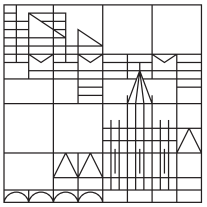
UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik (Theoretische Physik)
Dr. Stefan Gerlach
Raum P 817, Tel. (07531)88-3825
E-mail: stefan.gerlach@uni-konstanz.de

Universität Konstanz



Übungen zu Scientific Computing mit Python
Sommersemester 2025

Übungsblatt 3
Ausgabe 9.5., Übungen KW 20+21, Abgabe bis 23.5.

Kleine Programme und Rechnen mit Python

1. **Aufgabe: 1. Softwareprojekt**
   Als erstes kleines Programm wollen wir einen Einheitenumrechner programmieren. Dabei kommt es nicht auf Vollständigkeit an, jedoch soll das Programm immerhin bei der täglichen Arbeit hilfreich sein.

   (a) **Planung**: Überlege dir, wie die Ein- und Ausgabeeinheit sowie Zahlenwert eingelesen werden soll. Beginne mit wenigen Einheiten der Länge. Wie sollen die Umrechungsfaktoren bestimmt werden (über Basiseinheit oder mit Tabelle)?

   (b) **Implementieren und Testen**: Schreibe anhand der Planung ein Programm und überprüfe einfache Beispiele. Verbessere das Programm wenn nötig. Verwende git zur Versionskontrolle.

   (c) **Erweitern**: Erweitere das Programm, so dass die Parameter sowohl von der Kommandozeile, als auch abgefragt werden können. Jetzt können auch mehr Einheiten hinzugefügt werden. Das Programm soll auch die unterstützen Einheiten und eine Hilfe ausgeben (Option '-h').
   Hinweis: Die `argparse` Bibliothek ist hilfreich bei der Verarbeitung von Kommandozeilenoptionen. Im Jupterhub kann ein Skript mit `!python3 script.py ..` aufgerufen werden.

   (d) **Dokumentation**: Schreibe eine README-Datei, die das Programm dokumentiert (Optionen, unterstützte Einheiten, Beispiele)

2. **Aufgabe: Rechnen mit Python**

   (a) NumPy Arrays
      i. Erzeuge ein Numpy-Array mit den Werten von 1 - 100.
      ii. Halbiere alle Werte.
      iii. Ersetze alle geraden Werte mit 0.
      iv. Ersetze alle Werte, die Null sind mit 1.
      v. Normiere die Werte (Skaliere mit Faktor, so dass der Maximalwert 1 ist).

vi. Berechne die Differenz aufeinanderfolgender Werte.

(b) SymPy

i. Definiere den Ausdruck $f = x\mathrm{e}^{-x}$ und werte ihn für $x = 0; 0,1; 0,2; 0,4$ aus.

ii. Faktorisiere das Polynom $p(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 - 2x$ und finde die Nullstellen.

iii. Bestimme die Potenzreihe von $\sin(x)$ und $\tan(x)$ bis zur 5. Ordnung.

iv. Integriere die Funktion $f(x) = \sin(x)\mathrm{e}^{-x}$ und differenziere sie zur Probe.

v. Berechne (mit Einheiten): $F = ma$ für $m = 1$ kg und $a = 10$ m/s^2.

3. **Aufgabe: Testen und Multiprocessing**

(a) 2. Softwareprojekt: Binomialkoeffizientenberechner

i. Schreibe eine Funktion, die den Binomialkoeffizienten $\binom{n}{k}$ berechnet.

ii. Schreibe ein Programm, dass n und k als Option übernimmt und rufe damit die Funktion auf.

iii. Überprüfe die Parameter auf Eingabefehler.

iv. Schreibe mit `pytest` die fünf Tests $\binom{0}{0} = 1$, $\binom{5}{1} = 5$, $\binom{5}{5} = 1$, $\binom{-1}{1} = 0$ und $\binom{3}{2} = 0$ für die Funktion und verbessere, wenn nötig, die Funktion.

(b) Multiprocessing

i. Teste das Multiprocessing-Beispiel aus der Vorlesung für verschiedene Anzahl an Threads.

ii. Wieviele Cores hat der genutzte Rechner und welche Anzahl an Threads ist optimal (am schnellsten)?