

數值分析

施澄鐘 著



香港科技出版社

數值分析

編著者：施澄鑒

出版者：香港科技出版社

發行者：香港科技出版社

九龍彩虹道810號六樓

印刷者：永達印刷公司

香港黃竹坑建明工業大廈九樓D座

定 價： H. K. :

\$45.00

葉序

自工業革命之後，科學技術、日益精進、百年之間、度越千載。比年以來，有所謂電子計算機之間世，因其無論於科學繁複問題之解決，及工商企業各種資料之儲存運用，均可獲至極完美之效益，故其發展，尤為迅速，允稱一日千里。洎乎今日，精微若太空科學，簡易若民生日用，僉可謂與計算機息息相關，而其日後於國計民生之影響，亦必極大，吾人誠可謂無計算機則無科學，無科學則無現代之國家，故今日計算機之如何推廣應用，實乃當務之急也。

計算機之應用，固甚繁雜，一言以蔽之，多與數學有關，蓋一般問題，均可以數學解釋之，而解決數學問題，即可謂解決問題之問題也。施君此書，即提供簡易之數學方法及程式計劃，其目的乃欲培養學習者能以數值分析法利用計算機解決問題之能力也。

施君澄鑑，逢甲大學工學碩士，年青有爲，學有專長，自六十九學年起，由本校聘爲教席，擔任電子資料處理科數值分析等課程，認真負責，甚獲好評。施君有見於目前大專學校有關數值分析之教本，或涉艱深，而偏於專門，或乖離計算機應用之道，乃於授課餘暇，將其平日講授之筆記，整理增訂，彙爲一帙。余觀其書，條理密察，體用兼備，信於計算機之應用，必大有裨益也，行將付梓，爰綴數言以爲序。

葉成茂序

Huihai/07

自序

由於人類不斷的研究與創造、科學的進步與發展真是一日千里，無可限量，尤其計算機的發明，更創出了各種奇蹟，幾乎人類的生活均與其息息相關不可分離。計算機的特點在於能快速、精確而容易的處理問題，並且能隨時提供使用者所需之資料，但是該如何有效的應用此種特點，去幫助吾人解答問題，實是吾人使用計算機的心願和目的，本書即將提供一些簡易的數學方法和程式，並且利用計算機去解決工程上、商業上或企業、機構上所發生之數學有關問題。

本書之編寫力求內容充實，說明詳細，以期能了解理論而發揮實際應用為原則，本書每章編寫內容大致上可分為下面幾部份：

- 1 簡介部份：介紹本章之研討範圍和研討目的，使讀者在學習本章方法前，先對本章有一概略性認識。
- 2 理論部份：詳述所使用數學方法之原理，並一一舉例說明其解法。使讀者能充分了解其方法之涵意與精神所在，而能完全吸收。
- 3 程式部份：將每種方法之內容，編寫成 FORTRAN IV 程式計劃能實際上機實習，以收融會貫通之效。
- 4 練習部份：於每章結束後附上練習題，使讀者能做最後複習，熟練各種解法，使能達到學以致用之目的。

此外，並於附錄部份 A 附錄計算機 FORTRAN IV 程式語言要點，B 附錄常用之數學公式，於 C 附錄參考文獻，於 D 附錄 Basic 程式計劃，以使讀者在學習各方法後，亦能使用中小型電腦來解題，並於本書最後附上索引，以利讀者查索使用。

本書完全依照讀者需要編寫，並實際於課堂教授使用，適用於一般大專院校，並可做為自修參考材料。

目 錄

序

自序

第一章 數值分析與誤差(Numerical Analysis & Errors)

1-1 簡介	1
1-2 概數	2
1-3 數值捨入與切割	2
1-4 有效數字	4
1-5 絕對誤差與相對誤差	4
1-6 數列誤差	6
1-7 固有誤差	21
1-8 捨位誤差	21
1-9 截尾誤差	22
1-10 誤差一般式	22
1-11 誤差式在算術運算上之應用	24
練習一	30

第二章 非線性方程式的解(Solution of Nonlinear Equations)

2-1 簡介	33
2-2 半間距法	33
2-3 假位法	39

2-4	割線法.....	48
2-5	牛頓 - 拉夫森法.....	58
2-6	伯基 - 維塔法.....	66
2-7	貝爾斯托法.....	75
練習二.....		92

第三章 矩陣、行列式與聯立方程式的解(Matrix, Determinant and simultaneous Equation Solution)

