Python für Physiker

Günter Duckeck

Johannes Elmsheuser

22.9. – 26.9.2014, 10:00-12:00, 13:30-16:00 Uhr CIP-Pool, Schellingstr. 4

Inhalt:

Einführung

Python Grundlagen Variables, Control, Funktionen, Lists, Tuples, Dictionaries, I/O

OO Programmieren - Klassen und Objekte

Python Standardlibs und Python für Wissenschaftler Exceptions, Introspec-

tion, Numpy, Matplotlib ...

Folien & Übungen als pdf und im WWW

http://www.etp.physik.uni-muenchen.de/kurs/Computing/python

Schlüsselqualifikation für Bachelor/Master

- Einwöchiger Blockkurs jeweils equivalent zu SQ 1+2, d.h.
 - 1. Kurs = Python für Physiker = SQ1+2 = 3 ECTS Punkte
- Erfolgreiches Bestehen der Leistungskontrolle (= schriftlicher Kurztest am Ende) ist Kriterium für Punktevergabe
- Wir schicken die Liste erfolgreichen Kursteilnehmer Prüfungsamt, der ans Sie müssen aber dennoch zusätzlich Prüfungsamt welchen Kurs im angeben Sie Schlüsselqualifikation anrechnen wollen. siehe http://www.physik.unials muenchen.de/studium/infos_studium/fag/meldungen/index.html

Allgemeines

Allgemeines

Python ist moderne Skript-Sprache

- klare Syntax
- einfache Struktur
- Features für objektorientiertes Programmieren
- mächtige Funktionen-Pakete (=Module) mitgeliefert
- ⇒ flache Lernkurve
 - Einstieg wesentlich schneller als bei Fortran, C/C++, und sogar JAVA
 - Aber: riesiger Funktionsumfang, Vielzahl von Modulen, Erweiterungen (Databases, XML, Networking, ...), Entwicklungsumgebungen, etc.

Allgemeines 4

Ziel des Kurses Python für Physiker:

- Python Syntax
- Grundlegende Funktionalität: Variablen, Funktionen, I/O, Standard API

und damit

- Fähigkeit zum Erstellen kleiner Programme
- Anregungen zur Verwendung weiterführender Module

Aber Grundkurs:

- Keine umfassende Präsentation des kompletten Python Sprachumfangs
- Keine Schulung objektorientiertes Design/Programmieren

• ...

Ablauf 5

Ablauf

- Mo, Di, Mi, Do, Fr; jeweils 10:00 − 12:00 und 13:30 − 16:00
- Schwerpunkt praktische Übungen: ca. 1/3 Theorie, ca. 2/3 Übungen am Rechner im CIP.
- 10 Kursblöcke a 2/2.5 h = 18 h
 - 1. Python Grundlagen 3-4 Blöcke
 - 2. Klassen und Objekte ca. 3 Blöcke
 - 3. Python Standard-Libs und Anwendungen ca. 3 Blöcke

Flexible Gestaltung, je nach Kenntnisse und Neigungen der Teilnehmer, insbesondere letzter Teil, Python Anwendungen:

Numerik, GUI, Threading, XML, Webservices, ...

Literatur und Links

Zu Python gibt es ein großes Angebot an Lehrbüchern, sowie Online Kurse und Tutorials, FAQs und Diskussionsforen im Web. Hier eine kleine Auswahl:

Learning Python Mark Lutz, 4. Auflage, O'Reilly Series, 2009. Gute, ausführliche Einführung in Python.

Python Essential Reference David Beazley, 3. Auflage 2006, übersichtliche, komplette Referenz auf aktuellem Stand der Python Versionen.

http://www.python.org Offizielle Python Homepage. Unerschöpfliche Quelle für Downloads, Dokumentation, Tutorials, Links.

Python 2.7 Quick Reference Kompakte Online-Referenz zu Python

A Byte of Python Grundlegende Einführung in Python, Online Buch, wendet sich ausdrücklich an Newcomer im Programmieren.

How to Think Like a Computer Scientist (Python) erhältlich als Buch und online. Gute konzeptionelle Einführung ins Programmieren.

Äquivalente Versionen für JAVA und C++.

Dive Into Python Mark Pilgrim, 2004, fundierte Einführung in Python für Leute die schon Erfahrung im Programmieren in anderen Sprachen habe, Online und als Buch erhältlich.

Python 2.7.3 Documentation Dokumentation zu Python 2.7.3

Python 2.7.3 Library Reference Dokumentation der Python Standard Library

Python Gui Overview Überblick zu GUI Paketen für Python

Python TKinter TKinter Anleitung

Python Grimoire Sehr schöne Diskussion zur Verwendung von Python für gängige Programmierprobleme.

Python Cookbook Umfangreiche Sammlung von Rezepten zur Problemlösung in Python, allerdings eher auf fortgeschrittenem Niveau ...

Software Carpentry Handwerkszeug zum Programmieren für Naturwissenschaftler. Nicht nur Python sondern Rundumschlag von Shells, Programmiertechniken, XML, Spreadsheets, Databases, Web-Programming, u.v.m. Python als Glue-language, das die verschiedenen Bereiche verknüpft.

Python Tutorials Grosser Fundus an Python Tutorials, nach Themenbereichen sortiert.

Python for Data Analysis Wes McKinney, First Edition, O'Reilly Series, Oktober 2012. Viele Tipps und Tools zu Python und Datenanalyse in Python.

Das Python-Praxisbuch - Der große Profi-Leitfaden für Programmierer

Farid Hajji, Addison-Wesley, September 2008. Sehr ausführliche Beschreibungen und Beispiele zu fortgeschrittenen Themen in Python.

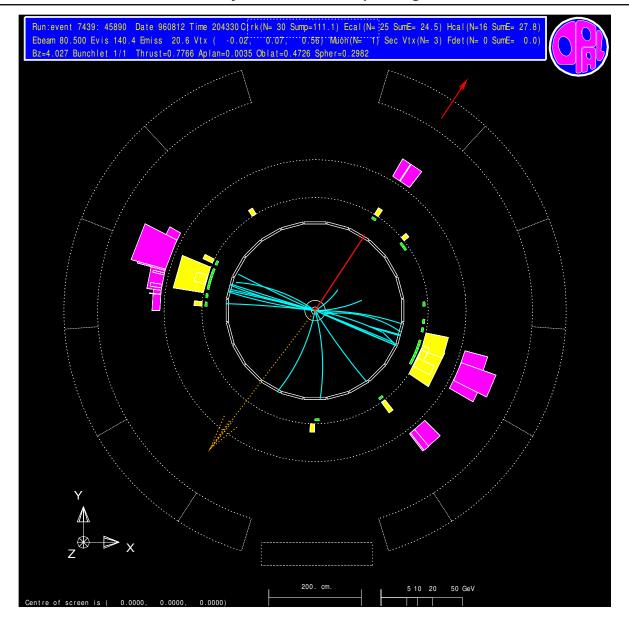
Physik und Computing

In der Physik sind Computer fast überall von zentraler Bedeutung: Design von Experimenten, Datenauslese, Auswertung und Statistik, Simulation, Theorie, Kommunikation, Recherche, ...

Eine Sonderrolle spielt die Teilchenphysik:

Experimente immer am technologischen Limit bei Datenvolumen und –rate, Prozessorgeschwindigkeit Teilchenphysik nicht nur Nutzer sondern hat viele Entwicklungen vorangebracht:

- verteiltes Rechnen
- Realtime computing
- WWW am CERN erfunden
- GRID Projekt



Computing Kenntnisse für Physiker – eine Wunschliste

- Alltag: Textverarbeitung (Office, Latex), Präsentationen (PPT, TeX), WWW Nutzung, E-Mail
 Selbststudium
- Datenanalyse/Statistik: Tabellenkalkulation (Excel), SAS, ROOT ⇒ (Selbst/Kurs)
- Mathematik/symbolische Algebra: Maple, Mathematica, ... ⇒ (Selbst/Kurs)
- Höhere Programmiersprache: Fortran, C/C++, Java, ...⇒ Kurse
- Numerik: Algorithmen (Fortran/C++) ⇒ Vorlesung (Schein)
- Advanced concepts: OO–Programmieren und –Design, GUI, Threads, Container ⇒ Kurse
- Hardware Programmierung ⇒ (Kurs)
- ◆ High Level IT Anwendungen: Databases, XML, Skript-Sprachen, Web-Programmierung, Grid, ...
 ⇒ Python Kurs

Programmiersprachen und Programmieren

Natürliche Sprachen (Deutsch, Französisch, ...) entwickeln sich langsam über viele Jahrhunderte, es gibt keine klaren von vorneherein festgelegten Regeln. Im Gegensatz dazu sind formale Sprachen gezielt für bestimmte Aufgaben entworfen worden, z.B. in Musik, Mathematik, Chemie, oder eben die Programmiersprachen um Abläufe in der *Datenverarbeitung* auszudrücken.

Gewisse grundsätzliche Gemeinsamkeiten: *Struktur, Syntax, Begriffe*, aber formale Sprachen viel **präziser, strikter, dichter**. Keine oder kaum Ambiguitäten, wenig Redundanz, genau umrissene Bedeutung, keine Metaphern o.ä.

Konsequenz für Lesen und Verstehen:

- Informationsdichte in Programmtext wesentlich größer
- kein Lesen von Anfang bis Ende, sondern Orientierung an Struktur
- jedes Detail ist wichtig

Was ist Programmieren?

Ein Programm ist eine Reihen von Anweisungen, die bestimmen wie eine Datenverarbeitung abläuft. Dazu sind nur wenige grundlegende Funktionen nötig, die im Prinzip allen Programmiersprachen gemeinsam sind:

- Input: Daten von Tastatur, File, Netzwerk, Sensor, ...
- Output: Daten auf Bildschirm, Datei, Drucker, Steuergerät, ...
- Operation: mathematischer Ausdruck, Zuweisung, ...
- Testen und Verzweigen: Überprüfen von Bedingungen, unterschiedliche Abläufe
- Schleifen: Wiederholte Ausführung bestimmter Abschnitte

Python Features

- Python ist objekt-orientierte, plattform-unabhängige Programmiersprache. Entwickelt Ende der 90er Jahre.
- Python ist Interpreter/Skript Sprache, wie Shell-scripts, Perl, Basic, im Gegensatz zu Compiler-sprachen C/C++, Fortran, Cobol, ..., (JAVA irgendwo dazwischen)
- Traditionell werden Interpreter/Skript-Sprachen v.a. für Systemadministration oder Hilfs-macros (z.B. MS Excel/VB) verwendet.
- Python zunehmend als eigenständige Sprache für Vielzahl von Anwendungsbereichen.
- Insbesondere als glue language um unterschiedliche Bereiche zu verknüpfen, z.B. Datennahme via Sensor in C/C++, Zugriff via Web-interfaces, Abspeichern in Datenbank ⇒ Python ideal zur Verknüpfung

Python vs C++

Pros:

- Wohldefinierter, überschaubarer Sprachumfang
- Vielzahl von Hilfspaketen zu I/O, Networking, Graphik, Databases, ... in Standarddistribution integriert.
- Viele Features in Sprache integriert, die alltägliche Programmieraufgaben wesentlich erleichtern.
- Plattform unabhängig
- Flache Lernkurve, hohe Programmiereffizienz

Cons:

- Performance-Nachteile
- Hardwarenahe Programmierung erschwert

Python und C++ nicht wirklich Konkurrenz sondern eher komplementär. In Python viele "einfache" Aufgaben sehr leicht zu lösen. Für zeit-/speicherkritische Probleme C/C++ um Längen besser. *Allerdings:* Bei heutiger Computer-performance nur selten der Fall. Dann am besten heterogene Lösung

1 Python Grundlagen

- Die ersten Schritte Interaktiv, Skripte ausführen
- Python Operationen
- Grundlegende Datentypen und Definition von Variablen
- Strings, Lists und Tuples
- Control-statements
- Funktionen
- Basic I/O
- Ergänzungen
- Aufgaben

1.1 Die ersten Schritte

Das Standard-Minimal-Programm in Python

```
print "Hello, world"
```

ist absolut minimalistisch ...

Einziges Statement ist Aufruf von print mit String der ausgegeben werden soll

Zum Vergleich, dasselbe in Java

und C++

```
// Hello-world C++ Version
#include <iostream> // pre-prozessor command
using namespace std; // declare namespace
int main() // function definition
{
    cout << "Hello world" << endl;
    return(0);
}</pre>
```

Grundlegende Syntax ist Python spezifisch:

Ähnlichkeiten am ehesten mit anderen Skript-Sprachen (bash, perl), weniger mit C/C++/JAVA.

- Kommentare beginnen mit #
- Ausdruck wird durch Zeilenende abgeschlossen (nicht Semikolon ';')
- Einrücken spielt zentrale Rolle: definiert Kontrollstrukturen, Funktionen, Klassen, ...

Python interaktiv

- Start mit python im Shell Fenster startet eine interaktive Python Sitzung.
- Beliebige Python Kommandos können eingegeben werden und werden nach return–Eingabe sofort vom Python Interpreter ausgeführt.
- Beenden mit Ctrl-D bzw. Strg-D
- Sehr nützlich für Tests, Taschenrechner, Fehlersuche, zum Kennenlernen, etc.

```
Python 2.3.4 (#1, Nov 9 2004, 19:37:48)
[GCC 3.2.2 20030222 (Red Hat Linux 3.2.2-5)] on linux2
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>> 1+1
>>> range(10)
[0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]
>>> print "Hallo, wie geht's ?"
Hallo, wie geht's ?
>>> 2**32
4294967296L
>>> 3**0.5
1.7320508075688772
>>>
>>> for i in range(1,11):
       print i, i**2, i**3
3 9 27
```

Meistens geht's aber darum Programme zu schreiben, die man immer wieder verwenden möchte, dann

2

Erstellen des Quellprogramms im Editor, z.B.:

```
kate hello.py
oder:
gedit hello.py
# hello.py
print 'Hallo Welt !'
```

Python Konvention: Filename des Quellprogramms hat Endung .py

Ausführen:

```
python hello.py
```

Der Python-Interpreter liest die Datei und führt die Anweisungen der Reihe nach aus, analog zur interaktiven Eingabe.

Python-Interpreter führt systemabhängige Übersetzung der Anweisungen aus.

1.2 Ein kleines Programm

```
# print Fahrenheit-> Celsius Tabelle
                                                                                                         1
lower = 0
                                                                                                         2
upper = 300
step = 20
fahr = lower
while (fahr < upper):
                                                                                                         6
    celsius = 5./9 * (fahr -32) # conversion
                                                                                                         7
   print 'Fahrenheit %6.1f = Celsius %6.3f' % (fahr , celsius) # formatierte Ausgabe
                                                                                                         8
    print "Fahrenheit ", fahr," = Celsius ", celsius
                                                                                                         9
    fahr += step # increment
                                                                                                         10
# end of loop
                                                                                                         11
```

Hier Vorgriff auf Variablen, Kontrollstrukturen, arithmetische Ausdrücke, Ausgabe, ...

- Variablen können in Python jederzeit verwendet werden, die Deklaration erfolgt einfach mittels Zuweisung, z.B. x = 1. Es ist keine Typ-Angabe nötig (\Rightarrow später).
- Control-Statement Schleife/Loop:

```
while ( Bedingung ):
    expressions
```

- Bedingung fahr < upper wird getestet</pre>
- wenn erfüllt werden expression ausgeführt dann zurück zu (6).
- Andernfalls zum Ende der Schleife: (11)
- Arithmetischer Ausdruck (5./9) * (fahr 32) wird ausgewertet und dann der Variablen celsius zugewiesen.
- Inkrement fahr += step: Erhöhe Wert der Variablen fahr um step.
- Function call für output, Formatierungsangaben für Gleitkommazahlen: %6.3f bewirkt Ausgabe von Gleitkommazahl mit 3 Nachkommastellen und 6 Stellen insgesamt (⇒ später).
- In Python wird ein Statement durch das Zeilenende abgeschlossen. Keine Beschränkung der Zeilenlänge!

Definition der Syntax Elemente

- Statement Ausführbare Anweisung: I.d.R. ist jede Python Zeile eine ausführbare Anweisung, das kann sein:
 - Assignment Zuweisung: a = expression Objekt wird erzeugt und einer Variablen zugewiesen
 - Expression Anweisung: einfache Konstante, Variable, arithmetische oder logische Operation
 (5./9. * (fahr 32) oder fahr < upper),
 Funktionsaufruf: print 'Fahrenheit ', fahr</pre>
 - Kontroll-struktur: while, for, if
- Ausnahmen sind:
 - Funktions oder Klassendeklaration
 - Kommentare

1.3 Python Operationen

Arithmetische Operationen und Zuweisungen

JAVA/C++	Python	Zweck
-x	-x	Vorzeichen
x + y	x + y	Addition
x-y	x-y	Subtraktion
x * y	x * y	Multiplikation
x/y	x/y	Division
x%y	x%y	Modulo (Rest nach Div.)
pow(x,y)	x * *y	Potenzieren
x = y	x = y	Zuweisung
x + = y	x + = y	Zuweisung mit Änderung ($x=x+y$)
(-=,*=,/=,%=)	(-=,*=,/=,%=,**=)	

Kein x++, ++x, x--, --x in Python!

Logische Operationen und Vergleiche:

JAVA/C++	Python	Zweck
false / (oder 0)	False	falsch
true / (oder $\neq 0$)	True	wahr
!x	not x	Negation
x&&y	x and y	AND Verknüpfung
x y	x or y	OR Verknüpfung
x < y	x < y	kleiner als
$x \le y$	$x \le y$	kleiner als oder gleich
x > y	x > y	größer als
x >= y	x >= y	größer als oder gleich
x == y	x == y	gleich
x! = y	x! = y	ungleich

Vorrangregeln für Operatoren: f = a * x * * 2 + b * x + c funktioniert wie erwartet nach Mathematik (Punkt vor Strich ...). Weiteres im Prinzip eindeutig festgelegt, dennoch besser mit Klammern unmissverständlich klarmachen: x = y > z? (x=y) > z oder x = (y>z)

Bit Operationen:

Python, JAVA, C++	Zweck
\tilde{x}	Complement
x&y	bitwise AND
x y	bitwise OR
$x^{}y$	bitwise XOR
x << y	left shift
x >> y	right shift mit sign

```
print(2 | 1) # = 3

print(2 & 1) # = 0

print(2 & 3) # = 2

print(2 <<1) # = 4
```

Mehr Beispiele später in den Übungen

1.4 Variablen in Python

Wie in anderen Sprachen auch gibt es in Python verschiedene Datentypen für *ganze Zahlen, Fließkom-mazahlen, Text–Strings, Arrays/Listen, u.a.*.

- In Python werden Variablen dynamisch angelegt mittels Zuweisung.
- Die Typ-Zuordnung passiert ebenfalls **dynamisch**, je nachdem welcher Datentyp benötigt wird.
- Im Gegensatz zu JAVA/C++ kann die Zuordung jederzeit geändert werden.

```
x = 1  # int
y = 0.73  # float

z = 'Hi there' # string

#

a = x + y # float

#

x = z  # x jetzt string

#

a = x + y # Fehler: string + float geht nicht

9
```

Python ist eine *dynamically-typed language*, die Variablenzuordnung erfolgt zur Laufzeit, aus dem Context.

