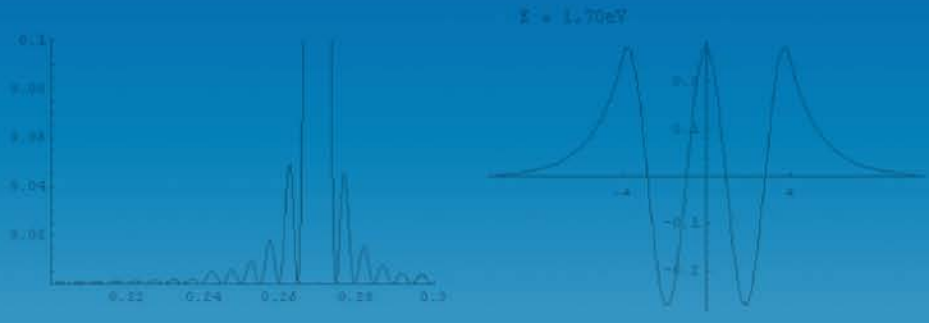
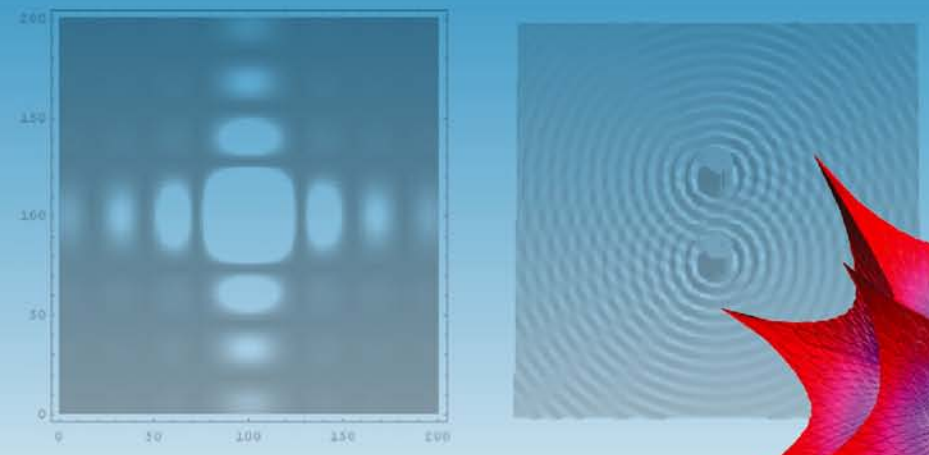
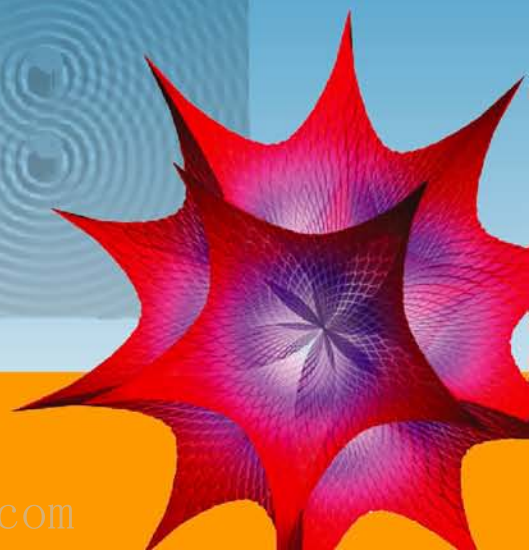
Mathematica与大学物理计算

董 键 著







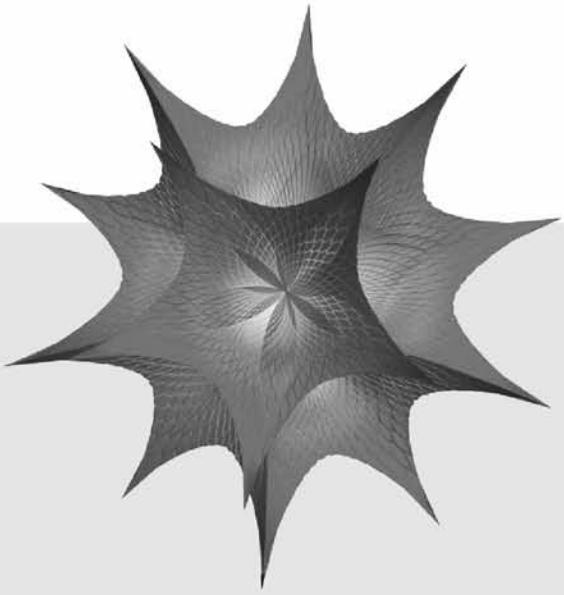


清华大学出版社

需要全本请访问 www.ertongbook.com

Mathematica 与大学物理计算

董 键 著



清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书以 Mathematica 为计算工具，引导读者通过物理计算更好地理解物理学。全书共分 Mathematica 基础、物理学基础、电磁学部分、光学部分、量子部分几方面，汇集了 Mathematica 众多的用于物理计算的函数功能，例题丰富。

