

Počítačové algebraické systémy ve fyzice

O. Borovec, J. Krejčí
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT
honz.krejci@seznam.cz

Abstrakt:

Cílem tohoto miniprojektu bylo seznámit se základy ovládání a použití tzv. počítačových algebraických systémů (dále jen PAS). PAS je speciální druh programů určených pro řešení problémů (které lze matematicky zapsat), včetně grafického znázornění.

Z celé škály těchto programů jsme se nejlépe seznámili s Wolframem Mathematicou. Je to program, který má několik výhod, které především spočívají ve velkém množství pomocné dokumentace k programu. Naučili jsme se používat řadu jeho funkcí – např. řešení rovnic, nerovnic, soustav rovnic i nerovnic, zjednodušování výrazů, práce s goniometrickými funkcemi, úpravu na součinnový tvar, tvorbu 2D nebo 3D grafů, integrace, derivace atd. Ze zajímavých funkcí můžeme zmínit např. manipulaci, která umožňuje uživateli úpravu vstupních parametrů.

1 Úvod

V dnešní době existuje řada problémů, které jsou považovány za velmi složité nebo dokonce bez použití počítače prakticky neřešitelné. Naštěstí existují programy, které jsou schopny si s těmito problémy poradit. Nebylo by dobré, pokud si nevíme rady s příkladem, mít v záloze pojistku? Nebylo by dobré proto umět pracovat s některým z těchto programů? Nebylo by dobré umět vizualizovat funkce, jejichž složitost je pro „ruční“ zobrazení již moc velká?

Nás tato možnost velmi zaujala a rádi bychom se s vámi o naše nově nabyté znalosti podělili. Nejdříve se podíváme stručně do historie, řekneme si obecně něco k programu Mathematica, poté se podíváme na základní funkce a rovněž na několik zajímavých ukázek, co lze v Mathematice vytvořit.

2 Historie

Počítačové algebraické systémy (PAS) po poprvé začali objevovat od šedesátých let minulého století, to bylo podníceno rozvojem přírodních věd, jejichž výpočty začaly být velmi složité, a tudíž se zde otevřela cesta pro programy, které tyto výpočty byly schopny efektivně řešit.

Jeden z prvních, kdo se těmto systémům věnoval, byl (budoucí) nositel Nobelovy ceny – M. Veltman, který vytvořil první program pro symbolické výpočty nazvaný „Čistá lod“. Později následoval MATHLAB ad.

V dnešní době jsou nejznámějšími komerčními PAS jsou Mathematica a Maple, mezi volně šiřitelnými např. Axiom, Maxima ad.

3 Mathematica

Při bádání v tomto oboru jsme pracovali hlavně v programu Mathematica 8, který patří mezi neznámější zástupce PAS.

Mathematica je tvořena dvěma částmi – výpočetním jádrem – Kernel a grafickým prostředím. Má několik nesporných výhod – 1. pro začínající má připravenou dobře strukturovanou nápovědu (ke všem funkcím, syntaxím atd.). 2. jeho nápověda se vztahuje i na chyby v zápisu funkcí. 3. u funkcí je možnost zobrazit si jejich defaultní parametry, které daná funkce vyžaduje. 4. na internetu nalezneme obrovské množství materiálů, jak pracovat s tímto programem. 5. zajímavou možností je možnost stáhnout si již vytvořené funkce.

Určitá skupina uživatelů může mít problém s tím, že Mathematica je k dispozici pouze v Angličtině a že psaní syntaxí se je zdánlivě složité.

Práce v Mathematice

Pracovní prostředí programu je pojmenováno notebook, lze ho přirovnat k čistému listu papíru. Výhodou programu je, že umožňuje kombinovat obyčejný text s „matematickým“ textem.

Kromě nejzákladnější části matematiky se nelze obejít bez funkcí, nejpoužívanější funkce má samotný program již nadefinovány a jsou pojmenovány velmi jednoduše. V Mathematice rovněž existuje možnost definovat si své vlastní funkce. Mezi nejpoužívanější funkce patří: Solve, Plot, Manipulate, Reduce, Expand, Graphics, Show, ad.

