

■ Maple 11 – mit neuen Physik-Werkzeugen

Für das Computer-Algebra-System (CAS) Maple ist nun die neue Version 11 erschienen. Maple erlaubt es, ein mathematisches oder physikalisches Problem mit analytischen und numerischen Rechenmethoden sowie grafische Methoden im Rahmen einer einheitlichen Computer-Oberfläche zu untersuchen. Generell bieten CAS dem Anwender drei Vorteile. Zum einen kann der Anwender die analytischen, numerischen und grafischen Methoden leicht miteinander kombinieren. Zweitens lassen sich nicht nur numerische sondern auch analytische Rechnungen mit veränderten Ausgangsbedingungen wiederholen. Drittens ist die Lösung eines Problems automatisch verknüpft mit deren vollständiger Dokumentation, sodass es jederzeit (prinzipiell) möglich ist, eine Lösung zu reproduzieren. Hierzu gehört auch die Möglichkeit, eine Rechnung an Kollegen weiterzuleiten, welche die Rechnung dann überprüfen und wiederholen können.

Sehr grob lassen sich die Anwender von Maple in zwei Klassen einteilen, jene, die unter Verwendung der vorgegebenen Werkzeuge ein Problem lösen wollen, und jene, die ihre eigenen Werkzeuge entwickeln. Maple 11 zeichnet sich dadurch aus, daß es für dieses breite Spektrum von unterschiedlichen Anwendungen gleichermaßen hilfreich ist.

Die Kapazitäten von Maple sind in Pakete aufgeteilt, die bei Bedarf zugeladen werden. Inzwischen verfügt Maple standardmäßig über insgesamt 108 Pakete, welche ein breites Anwendungsspektrum abdecken. Die beiden wichtigsten Pakete sind sicher „Plots“ zur Erstellung von Grafiken und „Linear-Algebra“ für Anwendungen aus der linearen Algebra. Daneben gibt es Pakete zu den meisten Gebieten der Mathematik, z. B. für Differentialgleichungen, Differentialformen, Gruppentheorie, Statistik und Fehlerfortpflanzung.

Neues Paket für die Physik

Ein bemerkenswerter Fortschritt in Version 11 ist das neue Paket

„Physics“, mit dem Maple erstmals auch Physik-spezifische Werkzeuge zur Verfügung stellt. Dieses Paket eignet sich vor allem für drei Klassen von Problemen:

- die Vektorrechnung mit abstrakten (basisunabhängigen) Vektoren, welche z. B. für die klassische Mechanik und die klassische Feldtheorie von Bedeutung sind,
- nichtkommutierende Operatoren und die Diracsche Bra-Ket-Notation, welche für die Quantenmechanik eine wichtige Rolle spielen,
- relativistische Quantenfeldtheorie.

Die Möglichkeiten allein in den ersten beiden Klassen sind im Paket Physics aber noch nicht ausgeschöpft. Z. B. ist ihre Verknüpfung, also etwa das Rechnen mit vektorwertigen Operatoren, bisher nur in eingeschränktem Maße möglich. Maple 11 erlaubt es, Software-Updates automatisch von den Maple-Webseiten herunterzuladen. Es ist zu hoffen, dass Maplesoft diese Entwicklung fortsetzt, zum einen, indem es Updates für das Paket Physics zur Verfügung stellt, zum anderen, indem es (in künftigen Versionen) weitere Pakete bereitstellt, z. B. für die Variationsrechnung.

Für anspruchsvolle Anwendungen sehr hilfreich ist die übersichtliche und leistungsfähige Programmierumgebung (einschließlich Debugger), die es erlaubt, für die eigenen Projekte komplexe maßgeschneiderte Funktionen und Programme zu erstellen. Die meisten Funktionen und Module, die standardmäßig innerhalb von Maple zur Verfügung stehen, sind selbst mit dieser Programmiersprache erstellt worden. (Insbesondere lässt sich auch der Code all dieser Funktionen und Module anzeigen.) Ein neues Paket in Version 11 unterstützt es, Programme so zu gestalten, dass sich deren Ausführung auf mehrere CPUs verteilen lässt.

