

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Maple als Taschenrechner	1
1.2	Wertzuweisung	3
1.3	Funktionen	6
1.4	Library-Struktur	9
1.5	Einfache Datenstrukturen	10
1.6	Strings, Namen	13
1.7	Ein- und Ausgabe über Dateien	15
1.8	Einfache Plotfunktionen	17
1.8.1	Interaktive Erstellung von Graphiken	27
2	Manipulation von Formeln und Datenstrukturen	33
2.1	simplify	33
2.2	expand, factor	34
2.3	normal, rationalize	36
2.4	convert	37
2.5	collect, combine	38
2.6	sort	40
2.7	map, zip	41
2.8	Strukturelle Manipulationen	42
2.9	Häufig gestellte Fragen	43
2.10	Fallstudie: Vollständige Induktion	44
3	Grundlagen der Analysis	47
3.1	Folgen und Grenzwerte	47
3.2	Grenzwerte bei Funktionen, Stetigkeit	49
3.3	Differentiation	52
3.4	Differentiationsregeln	57
3.5	Kurvendiskussion	58
3.6	Extremwertprobleme	64
4	Integralrechnung	67
4.1	Riemann-Integral	67
4.2	Elementare Integrationstechniken	72
4.3	Algorithmen für die unbestimmte Integration	74
4.4	Bestimmte Integration	78
4.5	Numerische Integration	81

5	Lineare Algebra	85
5.1	Vektoroperationen	85
5.2	Matrixoperationen	90
5.3	Lineare Gleichungssysteme	93
5.4	Diagonalisierung	98
5.5	Matrixzerlegung	101
5.6	Spreadsheets	104
6	Programmieren in Maple	107
6.1	Verzweigungen, Schleifen	107
6.2	Prozeduren	112
6.3	Optionen und interne Prozedurverwaltung	119
6.4	Module	123
6.4.1	Symbolische Differentiation I	125
6.4.2	Symbolische Differentiation II	128
6.5	Maplets	134
6.5.1	Einführung	134
6.5.2	Ein erstes Maplet	136
6.5.3	Das Element TextField und Return-Werte	137
6.5.4	Kommunikation mit dem Kernel	138
6.5.5	Ausgabe von Plots im Maplet	138
6.5.6	Maplet Viewer	140
7	Differentialgleichungen	141
7.1	Symbolische Lösung	141
7.2	Laplace-Transformationsmethode	143
7.3	Näherungslösung durch Reihenentwicklung	146
7.4	Numerische Lösung	148
7.5	Zeichnen von Lösungskurven	150
8	Numerische Verfahren	155
8.1	Newton-Iteration	155
8.2	Sekanten-Methode	158
8.3	Numerische Differentiation	159
8.4	Newton-Cotes-Quadratur	162
8.5	Gauß-Legendre-Quadratur	165
8.6	Runge-Kutta-Verfahren	168
8.7	Aitken-Transformation	172
8.8	Shanks-Transformation	176
8.8.1	Epsilon-Algorithmus	183
8.8.2	Geometrische Interpretation	187
8.9	Levin-Transformation	189
8.9.1	Rekursions-Algorithmus	192
8.9.2	CNC-Transformation	198
8.9.3	Summation von divergenten Reihen	202
8.10	Allgemeines Extrapolationsverfahren	205
8.10.1	Richardson-Extrapolation	207
8.10.2	Sidi-Transformation	212

9	Transformation von Programmen	219
9.1	Generierung von Fortran-, C- und Java-Code	219
9.2	Optimierung von Berechnungssequenzen	222
9.3	Automatische Differentiation	225
9.4	Gradienten und Hesse-Matrix	230
10	Nutzung kompilierter Programme	237
10.1	Einbinden eigener C- und Fortran-Programme	237
10.2	Einbinden von Bibliotheksprogrammen	239
10.3	Übersetzen und Einbinden der Maple-Prozedur FFT	243
10.4	Eigenwertprobleme in der Quantenchemie	249
10.4.1	Cholesky-Faktorisierung	253
10.4.2	Löwdin-Orthogonalisierung	257
	Literaturverzeichnis	261
	Index	265

Vorwort

Maple ist ein weitverbreitetes mathematisches Softwaresystem, das in Mathematik, Naturwissenschaft und Technik für Forschung und Anwendung sowie Lehrzwecke eingesetzt wird. Die Maple-Software ermöglicht symbolisches Rechnen (Computeralgebra), numerisches Rechnen und Visualisierung in einer integrierten und benutzerfreundlichen Arbeitsumgebung. Darüber hinaus bietet Maple eine flexible und leicht zu erlernende Programmiersprache.

Ursprünglich ein reines Computeralgebrasystem wurde Maple im Laufe der Jahre, beruhend auf dem Feedback vieler Anwender, ständig erweitert und an die Anforderungen der Angewandten Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens angepasst. Diese Entwicklungen haben dazu geführt, dass Maple zu einem universellen Mathematik-Softwaresystem ausgebaut wurde.

