

Scientific Linux

Wissenschaftliche Software für Linux

Frank Bok
Wolfgang Fütterer

17.01.2008

Freie Software als Alternative zu kommerzieller Software

Vorstellung von 3 Softwarepaketen die als Alternative für kommerziell erhältliche Software dienen kann

- Matlab \iff Scilab/Octave
- Mathematica \iff Maxima



Scilab - Eine Alternative zu Matlab



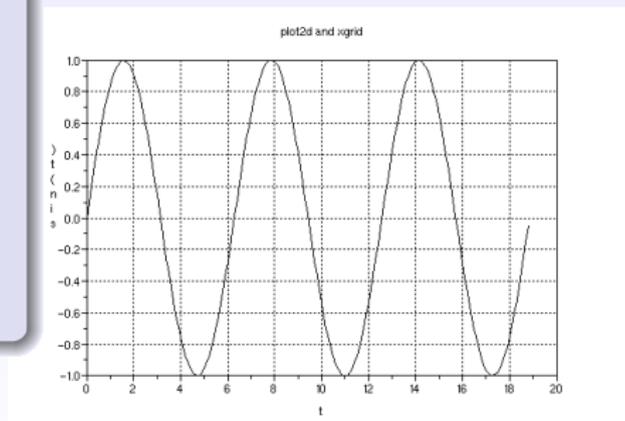
- Softwarepaket für numerische Mathematik, z.B. Matrizenrechnung
- Beginn der Entwicklung 1990 am Institut national de recherche en informatique et en automatique (INRIA)
- Seit 2003: Scilab Konsortium unter Federführung der INRIA
- Syntax mit Matlab nahezu identisch
⇒ Matlab/Scilab-Konverter
- Erweiterbar durch Module/Toolboxen (C, FORTRAN, Scilab-Skripte)
- Internet: <http://www.scilab.org>



Scilab - Funktionalität



- **2D- und 3D-Plots mit Gnuplot/Labplot**
- numerische lineare Algebra
- Polynom-Berechnungen
- Statistik
- Regelungstechnik/SCICOS
- digitale Signalverarbeitung

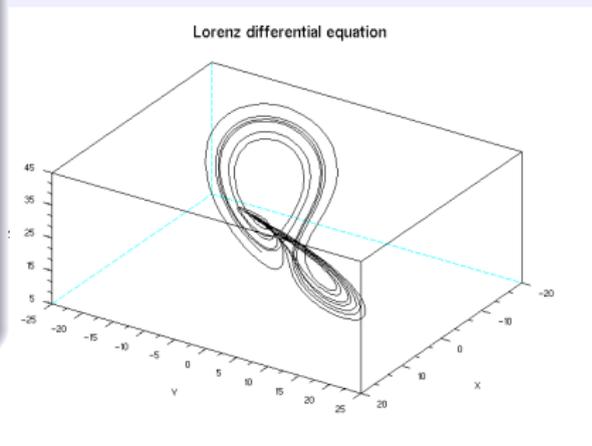




Scilab - Funktionalität



- 2D- und 3D-Plots mit Gnuplot/Labplot
- **numerische lineare Algebra**
- Polynom-Berechnungen
- Statistik
- Regelungstechnik/SCICOS
- digitale Signalverarbeitung





Scilab - Funktionalität



- 2D- und 3D-Plots mit Gnuplot/Labplot
- numerische lineare Algebra
- **Polynom-Berechnungen**
- Statistik
- Regelungstechnik/SCICOS
- digitale Signalverarbeitung

