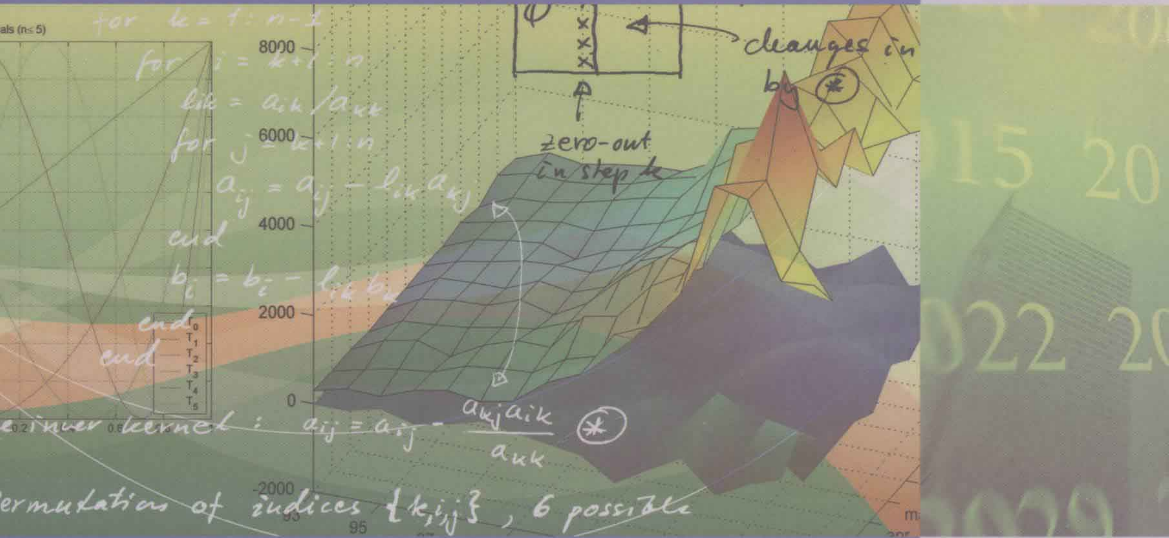
Applied Numerical Analysis
Using MATLAB 2/E



應用數值分析－使用MATLAB

（精要版）（第二版）

Laurene V. Fausett 原著

管金談、吳邦彥、江大成 編譯

全華圖書股份有限公司

應用數値分析－使用 MATLAB（精要版）（第二版）

Applied Numerical Analysis Using MATLAB 2/E

Laurene V. Fausett　原著
管金談、吳邦彥、江大成　編譯

全華圖書股份有限公司　印行

PEARSON
台灣培生教育出版股份有限公司
Pearson Education Taiwan Ltd.

國家圖書館出版品預行編目資料

應用數值分析—使用 MATLAB (精要版)(第二版) /
Laurene V. Fausett 原著 ; 管金談, 吳邦彥, 江大成
編譯. -- 初版. -- 臺北市 : 臺灣培生教育出版 ;
臺北縣土城市 : 全華圖書發行, 2009.07
面 ; 公分
精要版
參考書目 : 面
譯自 : Applied Numerical Analysis Using
MATLAB, 2nd ed
ISBN 978-986-154-581-3(平裝)

1. 數值分析 2. 資料處理

318 98009719

應用數值分析—使用 MATLAB (精要版)(第二版)

Applied Numerical Analysis Using MATLAB 2/E

原　　著　Laurene V. Fausett
編　　譯　管金談 (南開科技大學 / 車輛與機電產業研究所暨機械工程系)、
　　　　　吳邦彥 (德霖技術學院 / 機械系)、江大成
執行編輯　蔡瓊慧
出 版 者　台灣培生教育出版股份有限公司
　　　　　地址：台北市重慶南路一段 147 號 5 樓
　　　　　電話：(02) 2370-8168
　　　　　傳眞：(02) 2370-8169
　　　　　網址：http://www.pearson.com.tw
　　　　　E-mail：Hed.srv.TW@Pearson.com
發 行 所　全華圖書股份有限公司
總 代 理　全華圖書股份有限公司
　　　　　地址：23671 台北縣土城市忠義路 21 號
　　　　　電話：(02) 2262-5666 (總機)
　　　　　傳眞：(02) 2262-8333
　　　　　網址：http://www.chwa.com.tw | www.opentech.com.tw
　　　　　E-mail：book@chwa.com.tw
　　　　　郵政帳號：0100836-1 號
初版一刷　2009 年 07 月
I S B N　978-986-154-581-3 (平裝)
圖書編號　06084
定　　價　新台幣 480 元

