

Rechnernutzung in der Physik

Teil II: Computeralgebra/Mathematica

1. Grundlagen (von Mathematica)
2. Klassische Physik und Computeralgebra
3. Numerische Integration
4. Quantenmechanik und Computeralgebra
5. Computeralgebrasysteme

Literatur

- C. Weiß: „Mathematica kompakt: Einführung – Funktionsumfang – Praxisbeispiele“, Oldenbourg
- F. Olness, R. Zimmermann: „Mathematica for Physics“, Addison Wesley
- R. Maeder: „Programming in Mathematica“, Addison Wesley
- W. Kinzel, G. Reents: „Physik per Computer“, Spektrum
- M. Trott: „The Mathematica Guide Book for Programming“, Springer
- Documentation Center von Mathematica

1. Grundlagen (von Mathematica)

1.1. Computeralgebrasysteme (CAS)

- Moderne Physik (Theorie und Experiment) ist ohne Computer undenkbar
- Computeralgebrasysteme (CAS): symbolisches Rechnen, differenzieren, integrieren, lineare Algebra, Numerik, Datenanalyse, ...
- Beispiel (theoretische Teilchenphysik): Quantenkorrekturen zur Polarisationsfunktion des Photons:
 - analytische Rechnung
 - ≈ 1 TByte für Zwischenausdruck
 - mehrere Monate CPU-Zeit (auf Hochleistungscomputer)
- CAS $\leftrightarrow$ Höhere Programmiersprachen (C++, Fortran, ...)
- “universelle” CAS (haben Anspruch, alles zu können)
- spezialisierte CAS (spezialisiert auf bestimmte Aufgaben; schnell; effektiv)

Überblick über CAS (nicht vollständig)

Mathematica	sehr umfangreich; anal. + num. Rng. möglich; weit verbreitet
Maple	— ” —
Macsyma	seit 1968; erstes umfangreiches CAS
Derive	seit 1988; wenig Speicherplatzbedarf
MuPad	Univ. Paderborn
MatLab	Matrix Laboratory; „Technical Computing“ graph. Darstellung; num. Rechnungen
Axiom	nützlich im Zusammenhang mit math. Algorithmen
Ginac	Univ. Mainz; C++ Bibliothek; open source; durch Hauptspeicher begr.
Form	geringer Befehlsumfang; aber sehr schnell, auch bei grossen Ausdr. keine Numerik; kein interaktiver Modus; gutes Pattern matching
Reduce	„zwischen Mathematica und Form“; z.B. schnell bei Faktorisierung von Polynomen.
Fermat	„Weltmeister“ beim Berechnen von ggT

Überblick über CAS (nicht vollständig)

CAS

Axiom axiom-developer.org

Derive

Fermat www.bway.net/~lewis

FORM www.nikhef.nl/~form

Ginac www.ginac.de

Macsyma www.symbolics-dks.com/Macsyma-1.htm

Maple www.maplesoft.com

Mathematica www.wolfram.com

MatLab www.mathworks.com/products/matlab

Mupad www.mupad.de

Reduce www.reduce-algebra.com

1.2. Einführung in Mathematica

⇒ `kap_1_intro.nb`