第一章 非线性方程与方程组的数值解法

刘文杰

哈尔滨工业大学数学学院 http://homepage.hit.edu.cn/LiuWenjie



考虑下面的方程

$$f(x) = 0.$$

如果 f(x) 是一次多项式,则称为**线性方程**,否则就称为**非线性方程**.一类常见的重要非线性方程就是代数方程,即

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n = 0,$$

其中 a_0, a_1, \ldots, a_n 是给定的数 (n > 1) 是非线性方程, n = 1 是线性方程) . 由代数学基本定理可知, 代数方程在复数域中存在 n 个解 (如果有相同的则计算重数). 当 n = 1, 2, 3, 4 时, 存在相应的求根公式, 但当 $n \ge 5$ 时, 不存在一般的求根公式, 此时只能通过数值方法求解.

给定方程 f(x) = 0

- 如果有 α 使得 $f(\alpha) = 0$, 则称 α 为 f(x) = 0 的根 (解) 或 f(x) 的零点.
- 设有正整数 r 使得

$$f(x) = (x - \alpha)^r g(x),$$

旦 $g(\alpha) \neq 0$, 则当 $r \geq 2$ 时, 称 α 为 f(x) = 0 的 r 重根; 当 r = 1 时, 称 α 为 f(x) = 0 的单根。

• 若 α 为f(x)=0的r重根,则

$$f(\alpha) = f'(\alpha) = \dots = f^{(r-1)}(\alpha) = 0, f^{(r)}(\alpha) \neq 0$$

• 有解区间: 若 [a,b] 内至少存在 f(x)=0 的一个实数解 (不讨论复数解), 则称 [a,b] 为有解区间。

我们研究内容就是在有解的前提下求出方程 f(x) = 0 的近似解.

 $f(x)=(x-\alpha)^rg(x),\,g(x)$ 的 r 阶导数连续, 对 f(x) 求 $n\leq r$ 次导数, 使用高阶导 公式有

$$f^{(n)}(x) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} [(x-\alpha)^r]^{(k)} g^{(n-k)}(x),$$

其中

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$$

$$[(x-\alpha)^r]^{(k)} = r(r-1)\cdots(r-k+1)(x-\alpha)^{r-k}, \quad k \le r$$

所以

$$f(\alpha) = f'(\alpha) = \dots = f^{(r-1)}(\alpha) = 0, f^{(r)}(\alpha) \neq 0$$

求根步骤

- (i) 根存在性 (我们只考虑实根情况): 方程是否有根? 如果有,有几个根?
- (ii) 根的隔离: 找出每个有且仅有一个根的子区间,有根子区间内的任一点都可看成是该根的一个近似值.
- (iii) 根的精确化: 直到足够精确为止.

非线性方程可能存在多个或无穷多个解,因此要强调求解区域。

求根方法

- 二分 (Bisection) 法
- 迭代法: 单点迭代法 (不动点迭代, Newton 迭代法)、多点迭代法 (弦截法)

§1.1.2 求实根的二分 (Bisection) 法

二分法基本思想

设 f(x) = 0 在区间 [a,b] 内至少有一个实数解. 对分法的基本思想就是将这个有解区间进行对分, 并找出解所在的小区间, 记为新的有解区间, 然后再对这个小区间进行对分. 依次类推, 直到有解区间的长度足够小为止, 此时有解区间内的任意一点都可以作为 f(x) = 0 的近似解 (实际计算中通常取中点)。

二分法数学原理

定理 (介值定理) 设 f(x) 在 [a,b] 内连续,且 f(a)f(b) < 0,则在 (a,b) 内至少存在一点 ξ ,使得 $f(\xi) = 0$.

- (i) 取 [a,b] 的中点 $x_0 = \frac{a+b}{2}$, 计算 $f(x_0)$ 的值.
 - 1. 若 $f(x_0) = 0$, 则 x_0 为方程 f(x) = 0 的根, 计算结束.
 - 2. 若 $f(x_0) \neq 0$, 如果 $f(x_0)$ 与 f(a) 同号, 则记 $a_1 = x_0$, $b_1 = b$
 - 3. 若 $f(x_0)$ 与 f(a) 异号, 则记 $a_1 = a$, $b_1 = x_0$

 $[a_1,b_1]$ 为新的有根区间, $[a_1,b_1]\subset [a,b]$ 且 $b_1-a_1=rac{b-a}{2}$ 进行下一步.

- (ii) 取 $[a_1, b_1]$ 的中点 $x_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}$, 计算 $f(x_1)$ 的值.
 - 1. 若 $f(x_1) = 0$,则 x_1 为方程 f(x) = 0 的根,计算结束.
 - 2. 若 $f(x_1) \neq 0$, 如果 $f(x_1)$ 与 $f(a_1)$ 同号, 则记 $a_2 = x_1$, $b_2 = b_1$;
 - 3. 如果 $f(x_1)$ 与 $f(a_1)$ 异号, 则记 $a_2 = a_1$, $b_2 = x_1$.

这时 $[a_2,b_2]$ 为新的有根区间, $[a_2,b_2]\subset [a_1,b_1]\subset [a,b]$ 且 $b_2-a_2=\frac{b-a}{2^2}$ 进行下一步.

如此重复 n 次仍未找到方程的根,反复对分下去,则得一有根区间序列

 $\{[a_n,b_n]\}_{n=0}^{\infty}$,满足

$$[a,b]\supset [a_1,b_1]\supset\cdots\supset [a_n,b_n]\supset\cdots$$

ii)

$$b_n - a_n = \frac{b - a}{2^n}$$

当 $n \to \infty$ 时 $[a_n, b_n]$ 缩为一点 α ,它显然是方程 f(x) = 0 的根,当 n 很大时,可 取 $[a_n, b_n]$ 的中点 x_n 作为方程 f(x) = 0 的根 α 的近似值.

$$x_n = \frac{a_n + b_n}{2}, \quad |x_n - \alpha| \le \frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b - a}{2^{n+1}}$$

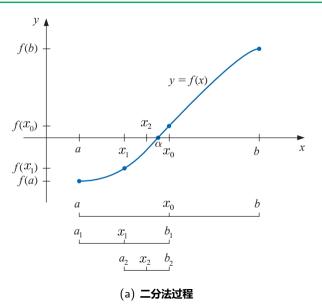
给定精度 ε

$$\frac{b-a}{2^{n+1}} \le \varepsilon \Leftrightarrow \frac{\ln(b-a) - \ln \varepsilon}{\ln 2} - 1 \le n$$

一般取 $n = \left[\frac{\ln(b-a) - \ln \varepsilon}{\ln 2} - 1\right]$, [x] 代表大于等于 x 的最小整数。

常用停止条件

- $1. |f(x_n)| < \varepsilon;$
- $2. |b_n a_n| < \varepsilon;$
- 3. 最大迭代步数 $n=[rac{\ln(b-a)-\lnarepsilon}{\ln 2}-1]$, 满足此条件停止。



§1.1.2 二分法

用二分法求解时,可以先使用软件描点连线法画出 f(x) 图形,以确定一个大致的有解区间。

- 适用范围: 只适合求连续函数的单重实根或奇数重实根;
- 优点: 简单易用, 只要满足介值定理的条件, 算法总是收敛的;
- 缺点:
 - (1) 收敛速度较慢:
 - (2) 不能求复根和偶数重根;
 - (3) 只能求一个根。
- 总结:一般可先用来计算解的一个粗糙估计,然后再用其他方法进行加速,如 Newton 法.

§1.1.2 二分法: 例

例 用二分法求方程 $f(x) = e^{-x} - \sin(\frac{\pi x}{2}) = 0$ 在区间 [0,1] 内的实根的近似值,要 求误差不超过 $1/2^5$. 解

$$f(0) = 1 > 0, \quad f(1) = e^{-1} - 1 < 0$$

且 f(x) 在 [0,1] 上连续,故方程 f(x) = 0 在 (0,1) 内至少有一个根.

$$f'(x) = -e^{-x} - \frac{\pi}{2}\cos\left(\frac{\pi x}{2}\right)$$

当 $x \in [0,1]$ 时, f'(x) < 0, 从而 f(x) 在 [0,1] 上单调递减, 故在区间 (0,1) 内仅有 方程 f(x) = 0 的一个根.

(0,1) 是方程 f(x) = 0 的有根区间.

