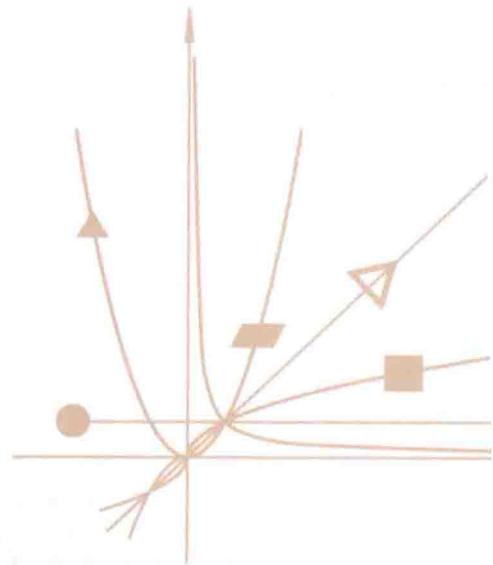




“十二五”国家重点图书出版规划项目
中国科学技术大学 **精品教材**



张韵华 王新茂 / 编著

Mathematica 7 实用教程

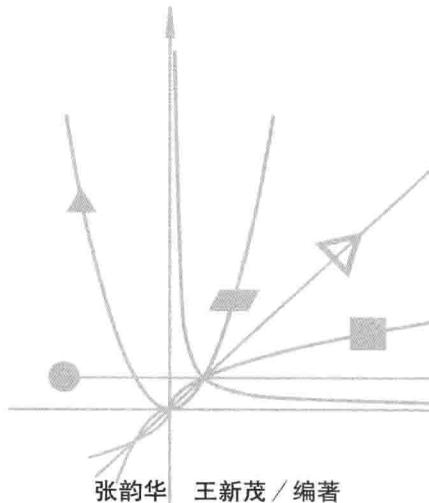
Step up to Mathematica 7

第2版

中国科学技术大学出版社



“十二五”国家重点图书出版规划项目
中国科学技术大学  教材



张韵华 王新茂 / 编著

Step up to Mathematica 7

Mathematica 7 实用教程

第2版

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

符号计算软件是能做高等数学和初等数学题目、画数学函数和数据的图形以及编写程序的应用软件系统。Mathematica 以其友好的界面而成为流行的符号计算软件。在符号计算系统的软件环境下,我们可以轻松愉快地用计算机进行数学公式推导、数学计算和图形变换。

本书内容包括:如何应用 Mathematica 7 做因式分解、数项求和、函数极限、不定积分、求解偏微分方程、求解线性方程组、计算矩阵的特征值和特征向量、矩阵分解、插值、拟合和统计等数学运算;如何用函数、数据、图元素画图;如何自定义函数和写程序构建程序包。

本书可作为高等院校学生学习 Mathematica 的教材,数学实验和数学建模课程的辅助教材,数学教学的辅助工具,科研和工程技术人员科学计算的参考教材。

图书在版编目(CIP)数据

Mathematica 7 实用教程 / 张韵华, 王新茂编著. —2 版. —合肥: 中国科学技术大学出版社, 2014. 8

(中国科学技术大学精品教材)

“十二五”国家重点图书出版规划项目

ISBN 978-7-312-03573-9

I. M… II. ①张… ②王… III. Mathematica 软件—高等学校—教材
IV. TP317

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 179789 号

中国科学技术大学出版社出版发行

安徽省合肥市金寨路 96 号, 230026

<http://press.ustc.edu.cn>

合肥市宏基印刷有限公司印刷

全国新华书店经销

开本: 710mm×960mm 1/16 印张: 21.25 字数: 400 千
2010 年 1 月第 1 版 2014 年 8 月第 2 版 2014 年 8 月第 3 次印刷
定价: 38.00 元

