数值分析

—— 科学与工程计算基础

任课教师：黄忠亿

清华大学数学科学系

目录

非线性方程求根

即求解 $f(x) = 0$, 其中 $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ 为非线性函数.

我们知道, 即便 $f(x)$ 是多项式函数 $p_n(x)$, 由Abel定理, 当 $n \geq 5$ 时, 也没有一般的求根公式.

因此我们需要研究迭代法来求解上述非线性方程.

设 $f(x) \in C[a, b]$, 如果 $f(a) \cdot f(b) < 0$, 那么 f 在区间 $[a, b]$ 上必然有一个根.

最简单的办法是用二分法来求解.

非线性方程求根—二分法

算法 4.1 (二分法)

令 $a_0 = a, b_0 = b, x_0 = \frac{a_0+b_0}{2}, k = 0$

1. 若 $f(x_k) = 0$, 则输出 x_k, 停止迭代;
   否则
   - 若 $f(x_k) \cdot f(a_k) < 0$, 则令 $b_{k+1} = x_k, a_{k+1} = a_k$;
   - 若 $f(x_k) \cdot f(b_k) < 0$, 则令 $a_{k+1} = x_k, b_{k+1} = b_k$;
2. $k = k + 1$, 若 $|b_k - a_k| < \varepsilon$ 则令 $x_k = \frac{a_k+b_k}{2}$, 输出并停止迭代;
   否则转1.

这样我们得到 $[a, b] = [a_0, b_0] \supset [a_1, b_1] \supset \cdots \supset [a_n, b_n] \supset \cdots$ 每次区间长度减半，故称为二分法.

非线性方程求根—二分法

例 4.1

求 $f(x) = x^3 - x - 1$ 在 $[1, 1.5]$ 上的根.

解: $a_0 = 1, b_0 = 1.5$. $f(a_0) = -1 < 0$, $f(b_0) = 0.875 > 0$.

因此区间$[1, 1.5]$上 f 必有根.

用二分法迭代到 $k = 6$:

$a_6 = 1.3203125$, $b_6 = 1.328125$, $x_6 = \underline{1.324}21875$.

可保证有三位有效数字: $\frac{b_6 - a_6}{2} \approx 4 \times 10^{-3} < 5 \times 10^{-3}$.

实际上 $x^* = 1.324717957244\cdots$, x_6 有四位有效数字. $\square$

这种迭代只是线性收敛, 收敛比较慢. 因此希望构造更快收敛格式: $x = \varphi(x)$ 形式的迭代法—不动点迭代.

非线性方程求根—不动点迭代法

我们将 $f(x)=0$ 转化为与其等价的形式 $x=\varphi(x)$:

$$\text{即 } f(\alpha)=0 \Longleftrightarrow \alpha=\varphi(\alpha).$$

显然有无穷多种φ. 我们需要研究: 是否任取 x_0, 迭代$x_{n+1}=\varphi(x_n)$ 都能收敛到根α? 此外收敛速度如何？(我们当然希望越快越好！)

定义 4.1 (不动点)

设 $\varphi: D\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ (称为 $D\to\mathbb{R}^n$ 的映射), 如果存在 $x^*\in D$, s.t. $x^*=\varphi(x^*)$, 则称 x^* 为映射 φ 的不动点.

定义 4.2 (压缩映射)

设 $\varphi: D\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$, 如果存在 $C\in(0,1)$, s.t. $\forall x,y\in D_0\subset D$, 有 $\|\varphi(x)-\varphi(y)\|\le C\,\|x-y\|$, 则称 φ 为在 D_0 上为压缩映射, C 称为压缩系数.

非线性方程求根—不动点迭代法

显然压缩性与所取范数有关.

例如, 设 $A = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.9 \\ 0.0 & 0.1 \end{pmatrix}$, 如果取无穷范数或1-范数, 都有 $\|A\|_\infty = \|A\|_1 = 1$, 但是 $\|A\|_2 \approx 0.912 < 1$. 即若令 $\varphi(\mathbf{x}) = A\mathbf{x}$, 那么 φ 在 $\|\cdot\|_2$ 范数下为压缩的, 在 $\|\cdot\|_\infty$ 及 $\|\cdot\|_1$ 下都不压缩.

定理 4.1 (压缩映射原理)

设 $\varphi: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 在闭集 $D_0 \subset D$ 中是压缩映射, 且 $\varphi(D_0) \subset D_0$, 则 $\varphi(x)$ 在 D_0 上存在唯一不动点.

$\triangleleft$ 先证明 φ 在 D_0 上有不动点: 任取 $x_0 \in D_0$, 令 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$.

非线性方程求根—不动点迭代法

由 $\varphi(D_0) \subset D_0$ 知, $\{x_k\}_{k=0}^{+\infty} \subset D_0$, 且

$\|x_{k+1}-x_k\| = \|\varphi(x_k)-\varphi(x_{k-1})\| \leq C\|x_k - x_{k-1}\| \leq \cdots \leq C^k\|x_1 - x_0\|.$

这样 $\forall k, l \in \mathbb{N}$, 有

$$\begin{aligned} \|x_{k+l} - x_k\| &\leq \sum_{j=1}^{l} \|x_{k+j} - x_{k+j-1}\| \leq \sum_{j=1}^{l} C^{j-1} \|x_{k+1} - x_k\| \\ &\leq \frac{1}{1-C} \|x_{k+1} - x_k\| \leq \frac{C^k}{1-C} \|x_1 - x_0\| \qquad (4.1) \end{aligned}$$

由于 $0 < C < 1 \Longrightarrow \{x_k\}_{k\geq 0}$ 为所谓Cauchy列, 即必然收敛.

又$D_0 \subset \mathbb{R}^n$ 为闭集, 因而 $\{x_k\}_{k\geq 0} \subset D_0$, 在 D_0 中有极限点 x^*: 即 $\exists x^* \in D_0$, s.t. $x_k \to x^*$, 当 $k \to \infty$.

非线性方程求根—不动点迭代法

又由于 φ 为压缩映射, 自然也连续, 因而有

$$x^* = \lim_{k\to\infty} x_k = \lim_{k\to\infty} \varphi(x_{k-1}) = \varphi(x^*).$$

即 x^* 确实为 φ 的不动点. 这样证明了不动点的存在性.

再看唯一性: 假设 $\varphi(x^*) = x^*, \varphi(y^*) = y^*$, 那么

$$\|x^* - y^*\| = \|\varphi(x^*) - \varphi(y^*)\| \le C\,\|x^* - y^*\|,$$

由于$0 < C < 1 \Longrightarrow x^* = y^*$. 唯一性证毕. $\triangleright$

推论 4.1

$$\|x_k - x^*\| \le \frac{C}{1-C}\|x_k - x_{k-1}\| \le \frac{C^k}{1-C}\|x_1 - x_0\|.$$

$\triangleleft$ 在 (4.1) 中令 $l \to +\infty$ 即得. $\triangleright$

非线性方程求根—不动点迭代法

上面定理表明, φ 只需对一种范数压缩, 且 $\varphi(D_0) \subset D_0$, 就能保证在 D_0 中有唯一不动点.

上述定理条件并非迭代收敛的充要条件. 实际上有以下条件更宽松的定理:

定理 4.2 (Brouwer不动点定理)

设 $\varphi : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 在有界闭凸集$D_0 \subset D$ 上连续且 $\varphi(D_0) \subset D_0$, 则 φ 在 D_0 上有不动点 (注意，此时不一定唯一).

注意, 条件$\varphi(D_0) \subset D_0$不容易验证, 因此一般只要求 φ 在 x_0 的邻域 $S(x_0, r) = \{|x - x_0| \leq r\}$ 上为压缩映射, 且 $\|x_0 - \varphi(x_0)\| \leq (1 - C)r$, 其中 C 为压缩系数.

非线性方程求根—不动点迭代法

这样, $\forall x \in S(x_0, r)$,

$$\begin{aligned}\|x_0 - \varphi(x)\| &\leq \|x_0 - \varphi(x_0)\| + \|\varphi(x_0) - \varphi(x)\| \\ &\leq (1 - C)r + C\,\|x_0 - x\| \leq r.\end{aligned}$$

即有 $\varphi\big(S(x_0, r)\big) \subset S(x_0, r)$.

例 4.2

仍然求 $f(x) = x^3 - x - 1$ 在 $[1, 1.5]$ 上的根.

解: 将方程改写为 $x = \varphi(x) \equiv \sqrt[3]{x+1}$. 仍取 $x_0 = 1.25$ 有 $x_1 = 1.310371$, $x_2 = 1.321987$, $x_3 = \underline{1.324}199$ 有四位有效数字, $\cdots$, $x_6 = \underline{1.324714}$, 具有六位有效数字. 这比前面二分法收敛快. □

不动点迭代法收敛性分析

我们下面来看不动点迭代的局部收敛性及收敛速度等分析.

定义 4.3 (局部收敛性)

假设 $\exists\delta>0$ s.t. 在 $x=\varphi(x)$ 的根 α 的一个闭邻域 $B\equiv[\alpha-\delta,\alpha+\delta]$ 上, 迭代 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 对任意 $x_0\in B$ 都收敛, 则称该迭代在 α 的邻域有局部收敛性.

定义 4.4 (收敛阶)

设 $\{x_k\}\to\alpha$, 令 $\varepsilon_k=x_k-\alpha$. 若存在 $C\neq0$, s.t. $\dfrac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p}\to C$, 则称 $\{x_k\}$ 是 p 阶收敛到 α. 迭代函数 φ 称为 p 阶迭代函数.

我们有以下局部收敛性和收敛阶的判别定理.

不动点迭代法收敛性分析

定理 4.3 (局部收敛性)

设 α 为 $x=\varphi(x)$ 的不动点, $\varphi'(x)$ 在 α 邻域内连续且 $|\varphi'(\alpha)|<1$, 则迭代 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 在 α 的邻域内具有局部收敛性.

$\lhd$ 即需要证明 $\exists\delta>0$, 在 $[\alpha-\delta,\alpha+\delta]$ 上迭代收敛.

因 $A=|\varphi'(\alpha)|<1$, 且 φ' 在 α 邻域内连续, 故 $\exists\delta>0$ 及 $C\in(0,1)$ *s.t.*

当 $x\in B=[\alpha-\delta,\alpha+\delta]$ 时, $|\varphi'(x)|\le C<1$.

这时 $\forall x,y\in B, |\varphi(x)-\varphi(y)|=|\varphi'(\xi)|\cdot|x-y|\le C|x-y|$, 即压缩.

且 $|\varphi(x)-\alpha|=|\varphi(x)-\varphi(\alpha)|\le C|x-\alpha|\le C\delta<\delta$,

即有 $\forall x\in B, \varphi(x)\in B$.

这样 $\varphi(B)\subset B$, 且 φ 在 B 上压缩 $\Longrightarrow \{x_k\}\to\alpha$. $\rhd$

非线性方程求根—不动点迭代法

定理 4.4 (高阶迭代函数的充要条件)

设 φ 为迭代函数, φ 的 p $(p>1)$ 阶导数 $\varphi^{(p)}$ 在 $x=\varphi(x)$ 的根 α 邻域内连续 (即 $\varphi(\alpha)=\alpha$). 若

(4.2) $$\varphi^{(k)}(\alpha)=0,\ k=1,\cdots,p-1,\ \text{且}\ \varphi^{(p)}(\alpha)\neq 0,$$

则 φ 为 p 阶迭代函数, 且 $\dfrac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p}\to\dfrac{|\varphi^{(p)}(\alpha)|}{p!}$. 反之, 若 φ 为 p 阶迭代函数, 则 (4.2) 成立.