3-1	簡介.....	95
3-2	矩陣種類.....	95
3-3	矩陣基本運算.....	99
3-4	行列式.....	102
3-5	反矩陣.....	105
3-6	克拉瑪法則與聯立方程式.....	108
3-7	矩陣運算之程式設計.....	111
3-8	行列式值之計算.....	117
3-9	交換法求反矩陣.....	125
3-10	聯立方程式的解.....	139
3-10-1	高斯直接消去法.....	139
3-10-2	高斯裘登消去法.....	149
3-10-3	高斯裘登消去法求行列式值.....	155
3-10-4	克勞特法.....	161
3-10-5	寇列斯基法.....	173
3-10-6	加可比疊代法.....	181
3-10-7	高斯謝德疊代法.....	188
3-11	帶型矩陣解法.....	195
3-12	特徵值與特徵向量.....	202
3-12-1	連續疊代法.....	205
3-12-2	矩陣減縮法.....	215

第四章 插值法(Interpolation Method)

4-1 簡介.....	231
4-2 差商.....	232
4-3 差分.....	234
4-3-1 前向差分號.....	234
4-3-2 後向差分號.....	241
4-3-3 中央差分號.....	244
4-3-4 代換號.....	247
4-3-5 平均號.....	249
4-3-6 差分誤差.....	249
4-4 線性插值法.....	252
4-5 差分表之程式設計.....	256
4-6 牛頓前向差分插值法.....	259
4-7 牛頓後向差分插值法.....	263
4-8 中央差分插值法.....	267
4-8-1 高斯前向插值法.....	267
4-8-2 高斯後向插值法.....	271
4-8-3 斯德林插值法.....	275
4-8-4 拉普勒斯 - 埃弗烈特插值法.....	282
4-9 拉格南奇插值法.....	290
4-10 牛頓差商插值法與埃特肯法.....	296
4-11 插值誤差.....	304
練習四.....	309

第五章 近似法(Approximation)

5-1 簡介.....	313
-------------	-----

5-2	最小平方近似法	314
5-3	最小平方多項式近似法	320
5-4	契比希夫多項式近似法	327
練習五		339

第六章 數值微分(Numerical Differentiation)

6-1	簡介	343
6-2	數值微分法	343
6-2-1	導數與差分關係	343
6-2-2	利用差分轉換函數值求導數	353
6-3	外推導數法	367
練習六		378

第七章 數值積分(Numerical Integration)

7-1	簡介	381
7-2	梯形積分法	382
7-3	辛浦申積分法與牛頓-卡茲積分法	392
7-4	農伯格積分法	404
7-5	高斯積分法	415
7-6	數值多重積分	430
7-6-1	數值雙重積分	430
7-6-2	數值三重積分	434
練習七		444

第八章 常微分方程式的數值解(Numerical Solution of Ordinary Differential Equations)

8-1	簡介	449
(→)	初值型問題	449
8-2	泰勒級數法	450

8-3	悠勒法.....	454
8-4	改良悠勒法.....	456
8-5	阮奇 - 庫特法.....	464
8-6	邁恩法.....	477
8-7	亞當 - 末頓法.....	483
8-8	高階常微分方程式.....	491
(二)	邊值型問題.....	503
8-9	射擊法.....	503
8-10	有限差分法.....	511
練習八.....		518

第九章 蒙地卡羅法與亂數(Monte Carlo Methods and Random Numbers)

9-1	蒙地卡羅法.....	521
9-2	巴縫針問題.....	525
9-3	亂數的產生一次幕剩餘法.....	531
練習九.....		535

第十章 線性規劃(Linear Programming)

10-1	簡介.....	537
10-2	線性規劃之模型.....	537
10-3	釋例.....	538
10-4	兩變數之問題—圖解法.....	542
10-5	簡捷法.....	548
10-6	人為變數.....	558
練習十.....		579

附錄 A 計算機FORTRAN程式語言要點..... 581

附錄 B 常用數學公式、定理..... 625

第一章 數值分析與誤差

(Numerical Analysis & Errors)

1-1 簡 介 (Introduction)

在吾人生活領域中，對於一般的物理現象或工商企業等各方面所發生的問題，常希望以簡明的數學關係式來表示，或者由各種性質所代表之各個數學式中，求得滿足所有性質條件之解，則吾人可利用一組數值或單一數值資料來推衍，而導出代表性之關係式或近似解出來，這種由數值資料推衍出關係式或近似解的方法，吾人稱之為數值分析法 (Numerical Analysis Method)，但是由一組數值資料要推導出某一關係式或近似解並非容易之事，必須借助數學上特殊解法，以及計算機快速而準確的計算方可達成，因此，吾人可視數值分析法為數學方法中的一個分支，它在利用計算機，以提供一種快速，準確而有用之數學解答。

