Tupel: unveränderbare Listen

```
>>> kaufen = ("Muesli", "Kaese", "Milch")
>>> print kaufen[1]
Kaese
>>> for f in kaufen[:2]: print f
Muesli
Kaese
>>> kaufen[1] = "Camembert"
TypeError: 'tuple' object does not support item assignment
>>> print k + k
('Muesli', 'Kaese', 'Milch', 'Muesli', 'Kaese', 'Milch')
```

- komma-getrennt in runden Klammern
- können nicht verändert werden
- ansonsten wie Listen einsetzbar
- Strings sind Tupel von Zeichen

Dictionaries

```
>>> de_en = { "Milch": "milk", "Mehl": "flour" }
>>> print de_en
{'Mehl': 'flour', 'Milch': 'milk'}
>>> de_en["Oel"]="oil"
>>> for de in de_en: print de, "=>", de_en[de]
Mehl => flour
Milch => milk
Oel => oil
>>> for de, en in de_en.iteritems(): print de, "=>", en
>>> if "Mehl" in de_en: print "Kann \"Mehl\" uebersetzen"
```

- komma-getrennt in geschweiften Klammern
- speichert Paare von Schlüsseln (Keys) und Werten
- Speicher-Reihenfolge der Werte ist nicht festgelegt
- daher Indizierung über die Keys, nicht Listenindex o.ä.
- mit **in** kann nach Schlüsseln gesucht werden

Formatierte Ausgabe: der %-Operator

```
>>> print "Integer %d %05d" % (42, 42)
Integer 42 00042
>>> print "Fliesskomma %e |%+8.4f| %g" % (3.14, 3.14, 3.14)
Fliesskomma 3.140000e+00 | +3.1400| 3.14
>>> print "Strings %s %10s" % ("Hallo", "Welt")
Strings Hallo       Welt
```

- Der %-Operator ersetzt %-Platzhalter in einem String
- %d: Ganzahlen (Integers)
- %e, %f, %g: Fliesskomma mit oder ohne Exponent oder wenn nötig (Standardformat)
- %s: einen String einfügen
- %*x*[defgs]: auf *x* Stellen mit Leerzeichen auffüllen
- %0*x*[defg]: mit Nullen auffüllen
- %*x*.*y*[efg]: *x* gesamt, *y* Nachkommastellen

http://www.icp.uni-stuttgart.de

Objekte in Python

```
>>> original = list()
>>> original.append(3)
>>> original.append(2)

>>> kopie = list(original)
```

```
>>> original.append(1)
>>> original.sort()

>>> print original, kopie
[1, 2, 3], [3, 2]
```

- In Python können komplexe Datentypen wie Objekte im Sinne der **objekt-orientierten Programmierung** verwendet werden
- Datentypen entsprechen **Klassen** (hier **`list`**)
- Variablen entsprechen **Objekten** (hier `original` und `kopie`)
- Objekte werden durch durch Aufruf von Klasse() erzeugt
- **Methoden** eines Objekts werden in der Form Objekt.Methode() aufgerufen (hier **`list`**`.append()` und **`list`**`.sort()`)
- **`help`**(Klasse/Datentyp) informiert über vorhandene Methoden
- Per **`class`** kann man selber Klassen erstellen

Stringmethoden

- Zeichenkette in Zeichenkette suchen

  `"Hallo Welt".find("Welt")` → 6

  `"Hallo Welt".find("Mond")` → -1

- Zeichenkette in Zeichenkette ersetzen

  `"abcdabcabe".replace("abc", "123")` → `'123d123abe'`

- Groß-/Kleinschreibung ändern

  `"hallo Welt".capitalize()` → `'Hallo welt'`

  `"Hallo Welt".upper()` → `'HALLO WELT'`

  `"Hallo Welt".lower()` → `'hallo welt'`

- in eine Liste zerlegen

  `"1, 2, 3, 4".split(",")` → `['1', ' 2', ' 3', ' 4']`

- zuschneiden

  `"  Hallo ".strip()` → `'Hallo'`

  `"..Hallo..".lstrip(".")` → `'Hallo..'`

http://www.icp.uni-stuttgart.de

Ein-/Ausgabe: Dateien in Python

```
eingabe = open("ein.txt")
ausgabe = open("aus.txt", "w")
nr = 0
ausgabe.write("Datei %s mit Zeilennummern\n" % eingabe.name)
for zeile in eingabe:
    nr += 1
    ausgabe.write("%d: %s" % (nr, zeile))
ausgabe.close()
```

- Dateien sind mit `open(datei, mode)` erzeugte Objekte
- Mögliche Modi (Wert von `mode`):

r oder leer	lesen
w	schreiben, Datei zuvor leeren
a	schreiben, an existierende Datei anhängen

- sind Sequenzen von Zeilen (wie eine Liste von Zeilen)
- Nur beim Schließen der Datei werden alle Daten geschrieben

Ein-/Ausgabe: Dateien in Python

```
eingabe = open("ein.txt")
ausgabe = open("aus.txt", "w")
nr = 0
ausgabe.write("Datei %s mit Zeilennummern\n" % eingabe.name)
for zeile in eingabe:
    nr += 1
    ausgabe.write("%d: %s" % (nr, zeile))
ausgabe.close()
```

- `datei.read()`: Lesen der *gesamten* Datei als Zeichenkette
- `datei.readline()`: Lesen einer Zeile als Zeichenkette
- Je nach Bedarf mittels `split`, **`map`**, **`int`** oder **`float`** verarbeiten

```
l = '3. 4. 1.'
map(float, l.split())
```