$\lhd$ "$\Longrightarrow$": 假设 (4.2) 成立, 即有 $\varphi'(\alpha)=0$, 由前一定理 4.3 结论知该迭代有局部收敛性. 即存在 $\delta, C>0$ *s.t.*

$$\forall x\in B=[\alpha-\delta,\alpha+\delta], |\varphi'(x)|\le C<1.$$

非线性方程求根—不动点迭代法

这样, 如果取初值 $x_0 \in B$, 有 $x_{k+1} = \varphi(x_k) \in B$ 且 $\{x_k\} \to \alpha$.

把 $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ 在 α 处 Taylor 展开:

$$x_{k+1} = \varphi(\alpha) + \varphi'(\alpha)(x_k - \alpha) + \cdots + \varphi^{(p-1)}(\alpha)\frac{(x_k-\alpha)^{p-1}}{(p-1)!} + \varphi^{(p)}(\xi_k)\frac{(x_k-\alpha)^p}{p!}$$

其中$\xi_k \in (x_k, \alpha)$, 可写成 $\xi_k = \alpha + \theta(x_k - \alpha)$, $\theta \in (0,1)$.

$$\Longrightarrow \varepsilon_{k+1} = x_{k+1} - \alpha = \varphi^{(p)}(\xi_k)\frac{\varepsilon_k^p}{p!}$$

$$\Longrightarrow \frac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p} = \frac{|\varphi^{(p)}(\xi_k)|}{p!} \to \frac{|\varphi^{(p)}(\alpha)|}{p!} \neq 0 \text{ (因为 } \xi_k \to \alpha\text{)}.$$

因此根据定义知 φ 为 p 阶迭代函数.

非线性方程求根—不动点迭代法

"$\Longleftarrow$": 反之, 设 φ 为 p 阶迭代函数, 即 $\frac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p} \to C \neq 0$
可以假设存在 $p_0 \geq 1$ *s.t.*

$\varphi^{(k)}(\alpha) = 0, \ k = 1, \cdots, p_0 - 1,$ 且 $\varphi^{(p_0)}(\alpha) \neq 0.$

重复上面证明过程, 我们有 $\dfrac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^{p_0}} \to \dfrac{\left|\varphi^{(p_0)}(\alpha)\right|}{p_0!} \neq 0$

这样 $\dfrac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p} = \dfrac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^{p_0}} \dfrac{1}{|\varepsilon_k|^{p-p_0}}$. 另外由于迭代收敛, 有 $\varepsilon_k \to 0$.

若 $p > p_0$, 那么 $|\varepsilon_k|^{p-p_0} \to 0 \Longrightarrow \frac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p} \to \infty$, 矛盾!

若 $p < p_0$, 那么 $|\varepsilon_k|^{p-p_0} \to +\infty \Longrightarrow \frac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p} \to 0$, 也矛盾!

因此必有 $p = p_0$. $\triangleright$

非线性方程求根—迭代函数构造

下面一个主要问题就是如何构造高阶迭代函数? 即，我们有了 $f(x)=0$ 的表达式, 如何转化为 $x=\varphi(x)$ 形式, 且使得 φ 为 p 阶迭代函数 (自然希望 p 越大越好), 即希望有上面(4.2)式成立.

例 4.3 (还是先看前面的例子 $f(x)=x^3-x-1=0$)

前面写的迭代函数 $\varphi_1(x)=\sqrt[3]{x+1}$. 计算得到 $\varphi'(x)=\frac{1}{3}(x+1)^{-\frac{2}{3}}$, 显然在 $\alpha=1.324717957244\cdots$ 处不为零, 即此迭代为线性收敛.

若将 $f(x)=0$ 变形为 $3x^3-x-2x^3+1=0$, 取$\varphi_2(x)=\frac{2x^3+1}{3x^2-1}$.

可以验证 $\varphi_2'(\alpha)=0$. 仍取 $x_0=1.25$ 计算可得

$x_2=\underline{1.3247}49\cdots$, $x_3=\underline{1.324717958}\cdots$ 九位有效数字了.

确实二次收敛方法比线性收敛方法明显快很多!

非线性方程求根—迭代函数构造

下面先设 $f \in C^p[a,b]$ 有 p 阶连续导数, 且设 $\forall x \in [a,b]$, $f'(x) \neq 0$ (即 f 在 $[a,b]$ 上为单射, 不会有重根).

因为 f 为单射, 即 $y = f(x)$ 存在反函数 $x = \mathcal{F}(y)$, 且 $\mathcal{F}$ 也有 p 阶连续导数: $f(\alpha) = 0 \Longleftrightarrow \alpha = \mathcal{F}(0)$. 给了 $x \in [a,b]$, 我们可以计算 $y = f(x)$, 亦即 $x = \mathcal{F}(y)$.

任给一个 $z = \mathcal{F}(\eta) = \mathcal{F}(y + \eta - y)$ 在 y 处Taylor展开

$$z = \mathcal{F}(y + \eta - y) = \mathcal{F}(y) + \mathcal{F}'(y)(\eta - y) + \cdots + \frac{\mathcal{F}^{(p)}(\xi)}{p!}(\eta - y)^p.$$

把 $z = \mathcal{F}(\eta)$ 换成 $\alpha = \mathcal{F}(0)$, 即 $\eta = 0$ (再注意 $y = f(x)$) 有

$$\alpha = x + \sum_{j=1}^{p-1} \frac{[-f(x)]^j}{j!}\mathcal{F}^{(j)}(f(x)) + \frac{\mathcal{F}^{(p)}(\xi)}{p!}[-f(x)]^p. \tag{4.3}$$

非线性方程求根—迭代函数构造

如果我们令 $\gamma_j(x) = \mathcal{F}^{(j)}(f(x))$, 可以定义

(4.4)
$$\varphi_p(x) = x + \sum_{j=1}^{p-1} \frac{[-f(x)]^j}{j!}\gamma_j(x).$$

显然有 $\varphi(\alpha) = \alpha$ (因为 $f(\alpha) = 0$). 且我们有以下定理

定理 4.5

设 $f(x)$ 在含有根 α 的区间 $[a, b]$ 上有 p 阶连续导数, 且 $\forall x \in [a, b]$, $f'(x) \neq 0$. 那么上面 (4.4) 式定义的迭代函数至少为 p 阶迭代函数.

$\lhd$ 对 $x_{k+1} = \varphi_p(x_k)$, 令 $\varepsilon_{k+1} = x_{k+1} - \alpha = \varphi_p(x_k) - \alpha$

在 (4.3) 中令 $x = x_k$ 有 $\alpha = \varphi_p(x_k) + \dfrac{\mathcal{F}^{(p)}(\xi)}{p!}[-f(x_k)]^p$.

非线性方程求根—迭代函数构造

即: $\varepsilon_{k+1} = -\dfrac{\mathcal{F}^{(p)}(\xi)}{p!}[-f(x_k)]^p$

$$= (-1)^{p+1}\frac{\mathcal{F}^{(p)}(\xi)}{p!}[f(\alpha) + f'(\eta)(x_k - \alpha)]^p$$

$$= (-1)^{p+1}\frac{\mathcal{F}^{(p)}(\xi)}{p!}[f'(\eta)]^p{\varepsilon_k}^p, \quad \text{其中 } \eta \in (x_k, \alpha).$$

$$\Longrightarrow \frac{\varepsilon_{k+1}}{\varepsilon_k^p} = \frac{(-1)^{p+1}\mathcal{F}^{(p)}(\xi)}{p!}[f'(\eta)]^p,$$

由 $f, \mathcal{F}$ 光滑 $\Longrightarrow |\mathcal{F}^{(p)}(\xi)| \le C_1, |f'(\eta)| \le C_2$

$\Longrightarrow \dfrac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p} \le \dfrac{C_1C_2}{p!} \le C$ 为常数. 即 $\varphi_p(x)$ 至少为 p 阶迭代函数. $\triangleright$

非线性方程求根—迭代函数构造

下面看如何计算 $\gamma_j(x) = \mathcal{F}^{(j)}\big(f(x)\big)$?

由 $\mathcal{F}$ 为 f 之反函数, 有: $x = \mathcal{F}\big(f(x)\big)$.

对 x 求导(复合函数求导): $1 = \mathcal{F}'\big(f(x)\big)f'(x)$

继续对 x 求导得:

$$0 = \mathcal{F}''\big(f(x)\big)[f'(x)]^2 + \mathcal{F}'\big(f(x)\big)f''(x)$$

$$0 = \mathcal{F}'''\big(f(x)\big)[f'(x)]^3 + 3\mathcal{F}''\big(f(x)\big)f''(x)f'(x) + \mathcal{F}'\big(f(x)\big)f'''(x)$$

$$\vdots$$

即有: $\gamma_1(x) = \dfrac{1}{f'(x)}$, $\quad \gamma_2(x) = -\dfrac{f''(x)\gamma_1(x)}{[f'(x)]^2}$,

$$\gamma_3(x) = -\frac{3f'(x)f''(x)\gamma_2(x) + f'''(x)\gamma_1(x)}{[f'(x)]^3}, \cdots\cdots$$

非线性方程求根—迭代函数构造

例 4.4

仍回到上一个例子 $x^3 - x - 1 = 0$. 我们来看之前的迭代公式:

$\varphi_1(x) = \sqrt[3]{x+1}$, $\varphi'(\alpha) \neq 0$, 这显然是个一阶收敛格式.

$\varphi_2(x) = \dfrac{2x^3+1}{3x^2-1}$, 因为 $\varphi_2'(\alpha) = 0$, 这是个二阶收敛格式.

如果我们令 $\varphi_3(x) = \varphi_2(x) + \dfrac{(x^3-x-1)^2}{2!}\gamma_2(x)$,

仍取 $x_0 = 1.25$, 计算有 $x_1 = \underline{1.32}39\cdots$, $x_2 = \underline{1.3247179}565\cdots$

已相当于 $\varphi_2(x)$ 计算的第三步结果.

所以三阶格式确实收敛更快.

非线性方程求根—迭代方法的加速

前面小节中介绍的迭代函数的构造方法, 需要函数 f 足够光滑, 另外可以看到计算高阶导数也很复杂.

那么如果本身一种迭代方法收敛很慢(甚至不收敛)的话怎么办呢? 如何对其进行改造(加速)?

Aitken 加速思想:

假设由迭代函数 $\varphi(x)$ 产生的序列 $\{x_k\}_{k=0}^{+\infty} \to \alpha = \varphi(\alpha)$

利用微分中值定理:

$$x_1 - \alpha = \varphi(x_0) - \varphi(\alpha) = \varphi'(\xi)(x_0 - \alpha), \quad 其中\ \xi \in (x_0, \alpha)$$

假设 $\varphi(x)$ 在α附近变化不大, 即 $\varphi'(x)$ 在 α 附近约为一个常数 L

非线性方程求根—Aitken加速

则 $x_1-\alpha\approx L(x_0-\alpha)$; 类似地，再迭代一次 $x_2-\alpha\approx L(x_1-\alpha)$.

