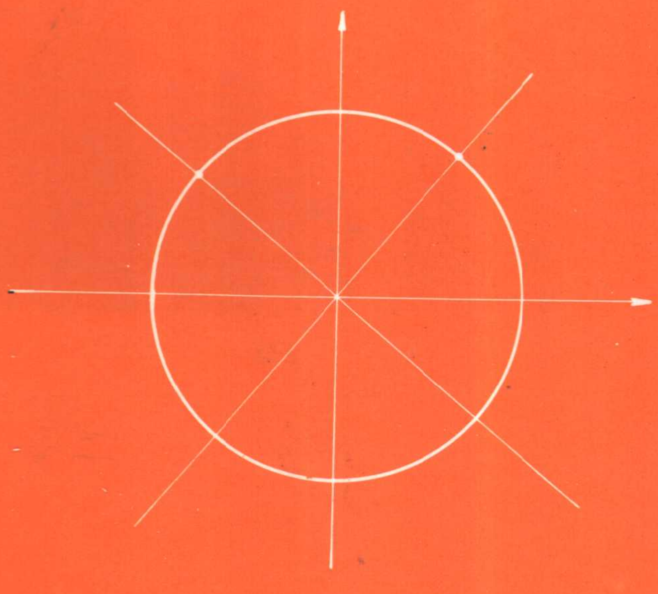
部編大學用書

非線性聯立方程式數值方法

許世壁 編著



國立編譯館主編
中央圖書出版社發行

部編大學用書

非線性聯立方程式數值方法

許世壁 編著

國立編譯館主編
中央圖書出版社發行

非線性聯立方程式
數值方法

實價新台幣貳佰壹拾元整

行政院新聞局出版事業登記證，局版台業字第〇九二〇號

著作權所有人：國立編譯館
編著者：許世壁
出版者：中央圖書出版社
台北市重慶南路一段一四一號
發行人：林在高
發行所：中央圖書出版社
台北市重慶南路一段一四一號
電話：三三一五七二六
三七一九八九三
郵撥：〇〇〇〇九一四—六
印刷所：國順文具印刷行
板橋市中正路216巷2弄13號
中華民國七十七年六月初版

編號：3314

序

求非線聯性立方程的解在近代數學發展中扮演了一個非常重要的角色。例如Brouwer固定點定理，Schauder固定點定理，Banach固定點定理。數學家的主要興趣是在於證明解的存在性甚而至於解的唯一性。近代數學分析之一大部門——非線性泛函分析中的**映射度理論**（Degree Theory）探討了如何證明解的存在性。

由於在應用上如何建立一個可靠的**數值算則**（Numerical algorthm）求非線性聯立方程之數值解，變得越來越需要。**古典的牛頓法**（Newton's method）及**擬牛頓法**（Quasi-Newton's method）一直被廣泛地應用。可是它們需要使用者對問題瞭解很清楚，即大略知道解的位置。換句話說，使用者必須給一個很好的**起始值**（Initial guess），然後**錯了再試**（Trial and error），直到解收斂爲止。爲了避免起始值帶來的困擾，在1960年Davidenko引進了所謂**連續法**（Continuation method），而1978年Chow, Mallet-Paret及Yorke引進了Homotopy method，Smale也引進了所謂的"Continuous Newton method"，使得解非線性聯立方程在數學理論上及數值分析,方法上更向前邁了一大步。

本書最主要的目的即在於介紹這些**全面方法**（Global method）的數學理論及數值方法。爲了讓讀者能夠不需要太多的預備知識，我們在第一章及第二章介紹了數值計算裏的線性聯立方程式及最小平方法。在第三章我們亦介紹了牛頓法及擬牛頓法，它們在以後的數值計算中亦扮演了一個不可缺少的工具。第四章介紹了解非線性聯立方程式$F(x)=0$之數學理論。而第五章是討論如何根據第四章的理論來建立可靠的數值算則。在第六章，我們將第四，五章的結果應用到如何

解兩點非線性邊界值問題。第七章之內容爲如何求出所有聯之複數多項式之數值解。在第八章我們解釋如何寫下

1. 解非線性聯立方程式$F(x)=0$
2. 解聯立複數多項式$P(z)=0$
3. 解兩點非線性邊界值問題

之副程式（Subroutines），而且爲了使用者方便起見我們附錄了這三個副程式。

最後，我首先感謝Michigan state University的李天岩教授。他於1982年暑假在交通大學應數系開了數值分析研討會引發了我對這些題目的興趣而且多年來蒙他不厭其煩地與我討論很多有關本書之細節。對於交通大學同事之鼓勵我亦感激，尤其鄭國順教授、王丕承教授在精神上的支援。我的學生彭成竹，詹克己及吳仲仁等三位同學一，二年來在我的指導下完成了這些副程式及其他結果。他們的功勞與苦勞是不可磨滅的。還有本書是以筆者1983年在交通大學應用數學研究所開的數值分析課程之講義爲構架所寫成的。我要謝謝交大研究生給我的建議。最重要的是我太太唐台立一年多來的愛心與鼓勵俾使本書得以完成。我亦感謝國立編譯館的大力支持，使得本書得以出版。

