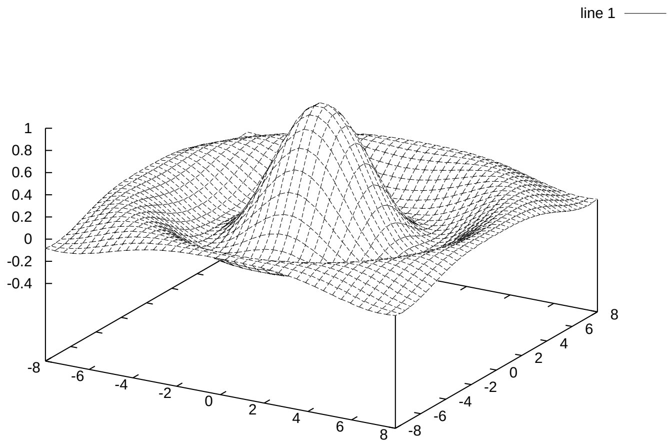
Einführung in GNU Octave

Hubert Selhofer, mit Änderungen von Marcel Oliver

2001/11/09



Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen

1.1 Was ist Octave?

Octave ist eine interaktive Scriptsprache, die speziell für vektorisierbare Berechnungen optimiert ist und dabei Standardroutinen der numerischen Mathematik (z.B. EISPACK oder LAPACK) auf einfache Weise zugänglich macht.

Der Syntax von Octave ist dem proprietären Matlab sehr ähnlich, d.h. ein Octave Programm kann meist auch von Matlab ausgeführt werden. Die Rückwärtskompatibilität ist nicht immer gegeben, da Matlab besonders im Grafikbereich um einen erheblich größeren Funktionsumfang verfügt.

1.2 Hilfe!

- `help` listet alle Befehle und internen Variablen auf.
- `help name` gibt Hilfetext zur Variable oder Funktion „name“ aus.

Beispiel:

```
octave:1> help eig
```

1.3 Eingabekonventionen

- Alle Befehle können sowohl interaktiv, als auch über Skriptdateien eingegeben werden.

- Scripts sind Textdateien mit dem Suffix `.m`. Sie werden durch Aufruf des Dateinamens ohne Suffix eingelesen, und verhalten sich so, als ob ihr Inhalt Zeile für Zeile am Prompt eingegeben würde.
- `;` trennt mehrere Befehle in einer Zeile, und unterdrückt die Zusgabe von Werten.
- `,` trennt Befehle, gibt aber Werte aus.
- `...` am Zeilenende bedeutet, dass der Ausdruck in der nächsten Zeile weitergeht.
- Kommentare werden mit `%` eingeleitet.
- Octave unterscheidet zwischen Groß- und Kleinbuchstaben.

1.4 Variablen und Standardoperationen

- `varname = expression` weist `varname` den Wert `expression` zu.
- Es gibt die „üblichen“ Funktionen `+`, `-`, `*`, `/`, `^`, `sin`, `cos`, `exp`, `acos`, `abs`, usw.
- Die elementaren logischen Operatoren sind:

`<`	kleiner	`<=`	kleiner oder gleich	`&`	und
`>`	größer	`>=`	größer oder gleich	`|`	oder
`==`	gleich	`<>`	ungleich	`~`	nicht

Zur Diagnose von benutzerdefinierten Objekten sind folgende Befehle hilfreich:

- `whos` zeigt alle definierten Variablen und Funktionen (siehe Abschnitt 3.1) an.
- `clear name` löscht `name` aus dem Speicher; falls „name“ nicht angegeben wird, werden *alle* Variablen und Funktionen gelöscht.
- `type name` gibt die Variable oder Funktion `name` am Bildschirm aus.

