

王同科

张东丽

王彩华

编

Mathematica 与数值分析实验



清华大学出版社

Mathematica 与数值分析实验

王同科 张东丽 王彩华 编

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书以 Mathematica 软件为实验平台,以算法的实现、理解和应用为主线,按照李庆扬、王能超和易大义三位教授编写的《数值分析(第5版)》(清华大学出版社)的章节安排,将数值分析的内容有机地串联在一起,借助于部分例题的计算机求解,安排了各种数值方法基础性编程实验,以提升程序编写能力;通过理解数值分析课程难点的演示性实验,来培养学术研究能力和探索精神;利用一些应用性实验,来展现数值分析的巨大应用前景.所有程序在综合考虑算法、可读性和效率的基础上,经过精心设计和运行测试,具有非常大的学习价值.

本教材适合作为理工科各专业开设的数值分析课程的配套实验教材,也可以作为国内各院校普遍开设的数学实验教材.对于理工科各专业的研究生和科学工程计算人员,本教材也具有非常大的参考价值.

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 与数值分析实验 / 王同科,张东丽,王彩华编. --北京: 清华大学出版社, 2011.9

ISBN 978-7-302-25943-5

I. ①M… II. ①王… ②张… ③王… III. ①数值分析—应用软件, Mathematica
IV. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 122827 号

责任编辑:刘颖

责任校对:刘玉霞

责任印制:李红英

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 装 者:清华大学印刷厂

经 销:全国新华书店

开 本:185×230

印 张:16.25

字 数:348 千字

版 次:2011 年 9 月第 1 版

印 次:2011 年 9 月第 1 次印刷

印 数:1~3000

定 价:29.00 元

产品编号:041454-01

前言

数值分析(numerical analysis)也称为计算方法,是一门研究算法的学科.算法思想最早萌芽于古代东方数学,它是人们在解决实际问题中的经验总结,如中国古代《九章算术》中的方程术、刘徽的割圆术、《数书九章》中的大衍求一术等.在中世纪,中国与印度的数学家创造了大量结构复杂、应用广泛的算法,如方程组求解,方程求根,欧几里得的辗转相除法等,这些算法不再是简单的经验法则,而成为一种归纳思维能力的产物,算法思想有了质的飞跃.人们逐渐认识到:算法是一种有限的指令,可以机械地运行,得到确定的答案.15世纪时欧洲资本主义工商业兴起,数学发展的主要舞台转移至欧洲,到17世纪以解析几何和微积分为标志的近代数学开始形成发展.各个时期的数学家在发展基础数学的同时由于实际问题计算的需要,也对计算方法做出了重要贡献,如牛顿、欧拉、拉格朗日发展了一般插值方法与差分方法,高斯和切比雪夫分别对于均方模量和绝对值模量发展了最优逼近的方法与理论等.但是,在20世纪40年代之前,由于社会生产规模的制约,特别是技术手段和计算工具的不足,数值计算的发展比较缓慢,对科学研究和工程技术所起的作用也是有限的.1946年,美国宾夕法尼亚大学研制成功世界上第一台程序控制电子计算机ENIAC,同年,冯·诺依曼及其同事起草并向美国海军部提交了一份报告——《高阶线性方程组的解》,这标志着数值分析作为一门学科正式诞生.随后,在科学研究和工程应用的驱动下,与电子计算机的更新换代相呼应,数值分析得到了前所未有的发展.

数值分析研究如何使用计算机求解各类数学问题的方法和理论.随着信息技术和计算机科学的迅猛发展,计算方法在物理、化学、生物、地质、天气预报、航空航天、水利、汽车制造和机械设计等领域的科学研究和工程计算中得到了极大的应用,形成了独具特色的计算类交叉学科,统称为计算科学,其实质就是使用计算机通过计算的手段探索自然现象和社会现象的客观规律.目前,实验、理论和计算已经成为人们进行科学活动的三大方法.数值分析是计算科学的基础,它在很大程度上还代表着整个计算科学的发展.正因为如此,

