Einführung in Matlab und Python - Einheit 1

Einleitung, Vektoren und Matrizen

Jochen Schulz

Georg-August Universität Göttingen 

Organisatorisches

- Anmeldung → StudIP
  `https://studip.uni-goettingen.de/`
  Einführung in Matlab und Python (Mathematische Anwendersysteme)
- Alle Unterlagen (Aufgabenblätter, Vorlesungsfolien, Beispiele, Musterlösungen) → StudIP

Organisatorisches

- Anmeldung → StudIP
  `https://studip.uni-goettingen.de/`
  Einführung in Matlab und Python (Mathematische Anwendersysteme)
- Alle Unterlagen (Aufgabenblätter, Vorlesungsfolien, Beispiele, Musterlösungen) → StudIP

Dozent

Jochen Schulz
NAM, Zimmer 04 (Erdgeschoß)
Telefon: 39-4525
Email: `schulz@math.uni-goettingen.de`
XMPP: `schulz@jabber.num.math.uni-goettingen.de`

Ablauf der Veranstaltung

- Blockveranstaltung vom 9.9 - 20.9.2013
- Vorlesung: 9.15 - ca. 11.30 (MN55)
- Übungsbetrieb/Praktikum: ca. 11:30 - ca. 17:00 (NAM WAP-Raum)
  - 1 Übungszettel/Tag.
  - Besprechung Aufgaben vom Vortag (individuell)
  - Betreuung: Hilfestellung beim Bearbeiten der Aufgaben
- Klausur: 27.9.2013; 10:00 - 11:30; Anmeldung über FlexNow.

Inhalt der Vorlesung

1. **Tag** Organisatorisches, Basis von Matlab und Python
2. **Tag** Programmieren, Datenstrukturen
3. **Tag** Rekursionen, Grafik
4. **Tag** ? Polynome, Interpolation, Debugging
5. **Tag** ? Mehrdimensionale Arrays, Funktionen, Numerische Lineare Algebra, Dünnbesetzte Matrizen
6. **Tag** ? Numerische Mathematik, Profiler
7. **Tag** ? Visualisierung und Validierung
8. **Tag** ? Schnittstelle zu C (Optional)
9. **Tag** ? Wunschvorlesung
10. **Tag** Fragestunde

Aufbau

1. **MATLAB und Python Basis**
   - Einleitung
   - Grundlegende Bedienung MATLAB
   - Grundlegende Bedienung Python (Spyder)
   - Erstes Beispiel
2. **Programmieren: Basis**
3. **Vektoren und Matrizen**
   - Erzeugen von Vektoren
   - Erzeugen von Matrizen
   - Manipulation von Matrizen
   - Matrix- und Vektoroperationen

Aufbau

Aufbau

Programmieren für den Wissenschaftler

- Daten erzeugen oder erheben (Simulation, Experiment)
- Weiterverarbeitung von Daten
- Visualisierung und Validierung
- Ergebnisse veröffentlichen bzw. kommunizieren

Wir wollen: eine *High-Level* Sprache:

- Programmieren ist leicht
- Vorhandene Elemente nutzen
- geeignet für Prototyping und Debugging (Interaktion)
- Möglichst nur ein Werkzeug für alle Probleme

MATLAB

- MATLAB steht für Matrix laboratory; ursprünglich speziell Matrizenrechnung.
- Interaktives System für numerische Berechnungen und Visualisierungen (Skriptsprache).

Vorteile

- Vielfältige Visualisierungsmöglichkeiten.
- Viele zusätzliche Toolboxes (Symb. Math T., PDE T., Wavelet T.)
- Ausgereifte und integrierte Oberfläche.

Nachteile

- Kostenintensiv.
- Ein/Ausgabe von Dateien kann umständlich sein.
- Spezialisierter Funktionsumfang macht manche Programmierung schwer.

Python: NumPy, SciPy, SymPy

- Modulare Skriptsprache.

Vorteile

- Viele Module mit wissenschaftlichen Fokus.
- Klare Code-Struktur.
- Ebenso viele Module für den nicht-wissenschaftlichen Gebrauch (nützlich z.B. für Ein-/Ausgabe).
- Frei und open-source.