Beispiele:

```
octave:1> x12 = 1/8, long_name = 'Ein String'
x12 = 0.12500
long_name = Ein String
octave:2> sqrt(-1)-i
ans = 0
octave:3> x = sqrt(2); sin(x)/x
ans = 0.69846
```

Und hier ein Script `doless`, der in der Datei `doless.m` gespeichert ist:

```
eins = 1;
zwei = 2;
drei = eins + zwei;
```

Aufruf des Scripts:

```
octave:1> doless
octave:2> whos
*** local user variables:
prot  type              rows   cols  name
====  ====              ====   ====  ====
 wd   real scalar          1      1  drei
 wd   real scalar          1      1  eins
 wd   real scalar          1      1  zwei
```

2 Vektor- und Matrixoperationen

Matrizen und Vektoren sind die wichtigsten Grundbausteine zur Programmierung in Octave.

2.1 Vektoren

- Zeilenvektor $v = (1, 2, 3)$:

  `v = [ 1 2 3 ]`

- Spaltenvektor: $v = (1, 2, 3)^T$:

  `v = [ 1; 2; 3 ]`

- Automatische Erzeugung von Vektoren mit konstantem Inkrement:

  `Anfang[:Inkrement]:Ende`

Beispiele:

```
octave:1> x = 3:6
x =
  3  4  5  6
octave:2> y = 0:.15:.7
y =
0.00000  0.15000  0.30000  0.45000  0.60000
octave:3> z = pi:-pi/4:0
z =
3.14159  2.35619  1.57080  0.78540  0.00000
```

2.2 Matrizen

Eine Matrix $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$ wird erzeugt durch:

```
octave:1> A = [ 1 2; 3 4]
A =
  1  2
  3  4
```

Matrizen können folgenderweise aus Teilmatrizen zusammengesetzt werden:

```
octave:2> b = [5; 6];
octave:3> M = [A b]
M =

  1  2  5
  3  4  6
```

Für einige wichtige $(m \times n)$-Matrizen existieren eigene Befehle. Falls m gleich n ist, muß nur ein Argument angegeben werden.

- `eye(m,n)` erzeugt eine Matrix mit 1-ern auf der Hauptdiagonale. Im Spezialfall $m = n$ ergibt sich die Einheitsmatrix.
- `zeros(m,n)` erzeugt eine Nullmatrix der Dimension $(m \times n)$.
- `ones(m,n)` erzeugt eine Matrix der Dimension $(m \times n)$ mit $a_{ij} = 1 \ \forall i, j$.
- `rand(m,n)` erzeugt eine Zufallsmatrix der Dimension $(m \times n)$ mit gleichverteilten Einträgen. Andere Verteilungen siehe `help randn`.

2.3 Grundlegende Operationen

- `+`, `-` und `*` bezeichnen Matrixaddition, -subtraktion und -multiplikation
- `A'` transponiert und konjugiert `A`.
- `A.'` transponiert `A`.

Beispiele:

```
octave:1> A = [1 2; 3 4]; B = 2*ones(2,2);
octave:2> A+B, A-B, A*B
ans =
  3  4
  5  6
ans =
  -1   0
   1   2
ans =
   6   6
  14  14
```

2.4 Elementweise Operationen

Während z.B. `*` die standard Matrixmultiplikation bezeichnet, gibt es alle Operatoren mit vorangestelltem Punkt für elementweise Verknüpfung: `.*`, `./`, `.^`, u.s.w.

Beispiele:

```
octave:1> A = [1 2; 3 4]; A.^2  % elementweise Potenz
ans =

   1   4
   9  16

octave:2> A^2  % Zum Vergleich die matrixweise Potenz
ans =

   7  10
  15  22
```

2.5 Indizierung und Slicing

- `v(k)` ist das k-te Element des Zeilen- oder Spaltenvektors v.
- `A(k,l)` ist das Matrixelement a_{kl}.
- `v(m:n)` ist das "Slice" des Vektors v vom m-ten bis zum n-ten Eintrag.
- `A(k,:)` ist die k-te Zeile der Matrix A.
- `A(:,l)` ist die l-te Spalte der Matrix A.