数值分析或数值计算方法课程在高等院校的数学与应用数学专业、信息与计算科学专业得以普遍开设,并成为许多理工科专业的公共课。

数值分析作为一门数学课程,自然有一套严谨的理论体系。同时,数值分析所介绍的方法又需要在计算机上实现,课程呈现出很强的实践性。在1995年以前,由于计算条件的限制,数值分析课程主要学习算法推导和误差分析等理论知识。自此之后,随着计算机的普及和数学软件的成熟,在数值分析教学中逐步引入了上机实验这一实践环节。目前,绝大部分高校的数值分析课程都安排有上机实验,新近出版的数值分析教材也都增加了上机实习内容,其中实习题目以算法的实现居多,还有一些教材给出了部分算法程序。这些方法或做法为数值分析教学增添了新的活力,有助于培养学生的数值计算能力。同时,我们还认识到,在数值分析教学中单纯安排一些算法上机实验是远远不够的,我们还可以在数值分析实践教学方面做更多的事情,在培养学生的计算意识方面做得更好。鉴于此,作者在长期从事数值分析教学和计算数学科研的基础上,有针对性地编写了这本数值分析实验教材。

本教材围绕算法这一主题展开,用算法的实现、算法的理解、算法的应用这一主线将各部分内容有机地串联在一起。需要指出的是,算法这一主题还包括了算法的设计、算法的推导和算法的分析这三个基本环节,它们构成了数值分析理论教学的基本内容,所有的数值分析教材都有详细叙述。本教材为了体现算法的完整性,对于这些内容给予了简单介绍。算法的实现是本教材的基本内容,包含了数值分析教材中最主要的一些算法。目前,常用数值算法都已经实现了软件化,在数学软件中,通过一个简单的命令即可实现复杂的算法。关于算法实现,我们采用了两种处理方式,一是从最底层算法着手编写程序,其目的在于培养学生的科学计算程序设计能力;二是直接调用数学软件的功能函数,其原因在于有些算法本身过于复杂,直接实现比较困难。比如,非线性最小二乘拟合算法本身并不包括在本科数值分析教材中,但实际应用又比较重要;又比如,编写快速傅里叶变换程序对于有很好编程基础的人员也不容易,但使用软件实现非常简单。在数值分析教材中,对于同一类问题,通常会给出若干种数值方法,并对每种方法进行理论分析,包括截断误差估计或收敛阶估计或舍入误差估计、收敛性分析、稳定性分析等。这些分析对于学好数值分析无疑是重要的,但对于各种算法的实际计算效果及在应用算法时需要注意的问题往往涉及较少,而这正是本教材的重点内容。本教材在每一章都设计了多个实验,对算法从多个角度进行直观地分析和比较,目的在于使学生能够更好地理解算法,进而在应用时能够做到自如地选择算法。数值分析是数学与实际产生联系的桥梁课程,大部分学生学习数值分析的目的在于应用,如何应用数值算法解决实际计算问题在数值分析教材中很少探讨。本教材精选了一些应用实例,以问题解决为出发点,探讨算法在其中所起的关键作用,以便学生对数值算法的最终归宿有所了解,增强学好用好数值分析的自觉性。

目前,国内外已经出版了多种数值分析优秀教材,这些教材各具特色,为数值分析的教学提供了极大的方便。本教材作为数值分析的实验教材,按照李庆扬、王能超和易大义三位教授编写的《数值分析(第5版)》(清华大学出版社)的体系精心挑选并设计实验,可以作为

该教材的配套实验教材. 本教材的大部分实验从章节上看并没有特别的先后次序, 实验内容由浅入深, 层次分明, 难度基本不超过国内流行的数值分析教材. 因此, 本教材实验内容同样适用于其他数值分析教材.

本书作为一本实验教材, 提供实验程序是必需的. 由于本教材并不仅仅是为了提供一本数值方法诸程序而编写的指导书, 更重要的目的在于通过实验学习、理解数值分析, 并在需要时能够正确选择算法, 这就要求在完成实验时不但要进行数值计算, 而且还要用到许多符号演算, 并需要大量绘图. 因此, 在软件的选择方面, 理想的软件应该具备数值计算功能、符号运算功能和绘制各种图形的功能. 具有所有这些功能的流行数学软件当属 MATLAB 和 Mathematica. 本教材选用 Mathematica 软件作为编程语言, 对于熟悉 MATLAB 软件的读者, 自己不难写出基础算法程序, 或从 MATLAB 大量资源中找到相应的程序. 作为教材的后续建设内容, 本教材将在课程网站上逐步给出实验的 MATLAB 程序.