将上面两式相除得到 $\dfrac{x_2-\alpha}{x_1-\alpha}\approx\dfrac{x_1-\alpha}{x_0-\alpha}$

$$\Longrightarrow x_2x_0-(x_2+x_0)\alpha+\alpha^2=x_1^2-2\alpha x_1+\alpha^2$$

由此解出 $\alpha\approx\dfrac{x_0x_2-x_1^2}{x_2-2x_1+x_0}\equiv x_0-\dfrac{(x_1-x_0)^2}{x_2-2x_1+x_0}\equiv\tilde{x}_0.$

这表明, 利用 x_1,x_2 可以进一步修正近似 x_0.

非线性方程求根—Aitken加速

可以证明, 按照公式

$$\widetilde{x}_{k+1} = x_k - \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{x_{k+2} - 2x_{k+1} + x_k}$$

修正后得到的 $\{\widetilde{x}_k\}_{k=0}^{+\infty}$ 更快地收敛到 α:

$$\text{即} \lim_{k\to\infty} \frac{\widetilde{x}_k - \alpha}{x_k - \alpha} = 0.$$

例 4.5 (对于前面 $x^3 - x - 1 = 0$ 的线性收敛迭代函数)

$\varphi_1(x) = \sqrt[3]{x+1}$, 如果使用 *Aitken* 加速, 可以得到

$\widetilde{x}_0 = \underline{1.32475}\cdots$, $\widetilde{x}_1 = \underline{1.324719}\cdots$ 与二阶方法差不多

非线性方程求根—Steffensen加速

Steffensen加速方法:

将 Aitken 加速与不动点迭代相结合, 便得到 Steffensen 加速方法:

令 $y_k = \varphi(x_k)$, $z_k = \varphi(y_k)$, 定义

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

这相当于定义了一个新的迭代函数 ψ:

$$\psi(x) = x - \frac{\big(\varphi(x) - x\big)^2}{\varphi\big(\varphi(x)\big) - 2\varphi(x) + x}.$$

也可以看成: 想求 $\varphi(x) = x$ 的根 α, 即 $\varphi(\alpha) - \alpha = 0$.

令 $\varepsilon(x) = \varphi(x) - x$, 自然有 $\varepsilon(\alpha) = 0$.

非线性方程求根—Steffensen加速

已经有 $\varepsilon(x_k) = \varphi(x_k) - x_k = y_k - x_k, \quad \varepsilon(y_k) = \varphi(y_k) - y_k = z_k - y_k.$

过 $(x_k, \varepsilon(x_k)), (y_k, \varepsilon(y_k))$ 两点的直线, 与x-轴交点为

$$\varepsilon(x_k) + \frac{\varepsilon(y_k) - \varepsilon(x_k)}{y_k - x_k}(x - x_k) = 0 \Longrightarrow x = x_k - \frac{\varepsilon(x_k)}{\varepsilon(y_k) - \varepsilon(x_k)}(y_k - x_k)$$

记此交点为 x_{k+1}, 即 $x_{k+1} = \psi(x_k) \equiv x_k - \dfrac{\big(\varphi(x_k) - x_k\big)^2}{\varphi\big(\varphi(x_k)\big) - 2\varphi(x_k) + x_k}.$

例 4.6 (对于前面 $x^3 - x - 1 = 0$ 的线性收敛迭代函数)

$\varphi_1(x) = \sqrt[3]{x+1}$, 如果使用*Steffensen*加速方法, 可以得到

$\bar{x}_0 = 1.25, \quad \bar{x}_1 = \underline{1.3247}5\cdots, \quad \bar{x}_2 = \underline{1.3247179572}5\cdots$

与三阶方法差不多.

非线性方程求根—Steffensen加速

定理 4.6 (Steffensen加速)

设 $\varphi'(\alpha) \neq 1$(即α为单根), 则*Steffensen*加速法至少是二阶收敛的.

$\lhd$ 无妨设 $\alpha = 0$ (否则下面可以用 $x-\alpha$ 代替 x), 设 φ 为 p 阶迭代函数, 即 $\varphi'(0) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(0) = 0$, $\varphi^{(p)}(0) = p!A \neq 0$, 那么在 $x=0$ 附近有

$\varphi(x) = Ax^p + \frac{\varphi^{(p+1)}(\theta x)}{(p+1)!}x^{p+1}$, 其中 $\theta \in (0,1)$.

因而 $[\varphi(x)]^2 = [Ax^p + \mathcal{O}(x^{p+1})]^2 = A^2x^{2p} + \mathcal{O}(x^{2p+1})$.

又 $\varphi\big(\varphi(x)\big) = A\big(Ax^p + \mathcal{O}(x^{p+1})\big)^p + \mathcal{O}\big(Ax^p + \mathcal{O}(x^{p+1})\big)^{p+1}$

$= \begin{cases} \mathcal{O}(x^{p^2}), & p > 1, \\ A^2x + \mathcal{O}(x^2), & p = 1. \end{cases}$ 考虑到 $\psi(x) = x - \frac{\big(\varphi(x)-x\big)^2}{\varphi\big(\varphi(x)\big)-2\varphi(x)+x}$

这样 $p>1$ 时, $\psi(x) = -A^2x^{2p-1} + \mathcal{O}(x^{2p})$;

$p=1$ 时, 此时 $A = \varphi'(0) \neq 1$, 因而 $\psi(x) = \mathcal{O}(x^2)$. $\rhd$

非线性方程求根—Steffensen加速

注 4.1

如果 $p=1$ 且 $\varphi'(\alpha)=1$, 表明 α 为 $x-\varphi(x)=0$ 的 $m(\geq 2)$ 重根, 此时*Steffensen* 加速法为一阶收敛.

从上面分析还可看出, 即便 $|\varphi'(\alpha)|>1$ $(p=1)$, 此时 φ 迭代不收敛, 但仍有 *Steffensen* 加速法为二阶收敛的.

例 4.7 (对于前面 $x^3-x-1=0$ 的迭代函数 $\varphi_0(x)=x^3-1$)

显然它不收敛: $x_0=1.25$, $x_1=0.953125$, $x_2=-0.134136, \cdots$

但经过*Steffensen*加速之后:

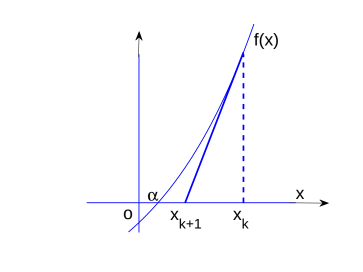
$\bar{x}_0=1.25$, $\bar{x}_1=1.3615$, $\bar{x}_2=1.3306$, $\bar{x}_3=\underline{1.324}9$, $\bar{x}_4=\underline{1.324718}09$.

Steffensen 加速最大的好处是不用计算导数也可以得到二阶以上的收敛格式 (通常二阶格式也就够了).

目录

牛顿迭代法

通常来说, 二阶格式已经够用. 因而工程上使用较多的是前面用到 $f'(x)$ 构造出来的Newton迭代法:



$$\varphi_2(x) = x - [f'(x)]^{-1} f(x).$$

这其实就是一种将 $f(x)$ 线性化的方法. 如左图所示,

$$x_{k+1} = x_k - [f'(x_k)]^{-1} f(x_k).$$

可理解为, 过 $(x_k, f(x_k))$ 做 $f(x)$ 的切线, 交 x-轴于 x_{k+1} 点. 我们知道局部上该点的切线是曲线在该点附近最好的直线近似.

牛顿迭代法

或者说, 我们可以看成在 x_k 附近将 $f(x)$ Taylor 展开 (只保留线性部分):

$$f(x) \approx f(x_k) + f'(x_k) \cdot (x - x_k).$$

这样求 $f(x) = 0$ 即为

$$0 \approx f(x_k) + f'(x_k) \cdot (x_{k+1} - x_k)$$

$$\Longrightarrow x_{k+1} = x_k - [f'(x_k)]^{-1} f(x_k).$$

显然, $\varphi'(x) = 1 - \dfrac{[f'(x)]^2 - f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} = \dfrac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$.

$f'(\alpha) \neq 0$ 时, 自然有 $\varphi'(\alpha) = 0$.

即单根情形牛顿法为二阶收敛.

牛顿迭代法

例 4.8 (求解 $xe^x - 1 = 0$. 易见 $\alpha \in (0,1)$)

$$\varphi(x) = x - \frac{f}{f'} = x - \frac{xe^x - 1}{e^x + xe^x} = \frac{x^2 + e^{-x}}{1+x}, \quad x^* = 0.5671432904\cdots$$

取 $x_0 = 0.5$, 有 $x_1 = 0.57102$, $x_2 = 0.\underline{5671}56$, $x_3 = 0.\underline{567143290}5$

如果我们用 $x = e^{-x}$ 来迭代, 需要15次才能得到 $x_{15} = 0.\underline{5671}57$

牛顿迭代法

关于牛顿迭代法的收敛性有以下充分性条件定理:

定理 4.7

设 $f \in C[a,b]$ 并有二阶导数, 且

1. $f(a)f(b) < 0$ （保证$[a,b]$ 上有零点）;
2. $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上不变号, 且 $f'(x) \neq 0, \forall x \in [a,b]$;
3. 令 $c = a$或b, s.t. $|f'(c)| = \min\{|f'(a)|, |f'(b)|\}$, 且满足 $\dfrac{|f(c)|}{b-a} \le |f'(c)|$　(这为了保证 $\varphi([a,b]) \subset [a,b]$).

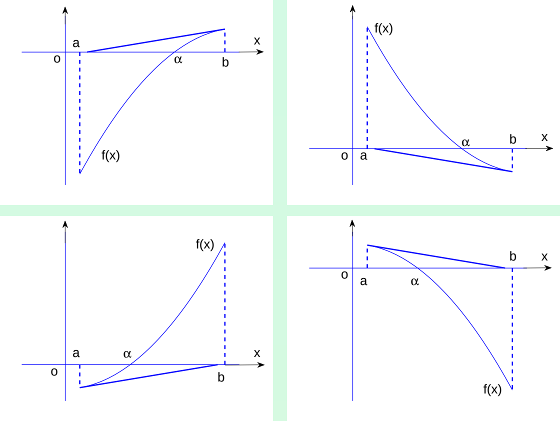
则 $\forall x_0 \in [a,b]$, $x_{k+1} = x_k - [f'(x_k)]^{-1} f(x_k)$ 二阶收敛到f的根 α.

$\lhd$ 因 $f(a)f(b) < 0$, 可无妨设 $f(a) < 0$, $f(b) > 0$.

牛顿迭代法

又因 $f''(x)$ 不变号, 可无妨设 $f''(x) < 0$ (即 $f'(x)$ 单调下降)

此外 $f'(x) \neq 0$, 可无妨设 $f'(x) > 0$. 实际共有如下四种情况:



牛顿迭代法

即我们只讨论上面第一种情形, 其他情形完全类似.

由 $f(a) < 0,\ f(b) > 0$, 可知一定有 $\alpha \in (a,b)$ s.t. $f(\alpha) = 0$.
又因为 $f'(x) > 0$, 即 $f(x)$ 单调上升, 因而只有一个零点 α.
再由假设第三条, 因为 $|f'(b)| < |f'(a)|$, 故取 $c = b$, 由假设, 应该有
$\frac{f(b)}{b-a} \le f'(b) \Longrightarrow b - [f'(b)]^{-1} f(b) \ge a$. 此即 $\varphi(b) \ge a$.

