第四章　非线性方程(组)的数值解法

数值分析

南京理工大学数统学院

4.1 非线性方程的数值解法

4.1.1 根的定义与二分法

方程$f(x)=0$的根$x^\star$, 又称为函数$f(x)$的零点, 它使$f(x^\star)=0$.

若$f(x)$可分解为

$$f(x)=(x-x^\star)^m g(x),$$

其中m为正整数, 且$g(x^\star)\neq 0$. 当$m=1$时, 则称$x^\star$为单根; 若$m>1$, 称$x^\star$为$f(x)=0$的m重根, 或$x^\star$为$f(x)$的m重零点.

若$x^\star$是$f(x)$的m重零点, 且$g(x)$充分光滑, 则

$$f(x^\star)=f'(x^\star)=\cdots=f^{(m-1)}(x^\star)=0, \quad f^{(m)}(x^\star)\neq 0.$$

科学与工程计算中有大量方程求根问题，其中一类特殊的问题是多项式方程

$$f(x)=a_nx^n+\cdots+a_1x+a_0,\quad (a_n\neq 0)$$

的求根问题，其中系数$a_i(i=0,1,\cdots,n)$为实数.

当$f(x)$为n次代数多项式时，根据代数学基本定理，n次方程在复数域内有且只有n 个根(含复根，m重根按m计算).

$n>5$时，不能用公式表示方程的根.

实际问题，不一定需要根的精确值，往往需要满足一定精度的近似根.

对于$n\geq 3$的多项式方程和一般连续函数方程，可采用数值方法求近似根.

二分法

方程$f(x)=0$, 如果在区间$[a,b]$上至少有一个根, 则称$[a,b]$是方程的一个**有根区间**.

设函数$f(x)$在$[a,b]$上连续, 且有$f(a)f(b)<0$, 根据介值定理, $[a,b]$ 是一个有根区间.

进一步, 若区间$[a,b]$上, $f(x)$严格单调, 则$[a,b]$内有且仅有一个根, 这时若能将有根区间不断缩小, 便能逐步得到根的近似值.

二分法基本思想: 采用对分区间的方法根据分点处函数值的符号逐步将有根区间缩小, 使在足够小的区间内, 方程有且仅有一个根.

设方程$f(x)=0$的一有根区间为$[a,b]$(且其内只有一个根), $f(a)f(b)<0$, 取中点$x_0=\dfrac{a+b}{2}$, 将区间$[a,b]$分成两个小区间: $[a,x_0]$和$[x_0,b]$, 计算$f(x_0)$:

若$f(x_0)=0$, 则x_0为$f(x)=0$的根, 计算结束;

若$f(a)f(x_0)<0$, 令$a_1=a$, $b_1=x_0$;

若$f(x_0)f(b)<0$, 令$a_1=x_0$, $b_1=b$;

$[a_1,b_1]$为新的有根区间, 对它施行同样的处理, 得到一系列有根区间:

$$[a,b]\supset[a_1,b_1]\supset[a_2,b_2]\supset\cdots\supset[a_k,b_k]\supset\cdots$$

其中每个区间长度都是前一个的一半, 区间$[a_k,b_k]$的长度为 $b_k-a_k=\dfrac{1}{2^k}(b-a)$.

如果二分过程无限继续下去，这些有根区间最终必收缩于一点$x^\star$，该点就是所求根.

如果取$[a_k, b_k]$的中点$x_k = \dfrac{a_k + b_k}{2}$作为$f(x) = 0$根的近似值，则有误差估计式:

$$|x_k - x^\star| \le \frac{1}{2}(b_k - a_k) = \frac{1}{2^{k+1}}(b - a).$$

对于所给精度ϵ，若取k使得

$$\frac{1}{2^{k+1}}(b - a) \le \epsilon,$$

则$|x_k - x^\star| \le \epsilon$，算法终止.

例 求方程$x(x+1)^2-1=0$在区间$[0,1]$内的一个实根, 要求保留四位有效数字.

例　求方程$x(x+1)^2-1=0$在区间$[0,1]$内的一个实根，要求保留四位有效数字.

解　$f(0)<0$, $f(1)>0$, 按照误差估计式，预计只要二分14次，便能达到预定精度，二分计算结果如表:

k	a_k	b_k	x_k	$f(x_k)$符号
0	0.0	1.0	0.5	+
1	0.0	0.5	0.25	-
2	0.25	0.5	0.375	-
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
14	0.465515	0.465576	0.465546	-

二分法优点: 算法简单, 且总是收敛的;

缺点: 收敛慢, 不能求偶数重根, 故通常不单独将其用于求根, 只用于为根求一个较好的初始近似值.

4.1.2 不动点迭代法

1. 迭代格式

对非线性方程$f(x)=0$,

若可化为等价方程$x=\varphi(x)$(其解为$\varphi(x)$的不动点),

由此建立递推公式

$$x_{k+1}=\varphi(x_k), \quad k=0,1,\cdots \tag{1.1}$$

给定初值x_0可得序列$\{x_k\}_0^\infty$, 如果$\lim\limits_{k\to\infty} x_k=x^\star$, 且$\varphi(x)$在$x^\star$附近连续, 则

$$x^\star=\lim_{k\to\infty} x_{k+1}=\lim_{k\to\infty}\varphi(x_k)=\varphi\left(\lim_{k\to\infty} x_k\right)=\varphi(x^\star),$$

于是$x^\star$是方程$x=\varphi(x)$的根, 也是原方程$f(x)=0$的根.

$$x_{k+1} = \varphi(x_k), \quad k = 0, 1, \cdots \tag{1.1}$$

一般地, 称(1.1)为迭代格式, 也称迭代公式, $\{x_k\}$ 为迭代序列, x_0 为迭代初值, $\varphi(x)$ 为迭代函数, 用迭代格式(1.1)求得方程近似根的方法称为不动点迭代法, 或简单迭代法.

当迭代序列收敛时, 称迭代法收敛, 否则称迭代法发散.

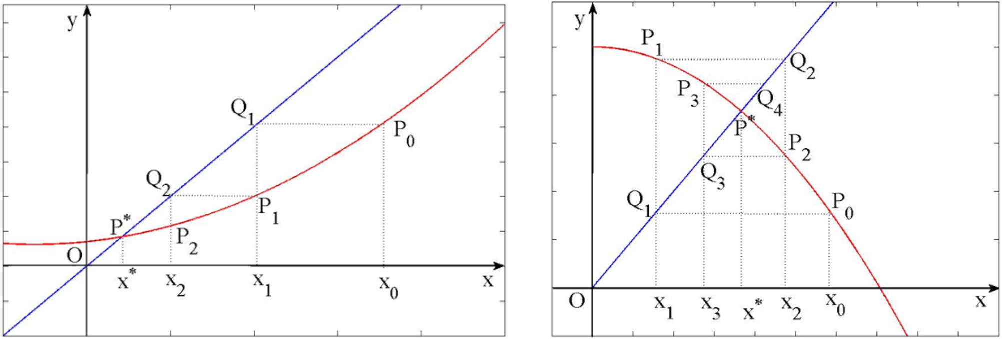


Figure: 不动点迭代法的几何意义(迭代收敛)

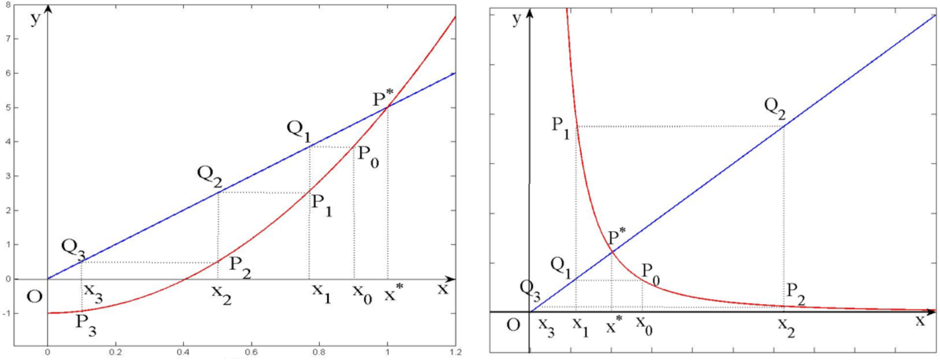


Figure: 不动点迭代法的几何意义(迭代发散)

例 求方程 $x^3+x-1=0\ \ (x>0)$ 在区间$[0.5,1]$内的一个实根.