Numerische Rechenmöglichkeiten

Weiter verbessert wurden die numerischen Rechenmöglichkeiten von Maple. Von großem Vorteil ist hier zweifelsohne die

Zusammenarbeit zwischen Maplesoft und der Numerical Algorithm Group (NAG, www.nag.co.uk). Diese hat den Vorteil, dass Maple für viele numerische Probleme intern auf hoch optimierte und seit Jahren bewährte NAG-Routinen zugreift. Dies betrifft sowohl numerische Rechnungen, welche



Vertrieb: Scientific Computers GmbH, www.scientific.de
Preis: Vollversion: 2290 €, Hochschule: 990 €, Studenten-Lizenz: 189 €
Systemvoraussetzungen: Windows 2000, XP, 2003, Linux 32 bit; Linux 64 bit AMD/Itanium; MacOS X 10.4.4 oder höher, Speicher 650 MB, RAM 512 MB

Hardware-Arithmetik mit fester Genauigkeit verwenden, als auch Rechnungen mit Software-Arithmetik in beliebiger Genauigkeit. Hierbei handelt es sich um ein fortlaufendes Projekt, bei dem die numerischen Fähigkeiten in jeder neuen Maple-Version weiter verbessert werden.

Darüber hinaus besteht die Möglichkeit, eigene Routinen in C, Fortran oder Java zu programmieren und in Maple einzubinden oder innerhalb von Maple auf Matlab zuzugreifen. Umgekehrt besteht auch die Möglichkeit, Maple-Algorithmen und Datenstrukturen in kompilierte C, Java und Visual-Basic-Programme einzubinden. Schließlich lassen sich analytische Ausdrücke, die in Maple berechnet wurden, in hochoptimierten C, Fortran, Java, Matlab oder Visual-Basic-Code übersetzen.

Anspruchsvollere Anwendungen von CAS sind häufig hoch spezialisiert. So ist es im Einzelfall unvermeidlich, dass jedes CAS gelegentlich an seine Grenzen stößt, sei es, weil eine Rechnung falsch ausgeführt wird oder weil eine Rechnung zu einem Programm-Absturz führt. Ein wesentlicher Teil der Neuerungen und Verbesserungen bei Maple 11 besteht aus vielen kleinen Details im mathematischen Innenleben dieses Programms, die sich vor allem im Rahmen von anspruchsvolleren Anwendungen angenehm bemerkbar machen. Die Version 11 von Maple ist in diesem

Sinn ein solides Produkt, bei dem derartige Probleme äußerst selten auftreten.

Neue Anwender sind oft überrascht, dass Maple scheinbar triviale Rechenschritte wie die Ersetzung $\sqrt{x^2} \rightarrow x$ nicht ausführt – auch nicht in Version 11. Allerdings ist diese Ersetzung im Allgemeinen auch falsch, und

> simplify (sqrt (x^2)) assuming x>0

liefert das gewünschte Ergebnis. Derartige Annahmen zu den möglichen Werten einer Variablen oder eines mathematischen Ausdrucks bilden häufig einen wichtigen Teil von Rechnungen mit Maple, die mit Bedacht zu wählen sind.

Analytische Rechnungen

Gerade in der Physik sind analytische Rechnungen oft dadurch motiviert, dass sich ein analytisches Ergebnis klarer interpretieren lässt als eine numerische Lösung. Bei komplexen analytischen Rechnungen mit einem Programm wie Maple 11 ergibt sich allerdings schnell ein Ergebnis, das mehrere Bildschirmseiten füllt. Häufig existieren dann eine Vielzahl von mathematisch gleichwertigen Möglichkeiten, das Ergebnis anzuzeigen. Hier ist auch im Computer-Zeitalter weiterhin die physikalische Intuition gefragt, um solch ein Ergebnis in sinnvoller Weise zusammenzufassen und zu interpretieren. Auch wenn Maple

11 großartige Möglichkeiten bietet, kann es uns nicht das Mitdenken abnehmen!

