#### Solutions to Exercises to

# **Programming Methods** in Scientific Computing

David Bauer Jendrik Stelzner

Letzte Änderung: 31. Januar 2018

# Inhaltsverzeichnis

3	Python, the Fundamentals	3
4	Python in Scientific Computation	23
5	Python in Computer Algebra, SymPy	38
6	The language C++	46

## 3 Python, the Fundamentals

#### Exercise 3.1

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

```
print("Calculate machine epsilon:")
  eps = 1.0
3
   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:")
11
12
  eps = 1.0
13
14
  while eps > 0:
15
     eps /= 2
    i += 1
17
  eps *= 2
18 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

$$(0,00...001)_2 \cdot 2^{-1022} = 2^{-1074}.$$

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.

```
class Polynomial:
       def __init__(self, coeff):
2
3
           self.coeff = coeff
4
       def __str__(self):
5
6
           if self.coeff == []:
7
               s = "0"
               s += "{} x^0".format(self.coeff[0])
10
11
           for i in range(1,len(self.coeff)):
               s += " + {} x^{} . format(self.coeff[i], i)
12
13
           return s
14
       def
             repr (self):
15
16
           return str(s)
17
       def __call__(self, x):
18
19
           s = 0
           for i in range(len(self.coeff)):
20
21
               s += self.coeff[i]*x**i
22
           return s
23
             _add__(self, other):
24
           l = []
25
```

```
if len(self.coeff) > len(other.coeff):
26
27
               l += self.coeff
28
               for i in range(len(other.coeff)):
29
                   l[i] += other.coeff[i]
30
               l += other.coeff
31
               for i in range(len(self.coeff)):
32
33
                    l[i] += self.coeff[i]
           return Polynomial(l)
34
35
36
            _eq__(self, other):
           return self.coeff == other.coeff
37
38
39
       def derivative(self):
           coeff = []
40
           for i in range(1,len(self.coeff)):
41
               coeff.append(i * self.coeff[i])
42
43
           return Polynomial(coeff)
44
45
       def antiderivative(self):
           coeff = [0]
46
47
           for i in range(len(self.coeff)):
               coeff.append(self.coeff[i]/(i+1))
48
49
           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 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.

```
class Matrix():
       def __init__(self, entries):
2
3
            \overline{m} = len(entries)
            if m == 0:
4
5
                raise ValueError("height must be positive")
6
            n = len(entries[0])
7
            if n == 0:
                raise ValueError("width must be positive")
8
            for i in range(1, m):
9
10
                if len(entries[i]) != n:
11
                     raise ValueError("rows must have the same width")
            self.height = m
12
13
            self.width = n
            self.entries = entries
14
15
            __getitem__(self, i):
return self.entries[i]
                                            # allows to get the rows via A[i]
16
17
18
                                            # allows to set rows via A[i]
19
       def __setitem__(self, i, k):
20
            self.entries[i] = k
21
            __str__(self):
rows = ["["]*self.height
22
                                            # allows print(A) for a Matrix A
23
24
            for j in range(self.width): # construct output columnwise, align left
                numbers = []
                                            # numbers to appear in column j
25
                                            # maximal length of a number in column j
26
                maxlen = 0
27
                for i in range(self.height):
                     s = str(self[i][j])
28
29
                     numbers.append(s)
30
                     if len(s) > maxlen:
                         maxlen = len(s)
31
                for i in range(self.height):
32
                     # pad the entries if they are too short
rows[i] += numbers[i] + " "*(maxlen—len(numbers[i])) + " "
33
34
35
            for r in rows:
36
                s += r[:-1] + "]\n" # remove white space at the end of ech line
37
                                       # remove empty line at the end
38
            s = s[:-1]
            return s
39
40
41
            __repr__(self):
42
            return str(self)
43
             _mul__(self, other):
44
            \overline{\textbf{if}} se\overline{\textbf{lf}}.width != other.height:
45
46
                raise TypeError('matrix dimensions do not match')
            newentries = []
47
            for i in range(self.height):
48
49
                row = []
50
                for j in range(other.width):
                     s = self[i][0] * other[0][j]
51
                                                         # makes s have the right type
                     for k in range(1, self.width):
52
53
                          s += self[i][k] * other[k][j]
                     row.append(s)
54
                newentries.append(row)
55
```

```
return Matrix(newentries)
 56
 57
 58
                  _(self, other):
              _eq__
            if self.height != other.height or self.width != other.width:
 59
                     return False
 60
            for i in range(self.height):
 61
                 for j in range(self.width):
 62
                     if self[i][j] != other[i][j]:
 63
                          return False
 64
 65
            return True
 66
 67
        def mapentries(self, f):
                                           # applies a function to all entries
            A = zeromatrix(self.height, self.width) # zeromatrix is defined below
 68
 69
            for i in range(self.height):
 70
                 for j in range(self.width):
 71
                     A[i][j] = f(self[i][j])
 72
             return A
 73
 74
        def addrow(self, i, j, c):
                                           # add c times row j to row i
 75
            for k in range(self.width):
                 self[i][k] = c * self[j][k] + self[i][k]
 76
 77
                 # makes c responsible for implementing the operations
 78
        def addcolumn(self, i, j, c): # add c times column j to column i
 79
            for k in range(self.height):
 80
                 self[k][i] = c * self[k][j] + self[k][i]
 81
 82
 83
        def multrow(self, i, c):
                                           # multiply row i with c
            for j in range(self.width):
 84
 85
                 self[i][j] = c * self[i][j]
 86
        def multcolumn(self, j, c):
    for i in range(self.height):
 87
                                           # multiply row j with c
 88
 89
                 self[i][j] = c * self[i][j]
 90
        def swaprows(self, i, j):  # swap row
   if i > self.height or j > self.height:
 91
                                           # swap rows i and j
 92
 93
                 raise ValueError("swap nonexistent rows")
            l = self[i]
 94
            self[i] = self[j]
 95
 96
            self[j] = l
 97
 98
        def transpose(self):
            T = zeromatrix(self.width, self.height)
 99
100
            for i in range(self.height):
101
                 for j in range(self.width):
                     T[j][i] = self[i][j]
102
103
```

