

高等院校精品课程系列教材·省级

科学计算引论

基于Mathematica的数值分析

徐安农 ©主编



*Introduction to Scientific Computing
Numerical Analysis With Mathematica*



机械工业出版社
China Machine Press

高等院校精品课程系列教材·省级

科学计算引论

基于Mathematica的数值分析

徐安农◎主编 彭丰富 李光云◎参编



Introduction to Scientific Computing
Numerical Analysis With Mathematica



机械工业出版社
China Machine Press

本书涉及各类数学问题的数值解法和必要的基础理论, 内容包括 Mathematica 软件介绍、数值分析的基本概念、线性方程组的数值方法、函数的插值、数值逼近、数值微积分、非线性方程求根、矩阵的特征值与特征向量、常微分方程问题的数值计算等. 为了使学生充分了解数值分析方法在科学研究与工程实践中的重要作用, 本书还特别设置了应用实例的章节, 旨在激发学生的学习兴趣.

本书适合作为高等院校应用数学、信息与计算科学、统计等专业数值分析的教材或教学参考书, 也可供科研工作者、相关技术人员参考使用.

封底无防伪标均为盗版

版权所有, 侵权必究

本书法律顾问 北京市展达律师事务所

图书在版编目 (CIP) 数据

科学计算引论: 基于 Mathematica 的数值分析 / 徐安农主编. —北京: 机械工业出版社, 2010.8
(高等院校精品课程系列教材)

ISBN 978-7-111-31091-4

I. 科… II. 徐… III. 数值计算-应用软件, Mathematica-高等学校-教材 IV. O245

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 118262 号

机械工业出版社 (北京市西城区百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

责任编辑: 李 荣

北京市荣盛彩色印刷有限公司印刷

2010 年 9 月第 1 版第 1 次印刷

184mm×260mm·18 印张

标准书号: ISBN 978-7-111-31091-4

定价: 36.00 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

客服热线: (010) 88378991; 88361066

购书热线: (010) 68326294; 88379649; 68995259

投稿热线: (010) 88379604

读者信箱: hzsj@hzbook.com

出版者的话

机械工业出版社华章公司秉承“全球采集内容，服务中国教育”的理念，经过十余年的不懈努力，引进、翻译、出版了大量在计算机科学界、电子科学界享有盛名的专家名著与名校教材，其中包括 Donald E. Knuth、Alfred V. Aho、Jim Gray、Jeffrey D. Ullman、R. Jacob Baker 等大师名家的一批经典作品，这些作品对国内计算机教育事业的发展起到了一定的推动作用。今天，全国高等学校精品课程建设工作的蓬勃开展为我们更好地服务于计算机教育、电子信息科学教育提供了良好的契机，我们将以严谨的治学态度及全面服务的专业出版精神，在国内广大院校老师们的支持与帮助下，陆续推出具有国内一流教学水平的“高等院校精品课程系列教材”。

精品课程是具有一流教师队伍、一流教学内容、一流教学方法、一流教材、一流教学管理等特点的示范性课程，是教育部实施的“高等学校教学质量与教学改革工程”的重要组成部分，是教育部深化教学改革，以教育信息化带动教育现代化的一项重要举措。自 2003 年精品课程建设项目持续推进以来，国内高校中的优秀教师纷纷在总结本校富有历史传统而又特色突出的课程教学方法与经验成绩的基础上，充分运用现代网络传播技术将优质的教学资源上网共享，使国内其他高校在实施同类课程教学的过程中能够借鉴、使用这些优质的教学资源，在更大范围内提高高等学校的教学和人才培养质量，提升我国高等教育的综合实力和国际竞争能力。经过几年的共同努力，已经建立起了较为齐全的各门类及各专业的校、省、国家三级精品课程体系，期间先后有总计 750 门课程通过了专家评审，获得了“国家精品课程”称号。

这些各个层次的“精品课程”建设过程都比较充分地体现了教育部所要求的七个重点，即：具有科学的建设规划，配备高水平的教学队伍，不断进行教学内容和课程体系的改革，使用先进的教学方法和手段，注重建设系列化的优秀教材，高度重视理论与实践两个环节，切实激励各方人员共同参与。也正因为这样的多方面积极参与，使得我国的高等教育在近年来由精英教育转向大众教育的跨越式发展中取得了教学质量上的突破与飞跃。精品课教材作为精品课程的要件之一，比以往教材更加具有实践检验性，教学辅助资源经过不断地更新与补充更加丰富，是精品课教学团队智慧的共同体现。

“师者，所以传道授业解惑也”。教材是体现教学内容和教学要求的知识载体，是教师进行教学活动的基本工具，是提高教学质量的重要保证。精品课程教学团队中优秀的老师们集多年治学经验撰写出版相关教材，也是精品课程建设的一个重要方面。华章作为专业的出版团队，长久以来以“传承专业知识

