第四章 非线性方程（组）的迭代算法

/* Solutions of Nonlinear Equations */

§1 问题的背景

（1）求n次多项式的根

代数方程

$$a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 = 0 \quad (a_n \neq 0)$$

（2）光的衍射理论

超越方程

$$x - \tan x = 0$$

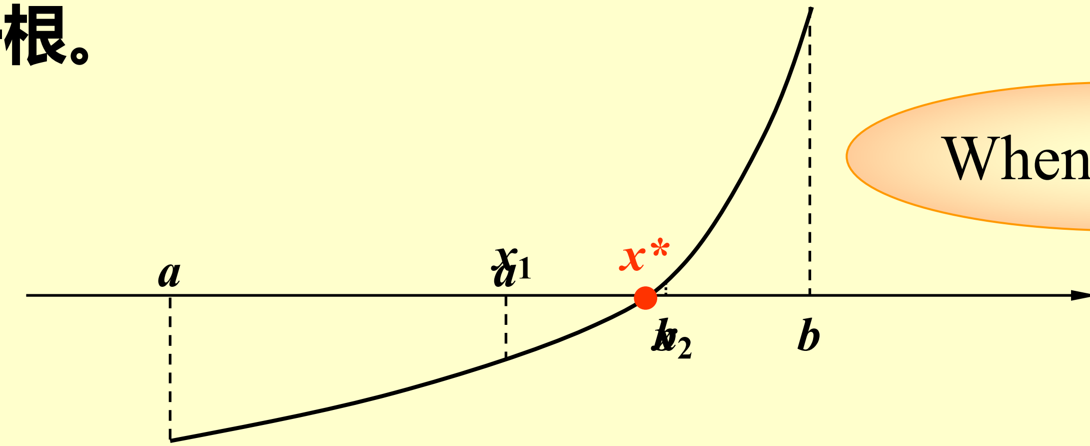
（3）行星轨道计算，求开普勒方程

$$x - a \sin x = b$$

（4）研究求解非线性方程（组）$f(x) = 0$ 的数值方法

二分法（一维问题） /* Bisection Method in 1D*/

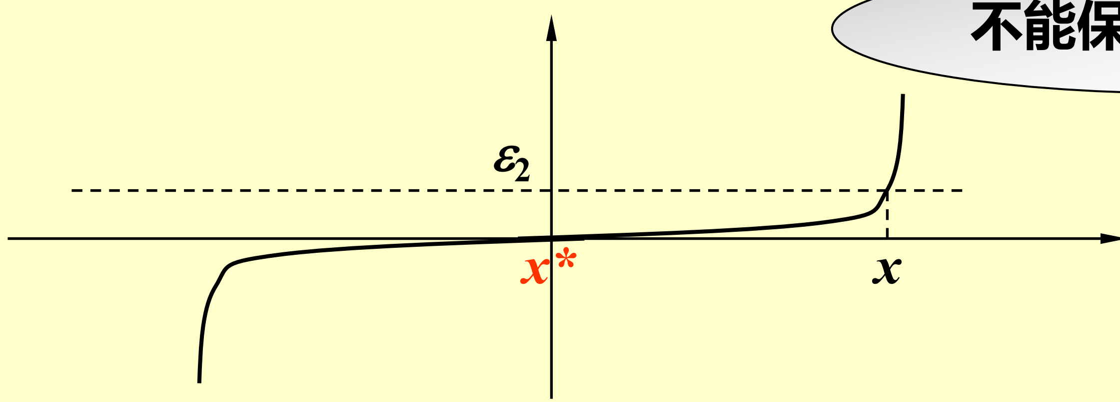
原理：若 $f \in C[a, b]$，且 $f(a) \cdot f(b) < 0$，则 f 在 (a, b) 上必有一根。



When to stop?

$$|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon_1 \quad \text{或} \quad |f(x)| < \varepsilon_2$$

不能保证 x 的精度



误差分析： 第1步产生的$x_1 = \dfrac{a+b}{2}$有误差 $|x_1 - x^*| \le \dfrac{b-a}{2}$

第 k 步产生的 x_k 有误差 $|x_k - x^*| \le \dfrac{b-a}{2^k}$

对于给定的精度 ε,可估计二分法所需的步数 k ：

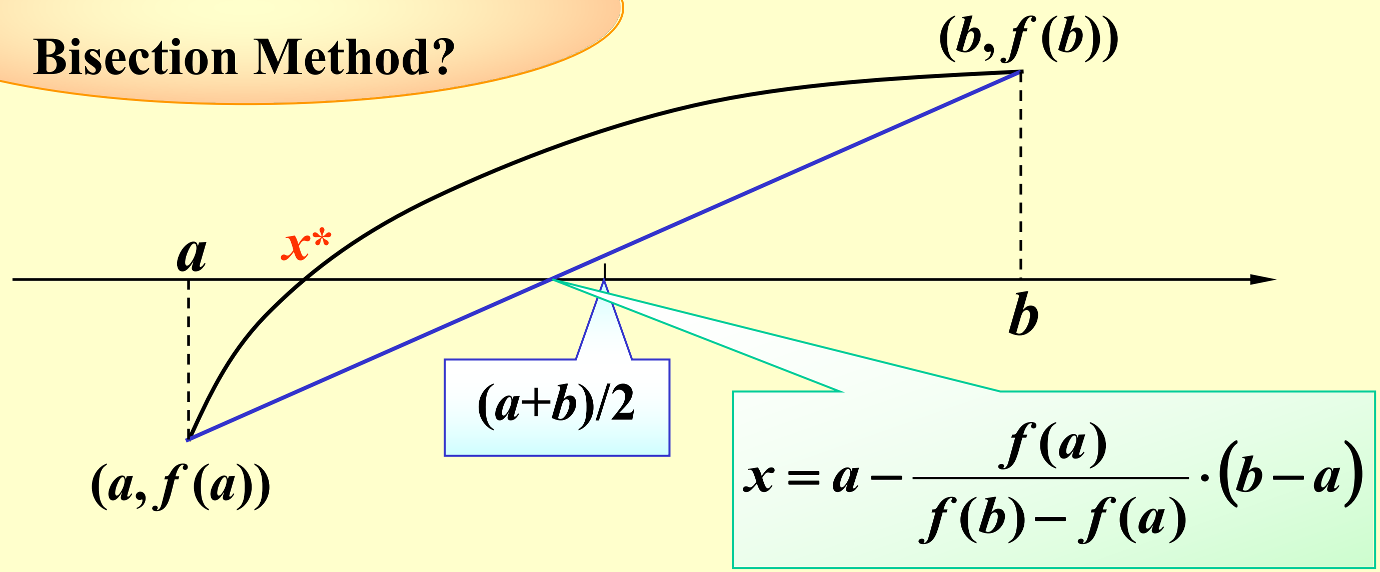
$$\frac{b-a}{2^k} < \varepsilon \quad \Rightarrow \quad k > \frac{\left[\ln(b-a) - \ln\varepsilon\right]}{\ln 2}$$