本书可供学生编程模仿，同时也具有重要的学术价值，适合大学生、研究生、物理教师（包括中学物理教师）、科研人员以及物理爱好者学习参考。

版权所有，侵权必究。侵权举报电话：010-62782989　13701121933

图书在版编目（CIP）数据

Mathematica 与大学物理计算/董键著. --北京：清华大学出版社，2010.9
ISBN 978-7-302-23115-8

Ⅰ. ①M…　Ⅱ. ①董…　Ⅲ. ①数学物理方法－数值计算－应用软件，Mathematica　Ⅳ. ①O411.1　②O245

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2010）第 113982 号

责任编辑：朱红莲　李　嫚
责任校对：赵丽敏
责任印制：

出版发行：清华大学出版社　　**地　　址**：北京清华大学学研大厦 A 座
http://www.tup.com.cn　　**邮　　编**：100084
社　总　机：010-62770175　　**邮　购**：010-62786544
投稿与读者服务：010-62776969，c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质　量　反　馈：010-62772015，zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 刷 者：
装 订 者：
经　　销：全国新华书店
开　　本：185×260　　**印　张**：24.75　　**字　　数**：566 千字
版　　次：2010 年 9 月第 1 版　　**印　　次**：2010 年 9 月第1次印刷
印　　数：1～　000
定　　价：　.00 元

产品编号：034161-01

FOREWORD 前言

本书以 Mathematica 为计算工具，试图引导读者通过物理计算达到更好地理解物理学的目的。书中内容由简到繁，从比较简单的力学问题入手，为读者在问题提出和 Mathematica 编程方面打下一个良好的基础；随后讨论了频谱、能谱、傅里叶变换和相关等重要概念，以及卫星轨道面的不稳定。在电磁学部分，对一些重要的电磁学问题进行了引申讨论，并介绍了力线、磁场和电位等物理量的直接计算法、折线法、保角变换法、差分法、参数方程法、插值法等有效的计算方法。在光学部分，讨论了折射率连续分布介质中光路的计算问题，发展了界面上折射率跃变的光学系统中光路的计算法，并对光的衍射进行了模拟。在量子部分，既介绍了比较简单的量子问题的计算，也讨论了一些更加抽象的问题，例如量子态的叠加导致能级分裂、共振隧穿等，并介绍了 Mathematica 解决“边值问题”的功能。在随机运动部分，扼要介绍了概率统计的知识，以弥补学生在这方面的欠缺，然后模拟了分子的热运动，计算了粒子的平衡统计分布，并展示了过渡过程以及统计量的涨落性质，给读者提供了一个从力学角度理解热运动问题的视角。最后介绍了若干物理实验的误差分析，从中可以看出计算方法如何与实验问题相结合，成功地发现误差并减小误差。全书汇集了 Mathematica 众多的用于物理计算的函数功能，例题丰富，既可以供学生编程模仿，也有重要的学术价值，适合于大学生、研究生、物理教师（包括中学物理教师）、科研人员，以及物理爱好者学习参考。

本书的编写得到清华大学出版社编审人员的指导，在此致以衷心感谢。

读者在使用本书时若遇到问题，可以通过邮箱 qfdongjian@163.com 与作者联系，欢迎交流。

董　键

2010 年 7 月

CONTENTS 目录

第 1 章　初识 Mathematica …… 1

1.1　Mathematica 的窗口功能 …… 1
1.2　Mathematica 的变量与函数 …… 3
1.3　Mathematica 的程序输入、保存与运行 …… 4
1.4　Mathematica 的表型数据 …… 5
1.5　Mathematica 求解微分方程 …… 8

第 2 章　单摆 …… 11

2.1　单摆振动方程与数值解 …… 12
2.1.1　方程的推导与分析 …… 12
2.1.2　单摆方程的数值解 …… 13
2.2　振幅、周期和相位 …… 16
2.2.1　从数值解里求振幅和周期 …… 16
2.2.2　相位与“失步”现象 …… 18
2.2.3　周期与振幅的关系 …… 22
2.2.4　周期拟合公式所揭示的秘密 …… 24
2.2.5　单摆振动与正弦振动的差别 …… 25
2.2.6　本节附录：关于曲线拟合 …… 27
2.3　阻尼摆 …… 27
2.3.1　运动方程、数值解与相图 …… 27
2.3.2　周期与时间的关系 …… 29
2.3.3　小角度下的周期问题 …… 31
2.4　本章附录：无阻尼单摆周期的准确表达式 …… 32