前言

Preface

在數學的各種領域，數值計算是最古老的其中之一。它同時也是和現實世界關係最密切者之一。古代的天文學家計算出四季的變動和夏至、冬至；現代的數學模型，則可做出高度精確的天氣預測。古代巴比倫人用簡單的迭代法計算出平方根的近似值；今天則有許多功能強大的方法可求解極端複雜的非線性方程組。各種數值方法的實用性取決於可用的計算工具；簡單的方法可快速獲得小型問題的解，而更爲精密複雜的方法則適用於大型科學計算。

本書《*Applied Numerical Analysis Using MATLAB*》對數值分析中的古典方法做出了清楚的解釋；以這些方法爲基礎所衍生出來的新的、先進的方法，則於各章的後段介紹。本書的標題傳達了幾個關於本書撰寫方式的重點。

首先，本書標題明白指出，教材內容以應用爲導向。每一章 (除第一章外) 都有相同的配置。在每一章我們都會先說明該章所介紹之方法可用於何種應用問題。在介紹每一種方法之前都會先介紹該方法如何作用，亦即，如何使用它。接著，會介紹一個可執行計算的數值程序 (簡單的電腦程式)，然後再考慮方法背後的理論。整章裡各個例題，包括將該方法用於簡單的假設性問題 (說明該方法的使用方式) 以及較實際的應用 (以一種較廣泛的方式闡釋該方法)。最後，各章後面的習題包括了方法練習、利用所介紹的方法求解各種科學或工程領域中的應用問題、進一步在計算層面探討各方法、並延伸讀者的理解程度 (較偏重理論性)。

其次，「數值分析 (numerical analysis)」一詞，意指，對各種問題，我們的目的在求得準確，但在大多數情形下只是「近似」的數值解。「數值分析」、「數值方法」、「數值技術」及「科學計算」等各個名詞，其意義上的微小差別在於問題的規模、所用之計算資源，以及我們所感興趣的是「如何用」還是「爲何能用」和「何時能用」。在本書中，對每個方法先做偏向應用的介紹，再做分析，而建議的延伸閱讀則提供了深入的理論說明。「理論引導實用，實用激發理論 (Theory guides practice; practice inspires theory)」。在許多例子中，科學家或工程師發展出計算方法以解決問題，之後再由數學家爲它們建立起穩固的理論基礎。有一句古諺說：「沒有實用的理論是無效的；實用卻沒有理論是盲目的 (theory without practice is sterile (pointless); actice without theory is blind)」。在本書中，我們希望納入夠多的理論，使讀者不會盲目的使用方法，同時避免過多的理論說明以免讓讀者茫無頭緒。

時至今日，可用於計算的工具包括紙筆、掌上型計算機、桌上型個人電腦、一直到功能強大的超級電腦，再加上平行運算能力。也有各種的專業套裝軟體，可求解各種數值問題。在本書中，有幾個原因讓我們選擇 MATLAB 作爲計算環境。將數值方法寫成 MATLAB 的電腦程式，和將數值方法寫成算則或虛擬程式碼，是一樣容易閱讀與理解的。MATLAB 具有很方便的繪圖功能。對於大多數重要的數值方法，MATLAB 都有高品質的內建函數。最後，MATLAB 的功能足以處理大型問題。它的向量——矩陣的型式，是科學計算的絕佳基礎，包括平行計算算則。

雖然瞭解並使用專業軟體是數值計算的重要一環，但應用數學家、科學家或工程師不應該依賴罐裝的程序。我在 Laramie 能源科技中心的一位同事曾說過：「好的科學家吹製自己要用的試管，解自己的微分方程」。以同樣的思維，好的數值分析師寫自己的電腦程式，並證明自己的理論。

