第七章　非线性方程求根

1　方程求根与二分法

1.1　引言

本章考虑求下列非线性方程的根
$$f(x) = 0.$$
$x^* \in R = (-\infty, \infty)$是根, 是指它满足
$$f(x^*) = 0.$$
如果根x^*还满足
$$f'(x^*) \neq 0,$$
则称它是一个**单根**; 如果满足
$$f^{(i)}(x^*) = 0, \quad 0 \leq i \leq k-1$$
且
$$f^{(k)}(x^*) \neq 0.$$
则称它是一个k**重根**. 如果存在x^*的某个邻域$(x^* - \epsilon, x^* + \epsilon)(\epsilon > 0)$, 使得在这个领域内没有$f(x)$的其他根, 则称$x^*$为**孤立根**.

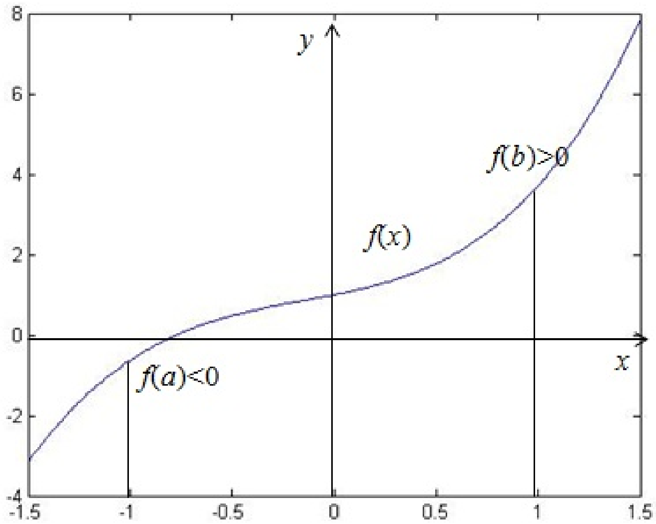
这一章里我们总是假设$f(x) \in C[a,b]$.

定理　若$f(x) \in C[a,b]$满足$f(a)f(b) < 0$, 则至少存在一个点$x^* \in [a,b]$,满足$f(x^*) = 0$. 进一步, 如果$f'(x)$都存在且保持不变号, 则这个根是单根, 也是孤立根.

一个简单的例子, 考虑$f(x) = x^3 + e^x$, $a = -1, b = 1$.

由于$f(a) = f(-1) < 0, f(b) = f(1) > 0$, 因此$f(x)$在[-1,1]内至少有一个根.

由于$f'(x) = 3x^2 + e^x$, 对所有的$x \in [-1,1]$恒为正, 因此这个根是单根, 也是孤立根.



1.2 二分法

算法

假设$f(a_0)f(b_0) < 0$,则可按照下面的算法得到区间$I_k = (a_k, b_k)$,$k = 1, 2, \ldots$, 使得在该区间内有一个根:

$$(a_k, b_k) = \begin{cases} (x_k, b_{k-1}) & \text{若 } f(x_k)f(b_{k-1}) < 0 \\ (a_{k-1}, x_k) & \text{若 } f(x_k)f(a_{k-1}) < 0 \end{cases}$$

其中

$$x_k = \frac{1}{2}(a_{k-1} + b_{k-1}).$$

如果对于某个k有, $f(x_k) = 0$, 那么我们就已经找到了一个根, 否则可以按照上面的算法计算下去, 直至满足$b_k - a_k$小于某个事先给定的阈值, 此时x_k就可以作为一个近似根.

先验估计

假设初始区间为(a_0, b_0), 那么上面的算法得到的各个区间满足

$$\begin{aligned} b_1 - a_1 &= \frac{b_0 - a_0}{2}, \\ b_2 - a_2 &= \frac{b_1 - a_1}{2} = \frac{b_0 - a_0}{2^2}, \\ \cdots &= \ldots, \\ b_k - a_k &= \frac{b_{k-1} - a_{k-1}}{2} = \frac{b_0 - a_0}{2^k}. \end{aligned}$$

由于我们是把区间$I_k = (a_k, b_k)$的中点

$$x_k = \frac{1}{2}(b_{k-1} + a_{k-1})$$

作为近似根, 因此它与真根之间的误差

$$|x^* - x_k| \le \frac{b_{k-1} - a_{k-1}}{2} = \frac{b_0 - a_0}{2^k}.$$

如果要求近似根满足精度

$$|x^* - x_k| < 10^{-t}$$

那么可以估计出需要的迭代步数k要满足

$$\frac{b_0 - a_0}{2^k} < 10^{-t}$$

即

$$k > \frac{\ln(10^t(b_0 - a_0))}{\ln 2}.$$

比如当$t = 10$和$b_0 - a_0 = 1$时, 所需迭代步数$k > 34$.

