非线性方程的数值解法

温丹苹
邮箱：dpwen@nju.edu.cn
办公室：工管院协鑫楼306

- 方程求解是科学计算中一个重要研究对象。
- 几百年前就已经找到代数方程中二次至四次方程 的求解公式，但是更高次数的方程目前仍**无有效的精确解法**。
- 因此，研究**非线性方程的数值解法**成为必然。

► 在生产实践和科学技术中，常遇到一些**高次代数方程或超越方程**，一般不存在直接解法，通常需要使用**迭代法**来求**近似数值解**。

▶ 记非线性方程的一般形式为

$$f(x) = 0 \tag{1}$$

方程的解 x_*称为根，也称为 f(x) 的零点。

▶ 当 $f(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x_n$ 时，公式（1）为代数方程。否则，公式（1）称作超越方程。

* 若 $f(x) \in C[a,b]$，且 $f(a) * f(b) < 0$，则 $[a,b]$ 上至少存在 $f(x) = 0$ 的一个实根。【Zero theorem】

回忆：三大微分中值定理

（一）罗尔定理

定理 1　设 $f(x) \in C[a,b]$，在 (a,b) 内可导，$f(a)=f(b)$，则存在 $\xi \in (a,b)$，使得

$$f'(\xi)=0.$$

二 拉格朗日中值

2.1 定义

定义

如果函数$f(x)$满足：

1. 在闭区间$[a,b]$上连续；
2. 在开区间(a,b)内可微分；

那么至少有一点ξ，$a<\xi<b$，使下面等式成立

$$f(b)-f(a)=f'(\xi)(b-a)。$$

三 柯西中值定理

定义

定理 3　设 $f(x),g(x) \in C[a,b]$，在 (a,b) 内可导，且 $g'(x) \neq 0 (a<x<b)$，则存在 $\xi \in (a,b)$，使得 $\dfrac{f(b)-f(a)}{g(b)-g(a)}=\dfrac{f'(\xi)}{g'(\xi)}$.

当g(x) = x 时候，为拉格朗日

基本概念

- **解, 根, 零点**:

  所有满足 $f(x_*)=0$ 的数 x_* 都称为方程的解或根, 也称为 $f(x)$ 的零点.

- 解的 **重数**:

  若 $f(x)=(x-x_*)^m g(x)$ 且 $g(x_*)\neq 0$, 则 x_* 为 $f(x)=0$ 的 m 重解 (根).

- **有解区间**:

  若 $[a,b]$ 内至少存在 $f(x)=0$ 的一个实数解, 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**.

* 若无特别说明, 本讲我们只考虑实数解, 并假定 f(x) 的表达式中也只包含实数

* 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**

◆ 数值方法求解f(x)=0的解，一般通过以下两步进行**逐步搜索法**求解:

1. 确定根所在的区间，按照某个规则，不停缩小这个有根区间;
2. 不断重复上一步，有根区间的长度会逐渐趋近到零，这时，区间内的点逐渐逼近方程的根。

2.1.1 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.
- **二分法的基本思想**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).