Wahl der Pakete

Für alle Funktionen und Pakete steht eine umfangreiche Online-Hilfe zur Verfügung, die deren Funktionsweise mit diversen Beispielen detailliert erläutert. Allerdings bezieht sich die Online-Hilfe jeweils auf einzelne Funktionen oder Pakete. Für einige Fragestellungen wie die Vektorrechnung stehen inzwischen mehrere Pakete zur Verfügung, die sich jedoch im Detail erheblich unterscheiden. Die Auswahl des „richtigen“ Paketes ist dann nicht immer leicht, und zu Beginn eines größeren Projekts ist es unbedingt empfehlenswert, die zur Verfügung stehenden Pakete sorgfältig miteinander zu vergleichen. Andererseits illustriert dies die enorme Leistungsfähigkeit von Maple, die es dem fortgeschrittenen Anwender erlaubt, komplexe maßgeschneiderte Lösungen für sehr unterschiedliche Klassen von Problemen zu erstellen.

Benutzerfreundlichkeit

Beim Einsatz von Maple für einfachere Aufgaben, etwa eine schnelle Datenanalyse oder Simulation, sowie in der Lehre steht vor allem die Benutzerfreundlichkeit im Vordergrund. Die Benutzeroberfläche von Maple 11 ist gerade unter die-

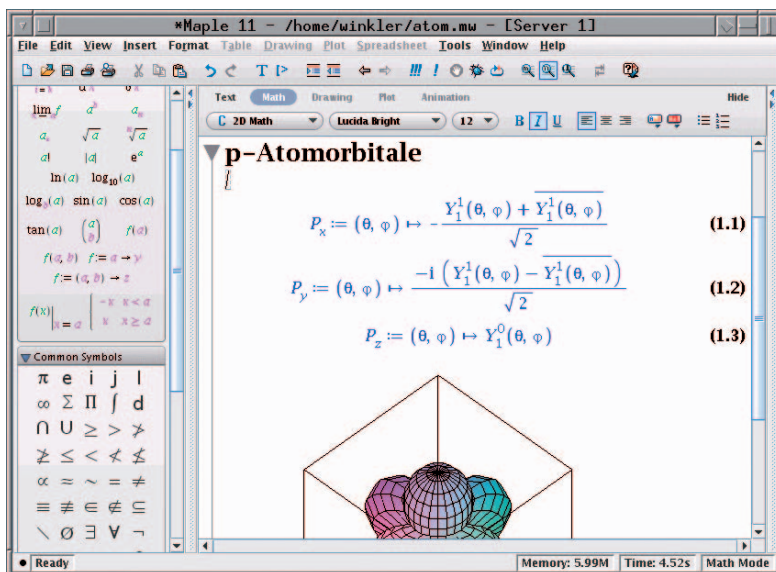
sem Blickwinkel weiter verbessert worden, mit dem Ziel, einfache Probleme schnell und übersichtlich bearbeiten zu können. Maple 11 bietet zwei verschiedene Modi zum interaktiven Arbeiten. Im Worksheet-Modus wechseln Ein- und Ausgabe in klar getrennten Schritten miteinander ab. Dieser Modus eignet sich sowohl für einfache Probleme als auch zur Bearbeitung komplexerer Aufgaben, da er eine umfassende Kontrolle über die Arbeitsschritte bietet. Darüber hinaus stehen etliche fortgeschrittene Funktionen und Werkzeuge allein in diesem Modus zur Verfügung. Demgegenüber zielt der Dokument-Modus darauf ab, einfache Probleme wie in einem Notizbuch schnell und flexibel zu bearbeiten und gleichzeitig automatisch alle Schritte möglichst übersichtlich zu dokumentieren. In Maple 11 ist dieser Modus als Standardeinstellung ausgewählt.