优点： ①简单；
② 对$f(x)$ 要求不高(只要连续即可) .

缺点： ① 无法求复根及偶重根;
② 收敛慢，仅线性收敛;
③ 难以推广到多维空间。

➢ 试位法 /* Regula Falsi Method */

Is it really better than Bisection Method?



注：试位法每次迭代比二分法多算一次乘法，而且不保证收敛。当 $f''(x) \geq 0, x \in [a,b]$ 时，是收敛的。

§ 2 不动点迭代法 /* Fixed-Point Iteration */

$$f(x)=0 \quad \xleftrightarrow{\text{等价变换}} \quad x=g(x)$$

$f(x)$ 的根 $\longleftrightarrow$ $g(x)$ 的不动点

思路

从一个初值 x_0 出发，计算

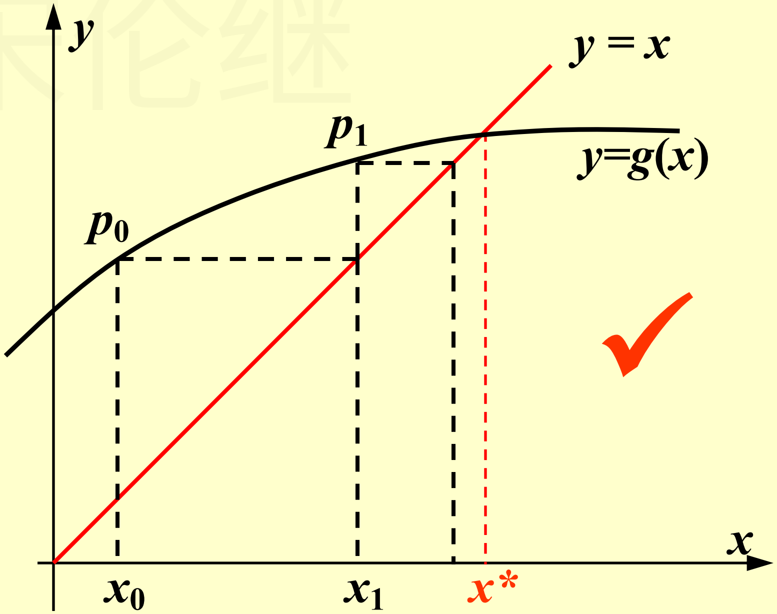
$$x_1=g(x_0),\ \ x_2=g(x_1),\ \ldots,\ x_{k+1}=g(x_k),\ \ldots$$

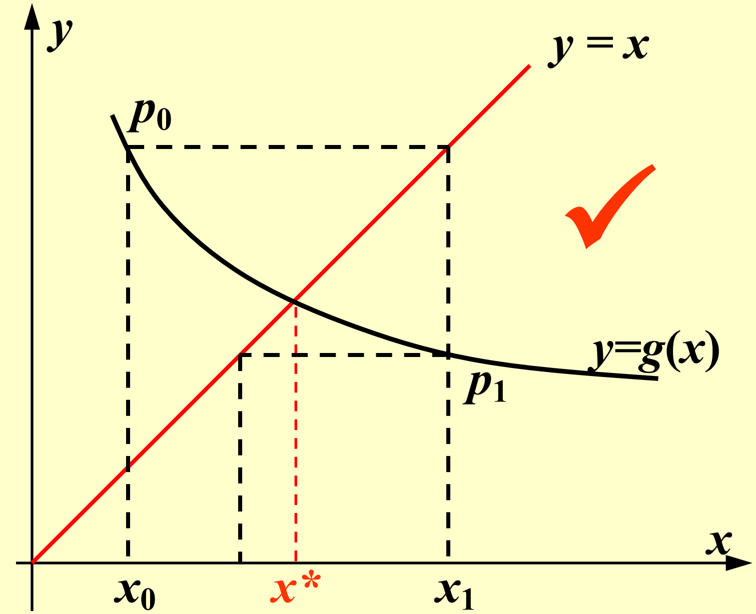
若 $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛，即存在 x^* 使得 $\lim\limits_{k\to\infty} x_k = x^*$

