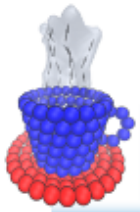


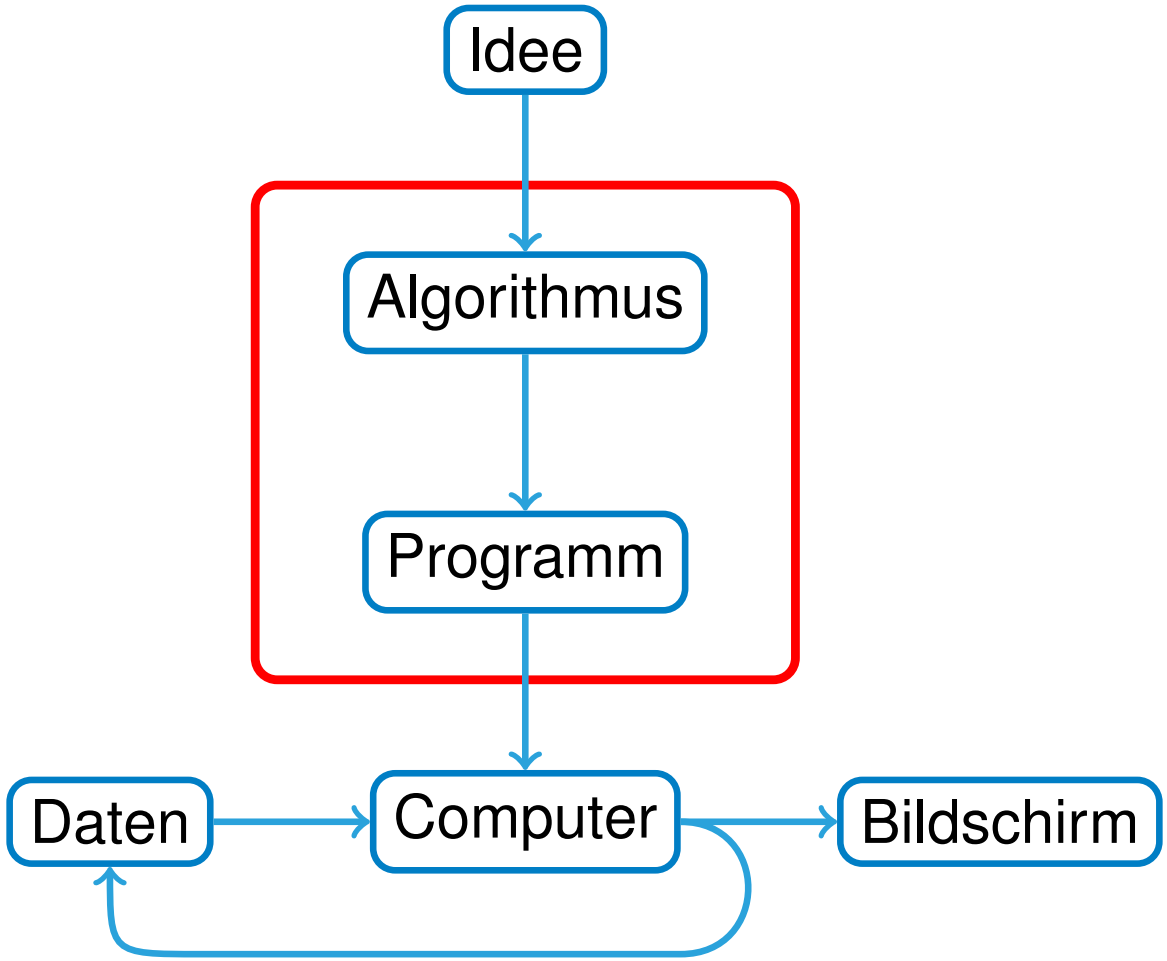
Computergrundlagen
Programmieren lernen — in Python

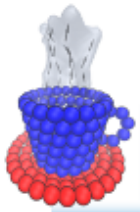
Axel Arnold

Institut für Computerphysik
Universität Stuttgart

Wintersemester 2014/15

Was ist Programmieren?





Algorithmus

Wikipedia:

Ein Algorithmus ist eine aus endlich vielen Schritten bestehende eindeutige Handlungsvorschrift zur Lösung eines Problems oder einer Klasse von Problemen.

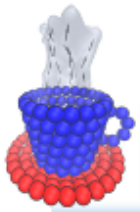
Ein Beispiel-**Problem**:

Gegeben

- Liste aller Teilnehmer der Vorlesung

Fragestellung

- ~~Wer wird die Klausur bestehen?~~ ↯
- Wieviele Studenten haben nur einen Vornamen?
- Wessen Matrikelnummer ist eine Primzahl?



Programm

Ein Programm ist eine Realisation eines Algorithmus in einer bestimmten Programmiersprache.

- Es gibt derzeit mehrere 100 verschiedene Programmiersprachen
- Die meisten sind *Turing-vollständig*, können also alle bekannten Algorithmen umsetzen

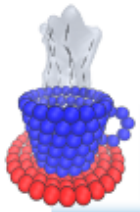
Softwareentwicklung und Programmieren

- Entwickeln der Algorithmen
  - Aufteilen in einfachere Probleme
  - Wiederverwendbarkeit
- Umsetzen in einer passenden Programmiersprache

Von der Idee zum Programm

Schritte bei der Entwicklung eines Programms

1. **Problemanalyse**
   - Was soll das Programm leisten?
     Z.B. eine Nullstelle finden, Molekulardynamik simulieren
   - Was sind Nebenbedingungen?
     Z.B. ist die Funktion reellwertig? Wieviele Atome?
2. **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
   - Wahl der Programmiersprache



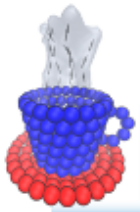
Von der Idee zum Programm

Schritte bei der Entwicklung eines Programms

3. **Implementation und Dokumentation**
   - Programmieren und *gleichzeitig* dokumentieren
   - Kommentare und externe Dokumentation (z.B. Formeln)
4. **Testen auf Korrektheit**
   - Funktioniert das Programm bei erwünschter Eingabe?
     Z.B. findet es eine bekannte Lösung?
   - Gibt es aussagekräftige Fehler bei falscher Eingabe?
     Z.B. vergessene Parameter, zu große Werte
5. **Testen auf Effizienz**
   - Wie lange braucht das Programm bei beliebigen Eingaben?
   - Wieviel Speicher braucht es?
6. Meist wieder zurück zur Problemanalyse, weil man etwas vergessen hat . . .

. . . und jetzt das Ganze in Python

- schnell zu erlernende, moderne Programmiersprache – tut, was man erwartet
- viele Standardfunktionen („all batteries included“)
- Bibliotheken für alle anderen Zwecke
- freie Software mit aktiver Gemeinde
- portabel, gibt es für fast jedes Betriebssystem
- entwickelt von Guido van Rossum, CWI, Amsterdam

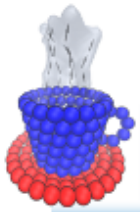


Informationen zu Python

- Aktuelle Versionen 3.3.0 bzw. 2.7.3
- 2.x ist *noch* weiter verbreitet (z.B. Python 2.7.3 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`
- mit Programmiererfahrung „Dive into Python“
  `http://diveintopython.net`



Python starten

Aus der Shell:

```
> python
Python 2.7.3 (default, Aug  1 2012, 05:14:39)
[GCC 4.6.3] 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, komma-separiert
- `help()`: interaktive Hilfe, wird mit „q“ beendet
- Statt `exit()` reicht auch Control-d
- oder `ipython` mit Tab-Ergänzung, History usw.

Python-Skripte

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!

Beispiel: Fakultät

- **Problem**
  Gegeben: Eine ganze Zahl n
  Gesucht: Die Fakultät $n! = 1 \cdot 2 \cdots n$ von n
- **Implementation**

```
# calculate factorial 1*2*...*n
n = 5
factorial = 1
for k in range(1, n+1):
    factorial = factorial * k
print n, "! =", factorial
```

Ausgabe:

```
5 ! = 120
```

- Gegebene Daten (n=5) fix ins Programm eingefügt
  $\Longrightarrow$ später lernen wir, Daten einzulesen

Datentyp: Ganzzahlen

