

21世纪高等院校选用教材

理工类

# 科学计算技术与Matlab

天津大学

刘则毅 主编

刘东毅 马逢时 毛云英 史道济 编著

科学出版社

21 世纪高等院校选用教材(理工类)

# 科学计算技术与 Matlab

天津大学

刘则毅 主编

刘东毅 马逢时 毛云英 史道济 编著

科学出版社

2001

## 内 容 简 介

本书结合 Matlab 工具箱的使用全面介绍常用的科学计算方法与技术。全书分三篇:数值计算方法,随机科学计算方法和最优化方法。本书不仅对 Matlab 各有关程序的使用方法做了详尽的介绍,还特别注重介绍有关的数学基本概念、数值方法的使用条件、计算机输出结果的含义。通过完整的应用例题的介绍,力图使读者能全面学会如何分析实际问题,如何动手编程计算及如何对获得的计算结果进行分析。对于各例题,书中均附有完整的通用的程序供使用者学习参考或直接调用。

本书读者对象为高等院校理工科学生、研究生、教师和有关的科技工作者。

### 图书在版编目(CIP)数据

科学计算技术与 Matlab/刘则毅主编. —北京:科学出版社,2001  
21 世纪高等院校选用教材(理工类)  
ISBN 7-03-009323-2

I. 科… II. 刘… III. ①科学计算-技术-高等学校-教材②计算机辅助计算-软件包, Matlab -高等学校-教材 IV. N32

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 22660 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

源海印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2001 年 9 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2001 年 9 月第一次印刷 印张:22 1/2

印数:1—5 000 字数:404 000

定价:29.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换(新欣))

## 前 言

20 世纪八九十年代,科学技术进入了迅猛发展的时期,信息科学飞速发展,各个学科相互交融,对每个科学工作者提出了更高的要求,他们不仅要全面掌握本专业的知识,还要有广博的知识视野,才能适应多学科的综合研究的需要.数学思想及数学方法正日益广泛地渗透到科学研究、工程设计、管理决策、商务运作、经济分析等各个领域.成为强有力的载体和工具.然而,面对近几十年来的数学领域的丰富的内容,一般非数学专业的科技工作者都会望而生畏,与此同时,计算机技术的发展为科学工作者应用数学知识提供越来越好的条件.

在研究与解决具体问题中,往往会遇到各种各样的数学计算,这些计算常常难以用手工精确而快捷地进行,必须借助于计算机编制相应的程序做近似计算,前些年流行用 Basic, Fortran 和 C 语言编制计算程序,既需要对有关算法有深刻的了解,还需要熟练地掌握所用语言的语法及编程技巧.对许多科学工作者而言,同时具备这两方面技能是很困难的,另外,繁杂的编制程序过程不仅耗去大量人力与物力,而且影响工作进程和效率.

美国 Mathwork 公司于 1984 年推出的“Matrix Laboratory”(缩写为 Matlab)软件包是当今世界上最好的科学计算工具.目前最新的 6. x 版本(Windows 环境)是一种功能强、效率高、便于进行科学和工程计算的交互式软件包.它集应用程序和图形于一体,具有极强的直观显示功能,因而非常便于使用. Matlab 软件包中包含有科研和工程设计中常用的各种数值计算方法的计算程序.大量的基本的数值计算可在 Matlab 环境下直接进行,其语言表达形式极其简洁,几乎与通常的数学表达形式相同,不需像传统的算法语言那样进行编程. Matlab 的简单的编程语言又使你可以把它的不同的计算程序连接起来完成复杂的数值计算过程. Matlab 可以在计算机上直接输出结果和精美的图形显示, Matlab 大大降低了对使用者的数学基础和计算机语言知识的要求,它是广大科技工作者的得力助手.

