计算方法丛书

非线性方程组的数值解法

李庆扬 莫孜中 祁力群 著

科学出版社

计算方法丛书

非线性方程组的数值解法

李庆扬　莫孜中　祁力群 著

科学出版社

内 容 简 介

本书论述了解非线性方程组的基本理论和方法，着重介绍：Newton法、单纯形算法、同伦延拓法、区间迭代法，以及计算机数学库中常用的新算法，还介绍了方法的收敛性定理和方程解的存在唯一性，并且给出了有实际应用价值的、效果好的算法步骤和数值例题.

本书可供高等学校数学系师生，有关研究人员和工程技术人员参考。

计 算 方 法 丛 书

非线性方程组的数值解法

李庆扬 莫孜中 祁力群 著

责任编辑 林 鹏 张鸿林

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码 100717

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1987年10月第一版 开本：850×1168 1/32

1997年7月第三次印刷 印张：9 1/4

印数：5 601—8 600 字数：240 000

ISBN 7-03-002846-5/O·532

定价：17.00元

前　　言

非线性方程组数值解法是计算数学的一个重要课题，在实际问题中有广泛的应用，特别在各种非线性问题的科学计算中更显出它的重要性．因此，近一、二十年来有关这一课题的发展十分迅速，不但各种经典的迭代法有新的发展，而且相继出现了很多新的数值方法．本书是为满足科学计算和培养计算数学专业人才的需要而编写的，本书内容自 1980 年以来曾多次作为清华大学计算数学专业研究生教材，取得一定的效果．

本书主要介绍有关非线性方程组数值解的理论和方法，除了讨论经典的、常用的迭代法及其收敛性理论外，还介绍近一、二十年新发展的方法，如同伦延拓法，单纯形算法，区间迭代法以及计算机数学库中常用的新算法，也包括作者近年来某些研究成果．书中对有关非线性方程组解的存在唯一性进行了一些探讨，对有实际应用价值和效果较好的算法给出了计算步骤和数值例题．本书在理论上自成系统，有一定深度和广度，方法较完整，便于应用，可作为计算数学专业研究生和高年级学生专门化课程的教材，也可供一般科技人员学习参考．学习本书要求有一定多元微积分及线性代数的基础．

在编写本书过程中清华大学应用数学系孙念增教授和施妙根老师认真审阅了本书原稿，原计算数学研究生李受白、冯国胜同志提供了四，七两章部分例题，我们在此仅向这些同志表示衷心的感谢．

作者

目　　录

引　　言

n 个变量 n 个方程的非线性方程组的一般形式为

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

其中 $f_i(i = 1, 2, \cdots, n)$ 是定义在 n 维 Euclid 空间 R^n 中开域 D 上的实值函数．若用向量记号，令

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \ 0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

则上述方程可改写为

$$F(x) = 0, \tag{0.1}$$

这里 F 表示定义在 R^n 中开域 D 上的非线性映象，记为

$$F: D \subset R^n \to R^n.$$

若存在 $x^* \in D$，使 $F(x^*) = 0$，则 x^* 称为方程组 (0.1) 的解． 本书就是研究寻找方程 (0.1) 的解 x^* 的方法及有关理论．

随着科学技术的发展和电子计算机的广泛应用，求解形如 (0.1) 的非线性方程组的问题越来越多地被提出来了，例如非线性有限元问题，非线性断裂问题，弹塑性问题及其他非线性力学问题，电路问题，电力系统计算，经济与非线性规划问题等．而且其中相当多是由拟线性或非线性偏微分方程或常微分方程离散化后得到的，最简单的例子是两点边值问题：

$$x'' = f(t, x) \quad 0 \leqslant t \leqslant 1, \ x(0) = \alpha, \ x(1) = \beta. \tag{0.2}$$

假定 f 在 $D = \{(t, x) | 0 \leqslant t \leqslant 1, -\infty < x < +\infty\}$ 上为二阶连续可微，为了计算 (0.2) 的解 x 的近似数值，可用差分方法离散