```
>>> print 42
42
>>> print -12345
-12345
>>> print 20/2
10
>>> print 3/2, -3/2
1 -2
```

- Klassische, mathematische Ganzzahlen
- Division liefert nur ganzzahligen Rest (anders in Python 3!)
- rundet dabei immer ab, auch bei negativen Zahlen

Exkurs: Zahlensysteme

Sei $B > 0$ eine natürliche Zahl. Dann kann jede natürliche Zahl z *eindeutig* dargestellt werden als

$$z = \sum_{i=0}^{N} B^n z_k \text{ mit } 0 \leq z_k < B$$

Beispiel

- $B = 10$ entspricht unserem Dezimalsystem:
$$1042 = 10^0 \cdot 2 + 10^1 \cdot 4 + 10^3 \cdot 1 = 1042\text{d}$$
- $B = 8$ ergibt das Oktalsystem:
$$1042 = 8^0 \cdot 2 + 8^1 \cdot 2 + 8^3 \cdot 2 = 2022\text{o}$$
- $B = 16$ das Hexadezimalsystem (Ziffern 1–9, A–F):
$$1042 = 16^0 \cdot 2 + 16^1 \cdot 1 + 16^2 \cdot 4 = 412\text{x}$$

Binärsystem

- Computer arbeiten mit zwei Zuständen: viel/wenig Strom
- interpretiere als Ziffern 0 und 1 $\implies$ $B = 2$
- Umrechnung von Binär- auf Dezimalzahlen ist umständlich:

$$1042 = 2^{10} + 2^4 + 2^1 = 10.000.010.010\text{b}$$

- Binär$\leftrightarrow$ oktal ist einfach:

$$\begin{matrix} 2\,1 & 4\,2\,1 & 4\,2\,1 & 4\,2\,1 \\ 10.000.010.010\text{b} = 2022\text{o} \end{matrix}$$

- *Hexadezimal* ($B = 16$, Ziffern 1–9, A–F) auch:

$$\begin{matrix} 4\,2 & 1\,8\,4 & 2\,1\,8 & 4\,2\,1 \\ 10.000.010.010\text{b} = 812\text{h} \end{matrix}$$

$$1010.1111.1111.1110\text{b} = \text{AFFEh}$$

- daher beliebt bei Programmierern
- `print "{:x}".format(42)` gibt hexadezimal aus
- analog o für oktal, b für binär

Addieren/Subtrahieren im Binärsystem

Genau wie im Dezimalsystem:

	101010	(Summand a)		101010	(1. Summand a)
+	1111	(Summand b)	-	1111	(2. Summand b)
	1110	(Übertrag c)		11111	(geborgt c)
=	111001	(Ergebnis e)	=	11011	(Ergebnis e)

- Multiplikation / Division wie in der Grundschule

Komplementdarstellung negativer Zahlen

- n Bit stellen nur Zahlen $\in [0, 2^n)$ dar
- Höhere Bits werden ignoriert, insbesondere ist $2^n \equiv 0$
- Negative Zahlen werden als $-z \equiv 2^n - z$ dargestellt
- Daher ist $-5 = 256 - 5 = 251 = 11111011\text{b}$ bei 8 Bit

Datentyp: (Fließ-)kommazahlen

```
>>> print 12345.000
12345.0
>>> print 6.023e23, 13.8E-24
6.023e+23 1.38e-23
>>> print 3.0/2
1.5
```

- Reelle Zahlen der Form $6{,}023 \cdot 10^{23}$
- Endliche binäre Genauigkeit von Mantisse und Exponent
- `1.38e-23` steht z. B. für $1{,}38 \times 10^{-23}$
- üblich: $\approx \pm 10^{300}$, 17 Stellen („doppelte Genauigkeit“)
- Achtung: englische Schreibweise, Punkt statt Komma
- Keine Tausenderpunkte (oder -kommas)
- `12345` $\neq$ `12345.0` (z. B. bei der Ausgabe, Division,...)

Addition/Subtraktion von Fließkommazahlen

Beispiele:

$$1{,}0 \cdot 10^0 + 1{,}0 \cdot 10^{-5}$$
$$= 1{,}0 \cdot 10^0 + 0{,}00001 \cdot 10^0 = 1{,}00001 \cdot 10^0$$

$$1{,}000002 \cdot 10^0 - 1{,}000001 \cdot 10^0$$
$$= 0{,}000001 \cdot 10^0 = 1{,}0 \cdot 10^{-6}$$

- Stellen der kleineren Zahl gehen verloren
- **Auslöschung**: Subtraktion gleich großer Zahlen
  $\Longrightarrow$ viele führende Nullen, wenig signifikante Stellen übrig
- Deswegen ist die Reihenfolge auch bei Additionen nicht egal

Datentyp: Zeichenketten

```
>>> 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
- Zeichenketten sind keine Zahlen!

$$\texttt{"1"} \neq 1$$

- `int(string)` konvertiert Zeichenkette in Ganzzahl
- entsprechend `float(string)` für Fließkomma

Sich etwas merken — Variablen

```
>>> factorial = 2
>>> factor = 3
>>> print factorial, factor
2 3
>>> factorial = factorial * factor
>>> factor = 4
>>> print factorial, factor
6 4
```

- Werte können mit Namen belegt werden **und verändert**
- keine mathematischen Variablen, sondern Speicherplätze
- Daher ist `factorial = factorial * factor` kein Unsinn, sondern multipliziert `factorial` mit `factor`
- Die nachträgliche Änderung von `factor` ändert nicht `factorial`, das Ergebnis der vorherigen Rechnung!

Sich etwas merken — Variablen

```
>>> factorial = 2
>>> factor = 3
>>> print factorial, factor
2 3
>>> factorial = factorial * factor
>>> factor = 4
>>> print factorial, factor
6 4
```

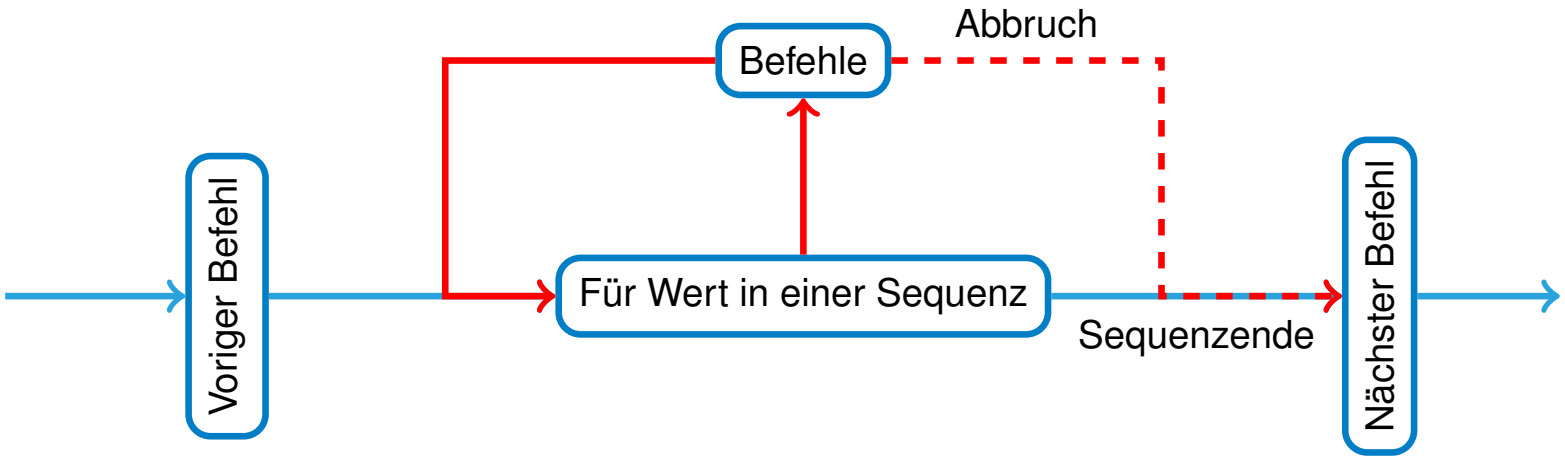
- Variablennamen bestehen aus Buchstaben, Ziffern oder „ _ “ (Unterstrich), am Anfang keine Ziffer
- Groß-/Kleinschreibung ist relevant: Hase $\neq$ hase
- **Richtig:** `i`, `some_value`, `SomeValue`, `v123`, `_hidden`, `_1`
- **Falsch:** `1_value`, `some␣value`, `some-value`
- am besten sprechende Bezeichner, also „factorial“, „n“ statt „v1“, „v2“

Arithmetische Ausdrücke

+	Addition, bei Strings aneinanderfügen, z.B. 1 + 2 → 3, "a" + "b" → "ab"
-	Subtraktion, z.B. 1 - 2 → -1
*	Multiplikation, Strings vervielfältigen, z.B. 2 * 3 = 6, "ab" * 2 → "abab"
/	Division, bei ganzen Zahlen ganzzahlig, z.B. 3 / 2 → 1, -3 / 2 → -2, 3.0 / 2 → 1.5
%	Rest bei Division, z.B. 5 % 2 → 1
**	Exponent, z.B. 3**2 → 9, 0.1**3 → 0.001

- mathematische Präzedenz (Exponent vor Punkt vor Strich), z. B. `2**3 * 3 + 5` → $2^3 \cdot 3 + 5 = 29$
- Präzedenz kann durch runde Klammern geändert werden: `2**(3 * (3 + 5))` → $2^{3 \cdot 8} = 16.777.216$

for-Schleifen



- Wiederholen eines Blocks von Befehlen
- *Schleifenvariable* nimmt dabei verschiedene Werte aus einer *Sequenz* (Liste) an
- Die abzuarbeitende Sequenz bleibt fest
- Kann bei Bedarf abgebrochen werden (Ziel erreicht, Fehler, . . .)

Für jeden Studenten in den Computergrundlagen finde einen Übungsplatz

for-Schleifen in Python

```
for v in range(k, l): body
```

- Ruft `body` für jedes Element in der Liste `range(k, l)` einmal auf
- Bei jedem Aufruf wird die Variable `v` auf das aktuelle Element gesetzt
- `range(k,l)` ist eine Liste der Zahlen a mit $k \leq a < l$
- später lernen wir, Listen zu erstellen und verändern

Beispiel

```
>>> b = 0
>>> for a in range(1, 10):
...     b = b + a
>>> print b
45
>>> print range(1,10)
[1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]
```

Blöcke und Einrückung

```
>>> b = 0
>>> for a in range(1, 3):
...     b = b + a
...     print b
4
6
>>> b = 0
>>> for a in range(1, 3):
...     b = b + a
... print b
6
```

- Alle *gleich eingerückten* Befehle gehören zum Block
- Einzeilige Blöcke können auch direkt hinter den Doppelpunkt
- Einrücken durch Leerzeichen oder Tabulatoren (einfacher)
- So kann ein Schleifenkörper mehrere Befehle enthalten

Blöcke und Einrückung

- 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!