Nachteile

- Entwicklungsumgebung etwas komplizierter (Spyder,ipython).
- Nicht alle spezialisierten Möglichkeiten anderer Software.

Literatur

MATLAB

- Matlab online-help :-).
- Introduction to Scientific Computing, C.F. van Loan, Prentice Hall, New Jersey, 1997,
- Scientific Computing with MATLAB, A. Quarteroni, F. Saleri, Springer, 2003,

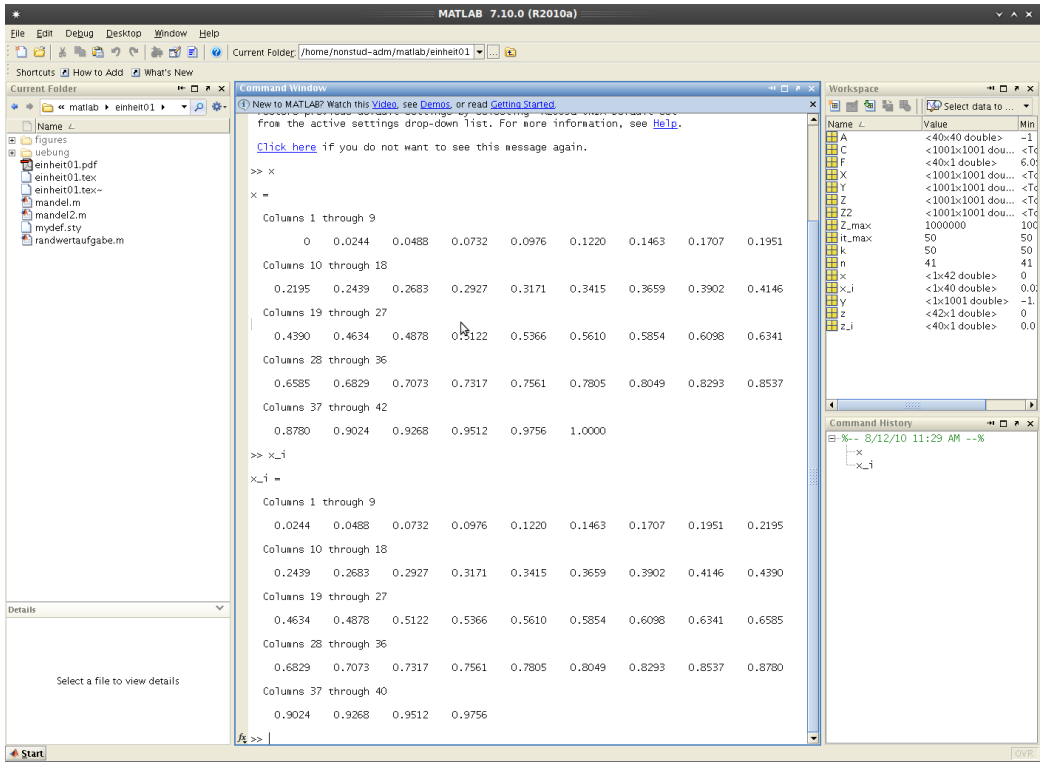
Python

- NumPy, SciPy SciPy developers (`http://scipy.org/`),
- SciPy-lectures, F. Perez, E. Gouillart, G. Varoquaux, V. Haenel (`http://scipy-lectures.github.io`),
- Matplotlib (`http://matplotlib.org`)
- scitools (`https://code.google.com/p/scitools/`)
- mayavi (`http://docs.enthought.com/mayavi/mayavi/mlab.html`)

Aufbau

MATLAB Fenster-Aufbau

Starten von MATLAB: Eingabe von `matlab &` (in einem Terminal).



