§ 4 牛顿法 /* Newton - Raphson Method */

原理：将非线性方程线性化

—— Taylor 展开 /* Taylor's expansion */

取 $x_0 \approx x^*$，将 $f(x)$在 x_0 做一阶Taylor展开:

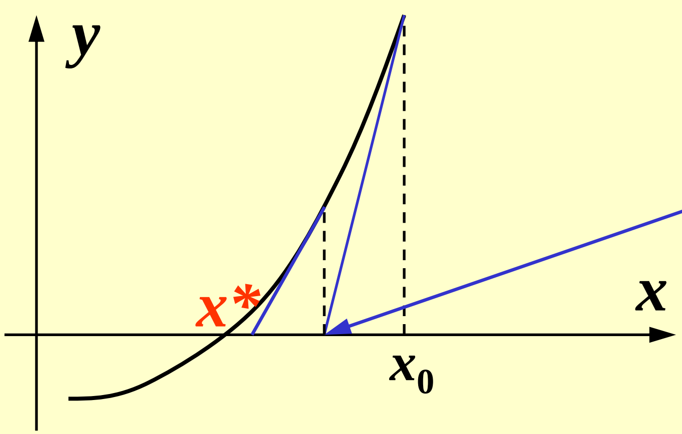
$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_0)^2,$$ ξ在 x_0 和 x 之间。

将 $(x^* - x_0)^2$ 看成高阶小量，则有：

$$0 = f(x^*) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x^* - x_0) \quad \Rightarrow \quad x^* \approx x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

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

线性 /* linear */



只要 $f \in C^1$，每一步迭代都有 $f'(x_k) \neq 0$， 而且 $\lim_{k\to\infty} x_k = x^*$，则 x^*就是 f 的根。

现在令$\varphi(x) = x + h(x) f(x)$, $h(x)$ 为待定函数，但$h(x^*) \neq 0$，则

$$f(x) = 0 \xleftrightarrow{\text{等价}} x = \varphi(x) = x + h(x) f(x)$$

x^*是根

由构造过程知Newton迭代法至少有二阶的收敛速度。

十分重要的问题是构造迭代函数。为了使收敛速度的阶高一些，应尽可能使$\varphi(x)$在x^*处有直到更高阶导数等于0。

$$) = \frac{-1}{f'(x^*)}$$

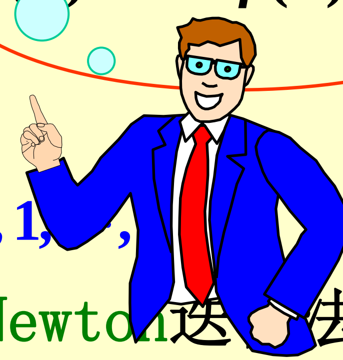
$$)= 0$$

故可取 $h(x) = \dfrac{-1}{f'(x)}$ ，于是 $\varphi(x)$被确定为 $\varphi(x) = x - f(x)/f'(x)$

由此得出下面的特殊的简单迭代法

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k)/f'(x_k) \quad k = 0, 1, \cdots,$$

----称为Newton迭代法



定理（局部收敛性）设 $f \in C^2[a, b]$，若 x^* 为 $f(x)$ 在$[a, b]$上的根，且 $f'(x^*) \neq 0$，则存在 x^* 的邻域 $R(x^*)$ 使得任取初值 $x_0 \in R(x^*)$，Newton's Method产生的序列$\{x_k\}$收敛到x^*，且满足

$$\lim_{k\to\infty}\frac{x^*-x_{k+1}}{(x^*-x_k)^2}=-\frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$$

解非线性方程 $f(x)=0$ 的牛顿法，是一种将非线性方程线性化方法。它是解代数方程和超越方程的有效方法之一。牛顿方法在单根附近具有较高的收敛速度，而且牛顿方法不仅可以用来求实根，还可用来求 $f(x)=0$ 代数方程的复根，同时还可推广用来解非线性方程组。

