應用數值分析

applied numerical analysis

原著者：Curtis F. Gerald

学

譯述者：郭　後　良

科技圖書股份有限公司

應用數值分析

applied numerical analysis

原著者：Curtis F. Gerald

譯述者：郭　俊　良

科技圖書股份有限公司

4.50

本公司經新聞局核准登記
登記證局版台業字第1123號

書　名：應用數值分析
原著者：Curtis F. Gerald
譯述者：郭 俊 良
發行人：趙 國 華
發行者：科技圖書股份有限公司
台北市博愛路185號二樓
電　話：3110953
郵政劃撥帳號15697

六十六年一月初版
六十七年五月二版

特價新台幣70元

原序

解決科學和工程問題的數值技巧日趨重要，而這一課題已成爲訓練應用數學人才、工程師和科學者的重要部門。一個明顯的理由，當一般分析方法無法解決的問題，常可利用數值方法（numerical method）求得合理的解答。例如求超越方程式的根，或解非線性微分方程式等。在應用上，數值方法幾乎是不受限制的。

數值程序（numerical procedures）之所以重要的第二個理由，或許是更重要的理由，就是與數位電算機（digital computer）間的相互關係。對數值方案（numerical scheme）的一般適應性，所付出的代價是算術運算的複雜。既然數位電算機在使用數值方法解決問題上，能提供一個幾乎不費力的方法（從使用者的觀點而言）來完成簡單、但冗長而乏味的計算。因此這種神妙工具的出現，使囿於應用數學中一個專門領域的數值方法，再度顯出其重要性。再者，數位電算機的運算大都是算術的重覆計算，這種電算機依擬定的計劃以解決科學問題的方法，即爲我們習知的數值方法。兩者間的關係，是彼此的數值方法。除了很簡單的例子外，皆需用電算機來計算，而電算機從數值分析（numerical analysis）的知識以推導程式邏輯（program logic）。

這本書是爲學習應用數學、工程、技術和科學方面的學生所寫的。假設讀者已具備微積分的知識，若具微分方程式的基礎更好，但並非必要。在誤差分析和數值分析的推演，有一些重要的知識需由微積分的課程中獲得。例如戴勞級數的展開和均值定理等，這些在附錄中附有簡單的複習。

本書的重點，放在數值程序的應用技巧。許多例題和習題的數學模式（nathematical models），皆有實際的物理現象與之對照。這樣，可促使學生瞭解數學問題和物理現象間的關係。因爲學生通常忽略這方面的訓練。簡化的物理問題被大量選用着，因爲一般大學生對複雜的工程技術領域，皆缺乏應備的知識。

不瞭解數值方法的限制，便無法適切予以應用。本書稱爲應用數值分析意味著只是數值程序的描述而已。數值方法的誤差分析，比推演和應用更困難。但數值分析若不考慮誤差，以及收斂和穩定的性質，則這本書只像種天書，而不能使人有所瞭解其內涵。這是作爲一本教科書所爲難之處。本書將誤差分析介紹給二年級以上的學生，避免公式化的陳述，在許多情況

wtsts/op

中略予簡略證明。在某些例子中，僅證明其特殊情況，再討論更廣泛的情況。本書採用通俗語調。作者相信，如作嚴密的證明將嚇退許多學生，而且證明一個問題所必備的一些函數條件，必須在需要之前提出。若採用重述方式，對學生而言，往往無法接受。因此，所有的證明皆用讀者和作者討論方式提出，而不採用呆板公式化的形式。顯然，雖非嚴密證明，但定理中一些重要項目都沒有被忽略。

由於數值分析和數位電算機程式幾乎混爲一談，因此許多近代的作者寫書時，認爲兩者該同時學習。但依課堂上的經驗顯示，這是不可靠的。通常，學生在學習數位電算機程式上發生的困難，較在學習數值分析爲多。因此，剛學習數值分析時，即以數位電算機程式來說明，往往會忽視數值分析的概念。作者爲避免這些困惑，保持兩者間的關係而作同時處理辦法。但兩者之間是各自獨立的。每一章中，首先將焦點置於數值方法，在經推導之後，再介紹該方法的電算機程式。學生在解問題時，應先用計算尺或電算器（electronic calculator）去瞭解程序的本質，然後再寫出電算機程式。教師們對這方面曾有些意見，有些教師喜歡將程式留到第二學期講授，在學生對數值分析有了相當認識後，選擇早期的課題來介紹電算機的應用，作者很成功的使用這種方式。既然福傳（FORTRAN）是應用最廣的語言，因此在程式的舉例中，皆引用之。本書使用福傳二號（FORTRAN Ⅱ），因其比較其他高級語言容易接受。

