Kapitola 1

Úvod

Numerická matematika (někdy též nazývaná výpočtová matematika – odpovídající překladu anglické terminologie "numerical/computational mathematics") představuje rozsáhlou oblast matematiky zabývající se zpracováním matematických modelů pomocí výpočetní techniky. Výpočtová matematika tedy realizuje přechod od čistě teoretické matematiky k prakticky použitelným výsledkům. S jejím použitím se lze setkat ve všech oblastech lidské činnosti – zejména v technice a přírodních vědách, ale i v ekonomice, financích, lékařských vědách a jinde.

Numerická matematika obsahuje hluboké teorie získané na základě výsledků z matematické analýzy, algebry, funkcionální analýzy, topologie a ostatních matematických disciplin. Cílem teoretické numerické matematiky je dokázat kvalitativní vlastnosti numerických metod a algoritmů za pomoci rigorózních matematických postupů. To je často možné pouze za restriktivních předpokladů, případně pro zjednodušené modelové problémy. Na druhé straně, úspěšné aplikace numerických metod jsou často podmíněné užitím některých "přísad", které nejsou standardními v jiných částech matematiky. Teoretické výsledky jsou heuristicky extrapolovány na komplikované problémy na základě naší zkušenosti, intuice a četných numerických experimentů a testů. Odtud plyne, že numerická matematika má dvě "tváře". Jak se vyjádřil profesor A. Ralston ve své monografii [12], můžeme ji na jedné straně charakterizovat jako vědu a na druhé straně jako umění.

Numerická matematika se zabývá řadou oblastí. Jmenujme zejména řešení velkých soustav lineárních rovnic, výpočet vlastních čísel a vlastních vektorů matic, řešení systémů nelineárních rovnic, aproximaci funkcí, numerickou integraci, numerické metody optimalizace a řešení obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic. Nejrůznějším partiím numerické matematiky je věnována řada učebnic a monografií. Zde uvádíme pouze některé z nich, které mají vztah k základním kurzům numerické matematiky a umožňují rozšířit znalosti získané v těchto kurzech. Jedná se o monografie [1], [3], [5], [11], [12] a [14].

Cílem těchto skript je poskytnout základní učební text studentům, kteří navštěvují přednášku *Základy numerické matematiky* na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy v Praze. Část témat, kterými se tato přednáška zabývá, je již shrnuta ve skriptech J. Segethové [13]. Jde o interpolaci funkcí, ortogonální polynomy, aproximaci metodou nejmenších čtverců, numerickou kvadraturu, numerické metody lineární algebry a řešení nelineárních rovnic. Část témat obsažených v přednášce ovšem není v těchto skriptech uvedena. Skripta, která držíte v ruce se snaží tuto mezeru zaplnit.

Náplní skript je výklad následujících partií numerické matematiky, které v další části úvodu popíšeme podrobněji.

Interpolace funkcí pomocí polynomů

Klasickou metodou aproximace dané funkce či dané sady dat je interpolace těchto dat polynomy. Pokud nám jde čistě o aproximaci pomocí zadaných funkčních hodnot v několika uzlech, jedná se o známou Lagrangeovu interpolaci polynomem. V tomto případě hledáme polynom p_n stupně n takový, že

$$p_n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, \cdots, n,$$

kde $f(x_i)$ jsou zadané funkční hodnoty či data a x_i jsou navzájem různé body, ve kterých se tyto hodnoty mají nabývat. Tato forma aproximace se ovšem nehodí pro velké sady dat, kdy jsou výpočty s polynomy velmi vysokých stupňů nepraktické a výpočetně náročné. Navíc aproximace polynomy vysokých stupňů není vhodná k aproximaci nehladkých funkcí, například v tom smyslu, že posloupnost takto konstruovaných p_n nemusí vůbec konvergovat k f pro $n \to \infty$.

Aby se odstranily uvedené nevýhody polynomiální interpolace, začaly se ve čtyřicátých letech 20. století objevovat první náznaky teorie spline funkcí, které si pro své vhodné teoretické a praktické vlastnosti získaly v následujících desetiletích velkou oblibu. Základní myšlenkou splinů je konstrukce funkcí, které jsou *po částech* polynomiální na dělení daném například interpolačními uzly x_i. Přitom se navíc požaduje, aby tyto funkce byly třídy C^k pro nějaké k. Interpolace takovýmito funkcemi si zachovává výhody polynomiální interpolace, zatímco se vyhýbá jejím nevýhodám.

