}^{(k)}} = \frac{\varrho_{k-1}\cdots\varrho_0}{\varrho_{k-1}\cdots\varrho_0}\cdot\frac{e_1^T A^{k+1}\vec{x}^{(0)}}{e_1^T A^k\vec{x}^{(0)}} =$$

$$= \frac{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^{k+1} & & \\ & J_2^{k+1} & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^{k} & & \\ & J_2^{k} & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}} = \lambda_1\frac{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}1 & & \\ & (\frac{1}{\lambda_1}J_2)^{k+1} & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}1 & & \\ & (\frac{1}{\lambda_1}J_2)^{k} & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}.$$

Podle věty 2.8 konvergují diagonální bloky k nulové matici, a tak

$$\varrho_k \overset{k\to\infty}{\longrightarrow} \lambda_1\frac{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}1 & \\ & O\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}1 & \\ & O\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}} = \lambda_1$$

za předpokladu, že $e_1^T T\vec{x}^{(0)} \neq 0$. Jednak je ale nalezení takového vektoru $\vec{x}^{(0)}$, že $e_1^T T\vec{x}^{(0)} = 0$, dosti obtížné, jednak vše spraví chyby vzniklé zaokrouhlováním. Dále podle (33) a (32) platí

$$\vec{x}^{(k)} = \frac{A\vec{x}^{(k-1)}}{e_1^T A\vec{x}^{(k-1)}} = \frac{\varrho_{k-2}\cdots\varrho_0}{\varrho_{k-2}\cdots\varrho_0}\cdot\frac{A^k\vec{x}^{(0)}}{e_1^T A^k\vec{x}^{(0)}} =$$

$$= \frac{T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^{k} & & \\ & J_2^{k} & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^{k} & & \\ & J_2^{k} & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}} = \frac{T^{-1}\begin{pmatrix}1 & & \\ & (\frac{1}{\lambda_1}J_2)^{k} & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}1 & & \\ & (\frac{1}{\lambda_1}J_2)^{k} & \\ & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}.$$

Analogicky jako výše dostaneme

$$\vec{x}^{(k)} \overset{k\to\infty}{\longrightarrow} \frac{T^{-1}\begin{pmatrix}1 & \\ & O\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}1 & \\ & O\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}} \overset{\text{ozn.}}{=} \vec{y}.$$

Zjistili jsme tedy, že posloupnost $(\vec{x}^{(k)})$ konverguje. Snadno se přesvědčíme, že její limitní vektor $\vec{y}$ je vlastním vektorem matice $A$ příslušejícím k vlastnímu číslu $\lambda_1$: Z (31) totiž vyplývá vztah $\varrho_k \vec{x}^{(k+1)} = A\vec{x}^{(k)}$ a jeho zlimicením dostáváme $\lambda_1 \vec{y} = A\vec{y}$.

2. Nechť $A$ má v absolutní hodnotě největší jediné vlastní číslo $\lambda_1$ s algebraickou i geometrickou násobností rovnou $p$. Potom podle Jordanovy věty existuje regulární matice $T$ tak, že platí

$$A = T^{-1}\begin{pmatrix} \underbrace{\begin{matrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_1\end{matrix}}_{p\text{-krát}} & & \\ & J_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} T$$

a chování posloupností $(\varrho_k)$, $(\vec{x}^{(k)})$ bude podobné jako v předchozím případě, pouze s následující záměnou matic:

$$\begin{pmatrix}1 & & \\ & 0 & \\ & & \ddots\end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \underbrace{\begin{matrix}1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1\end{matrix}}_{p\text{-krát}} & & \\ & 0 & \\ & & \ddots \end{pmatrix},$$

tj. tam, kde v bodě 1 vystupovala první matice, bude nyní vystupovat druhá.

3. Nechť $A$ má v absolutní hodnotě největší dvě vlastní čísla $\lambda_1, -\lambda_1$ s algebraickou i geometrickou násobností rovnou 1. Potom podle Jordanovy věty existuje regulární matice $T$ tak, že platí

$$A = T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1 & & & \\ & -\lambda_1 & & \\ & & J_2 & \\ & & & \ddots\end{pmatrix} T. \tag{35}$$

Podobnou cestou jako v případě 1 dostaneme

$$\varrho_k = \frac{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^{k+1} & & & \\ & (-\lambda_1)^{k+1} & & \\ & & J_2^{k+1} & \\ & & & \ddots\end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^{k} & & & \\ & (-\lambda_1)^{k} & & \\ & & J_2^{k} & \\ & & & \ddots\end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}} =$$

$$= \lambda_1 \frac{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & (-1)^{k+1} & & \\ & & (\frac{1}{\lambda_1} J_2)^{k+1} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & (-1)^{k} & & \\ & & (\frac{1}{\lambda_1} J_2)^{k} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}.$$

Tato posloupnost obecně diverguje, vybrané posloupnosti $\varrho_{2i}$, $\varrho_{2i+1}$ však konvergují:

$$\varrho_{2i} \xrightarrow{i\to\infty} \lambda_1 \frac{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}, \quad \varrho_{2i+1} \xrightarrow{i\to\infty} \lambda_1 \frac{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}$$

a platí $\varrho_{2i}\varrho_{2i+1} \to \lambda_1^2$.

Posloupnosti $A\vec{x}^{(k)} + \lambda_1\vec{x}^{(k)}$, resp. $A\vec{x}^{(k)} - \lambda_1\vec{x}^{(k)}$ aproximují vlastní vektory příslušné k vlastním číslům $\lambda_1$, resp. $-\lambda_1$, i když nekonvergují. Dokážeme například, že posloupnost $A\vec{x}^{(2i)} + \lambda_1\vec{x}^{(2i)}$ konverguje k vlastnímu vektoru přísl. k vlastnímu číslu $\lambda_1$:

Podle (31) je

$$A\vec{x}^{(2i)} + \lambda_1\vec{x}^{(2i)} = \frac{A^2\vec{x}^{(2i-1)} + \lambda_1 A\vec{x}^{(2i-1)}}{e_1^T A\vec{x}^{(2i-1)}} = \frac{A^{2i+1}\vec{x}^{(0)} + \lambda_1 A^{2i}\vec{x}^{(0)}}{e_1^T A^{2i}\vec{x}^{(0)}} =$$

$$= \frac{T^{-1}\left[\begin{pmatrix} \lambda_1^{2i+1} & & & \\ & (-\lambda_1)^{2i+1} & & \\ & & J_2^{2i+1} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} \lambda_1^{2i} & & & \\ & (-\lambda_1)^{2i} & & \\ & & J_2^{2i} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}\right] T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1^{2i} & & & \\ & (-\lambda_1)^{2i} & & \\ & & J_2^{2i} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}} =$$

$$= \lambda_1 \frac{T^{-1} \begin{pmatrix} 2 & & & \\ & 0 & & \\ & & (\frac{1}{\lambda_1} J_2)^{2i+1} + (\frac{1}{\lambda_1} J_2)^{2i} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & (\frac{1}{\lambda_1} J_2)^{2i} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}} \xrightarrow{i\to\infty} \frac{\lambda_1}{\alpha} T^{-1} \begin{pmatrix} 2 & \\ & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}$$

a tento limitní vektor je vlastním vektorem matice $A$ příslušejícím k vlastnímu číslu $\lambda_1$. S využitím (35) totiž dostaneme

$$A\left[\frac{\lambda_1}{\alpha} T^{-1} \begin{pmatrix} 2 & \\ & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}\right] = \frac{\lambda_1}{\alpha} T^{-1} \begin{pmatrix} 2\lambda_1 & \\ & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)} = \lambda_1 \frac{\lambda_1}{\alpha} T^{-1} \begin{pmatrix} 2 & \\ & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}.$$

4. Nechť $A$ má v absolutní hodnotě největší dvě vlastní čísla $\lambda_1$, $\overline{\lambda}_1$ s algebraickou i geometrickou násobností rovnou 1. Potom podle Jordanovy věty existuje regulární matice $T$ tak, že platí

$$A = T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \overline{\lambda}_1 & & \\ & & J_2 & \\ & & & \ddots\end{pmatrix}T.$$

Podobně jako výše zjistíme, že posloupnosti (31) v tomto případě nekonvergují, protože se $(\frac{\overline{\lambda}_1}{\lambda_1})^k$ a $(\frac{\lambda_i}{\lambda_1})^k$, $i > 1$ točí v jednotkové kružnici.

**Tvrzení 3.1.** Buď $t^2 + pt + q$ polynom, který má za kořeny $\lambda_1$, $\overline{\lambda}_1$. Potom

$$A^2\vec{x}^{(k)} + pA\vec{x}^{(k)} + q\vec{x}^{(k)} \overset{k\to\infty}{\longrightarrow} \vec{o},$$

tj. pro vysoká $k$ je soubor vektorů $(A^2\vec{x}^{(k)}, A\vec{x}^{(k)}, \vec{x}^{(k)})$ téměř lineárně závislý.

*Důkaz.* Platí $A^2\vec{x}^{(k)} + pA\vec{x}^{(k)} + q\vec{x}^{(k)} =$

$$= \frac{1}{e_1^T A\vec{x}^{(k-1)}}[A^3 + pA^2 + qA]\vec{x}^{(k-1)} = \frac{[A^{k+2} + pA^{k+1} + qA^k]\vec{x}^{(0)}}{e_1^T A^k \vec{x}^{(0)}} =$$

$$= \frac{T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^{k+2} + p\lambda_1^{k+1} + q\lambda_1^k & & & \\ & \overline{\lambda}_1^{k+2} + p\overline{\lambda}_1^{k+1} + q\overline{\lambda}_1^k & & \\ & & J_2^{k+2} + pJ_2^{k+1} + qJ_2^k & \\ & & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^k & & & \\ & \overline{\lambda}_1^k & & \\ & & J_2^k & \\ & & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}} =$$

$$= \frac{T^{-1}\begin{pmatrix}\lambda_1^2 + p\lambda_1 + q & & & \\ & (\frac{\overline{\lambda}_1}{\lambda_1})^k(\overline{\lambda}_1^2 + p\overline{\lambda}_1 + q) & & \\ & & (\frac{1}{\lambda_1}J_2)^k(J_2^2 + pJ_2 + q) & \\ & & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1}\begin{pmatrix}1 & & & \\ & (\frac{\overline{\lambda}_1}{\lambda_1})^k & & \\ & & (\frac{1}{\lambda_1}J_2)^k & \\ & & & \ddots\end{pmatrix}T\vec{x}^{(0)}} \overset{k\to\infty}{\longrightarrow} \vec{o},$$

neboť $\lambda_1^2 + p\lambda_1 + q = \overline{\lambda}_1^2 + p\overline{\lambda}_1 + q = 0$ a stále předpokládáme $e_1^T T\vec{x}^{(0)} \neq 0$. □

Postup je tedy následující: Protože platí $A^2\vec{x}^{(k)} = \varrho_{k+1}\varrho_k\vec{x}^{(k+2)}$, $A\vec{x}^{(k)} = \varrho_k\vec{x}^{(k+1)}$, stačí sledovat lineární závistlost tří po sobě jdoucích členů posloupnosti $\vec{x}^{(k)}$ pro vysoké indexy $k$, z nich vypočítat koeficienty $p$, $q$ a vlastní čísla $\lambda_1$, $\overline{\lambda}_1$ nalézt jako kořeny polynomu $t^2 + pt + q$.

Posloupnosti $A\vec{x}^{(k)} - \lambda_1\vec{x}^{(k)}$, resp. $A\vec{x}^{(k)} - \overline{\lambda}_1\vec{x}^{(k)}$ aproximují vlastní vektory příslušné k vlastním číslům $\overline{\lambda}_1$, resp. $\lambda_1$. Dokážeme první z těchto případů:

Platí $A^2\vec{x}^{(k)} + pA\vec{x}^{(k)} + q\vec{x}^{(k)} \approx \vec{o}$, přičemž $p = -(\lambda_1 + \overline{\lambda}_1)$ a $q = \lambda_1\overline{\lambda}_1$. Po dosazení dostaneme $A^2\vec{x}^{(k)} - \lambda_1 A\vec{x}^{(k)} \approx \overline{\lambda}_1 A\vec{x}^{(k)} - \lambda_1\overline{\lambda}_1\vec{x}^{(k)}$, tj. $A(A\vec{x}^{(k)} - \lambda_1\vec{x}^{(k)}) \approx \approx \overline{\lambda}_1(A\vec{x}^{(k)} - \lambda_1\vec{x}^{(k)})$.

5. Nechť $A$ má v absolutní hodnotě největší jediné vlastní číslo $\lambda_1$ s algebraickou násobností rovnou 2 a geometrickou násobností rovnou 1. Potom podle Jordanovy věty existuje regulární matice $T$ tak,

že platí

$$A = T^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ 1 & \lambda_1 & & \\ & & J_2 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T.$$

Tentokrát dostaneme

$$\varrho_k = \frac{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1^{k+1} & & & \\ (k+1)\lambda_1^k & \lambda_1^{k+1} & & \\ & & J_2^{k+1} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1^k & & & \\ k\lambda_1^{k-1} & \lambda_1^k & & \\ & & J_2^k & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}} =$$

$$= \frac{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ k+1 & \lambda_1 & & \\ & & (\frac{1}{\lambda_1} J_2)^k J_2 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \frac{k}{\lambda_1} & 1 & & \\ & & (\frac{1}{\lambda_1} J_2)^k & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}.$$

Poslední výraz má pro $k \to \infty$ stejnou limitu jako výraz

$$\frac{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ k+1 & \lambda_1 & \\ & & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & \\ \frac{k}{\lambda_1} & 1 & \\ & & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}} = \lambda_1 \left[ 1 + \frac{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 0 & & \\ \frac{1}{\lambda_1} & 0 & \\ & & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}}{e_1^T T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & \\ \frac{k}{\lambda_1} & 1 & \\ & & O \end{pmatrix} T\vec{x}^{(0)}} \right] \xrightarrow{k\to\infty} \lambda_1.$$

*Poznámka.* Právě popsaný případ se od předchozích liší rychlostí konvergence. Ta v případech 1–4 závisela na rychlostech konvergencí $(\frac{\lambda_i}{\lambda_1})^k \to 0$, $i > 1$; v případě 5 je konvergence úměrná $1/k$, tedy výrazně pomalejší. Považujeme-li 5 za 4, získáme výsledek rychleji.

*Poznámka.* Členy posloupnosti $(\vec{x}^{(k)})$ jsou pouhými násobky tzv. Krylovovy posloupnosti $(A^k \vec{x}^{(0)})$. Stačilo by tedy počítat členy této posloupnsoti. Přesto je i v tomto případě potřeba alespoň čas od času dělit vhodnou konstantou, aby nedošlo k přetečení nebo naopak zaokrouhlení na nulu.

3.2. **Redukční metoda.** Představte si, že znáte jedno vlastní číslo $\lambda$ matice $A$ a k němu příslušející vlastní vektor $\vec{u} = (u_1, \dots, u_n)^T$. Jestliže vás zajímá ještě nějaké jiné vlastní číslo (a k němu příslušející vlastní vektor) této matice, potom redukční metoda je tím, co potřebujete.

Bez újmy na obecnosti buď $u_1 \neq 0$. Označme

$$P = \begin{pmatrix} u_1 & & & \\ u_2 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ u_n & & & 1 \end{pmatrix} = (\vec{u}, \vec{e}^{(2)}, \dots, \vec{e}^{(n)}).$$

Potom

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{u_1} & & & \\ \frac{-u_2}{u_1} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \frac{-u_n}{u_1} & & & 1 \end{pmatrix}$$

a $AP = (A\vec{u},\ A\vec{e}^{(2)},\ \ldots,\ A\vec{e}^{(n)})$, odkud

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \frac{1}{u_1} & & & \\ \frac{-u_2}{u_1} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \frac{-u_n}{u_1} & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 u_1 & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ \lambda_1 u_2 & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \lambda_1 u_n & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_1 & \frac{a_{12}}{u_1} & \ldots & \frac{a_{1n}}{u_1} \\ 0 & a_{22} - \frac{u_2}{u_1} a_{12} & \ldots & a_{2n} - \frac{u_2}{u_1} a_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2} - \frac{u_n}{u_1} a_{12} & \ldots & a_{nn} - \frac{u_n}{u_1} a_{1n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \frac{a_{12}}{u_1} & \ldots & \frac{a_{1n}}{u_1} \\ & & & \\ \vec{o} & & B & \\ & & & \end{pmatrix},$$

přičemž $B$ jsme označili sumbatici, která vznikne z matice $P^{-1}AP$ vynecháním prvního řádku a sloupce. Matice $A$ je podobná matici $P^{-1}AP$, má proto stejný charakteristický polynom $|A - \lambda I| = (\lambda_1 - \lambda)\,|B - \lambda I|$. Matice $B$ má tedy stejné spektrum jako matice $A$ až na to, že vlastní číslo $\lambda_1$ v něm má o jedničku menší algebraickou násobnost. Speciálně, je-li $\lambda_1$ jednoduché vlastní číslo matice $A$, potom to není vlastní číslo matice $B$.

Spočteme-li (např. mocninnou metodou) nějaké vlastní číslo $\lambda_2 \neq \lambda_1$ matice $B$ a k němu příslušející vlastní vektor $\vec{z} = (z_2,\ \ldots,\ z_n)^T$, získáme vlastní vektor matice $A$ příslušející k vlastnímu číslu $\lambda_2$ takto: Hledejme $z_1 \in \mathbb{C}$ tak, aby $\begin{pmatrix} z_1 \\ \vec{z} \end{pmatrix}$ byl vlastní vektor matice $P^{-1}AP$. Musí platit

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & \frac{a_{12}}{u_1} & \ldots & \frac{a_{1n}}{u_1} \\ \vec{o} & & B & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ \vec{z} \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} z_1 \\ \vec{z} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 z_1 + \frac{1}{u_1}(a_{12} z_2 + \ldots + a_{1n} z_n) \\ \lambda_2 \vec{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_2 z_1 \\ \lambda_2 \vec{z} \end{pmatrix},$$

$$z_1 = \frac{a_{12} z_2 + \ldots + a_{1n} z_n}{(\lambda_2 - \lambda_1) u_1}.$$

Přechod od vlastního vektoru matice $P^{-1}AP$ k vlastnímu vektoru matice $A$ je již hračkou: Stačí vztah

$$P^{-1}AP \begin{pmatrix} z_1 \\ \vec{z} \end{pmatrix} = \lambda_2 \begin{pmatrix} z_1 \\ \vec{z} \end{pmatrix}$$

vynásobit zleva maticí $P$ a dozvíme se, že vlastním vektorem matice $A$ příslušejícím k vlastnímu číslu $\lambda_2$ je vektor

$$P \begin{pmatrix} z_1 \\ \vec{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 & & & \\ u_2 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ u_n & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 u_1 \\ z_1 u_2 + z_2 \\ \vdots \\ z_1 u_n + z_n \end{pmatrix} = z_1 \vec{u} + \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{z} \end{pmatrix}.$$

*Poznámka.* K řešení úplného problému vlastních čísel se redukční metoda nehodí, neboť v praxi by se každé další vlastní číslo počítalo se stále menší přesností.