§1.1.2 二分法: 例

$$\frac{\ln 1 - \ln(2^{-5})}{\ln 2} - 1 = 4 \le n$$

用二分法计算结果见下表:

取
$$x_4 = \frac{1}{2}(0.4375 + 0.5) = 0.46875$$
, 其误差限为 $|x_4 - \alpha| \le \frac{1}{2^5}$

§1.2 不动点迭代法: 基本思想

基本思想

将方程 f(x) = 0 改写成等价形式 $\varphi(x) - x = 0$ 或

$$x = \varphi(x) \tag{1}$$

基于该等价方程,构造出不动点迭代的一般迭代格式:

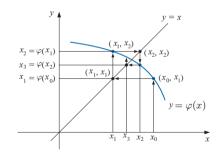
$$x_{i+1} = \varphi(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \cdots,$$
 (2)

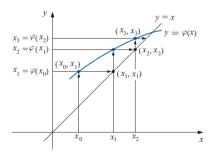
其中 x_0 为选取的迭代初始值. 这就是不动点迭代法 (Fixed-Point iteration), 简 称迭代法, $\varphi(x)$ 称为迭代函数。

§1.2 不动点迭代法

不动点迭代将方程求解转化为函数求值,后者显然要容易很多。

几何含义: 曲线 $y = \varphi(x)$ 与直线 y = x 的交点





(b) 不动点迭代过程

§1.2 不动点迭代法

常用停止条件

- **1.** $|f(x_i)| < \varepsilon$;
- **2.** $|x_{i+1} x_i| < \varepsilon$;
- 3. 最大迭代步数,满足此条件停止,一般是迭代序列发散。

迭代法收敛或发散

设 $\varphi(x)$ 连续, 不动点迭代生成的点列为 $x_0, x_1, \ldots, x_i, \ldots$ 如果存在 α 使得

$$\lim_{i \to \infty} x_i = \alpha,$$

则由连续函数的性质可知

$$\alpha = \lim_{i \to \infty} x_{i+1} = \lim_{i \to \infty} \varphi(x_i) = \varphi\left(\lim_{i \to \infty} x_i\right) = \varphi(\alpha).$$

因此 α 是 $\varphi(x)$ 的一个不动点,此时我们称迭代法收敛. 如果点列 $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ 不收敛,则称不动点迭代是发散的.

定理 1.1 (不动点迭代的全局收敛性) 设 $\varphi(x)$ 满足

- (i) 当 $x \in [a,b]$ 时, $\varphi(x) \in [a,b]$;
- (ii) $\forall x_1, x_2 \in [a, b]$, 有 $|\varphi(x_1) \varphi(x_2)| \le L |x_1 x_2|$, L < 1.

则对任意初值 $x_0 \in [a,b]$, 迭代过程 $x_{i+1} = \varphi(x_i)$ 收敛于 $x = \varphi(x)$ 在 [a,b] 上的惟一根 (不动点),且有误差估计式

$$|\alpha - x_i| \le \frac{L}{1 - L} |x_i - x_{i-1}|$$

 $|\alpha - x_i| \le \frac{L^i}{1 - L} |x_1 - x_0|$

全局收敛: 收敛性与迭代初值的选取无关.

证 根的存在性: 由(ii)知 $\varphi(x)$ 连续. 令 $h(x)=x-\varphi(x)$, 由(i)知 $h(a)\leq 0, h(b)\geq 0$, 从而 h(x)=0 在 [a,b] 上有根 α ,即 $x=\varphi(x)$ 在 [a,b] 上有根 α .

根的唯一性:

设
$$x = \varphi(x)$$
 在 $[a,b]$ 上有两根 $\alpha_1, \alpha_2, \quad \alpha_1 \neq \alpha_2,$ $|\alpha_1 - \alpha_2| = |\varphi(\alpha_1) - \varphi(\alpha_2)| \leq L |\alpha_1 - \alpha_2|$ 与 $L < 1$ 矛盾. 故 $\alpha_1 = \alpha_2$

双 $\alpha_1 = \alpha_2$ 序列的收敛性:

$$|x_{i+1} - \alpha| = |\varphi(x_i) - \varphi(\alpha)| \le L |x_i - \alpha|$$
$$|x_{i+1} - \alpha| \le L^{i+1} |x_0 - \alpha|$$

由 $0 \le L < 1$ 有

$$\lim_{i \to \infty} x_i = \alpha$$

误差估计

$$|\alpha - x_i| = |\varphi(\alpha) - \varphi(x_{i-1})| \le L |\alpha - x_{i-1}|$$

$$= L |(\alpha - x_i) + (x_i - x_{i-1})| \le L |\alpha - x_i| + L |x_i - x_{i-1}|$$

$$|\alpha - x_i| \le \frac{L}{1 - L} |x_i - x_{i-1}|.$$

$$|x_{i} - x_{i-1}| = |\varphi(x_{i-1}) - \varphi(x_{i-2})| \le L |x_{i-1} - x_{i-2}|$$

$$\le L^{2} |x_{i-2} - x_{i-3}| \le \dots \le L^{i-1} |x_{1} - x_{0}|$$

$$|\alpha - x_i| \le \frac{L}{1 - L} |x_i - x_{i-1}| \le \frac{L^i}{1 - L} |x_1 - x_0|.$$

定理 1.2 设 $\varphi(x)$ 在 [a,b] 上具有一阶导数,且

- (i) 当 $x \in [a,b]$ 时, $\varphi(x) \in [a,b]$;
- (ii) $\forall x \in [a,b]$, 有 $|\varphi'(x)| \leq L < 1$

则对任意初值 $x_0 \in [a,b]$, 迭代过程 $x_{i+1} = \varphi(x_i)$ 收敛于 $x = \varphi(x)$ 在 [a,b] 上的性一根 α . 如果 $\varphi(x)$ 在 [a,b] 上的一阶导数连续,有

$$\lim_{i \to \infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{x_i - \alpha} = \varphi'(\alpha)$$
$$|\alpha - x_i| \le \frac{L}{1 - L} |x_i - x_{i-1}|$$

$$|\alpha - x_i| \le \frac{L^i}{1 - L} |x_1 - x_0|$$

证 由条件 (ii) 和微分中值定理得 $\forall x_1, x_2 \in [a, b]$, 有

$$|\varphi(x_1) - \varphi(x_2)| = |\varphi'(\xi)| |x_1 - x_2| \le L |x_1 - x_2|, \quad L < 1$$

使用微分中值定理

$$\lim_{i \to \infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{x_i - \alpha} = \lim_{i \to \infty} \frac{\varphi(x_i) - \varphi(\alpha)}{x_i - \alpha} = \lim_{i \to \infty} \varphi'(\xi_i) = \varphi'(\alpha)$$

例 为求方程 $x^3 - x^2 - 1 = 0$ 在 $x_0 = 1.5$ 附近的一个根, 设将方程改写成下列等价形式, 并建立相应的迭代公式.

- (1) $x = 1 + 1/x^2$, 迭代公式 $x_{i+1} = 1 + 1/x_i^2$;
- (2) $x^3 = x^2 + 1$, 迭代公式 $x_{i+1} = \sqrt[3]{x_i^2 + 1}$;
- (3) $x^2 = \frac{1}{x-1}$, 迭代公式 $x_{i+1} = 1/\sqrt{x_i 1}$.

试分析每种迭代公式的收敛性, 并选取一种公式求出具有四位有效数字的近似根. 解 考虑 $x_0 = 1.5$ 的邻域 [1.3, 1.6].

(1) $\stackrel{\text{d}}{=} x \in [1.3, 1, 6]$ $\text{ iff}, \ \varphi(x) = 1 + \frac{1}{x^2} \in [1.3, 1.6],$

$$|\varphi'(x)| = \left| -\frac{2}{x^3} \right| \le \frac{2}{1.3^3} \approx 0.910 = L < 1,$$

故迭代 $x_{i+1} = 1 + \frac{1}{x_i^2}$ 在 [1.3, 1.6] 上全局收敛。

定义 1.1 设方程 $x = \varphi(x)$ 有根 α , 如果存在 α 的某个 δ -邻域

$$U_{\delta}(\alpha) \triangleq \{x \in \mathbb{R} : |x - \alpha| \le \delta\},\$$

对任意初值 $x_0 \in U_\delta(\alpha)$, 迭代过程 $x_{i+1} = \varphi(x_i)$ 所产生的序列 $\{x_i\}$ 均收敛于 α , 则称迭代过程 $x_{i+1} = \varphi(x_i)$ 是局部收敛的.