第 3 章　复杂运动与计算误差 …… 33

3.1　弹簧摆 …… 33
3.1.1　运动方程与非周期轨道 …… 33
3.1.2　受阻尼的弹簧摆 …… 35
3.1.3　临界阻尼现象 …… 36

需要全本请访问 www.ertongbook.com

3.2 串联耦合摆…… 37
3.2.1 运动方程与非周期轨道 …… 37
3.2.2 运动的动画演示 …… 40
3.3 并联耦合摆…… 42
3.4 观察计算误差…… 46
3.4.1 计算误差的观察方法 …… 46
3.4.2 影响计算误差的因素 …… 47

第 4 章 频谱与相关 …… 52

4.1 傅里叶变换…… 52
4.2 弹簧摆的频谱…… 54
4.2.1 观察坐标的时间变化 …… 55
4.2.2 “硬算”频谱与能谱 …… 56
4.2.3 谱峰的提取与分析 …… 60
4.2.4 “旁瓣”的由来 …… 64
4.3 快速傅里叶变换…… 65
4.3.1 变换公式、变换函数与处理步骤…… 66
4.3.2 弹簧摆的能谱计算 …… 67
4.3.3 FFT 评注 …… 69
4.4 并联耦合摆的频谱…… 70
4.5 相关…… 76
4.5.1 “相关”的基本概念 …… 76
4.5.2 一个具有复杂相关性的例子 …… 79
4.5.3 相关运算函数 …… 82
4.5.4 正弦信号的相关与测量信号的提取 …… 83

第 5 章 卫星 …… 87

5.1 卫星运动的约化方程…… 87
5.1.1 约化方程的推导与轨道计算 …… 87
5.1.2 轨道参数的计算 …… 90
5.2 卫星轨道的变动…… 92
5.2.1 碰撞变轨 …… 92
5.2.2 非球对称引力场导致的变轨 …… 94
5.3 卫星轨道的分解与还原…… 96
5.3.1 轨道坐标及其傅里叶级数分解 …… 96
5.3.2 轨道还原…… 101
5.3.3 轨道的傅里叶积分法分解…… 103
5.3.4 傅里叶变换的几个问题…… 104

第 6 章 电 …… 107

6.1 美丽的电力线 …… 107
6.1.1 静电场方程与电力线方程 …… 107
6.1.2 单个点电荷电力线的直接计算 …… 108
6.1.3 两个点电荷部分电力线的直接计算 …… 109
6.1.4 电力线计算的“折线法” …… 111
6.1.5 电力线计算的“参数方程法” …… 113
6.2 简单而重要的电场 …… 116
6.2.1 例 1：单个带电圆线圈产生的电场和电力线 …… 116
6.2.2 例 2：两个平行带电圆线圈产生的电场与电力线 …… 121
6.2.3 例 3：线圈带电量与电压的关系 …… 127
6.2.4 例 4：半无限大平板金属带电后周围的电场 …… 129
6.2.5 例 5：两根平行金属圆直导体横截面上的电位与电荷分布 …… 133
6.3 电位的差分计算 …… 139
6.3.1 基本原理 …… 139
6.3.2 聚焦电极内的电位计算 …… 140
6.3.3 计算结果的存储和调用 …… 143
6.3.4 聚焦电极内电子的运动轨迹 …… 144
6.4 电路的计算 …… 146
6.4.1 例 1：直流电桥 …… 146
6.4.2 例 2：交流电路的稳态分析 …… 147
6.4.3 例 3：交流电路的瞬态分析 …… 149

第 7 章 磁 …… 151

7.1 磁场分布与磁力线的画法 …… 151
7.1.1 例 1：单个载流圆线圈周围的磁场与磁力线分布 …… 151
7.1.2 例 2：两根无限长平行载流双导线截面上的磁场及磁力线分布 …… 156
7.1.3 例 3：两个平行载流圆线圈产生的磁场与磁力线分布 …… 160
7.1.4 例 4：磁阱 …… 164
7.1.5 例 5：载流三相输电导线横截面上的磁力线分布 …… 167
7.1.6 例 6：通电螺线管的磁场和磁力线分布 …… 174
7.2 电子在磁场中的运动 …… 182
7.2.1 例 1：两个平行载流线圈对电子运动的磁约束 …… 182
7.2.2 例 2：磁控管内电子的运动 …… 188
7.2.3 例 3：磁控溅射中电子的运动 …… 192

第 8 章 光 …… 195

8.1 几何光学：连续介质的光路计算 …… 195

8.1.1 光线方程…… 195
8.1.2 模拟光在大气中的折射…… 196
8.2 几何光学：在折射率跃变介质中光路的计算 …… 197
8.2.1 基本原理…… 197
8.2.2 光路计算举例…… 200
8.3 波动光学：光衍射的计算 …… 212
8.3.1 例 1：单个圆孔的衍射 …… 213
8.3.2 例 2：三角形孔的衍射 …… 219
8.3.3 例 3：矩形孔的衍射 …… 221

