FORTRAN77
數値計算入門

張兆旭　譯

FORTRAN77
數值計算入門

張兆旭　譯

儒林圖書公司 印行

FORTRAN 77 數值計算入門

譯　者：張兆旭
發行人：楊鏡秋
出版者：儒林圖書有限公司
地　址：台北市重慶南路一段 111 號
電　話：3812302　3110883　3140111
郵政劃撥：0106792-1 號
吉豐印刷廠有限公司承印
板橋市三民路二段正隆巷 46 弄 7 號
行政院新聞局局版台業字第 1492 號

中華民國七十四年三月初版

定價新台幣　180　元正

序

近年來個人電腦的發展非常驚人，隨之電腦的應用領域也大爲擴大，令人目不暇給。在科學計算的領域，從前解聯立方程式或微分方程式是一件大事，經常可看到一些人爲此日夜廢寢忘食，弄得身心交瘁。如今只要利用電腦廠商或軟體公司提供的程式庫，程式設計就變成輕而易舉的事了。

利用這種像「黑箱」一樣的數值計算的程式庫，即使不甚清楚解題步驟，也必須充分認識程式庫的功能、界限。也就是說，爲了避免數值計算法的誤用，也需要對解題步驟有某一程度的認識。

本書就是爲了使讀者多少了解解題步驟，進而能夠運用自如，利用最新的FORTRAN77，深入淺出地介紹解題步驟。因此，爲了徹底說明數值分析的計算步驟，所舉的FORTRAN程式，不論數質分析所用的符號或步驟都儘可能以淺近的形式表示，而省略了諸如講求計算效率或錯誤處理一類使解題步驟變成複雜的因素。

本書重點在說明上述的步驟，因此，有關公式的誤差、定理的證明一概付諸闕如。對嚴密的數值分析理論有興趣的人，請參考其他有關的專門書籍。

本書爲欲學數值分析的人或學生的入門書，若能供一般在微電腦或個人電腦上設計程式的人參考之用，則是筆者的一大榮幸。

本書執筆之際，承蒙產業能率大學味村重臣教授多方指導；出版時，歐姆出版社同仁也鼎力相助，功不可沒，在此一併致謝！

目　　錄

第1章

非線性代數方程式的解法

在這一章中，除了高次代數方程式留待第2章處理之外，將介紹分數方程式、超越方程式等非線性代數方程式的解法。

代數方程式的解法如下：

(1) 求根的近似值的方法：Bernoulli 法、Graeffe 法等。

(2) 已知根的近似值時，增高其精確度的方法：Regula-Falsi 法、反覆法、Newton-Raphson 法等。

在這裏介紹(2)的方法。

1.1 反覆法

試考慮逐次逼近求下面方程式的實根。

$$f(x)=0 \tag{1·1}$$

將式（1.1）改寫成如下形式

$$x=F(x) \tag{1·2}$$

這是從近似根 x_0 開始逐次如下求近似根的方法。

$x_1=F(x_0)$

$x_2=F(x_1)$

$x_3=F(x_2)$

一般逐次進行如下的反覆式。

$$x_{k+1}=F(x_k) \qquad (k=0,1,2,\cdots\cdots) \tag{1·3}$$

進行到滿足下面收斂判定條件

$$\frac{|x_{k+1}-x_k|}{|x_k|}\leq\varepsilon \qquad (\varepsilon:\text{收斂判定常數}) \tag{1·4}$$

要使式（1·3）的反覆式收斂的條件假定當式（1·1）的根爲 α 時，則由式（1·2）

$\alpha=F(\alpha)$

也可寫成下面的式子

$$\alpha-x_{k+1}=F(\alpha)-F(x_k) \tag{1·5}$$

若 $F(x)$, $F'(x)$ 在區間 $[\alpha, x_k]$ 連續，則根據平均值定理，式（1·5）變成

$$\begin{aligned}\alpha-x_{k+1}&=F(\alpha)-F(x_k)\\&=(\alpha-x_k)F'(\xi_k) \qquad (\alpha<\xi_k<x_k)\end{aligned} \tag{1·6}$$

當 k 很大時，可看做如下的式子

$$F'(\xi_k)\fallingdotseq F'(\alpha) \tag{1·7}$$

因此，

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\alpha-x_{k+1}}{\alpha-x_k}\fallingdotseq F'(\alpha)\\&\alpha-x_1\fallingdotseq(\alpha-x_0)F'(\alpha)\\&\alpha-x_2\fallingdotseq(\alpha-x_1)F'(\alpha)\\&\qquad\fallingdotseq(\alpha-x_0)\{F'(\alpha)\}^2\end{aligned}\right\} \tag{1·8}$$

$$\therefore \quad \alpha-x_{k+1}\fallingdotseq(\alpha-x_0)\{F'(\alpha)\}^{k+1} \tag{1·9}$$