本書有足夠的材料供給一年的課業。但若選取某些課題，則較短的課業仍可使用。爲了適合這些情況，某些部份可說是整本書的複習。介紹整本書的基本觀念，這些可予略去。有些部份以不同的方式提出，其實只是重述而已。例如有限差分近似值的微分，隱含在邊際值問題與偏微分方程式章節內，而與挿值多項式完全獨立。數值分析最少應包括超越與代數方程式、線性方程式、起初值與邊界值問題和偏微分方程式。一個明智的課題選擇，和花費較少的注意力於誤差分析上，可適用於三至四學季（quarter units）制。

祁勞爾德　C F. Gerald

目　錄

第一章

非線性方程式解法

solution of nonlinear equations

在應用數學(applied mathematics)中，我們常需求解方程式的根，而代數學可說是爲求解方程式而發展的。在簡單的情況中，方程式中的常數，用簡單的算術重組，以定出未知的變數值。例如二次多項式可以熟悉的二次方程式公式（quadratic formula）來表示。三次或四次多項式的公式雖然存在，但非常複雜，很少使用；至於更高次方程式，已被證明用公式求解爲不可能的。大部份的超越方程式（transcendent equations）（包括三角和指數方程式）也同樣很難處理。

無法用明顯的方式來表達的這些方程式，使用數值分析（numerical analysis)處理雖有些困難，但仍可提供一種方法，至少可得到所求的近似值。大部份的數值程序（numerical procedures），都根據一個方案，可視爲提供一組連續的近似值，每得一值必比前者更爲精確。因此，在經由程序的充分重覆後，即可獲得與正確值的誤差在容許範圍以內的近似值。數值程序，可視爲數學分析的極限概念。

1-1 半區間法

我們將研究的第一個數值程序爲半區間法（method of interval-halving）*。就下列的三次式

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

當 $x = 1$ 時，f 值爲 -4。當 $x = 2$ 時，f 值爲 $+3$。
因該函數爲連續的，很明顯在 $x = 1$ 與 $x = 2$ 時，函數值的符號相反，這表示至少有一根在(1,2)區間。見圖 1-1。

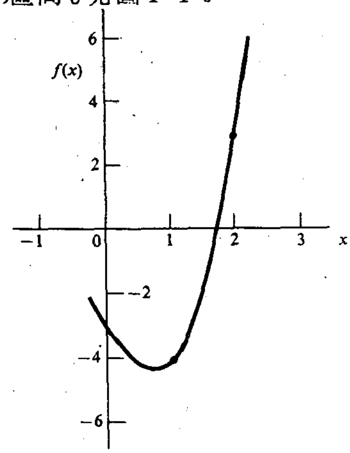

圖. 1.1

*這方法亦稱巴爾柴拿（Bolzano）法。

假設，求得$x=1.5$的函數值，並與$x=1$與$x=2$的函數值比較，如表1-1。既然$x=1.5$與$x=2$的函數值符號相異，則該根必在兩者之間。顯然，連續使用半區間法，定得一個非常小的區間，而根必在此區間之內。在本例中，繼續此過程，可求得一近似值，與正確的根值

$x=\sqrt{3}=1.7320508075$ ……甚爲接近。

表 1.1. 半區間法

x	$f(x)=x^3+x^2-3x-3$
$x_1=1$	-4.0
$x_2=2$	3.0
$x_3=1.5$	-1.875
$x_4=1.75$	$0.17187\cdots$
$x_5=1.625$	$-0.94335\cdots$
$x_6=1.6875$	$-0.40942\cdots$
$x_7=1.71875$	$-0.12478\cdots$
$x_8=1.73437\cdots$	$0.02198\cdots$
.	.
.	.
.	.
$1.73205\cdots$	$-0.00000\cdots$

