

Matemaatika vabavara programmid

Marek Kolk

Tartu Ülikool

2. mai, 2011

<http://math.ut.ee/~mkolk243/>

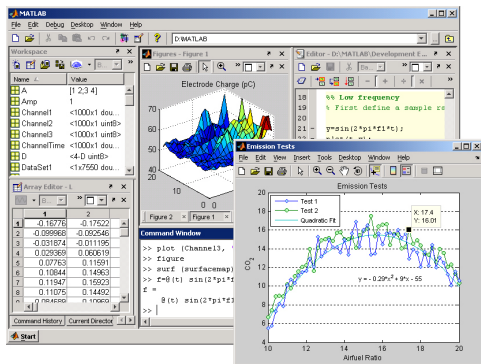
- 1 Programmide tutvustus (12 programmi)
- 2 Testülesanne (lihtne for-test)
- 3 Kiirustesti tulemused (Arvuti 2GB /1.8 GH)
- 4 Kommentaarid
- 5 Lisaviited

- 1 \$ **MatLab** 7.11 (7.12)
- 2 - **SciLab** 5.3.0 (5.3.1)
- 3 - **FreeMat** 4.0
- 4 - **GNU Octave** 3.2.4. + GUI Octave 1.0
- 5 - **Euler Math Toolbox** 11.4 (EuMathT)
- 6 - **R** 2.13.0
- 7 \$ **MathCad** 14 (15)
- 8 \$ **Maple** 11 (15)
- 9 - **Maxima** 5.20.1 (wxMaxima)
- 10 - **Sage** 4.6.2
- 11 - **Fortran**, projekt Force 2.0
- 12 - **IPython** 0.10.2 (Python 2.7.1)

MatLab 7.11 (7.12)

<http://www.mathworks.com>

Reklaamitakse kui kiiremat arvutusvahendit võrreldes C, C++, Fortraniga. Arendust alustati 1970ndate lõpust.



Kommertstarkvara

Vektorid ja maatriksid

500 USD + iga lisa

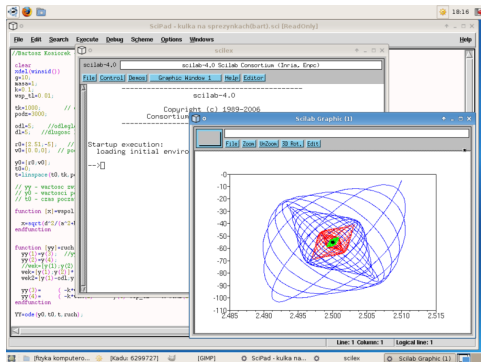
a' 200 USD

personaalne :
akadeemia, tudeng

SciLab 5.3.0 (5.3.1)

<http://www.scilab.org>

MatLabile sarnane süntaks, kasutajakonsool ja tööpõhimõte.
Arendust alustati 1990.



Vabavara

Vektorid ja matriksid

Matlabi kood → SciLab

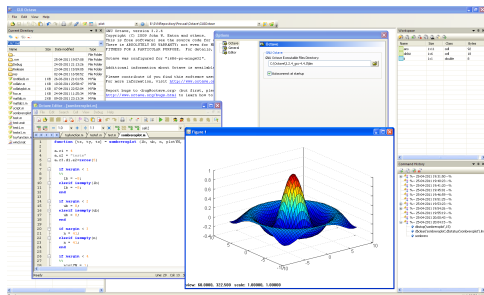
GNU Octave 3.2.4

GUI Octave 1.0 (Windowsi kasutajakonsool)

<http://www.gnu.org/software/octave/>

<http://sites.google.com/site/gui octave/>

MatLabile väga sarnane süntaks, kasutajakonsool ja tööpõhimõte.
Kasutajakonsool sarnane FreeMati omale. Arendust alustati 1988.



Vabavara

Vektorid ja maatriksid

Lihtne ja meeldiv disain

Avaneb kiiresti

Euler Math Toolbox 11.4

EuMathT

<http://eumat.sourceforge.net>

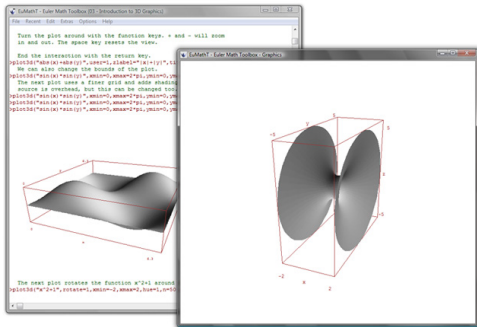
MatLabile sarnane kuid veidi erinev süntaks. Arendust alustati 1987.

