數值分析

伯登·费尔斯 著
陈 建 宏 译

曉園出版社
世界图书出版公司

数值分析

伯登・费尔斯 著
陈 建 宏 译

曉園出版社
世界图书出版公司
北京・广州・上海・西安

数 值 分 析

伯登、费尔斯 著
陈建宏 译

*

晓园出版社出版
世界图书出版公司北京公司重印
北京朝阳门内大街 137 号
北京中西印刷厂印刷
新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1995年 6 月第 一 版 开本：787×1245 1/20
1995年 6 月第一次印刷 印张：36.5
印数：0001—400 字数：72万字

ISBN：7-5062-1768-6/O·119
定价：40.00元 （WB9312/3）

緒　論

數值分析的主題是在設計方法以有效率地解數學問題，其效率視方法所需的精確度及使用容易性而定。在實際情況中，數學問題是根據物理現象、在簡化的假設下導出來的，一般而言，物理假設越少越能以適當的數學模式來描述物理現象，但同時也較難解得出分析解，或甚至解不出來。由於數學問題通常不能正確地描述物理問題，因此，採用近似法來解物理問題的較複雜數學模式似乎比求出簡化模式的正確解要適當些。爲求取此種近似解，我們必須設計出一個稱爲演算法（algorithm）的方法，演算法是由可以求得數學問題之近似解的代數、邏輯運算組成，而且我們希望此近似值與物理問題間的誤差小於原先預定之值。

由於方法的效率與執行運算的容易性有關，因此，解題之法須視計算機及計算機技術而定；25 年前，在數值計算設備廣泛使用之前，採用須作大量運算的方法是行不通的，但由於計算機設備的日新月異，使得其中有些方法越來越具吸引力。目前，雖然大量的計算時間所造成的花費仍是個重要的考慮因素，但其限制使用的因素通常和該法所需的計算機儲存量有關。個人電腦的越來越容易弄得到。以及低花費的方程式計算器對近似法的選擇也具有影響力，因它們可用來解許多比較簡單的問題。

許多最新數值方法的基本理念已早爲人所知，而估計使用這些方法所造成之誤差範圍的方法也早就爲人們所導出；因此，我們的興趣主要是放在如何導演這些方法及其誤差之估計，因爲不論未來的技術如何，我們在未來無疑的將再採用這些方法來推導其他的數值方法，並應用之。

本書所要討論的方法包括目前常用的方法，以及未來最有希望作改進的方法。

序

關於本書

本書的內容是根據過去數年來的一系列數值分析課程整理而得的，本書的設計主要是給大三的工程及科學方面的學生使用，我們假設他們已修過一門初等微積分，而且知道一些高級程式語言的使用（如培基、福傳或是巴斯可語言）。另雖然知道一些基本的矩陣運算及微分方程有助於對本書內容的了解，但由於我們在本書的適當地方，對這些論題都作了充分的介紹，因此，讀者即使不知，那也無妨。

雖本書的材料足夠一學年的教學之用，但我們希望本書的讀者將此書當作一個學期的課程教科書；在這樣的課程中，讀者應學著去體會那類型的問題應用數值方法來解，並了解數值方法所帶來的誤差傳播的情形；同時，讀者也有相當多的機會，應用所學來正確地求得無法以解析法解出之問題的近似值。而那些未在課堂教授的部分則可當作往後碰到問題時的參考。但不論是作爲一年或半年課程的教科書，本書的一貫理想都是：介紹數值方法，告訴讀者這些方法如何如何可行、爲何可行及何時可行，同時奠定往後更進一步的探討的堅實基礎。

事實上，本書中的每一個觀念都輔以例子來說明；在本版中，大約有 2000 個曾在課堂上檢驗過的習題，其範圍自基本的演算法應用到理論的推廣與延伸；此外，我們也自許多不同的領域（工程、物理、生物及社會學）中擷取許多應用問題作爲習題，其選取的方式，儘量是精簡，並能示範如何將數值方法應用到「眞實」的情況。