整個表1.1，係描述所討論的自變數x與其對應函數$f(x)$值在有限位小數的近似正確值。即使保留若干位數，如數位電算機（digital computer）中的浮點運算（floating point operation），仍有誤差存在。這並非數值分析才有，在所有的計算中皆有此種現象。稍後我們將涉及此種捨位誤差（round-off error）。數值方法（numerical method）與數值分析（numerical analysis）的差別，在於後者是考慮誤差問題。盲目的使用任何一種計算方法，而不涉及其準確度（accuracy）是很不智的。

是否取擇最接近部份值，或去掉額外的位數，均對捨位誤差起不同的影響。表1.1中，小數在五位後被去掉，與大部份的數位電算機作用相同。

準確度的限制，除了有效位數受到限制外，還有個明顯的限制，就是把程序終止得太快。半區間法的優點，除簡單外，最重要的是對所求出的近似值的準確度有所瞭解。既然根值必須介於兩個函數符號互異的x值之間，因此最後一個近似值的誤差絕不大於最後區間的一半，而此值在該區間的中點，用其他方法則很難決定其準確度。

一般學生僅有計算尺作爲計算工具，只能求到大約三位有效數字，但在學本方法時，已經夠用。如果僅需熟悉桌上電算器（desk calculator）或掌中電算器（pocket calculator），這些問題是應該利用桌上或掌中電算器計算。除非能寫出計算機程式，與操作，否則對數值分析的經驗便不算完整。

1-2 內插法

雖然半區間法容易，且具簡單誤差分析，但並非很有效率。對大部份的函數，我們可改善其收斂性，加快求根的速率。內插法（method of interpolation）*即爲其中之一。首先假設在（x_1, x_2）區間內，函數呈線性，而 $f(x_1)$ 與 $f(x_2)$ 爲異號。圖 2.1中很明顯的三角關係，可寫成⁺。

$$\frac{x_2 - x_3}{x_2 - x_1} = \frac{f(x_2)}{f(x_2) - f(x_1)},$$

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f(x_2) - f(x_1)}(x_2 - x_1).$$

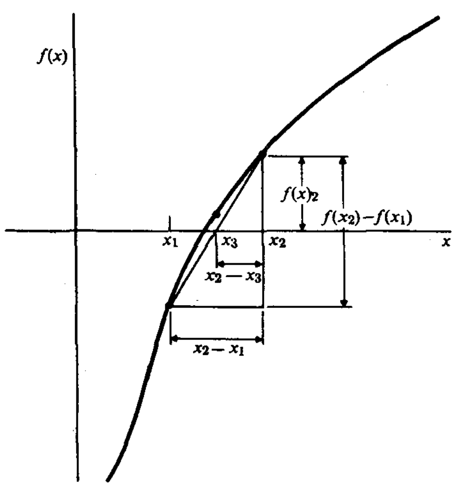

圖. 2.1

*此法亦稱爲虛位法（method of false position），由拉丁語轉變而來。也是很古老的方法。

⁺既然 $(f(x_2)-f(x_1))/(x_2-x_1)$ 是正割線的斜率，與函數在根值鄰近區的斜率近似。這方程式可視爲 $x_3 = x_2 - f(x_2)/$（函數的斜率）。與下節的牛頓（Newton）法比較。

表 2.1. 線性內插法

x	$f(x)=x^3+x^2-3x-3$
$x_1=1.0$	-4
$x_2=2.0$	3
$x_3=1.57142$	-1.36449
$x_4=1.70540$	-0.24784
$x_5=1.72788$	-0.03936
$x_6=1.73140$	-0.00615
$x_7=1.73194$	

$$x_3=2-\frac{3}{7}(2-1)=1.57142$$

$$x_4=2-\frac{3}{4.36449}(2-1.57142)=1.70540$$

$$x_5=2-\frac{3}{3.24784}(2-1.70540)$$

$$x_6=2-\frac{3}{3.03936}(2-1.72788)$$

然後算出 $f(x_3)$，依線性內插（interpolate linearly）在兩異號值中得 x_4。重複此法可改善根的估値。表2.1是以1.1節的例子，利用本法所得的結果。此法顯然比半區間法趨近得快。在六次後所得的準確度與半區間法經八次後所得的幾乎相同。很明顯，連續近似值趨向函數爲零的速率，決定於所考慮的區間內函數接近直線的程度。換句話說，收歛速率相當於曲線斜率的改變率，係由二次微分得來。我們將不再作進一步研究此方法。

