

應用數值分析

C. F. 杰拉尔德 著



曉園出版社
世界圖書出版公司

51.81

9

應用數值分析

譯著者 顏 仁 鴻

曉園出版社
世界圖書出版公司

北京·廣州·上海·西安

1992

W-07-06

应用数值分析

(美) C. F. 杰拉尔德 著

颜红鸿 译著

*

晓园出版社出版

世界图书出版公司北京分公司重印

北京朝阳门内大街 137 号

北京中西印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1993 年 1 月第 一 版 开本: 711 × 1245 1/24

1993 年 1 月第一次印刷 印张: 27.5

印数: 0001-900 字数: 49.5 万字

ISBN: 7-5062-1458-X/O·64

定价: 20.30 元 (W_{9206/1})

世界图书出版公司通过中华版权代理公司向晓园出版社购得重印权

限国内发行

譯 序

數值方法 (Numerical Method) 及數值分析 (Numerical Analysis)，在基本上有很大的差異，前者是知其然而不知其所以然，而後者則是彌補前者的所有缺憾，進而了解正確方法的使用。

本書包容了這兩種情況的優點，更重要的是它告訴了讀者每一種方法的通用性及分析的精髓，雖然它羅列出許多基本計算工具的作業，但這也正是一般工科學生所常見的，在其種種優點中，最為譯者所關注的是其與計算機的結合，時下的風尚與計算機的普及，使得讀者在科技的趨迫下使本書很快的領你進入另一領域，亦可輕鬆的面對你所遭逢的數值問題。

由簡而繁，由方法而分析，是本書的一脈，簡易的線性方程組是常見的，繁雜的偏微分方程亦令人頭痛，但作者都一一的比較、解決，並做成程式，望讀者能善加利用。

本書製作期間顏仁鴻先生赴美深造，由台大電機系王德鵬先生執校閱工作，使得本書更完美，在此特致謝意。

編審部 謹識

1986年12月

原 序

應用數值分析第三版除了保留前幾版的重點與特色外，還併入一些重要的改變，使得本書在其領域中成為較成功的一本。在大部分有關數值分析的教科書中，具有較廣範的主題仍舊是本書的品質保證。而易讀性與數學上的可親性使得本書適合於大二、大三學工程、科學、數學或計算機科學的學生當作教科書。讀者僅須具備一般微積分的基礎及常微分方程式的初步，即可毫無困難地學習。這項特點亦使得本書成為從事實務的工程師有價值的指南與參考書。

與第二版最主要的不同點是在於每章所附的程式已全部重寫過。在前幾版中，幾乎所有的程式皆用FORTRAN寫成。但新版是利用FORTRAN 77。程式的結構以騎線隔開顯得清晰，且利用很多註解，使得演算過程被補充說明的相當明瞭易懂。其中有一個程式是用Pascal寫成，主要是用來證明其他語言更應用來執行數值分析的過程。

本書除了這些程式外，一些常用的參考程式被製成能輔助數值分析的軟體庫存程式。IMSL特別被討論且鼓勵學生多比較這些庫存副程式與本書的例題。然而這些有特色且由專業人員寫成的庫存程式並沒有歸入書中以較簡單方式設計的程式中。我們發現課本中的程式對於解題非常有效。使用本書當教科書的老師最好要學生使用庫存副程式；尤其是當它們有裨益時，或者是將我們的程式儲存在他（她）的系統中，而把本書說明當做是指南。

本書仍然包含一些稀有的問題要由學生自己求解。而且我們加入了一些新問題，也改進了一些舊有的題目。習題仍然被細分成與各節相當直接有關的題目，以及一些較富挑戰性的應用題與想法。

我們使本書新加的例題與章節儘可能寫的詳細明白，我們利用很多使用者在書中的加註來改進。另外有一些主題已經被重新登錄；例如，三次仿樣函數被包含在討論插值法的新章節中，因為我們發現一些老師認為這種分類較合理。