Gegensatz statically-typed language wie C, JAVA: Typzuordnung fix, explizite Typ-Angabe erforderlich.

1.5 Primitive Datentypen

Ganze Zahlen (int)

Ganze Zahlen werden in Python sehr speziell behandelt. Für "kleine" Zahlen ($\approx \pm 2 \cdot 10^9$) ist es wie in Java/C++: 32-bit integer.

Zusätzlich gibt es die *long integers* deren Länge **unbegrenzt** ist *(bis auf System–Grenzen)*. Python erledigt automatisch den Übergang von **32-bit int** zu **long int** falls erforderlich.

Gleitkommazahlen (float)

```
>>> 2.6+7.8

10.4

>>> 2.5**2

6.25

>>> 2.5**(1./10)

1.0959582263852172
```

Entsprechen den *double* in JAVA/C++, d.h. 64 bit werden zur Darstellung verwendet, unterteilt in Mantisse und Exponent:



Zahlen-Bereich: $\approx [\pm 4.9 \cdot 10^{-324}, \pm 1.8 \cdot 10^{+308}]$, ca. 16 Dezimalstellen

Wichtig: Operationen mit Gleitkommazahlen sind in der Regel nicht exakt, da Rundungsfehler auftreten. Selbst einfache Dezimal–Zahlen (z.B. 0.1, 0.2) sind nicht exakt als als double darstellbar, weil eine unendliche Folge von 2-er Potenzen nötig wäre.

Mathematische Funktionen, wie \sin , \cos , \exp , etc., sind im Python Modul math enthalten und können über math.function angesprochen werden, zuvor import math ausführen:

```
>>> import math
>>> math.sin(0.5)
0.47942553860420301
>>> math.log10(65)
1.8129133566428555
>>> ...
```

Name	Purpose
acos(x)	Arc cosine of x
asin(x)	Arc sine of x
atan(x)	Arc tangent of x
atan2(x,y)	Arc tangent of x/y
ceil(x)	Ceiling of x; the largest integer equal to or greater than x
cos(x)	Cosine of x
cosh(x)	Hyperbolic cosine of x
exp(x)	e raised to the power of x
fabs(x)	Absolute value of x
floor(x)	Floor of x; the largest integer equal to or less than x
fmod(x)	x modulo y
frexp(x)	The mantissa and exponent for x.
hypot(x, y)	Euclidean distance, sqrt(x*x + y*y)
ldexp(x, i)	x * (2**i)
log(x)	Natural logarithm of x
log10(x)	Base 10 logarithm of x
modf(x)	Return the fractional and integer parts of x
pow(x, y)	x raised to the power of y
sin(x)	Sine of x
sinh(x)	Hyperbolic sine of x
sqrt(x)	Square root of x
tan(x)	Tangent of x
tanh(x)	Hyperbolic tangent of x

Komplexe Zahlen

In Python sind komplexe Zahlen als Paar von 2 Gleitkommazahlen implementiert.

- j kennzeichnet imaginäre Einheit
- komplexe Zahl als Real + Imagj definieren, z.B. 3 + 2j
- Alle g\u00e4ngigen Operationen: +, -, *, /, **, abs(), ==
- Zugriff auf Real- bzw Imaginärteil mittels: var.real, var.imag

```
>>> z=2+4j

>>> abs(z)

4.4721359549995796

>>> v=3-2j

>>> z/v

(-0.15384615384615385+1.2307692307692308j)

>>> z**3

(-88-16j)

>>> z**v

(775.7930102695509+262.01856311381101j)

>>> z.imag

4.0
```

```
>>> z.real 2.0
```

Mathematische Funktionen für komplexe Zahlen sind analog zu Gleitkommazahlen definiert, nur muss das Modul cmath geladen werden (import cmath)

```
>>> import cmath
>>> cmath.exp(1+1j)
(1.4686939399158851+2.2873552871788423j)
>>> cmath.exp(math.pi/2 * 1j)
(6.1230317691118863e-17+1j)
>>> ...
```

Liste der reservierten Wörter in Python

Dürfen nicht als Namen für Variablen, Funktionen, Klassen verwendet werden!

```
and del for is raise
assert elif from lambda return
break else global not try
class except if or while
continue exec import pass yield
def finally in print
```

Hinzu kommen noch die Namen gängiger Typen, Klassen und Funktionen wie bool float sin exp ...

Wird zwar syntaktisch von Python akzeptiert, führt aber leicht ins Chaos ...

1.6 Strings und Sequences

Strings – Zeichenketten

In Python spezieller Datentyp *string* zur Darstellung von Zeichenketten und Operationen mit Zeichenketten.

- Definition wahlweise mit single oder double Quotes
- Aneinanderhängen mit +
- Sub–Strings mit [] Operator
- Viele nützliche Funktionen zum Konvertieren, Zählen, Sub-Strings suchen, ... (siehe Python Strings)

```
a = 'Hello '
                           # Single quotes
                                                                                                 1
                           # Double quotes
b = "World"
                                                                                                 2
c = "Bob said 'hey there.'" # A mix of both
e = b + a # concatenate
          # -> World Hello
print e
                                                                                                 5
f = a*3 # -> 'Hello Hello '
                                                                                                 6
          # (5+1). Element von c \rightarrow a
c[5]
                                                                                                 7
```

$c[2:8]$ # (39.). Element von $c \rightarrow b$ said	8
c.count($'e'$) # wie oft kommt 'e' vor in $c \rightarrow 3$	9
c.upper() # -> "BOB SAID 'HEY THERE."	10
# string methods can be applied on string constants directly	11
<pre>"abracadabra".find("ra") # -> 2 (=Index of substring "ra")</pre>	12
" a b ".strip() # -> "a b" (remove leading and trailing white space)	13
"abracadabra".replace("ra", "lu") # -> "ablucadablu"	14
#	15
# string methods don't change original string,	16
# if needed a new string is created	17
e="abracadabra"	18
<pre>print e.replace("ra", "lu") # -> "ablucadablu"</pre>	19
print e # -> "abracadabra"	20

Man kann mehrere Methodenaufrufe aneinander-reihen (=chaining), oft praktisch, aber leicht unleserlich ...

```
# chaining method calls
element = "cesium"

print ':' + element.upper()[4:7].center(10) + ':'

# : UM :

4
```

List – Arrays in Python

Ein wichtiges Konstrukt in allen Programmiersprachen sind arrays, das sind

- Liste von Variablen oder Objekten
- Die einzelnen Elemente können über ihren *Index* angesprochen werden

In Python gibt es dafür die **list**, wie bei *strings* dient sie nicht nur zum Abspeichern der Daten sondern stellt viele nützliche Funktionen bereit.

- Erzeugen mit eckige Klammer und Elemente: A = [2, 5, 4, 77, 43]
- Python zählt (wie JAVA/C++) von 0 bis Länge–1
- Länge kann abgefragt werden mit len (A)
- Zugriff auf nicht-existierende Elemente gibt Fehler
- Im Gegensatz zu einfachen Java/C++ Arrays ist die **Python list** sehr flexibel und bietet viele Hilfsfunktionen:
 - Anhängen, Einfügen, Löschen von Elementen: A.append(42); A.insert(2,55); del A[3]
 - Hilfsfunktionen zum Sortieren, Umdrehen, ...
- Kann unterschiedliche Datentypen enthalten, auch andere list

- List bestimmter L\u00e4nge anlegen und f\u00fcllen mit z.B.
 K = [0] *20 (Liste von 20 int alle auf 0 gesetzt)
- List mit aufeinanderfolgenden Zahlen mit z.B.
 range (10) (Liste von 10 int mit Werten von 0 bis 9)

```
>>> L = [ 1, 5, 9, 45, 3, 72, 27 ] # Definition list
                                                                                                          1
>>> len(L) # Laenge
                                                                                                          2
                                                                                                          3
>>> L[6] # Element 6+1
                                                                                                          4
72
                                                                                                          5
>>> L[8] # ausserhalb
                                                                                                          6
#Traceback (most recent call last):
                                                                                                         7
# File "<stdin>", line 1, in ?
#IndexError: list index out of range
                                                                                                          9
>>> L[2] = 11 # aendern von Element 3
                                                                                                          10
>>> L
                                                                                                          11
[1, 5, 11, 45, 3, 72, 27]
                                                                                                          12
>>> L.sort()
                                                                                                          13
>>> L
                                                                                                          14
[1, 3, 5, 9, 27, 45, 72]
                                                                                                          15
```

>>> L.append(87) # anhaengen	16
>>> L	17
[1, 5, 11, 45, 3, 72, 27, 87]	18
>>>	19
>>> L.insert(2,33) # einfuegen	20
>>> L	21
[1, 5, 33, 11, 45, 3, 72, 27, 87]	22
>>>	23
>>> del L[3:5] # Loeschen Element 4-6	24
>>> L	25
[1, 5, 33, 3, 72, 27, 87]	26
>>>	27
>>> L.sort() # sortieren	28
>>> L	29
[1, 3, 5, 27, 33, 72, 87]	30
>>>	31
>>> L.reverse() # Reihenfolge umdrehen	32
>>> L	33
[87, 72, 33, 27, 5, 3, 1]	34
••••	35

```
>>> K=[0]*10 # List mit 10 Elementen, alle 0
                                                                                            36
>>> K
                                                                                            37
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
                                                                                            38
>>> M = [1, 2.45, (1+4j), L[1:5]] # mixed list
                                                                                            39
>>> M
                                                                                            40
41
>>> M[3][2]
                                                                                            42
27
                                                                                            43
                                                                                            44
>>> G = range(20)
                                                                                            45
>>> G
                                                                                            46
[0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]
                                                                                            47
>>>
                                                                                            48
>>> G = range(1,11) # Zahlen 1-10
                                                                                            49
>>> G = range(1,11,2) # Zahlen 1,3,5,7,9
                                                                                            50
```

2D Arrays oder Matrizen

Einfach auf mehr Dimensionen zu erweitern:

- Matrix mit 4×3 int Elementen: $M = [0] \star 4, [0] \star 4, [0] \star 4$
- oder direkt initialisieren: M = [[1,2,3,4],[2,3,4,5],[3,4,5,6]]
- Zugriff via M[0][0] (1. Element) bis M[2][3] (letztes Element).
- Vorsicht: M = [[0] *4] *3 klappt nicht (produziert 3 Verweise auf diesselbe Liste mit 4 Werten).

Alternative: list-comprehension

```
M = [0] *4 \text{ for i in range}(3)]
```

• Analog Erweiterung auf höhere Dimensionen > 2:

```
M = [[[0]*4 \text{ for i in range}(3)] \text{ for j in range}(2)]
```

Python Sequences

string und list gehören beide zur Gruppe der Python Sequences:

- string ist eine Art list, allerdings sind die Elemente nur chars
- **string** ist *immutable*, d.h. einzelne Elemente können nicht überschrieben werden:

```
S = 'Balduin'
S[1] # --> 'a'
S[1]='o' # --> Fehler
```

- Dafür viele extra Funktionen für String (S.upper(), S.lower(), ...)
- Variante von list ist tuple: Anlegen mit runder Klammer () statt [], z.B. T = (1, 4, 6, 8).
- tuple sind wie string immutable, man kann Elemente nicht ändern, löschen, einfügen, anhängen.

Konvertierungen möglich:

```
>>> T = (1,4,6,8) # tuple

>>> T[1] # -> 4

>>> T[1] = 7 # error for tuple

#Traceback (most recent call last):

# File "<stdin>", line 1, in ?
```

```
#TypeError: object doesn't support item assignment
                                                                                                      6
>>> V = list(T) # tuple -> list
                                                                                                      7
>>> V
                                                                                                      8
[1, 4, 6, 8]
>>> V[1] = 7 \# ok for list
                                                                                                      10
                                                                                                      11
>>> S = 'Balduin'
                                                                                                      12
>>> S[1] = 'o' # Fehler
                                                                                                      13
>>> B = list(S) # Konvertierung in list
                                                                                                      14
['B', 'a', 'l', 'd', 'u', 'i', 'n']
                                                                                                      15
>>> B[1] = 'o' # ok
                                                                                                      16
>>> S = "".join(B) # zurueck nach string
                                                                                                      17
'Bolduin'
                                                                                                      18
```

Slicing – Stückchen rausschneiden

```
...  
>>> a=range(10)

>>> a

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

```
>>> a[4:7]
                                                                                               4
[4, 5, 6]
                                                                                               5
>>> a[-3:]
                                                                                               6
[7, 8, 9]
                                                                                               7
>>> a[-3:-1]
                                                                                               8
[7, 8]
                                                                                               9
>>> a[-3:2]
                                                                                               10
[]
                                                                                               11
                                                                                               12
>>> S = "Donaudampfschiffahrtsgesellschaftkapitaenskajuetenblumenvase"
                                                                                               13
>>> s[-10:] # extract last 10 chars
                                                                                               14
'blumenvase'
                                                                                               15
```

1.7 Control-statements

```
"Eigentliches Programmieren" braucht Kontrollstrukturen:
Bedingungen testen und ggf. ausführen,
Zähl-Schleifen, Endlosschleifen, etc.
if: Standard-Konstruktion für einfache Verzweigungen
if (expr):
           statements

    True: statements werden ausgeführt

 • False: statements werden übersprungen
if-else: Verzweigung und Alternative
if (expr):
           statements_1
else:
           statements_2
 • True: statements_1 werden ausgeführt
 • False: statements_2 werden ausgeführt
Typ bool relativ neu in Python. In älteren Versionen einfach int verwendet:
```

1

2

```
• 0 entspricht False
 • != 0 entspricht True
Wichtig: Für if bzw. elif kann expr vom Typ bool oder int sein.
Häufiger Fehler in C/C++: if (a = b) ... statt if (a == b) ...
In Python nicht möglich, Syntax-Fehler!
if-elif-elif-...-else: Verzweigung und mehrere Alternativen
if (expr1):
          statements_1
elif (expr2):
          statements_2
elif (expr3):
          statements_3
else:
          statements_n
if (a < b): a = b # einfaches if, auch in 1 Zeile
```

```
if ( a < b ): # if - else
                                                                                                          3
   a = b
                                                                                                          4
else:
                                                                                                          5
    b = a
                                                                                                          6
                                                                                                          7
if ( a < b ): # if - else if - else
                                                                                                          8
   a = b
                                                                                                          9
elif (a > b):
                                                                                                          10
   b = a
                                                                                                          11
elif (a == b):
                                                                                                          12
                                                                                                          13
else: # wenn alles andre fehlschlaegt ...
                                                                                                          14
    print "What else could I test ?"
                                                                                                          15
```

Schleifen

while-loops:

```
while ( expr ):
    statements
```

Zeilen statements werden ausgeführt solange Ausdruck expr wahr ist (True)

```
# klassische Zaehlschleife
                                                                                                             1
i=0
                                                                                                             2
while ( i<10):
                                                                                                              3
    print i
   i += 1
                                                                                                             5
                                                                                                             6
# Summiere Quadratzahlen 1**2..10**2
                                                                                                             7
sum=0; i=0
                                                                                                             8
while ( i<10):
                                                                                                             9
   i += 1
                                                                                                             10
    sum += i*i
                                                                                                             11
#...
                                                                                                             12
# Einlesen
                                                                                                             13
n=0
                                                                                                              14
```

```
while ( True ): # Endlosschleife
    s=f.readline()
    if ( len(s) == 0 ): break
        n += 1
#
print "Lines read ", n
15
16
17
18
20
```

while Schleifen universell verwendbar, insbesondere bei *nicht absehbarer* Abbruchbedingung, Ende als Reaktion auf z.B. bestimmtes Ereignis, End-of-file.

for-loops:

sind Alternative, insbesondere für Zählschleifen oder wenn über Elemente einer Python Sequenz iteriert werden soll.

Syntax:

```
for var in Sequence:
    statements
```

- Für jedes Element einer Sequenz (list, string, ...) wird statement ausgeführt. Das jeweilige Element steht in var.
- Mit der Funktion range (n) kann man leicht Sequenzen erzeugen und damit Abzählschleifen erstellen for i in range (10): # Zahlen von 0-9

```
S = [1,4,5,9,56]
for i in S:
    print i

#

S = "Donaudampfschiffahrtsgesellschaft"

5 ca = 0
for c in s: # iteriere ueber String
    if (c=='a'):

8
```

```
ca += 1 # count 'a'
                                                                                                            9
#
                                                                                                            10
print ca, " 'a' in ", s
                                                                                                            11
## Note: bad python programming style, better use string function
                                                                                                            12
# s.count('a')
                                                                                                            13
a=[[0]*3]*4 # 4x3 Matrix
                                                                                                            14
for i in range(4): # Verschachtelte Schleifen
                                                                                                            15
    for j in range(3):
                                                                                                            16
        a[i][j] = i*j # Fuellen von Matrix
                                                                                                            17
#
                                                                                                            18
```

break/continue:

Innerhalb des statements Blocks von for bzw. while Schleifen kann man mit

- break die Schleife beenden oder mit
- continue zur nächsten Iteration springen.

```
while ( True ):
....

if ( ... ): continue # Springt ans Ende der Schleife
   if ( ... ): break; # Springt aus der Schleife raus
....

5
```

for/while und else

- Interessantes Feature in Python ist die Kombination der Schleifen mit einem anschliessenden else Block.
- Dieser wird ausgeführt wenn die Schleife nicht mit break beendet wurde.
- Typische Anwendung:
 - In der Schleife wird das Eintreten eines bestimmten Erignisses untersucht, z.B. Suche nach Elementen, Konvergenz, ...
 - Bei Eintritt wird mit break abgebrochen und else Block ignoriert.
 - Bei Nicht-Eintreten läuft die Schleife bis zum Ende, anschliessend wird else Block ausgeführt.

```
#
s = "Donaudampfschiffahrtsgesellschaft"
for c in s: # iteriere ueber String
    if (C=='x'):
        print 'x found in ', s
        break
else:
```

print 'x not found in ', s

8

9

1.8 Funktionen

Die klassische Art (*modulares Programmieren*) ein großes, komplexes Programm überschaubar zu gestalten ist die Aufteilung der Funktionalität in kleinere, eigenständige Untereinheiten für bestimmte Aufgaben, d.h. Einteilung in **Funktionen**.