Funkce Mathematicy

Jak již bylo zmíněno, v prostředí mathematicy se používají funkce, nyní popíšu ty základní:

Solve[rovnice₁,rovnice₂,...,proměnná,obor] – vyřeší rovnici nebo soustavu rovnic pro zmíněnou proměnnou ve stanoveném oboru (bez zadání oboru je def. obor R)

$$\text{Solve}[n^2 + 2n + 5 == 3n^2 + 75n + 1, n]$$
$$\left\{ \left\{ n \rightarrow \frac{1}{4} (-73 - \sqrt{5361}) \right\}, \left\{ n \rightarrow \frac{8}{73 + \sqrt{5361}} \right\} \right\}$$

Reduce[nerovnice, proměnná, obor] – vyřeší nerovnici nebo soustavu nerovnic pro stanovenou proměnnou ve stanoveném oboru

```
In[56]:= Reduce[{x > 2 z + 20, z < 5 + x + 17}, {x, z}]  
Out[56]= (x ≤ -6 && z < 17 + 5 x) || (x > -6 && z <  $\frac{1}{2}(-20 + x)$ )
```

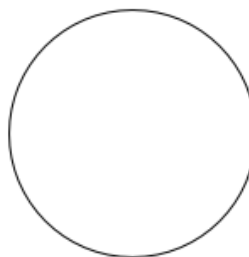
Simplify[výraz] – zjednoduší stanovený výraz

```
In[41]:= Simplify[2 k + 10 l + 34 / 4 k + 12 == 18 k - 34 l + 76]  
Out[41]= 128 + 15 k == 88 l
```

Graphics[těleso[parametry]] – vykreslí požadované těleso s předepsanými parametry
- tělesa – Circle, Square, ...

```
In[49]:= Graphics[Circle[{0, 0}, 0.1]]
```

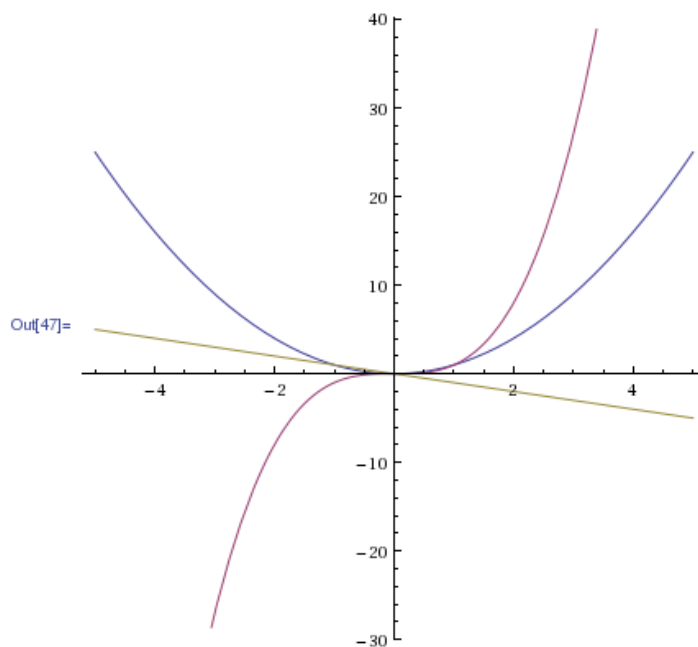
Out[49]=



Manipulate[výraz_nebo_funkce, {u, u_min, u_max}] – funkce, která realizuje výraz nebo funkci, s tím, že uživatel je schopen měnit velikost parametru u (nebo parametrů)

Plot[f, {x, x_min, x_max}] – vykreslí danou funkci, pro neznámou v rozsahu x_min - x_max

```
In[47]:= Plot[{x^2, x^3, -x}, {x, -5, 5}, AspectRatio -> 1]
```



