

JIXIEXUE DE SHUXUEFANGFA

机械学的数学方法

张纪元 编著

上海交通大学出版社

机械学的数学方法

张纪元 编著

上海交通大学出版社

内 容 提 要

本书内容包括线性代数方程组常用的直接解法和迭代解法;非线性代数方程组的一般迭代法;牛顿-拉夫逊法和詹重禧法;全局收敛解法;区间分析法、同伦法和消元法;函数逼近(包括插值逼近、一致逼近、平方逼近和函数拟合)的方法;数值微分和数值积分的常用算法;非线性微分方程的常用有效解法;约束最优化问题的实用算法;增广乘子法、直接解法和遗传算法;以及应用前景十分广阔的最新解法——分解法等。书中还有作者提出或改进的多种新算法。整书内容构成了求解机械学中常用数学模型的方法体系。

本书有三个特点:一是内容较新颖、方法有创新,二是方法实用、针对性强,三是语言叙述通俗易懂;是一本覆盖面较广、有一定深度、较有新意和一定程度上能满足工程需要的有关非线性问题解法的著作;对于非数学专业毕业的工程技术人员、科研人员、高校教师和研究生等都会有较大的使用价值。只要具备大学本科水平、掌握高等数学基本理论并有一定计算机语言知识的读者,经过努力都能看懂和使用本书。

图书在版编目(CIP)数据

机械学的数学方法 / 张纪元编著. —上海: 上海交通大学出版社, 2003
ISBN 7-313-03229-3

I. 机... II. 张... III. 机械学—算法 IV. TH11

中国版本图书馆CIP数据核字(2002)第090408号

机械学的数学方法

张纪元 编著

上海交通大学出版社出版发行

(上海市番禺路877号 邮政编码200030)

电话: 64071208 出版人: 张天蔚

常熟市文化印刷有限公司印刷 全国新华书店经销

开本: 787mm × 1092mm 1/16 印张: 14 字数: 346千字

2003年1月第1版 2003年1月第1次印刷

印数: 1—1 050

ISBN 7-313-03229-3/TH·101 定价: 22.00元

版权所有 侵权必究

序 言

《机械学的数学方法》论述机械学研究中常用的数学方法,重点是非线性方程组(包括代数方程组和微分方程组)的解法。

美国一个高级专家委员会的主席戴维(E. David)指出:“很少有人认识到,被如此称颂的高技术实质上是一种数学技术。”方法论大师笛卡尔(R. Descartes)在其著作《思维的法则》中更是一语中的:“一切问题可以化为数学问题,一切数学问题可以化为代数问题,一切代数问题可以化为方程组的求解问题。”作为一个机构学者,作者深知数学对机械学发展的重大影响。因为机械学研究中可以定量描述的绝大多数问题都可以归结为非线性方程组的求解问题。非线性方程组解法的不断提出,推动了机械学的不断发展;机械学中不少难题,等待着更新的数学方法去突破。非线性问题解法的研究水平,很大程度上决定了机械学的研究水平。因此,国家自然科学基金委员会在《自然科学学科发展战略报告——机械学》一书中呼吁“寻求新的数学工具并应用于机构分析与综合,如非线性方程组各种有效解法等”。

非线性问题的每一种解法,都有一套系统、严格的数学理论,有的数学理论还十分深奥难懂。在有关非线性问题解法的论著中,一个接一个的定义、定理、推论和证明,高度抽象的概念,非常术语化的叙述语言和令人眼花缭乱的数学符号,使得没有相当数学功底的人们望而生畏,很难真正掌握一些难度较大的有效新解法。作者结合自己的理解和实践,用通俗易懂的语言叙述和解释有关的数学定义、定理和方法,以便读者更易接受。通俗易懂是本书的特点之一。

数学家们在研究非线性问题解法时,更注意的是理论的完整性、严密性和系统性,而对方法的实现、计算机程序的编制和工程应用中可能会遇到的问题则较少关注。当工程技术人员应用这些方法去解决实际工程问题时,一方面要咀嚼消化这些方法的理论和实质,另一方面还要大伤脑筋地解决计算过程中出现的一些技巧性问题。另外,还有一些实用有效的算法,并非完全是靠理论推导能得到的。例如往往会出现理论上一时还无法证明,但实际应用效果相当好的有效算法。这些算法很有“工程味”,在工程界很受欢迎,有很好的推广应用价值。作者结合机械学研究中遇到的问题,对一些算法进行了技巧性的工程处理和改进,使得有关算法更实用、更具针对性。实用化和针对性强是本书的另一个特点。

到目前为止,数学家们已提出许多种非线性问题的解法。面对浩瀚的解法海洋,一般的工程技术人员有时会感到无所适从,不知哪些解法更有效实用,哪些解法的有机结合会起到事半功倍的作用。另一方面,近20年来,非线性问题的新型解法不断涌现,逐渐成熟,例如,同伦法、吴方法、分解法和遗传算法等。对这些新解法,了解的人并不多,在工程技术人员中更少。本书不仅叙述机械学中一些常用的数学方法,而且还推荐近期出现的使用效果较好的新算法;此外,还介绍作者在算法的有机结合和相互渗透方面的研究成果。内容较新颖、方法有创新是本书的第三个特点。

