CHAPTER 1

數值分析與電腦軟體

1-1 緒　言

科學家或工程師在研究某一理化現象或工程問題時，可能產生一些如非線性方程式、常微分方程式、偏微分方程式等方程式或方程式組、常微分方程式組等方程式組。這些方程式或方程式組如屬單變數或變數個數不多的線性方程式或方程式組可以有解析解外，絕大部分的方程式或方程式組則尚難或尚無解析解，而須借助於數值分析的方法來獲得近似解。數值分析基本上是以一個或多個可以計算的方程式及假設的初始解經過冗長的迭代演算逐步趨近於真實解的方法。事實上，問題的真實解為一個未知之數，如何研判逐次演算結果是否趨近於真實解是研究數值分析的重要課題之一。因此，誤差（Error）是數值分析方法與生俱來的本質；如果某種數值分析方法所產生的誤差隨著逐次演算逐漸縮小而趨於 0，則稱為穩定的數值分析演算；反之，如果所產生的誤差隨著逐次演算而逐漸擴大，則屬不穩定的數值分析演算。

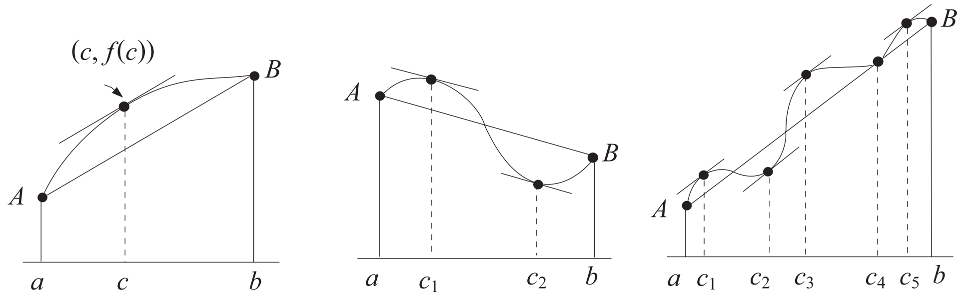
隨著電腦科技的進步，許多更為精準的數值分析演算法相繼出籠，但是這些演算法已經複雜到非人工手算所能及，因此使用電腦軟體來演算已是一種趨勢。本書特別以微軟公司的 Excel 試算表軟體為基礎，開發數值分析軟體一種隨書附贈，以便學習者可以體會演算過程與享受演算結果。本章就數值分析的重要定理、誤差的產生與推估、數值分析軟體安裝與使用三大部分說明之。

1-2 數值分析重要定理

均值定理（Mean Value Theorem）、極值定理（Extreme Value Theorem）、中間值定理（Intermediate Value Theorem）在微積分與數值分析中均扮演重要角色。首先觀察圖 1-2-1 為連續函數 $f(x)$ 在區間 $[a,b]$ 間的連續曲線及曲線上的一條或多條切線。在圖 1-2-1(a)中曲線上一點 $(c,f(c))$ 的切線平行於 $A(a,f(a))$ 、$B(b,f(b))$ 兩點所連接的弦線；圖 1-2-1(b)中曲線上的兩點 $(c_1,f(c_1))$ 、$(c_2,f(c_2))$ 的切線均平行於 $A(a,f(a))$ 、$B(b,f(b))$ 兩點所連接的弦線；圖 1-2-1(c)中曲線上共有五個點 $(c_1,f(c_1))$ 、$(c_2,f(c_2))$ 、⋯、$(c_5,f(c_5))$ 的切線均平行於 $A(a,f(a))$ 、$B(b,f(b))$ 兩點所連接的弦線。均值定理保證連續曲線 $f(x)$ 在某一區間內至少有一個點，其在曲線上的切線與弦線平行。弦線與切線的平行意味著弦線與切線的斜率必相等。在連續曲線上某點 c 的斜率為該點在曲線上一

階導數值 $f^{(1)}(c)$；而弦線 AB 的斜率則為$[f(b)-f(a)]/(b-a)$，故得

$$\frac{f(b)-f(a)}{b-a}=f^{(1)}(c)\text{，其中 } c \text{ 為開放區間}(a,b)\text{中的某一點}$$



(a)　(b)　(c)