V kapitole 2 odvodíme konstrukci po částech kubických interpolačních splinů, shrneme některé jejich vlastnosti a zmíníme se i o jiných typech splinů. Vzhledem k rozsáhlosti a hloubce této problematiky je pak nutné čtenáře odkázat na specializovanější literaturu, například velmi obsáhlá skripta *Základy teorie splinů* od K. Najzara, [9].

Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic

Diferenciální rovnice, at' již obyčejné či parciální, jsou velmi rozsáhlou oblastí matematiky s bohatou historií, která i dnes prochází velmi bouřlivým vývojem. U obyčejných diferenciálních rovnic jsou dnes zkoumané zejména kvalitativní otázky týkající se struktury řešení, invariantů, atraktorů a podobných objektů či vlastností řešení. Naproti tomu u komplikovanějších nelineárních parciálních diferenciálních rovnic jsou i ty nejelementárnější otázky existence, jednoznačnosti či regularity řešení často dosud otevřeným problémem. Pomocí diferenciálních rovnic je formulována velká část fyzikálních i praktických inženýrských problémů. S diferenciálními rovnicemi se ale setkáváme i v ekonomii, finanční a pojistné matematice nebo v biologii. Z praktického hlediska vyvstává otázka, jak tyto rovnice řešit.

Většina kapitoly 2 bude věnována numerickému řešení obyčejné diferenciální rovnice ve tvaru

$$y' = f(x, y),$$

s předepsanou počáteční podmínkou $y(a) = \eta$. Existence (případně i jednoznačnost) řešení takovéto rovnice je zaručena za velmi obecných předpokladů, viz například [7]. Naproti tomu existuje řada klasických výsledků o nemožnosti vyjádřit řešení konkrétních rovnic "vzorcem". Konkrétní příklady takových rovnic uvádíme na začátku 3. kapitoly. Z toho vyplývá nezbytnost numerického řešení obyčejných diferenciálních, které nám dovoluje nalézt v rozumném čase velmi přesné aproximace jejich řešení. V 3. kapitole budou zavedeny a analyzovány klasické jednokrokové a vícekrokové metody. Z teoretického hlediska bude zkoumána konvergence těchto metod, teoretické i praktické odhady chyb a vliv zaokrouhlovacích chyb na přesnost řešení. Na závěr uvedeme jednoduchý příklad na řešení jednoduché lineární parciální diferenciální rovnice. Zde půjde ovšem pouze o ilustrační příklad, protože celá problematika se vymyká rozsahu a zaměření tohoto textu.

Numerické metody optimalizace

V této poslední kapitole se budeme zabývat hledáním minima zadaného funkcionálu, respektive bodu, ve kterém se toto minimum nabývá. Minimalizace daného funkcionálu není jen čistě matematickou hříčkou. Obecným konceptem ve fyzice jsou principy minimalizace energie, produkce entropie, funkcionálu akce a podobně, které charakterizují různé rovnovážné systémy, ať již tyto pojmy znamenají v konkrétním případě cokoliv. V čistě aplikované, inženýrské praxi se také setkáváme s problémem najít řešení nějakého problému, které je v určitém smyslu optimální. Problém samotný může být například komplikovanou diferenciální rovnicí (např. popisující proudění vzduchu kolem křídla letadla) a funkcionál, který minimalizujeme závisí na daném řešení (např. odpor vzduchu působící na křídlo daného tvaru). V tomto příkladu je tedy cílem najít optimální tvar křídla, přičemž jediné vyhodnocení příslušného funkcionálu vyžaduje vyřešení rovnic proudění vzduchu. Z tohoto důvodu je jasné, že potřebujeme numerické metody minimalizace (o přesném vyřešení takto komplikované úlohy nemůže být řeč), které budou velmi rychle konvergovat k přesnému řešení dané úlohy.

V této kapitole napřed vybudujeme základy konvexní analýzy a jako příklad základní numerické metody pro minimalizaci funkcionálu uvedeme metodu největšího spádu. V tomto případě se jedná o metodu využívající informace o gradientu daného funkcionálu. Jelikož se jedná o velmi rozsáhlou, stále se vyvíjející problematiku, je zde opět nutné čtenáře v případě zájmu odkázat na podrobnější texty speciálně zaměřené na toto téma, např. [8].