下面分两种情况讨论:

1) $\forall x_0 \in [a, \alpha]$, 那么有 $f(x_0) \le 0$, 注意到有 $f'(x_0) > 0,\ f''(x_0) < 0$
$\Longrightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \ge x_0$. 另外由 $\varphi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$
$\Longrightarrow \varphi'(x)$ 在 $[a, \alpha]$ 上为正 $\Longrightarrow x_1 = \varphi(x_0) \le \varphi(\alpha) = \alpha$.
即若 $x_0 \in [a, \alpha] \Longrightarrow \{x_k\} \subset (a, \alpha]$ 且 $\{x_k\} \uparrow \Longrightarrow x_k \to x^*$.

牛顿迭代法

2) $\forall x_0 \in [\alpha, b]$, 那么有 $f(x_0) \geq 0$, 注意到有 $f'(x_0) > 0$, $f''(x_0) < 0$

仍然由 $\varphi'(x) = \dfrac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} \Longrightarrow \varphi'(x)$ 在 $[\alpha, b]$ 上为负

$\Longrightarrow \alpha = \varphi(\alpha) \geq x_1 = \varphi(x_0) \geq \varphi(b) \geq a$ (由假设条件3 得到).

这表明如果 $x_0 \in (\alpha, b]$, 迭代一次之后 $x_1 \in [a, \alpha]$, 即回到情形1).

因此结合上面两种情形的讨论可以得到

$\forall x_0 \in [a, b]$, $x_{k+1} = \varphi(x_k) \stackrel{k\to\infty}{\Longrightarrow} \alpha$.

$\{x_k\}$的二次收敛性由 $\varphi'(\alpha) = 0$ 可以得到. $\triangleright$

牛顿迭代法

从上面的定理可以看到，一般来说牛顿迭代只能保证局部收敛性.

例 4.9 (特殊情形有全局收敛的格式)

求解 $x^2 = C > 0$ 的根 $\sqrt{C} > 0$ 的牛顿迭代函数为:

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} = x - \frac{x^2 - C}{2x} = \frac{x^2 + C}{2x}.$$

可以证明此格式 $\forall x_0 > 0,\ x_{k+1} \longrightarrow \sqrt{C}$.

$$\lhd\ x_{k+1} = \frac{x_k^2 + C}{2x_k} = \frac{(x_k \pm \sqrt{C})^2}{2x_k} \mp \sqrt{C}$$

$$\Longrightarrow \frac{x_{k+1} - \sqrt{C}}{x_{k+1} + \sqrt{C}} = \left(\frac{x_k - \sqrt{C}}{x_k + \sqrt{C}}\right)^2 = \left(\frac{x_0 - \sqrt{C}}{x_0 + \sqrt{C}}\right)^{2^{k+1}} \longrightarrow 0$$

即 $x_k \longrightarrow \sqrt{C}$. $\rhd$

重根的处理办法

前面都假设 $f'(x) \neq 0$, 即单根情形. 但我们总会遇到重根情况.

下面设 α 为 $f(x)$ 的 $m \in \mathbb{N}$ 重根, 即

$$f(x) = (x-\alpha)^m g(x), g(\alpha) \neq 0.$$

当 $m \geq 2$ 时, 牛顿迭代格式不再具有二阶收敛性, 计算可得

$$\varphi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} \Longrightarrow \varphi'(\alpha) = 1 - \frac{1}{m} \neq 0.$$

即牛顿迭代此时只能是线性收敛.

如果我们知道 m 的值, 可以如下修改迭代函数

$$\psi(x) = x - m\frac{f(x)}{f'(x)} \Longrightarrow \psi'(\alpha) = 0. \tag{4.5}$$

仍可以有二阶收敛性. 但通常 m 的值不知道, 我们可以如下处理.

重根的处理办法

假设 f 充分光滑, 令 $\mu(x)=\frac{f(x)}{f'(x)}$, 显然有 α 为 $\mu(x)$ 的单根.

这样我们对 $\mu(x)$ 使用牛顿迭代便可以得到二阶收敛格式:

(4.6) $$\varphi(x)=x-\frac{\mu(x)}{\mu'(x)}=x-\frac{f(x)f'(x)}{[f'(x)]^2-f(x)f''(x)}.$$

当然上面需要计算 f 的二阶导数.

如果不想计算高阶导数, 还可以如下考虑:(在 α 附近展开)

$$f(x)=\sum_{j=0}^{m-1}\frac{f^{(j)}(\alpha)}{j!}(x-\alpha)^j+\frac{(x-\alpha)^m f^{(m)}(\xi)}{m!}\equiv\frac{(x-\alpha)^m f^{(m)}(\xi)}{m!}$$

同理, 将 $f'(x)$ 也在 α 附近展开得 $f'(x)=\dfrac{(x-\alpha)^{m-1}f^{(m)}(\eta)}{(m-1)!}$

$$\Longrightarrow \mu(x)=\frac{f(x)}{f'(x)}=\frac{x-\alpha}{m}\big(1+\mathcal{O}(x-\alpha)\big).$$

重根的处理办法

令 $h(x)=\dfrac{\ln|f(x)|}{\ln|\mu(x)|}=\dfrac{m\ln|x-\alpha|+\ln|\frac{f^{(m)}(\xi)}{m!}|}{\ln|x-\alpha|+\ln|\frac{1}{m}(1+\mathcal{O}(x-\alpha))|}\xrightarrow{x\to\alpha} m$

因此利用上式和(4.5)式, 可以定义迭代函数为

(4.7) $$\varphi(x)=x-h(x)\frac{f(x)}{f'(x)}\equiv x-\frac{f(x)\ln|f(x)|}{f'(x)\left(\ln|f(x)|-\ln|f'(x)|\right)}$$

上式也是渐近二阶格式.

例 4.10 (求 $(x^2-\frac{1}{8})^2=0$ 的二重根 $x=\frac{\sqrt{2}}{4}\approx 0.3535533905\cdots$)

牛顿法 $\varphi(x)=x-\frac{f}{f'}=\frac{3x^2+\frac{1}{8}}{4x}$: $x_0=0.3$, $x_3=0.348$, $x_{14}=0.\underline{35355}$

(4.6)式 $\varphi(y)=y-\frac{\mu}{\mu'}=\frac{y}{4y^2+\frac{1}{2}}$: $y_0=0.3$, $y_3=0.\underline{353553389}\cdots$

(4.7)式: $z_0=0.3$, $z_3=0.\underline{353556}\cdots$, $z_5=0.\underline{353553392}\cdots$

可以看到 (4.7)式确实是超线性收敛的 (接近于二阶收敛).

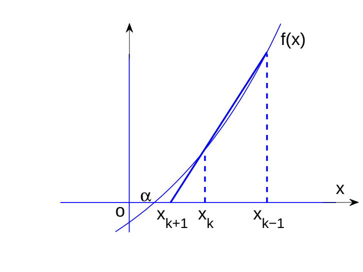
目录

拟牛顿迭代法–弦截法

有时候函数表达式过于复杂(或者没有明确表达式), 为避免求导数, 则需要用别的简单函数来近似 f 或者说 f':

1)弦截法(即用线性函数来近似 f):

假设已经计算出来 x_{k-1}, x_k, 过 $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$、$(x_k, f(x_k))$ 做一条直线 $P_1(x) = f(x_k) + \frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}(x - x_k)$.



再求 $P_1(x) = 0$ 的点有

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

这相当于用 $\dfrac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$ 来近似$f'(x)$.

几何解释见左图, 故名“弦截法”.

拟牛顿迭代法–弦截法

例 4.11 (求 $xe^x - 1 = 0$ 的零点 $\alpha \approx 0.5671432904\cdots$)

若取 $x_0 = 0.5$, $x_1 = 0.6$ 用弦截法:

$x_2 = 0.\underline{565}315\cdots$, $x_3 = 0.\underline{567095}\cdots$, $x_4 = 0.\underline{5671433}6\cdots$

可以看到它快于线性收敛, 但慢于牛顿法.

事实上有以下收敛性定理:

定理 4.8

设 f 在 $\triangle = [\alpha-\delta, \alpha+\delta]$ 上有二阶连续导数, $f(\alpha)=0$, $f''(\alpha)\neq 0$, $f'(x) \neq 0$ (即单根), 且 $x_0, x_1 \in \triangle$. 设 $M = \dfrac{\max_{x\in\triangle}|f''(x)|}{2\min_{x\in\triangle}|f'(x)|}$.

若 $\delta > 0$ 充分小, s.t. $M\delta < 1$, 则弦截法收敛, 收敛阶为 $\dfrac{\sqrt{5}+1}{2}$ (为方程 $p^2 - p - 1 = 0$ 的根).

拟牛顿迭代法–弦截法

◁ 记 $P_1(x) = f(x_k) + \dfrac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}(x - x_k)$ 为过前两次迭代点 $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$、$(x_k, f(x_k))$ 的直线. 我们有

$$\begin{aligned} f(x) - P_1(x) &= f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_k)^2 \\ &\quad -[f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) - \frac{f''(\eta)}{2}(x_k - x_{k-1})(x - x_k)] \\ &= \frac{f''(\zeta)}{2}(x - x_k)(x - x_{k-1}). \end{aligned}$$

上式中令 $x = \alpha$, 即 $P_1(\alpha) = -\dfrac{f''(\zeta)}{2}(\alpha - x_k)(\alpha - x_{k-1})$.

又因为 $P_1(x_{k+1}) = 0 \Longrightarrow$

$$P_1(\alpha) = P_1(\alpha) - P_1(x_{k+1}) = P_1'(\gamma)(\alpha - x_{k+1}) = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}(\alpha - x_{k+1}).$$

这样令 $\varepsilon_k = x_k - \alpha$, 有 $\varepsilon_{k+1} = -\dfrac{P_1(\alpha)}{\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}} = \dfrac{f''(\zeta)}{\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}}\varepsilon_{k-1}\varepsilon_k$.

拟牛顿迭代法–弦截法

令 $M = \max\limits_{\xi_1,\xi_2\in\triangle} \dfrac{|f''(\xi_1)|}{2|f'(\xi_2)|}$, 且设 $M\delta < 1$, 有 $|\varepsilon_{k+1}| \le M|\varepsilon_k| \cdot |\varepsilon_{k-1}|$. 由于 $M\delta < 1, |\varepsilon_0| \le \delta, |\varepsilon_1| \le \delta \Longrightarrow |\varepsilon_{k+1}| \le \delta,\ k = 1, 2, \cdots,$

即总有 $x_k \in \triangle$. 且 $|\varepsilon_{k+1}| \le M\delta|\varepsilon_k| \le (M\delta)^k|\varepsilon_1| \to 0$, 即迭代收敛.

再看收敛阶: 设 $|\frac{\varepsilon_{k+1}}{\varepsilon_k^p}| \to C \ne 0,$

即 $|\varepsilon_{k+1}| \sim C|\varepsilon_k|^p, |\varepsilon_k| \sim C|\varepsilon_{k-1}|^p \Longrightarrow |\varepsilon_{k-1}| \sim C^{-\frac{1}{p}}|\varepsilon_k|^{\frac{1}{p}}$

即 $|\varepsilon_{k+1}| = A|\varepsilon_k| \cdot |\varepsilon_{k-1}| = AC^{-\frac{1}{p}}|\varepsilon_k|^{\frac{1+p}{p}} = C|\varepsilon_k|^p$

即 $\frac{1+p}{p} = p \Longrightarrow p^2 - p - 1 = 0 \Longrightarrow p = \frac{1\pm\sqrt{5}}{2}$.