考虑到广大科技工作者的需要,我们编写的是在实际工作中应用最广泛的下列三个方面内容:数值计算方法、最优化计算方法与随机科学计算方法.本书不仅对 Matlab 程序的使用方法做了详尽的介绍,更特别注重介绍有关的数学基本概念、数值方法的使用条件、计算机输出结果的含义.通过完整的应

用例题的介绍,力图使读者能全面学会如何分析实际问题、如何动手编程计算及如何对获得的计算结果进行分析.对于各个例题,书中均附有完整的通用程序,供使用者学习参考或直接调用.除此之外,还有一些经常遇到的问题,如全局最优化问题,动态规划问题等,在现有的 Matlab 软件包中尚无现成程序,针对这些问题我们编写了相应的示范程序,这些示范程序将放在网站 [www.twt.edu.cn](http://www.twt.edu.cn) 及 [www.tju.edu.cn](http://www.tju.edu.cn) 上,读者可自由下载,为读者学习和使用提供了方便.

本书是在刘则毅的主持下编写完成的.数值计算方法由刘东毅编写,最优化计算方法由毛云英与刘则毅编写,随机科学计算方法由马逢时与史道济编写.由于作者水平有限,加之无同类书籍作参考,在书中肯定会有某些取材欠妥及叙述错讹或内容疏漏之处,敬请读者及专家学者批评指正.

编著者

2000年10月

## 前 言

20 世纪八九十年代,科学技术进入了迅猛发展的时期,信息科学飞速发展,各个学科相互交融,对每个科学工作者提出了更高的要求,他们不仅要全面掌握本专业的知识,还要有广博的知识视野,才能适应多学科的综合研究的需要.数学思想及数学方法正日益广泛地渗透到科学研究、工程设计、管理决策、商务运作、经济分析等各个领域.成为强有力的载体和工具.然而,面对近几十年来的数学领域的丰富的内容,一般非数学专业的科技工作者都会望而生畏,与此同时,计算机技术的发展为科学工作者应用数学知识提供越来越好的条件.

在研究与解决具体问题中,往往会遇到各种各样的数学计算,这些计算常常难以用手工精确而快捷地进行,必须借助于计算机编制相应的程序做近似计算,前些年流行用 Basic, Fortran 和 C 语言编制计算程序,既需要对有关算法有深刻的了解,还需要熟练地掌握所用语言的语法及编程技巧.对许多科学工作者而言,同时具备这两方面技能是很困难的,另外,繁杂的编制程序过程不仅耗去大量人力与物力,而且影响工作进程和效率.

美国 Mathwork 公司于 1984 年推出的“Matrix Laboratory”(缩写为 Matlab)软件包是当今世界上最好的科学计算工具.目前最新的 6. x 版本(Windows 环境)是一种功能强、效率高、便于进行科学和工程计算的交互式软件包.它集应用程序和图形于一体,具有极强的直观显示功能,因而非常便于使用. Matlab 软件包中包含有科研和工程设计中常用的各种数值计算方法的计算程序.大量的基本的数值计算可在 Matlab 环境下直接进行,其语言表达形式极其简洁,几乎与通常的数学表达形式相同,不需像传统的算法语言那样进行编程. Matlab 的简单的编程语言又使你可以把它的不同的计算程序连接起来完成复杂的数值计算过程. Matlab 可以在计算机上直接输出结果和精美的图形显示, Matlab 大大降低了对使用者的数学基础和计算机语言知识的要求,它是广大科技工作者的得力助手.

考虑到广大科技工作者的需要,我们编写的是在实际工作中应用最广泛的下列三个方面内容:数值计算方法、最优化计算方法与随机科学计算方法.本书不仅对 Matlab 程序的使用方法做了详尽的介绍,更特别注重介绍有关的数学基本概念、数值方法的使用条件、计算机输出结果的含义.通过完整的应