精华,服务中国教育事业”为使命,遵循“分享、专业、创新”的价值观,实践着“国际视野、专业出版、教育为本、科学管理”的出版方针,愿与高等院校的老师共同携手,为中国的高等教育事业走向国际化而努力。

为更好地服务于精品课程配套教材的出版,华章不仅密切关注高校的优秀课程建设,而且还将利用自身的优势帮助教师完善课程设置、提供教辅资料、准备晋级申报、推广教学经验。具体详情可访问专门网站 <http://www.hzbook.com/jpkc.aspx>,并可在线填写出版申请,欢迎您对我们的工作给予帮助和指导。

投稿专线: 010-88379604

投稿 E-mail: hzjsj@hzbook.com



华章教育

华章科技图书出版中心

前言

“数值分析”属于数学的一个分支——计算数学，它是研究如何利用计算工具求出数学问题的数值解的一门学问。在古代，人们用算筹来做算术计算。大约在宋元期间出现了珠算，珠算一直延续到 19 世纪中叶，广泛应用于各种场合。工程人员使用的计算尺是计算工具发展的一个重要标志，用计算尺可以做乘除、方幂、开方、对数等基本函数运算。这些计算工具都对数学的计算起到过重要的作用。然而，20 世纪 40 年代发明的电子计算机，对计算数学的发展真正起到了革命性的推动作用。半个多世纪以来，计算数学的发展已经远远超越了其传统意义，成为现代意义上的计算科学，与理论研究、科学实验并立，成为科学发现的第三大科学方法。

在使用电子计算机进行数值计算的过程中，数学软件起着关键的作用。目前，在世界范围流行的数学软件主要有 Mathematica、MATLAB、Maple 等，本书选择 Mathematica 作为主要的计算软件。Mathematica 是 1988 年美国 Wolfram Research 公司成功开发的综合性数学软件包。Wolfram Research 是在美国物理学家 Stephen Wolfram 领导下的软件研发公司，多年来其软件和服务不断创新，迄今 Mathematica V7.0 For Windows 版本已经在世界上广为流行。Mathematica 面向的是具有一定的数学知识但并不具有很多计算机知识的科研工作者，因此在科研和高等院校中有着广泛的应用，世界排名前 200 位的大学、全球《财富》500 强企业基本都在使用 Mathematica 软件。

本书内容分为 9 章，每章的理论部分内容与课堂教学的学时安排为：

第 1 章简要介绍数值计算的工具软件 Mathematica。（建议学时：2）第 2 章给出误差理论的基本概念以及数值计算中应该注意的几个问题。（建议学时：4）第 3 章介绍数值线性代数的主要方法，对直接法和迭代法的算法设计和误差分析进行系统的讨论。（建议学时：8）第 4 章介绍经典的插值方法，包括牛顿插值、拉格朗日插值以及三次样条插值等。（建议学时：8）第 5 章介绍曲线拟合的最小二乘法和最佳平方逼近，并且给出正交多项式的定义、性质和常用的几类正交多项式。（建议学时：8）第 6 章系统地介绍数值积分和数值微分的常用算法，主要有牛顿-科茨积分公式、高斯型积分公式，以及迭代加速的理查逊外推法。（建议学时：8）第 7 章介绍非线性方程和非线性方程组的数值算法，重点讨论二分法、不动点迭代法、牛顿迭代法以及拟牛顿法。（建议学时：8）第 8 章介绍求矩阵特征值的经典算法，包括幂法、反幂法、雅可比算法和近代常用的 QR 算法。（建议学时：6）第 9 章系统地介绍常微分方程和常微分方程组的数值算法。（建议学时：8）

本书第 2~9 章分别给出 8 个数值实验，建议实验学时为 12，可以选做其中的 6 个实验。全书讲授共需 72 学时，各章实验要安排在理论课完成之后进行。任课教师可以根据教学安排来调整学时和选择重点介绍的内容。

本书适用于多层次、多专业和多学科的教学,在内容以及侧重点上都有所选择,讲究学以致用,贯彻数值分析与数值计算并重的思想,不过分追求理论的完整,着重基本和经典的算法,也注意介绍现代科学计算的最新方法。在学习算法的基础上想进一步研究和创新的学生,可以阅读书后给出的参考文献。

