

# 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
  - $\approx 1$  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“<br>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.<br>keine Numerik; kein interaktiver Modus; gutes Pattern matching |
| Reduce      | „zwischen Mathematica und Form“;<br>z.B. schnell bei Faktorisierung von Polynomen.   |
| Fermat      | „Weltmeister“ beim Berechnen von ggT   |

# Überblick über CAS (nicht vollständig)

CAS

Axiom [axiom-developer.org](http://axiom-developer.org)

Fermat [www.bway.net/~lewis](http://www.bway.net/~lewis)

FORM [www.nikhef.nl/~form](http://www.nikhef.nl/~form)

Ginac [www.ginac.de](http://www.ginac.de)

Macsyma [www.symbolics-dks.com/Macsyma-1.htm](http://www.symbolics-dks.com/Macsyma-1.htm)

Maple [www.maplesoft.com](http://www.maplesoft.com)

Mathematica [www.wolfram.com](http://www.wolfram.com)

MatLab [www.mathworks.com/products/matlab](http://www.mathworks.com/products/matlab)

Mupad [www.mupad.de](http://www.mupad.de)

Reduce [www.reduce-algebra.com](http://www.reduce-algebra.com)

# 1.2. Einführung in Mathematica

⇒ `kap_1_intro.nb`