证明： Newton's Method 事实上是一种特殊的不动点迭代

其中 $\varphi(x) = x - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$，则

$$|\varphi'(x^*)| = \left|\frac{f''(x^*)f(x^*)}{f'^2(x^*)}\right| = 0 < 1 \;\Rightarrow\; \text{收敛} \quad ✓$$

由 Taylor 展开…

在单根 /*simple root */
附近收敛快

$$0 = f(x^*) = f(x_k) \;\ldots\; x_k)^2$$

$$\Rightarrow \quad x^* = \underbrace{x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}}_{x_{k+1}} - \frac{f''(\xi_k)}{2!\,f'(x_k)}(x \;\ldots\;)^2$$

$$\Rightarrow \quad \frac{x^* - x_{k+1}}{(x^* - x_k)^2} = -\frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)}$$

只要 $f'(x^*) \neq 0$，则令 $k \to \infty$ 可得结论。 ∎

例　用牛顿法解方程 $xe^{x}-1=0$

$$x_{k+1}=x_k-\frac{x_k-e^{-x_k}}{1+x_k}$$

取迭代值 $x_0=0.5$，迭代结果列于表中。

k	0	1	2	3
x_k	0.5	0.57102	.056716	0.56714

所给方程实际上是方程 $x=e^{-x}$ 的等价形式。若用迭代格式 $x_{k+1}=e^{-x_k}$ 进行计算，迭代到同一精度要迭代17次，可见牛顿法收敛速度是很快的。

例 利用Newton迭代法计算$\sqrt{2}$的近似值。

解 $\sqrt{2}$可视为$f(x)=x^2-2=0$的正根, 而$f'(x)=2x$

则Newton迭代公式为:

$$x_{k+1}=x_k-\frac{x_k^2-2}{2x_k}=\frac{1}{2}x_k+\frac{1}{x_k}\quad k=1,2,\cdots$$