# 目 录

## 第一篇 数值计算方法

第一章 插值法 .....	( 1 )
§ 1. 多项式插值 .....	( 1 )
§ 2. 样条插值 .....	( 10 )
第二章 数值微分与数值积分 .....	( 17 )
§ 1. 数值微分与差分 .....	( 17 )
§ 2. 一元函数数值积分 .....	( 25 )
§ 3. 重积分的计算 .....	( 35 )
第三章 微分方程(组)数值解 .....	( 37 )
§ 1. 常微分方程组初值问题的数值解 .....	( 37 )
§ 2. 常微分方程初值问题数值解法程序的深入 .....	( 46 )
§ 3. 常微分方程组边值问题的数值解 .....	( 54 )
§ 4. 偏微分方程组数值解 .....	( 62 )
参考文献 .....	( 71 )
附录 1 程序及 m-文件索引 .....	( 72 )
附录 2 主包中部分程序目录 .....	( 73 )

## 第二篇 随机科学计算方法

第四章 数据的基本统计分析 .....	( 75 )
§ 1. 随机变量与分布 .....	( 75 )
§ 2. 描述性统计 .....	( 88 )
§ 3. 异常值 .....	( 96 )
§ 4. 参数估计 .....	( 99 )
§ 5. 假设检验 .....	( 104 )
第五章 方差分析 .....	( 112 )
§ 1. 单因素试验方差分析 .....	( 112 )
§ 2. 双因素试验方差分析 .....	( 117 )

---

§ 3. 多因素试验方差分析 .....	( 125 )
第六章 回归模型 .....	( 135 )
§ 1. 一元线性回归 .....	( 135 )
§ 2. 多元线性回归模型 .....	( 145 )
§ 3. 逐步回归 .....	( 150 )
§ 4. 多项式回归 .....	( 153 )
§ 5. 非线性回归分析 .....	( 156 )
§ 6. 广义线性模型 .....	( 163 )
第七章 非参数检验 .....	( 172 )
§ 1. 符号检验 .....	( 172 )
§ 2. 秩和检验 .....	( 176 )
§ 3. 符号秩和检验 .....	( 178 )
§ 4. 分布拟合检验 .....	( 180 )
第八章 多元统计分析 .....	( 188 )
§ 1. 主成分分析 .....	( 190 )
§ 2. 判别分析 .....	( 197 )
§ 3. 聚类分析 .....	( 205 )
§ 4. 多元方差分析及其聚类分析 .....	( 211 )
第九章 试验设计 .....	( 217 )
§ 1. 因子试验设计 .....	( 217 )
§ 2. 回归设计 .....	( 223 )
第十章 质量管理统计方法 .....	( 230 )
§ 1. 质量控制图 .....	( 230 )
§ 2. 工序能力统计分析 .....	( 238 )
第十一章 统计模拟计算方法 .....	( 243 )
§ 1. 随机数的产生 .....	( 243 )
§ 2. 应用举例及补充说明 .....	( 251 )
第十二章 统计工具演示 .....	( 254 )
§ 1. 分布函数及分布密度的计算 .....	( 254 )
§ 2. 多项式回归拟合预测的计算 .....	( 257 )
§ 3. 产生随机数的计算 .....	( 261 )
§ 4. 试验设计、响应曲面及非线性回归的演示 .....	( 262 )
参考文献 .....	( 267 )
附录 1 程序及 m-文件索引 .....	( 268 )



