
Python für Naturwissenschaftler

Release 2016alpha

Gert-Ludwig Ingold

20.10.2016

1 Einführung	1
1.1 Verwendete Symbole	1
1.2 Danke an	2
2 Fortgeschrittene Aspekte von Python	3
2.1 Sets	3
2.2 Das <code>collections</code> -Modul	5
2.3 List comprehensions	9
2.4 Generatoren und Iteratoren	12
2.5 Dekoratoren	15
2.6 Ausnahmen	19
2.7 Kontext mit <code>with</code> -Anweisung	23
3 NumPy	25
3.1 Python-Listen und NumPy-Arrays	25
3.2 Erzeugung von NumPy-Arrays	28
3.3 Adressierung von NumPy-Arrays	31
3.4 Universelle Funktionen	37
3.5 Lineare Algebra	40
4 Erstellung von Grafiken mit matplotlib	43
5 Erstellung von Grafiken mit PyX	63
6 Versionskontrolle mit Git	85
6.1 Vorbemerkungen	85
6.2 Grundlegende Arbeitsschritte	85
6.3 Verzweigen und Zusammenführen	90
6.4 Umgang mit entfernten Archiven	94
7 Testen von Programmen	99
7.1 Wozu braucht man Tests?	99
7.2 Das <code>doctest</code> -Modul	100
7.3 Das <code>unittest</code> -Modul	102
7.4 Testen mit NumPy	106
8 Laufzeituntersuchungen	109
8.1 Allgemeine Vorbemerkungen	109
8.2 Das Modul <code>timeit</code>	110
8.3 Das Modul <code>cProfile</code>	112

Einführung

Die Vorlesung »Python für Naturwissenschaftler« baut auf der Vorlesung »Einführung in das Programmieren für Physiker und Naturwissenschaftler«, im Folgenden kurz Einführungsvorlesung genannt, auf. Sie setzt daher Kenntnisse der Programmiersprache Python, wie Sie in der Einführungsvorlesung vermittelt werden, voraus. Gegebenenfalls wird empfohlen, sich Grundkenntnisse von Python mit Hilfe des Manuskripts zur Einführungsvorlesung anzueignen oder das Manuskript zu verwenden, um Kenntnisse aufzufrischen.

Die Einführungsvorlesung beschränkt sich bewusst weitestgehend auf Sprachelemente von Python, die in ähnlicher Form auch in anderen, für den Naturwissenschaftler wichtigen Programmiersprachen, wie C oder Fortran, verfügbar sind. Diese Beschränkung wird in der Vorlesung »Python für Naturwissenschaftler« fallengelassen, so dass einige weitere wichtige Sprachelemente besprochen werden können. Dabei wird jedoch keine Vollständigkeit angestrebt. Vielmehr soll auch Raum bleiben, um erstens eine etwas detailliertere Einführung in die zentrale numerische Bibliothek in Python, nämlich NumPy, zu geben und zweitens einige für die Codeentwicklung relevante Werkzeuge zu besprechen.

Aus Zeitgründen werden wir uns bei Letzteren auf Versionskontrollsysteme, auf Verfahren zum systematischen und nachvollziehbaren Testen von Programmen und auf Verfahren zur Bestimmung der Laufzeiten verschiedener Programmteile beschränken. Einige dieser Techniken werden wir zwar konkret im Zusammenspiel mit Python kennenlernen, sie sind aber auch auf andere Programmiersprachen übertragbar. Auch wenn solche Techniken häufig als unnötiger Aufwand empfunden werden, können sie wesentlich zur Qualität wissenschaftlichen Rechnens beitragen.¹

Die im Manuskript gezeigten Code-Beispiele sind für die Verwendung mit einer aktuellen Version von Python 3 vorgesehen. Ein Großteil der Beispiele ist aber auch unter Python 2.7 lauffähig oder lässt sich durch kleinere Anpassungen lauffähig machen.

1.1 Verwendete Symbole

`In [1]:` stellt den Prompt des IPython-Interpreters dar, wobei statt der 1 auch eine andere Eingabenummer stehen kann.

`Out [1]:` weist auf die Ausgabe des IPython-Interpreters zur Eingabe `In [1]:` hin.

`...:` wird im IPython-Interpreter als Prompt verwendet, wenn die Eingabe fortzusetzen ist, zum Beispiel im Rahmen einer Schleife. Diese Art der Eingabe kann sich über mehrere Zeilen hinziehen. Zum Beenden wird die EINGABE-Taste ohne vorherige Eingabe von Text verwendet.

`$` steht für den Prompt, also die Eingabeaufforderung, der Shell beim kommandozeilenbasierten Arbeiten in einem Terminalfenster.

+ Dieses Symbol kennzeichnet weiterführende Anmerkungen, die sich unter anderem auf speziellere Aspekte der Programmiersprache Python beziehen.

¹ arXiv:1210.0530

1.2 Danke an ...

- ... die Hörerinnen und Hörer der Vorlesung „Python für Naturwissenschaftler“, deren Fragen und Anregungen in diesem Manuskript ihren Niederschlag fanden;
- Michael Hartmann und Benjamin Spreng für eine Reihe von Kommentaren zu diesem Manuskript.

Fortgeschrittene Aspekte von Python

In diesem Kapitel sollen einige Sprachelemente von Python besprochen werden, auf die in der Vorlesung »Einführung in das Programmieren für Physiker und Materialwissenschaftler« nicht oder nur sehr kurz eingegangen wurde. Aus Platz- und Zeitgründen muss allerdings auch hier eine Auswahl getroffen werden.

2.1 Sets

In der Vorlesung »Einführung in das Programmieren für Physiker und Materialwissenschaftler« hatten wir uns im Kapitel über zusammengesetzte Datentypen vor allem mit Listen, Tupeln, Zeichenketten und Dictionaries beschäftigt. Sets wurden dagegen nur kurz erwähnt und sollen hier etwas ausführlicher besprochen werden.

Ein Set ist eine Menge von Python-Objekten, denen ein Hashwert zugeordnet werden kann. Insofern ist es mit einem Dictionary vergleichbar, das nur Schlüssel, aber nicht die zugehörigen Werte enthält. Die Einträge eines Sets können nicht mehrfach auftreten, so dass die Bildung eines Sets geeignet ist, um aus einer Liste Duplikate zu entfernen. Dies wird im Folgenden demonstriert.

```
In [1]: list_pts = [(0, 0), (-1, 2), (0, 0), (1, 2), (-1, 2), (0, 0)]
In [2]: set_pts = set(list_pts)
In [3]: set_pts
Out[3]: {(-1, 2), (0, 0), (1, 2)}
In [4]: uniq_list_pts = list(set_pts)
In [5]: uniq_list_pts
Out[5]: [(1, 2), (0, 0), (-1, 2)]
```

Zunächst wird eine Liste erstellt, die hier Tupel enthält, um beispielsweise Punkte in der Ebene zu beschreiben. In der Eingabe 2 wird ein Set erstellt, in dem, wie man in der Ausgabe 3 sieht, tatsächlich keine Duplikate mehr vorkommen. Dabei liegen die Elemente im Set nicht in einer bestimmten Ordnung vor, ganz so wie wir es von Dictionaries kennen. Bei Bedarf kann man das Set auch wieder in eine Liste umwandeln, wie die Eingabe 4 und die Ausgabe 5 zeigen.

Statt wie im vorigen Beispiel ein Set durch Umwandlung aus einer Liste zu erzeugen, kann man die Elemente des Sets auch direkt in einer Notation mit geschweiften Klammern, die an die Verwandtschaft mit Dictionaries erinnert, eingeben.

```
In [1]: set_of_ints = {1, 3, 2, 5, 2, 1, 3, 4}
In [2]: set_of_ints
Out[2]: {1, 2, 3, 4, 5}
```

Auch hier werden natürlich eventuelle Dubletten entfernt.

Ähnlich wie Listen oder Dictionaries sind Sets auch veränderbar (*mutable*) und damit selbst nicht als Elemente von Sets oder als Schlüssel von Dictionaries verwendbar. Dafür kann man Elemente hinzufügen oder entfernen, wobei der Versuch, ein nicht vorhandenes Element zu entfernen, eine `KeyError`-Ausnahme auslöst.

```
In [1]: data = {1, 2, 4}
In [2]: data.add(3)
In [3]: data
Out[3]: {1, 2, 3, 4}
In [4]: data.remove(1)
In [5]: data
Out[5]: {2, 3, 4}
In [6]: data.remove(10)
-----
KeyError                                     Traceback (most recent call last)
<ipython-input-13-6610e4562113> in <module>()
----> 1 data.remove(10)

KeyError: 10
```

Will man ein Set als Schlüssel verwenden und ist man dafür bereit, auf die gerade beschriebenen Möglichkeiten, ein Set zu verändern, zu verzichten, so greift man auf das `frozenset` zurück, das wie der Name schon andeutet unveränderlich (*immutable*) ist.

```
In [1]: evens = frozenset([2, 4, 6, 8])
In [2]: evens.add(10)
-----
AttributeError                               Traceback (most recent call last)
<ipython-input-15-2c352b4e8a10> in <module>()
----> 1 evens.add(10)

AttributeError: 'frozenset' object has no attribute 'add'

In [3]: odds = frozenset([1, 3, 5, 7])
In [4]: numbers = {"evens": "some even numbers", "odds": "some odd numbers"}
In [5]: numbers.keys()
Out[5]: dict_keys([frozenset({8, 2, 4, 6}), frozenset({1, 3, 5, 7})])
```

Um zu überprüfen, ob ein Objekt Element einer Menge ist, ist es günstig, statt einer Liste ein Set zu verwenden, wie die folgenden Tests zeigen.¹

```
In [1]: nmax = 1000000
In [2]: xlist = list(range(nmax))
In [3]: xset = set(xlist)
In [4]: %timeit 1 in xlist
10000000 loops, best of 3: 37 ns per loop
In [5]: %timeit 1 in xset
10000000 loops, best of 3: 32.1 ns per loop
```

¹ Hier verwenden wir `%timeit`, eine der so genannten magischen Funktionen der verbesserten Python-Shell IPython, die es erlaubt, Ausführungszeiten einzelner Befehle zu bestimmen. Will man die Ausführungszeit eines ganzen Befehlsblocks bestimmen, so muss die magische `%%timeit`-Funktion mit zwei Prozentzeichen verwendet werden. Wir werden hierauf im Abschnitt *Das Modul timeit* zurückkommen.

```
In [6]: %timeit nmax-1 in xlist
100 loops, best of 3: 10.6 ms per loop
```

```
In [7]: %timeit nmax-1 in xset
10000000 loops, best of 3: 85.4 ns per loop
```

Hier liegen eine Liste und ein Set mit einer Million Elementen vor. Prüft man auf Mitgliedschaft eines der ersten Listenelemente ab, so gibt es keinen wesentlichen Unterschied zwischen Liste und Set. Ganz anders sieht es aus, wenn man ein Element vom Ende der Liste auswählt. In diesem Fall muss die ganze Liste durchsucht werden und die Ausführungszeit ist in unserem Beispiel mehr als hunderttausendmal langsamer als für das Set. Dieser Unterschied ist vor allem auch dann relevant, wenn das gewählte Element nicht vorhanden ist, so dass auf jeden Fall die gesamte Liste durchsucht werden muss. Natürlich ist die Erzeugung eines Sets mit einem Zeitaufwand verbunden. Muss man aber häufig auf Mitgliedschaft in einer bestimmten Liste testen, so kann die Umwandlung in ein Set die Ausführung entscheidend beschleunigen.

Neben dem Test auf Mitgliedschaft lässt ein Set auch noch eine Reihe von Operationen auf Mengen zu, wie zum Beispiel das Vereinigen zweier Mengen (`union` oder `|`), das Bilden der Schnittmenge (`intersection` oder `&`) und deren Komplement (`symmetric_difference` oder `^`) sowie das Bilden der Differenzmenge (`difference` oder `-`). Zudem lässt sich auf Unter- und Obermenge (`issubset` bzw. `issuperset`) sowie Schnittmengenfreiheit (`isdisjoint`) testen. Diese Möglichkeiten sind im Folgenden illustriert.

```
In [1]: a = set([1, 2, 3])
```

```
In [2]: b = set([4, 5, 6])
```

```
In [3]: a.union(b)
```

```
Out[3]: {1, 2, 3, 4, 5, 6}
```

```
In [4]: c = set([1, 3, 6])
```

```
In [5]: a.intersection(c)
```

```
Out[5]: {1, 3}
```

```
In [6]: a.symmetric_difference(c)
```

```
Out[6]: {2, 6}
```

```
In [7]: a.difference(c)
```

```
Out[7]: {2}
```

```
In [8]: d = set([1, 3])
```

```
In [9]: a.issuperset(d)
```

```
Out[9]: True
```

```
In [10]: a.issubset(d)
```

```
Out[10]: False
```

```
In [11]: a.isdisjoint(b)
```

```
Out[11]: True
```

2.2 Das `collections`-Modul

Die Standardbibliothek von Python stellt im `collections`-Modul einige interessante Container-Datentypen zur Verfügung, die es erlauben, Probleme zu lösen, die gelegentlich mit Listen, Tupeln oder Dictionaries auftreten. Im Folgenden soll eine Auswahl dieser Datentypen kurz vorgestellt werden.

Wir beginnen mit den Tupeln, deren einzelne Elemente mit Hilfe von Integern angesprochen werden können. Wenn die einzelnen Elemente eine spezielle Bedeutung haben, ist jedoch die Zuordnung zu den Indizes nicht immer offensichtlich.

Als Beispiel betrachten wir Farben, die im RGB-System durch ein Tupel von drei Integern mit Werten zwischen 0 und 255 dargestellt werden können. Eine bestimmte Farbe könnte also folgendermaßen durch ein Tupel repräsentiert sein:

```
In [1]: farbe = (135, 206, 235)
```

```
In [2]: farbe[1]
```

```
Out[2]: 206
```

```
In [3]: r, g, b = farbe
```

```
In [4]: g
```

```
Out[4]: 206
```

Hierbei muss man wissen, dass das Element mit Index 1 dem Grünwert entspricht. Um den Code verständlicher zu machen, kann man das Tupel auch wie in Eingabezeile 3 in die einzelnen Bestandteile zerlegen und diese entsprechend benennen. Es wäre jedoch praktischer, wenn man diesen Schritt nicht explizit vornehmen müsste.

In einem solchen Fall ist ein `namedtuple` nützlich, um lesbaren Code zu schreiben. In der Definition des `namedtuple` zur Darstellung einer Farbe ordnen wir den einzelnen Elementen Namen zu und können mit Hilfe dieser Namen auf die Elemente zugreifen.

```
In [5]: import collections
```

```
In [6]: Farbe = collections.namedtuple('Farbe', 'r g b')
```

```
In [7]: f1 = Farbe(135, 206, 235)
```

```
In [8]: f1[1]
```

```
Out[8]: 206
```

```
In [9]: f1.g
```

```
Out[9]: 206
```

```
In [10]: f2 = Farbe(50, 205, 50)
```

```
In [11]: f1.b > f2.b
```

```
Out[11]: True
```

Gemäß der Definition in Eingabezeile 6 erhalten die Elemente die Bezeichner `r`, `g` und `b` und können dazu verwendet werden, auf die entsprechenden Elemente zuzugreifen, wie in den Eingabezeilen 9 und 11 zu sehen ist. Es ist jedoch auch weiterhin möglich, wie in Eingabezeile 8 auf ein Element mit Hilfe seines Index zuzugreifen.

Die Bezeichner sind nicht nur auf einzelne Buchstaben beschränkt, sondern können bei Bedarf noch aussagekräftiger gewählt werden.

```
In [12]: Farbe = collections.namedtuple('Farbe', 'rot grün blau')
```

```
In [13]: f1 = Farbe(135, 206, 235)
```

```
In [14]: f1.grün
```

```
Out[14]: 206
```

Im Unterschied zum Dictionary ist das `namedtuple`, genauso wie das Tuple, *immutable*, kann also zum Beispiel als Schlüssel für ein Dictionary verwendet werden. Zudem ist es so speichereffizient wie ein normales Tuple.

```
In [15]: f1.rot = 20
```

```
-----  
AttributeError                                Traceback (most recent call last)  
<ipython-input-15-ac8b7e672be5> in <module>()  
----> 1 f1.rot = 20
```

```
AttributeError: can't set attribute
```

```
In [16]: f2 = Farbe(50, 205, 50)

In [17]: rgbdict = {f1: 'SkyBlue', f2: 'LimeGreen'}

In [18]: rgbdict[Farbe(128, 90, 215)]
Out[18]: 'SkyBlue'
```

Ein anderes Problem tritt in Zusammenhang mit Listen auf. Während der Zeitaufwand für das Anhängen eines neuen Elements sehr klein ist, kann das Einfügen eines Elements am Anfang der Liste sehr zeitaufwändig sein wie das folgende Beispiel zeigt.

```
In [19]: %%timeit
....: xlist = list()
....: for n in range(100000):
....:     xlist.append(n)
....:
100 loops, best of 3: 7.66 ms per loop

In [20]: %%timeit
....: xlist = list()
....: for n in range(100000):
....:     xlist.insert(0, n)
....:
1 loop, best of 3: 2.63 s per loop
```

In einem solchen Fall kann ein so genanntes deque, dessen Name sich von *double-ended queue*² ableitet, erhebliche Vorteile bringen, so lange man Elemente an einem der beiden Enden hinzufügt oder entfernt.

```
In [21]: %%timeit
....: xdeq = collections.deque()
....: for n in range(100000):
....:     xdeq.append(n)
....:
100 loops, best of 3: 7.57 ms per loop

In [22]: %%timeit
....: xdeq = collections.deque()
....: for n in range(100000):
....:     xdeq.appendleft(n)
....:
100 loops, best of 3: 7.61 ms per loop
```

Eine mögliche Anwendung ist ein FIFO (*first in, first out*), das Objekte aufnehmen kann und in dieser Reihenfolge auch wieder zurückgibt.

```
In [23]: xdeq = collections.deque([2, 1])
```

```
In [24]: xdeq.appendleft(3)
```

```
In [25]: xdeq
Out[25]: deque([3, 2, 1])
```

```
In [26]: xdeq.pop()
Out[26]: 1
```

```
In [27]: xdeq
Out[27]: deque([3, 2])
```

```
In [28]: xdeq.pop()
Out[28]: 2
```

```
In [29]: xdeq
```

² Für weitere Informationen siehe z.B. den Wikipedia-Eintrag zu double-ended queue.

```
Out[29]: deque([3])
In [30]: xdeq.appendleft(4)
In [31]: xdeq
Out[31]: deque([4, 3])
In [32]: xdeq.pop()
Out[32]: 3
In [33]: xdeq
Out[33]: deque([4])
```

Auch das Rotieren eines deque ist leicht möglich.

```
In [34]: xdeq = collections.deque(range(10))
In [35]: xdeq
Out[35]: deque([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])
In [36]: xdeq.rotate(3)
In [37]: xdeq
Out[37]: deque([7, 8, 9, 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6])
In [38]: xdeq.rotate(-5)
In [39]: xdeq
Out[39]: deque([2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 0, 1])
```

Abschließend wollen wir noch kurz das OrderedDict erwähnen. Bei Dictionaries sind die Schlüssel im Allgemeinen nicht geordnet. Ein OrderedDict dagegen merkt sich, in welcher Reihenfolge die Einträge hinzugefügt wurden.

```
In [40]: nobelpreise = dict([('Marie Curie', 1903),
...:                      ('Maria Goeppert Mayer', 1963),
...:                      ('Klaus von Klitzing', 1985),
...:                      ('Albert Einstein', 1921)])
In [41]: for preis in nobelpreise:
...:     print(preis)
...
Maria Goeppert Mayer
Marie Curie
Albert Einstein
Klaus von Klitzing
In [42]: nobelpreise = collections.OrderedDict([('Marie Curie', 1903),
...:                                              ('Maria Goeppert Mayer', 1963),
...:                                              ('Klaus von Klitzing', 1985),
...:                                              ('Albert Einstein', 1921)])
In [43]: for preis in nobelpreise:
...:     print(preis)
...
Marie Curie
Maria Goeppert Mayer
Klaus von Klitzing
Albert Einstein
```

Es gibt die Möglichkeit, mit der Methode `move_to_end()` einen einzelnen Eintrag an das Ende eines OrderedDict zu verschieben. Um ein bestehendes Dictionary oder OrderedDict umzusortieren, erzeugt man am besten ein neues OrderedDict.

```
In [44]: nobelpreise_sorted = collections.OrderedDict(
...:                     sorted(nobelpreise.items(),
...:                               key=lambda x: x[1]))
In [45]: for name, jahr in nobelpreise_sorted.items():
...:     print(jahr, name)
...:
1903 Marie Curie
1921 Albert Einstein
1963 Maria Goeppert Mayer
1985 Klaus von Klitzing
```

2.3 List comprehensions

Um eine Liste aufzubauen, kann man sich zum Beispiel der folgenden Konstruktion bedienen.

```
In [1]: squares = []
In [2]: for n in range(10):
...:     squares.append(n*n)
...
In [3]: squares
Out[3]: [0, 1, 4, 9, 16, 25, 36, 49, 64, 81]
```

Hierbei wird zunächst eine leere Liste angelegt, an die anschließend in einer Schleife die Quadratzahlen angefügt werden. Etwas kompakter und damit auch übersichtlicher kann man diese Funktionalität mit Hilfe einer so genannten *list comprehension*³ erreichen.

```
In [1]: squares = [n*n for n in range(10)]
In [2]: squares
Out[2]: [0, 1, 4, 9, 16, 25, 36, 49, 64, 81]
```

Liest man den Text in den eckigen Klammern in Eingabe 1, so bekommt man eine sehr klare Vorstellung davon, was dieser Code bewirken soll. Vor der `for`-Anweisung kann auch eine andere Anweisung stehen, die die Listenelemente erzeugt.

```
In [1]: from math import pi, sin
In [2]: [(0.1*pi*n, sin(0.1*pi*n)) for n in range(6)]
Out[2]: [(0.0, 0.0),
(0.3141592653589793, 0.3090169943749474),
(0.6283185307179586, 0.5877852522924731),
(0.9424777960769379, 0.8090169943749475),
(1.2566370614359172, 0.9510565162951535),
(1.5707963267948966, 1.0)]
```

List comprehensions sind nicht nur häufig übersichtlicher, sondern in der Ausführung auch etwas schneller.

```
In [1]: %%timeit result = []
...: for n in range(1000):
...:     result.append(n*n)
...
10000 loops, best of 3: 91.8 µs per loop
In [2]: %%timeit result = [n*n for n in range(1000)]
10000 loops, best of 3: 54.4 µs per loop
```

³ Wir belassen es hier bei dem üblicherweise verwendeten englischen Begriff. Gelegentlich findet man den Begriff »Listenabstraktion« als deutsche Übersetzung.