二分法的数学原理

定理 (零点定理) 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 $f(\xi) = 0$。

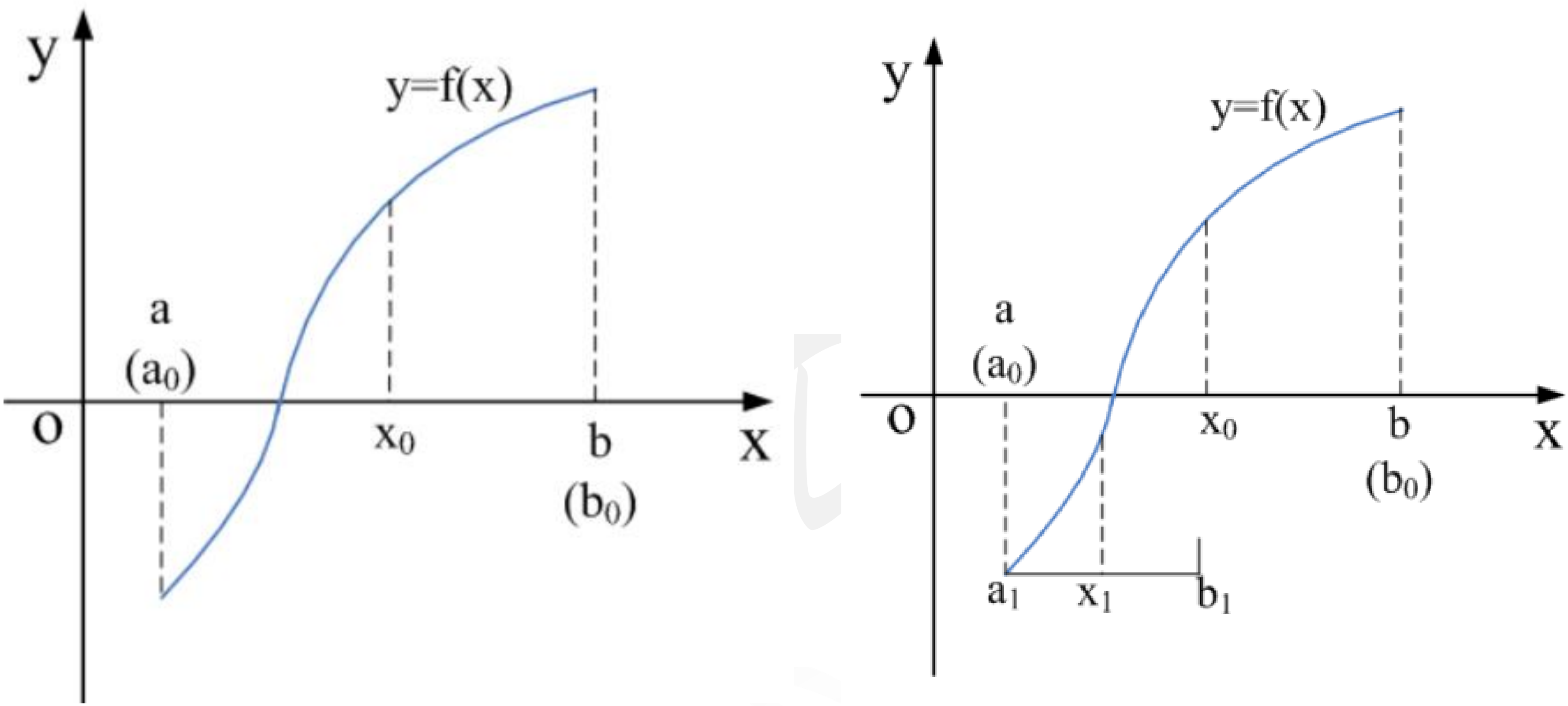
2.1.1 二分法基本思想

算法 对分法

给定函数 $f(x)$ 和求解区间 $[a, b]$, 以及精度要求 $\varepsilon > 0$
令 $a_1 = a,\ b_1 = b$
计算 $f(a_1)$ 和 $f(b_1)$,
如果 $f(a_1)f(b_1) > 0$, 则输出算法失败信息并停止计算
for $k = 1, 2, \ldots,$ **do**
　　计算 $x_k = \dfrac{a_k + b_k}{2}$ 和 $f(x_k)$
　　如果 $|b_k - a_k| < \varepsilon$, 则返回数值解 x_k 并停止计算;
　　如果 $f(a_k)f(x_k) < 0$, 则令 $a_{k+1} = a_k,\ b_k = x_k$; 否则令 $a_{k+1} = x_k,\ b_{k+1} = b_k$;
end for

* 用二分法求根，通常先**画出草图**以确定根的大概位置。

2.1.1 二分法基本思想



* 记区间$[a_k, b_k]$的长度为d_k，则该区间与最初区间$[a, b]$的长度关系为 $d_k = \frac{1}{2^k}(b-a)$

2.1.3 二分法收敛性

记第 k 步得到的有解区间为 $[a_k, b_k]$, 中点为 x_k. 则 $a_1 = a$, $b_1 = b$, 且

$$|x_k - x_*| = \left|\frac{1}{2}(a_k + b_k) - x_*\right| \le \frac{1}{2}(b_k - a_k).$$

由于每次都是对分有解区间, 因此有

$$b_k - a_k = \frac{1}{2}(b_{k-1} - a_{k-1}) = \frac{1}{2^2}(b_{k-2} - a_{k-2}) = \cdots = \frac{1}{2^{k-1}}(b_1 - a_1).$$

因此

$$|x_k - x_*| \le \frac{1}{2}(b_k - a_k) \le \frac{1}{2^k}(b - a) \quad \to 0 \quad (k \to \infty)$$

2.1.3 二分法收敛性

二分法注意事项：

* 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, 只要满足零点定理的条件, 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:常用于求精度要求不高的近似解或提供初值, 然后再用其他方法进行加速, 如 Newton 法.

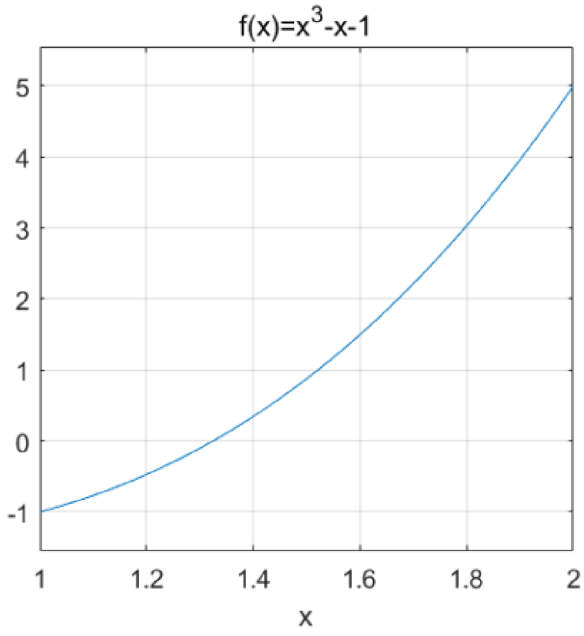
2.1.3 二分法收敛性

例 用对分法求 $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$ 在 $[1, 2]$ 内的根.

