数值分析

王德明　吴勃英　编著

哈尔滨出版社

数值分析

王德明　吴勃英　编著

哈 尔 滨 出 版 社

图书在版编目(CIP)数据

数值分析 / 王德明等编著. - 哈尔滨:哈尔滨出版社,
2001.10
ISBN 7-80639-613-6

Ⅰ.数… Ⅱ.王… Ⅲ.计算方法-高等学校-教
学参考资料 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 075505 号

责任编辑:刘培杰
封面设计:卞秉利

数值分析
王德明等编著

哈尔滨出版社
哈尔滨市南岗区贵新街 170 号
邮政编码:150006 电话:0451-6225161
E-mail:hrbcbs@yeah.net
全国新华书店发行
哈尔滨工业大学印刷厂印刷

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 12.125 字数 300 千字
2001 年 10 月第 1 版 2001 年 10 月第 1 次印刷
印数 1-3040 册
ISBN 7-80639-613-6/G·199
定价:24.00 元

前　言

数值分析既是一门科学，也是一门艺术。

作为科学，数值分析研究的是近似计算规律，是研究用算术运算求解数学问题的方法。它是一门不充分精确的学科。

作为艺术，数值分析是研究如何选择最适合于所求解的数学问题的方法。这就意味着任何想要实际掌握数值分析的人对于各种数值方法应该多有一些实际体验，从而对各种方法均能有一个很直观的理解，才能选择最合适的方法来求解实际工程问题抽象出来的数学问题。

随着计算机科学的发展与普及，数值分析已成为许多工程及科学研究中普遍采用的工具。作为艺术，计算机的高速计算能力已使数值分析发生了革命性的变化；作为科学，高速计算机也极大地刺激了数值分析理论的蓬勃发展。

本书主要是向读者介绍数值分析的基本理论和在计算机上特别有效的数值方法。考虑到工科专业及其研究生对数值分析的实际要求，着重介绍数值方法的构造、使用范围以及应用时的计算效果、稳定性、收敛性等问题。特别是对工程中应用数值方法所遇到困难问题，书中尽可能地加以解答，以供读者参考。

由于编者水平有限，书中难免有不妥之处，敬请读者批评指正。

编者

2001 年 2 月 23 日

目　　录

第一章　非线性方程的解法

§1　基本问题

本章讨论非线性方程的求解方法,主要内容是搜索一般方程

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

的实根。也称寻找函数 $f(x)$ 的零点问题。

我们假设所考虑的方程是没有封闭形式的解,或者寻找方程的封闭解是非常困难的。如果方程有封闭形式的解,则计算就变得很容易了。例如,对于二次方程

$$ax^2 + bx + c = 0 \qquad a \neq 0$$

它的解就是

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

事实上,多项式方程 $P_n(x) = 0$,只有当 $n \leqslant 4$ 时才有封闭形式的解;而当 $n \geqslant 5$ 时,方程没有一般形式的解。因此,对于(1 - 1) 式那样的一般方程,更不存在根的解析表达式。而实际应用中,也不一定需要得到根的解析表达式,只要得到满足精度要求的根的近似值就可以了。本章主要介绍求解一般性方程(1 - 1) 的单实根的一些有效算法,但若对多个根都有兴趣的话,则一旦算出 m 个根 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_m$,用这些方法中的任何一个,应用到下述函数

$$f_m(x) = \frac{f(x)}{\prod_{i=1}^{m}(x - \alpha_i)}$$

上,就能算出第 $m + 1$ 个根 α_{m+1}。

一般来说,求根问题大致可分为三个方面的内容。

1. 根的存在性。方程(1 - 1) 式是否有根?如果有,有多少个根?对于多项式方程,这个问题已经解决,即 n 次方程有 n 个根。

2. 根的隔离。把有根区间分成较小的子区间,每个子区间或者有一个根,或者没有根。这样,实际上获得了根的近似值。

3. 根的精确化。将根的近似值精确化,使误差小于给定数值为止。

求根方法中最简单最直观的方法是二分法。

设函数 $f(x)$ 在$[a,b]$上连续,且 $f(a)f(b) < 0$。为了讨论方便,不妨假设 $f(a) < 0$, $f(b) > 0$。根据连续函数根的存在性定理知道,方程(1 - 1) 在(a,b) 区间上一定有实根。称(a,b) 是方程的有根区间。这里假设(a,b) 区间内只有一个根 α。如图 1.1 所示。

二分法的计算过程为:

1. 取区间$[a,b]$ 的中间点 $x_0 = \dfrac{a+b}{2}$,并计算中点函数值 $f(x_0)$,判断

若 $f(a)f(x_0)<0$,则有根区间为$[a,x_0]$,取 $a_1=a,b_1=x_0$,即新的有根区间为$[a_1,b_1]$;

若 $f(a)f(x_0)=0$,则 x_0 即为所求的根 α;

若 $f(a)f(x_0)>0$,则有根区间为$[x_0,b]$,取 $a_1=x_0,b_1=b$,即新的有根区间为$[a_1,b_1]$;

2. 取区间$[a_1,b_1]$的中间点 $x_1=\dfrac{a_1+b_1}{2}$,并计算中点函数值 $f(x_1)$,判断

若 $f(a_1)f(x_1)<0$,则有根区间为$[a_1,x_1]$,取 $a_2=a_1,b_2=x_1$,即新的有根区间为$[a_2,b_2]$;

若 $f(a_1)f(x_1)=0$,则 x_1 即为所求的根 α;

若 $f(a_1)f(x_1)>0$,则有根区间为$[x_1,b_1]$,取 $a_2=x_1,b_2=b_1$,即新的有根区间为$[a_2,b_2]$;

此过程可以一直进行下去,则可得到一系列有根区间

$$[a,b]\supset[a_1,b_1]\supset[a_2,b_2]\supset\cdots\supset[a_n,b_n]\supset\cdots$$

显然,$[a_n,b_n]$的区间长度为

$$b_n-a_n=\frac{b_{n-1}-a_{n-1}}{2}=\cdots=\frac{b-a}{2^n}$$

如图 1.1 所示。

这时,我们取最后一个区间的中间 x_n 作为方程(1-1)的根的近似值

$$x_n=\frac{a_n+b_n}{2}\qquad x_n\in[a_n,b_n]\tag{1-2}$$

其误差估计式为

$$|\alpha-x_n|\leqslant\frac{b_n-a_n}{2}=\frac{b-a}{2^{n+1}}\tag{1-3}$$

当 $n\to\infty$ 时,$|\alpha-x_n|\leqslant\dfrac{b-a}{2^{n+1}}\to 0$,即 $x_n\to\alpha$。

对给定的小数 $\varepsilon>0$,要使

$$|\alpha-x_n|<\varepsilon$$

只须令

$$\frac{b-a}{2^{n+1}}<\varepsilon$$

即

$$2^{n+1}>\frac{b-a}{2^{n+1}}$$

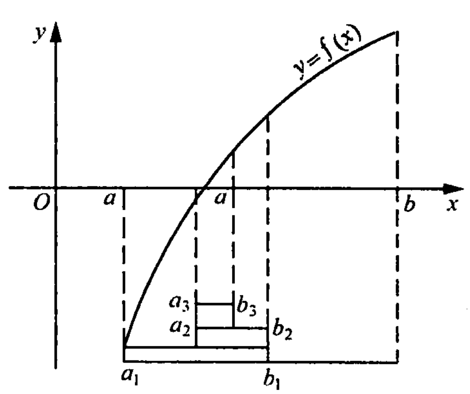

图 1.1 二分法

所以

$$n+1>[(\ln(b-a)-\ln\varepsilon)/\ln 2]\tag{1-4}$$

其中,[ ] 表示取整数。

利用式(1-4),对给定的精度,可预先确定出二分的次数。

二分法的优点是计算过程简单，收敛性可保证，对函数的性质要求低，只要求连续就可以了；它的缺点是计算收敛的速度慢，不能求偶数重根，也不能求复根和虚根。特别是函数值 $f(a_k),f(b_k)(k=0,1,2,\cdots)$ 每次均已计算出来，但没有利用上，只利用了它们的符号，显然是一种浪费。

§2 迭代法

求方程(1 - 1) 的根的主要方法是迭代法。它的基本思想是，通过构造一个迭代格式，也就是一种递推关系式，来产生一个根的近似值计算序列，并希望该序列能收敛于方程(1 - 1) 的根。