在本教材中, 我们给出了部分实验程序, 还有一部分程序没有给出, 希望读者在学习程序编写方法的基础上能够自己动手编写程序, 增强实践能力, 为以后的工作打下坚实的计算基础. 根据作者多年编写程序的经验, 编写一个程序会有一分的收获, 编写两个程序会有两分的收获, 如果能够编写出本教材所有实验的程序, 则编程能力必定会有质的提高. 当然, 为了方便不同层次的读者使用本书, 我们将建立一个数值分析课程网站, 将所有实验程序放在网站上, 供读者下载, 网址为

<http://59.67.75.245/college/sxxy/skin/one/index.asp>

点击本科生教学→课程建设→数值分析资料

本教材主要由王同科编写完成, 张东丽参与编写了第 1 章及后面章节的部分实验, 王彩华参与编写了部分实验, 并仔细阅读了各章内容, 提出了很好的修改意见. 由于作者水平所限, 书中遗漏和错误之处在所难免, 恳请读者批评指正. 读者在使用过程中如有问题, 请与王同科联系, 电子邮件地址: wangtke@sina.com.

在实验设计过程中, 我们参考了国内外的一些数值分析、数学分析、数学实验和数学模型教材, 我们将它们一一列在本书最后的参考文献中, 在此对作者一并致谢!

在教材编写过程中, 天津师范大学教务处和数学科学学院给予了大力支持, 在此表示感谢.

作 者

2011 年 5 月

内容介绍和使用指南

在前言中我们已经阐述了本教材的编写思路,按照教材编写目的,在每一章我们都给出了若干个实验,这些实验分为以下几类.

(1) 李庆扬、王能超和易大义三位教授编写的《数值分析(第5版)》(清华大学出版社)中部分例题选解.数值分析教材中的例题对于学生熟悉计算过程、理解算法思想、掌握算法实质是非常重要的,教师和学生都会给予充分重视.由于算法最终是要在计算机上实现的,即使简单的例题,计算量也都比较大,教师在讲解时往往关注求解思路,学生则关心求解过程,缺乏参与计算过程的体验,这对于教学是不全面的.教师如果在讲授课程时通过数学软件直接演示一些例题的求解过程,将抽象的数学知识直观地呈现在学生面前,则可以使学生对算法有更加鲜明的感性认识,课堂教学效果会更好.基于以上认识,我们将教材中的部分例题完全按照教材中的解题思路给出了计算机求解程序,这些程序简单易懂,学生容易接受,希望借此培养学生应用计算机解决问题的意识,同时也为学生做好习题提供借鉴.

(2) 数值分析算法实验,这是本教材的重点内容,主要包括数值分析教材中给出的一些主要算法的程序编写实验,为了理解算法而设计的实验和一些具有探索性质的实验.为了方便读者学习,对于这些实验我们分章给予介绍,见下表.

第1章	机器误差实验,调和级数计算实验,算法稳定性实验,两个相近数相减实验,算法计算效率实验,随机模拟实验
第2章	拉格朗日和牛顿插值实验, Γ 函数计算实验,插值多项式和泰勒多项式性质比较实验,插值振荡及其克服方法实验,变网格单调型插值实验,非光滑函数牛顿插值和三次样条插值实验
第3章	伯恩斯坦多项式逼近实验,切比雪夫多项式降阶实验,切比雪夫多项式零点和极值点插值实验,最佳平方逼近多项式收敛性实验,函数的有理逼近实验,三角多项式插值实验,离散傅里叶变换性质实验,线性和非线性最小二乘拟合实验,插值与拟合的性质实验,调和级数(分母中含有数字9的项去掉)收敛性实验
第4章	数值积分的梯形公式和辛普森公式动画演示实验,数值积分的梯形方法、辛普森方法、龙贝格方法和高斯方法实验,自适应辛普森算法实验,数值积分方法计算 π 的效率比较实验,蒙特卡罗方法计算积分实验,中心差商公式实验,二次插值函数一阶导数超收敛点实验
第5章	求解线性代数方程组的列主元高斯消去法实验,对称正定线性代数方程组的改进平方根算法实验,三对角线性代数方程组的追赶法求解实验,希尔伯特矩阵条件数和求解实验,列主元高斯消去法增长因子实验,病态带状线性代数方程组非常规分解计算实验
第6章	求解线性代数方程组的雅可比迭代法实验、高斯-塞德尔迭代法实验、SOR迭代法实验,SOR方法和共轭梯度方法求解希尔伯特方程组实验,泊松方程五点差分格式求解实验
第7章	非线性方程求根的二分法、牛顿法和弦截法实验,不动点迭代法求非线性方程的最小正根问题实验,使用复函数的牛顿迭代研究牛顿法收敛域实验,求两条曲线的交点问题实验