```
def GravForce( mass1, mass2, distance): # Kopf der Funktion1GRAV_CONST = 6.673e-11 # Gravitationskonstante m^3 / ( kg s^2 )2f = GRAV_CONST * mass1 * mass2 / distance**2 # Kraft ausrechnen3return(f) # Ergebnis zurueckgeben4mSonne = 1.9889e30; mErde = 5.974e24; dErdeSonne = 1.49597e11; rErde = 6.378e65# Aufruf von Funktion GravForce6gErdeSonne = GravForce( mSonne, mErde, dErdeSonne ) # Kraft Sonne-Erde7print gErdeSonne8gPerson = GravForce( mErde, 80., rErde ) # Gewichtskraft 80 kg auf Erde9print gPerson10
```

1-4 **Definition** der Funktion GravForce.

Zeile 1 Deklaration der Funktion GravForce:

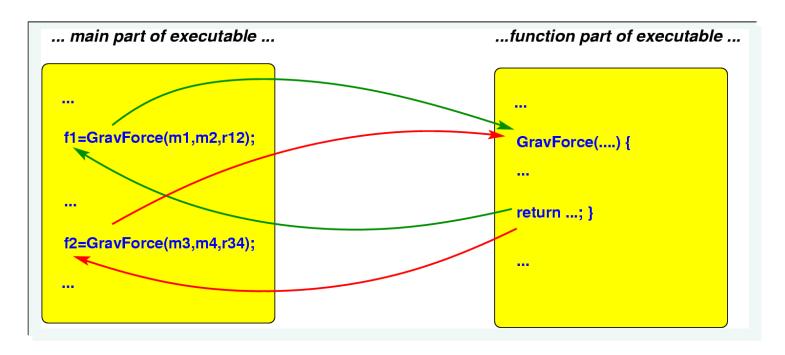
Angabe von Namen der Funktion sowie Namen der Parameter.

Funktionsaufruf bewirkt:

- Bei Programmlauf wird zu der entsprechenden Funktion gesprungen
- Die *Parameter* Funktion (mass1, mass2, ...) erhalten beim Aufruf die übergebenen aktuellen Werte der Argumente (msonne, merde, ...), d.h.

```
mass1 = mSonne; mass2 = mErde; distance = dErdeSonne
bzw.
mass1 = mErde; mass2 = 80.; distance = rErde
```

- return ... am Ende der Funktion bewirkt Rückkehr an die rufende Stelle und ggf. Rückgabe des Werts
- Rückgabewert kann Variable in rufendem Programm zugewiesen werden gPerson = 783.



Programm-Design

- Aus Sicht der Anwendungsprogrammiererin ist die Funktion eine *Black Box*.
- Es interessiert nur, was die Funktion leisten soll und wie die *Schnittstelle* aussieht, d.h. Name der Funktion, Typ und Zahl der Argumente.
- Details der Implementierung sollten nicht relevant sein.

Funktionen brauchen nicht immer Argumente ...

```
time.ctime() # returns current date and time
'Fri Mar 18 14:06:00 2005'
```

Funktionen müssen nicht unbedingt was zurückgeben

```
def greeting(): # Begruessung
    hour=time.localtime()[3] # extract Stunde
                                                                                                      2
    gruss='Guten Tag'
                                                                                                      3
    if (4<hour<10):
        gruss='Guten Morgen'
                                                                                                      5
    elif ( 11<hour<13 ):
                                                                                                      6
        gruss='Mahlzeit'
         ( 18<hour<21 ):
                                                                                                      8
        gruss='Guten Abend'
                                                                                                      9
         (hour>21 or hour < 4):
                                                                                                      10
        gruss='Gute Nacht'
                                                                                                      11
                                                                                                      12
    print gruss
                                                                                                      13
```

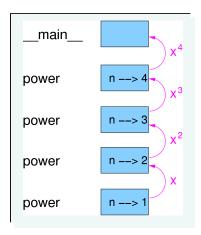
Funktionen können mehrere Werte zurückgeben

(... nicht möglich in Java, FORTRAN, C/C++)

Rekursive Funktionsaufrufe (Funktion ruft sich selbst) sind möglich:

```
def power( x, n ): # define power function
    if ( n > 1 ) :
        return( x * power(x, n-1) ) # rekursiver Aufruf
        else:
            return( x )
#
```

```
power (x, 4)
```



Default Werte für Parameter

- Es können Default Werte (=Standard-Vorgaben) für die Parameter bei Definition der Funktion angegeben werden. par=value
- Bei Aufruf können diese Argumente weggelassen werden, dann werden die default Werte benutzt.

Keyword Argumente

Normalerweise wird beim Aufruf nur die Liste der Argumente übergeben und die Zuordnung der Argumente zu den Funktionsparametern geht nach der Position,

```
d.h. 1. Par = 1. Arg, 2. Par = 2. Arg, ....
```

Alternativ kann man beim Aufruf explizit den Namen (=keyword) einzelner Parameter angeben zusammen mit dem Argument: par-name=arg-wert

```
def parabel( x, a=0., b=0., c=0. ): # define parabel (poly 2)
    return( x**2 * a + x * b + c )

#

>>> parabel(2, 1., 2., 3.)

11.0

>>> parabel(2) # default Werte fuer a,b,c

0.0
6
```

>>> parabel(2, 1.) # a=1, default Werte fuer b,c	8
4.0	9
>>> parabel(2, c=3) # keyword-argument c=3, default Werte fuer a,b	10
3.0	11
>>> parabel(2, b=2) # keyword-argument b=2, default Werte fuer a,c	12
4.0	13
>>> parabel(2, c=0, b=5) # keyword-argument c,b, default Wert fuer a	14
10.0	15
>>> parabel()	16
#Traceback (most recent call last):	17
# File " <stdin>", line 1, in ?</stdin>	18
#TypeError: parabel() takes at least 1 argument (0 given)	19

lambda Funktionen

Anonyme Kurzform für Funktionen. Sie werden nicht mit def function-name ... deklariert wie bei den üblichen Funktionen, sondern quasi anonym in einer Zeile:

```
def squareAdd( x, y):
    return( x**2 + y**2)

#

f = lambda x, y : x**2 + y**2  # definition als lambda function in einer Zeile

#

# Aufruf

squareAdd( 2., 3. ) # = 13

#

f( 2., 3.) # aequivalent = 13
```

lambda functions sind vor allem dann nützlich wenn als Argument beim Aufruf einer Funktion eine Funktion benötigt wird. Sehr häufig bei **GUI Funktionen**: Verknüpfung von Ereignis (z.B. Mausklick) und Aktion (*call-back function*). ⇒ Später

Weiteres Beispiel: Numerik – Nullstellen von Funktion

```
def suche( x1, x2, f ):
                                                                                                  1
   " suche Nullstelle von Funktion f zwischen x1 und x2"
                                                                                                  2
   f1 = f(x1);
                                                                                                   3
   f2 = f(x2);
   i = 0
                                                                                                   5
   while i < 1000 : # Abbruch nach 1000 Iterationen
                                                                                                   6
       xn = (x1+x2)/2. # Neues x in Mitte
                                                                                                   7
       fn = f(xn); # Funktionswert dazu
                                                                                                   8
       if abs(fn) < 1e-6: break # Konvergenz: 1e-6 an Nullstelle, dann Abbruch
                                                                                                   9
       if fn*f2 > 0. : # gleiches Vorzeichen wir f2 ?
                                                                                                   10
           x2,f2 = xn,fn # dann ersetze x2,f2
                                                                                                   11
       else:
                                                                                                   12
           x1,f1 = xn,fn # andernfalls x1,f1
                                                                                                   13
                                                                                                   14
       i = i+1
                                                                                                   15
   else:
                           # keine Konvergenz
                                                                                                   16
       print 'Error: Keine Konvergenz fuer Nullstellensuche', fn
                                                                                                  17
                                                                                                   18
   return xn
                                                                                                   19
                                                                                                   20
```

```
# Test
                                                                                                                 21
def myf(x):
                                                                                                                 22
    return( math.exp(-x) -x);
                                                                                                                 23
#
                                                                                                                 24
nullstelle.suche(0., 3., math.cos) # Funktion aus math
                                                                                                                 25
nullstelle.suche(0., 3., myf)
                                   # selbst-definierte
                                                          Funktion
                                                                                                                 26
nullstelle.suche(0., 3., \frac{lambda}{lambda} x : math.exp(x) -2.) # Kurzform mit lambda func
                                                                                                                 27
```

- Algorithmus zur Nullstellensuche ist generisch, d.h. unabhängig von spezifischer Funktion.
- Konkrete Funktion als Argument bei Aufruf nullstelle.suche (...)
- lambda functions erlauben kompakte Verwendung/Schreibweise

1.9 Input/Output Grundlagen

I/O in Python recht einfach, mächtige Funktionen eingebaut.

Standard-Ausgabe mittels print schon gezeigt:

```
>>> print 'Pi = ', math.pi
Pi = 3.14159265359
```

Gegenstück ist Standard-Eingabe mittels input ():

```
>>> h=input()
                                                                                                    1
2.7
                                                                                                    2
>>> h
                                                                                                    3
2.70000000000000002
>>> h=input()
                                                                                                    5
"baby"
                                                                                                    6
>>> h
                                                                                                    7
'baby'
                                                                                                    8
>>> h=input()
                                                                                                    9
8+8j
                                                                                                    10
>>> h
                                                                                                    11
(8+8j)
                                                                                                    12
```

```
>>> h=input("Zahl:")
                                                                                                 13
Zahl:100
                                                                                                 14
>>> (a,b,c)=input("Drei Zahlen: ")
                                                                                                 15
Drei Zahlen: 25, 64, 77
                                                                                                 16
#
                                                                                                 17
>>> d=raw_input()
                                                                                                 18
"hello there , wie geht's heute"
                                                                                                 19
>>> d
                                                                                                 20
"hello there , wie geht's heute"
                                                                                                 21
```

- Zeilenweise Eingabe
- automatische Konvertierung in Standard-Datentypen
- Als Argument kann input() ein prompt-String übergeben werden (Eingabe-Aufforderung)
 input (prompt-string)
- Gleichzeitig können mehrere Variablen gelesen werden
- Bei komplexem Input besser mittels raw_input () in String einlesen und mittels string Funktionen
 weiter verarbeiten

Ein/Ausgabe mit Dateien

ist sehr komfortabel in Python:

- File Objekt erstellen mit f=open("filename") (Lesen) bzw. f=open("filename", "w") zum Schreiben.
- Lese– bzw Schreib–operationen immer mit Strings
- f.readlines() liest alle Zeilen und liefert list of strings zurück
- Alternativ iterieren mit for line in f: über alle Zeilen
- Ausgabe mit f.write("Some Txt String")
- Schliessen nicht vergessen f.close()

```
f=open("numbers.dat") # Oeffne file

zeilen=f.readlines() # Lese alle Zeilen \rightarrow list of strings

len(zeilen) # 100

zeilen[8] # \rightarrow '0.720203\n'

b = float(zeilen[8]) # Konversion string \rightarrow float

b # \rightarrow 0.72020300000000004

f.close # file schliessen
```

Konversionen in/von Strings

• Für Standard-Datentypen gibt es Funktion str() um int, float, complex in String umzuwandeln:

```
str(667); str(3.1415); str(1+6j)
```

• Flexible Formatierung ähnlich wie in C mittels Format string:

```
"Fahrenheit %6.1f = Celsius %6.3f" % (fahr , celsius)
```

• Konvertierung String nach ... einfach mit:

```
int("667"); float("3.1415"); complex("1+6j")
```

Kommandozeile:

Eine weitere Möglichkeit zur Kommunikation mit dem Programm ist die Übergabe von Argumenten beim Start:

```
# ReadArgs.py
# Aufruf in shell:
                                                                                                          2
# python ReadArgs.py 99 3.1415 blabla
import sys
n=0
for arg in sys.argv: # Argumente als Liste von strings
    print "arg %d : %s " % ( n, arg )
                                                                                                          7
    n += 1
                                                                                                          8
                                                                                                          9
# arg 0 : ReadArgs.py
                                                                                                          10
# arg 1:99
                                                                                                          11
# arg 2 : 3.1415
                                                                                                          12
# arg 3 : blabla
                                                                                                          13
```

Argumente als list von strings verfügbar in sys.argv

• 1. Argument (sys.argv[0]) ist automatisch immer Name des Programms

1.10 Python Module

Per Default bietet Python eine gewisse Grundfunktionalität. Für weitergehende Anwendungen müssen aber i.d.R. weitere **Python Module** eingebunden werden.

Drei Arten dieser Module kann man unterscheiden:

- Module der **Python Standard–Distribution**, z.B. *math, cmath, sys, random, Tkinter, ...* (siehe Python 2.7.3 Module Index).
- Externe Module: Riesige Zahl an weiteren Python Modulen erhältlich. Aber individueller Download und Installation erforderlich. (\Rightarrow Später)
- Eigene Module: Grundlegendes Design-Prinzip ist Programm in Untereinheiten aufzuteilen, d.h. in verschiedene Python Module.

Verwendung von Modules einfach durch Statement:

```
import module-name
```

Das funktioniert ohne weiteres

- für die Python Standard Modules
- sowie für selbst-erstellte Modules, die den Filenamen module-name.py tragen und sich im momentanen Arbeitsverzeichnis befinden.

(Für andere, externe Module muss i.a. der PYTHONPATH angepasst werden ⇒ später)

Beispiel: Python Module für weitere mathematische Funktionen

```
# mathutil.py: Verschiedene mathematische Hilfsfunktionen
                                                                                                     1
import math
                                                                                                    2
pi2=math.pi*2.
def fak(n):
    "Berechne Fakultaet"
                                                                                                     5
def gcd(a, b):
                                                                                                     7
    "Berechne groessten gemeinsamen Teiler von a und b"
                                                                                                     8
                                                                                                     9
def fibonacci(n):
                                                                                                     10
    "Berechne n-te Fibonacci Zahl"
                                                                                                    11
                                                                                                     12
                                                                                                     13
```

Verwendung in anderem Python Skript oder interaktiv:

Zuerst Laden des Moduls und dann nutzen der Variablen/Funktionen via module-name.function(), module-name.variable, z.B.:

import mathutil # import package	1
f20 = mathutil.fak(20) # call function from mathutil	2
umfang = mathutil.pi2 * radius # use variable from mathutil	3

1.11 Python Namespaces

Wie in Java/C++ gibt es in Python das Konzept der Namespaces (=Namensräume).

- Namespaces helfen Konflikte mit Variablen/Funktions-Namen zu vermeiden.
- Per default definiert jedes Python Module seinen **eigenen Namespace**, bei Verwendung in anderen Modulen wird Namespace (=module-name) explizit mit angegeben, bei Verwendung von Funktionen oder Variablen des entsprechenden Moduls.

```
import math # import package
import mathutil # import package
umfang = mathutil.pi2 * radius #
...
pi2=math.pi**2 # Pi^2, kein Konflikt mit pi2 aus mathutil
...
6
```

Variante von *import*, so dass Module gleichen namespace verwendet: Statt

import sys; print sys.argv # explizite namespace Angabe

auch möglich:

from sys import argv; print argv # argv jetzt im std namespace

oder

from sys import *; print argv # alle Variablen/Funktione aus sys jetzt
im std namespace

Inbesondere letzteres besser nicht verwenden!

Globale und lokale Variablen:

Variablen, die auf Ebene eines Modules definiert sind, sind globale Variablen

- sie sind überall verfügbar, wo das jeweilige Module verfügbar ist
- sie bleiben erhalten während des gesamten weiteren Programmlaufs

Dagegen sind Variablen, die innerhalb einer Funktion definiert sind, per default lokale Variablen

- sie sind nur inerhalb der jeweiligen Funktion verfügbar
- sie existieren nur solange die Funktion aktiv ist, d.h. Python die Anweisungen in der Funktion abarbeitet.

Alternativ kann man innerhalb einer Funktion Variablen als **global** deklarieren, dann haben sie globale Gültigkeit und Lebensdauer, sobald die Funktion einmal gerufen wurde.