- Launch Pad: Startmenü
- Command Window: Befehlseingabe und Standardausgabe
- Workspace: Ansicht von Variablen und deren Art und Grösse; Ändern der Einträge
- Grafik: normalerweise in separaten Fenstern

Struktur von Skript-Files

- Skript-Files bestehen aus einer Sequenz von Befehlen, die nacheinander abgearbeitet werden.
- operiert auf Variablen im *Workspace*.
- Gestartet wird das Programm `name.m` durch Eingabe von `name`.
- Beschreibung des Skript-Files (Auch Funktion):

```
help sin
```

```
sin     Sine of argument in radians.
   sin(X) is the sine of the elements of X.
```

Struktur von Function-Files

```
function [Out_1,..,Out_k] = myfunction(In_1,..,In_l)
% Beschreibung der Funktion
  ..
Out_1=..
  ..
Out_k=..
```

Soll keine Variable zurückgegeben werden, so besteht die erste Zeile aus

```
function myfunction(In_1,..,In_k)
```

- Call-by-value
- Variablen lokal, d.h.
  - Variablen des Workspace sind nicht verfügbar.
  - definierte Variablen werden nicht im Workspace gespeichert.

Wichtig: Funktionsname = Dateiname.

Priorität beim Programmaufruf

Beispiel-Programmaufruf

```
name
```

Testet ob,..

1. Variable
2. Unterfunktion. Eine Unterfunktion ist ein Programm/Funktion, die in derselben Datei wie der Aufruf steht.
3. Programm im aktuellen Verzeichnis.
4. *private function*.
5. Programm im Suchpfad.

Bei gefundenem Namen wird die Suche beendet.

Suchpfad

Der Suchpfad (Variable `path`) enthält Verzeichnisse in einer geordneten Liste.

- Abarbeitung erfolgt der Ordnung gemäss.
- Suchpfade hinzufügen:

```
addpath <pfadname>
```

- Suchpfade entfernen:

```
rmpath <pfadname>
```

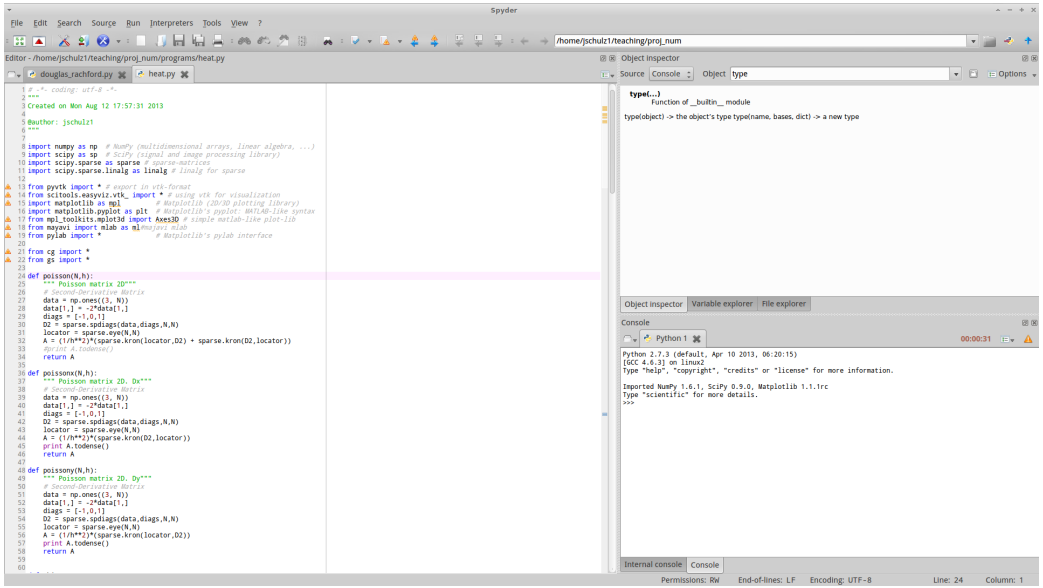
Bedienung: Kurzreferenz

- `doc <name>`
  öffnet grafisches Hilfefenster zum jeweiligen Programm.
- F5
  führt offene Datei im command window aus.
- F9
  führt markierte Code-Zeilen aus.
- clear
  löscht Variablen im Workspace
- `lookfor <name>`
  Suche nach `name` in den Kommentaren zu den Funktionen (auch: grafisches Hilfefenster).
- `what`
  m-Files im aktuellen Verzeichnis.
- `type <name>`
  Inhalt von `name.m` (Command Window).
- `which <name>`
  absoluter Pfad der Datei, in dem die Funktion `name` gespeichert ist.