# 4. Úplný problém vlastních čísel

Úkolem je nalézt v sechna vlastní čísla a případně i všechny vlastní vektory dané regulární matice.

## 4.1. **Trojúhelníková metoda a LR-algoritmus.**

4.1.1. *Trojúhelníková metoda.* Konstruujeme dvě posloupnosti matic $(L_s)$, $(R_s)$ tak, že $L_0$ zvolíme a matice $L_1$, $R_1$ získáme z rozkladu matice $AL_0$ na součin dolní trojúhelníkové matice s jedničkami na diagonále a horní trojúhelníkové matice: $AL_0 = L_1 R_1$. Předpokládejme, že matice $AL_0$ je silně regulární, aby byl tento rozklad jednoznačný. Dále postupujeme analogicky:

$$AL_k = L_{k+1} R_{k+1}, \tag{36}$$

přičemž $L_{k+1}$ je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále a $R_{k+1}$ horní trojúhelníková matice.

Za příznivých okolností posloupnost $(L_s)$ konverguje a potom vlastní čísla a vektory matice $A$ najdeme snadno:

**Tvrzení 4.1.** Nechť posloupnost $(L_s)$ konverguje k matici $L$. Potom konverguje i posloupnost $(R_s)$, a označíme-li $R$ limitní matici této posloupnosti, platí:

1. Diagonální prvky matice $R$ jsou vlastní čísla matice $A$.
2. Je-li $\vec{y}$ vlastní vektor matice $R$, potom $L\vec{y}$ je vlastní vektor matice $A$.

*Důkaz.* Z (36) vyplývá $R_{k+1} = L_{k+1}^{-1} AL_k$, a konverguje-li posloupnost $(L_s)$, potom zřejmě konverguje i posloupnost $(L_s^{-1})$, takže musí konvergovat i posloupnost $(R_s)$. Zlimicením tohoto vztahu dostaneme $R = L^{-1}AL$.

1. Poslední rovnost znamená, že matice $R$ je podobná matici $A$, a tudíž má stejná vlastní čísla. Protože všechny členy posloupnosti $(R_s)$ jsou horní trojúhelníkové matice, musí být podle definice 2.1 matice $R$ též horní trojúhelníková a vlastními čísly trojúhelníkové matice jsou její diagonální prvky.
2. Platí $R\vec{y}^{(i)} = \lambda_i \vec{y}^{(i)}$, ale $R = L^{-1}AL$, takže $AL\vec{y}^{(i)} = \lambda_i L\vec{y}^{(i)}$.

□

4.1.2. *LR-algoritmus.* Konstruujeme tři posloupnosti matic $(A_s)$, $(\bar{L}_s)$, $(\bar{R}_s)$ tak, že položíme $A_1 = A$ a matice $\bar{L}_1$, $\bar{R}_1$ získáme z rozkladu matice $A_1$ na součin dolní trojúhelníkové matice s jedničkami na diagonále a horní trojúhelníkové matice: $A_1 = \bar{L}_1 \bar{R}_1$. Předpokládejme, že matice $A$ je silně regulární, aby byl tento rozklad jednoznačný. Matici $A_2$ získáme takto: $A_2 = \bar{R}_1 \bar{L}_1$. Dále postupujeme analogicky:

$$A_{k+1} = \bar{R}_k \bar{L}_k \longrightarrow A_{k+1} = \bar{L}_{k+1} \bar{R}_{k+1}. \tag{37}$$

Z druhé rovnice v (37) plyne $\bar{R}_k = \bar{L}_k^{-1} A_k$. Tento vztah dosadíme do první rovnice tamtéž a máme $A_{k+1} = \bar{L}_k^{-1} A_k \bar{L}_k$. To znamená, že všechny matice $A_k$ jsou si podobné. Za příznivých okolností konverguje posloupnost $(A_s)$ k horní trojúhelníkové matici; za méně příznivých alespoň některé prvky matic $A_k$ pod diagonálou konvergují k nule a díky tomu dokážeme vlastní čísla určit i tehdy.

4.1.3. *Odvození vzorců pro rozklad.* Buďte $A = (a_{ij})$,

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1n} \\ & r_{22} & \dots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix}.$$

Z rovnosti $A = LR$ dostaneme

$$\begin{aligned} a_{ij} &= l_{i1}r_{1j} + l_{i2}r_{2j} + \ldots + l_{ii-1}r_{i-1j} + r_{ij} && \text{pro } i \le j,\ j \in \hat{n}, \\ a_{ij} &= l_{i1}r_{1j} + l_{i2}r_{2j} + \ldots + l_{ij-1}r_{j-1j} + l_{ij}r_{jj} && \text{pro } i > j,\ i \in \hat{n} \end{aligned}$$

a odtud plyne

$$\begin{aligned} r_{ij} &= a_{ij} - (l_{i1}r_{1j} + l_{i2}r_{2j} + \ldots + l_{ii-1}r_{i-1j}) && \text{pro } i \le j,\ j \in \hat{n}, \\ l_{ij} &= \tfrac{1}{r_{jj}}[a_{ij} - (l_{i1}r_{1j} + l_{i2}r_{2j} + \ldots + l_{ij-1}r_{j-1j})] && \text{pro } i > j,\ i \in \hat{n}. \end{aligned}$$

Prvky $r_{ij}$, $l_{ij}$ je možné zapisovat hned po výpočtu na místa, kde byly předtím prvky $a_{ij}$, a to v pořadí naznačeném ve schématu:

$$\begin{array}{cccccccl}
r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} & r_{1n+1} & \leftarrow & \text{1. krok} \\
l_{21} & r_{22} & r_{23} & \dots & r_{2n} & r_{2n+1} & \leftarrow & \text{3. krok} \\
l_{31} & l_{32} & & & & & & \\
\vdots & \vdots & & & & & & \\
l_{n1} & l_{n2} & & & & & & \\
\uparrow & \uparrow & & & & & & \\
\text{2. krok} & \text{4. krok} & & & & & &
\end{array}$$

*Poznámka* (porovnání metod). (1) Rychlost obou metod je stejná.

(2) Trojúhelníková metoda má na rozdíl od LR-algoritmu samoopravnou schopnost, neboť matici $L_0$ lze volit téměř libovolně (dokonce nemusí být ani trojúhelníková).

(3) Trojúhelníková metoda má větší paměťové nároky: Jsou potřeba dvě pole o rozměrech $n \times n$ (v jednom musí být po celou dobu uložena matice soustavy). U LR-algoritmu stačí jediné pole o rozměrech $n \times n$. Je-li matice soustavy např. tridiagonální, potom může mít toto pole rozměry dokonce jen $3 \times n$.

4.1.4. *Konvergence.*

**Tvrzení 4.2.** Nechť je matice $A^s L_0$ silně regulární a buď $A^s L_0 = \mathcal{L}_s \mathcal{R}_s$ její rozklad na dolní trojúhelníkovou matici s jedničkami na diagonále $\mathcal{L}_s$ a horní trojúhelníkovou matici $\mathcal{R}_s$. Potom platí

$$\mathcal{L}_s = L_s, \mathcal{R}_s = R_s \dots R_1,$$

kde $L_s$, resp. $R_s$ jsou příslušné členy posloupností matic $(L_k)$, resp. $(R_k)$ v trojúhelníkové metodě.

*Důkaz.* Podle (36) platí $A^s L_0 = A^{s-1} A L_0 = A^{s-1} L_1 R_1 = A^{s-2} A L_1 R_1 = A^{s-2} L_2 R_2 R_1 = \dots = L_s R_s \dots R_2 R_1$. Tvrzení vyplývá z jednoznačnosti rozkladu. □

**Tvrzení 4.3.** Buďte

(1) matice $A^s$ silně regulární,
(2) $(L_k)$, $(R_k)$ posloupnosti matic z trojúhelníkové metody při volbě $L_0 = I$,
(3) $(\bar{L}_k)$, $(\bar{R}_k)$ posloupnosti matic z LR-algoritmu.

Potom platí $L_s = \bar{L}_1 \dots \bar{L}_s$, $R_s = \bar{R}_s$.

*Důkaz.* Podle (37) je

$$A^s = \underbrace{A_1 \dots A_1}_{s\text{-krát}} = \bar{L}_1 \underbrace{\bar{R}_1 \bar{L}_1}_{A_2} \bar{R}_1 \dots \bar{L}_1 \underbrace{\bar{R}_1 \bar{L}_1}_{A_2} \bar{R}_1 =$$
$$= \bar{L}_1 \bar{L}_2 \underbrace{\bar{R}_2 \bar{L}_2}_{A_3} \bar{R}_2 \dots \bar{L}_2 \underbrace{\bar{R}_2 \bar{L}_2}_{A_3} \bar{R}_2 \bar{R}_1 = \dots = \bar{L}_1 \dots \bar{L}_s \bar{R}_s \dots \bar{R}_1.$$

Položíme-li v důkazu předchozího tvrzení $L_0 = I$, vyplyne tvrzení opět z jednoznačnosti rozkladu. □

**Důsledek 4.4.** Konverguje-li trojúhelníková metoda při volbě $L_0 = I$, potom posloupnost $(A_s)$ v LR-algoritmu konverguje k horní trojúhelníkové matici.

*Důkaz.* Podle předchozího tvrzení je $L_s = L_{s-1} \bar{L}_s$, $R_s = \bar{R}_s$. Odtud $A_s = \bar{L}_s \bar{R}_s = L_{s-1}^{-1} L_s R_s$. Podle předpokladu je $L_s \to L$, $R_s \to R$, a tak $A_s \to R$. □

Od této chvíle budeme předpokládat, že matice $A$ má vlastní čísla $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, přičemž algebraická i geometrická násobnost každého z těchto vlastních čísel je stejná, a že platí

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n| . \tag{38}$$

Podle Jordanovy věty je tedy matice $A$ podobná diagonální matici

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix},$$

tj. existuje taková regulární matice $X$, že platí $A = XDX^{-1}$. Toto značení si rovněž podržme až do konce kapitoly.

Nyní rozebereme tři případy. U prvních dvou se budeme soustředit na trojúhelníkovou metodu — z předchozího důsledku je zřejmé, že konverguje-li tato metoda, konverguje i LR-algoritmus. V posledním případě trojúhelníková metoda nekonverguje, a proto se omezíme na popis chování LR-algoritmu. Napřed si ještě vyslovíme důležitou lemmu.

**Lemma 4.5.** Buď $A$ matice tvaru $A = I + F$ a nechť $\|F\|$ je dostatečně malá. Potom existuje dolní trojúhelníková matice $L$ s jedničkami na diagonále a horní trojúhelníková matice $R$ tak, že $A = LR$, a platí $L \to I$, $R \to I$ pro $\|F\| \to 0$.

*Důkaz.* Bez důkazů uveďme, že jsou-li $L = (l_{ij})$, $D = (d_{ij})$, $R = (r_{ij})$ matice z trojúhelníkového rozkladu matice $A$, protom platí

$$l_{ij} = \frac{\det A_{ij}}{\det A_{ii}}\ (j < i),\ d_{ij} = \frac{\det A_{ii}}{\det A_{i-1i-1}}\ (j = i),\ r_{ij} = \frac{\det A_{ij}}{\det A_{jj}}\ (j > i),$$

kde $A_{ij}$ je matice, která vznikne z $A$ v případě $i \leq j$ vynecháním řádků $i+1, \ldots, n$ a sloupců $i, i+1, \ldots, j-1, j+1, \ldots, n$ a v případě $i > j$ vynecháním řádků $j, j+1, \ldots, i-1, i+1, \ldots, n$ a sloupců $j+1, \ldots, n$. Z definice determinantu je zřejmé, že jde o spojité funkce proměnných $a_{ij}$ (jsou to racionální funkce, tj. podíly polynomů a ,,polynom je ta nejspojitější funkce, jaká může bejt”). To znamená, že má-li matice $A$ rozklad, potom má rozklad i matice $B$, která se ,,příliš neliší”od $A$, a rozklad této matice $B$ se ,,příliš neliší”od rozkladu matice $A$. □

**Tvrzení 4.6.**
(1) Nechť jsou všechna vlastní čísla matice $A$ jednoduchá a různá co do absolutních hodnot (tj. všechny nerovnosti v (38) jsou ostré).
(2) Nechť jsou obě matice $X$, $X^{-1}L_0$ silně regulární.

Potom trojúhelníková metoda konverguje.

*Důkaz.* Podle předpokladu existuje jednoznačný rozklad $X^{-1}L_0 = L_Y R_Y$, kde $L_Y$ je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále a $R_Y$ horní trojúhelníková matice. Proto platí

$$A^s L_0 = XD^s X^{-1} L_0 = XD^s L_Y R_Y = XD^s L_Y D^{-s} D^s R_Y, \tag{39}$$

kde $D^{-s}$ je zkrácené označení matice $(D^{-1})^s$ — tato matice určitě existuje, neboť předpokládáme, že matice $A$ je regulární. Zkoumejme matici $D^s L_Y D^{-s}$: S využitím vět 1.6 a 1.7 dostáváme

$$[D^s L_Y D^{-s}]_{ij} = \begin{cases} 0 & j > i, \\ 1 & j = i, \\ [L_Y]_{ij} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^s & j < i. \end{cases}$$

Z předpokladu 1 vyplývá, že pro $i > j$ je $\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right| < 1$, takže prvky pod diagonálou konvergují k nule, a proto můžeme psát $D^s L_Y D^{-s} = I + F_s$, kde $F_s$ je dolní trojúhelníková matice s nulami na diagonále. Tento vztah dosadíme do (39) a zároveň provedeme rozklad $X = L_X R_X$, kde $L_X$ je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále a $R_X$ horní trojúhelníková matice. Dostaneme

$$A^s L_0 = L_X R_X (I + F_s) D^s R_Y = L_X (R_X + R_X F_s) D^s R_Y = L_X (I + R_X F_s R_X^{-1}) R_X D^s R_Y.$$

Označme $G_s = R_X F_s R_X^{-1}$. Protože $F_s \overset{s\to\infty}{\longrightarrow} O$, je i $G_s \overset{s\to\infty}{\longrightarrow} O$ a pro vysoká $s$ existuje podle lemmy 4.5 rozklad

$$I + G_s = (I + L_G^{(s)})(I + R_G^{(s)}),$$

kde $L_G^{(s)}$ je dolní trojúhelníková matice s nulami na diagonále, $L_G^{(s)} \overset{s\to\infty}{\longrightarrow} O$, a $R_G^{(s)}$ je horní trojúhelníková matice, $R_G^{(s)} \overset{s\to\infty}{\longrightarrow} O$. Získali jsme vztah

$$A^s L_0 = L_X (I + L_G^{(s)})(I + R_G^{(s)}) R_X D^s R_Y.$$

To je ovšem rozklad matice $A^s L_0$ na součin dolní trojúhelníkové matici s jedničkami na diagonále a horní trojúhelníkové matice. Protože je tento rozklad za daných předpokladů jednoznačný, musí podle tvrzení 4.2 platit $L_X(I + L_G^{(s)}) = L_s$, kde $L_s$ je příslušná matice z posloupnosti $(L_k)$ v trojúhelníkové metodě. Zlimicením tohoto vztahu dostaneme $L_s \to L_X$, tj. trojúhelníková metoda konverguje. □

*Poznámka* (důsledky důkazu).

(1) Z důkazu předchozího tvrzení vyplývá existence takového $p \in \mathbb{N}$, že jsou-li matice $AL_0$, $AL_1$, $\dots$, $AL_p$ silně regulární, potom je zaručena existence rozkladu (36) matic $AL_{p+1}$, $AL_{p+2}$, $\dots$

(2) Rychlost konvergence závisí na rychlosti konvergence $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^s \to 0$, $i > j$, tj. konvergence je tím rychlejší, čím více se liší absolutní hodnoty vlastních čísel matice $A$.

(3) Vlastní čísla budou na diagonále limitní matice posloupnosti $(R_s)$ z trojúhelníkové metody srovnána podle velikosti.

*Důkaz.* Dokážeme poslední tvrzení: Podle (36) platí $R_s = L_s^{-1}AL_{s-1}$. Označíme-li $R$ limitní matici posloupnosti $(R_k)$ v trojúhelníkové metodě, potom zlimicením tohoto vztahu dostaneme

$$R = L_X^{-1}AL_X = L_X^{-1}XDX^{-1}L_X = R_XDR_X^{-1}.$$

Tvrzení vyplývá z vět 1.6 a 1.7. □

**Důsledek 4.7.** Je-li splněn předpoklad 1 tvrzení 4.6 a jsou-li matice $X$, $X^{-1}$ silně regulární, potom posloupnost $(A_s)$ v LR-algoritmu konverguje k horní trojúhelníkové matici.

*Důkaz.* Tvrzení plyne z důsledku 4.4. □

**Tvrzení 4.8.**

(1) Nechť má matice $A$ jedno vlastní číslo násobné a ostatní její vlastní čísla nechť jsou jednoduchá a různá co do absolutních hodnot, tj. platí $\lambda_r = \lambda_{r+1} = \dots = \lambda_t$ a jinak všechny nerovnosti v (38) jsou ostré.

(2) Nechť jsou matice $X^{-1}L_0$, $X\tilde{L}$ silně regulární (význam matice $\tilde{L}$ viz důkaz).

Potom trojúhelníková metoda konverguje.

