

Serie 1

Besprechung: Fr. 24.2, in den Übungsgruppen

Forum: <https://forum.math.ethz.ch/c/spring-23/numerische-methoden-phys/>

Webpage: <https://metaphor.ethz.ch/x/2023/fs/401-2664-00L/>

1. Erste Schritte in Python

Diese Serie ist eine Einführung ins wissenschaftliche Rechnen in Python. Wir werden lernen effizient, lesbaren Python code zu schreiben.

Es gibt auch andere Tutorials. Welches ihr durcharbeitet ist nicht wichtig. Eigentliche Aufgaben gibt es in Aufgabe 4, 5, 7. Wenn ihr diese lösen könnt, dann reichen eure Python-Kenntnisse fürs Erste.

- Ein Tutorial für Studierende mit C++ Vorkenntnisse
<https://lec.inf.ethz.ch/tutorials/cpp-to-py>
- Scipy lecture notes: <http://www.scipy-lectures.org>

Die Syntax für eine Funktion ist:

```
def_function_name(argument):  
    """Dies_ist_eine_'docstring'."""  
  
    """Die_docstring_beschreibt_was_die_Funktion_macht."""  
    """  
  
    print(argument)  
    return 42.0  
  
def_another_function():  
    """Lest_den_Abschnitt_ueber_gute_Kommentare."""  
  
    #_Gibt_-42.0_zurueck._-<--_Uhm,_ja._Offensichtlich,  
    #_....._aber_wiso_-42.0??  
    return -42.0
```

In Python beginnt ein neuer Codeblock immer mit einem `:`. Der darauf folgende Block *muss* eingerückt werden. Der Standard sagt man soll mit 4 Leerschlägen einzurücken. Der Block endet mit dem Indentlevel.

Funktionen können und sollten mit einer docstring kommentiert werden. Die erste Zeile der docstring ist ein kurzer präziser Satz. Falls mehr gesagt werden muss, folgt eine leere Zeile und danach beliebig viel Text.

Bitte wenden!

Kommentare sind äusserst wichtig aber nicht alle Kommentare sind nützlich. Man muss trainieren gute Kommentare zu schreiben. Nicht immer ist ein Kommentar die beste Lösung um den Code leserlicher zu machen. Manchmal sollte man den Code umschreiben, damit er leichter zu verstehen ist. Eventuell braucht es eine neue Funktion, oder einen besseren Funktionsnamen. Dies wird deutlich beschrieben in Robert C. Martin, *Clean Code*.

Wir wollen den Code ausprobieren. Dazu speichern wir den Code in einer Datei `functions.py` und testen den code in `ipython`.

```
$ ipython3 functions.py
```

Nichts geschieht.

```
$ ipython3 -i functions.py
```

Diesmal passiert fast nichts, aber jetzt seid ihr in IPython drin. Ihr könnt direkt Code ausprobieren

```
In [1]: function_name("this is a string, i.e. text")
this is a string, i.e. text
Out[1]: 42.0
```

Modifiziert `function_name`, z.B. ersetzt 42.0 mit 43.0.

```
In [2]: function_name(3)
3
Out[2]: 42.0
```

Seltsam, die Funktion gibt immer noch 42.0 zurück. Man kann die Funktionen neuladen indem man das script nochmals ausführt:

```
In [3]: run functions.py
```

Beendet IPython mit `Ctrl+d` oder `exit`. Überigens kann ein laufendes Script mit `Ctrl+c` abgebrochen werden.

2. Sequenzen

Schreiben Sie ein Programm `sequences.py` welches $k = 2i + 1$ für $i = 0, 1, \dots, 10$ untereinander im Terminal ausgibt. Hinweise: `range` und f-strings.