在寫作第二版時，作者有機會就內容與表現方式來改進。在本書中，我們重新安排了某些主題的順序，並納入更多科學計算所用的方法，其中一些是 MATLAB 內建函數所用的方法。另一項有關內容呈現方式的重要改進，則爲本書的實體配置方式。我們非常小心的，以使得書中的例題、範例程式及其它素材都位在同一頁，至少也是在相鄰的對頁。

因爲數值方法的探討涵蓋了極大的數學領域，任一本書想要維持合理的厚度，就必須慎選要納入的主題。若作爲一學期的課程，有多種取捨方式。一門課可以涵蓋多種類型問題的基本方法，或對少數方法做較深入的探討。可利用本書所列的示範函數、MATLAB 的內建函數以及同學生們用 MATLAB 或其它電腦語言所撰寫的程式，來探討各種問題。

數值分析中的標準課題，有時可區分爲數值線性代數和數值微分方程兩大領域。但這種分法會遺漏許多重要的範疇。以一種較爲開闊的觀點來看，本書所涵蓋的內容

可區分為：建立基礎 (第 1 章)、數值微積分與微積分之前 (第 2、7 及 11 章)、數值線性代數 (第 3–6 章)、近似與內插 (第 8 章)。

各章所包含的內容如下：

- 第 1 章　奠定本書其餘各章之基礎，包含說明用範例、相關基礎知識、一些基本議題和使用 MATLAB 計算與寫程式的說明。
- 第 2 章　則討論求單變數非線性函數零點，以及此種函數的最小化。
- 第 3–6　章處理屬於數值線性代數的課題。包含以直接法解線性方程組、矩陣的 LU 及 QR 因式分解、求特徵值與特徵向量的數值方法以及用迭代法解線性方程組。
- 第 7 章　考慮多變數非線性函數。討論了求非線性函數或非線性方程組零點，以及求非線性函數最小值的方法。
- 第 8 章　涵蓋了用於近似與內插的數值方法。探討多項式與分段多項式內插。

對於教材的大部份而言，一個包含對微分方程與線性代數做介紹的微積分課程就可提供充份的基礎知識。對於包含較深之線性代數的方法 (特別是求特徵值的 QR 法)，則最好先修過線性代數課程。

對本書做出貢獻的人太多，無法在此一一列舉。我在佛州理工學院、海軍研究院、南卡愛肯大學、喬治亞南方大學、和德州 A&M–Commerce 的同事們，都對我提供支持、鼓勵和建議。我同時也要感謝我在世界各地的同事們，他們對本書的第一版提供回饋。同時感謝審查者，他們的批評與建議幫助本書以更精緻的方式呈現。另外要特別感謝 Jim Ortega 和 Gene Golub 所提出的批評、建議和鼓勵。我的學生們也以不同的方式對本書做出貢獻；本書是寫給他們的。

衷心感謝 Prentice Hall 的編輯。我要特別感謝第一版的編輯 Scott Disanno、第二版的編輯 Daniel Sandin 和本版的管理編輯 David George。特別感謝 PreTeX, Inc 的 Paul Mailhot，以他專業的技術支援本書的 LaTeX 檔案的印製。

我也要感謝 Fr. James 對封面的設計。最後，也是最重要的，我要感謝我的先生兼同事 Don Fausett，感謝他的耐心與支持。

LAURENE V. FAUSETT

Texas A&M University–Commerce

目錄

Contents

Chapter 1

基礎

由古老的年代開始，數學研究中很重要的一部份，就是為眞實世界中的問題尋求解答。許多我們感興趣的問題，往往無法找到確切解，或是無法藉以提供簡明的答案。管用的答案可能來自反覆計算所求得的近似解。

許多數值方法其實歷史悠久。有證據顯示，巴比倫人 (3700 多年前) 已經知道如何求出二次方程式的數值解，以及整數平方根的近似值。他們也使用線性內插的方法來計算複利的問題。

在中國漢朝 (約 2000 年前) 一本叫《**九章算術**》的書中，就出現了一個求解線性方程組的例題，使用的方法我們現在稱做高斯消去法；該書中也用了矩陣的符號。著名的德國數學家高斯 (Carl Friedrich Gauss，1777–1855) 指出，該方法在他當時已廣為人知。