本书第1~5章由徐安农编写,第6~9章由彭丰富编写,李光云编写了各章的数值实验、全部习题及参考答案。由于水平的限制,本书错漏之处在所难免,欢迎广大读者批评指正。

本书的出版得到广西壮族自治区精品课程教材出版资助和区级优质专业应用数学的项目资助,特致感谢。

作者

2010年5月于桂林电子科技大学

目 录

出版者的话	1
前言	1
第 1 章 数值计算工具 Mathematica	1
1.0 概述	1
1.1 Mathematica 入门	1
1.1.1 Mathematica 的启动	1
1.1.2 Mathematica 的菜单项	2
1.1.3 从 Mathematica 获得信息	3
1.1.4 使用 Mathematica 的函数	4
1.2 强大的绘图功能	5
1.2.1 基本作图命令	5
1.2.2 绘图的参数	8
1.2.3 动画功能	10
1.3 对数组和矩阵作运算	12
1.3.1 数组与矩阵的构造方法	13
1.3.2 获取数组或矩阵元素	13
1.3.3 矩阵的运算	14
1.3.4 集合运算	15
1.4 数值计算	15
1.4.1 矩阵的分解	16
1.4.2 求解线性方程组	18
1.4.3 曲线拟合	18
1.4.4 函数插值	19
1.4.5 数值积分	20
1.4.6 非线性方程和非线性方程组的数值解法	21
1.4.7 微分方程数值解	23
1.5 Mathematica 编程	24
1.5.1 用户自定义函数	24
1.5.2 循环结构	25
1.5.3 条件与分支结构	26
1.6 本章小结	28
习题 1	28
第 2 章 科学计算的基本概念	30
2.0 概述	30

2.0.1 科学计算的对象	30
2.0.2 用数值方法计算数学问题的过程	31
2.0.3 构造算法的基本手段与研究算法的核心问题	32
2.1 误差的概念	33
2.1.1 绝对误差的概念	33
2.1.2 相对误差和相对误差限	33
2.1.3 近似数的有效数字位	34
2.2 浮点数与舍入误差	35
2.2.1 计算机中数的表示	35
2.2.2 浮点运算和舍入误差	36
2.3 误差的传播	37
2.3.1 基本算术运算的误差	37
2.3.2 函数求值的误差	38
2.4 计算方法与计算复杂性	38
2.4.1 两个相近的数相减造成的有效位数丢失	39
2.4.2 防止计算中大数“吃”小数	39
2.4.3 减少计算的次数	40
2.4.4 Mathematica 中精度数的计算	40
2.5 问题的病态性和算法的稳定性	41
2.5.1 Wilkinson 多项式根与系数的敏感性	41
2.5.2 病态方程组	42
2.5.3 算法的稳定性	43
2.6 本章小结	44
第 2 章实验 误差理论	45
习题 2	45
第 3 章 线性代数方程组的解法	47
3.0 概述	47
3.1 高斯消元法	49
3.1.1 顺序消元法	49
3.1.2 列选主元高斯消元法	53
3.1.3 行尺度主元消元法	55
3.2 矩阵的三角分解	56

3.2.1 矩阵的 LU 分解	56	4.5 样条插值	113
3.2.2 对称正定矩阵的平方根法	60	4.6 应用实例	117
3.2.3 三对角方程组的追赶法	62	4.7 本章小结	118
3.3 矩阵的条件数和直接方法的 误差分析	63	第 4 章实验 函数插值	119
3.3.1 向量和矩阵的范数	64	习题 4	124
3.3.2 条件数	66	第 5 章 函数逼近与拟合	128
3.4 解线性方程组的迭代法	70	5.0 概述	128
3.4.1 雅可比迭代法	71	5.1 最小二乘法与线性拟合	128
3.4.2 高斯-赛德尔迭代法	73	5.2 曲线拟合	132
3.4.3 松弛迭代法	75	5.3 正交多项式	136
3.4.4 迭代法的收敛性及误差估计	76	5.3.1 内积空间	136
3.5 应用实例	81	5.3.2 连续区间上的正交多项式	137
3.5.1 用高斯消元法求矩阵的行 列式和逆矩阵	81	5.3.3 常用的正交多项式	139
3.5.2 投入产出模型	82	5.3.4 离散点集上的正交多项式	141
3.5.3 用逆矩阵编写密电码	83	5.4 最佳平方逼近	142
3.6 本章小结	83	5.4.1 连续函数的最佳平方逼近	142
第 3 章实验 线性方程组的直接法和 迭代法	84	5.4.2 正交多项式拟合	144
习题 3	89	5.5 应用实例	146
第 4 章 函数插值	94	5.6 本章小结	149
4.0 概述	94	第 5 章实验 拟合	149
4.1 牛顿插值	94	习题 5	153
4.1.1 一般的牛顿插值	95	第 6 章 数值积分与微分	156
4.1.2 等距节点的牛顿插值	97	6.0 概述	156
4.2 拉格朗日插值	99	6.1 牛顿-科茨求积公式	157
4.2.1 拉格朗日插值多项式的构造 方法	99	6.1.1 插值型求积法	157
4.2.2 插值的误差估计	100	6.1.2 牛顿-科茨求积公式	158
4.2.3 拉格朗日插值算法在计算机上 的实现	103	6.1.3 牛顿-科茨公式的误差分析	160
4.2.4 插值函数收敛性的进一步 分析	105	6.2 复化求积公式	162
4.3 埃尔米特插值	105	6.2.1 复化梯形求积公式	162
4.3.1 两点三次埃尔米特插值	106	6.2.2 复化辛普森求积公式	163
4.3.2 $n+1$ 个节点埃尔米特插值	107	6.2.3 事后误差估计	164
4.4 分段低次插值	108	6.3 外推原理与龙贝格求积法	165
4.4.1 分段线性插值	108	6.3.1 外推原理	165
4.4.2 分段三次埃尔米特插值	110	6.3.2 龙贝格求积法	166
4.4.3 保形插值	112	6.4 高斯求积公式	167
		6.4.1 高斯求积公式的基本理论	167
		6.4.2 常用高斯求积公式	169
		6.4.3 高斯求积公式的余项与稳 定性	171
		6.5 数值微分	172
		6.5.1 插值型求导公式	172