第 9 章 量子…… 226

9.1 束缚态 …… 227
9.1.1 例 1：一维有限深势阱 …… 227
9.1.2 例 2：量子态的叠加与新能级的形成 …… 237
9.1.3 例 3：量子围栏 …… 247
9.2 散射 …… 256
9.2.1 有效质量近似…… 256
9.2.2 计算透射系数…… 259
9.3 能带 …… 261
9.3.1 周期性势场内的能量方程…… 262
9.3.2 能带的形成…… 268
9.4 束缚态的边值计算法 …… 270
9.4.1 一维方势阱束缚态的边值解法…… 270
9.4.2 复杂势函数情况下的边值问题解法…… 274
9.4.3 对边值计算结果的修正…… 279

第 10 章 概率与随机运动 …… 283

10.1 概率统计基础 …… 284
10.1.1 概率的公理化定义 …… 284
10.1.2 重要的概率公式 …… 285
10.1.3 概率计算的例子 …… 285
10.1.4 随机变量 …… 287
10.1.5 平均值与方差 …… 287
10.1.6 二项分布 …… 288
10.1.7 概率用于物理计算 …… 290
10.2 在概率指导下…… …… 293
10.2.1 例 1：谁先打第一枪 …… 293
10.2.2 例 2：抽签原理 …… 294

10.2.3 例 3：公共汽车的门 …… 294
10.2.4 例 4：粗大测量数据的剔除 …… 295
10.2.5 例 5：热处理效果对比 …… 297
10.2.6 例 6：疾病普查 …… 299
10.2.7 例 7：确定进货量 …… 301
10.3 模拟理想气体分子的热运动 …… 303
10.3.1 引言 …… 303
10.3.2 同种分子碰撞的理论 …… 304
10.3.3 器壁的作用 …… 305
10.3.4 模拟方案 …… 305
10.3.5 一些模拟结果 …… 305
10.3.6 本节小结 …… 312
10.4 布朗运动的模拟 …… 313
10.4.1 布朗运动的爱因斯坦关系 …… 313
10.4.2 布朗运动的模拟 …… 314
10.5 布朗运动的统计特性——热平衡 …… 318
10.5.1 模拟计算爱因斯坦关系 …… 318
10.5.2 布朗粒子的能量统计特性 …… 321
10.6 布朗运动的统计特性——过渡状态 …… 322
10.7 模拟树叶的布朗运动 …… 324

第 11 章 实验 …… 328

11.1 模拟机械波的干涉 …… 328
11.1.1 波的叠加公式 …… 328
11.1.2 模拟同频率波的干涉 …… 329
11.1.3 模拟频率不同、波速不同的波的干涉 …… 330
11.2 数据拟合与实验误差 …… 332
11.2.1 例 1：测量灵敏电流计内电阻和电流常数 …… 333
11.2.2 例 2：测量音叉振动曲线 …… 341
11.2.3 例 3：密立根油滴实验 …… 345

附录 A 编程与调试 …… 349

附录 B Mathematica 的补充介绍 …… 354

B.1 若干函数介绍 …… 354
B.1.1 绘图函数 …… 354
B.1.2 数值积分函数 …… 362
B.1.3 求微分方程数值解的函数 …… 364

需要全本请访问 www.ertongbook.com

B.2 若干菜单功能 …… 366
B.2.1 File 菜单 …… 366
B.2.2 Edit 菜单 …… 367
B.2.3 Insert 菜单 …… 367
B.2.4 Format 菜单 …… 368
B.2.5 Cell 菜单 …… 368
B.2.6 Graphics 菜单 …… 369
B.2.7 Evaluation 菜单 …… 369
B.2.8 Palettes 菜单 …… 370
B.2.9 Window 菜单 …… 370
B.2.10 Help 菜单 …… 370

附录 C EquationTrekker …… 371

附录 D 统计函数与分布检验 …… 376

D.1 统计函数介绍 …… 377
D.1.1 Statistical Quantities …… 377
D.1.2 Random Sampling …… 378
D.1.3 Statistical Distribution …… 378
D.2 分布类型的检验 …… 379
D.2.1 QQ 图 …… 379
D.2.2 D_n 检验法 …… 382

第1章 初识Mathematica

本书的计算工作都是在数学软件 Mathematica 环境支持下进行的，因此应该先对该软件进行一些必要的介绍。虽然现在用于科学计算的软件有很多，但 Mathematica 以其简单的“语法”和强大的功能，使很多科学工作者都对它特别青睐。对于学习数学和物理的学员来讲，首先要学会使用 Mathematica，若要从事工程计算，再学习 MATLAB 等软件。Mathematica 作为大学物理的学习工具和科普工具软件是首屈一指的。

要用 Mathematica 进行计算，首先要将它安装到计算机里。作为一个大众软件，Mathematica 已经很流行，作为初学者可以到 Mathematica 的研制公司的网站上下载（试用版），网址是 http://www.wolfram.com。现在，Mathematica 已经发展到 7.x 版，其学习版也可以从网络上下载。①