圖 1-2-1

依以上幾何描述，可得導數均值定理（Mean Value Theorem of Derivatives）為

均值定理：假設$a \neq b$且函數$f(x)$在區間$[a,b]$內為連續函數，若區間$[a,b]$間任意一點的一階導數$f^{(1)}(x)$均存在，則區間$[a,b]$必有一點 c 使得

$$f(b)-f(a)=f^{(1)}(c)(b-a) \tag{1-2-1}$$

c 稱為函數$f(x)$在區間$[a,b]$的均值。均值定理僅敘述區間$[a,b]$內曲線上必有一點或多點的斜率必與區間端點弦線斜率相同，至於這些點的位置則未論定。某些函數的均值可以很容易確定，但另一些函數則很難覓得均值的位置。在數值分析演算法中並無須確定該均值的位置，僅知某函數在區間$[a,b]$內必有一個或多個均值就可以獲得許多有用的結論。

例題 1-2-1

試以均值定理證明 $e^x > 1+x$，只要 $x \neq 0$。

解答：

設$f(x)=e^x$，則依公式（1-2-1）在$[0,x]$區間內必有一點 c 可使得 $e^x-1=e^c x$，因此只要證明 $e^c x > x$ 則可得證。

若 $x>0$，則 $0<c<x$，因此 $e^c>1$，故 $e^c x>x$；若 $x<0$，則 $x<c<0$，因此 $e^c<1$，故 $e^c x>x$，故得證。以上證明僅需知悉區間$[0, x]$內確有一點 c 存在而無須確定其位置即可得證。

若函數$f(x)$並非在區間$[a, b]$內任意一點的一階導數均存在，則導數均值定理不可適用。圖 1-2-2 為函數$f(x) = |x|$在$[-1, 2]$區間內的曲線，因為該函數在$x = 0$處的一階導數並不存在，故無法適用均值定理。區間端點A、B弦線的斜率為 1/3，但$x = 0$處兩側的直線斜率均非 1/3。

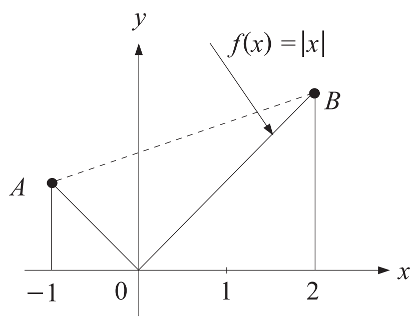


圖 1-2-2

由導數均值定理可得一個特殊情形的洛爾定理（Rolle's Theorem）敘述如下：

洛爾定理（Rolle's Theorem）：若函數$f(x)$在區間$[a, b]$內為連續且存在一階導數值，若$f(a) = f(b)$，則區間$[a, b]$內存在一點或多點c使得$f^{(1)}(c) = 0$，如圖 1-2-3。

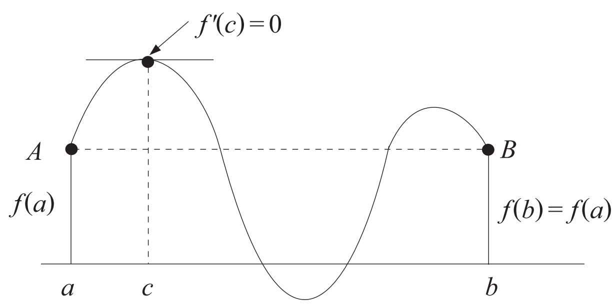


圖 1-2-3

由圖 1-2-3 可推知，當$f(a) = f(b)$，則在弦線以上（或以下）必有一個最高（低）點的斜率等於 0。

在實際工程或社會經濟裡，尋覓一個函數的最大值或最小值是一種經常的需求，例如尋求最低空氣阻力的飛行器外型曲線，以一定長度的圍牆圍出最大土地面積，以一定面積的鋼板製造容積最大的容器等均是尋覓最大值或最小值的問題。這些最大值或最小值統稱為極值（Extreme Value）。

