非线性方程求根

禤科材

(中国科学技术大学化学与材料科学学院，安徽合肥 230026)

1 实验原理

对于非线性方程求根问题，主要有两种方法：牛顿法与弦截法。

1.1 牛顿法及其二次收敛性

牛顿法的迭代公式为

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \tag{1.1}$$

牛顿法是一个二次收敛的算法，证明如下。将 $f(x)$ 在 r 处泰勒展开到二阶：

$$f(r) = f(x_i) + (r - x_i)f'(x_i) + \frac{(r - x_i)^2}{2}f''(\xi_i)$$

由于 r 是根，我们有

$$\begin{aligned} 0 &= f(x_i) + (r - x_i)f'(x_i) + \frac{(r - x_i)^2}{2}f''(\xi_i) \\ -\frac{f(x_i)}{f'(x_i)} &= r - x_i + \frac{(r - x_i)^2}{2}\frac{f''(\xi_i)}{f'(x_i)} \end{aligned}$$

这里假设 $f'(x_i) \neq 0$ 。重新整理则有

$$\begin{aligned} x_i - -\frac{f(x_i)}{f'(x_i)} - r &= \frac{(r - x_i)^2}{2}\frac{f''(\xi_i)}{f'(x_i)} \\ x_{i+1} - r &= e_i^2 \frac{f''(\xi_i)}{2f'(x_i)} \\ e_{i+1} &= e_i^2 \left|\frac{f''(\xi_i)}{2f'(x_i)}\right| \end{aligned}$$

所以牛顿法是二次收敛的。

实验日期： 2023 年 4 月 22 日

作者简介： 禤科材（2002-），男，学号 PB20030874，中国科学技术大学本科在读，专业方向为化学物理

联系方式： 电话 18108064415 ，邮箱 ustcxkc@mail.ustc.edu.cn

1.2 弦截法的超线性收敛

弦截法的迭代公式为

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_i - x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})} \tag{1.2}$$

弦截法的收敛阶为 1.618 ，稍慢于牛顿法，证明如下。代数整理并舍弃高阶项，易得

$$e_{i+1} = \left|\frac{f''(\xi_i)}{2f'(x_i)}\right| e_i e_{i-1}$$

假设它的收敛阶为 α ，则

$$e_{i+1} = \left|\frac{f''(\xi_i)}{2f'(x_i)}\right|^{\alpha-1} e_i^{\alpha}$$

再取极限，解得

$$\alpha = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$$

证明完毕。

2 实验方法

使用 jupyter notebook 编程求解。

3 实验结果

对于函数

$$f(x) = \frac{x^3}{3} - x$$

分别按照题目要求使用不同的初值求解，结果如下：

表 1: 牛顿法

初值	根	步数
0.1	0.0	2
0.2	0.0	3
0.9	-1.7320508075688774	6
9.0	1.7320508075688774	9

表 2: 弦截法

初值	根	步数
$[-0.1, 0.1]$	0.0	1
$[-0.2, 0.2]$	0.0	1
$[-2.0, 0.9]$	1.7320508075688772	11
$[0.9, 9.0]$	1.7320508075688772	13

经过对比，牛顿法如果在非常靠近根的初始值开始，它所需要的收敛步数将大于弦截法；而在初始值不那么靠近根的情况下，牛顿法的迭代步数将会小于弦截法。