三角函數近似法、快速富氏轉換、合適的積分法及利用九點及五點近似法求橢圓偏微分方程式的導數等等，都是新加的課題。

我們再次發現本書有足夠的內容可上一整年的課程，但是若經精細的選取，則可用於較短期的課程中。由於本書本身易讀，所以很多學生將會發現在他們的職業生涯的研究主題與過程中，它將是一本有益的參考書，即使他們未曾在課堂上學過。

我們對於誤差的觀點並沒有改變。我們感覺到學生僅能在解題時才認識誤差的主旨，尤其是由於計算機字數的限制所產生的執行誤差。於是寧可在各數值方法之前，先討論這個主題。我們將計算機算術的與生成的執行誤差收錄於第一章末尾。而在其他各章節中，也以其對結果的精確度以及與計算量的關係再加以探討。

我們欲謝謝對此再版書有特別幫助的同僚：烏斯特工藝學院的 Paul Davis；匹茲堡大學的 Richard Dougall；Monterey 海軍研究院的 Richard Franke；Davis 加州大學的 G. Kurowski；Long Beach 加州州立大學的 Melvin Lax；Fullerton 加州州立大學的 John Mathews；Seattle 華盛頓大學的 Robert T. Moore，Urbana 伊利諾大學的 R. D. Skeel；West Hartford 哈佛大學的 Stephen Snover；以及 Potsdam Clarkson 學院的 Thomas Wright。最後，也非常感謝 Alura Rogers 的幫忙，修改了所有 Fortran 程式。

加州聖路易士歐比斯堡
1983, 11 月

C. F. G.
P. O. W.

目 錄

第一章 非線性方程式的解 1

1. 礦坑中的梯子 1 / 2. 半區間法 3 / 3. 線性內插法 8 / 4. 牛頓法 15 / 5. $x=g(x)$ 型式的使用 21 / 6. 牛頓法的收斂 26 / 7. 利用二次因式的貝爾司投法 27 / 8. 差-商法 31 / 9. 其他的方法 34 / 10. 誤差和電子計算機的算法 37 / 11. 解方程式方法的程式規劃 43 / 習題 70

第二章 解方程式組 81

1. 平板上的穩定溫度 81 / 2. 矩陣符號 82 / 3. 消去法 89 / 4. 高斯和高斯-喬旦法 92 / 5. LU分割 101 / 6. 線性系統-奇矩陣的一些疑義 108 / 7. 矩陣和反置矩陣的行列式值 112 / 8. 矩陣與向量模數 116 / 9. 解的誤差和條件數 119 / 10. 用迭代法解線性系統 127 / 11. 鬆弛法 132 / 12. 非線性方程組 137 / 13. 解方程組的程式 143 / 習題 160

第三章 內插多項式 173

1. 一個內插問題 173 / 2. 差數表 174 / 3. 表中誤差的影響 179 / 4. 內插多項式 180 / 5. 其他的內插多項式 182 / 6. 誤差項和內插值的誤差 187

／ 7. 用符號法推導公式 193 / 8. 非均勻間隔 x - 值的內插 196 / 9. 反置內插 201 / 10. 以立方雲規內插資料 203 / 11. 二維空間的多項式內插 213 / 12. 內插的計算機程式 217 / 習題 225

第四章 數值微分和數值積分 235

1. 由列表值求微分、積分 235 / 2. 內插多項式的第一階導數 236 / 3. 高階導數的公式 241 / 4. 導數的菱形圖 243 / 5. 外插技巧 248 / 6. 導數的取捨誤差和精確性 251 / 7. 牛頓-柯蒂司積分公式 255 / 8. 梯形法則 258 / 9. 藍柏格積分 260 / 10. 辛普森 $\frac{1}{3}$ 法則 263 / 11. 辛普森 $\frac{3}{8}$ 法則 264 / 12. 以其他方法導出積分公式 266 / 13. 高斯積分法 269 / 14. 瑕積分和不定積分 272 / 15. 可適應積分 274 / 16. 立方雲規函數的應用 276 / 17. 多重積分 279 / 18. 多重積分和外插的誤差 284 / 19. 不定極限的多重積分 286 / 20. 微分和積分的程式 288 / 習題 299

