

應用數值分析

applied
numerical
analysis

原著者：Curtis F. Gerald

譯述者：郭 學 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，而這一課題已成為訓練應用數學人才、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，即為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)。

這本書是為學習應用數學、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 (mathematical 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。因為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，因為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。本書稱為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，則這本書只像一種天書，而不能使人有所瞭解其內涵。這是作為一本教科書所為難之處。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

WESTS/OP

應用數值分析

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為一談，因此許多近代的作者寫書時，認為兩者該同時學習。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，較在學習數值分析為多。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。作者為避免這些困惑，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。為了適合這些情況，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，而與插值多項式完全獨立。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

1.1	半區間法	2
1.2	內插法	4
1.3	牛頓法	7
1.4	迭代法	12
1.5	牛頓法的收斂性	15
1.6	二次因式的巴力司杜法	16
1.7	商數—差分算式	20
1.8	其他方法	22
1.9	用電算機程式解方程式	23
	問題 1	26

第二章 插值多項式

2.1	差分表	34
2.2	表中誤差的影響	37
2.3	插值多項式	38
2.4	其他插值多項式	40
2.5	內插值的菱形圖	41
2.6	誤差項與內插值的誤差	43
2.7	利用符號法的公式推導	45
2.8	不相等間隔的 X 值內插	47
2.9	反內插法	48
2.10	內插法用電算機程式	50
	問題 2	52

第三章 數值積分

3.1	梯形法則	60
3.2	龍伴積分法	62
3.3	積分法的菱形圖	65
3.4	牛頓—可茲公式	67

應用數值分析

3.5	用符號法推導公式	69
3.6	高斯求積法	70
3.7	電算機程式	72
	問題 3.	75

第四章 數值微分

4.1	從插值多項式導得的微分式	81
4.2	用符號法推導公式	83
4.3	微分菱形圖	85
4.4	外插技巧	87
4.5	微分的電算機程式	89
	問題 4.	90

第五章 未定係數法公式

5.1	用未定係數法推導微分公式	95
5.2	微分公式的誤差項	98
5.3	用未定係數法的積分公式	99
5.4	用區間外點的積分公式	102
5.5	積分公式的誤差	104
	問題 5.	106

第六章 常微方程式數值解法

6.1	戴勞級數法	113
6.2	尤拉與修正尤拉法	115
6.3	倫格—庫塔法	118
6.4	密爾恩法	119
6.5	密爾恩法的不穩定性	121
6.6	亞當斯—慕爾登法	123
6.7	收斂準則	125
6.8	誤差與誤差傳遞	127
6.9	方程式組與高次方程式	129
6.10	特殊方法	133
6.11	電算機的應用	133

問題 6	136
第七章 聯立方程式組解法	
7.1 矩陣符號	143
7.2 消去法	145
7.3 高斯與高斯—約旦法	148
7.4 克勞脫縮減法	150
7.5 矩陣與反矩陣的行列值	152
7.6 高斯—西爾迭代法	154
7.7 張弛法	157
7.8 非線性方程式組	160
7.9 方程式組的電算機程式	162
問題 7	166
第八章 邊界值問題	
8.1 射擊法	172
8.2 方程式組求解	174
8.3 微分的邊界條件	177
8.4 特徵值問題	179
8.5 用迭代法求矩陣的特徵值	182
8.6 程式	184
問題 8	185
第九章 橢圓偏微分方程式數值解法	
9.1 穩定態的熱流方程式	190
9.2 微分方程式表示法	192
9.3 正方程區域的拉卜拉斯方程式	194
9.4 張弛法	197
9.5 卜桑方程式	199
9.6 微分的邊界條件	201
9.7 不規則區域	204
9.8 在非矩形網的拉卜拉斯運算子	205
9.9 黎白孟法的加速收斂	207

應用數值分析

9.10	三維空間的拉卜拉斯運算子	208
9.11	解卜桑方程式的電算機程式	210
	問題9	211

第十章 拋物線偏微分方程式數值解法

10.1	明確法	219
10.2	克朗克-尼可爾孫法	224
10.3	微分的邊界條件	227
10.4	穩定性與收斂性	230
10.5	二維或三維的拋物線方程式	235
10.6	解拋物線方程式用程式	237
	問題10	243

第十一章 雙曲線偏微分方程式數值解法

11.1	用有限差分法解波方程式	248
11.2	第阿侖伴解作比較	250
11.3	數值方法的穩定性	254
11.4	特性法	254
11.5	簡單波方程式的程式	260
	問題11	263

第十二章 數值雙重積分與多重積分

12.1	二維多項式內插法	267
12.2	數值雙重積分	270
12.3	多重積分與外插法的誤差	274
12.4	可變極限的多重積分	276
12.5	雙重積分程式	279
	問題12	279