有一明顯方法，可以改善這線性內插法。選出兩個最接近的根值（用不同兩點的函數值表示之），從這些內插（interpolate）或外插（extrapolat 求得近似值，以代替內插法需要兩個函數值的符號相異的限制。通常，最接近的根值，是最後計算所得的值。如是可使考慮的區間變小，且改善函數假設能以通過這兩點的直線來表示。

表2.2卽爲根據這方案的計算結果。稱謂正割法*（secant method）。顯示有更快的收歛，x_6 比用內插法所得的 x_7 更爲準確。

---

*如此稱呼，乃因通過該曲線上兩點的直線稱爲正割線之故。

表 **2.2.** 正割法

x	$f(x) = x^3 + x^2 - 3x - 3$
$x_1 = 1.0.$	-4
$x_2 = 2.0$	3
$x_3 = 1.57142$	-1.36449
$x_4 = 1.70540$	-0.24784
$x_5 = 1.73513$	0.02920
$x_6 = 1.73199$	

$$x_3 = 2 - \frac{3}{7}(2 - 1)$$

$$x_4 = 2 - \frac{3}{4.36449}(2 - 1.57142)$$

$$x_5 = 1.70540 - \frac{-0.24784}{1.11665}(1.70540 - 1.57142)$$

$$x_6 = 1.73513 - \frac{0.02920}{-0.27704}(1.73513 - 1.70540)$$

若兩點的函數值同號，而不知是否接近正確的根值，不要貿然使用外插法。圖2.2表示根不存在時，一個尋求根值的錯誤見解。在計算機程式中尤其重要。因爲它不像用手計算那樣方便，在一連串的計算值計算後馬上顯示出來。

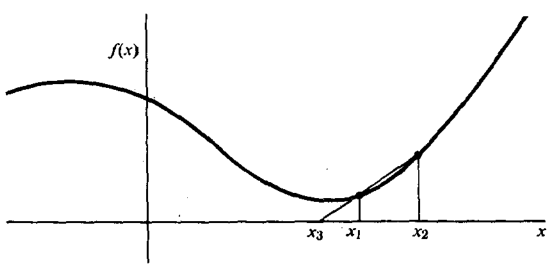

圖. 2.2

當然，我們所討論的方法並不限於多項式。表2.3係求下列方程式根的計算。

$$3x + \sin x - e^x = 0.$$

三角函數項的 x 值以弳（radian）計量。最初的二個函數值，使一個根介於 $x = 0$ 與 $x = 1$ 之間。如果在最初的計算，僅帶很少位小數，用手算可較省

表 2.3. 用正割法求超越函數零點法

x	$f(x)=3x+\sin x-e^x$
$x_1=0$	-1.000
$x_2=1$	1.1232
$x_3=0.47$	0.3629
$x_4=0.35$	-0.0262
$x_5=0.358$	-0.0061
$x_6=0.3604$	

$$x_3=1-\frac{1.1232}{2.1232}(1-0)=0.4710,\ \text{say } 0.47$$

$$x_4=0.47-\frac{0.3629}{1.3629}(0.47-0)=0.3449,\ \text{say } 0.35$$

$$x_5=0.47-\frac{0.3629}{0.3891}(0.47-0.35)=0.3581,\ \text{use } 0.358$$

$$x_6=0.358-\frac{-0.0061}{0.0201}(0.358-0.35)=0.3604$$

力，增加小數的位數，僅是為了增加其準確度。

目前所討論的方法，在計算時皆需根的初估(initial estimate)值。幾乎所有解方程式的數值分析方案皆需要初估值。通常用最初試驗和誤差計算，或繪出函數的簡略圖形，以找出開始值(starting value)。隨後，我們討論一些對多項式的自動開始(self-starting)方法。

1-3 牛頓法

牛頓(Newton)法*是解方程式使用非常廣泛的方法之一。圖 3.1是圖形的描述。從一個離根不太遠的初估值 x_1 開始，沿切線與 x 軸的交點外插，作為下一近似值。如此，一直繼續到 x 值甚為接近，或函數值甚為接近於零⁺。

---

*牛頓沒有發表該法進一步的探討，在其名著Principia(1686)上曾解過一個三次多項式，在此係將原來的例子予以修潤。

⁺本規約(criterion)的使用，視方程式用在物理問題的情況而定。通常，連續的 x 值對指定的容許誤差間的協調是需要的。