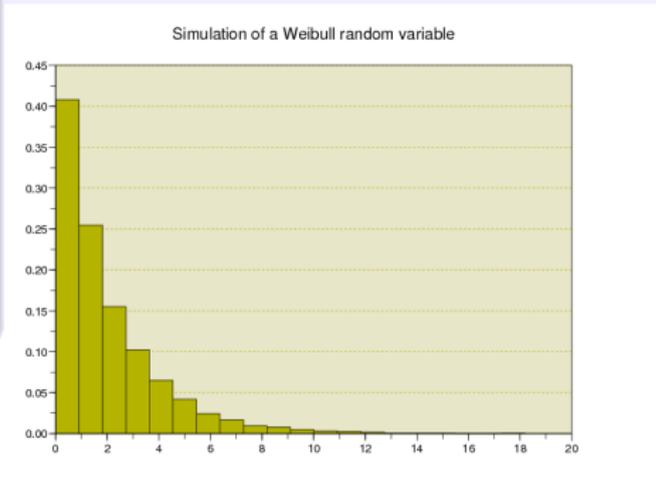




Scilab - Funktionalität



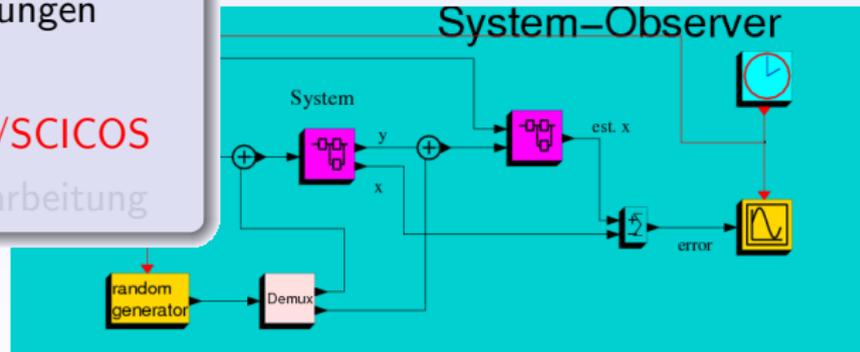
- 2D- und 3D-Plots mit Gnuplot/Labplot
- numerische lineare Algebra
- Polynom-Berechnungen
- **Statistik**
- Regelungstechnik/SCICOS
- digitale Signalverarbeitung



Scilab - Funktionalität



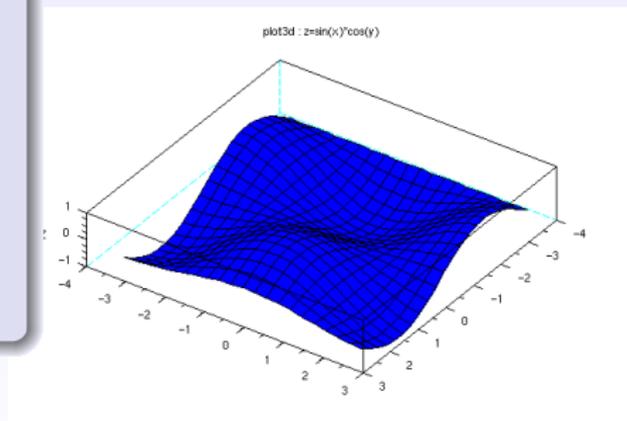
- 2D- und 3D-Plots mit Gnuplot/Labplot
- numerische lineare Algebra
- Polynom-Berechnungen
- Statistik
- **Regelungstechnik/SCICOS**
- digitale Signalverarbeitung



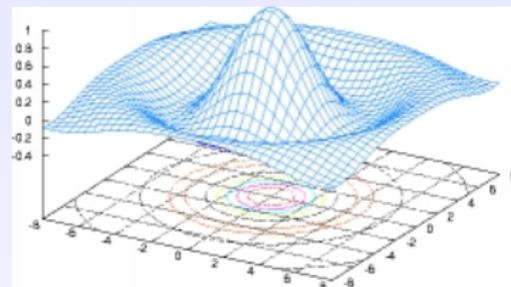
Scilab - Funktionalität



- 2D- und 3D-Plots mit Gnuplot/Labplot
- numerische lineare Algebra
- Polynom-Berechnungen
- Statistik
- Regelungstechnik/SCICOS
- **digitale Signalverarbeitung**



Octave als weitere Alternative



- Skriptsprache für numerische Mathematik
- Syntax nahezu mit Matlab kompatibel
- Internet: <http://www.octave.org>
- Erweiterungen: octave-forge (<http://octave.sourceforge.net>)
- Kommandozeilenorientiert, Skriptgesteuert
- GUIs: koctave (alt), qtoctave(neu)