解 (1) $x=1-x^3,\ x_0=0.5, x_1=0.875,\cdots,x_9=1.00, x_{10}=0.00$

(2) $x=\sqrt[3]{1-x},\ x_0=0.5,\cdots,x_{24}=0.68227157, x_{25}=0.68236807$

(3) $x=\frac{1+2x^3}{1+3x^2},\ x_0=0.5,\cdots,x_4=0.68232780, x_5=0.68232780$

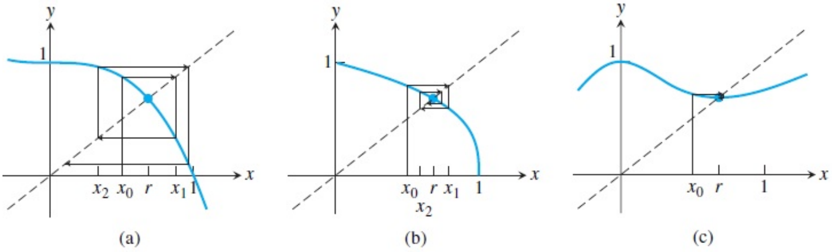


Figure 1.3 Geometric view of FPI. The fixed point is the intersection of $g(x)$ and the diagonal line. Three examples of $g(x)$ are shown together with the first few steps of FPI. (a) $g(x)=1-x^3$ (b) $g(x)=(1-x)^{1/3}$ (c) $g(x)=(1+2x^3)/(1+3x^2)$

2. 迭代法的全局收敛性

定理4.1: 若$\varphi(x)$在$[a,b]$上具有一阶连续导数，且满足条件:

(1) 当$x\in[a,b]$时，$\varphi(x)\in[a,b]$;

(2) 存在正数$L<1$，使对任意$x\in[a,b]$，有$|\varphi'(x)|\le L<1$，

则有: (1) 方程$x=\varphi(x)$ 在区间$[a,b]$上存在唯一根$x^\star$;

(2) 对任何初值$x_0\in[a,b]$，由$x_{k+1}=\varphi(x_k)$，$k=0,1,\cdots$确定的x_k收敛于$x^\star$;

(3) $|x_k-x^\star|\le\dfrac{L}{1-L}|x_k-x_{k-1}|,\ k=1,2,\cdots;$

(4) $|x_k-x^\star|\le\dfrac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|,\ k=1,2,\cdots;$

(5) $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{x_{k+1}-x^\star}{x_k-x^\star}=\varphi'(x^\star).$

注:

(1) 若L接近于1, 则收敛可能很慢.

(2) 定理4.1的结论(3)直接用计算结果x_k与x_{k-1}来估计误差, 称为后验误差估计式.

(3) 定理4.1的结论(4)是在尚未计算时估计出x_k的误差$|x^\star - x_k|$, 因此称为先验误差估计式, 可用于计算需要迭代的步数.

(4) 定理4.1条件可用下面Lipschitz条件来代替:

存在正实数$L < 1$, 使$\forall\ x,\ \ y \in [a, b]$, 有

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \le L|x - y|.$$

定理4.2: 设方程$x=\varphi(x)$在$[a,b]$内有根x^*, 且当$x\in[a,b]$ 时, $|\varphi'(x)|\geq 1$, 则对任意初值$x_0\in[a,b]$ 且$x_0\neq x^\star$, 迭代公式$x_{k+1}=\varphi(x_k)$发散.

定理4.2: 设方程$x=\varphi(x)$在$[a,b]$内有根x^*, 且当$x\in[a,b]$ 时, $|\varphi'(x)|\geq 1$, 则对任意初值$x_0\in[a,b]$ 且$x_0\neq x^\star$, 迭代公式$x_{k+1}=\varphi(x_k)$发散.

例 用不动点迭代法求方程$f(x)=x(x+1)^2-1=0$在区间$[0,1]$内的一个实根, 精确至4位有效数字.

定理4.2: 设方程$x=\varphi(x)$在$[a,b]$内有根x^*, 且当$x\in[a,b]$ 时, $|\varphi'(x)|\geq 1$, 则对任意初值$x_0\in[a,b]$ 且$x_0\neq x^\star$, 迭代公式$x_{k+1}=\varphi(x_k)$发散.

例 用不动点迭代法求方程$f(x)=x(x+1)^2-1=0$在区间$[0,1]$内的一个实根, 精确至4位有效数字.

解 将方程化为等价形式$x=\dfrac{1}{(x+1)^2}$, 于是

$$\varphi(x)=\frac{1}{(x+1)^2},\quad \varphi'(x)=-\frac{2}{(x+1)^3}.$$

当$x\in[0,1]$时, $\varphi(x)\in[\varphi(1),\varphi(0)]=[0.25,1]\subseteq[0,1]$,

但$|\varphi'(0)|=2$, 定理4.1条件(2)不满足, 因此需要缩小有根区间.

从$x_0=0$开始, 以$h=0.2$为步长, 逐步验证, 得$f(0.2)<0$, $f(0.4)<0$, $f(0.6)>0$, 由此知方程在$[0.4,0.6]$内有一实根.

当$x\in[0.4,0.6]$时，有 $|\varphi'(x)|\le|\varphi'(0.4)|=\dfrac{2}{(0.4+1)^3}=0.7289<1$，

但是 $\varphi(x)\in[\varphi(0.6),\varphi(0.4)]=\left[\dfrac{1}{(0.6+1)^2},\dfrac{1}{(0.4+1)^2}\right]=[0.3906,0.5102]\not\subseteq[0.4,0.6]$，

继续缩小有根区间为$[0.4,0.55]$，此时

$\varphi(x)\in[\varphi(0.55),\varphi(0.4)]=\left[\dfrac{1}{(0.55+1)^2},\dfrac{1}{(0.4+1)^2}\right]=[0.4612,0.5102]\subseteq[0.4,0.55]$，

$|\varphi'(x)|\le|\varphi'(0.4)|=0.7289<1$，

于是$\forall\ x_0\in[0.4,0.55]$，迭代格式收敛，取$x_0=0.4$，计算结果列表如下

k	x_k	k	x_k
0	0.4	$\vdots$	$\vdots$
1	0.510204	$\vdots$	$\vdots$
2	0.438459	$\vdots$	$\vdots$
3	0.483287	17	0.465602
4	0.454516	18	0.465552
5	0.472675	19	0.465584
6	0.461090	20	0.465563

迭代18次时，有4位有效数字，取$x^\star \approx 0.4656$，其误差不超过0.5×10^{-4}.

3. 局部收敛性与收敛速度

定义: 设方程$x=\varphi(x)$有根$x^\star$, 若在$x^\star$的某个邻域$S=\{x||x-x^\star|\le\delta\}$内, 对任意初值$x_0\in S$, 迭代格式

$$x_{k+1}=\varphi(x_k),\quad k=0,1,2,\cdots \tag{1.2}$$

产生的序列$\{x_k\}\in S$, 且收敛于$x^\star$, 则称迭代格式在$x^\star$附近是局部收敛的.

定理4.3: 设方程$x=\varphi(x)$有根$x^\star$, 且在$x^\star$的某个邻域$S=\{x||x-x^\star|\leq\delta\}$内$\varphi(x)$存在一阶连续导数, 则

(1) 当$|\varphi'(x^\star)|<1$时, 迭代格式(1.2)局部收敛;

(2) 当$|\varphi'(x^\star)|\geq 1$时, 迭代格式(1.2)发散.

定理4.3: 设方程$x=\varphi(x)$有根$x^\star$, 且在$x^\star$的某个邻域$S=\{x||x-x^\star|\leq\delta\}$内$\varphi(x)$存在一阶连续导数, 则

(1) 当$|\varphi'(x^\star)|<1$时, 迭代格式(1.2)局部收敛;

(2) 当$|\varphi'(x^\star)|\geq 1$时, 迭代格式(1.2)发散.

证明: (1) 设$|\varphi'(x^\star)|<1$, 由连续函数的性质, 则当δ适当小时, 对任意$x\in S$, 有$|\varphi'(x)|\leq L<1$, 且

$$|\varphi(x)-x^\star|=|\varphi(x)-\varphi(x^\star)|=|(x-x^\star)\varphi'(\xi)|\leq L|x-x^\star|<|x-x^\star|\leq\delta,$$

即$\varphi(x)\in S$, 在区间S上, 定理4.1条件满足, 因此迭代格式局部收敛.

(2) 设$|\varphi'(x)|\geq 1$, 则在$x^\star$的某个邻域内有$|\varphi'(x)|\geq 1$, 由定理4.2知迭代格式发散.