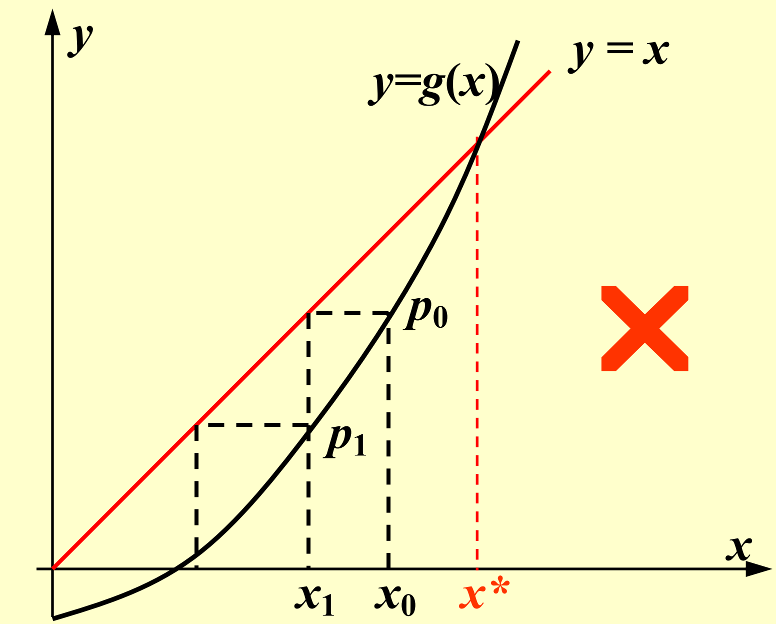
且 g 连续，则由 $\lim\limits_{k\to\infty} x_{k+1} = \lim\limits_{k\to\infty} g(x_k)$

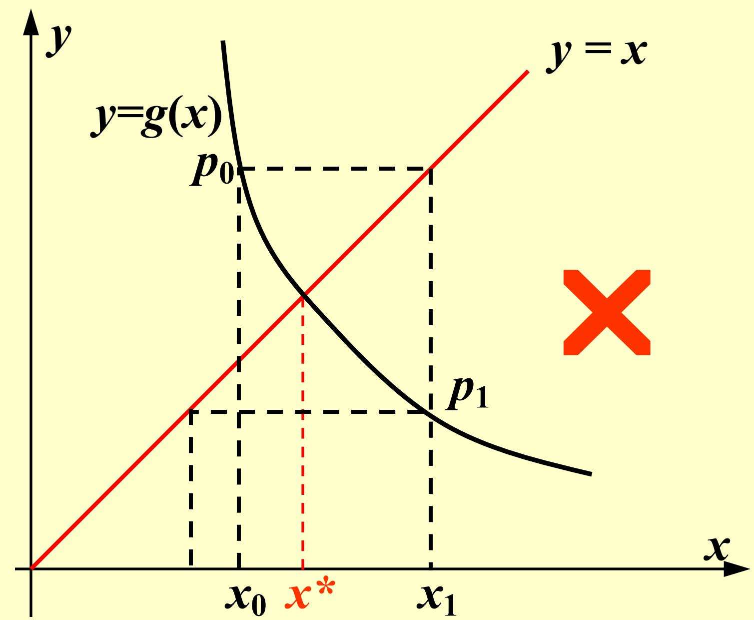
可知 $\qquad x^* = g(x^*)$

即 x^* 是 g 的不动点，也就是 f 的根。


y
y = x
p1
y=g(x)
p0
✓
x
x0
x1
x*


y
y = x
p0
✓
y=g(x)
p1
x
x0
x*
x1


y
y = x
y=g(x)
p0
p1
×
x
x1
x0
x*


y
y = x
y=g(x)
p0
×
p1
x
x0
x*
x1

定理 考虑方程 $x = g(x)$, $g(x)\in C[a, b]$, 若

(I) 当 $x\in[a, b]$ 时， $g(x)\in[a, b]$；

(II) $\exists\, 0 \le L < 1$ 使得 $|\, g'(x)\,| \le L < 1$ 对 $\forall\, x\in[a, b]$ 成立。

则任取 $x_0\in[a, b]$，由 $x_{k+1} = g(x_k)$ 得到的序列 $\{\, x_k \,\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛于$g(x)$ 在$[a, b]$上的唯一不动点。并且有误差估计式：

① $|\, x^* - x_k \,| \le \dfrac{1}{1-L}\,|\, x_{k+1} - x_k \,|$

($k = 1, 2, \ldots$)

② $|\, x^* - x_k \,| \le \dfrac{L^k}{1-L}\,|\, x_1 - x_0 \,|$

且存在极限 $\displaystyle\lim_{k\to\infty} \frac{x^* - x_{k+1}}{x^* - x_k} = g'(x^*)$

证明：① $g(x)$ 在$[a, b]$上存在不动点？

令 $f(x) = g(x) - x$ $\quad \because \; a \le g(x) \le b$

$\therefore f(a) = g(a) - a \ge 0$， $f(b) = g(b) - b \le 0$

$\Rightarrow f(x)$有根

② 不动点唯一？

反证：若不然，设还有 $\tilde{x} = g(\tilde{x})$，则

$x^* - \tilde{x} = g(x^*) - g(\tilde{x}) = g'(\xi)(x^* - \tilde{x})$， ξ 在 x^* 和$\tilde{x}$ 之间。

$\Rightarrow \; (x^* - \tilde{x})(1 - g'(\xi)) = 0$ 而 $|g'(\xi)| < 1$ $\quad \therefore \; x^* = \tilde{x}$

③ 当$k \to \infty$时， x_k收敛到x^* ？

$$|x^* - x_k| = |g(x^*) - g(x_{k-1})| = |g'(\xi_{k-1})| \cdot |x^* - x_{k-1}|$$

$$\le L|x^* - x_{k-1}| \le \ldots\ldots \le L^k |x^* - x_0| \to 0 \; ✓$$

④ $|x^*-x_k|\le\dfrac{1}{1-L}|x_{k+1}-x_k|$?

$$|x_{k+1}-x_k|\ge|x^*-x_k|-|x^*-x_{k+1}|\ge|x^*-x_k|-L|x^*-x_k|$$

⑤ $|x^*-x_k|\le\dfrac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|$?

$$|x_{k+1}-x_k|=|g(x_k)-g(x_{k-1})|=|g'(\xi_k)(x_k-x_{k-1})|$$

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

⑥ $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{x^*-x_{k+1}}{x^*-x_k}=g'(x^*)$?