第十三章 曲線配合與函數近似

13.1	最小二乘方近似法	284
13.2	最小二乘方配合非線性曲線	287
13.3	用三次曲線規配合數據法	290

13.4	節約冪級數的函數近似法	294
13.5	有理函數的近似法	299
	問題13.	305
附錄	311
文獻	315
部分問題答案	317

第一章

非線性方程式解法

solution of nonlinear equations

2 應用數值分析

在應用數學 (applied mathematics) 中，我們常需求解方程式的根，而代數學可說是為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用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為不可能的。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，可視為提供一組連續的近似值，每得一值必比前者更為精確。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，可視為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為半區間法 (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 值為 -4 。當 $x = 2$ 時， f 值為 $+3$ 。

因該函數為連續的，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。

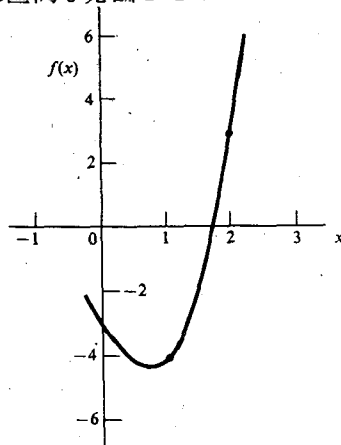


圖. 1.1

*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。

$x = \sqrt{3} = 1.7320508075 \dots$ 甚為接近。

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...
$x_5 = 1.625$	-0.94335...
$x_6 = 1.6875$	-0.40942...
$x_7 = 1.71875$	-0.12478...
$x_8 = 1.73437\dots$	0.02198...
⋮	⋮
⋮	⋮
⋮	⋮
1.73205...	-0.00000...

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。

是否取捨最接近部份值，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。

4 應用數值分析

一般學生僅有計算尺作為計算工具，只能求到大約三位有效數字，但在基本方法時，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)* 即為其中之一。首先假設在 (x_1, x_2) 區間內，函數呈線性，而 $f(x_1)$ 與 $f(x_2)$ 為異號。圖 2.1 中很明顯的三角關係，可寫成⁺。

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

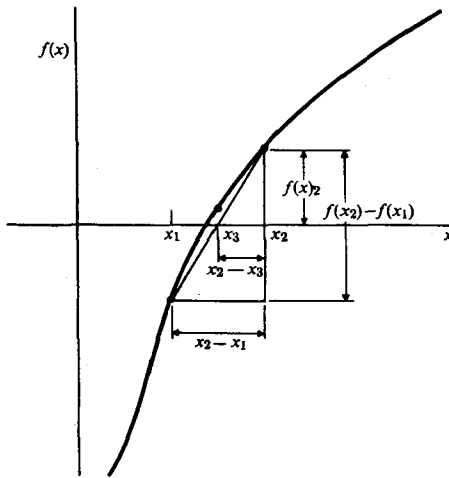


圖. 2.1

*此法亦稱為虛位法 (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。這方程式可視為 $x_3 = x_2 - f(x_2) / (\text{函數的斜率})$ 。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值。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為零的速率，決定於所考慮的區間內函數接近直線的程度。換句話說，收斂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 (extrapolate) 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 即為根據這方案的計算結果。稱謂正割法* (secant method)。顯示有更快的收斂， x_6 比用內插法所得的 x_7 更為準確。

*如此稱呼，乃因通過該曲線上兩點的直線稱為正割線之故。

6 應用數值分析

表 2.2. 正割法

x	$f(x) = x^3 + x^2 - 3x - 5$
$x_1 = 1.0$	-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。因為它不像用手計算那樣方便，在一連串的计算值計算後馬上顯示出來。

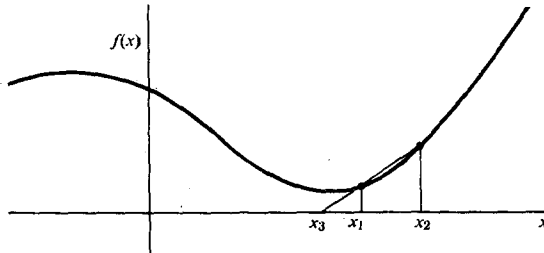


圖. 2.2

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 值以強 (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
$x_6 = 0.3604$	
$x_3 = 1 - \frac{1.1232}{2.1232}(1 - 0) = 0.4710$, say 0.47	
$x_4 = 0.47 - \frac{0.3629}{1.3629}(0.47 - 0) = 0.3449$, say 0.35	
$x_5 = 0.47 - \frac{0.3629}{0.3891}(0.47 - 0.35) = 0.3581$, 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，僅是爲了增加其準確度。

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，作爲下一近似值。如此，一直繼續到 x 值甚爲接近，或函數值甚爲接近於零⁺。

*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。