許 世 壁

識於清華大學應數所

目　錄

第六章 兩點邊界值之數值方法

第七章 聯立多項式之數值方法

第八章 計算機程式集

第一章

線性聯立方程式

§1：導 論

本書的前面二章所要討論的是一些基本的**數値線性代數**（Numerical linear algebra），其內容分別爲：

1. **線性聯立方程式**

$$Ax=b\ ,A\in R^{n\times n}\ ,\ x\ ,\ b\in R^{n}$$

之數値解法。

2. **線性最小平方法**（Linear least square method）亦即求：

$$\min_{x\in R^n}\|Ax-b\|_2\text{，在此}$$

A 爲一 $m\times n$ 之矩陣，

b 爲一 $m\times 1$ 之向量，而

x 爲一 $n\times 1$ 之向量。

爲什麼本書的目的是在解非線性聯立方程：

$$F(x)=0\ ,\ F:R^n\longrightarrow R^n$$

而必須引進這些線性方程式的解法呢？在此我們必須強調數値線性代數的重要性。除了它本身用途很廣外，在數値分析領域的其他學科也直接或間接地應用到數値線性代數的方法與觀念。事實上，數値線性代數是數値分析的靈魂。如果讀者已經熟悉第一章及第二章之內容，可以直接從第三章念起。

現在我們考慮下列線性聯立方程式：

$$\begin{cases} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots\cdots\cdots+a_{1n}x_n=b_1\\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots\cdots\cdots+a_{2n}x_n=b_2\\ \vdots\\ a_{n-1,1}x_1+a_{n-1,2}x_2+\cdots\cdots\cdots+a_{n-1,n}x_n=b_{n-1}\\ a_{n,1}x_1+a_{n,2}x_2+\cdots\cdots\cdots\cdots+a_{n,n}x_n=b_n \end{cases} \tag{1-1}$$

如果我們用矩陣的表法，則（1-1）可以簡寫爲：

$$Ax=b \qquad (1\text{-}2)$$

$$A=\begin{bmatrix} a_{11}, a_{12}, \cdots\cdots, a_{1n} \\ a_{21}, a_{22}, \cdots\cdots, a_{2n} \\ \\ \\ a_{n1}, a_{n2}, \cdots\cdots, a_{nn} \end{bmatrix}, \quad x=\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b=\begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

用非數值，即純數學的方法來求（1-2）的解 x，有下列二種方式：

1. x 可寫爲 $x=A^{-1}b$，所以我必須先將 A 之**反矩陣**（Inverse matrix）A^{-1} 求出，然後再算 $A^{-1}b$。

2. 利用所謂的**克拉瑪法則**（Cramer's rule），算 $x_j=\dfrac{\det A_j}{\det A}$，在此 det 代表行列式，而

$$A_j=\begin{array}{c} \begin{bmatrix} a_{11} & b_1 & a_{1n} \\ a_{12} & b_2 & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & b_n & a_{nn} \end{bmatrix} \\ \text{第 j 行} \end{array}$$

以後我們會瞭解這二種方法不僅浪費計算時間而且會產生所謂的**數值不穩定**（Numerical instabilty）的現象。

現在我們依 $Ax=b$ 之形式，將問題歸納成二大類：

(1) 如果 A 爲一 $n\times n$ 之矩陣，$1\le n\le 300$，我們稱 A 爲一**稠密矩陣**(Dense matrix)。

(2) 如果 $n\ge 300$，而且矩陣 A 裏大部份元素爲零，則我們稱 A 爲**一稀疏矩陣**（Sparse matrix）。

通常解 $Ax=b$，我們有下列二種方法：

(1)**直接方法**(Direct method):即**高斯消去法**(Gaussion elimination),用於解稠密矩陣。如果配合**圖形學理論**(Graphic theory),亦可用於解稀疏矩陣之問題。[8]

(2)**間接方法**(Indrect method):即**迭代計算法**(Iterative method),通常只用於解稀疏矩陣之問題。

由於計算機之容量有限,我們無法將稀疏矩陣的每一個元素存入計算機裏,所以我們必須善用稀疏矩陣裏有很多零元素之性質,設計適當的算則(Algorithm)來解問題。從 1970 年以後,稀疏矩陣變得越來越重要。在工、商業界碰到的問題皆爲稀疏矩陣。而稠密矩陣之解法差不多已經塵埃落定。現在我們列舉一些解 $Ax=b$ 之應用:

1. **最佳化問題**(Optimization problem):如**線性規劃**(Linear programming)及**非線性規劃**(Nonlinear programming)。
2. **非線性聯立方程式**:如**牛頓法**(Newton's method),**擬牛頓法**(Quasi-newton's method)及**同倫方法**(Homotopy method)等。
3. **偏微分方程之數值解**(Numerical solutions in partial differential equations):用**有限差分法**(Finite difference method)或**有限元素法**(Finite element method)來解偏微分方程時,必導出 $Ax=b$ 之問題,而且通常 A 爲一稀疏矩陣。

最後,我們列舉一些解 $Ax=b$ 常用的**計算機程式集**(Computer package):

1. Linpack:由美國**阿崗實驗中心**(Argonne Nation Lab)。所發展出來的**程式集**(Subroutines)專門解 $Ax=b$,讀者可參考[9]。
2. IMSL:即International mathematics and statbtic library,包括各式各樣常用之程式,其信賴度及聲譽非常好。

§2:高斯消去法

什麼是高斯消去法?我們舉下列例子來說明:

例一：

$$
\begin{aligned}
x_1 + 2x_2 + x_3 &= 0 \cdots\cdots\cdots\cdots ① \\
2x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 3 \cdots\cdots\cdots\cdots ② \\
-x_1 - 3x_2 &= 2 \cdots\cdots\cdots\cdots ③
\end{aligned}
\qquad (2\text{-}1)
$$

我們以矩陣之表法來代替(2-1)並且消去②及③式中之x_1項之係數:

$$
\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \\ -1 & -3 & 0 & 2 \end{array}\right]
\xrightarrow[③-(-1)\times①]{②-2\times①}
\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \end{array}\right]
$$

$$
\xrightarrow{③-½\times②}
\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & ½ & ½ \end{array}\right]
\qquad (2\text{-}2)
$$

由上述表法，我們很容易知道高斯消去法的精神是將第二及第三個方程式裏的x_1項之係數“殺掉”變成零。而後在新的聯立方程式中將第三個方程式裏的x_2項之係數變成零。簡而言之，我們將原來的$Ax=b$，經過一連串的**初等列運算**(Elementary row operations)，變成一個結構比較簡單的聯立方程式$Ux=g$，在此U爲一**上三角形矩陣**(Upper triangular matrix)，

$$
U = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & ½ \end{bmatrix},\ g = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ ½ \end{bmatrix}。
$$

然後，我們直接求$Ux=g$之解。因爲U爲一上三角形矩陣，我們可以利用所謂的“**倒退代換法**”(Backward substitution)來解x。在本例裏，即

$$
\left\{\begin{aligned}
x_1 + 2x_2 + x_3 &= 0 \\
-2x_2 + x_3 &= 3 \\
½\, x_3 &= ½
\end{aligned}\right.
$$

所以，$x_3=1$，$x_2=(3-x_3)/-2=-1$，$x_1=-2x_2-x_3=1$。在此我們順便定義一些常用的名詞。我們稱(2-2)式中的第一個矩陣裏的元素$a_{11}^{(1)}=1$及第二個矩陣裏的元素$a_{22}^{(2)}=-2$爲**定位元素**(Pivot)。定位元素必須爲非零之數，否則高斯消去法無法進行。我們稱$m_{21}=2$，$m_{31}=-1$，$m_{32}=½$爲**乘數**(multiplier)，他們在(2-2)式中代表之意義爲$m_{21}=a_{21}^{(1)}/a_{11}^{(1)}=2/1$，$m_{31}=a_{31}^{(1)}/a_{11}^{(1)}=-1/1$，$m_{32}=a_{32}^{(2)}/a_{22}^{(2)}=-1/-2$。

高斯消去法最重要的含義在於“**LU 分解式**”（*LU* decomposition），換句話說，如果 $Ax=b$ 能夠用高斯消去法變成 $Ux=g$ 的話，則矩陣 A 可以分解成 $A=LU$，L 及 U 分別爲一 $n\times n$ 之下，**上三角形矩陣**（Lower, upper triangular matrix）。我們在此用例一來說明這個觀念。

首先讓我們來觀察例一中消去法的第一步，

$$A=\begin{bmatrix}1&2&1\\2&2&3\\-1&3&0\end{bmatrix}\xrightarrow{②-2\times①}A_1=\begin{bmatrix}1&2&1\\0&-2&1\\1&-3&0\end{bmatrix}$$

矩陣 A 與 A_1 之間的關係 用矩陣的乘法來表示，可得到下列關係式：

$$A_1=\begin{bmatrix}1&2&1\\0&-2&1\\1&-3&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\-2&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2&1\\2&2&3\\-1&-3&0\end{bmatrix}=E_{21}A,$$

在此

$$E_{21}=\begin{bmatrix}1&0&0\\-m_{21}&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\tag{2-3}$$

