Einführung in Matlab - Einheit 6 Numerische Mathematik, Profiler

Jochen Schulz

Georg-August Universität Göttingen

Aufbau

- Numerische Mathematik
 - Poisson Problem
 - Differentialgleichungen
 - Lorenz-Gleichungen
 - Nichtlineare Gleichungen lösen und Optimierung

2 Profiler

Aufbau

- Numerische Mathematik
 - Poisson Problem
 - Differentialgleichungen
 - Lorenz-Gleichungen
 - Nichtlineare Gleichungen lösen und Optimierung
- 2 Profiler

Poisson Problem

- Poisson Problem beschreibt stationäre Wärmeverteilungen.
- Poisson Problem: Suche $u \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ mit

$$\left\{ \begin{array}{rcl} -\triangle u & = & f & \text{in } \Omega \\ u & = & 0 & \text{auf } \partial \Omega \end{array} \right.$$

für
$$\Omega = (0,1)^2$$
 und $f \in C(\Omega)$.

• Laplace-Operator $\triangle u := \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}$

- Äquidistante Gitterweite $h = \frac{1}{N}$, $N \in \mathbb{N}$
- Menge aller Gitterpunkte

$$Z_h:=\left\{(x,y)\in\overline{\Omega}\ \mid\ x=z_1h,\ y=z_2h\ \text{mit}\ z_1,z_2\in\mathbb{Z}\right\}.$$

• Innere Gitterpunkte: $\omega_h := Z_h \cap \Omega$

• Approximation von $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y)$

$$\frac{u(x-h,y)-2u(x,y)+u(x+h,y)}{h^2}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y)+\mathcal{O}(h^2)$$

• Approximation von $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x,y)$

$$\frac{u(x,y-h)-2u(x,y)+u(x,y+h)}{h^2}=\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x,y)+\mathcal{O}(h^2)$$

• Addition ergibt für $\triangle u(x, y)$ die Näherung

$$\frac{1}{h^2} \left(u(x,y-h) + u(x-h,y) - 4u(x,y) + u(x,y+h) + u(x+h,y) \right)$$

• Definition $u_{i,j} := u(ih, jh)$ ergibt an Gitterpunkten (ih, jh)

$$-u_{i,j-1}-u_{i-1,j}+4u_{i,j}-u_{i+1,j}-u_{i,j+1}=h^2f_{ij}$$

mit $i, j \in \{1, ..., N-1\}$ und $f_{ij} := f(ih, jh)$.

• Randbedingungen ergeben $u_{0,i} = u_{N,i} = u_{i,0} = u_{i,N} = 0$, $i = 0, \dots, N$.

• Lexikografische Sortierung der inneren Unbekannten

$$\begin{array}{cccccccc} (h,(N-1)h) & (2h,(N-1)h) & \dots & ((N-1)h,(N-1)h) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ (h,2h) & (2h,2h) & \dots & ((N-1)h,2h) \\ (h,h), & (2h,h) & \dots & ((N-1)h,h) \end{array}$$

ergibt Vektor $U_{i+(N-1)(j-1)} = u_{i,j}$.

Lineares Gleichungssystem für $U = (U_i)_{i=1}^{(N-1)^2}$

$$AU = F$$

mit

•
$$F := (f_i)_{i=1}^{(N-1)^2} \text{ mit } f_{i+(N-1)(j-1)} = f(ih, jh), i, j \in \{1, \dots, N-1\},$$

•

$$A := \frac{1}{h^2} tridiag(-I_{N-1}, T, -I_{N-1}) \in \mathbb{R}^{(N-1)^2 \times (N-1)^2},$$

$$T := tridiag(-1, 4, -1) \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}.$$

Implementierung

```
function loes = poisson (f,n)
f = fcnchk(f):
A = gallery('poisson',n-1);
% Erzeuge rechte Seite und Mesh
loes.mesh = zeros(2,(n-1)^2);
F = zeros((n-1)^2,1);
for i = 1:(n-1)
    for j = 1:(n-1)
        F(i+(n-1)*(j-1)) = (1/n)^2*f(i/n,j/n);
        loes.mesh(:,i+(n-1)*(j-1)) = [i/n; j/n];
    end
end
% Loese das lineare System
loes.x = A \setminus F;
```