第 8 章	求矩阵按模最大特征值幂法演示实验,幂法和反幂法计算实验,瑞利商位移反幂法计算矩阵的特征值实验,格什戈林圆盘定理估计矩阵特征值实验,希尔伯特矩阵谱范数条件数估计和奇异值分解方法计算实验,豪斯霍尔德变换的几何意义和应用实验,QR 算法求矩阵全部特征值实验,矩阵指数函数的计算实验
第 9 章	求解常微分方程初值问题的欧拉方法、改进的欧拉方法、龙格—库塔方法和四阶亚当斯显式和隐式方法求解实验,显式和隐式方法稳定性条件实验,求解常微分方程初值问题的变步长龙格—库塔—费尔伯格方法实验,非光滑函数求解实验

(3) 数值方法应用性实验. 从数值分析课程的特点和教学目标来看, 培养学生运用数值方法解决实际问题的能力至关重要, 应用性实验即是为此目的而设. 这部分实验从物理、化学、生物、管理、工程等领域中选取实际问题, 充分使用 Mathematica 强大的数值计算和符号运算能力进行解答, 使学生了解理论如何应用于实践, 增强学生学习兴趣, 培养学生的数学建模能力.

本教材实验主要来自两个方面. 一是作者多年来从事数值分析和数学实验教学的工作积累, 并融入了作者多年从事计算数学科研的心得体会, 如函数的伯恩斯坦多项式逼近在数值分析教材中总被提及, 评价是理论上性质优异, 计算上收敛太慢, 但收敛究竟有多慢, 则没有说明, 我们就设计一个实验直观说明函数的伯恩斯坦多项式逼近只有线性收敛速度; 再如, 插值函数的一阶导数超收敛点称为应力佳点, 在工程中有重要应用, 也是目前我们的研究方向, 我们就设计了二次插值函数的一阶导数超收敛点实验, 用来说明一阶导数超收敛点的良好性质. 本教材实验的第二个来源是国内外的一些数值分析、数学分析、数学实验和数学模型教材. 对于这部分实验, 我们首先编写程序进行计算, 然后对计算结果进行分析比较, 并尽可能使用现有理论给予解释, 最后对原问题进行更新改造, 形成了现在的实验. 例如, 数值积分方法计算 π 的效率比较实验来源于李尚志等教授编写的数学实验教材. 原实验使用两个积分公式计算 π , 我们使用四个被积函数性质各异的公式计算 π . 在计算过程中, 我们发现各个公式的计算精度有很大差异, 对这种现象我们进行了理论解释, 从而得到了一个有一定深度的探索性实验. 这种通过计算发现问题并给以合理解释的研究方法正是计算科学的精髓所在, 在教材中得到了很好的体现, 希望读者加以注意. 本教材程序均由我们自己编写, 在综合考虑了算法、可读性和执行效率的基础上, 我们经过精心设计, 力争写出具有示范性质的高质量程序供学生学习. 在程序部分, 我们还给出了使用软件的一些心得体会, 我们特别强调的一个观点是对于程序或软件命令得到的结果一定要进行某种形式的检验, 保证计算结果正确可靠.

本教材提供了比较多的实验, 然而数值分析课程教学时数有限, 所有实验不可能全部完成, 对实验进行取舍是必需的. 我们给出下面几点建议. 第一, 数值分析教材中的例题选解实验可由教师在课堂上讲解例题的同时演示计算机求解过程, 学生课后练习, 也可以对这些程序修改后用来做习题. 第二, 教材中有一部分实验本身就是用来直观说明课程内容的, 这部

分实验最好融入到课程讲授中,便于学生直观理解教学内容.这部分实验不再一一列出,由教师根据课程讲授内容自主选择.第三,由教师根据教学目的或学生根据自己的爱好选择部分实验供上机实习之用.对于将来从事计算数学研究和软件开发的学生而言,学会编写基础算法程序是必需的;对于将来使用算法的学生而言,则不必拘泥于基础算法程序的编写,可以直接使用软件提供的命令或直接调用本教材给出的基础算法程序完成一些算法理解性实验.第四,对于应用性实验,我们建议学生自学或由教师指定一些实验由学生在上机实习时间完成.