Ein-/Ausgabe: Dateien in Python

```
eingabe = open("ein.txt")
ausgabe = open("aus.txt", "w")
nr = 0
ausgabe.write("Datei %s mit Zeilennummern\n" % eingabe.name)
for zeile in eingabe:
    nr += 1
    ausgabe.write("%d: %s" % (nr, zeile))
ausgabe.close()
```

- `datei.write(data)`: *Zeichenkette* data zur Datei hinzufügen
- Anders als **`print`** *kein* automatisches Zeilenende
- Bei Bedarf Zeilenumbruch mit „\n“
- Daten, die keine Zeichenketten sind, mittels %-Operator oder **`str`** umwandeln

Dateien als Sequenzen

```
input  = open("in.txt")
output = open("out.txt", "w")
linenr = 0
for line in input:
    linenr += 1
    output.write(str(linenr) + ": " + line + "\n")
output.close()
```

- Alternative Implementation zum vorigen Beispiel
- Dateien verhalten sich in **`for`** wie Listen von Zeilen
- Einfache zeilenweise Verarbeitung
- Aber kein Elementzugriff usw.!
- `write`: alternative, umständlichere Ausgabe mittels **`str`**-Umwandlung

Standarddateien

- wie in der bash gibt es auch Dateien für Standard-Eingabe, -Ausgabe und Fehler-Ausgabe
- Die Dateivariablen sind

`sys.stdin`	Eingabe (etwa Tastatur)
`sys.stdout`	Standard-Ausgabe
`sys.stderr`	Fehler-Ausgabe

```
import sys
line = sys.stdin.readline()
sys.stderr.write("don't know what to do with {}\n".format(line)
for i in range(10):
    sys.stdout.write("{}, ".format(i))
sys.stdout.write("\n")
```

Ausgabe:

```
0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9,
```

Ein-/Ausgabe mittels `raw_input`

```
>>> passwd = raw_input("enter password to continue: ")
enter a password to continue: secret
>>> control = input("please repeat the password: ")
please repeat the password: passwd
>>> if passwd == control: print "both are the same!"
both are the same!
```

- Tastatureingaben können einfach über **`raw_input`** in eine Zeichenkette gelesen werden
- **`input`** wertet diese hingegen als Python-Ausdruck aus
- Dies ist eine potentielle Fehlerquelle:

```
>>> passwd = input("enter a password to continue: ")
enter a password to continue: secret
NameError: name 'secret' is not defined
```

- Eingaben über die Kommandozeile sind meist praktischer — oder wäre Dir ein mv lieber, dass nach den Dateien fragt?

Umlaute — Encoding-Cookie

```
#! /usr/bin/python
# encoding: utf-8
# Zufaellige Konstante α
alpha = 0.5
# α² ausgeben
print "Mir dünkt, dass α² = {:g}".format(alpha**2)
```

Ausgabe:

```
Mir dünkt, dass α² = 0.25
```

- Umlaute funktionieren bei Angabe der Codierung
- Muss in den ersten beiden Zeilen stehen
- Variablennamen trotzdem in ASCII!

Fehlermeldungen: raise

```
def loesungen_der_quad_gln(a, b, c):
    "loest a x^2 + b x + c = 0"
    det = (0.5*b/a)**2 - c
    if det < 0: raise Exception("Es gibt keine Loesung!")
    return (-0.5*b/a + det**0.5, -0.5*b/a - det**0.5)

try:
    loesungen_der_quad_gln(1,0,1)
except:
    print "es gibt keine Loesung, versuch was anderes!"
```

- **raise** Exception("Meldung") wirft eine Ausnahme (Exception)
- Funktionen werden nacheinander an der aktuellen Stelle beendet
- mit **try**: ... **except**: ... lassen sich Fehler abfangen, dann geht es im **except**-Block weiter

Module

```
>>> import sys
>>> print "program name is \"{}\"".format(sys.argv[0])
program name is ""
>>> from random import random
>>> print random()
0.296915031568
```

- Bis jetzt haben wir einen Teil der Basisfunktionalität von Python gesehen.
- Weitere Funktionen sind in **Module** ausgelagert
- Manche sind nicht Teil von Python und müssen erst nachinstalliert werden
- Die Benutzung eines installierten Moduls muss per **`import`** angekündigt werden („Modul laden“)
- Hilfe: **`help`**`(modul)`, alle Funktionen: **`dir`**`(modul)`

Das sys-Modul

- Schon vorher für Eingaben benutzt
- Stellt Informationen über Python und das laufende Programm selber zur Verfügung
- `sys.argv`: Kommandozeilenparameter, `sys.argv[0]` ist der Programmname
- `sys.stdin`, `sys.stdout`, `sys.stderr`: Standard-Ein-/Ausgabedateien

```
import sys
sys.stdout.write("running {}\n".format(sys.argv[0]))
line = sys.stdin.readline()
sys.stderr.write("some error message\n")
```

argparse-Modul: Parameter in Python 2.7

```
from argparse import ArgumentParser
parser = ArgumentParser()
parser.add_argument("-f", "--file", dest="filename",
                    help="write to FILE", metavar="FILE")
parser.add_argument("number", type=int, help="the number")
args = parser.parse_args()
```

- Einlesen von Kommandozeilenflags
- `add_argument` spezifiziert Parameter
  - kurzer + langer Name („-f“,„–file“),
    ohne Minus positionsabhängiger Parameter
  - `dest`: Zielvariable für den vom Benutzer gegebenen Wert
  - **`type`**: geforderter Datentyp (**`type`**`="int"`)
- Bei Aufruf `python parse.py -f test 1` ist
  `args.filename = 'test'`, `args.number = 1`
- `python parse.py -f test a` gibt Fehler, da „a“ keine Zahl

http://www.icp.uni-stuttgart.de

math- und random-Modul

```
import math
import random
def boxmueller():
    """
liefert normalverteilte Zufallszahlen
nach dem Box-Mueller-Verfahren
    """
    r1, r2 = random.random(), random.random()
    return math.sqrt(-2*math.log(r1))*math.cos(2*math.pi*r2)
```