```
def setx1(a):
    x=a # local x
    print 'x in setx1 = ', x
    y1=111

def setx2(a):
    global x, y2 # global x, y2
```

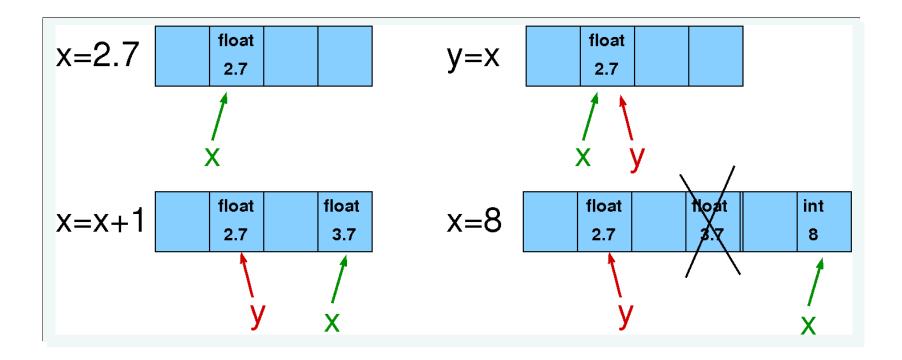
```
x=a
                                                                                                        7
    print 'x in setx2 = ', x
                                                                                                        8
   y2 = 222
                                                                                                        9
x=5
                                                                                                        10
setx1(11)
                                                                                                        11
print 'x after setx1 = ', x
                                                                                                        12
print y2 # Error global in y2, but not yet defined since setx2 not called
                                                                                                        13
setx2(22)
                                                                                                        14
print 'x after setx2 = ', x
                                                                                                        15
#
                                                                                                        16
print y1 # error only local in setx1
                                                                                                        17
print y2 # ok now
                                                                                                        18
```

1.12 Variablen vs Objekte in Python

Python Variablen spielen eine ganz andere Rolle als Variablen in C++/JAVA.

- Zentrales Element in Python sind *Python-Objects*. Diese entstehen als Ergebnis einer Operation, Funktionsaufruf, o.a.
- Python-Objects haben einen bestimmten Typ (int, float, string, list, class name, ...) und belegen den entsprechenden Speicherplatz.
- Zuweisung in Python, z.B. x = 2.7 bewirkt lediglich, dass das float-Object mit Wert 2.7 und Speicherplatz 64 bit über den Namen x angesprochen werden kann.
- Zuweisung y = x bewirkt nicht Kopie sondern einfach nur weiterer Namen mit dem dasselbe
 Objekt angesprochen wird.
- "Änderung" der Variablen x = x + 1 bewirkt nicht Änderung des ursprünglichen Python-Objects sondern Erzeugung eines neuen unabhängigen Objekts mit Wert 2.7 + 1 = 3.7. Mit x wird jetzt dieses neue Objekt angesprochen, das ursprüngliche ist nach wie vor vorhanden, mit y kann es angesprochen werden.

In C++/Java Variable und Objekt dasselbe (zumindest für primitive Datentypen int, float, ...).



1.13 Programme debuggen

Programmieren ist eine komplexe Angelegenheit. Nur die wenigsten schaffen es mehr als 10 Zeilen fehlerfrei zu schreiben. Erst recht nicht als Anfänger. Häufig meiste Zeit bei Programmentwicklung für Fehlersuche (=debuggen) und Korrektur.

Hilfreich Fehler zu klassifizieren:

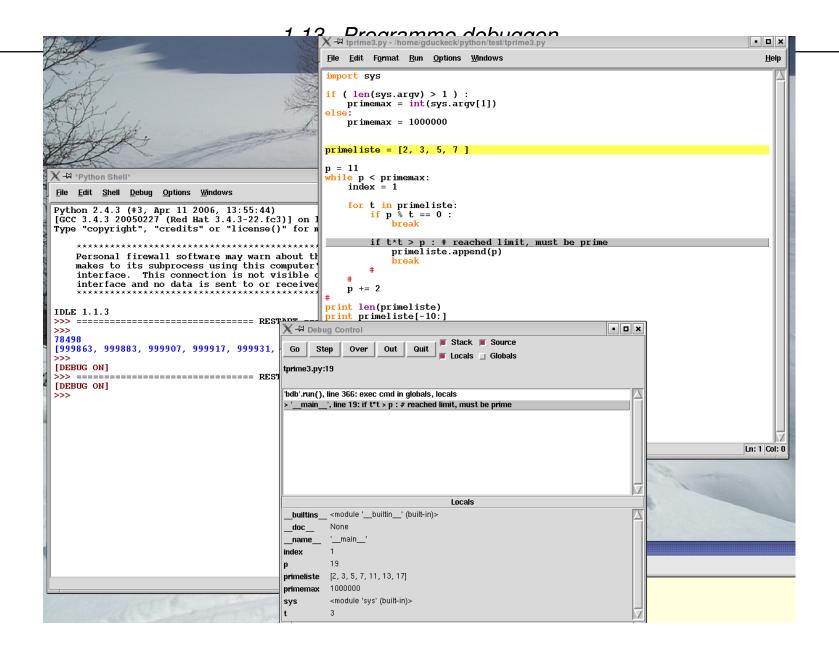
- Syntax-Fehler: Der Python Interpreter kann ein Programm nur übersetzen wenn die Syntax des Programms korrekt ist, d.h. den Python Regeln entspricht. Beispielsweise nicht kompatible Datentypen in Operationen, falsche key-words, fehlende Klammern, unbekannte Funktionen oder Klasse, und vieles andere. Besonders für Anfänger häufigste Fehlerquelle und ziemlich lästig wegen kryptischer Fehlermeldungen des Interpreters, dennoch einfachste Art von Fehler.
- Laufzeit-Fehler treten beim Ausführen des Programms auf (= run-time errors) und führen i.d.R. zum Abbruch des Programms, z.B. Division durch Null, File existiert nicht, Speicherüberlauf, Zugriff auf nicht-existierende Array Elemente, etc. Manchmal offensichtlich, oft aber auch schwer und mühsam zu finden. Python ziemlich sicher und gutmütig im Vergleich mit C, C++, FORTRAN, ... In Python integriertes System zum exception-handling (weiteres später).
- Semantik-Fehler Programm kompiliert und läuft, tut aber nicht das was es soll. Mal einfach, kann aber auch Milliarden kosten (Ariane, Toll-collect).

Meiste Zeit bei Programmentwicklung i.d.R. für (Laufzeit-/Semantik-) Fehlersuche. In Python oft interaktives Ausprobieren möglich zur schnellen Fehlersuche, ansonsten ist Standardverfahren print statements an den kritischen Stellen.

⇒ umständlich, zeitraubend

Wesentlich eleganter mit richtigem debugger

- Programm läuft unter Kontrolle des Debuggers
- Zeile für Zeile dem Source-code nach
- oder breakpoints an den kritischen Stellen setzen und direkt dahin laufen.
- Inhalt von Variablen kann angezeigt werden. Bewirkt dass zusätzliche Info in den kompilierten code geschrieben wird.
- Klassischer Kommandozeilen-Debugger:
 Starten mit Module pdb: python -m pdb tprime.py
- Oder Integrierter Debugger mit GUI, z.B. in Python Entwicklungsumgebung idle : idle tprime.py



1.14 Python Grundlagen Zusammenfassung

Soweit Schnelldurchgang

- Syntax
- Basic Datentypen
- Operationen, Kontrollstrukturen

Zwangsläufig unvollständig und oberflächlich

Aber keine Panik, auch wenn vieles unklar ist

- Grundlegende Sprachelemente tauchen immer wieder auf
- Man braucht Zeit zum Verdauen und eigene Erfahrungen zu sammeln
- ⇒ fragen, üben, fragen, üben, fragen, üben, ...

1.15 Aufgaben

Es sind mit Absicht viele, es reicht wenn Sie etwa die Hälfte (gründlich) bearbeiten. Der Rest ist für zu Hause, als Anregung gedacht.

Grün markierte sind das Minimalprogramm, die sollten auf jeden Fall bearbeitet werden. Rot gekennzeichnete sind anspruchsvoller und v.a. für diejenigen gedacht, die schon Programmierkenntnisse mitbringen.

1. Warmlaufen

- Benutzen Sie Python interaktiv, geben Sie Zahlen und Strings aus, verwenden Sie Python als Taschenrechner.
- Erstellen Sie das "Hello world" Programm im Editor, dann mit dem Python Interpreter ausführen.
- Dasselbe mit der Fahrenheit/Celsius Konversion
 modifizieren Sie es: Schrittweite, Bereich, umdrehen in Celsius Fahrenheit.

2. Quadrat- und Kubik-Zahlen

- (a) Erstellen Sie ein Programm, das die Quadrat- und Kubik-Zahlen von 1 bis 150 ausgibt und am Ende die Summe der Quadrat- bzw. Kubik-Zahlen
- (b) Demonstrieren Sie folgende mathematische Identität für n = 1..200:

$$\sum_{i=1}^{n} i^3 = \left(\sum_{i=1}^{n} i\right)^2$$

3. Fließkommazahlen

- (a) Lassen Sie das Programm TestFloat.py laufen. Warum "können Rechner nicht rechnen"?
- (b) Genauigkeit von float Operationen: Reduzieren Sie schrittweise

```
eps = 1.
while (...):
    eps /= 2.
addieren Sie's zu
    onePlusEps = 1.0 + eps
solange bis
    if ( onePlusEps == 1.0 ) ...
```

4. Fibonacci-Zahlen

Fibonacci-Zahlen Zahlentheorie wichtige Rolle der spielen eine in haben interessante Eigenschaften. Sie sind definiert als: und viele

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2}; F_0 = 0, F_1 = 1$$

- (a) Erstellen Sie eine Liste der Fibonacci-Zahlen.
- (b) Demonstrieren Sie dass gilt:

$$F_{n+1} \cdot F_{n-1} - F_n^2 = (-1)^n$$

5. Bit Operationen

Programmieren Sie die binäre Ausgabe von Integerzahlen mit Hilfe von Bit Operationen.

```
z.B.: 5 \rightarrow 101
Hinweis: Bit 15 in n abfragen mit z.B.: if ( ( ( 1 <<15) & n ) != 0 )
```

6. Prim-Zahlen

- (a) Erstellen Sie ein Programm, das testet ob eine gegebene Zahl eine Primzahl ist.
- (b) Erweitern Sie das Programm, so dass es abzählt wieviele Primzahlen es gibt, die kleiner als eine vorgegebene Zahl sind, z.B. $1\,000\,000$.

Hinweis: Es geht nicht darum einen schnellen Algorithmus zu finden, machen Sie's so simpel wie möglich.

- (c) Sieb des Erasthones ist ein klassisches Verfahren zur Bestimmung aller Primzahlen zwischen 2 und n. Der Algorithmus geht folgendermassen:
- Erstelle Liste aller Zahlen von 2 bis n
- Nimm schrittweise jede Zahl i dieser Liste, falls sie nicht gestrichen ist.
- Streiche alle Vielfachen von i aus der Liste

Am Ende bleiben genau die Primzahlen übrig in der Liste. (Tipp: Test auf Vielfaches mit modulo Operator: m%i == 0)

7. Lineare Algebra

- (a) Vektoroperationen: Legen Sie 2 Arrays mit den Elementen [0.3, 1.8, -2.2] bzw [-2.5, 3.8, 0.4] an und berechnen Sie das Skalarprodukt und das Vektorprodukt.
- (b) Matrixmultiplikation: Schreiben Sie ein Programm zur Multiplikation dieser beiden Matrizen:

```
C = [ [ 0.61, 0.24, 1.16 ], [ 0.14, -0.82, 0.92 ], [ -1.25, 0.96, -0.23 ] ]
D = [ [ 0.40, -0.68, -0.68 ], [ 0.65, -0.75, 0.23 ], [ 0.52, 0.51, 0.31 ] ]
```

8. Programmlogik bei Schleifen

Folgendes Beispiel ist ein funktionierendes Python Programm (übernommen aus Learning Python). In einer Liste soll nach einem bestimmten Wert gesucht werden. Allerdings ist der Stil eher C++/JAVA.

```
L = [1, 2, 4, 8, 16, 32, 64]
                                                                                                                 1
X = 5
                                                                                                                 2
found = i = 0
                                                                                                                 3
while not found and i < len(L):
                                                                                                                 4
    if 2^{**} X == L[i]:
                                                                                                                 5
         found = 1
                                                                                                                 6
    else:
                                                                                                                 7
        i = i+1
                                                                                                                 8
```

```
if found:
    print 'at index', i

else:
    print X, ' not found'
10
11
```

In Python lässt es sich eleganter lösen, implementieren Sie verschiedene Varianten:

- (a) found und if am Ende sind überflüssig wenn man stattdessen eine while: ... else: Kombination macht.
- (b) for Loop statt while, ohne *indexing* logic, stattdessen mit L.index(X) Position abfragen.
- (c) in Operator alleine: if X in L: ...

9. Funktion für Fakultät

Schreiben Sie eine Funktion fak(n), zur Berechnung der Fakultät n!. Bis zu welchem n lässt sich n! für float Typen berechnen?

10. Rekursive Funktion

Ein Paradebeispiel für Rekursion ist Euklid's Algorithmus zur Bestimmung des *Größten Gemeinsamen Teilers* zweier Zahlen GT(a,b).

$$GGT(a,b) = \begin{cases} GGT(b, a \mod b) & \text{wenn } a \text{ nicht durch } b \text{ teilbar ist} \\ b & \text{sonst} \end{cases}$$

Erstellen Sie eine solche Funktion in Python.

11. Mathematische Funktionen

In dem Python Module *math* (siehe Python math oder help (math) im Python Interpreter) sind die Standard mathematischen Funktionen dokumentiert. Zur Benutzung in ihrem Programm zunächst das Modul laden:

```
import math und dann den Module-Namen math. voranstellen, also z.B.
mypi = 4. * math.atan(1.)
```

Machen Sie sich mit den Funktionen vertraut, z.B.

- Was ist das Ergebnis von math.sqrt (144), math.sqrt (−1.), math.log (10),
 math.atan (1.) math.pI/4., ...
- Zum Rechnen mit komplexen Zahlen gibt es das entsprechende Python Module *cmath*. Testen Sie diese Funktionen

12. Funktionen als Argumente und lambda functions

(a) Implementieren Sie das vorgestellte Beispiel mit der Nullstellen-Suche, benutzen Sie andere Funktionen, $\boxed{e^x-x^{10}}$

, ...

(b) Machen Sie analog eine Funktion zur Integration mit Trapez- oder Simpson-Regel und frei

wählbarer Zahl von Stützstellen.

13. Einlesen und Arrays

In der Datei numbers.dat finden Sie eine Liste mit 100 Fließkommazahlen. Lesen Sie diese ein und

- (a) finden den kleinsten und größten Wert.
- (b) erlauben Sie die Übergabe einer Zahl per Argument und finden Sie die Zahl aus numbers.dat, die am nächsten liegt.
- (c) speichern Sie alle Zahlen in eine Liste von float Zahlen. Sortieren Sie die Liste in absteigender Reihenfolge und geben Sie sie aus.

14. Files kopieren

Schreiben Sie ein Programm zum kopieren von Files, z.B.

```
python FileCopy.py file1.txt file2.txt
soll file1.txt nach file2.txt kopieren.
```

15. Zeilen, Wörter, Zeichen zählen

Schreiben Sie ein Programm, das die Zahl der Zeilen, Wörter und Zeichen bestimmt für ein File das auf der Kommandozeile angegeben wird, z.B.

```
python count.py /etc/passwd
```

16. String Funktionen

Für Python Strings sind eine Reihe nützlicher Hilfsfunktionen definiert, siehe http://www.python.org/doc/2.7.3/library/stdtypes.html#string-methods.

In kant.txt finden Sie eine elektronische Fassung von Immanuel Kant's "Kritik der reinen Vernunft".

- (a) Wieviele Zeilen enthält der Text?
- (b) Finden Sie die String Funktion die Groß-Buchstaben in Klein-Buchstaben umwandelt und transformieren sie damit den ganzen Text.
- (c) Wie oft kommt das Wort Vernunft in dem Text vor?

17. Strings und Sequenzen

Studieren Sie folgende sechs Code-Segmente, d.h. überlegen Sie zunächst welches Ergebnis Sie jeweils erwarten, probieren es dann aus und versuchen es zu verstehen falls die Erwartung nicht eingetroffen ist.

```
#
"aaaaa".count("aaa")
#

X = ['a', 'b', 'c', 'd']

x[0:2] = []
```

```
7
X = ['a', 'b', 'c', 'd']
                                                                                                        8
x[0:2] = ['q']
                                                                                                        9
                                                                                                        10
x = ['a', 'b', 'c', 'd']
                                                                                                        11
x[0:2] = 'q'
                                                                                                        12
                                                                                                        13
x = ['a', 'b', 'c', 'd']
                                                                                                        14
x[0:2] = 99
                                                                                                        15
                                                                                                        16
x = ['a', 'b', 'c', 'd']
                                                                                                        17
x[0:2] = [99]
                                                                                                        18
    #
                                                                                                            19
```

2 Klassen und Objekte

- Warum objektorientiertes Programmieren ?
- Ein einfaches Beispiel 3D Vektor
- Klassen und Objekte, Methoden und Variablen
- Vererbung
- Abstrakte Methoden und Klassen
- Interfaces
- Aufgaben

2.1 Warum objektorientiertes Programmieren?

Intrinsische Datentypen (int, float, string, ...) sind unzureichend für die allermeisten praktischen Probleme.

Offensichtlich im Bereich Verwaltung, Wirtschaft, Handel, ...

- Studenten–Daten an der LMU
- Fahrscheine buchen bei DB
- Ebay Auktionen, ...

Praktisch immer komplexe *Datenmodelle*, d.h. zusammengesetzt aus Strings, int und float Zahlen, Querverweise auf weitere Infos, usw.

Aber auch im naturwissenschaftlich/technischen Umfeld – mit überwiegend numerischen Informationen – sind Messdaten keine isolierten Zahlenkolonnen sondern i.d.R. komplex strukturiert und ergeben nur im Kontext mit dem Experiment (*Aufbau, Parameter, Außenbedingungen*) einen Sinn.

- Spuren im Detektor sind 3er oder 4er Vektoren, bestehen aus Hits, gehören zu einem Sub-Detektor, ...
- Fluoreszenz–Spektrum: Wertepaare (*Frequenz, Intensität*) plus Zusatzinfo zu Probe, Apparatur, Kalibration, äussere Parameter, ...

• ...

Im Prinzip mit **Python list** möglich Problem zu lösen, da beliebige andere Elemente in einer Python list abgelegt werden können, beliebige Datenstrukturen sind möglich. Aber OO programmieren geht weiter:

Verknüpfung von Daten und Methoden

Historische Entwicklung:

Unstructered Programming: Ein Hauptprogamm + Daten

Procedural Programming: Ein Hauptprogamm + globale Daten + kleinere Funktionen (prozedures)

Modular Programming: Ein Hauptprogamm + globale Daten + Module mit lokalen Daten und Unterprozeduren

Object-oriented: Daten und Prozeduren integriert in Klassen, d.h. direkte Kopplung von Daten und Prozeduren. Keine globalen Daten, kein eigentliches Hauptprogramm, Objekte kommunizieren direkt

Im Prinzip natürlicher & intuitiver Ansatz:

⇒ Alltag Datum & Methode verknüpft

```
Auto ..., Fahren, Schalten, Blinken, ...
Wiesn ..., Maß, Schunkeln, Brechen, ...
Fußball ..., Blutgrätsche, Schwalbe, ...
```

2.2 Von primitiven Datentypen zu komplexen Datenstrukturen

Standard Datentypen alleine ungeschickt bzw. unzureichend für praktische Anwendungen, z.B. Studentendaten: *Name, Studiengang, Alter, Semester, Matrikel-Nummer, Noten, ...* Kombination aus string, int, float Daten.

In Python mittels einfachster Form von Klasse möglich solche Datenstrukturen selbst zu definieren:

```
class Stud: # dumb class
                                                                                                        1
    pass
                                                                                                        2
sta = Stud() # Erzeugung Variable vom typ Stud
                                                                                                        3
sta.name = "Albert Unirock"
sta.fach = "Physik"
                                                                                                        5
sta.alter = 25
stb = Stud() # Erzeugung Variable vom typ Stud
                                                                                                        8
stb.name = "Berta Bohne"
                                                                                                        9
stb.fach = "Informatik"
                                                                                                        10
stb.alter = 19
                                                                                                        11
                                                                                                        12
. . .
```

- Leere Klasse Stud
- Erzeugen eines Objektes einer Klasse und Zuweisung an entsprechende Variable:

```
sa = Stud()
```

- Beispielklasse hier zunächst völlig leer und ohne weitere Funktionalität, kann aber als Hülle/Container für beliebige Variablen dienen
- Erzeugen/Zugriff auf Variablen des Objektes mittels objectname.variable: sa.alter = 21;

Weiteres Beispiel: Klasse für einfachen Dreier-Vektor

```
class Dumb3Vec: # weitere leere Klasse, nur Huelle fuer 3-er Vektoren
                                                                                                        1
    pass # empty statement, hier noetig
                                                                                                        2
# Anwendung
                                                                                                        3
v = Dumb3Vec() # Erzeugung Variable vom typ Dumb3Vec
                                                                                                        4
w = Dumb3Vec() # Erzeugung Variable vom typ Dumb3Vec
                                                                                                        5
v.x = 1.0
                                                                                                        6
v.y = 0.5
y.z = -0.8
                                                                                                        8
w.x = 1.5
                                                                                                        9
w.y = -0.5
                                                                                                        10
w.z = -2.8
                                                                                                        11
                                                                                                        12
// Laenge ausrechnen
                                                                                                        13
len = math.sqrt(v.x*v.x + v.y*v.y + v.z*v.z)
                                                                                                        14
u = Dumb3Vec()
                                                                                                        15
# v und w addieren
                                                                                                        16
U.X = V.X + W.X
                                                                                                        17
U.y = V.y + W.y
                                                                                                        18
```

```
U.Z = V.Z + W.Z
\dots
20
```

Anstatt gängige Operationen jedesmal wieder neu zu programmieren wäre es geschickt, wenn dies gleich die Klasse übernehmen könnte, d.h. Klassen nicht nur zum Definieren beliebiger Datenstrukturen sondern auch gleich Operationen bzw. Methoden mit diesen Daten

```
import math
class Smart3Vec: # Klasse fuer 3-er Vektoren mit Methoden
                                                                                                               2
    x = 0 # default values
                                                                                                               3
    y = 0
    z = 0
    def Length( self ):
        return(math.sqrt(self.x*self.x + self.y*self.y + self.z*self.z ))
                                                                                                               7
    def Add( self, a ):
                                                                                                               8
        t = Smart3Vec()
                                                                                                               9
        t.x = self.x + a.x
                                                                                                               10
        t.y = self.y + a.y
                                                                                                               11
```