所以，若 $|F'(\alpha)|<1$，則收斂。

式（1.8）中，若誤差 $\alpha-x_k=\varepsilon_k,\ \rho_k\fallingdotseq F'(\alpha)$，則下面式子成立

$$\varepsilon_{k+1}=\rho_k\varepsilon_k \tag{1·10}$$

因此，反覆法也稱為一次近似式。

〔計算步驟整理〕

① 將 $f(x)=0$ 改寫成 $x=F(x)$ 的形式。

② 由第 1 近似值 x_0 進行下面反覆計算

$$x_{k+1}=F(x_k)\qquad (k=0,1,2,\cdots\cdots)$$

直至滿足下面的條件

$$\frac{|x_{k+1}-x_k|}{|x_k|}<\varepsilon\qquad (\varepsilon:\text{收斂判定常數})$$

但是初值 x_0 用 0 時，收斂判定中的分母為 0，不能除，因此必須用下面的方法進行收斂判定

$$|x_{k+1}-x_k|<\varepsilon|x_k|$$

〔反覆法程式〕

（i） 利用反覆法求下面程式所用例子的根

$$f(x)=2\sin x-x(1+2x^2)=0\qquad (1)$$

按照式（1.2），將式(1)變成下面的形式

$$x=\frac{2\sin x}{1+2x^2}\qquad (2)$$

$$F(x)=\frac{2\sin x}{1+2x^2}\qquad (3)$$

初值 $x_0=0.5$

(ii) 程式所用的符號

X0：初値 x_0

EPS：收斂判定常數 ε

(iii) 程式

```
C     HANPUKU HOU
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      F(X)=2*DSIN(X)/(1+2*X**2)
      READ(5,1)X0,EPS
    1 FORMAT(F5.0,E10.0)
   10 X1=F(X0)
      IF(DABS(X1-X0)/DABS(X0).GT.EPS)THEN
       X0=X1
       GO TO 10
       ELSE
      END IF
      WRITE(6,2)X1
    2 FORMAT('1',2X,'X = ',F20.9)
      STOP
      END
```

結果

```
X =            0.655650794
```

1.2 Regula-Falsi法

代數方程式

$$f(x)=0 \tag{1·11}$$

取其曲線上點 B$(b, f(b))$，再取另一點 A$(x_0, f(x_0))$，Y座標必須符號相反；點A、B間的直線與X軸的交點爲第1近似 x_1（請參照，1.1），再取點C$(x_1, f(x_1))$，點C、B間的直線與X軸的交點爲第2近似 x_2 。以下反覆同樣的步驟，以逐漸接近實際的根。

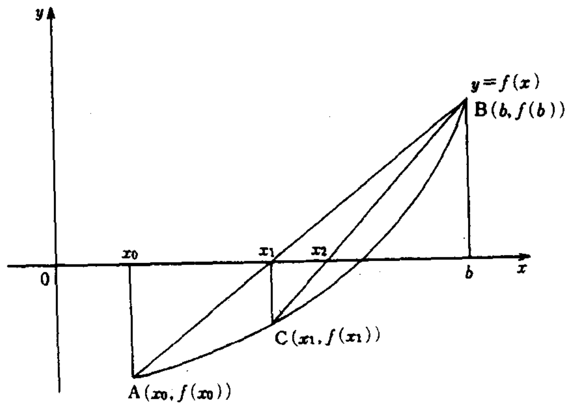

圖 1·1

欲求第 1 次近似 x_1 ，先求通過 2 點 A 、 B 的直線方程式，再求該直線與 X 軸交點的 X 座標即可。因此

$$y-f(x_0)=\frac{f(b)-f(x_0)}{b-x_0}(x-x_0) \tag{1·12}$$

$$\therefore\quad y=\frac{\{f(b)-f(x_0)\}x+bf(x_0)-x_0f(b)}{b-x_0} \tag{1·13}$$

式 (1·13) 與 X 軸交點 y = 0 ，則

$$\frac{\{f(b)-f(x_0)\}x+bf(x_0)-x_0f(b)}{b-x_0}=0$$

然後

$$x=\frac{x_0f(b)-bf(x_0)}{f(b)-f(x_0)} \tag{1·14}$$

根據式 (1·14)，第 1 次近似 x_1 為

$$x_1=\frac{x_0 f(b)-bf(x_0)}{f(b)-f(x_0)}$$

同樣，第 2 次近似 x_2 ，第 3 次近似 x_3 爲

$$x_2=\frac{x_1 f(b)-bf(x_1)}{f(b)-f(x_1)}$$

$$x_3=\frac{x_2 f(b)-bf(x_2)}{f(b)-f(x_2)}$$

一般而言

$$x_{k+1}=\frac{x_k f(b)-bf(x_k)}{f(b)-f(x_k)} \qquad (k=0,1,2,\cdots\cdots) \qquad (1\cdot15)$$