對於某些問題欲以數學式表示，吾人可利用一組實驗或調查來蒐集問題之數值資料，而藉數值分析法來完成。例如，吾人想了解某種木材在水中浸漬之吸水量情形，吾人可從此種木材中，取用一組規格相同之木片樣本 (Sample)，然後將這些樣本同時浸入水中，每隔一定時間取出一片，測量其增加之重量，即可得到樣本在不同時間下之吸水量資料；由浸漬時間之長短及吸水量之多寡之數值資料，利用數值分析近似法 (Approximation)，即可進一步求得木材在任何時間下之吸水量情形，而且此種浸漬時間對吸水量之關係，係以數學函數式方式表示出來：

$$A = F(t) \quad (1.1)$$

其中， A 表吸水量， t 表浸漬時間，只要吾人將浸漬時間之數值資料代入 (1.1) 式中，即可求得在該時間浸漬下木材之吸水量情形（當然在此所得之吸水量情形，並非完全精確者，因為吾人尚有某些條件限制未考慮在內）。

2 數值分析

除此之外，其他例如複雜之數學式 $\int_0^1 \sin(x^2 + 1) dx$ ，或 $(\sin x - x)/x^3 = 1 \dots$ 等，很難利用一般之數學公式或定理來求解，則亦可借助數值分析法來完成。例如上面所提之數學式，前者可利用第七章之數值積分（Numerical Integration），後者可利用第二章非線性方程式的解（Solutions of Nonlinear Equation）來獲得解答。

因此，使用數值分析法吾人可簡易的得到問題之結果，雖然吾人可由數值分析法容易的獲得問題結果，但是，吾人尚必須注意到一點，就是問題之結果是否精確？是否有誤差？因為如所得結果不精確，而誤差值太大時，則所得之結果便無多大意義了。因此，誤差大小在數值分析法中佔有極重要之地位，吾人必須了解誤差產生原因，設法減少誤差，以得到真正準確之值。

1-2 概 數 (Approximate Number)

概數又稱為某數之近似值（Approximation），可用來代表該數，但不全等於該數。例如，有任意數 0.14573 與 0.1457，或 2.56349 與 2.5635，假若 0.14573 或 2.56349 為真實值（True Value），則吾人可稱 0.1457 為 0.14573 之概數，或 2.5635 為 2.56349 之概數。

某數 N 之概數記為 \bar{N} ，若 e_n 表誤差（Error），則某數與其概數間之關係，又可表示為：

$$N = \bar{N} + e_n \quad (1.2)$$

其實在數值分析法中，經由計算機運算所得之數值，大部份不是極準確之數，而幾乎都是近似值，至少都具有少許之誤差。

1-3 數值捨入（Rounding off）與切割（Chopping）

在計算機中，一般數值均以有限數元（bits）位數表示，由此經計算所得之數值位數，若大於計算機之數元位數時，常產生數值的捨入與切割，對於數值捨入之方法，係遵照下面規則完成：

1 假如欲捨除 (discard) 數位之數值小於 5，則將此數位及其右側所有數位之數值直接捨除，不進位。

2 假如欲捨除之數位數值大於 5，則將此數位及其右側所有數位捨除，然後進位。

3 假如欲捨數位之數值恰好是 5 時，且若

(1). 左邊數位之數值是偶數 (even) 時，則將 5 及其右側所有數位直接捨除，不進位。

(2). 左邊數位之數值是奇數 (Odd) 時，則將 5 及其右側所有數位捨除，並進位。

例如，欲將下面各數取至小數第四位時，依捨入法則為：

原 數	捨入法
0.58432	→ 0.5843 (2 捨除，不進位)
0.17257	→ 0.1726 (7 捨除，進位)
6.91466	→ 6.9147 (6 捨除，進位)
3.28375	→ 3.2838 (5 捨除，進位)
1.31725	→ 1.3172 (5 捨除，不進位)

而切割法，即不論欲捨除數位之數值大小為何，則將此數位及其右側之所有數位一律刪除，且不進位。例如，欲將下面各數取至小數第四位時，依切割法則為：

原 數	切割法
0.58432	→ 0.5843 (2 刪除，不進位)
0.17257	→ 0.1725 (7 刪除，不進位)
6.91466	→ 6.9146 (6 刪除，不進位)
3.28375	→ 3.2837 (5 刪除，不進位)
1.31725	→ 1.3172 (5 刪除，不進位)

一般計算機之 FORTRAN 編譯程式 (compiler)，在建立目的程式 (object program) 時，大多採用切割法，其優點為運算速度快，缺點為誤差比捨入法大。