还有很多“数学实验”的书在介绍 Mathematica（往往是低版本的），它们提供了更多的例子让读者体会其函数的功能。Mathematica 的“联机帮助”有比较详细的介绍，所提供的例子也简单明了，对于各种学习阶段的用户都有帮助，用户只要按 F1 键就能启动浏览界面。

总之，读者要是下决心想学 Mathematica，就能搜集到足够的材料，这在有计算机并连接上网的情况下是一件并不费力的事。

1.1 Mathematica 的窗口功能

现在，假定读者已经在计算机里安装了 Mathematica，可以像启动其他视窗软件一样地启动它。图 1-1 就是 Mathematica 7.0 工作时的窗口画面，可以看到，在该视窗画面上，有菜单条、标题栏、工具条、工作区和模板窗口。其中，菜单条和模板随版本而异（前者将在附录 B 中做详细介绍）。

---

① 丁大正. **Mathematica 5.0 在大学数学课程中的应用**. 北京：电子工业出版社，2006. 5.x 版的功能已经很好了，能满足通常运算的需要.

S. Wolfram 著. **Mathematica 全书**. 赫孝良，周义仓译. 西安：西安交通大学出版社，2002（此书对 Mathematica 语法、功能和原理进行了全面介绍）.

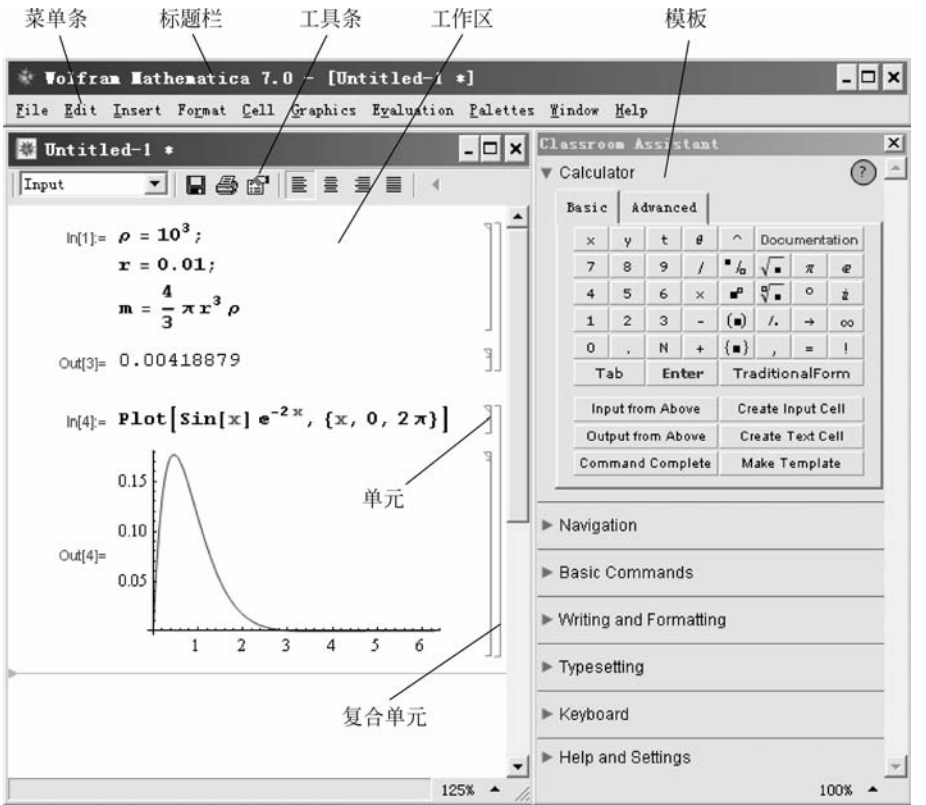


图 1-1　Mathematica 7.0 工作时的窗口画面

用户可以在**工作区**里输入编制的程序，本例中有两个小程序，第一个程序进行一个球体的质量计算，第二个程序画出了一个函数的曲线。在工作区的顶部可以显示**工具条**，从 Windows 菜单启动 Show Toolbar。工具条可以用来选择单元类型、保存和打印文件、程序对齐方式等。

模板是进行符号与函数简便输入的地方，在用户还不熟悉 Mathematica 的符号和函数的情况下，可以使用模板输入。模板窗口有几个，读者可以从 Palettes 菜单进入，选择你需要的模板窗口，对多数用户来讲，使用 Basic Math Assistant 和 Classroom Assistant 两个模板就可以了。

在工作区的右边，读者可能注意到一些拉长的右括号“]”，这是“*单元括号*”，它所括起来的区域是一个**单元**(Cell)，Mathematica 就是**按单元进行计算和显示的**。单元又分为输入单元、输出单元和图形单元等。程序运行后，一般会有输出，这时，原来的一个输入单元就会跟随输出单元，系统自动将输入-输出单元用一个更大的“]”将它们括起来，组成一个*复合单元*，表示输入-输出单元的逻辑联系；同时，会在左边出现类似 In[1]:= 这样的符号，它们表示输入程序的行号，但不会在每行前面都有行号；有的行要输出结果，就会在程序后面出现 Out[3]= 这样的符号，表示它是哪个输入行产生的结果。注意，**末尾不加分号(;)的输入行会有结果输出，而末尾加了分号就不输出这一行运算的结果**，但运算结