- `math` stellt viele mathematische Grundfunktionen zur Verfügung, z.B. **floor/ceil**, **exp/log**, **sin/cos**, **pi**
- `random` erzeugt *pseudo*zufällige Zahlen
  - **`random`**`()`: gleichverteilt in $[0, 1)$
  - **`randint`**`(a, b)`: gleichverteilt ganze Zahlen in $[a, b)$
  - **`gauss`**`(m, s)`: normalverteilt mit Mittelwert m und Varianz s

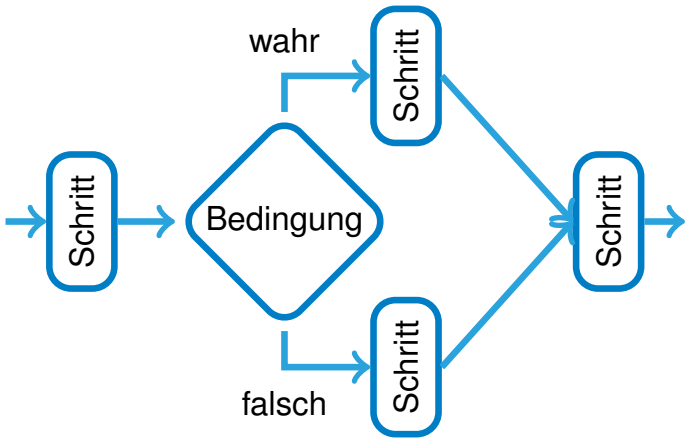
os-Modul: Betriebssystemfunktionen

```
import os
import os.path
# Datei in Verzeichnis "alt" verschieben
dir = os.path.dirname(file)
name = os.path.basename(file)
altdir = os.path.join(dir, "alt")
# Verzeichnis "alt" erstellen, falls es nicht existiert
if not os.path.isdir(altdir): os.mkdir(altdir)
# Verschieben, falls nicht schon existent
newpath = os.path.join(altdir, name)
if not os.path.exists(newpath): os.rename(file, newpath)
```

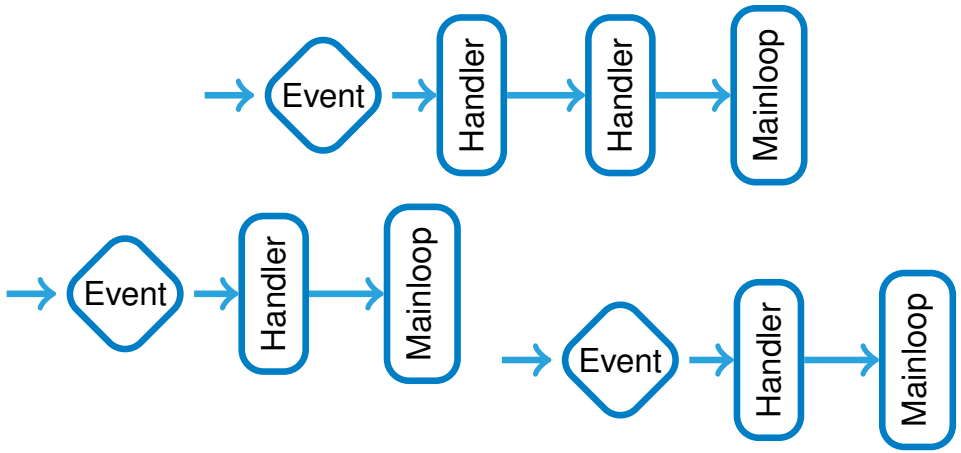
- betriebssystemunabhängige Pfadtools im Untermodul `os.path`: z.B. `dirname`, `basename`, `join`, `exists`, `isdir`
- `os.system`: Programme wie von der Shell aufrufen
- `os.rename/os.remove`: Dateien umbenennen / löschen
- `os.mkdir/os.rmdir`: erzeugen / entfernen von Verzeichnissen

Graphical User Interfaces (GUI)

Klassisch



Eventgetrieben (GUI)



- Klassisch: Programm bestimmt, was passiert
- Warten auf Benutzereingaben
- GUI: Programm reagiert auf Eingaben (Events)
- Hauptschleife ruft Codestücke (Handler) auf
- Reihenfolge durch Benutzereingaben oder Timer bestimmt
- Programm muss Datenkonsistenz sicherstellen

Das Tkinter-Modul

```
import Tkinter
root = Tkinter.Tk() # main window and connection to Tk
root.title("test program")
def quit():
    print text.get()
    root.quit()
# text input
text = Tkinter.Entry(root)
text.pack()
# button ending the program
end = Tkinter.Button(root, text = "Quit", command = quit)
end.pack({"side": "bottom"})
root.mainloop()
```

- bietet Knöpfe, Textfenster, Menüs, einfache Graphik usw.
- mit `Tk.mainloop` geht die Kontrolle an das Tk-Toolkit
- danach eventgesteuertes Programm

Numerik mit Python – numpy

- `numpy` ist ein Modul für effiziente numerische Rechnungen
- Nicht fester Bestandteil von Python, aber Paket in allen Linux-Distributionen
- Alles nötige unter `http://numpy.scipy.org`
- Bietet unter anderem
  - mathematische Grundoperationen
  - Sortieren, Auswahl von Spalten, Zeilen usw.
  - Eigenwerte, -vektoren, Diagonalisierung
  - diskrete Fouriertransformation
  - statistische Auswertung
  - Zufallsgeneratoren
- Wird bei `ipython --pylab` automatisch unter dem Kürzel `np` geladen