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)
```

Die Assoziativität der Matrixmultiplikation testen wir mit dem folgenden Code:

```
1  A = Matrix([[0,1],[1,0],[1,1]])
2  print("A:")
3  print(A)
4  B = Matrix([[1,2,3,4],[5,6,7,8]])
5  print("B:")
6  print(B)
7  C = Matrix([[1,0],[0,1],[1,0],[0,1]])
8  print("C:")
9  print(C)
10  print("Checking if A(BC) == (AB)C:")
11  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
3
          if type(num) == Rational:
4
               p = num/Rational(denum)
5
               self.num = p.num
6
               self.denum = p.denum
7
          elif type(num) != int:
               raise TypeError("numerator is no integer")
           elif type(denum) != int:
10
               raise TypeError("denumerater is no integer")
           elif denum == 0:
11
```

```
raise ZeroDivisionError("denumerator is zero")
12
13
           else:
14
                self.num = num
                self.denum = denum
15
16
           __str__(self): # allows print(x) for Rat.
return "{}/{}".format(self.num, self.denum)
                              # allows print(x) for Rational x
17
18
19
20
            __repr__(self):
21
           return str(self)
22
23
             add (self, other):
           \overline{if} type(other) == int:
24
25
                return self + Rational(other)
           elif type(other) == Rational:
26
                return Rational( self.num * other.denum + self.denum * other.num,
27
                      self.denum * other.denum )
           raise TypeError("unsupported operand type(s) for + or add(): '
28
                Rational' and '{}'".format(type(other).__name__))
29
             _sub___(self, other):
30
           \overline{if} ty\overline{pe}(other) == int:
31
                return self - Rational(other)
32
           elif type(other) == Rational:
33
                return Rational( self.num * other.denum - self.denum * other.num,
34
                     self.denum * other.num )
35
           raise TypeError("unsupported operand type(s) for - or sub(): '
                Rational' and '{}'".format(type(other). name ))
36
             _mul__(self, other):
37
           if type(other) == int:
38
                return self * Rational(other)
39
40
           elif type(other) == Rational:
                return Rational( self.num * other.num, self.denum * other.denum )
41
42
           raise TypeError("unsupported operand type(s) for * or mul():
                Rational' and '{}'".format(type(other).__name__))
43
44
             _truediv___(self, other):
           if type(other) == int:
45
                return self / Rational(other)
46
           elif type(other) == Rational:
47
                if other.num == 0:
48
                    raise ZeroDivisionError("division by zero")
49
                return Rational( self.num * other.denum, self.denum * other.num)
50
           raise TypeError("unsupported operand type(s) for / or truediv():
51
                Rational' and '{}'".format(type(other).__name__))
52
           __pow__(self, n): #
if not type(n) == int:
53
                                # supports only integer powers
54
55
                raise TypeError("unsupported operand type(s) for ** or pow(): '
                    Rational' and '{}'".format(type(n).__name__))
56
57
                return Rational(self.num**n, self.denum**n)
            return Rational(self.denum, self.num)**(-n)
58
59
       def __pos__(self):
60
```