全局收敛与局部收敛

局部收敛意味着只有当初值离真解足够近时,才能保证收敛.由于真解是不知道的,因此如果只具有局部收敛性,则**初值选取要求较高**,很有可能无法保证收敛.这也是局部收敛与全局收敛的最大区别.

在实际计算中,可以用其他具有全局收敛性的方法 (比如对分法) 获取一个近似解,然后再进行迭代.

定理 1.3 若 α 是 $\varphi(x)$ 的不动点,根的邻域内有一阶连续的导数,且 $|\varphi'(\alpha)| < 1$,则迭代过程 $x_{i+1} = \varphi(x_i)$ 具有局部收敛性. 证 由于 $\varphi'(x)$ 连续,和 $|\varphi'(\alpha)| < 1$,则存在一个邻域 $U_{\delta}(\alpha)$,使得对 $\forall x \in U_{\delta}(\alpha)$ 满足

$$|\varphi'(x)| \le L < 1$$

$$|\varphi(x) - \alpha| = |\varphi(x) - \varphi(\alpha)| = |\varphi'(\xi)||x - \alpha| \le |x - \alpha| \le \delta$$

所以 $\varphi(x) \in U_{\delta}(\alpha)$. 由前面定理得结论成立。

§1.2 不动点迭代法: 局部收敛阶

定义 1.2 设迭代过程 $x_{i+1}=\varphi\left(x_{i}\right)$ 产生的序列 $\{x_{i}\}_{i=0}^{\infty}$ 收敛于方程 $x=\varphi(x)$ 的根 α , 记 $\varepsilon_{i}=\alpha-x_{i}$, 若

$$\lim_{i \to \infty} \frac{|\varepsilon_{i+1}|}{|\varepsilon_i|^p} = c, \quad c > 0$$

则称迭代过程是 p 阶收敛的. 特别地

当 p=1 时, 称为线性收敛, c<1;

当 p > 1 时,称为超线性收敛;

当 p=2 时,称为二次收敛或平方收敛。

收敛阶是衡量迭代法收敛速度快慢的一个重要指标. p 越大, 收敛越快.

§1.2 不动点迭代法

定理 1.4 (收敛性定理) 若 $\varphi(x)$ 在不动点 α 的邻域内有 p(p) 为正整数) 阶连续导数,则当初值 x_0 取得充分靠近 α 时,迭代格式 $x_{i+1} = \varphi(x_i)$ 满足

$$\varphi(\alpha) = \alpha, \quad \varphi'(\alpha) = \varphi''(\alpha) = \dots = \varphi^{(p-1)}(\alpha) = 0, \quad \varphi^{(p)}(\alpha) \neq 0$$

则迭代法为 p 阶收敛, 且

$$\lim_{i \to \infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{(x_i - \alpha)^p} = \frac{1}{p!} \varphi^{(p)}(\alpha).$$

证

$$x_{i+1} = \varphi(x_i) = \varphi(\alpha) + \varphi'(\alpha) (x_i - \alpha)$$

$$+ \dots + \frac{1}{(p-1)!} \varphi^{(p-1)}(\alpha) (x_i - \alpha)^{p-1}$$

$$+ \frac{1}{p!} \varphi^{(p)}(\xi_i) (x_i - \alpha)^p$$

$$x_{i+1} - \alpha = \frac{1}{p!} \varphi^{(p)}(\xi_i) (x_i - \alpha)^p$$

§1.2 不动点迭代法

$$\lim_{i \to \infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{(x_i - \alpha)^p} = \frac{1}{p!} \varphi^{(p)}(\alpha) \neq 0$$

即 $x_{i+1} = \varphi(x_i)$ 为 p 阶收敛.

在前面的介绍的迭代法中, 计算 x_{i+1} 时, 只用到点 x_i 的值. 有时, 我们为了利用前面多个点的信息, 比如前 $\ell \geq 2$ 个点, 可以设计下面的迭代法:

$$x_{i+1} = \varphi(x_i, x_{i-1}, \dots, x_{i-\ell+1}), \quad i = \ell - 1, \ell, \ell + 1, \dots$$

我们称之为多点迭代法. 比如后面会提到的割线法和抛物线法, 都是多点迭代. 显然, 多点迭代法—开始需要给定 ℓ 个初始值, 即 $x_0, x_1, \ldots, x_{\ell-1}$.

§1.2 不动点迭代法: 单调有界收敛准则

如果数列 $\{x_i\}$ 满足条件

$$x_0 \leqslant x_1 \leqslant \cdots \leqslant x_i \leqslant x_{i+1} \leqslant \cdots,$$

则称数列 $\{x_i\}$ 是单调增加的.

如果数列 $\{x_i\}$ 满足条件

$$x_0 \geqslant x_1 \geqslant \cdots \geqslant x_i \geqslant x_{i+1} \geqslant \cdots,$$

则称数列 $\{x_i\}$ 是单调减少的. 单调增加或单调减少的数列简称单调数列.

§1.2 不动点迭代法: 单调有界收敛准则

单调有界数列必有极限

如果详细地说,则有下列性质.

1. 如果数列 $\{x_i\}$ 单调增加且有上界, 即存在数 M, 使得

$$x_i \leqslant M \quad (i = 0, 1, 2, \cdots),$$

那么 $\lim_{i\to\infty} x_i$ 必存在 (且极限 $\leq M$).

2. 如果数列 $\{x_i\}$ 单调减少且有下界, 即存在数 m, 使得

$$x_i \geqslant m \quad (i = 0, 1, 2, \cdots),$$

那么 $\lim_{i\to\infty} x_i$ 必存在 (且极限 $\geqslant m$).

例 设 $F(x) = x + c(x^2 - 3)$, 应如何选取 c 才能使迭代 $x_{i+1} = F(x_i)$ 具有局部 收敛性?

解 方程 x=F(x) 的根为 $\alpha_1=-\sqrt{3},\ \alpha_2=\sqrt{3},\ F'(x)=1+2cx$, 函数 F(x) 在根附近具有连续一阶导数,

解
$$F'(-\sqrt{3}) = |1 - 2\sqrt{3}c| < 1$$
 得 $0 < c < \frac{1}{\sqrt{3}}$

解 $F'(\sqrt{3}) = |1 + 2\sqrt{3}c| < 1$ 得 $-\frac{1}{\sqrt{3}} < c < 0$ 从而使迭代 $x_{i+1} = F(x_i)$ 具有局部收敛性, 则 $|c| < \frac{1}{1/2}$,且 $c \neq 0$.

令
$$F'(-\sqrt{3}) = 1 - 2\sqrt{3}c = 0$$
 得 $c = \frac{1}{2\sqrt{3}}$;

令
$$F'(\sqrt{3}) = 1 + 2\sqrt{3}c = 0$$
, 得 $c = -\frac{1}{2\sqrt{3}}$.

这时
$$F''(x) = 2c \neq 0$$

故当 c 取 $\pm \frac{1}{2\sqrt{3}}$ 时,为平方收敛,这时迭代收敛较快.