`np.ndarray` – *n*-dimensionale Arrays

```
>>> import numpy as np
>>> A = np.identity(2)
>>> print A
[[ 1.  0.]
 [ 0.  1.]]
>>> v = np.zeros(5)
>>> print v
[ 0.  0.  0.  0.  0.]
>>> print type(A), type(v)
<type 'numpy.ndarray'> <type 'numpy.ndarray'>
```

- NumPy basiert auf *n*-dimensionalem Array `numpy.ndarray`
- Technisch zwischen Array und Tupel
  - Kein `append`/`remove`
  - Aber elementweiser lesender und schreibender Zugriff
  - Alle Elemente vom selben (einfachen) Datentyp
- Entspricht mathematischen Vektoren, Arrays, Tensoren, ...

Eindimensionale Arrays – Vektoren

```
>>> import numpy as np
>>> print np.array([1.0, 2, 3])
[ 1.,  2.,  3.]
>>> print np.zeros(2)
[ 0.,  0.]
>>> print np.ones(5)
[ 1.,  1.,  1.,  1.,  1.]
>>> print np.arange(2.2, 3, 0.2)
[ 2.2,  2.4,  2.6,  2.8]
```

- `np.array` erzeugt ein `ndarray` aus einer (geschachtelten) Liste
- `np.arange` entspricht **`range`** für Fliesskomma
- `np.zeros/ones` erzeugen 0er/1er-Arrays

Mehrdimensionale Arrays

```
>>> print np.array([[1, 2, 3], [4, 5, 6]])
array([[1, 2, 3],
       [4, 5, 6]])
>>> print np.array([[[1,2,3], [4,5,6]], [[7,8,9], [0,1,2]]])
array([[[1, 2, 3],
        [4, 5, 6]],

       [[7, 8, 9],
        [0, 1, 2]]])
>>> print np.zeros((2, 2))
array([[ 0.,  0.],
       [ 0.,  0.]])
```

- Mehrdimensionale Arrays entsprechen verschachtelten Listen
- Alle Zeilen müssen die gleiche Länge haben
- `np.zeros/ones`: Größe als Tupel von Dimensionen

Array-Informationen

```
>>> v = np.zeros(4)
>>> print v.shape
(4,)
>>> I = np.identity(2)
>>> print I.shape
(2, 2)
>>> print I.dtype
float64
```

- `array.shape` gibt die Größen der Dimensionen als Tupel zurück
- Anzahl der Dimensionen (Vektor, Matrix, ...) ergibt sich aus Länge des Tupels
- `array.dtype` gibt den gemeinsamen Datentyp aller Elemente
- Wichtig beim Debuggen (Warum passen die Matrix und der Vektor nicht zusammen?)

http://www.icp.uni-stuttgart.de

Elementzugriff

```
>>> a = np.array([[1,2,3,4,5,6], [7,8,9,0,1,2]])
>>> print a[0]
[1 2 3 4 5 6]
>>> print a[1]
[7 8 9 0 1 2]
>>> print a[1,2]
9
```

- `[]` indiziert Zeilen und Elemente usw.
- Anders als bei Pythonlisten können geschachtelte Indizes auftreten (wie bei Matrizen)
- `a[1,2]` entspricht mathematisch $a_{2,3}$ wegen der verschiedenen Zählweisen (ab 0 bzw. ab 1)
- Achtung: in der Mathematik bezeichnet a_1 meist einen *Spalten*vektor, hier `a[1]` einen *Zeilen*vektor
- Es gilt wie in der Mathematik: **Z**eilen **z**uerst, **Sp**alten **sp**äter!

Subarrays

```
>>> a = np.array([[1,2,3], [4,5,6], [7,8,9]])
>>> print a[1:,1:]
[[5 6]
 [8 9]]
>>> print a[:,2]
[3 6 9]
```

- Wie bei Listen lassen sich auch Bereiche wählen, in allen Dimensionen
- `a[1:,1:]` beschreibt die 1,1-Untermatrix, also ab der 2. Zeile und Spalte
- `a[:,2]` beschreibt den 3. Spaltenvektor
- Achtung, dies sind immer *flache* Kopien!

Flache und tiefe Kopien von ndarray

```
>>> a = np.array([[1,2,3], [4,5,6], [7,8,9]])
>>> b = a.copy()          # tiefe Kopie
>>> a[:,0] = np.zeros(3) # flache Kopie, ändert a
>>> print a
[[0 2 3]
 [0 5 6]
 [0 8 9]]
>>> print b
[[1 2 3]
 [4 5 6]
 [7 8 9]]
```

- Nützlich, weil häufig Untermatrizen verändert werden
- Anders als bei Python-Arrays sind Unterlisten *keine* Kopien!
- Kopien gibt es nur explizit durch `copy`

Manipulation von ndarrays

```
>>> a = np.array([[1,2], [3,4]])
>>> a = np.concatenate((a, [[5,6]]))
>>> print a
[[1 2]
 [3 4]
 [5 6]]
>>> print a.transpose()
[[1 3 5]
 [2 4 6]]
>>> a = np.array([1 + 2j])
>>> print a.conjugate()
[ 1.-2.j]
```

- `np.concatenate` hängt Matrizen aneinander
- `transpose()`: Transponierte (Spalten und Zeilen vertauschen)
- `conjugate()`: Komplex Konjugierte

np.dot: Matrix-Matrix-Multiplikation

```
>>> a = np.array([[1,2],[3,4]])
>>> i = np.identity(2)              # Einheitsmatrix
>>> print a*i                       # punktweises Produkt
[[1 0]
 [0 4]]
>>> print np.dot(a,i)               # echtes Matrixprodukt
[[1 2]
 [3 4]]
>>> print np.dot(a[0], a[1])        # Skalarprodukt der Zeilen
11
```