```
return Rational( self.num, self.denum )
61
62
              _neg__(self):
63
             return Rational( -self.num, self.denum )
64
65
66
              abs (self):
             \overline{\textbf{if}} se\overline{\textbf{lf}}.num <= 0 and self.denum > 0:
67
68
                 return Rational(-self.num, self.denum)
             elif self.num >= 0 and self.denum < 0:</pre>
69
70
                 return Rational(self.num, -self.denum)
             return Rational(self.num, self.denum)
72
               _eq__(self, other):
73
74
             \overline{\text{if type}}(\text{other}) == \text{int}: \# \text{allows comparison to int, used for } x == 0
75
                 return (self == Rational(other))
             return (self.num * other.denum == self.denum * other.num)
76
77
78
               _float__(self):
             return self.num / self.denum
```

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

```
1 from copy import deepcopy
3
  # expects the matrix entries to be comparable to \theta in a sensible way
4
   def naive_lu(A):
       if A.height != A.width:
           raise ValueError("matrix is not square")
6
       U = deepcopy(A)
                         # circumvent pass by reference
8
       n = U.height
       L = identitymatrix(n)
10
       # bring U in upper triangular form, change L such that always LU = A
       for j in range(n):
11
           if U[j][\bar{j}] == 0:
12
13
                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
14
15
16
                U.addrow(i, j, -U[i][j]/U[j][j])
       return (L,U)
17
```

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:

```
7 print("U:")
8 print(U)
9 B = Matrix([[0,1],[1,0]])
10 print("B:")
11 print(B)
12 print("Trying to calculate the LU decomposition of B:")
13 (L,U) == naive_lu(B)
```

Als Output erhalten wir das Folgende:

```
$ python exercise_03_04.py
[3 2 1]
[6 6 3]
[9 10 6]
[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.

```
from copy import deepcopy
  from math import sqrt
2
3
4
  # expects int or float as matrix entries
5
  def cholesky(A):
      if A.height != A.width:
          raise ValueError("matrix is not square")
      B = deepcopy(A)
8
      n = B.height
      L = zeromatrix(n,n)
10
11
      for i in range(n):
```

```
12
            rowsum = 0
            for j in range(i):
13
14
                 s = 0
                for k in range(j):
    s += L[i][k] * L[j][k]
15
16
17
                 L[i][j] = (B[i][j] - s)/L[j][j]
                 rowsum += L[i][j]**2
18
19
            L[i][i] = sqrt(B[i][i] - rowsum)
20
       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:

```
1 A = Matrix([[1,2,1],[2,5,2],[1,2,10]])
2 print("A:")
  print(A)
  L = cholesky(A)
5 print("L:")
  print(L)
  print("L * L^T:")
8 print(L * L.transpose())
9 B = Matrix([[1.01E-2, 0.705, 1.42E-2],[0.705,49.5,1],[1.42E-2,1,1]])
10 print("B:")
11 print(B)
12 \mid L = \text{cholesky(B)}
13 print("L:")
14 print(L)
15 print("L * L^T:")
16 print(L * L.transpose())
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_05.py
Α:
[1 2 1 ]
[2 5 2 ]
[1 2 10]
[1.000]
[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]
В:
[0.0101 0.705 0.0142]
[0.705 49.5 1
[0.0142 1
[0.1004987562112089 0
                                          0
                                                            ]
```

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

```
from copy import deepcopy
2
3
  # expects the matrix entries to be comparable to 0 in a sensible way
4
  def invert(A):
5
       if A.height != A.width:
           raise ValueError("matrix is not square")
       B = deepcopy(A)
                        # circumvent pass by reference
8
       n = B.height
       Inv = identitymatrix(n)
9
10
       B = B.mapentries(Rational)
                                        # make all
       Inv = Inv.mapentries(Rational) # entries rational
11
       # bring B in lower triangular form
12
       for j in range(n):
13
          p = -1
for i in range(j,n):
14
15
16
               if B[i][j] != 0:
17
                   p = i
                   break
18
19
           if p == -1:
               raise ZeroDivisionError("matrix is not invertible")
20
21
               i in range(p+1,n):
               Inv.addrow(i, p, -B[i][j]/B[p][j]) # import: change inverse
22
                   first
       23
24
25
       for i in range(n):
           Inv.multrow(i, B[i][i]**(-1))
B.multrow(i, B[i][i]**(-1))
26
                                           \#**(-1) also works for Rational
27
28
       # bring B into identity form
       for j in range(n):
29
30
           for i in range(j):
               Inv.addrow(i, j, -B[i][j])
31
               B.addrow(i, j, -B[i][j])
32
33
       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:

```
1  A = Matrix([[3,-1,2],[-3,4,-1],[-6,5,-2]])
2  print("A:")
3  print(A)
4  B = invert(A)
5  print("A^(-1) with rationals:")
6  print(B)
7  print("A^(-1) with floats:")
8  print(B.mapentries(float))
9  print("Checking if A*B == I (using rationals):")
10  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
[3 -1 2]
\begin{bmatrix} -3 & 4 & -1 \\ [-6 & 5 & -2] \end{bmatrix}
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:
0.0
                   [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
4
5
  # and to be nonsingular
  def grdecomp(A):
6
       if A.height != A.width:
7
           return ValueError("only square matrices are supported")
       n = A.height
       Q = deepcopy(A)
10
11
       R = identitymatrix(n)
       for j in range(n):
12
           # make the j—th column of Q orthogonal to the next columns
13
14
           for k in range(j):
               s = 0 # inner product of j—th and k—th columns
15
               for i in range(n):
16
                   s \leftarrow Q[i][j] * Q[i][k]
17
18
               Q.addcolumn(j, k, -s)
```