第五章 常微分方程式的數值解 311

1. 田鼠的人口特徵 311 / 2. 泰勒級數法 313 / 3. 歐拉和修正的歐拉法 315 / 4. 阮吉-庫達法 319 / 5. 多步驟法 325 / 6. 麥林法 328 / 7. 亞當斯-慕爾敦法 332 / 8. 收斂法則 337 / 9. 誤差和誤差傳遞 340 / 10. 系統方程式和較高次方程式 343 / 11. 解微分方程式方法的比較 349 / 12. 計算機的運用 352 / 習題 360

第六章 邊界值問題和特徵值問題 373

1. “射擊”法 373 / 2. 經由一組方程式而得之解 379 / 3. 導數的邊界條件 385 / 4. 特徵值問題 387 / 5. 以迭代法解矩陣特徵值 391 / 6. 程式 400 / 習題 408

第七章 橢圓的偏微分方程式之數值解 415

1. 在加熱板中的平衡溫度 415 / 2. 穩定態熱流的平衡 416 / 3. 以微分方程式表示之 420 / 4. 拉普拉斯方程式用於長方形區域 423 / 5. 迭代法解拉普拉斯方程式 427 / 6. 布阿松方程式 434 / 7. 導數的邊界條件 437 / 8. 不規則區域 439 / 9. 在非長方形座標中的拉普拉斯算子 444 / 10. 在三度空間的拉普拉斯算子 447 / 11. 矩陣型式、稀疏性和 A. D. I. 法 450 / 12. 解布阿松方程式的計算機程式 455 / 習題 464

第八章 拋物線的偏微分方程式 473

1. 直接法 475 / 2. 克蘭克-尼古森法 484 / 3. 導數型的邊界條件 487 / 4. 穩定和收斂法則 490 / 5. 二度或超過二度空間的拋物線方程式 497 / 6. 解橢圓方程式的程式 502 / 習題 514

第九章 雙曲線偏微分方程式 521

1. 以有限差數法解波動方程式 523 / 2. 德艾倫伯解的比較 525 / 3. 數值法的穩定性 529 / 4. 特性法 530 / 5. 二度空間的波動方程式 542 / 6. 解簡易

波動方程式的程式 544 / 習題 549

第十章 曲線配適和函數的趨近 555

1. 最小平方近似值 555 / 2. 以最小平方法配適非線性曲線 559 / 3. 謝比雪夫多項式 566 / 4. 以簡潔的冪次級數做函數趨近 569 / 5. 以有理函數趨近 573 / 6. 以三角函數數列逼近函數；快速傅立葉轉換 (FFT) 582 / 7. 程式 587 / 習題 598

參考書目 605

附錄 A 微積分中的一些基本資料 607

附錄 B 用未定係數法導出一些公式 611

附錄 C 軟體庫 625

習題答案 629

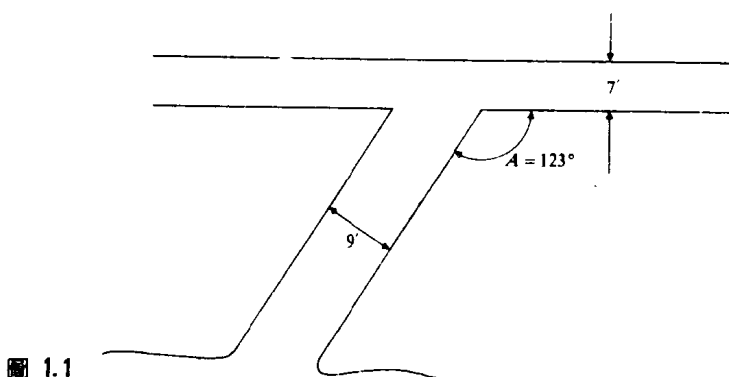
第一章

非線性方程式的解

1.1 礦坑中的梯子

以應用數學而言，解一個非線性方程式並不少見。假設你在礦場中工作，以下所描述的將是一個典型的問題：

有兩個坑道通風口以 123° 的角度相交，如圖 1.1，直的通風口寬 7 呎，而進風口寬 9 呎，試問能穿過這轉彎的梯子其最長可達多少？這梯子的厚度可忽略，但沿著角轉彎時不可碰到通風道。你的解必需是一個通解 (general case)，其中角 A 及通風道的寬度均為變數 (variable)。