$$\lim_{k\to\infty}\frac{x^*-x_{k+1}}{x^*-x_k}=\lim_{k\to\infty}\frac{g(x^*)-g(x_k)}{x^*-x_k}=\lim_{k\to\infty}\frac{g'(\xi_k)(x^*-x_k)}{x^*-x_k}=g'(x^*)$$

注：定理条件非必要条件，可将$[a, b]$缩小，定义局部收敛性：若在 x^* 的某δ领域 $B_\delta=\{x\,|\,|x-x^*|\le\delta\}$ 有 $g\in C^1[a, b]$ 且 $|g'(x^*)|<1$，则由$\forall x_0\in B_\delta$开始的迭代收敛。即调整初值可得到收敛的结果。

注：上述定理条件（II），换成下列Lipschitz(利普希兹)条件也存在唯一的不动点。

(II) $\exists\, 0 \le L < 1$ 使得 $|\,g(x) - g(y)\,| \le L\,|x-y|$ 对 $\forall\, x \in [a, b]$ 成立。

L称为利普希兹常数

反证：若不然，设还有两个不动点x_1^*, x_2^* 且$x_1^* \neq x_2^*$，则

$$|x_1^* - x_2^*| = |g(x_1^*) - g(x_2^*)|$$

$$\le L\,|x_1^* - x_2^*| < |x_1^* - x_2^*|,$$

引出矛盾，所以不动点唯一。

有$|x_{k+p} - x_k| = |x_{k+p} - x_{k+P-1} + x_{k+p-1} + \cdots + x_{k+1} - x_k|$

$$\le |x_{k+p} - x_{k+P-1}| + |x_{k+p-1} - x_{k+p-2}| + \cdots + |x_{k+1} - x_k|$$

$$\le (L^{p-1} + L^{p-2} + \cdots + L+1)\,|x_{k+1} - x_k| \le \frac{1}{1-L}|x_{k+1} - x_k|$$

迭代法的收敛阶 /* Order of Convergence */

定义 设迭代序列$\{x_{k+1}\}$满足$x_{k+1}=g(x_k)$收敛到$g(x)$的不动点x^*。设$e_k=x_k-x^*$，若$\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p}=C>0$，则称该迭代为至少$p$阶收敛，其中$C$称为渐进误差常数，$p\geq 1$。

- $p=1$，$0<C<1$有 $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{|e_{k+1}|}{|e_k|}=C\neq 0$，称为至少线性收敛。
- $p=1$，C=0 有 $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{|e_{k+1}|}{|e_k|}=0$，称为超线性收敛。
- $p\geq 1$，C=0 有 $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p}=0$，称为超$p$阶收敛。

注：（1）超线性收敛不一定有$p>1$。例如$x_n=1/n^n$超线性收敛到0，但对任何$p>1$都没有p阶收敛。

（2）n维情形，上述定义中的绝对值换成范数即可。

§ 3 局部收敛性 /* local convergence */

➢ **待定参数法：**

若 $|g'(x)| \geq 1$，则将 $x = g(x)$ 等价地改造为

$$x = x - Kx + Kg(x) = (1-K)x + Kg(x) = \varphi(x)$$

求K，使得 $x = x - Kx + Kg(x) = (1-K)x + Kg(x) = \varphi(x)$

例： 求 $f(x) = x^3 - 3x + 1 = 0$ 在 $(1, 2)$ 的实根。

如果用 $x = \frac{1}{3}(x^3+1) = g(x)$ 进行迭代，则在$(1, 2)$中有

$$|g'(x)| = |x^2| > 1$$

现令 $\varphi(x) = (1-K)x + Kg(x) = (1-K)x + \frac{K}{3}(x^3+1)$

希望 $|\varphi'(x)| = |1 - K + Kx^2| < 1$，即 $\frac{-2}{x^2-1} < K < 0$

在 $(1, 2)$ 上可取任意 $-\frac{2}{3} < K < 0$ 例如$K = -0.5$，则对应 $x = \frac{3}{2}x - \frac{1}{6}(x^3+1)$ 即产生收敛序列。