本书内容包括线性代数方程组常用的直接解法和迭代解法;非线性代数方程组的使用效果较好的一般迭代法:牛顿-拉夫逊法和詹重禧法;非线性代数方程组的全局收敛解法:区间分析、同伦法和消元法;函数逼近(包括插值逼近、一致逼近、平方逼近和函数拟合)的方法;数

值微分和数值积分的常用算法;非线性微分方程的常用有效解法:基尔公式和迷尔尼-哈明预测-校正系统;约束最优化问题的实用算法;增广乘子法、直接解法和遗传算法;以及应用前景十分广阔的最新解法——分解法等。整书内容构成了求解机械学中常用数学模型的方法体系。本书在论述各种方法时,不过分追求理论的完整性、严密性和系统性,而是注重介绍方法的原理、算法的实施、程序的编制、适用场合和优缺点。对于算法实施过程中可能会遇到的问题,给出相应的工程处理方法;对于较难理解的一些概念、方法,结合简单的例子加以阐述;对于一些常用有效方法给出相应的计算步骤;而对于一些新的解法,则还给出应用例子。这样一本覆盖面较广、有一定深度、较有新意和一定程度上能满足工程需要的有关非线性问题解法的著作,对于非数学专业毕业的工程技术人员、科研人员、高校教师和研究生等都会有较大的使用价值。只要具备大学本科水平、掌握高等数学基本理论并有一定计算机语言知识的读者,经过努力都能看懂和使用这本书。

作者从事机械学的教学和研究工作已有 28 年。除了教学工作,28 年来,作者主要做了两件事:一件事是非线性问题解法的学习研究,另一件事是非线性问题解法在机械学中的应用研究。在非线性问题解法的学习研究和应用研究过程中,颇有体会,积累了一些数值处理的经验,编制了大量的计算机程序,提出了一些实用有效算法,并将多种方法应用于机械学的研究。其中包括:詹重禧法的实用化;在区间分析法的研究中提出应用定义域法求三角函数的具有包含单调性的最小区间扩展;在同伦法的研究中导出与齐次理论相匹配的初始多项式组的一般表达式,给出计算机进行变元分组和自动生成初始多项式组的算法,提出在实数域上求解多项式方程组全部孤立实零点的实数同伦法和非线性代数方程组大部分实零点的近似同伦法;在消元法的研究中,对多项式方程组的零点集结构式进行了改进,提出了消元效果更好的基组结构式消元法、改进格鲁布纳基法和综合消元法;在微分方程解法的研究中,应用最优化理论确定了线性四步法的最优系数;在最优化算法的研究中,提出正交计算设计法;在各种方法的相互结合和渗透方面,提出了求解约束优化问题的同伦优化法,并将詹重禧法和同伦法有机地结合应用;等等。

与本书有关内容的研究工作,作者得到了国家自然科学基金(项目编号:58975180, 59375203 和 59875084)、交通部“通达计划”(项目编号:95-04-03-37)和上海市高等学校科技发展基金(项目编号:97JG05055+1)等的资助。本书的出版还得到了上海市教委重点学科(上海海运学院机械学学科)建设基金和上海海运学院罗煌枫博士奖励基金的资助。

北京航空航天大学[张启先]院士、南京理工大学的沈守范教授对本书的出版给予了积极的推荐。邹慧君教授、华大年教授、白师贤教授、杨廷力教授、马履中教授、顾国庆教授、陈廷雨教授等学者,对本书中有关的研究成果给予了充分的肯定,并对本书的撰写和出版给予了热情的帮助与支持。作者的老师沈守范教授和戴忠森教授,同事吴钢副教授和丁福生工程师,以及学生牛志纲硕士、李波硕士、汪萍锋硕士等,对本书有关内容的研究工作及书稿的整理打印等工作都做出了各自的贡献。对以上支持本书出版的单位和个人,作者在此一并表示衷心的感谢!

由于本书涉及面较广,所需数学理论较深,所述内容较新,又受作者水平所限,挂一漏万和谬误不当之处在所难免,敬请读者批评指正。

张纪元

2003 年 1 月于上海

目 录

绪论	1
§ 0-1 机械学中非线性问题的数学模型	1
一、非线性代数方程组模型	1
二、非线性常微分方程组模型	1
三、非线性规划模型	1
§ 0-2 非线性代数方程组的解法综述	2
一、准确解法	2
二、求类解析解的消元法	2
三、数值迭代法	3
四、渐近解法	6
第一章 一元方程的解法	7
§ 1-1 牛顿迭代法	7
§ 1-2 0.618 法	8
§ 1-3 一元多项式方程的解法	9
一、四次以下多项式方程的准确解	9
二、斯图姆方法	10
第二章 线性代数方程组的解法	14
§ 2-1 解线性方程组的直接法	15
一、高斯列主元消去法	15
二、豪斯霍尔德法	16
三、系数矩阵为对称正定矩阵的三角分解法	19
四、系数矩阵为对角占优的三对角线矩阵的追赶法	19
§ 2-2 解线性方程组的迭代法	20
一、雅可比迭代法	21
二、高斯-塞德尔迭代法	21
三、收敛性	22
四、超松弛迭代法	23
§ 2-3 矩阵特征值和特征向量	24
一、求矩阵的逆矩阵	25
二、矩阵特征值和特征向量的计算方法	25
三、确定频率和振型的矩阵迭代法	28