注: 注意二分法的收敛速度与$f(x)$完全无关.

例1 用二分法求函数$f(x) = x^3 + x - 1$在区间[0,1]内的一个近似根.

解 在这个例子里

$$a_0 = 0, \quad , b_0 = 1, \quad f(a_0) = f(0) < 0, \quad f(b_0) = 1 > 0,$$

$$f(a_0)f(b_0) = f(0)f(1) = -1 < 0,$$

因此$f(x)$在区间$[0, 1]$内至少有一个根.

第一步: 令

$$x_1 = (a_0 + b_0)/2 = 1/2,$$

则可计算出

$$f(x_1) = f(1/2) = -3/8 < 0, \quad f(x_1)f(b_0) = -3/8 < 0,$$

所以就有

$$[a_1, b_1] = [x_1, b_0] = [1/2, 1].$$

第二步: 令

$$x_2 = (a_1 + b_1)/2 = 3/4,$$

则有

$$f(x_2) = f(3/4) = 11/64 > 0, \quad f(x_2)f(a_1) < 0,$$

于是

$$[a_2, b_2] = [a_1, x_2].$$

类似进行上面的步骤, 可以得到下表:

i	a_i	$f(a_i)$	x_{i+1}	$f(x_{i+1})$	b_i	$f(b_i)$
0	0.0000	$-$	0.5000	$-$	1.0000	$+$
1	0.5000	$-$	0.7500	$+$	1.0000	$+$
2	0.5000	$-$	0.6250	$-$	0.7500	$+$
3	0.6250	$-$	0.6975	$+$	0.7500	$+$
4	0.6250	$-$	0.6562	$-$	0.6875	$+$
5	0.6562	$-$	0.6719	$-$	0.6875	$+$

.

例2 利用二分法求函数$f(x) = cos(x) - x$在区间[0, 1]内的一个根, 要求精确到小数点后六位.

解 首先我们来计算所需迭代步数k. 由于

$$|x^{\star} - x_k| \leq \frac{b_0 - a_0}{2^k},$$

经过$k-1$步迭代后的误差为

$$\frac{b_0 - a_0}{2^k} = \frac{1}{2^k}.$$

因此根据精度要求, 可知k必须满足

$$\frac{1}{2^k} < 0.5 \times 10^{-6}.$$

可以解出k不能小于19. 计算结果见下表:

k	a_k	$f(a_k)$	x_{k+1}	$f(x_{k+1})$	b_k	$f(b_k)$
0	0.000000	$+$	0.500000	$+$	1.000000	$-$
1	0.500000	$+$	0.750000	$-$	1.000000	$-$
2	0.500000	$+$	0.625000	$+$	0.750000	$-$
3	0.625000	$+$	0.687500	$+$	0.750000	$-$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
19	0.739084	$+$	0.739085	$-$	0.739086	$-$

我们得到的近似解是$x_{20} = 0.739085$, 它至少精确到小数点后六位.

2 迭代法及其收敛性

考虑方程$g(x) = x$, 其中g是已知函数. 如果存在某个ξ满足这个方程, 即

$$g(\xi) = \xi.$$

则称ξ是g的一个**不动点**.

例3 求$g(x) = \frac{x^2-2}{3}$在[-1,1]内的不动点.

解 令$f(x) = g(x) - x$, 则

$$f(1) = g(1) - 1 = -\frac{1}{3} - 1 < 0.$$

$$f(-1) = g(-1) + 1 = -\frac{1}{3} + 1 > 0.$$

这表明存在一个$\xi \in (-1, 1)$满足

$$f(\xi) = 0 \Longleftrightarrow g(\xi) - \xi = 0 \Longleftrightarrow g(\xi) = \xi,$$

也就是说ξ是$g(-1, 1)$内的不动点.