Vabavara

Vektorid ja matriksid

Sisaldab Maximat

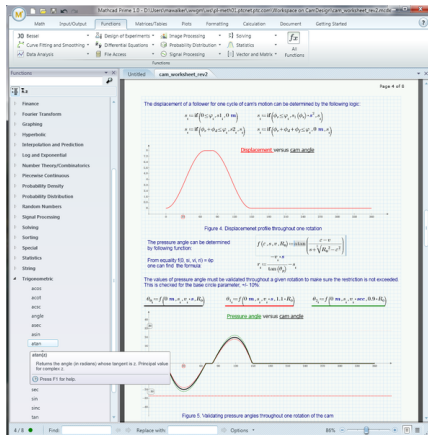
Avaneb kiiresti, kuid
nõrk disain ja ebamu-
gav



MathCad 14 (15)

<http://www.ptc.com/products/mathcad/>

Mõeldud eelkõige numbrilisteks arvutamisteks, kuid omab kompuuteralgebra vahendeid. Arendust alustati 1985.



Kommertstarkvara

1279 USD, 99 USD

Osaline CAS

WYSIWYG

Maxima 5.20.1

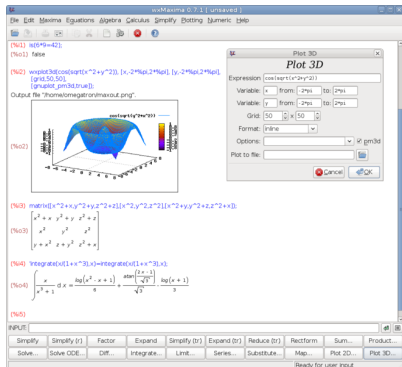
wxMaxima 0.8.4 (Windowsi kasutajakonsool)

<http://maxima.sourceforge.net>

<http://andrejv.github.com/wxmaxima/>

Lihtne alternatiiv programmidele Maple, Mathematica, Magma.

Maxima arendati 1982. aasta Macsyma versioonist.



Vabavara

CAS

Sage 4.6.2 SageMath <http://www.sagemath.org>

Avatud koodiga projekt, mis sisaldab mitmeid vabavara programme (IPython, Maxima, R, SymPy, NumPy, PARI, Singular jne - kokku u. 100 paketti). Loodud alternatiiviks programmidele Magma, Maple, Mathematica, Matlab. Avalikustati 2005.
SAGE (Software for Algebra and Geometry Experimentation)

The screenshot shows a web browser window with the SageMath interface. The page title is "Sage Notebook". The URL is "http://localhost:8080/home/admin/1/". The interface includes a navigation bar with links like "admin", "Logout", "Home", "Published", "New", "Info", "Help", "About", "Contact", "Feedback", "Share", "Publish". Below the navigation bar, there is a text input area containing the following code:

```

s = matrix(GF(2), 4, 4, [[1, 3, 2, 6, 5, 1, -2, -5, 3, 6, 4, 5, 5, 4, 5, 5]]
sm = s - s.transpose()

```

The output of the code is displayed below the input area:

```

x^4 - 11x^3 - 11x^2 + 120x - 203

```

Below the output, there is a section titled "m.eigenvalues()" which shows the eigenvalues of the matrix:

```

[1, -105/101372*a0^3 + 169/25343*a0^2 + 17965/101372*a0 + 28723/101372,
 -15/101372*a0^3 + 12/101372*a0^2 + 1589/101372*a0 + 16629/101372,
 101/25343*a0^3 - 931/25343*a0^2 - 261/25343*a0 - 4635/25343]

```

Below the eigenvalues, there is a section titled "m.image()" which shows the image of the matrix:

```

Vector space of degree 4 and dimension 4 over Rational Field
Basis matrix:
[[1 0 0 0]
 [0 1 0 0]
 [0 0 1 0]
 [0 0 0 1]]

```

Below the image, there is a section titled "m.ker()" which shows the kernel of the matrix:

```

Vector space of degree 4 and dimension 0 over Rational Field
Basis matrix:
[]