一般来讲，我们总可将方程(1 - 1) 化成等价方程

$$x = F(x) \tag{2-1}$$

然后选定一个根的初始近似值 x_0，利用关系

$$x_{i+1} = F(x_i) \qquad i = 0,1,2,\cdots \tag{2-2}$$

产生序列 $\{x_i\}$。如果该序列收敛于 α，则 α 必须满足(2 - 1)，故 α 也就是方程(1 - 1) 的根。

由此可见，迭代法所涉及的基本问题是迭代格式的构造。通常迭代法可分为单点迭代法和多点迭代法两种形式。

单点迭代法的一般形式为(2 - 2)，为产生迭代序列 $\{x_i\}$，仅需一个初值 x_0。其中 F 称为迭代函数。

多点迭代法的一般形式为

$$x_{i+1} = F(x_i,x_{i-1},\cdots,x_{i-n+1}) \qquad i = 0,1,2,\cdots \tag{2-3}$$

其中，$x_0,x_{-1},\cdots,x_{-n+1}$ 为初始近似值。

迭代法的最一般形式为

$$x_{i+1} = F_i(x_i,x_{i-1},\cdots,x_{i-n+1}) \qquad i = 0,1,2,\cdots \tag{2-4}$$

若 F_i 随迭代次数 i 变化，则称迭代为非定常迭代；若 F_i 不随迭代次数 i 变化，即 $F_i = F$，则称迭代为定常迭代。

然而，我们所构造的迭代格式是否有意义，在于迭代是否收敛。对于一个收敛的迭代格式，其使用价值将依赖于迭代过程的收敛速度和计算效率。

一、收敛性

迭代收敛性问题是迭代法研究的主要问题。在某种意义上讲，它是很容易解答的问题。我们可以认为，若初值充分接近于根 α，则迭代收敛于 α；而在另外一种意义上讲，它又是不容易解答的问题，因为很难证明，当初值接近根什么程度时，才能保证收敛？

定义：设 α 是方程 $f(x)=0$ 的根，若存在 α 的一个邻域 Δ，当初值属于 Δ 时，迭代收敛，则称该迭代过程具有局部收敛性。

我们将着重研究迭代的局部收敛性。

二、收敛速度

定义：设 $\epsilon_i = \alpha - x_i$ 为迭代误差，若

$$\lim_{i\to\infty}\frac{|\varepsilon_{i+1}|}{|\varepsilon_i|^P}=c\neq 0 \tag{2-5}$$

则称迭代是 P 阶收敛的。c 称为渐近常数。

这里,$c\neq 0$ 是为了保证收敛阶 P 的唯一性。若 $P=1$,则 $c<1$ 时迭代收敛;若 $P>1$,c 不要求小于 1。收敛阶的概念刻划了迭代收敛速度的快慢。一般来说,P 越大,收敛速度越快。习惯上,$P=1$ 称为线性收敛;$P>1$ 称为超线性收敛;$P=2$ 称为平方收敛。

三、计算效率

收敛阶只能刻划迭代收敛于根 α 所需的迭代次数的多少。但不能说明迭代收敛实际所需要的时间的多少。这还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。

设 θ 为迭代法每步的计算量,I 为达到收敛精度时迭代所需的步数,则 θI 为整个迭代过程所需的总的计算量。显然,计算效率 $EI\propto\dfrac{1}{\theta I}$。

为了能够在迭代方法使用之前就能说明该方法的计算效率(I 只能是当迭代过程结束后才能知道)。通过比较不同的方法,在相同的初值条件下,达到相同的收敛精度时,所需的总的计算量,可以给出一种近似描述计算效率的效率指数。

设有两个不同的迭代方法,其收敛阶分别为 P_1 和 P_2,渐近常数分别为 C_1 和 C_2。两个方法迭代计算时取同一初值 x_0。则当迭代接近于真值 α 时,有近似关系式

$$\begin{aligned}|\varepsilon_{i+1}^{(1)}|&=C_1|\varepsilon_i|^{P_1}\\|\varepsilon_{i+1}^{(2)}|&=C_2|\varepsilon_i|^{P_2}\end{aligned}\tag{2-6}$$

其中,$\varepsilon_i^{(1)}$ 和 $\varepsilon_i^{(2)}$ 分别为两种迭代方法的迭代误差,且 $\varepsilon_0^{(1)}=\varepsilon_0^{(2)}$。

若记 $S_i=-\ln|\varepsilon_i^{(1)}|$,$T_i=-\ln|\varepsilon_i^{(2)}|$,则由(2-6)有

$$S_{i+1}=P_1S_i-\ln C_1 \tag{2-7}$$

$$T_{i+1}=P_2T_i-\ln C_2 \tag{2-8}$$

这是两个一阶常系数非齐次差分方程。

对于(2-7),由于

$$\begin{aligned}S_1&=P_1S_0-\ln C_1\\S_2&=P_1S_1-\ln C_1=P_1^2S_0-P_1\ln C_1-\ln C_1\\S_3&=P_1S_2-\ln C_1=P_1^3S_0-P_1^2\ln C_1-P_1\ln C_1-\ln C_1\\&\vdots\\S_i&=P_1^iS_0-(P_1^{i-1}+P_1^{i-2}+\cdots+P_1+1)\ln C_1=\\&\quad P_1^iS_0-\frac{P_1^i-1}{P_1-1}\ln C_1\end{aligned}$$