Aufbau

Spyder Fenster-Aufbau

Starten von Spyder: Eingabe von `spyder &` (in einem Terminal).



- Editor: Dateimanipulation
- Console: Befehlseingabe und Standardausgabe
- Object Inspector: Hilfe und Variablenansicht
- Grafik: in separaten Fenstern

Struktur von Skript-Files

- Skript-Files bestehen aus einer Sequenz von Befehlen, die nacheinander abgearbeitet werden, sowie von definierten Funktionen
- enthält geladene Module.
- operiert auf globalen Variablen.
- Gestartet wird das Programm name.py durch F5 im Editor oder in einem terminal.

Funktionen

Eine Funktion kann man wie folgt definieren:

```
def <name>(<Argumente>) :
    """ Beschreibung """
    <Code Block>
    return <Rueckgabe>
```

- Variablen lokal.
- Call-by-reference.
- Objekt-Methoden:
  Objekte besitzen Funktionen, sogenannte Objekt-Methoden. Ein Objekt kennt alle auf sich selbst anwendbaren Funktionen.

```
f = 3.14
f.is_integer()
```

Priorität beim Programmaufruf

Beispiel-Programmaufruf

```
name
```

Testet ob,..

1. Variable
2. Funktion

Bei gefundenem Namen wird die Suche beendet.

Bedienung : Kurzreferenz

Programm: spyder

- <name>?
  öffnet Hilfe zur jeweiligen Funktion.
- F5
  führt offene Datei in dedizierter oder vorhandener Shell aus.
- F9
  führt markierte Code-Zeilen aus.
- <name>.TAB
  zeigt alle Objektmethoden.

Aufbau

Graph eines Polynoms

Aufgabe:

Zeichnen Sie den Graphen eines Polynoms

$$p(x) = \sum_{i=0}^{N} a_i x^i, \quad a_i \in \mathbb{R}$$

Zu Werten $(x_i)_{i=1}^n$ muß man $(p(x_i))_{i=1}^n$ berechnen.

Skalare Version

matlab

```
function y=ausw_poly1(a,x)

n = length(a);
aux_vector = x.^(0:n-1);
y = aux_vector*transpose(a);
```

python

```
def ausw_poly1(a,x):
    n = len(a)
    aux_vector = x**np.array(range(0,n))
    return dot(aux_vector,a)
```

Vektorielle Version

matlab

```
function y = ausw_poly2(a,x)
n = length(a);
k = length(x);
A = repmat(transpose(x),1,n);
B = repmat(0:(n-1),k,1);
y = (A.^B)*transpose(a);
```

python

```
def ausw_poly2(a,x):
    n = len(a)
    k = len(x)
    xm = np.array([x])
    A = sp.repeat(xm.T, n,1)
    B = sp.repeat(np.array([range(0,n)]), k,0)
    return dot(A**B,a)
```

Plotten des Polynoms

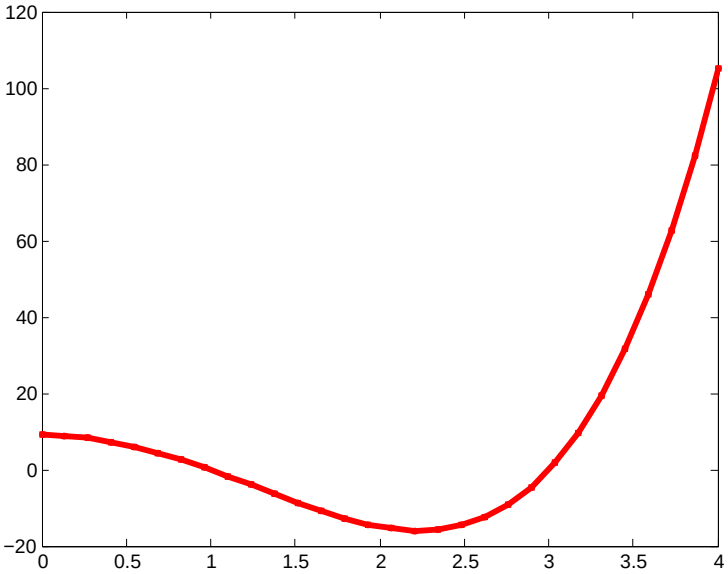
matlab

```
a = [9 0 -10 0 1]; % Koeffizienten

x = linspace(0,4,30); % Betrachte [0,4]
y = ausw_poly2(a,x);
% Plotten
plot(x,y,'r*-','LineWidth',3,'MarkerSize',4)
```