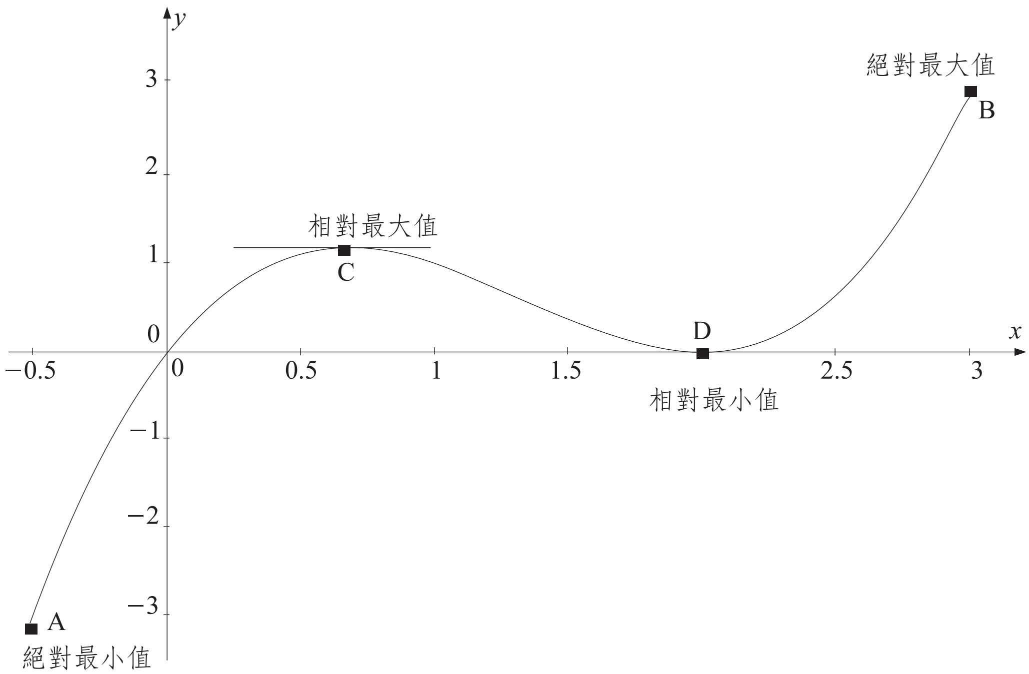


圖 1-2-4

圖 1-2-4 為函數 $f(x)=x(x-2)^2$ 在$[-0.5, 3]$間的曲線，點 A 為函數在$[-0.5, 3]$區間內函數值最小的點，故其函數值稱為絕對最小值（或全域最小值）；點 B 為函數在$[-0.5, 3]$區間內函數值最大的點，故其函數值稱為絕對最大值（或全域最大值）；點 C 為函數在$[-0.5, 3]$區間內某一小區間$[0.5, 1]$間函數值最大的點，故其函數值稱為相對最大值（或區域最大值）；點 D 為函數在$[-0.5, 3]$區間內某一小區間$[1.5, 2.5]$間函數值最小的點，故其函數值稱為相對最小值（或區域最小值）。敘述函數極值存在條件的極值定理為

極值定理（Extreme Value Theorem）：假設函數 $f(x)$ 為在區間$[a, b]$內連續且一階可微分式，若在區間$[a, b]$內 c 點有一個極值，則 $f^{(1)}(c)=0$。

$f^{(1)}(c)=0$ 為函數 $f(x)$ 在區間內有極值的充分而非必要條件。圖 1-2-5 為函數 $f(x)=|x|$在區間$[-3, 3]$內的曲線，雖然在 $x=0$ 處有極小值，但其一階導數則不存在；圖 1-2-6 為在區間$[0, 1]$內的曲線，雖然在區間右端點有極大值，但其一階導數非為 0。