所以

$$S_i=P_1^iS_0-\ln C_1^{\frac{P_1^i-1}{P_1-1}} \tag{2-9}$$

同理,对于(2-8),有

$$T_i = P_2^i T_0 - \ln C_2^{\frac{P_2^i - 1}{P_2 - 1}} \tag{2-10}$$

其中,由于两个方法所取初值相同,所以 $S_0 = T_0$。

设两种方法(1)和(2)达到相同收敛程度时,所需的迭代步数分别为 I 和 J,则有

$$|\varepsilon_I^{(1)}| \approx |\varepsilon_J^{(2)}|$$

亦即

$$S_I \approx T_J$$

所以,根据(2-9)和(2-10),有

$$S_0(P_1^I - P_2^J) + \ln \frac{C_2^{(P_2^J - 1)/(P_2 - 1)}}{C_1^{(P_1^I - 1)/(P_1 - 1)}} \approx 0 \tag{2-11}$$

一般地讲,(2-11)中的第一项总比第二项要大得多,例如当 C_1 和 C_2 都接近于1时,这往往是一个好的假设。在这种情况下,由(2-11)得

$$P_1^I \approx P_2^J$$

或者

$$\frac{I}{1/\ln P_1} \approx \frac{J}{1/\ln P_2} \tag{2-12}$$

若记 θ 和 φ 分别为两个迭代方法每次迭代所需的计算量,则两个迭代方法的总的计算量分别为 θI 和 φJ。比较两个迭代方法的计算效率,也就是要比较 θI 和 φJ。其中,量 θ 和 φ 可由两个迭代方法中的迭代函数中估计出来。

由(2-12)得

$$\frac{\theta I}{\theta/\ln P_1} \approx \frac{\varphi J}{\varphi/\ln P_2} \tag{2-13}$$

因此,要比较总计算量 θI 和 φJ,只需比较 $\theta/\ln P_1$ 和 $\varphi/\ln P_2$ 这样,量 $\theta/\ln P$ 可以作为衡量计算效率的一个标准。即量 $\theta/\ln P$ 越小效率越高,这时意味着总的计算量越小。

定义:效率指数为

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

于是,比较不同的迭代方法的计算效率时,只须考察这些方法的效率指数 EI,EI 越大,计算效率就越高。

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。

有时对于具体的函数 $f(x)$,若已算出 $f(x)$,往往能够在计算机上十分方便地计算出 $f'(x)$。例如,$f(x)$ 由初等函数组成,计算 $f(x)$ 的计算量主要是在这些初等函数的计算上。因为 $f'(x)$ 也是这些初等函数的某种组合,$f'(x)$ 的计算就十分简单了。

§3 单点迭代法

一、简单迭代法

考虑迭代法

$$x_{i+1} = F(x_i) \qquad i = 0,1,2,\cdots \tag{3-1}$$

若迭代收敛于根 α,则称 α 为方程

$$x = F(x)$$

的不动点。

一般来讲,非线性方程 $f(x) = 0$ 总可以转化为求 $x = F(x)$ 的不动点问题。例如,求方程

$$9x^2 - \sin x - 1 = 0$$

在[0,1]内的根,此时可将方程转化为等价方程

$$x = \frac{1}{3}\sqrt{\sin x + 1}$$

于是迭代公式为

$$x_{i+1} = \frac{1}{3}\sqrt{\sin x_i + 1} \qquad i = 0,1,2,\cdots$$

其中,迭代函数 $F(x) = \frac{1}{3}\sqrt{\sin x + 1}$。

在[0,1]内任取一个初值 x_0,比如取 $x_0 = 0.4$,迭代可以收敛于根 $\alpha = 0.391846907$。

然而,原方程还可以写成

$$x = \arcsin(9x^2 - 1)$$

于是迭代公式为

$$x_{i+1} = \arcsin(9x_i - 1) \qquad i = 0,1,2,\cdots$$

任取初值 $x_0 = 0.4 \in [0,1]$,迭代却是发散的。因此,可以看出,迭代公式是否收敛,与迭代函数 $F(x)$ 的形式有关。什么情况下迭代收敛呢?让我们先从几何意义上加以分析。