总序

2008年,为庆祝中国科学技术大学建校五十周年,反映建校以来的办学理念和特色,集中展示教材建设的成果,学校决定组织编写出版代表中国科学技术大学教学水平的精品教材系列。在各方的共同努力下,共组织选题281种,经过多轮、严格的评审,最后确定50种入选精品教材系列。

五十周年校庆精品教材系列于2008年9月纪念建校五十周年之际陆续出版,共出书50种,在学生、教师、校友以及高校同行中引起了很好的反响,并整体进入国家新闻出版总署的“十一五”国家重点图书出版规划。为继续鼓励教师积极开展教学研究与教学建设,结合自己的教学与科研积累编写高水平的教材,学校决定,将精品教材出版作为常规工作,以《中国科学技术大学精品教材》系列的形式长期出版,并设立专项基金给予支持。国家新闻出版总署也将该精品教材系列继续列入“十二五”国家重点图书出版规划。

1958年学校成立之时,教员大部分来自中国科学院的各个研究所。作为各个研究所的科研人员,他们到学校后保持了教学的同时又作研究的传统。同时,根据“全院办校,所系结合”的原则,科学院各个研究所在科研第一线工作的杰出科学家也参与学校的教学,为本科生授课,将最新的科研成果融入到教学中。虽然现在外界环境和内在条件都发生了很大变化,但学校以教学为主、教学与科研相结合的方针没有变。正因为坚持了科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合的方针,并形成了优良的传统,才培养了一批又一批高质量的人才。

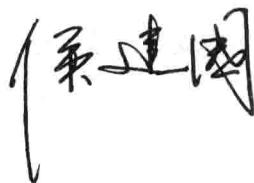
学校非常重视基础课和专业基础课教学的传统,也是她特别成功的原因之一。当今社会,科技发展突飞猛进、科技成果日新月异,没有扎实的基础知识,很难在科学技术研究中作出重大贡献。建校之初,华罗庚、吴有训、严济慈等老一辈科学家、教育家就身体力行,亲自为本科生讲授基础课。他们以渊博的学识、精湛的讲课艺术、高尚的师德,带出一批又一批杰出的年轻教员,培养

了一届又一届优秀学生。入选精品教材系列的绝大部分是基础课或专业基础课的教材,其作者大多直接或间接受到过这些老一辈科学家、教育家的教诲和影响,因此在教材中也贯穿着这些先辈的教育教学理念与科学探索精神。

改革开放之初,学校最先选派青年骨干教师赴西方国家交流、学习,他们在带回先进科学技术的同时,也把西方先进的教育理念、教学方法、教学内容等带回到中国科学技术大学,并以极大的热情进行教学实践,使“科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合”的方针得到进一步深化,取得了非常好的效果,培养的学生得到全社会的认可。这些教学改革影响深远,直到今天仍然受到学生的欢迎,并辐射到其他高校。在入选的精品教材中,这种理念与尝试也都有充分的体现。

中国科学技术大学自建校以来就形成的又一传统是根据学生的特点,用创新的精神编写教材。进入我校学习的都是基础扎实、学业优秀、求知欲强、勇于探索和追求的学生,针对他们的具体情况编写教材,才能更加有利于培养他们的创新精神。教师们坚持教学与科研的结合,根据自己的科研体会,借鉴目前国外相关专业有关课程的经验,注意理论与实际应用的结合,基础知识与最新发展的结合,课堂教学与课外实践的结合,精心组织材料、认真编写教材,使学生在掌握扎实的理论基础的同时,了解最新的研究方法,掌握实际应用的技术。

入选的这些精品教材,既是教学一线教师长期教学积累的成果,也是学校教学传统的体现,反映了中国科学技术大学的教学理念、教学特色和教学改革成果。希望该精品教材系列的出版,能对我们继续探索科教紧密结合培养拔尖创新人才,进一步提高教育教学质量有所帮助,为高等教育事业作出我们的贡献。