第三章 解非线性代数方程组的一般迭代法	33
§ 3-1 简单迭代法	33
§ 3-2 牛顿-拉夫逊法	34
§ 3-3 詹重禧法	35
一、法式方程	35
二、基本公式	36
三、有关问题的讨论	37
四、计算步骤	38
第四章 区间分析法	40
§ 4-1 区间及其运算	40
一、区间	40
二、区间向量	41
三、区间矩阵	42
四、函数的区间扩展	42
§ 4-2 区间迭代法	45
一、 $K-H$ 算子	45
二、摩尔检验	46
三、迭代步骤	47
四、程序框图及程序	47
五、一元多项式方程的区间迭代法	49
第五章 解多元多项式方程组的消元法	50
§ 5-1 结式消元法	51
一、多项式的整除	51
二、结式和结式消元	52
三、结式消元法的程序	56
§ 5-2 吴方法	60
一、基本概念和定义	60
二、伪除法	61
三、整序	62
四、多项式方程组的零点集结构式	64
§ 5-3 聚筛法	65
一、迪克逊导出方程组和迪克逊矩阵	65
二、聚筛法的主要计算步骤	66
§ 5-4 基组结式消元法	67
一、贝左结式	67
二、对零点集结构式的改进	68

三、基组结式消元法的主要计算步骤	70
四、基组结式消元法的特点	71
五、 $m \geq n$ 的结式消元法	73
§ 5-5 生成格鲁布纳基的一个改进算法	76
一、布切伯格算法	76
二、对布切伯格算法的改进	80
§ 5-6 综合消元法	83
一、综合消元法的基本原理	83
二、(PS)与(TS)同解的一个充分条件	83
三、综合消元法的计算步骤	84
第六章 函数逼近、数值微积分和常微分方程的数值解法	86
§ 6-1 插值逼近	86
一、拉格朗日插值多项式	87
二、埃尔米特插值	87
三、分段三次埃尔米特插值	89
四、三次样条插值	89
§ 6-2 一致逼近	93
一、逼近多项式的存在性	93
二、最佳逼近多项式的性质	94
三、里米兹算法	95
四、契比雪夫多项式	96
五、幂级数项数的节约	98
§ 6-3 平方逼近	99
一、函数族的正交和线性无关	99
二、用线性无关函数族作平方逼近	101
三、用正交函数族作平方逼近	102
四、用勒让德多项式作平方逼近	102
五、用契比雪夫多项式作平方逼近	104
§ 6-4 曲线拟合的最小二乘法	105
一、最小二乘法	105
二、用正交函数作最小二乘拟合	106
§ 6-5 定积分的数值计算	108
一、数值求积的基本方法	108
二、求积公式的代数精度	109
三、插值型求积公式	109
四、高斯公式	112
五、复化求积法	115
六、龙贝格算法	116

§ 6-6 导数的数值计算	120
一、机械求导公式	120
二、插值型求导公式	120
三、样条求导公式	122
§ 6-7 常微分方程初值问题的数值解法	123
一、欧拉方法	123
二、龙格-库塔法	125
三、线性多步法	129
四、线性四步法的最优系数	131
五、常微分方程组初值问题的解法	134
六、高阶常微分方程(或方程组)初值问题的解法	135
§ 6-8 常微分方程边值问题的数值解法	136
一、试射法(又称打靶法)	136
二、差分法	137
第 7 章 同伦法	140
§ 7-1 一般方程组的同伦算法	140
一、同伦算子及同伦方程组	140
二、同伦方程组的解法	141
§ 7-2 确定多项式方程组所有孤立零点的同伦解法	143
一、贝左数和齐次数	143
二、变元分组	145
三、根据贝左数确定多项式方程组全部孤立零点的同伦解法	146
四、根据齐次数确定多项式方程组全部孤立零点的齐次化方法	149
五、系数同伦法	151
§ 7-3 实数同伦法	152
一、实数同伦法的理论根据	152
二、程序编制中应解决的几个具体问题	154
三、实数同伦算法	155
四、实数同伦法算例	156
§ 7-4 近似同伦法	157
一、近似同伦法 1	157
二、近似同伦法 2	159
第八章 分解法	161
§ 8-1 概述	161
§ 8-2 阿杜美因多项式	162
一、阿杜美因多项式的统一表达式	162
二、正幂函数的阿杜美因多项式	163

三、指数函数的阿杜美因多项式	164
四、负幂函数的阿杜美因多项式	165
五、正弦函数的阿杜美因多项式	165
六、余弦函数的阿杜美因多项式	166
§ 8-3 非线性方程的渐近解	167
§ 8-4 分解法在解常微分方程中的应用	169
一、初值问题的解法	169
二、边值问题的解法	176
§ 8-5 分解法在解偏微分方程中的应用	178
一、一阶偏微分方程	178
二、二阶偏微分方程	180
第九章 约束最优化问题的实用算法	184
§ 9-1 增广乘子法	184
一、构造函数	184
二、计算步骤	185
三、PHR 法的特点	185
§ 9-2 同伦优化法	186
一、K-T 条件	186
二、等式约束优化问题的非线性方程组模型	187
三、不等式约束优化问题的非线性方程组模型	188
四、一般约束优化问题的非线性方程组模型	190
五、数值计算	192
§ 9-3 约束优化问题的直接算法	194
一、网格法	194
二、随机试验法	195
三、正交计算设计法	196
§ 9-4 遗传算法	199
一、遗传算法的基本流程	199
二、参数编码	199
三、初始代群体的生成	200
四、适应度函数	200
五、遗传操作	202
六、遗传算法的计算步骤	205
七、收敛性分析	206
主要参考文献	212
一、主要引文	212
二、作者近期论著	214