*Důkaz.* Podle předpokladu existuje jednoznačný rozklad $X^{-1}L_0 = L_YR_Y$, kde $L_Y$ je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále a $R_Y$ horní trojúhelníková matice. Proto opět platí (39) a

$$[D^sL_YD^{-s}]_{ij} = \begin{cases} 0 & j > i, \\ 1 & j = i, \\ [L_Y]_{ij}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^s & j < i. \end{cases}$$

Tentokrát však k nule nekonvergují všechny prvky pod diagonálou, ale pouze ty z nich, které leží ve sloupcích $1, \dots, r-1$ nebo v řádcích $t+1, \dots, n$. Označme $\tilde{L}$ matici, která vznikne z $D^sL_YD^{-s}$ tak, že prvky, které konvergují k nule, nahradíme nulami. Je tedy $D^sL_YD^{-s} = \tilde{L} + \tilde{F}_s$, kde $\tilde{F}_s \to O$. Tento vztah dosadíme do (39) a zároveň provedeme rozklad $X\tilde{L} = L_XR_X$, kde $L_X$ je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále a $R_X$ horní trojúhelníková matice. Dostaneme

$$A^sL_0 = X(\tilde{L} + \tilde{F}_s)D^sR_Y = X\tilde{L}(I + \tilde{L}^{-1}\tilde{F}_s)D^sR_Y = L_X(I + R_X\tilde{L}^{-1}\tilde{F}_sR_X^{-1})R_XD^sR_Y.$$

Označme $K_s = R_X\tilde{L}^{-1}\tilde{F}_sR_X^{-1}$. Protože $F_s \overset{s\to\infty}{\longrightarrow} O$, je i $K_s \overset{s\to\infty}{\longrightarrow} O$ a pro vysoká $s$ existuje podle lemmy 4.5 rozklad

$$I + K_s = (I + L_K^{(s)})(I + R_K^{(s)}),$$

kde $L_K^{(s)}$ je dolní trojúhelníková matice s nulami na diagonále, $L_K^{(s)} \overset{s\to\infty}{\longrightarrow} O$, a $R_K^{(s)}$ je horní trojúhelníková matice, $R_K^{(s)} \overset{s\to\infty}{\longrightarrow} O$. Získali jsme vztah

$$A^sL_0 = L_X(I + L_K^{(s)})(I + R_K^{(s)})R_XD^sR_Y.$$

Stejnou úvahou jako v důkazu tvrzení 4.6 zjistíme, že $L_s \to L_X$. □

*Poznámka.* Vlastní čísla budou na diagonále limitní matice posloupnosti $(R_s)$ z trojúhelníkové metody opět srovnána podle velikosti.

*Důkaz.* Z (36) vyplývá $R_s = L_s^{-1}AL_{s-1}$. Zlimicením tohoto vztahu dostaneme

$$R = L_X^{-1}XDX^{-1}L_X = L_X^{-1}X\tilde{L}\tilde{L}^{-1}D\tilde{L}\tilde{L}^{-1}X^{-1}L_X = R_X(\tilde{L}^{-1}D\tilde{L})R_X^{-1}.$$

Zkoumejme matici $\tilde{L}^{-1}D\tilde{L}$: Matice $D$, $\tilde{L}$ pišme v blokovém tvaru

$$D = \begin{pmatrix} D_1 & & \\ & \lambda_r I & \\ & & D_2 \end{pmatrix}, \tilde{L} = \begin{pmatrix} I & & \\ & L^+ & \\ & & I \end{pmatrix},$$

kde $L^+$ je dolní trojúhelníková matice řádu $t-r+1$. Potom platí

$$\tilde{L}^{-1}D\tilde{L} = \begin{pmatrix} I & & \\ & L^+ & \\ & & I \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} D_1 & & \\ & \lambda_r I & \\ & & D_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & & \\ & L^+ & \\ & & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 & & \\ & \lambda_r I & \\ & & D_2 \end{pmatrix} = D,$$

takže $R = R_X D R_X^{-1}$ a tvrzení opět vyplývá z vět 1.6 a 1.7. $\square$

Poslední případ rozebereme slovně.

(1) Nechť v (38) platí $|\lambda_r| = |\lambda_{r+1}| = \ldots = |\lambda_t|$ a ostatní nerovnosti jsou ostré.
(2) Nechť jsou matice $X$, $X^{-1}$ silně regulární.
(3) Nechť $\forall s \in \mathbb{N}$ existuje rozklad $X\tilde{L}_s = L_s^* R_s^*$ a prvky matic $L_s^*$, $R_s^*$ jsou omezené nezávisle na $s$ (význam matic $\tilde{L}_s$ viz dále).
(4) Nechť $\forall s \in \mathbb{N}$ existuje rozklad $R_{22}L_s^+ = \hat{L}_s\hat{R}_s$ (význam matic $R_{22}$, $L_s^+$ viz dále).

Jak jsme předeslali, trojúhelníková metoda v tomto případě nekonverguje, a proto se omezíme na popis chování LR-algoritmu. Ten sice také nekonverguje, ale konvergovat budou alespoň některé prvky matic $(A_s)$.

Proveďme rozklad $X^{-1} = L_Y R_Y$. Potom

$$A^s = XD^sX^{-1} = XD^sL_YR_Y = XD^sL_YD^{-s}D^sR_Y \tag{40}$$

a pro prvky matice $D^sL_YD^{-s}$ opět platí

$$[D^sL_YD^{-s}]_{ij} = \begin{cases} 0 & j > i, \\ 1 & j = i, \\ [L_Y]_{ij}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^s & j < i. \end{cases}$$

Posloupnost $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^s$ je pro $i, j \in \{r, r+1, \ldots, t\}$, $i > j$ zřejmě divergentní — členy posloupnosti „se točí" v jednotkové kružnici. Ostatní prvky pod diagonálou však konvergují k nule, a tak můžeme tentokrát psát $D^sL_YD^{-s} = \tilde{L}_s + \tilde{F}_s$, kde $\tilde{F}_s \to O$. Matice $\tilde{L}_s = D^s\tilde{L}D^{-s}$ je dolní trojúhelníková s jedničkami na diagonále a všechny její mimodiagonální prvky mají stejnou absolutní hodnotu (matice $\tilde{L}$ má stejný význam jako v důkazu předchozího tvrzení). Předchozí vztah dosadíme do (40) a provedeme rozklad podle bodu 3:

$$A^s = X(\tilde{L}_s + \tilde{F}_s)D^sR_Y = X\tilde{L}_s(I + \tilde{L}_s^{-1}\tilde{F}_s)D^sR_Y = L_s^*R_s^*(I + \tilde{L}_s^{-1}\tilde{F}_s)D^sR_Y =$$
$$= L_s^*(I + R_s^*\tilde{L}_s^{-1}\tilde{F}_sR_s^{*-1})R_s^*D^sR_Y.$$

Označme $G_s = R_s^*\tilde{L}_s^{-1}\tilde{F}_sR_s^{*-1}$. Protože $F_s \xrightarrow{s\to\infty} O$, je i $G_s \xrightarrow{s\to\infty} O$ a pro vysoká $s$ existuje podle lemmy 4.5 rozklad

$$I + G_s = (I + L_G^{(s)})(I + R_G^{(s)}),$$

kde $L_G^{(s)}$ je dolní trojúhelníková matice s nulami na diagonále, $L_G^{(s)} \xrightarrow{s\to\infty} O$, a $R_G^{(s)}$ je horní trojúhelníková matice, $R_G^{(s)} \xrightarrow{s\to\infty} O$. Získali jsme vztah

$$A^s = L_s^*(I + L_G^{(s)})(I + R_G^{(s)})R_s^*D^sR_Y.$$

Proveďme rozklad matice $A^s = \mathcal{L}_s\mathcal{R}_s$, kde $\mathcal{L}_s$ je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále a $\mathcal{R}_s$ horní trojúhelníková matice. Z jednoznačnosti tohoto rozkladu vyplývá $\mathcal{L}_s = L_s^*(I + L_G^{(s)})$, takže pro vysoká $s$ je $\mathcal{L}_s \approx L_s^*$ (posloupnost $(L_k^*)$ nemusí konvergovat, proto nepíšeme $\mathcal{L}_s \to L_s^*$). Dále víme, že podle (37) je

$$A_{s+1} = \bar{L}_s^{-1}A_s\bar{L}_s = \bar{L}_s^{-1}\ldots\bar{L}_1^{-1}A_1\bar{L}_1\ldots\bar{L}_s = \mathcal{L}_s^{-1}A_1\mathcal{L}_s,$$

a tak po dosazení $L_s^*$ za $\mathcal{L}_s$ máme

$$A_{s+1} \approx L_s^{*-1}AL_s^* = L_s^{*-1}XDX^{-1}L_s^* = L_s^{*-1}X\tilde{L}_s\tilde{L}_s^{-1}D\tilde{L}_s\tilde{L}_s^{-1}X^{-1}L_s^* =$$

$$= L_s^{*-1} L_s^* R_s^* \tilde{L}_s^{-1} D \tilde{L}_s R_s^{*-1} L_s^{*-1} L_s^* = R_s^* \tilde{L}_s^{-1} D \tilde{L}_s \tilde{R}_s^{*-1}.$$

Zbývá najít vhodné vyjádření matice $R_s^*$. Platí $L_s^* R_s^* = X\tilde{L}_s = L_X R_X \tilde{L}_s$. Rozdělme matice z posledního výrazu na bloky

$$L_X = \begin{pmatrix} L_{11} & & \\ L_{21} & L_{22} & \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix},\ R_X = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ & R_{22} & R_{23} \\ & & R_{33} \end{pmatrix},\ \tilde{L}_s = \begin{pmatrix} I & & \\ & L_s^+ & \\ & & I \end{pmatrix}.$$

Potom je

$$L_X R_X \tilde{L}_s = \begin{pmatrix} L_{11} & & \\ L_{21} & L_{22} & \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ & R_{22} & R_{23} \\ & & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & & \\ & L_s^+ & \\ & & I \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} L_{11} & & \\ L_{21} & L_{22} & \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12}L_s^+ & R_{13} \\ & R_{22}L_s^+ & R_{23} \\ & & R_{33} \end{pmatrix}.$$

Potíž je v tom, že blok $R_{22}L_s^+$ není diagonální. Podle bodu 4 však můžeme provést jeho rozklad $R_{22}L_s^+ = \hat{L}_s \hat{R}_s$ a odtud

$$L_s^* = L_X \begin{pmatrix} I & & \\ & \hat{L}_s & \\ & & I \end{pmatrix},\ R_s^* = \begin{pmatrix} I & & \\ & \hat{L}_s^{-1} & \\ & & I \end{pmatrix} R_X \tilde{L}_s.$$

Po dosazení dostaneme

$$A_{s+1} \approx \begin{pmatrix} I & & \\ & \hat{L}_s^{-1} & \\ & & I \end{pmatrix} R_X \tilde{L}_s \tilde{L}_s^{-1} D \tilde{L}_s (R_X \tilde{L}_s)^{-1} \begin{pmatrix} I & & \\ & \hat{L}_s^{-1} & \\ & & I \end{pmatrix}^{-1} =$$
$$= \begin{pmatrix} I & & \\ & \hat{L}_s^{-1} & \\ & & I \end{pmatrix} R_X D R_X^{-1} \begin{pmatrix} I & & \\ & \hat{L}_s & \\ & & I \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} I & & \\ & \hat{L}_s^{-1} & \\ & & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{R}_{11} & \tilde{R}_{12} & \tilde{R}_{13} \\ & \tilde{R}_{22} & \tilde{R}_{23} \\ & & \tilde{R}_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & & \\ & \hat{L}_s & \\ & & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{R}_{11} & \tilde{R}_{12}\hat{L}_s & \tilde{R}_{13} \\ & \hat{L}_s^{-1}\tilde{R}_{22}\hat{L}_s & \hat{L}_s^{-1}\tilde{R}_{23} \\ & & \tilde{R}_{33} \end{pmatrix},$$

kde

$$\tilde{R}_{11} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_{r-1} \end{pmatrix},\ \tilde{R}_{22} = \begin{pmatrix} \lambda_r & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_t \end{pmatrix},\ \tilde{R}_{33} = \begin{pmatrix} \lambda_{t+1} & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

**Shrnutí.** Posloupnost $(A_s)$ se pro vysoká $s$ chová takto:

(1) Diagonální prvky ve sloupcích $1, \ldots, r-1, t+1, \ldots, n$ konvergují k vlastním číslům $\lambda_1, \ldots, \lambda_{r-1}, \lambda_{t+1}, \ldots, \lambda_n$ a prvky pod diagonálou v těchto sloupcích konvergují k nule.

(2) Ve sloupcích $r, \ldots, t$ konvergují k nule obecně pouze prvky v řádcích $t+1, \ldots, n$.

(3) Zbylá vlastní čísla jsou vlastními čísly submatice, která vznikne z matice $A_s$ vynecháním řádků a sloupců $1, \ldots, r-1, t+1, \ldots, n$.

*Poznámka.* Podobná situace nastane, má-li matice $A$ komplexně sdružené dvojice vlastních čísel, tj. existují-li vzájemně různá čísla $k_1, \ldots, k_p \in \widehat{n-1}$ tak, že $(\forall i \in \hat{p})(\lambda_{k_i} = \overline{\lambda_{k_{i+1}}})$ a jinak všechny nerovnosti v (38) jsou ostré. Potom budou matice $A_s$ pro vysoká $s$ „téměř diagonální", ovšem na diagonále budou mít $p$ bločků o rozměrech $2 \times 2$, jejichž vlastními čísly budou dvojice $\lambda_{k_i}, \overline{\lambda_{k_i}}$ $(i \in \hat{p})$.

## 5. Iterační metody řešení rovnice tvaru $f(x) = 0$

Buď $f$ reálná funkce jedné reálné proměnné. Numerické řešení rovnice $f(x) = 0$ sestává ze dvou etap:

(1) separace kořenů, tj. nalezení intervalů, z nichž v každém leží právě jeden kořen, nebo alespoň nalezení intervalu, v němž leží nějaký kořen,
(2) výpočet odseparovaného kořene se zadanou přesností.

Obecný postup pro separaci kořenů je znám pouze pro algebraické rovnice. Proto se spokojíme s následující větou:

**Věta 5.1.** Buďte

(1) $f$ funkce spojitá na $\langle a, b\rangle$,
(2) $f(a) \neq 0 \wedge f(b) \neq 0$,
(3) $\mathrm{sgn} f(a) \neq \mathrm{sgn} f(b)$.

Potom rovnice $f(x) = 0$ má v $(a, b)$ alespoň jeden kořen. Jestliže navíc $f'$ nemění na $(a, b)$ znamení, je to kořen právě jediný.

**Důsledek 5.2.** Buďte $\varphi, \psi$ dvě funkce spojité v $\langle a, b\rangle$ a nechť je splněna jedna z následujících podmínek:

(1) $\varphi(a) < \psi(a) \wedge \varphi(b) > \psi(b)$,
(2) $\varphi(a) > \psi(a) \wedge \varphi(b) < \psi(b)$.

Potom rovnice $\varphi(x) = \psi(x)$ má v $(a, b)$ alespoň jeden kořen.

*Poznámka.* Smysl právě uvedeného důsledku ihned vyplyne, zvolíme-li v něm za funkci $\psi$ identitu. Kořen rovnice $f(x) = 0$ je totiž pevným bodem funkce $\varphi : x \mapsto f(x) + x$. Stejně jako iterační metody řešení soustavy lineárních algebraických rovnic budou tedy i metody řešení rovnice tvaru $f(x) = 0$ aplikacemi věty o pevném bodě.

5.1. **Princip iteračních metod.** Rovnici $f(x) = 0$ převedeme na tvar $x = \varphi(x)$ a konstruujeme iterační posloupnost $(x_n)$ podle vztahu $x_{k+1} = \varphi(x_k)$. Provedeme-li v tomto vztahu limitní přechod, získáme následující pozorování:

**Tvrzení 5.3.** Jestliže iterační posloupnost $(x_n)$ konverguje, potom je její limitou kořen rovnice $x = \varphi(x)$.

**Věta 5.4.** Buďte

(1) $\alpha$ kořen rovnice $x = \varphi(x)$,
(2) $\varphi$ diferencovatelná na jeho okolí $V = \{x| \, |x - \alpha| \leq r\} = \langle \alpha - r, \alpha + r\rangle$,
(3) $(\forall x \in V)(|\varphi'(x)| \leq K < 1)$.

Potom posloupnost $(x_n)$ definovaná vztahem $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ konverguje pro každé $x_0 \in V$.

*Důkaz.* Matematickou indukcí dokážeme, že platí

$$x_0 \in V \Rightarrow (\forall k \in \mathbb{N})(x_k \in V).$$

(1) Buď $x_0 \in V$. Dokážeme, že $x_1 \in V$:
$$|x_1 - \alpha| = |\varphi(x_0) - \varphi(\alpha)| = |\varphi'(\xi)| \, |x_0 - \alpha| \leq Kr < r,$$
neboť $\xi \in (x_0, \alpha)$.
(2) Buďte $(\forall i \in \hat{k}_0)(x_i \in V)$. Dokážeme, že $x_{k+1} \in V$:
$$|x_{k+1} - \alpha| = |\varphi(x_k) - \varphi(\alpha)| = |\varphi'(\xi_k)| \, |x_k - \alpha| \leq K \, |x_k - \alpha| \leq$$
$$\leq K^2 \, |x_{k-1} - \alpha| \leq ... \leq K^{k+1} \, |x_0 - \alpha| \, .$$

Protože $K < 1$, konverguje posloupnost $(K^n)$ k nule, a tak $x_n \to \alpha$. □

**Důsledek 5.5.** Buď $\varphi'$ spojitá v okolí bodu $\alpha$ a nechť $|\varphi'(\alpha)| < 1$. Potom posloupnost $(x_n)$ konverguje, je-li $x_0$ zvoleno dostatečně blízko $\alpha$.

*Důkaz.* Stačí zvolit okolí $V$ tak, aby pro všechna $x \in V$ platilo $|\varphi'(x)| < 1$. □

**Definice 5.6.** Řekneme, že iterační metoda daná vzorcem $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ má řád konvergence $m$, jestliže $\varphi$ má spojité derivace v okolí $\alpha$ do řádu $m$ včetně (tj. $\varphi \in \mathcal{C}^{(m)}(H_\alpha)$) a platí $\varphi'(\alpha) = \varphi''(\alpha) = \ldots = \varphi^{(m-1)}(\alpha) = 0 \wedge \varphi^{(m)} \neq 0$.

*Poznámka* (vliv řádu konvergence na její rychlost)*.* Nechť je dána iterační metoda, která má řád konvergence $m$. Potom

$$x_{k+1} - \alpha = \varphi(x_k) - \varphi(\alpha) = (x_k - \alpha)\varphi'(\alpha) + \frac{(x_k - \alpha)^2}{2!}\varphi''(\alpha) + \ldots +$$
$$+\frac{(x_k - \alpha)^{m-1}}{(m-1)!}\varphi^{(m-1)}(\alpha) + \frac{(x_k - \alpha)^m}{m!}\varphi^{(m)}(\xi) = \frac{(x_k - \alpha)^m}{m!}\varphi^{(m)}(\xi).$$

Protože je $\varphi^{(m)}$ spojitá, můžeme ji na omezeném intervalu odhadnout konstantou, a proto

$$|x_{k+1} - \alpha| \leq M_m \, |x_k - \alpha|^m \,. \tag{41}$$

*Poznámka.* Je-li v (41) $m = 2$, říkáme, že metoda konverguje kvadraticky, v případě $m = 3$ kubicky, no a s rychlejšíma se setkáváme tak akorát v pohádkách.

