1. 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 1.1. Buďte

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

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 1.2. Buďte φ, ψ 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 ψ 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.

1.1. **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 1.3. Jestliže iterační posloupnost (x_n) konverguje, potom je její limitou kořen rovnice $x = \varphi(x)$.

Věta 1.4. Buďte

(1) α kořen rovnice $x = \varphi(x)$,
(2) φ 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 1.5. Buď φ' spojitá v okolí bodu α a nechť $|\varphi'(\alpha)| < 1$. Potom posloupnost (x_n) konverguje, je-li x_0 zvoleno dostatečně blízko α.

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

Definice 1.6. Řekneme, že iterační metoda daná vzorcem $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ má řád konvergence m, jestliže φ má spojité derivace v okolí α 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

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

Poznámka. Je-li v (1) $m = 2$, 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 $y = x$.

1.2. **Metoda Regula falsi.** Nechť je kořen α 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

$$x_{k+1} = \frac{x_k f(p) - p f(x_k)}{f(p) - f(x_k)} \overset{k\to\infty}{\Longrightarrow} \varphi(x) = \frac{x f(p) - p f(x)}{f(p) - f(x)}. \tag{2}$$

Tvrzení 1.7. 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 (2) 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

$$\varphi'(\alpha) = \frac{[f(p) - pf'(\alpha)]f(p) + \alpha f'(\alpha)f(p)}{[f(p)]^2} = \frac{f(p) + (\alpha - p)f'(\alpha)}{f(p)}. \tag{3}$$

Poslední výraz teď upravíme tak, abychom se zbavili nepříjemného $f(p)$. Potom totiž dokážeme, že $|\varphi'(\alpha)| \leq K < 1$, a z věty 1.4 vyplyne konvergence metody. Začneme s čitatelem. Rozviňme funkci f do Taylorova rozvoje se středem v bodě α:

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

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 (3):

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

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

1.3. **Newtonova metoda.** Nechť je kořen α 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

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \overset{k\to\infty}{\Longrightarrow} \varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}. \tag{4}$$

Tvrzení 1.8. Pro konvergenci Newtonovy metody platí naprostá obdoba tvrzení 1.7. 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 φ' plyne existence takového okolí V kořene α, že $(\forall x \in V)(|\varphi'(x)| \leq K < 1)$. Nyní stačí použít větu 1.4.

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 1.9. Předpoklad existence f''' v předchozím tvrzení je nadbytečný, tj. Newtonova metoda konverguje kvadraticky, i když f''' neexistuje.

Důkaz. Podle prvního vztahu ve (4) 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 $|x_{k+1} - \alpha| \leq M\,|x_k - \alpha|^2$. □

1.4. **Čebyševova metoda.** Nechť je kořen α 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

$$\varphi_r(x) = \alpha + (-1)^r \frac{F^{(r+1)}(\eta)}{(r+1)!} f^{r+1}(x). \tag{5}$$

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 (5) je zřejmé, že pro $r \in \mathbb{N}$ platí $\varphi_r(\alpha) = \alpha$.

Tvrzení 1.10. 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 φ_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

$$f(x) = f(x) - f(\alpha) = f'(\xi)(x - \alpha), \tag{6}$$

kde $\xi \in (x, \alpha)$. Poslední dva vztahy dosadíme do (5):

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

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 1.10, musí existovat $\varphi_r^{(r)}$ a φ_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 1.11. Ke splnění $|x_{k+1} - \alpha| \leq M\, |x_k - \alpha|^{r+1}$ stačí $r+1$ spojitých derivací.

Důkaz. Dosadíme-li vztah (6) do (5), 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. $\square$