6.5.2 三次样条求导	174	8.4.2 QR 算法及其收敛性	220
6.5.3 数值微分的外推算法	174	8.4.3 带原点位移的 QR 算法	222
6.6 应用实例	175	8.5 应用实例	224
6.7 本章小结	177	8.6 本章小结	225
第 6 章实验 数值积分计算	177	第 8 章实验 矩阵特征值与特征向量 的计算	226
习题 6	180	习题 8	230
第 7 章 非线性方程和方程组的 数值解法	182	第 9 章 常微分方程初值问题的 数值解法	232
7.0 概述	182	9.0 概述	232
7.1 方程求根的二分法	183	9.1 欧拉方法	232
7.2 一元方程的不动点迭代法	184	9.1.1 欧拉方法及其有关的方法	232
7.2.1 不动点迭代法及其收敛性	184	9.1.2 局部误差和方法的阶	235
7.2.2 局部收敛性和加速收敛法	187	9.2 龙格-库塔方法	236
7.3 一元方程的常用迭代法	190	9.2.1 龙格-库塔方法的基本思想	236
7.3.1 牛顿迭代法	190	9.2.2 几类显式龙格-库塔方法	237
7.3.2 割线法与抛物线法	192	9.3 单步法的收敛性和稳定性	240
7.4 非线性方程组的数值解法	194	9.3.1 单步法的收敛性	240
7.4.1 非线性方程组的不动点 迭代法	194	9.3.2 单步法的稳定性	241
7.4.2 非线性方程组的牛顿法	197	9.4 线性多步法	243
7.4.3 非线性方程组的拟牛顿法	199	9.4.1 基于数值积分的方法	243
7.5 应用实例	201	9.4.2 基于泰勒展开的方法	245
7.6 本章小结	202	9.4.3 预估-校正算法	247
第 7 章实验 非线性方程求解	202	9.5 一阶微分方程组的数值解法	249
习题 7	206	9.5.1 一阶微分方程组和高阶方程	249
第 8 章 矩阵特征值问题的 数值解法	209	9.5.2 刚性方程组	250
8.0 概述	209	9.6 边值问题的数值解法	252
8.1 特征值问题的性质与估计	209	9.6.1 打靶法	252
8.2 乘幂法和反幂法	210	9.6.2 差分方法	255
8.2.1 乘幂法和加速方法	210	9.7 应用实例	257
8.2.2 反幂法和原点位移	212	9.8 本章小结	258
8.3 雅可比方法	214	第 9 章实验 常微分方程初值问题	258
8.4 QR 算法	217	习题 9	262
8.4.1 化矩阵为海森伯格形	217	部分习题参考答案	265
		参考文献	278

第1章

数值计算工具 Mathematica

1.0 概述

Mathematica 是 1988 年美国 Wolfram Research 公司成功开发的综合性数学软件包。Wolfram Research 是美国物理学家、复杂系统和复杂网络理论先驱 Stephen Wolfram 创办并领导的一个公司，已将 Mathematica 的版本从 MS DOS 386 V12、V2.0 For Windows 持续升级到 V7.0 For Windows，如今 V7.0 For Windows 版本在世界上广为流行，2009 年针对中国用户推出了简体中文版。Wolfram Research 公司的统计显示，在美国每年有几千万人使用着 Mathematica 的不同版本，在其他国家和地区有超过两百万的 Mathematica 用户。全球《财富》500 强企业基本都在使用 Mathematica。Mathematica 面向的是具有一定的数学知识但并不具有很多计算机知识的科研工作者，因此在科研和高等院校中有着广泛的应用。

Mathematica 最早是用于量子力学研究的，主要用于工程计算领域，近年来应用领域逐步拓宽。它处理一些基本数学计算的能力也在逐步提高，比如求极限、求微分、求积分、解微分方程等。

Mathematica 是第一个将数值计算、符号运算和图形显示有机结合在一起的数学软件，其工作环境非常人性化，使用者在 Notebook 环境下输入表达式命令后，系统立即进行处理，然后返回结果。

Mathematica 特别擅长符号运算。当使用者输入一个表达式后，系统在大量的对应法则中寻找最好的等价结果。比如，Mathematica 可以作多项式的因式分解，求函数的导函数，求不定积分等。