附录 2 统计工具箱目录 .....	( 269 )
--------------------	---------

### 第三篇 最优化方法

第十三章 最优化问题及优化工具箱简介 .....	( 279 )
§ 1. 最优化问题简介 .....	( 279 )
§ 2. 优化工具箱简介 .....	( 281 )
第十四章 无约束最优化与方程求根 .....	( 285 )
§ 1. 一般的无约束最优化 .....	( 285 )
§ 2. 线性方程组求解 .....	( 288 )
§ 3. 非线性方程求解 .....	( 290 )
第十五章 约束最优化 .....	( 295 )
§ 1. 一般的约束最优化 .....	( 295 )
§ 2. 二次规划 .....	( 299 )
§ 3. 线性规划 .....	( 301 )
§ 4. 运输问题 .....	( 304 )
第十六章 最小二乘优化 .....	( 307 )
§ 1. 非负线性最小二乘问题 .....	( 307 )
§ 2. 约束线性最小二乘 .....	( 309 )
§ 3. 非线性最小二乘 .....	( 312 )
§ 4. 非线性最小二乘拟合 .....	( 315 )
第十七章 动态规划 .....	( 319 )
§ 1. 多阶段决策问题及其动态规划方法 .....	( 319 )
§ 2. 投资问题 .....	( 323 )
§ 3. 生产与存贮问题 .....	( 325 )
§ 4. 设备更新问题 .....	( 330 )
第十八章 几种其他的最优化问题 .....	( 333 )
§ 1. 最小最大问题 .....	( 333 )
§ 2. 求全局最优解的模拟退火法 .....	( 335 )
参考文献 .....	( 348 )
附录 1 程序及 m-文件索引 .....	( 349 )
附录 2 优化工具箱目录(部分) .....	( 349 )

# 第一篇 数值计算方法

## 第一章 插值法

在实际中遇到的函数,有许多是在各种实验中测出数据,然后用表格方式给出的.例如通过实验观测,得出了某个函数  $y = f(x)$  在一系列点  $x_0, x_1, x_2, \dots$  上的函数值  $y_0, y_1, y_2, \dots$ , 或导数值  $y'_0, y'_1, y'_2, \dots$ , 但其他的  $x$  值所对应函数值或导数值等所需要相关的值是未知的.这种列表函数不便于分析其性质和变化规律,特别还不能直接求出表中没有列出的点处的函数值或导数值等.因此,常希望能找到这种函数的一解析表达式或近似表达式.然而在工程实践中,能找到满足一定要求的近似表达式即可.插值法就是寻求函数近似表达式的一种方法.可以用各种不同的函数来近似原来的函数,常用的函数为多项式函数和样条函数.

### § 1. 多项式插值

#### 1.1 问题描述

对于给定的数据表格:

$x$	$x_0$	$x_1$	$\dots$	$x_n$
$y = f(x)$	$y_0$	$y_1$	$\dots$	$y_n$

其中  $f(x)$  在区间  $[a, b]$  上连续,  $x_0, x_1, \dots, x_n$  为区间  $[a, b]$  上  $n+1$  互不相同的点,要求在一性质良好、易于计算的函数类  $\{P(x)\}$  中,找出一满足

$$P(x_i) = y_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n)$$

的函数  $P(x)$  作为  $f(x)$  的近似,这就是最基本的插值问题.插值法可依所选取的函数类来分类,如当函数  $P(x)$  为阶梯函数时,相应的插值问题称为阶梯函数.当函数  $P(x)$  为  $n$  次多项式时,相应的插值问题称为  $n$  次多项式插值,简称多项式插值,尤其当  $n=1$  时,称为线性插值,当  $n=2$  时,称为抛物插

值,当  $n=3$  时,称为立方插值.

在实际计算中,人们知道高次多项式插值误差较大,故而采用分段低次插值,即把插值区间  $[a, b]$  分成若干个小区间  $[x_{i-1}, x_i]$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ), 然后在每个小区间上进行低次(一次、二次或三次)多项式插值.

以上是一元插值,当实际问题是一个多元函数时,只要取函数类  $\{P(x)\}$  为多元函数即可,其原理是一样的,相应的插值问题称为多元插值.