In unserem Fall ist die list comprehension also um fast einen Faktor 1,7 schneller.

Die Syntax von list comprehensions ist nicht auf die bisher beschriebenen einfachen Fälle beschränkt. Sie lässt zum Beispiel auch das Schachteln von Schleifen zu.

```
In [1]: [x**y for y in range(1, 4) for x in range(2, 5)]
Out[1]: [2, 3, 4, 9, 16, 8, 27, 64]
```

```
In [2]: result = []
```

```
In [3]: for y in range(1, 4):
...:     for x in range(2, 5):
...:         result.append(x**y)
...:
```

```
In [4]: result
Out[4]: [2, 3, 4, 9, 16, 8, 27, 64]
```

Wie man sieht, sind die `for`-Schleifen in der list comprehension von der äußersten zur innersten Schleife anzugeben, wobei man auch mehr als zwei Schleifen schachteln kann.

Man kann das Hinzufügen zur Liste zusätzlich noch von Bedingungen abhängig machen. Im folgenden Beispiel wird das Tupel nur in die Liste aufgenommen, wenn die erste Zahl ohne Rest durch die zweite Zahl teilbar ist.

```
In [1]: [(x, y) for x in range(1, 11) for y in range(2, x) if x % y == 0]
Out[1]: [(4, 2), (6, 2), (6, 3), (8, 2), (8, 4), (9, 3), (10, 2), (10, 5)]
```

Als kleines Anwendungsbeispiel betrachten wir den Quicksort-Algorithmus zur Sortierung von Listen. Die Idee hierbei besteht darin, ein Listenelement zu nehmen und die kleineren Elemente in einer rekursiv sortierten Liste diesem Element voranzustellen und die anderen Elemente sortiert anzuhängen.

```
In [1]: def quicksort(x):
...:     if len(x) < 2: return x
...:     return (quicksort([y for y in x[1:] if y < x[0]]))
...:             +x[0:1]
...:             +quicksort([y for y in x[1:] if x[0] <= y]))
```

```
In [2]: import random
```

```
In [3]: liste = [random.randint(1, 100) for n in range(10)]
```

```
In [4]: liste
Out[4]: [51, 93, 66, 62, 46, 87, 91, 41, 3, 40]
```

```
In [5]: quicksort(liste)
Out[5]: [3, 40, 41, 46, 51, 62, 66, 87, 91, 93]
```

Das Konzept der list comprehension lässt sich auch auf Sets und Dictionaries übertragen. Letzteres ist im folgenden Beispiel gezeigt.

```
In [25]: s = 'Augsburg'
```

```
In [26]: {x: s.count(x) for x in s}
Out[26]: {'A': 1, 'b': 1, 'r': 1, 's': 1, 'u': 2, 'g': 2}
```

Wie wir gesehen haben, kann eine list comprehension zum einen aus einer Liste durch Anwendung einer Funktion eine andere Liste machen und zum anderen Listenelemente zur Aufnahme in die neue Liste mit Hilfe einer Bedingung auswählen. Diese beiden Komponenten können gemeinsam oder auch einzeln vorkommen. In letzterem Fall kann man alternativ die `map`-Funktion bzw. die `filter`-Funktion verwenden. Beide sind zentrale Elemente des so genannten funktionalen Programmierens.

`map` wendet die im ersten Argument angegebene Funktion auf die im zweiten Argument angegebene Liste an. Um eine Liste von Quadratzahlen zu erzeugen, kann man statt einer expliziten `for`-Schleife auch eine der beiden folgenden Möglichkeiten verwenden:

```
In [1]: [x*x for x in range(1, 11)]
Out[1]: [1, 4, 9, 16, 25, 36, 49, 64, 81, 100]

In [2]: quadrate = map(lambda x: x*x, range(1, 11))

In [3]: list(quadrate)
Out[3]: [1, 4, 9, 16, 25, 36, 49, 64, 81, 100]
```

Eine nützliche Anwendung der `map`-Funktion besteht darin, die nach dem Einlesen numerischer Daten zunächst vorhandenen Strings in Floats umzuwandeln:

```
In [1]: s = "0.1 0.2 0.4 -0.5"

In [2]: zeilenelemente = map(float, s.split())

In [3]: list(zeilenelemente)
Out[3]: [0.1, 0.2, 0.4, -0.5]
```

Bei der `filter`-Funktion muss die als erstes Argument angegebene Funktion einen Wahrheitswert zurückgeben, der darüber entscheidet, ob ein Element der Sequenz im zweiten Argument übernommen wird oder nicht.

```
In [1]: initialen = filter(lambda x: x.isupper(), 'Albert Einstein')

In [2]: "".join(initialen)
Out[2]: 'AE'
```

Zur Abwechslung haben wir hier statt einer Liste eine Zeichenkette verwendet, die Zeichen für Zeichen abgearbeitet wird. Das Ergebnis enthält die Großbuchstaben der Zeichenkette.

Zu den wesentlichen Elementen des funktionalen Programmierens gehört auch die `reduce`-Funktion. Während sie in Python 2 noch zum normalen Sprachumfang gehörte, muss sie in Python 3 aus dem `functools`-Modul importiert werden⁴. Tatsächlich gibt es für viele Anwendungsfälle angepasste Funktionen als Ersatz, wie wir gleich noch sehen werden.

Als erstes Argument muss `reduce` eine Funktion bekommen, die zwei Argumente verarbeitet. `reduce` wendet dann die Funktion auf die ersten beiden Elemente der als zweites Argument angegebenen Liste an, verarbeitet dann entsprechend das Ergebnis und das dritte Element der Liste und fährt so fort bis das Ende der Liste erreicht ist. Die folgende Implementation der Fakultät illustriert dies.

```
In [1]: import functools

In [2]: factorial = lambda n: functools.reduce(lambda x, y: x*y, range(1, n+1))

In [3]: factorial(6)
Out[3]: 720
```

Entsprechend lässt sich auch die Summe der Elemente einer Liste bestimmen.

```
In [1]: reduce(lambda x, y: x+y, [0.1, 0.3, 0.7])
Out[1]: 1.1

In [2]: sum([0.1, 0.3, 0.7])
Out[2]: 1.1
```

Wie die zweite Eingabe zeigt, stellt Python zu diesem Zweck auch direkt die `sum`-Funktion zur Verfügung. Ähnliches gilt für die Verwendung der Oder- und der Und-Verknüpfung in der `reduce`-Funktion, die direkt durch die `any`- bzw. `all`-Funktion abgedeckt werden.

```
In [1]: any([x % 2 for x in [2, 5, 6]])
Out[1]: True

In [2]: all([x % 2 for x in [2, 5, 6]])
Out[2]: False
```

⁴ Guido von Rossum begründet das in einem Blog mit dem Titel *The fate of reduce() in Python 3000* aus dem Jahr 2005.

In der ersten Eingabe wird überprüft, ob mindestens ein Element der Liste ungerade ist, während die zweite Eingabe überprüft, ob alle Elemente ungerade sind.

Zum Abschluss dieses Kapitels wollen wir noch zwei äußerst praktische eingebaute Funktionen erwähnen, die, falls sie nicht existieren würden, mit list comprehensions realisiert werden könnten. Häufig benötigt man bei der Iteration über eine Liste in einer `for`-Schleife noch den Index des betreffenden Eintrags. Dies lässt sich mit Hilfe der `enumerate`-Funktion sehr einfach realisieren.

```
In [1]: for nr, text in enumerate(['eins', 'zwei', 'drei']):
    ...
1 eins
2 zwei
3 drei
```

Die `enumerate`-Funktion gibt also für jedes Element der Liste ein Tupel zurück, das aus dem Index und dem entsprechenden Element besteht. Dabei beginnt die Zählung wie immer in Python bei Null.

Es kommt auch immer wieder vor, dass man zwei oder mehr Listen parallel in einer `for`-Schleife abarbeiten möchte. Dann ist die `zip`-Funktion von Nutzen, die aus den Einträgen mit gleichem Index nach dem Reißverschlussprinzip Tupel zusammenbaut.

```
In [1]: a = [1, 2, 3]
In [2]: b = [4, 5, 6]
In [3]: ab = zip(a, b)
In [4]: list(ab)
Out[4]: [(1, 4), (2, 5), (3, 6)]
```

Sollten die beteiligten Listen verschieden lang sein, so ist die Länge der neuen Liste durch die kürzeste der eingegebenen Listen bestimmt.

Man kann die `zip`-Funktion zum Beispiel dazu verwenden, um elegant Mittelwerte aus aufeinanderfolgenden Listenelementen zu berechnen.

```
In [1]: data = [1, 4, 5, 3, -1, 2]
In [2]: for x, y in zip(data[:-1], data[1:]):
    ...
2.5
4.5
4.0
1.0
0.5
```

2.4 Generatoren und Iteratoren

Es kommt häufig vor, dass man Listen mit einer list comprehension erzeugt, nur um anschließend über diese Liste zu iterieren. Dabei reicht es völlig aus, wenn die jeweiligen Elemente erst bei Bedarf erzeugt werden. Somit ist es nicht mehr erforderlich, die ganze Liste im Speicher bereitzuhalten, was bei großen Listen durchaus zum Problem werden könnte.

Will man die Listenerzeugung vermeiden, so kann man statt einer list comprehension einen Generatorausdruck verwenden. Die beiden unterscheiden sich syntaktisch dadurch, dass die umschließenden eckigen Klammern der list comprehension durch runde Klammern ersetzt werden.

```
In [1]: quadrate = (x*x for x in xrange(4))
In [2]: quadrate
```

```
Out[2]: <generator object <genexpr> at 0x39e4a00>
```

```
In [3]: for q in quadrate:  
...:     print q  
...:  
0  
1  
4  
9
```

Man kann die Werte des Generatorausdruck auch explizit durch Verwendung der zugehörigen `__next__`-Methode abrufen. Allerdings sind die Werte nach dem obigen Beispiel bereits abgearbeitet, so dass die `__next__`-Methode in einer StopIteration-Ausnahme resultiert. Damit wird angezeigt, dass bereits alle Wert ausgegeben wurden. Die StopIteration-Ausnahme war auch in der `for`-Schleife verantwortlich dafür, dass diese beendet wurde.

```
In [4]: next(quadrate)  
-----  
StopIteration                                     Traceback (most recent call last)  
<ipython-input-4-ec579e92187a> in <module>()  
----> 1 quadrate.next()
```

```
StopIteration:
```

```
In [5]: quadrate = (x*x for x in xrange(4))
```

```
In [6]: next(quadrate)  
Out[6]: 0
```

```
In [7]: next(quadrate)  
Out[7]: 1
```

```
In [8]: next(quadrate)  
Out[8]: 4
```

```
In [9]: next(quadrate)  
Out[9]: 9
```

```
In [10]: next(quadrate)  
-----  
StopIteration                                     Traceback (most recent call last)  
<ipython-input-10-ec579e92187a> in <module>()  
----> 1 quadrate.next()
```

```
StopIteration:
```

In Eingabe 5 wurde der Generatorausdruck neu initialisiert, so dass er wieder vier Werte liefern konnte. Am Ende wird dann wiederum die StopIteration-Ausnahme ausgelöst. Natürlich kann man diese Ausnahme auch abfangen, wie in folgendem Beispiel gezeigt wird.

```
In [1]: def q():  
...:     try:  
...:         return quadrate.next()  
...:     except StopIteration:  
...:         return "Das war's mit den Quadratzahlen."  
...:
```

```
In [2]: quadrate = (x*x for x in xrange(4))
```

```
In [3]: [q() for n in range(5)]  
Out[3]: [0, 1, 4, 9, "Das war's mit den Quadratzahlen."]
```

Aus Sequenzen kann man mit Hilfe der eingebauten `iter`-Funktion Iteratoren konstruieren.

```
In [1]: i = iter([1, 2, 3])

In [2]: next(i)
Out[2]: 1

In [3]: next(i)
Out[3]: 2

In [4]: next(i)
Out[4]: 3

In [5]: next(i)
-----
StopIteration                                     Traceback (most recent call last)
<ipython-input-5-e590fe0d22f8> in <module>()
----> 1 next(i)

StopIteration:
```

In der Eingabe 1 wird ein Iterator erzeugt, der über eine `__next__`-Methode verfügt und nach dem Abarbeiten der Liste eine `StopIteration`-Ausnahme auslöst. Iteratoren kann man auch über eine Klassendefinition erhalten, wie im folgenden Beispiel für die Fibonacci-Zahlen gezeigt ist.

```
In [1]: class Fibonacci(object):
....:     def __init__(self, nmax):
....:         self.nmax = nmax
....:         self.a = 0
....:         self.b = 1
....:     def __iter__(self):
....:         return self
....:     def __next__(self):
....:         if self.nmax == 0:
....:             raise StopIteration
....:         self.b, self.a = self.b+self.a, self.b
....:         self.nmax = self.nmax-1
....:         return self.a
....:

In [2]: for n in Fibonacci(10):
....:     print(n, end=' ')
....:
1 1 2 3 5 8 13 21 34 55
```

Die `__iter__`-Methode dieser Klasse gibt sich selbst zurück, während die `__next__`-Methode das jeweils nächste Element zurückgibt. Nachdem die ersten `nmax` Elemente der Fibonacci-Reihe erzeugt wurden, wird eine `StopIteration`-Ausnahme ausgelöst, die zur Beendung der `for`-Schleife in Eingabe 2 führt.

Normalerweise wird es einfacher sein, statt einer solchen Klassendefinition einen Generator zu schreiben. Dieser sieht auf den ersten Blick wie eine Funktionsdefinition aus. Allerdings ist die `return`-Anweisung durch eine `yield`-Anweisung ersetzt, die dafür verantwortlich ist, den jeweils nächsten Wert zurückzugeben. Bemerkenswert ist im Vergleich zu Funktionen außerdem, dass die Werte der Funktionsvariablen nicht verlorengehen. Das folgende Beispiel erzeugt die ersten Zeilen eines pascalschen Dreiecks.

```
In [1]: def pascaltriangle(n):
....:     coeff = 1
....:     yield coeff
....:     for m in range(n):
....:         coeff = coeff* (n-m) / (m+1)
....:         yield coeff
....:     raise StopIteration

In [2]: for n in range(11):
```

```

...:     print " ".join(str(p).center(3) for p in pascaltriangle(n)).center(50)
...:
      1
     1   1
    1   2   1
   1   3   3   1
  1   4   6   4   1
 1   5   10  10  5   1
 1   6   15   20  15  6   1
 1   7   21   35  35  21  7   1
 1   8   28   56  70  56  28  8   1
 1   9   36   84  126 126  84  36  9   1
1   10  45  120 210 252 210 120  45  10  1

```

In der letzten Zeile fungieren die Klammern der `join`-Methode gleichzeitig als Klammern für den Generatorausdruck.

+ Man kann `yield` auch benutzen, um Werte in die Funktion einzuspeisen. Auf diese Weise erhält man eine Koroutine. Dieses Konzept soll hier jedoch nicht weiter diskutiert werden.

Abschließend sei noch erwähnt, dass das `itertools`-Modul eine ganze Reihe von nützlichen Iteratoren zur Verfügung stellt. Als Beispiel mögen Permutationen dienen.

```

In [1]: import itertools

In [2]: for s in itertools.permutations("ABC"):
...:     print s
...:
('A', 'B', 'C')
('A', 'C', 'B')
('B', 'A', 'C')
('B', 'C', 'A')
('C', 'A', 'B')
('C', 'B', 'A')

```

2.5 Dekoratoren

Dekoratoren sind ein Programmierkonstrukt, das man gelegentlich gewinnbringend einsetzen kann, wie wir im Folgenden sehen werden. Aber selbst wenn man keine eigenen Dekoratoren programmieren möchte, sollte man zumindest das Konzept kennen. Es kommt immer wieder vor, dass bei der Verwendung von fremden Python-Paketen Dekoratoren zum Einsatz kommen. Dies kann dann zum Beispiel folgendermaßen aussehen:

```

@login_required
def myfunc():
    """this function should only be executable by users properly logged in"""
    pass

```

Der Operator `@` weist hier auf die Verwendung eines Dekorators hin.

Bevor wir uns aber mit Dekoratoren beschäftigen, ist es nützlich, so genannte Closures⁵ zu diskutieren. Das Konzept soll an einem einfachen Beispiel erläutert werden.

```

In [1]: def add_tax(taxrate):
...:     def _add_tax(value):
...:         return value*(1+0.01*taxrate)
...:     return _add_tax
...:

In [2]: add_mwst = add_tax(19)

```

⁵ Wir belassen es auch hier wieder bei dem häufig verwendeten englischen Begriff, der als »Funktionsabschluss« zu übersetzen wäre.

```
In [3]: add_reduzierte_mwst = add_tax(7)

In [4]: for f in [add_mwst, add_reduzierte_mwst]:
...:     print('{:.2f}'.format(f(10)))
...:
11.90
10.70
```

Mit `add_tax` haben wir hier eine Funktion definiert, die wiederum eine Funktion zurückgibt. Das Interessante an dieser Konstruktion ist, dass die zurückgegebene Funktion sich den Kontext merkt, in dem sie erzeugt wurde. In unserem Beispiel bedeutet das, dass die Funktion `_add_tax` auf den Wert der Variable `taxrate`, also den Steuersatz, auch später noch zugreifen kann. Dies wird deutlich, wenn wir zur Addition des vollen Mehrwertsteuersatzes die Funktion `add_mwst` definieren. Hierbei wird der Variable `taxrate` der Wert 19 mitgegeben, der später beim Aufruf von `add_mwst` noch zur Verfügung steht. Entsprechend definieren wir eine Funktion zur Addition des reduzierten Mehrwertsteuersatzes. Am Beispiel der abschließenden Schleife wird deutlich, dass die Funktionen wie gewünscht funktionieren.

Kommen wir nun zurück zu den Dekoratoren. Diese erlauben es, Funktionen oder Klassen mit Zusatzfunktionalität zu versehen oder diese zu modifizieren. Wir wollen uns hier auf Funktionen beschränken. Betrachten wir als ein erstes Beispiel den folgenden Code:

```
In [1]: def register(func):
...:     print('{} registered'.format(func.__name__))
...:     return func
...:

In [2]: @register
...: def myfunc():
...:     print('executing myfunc')
...:
myfunc registered

In [3]: myfunc()
executing myfunc

In [4]: @register
...: def myotherfunc():
...:     print('executing myotherfunc')
...:
myotherfunc registered

In [5]: myotherfunc()
executing myotherfunc
```

Hier haben wir zunächst einen Dekorator `register` definiert, der als Argument eine Funktion erhält. Bevor er sie unverändert zurückgibt, registriert er die Funktion, was hier durch eine einfache Ausgabe nur angedeutet wird. Der Dekorator kann nun verwendet werden, indem vor der gewünschten Funktion die Zeile `@register` eingefügt wird. Wie schon erwähnt, gibt der Operator `@` an, dass hier ein Dekorator verwendet wird, die folgende Funktion also dekoriert wird. In der Eingabe 2 wird `myfunc` als Argument an `register` übergeben. Bei der Auswertung der Funktionsdefinition wird nun der Ausgabebefehl ausgeführt. Später erfolgt dies nicht mehr, da der Dekorator `register` die Funktion ja unverändert zurückgegeben hat. Die Eingabe 4 zeigt, dass der Dekorator mit einer beliebigen Funktion verwendet werden kann.