- Arrays werden normalerweise *punktweise* multipliziert
- `np.dot` entspricht
  - bei zwei eindimensionalen Arrays dem Vektor-Skalarprodukt
  - bei zwei zweidimensionalen Arrays der Matrix-Multiplikation
  - bei ein- und zweidim. Arrays der Vektor-Matrix-Multiplikation

Lineare Algebra

```
>>> a = np.array([[1,0],[0,1]])
>>> print a.min(), print a.max()
0 1
>>> print np.linalg.det(a)
1
>>> print np.linalg.eig(a)
(array([ 1.,  1.]), array([[ 1.,  0.],
       [ 0.,  1.]]))
```

- **min,max**: Minimum und Maximum aller Elemente
- `cross`: Vektorkreuzprodukt
- `linalg.det, .trace`: Determinante und Spur
- `linalg.norm`: (2-)Norm
- `linalg.eig`: Eigenwerte und -vektoren
- `linalg.inv`: Matrixinverse
- `linalg.solve(A, b)`: Lösen von $Ax = b$

Beispiel: Rücksubstitution

Problem

Gegeben: Rechte obere Dreiecksmatrix A, Vektor b

Gesucht: Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \dots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ & & a_{22}x_2 & + & \dots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ & & & & \ddots & & \vdots & & \vdots \\ & & & & & & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}$$

Zum Beispiel aus dem Gaußschen Eliminationsverfahren (dazu mehr in „Physik auf dem Computer“)

Methode: Rücksubstitution

- Letzte Gleichung: $a_{nn}x_n = b_n \implies x_n = b_n/a_{nn}$
- Vorletzte Gleichung:

$$x_{n-1} = (b_{n-1} - a_{n-1,n}x_n)/a_{n-1,n-1}$$

- Und so weiter...

Implementation

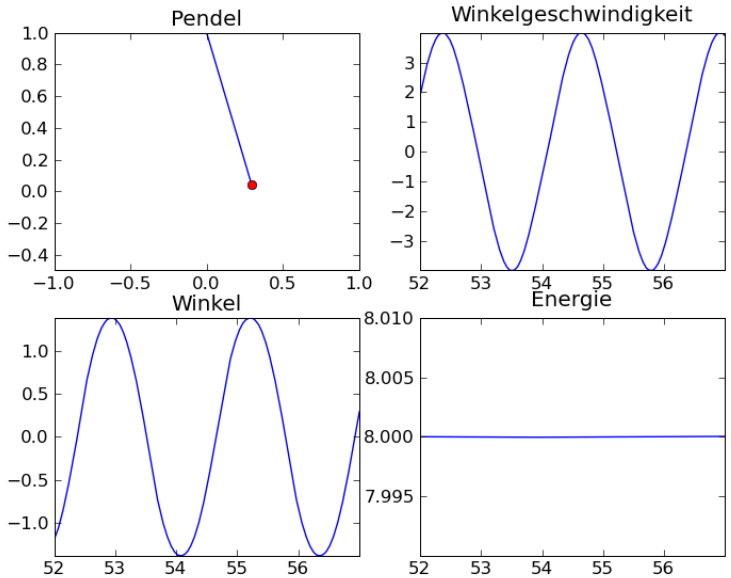
```
import numpy as np
def backsubstitute(A, b):
    rows = b.shape[0]                # length of the problem
    x = np.zeros(rows)               # solution, same size as b
    for i in range(1, rows + 1): # loop rows reversely
        row = rows - i
        x[row] = b[row] - np.dot(A[row,row+1:], x[row+1:])
        x[row] /= A[row,row]
    return x
A = np.array([[1, 2, 3], [0, 4, 5], [0, 0, 6]])
b = np.array([1, 2, 3])
print backsubstitute(A, b), np.linalg.solve(A, b)
```

Ausgabe

```
[-0.25  -0.125  0.5  ] [-0.25  -0.125  0.5  ]
```

Analyse und Visualisierung

Zeit	Winkel	Geschw.	Energie
55.0	1.1605	2.0509	8.000015
55.2	1.3839	0.1625	8.000017
55.4	1.2245	-1.7434	8.000016
55.6	0.7040	-3.3668	8.000008
55.8	-0.0556	-3.9962	8.000000
56.0	-0.7951	-3.1810	8.000009
56.2	-1.2694	-1.4849	8.000016
56.4	-1.3756	0.43024	8.000017
56.6	-1.1001	2.29749	8.000014
56.8	-0.4860	3.70518	8.000004



- Zahlen anschauen ist langweilig!
- Graphen sind besser geeignet
- Statistik hilft, Ergebnisse einzuschätzen (Fehlerbalken)
- Histogramme, Durchschnitt, Varianz

Durchschnitt und Varianz

```
>>> samples=100000
>>> z = np.random.normal(0, 2, samples)

>>> print np.mean(z)
-0.00123299611634
>>> print np.var(z)
4.03344753342
```