Im Forschungszentrum Jülich wird Maple seit über zehn Jahren für die mathematische Problemlösung und Modellierung verwendet. Für einen Einstieg in Maple wird jährlich ein Kurs angeboten. Zudem wird Maple bei der Ausbildung Mathematisch-technischer Assistenten (MaTA) seit vielen Jahren vorlesungsbegleitend eingesetzt, insbesondere in der Analysis und Linearen Algebra. Die MaTA-Absolventen haben die Möglichkeit das ausbildungsbegleitende Studium der Technomathematik an der Fachhochschule Aachen/Jülich fortzusetzen und können in weiteren vier Semestern das Diplom erwerben. Das vorliegende Skript wurde für die neue Vorlesung Computermathematik im Hauptstudium des Studiengangs Technomathematik erstellt. Es umfasst neben den Materialien zur Vorlesung auch Kursunterlagen aus der MaTA-Ausbildung am Zentralinstitut für Angewandte Mathematik des Forschungszentrums (Kapitel 1-5). Methoden der Computeralgebra für die mathematische Modellierung, Numerik und Programmierung bilden den inhaltlichen Schwerpunkt der Vorlesung. Einzelthemen sind:

- Programmiertechniken in Maple (Prozeduren, Module, Maplets)
- Methoden der Differentiation
- Lösen von Differentialgleichungen und Eigenwertproblemen
- Ableitung und Analyse numerischer Verfahren (Konvergenz- und Fehlerordnungen)
- Konvergenzbeschleunigungsmethoden
- Programmgenerierung und -optimierung

In dieser Veranstaltung wurden erstmals neue und innovative Elemente der Computermathematik angewandt bzw. erprobt, z.B.:

- Ableitung und Analyse numerischer Verfahren mittels algebraischer Rechnungen sowie beliebig genauer Gleitkommaarithmetik
- Einsatz schneller Hardware-Gleitkommaarithmetik durch "dynamisches Linken" externer (NAG-)Programme in C bzw. Fortran
- Vorführung auch größerer algebraischer und numerischer Rechnungen unter Nutzung moderner Präsentationstechnik (Laptop mit Beamer, Maple-Worksheet-Interface)

Dieses Dokument wurde mit Hilfe der \LaTeX -Exportfunktion in Maple aus dem zugrunde liegenden Maple-Skript abgeleitet, das mit Version 8 der Maple-Software erstellt wurde. Da schon frühzeitig eine Beta-Version von Maple 9 zur Verfügung stand, werden auch einige Neu- und Weiterentwicklungen demonstriert. Auf die graphische Benutzerober-

fläche der Maple-Software wird in diesem Skriptum nur am Rande eingegangen. Die Programmierung eigener graphischer Oberflächen für Anwendungen, sogenannte Maplets, wird dagegen in Kapitel 6.5 kurz erläutert. Maple arbeitet kommandozeilenorientiert, d.h. Anweisungen werden generell über eine Eingabezeile erfasst. Es ist daher notwendig, dass der Anwender die Syntax elementarer und wichtiger Kommandos erlernt, auch wenn dies anfangs ein wenig Zeit und Geduld erfordert. Der Aufwand lohnt sich allemal. Die verwendeten Befehle und Funktionen sind in den Worksheets über Hyperlinks mit den entsprechenden Hilfeseiten des Maple-Systems verknüpft. Sie werden im Index dieses Buches im `typewriter`-Font aufgeführt. Im Text erscheinen die Links zu den Hilfeseiten in Fettdruck.

Eine vorläufige Version dieses Skriptums (in Maple- und \LaTeX -Format) stand den Studenten mit Beginn der Vorlesung zur Verfügung. Die Übungsaufgaben (als Maple-Arbeitsblätter) wurden über eine WWW-Seite zur Veranstaltung verteilt. Das vollständige Skript mit Übungsaufgaben befindet sich als Maple-Dokument auf der CD zu diesem Buch.

Computergestützte Mathematik wird in Zukunft ebenso selbstverständlich sein, wie es CAD heute schon im Bereich Konstruktion ist. Daher ist es wichtig, dass Naturwissenschaftler und Ingenieure die neuen Rechentechniken aus Mathematik und Informatik beherrschen und einsetzen können. Ziel dieses Buches ist es, Studenten von Anfang an mit den Möglichkeiten der integrierten Mathematik-Software Maple durch *learning by doing* vertraut zu machen, insbesondere für die wichtigen Technomathematik-Themen Modellierung, Numerik und Programmierung.

Für die vielen Anregungen und für die kritische Durchsicht des Manuskriptes möchte ich Frau Monika Marx, Frau Ruth Zimmermann und den Studenten dieser Veranstaltung herzlich danken. Für die Hilfe bei der Indexerstellung danke ich Frau Ilona Lütje. Herrn Prof. Siegfried Pawelke (FH Jülich) gebührt mein Dank für viele Diskussionen und Anmerkungen zur Maple-Anwendung in der Lehre. Mein besonderer Dank geht an René Külheim, der zur Erstellung der Unterkapitel über die Maplet-Programmierung und die Einbindung externer C- und Fortran-Programme maßgeblich beigetragen hat.

Jülich
Juli 2003

Johannes Grotendorst