Wenden wir uns nun einem etwas komplexeren Beispiel zu. Wir haben in dem untenstehenden Code-Beispiel in den Zeilen 17-21 die Minimalvariante einer rekursiven Funktion für die Berechnung der Fakultät programmiert. Diese Funktion soll nun so modifiziert werden, dass Logging-Information ausgegeben wird. Zu Beginn der Funktion soll ausgegeben werden, mit welchem Argument die Funktion aufgerufen wurde und am Ende sollen zusätzlich das Ergebnis und die seit dem Aufruf verstrichene Zeit ausgegeben werden.

Natürlich könnte die entsprechende Funktionalität direkt in die Funktion programmiert werden, aber es spricht einiges dagegen, so vorzugehen. Die Fähigkeit, Logging-Information auszugeben, hat nichts mit der Berechnung der Fakultät zu tun, und daher ist es besser, die beiden Funktionalitäten sauber zu trennen. Dies wird deutlich, wenn

man bedenkt, dass die Ausgabe von Logging-Information vor allem in der Entwicklungsphase erforderlich ist und später wahrscheinlich entfernt werden soll. Dann müsste man wieder in das Innere der Funktion eingreifen und die richtigen Zeilen identifizieren, die entfernt werden müssen. Außerdem ist die Ausgabe von Logging-Information etwas, was nicht nur für unsere spezielle Funktion nützlich ist, sondern auch in anderen Fällen verwendet werden kann. Dies spricht wiederum dafür, diese Funktionalität aus der eigentlichen Funktion fernzuhalten.

Genau dieses Ziel ist in dem folgenden Code realisiert, in dem die Funktion `factorial` mit einem Dekorator versehen ist.

```

1 import time
2 from itertools import chain
3
4 def logging(func):
5     def func_with_log(*args, **kwargs):
6         argumente = ', '.join(map(repr, chain(args, kwargs.items())))
7         print('calling {}({})'.format(func.__name__, argumente))
8         start = time.time()
9         result = func(*args, **kwargs)
10        elapsed = time.time() - start
11        print('got {}({}) = {} in {:.3f} ms'.format(
12            func.__name__, argumente, result, elapsed * 1000
13            ))
14    return result
15    return func_with_log
16
17 @logging
18 def factorial(n):
19     if n == 1:
20         return 1
21     else:
22         return n * factorial(n-1)
23
24 factorial(5)

```

Sehen wir uns nun also den Dekorator `logging` in den Zeilen 4-14 an. Wie schon angedeutet, wird die Funktion `factorial` als Argument `func` an die Funktion `logging` übergeben. Der wesentliche Teil von `logging` besteht darin, eine neue Funktion, die hier den Namen `func_with_log` trägt, zu definieren, die die Funktion `func` ersetzen wird. Die Definition in den Zeilen 5-13 ist absichtlich allgemeiner gehalten als es für uns Beispiel notwendig wäre. So lässt sich der Dekorator auch in anderen Fällen direkt einsetzen. Daher lassen wir in Zeile 5 eine allgemeine Übergabe von Variablen in einem Tupel `args` und einem Dictionary `kwargs` zu.

Die zugehörigen Werte werden in der Zeile 6 durch Kommas separiert zu einem String zusammenggebaut. Dabei übernimmt die aus dem `itertools`-Modul importierte Funktion `chain` die Aufgabe, die Elemente des Tupels `args` und der Schlüssel-Wert-Tupel des Dictionaries `kwargs` zu einer einzigen Sequenz zusammenzufassen. Mit Hilfe der `map`-Funktion wird zu jedem Element mit Hilfe der `repr`-Funktion die zugehörige Darstellung erzeugt. Die `join`-Funktion baut diese Darstellung schließlich zu einem String zusammen. Nachdem dieses Verfahren etwas komplexer ist, sei angemerkt, dass dieses Vorgehen nichts mit dem Dekorator an sich zu tun hat. Vielmehr ist es durch unsere Anforderung bedingt, Logging-Information einschließlich der Aufrufparameter ausgeben zu können, und dies nicht nur für die `factorial`-Funktion, sondern in einem möglichst allgemeinen Fall. Die Ausgabe der Logging-Information erfolgt in Zeile 7. Zeile 8 bestimmt den Startzeitpunkt. In diesem Zusammenhang wurde in Zeile 1 das `time`-Modul importiert.

Nach diesen Vorarbeiten wird in Zeile 9 die eigentliche Funktion, die die Fakultät berechnen soll, aufgerufen. Typischerweise wird die ursprüngliche Funktion tatsächlich aufgerufen. Allerdings ist dies nicht unbedingt notwendig. Man könnte stattdessen hier einfach einen Hinweis ausgeben, dass nun die Fakultät zu berechnen wäre. Auf diese Weise würde man jedoch kein Ergebnis für die Fakultät erhalten.

Nachdem die `factorial`-Funktion ihr Ergebnis zurückgegeben hat, wird in Zeile 10 die verstrichene Zeit bestimmt und in Zeile 11 in Millisekunden gemeinsam mit dem Ergebnis ausgegeben. Abschließend soll die dekorierte Funktion das berechnete Resultat zurückgeben. Damit ist die Definition der dekorierten Funktion beendet und der Dekorator gibt diese Funktion in Zeile 14 zurück.

Ruft man in Zeile 24 nun die Funktion `factorial` auf, so wird wegen des `logging`-Dekorators in Wirklichkeit

die gerade besprochene, dekorierte Funktion ausgeführt. Man erhält somit die folgende Ausgabe:

```
calling factorial(5)
calling factorial(4)
calling factorial(3)
calling factorial(2)
calling factorial(1)
got factorial(1) = 1 in 0.004 ms
got factorial(2) = 2 in 0.085 ms
got factorial(3) = 6 in 0.163 ms
got factorial(4) = 24 in 0.281 ms
got factorial(5) = 120 in 0.524 ms
```

In dieser Ausgabe ist gut zu sehen, wie durch die rekursive Abarbeitung nacheinander die Fakultät von 5, von 4, von 3, von 2 und von 1 berechnet wird. Die Ausführungen sind geschachtelt, denn die Berechnung der Fakultät von 2 kann erst beendet werden, wenn die Fakultät von 1 bestimmt wurde. Entsprechend benötigt die Berechnung der Fakultät von 5 auch mehr Zeit als die Berechnung der Fakultät von 4 usw. Der `logging`-Dekorator erlaubt somit Einblicke in die Abarbeitung der rekursiven Funktion ohne dass wir in diese Funktion direkt eingreifen mussten.

Abschließend betrachten wir noch ein weiteres Anwendungsbeispiel, das besonders dann von Interesse ist, wenn die Ausführung einer Funktion relativ aufwändig ist. Dann kann es sinnvoll sein, Ergebnisse aufzubewahren und auf diese bei einem erneuten Aufruf mit den gleichen Argumenten wieder zuzugreifen. Dies setzt natürlich eine deterministische Funktion voraus, also eine Funktion, deren Ergebnis nur von den übergebenen Argumenten abhängt. Außerdem wird der Gewinn an Rechenzeit mit Speicherplatz bezahlt. Dies ist jedoch normalerweise unproblematisch, so lange sich die Zahl verschiedener Argumentwerte in Grenzen hält.

```
1 import functools
2
3 def memoize(func):
4     cache = {}
5     @functools.wraps(func)
6     def _memoize(*args):
7         if args in cache:
8             return cache[args]
9         result = func(*args)
10        cache[args] = result
11        return result
12    return _memoize
13
14 @logging
15 @memoize
16 def factorial(n):
17     if n == 1:
18         return 1
19     else:
20         return n*factorial(n-1)
```

Im `memoize`-Dekorator ist hier eine Closure realisiert, die es der Funktion `_memoize` erlaubt, auch später auf das Dictionary `cache` zuzugreifen, in dem die Ergebnisse gespeichert werden. Hierzu eignet sich ein Dictionary, weil man die Argumente in Form des Tupels `args` als Schlüssel hinterlegen kann. Allerdings ist es nicht möglich, auch ein eventuelles Dictionary `kwargs` im Schlüssel unterzubringen. Argumente, die mit Schlüsselworten übergeben werden, sind hier somit nicht erlaubt.

Aus den Zeilen 14 und 15 ersieht man, dass Dekoratoren auch geschachtelt werden können. Die Funktion `factorial` wird zunächst mit dem `memoize`-Dekorator versehen. Die so dekorierte Funktion wird dann mit dem `logging`-Dekorator versehen. Eine Schwierigkeit besteht hier allerdings darin, dass der `logging`-Dekorator für ein korrektes Funktionieren den Namen der ursprünglichen Funktion, also `factorial` benötigt. Aus diesem Grunde verwendet man in Zeile 5 den `wraps`-Dekorator aus dem `functools`-Modul, der dafür sorgt, dass Name und Dokumentationsstring diejenigen der Funktion `func` und nicht der Funktion `_memoize` sind.

Im Folgenden ist die Funktionsweise des `memoize`-Dekorators gezeigt.

```
In [1]: factorial(4)
calling factorial(4)
calling factorial(3)
calling factorial(2)
calling factorial(1)
got factorial(1) = 1 in 0.005 ms
got factorial(2) = 2 in 0.063 ms
got factorial(3) = 6 in 0.252 ms
got factorial(4) = 24 in 0.369 ms
Out[2]: 24
```

```
In [2]: factorial(3)
calling factorial(3)
got factorial(3) = 6 in 0.007 ms
Out[3]: 6
```

Beim ersten Aufruf der Funktion `factorial` wird die Fakultät rekursiv ausgewertet wie wir das schon weiter oben gesehen haben. Dabei werden aber die berechneten Werte im Dictionary cache gespeichert. Ruft man nun die Funktion mit einem Argument auf, dessen Fakultät bereits berechnet wurde, kann direkt auf das Ergebnis im Cache zugegriffen werden. Dies zeigt sich daran, dass keine rekursive Berechnung mehr durchgeführt wird und die benötigte Zeit bis zur Rückgabe des Ergebnisses sehr kurz ist.

Abschließend sei noch kurz erwähnt, dass Dekoratoren auch ein Argument haben können, das wie üblich in Klammern angegeben wird. Dabei ist zu beachten, dass dem Dekorator dann nicht mehr wie in den hier diskutierten Beispielen die zu dekorierende Funktion übergeben wird, sondern das angegebene Argument. Die zu dekorierende Funktion wird dafür dann an die im Dekorator definierte Funktion übergeben.

2.6 Ausnahmen

Bereits in der »Einführung in das Programmieren« hatten wir Ausnahmen (*exceptions*) kennengelernt und gesehen, wie man mit einem `except`-Block auf eine Ausnahme reagieren kann. Zudem haben wir im Abschnitt *Generatoren und Iteratoren* eine Anwendung gesehen, in der wir selbst eine Ausnahme ausgelöst haben, nämlich eine `StopIteration`-Ausnahme. Im Folgenden sollen noch einige Aspekte von Ausnahmen diskutiert werden, die bis jetzt zu kurz kamen.

Grundsätzlich ist es sinnvoll, möglichst spezifisch auf Ausnahmen zu reagieren. Daher sollte zum einen der `try`-Block kurz gehalten werden, um einen möglichst direkten Zusammenhang zwischen Ausnahme und auslösendem Code zu garantieren. Zum anderen sollten nicht unnötig viele Ausnahmen gleichzeitig in einem `except`-Block abgefangen werden.

```
In [1]: try:
....     datei = open('test.dat')
.... except IOError as e:
....     print('abgefangener Fehler:', e)
.... else:
....     content = datei.readlines()
....     datei.close()
....
```

```
In [2]: content
Out[2]: ['Das ist der Inhalt der Test-Datei.\n']
```

```
In [3]: try:
....     datei = open('test.dat')
.... except IOError as e:
....     print('abgefangener Fehler:', e)
.... else:
....     content = datei.readlines()
....     datei.close()
....
```

abgefangener Fehler: [Errno 2] No such file or directory: 'test.dat'

Bei der ersten Eingabe ist die Datei test.dat vorhanden und kann geöffnet werden. Der except-Block wird daher übersprungen und der else-Block ausgeführt. Im Prinzip hätte man den Inhalt des else-Blocks auch im try-Block unterbringen können. Die hier gezeigte Variante hat jedoch den Vorteil, dass der Zusammenhang zwischen dem Versuch, eine Datei zu öffnen, und der eventuellen IOError-Ausnahme eindeutig ist. In der Eingabe 3 ist die Datei test.dat nicht vorhanden, und es wird der except-Block ausgeführt. Die Variable e nach dem Schlüsselwort as enthält dabei Informationen, die beim Auslösen der Ausnahme übergeben wurden und hier im except-Block zur Information des Benutzers ausgegeben werden. Der else-Block wird hier im Gegensatz zum ersten Fall nicht ausgeführt.

Wenn die Ausführung des Codes im try-Block potentiell zu verschiedenen Ausnahmen führen kann, ist es sinnvoll, mehrere except-Blöcke vorzusehen, wie das folgende Beispiel zeigt.

```

1 def myfunc(x):
2     mydict = {1: 'eins', 2: 'zwei'}
3     try:
4         print(mydict[int(x)])
5     except KeyError as e:
6         print('KeyError:', e)
7     except TypeError as e:
8         print('TypeError:', e)
9
10 myfunc(1.5)
11 myfunc(5.5)
12 myfunc(1+3j)
```

Während der Funktionsaufruf in Zeile 10 keine Ausnahme auslöst, führen die Aufrufe in den Zeilen 11 und 12 zu einem KeyError, da es den Schlüssel 5 in mydict nicht gibt, bzw. zu einem TypeError weil sich die komplexe Zahl 1+3j nicht in einen Integer umwandeln lässt. Die Ausgabe sieht dementsprechend folgendermaßen aus:

```
eins
KeyError: 5
TypeError: can't convert complex to int
```

In diesem Beispiel wird Code wiederholt. Dies lässt sich verhindern, wenn man die Funktion wie folgt definiert.

```

1 def myfunc(x):
2     mydict = {1: 'eins', 2: 'zwei'}
3     try:
4         print(mydict[int(x)])
5     except (KeyError, TypeError) as e:
6         print(": ".join([type(e).__name__, str(e)]))
```

Möchte man alle Ausnahmen abfangen, so kann man das Tupel in Zeile 5 zum Beispiel durch Exception oder gar BaseException ersetzen. Auf den Hintergrund hierfür kommen wir etwas später noch zurück.

Einer Folge von except-Blöcken könnte sich natürlich auch wieder ein else-Block anschließen, wie wir dies weiter oben gesehen hatten. Allerdings gibt es nicht nur Situationen, wo abhängig vom Auftreten einer Ausnahme der eine oder andere Block abgearbeitet wird, sondern es kann auch vorkommen, dass am Ende auf jeden Fall ein gewisser Codeblock ausgeführt werden soll. Ein typischer Fall ist das Schreiben in eine Datei. Dabei muss am Ende sichergestellt werden, dass die Datei geschlossen wird. Hierzu dient der finally-Block. Betrachten wir ein Beispiel.

```

def myfunc(nr, x):
    datei = open('test_%i.dat' % nr, 'w')
    datei.write('ANFANG\n')
    try:
        datei.write('%g\n' % (1/x))
    except ZeroDivisionError as e:
        print('ZeroDivisionError:', e)
    finally:
```

```

        datei.write('ENDE\n')
        datei.close()

for nr, x in enumerate([1.5, 0, 'Test']):
    myfunc(nr, x)

```

In der Funktion `myfunc` soll der Kehrwert des Arguments in die Datei `test.dat` geschrieben werden. Es ergibt sich die folgende Ausgabe:

```

--- test_0.dat ---
ANFANG
0.666667
ENDE

--- test_1.dat ---
ANFANG
ENDE

--- test_2.dat ---
ANFANG
ENDE

```

Dabei wird im zweiten Fall wegen der Division durch Null kein Kehrwert ausgegeben, während im dritten Fall ein `TypeError` auftritt, weil versucht wird, durch einen String zu dividieren. Diese Ausnahme wird zwar nicht abgefangen, aber es ist immerhin garantiert, dass die Ausgabedatei ordnungsgemäß geschlossen wird.

Was würde passieren, wenn man das Schließen der Datei nicht in einem `finally`-Block unterbringt, sondern einfach am Ende der Funktion ausführen lässt? Wir modifizieren unseren Code entsprechend:

```

1 def myfunc(nr, x):
2     datei = open('test_%i.dat' % nr, 'w')
3     datei.write('ANFANG\n')
4     try:
5         datei.write("%g\n" % (1/x))
6     except ZeroDivisionError as e:
7         print('ZeroDivisionError:', e)
8     datei.write('ENDE\n')
9     datei.close()
10
11 for nr, x in enumerate([1.5, 0, 'Test']):
12     myfunc(nr, x)

```

Nun erhält man die folgenden Dateiinhalte:

```

--- test_0.dat ---
ANFANG
0.666667
ENDE

--- test_1.dat ---
ANFANG
ENDE

--- test_2.dat ---
ANFANG

```

Wie man sieht, ist die letzte Datei unvollständig. Die nicht abgefangene `TypeError`-Ausnahme führt zu einem Programmabbruch, der sowohl die Ausführung des `write`-Befehls in Zeile 10 als auch das Schließen der Datei verhindert. In der ersten Variante des Programms dagegen gehört der `finally`-Block zum `try...except`-Block und wird somit auf jeden Fall ausgeführt. Erst danach führt der `TypeError` in diesem Fall zum Programmabbruch.

Selbst in obigem Beispiel ohne `finally`-Block wurde die Datei geschlossen, da dies spätestens durch das Betriebssystem beim Programmende veranlasst wird. Es ist aber dennoch kein guter Stil, sich hierauf zu verlassen.

Eine Datei nicht zu schließen, kann in Python Schwierigkeiten bereiten, wenn man die Datei anschließend wieder zum Lesen öffnen will. Auch wenn man auf eine große Zahl von Dateien schreiben möchte, kann es zu Problemen kommen, wenn man Dateien nicht schließt, da die Zahl der offenen Dateien beschränkt ist. In diesem Zusammenhang gibt es Unterschiede zwischen verschiedenen Implementationen von Python. In CPython, also der standardmäßig verwendeten, in der Programmiersprache C implementierten Version von Python, sorgt ein als »garbage collection« bezeichneter Prozess, also das Einsammeln von (Daten-)Müll, dafür, dass überflüssige Objekte entfernt werden. Hierbei werden auch Dateien geschlossen, auf die nicht mehr zugegriffen wird. Allerdings wird dies nicht durch die Sprachdefinition garantiert. In Jython, einer Python-Implementation für die Java Virtual Machine, ist dies tatsächlich nicht der Fall.

