Solutions to Exercises to

Programming Methods in Scientific Computing

David Bauer
Jendrik Stelzner

Letzte Änderung: 12. Dezember 2017

Inhaltsverzeichnis

3 Python, the Fundamentals

Exercise 3.1

Wir nutzen den folgenden, leicht abgeänderten Code (für besseren Output):

```
print("Calculate machine epsilon:")
eps = 1.0
i = 0
while 1+eps > 1:
  eps = eps/2
  i += 1
eps *= 2
print("eps: {}".format(eps))
print("iterations: {}".format(i))

print("With different loop condition:")
eps = 1.0
i = 0
while eps > 0:
  eps /= 2
  i += 1
eps *= 2
print("eps: {}".format(eps))
print("iterations: {}".format(i))
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
Calculate machine epsilon:
eps: 2.220446049250313e-16
iterations: 53
With different loop condition:
eps: 0.0
iterations: 1075
```

Der IEEE Standard für Floating-Point-Variablen legt fest, dass bei einer Variable vom Typ double die Mantisse 52 Bit groß ist, und der Exponent 11 Bit. Hierbei ist zu beachten, dass der Exponent in der Darstellung um den Bias von 1023 verschoben wird, falls es sich um eine normalisierte Zahl handelt (Exponent ungleich 0) und um 1022, falls es sich um eine denormalistierte Zahl handelt. Ebenfalls wird der größte Exponent (2047) als `NaN` oder `inf` interpretiert, sodass sich der tatsächliche Exponent der Zahl also im Bereich von -1022 bis $+1023$ befindet.

Das bedeutet, dass die kleinste darstellbare Zahl, die größer als 1 ist, von der Form $(1,00\dots001)_2 = 1 + 2^{-52}$ ist. (Hier steht $(\dots)_2$ für die Binärdarstellung.) Die kleinste darstellbare Zahl, die größer als 0 ist, ist dagegen die Zahl

$$(0,00\dots001)_2 \cdot 2^{-1022} = 2^{-1074}.$$

Der erste Algorithmus rechnet der Reihe nach zunächst die Zahlen 2^{-i} aus und vergleicht dann 1 mit $1 + 2^{-i}$. Bei $i = 52$ ist dies die kleinste Zahl größer als 1, wie oben beschrieben. Im nächsten Durchlauf wird dann `eps` auf 2^{-53} gesetzt. Hier wird nun $1 +$ `eps` auf 1 gerundet, die Schleife bricht also ab. Anschließend wird `eps` wieder verdoppelt, sodass sich der folgende Output ergibt:

```
eps: 2.220446049250313e-16
iterations: 53
```

Beim zweiten Algorithmus wird dagegen 2^{-i} mit 0 verglichen. Dies muss bis zum 1074-sten Durchlauf der Schleife nicht gerundet werden. Zu diesem Zeitpunkt hat `eps` den Wert 2^{-1074}, die kleinste positive darstellbare Zahl. Im nächsten Schleifendurchlauf wird `eps` halbiert und auf 0 gerundet. Die Schleife bricht also nach 1075 Durchläufen ab. Danach wird `eps` wieder verdoppelt, hat also den Wert $0 \cdot 2 = 0$. Der Output ist also:

```
eps: 0.0
iterations: 1075
```

Exercise 3.2

Wir erweitern die gegeben Klasse `Polynomial` um eine Methode `derivative` zum Ableiten, sowie eine Methode `antiderivative` zum Bilden einer Stammfunktion. Dabei wählen wir die „Integrationskonstante“ als 0. Wir definieren außerdem Funktionen zum Ausgeben von Polynomen durch die `print`-Funktion.

```python
class Polynomial:
    def __init__(self, coeff):
        self.coeff = coeff

    def __str__(self):
        s = ""
        if self.coeff == []:
            s = "0"
        else:
            s += "{} x^0".format(self.coeff[0])
        for i in range(1,len(self.coeff)):
            s += " + {} x^{}".format(self.coeff[i], i)
        return s

    def __repr__(self):
        return str(s)

    def __call__(self, x):
        s = 0
        for i in range(len(self.coeff)):
            s += self.coeff[i]*x**i
        return s

    def __add__(self, other):
        l = []
```

```
        if len(self.coeff) > len(other.coeff):
            l += self.coeff
            for i in range(len(other.coeff)):
                l[i] += other.coeff[i]
        else:
            l += other.coeff
            for i in range(len(self.coeff)):
                l[i] += self.coeff[i]
        return Polynomial(l)

    def __eq__(self, other):
        return self.coeff == other.coeff

    def derivative(self):
        coeff = []
        for i in range(1,len(self.coeff)):
            coeff.append(i * self.coeff[i])
        return Polynomial(coeff)

    def antiderivative(self):
        coeff = [0]
        for i in range(len(self.coeff)):
            coeff.append(self.coeff[i]/(i+1))
        return Polynomial(coeff)
```

Für das gegebene Polynom $p(x) = 3x^2 + 2x + 1$ testen wir unser Programm mit dem folgenden Code:

```
p = Polynomial([1,2,3])
print("The given polynmial p:")
print(p)
print("The derivative of p:")
print( p.derivative() )
print("The antiderivative of p:")
print( p.antiderivative() )
print("Taking antiderivative and then derivative:")
print( p.antiderivative().derivative() )
```

Dabei erhalten wir den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_02.py
The given polynmial p:
1 x^0 + 2 x^1 + 3 x^2
The derivative of p:
2 x^0 + 6 x^1
The antiderivative of p:
0 x^0 + 1.0 x^1 + 1.0 x^2 + 1.0 x^3
Taking antiderivative and then derivative:
1.0 x^0 + 2.0 x^1 + 3.0 x^2
```

Exercise 3.3

Wir definieren direkt Klasse `Matrix`, die über alle Methoden verfügt, die wir in diesem und den späteren Aufgabenteilen nutzen werden.

```python
class Matrix():
    def __init__(self, entries):
        m = len(entries)
        if m == 0:
            raise ValueError("height must be positive")
        n = len(entries[0])
        if n == 0:
            raise ValueError("width must be positive")
        for i in range(1, m):
            if len(entries[i]) != n:
                raise ValueError("rows must have the same width")
        self.height = m
        self.width = n
        self.entries = entries

    def __getitem__(self, i):       # allows to get the rows via A[i]
        return self.entries[i]

    def __setitem__(self, i, k):    # allows to set rows via A[i]
        self.entries[i] = k

    def __str__(self):              # allows print(A) for a Matrix A
        rows = ["["]*self.height
        for j in range(self.width): # construct output columnwise, align left
            numbers = []            # numbers to appear in column j
            maxlen = 0              # maximal length of a number in column j
            for i in range(self.height):
                s = str(self[i][j])
                numbers.append(s)
                if len(s) > maxlen:
                    maxlen = len(s)
            for i in range(self.height):
                # pad the entries if they are too short
                rows[i] += numbers[i] + " "*(maxlen-len(numbers[i])) + " "
        s = ""
        for r in rows:
            s += r[:-1] + "]\n" # remove white space at the end of ech line
        s = s[:-1]              # remove empty line at the end
        return s

    def __repr__(self):
        return str(self)

    def __mul__(self, other):
        if self.width != other.height:
            raise TypeError('matrix dimensions do not match')
        newentries = []
        for i in range(self.height):
            row = []
            for j in range(other.width):
                s = self[i][0] * other[0][j]    # makes s have the right type
                for k in range(1, self.width):
                    s += self[i][k] * other[k][j]
                row.append(s)
            newentries.append(row)
```

```
        return Matrix(newentries)

    def __eq__(self, other):
        if self.height != other.height or self.width != other.width:
                return False
        for i in range(self.height):
            for j in range(self.width):
                if self[i][j] != other[i][j]:
                    return False
        return True

    def mapentries(self, f):        # applies a function to all entries
        A = zeromatrix(self.height, self.width) # zeromatrix is defined below
        for i in range(self.height):
            for j in range(self.width):
                A[i][j] = f(self[i][j])
        return A

    def addrow(self, i, j, c):      # add c times row j to row i
        for k in range(self.width):
            self[i][k] =  c * self[j][k] + self[i][k]
            # makes c responsible for implementing the operations

    def addcolumn(self, i, j, c):   # add c times column j to column i
        for k in range(self.height):
            self[k][i] = c * self[k][j] + self[k][i]

    def multrow(self, i, c):        # multiply row i with c
        for j in range(self.width):
            self[i][j] = c * self[i][j]

    def multcolumn(self, j, c):     # multiply row j with c
        for i in range(self.height):
            self[i][j] = c * self[i][j]

    def swaprows(self, i, j):       # swap rows i and j
        if i > self.height or j > self.height:
            raise ValueError("swap nonexistent rows")
        l = self[i]
        self[i] = self[j]
        self[j] = l

    def transpose(self):
        T = zeromatrix(self.width, self.height)
        for i in range(self.height):
            for j in range(self.width):
                T[j][i] = self[i][j]
        return T
```

Wir definieren zudem Hilfsfunktionen, die wir im Weiteren nutzen werden:

```
def zeromatrix(height, width):  # creates a zero matrix
    entries = []
    for i in range(height):
        entries.append([0]*width)
    return Matrix(entries)

```

```
def identitymatrix(size):       # creates an identiy matrix
    E = zeromatrix(size, size)
    for i in range(size):
        E[i][i] = 1
    return E
```

Die Assoziativität der Matrixmultiplikation testen wir mit dem folgenden Code:

```
A = Matrix([[0,1],[1,0],[1,1]])
print("A:")
print(A)
B = Matrix([[1,2,3,4],[5,6,7,8]])
print("B:")
print(B)
C = Matrix([[1,0],[0,1],[1,0],[0,1]])
print("C:")
print(C)
print("Checking if A(BC) == (AB)C:")
print(A * (B * C) == (A * B) * C)
```

Wir erhalten wir (durch Ausführen in der Konsole) den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_03.py
A:
[0 1]
[1 0]
[1 1]
B:
[1 2 3 4]
[5 6 7 8]
C:
[1 0]
[0 1]
[1 0]
[0 1]
Checking if A(BC) == (AB)C:
True
```

Exercise 3.4

Wir schreiben zunächst eine Klasse `Rational`, die ein genaues Rechnen mit rationalen Zahlen erlaubt.

```
class Rational():
    def __init__(self, num, denum = 1):   # default denumerator is 1
        if type(num) == Rational:
            p = num/Rational(denum)
            self.num = p.num
            self.denum = p.denum
        elif type(num) != int:
            raise TypeError("numerator is no integer")
        elif type(denum) != int:
            raise TypeError("denumerater is no integer")
        elif denum == 0:
```

```
            raise ZeroDivisionError("denumerator is zero")
        else:
            self.num = num
            self.denum = denum

    def __str__(self):    # allows print(x) for Rational x
        return "{}/{}".format(self.num, self.denum)

    def __repr__(self):
        return str(self)

    def __add__(self, other):
        if type(other) == int:
            return self + Rational(other)
        elif type(other) == Rational:
            return Rational( self.num * other.denum + self.denum * other.num, self.denum * other.denum )
        raise TypeError("unsupported operand type(s) for + or add(): 'Rational' and '{}'".format(type(other).__name__))

    def __sub__(self, other):
        if type(other) == int:
            return self - Rational(other)
        elif type(other) == Rational:
            return Rational( self.num * other.denum - self.denum * other.num, self.denum * other.num )
        raise TypeError("unsupported operand type(s) for - or sub(): 'Rational' and '{}'".format(type(other).__name__))

    def __mul__(self, other):
        if type(other) == int:
            return self * Rational(other)
        elif type(other) == Rational:
            return Rational( self.num * other.num, self.denum * other.denum )
        raise TypeError("unsupported operand type(s) for * or mul(): 'Rational' and '{}'".format(type(other).__name__))

    def __truediv__(self, other):
        if type(other) == int:
            return self / Rational(other)
        elif type(other) == Rational:
            if other.num == 0:
                raise ZeroDivisionError("division by zero")
            return Rational( self.num * other.denum, self.denum * other.num)
        raise TypeError("unsupported operand type(s) for / or truediv(): 'Rational' and '{}'".format(type(other).__name__))

    def __pow__(self, n):   # supports only integer powers
        if not type(n) == int:
            raise TypeError("unsupported operand type(s) for ** or pow(): 'Rational' and '{}'".format(type(n).__name__))
        if n >= 0:
            return Rational(self.num**n, self.denum**n)
        return Rational(self.denum, self.num)**(-n)

    def __pos__(self):
```

```
        return Rational( self.num, self.denum )

    def __neg__(self):
        return Rational( -self.num, self.denum )

    def __abs__(self):
        if self.num <= 0 and self.denum > 0:
            return Rational(-self.num, self.denum)
        elif self.num >= 0 and self.denum < 0:
            return Rational(self.num, -self.denum)
        return Rational(self.num, self.denum)

    def __eq__(self, other):
        if type(other) == int:  # allows comparison to int, used for x == 0
            return (self == Rational(other))
        return (self.num * other.denum == self.denum * other.num)

    def __float__(self):
        return self.num / self.denum
```

Die LU-Zerlegung von passenden Matrix mit ganzzahligen Einträgen kann nun dem folgenden naiven Algorithmus berechnet werden:

```
from copy import deepcopy

# expects the matrix entries to be comparable to 0 in a sensible way
def naive_lu(A):
    if A.height != A.width:
        raise ValueError("matrix is not square")
    U = deepcopy(A)   # circumvent pass by reference
    n = U.height
    L = identitymatrix(n)
    # bring U in upper triangular form, change L such that always LU = A
    for j in range(n):
        if U[j][j] == 0:
            raise ValueError("algorithm does not work for this matrix")
        for i in range(j+1,n):
            L.addcolumn(j, i,  U[i][j]/U[j][j]) # important: change L first
            U.addrow(i, j, -U[i][j]/U[j][j])
    return (L,U)
```

Wir testen das Program anhand der gegebenen Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 6 & 6 & 3 \\ 9 & 10 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

mit dem folgenden Code:

```
A = Matrix([[3,2,1],[6,6,3],[9,10,6]])
print("A:")
print(A)
(L,U) = naive_lu(A.mapentries(Rational))
print("L:")
print(L)
```

```python
print("U:")
print(U)
B = Matrix([[0,1],[1,0]])
print("B:")
print(B)
print("Trying to calculate the LU decomposition of B:")
(L,U) == naive_lu(B)
```

Als Output erhalten wir das Folgende:

```
$ python exercise_03_04.py
A:
[3 2  1]
[6 6  3]
[9 10 6]
L:
[9/9  0/18  0]
[18/9 18/18 0]
[27/9 36/18 1]
U:
[3/1   2/1   1/1    ]
[0/3   6/3   3/3    ]
[0/162 0/162 162/162]
Check if L*U == A:
True
B:
[0 1]
[1 0]
Trying to calculate the LU decomposition of B:
Traceback (most recent call last):
  File "exercise_03_04.py", line 62, in <module>
    (L,U) == naive_lu(B)
  File "exercise_03_04.py", line 15, in naive_lu
    raise ValueError("algorithm does not work for this matrix")
ValueError: algorithm does not work for this matrix
```

Da die Matrix B keine LU-Zerlegung besitzt, ist es okay, dass unser Algorithmus diese nicht findet.

Exercise 3.5

Wir bestimmen die Cholesky-Zerlegung eintragsweise.

```python
from copy import deepcopy
from math import sqrt

# expects int or float as matrix entries
def cholesky(A):
    if A.height != A.width:
        raise ValueError("matrix is not square")
    B = deepcopy(A)
    n = B.height
    L = zeromatrix(n,n)
    for i in range(n):
```

```python
        rowsum = 0
        for j in range(i):
            s = 0
            for k in range(j):
                s += L[i][k] * L[j][k]
            L[i][j] = (B[i][j] - s)/L[j][j]
            rowsum += L[i][j]**2
        L[i][i] = sqrt( B[i][i] - rowsum )
    return L
```

Für die gegebenen Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 2 \\ 1 & 2 & 10 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \begin{pmatrix} 1.01 \cdot 10^{-2} & 0.705 & 1.42 \cdot 10^{-2} \\ 0.705 & 49.5 & 1 \\ 1.42 \cdot 10^{-2} & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

testen wir unser Programm mit dem folgenden Code:

```python
A = Matrix([[1,2,1],[2,5,2],[1,2,10]])
print("A:")
print(A)
L = cholesky(A)
print("L:")
print(L)
print("L * L^T:")
print(L * L.transpose())
B = Matrix([[1.01E-2, 0.705, 1.42E-2],[0.705,49.5,1],[1.42E-2,1,1]])
print("B:")
print(B)
L = cholesky(B)
print("L:")
print(L)
print("L * L^T:")
print(L * L.transpose())
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_05.py
A:
[1 2 1 ]
[2 5 2 ]
[1 2 10]
L:
[1.0 0   0  ]
[2.0 1.0 0  ]
[1.0 0.0 3.0]
L * L^T:
[1.0 2.0 1.0 ]
[2.0 5.0 2.0 ]
[1.0 2.0 10.0]
B:
[0.0101 0.705 0.0142]
[0.705  49.5  1     ]
[0.0142 1     1     ]
L:
[0.1004987562112089  0                    0                 ]
```

```
[7.015012190980423   0.5381486415443629   0                  ]
[0.14129528100981847 0.016374437298272527 0.9898320672556135]
L * L^T:
[0.010100000000000001 0.705 0.014200000000000003]
[0.705                49.5  1.0                 ]
[0.014200000000000003 1.0   1.0                 ]
```

Exercise 3.6

Mithilfe elementarer Zeilenumformungen, die in der Klasse `Matrix` implementiert sind, lässt sich nun der Gauß-Algorithmus zum Invertieren von Matrizen implementieren.

```python
from copy import deepcopy

# expects the matrix entries to be comparable to 0 in a sensible way
def invert(A):
    if A.height != A.width:
        raise ValueError("matrix is not square")
    B = deepcopy(A)   # circumvent pass by reference
    n = B.height
    Inv = identitymatrix(n)
    B = B.mapentries(Rational)      # make all
    Inv = Inv.mapentries(Rational)  # entries rational
    # bring B in lower triangular form
    for j in range(n):
        p = -1
        for i in range(j,n):
            if B[i][j] != 0:
                p = i
                break
        if p == -1:
            raise ZeroDivisionError("matrix is not invertible")
        for i in range(p+1,n):
            Inv.addrow(i, p, -B[i][j]/B[p][j])  # import: change inverse first
            B.addrow(i, p, -B[i][j]/B[p][j])
    # norm the diagonal entries
    for i in range(n):
        Inv.multrow(i, B[i][i]**(-1))   # **(-1) also works for Rational
        B.multrow(i, B[i][i]**(-1))
    # bring B into identity form
    for j in range(n):
        for i in range(j):
            Inv.addrow(i, j, -B[i][j])
            B.addrow(i, j, -B[i][j])
    return Inv
```