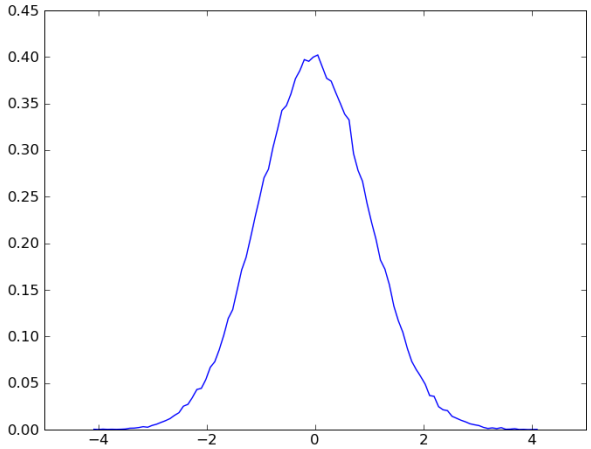
- Arithmetischer **Durchschnitt**

$$\langle z \rangle = \sum_{i=1}^{\mathrm{len}(z)} z_i / \mathrm{len}(z)$$

- **Varianz**

$$\sigma(z) = \left\langle (z - \langle z \rangle)^2 \right\rangle$$

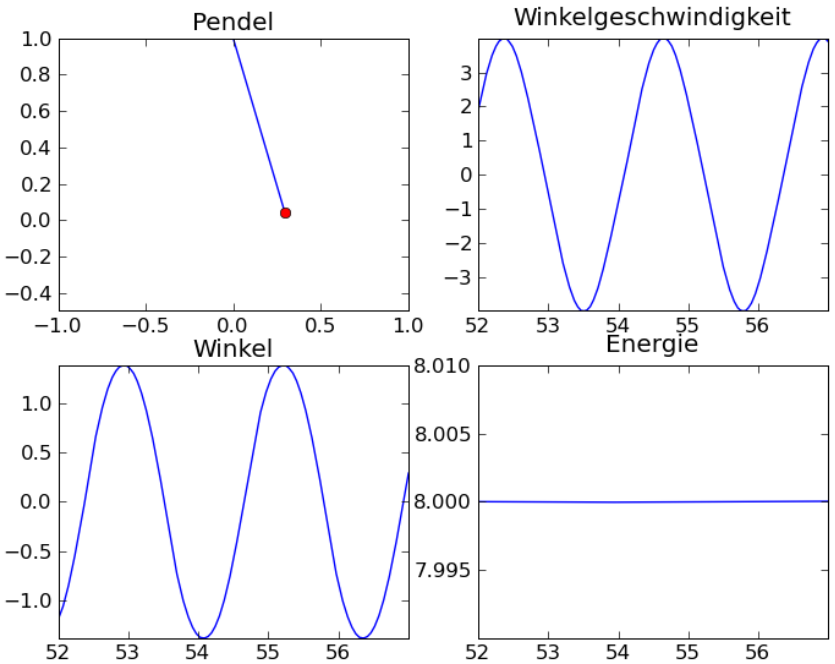
Histogramme




```
>>> zz = np.random.normal(0,1,100000)
>>> werte, raender = np.histogram(zz, bins=100, normed=True)
```

- Histogramme geben die Häufigkeit von Werten an
- In `bins` vielen gleich breiten Intervallen
- `werte` sind die Häufigkeiten, `raender` die Grenzen der Intervalle (ein Wert mehr als in `werte`)

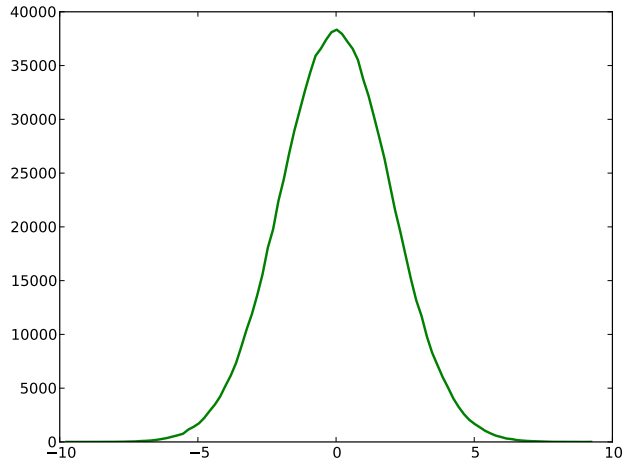
Malen nach Zahlen – matplotlib



- Ein Modul zum Erstellen von Graphen
- 2D oder 3D, mehrere Graphen in einem
- Speichern als Bitmap
- Kann auch animierte Kurven darstellen

2D-Plots

```
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as pyplot
...
x = np.arange(0, 2*np.pi, 0.01)
y = np.sin(x)
pyplot.plot(x, y, "g", linewidth=2)
pyplot.text(1, -0.5, "sin(2*pi*x)")
pyplot.show()
```



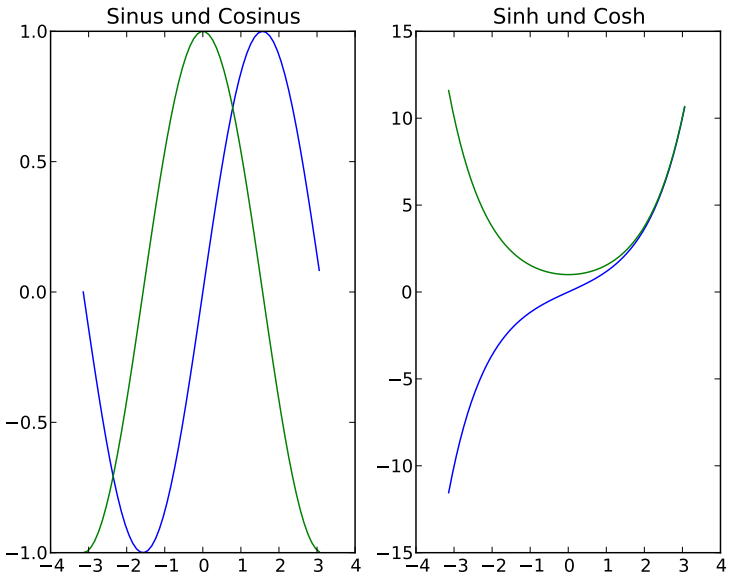
- `pyplot.plot` erzeugt einen 2D-Graphen
- `pyplot.text` schreibt beliebigen Text in den Graphen
- `pyplot.show()` zeigt den Graphen an
- Parametrische Plots mit Punkten (`x[t]`, `y[t]`)
- für Funktionen Punkte (`x[t]`, `y(x[t])`) mit `x` Bereich
- Farbe und Form über String und Parameter – ausprobieren