照後面會講，解此問題必需解下列超越方程式 (transcendental equation) 中的 C 值：

$$\frac{9 \cos(\pi - 123^\circ - C)}{\sin^2(\pi - 123^\circ - C)} - \frac{7 \cos C}{\sin^2 C} = 0,$$

再將 C 代入下式：

$$l = \frac{9}{\sin(\pi - 123^\circ - C)} + \frac{7}{\sin C}.$$

我們所要努力的，就是找出代數或超越方程式的解，也就是這一章的

2 第一章 非線性方程式的解

主題。

這兒所述的，是解析我們梯子問題的一個途徑，當我們攜著梯子沿著轉角時，我們可以觀察到梯子連續的位置，它一定有一個臨界位置（critical position），也就是說在兩個通風道相交處梯子的兩端都碰到牆，而有某一點接觸轉角（見圖 1.2），設 C 為臨界位置時梯子與牆邊的角度。

我們考慮在臨界位置時所取之一序列的線，它們的長度隨角度 C 而變，可得到下列這些關係式（角度以徑表示之）：

$$\begin{aligned} \ell_1 &= \frac{w_2}{\sin B}; & \ell_2 &= \frac{w_1}{\sin C}; \\ B &= \pi - A - C; \\ \ell &= \ell_1 + \ell_2 = \frac{w_2}{\sin(\pi - A - C)} + \frac{w_1}{\sin C}. \end{aligned}$$

梯子可穿過轉彎的最大長度是 l 的最小值，而 l 是角 C 的函數，我們因此可設定 $dl/dC = 0$ 。

$$\frac{d\ell}{dC} = \frac{w_2 \cos(\pi - A - C)}{\sin^2(\pi - A - C)} - \frac{w_1 \cos C}{\sin^2 C} = 0.$$

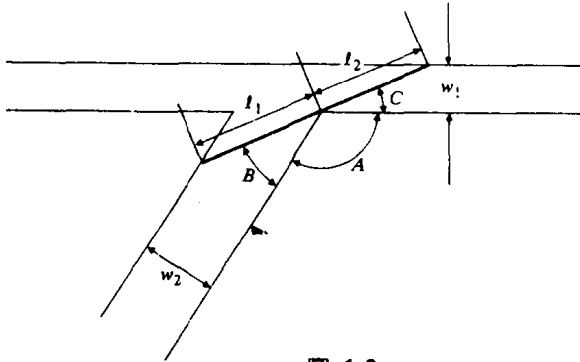


圖 1.2

假如我們能夠找到 C 值滿足此方程式，那麼我們就可以解出此問題，即臨界角度決定後，梯子之長度可解得：

$$\ell = \frac{w_2}{\sin(\pi - A - C)} + \frac{w_1}{\sin C}.$$

這一章中我們研究求解方程式根 (root) 的方法，如礦坑中梯子的例子。大多數的代數問題都專注於方程式的解，一些單純的情況下，我們將未知變數 (unknown variable) 的值經由重排而用簡單的方程式中之常數的算術組合來表示。如二次多項式我們可以熟悉的二次式公式 (quadratic formula) 表示。至於三次、四次多項式之公式雖然有，但太複雜以致於很少使用，對於更高次方程式已證明經由公式尋找解是不可能的，大多數的超越方程式 (包括三角或指數函數) 亦很難處理。

以明確的形式來表示出方程式的解雖非全然不可能却很困難，而數值分析提供了解根的方法，或至少可以盡量逼近真正的解。這些數值方法都遵循一個原則，它提供了一串連續的近似值，每一個都較前者更為準確，當它重複到某一個程度後，可以任意地接近真值，而不論我們給它限定多小的容忍區間，所以數值方法可以視為很像數學分析中的極限觀念。