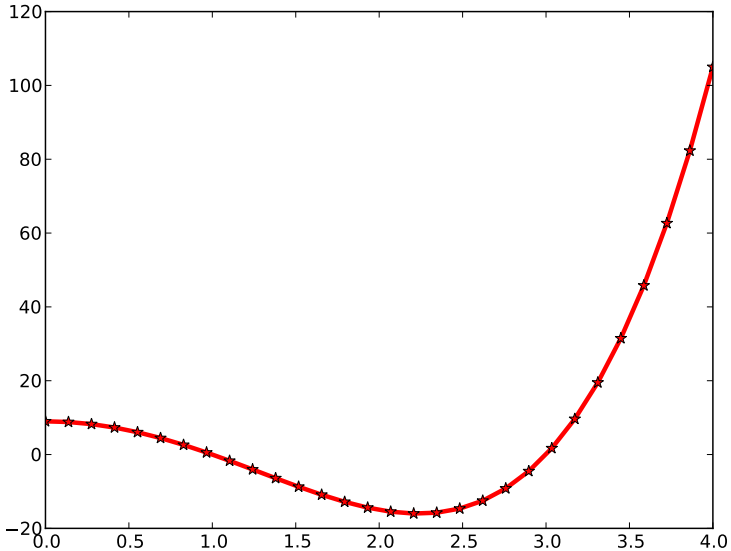
python

```
a = np.array([9,0,-10,0,1])

x = np.linspace(0,4,30) # Betrachte [0,4]
y = ausw_poly2(a,x)
#Plotten
plot(x,y,'r*-',linewidth=3,markersize=8)
```

Plotten des Polynoms



Matlab



Python

Aufbau

Bezeichner

- Bezeichner sind Namen, wie z.B. x oder f. Sie können im mathematischen Kontext sowohl Variablen als auch Unbestimmte repräsentieren.
- Bezeichner sind aus Buchstaben, Ziffern und Unterstrich _ zusammengesetzt.
- Man unterscheidet zwischen Groß- und Kleinschreibung.
- Bezeichner dürfen nicht mit einer Ziffer beginnen.

Beispiele

- zulässige Bezeichner: x, f, x23, _x_1
- unzulässige Bezeichner: 12x, p~, x>y, Das System

Wert eines Bezeichners

- Der Wert eines Bezeichners ist ein Objekt eines bestimmten Datentyps.
- Ein Datentyp ist durch seine Eigenschaften gegeben.
  Beispiel: ganze Zahlen (Integers), Zeichenketten (Strings), Gleitkommazahlen (float) ...
- Matlab: 2D-Arrays vom Typ Double vorherrschend
- Python: integer, float, numpy.ndarray, lists,..
- Ein Objekt ist eine Instanz (Einheit) eines Datentyps.

Zuweisungsoperator =

```
<bezeichner> = <wert>
```

Zuweisung des Wertes wert zu dem Bezeichner bez.