從初值 x_0 開始反覆式（ 1·15 ）直至滿足下面收斂判定條件

$$\frac{|x_{k+1}-x_k|}{|x_k|}<\varepsilon \qquad (1\cdot16)$$

〔計算步驟整理〕

利用定點 b ，初值 x_0 進行下面反覆計算

$$x_{k+1}=\frac{x_k f(b)-bf(x_k)}{f(b)-f(x_k)} \qquad (k=0,1,2,\cdots\cdots)$$

直至滿足下列條件

$$\frac{|x_{k+1}-x_k|}{|x_k|}<\varepsilon \qquad (\ \varepsilon\ ：收斂判定常數\ )$$

或

$$|x_{k+1}-x_k|<\varepsilon|x_k|$$

但是，所求的根 x 必須 $x_0\leqq x\leqq b$ 。

〔Regula-Falsi 法程式〕

（i） 利用 Regula-Falsi 法求下面程式中所用例子的一個根

$$f(x)=x^3+11x-6=0$$

(ii)　程式中所用的符號

X0　：初值 x_0

B　：定點 b

EPS：收斂判定常數 ε

(iii)　程式

```
C       REGULA-FALSI METHOD
        IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
        F(X)=X**3+11*X-6
        READ(5,1)X0,B,EPS
      1 FORMAT(2F10.0,E10.0)
     10 X1=(X0*F(B)-B*F(X0))/(F(B)-F(X0))
        IF(DABS(X1-X0)/DABS(X0).GT.EPS)THEN
         X0=X1
         GO TO 10
         ELSE
        END IF
        WRITE(6,2)X1
      2 FORMAT('1',2X,'X = ',F20.9)
        STOP
        END
```

結果

```
X =              0.531783203
```

1.3　Newton-Raphson method法

$$f(x)=0 \tag{1·17}$$

假設上面程式實際的根 α 的第 k 近似值爲 x_k ，誤差爲 ε_k ，則

$$\alpha=x_k+\varepsilon_k \tag{1·18}$$

根據式（1·17）、（1·18），下面式子成立

$$f(\alpha)=f(x_k+\varepsilon_k)=0 \tag{1·19}$$

在 x_k 的近旁，將式（1·19）利用 Taylor 展開

$$f(x_k+\varepsilon_k)=f(x_k)+\varepsilon_k f'(x_k)+\frac{\varepsilon_k^2}{2!}f''(\zeta) \qquad (x_k<\zeta<\alpha) \tag{1·20}$$

假定 ε_k 非常小，可以忽視 ε_k 2 次以上的項，因此

$$0=f(x_k+\varepsilon_k)\fallingdotseq f(x_k)+\varepsilon_k f'(x_k) \tag{1·21}$$

然後

$$\varepsilon_k=-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{1·22}$$

由式（1·18）、（1·22）

$$\alpha=x_k+\varepsilon_k=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

由上式得出 Newton-Raphson 反覆式

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \qquad (k=0,1,2,\cdots\cdots) \tag{1·23}$$

由初值 x_0 開始，利用式（1·23）如下順序反覆

$$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

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

直至滿足下列收斂判定條件

$$\frac{|x_{k+1}-x_k|}{|x_k|}<\varepsilon \tag{1·24}$$

設

$$x_{k+1}=F(x_k)=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{1·25}$$

則

$$\alpha-x_{k+1}=F(\alpha)-F(x_k) \tag{1·26}$$

若 $F(x)$, $F'(x)$ 在區間 $[\alpha, x_k]$ 連續，利用平均值定理，式（1·26）變成

$$\alpha-x_{k+1}=F(\alpha)-F(x_k)=(\alpha-x_k)F'(\xi_k) \qquad (\alpha<\xi<x_k) \tag{1·27}$$

由式（1·23）、（1·27）

$$\alpha-x_{k+1}=\alpha-x_k-\frac{f(\alpha)-f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{1·28}$$

又

$$f(\alpha)-f(x_k)=(\alpha-x_k)f'(x_k)+\frac{1}{2!}(\alpha-x_k)^2f''(\xi) \qquad (\alpha<\xi<x_k)$$

因此，式（1·28）為

$$\alpha-x_{k+1}=-\frac{1}{2}(\alpha-x_k)^2\frac{f''(\xi)}{f'(x_k)} \tag{1·29}$$

設誤差 $\alpha-x_k=\varepsilon_k$ ，則式（1·29）為

$$\varepsilon_{k+1}=-\frac{1}{2}\,\frac{f''(\xi)}{f'(x_k)}\,\varepsilon_k^{\,2} \tag{1·30}$$

因此在Newton-Raphson 法中，誤差以平方速度變小。

〔計算步驟整理〕

① 由 $f(x)$ 求 $f'(x)$

② 由初值 x_0 反覆計算下面式子

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \qquad (k=0,1,2,\cdots\cdots)$$

直至滿足下面條件

$$\frac{|x_{k+1}-x_k|}{|x_k|}<\varepsilon \qquad (\varepsilon：收斂判定常數)$$

或

$$|x_{k+1}-x_k|<\varepsilon|x_k|$$

〔Newton-Raphson法程式〕

(i) 程式所用的例子

根據Newton-Raphson法，用下面式子計算$\sqrt{2}$。

$$f(x)=x^2-2=0$$
$$f'(x)=2x$$

(ii) 程式所用的符號

X0：初值 x_0
EPS：收斂判定常數 ε
F(X)：$f(x)$
DF(X)：$f'(x)$

(iii) 程式

```
C     NEWTON-RAPHSON METHOD
      IMPLICIT  REAL*8(A-H,O-Z)
      F(X)=X**2-2
      DF(X)=2*X
      READ(5,1)X0,EPS
```