当然这个问题的不动点可以直接计算出来

$$g(\xi)=\xi \Longleftrightarrow \frac{\xi^2-2}{3}=\xi \Longleftrightarrow \xi^2-3\xi-2=0.$$

可解出

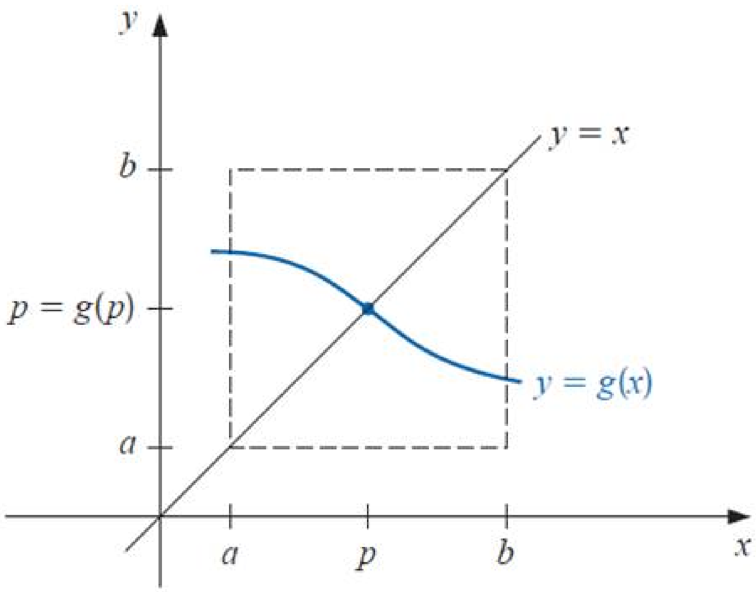
$$\xi=\frac{3\pm\sqrt{17}}{2}.$$

因此$\xi=\frac{3-\sqrt{17}}{2}$就是$g$在$(-1,1)$内的不动点.

定理1 如果函数$g(x)$在$[a,b]$上连续, 且对所有的$x\in[a,b]$都有$a\le g(x)\le b$, 那么函数$g(x)$一定存在一个不动点$\xi\in[a,b]$. 进一步如果$g(x)$在(a,b)上可导, 且满足

$$|g'(x)|\le\alpha<1,\quad \forall x\in(a,b),$$

则$g(x)$在$[a,b]$上的不动点唯一.



证明 令$f(x)=g(x)-x$, $x\in[a,b]$. 若$g(a)=a$, 则a就是g的一个不动点; 若$g(b)=b$, 那么b就是一个不动点. 因此在接下来的证明中我们总假设$g(a)\ne a$, $g(b)\ne b$. 于是就有$a<g(a)$, $g(b)<b$, 这表明

$$f(a)=g(a)-a>0,\qquad f(b)=g(b)-b<0.$$

因此存在$\xi\in(a,b)$使得$f(\xi)=0$, 即$g(\xi)=\xi$.

进一步, 如果$|g'(x)|\le\alpha<1$, 我们来证明此时不动点唯一. 用反证法. 假设在$[a,b]$上有两个不同的不动点ξ_1和ξ_2, 则有

$$|\xi_1-\xi_2|=|g(\xi_1)-g(\xi_2)|=|g'(\theta)(\xi_1-\xi_2)|.$$

其中$\theta \in (\xi_1, \xi_2) \subset (a, b)$. 于是

$$|\xi_1 - \xi_2| \leq \alpha |\xi_1 - \xi_2| < |\xi_1 - \xi_2|.$$

矛盾, 因此此时不动点唯一.

例4 证明$g(x) = \cos x$在[0,1]内有唯一的不动点.

证明 显然$g(x) = \cos x$在[0,1]内连续, 且对所有的$x \in [0, 1]$, 都有$0 \leq \cos x \leq 1$. 由定理1可知g在$[0, 1]$内有不动点. 又由于

$$g'(x) = -\sin x \Longrightarrow |g'(x)| \leq \sin 1 < 1 \quad \forall x \in (0, 1).$$

因此由定理1可知不动点唯一.

2.1 不动点迭代法

假设g存在不动点ξ, 即$g(\xi) = \xi$. 我们希望找到这个ξ.

不动点迭代法是指: 给定初值x_0, 按照公式

$$x_{n+1} = g(x_n), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

依次得到$\{x_n\}$, $n = 1, 2, \ldots$.

关于不动点迭代法, 有如下的收敛性定理.