果仍保存在内存里。

上面说了，Mathematica 的程序是按单元来组织的，每个单元的程序单独编写和运行。那么，写好了程序，如何运行呢？这就要按**运行命令键**，即数字键盘区的 Enter 键，或者字母键盘区的 Shift＋Enter 组合键，字母键盘区的 Enter 键不是运行键，而是编辑键，例如输入程序要换行了，就是按这个区域的 Enter 键。要记住的一点是：在按运行命令以前，请将光标**定位**到相应程序的单元区，若不然，就不会按要求运行。

如果要写多个程序，可以在已写程序单元下面的空白处单击鼠标，然后开始写新的程序，系统自动产生新的单元括号；也可以在已写过内容的两个单元之间插入新的单元，办法是：将光标移动到两个单元之间的空白处，光标变成了平躺的“工”字形，单击鼠标，出现一条水平横线，这时就可以写新的程序或者添加文字了。

1.2　Mathematica 的变量与函数

对于初学者，要切记的一条是：虽然表面上看各个单元是独立的，但是，各个单元使用的“变量”（以及输出结果）却是公共的，**不同单元的程序能够借助于变量互相联系，尤其是能互相干扰！**

什么是变量呢？变量是一个符号，用来储存一些数据，这个数据就称为**变量的值**。变量就像一个仓库，数据可以进进出出，随着程序的运行，变量的值可以改变。表示变量的符号叫做**变量名**，Mathematica 给变量起名的规则是：**以英文字母开头，后面可以添加英文字母、数字、希腊字母**；或者，**以希腊字母开头，后面可以添加英文字母、数字和希腊字母**。变量名的长度没有限制，但不能含有空格、标点符号或下画线等。字母区分大写和小写，例如 a12b 与 A12b 就是不同的变量名。要注意，有几个字母是 Mathematica 系统使用的，有特别含义，用户不要随意使用。它们是：E、I、D、C、O、N（其中 E 表示自然对数的底，还用e 表示，快捷输入方式是 ESC ee ESC，即先按 Esc 键，再按两次 e 键，最后再按 Esc 键，就输入了e；而 I 表示虚数因子，见后）。在图 1-1 的窗口程序里，共使用了 3 个变量，它们分别是 ρ、r 和 m。Mathematica 的变量类型不用声明，是根据赋值的类型自动确定的。

知道了什么是变量，如何提防不同单元间变量的干扰呢？办法是：**如果你确认不再需要使用过的变量，那就清除它的值！**所使用的**函数**是

$$\mathbf{Clear}[\rho, r, m]$$

这是本书介绍的第一个函数，它对 Mathematica 的运行安全至关重要！

Mathematica 的函数分为系统定义的函数和用户自己定义的函数，系统定义的函数可以在“联机帮助”里找到它们的使用格式；用户自己定义的函数，后面会介绍。在函数 **Clear**[]里，已经包含了 Mathematica 函数的基本特征，那就是：**除了数学上早有约定俗成的函数名之外，其他函数名都用全拼的英文单词表示，函数名的首字母大写，在函数名之后要用[]把函数作用的对象括起来**。至于对象是什么，则与具体的函数有关。**若函数名由几个英文单词组成，则每个单词的首字母都大写**。函数都要严格按格式使用，**只有严格遵守规定，才能不会出错**。

更多的 Mathematica 函数将随着物理问题的出现进行介绍，读者如果嫌这个办法慢，可以先按某一本介绍 Mathematica 的书突击式地学上一阵子，然后再来看本书后面的介绍。我们要把它当作物理研究的工具，甚至当作物理不可分割的一部分，这样来重视 Mathematica，一点都不过分，因为没有这个工具，就跟没有电压表一样，想测量出电压那是很困难的。可以说，对 Mathematica 越熟练，读者的物理研究水平就越高。

1.3 Mathematica 的程序输入、保存与运行

所有需要 Mathematica 做的工作都必须通过程序进行。**编程**是解决问题的基本手段。程序一般先在纸上写好，或者写一个大概，然后输入计算机，经过**运行调试**，以检验它是否正确。关于程序调试，请参阅附录 A。这里先说说如何输入。程序输入是逐行进行的，不过，“**行**”的长度是不确定的，因为只有“语句”是基本的，不同的“语句”可以用**分号**连接放在一个输入行里。比如图 1-1 的第一个程序有 3 行，其实可以放在一行里。Mathematica 行的长度没有限制，用户可以根据需要把多个“语句”放在一行里，当一行遇到窗口边缘的时候，它会自动调整屏幕一行的字符数，另起一行，显示其余的部分。