- func(arg)=expr(arg): Definition der Funktion func mit dem Argument arg und Zuweisung des Ausdrucks expr zu (abhängig von arg)
- **Warnung:** Unterscheiden Sie stets zwischen dem Zuweisungsoperator = und dem logischen Operator ==.
- Löschen von Zuweisungen/Variablen.
  - Python: %clear <bezeichner>
  - Matlab: clear <bezeichner>

Python: Listen und Tuple

- Eine Liste ist in Python mit [.. , ..] gekennzeichnet

```
liste = [21,22,24,23]
liste.sort(); liste
```

```
[21, 22, 23, 24]
```

- Ein Tuple ist in Python mit (.. , ..) gekennzeichnet

```
tuple = (liste[0], liste[2])
tuple, tuple[0]
```

```
(( 21, 24), 21)
```

- Liste von ganzen Zahlen von a bis b

```
range(a,b+1)
```

Aufbau

Aufbau

Vektoren I

- Erzeugen 'per Hand'

```
b = [1 2 4]
```

```
b = np.array([1,2,4])
```

- Abfragen der Einträge von *b*

```
b(2)
```

```
b[1]
```

Index $\equiv$ Position im Vektor

Achtung: *Matlab*: Indizes beginnen immer mit 1!

Python: Indizes beginnen immer mit 0!

Doppelpunkt - Notation

`x:s:z` erzeugt einen Vektor der Form

$$(x, x+s, x+2s, x+3s, \ldots, z).$$

```
>> a = 2:11
a =
 2   3   4   5   6   7   8   9   10   11

>> c = -2:0.75:1
c =
 -2.0000 -1.2500 -0.5000 0.2500 1.0000
```

Vektoren II

- `length(a)`(Matlab) `len(a)`(Python)
  Länge des Vektors *a* an.
- `linspace(x1,x2,N)`
  Vektor
  $$x1, x1 + \frac{x2 - x1}{N - 1}, x1 + 2\frac{x2 - x1}{N - 1}, \ldots, x2$$
  der Länge *N*.

```
linspace(1,2,4)
```

```
ans =
    1.0000    1.3333    1.6667    2.0000
```

- `logspace(x1,x2,N)`
  wie `linspace`, nur logarith. Skalierung

Aufbau

Erzeugen von Matrizen

- Erzeugen 'per Hand'

```
B = [1 3 4; 5 6 7]
```

```
B = np.array([[1,3,4],[5,6,7]])
#alternativ (Unterschiedlicher Datentyp!)
B = matrix([[1,3,4],[5,6,7]])
```

- `eye(n,m)`
  ($n \times m$)-EinheitsMatrix)

```
eye(2,3)
```

```
ans =
     1     0     0
     0     1     0
```

(1 auf der Hauptdiagonalen und 0 sonst).

Erzeugen von Matrizen II

- `zeros(n,m)`(Matlab) zeros((n,m))(Python)
  $(n \times m)$- Matrix mit 0 als Einträge.
- `ones(n,m)`(Matlab) ones((n,m))(Python)
  $(n \times m)$- Matrix mit 1 als Einträge.
- Blockmatrizen

```
C = [B zeros(2,2); eye(2,3) eye(2,2)]
```

```
C = vstack([hstack([B, zeros((2,2))] ) ,hstack([eye
    (2,3), eye(2,2)]) ])
```

```
C =
     1     3     4     0     0
     5     6     7     0     0
     1     0     0     1     0
     0     1     0     0     1
```

Achtung: Matrizen in einer Zeile müssen dieselbe Zeilenanzahl haben und Matrizen in einer Spalte dieselbe Spaltenanzahl.

Erzeugen von Matrizen III

- `repmat(A,n,m)`(Matlab) tile (A,(n,m)(Python)
  Blockmatrix mit $(n \times m)$ aus A bestehenden Blöcken zusammenhängen

```
D = repmat(B,1,2)
```

```
D = tile(B,(1,2))
```

```
D =
     1     3     4     1     3     4
     5     6     7     5     6     7
```

- `diag(v,k)`
  Matrix der Größe $(n+|k|) \times (n+|k|)$ mit den Einträgen des Vektors v (Länge n) auf der k-ten Nebendiagonalen.

Aufbau

Beispiel- und Spezial-Matrizen

- Beispiel

```
E = vander(linspace(1,3,3))
```

```
E =
     1     1     1
     4     2     1
     9     3     1
```

- Hilbert-Matrix: `hilb`(Matlab) und scipy.linalg.hilbert (Python)
- Hadamard-Matrix: `hadamard` (Matlab) und scipy.linalg.hadamard (Python)
- use.