例 考虑迭代过程

$$x_{i+1} = \varphi(x_i), \quad \varphi(x) = \sqrt{2+x}$$

- (a) 对任意的 $x_0 > 0$, $x_0 \neq 2$ 迭代得到的单调收敛到 2.
- (b) 对任意的 $x_0 > 0$, $x_0 \neq 2$ 迭代法线性收敛。

证

(a) 当 $0 < x_0 < 2$ 时 $0 < x_1 = \sqrt{2 + x_0} < 2$ 使用归纳法可得对任意的 k > 0, $0 < x_i < 2$, 序列 $\{x_i\}$ 有界。

$$x_{i+1} - x_i = \sqrt{2 + x_i} - x_i = \frac{2 + x_i - x_i^2}{\sqrt{2 + x_i} + x_i} > 0$$

所以 $x_{i+1} > x_i$, 单调有界序列必收敛, 收敛值为 $\alpha > x_0$

$$\alpha = \sqrt{2 + \alpha}, \quad \alpha = 2.$$

当
$$x_0 > 2$$
 时同理

(b)
$$\varphi'(x) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2+x}}, \quad \varphi'(2) = \frac{1}{4}.$$

例 设 $a>0, x_0>0$, 证明: 迭代公式 $x_{i+1}=\frac{x_i(x_i^2+3a)}{3x_i^2+a}$ 是计算 \sqrt{a} 的三阶方法. 证 显然 \sqrt{a} 是方程 $x=x\left(x^2+3a\right)/\left(3x^2+a\right)$ 的根. 事实上此方程有根 $0,-\sqrt{a},\sqrt{a}$ 若 $a>0, \quad x_0>0$, 则 $x_i>0$ $(i=1,2,\ldots)$. 且,

$$\sqrt{a} - x_{i+1} = \sqrt{a} - \frac{x_i \left(x_i^2 + 3a\right)}{3x_i^2 + a} = \frac{\left(\sqrt{a} - x_i\right)^3}{3x_i^2 + a}$$

$$\sqrt{a} + x_{i+1} = \sqrt{a} + \frac{x_i \left(x_i^2 + 3a\right)}{3x_i^2 + a} = \frac{\left(\sqrt{a} + x_i\right)^3}{3x_i^2 + a}$$

$$\frac{\sqrt{a} - x_{i+1}}{\sqrt{a} + x_{i+1}} = \frac{\left(\sqrt{a} - x_i\right)^3}{\left(\sqrt{a} + x_i\right)^3} = \frac{\left(\sqrt{a} - x_{i-1}\right)^{3^2}}{\left(\sqrt{a} + x_i\right)^{3^2}} = \dots = \frac{\left(\sqrt{a} - x_0\right)^{3^{i+1}}}{\left(\sqrt{a} + x_i\right)^{3^{i+1}}}$$

$$\frac{\sqrt{a} - x_i}{\sqrt{a} + x_i} = \left(\frac{\sqrt{a} - x_0}{\sqrt{a} + x_0}\right)^{3^i}$$

令
$$q = \frac{\sqrt{a} - x_0}{\sqrt{a} + x_0}$$
 解得 $x_i = (\frac{1 - q^{3^i}}{1 + q^{3^i}})\sqrt{a}$

由 |q| < 1 有

$$\lim_{i \to \infty} x_i = \lim_{i \to \infty} \left(\frac{1 - q^{3^i}}{1 + q^{3^i}} \right) \sqrt{a} = \sqrt{a}$$

即迭代序列收敛于 \sqrt{a}

$$\lim_{i \to \infty} \frac{\sqrt{a} - x_{i+1}}{(\sqrt{a} - x_i)^3} = \lim_{i \to \infty} \frac{1}{3x_i^2 + a} = \frac{1}{4a} \neq 0$$

故此迭代式确是求 \sqrt{a} 的 3 阶方法.

§1.2 不动点迭代法

考虑迭代过程 $x_{i+1} = \varphi(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots$, 得到的序列 $\{x_i\}_{i=0}^n$.

- 1. 证明序列的收敛性:单调有界序列(判断有界性可以用归纳法或者通过计算导数判断单调区间来计算函数的界,或者不等式;单调性一般做差或者相除),数列可以写出来通项公式等; 定理 1.2.
- 求序列的收敛的值,如果数列可以写成通项公式,数列如果收敛可以直接求出来;如果是由单调有界系列得到序列的收敛性,可以设

$$\lim_{i \to \infty} x_i = \alpha$$

对迭代公式两边同时取极限

$$\lim_{i \to \infty} x_{i+1} = \lim_{i \to \infty} \varphi(x_i)$$

得 $\alpha = \varphi(\alpha)$,解出满足有界的 α .

3. 判断收敛阶:收敛性定理或者定义(可以先用收敛性定理,很多时候用定义更简单些)。

§1.2 不动点迭代法

或者计算下面极限 (p 给定)

$$\lim_{i \to \infty} \frac{\alpha - x_{i+1}}{(\alpha - x_i)^p}$$

或者

$$\lim_{i \to \infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{(x_i - \alpha)^p}$$

一般方法是直接计算,或者使用收敛性定理的结论,或者是使用泰勒公式或者 微分中值定理等

基本思想: 线性化

将 f(x) 在 x_i 处 Taylor 展开可得

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_i)^2$$

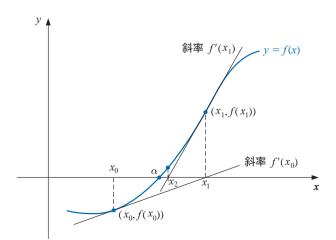
忽略二次项, 可得 $f(x) \approx P(x)$, 其中

$$P(x) \triangleq f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i).$$

用 P(x) 的零点来近似 f(x) 的零点, 并将其记为 x_{i+1} .

$$P(x_{i+1}) = 0 \Rightarrow x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

 x_{i+1} 为过点 $(x_i, f(x_i))$ 切线与 x 轴的交点。



§1.3 Newton 迭代法: 收敛性

Newton 法的迭代函数是

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

从而

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{f'(x)}{f'(x)} + \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

由此知若 α 是 f(x) = 0 的一个单根,

$$f(\alpha) = 0, f'(\alpha) \neq 0, \varphi'(\alpha) = 0, \varphi''(\alpha) = f''(\alpha)/f'(\alpha)$$

则在根 α 附近 Newton 法是局部收敛的, 并且至少是二阶收敛的, 即 p=2. 但如果 α 是 f(x)=0 的重根, 则 Newton 法仅是<mark>局部线性收敛</mark>的, 即 p=1.

§1.3 Newton 迭代法: 收敛性

定理

设 α 是 f(x) 的零点, 且 $f'(\alpha) \neq 0$, 则 Newton 法至少二阶局部收敛:

$$\lim_{i \to \infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{(x_i - \alpha)^2} = \frac{\varphi''(\alpha)}{2} = \frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)}.$$

Newton 法的优点是收敛速度快 (至少二阶局部收敛), 特别是当迭代点充分靠近精确解时. 一般来说 Newton 法只是局部收敛, 如果初值离真解太远可能就不收敛, 因此初值的选取很重要但也比较困难. 但缺点是

- 对重根收敛速度较慢, 只有线性收敛
- 对初值的选取很敏感, 要求初值相当接近真解
- 每一次迭代都需要计算导数, 难度和工作量都可能会比较大

例 研究使用 $x^2 = a$ 来求 \sqrt{a} 的 Newton 公式, 取 $x_0 > 0$. 证明: 对一切

 $i=1,2,\cdots, \quad x_i \geq \sqrt{a}$, Newton 公式产生的序列 $\{x_i\}$ 是单调递减的,从而迭代过程收敛。

证 方法 1 想办法求通项公式需要利用不动点: $f(x) = x^2 - a$ 其 Newton 公式为

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = \frac{1}{2} \left(x_i + \frac{a}{x_i} \right), x_0 > 0 \quad (i = 0, 1, 2, \ldots)$$

方程两边同时减去不动点 \sqrt{a} 和 $-\sqrt{a}$ 得

$$x_{i+1} - \sqrt{a} = \frac{1}{2} \left(x_i + \frac{a}{x_i} - 2\sqrt{a} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{(x_i - \sqrt{a})^2}{x_i}$$

$$x_{i+1} - (-\sqrt{a}) = \frac{1}{2} \left(x_i + \frac{a}{x_i} + 2\sqrt{a} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{(x_i + \sqrt{a})^2}{x_i}$$

两个方程相除得

$$\frac{x_{i+1} - \sqrt{a}}{x_{i+1} + \sqrt{a}} = \frac{(x_i - \sqrt{a})^2}{(x_i + \sqrt{a})^2} = \frac{(x_{i-1} - \sqrt{a})^{2^2}}{(x_{i-1} + \sqrt{a})^{2^2}} = \dots = \frac{(x_0 - \sqrt{a})^{2^{i+1}}}{(x_0 + \sqrt{a})^{2^{i+1}}}$$

记

$$q = \frac{x_0 - \sqrt{a}}{x_0 + \sqrt{a}}, \quad |q| < 1$$

所以

$$\frac{x_i - \sqrt{a}}{x_i + \sqrt{a}} = q^{2^i} \Rightarrow x_i = \frac{1 + q^{2^i}}{1 - q^{2^i}} \sqrt{a}$$

得迭代过程收敛,且

$$\lim_{k \to \infty} x_i = \sqrt{a}$$

证 方法 2 利用单调有界序列 (或者单调增加有上界、单调减少有下界) : 其

Newton 公式为

$$x_{i+1} = \frac{1}{2} \left(x_i + \frac{a}{x_i} \right), x_0 > 0 \quad (i = 0, 1, 2, ...)$$

因 a>0, $x_0>0$, 故 $x_i>0$ $(i=1,2,\ldots)$

$$x_{i+1} = \frac{1}{2} \left(x_i + \frac{a}{x_i} \right)$$
$$= \frac{1}{2} \left(\sqrt{x_i} - \frac{\sqrt{a}}{\sqrt{x_i}} \right)^2 + \sqrt{a} \ge \sqrt{a}$$

因此对一切 $i \geq 1$, 均有 $x_i \geq \sqrt{a}$. 利用这一结果,得

$$\frac{x_{i+1}}{x_i} = \frac{1}{2} \frac{x_i + a/x_i}{x_i} = \frac{1}{2} + \frac{a}{2x_i^2} \le \frac{1}{2} + \frac{a}{2a} = 1$$

故 $x_{i+1} \le x_i$,即 $\{x_i\}$ 单调递减. 根据单调有界原理知 $\{x_i\}$ 收敛.