绪 论

§ 0-1 机械学中非线性问题的数学模型

在机械学研究中,遇到的最简单的数学关系是线性关系。例如:机构运动学中的速度、加速度和误差分析、测量数据的处理以及个别简单机构运动综合等问题都是线性问题;在机构动力学中,机构的动态静力分析、刚性转子的动平衡、机构的线性振动和机器运动的控制等问题也是线性问题。对于有些线性问题,其数学模型可以归结为如下的线性代数方程组:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}。 \quad (0-1)$$

式中: $\mathbf{A} = (a_{ij})_{m \times n}$ 是 m 行 n 列的已知矩阵, $\mathbf{b} = [b_1, \dots, b_m]^T$ 为已知的列阵, $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ 是 n 维的未知列阵。

而另一些线性问题,其数学模型则可用如下的线性常微分方程组表示:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{A}(t)\mathbf{x} + \mathbf{f}(t)。 \quad (0-2)$$

式中: $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ 表示 n 个待定的函数 $x_i = x_i(t), i = 1, \dots, n; \mathbf{A}(t) = (a_{ij}(t))_{n \times n}$ 为已知的函数矩阵; $\mathbf{f}(t) = [f_1(t), \dots, f_n(t)]^T$ 为 n 个已知的函数; t 为自变量。

但在机构学研究中,遇到的大量问题是非线性问题。例如:机构运动学中的位移分析,机构奇异位置和极限位置的确定,以及绝大多数机构的运动综合等问题,机构动力学中的机器真实运动求解,飞轮转动惯量的确定,机构动平衡,挠性转子的动平衡和机械的动力学设计等问题都是非线性问题。这些非线性问题,常可归结为如下三种数学模型。

一、非线性代数方程组模型

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}。 \quad (0-3)$$

式中: $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ 为待定的 n 个未知变量; $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})]^T$ 为变量 $\mathbf{x}$ 的 m 维向量值函数。

二、非线性常微分方程组模型

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(t; x_1, \dots, x_n) \quad (i = 1, \dots, n)。 \quad (0-4)$$

式中: t 是自变量, $x_i = x_i(t) (i = 1, \dots, n)$ 为 n 个待定的函数; $f_i(t; x_1, \dots, x_n) (i = 1, \dots, n)$ 为 n 个已知函数。

三、非线性规划模型

$$\begin{cases} \min f(\mathbf{x}); \\ \text{s. t. } h_i(\mathbf{x}) = 0 \quad (i = 1, \dots, m; m < n); \\ \quad \quad g_j(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (j = 1, \dots, p)。 \end{cases} \quad (0-5)$$

式中: $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n$ 为 n 个设计变量; $f(\mathbf{x})$ 为目标函数; $h_i(\mathbf{x}) (i = 1, \dots, m)$ 为等式约束函数; $g_j(\mathbf{x}) (j = 1, \dots, p)$ 为不等式约束函数。

当然, 有的非线性问题, 如连续系统的振动问题, 可归结为偏微分方程组模型; 也不排除可采用其他一些数学模型。但在机构学研究中, 目前应用最多的是上述三种数学模型; 其中, 以非线性代数方程组模型(式 0-3) 和非线性规划模型(式 0-5) 应用最多, 求解最复杂。

§ 0-2 非线性代数方程组的解法综述

历史上, 为解决各门科学中的线性问题, 已经形成了一整套方法^[1~4], 且研究得比较透彻, 有了许多应用。

非线性代数方程组(若不特指, 以下简称为非线性方程组) 的解法有很多, 按求解过程和求解结果分类, 大致有以下四类解法。

一、准确解法

设方程组(0-3) 可表达为

$$f_i(\mathbf{u}; \mathbf{x}) = 0 \quad (i = 1, \dots, m)。 \quad (0-6)$$

式中: $\mathbf{u} = [u_1, \dots, u_r]^T \in \mathbb{R}^r$ 为 r 个参变元; $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n$ 为待定的 n 个变量。

若其解可用具体的函数表达式表达为

$$x_i^* = x_i^*(\mathbf{u}) \quad (i = 1, \dots, n), \quad (0-7)$$

则称 $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^*(\mathbf{u}) = [x_1^*(\mathbf{u}), \dots, x_n^*(\mathbf{u})]^T$ 为方程组(0-6) 的准确解或公式解。

例如, 4 次以下的一元多项式方程有公式解。方程组的准确解有重要意义。因为公式解最可靠, 可以弄清问题的本质; 而且在计算方法中, 常把准确解作为各种近似解好坏的检验。另外, 方程组能否求得准确解的研究对数学本身的发展有重大推动作用。例如: 研究高次代数方程的求解方法产生了伽罗华理论, 它是近代数学的开端。所以, 对于非线性方程组, 若能求得准确解, 还是应该想法求出其准确解。但是, 大多数非线性方程组是没有准确解的。