Maxima - Eine Alternative zu Mathematica



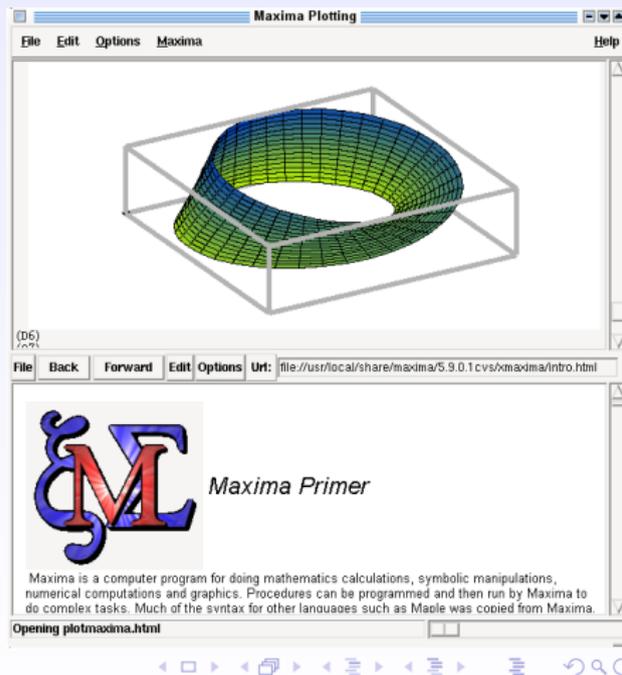
- Computeralgebrasystem
- Weiterentwicklung von Macsyma (1960, MIT, William Shelter)
- Veröffentlichung 1998 unter der GPL als Maxima
- Kommandozeilenorientiert,
- GUIs: xmaxima, wxmaxima
- Internet: <http://maxima.sourceforge.net>



Maxima - Funktionalität



- Lösung algebraischer Gleichungen
- Differenzieren
- bestimmte/unbestimmte Integrale berechnen
- Laplace-Transformation
- Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung
- Plotten mittels Gnuplot



Maxima - Funktionalität



- Lösung algebraischer Gleichungen
- Differenzieren
- bestimmte/unbestimmte Integrale berechnen
- Laplace-Transformation
- Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung
- Plotten mittels Gnuplot

```

no name  --  x
File Edit Insert Format Document View Go Tools Help
[Icons]
I B S [Icons]

Maxima 5.9.0.lcvs http://maxima.sourceforge.net
Distributed under the GNU Public License. See the file COPYING.
Dedicated to the memory of William Schelter.
This is a development version of Maxima. The function bug_report()
provides bug reporting information.

(C1) integrate(1/(1+x^4),x);
(D1) 
$$\frac{\log(x^2 + \sqrt{2}x + 1)}{4\sqrt{2}} - \frac{\log(x^2 - \sqrt{2}x + 1)}{4\sqrt{2}} + \frac{\arctan\left(\frac{2x + \sqrt{2}}{\sqrt{2}}\right)}{2\sqrt{2}} + \frac{\arctan\left(\frac{2x - \sqrt{2}}{\sqrt{2}}\right)}{2\sqrt{2}}$$

(C2) matrix([x^2+x,y^2+y,z^2+z],[x^2,y^2,z^2],[x^2+y,y^2+z,z^2+x]);
(D2) 
$$\begin{pmatrix} x^2+x & y^2+y & z^2+z \\ x^2 & y^2 & z^2 \\ y+x^2 & z+y^2 & x^2+x \end{pmatrix}$$

(C3) ode2('diff(y,x)+3*x*y = sin(x)/x,y,x);
(D3) 
$$y = e^{-\frac{3x^2}{2}} \left( \int \frac{e^{\frac{3x^2}{2}} \sin x}{x} dx + \%C \right)$$

(C4) expand((x+y)^5);
(D4) 
$$y^5 + 5xy^4 + 10x^2y^3 + 10x^3y^2 + 5x^4y + x^5$$

(C5) I
generic maxima program roman 10 blue
session input start