已经知道迭代收敛, 故 $p = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$. $\triangleright$

拟牛顿迭代法–抛物线法

类似于前面介绍的弦截法, 如果有了 x_{k-2}, x_{k-1}, x_k, 可以构造一个二次函数 $P_2(x)$ 来近似 $f(x)$, 进而近似计算 $f'(x_k) \approx P_2'(x_k)$, 或者说求 $P_2(x_{k+1}) = 0$ 解出 x_{k+1}. 这里

$$P_2(x) = f(x_k) + f[x_k, x_{k-1}](x - x_k) + f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}](x - x_k)(x - x_{k-1}),$$

其中 $f[x_k, x_{k-1}] = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$, $f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}] = \frac{f[x_k, x_{k-1}] - f[x_{k-1}, x_{k-2}]}{x_k - x_{k-2}}$.

解 $P_2(x) = 0$ 得

$$x_{k+1}^{\pm} = x_k - \frac{2f(x_k)}{\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4f(x_k)f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}]}} \tag{4.8}$$

其中 $\omega = f[x_k, x_{k-1}] + f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}](x_k - x_{k-1})$. 这里取‘±’使得 $x_{k+1}^{\pm}$ 更靠近 x_k (因为一般认为 x_k 比之前计算的点更靠近根), 即取‘±’与 ω 符号相同. 可以看到格式 (4.8) 可计算复根.

拟牛顿迭代法–抛物线法

例 4.12 (仍考虑求 $xe^x - 1 = 0$ 的根 $\alpha \approx 0.5671432904\cdots$)

若取 $x_0 = 0.5$, $x_1 = 0.6$, $x_2 = 0.\underline{565}315\cdots$, 用抛物线法:

$\Longrightarrow x_3 = 0.\underline{567148}\cdots$ 可以看到它快于弦截法, 但慢于牛顿法.

我们有以下收敛性定理:

定理 4.9

设 f 在 $\triangle = [\alpha - \delta, \alpha + \delta]$ 上有三阶连续导数, $f(\alpha)=0$, $f'''(\alpha)\neq 0$, $f'(x) \neq 0$ (即单根), 且 $x_0, x_1, x_2 \in \triangle$. 设 $M = \max\limits_{\xi,\eta\in\triangle} \dfrac{|f'''(\xi)|}{6|f'(\eta)|}$.

若 $\delta > 0$ 充分小, s.t. $M\delta^2 < 1$, 则抛物线法收敛, 收敛阶为 $1.839\cdots$ (为方程 $p^3 - p^2 - p - 1 = 0$ 的根).

目录

多项式求根

我们在后面常遇到多项式求根的问题，这里特别讨论一下.

令 $p_n(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_n$. 我们经常需要求一些实系数正交多项式的零点, 它们的根均为实的单根, 且其范围一般也知道 (这在后面会专门讲到), 即有 $c_0 < z_n < z_{n-1} < \cdots < z_1 < c_1$.

这样, 如果我们从 c_1 出发, 用牛顿法迭代, 可以证明会很快收敛到 z_1. 问题是如何继续求剩下的根?

设 $p_n(x) = (x - z_1)p_{n-1}(x)$, 如何快速、高精度地求出 $p_{n-1}(x)$ 的表达式(即其系数)呢？ 显然我们不能简单地去做辗转相除, 那样数值误差一般会较大.

多项式求根

如果我们使用秦九韶算法，即 $\forall z \in \mathbb{C}$, 若令

$$s_0 = a_0, \quad s_k = a_k + s_{k-1}z,\ k = 1, \cdots, n$$

我们可以得到 $s_n = p_n(z)$. 这样如果我们令

$$p_{n-1}(x) = s_0 x^{n-1} + s_1 x^{n-2} + \cdots + s_{n-2}x + s_{n-1}.$$

简单计算有

$$p_{n-1}(x)(x-z) + s_n = \sum_{m=0}^{n-1} s_m x^{n-1-m} \cdot (x-z) + s_n$$

$$= s_n + \sum_{m=0}^{n-1} (s_m x^{n-m} - s_m z x^{n-1-m})$$

$$= s_0 x^n + \sum_{k=1}^{n} (s_k x^{n-k} - s_{k-1} z x^{n-k}) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^{n-k} \equiv p_n(x)$$

多项式求根

这说明，当 z 是 $p_n(x)$ 的根时, 即 $p_n(z) = s_n = 0$ 时, 从上面式子即有 $p_{n-1}(x) = \dfrac{p_n(x)}{x-z}$. 这样，当我们计算出 $p_n(x)$ 的一个根 z_1 之后, 按照上面的秦九韶算法计算一遍, 便得到了

$$p_{n-1}(x) = \frac{p_n(x)}{x-z_1} \equiv s_0(z_1)x^{n-1} + s_1(z_1)x^{n-2} + \cdots + s_{n-1}(z_1)$$

然后我们再对 $p_{n-1}(x)$ 用牛顿法，取初值为 $x_0 = z_1$ 即可, 便可以很快计算出 z_2, 依次计算下去 $\cdots\cdots$

为了提高精度, 在计算完 $z_1, z_2, \cdots, z_n$ 之后, 再对 $p_n(x)$ 用它们做初值, 用牛顿法再迭代一遍, 可以得到精度更高的近似值. 如果遇到重根情形(一般来说即迭代收敛很慢时), 同样需要做前面的重根处理, 否则只能是线性收敛.

实系数多项式求复共轭根

为了求多项式的复根，我们一个办法是考虑复数运算, 即选取复值的初值用牛顿法或者抛物线法进行计算.

当然如果是实系数多项式求复根, 我们知道其复根是成共轭对出现的, 故而我们可以避免复数运算:

将 $p_n(x)$ 写成 $p_n(x) = (x^2 - ux - v)q_{n-2}(x) + b_1(x-u) + b_0$ 形式, 其中 b_1, b_0 为依赖于 $u, v \in \mathbb{R}$ 的两个实数. 我们想求 $p_n(x)$ 的两个复共轭根 $z, \bar{z}$, 希望它们也是 $x^2 - ux - v = 0$ 的复共轭根.

这样我们只需用牛顿法求解非线性方程组

$$b_1(u,v) = 0, \quad b_0(u,v) = 0$$

得到 u, v 两个实数后再解方程 $x^2 - ux - v = 0$ 得到共轭对 $z, \bar{z}$.

Bairstow's 算法

这可以通过 Bairstow's 算法来实现.

定理 4.10 (Bairstow's 算法)

将一个多项式 $p_n(z) = a_n z^n + \cdots + a_1 z + a_0$ 除以一个二次多项式 $z^2 - uz - v$, 其商和余项

$$
\begin{aligned}
q(z) &= b_n z^{n-2} + b_{n-1} z^{n-3} + \cdots + b_3 z + b_2 \\
r(z) &= b_1(z-u) + b_0
\end{aligned}
$$

可如下递归计算: 令 $b_{n+2} = b_{n+1} = 0$, 对 $k = n, n-1, \cdots, 0$,

$$b_k = a_k + u b_{k+1} + v b_{k+2}.$$

Bairstow's 算法

◁ 对 p_n, q, r, 我们有以下式子

$$p_n(z) = q(z)(z^2 - uz - v) + r(z),$$

或者说有以下式子

$$\sum_{k=0}^{n} a_k z^k = (z^2 - uz - v)\sum_{k=2}^{n} b_k z^{k-2} + b_1(z-u) + b_0.$$

列出 z^k 的系数即得

$$\begin{aligned} a_n &= b_n \\ a_{n-1} &= b_{n-1} - ub_n \\ a_k &= b_k - ub_{k+1} - vb_{k+2} \quad (0 \le k \le n-2) \end{aligned}$$

考虑到 $b_{n+2} = b_{n+1} = 0$, 我们就完成了定理证明. ▷

Bairstow's 算法

前面我们要计算实系数多项式 $p_n(x)$ 的一对复共轭对根 $\omega, \bar{\omega}$, 按照上面定理的做法, 我们得到 $b_0 = b_0(u, v)$, $b_1 = b_1(u, v)$. 解方程组

$$b_0(u, v) = 0, \quad b_1(u, v) = 0,$$

即得 u, v. 再解 $z^2 - uz - v = 0$ 即得复共轭对根 $\omega, \bar{\omega}$.

下面看如果用 Newton's 迭代法来解 $b_0(u, v) = 0$, $b_1(u, v) = 0$, 我们有了猜测 u, v 后, 如何计算修正值 δu, δv:

Bairstow's 算法

记 $c_k = \dfrac{\partial b_k}{\partial u}$, $d_k = \dfrac{\partial b_{k-1}}{\partial v}$, 利用前面定理 4.10 的结论有

$$\begin{aligned} c_k &= b_{k+1} + uc_{k+1} + vc_{k+2}, \quad (c_{n+1} = c_n = 0) \\ d_k &= b_{k+1} + ud_{k+1} + vd_{k+2}, \quad (d_{n+1} = d_n = 0) \end{aligned}$$

显然我们只需要计算一个序列 $\{c_k\}$ 就够了. 由牛顿法我们有

$$\begin{array}{l} b_0(u,v) + \frac{\partial b_0}{\partial u}\delta u + \frac{\partial b_0}{\partial v}\delta v = 0 \\ b_1(u,v) + \frac{\partial b_1}{\partial u}\delta u + \frac{\partial b_1}{\partial v}\delta v = 0 \end{array} \Longrightarrow \begin{pmatrix} c_0 & c_1 \\ c_1 & c_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta u \\ \delta v \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} b_0(u,v) \\ b_1(u,v) \end{pmatrix}$$

这样结合前面定理 4.10, 我们就完成了 Bairstow's 算法:

$$(u,v) \to (b_0, b_1) \to (c_0, c_1, c_2) \to (\delta u, \delta v) \cdots$$

目录

Newton法及其收敛性

记 $\vec{F} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, 即 $f_i = f_i(x_1, \cdots, x_n) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

欲求解 $\vec{F}(\mathbf{x}) = 0$, 可将一元函数情形推广过来. 记$\vec{F}$ 的Jacobi矩阵为

$$\vec{F}'(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

向量形式的Newton迭代法为

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - [\vec{F}'(\mathbf{x}^{(k)})]^{-1} \cdot \vec{F}(\mathbf{x}^{(k)}) \equiv \Phi(\mathbf{x}^{(k)}), \tag{4.9}$$

即 $\Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - [\vec{F}'(\mathbf{x})]^{-1} \cdot \vec{F}(\mathbf{x})$.

Newton法及其收敛性

定义 4.5 (可微的定义)

设 $\vec{F}'(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}$ 处存在, 且 $\lim\limits_{\mathbf{h}\to 0}\dfrac{\|\vec{F}(\mathbf{x}+\mathbf{h})-\vec{F}(\mathbf{x})-\vec{F}'(\mathbf{x})\mathbf{h}\|}{\|\mathbf{h}\|}=0$, 则称 $\vec{F}$ 在 $\mathbf{x}$ 处可微.