如图1.2所示,迭代方程 $x = F(x)$ 的根,实际上是函数 $y = x$ 和 $y = F(x)$ 的交点。

显然,要使迭代收敛,则要求

$$| F'(x) | \leqslant L < 1 \qquad x \in [a,b]$$

另外,为了使迭代过程不致中断,必须要求序列 $\{x_i\}$ 的任一项 x_i 落在函数 $F(x)$ 的定义域内。所以我们必须假设 $F(x)$ 的值域和定义域一致,记为 $[a,b]$,即对任一 $x \in [a,b]$,必有 $F(x) \in [a,b]$。于是有

【定理1.1】 若当 $x \in [a,b]$ 时,$F(x) \in [a,b]$,且 $F(x)$ 满足

$$| F'(x) | \leqslant L < 1 \qquad x \in [a,b] \tag{3-2}$$

则迭代收敛于唯一根 α。

【证明】 先证存在性。

作函数 $g(x) = x - F(x)$,则 $g(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续,由条件可知:$g(a) = a - F(a)$

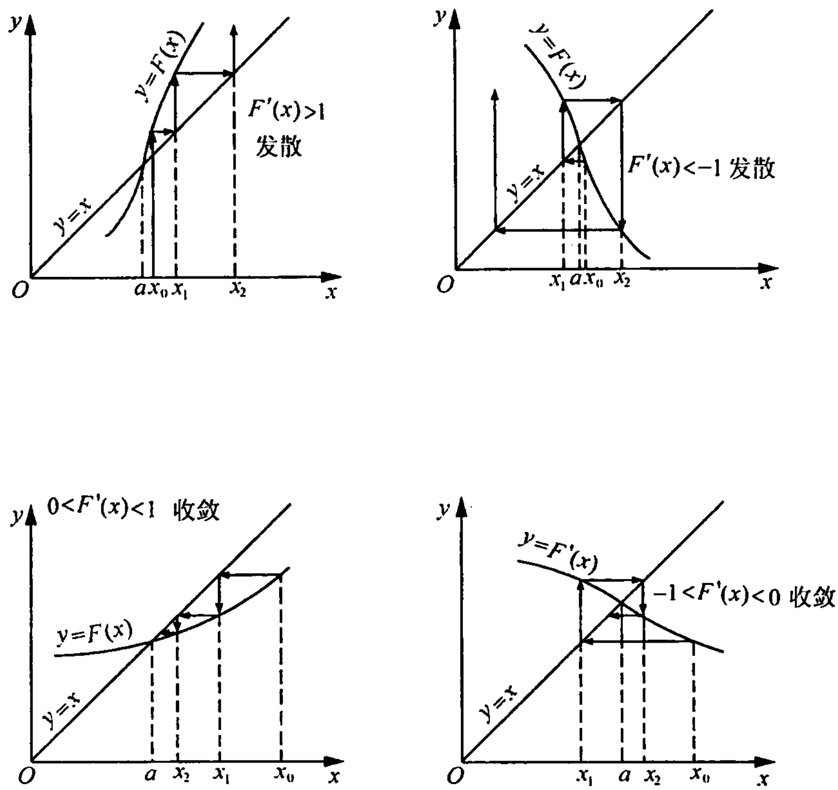

图 1.2

$\leqslant 0, g(b) = b - F(b) \geqslant 0$,于是必有 $\alpha \in [a,b]$ 使 $g(\alpha) = 0$,即 $\alpha = F(\alpha)$,亦即 α 是 $x = F(x)$ 的根。

再证明唯一性。

假设存在两个根 α_1, α_2,则由条件及微分中值定理得

$$\begin{aligned}|\alpha_1 - \alpha_2| = |F(\alpha_1) - F(\alpha_2)| = \\ |F'(\zeta)(\alpha_1 - \alpha_2)| \leqslant \\ L|\alpha_1 - \alpha_2|\end{aligned}$$

因为 $L < 1$,所以必有 $\alpha_1 = \alpha_2$。

下面证明收敛性。

按迭代过程(3 - 1)有

$$\begin{aligned}|\alpha - x_{i+1}| = |F(\alpha) - F(x_i)| = \\ |F'(\zeta)(\alpha - x_i)| \qquad \zeta \in (\alpha, x_i)\end{aligned}$$

所以

$$|\alpha - x_{i+1}| \leqslant L|\alpha - x_i| \leqslant L^2|\alpha - x_{i-1}| \leqslant \cdots \leqslant L^{i+1}|\alpha - x_0|$$