Demo_2_1_NLS_bisection.m

易知 $f(1) = -1 < 0$, $f(2) = 5 > 0$, 所以 $f(x)$ 在 $[1, 2]$ 内存在零点 (见下图).

k	$a/f(a)$	$b/f(b)$	x	$f(x)$
1	1.0000/-	2.0000/+	1.5000	0.8750
2	1.0000/-	1.5000/+	1.2500	-0.2969
3	1.2500/-	1.5000/+	1.3750	0.2246
4	1.2500/-	1.3750/+	1.3125	-0.0515
5	1.3125/-	1.3750/+	1.3438	0.0826
6	1.3125/-	1.3438/+	1.3281	0.0146
7	1.3125/-	1.3281/+	1.3203	-0.0187
8	1.3203/-	1.3281/+	1.3242	-0.0021
9	1.3242/-	1.3281/+	1.3262	0.0062
10	1.3242/-	1.3262/+	1.3252	0.0020



2.2 迭代法

* 迭代法就是用某种**渐近（极限）过程**去逐步地逼近真解，从而求出非线性方程具有指定精确度近似解的方法。

2.2.1 迭代法基本思想

不动点迭代法

将原方程改写成一个等价的方程

$$\boxed{f(x) = 0} \Longleftrightarrow \boxed{\varphi(x) - x = 0} \quad \text{或} \quad \boxed{x = \varphi(x)}$$

基于该等价方程，构造出不动点迭代的 **一般迭代格式**:

$$\boxed{x_{k+1} = \varphi(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{2.1}$$

其中 x_0 为迭代初始值，可以任意选取．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**.

2.2.1 迭代法基本思想

x_* 是 $f(x)=0$ 的解当且仅当 $x_*=\varphi(x_*)$, 即 $\varphi(x)$ 的不动点.

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很多很多.

例 求方程 $x^3-x-1=0$ 的解。

解：将原方程化为等价方程 $x=\sqrt[3]{x+1}$ ，迭代函数和迭代序列分别为

$$g_1(x)=\sqrt[3]{x+1}\text{；}\quad x_{n+1}=\sqrt[3]{x_n+1}\text{，}\quad n=0,1,2,\cdots$$