```
t.z = self.z + a.z
                                                                                                          12
    return(t)
                                                                                                          13
  # Anwendung
                                                                                                          14
v = Smart3Vec() # Erzeugung Variable vom typ Smart3Vec
                                                                                                          15
w = Smart3Vec() # Erzeugung Variable vom typ Smart3Vec
                                                                                                           16
v.x = 1.0
                                                                                                          17
v.y = 0.5
                                                                                                          18
v.z = -0.8
                                                                                                           19
w.x = 1.5
                                                                                                          20
w.y = -0.5
                                                                                                           21
w.z = -2.8
                                                                                                           22
# v kann seine Laenge selbst ausrechnen ...
                                                                                                          23
print v.Length()
                                                                                                           24
# ... und weiss auch wie es einen anderen Vektor addiert
                                                                                                           25
u = v.Add(w)
                                                                                                           26
print u.Length()
                                                                                                           27
```

⇒ Grundkonzept für Objektorientiertes Programmieren

2.3 Eine richtige Klasse für 3D Vektor

```
#
                                                                                                               1
import math
                                                                                                               2
class ThreeVec(object):
    "Class for 3 Vector and operations"
                                                                                                               5
    def __init__( self, x=0., y=0., z=0.):
                                                                                                               6
        self.x = x
        self.y = y
                                                                                                               8
        self.z = z
                                                                                                               9
    def Add( self, tv ): # add two 3 vecs
                                                                                                               10
        newvec = ThreeVec( self.x+tv.x, self.y+tv.y, self.z+tv.z)
                                                                                                               11
        return newvec
                                                                                                               12
    def Length( self ): #
                                                                                                               13
        return math.sqrt( self.x**2 + self.y**2 + self.z**2 )
                                                                                                               14
    def Scale( self, a ): # Skalierung mit float
                                                                                                               15
        pass
                                                                                                               16
                                                                                                               17
    def Angle( self, a ): # Winkel zwischen 2 Threevectors
                                                                                                               18
```

```
pass
                                                                                                          19
#
                                                                                                          20
    def ScalProd( self, tv ): # Skalarprodukt von 2 Threevectors
                                                                                                          21
        pass
                                                                                                          22
#
                                                                                                          23
    def CrossProd( self, tv ): # Kreuzprodukt von 2 Threevectors
                                                                                                          24
        pass
                                                                                                          25
#
                                                                                                          26
                                                                                                          27
                                                                                                          28
# use ThreeVec
                                                                                                          29
                                                                                                          30
tv1 = ThreeVec( 1., 2., 0.) # create ThreeVec object ( calls ThreeVec.__init__ )
                                                                                                          31
tv2 = ThreeVec(1., -1., 1.) # create ThreeVec object
                                                                                                          32
tv3 = ThreeVec(3, -2, 4) # create ThreeVec object
                                                                                                          33
tv4 = tv3.Add(tv1)
                             # Add two ThreeVecs
                                                                                                          34
print tv1.Length()
                                                                                                          35
print tv3.Length()
                                                                                                          36
print tv4.Length()
                                                                                                          37
```

- Eine Klasse definiert einen neuen Typ
- Typ enthält massgeschneiderte Daten und v.a. Methoden
- Die Klasse ist zunächst eine abstrakte Definition eines Datentyps mit zugehörigen Methoden
- Ein **Objekt** wird daraus wenn eine *Instanz* der Klasse erzeugt wird:

```
v = ThreeVec(1., 0.5, 2.)
```

• Bei Erzeugung wird implizit spezielle Methode gerufen mit Namen __init__(...), diese dient zur Initialisierung des Objekts.

Nicht zwingend nötig, aber i.d.R. praktisch zur Initialisierung. Entspricht in etwa der *Konstruktor–Methode* in C++/Java.

• Anschliessend können Methoden für die erzeugten Objekte gerufen werden.

```
tv4 = tv3.Add( tv1 )
tv1.Length()
```

2.4 Daten und Methoden in Klassen

Variablen und Funktionen, die innerhalb einer Klasse definiert sind, sind die sogenannten membervariables bzw. member-functions.

Bei der Verwendung, d.h. ausserhalb der Klasse werden sie mittels objectname.variable oder objectname.function() angesprochen, z.B.

```
u = ThreeVec(1.,2.,-1.)
v = ThreeVec(0.,2.,1.)
u.x = 7
w = u.Add(v)
```

Bei der Definition der Member-functions selbst, d.h. **innerhalb der Klasse**, werden die member-variables bzw. andere member-functions über **self** angesprochen.

• self ist Schlüsselwort und bezieht sich auf das jeweilige Objekt für das die Methode gerufen wird.

• self muss immer als erster Parameter der member-functions angegeben werden, aber nicht als Argument beim Aufruf, das macht Python implizit. Aufruf:

```
v = ThreeVec(0., 2., 1.)
v.Length()
```

• Innerhalb der member-function bezieht sich **self** jetzt auf den **ThreeVec v**, d.h. v.x == self.x, v.y == self.y, ...

```
class ThreeVec(object):
...

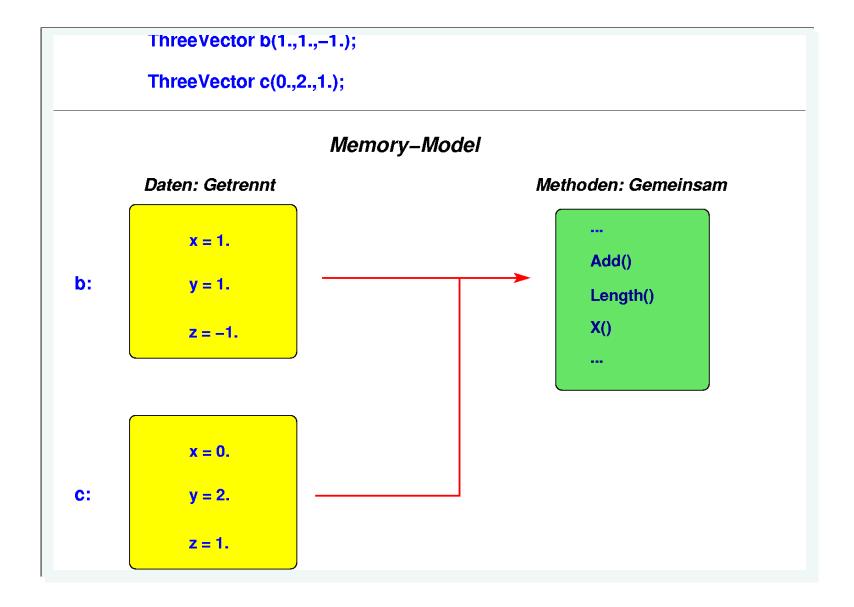
def Length( self ):
    return math.sqrt( self.x**2 + self.y**2 + self.z**2 )
```

self spielt ähnliche Rolle wie this in C++/JAVA

Besondere Bedeutung hat __init__ (...) Methode

- Dient zum Anlegen des Objekts, i.d.R. sollten alle verwendeten Member-Variablen hier erzeugt werden. (Aber kein Zwang in Python, Definition/Zugriff kann von überall erfolgen, kein *Verstecken* der Daten möglich wie in C++/Java mit *private*.)
- Wird implizit gerufen bei Erzeugen eines Objektes der Klasse, d.h.

```
v = ThreeVec( 1., 0.5, 2.) entspricht in etwa
v = ThreeVec(); v.__init__( 1., 0.5, 2.)
```



Vergleich prozedural vs objektorientiert

Mit den **ThreeVecs** soweit jetzt diskutiert kann man sehr einfach und effizient Code für Dreier-Vektor Manipulationen schreiben, z.B. Vektoren addieren, mit Skalar multiplizieren, ...

```
u = ThreeVec(1.,1.,-1.)
v = ThreeVec(2.,0.,3.)
w = u.Add( v.Scale(3.) )
```

Wie würde man es ohne Klassen/Objekte lösen?

Variante 1: Direkt kodieren:

```
a = [1, 1, -1];
b = [2, 0, 3];
c = [0]*3

for i in range(3):
c[i] = a[i] + 3. * b[i]

#
```

Variante 2: Entsprechende globale Python Funktionen definieren/verwenden:

```
def ScaleVector( vin, scale ):
                                                                                                            1
    "Multiply vector elemtns by scalar"
                                                                                                             2
    vout = [0]*len(vin)
                                                                                                             3
    for i in range( len(vin) ):
        vout[i] = scale*vin[i]
                                                                                                             5
    return vout
                                                                                                             6
                                                                                                             7
def AddVector( v1, double v2 ):
                                                                                                             8
    "Add two vectors"
                                                                                                             9
    vout = [0]*len(v1)
                                                                                                             10
    for i in range( len(v1) ):
                                                                                                             11
        vout[i] = v1[i] + v2[i]
                                                                                                             12
    return vout
                                                                                                             13
                                                                                                             14
a = [1, 1, -1];
                                                                                                             15
b = [2, 0, 3];
                                                                                                             16
c = ScaleVector(b, 3.)
                                                                                                            17
c = AddVector(a, c)
                                                                                                             18
```

Geht natürlich auch, aber unhandlich, kryptisch, fehleranfällig, ...

2.5 Dynamische Speicherverwaltung

In modernen Sprachen, wie Python und C++/JAVA, kann ein Programm jederzeit eine im Prinzip beliebig grosse Menge Speicher für Objekte oder Arrays anfordern, mittels z.B.

```
a = [some-object] *length
```

Eine besonders schönes Feature von Python (und JAVA) ist, daß das schon alles ist; das aufräumen passiert automatisch.

In C/C++ dagegen muss sich die Programmiererin selbst darum kümmern den allozierten Speicher wieder zu räumen, eine sehr heikle und fehleranfällige Aufgabe.

```
delete [] room; // C++ room2 still defined, dangling ref

11
```

Python merkt sich alle Referenzen auf die angelegten Objekte bzw. den allozierten Speicherbereich. Sobald keine mehr vorhanden sind wird der Bereich zum Abschuss für den *garbage-collector* freigegeben. Dieser wird bei Bedarf automatisch gerufen. In der Regel kein Eingriff des Programmierers nötig.

2.6 Scope und Lifetime

'Klassen'-Variablen, d.h. Variablen, die mit einer Klasse definiert sind

- werden initialisiert wenn das Objekt angelegt wird
- existieren solange das Objekt existiert
- sind überall verfügbar, wo das Objekt verfügbar ist.

Lokale Variable, d.h. Variablen die innerhalb einer Funktion oder Methode definiert sind

- Scope (Gültigkeitsbereich) auf die Funktion beschränkt, unbekannt ausserhalb
- Lebensdauer ditto, während Programm in Funktion

Python-Objekte existieren solange irgendwo eine Referenzvariable dafür existiert.

2.7 Operator overloading

In Python können Standardoperationen, wie +, *, etc für beliebige Klassen definiert werden. Dazu muss nur eine Methode mit Namen __add__(...) in der Klasse definiert sein:

```
class ThreeVec(object):
    ...

def Add( self, tv ): # Add function
    newvec = ThreeVec( self.x+tv.x, self.y+tv.y, self.z+tv.z)
    return newvec

def __add__( self, tv ): # dasselbe aber fuer + Operator
    "method for overloading the + operator"
    newvec = ThreeVec( self.x+tv.x, self.y+tv.y, self.z+tv.z)
    return newvec
```

und schon kann man statt

```
u = ThreeVec(1.,1.,-1.)
v = ThreeVec(2.,0.,3.)
w = u.Add( v )
```

einfach schreiben

```
z = u + v \# equivalent, calls u.\_add\_(v)
```

Operator overloading prinzipiell möglich für alle Python-Operationen

```
*: __mul__, -: __sub__, /: __div__,

<: __lt__, >: __gt__, ==: __eq__, .....
```

aber nicht immer sinnvoll:

```
z = u * v
```

Multiplikation von Dreier-Vektoren ist Skalar- oder Vektorprodukt ??

Besser nicht implementieren in diesem Fall und stattdessen aussagekräftige Funktionsnamen verwenden, u.SkalProd(v); u.CrossProd(v)

2.8 Klassen erweitern – Vererbung

In der Physik sind häufig Vierer-Vektoren (=Lorentz-Vektor) gefragt, d.h. Dreier-Vektoren erweitert um Zeit bzw. Energie-Komponente. Mögliche Lorentz-Vektor Klasse:

```
class LorentzVec(object):
                                                                                                                    1
    "Class for 4 Vector and operations"
                                                                                                                    2
    def __init__( self, x=0., y=0., z=0., t=0.):
                                                                                                                    3
        self.x = x
         self.y = y
                                                                                                                    5
         self.z = z
                                                                                                                    6
         self.t = t
                                                                                                                    7
    def Add( self, lv ):
                                                                                                                    8
         newvec = LorentzVec( self.x+lv.x, self.y+lv.y, self.z+lv.z, self.t+lv.t)
                                                                                                                    9
        return newvec
                                                                                                                    10
    def Angle( self, lv ):
                                                                                                                    11
                                                                                                                    12
         . . .
    def Mass( self ):
                                                                                                                    13
                                                                                                                    14
         . . .
```

Viele Gemeinsamkeiten mit *ThreeVec* und ein paar Erweiterungen

- 3 alte, 1 neues Datenelement
- einige Methoden identisch Angle(), Theta(), ...
- einige komplett neu (Masse zweier 4-Vectors)
- einige müssen neu implementiert werden (Add, ...)

Design Prinzip Code-Reuse statt cut&paste!

⇒ LorentzVector enthält ThreeVector: "has-a" relationship (Aggregation).

```
class LorentzVec(object):
                                                                                                            1
    "Class for 4 Vector and operations"
                                                                                                            2
    def __init__( self, x=0., y=0., z=0., t=0.):
                                                                                                            3
        self.v3 = ThreeVector(x, y, z) # contains ThreeVector
        self.t = t
                                                                                                            5
    def Add( self, tv ):
                                                                                                            6
        w = self.v3 + tv.v3 # add ThreeVectors first
        newvec = LorentzVec( w.x, w.y, w.z, self.t+tv.t)
                                                                                                            8
        return newvec
                                                                                                            9
    def Angle( self, tv ):
                                                                                                            10
```

```
return( self.v3.Angle( tv.v3) # use ThreeVector Method

def Mass( self ):
....
```

Im Prinzip ok, allerdings viele stumpfsinnige *Mapping–Funktionen* von DreierVektor auf ViererVektor nötig.

3. Möglichkeit: Vererbung

ViererVektor ist DreierVektor mit ein paar Ergänzungen

```
class LorentzVec(ThreeVec): # inherits from ThreeVec
                                                                                                             1
    "Class for 4 Vector and operations"
                                                                                                             2
    def __init__( self, x=0., y=0., z=0., t=0.):
                                                                                                             3
        ThreeVec.__init__( self, x, y, z ) # initialize
                                                              Three Vec
                                                                                                             4
        self.t = t
                                                                                                             5
    def Add( self, tv ):
                                                                                                             6
        w = ThreeVec.Add( self, tv ) # call ThreeVec method first
                                                                                                             7
        newvec = LorentzVec( w.x, w.y, w.z, self.t+tv.t)
                                                                                                             8
        return newvec
                                                                                                             9
     def Angle( self, tv ): no need to define here, available from ThreeVec
                                                                                                             10
    def Mass( self ):
                                                                                                             11
                                                                                                             12
```

Jetzt übernimmt bzw. **erbt** *LorentzVector* alle Funktionen von *ThreeVec*, z.B. Winkelberechnung funktioniert sofort:

```
LorentzVec c = LorentzVec(1.000001, 1., 0., 0.);
```

```
LorentzVec d = LorentzVec(2.,1.,1.,0.);
c.Angle(d);
```

- Für die *abgeleitete* Klasse (LorentzVec) sind Methoden und Variablen, die in der *Basisklasse* (ThreeVec) definiert sind, direkt verfügbar, z.B. ThreeVec.Angle(..). Sie müssen nicht nochmals extra angegeben werden.
- Die *abgeleitete* Klasse **kann** Methoden, die in der *Basisklasse* schon definiert sind überschreiben, d.h. neu implementieren, z.B. LorentzVec.Add. Bei Verwendung wird dann automatisch die für LorentzVec definierte Klasse genommen.
- Memberfunktionen der abgeleiteten Klasse k\u00f6nnen explizit auf Funktionen der Basisklasse zugreifen: Classname.method(self,...), z.B. in LorentzVec.Add kann ThreeVec.Add(self,...) gerufen werden.
- Abgeleitete Klasse kann beliebige weitere Methoden und Variablen einführen.

Vererbung ("is-a" relationship) bedeutet alle Eigenschaften und Funktionen einer Grund-Klasse (base class) in eine weitere Klasse (derived class) zu übernehmen. Daraus ergibt sich eine enorme Erweiterung der Funktionalität. Ausgehend von vorhandenen, simplen Grundklassen können relativ leicht neue Klassen abgeleitet werden, ohne jedesmal diesselben grundlegenden Funktionen neu zu implementieren.

Allerdings: Vererbung nicht übertreiben, nicht immer sinnvoll, im Zweifelsfall Aggregation verwenden.

Rechteck und Quadrat

Zunächst naheliegend *Quadrat* von *Rechteck* abzuleiten (=vererben), viele Funktionen und Eigenschaften gemeinsam. Aber grundsätzliche Probleme bei Verhalten, z.B.:

```
class Rechteck:
                                                                                                                         1
    def __init__( self, w, I ):
                                                                                                                         2
         self.w = w
                                                                                                                         3
         self.l = l
  // ...
                                                                                                                         5
  def setLength( self, len):
                                                                                                                        7
  def setWidth( self, wid):
                                                                                                                         8
                                                                                                                         9
};
                                                                                                                         10
```

Was soll ein Quadrat mit diesen Funktionen machen?

setLength (...) bei *Quadrat* ändert immer auch width und vice-versa. Verhalten nicht kompatibel mit *Rechteck*.

Wichtig für OO Programmieren ist **konsistentes Verhalten** von Klassen, dazu wird Vererbung eingesetzt. Es geht weniger um *bequemes* Übernehmen von Funktionalität.

Mathematisch ist Quadrat Unterklasse von Rechteck, aber nicht im Sinne von OOP!

2.9 Abstrakte Klassen und Polymorphismus

In C++/Java wichtige Konzepte für Objektorientiertes Programmieren:

- Abstrakte Klassen sind Basisklassen, die Methoden vorgeben, jedoch ohne sie zu implementieren. Damit wird erzwungen, dass alle Klassen die sich von so einer Klasse ableiten diese Methoden eigenständig implementieren müssen. In C++/JAVA gibt es dafür ein explizites Schlüsselwort abstract. In Python so nicht vorhanden.
- Polymorphismus hängt eng mit abstrakten Klassen zusammen. In C++/Java bedeutet es, dass Objekt-Methoden einer abgeleiteten Klasse über Referenzen auf die Basisklasse angesprochen werden können. Dabei genügt es wenn diese Methoden als abstrakte Methoden in der Basisklasse deklariert sind.

In Python ist Polymorphismus selbstverständliche Beigabe, aufgrund des **dynamic-typing** gibt es keine starren Datentypen, erst bei konkreter Verwendung eines Objektes zur Laufzeit wird nach der aufgerufenen Methode gesucht. Deshalb ist das Fehlen von expliziten abstrakten Klassen in Python weniger wichtig. Falls dennoch benötigt kann die Funktionalität auch mit einfachen Programmiertricks emuliert werden.

2.10 Ergänzung – Standard Methoden für Klassen

Für Klassen, die zur *Aufnahme von Daten* dienen, empfiehlt es sich Methoden zu implementieren, die Vergleiche und Ausgabe unterstützen.

Das sind:

• __str__(self): Soll das Objekt als string darstellen. Wenn Methode vorhanden, wird sie implizit bei *print* verwendet, d.h.