## 1.2 程序及使用说明

在 Matlab“主包”里提供了一元、二元及三元以上插值程序,下面我们分别介绍:

### 1.2.1 一元插值

Matlab 中的函数 INTERP1 可实现一元插值,并指定插值方法.其调用格式如下:

$YI = \text{INTERP1}(X, Y, XI, \text{'method'})$

说明:(1) 对数据 X 和 Y 依选用的方法构造插值函数,并计算 XI 处的函数值,返回给 YI. 参数 methods 指定插值方法,其选项为:

'nearest'-nearest neighbor interpolation(最近邻插值,以数据 X 值为中心构造阶梯函数)

'linear'-linear interpolation(线性插值 缺省选项)

'spline'-cubic spline interpolation(三次样条插值)

'cubic'-cubic interpolation(三次多项式插值)

(2)所有的插值方法要求 X 的元素是单调的,可不等距.当 X 的元素是单调、等距的时,使用 '\* linear', '\* cubic', '\* nearest', 或 '\* spline' 选项可快速得到插值结果.如果 Y 矩阵,那么 Y 的各列将以 X 为公共的横坐标,计算多个(等于 Y 的列数, SIZE(Y, 2))插值函数,输出值 YI 将是 XI 维数  $\times$  SIZE(Y, 2) 矩阵.超出范围  $[Xmin, Xmax]$  的 XI 值, YI 将返回 NaN.

表 1.1.1 四种插值法的比较(示例见例 1.1.1)

	占用内存	运算时间	函数特点
Nearest	最少	最少	不连续
Linear	$>N$	$>N$	连续但不光滑
Cubic	$>L, N$	$>L, N$	连续可微
Spline	$<C$	$>C$	二阶连续可微

Matlab 还提供一个快速一元插值函数,其调用格式如下:

$$F = \text{INTERP1Q}(X, Y, XI)$$

当 X 数据不等距时, INTERP1Q 比 INTERP1 快,但当 X 数据等距时,不如使用 ' \* linear' 选项的 INTERP1 快. INTERP1Q 的使用与 INTERP1 类似,这里不再重复.

### 1.2.2 二元插值函数

二元插值函数在图像处理和数据可视化领域有广泛应用. Matlab 有两个函数 GRIDDATA 和 INTERP2 可以实现此功能.

1.2.2.1 随机数据点的插值:GRIDDATA. 其调用格式为

$$(1) ZI = \text{GRIDDATA}(X, Y, Z, XI, YI)$$

依据已知数据 X、Y、Z, 构造插值函数  $Z = F(X, Y)$ , 返回在相应数据点 XI, YI 处函数值  $ZI = F(XI, YI)$ .

$$(2) [XI, YI, ZI] = \text{GRIDDATA}(X, Y, Z, XI, YI)$$

这里  $[XI, YI] = \text{MESHGRID}(XI, YI)$ .

$$(3) [\dots] = \text{GRIDDATA}(\dots, 'method')$$

这里 method 是指下列方法之一:

'linear'      Triangle-based linear interpolation (缺省的方法).

'cubic'      Triangle-based cubic interpolation.

'nearest'    Nearest neighbor interpolation.

'v4'          Matlab 4 griddata method.

说明:当方法 'linear' 和 'nearest' 生成曲面函数分别有不连续一阶导数和不连续时, 'cubic' 和 'v4' 方法将生成光滑曲面. 除 'v4' 外所有的方法都基于数据的 Delaunay 三角剖分. XI 可以是行向量, 此时它指定一每行均为 XI 的矩阵, 同样 YI 可以是列向量, 此时它指定一每列均为 YI 的矩阵. 参见 INTERP2, DELAUNAY, MESHGRID.

1.2.2.2 单调数据点插值:INTERP2, 其调用格式为

$$(1) ZI = \text{INTERP2}(X, Y, Z, XI, YI)$$

矩阵 X 和 Y 指定 2-D 区域数据点, 在这些数据点处数值矩阵 Z 已知, 依此构造插值函数  $Z = F(X, Y)$ , 返回在相应数据点 XI, YI 处函数值  $ZI = F(XI, YI)$ . 对超出范围  $[Xmin, Xmax, Ymin, Ymax]$  的 XI 和 YI 值将返回  $ZI = \text{NaN}$ .

$$(2) ZI = \text{INTERP2}(Z, XI, YI)$$

这里假设  $X = 1:N, Y = 1:M$  和  $[M, N] = \text{SIZE}(Z)$ .