第三版中的更改

和前版比較，本版在許多方面皆有改進，而且也增加了一些新的內容：

- 我們將第一章擴充，以探討更多有關捨入誤差的問題，並以一些新的例子說明一些經常會遇到的問題。
- 在第二章中，有關非線性方程式的理論部分，我們作了濃縮、簡化的工作。
- 在第二章中，我們加進了米勒法，作爲解一般性多項式方程式之用。
- 在第三章中，我們更強調均差法，在本版中，有兩個新的演算法：一個是牛頓

內插均差法，另一個是用均差來簡化赫密特內插法。

- 我們在第四章中，主要是強調理查森外插法。
- 在第四章中，我們已將高斯積分法該節的內容作了修改，以避免和第七章的正交多項式有過多的重疊。
- 在第五章中，我們加了解微分方程組及剛性微分方程組的演算法。
- 在第五章的緒論中，我們將多步法和變步距預估－校正法的探討分開。
- 在第六章中，我們刪除了通常線性代數課程中會討論的內容，因此，本文變得較簡單。
- 在第六章中，我們將尋樞法的部分擴充，以期能更完整地討論此一重要的課程。
- 在第七章中，我們簡化了正交矩陣的討論，而將快速傅立葉轉換的內容加以擴充。
- 我們將第八章的第一節簡化，而後面各節的順序則另作了安排。
- 在第九章最後，我們加上了快速下降法，作爲求取牛頓法及波義登法之初始近似值之用。
- 在第十章中，在探討解邊界值問題的差分法中，我們已將線性問題及非線性問題分開討論。
- 根據有關的反應，特徵法並不常用，我們已在第十一章中，將此法刪除。

《演算法》

如同前一版，所有本書中的重要方法都列有一個結構性的演算法，而沒有程式。即使學生們沒有寫程式的經驗，他們也可根據所列的演算法的步驟，而寫出程式。我們之所以沒有列出程式，其原因是：據我們的經驗，學生往往對有關的方法不求甚解，而只用既有的程式去求取結果。然而，教師手册中列有完整的福傳程式及全部的習題解答，這些答案都是採用楊城州立大學（Youngstown State University）的 Amdah 470 V/6 計算機 WATFIV 以單倍準度算得的。

雖然這些演算法足以用來寫出程式，以解課本中的例題和習題，但我們要強調的一點是：我們志不在寫一個具有一般用途的軟體程式，就計算時間及儲存所需的記憶容量而言，書中的演算法並不見得是最有效率的方法。事實上，當效率與方法之重點說明有衝突時，我們一直是選取能說明重點之演算程序。

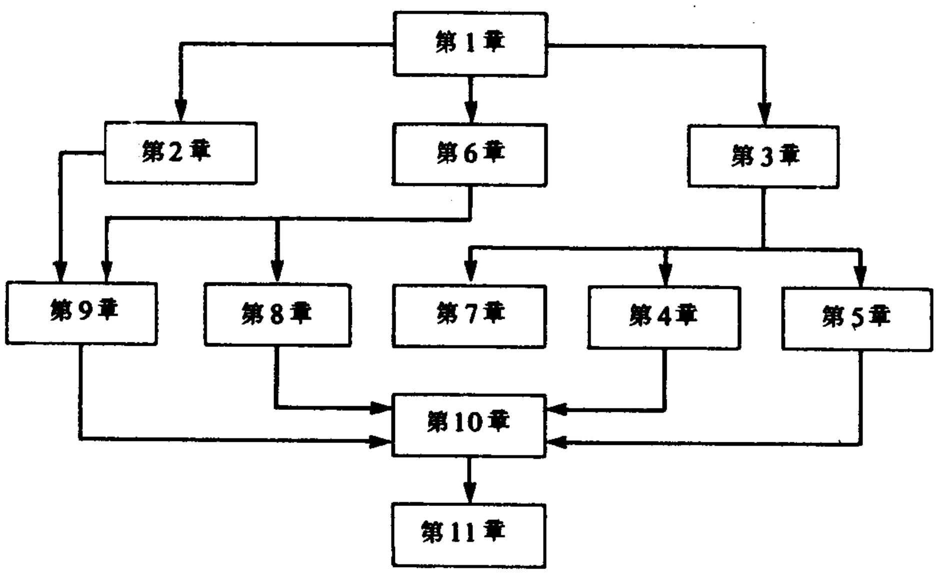
在過去，我們對於可用的數值方法標準軟體程式都曾作詳細的說明，但最近已有一本書作了這樣的工作，即文獻[108]；在該書，作者對 IMSL（International Mathematical and Statistical Library，國際數學及統計圖書

