

Computergrundlagen Programmieren in Python

Axel Arnold

Institut für Computerphysik
Universität Stuttgart

Wintersemester 2011/12



- schnell zu erlernende Programmiersprache
– tut, was man erwartet
- objektorientierte Programmierung ist möglich
- viele Standardfunktionen („all batteries included“)
- breite Auswahl an Bibliotheken
- freie Software mit aktiver Gemeinde
- portabel, gibt es für fast jedes Betriebssystem
- entwickelt von Guido van Rossum, CWI, Amsterdam

- aktuelle Versionen 3.2 bzw. 2.7.2
- 2.x ist *noch* weiter verbreitet (z.B. Python 2.6 im CIP-Pool)
- diese Vorlesung behandelt daher noch 2.x
- aber längst nicht alles, was Python kann

Hilfe zu Python

- offizielle Homepage
<http://www.python.org>
- Einsteigerkurs „A Byte of Python“
<http://swaroopch.com/notes/Python> (englisch)
<http://abop-german.berlios.de> (deutsch)
- mit Programmiererfahrung „Dive into Python“
<http://diveintopython.net>

Aus der Shell:

```
> python
```

```
Python 2.6.5 (r265:79063, Apr 16 2010, 13:57:41)
```

```
[GCC 4.4.3] on linux2
```

```
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more...
```

```
>>> print "Hello World"
```

```
Hello World
```

```
>>> help("print")
```

```
>>> exit()
```

- >>> markiert Eingaben
- **print**: Ausgabe auf das Terminal
- help(): interaktive Hilfe, wird mit "q" beendet
- statt exit() reicht auch Control-d
- oder ipython mit Tab-Ergänzung, History usw.

Als Python-Skript helloworld.py:

```
#!/usr/bin/python
```

```
# unsere erste Python-Anweisung
```

```
print "Hello World"
```

- mit `python helloworld.py` starten
- oder ausführbar machen (`chmod a+x helloworld.py`)
- **Umlaute vermeiden** oder Encoding-Cookie einfügen
- „`#!`“ funktioniert genauso wie beim Shell-Skript
- Zeilen, die mit „`#`“ starten, sind Kommentare

**Kommentare sind wichtig,
um ein Programm verständlich machen!**

- und nicht, um es zu verlängern!

- ganze Zahlen:
-

```
>>> print 42
```

```
42
```

```
>>> print -12345
```

```
-12345
```

- Fließkommazahlen:
-

```
>>> print 12345.000
```

```
12345.0
```

```
>>> print 6.023e23
```

```
6.023e+23
```

```
>>> print 13.8E-24
```

```
1.38e-23
```

- 1.38e-23 steht z. B. für 1.38×10^{-23}
- $12345 \neq 12345.0$ (z. B. bei der Ausgabe)

- Zeichenketten (Strings)

```
>>> print "Hello World"
```

```
Hello World
```

```
>>> print 'Hello World'
```

```
Hello World
```

```
>>> print """Hello
```

```
... World"""
```

```
Hello
```

```
World
```

- zwischen einfachen (') oder doppelten (") Anführungszeichen
- Über mehrere Zeilen mit dreifachen Anführungszeichen
- Leerzeichen sind normale Zeichen!
`"Hello World" ≠ "Hello World"`
- Zeichenketten sind keine Zahlen! `"1" ≠ 1`

```
>>> number1 = 1
>>> number2 = number1 + 5
>>> print number1, number2
1 6
>>> number2 = "Keine Zahl"
>>> print number2
Keine Zahl
```

- Variablennamen bestehen aus Buchstaben, Ziffern oder „_“ (Unterstrich)
- am Anfang keine Ziffer
- Groß-/Kleinschreibung ist relevant: Hase \neq hase
- **Richtig:** i, some_value, SomeValue, v123, _hidden, _1
- **Falsch:** 1_value, some_value, some-value