1.2 半區間法

我們首先要學習的數值方法是半區間法 (interval-halving)^{*}，考慮立方方程式：

$$f(x) = x^3 + x^2 - 3x - 3 = 0.$$

當 $x=1$ 時， f 值是 -4 ，當 $x=2$ 時， f 值是 3 ，因為這函數是連續的 (continuous)，而很明顯的，當 $x=1$ 和 $x=2$ 時，函數值的符號相反，所以可保證在 $(1, 2)$ 中至少有一根 (見圖 1.3)。

假若我們算出函數在 $x=1.5$ 時之值，並與 $x=1$ 和 $x=2$ 時之值做比較，即可發現當 $x=1.5$ 和 $x=2$ 時，函數值的符號相反，那麼有一根在這兩個值之間。顯然的，我們繼續使用這半區間法一定可以決定一個很小很小的區間，使得此根落於其間。例如，繼續這方法可以導致一個根的近似值如 $x = \sqrt{3} = 1.7320508075 \dots$ 這方法可以用圖 1.4 來說明。

假設我們只想得到一個近似的答案，圖 1.4 的圖解法即可，但為了得到更精確的解，我們需要一個數學化的原則來表達。我們的演算法 (一個

^{*} 這方法發源的很早，也叫做 Bolzano method，有些作者稱它為二分法。

4 第一章 非線性方程式的解

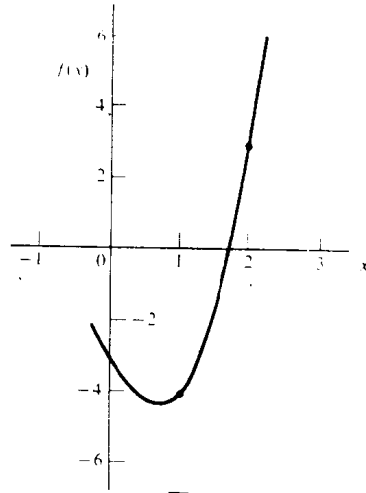


圖 1.3

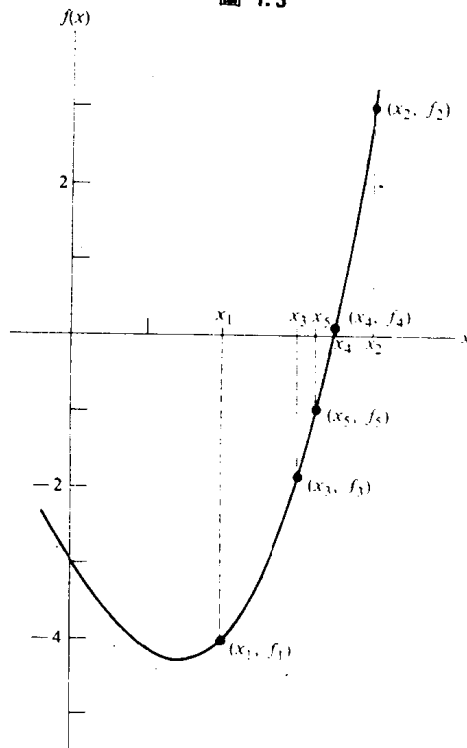


圖 1.4

有系統的程序，是個技術上的名詞)也應該以一種可以輕易地在計算機上運用這個方法的方式來表示。我們將採用一種特別強調次序性結構的演算法表示。

半區間法 (二分法)

決定函數 $f(x)=0$ 的根，精確於我們特定的容忍區間。給定二值 x_1 和 x_2 ，而且 $f(x_1)$ 和 $f(x_2)$ 是反號：

```
DO WHILE  $\frac{1}{2}|x_1 - x_2| \geq$  容忍值
    設定  $x_3 = (x_1 + x_2)/2$ .
    若  $f(x_3)$  與  $f(x_1)$ : 符號相反
        設定  $x_2 = x_3$ .
    ELSE 設定  $x_1 = x_3$ .
    ENDIF.
ENDDO.
```

這最後值 x_3 近似於真正的根。

注意：當函數 $f(x)$ 在 $[x_1, x_2]$ 間不連續時解出之根可能是錯的。

把此方法應用到 $f(x) = x^3 + x^2 - 3x - 3 = 0$ 時，我們得到表 1.1 (table 1.1)，這重覆的演算法稱為迭代法 (iteration)，而連續的近似值稱為迭代值 (iterate)。