3. Wurzel einer positiven Zahl

Das Newton-Verfahren zur Berechnung der Wurzel einer positiven Zahl a ist gegeben durch

$$x_k = \frac{1}{2} \left(x_{k-1} + \frac{a}{x_{k-1}} \right) \quad x_0 = 2a$$

Schreiben Sie ein Programm `newton.py`, welches \sqrt{a} bis auf eine gewisse Genauigkeit $|x_k - x_{k-1}| \leq \tau$ berechnet, und anschliessend die Approximation von \sqrt{a} und die dazu benötigte Anzahl an Iterationen k im Terminal ausgibt. Probieren Sie Ihr Programm mit $\tau = 10^{-5}$ und $a = 7$. Tipp: Es kann nützlich sein, eine `while`-Schleife zu verwenden:

Siehe nächstes Blatt!

```
while Bedingung :  
    Anweisungsblock
```

und die Funktion `abs`, die unter `numpy` verfügbar ist.

4. Arrays erstellen in Python

Die wichtigste Datenstruktur für numerisches Programmieren ist das mehrdimensionale Array. Das Paket dafür heisst `numpy`.

Für diese Aufgabe werden wir Python interaktiv benutzen. Startet `ipython3`.

Kleine strukturlose Arrays erstellt man so:

```
In [1]: import numpy as np  
In [2]: x = np.array([19.0, 12.0, -3.0])  
In [3]: A = np.array([[1.0, 0.0], [1.0, 4.0]])
```

Arrays mit lauter Nullen

```
In [4]: A = np.zeros((3, 4))  
In [5]: A  
In [6]: A.shape
```

In der ersten Aufgabe haben wir Docstrings gesehen. Wir können den Docstring einer beliebigen Funktion aufrufen:

```
In [7]: ?np.empty
```

Ganz praktisch, wenn man keinen Internetzugang hat.

Dies erstellt ein eindimensionales Array aufeinander folgenden Zahlen:

```
In [8]: ?np.arange  
In [9]: x = np.arange(4)  
In [10]: x = np.arange(3, 10)
```

Beachtet, dass die letzte Zahl nicht mit dabei ist, die erste aber schon. Es sind also 4 Elemente in `np.arange(4)`.

```
In [11]: np.arange(4).size
```

Ein uniformes Gitter in einer Dimension erstellt man am einfachsten mit:

```
In [12]: ?np.linspace  
In [13]: np.linspace(0.0, 1.0, 5)
```

Die Funktion `np.meshgrid` eignet sich für rechteckige Gitter in zwei Dimensionen. Ein 3×5 Gitter auf $[1, 2] \times [3, 4]$ erstellt man so:

Bitte wenden!

```
In [14]: x = np.linspace(1, 2, 3)
In [15]: y = np.linspace(3, 4, 5)
In [16]: X, Y = np.meshgrid(x, y)
```

5. Contour Plots.

Sei

$$f(x, y) = \sin(2\pi(x^2 + y)), \quad (1)$$

mit $(x, y) \in \mathbb{R}^2$.

- Plotten Sie Höhenlinien von f . *Hinweis:* `contour` aus `matplotlib`.
- Plotten Sie sowohl die Höhenlinien also auch eine konstante Farbe zwischen den Höhenlinien, ein sogenannter gefüllter Contourplot. *Hinweis:* `contourf` aus `matplotlib`.
- Plotten Sie einen Colorplot. *Hinweis:* Verwenden Sie `pcolormesh`.

6. Die Julia Menge.

Sei $f(z) = z^2 - 0.4 + 0.6i$ und $D = [-1, 1]^2 \subset \mathbb{C}$. Für 1000×1000 Punkte $z \in D$ berechne

$$g(z) = \max\{n \in \mathbb{N} : |f^n(z)| < 100\}. \quad (2)$$

Plotte $\log g$ mittels

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

...

```
plt.pcolormesh(np.real(z), np.imag(z), np.log(n_times_finite))
```

Das Problem ist so gewählt, dass eine einfache, elegante Lösung existiert. Falls irgendein Schritt kompliziert oder mühsam wird sollte man in die Referenzlösung schauen.

Schrittweise Anleitung:

- Implementiere f .
- Berechne ein 1D Gitter auf $[0, 1]$.
- Berechne ein 2D Gitter auf $[0, 1]^2 \subset \mathbb{R}^2$.
- Berechne ein Gitter für $D \subset \mathbb{C}$. Verwende die Abbildung $z = x + iy$. Die imaginäre Einheit ist in Python `1.0j`.
- Für $k < n$, berechne $f(f^{k-1}(z))$ und überprüfe ob der Wert endlich, d.h im Betrag kleiner als 100, ist. Numpy macht dies leicht: `y[np.abs(x) < 100] += 1.0`. Wähle $n = 60$ oder so.
- Plotte $\log g$.