中国科学技术大学校长
中国科学院院士
第三世界科学院院士

前　　言

符号计算系统是一个展示和应用数学知识的系统,一个集成化的、计算机化的数学软件系统,一个在大学和研究所流行的应用软件。在符号计算系统环境下,我们可以轻松愉快地用计算机进行数学公式推导、数值计算和图形变换。

目前 **Mathematica** 用户达到数百万,包括世界 500 强公司、国家级的研究实验室和世界各地顶尖的大学。2004 年的三位诺贝尔物理学奖得主都是 **Mathematica** 的忠实用户。在北美、欧洲和日本都有大学将 **Mathematica** 作为大学生在校必修的计算机课程之一。

1994 年,中国科学技术大学成为了国内最早为本科生开设符号计算语言 **Mathematica** 课程的两所高校之一,该课程现已作为数学系和全校本科生公共选修课,已有 20 多届数学系学生和 10 多届物理、化学、生物、地空、信息和管理等专业的理工科学生选修了本课程。

这些聪明的学生不但很快掌握了使用方法,还结合所学专业做出了不少值得记录在案的习题。他们已将 **Mathematica** 用在数学课程学习、数学建模竞赛、大学生研究计划和毕业论文中。

20 世纪 90 年代中期,在国内高校中 **Mathematica** 主要作为“数学建模”竞赛的计算工具,由于符号计算软件在数学表示和函数绘图上的优势,近年来多所高等院校用它作为“数学实验”课程的主要工具和高等数学课程教学改革的支撑平台,它的应用范围正在扩展之中。

为了满足课程教学需要,经过几年教学实践,我们编写了《**Mathematica**(1.2 版)符号计算实用教程》(中国科学技术大学出版社,1998 年 9 月)和《符号计算系统 **Mathematica**(4.0 版)教程》(科学出版社,2001 年 11 月)。这两本书荣幸地被一些高校选用,也得到了读者很多有益的

反馈建议。在此感谢选用过这两本教材的教师、学生和读者！

在本教材中一方面按照数学内容的进程,从初等数学到高等数学,介绍如何调用 Mathematica 的函数做初等数学、微积分、线性代数和微分方程中的计算题,验证数学公式的推导,演示函数图形,给学生提供了重温高等数学和探索数学的空间,让高年级本科生和研究生在专业课学习中“会用”和“用好”高等数学;另一方面按照计算机语言的结构,从简单的命令行输入到构建复杂的程序包,学习过程编程和函数编程。

本教材绪论部分对符号计算系统和 Mathematica 作一简介,以实例介绍 Mathematica 的风采以及怎样获取帮助;第 1 章介绍 Mathematica 中的数值类型和基本量;第 2 章至第 4 章按初等数学到高等数学的内容排列,介绍如何求和、计算极限、计算不定积分、求解偏微分方程、求解线性方程组、计算矩阵的特征值和特征向量以及矩阵分解等数学运算;第 5 章介绍数值计算方法;第 6 章介绍二维和三维的函数作图、数据画图、图元素绘图以及系统程序包中各类画图函数(第 1 章到第 6 章介绍如何使用系统的函数,重在调用系统丰富的函数资源);第 7 章和第 8 章介绍定义函数方式和编写程序构建程序包。

本教材基于 2009 年 Mathematica 7.0.1 的版本,它包括了 Mathematica 的核心功能,基本的数学运算函数、画图命令和编程语句在升级版本中仍然“畅通无阻”。在近几年的升级版本中在专项功能的集成化、系统与互联网的交互等多方面不断改进和提高。例如:2010 年 Mathematica 8.0,完成与 Wolfram|Alpha 的集成,增加了自动概率和期望计算以及许多统计可视化功能、集成小波分析等;2012 年 Mathematica 9.0.0,具有全新 Wolfram 预测界面,大幅度提高了 Mathematica 的导航和探索功能,集成模拟和数字信号处理,全面的客户端网页访问,以及与网页 API 的交互;2014 年 Mathematica 10.0.0,增加了高度自动化的机器学习,集成的几何计算,非线性控制系统和增强的信号处理,增强的偏微分方程求解功能,访问扩展的 Wolfram Knowledgebase。

特别感谢李翊神教授,由于他对 Mathematica 的推荐和倡导,才让作者有了写作本书的想法和动力。

感谢季孝达教授对出版本教材给予的帮助和支持!