定理2 假设g在$[a, b]$上连续, 满足$a \leq g(x) \leq b$, 而且$g'(x)$存在, 满足

$$|g'(x)| \leq \alpha < 1 \quad \forall x \in (a, b).$$

任取$x_0 \in [a, b]$, 令

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

则序列$\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$收敛到g在$[a, b]$内的唯一不动点.

证明 利用微分中值定理可得

$$\begin{aligned}
|x_n - \xi| &= |g(x_{n-1}) - g(\xi)| \\
&= |g'(\theta)(x_{n-1} - \xi)|, \quad \theta \in (a, b) \\
&= |g'(\theta)||x_{n-1} - \xi| \\
&\leq \alpha |x_{n-1} - \xi| \quad \forall n = 1, 2, \ldots.
\end{aligned}$$

反复利用上式可得

$$|x_n - \xi| \leq \alpha^n |x_0 - \xi|.$$

由于$\alpha < 1$, 因此$\alpha^n \to 0$, 于是就有

$$|x_n - \xi| \to 0 \quad \text{当 } n \to \infty.$$

定理得证.

在上面的证明过程中, 我们已经得到了一个误差界估计:

$$|x_n - \xi| \leq \alpha^n |x_0 - \xi|.$$

但是上式右端无法计算, 因为ξ是未知的. 我们希望找到一个可计算的误差上界. 利用三角不等式有

$$\begin{aligned} |x_0 - \xi| &= |x_0 - x_1 + x_1 - \xi| \\ &\leq |x_0 - x_1| + |x_1 - \xi| \\ &\leq |x_0 - x_1| + \alpha |x_0 - \xi|, \end{aligned}$$

于是可得,

$$(1-\alpha)|x_0 - \xi| \leq |x_0 - x_1|$$
$$|x_0 - \xi| \leq \frac{1}{1-\alpha}|x_0 - x_1|.$$

代回之前的误差估计即有

$$|x_n - \xi| \leq \frac{\alpha^n}{1-\alpha}|x_0 - x_1|.$$

这是一个可估计的误差上界.

例5 用不动点迭代计算方程$x^3 + 4x^2 - 10 = 0$在[1,2]内的唯一不动点.

解 首先我们要把给定的方程改写成$x = g(x)$的形式, 有多种写法.

情形1: 把方程写成

$$x = x^3 + 4x^2 + x - 10,$$

相当于$g(x) = x^3 + 4x^2 + x - 10$, 此时

$$g'(x) = 3x^2 + 8x + 1.$$

显然不能满足$|g'(x)| \leq \alpha < 1$. 此时不能用定理2的结论.

情形2: 把方程改写成

$$4x^2 = 10 - x^3 \longleftrightarrow x = \pm\sqrt{(10 - x^3)/4}.$$

由于我们要找的是正根, 因此应该取$x = \frac{1}{2}\sqrt{10 - x^3}$. 于是$g(x) = \frac{1}{2}\sqrt{10 - x^3}$, $g'(x) = -\frac{3}{4}x^2(10 - x^3)^{-\frac{1}{2}}$.

要求的是在$[1, 2]$内的正根. 注意到$|g'(x)|$在[1,2]内严格单调递增, 而

$$|g'(1)| = \frac{1}{4}, \quad |g'(2)| = \frac{3}{\sqrt{2}} > 1.$$

因此在区间[1,2]上也不能用定理2的结论.

把[1,2]分成两个小区间[1,3/2]和[3/2, 2]. 先考虑区间[1,3/2], 由于

$$|g'(3/2)| = 0.6556... < 1,$$

而$|g'(x)|$是单调递增函数, 于是就有

$$|g'(x)| \leq |g'(3/2)| = \alpha < 1 \quad \forall x \in [1, 3/2].$$

另一方面, 由于$g(x)$[1,3/2]上单调递减,

$$g(1)=3/2 \quad \text{and} \quad g(3/2)=1.2869\ldots>1.$$

因此$g(x)\in[1,3/2], \quad \forall x\in[1,3/2]$. 于是由定理2可知, 任取$x_0\in[1,3/2]$, 并令

$$x_{n+1}=g(x_n), \qquad n=0,1,\ldots,$$

则$x_n\to\xi$就是$g(x)$在[1,3/2]内的唯一不动点, 也就是所求方程的根.

数值结果如下: 这里初值选为$x_0=\frac{1}{2}(1+3/2)=1.25$.

