第4章 逐次逼近法

4.1 解线性方程组的迭代解法

4.2 非线性方程的迭代解法

4.1　解线性方程组的迭代法

4.1.1 简单迭代法

4.1.2 迭代法的收敛性

前面已经介绍了用直接法求解线性方程组：

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b} \tag{4-1}$$

其中 $\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}, \boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^{n}, \boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^{n}$

在用直接法求解的过程中，我们发现系数矩阵 **A** 在不断变动，如果 **A** 的阶数较大时，占用计算机的内存就很大，而且程序较复杂，对程序设计的技巧要求也较高。

因此，我们希望找到一种在求解过程中系数矩阵不变，且程序设计又不复杂的求解方法，这种方法就是迭代法。

使用迭代法求解（4-1）时，首先要将它变形，变成如下形状的等价方程组

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{f} \qquad \text{（4-2）}$$

其中 $\boldsymbol{B} \in \mathbf{R}^{n\times n}, \boldsymbol{f} \in \mathbf{R}^{n}, \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^{n}$

即（4-1）的解是（4-2）的解，反之，（4-2）的解也是（4-1）的解。用不同的方法构造（4-2）就可得到不同的迭代法。（4-2）中的矩阵*B*称为迭代矩阵。

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Leftrightarrow \text{(4-2)}$$

如果已导出（4-1）的等价方程组（4-2）后，计算（4-1）的解就变成求序列的极限.

取初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$

代入（4-2）的右端. 其中，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{f}$ **（4-2）**

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{f}$$

$$\boldsymbol{x}^{(2)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(1)} + \boldsymbol{f}$$

$$\boldsymbol{x}^{(3)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(2)} + \boldsymbol{f}$$

其一般形式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f} \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots) \qquad （4\text{-}3）$$

通常称使用（4-3）式求解的方法为迭代法，也称迭代过程或迭代格式.

如果对任意 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，都有当 $k \to \infty$ 时，$x^{(k)} \to x^{*}$。

其中 $\boldsymbol{x}^{(k)} = (\boldsymbol{x}_1^{(k)}, \boldsymbol{x}_2^{(k)}, \cdots, \boldsymbol{x}_n^{(k)})^T$，$\boldsymbol{x}^{*} = (\boldsymbol{x}_1^{*}, \boldsymbol{x}_2^{*}, \cdots, \boldsymbol{x}_n^{*})^T$

也可写成

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{*} \qquad \text{即} \qquad \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}_i^{(k)} = \boldsymbol{x}_i^{*},\quad i = 1, 2, \cdots, n$$

称该迭代法收敛，否则称迭代法发散.

由于

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}$$

所以收敛迭代法的极限向量 x^*，满足

$$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{f}$$

即为方程组（4-2）的解，从而也是（4-1）的解。因此，使用迭代法求解就是求向量序列 $\boldsymbol{x}^{(0)}, \boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \cdots$ 的极限向量 $\boldsymbol{x}^*$。

4.1.1 简单迭代法

简单迭代法也称基本迭代法，有些迭代法可以通过对基本迭代法的加速或变形而得到。设线性方程组的一般形式为

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

其中矩阵 $A = (a_{ij})_{n\times n}$ 为非奇异，且 $a_{ii} \neq 0\ (i = 1, 2, \cdots, n)$。

对上式移项和变形后可得等价的方程组：

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{1}{a_{11}}\left(b_1 - a_{12}x_2 - \cdots - a_{1n}x_n \right) \\ \qquad\vdots \\ x_i = \dfrac{1}{a_{ii}}\left(b_i - a_{i1}x_1 - \cdots - a_{ii-1}x_{i-1} - a_{ii+1}x_{i+1} - \cdots - a_{in}x_n \right) \\ \qquad\vdots \\ x_n = \dfrac{1}{a_{nn}}\left(b_n - a_{n1}x_1 - \cdots - a_{nn-1}x_{n-1} \right) \end{cases} \tag{4-4}$$

将（4-4）写成迭代格式，即

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left[b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} \right] \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{4-5}$$

也可写成

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right] \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \qquad （3-6）$$

迭代法（4-5）或（4-6）称为**Jacobi迭代法**。

例1 将线性方程组

$$\begin{cases} 8x_1-3x_2+2x_3=20 \\ 4x_1+11x_2-x_3=33 \\ 2x_1+x_2+4x_3=12 \end{cases} \quad \begin{aligned} &\Longrightarrow x_1=\frac{1}{8}(3x_2-2x_3+20) \\ &\Longrightarrow x_2=\frac{1}{11}(-4x_1+x_3+33) \\ &\Longrightarrow x_3=\frac{1}{4}(-2x_1-x_2+12) \end{aligned}$$

解：写成Jacobi迭代格式（4-5）：

$$x_i^{(k+1)}=\frac{1}{a_{ii}}\left(b_i-\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}a_{ij}x_j^{(k)}\right) \quad (i=1,2,\cdots,n)\text{（4-5）}$$

$$\begin{cases} 8x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 20 \\ 4x_1 + 11x_2 - x_3 = 33 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 12 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{8}(20 + 3x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{11}(33 - 4x_1^{(k)} + x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \dfrac{1}{4}(12 - 2x_1^{(k)} - x_2^{(k)}) \end{cases}$$

取初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (0,0,0)^T$

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right)$$

$$x_1^{(1)} = \frac{20}{8}, \quad x_2^{(1)} = \frac{33}{11} = 3, \quad x_3^{(1)} = \frac{12}{4} = 3\ ;$$

$$x_1^{(1)}=\frac{20}{8},\qquad x_2^{(1)}=\frac{33}{11}=3,\qquad x_3^{(1)}=\frac{12}{4}=3\text{；}$$

$$x_1^{(2)}=\frac{1}{8}\left(20+3\times3-2\times3\right)\approx2.875\quad\ldots,\quad x_1^{(10)}\approx3.00032$$

$$x_2^{(2)}=\frac{1}{11}\left(33+4\times\frac{20}{8}+3\right)\approx2.3636\quad\ldots,\quad x_2^{(10)}\approx1.999838$$

$$x_3^{(2)}=\frac{1}{4}\left(12-2\times\frac{20}{8}-3\right)\approx1\quad\ldots,\quad x_3^{(10)}\approx0.999881$$

终止条件为： $\left\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\right\|\le\varepsilon$。精确解为：$x^*=\left(3,2,1\right)^T$。

在Jacobi迭代过程中，对已经算出来的信息未加充分利用，在计算 $x_2^{(k+1)}$ 时 $x_1^{(k+1)}$ 已经算出，计算 $x_i^{(k+1)}$ 时 $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$ 已经算出。一般说来，后面的计算值 $x_i^{(k+1)}$ 比前面的计算值 $x_i^{(k)}$ 要精确些。故对Jacobi迭代法（4-5）可作如下改进.

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{8}(20 + 3x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{11}(33 - 4x_1^{(k)} + x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \dfrac{1}{4}(12 - 2x_1^{(k)} - x_2^{(k)}) \end{cases} \qquad \begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{8}(20 + 3x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{11}(33 - 4x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \dfrac{1}{4}(12 - 2x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)}) \end{cases}$$

取初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}=(0,0,0)^T$ ，得到

$$x_1^{(1)}=2.5$$

$$x_2^{(1)}=3-0.363636\times 2.5\approx 2.0909091$$

$$x_3^{(1)}=3-0.5\times 2.5-0.25\times 2.0909091\approx 1.768939$$

$$\vdots$$

$x_1^{(5)}\approx 2.999843$， $x_2^{(5)}\approx 2.000072$， $x_3^{(5)}\approx 1.000061$。

终止条件为： $\left\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\right\|\le 10^{-5}$

将迭代格式可写成如下的分量形式，即

$$\begin{cases} x_i^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right) \\ k = 0, 1, 2, \cdots; \\ i = 1, 2, \cdots, n \end{cases} \tag{4-9}$$

称为**Gauss-Seidel迭代法**。

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right) \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

Jacobi迭代

3.1.2 迭代法的收敛性

我们要考虑如下问题：

① 如何判断迭代过程是否收敛呢？

② 迭代格式收敛的充要条件、充分条件是什么？

③ 决定迭代收敛速度的因素是什么？

设某种迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}$$

且该线性方程组的精确解为 $\boldsymbol{x}^*$，则

$$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{f}$$

两式相减，得

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{*}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{*}=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*})=\cdots=B^{k+1}\left(x^{(0)}-x^{*}\right)$$

令 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}=\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*}$，则

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}=\boldsymbol{B}^{2}\boldsymbol{\varepsilon}^{(k-1)}=\cdots=\boldsymbol{B}^{k+1}\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}$$

故当 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)}=\boldsymbol{0}$ 时，$\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{\varepsilon}^{(k+1)}=\lim\limits_{k\to\infty}\left(\boldsymbol{B}^{k+1}\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}\right)=\boldsymbol{0}$

而 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}=\boldsymbol{x}^{(0)}-\boldsymbol{x}^{*}$ 是一个非零的常向量，因此只有

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^{k+1}=\boldsymbol{O}_{n\times n}\quad（零矩阵）$$

定理 4.1

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}=0 \quad (\text{即} \quad \boldsymbol{x}_i^{(k)}\to\boldsymbol{x}_i^*,\ i=1,2,\cdots,n\ )$$

的充分而且必要条件是 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^k=\boldsymbol{O}_{n\times n} \Leftrightarrow \rho(\boldsymbol{B})<1$。