Gelegentlich passiert es, dass ein Problem über die Möglichkeiten des Dokument-Modus hinauswächst. Leider ist es dann aber mit größeren Umständen verbunden, das Projekt nachträglich vom Dokument-Modus in den Worksheet-Modus zu überführen. Falls häufiger mit diesem Szenario zu rechnen ist, so ist es sinnvoll, den Worksheet-Modus als Standard einzustellen (im Menü „Tools → Options → Interface“).

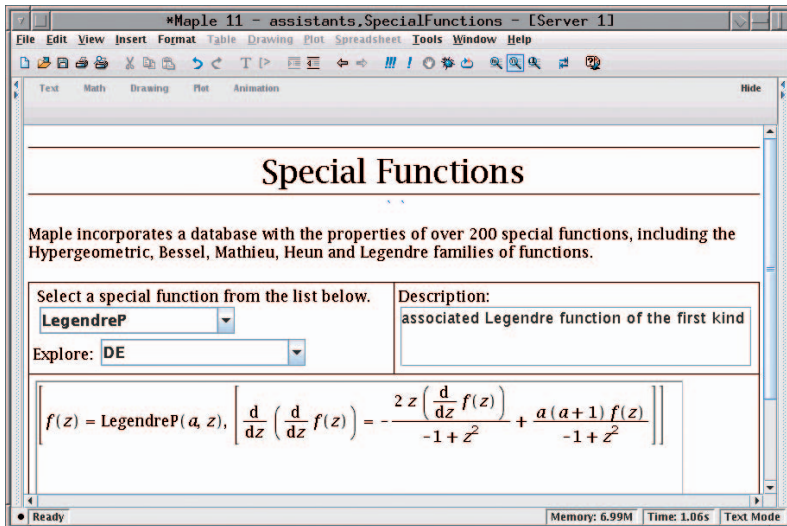
Spezialisierte Assistenten

Für etliche Anwendungen stellt Maple 11 eine dritte Oberfläche zur Verfügung. Die „Assistenten“ sind grafische Oberflächen für einzelne Maple-Anwendungen, die darauf ausgelegt sind, eine spezielle Aufgabe interaktiv vor allem mit der Maus zu bearbeiten. Assistenten gibt es z. B. für die Gestaltung von Grafiken, Datenanalyse, Funktionsminimierung und die Analyse von Differentialgleichungen. Diese Assistenten lassen sich einfacher und übersichtlicher benutzen als die entsprechenden Kommandos, die im Worksheet-Modus zur Verfügung stehen. Dies impliziert allerdings Einschränkungen bei der Funktionalität und Flexibilität.

Ein Beispiel hierfür ist die für



Maple 11 stellt die verwendeten Formeln in einem leicht lesbaren Format dar, das weitestgehend den üblichen Konventionen entspricht.



Maple 11 enthält eine Datenbank mit den Eigenschaften von über 200 speziellen Funktionen, auf die mit einem Assistenten oder über die Kommandozeile zugegriffen werden kann.

viele physikalischen Probleme hilfreiche Datenbank zu den Eigenschaften spezieller Funktionen (FunctionAdvisor). Sie ist nicht einfach nur eine Tabellensammlung wie das bekannte Standardwerk von Abramowitz und Stegun. Wenn z. B. eine Formel mittels vom Anwender gewählter Variablen ausgedrückt wird, lässt sich diese auch unmittelbar in eine Maple-Rechnung einsetzen. In Maple 11 steht nun ein neuer Assistent zur Verfügung, der es erlaubt, die Datenbank mit wenigen Mausklicks zu durchsuchen. Doch auf diesem neuen Weg lässt sich die Datenbank bisher nur wie ein Nachschlagewerk benutzen. Deren unmittelbare Einbindung in eine Rechnung erfor-

dert weiterhin die entsprechenden Eingaben auf der Kommandozeile.