注：定理4.3对初值x_0要求较高．如果已知$x^\star$的大概位置，x_0为$x^\star$的一个较好的近似，则可用$|\varphi'(x_0)| < 1$代替$|\varphi'(x^\star)| < 1$，用$|\varphi'(x_0)| \geq 1$代替$|\varphi'(x^\star)| \geq 1$，然后用定理4.3判断迭代格式的局部敛散性．

注: 定理4.3对初值x_0要求较高. 如果已知$x^\star$的大概位置, x_0为$x^\star$的一个较好的近似, 则可用$|\varphi'(x_0)| < 1$代替$|\varphi'(x^\star)| < 1$, 用$|\varphi'(x_0)| \geq 1$代替$|\varphi'(x^\star)| \geq 1$, 然后用定理4.3判断迭代格式的局部敛散性.

例 用不动点迭代法求方程$f(x) = x(x+1)^2 - 1 = 0$在$x_0 = 0.4$附近的根.

注：定理4.3对初值x_0要求较高．如果已知$x^\star$的大概位置，x_0为$x^\star$的一个较好的近似，则可用$|\varphi'(x_0)| < 1$代替$|\varphi'(x^\star)| < 1$，用$|\varphi'(x_0)| \geq 1$代替$|\varphi'(x^\star)| \geq 1$，然后用定理4.3判断迭代格式的局部敛散性．

例 用不动点迭代法求方程$f(x) = x(x+1)^2 - 1 = 0$在$x_0 = 0.4$附近的根．

解 将方程化为等价形式$x = \dfrac{1}{(x+1)^2}$，于是

$$\varphi(x) = \frac{1}{(x+1)^2}, \quad \varphi'(x) = -\frac{2}{(x+1)^3},$$

因为$|\varphi'(0.4)| = 0.7289$，由定理4.3知迭代格式

$$x_{k+1} = \frac{1}{(x_k+1)^2}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

是局部收敛的．计算结果见上例．

定义: 设迭代格式$x_{k+1} = \varphi(x_k)$收敛于方程$x = \varphi(x)$的根$x^\star$, 记迭代误差$e_k = x_k - x^\star$,

(1) 若存在实数$p \geq 1$及非零常数$C(p = 1$时$C \in (0,1))$, 使

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p} = C, \tag{1.3}$$

则称$\{x_k\}$是p阶收敛的, C称为渐近误差常数.

(2) 若存在实数$p \geq 1$及$C > 0(p = 1$时$C \in (0,1))$, 以及正整数K, 使得当$k > K$时,

$$|e_{k+1}| \leq C|e_k|^p, \tag{1.4}$$

则称$\{x_k\}$至少p阶收敛.(注: 若p阶收敛, 则至少p阶收敛)

当$p=1$ 时，也称为线性收敛，当$p>1$时，称为超线性收敛，当$p=2$ 时，称为平方收敛.

定理4.4：设$x^\star$是$\varphi(x)$的不动点，在$x^\star$附近$|\varphi'(x)|<1$，

(1) 若$\varphi'(x)$在$x^\star$的邻域上连续，$\varphi'(x^\star)\neq 0$，则对一个任意靠近$x^\star$ 的初值，迭代公式$x_{k+1}=\varphi(x_k)$线性收敛；

(2) 若$\varphi''(x)$在$x^\star$的邻域上连续，$\varphi'(x^\star)=0$，$\varphi''(x^\star)\neq 0$，则$x_{k+1}=\varphi(x_k)$平方收敛；

(3) 若$\varphi^{(p)}(x)$在$x^\star$的邻域上连续，$\varphi'(x^\star)=\cdots=\varphi^{(p-1)}(x^\star)=0$，$\varphi^{(p)}(x^\star)\neq 0$，则$x_{k+1}=\varphi(x_k)$是$p$阶收敛的，且有

$$\lim_{k\to\infty}\frac{e_{k+1}}{e_k^p}=\frac{\varphi^{(p)}(x^\star)}{p!}. \tag{1.5}$$

例 设2个迭代分别是线性收敛与平方收敛的:

(1) $\dfrac{e_{k+1}}{e_k}=\dfrac{1}{2}$, (2) $\dfrac{\tilde{e}_{k+1}}{\tilde{e}_k^2}=\dfrac{1}{2}$, $k=0,1,\cdots$

其中 $e_0=\tilde{e}_0=\dfrac{1}{3}$, 若取精度$\epsilon=10^{-10}$, 试分别估计这2个迭代所需迭代次数.

例 设2个迭代分别是线性收敛与平方收敛的:

(1) $\dfrac{e_{k+1}}{e_k}=\dfrac{1}{2}$, (2) $\dfrac{\tilde{e}_{k+1}}{\tilde{e}_k^2}=\dfrac{1}{2}$, $k=0,1,\cdots$

其中 $e_0=\tilde{e}_0=\dfrac{1}{3}$, 若取精度$\epsilon=10^{-10}$, 试分别估计这2个迭代所需迭代次数.

解 (1) 由$\dfrac{e_{k+1}}{e_k}=\dfrac{1}{2}$, $e_0=\dfrac{1}{3}$, 可得

$$e_k=\frac{1}{2}e_{k-1}=\cdots=\frac{1}{2^k}e_0=\frac{1}{2^k}\frac{1}{3},$$

要使$|e_k|<10^{-10}$, 只要$\dfrac{1}{2^k}\dfrac{1}{3}\leq 10^{-10}$, 可得

$$k\geq\frac{10\ln 10-\ln 3}{\ln 2}=31.63,$$

因此要满足精度要求, 应迭代32次.

(2) 由$\dfrac{\tilde{e}_{k+1}}{\tilde{e}_k^2}=\dfrac{1}{2}$, $\tilde{e}_0=\dfrac{1}{3}$, 可得

$$\tilde{e}_k=\frac{1}{2}\tilde{e}_{k-1}^2=\cdots=\left(\frac{1}{2}\right)^{2^k-1}\left(\frac{1}{3}\right)^{2^k}=2\left(\frac{1}{6}\right)^{2^k},$$

要使$|\tilde{e}_k|<10^{-10}$, 只要$2\left(\dfrac{1}{6}\right)^{2^k}\le 10^{-10}$, 可得

$$k\ge\frac{\ln 13.328}{\ln 2}=3.73,$$

因此要满足精度要求, 应迭代4次.

4.1.3 迭代加速收敛的方法

在许多情况下，可以由迭代函数$\varphi(x)$构造一个新的迭代函数$\Phi(x)$，使得:

(1) 方程$x=\Phi(x)$和$x=\varphi(x)$具有相同的根$x^\star$;

(2) 由迭代公式$x_{k+1}=\Phi(x_k)$产生的迭代序列收敛于$x^\star$的阶高于$x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 产生的迭代序列收敛于$x^\star$的阶.

4.1.3 迭代加速收敛的方法

在许多情况下，可以由迭代函数$\varphi(x)$构造一个新的迭代函数$\Phi(x)$，使得:

(1) 方程$x=\Phi(x)$和$x=\varphi(x)$具有相同的根$x^\star$;

(2) 由迭代公式$x_{k+1}=\Phi(x_k)$产生的迭代序列收敛于$x^\star$的阶高于$x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 产生的迭代序列收敛于$x^\star$的阶.

方法1: 思路: 对方程$x=\varphi(x)$，若$\varphi'(x^\star)\neq 0$(即迭代格式可能线性收敛)，直接构造出与其等价的方程$x=\Phi(x)$，但$\Phi'(x^\star)=0$(即迭代格式可能平方收敛，或更快).

将$x=\varphi(x)$写为$(1+C)x=(1+C)\varphi(x)$, $C\neq -1$，于是

$$x=\varphi(x)+C(\varphi(x)-x)=\Phi(x),$$

$$\Phi'(x^\star) = [\varphi(x) + C(\varphi(x) - x)]'\Big|_{x=x^\star} = 0,$$

于是

$$C = \frac{\varphi'(x^\star)}{1-\varphi'(x^\star)}, \quad \Phi(x) = \frac{1}{1-\varphi'(x^\star)}\left[\varphi(x) - x\varphi'(x^\star)\right].$$

由于$\Phi'(x^\star) = 0$, 故迭代格式

$$x_{k+1} = \frac{1}{1-\varphi'(x^\star)}[\varphi(x_k) - \varphi'(x^\star)x_k], \tag{1.6}$$

至少平方收敛.

注: 实际计算时, 由于$x^\star$未知, 故常用其邻近值, 如x_{k_0}代替而使用如下迭代格式(这样处理后迭代速度可能不是平方收敛)

$$x_{k+1} = \frac{1}{1-L}\left[\varphi(x_k) - Lx_k\right], \quad L = \varphi'(x_{k_0}). \tag{1.7}$$

例 用迭代法求方程$f(x)=x(x+1)^2-1=0$在0.4附近的一个实根，精确至4位有效数字.