定理 4.2 迭代法 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{f}$ 对任意 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 和 $\boldsymbol{f}$ 均收敛的充要条件为：$\rho(\boldsymbol{B})<1$。

定理 4.3（充分条件） 若 $\|\boldsymbol{B}\|<1$，则迭代法收敛，

且有 $$\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*}\| \le \frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\| \le \frac{\|\boldsymbol{B}\|^{k}}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\cdot\left\|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(0)}\right\|$$

证明 $$\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k-1)} = \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*} &= \boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k+1)}+\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{*}\\ &= \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k-1)}-\boldsymbol{x}^{(k)})+\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*})\end{aligned}$$

$$\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*}\right\| \le \|\boldsymbol{B}\|\cdot\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\|+\|\boldsymbol{B}\|\cdot\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*}\right\|$$

$$(1-\|\boldsymbol{B}\|)\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*}\right\| \le \|\boldsymbol{B}\|\cdot\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\| \le \cdots \le \|\boldsymbol{B}\|^{k}\cdot\left\|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(0)}\right\|$$

$$\left\|\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}\right\| = \left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{*}\right\| \le \frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\cdot\left\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\| \le \frac{\|\boldsymbol{B}\|^{k}}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\cdot\left\|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(0)}\right\|$$

考察Jacobi迭代法和G-S迭代法的矩阵形式及收敛性

若记

$$
\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}
a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,i} & \cdots & a_{1,n} \\
a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2,n} \\
\vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
a_{i,1} & \cdots & a_{i,i-1} & a_{i,i} & \cdots & a_{i,n} \\
\vdots & & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\
a_{n,1} & \cdots & a_{n,i-1} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{n,n}
\end{pmatrix}
$$

$$\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(a_{11}, a_{22}, \cdots, a_{nn})$$

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 0 & & & & & 0 \\ -a_{21} & 0 & & & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & & & \\ -a_{j1} & \cdots & -a_{jj-1} & 0 & & \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{nj-1} & \cdots & -a_{nn-1} & 0 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1j} & \cdots & -a_{1n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & 0 & -a_{j-1j} & \cdots & -a_{j-1n} \\ & & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & & 0 & -a_{n-1n} \\ 0 & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

则

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{L} - \boldsymbol{U}$$

观察Jacobi迭代法

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{ii}}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}} \qquad (i=1,2,\cdots,n)$$

则其矩阵的表示形式为：

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_1}{a_{nn}} \end{pmatrix}$$

注意：

$$\overset{B}{\begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}} = \overset{D^{-1}}{\begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & \\ & \frac{1}{a_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix}} \overset{L+U}{\begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ -a_{21} & 0 & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}}$$

$$f \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_1}{a_{nn}} \end{pmatrix} = \overset{D^{-1}}{\begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & \\ & \frac{1}{a_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix}} \overset{b}{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}}$$

则Jacobi迭代法可写成为：

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{D}^{-1}\left(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}\right)\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$$

令 $\boldsymbol{B}_J = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})$， $\boldsymbol{f}_J = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$

或者，由 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U}$，得 $\boldsymbol{D}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}$从而

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{-1}\left(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}\right)\boldsymbol{x} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$$

则得（**4-1**）的等价方程组为 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}_J\boldsymbol{x} + \boldsymbol{f}_J$

其迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}_J\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}_J \qquad k = 0, 1, 2, \cdots$$

将Gauss-Seidel公式改写成

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + b_i \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

从而可写成矩阵形式为

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{D}} \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & & & \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{L}} \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix}$$

$$+ \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & 0 & \cdots & -a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 0 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{U}} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{b}}$$

从而有 $\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{L}\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{b}$

整理后可得

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)} + (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

令 $\boldsymbol{B}_G = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U} \qquad \boldsymbol{f}_G = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$

则 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}_G\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{f}_G$ （$k = 0,1,\cdots$） （**4-10**）

（4-10）就是Gauss-Seidel迭代法。

例5 设线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}$$，其中 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}$

问使用Jacobi法和G-S法求解是否收敛.

（1）求Jacobi迭代法的迭代矩阵

$$\boldsymbol{B}_J = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}) = \begin{pmatrix} 0 & -2 & +2 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -2 & 0 \end{pmatrix}$$

则

$$\det\left(\lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}_J\right) = \begin{vmatrix} \lambda & 2 & -2 \\ 1 & \lambda & 1 \\ 2 & 2 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^3 = 0$$

即 $\rho(\boldsymbol{B}) = 0 < 1$ ，故Jacobi迭代法收敛.

（2）求G-S迭代法的迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_G$ ，由

$$\det\left(\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_G\right)=\det\left(\lambda \boldsymbol{I}-(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}\right)$$

$$=\det\left((\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\left(\lambda(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})-\boldsymbol{U}\right)\right)$$

$$=\det\left((\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\right)\cdot\det\left(\lambda(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})-\boldsymbol{U}\right)=0$$

得

$$\det\left(\lambda(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})-\boldsymbol{U}\right)=\begin{vmatrix}\lambda & 2 & -2\\ \lambda & \lambda & 1\\ 2\lambda & 2\lambda & \lambda\end{vmatrix}=\lambda^3-4\lambda^2+4\lambda=\lambda(\lambda-2)^2=0$$

进一步得 $\rho(\boldsymbol{B}_G)=2>1$ ，故G-S迭代法发散.

注意: 并不是对任何情况, G-S迭代比Jacobi迭代收敛速度快.

例6　设线性方程组

$$Ax = b, \text{ 其中 } A = \begin{pmatrix} 3 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 1 \\ -2 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

问使用Jacobi法和G-S法求解是否收敛.

（1）求Jacobi迭代法的迭代矩阵

$$\boldsymbol{B}_J=\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})=\begin{pmatrix}0&0&2/3\\0&0&-1/2\\1&-1/2&0\end{pmatrix}$$

则

$$\det\left(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_J\right)=\begin{vmatrix}\lambda&0&-2/3\\0&\lambda&1/2\\-1&1/2&\lambda\end{vmatrix}=\lambda(\lambda^2-\frac{11}{12})$$

即 $\rho(\boldsymbol{B})=\sqrt{\dfrac{11}{12}}<1$ ，故Jacobi迭代法收敛.

（2）G-S迭代法的迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_G$ 的特征值满足

$$\det\left(\lambda\left(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}\right)-\boldsymbol{U}\right)=\begin{vmatrix} 3\lambda & 0 & -2 \\ 0 & 2\lambda & 1 \\ -2\lambda & \lambda & 2\lambda \end{vmatrix}=12\lambda^3-11\lambda^2$$

进一步得 $\rho(\boldsymbol{B}_G)=\dfrac{11}{12}<1$ ，故G-S迭代法收敛.

对于某些特殊的方程组，从方程组本身就可判定其收敛性.不必求迭代矩阵的特征值或范数.

定义4.1　如果矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$ 的元素满足不等式

$$|a_{ii}|\geq\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n}|a_{ij}|\qquad(i=1,2,\cdots,n)\qquad\textbf{(4-14)}$$

则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对角占优阵，如果（4-14）中严格不等式成立，称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优阵.

可以证明严格对角占优阵 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，即

$$\det(\boldsymbol{A})\neq 0$$

事实上，如果A奇异，则Ax=0有非零解 $c_1, c_2, \ldots, c_n$

令 $$|c_i| = \max_{1\le j\le n}\{|c_j|\}$$

则 $$a_{i,1}c_1 + a_{i,2}c_2 + \cdots + a_{i,n}c_n = 0$$

$$\Rightarrow a_{i,i}c_i = -\sum_{j\ne i} a_{i,j}c_j$$

$$\Rightarrow |a_{i,i}|\cdot|c_i| \le \sum_{j\ne i} |a_{i,j}|\cdot|c_j|$$

$$\Rightarrow |a_{i,i}| \le \sum_{j\ne i} |a_{i,j}|\cdot|c_j|/|c_i| \le \sum_{j\ne i} |a_{i,j}|$$

与A为严格对角占优矩阵矛盾!

$$\begin{pmatrix} 5 & -2 & 2 \\ -1 & 2 & -1 \\ -2 & -2 & 6 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

对角占优矩阵　　　　严格对角占优矩阵

定理4.4（充分性条件）若线性方程组

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$$

中的 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优阵，则Jacobi法和Gauss-Seidel法均收敛。

证（1）Jacobi迭代矩阵为

$$\boldsymbol{B}_J=\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}) = \begin{pmatrix} 0 & -\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\dfrac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\dfrac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\dfrac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\dfrac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\dfrac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

则 $\boldsymbol{B}_J$ 的每一行每个元素取绝对值的和为

$$\frac{1}{|a_{ii}|}\sum_{j\neq i}|a_{ij}| \qquad (i=1,2,\cdots,n)$$

因为 $\boldsymbol{A}$ 为严格对角占优阵，即

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \qquad \text{（4-15）}$$

所以 $$\frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{j \neq i} |a_{ij}| < 1 \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

即

$$\| \boldsymbol{B}_J \|_\infty = \max_i \sum_{j \neq i} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1$$

根据定理3.3，Jacobi迭代法收敛.