Bestimmung der Größe:

- `length(v)` gibt die Länge des Vektors v zurück.
- `[Zeilen,Spalten] = size(A)` gibt die Anzahl der Zeilen und Spalten von A zurück.

Änderung der Gestalt:

- `reshape(A,m,n)` formt `A` in eine $(m \times n)$-Matrix um.
- `diag(A)` liefert die Diagonale a_{jj} der Matrix `A` in einem Spaltenvektor.
- `diag(v)` erzeugt eine Matrix mit dem Vektor `v` auf der Hauptdiagonalen.
- `diag(v,k)` erzeugt eine Matrix mit dem Vektor `v` in der `k`-ten Nebendiagonalen.
- `A(k,:) = zv` weist der `k`-ten Zeile von `A` den Zeilenvektor `zv` zu.
- `A(k,:) = []` löscht die `k`-te Zeile aus `A`.
- `A(:,k) = sv` weist der `k`-ten Spalte von `A` den Spaltenvektor `sv` zu.
- `A(:,k) = []` löscht die `k`-te Spalte aus `A`.

Beispiele:

```
octave:1> A = [1 2 3; 4 5 6]; v = [7; 8];
octave:2> A(2,3) = v(2)
A =

  1  2  3
  4  5  8

octave:3> A(:,2) = v
A =

  1  7  3
  4  8  8

octave:4> A(1,1:2) = v'
A =

  7  8  3
  4  8  8
```

2.6 Lösung linearer Gleichungssysteme

- `A\b` löst die Gleichung $Ax = b$.

Falls A eine $(n \times n)$-Matrix ist, wird Gaußelimination verwendet, sonst wird via QR-Zerlegung eine Lösung im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate berechnet. Ist A schlecht konditioniert oder singulär, wird eine Warnung ausgegeben.

2.7 Inverse, Zerlegungen, Eigenwerte, etc.

- `B = inv(A)` berechnet die Inverse von A.
- `[L,U,P] = lu(A)` berechnet eine LU-Zerlegung $LU = PA$.
- `[Q,R] = qr(A)` berechnet die QR-Zerlegung $QR = A$.
- `R = chol(A)` berechnet die Choleskyzerlegung von A.
- `S = svd(A)` berechnet die Singulärwerte von A.
- `H = hess(A)` bringt A in Hessenbergform.
- `E = eig(A)` berechnet alle Eigenwerte von A.
- `[V,D] = eig(A)` berechnet eine Diagonalmatrix D, die die Eigenwerte enthält und eine Matrix V mit den dazugehörigen Eigenvektoren. Es gilt also $AV = VD$.
- `norm(X,p)` berechnet die p-Norm des Vektors X. Falls X eine Matrix ist, kann p die Werte `1`, `2` oder `inf` haben. Der Default ist $p = 2$.
- `cond(A)` berechnet die Konditionszahl von A in 2-Norm.

Viele dieser Befehle unterstützen weitere Optionen. Diese können Sie mit `help funcname` erfahren.

2.8 Test auf Nulleinträge

- `[i,j,v] = find(A)` findet die Indizes aller Elemente $\neq 0$ in `A` Es gilt: $A_{i(l),j(l)} = v_l \neq 0$.
- `any(A)` ist 1, falls `A` Elemente $\neq 0$ enthält. Bei Matrizen operiert `any` auf den Spalten.

3 Kontrollstrukturen

3.1 Funktionen

Traditionell sind Funktionen ebenfalls Textdateien mit Suffix `.m`. Im Unterschied zu Skripts können Funktionen mit Argumenten aufgerufen werden, und alle innerhalb der Funktion verwendeten Variablen sind *lokal* (sie beeinflussen die vorher definierten Variablen nicht).