Python stellt standardmäßig bereits eine große Zahl von Ausnahmen zur Verfügung, die alle als Unterklassen von einer Basisklasse, der `BaseException` abgeleitet sind. Die folgende Klassenhierarchie der Ausnahmen ist der Python-Dokumentation entnommen, wo die einzelnen Ausnahmen auch genauer beschrieben sind.⁶

```
BaseException
+-- SystemExit
+-- KeyboardInterrupt
+-- GeneratorExit
--- Exception
    +-- StopIteration
    +-- StandardError
        |    +-- BufferError
        |    +-- ArithmeticError
        |    |    +-- FloatingPointError
        |    |    +-- OverflowError
        |    |    +-- ZeroDivisionError
        |    +-- AssertionError
        |    +-- AttributeError
        |    +-- EnvironmentError
        |    |    +-- IOError
        |    |    +-- OSError
        |    |    +-- WindowsError (Windows)
        |    |    +-- VMSError (VMS)
        +-- EOFError
        +-- ImportError
        +-- LookupError
        |    +-- IndexError
        |    +-- KeyError
        +-- MemoryError
        +-- NameError
        |    +-- UnboundLocalError
        +-- ReferenceError
        +-- RuntimeError
        |    +-- NotImplementedError
        +-- SyntaxError
        |    +-- IndentationError
        |    +-- TabError
        +-- SystemError
        +-- TypeError
        +-- ValueError
            +-- UnicodeError
                +-- UnicodeDecodeError
                +-- UnicodeEncodeError
                +-- UnicodeTranslateError
--- Warning
    +-- DeprecationWarning
    +-- PendingDeprecationWarning
    +-- RuntimeWarning
    +-- SyntaxWarning
    +-- UserWarning
    +-- FutureWarning
```

⁶ Siehe [6. Built-in Exceptions](#) in der Dokumentation der Standardbibliothek von Python.

```
+-- ImportWarning
+-- UnicodeWarning
+-- BytesWarning
```

Will man gleichzeitig Ausnahmen abfangen, die Unterklassen einer gemeinsamen Klasse sind, so kann man stattdessen auch direkt die entsprechende Ausnahmeklasse abfangen. Somit sind beispielsweise

```
except (IndexError, KeyError) as e:
```

und

```
except LookupError as e:
```

äquivalent. Man kann die vorhandenen Ausnahmeklassen, sofern sie von der Fehlerart her passend sind, auch direkt für eigene Zwecke verwenden oder Unterklassen programmieren. Beim Auslösen einer Ausnahme kann dabei auch eine entsprechende Fehlermeldung mitgegeben werden.

```
In [1]: raise ValueError('42 ist keine erlaubte Eingabe!')
```

```
-----
ValueError                                                 Traceback (most recent call last)
<ipython-input-1-c6e93f8997ca> in <module>()
----> 1 raise ValueError("42 ist keine erlaubte Eingabe!")

ValueError: 42 ist keine erlaubte Eingabe!
```

Hat man eine Ausnahme abgefangen, so hat man die Möglichkeit, nach einer adäquaten Reaktion die Ausnahme erneut auszulösen. Geschieht dies in einer Funktion, so hat das aufrufende Programm wiederum die Möglichkeit, entsprechend zu reagieren. Dies ist im folgenden Beispiel illustriert.

```
def reciprocal(x):
    try:
        return 1/x
    except ZeroDivisionError:
        msg = 'Maybe the main program knows what to do...'
        raise ZeroDivisionError(msg)

    try:
        reciprocal(0)
    except ZeroDivisionError as e:
        print(e)
        print("Let's just continue!")

print("That's the end of the program.")
```

Dieses Programm erzeugt die folgende Ausgabe:

```
Maybe the main program knows what to do...
Let's just continue!
That's the end of the program.
```

Die Funktion `reciprocal` fängt die Division durch Null ab. Sie verhindert damit den vorzeitigen Programmabbruch und gibt dem Hauptprogramm die Chance, in geeigneter Weise zu reagieren. Dies geschieht hier, indem wiederum der `ZeroDivisionError` abgefangen wird.

2.7 Kontext mit `with`-Anweisung

Im vorigen Abschnitt hatten wir im Zusammenhang mit dem Zugriff auf eine Datei ein typisches Szenario kennengelernt, bei dem die eigentliche Funktionalität zwischen zwei Schritte eingebettet ist, in denen zunächst Vorbereitungen getroffen werden und am Ende notwendige Aufräumarbeiten durchgeführt werden. In unserem Beispiel wäre dies das Öffnen der Datei zu Beginn und das Schließen der Datei am Ende. Eine solche Situation kann in Python mit Hilfe eines Kontextmanagers elegant bewältigt werden. Dies ist im folgenden Beispiel gezeigt.

```
with open('test.dat', 'w') as file:
    for n in range(4, -1, -1):
        file.write('{:g}\n'.format(1/n))
```

Dies entspricht einem `try...finally`-Konstrukt, bei dem im `finally`-Block unabhängig vom Auftreten einer Ausnahme die Datei wieder geschlossen wird. Die Ausgabedatei hat dann den folgenden Inhalt:

```
0.25
0.333333
0.5
1
```

Sie wurde explizit beim Verlassen des `with`-Blocks geschlossen, nachdem zuvor die Variable `n` den Wert Null erreicht hat und die Division eine `ZeroDivisionError`-Ausnahme ausgelöst hat. Um dies zu überprüfen, muss man die Ausnahme abfangen.

```
try:
    with open('test.dat', 'w') as file:
        for n in range(4, -1, -1):
            file.write('{:g}\n'.format(1/n))
except ZeroDivisionError:
    print('division by zero')

print('file is closed: {}'.format(file.closed))
```

Die zugehörige Ausgabe lautet dann wie erwartet:

```
division by zero
file is closed: True
```

Kontextmanager können unter anderem beim Arbeiten mit Cython⁷ nützlich sein. Cython ermöglicht die Optimierung von Python-Skripten, indem es C-Erweiterungen anbietet. Dazu gehört unter anderem die Möglichkeit, den Datentyp von Variablen festzulegen. In Python werden Listenindizes normalerweise darauf überprüft, ob sie innerhalb des zulässigen Bereichs liegen, und es werden negative Indizes entsprechend behandelt. Dies kostet natürlich Zeit. Ist man sich sicher, dass man weder negative Indizes benutzt noch die Listengrenzen überschreitet, so kann man bei der Benutzung von Cython auf die genannte Funktionalität verzichten. Will man dies in einem begrenzten Code-Block tun, so bietet sich die Verwendung von `with cython.boundscheck(False)` an. Eine andere Anwendung besteht im Ausschalten des *Global Interpreter Locks*⁸ von Python mit Hilfe des `nogil`-Kontextmanagers.

⁷ Weitere Informationen zu Cython findet man unter www.cython.org. Cython sollte nicht mit CPython verwechselt werden, der C-Implementation von Python, die man standardmäßig beim `python`-Aufruf verwendet.

⁸ Siehe das [Glossar der Python-Dokumentation](#) für eine kurze Erläuterung des GIL.

NumPy

In der Vorlesung »Einführung in das Programmieren für Physiker und Naturwissenschaftler« wurde am Beispiel von NumPy und SciPy eine kurze Einführung in die Benutzung numerischer Programmbibliotheken gegeben. Dabei wurde an einigen wenigen Beispielen gezeigt, wie man in Python mit Vektoren und Matrizen arbeiten und einfache Problemstellungen der linearen Algebra lösen kann. Im Folgenden wollen wir uns etwas genauer mit NumPy beschäftigen ohne dabei eine vollständige Beschreibung anzustreben. Bei Bedarf sollte daher die [NumPy Referenzdokumentation](#) herangezogen werden. Als Informationsquelle sind zudem die [Python Scientific Lecture Notes](#) empfehlenswert. Dort werden auch andere Programmbibliotheken diskutiert, die in naturwissenschaftlichen Anwendungen hilfreich sein können.

3.1 Python-Listen und NumPy-Arrays

Viele naturwissenschaftliche Problemstellungen lassen sich in natürlicher Weise mit Hilfe von Vektoren und Matrizen formulieren. Dies kann entweder eine Eigenschaft des ursprünglichen Problems sein, beispielsweise bei der Beschreibung eines gekoppelten schwingenden Systems mit Hilfe von gekoppelten Differentialgleichungen. Es kann aber auch vorkommen, dass erst die numerische Umsetzung zu einer Formulierung in Vektoren und Matrizen führt, zum Beispiel bei der Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung.

Will man solche Problemstellungen mit den Standardmitteln bearbeiten, die von Python zur Verfügung gestellt werden, so wird man auf Listen zurückgreifen müssen. Um eine zweidimensionale Matrix zu definieren, würde man eine Liste von Listen anlegen und könnte dann durch eine doppelte Indizierung auf ein einzelnes Element zugreifen.

```
In [1]: matrix = [[1.1, 2.2, 3.3], [4.4, 5.5, 6.6], [7.7, 8.8, 9.9]]  
In [2]: matrix[0]  
Out[2]: [1.1, 2.2, 3.3]  
  
In [3]: matrix[0][2]  
Out[3]: 3.3
```

Das Beispiel erklärt die doppelte Indizierung. Durch den ersten Index, hier `[0]`, wird die erste Unterliste ausgewählt aus der wiederum ein einzelnes Element, hier das dritte, ausgewählt werden kann. Somit besteht hier, ganz im Gegensatz zu zweidimensionalen Matrizen, ein grundsätzlicher Unterschied zwischen Zeilen und Spalten. Eine Zeile kann man entweder wie oben in der Eingabe 2 erhalten oder auch etwas umständlicher mit

```
In [4]: matrix[0][:]  
Out[4]: [1.1, 2.2, 3.3]
```

Hier ist explizit angegeben, dass wir alle Elemente der ersten Zeile haben wollen. Ein entsprechender Zugriff auf eine Spalte funktioniert jedoch nicht:

```
In [5]: matrix[:, 0]  
Out[5]: [1.1, 2.2, 3.3]
```

Hier gibt `matrix[:]` eine Liste mit allen Unterlisten, also einfach die ursprüngliche Liste zurück. Somit ist `matrix[:][0]` nichts anderes als die erste Unterliste. Wir erhalten also wiederum die erste Zeile und keineswegs die erste Spalte. Allgemein ist die Extraktion einer Untermatrix aus einer durch Listen dargestellten Matrix nicht ohne einen gewissen Aufwand möglich.

Ein weiterer Nachteil besteht in der Flexibilität von Listen, die ja bekanntlich beliebige Objekte enthalten können. Python muss daher einen erheblichen Aufwand bei der Verwaltung von Listen treiben. Dies betrifft alleine schon die Adressierung eines einzelnen Elements. Andererseits wird diese Flexibilität bei Matrizen überhaupt nicht benötigt, da dort alle Einträge vom gleichen Datentyp sind. Es sollte also möglich sein, erheblich effizientere Programme zu schreiben, indem man Matrizen nicht durch Listen darstellt, sondern durch einen auf diese Aufgabe zugeschnittenen Datentypen. Hierzu greift man auf das von NumPy zur Verfügung gestellte `ndarray`-Objekt, also ein N-dimensionales Array, zurück.

Ein Array¹ besitzt als wesentliche Bestandteile die Daten im eigentlichen Sinne, also die Werte der einzelnen Matrixelemente, sowie Information darüber, wie auf ein spezifisches Matrixelement zugegriffen werden kann. Die Daten sind im Speicher einfach hintereinander, also in eindimensionaler Form, abgelegt. Dabei gibt es die Möglichkeit, die Matrix zeilenweise oder spaltenweise abzuspeichern. Ersteres wird von der Programmiersprache C verwendet, während die zweite Variante von Fortran verwendet wird.

Nachdem die Daten strukturlos im Speicher abgelegt sind, müssen `ndarray`-Objekte, wie schon erwähnt, neben den Daten auch Informationen darüber besitzen, wie auf einzelne Matrixelemente zugegriffen wird. Auf diese Weise lässt sich sehr leicht die Adresse der Daten eines Matrixelements bestimmen. Zudem ist es möglich, die gleichen Daten im Speicher auf verschiedene Weise anzusehen. Damit ist es häufig möglich, unnötige Kopiervorgänge im Speicher zu vermeiden. Andererseits ist es aus diesem Grunde wichtig zu wissen, ob NumPy im Einzelfall nur eine andere Sicht auf die Daten zur Verfügung stellt oder tatsächlich ein neues Array erzeugt.

Um die Informationen über die Struktur eines Arrays besser zu verstehen, betrachten wir ein Beispiel.

```
In [1]: import numpy as np  
  
In [2]: matrix = np.arange(16)  
  
In [3]: matrix  
Out[3]: array([ 0,  1,  2,  3,  4,  5,  6,  7,  8,  9, 10, 11, 12, 13, 14, 15])  
  
In [4]: matrix.dtype, matrix.itemsize, matrix.size, matrix.nbytes  
Out[4]: (dtype('int64'), 8, 16, 128)  
  
In [5]: matrix.shape  
Out[5]: (16,)  
  
In [6]: matrix.strides  
Out[6]: (8,)
```

Wir laden zunächst das `numpy`-Modul, für das üblicherweise die Abkürzung `np` verwendet wird. Dieser Schritt wird in allen folgenden Beispielen vorausgesetzt. Dann erzeugen wir uns auf möglichst einfache Weise ein Array mit 16 Elementen. Die Funktionsweise von `arange` werden wir später noch etwas ausführlicher diskutieren. Wir erhalten somit ein eindimensionales Array, das die Zahlen von 0 bis 15 als Integers enthält. Das Objekt `matrix` hat nun einige Eigenschaften. Der Datentyp `dtype` ist hier `int64`, also ein Integer mit einer Länge von 64 Bit oder 8 Bytes. Letzteres wird auch durch das Attribut `itemsize` angegeben. Die Größe des Arrays, also `size`, ist 16, so dass sich insgesamt ein Speicherbedarf `nbytes` von 128 Bytes ergibt. Das Tupel `shape` gibt die Form des Arrays an. In unserem Fall gibt es nur eine Dimension, die 16 Elemente enthält. Das Tupel `strides` schließlich gibt an, wie weit benachbarte Elemente in einer bestimmten Dimension voneinander entfernt sind. Bei einem eindimensionalen Array ist dies gerade die Zahl der Bytes, die ein Dateneintrag benötigt.

Mit Hilfe der Attribute `shape` und `strides` kann man nun eine andere Sicht auf das gleiche Array erhalten.

```
In [7]: matrix.shape = (4, 4)  
  
In [8]: matrix
```

¹ Wir verwenden im Folgenden das englische Wort *Array*, um damit den `ndarray`-Datentyp aus NumPy zu bezeichnen. Ein Grund dafür, nicht von Matrizen zu sprechen, besteht darin, dass sich Arrays nicht notwendigerweise wie Matrizen verhalten. So entspricht das Produkt von zwei Arrays im Allgemeinen nicht dem Matrixprodukt.

```
Out[8]:  
array([[ 0,  1,  2,  3],  
       [ 4,  5,  6,  7],  
       [ 8,  9, 10, 11],  
       [12, 13, 14, 15]])  
  
In [9]: matrix.strides  
Out[9]: (32, 8)  
  
In [10]: matrix.shape = (2, 2, 2, 2)  
  
In [11]: matrix  
Out[11]:  
array([[[[ 0,  1],  
           [ 2,  3]],  
  
           [[[ 4,  5],  
             [ 6,  7]]],  
  
           [[[ 8,  9],  
             [10, 11]],  
  
             [[12, 13],  
              [14, 15]]]])  
  
In [12]: matrix.strides  
Out[12]: (64, 32, 16, 8)
```

Wir interpretieren zunächst die 16 Matrixelemente als ein 4×4 -Array, ohne dabei die eigentlichen Array-Daten im Speicher in irgendeiner Weise zu modifizieren. Lediglich das Attribut `shape` haben wir neu gesetzt. Das Attribut `strides` gibt uns nun an, dass der Abstand der Daten in der ersten Dimension, also innerhalb einer Spalte, 32 Bytes beträgt, während der Abstand in der zweiten Dimension, also innerhalb einer Zeile, nach wie vor 8 ist. So lange das Produkt der Dimensionen der Gesamtzahl der Matrixelemente entspricht, können wir auch andere Matrixdimensionen wählen. So können wir unsere Daten auch als ein $2 \times 2 \times 2 \times 2$ -Array ansehen, wie der zweite Teil der obigen Ausgabe zeigt.

Mit Hilfe der Attribute `shape` und `strides` lässt sich die Sicht auf ein Array auf sehr flexible Weise festlegen. Allerdings ist der Benutzer selbst für die Folgen verantwortlich, wie der zweite Teil des folgenden Beispiels zeigt. Dazu gehen wir zum 4×4 -Array zurück und verändern das Attribut `strides` mit Hilfe der `as_strided`-Methode.

```
In [13]: matrix.shape = (4, 4)  
  
In [14]: matrix1 = np.lib.stride_tricks.as_strided(matrix, strides=(16, 16))  
  
In [15]: matrix1  
Out[15]:  
array([[ 0,  2,  4,  6],  
       [ 2,  4,  6,  8],  
       [ 4,  6,  8, 10],  
       [ 6,  8, 10, 12]])  
  
In [16]: matrix2 = np.lib.stride_tricks.as_strided(matrix, shape=(4, 4), strides=(16, 4))  
  
In [17]: matrix2  
Out[17]:  
array([[ 0,  4294967296,  1,  8589934592],  
      [ 2, 12884901888,  3, 17179869184],  
      [ 4, 21474836480,  5, 25769803776],  
      [ 6, 30064771072,  7, 34359738368]])
```

Im ersten Fall ist der Wert der `strides` gerade das Doppelte der Datenbreite, so dass in einer Zeile von einem Wert

zum nächsten jeweils ein Wert im Array übersprungen wird. Beim Übergang von einer Zeile zur nächsten wird gegenüber dem Beginn der vorherigen Zeile auch nur um zwei Werte vorangeschritten, so dass sich das gezeigte Resultat ergibt.

Im zweiten Beispiel wurde ein *stride* gewählt, der nur die Hälfte einer Datenbreite beträgt. Der berechnete Beginn eines neuen Werts im Speicher liegt damit nicht an einer Stelle, die einem tatsächlichen Beginn eines Werts entspricht. Python interpretiert dennoch die erhaltene Information und erzeugt so das obige Array. In unserem Beispiel erreicht man bei jedem zweiten Wert wieder eine korrekte Datengrenze. Die Manipulation von *strides* erfordert also eine gewisse Sorgfalt, und man ist für eventuelle Fehler selbst verantwortlich.

Für die Anwendung ist es wichtig zu wissen, dass die Manipulation der Attribute `shape` und `strides` nicht die Daten im Speicher verändert. Es wird also nur eine neue Sicht auf die vorhandenen Daten vermittelt. Dies ist insofern von Bedeutung als das Kopieren von größeren Datenmengen durchaus mit einem größeren Zeitaufwand verbunden sein kann. Ein Beispiel für die Durchführung einer häufigen Matrixoperation durch Anpassung der *strides* werden wir gleich sehen. Zuvor wollen wir uns aber überzeugen, dass in den obigen Beispielen tatsächlich kein neues Array erzeugt wurde.

Dazu setzen wir den oberen linken Eintrag im ursprünglichen Array auf einen neuen Wert und zeigen, dass diese Änderung auch in den Arrays mit veränderten *strides* zu sehen ist.

```
In [18]: matrix[0, 0] = 99
```

```
In [19]: matrix
```

```
Out[19]: array([[99,  1,  2,  3],
   [ 4,  5,  6,  7],
   [ 8,  9, 10, 11],
   [12, 13, 14, 15]])
```

```
In [20]: matrix1
```

```
Out[20]: array([[99,  2,  4,  6],
   [ 2,  4,  6,  8],
   [ 4,  6,  8, 10],
   [ 6,  8, 10, 12]])
```

Eine Matrix lässt sich nun transponieren, ohne dass Matrixelemente im Speicher hin und her kopiert werden müssen. Dies zeigt das folgende Beispiel, in welchem einfach die zwei Werte der *strides* vertrauscht werden:

```
In [21]: matrix, matrix.strides
```

```
Out[21]: (array([[99,  1,  2,  3],
   [ 4,  5,  6,  7],
   [ 8,  9, 10, 11],
   [12, 13, 14, 15]]), (32, 8))
```

```
In [22]: np.lib.stride_tricks.as_strided(matrix, strides=(8, 32))
```

```
Out[22]: array([[99,  4,  8, 12],
   [ 1,  5,  9, 13],
   [ 2,  6, 10, 14],
   [ 3,  7, 11, 15]])
```

Obwohl die Daten im Speicher nicht verändert wurden, kann man jetzt mit der transponierten Matrix arbeiten.

3.2 Erzeugung von NumPy-Arrays

NumPy-Arrays lassen sich je nach Bedarf auf verschiedene Arten erzeugen. Die Basis bildet die `ndarray`-Methode, auf die man immer zurückgreifen kann. In den meisten Fällen wird es aber praktischer sein, auf angepasste Methoden zurückgreifen, die wir im Folgenden besprechen wollen.