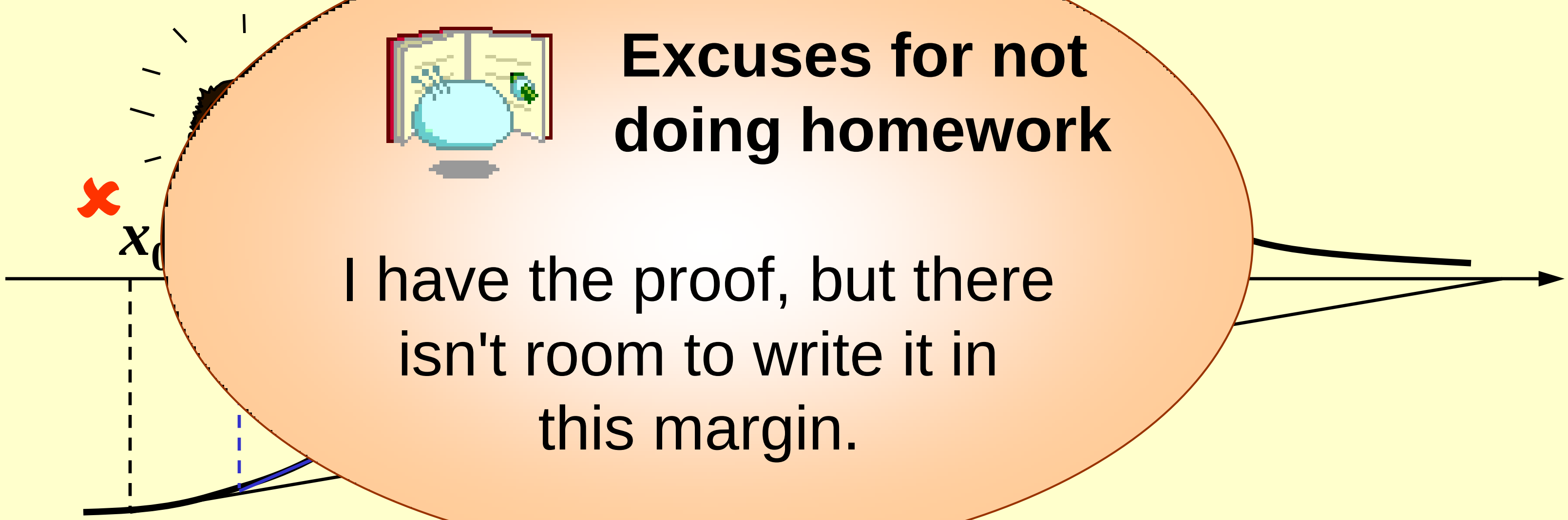
取初值$x_0=1$,则得到

$x_1=1.500000000$ $\quad x_2=1.416666667$

$x_3=1.414215686$ $\quad x_4=1.414213562$


x_4与精确根取十位有效数字完全相同。

注：Newton's Method 收敛性依赖于x_0 的选取。



Excuses for not doing homework

I have the proof, but there isn't room to write it in this margin.

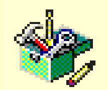
HW: p.230 #9, #10，#11

Newton法的改进

优点：Newton法收敛很快（对单根），算法简单。

缺点： 1）初值 x_0 不能偏离 x^* 太大，否则可能不收敛，2）对重根收敛较慢，3）需要计算导数值。

针对这几点改进如下：

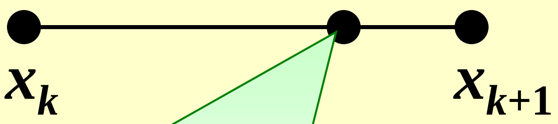


Newton下山法 /* Descent Method */

——**Newton's Method 局部微调：**

由Newton迭代法的收敛性定理知（局部收敛性），*Newton* 迭代法对初值 x_0 的要求是很苛刻的，在实际应用中，往往很难给出较好的初值 x_0，牛顿下山法，就是在事先没有给出较好的初值情况下，求 $f(x)=0$ 根的一种修正的牛顿法。

原理：若由 x_k 得到的 x_{k+1} 不能使 $|f|$ 减小，则在 x_k 和 x_{k+1} 之间找一个更好的点 $\overline{x_{k+1}}$，使得 $\left|f(\overline{x_{k+1}})\right| < \left|f(x_k)\right|$。



$\lambda x_{k+1} + (1-\lambda)x_k$, $\lambda \in [0, 1]$

$$\overline{x_{k+1}} = \lambda\left[x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\right] + (1-\lambda)x_k$$

$$= x_k - \lambda\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

λ称为下山因子（一个可选择的参数）

选择因子λ使（即选取 $\lambda = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2^2}, \cdots, \lambda \geq \varepsilon_\lambda > 0$）

$|f(x_{k+1})| < |f(x_k)|$

将下山法和牛顿法结合起来使用的方法，称为Newton下山法。

注：$\lambda = 1$ 时就是Newton's Method 公式。

当 $\lambda = 1$ 代入效果不好时，将 λ 减半计算。

例　求方程 $x^3-x-1=0$在 $x=1.5$ 附近的一个根 x^*。

解　1）用Newton法计算

Newton公式： $x_{k+1}=x_k-\dfrac{x_k^3-x_k-1}{3x_k^2-1}$

显然，当取初值 $x_0=1.5$ 时，计算结果如下：

k	0	1	2	3
x_k	1.5	1.34783	1.32520	1.32472

表中 x_3 的每一位数字均为有效数字。

当取初值 $x_0=0.6$ 时，按牛顿公式计算有 $x_1=17.9, x_2=11.9,\cdots$ 影响收敛速度，$x_1=17.9$，这个结果反而比 x_0 更偏离了所求的根 x^*。

2）用Newton下山法计算

按Newton公式求得的迭代值 $\bar{x}_1=17.9$，设取下山因子 $\lambda=\dfrac{1}{32}$，由用Newton下山法计算可求得 $x_1=\dfrac{1}{32}\bar{x}_1+\dfrac{31}{32}x_0=1.140625$ 这个结果纠正了 $\bar{x}_1$ 的严重偏差。

Algorithm: Newton's Descent Method

Find a solution to $f(x) = 0$ given an initial approximation x_0.

