

# Система аналитических вычислений MAXIMA и её использование в научных исследованиях

## Введение

В настоящее время получили большое распространение специальные программные средства, позволяющие провести весь цикл разработки какой-либо математической модели: от поиска и просмотра необходимой литературы до непосредственного решения задачи (аналитического и/или численного) и подготовки отчёта или статьи к печати. К такому средству относится **система аналитических вычислений Maxima**. Эта программная среда (пакет) — хороший выбор для проведения любой учебной задачи или серьёзного исследования, где требуется математика — от курсовой работы до научной или инженерной разработки высокого класса. С помощью этих пакетов проще готовить и выполнять задания, устраивать демонстрации и гораздо быстрее решать исследовательские и инженерные задачи.

В настоящее время компьютерные программы этого класса (проприетарные — **Maple, Mathematica, MATLAB, MathCad** и др., или с открытым кодом - **Maxima**) находят самое широкое применение в научных исследованиях, становятся одним из обязательных компонентов компьютерных технологий, используемых в образовании.

## Системы Компьютерной Математики (**СКМ**)

Для студентов **СКМ** удобное средство решения всевозможных задач, связанных с символьными преобразованиями (математический анализ, высшая математика, линейная алгебра и аналитическая геометрия и т.п.), а также средство решения задач моделирования статических (описываемых алгебраическими уравнениями) и динамических (описываемых дифференциальными уравнениями) систем.

Кроме того, **СКМ** — хорошее средство создания графических иллюстраций и документов, содержащих математические формулы и выкладки.

Для научных работников и инженеров СКМ незаменимое средство анализа постановки всевозможных задач моделирования.

# Системы Компьютерной Математики (СКМ)

Под системами компьютерной математики понимают программное обеспечение, которое позволяет не только выполнять численные расчёты на компьютере, но и производить аналитические (символьные) преобразования различных математических и графических объектов.

Все широко известные математические пакеты: **Maple**, **Matlab**, **Mathematica**, позволяют проводить как символьные вычисления, так и использовать численные методы.

В настоящее время такие системы являются одним из основных вычислительных инструментов компьютерного моделирования в реальном времени и находят применение в различных областях науки. Они открывают также новые возможности для преподавания многих учебных дисциплин, таких как алгебра и геометрия, физика и информатика, экономика и статистика, экология.

Применение **СКМ** существенно повышает производительность труда научного работника, преподавателя вуза, учителя.

## Определение систем компьютерной алгебры

Компьютерная алгебра — область математики, лежащая на стыке алгебры и вычислительных методов. Для неё, как и для любой области, лежащей на стыке различных наук, трудно определить чёткие границы.

Часто говорят, что к компьютерной алгебре относятся вопросы слишком алгебраические, чтобы содержаться в учебниках по вычислительной математике, и слишком вычислительные, чтобы содержаться в учебниках по алгебре.

При этом ответ на вопрос о том, относится ли конкретная задача к компьютерной алгебре, часто зависит от склонностей специалиста.

## Недостатки численных расчётов

Результаты численных вычислений редко бывают абсолютно точными в математическом смысле: как правило, при операциях с вещественными числами происходит их округление, обусловленное принципиальным ограничением разрядной сетки компьютера при хранении чисел в памяти.

Реализация большинства численных методов (например, решения нелинейных или дифференциальных уравнений) также базируется на заведомо приближённых алгоритмах.

Часто из-за накопления погрешностей эти методы теряют вычислительную устойчивость и расходятся, давая неверные решения или даже ведя к полному краху работы.

## Недостатки численных расчётов

Многие учёные справедливо критиковали численные математические системы и программы реализации численных методов за частный характер получаемых с их помощью результатов. Они не давали возможности получить общие формулы, описывающие решение задач.

Как правило, из результатов численных вычислений невозможно было сделать какие-либо общие теоретические, а подчас и практические выводы.

Поэтому, прежде чем использовать такие системы в реализации серьёзных научных проектов, приходилось прибегать к дорогой и недостаточно оперативной помощи математиков-аналитиков. Именно они (если это было возможно) решали нужные задачи в аналитическом виде и предлагали более или менее приемлемые методы их численного решения на компьютерах.

## Отличия символьных вычислений от численных

Термин "компьютерная алгебра" возник как синоним терминов "символьные вычисления", "аналитические вычисления", "аналитические преобразования" и т. д. Даже в настоящее время этот термин на французском языке дословно означает "формальные вычисления".

Когда говорят о вычислительных методах, то считается, что все вычисления выполняются в поле вещественных или комплексных чисел. В действительности же всякая программа для ЭВМ имеет дело только с конечным набором рациональных чисел, поскольку только такие числа представляются в компьютере.