(3)  $ZI = \text{INTERP2}(\dots, 'method')$

这里 `method` 是指下列方法之一:

'nearest' —nearest neighbor interpolation  
 'linear' —bilinear interpolation(缺省的方法)  
 'cubic' —bicubic interpolation  
 'spline' —spline interpolation

说明:所有的插值方法要求  $X$  和  $Y$  的元素是单调的,即单增或单减,可不等距.当  $X$  和  $Y$  的元素是单调、等距时,使用 '`* linear`', '`* cubic`', '`* nearest`',或 '`* spline`'选项可快速得到插值结果.对一元向量  $x_i$  和  $y_i$ ,应先使用指令  $[XI, YI] = \text{meshgrid}(x_i, y_i)$  生成数据点矩阵  $XI, YI$ .最邻近插值法('nearest')可用于医学图像处理,双立方插值法('cubic')常用于图像处理(医学问题除外).相关指令可参见 `INTERP1`, `INTERP3`, `INTERPN`, `MESHGRID`, `GRIDDATA`.

1.2.3  $n$  元函数插值 对于三元及以上多元函数插值可调用 `INTERP3` 和 `INTERPN`.它们最一般的调用格式分别为:

(1)  $VI = \text{INTERP3}(X, Y, Z, V, XI, YI, ZI, 'method')$

(2)  $VI = \text{INTERPN}(X1, X2, X3, \dots, V, Y1, Y2, Y3, \dots, 'method')$

其使用方法参见 `INTERP1`, `INTERP2` 或查看在线帮助.

### 1.3 应用示例

例 1.1.1 以满足一元函数  $y = \sin(x)$  的数据进行插值为例,比较各种插值方法.参见(图 1.1.1)

编写程序如下:

```
x = [0:0.5 * pi:2 * pi 2 * pi + 0.6 * pi:0.4 * pi:4 * pi];
y = sin(x); xi = 0:0.05 * pi:4 * pi;
y_nearest = interp1(x, y, xi, 'nearest');
y_linear = interp1(x, y, xi);
y_spline = interp1(x, y, xi, 'spline');
y_cubic = interp1(x, y, xi, 'cubic');
plot(x, y, 'o', xi, y_nearest, '-', xi, y_linear, 'k--', xi,
      y_spline, 'k:', xi, y_cubic, 'k-');
xlabel('x'); ylabel('y');
legend('original data', 'nearest', 'linear', 'spline', 'cubic')
```

例 1.1.2 在某处测得海洋不同深度处水温如下:

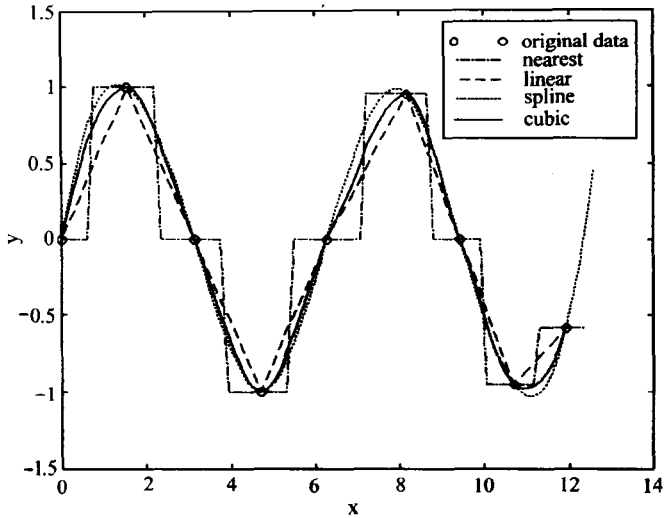


图 1.1.1 各种插值法的比较

深度(M)	446	714	950	1422	1634
水温(℃)	7.04	4.28	3.40	2.54	2.13

利用分段线性插值函数, 求在深度 500 米、1000 米、1500 米处的水温。  
编写程序如下:

```
M = [466 714 950 1422 1634];
```

```
C = [7.04 4.28 3.40 2.54 2.13];
```

```
Mi = [500 1000 1500];
```

```
Ci = interp1(M, C, Mi);
```