$x_1=1.4180$	$(x_1=g(x_0))$
$x_2=1.3367$	$(x_2=g(x_1))$
$x_3=1.3795$	$(x_3=g(x_2))$
$x_4=1.3578$	$(x_4=g(x_3))$
$x_5=1.3690$	$(x_5=g(x_4))$
$x_6=1.3633$	$(x_6=g(x_5))$
$x_7=1.3662$	$(x_7=g(x_6))$
$x_8=1.3647$	$(x_8=g(x_7))$
$x_9=1.3654$	$(x_9=g(x_8))$
$x_{10}=1.3651$	$(x_{10}=g(x_9))$
$\vdots$	$\vdots$

真解为$\xi=1.3652$.

例6 利用不动点迭代计算$\sqrt{2}$.

解 下面是一种计算$\sqrt{2}$的古老的方法. 假设初始估计为

$$x_0=1.$$

这显然太小, 而$2/x_0=2/1=2$又太大, 因此很容易想到取它们的均值:

$$x_1=\frac{x_0+\frac{2}{x_0}}{2}=\frac{1+\frac{2}{1}}{2}=\frac{3}{2}.$$

重复上述过程, 由于3/2大于$\sqrt{2}$, 而$2/x_1=2/(3/2)=4/3$又太小, 再取它们的均值:

$$x_2=\frac{x_1+\frac{2}{x_1}}{2}=\frac{17}{12}.$$

继续重复, $\sqrt{2}$属于区间$[x_2,2/x_2]$. 下一步即有

$$x_3=\frac{x_2+\frac{2}{x_2}}{2}=\frac{577}{408}\approx 1.414215686.$$

容易验证, x_3与$\sqrt{2}$之间的误差不超过3×10^{-6}.

上述的过程实际上就是不动点迭代:

$$x_{i+1}=\frac{x_i+\frac{2}{x_i}}{2},$$

其中初值为$x_0 = 1$, 它收敛到方程

$$x = \frac{x + \frac{2}{x}}{2}$$

在$[1, 2]$内的唯一不动点$\sqrt{2}$.

2.2 收敛阶

假设g是$[a, b]$上的连续函数, g'在(a, b)上连续, 满足

$$|g'(x)| \le \alpha < 1 \quad \forall x \in (a, b).$$

假设对于某个初值$x_0 \in [a, b]$, 下面的迭代格式

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

产生的序列$\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$收敛到g的不动点ξ. 利用Taylor展开可得

$$x_{n+1} = g(x_n) = g(\xi) + (x_n - \xi) g'(\xi_n),$$

其中$\xi_n \in (x_n, \xi)$. 由上式可得

$$\begin{aligned}
x_{n+1} - \xi &= (x_n - \xi)\, g'(\xi_n) \\
\Longrightarrow \quad \frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|} &= |g'(\xi_n)| \\
\Longrightarrow \quad \lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|} &= \lim_{n\to\infty} |g'(\xi_n)|.
\end{aligned}$$

由于$\xi_n \in (x_n, \xi)$, 而$x_n \to \xi$, 因此$\lim_{n\to\infty} \xi_n = \xi$. 于是就有

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|} = |g'(\xi)|.$$

先假设$g'(\xi) = 0$, g''在(a, b)上连续, 再次利用Taylor展开可得

$$\begin{aligned}
x_{n+1} &= g(x_n) \\
&= g(\xi) + g'(\xi)(x_n - \xi) + \frac{g''(\xi_n)}{2}(x_n - \xi)^2 \\
&= \xi + \frac{g''(\xi_n)}{2}(x_n - \xi)^2.
\end{aligned}$$

其中$\xi_n \in (x_n, \xi)$. 利用上面类似的技巧可得

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|^2} = \frac{|g''(\xi)|}{2!}.$$

如果$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|} = |g'(\xi)|$, 且$|g'(\xi)| \neq 0$, 则称$\{x_n\}$**线性收敛**到$\xi$, 或者说收敛是**一阶**的.

如果$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|^2} = \frac{|g''(\xi)|}{2!}$, 且$|g''(\xi)| \neq 0$, 则称$\{x_n\}$**二次收敛**到$\xi$, 或者说收敛是**二阶**的.

一般的, 如果
$$\lim_{n\to\infty}\frac{|x_{n+1}-\xi|}{|x_n-\xi|^k}=\lambda$$
成立, 且$\lambda\neq 0$, 则称$\{x_n\}k$**阶收敛**到ξ

问题: 高阶收敛的优势?