Beispiel: Pythagoreische Zahlentripel (Schleifen)

- **Problem**
  Gegeben: Eine ganze Zahl c
  Gesucht: Zwei Zahlen a, b mit $a^2 + b^2 = c^2$
  - $a = 0$, $b = c$ geht immer $\Rightarrow a,b > 0$
  - Wenn es keine Lösung gibt? Fehlermeldung!
- **Methodenwahl**, Algorithmus:
  - Es muss offenbar gelten: $a < c$ und $b < c$
  - O.B.d.A. sei auch $a \leq b$, also $0 < a \leq b < c$
  - Durchprobieren aller Paare a, b mit $0 < a < c$ und $a \leq b < c$:

$c = 5 \implies c^2 = 25, a^2 + b^2 =$

	1	2	3	4
1	2	5	10	17
2		8	13	20
3			18	**25**
4				32

Implementation

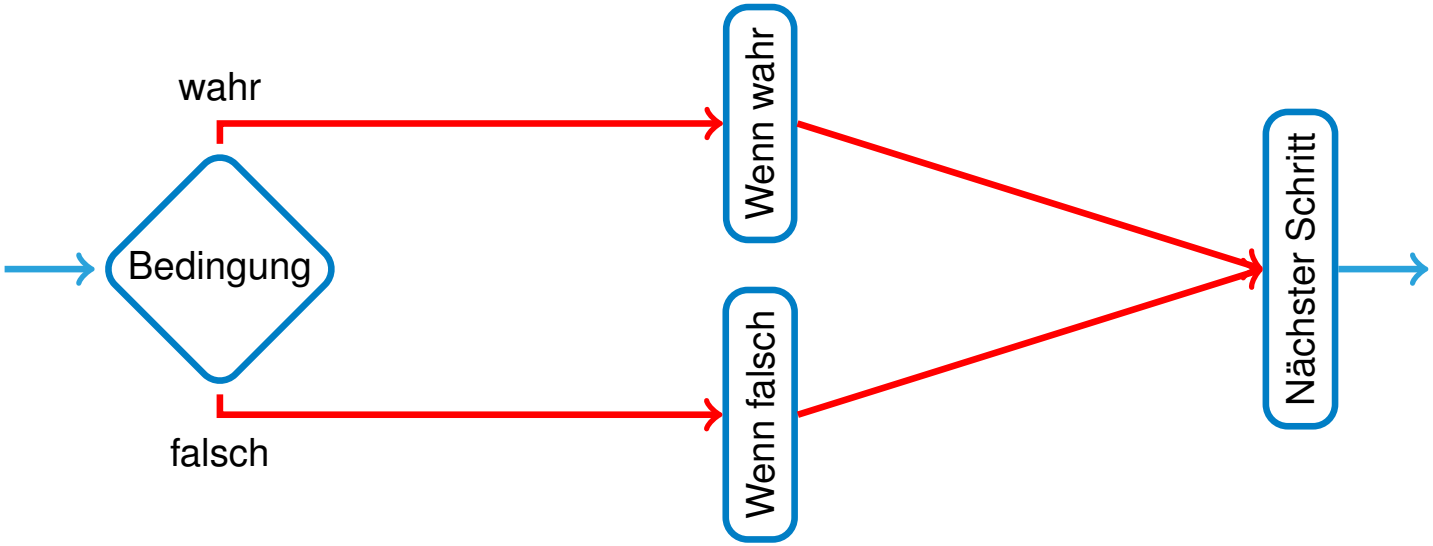
```
# Try to find a pythagorean triple a^2 + b^2 = c^2.
# parameter: rhs number, should be an integer larger than 0
c = 5000

# try all possible pairs
for a in range(1,c):
    for b in range(a,c):
        if a**2 + b**2 == c**2:
            print "{}^2 + {}^2 = {}^2".format(a, b, c)
            exit()
```

Ausgabe:

```
3^2 + 4^2 = 5^2
```

- Gegebene Daten (c=5) fix ins Programm eingefügt
  $\Longrightarrow$ später lernen wir, Daten einzulesen

Bedingte Ausführung



- Das Programm kann auf Werte von Variablen verschieden reagieren
- Wird als *Verzweigung* bezeichnet
- Auch mehr Äste möglich (z.B. < 0, $= 0$, > 0)

Student hat mehr als 50% Punkte? $\Longrightarrow$ zur Klausur zulassen

if: bedingte Ausführung in Python

```
if   cond:  body_cond_true
elif cond2: body_cond2_true
else:       body_false
```

- **`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

Beispiel

```
>>> 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
```

Logische Ausdrücke

`==, !=`	Test auf (Un-)Gleichheit, z.B. `2 == 2` → `True`, `1 == 1.0` → `True`, `2 == 1` → `False`
`<,>,<=,>=`	Vergleich, z.B. `2 > 1` → `True`, `1 <= -1` → `False`
`or, and`	Logische Verknüpfungen „oder“ bzw. „und“
`not`	Logische Negation, z.B. `not False == True`

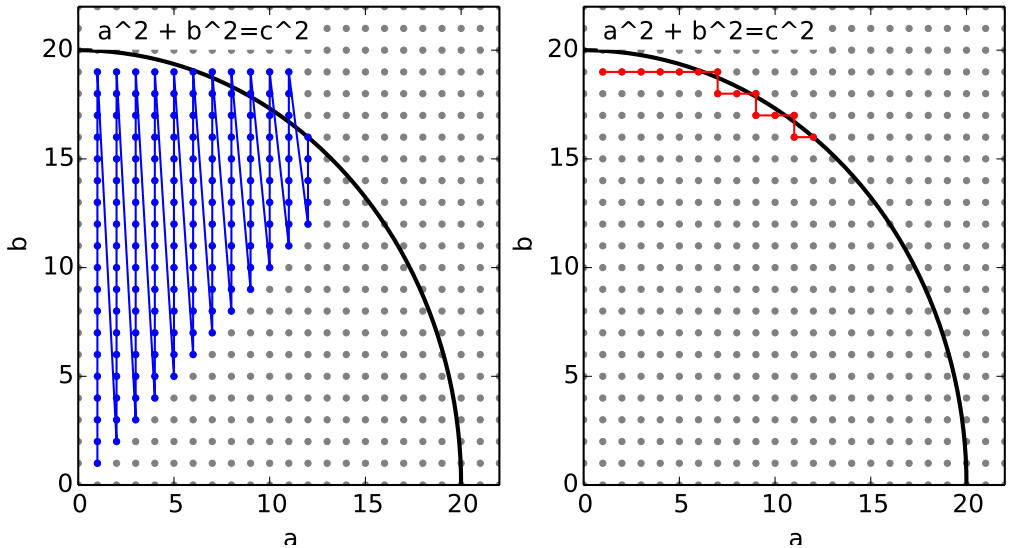
- Wahrheitswerte **`True`** („wahr “) oder **`False`** („falsch “)
- Verknüpfungen wie in der klassischen **Aussagenlogik**
- Präzedenz: logische Verknüpfungen vor Vergleichen

```
3 > 2 and 5 < 7 → True
1 < 1 or 2 >= 3 → False
```

Testen auf Effizienz

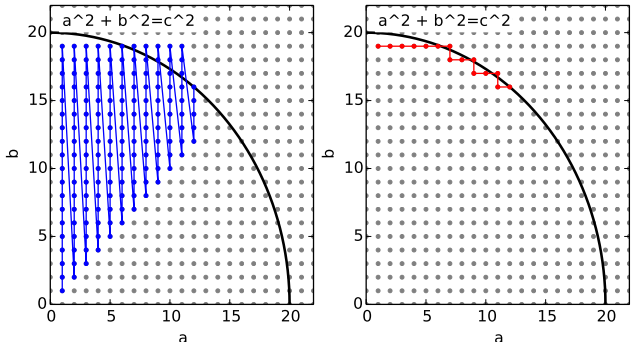
Zahl (alle ohne Lösung)	1236	12343	123456
Zeit	0,2s	18,5s	30m

- Das ist sehr langsam! Geht das besser? Ja!



- Statt alle Paare auszuprobieren, suche nur in der Umgebung des Halbkreises!

Testen auf Effizienz



- **Methodenwahl**, effizienterer Algorithmus:
  - 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
  - Mit der selben Argumentation kann man fortfahren
  - Wir haben alle Möglichkeiten getestet, wenn $a > b$
- braucht maximal $|c|/2$ statt $c(c-1)/2$ viele Schritte

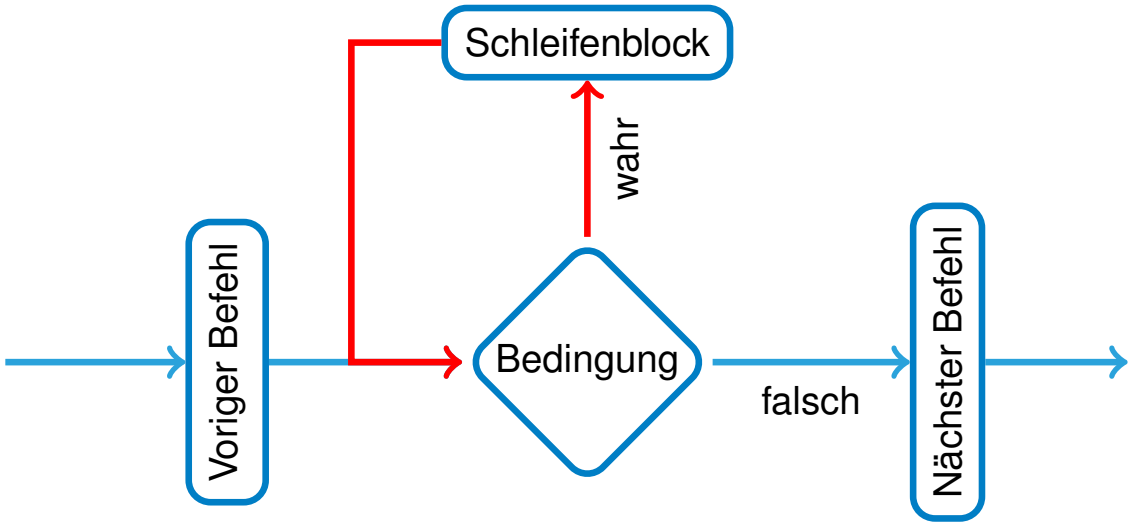
Neue Implementation

```
# parameter: rhs number, should be an integer larger than 0
c = 5
# starting pair
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:
        print "{}^2 + {}^2 = {}^2".format(a, b, c)
        break
```