Falls es klappt und Ihnen die Bilder gefallen, können sie die Auflösung erhöhen und $n = 600$ setzen. Mit `Ctrl+C` können Sie ein Skript abbrechen. Die Farben kann man via einer sogenannten colormap ändern.

Siehe nächstes Blatt!

7. Stencil Operationen in Numpy

In vielen Algorithmen findet man

$$y_i = f(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}), \quad i = 1, \dots, n. \quad (3)$$

Hier sind uns die Spezialfälle $i = 1$ und $i = n$ egal.

Damit wir eine solche Operation implementieren können brauchen wir “slices”.

Öffnet wieder ein interaktives IPython.

```
In [1]: import numpy as np
In [2]: A = np.arange(3*4).reshape((3, 4))
In [3]: A
In [4]: A[:,0]
In [5]: A[1,:]
In [6]: A[1:,:]
In [7]: A[1:-1,:]
```

Das reicht um einen 3-Punkte Stencil zu implementieren.

```
# -*- coding: utf-8 -*-

import numpy as np

def stencil(y, dx):
    """Zeigt wie man einen simplen Stencil implementiert.

    Berechnet die approximative zweite Ableitung der gegebenen
    Punktwerte.

    y : array_like
        Dies sind die Punktwerte der Funktion von der die
        zweite Ableitung berechnet wird.

    dx : double
        Gitterkonstante, delta x = x[1] - x[0].
    """

    # Sehr kurze, logisch äusserst eng verknüpfte Zuweisungen
    # darf man auf eine Zeile schreiben.
    left, middle, right = y[:-2], y[1:-1], y[2:]
    return ((right - middle)/dx - (middle - left)/dx)/dx

x = np.linspace(0, 1, 1000)
y = np.sin(2.0*np.pi*x)
stencil(y, x[1] - x[0])
```

Im oberen Beispiel sind `left`, `middle`, `right` keine Kopien von `y` sondern eine view. Das heisst, `left` sieht den gleichen Speicher wie `y`, jedoch ist das Array kürzer. `middle` zeigt auch wieder auf den gleichen Speicher, aber die Indizes sind verschoben.

Bitte wenden!

- (a) Im Beispiel wird die Operation $(b - a)/dx$ drei mal verwendet. Eigentlich könnte man das mit weniger Wiederholungen schreiben. Implementiert `first_derivative(y, dx)`. Schreibt eine neue Funktion `second_derivative`, welche `first_derivative` zweimal aufruft. Testet `second_derivative` in dem ihr die Werte mit `stencil` vergleicht. Tipp: `np.abs, np.all`.
- (b) Zählt die Anzahl Floating-point Operations (FLOP) in `stencil` und `second_derivative` und überlegt ob man dies weiter optimieren könnte.
- (c) Messt die Laufzeit der drei Implementationen. Tipp: `timeit`.
- (d) Explizite Schleifen seien langsam in Python. Stimmt das überhaupt? Falls ja, wie viel langsamer?

8. Operation entlang bestimmter Achsen

Die Dimension eines Arrays ist die Anzahl Achsen die es besitzt. Ein paar Beispiele:

```
In [1]: x = np.empty(34) # Eine Achse, eindimensional.
In [2]: x = np.empty((34,3)) # Zwei Achsen, zwei-dimensional.
In [3]: x[:,0] # ist ein slice entlang der ersten Achse.
```

Die Funktionen `np.max`, `np.min`, `np.sum` sind Reduktionen. Als Argument nehmen sie ein Array und geben einen Skalar zurück.

Es ist nicht immer gewünscht, dass die Reduktion über das ganze Array geschieht, manmal will man die Reduktion nur entlang einer bestimmen Achse ausführen. Die meisten Reduktionen in Numpy akzeptieren ein Argument `axis`. Wir schauen uns ein Beispiel an:

```
In [4]: x = np.random.random((2, 3, 1000))
In [5]: np.max(x, axis=2)
In [6]: np.min(x, axis=-1)
```

9. Broadcasting

Das letzte Thema welches besprochen werden muss ist *broadcasting*.