考虑两个迭代格式:
$$x_{n+1}=g_1(x_n),\quad n=0,1,\ldots$$
$$\widetilde{x}_{n+1}=g_2(\widetilde{x}_n),\quad n=0,1,\ldots.$$
假设$x_n\to\xi$是线性收敛,
$$\lim_{n\to\infty}\frac{|x_{n+1}-\xi|}{|x_n-\xi|}=0.1$$
$\widetilde{x}_n\to\widetilde{\xi}$是二次收敛,
$$\lim_{n\to\infty}\frac{\left|\widetilde{x}_{n+1}-\widetilde{\xi}\right|}{\left|\widetilde{x}_n-\widetilde{\xi}\right|^2}=0.1.$$
则有
$$|x_{n+1}-\xi|\approx 0.1\,|x_n-\xi|\,.$$
如果$|x_n-\xi|\approx 10^{-p}$, 其中$p>0$, 则
$$|x_{n+1}-\xi|\approx 10^{-(p+1)}.$$

另一方面, 我们有
$$\left|\widetilde{x}_{n+1}-\widetilde{\xi}\right|\approx 0.1\left|\widetilde{x}_n-\widetilde{\xi}\right|^2.$$
若$\left|\widetilde{x}_n-\widetilde{\xi}\right|\approx 10^{-p}$, 则
$$\left|\widetilde{x}_{n+1}-\widetilde{\xi}\right|\approx 10^{-(2p+1)}.$$

这表明二次收敛比线性收敛收敛的更快, 误差下降的更快.

定理3　假设迭代法
$$x_{n+1}=g(x_n),\qquad n=0,1,\ldots$$
收敛到g的一个不动点ξ. 如果$g'(\xi)=g''(\xi)=\cdots=g^{(k-1)}(\xi)=0$, $g^{(k)}(\xi)\neq 0$, 且$g^{(k)}$连续, 则
$$\lim_{n\to\infty}\frac{|x_{n+1}-\xi|}{|x_n-\xi|^k}=\frac{\left|g^{(k)}(\xi)\right|}{k!}\neq 0,$$
即x_n是k阶收敛到ξ.

证明　利用Taylor展开可得
$$\begin{aligned}x_{n+1} &= g(x_n)=g(\xi)+g'(\xi)(x_n-\xi)\\ &\quad+\cdots+\frac{g^{(k-1)}(\xi)}{(k-1)!}(x_n-\xi)^{k-1}+\frac{g^{(k)}(\xi_n)}{k!}(x_n-\xi)^k\end{aligned}$$

其中$\xi_n \in (x_n, \xi)$. 由于$g'(\xi) = \cdots = g^{(k-1)}(\xi) = 0$, 于是有

$$x_{n+1} = \xi + \frac{g^{(k)}(\xi_n)}{k!}(x_n - \xi)^k,$$

这表明

$$\frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|^k} = \frac{\left|g^{(k)}(\xi_n)\right|}{k!}.$$

即

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|^k} = \lim_{n\to\infty} \frac{\left|g^{(k)}(\xi_n)\right|}{k!} = \frac{\left|g^{(k)}(\xi)\right|}{k!}.$$

3 牛顿法

考虑

$$f(x) = 0,$$

其中f连续可微. 假设ξ是f的一个单根, 即$f'(\xi) \neq 0$. 我们希望把上面的方程改写为

$$x = g(x)$$

的形式, 使得对应的迭代法

$$x_{n+1} = g(x_n), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

至少二次收敛.

设

$$g(x) = x - u(x)f(x),$$

其中$u(x)$是一个待定函数. 如果$u(x)$在某个包含ξ的区间I上不为零, 则当$x \in I$时,

$$\begin{aligned} & x = g(x) = x - u(x)f(x) \\ \iff\quad & u(x)f(x) = 0 \\ \iff\quad & f(x) = 0. \end{aligned}$$

这表明ξ是$f(x)$的根等价于ξ是g的不动点.

这样对应的迭代法$x_{n+1} = g(x_n)$就是

$$x_{n+1} = x_n - u(x_n)f(x_n), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

我们希望找到u使得这个迭代格式至少二次收敛.