14

其他证明有界性的技巧, $x_i > 0$ 利用几何平均不等式

$$x_{i+1} = \frac{1}{2} \left(x_i + \frac{a}{x_i} \right) \ge \frac{1}{2} 2 \sqrt{x_i \frac{a}{x_i}} = \sqrt{a}.$$

或者利用归纳法或者利用求导算单调区间,根据单调性算界。

单调性:可以用

$$x_{i+1} - x_i = \frac{1}{2} \left(x_i + \frac{a}{x_i} \right) - x_i = \frac{1}{2} \frac{a - x_i^2}{x_i} \le 0$$

45

知道序列收敛了,设收敛值

$$\lim_{i \to \infty} x_i = \alpha$$

由单调性和有界性得

$$\sqrt{a} \le x_i \le x_1, \Rightarrow \sqrt{a} \le \alpha \le x_1$$

$$\lim_{i \to \infty} x_{i+1} = \frac{1}{2} \lim_{i \to \infty} \left(x_i + \frac{a}{x_i} \right) \Rightarrow \alpha = \frac{1}{2} \left(\alpha + \frac{a}{\alpha} \right)$$

得

$$\alpha = \sqrt{a}$$
.

证 方法 3 利用定理 1.2:

$$\forall x \in [\sqrt{a}, x_1] \Rightarrow \varphi'(x) = \frac{1}{2}(1 - \frac{a}{x^2}) \in [0, \frac{1}{2}(1 - \frac{a}{x_1^2})]$$

得到

$$0 \le \varphi'(x) < \frac{1}{2}(1 - \frac{a}{x_1^2})$$

满足定理 1.2 的条件 (ii).

使用迭代函数导数大于的条件,可知 $\varphi(x)$ 在 $[\sqrt{a},x_1]$ 单调增加

$$\forall x \in [\sqrt{a}, x_1] \Rightarrow \varphi(x) \in [\varphi(\sqrt{a}), \varphi(x_1)]$$

$$\varphi(\sqrt{a}) = \sqrt{a}, \quad \varphi(x_1) = x_2 \le x_1 \Rightarrow \varphi(x) \in [\sqrt{a}, x_1].$$

计算收敛阶

使用定义: 迭代过程两边同时减去 α (或者 α 减去迭代过程)

$$x_{i+1} - \sqrt{a} = \frac{1}{2} \left(x_i + \frac{a}{x_i} \right) - \sqrt{a} = \frac{1}{2} \frac{(x_i - \sqrt{a})^2}{x_i}$$

显然

$$\lim_{i \to \infty} \frac{x_{i+1} - \sqrt{a}}{(x_i - \sqrt{a})^2} = \lim_{i \to \infty} \frac{1}{2} \frac{1}{x_i} = \frac{1}{2\sqrt{a}}$$

迭代过程 2 阶收敛 使用收敛性定理

选供过程 2 KNIKA

$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \left(x + \frac{a}{x} \right)$$

$$\varphi'(x) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{a}{x^2} \right) \Rightarrow \varphi'(\sqrt{a}) = 0$$

$$\varphi''(x) = \frac{1}{2} 2 \frac{a}{x^3} \Rightarrow \varphi''(\sqrt{a}) = \frac{1}{\sqrt{a}} \neq 0$$

18

例 设 a 为正实数,试建立求 $\frac{1}{a}$ 的 Newton 迭代公式,要求在迭代函数中不用除法运算,并要求当取初值 x_0 满足 $0 < x_0 < \frac{2}{a}$ 时,此算法是收敛的解 **方法 1** 考虑方程 $f(x) = \frac{1}{x} - a = 0$,则 $\frac{1}{a}$ 为此方程的根, $f'(x) = -\frac{1}{x^2}$,用 Newton 法求此方程根的迭代公式为

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = x_i(2 - ax_i) \quad (i = 0, 1, 2, ...)$$

迭代函数不含除法运算.

迭代方程两边同时减去不动点 1/a

$$x_{i+1} - \frac{1}{a} = x_i(2 - ax_i) - \frac{1}{a} \quad (i = 0, 1, 2, \ldots)$$

有

$$1 - ax_{i+1} = 1 - ax_i (2 - ax_i) = (1 - ax_i)^2 \quad (i = 0, 1, 2, \dots)$$

递推可得

$$1 - ax_i = (1 - ax_0)^{2^i} \quad (i = 0, 1, 2, \ldots)$$

解得

$$x_i = \frac{1}{a}[1 - (1 - ax_0)^{2^i}]$$
 $(i = 0, 1, 2, \cdots)$

当

$$0 < x_0 < \frac{2}{a}$$

时,

$$|1 - ax_0| < 1$$

从而

$$\lim_{i \to \infty} (1 - ax_0)^{2^i} = 0$$

故

$$\lim_{i \to \infty} x_i = \frac{1}{a}$$

此算法收敛.

解 方法 2 使用 $0 < x_0 < \frac{2}{a}$ 得

$$1 > 1 - ax_1 = (1 - ax_0)^2 \ge 0$$

所以

$$0 < x_1 \le \frac{1}{a}$$

不妨设 $0 < x_i \leq \frac{1}{a}$, 有

$$1 > 1 - ax_{i+1} = 1 - ax_i (2 - ax_i) = (1 - ax_i)^2 \ge 0$$

则

$$0 < x_{i+1} \le \frac{1}{a}$$

由归纳法得

$$0 < x_i \le \frac{1}{a}, \quad i = 1, 2, \cdots$$

 $x_{i+1} - x_i = x_i(1 - ax_i) \ge 0$ (i = 1, 2, ...) 得单调性 所以 $x_1 \le x_i \le \frac{1}{a}$ 且单调,单独有界序列必收敛

§1.3 Newton 迭代法: 简化 Newton 法

简化 Newton 法 的主要目的是避免每次的求导运算

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{C}$$
 , $i = 0, 1, 2, \dots$

若
$$|\varphi'(x)| = \left|1 - \frac{f'(x)}{C}\right| < 1$$
 是一阶收敛的.

一般地, 取 $C = f'(x_0)$ 替代所有的 $f'(x_i)$, 这样就只需计算一次导数.

对应的迭代格式为

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_0)}$$
 $i = 0, 1, 2, ...$

§1.3 Newton 迭代法:Newton 下山法

Newton 下山法 是为了克服 Newton 法局部收敛的这个缺点

基本思想

要求每一步迭代满足下降条件

$$|f\left(x_{i+1}\right)| < |f\left(x_{i}\right)|$$

即保持函数的绝对值是下降的,这样就能保证全局收敛性.

具体做法是加入一个下山因子 λ , 即

$$x_{i+1} = x_i - \lambda \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$
 $(0 < \lambda \le 1), \quad i = 0, 1, 2, \dots$

其中 λ 为下山因子, λ 的选取办法: 从 $\lambda=1$ 开始, 逐次减半, 直到满足下降条件为止.