解 取$x_{k_0}=0.4$，则$L=\varphi'(0.4)=-0.7289$得迭代格式

$$x_{k+1}=\frac{1}{1+0.7289}\left[\frac{1}{(x_k+1)^2}+0.7289x_k\right],$$

取$x_0=0.4$，计算结果列于下表:

k	x_k	k	x_k
0	0.4	3	0.465566
1	0.463742	4	0.465571
2	0.465473		

$x^\star\approx 0.465571$，迭代4步即可得到4位有效数字的近似根.

方法2(艾特金(Aitken)加速法):

设已得到线性收敛的迭代序列$\{x_k\}$, $\lim\limits_{k\to\infty}\left|\dfrac{x_{k+1}-x^\star}{x_k-x^\star}\right| = C(0<C<1)$,

因而当k适当大时, 有

$$\frac{x_{k+2}-x^\star}{x_{k+1}-x^\star} \approx \frac{x_{k+1}-x^\star}{x_k-x^\star} \Rightarrow x^\star \approx \frac{x_k x_{k+2}-x_{k+1}^2}{x_{k+2}-2x_{k+1}+x_k},$$

$$\tilde{x}_k = \frac{x_k x_{k+2}-x_{k+1}^2}{x_{k+2}-2x_{k+1}+x_k}. \tag{1.8}$$

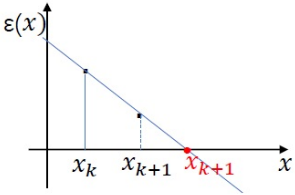
由序列$\{x_k\}$得到序列$\{\tilde{x}_k\}$的方法称为Aitken加速方法.

Aitken加速的几何意义:

设相邻两步迭代的误差$\varepsilon(x_k)=x_{k+1}-x_k$，加速迭代收敛即加快$\varepsilon(x_k)$趋于零的速度. 若

$$\varepsilon(x_k)=x_{k+1}-x_k,\quad \varepsilon(x_{k+1})=x_{k+2}-x_{k+1},$$

都不等于零，则可以在"$x-\varepsilon(x)$"坐标系上，用经过 $(x_k,\varepsilon(x_k))$ 和 $(x_{k+1},\varepsilon(x_{k+1}))$ 的直线与 x 轴的交点，取 x_{k+1} 作为第 $k+1$ 次迭代的结果



定理4.5: 设序列$\{x_k\}$满足$x_k \neq 0$, $k = 1, 2, \cdots$, 且存在非零常数λ, 满足$|\lambda| < 1$, 使

$$x_{k+1} - x^\star = (\lambda + \delta_k)(x_k - x^\star), \tag{1.9}$$

其中$\lim\limits_{k\to\infty} \delta_k = 0$, 则对充分大的$k$, 由(1.8)定义的$\tilde{x}_k$都存在, 且

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\tilde{x}_k - x^\star}{x_k - x^\star} = 0, \tag{1.10}$$

即$\{\tilde{x}_k\}$收敛比$\{x_k\}$快.

斯蒂芬森(Steffensen)迭代法: 对不动点迭代法应用Aitken加速,

$$x^\star \approx \frac{x_k\varphi(\varphi(x_k)) - \varphi^2(x_k)}{\varphi(\varphi(x_k)) - 2\varphi(x_k) + x_k},$$

将上式左端作为新的近似值x_{k+1}, 得到迭代格式$x_{k+1} = \Phi(x_k)$, $k = 0, 1, \cdots,$

$$\Phi(x) = \frac{x\varphi(\varphi(x)) - \varphi^2(x)}{\varphi(\varphi(x)) - 2\varphi(x) + x}, \tag{1.11}$$

$$x_{k+1} = \frac{x_k\varphi(\varphi(x_k)) - \varphi^2(x_k)}{\varphi(\varphi(x_k)) - 2\varphi(x_k) + x_k}. \tag{1.12}$$

(1.12)称为Steffensen迭代法.

定理4.6: 若 x^* 为 $\Phi(x)$ 的不动点，则也是 $\varphi(x)$ 的不动点；反之，若 x^* 为 $\varphi(x)$ 的不动点，$\varphi'(x)$ 存在且连续，$\varphi'(x^*) \neq 1$，x^* 也是 $\Phi(x)$ 的不动点。

定理4.7: 若 x^* 为 $\varphi(x)$ 的不动点，在 x^* 的邻域中 $\varphi(x)$ 有 $p+1$ 阶连续导数，若对 $p=1$，$\varphi'(x^*) \neq 1$，则Steffensen 迭代二阶收敛；若原迭代法 p阶收敛($p>1$)，则 Steffensen 迭代 $2p-1$ 阶收敛。

注: 由定理4.7, $p=1$时条件$\varphi'(x^\star) \neq 1$, Steffensen迭代法不仅可以提高收敛速度, 有时也可将原本不收敛的迭代法改进为二阶收敛的方法.

例 用Steffensen迭代法求方程$f(x)=x(x+1)^2-1=0$在0.4附近的一个实根，精确至4位有效数字.

解 将方程化为等价形式$x=\dfrac{1}{(x+1)^2}$，于是$\varphi(x)=\dfrac{1}{(x+1)^2}$，$|\varphi'(0.4)|\approx 0.7289$，迭代格式$x_{k+1}=\varphi(x_k)$局部线性收敛.

Steffensen迭代法 $$x_{k+1}=\frac{x_k\varphi(\varphi(x_k))-\varphi(x_k)^2}{\varphi(\varphi(x_k))-2\varphi(x_k)+x_k},\quad k=0,1,2,\cdots$$

k	x_k	$\varphi(x_k)$	$\varphi(\varphi(x_k))$
0	0.4	0.510204	0.438459
1	0.466749	0.464824	0.466046
2	0.465571	0.465571	

$x^\star\approx 0.465571$，迭代2步即可得到4位有效数字的近似根.

4.1.4 Newton迭代法和割线法

1. Newton迭代法的构造

Newton法思想：利用Taylor展开，将非线性方程近似为线性方程.

设$x^\star$是$f(x)=0$的根，且已有一个近似值$x_k \approx x^\star$，如果$f''(x)$存在且连续，由Taylor展开式

$$
\begin{aligned}
f(x^\star) &= f(x_k) + f'(x_k)(x^\star - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2}(x^\star - x_k)^2, \quad \xi\text{在}x^\star\text{和}x_k\text{之间}, \\
&\approx f(x_k) + f'(x_k)(x^\star - x_k),
\end{aligned}
$$

于是得到近似方程$f(x_k) + f'(x_k)(\tilde{x}^\star - x_k) = 0$，如果$f'(x_k) \neq 0$，可得

$$
\tilde{x}^\star = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \tag{1.13}
$$

取$\tilde{x}^\star$作为原方程新的近似根x_{k+1}, 即

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots \tag{1.14}$$

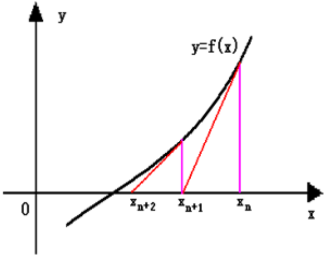
(1.14)称为牛顿迭代公式, 用牛顿迭代公式求方程根的方法称为牛顿迭代法, 简称牛顿法.

Newton迭代法也是一种不动点迭代法, 迭代函数为

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}. \tag{1.15}$$

Newton迭代法的几何意义:

方程 $$y=f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k)$$
是曲线在点$(x_k, f(x_k))$处的切线方程, 迭代格式(1.14)就是切线与x轴交点的横坐标, 所以**牛顿法是用切线与x轴交点横坐标近似代替曲线与x轴交点横坐标**, 因此牛顿法也称切线法.