Для записи целого числа отводится обычно 16 или 32 двоичных символа (бита), для вещественного – 32 или 64 бита. Это множество не замкнуто относительно арифметических операций, что может выражаться в различных переполнениях (например, при умножении достаточно больших чисел или при делении на маленькое число). Ещё более существенной особенностью вычислительной математики является то, что арифметические операции над этими числами, выполняемые компьютером, отличаются от арифметических операций в поле рациональных чисел.

## Отличия символьных вычислений от численных

Особенностью компьютерных вычислений является неизбежное наличие погрешности или конечной точности вычислений. Каждую задачу требуется решить с использованием имеющихся ресурсов ЭВМ за обозримое время с заданной точностью, поэтому оценка погрешности — важная задача вычислительной математики.

*Решение проблемы точности вычислений и конечности получаемых численных результатов в определённой степени даётся развитием систем компьютерной алгебры.*

Системы компьютерной алгебры, осуществляющие аналитические вычисления, широко используют множество рациональных чисел. Компьютерные операции над рациональными числами совпадают с соответствующими операциями в поле рациональных чисел.

Кроме того, ограничения на допустимые размеры числа (количество знаков в его записи) позволяет пользоваться практически любыми рациональными числами, операции над которыми выполняются за приемлемое время.

## Классификация систем компьютерной математики

В настоящее время системы компьютерной математики (**СКМ**) можно разделить на семь основных классов:

- I. системы для численных расчётов,
- II.табличные процессоры,
- III.матричные системы,
- IV.системы для статистических расчётов,
- V.системы для специальных расчётов,
- VI. системы для аналитических расчётов (компьютерной алгебры),
- VII.универсальные системы.

Каждая система компьютерной математики имеет нюансы в своей архитектуре или структуре. Тем не менее можно прийти к выводу, что у современных универсальных **СКМ** следующая типовая структура:

Центральное место занимает ядро системы — коды множества заранее откомпилированных функций и процедур, обеспечивающих достаточно представительный набор встроенных функций и операторов системы.

Интерфейс даёт пользователю возможность обращаться к ядру со своими запросами и получать результат решения на экране дисплея. Интерфейс современных **СКМ** основан на средствах популярных операционных систем **Windows** и обеспечивает присущие им удобства работы.

## Классификация систем компьютерной математики

Функции и процедуры, включённые в ядро, выполняются предельно быстро. Поэтому объём ядра ограничивают, но к нему добавляют библиотеки более редких процедур и функций.

Кардинальное расширение возможностей систем и их адаптация к решаемым конкретными пользователями задачам достигаются за счёт пакетов расширения систем. Эти пакеты (нередко и библиотеки) пишутся на собственном языке программирования той или иной **СКМ**, что делает возможным их подготовку обычными пользователями.

Ядро, библиотеки, пакеты расширения и справочная система современных **СКМ** аккумулируют знания в области математики, накопленные за тысячелетия её развития.

## Задачи систем компьютерной алгебры **СКА**

Развитие компьютерных математических систем привело к появлению отдельного класса программ, который получил названия Системы Компьютерной Алгебры (**СКА**).

Главная задача **СКА** — это обработка математических выражений в символьной форме.

Символьные операции обычно включают в себя: вычисление символьных либо числовых значений для выражений, преобразование, изменение формы выражений, нахождение производной одной или нескольких переменных, решение линейных и нелинейных уравнений, решение дифференциальных уравнений, вычисление пределов, вычисление определённых и неопределённых интегралов, работа с множествами, вычисления и работа с матрицами.

В дополнение к перечисленному, большинство **СКА** поддерживают разнообразные численные операции: расчёт значений выражений при определённых значениях переменных, построение графиков на плоскости и в пространстве.

Большинство **СКА** включают в себя высокоуровневый язык программирования, который позволяет реализовать свои собственные алгоритмы.

Наука, которая изучает алгоритмы, применяемые в **СКА**, называется компьютерной алгеброй.

## Место компьютерной алгебры в информатике

Компьютерная алгебра есть та часть информатики, которая занимается разработкой, анализом, реализацией и применением алгебраических алгоритмов.

Алгебраические объекты можно точно представить в памяти вычислительной машины, благодаря чему алгебраические преобразования могут быть выполнены без потери точности и значимости.

Обычно алгебраические алгоритмы реализуются в программных системах, допускающих ввод и вывод информации в символьных алгебраических обозначениях.

Опираясь на противопоставление, можно сказать, что компьютерная алгебра рассматривает такие объекты, которые имеют слишком вычислительный характер, чтобы встречаться в книгах по алгебре, и слишком алгебраический характер, чтобы быть представленными в учебниках по информатике.

Многие алгоритмы компьютерной алгебры можно рассматривать как полу численные (в смысле Кнута).