（2）G-S迭代矩阵为 $\boldsymbol{B}_G=(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}$

$\boldsymbol{B}_G$ 的特征值 λ 满足

$$\det\left(\lambda \boldsymbol{I}-(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}\right)=\det(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\cdot\det[\lambda(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})-\boldsymbol{U}]=0$$

因为 $\det(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\neq 0$ ，设

$$\boldsymbol{C}=\lambda(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})-\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}\lambda a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nn}\end{pmatrix}$$

则有

$$\det(C) = \det\big(\lambda(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L}) - \boldsymbol{U}\big) = 0 \qquad （4–16）$$

现在证明 $|\lambda| < 1$.用反证法，假设 $|\lambda| \geq 1$，又由于

$\boldsymbol{A}$为严格对角占优阵，所以（4–15）式成立，则应有

$$|\lambda||a_{ii}| > |\lambda| \sum_{j \neq i} |a_{ij}| = \sum_{j \neq i} |\lambda||a_{ij}|$$

$$\geq \sum_{j=1}^{i-1} |\lambda||a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^{n} |a_{ij}| \qquad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

即矩阵 $\boldsymbol{C}$ 为严格对角占优阵，故

$\det(\boldsymbol{C}) \neq \boldsymbol{O}$，与（4-16）式矛盾，则必有 $|\lambda| < 1$

即 $\boldsymbol{B}_G$ 的所有特征值的绝对值均小于1，即

$$\rho(\boldsymbol{B}_G) < 1$$

根据定理4.2，G-S迭代法收敛.

迭代改善法

对良态或者不十分严重病态的线性方程组,与直接法结合对已得近似解进行精度改善.

1)用三角分解法(带列主元LU分解)求$\boldsymbol{Ax=b}$

$$\boldsymbol{PA = LU \quad \Rightarrow PAx = LUx = Pb}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{Ly = Pb} \\ \boldsymbol{Ux = y} \end{cases}$$

得到计算解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$

2)求 $\tilde{x}$ 的修正向量 z

用**双精度**计算余向量 $r = b - A\tilde{x} \;\; = Ax - A\tilde{x} = Az$

$$PAz = LUz = Pr \;\; \Rightarrow \begin{cases} Ly = Pr \\ Uz = y \end{cases}$$

令 $x = \tilde{x} + z \qquad Ax = A\tilde{x} + Az = b - r + Az = b$

故 $x = \tilde{x} + z$ 即为近似解 $\tilde{x}$ 的改进解.

3)反复对近似解进行改善,即反复2)的过程.

例3 见书P57-58

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}\xrightarrow{\text{直接法得初始近似解}}\boldsymbol{x}^{*}\approx\boldsymbol{x}^{(1)}$$

$$\text{余量}\boldsymbol{r}^{(1)}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}^{(1)}\xrightarrow{\text{利用余量求修正量}}\boldsymbol{Az}^{(1)}=\boldsymbol{r}^{(1)}$$

$$\xrightarrow{\text{修正}}\boldsymbol{x}^{(2)}=\boldsymbol{x}^{(1)}+\boldsymbol{z}^{(1)}$$

$$\text{余量}\boldsymbol{r}^{(2)}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}^{(2)}\xrightarrow{\text{利用余量求修正量}}\boldsymbol{Az}^{(2)}=\boldsymbol{r}^{(2)}$$

$$\xrightarrow{\text{修正}}\boldsymbol{x}^{(3)}=\boldsymbol{x}^{(2)}+\boldsymbol{z}^{(2)}$$

4.2　非线性方程的迭代解法

4.2.0 绪论

4.2.1 简单迭代法

4.2.2 Newton迭代法及其变形

4.2.3 多根区间上的逐次逼近法

工程实际与科学计算中都遇到大量求解非线性方程的问题。设非线性方程

$$f(x)=0 \tag{4-17}$$

求数 α，使 $f(\alpha)\equiv 0$，则称 α 为方程（4-17）的根，或称函数 $f(x)$ 的零点。

常见的非线性方程有，代数方程（二次、三次等）超越方程（三角方程，指数、对数方程等）。

但是我们发现即使是最基本的代数方程，当次数超过4时，在一般情况下就不能用公式表示方程的根，即难于用解析法求出方程的根，对于超越方程那就更难了。

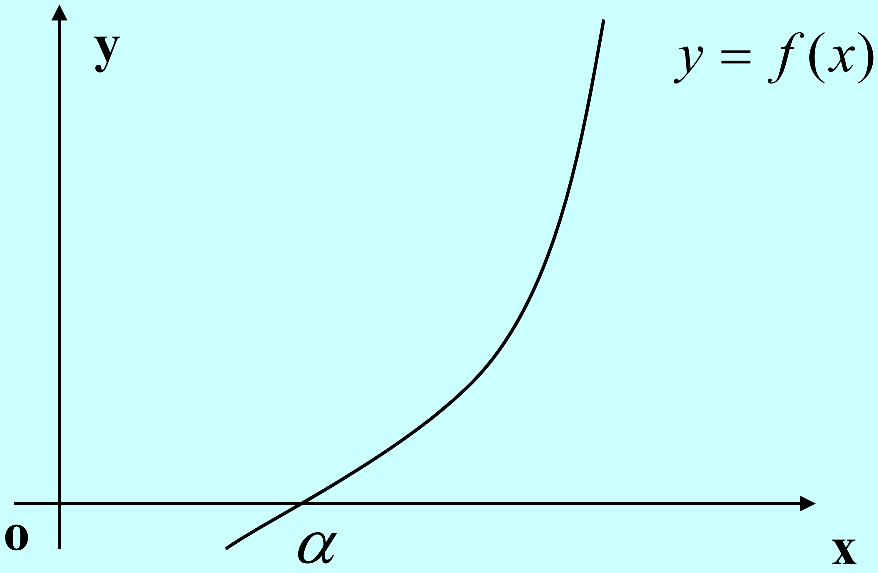
因此，研究用数值方法计算非线性方程的根就显得非常必要。在求根时通常假设非线性方程 $f(x)=0$ 中的函数　　是关于 x 的连续函数。

若令

$$y = f(x)$$

则它在平面直角坐标系 $O-xy$ 下的图象为连续曲线，

可见, 求 $f(x)=0$ 的根，就是求 $y=f(x)$ 与 x 轴的交点 α



如果 $f(x)=0$ 在区间 $[a,b]$ 上仅有一个根，则称 $[a,b]$ 为方程的单根区间; 若方程在 $[a,b]$ 上有多个根，则称 $[a,b]$ 为方程的多根区间。

方程的单根区间和多根区间统称为方程的有根区间。为了研究方便，我们主要研究方程在单根区间上的求解方法。

4.2.1 简单迭代法

首先将方程 $f(x)=0$ 化为一个与它同解的方程

$$x=\varphi(x) \qquad (4\text{-}18)$$

其中 $\varphi(x)$ 为 x 的连续函数。即如果数 α 使 $f(\alpha)\equiv 0$，则也有 $\alpha\equiv\varphi(\alpha)$，反之，若 $\alpha\equiv\varphi(\alpha)$，则也有 $f(\alpha)\equiv 0$。

任取一个初始值 x_0，代入（4-18）的右端，得到 $x_1=\varphi(x_0)$ 再将 x_1 代入（4-18）右端得 $x_2=\varphi(x_1)$，继为之，得到一个数列，其一般表示形式为

$$x_{k+1}=\varphi(x_k) \qquad (k=0,1,2,\cdots) \qquad （4-19）$$

通常称（4-19）为求解非线性方程的简单迭代法，也称迭代法或迭代过程或迭代格式，$\varphi(x)$ 称为迭代函数，x_k 称第 k 步的迭代值或简称迭代值。

如果由迭代格式产生的数列收敛，即

$$\lim_{k \to \infty} x_k = \alpha$$

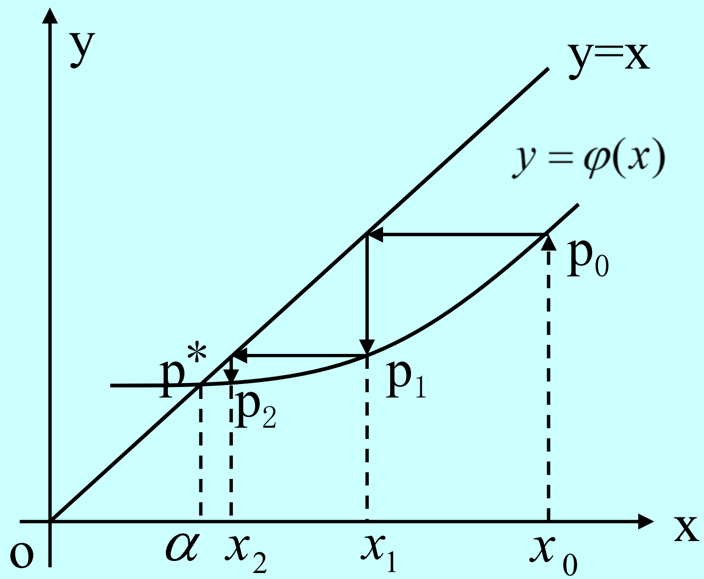
则称迭代法收敛，否则称迭代法发散。若迭代法收敛于 α，则 α 就是方程（4-17）的根，即有 $f(\alpha) \equiv 0$。

几何直观：

在曲线 $y=\varphi(x)$ 上得到点列 $P_1, P_2, \cdots$，其横坐标分别为由公式

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

所确定的迭代值 $x_1, x_2, \cdots$，若迭代法收敛 $\lim_{k\to\infty} x_k=\alpha$ ，则点列 $P_1, P_2, \cdots$将越来越逼近所求的交点 $P(\alpha)=P^*$ 。