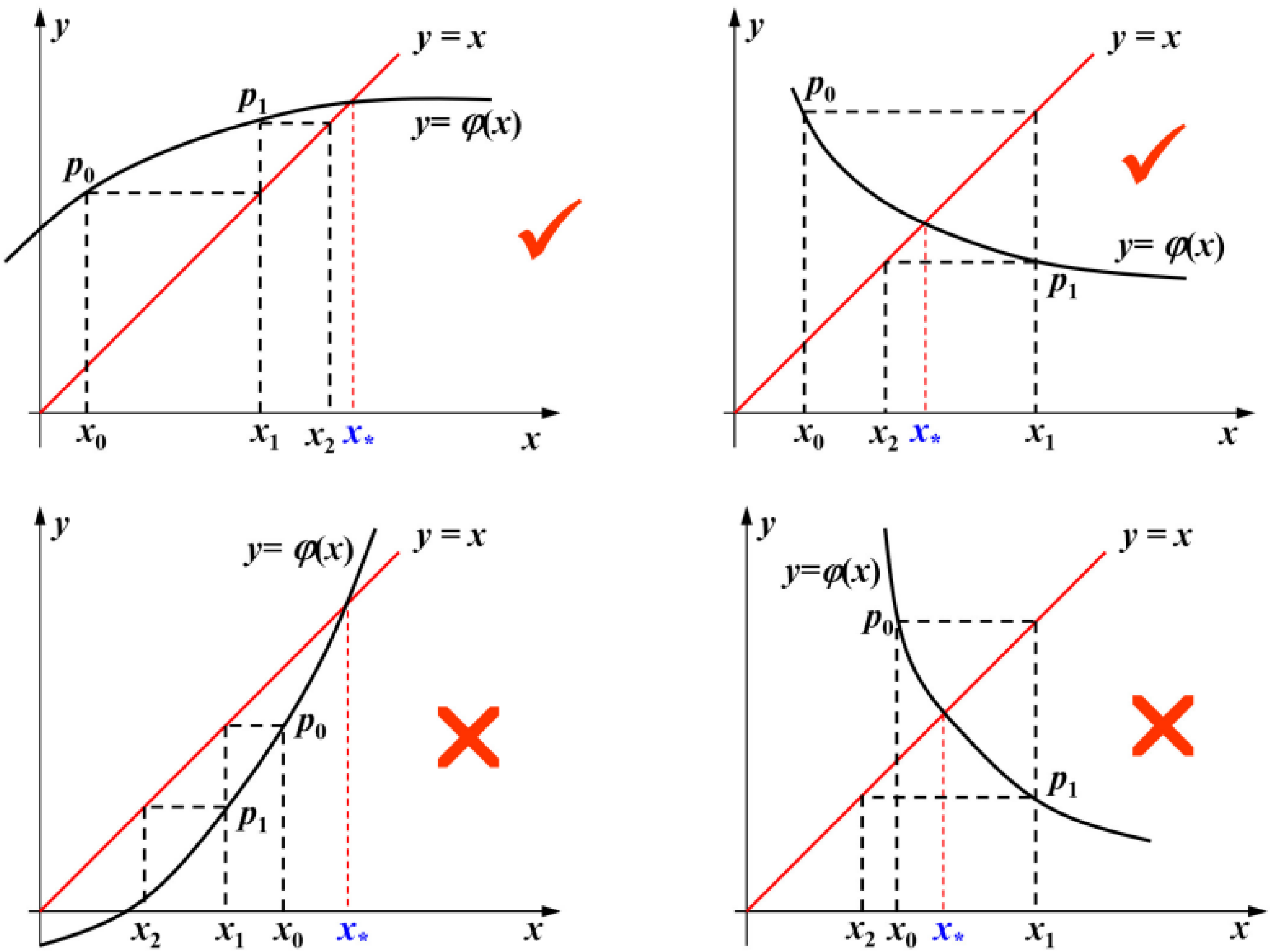
取初值 $x_0=1.5$，得迭代序列：

$$x_1=1.35721,\ x_2=1.33086,\ x_3=1.32588,$$
$$x_4=1.32494,\ x_5=1.32476,\ x_6=1.32473,$$
$$x_7=1.32472,\ x_8=1.32472,\ \cdots$$

若取6位有效数字，x_7可作为方程在 $x_0=1.5$ 附近的一个近似解：$x^*\approx 1.32472$ 。

2.2.1 迭代法基本思想

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



2.2.1 迭代法基本思想

例　求方程 $x^3-x-1=0$ 的解

方法二：

原方程也可以化为等价方程 $x=x^3-1$，其迭代函数和迭代序列分别为

$$g_2(x)=x^3-1,\quad x_{n+1}=x_n^3-1,\quad n=0,1,2,\cdots$$

取同样的初值 $x_0=1.5$，得迭代序列：

$$x_1=2.375,\quad x_2=12.3965,\quad x_3=1904.01,\quad \cdots$$

继续迭代，可知该序列的极限不存在，可见其迭代过程是发散的。

2.2.1 迭代法基本思想

◆ **启示：**

在用迭代法求非线性方程的近似解时，**迭代函数的选取很关键**，它涉及迭代序列是否收敛；另外，**迭代过程也不能无限次地进行下去**，需要考虑何时结束迭代的问题。

◆ **迭代法需要解决两个基本的问题：**

1. 如何选择初始近似值x_0和迭代函数$\varphi(x)$，才能保证按迭代公式$x_{n+1}=\varphi(x_n)$求出的迭代序列$\{x_n\}$收敛？

2. 当迭代序列$\{x_n\}$收敛时，用计算机如何结束迭代过程？

收敛 or 发散判断

设 $\varphi(x)$ 连续, 不动点迭代生成的点列为 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots$. 如果存在 x_* 使得

$$\lim_{k\to\infty} x_k = x_*,$$

则由连续函数的性质可知

$$x_* = \lim_{k\to\infty} x_{k+1} = \lim_{k\to\infty} \varphi(x_k) = \varphi\left(\lim_{k\to\infty} x_k\right) = \varphi(x_*).$$

因此 x_* 是 $\varphi(x)$ 的一个不动点, 此时我们称迭代法 **收敛**.

如果点列 $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ 不收敛, 则称不动点迭代是 **发散** 的.

2.2.2 迭代法收敛性

定理 (不动点的存在唯一性) 设 $\varphi(x) \in C[a,b]$ 且满足

(1) 对任意 $x \in [a,b]$, 都有 $\varphi(x) \in [a,b]$,

(2) 存在常数 L, 满足 $0 < L < 1$, 使得对任意 $x, y \in [a,b]$ 都有

$$\boxed{|\varphi(x) - \varphi(y)| \le L|x - y|},$$

利普希茨条件

则 $\varphi(x)$ 在 $[a,b]$ 上存在唯一的不动点.

条件 $|\varphi(x) - \varphi(y)| \le L|x - y|$ 称为 **Lipschitz 条件**.

当 $L < 1$ 时, 称 $\varphi(x)$ 为 **压缩映射**.

2.2.2 迭代法收敛性

定理 (不动点迭代的全局收敛性) 设 $\varphi(x) \in C[a, b]$ 且满足

(1) 对任意 $x \in [a, b]$, 都有 $\varphi(x) \in [a, b]$,

(2) 存在常数 L, 满足 $0 < L < 1$, 使得对任意 $x, y \in [a, b]$ 都有

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq L|x - y|.$$

则对任意初始值 $x_0 \in [a, b]$, 不动点迭代收敛, 且

$$|x_k - x_*| \leq \frac{L}{1-L}|x_k - x_{k-1}| \leq \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0|,$$

其中 x_* 是 $\varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 内的唯一不动点.

◆ **全局收敛:** 收敛性与迭代初值的选取无关.