- Effizienz dieser Lösung:

Zahl	12343	123456	1234561	12345676	123456789
Zeit	0.04s	0.08s	0.65s	6.2s	62.4s
Zeit (alt)	0,2s	18,5s	30m	-	-

Vorprüfende Schleifen: while



- Wiederholte Ausführung ähnlich wie for-Schleifen
- Keine *Schleifenvariable*, sondern Schleifenbedingung
- Ist die Bedingung immer erfüllt, kommt es zur **Endlosschleife**

Solange $a > 0$, ziehe eins von a ab

Solange noch Zeilen in der Datei sind, lese eine Zeile

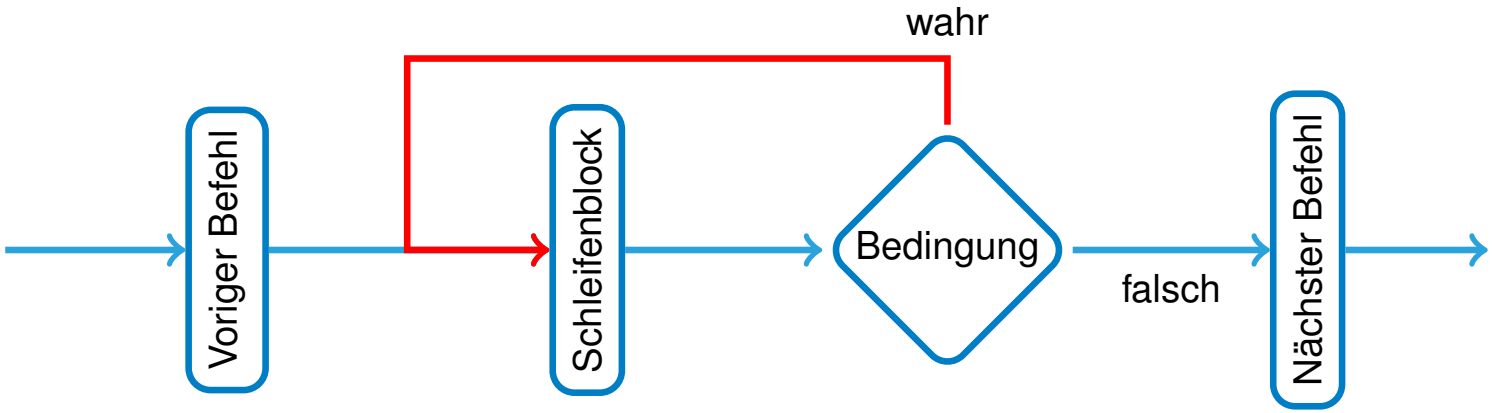
while-Schleifen in Python

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

- Führt den Block solange aus, wie die Bedingung wahr ist
- Block wird nicht ausgeführt, wenn Bedingung sofort verletzt ist:

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

Nachprüfende Schleifen: do ... while



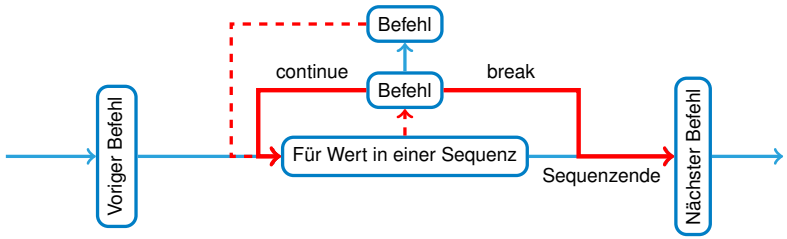
- **`do...while`**-Schleifen führen zunächst den Schleifenblock aus und überprüfen dann die Bedingung
- Nötig, wenn die Bedingung vom Ergebnis des Blocks abhängt
- In Python durch normale **`while`**-Schleife ersetzen:

```
>>> condition = True
>>> while condition:
...     body()
...     condition = check()
```

break und continue: Schleifen beenden

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

- Beide überspringen den Rest des Schleifenkörpers
- **break** bricht die Schleife ganz ab
- **continue** springt zum Anfang
- Aber immer nur die innerste Schleife



Formatierte Ausgabe: `.format`

```
>>> print "{}^2 + {}^2 = {:05}^2".format(3, 4, 5)
3^2 + 4^2 = 00005^2
>>> print "Strings {1} {0:>10}".format("Welt", "Hallo")
Strings Hallo       Welt
>>> print "Fliess {:e} {:+8.4f} {:g}".format(3.14,3.14,3.14)
Fliess 3.140000e+00  +3.1400 3.14
```

- String.`format` ersetzt {}-Platzhalter
- erster Parameter ersetzt `{0}`, zweiter `{1}` usw.
- Formatierungsangaben hinter „:“, u. a.
  - <, >, ^: links-, rechtsbündig oder zentriert
  - +: Vorzeichen immer ausgeben
  - `0`: führende Nullen bei Zahlen
  - gefolgt von Breite.Genauigkeit
  - `e`, `f`, `g`: verschiedene Fließkommaformate
  - x, b: hexadezimal und binär ausgeben

Parameter einlesen

```
import sys
# get integer c from the command line
try:
    c = int(sys.argv[1])
except:
    sys.stderr.write("usage: {} <c>\n".format(sys.argv[0]))
    exit(-1)
print c
```

- Bisher ist c fest im Programm $\Longrightarrow$
  wenn wir c ändern wollen, müssen wir das Programm ändern
- Besser von der Kommandozeile lesen!
- So können wir das Programm direkt vom Terminal benutzen
- Wir brauchen keinen Editor, wenn es mal tut

Parameter einlesen

```
import sys
# get integer c from the command line
try:
    c = int(sys.argv[1])
except:
    sys.stderr.write("usage: {} <c>\n".format(sys.argv[0]))
    exit(-1)
print c
```

- **import** sys lädt das sys-Modul, dazu später mehr
- sys.argv[i] gibt dann den i-ten Parameter des Programms
- sys.argv[0] ist der Name des Skripts
- int(string) konvertiert Zeichenkette in Ganzzahl
- Der **except**-Block wird nur ausgeführt, wenn es beim Lesen von c einen Fehler gab

Beispiel: Sortieren

Gegeben: Liste $A = a_o, \ldots, a_N$

Gesucht: Liste $A' = a'_o, \ldots, a'_N$ mit denselben Elementen wie A, aber sortiert, also $a'_0 \leq a'_1 \leq \ldots \leq a'_N$

- Datentyp ist egal, so lange $\leq$ definiert ist
- In Python ganz einfach:
  - `A.sort()` $\Longrightarrow$ `A` wird umsortiert
  - `B = sorted(A)` $\Longrightarrow$ `A` bleibt gleich, `B` ist die sortierte Liste

```
>>> A = [2,1,3,5,4]
>>> print sorted(A), A
[1, 2, 3, 4, 5] [2, 1, 3, 5, 4]
>>> A.sort()
>>> print A
[1, 2, 3, 4, 5]
```

- Aber was passiert da nun? Wie sortiert der Computer?

Sortieralgorithmus 1: Bubblesort

Idee

- paarweises Sortieren, größere Werte steigen wie Blasen auf
- ein Durchlauf aller Elemente $\Longrightarrow$ größtes Element ganz oben
- m Durchläufe $\Longrightarrow$ m oberste Elemente einsortiert
- $\Longrightarrow$ nach spätestens N Durchläufen fertig
- fertig, sobald nichts mehr vertauscht wird

Effizienz

- im Schnitt $N/2$ Durchläufe mit $N/2$ Vergleichen
  $\Longrightarrow$ Laufzeit $\mathcal{O}(N^2)$
- Auch im schlimmsten Fall $N-1+N-2+\ldots+1=\mathcal{O}(N^2)$
- Kein zusätzlicher Speicherbedarf

Implementation

```
def sort(A):
    "sort list A in place"
    N = len(A)
    for round in range(N):
        changed = False
        for k in range(N - round - 1):
            if A[k] > A[k+1]:
                A[k], A[k + 1] = A[k+1], A[k]
                changed = True
        if not changed: break
A = [1,3,2,5,4]
sort(A)
print A
```

Ausgabe:

```
[1, 2, 3, 4, 5]
```

Listen in Python

```
>>> kaufen = [ "Muesli", "Milch", "Obst" ]
>>> kaufen[1] = "Sahne" # "Milch" durch Sahne ersetzen
>>> print kaufen
['Muesli', 'Sahne', 'Obst']
>>> print kaufen[0] # erstes (!) Element
Muesli
>>> print kaufen[-1] # letztes Element
Obst
>>> print "Saft" in kaufen
False
```

- komma-getrennt in eckigen Klammmern
- können Daten *verschiedenen* Typs enthalten
- `liste[i]` bezeichnet das `i`-te Listenelement (bei 0 startend)
- negative Indizes starten vom Ende
- `x in liste` überprüft, ob `liste` ein Element mit Wert `x` enthält