*Poznámka* (grafická interpretace iteračních metod)*.* Při hledání kořenů rovnice $x = \varphi(x)$ konstruujeme lomenou čáru, která se lomí při dosažení grafu funkce $y = \varphi(x)$ nebo osy kvadrantu $y = x$.

5.2. **Metoda Regula falsi.** Nechť je kořen $\alpha$ rovnice $f(x) = 0$ odseparován v intervalu $\langle a, b\rangle$, $f'(\alpha) \neq 0$. Předpokládejme, že $f'$ i $f''$ jsou v $\langle a, b\rangle$ spojité a nemění v něm znamení. Zvolme $p \in \{a, b\}$ tak, aby platilo $f(p)f''(p) > 0$. Za výchozí bod $x_0$ posloupnosti $(x_n)$ zvolme zbylý prvek množiny $\{a, b\}$, takže bude platit $f(x_0)f''(x_0) < 0$. Další bod $x_1$ získáme jako $x$-ovou souřadnici průsečíku spojnice bodů $[x_0, f(x_0)]$ a $[p, f(p)]$ s osou $x$ atd. Rovnice přímky spojující body $[x_0, f(x_0)]$ a $[p, f(p)]$ je

$$y - f(x_0) = \frac{f(p) - f(x_0)}{p - x_0}(x - x_0).$$

Položíme-li $y = 0$, získáme $x$-ovou souřadnici průsečíku této přímky s osou $x$, tj. bod $x_1$:

$$-f(x_0) = \frac{f(p) - f(x_0)}{p - x_0}(x_1 - x_0) \Rightarrow x_1 = \frac{x_0 f(p) - p f(x_0)}{f(p) - f(x_0)}.$$

Obecně pro $k \in \mathbb{N}$ je

$$x_{k+1} = \frac{x_k f(p) - p f(x_k)}{f(p) - f(x_k)} \overset{k\to\infty}{\Longrightarrow} \varphi(x) = \frac{x f(p) - p f(x)}{f(p) - f(x)}. \tag{42}$$

**Tvrzení 5.7.** Konvergence metody Regula falsi je zajištěna splněním těchto předpokladů:

(1) $(\exists H_\alpha)(f', f'' \in \mathcal{C}(H_\alpha))$,
(2) $f'(\alpha) \neq 0$.

*Důkaz.* Zderivováním pravé strany (42) dostáváme

$$\varphi'(x) = \frac{[f(p) - pf'(x)][f(p) - f(x)] + f'(x)[xf(p) - pf(x)]}{[f(p) - f(x)]^2}.$$

Uvážíme-li, že $f(\alpha) = 0$, dozvídáme se

$$\varphi'(\alpha) = \frac{[f(p) - pf'(\alpha)]f(p) + \alpha f'(\alpha)f(p)}{[f(p)]^2} = \frac{f(p) + (\alpha - p)f'(\alpha)}{f(p)}. \tag{43}$$

Poslední výraz teď upravíme tak, abychom se zbavili nepříjemného $f(p)$. Potom totiž dokážeme, že $|\varphi'(\alpha)| \leq K < 1$, a z věty 5.4 vyplyne konvergence metody. Začneme s čitatelem. Rozviňme funkci $f$ do Taylorova rozvoje se středem v bodě $\alpha$:

$$f(x) = f(\alpha) + \frac{f'(\alpha)}{1!}(x - \alpha) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x - \alpha)^2.$$

Dosadíme-li do tohoto vztahu za $x = p$, dostaneme

$$f(p) + (\alpha - p)f'(\alpha) = \frac{f''(\xi)}{2}(p - \alpha)^2.$$

To už vypadá celkem pěkně, ale ještě je tu jmenovatel. Rozviňme proto opět funkci $f$, ale tentokrát jen do prvního řádu: $f(x) = f(\alpha) + f'(\eta)(x - \alpha)$, takže pro $x = p$ máme $f(p) = f'(\eta)(p - \alpha)$. Nyní již můžeme dosadit do rovnice (43):

$$\varphi'(\alpha) = \frac{f''(\xi)(p-\alpha)^2}{2f'(\eta)(p-\alpha)} = \frac{f''(\xi)(p-\alpha)}{2f'(\eta)}.$$

Z předpokladů 1, 2 vyplývá, že podíl $f''(\xi)/f'(\eta)$ lze odhadnout konstantou, a proto je-li $p$ dostatečně blízko $\alpha$, můžeme dosáhnout $|\varphi'(\alpha)|$ tak malé, jak potřebujeme. □

5.3. **Newtonova metoda.** Nechť je kořen $\alpha$ rovnice $f(x) = 0$ odseparován v intervalu $\langle a, b\rangle$, $f'(\alpha) \neq 0$. Předpokládejme, že $f'$ i $f''$ jsou v $\langle a, b\rangle$ spojité a nemění v něm znamení. Za výchozí bod $x_0$ posloupnosti $(x_n)$ zvolme $x_0 \in \{a, b\}$ tak, aby platilo $f(x_0)f''(x_0) > 0$. Na rozdíl od metody Regula falsi tedy nemáme žádný bod $p$. Místo posloupnosti sečen spojujících body $[x_k, f(x_k)]$ a $[p, f(p)]$ budeme konstruovat posloupnost tečen ke grafu funkce $f$ v bodech $[x_k, f(x_k)]$. Bod $x_{k+1}$ získáme jako $x$-ovou souřadnici průsečíku tečny v bodě $[x_k, f(x_k)]$ s osou $x$.

Rovnice tečny v bodě $[x_0, f(x_0)]$ je $y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$. Položíme-li $y = 0$, získáme $x$-ovou souřadnici průsečíku této přímky s osou $x$, tj. bod $x_1$:

$$-f(x_0) = f'(x_0)(x_1 - x_0) \Rightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Obecně pro $k \in \mathbb{N}$ je

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \overset{k\to\infty}{\Longrightarrow} \varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}. \tag{44}$$

**Tvrzení 5.8.** Pro konvergenci Newtonovy metody platí naprostá obdoba tvrzení 5.7. Je-li navíc $f''' \in \mathcal{C}(H_\alpha)$, potom má Newtonova metoda řád konvergence 2.

*Důkaz.* Konvergence:

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{{f'}^2(x) - f(x)f''(x)}{{f'}^2(x)} = \frac{f(x)f''(x)}{{f'}^2(x)} \Rightarrow \varphi'(\alpha) = 0.$$

Ze spojitosti $\varphi'$ plyne existence takového okolí $V$ kořene $\alpha$, že $(\forall x \in V)(|\varphi'(x)| \leq K < 1)$. Nyní stačí použít větu 5.4.

Druhá část tvrzení:

$$\varphi''(\alpha) = \frac{{f'}^3(\alpha)f''(\alpha)}{{f'}^4(\alpha)} = \frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} \neq 0,$$

neboť $f''$ nemění v $\langle a, b\rangle$ znamení. Podle definice jde tedy skutečně o metodu 2. řádu konvergence, tudíž $|x_{k+1} - \alpha| \leq M\,|x_k - \alpha|^2$. □

**Tvrzení 5.9.** Předpoklad existence $f'''$ v předchozím tvrzení je nadbytečný, tj. Newtonova metoda konverguje kvadraticky, i když $f'''$ neexistuje.

*Důkaz.* Podle prvního vztahu ve (44) platí

$$x_{k+1} - \alpha = x_k - \alpha - \frac{f(x_k) - f(\alpha)}{f'(x_k)} = x_k - \alpha - \frac{f'(\xi_k)(x_k - \alpha)}{f'(x_k)} =$$

$$= \frac{f'(x_k) - f'(\xi_k)}{f'(x_k)}(x_k - \alpha) = \frac{f''(\eta_k)}{f'(x_k)}(x_k - \xi_k)(x_k - \alpha).$$

Protože $|x_k - \xi_k| < |x_k - \alpha|$, je $|x_{k+1} - \alpha| \leq M\,|x_k - \alpha|^2$. □

5.4. **Čebyševova metoda.** Nechť je kořen $\alpha$ rovnice $f(x) = 0$ odseparován v intervalu $\langle a, b\rangle$, $f'(\alpha) \neq 0$. Předpokládejme, že $f$ má v $\langle a, b\rangle$ $2r+1$ spojitých derivací a $\langle a, b\rangle$ je tak malý, že $\forall x \in \langle a, b\rangle$ platí $f'(x) \neq 0$. Potom na $\langle a, b\rangle$ existuje $F = f^{-1}$, tj. $(\forall x \in \langle a, b\rangle)(F(f(x)) = x)$, a platí $f(\alpha) = 0 \Leftrightarrow F(0) = \alpha$.

V dalším využijeme existence inverzní funkce $F$. To, že ji ve skutečnosti neznáme, není na závadu, protože nakonec najdeme vhodné vyjádření pomocí původní funkce $f$ a jejích derivací. Nejprve funkci $F$ rozvineme pomocí Taylorova vzorce se středem v bodě $y_0$:

$$F(y) = F(y_0) + \sum_{k=1}^{r} \frac{F^{(k)}(y_0)}{k!}(y - y_0)^k + \frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!}(y - y_0)^{r+1}.$$

Položme $y = 0$. Potom

$$F(0) = F(y_0) + \sum_{k=1}^{r}(-1)^k \frac{F^{(k)}(y_0)}{k!} y_0^k + (-1)^{r+1}\frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!} y_0^{r+1},$$

kde $\eta \in (0, y_0)$. Po dosazení za $F(0) = \alpha$ a $y_0 = f(x)$ máme

$$\alpha = x + \sum_{k=1}^{r}(-1)^k \frac{F^{(k)}(f(x))}{k!} f^k(x) + (-1)^{r+1}\frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!} f^{r+1}(x),$$

kde $\eta \in (0, f(x))$. Poslední sčítanec převeďme na levou stranu a označme

$$\varphi_r(x) = \alpha + (-1)^r \frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!} f^{r+1}(x). \tag{45}$$

Označíme-li ještě $a_k(x) = F^{(k)}(f(x))$, potom z předchozích dvou rovností vyplývá

$$\varphi_r(x) = x + \sum_{k=1}^{r}(-1)^k \frac{a_k(x)}{k!} f^k(x).$$

Z tohoto vztahu nebo již z (45) je zřejmé, že pro $r \in \mathbb{N}$ platí $\varphi_r(\alpha) = \alpha$.

**Tvrzení 5.10.** Iterační metoda daná vzorcem $x_{k+1} = \varphi_r(x_k)$ má řád konvergence alespoň $r+1$.

*Důkaz.* Máme dokázat, že platí $\varphi_r'(\alpha) = \varphi_r''(\alpha) = \ldots = \varphi_r^{(r)}(\alpha) = 0$. Důkaz provedeme sporem. Předpokládejme existenci takového $p \in \hat{r}$, že $\varphi_r^{(p)}(\alpha) \neq 0$. (Pokud by takových $p$ existovalo více, zvolíme nejmenší z nich.) Funkci $\varphi_r$ rozvineme do $p$-tého řádu:

$$\varphi_r(x) = \varphi_r(\alpha) + \frac{\varphi_r^{(p)}(\alpha)}{p!}(x - \alpha)^p + \frac{\varphi_r^{(p+1)}(\chi)}{(p+1)!}(x - \alpha)^{p+1}.$$

(Členy řádů 1 až $p-1$ jsou nulové, a proto je nevypisujeme). Podle Lagrangeovy věty platí

$$f(x) = f(x) - f(\alpha) = f'(\xi)(x - \alpha), \tag{46}$$

kde $\xi \in (x, \alpha)$. Poslední dva vztahy dosadíme do (45):

$$\frac{\varphi_r^{(p)}(\alpha)}{p!}(x - \alpha)^p + \frac{\varphi_r^{(p+1)}(\chi)}{(p+1)!}(x - \alpha)^{p+1} = (-1)^r \frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!} f'^{r+1}(\xi)(x - \alpha)^{r+1}.$$

Odtud vyplývá

$$\frac{\varphi_r^{(p)}(\alpha)}{p!} = -\frac{\varphi_r^{(p+1)}(\chi)}{(p+1)!}(x - \alpha) + (-1)^r \frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!} f'^{r+1}(\xi)(x - \alpha)^{r-p+1}.$$

Podle předpokladu je levá strana této rovnice nenulová, ale oba členy vpravo můžeme učinit libovolně malými a to je spor. $\square$

V našem vzorci pro $\varphi_r(x)$ vystupují koeficienty $a_k(x)$ a ty se nyní pokusíme vhodně vyjádřit. Opakovaným derivováním rovnice $F(f(x)) = x$ dostaneme systém $r$ rovnic

$$\begin{aligned}
&F'(f(x))f'(x) = 1,\\
&F''(f(x)){f'}^2(x) + F'(f(x))f''(x) = 0,\\
&F'''(f(x)){f'}^3(x) + 3F''(f(x))f'(x)f''(x) + F'(f(x))f'''(x) = 0\\
&\text{atd.}
\end{aligned}$$

Tyto rovnice přepíšeme pomocí $a_k(x)$. Obdržíme trojúhelníkovou soustavu pro $a_1(x), a_2(x), ..., a_r(x)$:

$$\begin{aligned}
&a_1(x)f'(x) = 1,\\
&a_2(x){f'}^2(x) + a_1(x)f''(x) = 0,\\
&a_3(x){f'}^3(x) + 3a_2(x)f'(x)f''(x) + a_1(x)f'''(x) = 0\\
&\text{atd.}
\end{aligned}$$

*Poznámka.* Zvolíme-li nyní $r = 1$, dostaneme Newtonovu metodu

$$a_1(x) = \frac{1}{f'(x)} \Rightarrow \varphi_1(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

a při volbě $r = 2$ obdržíme

$$a_2(x) = -\frac{f''(x)}{{f'}^3(x)} \Rightarrow \varphi_2(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} - \frac{f''(x)f^2(x)}{2{f'}^3(x)}.$$

*Poznámka.* Dosud jsme předpokládali, že funkce $f$ má v intervalu $\langle a, b\rangle$ $2r + 1$ spojitých derivací. Má-li mít totiž metoda řád konvergence $r + 1$, jak o tom mluví tvrzení 5.10, musí existovat $\varphi_r^{(r)}$ a $\varphi_r$ závisí na $F^{(r+1)}$, tedy i na $f^{(r+1)}$. Na závěr uvedeme tvrzení, které mluví o rychlosti konvergence (ne tedy o jejím řádu ve smyslu definice) v případě, že tento předpoklad není splněn:

**Tvrzení 5.11.** Ke splnění $|x_{k+1} - \alpha| \leq M\, |x_k - \alpha|^{r+1}$ stačí $r + 1$ spojitých derivací.

*Důkaz.* Dosadíme-li vztah (46) do (45), dostaneme

$$|x_{k+1} - \alpha| = |\varphi_r(x_k) - \alpha| = \left|\frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!}{f'}^{r+1}(\xi)\right| |x_k - \alpha|^{r+1}.$$

Funkce $\frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!}{f'}^{r+1}(\xi)$ je spojitá, a proto ji lze na omezeném intervalu odhadnout konstantou $M$. $\square$

## 6. Iterační metody pro řešení systémů nelineárních algebraických a transcendentních rovnic

Buďte $f_1, f_2, ..., f_n$ reálné funkce $n$ reálných proměnných. Naším cílem je nalézt řešení soustavy

$$f_1(x_1, x_2, ..., x_n) = 0,\ f_2(x_1, x_2, ..., x_n) = 0,\ \ldots,\ f_n(x_1, x_2, ..., x_n) = 0 \tag{47}$$

ve tvaru $\vec{a} = (a_1, a_2, ..., a_n)^T$. Separaci kořenů v tomto případě vůbec neumíme provést, a proto budeme dále předpokládat, že známe konvexní oblast $G$ s vlastností $\vec{a} \in G$.

6.1. **Princip iteračních metod.** Systém (47) převedeme na systém

$$x_1 = \varphi_1(x_1, x_2, ..., x_n),\ x_2 = \varphi_2(x_1, x_2, ..., x_n),\ ...,\ x_n = \varphi_n(x_1, x_2, ..., x_n) \tag{48}$$

a konstruujeme posloupnost vektorů $(\vec{x}^{(k)})$ takto:

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \varphi_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, ..., x_n^{(k)}), \\ x_2^{(k+1)} &= \varphi_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, ..., x_n^{(k)}), \\ &\ldots, \\ x_n^{(k+1)} &= \varphi_n(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, ..., x_n^{(k)}). \end{aligned} \tag{49}$$

**Tvrzení 6.1.** Buďte

(1) řešení $\vec{a}$ systému (48) odseparováno v konvexní oblasti $G$,
(2) $(\forall i, j \in \hat{n})(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j}$ spojité na $\overline{G})$,
(3) $(\forall k \in \mathbb{N}_0)(\vec{x}^{(k)} \in G)$,
(4) $\varrho(\mathcal{M}) < 1$, kde $\mathcal{M}$ je matice definovaná vztahem

$$[\mathcal{M}]_{ij} = \max_{\vec{x} \in \overline{G}} \left| \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j}(\vec{x}) \right|.$$

Potom posloupnost $(\vec{x}^{(k)})$ daná předpisem (49) konverguje k řešení $\vec{a}$.

