

**Programmierung für Naturwissenschaften
Sommersemester 2015
Übungen zur Vorlesung: Ausgabe am 02.07.2015**

Punkteverteilung: Aufgabe 10.1: 4 Punkte, Aufgabe 10.2: 6 Punkte

Abgabe bis zum 08.07.2015, 10:00 Uhr.

Aufgabe 11.1 Geometriekonverter

Ein häufige Aufgabe für Skript-Sprachen ist die Konvertierung verschiedener Input-Formate für unterschiedliche Programme. Als Beispiel soll ein Python-Skript `geokonverter.py` erstellt werden, welches die Molekülgeometriedateien der Programme DALTON und TURBOMOLE sowie das allgemeine xyz-Format einlesen und in eines der anderen Formate umwandeln kann. Der Aufruf soll folgendermaßen erfolgen:

```
python3 geokonverter.py -o <Ausgabeformat> [Optionen] <Input-Datei(en)>
```

Die Angabe des Ausgabeformats (o = ORCA, t = TURBOMOLE, x = xyz-Format) ist obligatorisch, weitere Optionen sind entsprechend optional. Folgende Optionen sollen unterstützt werden:

- `-f <Datei>`: Angabe einer Ausgabedatei, deren Name angegeben werden muss, andernfalls wird auf die Standardausgabe geschrieben
- `-h`, `--help`: Ausgabe eines Benutzungshinweises und eine Auflistung aller Optionen, anschließend wird das Skript beendet
- `-b`: Batch-Modus, es können beliebig viele Dateien angegeben werden, deren Formate alle in das Ausgabeformat konvertiert werden; Ausgaben werden durch `#----#` getrennt.

Machen Sie in Ihrem Skript von *sinnvollen* Fehlerabfragen gebrauch.

Hinweise:

Sie können nicht davon ausgehen, dass das Dateiformat immer über die Dateiendung zu identifizieren ist.

Definition des xyz-Formats:

- 1. Zeile: Anzahl der Atome im Molekül N
- 2. Zeile: Kommentarzeile, ggf. leer
- 3. bis $N + 2t$ Zeile: Atomkoordinatenangaben Atomtyp, x, y, z

Die Atomkoordinaten werden in Ångström angegeben.

Definition des TURBOMOLE-Formats:

- 1. Zeile: Signalwort `$coord`
- 2. bis $N + 1t$ Zeile: Atomkoordinatenangaben x, y, z, Atomtyp
- $N + 2t$ Zeile: beginnt mit (irgend-)einem Signalwort (eingeleitet durch \$), diese und alle weiteren Zeilen können im Input ignoriert werden, im Output soll `$end` genutzt werden

Die Atomkoordinaten werden in Bohr angegeben (1 Bohr = 0,529177 Ångström).

Definition des ORCA-Formats:

- 1. Zeile: wird durch ! eingeleitet und kann verschiedene Keywörter enthalten, bei der Ausgabe in ORCA-Format soll die Zeile nach ! leer bleiben
- weitere Zeilen: optional können weitere Zeilen mit zusätzlichen Informationen vorhanden sein
- Geometrieblock: eingeleitet durch *xyz <int1> <int2>, wobei <int1> die Ladung des Moleküls, <int2> die Spinmultiplizität der Wellenfunktion beschreibt; bei der Ausgabe in ORCA-Format soll von einem neutralen Molekül (Ladung = 0) ausgegangen werden, die Multiplizität soll entsprechend 1 sein, wenn die Anzahl der Elektronen gerade ist, oder 2 andernfalls.
- anschließend für jedes Atom:
 - Atomtyp, x, y, z
- abschließend *

Die Atomkoordinaten werden in Ångström angegeben.

Zur Veranschaulichung finden Sie in STiNE die Angaben für *p*-Nitroanilin in den entsprechenden Dateien: pna.xyz (xyz-Format), pna.orc (ORCA-Format), pna.crd (TURBOMOLE-Format).

Aufgabe 11.2 Matrixmultiplikation

Erstellen Sie ein Python-Skript, in welchem Sie drei verschiedene Möglichkeiten zur Matrixmultiplikation nutzen. Dabei soll jeweils das für eine gegebene $N \times N$ Matrix A mit $A_{i,j} = 1.0$ die Matrix:

$$B = AA \quad (1)$$

berechnet werden.

Die drei zu testenden Varianten für die Matrixmultiplikation sollen auf folgenden Ansätzen beruhen:

1. Die Matrix wird als Liste von Listen in Python repräsentiert.
2. Es wird das Modul `numpy` verwendet.
3. Verwenden Sie das Modul `ctypes` und rufen Sie die entsprechenden Funktion aus Ihrer selbst erstellten C-Bibliothek auf. Die Matrix soll Werte vom Typ `double` enthalten.

Nutzen Sie außerdem das Modul `time`, um jeweils die Laufzeit für die drei Varianten zu bestimmen. Berechnen Sie mit allen drei oben genannten Ansätzen die Matrix B für $N = 25, 50, 100, 500, 1000$. Berechnen Sie mit den Ansätzen zwei und drei die Matrix B auf für $N = 2500, 5000$. Geben Sie alle Laufzeiten in Sekunden in tabulierter Form aus.

Die Lösungen zu diesen Aufgaben werden am 09.07.2015 besprochen.