所以

$$\lim_{i\to\infty}|\alpha - x_{i+1}| = 0$$

即

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

证毕。

事实上,迭代格式(3-1)对函数 $F(x)$ 的要求还可降低。即有

【定理1.2】 设 $F(x)$ 满足条件:

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

(2) 对任何 $x_1, x_2 \in [a,b]$,有

$$|F(x_1) - F(x_2)| \leqslant L|x_1 - x_2| \qquad L < 1 \tag{3-3}$$

则对任意初值 $x_0 \in [a,b]$,迭代(3-1)收敛于根 α,且有如下误差估计式:

$$|\alpha - x_i| \leqslant \frac{1}{1-L}|x_{i+1} - x_i| \tag{3-4}$$

$$|\alpha - x_i| \leqslant \frac{L^i}{1-L}|x_1 - x_0| \tag{3-5}$$

由定理1.1和定理1.2可以看出,迭代的收敛速度与 L 的大小有关, L 越小,迭代收敛的速度越快。由(3-5)可知,若 L 已知,则对预先给定的精度可估计出迭代次数。但实际计算中,由于 L 不易求得,这个办法较难应用。然而,由(3-4)可知,只要相邻两次迭代值之差充分小,就能保证近似解 x_i 充分精确。所以,若事先给出精度 δ,当 $|x_{i+1} - x_i| < \delta$ 时,就可结束迭代过程,取 x_{i+1} 为根的近似值。但注意,当 $L \approx 1$ 时,这个方法就不可靠了。

【例1】 求方程 $xe^x - 1 = 0$ 在 $[\frac{1}{2}, \ln 2]$ 中的根。

先将方程改写为 $x = F(x)$ 的形式:

$$x = e^{-x}$$

这里,迭代函数 $F(x) = e^{-x}$。因为 $F'(x) = -e^{-x} < 0$,所以 $F(x)$ 是单调下降函数。于是当 $x \in [\frac{1}{2}, \ln 2]$ 时有

$$\frac{1}{2} = F(\ln 2) \leqslant F(x) \leqslant F(\frac{1}{2}) < \ln 2$$

即

$$F(x) \in [\frac{1}{2}, \ln 2] \qquad \text{当 } x \in [\frac{1}{2}, \ln 2] \text{ 时}$$

而

$$|F'(x)| = |-e^{-x}| \leqslant e^{-\frac{1}{2}} < 1$$

所以,根据定理1.1,方程 $x = e^{-x}$ 在 $[\frac{1}{2}, \ln 2]$ 上存在唯一的根,且迭代是收敛的。

取初值 $x_0 = 0.5$,利用迭代公式

$$x_{i+1} = e^{-x_i} \qquad i = 0,1,2,\cdots$$

结果为

$$x_0 = 0.50000, x_1 = 0.606531, x_2 = 0.545239, \cdots, x_{23} = 0.567143$$

一般说来,定理1.1和定理1.2的条件是难于验证的,对于大范围的含根区间,此条件不一定成立。实际上,使用迭代法总是在根 α 的邻域内进行,所以我们给出局部收敛性条件。

【定理 1.3】 若 $F(x)$ 在 $x = F(x)$ 的根 α 的邻域内具有连续的一阶导数,且 $|F'(\alpha)| < 1$,则(3－1)具有局部收敛性。

【证明】 由连续函数的性质知,存在一个邻域 $\Delta = [\alpha - \delta, \alpha + \delta]$,使得

$$\max_{x \in \Delta} |F'(x)| \leqslant L < 1$$

从而由定理 1.1 即得结论。证毕。

二、单点迭代的收敛阶

【定理 1.4】 设迭代函数 $F(x)$ 在方程 $x = F(x)$ 的根 α 的邻域内有充分多阶连续导数,则迭代法(3－1)关于 α 是 P 阶的充分必要条件是

$$\begin{aligned} &F^{(j)}(\alpha) = 0 \qquad j = 1,2,\cdots,p-1 \\ &F^{(p)}(\alpha) \neq 0 \end{aligned} \tag{3-6}$$

【证明】 先证充分性。

设 $F^{(j)}(\alpha) = 0, j = 1,2,\cdots,p-1, F^{(p)}(\alpha) \neq 0$,根据台勒(Taylor)展开式有

$$x_{i+1} = F(x_i) = F(\alpha) + F'(\alpha)(x_i - \alpha) + \cdots + \frac{1}{(p-1)!}F^{(p-1)}(\alpha)(x_i - \alpha)^{p-1} +$$

$$\frac{1}{p!}F^{(p)}(\alpha + \theta_i(x_i - \alpha))(x_i - \alpha)^p \qquad 0 < \theta_i < 1$$