Um ein mit Nullen aufgefülltes 2×2 -Array zu erzeugen, geht man folgendermaßen vor:

```
In [1]: matrix1 = np.zeros((2, 2))

In [2]: matrix1, matrix1.dtype
Out[2]:
(array([[ 0.,  0.],
       [ 0.,  0.]]), dtype('float64'))
```

Das Tupel im Argument gibt dabei die Form des Arrays vor. Wird der Datentyp der Einträge nicht weiter spezifiziert, so werden Gleitkommazahlen mit einer Länge von 8 Byte verwendet. Man kann aber auch explizit zum Beispiel Integereinträge verlangen:

```
In [3]: np.zeros((2, 2), dtype=np.int)
Out[3]:
array([[0, 0],
       [0, 0]])
```

Will man alle Elemente eines Arrays mit einem konstanten Wert ungleich Null füllen, so kann man `ones` verwenden und das sich ergebende Array mit einem Faktor multiplizieren.

```
In [4]: 2*np.ones((2, 3))
Out[4]:
array([[ 2.,  2.,  2.],
       [ 2.,  2.,  2.]])
```

Häufig benötigt man eine Einheitsmatrix, die man mit Hilfe von `identity` erhält:

```
In [5]: np.identity(3)
Out[5]:
array([[ 1.,  0.,  0.],
       [ 0.,  1.,  0.],
       [ 0.,  0.,  1.]])
```

Hierbei wird immer eine Diagonalmatrix erzeugt. Will man dies nicht, so kann man `eye` verwenden, das nicht nur nicht quadratische Arrays erzeugen kann, sondern auch die Diagonale nach oben oder unten verschieben lässt.

```
In [6]: np.eye(2, 4)
Out[6]:
array([[ 1.,  0.,  0.,  0.],
       [ 0.,  1.,  0.,  0.]])
```

Zu beachten ist hier, dass die Form des Arrays nicht als Tupel vorgegeben wird, da ohnehin nur zweidimensionale Arrays erzeugt werden können. Lässt man das zweite Argument weg, so wird ein quadratisches Array erzeugt. Will man die Diagonaleinträge verschieben, so gibt man dies mit Hilfe des Parameters `k` an:

```
In [7]: np.eye(4, k=1)-np.eye(4, k=-1)
Out[7]:
array([[ 0.,  1.,  0.,  0.],
       [-1.,  0.,  1.,  0.],
       [ 0., -1.,  0.,  1.],
       [ 0.,  0., -1.,  0.]])
```

Hat man, wie zu Beginn des vorigen Abschnitts beschrieben, eine Matrix in Form einer Liste mit Unterlisten vorliegen, so kann man diese in ein Array umwandeln:

```
In [8]: np.array([[1, 2], [3, 4]])
Out[8]:
array([[1, 2],
       [3, 4]])
```

Dies geht zum Beispiel auch, wenn man statt Listen Tupel vorliegen hat.

Lassen sich die Arrayeinträge als Funktion der Indizes ausdrücken, so kann man die `fromfunction`-Funktion verwenden, wie in dem folgenden Beispiel zu sehen ist, das eine Multiplikationstabelle erzeugt.

```
In [9]: np.fromfunction(lambda i, j: (i+1)*(j+1), (6, 6), dtype=np.int)
Out[9]:
array([[ 1,  2,  3,  4,  5,  6],
       [ 2,  4,  6,  8, 10, 12],
       [ 3,  6,  9, 12, 15, 18],
       [ 4,  8, 12, 16, 20, 24],
       [ 5, 10, 15, 20, 25, 30],
       [ 6, 12, 18, 24, 30, 36]])
```

Diese Funktion ist nicht auf zweidimensionale Arrays beschränkt.

Bei der Konstruktion von Arrays sind auch Funktionen interessant, die als Verallgemeinerung der in Python eingebauten Funktion `range` angesehen werden können. Ihr Nutzen ergibt sich vor allem aus der Tatsache, dass man gewissen Funktionen, den universellen Funktionen oder ufuncs in NumPy, die wir später noch besprechen werden, ganze Arrays als Argumente übergeben kann. Damit wird eine besonders effiziente Auswertung dieser Funktionen möglich.

Eindimensionale Arrays lassen sich mit Hilfe von `arange`, `linspace` und `logspace` erzeugen:

```
In [10]: np.arange(1, 2, 0.1)
Out[10]: array([ 1. ,  1.1,  1.2,  1.3,  1.4,  1.5,  1.6,  1.7,  1.8,  1.9])

In [11]: np.linspace(1, 2, 11)
Out[11]: array([ 1. ,  1.1,  1.2,  1.3,  1.4,  1.5,  1.6,  1.7,  1.8,  1.9,  2. ])

In [12]: np.linspace(1, 2, 4, retstep=True)
Out[12]:
(array([ 1.          ,  1.33333333,  1.66666667,  2.          ]),
 0.333333333333333)

In [13]: np.logspace(0, 3, 6)
Out[13]:
array([ 1.          ,  3.98107171,  15.84893192,  63.09573445,
       251.18864315, 1000.        ])

In [14]: np.logspace(0, 3, 4, base=2)
Out[14]: array([ 1.,  2.,  4.,  8.])
```

Ähnlich wie bei `range` erzeugt `arange` aus der Angabe eines Start- und eines Endwerts sowie einer Schrittweite eine Folge von Werten. Allerdings können diese auch Gleitkommazahlen sein. Zudem wird statt einer Liste ein Array erzeugt. Wie bei `range` ist der Endwert hierin nicht enthalten.

Häufig möchte man aber statt einer Schrittweite eine Anzahl von Punkten vorgeben. Dafür ist `linspace` eine geeignete Funktion, sofern die Schrittweite konstant sein soll. Bei Bedarf kann man sich neben dem Array auch noch die Schrittweite ausgeben lassen. Benötigt man eine logarithmische Skala, so verwendet man `logspace`, das den Exponenten linear zwischen einem Start- und einem Endwert verändert. Die Basis ist standardmäßig 10, sie kann aber durch Setzen des Parameters `base` an spezielle Erfordernisse angepasst werden.

Möchte man eine Funktion auf einem Gitter auswerten und benötigt man dazu separate Arrays für die x- und y-Werte, so hilft `meshgrid` weiter.

```
In [15]: xvals, yvals = np.meshgrid([-1, 0, 1], [2, 3, 4])
In [16]: xvals
Out[16]:
array([[-1,  0,  1],
       [-1,  0,  1],
       [-1,  0,  1]])

In [17]: yvals
Out[17]:
array([[2, 2, 2],
       [3, 3, 3],
       [4, 4, 4]])
```

In diesem Zusammenhang sind auch die Funktionen `mgrid` und `ogrid` von Interesse, die wir besprechen werden, wenn wir die Adressierung von Arrays genauer angesehen haben.

Abschließend wollen wir noch kurz andeuten, wie man ein Array durch Einlesen von Daten aus einer Datei erhalten kann. Die Datei heiße `x_von_t.dat` und habe den folgenden Inhalt:

```
# Zeit  Ort
0.0  0.0
0.1  0.1
0.2  0.4
0.3  0.9
```

Hierbei zeigt das `#`-Zeichen in der ersten Zeile an, dass es sich um eine Kommentarzeile handelt, die nicht in das Array übernommen werden soll. Unter Verwendung von `loadtxt` kann man die Daten nun einlesen:

```
In [18]: np.loadtxt("x_von_t.dat")
Out[18]:
array([[ 0.,  0.],
       [ 0.1,  0.1],
       [ 0.2,  0.4],
       [ 0.3,  0.9]])
```

Bei der `loadtxt`-Funktion lassen sich zum Beispiel das Kommentarzeichen oder die Trennzeichen zwischen Einträgen konfigurieren. Noch wesentlich flexibler ist `genfromtxt`, das es unter anderem erlaubt, Spaltenüberschriften aus der Datei zu entnehmen oder mit fehlenden Einträgen umzugehen. Für Details wird auf die zugehörige Dokumentation verwiesen.

3.3 Adressierung von NumPy-Arrays

Die Adressierungsmöglichkeiten für NumPy-Arrays basieren auf der so genannten *slice*-Syntax, die wir von Python-Listen her kennen und uns hier noch einmal kurz in Erinnerung rufen wollen. Einen Ausschnitt aus einer Liste, ein *slice*, erhält man durch die Notation `[start:stop:step]`. Hierbei werden ausgehend von dem Element mit dem Index `start` die Elemente bis vor das Element mit dem Index `stop` mit einer Schrittweite `step` ausgewählt. Wird die Schrittweite nicht angegeben, so nimmt `step` den Defaultwert `1` an. Negative Schrittweiten führen in der Liste von hinten nach vorne. Fehlen `start` und/oder `stop` so beginnen die ausgewählten Elemente mit dem ersten Element bzw. enden mit dem letzten Element. Negative Indexwerte werden vom Ende der Liste her genommen. Das letzte Element kann also mit dem Index `-1`, das vorletzte Element mit dem Index `-2` usw. angesprochen werden. Diese Indizierung funktioniert so auch für NumPy-Arrays wie die folgenden Beispiele zeigen.

```
In [19]: a = np.arange(10)

In [20]: a
Out[20]: array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])

In [21]: a[:]
Out[21]: array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])

In [22]: a[::-2]
Out[22]: array([0, 2, 4, 6, 8])

In [23]: a[1:4]
Out[23]: array([1, 2, 3])

In [24]: a[6:-2]
Out[24]: array([6, 7])

In [25]: a[::-1]
Out[25]: array([9, 8, 7, 6, 5, 4, 3, 2, 1, 0])
```

Für mehrdimensionale Arrays wird die Notation direkt verallgemeinert. Im Gegensatz zu der im Abschnitt [Python-Listen und NumPy-Arrays](#) beschriebenen Notation für Listen von Listen werden hier die diversen Indexangaben durch Kommas getrennt zusammengefasst. Einige Beispiele für zweidimensionale Arrays sollen das illustrieren.

```
In [26]: a = np.arange(36).reshape(6, 6)
```

```
In [27]: a
```

```
Out[27]:  
array([[ 0,  1,  2,  3,  4,  5],  
       [ 6,  7,  8,  9, 10, 11],  
       [12, 13, 14, 15, 16, 17],  
       [18, 19, 20, 21, 22, 23],  
       [24, 25, 26, 27, 28, 29],  
       [30, 31, 32, 33, 34, 35]])
```

```
In [28]: a[:, :]
```

```
Out[28]:  
array([[ 0,  1,  2,  3,  4,  5],  
       [ 6,  7,  8,  9, 10, 11],  
       [12, 13, 14, 15, 16, 17],  
       [18, 19, 20, 21, 22, 23],  
       [24, 25, 26, 27, 28, 29],  
       [30, 31, 32, 33, 34, 35]])
```

```
In [29]: a[2:4, 2:4]
```

```
Out[29]:  
array([[14, 15],  
      [20, 21]])
```

```
In [30]: a[2:4, 3:5]
```

```
Out[30]:  
array([[15, 16],  
      [21, 22]])
```

```
In [31]: a[::-2, ::2]
```

```
Out[31]:  
array([[ 0,  2,  4],  
       [12, 14, 16],  
       [24, 26, 28]])
```

```
In [32]: a[2::-2, ::2]
```

```
Out[32]:  
array([[12, 14, 16],  
      [24, 26, 28]])
```

```
In [33]: a[2:4]
```

```
Out[33]:  
array([[12, 13, 14, 15, 16, 17],  
      [18, 19, 20, 21, 22, 23]])
```

Wie das letzte Beispiel zeigt, ergänzt NumPy bei fehlenden Indexangaben jeweils einen Doppelpunkt, so dass alle Elemente ausgewählt werden, die mit den explizit gemachten Indexangaben konsistent sind.

Will man eine Spalte (oder auch eine Zeile) in einer zweidimensionalen Array auswählen, so hat man zwei verschiedene Möglichkeiten:

```
In [34]: a[:, 0:1]
```

```
Out[34]:  
array([[ 0],  
       [ 6],  
       [12],  
       [18],  
       [24],  
       [30]])
```

```
In [35]: a[:, 0]
Out[35]: array([ 0,  6, 12, 18, 24, 30])
```

Im ersten Fall sorgt die für beide Dimensionen vorhandene Indexnotation dafür, dass ein zweidimensionales Array erzeugt wird, das die Elemente der ersten Spalte enthält. Im zweiten Fall wird für die zweite Dimension ein fester Index angegeben, so dass nun ein eindimensionales Array erzeugt wird, die wiederum aus den Elementen der ersten Spalte besteht.

In einigen NumPy-Methoden gibt es einen Parameter `axis`, der die Richtung in dem Array angibt, in der die Methode ausgeführt werden soll. Die Achsennummer ergibt sich aus der Position der zugehörigen Indexangabe. Wie man aus den obigen Beispielen entnehmen kann, verläuft die Achse 0 von oben nach unten, während die Achse 1 von links nach rechts verläuft. Das Aufsummieren von Elementen unserer Beispielmatrix erfolgt dann mit Hilfe der `sum`-Methode entweder von oben nach unten, von links nach rechts oder über alle Elemente.

```
In [36]: a.sum(axis=0)
Out[36]: array([ 90,  96, 102, 108, 114, 120])
```

```
In [37]: a.sum(axis=1)
Out[37]: array([ 15,  51,  87, 123, 159, 195])
```

```
In [38]: a.sum()
Out[38]: 630
```

Zur Verdeutlichung betrachten wir noch ein dreidimensionales Array.

```
In [39]: b = np.arange(27).reshape(3, 3, 3)
```

```
In [40]: b
Out[40]:
array([[[ 0,  1,  2],
       [ 3,  4,  5],
       [ 6,  7,  8]],

       [[ 9, 10, 11],
       [12, 13, 14],
       [15, 16, 17]],

       [[[18, 19, 20],
       [21, 22, 23],
       [24, 25, 26]]])
```

```
In [41]: b[0:1]
Out[41]:
array([[[ 0,  1,  2],
       [ 3,  4,  5],
       [ 6,  7,  8]]])
```

```
In [42]: b[:, 0:1]
Out[42]:
array([[[ 0,  1,  2]],
       [[ 9, 10, 11]],
       [[18, 19, 20]]])
```

```
In [43]: b[:, :, 0:1]
Out[43]:
array([[[ 0],
       [ 3],
       [ 6]],

       [[ 9],
       [12],
```

```
[15]],

[[18],
[21],
[24]]))

In [44]: b[..., 0:1]
Out[44]:
array([[[ 0],
       [ 3],
       [ 6]],

       [[ 9],
       [12],
       [15]],

       [[18],
       [21],
       [24]]])
```

Man sieht hier deutlich, wie je nach Wahl der Achse ein entsprechender Schnitt durch das als Würfel vorstellbare Array gemacht wird. Das letzte Beispiel zeigt die Benutzung des Auslassungszeichens `...` (im Englischen *ellipsis* genannt). Es steht für die Anzahl von Doppelpunkten, die nötig sind, um die Indizes für alle Dimensionen zu spezifizieren. Allerdings funktioniert dies nur beim ersten Auftreten des Auslassungszeichens, da sonst nicht klar ist, wie viele Indexspezifikation für jedes Auslassungszeichen einzusetzen sind. Alle weiteren Auslassungszeichen werden daher durch einen einzelnen Doppelpunkt ersetzt.

Weiter oben hatten wir in einem Beispiel gesehen, dass die Angabe eines festen Index die Dimension des Arrays effektiv um Eins vermindert. Umgekehrt ist es auch möglich, eine zusätzliche Dimension der Länge Eins hinzuzufügen. Hierzu dient `newaxis`, das an der gewünschten Stelle als Index eingesetzt werden kann. Die folgenden Beispiele zeigen, wie aus einem eindimensionalen Array so zwei verschiedene zweidimensionale Arrays konstruiert werden können.

```
In [45]: c = np.arange(5)

In [46]: c
Out[46]: array([0, 1, 2, 3, 4])

In [47]: c[:, np.newaxis]
Out[47]:
array([[0],
       [1],
       [2],
       [3],
       [4]])

In [48]: c[np.newaxis, :]
Out[48]: array([[0, 1, 2, 3, 4]])
```

Eine Anwendung hiervon werden wir weiter unten in diesem Kapitel kennenlernen, wenn wir uns mit der Erweiterung von Arrays auf eine Zielgröße, dem so genannten *broadcasting* beschäftigen.

Zunächst wollen wir aber noch eine weitere Indizierungsmethode, das so genannte *fancy indexing*, ansprechen. Obwohl es sich hierbei um ein sehr flexibles und mächtiges Verfahren handelt, sollte man bedenken, dass hier immer eine Kopie des Arrays erzeugt wird und nicht einfach nur eine neue Sicht auf bereits vorhandene Daten. Da Letzteres effizienter ist, sollte man *fancy indexing* in erster Linie in Situationen einsetzen, in denen das normale Indizieren nicht ausreicht.

Beim *fancy indexing* werden die möglichen Indizes als Arrays oder zum Beispiel als Liste, nicht jedoch als Tupel, angegeben. Die Elemente können dabei *Integer* oder *Boolean* sein. Beginnen wir mit dem ersten Fall, wobei wir zunächst von einem eindimensionalen Array ausgehen.

```
In [49]: a = np.arange(10, 20)

In [50]: a[[0, 3, 0, 5]]
Out[50]: array([10, 13, 10, 15])

In [51]: a[np.array([[0, 2], [1, 4]])]
Out[51]:
array([[10, 12],
       [11, 14]])
```

Im ersten Fall werden einzelne Arrayelemente durch Angabe der Indizes ausgewählt, wobei auch Wiederholungen sowie eine nichtmonotone Wahl von Indizes möglich sind. Sind die Indizes als Array angegeben, so wird ein Array der gleichen Form erzeugt.

Bei der Auswahl von Elementen aus einem mehrdimensionalen Arrays muss man gegebenenfalls weitere Indexlisten oder -arrays angeben.

```
In [52]: a = np.arange(16).reshape(4, 4)

In [53]: a
Out[53]:
array([[ 0,  1,  2,  3],
       [ 4,  5,  6,  7],
       [ 8,  9, 10, 11],
       [12, 13, 14, 15]])

In [54]: a[[0, 1, 2]]
Out[54]:
array([[ 0,  1,  2,  3],
       [ 4,  5,  6,  7],
       [ 8,  9, 10, 11]])

In [55]: a[[0, 1, 2], [1, 2, 3]]
Out[55]: array([ 1,  6, 11])
```

Interessant ist die Verwendung von Indexarrays mit Elementen vom Typ *Boolean*. Ein solches Indexarray lässt sich zum Beispiel mit Hilfe einer logischen Operation auf einem Array erzeugen, wie das folgende Beispiel demonstriert. Eine Reihe von Zufallszahlen soll dabei bei einem Schwellenwert nach unten abgeschnitten werden.

```
1 threshold = 0.3
2 a = np.random.random(12)
3 print a
4 print "-"*30
5 indexarray = a<threshold
6 print indexarray
7 print "-"*30
8 a[indexarray] = threshold
9 print a
```

Damit ergibt sich beispielsweise die folgende Ausgabe:

```
[ 0.11859559  0.49034494  0.08552061  0.69204077  0.18406457  0.06819091
  0.36785529  0.16873423  0.44615435  0.57774615  0.54327126  0.57381642]
-----
[ True False  True False  True  True False  True False False False]
-----
[ 0.3           0.49034494  0.3           0.69204077  0.3           0.3
  0.36785529  0.3           0.44615435  0.57774615  0.54327126  0.57381642]
```

In Zeile 5 wird ein Array `indexarray` erzeugt, das an den Stellen, an denen die Elemente des Arrays `a` kleiner als der Schwellwert sind, den Wahrheitswert `True` besitzt. In Zeile 8 werden die auf diese Weise indizierten Elemente dann auf den Schwellwert gesetzt. Es sei noch angemerkt, dass sich diese Funktionalität auch direkt mit der `clip`-Funktion erreichen lässt.