Implementierung

```
% Ergaenze Randbedingungen
loes.x = [loes.x; zeros(4*(n+1),1)];
loes.mesh = [loes.mesh, [zeros(1,n+1); 0:1/n:1]];
loes.mesh = [loes.mesh, [ones(1,n+1); 0:1/n:1]];
loes.mesh = [loes.mesh, [0:1/n:1; ones(1,n+1)]];
loes.mesh = [loes.mesh, [0:1/n:1; zeros(1,n+1)]];
% Plotten
plot3(loes.mesh(1,:),loes.mesh(2,:),loes.x,'*');
figure;
[X,Y] = meshgrid(0:1/n:1,0:1/n:1);
Fi = TriScatteredInterp(loes.mesh(1,:)', loes.mesh(2,:)',
   loes.x,'linear');
Z = Fi(X,Y);
surf(X,Y,Z); shading flat;
```

Aufbau

- Numerische Mathematik
 - Poisson Problem
 - Differentialgleichungen
 - Lorenz-Gleichungen
 - Nichtlineare Gleichungen lösen und Optimierung
- 2 Profiler

Gewöhnliche Differentialgleichungen

Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein Intervall. Bei einer gewöhnlichen Dgl. sucht man eine Funktion $y:I \longrightarrow \mathbb{R}^n$, so dass

$$\frac{d}{dt}y(t) = f(t, y(t)), t \in I \quad y(t_0) = y_0,$$

wobei $y_0 \in \mathbb{R}^n$ ein vorgegebener Anfangswert an $t_0 \in I$ und $f \colon I \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ die rechte Seite ist. Außerdem sei $\frac{d}{dt}y(t) := (\frac{\partial y_1(t)}{\partial t}, \dots, \frac{\partial y_n(t)}{\partial t})^t$.

Beispiele:

$$\frac{d}{dt}y(t)=y(t), \ y(t_0)=y_0, \quad \text{L\"osung: } y(t)=y_0e^{t-t_0}$$

$$\frac{d}{dt}y(t)=e^y\sin(t), \quad \text{L\"osung: } y(t)=-\log(\cos(x)+C), \ C+\cos(x)>0$$

Skalares Beispiel

Löse für $0 \le t \le 3$ mit ode45 die Dgl.

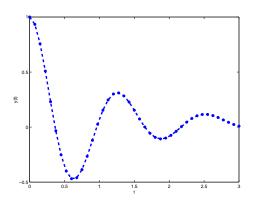
$$\frac{d}{dt}y(t) = -y(t) - 5e^{-t}\sin 5t, \quad y(0) = 1.$$

• Die rechte Seite als eigene Funktion:

Skalares Beispiel

Ausrechnen und Plotten

```
tspan = [0,3]; aw = 1;
[t,y] = ode15s(@rechte_seite1,tspan,aw,options);
plot(t,y,'r*--','Linewidth',3,'MarkerSize',15)
xlabel('t'), ylabel('y(t)')
```



ODE in MATLAB

```
[<t>,<y>] = ode45(<@fun>, <tspan>, <aw>, <options>)
```

- @fun steht für die rechte Seite der Dgl. (m-File).
- $aw \in \mathbb{R}^n$ ist der Anfangswert.
- tspan gibt das Zeitintervall an, auf dem die Dgl. berechnet werden soll. Normalerweise ist es von der Form $tspan=[t_0, t_1]$. Dann wird die Dgl. auf dem Intervall $[t_0, t_1]$ berechnet (Anfangswert: $y(t_0) = aw$).
- Rückgabewerte: Vektoren t und Matrizen y. Dabei ist y(:,i) die Lösung an der Stelle t(i). Die Punkte t_i werden automatisch bestimmt.
- Durch die optionale Angabe von options kann der Löser gezielt eingestellt werden.
- Spezifiziert man mehr als zwei Zeitpunkte in tspan, so gibt MATLAB die Lösung genau an diesen Zeitschritten zurück.

Optionen

Die genauen Parameter der ODE-Löser können durch

```
options = odeset('Eigenschaft 1','Spez. 1',...
'Eigenschaft 2','Spez. 2',...)
```

gesteuert werden. Die wichtigsten Parameter sind AbsTol (Default 10^{-6}) und RelTol (Default: 10^{-3}).