下面，介绍几个常用符号的输入办法，学会它们可以提高用户的输入速度，要点是使用**快捷键**。

分数线：Ctrl＋/

二次根号：Ctrl＋2

上标：Ctrl＋6

要输入希腊字母，懒惰一点是使用模板上的 Typesetting，找到希腊字母区，点击相应的字母。不过，读者可以事先学会使用快捷键来输入一些常用的希腊字母，这些快捷键的学习方法是：先激活模板，鼠标指向某个字母，例如 ρ，在光标下面的提示框里出现 ESC r ESC，表示字母 ρ 的快捷输入方式，见图 1-2。



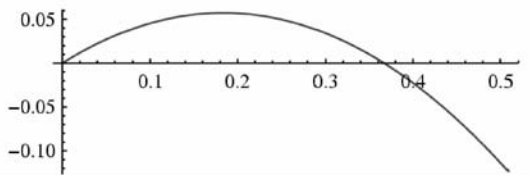
图 1-2　显示字符的快捷输入法

通过输入练习，熟记几个常用字母的输入方式，这有助于提高用户的输入速度。下面给出一个小程序作为输入练习，它用参数方程的形式画出了一个抛体的运动轨迹。按公式画曲线，使公式表示的变化过程形象化，是 Mathematica 的一个重要功能，我们后面会反复使用作图功能。不过，毕竟物理学还是一门抽象的科学，计算工具的形象化作用是有限的，读者还需要在物理建模和编程技巧方面多下工夫，才能真正学好物理学。

```
In[1]:= g = 9.8; v0 = 2; θ0 = 32;
        x = v0 * Cos[θ0 * π/180] * t;
```

```
y = v0 * Sin[θ0 * π/180] * t - 1/2 * g * t^2;
ParametricPlot[{x, y}, {t, 0, 0.3},
 PlotStyle → Thickness[0.004],
 AxesStyle → Thickness[0.003]]
Clear[g, v0, θ0, x, y]
```

Out[4]=



用户辛辛苦苦编写的 Mathematica 程序，若有保留价值，就及时保存起来。保存文件的操作是常规的，即从菜单 File 进入，里面有文件建立、打开和保存等命令。也可以通过 Window 菜单激活 Toolbar 工具条，点击保存按钮更方便保存文件。建议在常用的磁盘里建立一个文件夹，以后就将 Mathematica 文件存放在那里面。文件保存时要输入一个文件名，可以是英文字母、汉字、拼音字母、数字、减号、冒号的组合等。Mathematica 程序文件名的**后缀**是 **nb**，表示“**笔记本**”文件(note book)，因为 Mathematica 程序按单元依次排列下来，就像一个笔记本。

一个“笔记本”里可以保存很多个程序。若要阅读、编辑或运行一个“笔记本”里的程序，可通过资源管理器找到这个文件，双击文件名，就启动了 Mathematica，同时打开了文件。用户可以同时打开多个“笔记本”文件，管理这些文件窗口的方法是常规的，一般通过菜单条上的 Window 菜单在不同文件间切换，或者使用快捷键 Ctrl＋F6 依次切换(打开 Window 菜单也有快捷键，即 Alt＋W)。在第一次按了程序运行命令后，Mathematica 会启动“**核心程序**”Kernel. exe，然后才能从事计算，这需要等上一会儿。在程序运行期间，除了工作区右边的单元括号变了颜色，用户还会在顶部标题栏看到 Running...Untitled-1(或文件名)等，表明**程序正在运行，此时一般不要再进行其他操作**，否则，会影响程序的运行，甚至出现不可预料的后果。如果想终止程序运行，则按命令“Alt＋，”弹出一个对话框，选择“结束运行”就行了。有时候，程序在一个地方终止后，会继续运行下面的部分，那就继续按终止命令，直到结束，此时顶部的 Running...消失，工作区窗口右边的单元括号的颜色恢复到正常编辑状态的颜色。

一些程序在运行期间会产生需要保存的数据，程序将建立相应的文件。关于**数据文件**的保存和使用，将在需要的地方介绍。

1.4　Mathematica 的表型数据

下面介绍 Mathematica 的“数”或“数据”的类型，以及部分 Mathematica 的函数。

Mathematica 使用的数分为**近似数**和**准确数**，凡带有小数点的数都是近似数，又称为实数；其余的数都叫做准确数，包括整数、分数等。在此基础上还定义了复数，即形如 $a+bi$ 的数，其中 a、b 是近似或准确的数，i 是虚数因子($i^2=-1$)，它在 Mathematica 中有两种