Wir testen unser Programm anhand der gegebenen Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ -3 & 4 & -1 \\ -6 & 5 & -2 \end{pmatrix}$$

mit dem folgenden Code:

```
A = Matrix([[3,-1,2],[-3,4,-1],[-6,5,-2]])
print("A:")
print(A)
B = invert(A)
print("A^(-1) with rationals:")
print(B)
print("A^(-1) with floats:")
print(B.mapentries(float))
print("Checking if A*B == I (using rationals):")
print(A.mapentries(Rational) * B == identitymatrix(3))
```

Dabei nutzen wir erneut die Klasse `Rational`, um ein genaues Rechnen zu erlauben. Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_06.py
A:
[3  -1 2 ]
[-3 4  -1]
[-6 5  -2]
A^(-1) with rationals:
[-1162261467/3486784401 3099363912/3486784401 -2711943423/3486784401]
[0/43046721             28697814/43046721     -14348907/43046721    ]
[59049/59049            -59049/59049          59049/59049           ]
A^(-1) with floats:
[-0.3333333333333333 0.8888888888888888 -0.7777777777777778]
[0.0                 0.6666666666666666 -0.3333333333333333]
[1.0                 -1.0               1.0                ]
Checking if A*B == I (using rationals):
True
```

Exercise 3.7

Wir Berechnen die QR-Zerlegung einer nicht-singulären Matrix A durch Anwenden des Gram-Schmidt-Verfahrens auf die Spalten von A, von links nach rechts:

```
from copy import deepcopy
from math import sqrt

# assumes the matrix to have integer or float values
# and to be nonsingular
def qrdecomp(A):
    if A.height != A.width:
        return ValueError("only square matrices are supported")
    n = A.height
    Q = deepcopy(A)
    R = identitymatrix(n)
    for j in range(n):
        # make the j-th column of Q orthogonal to the next columns
        for k in range(j):
            s = 0   # inner product of j-th and k-th columns
            for i in range(n):
                s += Q[i][j] * Q[i][k]
            Q.addcolumn(j, k, -s)
```

```
            R.addrow(k, j, s)
        sn = 0   # squared norm of the j-th column
        for i in range(n):
            sn += Q[i][j]**2
        Q.multcolumn(j, sqrt(sn)**(-1))
        R.multrow(j, sqrt(sn))
    return (Q,R)
```

Für die gegebene Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 12 & -51 & 4 \\ 6 & 167 & -68 \\ -4 & 24 & -41 \end{pmatrix}$$

testen wir das Programm mithilfe des folgenden Codes:

```
A = Matrix([[12,-51,4],[6,167,-68],[-4,24,-41]])
print("A:")
print(A)
(Q,R) = qrdecomp(A)
print("Q:")
print(Q)
print("Q * Q^T:")
print(Q * Q.transpose())
print("R:")
print(R)
print("Q*R:")
print(Q*R)
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_07.py
A:
[12 -51 4  ]
[6  167 -68]
[-4 24  -41]
Q:
[0.8571428571428571  -0.3942857142857143 -0.33142857142857124]
[0.42857142857142855 0.9028571428571428  0.03428571428571376 ]
[-0.2857142857142857 0.17142857142857143 -0.9428571428571428 ]
Q * Q^T:
[0.9999999999999998      1.474514954580286e-16 -1.6653345369377348e-16]
[1.474514954580286e-16   0.9999999999999998    4.996003610813204e-16  ]
[-1.6653345369377348e-16 4.996003610813204e-16 1.0                    ]
R:
[14.0 20.999999999999996 -14.000000000000002]
[0.0  175.0              -69.99999999999999 ]
[0.0  0.0                35.0               ]
Q*R:
[12.0 -51.0 4.000000000000002]
[6.0  167.0 -68.0            ]
[-4.0 24.0  -41.0            ]
```

Exercise 3.8

(1)

Alle notwendigen Funktionswerte werden zunächst berechnet und in einer Liste gespeichert, um das mehrfache Berechnen gleicher Funktionswerte zu umgehen.

```
def trapeze(f,a,b,n):
    values = [f(a + (k/n)*(b-a)) for k in range(n+1)]
    integral = 0
    for i in range(len(values)-1):
        integral += values[i] + values[i+1]
    integral = (b-a)*integral/n/2
    return integral
```

(2)

Wir testen unser Programm anhand des gegebenen Integrals $\int_0^\pi \sin(x)\,\mathrm{d}x$ mit dem folgenden Code:

```
from math import sin, pi
n = 1
s = 0
while 2 - s >= 1.E-6:   # sin is concave on [0,pi] -> estimate too small
    n += 1              # can skip n = 1 because it results in 0
    s = trapeze(sin, 0, pi, n)

print("Estimate for integral of sin from 0 to pi using trapeze:")
print(s)
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_08.py
Estimate for integral of sin from 0 to pi using trapeze:
1.9999990007015205
```

Exercise 3.9

(1)

Wir definieren eine neue Funktion `powertrapeze`, welche das angegebene Verfahren implementiert:

```
def powertrapeze(f, a, b, mmax):
    integrals = []              # list of the approximations
    values = [f(a), f(b)]       # list of the calculated values
    for m in range(1,mmax+1):
        n = 2**m
        for k in range(1,n,2):
            values.insert(k, f(a + (k/n)*(b-a)))    # add new values
        integral = 0
```

```
        for i in range(len(values)-1):
            integral += values[i] + values[i+1]
        integral = (b-a)*integral/n/2
        integrals.append(integral)                  # add new approx.
    return integrals
```

Hiermit berechnen die Approximationen für $\int_0^\pi \sin(x)\,\mathrm{d}x$ für $m = 1, \ldots, 10$ mit dem folgenden Code:

```
from math import sin, pi
m = 10
results = powertrapeze(sin, 0, pi, m)
print("Calculate trapeze estimate for int. of sin from 0 to pi, 2^m intervals:")
print(" m \testimate \t\terror")
for i in range(m):
    print("{:2d}\t{}\t{:.20f}".format(i+1, results[i], 2-results[i]))
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
Calculate trapeze estimate for int. of sin from 0 to pi, 2^m intervals:
 m      estimate                error
 1      1.5707963267948966      0.42920367320510344200
 2      1.8961188979370398      0.10388110206296019555
 3      1.9742316019455508      0.02576839805444919307
 4      1.9935703437723395      0.00642965622766045186
 5      1.9983933609701445      0.00160663902985547224
 6      1.9995983886400386      0.00040161135996141795
 7      1.9998996001842035      0.00010039981579645918
 8      1.9999749002350518      0.00002509976494824429
 9      1.9999937250705773      0.00000627492942273378
10      1.9999984312683816      0.00000156873161838433
```

(2)

Es fällt auf, dass sich der Fehler in jedem Schritt etwa geviertelt wird. Bezeichnet a_n die n-te Approximation, so gilt $a_0 \leq a_1 \leq \cdots \leq a_n$, da sin auf $[0, \pi]$ konkav ist. Deshalb ist die Vermutung äquivalent dazu, dass die Quotienten $(a_i - a_{i+1})/(a_{i+1} - a_{i+2})$ ungefähr 4 sind. Dies testen wir mit dem folgenden weiteren Code:

```
print("Quotients of any two subsequent differences of estimates:")
for i in range(m-2):
    q = (results[i] - results[i+1]) / (results[i+1] - results[i+2])
    print(q)
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
Quotients of any two subsequent differences of estimates:
4.164784400584785
4.039182316416593
4.009677144752887
4.002411992937073
4.00060254408483
4.000150607761501
```

```
4.000037649528035
4.000009414842847
```

Es fällt auf, dass das Verhältnis sogar gegen 4 zu gehen scheint.

(3)

Wir berechnen die Approximationen für $\int_0^2 3^{3x-1}\,\mathrm{d}x$ für $m = 1, \dots, 10$ mit dem folgenden Code:

```
m = 10
f = (lambda x : 3**(3*x-1))
results = powertrapeze( f, 0, 2, m)
print("Calculate trapeze estimate for int. of 3^(3x-1) from 0 to 2, 2^m
    intervals:")
print(" m \testimate")
for i in range(m):
    print("{:2d}\t{:24.20f}".format(i+1, results[i]))
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
Calculate trapeze estimate for int. of 3^(3x-1) from 0 to 2, 2^m intervals:
 m      estimate
 1      130.66666666666665719276
 2       89.58204463929762084717
 3       77.74742639121230070032
 4       74.66669853961546721166
 5       73.88840395800384897029
 6       73.69331521665949935596
 7       73.64451070980437918934
 8       73.63230756098684537392
 9       73.62925664736960129630
10       73.62849391106399821183
```

Da f konvex ist, sind die Approximationen b_n monoton fallend. Die Vermutung lässt sich erneut durch das Betrachten der Quotienten $(b_i - b_{i+1})/(b_{i+1} - b_{i+2})$ überprüfen. Hierfür nutzen wir (erneut) den folgenden Code:

```
print("Quotients of any two subsequent differences of estimates:")
for i in range(m-2):
    q = (results[i] - results[i+1])/(results[i+1] - results[i+2])
    print(q)
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
Quotients of any two subsequent differences of estimates:
3.471562932248868
3.841500716121706
3.958305665211694
3.9894387356667425
3.9973509398114637
3.9993371862347957
3.9998342622879792
3.999958563440565
```

Unsere Vermutung scheint sich zu bestätigen.

Exercise 3.10

Für die Funktion $f(x) = e^{x^2}$ gilt $f''(x) = (4x^2+2)e^{x^2}$. Da $f''(x) > 0$ auf $[0,1]$ monoton steigend ist, gilt für alle $0 \le a \le b \le 1$, dass

$$|\mathrm{E}(f,a,b)| \le \frac{(b-a)^3}{12} \max_{a\le x\le b} |f''(x)| \le \frac{(b-a)^3}{12} f''(b)\,.$$

Für alle $n \ge 1$ und $0 \le k \le n-1$ gilt deshalb

$$\left| E\left(f, \frac{k}{n}, \frac{k+1}{n}\right)\right| \le \frac{1}{12n^3}\left(4\left(\frac{k+1}{n}\right)^2 + 2\right) \underbrace{e^{((k+1)/n)^2}}_{\le e \le 4} \le \frac{1}{12n^3}(4+2)\cdot 4 \le \frac{2}{n^3}\,.$$

Der gesamte Fehler bei einer Unterteilung von $[0,1]$ in n Intervalle lässt sich deshalb durch

$$n \cdot \frac{2}{n^3} = \frac{2}{n^2}$$

abschätzen. Dabei gilt

$$\frac{2}{n^2} < 10^{-6} \iff n^2 > 2\cdot 10^6 \iff n > \sqrt{2}\cdot 10^3 \impliedby n > 1500\,.$$

Für das verbesserte Trapezverfahren aus Exercise 3.9 gilt mit $n = 2^m$, dass $n > 1500$ für $m \ge 11$. Wir nutzen nun den folgenden Code, um die entsprechenden Approximationen für $m = 1, \ldots, 11$ zu bestimmen:

```python
from math import exp
f = (lambda x: exp(x**2))
m = 11
results = powertrapeze(f, 0, 1, m)
print("Calculate trapeze estimate for int. of e^(x^2) from 0 to 1, 2^m
    intervals:")
for i in range(m):
    print("m={:2d}\t{:24.20f}".format(i+1, results[i]))
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_10.py
Calculate trapeze estimate for int. of e^(x^2) from 0 to 1, 2^m intervals:
m= 1      1.57158316545863208091
m= 2      1.49067886169885532865
m= 3      1.46971227642966528748
m= 4      1.46442031014948170764
m= 5      1.46309410260642858148
m= 6      1.46276234857772702291
m= 7      1.46267939741858832292
m= 8      1.46265865883777390621
m= 9      1.46265347414312651964
m=10      1.46265217796637525538
m=11      1.46265185392199392744
```

Exercise 3.11

Ist $T_n(x) = \sum_{k=0}^{n} x^k/k!$ das k-te Taylorpolynom für $f(x) = e^x$ an der Entwicklungsstelle 0, so gilt für das Restglied $R_n(x) \coloneqq e^x - T_n(x)$, dass es für jedes $x \in \mathbb{R}$ ein ξ zwschen 0 und x gibt, so dass

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\xi^n = \frac{e^\xi \xi^n}{(n+1)!}\,.$$

Für alle $x \geq 0$ gilt $e^\xi \leq e^x \leq 3^x$, und somit gilt

$$|R_n(x)| \leq \frac{3^x x^n}{(n+1)!} \qquad \text{für alle } x \geq 0\,.$$

Für alle $x \leq 0$ gilt $e^\xi \leq e^0 = 1$, und somit

$$|R_n(x)| \leq \frac{(-x)^n}{(n+1)!}\,.$$

Dies führt zu dem folgenden Code:

```python
def exp_approx(x):
    y = 1       # current approx
    d = 6       # number of digits
    n = 1
    fac = 1     # n!
    if x >= 0:
        while fac < (3**x) * (x**(n+1)) * 10**d:
            y += x**n / fac
            n += 1
            fac *= n
    if x < 0:
        while fac < ((-x)**(n+1)) * 10**d:
            y += x**n / fac
            n += 1
            fac *= n
    return y
```

Wir testen die Genauigkeit des Programms mit dem folgenden Code:

```python
from math import exp
print("Comparison of exp_approx(x) and exp(x) up to 7 digits.")
print("{:>3s}   {:>22s}   {:>22s}   {:13s}".format("x","approximation","exact","difference (10 digits)"))
for x in range(-30,31):
    approx = exp_approx(x)
    exact = exp(x)          # not really exact, but better then the above
    print("{:3d}   {:22.7f}   {:22.7f}   {:13.10f}".format(x, approx, exact, exact-approx))
```

Wir erhalten den folgenden (gekürzten) Output:

```
Comparison of exp_approx(x) and exp(x) up to 7 digits.
```

```
  x           approximation                          exact   difference (10 digits
    )
-30              -0.0000855                      0.0000000    0.0000855145
-29               0.0000551                      0.0000000   -0.0000550745
-28               0.0000050                      0.0000000   -0.0000050079
-27              -0.0000045                      0.0000000    0.0000044619
-26              -0.0000014                      0.0000000    0.0000013633
-25              -0.0000006                      0.0000000    0.0000006464
-24              -0.0000003                      0.0000000    0.0000002671
-23              -0.0000000                      0.0000000    0.0000000403
-22              -0.0000000                      0.0000000    0.0000000071
-21              -0.0000000                      0.0000000    0.0000000192
[...]
 21       1318815734.4832141       1318815734.4832146    0.0000004768
 22       3584912846.1315928       3584912846.1315918   -0.0000009537
 23       9744803446.2489052       9744803446.2489033   -0.0000019073
 24      26489122129.8434715      26489122129.8434715    0.0000000000
 25      72004899337.3858795      72004899337.3858795    0.0000000000
 26     195729609428.8387451     195729609428.8387756    0.0000305176
 27     532048240601.7988281     532048240601.7986450   -0.0001831055
 28    1446257064291.4738770    1446257064291.4750977    0.0012207031
 29    3931334297144.0424805    3931334297144.0419922   -0.0004882812
 30   10686474581524.4667969   10686474581524.4628906   -0.0039062500
```

Für etwa $x \geq 23$ und $x \leq -26$ hat unsere Approximation nicht mehr die gewünschten Genauigkeit, da die aufzuaddierenden Summanden $x^n/n!$ dann zu klein werden.

Exercise 3.12

(1)

Wir definieren zunächst eine Klasse `TimeOutError`, um ggf. eine passende Fehlermeldung ausgeben zu können.

```
class TimeOutError(Exception):
    pass
```

Wir implementieren das Newton-Verfahren mit der gewünschten Genauigkeit:

```
def newton(f, f_prime, x):
    n = 1
    xold = x
    xnew = x
    while n <= 100:
        d = f_prime(xold)
        if d == 0:
            raise ZeroDivisionError("derivative vanishes at {}".format(xold))
        xnew = xold - f(xold)/d
        if 0 <= xnew - xold <= 1.E-7 or 0 <= xold - xnew <= 1.E-7:
            return xnew
        xold = xnew
        n += 1
    raise TimeOutError("the calculation takes too long")
```

(2)

Wir testen unser Programm anhand der gegebenen Funktion $f(x) = x^2 - 2$ mit dem folgenden Code:

```
f = (lambda x: x**2 - 2)
fprime = (lambda x: 2*x)
print("Calculating an approximation of sqrt(2):")
print( newton(f, fprime, 1) )
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_12.py
Calculating an approximation of sqrt(2):
1.4142135623730951
```

Dabei stimmen die ersten 15 Nachkommestellen mit dem exakten Ergebnis überein.

4 Python in Scientific Computation

Exercise 4.13

Wir geben den beiden Funktionen ein zusätzliches Argument `err`, mithilfe dessen entschieden wird, wann die Funktion abbricht; standardmäßig ist dieser Wert bei 10^{-6}.

```
def bisect_it(f, a, b, err=1e-6):
    x = (a+b)/2
    while abs(f(x)) >= err:
        # f(a) < 0 < f(b) by assumption
        if f(x) > 0:
            b = x
        else:
            a = x
        x = (a+b)/2
    return x

def bisect_rec(f, a, b, err=1e-6):
    x = (a+b)/2
    if abs(f(x)) < err:
        return x
    if f(x) > 0:
        return bisect_rec(f, a, x, err)
    else:
        return bisect_rec(f, x, b, err)
```

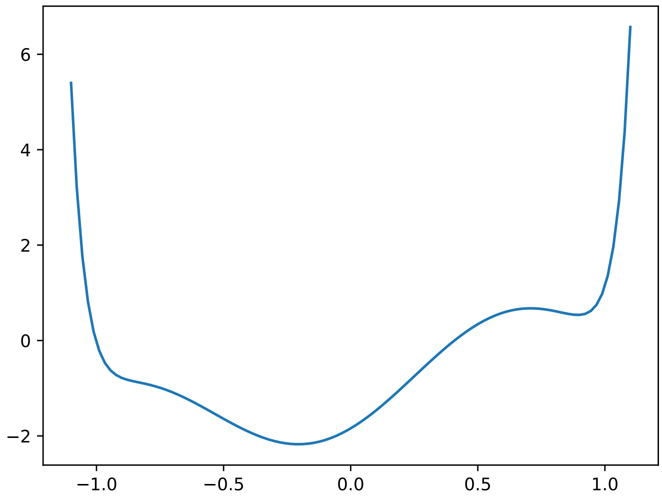
Wir testen die beiden Funktionen an der gegebenen Funktion

$$f(x) = \sin(4x - 1) + x + x^{20} - 1.$$

Hierfür plotten wir die Funktion zunächst mithilfe des folgenden Codes:

```
from scipy import linspace, sin
import matplotlib.pyplot as plt

def f(x): return sin(4*x-1)+ x + x**20 - 1

x = linspace(-1.1, 1.1, 100)
plt.clf()
plt.plot(x, f(x))
plt.show()
```

Wir wählen das Intervall $[-1.1, 1.1]$, da die Funktion f außerhalb dieses Intervalls zu groß wird. Wir erhalten den folgenden Graphen:



Anhand des Graphen sind zwei Nullstellen zu erkennen, jeweils in der Nähe von -1 und 0.4. Wir berechnen die Nullstellen nun mit dem folgenden Code:

```
xit1, xit2 = bisect_it(f, 0, -1.5), bisect_it(f,0,1)
print("The roots with bisect_it are {} and {}.".format(xit1, xit2))
xrec1, xrec2 = bisect_rec(f, 0, -1.5), bisect_rec(f,0,1)
print("The roots with bisect_rec are {} and {}.".format(xrec1, xrec2))
```

Wir erhalten den folgende Output:

```
$ python exercise_04_13.py
The roots with bisect_it are -1.002246916294098 and 0.4082937240600586.
The roots with bisect_rec are -1.002246916294098 and 0.4082937240600586.
```

Exercise 4.14

Wir nutzen die bishere `newton`-Methode, kombiniert mit einer Approximation für Ableitungen:

```
### Newton method from exercise 3.12

class TimeOutError(Exception):
    pass

def newton(f, f_prime, x):
    n = 1
    xold = x
    xnew = x
    while n <= 100:
```

```
        d = f_prime(xold)
        if d == 0:
            raise ZeroDivisionError("derivative vanishes at {}".format(xold))
        xnew = xold - f(xold)/d
        if abs(xnew - xold) <= 1.E-7:
            return xnew
        xold = xnew
        n += 1
    raise TimeOutError("the calculation takes too long")



### new Newton method

def prime(f, h=1e-6):
    return (lambda x: (f(x+h)-f(x))/h)

def newton_ext(f, x):
    fprime = prime(f)
    return newton(f, fprime, x)
```

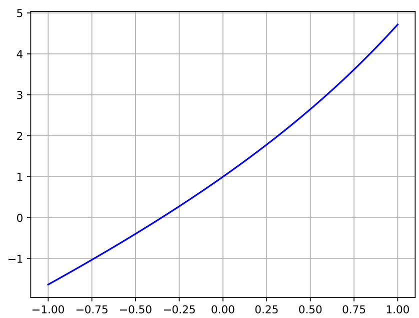
Wir plotten nun zunächst die gegeben Funktion

$$f(x) = e^x + 2x$$

mit dem folgenden Code:

```
    from scipy import exp, linspace
    import matplotlib.pyplot as plt

    def f(x): return exp(x) + 2*x

    x = linspace(-1, 1, 100)
    plt.clf()
    plt.grid()
    plt.plot(x, f(x), color="b")
    plt.show()
```

Wir erhalten den folgenden Graphen:



Wir wählen nun den Startwert $x_0 = 1$, und berechnen die Nullstelle von f sowohl mit der bisherigen `newton`-Funktion, als auch mit der neuen `newton_ext`-Funktion:

```
x0 = 1
def fprime(x): return exp(x) + 2
print("With the exact derivative we get a root at      {}.".format(newton(f, fprime, x0)))
print("With an approximate derivative we get a root at {}.".format(newton_ext(f, x0)))
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_04_14.py
With the exact derivative we get a root at      -0.3517337112491958.
With an approximate derivative we get a root at -0.35173371124919584.
```

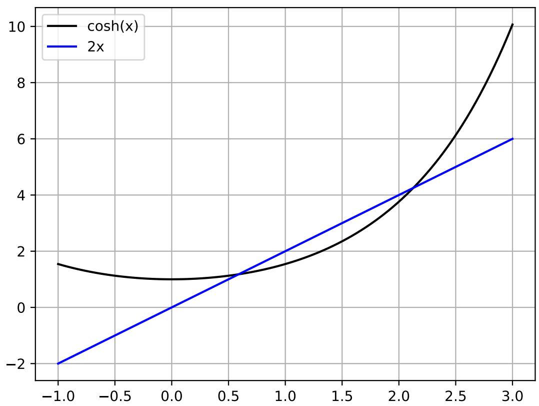
Exercise 4.15

(1)

Wir plotten zunächst die beiden Funktionen:

```
from scipy import cosh, linspace
import matplotlib.pyplot as plt

x = linspace(-1, 3, 100)
plt.clf()
plt.plot(x, cosh(x), color="k", label="cosh(x)")
plt.plot(x, 2*x, color="b", label="2x")
plt.grid()
plt.legend()
plt.show()
```

Wir erhalten den folgenden Graphen:



Wir bestimmen nun die beiden Nullstellen mit dem folgenden Code:

```
from exercise_04_14 import prime, newton_ext

def f(x): return cosh(x) - 2*x
x1 = 0.5
x2 = 2
print( "The intersections are at {} and {}.".format(newton_ext(f, x1),
    newton_ext(f, x2)) )
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_04_15.py
The intersections are at 0.5893877634693506 and 2.1267998926782568.
```

(2)

Die gegebene Funktion f ist konvex; für einen beliebigen Startwert x_0 mit $f'(x_0) \neq 0$ konvergiert daher das Newton-Verfahren gegen eine der beiden Nullstellen. Der einzige krtische Punkt ist daher der Wert $x \in \mathbb{R}$ mit $f'(x) = 0$ (dieser ist eindeutig, da f als konvexe Funktion nur ein Minimum besitzen kann). Wir bestimmen diesen Wert näherungsweise:

```
fprime = prime(f)
print("The newton method cannot start at {}.".format(newton_ext(fprime, 1)))
```

Wir erhalten das folgende Ergebnis:

```
The intersections are at 0.5893877634693506 and 2.1267998926782568.
```

Exercise 4.16

Wir passen zunächst die bisherige `newton`-Methode an, um mit scipy `array` zu arbeiten:

```
from scipy import *
from scipy.linalg import *

class TimeOutError(Exception):
    pass

def newton(f, Df, x):
    n = 1
    xold = x
    xnew = x
    while n <= 100:
        D = Df(xold)
        xnew = xold - inv(D) @ f(xold)
        if norm(xnew - xold) <= 1e-6:
            return xnew
        xold = xnew
        n += 1
    raise TimeOutError("the calculation takes too long")
```

Anschließend bestimmen wir die gesuchte Nullstelle:

```
def f(p):
  (x,y,z) = p
  xnew = 9*x**2 + 36*y**2 + 4*z**2 - 36
  ynew = x**2 - 2*y**2 - 20*z
  znew = x**2 - y**2 + z**2
  return (xnew, ynew, znew)

def J(p):
  (x,y,z) = p
  A = zeros((3,3))
  A[0,0] = 18*x
  A[0,1] = 72*y
  A[0,2] = 8*z
  A[1,0] = 2*x
  A[1,1] = -2*y
  A[1,2] = -20
  A[2,0] = 2*x
  A[2,1] = -2*y
  A[2,2] = 2*z
  return A

x0 = (1,1,1)
print( "One root is {}.".format(newton(f, J, x0)) )
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_04_16.py
One root is [ 0.89362823  0.89452701 -0.04008929].
```

Exercise 4.17

Wir nutzen die Methoden `quad` und `romberg` mit den Standardoptionen, und die Methoden `trapz` und `simps` mit einer Unterteilung der jeweiligen Intervalle in 1000 gleichmäßige Teilintervalle:

```
from scipy import sin, exp, pi, linspace
from scipy.integrate import quad, romberg, trapz, simps

f = sin
def g(x): return 3**(3*x-1)
def h(x): return exp(x**2)

x1 = linspace(0, pi, 1000)
x2 = linspace(0, 2, 1000)
x3 = linspace(0, 1, 1000)

print( "         {:19} {:21} {:20}".format( "sin(x) from 0 to pi ", "3^(3x-1) from 0 to 2", "e^(x^2) from 0 to 1" ) )
print( "quad:    {:19.17f} {:21.17f} {:20.17f}".format( quad(f,0,pi)[0], quad(g,0,2)[0], quad(h,0,1)[0] ) )
print( "romberg: {:19.17f} {:21.17f} {:20.17f}".format( romberg(f,0,pi), romberg(g,0,2), romberg(h,0,1) ) )
```

```
print( "trapz:   {:19.17f} {:21.17f} {:20.17f}".format( trapz(f(x1), x1),
    trapz(g(x2), x2), trapz(h(x3), x3)  ) )
print( "simps:   {:19.17f} {:21.17f} {:20.17f}".format( simps(f(x1), x1),
    simps(g(x2), x2), simps(h(x3), x3)  ) )
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_04_17.py
         sin(x) from 0 to pi  3^(3x-1) from 0 to 2  e^(x^2) from 0 to 1
quad:    2.00000000000000000  73.62823966492641148  1.46265174590718150
romberg: 2.00000000000132117  73.62823966494875094  1.46265174591010316
trapz:   1.99999835177085195  73.62850679530863829  1.46265219986153205
simps:   1.99999999999701172  73.62824054651866845  1.46265174667154541
```

Exercise 4.18

Wir nutzen die folgende Funktion, um eine gegebene quadratische Matrix A als $A = L + D + U$ wie in der Aufgabenstellung zu zerlegen:

```
def ldu(A):
    (n, m) = A.shape
    if n != m:
        return ValueError("matrix is not square")
    L = zeros((n,n))
    D = zeros((n,n))
    U = zeros((n,n))
    for i in range(n):
        L[i,:i] = A[i,:i]
        D[i,i] = A[i,i]
        U[i, i+1:] = A[i, i+1:]
    return(L,D,U)
```

Wir bestimmen nun zunächst die exakte Lösung mithilfe des folgenden Codes:

```
A = array([[4,3,0],[3,4,-1],[0,-1,4]])
print("A:")
print(A)

b = array([24,30,-24])
print("b:")
print(b)

xct = solve(A, b)
print("The solution to Ax = b is:")
print(xct)
```

Anschließend berechnen wir mithilfe des Gauß-Seidel-Algorithmus eine approximative Lösung:

```
L,D,U = ldu(A)
n = 3
x = array([3,3,3])
for i in range(n+1):
    x = inv(D + L) @ (b - U @ x)
```

```
print("An approximate solution to Ax = b is:")
print(x)
print("The difference is:")
print(xct - x)
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_04_18.py
A:
[[ 4  3  0]
 [ 3  4 -1]
 [ 0 -1  4]]
b:
[ 24  30 -24]
The solution to Ax = b is:
[ 3.  4. -5.]
An approximate solution to Ax = b is:
[ 2.57885742  4.35095215 -4.91226196]
The difference is:
[ 0.42114258 -0.35095215 -0.08773804]
```

Exercise 4.19

Wir interpolieren die gegebenen Werte mit einem Polynom p vom Grad 7. Hierfür nutzen wir die Funktion `KroghInterpolator` aus dem Paket `scipy.interpolate`; mit dieser lassen sich die Ableitungen $p^{(n)}(0)$ bestimmen, aus denen sich dann die Koeffizienten bestimmen lassen:

```
from scipy import *
from scipy.misc import factorial
from scipy.interpolate import KroghInterpolator

xarr = linspace(0,3,7)
f = [1,1,0,0,3,1,2]
p = KroghInterpolator(xarr, f)

# getting the coefficients

deriv = p.derivatives(0)
coeff = []
for n in range(len(deriv)):
    coeff.append(deriv[n]/factorial(n))

print("The coefficients (via interpolation) are {}:")
print(coeff)
```

Wir bestimmen die Koeffizienten anschließend noch einmal durch ein entsprechendes lineares Gleichungssystem:

```
from scipy.linalg import solve
A = zeros((7,7))
for i in range(len(xarr)):
```

```
    for j in range(len(f)):
        A[i,j] = xarr[i]**j

print("The coefficients (via linear equations) are {}:")
print(solve(A, f))
```

Wir erhalten den folgenden Output:

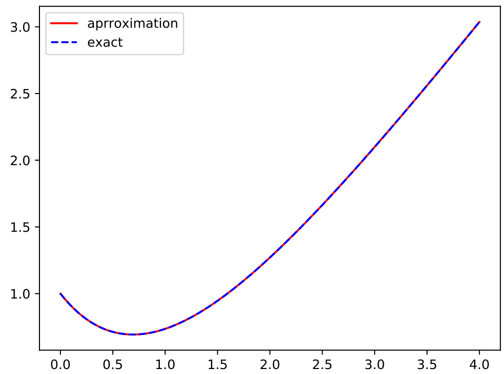
```
$ python exercise_04_19.py
The coefficients (via interpolation) are {}:
[1.0, -13.666666666666661, 65.46666666666664, -110.66666666666664,
    81.333333333333314, -26.666666666666661, 3.1999999999999993]
The coefficients (via linear equations) are {}:
[   1.          -13.66666667   65.46666667 -110.66666667   81.33333333
-26.66666667    3.2        ]
```

Exercise 4.20

Wir nutzen den folgenden Code:

```
from scipy import *
from scipy.integrate import odeint
import matplotlib.pyplot as plt

def du(u, x): return x - u
xs = linspace(0,4,100)
u0 = 1.0
ys = odeint(du, u0, xs)

plt.clf()
plt.plot(xs, ys, "r", label="aprroximation")
plt.plot(xs, xs - 1 + 2*exp(-xs), "b--", label="exact")
plt.legend()
plt.show()
```

Wir erhalten damit das folgende Bild:



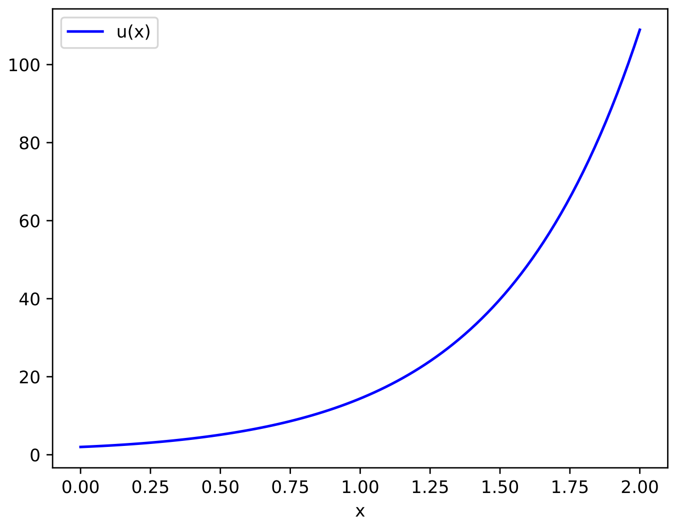
Die beiden Graphen sind praktisch nicht unterscheidbar.

Exercise 4.21

Wir nutzen den folgenden Code:

```
from scipy import *
from scipy.integrate import odeint
import matplotlib.pyplot as plt

def f(y, x):
    (u, uprim) = y
    dy = (uprim, (3*x+2)/(3*x-1)*uprim + (6*x-8)/(3*x-1)*u)
    return dy

# initial value
u0 = (2, 3)
I = linspace(0,2, 100)

# solving and ploting
sol = odeint(f, u0, I)
plt.clf()
plt.plot(I, sol[:,0], color='b', label="u(x)")
plt.legend()
plt.xlabel('x')
plt.show()
```

Wir erhalten den folgenden Graphen:



Exercise 4.22

Das gegebene Randwertproblem

$$u' = -|u(x)|, \quad u(0) = 0, \quad u(4) = -2$$

für $u \in C^1[0,1]$ hat, entgegen der Aufgabenstellung, keine Lösung:

Die Funktion u wäre monoton fallend, da $u'(x) = -|u(x)| \leq 0$ für alle $x \in [0,4]$. Daher ist

$$I \coloneqq \{x \in [0,4] \mid u(x) < 0\}$$

ein Intervall mit Randpunkt 4. Wegen der Stetigkeit von u ist I halboffen; es gibt also $x_0 \in [0,4]$ mit $I = (x_0, 4]$. Da $u(0) = 0$ gilt, ist dabei $x_0 > 0$.

Auf dem Intervall I gilt nun $-|u| = u$. Also erfüllt u auf I die Differenzialgleichung $u' = u$. Somit gibt es eine Konstante $c \in \mathbb{R}$ mit $u(x) = ce^x$ für alle $x \in I$. Es gilt

$$-2 = u(4) = ce^4$$

und somit $c = -2e^{-4}$. Dann gilt aber

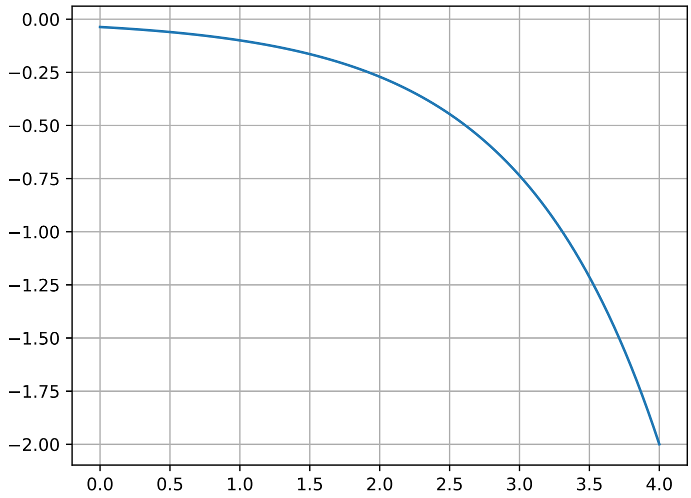
$$u(x_0) = \lim_{x \downarrow x_0} u(x) = \lim_{x \downarrow x_0} -2e^{x-4} = -2e^{x_0 - 4} < 0,$$

im Widerspruch zu $x_0 \notin I$.

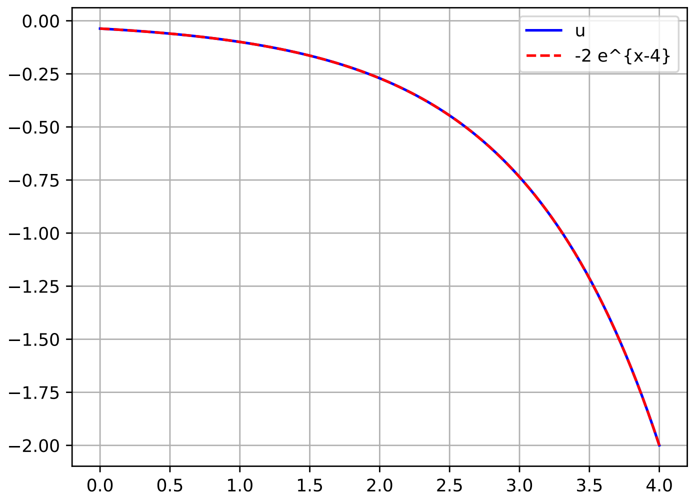
Unsere obige Argumentation lässt sich auch spiegelt sich auch in dem Verhalten von `scipy` wieder: Das folgende Programm würde eine Lösung der Differenzgliechung liefern und plotten:

```
from scipy import *
from scipy.integrate import solve_bvp
import matplotlib.pyplot as plt

def f(x,y): return -abs(y)
def bc(yl, yr): return abs(yl) + abs(yr+2)

I = linspace(0, 4)

y = zeros((1, len(I)))
y[0][0] = 1

res = solve_bvp(f, bc, I, y)

x = linspace(0, 4, 100)
u = res.sol(x)[0]

plt.clf()
plt.plot(x, u)
plt.grid()
plt.show()
```

Wir erhalten den folgenden Graphen:



Die Randbedingung $u(4) = -2$ wird zwar beachtet, die Randbedingung $u(0) = 0$ hingegen nicht. Der eingezeichnete Graph ist, entsprechend der obigen Argumentation, der von $-2e^{x-4}$:



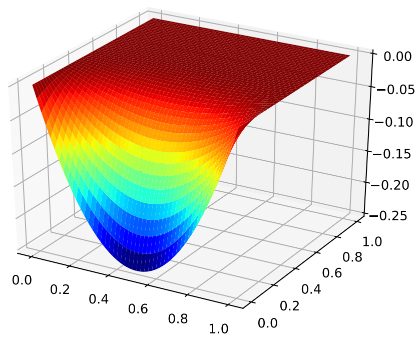
Exercise 4.23

(1)

Wir plotten `L` durch den folgenden zusätzlichen Code:

```
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
from matplotlib import cm

fig = plt.figure()
ax = fig.gca(projection='3d')
x, y = meshgrid(x, y)
surf = ax.plot_surface(x, y, L, rstride=1, cstride=1, cmap=cm.jet, linewidth
    =0)
plt.show()
```

Wir erhalten hierdurch das folgende Bild:



(2)

Das Programm berechnet für $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ eine approximative Lösung der Differentialgleichung

$$\Delta u = 0 \text{ auf } \Omega \qquad \text{und} \qquad u = g \text{ auf } \partial\Omega.$$

wobei

$$g(x,y) = \begin{cases} y(y-1) & \text{falls } x = 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dabei soll für alle für alle $i, j = 0, \dots, 50$ der Eintrag `L[i,j]` approximativ dem Funktionswert $u(i/50, j/50) =: u_{ij}$ entsprechen. Die aus

$$u = g \text{ auf } \partial\Omega$$

folgenden Randbedingungen, wird durch die folgende Zeile des Codes festgelegt:

```
L[0,:] = y*(y-1)
```

Man bemerke, dass die Randwerte `L[i,j]` (mit $i = 0, 50$ und $j = 0, 50$) im Laufe des Programmes unverändert bleiben. Die Gleichung

$$\Delta u = 0 \text{ auf } \Omega$$

wird mit

$$\frac{1}{h^2}(-u_{i-1,j} - u_{i,j-1} + 4u_{ij} - u_{i+1,j} - u_{i,j+1}) = f(ih, jh) \overset{!}{=} 0$$

(siehe Abschnitt 4.8, Seite 60 im Skript) durch die folgende Gleichung des Codes implementiert:

```
            L[i,j] = (Lt[i+1,j] + Lt[i-1,j] + Lt[i,j+1] + Lt[i,j-1]) / 4
```

Der Code funktioniert also dadurch, dass auf dem Rand mit den exakten Werten für u_{ij} begonnen wird, und diese dann mithilfe der Gleichung

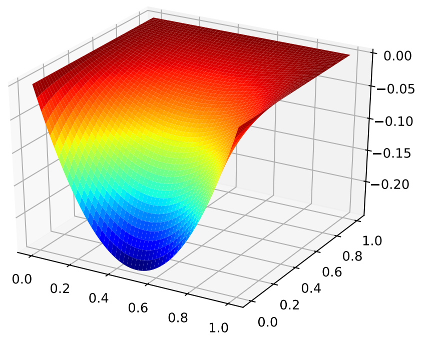
$$u_{ij} = \frac{u_{i-1,j} + u_{i,j-1} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1}}{4}$$

auch nach innen hin propagiert werden.

Um unsere Vermutung zu überprüfen, bestimen wir mithilfe der gegebenen Methode `poisson_solver` die exakte Lösung, und plotten diese:

```
from poissonsolver import *
f = (lambda x,y: 0)
def g(x,y):
    if x == 0:
        return y*(y-1)
    return 0
poisson_solver(f, g, 51)
```

Wir erhalten den folgenden Graphen:



Der Vergleich mit dem obigen Graphen bestätigt unsere Vermutung.

5 Python in Computer Algebra, SymPy

Exercise 5.24

(1)

Wir testen, für welche Werte von α die Determinante von A verschwindet:

```
from sympy import symbols, Matrix, solveset, linsolve

alpha, beta, x, y, z = symbols('alpha beta x y z')

A = Matrix([[1,1,1],[1,0,-1],[alpha,-1,1]])
b = Matrix([3,beta,-3])
print( "The kernel is nonzero for the following values of alpha:" )
print( solveset(det(A)) )
```

Als Ergebnis erhalten wir `{-3}`. Somit hat das lineare Gleichungssystem $Ax = 0$ nur für $\alpha \neq -3$ nicht-triviale Lösungen.

(2)

Die Spalten von A sind genau linear abhängig, wenn $\det A = 0$ gilt. Nach dem vorherigen Aufgabenteil gilt dies nur für $\alpha = -3$.

(3)

Für $\alpha \neq -3$ ist die Matrix invertierbar, sodass das Gleichungssystem $Ax = b$ dann für jedes $\beta \in \mathbb{R}$ eine eindeutige Lösung hat. Für $\alpha = 3$ hat die Matrix A immer noch Rang 2, weshalb sich die Werte für β in diesem Fall wie folgt bestimmen lässt:

```
v,w = A.subs(alpha,-3).columnspace()    # column space is 2-dimensional
B = v.col_insert(1, w).col_insert(2, b)
print("For alpha = -3 there exists a solution for the following values of beta:")
print( solveset(det(B)) )
```

Wir erhalten den Wert $\beta = 0$.

(4)

Für $\alpha = -3$, $\beta = 0$ berechnen wir die Lösungen des Gleichungssystems $Ax = b$ mit `linsolve`:

```
print("For alpha = -3, beta = 0 the solutions are given as follows:")
print( linsolve( [Eq(x+y+z,3), Eq(x-z,0), Eq(-3*x-y+z,-3) ], [x,y,z] ) )
```

Als Lösung erhalten wir `{(z, -2*z + 3, z)}`.

Exercise 5.25

Wir bestimmen zunächst die Eigenwerte und zugehörigen Eigenvektoren:

```
from sympy import symbols, Matrix, simplify, limit, cos, sin

eps = symbols('eps')
A = Matrix([[1 + eps*cos(2/eps), -eps*sin(2/eps)],[-eps*sin(2/eps), 1 + eps*
    cos(2/eps)]])

e = A.eigenvects()
lambda1 = simplify(e[0][0])
lambda2 = simplify(e[1][0])
phi1 = simplify(e[0][2][0])
phi2 = simplify(e[1][2][0])

print("The eigenvalues are:")
print(lambda1)
print(lambda2)
print("The corresponding eigenvectors are:")
print(phi1)
print(phi2)
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
The eigenvalues are:
sqrt(2)*eps*cos(pi/4 - 2/eps) + 1
sqrt(2)*eps*cos(pi/4 + 2/eps) + 1
The corresponding eigenvectors are:
Matrix([[-1], [1]])
Matrix([[1], [1]])
```

Inbesondere sind die Eigenwerte φ_1 und φ_2 unabhängig von ϵ. Wir bestimmen nun die Grenzwerte von $A(\epsilon)$ und $\lambda_i(\epsilon)$ für $\epsilon \to 0$:

```
print("For eps -> 0 the matrix A becomes:")
print( A.applyfunc( (lambda x: limit(x, eps, 0) ) ) )
print("For eps -> 0 the eigenvalues become:")
print( limit(lambda1, eps, 0) )
print( limit(lambda2, eps, 0) )
```

Wir erhalten die folgenden Ergebnisse:

```
For eps -> 0 the matrix A becomes:
Matrix([[1, 0], [0, 1]])
For eps -> 0 the eigenvalues become:
1
1
```

Exercise 5.26

Die Abbildung $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $x \mapsto x^3 + 3x$ ist stetig mit $\lim_{x\to-\infty} f(x) = -\infty$ und $\lim_{x\to\infty} f(x) = \infty$; nach dem Zwischenwertsatz ist f deshalb surjektiv. Außerdem ist f differenzierbar mit $f'(x) = 3x^2 + 3 > 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$, weshalb f streng monoton steigend, und somit injektiv ist. Die Abbildung f ist also bijektiv, weshalb die Gleichung $f(x) = a$ für jedes $a \in \mathbb{R}$ eine eindeutige reelle Lösung besitzt.

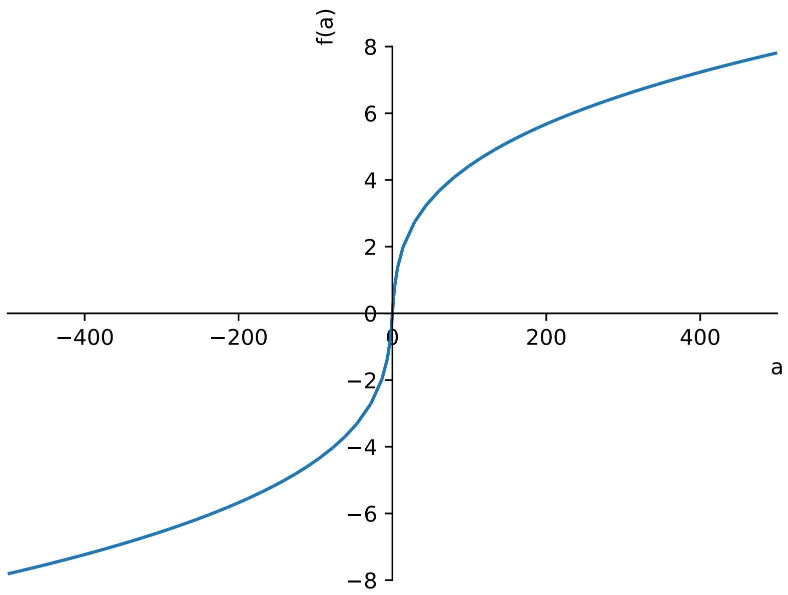
Mithilfe von scipy lassen sich die drei verschiedenen Lösungen bestimmen:

```
from sympy import *

a, x = symbols('a x', real=True)
sol = solveset(x**3 + 3*x - a, x)
print(sol)
```

Wir erhalten die folgenden Lösungen:

```
{-(-1/2 - sqrt(3)*I/2)*(-27*a/2 + sqrt(729*a**2 + 2916)/2)**(1/3)/3 +
    3/((-1/2 - sqrt(3)*I/2)*(-27*a/2 + sqrt(729*a**2 + 2916)/2)**(1/3)),
    -(-1/2 + sqrt(3)*I/2)*(-27*a/2 + sqrt(729*a**2 + 2916)/2)**(1/3)/3 +
    3/((-1/2 + sqrt(3)*I/2)*(-27*a/2 + sqrt(729*a**2 + 2916)/2)**(1/3)),
    -(-27*a/2 + sqrt(729*a**2 + 2916)/2)**(1/3)/3 + 3/(-27*a/2 + sqrt(729*a
    **2 + 2916)/2)**(1/3)}
```

Wir können nun die reelle Lösung im geforderten Intervall $[-500, 500]$ plotten.



Exercise 5.27

Wir passen die bisherige `newton`-Methode dahingehend an, dass sie anstelle einer Funktion f einen „Funktionsausdruck“ der Form `exp(x) + 2*x` annimmt, und diesen intern in eine entsprechende Funktion umwandelt.

```
def newton(f, var, x0): # var = variable name
    fprime  = f.diff(var)
    g = lambdify(var, f)
    gprime = lambdify(var, fprime)
    n = 1
    xold = x0
    xnew = x0
    while n <= 100:
        d = gprime(xold)
        if d == 0:
            raise ZeroDivisionError("derivative vanishes at {}".format(xold))
        xnew = xold - g(xold)/d
        if abs(xnew - xold) < 1.E-7:
            return xnew
        xold = xnew
        n += 1
    raise TimeOutError("the calculation takes too long")
```

Hiermit bestimmen wir die Lösungen der Gleichungen $e^x + 2x = 0$ und $\cosh(x) = 2x$, wobei wir die gleichen Startwerte wie in den entsprechenden vorherigen Aufgaben nutzen:

```
x = symbols('x')
f = exp(x) + 2*x
g = cosh(x) - 2*x
x0 = 1
print("The root of e^x + 2x is {}.".format(newton(f, x, 1)))
x1 = 0.5
x2 = 2
print("The functions cosh(x) and 2x intersect at {} and {}.".format(newton(g,
    x, x1), newton(g, x, x2)))
```

Wir erhalten die folgenden Ergebnisse:

```
The root of e^x + 2x is -0.3517337112491958.
The functions cosh(x) and 2x intersect at the two points 0.5893877634693505
    and 2.1267998926782568.
```

Dies sind die gleichen Ergebnisse wie zuvor.

Exercise 5.28

Wir nutzen den folgenden Code:

```
from sympy import symbols, Matrix

class TimeOutError(Exception):
    pass
```

```

# expect f to be a matrix
def newton(f, var, x0):
    n = len(var)
    if n != len(f):
        raise ValueError("wrong function type")
    Df = Matrix(n, n, (lambda i,j: f[i].diff(var[j])))
    def g(x):
        sublist = list(zip(var, x))
        substitutor = (lambda e: e.subs( sublist ))
        return f.applyfunc( substitutor )
    def Dg(x):
        sublist = list(zip(var, x))
        substitutor = (lambda e: e.subs( sublist ))
        return Df.applyfunc( substitutor )
    n = 1
    xold = x0
    xnew = x0
    while n <= 100:
        D = Dg(xold)
        xnew = xold - D**(-1) @ g(xold)
        if (xnew - xold).norm() < 1e-6:
            return xnew
        xold = xnew
        n += 1
    raise TimeOutError("the calculation takes too long")
```

Wir testen unser Programm anhand der gegebenen Funktion:

```
x, y, z = symbols('x y z')

f = Matrix([9*x**2 + 36*y**2 + 4*z**2 - 36, x**2 - 2*y**2 - 20*z, x**2 - y**2
     + z**2])
x0 = Matrix([1,1,0])
print( "One root is {}.". format(newton(f, [x,y,z], x0).applyfunc(float)) )
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
One root is Matrix([[0.893628234476483], [0.894527010390578],
    [-0.0400892861591528]]).
```

Exercise 5.29

Wir bestimmen zunächst die allgemeine Lösung ohne Betrachtung des Anfangswertes:

```
from sympy import symbols, Function, Eq, dsolve, solve, simplify

u = Function('u')
x = symbols('x')

ode = Eq(u(x).diff(x) + u(x), x)
gen_sol = dsolve(ode, u(x))
expr = simplify(gen_sol.rhs)

```

```
print("The general solution is: {}".format(expr))
```

Wir erhalten die Lösungen `C1*exp(-x) + x - 1`. Wir bringen nun die Anfangsbedingung ins Spiel:

```
C1 = symbols('C1')
b = solve( Eq(expr.subs(x,0),1) )
expr2 = expr.subs(C1, b[0])

print("The initial value results in the solution: {}".format(expr2))
```

Wir erhalten damit die Lösung `x - 1 + 2*exp(-x)`.

Exercise 5.30

Wir lösen zunächst die Differentialgleichung ohne Betrachtung der Randwerte:

```
from sympy import symbols, Function, Eq, simplify, dsolve, solve

u = Function('u')
x = symbols('x')

ode = Eq(u(x).diff(x,x), u(x))
gen_sol = dsolve(ode, u(x))
expr = simplify(gen_sol.rhs)

print("The general solution is {}".format(expr))
```

Wir erhalten damit die Lösungen `C1*exp(-x) + C2*exp(x)`. Nun bringen wir noch die Randwerte ins Spiel:

```
C1, C2 = symbols('C1 C2')
b = solve( [Eq(expr.subs(x,0),0), Eq(expr.diff(x).subs(x,1),-1)], [C1, C2] )
expr2 = simplify(simplify(expr.subs(b))) # simplify not idempotent?

print("The boundary values lead to the solution {}".format(expr2))
```

Wir erhalten damit die konkrete Lösung `-2*E*sinh(x)/(1 + exp(2))`. (Das doppelte Anwenden von `simplify` führt seltsamerweise zu einem besseren Ergebnis als das einmalige Anwenden.)

Exercise 5.31

Wir bestimmen die Skalarprodukte $\langle p_i, p_j \rangle$ und tragen diese in eine Matrix ein:

```
from sympy import symbols, integrate, Matrix, eye, S

x = symbols('x')

def innerL2(f, g, var):
    return integrate( f*g, (var, 0, 1) )

```

```
p = [ 1, x-S(1)/2, x**2 - x + S(1)/6 ]
B = Matrix( len(p), len(p), (lambda i,j: innerL2(p[i], p[j], x) ) )
print(B)
```

Wir erhalten die folgende Matrix:

```
Matrix([[1, 0, 0], [0, 1/12, 0], [0, 0, 1/180]])
```

Dies ist eine Diagonalmatrix, was die paarweise Orthogonalität der p_i zeigt.

Exercise 5.32

Wir berechnen die Legendre-Polynome, indem wir auf die Polynome $1, x, x^2, \dots, x^n$ das Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahren anwenden:

```
from sympy import symbols, Matrix, integrate

x = symbols('x')

def innerL2(f,g, var):
    return integrate( f*g, (var, -1, 1) )

def legendre(n):
    p = [x**i for i in range(n+1)]
    normsq = []
    for i in range(n+1):
        s = 0
        for j in range(i):
            s += innerL2(p[i], p[j], x)/normsq[j] * p[j]
        p[i] -= s
        normsq.append( innerL2(p[i], p[i], x) )
    return p
```

Wir testen die Orthogonalität der ersten 6 Legendre-Polynome:

```
p = legendre(6)
print( Matrix(6, 6, (lambda i,j: innerL2(p[i], p[j], x))) )
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
Matrix([[2, 0, 0, 0, 0, 0], [0, 2/3, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 8/45, 0, 0, 0], [0,
    0, 0, 8/175, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 128/11025, 0], [0, 0, 0, 0, 0,
    128/43659]])
```

Es handelt sich um eine Diagonalmatrix, was die Orthogonalität zeigt.