化，取步长 $h=\dfrac{1}{n+1}$，$t_j=jh, j=0,1,\cdots,n+1$，则

$$x''(t_j)\doteq\frac{1}{h^2}(x_{j+1}-2x_j+x_{j-1}),\ j=1,2,\cdots,n.$$

若引入矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

及映象 $\phi: R^n\to R^n$ 为

$$\phi(x)=h^2\begin{bmatrix} f(t_1,x_1)-(\alpha/h^2) \\ f(t_2,x_2) \\ \vdots \\ f(t_{n-1},x_{n-1}) \\ f(t_n,x_n)-(\beta/h^2) \end{bmatrix},$$

则方程 (0.2) 可化为

$$Ax+\phi(x)=0. \tag{0.3}$$

这个方程组是本书后半部分将要引用到的简单例子．只要包含有未知函数及其导函数的非线性项的微分方程，无论是用差分方法还是用有限元方法，离散化后得到的方程组都是非线性方程组．

在很多实际应用问题中，需要求已知函数 $g: D\subset R^n\to R^1$ 的极小点 x^*，即求 $x^*\in D$ 使

$$g(x^*)=\min\{g(x)\mid x\in D\},$$

这就是所谓的极小化问题．如果 g 可微，由多元函数极值必要条件，x^* 应是方程组

$$f_i(x)\equiv\frac{\partial}{\partial x_i}g(x)=0,\ i=1,\cdots,n \tag{0.4}$$

的解．这类问题的一个常见例子是非线性最小二乘逼近问题．假定某一量 y 满足形如 $y(t)=f(t,x)$ 的关系，其中 f 是 t 与 x 的

已知函数，t 是独立变量，参量 $x=(x_1,\cdots,x_n)^T$ 是未知的 n 维向量，若在点 $a\leqslant t_1<t_2<\cdots<t_m\leqslant b$ 上测得 y 的一组值

$$y_1,y_2,\cdots,y_m\ (m>n),$$

要求 x 使偏差 $[y_i-f(t_i,x)]$ 的平方和为极小，即要求

$$g(x)=\sum_{i=1}^{m}[y_i-f(t_i,x)]^2$$

在 R^n 上取极小，显然 $g:R^n\to R^1$，这问题转化为求非线性方程组：

$$\sum_{j=1}^{m}[y_j-f(t_j,x)]\frac{\partial}{\partial x_i}f(t_j,x)=0,\ i=1,2,\cdots,n \qquad (0.5)$$

的解。

总之，求解形如 (0.1) 的非线性方程组的问题，已经引起人们广泛的重视．早在七十年代以前，在理论上和数值解法上都对它做了大量研究，在 Ortega 与 Rheinboldt 的书[1]与文献[2]中，已做了较系统介绍．但是，由于非线性方程组求解问题无论在理论上或解法上都不如线性方程组成熟和有效．因此，对非线性方程组解的存在性及寻找有效的数值方法均存在很多问题，需要进一步研究与解决．例如，对非线性方程组是否有解，有多少解，理论上就没很好解决．在解法上，除对极特殊的非线性方程组外，直接法几乎是不能使用的，而迭代法由于受初值选取的限制，往往不能有效地求出方程的解，因此，有不少问题需要研究．

本书将介绍求解非线性方程组的迭代法及其收敛性，特别对适合于在计算机上求解的有效算法及近十几年发展的新方法，例如，一些具有大范围收敛性特点的算法，即延拓法，区间迭代法，单调迭代法与单纯形算法等，本书都做了较详细介绍．对六十年代中期以后才提出的一些局部收敛的新方法如 Brown 算法，Broyden 方法等，在本书中也都做了介绍，目前在计算机数学软件中已普遍使用了这些方法．另外象经典的 Newton 法及其新的发展也是本书讨论的一个重点．然而，把非线性方程组求解问题归结为求极小化问题，得到一类称为极小化方法的迭代法，目前国内已有较多