Im vorigen Beispiel haben wir in der Vergleichsoperation in Zeile 5 ein Array und ein Skalar miteinander verglichen. Wie kann dies funktionieren? Den Vergleich zweier Arrays derselben Form kann man sinnvoll elementweise definieren. Soll ein Array mit einem Skalar verglichen werden, so wird der Skalar von NumPy zunächst mit gleichen Elementen so erweitert, das ein Array mit der benötigten Form entsteht. Dieser als *broadcasting* bezeichnete Prozess kommt beispielsweise auch bei arithmetischen Operationen zum Einsatz. Die beiden folgenden Anweisungen sind daher äquivalent:

```
In [56]: a = np.arange(5)
```

```
In [57]: a*3
```

```
Out[57]: array([ 0,  3,  6,  9, 12])
```

```
In [58]: a*np.array([3, 3, 3, 3, 3])
```

```
Out[58]: array([ 0,  3,  6,  9, 12])
```

Broadcasting ist genau dann möglich, wenn beim Vergleich der Achsen der beiden beteiligten Arrays von der letzten Achse beginnend die Länge der Achsen jeweils gleich ist oder eine Achse die Länge Eins besitzt. Eine Achse der Länge Eins wird durch Wiederholen der Elemente im erforderlichen Umfang verlängert. Entsprechendes geschieht beim Hinzufügen von Achsen von vorne, um die Dimensionen der Arrays identisch zu machen. Wir illustrieren dies an einem Beispiel.

```
In [59]: a = np.arange(20).reshape(4, 5)
```

```
In [60]: a
```

```
Out[60]:  
array([[ 0,  1,  2,  3,  4],  
       [ 5,  6,  7,  8,  9],  
       [10, 11, 12, 13, 14],  
       [15, 16, 17, 18, 19]])
```

```
In [61]: a*np.arange(5)
```

```
Out[61]:  
array([[ 0,  1,  4,  9, 16],  
       [ 0,  6, 14, 24, 36],  
       [ 0, 11, 24, 39, 56],  
       [ 0, 16, 34, 54, 76]])
```

```
In [62]: a*np.arange(4)
```

```
-----
```

```
ValueError Traceback (most recent call last)
```

```
<ipython console> in <module>()
```

```
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (4,5) (4,)
```

Das Array `a` hat die Form `(4, 5)` und kann daher mit einem Array der Form `(5,)` multipliziert werden. Von hinten gerechnet stimmen die Achsenlängen überein, so dass vorne eine Achse der Länge 4 angefügt werden kann. Ein entsprechend erweitertes Array hätte folgendes Aussehen:

```
In [63]: np.ones(shape=(4, 5), dtype=int)*np.arange(5)
```

```
Out[63]:  
array([[ 0,  1,  2,  3,  4],  
       [ 0,  1,  2,  3,  4],  
       [ 0,  1,  2,  3,  4],  
       [ 0,  1,  2,  3,  4]])
```

Damit ist ein elementweises Multiplizieren möglich. Im zweiten Beispiel oben haben wir es neben unserem Array `a` der Form `(4, 5)` mit einem Array der Form `(4,)` zu tun. In diesem Fall ist kein *broadcasting* möglich, und es kommt zu einer `ValueError`-Ausnahme. Anders stellt sich die Situation dar, wenn die Achsenlänge 4 zur Achse 0 gehört und die Achse 1 die Länge 1 besitzt. Dies können wir mit Hilfe von `newaxis` erreichen:

```
In [64]: b = np.arange(4)[:, np.newaxis]
```

```
In [65]: b
Out[65]:
array([[0],
       [1],
       [2],
       [3]])

In [66]: b.shape
Out[66]: (4, 1)

In [67]: a*b
Out[67]:
array([[ 0,   0,   0,   0,   0],
       [ 5,   6,   7,   8,   9],
       [20,  22,  24,  26,  28],
       [45,  48,  51,  54,  57]])
```

3.4 Universelle Funktionen

Im vorigen Unterkapitel haben wir bereits begonnen, mathematische Operationen mit Arrays zu betrachten. Was passiert, wenn wir versuchen, Funktionen von Arrays auszuwerten? Für die folgenden Betrachtungen importieren wir zusätzlich zum `numpy`-Paket, das in diesem Kapitel immer importiert sein sollte, noch das `math`-Modul und versuchen dann, den Sinus eines Arrays auszuwerten.

```
In [1]: import math

In [2]: math.sin(np.linspace(0, math.pi, 11))
-----
TypeError                                         Traceback (most recent call last)
<ipython console> in <module>()
TypeError: only length-1 arrays can be converted to Python scalars
```

Dabei scheitern wir jedoch, da der Sinus aus dem `math`-Modul nur mit skalaren Größen umgehen kann. Hätte unser Array nur ein Element enthalten, so wären wir noch erfolgreich gewesen. Im Beispiel hatten wir jedoch mehr als ein Element, genauer gesagt elf Elemente, und somit kommt es zu einer `TypeError`-Ausnahme.

Den Ausweg bietet in diesem Fall das `numpy`-Paket selbst, das eine eigene Sinusfunktion zur Verfügung stellt, die in der Lage ist, auch mit Arrays umzugehen.

```
In [3]: np.sin(np.linspace(0, math.pi, 11))
Out[3]:
array([ 0.00000000e+00,   3.09016994e-01,   5.87785252e-01,
       8.09016994e-01,   9.51056516e-01,   1.00000000e+00,
       9.51056516e-01,   8.09016994e-01,   5.87785252e-01,
       3.09016994e-01,   1.22460635e-16])

In [4]: np.sin(math.pi/6*np.arange(12).reshape(2, 6))
Out[4]:
array([[ 0.00000000e+00,   5.00000000e-01,   8.66025404e-01,
       1.00000000e+00,   8.66025404e-01,   5.00000000e-01],
       [ 1.22460635e-16, -5.00000000e-01, -8.66025404e-01,
       -1.00000000e+00, -8.66025404e-01, -5.00000000e-01]])
```

Statt die Kreiszahl aus dem `math`-Modul zu nehmen, hätten wir sie genauso gut aus dem `numpy`-Paket nehmen können.

Funktionen wie die gerade benutzte Sinusfunktion aus dem `numpy`-Paket, die Arrays als Argumente akzeptieren, werden universelle Funktionen (*universal function* oder kurz *ufunc*) genannt. Die im `numpy`-Paket verfügbaren

universellen Funktionen sind in der [NumPy-Dokumentation zu ufuncs](#) aufgeführt. Implementationen von speziellen Funktionen als universelle Funktion sind im `scipy`-Paket zu finden. Viele Funktionen in `scipy.special`, jedoch nicht alle, sind als `ufuncs` implementiert. Als nur eines von vielen möglichen Beispielen wählen wir die Gammafunktion:

```
In [5]: import scipy.special
```

```
In [6]: scipy.special.gamma(np.linspace(1, 5, 9))
```

```
Out[6]:
```

```
array([ 1.          ,  0.88622693,  1.          ,  1.32934039,
       2.          ,  3.32335097,  6.          , 11.6317284 ,  24.         ])
```

Gelegentlich benötigt man eine Funktion von zwei Variablen auf einem Gitter. Man könnte hierzu die `meshgrid`-Funktion heranziehen, die wir im Abschnitt [Erzeugung von NumPy-Arrays](#) erwähnt hatten. Da man dort die einzelnen Gitterpunkte explizit angegeben muss, ist es häufig bequemer, eine `mgrid`-Gitter zu verwenden.

```
In [7]: np.mgrid[0:3, 0:3]
```

```
Out[7]:
```

```
array([[[0, 0, 0],
       [1, 1, 1],
       [2, 2, 2]],

      [[0, 1, 2],
       [0, 1, 2],
       [0, 1, 2]]])
```

```
In [8]: np.mgrid[0:3:7j, 0:3:7j]
```

```
Out[8]:
```

```
array([[[ 0. ,  0. ,  0. ,  0. ,  0. ,  0. ,  0. ],
       [ 0.5,  0.5,  0.5,  0.5,  0.5,  0.5,  0.5],
       [ 1. ,  1. ,  1. ,  1. ,  1. ,  1. ,  1. ],
       [ 1.5,  1.5,  1.5,  1.5,  1.5,  1.5,  1.5],
       [ 2. ,  2. ,  2. ,  2. ,  2. ,  2. ,  2. ],
       [ 2.5,  2.5,  2.5,  2.5,  2.5,  2.5,  2.5],
       [ 3. ,  3. ,  3. ,  3. ,  3. ,  3. ,  3. ]],

      [[ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ,  2.5,  3. ],
       [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ,  2.5,  3. ],
       [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ,  2.5,  3. ],
       [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ,  2.5,  3. ],
       [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ,  2.5,  3. ],
       [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ,  2.5,  3. ],
       [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ,  2.5,  3. ]]])
```

Man beachte, dass im zweiten Fall das dritte Element in der `slice`-Syntax imaginär ist. Damit wird angedeutet, dass nicht die Schrittweite gemeint ist, sondern die Anzahl der Werte im durch die ersten beiden Zahlen spezifizierten Intervall. Unter Verwendung des `Broadcasting` genügt auch ein `ogrid`-Gitter.

```
In [9]: np.ogrid[0:3:7j, 0:3:7j]
```

```
Out[9]:
```

```
[array([[ 0. ],
       [ 0.5],
       [ 1. ],
       [ 1.5],
       [ 2. ],
       [ 2.5],
       [ 3. ]]),
 array([[ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ,  2.5,  3. ]]])
```

Eine Anwendung bei der Berechnung von Kugelflächenfunktionen könnte folgendermaßen aussehen².

² Im `scipy`-Modul sind die Winkel im Vergleich zur üblichen Konvention gerade vertauscht benannt (siehe auch die Dokumentation zur Funktion `sph_harm`).

```

import numpy as np
import scipy.special

thetas, phis = np.ogrid[0:np.pi:5j, 0:2*np.pi:9j]
n, m = 5, 2
resultat = scipy.special.sph_harm(m, n, phis, thetas)

print resultat

```

Wir verzichten darauf, das Ergebnis anzugeben, da es keine weiteren Einsichten bringt, außer dass tatsächlich ein 5×9 -Array erzeugt wird. Abschließend sei noch angemerkt, dass der Aufruf von `sph_harm` nicht funktioniert, wenn man `phis` und `thetas` folgendermaßen definiert:

```

thetas = np.linspace(0, np.pi, 5)
phis = np.linspace(0, 2*np.pi, 9)

```

Diese Definition würde kein *Broadcasting* erlauben. Hätten beide Arrays die gleiche Länge, würde die Kugelflächenfunktion zwar ausgewertet werden, aber man würde kein zweidimensionales Array sondern nur ein eindimensionales Array erhalten.

Es ist nicht nur praktisch, Funktionen von Arrays direkt berechnen zu können, sondern es spart häufig auch Rechenzeit. Wir wollen dies an einem Beispiel illustrieren.

In [10]: `nmax = 100000`

```

In [11]: %%timeit
....: for n in range(nmax):
....:     x = 2*math.pi*n/(nmax-1)
....:     y = math.sin(x)
....:
10 loops, best of 3: 33.2 ms per loop

```

```

In [12]: %%timeit
....: x = np.linspace(0, 2*np.pi, nmax)
....: y = np.sin(x)
....:
100 loops, best of 3: 2.96 ms per loop

```

```

In [13]: %%timeit
....: prefactor = 2*math.pi/(nmax-1)
....: for n in range(nmax):
....:     y = math.sin(prefactor*n)
....:
100 loops, best of 3: 16.5 ms per loop

```

Die angegebenen Rechenzeiten sind natürlich von der Hardware abhängig, auf der der Code ausgeführt wurde. Daher kommt es statt auf die Absolutwerte auf Verhältnisse von Rechenzeiten zueinander an. Dabei zeigt sich, dass die im ersten Codestück programmierte explizite `for`-Schleife etwa elfmal langsamer ist als das zweite Codestück, das eine universelle Funktion verwendet. Ein Anteil dieses Geschwindigkeitsvorteils ergibt sich daraus, dass in der `for`-Schleife unnötige Rechenarbeit geleistet wird. Zieht man die Berechnung des konstanten Faktors `prefactor` aus der Schleife heraus, so wird die Rechenzeit immerhin etwas mehr als halbiert. Dennoch ist die Verwendung der universellen Funktion deutlich schneller. Der Geschwindigkeitsvorteil ergibt sich allerdings erst bei hinreichend großen Arrays. Bei kleinen Arrays kann dagegen der mit der Verwaltung der Arrays verbundene Aufwand überwiegen.

Abschließend sei noch angemerkt, dass es sich wegen der genannten Rechenzeitvorteile lohnt, einen Blick in die Liste der von NumPy zur Verfügung gestellten [mathematischen Funktionen](#) zu werfen. Möchte man zum Beispiel die Summe der Elemente eines Arrays berechnen, so verwendet man sinnvollerweise die `sum`-Funktion von NumPy.

3.5 Lineare Algebra

Physikalische Fragestellungen, die sich mit Hilfe von Vektoren und Matrizen formulieren lassen, benötigen zur Lösung sehr häufig Methoden der linearen Algebra. NumPy leistet hierbei Unterstützung, insbesondere mit dem linalg-Paket. Im Folgenden gehen wir auf einige Aspekte ein, ohne Vollständigkeit anzustreben. Daher empfiehlt es sich, auch einen Blick in den [entsprechenden Abschnitt der Dokumentation](#) zu werfen. Zunächst importieren wir die Module, die wir für die Beispiele dieses Kapitels benötigen:

```
In [1]: import numpy as np  
In [2]: import numpy.linalg as LA
```

Beim Arbeiten mit Matrizen und NumPy muss man immer bedenken, dass der Multiplikationsoperator `*` nicht für eine Matrixmultiplikation steht. Vielmehr wird damit eine elementweise Multiplikation ausgeführt:

```
In [3]: a1 = np.array([[1, -3], [-2, 5]])  
  
In [4]: a1  
Out[4]:  
array([[ 1, -3],  
       [-2,  5]])  
  
In [5]: a2 = np.array([[3, -6], [2, -1]])  
  
In [6]: a2  
Out[6]:  
array([[ 3, -6],  
       [ 2, -1]])  
  
In [7]: a1*a2  
Out[7]:  
array([[ 3, 18],  
       [-4, -5]])
```

Möchte man dagegen eine Matrixmultiplikation ausführen, so verwendet man das `dot`-Produkt:

```
In [8]: np.dot(a1, a2)  
Out[8]:  
array([-3, -3],  
      [ 4,  7])
```

Man könnte die Norm eines Vektors ebenfalls mit Hilfe des `dot`-Produkts bestimmen. Es bietet sich jedoch an, hierzu direkt die `norm`-Funktion zu verwenden:

```
In [9]: vec = np.array([1, -2, 3])  
  
In [10]: LA.norm(vec)  
Out[10]: 3.7416573867739413  
  
In [11]: LA.norm(vec)**2  
Out[11]: 14.0
```

Als nächstes wollen wir ein inhomogenes lineares Gleichungssystem $\mathbf{ax} = \mathbf{b}$ lösen, wobei die Matrix \mathbf{a} und der Vektor \mathbf{b} gegeben sind und der Vektor \mathbf{x} gesucht ist.

```
In [12]: a = np.array([[2, -1], [-3, 2]])  
In [13]: b = np.array([1, 2])  
  
In [14]: LA.det(a)  
Out[14]: 0.9999999999999978
```

```
In [15]: np.dot(LA.inv(a), b)
Out[15]: array([ 4.,  7.])
```

In Eingabe 14 haben wir zunächst überprüft, dass die Determinante der Matrix a ungleich Null ist, so dass die invertierte Matrix existiert. Anschließend haben wir den Vektor b von links mit der Inversen von a multipliziert, um den Lösungsvektor zu erhalten. Allerdings erfolgt die numerische Lösung eines inhomogenen linearen Gleichungssystems normalerweise nicht über eine Inversion der Matrix, sondern mit Hilfe einer geeignet durchgeführten Gauß-Elimination. NumPy stellt hierzu die `solve`-Funktion zur Verfügung:

```
In [16]: LA.solve(a, b)
Out[16]: array([ 4.,  7.])
```

Eine nicht invertierbare Matrix führt hier wie auch bei der Bestimmung der Determinante auf eine `LinAlgError`-Ausnahme mit dem Hinweis auf eine singuläre Matrix.

Eine häufig vorkommende Problemstellung im Bereich der linearen Algebra sind Eigenwertprobleme. Die `eig`-Funktion bestimmt rechtsseitige Eigenvektoren und die zugehörigen Eigenwerte für beliebige quadratische Matrizen:

```
In [17]: a = np.array([[1, 3], [4, -1]])
In [18]: evals, evecs = LA.eig(a)
In [19]: evals
Out[19]: array([ 3.60555128, -3.60555128])
In [20]: evecs
Out[20]:
array([[ 0.75499722, -0.54580557],
       [ 0.65572799,  0.83791185]])
In [21]: for n in range(evecs.shape[0]):
    print(np.dot(a, evecs[:, n]), evals[n]*evecs[:, n])
Out[21]:
[ 2.72218119  2.36426089] [ 2.72218119  2.36426089]
[ 1.96792999 -3.02113415] [ 1.96792999 -3.02113415]
```

Die Ausgabe am Ende zeigt, dass die Eigenvektoren und -werte in der Tat korrekt sind. Benötigt man nur die Eigenwerte einer Matrix, so kann man durch Benutzung der `eigvals`-Funktion Rechenzeit sparen.

Für die Lösung eines Eigenwertproblems von symmetrischen oder hermiteschen³ Matrizen gibt es die Funktionen `eigh` und `eigvalsh`, bei denen es genügt, nur die obere oder die untere Hälfte der Matrix zu spezifizieren. Viel wichtiger ist jedoch, dass diese Funktionen einen erheblichen Zeitvorteil bieten können:

```
In [22]: a = np.random.random(250000).reshape(500, 500)
In [23]: a = a+a.T
In [24]: %timeit LA.eig(a)
1 loops, best of 3: 736 ms per loop
In [25]: %timeit LA.eigh(a)
10 loops, best of 3: 208 ms per loop
```

Hier wird in Eingabe 23 durch Addition der Transponierten eine symmetrische Matrix erzeugt, so dass die beiden Funktionen `eig` und `eigh` mit der gleichen Matrix arbeiten. Die Funktion `eigh` ist in diesem Beispiel immerhin um mehr als einen Faktor 3 schneller.

Hat man mit Hilfe eines Python Skripts Daten erzeugt, so möchte man diese häufig grafisch darstellen. Eine Möglichkeit hierfür besteht darin, die Daten in einer Datei abzuspeichern, um sie anschließend mit einem unabhängigen Programm grafisch aufzubereiten. Ein Programm, das im wissenschaftlichen Bereich gerne benutzt wird, ist

³ Eine hermitesche Matrix geht beim Transponieren in die konjugiert komplexe Matrix über: $a_{ij} = a_{ji}^*$.

beispielsweise `gnuplot`⁴.

Ein anderer Zugang besteht darin, die Grafik direkt in dem Programm zu erzeugen, das die Daten berechnet. Hierfür gibt es eine Reihe von Programmpaketen. Am häufigsten benutzt wird wohl `matplotlib`⁵, das eng mit den wissenschaftlichen Paketen `NumPy` und `SciPy` zusammenhängt. Ein weiteres Paket, das zudem sehr gut geeignet ist, um Schemazeichnungen und ähnliche Abbildungen zu erzeugen, ist `PyX`⁶. In diesem Kapitel werden wir eine Einführung in diese beiden Programmpakete geben. Beide sind jedoch so mächtig, dass es nicht möglich ist, alle Aspekte zu besprechen. Um eine Vorstellung von den jeweiligen Möglichkeiten zu bekommen, empfiehlt es sich, die entsprechenden Projektseiten im Internet zu besuchen und einen Blick auf die dort vorhandenen Beispieldateien zu werfen.

Möchte man seine Daten mit einem Pythonprogramm grafisch aufbereiten, so sollte man sich Gedanken darüber machen, ob man dies innerhalb eines einzigen Programms tun möchte. Dies gilt insbesondere dann, wenn die Erzeugung der Daten zeitlich sehr aufwändig ist. Ist die Grafikerstellung nämlich fehlerhaft, so hat man nicht nur nicht die gewünschte Grafik, sondern zudem die erzeugten Daten verloren. In einem solchen Fall ist es sinnvoll, die Erzeugung von Daten und Grafiken zu trennen. Zumindest sollte man aber die Daten nach ihrer Erzeugung in einer Datei sichern.

⁴ Für weitere Informationen siehe die [Gnuplot-Webseite](#).

⁵ Die Programmbibliothek zum Herunterladen und weitere Informationen findet man auf der [matplotlib-Webseite](#).

⁶ Die Programmbibliothek zum Herunterladen und weitere Informationen findet man auf der [PyX-Webseite](#).

Erstellung von Grafiken mit matplotlib

Bei matplotlib gibt es verschiedene Wege zur Erstellung einer Grafik. Man kann entweder das zu matplotlib gehörige `pylab`-Modul laden oder in IPython das magische Kommando `%pylab` verwenden. Dieser Weg führt dazu, dass umfangreiche Namensräume importiert werden, was einerseits der Bequemlichkeit dient, andererseits aber den Nachteil besitzt, dass häufig schwer nachzuvollziehen ist, woher eine bestimmte Funktion stammt. Daher ist von der Benutzung des `pylab`-Moduls eher abzuraten, und wir werden es im Folgenden auch nicht verwenden.

Eine zweite Variante besteht in der Benutzung des `pyplot`-Moduls aus matplotlib. Dieses Modul erlaubt es, den Zustand einer Grafik zu verändern und eignet sich daher besonders für die interaktive Entwicklung von Grafiken, zum Beispiel in einer IPython-Shell oder einem IPython-Notebook. Die Verwendung von `pyplot` ist aber genauso in einem normalen Python-Skript möglich. Die meisten der im Folgenden besprochenen Beispiele verwenden `pyplot`.

Schließlich bietet matplotlib einen objektorientierten Zugang, den wir in den letzten Beispiele dieses Kapitels etwas kennenlernen werden.