例1 用迭代法求 $f(x)=2x^3-x-1=0$ 的根。

解 （1）化方程为等价方程

$$x=\sqrt[3]{\frac{x+1}{2}}=\varphi(x)$$

取初始值 $x_0=0$，则迭代值为

$$x_1=\sqrt[3]{\frac{1}{2}}=\sqrt[3]{0.5}\approx 0.79\ ,\quad x_2=\sqrt[3]{\frac{1+0.79}{2}}=\sqrt[3]{0.895}\approx 0.964\ ,$$

$$x_3=\sqrt[3]{\frac{1+0.964}{2}}\approx 0.994\ ,\ \cdots$$

显然，当 $k\to\infty$ 时，

$x_k\to 1$ 且 $f(1)\equiv 0$，即迭代法收敛于1，$x=1$ 就是方程 $f(x)=0$ 的根。

（2）化 $f(x)=0$ 为等价方程 $x=2x^3-1=\varphi(x)$，同样取初始值 $x_0=0$，其迭代格式为 $x_{k+1}=2x_k^3-1$

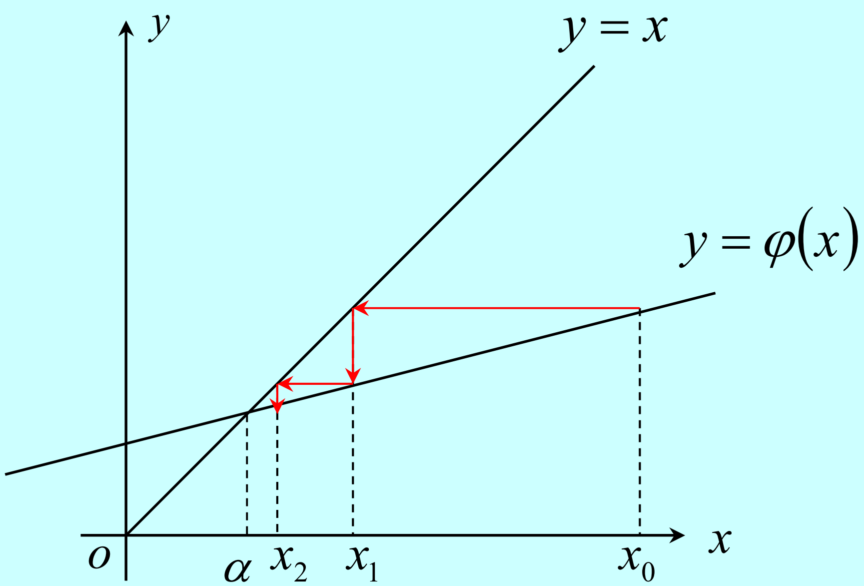
$x_1=2\times 0-1=-1$，$x_2=2(-1)^3-1=-3$，$x_3=2(-3)^3-1=-55$，

显然，当 $k\to\infty$ 时，$x_k\to-\infty$，故迭代法发散。

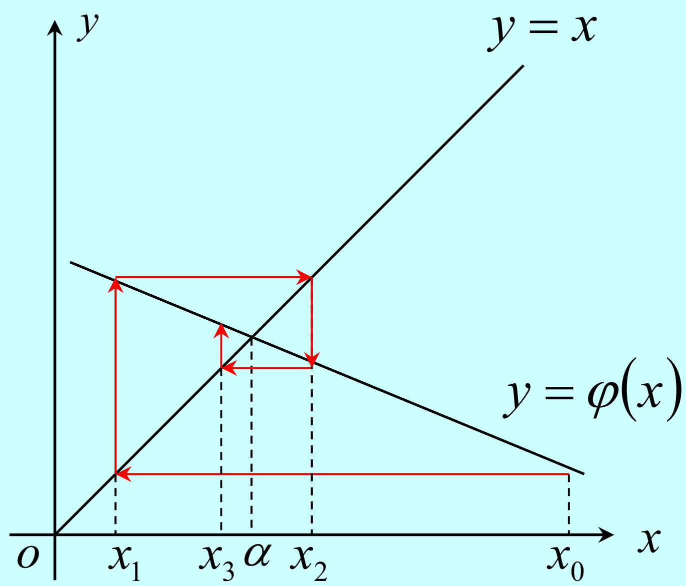
上述例子表明，迭代法的收敛与发散，依赖于迭代函数的构造，迭代函数构造的方法很多。

例如，$x=x-f(x)=\varphi(x)$ 中的 就是（4-17）的迭代函数。而且很容易证明 $\varphi(x)=x-k(x)f(x)\ \ (k(x)\neq 0)$ 也是（4-17）的迭代函数。

对于同一个方程，由于构造出来的迭代函数不同，有的迭代函数所构成的迭代法收敛，有的迭代函数所构成的迭代法却发散。那么迭代函数须满足什么条件，迭代法才能收敛。

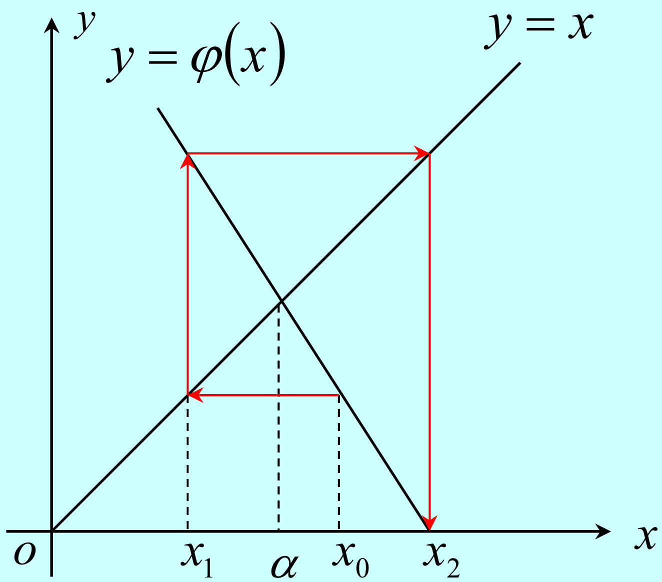


$0 < \varphi'(x) < 1$

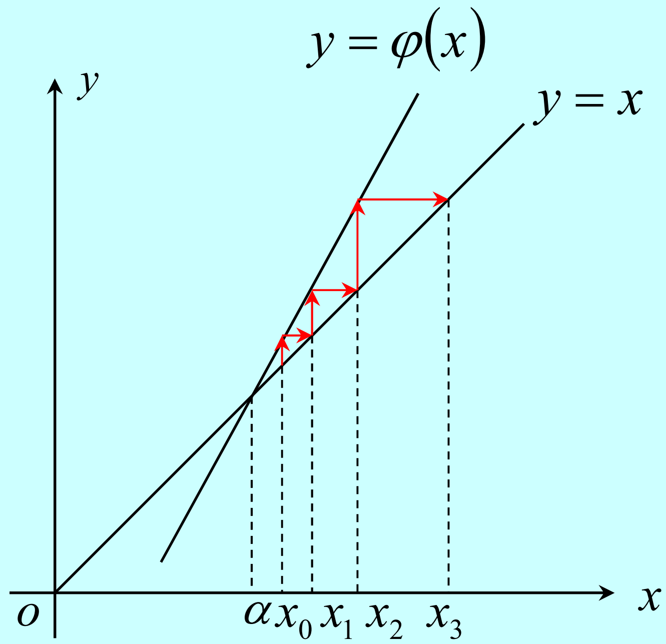


$-1 < \varphi'(x) < 0$

从而, 迭代函数满足条件：$|\varphi'(x)| < 1$ 时, 迭代法收敛。



$\varphi'(x)<-1$



$1<\varphi'(x)$

从而, 当 $\varphi'(x)<-1$ 或 $1<\varphi'(x)$ 时, 迭代法发散。

定理4.5 设迭代函数 $\varphi(x)$ 满足

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

（2）存在正数 $0<L<1$，对任意 $x\in[a,b]$ 均有

$$|\varphi'(x)|\le L$$

则 $x=\varphi(x)$ 在 $[a,b]$ 内存在唯一根 α，且对任意初始值 $x_0\in[a,b]$，迭代法

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

收敛于 α，且

1. $$|x_k-\alpha|\le\frac{L}{1-L}|x_k-x_{k-1}| \tag{4-20}$$

2. $$|x_k-\alpha|\le\frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0| \tag{4-21}$$

证 满足条件（1）、（2）时，易证方程 $x=\varphi(x)$ 在 $[a,b]$内存在唯一根α 。事实上，令 $f(x)=x-\varphi(x)$

由 $x\in[a,b]$ 时， $a\le\varphi(x)\le b$

$$f(a)=a-\varphi(a)\le 0 \qquad f(b)=b-\varphi(b)\ge 0$$

$$|\varphi'(x)|\le L<1 \quad \Rightarrow f'(x)=1-\varphi'(x)>0$$

连续函数$\boldsymbol{f(x)}$在$\boldsymbol{[a,b]}$上单调，且在端点取值异号， 故在$\boldsymbol{[a,b]}$上有唯一根.