```



Maxima - Funktionalität



- Lösung algebraischer Gleichungen
- Differenzieren
- bestimmte/unbestimmte Integrale berechnen
- Laplace-Transformation
- Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung
- Plotten mittels Gnuplot

```

@emacs@defun.localdomain
File Edit Options Buffers Tools Complete In/Out Signals Help
[Icons] x [Icons] [Icons] [Icons] [Icons] [Icons]
(C1) 'integrate(sinh(a*x)*f(t-x),x,0,t) + b*f(t) - t^2;
(D1) 
$$\int_0^t f(t-x) \sinh(ax) dx + b f(t) = t^2$$

(C2) Laplace(x,t,s);
(D2) 
$$b \mathcal{L}(f(t), t, s) + \frac{a \mathcal{L}(f(t), t, s)}{s^2 - a^2} = \frac{2}{s^3}$$

(C3) linsolve(%1, ['Laplace(f(t), t, s)]);
(D3) 
$$\left[ \mathcal{L}(f(t), t, s) = \frac{2s^2 - 2a^2}{bs^3 + (a-a^2b)s^3} \right]$$

(C4) tilt(%1, s, t);
(*) 
$$\text{Is } ab(a-b-1) \text{ positive, negative, or zero?pos;}$$

(D4) 
$$f(t) = -\frac{2 \cosh\left(\frac{\sqrt{ab(a-b-1)}t}{b}\right)}{a^3b^2 - 2a^2b + a} + \frac{at^2}{ab-1} + \frac{2}{a^3b^2 - 2a^2b + a}$$

(C5) expand((x+y+z)^6);
(D5) 
$$\begin{aligned} & z^6 + 6yz^5 + 6xz^5 + 15y^2z^4 + 15y^2z^4 + 30xyz^4 + 15x^2z^4 \\ & + 20y^3z^3 + 60xy^2z^3 + 60x^2yz^3 + 20x^3z^3 + 15y^4z^2 \\ & + 60xy^3z^2 + 90x^2y^2z^2 + 60x^3yz^2 + 15x^4z^2 + 6y^5z \\ & + 30xy^4z + 60x^2y^3z + 60x^3y^2z + 30x^4yz + 6x^5z \\ & + y^6 + 6xy^5 + 15x^2y^4 + 20x^3y^3 + 15x^4y^2 + 6x^5y + z^6 \end{aligned}$$

(C6) h[i,j]:=1/(1+j-1);
(D6) 
$$h_{i,j} := \frac{1}{1+j-1}$$

(C7) gennatrix(h,2,2);
(D7) 
$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

(C8) 'diff(g(x), x, 2) - 'diff(g(x), x) - cos(x);
(D8) 
$$\frac{d^2}{dx^2} g(x) = \frac{d}{dx} g(x) - \cos x$$

(C9)

```



Maxima - Funktionalität



- Lösung algebraischer Gleichungen
- Differenzieren
- bestimmte/unbestimmte Integrale berechnen
- **Laplace-Transformation**
- Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung
- Plotten mittels Gnuplot

```

Maxima 5.9.0.lcvs http://maxima.sourceforge.net
Distributed under the GNU Public License. See the file COPYING.
Dedicated to the memory of William Schelter.
This is a development version of Maxima. The function bug_report()
provides bug reporting information.
(C1) integrate(1/(1-x^3), x);

(D1)
      2      2      2      2      2      2      2      2      2      2
      LOG(x - x + 1) + ATAN(-----) + LOG(x + 1)
                        SORT(3)
-----
      6      3      3
      SORT(3)
(C2) matrix([x^2+y^2, x^y], [x^3+x^y*y^x, x^y-y^x]);

(D2)
      [ 2      2      y      ]
      [ y + x      x      ]
      [ x      y      3      y      x      ]
      [ y + x + x      x      - y      ]
(C3) ode2('diff(y,x,2) - y = 1, y, x);

(D3)
      y = %K1 %E^x + %K2 %E^-x - 1
(C4) expand((x+y+z)^4);

(D4) z^4 + 4 y z^3 + 4 x z^3 + 6 y z^2 + 12 x y z^2 + 6 x z^2 + 4 y z^3 + 12 x y z^2
      + 12 x^2 y z^2 + 4 x^3 z + y^4 + 4 x^3 y + 6 x^2 y^2 + 4 x^3 y + x^4
(C5) █

--++ *maxima* (Inferior Maxima: run)--L31--C5--All
-- Parentes match
  