运行结果:

```
Ci = 6.6616    3.3089    2.3892
```

即在深度 500 米、1000 米、1500 米处的水温分别近似为 6.66℃, 3.31℃ 和 2.39℃。

例 1.1.3 先利用随机产生的数据  $x, y$ , 通过函数  $z = xye^{-(x^2+y^2)}$  生成数据  $z$ , 然后利用数据  $x, y, z$  绘出函数  $z = xye^{-(x^2+y^2)}$  的图形。(真实图形见

图 1.1.5)

编写程序如下:

首先,生成随机数据  $x, y, z$ , 它们的空间分布见图 1.1.2.

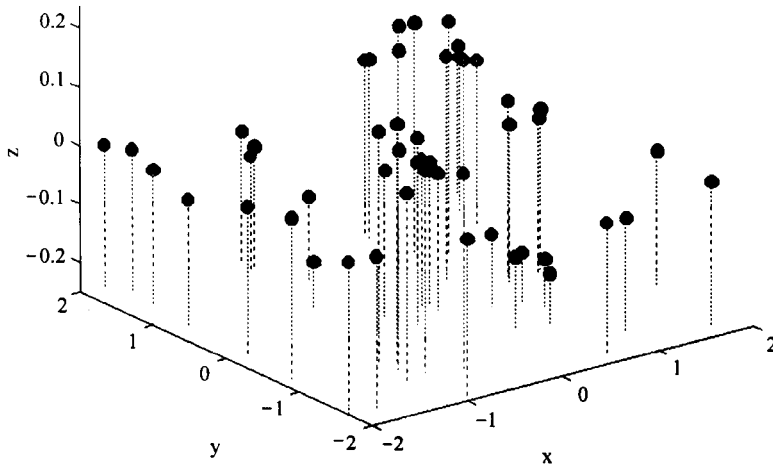


图 1.1.2 随机数据点的空间分布

```

rand('seed',0);
x = rand(50,1) * 4 - 2;
y = rand(50,1) * 4 - 2;
z = x .* y .* exp(-x.^2 - y.^2);
figure(1)
zmax = max(z);
zmin = min(z);
bm = zmin - 0.25 * (zmax - zmin);
top = zmax + 0.25 * (zmax - zmin);
plot3(x, y, z, '.', 'markersize', 4 * 6);
hold on
z0 = bm * ones(1, length(z));
plot3([x';x'], [y';y'], [z';z0], 'k:');
hold off
set(gca, 'Zlim', [bm, top]);
xlabel('x'); ylabel('y'); zlabel('z');

```

```
grid off
```

再进行二元插值, 求出绘图要使用矩形网格点上的值, 然后绘图, 见图 1.1.3.

```
T = -2:0.1:2;
[Xi, Yi] = meshgrid(T, T);
Zi = griddata(x, y, z, Xi, Yi);
figure(2)
mesh(Xi, Yi, Zi);
hidden off
hold on
plot3(x, y, z, 'o', 'markersize', 4 * 6)
colormap([0.5, 0.5, 0.5])
hold off
```