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:

```
1  A = Matrix([[12,-51,4],[6,167,-68],[-4,24,-41]])
print("A:")
print(A)
((0,R) = qrdecomp(A)
print("0:")
print(0)
print("0 * Q^T:")
print(0 * Q.transpose())
print("R:")
print(R)
print("0*R:")
print("0*R:")
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_03_07.py
[12 -51 4 ]
[6 167 -68]
[-4 24 -41]
[-0.2857142857142857 \ 0.17142857142857143 \ -0.9428571428571428 \ ]
Q * Q^T:
[0.99999999999998
                   1.474514954580286e-16 -1.6653345369377348e-16
[1.474514954580286e-16 0.99999999999999 4.996003610813204e-16 ]
[-1.6653345369377348e{-16}\ 4.996003610813204e{-16}\ 1.0
[0.0 175.0
                    -69.9999999999999]
[0.0 0.0]
                    35.0
0*R:
[6.0 167.0 -68.0 
[-4.0 24.0 -41.0
```

#### **(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  $\int_0^{\pi} \sin(x) dx$  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  $m=1,\dots,10$  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{:.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<sup>m</sup> intervals:
        estimate
                                 error
        1.5707963267948966
                                 0.42920367320510344200
2
        1.8961188979370398
                                 0.10388110206296019555
        1.9742316019455508
                                 0.02576839805444919307
        1.9935703437723395
                                 0.00642965622766045186
5
                                 0.00160663902985547224
        1.9983933609701445
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  $a_0 \le a_1 \le \cdots \le a_n$ , 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:

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.

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

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

Für alle  $n \geq 1$  und  $0 \leq k \leq n-1$  gilt deshalb

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

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

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

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

```
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:
          1.57158316545863208091
          1.49067886169885532865
m=
          1.46971227642966528748
m=3
          1.46442031014948170764
m=
m=5
          1.46309410260642858148
          1.46276234857772702291
m=6
          1.46267939741858832292
m=
m=8
          1.46265865883777390621
m=9
          1.46265347414312651964
          1.46265217796637525538
m = 10
          1.46265185392199392744
m = 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  $R_n(x) := e^x - T_n(x)$ , dass es für jedes  $x \in \mathbb{R}$  ein  $\xi$  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  $x \ge 0$  gilt  $e^{\xi} \le e^x \le 3^x$ , und somit gilt

$$|R_n(x)| \le \frac{3^x x^n}{(n+1)!}$$
 für alle  $x \ge 0$ .

Für alle  $x \le 0$  gilt  $e^{\xi} \le e^0 = 1$ , und somit

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

Dies führt zu dem folgenden Code:

```
def exp approx(x):
2
3
       y = 1
d = 6
                    # current approx
                    # number of digits
4
5
       n = 1
       fac = 1
6
7
       if x >= 0:
           while fac < (3**x) * (x**(n+1)) * 10**d:
                y += x**n / fac
10
                fac *= n
       if x < 0:
11
           while fac < ((-x)**(n+1)) * 10**d:
12
13
                y += x**n / fac
14
                n += 1
                fac *= n
15
       return y
```

Wir testen die Genauigkeit des Programms mit dem folgenden Code:

Wir erhalten den folgenden (gekürzten) Output:

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