Elemente zu Listen hinzufügen

```
>>> kaufen = [ "Muesli", "Milch", "Obst" ]
>>> kaufen.append("Brot")
>>> print kaufen
['Muesli', 'Milch', 'Obst', 'Brot']
>>> kaufen.insert(1, "Saft")
>>> print kaufen
['Muesli', 'Saft', 'Milch', 'Obst', 'Brot']
>>> kaufen = kaufen + [ "Milch", "Mehl" ]
>>> print kaufen
['Muesli', 'Saft', 'Milch', 'Obst', 'Brot', 'Milch', 'Mehl']
```

- `liste.append(x)` hängt `x` am Ende der Liste `liste` an
- `liste.insert(i, x)` fügt `x` an Position `i` der Liste `liste` an
- Listen können durch + aneinandergefügt werden

Elemente löschen

```
>>> kaufen = [ "Muesli", "Milch", "Obst", "Brot", "Milch" ]
>>> kaufen.remove("Milch")
>>> print kaufen
['Muesli', 'Obst', 'Brot', 'Milch']
>>> kaufen.remove("Milch")
>>> print kaufen
['Muesli', 'Obst']
>>> kaufen.remove("Saft")
ValueError: list.remove(x): x not in list
['Muesli', 'Obst', 'Brot']
>>> del kaufen[-1]
```

- `liste.remove(x)` entfernt *das erste Element* mit dem *Wert* `x` aus der Liste
- Fehler, wenn es kein solches gibt (daher mit **`in`** testen)
- **`del`** `liste[i]` löscht das Element mit *Index* `i` aus der Liste

Unterlisten

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

- `[i:j+1]` ist die Unterliste vom `i`-ten bis zum `j`-ten Element
- Leere Grenzen entsprechen Anfang bzw. Ende,
  also stets `liste == liste[:] == liste[0:]`
- **`for`**-Schleife iteriert über alle Elemente
- negative Indizes starten vom Ende
- `len()` berechnet die Listenlänge

Vorsicht: Flache Kopien!

```
>>> kaufen = [ "Muesli", "Milch", "Obst" ]
```

Flache Kopie:

```
>>> merken = kaufen
>>> del kaufen[-1]
>>> print merken
['Muesli', 'Sahne']
```

Subliste, echte Kopie:

```
>>> merken = kaufen[:]
>>> del kaufen[-1]
>>> print merken
['Muesli', 'Sahne', 'Obst']
```

„=“ macht in Python flache Kopien von Listen!

- Flache Kopien (shallow copies) *verweisen* auf dieselben Daten
- Änderungen an einer flachen Kopie betreffen auch das Original
- Sublisten sind echte Kopien (deep copies, weil alles kopiert wird)
- nur `kaufen[:]` ist eine echte Kopie von `kaufen`

Tupel: unveränderbare Listen

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

- komma-getrennt in runden Klammern
- Solange eindeutig, können die Klammern weggelassen werden
- können nicht verändert werden
- ansonsten wie Listen einsetzbar, aber schneller
- Zeichenketten sind Tupel von Zeichen

Austauschen (Swappen) von Werten mit Tupeln

```
>>> A=1
>>> B=2
>>> A, B = B, A
>>> print A, B
2 1
```

So hingegen nicht:

```
>>> A = B
>>> B = A
>>> print A, B
1 1
```

- Listen und Tupel können *links* vom Gleichheitszeichen stehen
- Elemente werden der Reihe nach zugeordnet
- `A,B = B,A` tauscht also die Werte zweier Variablen aus (Tupelzuweisung!)

Listenabstraktion: Listen aus Listen erzeugen

```
>>> print [a**2 for a in [0,1,2,3,4]]
[0, 1, 4, 9, 16]
>>> print sum([a**2 for a in range(5)])
30
>>> print [a for a in range(10) if a % 2 == 1]
[1, 3, 5, 7, 9]
>>> print [(a,b) for a in range(3) for b in range(2)]
[(0, 0), (0, 1), (1, 0), (1, 1), (2, 0), (2, 1)]
```

- Listen können in neue Listen abgebildet werden
- Syntax: `[ausdruck for variable in liste if bedingung]`
  - `ausdruck`: beliebige Formel, die meist von `variable` abhängt
  - `variable`, `liste`: wie in einer for-Schleife
  - `bedingung`: welche Werte für `variable` zulässig sind
- mehrere **`for`**s können aufeinander folgen (rechteckiges Schema)

Sortieralgorithmus 2: Quicksort

Idee

- Teile und Herrsche (Divide & Conquer): Aufteilen in zwei kleinere Unterprobleme
- Liste ist fertig sortiert, falls $N \leq 1$
- wähle *Pivot*- (Angel-) element p
- erzeuge Listen K und G der Elemente kleiner/größer als p
- sortiere die beiden Listen K und G
- Ergebnis ist die Liste $K \oplus \{p\} \oplus G$

Effizienz

- im Schnitt $\log_2 N$-mal aufteilen, dabei N Elemente einordnen $\Longrightarrow$ Laufzeit $\mathcal{O}(N \log N)$
- Aber im schlimmsten Fall $N - 1 + N - 2 + ... + 1 = \mathcal{O}(N^2)$

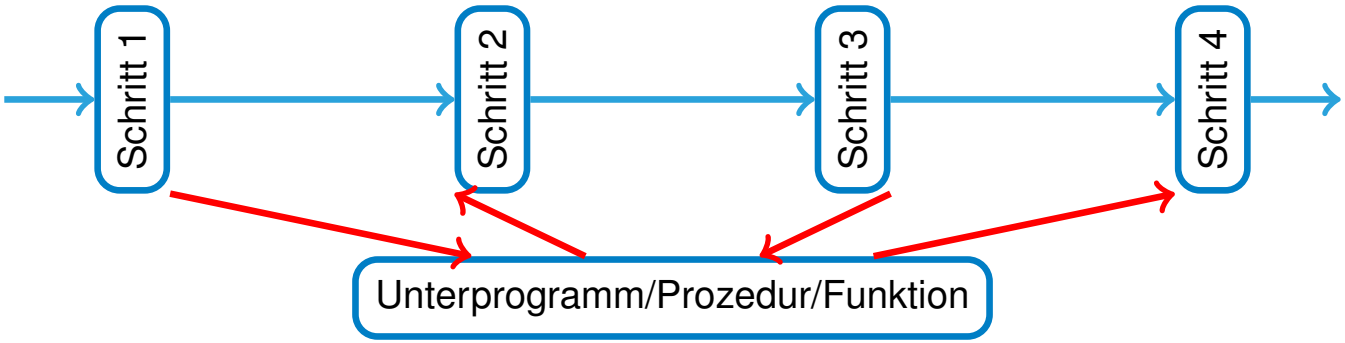
Implementation

```
def sort(A):
    print "sorting", A
    if len(A) <= 1: return A
    pivot = A[0]
    smaller = [a for a in A[1:] if a < pivot]
    larger  = [a for a in A[1:] if a >= pivot]
    print "smaller=",smaller,"pivot=",pivot,"larger=",larger
    return sort(smaller) + [pivot] + sort(larger)
A = [3,1,2,5,4,2,3,4,2]
print sort(A)
```

Ausgabe:

```
sorting [3, 1, 2, 5, 4, 2, 3, 4, 2]
smaller= [1, 2, 2, 2] pivot= 3 larger= [5, 4, 3, 4]
sorting [1, 2, 2, 2]
...
```

Funktionen



- Funktionen (Unterprogramme, Prozeduren) unterbrechen die aktuelle Befehlskette und fahren an anderer Stelle fort
- Kehren an ihrem Ende wieder zur ursprünglichen Kette zurück
- Funktionen können selber wieder Funktionen aufrufen
- Vermeiden Code-Duplikation
  - kürzerer Code
  - besser wartbar, Fehler müssen nur einmal verbessert werden
- Sprechende Namen dokumentieren, was der Codeteil tun soll

Funktionen in Python

```
>>> 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 verhalten sich wie Variablen
- Beim Aufruf bekommen die Argumentvariablen Werte in der Aufrufreihenfolge
- Der Funktionskörper ist wieder ein Block

Lokale Variablen

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

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

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

Vorgabewerte und Argumente benennen

```
>>> 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

return: eine Funktion beenden

```
>>> def max(a, b):
...     if a > b: return a
...     else:     return b
>>> print max(3, 2)
3
>>> options, args = parser.parse_args()
```

- **return** beendet die Funktion sofort (vgl. **break**)
- eine Funktion kann einen Wert zurückliefern
- der Wert wird bei **return** spezifiziert

```
>>> def minmax(a, b): return max(a), min(a)
>>> options, args = parser.parse_args()
```

- Der Rückgabewert kann auch ein Tupel sein
  $\Longrightarrow$ mehrere Werte zurückgeben