2.2.2 迭代法收敛性

设 $\varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, 在 (a, b) 内可导, 则由 Lagrange 中值定理可得

$$\varphi(y) - \varphi(x) = \varphi'(\xi)(y - x), \quad \xi \in (a, b)$$

因此

$$|\varphi(y) - \varphi(x)| \le \max_{\xi \in [a,b]} |\varphi'(\xi)| \cdot |y - x|.$$

推论 设 $\varphi(x) \in C^1[a, b]$ 且对 $\forall\, x \in [a, b]$, 都有 $\varphi(x) \in [a, b]$. 若存在常数 L, 使得

$$|\varphi'(x)| \le L < 1, \quad \forall\, x \in [a, b],$$

则对任意初始值 $x_0 \in [a, b]$, 不动点迭代收敛, 且

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

2.2.2 迭代法收敛性

例 试构造不动点迭代格式，计算 $f(x)=x^3-x-1$ 在 $[1,2]$ 中的零点.

Demo_2_2_NLS_fixpoint.m

- $\varphi(x)=x^3-1$ 无法判断

  (1) $\varphi(x)\in[1,2]?\quad\rightarrow$ **NO**

  (2) $|\varphi'(x)|=\leq L<1?\quad\rightarrow$ **NO**

- $\varphi(x)=\sqrt[3]{x+1}$ 全局收敛

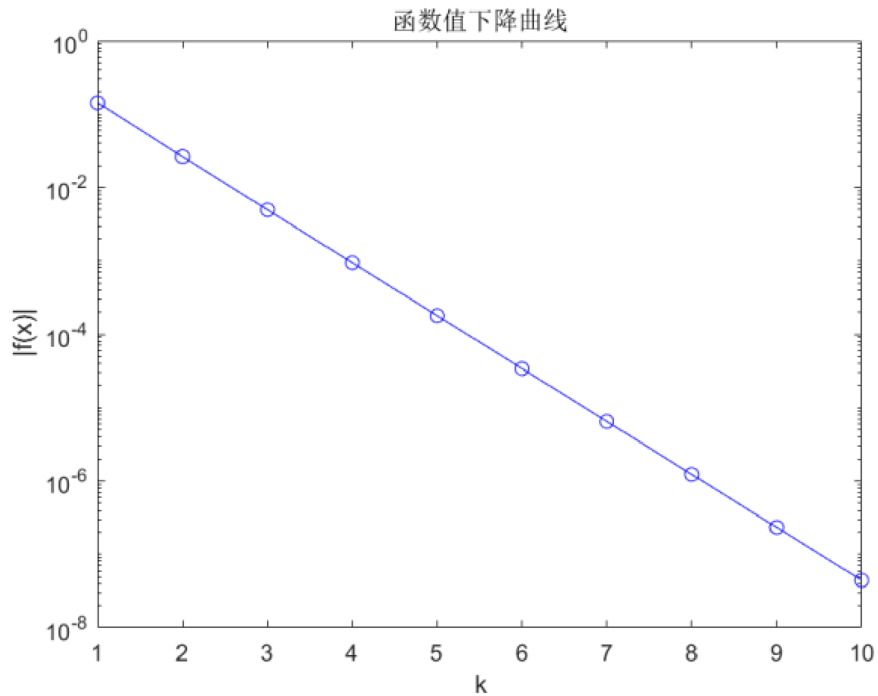
  (1) $1\leq\varphi(x)\leq 2,\ \forall x\in[1,2]$

  (2) $|\varphi'(x)|=\left|\frac{1}{3}(x+1)^{-2/3}\right|\leq\frac{1}{3}\sqrt[3]{0.25}<1$

2.2.2 迭代法收敛性

取中点为初始值，不动点迭代 $x_{k+1} = \varphi(x_k) = \sqrt[3]{x_k + 1}$ 的计算结果:

k	x	$\lvert f(x)\rvert$
1	1.3572	1.43e-01
2	1.3309	2.63e-02
3	1.3259	4.98e-03
4	1.3249	9.44e-04
5	1.3248	1.79e-04
6	1.3247	3.41e-05
7	1.3247	6.47e-06
8	1.3247	1.23e-06
9	1.3247	2.33e-07
10	1.3247	4.43e-08



2.2.2 迭代法收敛性

不动点迭代的局部收敛性：

定义 设 x_* 是 $\varphi(x)$ 的不动点，若存在 x_* 的某个 δ-邻域

$$U_\delta(x_*) \triangleq \{x \in \mathbb{R} : |x - x_*| < \delta\},$$

使得对任意 $x_0 \in U_\delta(x_*)$，不动点迭代均收敛，则称该迭代是 局部收敛 的.

定理 设 x_* 是 $\varphi(x)$ 的不动点，若 $\varphi'(x)$ 在 x_* 的某个邻域内连续且

$$|\varphi'(x_*)| < 1,$$

则不动点迭代 (2.1) 局部收敛.

2.2.2 迭代法收敛性

◆ 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.