Beispiel: Eine Funktion `f`, die in der Datei `f.m` gespeichert ist.

```
function y = f (x)
  y = cos(x/2)+x;
end
```

Bemerkung: In Octave kann man—sinnvollerweise—beliebig viele Funktionen in einer Skriptdatei definieren. Matlab hingegen lässt strikt nur eine Funktion pro `.m` Datei zu, und der Funktionsname muss mit dem Dateinamen übereinstimmen. Falls Kompatibilität mit Matlab wichtig ist, sollte diese Einschränkung auch auf Octave-Programme angewandt werden.

Beispiel mit zwei Funktionswerten: Eine Funktion `dolittle`, die in der Datei `dolittle.m` gespeichert ist.

```
function [out1,out2] = dolittle (x)
  out1 = x^2;
  out2 = out1*x;
end
```

Aufruf der Funktion:

```
octave:1> [x1,x2]=dolittle(2)
x1 = 4
x2 = 8
octave:2> whos
*** currently compiled functions:
prot  type               rows   cols  name
====  ====               ====   ====  ====
 wd   user function         -      -  dolittle
*** local user variables:
prot  type               rows   cols  name
====  ====               ====   ====  ====
 wd   real scalar           1      1  x1
 wd   real scalar           1      1  x2
```

Offensichtlich waren die beiden Variablen `out1, out2` in `dolittle` lokal. Eine vorher definierte Variable `out1` oder `out2` wird durch den Aufruf der Funktion nicht beeinflußt.

3.2 Globale Variablen

`global name` deklariert `name` als globale Variable.

Beispiel: Eine Funktion `foo` in der Datei `foo.m`:

```
function out = foo(arg1,arg2)
global N % verwende N als globale Variable
<Berechnung>
end
```

Wird N in der Funktion verändert, ändert das auch den ursprünglichen Wert von N im „workplace“.

3.3 Schleifen

Die Syntax von *for*- und *while*-Schleifen wird an folgenden Beipielen klar:

```
for n = 1:10
  [x(n),y(n)]=dolittle(n);
end

while t<T
  t = t+h;
end
```

For-Schleife rückwärts:

```
for n = 10:-1:1
...
```

3.4 Verzweigungen

Bedingte Verzweigungen lassen sich so programmieren:

```
if x==0
  error('x ist 0!');
else
  y = 1/x;
end

switch pnorm
  case 1;
    sum(abs(v))
  case inf;
    max(abs(v))
  otherwise
    sqrt(v'*v)
end
```

3.5 Funktionen von Funktionen

- `eval(string)` wertet `string` als Octave-Code aus.
- `feval(funcname,arg1,...)` ist äquivalent zum Aufruf von `funcname` mit Argumenten `arg1,...`.

Beispiel Berechne mit der Mittelpunktsregel:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f\left(a + (j+\frac{1}{2})\frac{b-a}{N}\right)$$

Die Funktionen `gauss.m` und `mpr.m` seien folgendermaßen definiert:

```
function y = gauss(x)
  y = exp(-x.^2/2);
end

function S = mpr(fun,a,b,N)
  h = (b-a)/N;
  S = h*sum(feval(fun,[a+h/2:h:b]));
end
```

Jetzt kann man die Funktion `gauss` durch folgenden Aufruf integrieren:

```
octave:1> mpr('gauss',0,5,500)
```

3.6 Effizienzüberlegungen

Schleifen und Funktionsaufrufe, insbesondere über den Umweg `feval`, sind sehr teuer. Deswegen möglichst alle Operationen vektorisieren.