$$0=f(\alpha)=\alpha-\varphi(\alpha) \iff \alpha=\varphi(\alpha)$$

根据微分中值定理可得

$$x_{k+1}-\alpha = \varphi(x_k)-\varphi(\alpha) = \varphi'(\xi_1)(x_k-\alpha)$$

$$x_{k+1}-x_k = \varphi(x_k)-\varphi(x_{k-1}) = \varphi'(\xi_2)(x_k-x_{k-1})$$

其中 $\xi_1,\xi_2 \in [a,b]$ 由条件（2）得

$$\begin{cases} |x_{k+1}-\alpha| = |\varphi'(\xi_1)||x_k-\alpha| \le L|x_k-\alpha| \\ |x_{k+1}-x_k| = |\varphi'(\xi_2)||x_k-x_{k-1}| \le L|x_k-x_{k-1}| \end{cases} \qquad (4\text{-}22)$$

又因为

$$|x_k-\alpha| \le |x_k-x_{k+1}|+|x_{k+1}-\alpha| \le L|x_k-x_{k-1}|+L|x_k-\alpha|$$

将上式移项整理后，得 $(1-L)|x_k-\alpha| \le L|x_k-x_{k-1}|$，从而

$$|x_k-\alpha| \le \frac{L}{1-L}|x_k-x_{k-1}|$$

即（4-20）成立。再反复使用（4-22）的第2式，得

$$|x_k-x_{k-1}| \le L|x_{k-1}-x_{k-2}| \le \cdots \le L^{k-1}|x_1-x_0|$$

将上式代入（4-20）即得（4-21）成立。

又因为 $L<1$，所以根据（4-21）得

$$\lim_{k\to\infty}|x_k-\alpha|=0 \quad 即 \quad \lim_{k\to\infty}x_k=\alpha$$

故迭代法收敛。

当迭代函数满足定理4.5的条件且 L 较小时，根据（4-20）式可知，只要相邻两次计算值的偏差 $|x_k - x_{k-1}|$ 达到事先给定的精度要求 δ（即 $|x_k - x_{k-1}| \le \delta$）时，迭代过程就可以终止，$x_k$ 就可作为 α 的近似值。因此，（4-20）式也是判断迭代是否可终止的依据。如果对 L 的大小可作出估计时，由（4-21）式就可以大概估计出迭代过程所需要的迭代次数，即 $|x_k - \alpha| \le \delta$ 时，k 的大小范围。

$$|x_k - \alpha| \le \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0| < \delta \Rightarrow k \ge \log_L \frac{\delta(1-L)}{|x_1 - x_0|}$$

由于定理4.5的条件一般难于验证，而且在大区间$[a,b]$上，这些条件也不一定都成立，所以在使用迭代法时往往在根α的附近进行。只要假定$\varphi'(x)$在α的附近连续，且满足

$$\left|\varphi'(\alpha)\right| < 1$$

则根据连续函数的性质，一定存在α的某个邻域$S: |x-\alpha| \le \delta$，$\varphi(x)$在S上满足定理4.5的条件。

故在S中任取初始值x_0，迭代格式

$$x_k = \varphi(x_{k-1})$$

收敛于方程的根α，即$f(\alpha) \equiv 0$，称此收敛为局部收敛.

例2 求方程 $x=e^{-x}$在 $x=0.5$ 附近的一个根，要求精度$\delta=10^{-3}$。$\left(f(x)=xe^{x}-1=0\right)$

解 由于 $\varphi'(x)=(e^{-x})'=-e^{-x}$，故当$x\in[0.5,0.7]$ 时，

$$|\varphi'(x)|=|-e^{-x}|=e^{-x}\le 0.61<1$$

因此，迭代格式 $x_{k+1}=e^{-x_k}$，对于初始值x_0=0. 5是收敛的。

迭代停止条件

$$|x_k-x_{k-1}|\le\frac{1-L}{L}\delta=\frac{1-0.61}{0.61}\times10^{-3}=0.64\times10^{-3}$$

迭代的数值结果表

k	x_k	e^{-x_k}	$\lvert x_{k+1}-x_k \rvert$
0	0.5	0.606531	0.106531
1	0.606531	0.545239	0.061292
2	0.545239	0.579703	0.034464
3	0.579703	0.560065	0.019638
4	0.560065	0.571172	0.011107
5	0.571172	0.564863	0.006309
6	0.564863	0.568439	0.003576
7	0.568439	0.566409	0.002030
8	0.566409	0.567560	0.001151
9	0.567560	0.566907	0.000653
10	0.566907	0.567277	0.000370

从定理4.5的（4-21）式可以看出，当L或$|\varphi'(x)|$在$[a,b]$上的值越小，迭代过程的收敛速度就越快。但当$L<1$且接近于1时，迭代法虽然收敛，但收敛速度很慢。为了使收敛速度有定量的判断，特介绍收敛速度的阶的概念，作为判断迭代法收敛速度的重要标准。

设迭代格式$x_{k+1}=\varphi(x_k)$，当$k\to\infty$时，$x_{k+1}\to\alpha$，并记$e_k=x_k-\alpha$。

定义4.2 若存在实数 $p \ge 1$ 和 $c > 0$ 满足

$$\lim_{k\to\infty}\frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p}=c \qquad (4\text{-}23)$$

则称迭代法是 p 阶收敛。当 $p=1$ 时，称线性收敛，当 $p>1$ 时称超线性收敛，当 $p=2$ 时称平方收敛。

p 越大迭代法的收敛速度也越快。但是在实际使用中 p 很难直接确定，常常采用一些其他的方法来确定收敛的阶。 使用**Taylor**展开式是一种常用的方法。

如果 $\varphi(x)$ 在根 α 处充分光滑（各阶导数存在），则可对 $\varphi(x)$ 在 α 处进行**Taylor**展开，得

$$x_{k+1}=\varphi(x_k)=\varphi(\alpha)+\varphi'(\alpha)(x_k-\alpha)+\frac{\varphi''(\alpha)}{2!}(x_k-\alpha)^2$$

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

如果 $\varphi'(\alpha)=\varphi''(\alpha)=\cdots=\varphi^{(p-1)}(\alpha)=0$ ，但是 $\varphi^{(p)}(\alpha)\neq 0$ ，则

$$x_{k+1}-\varphi(\alpha)=x_{k+1}-\alpha=$$

即

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

从而

$$\lim_{k\to\infty}\frac{|x_{k+1}-\alpha|}{|x_k-\alpha|^p}=\lim_{k\to\infty}\frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p}=\lim_{k\to\infty}\frac{|\varphi^{(p)}(\xi_k)|}{p!}=\frac{|\varphi^{(p)}(\alpha)|}{p!}$$

上式说明迭代法具有 p 阶收敛。

定理4.6 如果 $x=\varphi(x)$ 中的迭代函数 $\varphi(x)$ 在根 α 附近满足：

（1）$\varphi(x)$ 存在 p 阶导数且连续；

（2）$\varphi'(\alpha)=\varphi''(\alpha)=\cdots=\varphi^{(p-1)}(\alpha)=0,\varphi^{(p)}(\alpha)\neq 0$，则迭代法 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 是 p 阶收敛。

例 取迭代函数 $\varphi(x)=x+\alpha(x^2-5)$

要使如下迭代法收敛到 $x^*=\sqrt{5}$，则 α 应取何值？

且其收敛阶是多少？ $x_{k+1}=\varphi(x_k)$

解： $|\varphi'(x)|=|1+2\alpha x|$ 令 $|\varphi'(\sqrt{5})|=|1+2\alpha\sqrt{5}|<1$

$$-1<1+2\alpha\sqrt{5}<1 \quad\Rightarrow\quad -\frac{1}{\sqrt{5}}<\alpha<0$$

当 $\alpha=-\dfrac{1}{2\sqrt{5}}$ 时， $\varphi'(\sqrt{5})=0$ 其收敛阶 $p\geq 2$

当 $\alpha\neq-\dfrac{1}{2\sqrt{5}}$ 时，$0\neq|\varphi'(\sqrt{5})|<1$ 其收敛阶 $p=1$

例3 设 $f(x)=0$ 且 $f(\alpha)\equiv 0, f'(\alpha)\neq 0$ 证明由

$$x = x - \frac{f(x)}{f'(x)} = \varphi(x) \qquad (4\text{-}24)$$

建立的迭代格式至少是平方收敛。

证 根据定理4.6，只需证明 $\varphi'(\alpha)=0$ 。因为

$$\varphi'(\alpha) = \left[x - \frac{f(x)}{f'(x)}\right]'_{x=\alpha} = \left[1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}\right]_{x=\alpha} = \left[\frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}\right]_{x=\alpha} = 0$$

故该迭代法至少是平方收敛。

由（4-24）式建立的迭代法就是有名的Newton法。

4.2.2 Newton迭代法及其变形

用迭代法解非线性方程时，如何构造迭代函数是非常重要的，那么怎样构造的迭代函数才能保证迭代法收敛呢？不管非线性方程 $f(x)=0$ 的形式如何，总可以构造

$$x=\varphi(x)=x-k(x)f(x)\quad (k(x)\neq 0) \tag{4-25}$$

作为方程（4-17）求解的迭代函数。因为

$$\varphi'(x)=1-k'(x)f(x)-k(x)f'(x)$$

而且 $|\varphi'(x)|$ 在根 α 附近越小，其局部收敛速度越快，

故可令

$$\varphi'(\alpha)=1-k'(\alpha)f(\alpha)-k(\alpha)f'(\alpha)=1-k(\alpha)f'(\alpha)=0$$