2.2.2 迭代法收敛性

- 当迭代序列$\{x_n\}$收敛时，**如何决定迭代过程结束**，这是采用迭代法在计算机上求解非线性方程的一个重要问题。

- 通常是以迭代过程中相邻两项之差的绝对值是否小于给定的允许精度来确定，即以关系式（ε为允许精度）$|x_{n+1}-x_n| \le \varepsilon$ 是否满足来决定迭代过程是否结束。

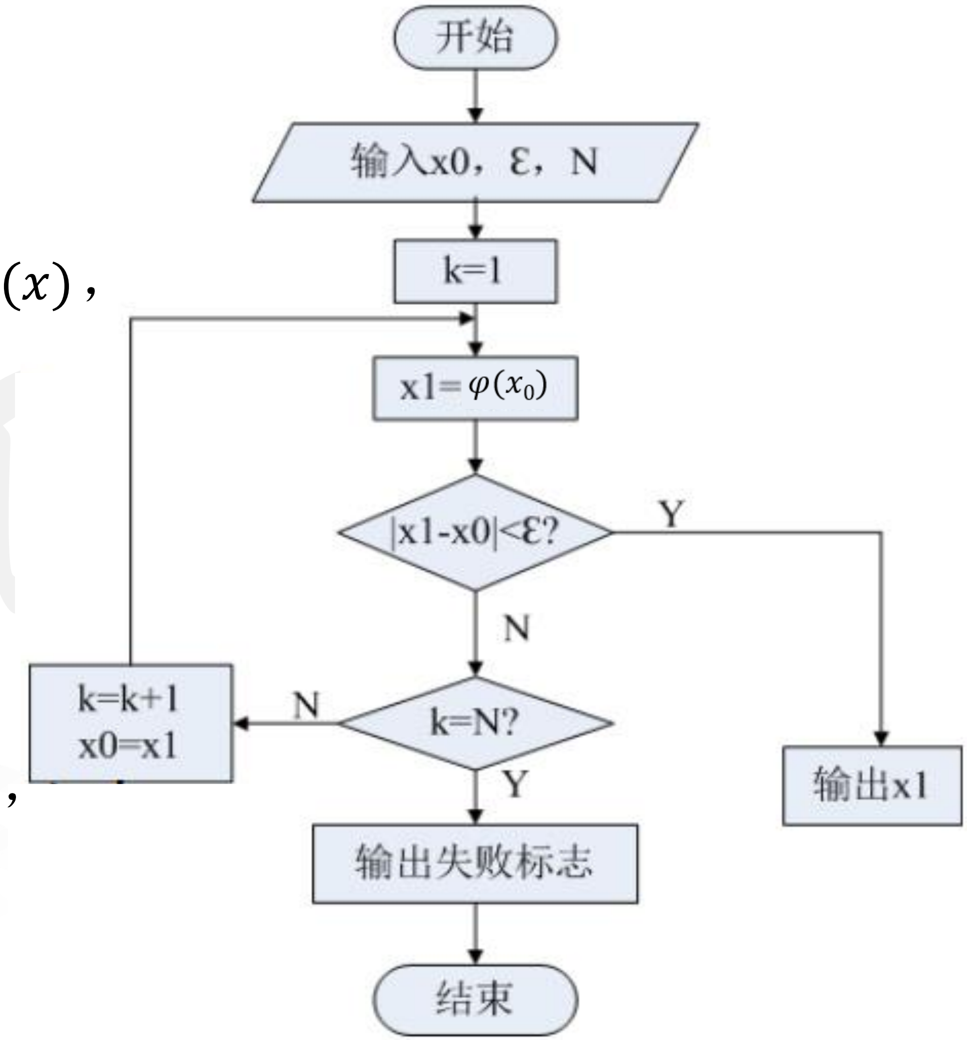
2.2.3 计算步骤和程序框图

◆ 设ε为给定的允许精度， 迭代法的计算步骤如下：

1. 选定初值x_0。由f(x)=0确定函数$\varphi(x)$，得等价形式$x = \varphi(x)$ 。

2. 计算$\varphi(x_0)$ 。由迭代公式得 $x_1 = \varphi(x_0)$。

3. 如果 $|x_1 - x_0| \le \varepsilon$ ，则迭代结束，取x_1为解的近似值；否则，用x_1代替x_0， 重复**步骤2**和**步骤3**。



例题

例 求方程 $x^3-2x-5=0$ 的一个正实根，允许精度 $\varepsilon=10^{-3}$。

解： 设 $f(x)=x^3-2x-5$，由于 $f(1)=-6<0$，$f(3)=16>0$，所以方程在区间 $[1,3]$ 内有一正根。

将原方程改写成等价形式 $x=\sqrt[3]{2x+5}$，则迭代函数为

$$g(x)=(2x+5)^{\frac{1}{3}}$$

对 $g(x)$ 求导，得

$$g'(x)=\frac{2}{3}(2x+5)^{-\frac{2}{3}}$$

例题

解（续）：当$x\in[2,3]$时，有$|g'(x)|\le\frac{2}{3}$。

迭代格式

$$\begin{cases} x_0=2, \\ x_{n+1}=(2x_n+5)^{\frac{1}{3}}, \quad n=0,1,2,\cdots \end{cases}$$