Beispiel: Wir programmieren die Mittelpunktsregel aus dem vorherigen Abschnitt mit einer *for*-Schleife (Datei `mpr_langsam.m`):

```
function S = mpr_langsam(fun,a,b,N)
  h = (b-a)/N; S = 0;
  for k = 0:(N-1),
    S = S + feval(fun,a+h*(k+1/2));
  end
  S = h*S;
end
```

Man vergleiche die Ausführungszeiten:

```
octave:1> t = cputime;
> Int1=mpr('gauss',0,5,500); t1=cputime-t;
octave:2> t = cputime;
> Int2=mpr_langsam('gauss',0,5,500); t2=cputime-t;
octave:3> Int1-Int2, t2/t1
ans = 0
ans = 45.250
```

3.7 Ein- und Ausgabe

- `save datei var1 [var2 ...]` speichert die Variablen `var1` usw. in der Datei mit dem Namen `datei` ab.
- `load datei` liest die Datei `datei`.
- `fprintf(string[,var1,...])` lehnt sich stark an den Syntax in C an, siehe `man fprintf` unter Unix.
- `format [long|short]` vergrößert oder verkleinert die Anzahl der ausgegebenen Kommastellen. Der Aufruf ohne Argument stellt das Standardverhalten wieder her.

Beispiel:

```
octave:1> for k = .1:.2:.5,
> fprintf('1/%g = %10.2e\n',k,1/k); end
1/0.1 =   1.00e+01
1/0.3 =   3.33e+00
1/0.5 =   2.00e+00
```

4 Grafik

4.1 2D-Grafiken

- `plot(x,y[,fmt])` zeichnet eine Linie durch die Punkte (x_j, y_j). Mit dem String `fmt` können Linienart und Farbe gewählt werden (siehe `help plot`).
- `semilogx(x,y[,fmt])` Syntax wie `plot`, die x-Achse wird logarithmisch gezeichnet.
- `semilogy(x,y[,fmt])` Syntax wie `plot`, die y-Achse wird logarithmisch gezeichnet.
- `loglog(x,y[,fmt])` Syntax wie `plot`, beide Achsen werden logarithmisch gezeichnet.

Soll eine Funktion $y = f(x)$ geplottet werden, geht man praktischerweise folgendermassen vor:

1. Man erzeugt einen Vektor mit den x-Koordinaten aller zu plottenden Punkte:

   ```
   x = x_min:schrittweite:x_max;
   ```

   (Siehe auch Abschnitt 2.1.)

2. Man erhält einen Vektor mit den dazugehörigen y-Werten, indem man die funktion f elementweise auf den x-Vektor wirken lässt:

   ```
   y = f(x);
   ```

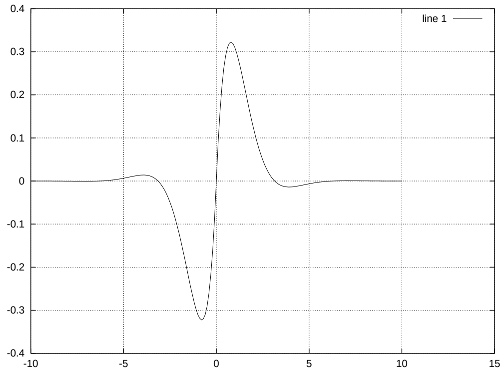
Wichtig: Damit f elementweise operiert, müssen die Operatoren `.+`, `.-`, `.^` usw. anstelle der üblichen `+`, `-` und `^` verwendent werden! (Siehe Abschnitt 2.4.)

3. Jetzt kann man den Plot-Befehl aufrufen:

```
plot(x,y); grid; replot
```

Beispiel:

```
octave:1> x = -10:.1:10;
octave:2> y = sin(x).*exp(-abs(x));
octave:3> plot(x,y); grid; replot
```

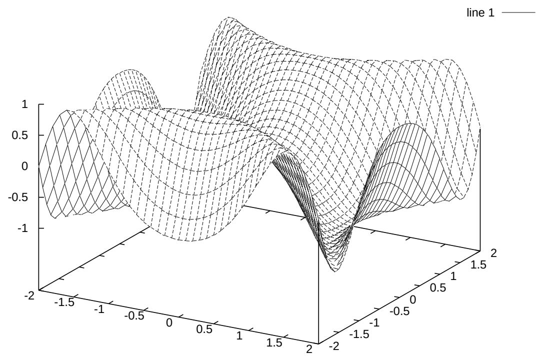


4.2 3D-Grafiken:

- `[xx,yy] = meshgrid(x,y)` erzeugt aus den Vektoren x und y Gitterdaten.
- `mesh(x,y,z)` zeichnet eine Fläche in 3D.