1-4 有效數字 (Significant figures)

概數中每一個確定的數位稱為有效數字，例如：

0.0002603 → 4位有效數字

0.00026030 → 5位有效數字

2.603×10^5 → 4位有效數字

2.6030×10^5 → 5位有效數字

1.002603 → 7位有效數字

若 \bar{N} 是某數 N 之概數，則 N 與 \bar{N} 能捨至相同之 n 位有效數字，且 \bar{N} 可稱為某數 N 至 n 位有效數字之概數，例如：

$N = 34.655006$ → 34.66

$\bar{N} = 34.65500$ → 34.66

則稱 \bar{N} 近似 N 至 4 位有效數字，或 $\bar{N} = 34.66$ 為 N 之 4 位有效數字概數，又如：

$N = 14.6540032$ → 14.654

$\bar{N} = 14.654326$ → 14.654

則 \bar{N} 近似 N 至 5 位有效數字，或 $\bar{N} = 14.654$ 為 N 之 5 位有效數字概數。

1-5 絶對誤差 (Absolute Errors) 與相對誤差 (Relative Errors)

若 \bar{N} 表某數 N 之概數，則某數 N 之絕對誤差定義為：

$$|E_a| = |N - \bar{N}| = |\bar{N} - N| \quad (1.3)$$

而其相對誤差之定義為：

$$|E_r| = \frac{|N - \bar{N}|}{|N|} \quad (1.4)$$

(例1)：若已知某數 N 及 \bar{N} 之數值如下表所示，求絕對誤差 $|E_a|$ 與相對誤差 $|E_r|$ 之值各為若干？

N	1.333	0.001
\bar{N}	1.334	0.002

(解)：若 $N = 1.333$, $\bar{N} = 1.334$ 時

$$|E_a| = |1.333 - 1.334| = 0.001$$

$$|E_r| = |1.333 - 1.334| / |1.333| = 0.75 \times 10^{-3}$$

若 $N = 0.001$, $\bar{N} = 0.002$ 時

$$|E_a| = |0.001 - 0.002| = 0.001$$

$$|E_r| = |0.001 - 0.002| / |0.001| = 1.0$$

將其列表則為

N	\bar{N}	$ E_a $	$ E_r $	
1.333	1.334	0.001	0.75×10^{-3}	
0.001	0.002	0.001	1.0 (ANS.)

計算 N 之絕對誤差，可用某數 N 減去其概數 \bar{N} ，再求差之絕對值，亦可用概數 \bar{N} 減去某數 N 再求絕對值，但是對相對誤差計算而言，其意義則大不相同，因為在相對誤差之定義中分子，第一個數均被視為“真實值”看待。例如， N 之相對誤差絕不可寫為 $|1.334 - 1.333| / |1.334|$ 或 $|0.002 - 0.001| / |0.002|$ 否則就錯了。另外，在表現誤差之特性方面絕對誤差與相對誤差兩者不同，而以相對誤差較能表現誤差之實際性質。例如，吾人在例1中， $N = 1.333$ 與 $N = 0.001$ 之絕對誤差 $|E_a|$ 均為0.001，但是相對誤差 $|E_r|$ 之值相差就很大了，因為前者 $|E_r| = 0.75 \times 10^{-3}$ ，而後者 $|E_r| = 1.0$ ，可見絕對誤差雖相同，但其相對誤差不盡相同，而可依相對誤差之大小，視 $\bar{N} = 1.334$ 為 $N = 1.333$ 之“較佳(準確/)"近似值，而 $\bar{N} = 0.002$ 為 $N = 0.001$ 之“較差”近似值。

1.6 數列誤差 (Series Errors)

吾人經常將某一個函數展開成一個數列 (Series)，然後將此數列前幾項數值累加起來，當作某函數之近似值，此種利用有限數列項式求某函數之概數，有時候是函數求值中唯一可行之法，但因為只以有限項相加，而捨棄其餘諸項式，故必須估計其誤差。

(1). 泰勒式 (Taylor's Series)

若 $f(x)$ 為一函數， n 為正整數， c 為 $[a, b]$ 區間內之一數，且 $f(x)$ 在 c 處之前 n 階導數均存在，對 $x \in [a, b]$ 時 $f^{(n+1)}(x)$ 亦存在，則必存在一個數 ξ 介於 c 與 x 之間，使得

$$\begin{aligned} f(x) &= P_n(x) + R_n(x) \\ &= \left[\sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(c)}{k!} \cdot (x-c)^k \right] + R_n \\ &= \left[f(c) + f'(c) \cdot (x-c) + \frac{f''(c)}{2!} \cdot (x-c)^2 + \dots \dots \right. \\ &\quad \left. + \frac{f^{(n)}(c)}{n!} \cdot (x-c)^n \right] + R_n(x) \end{aligned} \quad (1.5)$$