定义 4.6

设存在 $\mathbf{x}^*$ 的一个邻域 S, 当 $\mathbf{x}^{(0)}\in S$ 时, 迭代 $\mathbf{x}^{(k+1)}=G(\mathbf{x}^{(k)})$ 有定义且 $\mathbf{x}^{(k)}\to\mathbf{x}^*$, 则称 $G:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ 的不动点 $\mathbf{x}^*$ 是迭代序列 $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ 的吸引点, 且称该迭代 局部收敛.

Newton法及其收敛性

定理 4.11 (局部收敛的充分条件)

设 $G:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 在其不动点 $\mathbf{x}^*$ 处可微, 且 $\rho(G'(\mathbf{x}^*)) < 1$, 则 $\mathbf{x}^*$ 是迭代 $\mathbf{x}^{(k+1)} = G(\mathbf{x}^{(k)})$ 的吸引点 (即该迭代局部收敛).

定理 4.12 (Newton迭代的局部收敛性)

设 $\vec{F}$: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 在 $\mathbf{x}^*$ 的邻域S内可微, 且 $\vec{F}'(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}^*$ 处连续, $\vec{F}'(\mathbf{x})$ 在 S 内可逆. 则牛顿迭代(4.9)局部收敛, $\mathbf{x}^*$ 是吸引点, 且有

$$\lim_{k\to+\infty} \frac{\left\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\right\|}{\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\|} = 0, \quad \text{即超线性收敛.}$$

若存在 $\gamma > 0$, s.t. $\forall \mathbf{x} \in S$, $\| \vec{F}'(\mathbf{x}) - \vec{F}'(\mathbf{x}^*)\| \le \gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|$ ($\vec{\mathrm{F}}'$ 为Lipschitz连续), 则该迭代至少为二阶收敛.

Newton法及其收敛性

若再加强一些条件, 则可以得到下面的牛顿迭代收敛的充分性条件.

定理 4.13 (Newton迭代收敛的充分性条件)

设 $\vec{F}: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 在凸集 D 上可微, 且

1. 存在 $\gamma > 0$ *s.t.* $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$, $\|\vec{F}'(\mathbf{x}) - \vec{F}'(\mathbf{y})\| \le \gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$;
2. 在 D 上, $\vec{F}'(\mathbf{x})$ 可逆, 且存在 $\beta > 0$, *s.t.* $\forall \mathbf{x} \in D$, $\|[\vec{F}'(\mathbf{x})]^{-1}\| \le \beta$;
3. 对 $\mathbf{x}^{(0)} \in D$, 令 $\alpha = \|[\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})]^{-1} \cdot \vec{F}(\mathbf{x}^{(0)})\| \ge 0$, 有 $q = \alpha\beta\gamma < \frac{1}{2}$;
4. 记 $S = \{\mathbf{x} : \left\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\right\| \le 2\alpha\}$, 有 $S \subset D$.

那么 $\vec{F}$ 在 S 中有唯一零点 $\mathbf{x}^*$, 且牛顿迭代(4.9)有定义, $\mathbf{x}^{(k+1)} \to \mathbf{x}^*$, 且有 $\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\| \le 2\alpha q^{2^k - 1}$, $k = 0, 1, \cdots$.

Newton法及其收敛性

◁ 我们分四步来证明该定理.

1) 由 $f_j(\mathbf{x}) - f_j(\mathbf{y}) = \int_0^1 \frac{d}{d\lambda} f_j\big(\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y}\big) d\lambda$

$$= \sum_{k=1}^{n} \int_0^1 \frac{\partial f_j}{\partial x_k}\big(\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y}\big)(x_k - y_k) d\lambda$$

写成向量形式: $\vec{F}(\mathbf{x}) - \vec{F}(\mathbf{y}) = \int_0^1 \vec{F}'\big(\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y}\big) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\lambda$

因而: $\vec{F}(\mathbf{x}) - \vec{F}(\mathbf{y}) - \vec{F}'(\mathbf{z})(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \int_0^1 \big[\vec{F}'\big(\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y}\big) - \vec{F}'(\mathbf{z})\big] \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\lambda$

取范数有

$$\|\vec{F}(\mathbf{x}) - \vec{F}(\mathbf{y}) - \vec{F}'(\mathbf{z})(\mathbf{x} - \mathbf{y})\| \le \int_0^1 \|\vec{F}'\big(\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y}\big) - \vec{F}'(\mathbf{z})\| \cdot \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| d\lambda$$

Newton法及其收敛性

利用定理第一条假设(关于$F'(\mathbf{x})$的Lipschitz连续性)有

$$\|\vec{F}(\mathbf{x})-\vec{F}(\mathbf{y})-\vec{F}'(\mathbf{z})(\mathbf{x}-\mathbf{y})\| \le \gamma \int_0^1 \|\lambda\mathbf{x}+(1-\lambda)\mathbf{y}-\mathbf{z}\|\cdot\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|d\lambda$$

$$\le \frac{\gamma}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|\cdot\{\|\mathbf{x}-\mathbf{z}\|+\|\mathbf{y}-\mathbf{z}\|\} \quad \left(\text{三角不等式及} \int_0^1 \lambda d\lambda = \frac{1}{2}\right)$$

令 $\mathbf{z}=\mathbf{y}$ 有

$$\|\vec{F}(\mathbf{x})-\vec{F}(\mathbf{y})-\vec{F}'(\mathbf{y})(\mathbf{x}-\mathbf{y})\| \le \frac{\gamma}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|^2. \tag{4.10}$$

取 $\mathbf{z}=\mathbf{x}^{(0)}$, 则 $\forall \mathbf{x},\mathbf{y}\in S$, 因 $\left\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(0)}\right\| \le 2\alpha$, $\left\|\mathbf{y}-\mathbf{x}^{(0)}\right\| \le 2\alpha$, 即:

$$\begin{aligned}\|\vec{F}(\mathbf{x})-\vec{F}(\mathbf{y})-\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})(\mathbf{x}-\mathbf{y})\| &\le \frac{\gamma}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|\left(\left\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(0)}\right\|+\left\|\mathbf{y}-\mathbf{x}^{(0)}\right\|\right)\\ &\le 2\alpha\gamma\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|. \end{aligned} \tag{4.11}$$

Newton法及其收敛性

2) 归纳证明 $\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(0)}\right\| \leq 2\alpha, \left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)}\right\| \leq \alpha \cdot q^{2^k-1}$.

显然$\left\|\mathbf{x}^{(1)}-\mathbf{x}^{(0)}\right\| = \left\|[\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})]^{-1}\vec{F}(\mathbf{x}^{(0)})\right\| = \alpha \leq 2\alpha.$

假设$\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(0)}\right\| \leq 2\alpha$, 自然 $\vec{F}'(\mathbf{x}^{(k)})$ 可逆, 即 $\mathbf{x}^{(k+1)}$ 有定义

$$\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)}\right\| = \left\|[\vec{F}'(\mathbf{x}^{(k)})]^{-1}\cdot\vec{F}(\mathbf{x}^{(k)})\right\| \overset{\text{假设2}}{\leq} \beta\left\|\vec{F}(\mathbf{x}^{(k)})\right\|$$

$$\overset{\text{由}\mathbf{x}^{(k)}\text{的定义}}{=} \beta\left\|\vec{F}(\mathbf{x}^{(k)}) - [\vec{F}(\mathbf{x}^{(k-1)}) + \vec{F}'(\mathbf{x}^{(k-1)})(\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(k-1)})]\right\|$$

$$\overset{\text{已证1)}}{\leq} \frac{\beta\gamma}{2}\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(k-1)}\right\|^2 \overset{\text{归纳假设}}{\leq} \frac{\beta\gamma}{2}\left(\alpha q^{2^{k-1}-1}\right)^2 \overset{(q=\alpha\beta\gamma)}{=} \alpha q^{2^k-1}.$$

Newton法及其收敛性

由三角不等式

$$\begin{aligned}\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(0)}\right\| &\leq \sum_{j=0}^{k}\left\|\mathbf{x}^{(j+1)}-\mathbf{x}^{(j)}\right\| \\ &\leq \alpha\sum_{j=0}^{k} q^{2^j-1} \leq \alpha\sum_{j=0}^{+\infty} q^j \\ &\leq \frac{\alpha}{1-q} \overset{\text{假设}q<\frac{1}{2}}{\leq} 2\alpha.\end{aligned}$$

Newton法及其收敛性

3) 再证 $\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^*\| \le 2\alpha q^{2^k-1}$.

$\forall m \in \mathbb{N}$, 由于 $q < \frac{1}{2}$ 知

$$\left\|\mathbf{x}^{(k+m)}-\mathbf{x}^{(k)}\right\| \le \sum_{j=1}^{m}\left\|\mathbf{x}^{(k+j)}-\mathbf{x}^{(k+j-1)}\right\| \le \alpha\sum_{j=1}^{m} q^{2^{k+j-1}-1}$$

$$= \alpha q^{2^k-1}\sum_{j=1}^{m}(q^{2^k})^{2^{j-1}-1} < \alpha q^{2^k-1}\frac{1}{1-q} \le 2\alpha q^{2^k-1} \tag{4.12}$$

因而$\{\mathbf{x}^{(k)}\}$为Cauchy列, 即存在 $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ *s.t.* $\mathbf{x}^* = \lim_{k\to\infty}\mathbf{x}^{(k)}$.

由 $\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(0)}\| \le 2\alpha$, 让 $k\to\infty$, 有 $\|\mathbf{x}^*-\mathbf{x}^{(0)}\| \le 2\alpha$, 即 $\mathbf{x}^* \in S$.

令 (4.12) 式中 $m\to\infty$, 得 $\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^*\| \le 2\alpha q^{2^k-1}$.

Newton法及其收敛性

4) 最后证 $\mathbf{x}^*$ 为 $\vec{F}(\mathbf{x})$ 在 S 中的唯一零点.

因 $\left\|\vec{F}(\mathbf{x}^{(k)})\right\| \overset{\mathbf{x}^{(k+1)}\text{的定义}}{=} \left\|\vec{F}'(\mathbf{x}^{(k)})(\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)})\right\|$

$\leq \left(\left\|\vec{F}'(\mathbf{x}^{(k)})-\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})\right\| + \left\|\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})\right\|\right)\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)}\right\|$

$\overset{(4.12)\text{中}m=1}{\leq} \left(\gamma\left\|\mathbf{x}^{(k)}-\mathbf{x}^{(0)}\right\| + \left\|\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})\right\|\right) 2\alpha q^{2^k-1} \longrightarrow 0$

由 $\vec{F}(\mathbf{x})$ 的连续性得 $\vec{F}(\mathbf{x}^*) = \lim_{k\to\infty}\vec{F}(\mathbf{x}^{(k)}) = 0.$

令 $\Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - [\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})]^{-1}\cdot\vec{F}(\mathbf{x})$, 有

$\|\Phi(\mathbf{x})-\Phi(\mathbf{y})\| = \|[\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})]^{-1}\cdot[\vec{F}(\mathbf{x})-\vec{F}(\mathbf{y})-\vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})(\mathbf{x}-\mathbf{y})]\|$

$\leq \beta\cdot 2\alpha\gamma\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\| = 2q\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\| < \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|$. 即 Φ 为压缩映射, 因而在 S 中至多有一个不动点, $\vec{F}(\mathbf{x}^*) = 0 \Longleftrightarrow \Phi(\mathbf{x}^*) = \mathbf{x}^*$. $\triangleright$

解非线性方程组的拟牛顿法

对于高维问题，计算Jacobi矩阵的计算量就更大了. 为了避免计算 $\vec{F}'(\mathbf{x}^*)$, 通常试图用简单矩阵 A_k 来近似 $\vec{F}'(\mathbf{x}^{(k)})$. 但是如果:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - A_k^{-1} \cdot \vec{F}(\mathbf{x}^{(k)})$$

中 A_k 近似得不够好, 比如令 $A_k \equiv \vec{F}'(\mathbf{x}^{(0)})$, 那么只能有线性收敛.