Beispiel:

```
octave:1> x = -2:0.1:2;
octave:2> [xx,yy] = meshgrid(x,x);
octave:3> z = sin(xx.^2-yy.^2);
octave:4> mesh(x,x,z);
```



4.3 Befehle für 2D- und 3D-Grafiken:

- `title(string)` schreibt `string` als Titelzeile in die Grafik.
- `xlabel(string)` beschriftet die x-Achse mit `string`.
- `ylabel(string)` beschriftet die y-Achse mit `string`.
- `zlabel(string)` beschriftet die z-Achse mit `string`.
- `axis(v)` legt den Ausschnitt fest; `v` ist ein Vektor der Form `v = (xmin, xmax, ymin, ymax[, zmin zmax])`.
- `hold [on|off]` legt fest, ob die nächste Grafikausgabe die alte Grafik löschen soll.
- `clg` löscht das Grafikfenster.
- `replot` erzwingt eine erneute Ausgabe der aktuellen Grafik. Dies ist in Octave bei Änderungen einer bestehenden Grafik nötig. (Dieser Befehl existiert nur in Octave und ist auch nur da notwendig.)

5 Übungen

5.1 Lineare Algebra

Erzeugen Sie eine Matrix A und einen Vektor b mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} 36 \\ 88 \end{pmatrix}.$$

Lösen Sie nun das Gleichungssystem $Ax = b$ durch Eingabe von 4 Zeichen. Berechnen Sie danach die LU- und QR-Zerlegung sowie die Eigenwerte mit Eigenvektoren von A. Rechnen Sie die Choleskyzerlegung von $A^T A$ aus, und überzeugen Sie sich, dass $\mathrm{cond}(A^T A) = \mathrm{cond}(A)^2$ ist.

Lösungsvorschlag:

```
A = reshape(1:4,2,2).'; b = [36; 88];
A\b
[L,U,P] = lu(A)
[Q,R] = qr(A)
[V,D] = eig(A)
A2 = A.'*A;
R = chol(A2)
cond(A)^2 - cond(A2)
```

5.2 Timing

Berechnen Sie ein Matrix-Vektor-Produkt einer (100×100)-Zufallsmatrix mit einem Zufallsvektor, indem Sie einerseits die eingebaute Funktion `*`, andererseits *for*-Schleifen verwenden. Vergleichen Sie die Rechenzeiten beider Lösungen.

Lösungsvorschlag:

```
A = rand(100); b = rand(100,1);
t = cputime;
v = A*b; t1 = cputime-t;
w = zeros(100,1);
t = cputime;
for n = 1:100,
  for m = 1:100
    w(n) = w(n)+A(n,m)*b(m);
  end
end
t2 = cputime-t;

norm(v-w), t2/t1
ans = 0
ans = 577.00
```

5.3 Stabilitätsfunktionen von BDF-Integratoren

Berechnen Sie alle Nullstellen des Polynoms

$$\frac{147}{60}\zeta^6 - 6\zeta^5 + \frac{15}{2}\zeta^4 - \frac{20}{3}\zeta^3 + \frac{15}{4}\zeta^2 - \frac{6}{5}\zeta + \frac{1}{6}$$

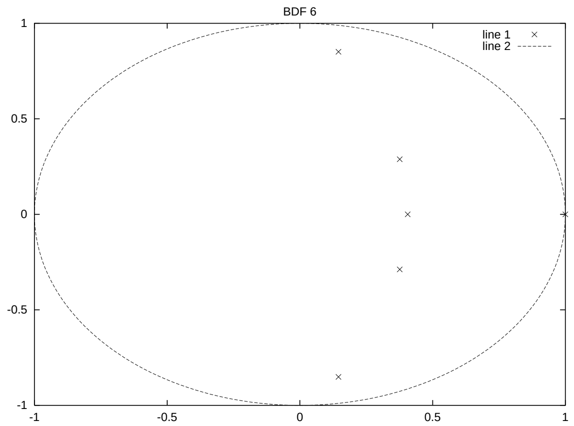
Hinweis: Verwenden Sie den Befehl `compan`.