Um mit matplotlib arbeiten zu können, müssen zunächst die benötigten Module importiert werden:

```
In [1]: import numpy as np
....: import matplotlib as mpl
....: import matplotlib.pyplot as plt
....: %matplotlib
Using matplotlib backend: Qt4Agg
```

In den meisten Fällen wird hierzu das NumPy-Modul gehören, das wir wie gewohnt unter der Abkürzung `np` in der ersten Zeile importieren. Für die Arbeit mit `pyplot` wird der Importbefehl in der dritten Zeile benötigt, wobei wir uns hier an die Konvention halten, für `pyplot` die Abkürzung `plt` zu verwenden. Da wir gelegentlich das matplotlib-Modul selbst benötigen, um die Fähigkeiten von matplotlib zu demonstrieren, importieren wir es in der zweiten Zeile. Hierauf kann man in vielen Fällen verzichten.

Für die interaktive Arbeit in der IPython-Shell wird abschließend noch das magische Kommando `%matplotlib` verwendet. Arbeitet man mit einem Python-Skript, so entfällt dieser Schritt. Wenn man mit einem IPython-Notebook arbeitet, so hat man noch die Möglichkeit, Grafiken direkt in das Notebook einzubetten. In diesem Fall lautet das magische Kommando `%matplotlib inline`.

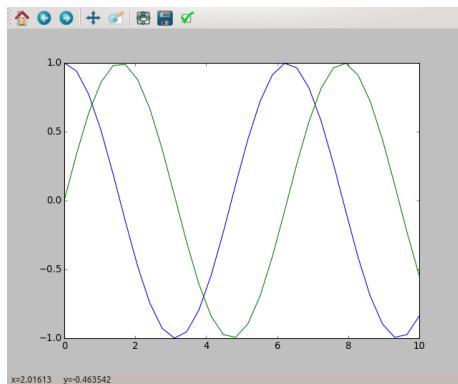
Wir wollen nun eine einfache Grafik erstellen, deren Eigenschaften wir im Weiteren schrittweise verändern werden. Zunächst erzeugen wir drei NumPy-Arrays, die die Daten für zwei Funktionen enthalten, die wir grafisch darstellen wollen.

```
In [2]: x = np.linspace(0, 10, 30)
....: y1 = np.cos(x)
....: y2 = np.sin(x)
```

Nun können wir leicht eine Grafik erzeugen, die die beiden Funktionen darstellt.

```
In [3]: plt.plot(x, y1)
....: plt.plot(x, y2)
Out[3]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x7f48b0a01320>]
```

Führt man diese beiden Kommandos aus, so öffnet sich ein Fenster, das neben der Grafik auch einige Icons enthält, die es erlauben, die Darstellung zu modifizieren.



Die acht Icons haben von links nach rechts die folgenden Funktionen:

- Nachdem man mit Hilfe der anderen Icons Veränderungen an der Grafik vorgenommen hat, kann man mit diesem Icon wieder zur ursprünglichen Darstellung zurückkehren.
- Mit diesem Icon kommt man zur vorhergehenden Darstellung zurück.
- Ist man zu einer früheren Darstellung zurückgegangen, so kommt man mit diesem Icon zu neueren Darstellungen.
- Mit diesem Icon lässt sich der Bildausschnitt verschieben.
- Mit diesem Icon lässt sich ein kleinerer Bildausschnitt durch Aufziehen eines Rechtecks wählen. Man kann also bei Bedarf in die Abbildung hineinzoomen.
- Dieses Icon erlaubt es, die Seitenverhältnisse der Abbildung und die Größe der Ränder zu verändern.
- Dieses Icon dient dazu, die Grafik in einer Datei zu speichern, sei es in einem Bitmap-Format wie zum Beispiel `png` oder in einem Vektorgrafik-Format wie `eps`, `pdf` oder `svg`.
- Das letzte Icon ist nicht bei jedem Backend vorhanden, wird aber bei dem hier verwendeten Qt-Backend angezeigt. Es erlaubt die Wahl des x - und y -Achsenabschnitts, das Setzen von Beschriftungen sowie die Wahl von logarithmischen Achsen. Diese Funktionalität ist aber auch durch entsprechende `pyplot`-Funktionen verfügbar, wie wir im Folgenden sehen werden.

Bevor wir uns aber mit der Beschriftung der Grafik beschäftigen, wollen wir uns zunächst der Darstellung der Daten zuwenden. Standardmäßig werden die Daten mit Hilfe einer durchgezogenen Kurve dargestellt, deren Farbe von einem Datensatz zum nächsten automatisch wechselt. Wir wollen nun die Darstellung dieser Kurven verändern. Dazu beschaffen wir uns zunächst die beiden Linien

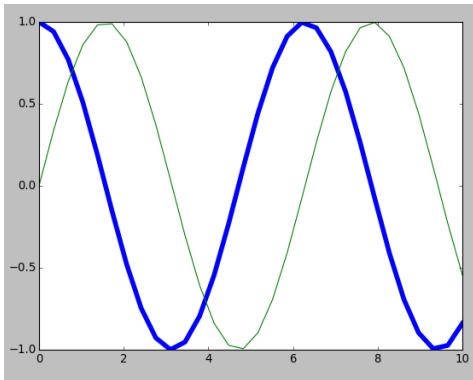
```
In [4]: line1, line2 = plt.gca().lines
```

`gca` steht hier für »get current axes«, das die aktuelle Untergrafik zurückgibt. In unserem Fall handelt es sich einfach um die aktuelle Grafik. Da aber eine Abbildung, wie wir später noch sehen werden, aus mehreren Untergräfiken bestehen kann, ist es im Prinzip wichtig, zwischen einer Untergrafik und der gesamten Abbildung zu unterscheiden. Mit Hilfe des `lines`-Attributes kann man eine Liste der aktuell vorhandenen Linien erhalten. Da wir wissen, dass es sich um zwei Linien handelt, können wir die Liste direkt entpacken.

Nachdem wir nun Zugriff auf die Linien haben, können wir deren Eigenschaften ändern. Dazu gibt es zwei Möglichkeiten, wie wir hier am Beispiel der Linienbreite zeigen wollen. Man kann die Linienbreite durch eine entsprechende Methode setzen, wobei man anschließend die Grafik mit einer `draw`-Anweisung in dem noch geöffneten Fenster neu erzeugen muss.

```
In [5]: line1.set_linewidth(5)
...: plt.draw()
```

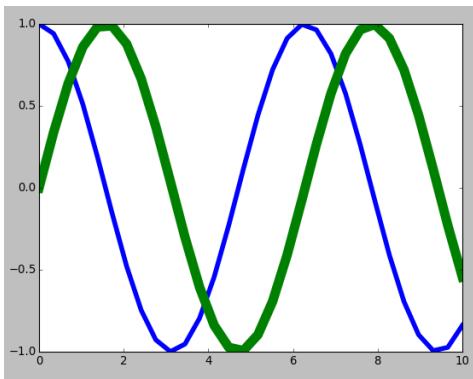
Das Ergebnis sieht dann folgendermaßen aus:



Alternativ kann man die `setp`-Methode verwenden, die es erlaubt, Eigenschaften zu setzen (»set properties«), in diesem Fall die Linienbreite der zweiten Linie.

```
In [6]: plt.setp(line2, linewidth=10)
```

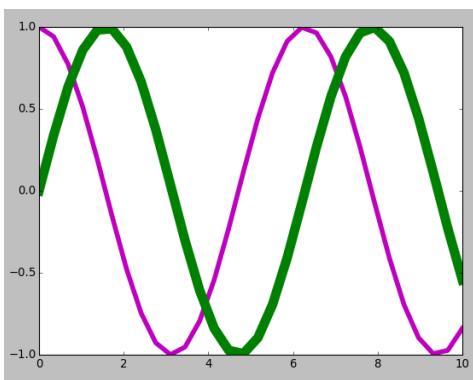
Die Grafik hat danach das folgende Aussehen:



Im nächsten Schritt wollen wir die Farben der beiden Linien verändern und verwenden dafür wieder die `setp`-Methode,

```
In [7]: plt.setp(line1, color='m')
```

und erhalten folgende Ausgabe:



In diesem Beispiel haben wir ausgenutzt, dass sich eine Reihe von Farben mit Hilfe eines Buchstabens auswählen lassen. Eine Liste dieser Farben lässt sich folgendermaßen ausgeben:

```
In [8]: mpl.colors.ColorConverter.colors
Out[8]: {'y': (0.75, 0.75, 0),
 'w': (1.0, 1.0, 1.0),
 'g': (0.0, 0.5, 0.0),
 'm': (0.75, 0, 0.75),
 'r': (1.0, 0.0, 0.0),
```

```
'c': (0.0, 0.75, 0.75),  
'k': (0.0, 0.0, 0.0),  
'b': (0.0, 0.0, 1.0)}
```

Es stehen auf diese Weise also die Farben Gelb (`y`), Weiß (`w`), Grün (`g`), Magenta (`m`), Rot (`r`), Cyan (`c`), Schwarz (`k`) und Blau (`b`) zur Verfügung. Die aufgelisteten Tupel geben die RGB-Darstellung der jeweiligen Farben an, das heißt den Anteil der Farben Rot, Grün und Blau. Dieses ist direkt an den Farben Rot und Blau nachvollziehbar. Bei Grün ist die Helligkeit reduziert, da diese Farbe bei voller Helligkeit im Allgemeinen schlecht zu sehen ist. Bei Weiß haben alle drei Kanäle ihren Maximalwert, während bei Schwarz keiner der Kanäle beiträgt. Bei den Komplementärfarben Cyan, Magenta und Gelb sind zwei der drei Kanäle beteiligt.

Eine große Zahl von Farben lässt sich durch Angabe eines Farbnamens erhalten, wobei man sich eine vollständige Liste der verfügbaren Namen anzeigen lassen kann.

```
In [9]: mpl.colors.cnames  
Out[9]: {'gold': '#FFD700', 'darkorchid': '#9932CC', 'silver': '#C0C0C0',  
'aquamarine': '#7FFF7D', 'mediumseagreen': '#3CB371', 'gray': '#808080',  
...  
'mediumspringgreen': '#00FA9A', 'darkturquoise': '#00CED1', 'darkblue': '#00008B',  
'deeppink': '#FF1493', 'sage': '#87AE73', 'mediumorchid': '#BA55D3'}
```

Jeder Farbe ist wieder ein RGB-Wert zugeordnet, der in diesem Fall hexadezimal kodiert ist. Der RGB-Wert besteht hier aus drei zweistelligen Hexadezimalzahlen, die demnach Werte zwischen 0 und 255 repräsentieren. Um auf die obige RGB-Darstellung zu kommen, muss man das Intervall von 0 bis 255 auf das Intervall von 0 bis 1 abbilden, also durch 255 teilen.

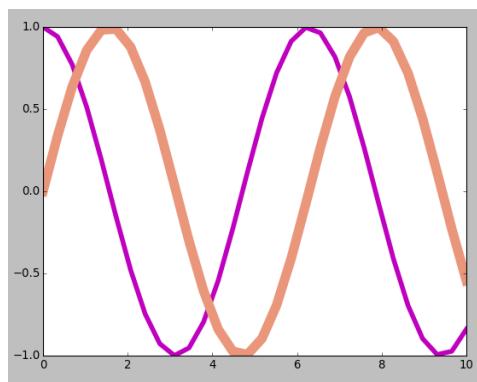
Die obige Liste der verfügbaren Farbnamen ist nicht vollständig wiedergegeben. Für die Farbauswahl praktischer ist die folgende, daraus erstellte Farbtabelle, die mit Hilfe des Skripts `named_colors.py` aus der matplotlib-Galerie erzeugt werden kann.

black	k	dimgray	dimgrey
gray	grey	darkgray	darkgray
silver	lightgrey	lightgray	gainsboro
whitesmoke	white	w	snow
rosybrown	lightcoral	indianred	brown
firebrick	maroon	darkerd	red
r	mistyrose	salmon	tomato
darksalmon	coral	orangered	lightsalmon
sienna	seashell	chocolate	saddlebrown
sandybrown	peachpuff	peru	linen
bisque	darkorange	burlywood	antiquewhite
tan	navajowhite	blanchedalmond	papayawhip
moccasin	orange	wheat	oldlace
floralwhite	darkgoldenrod	goldenrod	cornsilk
gold	lemonchiffon	khaki	palegoldenrod
darkkhaki	ivory	beige	lightyellow
lightgoldenrodyellow	olive	y	yellow
olivedrab	yellowgreen	darkolivegreen	greenyellow
chartreuse	lawngreen	sage	lightsage
darksage	honeydew	darkseagreen	palegreen
lightgreen	forestgreen	limegreen	darkgreen
green	g	mintcream	seagreen
mediumseagreen	springgreen	turquoise	mediumspringgreen
mediumaquamarine	aquamarine	lightcyan	lightseagreen
mediumturquoise	azure	teal	paleturquoise
darkslategrey	darkslategray	aqua	darkcyan
c	cyan	lightblue	darkturquoise
cadetblue	powderblue	steelblue	deepskyblue
skyblue	lightskyblue	lightslategrey	aliceblue
dodgerblue	lightslategray	lightsteelblue	slategrey
slategray	lightsteelblue	lavender	royalblue
ghostwhite	lavender	mediumblue	navy
darkblue	mediumblue	darkslateblue	b
slateblue	darkblue	indigo	mediumpurple
blueviolet	slateblue	thistle	darkviolet
mediumorchid	indigo	darkmagenta	violet
purple	thistle	orchid	fuchsia
magenta	darkmagenta	lavenderblush	deppink
hotpink	orchid	lightpink	crimson
pink	lavenderblush	lightpink	

Als Beispiel ändern wir die Farbe der zweiten Linie auf `darksalmon`

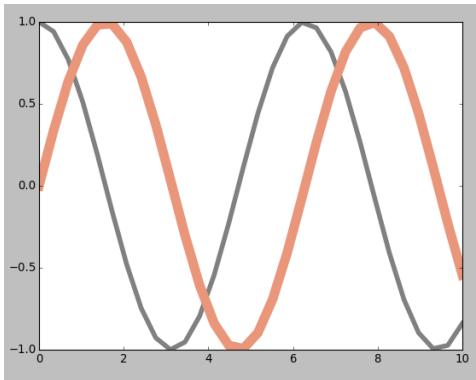
```
In [10]: plt.setp(line2, color='darksalmon')
```

und erhalten damit die folgende Ausgabe



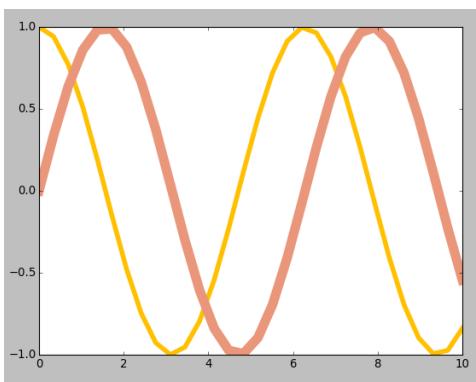
Falls die bisher genannten Farben nicht ausreichen sollten, kann man Farben auch stufenlos wählen, wenn man von der endlichen Auflösung der Gleitkommazahlen in Python absieht. So lassen sich Grautöne kontinuierlich von Schwarz bis Weiß mit Hilfe einer Zahl zwischen 0 und 1 festlegen. In dem folgenden Beispiel wird für die erste Linie ein Grauton vorgegeben.

```
In [11]: plt.setp(line1, color='0.5')
```

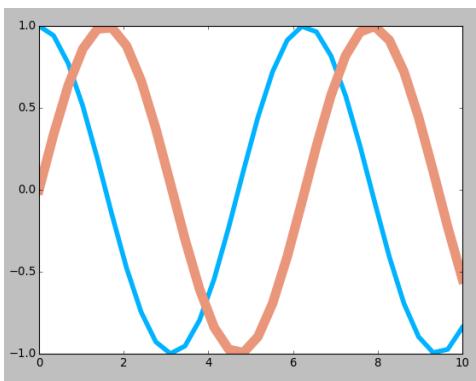


Wie bereits weiter oben beschrieben, lassen sich Farben in der RGB-Darstellung hexadezimal oder durch ein aus drei Zahlen bestehendes Tupel auswählen, wie die folgenden beiden Beispiele zeigen.

In [12]: `plt.setp(line1, color='#FFC000')`



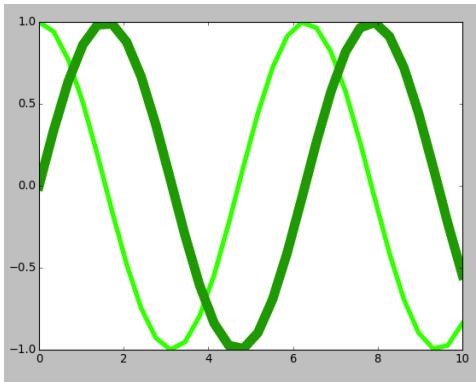
In [13]: `plt.setp(line1, color=(0, 0.7, 1))`



Alternativ zum RGB-System lassen sich Farben auch mit Hilfe des HSV-Systems darstellen, in dem die Farben ebenfalls durch ein Tupel aus drei Gleitkommazahlen zwischen 0 und 1 charakterisiert werden. Der erste Wert steht für den Farbton (»hue«) und gibt die Position im Farbkreis an. Dabei sind die Werte 0 und 1 der Farbe Rot zugeordnet. Grün liegt bei 1/3 und Blau bei 2/3. Der zweite Wert gibt die Farbsättigung (»saturation«) an. Verringert man diesen Wert, so geht man von der Farbe zu einem entsprechenden Grauton über. Der dritte Wert (»value«) schließlich beeinflusst die Helligkeit der Farbe.

Im folgenden Beispiel setzen wir den ersten Wert auf 0.3 und wählen so einen Grünton aus. Wie schon weiter oben erwähnt, besteht bei Grüntönen die Gefahr, dass sie zu hell erscheinen. Daher haben wir für die zweite Linie den dritten Wert des Tupels reduziert.

In [14]: `plt.setp(line1, color=matplotlib.colors.hsv_to_rgb((0.3, 1, 1)))`
...: `plt.setp(line2, color=matplotlib.colors.hsv_to_rgb((0.3, 1, 0.6)))`



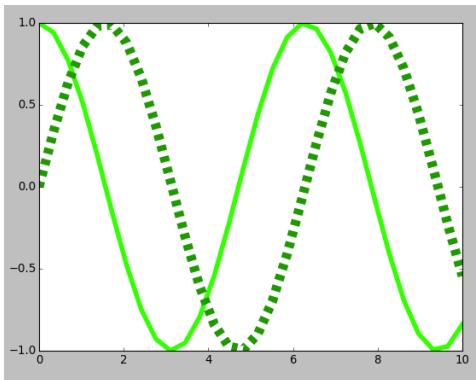
Um Unterschiede zwischen verschiedenen Linien hervorzuheben, kann man nicht nur verschiedene Farben einsetzen, sondern auch unterschiedliche Linienarten. Dies ist besonders dann sinnvoll, wenn man davon ausgehen muss, dass die Abbildung in schwarz/weiß gedruckt wird, so dass Farben auf Grautöne abgebildet würden.

Die Linienart wird in matplotlib durch einen String charakterisiert, der sich aus der folgenden Auflistung ergibt.

```
In [15]: mpl.lines.Line2D.lineStyles
Out[15]: {'--': '_draw_dashed',
      '-': '_draw_solid',
      ''': '_draw_nothing',
      ' ': '_draw_nothing',
      'None': '_draw_nothing',
      '-.': '_draw_dash_dot',
      ':': '_draw_dotted'}
```

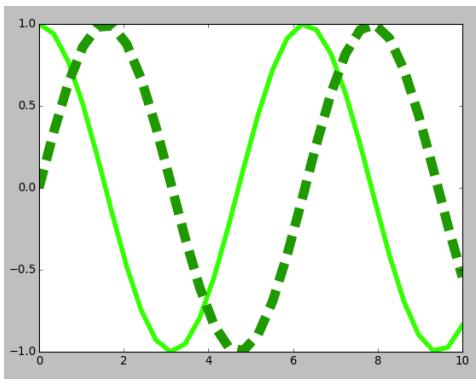
Möchte man eine Linie gestrichelt darstellen, kann man wie bei den Farben die `setp`-Methode verwenden und übergibt mit Hilfe des Schlüsselworts `linestyle` den entsprechenden Wert `--`.

```
In [16]: plt.setp(line2, linestyle='--')
```

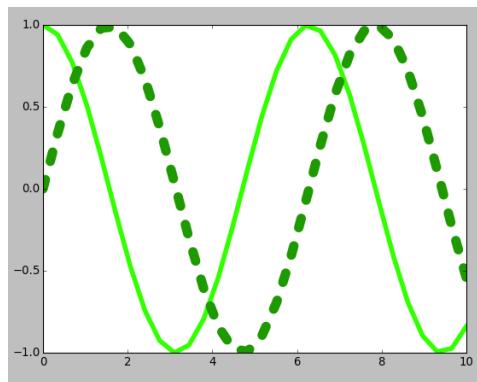


Bei Bedarf kann man die Strichlänge anpassen oder auch die Form der Strichenden festlegen.

```
In [17]: plt.setp(line2, dashes=(20, 10))
```

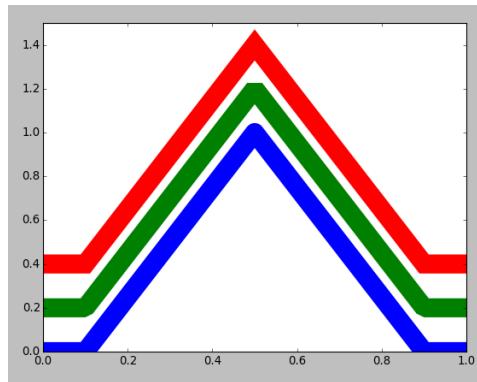


In [18]: `plt.setp(line2, dashes=(10, 20), dash_capstyle='round')`



Vor allem bei Linienverläufen, die Spitzen enthalten, kann es interessant sein, die Form vorzugeben, mit der Linien aneinander gefügt werden. Es gibt hierfür drei Möglichkeiten, die im Folgenden dargestellt sind.