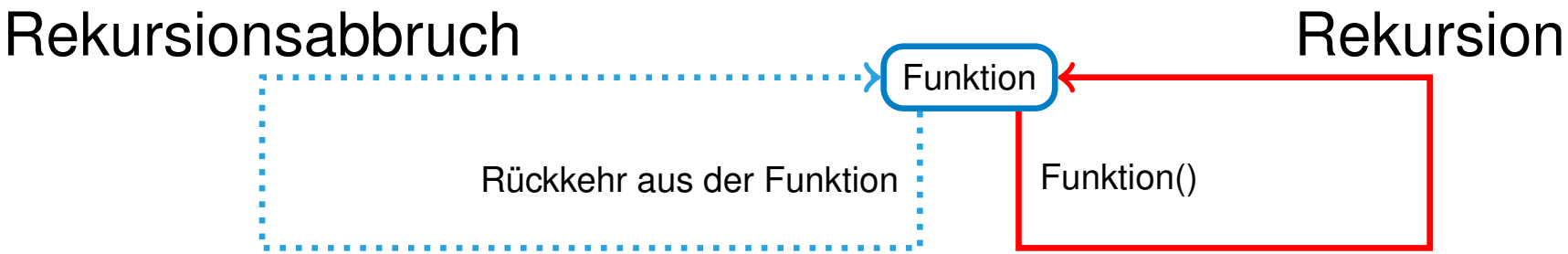
Dokumentation von Funktionen

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

def min(a, b):
    """
Gibt das Minimum von a und b aus. Funktioniert
ansonsten genau wie die Funktion max.
    """
    if a < b: print a
    else:     print b
```

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

Rekursion

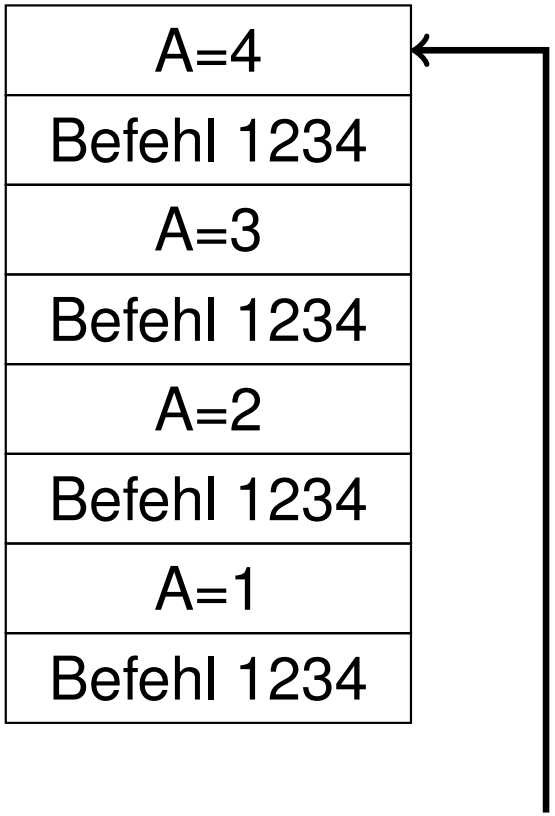
Eine Funktion, die sich selber aufruft, heißt rekursiv



- viele Algorithmen lassen sich elegant als Rekursion formulieren (Quicksort!)
- Ablauf meist nicht einfach zu verstehen
- ob eine Rekursion endet, ist nicht immer offensichtlich
- benötigt stets Abbruchkriterium

Funktionsaufrufe und Stack

- Wieso werden Funktionswerte bei Rekursion nicht überschrieben?
- Speicherung bei Funktionsaufruf auf dem **Stack**
- Eine Liste, bei der nur am Ende hinzugefügt (**push**) oder entfernt (**pop**) werden kann
- Jede Rekursion kann mit Hilfe eines Stacks in Schleifen übersetzt werden
- Rücksprungadresse auf dem Stack speichern
- So wird Rekursion in Computern tatsächlich umgesetzt



Sortieralgorithmus 3: Mergesort

Idee

- Problem Quicksort: kurze Listen können passieren
- daher in zwei etwa gleich große Listen teilen
- Liste ist fertig sortiert, falls $N \leq 1$
- sortiere die beiden Teillisten
- Verzahnen der beiden sortierten Listen
  - das kleinste Element steht am Anfang einer der beiden Listen
  - zur sortierten Gesamtliste zufügen
  - restliche Elemente analog

Effizienz

- im Schnitt $\log_2 N$-mal aufteilen, dabei N Elemente einordnen
  $\Longrightarrow$ Laufzeit stets $\mathcal{O}(N \log N)$, auch im schlimmsten Fall

Implementation

```
def sort(A):
    if len(A) <= 1: return A
    center = len(A)/2
    left, right = sort(A[:center]), sort(A[center:])
    merged = []
    # Listen verzahnen
    while left and right:
        if left[0] < right[0]:
            merged.append(left[0])
            del left[0]
        else:
            merged.append(right[0])
            del right[0]
    # Reste einsammeln
    merged += left + right
    return merged
```

Beispiel: Wörter zählen (dicts)

```
# count words in "gpl.txt"
count = {}
for line in open("gpl.txt"):
    # split into words at blanks
    text = line.split()
    for word in text:
        # normalize word
        word = word.strip(".,:;()\"").lower()
        # account: if already known, increase count
        if word in count: count[word] += 1
        # other create counter
        else:                count[word] = 1
# sort according to count and print 5 most used words
c_sorted = sorted(count, key=lambda word: count[word])
for word in reversed(c_sorted[-5:]):
    print "{:5s}: {:5d}".format(word, count[word])
```

Wörterbücher (dicts)

```
>>> de_en = { "Milch": "milk", "Mehl": "flour" }
>>> de_en["Eier"]="eggs"
>>> print de_en["Milch"]
milk
>>> if "Mehl" in de_en: print "I can translate \"Mehl\""
I can translate "Mehl"
```

- Komma-getrennte Paare von Schlüsseln (Keys) und Werten in geschweiften Klammern
- Die Werte sind zu den Schlüsseln **assoziiert**
- Vergleiche Wörterbuch: Deutsch → Englisch
- Mit **in** kann nach Schlüsseln gesucht werden
- Gut für unstrukturierte Daten

Wörterbücher (dicts)

```
>>> for de in de_en: print de, "=>", de_en[de]
Mehl => flour
Eier => eggs
Milch => milk
>>> de_en["Mehl"] = "wheat flour"
>>> for de, en in de_en.iteritems(): print de, "=>", en
Mehl => wheat flour
Eier => eggs
Milch => milk
```

- Werte sind änderbar (siehe auch Zählprogramm)
- Indizierung über die Keys, nicht Listenindex o.ä.
- **`for`** iteriert auch über die Schlüssel
- Oder mit **`iteritems`** über Schlüssel-Wert-Tupel

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".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..".lstrip(".")` → `'Hallo..'`

Ein-/Ausgabe: Dateien in Python

```
input  = open("in.txt")
output = open("out.txt", "w")
linenr = 0
while True:
    line = input.readline()
    if not line: break
    linenr += 1
    output.write("{}: {}\n".format(linenr, line))
output.close()
```

- Dateien sind mit `open(datei, mode)` erzeugte Objekte
- Nur beim Schließen (`close`) werden alle Daten geschrieben
- Mögliche Modi (Wert von `mode`):

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

Ein-/Ausgabe: Dateien in Python

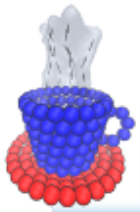
```
input  = open("in.txt")
output = open("out.txt", "w")
linenr = 0
while True:
    line = input.readline()
    if not line: break
    linenr += 1
    output.write("{}: {}\n".format(linenr, line))
output.close()
```

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

Ein-/Ausgabe: Dateien in Python

```
input  = open("in.txt")
output = open("out.txt", "w")
linenr = 0
while True:
    line = input.readline()
    if not line: break
    linenr += 1
    output.write("{}: {}\n".format(linenr, line))
output.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:

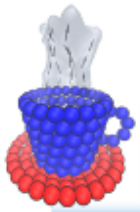
```
Mir dünkt, dass α² = 0.25
```

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

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

math- und random-Modul

```
import math
import random
def boxmuller():
    """
calculate Gaussian random numbers using the
Box-Muller transform
    """
    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*

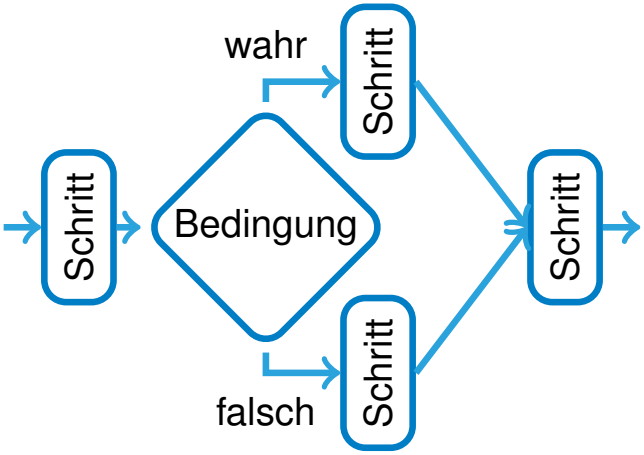
os-Modul: Betriebssystemfunktionen

```
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)
```

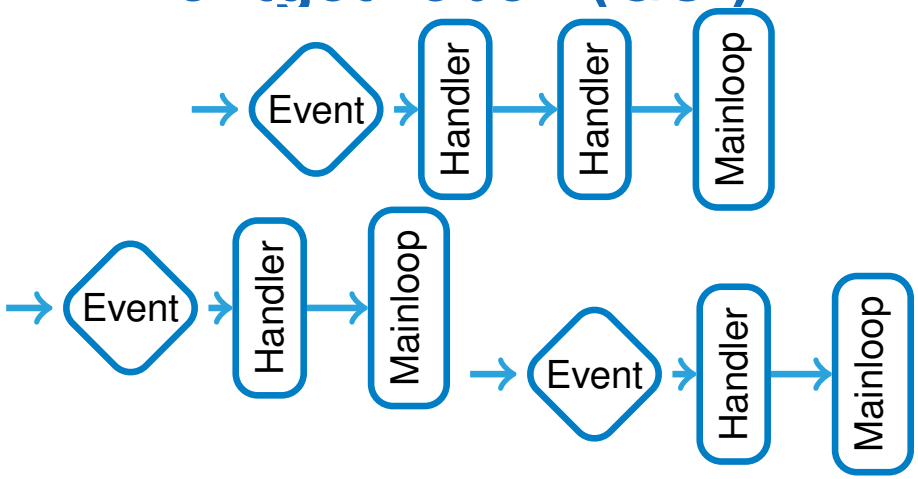
- betriebssystemunabhängige Pfadtools im Untermodul `os.path`: z.B. `dirname`, `basename`, `join`, `exists`, `isdir`
- `os.system`: Programme wie von der Shell aufrufen
- `os.rename/os.remove`: Dateien umbenennen / löschen
- `os.mkdir/os.rmdir`: erzeugen / entfernen von Verzeichnissen

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
# main window and connection to Tk
root = Tkinter.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

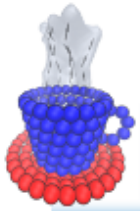
```
>>> A = np.identity(2)
>>> print A
[[ 1.  0.]
 [ 0.  1.]]
>>> v = np.zeros(5)
>>> print v
[ 0.  0.  0.  0.  0.]
>>> print type(A), type(v)
<type 'numpy.ndarray'> <type 'numpy.ndarray'>
```

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

 [[7, 8, 9],
  [0, 1, 2]]]
```

- `np.array` erzeugt ein mehrdimensionales `ndarray` aus einer (geschachtelten) Liste
- Alle Zeilen müssen die gleiche Länge haben
- Entsprechen Matrizen, Tensoren, ...