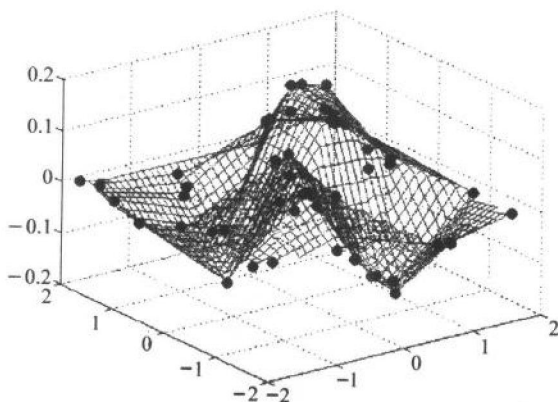


图 1.1.3 随机数据的二元插值

例 1.1.4 对于例 3 中的函数使用等距单调的数据点(64 个)进行二元插值, 参见图 1.1.4, 图 1.1.5 是真实的图形.

```
x = -2:0.5:2;
y = -2:0.5:2;
[x, y] = meshgrid(x, y);
z = x. * y. * exp(-x.^2 - y.^2);
T = -2:0.1:2;
[Xi, Yi] = meshgrid(T, T);
```



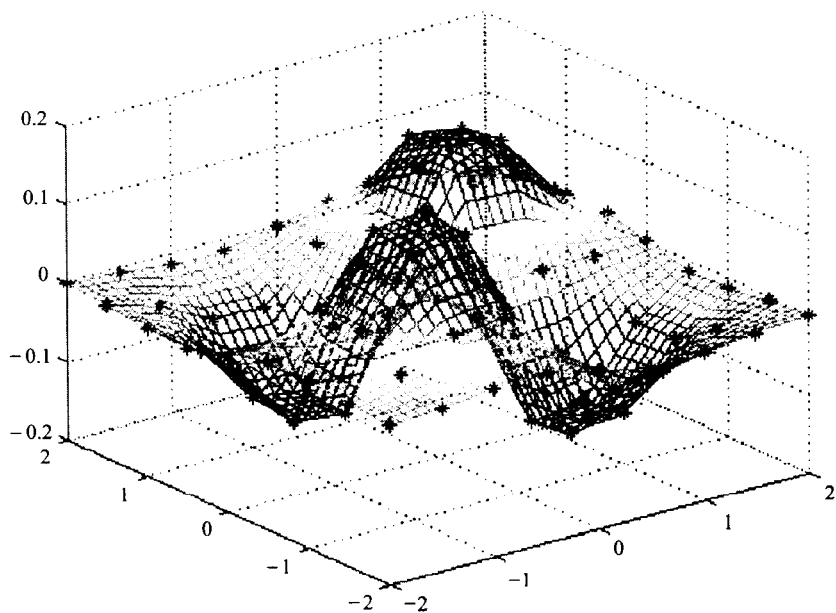


图 1.1.4 等距单调数据点的二元插值

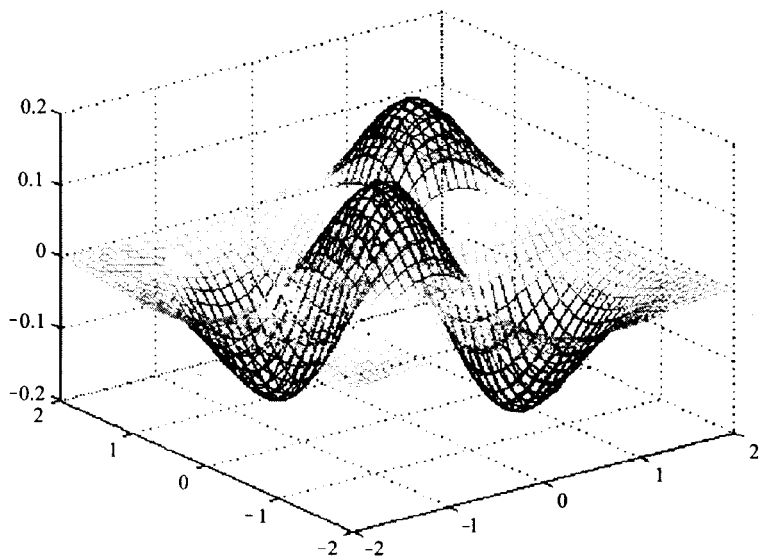


图 1.1.5 函数  $z = xye^{-(x^2+y^2)}$  真实图形