2. 局部收敛性

对Newton法的迭代函数$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$求导，得

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{(f'(x))^2 - f''(x)f(x)}{(f'(x))^2} = \frac{f''(x)f(x)}{(f'(x))^2}, \tag{1.16}$$

$$\varphi''(x) = \left(f(x)\frac{f''(x)}{(f'(x))^2}\right)' = f'(x)\frac{f''(x)}{(f'(x))^2} + f(x)\left(\frac{f''(x)}{(f'(x))^2}\right)', \tag{1.17}$$

2. 局部收敛性

对Newton法的迭代函数$\varphi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$求导, 得

$$\varphi'(x)=1-\frac{(f'(x))^2-f''(x)f(x)}{(f'(x))^2}=\frac{f''(x)f(x)}{(f'(x))^2}, \tag{1.16}$$

$$\varphi''(x)=\left(f(x)\frac{f''(x)}{(f'(x))^2}\right)'=f'(x)\frac{f''(x)}{(f'(x))^2}+f(x)\left(\frac{f''(x)}{(f'(x))^2}\right)', \tag{1.17}$$

(1) 当$x^\star$是$f(x)=0$的单根时, 则有$f(x^\star)=0,\ f'(x^\star)\neq 0$, 于是

$$\varphi(x^\star)=x^\star,\quad \varphi'(x^\star)=0,\quad \varphi''(x^\star)=\frac{f''(x^\star)}{f'(x^\star)}.$$

定理4.8: 设$f(x^\star)=0$, $f'(x^\star)\neq 0$, 且f在包含$x^\star$的一个区间上有二阶连续导数, 则Newton迭代法局部收敛到$x^\star$, 且至少是二阶收敛.

例: 设$a>0$, 用Newton法求方程$x^2-a=0$的根, 并分析其收敛性.

定理4.8: 设$f(x^\star)=0$, $f'(x^\star)\neq 0$, 且f在包含$x^\star$的一个区间上有二阶连续导数, 则Newton迭代法局部收敛到$x^\star$, 且至少是二阶收敛.

例: 设$a>0$, 用Newton法求方程$x^2-a=0$的根, 并分析其收敛性.

解: Newton法解这个方程的迭代公式:

$$x_{k+1}=\frac{1}{2}\left(x_k+\frac{a}{x_k}\right), \quad k=0,1,\cdots$$

如果$0<x_0<\sqrt{a}$, 有

$$x_1-\sqrt{a}=\frac{1}{2}\left(x_0+\frac{a}{x_0}\right)-\sqrt{a}=\frac{(x_0-\sqrt{a})^2}{2x_0},$$

所以$x_1>\sqrt{a}$, 同理可验证, $\forall\ x_k>\sqrt{a}$, 有$x_{k+1}>\sqrt{a}$, 而且

$$x_{k+1}-x_k=\frac{a-x_k^2}{2x_k}<0,$$

即$\{x_k\}$从$k=1$起是一个单调递减有下界的序列, 它有极限$x^\star$, 对迭代公式两边取极限, 得$x^\star=\sqrt{a}$.

如果$x_0>\sqrt{a}$, 类似可得, $\{x_k\}$从$k=0$起是一个单调递减有下界的序列, 它有极限$x^\star$, 对迭代公式两边取极限, 得$x^\star=\sqrt{a}$.

综上, 任取$x_0>0$, Newton迭代法都收敛到$\sqrt{a}$, 在$(0,+\infty)$上具有全局收敛性.

(2) 当$x^\star$是$f(x)=0$的$m(m\geq 2)$重根时，则有$f(x)=(x-x^\star)^m g(x)$，且$g(x^\star)\neq 0$，于是

$$\begin{aligned}\varphi(x)&=x-\frac{f(x)}{f'(x)}=x-\frac{(x-x^\star)^m g(x)}{m(x-x^\star)^{m-1}g(x)+(x-x^\star)^m g'(x)}\\&=x-\frac{(x-x^\star)g(x)}{mg(x)+(x-x^\star)g'(x)}.\end{aligned}$$

所以 $\varphi(x^\star)=x^\star$，

$$\begin{aligned}\varphi'(x^\star)&=\lim_{x\to x^\star}\frac{\varphi(x)-\varphi(x^\star)}{x-x^\star}=\lim_{x\to x^\star}\frac{x-\frac{(x-x^\star)g(x)}{mg(x)+(x-x^\star)g'(x)}-x^\star}{x-x^\star}\\&=\lim_{x\to x^\star}\left[1-\frac{g(x)}{mg(x)+(x-x^\star)g'(x)}\right]=1-\frac{1}{m},\end{aligned}$$

因而Newton 法对重根$(m\geq 2)$是一阶局部收敛，即线性收敛.

重根情形Newton法的改进

(1) 若$x^\star$是$f(x)=0$的$m(m\geq 2)$重根, m已知, 则可将Newton法迭代函数改为

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

构造迭代格式

$$x_{k+1}=x_k-m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)},\quad k=0,1,2,\cdots \tag{1.18}$$

此时, $\varphi'(x^\star)=0$, 此迭代格式至少平方收敛, 称(1.18)为改进的Newton迭代法.

(2) 若$x^\star$是$f(x)=0$的$m(m\geq 2)$重根，m未知，令$\mu(x)=\dfrac{f(x)}{f'(x)}$，则$x^\star$是$\mu(x)$ 的单根，对$\mu(x)=0$用Newton迭代法，迭代函数为

$$\varphi(x)=x-\frac{\mu(x)}{\mu'(x)}=x-\frac{f(x)f'(x)}{[f'(x)]^2-f(x)f''(x)}, \tag{1.19}$$

迭代法

$$x_{k+1}=x_k-\frac{\mu(x_k)}{\mu'(x_k)}=x_k-\frac{f(x_k)f'(x_k)}{[f'(x_k)]^2-f(x_k)f''(x_k)}, \tag{1.20}$$

至少二阶收敛.

注：式(1.20)的分母会包含两个接近零的数之差，要适当处理以避免严重的舍入误差.

3. 牛顿下山法

牛顿迭代法对初值的要求较高, 如果x_0偏离所求根$x^\star$较远, 则牛顿法可能发散. 为防止迭代发散, 对迭代过程再附加一项要求, 即具有单调性:

$$|f(x_{k+1})| < |f(x_k)|, \tag{1.21}$$

满足此要求的算法称下山法.

牛顿法与下山法结合: 将牛顿法的计算结果

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

与前一步的近似值x_k取加权平均作为新的改进值:

$$x_{k+1} = \lambda \bar{x}_{k+1} + (1-\lambda)x_k, \tag{1.22}$$

其中$0 < \lambda \leq 1$称为下山因子, (1.22)即

$$x_{k+1} = x_k - \lambda \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, \cdots \tag{1.23}$$

称为牛顿下山法.

选择下山因子的方法: 从$\lambda = 1$开始, 逐次将λ减半进行试算, 直至下降条件(1.21)满足.

牛顿下山法算法:

(1) 输入: $x_0,\ \epsilon,\ \epsilon_\lambda,\ \delta,\ \alpha$,

(2) $f_0 = f(x_0)$,

(3) $f_1 = f'(x_0)$, $\lambda = 1$,

(4) $x_1 = x_0 - \lambda \dfrac{f_0}{f_1}$, $f_2 = f(x_1)$,

(5) 若$|f_2| \geq |f_0|$, 且$\lambda > \epsilon_\lambda$, $\lambda = \alpha\lambda$, 转(4),

(6) 若$|f_2| \geq |f_0|$, 且$\lambda < \epsilon_\lambda$, 下山失败, $x_0 = x_0 + \delta$, 转(2),

(7) 若$|f_2| < \epsilon$ 或$|x_1 - x_0| < \epsilon$, 输出$x^\star = x_1$, 迭代终止,

(8) 若$|f_2| < |f_0|$, $x_0 = x_1$, $f_0 = f_2$, 转(3).

4. 割线法

牛顿法每步迭代要计算$f'(x_k)$，有时$f'(x_k)$计算较困难，为简化计算，可用x_{k-1}，x_k点上的差商近似导数，即

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

牛顿迭代公式变为

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \quad k = 1, 2, \cdots \tag{1.24}$$

称为割线法.

几何意义: 通过曲线$y = f(x)$上两点$(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$，$(x_k, f(x_k))$ 作曲线的割线，其与x轴交点横坐标就是x_{k+1}.

割线法是两步迭代法，局部收敛，收敛阶为$\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$.

例 分别用Newton迭代法和割线法求解方程$\cos x = x$在0.5附近的根，要求保留6位有效数字.

