4. 非线性方程组的不动点迭代法

设 $F: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$，把方程组 $F(x)=0$ 改写成等价的不动点形式

$$x = \Phi(x)$$

$\Phi: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 为连续函数.

相应的构造不动点迭代

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

定义 5.4.1 设 $\Phi: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，若存在 $L \in (0,1)$ 使得

$$\|\Phi(y) - \Phi(x)\| \le L\|x-y\|, \quad \forall x, y \in D_0 \subset D$$

则称 Φ 在 D_0 上是一个压缩映射

定理 5.4.1 设 $\Phi: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$，如果 Φ 在凸域 $D_0 \subset D$ 可导 $\Phi(x) = (\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_n(x))^T$ 满足 存在 $L \in (0,1)$

$$\left|\frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j}\right| \le \frac{L}{n}, \quad \forall x \in D_0$$

则 Φ 在 D_0 上对 ∞ 范数是压缩的.

证明：$\forall x, y \in D_0$ 由微分中值定理

$$\Phi(y) - \Phi(x) = \begin{bmatrix} \nabla\varphi_1(x+\xi_1 h) \\ \nabla\varphi_2(x+\xi_2 h) \\ \vdots \\ \nabla\varphi_n(x+\xi_n h) \end{bmatrix} h$$

其中 $h = y-x$，$\xi_i \in (0,1)$，$i = 1, 2, \cdots, n$

令 $A=[a_{ij}]\in\mathbb{R}^{n\times n}$， $a_{ij}=\dfrac{\partial\varphi_i(x+\xi_i h)}{\partial x_j}$

因为 D_0 是凸集，所以 $x+\xi_i h\in D_0$，$i=1,2,\cdots,n$

$$\|A\|_\infty=\max_{1\le i\le n}\left(\sum_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial\varphi_i(x+\xi_i h)}{\partial x_j}\right|\right)\le n\cdot\frac{L}{n}=L$$

所以

$$\|\Phi(y)-\Phi(x)\|_\infty\le\|A\|_\infty\|y-x\|_\infty\le L\|y-x\|_\infty$$

定理 5.4.2　$\Phi: D\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$，在闭集 $D_0\subset D$ 中压缩

且 $\Phi(x)\in D_0$，$\forall x\in D_0$

则 Φ 在 D_0 中存在唯一的不动点 x^*，且对任意 $x^0\in D_0$，不动点迭代收敛到 x^*，并

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

证明：$\forall x^0\in D_0$ 因为 Φ 把 D_0 映为自身，所以有

$x^k\in D_0$ 并且

$$\|x^{k+1}-x^k\|=\|\Phi(x^k)-\Phi(x^{k-1})\|\le L\|x^k-x^{k-1}\|$$

$$\Rightarrow\|x^{k+1}-x^k\|\le L^k\|x^1-x^0\|$$

$$\begin{aligned}\|x^{k+p}-x^k\|&\le\sum_{j=1}^{p}\|x^{k+j}-x^{k+j-1}\|\\&\le(L^{p-1}+\cdots+L+1)\|x^{k+1}-x^k\|\\&\le\frac{1}{1-L}\|x^{k+1}-x^k\|\le\frac{L^k}{1-L}\|x^1-x^0\|\end{aligned}$$

由此可得 $\{x^k\}$ 为 Cauchy 列 所以存在 $x^* \in \mathbb{R}^n$，使得 $\lim\limits_{k\to\infty} x^k = x^*$

又因为 D_0 为闭集，有 $x^* \in D_0$ 且

$$x^* = \lim_{k\to\infty} x^k = \lim_{k\to\infty} \Phi(x^{k-1}) \underset{\uparrow}{=} \Phi(x^*)$$

Φ连续

定义 5.4.2 $\Phi: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$，$x^*$ 为 Φ 的一个不动点，若存在 x^* 的一个邻域 $S \subset D$，对一切 $x^0 \in S$ 迭代法产生的序列 $\{x^k\} \subset S$，$\lim\limits_{k\to\infty} x^k = x^*$，则称迭代法局部收敛

