

PYTHON IN DER WISSENSCHAFT

Tobias Kohn

Martin Guggisberg

5.9.2015

Programmieren im Unterricht mit Python

AGENDA

- Interaktives Programmieren mit IPython
- IPython Notebook, Baukasten für Simulationen
- Beispiele:
 1. Grosse Zahlen
 2. Numerisch Differenzieren
 3. Funktionen graphisch darstellen
 4. Dichte der Primzahlen
 5. Lineare Algebra mit NumPy
 6. Wachstum
 - Begrenztes Wachstum
 - Logistisches Wachstum
 - Wachstum mit Gift
 - Wachstum mit Gift (optimistisches Modell)
 7. Diskrete Optimierung
 - Fermat-Punkt
 - Kranausleger
 - Hängende Kette

PROGRAMMIEREN IN DER WISSENSCHAFT

WIESO ?

MÖGLICHE ANTWORTEN

1. Numerische Verfahren in Natur- und Ingenieurwissenschaften
2. Simulationen ersetzen Experimente
3. Komplexe Datensätze erfordern interaktive Visualisierungen
4. Existenz mächtiger wissenschaftlicher Bibliotheken, wie z. B. NumPy, SciPy,

PERSÖNLICHER BEZUG ZUM WISSENSCHAFTLICHEN RECHNEN

Seit 2011 halte ich die Veranstaltung

Einstieg ins wissenschaftliche Rechnen mit
Python

Mein Skript basiert auf den ersten Kapitel des Buchs

A Primer on Scientific Programming with Python
von Hans Petter Langtangen

```
from numpy import *  
from ODESolver import RungeKutta4
```

```
def rhs(u, t):  
    R = 1  
    return alpha*u*(1 - u/R)
```

$$\frac{du}{dt} = \alpha u(1 - u)$$

$$u(0) = 0.1$$

$$R = 1$$

$$\alpha = 0.2$$

TEXTS IN COMPUTATIONAL SCIENCE
AND ENGINEERING

6

Hans Petter Langtangen

A Primer on Scientific Programming with Python

Editorial Board

T. J. Barth

M. Griebel

D. E. Keyes

R. M. Nieminen

D. Roose

T. Schlick

IPYTHON NOTEBOOK - INTERAKTIVES PROGRAMMIEREN

Wir leben in aufregenden Rechenzeiten. Die Kombination aus preiswerter und leistungsfähiger Hardware und mächtigen Bibliotheken, welche mit IPython Notebook einfach zugänglich gemacht werden können, erlauben es komplexe Berechnungen mit wenigen Zeilen Programmcode auszuführen. L. Felipe Martins, 2014 Author von IPython Notebook Essentials

IPYTHON HIGHLIGHTS

IBM verwenden IPython Notebooks und IPython.parallel seit 2014 für ihr Wissenssystem Watson.

8000 Zeilen Java, Javascript und HTML5 (**2 min / query**) wurden zu **200** Zeilen Python (**2 Sek / query**) portiert.

Quelle: [IPython: A unified environment for interactive data analysis](#)

GESCHICHTE VON IPYTHON NOTEBOOK

- **2001** Fernando Perez entwickeln erste Version einer interaktiven Python Shell als Physikstudent an der University of Colorado Boulder
- **2006** Austausch mit dem Mathematik-Projekt SAGE, erster Prototyp von Notebook wird mit SAGE getestet.
- **2007-2008** Notebook unterstützt alle Möglichkeiten von IPython
- **2010-2012** Frontend-Backend Redesign: Web-Frontend, Python Kernel
- **2015** Neue Kernel kommen im Projekt JUPYTER dazu

IPYTHON NOTEBOOK TESTEN OHNE INSTALLATION UND OHNE ANMELDUNG

<https://try.jupyter.org/>



Welcome to the Temporary Notebook (tmpnb) service!

This Notebook Server was **launched just for you**. It's a temporary way for you to try out a recent development version of the IPython/Jupyter notebook.

WARNING

Don't rely on this server for anything you want to last - your server will be *deleted after 10 minutes of inactivity*.

Your server is hosted thanks to [Rackspace](#), on their on-demand bare metal servers, [OnMetal](#).