Matlab: Zugriff auf Matrizen

```
A = [1 2 3; 4 5 6; 7 8 9]
```

```
A =
     1     2     3
     4     5     6
     7     8     9
```

Abfragen eines Eintrags

```
>> A(2,1)
ans =
     4
```

Abfrage von Blöcken

```
>> A(2:3,1:2)
ans =
     4     5
     7     8
```

Abfrage einer Zeile

```
>> A(2,:)
ans =
     4     5     6
```

Abfrage mehrerer Zeilen

```
>> A([1 3],:)
ans =
     1     2     3
     7     8     9
```

Python: Zugriff auf Matrizen

```
A = np.array([[1,2,3],[4,5,6],[7,8,9]])
```

```
A =
     1     2     3
     4     5     6
     7     8     9
```

Abfragen eines Eintrags

```
>>> A[1,0]
ans =
     4
```

Abfrage von Blöcken

```
>>> A[1:3,0:2]
ans =
     4     5
     7     8
```

Abfrage einer Zeile

```
>>> A[,:]
ans =
     4     5     6
```

Abfrage mehrerer Zeilen

```
>>> A[(0,2),:]
ans =
     1     2     3
     7     8     9
```

Aufbau

Matrizenoperationen

Standard-Matrix Operationen +,-,*

```
A = [1 2; 3 4]; B = 2*ones(2,2);
```

```
A = np.array([[1,2],[3,4]]); B = 2*ones((2,2))
```

Multiplikation

```
>>  A*B
ans =

     6     6
    14    14
```

```
>>> dot(A,B)
[[  6.,   6.],
 [ 14.,  14.]]
```

Addition

```
>> A+B
ans =

     3     4
     5     6
```

```
>>> A + B
([[ 3.,  4.],
  [ 5.,  6.]])
```

Subtraktion

```
>> A-B
ans =

    -1     0
     1     2
```

```
>>> A - B
([[ -1.,  0.],
  [ 1.,  2.]])
```

Andere Operatoren

- `A\B`(Matlab) solve(A,B)(Python)
  Lösung X von `A*X=B`.
- `A/B`(Matlab) solve(A.T,B.T)(Python)
  Lösung X von `X*A=B`.
- `inv(A)`
  Inverse von A.
- `A'`(Matlab) A.conj().T(Python)
  komplex Transponierte von A.
- `A.'`(Matlab) A.T(Python)
  Transponierte von A.
- `A^z`(Matlab) power(A,z)(Python)
  (quadratische Matrizen) $\underbrace{A * A * \cdots * A}_{z-mal}$
- `size(A)`(Matlab) A.shape(Python)
  Größe einer Matrix A .

Matlab: Punktnotation

```
A = [1 2; 3 4]; B = 2*ones(2,2);
```

- $C(i,j) = A(i,j) * B(i,j)$.

```
>> C = A.*B
C =
     2     4
     6     8
```

- $C(i,j) = A(i,j)/B(i,j)$.

```
>> C = A./B
C =
    0.5000    1.0000
    1.5000    2.0000
```

Matlab: Punktnotation

- $C(i,j) = B(i,j)/A(i,j)$.

```
>> C = A.\B
C =
    2.0000    1.0000
    0.6667    0.5000
```

- $C(i,j) = A(i,j)^{B(i,j)}$

```
>> C = A.^B
C =
     1     4
     9    16
```

Achtung: Dimension von A und B gleich.
Matrizen können durch Skalare ersetzt werden, z.B. `A.^2`.

Skalarprodukt

- Vektoren $a = (a_1, \ldots, a_n)$, $b = (b_1, \ldots b_n)$
- Skalarprodukt: ab^t
- Summe der Einträge von a: $(1, \ldots, 1)a^t$

Beispiel:

```
>> a=1:100; b=linspace(0,1,100);
>> a*transpose(b)
   3.3667e+03
>> ones(1,100)*transpose(a)
        5050
```

```
>>> a=linspace(1,100,100); b=linspace(0,1,100)
>>> dot(a,b)
3366.666666666667
>>> dot(ones((1,100)),a)
array([ 5050.])
```

Wichtig: komponentenweise Multiplikation: *(Python) .*(Matlab)!