Mathematica 在数值计算时能尽可能地保持计算的精确度。对整数运算，结果不受字段长度的限制；而对实数运算，则可以根据使用者的需要，给出任意位的有效数字。

Mathematica 不仅可以进行基本的计算，还可以进行图形处理，用 Mathematica 可以作出精美的二、三维图形。Mathematica 甚至还能对声音进行处理，也就是说，它可以让一个函数产生一个声音，并且输出表示该声音的波形。Mathematica 是一个宝库，它的许多潜能等待着有激情、有想象力的用户来开发。

数学软件 Mathematica 是学习和进行数值分析的好帮手，相信你一旦开始接触它，就会因它的友好和强大而爱不释手。

1.1 Mathematica 入门

1.1.1 Mathematica 的启动

在个人计算机上正确安装了 Mathematica 软件后，就会在 Windows 下出现 Mathematica 的

图标, 双击图标打开 Mathematica 的工作界面, 如图 1-1 所示。

和 Windows 的窗口一样, Mathematica 的 Notebook 也是一个可以缩放的窗口, 在上面可以进行各种数学计算和绘图。最上面是 Notebook 的文件名, 其下面是一个功能菜单条, 主要区域是工作窗口, 可以同时打开多个工作窗口, 使用起来格外方便。

Mathematica 的用法非常简单, 只要在工作区输入计算式, 然后同时按下 Shift 键和 Enter 键, 就可以执行运算, 随即给出计算的结果。

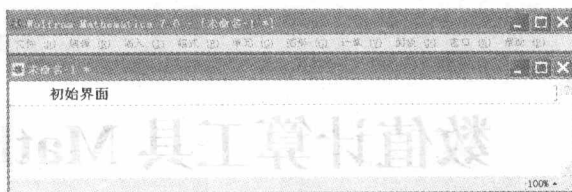


图 1-1

【例 1】计算 $3+2^3-\frac{1}{2}\times 15$ 。

解 输入

$3+2^3-1/2*15$

输出

$7/2$

【例 2】解方程 $ax^2+bx+c=0$ 。

解 输入命令

`Solve[a*x^2+b*x+c==0,x]`
`x/.%`

输出

$\{(-b-\sqrt{b^2-4ac})/(2a)\}, (-b+\sqrt{b^2-4ac})/(2a)\}$

【例 3】作正弦函数的图形。

解 输入命令

`Plot[Sin[x],{x,0,2 Pi}]`

输出图形见图 1-2。

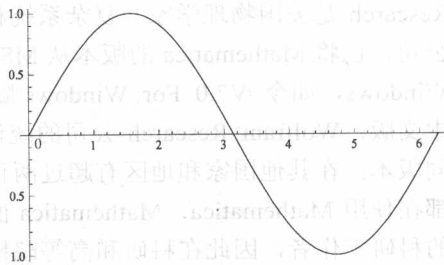


图 1-2

从以上几个例子可以看出, 在 Mathematica 环境下 Notebook 就像一个人机对话的工作台面, 写一条命令, 系统立刻执行并给出结果。

1.1.2 Mathematica 的菜单项

本小节简单介绍 Mathematica 的几个主要菜单的内容。

1. 文件

“文件”菜单的主要功能和其他应用软件基本相同, 其中有新建、打开、保存、另存、关闭以及打印等功能。

开始工作后, 第一件要做的事是把你的工作保存起来, 在“文件”菜单中选择“另存”, 选择储存的位置, 填写所要储存文件的文件名, 确定即可。退出 Mathematica 也利用“文件”菜单, 但是通常的方法是直接单击窗口左上角的“关闭”按钮。

2. 编辑

“编辑”菜单中有剪切、拷贝、粘贴、查找等功能。

3. 格式

“格式”菜单中有字体、形状、大小、颜色、背景等选项。在编写程序的过程中, 有时需

要用中文对程序段作解释,这时就可以在“格式”菜单中选取中文格式,比如用宋体。但是在程序中用中文作解释的部分要用“(*)”和“(*)”括起来,这样,程序运行时就会把这部分看做解释语句,不会作任何运算。需要注意的是“(*)”和“(*)”要在英文状态下输入。

4. 面板

在 Mathematica 7.0 的“面板”菜单中有几个输入助手——书写、数学、课堂助手,它们是快捷输入方式,如图 1-3 所示。

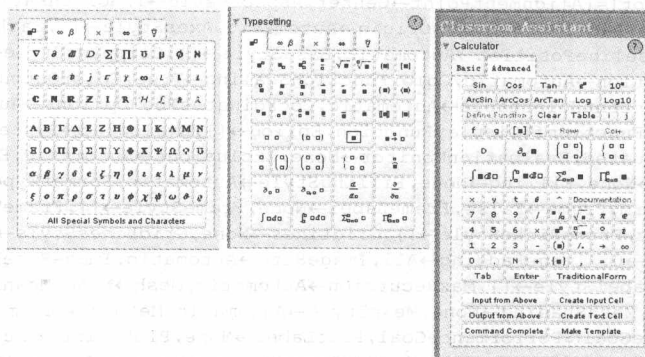


图 1-3

当需要输入键盘上没有的符号(比如希腊字母)时,可以打开这些面板。需要特别注意的是,课堂助手面板上的函数和计算符号都是可以用来真正运算的。比如,单击“ArcSin”,在工作窗口出现 `ArcSin[expr]`,将光标移到 `expr` 处,输入 0.5,按 Shift+Enter 键,立刻得到结果。