定义 5.4.3. 设向量序列 $\{x^k\}$ 收敛于 x^*，若存在 $p \geq 1$ 及 $c > 0$ 使

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|^p} = c$$

则称 $\{x^k\}$ p阶收敛

若存在 $p \geq 1$ 及 $c > 0$，以及整数 $K > 0$，使得当 $k > K$ 时

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq c\, \|x^k - x^*\|^p$$

则称 $\{x^k\}$ 至少p阶收敛

定理 5.4.3 设 $\Phi: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$，$x^* \in D$ 是 Φ 的不动点，且 Φ 在 x^* 可导 满足

$$\rho(\Phi'(x^*)) = \sigma < 1$$

则存在开球 $S=S(x^*,\delta)\subset D$，$\forall x^0\in S$，迭代法产生的序列 $\{x^k\}$ 收敛到 x^*

5. 方程组的 Newton 法和拟 Newton 法

考虑方程组 $F(x)=0$

已知 x^k 是一个近似解。由一阶 Taylor 近似

$$0=F(x^*)\approx F(x^k)+F'(x^k)(x^*-x^k)$$

由此解得新的近似解，记为 x^{k+1}

$$\boxed{x^{k+1}=x^k-\left(F'(x^k)\right)^{-1}F(x^k)}$$

定理 5.5.1 设 $F: D\subset\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$，$x^*\in D$ 满足 $F(x^*)=0$ 在 x^* 的开邻域 $S_0\subset D$，F 可导，$F'(x)$ 连续且 $F'(x^*)$ 可逆 则

(1) 存在闭球 $B(x^*,\delta)\subset S_0$ 使得 Newton 迭代对 $\forall x\in B(x^*,\delta)$ 有意义

(2) Newton 法产生的序列 $\{x^k\}$ 局部收敛于 x^*，且是超线性收敛

(3) 若存在 $\gamma>0$ 使得

$$\|F'(x)-F'(x^*)\|\le\gamma\|x-x^*\|,\quad \forall x\in S$$

则 $\{x^k\}$ 至少平方收敛

证明：(1) 因为 $F'(x^*)$ 可逆，令 $\alpha = \|F'(x^*)^{-1}\|$

$F'(x)$ 在 x^* 处连续，存在 $\delta>0$

$\forall x \in B(x^*,\delta) \subset S_0$ 有

$$\|F'(x) - F'(x^*)\| < \frac{1}{2\alpha}$$

所以有 $F'(x)$ 可逆 且

$$\|F'(x)^{-1}\| \le \frac{\alpha}{1-\frac{\alpha}{2\alpha}} = 2\alpha, \qquad \forall x \in B(x^*,\delta)$$

(2) $\|x^{k+1} - x^*\|$

$= \|F'(x^k)^{-1}(F(x^k) + F'(x^k)(x^*-x^k))\|$

$\le 2\alpha \|F(x^*) - F(x^k) - F'(x^k)(x^* - x^k)\|$

$= 2\alpha\|F(x^*) - F(x^k) - F'(x^*)(x^*-x^k) + (F'(x^*) - F'(x^k))(x^*-x^k)\|$

$\le 2\alpha\|F(x^k) - F(x^*) - F'(x^*)(x^k - x^*)\| + 2\alpha\|F'(x^*) - F'(x^k)\|\|x^k - x^*\|$

由于 $F'(x^*)$ 存在 $\forall \varepsilon>0$，$\exists \delta_1(\varepsilon)>0$ 使得 $\forall x\in B(x^*,\delta_1(\varepsilon))$

$$\|F(x) - F(x^*) - F'(x^*)(x-x^*)\| \le \varepsilon\|x - x^*\|,$$

由 $F'(x)$ 在 x^* 的连续性 $\exists \delta_2(\varepsilon)>0$ 使得 $\forall x \in B(x^*,\delta_2(\varepsilon))$

$$\|F'(x) - F'(x^*)\| \le \varepsilon$$

取 $\varepsilon = \frac{1}{8\alpha}$，$\tilde{\delta} = \min\{\delta_1(\frac{1}{8\alpha}), \delta_2(\frac{1}{8\alpha})\}$