本教材除了用作数值分析实验教材外,还可以用作国内各院校普遍开设的数学实验教材.下面给出本书作为数学实验教材的学习指南(以每周3至4课时,共19周为例).

第1~4周	Mathematica 软件介绍
第5周	函数计算实验(实验1.2 调和级数计算,实验1.5 泰勒级数法计算 $\ln 2$,实验2.2 Γ 函数计算)
第6周	插值应用实验(实验2.7 一年中哪一天白天最长,实验2.9 飞机的降落曲线实验)
第7~8周	最小二乘拟合实验(实验3.9 化学反应数据拟合,实验3.12 调和级数(分母中含有数字9的项去掉)收敛性实验,实验3.13 广告费用与效益预测,实验3.14 气田产气量和可采储量的预测问题,实验3.15 艾滋病药物疗效分析)
第9周	函数逼近和离散傅里叶变换实验(实验3.6 $\sqrt{x}$ 的有理函数逼近,实验3.8 观察傅里叶变换前后数列的不同特点,实验3.7 三角多项式插值实验)
第10周	数值积分方法计算 π (实验4.3 数值积分公式计算效率比较)
第11周	蒙特卡罗方法实验(实验1.6 随机模拟实验,实验4.6 蒙特卡罗方法计算积分)
第12周	平面图形的绘制与面积计算实验(实验4.10 河流横断面积计算,实验4.11 常见平面图形的面积计算)
第13周	线性代数方程组求解实验(实验5.6 油漆颜色混合问题,实验5.7 水平悬杆受力实验,实验5.8 圆的拟合问题及一些习题)
第14周	迭代、分形、混沌实验(实验7.6 种群生态学中昆虫的虫口模型实验,实验7.4 探讨复函数的牛顿迭代法收敛域)
第15周	几何变换实验(实验8.5 豪斯霍尔德变换的几何意义,实验8.1 幂法演示实验)
第16周	微分方程应用实验(实验7.8 两个塔之间所用电缆的长度计算问题,实验7.9 化工厂车间空气污染问题,实验9.5 捕食者-食饵种群状态的洛特卡-沃尔泰拉模型计算,实验9.6 放射性废料的处理问题)
第17周	优化问题(实验1.7 供应选址问题,实验9.7 最速降线问题)
第18周	实验7.10 贷款问题,实验8.9 作物育种方案的预测问题
第19周	各章习题选做

作者

2011年5月

目 录

第 1 章 Mathematica7.0 简介	1
1.1 绪论	1
1.2 Mathematica7.0 界面介绍	2
1.2.1 Mathematica7.0 的启动、运行和退出	2
1.2.2 帮助菜单的使用	2
1.3 Mathematica7.0 的基本运算	3
1.3.1 常量和变量	3
1.3.2 算术运算	3
1.3.3 Mathematica 中的函数	5
1.3.4 表与表的生成	7
习题 1.3	12
1.4 Mathematica7.0 的符号计算功能	13
1.4.1 表达式的表示形式	13
1.4.2 求解代数方程和方程组	14
1.4.3 数列运算	16
1.4.4 函数的极限、极值和幂级数展开运算	16
1.4.5 微积分运算	17
1.4.6 求解微分方程	18
1.4.7 矩阵计算	19
习题 1.4	22
1.5 Mathematica7.0 的图形功能	24
1.5.1 基本的二维图形	24
1.5.2 绘制散点图	27
1.5.3 二维参数作图	28
1.5.4 二维极坐标作图	29