的书作了介绍[3]，本书就不再讨论．本书力求使读者对这一领域到目前为止的主要成果，特别是行之有效的数值方法有一个基本了解，便于读者使用这些方法并为开展进一步研究打下基础。

为了便于读者阅读本书，在第一章中我们介绍了一些基本概念和理论，有的作为预备知识，有的则是关于非线性方程组可解性与迭代法的基本理论，这些材料对学习和掌握本书内容是十分重要的。

第一章　压缩映象与迭代法概述

§1　预 备 知 识

1-1　向量与矩阵范数

R^n 为 n 维实向量空间，$x \in R^n$ 表示 R^n 中的一个元素称为向量，记 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$，$x_i$ 为实数。

定义 1.1　如果向量 $x \in R^n$ 的某个实值函数 $N(x) = \|x\|$ 满足条件

(1)　$\|x\| \geqslant 0$，$\|x\| = 0$ 当且仅当 $x = 0$，

(2)　$\|cx\| = |c|\,\|x\|$，c 为任意实数，

(3)　$\|x + y\| \leqslant \|x\| + \|y\|$，$y \in R^n$，

则称 $N(x) = \|x\|$ 是 R^n 上的一个向量范数。

常用的三种向量范数是:

(1) 向量的∞范数(最大范数):

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leqslant i \leqslant n} |x_i|. \tag{1.1}$$

(2) 向量的 1 范数:

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|. \tag{1.2}$$

(3) 向量的 2 范数 (Euclid 范数):

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{1/2}. \tag{1.3}$$

这三种范数之间有以下关系

$$\frac{1}{n}\|x\|_1 \leqslant \frac{1}{\sqrt{n}}\|x\|_2 \leqslant \|x\|_\infty \leqslant \|x\|_2 \leqslant \|x\|_1. \tag{1.4}$$

在本书中未注明何种范数的地方，任何范数均通用，但一个定理或表达式均用同一种范数。

一个实 $m\times n$ 阵 $A=(a_{ij})$ 定义了一个从 R^n 到 R^m 的线性映象，用 $A\in L(R^n,R^m)$ 表示矩阵或线性算子，当 $n=m$ 时简记 $L(R^n,R^n)=L(R^n)$。如果线性算子 $A\in L(R^n)$ 是一一对应的，则 A 称为可逆或非奇异，它的逆记为 A^{-1}，又用 A^T 表示 A 的转置。用 $e_1,e_2,\cdots,e_n$ 表示单位坐标向量，e_i 表示第 i 个分量为 1，其余分量为 0。用 $I=(e_1,e_2,\cdots,e_n)$ 表示单位矩阵，0 表示全部元素为 0 的零矩阵。

定义 1.2 如果矩阵 $A\in L(R^n)$ 的某个非负的实值函数

$$N(A)=\|A\|,$$

满足条件：

(1) $\|A\|\geqslant 0$，$\|A\|=0$ 当且仅当 $A=0$，

(2) $\|cA\|=|c|\|A\|$，c 为实数，

(3) $\|A+B\|\leqslant\|A\|+\|B\|$，$B\in L(R^n)$，

(4) $\|AB\|\leqslant\|A\|\|B\|$，

则称 $N(A)$ 是 $L(R^n)$ 上的一个矩阵范数。

$$\|A\|_F=\left(\sum_{i,j=1}^{n}a_{ij}^2\right)^{1/2} \tag{1.5}$$

称为 A 的 Frobenius 范数。(简称 F 范数)

与向量范数相容的矩阵范数称为矩阵的算子范数，它由下式定义：

$$\|A\|_L=\max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_L}{\|x\|_L}. \tag{1.6}$$