目 次

总序	(i)
前言	(iii)
绪论	(1)
0.1 符号计算系统简介	(1)
0.2 Mathematica 简介	(5)
0.3 初识 Mathematica	(6)
0.4 获取帮助	(12)
第 1 章 Mathematica 的基本量	(18)
1.1 数的表示及其函数	(18)
1.2 字符串	(24)
1.3 变量	(29)
1.4 列表	(33)
1.5 表达式	(48)
习题 1	(51)
第 2 章 初等函数运算	(53)
2.1 多项式运算	(53)
2.2 三角函数运算	(64)
2.3 方程运算	(65)
2.4 求和与乘积运算	(71)
习题 2	(73)
第 3 章 微积分	(75)
3.1 求极限	(75)

3.2 微商和微分	(77)
3.3 不定积分和定积分	(82)
3.4 幂级数	(88)
3.5 微分方程	(92)
3.6 积分变换	(96)
习题 3	(101)
第 4 章 线性代数	(104)
4.1 矩阵的定义	(104)
4.2 矩阵的基本运算	(115)
4.3 矩阵的高级运算	(124)
习题 4	(134)
第 5 章 数值计算方法	(138)
5.1 插值	(138)
5.2 曲线拟合	(145)
5.3 数值积分	(150)
5.4 非线性方程求根	(155)
5.5 函数极值	(157)
5.6 数据统计和分析	(161)
5.7 微分方程数值解	(169)
5.8 离散傅里叶变换	(173)
5.9 线性规划	(175)
习题 5	(176)
第 6 章 在 Mathematica 中作图	(180)
6.1 二维图形	(180)
6.2 三维图形	(198)
6.3 图形动画和声音播放	(209)
6.4 等值线和密度图	(222)
6.5 用图元作图	(231)
6.6 特殊作图命令	(242)
习题 6	(261)

第7章 自定义函数和模式替换	(264)
7.1 自定义函数	(265)
7.2 模式替换	(274)
7.3 给模式附加条件	(278)
7.4 参数数目可变函数	(282)
7.5 函数的属性与属性定义	(284)
7.6 表达式部件操作	(287)
7.7 纯函数	(290)
习题 7	(292)
第8章 程序设计	(294)
8.1 条件语句	(294)
8.2 循环语句	(298)
8.3 转向语句	(302)
8.4 程序模块	(304)
8.5 程序调试	(309)
8.6 程序包	(312)
习题 8	(315)
附录	(318)
参考文献	(328)

绪 论

0.1 符号计算系统简介

◇ 数值计算与符号计算

从单纯计算到文字处理、图形变换、多媒体表示,计算机正在改变着我们的工作方式和生活方式。在 19 世纪之前,计算是数学家工作的主要内容,高斯对于谷神星轨道的计算和提出最小二乘拟合的方法便是一个例子。在 19 世纪之后,数学研究发生了重大改变,计算的色彩日渐淡薄,数学家对数学理论和数学结构远比对数学问题的求解计算更为关心。现代电子计算机问世以后,情况又发生了变化,利用计算机求解数学问题或证明数学定理成为行之有效的新方法。例如,世界上最早的电子计算机之一 ENIAC(Electronic Numerical Integrator and Computer)是为美国军方提供准确而及时的弹道火力表服务的,其中涉及求解大量复杂的非线性方程组和数值积分,这是用计算机求解数学问题的典型范例。又例如,组合数学中的著名问题“四色定理”是在利用计算机编程对各种可能情形加以枚举之后,从而得到证明的。