+	Addition, bei Strings aneinanderfügen, z.B. $1 + 2 \rightarrow 3$, $"a" + "b" \rightarrow "ab"$
-	Subtraktion, z.B. $1 - 2 \rightarrow -1$
*	Multiplikation, Strings vervielfältigen, z.B. $2 * 3 = 6$, $"ab" * 2 \rightarrow "abab"$
/	Division, bei ganzen Zahlen ganzzahlig, z.B. $3 / 2 \rightarrow 1$, $-3 / 2 \rightarrow -2$, $3.0 / 2 \rightarrow 1.5$
%	Rest bei Division, z.B. $5 \% 2 \rightarrow 1$
**	Exponent, z.B. $3**2 \rightarrow 9$, $.1**3 \rightarrow 0.001$

- mathematische Präzedenz (Exponent vor Punkt vor Strich), z. B. $2**3 * 3 + 5 \rightarrow 2^3 \cdot 3 + 5 = 29$
- Präzedenz kann durch runde Klammern geändert werden: $2**(3 * (3 + 5)) \rightarrow 2^{3 \cdot 8} = 16,777,216$

<code>==, !=</code>	Test auf (Un-)Gleichheit, z.B. <code>2 == 2</code> \rightarrow True, <code>1 == 1.0</code> \rightarrow True, <code>2 == 1</code> \rightarrow False
<code><, >, <=, >=</code>	Vergleich, z.B. <code>2 > 1</code> \rightarrow True, <code>1 <= -1</code> \rightarrow False
<code>or, and</code>	Logische Verknüpfungen „oder“ bzw. „und“
<code>not</code>	Logische Verneinung, z.B. <code>not False</code> \Rightarrow True

- Vergleiche liefern Wahrheitswerte: **True** oder **False**
- Wahrheitstabelle für die logische Verknüpfungen:

<i>a</i>	<i>b</i>	<i>a</i> und <i>b</i>	<i>a</i> oder <i>b</i>
True	True	True	True
False	True	False	True
True	False	False	True
False	False	False	False

- Präzedenz: logische Verknüpfungen vor Vergleichen
- Beispiele: `3 > 2 and 5 < 7` \rightarrow True,
`1 < 1 or 2 >= 3` \rightarrow False

```
>>> a = 1
>>> if a < 5:
...     print "a ist kleiner als 5"
... elif a > 5:
...     print "a ist groesser als 5"
... else:
...     print "a ist 5"
a ist kleiner als 5
>>> if a < 5 and a > 5:
...     print "Das kann nie passieren"
```

- **if-elif-else** führt den **Block** nach der ersten erfüllten Bedingung (logischer Wert True) aus
- Trifft keine Bedingung zu, wird der **else**-Block ausgeführt
- **elif** oder **else** sind optional

```
>>> a=5
>>> if a < 5:
...     # wenn a kleiner als 5 ist
...     b = -1
... else: b = 1
>>> # aber hier geht es immer weiter
... print b
1
```

- Alle *gleich eingerückten* Befehle gehören zum Block
- Nach dem **if**-Befehl geht es auf Einrückungsebene des **if** weiter, egal welcher **if**-Block ausgeführt wurde
- Einzeilige Blöcke können auch direkt hinter den Doppelpunkt
- Einrücken durch Leerzeichen oder Tabulatoren (einfacher)

- ein Block kann nicht leer sein, aber der Befehl **pass** tut nichts:

```
if a < 5:  
    pass  
else:  
    print "a ist groesser gleich 5"
```

- IndentationError** bei ungleichmäßiger Einrückung:

```
>>> print "Hallo"  
Hallo  
>>>     print "Hallo"  
File "<stdin>", line 1  
    print "Hallo"  
    ^
```

IndentationError: unexpected indent

- Falsche Einrückung führt im allgemeinen zu Programmfehlern!

```
>>> a = 1
>>> while a < 5:
...     a = a + 1
>>> print a
5
```

- Führt den Block solange aus, wie die Bedingung wahr ist
- kann auch nicht ausgeführt werden:

```
>>> a = 6
>>> while a < 5:
...     a = a + 1
...     print "erhoehe a um eins"
>>> print a
6
```

```
>>> for a in range(1, 3): print a
1
2
>>> b = 0
>>> for a in range(1, 100):
...     b = b + a
>>> print b
4950
>>> print 100 * (100 - 1) / 2
4950
```