因此我们希望在迭代过程中不断修正 A_k, 使得 A_k 越来越靠近 $\vec{F}'(\mathbf{x}^{(k)})$, 从而使得该拟牛顿法具有超线性收敛阶.

对比一维情形的割线法:

$$x_{k+1} = x_k - \left(\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}\right)^{-1} f(x_k) \equiv x_k - a_k^{-1} f(x_k)$$

即 $a_k = \frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}$, 或者说 $a_k \cdot (x_k - x_{k-1}) = f(x_k) - f(x_{k-1})$.

解非线性方程组的拟牛顿法

我们自然希望经过修正后的矩阵 A_{k+1} 满足类似关系

(4.13) $$A_{k+1}\left(\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)}\right)=\vec{F}\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right)-\vec{F}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$$

一般我们采取逐步修正方式, 即 $A_{k+1}=A_k+\triangle A_k.$

记 $\mathrm{rank}(\triangle A_k)=m\geq 1$, 一般 m 越小越好 (这样每步修正工作量较小). 我们这里主要学习一种秩1的拟牛顿法.

要想拟牛顿法具有超线性收敛性, 需要

(4.14) $$\lim_{k\to+\infty}\frac{\|[A_k-\vec{F}'(\mathbf{x}^{(k)})](\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)})\|}{\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)}\right\|}=0.$$

如何才能实现呢？即, 有了一个近似 A_k 之后, 如何修正使得更靠近 $\vec{F}'$？我们有以下引理:

解非线性方程组的拟牛顿法

引理 4.1

设 $A, D \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 定义 $F: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 为仿射变换: $F(\mathbf{x}) = D\mathbf{x} + \mathbf{b}$, 其中 $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. 令 $\mathbf{y}, \mathbf{y}' \in \mathbb{R}^n$, 设 $\mathbf{y} \neq \mathbf{y}'$, 记 $\mathbf{p} = \mathbf{y} - \mathbf{y}'$, $\mathbf{q} = F(\mathbf{y}') - F(\mathbf{y}) \equiv D\mathbf{p}$. 我们有矩阵 $A' = A + \dfrac{(\mathbf{q} - A\mathbf{p})\mathbf{p}^T}{\|\mathbf{p}\|_2^2}$ 满足

$$A'\mathbf{p} = D\mathbf{p} = \mathbf{q}, \quad \left\|A' - D\right\|_2 \leq \|A - D\|_2 .$$

(注: 该引理表明, 要想近似Jacobi矩阵 $D = F'(\mathbf{x})$, 如果已有一个近似 A, 那么如上修正后的 A' 会在二范数意义下比 A 逼近得更好, 且满足 $A'\mathbf{p} = D\mathbf{p} = \mathbf{q}$. 这给了我们一个从 A_k 到 A_{k+1} 的修正思路, 而且可以看到 $\triangle A = \dfrac{(\mathbf{q} - A\mathbf{p})\mathbf{p}^T}{\|\mathbf{p}\|_2^2}$ 的秩为1.)

解非线性方程组的拟牛顿法

◁ 由 A' 的定义, 计算可得

$$A'\mathbf{p} = A\mathbf{p} + \frac{(\mathbf{q} - A\mathbf{p})\mathbf{p}^T}{\mathbf{p}^T\mathbf{p}}\mathbf{p} = A\mathbf{p} + \mathbf{q} - A\mathbf{p} = \mathbf{q} = D\mathbf{p}.$$

任取单位向量 $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$, $\|\mathbf{u}\|_2 = 1$, 取 $\mathbf{u}$ 在 $\mathbf{p}$ 上的正交投影, *s.t.*

$$\mathbf{u} = \alpha\mathbf{p} + \mathbf{v}, \quad \text{即 } \mathbf{p}^T \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{自然 } \|\mathbf{v}\|_2 \leq 1.$$

这样 $A'\mathbf{v} = A\mathbf{v} + \frac{(\mathbf{q}-A\mathbf{p})\mathbf{p}^T}{\mathbf{p}^T\mathbf{p}}\mathbf{v} = A\mathbf{v}$, 由上面已证 $(A' - D)\mathbf{p} = 0$ 有

$$\begin{aligned} \left\|(A' - D)\mathbf{u}\right\|_2 &= \left\|(A' - D)(\alpha\mathbf{p} + \mathbf{v})\right\|_2 = \left\|(A' - D)\mathbf{v}\right\|_2 \\ &= \|(A - D)\mathbf{v}\|_2 \leq \|A - D\|_2 \cdot \|\mathbf{v}\| \leq \|A - D\|_2 . \end{aligned}$$

$$\text{因而 } \|A' - D\|_2 = \sup_{\|\mathbf{u}\|_2=1} \left\|(A' - D)\mathbf{u}\right\|_2 \leq \|A - D\|_2. \ \triangleright$$

解非线性方程组的拟牛顿法

利用上述引理我们得到以下Broyden秩1 方法:

算法 4.2 (Broyden秩1拟牛顿方法)

任取初始向量 $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, 无妨取初始矩阵 $A_0 = I \in \mathbb{R}^{n\times n}$,

对 $k = 0, 1, \cdots$ 计算

- $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - A_k^{-1} \vec{F}(\mathbf{x}^{(k)})$;
- $\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$, $\mathbf{q}^{(k)} = \vec{F}(\mathbf{x}^{(k+1)}) - \vec{F}(\mathbf{x}^{(k)})$;
- 如果 $\|\mathbf{p}^{(k)}\| \le \varepsilon$ 则停止迭代;
- 否则就修改 $A_{k+1} = A_k + \frac{(\mathbf{q}^{(k)} - A_k\mathbf{p}^{(k)})(\mathbf{p}^{(k)})^T}{(\mathbf{p}^{(k)})^T\mathbf{p}^{(k)}}$.

解非线性方程组的拟牛顿法

可以证明, 上面的 A_{k+1} 是极小值问题 $\min\limits_{A\in\mathcal{Q}}\|A-A_k\|_F$ 的解 (思考题). 其中 $\mathcal{Q}=\{A\in\mathbb{R}^{n\times n}|A\mathbf{p}^{(k)}=\mathbf{q}^{(k)}\}$, 这里 $\|A\|_F^2=\sum\limits_{i,j=1}^{n}|a_{ij}|^2$.

上面算法中，我们还需要计算 A_k^{-1}, 或者说需要解方程组 $A_k(\mathbf{x}^{(k+1)}-\mathbf{x}^{(k)})=-\overrightarrow{F}(\mathbf{x}^{(k)})$. 因为一般 A_k 不是稀疏矩阵, 因而该计算量为 $\mathcal{O}(n^3)$. 但是根据 A_k 的构造过程, 我们其实可以用 $\mathcal{O}(n^2)$ 的计算量来实现求解:

解非线性方程组的拟牛顿法

引理 4.2 (Sherman-Morrison)

设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$, 且 A 可逆, 对 $\mathbf{u},\mathbf{v}\in\mathbb{R}^n$, 我们有 当且仅当 $1+\mathbf{v}^TA^{-1}\mathbf{u}\neq 0$ 时, $A+\mathbf{u}\mathbf{v}^T$ 可逆， 且

$$(A+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^{-1}=A^{-1}-\frac{A^{-1}\cdot\mathbf{u}\mathbf{v}^T\cdot A^{-1}}{1+\mathbf{v}^TA^{-1}\mathbf{u}}.$$

$\lhd$ 直接计算有: $(A+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)\left[A^{-1}-\dfrac{A^{-1}\cdot\mathbf{u}\mathbf{v}^T\cdot A^{-1}}{1+\mathbf{v}^TA^{-1}\mathbf{u}}\right]$

$$=I+\mathbf{u}\mathbf{v}^TA^{-1}-\frac{\mathbf{u}\mathbf{v}^T\cdot A^{-1}}{1+\mathbf{v}^TA^{-1}\mathbf{u}}-\frac{\mathbf{u}\mathbf{v}^TA^{-1}\cdot\mathbf{u}\mathbf{v}^T\cdot A^{-1}}{1+\mathbf{v}^TA^{-1}\mathbf{u}}$$

(通分)$=I+\dfrac{\mathbf{u}\mathbf{v}^TA^{-1}+\mathbf{u}\mathbf{v}^TA^{-1}(\mathbf{v}^TA^{-1}\mathbf{u})-\mathbf{u}\mathbf{v}^T\cdot A^{-1}-\mathbf{u}(\mathbf{v}^TA^{-1}\mathbf{u})\mathbf{v}^T\cdot A^{-1}}{1+\mathbf{v}^TA^{-1}\mathbf{u}}=I.$

解非线性方程组的拟牛顿法

这样 $1+\mathbf{v}^T A^{-1}\mathbf{u} \neq 0$ 时, 显然有 $A+\mathbf{u}\mathbf{v}^T$ 可逆.

反之, 若 $A+\mathbf{u}\mathbf{v}^T$ 可逆 $\Longrightarrow I+\mathbf{u}\mathbf{v}^T A^{-1}$ 可逆

$$\Longrightarrow (I+\mathbf{u}\mathbf{v}^T A^{-1})\mathbf{u} = \mathbf{u}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T A^{-1}\mathbf{u} = \mathbf{u}(I+\mathbf{v}^T A^{-1}\mathbf{u})$$

自然可逆矩阵的特征值 $1+\mathbf{v}^T A^{-1}\mathbf{u} \neq 0$. $\triangleright$

若令 $H_k = A_k^{-1}$, $A=A_k$, $\mathbf{u} = \frac{\mathbf{q}^{(k)}-A_k\mathbf{p}^{(k)}}{\|\mathbf{p}^{(k)}\|_2^2}$, $\mathbf{v}=\mathbf{p}^{(k)}$

$$\Longrightarrow A_{k+1}^{-1} = A_k^{-1} - A_k^{-1}\Big(\frac{\mathbf{q}^{(k)}-A_k\mathbf{p}^{(k)}}{\|\mathbf{p}^{(k)}\|_2^2}\mathbf{p}^{(k)T}\Big)A_k^{-1} \Big/ \Big(1+\mathbf{p}^{(k)T}A_k^{-1}\frac{\mathbf{q}^{(k)}-A_k\mathbf{p}^{(k)}}{\|\mathbf{p}^{(k)}\|_2^2}\Big)$$

$$= H_k - \Big(\frac{H_k\mathbf{q}^{(k)}\mathbf{p}^{(k)T}H_k - \mathbf{p}^{(k)}\mathbf{p}^{(k)T}H_k}{\|\mathbf{p}^{(k)}\|_2^2}\Big) \Big/ \Big(\frac{\mathbf{p}^{(k)T}H_k\mathbf{q}^{(k)}}{\|\mathbf{p}^{(k)}\|_2^2}\Big)$$

$$= H_k - (H_k\mathbf{q}^{(k)} - \mathbf{p}^{(k)})\mathbf{p}^{(k)T}H_k \big/ (\mathbf{p}^{(k)T}H_k\mathbf{q}^{(k)})$$

解非线性方程组的拟牛顿法

这样，上面的算法可以改成

算法 4.3 (改进的Broyden秩1拟牛顿方法)

任取初始向量 $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, 无妨取初始矩阵 $H_0 = I \in \mathbb{R}^{n\times n}$,

对 $k = 0, 1, \cdots$ 计算

- $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - H_k \vec{F}(\mathbf{x}^{(k)})$;
- $\mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$, $\mathbf{q}^{(k)} = \vec{F}(\mathbf{x}^{(k+1)}) - \vec{F}(\mathbf{x}^{(k)})$;
- 如果 $\|\mathbf{p}^{(k)}\| \le \varepsilon$ 则停止迭代;
- 否则就修改 $H_{k+1} = H_k - (H_k\mathbf{q}^{(k)} - \mathbf{p}^{(k)}) \cdot \dfrac{(\mathbf{p}^{(k)})^T H_k}{(\mathbf{p}^{(k)})^T H_k \mathbf{q}^{(k)}}$.