二、求类解析解的消元法

设方程组(0-6) 经过某种消元过程, 可得出如下形式的三角型方程组 $(TS) = 0$:

$$(TS): \begin{cases} t_1(\mathbf{u}; x_1) = 0, \\ t_2(\mathbf{u}; x_1, x_2) = 0, \\ \dots\dots\dots \\ t_n(\mathbf{u}; x_1, \dots, x_n) = 0, \end{cases} \quad (0-8)$$

且原方程组(0-6) 的每个解都是三角型方程组 $(TS) = 0$ 的解, 则称 $(TS) = 0$ 为原方程组的类解析解。

若能求得类解析解, 则可以依次独立地求出 $(TS) = 0$ 中的 n 个一元方程的解, 再代入原方程组(0-6) 中检验, 就可确定原方程的解; 而且, 当原方程组(0-6) 中的参变元 $\mathbf{u}$ 的值改变时, 不需重新消元, 只要重新计算 (TS) 中与 $\mathbf{u}$ 有关的各参数的值, 就可顺利地求出新的解, 计算效率较高。另外, 类解析解的形式, 便于演绎和推理。

当然, 消元过程是复杂的; 而且, 并不是所有的非线性方程组都有其类解析解。好在机构学

研究中遇到的非线性方程组,经过三角变换后,大多数方程组都可以化成一个多项式方程组 $(PS) = \{p_1(u; x), \dots, p_m(u; x)\} = 0$ 。其中

$$p_i(u; x) = \sum_{j=1}^{l_i} a_{ij} t_{ij} = 0 \quad (i = 1, \dots, m)。 \quad (0-9)$$

式中: $a_{ij} = a_{ij}(u)$ 为实系数; $t_{ij} = \prod_{k=1}^n x_k^{m_{ijk}}$, 幂指数 m_{ijk} 为非负整数, 即 $p_i(u; x)$ 为 n 个变量 $x = [x_1, \dots, x_n]^T$ 的多元多项式。

对于多项式方程组(0-9), 现在已有较成熟的理论和方法, 用消元法, 求得其类解析解 $(TS) = 0$ 。此时, (TS) 中每个方程的求解, 都可化成一元多项式方程的求解。因此, 我们可称这样的类解析解为多项式解。而一元多项式方程的解法已经成熟, 可以求出其所有的零点, 从而可保证求得原方程组 $(PS) = 0$ 所有的解。

对多项式方程组 $(PS) = 0$ 进行消元的方法主要有: 吴方法^[5~8]、聚筛法^[9]、格鲁班纳基法^[10,11]、基组结式消元法^[21~23] 等。在这方面的研究水平, 我国处于领先地位。其中, 基组结式消元法具有消元过程简单、消元结果次数较低等特点, 在机构学研究中, 更具实用性。

求多项式方程组 $(PS) = 0$ 的多项式解 $(TS) = 0$, 在机构学研究中有重要的应用, 可用于解决机构的装配构形问题、机械手的树状解问题和机构的多方案综合等多解问题^[12~16, 24~26]。

三、数值迭代法

设在非线性方程组(0-6)中的参变元 $u_1, \dots, u_r$ 已有确定的值, 且方程个数 m 与变量个数 n 相等。此时, 方程组(0-6)可简单地表示为

$$f(x) = 0。 \quad (0-10)$$

式中: $x = [x_1, \dots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n$ 为 n 个待定的变元, $f(x) = [f_1(x), \dots, f_n(x)]^T$ 为定义在 n 维子空间 $D \subset \mathbb{R}^n$ 上的变元 x 的 n 维向量值函数, 即 $f: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 。

对于方程组(0-10), 我们可用数值迭代的方法求出它的解。用数值迭代法求解方程组(0-10), 就是构造迭代格式:

$$x^{(k+1)} = Gx^{(k)} \quad (k = 0, 1, \dots)。 \quad (0-11)$$

式中: G 为迭代矩阵。它应满足以下要求:

1) 适定性。即由迭代格式(0-11)得到的序列 $\{x^{(k)}\}$ 是适定的, 也就是 $x^{(k)} \in D$, 对 $k = 0, 1, \dots$ 均成立;

2) 收敛性。若 $x^* \in D$ 是方程组(0-10)的解, 则 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*$;

3) 在给定精度内求得解 x^* 的近似解 $x^{(n)}$ 的工作量较省。

上述三个要求中, 前两个要求是必须满足的。第三个要求是计算复杂性问题, 是衡量一个算法好坏的标志。

迭代格式(0-11)的含意是明确的, 即求解时, 必须取定初始点(或初值) $x^{(0)}$, 通过逐次迭代, 最终求得方程组(0-10)的满足精度要求的数值近似值 $x^{(n)}$ 。如果一个数值迭代法对初值 $x^{(0)}$ 没有本质上的限制, 则称这种方法为大范围收敛的方法; 否则, 称为一般迭代法。

1. 一般迭代法

求解非线性方程组的一般迭代法有很多, 但牛顿-拉夫逊法仍是最重要的方法之一。该法具有二阶敛速, 但每步要计算向量值函数 $f(x)$ 的雅可比矩阵 $J(x)$, 并解线性方程组, 计算工