解 设$f(x) = \cos x - x$，Newton迭代法的计算公式:

$$x_{k+1} = x_k + \frac{\cos x_k - x_k}{\sin x_k + 1},$$

割线法计算公式:

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

取初值$x_0 = 0.5$，$x_1 = 0.78539816(\approx \frac{\pi}{4})$，计算结果列于下表

	Newton迭代法	Newton迭代法	割线法
x_0	0.5	0.78539816	0.5
x_1	0.75522242	0.73953613	0.78539816
x_2	0.73914167	0.73908518	0.73638414
x_3	0.73908513	0.73908513	0.73905813
x_4	0.73908513	0.73908513	0.73908515
x_5	0.73908513	0.73908513	0.73908513

4.2 算子导数及其计算

1. 算子的连续性

定义： 设 X, Y 为 Banach 空间，$F: D \to Y$ 为线性或非线性算子，其中 $D \subset X$ 为算子的定义域。对于 $x_0 \in D$，若对于任意固定的 $h \in X$，$t \in \mathbb{R}$，只要 $x_0 + th \in D$，下面的极限成立

$$\lim_{t \to 0} F(x_0 + th) = F(x_0),$$

$$\left(\lim_{t \to 0} ||F(x_0 + th) - F(x_0)||_Y = 0 \right)$$

则称算子 F 在点 $x_0 \in D$ 处半连续（沿方向 h 连续）。

若对于任意 $h \in X$，有

$$\lim_{||h||_X \to 0} ||F(x_0+h) - F(x_0)||_Y = 0,$$

则称算子 F 在点 $x_0 \in D$ 处连续。

连续的概念是逐点定义的，若算子 F 在 $D \subset X$ 中的每一点都连续，则称算子 F 在 D 上是连续的。

算子除了连续性质以外，我们更关心的是算子的导数。在这里，我们介绍两种最常用的算子导数：

(1) Gâteaux 导数：传统极限形式定义导数的拓展。

(2) Fréchet 导数：传统微分形式定义导数的拓展。

2. Gâteaux导数 （传统极限形式定义导数的拓展）

定义： 设 X, Y 为 Banach 空间，$F: D \subset X \to Y$ 为线性或非线性算子，若在 $x_0 \in D$ 处，对于任意 $h \in X$，$t \in \mathbb{R}$，$x_0 + th \in D$，极限

$$\lim_{t \to 0} \frac{F(x_0 + th) - F(x_0)}{t}$$

存在，则称算子 F 在 x_0 处 Gâteaux 可微，称其极限 $DF(x_0, h)$ 为算子 F 在 x_0 处对于增量 h 的 Gâteaux 微分。进一步，若存在有界线性算子 $A: X \to Y$ （其中 A 与 x_0 有关，与 h 无关），使得

$$DF(x_0, h) = A \cdot h \ , \ \forall h \in X,$$

则称 A 为算子 F 在 x_0 处的 Gâteaux 导数，记为 $F'_G(x_0)$，其中 “$\cdot$” 表示一种“线性作用”。

3. Fréchet 导数（传统微分形式定义导数的拓展）

定义： 设 X, Y 为 Banach 空间，$F: D \subset X \to Y$ 为线性或非线性算子，在 $x_0 \in D$ 处，若对于任意满足 $x_0 + \Delta x \in D$ 的变化量 $\Delta x \in X$，都存在与 $\Delta x \in X$ 无关的有界线性算子 $A: X \to Y$，使得

$$F(x_0 + \Delta x) - F(x_0) = A \cdot \Delta x + \omega(x_0, \Delta x)$$

其中

$$\lim_{||\Delta x||_X \to 0} \frac{||w(x_0, \Delta x)||_Y}{||\Delta x||_X} = 0,$$

则称等式右端的线性主部 $A \cdot \Delta x$ 为算子 F 在 x_0 处的 Fréchet 微分，记作 $dF(x_0, \Delta x)$，其中有界线性算子 A 称为算子 F 在 x_0 处的 Fréchet 导数，记为 $F'_F(x_0)$。

关于 Gâteaux 导数与 Fréchet 导数的几点说明：

(1) 算子 F 是 Fréchet 可导，则必然是 Gâteaux 可导的，但反之未必。

(2) 算子 F 是 Gâteaux 可导且导数连续，则 F 也是 Fréchet 可导的。

(3) 若算子 F 是 Gâteaux 导数和 Fréchet 导数都存在，则两者一致且唯一，可统一记为 $F'(x)$。

(4) 在定义中的 $A \cdot h$ 和 $A \cdot \triangle x$ 中的 “$\cdot$”，表示一种“线性作用”，这种作用可能为数字的相乘、矩阵向量乘法、内积运算等等;

(5) 无论算子 F 本身是线性还是非线性的，它在某点 x_0 处的导数 $F'(x_0) = A$ 一定是线性算子。

4. 算子导数的计算

我们只需要计算 Gâteaux 导数即可，即需要计算极限

$$\lim_{t\to 0}\frac{F(x+th)-F(x)}{t}=DF(x,h)=F'(x)\cdot h$$

若令

$$g(t)=F(x+th),$$

则根据 Gâteaux 导数的定义，可得

$$DF(x,h)=\lim_{t\to 0}\frac{F(x+th)-F(x)}{t}=\lim_{t\to 0}\frac{g(t)-g(0)}{t}=g_t'(0)$$

可以看到，求 Gâteaux 微分 $DF(x,h)$ 的过程上可以转化为简单的求一元函数 $g(t)$ 在 $t=0$ 处的导数的问题.

(1) 一元函数导数的重新解释

例: 对于一元函数 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$, 求其导数 $f'(x)$.

解: 设 $g(t)=f(x+th)$, 则

$$
\begin{aligned}
g'_t(0) &= \lim_{t\to 0}\frac{g(t)-g(0)}{t} = \lim_{t\to 0}\frac{f(x+th)-f(x)}{t}\\
&= \lim_{t\to 0}\frac{f(x+th)-f(x)}{(x+th)-x}\cdot h = f'(x)\cdot h
\end{aligned}
$$

这里的 $f'(x)$ 是传统的一元函数的“导数”，但这里不是将它看作是一个简单的“数”，而是一个线性算子, 即

$$
f'(x):\mathbb{R}\to\mathbb{R}:\quad \forall h\in\mathbb{R},\quad f'(x)\cdot h = y\in\mathbb{R}
$$

注： 这里“·”所表示的“线性作用”为数字之间的乘法运算.

(2) 多元函数导数(梯度)的重新解释

例: 对于 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$, $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$, 设 f 具有连续偏导数, 求 $f'(\boldsymbol{x})$.

解: 设 $g(t)=f(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})$, $\forall\boldsymbol{h}=(h_1,h_2,\cdots,h_n)^T\in\mathbb{R}^n$, 则

$$
\begin{aligned}
g'(t) &= \left(f(x_1+th_1,x_2+th_2,\cdots,x_n+th_n)\right)_t' \\
&= \frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})h_1+\frac{\partial f}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})h_2+\cdots+\frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})h_n
\end{aligned}
$$

从而

$$
g'(0)=\frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x})h_1+\frac{\partial f}{\partial x_2}(\boldsymbol{x})h_2+\cdots+\frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x})h_n,
$$

$$
\begin{aligned}
&= (h_1, h_2 \cdots h_n)\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}), \frac{\partial f}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}), \cdots \frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x})\right)^T \\
&= (\nabla f(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{h}) \\
&= \nabla f(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{h},
\end{aligned}
$$

其中 $\nabla f(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}), \frac{\partial f}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}), \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x})\right)^T$ 为多元函数的梯度. 因此,

$$
f'(\boldsymbol{x}) = \nabla f(\boldsymbol{x})
$$

注: 这里 "·" 所表示的"线性作用"关系为向量与向量之间的内积运算.

例: 设 $F(\boldsymbol{x}) = ||\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}||_2^2$, 其中 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$, 求 $F'(\boldsymbol{x})$.

解: 设 $g(t) = F(\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{h})$, $\forall \boldsymbol{h} \in \mathbb{R}^n$, 则

$$\begin{aligned} g(t) &= ||\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} + t\boldsymbol{h}) - \boldsymbol{y}||_2^2 \\ &= (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + t\boldsymbol{A}\boldsymbol{h}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} + t\boldsymbol{A}\boldsymbol{h}) \\ &= t^2||\boldsymbol{A}\boldsymbol{h}||_2^2 + 2t(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{h}) + ||\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}||_2^2 \end{aligned}$$

即 $g'(0) = 2(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{h}) = \left(2\boldsymbol{A}^T(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}), \boldsymbol{h}\right)$, 从而

$$F'(\boldsymbol{x}) = 2\boldsymbol{A}^T(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})$$

5. 向量值函数的导数

在实际问题中，我们经常遇到求解线性或非线性方程组的问题，可以统一地表示为:

$$
\begin{cases}
f_1(x_1, x_2, \cdots x_n) = y_1 \\
f_2(x_1, x_2, \cdots x_n) = y_2 \\
\vdots \\
f_m(x_1, x_2, \cdots x_n) = y_m
\end{cases}
$$

其中 $f_1, f_2, \cdots, f_m$ 具有连续偏导数.