Input: initial approximation x_0; $f(x)$ and $f'(x)$; minimum step size of x_{min}; tolerance $TOL1$ for x; tolerance $TOL2$ for λ; maximum number of iterations N_{max}.

Output: approximate solution x or message of failure.

Step 1 Set $k = 1$;

Step 2 While ($k \le N_{max}$) do st

计算量未见得减小

Step 3 Set $\lambda = 1$;

Step 4 Set $x = x_0 - \lambda \dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$; pute x_k */

Step 5 If $|x - x_0| < TO$ hen Output (x); STOP; /* successful */

Step 6 If $|f(x)| < |f(x_0)|$ then $x_0 = x$; GOTO *Step 10* ; /* update x_0 */

Step 7 Set $\lambda = \lambda / 2$; /* update λ to descend */

Step 8 If $\lambda > TOL2$ then GOTO *Step 4* ; /* compute a better x_i */

Step 9 Set $x_0 = x_0 + x_{min}$; /* move forward anyway to avoid deadlock */

Step 10 Set k ++;

Step 11 Output (Method failed after N_{max} iterations); STOP. /* unsuccessful */

重根 /* multiple root */ 加速收敛法：

Q1: 若 $f'(x^*)=0$ ， Newton’s Method 是否仍收敛？

设 x^* 是方程 $f(x)=0$ 的 m 重根（$m\geq 2$），$f(x)$ 在 x^* 的某邻域

内有 ... $^{(m)}(x^*)\neq 0$

由T...

由于 $0<\varphi'(x^*)<1$ ，所以，只要 x_0 充分靠近 x^*，由Newton法产生的序列 $\{x_k\}$ 仍收敛于 x^*，但是只有线性的收敛速度。

A1: 有局部收敛性，但重数 m 越高，收敛越慢。

其中 ξ_1,ξ_2,ξ_3 都在 x 与 x^* 之间。由Newton法的迭代函数

$$\varphi(x)=x-f(x)/f'(x)$$

可得

$$\varphi'(x^*)=\lim_{x\to x^*}\varphi'(x)=\lim_{x\to x^*}\frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

$$=\lim_{x\to x^*}\frac{(m-1)f^{(m)}(\xi_1)f^{(m)}(\xi_3)}{m[f^{(m)}(\xi_2)]^2}=1-\frac{1}{m}$$

Q2: 如何加速重根的收敛？

A2:若把迭代函数修改为

$$\overline{\varphi}(x) = x - \frac{mf(x)}{f'(x)}$$

则有

$$\overline{\varphi}(x^*) = \lim_{x \to x^*} \overline{\varphi}(x) = \lim_{x \to x^*} [x - \frac{(x - x^*) f^{(m)}(\xi_1)}{f^{(m)}(\xi_2)}] = x^*$$

$$\overline{\varphi'}(x^*) = \lim_{x \to x^*} \overline{\varphi'}(x) = \lim_{x \to x^*} [1 - m + \frac{mf(x) f''(x)}{[f'(x)]^2}]$$

$$= 1 - m + m(1 - \frac{1}{m}) = 0$$

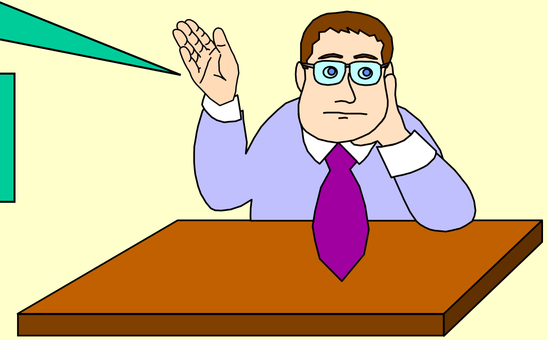
这两个等式说明，当 x^*是方程 $f(x)=0$的 m重根时，变形的 Newton法：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{mf(x_k)}{f'(x_k)} \qquad k = 0,1,\cdots\cdots$$