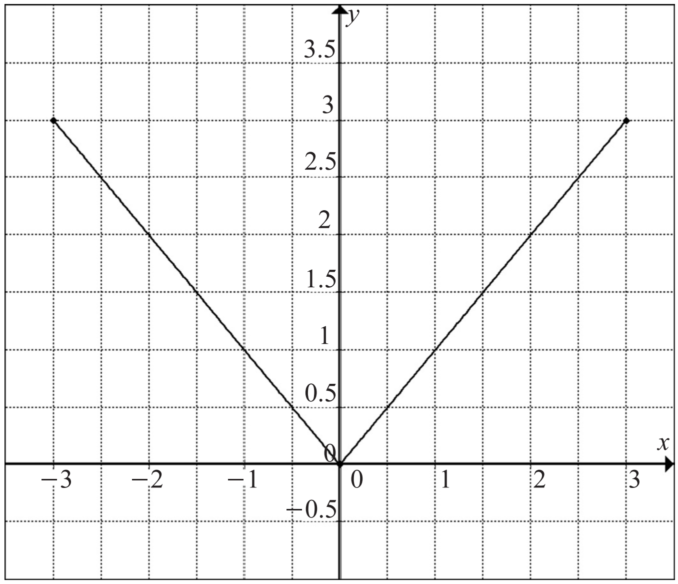


圖 1-2-5

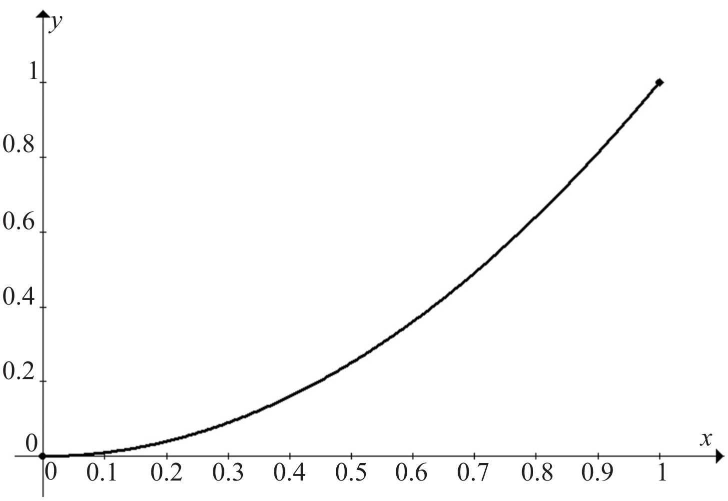


圖 1-2-6

圖 1-2-7 的曲線中，雖然在 $x=0$ 處的一階導數 $f^{(1)}(0)=0$，但在區間 $[-2, 2]$ 內的絕對最小值與絕對最大值均發生於區間的端點。

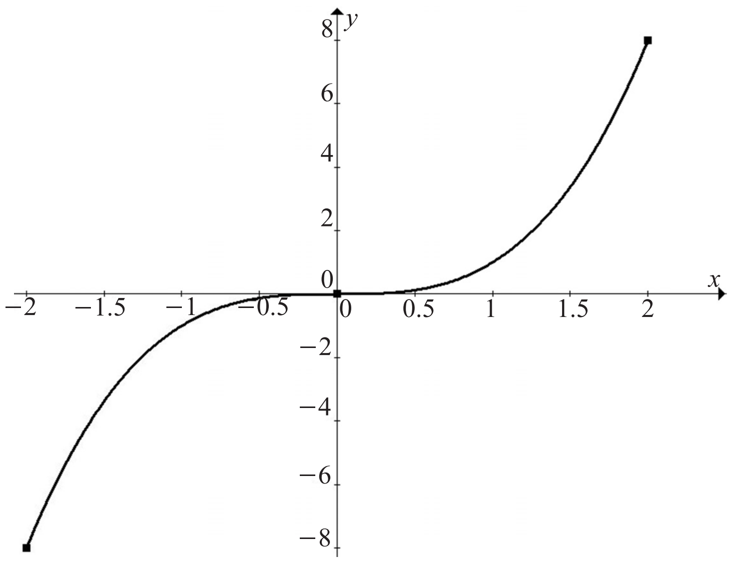


圖 1-2-7

解單變數方程式也是數值分析重要方法，相關演算法則依據如下的波札諾定理（Bolzano Theorem）與中間值定理（Intermmediate Value Theorem）推展所成。

波札諾定理（Bolzano Theorem）：若函數 $f(x)$為在區間$[a,b]$內任意點均為連續的函數，且假設函數值 $f(a)$ 與 $f(b)$ 互為異號，則在開放區間 (a,b) 內至少有一點 c ，使 $f(c)=0$，如圖 1-2-8。