*Důkaz.* Vyjděme z $i$-té rovnice v (49). Podle věty o přírůstku reálné funkce více proměnných existuje vektor $\vec{p}_i^{(k)}$ ležící ve „vnitřku"úsečky spojující body $\vec{x}^{(k)}$, $\vec{a}$ tak, že

$$x_i^{(k+1)} - a_i = \varphi_i(\vec{x}^{(k)}) - \varphi_i(\vec{a}) = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j}(\vec{p}_i^{(k)})(x_j^{(k)} - a_j). \tag{50}$$

To platí $\forall i \in \hat{n}$, takže máme pro každé $k \in \mathbb{N}$ zaručenu existenci $n$-tice vektorů $\vec{p}_1^{(k)}, \ldots, \vec{p}_n^{(k)}$ splňujících vztah (50). Označíme-li

$$\mathcal{M}_k = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_1}(\vec{p}_1^{(k)}) & \ldots & \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_n}(\vec{p}_1^{(k)}) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_1}(\vec{p}_n^{(k)}) & \ldots & \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_n}(\vec{p}_n^{(k)}) \end{pmatrix},$$

potom podle (50) zřejmě platí

$$\vec{x}^{(k+1)} - \vec{a} = \mathcal{M}_k(\vec{x}^{(k)} - \vec{a}) = \mathcal{M}_k\mathcal{M}_{k-1}(\vec{x}^{(k-1)} - \vec{a}) = ... = \mathcal{M}_k\mathcal{M}_{k-1}...\mathcal{M}_0(\vec{x}^{(0)} - \vec{a}).$$

Z toho plyne, že nutnou a postačující podmínkou pro konvergenci $\vec{x}^{(k)} \to \vec{a}$ za předpokladů 1–3 je

$$\lim_{k \to \infty} \prod_{i=0}^{k} \mathcal{M}_i = O. \tag{51}$$

Z definice matice $\mathcal{M}$ vyplývá $(\forall k \in \mathbb{N})([\mathcal{M}]_{ij} \geq |[\mathcal{M}_k]_{ij}|)$. Protože oblast $G$ je konvexní, obsahuje i úsečku $\langle \vec{x}^{(k)}, \vec{a} \rangle$. Odtud, z předchozí nerovnosti a z trojúhelníkové nerovnosti plyne další nerovnost $[\mathcal{M}^{k+1}]_{ij} \geq |[\mathcal{M}_k\mathcal{M}_{k-1}...\mathcal{M}_0]_{ij}|$, neboť na obou stranách této nerovnice jsou sumy stejného počtu součinů a vlevo vystupuje místo původního prvku odhad. Z této nerovnosti vyplývá, že konverguje-li posloupnost $(\mathcal{M}^k)$ k nulové matici, potom je splněno i (51). Podle věty 2.8 tak dostáváme kritérium konvergence $\varrho(\mathcal{M}) < 1$. □

*Poznámka* (důležitá). Předpoklad 3 v tvrzení 6.1 je podstatný. Následující tvrzení říká, že k jeho splnění je třeba zvolit $\vec{x}^{(0)}$ dostatečně blízko $\vec{a}$, ale nedozvíme se jak.

**Tvrzení 6.2.** Za předpokladů 1, 2, 4 tvrzení 6.1 existuje takové okolí $V$ bodu $\vec{a}$, že $x^{(0)} \in V \Rightarrow (\forall k \in \mathbb{N})(\vec{x}^{(k)} \in G)$.

*Důkaz.* Podle předpokladu 4 platí $\mathcal{M}^k \to O$. Z toho podle definice 2.1 a podle definice normy $\| \ \|_{\mathrm{I}}$ vyplývá existence takového $k \in \mathbb{N}$, že $\left\|\mathcal{M}^{k+1}\right\|_{\mathrm{I}} < 1$. Definujme $V = \{\vec{x} | \, \|\vec{x} - \vec{a}\|_{\mathrm{I}} < R\} = B_{\mathrm{I}}(\vec{a}, R)$, kde $R$ je tak malé, že platí

$$\vec{x}^{(0)} \in V \Rightarrow \vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, ..., \vec{x}^{(k)} \in G. \tag{52}$$

Vhodné $R$ určitě existuje, protože $k$ je pevné konečné číslo. Buď $\vec{x}^{(0)} \in V$. Potom z vlastností normy $\| \ \|_{\mathrm{I}}$ plyne

$$\left\|\vec{x}^{(k+1)} - \vec{a}\right\|_{\mathrm{I}} = \left\|\mathcal{M}_k \mathcal{M}_{k-1} \dots \mathcal{M}_0 (\vec{x}^{(0)} - \vec{a})\right\|_{\mathrm{I}} \leq$$
$$\leq \|\mathcal{M}_k \mathcal{M}_{k-1} \dots \mathcal{M}_0\|_{\mathrm{I}} \left\|\vec{x}^{(0)} - \vec{a}\right\|_{\mathrm{I}} \leq \|\mathcal{M}^{k+1}\|_{\mathrm{I}} \left\|\vec{x}^{(0)} - \vec{a}\right\|_{\mathrm{I}}.$$

Protože $\left\|\mathcal{M}^{k+1}\right\|_{\mathrm{I}} < 1$ a $\left\|\vec{x}^{(0)} - \vec{a}\right\|_{\mathrm{I}} < R$, je i součin $\left\|\mathcal{M}^{k+1}\right\|_{\mathrm{I}} \left\|\vec{x}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}} < R$, a proto $\vec{x}^{(k+1)} \in V$. To podle (52) znamená, že $\vec{x}^{(k+2)}$, $\vec{x}^{(k+3)}$, ..., $\vec{x}^{(2k+1)} \in G$. Nyní stejný postup aplikujeme na $\vec{x}^{(k+2)}$, $\vec{x}^{(k+3)}$, ..., $\vec{x}^{(2k+1)}$, takže se dozvíme, že $\vec{x}^{(2k+2)} \in V$, atd. □

6.2. **Newtonova metoda.** Přepišme nyní soustavu (47) do vektorové podoby $\vec{f}(\vec{x}) = \vec{o}$, kde $\vec{f}(x_1, \dots, x_n) = (f_1(x_1, \dots, x_n), \dots, f_n(x_1, \dots, x_n))^T$. Budiž řešení $\vec{a}$ této rovnice odseparováno v konvexní oblasti $G$ a nechť na $G$ existují $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\vec{x})$ a jsou spojité. Označme

$$f_x(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\vec{x}) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\vec{x}) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\vec{x}) & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

a předpokládejme, že matice $f_x(\vec{a})$ je regulární. Potom jsou ovšem regulární i všechny matice $f_x(\vec{x})$ pro $\vec{x} \in V_{\vec{a}}$, kde $V_{\vec{a}}$ je jisté okolí řešení $\vec{a}$. Nyní vyjděme z prvního vztahu ve (44) a vytvořme jeho maticovou obdobu

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - f_x^{-1}(\vec{x}^{(k)}) \vec{f}(\vec{x}^{(k)}). \tag{53}$$

Vektor $\vec{x}^{(k)}$ převedeme na levou stranu rovnosti a obě její strany vynásobíme zleva maticí $f_x(\vec{x}^{(k)})$, takže dostaneme $f_x(\vec{x}^{(k)})(\vec{x}^{(k+1)} - \vec{x}^{(k)}) = -\vec{f}(\vec{x}^{(k)})$. Označíme-li $\Delta \vec{x}^{(k)} = \vec{x}^{(k+1)} - \vec{x}^{(k)}$, přejde tento vztah ve tvar

$$f_x(\vec{x}^{(k)}) \Delta \vec{x}^{(k)} = -\vec{f}(\vec{x}^{(k)}), \ \vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + \Delta \vec{x}^{(k)}.$$

**Věta 6.3.** (1) Nechť konvexní oblast $G$ obsahuje řešení $\vec{a}$ systému $\vec{f}(\vec{x}) = \vec{o}$.
(2) Buď $f_x(\vec{a})$ regulární.
(3) Buďte $f_1, f_2, \dots, f_n$ spojité na $G$ včetně svých prvních parciálních derivací.

Potom existuje $\delta$-okolí $R = \{\vec{x} | \, \|\vec{x} - \vec{a}\| < \delta\}$ bodu $\vec{a}$ takové, že pro $\vec{x}^{(0)} \in R$ posloupnost $(\vec{x}^{(k)})$ v Newtonově metodě konverguje k $\vec{a}$.

*Důkaz.* Buďte $\vec{y}, \vec{z} \in G$. Definujme funkci

$$\Phi_i(t) = f_i(\vec{y} + t(\vec{z} - \vec{y})) = f_i(y_1 + t(z_1 - y_1), \ \dots, y_n + t(z_n - y_n)).$$

Potom zřejmě $\Phi_i(0) = f_i(\vec{y})$ a $\Phi_i(1) = f_i(\vec{z})$. Dále $\forall i \in \hat{n}$ platí

$$f_i(\vec{z}) - f_i(\vec{y}) = \Phi_i(1) - \Phi_i(0) = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}\Phi_i(t)}{\mathrm{d}t} \, \mathrm{d}t = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}f_i}{\mathrm{d}t}(\vec{y} + t(\vec{z} - \vec{y})) \, \mathrm{d}t =$$

$$= \int_0^1 \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\vec{y} + t(\vec{z} - \vec{y}))(z_j - y_j) \, \mathrm{d}t = \sum_{j=1}^n \underbrace{\left( \int_0^1 \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\vec{y} + t(\vec{z} - \vec{y})) \, \mathrm{d}t \right)}_{\text{ozn. } \mathcal{F}_{ij}(\vec{y}, \vec{z})} (z_j - y_j).$$

Označíme-li $F(\vec{y}, \vec{z}) = (\mathcal{F}_{ij}(\vec{y}, \vec{z}))$, potom podle předchozí rovnosti $\forall \vec{y}, \vec{z} \in G$ platí

$$\vec{f}(\vec{z}) - \vec{f}(\vec{y}) = F(\vec{y}, \vec{z})(\vec{z} - \vec{y}). \tag{54}$$

Položíme-li $\vec{y} = \vec{z} = \vec{a}$, pak

$$\mathcal{F}_{ij}(\vec{a}, \vec{a}) = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\vec{a}) \Rightarrow F(\vec{a}, \vec{a}) = f_x(\vec{a}) \Rightarrow f_x^{-1}(\vec{a}) F(\vec{a}, \vec{a}) = I.$$

Podle předpokladu 3 proto existuje takové okolí $R \subset G$ řešení $\vec{a}$, že pro každé $\vec{x} \in R$ platí $\left\| I - f_x^{-1}(\vec{x}) F(\vec{a}, \vec{x}) \right\| \leq K < 1$. Matematickou indukcí dokážeme, že

$$\vec{x}^{(0)} \in R \Rightarrow (\forall k \in \mathbb{N})(\vec{x}^{(k)} \in R).$$

Podle (53) a (54) pro všechna $k \in \mathbb{N}$ taková, že $\vec{x}^{(k)} \in G$, platí

$$\vec{x}^{(k+1)} - \vec{a} = \vec{x}^{(k)} - \vec{a} - f_x^{-1}(\vec{x}^{(k)})(\vec{f}(\vec{x}^{(k)}) - \vec{f}(\vec{a})) =$$
$$= \vec{x}^{(k)} - \vec{a} - f_x^{-1}(\vec{x}^{(k)}) F(\vec{a}, \vec{x}^{(k)})(\vec{x}^{(k)} - \vec{a}) = (I - f_x^{-1}(\vec{x}^{(k)}) F(\vec{a}, \vec{x}^{(k)}))(\vec{x}^{(k)} - \vec{a}).$$

(1) Buď $\vec{x}^{(0)} \in R$. Dokážeme, že $\vec{x}^{(1)} \in R$:

$$\left\| \vec{x}^{(1)} - \vec{a} \right\| = \left\| I - f_x^{-1}(\vec{x}^{(0)}) F(\vec{a}, \vec{x}^{(0)})(\vec{x}^{(0)} - \vec{a}) \right\| \leq$$
$$\leq \left\| I - f_x^{-1}(\vec{x}^{(0)}) F(\vec{a}, \vec{x}^{(0)}) \right\| \left\| \vec{x}^{(0)} - \vec{a} \right\| < 1.\delta = \delta.$$

(2) Buďte $(\forall i \in \hat{k}_0)(\vec{x}^{(i)} \in R)$. Dokážeme, že $\vec{x}^{(k+1)} \in R$:

$$\left\| \vec{x}^{(k+1)} - \vec{a} \right\| \leq \left\| I - f_x^{-1}(\vec{x}^{(k)}) F(\vec{a}, \vec{x}^{(k)}) \right\| \left\| \vec{x}^{(k)} - \vec{a} \right\| \leq K \left\| \vec{x}^{(k)} - \vec{a} \right\| \leq$$
$$\leq K^2 \left\| \vec{x}^{(k-1)} - \vec{a} \right\| \leq \ldots \leq K^{k+1} \left\| \vec{x}^{(0)} - \vec{a} \right\|.$$

Protože $K < 1$, dostaneme zlimicením posledního vztahu $\vec{x}^{(k)} \to \vec{a}$. □

**Tvrzení 6.4.** Charakter konvergence Newtonovy metody je kvadratický, tj.

$$\left\| \vec{x}^{(k+1)} - \vec{a} \right\| \leq L \left\| \vec{x}^{(k)} - \vec{a} \right\|^2.$$

*Důkaz.* Přesahuje rámec přednášky. („Je dlouhý.”) □

## 7. Lagrangeova interpolace

Buď $f$ reálná funkce reálné proměnné a nechť jsou dány její hodnoty ve vzájemně různých bodech $x_0, x_1, \dots, x_n$ — nazýváme je interpolační uzly. Našim úkolem je najít polynom $L_n$ co nejnižšího stupně tak, aby platilo $(\forall i \in \hat{n}_0)(L_n(x_i) = f(x_i))$. Tento polynom se nazývá Lagrangeův interpolační polynom příslušný k funkci $f$ a uzlům $x_0, x_1, \dots, x_n$.

*Poznámka.* Očekáváme, že je-li funkce $f$ dostatečně hladká, bude ji možno aproximovat polynomem $T_n$ i mezi interpolačními uzly. Proto také mluvíme o interpolačním polynomu. Kdybychom chtěli naopak usuzovat na hodnoty funkce $f$ vně nejmenšího intervalu obsahujícího interpolační uzly, mluvili bychom o extrapolaci.

**Tvrzení 7.1.** Buďte $f$ reálná funkce reálné proměnné a $x_0, x_1, \dots, x_n \in D(f)$. Potom existuje právě jeden Lagrangeův interpolační polynom příslušný k funkci $f$ a uzlům $x_0, x_1, \dots, x_n$.

*Důkaz.* Existence: Definujme funkci

$$\Phi_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}.$$

Zřejmě $\Phi_i$ je polynom stupně $n$ a platí $\Phi_i(x_j) = \delta_{ij}$ pro $i, j \in \hat{n}_0$. Dále je zřejmé, že funkce

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\Phi_i(x) \tag{55}$$

je polynom stupně nejvýše $n$-tého a že platí $(\forall i \in \hat{n}_0)(L_n(x_i) = f(x_i))$.

Jednoznačnost: Předpokládejme existenci polynomu $P_n \neq L_n$ stupně nejvýše $n$-tého takového, že $(\forall i \in \hat{n}_0)(P_n(x_i) = f(x_i))$. Potom funkce $P_n - L_n$ musí být také polynom stupně nejvýše $n$-tého. Přitom ale $P_n - L_n$ má $n+1$ kořenů, takže to musí být nulový polynom. □

**Věta 7.2.** (1) Buď $I$ interval a nechť $x_0, x_1, \dots, x_n \in I$.
(2) Nechť má funkce $f$ v intervalu $I$ derivaci řádu $n+1$.
(3) Buď $L_n$ Lagrangeův interpolační polynom příslušný k funkci $f$ a uzlům $x_0, x_1, \dots, x_n$.

Potom $\forall x \in I$ existuje bod $\xi$ ležící v nejmenším intervalu obsahujícím body $x, x_0, x_1, \dots, x_n$ tak, že platí

$$f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\,\omega_n(x),$$

kde $\omega_n(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$.

*Důkaz.* Pro $x \in \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ je $f(x) - L_n(x) = 0$, takže tvrzení zřejmě platí. Zvolme tedy pevně $x \in I$ tak, aby $(\forall i \in \hat{n}_0)(x \neq x_i)$. Označíme-li

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x),\ Q(t) = \omega_n(x)R_n(t) - \omega_n(t)R_n(x),$$

potom zřejmě $Q(x) = 0$, a protože $(\forall i \in \hat{n}_0)(\omega_n(x_i) = 0,\ R_n(x_i) = 0)$, je i $(\forall i \in \hat{n}_0)(Q(x_i) = 0)$. Funkce $Q$ má tedy $n+2$ kořenů a to podle Rolleovy věty[3] znamená, že funkce $Q'$ má $n+1$ vzájemně různých kořenů ležících mezi kořeny funkce $Q$. To opět znamená, že funkce $Q''$ má $n$ vzájemně různých kořenů ležících mezi kořeny funkce $Q'$ atd. Nakonec se dozvídáme, že funkce $Q^{(n+1)}$ má jeden kořen ležící mezi kořeny funkce $Q^{(n)}$. Označíme-li tento kořen $\xi$, platí tedy $Q^{(n+1)}(\xi) = 0$. Podle definice funkce $R_n$ zřejmě platí

$$R_n^{(n+1)}(x) = f^{(n+1)}(x) - L_n^{(n+1)}(x) = f^{(n+1)}(x) - 0 = f^{(n+1)}(x),$$

neboť $L_n$ je polynom stupně nejvýše $n$-tého. Podle definice funkce $\omega$ zase platí $\omega^{(n+1)}(x) = (n+1)!$, a tak

$$Q^{(n+1)}(\xi) = \omega_n(x)f_n^{(n+1)}(\xi) - R_n(x)(n+1)! = 0 \Rightarrow R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\,\omega_n(x).$$

□

[3] Rolleova věta: Buď $f$ reálná funkce spojitá na omezeném a uzavřeném itervalu $\langle a, b\rangle$ a nechť má $f$ v každém bodě intervalu $(a, b)$ derivaci. Je-li $f(a) = f(b)$, potom existuje $\xi \in (a, b)$ tak, že $f'(\xi) = 0$.

Konstrukce polynomu $L_n$ podle důkazu tvrzení 7.1 není ekonomická. Ukážeme si proto dvě lepší řešení.