若 $f'(\alpha)\neq 0$（即不是的重根），则

$$k(\alpha)=\frac{1}{f'(\alpha)}$$

故可取 $k(x)=\dfrac{1}{f'(x)}$ 代入（3-25）式，　得

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

定理4.7 设方程$f(x)=0$的根为 α，且 $f'(\alpha)\neq 0$ 则迭代法

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\quad (k=0,1,2,\cdots) \tag{4-26}$$

至少是平方收敛，并称（4-26）为**Newton迭代法**。

由于**Newton**迭代法带有 $f(x)$ 的导数 $f'(x)$，使用起来不太方便。为了不求导数，可用导数的近似式替代 $f'(x)$。因为

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

将它代入（4-26）的 $f'(x_k)$ 中，得

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

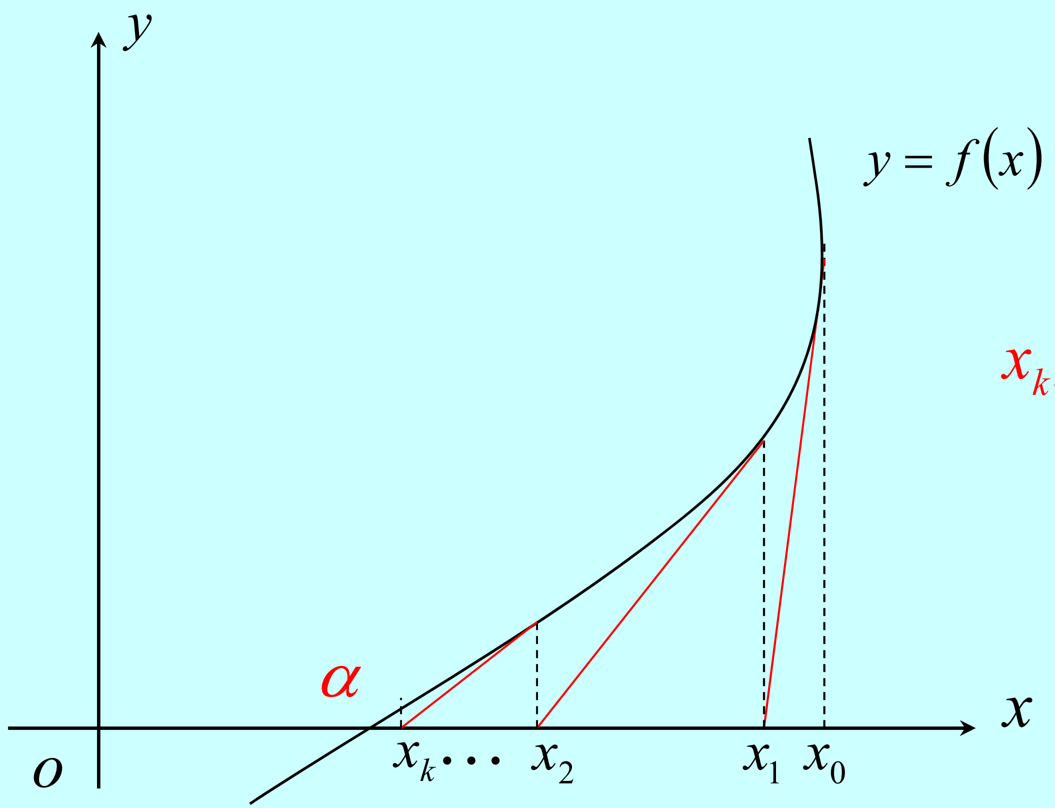
则 $x_{k+1}=$ （4-27）

（4-27）就是弦截法。由于弦截法采用了导数的近似值，故在**Newton**法和弦截法都收敛的情况下，弦截法的收敛阶为 $p=\frac{1+\sqrt{5}}{2}\approx 1.618$，低于**Newton**法，为超线性收敛。

Newton法与弦截法的几何意义如下：

使用Newton迭代格式，由 x_k 得到 x_{k+1}，在几何上就是过曲线上的B点作切线 p_1，p_1与 x 轴的交点即为 x_{k+1}。故Newton法也称切线法。

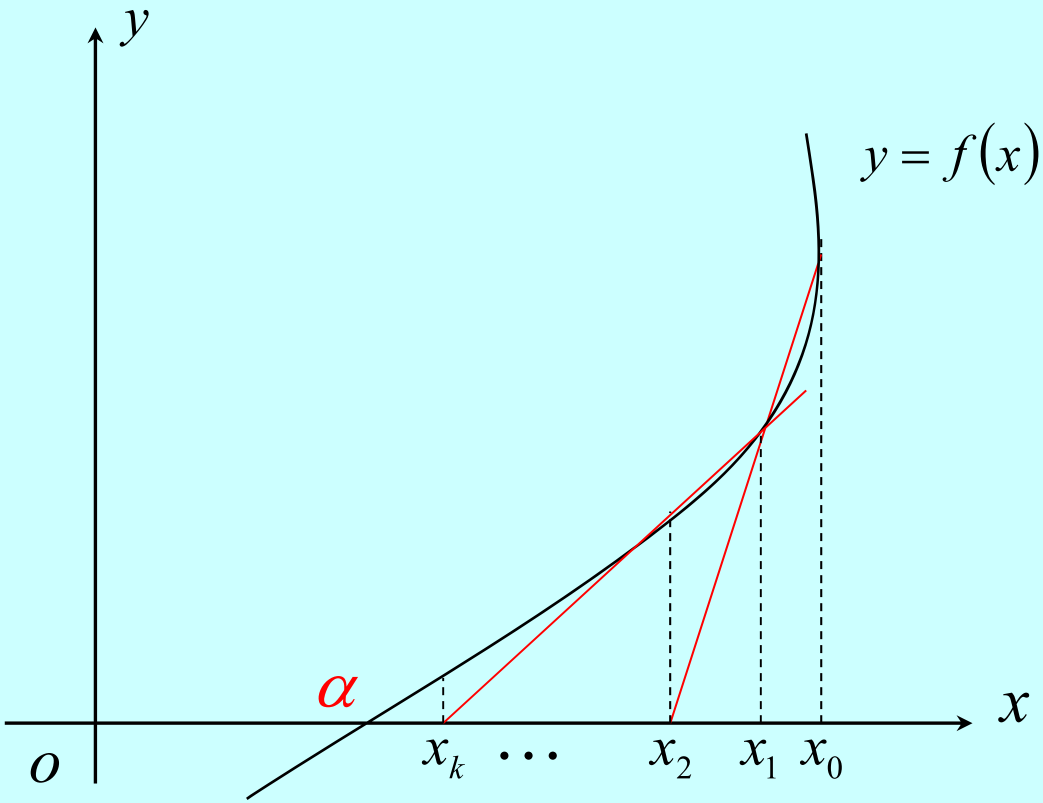
弦截法在几何上是一种以直代曲的近似方法。即用弦Q来替代曲线 AB。用 Q_i 在 x 轴上截取的值，即 Q_i 与 x 轴的交点 x_{k+i} 作为 α 的近似值，故称弦截法。



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

Newton 迭代法的几何意义

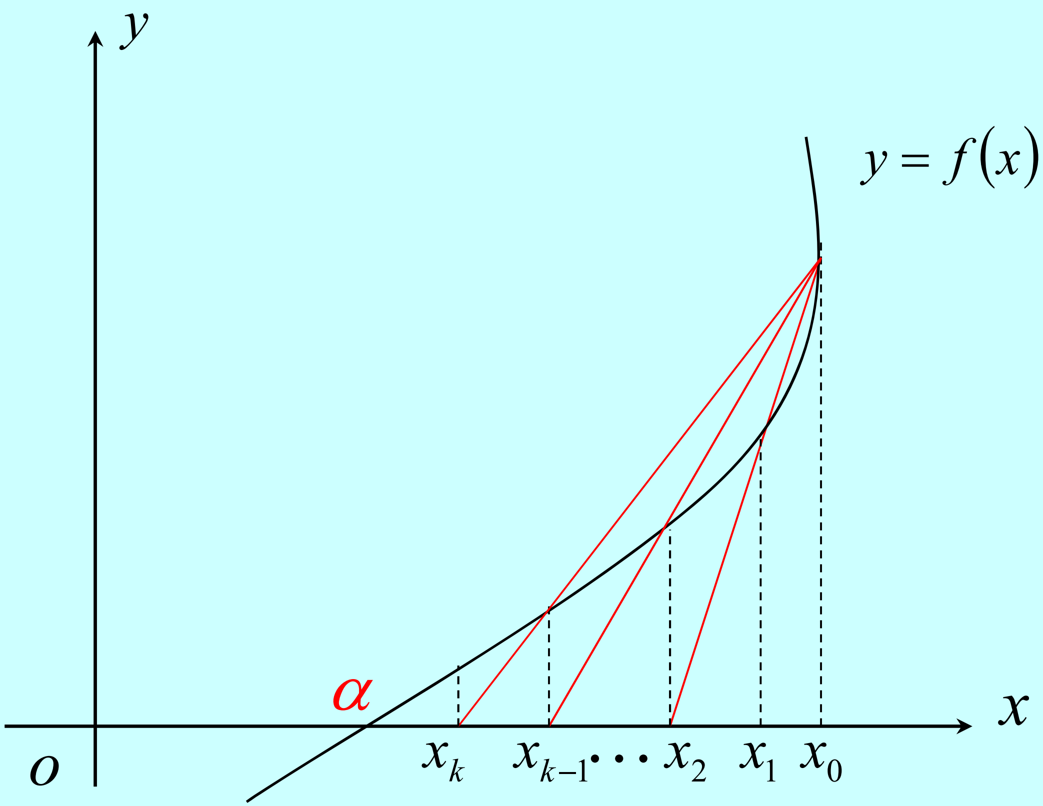
使用**Newton**迭代格式，就是过曲线上的点 x_k 作切线与 x 轴的交点即为 x_{k+1} ，故**Newton**法也称切线法。



