



中国科学技术大学

University of Science and Technology of China

Mathematica 教程 by 刘思齐

计算方法, 2023 年秋季学期

杨春雨

yang200875@mail.ustc.edu.cn

非线性化学实验室
中国科学技术大学 化学物理系

March 8, 2023

Contents

1	导论	1
1.1	为什么使用 Mathematica	1
1.2	Mathematica 的历史	1
1.3	作为计算器的 Mathematica	1
2	表达式	2
2.1	Atom	2
2.2	循环	2
2.3	函数定义	2
2.4	表达式的处理	2
3	模式匹配	2
4	重写规则	2

1 导论

1.1 为什么使用 Mathematica

科研工作者基本的工作范式是

1. 选定一个貌似可以解决的问题；
2. 尝试一些实际例子来理解这个问题；
3. 想象某种可能成功的解决方案；
4. 如果想出来的方法成功，则问题解决；
5. 如果方法不可行，回到 3；
6. 如果想到的所有方法都不可行，回到 1。

为了提高效率，我们应该人的工作给人，机器的工作交给机器。特别地，对于需要使用计算的人而言，就是将计算机的工作交给计算机。

当我们在做程序开发的时候，效率最高的方式是让开发时间和运行时间最短的方式。对于多数科研工作者而言，我们设计某一个程序，只需要让它完成一个特定的任务即可，程序本身可能运行几次甚至一次就好。一般来说，一个程序运行所需要的时间会远远短于开发的时间。所以对于科研工作者而言，最有效率的方式约等于开发时间最短的方式。

Mathematica 的语言接近于自然语言，内置了大量的函数，因此当我们需要完成一个计算任务的时候，使用 **Mathematica** 可以有效缩短开发时间。

所以使用 **Mathematica** 的理由其实很简单，就是提高效率。

1.2 Mathematica 的历史

Mathematica 的历史可以从他们的官方网页中了解到。**Mathematica** 是用 C 语言来完成的，两者因此具有一定的相似性。同时 **Mathematica** 在开发的时候，借鉴了 **Lisp**，因此它们也有许多相似的地方。

1.3 作为计算器的 Mathematica

Mathematica 中的计算是高精度计算，本身就可以当作一个计算器使用。有一些内置函数可以完成一些数学工作，**Expand** 可以展开，**Factor** 可以做因式分解，**Solve** 可以求解方程，**Limit** 求极限，**Integrate** 求积分，**Sum** 求级数，**D** 求导，**Dsolve** 求常微分方程。→ 在 **mathematica** 里面会显示成 →。

当我们在做一系列的计算的时候，如果担心重名变量的污染，可以重启内核。

在 **Mathematica** 中被赋值了的元素为黑色，没有的话为蓝色。**Mathematica** 注释的格式为 (* 注释 *)。

除了上述的简单功能之外，**Mathematica** 实际上内置了许多高级的功能，**Mathematica** 可以处理音乐。**Import** 函数可以直接从网上抓取数据，可以实现比如图片处理之类的功能。还可以用 **Mathematica** 抓取股票数据，进而实现量化交易等。

2 表达式

2.1 Atom

在 `Mathematica` 中符号、数字、字符串被称为原子 (`atom`)。其变量类似于 `python`。`Mathematica` 有一个系统内置的符号，它们不能被赋值。这些符号的命名遵循驼峰命名法。为了避免和系统内置的符号重复，自定义变量的时候，可以遵循首字母为小写的驼峰命名。

`Mathematica` 支持 `Unicode`。其类型检查并不严格。和多数语言不一样的是，其 `Bool` 值存在 `True` `False` 和 `Unevaluated`。

2.2 循环

2.3 函数定义

2.4 表达式的处理

3 模式匹配

`Mathematica` 的第二个基本原理是：计算即重写。

4 重写规则

`mma` 的第二个原理是计算即重写。所谓重写，就是将匹配成功的模式改写为其他形式。`Mathematica` 就是由一大堆重写规则组成的。

重写规则的一般形式是：（模式）（重写符号）（重写结果）。其中重写符号有四种：
`→` (`->`)

References