设 $f(x)=(x-\alpha)^r\,g(x)$, 整数 $r\geqslant 2, g\left(\alpha\right)\neq 0$, 则称 α 为方程 f(x)=0 的 r 重根, 此时有

$$f(\alpha) = f'(\alpha) = \dots = f^{(r-1)}(\alpha) = 0, \quad f^{(r)}(\alpha) \neq 0$$

方法一: 只要 $f'(x_i) \neq 0$ 仍可用 Newton 法,此时迭代函数

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

的导数满足 $\varphi'(\alpha)=1-\frac{1}{r}\neq 0$ 且 $|\varphi'(\alpha)|<1$, 所以因此, 只有局部线性收敛.

§1.3 Newton 迭代法: 重根, 重数已知

方法二: 用改进 Newton 法, 选取迭代函数为

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

迭代法

$$x_{i+1} = x_i - r \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad i = 0, 1, \dots$$

具有至少二阶局部收敛性,但需要知道 α 的重数. 这时 $\varphi'(\alpha) = 0$

§1.3 Newton 迭代法: 重根, 重数已知

Newton 迭代法的迭代函数为

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

导数为

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{g(x) + (x - \alpha)g'(x)}{rg(x) + (x - \alpha)g'(x)} + \frac{(x - \alpha)g(x)[rg'(x) + g'(x) + (x - \alpha)g''(x)]}{[rg(x) + (x - \alpha)g'(x)]^2}$$
$$\varphi'(\alpha) = 1 - \frac{1}{r} \neq 0$$

若取

$$\varphi(x) = x - r \frac{f(x)}{f'(x)} \Rightarrow \varphi'(\alpha) = 0$$

§1.3 Newton 迭代法: 重根, 重数未知

方法三: 令 u(x) = f(x)/f'(x), 若 α 是 f(x) = 0 的 r 重根,则

$$u(x) = \frac{(x - \alpha)^r g(x)}{r(x - \alpha)^{r-1} g(x) + (x - \alpha)^r g'(x)}$$
$$= \frac{(x - \alpha) g(x)}{rg(x) + (x - \alpha) g'(x)}$$

故 α 是 u(x) = 0 的单根. 对 u(x) = 0 用 Newton 法,其迭代函数为

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

构造迭代法

$$x_{i+1} = x_i - \frac{u(x_i)}{u'(x_i)} = x_i - \frac{f(x_i)f'(x_i)}{[f'(x_i)]^2 - f(x_i)f''(x_i)}, \quad i = 0, 1, \dots$$

该迭代格式至少二阶局部收敛. 但缺点是需要计算二阶导数。

注:重数已知,该迭代法也有二阶收敛性

§1.4 弦截法

目的: 避免计算导数, 并且尽可能地保持较高的收敛性 (即超线性收敛). 弦截法 (Secant Method) 也称割线法, 主要思想是用差商代替微商, 即

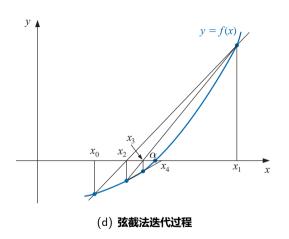
$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

代入 Newton 法即可得弦截法迭代格式:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})} f(x_i), \quad (i = 1, 2, ...)$$
 (3)

割线法需要提供两个迭代初始值

§1.4 弦截法



 x_{i+1} 为曲线过点 $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ 和 $(x_i, f(x_i))$ 的直线与 x 轴的交点。

§1.4 弦截法

定理 1.5 设 α 是 f(x) 的零点, f(x) 在 α 的某邻域 $U(\alpha,\delta)$ 内二阶连续可导, 且 $f'(x) \neq 0$. 若初值 $x_0, x_1 \in U(\alpha,\delta)$, 则当 δ 充分小时, 割线法具有 p 阶收敛性, 其中

$$p = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618,$$

即 $p \neq p^2 - p - 1 = 0$ 的一个根.

§1.5 迭代加速收敛的方法:Aitken 加速方法

当一个迭代序列 $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ 为收敛很慢的线性收敛时,即满足

$$\lim_{i \to \infty} \frac{\alpha - x_{i+1}}{\alpha - x_i} = C \neq 0.$$

由于当迭代值充分接近根 α 时,有

$$\alpha - x_{i+1} \approx C(\alpha - x_i),$$

 $\alpha - x_{i+2} \approx C(\alpha - x_{i+1}).$

所以消去 C, 可解得

$$\frac{\alpha - x_i}{\alpha - x_{i+1}} \approx \frac{\alpha - x_{i+1}}{\alpha - x_{i+2}} \Rightarrow \alpha \approx \frac{x_i x_{i+2} - x_{i+1}^2}{x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i} \tag{4}$$

显然,上式的右端项可能是 α 的一个更好的近似. 记

$$\bar{x}_i = x_i - \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i} = \frac{x_i x_{i+2} - x_{i+1}^2}{x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i},\tag{5}$$

是 α 新的近似值. 称利用式(5)构造序列 $\{\bar{x}_i\}_{i=0}^{\infty}$ 的方法为 Aitken(艾特肯) 加速收敛方法,

§1.5 迭代加速收敛的方法:Aitken 加速方法

这时得到两个迭代序列: $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ 和 $\{\bar{x}_i\}_{i=0}^{\infty}$.

定理

假定原不动点迭代收敛, 且 $\varphi'(\alpha) \neq 1$, 则

$$\lim_{i \to \infty} \frac{\bar{x}_i - \alpha}{x_i - \alpha} = 0.$$

这意味着 \bar{x}_i 比 x_i 更快地收敛到 α .

§1.5 迭代加速收敛的方法:Steffensen 迭代法

将 Aitken 加速技巧与不动点迭代相结合, 就得到Steffensen 迭代法:

$$y_i = \varphi(x_i), \quad z_i = \varphi(y_i), \quad x_{i+1} = x_i - \frac{(y_i - x_i)^2}{z_i - 2y_i + x_i}$$
 (6)

写成不动点迭代形式可得 $x_{i+1} = \psi(x_i)$, 其中迭代函数 $\psi(x)$ 为

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

定理

若 $\{x_i\}_{i=0}^\infty$ 是由一个不动点迭代方法得到的序列,式(6)又称为 Steffensen(斯蒂芬森) 加速迭代法.

可以证明, 当不动点迭代函数 $\varphi(x)$ 在 α 的某个邻域内具有二阶导数, $\varphi'(\alpha)=L\neq 1$ 且 $L\neq 0$, 则 Steffensen 迭代法**平方**收敛到 α .

§1.6 迭代方法的计算效率

虽然收敛阶能刻画迭代收敛于根 α 所需的迭代次数的多少,但不能说明迭代到收敛时实际所需要的时间的多少。因为这还需要看每一步迭代所需计算量的大小,也就是说,收敛阶的概念不能说明方法的计算效率。为此给出效率指数的概念。 定义 称

$$EI=p^{\frac{1}{\theta}}$$

为效率指数,其中, θ 表示每次迭代的计算量,p 表示迭代的收敛阶. 于是,比较不同的迭代方法的计算效率时,只需考察这些方法的效率指数 EI ,显然,EI **越大,计算效率就越高。**

§1.6 迭代方法的计算效率

应该指出,方法的阶 p 是局限于根的邻域的一个性质,所以方法的计算效率也是局限于根的邻域的一个性质。另外,每次迭代的计算量 θ 主要依赖于每次迭代中所需的函数计算量及其导数的计算量,而不依赖于迭代中的算术运算。

如果记计算 $f(x_i)$ 的计算量为 1 个单位, 计算 $f^{(j)}(x_i)$ 的计算量相对于计算 $f(x_i)$ 的计算量为 θ_i .

Newton 迭代法

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

效率指数为

$$EI_1 = 2^{\frac{1}{1+\theta_1}},$$

§1.6 迭代方法的计算效率

割线法

$$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})} f(x_i), \quad (i = 1, 2, ...)$$

割线法与 Newton 法的比较. 由于割线法的阶为 $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$, 且每次迭代仅计算一次 f(x), 其效率指数为

$$EI_2 = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$$

由直接计算容易知道,若 $\theta_1 < 0.44$,则 Newton 迭代法的效率大于割线法,即

$$EI_1 > EI_2$$

若 $\theta_1 > 0.44$,则 Newton 迭代法的效率小于割线法,即

$$EI_1 < EI_2$$

因此,对给定的 f(x),若要判断是否用割线法或 Newton 迭代法去解方程 f(x)=0,则非常合理的根据是估计 θ_1 ,若 $\theta_1>0.44$ 就使用割线法,否则使用 Newton 迭代法.