由定理3可知, 这相当于要求$g'(\xi) = 0$. 由于

$$g'(x) = 1 - u'(x)f(x) - u(x)f'(x),$$

即

$$g'(\xi) = 1 - u(\xi)f'(\xi).$$

若$g'(\xi)=0$, 则

$$u(\xi)=\frac{1}{f'(\xi)}, \qquad f'(\xi)\neq 0.$$

因此如果选择

$$u(x)=\frac{1}{f'(x)}, \qquad g(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)},$$

那么迭代法

$$x_{n+1}=g(x_n) \qquad \text{或者}$$

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n=0,1,2,\ldots,$$

至少二次收敛.

下面就是求解$f(x)=0$的单根的牛顿法, 要求精度为ϵ.

1. 选择初值x_0.

2. 对于$k=0,1,2,\ldots$, 迭代

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

   如果

$$\frac{|x_{k+1}-x_k|}{|x_k|}<\epsilon,$$

   则停止; 否则进行下一步.

例7 用牛顿法解方程$x=\cos(x)$.

解 令$f(x)=\cos(x)-x$, 可以验证$f(x)=0$在$[0,\pi/2]$内有唯一解. 由于$f'(x)=-\sin(x)-1$, 因此牛顿法的迭代格式为

$$x_{n+1}=x_n-\frac{\cos(x_n)-x_n}{-\sin(x_n)-1}, \quad n=0,1,2,\ldots$$

取$x_0=\pi/4$, 3次迭代后可得:

$x_1=0.73954$
$x_2=0.73909$
$x_3=0.73908.$

可以精确到小数点后4位.

例8 利用牛顿法求解方程$x^3+x-1=0$.

解 由于

$$f(x)=x^3+x-1,\ f'(x)=3x^2+1,$$

因此牛顿迭代格式为:

$$x_{i+1}=x_i-f(x_i)/f'(x_i)$$

$$=x_i-(x_i^3+x_i-1)/(3x_i^2+1)=(2x_i^3+1)/(3x_i^2+1).$$

从初值$x_0=-0.7$出发可得,

$$x_1=0.12712551,\ x_2=0.95767812,$$

$$x_3=0.73482779,\ x_4=0.68459177,$$

$$x_5=0.68233217,\ x_6=0.68232780,$$

$$x_7=0.68232780.$$

六次迭代后得到的解已经精确到小数点后8位了.

3.1 重根的情形

在上面的分析中, 我们假设了$f'(\xi)\neq 0$, 其中ξ是$f(x)=0$的根, 即

$$f(\xi)=0 \quad \text{and} \quad f'(\xi)\neq 0.$$

如前所定义, 这相当于说ξ是单根. 如果$f(\xi)=f^{(1)}(\xi)=\cdots=f^{(m-1)}(\xi)=0$, 且$f^{(m)}(\xi)\neq 0$, 则称$\xi$是一个$m$**重根**.

如果ξ是$f(x)=0$的重根, 上面的关于牛顿法的收敛性分析就不成立了, 也就是说牛顿法不是二次收敛了.

例9 已知方程

$$x^4-2x^3-x^2+2x+1=0$$

有一个2重的正根, 用牛顿法来计算这个根.

解 牛顿法的格式为

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n^4-2x_n^3-x_n^2+2x_n+1}{4x_n^3-6x_n^2-2x_n+2}, \quad n=0,1,2,\ldots$$

取初值为$x_0 = 2$, 下表给出了20步迭代得到的结果以及误差$x_k - x_{k-1}$:

k	x_k	$x_k - x_{k-1}$
1	1.83333333333333	−0.16666666666667
2	1.73437500000000	−0.09895833333333
3	1.67894580696203	−0.05542919303797
4	1.64927667057613	−0.02966913638590
⋮	⋮	⋮
11	1.61828483739017	−0.00025073617753
12	1.61815942713725	−0.00012541025292
13	1.61809671146153	−0.00006271567573
14	1.61806535098487	−0.00003136047665
15	1.61804967008321	−0.00001568090167
16	1.61804182947763	−0.00000784060557
17	1.61803790911884	−0.00000392035879
18	1.61803594895433	−0.00000196016451
19	1.61803496889080	−0.00000098006353
20	1.61803447887774	−0.00000049001306

注意真解是$\frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1.61803399$(精确到小数点后8位).

下面我们要证明如果ξ是$f(x) = 0$的一个二重根, 且f三阶连续可微, 那么迭代格式

$$x_{n+1} = x_n - 2\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

将二次收敛.