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

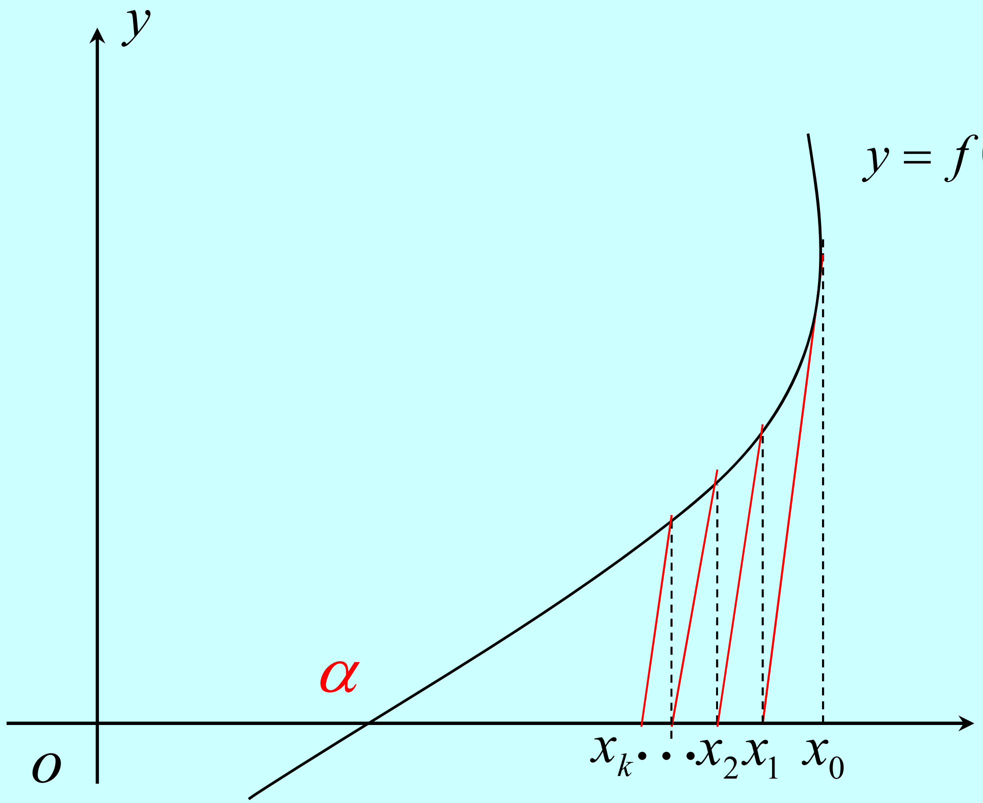
快速弦截法（割线法）的几何意义

在几何上是一种以直代曲的近似方法。即用弦来替代曲线用在轴上截取的值，即弦与 x 轴的交点 x_k 作为 α 的近似值，故称弦截法。



$$x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k - x_0)f(x_k)}{f(x_k) - f(x_0)}$$

单步弦截法的几何意义



$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}$$

平行线法的几何意义

从**Newton**和弦截法的迭代格式中可以看到，弦截法虽然不需要求导数值 $f'(x)$，但是使用时需要有前两两步的值， 即开始时需要有两个初始值 x_0, x_1 ；**Newton**法虽然需求 $f'(x)$ ，但是使用时只用到前一步的值，即只需要给出一个初始值就可以进行迭代计算。由于**Newton**法的收敛性是在根 α 附近讨论的，因此，初始值的选取与**Newton**法的收敛很有关系， 使用时必须充分注意。

例4　用**Newton**法和弦截法分别计算方程

$$f(x) = x^3 - x - 1 = 0$$

在 $x = 1.5$ 附近的根 α 。

解　（1）使用**Newton**法，并取 $x_0 = 1.5$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^3 - x_k - 1}{3x_k^2 - 1} \qquad (4\text{–}28)$$

$$x_1 = x_0 - \frac{x_0^3 - x_0 - 1}{3x_0^2 - 1} = 1.5 - \frac{(1.5)^3 - 1.5 - 1}{3(1.5)^2 - 1} \approx 1.34783$$

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1^3 - x_1 - 1}{3x_1^2 - 1} \approx 1.32520$$

$$x_3 = x_2 - \frac{x_2^3 - x_2 - 1}{3x_2^2 - 1} \approx 1.32472$$

$$x_4 = x_3 - \frac{x_3^3 - x_3 - 1}{3x_3^2 - 1} \approx 1.32472$$

迭代3次就得到具有6位有效数字的结果。

（2）使用弦截法，并取 $x_0 = 1.5, x_1 = 1.4$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1}) = x_k - \frac{x_k^3 - x_k - 1}{x_k^2 + x_{k-1}x_k + x_{k-1}^2 - 1}$$

$$x_2 = 1.4 - \frac{(1.4)^3 - 1.4 - 1}{(1.4)^2 + 1.4 \times 1.5 + (1.5)^2 - 1} \approx 1.33522$$

$$x_3 = 1.33522 - \frac{(1.33522)^3 - 1.33522 - 1}{(1.33522)^2 + 1.33522 \times 1.4 + (1.4)^2 - 1} \approx 1.32541$$

（3）取 $x_0=0$ ， 使用**Newton**法计算方程的根。使用公式（3-23）进行迭代计算后得

$$x_1=-1, x_2=-0.5, \quad x_3\approx 0.33, \quad x_4\approx -1.44$$

这个结果不但偏离所求的根， 而且还看不出它的收敛性。 从中可知，初始值的选取对**Newton**法是否收敛的重要性。

使用**Newton**法时，为了防止迭代发散， 我们在迭代格式中附加一个条件：

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

即要求 $|f(x_k)|$ 的值单调下降。为此，引入 $0<\lambda\le 1$，建立

$$x_{k+1}=x_k-\lambda\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\quad 0<\lambda\le 1 \qquad （4-29）$$

使 $|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$。其中 λ 称下山因子。称迭代法（4-29）为**Newton**下山法。

下山因子的选择一般采用试算法。即由迭代得到计算值 x_k 后，取不同的 λ 值试算，例如取 $\lambda=1,\frac{1}{2}\frac{1}{2^2}\frac{1}{2^3}\cdots$，用（4-29）进行试算，对用公式（4-29）算出的 x_{k+1}

均需要接着计算 $f(x_{k+1})$ ，如果 $|f(x_{k+1})|<|f(x_k)|$ 成立，则计算值 x_{k+1} 即为第 $k+1$ 步的迭代值。再取 $\lambda=1,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2^2}\cdots$ 用求得的 x_{k+1} 和（4-29）仿照前面的过程计算第 $k+2$ 步的迭代值。如果计算过程中碰到一个迭代值 x_k 取不到满足要求的 λ 值，则称“下山失败”需要另取初始值 x_0 ，仿照上述过程重算。若 $|f(x_k)|<\varepsilon_1$ 或 $|x_{k+1}-x_k|<\varepsilon_2$ （其中 ε_1 和 ε_2 是事先给定的精度要求值）时，迭代终止，并取 $\alpha\approx x_{k+1}$ 作为根的计算值；如果取不到满足要求的 x_0 迭代终止。

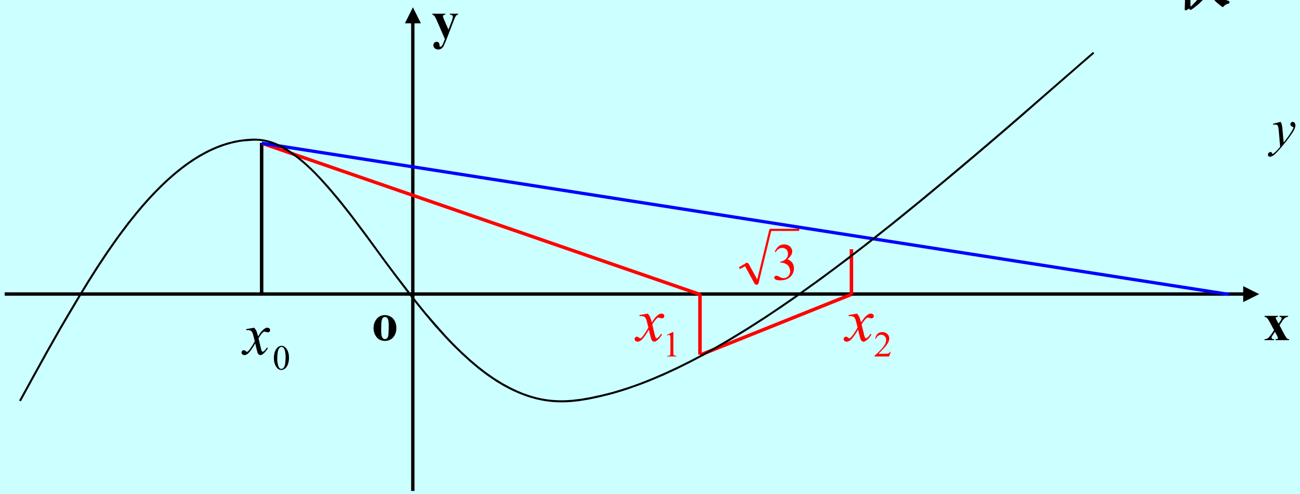
例5　用**Newton**下山法求方程

$$f(x)=\frac{x^3}{3}-x\ =0$$

的一个根。取 $x_0=-0.99$，终止条件：$|x_k-x_{k-1}|\le 10^{-5}$。

Newton下山法迭代公式：$x_{k+1}=x_k-\lambda\dfrac{x_k^3-3x_k}{3\left(x_k^2-1\right)}$，$\left|f\left(x_{k+1}\right)\right|<\left|f\left(x_k\right)\right|$