与三种常用的向量范数相对应的矩阵范数是：

$$\|A\|_\infty=\max_{1\leqslant i\leqslant n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|, \tag{1.7}$$

$$\|A\|_1=\max_{1\leqslant j\leqslant n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|, \tag{1.8}$$

$$\|A\|_2=\sqrt{\rho(A^TA)}, \tag{1.9}$$

这里 $\rho(A^TA)$ 表示矩阵 A^TA 的谱半径，矩阵 A 的谱半径 $\rho(A)$ 是：

$$\rho(A)=\max_{1\leqslant i\leqslant n}|\lambda_i|,\ \lambda_i\text{ 为 }A\text{ 的特征值.}$$

下面不加证明地给出常用的定理(证明见[1]的第二章,定理1.2的证明也见[4]的第一章§2).

定理 1.1 (范数等价定理) 若$\|\cdot\|$与$\|\cdot\|'$是两种不同的范数,则有常数 c_1,c_2 $(c_2\geqslant c_1>0)$, 使对任何 $x\in R^n$, 有

$$c_1\|x\|\leqslant\|x\|'\leqslant c_2\|x\|, \tag{1.10}$$

且对任何 $A\in L(R^n)$ 相应地有

$$(c_1/c_2)\|A\|\leqslant\|A\|'\leqslant(c_2/c_1)\|A\|. \tag{1.11}$$

定理 1.2 对任何 $A\in L(R^n)$ 和任给 $\varepsilon>0$, 总存在一种范数$\|\cdot\|$,使

$$\rho(A)\leqslant\|A\|\leqslant\rho(A)+\varepsilon. \tag{1.12}$$

定理 1.3 (摄动引理) 若 $A,C\in L(R^n)$, A^{-1} 存在且

$$\|A^{-1}\|\leqslant\alpha,\ \|A-C\|\leqslant\beta,\ \alpha\beta<1,$$

则C可逆且

$$\|C^{-1}\|\leqslant\alpha/(1-\alpha\beta). \tag{1.13}$$

下面再给出一些常用的符号与定义, 一个 n 维向量 $x^0\in R^n$, 也称 R^n 中的一个点, x^0 的 γ 邻域定义为

$$S(x^0,\gamma)=\{x\in R^n\mid\|x-x^0\|<\gamma\},$$

称为 x^0 的开球,并用 $\bar{S}(x^0,\gamma)=\{x\in R^n\mid\|x-x^0\|\leqslant\gamma\}$ 记 x^0 的闭球.

通常对 R^n 中的域 D,如果点 x 有一个邻域完全属于 D,则称 x 是D的内点,D的所有内点的集记 $\text{int}(D)$; 如果一个点 x 有一个邻域完全在D外,则称 x 为D的外点,除这两种情形的点称为D的边界点,边界点的全体称为D的边界,记作 ∂D,若 $D=\text{int}(D)$,则称D为开集;若 $D=\text{int}(D)+\partial D$, 则称$D$为闭集. 若对任何 $x,y\in D$ 及 $0\leqslant t\leqslant 1$ 有 $x+t(y-x)\in D$, 则D称为凸集.

定理 1.4 若映象 $A:D\subset R^n\to L(R^n)$ 在点 $x^0\in D$ 是连续的,且 $A(x^0)$ 可逆. 则存在 $\delta>0$ 和 $\gamma>0$, 使对任何

$$x\in D\cap\bar{S}(x^0,\delta),$$

有

$$\|[A(x)]^{-1}\| \leqslant \gamma, \tag{1.14}$$

且 $[A(x)]^{-1}$ 在 x^0 处连续(证明见[1]的 2.3.3 节)。

1-2 导数与中值定理

本节将简要介绍映象 $F:D\subset R^n \to R^m$ 的导数概念与中值定理,这是十分有用的。

定义 1.3 假定 $F:D\subset R^n \to R^m$,如果对任何固定的 $h\in R^n$,都有

$$\lim_{t\to 0}\|F(x+th)-F(x)\|=0, \tag{1.15}$$

则称 F 在 x 点是半连续的. 如果有

$$\lim_{h\to 0}\|F(x+h)-F(x)\|=0, \tag{1.16}$$

则称 F 在 x 点是连续的.