- **for** führt einen Block für jedes Element einer **Sequenz** aus
- Das aktuelle Element steht in `a`
- `range(k, l)` ist eine Liste der Zahlen a mit $k \leq a < l$
- später lernen wir, Listen zu erstellen und verändern

```
>>> for a in range(1, 10):
...     if a == 2 or a == 4 or a == 6: continue
...     elif a == 5: break
...     print a
1
3
>>> a = 1
>>> while True:
...     a = a + 1
...     if a > 5: break
>>> print a
6
```

- beide überspringen den Rest des Schleifenkörpers
- **break** bricht die Schleife ganz ab
- **continue** springt zum Anfang


```
>>> def printPi():  
...     print "pi ist ungefaehr 3.14159"  
>>> printPi()  
pi ist ungefaehr 3.14159
```

```
>>> def printMax(a, b):  
...     if a > b: print a  
...     else:    print b  
>>> printMax(3, 2)  
3
```

- eine Funktion kann beliebig viele Argumente haben
- Argumente sind Variablen der Funktion
- Beim Aufruf bekommen die Argumentvariablen Werte in der Reihenfolge der Definition
- Der Funktionskörper ist wieder ein Block

```
def printMax(a, b):  
    if a > b:  
        print a  
        return  
    print b
```

- **return** beendet die Funktion sofort

Rückgabewert

```
>>> def max(a, b):  
...     if a > b: return a  
...     else:    return b  
>>> print max(3, 2)  
3
```

- eine Funktion kann einen Wert zurückliefern
- der Wert wird bei **return** spezifiziert

```
>>> def max(a, b):  
...     if a > b: maxVal=a  
...     else:     maxVal=b  
...     return maxVal  
>>> print max(3, 2)  
3  
>>> print maxVal  
NameError: name 'maxVal' is not defined
```

- Variablen innerhalb einer Funktion sind *lokal*
- lokale Variablen existieren nur während der Funktionsausführung
- globale Variablen können aber gelesen werden

```
>>> faktor=2  
>>> def strecken(a): return faktor*a  
>>> print strecken(1.5)  
3.0
```

```
>>> def lj(r, epsilon = 1.0, sigma = 1.0):  
...     return 4*epsilon*( (sigma/r)**6 - (sigma/r)**12 )  
>>> print lj(2**(1./6.))  
1.0  
>>> print lj(2**(1./6.), 1, 1)  
1.0
```

- Argumentvariablen können mit Standardwerten vorbelegt werden
- diese müssen dann beim Aufruf nicht angegeben werden

```
>>> print lj(r = 1.0, sigma = 0.5)  
0.0615234375  
>>> print lj(epsilon=1.0, sigma = 1.0, r = 2.0)  
0.0615234375
```

- beim Aufruf können die Argumente auch explizit belegt werden
- dann ist die Reihenfolge egal

```
def max(a, b):  
    "Gibt das Maximum von a und b zurueck."  
    if a > b: return a  
    else:     return b
```

```
def min(a, b):  
    ""
```

Gibt das Minimum von a und b zurueck. Funktioniert
ansonsten genau wie die Funktion max.

```
    ""  
    if a < b: return a  
    else:     return b
```

-
- Dokumentation optionale Zeichenkette vor dem Funktionskörper
 - wird bei `help(funktion)` ausgegeben

```
def printGrid(f, a, b, step):  
    """  
    Gibt x, f(x) an den Punkten  
    x= a, a + step, a + 2*step, ..., b aus.  
    """  
    x = a  
    while x < b:  
        print x, f(x)  
        x = x + step  
  
def test(x): return x*x  
  
printGrid(test, 0, 1, 0.1)
```

- Funktionen ohne Argumentliste „(..)“ sind normale Werte
- Funktionen können in Variablen gespeichert werden
- ... oder als Argumente an andere Funktionen übergeben werden

```
def fakultaet(n):  
    # stellt sicher, das die Rekursion irgendwann stoppt  
    if n <= 1:  
        return 1  
    #  $n! = n * (n-1)!$   
    return n * fakultaet(n-1)
```