取 $\lambda=1,\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{4},\cdots$



如果不用下山法，取 $x_0 = -0.99$ ，使用**Newton**法进行迭代，从图中的动态轨迹显示，是难于求出根的。

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\frac{x_k^3}{3} - x_k}{x_k^2 - 1}$$

```
x_0=-0.99
x_1=32.5058
x_2=21.6911
x_3=14.4915
x_4=9.70724
x_5=6.54091
```

下表是使用**Newton下山法**计算的结果。

k	λ	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$
0		**-0.99**	0.66657	-0.01990	-33.49589
1	1	32.50598	11416.51989		
	1/2	15.75799	1233.55136		
	1/4	7.38400	126.81613		
	1/8	3.19700	7.69495		
	1/16	**1.10350**	-0.65559	0.21771	-3.01131
2	1	4.11481	19.10899		
	1/2	2.60916	3.31162		
	1/4	**1.85633**	0.27594	2.44594	0.11281
3	1	**1.74352**	0.02316	2.03985	0.01135
4	1	**1.73217**	0.00024	2.00041	0.00012
5	1	**1.73205**	0.00000	2.00000	0.00000
6	1	**1.73205**			

由 $|x_6 - x_5| \le 10^{-5}$ ，迭代终止。

注意： 1） 由 x_k 求 x_{k+1} 是根据（4-29）得到；

2） 在上表中的 x_i 例如 x_2 是根据下式求出

$$x_2 = x_1 - \lambda \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 1.10350 - (-3.01131) = 4.11481$$

4.2.3 多根区间上的逐次逼近法

方程 $f(x)=0$ 在多根区间 $[a,b]$ 上，根的情况主要有两种：其一，均为单根；其二，有重根。 现在分别讨论如下：

一、$[a,b]$ 是 $f(x)=0$ 仅有单根的多根区间

1）求单根区间

设 $f(x)=0$ 在 $[a,b]$ 上有 m 个根。将 $[a,b]$ 分成 n 个小区间：$[b_0,b_1],[b_1,b_2],\cdots,[b_{n-1},b_n]$ ，（其中 $b_0=a, b_n=b$）

然后计算 $f(b_i)(i=1,2,\cdots,n)$ 的值，当 $f(b_i)\cdot f(b_{i+1})<0$ 时，$f(x)=0$ 在 $[b_i,b_{i+1}]$ 上至少有一个根。

如果有根区间的个数确为 m，则所得到的有根区间就都是单根区间。如果有根区间的个数小于 m 时，再将有些小区间对分，设对分点为 $b_{i+\frac{1}{2}}$，然后计算 $f(b_{i+\frac{1}{2}})$ 再搜索有根区间，直到有根区间的个数是 m 为止。

2）在单根区间 $[c,d]$ 上求根

单根区间上求根的方法在前面已作介绍。在此介绍一种根的搜索法，它可用于求迭代法的初始值，也可用于求 $f(x)=0$ 的近似根。

将区间 $[c,d]$ 对分，设对分点（即区间中点）为 $x_0=\frac{1}{2}(c+d)$ ，计算 $f(x_0)$ ，如果 $f(x_0)$ 与 $f(c)$ 同号，说明方程的根 α 在 x_0 的右侧，此时令 $x_0=c_1, d=d_1$ 否则令 $c=c_1, x_0=d_1$ 。不管是那种情况，新的有根区间为 $[c_1,d_1]$ ，其长度为原来区间 $[c,d]$ 的一半。

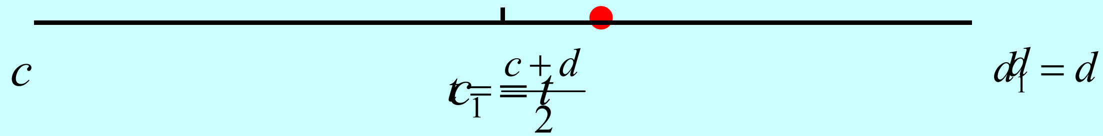
用同样方法可将含根区间的长度再压缩一半。如此继续下去，可使有根区间为 $[c_n, d_n]$ ，其长度为

$$d_n - c_n = \frac{1}{2^n}(d - c)$$

只要 n 足够大， 有根区间 $[c_n, d_n]$ 的长度就足够小，当 $d_n - c_n$ 达到根的精度要求时， 取

$$x_n = \frac{1}{2}(d_n + c_n)$$

就可作为根 α 的近似值。这种搜索根的方法称二分法。



$$f(c)\cdot f(t) > 0 \qquad f(d)\cdot f(t) < 0$$

$$[c, d] \supset [c_1, d_1] \supset \cdots \supset [c_n, d_n]$$

$$|x - \alpha| < \frac{d-c}{2^n}$$

如果发现用二分法求根的过程中，有根区间趋于零的速度较慢，此时，可以从某个区间 $[c_i, d_i]$ 开始使用其他迭代法求解，将 c_i 或 d_i 作为迭代法的初始值。

例6　求 $f(x)=x^3-11.1x^2+38.79x-41.769=0$ 在[0，8]中的三个根。

解　首先将有根区间[0，8]三等分，得

[0，2.7]　　[2.7，5.4]　　[5.4，8]

搜索单根区间：

$$[0,2.7] \qquad f(0)\cdot f(2.7)=(-41.768)\cdot(1.728)<0$$

$$[2.7,5.4] \qquad f(2.7)\cdot f(5.4)=(1.728)\cdot(1.485)>0$$

$$[5.4,8] \qquad f(5.4)\cdot f(8)=(1.485)\cdot(70.151)>0$$

$$[2.7,4] \qquad f(2.7)\cdot f(4)=(1.7)\cdot(-0.209)<0$$

$$[4,5.4] \qquad f(4)\cdot f(5.4)=(-0.2)\cdot(1.4)<0$$

故 $f(x)=0$ 的三个根分别在区间 $[0,\ 2.7]$, $[2.7,\ 4]$, $[4,\ 5.4]$ 中。用计算单根的方法，可分别求出三个区间上的计算根。

二、$f(x)=0$ 在 $[a,b]$ 上有重根

设 α 是 $f(x)=0$的 m 重根，其中$m\geq 2$整数， 则有

$$f(x)=(x-\alpha)^m g(x) \qquad 且g(\alpha)\neq 0$$

此时 $f(\alpha)=f'(\alpha)=f''(\alpha)=\cdots=f^{(m-1)}(\alpha)=0, f^{(m)}(\alpha)\neq 0$

在这种情况下，如果 $f'(x_k)\neq 0$，虽然使用**Newton**法也可以继续算下去，但是由于**Newton**法在定理3. 7中的条件$f'(\alpha)\neq 0$不满足，它的收敛速度可能较慢。事实上，由 $f(x)=(x-\alpha)^m g(x)$ 且$g(\alpha)\neq 0$

$$\varphi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}=x-\frac{(x-\alpha)^m g(x)}{m(x-\alpha)^{m-1}g(x)+(x-\alpha)^m g'(x)}$$

则 $$\varphi'(x)=1-\frac{g(x)}{m\cdot g(x)+(x-\alpha)g'(x)}-(x-\alpha)\cdot\left[\frac{g(x)}{m\cdot g(x)+(x-\alpha)g'(x)}\right]'$$

$$\varphi'(\alpha)=1-\frac{g(\alpha)}{m\cdot g(\alpha)+0}-0=1-\frac{1}{m}\neq 0$$

从而得到在这种条件下的**Newton**法如果收敛，它必是线性收敛的。为了提高收敛的阶， 可取

$$\varphi(x)=x-m\frac{f(x)}{f'(x)} \qquad （4-31）$$

从而 $\varphi'(\alpha)=1-\dfrac{m}{m}=0,$

故迭代法（4-31）至少是平方收敛的。

当m不知道时，可采用试探法或其他变形公式，在此就不介绍了。

例7 求方程 $f(x)=x^4-4x^2+4=0$ ，二重根$\sqrt{2}$的计算值。

解 （1） 使用Newton法

$$x_{k+1}=\varphi(x_k)=x_k-\frac{x_k^4-4x_k^2+4}{4x_k^3-8x_k}=x_k-\frac{x_k^2-2}{4x_k}$$

（2） 使用

$$x_{k+1} = x_k - 2\frac{x_k^2 - 2}{4x_k} = x_k - \frac{x_k^2 - 2}{2x_k}$$

上述两种方法都取初始值 $x_0 = 1.5$ ， 计算结果见下表。

x_i	方法（1）结果	方法（2）结果
1	1.453333	1.416667
2	1.436607	1.414216
3	1.425498	1.414214

从上面两种方法的计算解中可以看出，方法（2）的收敛速度较方法（1）快。