非线性方程组的一般形式为

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

令

$$m{F}(m{x}) = \left[egin{array}{c} f_1(x) \ f_2(x) \ dots \ f_n(x) \end{array}
ight], \quad m{x} = \left[egin{array}{c} x_1 \ x_2 \ dots \ x_n \end{array}
ight], \quad m{0} = \left[egin{array}{c} 0 \ 0 \ dots \ 0 \end{array}
ight]$$

上述方程组可表示为

$$F(x) = 0$$

给定非线性方程组 F(x) = 0,如果有 α 使得 $F(\alpha) = 0$,则称 α 为 F(x) = 0 的解. 当 n = 1 时,便是单个方程 (非线性方程) f(x) = 0

67

若已知方程组 F(x) = 0 的一个近似解

$$\mathbf{x}^{(i)} = \left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \cdots, x_n^{(i)}\right)^{\mathrm{T}}$$

将 F(x) = 0 的分量 $f_i(x)$ 在 $x^{(i)}$ 处用多元函数 Taylor 展开,取其线性部分有

$$oldsymbol{F}(oldsymbol{x})pproxoldsymbol{F}\left(oldsymbol{x}^{(i)}
ight)+oldsymbol{F}'\left(oldsymbol{x}^{(i)}
ight)\left(oldsymbol{x}-oldsymbol{x}^{(i)}
ight)$$

其中

$$m{F}'(m{x}) = \left[egin{array}{cccc} rac{\partial f_1}{\partial x_1} & rac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & rac{\partial f_1}{\partial x_n} \ rac{\partial f_2}{\partial x_1} & rac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & rac{\partial f_2}{\partial x_n} \ dots & dots & \ddots & dots \ rac{\partial f_n}{\partial x_1} & rac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & rac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{array}
ight]$$

为 F(x) 的 Jaccobi 矩阵.

多元函数 Taylor 展开, 取其线性部分

$$\begin{cases} f_{1}(x_{1}, x_{2}, \cdots, x_{n}) \approx f_{1}\left(x_{1}^{(i)}, x_{2}^{(i)}, \cdots, x_{n}^{(i)}\right) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f_{1}}{\partial x_{k}}\left(x_{k} - x_{k}^{(i)}\right) \\ f_{2}(x_{1}, x_{2}, \cdots, x_{n}) \approx f_{2}\left(x_{1}^{(i)}, x_{2}^{(i)}, \cdots, x_{n}^{(i)}\right) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f_{2}}{\partial x_{k}}\left(x_{k} - x_{k}^{(i)}\right) \\ \vdots \\ f_{n}(x_{1}, x_{2}, \cdots, x_{n}) \approx f_{n}\left(x_{1}^{(i)}, x_{2}^{(i)}, \cdots, x_{n}^{(i)}\right) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f_{n}}{\partial x_{k}}\left(x_{k} - x_{k}^{(i)}\right) \end{cases}$$

其中

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_k} = \frac{\partial f_1}{\partial x_k} \left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \cdots, x_n^{(i)} \right)$$

其他类似

用线性方程组

$$oldsymbol{F}'\left(oldsymbol{x}^{(i)}
ight)\left(oldsymbol{x}-oldsymbol{x}^{(i)}
ight)=-oldsymbol{F}\left(oldsymbol{x}^{(i)}
ight)$$

的解作为新的近似解便得解非线性方程组的 Newton 法

$$oldsymbol{x}^{(i+1)} = oldsymbol{x}^{(i)} - \left[oldsymbol{F}'\left(oldsymbol{x}^{(i)}
ight)
ight]^{-1} oldsymbol{F}\left(oldsymbol{x}^{(i)}
ight)$$

给定初始值
$$x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$$
, 对 $i = 0, 1, \ldots$ 计算

$$oldsymbol{F}'(oldsymbol{x}^{(i)})\Deltaoldsymbol{x}^{(i)} = -oldsymbol{F}(oldsymbol{x}^{(i)})$$

$$\boldsymbol{x}^{(i+1)} = \boldsymbol{x}^{(i)} + \Delta \boldsymbol{x}^{(i)}$$

直到收敛 $\max\{|F(x^{(i)})|\} < \varepsilon$

例用 Newton 法求解方程组 $\begin{cases} f_1(x_1,x_2) = x_1 + 2x_2 - 3 = 0 \\ f_2(x_1,x_2) = 2x_1^2 + x_2^2 - 5 = 0 \end{cases}$ 取 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (1.5,1.0)^{\mathrm{T}}$

解 Jacobi 矩阵
$$F'(x) = \begin{bmatrix} 1 & 2x \\ 4x_1 & 2x_2 \end{bmatrix}$$
 $F'(x)^{-1} = \frac{1}{2x_2 - 8x_1} \begin{bmatrix} 2x_2 & -2 \\ -4x_1 & 1 \end{bmatrix}$ 其 Newton

法为

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

由 $x^{(0)} = (1.5, 1.0)^T$ 逐次迭代求得

$$\mathbf{x}^{(1)} = (1.5, 0.75)^T$$
 $\mathbf{x}^{(2)} = (1.488095, 0.755952)^T$
 $\mathbf{x}^{(3)} = (1.488034, 0.755983)^T$

71

秩 m 拟 Newton 法 (给出初始化的 $x^{(0)}, A_0$)

$$oldsymbol{x}^{(k+1)} = oldsymbol{x}^{(k)} - oldsymbol{A}_k^{-1} oldsymbol{F}\left(oldsymbol{x}^{(k)}
ight)$$

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k + \Delta \mathbf{A}_k, \quad \operatorname{rank}(\Delta \mathbf{A}_k) = m \ge 1$$

要求 A_{k+1} 满足

$$m{A}_{k+1}\left(m{x}^{(k+1)}-m{x}^{(k)}
ight)=m{F}\left(m{x}^{(k+1)}
ight)-m{F}\left(m{x}^{(k)}
ight).$$
依据 \Deltam{A}_k 的不同取法可建立不同的拟 Newton 法.

在拟 Newton 法中,若矩阵 $A_k(k=0,1,\ldots)$ 非奇异,可令 $H_k=A_k^{-1}$,于是能得到

$$\left\{egin{array}{l} oldsymbol{x}^{(k+1)} = oldsymbol{x}^{(k)} - oldsymbol{H}_k oldsymbol{F} \left(oldsymbol{x}^{(k)}
ight) \ oldsymbol{H}_{k+1} = oldsymbol{H}_k + \Delta oldsymbol{H}_k, \quad k = 0, 1, \ldots \end{array}
ight.$$

其中
$$\operatorname{rank}(\Delta \boldsymbol{H}_k) = m \geq 1$$
 为修正矩阵 $\Delta \boldsymbol{H}_k$ 的秩, \boldsymbol{H}_{k+1} 满足
$$\boldsymbol{H}_{k+1}\left(\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{x}^{(k+1)}\right) - \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right)\right) = \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}.$$

(7)

(8)

(9)

(10)

秩 1 拟 Newton 法 (m=1)

设

$$\Delta \boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{v}_k^T, \quad \boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{v}_k \in \mathbb{R}^n$$
(11)

 u_k, v_k 待定. 记

$$m{r}^{(k)} = m{x}^{(k+1)} - m{x}^{(k)}, m{y}^{(k)} = m{F}(m{x}^{(k+1)}) - m{F}(m{x}^{(k)}),$$

则由(7)和(8)得

$$\boldsymbol{A}_{k+1}\boldsymbol{r}^{(k)}=\boldsymbol{y}^{(k)}$$

$$\boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{A}_k + \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{v}_k^T$$

则

$$(\boldsymbol{A}_k + \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{v}_k^T) \boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{y}^{(k)}$$

等价为

$$oldsymbol{u}_k oldsymbol{v}_k^T oldsymbol{r}^{(k)} = oldsymbol{y}^{(k)} - oldsymbol{A}_k oldsymbol{r}^{(k)}$$

若 $\boldsymbol{v}_k^T \boldsymbol{r}^{(k)} \neq 0$,则有

$$oldsymbol{u}_k = rac{1}{oldsymbol{v}_{x}^Toldsymbol{r}^{(k)}}[oldsymbol{y}_k - oldsymbol{A}_koldsymbol{r}^{(k)}]$$

将它代入(11),即得

$$\Delta \boldsymbol{A}_k = \frac{1}{\boldsymbol{v}_k^T \boldsymbol{r}^{(k)}} [\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{r}^{(k)}] \boldsymbol{v}_k^T$$
(12)