- Funktionen können andere Funktionen aufrufen, insbesondere sich selber
- Eine Funktion, die sich selber aufruft, heißt **rekursiv**
- Rekursionen treten in der Mathematik häufig auf
- sind aber oft nicht einfach zu verstehen
- Ob eine Rekursion endet, ist nicht immer offensichtlich
- Jeder rekursive Algorithmus kann auch **iterativ** als verschachtelte Schleifen formuliert werden

- Komplexe Datentypen sind zusammengesetzte Datentypen
- Beispiel: Eine Zeichenkette besteht aus beliebig vielen Zeichen
- die wichtigsten komplexen Datentypen in Python:
 - Strings (Zeichenketten)
 - Listen
 - Tupel
 - Dictionaries (Wörterbücher)
- diese können als **Sequenzen** in **for** eingesetzt werden:

```
>>> for x in "bla": print "->", x
-> b
-> l
-> a
```

```
>>> kaufen = [ "Muesli", "Milch", "Obst" ]
>>> kaufen[1] = "Sahne"
>>> print kaufen[-1]
Obst
>>> kaufen.append(42)
>>> del kaufen[-1]
>>> print kaufen
['Muesli', 'Sahne', 'Obst']
```

- komma-getrennt in eckigen Klammern
- können Daten *verschiedenen* Typs enthalten
- `liste[i]` bezeichnet das *i*-te Listenelement, negative Indizes starten vom Ende
- `liste.append()` fügt ein Element an eine Liste an
- **del** löscht ein Listenelement

```
>>> kaufen = kaufen + [ "0e1", "Mehl" ]
>>> print kaufen
['Muesli', 'Sahne', 'Obst', '0e1', 'Mehl']
>>> for l in kaufen[1:3]:
...     print l
Sahne
Obst
>>> print len(kaufen[:4])
3
```

- „+“ fügt zwei Listen aneinander
- `[i:j]` bezeichnet die Subliste vom `i`-ten bis zum `j-1`-ten Element
- Leere Sublisten-Grenzen entsprechen Anfang bzw. Ende, also stets `liste == liste[:] == liste[0:]`
- `for`-Schleife über alle Elemente
- `len()` berechnet die Listenlänge

Shallow copy:

```
>>> bezahlen = kaufen
>>> del kaufen[2:]
>>> print bezahlen
['Muesli', 'Sahne']
```

Subliste, deep copy:

```
>>> merken = kaufen[1:]
>>> del kaufen[2:]
>>> print merken
['Sahne', 'Obst', 'Oel', 'Mehl']
```

„=" macht in Python flache Kopien komplexer Datentypen!

- Flache Kopien (shallow copies) verweisen auf dieselben Daten
- Änderungen an einer flachen Kopie betreffen auch das Original
- Sublisten sind echte Kopien
- daher ist `l[:]` eine echte Kopie von `l`

```
>>> elementliste=[]
>>> liste = [ elementliste, elementliste ]
>>> liste[0].append("Hallo")
>>> print liste
[['Hallo'], ['Hallo']]
```

Mit echten Kopien (deep copies)

```
>>> liste = [ elementliste[:], elementliste[:] ]
>>> liste[0].append("Welt")
>>> print liste
[['Hallo', 'Welt'], ['Hallo']]
```

- komplexe Listenelemente sind flache Kopien und können daher mehrmals auf dieselben Daten verweisen
- kann zu unerwarteten Ergebnissen führen

```
>>> 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

```
>>> 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

```
>>> 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: Ganzzahlen (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
- %0x[defg]: mit Nullen auffüllen
- %x.y[efg]: x gesamt, y Nachkommastellen

```
>>> 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 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

- Zeichenkette in Zeichenkette suchen

"Hallo Welt".**find**("Welt") → 6

"Hallo Welt".**find**("Mond") → -1

- Zeichenkette in Zeichenkette ersetzen

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

- Groß-/Kleinschreibung ändern

"hallo".**capitalize**() → 'Hallo'

"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..".**rstrip**(".") → 'Hallo..'

```
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