```
u = ThreeVec (1., 2., 0.)
print u
```

• __cmp__(self, other) : Methode zum Vergleichen, soll -1, 0, 1 zurückgeben wenn self < other, self == other, self > other ist. Methode wird z.B. von list.sort() gerufen, wenn also Objekte in einer Liste sortiert werden.

2.11 Aufgaben

1. Vektor-Klasse

Entwerfen Sie ausgehend von dem Beispiel die ThreeVec Klasse.

Führen Sie zusätzliche *sinnvolle* Methoden ein, z.B. Länge eines Vektors, Winkel zwischen zwei Vektoren, Skalarprodukt, Vektorprodukt, Ausgabe, Vergleich.

Anschliessend sollte man diese Vektoren so benutzen können:

```
from ThreeVec import ThreeVec
                                                                                                    1
u = ThreeVec(1., 0.5, 2.)
                                                                                                    2
v = ThreeVec(1., 2.5, -1.)
                                                                                                    3
W = U + V
t = u - v
                                                                                                    5
t = t * 2.
                                                                                                    6
print "Vector w = ", w
print "Vector t = ", t
                                                                                                    8
r = u.CrossProduct(v)
                                                                                                    9
x = w.ScalarProduct(v)
                                                                                                    10
angle = w.Angle(u)
                                                                                                    11
```

#

(Ausgearbeitetes Beispiel: py, html)

2. Statistik

Die Klasse StatCalc.py. implementiert einige grundlegende Statistikfunktionen, wie Mittelwert, Standardabweichung, ...

- (a) Legen Sie ein Objekt an stat = StatCalc() und füllen in einer Schleife Zufallszahlen stat.enter(random-number) und bestimmen Mittelwert und Standardabweichung.

 (Zufallszahlen in Python über import random. Funktion random.gauss(0.,1.) liefert normal-verteilte Zufallszahlen, random.random() gleich-verteilte zwischen 0 und 1).
- (b) Erweitern Sie StatCalc.py um Methoden zur Ausgabe von Minimum und Maximum.
- (c) In semester.dat finden Sie die Semesterzahl bis zum Physikdiplom für zufällig ausgewählte Studenten. Die ersten 100 Einträge sind von Studenten der LMU, die restlichen 100 von Studenten der TUM. Lesen Sie die Daten ein und füllen LMU bzw TUM Zahlen jeweils in ein StatCalc Objekt. Sind die Mittelwerte im Rahmen der Schwankungen konsistent?
- (d) Überlegen Sie wie man das Problem aus (c) (mehrere Statistiken parallel führen) in einer prozeduralen Sprache (Fortran, C) angehen könnte, d.h. ohne Klassen und Objekte, nur mit Arrays und Funktionen.

3. Vererbung

Leiten Sie die Lorentz-Vektor Klasse (Vierer-Vektor = $(E, p_x, p_y, p_z) = (E, \vec{p})$) von der Dreier-Vektor Klasse ab.

Lorentz-Vektoren sollten als zusätzliche Methoden die Masse berechnen können:

$$M = \sqrt{E^2 - \vec{p}^2}$$

sowie die invariante Masse zweier Lorentzvektoren:

$$M_{inv} = \sqrt{(E_1 + E_2)^2 - (\vec{p_1} + \vec{p_2})^2}$$

Benutzung:

```
a = LorentzVector(45.0002,0.,0.,45.0)
b = LorentzVector(45.0002,31.8198,0.,31.8198)

print "Angle = " , a.Angle(b)

print "Mass a = " , a.Mass()

print "Mass b = " , b.Mass()

print "Mass a+b = " , b.InvMass(a)

...
7
```

(Ausgearbeitetes Beispiel: py, html)

4. Standard-Methoden

Implementieren Sie die Standard Methoden für die ThreeVec-Klasse, d.h. __str__(self) und __cmp__(self, other). Testen SIe es indem Sie eine größere Anzahl von ThreeVectors erzeugen, diese in eine list packen und anschliessend sortieren und ausgeben.

```
from ThreeVec import ThreeVec
import random # random numbers
                                                                                                            2
tvc = [] # empty list
                                                                                                            3
for i in range(100):
    # create random ThreeVec
                                                                                                            5
    u = ThreeVec(random.gauss(0,1), random.gauss(0,1), random.gauss(0,1))
    tvc.append(u) # store in list
                                                                                                            7
tvc.sort() # sort ThreeVec-list
                                                                                                            8
for tv in tvc:
        print tv.Length(), tv # output length and Threevec (via __str__())
                                                                                                                10
```

(Ausgearbeitetes Beispiel: py, html)

5. Vererbung und Polymorphismus 1:

Übernommen von http://www.lrz-muenchen.de/ebner/C++/Uebung/aufgaben_004.html

Das source file Particles.py (src, html) enthält ein Grundgerüst zu einer allgemeinen Basisklasse *Particle* und davon abgeleiteter Klassen.

- (a) Vervollständigen Sie die deklarierten __init__ Funktionen jeder Klasse.
- (b) Erstellen Sie eine Member-Funktion

```
move (dx, dy, dz),
```

die ein Particle um die angegebenen Werte in den drei Koordinaten verschiebt (also x+dx, y+dy, z+dz).

Hinweis: Überlegen Sie sich, wo diese Funktion überall deklariert/definiert werden muss, um möglichst wenig Arbeit zu haben. Zum Test löschen Sie die Kommentarzeichen in Schleife 1 in main().

6. Mondlandung

Ein Spieleklassiker ist die Mondlandung:

- Raumfähre wird von Mond angezogen
- Mit Gegen-Schub kann man Fall kontrollieren, allerdings sind Treibstoffvorräte begrenzt
- Ziel ist möglichst weiche Landung auf Mond.

Erstellen Sie eine Python Klasse für Mondfähre, welche Datenelemente, welche Methoden werden benötigt?

Lösungsbeispiel nach Buch Coding for Fun mit C++ bzw Python mondlandung.py.

Modifizieren Sie das Programm, z.B. zufällige Starthöhe, zufällige Variation des Schubfaktors, etc.

3 Python Standard–Bibliotheken und Python für Wissenschaftler

- Exception handling
- Mehr zu Python Container
- Dokumentation und Introspection
- Numpy
- Scipy
- Matplotlib

3.1 Exceptions

Wahrscheinlich hat jeder schon mal *exceptions* gesehen:

```
import sys
print "Hallo ", sys.argv[1]
2
```

Wenn man das ohne Argument startet

```
bekommt man
Traceback (most recent call last):
File "Hello2.py", line 2, in ?
print "Hallo ", sys.argv[1]
IndexError: list index out of range
```

weil man versucht auf argv[1] zuzugreifen, das aber nicht existiert, wenn man keine weiteren Argumente beim Aufruf übergibt. ist.

Zwei Arten das zu vermeiden:

Die klassische mittels control-statements:

```
import sys
if len(sys.argv) > 1:
    print "Hallo ", sys.argv[1]

else:
    print "Hallo ", "wer auch immer da hockt"

#
6
```

Dadurch wird verhindert dass Exception auftritt.

Und die moderne via try-except

```
import sys
try:
    print "Hallo ", sys.argv[1]

except:
    print "wer auch immer da hockt"
    # Programm bricht nicht ab!

print "\n Und weiter geht's . . . "

#

8
```

Das fängt die Exception auf innerhalb des except: Blocks.

Wozu das Ganze?

Programme sollen **robust** sein, d.h. sie sollen falsche Eingaben, extreme Datenwerte oder generell unerwartete Situationen vernünftig abfangen und nicht bei jeder Kleinigkeit das ganze Programm abbrechen.

Die klassische Methode mit if Abfragen hat eine Reihe von Nachteilen

- u.U. viele Abfragen nötig ⇒ unleserliche Programme
- schwer alle Möglichkeiten abzudecken
- check kann nicht erzwungen werden, z.B. in C
 int fd = open ("file.dat", 0) ist ein return Wert (fd = -1) Zeichen für Probleme beim Öffnen des files, aber das muss nicht behandelt, sondern kann einfach ignoriert werden.

Exceptions bieten elegante Lösung, insbesondere können Sie nicht einfach ignoriert werden.

Exceptions sind in Python als Klassen definiert und hierarchisch aufgebaut. Hier die wichtigsten, ausgehend von der Basisklasse **Exception**:

```
Exception
 +-- StandardError
      +-- KeyboardInterrupt
      +-- ImportError
      +-- EnvironmentError
           +-- IOError
      +-- EOFError
      +-- RuntimeError
      +-- AttributeError
      +-- TypeError
      +-- AssertionError
      +-- LookupError
           +-- IndexError
           +-- KeyError
      +-- ArithmeticError
           +-- OverflowError
           +-- ZeroDivisionError
```

```
| +-- FloatingPointError
| +-- ValueError
| +-- UnicodeError
| +-- UnicodeEncodeError
| +-- UnicodeDecodeError
| +-- UnicodeTranslateError
| +-- ReferenceError
| +-- SystemError
| +-- MemoryError
```

Verschiedene Optionen mit Exceptions umzugehen

Einfach ignorieren, dann Abbruch des Programms wenn Exception auftritt.

Oder man fängt sie mit try-except ab:

Generisch jede Exception

```
#M=[[0.]*2]*1

try:

    determinant = M[0][0]*M[1][1] - M[0][1]*M[1][0]

except Exception, x:

    print "Troubles: ", x.._class_..._name__ , ':', x

#

6

7
```

Oder spezifisch die einzelnen Möglichkeiten mit mehreren except statements

```
M=[[0.]*2]*1
try:
    determinant = M[0][0]*M[1][1] - M[0][1]*M[1][0]

except IndexError, x:
    print "M is the wrong size to have a determinant.", x

except NameError, x:
    print "Programming error! M doesn't exist: ", x

#
```

Ablauf:

- Keine Exception, alles ok, dann wird nur try: Block durchlaufen
- Exception tritt auf:
 - except Exception-(sub)class für diese Exception vorhanden, dann wird dieser except Block ausgeführt.

Das übergebene Exception Objekt enthält weitere Informationen.

Anschliessend läuft das Programm weiter.

- kein entsprechendes except vorhanden:
 - ⇒ Abbruch des Programms

Selber Exceptions auslösen

Man kann selbst Exceptions auszulösen, mit

raise SomeExceptionClass

```
import math
def root( A, B, C):
                                                                                                    2
   """ Returns the two roots of
                                                                                                    3
     the quadratic equation A*x*x + B*x + C = 0.
      (Throws an exception if A == 0 or B*B-4*A*C < 0.)"""
                                                                                                    5
   if (A == 0):
                                                                                                    6
       raise ValueError("A can't be zero.")
                                                                                                    7
   else:
                                                                                                    8
       disc = B*B - 4*A*C
                                                                                                    9
       if (disc < 0):
                                                                                                    10
           raise ArithmeticError("Discriminant < zero.")</pre>
                                                                                                    11
       else:
                                                                                                    12
           return ( (-B - math.sqrt(disc)) / (2*A), (-B + math.sqrt(disc)) / (2*A) )
                                                                                                    13
#
                                                                                                    14
print root( 1., 5., -3.) # ok
                                                                                                    15
root( 0., 2., 1.) # causes ValueError exception
                                                                                                    16
```

root(3., 2., 15.) # causes ArithmeticError exception

17

Insgesamt ermöglichen Exceptions eine Funktionalität, die allein mit return errnum und if Abfragen nicht zu erreichen wäre:

- Entwickler einer Klasse/Methode kann entscheiden was ein fataler Fehler ist und eine entsprechende Exception auslösen (oder sogar selbst eigene Exceptions definieren und verwenden ⇒ Literatur)
- Es ist dem **Anwender** der Klasse/Methode überlassen, es mit **try–except** abzufangen oder einen Programmabruch in Kauf zu nehmen.

3.2 Python–Dictionaries

Neben **list** und **tuple** gibt es einen weitere wichtigen Container, das **dict**. (Heisst in C++/JAVA map, in Perl associative array)

Bei *list, tuple* sind die einzlnen Elemente in einer festen Reihenfolge geordnet, der Zugriff läuft meist über eine Index-Nummer, d.h. die numerische Position ist mit dem Objekt assoziert.

Bei dict dagegen werden Paare von Werten gespeichert, key und value.

Zugriff auf die Elemente erfolgt über den **key**, ähnlich wie mit dem numerischen Index bei *array, list, tuple*, deshalb auch die Bezeichnung assoziativer Array.

Beispiel Wörterbuch:

```
#
engdeut={} # create empty dict
engdeut["hello"] = "Hallo"
engdeut["world"] = "Welt"
engdeut["computer"] = "Rechner"
engdeut["physics"] = "Physik"
engdeut["physicist"] = "Physiker"
engdeut["physician"] = "Arzt"
```

Verwendung:

• Initialisierung: Leeres dict anlegen

```
D = \{\}
```

• Elemente einfügen mit

```
D[key] = value
```

key und value können im Prinzip beliebige Datentypen sein, also sowohl die Python–Standardtypen als auch eigene Klassen. Für key gibt es eine Einschränkung: die Klasse muss eine sogennante *hash* Methode bereitstellen (implizit alle Python Standard–Datentypen und Sequences).

• Lese–Zugriff analog: Direkt mit Angabe eines *keys* als *array-index*, z.B. engdeut ["physics"]. Oder sequentiell durchlaufen mit Iteratoren:

```
#
                                                                                                                 1
                                                                                                                 2
print len(engdeut) # Laenge = 6
                                                                                                                 3
#
print engdeut.keys() # list der keys ['physician', 'physicist', ...]
                                                                                                                 5
#
                                                                                                                  6
for key in engdeut.keys(): # iterate over keys
                                                                                                                 7
    print engdeut[key]
                                                                                                                 8
#
                                                                                                                 9
for (e,d) in engdeut.items(): # iterate over key/value pairs
                                                                                                                 10
    print e, d
                                                                                                                 11
                                                                                                                      12
```

Ein dict ist eine Art Liste von Paaren. Diese Liste ist sortiert nach dem key. Deshalb:

• Jeder *key* kann nur einmal vorkommen. Bei erneuter Zuweisung wird existierender Wert überschrieben:

```
engdeut["computer"] = "Gombuder" # fraenkische Version
```

• Zugriff relativ effizient über sog. *hash* Algorithmen, dennoch langsamer und umständlicher als normale tuple/list über numerischen Index.

Test ob dict Element existiert

Lese-Zugriff auf dict Element (dwort = engdeut ["music"]) geht nur, wenn Element schon angelegt ist, andernfalls wird Exception ausgelöst.

Zwei Möglichkeiten damit umzugehen:

Explizit testen mit has_key() dict Methode, z.B.

```
engdeut.has_key("music") # False
engdeut.has_key("physics") # True
```

oder einfach mal probieren mit try-except:

```
try:
    dwort = engdeut["music"]
except KeyError:
    fcolr = "No translation for ", "music"
```

3.3 Dokumentation und Introspection

In Python ausgefeilte Mechanismen zur Dokumentation von Funktionen und Klassen sowie zur Abfrage von Informationen.

• **Docstring**: Es ist Python Konvention in die erste Zeile nach Definition einer Klasse oder Funktion in einem Textstring eine Kurzbeschreibung der Klasse/Funktion zu machen. Diese Beschreibung ist mehr als ein Kommentar, sie kann zusammen mit der Klasse/Funktion zur Laufzeit abgefragt werden.

```
class ThreeVec:
    "Class for 3 Vector and operations"

def Add( self, tv ): # add two 3 vecs
    "Add two ThreeVecs"

newvec = ThreeVec( self.x+tv.x, self.y+tv.y, self.z+tv.z)
    return newvec

6
```

Entsprechende Info zur Laufzeit abfragbar:

```
print ThreeVec.__doc__ oder
print ThreeVec.Add.__doc__
```

• oder sehr komfortabel interaktiv mit help (ThreeVec)

```
Help on class ThreeVec in module ThreeVec:
class ThreeVec
    Class for 3 Vector and operations
    Methods defined here:
    Add(self, tv)
    Length (self)
    SkalProd(self, tv)
    add (self, tv)
         method for overloading the + operator
    \underline{\phantom{a}} cmp\underline{\phantom{a}} (self, tv)
    \_init\_(self, x=0.0, y=0.0, z=0.0)
```

```
___str__(self)
...

• oder Basis-Info zu Methoden: dir(ThreeVec)
['Add', 'Length', 'SkalProd', '__add__', '__cmp__', '__doc__',
```

• genauso für Objekte, Info zu Methoden und Variablen:

'__init__', '__module__', '__str__']

```
v = ThreeVec(4.,5.,7.); dir(v)
['Add', 'Length', 'SkalProd', '__add__', '__cmp__', '__doc__',
'__init__', '__module__', '__str__', 'x', 'y', 'z']
```

• und schliesslich noch Abfrage von Typ über type (Object) oder direkt

```
>>> a=5.2
>>> b=[1,6,"abc"]
>>> c="Hello"
>>> type(a)
<type 'float'>
>>> type(b)
```

Object.__class__._name__

```
<type 'list'>
>>> type(c)
<type 'str'>
>>> type(v)
<type 'instance'>
>>> c.__class__.__name__
'str'
>>> b.__class__.__name__
'list'
>>> v.__class__.__name__
'ThreeVec'
```

3.4 Umlaute

Umlaute sowohl im Quelltext als auch in der Benutzereingabe und Ausgabe müssen in Python speziell behandelt werden. Untenstehendes Beispiel basierend auf den folgenden Wiki-Seiten demonstiert kurz, wie man Umlaute behandeln kann (umlaut.py):

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: iso-8859-1 -*-

import sys
# Encoding der Standardausgabe herausfinden
stdout_encoding = sys.stdout.encoding or sys.getfilesystemencoding()

temp = "Mnchen"
utemp = u"Mnchen"

print temp.decode("iso-8859-1").encode(stdout_encoding)

print utemp.encode(stdout_encoding)
```

3.5 Numpy, Scipy und Matplotlib

Es gibt zahlreiche wissenschaftliche Programme, Pakete und Biliotheken, die in verschiedenen Sprachen geschrieben worden sind: Mathematica, Maple, Matlab, Root, Numerical Recipes, etc. Für

große wissenschaftliche Anwendungen sind oft Ausführgeschwindigkeit wichtig. Es existieren zahlreiche externe Biliotheken auf die mit einer Python API zugegriffen werden kann. Im Folgenden werden folgende Pakete besprochen:

- numpy
- scipy
- matplotlib

Als kurzes einführendes Beispiel soll ein kleines physikalisches Problem besprochen werden: Zwei Massen sind über Federn gekoppelt. Die Bewegungsgleichungen dieses Systems sollen gelöst und der Zeitverlauf der Feder-Auslenkungen graphisch dargestellt werden.