Zeichnen Sie diese Nullstellen in der komplexen Ebene als Punkte ein, und fügen Sie einen Einheitskreis hinzu (Hinweis: `hold, real, imag`).

Lösungsvorschlag:

```
bdf6 = [147/60 -6 15/2 -20/3 15/4 -6/5 1/6];
R = eig(compan(bdf6));
plot(R,'+'); hold on
plot(exp(pi*i*[0:.01:2]));
```

```
if any(find(abs(R)>1))
  fprintf('BDF6 ist instabil\n');
else
  fprintf('BDF6 ist stabil\n');
end
```



5.4 3D-Plot

Zeichnen Sie den Graphen der Funktion

$$f(x, y) = \exp(-x^2 - y^2).$$

Lösungsvorschlag:

```
x = -3:0.1:3;
[xx,yy] = meshgrid(x,x);
z = exp(-xx.^2-yy.^2);
mesh(x,x,z);
title('exp(-x^2-y^2)');
replot;
```

5.5 Hilbertmatrix

Berechnen sie für die $(n \times n)$-Hilbertmatrix H $(n = 1, \ldots, 15)$ die Lösung des linearen Gleichungssystems $Hx = b$, $b =$ `ones(n,1)`. Berechnen Sie den Fehler und die Kondition der Matrix und zeichnen Sie die beiden in einem Fenster halblogarithmisch auf. (Hinweis: `hilb, invhilb`.)

Lösungsvorschlag:

```
err = zeros(15,1); co = zeros(15,1);
for k = 1:15
  H = hilb(k);
  b = ones(k,1);
  err(k) = norm(H\b-invhilb(k)*b);
  co(k) = cond(H);
```

```
end
semilogy(1:15,err,'r',1:15,co,'x');
```

5.6 Ausgleichsgerade

Berechnen Sie zu beliebig vorgegebenen Punkten (x_j, y_j), die durch zwei Vektoren x und y gegeben sind, die Ausgleichsgerade (im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate). Zeichnen Sie die Punkte und die Gerade.

Lösungsvorschlag:

```
function coeff = ausgl(x,y)
  n = length(x);
  A = [x ones(n,1)];
  coeff = A\y;
  plot(x,y,'x');
  hold on
  interv = [min(x) max(x)];
  plot(interv,coeff(1)*interv+coeff(2));
end
```

5.7 Trapezregel

Schreiben Sie ein Programm, das beliebige Funktionen f in einer Variablen auf einem Intervall $[a, b]$ numerisch integriert. Verwenden sie die Trapezregel ($h = (b - a)/N$):

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} f(a + jh) \right).$$

Verifizieren Sie in einem doppellogarithmischen Bild anhand einer beliebigen Funktion f, dass die Trapezregel Ordnung 2 hat.

Lösungsvorschlag:

```
function S = trapez(fun,a,b,N)
  h = (b-a)/N;
  % fy = feval(fun,[a:h:b]); besser:
  fy = feval(fun,linspace(a,b,N+1));
  fy(1) = fy(1)/2;
  fy(N+1) = fy(N+1)/2;
  S = h*sum(fy);
end

function y = f(x)
  y = exp(x);
end

for k=1:15;
  err(k) = abs(exp(1)-1-trapez('f',0,1,2^k));
```

```
end
loglog(1./2.^[1:15],err);
hold on;
loglog(1./2.^[1:15],err,'x');
title('Trapezregel, f(x) = exp(x)');
xlabel('Schrittweite');
ylabel('Fehler');
replot;
```