

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	28
2	Manipulation von Formeln und Datenstrukturen	33
2.1	simplify	33
2.2	expand, factor	34
2.3	normal, rationalize	35
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	Komplexe Zahlen	43
2.10	Häufig gestellte Fragen	45
2.11	Fallstudie: Vollständige Induktion	46
3	Grundlagen der Analysis	49
3.1	Folgen und Grenzwerte	49
3.2	Grenzwerte bei Funktionen, Stetigkeit	51
3.3	Differentiation	54
3.4	Differentiationsregeln	59
3.5	Kurvendiskussion	60
3.6	Extremwertprobleme	66
4	Integralrechnung	69
4.1	Riemann-Integral	69
4.2	Elementare Integrationstechniken	74
4.3	Algorithmen für die unbestimmte Integration	76
4.4	Bestimmte Integration	80
4.5	Numerische Integration	83

5	Lineare Algebra	87
5.1	Vektoroperationen	87
5.2	Matrixoperationen	92
5.3	Lineare Gleichungssysteme	95
5.4	Diagonalisierung	100
5.5	Matrixzerlegung	104
5.6	Spreadsheets	107
6	Programmieren in Maple	109
6.1	Verzweigungen, Schleifen	109
6.2	Prozeduren	114
6.3	Optionen und interne Prozedurverwaltung	121
6.4	Module	125
6.4.1	Symbolische Differentiation I	129
6.4.2	Symbolische Differentiation II	132
6.5	Maplets	138
6.5.1	Einführung	138
6.5.2	Ein erstes Maplet	140
6.5.3	Das Element TextField und Return-Werte	141
6.5.4	Kommunikation mit dem Kernel	142
6.5.5	Ausgabe von Plots im Maplet	143
6.5.6	Maplet Viewer	144
7	Differentialgleichungen	147
7.1	Symbolische Lösung	147
7.2	Laplace-Transformationsmethode	149
7.3	Näherungslösung durch Reihenentwicklung	152
7.4	Numerische Lösung	154
7.5	Zeichnen von Lösungskurven	156
7.6	Interaktive Analyse von Differentialgleichungen	159
8	Numerische Verfahren	163
8.1	Nullstellenberechnung mit Ableitungen	163
8.1.1	Newton-Methode	164
8.1.2	Halley-Verfahren	167
8.1.3	Hebden-Verfahren	169
8.2	Sekanten-Methode	172
8.3	Numerische Differentiation	173
8.4	Newton-Cotes-Quadratur	176
8.5	Gauß-Legendre-Quadratur	179
8.6	Runge-Kutta-Verfahren	182
8.7	Aitken-Transformation	186
8.7.1	Steffensen-Methode	191
8.8	Shanks-Transformation	193
8.8.1	Epsilon-Algorithmus	200
8.8.2	Geometrische Interpretation	203
8.9	Levin-Transformation	206
8.9.1	Rekursions-Algorithmus	209

8.9.2	CNC-Transformation	215
8.9.3	Summation von divergenten Reihen	219
8.10	Allgemeines Extrapolationsverfahren	222
8.10.1	Richardson-Extrapolation	224
8.10.2	Sidi-Transformation	229
9	Transformation von Programmen	235
9.1	Generierung von Fortran-, C- und Java-Code	235
9.2	Optimierung von Berechnungssequenzen	238
9.3	Automatische Differentiation	241
9.4	Gradienten und Hesse-Matrix	246
10	Nutzung kompilierter Programme	253
10.1	Einbinden eigener C- und Fortran-Programme	253
10.2	Einbinden von Bibliotheksprogrammen	255
10.3	Übersetzen und Einbinden der Maple-Prozedur FFT	259
10.4	Eigenwertprobleme in der Quantenchemie	265
10.4.1	Cholesky-Faktorisierung	269
10.4.2	Löwdin-Orthogonalisierung	273
	Literaturverzeichnis	279
	Index	283

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.

Maple im Forschungszentrum Jülich

Im Forschungszentrum Jülich wird Maple seit 15 Jahren für die mathematische Problemlösung und Modellierung verwendet. Für Neueinsteiger findet jährlich ein Einführungskurs statt. In der Ausbildung Mathematisch-Technischer Assistenten (MaTA) wird Maple 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 1-6). 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 werden 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 Programme in C bzw. Fortran sowie von Bibliotheksroutinen
- Vorführung auch größerer algebraischer und numerischer Rechnungen unter Nutzung moderner Präsentationstechnik

Print- und Worksheet-Version des Skriptes, Notation

Ziel dieses Buches ist es, Studenten von Anfang an mit den Möglichkeiten der integrierten Mathematik-Software Maple durch *learning by doing* vertraut zu machen. Das vollständige Skript mit Übungsaufgaben befindet sich als Maple-Dokument auf der CD zu diesem Buch, d.h. alle Rechenschritte und Beispiele können am Rechner nachvollzogen werden. Die Print-Version des Skriptes wurde mit Hilfe der \LaTeX -Exportfunktion in Maple aus den zugrunde liegenden Maple-Worksheets abgeleitet. Auf die graphische Benutzeroberfläche der Maple-Software wird in diesem Buch 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.

Zweite Auflage

Anlässlich der Neuauflage des Buches wurden die gesamten Kursunterlagen überarbeitet und an die Version Maple 9.5 angepasst. Neuerungen wurden wenn möglich berücksichtigt, hier insbesondere die Erweiterungen in der Ausbildungskomponente des Maple-Systems (Paket Student). In Kapitel 8 sind einige numerische Verfahren hinzugekommen. Die Farbgraphiken für das Buch sowie das Material für die CD wurden mit dem Classic Worksheet Interface von Maple 9.5 erstellt.

Für die vielen Anregungen und für die kritische Durchsicht des Manuskriptes möchte ich Frau Monika Marx, Frau Ruth Zimmermann, den Studenten der Vorlesung Computermathematik und Herrn Thomas Richard von Scientific Computers 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 beigetragen hat.

Jülich
Mai 2004

Johannes Grotendorst