所以,根据条件有

$$|x_{i+1} - \alpha| = \frac{1}{p!}|F^{(p)}(\alpha + \theta_i(x_i - \alpha))||(x_i - \alpha)^p|$$

所以

$$\lim_{i \to \infty} \frac{|\varepsilon_{i+1}|}{|\varepsilon_i|^p} = \lim_{i \to \infty} \frac{1}{p!}|F^{(p)}(\alpha + \theta_i(x_i - \alpha))| =$$

$$\frac{1}{p!}|F^{(p)}(\alpha)| \neq 0$$

由此可得结论迭代法(3－1)是 p 阶的。

再证必要性。(反证法)

设迭代法(3－1)是 p 阶的,如果(3－6)不成立,那么必有最小正整数 $p_0 \neq p$,使得

$$F^{(j)}(\alpha) = 0, j = 1,2,\cdots,p_0 - 1, F^{(p_0)}(\alpha) \neq 0$$

而由已证明的充分性知 $F(x)$ 是 p_0 阶的,于是产生矛盾,故(3－6)成立。证毕。

由定理 1.4 可看出,定常迭代(3－1)的收敛阶一定是正整数。

三、单点迭代法的构造

下面导出一类单点迭代函数。

设 $y = f(x)$ 有反函数 $x = g(y)$,则在 $f(x) = 0$ 的根 α 的邻域内,$g(y)$ 关于点 $y_i = f(x_i)$ 的台勒展式为

$$x = g(y) = \sum_{j=0}^{m+1} \frac{(y - y_i)^j}{j!} g^{(j)}(y_i) + \frac{(y - y_i)^{m+2}}{(m+2)!} g^{(m+2)}(\eta_i)$$

其中,η_i 介于 y 与 y_i 之间。

因为 $\alpha = g(0)$,所以得

$$\alpha = x_i + \sum_{j=1}^{m+1} \frac{(-1)^j}{j!}[f(x_i)]^j g^{(j)}(y_i) + \frac{(-1)^{m+2}}{(m+2)!}[f(x_i)]^{m+2} g^{(m+2)}(\eta_i) \approx$$

$$x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} + \sum_{j=2}^{m+1} \frac{(-1)^j}{j!}[f(x_i)]^j g^{(j)}(y_i) \tag{3-7}$$

所以,可以构造迭代公式

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} + \sum_{j=2}^{m+1} \frac{(-1)^j}{j!}[f(x_i)]^j g^{(j)}(y_i) \tag{3-8}$$

这里,我们用到了

$$y_i = f(x_i)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,y}g(y) = \frac{\mathrm{d}\,g(y)}{\mathrm{d}\,x} \cdot \frac{\mathrm{d}\,x}{\mathrm{d}\,y} = \frac{1}{f'(x)}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\,y^2}g(y) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,y}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,y}g(y)\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,x}\left(\frac{1}{f'(x)}\right)\frac{\mathrm{d}\,x}{\mathrm{d}\,y} = -\frac{f''(x)}{[f'(x)]^3}$$

$$\frac{\mathrm{d}^j}{\mathrm{d}\,y^j}g(y) = \frac{S_j(x)}{[f'(x)]^{2j-1}} \qquad j = 1,2,\cdots$$

其中,$S_1(x) = 1 \quad S_{j+1}(x) = f'(x)S'_j(x) - (2j-1)f''(x)S_j(x)$

所以,(3 - 8) 中的 $g^{(j)}(y_i)$ 可用 $f(x_i), f'(x_i), \cdots, f^{(j)}(x_i)$ 来表示。记

$$F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} + \sum_{j=2}^{m+1} \frac{(-1)^j}{j!}[f(x)]^j g^{(j)}(y)$$

则,若 α 是 $f(x) = 0$ 的单根,就有 $\alpha = F(\alpha)$。于是(3 - 8) 定义了一类求 $f(x) = 0$ 的根 α 的单点迭代公式。考虑(3 - 7) 与(3 - 8) 的差别,容易得到(3 - 8) 的收敛阶。即有

$$|\varepsilon_{i+1}| = \frac{1}{(m+2)!}|f(x_i)|^{m+2}|g^{(m+2)}(\eta_i)| =$$

$$\frac{1}{(m+2)!}|f'(\zeta_i)|^{m+2}|g^{(m+2)}(\eta_i)||\varepsilon_i|^{m+2} \quad \zeta_i \in (\alpha, x_i) \quad \eta_i \in (0, y_i)$$