館）程式庫中的大部分程式都作相當完整的說明，該書也對 ACM 演算法及其他的相關軟體作了討論。因此，如果讀者平常有需要，我們覺得與其在本書中作摘要性的說明，不如建議大家參看該書。

建議課程

本書的設計在於使教師有彈性在課程內容以及理論深度、應用性的強調上作適度的調整。根據這些目標，對於本書所沒有詳細說明的部分，以及在應用上足以說明其實際重要性的方法，都列有完整的參考文獻，以供參考查詢。其中文獻的選取，儘量是以各大學圖書館中能找到的爲準。

下面的流程圖說明各章的準備章節，其中與此表不同的分歧點在 3.6 節及 4.7 節第一頁下方之註明有所說明，表中大部分的授課順序都已由作者在楊城大學試驗過。



致　謝

作者願對本書前版指正的許許多多的人致謝，這些人包括以前諸版的評論者，以及本版的指正者：Brigham Young 大學的 G. S. Gill，Rensselaer 理工學院的 William Siegmann，Concordia 大學的 Jozef Brody，Ryerson 理工學院的 Alain Lan，Toronto 大學的 W. Gesing，Alabama 大學 Huntsville 分校的 Charles Chen，California 大學 Davis 分校的 G. J. Kurowski，California 州立大學 Hayward 分

校的Richard E. Goodrick，Toronto 大學的R. A. Mathon，Vermont 大學的Heath K. Riggs，Mississippi 州立大學的Roger C. McCann，Rochester理工學院的 Laxmi N. Gupta，紐約州立大學Buffalo 分校的Nicholas D. Goodman，Missouri 大學的Ralph Lee，以及其他許多在會議中，課堂上所碰到的本校師生。特別要感謝的是楊城大學的一個研究生Don Maxwell，他檢查所有的參考文獻的編蒐，並協助我們準備出版。

目　　錄

演算法索引

符號彙編

1

數值分析的數學基礎

在初等化學課程中，我們曾見到一個稱為理想氣體定律（ideal gas law）的式子

$$PV = NRT.$$

這是一個「理想」氣體之壓力P、體積V、溫度T及莫耳數N間的關係式，式中的R為一常數，其數值大小僅與所用的單位有關。

假設我們現在用兩組實驗來檢定此定律，並使用相同的氣體。在第一組中，

$$P = 1.0 \text{ atm} \qquad V = 0.10 \text{ 立方公尺}$$
$$N = 0.0042 \text{ 莫耳} \qquad R = 0.082.$$

由理想氣體定律，我們可預測氣體的溫度為

$$T = \frac{PV}{NR} = \frac{(1.0)(0.10)}{(0.082)(0.0042)} = 290^\circ \text{ K或 } 17\,^\circ\text{C}$$

當我們實際去量時，發現真正的溫度是 15 ℃。

而後，我們使用相同的R值及N值，但將壓力增為原來的四倍，並將體積減為原來的四分之一，重作此實驗；由於 PV 的積保持不變，由式子預測出來的值將仍保持 290 °K（或 17 °C），但事實上，我們卻發現此時的溫度是 32 ℃。