在 (1.5) 式中。 $P_n(x)$ 稱為函數 f 在 c 處之 n 次泰勒多項式 (Taylor's Polynomial of f of degree n about c)，而 $R_n(x)$ 稱為其餘式 (Remainder)，餘式有許多種表示法，如：

$$R_n(x) = \int_c^x f^{(n+1)}(t) \cdot \frac{(x-t)^n}{n!} \cdot dt \quad (1.6)$$

$$= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot (x-c)^{n+1}, \quad (c < \xi < x) \quad (1.7)$$

在 (1.6) 式中之餘式為一定積分式，可稱作積分式 (Integral Form) 之餘式，

而(1.7)式之餘式是利用積分均值定理導出，可稱為拉格朗奇型(Lagrange's Form)餘式。在(1.5)式中，若設 $c=0$ 時，則有

$$\begin{aligned} f(x) &= f(0) + f'(0) \cdot x + \frac{f''(0)}{2!} \cdot x^2 + \dots \\ &+ \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \cdot x^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot x^{n+1}, \quad (0 < \xi < x) \end{aligned} \quad (1.8)$$

上面(1.8)式為特殊之泰勒式，又稱為馬克勞林式(Maclaurin's Formula)。同理，由(1.5)式亦可獲得

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + h \cdot f'(x) + \frac{h^2}{2!} \cdot f''(x) + \dots \\ &+ \frac{h^n}{n!} \cdot f^{(n)}(x) + R_n(x+h) \end{aligned} \quad (1.9)$$

其中餘式

$$R_n(x+h) = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} \cdot f^{(n+1)}(\xi), \quad x < \xi < x+h \quad (1.10)$$

$$= \int_0^h \frac{f^{(n+1)}(x+h-t)}{n!} \cdot t^n \cdot dt \quad (1.11)$$

應用泰勒式求某函數之近似值，吾人可由(1.5)式中，得知

$$|f(x) - P_n(x)| = |R_n(x)| \quad (1.12)$$

若吾人能求取某一正數 d ，使(1.12)式有下面關係

$$|R_n(x)| \leq d$$

則有 $|f(x) - P_n(x)| \leq d$ 或 $P_n(x) - d \leq f(x) \leq P_n(x) + d$ (1.13)

即表示 $f(x) = P_n(x) \pm d$ 或 $f(x) \approx P_n(x)$ ，但誤差不大於 d (1.14)

(例2)：試利用 x 之四次泰勒式求 $\sin 0.2$ 之近似值，又誤差若干？

8 數值分析

(解)：令 $f(x) = \sin x$, $c = 0$, 則 $f(0) = \sin 0 = 0$;

$$\text{則 } f'(x) = \cos x, \quad f'(0) = \cos 0 = 1;$$

$$f''(x) = -\sin x, \quad f''(0) = -\sin 0 = 0;$$

$$f'''(x) = -\cos x, \quad f'''(0) = -\cos 0 = -1;$$

$$f^{(4)}(x) = \sin x, \quad f^{(4)}(0) = \sin 0 = 0;$$

$$f^{(5)}(x) = \cos x$$

$f(x)$ 在 $c = 0$ 處之 x 四次泰勒式及餘式分別為

$$P_4(x) = f(0) + f'(0) \cdot (x-0) + \frac{f''(0)}{2!} \cdot (x-0)^2$$

$$+ \frac{f'''(0)}{3!} \cdot (x-0)^3 + \frac{f^{(4)}(0)}{4!} \cdot (x-0)^4$$

$$R_4(x) = \frac{f^{(5)}(\xi)}{5!} \cdot (x-0)^5, \text{ 其中 } 0 < \xi < 0.2$$

則顯然可知

$$P_4(x) = 0 + 1 \cdot x + 0 + \frac{-1}{3!} \cdot x^3 + 0$$

$$= x - \frac{x^3}{6}$$

$$R_4(x) = \frac{\cos \xi}{5!} \cdot x^5, \text{ 其中 } 0 < \xi < 0.2$$

因 $|\cos \xi| \leq 1$ 且 $x = 0.2$, 故

$$|R_4(0.2)| \leq \frac{(0.2)^5}{5!} < 0.000003$$

$$P_4(0.2) = 0.2 - \frac{(0.2)^3}{6} = 0.19867$$

則 $\sin 0.2 = 0.19867 \pm 0.000003$