收敛。下表给出了上述迭代格式的迭代结果：

n	0	1	2	3	4
x_n	2	2.08008	2.09235	2.094217	2.094494

例题

解（续）：比较 x_3, x_4，它们的差的绝对值为

$$|x_4 - x_3| = 0.000277 \le \left(1 - \frac{2}{3}\right) \times 10^{-3}$$

已满足允许的误差精度，故所求方程的解为 $x^* \approx x_4 = 2.0945$ 。

n	0	1	2	3	4
x_n	2	2.08008	2.09235	2.094217	2.094494

2.2.4 收敛阶

* 收敛阶是衡量迭代法收敛速度快慢的一个重要指标。

定义 设迭代 $x_{k+1}=\varphi(x_k)$ 收敛到不动点 x_*. 记 $e_k \triangleq x_k - x_*$, 若

$$\lim_{k\to\infty}\frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p}=c,$$

其中 $p\geq 1$, 常数 c 与 k 无关, 则称该迭代是 **p 阶收敛** 的.

(1) 若 $p=1$ 且 $0<c<1$, 则称 **线性收敛**;

(2) 若 $p=2$, 则称 **二次收敛** 或 **平方收敛**;

(3) 若 $1<p<2$ 或 $p=1$ 且 $c=0$, 则称 **超线性收敛**.

2.2.4 收敛阶

定理 设 x_* 是 $\varphi(x)$ 的不动点，若 $\varphi'(x)$ 在 x_* 的某个邻域内连续且

$$|\varphi'(x_*)| < 1,$$

则不动点迭代 局部线性收敛.

定理 设 x_* 是 $\varphi(x)$ 的不动点且 $p \geq 2$ 是正整数. 若 $\varphi^{(p)}(x)$ 在 x_* 的某个邻域内连续且

$$\varphi'(x_*) = \varphi''(x_*) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(x_*) = 0, \quad \varphi^{(p)}(x_*) \neq 0, \tag{6.2}$$

则不动点迭代是 **p** 阶局部收敛 的，且有

$$\lim_{k\to\infty} \frac{x_{k+1} - x_*}{(x_k - x_*)^p} = \frac{\varphi^{(p)}(x_*)}{p!}.$$

◆ Aitken加速技巧

迭代两次: $x_{k+1}=\varphi(x_k)$, $\quad x_{k+2}=\varphi(x_{k+1})$, 可得

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

$$x_{k+2}-x_*=\varphi(x_{k+1})-\varphi(x_*)=\varphi'(\xi_2)(x_{k+1}-x_*).$$

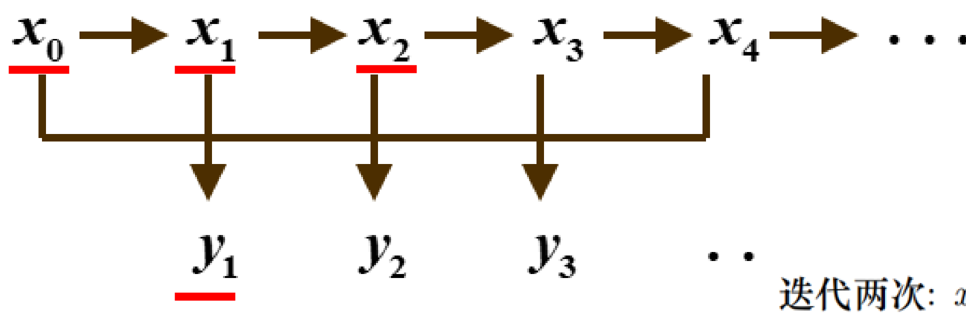
假定迭代收敛, 则当 k 较大时, x_k 和 x_{k+1} 都接近 x_*, 因此 ξ_1 与 ξ_2 也相近, 于是 $\varphi'(\xi_1)\approx\varphi'(\xi_2)$:

$$\frac{x_{k+1}-x_*}{x_{k+2}-x_*}\approx\frac{x_k-x_*}{x_{k+1}-x_*} \quad\Longrightarrow\quad \boxed{x_*\approx x_k-\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{x_{k+2}-2x_{k+1}+x_k}}$$

上式右端可能是 x_* 的一个更好的近似.

2.2.5 加速迭代技巧

加速方法：不动点迭代值做进一步计算



迭代两次: $x_{k+1}=\varphi(x_k)$, $x_{k+2}=\varphi(x_{k+1})$,

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

这时我们就得到两个迭代序列: $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$和 $\{y_k\}_{k=0}^{\infty}$。