```



Maxima - Funktionalität



- Lösung algebraischer Gleichungen
- Differenzieren
- bestimmte/unbestimmte Integrale berechnen
- Laplace-Transformation
- Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung
- Plotten mittels Gnuplot

```

wxMaxima 0.7.1 [ nicht gespeichert ]
Datei Bearbeiten Maxima Gleichungen Algebra Berechnen Vereinfachen Plotten Mensch Hilfe

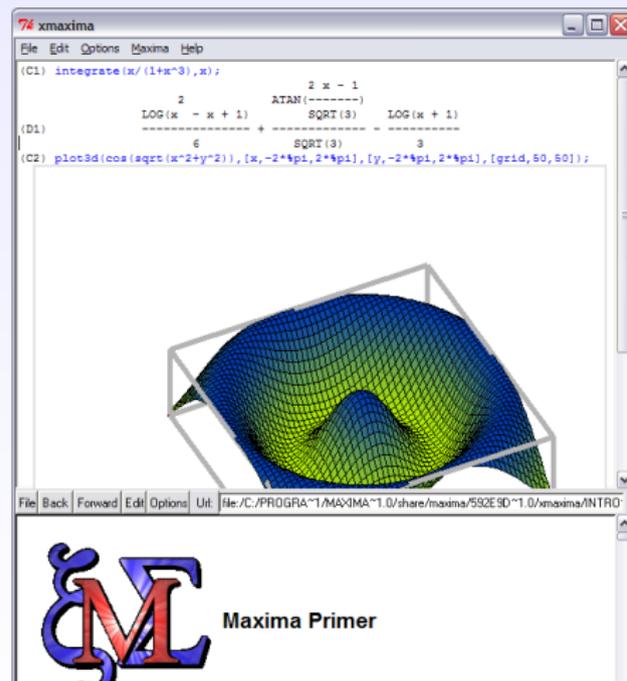
(%i1)
(%i3) 3*x^4+y*x^2+2*diff(y,x) = sin(x)/x
(%o3) x^2 ( (d/dx) y ) + 3x y = (sin(x))/x
(%i1)
(%i4) soln1:ode2(%y,x)
(%o4) y = (sqrt(2) - cos(x))/x^3
(%i1)
(%i5) ic1(soln1,x = %pi,y = 0)
(%o5) y = - (cos(x)+1)/x^3
(%i1)
(%i6) y*(diff(y,x))^3+diff(y,x,2) = 0
(%o6) (d^2/dx^2) y + y (d/dx) y^3 = 0
(%i1)
(%i7) soln2:ode2(%y,x)
Eingabe:
Vereinfachen  Wurzelvereinf.  Faktorisieren  Expandieren  Lösen...  2D Plotten...
Trigsimp      Trigexpand  Trigreduce  Rectform    Löse GOG...  3D Plotten...
Bereit für Benutzereingabe
  
```



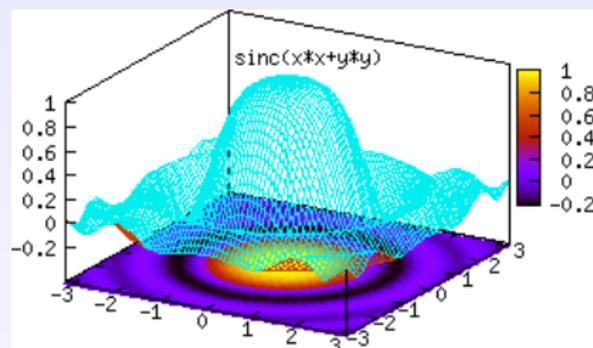
Maxima - Funktionalität



- Lösung algebraischer Gleichungen
- Differenzieren
- bestimmte/unbestimmte Integrale berechnen
- Laplace-Transformation
- Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung
- **Plotten mittels Gnuplot**



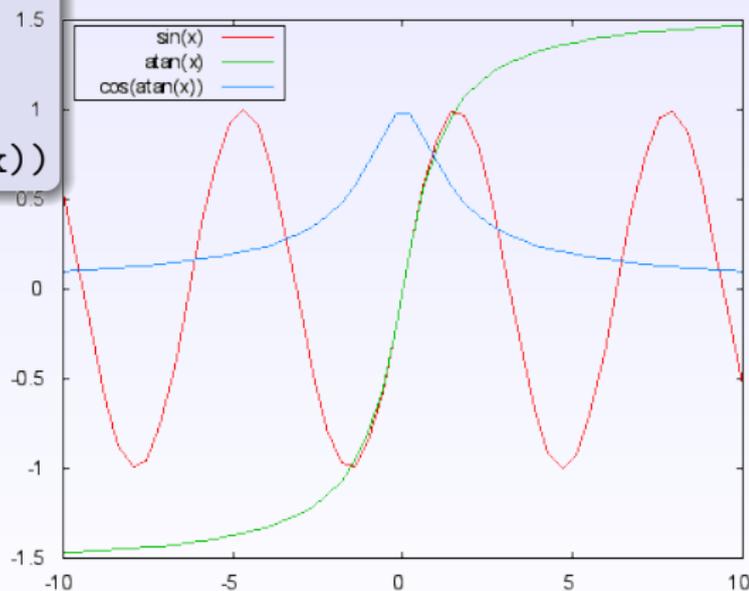
Gnuplot



- Plotter für Funktionen und Daten
- Kommandozeilenorientiert, Skriptgesteuert
- <http://www.gnuplot.info/>