當我們得到一個這麼大的誤差值時，我們顯然會對此定律產生懷疑；但在推斷此定律的正確性之前，我們應先檢討一下所用的數據，以了解此一誤差是否是因實驗的結果造成的；如果答案是肯定的，那我們就應探討一下到底要使用多準確的實驗數據，才能避免如此大的誤差。

在數值分析中，有關計算的誤差分析是個十分重要的課題，我們將在1.2節中介紹。

在本章中，我們準備扼要地複習一下單變數微積分，並介紹一些在探討收斂、誤差分析及機器數字所用的術語。

1-1 微積分複習

微積分的基礎是一函數的極限(limit)及連續性(continuity)的觀念。

【定義 1.1】

令 f 爲一定義在實數集合 X 中的函數，若對任一實數 $\varepsilon>0$，存在一個實數 $\delta>0$，使得當 $x\in X$，且 $0<|x-x_0|<\delta$ 時，$|f(x)-L|<\varepsilon$，則稱 f 在 x_0 的極限(limit)爲 L，表爲 $\lim_{x\to x_0} f(x)=L$。(見圖 1.1)

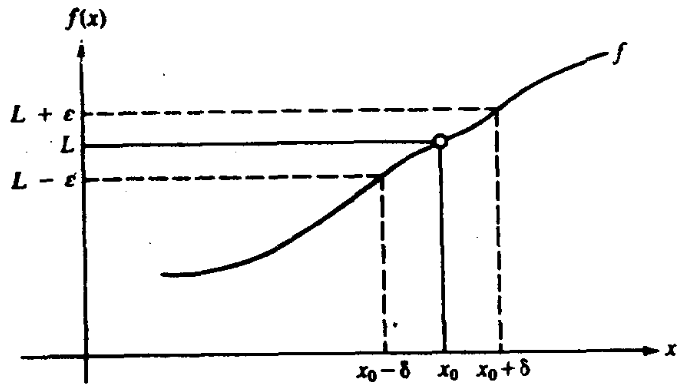


圖 1.1

【定義 1.2】

令 f 爲一定義於實數集合 X 中的函數，$x_0\in X$，若 $\lim_{x\to x_0} f(x)=f(x_0)$，則稱 f 在 x_0 上是連續的(continuous)。若 f 在 X 中的任一點上都連續，則稱 f 在 X 上連續。我們以 $C(X)$ 來表示所有在 X 中皆連續的函數。當 X 代表實線上一區段時，可將此符號的括號省略；舉例來說，我們以 $C[a,b]$ 來代表所有在封閉區間 $[a,b]$ 上都連續的函數之集合。

以同樣的方式，我們可定義實數序列或複數序列的極限(limit of a sequence)。

【定義 1.3】

令 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 爲一無窮實數或複數序列，若對任一 $\varepsilon>0$，存在一個正整數 $N(\varepsilon)$，使得當 $n>N(\varepsilon)$ 時，$|x_n-x|<\varepsilon$，則稱此序列收斂(converge)於 x (此值稱爲極限)，記爲 $\lim_{n\to\infty} x_n=x$，或當 $n\to\infty$ 時，$x_n\to x$。

下面的定理說明收斂性與連續性間的關係。

【定理 1.4】

若 f 爲一定義在實數集合 X 中的函數，且 $x_0 \in X$，則下面兩個敍述是對等的：

(a) f 在 x_0 點上是連續的；

(b) 若 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 爲 X 中任一收斂於 x_0 的序列，則

$$\lim_{n\to\infty} f(x_n)=f(x_0).$$

【定義 1.5】

若 f 爲一定義在含有 x_0 點的開區間上的函數，若

$$\lim_{x\to x_0}\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$$

存在，則稱 f 在 x_0 點上是可微的(differentiable)。當此極限存在時，我們一般以 $f'(x_0)$ 表示，稱作 f 在 x_0 點上的導數(derivative)。若一函數在集合 X 的任一數上均有一導數，則稱此函數在 X 上是可微的。