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

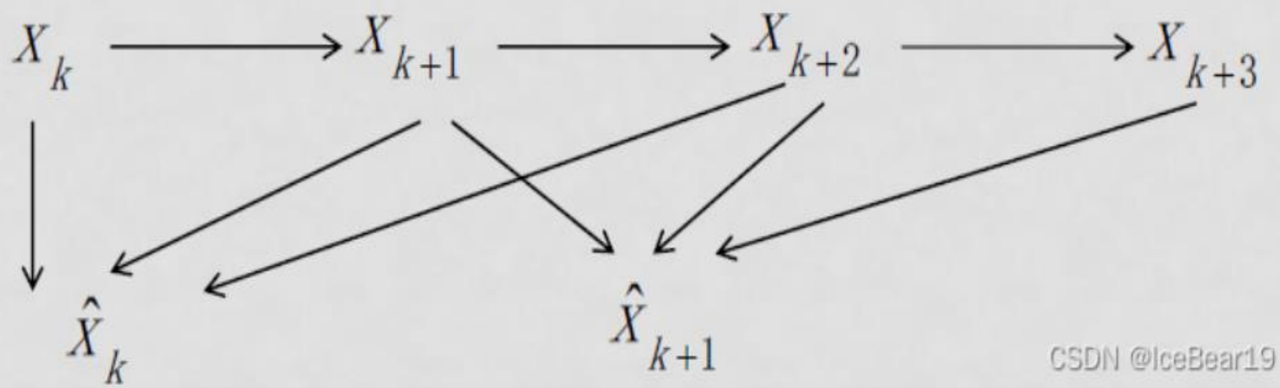
$$\lim_{k\to\infty} \frac{y_{k+1}-x_*}{x_k-x_*} = 0.$$

这意味着 y_k 比 x_k 更快地收敛到 x_*.

2.2.5 加速迭代技巧

◆ Aitken加速技巧

称 $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ 为**Aitken**加速序列，其迭代过程



◆ 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**:

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

写成不动点迭代形式可得

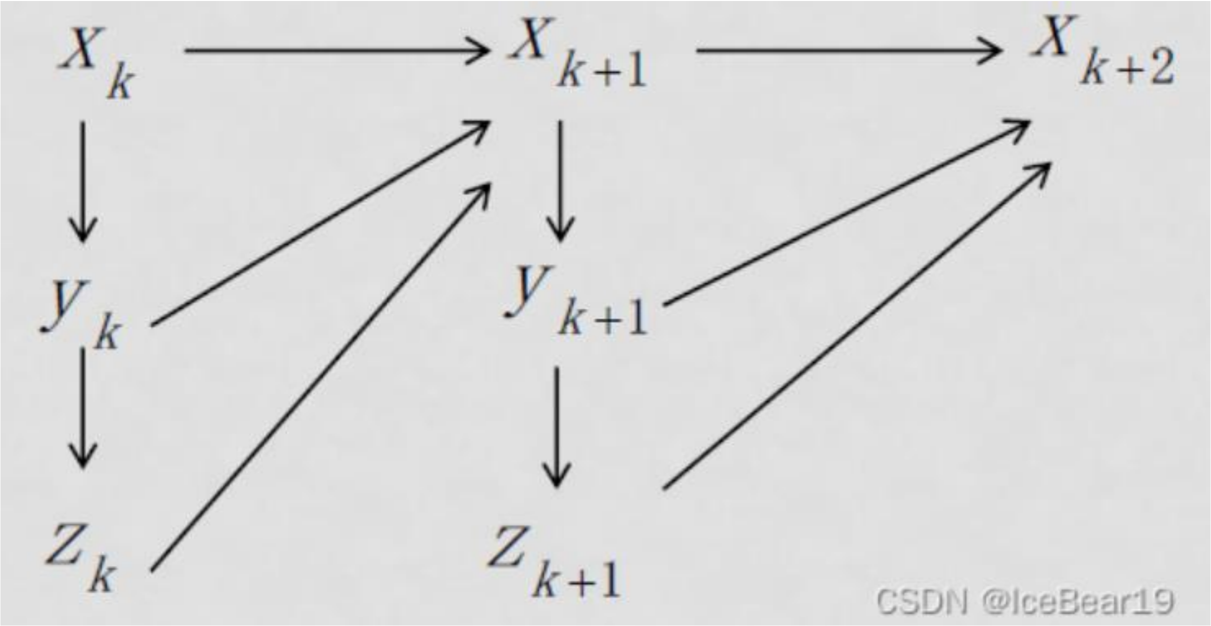
$$x_{k+1} = \psi(x_k)$$

其中迭代函数 $\psi(x)$ 为

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

* 若原迭代是 p 阶收敛的，则 Steffenson 加速后 p+1 阶收敛。

◆ **Steffensen 迭代法**



- **作业**

例 用 Steffensen 迭代法求 $f(x)=x^3-x-1$ 在区间 $[1,2]$ 内的零点（取 $\varphi(x)=x^3-1$）

Demo_2_3_NLS_Steffensen.m

用二分法、普通迭代法、Aitken迭代法、牛顿法、弦截法求解上述非线性方程。

◆ **思考题：**

用 Steffensen 迭代法求$f(x)=3x^2-e^x$在区间[3,4]内的零点。

取$\varphi(x)=2\ln x+\ln 3$,ε取值10^{-6}。

Demo_2_4_NLS_Steffensen.m

2.3 小结

- 介绍了计算机上常用的几种求非线性方程 $f(x)=0$ 的近似解的数值方法。

1. 二分法：常用于求精度要求不高的近似解或为迭代法提供初值。

   缺点：不能用于求偶次重根和复根；收敛速度较慢。

2. 迭代法：是一种逐次逼近的方法。

   优点：原理简单；编程方便。

   缺点：存在是否收敛和收敛速度快慢的问题。

- Q & A
- 谢谢