Mehrdimensionale Arrays

```
>>> print np.zeros((2, 2))
array([[ 0.,  0.],
       [ 0.,  0.]])
>>> print np.identity(2)
[[ 1.  0.]
 [ 0.  1.]]
>>> print np.outer([1,2],[3,5])
[[ 3  5]
 [ 6 10]]
```

- `np.zeros/ones` mit Tupeln von Dimensionen
- `np.identity` liefert die Identitätsmatrix (immer zweidimensional)
- `np.outer` ist das äußere Produkt von Vektoren:

$$a \otimes b = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \\ a_n b_1 & a_n b_2 & \dots \end{pmatrix}$$

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?)

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 $Ax = b$

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

Zum Beispiel aus dem Gaußschen Eliminationsverfahren (dazu in 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

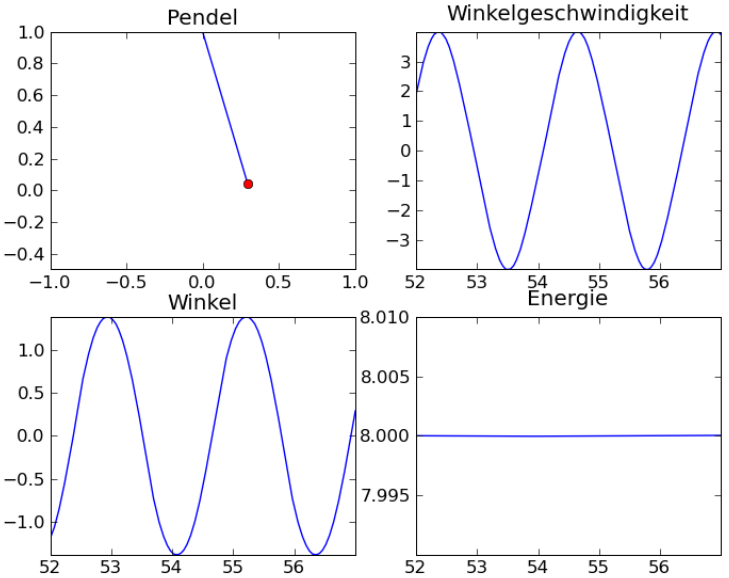
```
import numpy as np
def backsubstitute(A, b):
    rows = b.shape[0]                # length of the problem
    x = np.zeros(rows)               # solution, same size as b
    for i in range(1, rows + 1): # loop rows reversely
        row = rows - i
        x[row] = b[row] - np.dot(A[row,row+1:], x[row+1:])
        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
```

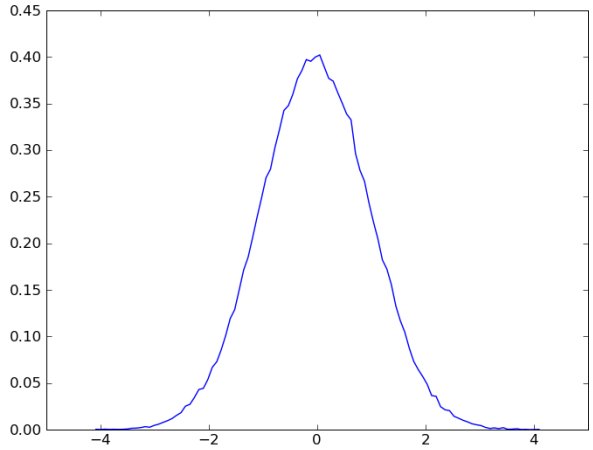
- Arithmetischer **Durchschnitt**

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

- **Varianz**

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

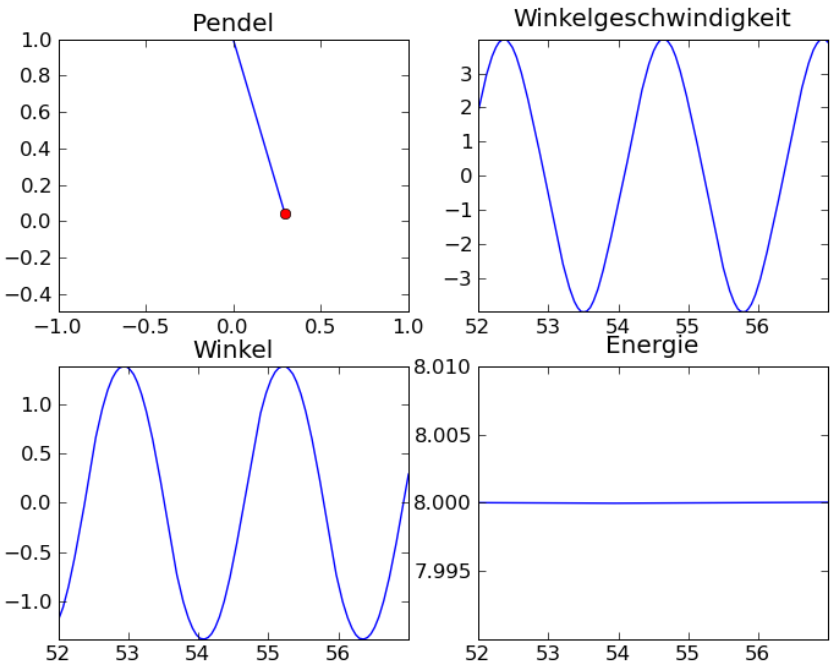
Histogramme




```
>>> zz = np.random.normal(0,1,100000)
>>> werte, rand = 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`)

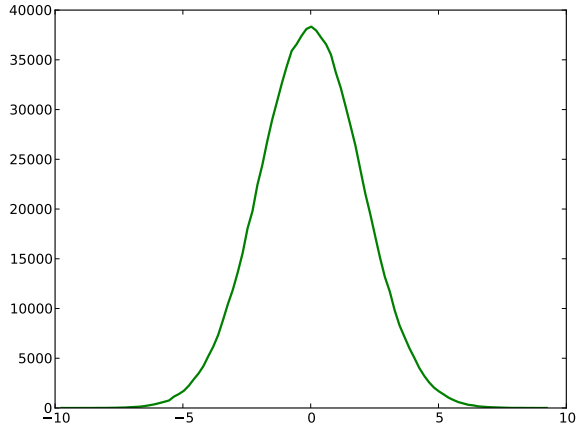
Malen nach Zahlen – matplotlib



- Ein Modul zum Erstellen von Graphen, mächtiger als Gnuplot
- 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()
```



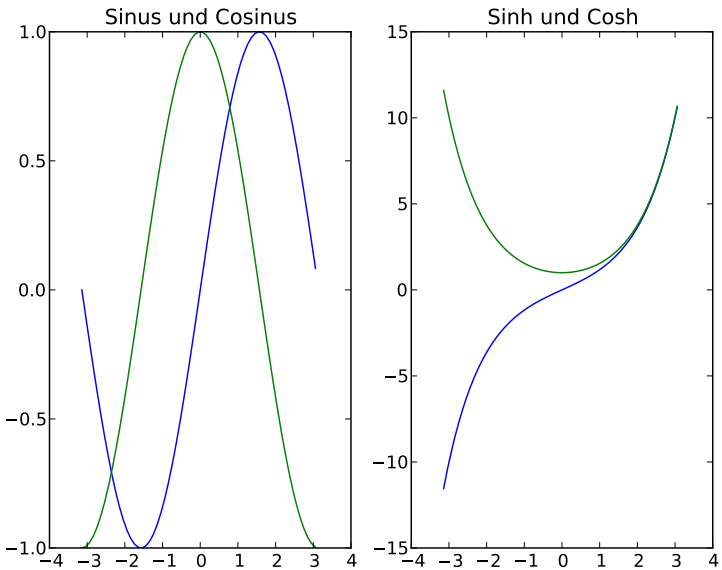
- `pyplot.plot` erzeugt einen 2D-Graphen
- `pyplot.text` schreibt beliebigen Text in den Graphen
- `pyplot.show()` zeigt den Graphen an
- Parametrische Plots mit Punkten (`x[t]`, `y[t]`)
- für Funktionen Punkte (`x[t]`, `y(x[t])`) mit x Bereich
- Farbe und Form über String und Parameter – ausprobieren