1.5.5	二维等值线图形	29
1.5.6	二维图形元素	30
1.5.7	三维图形的绘制	32
	习题 1.5	33
1.6	Mathematica7.0 程序设计	34
1.6.1	定义函数和变换规则	35
1.6.2	条件结构	37
1.6.3	循环结构	38
1.6.4	流程控制与并行计算	40
1.6.5	Mathematica 输入输出	40
	习题 1.6	41
1.7	应用实例	42
	习题 1.7	50
第 2 章	多项式插值	51
2.1	多项式插值简介	51
2.2	例题选解	53
2.3	多项式插值计算	59
2.4	插值的振荡现象	65
2.5	插值应用型实验	71
	习题 2	74
第 3 章	函数逼近与快速傅里叶变换	77
3.1	函数逼近简介	77
3.2	例题选解	79
3.3	函数的最佳逼近	82
3.4	曲线的最小二乘拟合	96
3.5	应用实例	101
	习题 3	106
第 4 章	数值积分与数值微分	108
4.1	数值积分与数值微分简介	108
4.2	例题选解	110
4.3	数值积分方法实验	114

4.4	数值微分方法实验	126
4.5	数值积分应用实例	129
	习题 4	134
第 5 章	解线性代数方程组的直接方法	136
5.1	直接方法简介	136
5.2	例题选解	137
5.3	高斯类消去法求解实验	140
5.4	线性代数方程组应用实例	147
	习题 5	151
第 6 章	线性代数方程组迭代解法	155
6.1	线性代数方程组迭代方法简介	155
6.2	例题选解	156
6.3	基本迭代法	161
	习题 6	169
第 7 章	非线性方程求根	171
7.1	非线性方程求根方法简介	171
7.2	例题选解	172
7.3	非线性方程求根基本算法	179
7.4	应用性实例	186
	习题 7	193
第 8 章	矩阵特征值问题计算	196
8.1	矩阵特征值问题计算简介	196
8.2	例题选解	197
8.3	矩阵特征值问题基本计算方法	201
8.4	矩阵特征值问题应用	213
	习题 8	215
第 9 章	常微分方程初值问题数值解法	217
9.1	常微分方程初值问题数值解法简介	217

9.2 例题选解	218
9.3 常微分方程基本求解算法	224
9.4 应用实例	234
习题 9	240
参考文献	242

1.1 绪 论

Mathematica 是由美国科学家 Stephen Wolfram 领导的 Wolfram 公司开发研制的一个用途广泛的科学计算软件. 1988 年发布 Mathematica 系统 1.0 版, 因系统精致的结构和强大的计算能力而广为流传, 经不断扩充和修改后, 于 2008 年 11 月推出 Mathematica7.0 版, 本教材以 Mathematica7.0 为模版介绍.

Mathematica 是目前世界上应用最广泛的符号计算系统之一, 能够完成符号和数值运算、数学图形绘制甚至动画制作等多种功能. 其主要特点包括:

(1) Mathematica 是人—机对话式软件, 使用者在软件的 Notebook 环境下输入命令后, 系统可以立即进行处理, 然后返回结果. 用户不必关心中间的计算过程, 其交互性能非常好.

(2) Mathematica 在进行数值计算时, 能尽可能地保持计算的精确度. 它对整数运算的结果不受字段长的限制, 而对实数运算结果则可以按使用者的需要, 给出足够多位的有效数字.

(3) Mathematica 的符号运算功能是非常突出的. 符号计算过程是常量、变量、函数和计算公式到常量、变量、函数和计算公式的变换, 即通常意义上的数学推导过程. 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 可以进行多项式的因式分解, 求函数的导数, 求不定积分等.

(4) Mathematica 不仅可以进行基本的计算, 还可以进行图形处理, 用 Mathematica 可以绘出精美的二维和三维图形. Mathematica 也能对声音进行处理, 它可以让一个函数产生一种声音, 并且绘出表示该声音的波形.

(5) Mathematica 本身还是一门高级计算机语言, 像其他计算机语言一样, 可以编写 Mathematica 程序完成特定的任务. 由于 Mathematica 的函数非常丰富, 使得其程序编写更加容易.

Mathematica 的最大优点在于它将各种功能有机地融合在一起, 使用者可以非常轻松地在 Notebook 环境下完成数值计算、符号计算、图形绘制和程序设计等工作.

为了给大家的学習提供更多的帮助, 在这里提几点建议: 首先要特别关注 Mathematica 软件自带的帮助系统(help), 这是一个非常好的学习材料, 也是一本最完整的教材, 其中给

出的一些例子非常有代表性. 其次可以从 Mathematica 网站的主页 <http://www.wolfram.com/> 上获得最新的、最权威的材料.