Beispiel:

```
options = odeset('AbsTol',1e-7,'RelTol',1e-4)
```

Andere Löser

Löser	Steifigkeit	Algorithmus	Ordnungen
ode45	nicht steif	Expliziter Runge-Kutta Löser	4, 5
ode23	nicht steif	Expliziter Runge-Kutta Löser	2, 3
ode113	nicht steif	Explizites Mehrschrittverfahren	1 - 13
ode15s	steif	Implizites Mehrschrittverfahren	1 - 5
ode23s	steif	Modifiziertes Rosenbrockverfahren	2, 3
ode23t	mittel steif	implizite Trapez Regel	2, 3
ode23tb	steif	Implizites Runge-Kutta Verf.	2, 3

Aufbau

- Numerische Mathematik
 - Poisson Problem
 - Differentialgleichungen
 - Lorenz-Gleichungen
 - Nichtlineare Gleichungen lösen und Optimierung
- 2 Profile:

Die Lorenz-Gleichungen

• Chaostheorie / Schmetterlingseffekt.

$$\frac{d}{dt}y_1(t) = 10(y_2(t) - y_1(t))$$

$$\frac{d}{dt}y_2(t) = 28y_1(t) - y_2(t) - y_1(t)y_3(t)$$

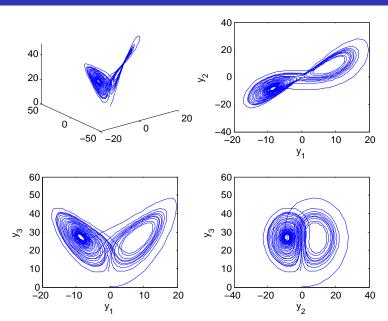
$$\frac{d}{dt}y_3(t) = y_1(t)y_2(t) - 8y_3(t)/3$$

rechte Seite:

Die Lorenz-Gleichungen

```
lorenz_gl.m
  Eine Approximation der Lorenzgleichungen
  Gerd Rapin 08.01.2004
tspan = [0,30]; aw = [0;1;0];
options = odeset ('AbsTol',1e-7,'RelTol',1e-4);
[t,y] = ode45(@lorenz rechte seite,tspan,aw, options);
subplot(2,2,1), plot3(y(:,1),y(:,2),y(:,3)),
subplot(2,2,2), plot(y(:,1),y(:,2)), xlabel('y 1'), ylabel
   ('y 2');
subplot(2,2,3), plot(y(:,1),y(:,3)), xlabel('y_1'), ylabel
  ('y 3');
subplot(2,2,4), plot(y(:,2),y(:,3)), xlabel('y_2'), ylabel
   ('y 3');
```

Die Lorenz-Gleichungen



Aufbau

- Numerische Mathematik
 - Poisson Problem
 - Differentialgleichungen
 - Lorenz-Gleichungen
 - Nichtlineare Gleichungen lösen und Optimierung

2 Profiler

Nichtlinearer Gleichungslöser

Löst nichtlineare Gleichungen

```
[x,fval] = fsolve(fun,x0,options)
```

- fun: Function handle.
- x0: Startvektor.
- options: Struktur der options (siehe optimset).

optimset

```
options = optimset('param1',value1,'param2',value2,..)
```

- 'TolFun': Abbruchkriterium für den Funktionswert.
- 'TolX': Abbruchkriterium für aktuellen Punkt x.
- 'MaxIter': Maximale Anzahl Iterationen.
- 'Display': Regelt Ausgabe im Commandwindow.
- 'Algorithm': Wahl des genutzten Algorithmus.

Beispiel

```
x0 = -5;  % Startwert
options = optimset('Display','iter','TolFun',10^-5);
f = @(x) 2*x - exp(-x);
[x,fval] = fsolve(f,x0,options)
```

```
x =
    0.351733710993003

fval =
    -6.926083040426079e-10
```

Ableitungsfrei / Nebenbedingungen

ohne Nebenbedingungen, multidimensional:

```
[x,fval,exitflag,output] = fminsearch(fun,x0,options)
```

- fun: Function handle.
- x0: Start-wert/vektor/matrix.
- options: Struktur der options (siehe optimset).

mit Nebenbedingungen, multidimensional:

```
x = fmincon(fun,x0,A,b,Aeq,beq,lb,ub,nonlcon,options)
```

Newtonverfahren

Das Newtonverfahren ist ein Verfahren zum Lösen von Gleichungen mit stetig, differenzierbaren Funktionen $f: \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$