➢ **Aitken 加速：**

一般地，有： $\hat{x}_K = x_K - \dfrac{(x_{K+1}-x_K)^2}{x_K - 2x_{K+1} + x_{K+2}}$

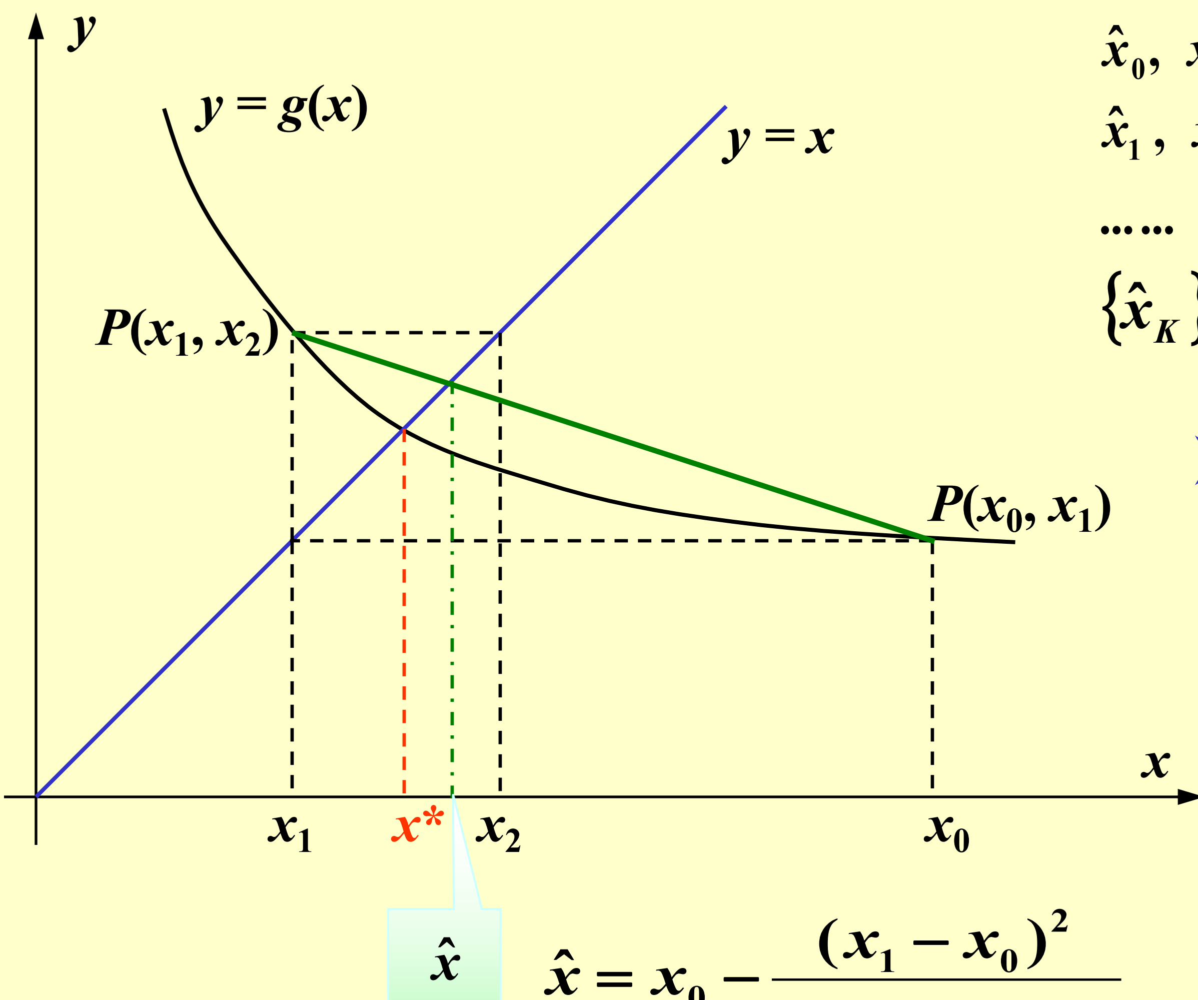
$x_0,\ x_1 = g(x_0),\ x_2 = g(x_1),$

$\hat{x}_0,\ x_3 = g(x_2),$

$\hat{x}_1,\ x_4 = g(x_3),$

……

$\{\hat{x}_K\}$**比**$\{x_K\}$**收敛得略快。**



$$\hat{x} = x_0 - \frac{(x_1 - x_0)^2}{x_0 - 2x_1 + x_2}$$

➢ **Steffensen 加速：**

$x_0,\ x_1 = g(x_0),\ x_2 = g(x_1),$

$\hat{x}_0,\ \bar{x}_1 = g(\hat{x}_0),\ \bar{x}_2 = g(\bar{x}_1),$

$\hat{\hat{x}}_0,$ ……

数值实例: 计算$x^3+4x^2-10=0$在$[1,2]$上的根

$$x^* \approx 1.365230013414097\ldots\ldots$$

无效的不动点构造

$$x=g(x)=x-(x^3+4x^2-10)$$

有效的不动点构造

$$x=g(x)=\left(\frac{10}{4+x}\right)^2$$

迭代次数k	$x_{k+1}=g(x_k)$	Aitken迭代法	Steffensen迭代法
0	1.500000000000000	1.500000000000000	1.500000000000000
1	1.348399724926484	1.365265223957260	1.365265223957260
2	1.367376371991283	1.365230584541776	1.365230013416586
3	1.364957015402487	1.365230022656744	1.365230013414097
4	1.365264748113442	1.365230013563715	
5	1.365225594160525	1.365230013416519	
6	1.365230575673434	1.365230013414136	
7	1.365229941878183	1.365230013414098	
8	1.365230022515568	1.365230013414097	
9	1.365230012256122		
10	1.365230013561425		
11	1.365230013395352		
12	1.365230013416482		
13	1.365230013413793		
14	1.365230013414136		
15	1.365230013414092		

二阶收敛

超线形收敛

线形收敛

- Aitken 加速有 $p>1$，如果$\{x_k\}$线形收敛，且

  $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{\widehat{x}_k-x^*}{\widehat{x}_k-x^*}=0$ ，为**超线性收敛**.

- Steffensen 加速，满足条件 $g'(x^*)\neq 1$ 时，**平方收敛**，有

  $p=2$.

Q: 如何实际确定收敛阶和渐近误差常数？

定理 设 x^* 为 $x=g(x)$ 的不动点，若 $g\in C^p(B_\delta(x^*))$，$p\ge 2$；$g'(x^*)=\ldots=g^{(p-1)}(x^*)=0$，且 $g^{(p)}(x^*)\ne 0$，则 $x_{k+1}=g(x_k)$ 在 $B_\delta(x^*)$ 内 p 阶收敛。

证明： $x_{k+1}=g(x_k)$

$$=\underset{\substack{\|\\ x^*}}{g(x^*)}+g'(x^*)(x_k-x^*)+\ldots+\frac{g^{(p)}(\xi_k)}{p\,!}(x_k-x^*)^p$$

$$\frac{g^{(p)}(\xi_k)}{p\,!}\xrightarrow{k\to\infty} C=\frac{g^{(p)}(x^*)}{p!}$$

利用条件，移项取极限

$$\lim_{k\to\infty}\frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p}=C>0$$

得证。

§ 4 牛顿法 /* Newton - Raphson Method */

一维情形原理：

将非线性方程线性化——Taylor 展开

取 $x_0 \approx x^*$，将 $f(x)$ 在 x_0 做一阶Taylor展开:

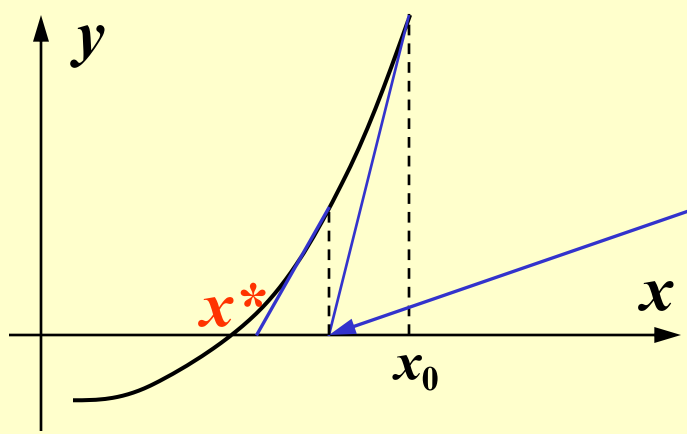
$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_0)^2$$，ξ 在 x_0 和 x 之间。

将 $(x^* - x_0)^2$ 看成高阶小量，则有：

$$0 = f(x^*) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x^* - x_0) \quad \Rightarrow \quad x^* \approx x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

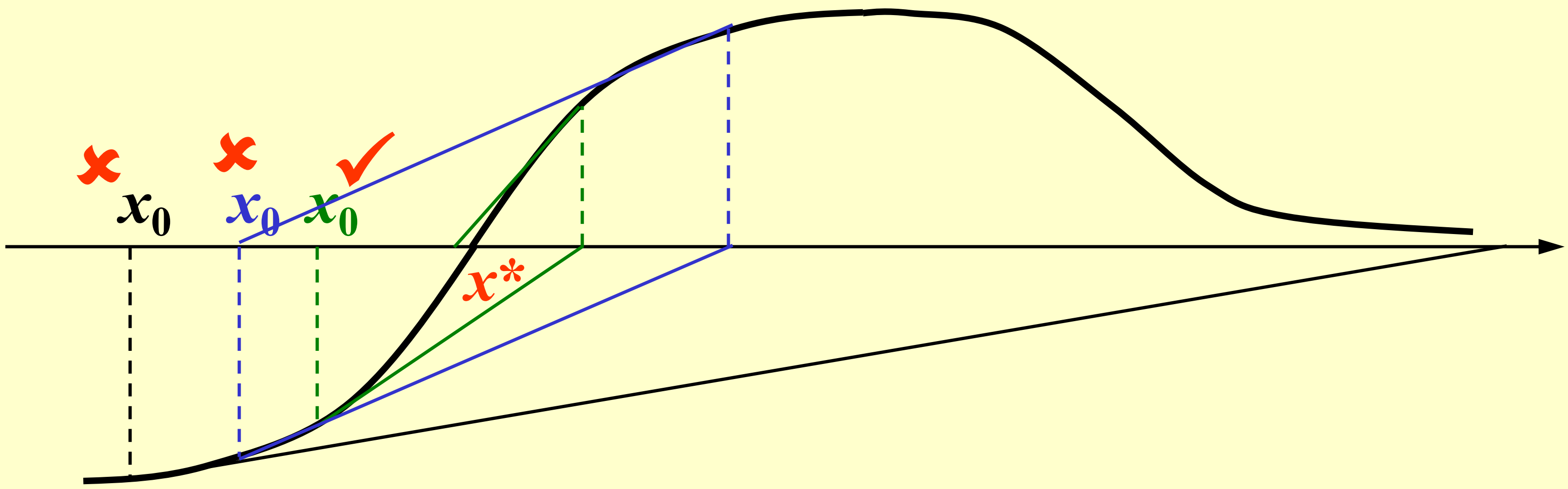
线性

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



只要 $f \in C^1$，每一步迭代都有 $f'(x_k) \neq 0$，而且 $\lim_{k \to \infty} x_k = x^*$，则 x^*就是 f 的根。

注：Newton's Method 收敛性依赖于x_0 的选取。



定理 设 $f(x^*)=0$，$f'(x^*)\neq 0$，且 $f(x)$ 在 x^* 的邻域上具有二阶连续导数，则由Newton法产生的序列

$$x_{n+1}=x_n-f(x_n)/f'(x_n)$$

局部收敛到 x^*, 且为平方收敛。

证明：Newton's Method 迭代函数是 $g(x)=x-\dfrac{f(x)}{f'(x)}$，则

$$g'(x)=f(x)\cdot f''(x)/[f'(x)]^2$$

因此 $g'(x^*)=0$ ，一般 $g''(x^*)\neq 0$

- Newton's Method 有 $\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{|e_{k+1}|}{|e_k|^2}=\left|\dfrac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}\right|$，只要 $f'(x^*)\neq 0$，