Mehrfache Graphen

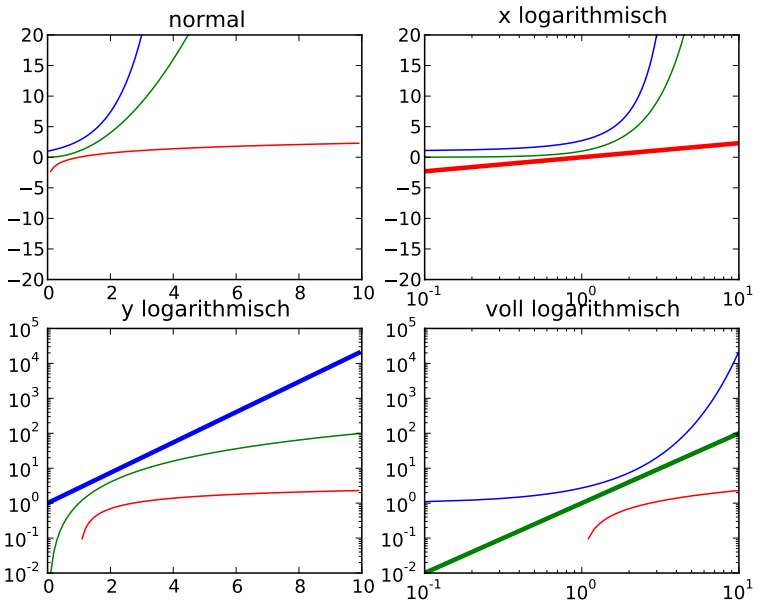
```
bild = pyplot.figure()

graph_1 = bild.add_subplot(121, title="Sinus und Cosinus")
graph_1.plot(x, np.sin(x))
graph_1.plot(x, np.cos(x))
graph_2 = bild.add_subplot(122, title="Sinh und Cosh")
graph_2.plot(x, np.sinh(x), x, np.cosh(x))
```

- Mehrere Kurven in einem Graphen:

  `plot(x_1,y_1 [,"stil"], x_2,y_2 ,...)!`
- Oder mehrere `plot`-Befehle
- Mehrere Graphen in einem Bild mit Hilfe von `add_subplot`



Logarithmische Skalen



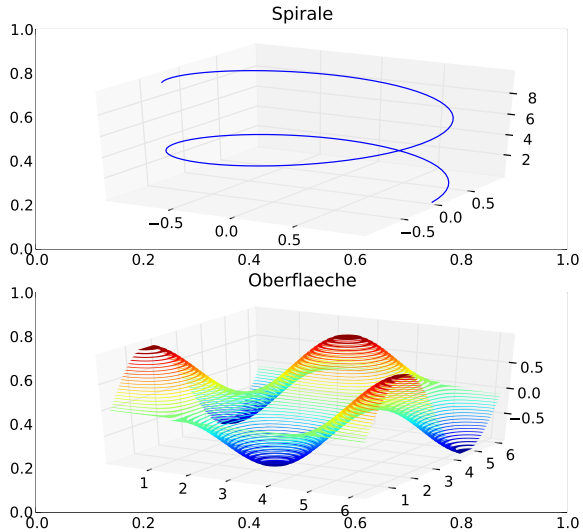
$y = exp(x)$
$y = x^2$
$y = log(x)$

- `set_xscale("log")` bzw. `set_yscale("log")`
- y logarithmisch: $y = \exp(x)$ wird zur Geraden $y' = log(y) = x$
- x logarithmisch: $y = \log(x) = x'$ ist eine Gerade
- $x + y$ logarithmisch: Potenzgesetze $y = x^n$ werden zu Geraden, da $y' = \log(x^n) = n \log(x) = nx'$

http://www.icp.uni-stuttgart.de

3D-Plots

```
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as pyplot
import mpl_toolkits.mplot3d as p3d
...
bild = pyplot.figure()
z = np.arange(0, 10, 0.1)
x, y = np.cos(z), np.sin(z)
graph = p3d.Axes3D(bild)
graph.plot(x, y, z)
```



- `plot`: wie 2D, nur mit 3 Koordinaten x, y, z
- `plot_wireframe`: Gitteroberflächen
- `contourf3D`: farbige Höhenkodierung
- Achtung! 3D ist neu und das Interface ändert sich noch

Interaktive Visualisierung

```
import matplotlib
matplotlib.use('TkAgg')
import matplotlib.pyplot as pyplot
...
abb = pyplot.figure()
plot = abb.add_subplot(111)
kurve, = plot.plot([],[])
def weiter():
    abb.canvas.manager.window.after(1000, weiter)
    kurve.set_data(x, np.sin(x))
    abb.canvas.draw()
    ...
abb.canvas.manager.window.after(100, weiter)
pyplot.show()
```

- Update und Timing durch GUI (hier TkInter)
- `set_data` um die Daten zu verändern

Methodik des Programmierens

Schritte bei der Entwicklung eines Programms

- **Problemanalyse**
  - Was soll das Programm leisten?
    Z.B. eine Nullstelle finden, Molekulardynamik simulieren
  - Was sind Nebenbedingungen?
    Z.B. ist die Funktion reellwertig? Wieviele Atome?
- **Methodenwahl**
  - Schrittweises Zerlegen in Teilprobleme (Top-Down-Analyse)
    Z.B. Propagation, Kraftberechnung, Ausgabe
  - Wahl von Datentypen und -strukturen
    Z.B. Listen oder Tupel? Wörterbuch?
  - Wahl der Rechenstrukturen (Algorithmen)
    Z.B. Newton-Verfahren, Regula falsi,...