Системы компьютерной алгебры обычно включают алгоритмы для интегрирования, вычисления элементарных трансцендентных функций, решения дифференциальных уравнений и т.п. Особенность упомянутых алгоритмов заключается в следующем:

- ✓ они оперируют с термами и формулами и вырабатывают выходную информацию в символьной форме;
- ✓ решение достигается посредством некоторого вида алгебраизации задачи (например, производную от полинома можно определить чисто комбинаторным образом);
- ✓ существуют методы точного представления величин, определяемых через пределы и имеющих бесконечное численное представление.

## Взаимосвязь СКА и традиционных математических дисциплин

Часто формулы, получаемые в качестве выходной информации при выполнении алгоритмов компьютерной алгебры, используются затем как входная информация в численных процедурах. Например, при интегрировании рациональных функций от нескольких переменных первое и, возможно, второе интегрирования выполняются в символьном виде, а остальные — численно.

Численные процедуры используют арифметику конечной точности и основываются на теории аппроксимации.

Например, численная процедура нахождения корней не всегда может отделить все корни, так как работает с числами конечной точности; она отделяет лишь кластеры корней, диаметр которых зависит от заданной точности представления чисел и многих других параметров.

## Повышения эффективности решения математических и вычислительных задач

Хорошо известно, что аналитические преобразования являются неотъемлемой частью научных исследований, и зачастую на их выполнение затрачивается больше труда, чем на остальную часть исследований, а для реализации специализированных методов, например, методов современного группового анализа дифференциальных уравнений, особенное значение имеет точность аналитических выражений. Однако ручные вычисления по любому из подобных методов требуют непомерно больших затрат времени.

Именно здесь и помогают методы компьютерной алгебры (**КА**) и соответствующие программные системы, являющиеся практически единственным средством решения таких задач, требующих больших затрат ручных вычислений и очень чувствительных к потере точности при численном счёте на ПК.

## Аналитические Вычисления (АВ)

**АВ** являются составной частью теоретической информатики, которая занимается разработкой, анализом, реализацией и применением алгебраических алгоритмов. Цели **АВ** лежат в области искусственного интеллекта, несмотря на то, что методы всё более и более удаляются от неё. Кроме того, используемые алгоритмы вводят в действие все менее элементарные математические средства.

Таким образом, **АВ** как самостоятельная дисциплина, на самом деле, лежит на стыке нескольких областей: информатики, искусственного интеллекта, современной математики (использующей нетрадиционные методы), что одновременно обогащает её и делает более трудной в исследовательском плане. Наименование этой научной дисциплины длительное время колебалось и, наконец, стабилизировалось как "Calcul formel" во французском языке, "Computer algebra" — в английском языке и "аналитические вычисления" или "компьютерная алгебра" — в русском.

Наиболее интуитивная цель **АВ** заключается в манипуляции с формулами. Математическая формула, описанная на одном из обычных языков программирования (Фортран, Паскаль, С), предназначена только для численных расчётов, когда переменным и параметрам присвоены численные значения.

В языке, допускающем АВ, для этой формулы также можно получить численное значение, но, кроме того, она может стать объектом формальных преобразований: дифференцирования, разложения в ряд, различных других разложений и даже интегрирования.

## Коммерческие и свободно распространяемые СКМ

**СКМ** были созданы в 70-ые годы и развивались в рамках проектов, связанных с искусственным интеллектом. Поэтому сфера применения их достаточно большая и разнообразная. Первыми популярными системами были **Reduce**, **Derive**, **Macsyma**. Некоторые из них до сих пор находятся в продаже. Свободно распространяемая версия **Macsyma** — **Maxima**. На данный момент лидерами продаж являются **Maple** и **Mathematica**. Оба этих пакета активно используются в математических, инженерных и других научных исследованиях. Существует множество коммерческих систем компьютерной алгебры: **Maple**, **Mathematica**, **MathCad** и другие. Свободно распространяемые программы: **Axiom**, **Eigenmath**, **Maxima**, **Yacas** и др.

Успех в современном использовании **САВ** лежит в интеграции всех машинных возможностей (символьный и численный интерфейс, встроенная графика, мультипликация, базы и банки данных и т. д.).

Все современные коммерческие системы компьютерной математики (**Mathematica**, **Maple**, **MatLab** и **Reduce**) обладают стандартным набором возможностей.

## стандартный набор возможностей САВ

- ✓ имеется входной макроязык для общения пользователя с системой, включающий специализированный набор функций для решения математических задач;
- ✓ имеются основные символьные (математические) объекты: полиномы, ряды, рациональные функции, выражения общего вида, векторы, матрицы;
- ✓ системы используют целые, рациональные, вещественные, комплексные числа;
- ✓ имеется несколько дополняющих друг друга режимов работы: редактирование, диагностика, диалог, протокол работы;
- ✓ присутствует связь со средствами разработки программ: возможны подстановки, вычисления значений, генерация программ, использование стандартного математического обеспечения (библиотек);
- ✓ используются интерфейсы для связи с офисными средствами, базами данных, графическими программными средствами и т.п.;
- ✓ Синтаксис языков систем в значительной степени аналогичен синтаксису Паскаля. Обязательно имеются операторы присваивания, понятие вызываемой функции (команды), более или менее богатый выбор управляющих структур (if, do while, repeat и т. д.), возможности для определения пользовательских процедур — в общем, весь арсенал классических языков программирования, необходимый для записи алгоритмов.