就有 $p\geq 2$。重根是线性收敛的。

见局部收敛性的证明

由定理可知Newton法局部收敛，且平方收敛。

Newton法算例

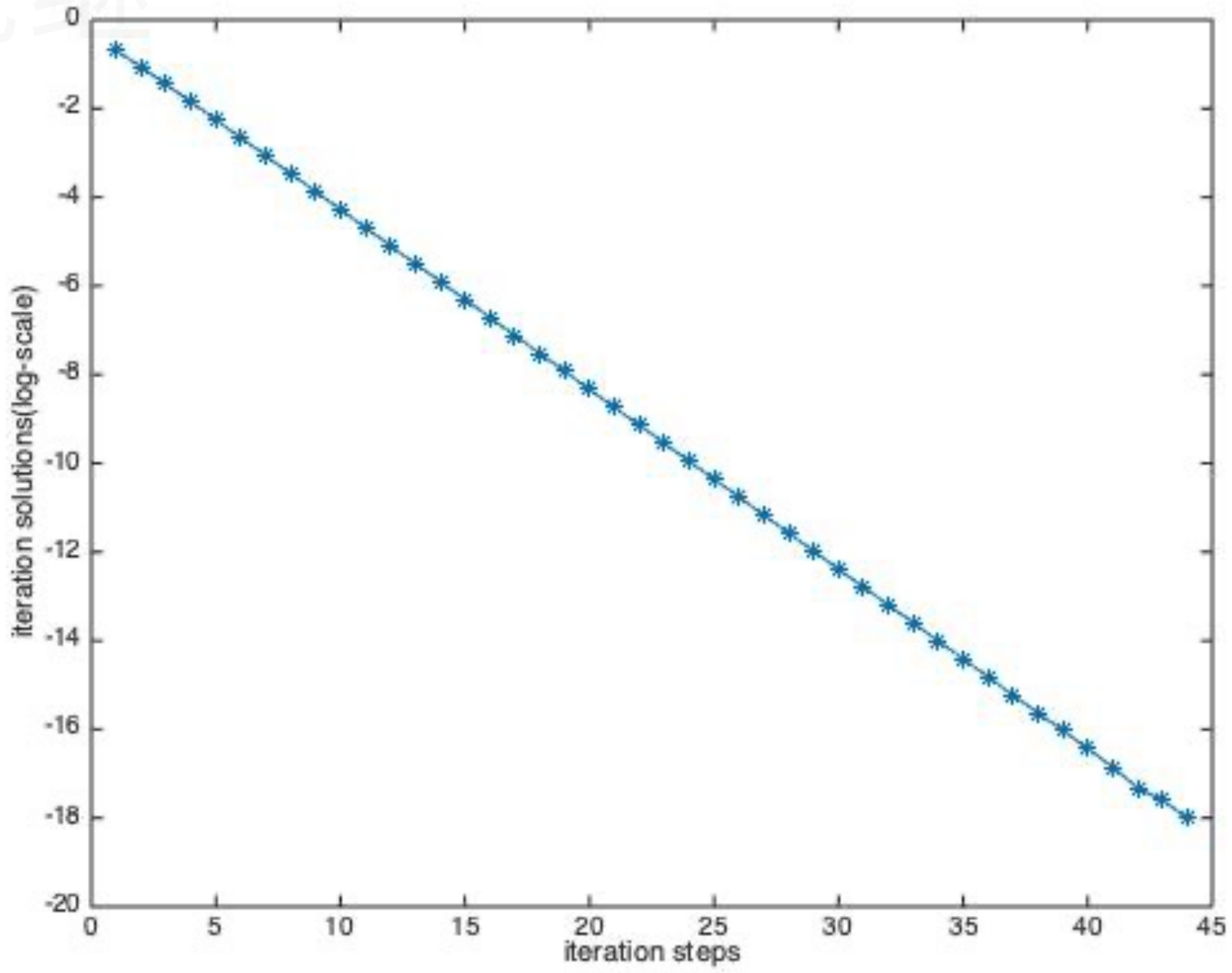
计算超越方程

$$x - \tan x = 0$$

以$x = 0.1$为初始解,计算数值解与精确解误差不超过1e-6.

Matlab程序

```
clear;clc;format long;
x0=0.1;%指定初值
tol=1e-6;  %精度
x(1)=x0; %赋初值
fprintf('%d  %.7f\n',0,x(1));
i=1; u=ones(3,1); %初始化向量
k(1)=1; %迭代次数
itmax=400;   %最大迭代次数
while(norm(u)>tol*norm(x(i)))  %Newton迭代
db=1-sec(x(i))^2; % 计算第k步f'(x)
b=x(i)-tan(x(i));% 计算第k步-f(x)
 u=b/db;% 计算迭代增量
    x(i+1)=x(i)+u(1); %得第k次迭代解
    i=i+1;
    k(i)=i;
    if(i>itmax) %超出设置最大迭代次数
    error('Exceed maximum iteration.');
    end
end
[k',x',y',z']    %返回所有迭代解
```



经过44次迭代后，从初始解0.5到数值解0.000000015137660, 纵向用对数坐标

重根情形，Newton法线性收敛。

(1) 设x^*是 $f(x)=0$的m重根，$m>1$, 即

$$f(x)=(x-x^*)^m p(x),$$

其中$p(x)$有二阶导数, $p(x^*)\neq 0$, 重根情况下 $f'(x^*)=0$, 不满足定理条件，不能直接用定理结论。

$$g(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}=x-\frac{(x-x^*)p(x)}{mp(x)+(x-x^*)p'(x)}$$

$$g'(x)=1-\frac{p(x)+(x-x^*)p'(x)}{mp(x)+(x-x^*)p'(x)}$$

$$-(x-x^*)p(x)\left(\frac{1}{mp(x)+(x-x^*)p'(x)}\right)'$$

$g'(x^*)=1-\frac{1}{m}$, 所以$0\neq|g'(x^*)|<1$,

Newton法线形收敛。

重根情形，如何提高Newton法至二阶收敛？

(1)取修正迭代函数为： $g(x)=x-\dfrac{mf(x)}{f'(x)}$

有$g(x^*)=x^*$，$g'(x^*)=0$,

迭代法$x_{k+1}=x_k-\dfrac{mf(x_k)}{f'(x_k)}$至少二阶收敛.

(2)取修正迭代函数为：

$$g(x)=x-\frac{\mu(x)}{\mu'(x)},\quad \mu(x)=\frac{(x-x^*)p(x)}{mp(x)+(x-x^*)p'(x)}=\frac{f(x)}{f'(x)}$$