Ein weiterer neuer Assistent dient als Frontend für das Paket ScientificConstants, das es erlaubt, mit Naturkonstanten zu arbeiten. Hier zeigt der Assistent für die einzelnen Konstanten nur deren numerischen Zahlenwerte an. Dabei werden maple-intern alle Naturkonstanten vollständig CODATA-konform durch fundamentale Naturkonstanten ausgedrückt. Im Worksheet-Modus lassen sich diese Zusammenhänge mit dem Befehl „GetConstant“ explizit anzeigen. Hier wäre es für viele Anwendungen in der Physik hilfreich, diese Information auch im Assistenten anzuzeigen.

Bei den analytischen Rechenfähigkeiten von Maple 11 fallen vor allem die folgenden Neuerungen und Verbesserungen ins Auge: Erstens kann Maple 11 nun auch unbestimmte Integrale lösen, die spezielle Funktionen enthalten. Zweitens gibt es ein neues Kommando, mit dem sich lineare Integralgleichungen lösen lassen. Schließlich wurden die Möglichkeiten erheblich erweitert, Systeme von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen sowie Systeme von Ungleichungen zu lösen.

Neben vielen anderen Verbesserungen in Version 11 gibt es erhebliche Erweiterungen bei den grafischen Möglichkeiten von Maple. Z. B. werden 2D-Grafiken generell erheblich schneller erstellt als bisher. Die Erzeugung von Dichtegrafiken wurde wesentlich verbessert. Schließlich gibt es vielfältige Möglichkeiten, eine Grafik nachzubearbeiten und z. B. Hilfslinien und Beschriftungen einzufügen.

Zusammenfassend besticht Maple 11 durch die Eigenschaft, dass es zahlreiche Werkzeuge und Algorithmen zur analytischen, numerischen und grafischen Bearbeitung eines Problems unter einer einheitlichen und übersichtlichen Oberfläche zusammenführt, die es erlaubt, eine Vielzahl unterschiedlicher Probleme in effizienter Weise zu bearbeiten.

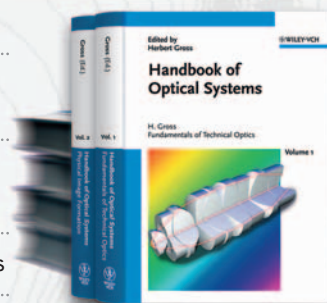
Roland Winkler

Prof. Dr. Roland Winkler, Department of Physics, Northern Illinois University, De Kalb, IL 60115, USA

Shedding New Light on Optical Science

Featuring

- a unique overview of the entire field
- latest research results in a uniform style
- over 3,000 color illustrations
- hands-on expert knowledge



ISBN-10: 3-527-40382-5
ISBN-13: 978-3-527-40382-0

6 Volume Set

Price of each volume if purchased as part of the set:

€ 248.- / £ 175.- / US\$ 317.50

Each volume will be invoiced and despatched upon publication.

Single volume price:

Approx € 298.- / £ 210.- / US\$ 375.-

Set price:

€ 1488.- / £ 1035.- / US\$ 1860.-

Publication dates:

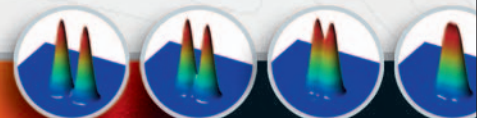
Volumes 1 and 2:
2005

Volume 3:
December 2006

Volume 4:
September 2007

Volume 5:
January 2008

Volume 6:
October 2008



WILEY-VCH

WILEY
1807-2007
KNOWLEDGE FOR
GENERATIONS

Wiley • Tel.: +49 (0) 6201 - 606 400 • Fax: +49 (0) 6201 - 606 184
e-Mail: service@wiley-vch.de • www.wiley-vch.de