【例 4】利用面板上的符号求无穷级数的和。

解

输入命令

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}$$

输出

$$\frac{\pi^2}{6}$$

见图 1-4。

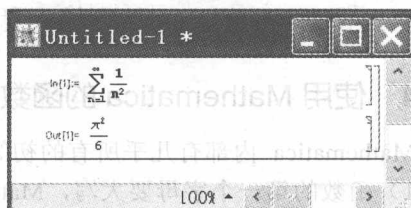


图 1-4

5. 帮助

“帮助”菜单是学习 Mathematica 的好助手,通过弹出的帮助窗口,可以获得命令的用法、范例、相关的知识所在的章节等许多信息。

1.1.3 从 Mathematica 获得信息

1. 使用“?”获得帮助

【例 5】如果希望知道绘图命令的用法,而又只记得绘图命令是从字母“P”开头的,则先查询所有“P”开头的函数(用“*”表示通配符):

?P*

系统给出提示信息(有删节):

PackingMethod,	PeriodicInterpolation,	PositiveDefiniteMatrixQ,
PaddedForm,	Permutations,	PossibleZeroQ,
Padding,	Pi,	Postfix,
PadeApproximant,	Pick,	PostScript,
PaletteNotebook,	PlayRange,	Precision,

PalettePath,
Pane,
PaneBox,

Plot,
Plot3D,
Plot3Matrix,

PrecisionGoal,
PreDecrement,
PreemptProtect,

要获得命令 Plot[] 的帮助, 输入:

?Plot

显示:

```
System`Plot
{ {Attributes[Plot]={HoldAll,Protected}},
{Options[Plot]={AlignmentPoint->Center,AspectRatio->1/GoldenRatio,Axes->True,AxesLabel->None,AxesOrigin->Automatic,AxesStyle->{},Background->None,BaselinePosition->Automatic,BaseStyle->{},ClippingStyle->None,ColorFunction->Automatic,ColorFunctionScaling->True,ColorOutput->Automatic,ContentSelectable->Automatic,CoordinatesToolOptions->Automatic,DisplayFunctionf$DisplayFunction,Epilog->{},Evaluated->System`Private`$Evaluated,EvaluationMonitor->None,Exclusions->Automatic,ExclusionsStyle->None,Filling->None,FillingStyle->Automatic,FormatTypeEffTradditionalForm,Frame->False,FrameLabel->None,FrameStyle->{},FrameTicks->Automatic,FrameTicksStyle->{},GridLines->None,GridLinesStyle->{},ImageMargins->0.,ImagePadding->All,ImageSize->Automatic,ImageSizeRaw->Automatic,LabelStyle->{},MaxRecursion->Automatic,Mesh->None,MeshFunctions->{#1&,MeshShading->None,MeshStyle->Automatic,Method->Automatic,PerformanceGoalf$PerformanceGoal,PlotLabel->None,PlotPoints->Automatic,PlotRange->{Full,Automatic},PlotRangeClipping->True,PlotRangePadding->Automatic,PlotRegion->Automatic,PlotStyle->Automatic,PreserveImageOptions->Automatic,Prolog->{},RegionFunction->(True&),RotateLabel->True,Ticks->Automatic,TicksStyle->{},WorkingPrecision->MachinePrecision}}
```

2. 提示信息

当用户输入错误时, Mathematica 会给出出错信息。

【例 6】当输入 $2/(3-3)$ 时, 系统提示零不能做分母, 给出的结果是无穷大。

```
Power::infy: Infinite expression 1/0 encountered.
ComplexInfinity
```

1.1.4 使用 Mathematica 的函数

Mathematica 内部有几乎所有的初等函数, 它们的输入有一定的格式。

- 1) 函数的第一个字母要大写, Mathematica 区分大小写。
- 2) 函数的自变量必须放在方括号内。
- 3) 有的函数有两个自变量, 要用 “,” 号隔开。

Mathematica 中常用的函数如表 1-1 所示。

表 1-1

函 数	功 能	函 数	功 能
Exp[x]	指数函数	Log[x]	对数函数
Sqrt[x]	平方根函数	Log[b,x]	以 b 为底的对数函数
Sin[x]	正弦函数	Cos[x]	余弦函数
Tan[x]	正切函数	Cot[x]	余切函数
ArcSin[x]	反正弦函数	ArcCos[x]	反余弦函数
ArcTan[x]	反正切函数	Abs[x]	绝对值函数
Sinh[x]	双曲正弦函数	Cosh[x]	双曲余弦函数
Tanh[x]	双曲正切函数	$n!$	n 的阶乘函数
ArcSinh[x]	反双曲正弦	ArcCosh[x]	反双曲余弦