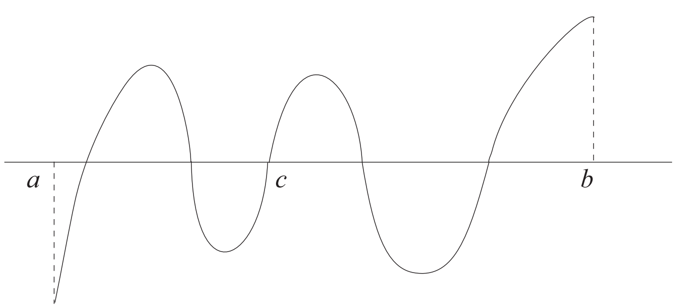


圖 1-2-8

中間值定理（Intermmediate Value Theorem）：若函數 $f(x)$ 為在區間$[a,b]$內連續的函數，且 K 為介於 $f(a)$ 與 $f(b)$ 間的任意數，則在開放區間 (a,b) 內存在數值 c 滿足 $f(c)=K$，如圖 1-2-9 所示。

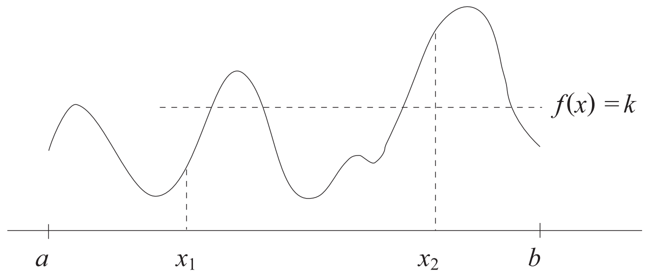


圖 1-2-9

例題 1-2-2

試以波札諾定理證明方程式 $x\cos(x) - 2x^2 + 3x - 1 = 0$，在[0.2, 0.3]及[1.2 1.3]區間內各有一根。

解答：

已知 $f(x) = x\cos(x) - 2x^2 + 3x - 1 = 0$，在區間[0.2, 0.3]區間端點函數值為

$$f(0.2) = 0.2 \times \cos(0.2) - 2(0.2)^2 + 3(0.2) - 1 = -0.284$$

$$f(0.3) = 0.3 \times \cos(0.3) - 2(0.3)^2 + 3(0.3) - 1 = 0.0066$$

因為函數值 $f(0.2)$ 與 $f(0.3)$ 互為異號，故在區間[0.2, 0.3]內必有一個根值 c_1 使 $f(c_1) = 0$。因為 $f(0.3)$ 比 $f(0.2)$ 的絕對值更靠近 0，故根值應該較為靠近 0.3；實際根值約為 0.29741，如圖 1-2-10。

另在區間[1.2, 1.3]區間端點函數值為

$$f(1.2) = 1.2 \times \cos(1.2) - 2(1.2)^2 + 3(1.2) - 1 = 0.155$$

$$f(1.3) = 1.3 \times \cos(1.3) - 2(1.3)^2 + 3(1.3) - 1 = -0.1323$$

因為函數值 $f(1.2)$ 與 $f(1.3)$ 互為異號，故在區間[1.2, 1.3]內必有一個根值 c_2 使 $f(c_2) = 0$。因為 $f(1.3)$ 比 $f(1.2)$ 的絕對值小，故根值應該較為靠近 1.3；實際根值約為 1.2565，如圖 1-2-10。

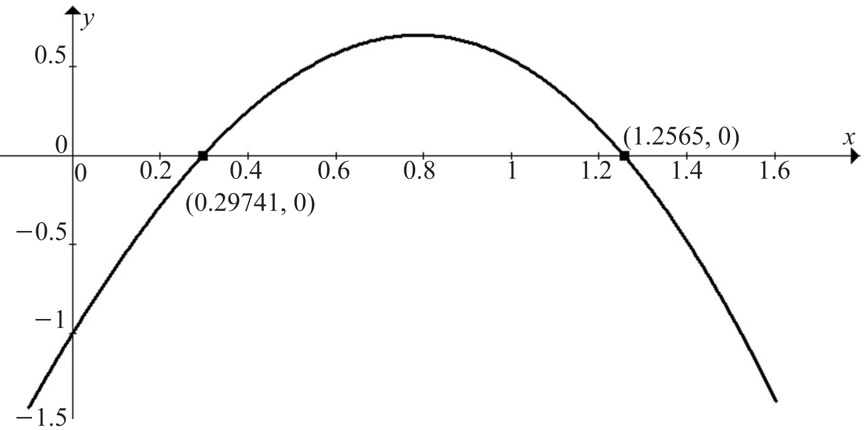


圖 1-2-10

1-3 截棄誤差與泰勒級數

多項式函數的微分、積分與推算函數值相對比其他函數簡單，因此在數值分析扮演重要角色。假使能夠以一多項式來近似表示某一個函數，則該函數的微分、積分或推算函數值均可以對該近似多項式進行微分、積分或求值。將某一函數以一多項式近似表示有多種的方法，泰勒級數多項式為使多項式滿足函數在某一點的函數值及多階導數值相符的一種表示方式。