若取 $v_k = r^{(k)} \neq 0$,即 $(r^{(k)})^T r^{(k)} \neq 0$,由式(12)得

$$\Delta oldsymbol{A}_k = [oldsymbol{y}^{(k)} - oldsymbol{A}_k oldsymbol{r}^{(k)}] rac{\left(oldsymbol{r}^{(k)}
ight)^T}{\left(oldsymbol{r}^{(k)}
ight)^T oldsymbol{r}^{(k)}}.$$

于是得到一个秩 1 拟 Newton 法: 给出初始条件 $x^{(0)}$ 和 A_0 (一般取 $A_0 = F'(x^{(0)})$), 对于 k = 0, 1, ...

$$\left\{egin{aligned} oldsymbol{x}^{(k+1)} &= oldsymbol{x}^{(k)} - oldsymbol{A}_k^{-1} oldsymbol{F}\left(oldsymbol{x}^{(k)}
ight), \ oldsymbol{r}^{(k)} &= oldsymbol{x}^{(k+1)} - oldsymbol{x}^{(k)}, oldsymbol{y}^{(k)} &= oldsymbol{F}(oldsymbol{x}^{(k+1)}) - oldsymbol{F}(oldsymbol{x}^{(k)}), \ oldsymbol{A}_{k+1} &= oldsymbol{A}_k + \left[oldsymbol{y}^{(k)} - oldsymbol{A}_k oldsymbol{r}^{(k)}
ight] rac{\left(oldsymbol{r}^{(k)}\right)^T}{\left(oldsymbol{r}^{(k)}\right)^T oldsymbol{r}^{(k)}}. \end{array}
ight.$$

称(14)为 Broyden 秩 1 方法.

(13)

(14)

设

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^T,$$

Sherman-Morrison 公式

$$m{B}^{-1} = m{A}^{-1} - rac{m{A}^{-1} (m{u}m{v}^T) m{A}^{-1}}{1 + m{v}^T m{A}^{-1} m{u}}.$$

则

$$\Delta oldsymbol{H}_k = oldsymbol{H}_{k+1} - oldsymbol{H}_k = (oldsymbol{A}_k + \Delta oldsymbol{A}_k)^{-1} - oldsymbol{A}_k^{-1}.$$

与(14)互逆的 Broyden 秩 1 方法为

$$\begin{cases}
\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{H}_{k} \boldsymbol{F} \left(\boldsymbol{x}^{(k)} \right) \\
\boldsymbol{H}_{k+1} = \boldsymbol{H}_{k} + \left[\boldsymbol{r}^{(k)} - \boldsymbol{H}_{k} \boldsymbol{y}^{(k)} \right] \frac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)} \right)^{T} \boldsymbol{H}_{k}}{\left(\boldsymbol{r}^{(k)} \right)^{T} \boldsymbol{H}_{k} \boldsymbol{y}^{(k)}}, \\
\left(\boldsymbol{r}^{(k)} \right)^{T} \boldsymbol{H}_{k} \boldsymbol{y}^{(k)} \neq 0, \\
\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}, \boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{F} (\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \boldsymbol{F} (\boldsymbol{x}^{(k)})
\end{cases} \tag{15}$$

只要选择较好的初始近似 $oldsymbol{x}^{(0)}$ 和初始矩阵 $oldsymbol{A}_0$ 或 $oldsymbol{H}_0$,一般可得到较好的近似解,

与(14)互逆的 Broyden 秩 1 方法为: 给出初始条件 $x^{(0)}$ 和 H_0 (一般取 $H_0 = F'\left(x^{(0)}\right)^{-1}$), 对于 $k=0,1,\ldots$

$$\begin{cases}
\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{F} \left(\boldsymbol{x}^{(k)} \right) \\
\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}, \boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{F} (\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \boldsymbol{F} (\boldsymbol{x}^{(k)}) \\
\boldsymbol{H}_{k+1} = \boldsymbol{H}_k + \left[\boldsymbol{r}^{(k)} - \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{y}^{(k)} \right] \frac{\left(\boldsymbol{r}^{(k)} \right)^T \boldsymbol{H}_k}{\left(\boldsymbol{r}^{(k)} \right)^T \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{y}^{(k)}}.
\end{cases} (16)$$

在(12)中若取 $v_k = F(x^{(k+1)})$, 得

$$oldsymbol{y}^{(k)} - oldsymbol{A}_k oldsymbol{r}^{(k)} = oldsymbol{F}\left(oldsymbol{x}^{(k+1)}
ight) - oldsymbol{F}\left(oldsymbol{x}^{(k)}
ight) - oldsymbol{A}_k oldsymbol{r}^{(k)} = oldsymbol{F}\left(oldsymbol{x}^{(k+1)}
ight) = oldsymbol{v}_k$$

于是由(12)可得秩 1 修正矩阵

$$\Delta oldsymbol{A}_k = [oldsymbol{y}^{(k)} - oldsymbol{A}_k oldsymbol{r}^{(k)}] rac{(oldsymbol{y}^{(k)} - oldsymbol{A}_k oldsymbol{r}^{(k)})^T}{(oldsymbol{y}^{(k)} - oldsymbol{A}_k oldsymbol{r}^{(k)})^T oldsymbol{r}^{(k)}}$$

可见 ΔA_k 对称,故若 A_0 对称,则所有 $A_{k+1}(k=0,1,\ldots)$ 也对称,于是可得到 F 的 Jacobi 矩阵对称时的秩 1 方法:

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{A}_k^{-1} \boldsymbol{F} \left(\boldsymbol{x}^{(k)} \right) \\ \boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{A}_k + \left[\boldsymbol{y}^{(k)} - \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{r}^{(k)} \right] \frac{\left(\boldsymbol{y}^{(k)} - \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{r}^{(k)} \right)^T}{\left(\boldsymbol{y}^{(k)} - \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{r}^{(k)} \right)^T \boldsymbol{r}^{(k)}} \end{cases}, \quad k = 0, 1, \dots$$

与此方法互逆的秩 1 方法是

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{H}_k \mathbf{F} \left(\mathbf{x}^{(k)} \right) \\ \mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \left[\mathbf{r}^{(k)} - \mathbf{H}_k \mathbf{y}^{(k)} \right] \frac{\left(\mathbf{r}^{(k)} - \mathbf{H}_k \mathbf{y}^{(k)} \right)^T \mathbf{H}_k}{\left(\mathbf{r}^{(k)} - \mathbf{H}_k \mathbf{y}^{(k)} \right)^T \mathbf{H}_k \mathbf{y}^{(k)}} \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots$$

例 用逆 Broyden 方法(15)求下列方程组

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1^2 - x_2 - 1 \\ x_1^2 - 4x_1 + x_2^2 - x_2 + 3.25 \end{bmatrix} = 0$$

的解,取
$$x^{(0)} = (0,0)^T$$
, $H_0 = F'(x^{(0)})^{-1}$.

解 $F(x^{(0)}) = (-1, 3.25)^T$,由于

$$\mathbf{A} = \mathbf{F}'(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 & -1 \\ 2x_1 - 4 & 2x_2 - 1 \end{bmatrix}$$

故

$$oldsymbol{A}_0 = oldsymbol{F}'\left(oldsymbol{x}^{(0)}
ight) = \left|egin{array}{cc} 0 & -1 \ -4 & -1 \end{array}
ight|$$

取

$$oldsymbol{H}_0 = oldsymbol{F}'\left(oldsymbol{x}^{(0)}
ight)^{-1} = \left[egin{array}{cc} 0.25 & -0.25 \ -1 & 0 \end{array}
ight]$$

用(15)迭代可求得
$$\boldsymbol{x}^{(1)} = (1.0625, -1)^T, \boldsymbol{r}^{(0)} = (1.0625, -1)^T,$$
 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(1)}) = (1.12890625, 2.1289.625)^T$
$$\boldsymbol{y}^{(0)} = (2.12890625, -1.1210937)^T$$

$$\boldsymbol{H}_1 = \begin{bmatrix} 0.3557441 & -0.2721932 \\ -0.5224991 & -0.1002162 \end{bmatrix}$$

重复以上步骤, 共迭代 11 次得解

$$\boldsymbol{x}^{(11)} = (1.54634088332, 1.39117631279)^T$$