## 7.1. Newtonova interpolační formule pro neekvidistantní intervaly.

**Definice 7.3.** Buďte $f$ reálná funkce reálné proměnné, $x_0, x_1, \ldots, x_n \in D(f)$ (tyto body přitom nemusejí být seřazeny podle velikosti). Poměrnými diferencemi 1. řádu nazýváme podíly typu

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \ \ldots, \ f(x_{n-1}, x_n) = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}.$$

Poměrnými diferencemi 2. řádu nazýváme výrazy

$$f(x_0, x_1, x_2) = \frac{f(x_1, x_2) - f(x_0, x_1)}{x_2 - x_0}, \ \ldots,$$

$$f(x_{n-2}, x_{n-1}, x_n) = \frac{f(x_{n-1}, x_n) - f(x_{n-2}, x_{n-1})}{x_n - x_{n-2}}.$$

Poměrnými diferencemi $k$-tého řádu nazýváme výrazy

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

Poměrné diference je zvykem zapisovat do tzv. diferenčního schématu:

$$\begin{array}{ccccc}
x_0 & f(x_0) & & & \\
 & & f(x_0, x_1) & & \\
x_1 & f(x_1) & & f(x_0, x_1, x_2) & \\
 & & f(x_1, x_2) & & f(x_0, x_1, x_2, x_3) \\
x_2 & f(x_2) & & f(x_1, x_2, x_3) & \\
 & & f(x_2, x_3) & & \\
x_3 & f(x_3) & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
x_{n-3} & f(x_{n-3}) & & & \\
 & & f(x_{n-3}, x_{n-2}) & & \\
x_{n-2} & f(x_{n-2}) & & f(x_{n-3}, x_{n-2}, x_{n-1}) & \\
 & & f(x_{n-2}, x_{n-1}) & & f(x_{n-3}, x_{n-2}, x_{n-1}, x_n) \\
x_{n-1} & f(x_{n-1}) & & f(x_{n-2}, x_{n-1}, x_n) & \\
 & & f(x_{n-1}, x_n) & & \\
x_n & f(x_n) & & &
\end{array}$$

**Tvrzení 7.4.** Pro poměrnou diferenci $k$-tého řádu platí

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

$$+ \frac{f(x_{i+1})}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2}) \ldots (x_{i+1} - x_{i+k})} + \ldots + \frac{f(x_{i+k})}{(x_{i+k} - x_i) \ldots (x_{i+k} - x_{i+k-1})}.$$

*Důkaz.* Indukcí podle $k$: Pro $k = 1$ je

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

Předpokládejme, že tvrzení platí pro $k - 1$. Dokážeme, že platí pro $k$:

$$f(x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}) = \frac{f(x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}) - f(x_i, \ldots, x_{i+k-1})}{x_{i+k} - x_i} \overset{\mathrm{IP}}{=}$$

$$\overset{\mathrm{IP}}{=} \frac{1}{x_{i+k} - x_i} \left[ \frac{f(x_{i+1})}{(x_{i+1} - x_{i+2}) \ldots (x_{i+1} - x_{i+k})} + \ldots + \right.$$

$$+ \frac{f(x_{i+k-1})}{(x_{i+k-1} - x_{i+1}) \ldots (x_{i+k-1} - x_{i+k-2})(x_{i+k-1} - x_{i+k})} + \frac{f(x_{i+k})}{(x_{i+k} - x_{i+1}) \ldots (x_{i+k} - x_{i+k-1})} -$$

$$-\frac{f(x_i)}{(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_{i+k-1})} - \frac{f(x_{i+1})}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})\dots(x_{i+1} - x_{i+k-1})} -$$
$$- \dots - \frac{f(x_{i+k-1})}{(x_{i+k-1} - x_i)\dots(x_{i+k-1} - x_{i+k-2})}\Bigg].$$

V lomených závorkách se vyskytují rozdíly typu[4]

$$\frac{f(x_j)}{(x_j - x_{i+1})\dots(x_j - x_{i+k})} - \frac{f(x_j)}{(x_j - x_i)\dots(x_j - x_{i+k-1})}.$$

Pro tyto dvojice platí

$$\frac{1}{x_{i+k} - x_i}\left[\frac{f(x_j)}{(x_j - x_{i+1})\dots(x_j - x_{i+k})} - \frac{f(x_j)}{(x_j - x_i)\dots(x_j - x_{i+k-1})}\right] =$$
$$= \frac{f(x_j)}{(x_j - x_{i+1})\dots(x_j - x_{i+k-1})} \cdot \frac{1}{x_{i+k} - x_i} \cdot \left[\frac{1}{x_j - x_{i+k}} - \frac{1}{x_j - x_i}\right] =$$
$$= \frac{f(x_j)}{(x_j - x_{i+1})\dots(x_j - x_{i+k-1})} \cdot \frac{1}{x_{i+k} - x_i} \cdot \frac{(x_j - x_i) - (x_j - x_{i+k})}{(x_j - x_{i+k})(x_j - x_i)} =$$
$$= \frac{f(x_j)}{(x_j - x_i)\dots(x_j - x_{i+k})} \cdot \frac{x_{i+k} - x_i}{x_{i+k} - x_i} = \frac{f(x_j)}{(x_j - x_i)\dots(x_j - x_{i+k})}.$$

□

**Důsledek 7.5.**
1. Poměrná diference součtu/rozdílu je součet/rozdíl odpovídajících poměrných diferencí.
2. Poměrná diference funkce $\alpha f$, kde $\alpha$ je konstanta, je rovna $\alpha$-násobku poměrné diference funkce $f$.
3. Poměrná diference je symetrická vůči všem svým proměnným, tj. skutečně nezáleží na pořadí uzlů.
4. Poměrná diference $k$-tého řádu funkce $f(x) = x^n$ je homogenní forma (viz dále) stupně $n - k$ ve svých proměnných.

*Důkaz.* Dokážeme bod 4. Ještě předtím si ale vysvětlíme, co je to forma.

Polynom je součet sčítanců tvaru $ax_1^{k_1} x_2^{k_2} \dots x_n^{k_n}$. Číslo $k_1 + k_2 + \dots + k_n$ se nazývá stupeň sčítance. Polynom, jehož všechny sčítance mají stejný stupeň, se nazývá forma.

Máme tedy dokázat, že $f(x_i,\ \dots,\ x_{i+k}) = \sum x_i^{\alpha_0} x_{i+1}^{\alpha_1} \dots x_{i+k}^{\alpha_k}$, kde suma je přes všechny $(k+1)$-tice $(\alpha_0,\ \alpha_1,\ \dots,\ \alpha_k)$, pro které platí $\alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_k = n - k$. Důkaz provedeme indukcí podle $k$. Pro $k = 1$ je

$$f(x_i, x_{i+1}) = \frac{x_{i+1}^n - x_i^n}{x_{i+1} - x_i} = x_{i+1}^{n-1} + x_{i+1}^{n-2} x_i + \dots + x_i^{n-1}.$$

Předpokládejme nyní, že tvrzení platí pro $k$. Dokážeme, že platí i pro $k+1$:

$$f(x_i, x_{i+1},\ \dots,\ x_{i+k},\ x_{i+k+1}) = \frac{f(x_{i+1},\ \dots,\ x_{i+k},\ x_{i+k+1}) - f(x_i,\ x_{i+1},\ \dots,\ x_{i+k})}{x_{i+k+1} - x_i} =$$
$$= \frac{f(x_{i+k+1},\ x_{i+1},\ \dots,\ x_{i+k}) - f(x_i,\ x_{i+1},\ \dots,\ x_{i+k})}{x_{i+k+1} - x_i} =$$
$$= \sum x_{i+1}^{\alpha_1} \dots x_{i+k}^{\alpha_k} \cdot \frac{x_{i+k+1}^{\alpha_0} - x_i^{\alpha_0}}{x_{i+k+1} - x_i} = \sum x_{i+1}^{\alpha_1} \dots x_{i+k}^{\alpha_k} (x_{i+k+1}^{\alpha_0 - 1} + x_{i+k+1}^{\alpha_0 - 2} x_i + \dots + x_i^{\alpha_0 - 1}).$$

Sumy jsou opět přes všechna $\alpha_j$, $j \in \hat{k}_0$, taková, že $\alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_k = n - k$. □

*Poznámka.* Z bodu 4 v předchozím tvrzení vyplývá, že $n$-tá poměrná diference funkce $x \mapsto x^n$ je konstanta a vyšší poměrné diference této funkce jsou rovny nule. Totéž zřejmě platí pro polynom stupně $n$.

[4] Dále pro stručnost nebudeme zdůrazňovat, že nulové členy ve jmenovatelích jsou vynechány, takže např. místo $(x_j - x_i)\dots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\dots(x_j - x_{j+k})$ budeme psát jen $(x_j - x_i)\dots(x_j - x_{i+k})$.

Nyní můžeme přikročit ke konstrukci Lagrangeova interpolačního polynomu. Nechť je dána funkce $f$ a uzly $x_0,\, x_1,\, \ldots,\, x_n$. Pro $n \geq 1$ můžeme psát

$$L_n = L_0 + (L_1 - L_0) + (L_2 - L_1) + \ldots + (L_n - L_{n-1}).$$

Protože $L_k - L_{k-1}$ je polynom stupně nejvýše $k$-tého a uzly $x_0,\, x_1,\, x_{k-1}$ musejí být jeho kořeny, znamená to, že

$$L_k(x) - L_{k-1}(x) = A(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{k-1}),$$

kde $A$ je konstanta. Uvážíme-li, že $L_k(x_k) = f(x_k)$, plyne z předchozího vztahu

$$f(x_k) - L_{k-1}(x_k) = A(x_k - x_0)(x_k - x_1)\ldots(x_k - x_{k-1}), \tag{56}$$

takže pro konstantu $A$ s použitím důkazu tvrzení 7.1 dostáváme

$$A = \frac{f(x_k)}{(x_k - x_0)\ldots(x_k - x_{k-1})} - \frac{\sum_{j=0}^{k-1} f(x_j)\frac{(x_k-x_0)\ldots(x_k-x_{j-1})(x_k-x_{j+1})\ldots(x_k-x_{k-1})}{(x_j-x_0)\ldots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\ldots(x_j-x_{k-1})}}{(x_k - x_0)\ldots(x_k - x_{k-1})} =$$

$$= \frac{f(x_k)}{(x_k - x_0)\ldots(x_k - x_{k-1})} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{f(x_j)}{(x_j - x_0)\ldots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\ldots(x_j - x_{k-1})(x_k - x_j)} =$$

$$= \sum_{j=0}^{k} \frac{f(x_j)}{(x_j - x_0)\ldots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\ldots(x_j - x_k)} = f(x_0,\, x_1,\, \ldots,\, x_k).$$

Protože zřejmě $L_0(x) \equiv f(x_0)$, plyne z předchozích vztahů ihned

$$\begin{aligned} L_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)f(x_0,\, x_1) + (x - x_0)(x - x_1)f(x_0,\, x_1,\, x_2) + \ldots + \\ +(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})f(x_0,\, x_1,\, \ldots,\, x_n). \end{aligned} \tag{57}$$

*Poznámka.* V praxi vycházíme z diferenčního schématu. Stačí z něj ovšem spočítat jen $f(x_0),\, f(x_0,\, x_1),\, \ldots,\, f(x_0,\, \ldots, x_n)$.

Na závěr se vraťme k větě 7.2. Buď $(\forall j \in \hat{n}_0)(x \neq x_j)$. Potom podle tvrzení 7.4 platí

$$f(x,\, x_0,\, \ldots,\, x_n) = \frac{f(x)}{(x - x_0)\ldots(x - x_n)} +$$

$$+ \sum_{j=0}^{n} \frac{f(x_j)}{(x_j - x)(x_j - x_0)\ldots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\ldots(x_j - x_n)},$$

odkud s použitím důkazu tvrzení 7.1 plyne

$$f(x) = (x - x_0)\ldots(x - x_n)\; f(x,\, x_0,\, \ldots,\, x_n) -$$

$$- \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\, \frac{(x - x_0)\ldots(x - x_n)}{(x_j - x)(x_j - x_0)\ldots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\ldots(x_j - x_n)} =$$

$$= \omega_n(x) f(x,\, x_0,\, \ldots,\, x_n) + \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\, \frac{(x - x_0)\ldots(x - x_{j-1})(x - x_{j+1})\ldots(x - x_n)}{(x_j - x_0)\ldots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\ldots(x_j - x_n)} =$$

$$= \omega_n(x) f(x,\, x_0,\, \ldots,\, x_n) + \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\Phi_j(x) = \omega_n(x) f(x,\, x_0,\, \ldots,\, x_n) + L_n(x).$$

Je tedy $f(x) - L_n(x) = \omega_n(x) f(x,\, x_0,\, \ldots,\, x_n)$. Porovnáním tohoto výrazu s výrazem ve zmiňované větě 7.2 zjistíme, že platí

$$f(x,\, x_0,\, \ldots,\, x_n) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!},$$

odkud po přeindexování $x \to x_i,\, x_0 \to x_{i+1},\, \ldots,\, x_{n-1} \to x_{i+k}$ dostaneme

$$f(x_i,\, x_{i+1},\, \ldots,\, x_{i+k}) = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}. \tag{58}$$

7.2. **Newtonova interpolační formule pro ekvidistantní intervaly.**
Buďte $x_0 \in \mathbb{R}$, $h \in \mathbb{R}^+$. Potom $\forall i \in \mathbb{Z}$ definujeme

$$x_i = x_0 + ih,\ f_i = f(x_i). \tag{59}$$

**Definice 7.6.** Konečnými diferencemi 1. řádu nazýváme výrazy

$$\ldots,\ f^1_{-\frac{3}{2}} = f_{-1} - f_{-2},\ f^1_{-\frac{1}{2}} = f_0 - f_{-1},\ f^1_{\frac{1}{2}} = f_1 - f_0,\ f^1_{\frac{3}{2}} = f_2 - f_1,\ \ldots$$

Konečnými diferencemi 2. řádu nazýváme výrazy

$$\ldots,\ f^2_{-2} = f^1_{-\frac{3}{2}} - f^1_{-\frac{5}{2}},\ f^2_{-1} = f^1_{-\frac{1}{2}} - f^1_{-\frac{3}{2}},\ f^2_0 = f^1_{\frac{1}{2}} - f^1_{-\frac{1}{2}},\ f^2_1 = f^1_{\frac{3}{2}} - f^1_{\frac{1}{2}}, f^2_2 = f^1_{\frac{5}{2}} - f^1_{\frac{3}{2}},\ \ldots$$

Konečnými diferencemi $k$-tého řádu nazýváme výrazy

$$f^k_i = f^{k-1}_{i+\frac{1}{2}} - f^{k-1}_{i-\frac{1}{2}}.$$

*Poznámka.* Zjednodušené značení:

| | | | |
|---|---|---|---|
| diference vpřed v $i$-tém uzlu | $\Delta f_i$ | $=$ | $f_{i+1} - f_i$, |
| diference vzad v $(i+1)$-ním uzlu | $\nabla f_{i+1}$ | $=$ | $f_{i+1} - f_i$, |
| symetrická diference | $\delta f_{i+\frac{1}{2}}$ | $=$ | $f_{i+1} - f_i$. |

*Poznámka.* Diferenční schéma:

$$\begin{array}{ccccccc}
\ldots & & & & & & \\
f_{-3} & & & & & & \\
 & f^1_{-\frac{5}{2}} & & & & & \\
f_{-2} & & f^2_{-2} & & & & \\
 & f^1_{-\frac{3}{2}} & & f^3_{-\frac{3}{2}} & & & \\
f_{-1} & & f^2_{-1} & & f^4_{-1} & & \\
 & f^1_{-\frac{1}{2}} & & f^3_{-\frac{1}{2}} & & f^5_{-\frac{1}{2}} & \\
f_0 & & f^2_0 & & f^4_0 & & f^6_0 \\
 & f^1_{\frac{1}{2}} & & f^3_{\frac{1}{2}} & & f^5_{\frac{1}{2}} & \\
f_1 & & f^2_1 & & f^4_1 & & \\
 & f^1_{\frac{3}{2}} & & f^3_{\frac{3}{2}} & & & \\
f_2 & & f^2_2 & & & & \\
 & f^1_{\frac{5}{2}} & & & & & \\
f_3 & & & & & & \\
\ldots & & & & & &
\end{array}$$

**Tvrzení 7.7** (nerekurzivní vyjádření $f^k_i$)**.** Platí

$$f^k_i = \binom{k}{0} f_{i+\frac{k}{2}} - \binom{k}{1} f_{i-1+\frac{k}{2}} + \binom{k}{2} f_{i-2+\frac{k}{2}} - \ldots +$$
$$+(-1)^{k-1} \binom{k}{k-1} f_{i+1-\frac{k}{2}} + (-1)^k \binom{k}{k} f_{i-\frac{k}{2}}.$$

*Náznak důkazu.*

$$\begin{aligned}
f^1_{i+\frac{1}{2}} &= f_{i+1} - f_i, \\
f^2_i &= f^1_{i+\frac{1}{2}} - f^1_{i-\frac{1}{2}} = (f_{i+1} - f_i) - (f_i - f_{i-1}) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}, \\
f^3_{i+\frac{1}{2}} &= f^2_{i+1} - f^2_i = (f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i) - (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}) = \\
&= f_{i+2} - 3f_{i+1} + 3f_i - f_{i-1}.
\end{aligned}$$

□

**Důsledek 7.8.** (1) $f = \varphi \pm \psi \Rightarrow f^k_i = \varphi^k_i \pm \psi^k_i$,
(2) $(\alpha f)^k_i = \alpha f^k_i$.

**Tvrzení 7.9** („to neni přímo důsledek”)**.**

$$f(x_i,\, x_{i+1},\, \ldots,\, x_{i+k}) = \frac{f^k_{i+\frac{k}{2}}}{k!\, h^k}$$

*Důkaz.*

$$f(x_i,\, x_{i+1}) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} = \frac{f^1_{i+\frac{1}{2}}}{h},$$

$$f(x_i,\, x_{i+1},\, x_{i+2}) = \frac{f(x_{i+1},\, x_{i+2}) - f(x_i,\, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i} = \frac{1}{2h}\left(\frac{f^1_{i+\frac{3}{2}}}{h} - \frac{f^1_{i+\frac{1}{2}}}{h}\right) = \frac{f^2_{i+1}}{2h^2}.$$

□

**Důsledek 7.10.** Pro polynom $n$-tého řádu je $n$-tá konečná diference konstanta a konečné diference vyšších řádů jsou nulové.

7.2.1. *Newtonova interpolační formule pro ekvidistantní intervaly pro interpolaci vpřed.* Sloučíme vzorce (57) a (59).

(1) Zavedeme substituci $t = \frac{x-x_0}{h}$:

$$\left.\begin{aligned} x &= x_0 + th \\ x_i &= x_0 + ih \end{aligned}\right\} x - x_i = h(t-i).$$

(2) Poměrné diference nahradíme podle tvrzení 7.9 konečnými:

$$L_n(x_0+th) = f_0 + tf^1_{\frac{1}{2}} + \frac{t(t-1)}{2!}f^2_1 + \frac{t(t-1)(t-2)}{3!}f^3_{\frac{3}{2}} + \ldots + \frac{t(t-1)\ldots(t-n+1)}{n!}f^n_{\frac{n}{2}}.$$

„Dá se to přepsat elegantně — já to nevyžaduju”:

$$L_n(x_0+th) = f_0 + \binom{t}{1}\Delta f_0 + \binom{t}{2}\Delta^2 f_0 + \ldots + \binom{t}{n}\Delta^n f_0.$$

7.2.2. *Newtonova interpolační formule pro ekvidistantní intervaly pro interpolaci vzad.* Proměnné ve vzorci (57) přeindexujeme takto: $x_i \to x_{-i}$ $(i \in \hat{n})$.