1-3-1 泰勒級數

泰勒級數有兩項在數值分析上很重要的功能；若已知某一函數在某一點的函數值與各階導數值，則可依據泰勒級數預測另一點的函數值；另一項功能則是可將任何平滑函數以多項式近似表示之。

以逐項研討建立泰勒級數的方式有助於掌握泰勒級數的原理，泰勒級數的第一項為

$$f(x_{i+1}) \cong f(x_i) \qquad (1\text{-}3\text{-}1)$$

此種關係稱為零階近似（Zero-order Approximation），它指出函數 f 在新點 x_{i+1} 的函數值與在舊點 x_i 的函數值近似；當函數甚為平滑且新點與舊點甚為靠近，則這種零

階近似接近事實，尤其當函數為常數項時，如 $f(x)=3$，因 $f(x_i)=3$ 與 $f(x_{i+1})=3$，則這種零階近似完全正確。不過當函數 f 在新點 x_{i+1} 與舊點 x_i 之間函數值有所變化時，則需要加入泰勒級數的其他項以提供更佳的近似估計。例如，加入第二項可得

$$f(x_{i+1}) \cong f(x_i)+f^{(1)}(x_i)(x_{i+1}-x_i) \tag{1-3-2}$$

此關係稱為一階近似（First-order Approximation）。加入第二項 $f^{(1)}(x_i)(x_{i+1}-x_i)$ 代表函數在舊點 x_i 的斜率乘以新舊點間的間距以修正零階近似的估計值。如果函數 $f(x)$ 為直線函數，則一階近似可以正確的修正舊點函數值到新點的函數值；但若函數為非直線函數，則一階近似僅能提供比零階近似稍佳的近似估計而已。

一階近似僅考量函數的斜率，若欲考量函數的曲率，則需加入含有函數二階導數 $f^{(2)}(x_i)$ 的泰勒級數第三項為

$$f(x_{i+1}) \cong f(x_i)+f^{(1)}(x_i)(x_{i+1}-x_i)+\frac{f^{(2)}(x_i)}{2!}(x_{i+1}-x_i)^2 \tag{1-3-3}$$

如此繼續加入其他項便可得完整的泰勒級數展開式

$$\begin{aligned}f(x_{i+1}) &= f(x_i)+f^{(1)}(x_i)(x_{i+1}-x_i)+\frac{f^{(2)}(x_i)}{2!}(x_{i+1}-x_i)^2 \\ &\quad +\frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}(x_{i+1}-x_i)^3+\cdots\cdots+\frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x_{i+1}-x_i)^n+R_n\end{aligned} \tag{1-3-4}$$

公式（1-3-4）為無窮級數，因此使用等號而非前面各公式中使用的近似號（≅），公式（1-3-4）中的餘項 R_n 代表 n 階近似的餘項，亦即代表 $n+1$ 階導數項及以後所有項的總和。餘項 R_n 可以表示為

$$R_n=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x_{i+1}-x_i)^{n+1} \tag{1-3-5}$$

ξ 值為介於 x_i 與 x_{i+1} 間的某個值。如果公式（1-3-4）中僅取無窮級數的前 n 項總和近似之，則餘項代表的如此近似所帶來的誤差，亦即截棄誤差（Truncation Errors）。若以 $h=x_{i+1}-x_i$ 表示相鄰兩點的間距，則公式（1-3-4）及公式（1-3-5）可改寫成

$$f(x_{i+1})=f(x_i)+f^{(1)}(x_i)h+\frac{f^{(2)}(x_i)}{2!}h^2+\frac{f^{(3)}(x_i)}{3!}h^3+\cdots+\frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}h^n+R_n \tag{1-3-6}$$

$$R_n=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}h^{n+1} \tag{1-3-7}$$