表示法，一种是用大写的字母 I 表示，另一种方法是输入 ESC ii ESC，产生符号 ⅈ。所有基本数之间可以进行四则运算，运算符也是常规的，即符号＋、－、＊、/表示加、减、乘、除(其中＊可以用空格代替)。乘方的表示有两种方法，一是按快捷键 Shift＋6，产生如 2^3 的计算机表示；另一种是按快捷键 Ctrl＋6，产生数学的表示，如 2^3。如果表达式比较复杂，要多使用圆括号“()”将不同部分分清楚，不能使用其他括号。

对于后面的计算来说，Mathematica 定义的“**表型数据**”(List)是非常有用的。所谓“表型数据”，就是用花括号括起来的数据，例如

$$\{1,2,-6,2.3\}$$
$$\{\{2,1\},\{-3,2\},\{10,-1\}\}$$
$$\{2.5,\{x\to 1.25\}\}$$

其中，第一种表示称为“一维的表”；第二种用嵌套的花括号表示，称为“二维的表”；第三种表示就比较复杂了，它不是通常理解的数据，它经常出现在 Mathematica 函数的输出结果中，不同的部分表示不同的含义，其中第二项表示“替换型数据”。

为了能正确使用表型数据，需要了解“表型数据”的操作规则，包括对表中元素的操作和对“表”的整体操作。各种“表的操作函数”可以通过“联机帮助”按下列步骤来查找：F1/Core Language/Lists。

现在介绍后面经常用的表示法。设一维表型数据赋给变量 data，“＝”就是赋值号，操作如下：

```
In[1]:= data = {a, b, c, d}
Out[1]= {a, b, c, d}
```

若读者想对其中的元素进行操作，访问的方法则是

data[[j]]

其中 j 只能取 1～4 的整数，表示**元素的序号或位置索引，要用双中括号括起来**。读者可以将第二个位置上的元素改换成 2，操作方法及运行结果如下：

```
In[2]:= data = {a, b, c, d};
        data[[2]] = 2;
        data
Out[4]= {a, 2, c, d}
```

注意：此操作不是将 b 改成了 2，而是表的第二个位置上的元素改成了 2。若读者想在第二个元素的基础上加上 2，则按以下操作：将第二个元素先取出，与 2 相加，再将结果赋给第二个元素，b 的值并未改变，程序如下：

```
In[5]:= data = {a, b, c, d};
        data[[2]] = data[[2]] + 2;
        data
Out[7]= {a, 2 + b, c, d}
```

同样，如果要使用**替换型数据**，则只要尊重替换运算的规则即可，例如

```
In[8]:= result = {2.5, {x → 1.25}};
        peak = result[[1]];
        peakposition = x /. result[[2]];
        Print["position: ", peakposition, "  peak: ", peak]
        Clear[result, peak, peakposition]

position: 1.25  peak: 2.5
```

其中/.是“替换运算符”，它的右边可以使用的表达式有

x→1.25　或者　{x→1.25}

等等。其中→的输入方法是“－”＋“＞”，或者 ESC －＞ ESC 。

本程序里使用了新函数 **Print**[]，即屏幕输出函数，输出了 4 个项目(项目之间用逗号分隔)，其中两个项目是字符串(用" "括起来的部分)，另外两个是实数，它们是从一维的表 result 里取出来的，分别赋给了变量 peak 和 peakposition，其中在赋给后者之前进行了替换运算。要注意的是：替换完了，符号 x 的值并没有变成 1.25，读者可以在第三个句子下面加一个句子，即简单地写上 x，然后换行，不加分号，运行程序，则只显示字母 x，并没有数据。

对于二维的表型数据，访问的方法有两种，一种是访问它的某一“行”，另一种是访问它的某个元素。元素好理解，什么是表的“行”呢？Mathematica 把二维的表看成了矩阵，例如，表{{a,b},{c,d}}可以表示成矩阵

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

据此，把表的第一“层”{a,b}称为第一行，以此类推。当然也可以谈矩阵的列，但 Mathematica 不常使用这个名字，常用行或层，另外就是“元素”了，例如 a、b、c、d 都叫元素。要访问行和元素，可以用如下的方式：

```
In[13]:= data = {{a, b}, {c, d}};
         data[[1]] = data[[1]] * 2;
         data
         data[[1, 2]] = data[[1, 2]] + 2;
         data

Out[15]= {{2 a, 2 b}, {c, d}}

Out[17]= {{2 a, 2 + 2 b}, {c, d}}
```

程序的第 2 行将表 data 的第 1 层取出，使用 data[[1]]，然后与 2 相乘，这就将该层里的所有元素都乘了 2，再赋给 data 第 1 层，由程序第 3 行输出，Out[15]显示了这个操作的结果，data 已经改变。程序第四行访问的是新的 data 的第 1 层第 2 个元素，使用符号 data[[1,2]]，然后对它加 2 并重新赋给这个位置，Out[17]证明了仅对这个位置进行了加 2 的操作，其他未变。

要记住：**访问某行，只要该行的序号；访问某个元素，要用两个序号，第一个序号是**

需要全本请访问 www.ertongbook.com