1.2 Mathematica7.0 界面介绍

1.2.1 Mathematica7.0 的启动、运行和退出

假设在 Windows 环境下已经安装好 Mathematica7.0, 启动 Windows 后, 在“开始”菜单的“程序”中单击 Mathematica7.0, 在屏幕上显示 Mathematica 的 Notebook 窗口, 系统暂时取名 Untitled-1, 直到用户保存时重新命名为止.

输入 $1+1$, 然后按下 Shift+Enter 键(或者小键盘上的 Enter 键), 这时系统开始计算并输出计算结果, 并给输入和输出附上次序标识 In[1] 和 Out[1], 注意 In[1] 是计算后才出现的; 再输入第二个表达式, 如 $\text{Plot}[\text{Sin}[x], \{x, 0, 2\text{Pi}\}]$, 按 Shift+Enter 键, 绘出 $\sin x$ 在 $[0, 2\pi]$ 上的图形, 系统分别将其标识为 In[2] 和 Out[2].

注 Mathematica 的 Notebook 是一个集成环境, Enter 键的作用是输入换行, 而 Shift+Enter 键则向计算机发出计算指令.

Mathematica 第一次计算时因为要启动核(kernel), 所需时间要长一些, 也可以在 Mathematica 启动后第一次计算之前, 手工启动核, 方法是用鼠标左键单击: 菜单 Evaluation→Kernel→Start Kernel→Local. 这样第一次计算就很快了. 在 Mathematica 工作过程中, 可以随时退出核, 方法是: 选择菜单 Evaluation→Quit Kernel→Local.

Mathematica 的使用功能见 Notebook 窗口中的各个下拉式菜单, 分别有 File, Edit, Insert, Format, Cell, Graphics, Evaluation, Palettes, Windows, Help, 每个菜单都有丰富的功能, 其中单元(Cell)在 Mathematica 中起重要作用, Mathematica 的一个输入或输出即为一个 Cell. Mathematica 退出时按 Alt+F4 或用鼠标左键单击窗口右上角的关闭按钮.

1.2.2 帮助菜单的使用

任何时候都可以用鼠标单击 Help 菜单中的 Documentation Center 命令, 打开帮助中心, 查找需要的帮助或者选择 Virtual Book, 里面有一本完整的 Mathematica 使用指南, 单击菜单命令, 可获得相关的帮助信息. Documentation Center 主要用来查找一些函数的使用方法, Virtual Book 则主要用来介绍 Mathematica 的主要功能, 主要选项有 Introduction, Core Language, Mathematics and Algorithms, Visualization and Graphics 等. 请自行打开帮助菜单浏览 Mathematica 的各项功能, 以便对 Mathematica 有一个整体的认识.

1.3 Mathematica7.0 的基本运算

1.3.1 常量和变量

在运算过程中保持不变的量称为常量,常量也称为常数,Mathematica 提供许多常用的数学常数,如:

Pi—圆周率;Degree—度;Infinity—无穷大;E—自然对数的底;I—虚数单位.

为了便于计算、保存或引用在运算中的一些中间结果,常常需要引进变量.在 Mathematica 中变量名以英文字母开头,后跟字母或数字,变量名字符的长度不限.例如: abcdefghijk, A, x3 都是合法的变量名;而 2t 和 u v(u 与 v 之间有一空格)不能作为变量名.英文字母中大小写意义不同,因此 A 与 a 表示两个不同的变量.在 Mathematica 中常量、函数都用大写字母开头的标识符来表示,为了避免混淆,变量名通常都以小写字母开头.用户可以对矩阵等变量用大写字母,这样更符合数学表示的习惯.

在 Mathematica 中变量即取即用,不需要先说明变量的类型再使用.在 Mathematica 中,变量不仅可以存放一个实数或复数,还可以存放一个多项式或复杂的图形等.

数值有类型,变量也有类型.通常在运算中不需要对变量进行类型说明,系统根据变量初值会作出正确的处理.在定义函数和程序设计中允许对变量进行类型说明.

在 Mathematica 中用“=”表示变量赋值.表 1.1 给出了变量赋值的常用形式.