同理，我們觀察例一中消去法的第二步，我們有下列關係式：

$$A_2=E_{31}A_1\tag{2-4}$$

$$E_{31}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\-(-1)&0&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\-m_{31}&0&1\end{bmatrix},$$

$$A_2=\begin{bmatrix}1&2&1\\0&-2&1\\0&-1&1\end{bmatrix}。$$

從消去法的第三步，我們得到：

$$A_3 = U = E_{32} A_2 \text{ ,} \tag{2-5}$$

在此

$$E_{32} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -m_{32} & 1 \end{bmatrix}$$

所以由（2-3），（2-4），（2-5）我們得到矩陣U與矩陣A之關係式：

$$U = E_{32} E_{31} E_{21} A \tag{2-6}$$

我們稱E_{21}，E_{31}，E_{32}這些矩陣為**基本下三角矩陣**（Elementary lower triangular matrices）。這些矩陣與單位矩陣 I 所不同的地方只在於第（i，j）個位置，E_{ij}之元素為$-m_{ij}$而I之元素為零。由於E_{ij}有下列非常好的性質：

$$(E_{ij})^{-1} = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} 1 & \ddots & & \bigcirc \\ & & 1 & \\ \bigcirc & -m_{ij} & \ddots & 1 \end{bmatrix}^{-1} & \begin{matrix} \\ \\ \leftarrow i \end{matrix} \\ \begin{matrix} \quad\uparrow \\ \quad j \end{matrix} & \end{array} = \begin{bmatrix} 1 & \ddots & & \bigcirc \\ & & 1 & \\ \bigcirc & m_{ij} & \ddots & 1 \end{bmatrix}$$

所以由（2-6），我們得到

$$A = E_{21}^{-1} E_{31}^{-1} E_{32}^{-1} U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ m_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & m_{32} & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{bmatrix} U = LU$$

說明 1 ：

如果我們將高斯消去法寫成算則的形式在計算機上解$Ax = b$時，對於那些被消去變成零的元素，我們不必用計算機去算而自動變

爲零。由於計算機本身對每一個數字均有其有效數位，如 $1/3=0.3333\cdots3$，如果您用計算機去算，有時反而無法得到零。因爲這些零以後我們不再用到，所以我們將乘數 m_{ij} 存放在這些零的位置，而不必要爲這些 m_{ij} **增加位置**（Storage）。

現在我們將例 1 推廣到一任意的 $n\times n$ 矩陣 A 及 $n\times 1$ 向量 b。下面我們描述解 $Ax=b$ 之高斯消去法算則。

算則 1：

目　的：將 $Ax=b$ 變成 $Ux=g$，然後用“倒退代換”法解 $Ux=g$。

演算法：令 $A^{(1)}=A=(a_{ij}^{(1)})$，$b^{(1)}=b=(b_1^{(1)},\cdots,b_n^{(1)})^T$。

步驟 1：

假設 $a_{11}^{(1)}\neq 0$。

定義乘數

$$m_{i1}=\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}\ ,\ i=2,\cdots\cdots,n$$

將第 2 個到第 n 個方程式中的 x_1 項係數消去，得

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-m_{i1}a_{1j}^{(1)}\ ,\ i\ ,\ j=2,\cdots\cdots,n$$
$$b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-m_{i1}b_1^{(1)}\ ,\ i=2,\cdots\cdots,n$$

而 $A^{(1)}$ 及 $b^{(1)}$ 裏的第一列保持不變，所以

$$A^{(2)}x=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)}\cdots\cdots\cdots a_{1n}^{(1)} & x_1 \\ 0 & a_{22}^{(2)}\cdots\cdots\cdots a_{2n}^{(2)} & \vdots \\ \vdots & \vdots \qquad\qquad \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} \qquad\quad a_{nn}^{(2)} & x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}=b^{(2)}$$

步驟 2：

假設 $a_{22}^{(2)}\neq 0$。

應用步驟 1 之方法到下列 $(n-1)\times(n-1)$ 之矩陣 $A^{(2)}$ 及方程式:

$$\begin{bmatrix} a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

準備消掉 x_2 項之係數。

步驟 k：

$1 \leq k \leq n-1$，假設 $A^{(k)}x = b^{(k)}$ 即

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & \ddots & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & \bigcirc & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

假設 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，令乘數

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}, \quad i = k+1, \cdots\cdots, n \tag{2-7}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, \quad i, j = k+1, \cdots, n \tag{2-8}$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, \quad i = k+1, \cdots \quad n \tag{2-9}$$

經過 $n-1$ 個步驟後，我們得到式子 $A^{(n)}x = b^{(n)}$，$A^{(n)} = U$，

$$Ux = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & \ddots & & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix} = g$$

利用“倒退代換法”來解 x，得