作量较大。更致命的缺点是对初始点 $x^{(0)}$ 的要求苛刻,必须使 $x^{(0)}$ 与解 x^* 充分靠近,才能使迭代格式收敛。针对牛顿-拉夫逊法的缺点,已有很多新的改进和变型的牛顿法。1965年布罗登(Broydon)在文献[17]中提出了一种拟牛顿法。该法不用计算 $J(x)$,也不用求逆,计算工作量由 $O(n^3)$ 降为 $O(n^2)$,理论和实践都证明,这是一个好的算法,但它仍要求初始点 $x^{(0)}$ 在 x^* 的充分小邻域内。也有人^[18]在简化 $J(x)$ 上下功夫,提出了割线法。其实质是以割线代替切线,利用已得的 $2n+1$ 个迭代点,构造 $J(x^{(k)})$ 的近似矩阵 $A^{(k)}$ 进行迭代计算。当 n 取不同的值及技术处理的方法不同时,就形成了不同的割线法。割线法只具超线性敛速。

2. 大范围收敛的方法

大范围收敛的方法,不仅对初始点 $x^{(0)}$ 没有本质上的限制,而且对有些方程组在满足一定的条件下,可求得原方程组(0-10)在子空间 $D \subset \mathbb{R}^n$ 上的所有解。这对解决机构学中的多解问题是非常有用的。目前,大范围收敛的方法主要有三种:不动点算法、区间分析法和同伦法。

(1) 不动点算法

不动点算法始于1967年。该法又称为单纯形法或轮回补偿法^[19,20]。下面分三步简述该法求方程组 $f(x) = 0$ 在 $D \subset \mathbb{R}^n$ 中的解 x^* 的基本思想。

第1步 将域 D 进行单纯形剖分 G ,若 $u^0, u^1, \dots, u^m \in \mathbb{R}^n, m \leq n$ 在最广位置上,所有满足 $x = \sum_{j=0}^m \lambda_j u^j, \sum_{j=0}^m \lambda_j = 1, \lambda_j \geq 0 \quad (j = 0, 1, \dots, m)$ 的点集合 σ 称为 m 维单纯形,记作 $\sigma = \{u^0, u^1, \dots, u^m\}$,而 $u^0, u^1, \dots, u^m$ 称为 σ 的顶点。

第2步 对单纯形剖分 G 给予一种恰当标号 l 。例如,可由 $f(x)$ 定义一种整数标号,对任意 $u \in G^0$ (G^0 是 G 中所有单纯形顶点的集合),定义

$$l(u) = \begin{cases} i, & f_i(u) > 0, \text{ 且 } f_j(u) \leq 0 \quad (\text{对任意 } j < i); \\ 0, & f_j(u) \leq 0 \quad (j = 1, \dots, n). \end{cases} \quad (0-12)$$

而 G 中具有标号为 $\{0, 1, \dots, n\}$ 的单纯形称为全标号 n 维单纯形;可以证明:若 $f(x)$ 在 D 上一致连续,只要单纯形剖分的格长足够小, σ 为 G 中的一个全标号单纯形,则对任何 $x \in \sigma$ 均可作为 $f(x) = 0$ 的近似解。

第3步 用一种有规则的搜索方法求全标号 n 维单纯形 σ 。

第3步最困难,也是不动点算法的关键。至今,数学界已提出了第一、二、三代不动点算法^[19~21]。虽然不动点算法的计算过程复杂,计算工作量较大,但它在经济数学、非线性规划和非线性方程组求解等方面已得到较广泛应用。

(2) 区间分析法

摩尔(Moore)于1966年在文献[22]中,第一次提出了区间分析法,并用于求解非线性方程组。随后,国内的数学家们开展了这方面的理论和应用研究^[21,23]。区间分析法的基本变量是区间而不是点,相应于点迭代映射 G (见式0-11),区间迭代的映射是区间矩阵 K ,是区间到区间的一种变换。若以 X 表示区间向量,则区间分析法的迭代格式为

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} \cap K(X^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots \quad (0-13)$$

若 $x^* \in X$ 是方程组(0-10)的解,则可取 $X^{(0)} = X$,用上述格式进行区间迭代,以求得 x^* 所在的小区间 X^* ,再应用一般迭代法在 X^* 上求解 x^* 。只要 $K(X^{(0)})$ 有以下性质:

1) $f(x) = 0$ 在 $X^{(0)}$ 中的解在 $K(X^{(0)})$ 中,从而都在 $X^{(1)} = X^{(0)} \cap K(X^{(0)})$ 中;若 $X^{(1)} = \emptyset$ (空集),则在 $X^{(0)}$ 中 $f(x) = 0$ 无解。

2) 若 $K(X^{(0)}) \subset X^{(0)}$, 则 $f(x) = 0$ 在 $X^{(0)}$ 内一定有解; 若 $K(X^{(0)})$ 各边长均短于 $X^{(0)}$ 的相应边长, 则 $f(x) = 0$ 在 $X^{(0)}$ 内有惟一解, 且从 $X^{(0)}$ 中心 $x^{(0)}$ 出发, 用一般迭代法一定能求得 $f(x) = 0$ 在 $X^{(0)}$ 中的解 x^* 。