Mehrfache Graphen

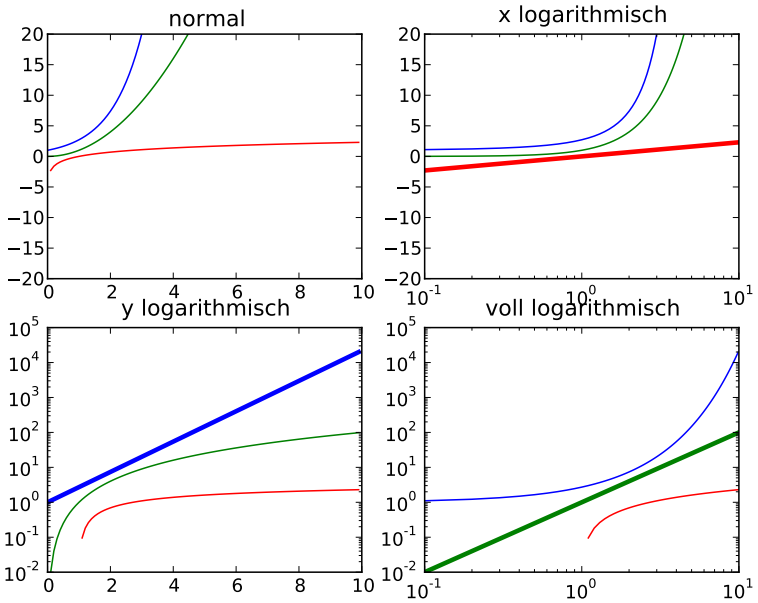
```
bild = pyplot.figure()

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

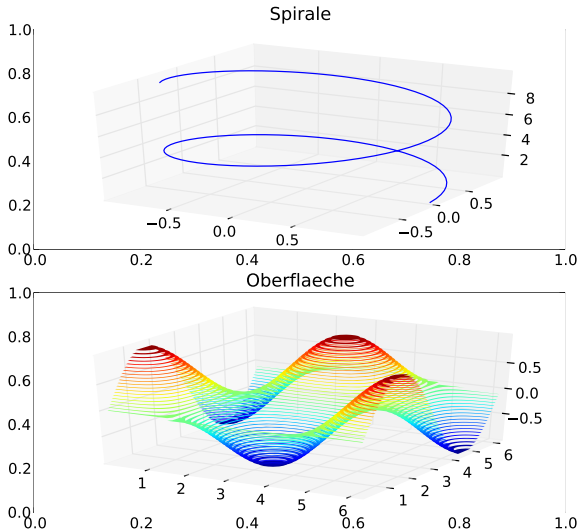


$y = exp(x)$
$y = x^2$
$y = log(x)$

- `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 $y' = \log(x^n) = n \log(x) = nx'$

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)
```

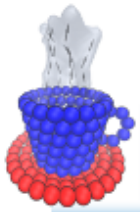


- `plot`: wie 2D, nur mit 3 Koordinaten x, y, z
- `plot_wireframe`: Gitteroberflächen
- `contourf3D`: farbige Höhenkodierung
- Achtung! 3D ist neu und das Interface ändert sich noch

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



Motivation

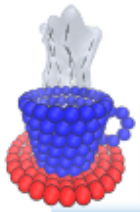
Wozu dienen *reguläre Ausdrücke*?

- Finden von *Mustern* in Text
- Parsen von Informationen (Logfiles)
- Komplexeres Suchen und Ersetzen (z.B. im Texteditor)

Beispiel

```
''This License'' refers to version 3 ...

                    ⇓

<em>This License</em> refers to version 3 ...
```

Reguläre Ausdrücke sind komplexere Musterbeschreibungen



Was sind reguläre Ausdrücke?

- Ein *regulärer Ausdruck* beschreibt ein *Muster*
- Formale Definition
  - Die leere Menge ε ist ein regulärer Ausdruck.
  - Jedes Zeichen ist ein regulärer Ausdruck.
    $\Longrightarrow$ *a* passt nur auf „a“.
  - Wenn *x* und *y* reguläre Ausdrücke sind, dann ist auch
    - (xy) ein regulärer Ausdruck (*Verkettung*).
      $\Longrightarrow$ (ab) passt nur auf „ab“.
    - $(x|y)$ ein regulärer Ausdruck (*Alternative*).
      $\Longrightarrow$ $(ab|c)$ passt auf „ab“ oder „c“.
    - $x*$ ein regulärer Ausdruck (*„Kleenesche Hülle“*)
      $\Longrightarrow$ $(ab)*$ passt auf „“ oder „ab“ oder „abab“ oder ...
- Klammern können weggelassen werden, wenn eindeutig.
  Präzedenz: $*$ vor Verkettung vor $|$.

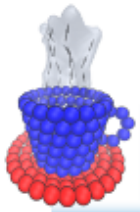
Reguläre Ausdrücke in Python

- `re.match(pattern, string)`
  Testet, ob der reguläre Ausdruck *pattern* am Anfang der Zeichenkette *string* passt
- `re.search(pattern, string)`
  Sucht, ob *pattern* irgendwo in *string* passt
- Achtung: nur der *Anfang* des Strings muss passen!
- Reguläre Ausdrücke in Python sind Zeichenketten mit Präfix „r“
- Metazeichen werden durch \zu regulären Zeichen:
  `\ ( ) [ ] { } * + . ^ $`

```
>>> import re
>>> if re.match(r'ab|c', 'abirrelevant'): print 'Passt!'
Passt!
>>> if re.search(r'\(1\*2\)', '7+(1*2)'): print 'Passt!'
Passt!
```

Erweiterte reguläre Ausdrücke

- `'.'` passt auf jedes Zeichen
  `'H.se'` passt auf `'Hase'` oder `'Hose'`
- `'a+'` $\equiv$ `'aa*'` (mindestens einmal)
  `'Hallo+'` passt auf `'Hallo'` oder `'Hallooo'`, aber nicht auf `'Hall'`
- `'a?'` $\equiv$ `'(a|)'` (ein- oder keinmal)
  `'b?engel'` passt auf `'bengel'` oder `'engel'`
- `'a{2,3}'`: zwei- oder dreimal
  `'Hallo{2,3}'` passt auf `'Halloo'` oder `'Hallooo'`
- `'^'` / `'$'`: Anfang / Ende der Zeichenfolge



Zeichenklassen

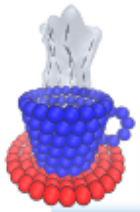
- `'[abc]'` ≡ `'a|b|c'`
  `'[HM]aus'` passt auf `'Haus'` oder `'Maus'`
- `'[^abc]'`: alle Zeichen *außer* a, b oder c
- `'[a-z]'`: alle Zeichen zwischen a und z
- Spezielle Zeichenklassen:
  - `'\w'`: Alphanumerisches Zeichen („**w**ord-character“)
  - `'\W'`: Alle Zeichen außer alphanumerischen Zeichen
  - `'\s'` / `'\S'`: (alles außer) Leerzeichen („**s**pace“)

```
>>> floatpattern = r'[+-]?[0-9]*\.[0-9]*(e[+-]?[0-9]+)?'
>>> if re.match(floatpattern, '-1.3e-17'): print 'Float'
Float
>>> if re.match(floatpattern, '17'): print 'Float'
>>> if re.match(floatpattern, '.3'): print 'Float'
Float
```

Suchen und Ersetzen

- `re.sub(`*`pattern, repl, string`*`)`
  Ersetzt alle Auftreten von *pattern* in *string* durch *repl*
- Klammern („(“ und „)“) in regulären Ausdruck erzeugen *Gruppen*
- Gruppe 0 ist der Treffer des gesamten Musters
- Andere Gruppennummern nach Reihenfolge im Ausdruck
- *repl* kann Referenzen auf Gruppen des reguläre Ausdrucks enthalten (`\1`, `\2`, `...`)

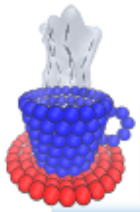
```
>>> import re
>>> s='"This License" refers to version 3 ...'
>>> print re.sub(r'"(.*)"', r'<em>\1</em>', s)
<em>This License</em> refers to version 3 ...
```



Rückgabewerte

- `re.match` und `re.search` geben *Match-Objekte* zurück
- Diese ermöglichen, mehr über den Treffer herauszufinden
  - `groups()` ergibt die Treffer der einzelnen Gruppen
  - `group(`*`id`*`)` ergibt den Treffer von Gruppe *id*
  - `span(`*`id`*`)` ergibt Tupel mit Anfangs- und Endposition
  - `start(`*`id`*`)` und `end(`*`id`*`)`

```
>>> m = re.search(r'(ab|bc)(c|d)+', 'xxxxabcxxxx')
>>> print m.groups()
('ab', 'c')
>>> print m.group(0), m.group(1), m.group(2)
abc ab c
>>> print m.span(0), m.span(1)
(4, 7) (4, 6)
>>> print m.start(0), m.end(0)
4 7
```



„Greediness“

```
>>> import re
>>> s='"Freedom" and "software" ...'
>>> print re.sub(r'"(.*)"', r'<em>\1</em>', s)
<em>Freedom" and "software</em> ...
```

- Kleenesche Hüllen matchen immer so viel wie möglich („greedy“)
- Zusätzliches ? hinter dem Muster matcht stattdessen so wenig wie möglich

```
>>> import re
>>> s='"Freedom" and "software" ...'
>>> print re.sub(r'"(.*?)"', r'<em>\1</em>', s)
<em>Freedom</em> and <em>software</em> ...
```

Reguläre Ausdrücke in anderen Programmen

- Alle Programmiersprachen besitzen Implementationen
- Emacs
  - Edit → Replace → Replace Regexp
  - Tastenkombination `M-C-%`
  - Eingabe von regulären Ausdrücken
  - *fast* so wie in Python
    - `(ab)` ⇒ `\(ab\)`
    - `\d` ⇒ `[0-9]`
- egrep ist grep mit regulären Ausdrücken