```
difference (10 digits
               approximation
                                                  exact
 Х
      )
-30
                   -0.0000855
                                              0.000000
                                                           0.0000855145
                   0.0000551
                                              0.0000000
                                                          -0.0000550745
-29
-28
                   0.0000050
                                              0.0000000
                                                          -0.0000050079
-27
                   -0.0000045
                                              0.000000
                                                           0.0000044619
-26
                  -0.0000014
                                              0.0000000
                                                           0.0000013633
-25
                  -0.0000006
                                              0.000000
                                                           0.0000006464
-24
                  -0.0000003
                                              0.000000
                                                           0.0000002671
                  -0.0000000
                                              0.0000000
                                                           0.0000000403
-23
-22
                  -0.0000000
                                              0.000000
                                                           0.0000000071
                   -0.0000000
-21
                                              0.000000
                                                           0.000000192
[...]
21
          1318815734.4832141
                                    1318815734.4832146
                                                           0.0000004768
          3584912846.1315928
                                    3584912846.1315918
                                                          -0.0000009537
22
          9744803446.2489052
                                    9744803446.2489033
                                                          -0.0000019073
23
 24
         26489122129.8434715
                                   26489122129.8434715
                                                           0.000000000
 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  $x \ge 23$  und  $x \le -26$  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):
2
       n = 1
3
       xold = x
4
       xnew = x
       while n <= 100:
6
           d = f_prime(xold)
7
           if d == 0:
               raise ZeroDivisionError("derivative vanishes at {}".format(xold))
8
9
           xnew = xold - f(xold)/d
           if 0 \le xnew - xold \le 1.E-7 or 0 \le xold - xnew \le 1.E-7:
10
               return xnew
11
           xold = xnew
12
           n += 1
13
       raise TimeOutError("the calculation takes too long")
14
```

(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):
2
3
       x = (a+b)/2
       while abs(f(x)) >= err:
           \# f(a) < 0 < f(b) by assumption
4
5
           if f(x) > 0:
               b = x
6
8
                a = x
9
           x = (a+b)/2
10
       return x
11
  def bisect_rec(f, a, b, err=1e-6):
12
       x = (a+b)/2
13
       if abs(f(x)) < err:</pre>
14
15
           return x
16
          f(x) > 0:
           return bisect_rec(f, a, x, err)
17
18
       else:
           return bisect_rec(f, x, b, err)
19
```

Wir testen die beiden Funktionen an der gegebenen Funktion

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

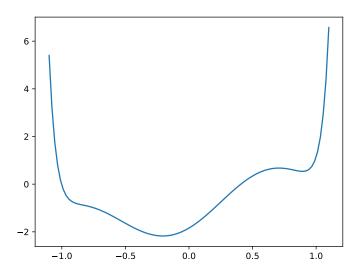
Hierfür plotten wir die Funktion zunächst mithilfe des folgenden Codes:

```
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 in der Konsole 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 bisherige 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:</pre>
```

```
d = f_prime(xold)
if d == 0:
11
12
                 raise ZeroDivisionError("derivative vanishes at {}".format(xold))
13
            xnew = xold - f(xold)/d
if abs(xnew - xold) <= 1.E-7:</pre>
14
15
16
                 return xnew
            xold = xnew
17
            n += 1
18
19
        raise TimeOutError("the calculation takes too long")
20
21
22
23
   ### new Newton method
24
25
   def prime(f, h=1e-6):
        return (lambda x: (f(x+h)-f(x))/h)
26
27
28
   def newton_ext(f, x):
29
        fprime = prime(f)
30
        return newton(f, fprime, x)
```

Wir plotten nun zunächst die gegeben Funktion

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

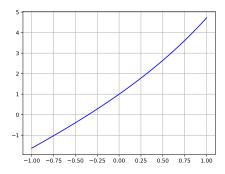
mit dem folgenden Code:

```
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:

Wir erhalten in der Konsole 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

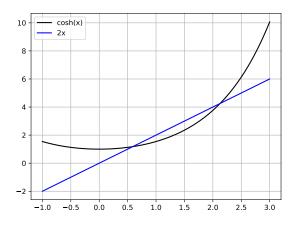
**(1)** 

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 kritische Punkt ist daher der eindeutige Wert  $x \in \mathbb{R}$  mit f'(x) = 0. 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 newton method cannot start at 1.4436349751811388.
```

#### 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):
4
5
       pass
6
7
   def newton(f, Df, x):
       n = 1
       xold = x
9
       xnew = x
10
       while n <= 100:
11
           D = Df(xold)
12
           xnew = xold - inv(D) @ f(xold)
13
           if norm(xnew - xold) \le 1e-6:
14
15
               return xnew
16
           xold = xnew
           n += 1
17
       raise TimeOutError("the calculation takes too long")
18
```

Anschließend bestimmen wir die gesuchte Nullstelle:

```
def f(p):
     (x,y,z) = p
     xnew = 9*x**2 + 36*y**2 + 4*z**2 - 36
3
4
    ynew = x**2 - 2*y**2 - 20*z
    znew = x**2 - y**2 + z**2
     return (xnew, ynew, znew)
7
8
  def J(p):
    (x,y,z) = p
    A = zeros((3,3))
10
    A[0,0] = 18*x
11
    A[0,1] = 72*y
12
    A[0,2] = 8*z
13
14
    A[1,0] = 2*x
    A[1,1] = -4*y
15
    A[1,2] = -20
16
17
    A[2,0] = 2*x
    A[2,1] = -2*y
18
19
    A[2,2] = 2*z
20
     return A
21
22
  x0 = [(1,1,0), (1,-1,0), (-1,1,0), (-1,-1,0)]
23
  print("initial value\troot")
  for i in range(4):
24
       print( "{}\t{}.".format(x0[i], newton(f, J, x0[i])) )
```

Wir erhalten den folgenden Output:

#### 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)
y2 = linspace(0, 2, 1000)
x3 = linspace(0, 1, 1000)
```

Wir erhalten den folgenden Output:

```
$ python exercise_04_17.py
         sin(x) from 0 to pi
                               3^{3}(3x-1) from 0 to 2
                                                      e^(x^2) from 0 to 1
         2.000000000000000000
                               73.62823966492641148
                                                      1.46265174590718150
quad:
         2.0000000000132117
romberg:
                               73.62823966494875094
                                                      1.46265174591010316
trapz:
         1.99999835177085195
                               73.62850679530863829
                                                      1.46265219986153205
simps:
         1.9999999999701172
                               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):
2
       (n, m) = A.shape
3
       if n != m:
4
           return ValueError("matrix is not square")
5
       L = zeros((n,n))
6
       D = zeros((n,n))
7
       U = zeros((n,n))
8
       for i in range(n):
9
           L[i,:i] = A[i,:i]
10
           D[i,i] = A[i,i]
11
           U[i, i+1:] = A[i, i+1:]
       return(L,D,U)
12
```

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

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

Wir erhalten den folgenden Output:

#### 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
5
  xarr = linspace(0,3,7)
  f = [1,1,0,0,3,1,2]
  p = KroghInterpolator(xarr, f)
  # getting the coefficients
10
  deriv = p.derivatives(0)
11
  coeff = []
12
13 for n in range(len(deriv)):
       coeff.append(deriv[n]/factorial(n))
14
15
  print("The coefficients (via interpolation) are:")
  print(coeff)
```

Zur Überprüfung unserer Ergebnisses bestimmen wir 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:

#### Exercise 4.20

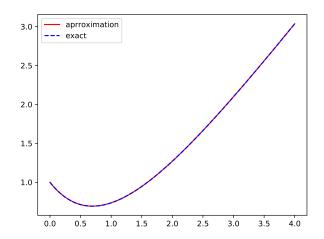
Wir nutzen den folgenden Code:

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

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

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

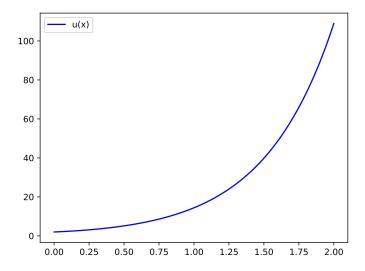
Wir erhalten damit das folgende Bild, in denen die beiden Graphen praktisch nicht unterscheidbar sind:



Wir nutzen den folgenden Code:

```
from scipy import *
    from scipy.integrate import odeint
import matplotlib.pyplot as plt
    \operatorname{def} f(y, x):
 5
         (u, uprim) = y 
dy = (uprim, (3*x+2)/(3*x-1)*uprim + (6*x-8)/(3*x-1)*u)
 6
7
 81
         return dy
 9
# initial value
11 u0 = (2, 3)
12 I = linspace(0,2, 100)
13
14 # solving and ploting
15 | sol = odeint(f, u0, I)
16 plt.clf()
    plt.plot(I, sol[:,0], color='b', label="u(x)")
17
plt.legend()
plt.show()
```

Wir erhalten den folgenden Graphen:



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  $u'(x) = -|u(x)| \le 0$  für alle  $x \in [0,4]$  gilt. Daher ist

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

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

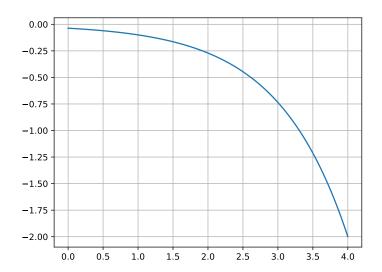
$$u(x_0) = \lim_{x \downarrow x_0} u(x) = \lim_{x \downarrow x_0} -2e^{x-4} = -2e^{x_0-4} < 0,$$

im Widerspruch zu  $x_0 \notin I$ .

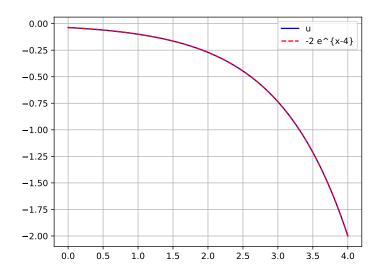
Unsere obige Argumentation spiegelt sich auch in dem Verhalten von scipy wieder: Das folgende Programm würde eine Lösung der Differenzgliechung liefern und plotten:

```
from scipy import \ast
   from scipy.integrate import solve_bvp
3
  import matplotlib.pyplot as plt
  def f(x,y): return -abs(y)
  def bc(yl, yr): return abs(yl) + abs(yr+2)
8
  I = linspace(0, 4)
10 \mid y = zeros((1, len(I)))
  y[0][0] = 1
11
12
  res = solve_bvp(f, bc, I, y)
13
14
  x = linspace(0, 4, 100)
15
16 \mid u = res.sol(x)[0]
17
  plt.clf()
18
19 plt.plot(x, u)
20 plt.grid()
21 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  $-2e^{x-4}$ , wie aus dem folgenden Bild hervorgeht:



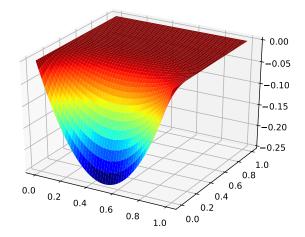
#### (1)

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

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

wobei

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

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

$$u = g$$
 auf  $\partial \Omega$ 

folgenden Randbedingungen werden durch die folgende Zeile des Codes festgelegt:

$$1 \mid L[0,:] = y*(y-1)$$

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

$$\Delta u = 0$$
 auf  $\Omega$ 

wird mit

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

(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

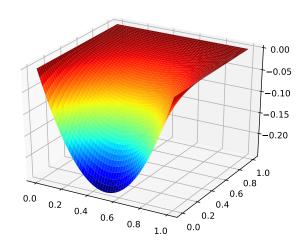
$$u_{ij} = \frac{u_{i-1,j} + u_{i,j-1} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1}}{4}$$

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  $\alpha$  die Determinante von A verschwindet:

```
from sympy import symbols, Eq, Matrix, solveset, linsolve, det
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  $\alpha=-3$  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  $\beta$  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 für 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] ) )
```

Wir bestimmen zunächst die Eigenwerte und zugehörigen Eigenvektoren:

```
from sympy import symbols, Matrix, simplify, limit, cos, sin
3
  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])
10 phi2 = simplify(e[1][2][0])
12
  print("The eigenvalues are:")
13 print(lambda1)
14 print(lambda2)
15 print("The corresponding eigenvectors are:")
  print(phil)
16
17 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  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  unabhängig von  $\epsilon$ . 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
```

Die Abbildung  $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ ,  $x \mapsto x^3 + 3x$  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.

(Leider haben wir es auch nach viel herumprobieren nicht geschaft, simpy richtig entscheiden zu lassen, welche der drei Nullstellen jeweils reell sind. Daher argumentieren wir diesen Teil rein mathematisch ohne zugehörigen Code.)

Mithilfe von scipy lassen sich die drei verschiedenen Lösungen bestimmen:

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

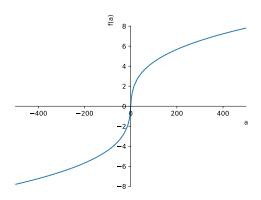
Wir erhalten die folgenden Lösungen:

```
 \begin{cases} -(-1/2-\operatorname{sqrt}(3)*I/2)*(-27*a/2+\operatorname{sqrt}(729*a**2+2916)/2)**(1/3)/3+\\ 3/((-1/2-\operatorname{sqrt}(3)*I/2)*(-27*a/2+\operatorname{sqrt}(729*a**2+2916)/2)**(1/3)),\\ -(-1/2+\operatorname{sqrt}(3)*I/2)*(-27*a/2+\operatorname{sqrt}(729*a**2+2916)/2)**(1/3)/3+\\ 3/((-1/2+\operatorname{sqrt}(3)*I/2)*(-27*a/2+\operatorname{sqrt}(729*a**2+2916)/2)**(1/3)),\\ -(-27*a/2+\operatorname{sqrt}(729*a**2+2916)/2)**(1/3)/3+3/(-27*a/2+\operatorname{sqrt}(729*a**2+2916)/2)**(1/3)\} \end{cases}
```