证明 令$g(x) = x - 2\frac{f(x)}{f'(x)}$, $x \neq \xi$, 则

$$\begin{aligned} g'(x) &= 1 - 2\left(\frac{f'(x)^2 - f''(x)f(x)}{f'(x)^2}\right) \\ &= -1 + \frac{2f(x)f''(x)}{f'(x)^2}, \quad x \neq \xi. \end{aligned}$$

由于ξ是二重根, 即$f(\xi) = f'(\xi) = 0$, $f''(\xi) \neq 0$, 于是有

$$\begin{aligned} g'(\xi) &= -1 + \lim_{x\to\xi} \frac{2f(x)f''(x)}{f'(x)^2} \\ &= -1 + \lim_{x\to\xi} \frac{2f'(x)f''(x)}{2f'(x)f''(x)} \qquad \text{(7–K)} \\ &= 0. \end{aligned}$$

因此迭代格式二次收敛.

一般的, 如果ξ是$f(x) = 0$的m重根, 则迭代格式

$$x_{n+1} = x_n - m\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

是二次收敛的.

但是这个迭代格式的最大缺点是m一般是未知的.

重新考虑例9, 即已知方程

$$x^4 - 2x^3 - x^2 + 2x + 1 = 0$$

有一个2重的正根, 用牛顿法来计算这个根.

解 修正的牛顿迭代格式为

$$x_{n+1} = x_n - \mathbf{2}\frac{x_n^4 - 2x_n^3 - x_n^2 + 2x_n + 1}{4x_n^3 - 6x_n^2 - 2x_n + 2}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

仍取初值$x_0 = 2$, 可以发现从x_6开始就保持不变, 与真解相比, 能精确到小数点后10位.

k	x_k	$x_k - x_{k-1}$
1	1.66666666666667	-0.33333333333333
2	1.61904761904762	-0.04761904761905
3	1.61803444782164	-0.00101317122598
4	1.61803398871125	-0.00000045911039
5	1.61803628709422	0.00000229838297
6	1.61803398869463	-0.00000229839960
7	1.61803398869463	0

4 解非线性方程组的牛顿法

考虑方程组

$$\begin{cases} f_1(x_1, \ldots, x_n) = 0, \\ \qquad \cdots \\ f_n(x_1, \ldots, x_n) = 0, \end{cases}$$

其中$f_1, \ldots, f_n$都是$x_1, \ldots, x_n$的多元函数. 如果用向量记号记$x = (x_1, \ldots, x_n)^T \in R^n, F = (f_1, \ldots, f_n)^T$, 则上述方程组可以写成

$$F(x) = 0.$$

当$n \geq 2$, 且至少有一个f_i是非线性函数时, 称之为非线性方程组. 考虑求这个非线性方程组的解.

与求解非线性方程的牛顿法类似, 假设已知一个近似根$x^{(k)} = (x_1^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)})^T$, 利用多元函数的Taylor展开并取线性近似, 可得

$$F(x) \approx F(x^{(k)}) + F'(x^{(k)})(x - x^{(k)}).$$

取右端为零, 可得到一个线性方程组

$$F'(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = -F(x^{(k)}),$$

其中

$$F'(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

称为雅可比(Jacobi)矩阵. 将上述线性方程组的解记为$x^{(k+1)}$, 则得到求解非线性方程组的牛顿法格式如下:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (F'(x^{(k)}))^{(-1)} F(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \ldots.$$

例10 用牛顿法求解方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3 = 0, \\ 2x_1^2 + x_2^2 - 5 = 0, \end{cases}$$

取初值为$x^{(0)} = (1.5, 1)^T$.

解 先求Jacobi矩阵

$$F'(x) = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 4x_1 & 2x_2 \end{bmatrix}, \quad (F'(x))^{-1} = \frac{1}{2x_2 - 8x_1} \begin{bmatrix} 2x_2 & -2 \\ -4x_1 & 1 \end{bmatrix},$$

因此牛顿迭代格式为:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{1}{2x_2 - 8x_1} \begin{bmatrix} 2x_2 & -2 \\ -4x_1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} + 2x_2^{(k)} - 3 \\ 2(x_1^{(k)})^2 + (x_2^{(k)})^2 - 5 \end{bmatrix}.$$

由$x^{(0)} = (1.5, 1)^T$可得

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= (1.5, 0.75)^T \\ x^{(2)} &= (1.488095, 0.755952)^T \\ x^{(3)} &= (1.488034, 0.755983)^T. \end{aligned}$$

$x^{(3)}$的每一位都是有效数字.