自然, 问题是要构造满足上述要求的算子 $K(X)$ 。这样的算子有摩尔构造的牛顿算子 $N(X)^{[22]}$; 克劳捷克(Krawczyk)的修正牛顿算子 $K(X)^{[24]}$ 和汉森(Hansen)对修正牛顿算子作进一步改进得到的汉森算子 $H(X)^{[25]}$ 等。其中, $H(X)$ 算子具有较高的敛速。区间分析法不仅是一个大范围收敛的算法, 而且该法还可判断给定长方形区域 X 内有无 $f(x) = 0$ 的解; 若有, 有几个解; 并可求出 X 中的所有解。不足的是该法的迭代计算工作量较大, 并要求 $f(x)$ 在 X 上具有包含单调性的区间扩展 $F(X)$, 而这样的 $F(X)$ 并不是对所有的 $f(x)$ 都容易找到的。好在对多项式方程组 $p(x) = 0$, $p(x)$ 具有包含单调性的自然扩展 $P(X) = p(X)$ 。因而, 区间分析法在机构学研究中有用武之地的。作者在文献[24, 27, 28]中, 引入区间分析法, 用于求解机构的装配构形和确定机构的运动误差区间。

(3) 同伦法

同伦法又称为嵌入法或连续法。同伦法作为数值工具用于方程求根, 最早是由拉汉叶(Lahaye)于1934年提出的。1948年他首先用于求方程组的解。但大量的研究工作是在近20年中进行的。有关同伦法的发展概况可见文献[26~28]。同伦法的主要思想如下所述。

引入参数 $t \in [0, b]$, 构造同伦算子 $H: [0, b] \times D \in \mathbb{R}^1 \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, 使其满足条件:

$$H(0, x) = f_0(x), H(b, x) = f(x). \quad (0-14)$$

式中: $H(0, x) = f_0(x) = 0$ 的解 $x^{(0)}$ 已知。若同伦方程组

$$H(t, x) = 0 \quad (0-15)$$

在 $t \in [0, b]$ 上有解 $x = x(t)$, 则 $x(b) = x^*$ 就是方程组 $f(x) = 0$ 的解。当 b 有限时, 可取 $b = 1$ 。满足条件(0-14)的同伦算子有很多。例如, 当 $t \in [0, 1]$ 时, 可取

$$H(t, x) = f(x) + (t-1)f(x^{(0)}) \quad (0-16)$$

或

$$H(t, x) = (1-t)(x - x^{(0)}) + tf(x). \quad (0-17)$$

当 $t \in [0, \infty)$ 时, 可取

$$H(t, x) = f(x) - e^{-t}f(x^{(0)}). \quad (0-18)$$

同伦法实质上是求 $f(x) = 0$ 的解转化为求同伦方程组(0-15)的解曲线 $x = x(t)$ 。该曲线以 $x^{(0)} = x(0)$ 为起点, $x(b) = x^*$ 为终点。经这样转化后, 直接求解方程组 $f(x) = 0$ 的困难得到了改善, 然而又产生了新的问题——合适同伦 $H(t, x)$ 的构造和求解。上面给出的同伦算子并不是对所有的 $f(x)$ 都合适的, 若 $H(t, x)$ 构造得不合适, 则很可能导致计算失败。至今, 这一问题还未得到彻底的解决。但对多项式方程组, 摩根(Morgan)在文献[29]中提出了齐次理论, 刘安心、杨廷力在专著[30]中提出变元分组原则, 作者在文献[29, 31]中提出初始方程组统一表达式, 使得多项式方程组的同伦构造及其求解得到了较彻底的解决, 并用同伦法成功地解决了机构学中的许多多解问题^[12, 30, 31, 211, 212]。

在上述三种大范围收敛的方法中, 相对而言, 同伦法在求机构学中多解问题的数值解时, 计算工作量较小, 算法较简单, 而且成功率较高, 应作为首选方法。

3. 无约束优化法

求非线性方程组(0-10)的解 x^* , 等价于求下列平方和形式的目标函数 $F(x)$ 的最小值点

x^* :

$$\min F(x) = \sum_{i=1}^n f_i^2(x). \quad (0-19)$$

上述优化问题为一个无约束优化问题。理论上,最速下降法、共轭梯度法、变尺度法和阻尼最小二乘法^[32,33]等无约束优化算法都可用来求解无约束优化问题(0-19)。但理论分析和实际计算都表明,詹重禧法^[34]是日前优化平方和形式目标函数的一个最好的方法。该法的计算工作量较小,有比牛顿法和阻尼最小二乘法等方法大得多的收敛域,而且还用于求解方程个数 m 大于变量个数 n 的相容方程组。但就其本质而言,詹重禧法仍属一般迭代法,对初始点 $x^{(0)}$ 还是有一定的限制。

四、渐近解法

渐近解不是数值解。渐近解是一种以方程组(0-6)参变元 $u_1, \dots, u_r$ 为参数的函数序列 $\{x^{(k)}(u)\}$ 。渐近解也不是方程组(0-6)的准确解,因为每一个 $x^{(k)}(u)$ 不能完全满足方程组(0-6)。但当参变元 $u_1, \dots, u_r$ 的值取定后,根据渐近解求得的数值解,能以任意高的精度成为方程组(0-6)的近似解。例如,一元方程 $f(u; x) = x - u - e^{-x} = 0$ 的渐近解为

$$x^{(k)} = u + \sum_{j=1}^k (-1)^{(j+1)} \frac{j^{j-1}}{j!} e^{-ju} \quad (k = 0, 1, \dots),$$

当 $k \rightarrow \infty$ 时, $\lim_{k \rightarrow \infty} f(u; x^{(k)}) \rightarrow 0$ 。