(1) Zavedeme substituci $t = \frac{x-x_0}{h}$:

$$\left.\begin{aligned} x &= x_0 + th \\ x_{-i} &= x_0 - ih \end{aligned}\right\} x - x_{-i} = h(t+i).$$

(2) Poměrné diference nahradíme konečnými:

$$L_n(x_0+th) = f_0 + tf^1_{-\frac{1}{2}} + \frac{t(t+1)}{2!}f^2_{-1} + \frac{t(t+1)(t+2)}{3!}f^3_{-\frac{3}{2}} + \ldots + \frac{t(t+1)\ldots(t+n-1)}{n!}f^n_{-\frac{n}{2}}.$$

„Trošku elegantnější je to s tim nabla”:

$$L_n(x_0+th) = f_0 + \binom{t}{1}\nabla f_0 + \binom{t+1}{2}\nabla^2 f_0 + \ldots + \binom{t+n-1}{n}\nabla^n f_0.$$

## 8. Numerický výpočet derivace

Jsou dány hodnoty funkce $f$ ve vzájemně různých uzlech $x_0,\, x_1,\, \dots,\, x_n$. Hledáme $k$-tou derivaci funkce $f$, a to především v bodech $x_0,\, x_1,\, \dots,\, x_n$. Principiálně se tato úloha řeší strašně snadno: stačí $k$-krát zderivovat vztah $f(x) = L_n(x) + R_n(x)$ a dostaneme

$$f^{(k)}(x) = L_n^{(k)}(x) + R_n^{(k)}(x).$$

Zřejmě musí $k \leq n$, jinak je to nanic (zůstane $f^{(k)}(x) = R_n^{(k)}(x)$). Našim cílem je elegantně vyjádřit $L_n^{(k)}$ a $R_n^{(k)}$. K tomu je potřeba zobecnit poměrné diference i pro opakující se argumenty.

**Definice 8.1.** Nechť $\forall i \in \hat{n}_0$ v okolí bodu $x_i$ existuje $f^{(k_i)}$. Potom definujeme

$$f(\underbrace{x_0,\, \dots,\, x_0}_{k_0\text{-krát}},\, \underbrace{x_1,\, \dots,\, x_1}_{k_1\text{-krát}},\, \dots,\, \underbrace{x_n,\, \dots,\, x_n}_{k_n\text{-krát}}) =$$

$$= \lim_{x_i^{(j)} \to x_i} f(x_0,\, x_0^{(1)},\, \dots,\, x_0^{(k_0-1)},\, x_1,\, x_1^{(1)},\, \dots,\, x_1^{(k_1-1)},\, \dots,\, x_n,\, x_n^{(1)},\, \dots,\, x_n^{(k_n-1)})$$

za předpokladu, že $x_i^{(j_1)} \neq x_i^{(j_2)}$ pro $j_1 \neq j_2$.

*Poznámka.* S použitím (58) dostáváme

$$f(x_0,\, x_0) = \lim_{x_0^{(1)} \to x_0} f(x_0,\, x_0^{(1)}) = \lim_{x_0^{(1)} \to x_0} \frac{f(x_0^{(1)}) - f(x_0)}{x_0^{(1)} - x_0} = f'(x_0),$$

$$f(\underbrace{x_0,\, \dots,\, x_0}_{k_0\text{-krát}}) = \lim_{x_0^{(j)} \to x_0} f(x_0,\, x_0^{(1)},\, \dots,\, x_0^{(k_0-1)}) = \lim_{x_0^{(j)} \to x_0} \frac{f^{(k_0-1)}(\xi)}{(k_0-1)!} = \frac{f^{(k_0-1)}(x_0)}{(k_0-1)!}.$$

Dále budeme předpokládat ekvidistantní rozmístění uzlů a omezíme se na

- 1. a 2. derivaci,
- nejnižší počty uzlů (tj. 2, resp. 3 u 1. derivace a 3 u 2. derivace),
- derivace pouze v uzlech.

Vyjděme ze vztahu

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

$$+ (x-x_0)\dots(x-x_n) f(x,\, x_0,\, \dots,\, x_n)$$

a zaveďme do něj substituci $t = \frac{x-x_0}{h}$:

$$\left.\begin{aligned} x &= x_0 + th \\ x_i &= x_0 + ih \end{aligned}\right\} x - x_i = h(t-i) \Rightarrow x_i - x_j = h(i-j).$$

Označíme-li opět $f_i = f(x_i)$, potom

$$f(x_0+th) = \sum_{i=0}^{n} \frac{f_i}{h^n i!(i-(i+1))\dots(i-n)} \frac{h^n t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} +$$

$$+ h^{n+1} t(t-1)\dots(t-n) f(x,\, x_0,\, \dots,\, x_n) =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \frac{f_i}{i!(n-i)!} \frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} + h^{n+1} t(t-1)\dots(t-n) f(x,\, x_0,\, \dots,\, x_n),$$

$$f'(x_0+th) = \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \frac{f_i}{i!(n-i)!} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[ \frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} \right] \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} +$$

$$+ h^{n+1} f(x,\, x_0,\, \dots,\, x_n) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[t(t-1)\dots(t-n)] \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} +$$

$$+ h^{n+1} t(t-1)\dots(t-n) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x,\, x_0,\, \dots,\, x_n).$$

Protože

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,\,x_0,\,\dots,\,x_n) = \lim_{x'\to x}\frac{f(x',\,x_0,\,\dots,\,x_n) - f(x,\,x_0,\,\dots,\,x_n)}{x'-x} = \\ = \lim_{x'\to x} f(x,\,x',\,x_0,\,\dots,\,x_n) = f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n)$$

a $\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{h}$, má $f'$ po dosazení podle (58) tvar

$$f'(x_0+th) = \frac{1}{h}\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\frac{f_i}{i!(n-i)!}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i}\right] + \\ + h^n\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[t(t-1)\dots(t-n)]\cdot\frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!} + h^{n+1}\cdot t(t-1)\dots(t-n)\cdot\frac{f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!}.$$

Pro druhou derivaci dostáváme

$$f''(x_0+th) = \frac{1}{h^2}\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\frac{f_i}{i!(n-i)!}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\left[\frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i}\right] + \\ + h^{n-1}f(x,\,x_0,\,\dots,\,x_n)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}[t(t-1)\dots(t-n)] + \\ + 2h^n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[t(t-1)\dots(t-n)]f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n) + h^{n+1}t(t-1)\dots(t-n)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n).$$

Pro derivaci $f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n)$ podle definice platí

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n) = \lim_{x'\to x}\frac{f(x',\,x',\,x_0,\,\dots,\,x_n) - f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n)}{x'-x}.$$

V čitateli přičteme a odečteme výraz $f(x,\,x',\,x_0,\,\dots,\,x_n)$ a limitu roztrhneme na dvě:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n) = \lim_{x'\to x}\frac{f(x',\,x_0,\,\dots,\,x_n,\,x') - f(x,\,x',\,x_0,\,\dots,\,x_n)}{x'-x} + \\ + \lim_{x'\to x}\frac{f(x,\,x_0,\,\dots,\,x_n,\,x') - f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n)}{x'-x} = \\ = \lim_{x'\to x} f(x,\,x',\,x_0,\,\dots,\,x_n,\,x') + \lim_{x'\to x} f(x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n,\,x') = 2f(x,\,x,\,x,\,x_0,\,\dots,\,x_n).$$

Nyní už můžeme psát vzorec pro chybu $f''$:

$$R_n''(x_0+th) = h^{n-1}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}[t(t-1)\dots(t-n)]\frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!} + \\ + 2h^n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[t(t-1)\dots(t-n)]\frac{f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!} + 2h^{n+1}t(t-1)\dots(t-n)\frac{f^{(n+3)}(\xi_3)}{(n+3)!}.$$

*Poznámka.* Bez důkazu uveďme, že platí

$$\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}f(x,\,x_0,\,\dots,\,x_n) = m!f(\underbrace{x,\,\dots,\,x}_{(m+1)\text{-krát}},\,x_0,\,\dots,\,x_n). \tag{60}$$

Dosadíme-li $n=1$ do vzorečku pro $f'$, dostaneme

$$f'(x_0+th) = \frac{1}{h}(f_1-f_0) + h(2t-1)\frac{f''(\xi_1)}{2!} + h^2t(t-1)\frac{f'''(\xi_2)}{3!}.$$

Značme dále $(\forall i\in\hat{n}_0)(f_i' = f'(x_i))$. Po dosazení $t=0$, resp. $t=1$ do předchozího vztahu máme

$$f_0' = \frac{f_1-f_0}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi),\ f_1' = \frac{f_1-f_0}{h} + \frac{h}{2}f''(\xi). \tag{61}$$

Stejný postup nyní uplatníme pro $n=2$ a dostaneme

$$f'(x_0+th) = \frac{1}{2h}[f_0(2t-3) - 2f_1(2t-2) + f_2(2t-1)] + \\ + h^2(3t^2-6t+2)\frac{f'''(\xi_1)}{3!} + h^3t(t-1)(t-2)\frac{f'''(\xi_2)}{4!},$$

$$f_0' = \frac{1}{2h}(-3f_0+4f_1-f_2) + \frac{h^2}{3}f'''(\xi),$$

$$
\begin{aligned}
f_1' &= \frac{1}{2h}(f_2 - f_0) + \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \\
f_2' &= \frac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) + \frac{h^2}{3} f'''(\xi).
\end{aligned} \tag{62}
$$

*Poznámka.* Porovnáním vzorců (61) a (62) zjistíme, že v případě $n = 2$ je chyba o řád menší.

Nyní do vzorce pro $f''$ dosadíme $n = 2$ a vyjádříme $f''(x_0)$, $f''(x_1)$, $f''(x_2)$:

$$
\begin{gathered}
f''(x_0 + th) = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + h(6t - 6)\frac{f'''(\xi_1)}{3!} + \\
+ 2h^2(3t^2 - 6t + 2)\frac{f^{(4)}(\xi_2)}{4!} + 2h^3 t(t-1)(t-2)\frac{f^{(5)}(\xi_3)}{5!}, \\
f''(x_0) = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) - hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6} f^{(4)}(\xi_2), \\
f''(x_1) = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \\
f''(x_2) = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6} f^{(4)}(\xi_2).
\end{gathered}
$$

## 9. Numerický výpočet integrálu

Chceme vypočítat

$$\int_c^d f(x)\ \mathrm{d}x \tag{63}$$

na základě znalosti $f(x_1,\ \dots,\ x_n)$, kde uzly $x_1,\ \dots,\ x_n$ jsou z intervalu $\langle c,\ d\rangle$.

9.1. **Newtonovy-Cotesovy formule pro ekvidistantní rozmístění uzlů.** Podle rozmístění uzlů v intervalu $\langle c,\ d\rangle$ rozlišujeme

(1) formule uzavřeného typu:

$$\begin{array}{cccc} a & c & \dots & d \\ \hline x_0 & x_1 & \dots & x_n \end{array}$$

$$c = a + h,\ d = a + nh,\ h = \frac{d-c}{n-1},$$

(2) formule otevřeného typu:

$$\begin{array}{ccccc} a = c & a+h & \dots & a+nh & d \\ \hline x_0 & x_1 & \dots & x_n & x_{n+1} \end{array}$$

$$c = a,\ d = a + (n+1)h,\ h = \frac{d-c}{n+1}.$$

Odvozovat budeme oba typy najednou pomocí parametru $k$:

$$c = a + (1-k)h,\ d = a + (n+k)h,\ h = \frac{d-c}{n-1+2k}.$$

Formule uzavřeného, resp. otevřeného typu zřejmě získáme volbou $k = 0$, resp. $k = 1$. Definujme funkci $F(y) = f(a + hy)$. Potom $F(i) = f(x_i)$. Zavedeme-li do integrálu (63) substituci $x = a + hy$, je

$$\int_c^d f(x)\ \mathrm{d}x = h \int_{1-k}^{n+k} F(y)\ \mathrm{d}y.$$

Funkci $F$ nahradíme Lagrangeovým interpolačním polynomem příslušným k této funkci a uzlům $1,\ \dots,\ n$. Potom

$$\int_c^d f(x)\ \mathrm{d}x = h \int_{1-k}^{n+k} \sum_{i=1}^{n} F(i) \frac{(y-1)\dots(y-(i-1))(y-(i+1))\dots(y-n)}{(i-1)\dots(i-(i-1))(i-(i+1))\dots(i-n)}\ \mathrm{d}y +$$

$$+ \underbrace{h \int_{1-k}^{n+k} (y-1)\dots(y-n)\ F(y,\ 1,\ \dots,\ n)\ \mathrm{d}y}_{\text{ozn. } \varrho_n} =$$

$$= h \int_{1-k}^{n+k} \sum_{i=1}^{n} \frac{F(i)}{(i-1)!\ (n-i)!\ (-1)^{i-n}} \frac{(y-1)\dots(y-n)}{y-i}\ \mathrm{d}y + h\varrho_n =$$

$$= (d-c) \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \underbrace{\frac{(-1)^{n-i} \int_{1-k}^{n+k} \frac{(y-1)\dots(y-n)}{y-i}\ \mathrm{d}y}{(n-1+2k)(i-1)!\ (n-i)!}}_{\text{ozn. } I_{i,k}^{(n)}} + \underbrace{h\varrho_n}_{\text{ozn. } R_{n,k}(f)},$$

kde $I_{i,\ k}^{(n)}$ jsou tzv. Newtonova-Cotesova čísla. Získali jsme tedy obecný vzorec

$$\int_c^d f(x)\ \mathrm{d}x = (d-c) \sum_{i=1}^{n} I_{i,\ k}^{(n)} f(x_i) + R_{n,\ k}(f). \tag{64}$$

**Tvrzení 9.1.** Newtonova-Cotesova čísla $I^{(n)}_{i,k}$ jsou symetrická v $i$, tj. $(\forall i \in \hat{n})(I^{(n)}_{i,\,k} = I^{(n)}_{n+1-i,\,k})$, a pro jejich součet platí

$$\sum_{i=1}^{n} I^{(n)}_{i,\,k} = 1.$$

*Důkaz.* První část tvrzení: Platí

$$I^{(n)}_{n+1-i,\,k} = \frac{(-1)^{i-1}}{(n-1+2k)(n-i)!\,(i-1)!} \int\limits_{1-k}^{n+k} \frac{(y-1)\dots(y-n)}{y-n+i-1}\,\mathrm{d}y.$$

Do integrálu vpravo zavedeme substituci $z = n+1-y$, tj. $y = n+1-z$:

$$I^{(n)}_{n+1-i,\,k} = \frac{(-1)^{1-i}}{(n-1+2k)(i-1)!\,(n-i)!} \int\limits_{n+k}^{1-k} \frac{(n-z)\dots(1-z)}{i-z}(-\mathrm{d}z) =$$

$$= \frac{(-1)^{n-i}}{(n-1+2k)(i-1)!\,(n-i)!} \int\limits_{1-k}^{n+k} \frac{(z-1)\dots(z-n)}{z-i}\,\mathrm{d}z = I^{(n)}_{i,\,k}.$$

Druhá část tvrzení: Položíme-li $f(x) \equiv 1$, potom zřejmě $R_{n,\,k}(f) = 0$ a podle (64) platí $d-c = (d-c)\sum_{i=1}^{n} I^{(n)}_{i,\,k}$. □

Nyní do vzorce (64) dosadíme $k=0$ a $n=2$. Podle předchozího tvrzení musí být $I^{(2)}_{1,0} = I^{(2)}_{2,0}$, takže

$$\int\limits_c^d f(x)\,\mathrm{d}x \approx (d-c)\left(\frac{1}{2}f(x_1) + \frac{1}{2}f(x_2)\right).$$

Pro $n=3$ si už musíme alespoň $I^{(3)}_{1,0}$ spočítat podle definice:

$$I^{(3)}_{1,0} = \frac{1}{2.0!\,2!}\int\limits_1^3 \frac{(y-1)(y-2)(y-3)}{y-1}\,\mathrm{d}y = \frac{1}{4}\cdot\frac{2}{3} = \frac{1}{6},$$

$$\int\limits_c^d f(x)\,\mathrm{d}x \approx (d-c)\left(\frac{1}{6}f(x_1) + \frac{4}{6}f(x_2) + \frac{1}{6}f(x_3)\right).$$

Podobným způsobem se dozvíme, že pro $n=4$ platí

$$\int\limits_c^d f(x)\,\mathrm{d}x \approx (d-c)\left(\frac{1}{8}f(x_1) + \frac{3}{8}f(x_2) + \frac{3}{8}f(x_3) + \frac{1}{8}f(x_4)\right).$$

Analogicky dokážeme, že v případě formulí otevřeného typu (tj. pro $k=1$) platí

$$n=1 \quad\Rightarrow\quad \int\limits_c^d f(x)\,\mathrm{d}x \approx (d-c)f(x_1),$$

$$n=2 \quad\Rightarrow\quad \int\limits_c^d f(x)\,\mathrm{d}x \approx (d-c)\left(\frac{1}{2}f(x_1) + \frac{1}{2}f(x_2)\right),$$

$$n=3 \quad\Rightarrow\quad \int\limits_c^d f(x)\,\mathrm{d}x \approx (d-c)\left(\frac{2}{3}f(x_1) - \frac{1}{3}f(x_2) + \frac{2}{3}f(x_3)\right).$$

9.2. **Určení chyby v Newtonových-Cotesových formulích.**

9.2.1. *Lichý počet uzlů.* Soustřeďme se nejprve na případ lichého počtu uzlů, tj. nechť $(\exists m \in \mathbb{N})(n = 2m-1)$. Potom pro chybu platí

$$\varrho_{2m-1} = \int\limits_{1-k}^{2m-1+k} \underbrace{(y-1)\dots(y-2m+1)}_{\text{ozn. } \psi(y)} F(y,\,1,\,\dots,\,2m-1)\,\mathrm{d}y.$$

Definujme funkci

$$\varphi(x) = \int\limits_{1-k}^{x} \psi(y)\mathrm{d}y. \tag{65}$$

**Tvrzení 9.2** (pomocné)**.** Označme

$$I_i = \int\limits_{i}^{i+1} \psi(y)\,\mathrm{d}y$$

pro $i = 0,\,1,\,\dots,\,m-1$. Potom platí $|I_0| > |I_1| > \dots > |I_{m-1}|$.