数值计算过程是常量值、变量值、函数值到数值的变换,一个或多个数值到一个数值的变换,一个多对一的变换。例如:计算 $y = \sin 10 + \ln 10$ 。其结果是 1.75856。在计算机高级语言中,算术表达式由常量、变量、函数和运算符等组成,算术表达式的值为某一精度范围内的数值。计算各种类型表达式的值是计算机高级语言的主要工作。

符号计算过程是常量、变量、函数和计算公式到常量、变量、函数和计算公式的一个变换,一个多对多的变换。它能完成数学表达式到数学表达式的精确运算和

数值计算。例如：计算一个初等函数的不定积分，其结果被积函数的原函数仍然是初等函数，

$$\iint 4(x^2 + y^3) \cos x dx dy = 8xy \cos x + y(4x^2 + y^3 - 8) \sin x$$

符号计算比数值计算对计算机的硬件和软件提出了更高的要求。和数值计算一样，设计有效的算法也是符号计算的核心。就算法而言，符号计算比数值计算能继承更多的、更丰富的数学遗产，古典数学中的许多算法仍然是核心算法的成员，当代数学的算法成果也被不断地充实到符号计算系统中。

◇ 符号计算系统

随着数学和计算机科学的发展，一门称为“符号计算”或“计算机代数”的交叉学科已经形成了。它的发展与代数计算、算法设计、机器学习、自动推理等紧密联系在一起。符号计算软件充分表达了这个学科的最新算法成果和应用。通用符号计算软件已经成为解决各种科学工程计算问题的有力工具。

符号计算系统是一个表示数学知识和数学工具的系统，一个集成化的数学软件系统。符号计算系统由系统内核、符号计算语言和若干软件包组成。一个符号计算系统通常包括数值计算、符号计算、图形演示和程序设计语言 4 个部分。并将各种功能融合在一起，易于保持数学公式推导、数值计算和图形可视化的一致性和连贯性。

符号计算系统的数学对象几乎涉及所有数学基础学科，从初等数学到高等数学，包括各类数学表达式的化简、四则运算、因式分解、极限、导数、积分、级数、常微分方程、偏微分方程、行列式、线性方程组以及各种向量和矩阵运算等。

符号计算已成功地应用于几乎所有的科学技术和工程领域，其中包括数学理论领域。由于它能够正确地完成科研人员在短时间内无法完成的公式推导计算，使得不少研究领域的前沿向前推移。

◇ 符号计算的应用

- 数学公式的推导工具

在 19 世纪，法国天文学家 Charles Delaunay 没有以太阳而是以月亮的位置作为计算时间的函数。从 1847 年到 1867 年用了 20 年的时间，他完成并发表了长达数百页的计算方面的文章，推导了近 4 万个公式。1970 年 MIT 的一个研究小组用符号计算软件对 Delaunay 的计算公式进行复查，只用了 20 小时的 CPU 时间便完成了。复查表明原先的计算只有 3 个错误，其中一个错误是某项的系数是 3 而不是 2，另外两个错误是由此而引起的。

科研中常常进行公式推导和公式验证，有时由于设计模型的复杂性，在手工推

导中既有数学理论的深度又有数学推导运算不菲的工作量。例如:一个 7 个自由度行走的机器人,从运动方程求解加速度时,包括大量的多维转换公式推导,可以有上百项,甚至上千项。这时只能用符号计算系统才能迅速、准确地求解;在推导有限元的刚度矩阵中、在计算行列式的展开和合并中,都可以用任何一个符号计算系统来完成公式演算。这样的例子还有很多,在数论、群论、李代数的理论研究中,也有专门的符号计算软件供数学家使用。用符号计算系统进行公式推导,既正确又迅速。它帮助科研人员摆脱了理论推导中繁琐的一面,把更多的精力放在创造性的思维中。