```
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

```
>>> import random
```

```
>>> print random.random(), random.randint(0, 100)  
0.576899996137, 42
```

```
>>> from random import randint
```

```
>>> print randint(0, 100)  
14
```

- enthalten nützliche Funktionen, Klassen, usw.
- sind nach Funktionalität zusammengefasst
- werden per **import** zugänglich gemacht
- Hilfe: `help(modul)`, alle Funktionen: `dir(modul)`
- einzelne Bestandteile kann man mit **from ... import** importieren
 - bei Namensgleichheit kann es zu Kollisionen kommen!

```
import math
import random
def boxmuller():
    """
    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 *pseudozufällige* 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

stellt Informationen über Python und das laufende Programm selber zur Verfügung.

- `sys.argv`: Kommandozeilenparameter, `sys.argv[0]` ist der Programmname
- `sys.path`: Liste der Verzeichnisse, in denen Python Module sucht
- `sys.exit("Fehlermeldung")`: bricht das Programm ab
- `sys.stdin`,
`sys.stdout`,
`sys.stderr`: Dateiobjekte für Standard-Ein-/Ausgabe

```
zeile = sys.stdin.readline()
```

```
sys.stdout.write("gerade eingegeben: %s" % zeile)
```

```
sys.stderr.write("Meldung auf der Fehlerausgabe")
```

```
from optparse import OptionParser
```

```
parser = OptionParser()
parser.add_option("-f", "--file", dest="filename",
                  help="Ausgabe in FILE", metavar="FILE")
parser.add_option("-q", "--quiet", dest="verbose",
                  action="store_false", default=True,
                  help="So wenige wie moeglich Ausgaben")
(options, args) = parser.parse_args()
```

- optparse liest Kommandozeilenparameter wie unter UNIX üblich
- liefert ein Objekt (hier options) mit allen Argumenten
- und eine Liste (args) mit den verbliebenen Argumente
- Bei Aufruf `python parse.py -f test a b c` ist:
 - `options.filename = "test"`
 - `options.verbose = True`, da Standardwert (default)
 - `args = ['a', 'b', 'c']`

```
import os
import os.path
dir = os.path.dirname(file)
name = os.path.basename(file)
altdir = os.path.join(dir, "alt")
if not os.path.isdir(altdir):
    if os.path.exists(altdir):
        raise Exception("\"alt\" kein Verzeichnis")
    else: os.mkdir(altdir)
os.rename(file, os.path.join(altdir, name))
```

- 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
- `os.fork`: Skript ab dieser Stelle zweimal ausführen


```
import Tkinter
```

```
# unser Hauptfenster und die Verbindung zum Tk-Toolkit  
root = Tkinter.Tk()  
root.title("Ein Testprogramm")  
# ein normaler Knopf, der einfach das Programm beendet.  
ende = Tkinter.Button(root, text = "Ende",  
                        command = root.quit)  
ende.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 (Eingaben, Timer)
- lehnt sich eng an Tcl/Tk an (<http://www.tcl.tk>)

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,...

Schritte bei der Entwicklung eines Programms

- **Implementation 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?

- 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 Implementation 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

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!
⇒ 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

- **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!

- Implementation

```
def zahlentripel(c):  
    """
```

```
Liefert ein Ganzzahlpaar (a, b), dass  $a^2 + b^2 = c^2$   
erfüllt, oder None, wenn keine Lösung 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?

- **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.

- **Implementation** 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

- **Problemstellung**

Sortieren einer Liste, so dass $a_0 \leq a_1 \leq \dots \leq a_N$

- **Methodenwahl**

Vergleiche jedes Element mit jedem und bringe das größere durch Tauschen nach oben

- **Implementierung**

```
def bubblesort(liste):
```

```
    "sortiert liste in aufsteigender Reihenfolge"
```

```
    N = len(liste)
```

```
    for runde in range(N):
```

```
        for k in range(N - 1):
```

```
            if liste[k] > liste[k+1]:
```

```
                liste[k], liste[k + 1] = liste[k+1], liste[k]
```

- **Effizienz** – wieder nur $N^2!$