Mathematica 中还定义了许多种类的函数, 如组合函数、数论函数、正交多项式函数等。表 1-2 列出其中的主要函数, 表 1-3 列出正交多项式函数。

表 1-2

函 数	功 能
Binomial[n,m]	从 n 个元素中每次取 m 个的组合数
$n!$	n 个元素的全排列数
Prime[k]	第 n 个质数
FactorInteger[n]	列出 n 的质因子及其指数

表 1-3

函 数	功 能
LegendreP[n,x]	勒让德函数
ChebyshevT[n,x]	切比雪夫函数
LaguerreL[n,x]	拉盖尔函数
HermiteH[n,x]	埃尔米特函数

【例 7】 构造杨辉三角形.

解 输入命令

```
Table[Binomial[n,k],{n,0,5},{k,0,n}];
TableForm[%]
```

输出

```
1
1, 1
1, 2, 1
1, 3, 3, 1
1, 4, 6, 4, 1
1, 5, 10, 10, 5, 1
```

【例 8】 画出勒让德函数的图形.

解 输入命令

```
g=Table[1,{i,1,6}];
For[i=1,i<=6,i++, g[[i]]=Plot[LegendreP[i,x],
{x,-1,1},DisplayFunction Identity];
]
Show[GraphicsArray[{{g[[1]],g[[2]],g[[3]]},
{g[[4]],g[[5]],g[[6]]}},DisplayFunction->$DisplayFunction]
```

输出图形如图 1-5 所示.

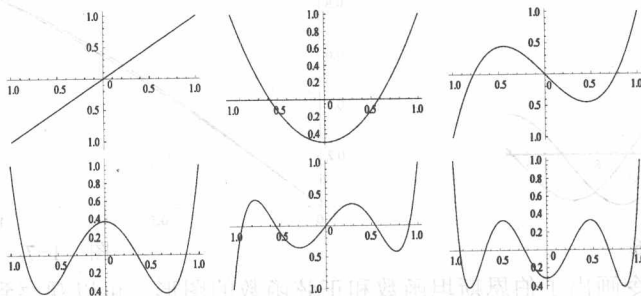


图 1-5

1.2 强大的绘图功能

计算的可视化是学习数值分析的有力工具, Mathematica 具有十分强大的画图功能, 图形作为计算结果的表达方式之一, 可以让我们直观地看到近似程度的好与坏, 下面就来介绍几种主要的作图命令.

1.2.1 基本作图命令

1) 二维图形函数 Plot[f,{x,xmin,xmax}]

二维参数画图

ParametricPlot[{x[t],y[t]},{t,tmin,tmax}]

极坐标作图

PolarPlot[10 Sin[13t],{t,θ,Θ}]

2) 三维图形函数 $\text{Plot3D}[f, \{x, x_{\min}, x_{\max}\}, \{y, y_{\min}, y_{\max}\}]$

三维参数画图 $\text{ParametricPlot3D}[\{x[u,v], y[u,v], z[u,v]\}, \{x, x_1, x_2\}, \{y, y_1, y_2\}, \{z, z_1, z_2\}]$

3) 散点图函数 $\text{ListPlot}[\{x_1, y_1\}, \{x_2, y_2\}, \dots, \{x_n, y_n\}]$

4) 画条形图和百分比图 $\text{BarChart}[\text{data}]$ 、 $\text{PieChart}[\text{data}]$

【例 1】画出贝塞尔函数的图形.

解 输入命令

```
Plot[{BesselJ[0, x], BesselJ[1, x], BesselJ[2, x]}, {x, 0, 10},
PlotStyle {RGBColor[0, 1, 0], RGBColor[0, 0, 1],
RGBColor[1, 0, 0]}]
```

输出图形见图 1-6.

【例 2】对于伯恩斯坦函数 $\sum_{k=0}^n f\left(\frac{k}{n}\right) C_n^k x^k (1-x)^{n-k}$, 令 $f(x) = \sin x$, $n=5$, 画出 5 次伯

恩斯斯坦函数 $B[5, x]$ 的图形与 $f(x) = \sin x$ 的图形.