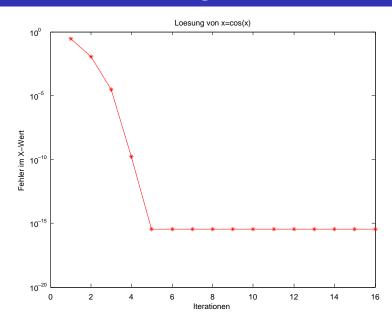
1D-Fall:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Newtonverfahren - Implementation

```
% Programm zur Loesung von x=cos(x)
xn = 1: % Startwert Newton
xr = 0.739085133215161; \% wahre Loesung
xnlist = xn-xr; % Fehlerliste
for i = 1:15
  xn = xn - (xn - cos(xn)) / (1 + sin(xn)); % Newton
  xnlist = [xnlist xn-xr];
end
% Listenausgabe
format long
xnlist'
% Plotausgabe
semilogy(1:length(xnlist),abs(xnlist),'r*-')
title('Loesung von x=cos(x)')
xlabel('Iterationen')
ylabel('Fehler im X-Wert')
```

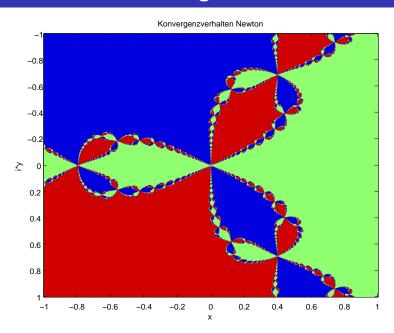
Newtonverfahren - Konvergenz



Newtonverfahren - Konvergenz

```
n = 1000;
x = linspace(-1,1,n);
[X,Y] = meshgrid(x,x);
Z = complex(X,Y);
TOL = 0.2;
V = zeros(n,n);
for idx = 1:20
    Z = Z - (Z.^3-1)./(3*Z.^2);
    ind = find (Z.^3 - 1 < TOL);
    V(ind) = angle(Z(ind));
end
image(x,x,V,'CDataMapping','scaled');
caxis([-2.5 2.5]);
title('Konvergenzverhalten Newton')
xlabel('x'),ylabel('i*y')
roots([1 0 0 -1])
```

Newtonverfahren - Konvergenz



Aufbau

- Numerische Mathematik
 - Poisson Problem
 - Differentialgleichungen
 - Lorenz-Gleichungen
 - Nichtlineare Gleichungen lösen und Optimierung
- 2 Profiler

Perfomance

Perfomance der ist bei realen Problemen schnell ein wichtiger Aspekt um Software zu erhalten die das gegebene Problem gut und schnell löst.

Einflussfaktoren:

- Algorithmus
- Implementation
- Betriebssytem und Programmiersprache
- Hardware

Profiler

Tool um Bottlenecks und Fehler (Bugs) herauszufinden.

Features

- (zeilenweise) Ausführungszeit
- Eltern-Kind-Beziehungen der Funktionen und deren Ausführungszeit
- Anzahl Funktionsaufrufe
- Geschichte (History) der Funktionsaufrufe
- Farbige Darstellung und Frontend

Benutzung

```
profile on
<Befehle>
profile viewer
```

Optionen und Kommandos:

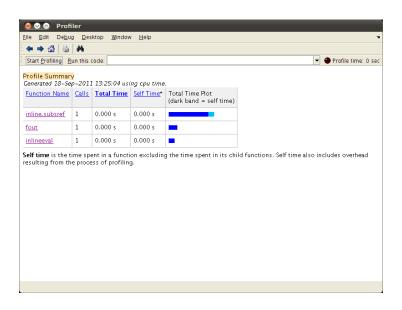
- -history: Speichert die Funktionsaufruf-history.
- -timer real: Setzt die Zeitmessung auf Realzeit.
- -timer cpu: Setzt die Zeitmessung auf CPU-Zeit.
- resume: Setzt den Profiler fort.

Profiler - Beispiel

```
function res = fout(x)
res = exp(x).*x.^2;
```

```
% profile inline-function vs. native function
x = linspace(1,100,1000000);
fin = inline('exp(x).*x.^2');
profile on -history -timer real
fin(x);
fout(x);
profile viewer
p = profile('info');
```

Profilerwindow



History der Funktionsaufrufe

```
% profile inline-function vs. native function
x = linspace(1,100,100000);
fin = inline('exp(x).*x.^2');
profile on -history
fin(x);
fout(x);
profile viewer
p = profile('info');
for n = 1:size(p.FunctionHistory,2)
 if p.FunctionHistory(1,n)==0
        str = 'entering function: ';
 else
        str = 'exiting function: ';
 end
 disp([str p.FunctionTable(p.FunctionHistory(2,n))
    .FunctionNamel)
end
```

Profiling Poisson

```
profile on
poisson(@(x,y) x*y.^4,100)
profile viewer
```