渐近解是介于准确解和数值解之间的另一种形式的解,它兼有准确解和数值解的优点。一方面,可从渐近解的函数表达式去寻求和理解非线性方程组的某些规律性的东西;另一方面,通过数值计算,可对感兴趣的和重要的量进行必要的定量分析。这也就是求渐近解的二个过程,即求渐近解表达式的过程和数值定量研究的过程。

美国科学家阿杜美因(G·Adomian)提出的分解法(Dicomposition Method)是目前求非线性方程组(0-6)渐近解的一个好方法。分解法用阿杜美因多项式表达渐近解。1979年,阿杜美因首先对线性问题提出了分解法,并成功地解决了线性随机问题。1983年以来,他又把分解法推广到非线性随机系统。近年来,分解法在理论研究上不断取得进展,不仅从求解常微分非线性方程推广到偏微分非线性方程,而且从单变量到多变量、从低维到高维、从连续到分段连续、从单方程到方程组等方面均获新成果^[35~41]。分解法在国内还鲜为人知,它的应用前景很是广阔,相信该法在机构学研究中也是大有用武之地的。

本书将介绍线性代数方程组常用的直接解法和迭代解法、非线性代数方程组的使用效果较好的一般迭代法和全局收敛解法、非线性微分方程组的常用有效解法、工程中实用的最优化方法以及应用前景十分广阔的分解法等内容。在论述各种方法时,注重介绍方法的思想实质、算法的实施、程序编制、适用场合和优缺点。对于算法实施过程中可能会遇到的问题,则给出相应的工程处理方法。相信这样一本覆盖面较广、有一定深度、较有新意和一定程度上能满足工程需要的有关非线性方程组解法的著作,对于非数学专业毕业的工程技术人员、科研人员、机械学者、高校教师和研究生等都会有较大的使用价值。

第一章 一元方程的解法

一元方程

$$f(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^1 \quad (1-1)$$

的解通常称为方程的根, 又称做函数 $f(x)$ 的零点。

不少实际工程问题可归结为一元方程(1-1)的求解问题, 而且当求得非线性方程组的类解析解后, 也需要求解一元方程。因此, 一元方程的求解是基础性的工作。本章介绍两种常用解法: 牛顿迭代法和 0.618 法, 以及机构学中涉及较多的一元多项式方程的解法。

§ 1-1 牛顿迭代法

求解一元方程的牛顿迭代法实质上是以线性函数近似待解函数 $f(x)$ 。设已有迭代点 $x^{(k)}$, 用 $f(x)$ 在 $x^{(k)}$ 点的线性展开式近似 $f(x)$, 则方程(1-1)成为

$$f(x) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0. \quad (1-2)$$

若 $f'(x^{(k)}) \neq 0$, 从上述方程中解出 x , 并将 x 作为下一个迭代点 $x^{(k+1)}$, 即得如下的牛顿迭代法的迭代格式:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - f(x^{(k)})/f'(x^{(k)}) \quad (k = 0, 1, \dots). \quad (1-3)$$

式中: $f'(x^{(k)}) = \frac{d}{dx}f(x^{(k)})$; $x^{(0)}$ 为初值。

当 $|f(x^{(k)})| \leq \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$ 为允许误差) 时, 可取 $x^{(k)}$ 为方程(1-1)的一个近似根。牛顿迭代法的几何意义如图 1-1 所示。从几何图形上可知, 方程 $f(x) = 0$ 的根 x^* 就是曲线 $y = f(x)$ 与 x 轴交点的横坐标。设过曲线 $y = f(x)$ 上的点 $(x^{(k)}, f(x^{(k)}))$ 作曲线的切线 T_k , 则切线 T_k 与 x 轴交点的横坐标为 $x^{(k+1)} = x^{(k)} - f(x^{(k)})/f'(x^{(k)})$ 。 $x^{(k+1)}$ 就是按迭代格式(1-3)求得的第 $k+1$ 次近似值。当收敛时, 随着迭代次数的增多, 切线 T_k 与 x 轴的交点 $x^{(k+1)}$ 会越来越接近方程 $f(x) = 0$ 的根 x^* 。因此, 牛顿迭代法又称为切线求根法^[18]。

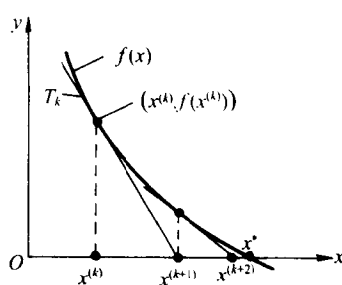


图 1-1

牛顿迭代法以其收敛快而著称(平方收敛), 但对初值 $x^{(0)}$ 的要求非常苛刻。此外, 当 $f'(x^*) = 0$ 时, 无法用牛顿迭代法求解方程 $f(x) = 0$ 。此时, 可改用 0.618 法求解。若导数 $f'(x)$ 求解困难, 可用差商等数值导数替代导数 $f'(x)$ 。不过, 替代后将减缓收敛速度。若用差商替代导数, 则迭代格式(1-3)变成如下近似牛顿法的迭代格式:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{2hf(x^{(k)})}{f(x^{(k)} + h) - f(x^{(k)} - h)} \quad (k = 0, 1, \dots). \quad (1-4)$$

式中: h 为求导步长。