- 理论研究的实验工具

在物理、化学和生物学等许多自然科学领域中,实验是科学的一个方法。符号计算系统的出现为数学领域和一些理论研究领域提供了实验工具。数学的创造大多来自直觉,用符号计算系统对设想的定理结论直接验证,或将待研究的方程绘出图形以观察几何性质和变化趋势,常常会给科研人员带来不同程度的灵感和启发,他们将数学实验的结果进行理论深化并加以严格证明,甚至会得到意想不到的收获。

- 数学教学的辅助工具

在符号计算语言的应用初期,使用者主要是科技工作者和相关专业人士。目前已广泛地应用于教学中,是计算机辅助教学的良好环境。它已成为国内很多高校“数学实验”和“数学建模”课程的有力支撑工具。目前国内外多所高校数学教材中都包括用符号计算语言做数学习题的内容。在高等数学课程教学中,系统提供的数学函数的几何直观帮助学生理解数学的内涵,培养学生的空间想像能力。它“轻松做数学题”的能力可以激发学生“学数学”的兴趣,提高学生用计算机软件“用数学”的能力。

◆ 符号计算系统软件简介

符号计算系统一般可分为专用系统和通用系统两大类。通用符号计算系统具有数值计算、符号计算、图形演示、程序设计等功能。目前比较流行的通用符号计算系统如表 0.1 所示(按字母顺序排列)。

符号计算系统通常有两种运行方式:一种是交互式,每输入一个命令,就执行相应的数学计算,类似于使用计算器;另一种方式是写一段程序,执行一系列的命令,类似于用 Basic 或 C 语言编写程序。每个符号计算系统都有自己的程序设计语言,这些语言与通用的高级语言大同小异。请看 C 语言和 Mathematica 中的几个语句形式(表 0.2)。

表 0.1 目前比较流行的通用符号计算系统

软件名称	说 明
Axiom	免费开源软件, http://axiom-developer.org
CoCoA	免费开源软件, 交换代数, http://cocoa.dima.unige.it
Euler	免费开源软件, http://eumat.sourceforge.net/
GAP	免费开源软件, 计算群论, http://www.gap-system.org/
Java Algebra System	免费开源软件, 交换可解多项式、Gröbner 基, http://krum.rz.uni-mannheim.de/jas
Macaulay2	免费开源软件, 代数几何、交换代数, http://www.math.uiuc.edu/Macaulay2
Maple	商业软件, http://www.maplesoft.com
Mathematica	商业软件, http://www.wolfram.com
Maxima	免费开源软件, http://maxima.sourceforge.net
Reduce	免费开源软件, http://reduce-algebra.sourceforge.net
Sage	免费开源软件, http://www.sagemath.org
Singular	免费开源软件, 交换代数、代数几何、奇点理论, http://www.singular.uni-kl.de

表 0.2 C 语言和 Mathematica 中的几个语句形式

C 语言	Mathematica
if(条件)语句 1; else 语句 2	If[条件, 语句 1, 语句 2]
while(条件)语句	While[条件, 语句]
for(初始化; 条件; 更新)语句	For[初始化, 条件, 更新, 语句]

0.2 Mathematica 简介

Mathematica 是美国 Wolfram 研究公司开发的符号计算系统,自 1988 年首次发布以来,因系统精致的结构和强大的计算能力而广为流传,经不断扩充功能和完善修改之后,本书的版本为 2008 年推出的 Mathematica 7。Mathematica 产品家族还包括 gridMathematica、webMathematica、Mathematica Player、Wolfram Workbench、Mathematica Applications 等系列产品。