这样每一步迭代的计算量仅为 $\mathcal{O}(n^2)$ (即矩阵×向量的计算量).

目录

同伦算法

前面讨论的非线性方程(组)的求解方法基本上都是局部收敛的，也就是说要初值 $\mathbf{x}^0$ 取得离解 $\mathbf{x}^*$ 足够靠近才可能收敛到 $\mathbf{x}^*$。

本节我们讨论的同伦算法（或者也称延拓法）可以作为扩大收敛域的有效方法，希望能从任意 $\mathbf{x}^0$ 出发，通过延拓求得方程

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{4.15}$$

的解 $\mathbf{x}^*$. 其基本思想是引入参数 $t \in [0,1]$, 构造一簇**同伦映射 $\mathbf{H}$**: $D \times [0,1] \subset \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^n$ 代替映射 $\mathbf{F}$： $D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, 使得

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}^0, 0) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{x}, 1) = \mathbf{F}(\mathbf{x}). \tag{4.16}$$

这表明 $t = 0$ 时, $\mathbf{H}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{0}$ 的解 $\mathbf{x}^0$ 已知, 当 $t = 1$ 时, $\mathbf{H}(\mathbf{x}, 1) \equiv \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的解 $\mathbf{x}^*$ 即为 (4.15) 的解.

同伦映射

满足 (4.16) 的同伦映射可以有各种不同的取法，常见的有以下两种

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},t)=\mathbf{F}(\mathbf{x})+(t-1)\mathbf{F}(\mathbf{x}^0), \tag{4.17}$$

及

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},t)=t\mathbf{F}(\mathbf{x})+(1-t)\mathbf{A}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^0), \tag{4.18}$$

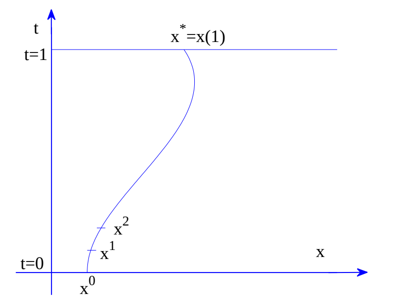
这里 $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为非奇异矩阵, $\mathbf{x}^0\in\mathbb{R}^n$ 取为已知的点.

显然 (4.17) 和 (4.18) 定义的映射 $\mathbf{H}(\mathbf{x},t)$ 都满足条件 (4.16). 其中 (4.17) 式称为牛顿同伦, (4.18) 称为凸同伦.

同伦方程

引入了同伦映射后，我们考虑同伦方程

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad t \in [0,1], \quad \mathbf{x} \in D \subset \mathbb{R}^n. \tag{4.19}$$



如果对于每个 $t \in [0,1]$, 方程 (4.19) 有解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t) : [0,1] \to D$ 连续. $(\mathbf{x}(t), t) \in \mathbb{R}^{n+1}$ 是在 $\mathbb{R}^{n+1}$ 中的一条曲线, 它的一端为已知点 $(\mathbf{x}^0, 0)$, 另一端是点 $(\mathbf{x}^*, 1)$. $\mathbf{x}^*$ 即为方程 (4.15) 的解. 这就是同伦法, 也称延拓法.

同伦曲线解的性质

关于同伦方程 (4.19) 解曲线 $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ 的存在性已经有不少研究，我们这里只给出牛顿同伦 (4.17) 的一个结果.

定理 4.14

设 $\mathbf{F}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 连续可微，且 $\mathbf{F}'(\mathbf{x})$ 非奇异, 对所有 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ 都有 $\left\|\mathbf{F}'(\mathbf{x})^{-1}\right\| \leq \beta$, 则 $\forall \mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, 存在唯一映射 $\mathbf{x}:\ [0,1] \to \mathbb{R}^n$, 使得 (4.19) 成立, 其中 $\mathbf{H}(\mathbf{x}, t)$ 是由 (4.17) 定义的. 且 $\mathbf{x}(t)$ 连续可微, 并有

$$\mathbf{x}'(t) = -\mathbf{F}'(\mathbf{x})^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}^0), \quad \forall t \in [0,1],\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^0. \tag{4.20}$$

上面定理条件较强, 事实上一般同伦方程 (4.19) 存在唯一解的条件可以降低到 $\mathbf{H}(\mathbf{x}, t)$ 的 Jacobi 矩阵 $\mathbf{J} = (\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial x}, \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t})$ 满秩即可.

数值延拓法

鉴于课时有限，关于同伦方程的解的存在唯一性我们课上就不讨论了，这里仅给出一种数值求解的办法.

首先将区间 $[0,1]$ 做一个划分

$$0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_N = 1.$$

用某种迭代法求解方程组

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}^k, t_k) = 0, \quad k = 1, 2, \cdots, N \tag{4.21}$$

由于 $k = 0$ 时方程组的解 $\mathbf{x}^0$ 是已知的, 故 $\mathbf{x}^0$ 可以作为 $k = 1$ 是方程组解 $\mathbf{x}^1$ 的初值近似. 一般的, 可用 $k-1$ 个方程组的解 $\mathbf{x}^{k-1}$ 作为第 k 个方程组解的初值近似. 如果 $t_k - t_{k-1}$ 足够小, 则可望 $\mathbf{x}^{k-1}$ 与 $\mathbf{x}^k$ 很靠近, 从而以上迭代是收敛的.

数值延拓法

例如我们使用牛顿迭代法来求解，则可以得到以下算法:

算法 4.4 (数值延拓法)

对 $k=1,2,\cdots,N$:

$$\mathbf{x}^{k,j+1}=\mathbf{x}^{k,j}-\mathbf{H}'_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}^{k,j},t_k)^{-1}\mathbf{H}(\mathbf{x}^{k,j},t_k),\quad j=0,1,\cdots,j_k-1$$

这里 $\mathbf{x}^{k,0}=\mathbf{x}^{k-1}$, $\mathbf{x}^k=\mathbf{x}^{k,j_k}$. 求得 $\mathbf{x}^N$ 后, 再继续用牛顿法迭代

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-\mathbf{H}'_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}^k,1)^{-1}\mathbf{H}(\mathbf{x}^k,1),\quad k=N,N+1,\cdots$$

直到 $\{\mathbf{x}^k\}_{k=0}^{+\infty}$ 收敛于 $\mathbf{x}^*$.

只要 t_k-t_{k-1} 足够小, 用牛顿法求解 (4.21) 是收敛的, 因此以上算法就是收敛的, 从而可以求得 $\mathbf{x}^*=\mathbf{x}(1)$.

数值延拓法

由于我们最终仅需 $\mathbf{x}^k \to \mathbf{x}^*$, 也就是说只要得到 $\mathbf{x}(1)$ 的一个好的近似 $\mathbf{x}^N$ 即可, 这样我们用牛顿法求解 (4.21) 时, 不需要每次都迭代到收敛, 即整个同伦曲线 $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ 不需要每个点都很精确.

最粗糙的, 可以取每个 $j_k = 1$, 即中间每步只迭代一次即可. 只要 $t_k - t_{k-1}$ 足够小, 这样就可以得到 $\mathbf{x}(1)$ 的一个好的近似 $\mathbf{x}^N$. 比如我们采用同伦 (4.17): $\mathbf{H}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}) + (t-1)\mathbf{F}(\mathbf{x}^0)$, 取 $j_k = 1$, $t_k = \frac{k}{N}$, 则得如下算法

算法 4.5 (延拓牛顿法)

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \mathbf{F}'(\mathbf{x}^k)^{-1}[\mathbf{F}(\mathbf{x}^k) + (\frac{k+1}{N} - 1)\mathbf{F}(\mathbf{x}^0)], & k = 0, \cdots, N-1 \\ \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \mathbf{F}'(\mathbf{x}^k)^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}^k), & k = N, N+1, \cdots \end{cases}$$

数值延拓法

以上算法本质上就是牛顿法, 只不过前N步的做法是为了得到 $\mathbf{x}^*$ 的一个好的近似 $\mathbf{x}^N$ 而已. 关于上面得到的迭代序列 $\{\mathbf{x}^k\}_{k=0}^{+\infty}$, 我们有以下大范围收敛定理:

定理 4.15

设 $\mathbf{F}: D\subset\mathbb{R}^n \to\mathbb{R}^n$ 在 $\mathbf{x}^0$ 的邻域 $S=\{\mathbf{x}\,|\,\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^0\| \le \beta\,\|\mathbf{F}(\mathbf{x}^0)\|\}\subset\mathring{D}$ 内存在连续的 $\mathbf{F}'(\mathbf{x})$, 并且其可逆, 满足

$$\left\|\mathbf{F}'(\mathbf{x})^{-1}\right\| \le \beta < +\infty, \quad \forall\mathbf{x}\in S.$$

及 $\forall\mathbf{x},\mathbf{y}\in S$, 存在 $\gamma > 0$ 使得

$$\left\|\mathbf{F}'(\mathbf{x}) - \mathbf{F}'(\mathbf{y})\right\| \le \gamma\,\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|\,.$$

则以 $\mathbf{x}^0$ 为初值, 存在正整数 $N_0 \ge 2\beta^2\gamma\left\|\mathbf{F}(\mathbf{x}^0)\right\|$, 使得 $N\ge N_0$ 时, 上述延拓牛顿法平方收敛于方程 $\mathbf{F}(\mathbf{x})=0$ 在 S 中的唯一解 $\mathbf{x}^*$.

算例

我们来看一个例子

例 4.13

考虑非线性方程组 $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} x_1^2 - x_2 + 1 \\ x_1 - \cos\frac{\pi x_2}{2} \end{pmatrix} = \boldsymbol{0}$, 例如给定初值 $\mathbf{x}^0 = \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \end{pmatrix}$, 欲求 $\mathbf{x}^*$（有三组解 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$）

可以看到, 直接用牛顿法不收敛. 但是如果取 $N = 10$, 使用延拓牛顿法(算法 4.5), 可得 $\mathbf{x}^{16} \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (达到14位有效数字).