表 1.1 中的每一個元素指示出自變數 (argument) x 和其對應函數 $f(x)$ 之值，當小數位數一定時這都是一個近似的值，而在電子計算機的浮點運算時，亦有相同的不準，因為電子計算機也有數字容量的極限。注意這對每一個計算法都是事實，並不只是在數值方法才如此，以後我們亦將注意這種取捨的誤差 (round-off error)。數值方法與數值分析的不同在於後者會考慮到誤差的情況，當然不考慮精確度而盲目的使用各種計算法是愚笨的！

不論我們四捨五入或割棄多餘的數字，在誤差取捨上都會造成不同的影響，在表 1.1 中的數字其小數後第五位都被捨棄，這相似於數位電子計算機的取捨法。

在我們的運算中限制有效位數的數目而有精確度的限制外，假如我們要這過程快些結束，還有一個明顯的限制。而半區間法除了簡單外，還有一重要的優點，就是我們知道根的近似值之精確度，由於根必需在 x - 值

表 1.1 半區間法解 $f(x) = x^3 + x^2 - 3x - 3 = 0$

迭代 次數	x_1	x_2	x_3	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	x_3 的最 大誤差
1	1	2	1.5	-4.0	3.0	-1.875	0.5
2	1.5	2	1.75	-1.875	3.0	0.17187	0.25
3	1.5	1.75	1.625	-1.875	0.17187...	-0.94335...	0.125
4	1.625	1.75	1.6875	-0.94335...	0.17187...	0.40942	0.0625
5	1.6875	1.75	1.71875	-0.40942...	0.17187...	-0.12478	0.03125
6	1.71875	1.75	1.73437...	-0.12478...	0.17187...	-0.02198	0.015625*
7	1.71875	1.73437...	1.72656...				0.0078125
∞			1.73205...			-0.00000...	

* 迭代 5 次後 x_3 的正確誤差是 0.01330。

之間，而且函數值是反號*，而最後近似值之誤差不超過區間長之一半，且其等於中點之值，而這區間可以很準確的知道，它等於 $|x_1 - x_2|$ 之一半。而其它方法中，精確度的決定相當困難。

計算值的精確經常以絕對誤差（真值 - 近似值）或相對誤差（絕對誤差除以真值）表示之。對於很大或很小的值而言，相對誤差是較佳的準確度量，有時我們以數字的有效位數來表示精確度是正確的，但在其他情況下，我們也以所使用小數之位數來表示。當真值未知時，我們只能特定一個近似的精確度，因為我們不可能準確的表示出它的精確度，因此我們常需限定誤差的大小。

半區間法（二分法）與本章中其它方法一樣，可適用於超越方程式。表 1.2 證明了一個結果，當我們將此法用來解 $f(x) = e^x - 3x = 0$ 時，在 $x = 1$ 和 $x = 2$ 之間有一根存在。

表 1.2 半區間法解 $f(x) = e^x - 3x = 0$

迭代 次數				極大值誤差			
	x_1	x_2	x_3	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	x_3
1	1.0	2.0	1.5	-0.028172	1.38906	-0.01831	0.5
2	1.5	2.0	1.75	-0.01831	1.38906	0.50460	0.25
3	1.5	1.75	1.625	-0.01831	0.50460	0.20342	0.125
4	1.5	1.625	1.5625	-0.01831	0.20342	0.08323	0.0625
5	1.5	1.5625	1.53125	-0.01831	0.08323	0.03020	0.03125
6	1.5	1.53125	1.51562	-0.01831	0.03020	0.00539	0.015625*
∞			1.51213...				

* 迭代 5 次後 x_3 之正確誤差是 -0.01912 。

在我們使用半區間法時，必需先有一個初值才能開始，而大多數解根的方法都是如此，而得到這初值的方法，可利用圖上看出，試算或是在計算機中寫一個程式尋找。

* 假設一函數 $f(x)$ 不是連續的，在 $f(x)$ 是反號時，在此區間可能沒有根的存在，所以對於一個未知函數求解時，我們先行測試這函數是否連續。