## Классификация СКА

Системы компьютерной алгебры можно условно разделить на системы общего назначения и специализированные.

К системам общего назначения относятся **Macsyma**, **Reduce**, **Mathematica**, **Maple**, **Axiom** и др.

К специализированным системам относятся такие системы: **Caley** и **GAP** — специализированные системы для вычислений в теории групп, **Macaulay**, **CoCoA**, **Singular** — системы разной степени универсальности для вычислений в кольце многочленов, **Schoonship** — специализированная система для вычислений в физике высоких энергий, **muMath** и её правонаследница **Derive** — системы, широко используемые в учебном процессе и многие другие.

## СКА общего назначения

В 80-е годы прошлого века широкое распространение в бывшем СССР получила система **Reduce**. Она первоначально предназначалась для решения физических задач, разрабатывалась на наиболее широко распространённых компьютерах, разработка до определённого времени не носила коммерческого характера (система до конца 80-х годов распространялась бесплатно).

**Macsyma**, так же, как и **Reduce**, является "старой" системой. В отличие от системы **Reduce**, **Macsyma** разрабатывалась с самого начала как коммерческий продукт. В ней более тщательно проработаны алгоритмические вопросы, её эффективность существенно выше, но меньшее её распространение можно объяснить двумя обстоятельствами: длительное время она была реализована только на малом числе "экзотических" компьютеров и распространялась только на коммерческой основе

## СКА общего назначения

Система **Maple**, созданная в 80-х годах прошлого века в Канаде, с самого начала была задумана как система для персональных компьютеров, учитывающая их особенности. Она развивается "вширь и вглубь", даже её ядро переписывалось с одного алгоритмического языка на другой. В настоящее время **Maple** широко применяется во многих странах (в частности, в США и Канаде) в учебном процессе, а также в различных областях научных и технических исследований.

**Maple** — это система для аналитического и численного решения математических задач, возникающих как в математике, так и в прикладных науках. Развитая система команд, удобный интерфейс и широкие возможности позволяют эффективно применять **Maple** для решения проблем математического моделирования.

**Maple** состоит из ядра, процедур, написанных на языке **C** и в высшей степени оптимизированных, библиотеки, написанной на **Maple**- языке, и интерфейса. Ядро выполняет большинство базисных операций. Библиотека содержит множество команд и процедур, выполняемых в режиме интерпретации.

В конце прошлого века получила широкое распространение и сейчас быстро развивается система **Mathematica**. Её успех в значительной степени объясняется её широкими графическими возможностями а также электронной документацией, которую можно рассматривать как электронную библиотеку, посвящённую различным разделам математики и информатики

**Mathematica** — это широко используемая **СКА** изначально разработана Стивеном Вольфрандом, которая продаётся компанией **Wolfram Research**. Он начал работу над **Mathematica** в 1986 году, а выпустил в 1988 году. **Mathematica** не только **СКА**, но и мощный язык программирования.

Этот язык программирования реализован на основе объектно ориентированного варианта языка **C**, расширяемого при помощи так называемых библиотек кода. Эти библиотеки представляют собой текстовые файлы, написанные на языке **Mathematica**.

**MathCad** — это СКА очень похожая на **Mathematica**. Распространяется компанией **Mathsoft**. **MathCad** ориентирован на поддержку концепций рабочего листа. Уравнения и выражения отображаются на рабочем листе так, как они выглядели бы на какой-нибудь презентации, а не так, как выглядят на языке программирования.

**Yacas** — это Open Source **СКА** общего назначения. Базируется на собственном языке программирования, главной целью при разработке этого языка была простота реализации новых алгоритмов

## СКА общего назначения

**Maxima** является потомком **СКА Macsyma**, которая начала своё существование в конце 1960 года в **MIT**. **Macsyma** первая создала систему компьютерной алгебры, она проложила путь для таких программ как **Maple** и **Mathematica**.

**Главный вариант Maxima разрабатывался Вильямом Шелтером с 1982 по 2001 год. В 1998 году он получил разрешение на реализацию открытого кода на GPL.**

Вскоре Вильям передал **Maxima** группе пользователей и разработчиков, которые сохранили её в рабочем состоянии.

На сегодняшний день пакет достаточно активно развивается, и во многих отношениях не уступает таким развитым системам компьютерной математики, как **Maple** или **Mathematica**.