向量值函数

向量值函数定义如下

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=\begin{pmatrix} f_1(\boldsymbol{x}) \\ f_2(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ f_m(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}, \text{其中} \quad \begin{aligned} &\boldsymbol{F}:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m \\ &\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T\in\mathbb{R}^n \\ &\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_m)^T\in\mathbb{R}^m \end{aligned}$$

这里 $f_1,f_2,\cdots,f_m$ 为具有连续偏导数的线性或非线性n元函数.

向量值函数的一阶导数：Jacobi矩阵

设 $g(t)=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h})$，$\forall \boldsymbol{h}=(h_1,h_2,\cdots,h_n)^T\in\mathbb{R}^n$，则

$$g'(t)=\begin{pmatrix} f_1(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h}) \\ \vdots \\ f_m(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h}) \end{pmatrix}_t' = \begin{pmatrix} (f_1(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h}))_t' \\ \vdots \\ (f_m(\boldsymbol{x}+t\boldsymbol{h}))_t' \end{pmatrix}$$

$$g'(0)=\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}h_1+\frac{\partial f_1}{\partial x_2}h_2+\cdots+\frac{\partial f_1}{\partial x_n}h_n \\ \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}h_1+\frac{\partial f_m}{\partial x_2}h_2+\cdots\frac{\partial f_m}{\partial x_n}h_n \end{pmatrix}$$

,

$$g'(0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, \frac{\partial f_1}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}, \frac{\partial f_m}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}_{m\times n} \cdot \boldsymbol{h},$$

从而得到

$$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, \frac{\partial f_1}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}, \frac{\partial f_m}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}_{m\times n} \quad \text{—Jacobi矩阵}$$

该矩阵通常被称为是算子 $\boldsymbol{F}$ 在 $\boldsymbol{x}$ 处的 **Jacobi 矩阵**.

4.3 不动点迭代基本原理

设 $F : D \subset X \to Y$ 为线性或非线性算子, 考虑下面方程的求解问题

$$F(x) = 0, \quad x \in X$$

将该方程等价地改写为

$$F(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x = \Phi(x),$$

其中 Φ 是连续算子($X \to X$), 称满足 $x^* = \Phi(x^*)$ 的点 x^* 为不动点, 显然求出不动点就得到原问题的解.

可构造相应的迭代法(不动点迭代):

$$x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)}),$$

得到迭代序列 $\{x^{(k)}\}$.

如果不动点迭代格式得到的迭代序列收敛, 即存在 x^*, 使得

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x^* \qquad (\lim_{k\to\infty} ||x^{(k)} - x^*|| = 0),$$

则有

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k+1)} = \lim_{k\to\infty} \Phi(x^{(k)}) \quad \Rightarrow x^* = \Phi(x^*) \quad \Rightarrow F(x^*) = 0,$$

从而得到原问题的解.

问题: 不动点迭代序列什么情况下收敛? 收敛速度如何?

不动点迭代的压缩映射原理

定义: 设 X 为 Banach 空间, 算子 $\Phi : D \subset X \to X$, 若存在常数 $L \in (0,1)$, 使得对任意 $x, y \in D_0 \subset D$, 都有

$$||\Phi(x) - \Phi(y)|| \leq L||x - y||,$$

则称 Φ 为D_0上的压缩映射, L 称为压缩因子.

定理4.9: (压缩映射原理) 设 X 为 Banach 空间, 如果

(1) 闭集$D_0 \subseteq X$; (闭集合)

(2) 算子 $\Phi : D_0 \to D_0$; (自身映射到自身)

(3) 算子 Φ 在 D_0 上是压缩映射; (压缩映射), 则算子 Φ 在 D_0 上存在唯一的不动点 x^*, 它是下面迭代格式

$$x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)}),$$

得到的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 的极限点(即 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^*$), 并有如下估计:

$$||x^{(k)} - x^*|| \le \frac{1}{1-L}\,||x^{(k+1)} - x^{(k)}|| \le \frac{L^k}{1-L}||x^{(0)} - \Phi(x^{(0)})||,$$

其中 L 为压缩因子, $x^{(0)} \in D_0$ 为迭代初值.

定义: 设迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^*, 记误差为 $e^{(k)} = x^{(k)} - x^*$, 则

(1)若存在实数 $p \geq 1$ 及非零常数 C, 使得

$$\lim_{k\to\infty} \frac{||e^{(k+1)}||}{||e^{(k)}||^p} = C$$

则称 $\{x^{(k)}\}$ 是 p 阶收敛, C 称为渐近误差常数.

(2)若存在实数 $p \geq 1$ 及常数 $C > 0$ (当 $p = 1$ 时规定 $0 < C < 1$), 以及正整数 K, 使得当 $k > K$ 时, 有

$$||e^{(k+1)}|| \leq C||e^{(k)}||^p$$

则称 $\{x^{(k)}\}$ 至少 p 阶收敛.

对于不动点迭代格式 $x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)})$, 其收敛速度和 Φ 相关.

定理4.10: 设 x^* 为算子 Φ 的不动点, 整数 $p > 1$, 且 $\Phi^{(p)}$ 在 x^* 的邻域连续, 且满足

$$\Phi'(x^*) = 0, \cdots, \Phi^{(p-1)}(x^*) = 0, \quad \Phi^{(p)}(x^*) \neq 0$$

则迭代法 $x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)})$ 生成的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 在 x^* 的邻域是 p 阶收敛的.

4.4 求解非线性方程组的迭代法

4.4.1 不动点迭代法

定理4.11: 设$D_0 = \{(x_1, x_2, \cdots, x_n) | a_i \leq x_i \leq b_i,\ i = 1, 2, \cdots, n\}$, 这里$a_i, b_i (i = 1, 2, \cdots, n)$为常数, 设$\Phi : D_0 \subset R^n \to R^n$具有一阶连续偏导, $\Phi(D_0) \subset D_0$, 若存在常数$L < 1$, 满足

$$\left| \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \right| \leq \frac{L}{n},\ \forall\ \boldsymbol{x} \in D_0,\ i, j = 1, 2, \cdots, n. \tag{4.1}$$

则迭代序列$\{\boldsymbol{x}^{(k)} | \boldsymbol{x}^{(k)} = \Phi(\boldsymbol{x}^{(k-1)})\}$对任意初始近似$\boldsymbol{x}^{(0)} \in D_0$收敛于$\Phi$的不动点$\boldsymbol{x}^* \in D_0$, 并有估计:

$$||\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}^{(k)}||_\infty \leq \frac{L^k}{1 - L} ||\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x}^{(0)}||_\infty.$$

局部收敛性(即在 x^* 附近收敛).

定理4.12:(Ostrowski) 设算子 $\Phi : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 有唯一不动点 $x^* \in \int(D)$, 且在 x^* 处 Fréchet 可导, $\Phi'(x^*)$ 的谱半径满足

$$\rho\left(\Phi'(x^*)\right) < 1$$

则存在开球 $S = S(x^*, \delta) \subset D$, 对于任意 $x^0 \in S$，由 $x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)})$ 生成的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛于 x^*.

例: 用不动点迭代法求解

$$\begin{cases} x_1^2 - 10x_1 + x_2^2 + 8 = 0 \\ x_1 x_2^2 + x_1 - 10x_2 + 8 = 0 \end{cases}$$

解: 将方程组写成 $x = \Phi(x)$ 形式, 其中

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \Phi(x) = \begin{pmatrix} g_1(x) \\ g_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{10}(x_1^2 + x_2^2 + 8) \\ \frac{1}{10}(x_1 + x_1 x_2^2 + 8) \end{pmatrix}$$

设 $D = \{(x_1, x_2)^T | 0 \le x_1, x_2 \le 1.5\}$ (闭区域), 则可验证

$$0.8 \le g_1(x), g_2(x) \le 1.5$$

即 $\Phi(D) \subset D$(自身到自身的映射).

对任意 $x, y \in D$，有

$$\begin{aligned}||\Phi(x)-\Phi(y)||_1 &= |g_1(x)-g_1(y)| + |g_2(x)-g_2(y)| \\ &= \frac{1}{10}\left|x_1^2-y_1^2+x_2^2-y_2^2\right| + \frac{1}{10}\left|x_1x_2^2-y_1y_2^2+x_1-y_1\right| \\ &\le 0.75\left(|x_1-y_1|+|x_2-y_2|\right) = 0.75||x-y||_1\end{aligned}$$

即 Φ 为压缩映射。

根据压缩映射原理，由 $\{x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)})\}$ 生成的迭代序列 $\{x^{(k)}\}$ 收敛。

取 $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})^T = (0,0)^T$，则可得到

$(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})^T = (0.8, 0.8)^T$, $(x_1^{(2)}, x_2^{(2)})^T = (0.928, 0.928)^T$,

$(x_1^{(3)}, x_2^{(3)})^T \approx (0.97283, 0.97327)^T$, $(x_1^{(4)}, x_2^{(4)})^T \approx (0.97283, 0.97327)^T$, .