Die Lösung unter der Benutzung von scipy und matplotlib ist in folgendem Wiki demonstiert: http://www.scipy.org/Cookbook/CoupledSpringMassSystem (Source code: two_springs.py, two_springs_solver.py, two_springs_plot.py)

3.6 NumPy

In der Praxis oft sehr rechenintensive numerische Operationen nötig:

- große Gleichungssysteme
- Matrizen
- Numerische Integration
- Fourier-Transformation
- Statistische Auswertungen und Berechnungen

Oft gibt es sehr ausführliche numerische Bibliotheken geschrieben in Fortran oder C/C++ (z.B. Numerical Recipes). numpy bietet Schnittstellen zu BLAS (Basic Linear Algebra Library) und ATLAS (Automatically Tuned Linear Algebra Software).

numpy bietet einen sehr effizienten Array-Datentyp ndarray mit Matrix-Aussehen und Funktionen aus der BLAS und ATLAS Bibliothek. Auf homogene Sammlung von float- und int-Werten wird hinter den Kulissen mit C- oder Fortran verwaltet.

Folgendes Programm benötigt 15-25s

```
a = range(10000000)
b = range(10000000)
c = []
for i in range(len(a)):
    c.append(a[i] + b[i])

Mit numpy ca. 0.5s

import numpy as np
a = np.arange(10000000)
b = np.arange(10000000)
c = a + b
```

```
z.B. Module von numpy: (Interessant: core, fft, linalq, lib)
['__config__', '_import_tools', 'add_newdocs', 'char', 'core',
 'ctypeslib', 'emath', 'fft', 'lib', 'linalg', 'ma', 'math',
 'random', 'rec', 'testing', 'version']
z.B. Funktionen in numpy.linalg:
['cholesky', 'cond', 'det', 'eig', 'eigh', 'eigvals', 'eigvalsh',
 'inv', 'lstsg', 'matrix power', 'norm', 'pinv', 'gr', 'solve',
 'svd', 'tensorinv', 'tensorsolve']
Hilfetext zu: help(numpy.linalg.gr)
Help on function gr in module numpy.linalg.linalg:
gr(a, mode='full')
    Compute QR decomposition of a matrix.
    Calculate the decomposition :math: 'A = Q R' where Q is orthonormal
    and R upper triangular.
```

Der Datentyp numpy.ndarray, den man mit numpy.array erhält, ist ein homogener Datentyp, also eine Liste von int oder float mit Struktur. ufuncs (Universalfunktionen) operieren auf jedes Element und sind durch Fortran oder C-Implementierung sehr schnell.

```
In [23]: from numpy import *
In [24]: pprint.pprint(typeDict)
{0: <type 'numpy.bool_'>,
 'u1': <type 'numpy.uint8'>,
 'u2': <type 'numpy.uint16'>,
 'u4': <type 'numpy.uint32'>,
 'u8': <type 'numpy.uint64'>,
 'ubyte': <type 'numpy.uint8'>,
 'uint': <type 'numpy.uint32'>,
 'uint0': <type 'numpy.uint32'>,
In [26]: a=array([[1,2,3,4],[4,5,6,7],[9,10,11,12]])
In [27]: a
Out [27]:
array([[1, 2, 3, 4],
       [4, 5, 6, 7],
       [ 9, 10, 11, 12]])
```

```
In [28]: print a
----> print(a)
[[1 2 3 4]
[4567]
 [ 9 10 11 12]]
In [29]: type(a)
Out[29]: <type 'numpy.ndarray'>
In [32]: [m \text{ for } m \text{ in } dir(a) \text{ if } not \text{ m.startswith}('___')]
In [35]: a.shape
Out [35]: (3, 4)
In [36]: a.reshape(4,3)
Out[36]:
array([[ 1, 2, 3],
     [ 4, 4, 5],
       [ 6, 7, 9],
       [10, 11, 12]])
In [37]: a.reshape (2,6)
Out [37]:
array([[ 1, 2, 3, 4, 4, 5],
       [ 6, 7, 9, 10, 11, 12]])
```

```
In [39]: a[2,3]
Out[39]: 12
In [40]: a.T
Out [40]:
array([[ 1, 4, 9],
     [ 2, 5, 10],
      [ 3, 6, 11],
      [ 4, 7, 12]])
In [41]: -1*a
Out [41]:
array([[-1, -2, -3, -4],
      [ -4, -5, -6, -7],
       [-9, -10, -11, -12]]
In [42]: a+a
Out [42]:
array([[2, 4, 6, 8],
       [ 8, 10, 12, 14],
       [18, 20, 22, 24]])
In [43]: a-a
Out [43]:
```

```
array([[0, 0, 0, 0],
       [0, 0, 0, 0],
       [0, 0, 0, 0]
In [44]: a*a
Out [44]:
array([[ 1, 4, 9, 16],
      [ 16, 25, 36, 49],
       [ 81, 100, 121, 144]])
In [45]: dot(a,a)
ValueError
                                          Traceback (most recent call last)
/tmp/examples/scipy/<ipython console> in <module>()
ValueError: objects are not aligned
In [47]: dot(a,a.reshape(4,3))
Out [47]:
array([[ 67, 75, 88],
```

Daten können gespeichert werden:

```
In [51]: a=array(arange(1,10).reshape(3,3))
In [52]: a
Out [52]:
array([[1, 2, 3],
       [4, 5, 6],
       [7, 8, 9]])
In [53]: a.tofile('a.data')
In [56]: !hexdump -C a.data
                                 03 00 00 00 04 00 00 00 | ........
00000000 01 00 00 00 02 00 00 00
                                                           1.....
00000010 05 00 00 00 06 00 00 00
                                 07 00 00 00 08 00 00 00
00000020
         09 00 00 00
                                                           | . . . . |
00000024
In [59]: b=fromfile('a.data', dtype=int)
In [60]: b
Out[60]: array([1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])
```

Histogramme:

```
In [5]: x=array([0.2, 6.4, 3.0, 1.6, 0.9, 2.3, 1.6, 5.7, 8.5, 4.0, 12.8])
In [6]: bins=array([0.0,1.0,2.5,4.0,10.0])
In [8]: N,bins=histogram(x,bins)
In [9]: N,bins
Out[9]: (array([2, 3, 1, 4]), array([ 0. ,  1. ,  2.5,  4. , 10. ]))
In [10]: N,bins=histogram(x,5,range=(0.0,10.0))
In [11]: N,bins
Out[11]: (array([4, 2, 2, 1, 1]), array([ 0.,  2.,  4.,  6.,  8., 10.]))
In [12]: N,bins=histogram(x,5,range=(0.0,10.0),normed=True)
In [13]: N,bins
Out[13]: (array([ 0.2 ,  0.1 ,  0.1 ,  0.05,  0.05]), array([ 0.,  2.,  4.,  6.,  8., 10.]))
```

Digitalisieren - zu welchem bin gehört jeder Wert x:

```
In [14]: x=array([0.2,6.4,3.0,1.6])
In [15]: bins=array([0.0,1.0,2.5,4.0,10.0])
In [16]: d=digitize(x,bins)
In [17]: d
Out[17]: array([1, 4, 3, 2])
```

Statistische Berechnungen - Korrelationsmatrix, mit T (Temperatur), P (Druck) und ρ (Dichte)

```
In [20]: T=array([1.3, 4.5, 2.8, 3.9])
In [21]: P=array([2.7, 8.7, 4.7, 8.2])
In [22]: print corrcoef([T,P])
----> print(corrcoef([T,P]))
[[ 1. 0.98062258]
 [ 0.98062258 1.
In [23]: rho=array([8.5,5.2,6.9,6.5])
In [24]: data=column_stack([T,P,rho])
In [25]: data
Out [25]:
array([[ 1.3, 2.7, 8.5],
      [4.5, 8.7, 5.2],
      [2.8, 4.7, 6.9],
      [3.9, 8.2, 6.5]
```

Diagonalwerte einer Matrize:

```
In [27]: a=arange(12).reshape(3,4)
In [28]: a
Out [28]:
array([[0, 1, 2, 3],
       [4, 5, 6, 7],
       [8, 9, 10, 11]])
In [29]: a.diagonal()
Out[29]: array([ 0, 5, 10])
In [30]: a.diagonal(offset=1)
Out[30]: array([ 1, 6, 11])
In [31]: a.diagonal(offset=-1)
Out [31]: array([4, 9])
In [32]: diagonal(a)
Out [32]: array([0, 5, 10])
Standardmatrizen:
In [33]: ones(3)
Out[33]: array([ 1., 1., 1.])
In [34]: zeros(3)
```

Gleichungssysteme lösen:

```
In [36]: from numpy.linalg import inv
In [37]: a=array([[3,1,5],[1,0,8],[2,1,4]])
In [38]: a
Out [38]:
array([[3, 1, 5],
       [1, 0, 8],
      [2, 1, 4]])
In [39]: inva=inv(a)
In [40]: inva
Out [40]:
array([[ 1.14285714, -0.14285714, -1.14285714],
       [-1.71428571, -0.28571429, 2.71428571],
       [-0.14285714, 0.14285714, 0.14285714]]
In [41]: dot(a, inva)
Out [41]:
array([[ 1.0000000e+00, 5.55111512e-17, 1.38777878e-16],
       [ 0.0000000e+00, 1.0000000e+00, 0.0000000e+00],
       [-1.11022302e-16, 0.00000000e+00, 1.00000000e+00]]
```

Nullstellen eines Polynom mit roots bestimmen:

```
In [49]: a=array([1,-6,-13,42])
In [50]: roots(a)
Out[50]: array([7., -3., 2.]
```

Fourier-Transformationen numpy.fft - es existieren verschiedene FFT: Standard-FFT, FFTs für reale Arrays, Hiermite-FFTs.

Lineare Algebra: Einzelwertzerlegung: $A = U\sigma V$

```
In [68]: A=array([[1.,3.,5.],[2.,4.,6.]])
In [69]: U, sigma, V=svd(A)
In [70]: print U
----> print(U)
[[-0.61962948 -0.78489445]
[-0.78489445 \quad 0.61962948]
In [71]: print sigma
----> print(sigma)
[ 9.52551809  0.51430058]
In [72]: print V
----> print(V)
[-0.2298477 -0.52474482 -0.81964194]
 [ 0.88346102  0.24078249  -0.40189603]
 [ 0.40824829 -0.81649658  0.40824829]]
In [74]: Sigma = zeros_like(A)
In [75]: n=min(A.shape)
In [76]: Sigma[:n,:n]=diag(sigma)
In [77]: Sigma
```

3.7 Matplotlib (pylab)

Mit matplotlib können professionelle 2D-Graphen aus z.B. scipy und numpy Daten erstellt werden.

Schöne Beispiele gibt es unter: http://www.scipy.org/Cookbook/Matplotlib. matplotlib hat folgende Eigenschaften:

- Interaktive und programmatische Benutzung
- Speichern der erzeugten Graphen in PS, EPS, SVG, PNG
- interaktiver Viewer

Einlesen und Darstellen von Daten

Folgendes Beispiel demonstriert, wie man einfache Daten aus der Datei numbers.dat einliest und in einem Diagramm darstellt:

```
#!/usr/bin/env python
from pylab import *
if __name__ == '__main__':
    # read in data to list
    data = loadtxt('numbers.dat')
    # create x data
    x = range(0, len(data))
    # create empty figure
    figure (1, figsize = (6, 4))
    xlabel('x')
    ylabel('numbers')
    # plot data with data points
```

```
plot(x,data,'.')
title('Content of numbers.dat')
# save figure to PNG file
savefig('numbers.png',dpi=72)
# show canvas
show()
```

Eine einfache Funktion darstellen:

```
#!/usr/bin/env python
11 11 11
Example: simple line plot.
Show how to make and save a simple line plot with labels, title and grid
11 11 11
import numpy
import pylab
t = numpy.arange(0.0, 1.0+0.01, 0.01)
s = numpy.cos(2*2*numpy.pi*t)
pylab.plot(t, s)
pylab.xlabel('time (s)')
pylab.ylabel('voltage (mV)')
pylab.title('About as simple as it gets, folks')
pylab.grid(True)
pylab.savefig('simple_plot')
pylab.show()
```

Ein Histogram mit Fit-Funktion:

```
#!/usr/bin/env python
import numpy as np
import matplotlib.mlab as mlab
import matplotlib.pyplot as plt
mu, sigma = 100, 15
x = mu + sigma * np.random.randn(10000)
# the histogram of the data
n, bins, patches = plt.hist(x, 50, normed=1, facecolor='green', alpha=0.75)
# add a 'best fit' line
y = mlab.normpdf(bins, mu, sigma)
l = plt.plot(bins, y, 'r--', linewidth=1)
plt.xlabel('Smarts')
plt.ylabel('Probability')
plt.title(r'$\mathrm{Histogram\ of\ IQ:}\ \mu=100,\ \sigma=15$')
plt.axis([40, 160, 0, 0.03])
```

```
plt.grid(True)
plt.show()
```

3.8 SciPy 192

3.8 SciPy

scipy ist eine Erweiterung von numpy mit vielen Bibilotheken für numerische Berechnungen, wie z.B. Optimierung, Numerische Integration, Statistik usw.

Zahlreiche Beispiele gibt es z.B.: http://www.scipy.org/Cookbook/

Lineare Regression:

```
#!/usr/bin/env python
from scipy import linspace, polyval, polyfit, sqrt, stats, randn
from pylab import plot, title, show , legend
#Linear regression example
# This is a very simple example of using two scipy tools
# for linear regression, polyfit and stats.linregress
#Sample data creation
#number of points
n = 50
t=linspace(-5,5,n)
#parameters
a=0.8; b=-4
x=polyval([a,b],t)
#add some noise
xn=x+randn(n)
```

```
#Linear regressison -polyfit - polyfit can be used other orders polys
(ar, br) = polyfit(t, xn, 1)
xr=polyval([ar,br],t)
#compute the mean square error
err=sqrt(sum((xr-xn)**2)/n)
print('Linear regression using polyfit')
print ('parameters: a=%.2f b=%.2f \nregression: a=%.2f b=%.2f, ms error= %.3f' % (a
#matplotlib ploting
title('Linear Regression Example')
plot(t,x,'q.--')
plot(t,xn,'k.')
plot(t,xr,'r.-')
legend(['original','plus noise', 'regression'])
show()
#Linear regression using stats.linregress
(a_s,b_s,r,tt,stderr)=stats.linregress(t,xn)
```

```
print('Linear regression using stats.linregress')
print('parameters: a=%.2f b=%.2f \nregression: a=%.2f b=%.2f, std error= %.3f' % (
```

Least Square Fit:

```
#/usr/bin/env python
import numpy
import pylab
from scipy.optimize import leastsq
# Generate data
from numpy import random , histogram, arange, sqrt, exp, nonzero
n = 1000; isi = random.exponential(0.1 , size=n)
db = 0.01; bins = arange(0 ,1.0, db)
h = histogram(isi, bins)[0]
p = h.astype(float)/n/db
# Function to be fit
# x - independent variable
# p - tuple of parameters
fitfunc = lambda p, x : exp (-x/p[0])/p[0]
# Standard form , here err is absolute error
errfunc = lambda p, x , y , err : (y - fitfunc(p, x)) / err
```

```
# Initial values for fit parameters
pinit = numpy.array([ 0.2 ])
# Hist count less than 4 has poor estimate of the weight
# don't use in the fitting process
idx = numpy.nonzero(h>4)
out=leastsq(errfunc,pinit,args=(bins[idx]+0.01/2,p[idx],p[idx]/sqrt(h[idx])),full_
11=' data'
pylab.errorbar(bins[idx],p[idx],yerr=p[idx]/sqrt(h[idx]),fmt='ko',label=11)
12='fit'
pylab.plot(bins, fitfunc((out[0],),bins),'r-',lw=2,label=12)
pylab.legend()
pylab.show()
```

Statistik: T-Test:

```
import scipy.stats as stats
a=numpy.random.normal(loc=10.,scale=5.0,size=1000)
b=numpy.random.normal(loc=10.,scale=5.0,size=1000)
c=numpy.random.normal(loc=20.,scale=5.0,size=1000)
print stats.ttest_rel(a,b)
# (0.16147132381998511, 0.87175484433810602)
print stats.ttest_rel(a,c)
# (-43.428791175286875, 0.0)
```

Das Inverse einer Martix:

```
array([[-1.48, 0.36, 0.88], [ 0.56, 0.08, -0.36], [ 0.16, -0.12, 0.04]])
```

Gleichungssysteme lösen:

```
In [15]: a=numpy.mat('[1 3 5; 2 5 1; 2 3 8]')
In [16]: b=numpy.mat('[10;8;3]')
In [17]: print linalg.solve(a ,b)
-----> print(linalg.solve(a ,b))
[[-9.28]
  [ 5.16]
  [ 0.76]]
```

Fouriertransformierte eines Kastenpotentials

```
#!/usr/bin/env python
import pylab
import scipy
import numpy
from numpy import *
from pylab import *
```

```
from scipy import *
x = numpy.arange(-100, 100, 0.01)
y = numpy.zeros_like(x)
# A box of height 1
y [(x > -0.5) & (x < 0.5)] = 1.0
clf()
subplot(2, 1, 1)
pylab.plot(x,y)
pylab.axis([-1,1,-0.5,2])
z=numpy.fft.fft(y)
f=numpy.fft.fftfreq(len(y),d=0.01)
subplot (2, 1, 2)
pylab.plot(f, numpy.abs(z))
pylab.axis([-5, 5, 0, 100])
pylab.show()
```

3.9 Aufgaben

1. Quadratische Gleichung

Erstellen Sie ein Programm zur Lösung der quadratischen Gleichung

$$Ax^2 + Bx + C = 0$$

basierend auf obigem Beispiel root

- Die Koeffizienten A, B, C von standard-input lesen
- try-except im rufenden Programm um auf die Exceptions sinnvoll zu reagieren.

2. Idiotensichere Fakultät

Modifizieren Sie ihre Funktion zur Berechnung der Fakultät für *float Zahlen* so, dass kein Uberlauf mehr auftreten kann, d.h. lösen Sie eine Exception aus

```
raise ArithmeticError("Number too large")
```

wenn der Wert zu gross wird.

Hinweis: Maximaler Float Wert auf Linux ist 1.7976931348623157E308. Jetzt muss man nur noch überlegen wie man's programmiert ohne dass zunächst die Grenze überschritten wird.