表 1.1 变量赋值的常用形式

赋值形式	意义
$x = \text{value}$	给 x 定义值 value
$x = y = \text{value}$	给 x 和 y 定义同一值 value
$\{x, y\} = \{\text{value1}, \text{value2}\}$	给 x 和 y 定义不同的值 value1 和 value2
$\{x, y\} = \{y, x\}$	交换 x 和 y 的值
$x = .$	清除变量 x 的值
$\text{Clear}[x]$	清除变量 x 的定义和值

1.3.2 算术运算

Mathematica 最基本的功能是进行算术运算,包括加(+),减(-),乘(*),除(/),乘方(^),阶乘(!)等,运算顺序遵守数学习惯,先阶乘,后乘方,再乘除,最后加减,同级运算遵守从左到右的顺序. Mathematica 作为一个著名的符号计算软件,和 C、Fortran 等高级语言对于数的处理有明显的不同,最大的区别在于 Mathematica 引入了任意精度实数,并且可以精确表示出非常大的整数. Mathematica 的实数分为两类,一是任意精度实数,如不带小数点的分数和无理数等,二是机器精度实数,主要指带小数点且小数位数小于等于 16 的小数,如

果小数位数大于 16, 则 Mathematica 将其解释为任意精度实数. Mathematica 的机器精度实数相当于 C、Fortran 等高级语言中的双精度实数, 在运算时会产生由于数据的舍入导致的浮点数误差, 但运算速度较快. Mathematica 的任意精度实数运算类似于通常意义上的数学运算, 计算准确, 但要花费比较长的时间, 机器精度数通过命令 SetAccuracy 可以转化为任意精度实数. 巧妙地应用 Mathematica 的任意精度实数和机器精度实数运算, 有助于更好地理解数值算法.

注 (1) 在 Mathematica 中, 也可以用空格代替乘号; 数字和字母相乘, 乘号可以省去, 例如: $3 * 2$ 可写成 $3\ 2$, $2 * x$ 可写成 $2x$, 但字母和字母相乘, 乘号或空格不能省去. 建议大家尽可能不要省去乘号, 以免引起混乱.

(2) 在 Mathematica 中, 表达式中用来表示运算结合次序的括号只允许是圆括号(无论多少层). 例如: $4 * (2 + 3 / (2 - 5))$.

(3) 当输入式子中不含小数点, Mathematica 按任意精度数处理, 输出结果是完全精确的. 例如: 输入 $2/3$, 输出仍然为 $2/3$.

(4) 为了得到计算结果的近似数或指定有效数字的位数, 可以用 $N[]$ 函数. 例如: $N[x]$, $N[x, 20]$, 前者取 x 的默认位数近似值, 后者取 x 的 20 位有效数字. N 函数对于任意精度数可以显示超过 16 位的小数位数, 对于机器精度实数不管是否使用 N 函数, 为了阅读方便通常仅显示 6 位数字, 但机器内部仍按 16 位小数存储和计算, 这时可以使用 InputForm 命令显示实数的全部有效数字, 基本用法为 $\text{InputForm}[x]$.

(5) $\%$ 表示上一个输出结果, $\%\%$ 表示倒数第二个输出结果, 以此类推, $\%n$ 表示第 n 个输出结果(而不是倒数第 n 个结果).

(6) 在 Mathematica 中, 如果在输入的表达式末尾加上一个分号“;”, 表示不显示计算结果, 但可以调用它的结果.

(7) 常用的符号见表 1.2.

表 1.2 Mathematica 中一些常用的符号

$(\cdot)$	圆括号用于组合运算	$\%$	代表最后产生的结果
$f[x]$	方括号用于函数	$\%\%$	倒数第二次的计算结果
$\{\}$	花括号用于列表	$\%\%\%(k)$	倒数第 k 次的计算结果
$[[i]]$	表中分量表示	$\%n$	输出行 $\text{Out}[n]$ 的结果

例

$\{6!, 6!! , 34 * 3.5, (2 * \text{Pi} + 5) / 4^2, N[\text{Pi}, 10], N[\text{Pi}, 20], E^4\}$

(* 输入一些表达式, 结果 $\{720, 48, 119., 1/16\ (5 + 2\pi), 3.141592654, 3.1415926535897932385, E^4\}$, 其中 $6!! = 6 * 4 * 2 *$)

Mathematica 可以计算非常大的整数和非常精确的实数, 请测试 $100!$, $200!$ 及 $N[\text{Pi}, 100]$, $N[E, 1000]$.