$(x_1^{(5)}, x_2^{(5)})^T \approx (0.98365, 0.98943)^T$, $(x_1^{(6)}, x_2^{(6)})^T \approx (0.99465, 0.99662)^T$

4.4.2 Newton 法

设$\boldsymbol{F}: D \subset R^n \to R^n$ F-可导, 考虑非线性方程组

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}.$$

设$\boldsymbol{x}^* \in D$为方程组的解, $\boldsymbol{x}^{(0)}$为$\boldsymbol{x}^*$的近似初始值, $\boldsymbol{x}^{(0)} \in D$, 由F- 导数的定义:

$$\mathbf{0} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(0)}) + \boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(0)}) \cdot (\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}^{(0)}) + \omega(\boldsymbol{x}^{(0)}, \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}^{(0)}),$$

其中$\omega(\boldsymbol{x}^{(0)}, \boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}^{(0)})$是高阶无穷小量, 略去此项, 得

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(0)}) + \boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(0)}) \cdot (\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}^{(0)}) \approx \boldsymbol{0},$$

于是 $\boldsymbol{x}^* \approx \boldsymbol{x}^{(0)} - [\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(0)})]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(0)})$, 记此近似值为$\boldsymbol{x}^{(1)}$, 用它作为初值又可导出新的$\boldsymbol{x}^*$的近似值

$$\boldsymbol{x}^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(1)} - [\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(1)})]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(1)}), \ \cdots$$

一般地,

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - [\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(k)})]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)}), \ k = 0, 1, 2, \cdots \tag{4.2}$$

称为Newton迭代法.

$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(k)})$为$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$在$\boldsymbol{x}^{(k)}$处的Jacobi矩阵, 每一次迭代都要求$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(k)})$ 的逆, 实际计算时可采用下面等价格式:

$$\begin{cases} \boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \Delta\boldsymbol{x}^{(k)} = -\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)}), \\ \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \Delta\boldsymbol{x}^{(k)}. \end{cases} \tag{4.3}$$

即Newton迭代法每一步要解一个n阶线性方程组, $\Delta\boldsymbol{x}^{(k)}$看作对前一次$\boldsymbol{x}^{(k)}$的修正.

算法(Newton迭代法):

(i) 给定初值$\boldsymbol{x}^{(0)}$及计算精度ϵ_1, ϵ_2, 并置$k=0$;

(ii) 计算$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)})$并记为$\boldsymbol{b}^{(k)}$, 若$||\boldsymbol{b}^{(k)}|| \le \epsilon_1$, 输出$\boldsymbol{x}^{(k)}$, 转(vii), 否则转(iii);

(iii) 计算$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(k)}) = \left(\partial_j f_i(\boldsymbol{x}^{(k)})\right)_{n\times n}$并记为$\boldsymbol{A}^{(k)}$;

(iv) 解方程组$\boldsymbol{A}^{(k)}\Delta\boldsymbol{x}^{(k)} = -\boldsymbol{b}^{(k)}$, 得$\Delta\boldsymbol{x}^{(k)}$;

(v) 置$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \Delta\boldsymbol{x}^{(k)}$;

(vi) 若$||\Delta\boldsymbol{x}^{(k)}|| \le \epsilon_2$, 输出$\boldsymbol{x}^{(k+1)}$, 迭代终止, 否则$k+1 \to k$, $\boldsymbol{x}^{(k+1)} \to \boldsymbol{x}^{(k)}$ 转(ii).

例: 用Newton法解方程组

$$\begin{cases} x_1^2 - 10x_1 + x_2^2 + 8 = 0 \\ x_1 x_2^2 + x_1 - 10x_2 + 8 = 0 \end{cases}$$

解: 记

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^2 - 10x_1 + x_2^2 + 8 \\ x_1 x_2^2 + x_1 - 10x_2 + 8 \end{bmatrix},$$

$F(x)$的Jacobi阵

$$F'(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 - 10 & 2x_2 \\ x_2^2 + 1 & 2x_1 x_2 - 10 \end{bmatrix}$$

取$\boldsymbol{x}^{(0)} = (0,0)^T$, 解$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(0)})\Delta\boldsymbol{x}^{(0)} = -\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(0)})$, 即

$$\begin{bmatrix} -10 & 0 \\ 1 & -10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1^{(0)} \\ \Delta x_2^{(0)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 8 \\ 8 \end{bmatrix}$$

得: $\Delta\boldsymbol{x}^{(0)} = (0.8, 0.8)^T$, 如此继续下去, 得到:

k	0	1	2	3	4
$x_1^{(k)}$	0	0.8	0.9913872	0.9999752	1.000000
$x_2^{(k)}$	0	0.8	0.9917119	0.9999685	1.000000

与前面不动点迭代法相比, 收敛要快得多.

对于非线性方程组的 Newton 迭代法，我们有收敛性结论：

定理4.13： 设 $\boldsymbol{F}: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 满足 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$，$\boldsymbol{x}^* \in D$，在 $\boldsymbol{x}^*$ 的开邻域 $S_0 \subset D$ 中有一阶连续导数且 $\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^*)$ 可逆，则

(1) 存在半径为 δ 的闭球 $S_\delta = S(\boldsymbol{x}^*, \delta) \subset S_0$，使得 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ 对闭球中的所有点都有意义；

(2) 由 Newton 迭代格式产生的迭代序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 局部收敛于 $\boldsymbol{x}^*$，且是超线性收敛；

(3) 若 Jacobi 矩阵满足 Lipschitz 条件，即存在 $\gamma > 0$ 使得

$$||\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^*)|| \leq \gamma ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*||, \quad \forall \boldsymbol{x} \in S_\delta$$

则 Newton 迭代法至少平方收敛。

Newton法的缺点:

(1) 每一步需要计算$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)})$和$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(k)})$及求解线性方程组, 计算量大

(2) $\boldsymbol{x}^{(0)}$必须靠近$\boldsymbol{x}^*$

4.4.3 Newton法的若干变形

1. 简单Newton法

在Newton法中，每次迭代要求$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(k)})$，要计算$n^2$个偏导数，计算量很大，若改为计算固定点$\boldsymbol{x}^{(0)}$ 的$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(0)})$，迭代公式变为:

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - [\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(0)})]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \cdots \tag{4.4}$$

称为简单Newton迭代法. 它只有线性收敛速度，失去Newton法收敛速度快的优点.

2. 离散Newton法

在实际使用Newton法时，为避免计算$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x})$，通常可用差商代替偏导数，即用矩阵$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{h})$ 代替$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x})$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{h})=\begin{pmatrix} \frac{1}{h_1}[f_1(\boldsymbol{x}+h_1\boldsymbol{e}_1)-f_1(\boldsymbol{x})] & \cdots & \frac{1}{h_n}[f_1(\boldsymbol{x}+h_n\boldsymbol{e}_n)-f_1(\boldsymbol{x})] \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{h_1}[f_n(\boldsymbol{x}+h_1\boldsymbol{e}_1)-f_n(\boldsymbol{x})] & \cdots & \frac{1}{h_n}[f_n(\boldsymbol{x}+h_n\boldsymbol{e}_n)-f_n(\boldsymbol{x})] \end{pmatrix}$$

这里$\boldsymbol{h}=(h_1,\cdots,h_n)^T$，$\boldsymbol{e}_i$为第$i$个坐标向量.

如果$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{h})^{-1}$存在, 就用$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}^{(k)},\boldsymbol{h}^{(k)})^{-1}$代替Newton 迭代公式中的$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{x}^{(k)})^{-1}$, 则得离散Newton法:

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}^{(k)},\boldsymbol{h}^{(k)})^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)}),\quad k=0,1,\cdots \tag{4.5}$$

其中$\{\boldsymbol{h}^{(k)}\}$为预先给定的向量序列.

若取$\boldsymbol{h}^{(k)}=(f_1(\boldsymbol{x}^{(k)}),f_2(\boldsymbol{x}^{(k)}),\cdots,f_n(\boldsymbol{x}^{(k)}))^T=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)})$, 于是

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}^{(k)},\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)}))^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(k)}),\quad k=0,1,\cdots \tag{4.6}$$

称为Newton-Stefensen方法, 该算法具有平方收敛速度, 每步需要计算$n+1$ 个$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ 函数值.