Methodik des Programmierens

Schritte bei der Entwicklung eines Programms

- **Implementierung und Dokumentation**
  - Programmieren und *gleichzeitig* dokumentieren
  - Kommentare und externe Dokumentation (z.B. Formeln)
- **Testen auf Korrektheit**
  - Funktioniert das Programm?
    Z.B. findet es eine bekannte Lösung?
  - Terminiert das Programm?
    D.h. hält es immer an?
- **Testen auf Effizienz**
  - Wie lange braucht das Programm bei beliebigen Eingaben?
  - Wieviel Speicher braucht es?

http://www.icp.uni-stuttgart.de

Methodik des Programmierens

- Teillösungen sollen wiederverwendbar sein
  – möglichst allgemein formulieren
- Meistens wiederholt sich der Prozess:
  - Bei der Methodenwahl stellen sich weitere Einschränkungen als nötig heraus
    Z.B. Funktion darf keine Singularitäten aufweisen
  - Bei der Implementierung zeigt sich, dass die gewählte Methode nicht umzusetzen ist
    Z.B. weil implizite Gleichungen gelöst werden müssten
  - Beim Testen zeigt sich, dass die Methode ungeeignet oder nicht schnell genug ist
    Z.B. zu langsam, numerisch instabil
- Mit wachsender Projektgröße wird Problemanalyse wichtiger
- *Software Engineering* bei umfangreichen Projekten und -teams

Testen auf Korrektheit und Effizienz

Korrektheit

- Extremwerte überprüfen (leere Eingabe, 0)
- *Generische* Fälle prüfen, d.h. alle Vorzeichen, bei reellen Zahlen nicht nur ganzzahlige Eingaben
- Alle Fehlermeldungen sollten getestet, also ausgelöst werden!
  $\Rightarrow$ mehr Tests für unzulässige Eingaben als für korrekte

Effizienz

- Wie viele elementare Schritte (Schleifendurchläufe) sind nötig?
- Möglichst langsam wachsende Anzahl elementarer Schritte
- Ebenso möglichst langsam wachsender Speicherbedarf
- Sonst können nur sehr kleine Aufgaben behandelt werden
- Beispiel: bei $N = 10^6$ ist selbst $0,1\mu s \times N^2 = 1$ Tag

Beispiel: Pythagoreische Zahlentripel

- **Problemanalyse**

  Gegeben: eine ganze Zahl c

  Gesucht: Zahlen a, b mit $a^2 + b^2 = c^2$

  1. Verfeinerung: $a = 0$, $b = c$ geht immer $\Rightarrow a, b > 0$

  2. Verfeinerung: Was, wenn es keine Lösung gibt? Fehlermeldung

- **Methodenwahl**
  - Es muss gelten: $0 < a < c$ und $0 < b < c$
  - Wir können also alle Paare a, b mit $0 < a < c$ und $0 < b < c$ durchprobieren – verschachtelte Schleifen
  - Unterteilung in Teilprobleme nicht sinnvoll

- **Effizienz**?

  Rechenzeit wächst wie $|c|^2$ – das ist langsam!

Beispiel: Pythagoreische Zahlentripel

- **Implementierung**

```
def zahlentripel(c):
    """
Liefert ein Ganzzahlpaar (a, b), dass a^2 + b^2 = c^2
erfuellt, oder None, wenn keine Loesung existiert.
    """
    # Durchprobieren aller Paare
    for a in range(1,c):
        for b in range(1,c):
            if a**2 + b**2 == c**2: return (a, b)
    return None
```

- Test der Effizienz

Zahl (alle ohne Lösung)	1236	12343	123456
Zeit	0.5s	41s	1:20h

- Das ist tatsächlich sehr langsam! Geht es besser?

Beispiel: Pythagoreische Zahlentripel

- **Methodenwahl** zur Effizienzverbesserung
  O.B.d.A. $a \leq b$
  - Sei zunächst $a = 1$ und $b = c - 1$
  - Ist $a^2 + b^2 > c^2$, so müssen wir b verringern,
    und wir wissen, dass es keine Lösung mit $b = c - 1$ gibt
  - Ist $a^2 + b^2 < c^2$, so müssen wir a erhöhen und wir wissen, dass es keine Lösung mit $a = 1$ gibt
  - Ist nun $a^2 + b^2 > c^2$, so müssen wir wieder b verringern,
    egal ob wir zuvor a erhöht oder b verringert haben
  - Wir haben alle Möglichkeiten getestet, wenn $a > b$
- **Effizienz?**
  Wir verringern oder erhöhen a bzw. b in jedem Schritt. Daher sind es nur maximal $|c|/2$ viele Schritte.

Beispiel: Pythagoreische Zahlentripel

- **Implementierung** der effizienten Vorgehensweise

```
def zahlentripel(c):
    "loest a^2 + b^2 = c^2 oder liefert None zurueck"
    # Einschachteln der moeglichen Loesung
    a = 1
    b = c - 1
    while a <= b:
        if   a**2 + b**2 < c**2: a += 1
        elif a**2 + b**2 > c**2: b -= 1
        else: return (a, b)
    return None
```

- Demonstration der Effizienz

Zahl	12343	123456	1234561	12345676	123456789
Zeit	0.01s	0.08s	0.63s	6.1s	62s