不仅可以收敛于x^*，而且仍具有二阶的收敛速度。

在重根的情况下，若重数m不知道呢？

可考虑函数：　$u(x)=\dfrac{f(x)}{f'(x)}$



即　将求 f 的重根转化为求另一函数的单根。

令 $u(x)=\dfrac{f(x)}{f'(x)}$，则 f 的重根 = u 的单根。

求解方程 $u(x)=0$ 的Newton 法迭代函数为

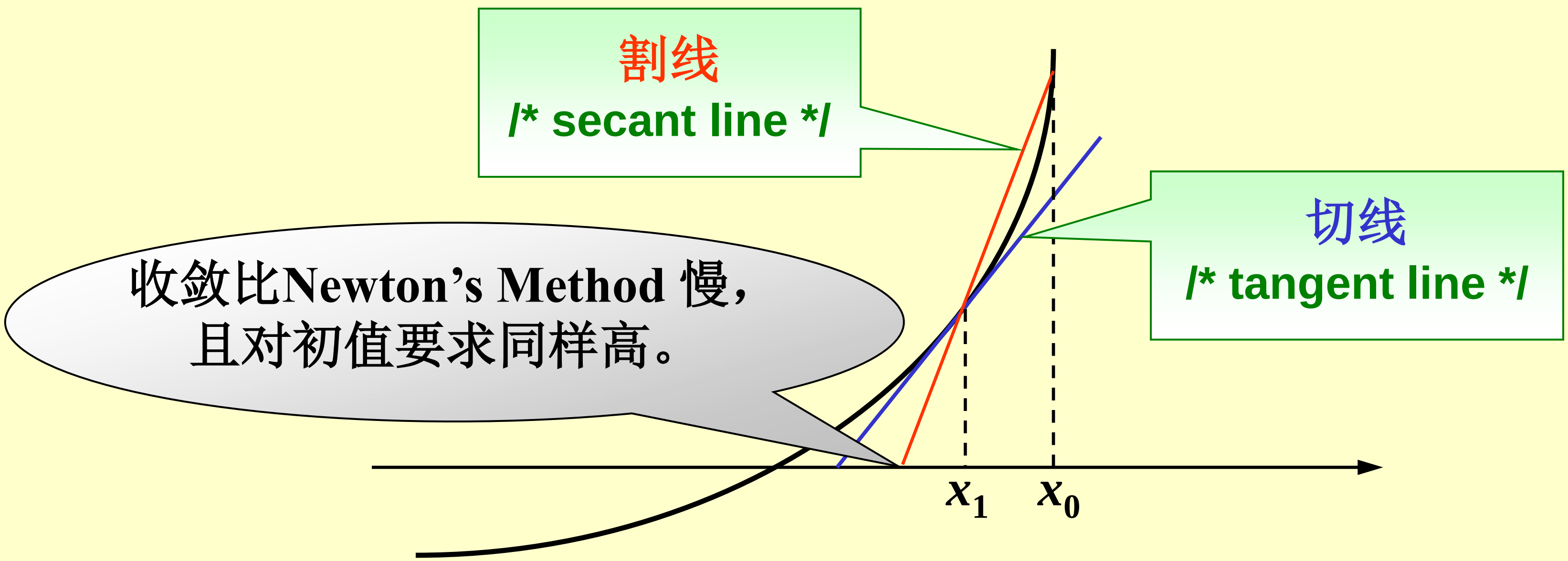
$$g(x)=x-\frac{u(x)}{u'(x)}=x-\frac{f(x)f'(x)}{[f'(x)]^2-f(x)f'(x)}$$

迭代公式为:

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)f'(x_k)}{[f'(x_k)]^2-f(x_k)f'(x_k)}\qquad (k=0,1,2,\cdots)$$

弦截法 /* Secant Method */：

Newton's Method 一步要计算 f 和 f'，相当于2个函数值，比较费时。现用 f 的值近似 f'，可少算一个函数值。



切线斜率 ≈ 割线斜率 $\Rightarrow \quad f'(x_k) \approx \dfrac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$

$$\Rightarrow \quad x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k)-f(x_{k-1})}$$

需要2个初值 x_0 和 x_1。