```

Vabavara

Pythoni baasil

Veebilehe konsool

Väga mahukas

IPython 0.10.2 (+ Python 2.7.1)

<http://ipython.scipy.org/moin/>

```

Shell - Konsole <2>
[~/test]~$ ipython
Python 2.7.1 (#1, Feb 24 2002, 16:21:58)
Type 'copyright', 'credits' or 'license' for more information.

IPython 0.10.2 -- An enhanced Interactive Python.
?                -> Introduction to IPython's features.
?object          -> Details about 'object'; object? also works, ?? prints more.
help             -> Python's own help system.
?magic          -> Information about IPython's 'magic' @ functions.

In [1]: ls --color
class.py  error.py*  qplot.py

In [2]: run error.py
Ramp time: 0.0

NameError                                Traceback (most recent call last)

/home/fperez/test/error.py
40
41     print 'speedup:', Rtime/RHtime
42
43 52 if __name__ == '__main__': main()
    global __name__ = '__main__', main = <function main>

/home/fperez/test/error.py in main()
43     array_num = zeros(size,'d')
44     for i in xrange(reps):
45         RampNum(array_num, size, 0.0, 1.0)
    global RampNum = <function RampNum>, array_num = array([ 0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.], size = 10)
46     RHtime = time.clock()-t0
47     print 'RampNum time:', RHtime

/home/fperez/test/error.py in RampNum(result=array([ 0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.], size=10, start=0.0, end=1.0)
27
28 def RampNum(result, size, start, end):
29     step = (ends-start)/(size-1)
    step = undefined, global ends = undefined, start = 0.0, size = 10
30     result[:] = arange(size)*step + start
31

NameError: global name 'ends' is not defined
WARNING: Failure executing file: 'error.py'

In [3]:

```

Vabavara

Kasutusel ka Sage all

Paralleelarvutus

Testproblem

$$N = 5000, \quad (1)$$

$$x_i = \frac{i}{N}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2)$$

$$S = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sin \left(\frac{1}{4} x_i x_j \right). \quad (3)$$

Lahendus summa käskudega

$$S1(N) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sin(i j h h), \quad h h = \frac{0.25}{N^2}, \quad (4)$$

$$S2(N) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sin\left(\frac{1}{4} \frac{i}{N} \frac{j}{N}\right), \quad (5)$$

$$S3(N, \vec{x}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sin(0.25 x_i x_j), \quad \vec{x} = (x_1, \dots, x_N), \quad (6)$$

$$S4(N, \vec{x}, f) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N f(x_i, x_j), \quad f(s, t) = \sin(0.25 s t). \quad (7)$$

Näide summeerimisest

```
function [ yy ] = S1( N )           # Matlab, Freemat, Octave
    hh = 0.25/N**2;
    yy = sum ( sum( sin( ( 1 : N )'*( 1 : N )*hh ) ) );
end
```

```
function [ yy ] = S1( N )           # Scilab
    hh = 0.25/N**2;
    yy = sum ( sin( [ 1 : N ]'*[ 1 : N ]*hh ) );
endfunction
```

```
S1:=proc(N::integer)::float;        # Maple
local i::integer,j::integer,hh::float;
    hh := evalhf(0.25/N**2);
    add( add( sin(i*j*hh),j=1..N),i=1..N)
end proc;
```

Lahendus topelt for-tsükliga

$$F1(N) : \text{for}_{i=1}^N \text{for}_{j=1}^N \{S = S + \sin(i j h h)\}, \quad h h = \frac{0.25}{N^2}, \quad (8)$$

$$F2(N) : \text{for}_{i=1}^N \text{for}_{j=1}^N \{S = S + \sin\left(\frac{1}{4} \frac{i}{N} \frac{j}{N}\right)\}, \quad (9)$$

$$F3(N, \vec{x}) : \text{for}_{i=1}^N \text{for}_{j=1}^N \{S = S + \sin(0.25 x_i x_j)\}, \quad \vec{x} = (x_1, \dots, x_N), \quad (10)$$

$$F4(N, \vec{x}, f) : \text{for}_{i=1}^N \text{for}_{j=1}^N \{S = S + f(x_i, x_j)\}, \quad f(s, t) = \sin(0.25 s t). \quad (11)$$