Mathematica 是 Mathematica 产品家族中最大的应用程序,内容丰富并功能强大的函数覆盖了初等数学、微积分和线性代数等众多的数学领域,它包含了多个数学方向的新方法和新技术;它包含的近百个作图函数是数据可视化的最好工具;它的编辑功能完备的工作平台 Notebooks 已成为许多报告和论文的通用标准;在给用户最大自由限度的集成环境和优良的系统开放性前提下,吸引了各领域和各行各业的用户。在近 20 年的算法开发中,Mathematica 建立了一个数值计算的新层次。特别是许多高效原始算法、自动选择算法以及在系统范围内支持自动误差追踪和任意精度算法。Mathematica 引入了并行计算,可以充分发挥多核处理器的计算能力和 Mathematica 的自动并行计算技术。

从计算到可视化,从开发到应用,在 20 年不断创新的基础上,Mathematica 7 提供了一个全新视野:终端技术应用和环境。Mathematica 7 简体中文版采用了中文的菜单界面和中文的帮助文档,以及超过 500 个新功能和 12 个新增应用领域。所有这些都完美地集成在一个系统中,给用户带来前所未有的连贯、可靠的工作流。Mathematica 7 的新特性还包括数学对象的即时 3D 模型,内置了图像处理和图像分析功能,基因组、化学、气象、天文学、金融、测地学数据的完整支持等,使其成为科学的研究的有力工具。

现在,Mathematica 在世界上拥有超过数百万的用户,已在工程领域、计算机科学、生物医学、金融和经济、数学、物理、化学和社会科学等范围得到应用。尤其在科研院所和高等院校广为流行。目前至少有 20 种语言写成的 700 多册书籍和几种专门介绍 Mathematica 的期刊。在英国和日本都有大学将 Mathematica 作为理工科学生入校必修的计算机课程之一。在教学研究和教学应用方面,世界各地的大学和高等教育工作者已开发基于 Mathematica 的多门课程。它也是国内

“数学模型”和“数学实验”课程最常用的工具。Mathematica 具有不同类型软件的特点。

- 具有计算器一样简单的交互式操作方式；
- 具有 Matlab 那样强的数值计算功能；
- 具有 Macsyma、Maple 和 Reduce 那样的符号计算功能；
- 具有 APL 和 LISP 那样的人工智能列表处理功能；
- 像 C 语言与 Pascal 语言那样的结构化程序设计语言。

◆ Mathematica 的发明者

Stephen Wolfram 是 Mathematica 的发明者，负责 Mathematica 核心系统的整体设计，同时也是 Wolfram Research 公司的创办人和总裁。Stephen Wolfram 于 1959 年生于英国伦敦，接受了伊顿公学、牛津大学和加州理工大学的教育，15 岁时发表了第一篇科技论文，20 岁时获得加州理工大学理论物理学博士学位，并于 1981 年成为最年轻的 MacArthur 奖获得者。此后，Stephen Wolfram 致力于研究大自然中复杂现象的产生根源。他所做的关于元胞自动机的研究工作获得了一系列重大的发现，为“复杂系统研究”这一新兴领域的创建奠定了基础，并在复杂性理论、人造生命、计算流体力学等诸多领域得到了广泛的应用。Stephen Wolfram 曾历任加州理工大学、普林斯顿高等研究院、伊利诺斯大学的物理学、数学和计算机科学教授，他于 1986 年创办了 Complex Systems 杂志，并于 1987 年创办了 Wolfram Research 公司。自从 Wolfram Research 公司创办开始，Stephen Wolfram 就担任公司的总裁并致力于 Mathematica 的发展，Wolfram 负责 Mathematica 的总体设计，他编写了 Mathematica 大部分的基本核心代码。

0.3 初识 Mathematica

Mathematica 是什么？Mathematica 是一个符号计算系统，是一个做数学和学数学的软件。Mathematica 能做什么？Mathematica 能够完成计算器的任何工作；能够做中小学数学中的计算题目；能做高等数学中的许多题目；给出数据或数学函数，只用一条命令就能绘出复杂的函数图形。

即使你对 Mathematica 还一无所知，看完下面的例子，你会发现 Mathematica 是位博学多才而又友好的助手。Mathematica 会成为你工作和学习的好伙伴！