【定理 1.6】

若 f 在 x_0 點上可微，則 f 在 x_0 點是連續的。

若一函數在 X 上有 n 次連續導數，則在數學上記爲 $C^n(X)$；而若所有階秩的導數都存在時，則表爲 $C^{\infty}(X)$。多項式函數、有理函數、三角函數、指數函數及對數函數都是屬於 $C^{\infty}(X)$ 的，其中 X 含所有可定義這些函數的數。當 X 爲一實數線的部分集合時，我們還是將式中的小括號省略。

下個定理在演導誤差的估計中有其本質上的重要性，其證明及本節未加以說明的結論均可在任一本標準的微積分課本中找到。

【定理 1.7】 (洛爾定理(Rolle's Theorem))

若 $f\in C[a,b]$，且 f 在 (a,b) 上可微；如果 $f(a)=f(b)=0$，則在 a、b 間有一數 c 存在，使得 $f'(c)=0$（見圖 1.2）。

【定理 1.8】 (均值定理)

若 $f\in C[a,b]$，且 f 在 (a,b) 區間上可微，則在 a、b 之間存在有一數 c，使得

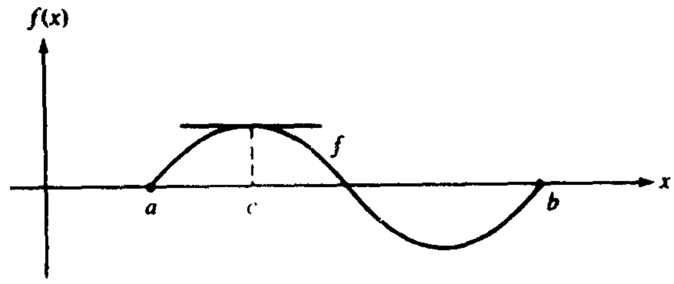


圖 1.2

$$f'(c)=\frac{f(b)-f(a)}{b-a}.\qquad (\text{見圖 } 1.3)$$

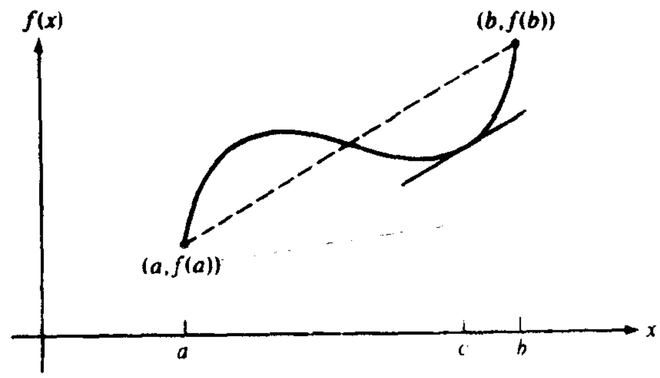


圖 1.3

【定理 1.9】（極值定理）

若 $f\in C[a,b]$，則對任一 $x\in[a,b]$，有二數 c_1，$c_2\in[a,b]$ 存在，使得 $f(c_1)\le f(x)\le f(c_2)$。此外，若 f 在 (a,b) 區間內可微，則 c_1，c_2 爲 $[a,b]$ 的端點或使 $f'=0$ 的點。

在討論數值方法時，我們需用到另外兩個定理，其一是均值定理在積分上的推廣定理。

【定理 1.10】（加權積分均值定理）

若 $f\in C[a,b]$，而 g 在 $[a,b]$ 可積，且 $g(x)$ 在 $[a,b]$ 上沒有變號，則在 a、b 間有一數 c 存在，使得

$$\int_a^b f(x)g(x)\,dx=f(c)\int_a^b g(x)\,dx.$$