Näide for-tsüklistest

```
F1<-function(N)      #R
{
  hh <- 0.25/N**2;
  summa<-0.0;
  for (i in 1:N)
  {
    for (j in 1:N)
    {
      summa <- summa + sin( i*j*hh );
    }
  }
  return(summa)
}
```

Tabel 1	MatLab	SciLab	IPython	Euler	Fortran	Com.Vis.For	R	Octave	FreeMat
$\sum \sum \sin(ij \ hh)$	0.7	0.9	1.9	2.7	3.4	?	3.8	4.0	4.4
$\sum \sum \sin(\frac{1}{4} \frac{i}{N} \frac{j}{N})$	0.8	0.8	2.3	2.7	3.4	?	3.9	3.8	4.5
$\sum \sum \sin(0.25 \ x_i \ x_j)$	0.7	0.8	2.1	2.7	3.4	?	3.9	3.9	4.4
$\sum \sum f(x_i, x_j)$	0.7	1.1	2.0	2.9	3.5	?	4.0	3.8	4.4
<i>for for sin(ij hh)</i>	0.9	44	123	166	3.5	1.2	78	423	2.4
<i>for for sin($\frac{1}{4} \frac{i}{N} \frac{j}{N}$)</i>	1.3	61	152	226	4.2	1.3	121	468	3.1
<i>for for sin(0.25 $x_i \ x_j$)</i>	1.1	65	195	215	3.1	1.1	102	649	5.6
<i>for for f(x_i, x_j)</i>	17	198	219	310	3.1	1.3	1332	1437	5.4

Tabel 2	MathCad	Maple comp	Maple evalhf	Maple evalf	Maxima comp	Maxima -	Sage *
$\sum \sum \sin(ij hh)$	5.1 *	-	20	2380	138	131	-
$\sum \sum \sin(\frac{1}{4} \frac{i}{N} \frac{j}{N})$	7.8 *	-	28	?	267	245	-
$\sum \sum \sin(0.25 x_i x_j)$	8.4 *	-	23	?	178	160	-
$\sum \sum f(x_i, x_j)$	10 *	-	30	?	205	323	-
<i>for for</i> $\sin(ij hh)$	5.8 *	7.8	22	2192	13	273	239
<i>for for</i> $\sin(\frac{1}{4} \frac{i}{N} \frac{j}{N})$	7.8 *	?	30	2247	15	400	551
<i>for for</i> $\sin(0.25 x_i x_j)$	8.6 *	8.2	26	2399	22	376	2684
<i>for for</i> $f(x_i, x_j)$	9.9 *	-	35	2425	81	603	2632

Kommentaariid

MatLab - Väga hästi optimeeritud, kuid kasutajafunktsioonide kasutamine pikas for-tsükliis võib olla aeglasem, kuid parem kui konkurentidel. Kasutajafunktsioonide grupeerimine nõuab hoolikat ümberkäimist. Kui JIT-kompilaator välja lülitada, siis

Tabel 3	$F1(N)$	$F2(N)$	$F3(N, x)$	$F4(N, \vec{x}, f)$
JIT sees (1 faili)	0.9	1.3	1.1	17.4
JIT sees (2 faili)	0.9	1.3	1.1	229
JIT väljas (1 faili)	35	44	42	208
JIT väljas (2 faili)	35	44	42	448

SciLab - Vektortehted pea sama kiired kui Matlabil, kuid for-tsükliid on väga aeglased, kusjuures puudub Matlabile sarnane JIT-kompilaator.

FreeMat - Vektortehted veidi aeglasemad (4 sekundit), kuid for-tsüklid toimivad vägagi talutava kiirusega. FreeMat kasutab JIT-kompilaatorit. Kui viimane välja lülitada, siis

Tabel 4	$F1(N)$	$F2(N)$	$F3(N, x)$	$F4(N, \vec{x}, f)$
JIT sees	2.4	3.1	5.6	5.4
JIT väljas	689	789	764	1180

Euler Math Toolbox - Vektortehted on suhtelised kiired, kuid for-tsüklid mitte. Lisaks on programmi kasutamine pisut harjumatu (nõrk kasutajaliides). Esimese mulje järgi eelistaks FreeMati.

GNU Octave - Kiiruse mõttes üks nõrgemaid vektortehetega programme, kuid kasutajaliides on kena. Esimese mulje järgi eelistaks FreeMati. Funktsiooni väljakutsumine for-tsüklis 1400 sekundit.