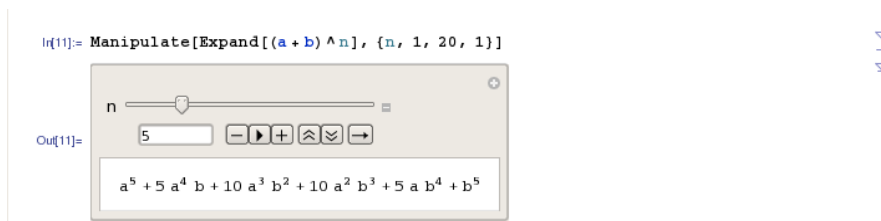
4 Aplikace

Možnosti uplatnění jsou velmi široké, od matematiky, přes fyziku, chemii, biologii, k sociálním vědám ad. Lze ho využít kdekoliv, kde je třeba grafický výstup nebo je nutnost řešit složité algebraické výpočty. V našem příspěvku se budeme zabývat aplikací ve fyzice a matematice.

Názorná aplikace 1

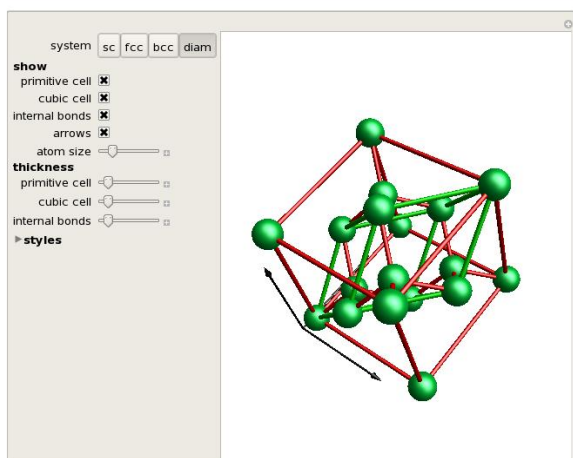
V tomto bodě bych vás rád seznámil s využitím velmi zajímavé funkce manipulace, která jak už bylo napsáno, realizuje výraz nebo rovnici s parametrem nebo parametry, které mění uživatel.

Pod textem vidíme velmi jednoduchý applet, který realizuje roznásobení dvojčlenu $a+b$ umocněného na n , n je parametr, který nastavuje sám uživatel (pomocí tažítka), podle hodnoty parametru se poté mění výstup samotné funkce. Nad samotným appletem je vidět přepis, který k appletu vede.



Názorná aplikace 2

Toto je příklad složitějšího použití, autor vytvořil applet, díky kterému můžeme pozorovat vztahy mezi atomy v krystalové mřížce. „Tažítky“ je možné měnit velikost atomů a tloušťku „čar“. Je zde možnost nechat si zobrazit spojnice vnitřních atomů, čtvercovou mřížku, ... Tělesem lze otáčet.



4 Shrnutí

Co říci závěrem? V dnešní době astrofyziky, kvantové fyziky, mikrotechniky a podobných odvětví si myslím, že je už jasné, že v některých odvětvích se vědec bez schopnosti použít PAS neobejde. Tudíž si myslím, že je velmi výhodné umět pracovat s těmito programy dříve, než je budeme potřebovat.

Jsme velmi rádi, že během uplynulých dvou dnů jsme alespoň částečně pronikli do jeho tajů a pochopili jsme určitou část jeho funkcí.

Poděkování

Za náš tým bych v první řadě chtěl poděkovat našemu supervisorovi Dr. Ing. Milanovi Šiňorovi, který nás zasvětil do problematiky algebraických systémů. Dále bych chtěl poděkovat pořadatelům Týdne vědy, že nám umožnili vůbec se setkat s naším supervisorem a že byli ochotní věnovat úsilí tomu, abychom se mohli něco zajímavého dozvědět. Dále bych chtěl poděkovat FJFI, že nám umožnila práci ve svých počítačových laboratořích s programem Mathematica.

Reference:

[1]Wikipedia, The Free Encyclopedia http://en.wikipedia.org/wiki/Computer_algebra_system
<http://en.wikipedia.org/wiki/Mathematica>

[2]Wolfram Research Company <http://wolfram.com>

[3]Eifert B.:Cubic Crystal Lattices <http://demonstrations.wolfram.com/CubicCrystalLattices>