解 输入命令

```
f[x_] := Sin[x]; n = 5;
P[x_, n_Integer, k_Integer] := Binomial[n, k] * x^k *
(1-x)^(n-k);
B[n_Integer, x_] := Sum[f[k/n] P[x, n, k],
{k, 0, n}];
t1 = Plot[B[n, x], {x, 0, Pi/2},
PlotStyle -> RGBColor[1, 0, 0]];
t2 = Plot[Sin[x], {x, 0, Pi/2}];
Show[t1, t2]
```

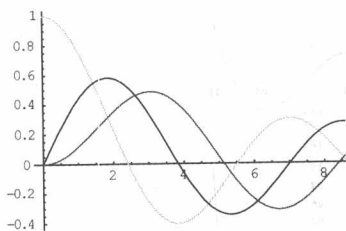


图 1-6

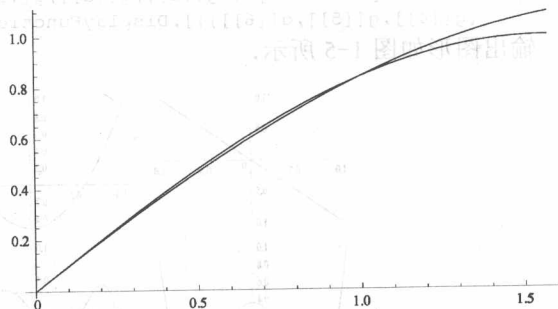


图 1-7

这里用 $\text{Plot}[]$ 命令画出了伯恩斯坦函数和正弦函数的图形. 可以观察到它们在区间 $(0, 1)$ 上很接近, 见图 1-7.

【例 3】画出 $\begin{cases} x = \cos 19t \\ y = \sin 20t \end{cases}$ 在区间 $[0, 2\pi]$ 上的图形.

解 输入命令

```
ParametricPlot[{Cos[19 t], Sin[20 t]}, {t, 0, 2 Pi},
AspectRatio -> Automatic]
```

输出图形见图 1-8.

【例 4】画出极坐标方程的图形: 一朵有 13 片花瓣的菊花.

解 输入命令

```
PolarPlot[10 Sin[13 \theta], {\theta, 0, 2 Pi}]
```

输出图形见图 1-9.

【例 5】画出 $z = \sin xy$ 在区域 $D = \{(x, y) | 0 \leq x \leq 2\pi, 0 \leq y \leq 2\pi\}$ 上的图形.

解 输入命令

```
Plot3D[Sin[x y],{x,0,2*Pi},{y,0,2*Pi},PlotPoints→40];
```

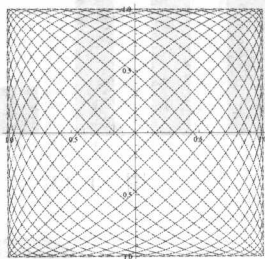


图 1-8

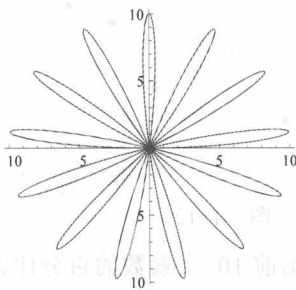


图 1-9

输出图形见图 1-10.

【例 6】画出二维正态分布密度函数 $f(x,y) = e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}$ 的图形.

解 输入命令

```
ParametricPlot3D[{u*Cos[v],u*Sin[v],Exp[-u^2/2]},{v,0,2*Pi},{u,0,4},  
PlotPoints→20,BoxRatios{1,1,0.4},Boxed→False,Axes→False]
```

运行程序, 输出图形见图 1-11.

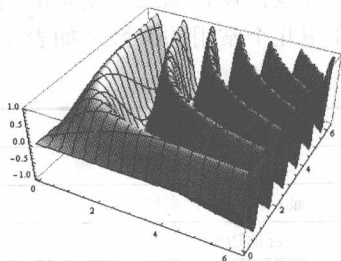


图 1-10

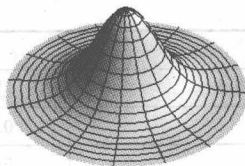


图 1-11

【例 7】散点图的画法.

解 输入命令

```
xk={6,8,10,12,14,16,18,20,22,24};  
yk={4.6,4.8,4.6,4.9,5.0,5.4,5.1,5.5,5.6,6.0};  
data=Table[{xk[[i]],yk[[i]]},{i,1,10}];  
t1=ListPlot[data,PlotStyle→PointSize[0.02]]
```

输出图形见图 1-12.

【例 8】画出统计数据的条形图.

解 先认识一个统计函数 BinCounts[数据,{最小值,最大值,增量}].

例如, 输入命令

```
BinCounts[{1,1,2,3,4,4,5,15,6,7,8,8,8,9,10,13},{0,15,3}]
```

则输出 {4,4,5,1,2}, 它表示落入区间 (0,3], (3,6], (6,9], (9,12], (12,15] 的数据个数分别是 4, 4, 5, 1, 2. 这个命令可以用来统计在相等间隔中数据的个数.

利用 BarChart[data]画出条形图, 注意在执行命令前, 先要调入专用的软件包 Graphics.

输入命令

```
<<Graphics  
BarChart[{4,4,5,1,2},BarGroupSpacing→0.5]
```

输出图形见图 1-13.