R - Väikene pettumus kiirustestides. Vektortehted jäävad alla SciLabile ja for-tsüklid samuti, kusjuures funktsiooni väljakutsumine for-tsüklis 1300 sekundit.

MathCad - Väga rahuldav tulemus graafilise programmi kohta, for-tsükliid toimivad normaalse kiirusega. Suuremate projektide korral ei pruugi graafiline lahendus just mugavaim jälgida olla.

Maple - Kui kasutada arvutusteks evalhf käsku, siis kasutatav (kusjuures stabiilse kiirusega). Kahjuks on kompileerimise võimalused väga piiratud (uuematel versioonidel on ilmselt seda arendatud). Vaikimisi toimiv evalf käsk on väga aeglane.

Maxima - Kompileerimise käsk on kohustuslik, lisaks peab tavalise jada (makelist) asemel kasutama Lisp-jadasid. Näiteks kompileeritud $F3(N, \vec{x})$ töötab Lisp-jadadega 22 sekundit ja tavalise jadaga 6000 sekundit (mittekompileeritud variant töötab koguni 17000 sekundit). Funktsioonidele viitamine on suhteliselt aeglane (paar korda aeglasem kui Maplel).

Sage - Suur ja palju avastamisrõõmu pakkuv projekt.

Kompileerimiseks ja optimeerimiseks on olemas mitmeid häid vahendeid, mida siin ei jõudnud uurida. Kui ei kasuta käsku `"from math import sin"`, siis lisandub tulemustele 300 sekundit.

IPython - Kasutatud koos NumPy paketiga. Vektortehted kiired, kuid for-tsüklite kompileerimise jaoks peab kasutama lisavahendeid. Sage virtuaalaknas töötab pisut aeglasemalt, kui tavalises dos-aknas.

Fortran - Tulemus sõltub kompilaatorist. For-tsüklid on kiired ja võimalik on kirjutada "ebaefektiivset" koodi ning ikkagi saavutada suhteliselt kiire tulemus. Vabavaraline Force projekt on kena ja lihtne, kuid kompileerimine annab paar korda aeglasema tulemuse kui sooviks.

Mõned lisaviited

Stefan Steinhaus. Comparison of mathematical programs for data analysis (Edition 5.04), Munich 2008.

<http://www.scientificweb.com/ncrunch/ncrunch5.pdf>

Vaadatud programmid: Gauss 8.0, Maple 11, Mathematica 6.0, Matlab 2008a, O-Matrix 6.3, Ox Professional 5.0, Scilab 4.1.2.

Tabel 5	Gauss	Maple	Mathematica	Matlab	O-Matrix	Ox	Scilab
for 15000x15000	29	259	323	67	58	32	511
rand(2000, 2000) ¹⁰⁰⁰	122	292	31	57	9.6	15	257
det(1500, 1500)	504	43	24	31	19	138	56
rand(1500, 1500) ⁻¹	562	150	74	73	54	342	152
AxB, (1500, 1500)	779	100	48	23	35	107	121
Fibon(10 ⁷)	3.3	821	2.1	1.4	1.0	2.2	3.1
Kokkuvõte	21%	11%	39%	54%	83%	42%	24%

Themistoklis Glavelis, Nikolaos Ploskas, Nikolaos Samaras. A computational evaluation of some free mathematical software for scientific computing. Journal of Computational Science 1 (2010) 150-158.

Vaadatud programmid: FreeMat 3.6, Mathnium 1.051, Octave 3.03, R 2.8.0, Scilab 5.0.2.

Tabel 6	FreeMat	Mathnium	Octave	R	Scilab
Algebra	62%	8.2%	51%	66%	59%
Maatrikstehted	31%	2.4%	39%	50%	64%
Statistika tehted	83%	5.6%	28%	34%	56%
Kokkuvõte	50%	10%	43%	55%	56%

Neeraj Sharma, Matthias K. Gobbert. A COMPARATIVE EVALUATION OF MATLAB, OCTAVE, FREEMAT, AND SCILAB FOR RESEARCH AND TEACHING. Technical Report number HPCF-2010-7, UMBC High Performance Computing Facility, University of Maryland, Baltimore County, 2010.

Vaadatud programmid: Matlab, Octave, FreeMat, Scilab.



Suvi ei ole enam kaugel! Tänan.