若 $x^k \in B(x^*, \tilde{\delta})$ 有

$$\|x^{k+1} - x^*\| \le \frac{1}{2}\|x^k - x^*\|$$

由此可得 $\{x^k\}$ 局部收敛，即 $\lim\limits_{k\to\infty} x^k = x^*$

则 $\forall \varepsilon>0$，$\exists N>0$ 使得 $\forall k>N$ 有

$$\|x^k - x^*\| < \min\{\delta_1(\frac{\varepsilon}{4\alpha}), \delta_2(\frac{\varepsilon}{4\alpha})\}$$

$$\Rightarrow \quad \|x^{k+1}-x^*\| \le \varepsilon \|x^k - x^*\|$$

$$\Rightarrow \quad \lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|} = 0$$

即 $\{x^k\}$ 超线性收敛

(3) 令 $g(t) = F(x^* + t(x^k - x^*))$, $t \in [0,1]$

$g'(t) = F'(x^* + t(x^k - x^*))(x^k - x^*)$, $t \in [0,1]$

且

$$\|g'(t) - g'(0)\| \le \|F'(x^* + t(x^k - x^*)) - F'(x^*)\| \|x^k - x^*\|$$

$$\le \gamma t \|x^k - x^*\|^2$$

从而有

$$\|F(x^k) - F(x^*) - F'(x^*)(x^k - x^*)\|$$

$$= \|g(1) - g(0) - g'(0)\|$$

$$= \left\| \int_0^1 g'(t) - g'(0)\, dt \right\|$$

$$\le \int_0^1 \|g'(t) - g'(0)\|\, dt$$

$$\le \int_0^1 \gamma t \|x^k - x^*\|^2 dt = \frac{1}{2}\gamma \|x^k - x^*\|^2$$

由此可得

$$\|x^{k+1} - x^*\| \le \alpha\gamma \|x^k - x^*\|^2 + 2\alpha\gamma \|x^k - x^*\|^2$$

$$= 3\alpha\gamma \|x^k - x^*\|^2$$

所以 $\{x^k\}$ 至少二阶收敛

• 拟 Newton 法

令

$$x^{k+1} = x^k - A_k^{-1} F(x^k)$$

其中 A_k 是 $F'(x^k)$ 的近似

A_{k+1} 满足下面的条件

$$A_{k+1} = A_k + \Delta A_k,$$

$$A_{k+1}(x^{k+1} - x^k) = F(x^{k+1}) - F(x^k)$$

想法：取 ΔA_k 为满足上述约束中 Frobenius 范数最小的。即

$$\Delta A_k = \underset{A \in Q}{\arg\min} \|A\|_F$$

$$Q = \{ A \in \mathbb{R}^{n \times n} : (A_k + A) p^k = g^k \}$$

$$p^k = x^{k+1} - x^k, \quad g^k = F(x^{k+1}) - F(x^k)$$

考虑优化问题

$$\min_{A \in \mathbb{R}^{n \times n}} \|A\|_F, \quad \text{s.t.} \quad A p^k = \tilde{g}^k = g^k - A_k p^k$$

最优解为 $A = (g^k - A_k p^k)(p^k)^T / \|p^k\|_2^2$

$\boxed{\text{解满足} \quad \operatorname{rank}(A) = 1}$

由此可得 Broyden 秩 1 方法：

$$x^{k+1} = x^k - A_k^{-1} F(x^k)$$

$$p^k = x^{k+1} - x^k, \quad g^k = F(x^{k+1}) - F(x^k)$$

$$A_{k+1} = A_k + \frac{(g^k - A p^k)(p^k)^T}{\|p^k\|_2^2}$$

引理 5.5.1 (Sherman-Morrison 公式) $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$

A 非奇异, $u, v \in \mathbb{R}^n$ 当且仅当

$1 + v^T A^{-1} u \neq 0$ 时 $A + uv^T$ 可逆, 并且

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

更一般地有 Woodbury 公式

$$(A + UCV^T)^{-1} = A^{-1} - A^{-1} U (C^{-1} + V^T A^{-1} U)^{-1} V^T A^{-1}$$

利用 Sherman - Morrison 公式可得

逆 Broyden 秩 1 方法

$$x^{k+1} = x^k - B_k F(x^k)$$

$$p^k = x^{k+1} - x^k, \quad g^k = F(x^{k+1}) - F(x^k)$$

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(p^k - B_k g^k)(p^k)^T B_k}{(p^k)^T B_k g^k}$$