Wer `np.ndarray.shape` und `np.ndarray.reshape` noch nicht durchgelesen und ausprobiert hat, sollte dies nun tun.

```
In [1]: x = np.arange(4*5).reshape((4,-1))
In [2]: y = np.arange(4).reshape((4, 1))
In [3]: x + y
```

Dies ist erstaunlich, weil `A` und `x` nicht die gleiche Form (shape) haben.

Falls zwei Arrays `x` und `y` die gleiche Dimension haben und die gleiche Anzahl Elemente entlang jeder Achse mit mehr als einem Element haben, dann wird broadcasting angewandt. Dies bedeutet, dass entlang Achsen mit einem Element das Array mit Kopien von sich selbst aufgefüllt wird, bis die Form zum anderen Array passt.

Siehe nächstes Blatt!

```
[[1, 2, 3]] + [[1, 2, 3], --> [[1, 2, 3], + [[1, 2, 3],
                        [2, 3, 4]]      [1, 2, 3]]   [2, 3, 4]]
```

```
[[1, 2, 3]] + [[1], --> [[1, 2, 3], + [[1, 1, 1],
                        [2]]      [1, 2, 3]]   [2, 2, 2]]
```

Falls die zwei Arrays eine unterschiedliche Dimension haben, dann wird zuerst von links mit Achsen mit einem Element aufgefüllt und dann versucht broadcasting anzuwenden. Auch dazu ein Beispiel:

```
[ 1, 2, 3] + [[1], --> [[1, 2, 3]], + [[1],
                [2]]      [2]]

--> [[1, 2, 3], + [[1, 1, 1],
      [1, 2, 3]]   [2, 2, 2]]
```

Aufgepasst, die leeren Achsen werden links hinzugefügt:

```
[ 1, 2, 3] + [[1, 2]] --> [[1, 2, 3]] + [[1, 2]] --> Exception
Shape: (3,) + (1, 2) -->      (1, 3) + (1, 2)
```

Oft wird `reshape` benutzt um leere Achsen einzufügen, damit broadcasting klappt. In diesem Fall kann `np.newaxis` nützlich sein.

```
In [4]: A = np.arange(2*3*4).reshape(2, 3, 4)
In [5]: B = np.arange(2*4).reshape(2, 4)
In [6]: A + B
In [7]: A + B.reshape((A.shape[0], 1, A.shape[2]))
In [8]: A + B[:,np.newaxis,:]
```

(a) In Aufgabe 4, ersetzt `meshgrid` durch geeignetes broadcasting im Schritt (d).

10. PDB der Python Debugger [Optional]

Den Debugger muss man nicht gleich am ersten Tag kennen lernen. Wer schon genug gelernt hat für einen Tag kann dieses Kapitel ein andermal durcharbeiten.

PDB ist ein Debugger. Ein Debugger hilft Code zu debuggen. Er ermöglicht es Zeile für Zeile zu verfolgen, wie der Code ausgeführt wird und welche Werte in beliebigen Variablen gespeichert sind.

Lasst euch nicht vom archaischen Interface abschrecken. PDB ist besser als `printf` debugging.

Ein cheat-sheet ist empfehlenswert.

11. Fortgeschrittenes IPython [Optional]

IPython verfügt über interessante profiling tools. Dieser post erklärt recht gut: <http://pynash.org/2013/03/06/timing-and-profiling/>.

Bitte wenden!

Jupyter ermöglicht ein Mathematica ähnliches Interface. Bedenkt, dass ihr an der Prüfung Pythonskripte schreiben müsst, ihr werdet Jupyter nicht benutzen können. Aber ihr lernt nicht nur für die Prüfung.

YT ist eine Plotting- und Datenanalyse-Bibliothek für Physiker. Ein wesentlicher Unterschied zu matplotlib ist, dass es Einheiten kennt. Ausserdem kann es den Output einiger komplizierter 3D-Simulationen lesen. Das kann für eine Bachelorarbeit durchaus nützlich sein.