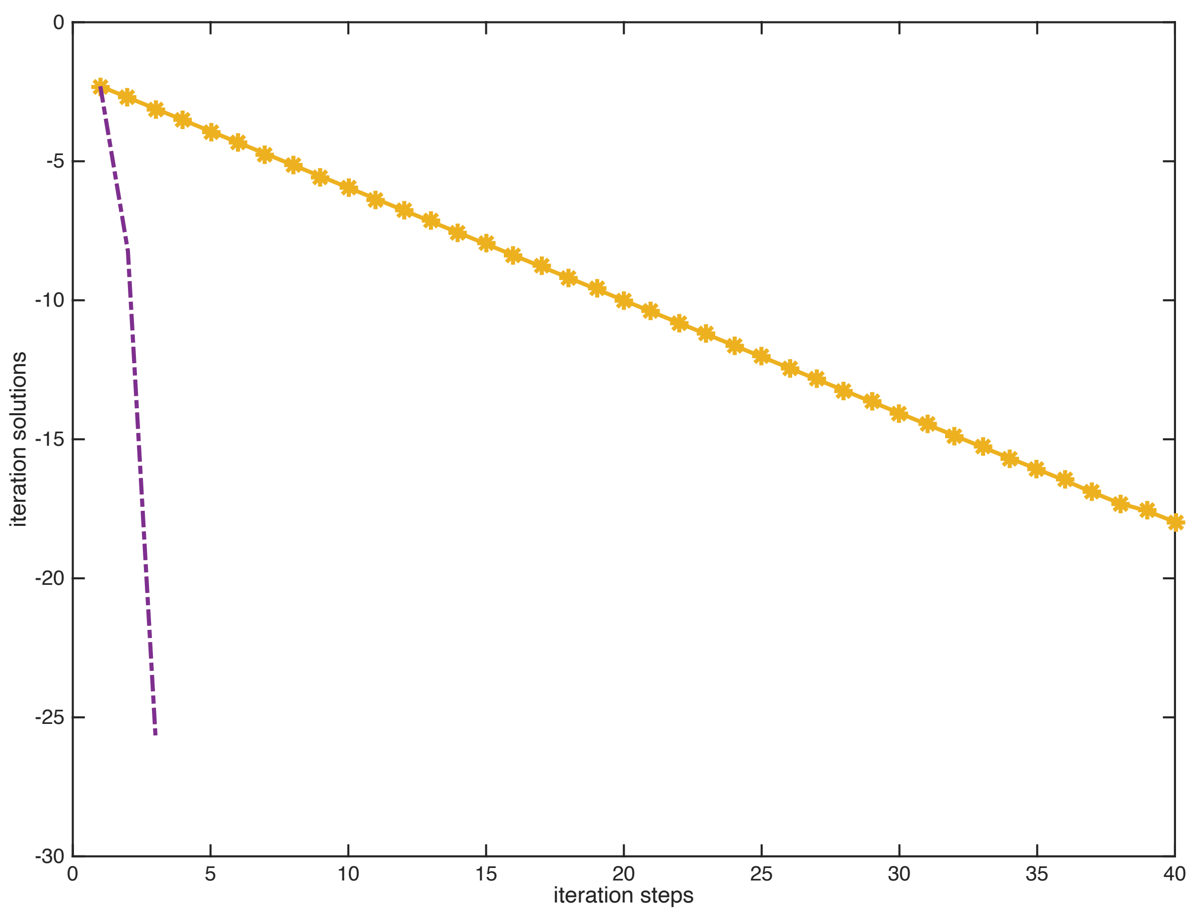
有$g(x^*)=x^*$，$g'(x^*)=0$,

迭代法$x_{k+1}=x_k-\dfrac{f(x_k)f'(x_k)}{f'(x_k)^2-f(x_k)f''(x_k)}$至少二阶收敛.

$f(x) = x - \tan(x)$，采用修正Newton迭代
$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x} - \frac{3\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})}{\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x})}$$，结果对比

迭代次数	修正前数值解	修正后数值解
0	0.100000000000000	0.100000000000000
1	0.066755682709209	0.000267048127628
2	0.044530248406928	0.000000000007245
10	0.002607488258194	
20	0.000045217910103	
30	0.000000784189563	
40	0.000000015658187	

数值解比较


0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
iteration solutions
0
5
10
15
20
25
30
35
40
iteration steps

定理（收敛的充分条件）设 $f \in C^2[a, b]$，若

（1）$f(a) f(b) < 0$；(2) $f'(x) \neq 0$， $x \in [a, b]$ ；

（3）f' 不变号， $x \in [a, b]$ ；

（4）选取 $x_0 \in [a, b]$ 使得 $f(x_0) f''(x_0) > 0$；

则Newton’s Method产生的序列{ … [a, b]

根唯一

产生的序列单调有界，保证收敛。

定理（局部收敛性）设 $f \in C^2[a, b]$，若 x^* 为 $f(x)$ 在$[a, b]$上的根，且 $f'(x^*) \neq 0$，则存在 x^* 的邻域$B_\delta(x^*)$ 使得任取初值 $B_\delta(x^*)$ ，Newton’s Method产生的序列$\{x_k\}$收敛到x^*，且满足 $B_\delta(x^*)$ 。

证明：Newton's Method 事实上是一种特殊的不动点迭代

其中 $g(x) = x - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$，则

$$|g'(x^*)| = \left|\frac{f''(x^*)f(x^*)}{f'^2(x^*)}\right| = 0 < 1 \quad \Rightarrow \text{ 收敛 } \checkmark$$

由 Taylor 展开

$0 = f(x^*) = f(x_k)$ … $x_k)^2$

$\Rightarrow \quad x^* = \underbrace{x_k - \dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}}_{x_{k+1}} - \dfrac{f''(\xi_k)}{2!\,f'(x_k)}(x$ … $)^2$

在单根 /*simple root */
附近收敛快

$$\Rightarrow \quad \frac{x^* - x_{k+1}}{(x^* - x_k)^2} = -\frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)}$$

只要 $f'(x^*) \neq 0$，则令 $k \to \infty$ 可得结论。 ∎

局部收敛性：

需要x_0取在x^*附近才能保证迭代序列的收敛性。

全局收敛性：

对 x_0选取无x^*附近的要求。

例如： 设$a > 0$，求平方根$\sqrt{a}$，化为解方程组

$$x^2 - a = 0$$

迭代公式？

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

可证如果$0 < x_0 < \sqrt{a}$，有下界$x_k > \sqrt{a}$，$(k = 1, \ldots\ldots)$

$x_{k+1} - x_k = \frac{a - {x_k}^2}{2x_k} < 0$，单减序列，**说明有极限$x^*$。**