*Důkaz.* Pro $i \le m-2$ je $I_{i+1} = \int_{i+1}^{i+2}(y-1)\dots(y-2m+1)\,\mathrm{d}y$. Do tohoto integrálu zavedeme substituci $z = y-1$, tj. $y = z+1$:

$$I_{i+1} = \int\limits_{i}^{i+1} z(z-1)\dots(z-2m+2)\,\mathrm{d}z = \int\limits_{i}^{i+1} z \cdot \frac{\psi(z)}{z-2m+1}\,\mathrm{d}z.$$

Protože funkce $z \to \frac{z}{z-2m+1}$ je v intervalu $\langle i,\,i+1\rangle$ zřejmě spojitá a funkce $\psi$ nemění v intervalu $(i,\,i+1)$ znamení (je to polynom a body $i,\,i+1$ jsou jeho jediné kořeny v $\langle i,\,i+1\rangle$), existuje podle 1. věty o střední hodnotě takové $\xi \in (i,\,i+1)$, že

$$I_{i+1} = \frac{\xi}{\xi-2m+1}\int\limits_{i}^{i+1} \psi(z)\,\mathrm{d}z = \frac{\xi}{\xi-2m+1} I_i.$$

Zřejmě platí $\left|\frac{\xi}{\xi-2m+1}\right| = \frac{\xi}{2m-1-\xi}$ a tato funkce proměnné $\xi$ je v celém intervalu $\langle 0,\,m-1\rangle$ ostře rostoucí. Proto $\forall i \in \{0,\,\dots,\,m-2\}$ platí

$$|I_{i+1}| = \frac{\xi}{2m-1-\xi}\,|I_i| \le \frac{m-1}{m}\,|I_i| < |I_i|\,.$$

$\square$

**Tvrzení 9.3** (pomocné)**.** Platí $\psi(y) = -\psi(2m-y)$.

*Důkaz.* Je $\psi(2m-y) = (2m-1-y)\dots(1-y) = -(y-1)\dots(y-2m+1)$. $\square$

**Tvrzení 9.4.** (1) Funkce $\varphi$ je polynom,
(2) $\varphi(1-k) = 0$,
(3) $\varphi(2m-1+k) = 0$,
(4) $(\forall x \in (1-k,\,2m-1+k))(\varphi(x) \ne 0)$.

*Důkaz.* (1) Zřejmé.
(2) Zřejmé.
(3) Podle (65) je

$$\varphi(2m-1+k) = \int\limits_{1-k}^{2m-1+k} (y-1)\dots(y-2m+1)\,\mathrm{d}y.$$

Zavedeme substituci $z = 2m-y$, tj. $y = 2m-z$:

$$\varphi(2m-1+k) = \int\limits_{2m-1+k}^{1-k} (2m-1-z)\dots(1-z)(-\mathrm{d}z) =$$

$$= -\int_{1-k}^{2m-1+k} (z-1)\dots(z-2m+1)\ \mathrm{d}z = -\varphi(2m-1+k).$$

Protože $\varphi(2m-1+k) = -\varphi(2m-1+k)$, musí být $\varphi(2m-1+k) = 0$.

(4) Z důkazu tvrzení 9.2 vyplývá, že funkce $\varphi$ nemění v intervalu $\langle i,\, i+1\rangle$ znamení a že $\operatorname{sgn} I_i = -\operatorname{sgn} I_{i+1}$ $(i \in \{0,\, \dots,\, m-2\})$. Odtud je zřejmé, že $(\forall x \in (1-k,\, m\rangle)(\operatorname{sgn}\varphi(x) = \operatorname{sgn} I_0)$.

Dokážeme, že pro $x \in \langle m,\, 2m-1+k)$ platí $\varphi(x) = \varphi(2m-x)$: Do integrálu

$$\varphi(2m-x) = \int_{1-k}^{2m-x} \psi(y)\mathrm{d}y$$

zavedeme substituci $z = 2m-y$, takže s využitím tvrzení 9.3 a již dokázaného bodu 3 dostaneme

$$\varphi(2m-x) = -\int_{2m-1+k}^{x} \psi(2m-z)\ \mathrm{d}z = \int_{2m-1+k}^{x} \psi(z)\ \mathrm{d}z =$$

$$= \int_{2m-1+k}^{1-k} \psi(z)\ \mathrm{d}z + \int_{1-k}^{x} \psi(z)\ \mathrm{d}z = -\varphi(2m-1+k) + \varphi(x) = \varphi(x).$$

□

Nyní již můžeme určit chybu $\varrho_{2m-1}$. K tomu využijeme metody per partes:

$$\varrho_{2m-1} = \int_{1-k}^{2m-1+k} \psi(y)F(y,\,1,\,\dots,\,2m-1)\ \mathrm{d}y =$$

$$= [\varphi(x)F(x,\,1,\,\dots,\,2m-1)]_{1-k}^{2m-1+k} - \int_{1-k}^{2m-1+k} \varphi(y)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}F(y,\,1,\,\dots,\,2m-1)\ \mathrm{d}y.$$

Podle bodů 2 a 3 tvrzení 9.4 je první sčítanec nulový, do druhého dosadíme z (60), takže

$$\int_{1-k}^{2m-1+k} \psi(y)F(y,\,1,\,\dots,\,2m-1)\ \mathrm{d}y = -\int_{1-k}^{2m-1+k} \varphi(y)F(y,\,y,\,1,\,\dots,\,2m-1)\ \mathrm{d}y.$$

Z tvrzení 7.4 vyplývá spojitost funkce $y \to F(y,\,y,\,1,\,\dots,\,2m-1)$ a podle tvrzení 9.4 funkce $\varphi$ nemění na $(k-1,\, 2m-1+k)$ znamení. Podle 1. věty o střední hodnotě proto existuje $\eta \in (1-k,\, 2m-1+k)$ tak, že

$$\varrho_{2m-1} = -F(\eta,\,\eta,\,1,\,\dots,\,2m-1)\int_{1-k}^{2m-1+k} \varphi(y)\ \mathrm{d}y = -\frac{F^{(2m)}(\xi)}{(2m)!}\int_{1-k}^{2m-1+k} \varphi(y)\ \mathrm{d}y.$$

9.2.2. *Sudý počet uzlů.* Nyní si rozeberme případ sudého počtu uzlů, tj. nechť $(\exists m \in \mathbb{N})(n = 2m)$. Potom

$$\varrho_{2m} = \int_{1-k}^{2m+k} (y-1)\dots(y-2m)F(y,\,1,\,\dots,\,2m)\ \mathrm{d}y =$$

$$= \int_{1-k}^{2m-1+k} \psi(y)(y-2m)F(y,\,1,\,\dots,\,2m)\ \mathrm{d}y + \int_{2m-1+k}^{2m} (y-1)\dots(y-2m)F(y,\,1,\,\dots,\,2m)\ \mathrm{d}y.$$

Označme poslední dva integrály po řadě $S_1$, $S_2$. Do prvního integrálu dosadíme

$$F(y,\,1,\,\dots,\,2m) = \frac{F(1,\,\dots,\,2m) - F(y,\,1,\,\dots,\,2m-1)}{2m-y},$$

takže dostaneme

$$S_1 = -F(1,\ \dots,\ 2m) \int\limits_{1-k}^{2m-1+k} \psi(y)\ \mathrm{d}y + \int\limits_{1-k}^{2m-1+k} \psi(y) F(y,\ 1,\ \dots,\ 2m-1)\ \mathrm{d}y =$$

$$= -F(1,\ \dots,\ 2m)\underbrace{\varphi(2m-1+k)}_{=0} + \varrho_{2m-1} = \frac{F^{(2m)}(\xi_1)}{(2m)!} \underbrace{\left( - \int\limits_{1-k}^{2m-1+k} \varphi(y)\ \mathrm{d}y \right)}_{\text{ozn. } A_1}.$$

Na druhý integrál použijeme oblíbenou 1. větu o střední hodnotě a máme

$$S_2 = \int\limits_{2m-1+k}^{2m} (y-1)\dots(y-2m) F(y,\ 1,\ \dots,\ 2m)\ \mathrm{d}y =$$

$$= F(\eta,\ 1,\ \dots,\ 2m) \underbrace{\int\limits_{2m-1+k}^{2m+k} (y-1)\dots(y-2m)\ \mathrm{d}y}_{\text{ozn. } A_2} = \frac{F^{(2m)}(\xi_2)}{(2m)!} A_2.$$

**Tvrzení 9.5.** Platí sgn $A_1 = \mathrm{sgn} A_2$.

*Důkaz.* Nechť např. $k = 0$ (případ $k = 1$ se dokáže podobně). Potom

$$A_1 = -\int\limits_1^{2m-1} \varphi(y)\ \mathrm{d}y, \qquad \text{kde} \qquad \varphi(y) = \int\limits_1^y (t-1)\dots(t-2m+1)\ \mathrm{d}t.$$

Podle tvrzení 9.4 nemění funkce $\varphi$ na $(1,\ 2m-1)$ znamení, a proto stačí zjistit sgn $\varphi$ v libovolném bodě tohoto intervalu, např. v bodě $y = 2$:

$$\varphi(2) = \int\limits_1^2 \underbrace{(t-1)}_{>0}\underbrace{(t-2)}_{<0}\dots\underbrace{(t-2m+1)}_{<0}\ \mathrm{d}t > 0,$$

takže $A_1$ je záporně vzatým integrálem kladné funkce, odkud $A_1 < 0$. Pro $A_2$ platí

$$A_2 = \int\limits_{2m-1}^{2m} \underbrace{(y-1)\dots(y-(2m-1))}_{>0}\underbrace{(y-2m)}_{<0}\ \mathrm{d}y < 0.$$

□

**Lemma 9.6.** Jsou-li $\varphi$ funkce spojitá v intervalu $\langle x_1,\ x_2\rangle$ a $A_1,\ A_2$ konstanty buď obě kladné, nebo obě záporné, potom

$$(\exists \xi \in \langle x_1,\ x_2\rangle)(A_1\varphi(x_1) + A_2\varphi(x_2) = (A_1 + A_2)\varphi(\xi)).$$

*Důkaz.* $\emptyset$ □

Platí

$$\varrho_{2m} = S_1 + S_2 = \frac{F^{(2m)}(\xi_1)}{(2m)!} A_1 + \frac{F^{(2m)}(\xi_2)}{(2m)!} A_2.$$

Předpokládejme, že $F^{(2m)}$ je spojitá funkce. Potom podle předchozí lemmy existuje $\xi \in \langle \xi_1,\ \xi_2\rangle$ tak, že

$$\varrho_{2m} = \frac{F^{(2m)}(\xi)}{(2m)!} \left( -\int\limits_{1-k}^{2m-1+k} \varphi(y)\ \mathrm{d}y + \int\limits_{2m+1-k}^{2m+k} (y-1)\dots(y-2m)\ \mathrm{d}y \right).$$

9.2.3. *Shrnutí.*

**Tvrzení 9.7.** Platí $F^{(n)}(y) = h^n f^{(n)}(x)$.

*Důkaz.* Na začátku kapitoly jsme zavedli funkci $F(y) = f(a + hy)$ a provedli substituci $x = a + hy$. Odtud plyne

$$\frac{\mathrm{d}F(y)}{\mathrm{d}y} = \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y},$$

tj. $F'(y) = hf'(a + hy)$ a indukcí pak $\frac{\mathrm{d}^n F}{\mathrm{d}y^n}(y) = h^n \frac{\mathrm{d}^n f}{\mathrm{d}x^n}(x)$. □

Obecné vzorce pro numerický výpočet integrálu tedy jsou:

$$\int_c^d f(x)\ \mathrm{d}x = (d-c)\sum_{i=1}^{2m-1} I_{i,\ k}^{(2m-1)} f(x_i) - \frac{h^{2m+1}}{(2m)!}\ f^{(2m)}(\xi) \int_{1-k}^{2m-1+k} \varphi(y)\ \mathrm{d}y$$

pro lichá $n$, tj. $n = 2m - 1$, a

$$\int_c^d f(x)\ \mathrm{d}x = (d-c)\sum_{i=1}^{2m} I_{i,\ k}^{(2m)} f(x_i) -$$

$$-\frac{h^{2m+1}}{(2m)!}\ f^{(2m)}(\xi)\left(\int_{1-k}^{2m-1+k} \varphi(y)\ \mathrm{d}y - \int_{2m-1+k}^{2m+k} (y-1)\dots(y-2m)\ \mathrm{d}y\right)$$

pro sudá $n$, tj. $n = 2m$.

Závěr: Výhodnější je formule pro lichý počet uzlů, protože mocnina $h$ je stejná, ale počet sčítanců je menší. Navíc koeficient u $h$ je v případě sudého počtu uzlů větší, jak víme z předchozí lemmy.

9.3. **Formule používané v praxi.** K praktickému výpočtu $\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x$ se nepoužívají Newtonovy-Cotesovy formule, ale obdélníková, lichoběžníková a Simpsonova formule.

9.3.1. *Obdélníková formule.* Interval $\langle a, b\rangle$ rozdělíme na $n$ dílků stejné délky a doprostřed každého dílku umístíme uzel $x_i = a + (i - \frac{1}{2})h$, kde $h = \frac{b-a}{n}$, $i \in \hat{n}$. Potom platí

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=1}^n \int_{\Delta_i} f(x)\ \mathrm{d}x.$$

Jednotlivé integrály vypočteme pomocí Newtonových-Cotesových formulí pro $k = n = m = 1$ (otevřený typ):

$$\int_{\Delta_i} f(x)\ \mathrm{d}x = hf(x_i) - \frac{1}{2}\left(\frac{h}{2}\right)^3 f''(\xi)\int_0^2\left(\int_0^y (t-1)\ \mathrm{d}t\right)\mathrm{d}y = hf(x_i) + \frac{h^3}{24}f''(\xi_i).$$

Odtud

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = h\sum_{i=1}^n f(x_i) + \frac{h^3}{24}\sum_{i=1}^n f''(\xi_i) = h\sum_{i=1}^n f(x_i) + h^2\cdot\frac{b-a}{24}\cdot\frac{\sum_{i=1}^n f''(\xi_i)}{n}.$$

Poslední zlomek je aritmetickým průměrem hodnot $f''(\xi_i)$, označme jej proto $f''(\xi)$:

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = h\sum_{i=1}^n f(x_i) + \frac{b-a}{24}h^2 f''(\xi).$$

9.3.2. *Lichoběžníková formule.* Interval $\langle a, b\rangle$ rozdělíme na $n$ dílků stejné délky a do jejich hraničních bodů umístíme uzly $x_i = x_0 + ih$, kde $h = \frac{b-a}{n}$, $i \in \hat{n}_0$. Potom platí

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\ \mathrm{d}x.$$

Jednotlivé integrály vypočteme pomocí Newtonových-Cotesových formulí pro $k=0$, $n=2$, $m=1$ (uzavřený typ):

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{h}{2}[f(x_{i-1}) + f(x_i)] - \frac{h^3}{12} f''(\xi_i),$$

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] - \frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^n f''(\xi_i) =$$

$$= \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] - h^2 \cdot \frac{b-a}{12} \cdot \frac{\sum_{i=1}^n f''(\xi_i)}{n}.$$

Za předpokladu spojitosti $f''$ je poslední zlomek opět aritmetickým průměrem, takže můžeme psát

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)] - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi).$$

*Poznámka.* Chyba zde vyšla větší než u obdélníkové formule. Je to tím, že zde jsme použili Newtonovy-Cotesovy formule pro sudé $n$.

9.3.3. *Simpsonova formule.* Interval $\langle a, b\rangle$ rozdělíme na $2n$ dílků stejné délky a uzly $x_i = x_0 + ih$, kde $h = \frac{b-a}{2n}$, $i \in \{0, \ldots, 2n\}$ umístíme do prostředního i obou hraničních bodů každého dílku. Potom platí

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \sum_{i=1}^n \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)\ \mathrm{d}x.$$

Jednotlivé integrály vypočteme pomocí Newtonových-Cotesových formulí pro $k=0$, $n=3$, $m=2$ (uzavřený typ):

$$\int_{2i-2}^{2i} f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{2h}{6}[f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi_i),$$

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \ldots +$$

$$+2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})] - \frac{h^5}{90}\sum_{i=1}^n f^{(4)}(\xi_i).$$

V posledním výrazu dosadíme za $h = \frac{b-a}{2n}$ a za předpokladu spojitosti $f^{(4)}$ můžeme psát

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \ldots +$$

$$+2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})] - \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi).$$

*Poznámka* (závěrečná). Numerická matematika II není doslovným přepisem zápisků z přednášky. Důvodem byla snaha o přehlednější a ucelenější pojetí, které by navíc zdůraznilo styčné body s lineární algebrou a matematickou analýzou. Výsledkem by mělo být snažší pochopení látky. Co je tedy jinak?

Něco je zde navíc a něco jiného chybí. Přidáno bylo několik poznámek, které upozorňují na souvislosti s jinými předměty, zejména s matematickou analýzou 3. Tyto poznámky slouží pouze ke zdůraznění souvislostí a ke snazšímu pochopení. Jsou samozřejmě zcela mimo rámec toho, co je třeba se učit ke zkoušce, a ten, koho by mátly, nebo kdo ještě neabsolvoval MAA3, je může klidně vynechat.

Co zde naopak nenajdete: Snahou bylo odstranit vše, co se nevyžaduje u zkoušky a přitom není podstatné pro pochopení další látky. Přesto zde zůstalo i několik takovýchto věcí, např. popis metody řízené relaxace.

Za zmínku stojí ještě dvě úpravy: Většina nových pojmů je uváděna až ve chvíli, kdy jsou tyto pojmy potřeba. Pozornému čtenáři skript jistě neuniklo, že dílčí snahy v tomto směru se objevují i v samotné přednášce. Tento projekt v nich tedy pouze jde o trochu dál.

Poslední a vlastně nejzásadnější změnou oproti přednášce je forma, jakou je veden výklad v jednotlivých kapitolách. Na přednášce je postup většinou takový, že se odvozuje ,,pořád dál", tj. bez průběžných shrnutí získaných výsledků. Naproti tomu zde je zvolena ,,klasičtější"forma tvrzení-důkaz. Velká část odvození je tak ,,skryta"do důkazů jistých tvrzení. To by mělo mít za následek větší přehlednost a srozumitelnost. Aby se tato tvrzení odlišila od vět, resp. lemm vyslovených na přednášce přímo (a tedy i v téže podobě vyžadovaných u zkoušky), jsou v textu označována slovem tvrzení. Pojmenování věta, resp. lemma jsou vyhrazena tvrzením takto označeným na přednášce. Upozornění: Přidaná tvrzení velmi často nejsou exaktní, tj. zejména neobsahují všechny potřebné předpoklady, pokud jsou zřejmé z kontextu. Je tomu tak především proto, aby nedošlo k příliš výraznému odklonu od přednášky. Stručně řečeno: cílem není naprostá přesnost ve všech detailech za cenu vytvoření něčeho, co nemá s přednáškou mnoho společného, ale spíš naopak — jednoduchost a zachování původního pojetí i za cenu drobných nepřesností.