3. Vorwahl-Dict

In der Datei vorwahl.txt stehen alle Vorwahlen und zugehörige Orte in Deutschland. Lesen Sie diese ein, speichern Sie's in einer dict und machen damit ein kleines Programm, das zu einer gegebenen Vorwahl den Ort ausgibt, und umgekehrt.

4. Genom Projekt

Eine DNA Sequenz kann als Array von *N Char* Werten dargestellt werden (N sehr gross). Das Problem ist, wiederkehrende Strukturen zu finden, d.h. Patterns der Länge M, wobei M fix und klein ist. In der Datei genom.txt finden Sie einen Abschnitt einer solchen DNA Sequenz. Überlegen Sie Algorithmen um signifikant häufige Patterns für vorgegebene Länge M zu finden.

5. Poker simulieren

Mit *python-lists* und *random.shuffle(list-name)* kann man leicht Spiele simulieren, und damit die Wahrscheinlichkeit für bestimmte Kombinationen abschätzen (ohne sich in den Feinheiten der Kombinatorik zu verirren). Simulieren Sie z.B. das Pokerspiel, was ist die Wahrscheinlichkeit ein Full-House auf die Hand zu bekommen?

Lösungsbeispiel: source

6. Berechnung von PI

Erzeugen Sie mit dem Zufallszahlen Modul numpy.random.random 1 Millionen Zufalls-Punkte mit x,y-Koordinaten zwischen 0 und 1. Wie groß ist der Anteil der Punkte innerhalb eines Radius von 1 vom Ursprung (0,0) ? Wie groß ist der Fehler zum zu erwartenden Ergebnis ?

Lösung: drop.py pidemo.py

7. Matplotlib

Berechnen Sie die Fouriertransformierte einer Gauss- und einer Delta-Funktions-Verteilung und zeichnen Sie die entsprechenden Verteilungen.

Lösung: fft_aufg.py

4 List comprehensions, Funktionsaufrufe, Reguläre Ausdrücke

4.1 List comprehensions

Aus einer Liste möchte man oft Elemente auswählen, die ein bestimmtes Kriterium erfüllen. Oder es soll eine Liste in eine andere Liste transformiert werden. Man könnte auch eine Kombination von Filtern und Transformieren anwenden. Hierzu stehen einerseits die Funktionen filter und map zu Verfügung. Andererseits kann man sog. list comprehensions verwenden.

- Als Beispiel soll eine Liste [1, 2, 3, 4, 5] dienen.
- Jedes Listenelement soll mit 10 multipliziert werden.
- Nur gerade Elemente sollen ausgewählt werden
- Nur gerade Elemente sollen ausgewählt und mit 10 multipliziert werden.

Zunächst filter und map:

```
>>> liste1 = [ 1, 2, 3, 4, 5 ]
>>> map(lambda x: x*10, liste1)
[10, 20, 30, 40, 50]
>>> filter(lambda x: x % 2 == 0, liste1)
```

```
[2, 4]
>>> map(lambda x: x*10, filter(lambda x: x % 2 == 0, liste1))
[20, 40]
```

Aber man kann auch sog. list comprehensions verwenden:

```
>>> [element*10 for element in liste1]
[10, 20, 30, 40, 50]
>>> [element for element in liste1 if element % 2 == 0]
[2, 4]
>>> [element*10 for element in liste1 if element % 2 == 0]
[20, 40]
```

List comprehensions haben folgenden allgemeine Form:

```
[ expr(element) for element in iterable if pred(element) ]
```

mit expr (element) ein beliebiger Ausdruck abhängig von element, iterable eine beliebige Sequenz und pred (element) eine Funktion, die True oder False liefert und von element abhängig ist.

4.2 Funktionsaufrufe

Eine Funktion in allgemeiner Form sieht folgendermassen aus:

```
def f(param1, param2='dummy', *liste1, **dict1):
   """Eine Funktion die ihre Argumente ausgibt"""
  print "param1: ", param1
  print "param2: ", param2
  print "listel: ", listel
  print "dict1: ", dict1
  try:
       nachname1 = dict1.get('nachname')
       print nachname1
   except:
       pass
   return [param1, param2]
f('hello', 'world', 'mehr', 'Argumente', nachname = 'max', vorname='mueller')
```

Die Ausgabe diese Beispielprogramms sieht dann so aus:

```
param1: hello
param2: world
liste1: ('mehr', 'Argumente')
dict1: {'nachname': 'max', 'vorname': 'mueller'}
max
```

Eine Funktion hat die Parameter:

- param1 ohne ,default'-Wert,
- param2=' dummy' mit einem ,default'-Wert,
- *liste1, die eine unspezifizierte Anzahl von Parametern in einer Liste speichert
- *dict1, die eine unspezifizierte Anzahl von Parmetern mit key,value in einem dictionary abspeichert. Die einzelen Werte können mit z.B. get abgefragt werden.

4.3 Reguläre Ausdrücke

In Strings kann man meist einfache Teil-Strings suchen und evt. ersetzen. Hierzu kann man die Einfachen String-Methoden index, rindex, find, rfind, replace und deb Operator in verwenden.

Mit Hilfe von regulären Ausdrücken kann man in Strings nach komplizierten Mustern suchen und Teile des Strings ersetzen. Eine ausführliche Beschreibung mit Beispielen zu regulären Ausdrücken gibt es unter: Regular Expressions

Da Python Modul re stellt zahlreiche Funktionen zur Verwendung von reguläre Ausdrücken zur Verfügung.

```
re.search im Vergleich zu in:
>>> import re
>>> input = 'Franz jagt im komplett verwahrlosten Taxi quer durch Bayern'
>>> re.search(r'Taxi', input)
<_sre.SRE_Match object at 0x7f9d50536e68>
>>> 'Taxi' in input
True
>>> re.search(r'Bus', input)
>>> 'Bus' in input
```

False

Ein String, der mit r eingeleitet wird, heisst 'roher' String. In diesem müssen keine backslashes entwertet werden, d.h. man gibt in Folgendem Beispiel entweder r'\bTaxi\b' oder '\bTaxi\b' an.

Falls nach einzelnen Wörtern gesucht werden soll, zeigt re.search mit dem Extra Parameter \b seinen Vorteil:

```
>>> input1 = 'Franz jagt im komplett verwahrlosten Taxi quer durch Bayern'
>>> input2 = 'Der Taxibus ist zu spaet'
>>> 'Taxi' in input1, 'Taxi' in input2
(True, True)
>>> re.search(r'\bTaxi\b', input1), re.search(r'\bTaxi\b', input2)
(<_sre.SRE_Match object at 0x7f9d50536ed0>, None)
```

Zum Ersetzen benutzt man re.sub:

```
>>> input1 = 'Franz jagt im komplett verwahrlosten Taxi quer durch Bayern'
>>> output=re.sub(r'Taxi','Bus',input)
>>> output
'Franz jagt im komplett verwahrlosten Bus quer durch Bayern'
```

Mit dem match Objekt kann man auf Teile des String zurückgreifen, die zu regulären Ausdruücken passen. Mit

```
r'(\b\w+\b)\s+\1'
```

lässt sich nach einem doppelt vorkommendem Wort suchen:

```
>>> input = 'Franz jagt im komplett verwahrlosten Taxi quer quer durch Bayern'
>>> mo=re.search(r'(\b\w+\b)\s+\1',input)
>>> mo
<_sre.SRE_Match object at 0x7f9d50555300>
>>> mo.group(0)
'quer quer'
>>> mo.group(1)
'quer'
>>> mo.start()
42.
>>> mo.span()
(42, 51)
>>> input[42: 51]
'quer quer'
```

re.search liefert nur das erste Vorkommen eines Such-Musters. Alle Vorkommen erhält man mit

```
re.findall oder re.finditer.
```

Ein schnelleren Zugriff auf Suchergebnisse vorallem bei grösseren Strings oder dem zeilenweisen Lesen/Suchen durch eine Datei erhält man mit re.compile. Der Such-Begriff wird einmal 'kompiliert' und kann anschliessend wiederverwendet werden.:

```
>>> input3 = 'Franz jagt im komplett verwahrlosten Taxi quer durch Bayern'
>>> input4 = 'Franz jagt im komplett verwahrlosten Taxi quer quer durch Bayern'
>>> regdoub = re.compile(r'(\b\w+\b)\s+\1')
>>> regdoub
<_sre.SRE_Pattern object at 0xb75c71a0>
>>> regdoub.search(input3)
>>> regdoub.search(input4)
<_sre.SRE_Match object at 0xb75999a0>
>>> regdoub.sub(r'\1',input3)
'Franz jagt im komplett verwahrlosten Taxi quer durch Bayern'
>>> regdoub.sub(r'\1',input4)
'Franz jagt im komplett verwahrlosten Taxi quer durch Bayern'
```

Mit dem Python Modul fnmatch kann mit der Unix Dateiname-Suche Konvention in strings gesucht werden. Hierbei werden die von der bash-Kommandozeile bekannten Regeln verwendet:

```
* entspricht allem
```

```
? entpricht einem Buchstaben
[seq] entspricht einem Buchstaben in seq
[!seq] entspricht einem Buchstaben nicht in seq
Folgendes Beispiel zeigt alle Dateinamen im aktuellen Verzeichnis mit der Endung .txt:
import fnmatch
import os

for file in os.listdir('.'):
   if fnmatch.fnmatch(file, '*.txt'):
        print file
```

4.4 Aufgaben

Zufallszahlen erzeugen

Mit Hilfe von list comprehensions erstellen Sie eine Liste von Zufallszahlen, z.B. einen Würfel-Wurf oder zwei-Würfel-Würfe gleichzeitig. Verwenden Sie hierzu random.randrange (1, 7).

Lösung: wuerfel.py

Funktionsparameter

Schreiben Sie eine Funktion, die nur ein Dictionary als Argument-Liste benutzt und werten Sie die Parameter in der Funktion aus.

• Suchen in Strings

Schreiben Sie ein Programm, das einen String und einen Substring als Eingabe nimmt. Der Substring soll im String gesucht werden und die Position und evt. mehrmaliges Vorkommen geprüft werden.

Lösung: stringsearch.py

5 Kurzeinführung in Linux

5.1 Links zu Linux Tutorials

Einige Tutorials zu Linux gibt es z.B. unter:

- SelfLinux
- UNIX Tutorial for Beginners

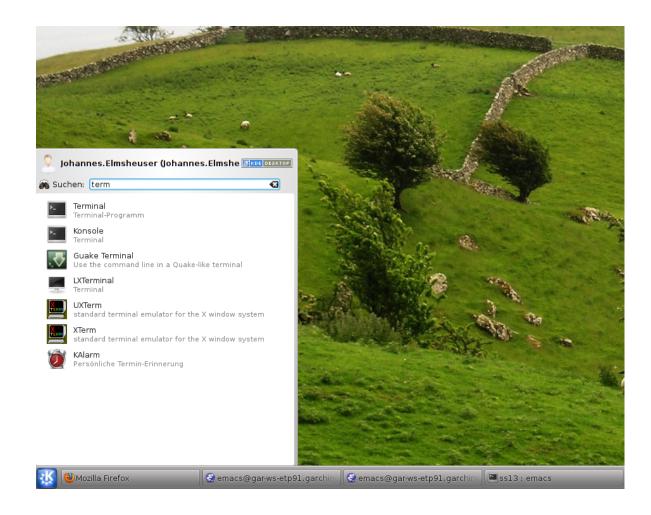
5.2 Die Linux X-Benutzeroberfläche

Die beliebtesten Benutzeroberflächen bzw. Fenstermanager auf Linuxsystemen sind: KDE bzw. GNOME. Diese können auf dem login-screen unter "Menü" → "Session type" zwischen verschiedenen Fenstermanager aussuchen. Wählen Sie entweder "KDE" bzw. "GNOME Classic".

5.3 Terminalfenster starten

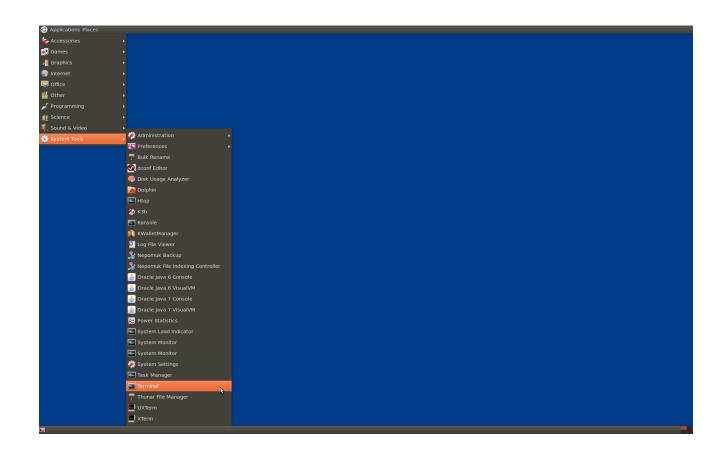
Nachdem Sie eingeloggt sind, starten Sie ein Terminalfenster, mit dem Sie verschiedene Befehle auf der Kommandzeile eingeben können:

• Unter KDE klicken Sie in der rechten unteren Bildschirmecke auf den blauen "K"-Knopf und tippen in das danach erscheinende Suchfeld des Startmenüs: "term". Klicken Sie anschliessend auf den "Konsole" Menüeintrag und ein Terminalprogramm wird gestartet.

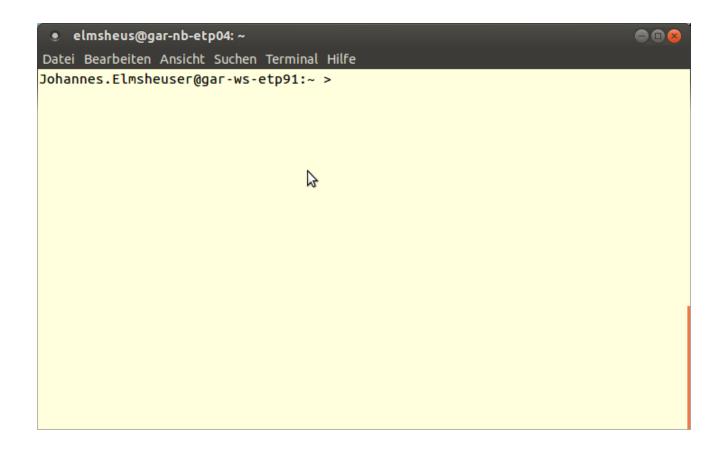


• Unter GNOME classic klicken Sie in der oberen rechten Bildschirmecke auf "Applications" und

anschliessend im "System Tools"-Menü auf den Eintrag "Terminal":



• Es öffnet sich ein Terminalfenster, in dem Sie Befehle auf der sog. bash Kommandzeile eingeben und ausführen können:



5.4 Befehle im Terminalfenster

Auf der bash Kommandozeile können Befehle eingegeben werden, um Programme zu starten oder z.B. mit dem Dateisystem zu interagieren.

Einfache Befehle:

• Das aktuelle Arbeitsverzeichnis anzeigen:

```
pwd
```

Den Inhalt des aktuellen Verzeichnis anzeigen:

Is

• Den Inhalt des aktuellen Verzeichnis als Liste anzeigen:

Is -I

• Den Inhalt des aktuellen Verzeichnis als Liste mit versteckten Dateien anzeigen:

```
Is -al
```

• Den Inhalt des aktuellen Verzeichnis als Liste sortiert nach Änderungdatum anzeigen:

```
Is -rtl
```

• In das Homeverzeichnis wechseln:

cd

• Ein neues Verzeichnis anlegen:

mkdir mycode

• In das neue Verzeichnis wechseln:

cd mycode

Weitere Befehle:

• Eine leere Datei anlegen:

touch test.txt

• Eine Datei löschen:

rm test.txt

• Eine Datei aus dem WWW herunterladen:

wget http://www.etp.physik.uni-muenchen.de/kurs/Computing/ckurs/source/numbers.dat

• Den Inhalt einer Datei vollständig anzeigen:

cat numbers.dat

• Den Inhalt einer Datei interaktiv anzeigen (Verlassen mit "q", Scrollen mit Pfeiltasten):

less numbers.dat

• Die Anzahl der Zeilen einer Datei anzeigen:

wc -l numbers.dat

• Ein leeres Verzeichnis löschen:

```
rmdir mytestdir
```

• Das aktuelle Verzeichnis kann mit "." angesprochen werden:

Is.

• In das übergeordnete Verzeichnis kann mit ".." angesprochen werden:

Is ...

In das übergeordnete Verzeichnis wechseln:

cd...

• Eine Datei von einem Verzeichnis in das aktuelle Verzeichnis kopieren:

cp /path/to/somefile.

• Eine Datei "somefile" vom Verzeichnis "/path/from" in das Verzeichnis "/path/to" kopieren:

cp /path/from/somefile /path/to/

Programme starten:

• Ein Programm starten Sie einfach durch Eingabe des Befehls auf der Kommandozeile. Dadurch wird die Kommandozeile für weitere Eingaben blockiert. Starten Sie deshalb saemtliche interaktiven Programme wie Editoren etc. immer mit einem zusätzlichem & am Ende der Befehlszeile, um die Kommandozeile wieder für neue Befehle freizugeben. Starten Sie den KDE Editor z.B. mit:

kate &

Befehlseingabe:

- Auf vorher eingegebene Befehle kann mit der Pfeil-nach-oben bzw. Pfeil-nach-unten Taste zugegriffen werden.
- Kommandozeilenvervollständigung: Lange Programmnamen können mit Hilfe der Tabulatortaste vervollständigt werden, d.h. Sie müssen nicht immer lange Programmnamen oder Dateinamen eintippen, sondern brauchen nur die Anfangsbuchstaben eintippen und nach Drücken der Tabulatortasten kann die Befehlszeile vervollständigt werden.

Eingabe-/Ausgabeumleitung:

• Die Ausgabe eines Programms oder eines beliebigen Befehls kann vom Bildschirm des Terminalfensters in eine Datei mit > umgeleitet werden:

```
|s-rt| > out.txt
```

• Die Eingabe in ein Programm kann anstatt von der Tastatur von einer Datei mit < umgeleitet werden:

```
cat < numbers.dat
```

Editoren:

KDE Editor:

kate

• GNOME Editor:

```
gedit
```

• Fortgeschrittene Editoren:

```
emacs oder vi
```

Entwicklungsumgebungen und Debugger:

- Java, C++, Python Entwicklungsumgebung:
 eclipse
- C++ Entwicklungsumgebung:kdevelop
- Qt und C++ Entwicklungsumgebung:
 qtcreator
- Graphischer Debugger:

ddd

GNU C++ Compiler:

• Ein C++ Programm kompilieren und linken in einem Schritt:

```
g++ -o mytest mytest.cpp
```

• Ein C++ Programm kompilieren:

```
g++ -c mytest.cpp
```

• Ein zusammengesetztes C++ Programm kompilieren und linken:

```
g++ -o TLVector MyLVector.cpp My3Vector.cpp
```

Verzeichnisse archivieren:

• Das aktuelle Verzeichnis in eine Datei archivieren und packen:

```
tar cvzf myfile.tar.gz.
```

• Ein Archivdatei in aktuelle Verzeichnis entpacken:

```
tar xvzf myfile.tar.gz
```