中國宋朝 (960–1279) 的數學家，將《**九章**》中的連續近似法加以一般化，以計算高次方程式的數值解。用於求解線性方程組的方法，也被延伸到求解高次方程組 (類似於西方世界在 19 世紀的成果)。

在希臘的數學中，則包含了用許多已知面積的小區塊，來求大範圍面積近似值的方法 (並有類似的方法以計算體積)。在阿基米德寫給 Eratosthenes 的一封信中 (約西

元前 250 年)，他描述了這些方法；該信於 1906 年被發現。

中東的學者在承接了希臘數學的傳統之後，著重於計算與實用兩方面。距今 900 年前的奧瑪·開陽 (Omar Khayyam)，在他代數的著作中對三次方程式做了系統性的探討。[他更出名的或許是身爲《魯拜詩集 (*Rubaiyat of Omar Khayyam*) 》的作者]。另一位波斯數學家 Jemshid Al-Kashi (約卒於 1436 年)，用迭代和三角學的方法解出三次方程式，同時他也瞭解求解一般化代數方程式的方法，也就是現在通稱爲 Horner 法的解法。W.G.Horner 在 1819 年發表此一方法，他應該不知道此種解法的歷史淵源。

李奧納多·費布納其 (Leonardo Fibonacci, c. 1200) 證明某些三次方程式不能用平方根求解，但可求得非常準確的近似解。

蘇格蘭人納皮爾 (John Napier) 在 1614 年出版了第一個對數表；並由 Henry Briggs 於 1624 年加以更定 (依據納皮爾的建議)，這是一件了不起的計算工具。

在整個發展歷史中，數學和天文學一直關係密切。哥白尼革命的領導者跨入多個新的數學領域。例如，克卜勒 (Johannes Kepler) 於 1615 年發表了《 **酒桶的新固體幾何** (New Solid Geometry of Wine Barrels) 》一書，書中利用幾何近似的方法以計算迴轉體的體積。

有一個非常有名的求方程式根的方法，叫做牛頓法 (Newton’s method) (或稱 Newton-Raphson 法)，它其實是將一個發表於 18 世紀初期求多項式根的方法加以一般化的結果。依據近來的研究，辛普森 (Thomas Simpson) [以求定積分之近似解的辛普森法則 (Simpson’s rule) 而聞名] 將牛頓法推廣至可用於更一般化的函數，並發表於 1740 年。

泰勒的方程式 (Taylow’s formula) 是許多數值方法的理論基礎。泰勒 (Brook Taylor) 在他 1715 年的著作中首度介紹了泰勒多項式；餘項 (remainder term) 的首度出現則是在拉格朗治 (Joseph Louis Lagrange) 1797 年的著作中。

Runge-Kutta 法 (Runge-Kutta method) 是在求常微分方程組的數值解時，最常使用的方法之一，這方法是在 100 年前，由德國的應用數學家 Carl Runge (1856–1927) 和 M.W. Kutta (1867–1944) 所創。Runge 同時也因爲他在 Zeeman 效應 (Zeeman effect) 的研究而得名，而 Kutta 則因爲他在空氣動力學的翼剖面昇力理論的貢獻而著名。

我們今日所用的計算機，依循了帕斯卡 (Blaise Pascal) 之加法機器 (1642)，以及

萊布尼茲 (Gottfried Wilhelm Leibniz) 的乘法機器 (1671) 中所引入的基本設計。在另一方面，電腦的起源通常可回溯到 Charles Babbage 的分析引擎 (analytical engine) (發展於 1830 年代)。不過，基本上整個個人電腦 (PC 或 Mac) 的開發是起自 1980 年前後。

雖然在開發電腦軟體時，前面提到的各種古典數值方法仍很重要，但現在的計算多偏好使用較新的發現或改進的方法。在此彙整其中一些，並加註該方法的主要發表日期。在本書的相關章節中會對它們作更詳細的討論。要求單一方程式的根，套裝軟體通常會使用較新的方法，如 Brent 的方法 (Brent's method) (1973) 或 Ridders 的方法 (Ridders's method)(1979)。對於條件式線性最佳化問題，標準的方法是單體法 (simplex method) (1948)。對於一般性非線性最小平方問題，Levenberg-Marquardt 方法 (Levenberg-Marguardt method) (1963) 漂亮的結合了兩種較老的方法。