IPYTHON WEBSEITE

- <http://ipython.org/>

CLOUD LÖSUNG WAKARI

- [Wakari.io](http://wakari.io) Webseite
- Zahlreiche Beispiele

LOKALE INSTALLATION AUF DEM EIGENEN COMPUTER

- IPython installieren
 - z.B. mit Anaconda, Anleitung (engl)
- Terminalfenster öffnen
- Kommando eingeben
 - `ipython notebook`

```
PIUMP — ipython notebook — 80x24
...IUMP/python_in_der_wissenschaft — Python • ipython notebook ...
~/dev/PIUMP — ipython notebook
~/dev/PIUMP — -bash

mgu:PIUMP guggisberg$ ipython notebook
[I 16:54:41.970 NotebookApp] Serving local MathJax from /Users/guggisberg/.ipython/nbextensions/mathjax/MathJax.js at /nbextensions/mathjax/MathJax.js
[I 16:54:41.998 NotebookApp] The port 8888 is already in use, trying another random port.
[I 16:54:42.013 NotebookApp] Serving notebooks from local directory: /Users/guggisberg/dev/PIUMP
[I 16:54:42.014 NotebookApp] 0 active kernels
[I 16:54:42.014 NotebookApp] The IPython Notebook is running at: http://localhost:8889/
```

```
[I 16:54:42.014 NotebookApp] 2 kernels (twice)
[W 16:54:42.788 NotebookApp] 19.59ms re
[W 16:54:55.818 NotebookApp] 1.60ms ref
[W 16:55:33.228 NotebookApp] 2.30ms ref
[]
```

python_in_der_wissenschaft/ x +

localhost:8889/tree/python_in_der_wissens Search

Most Visited FMS-GeoGebra GMapTool | GMap... reveal.js - The HT... Kanti Baden

Jupyter

- ☐ media
- ☐ src
- ☐ Modellierung dynamischer Systeme.ipynb
- ☐ Python in der Wissenschaft - Beispiele.ipynb
- ☐ Reaktions-Diffusions-System.ipynb
- ☐ README.md

```
down all
165441 (
165441 (
165441 (
t
```

HAUPTMERKMALE IPYTHON NOTEBOOK

- Direkt im Browser **editieren** und **ausführen**, mit **Introspektion** und **Befehlszeilenergänzung**
- Ausführbares Programm und Ergebnisse werden zusammen gespeichert (elektronische Protokollierung)
- Rich Media-Einbettung, Ergebnisse können in vielen gängigen Formaten ausgegeben werden, wie z.B. **HTML, SVG, LATEX, PNG**, usw.
- MathJax für die Darstellung von **mathematischer Formeln** (Latex)
- MarkDown für **formatierte** und **verknüpfte** Texte

WISSENSCHAFTLICHE BIBLIOTHEKEN SCIPY UND NUMPY

- NumPy erweitert Python mit Effizienten numerischen Methoden zu N-dimensionalen Arrays
- SciPy baut auf NumPy auf und erweitert Python in den Bereichen:
 - Effizientes lösen von Gleichungssystemen
 - Lösen von diskreten Optimierungsproblemen
 - Numerische Integration
 - gewöhnliche Diff. Gl.

IPYTHON - BAUKASTEN FÜR SIMULATIONEN

- [Programming with Python, G. Wilson](#)
- [Data Science from scratch](#)
- [Wakari.io Beispiele](#)
- [Gallery of IPython Notebooks](#)
- [Weitere Beispiele: Cookbook-code](#)
- [IPython Documentation](#)
- [IPython Videos](#)
- [Vorlesung \(2014\) SciPy - Library of scientific algorithms for Python, von J.R. Johansson, Hirosawa, Wako-shi, JAPAN](#)

DEMO

Start

SciPy Beispiele

LABOR - EIGENES EXPLORIEREN

- Dynamische Systeme mit Python simulieren
- IPython Notebook zu Reaktion-Diffusion Simulationen
- IPython Notebook Schwarmsimulation

VIELEN DANK

Alle Unterlagen finden Sie auf:

<http://www.tigerjython.ch/kurs2015/>

oder

<https://github.com/mgje/PIUMP>

THANKS TO HAKIM EL HATTAB / HAKIM.SE
FOR THE HTML PRESENTATION FRAMEWORK
REVEAL.JS