定义 1.4 假定 $F:D\subset R^n \to R^m$, 如果存在 $A\in L(R^n,R^m)$,对 D 的内点 x 及任一个 $h\in R^n$, 都有

$$\lim_{t\to 0}\frac{1}{t}\|F(x+th)-F(x)-tAh\|=0, \tag{1.17}$$

则称 F 在 x 点处为 Gateaux 可导,简称G可导,并有G导数 A, 记 $F'(x)=A$. 如果有

$$\lim_{h\to 0}\left(\frac{1}{\|h\|}\right)\|F(x+h)-F(x)-Ah\|=0, \tag{1.18}$$

则称F在 x 点处为 Frechet 可导,简称F可导,此时 $F'(x)=A$ 称为F导数。

若对 $h, k\in R^n$, 还有

$$\lim_{\|h-k\|\to 0}\left(\frac{1}{\|h-k\|}\right)\|F(x+h)-F(x+k)-F'(x)(h-k)\|=0, \tag{1.19}$$

则称 F 在 x 点处为强F可导, $F'(x)$ 为强F导数。

注意这些概念是逐个加深的,根据定义 F 在 x 处 G 可导,则在 x 处 F 的各分量函数 $f_1,\cdots,f_m$ 的偏导数 $\partial_j f_i(x)\equiv\partial f_i(x)/\partial x_j$,

$i=1,\cdots,m,j=1,\cdots,n$ 均存在，并且

$$F'(x)=(\partial_j f_i(x))=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}\\ \vdots & & \vdots\\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}\end{bmatrix}, \tag{1.20}$$

称 (1.20) 中的矩阵为 F 的 Jacobi 矩阵。

关于连续和可导的概念，根据定义容易证明它们有以下关系：F 在 x 连续则一定在 x 处半连续；F 在 x 点 G 可导则一定半连续，但不一定连续；F 在 x 点 F 可导则一定 G 可导，且 F 在 x 连续，此时 F 导数即 G 导数． F 在 x 为强 F 可导则一定 F 可导且导数相同．若 F 在 x 的一个邻域内 G 可导并连续，则 F 在 x 处为强 F 可导；若 F 在开域 D_0 内 G 导数连续则一定 F 可导且 F 导数连续．此时称 F 在 D_0 连续可微．

定义 1.5 假定映象 $F:D\subset R^n\to R^m$ 及 $D_0\subset D$，若存在常数 $c\geqslant 0$ 及 $p\in[0,1]$ 使得

$$\|F(x)-F(y)\|\leqslant c\|x-y\|^p, \tag{1.21}$$

对所有 $x,y\in D_0$ 成立，则称 F 在 D_0 上为 Holder 连续，如果 $p=1$ 则称 F 在 D_0 上为 Lipschitz 连续．若对所有 $x,y\in D_0$ 有

$$\|F'(x)-F'(y)\|\leqslant c\|x-y\|^p, \tag{1.22}$$

则称 $F'(x)$ 在 D_0 上为 Hölder 连续，当 $p=1$ 时称为 Lipschitz 连续．

有关导数的最常用定理是中值定理，它有各种形式表示，都是一元函数中值定理的推广，我们把它归纳写成如下的定理:

定理 1.5 若 $F:D\subset R^n\to R^m$ 在开凸集 $D_0\subset D$ 上 G 可导，对任何 $x,y,z\in D_0$，有

(1) 存在 $0\leqslant t_1,t_2,\cdots,t_m\leqslant 1$ 使

$$F(y)-F(x)=\begin{bmatrix}f_1'(x+t_1(y-x))\\ \vdots\\ f_m'(x+t_m(y-x))\end{bmatrix}(y-x). \tag{1.23}$$