Beispiele zu Gnuplot

```
set key left box
set samples 50
plot [-10:10]
sin(x), atan(x), cos(atan(x))
```

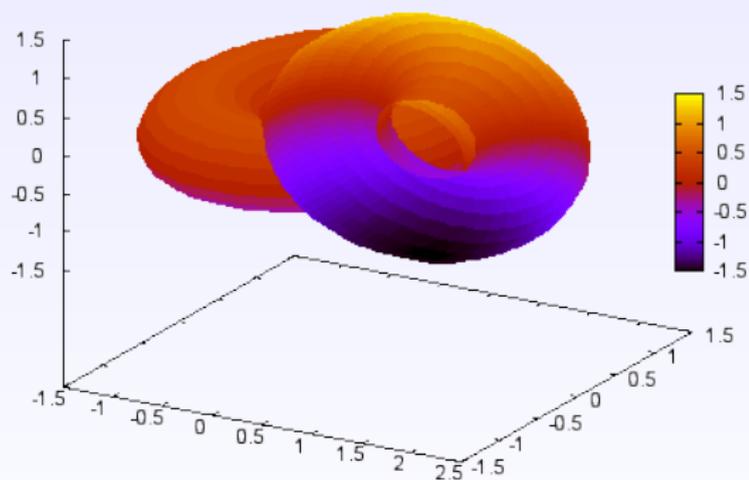


Quelle: Gnuplot Demo Gallery (<http://gnuplot.sourceforge.net/demo/>)

Beispiele zu Gnuplot

```
set title ''Interlocking Tori - PM3D surface with\  
no depth sorting''  
set parametric  
set urange [-pi:pi]  
set vrangle [-pi:pi]  
set isosamples 50,20  
unset key  
set view 60, 30, 1.1, 1.33  
set pm3d scansbackward  
splot cos(u)+.5*cos(u)*cos(v),sin(u)+.5*sin(u)*cos(v),\  
.5*sin(v) with pm3d, 1+cos(u)+.5*cos(u)*cos(v),\  
.5*sin(v),sin(u)+.5*sin(u)*cos(v) with pm3d
```

Interlocking Tori - P M3D surface with no depth sorting



Quelle: Gnuplot Demo Gallery (<http://gnuplot.sourceforge.net/demo/>)

Mehr Informationen

- UbuntuScience:
<https://www.help.ubuntu.com/community/UbuntuScience>
- OpenScience
<http://www.openscience.org/>
- Linux4Chemistry:
<http://www.redbrick.dcu.ie/~noel/linux4chemistry/linux4chemistry.py>
- Open-Source-Alternativen proprietärer wissenschaftl. Programme:
[https://help.ubuntu.com/community/UbuntuScience/ \](https://help.ubuntu.com/community/UbuntuScience/AlternativesToProprietarySoftware)
AlternativesToProprietarySoftware
- LabPlot-Online-Handbuch:
<http://labplot.sourceforge.net/LabPlot-Handbook-1.5.1-de/index.html>

Weitere Programme

- GIS-Knoppix:
www.sourcepole.ch/sources/software/gis-knoppix/
- Numerische Strömungsmechanik:
www.openfoam.org
- Visualisierung:
www.paraview.org
- Netzgeneratoren für FEM, etc.:
Netgen: <http://www.hpfem.jku.at/netgen>
Tetgen: <http://tetgen.berlios.de/>
Gmsh: <http://geuz.org/gmsh/>

und viele, viele, viele mehr...

Vielen Dank

“Software is like sex –it’s better when it’s free ” (Linus Thorwald)

Beispiel Octave

Lösen eines linearen Gleichungssystems

$$10x_1 + 11x_2 + 12x_3 = 1$$

$$3x_1 + 5x_2 + 8x_3 = 2$$

$$13x_1 + 21x_2 + 34x_3 = 3$$



Lösungsansatz

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 11 & 12 \\ 3 & 5 & 8 \\ 12 & 21 & 34 \end{pmatrix}; b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}; x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix};$$

Lösen des linearen Gleichungssystems: In Octave mittels '\'

$$x = b \setminus A$$