Wir können nun die reelle Lösung im geforderten Intervall [-500, 500] mit dem folgenden Code plotten:

```
1 f = list(sol)[0]
2 plot(f, (a, -500, 500))
```

Damit erhalten wir die folgenden Graphen:



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
2
       fprime = f.diff(var)
3
       g = lambdify(var, f)
       gprime = lambdify(var, fprime)
4
5
      xold = x0
6
7
       xnew = x0
8
       while n <= 100:
9
           d = gprime(xold)
10
           if d == 0:
               raise ZeroDivisionError("derivative vanishes at {}".format(xold))
11
12
           xnew = xold - g(xold)/d
13
           if abs(xnew - xold) < 1.E-7:
14
               return xnew
15
           xold = xnew
           n += 1
16
       raise TimeOutError("the calculation takes too long")
17
```

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:

Wir erhalten in der Konsole die folgenden Ergebnisse:

```
$ python exercise_05_27.py
The root of e^x + 2x is -0.3517337112491958.
The functions cosh(x) and 2x intersect at 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):
```

```
4
       pass
5
6
  # expect f to be a matrix
7
  def newton(f, var, x0):
8
       n = len(var)
       if n != len(f):
           raise ValueError("wrong function type")
10
       Df = Matrix(n, n, (lambda i,j: f[i].diff(var[j])))
11
12
       def g(x):
           sublist = list(zip(var, x))
13
14
           substitutor = (lambda e: e.subs( sublist ))
           return f.applyfunc( substitutor )
15
       def Dg(x):
16
17
           sublist = list(zip(var, x))
           substitutor = (lambda e: e.subs( sublist ))
18
           return Df.applyfunc( substitutor )
19
20
       xold = x0
21
22
       xnew = x0
23
       while n <= 100:
           D = Dg(xold)
24
25
           xnew = xold - D**(-1) @ g(xold)
26
           if (xnew - xold).norm() < 1e-6:
27
               return xnew
28
           xold = xnew
           n += 1
29
       raise TimeOutError("the calculation takes too long")
30
```

Wir testen unser Programm anhand der gegebenen Funktion:

Wir erhalten in der Konsole den folgenden Output:

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))
```

Anschließend nutzen wir noch die Anfangsbedingung:

```
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 in der Konsole den folgenden Output:

```
$python exercise_05_29.py$ The general solution is: C1*exp(-x) + x - 1 The initial value results in the solution: 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))
```

Anschließend nutzen wir noch die Anfangsbedingungen:

```
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))
```

(Das doppelte Anwenden von simplify führt seltsamerweise zu einem besseren Ergebnis als das einmalige Anwenden.) Wir erhalten in der Konsole den folgenden Output:

```
$ python exercise_05_30.py The general solution is C1*exp(-x) + C2*exp(x) The boundary values lead to the solution -2*E*sinh(x)/(1 + exp(2))
```

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
3
  x = symbols('x')
4
5
  def innerL2(f,g, var):
       return integrate( f*g, (var, -1, 1) )
6
8
  def legendre(n):
       p = [x**i for i in range(n+1)]
9
10
       normsq = []
       for i in range(n+1):
11
12
           s = 0
           for j in range(i):
13
               s += innerL2(p[i], p[j], x)/normsq[j] * p[j]
14
15
           p[i] = s
           normsq.append( innerL2(p[i], p[i], x) )
16
17
       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, 2/3, 0, 0, 0], [0, 0, 8/45, 0, 0, 0], [0, 0, 8/175, 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.

## 6 The language C++

#### Exercise 6.33

Wir nutzen den folgenden Code:

```
#include <cmath>
#include <iostream>
 2
   #define PI 3.14159265358979323846
   6
            e h = (b-a)/n;  // length of subintverals
double result = f(a);  // current sum
e x = a;  // left border of current subinterval
     double h = (b-a)/n;
     double x = a;
       for(int i = 1; i < n; i++) {
  result += 4*f(x+h/2);
  result += 2*f(x+h);
10
11
12
13
       x += h;
14
            result -= f(b);
15
      result *= h/6;
            return result;
17
18
19
20 int main(){
     std::cout.precision(10); // set output precision
     std::cout << simpson(sin,0,PI,2000) << std::endl;</pre>
22
23
            return 0;
24
```

Hierdurch erhalten wir den folgenden Output:

```
$ g++ exercise_07_33.cpp -o exercise_07_33
$ ./exercise_07_33
1.999999178
```