若 α 是单根,则 $|f'(\zeta_i)|^{m+2}|g^{m+2}(\eta_i)|$ 在 α 的某邻域内是有界的,且当 $i \to \infty$ 时 $\zeta_i \to \alpha$, $\eta_i \to 0$。所以

$$\lim_{i\to\infty} \frac{|\varepsilon_{i+1}|}{|\varepsilon_i|^{m+2}} = \frac{1}{(m+2)!}|f'(\alpha)|^{m+2}|g^{(m+2)}(0)| \neq 0 \tag{3-9}$$

即(3 - 8) 的收敛阶为 $p = m + 2$。

设 $f(x_i)$ 的计算量为 1, $f^{(j)}(x_i)$ 的计算量相于 $f(x_i)$ 的计算为 θ_j,则(3 - 8) 的每一步计算量为

$$\psi = 1 + \sum_{j=1}^{m+1}\theta_j$$

因此,(3 - 8) 的计算效率为

$$EI = p^{\frac{1}{\psi}} = (m+2)^{1/(1+\sum_{j=1}^{m+1}\theta_j)} \tag{3-10}$$

四、Newton 迭代法

在(3 - 8) 中最简单情形是取 $m = 0$ 时,此时迭代公式为

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \tag{3-11}$$

这就是著名的 Newton 迭代公式。从(3 - 9) 中知，它的收敛阶为 $p = 2$，即

$$\lim_{i\to\infty} \frac{|\varepsilon_{i+1}|}{|\varepsilon_i|^2} = \frac{|f''(\alpha)|}{2|f'(\alpha)|} \tag{3-12}$$

计算效率为

$$EI = 2^{\frac{1}{1+\theta_1}} \tag{3-13}$$

其中，θ_1 为 $f'(x_i)$ 的计算量相对 $f(x_i)$ 的计算量的比。

Newton 迭代法的几何意义是明显的。如图 1.3 所示。方程 $f(x) = 0$ 的根 α 是曲线 $y = f(x)$ 与直线 $y = 0$ 的交点的横坐标。Newton 迭代法是过 $(x_i, f(x_i))$ 点的切线方程

$$y = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i)$$

与 $y = 0$ 的交点的横坐标

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

作为根的新的近似值。此即由(3 - 11) 得到的 $f(x) = 0$ 的第 $i + 1$ 次近似值。继续取过点 $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$ 作切线与 x 轴的相交点，又可得 x_{i+2}，……。由此可见，只要初值取得充分接近根 α，这个序列就会很快收敛于 α。因此，由上述几何意义 Newton 迭代法在单变量情况下又称为切线法。

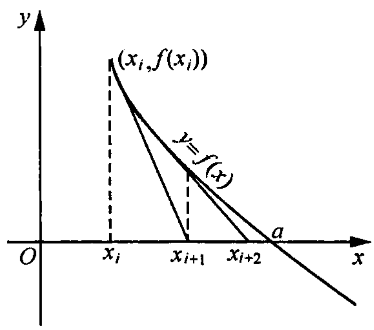

图 1.3　Newton 迭代法

应该指出，Newton 迭代法是否收敛，与初值的选取有关。当初值 x_0 充分接近根 α 时，一般可保证迭代收敛。它是具有局部收敛性的。

在实际问题中，如果考虑 Newton 迭代法的非局部收敛性，我们给出如下定理。

【定理 1.5】　设 $f(x)$ 在有根区间 $[a, b]$ 上二阶导数存在，且满足：

1. $f(a)f(b) < 0$;
2. $f'(x) \neq 0, x \in [a, b]$;
3. $f''(x)$ 不变号，$x \in [a, b]$;
4. 初值 $x_0 \in [a, b]$ 且使 $f''(x_0)f(x_0) > 0$

则 Newton 迭代序列 $\{x_i\}$ 收敛于 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 内的唯一根。

对此定理我们不作分析证明，只给出它的几何解释。图 1.4 的四种情况都满足定理条件。

条件 1 保证了根的存在；条件 2 表明函数单调，根唯一；条件 3 表示 $f(x)$ 的图形在 $[a, b]$ 内凹向不变；条件 4 保证了 $x \in [a, b]$ 时 $F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ 满足 $F(x) \in [a, b]$。从 Newton 迭代法的几何解释可以断定，迭代序列是收敛的。

【例 2】　用 Newton 迭代法建立求平方根 $\sqrt{C}$ $(C > 0)$ 的迭代公式

作函数 $f(x) = x^2 - C$，则 $f(x) = 0$ 的正根就是 $\sqrt{C}$。由(3 - 11) 得