各種程式庫或套裝軟體中用以求特徵值及特徵向量的常式，通常是依據 James Wilkinson 和 Christian Reinsch 所發表的常式 (1971)。在函數內插方面，由 Carl deBoor 所開發的三次雲形線 (1978) 是標準方法。至於有理函數的內插，Bulirsch-Stoer 算則 (1980) 是很重要的。經由 James Cooley 和 John Tukey 在 1960 年代的研究，人們才普遍瞭解到快速求出離散傅利葉轉換 (DFT) 的方法；不過 G. C. Danielson 和 C. Lanczos 也發展出類似的方法 (在 1940 年代初期)。事實上，以高斯 (1805) 爲首，大約有一打的學者，分別在不同年代各自發展出有效的 DFT 方法。關於求導數、積分值、解常微分及偏微分方程的數值方法，在近年亦有無數的創新。

對於使用數值方法的科學家或工程師，他們所面對的問題，古今並無多大差異，但是因爲可用的計算資源不同，各種考慮因素的相對重要性也隨之改變。最主要的兩項考慮是所須的計算量，以及結果的精確度。求解問題所用的數值方法可劃分爲直接法與迭代法兩類。直接法，例如高斯消去法，經由固定的計算步驟以獲得解答。而迭代法則會產生一序列的近似解 (依據設計，在適當的條件下它會收斂到眞實的解)。

如果用全眞 (exact) 的算術來進行直接法的所有計算，應可得到全眞的結果，例如高斯消去法，但數值的捨入 (round off) 所造成的影響可能甚大。同時，因爲現在的實際應用中所處理的線性方程組，通常都是非常大，在爲此類問題選擇解法時，計算效率是一個重要因素。其它的直接法，例如數值積分的方法，則是以可求得其積分的近似函數 (例如泰勒多項式) 來取代要求解的函數。此種方法的精度，取決於保留了幾項的泰勒級數。

對於迭代法，則必先瞭解收斂的問題。連續近似的答案，是否眞的會逼近眞實的答案？如果會，多快？如何決定甚麼時候要停止迭代過程？

在下一節中，我們將介紹三個問題，用以說明數值方法的基本類型。然後我們會歸納出一些相關的基礎知識，並介紹一些重要事項，如收斂和計算量等，它們在以後的章節會一再出現。在本章的最後我們將介紹 MATLAB 的功能，它是本書所採用的程式編撰環境。

在本書中，各種數值方法將依據它們所處理的問題型態而加以分組。求解單變數非線性方程式以及線性或非線性方程組的方法，分置於第 2、3 章及第 6、7 章。在第 4 及 5 章則說明一些來自數值線性代數的基本方法。泛函近似，包括內插、最小平方近似，將於第 8 章討論。

❖1.1 說明用範例

對於須要求數值解的各種問題，我們用以下三個例子來說明不同問題的類型。這些例子中的問題都很簡單，都是可以用一般的代數或微積分求得確切解的問題。但是，很多和它們密切相關的問題是找不到確切解的。它們同時也用來介紹一些將會一再出現的議題，例如「此方法是如何作用的？」、「它的效果有多好？」、「何時使用？」、「是否有更好的方法？」等等。

❑1.1.1 非線性方程式

雖然我們可以用二次式公式來求出二次函數，例如 $f(x)=x^2-3$ ，的零點，但對絕大多數的非線性函數而言，類似的方法並不存在。求三次函數之零點的公式就比二次式公式複雜多了，而 Niels Henrik Abel (1802–1829) 更證明了，對五次多項式根本不存在此種公式。(在 Smith，1959 可找到 Abel 論文的英譯。)

有許多不同方法可求得非線性函數零點的近似值。最簡單的是二分法 (bisection method)，它是一種系統化的搜尋方法；正割法(secant method)、錯位法 (false-position method) 及牛頓法 (Newton's method) 則使用直線來近似所要求解的函數。更複雜的方法則可使用二次式來近似所要求解的函數，或結合不同的方法。每一種方式都會產生一序列的近似值。在選擇方法的時候，一項重要的考慮是，這些近似值趨近所要答案的速度有多快。而每一次迭代所需的計算量也同樣重要。