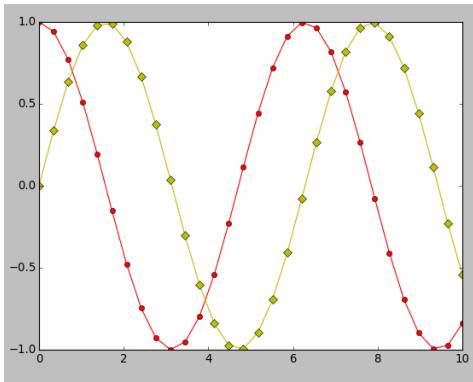
In [19]: `plt.cla()
.... xdata = np.array([0, 0.1, 0.5, 0.9, 1])
.... ydata = np.array([0, 0, 1, 0, 0])
.... for n in range(3):
.... plt.plot(xdata, ydata+0.2*n)
.... line = plt.gca().lines
.... plt.setp(line, linewidth=20)
.... plt.ylim(0, 1.5)
.... for n, joinstyle in enumerate(('round', 'bevel', 'miter')):
.... plt.setp(line[n], solid_joinstyle=joinstyle)`



In dem obigen Codebeispiel haben wir eine Funktion verwendet, die bis jetzt noch nicht besprochen wurde, nämlich `cla()`. Der Name steht für »clear current axes« und löscht die aktuellen Unterabbildung, die in unserem Fall einfach der aktuellen Abbildung entspricht.

Bis jetzt haben wir die Datenpunkte lediglich durch Linien dargestellt. Dies ist jedoch häufig entweder nicht gewünscht oder nicht ausreichend. Insbesondere bei Messdaten sollen die Datenpunkte oft einzeln markiert werden. In vielen Fällen kann man bei matplotlib auf eine sehr einfache Syntax zurückgreifen. Um dies zu illustrieren, erstellen wir unsere Beispielgrafik, mit der wir bisher überwiegend gearbeitet haben, neu. Im ersten `plot`-Aufruf verwenden wir als drittes Argument die Zeichenkette '`ro-`'. Das erste Zeichen, `r`, wird als Farbe interpretiert und bedeutet, wie wir bereits wissen, Rot. Das zweiten Zeichen, `o`, wird als Symbol interpretiert, in diesem Fall als Kreis. Der abschließende Bindestrich gibt an, dass nicht nur Symbole dargestellt werden sollen, sondern die Symbole außerdem durch eine durchgezogene Linie verbunden werden sollen. Für den zweiten Datensatz verlangen wir mit '`yD-`' statt roten Kreisen gelbe Rauten (»diamonds«).

In [20]: `plt.cla()
.... plt.plot(x, y1, 'ro-')
.... plt.plot(x, y2, 'yD-')
Out[20]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x7f48b0110860>]`



Um die Symbole modifizieren zu können, verschaffen wir uns Zugriff auf die einzelnen Linie, wie wir dies früher schon getan haben.

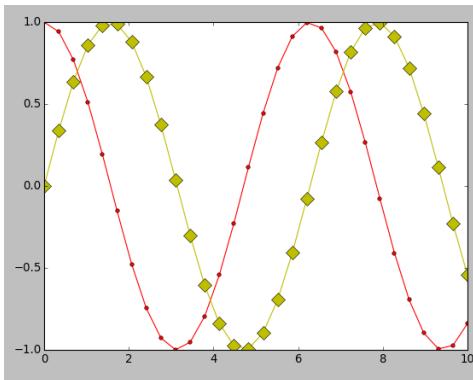
```
In [21]: line1, line2 = plt.gca().lines
```

Zunächst verändern wir die Größe der Symbole. Dazu beschaffen wir uns zunächst den aktuellen Wert, um eines der Symbole relativ zu diesem Wert vergrößern und das andere verkleinern zu können. Hierzu verwenden wir die Partnermethode zu `setp`, nämlich `getp`, das für »get property« steht, es also erlaubt, Eigenschaften in Erfahrung zu bringen.

```
In [22]: plt.getp(line1, 'markersize')
Out[22]: 6.0
```

Die Standardgröße der Symbole beträgt also 6, so dass wir davon ausgehend nun mit der bewährten `setp`-Methode neue Symbolgrößen setzen können.

```
In [23]: plt.setp(line1, markersize=4)
...: plt.setp(line2, markersize=10)
```

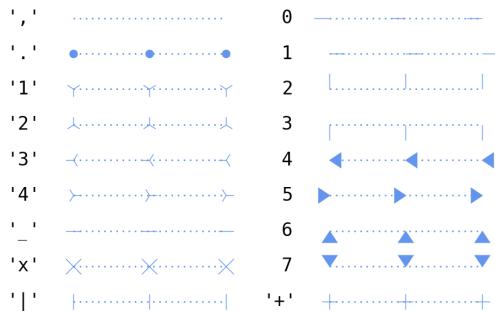


Neben Kreisen und Rauten stellt matplotlib natürlich noch weitere Symbole zur Verfügung, die man sich als Dictionary ausgeben lassen kann.

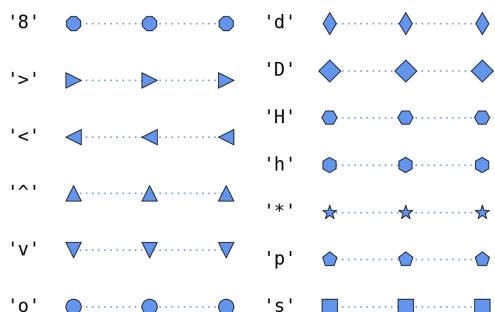
```
In [24]: mpl.lines.Line2D.markers
Out[24]: {'v': 'triangle_down', 0: 'tickleleft', 2: 'tickup', 's': 'square',
...
'h': 'hexagon1', '1': 'tri_down', 'p': 'pentagon', '2': 'tri_up'}
```

Das Dictionary ist hier nur auszugsweise wiedergegeben, da die folgende grafische Darstellung nützlicher ist. Zu beachten ist, dass zwar die meisten Symbole mit einem Zeichen ausgewählt werden, es aber dennoch einige Symbole gibt, auf die mit einer Ziffer Bezug genommen wird. So bezeichnen 4 und '4' unterschiedliche Symbole.

un-filled markers

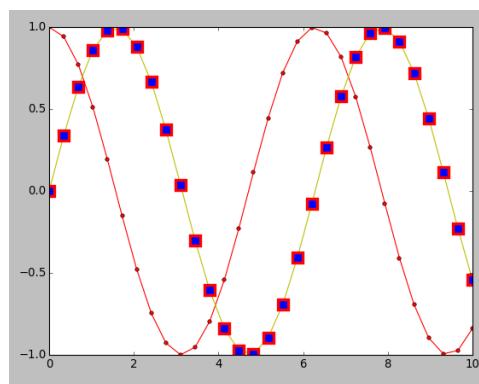


filled markers



Bei Bedarf lassen sich die Eigenschaften von Symbolen im Detail festlegen. Das folgende Beispiel erzeugt auf der Linie 2 quadratische blaue Symbole mit einem roten Rand von 3 Punkten Breite.

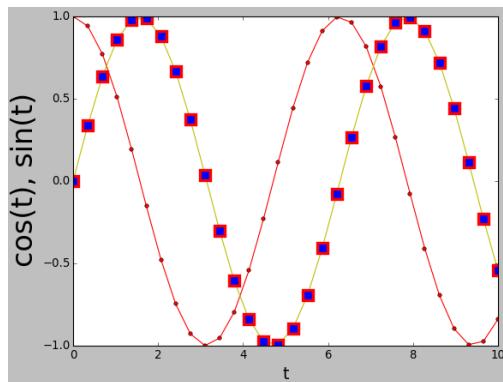
```
In [25]: plt.setp(line2, marker='s', markerfacecolor='b',
...:                 markeredgewidth=3, markeredgecolor='r')
```



Zu einem ordentlichen Funktionsgraphen gehört selbstverständlich auch eine Achsenbeschriftung. Im einfachsten Fall verwendet man `xlabel` und `ylabel` und gibt den Text als Argument in Form einer Zeichenkette an. Häufig muss man allerdings die Schriftgröße anpassen. Dies kann mit Hilfe eines entsprechenden Bezeichners geschehen, wie es hier für die x -Achse erfolgt, oder aber durch Angabe einer Schriftgröße in Punkten, wie es hier für die y -Achse gezeigt ist.

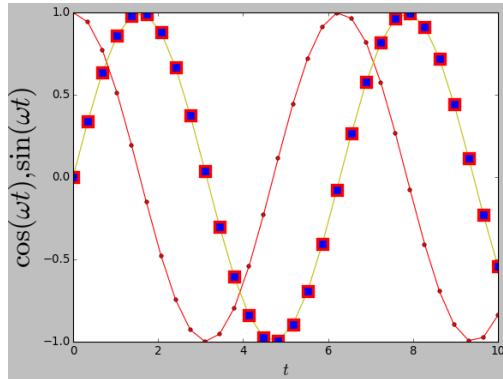
```
In [26]: plt.xlabel('t', fontsize='x-large')
Out[26]: <matplotlib.text.Text at 0x7f48b0a30668>
```

In [27]: `plt.ylabel('cos(t), sin(t)', fontsize=30)`
 Out [27]: <matplotlib.text.Text at 0x7f48b015a780>



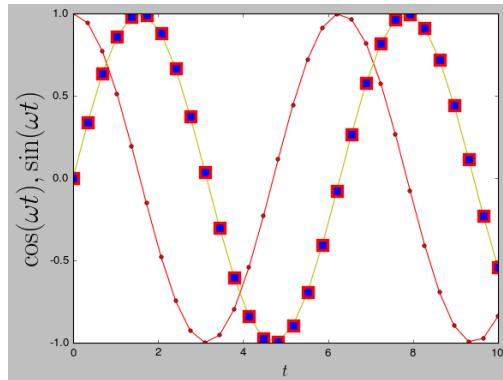
Einen besseren Mathematiksatz erhält man, wenn man die TeX-Syntax verwendet¹. Dabei werden mathematische Teile in Dollarzeichen eingeschlossen, was unter anderem zur Konsequenz hat, dass mathematische Symbole kursiv dargestellt werden. TeX- und LaTeX-Kommandos beginnen mit \ und so lassen sich beispielsweise griechische Buchstaben durch Voranstellen dieses Zeichens vor den Namen des Buchstabens erzeugen. \omega wird so zu einem ω .

In [28]: `plt.xlabel('t')`
 ...: `plt.ylabel(r'$\cos(\omega t), \sin(\omega t)$')`
 Out [28]: <matplotlib.text.Text at 0x7f48b015a780>



Standardmäßig interpretiert matplotlib selbst die in TeX-Syntax übergebenen Zeichenketten. Dabei wird nur ein Teil der äußerst umfangreichen Möglichkeiten von TeX unterstützt. Man kann jedoch auch verlangen, dass der Text von der lokal vorhandenen TeX-Installation gesetzt wird.

In [29]: `mpl.rc('text', usetex = True)`
 ...: `plt.ylabel(r'$\cos(\omega t), \sin(\omega t)$')`
 Out [29]: <matplotlib.text.Text at 0x7f48b015a780>



¹ Bei TeX und seiner Variante LaTeX handelt es sich um ein sehr mächtiges Textsatzsystem, das im wissenschaftlichen Umfeld stark genutzt wird. Für weitere Informationen siehe zum Beispiel www.dante.de.

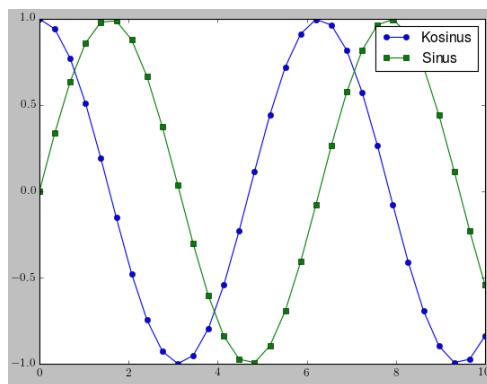
Dadurch verbessert sich in unserem Beispiel unter anderem die Platzierung des Kommas deutlich.

Gelegentlich ist es sinnvoll, eine Grafik mit einer Legende zu versehen, die die Bedeutung der einzelnen Kurven erläutert. Eine Möglichkeit, den Beschriftungstext vorzugeben, besteht darin, dies gleich bei der Erzeugung der Kurven mit Hilfe der Variable `label` zu tun.

```
In [30]: plt.cla()
.... plt.plot(x, y1, 'o-', label='Kosinus')
.... plt.plot(x, y2, 's-', label='Sinus')
Out[30]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x7f48b09f9828>]
```

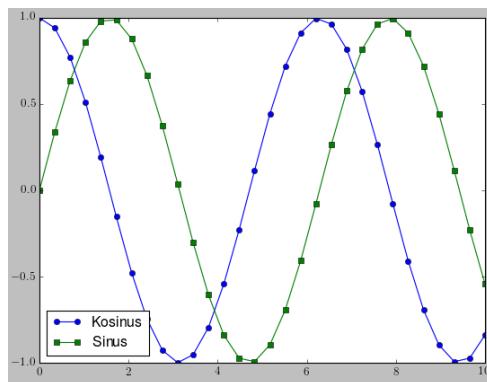
Die `legend`-Methode wird anschließend benutzt, um die Legende im Graphen zu setzen.

```
In [31]: plt.legend()
Out[31]: <matplotlib.legend.Legend at 0x7f48af928080>
```



Bei einer recht vollen Grafik, wie es hier der Fall ist, kann es sinnvoll sein, den Ort der Legende explizit vorzugeben.

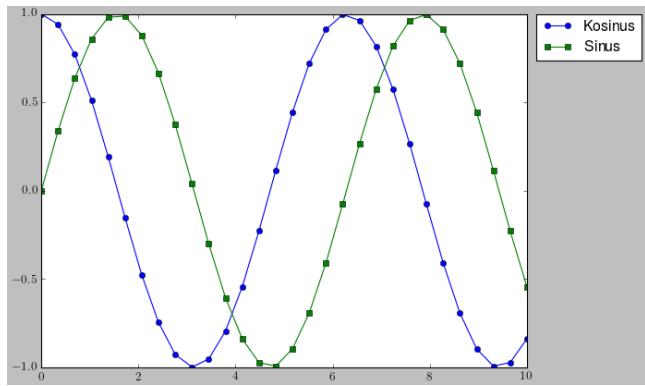
```
In [32]: plt.legend(loc='lower left')
Out[32]: <matplotlib.legend.Legend at 0x7f48af946ba8>
```



Steht ausreichend horizontaler Platz zur Verfügung, so kann es im vorliegenden Fall günstig sein, die Legende außerhalb der Grafik anzurordnen, wie das folgende Beispiel zeigt.

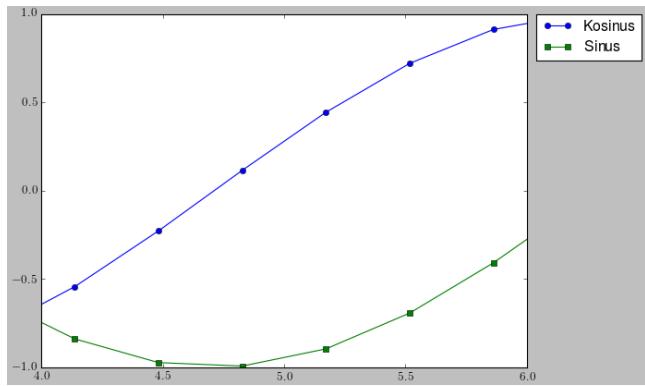
```
In [33]: plt.legend(bbox_to_anchor=(1.02, 1), loc='upper left', borderaxespad=0)
Out[33]: <matplotlib.legend.Legend at 0x7f48af8d4780>
```

Hier wird festgelegt, dass die Legende mit der oberen linken Ecke etwas außerhalb des rechten oberen Randes der Grafik platziert wird. Der genaue Punkt wird relativ zur so genannten »bounding box« angegeben, die hier immer die horizontale und vertikale Länge 1 besitzt, also unabhängig von den Problemkoordinaten ist, die hier in horizontaler Richtung von 0 bis 10 und in vertikaler Richtung von -1 bis 1 laufen. Der Punkt $(1.02, 1)$ liegt somit wie behauptet leicht rechts von der oberen rechten Ecke der Grafik.



Die Achsen haben neben der bereits besprochenen Achsenbeschriftung noch weitere Eigenschaften, die sich in matplotlib einstellen lassen. So kann es sinnvoll sein, den Umfang der Achsen in Problemkoordinaten unabhängig von dem Bereich festzulegen, in dem sich die Daten befinden. Im folgenden Beispiel wird die x -Achse auf einen kleinen Ausschnitt der bisherigen Achse eingeschränkt.

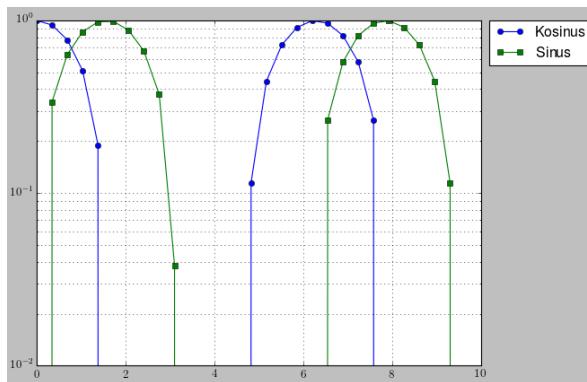
```
In [34]: plt.xlim(4, 6)
Out[34]: (4, 6)
```



```
In [35]: plt.xlim(0, 10)
Out[35]: (0, 10)
```

Nachdem wir wieder zum ursprünglichen Achsenumfang zurückgekehrt sind, wollen wir die y -Achse logarithmisch darstellen. Dies hat in unserem Fall den Nebeneffekt, dass die Bereiche, in denen negative y -Werte auftreten, nicht dargestellt werden. Außerdem wollen wir ein Koordinatengitter für beide Achsen anzeigen lassen.

```
In [36]: plt.yscale('log')
...: plt.grid(which='both')
```



Der Wechsel zwischen linearer und logarithmischer Achse kann auch direkt im Grafikfenster mit Hilfe der Tasten k für die x -Achse und l für die y -Achse erfolgen. Dies ist besonders dann praktisch, wenn man nur schnell überprüfen möchte, wie Daten in einer einfach- oder doppelt-logarithmischen Auftragung aussehen.

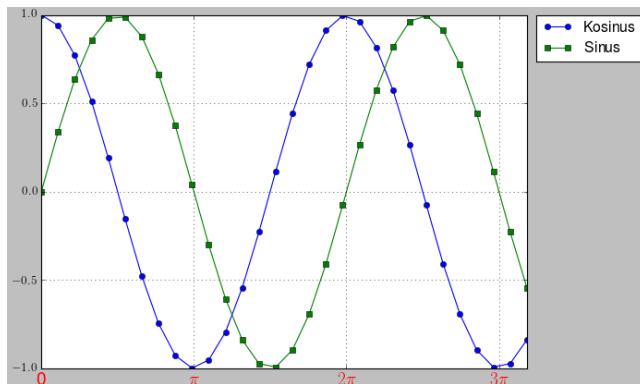
In [37]: `plt.yscale('linear')`

Wieder zu einer linearen Skala zurückgekehrt, wollen wir noch an einem einfachen Beispiel zeigen, wie man die Achseninteilung den jeweiligen Bedürfnissen anpassen kann. Eine genauere Diskussion der verschiedenen Möglichkeiten, die matplotlib zu diesem Zweck zur Verfügung stellt, würde hier zu weit führen.

Nachdem wir in unserer Beispielgrafik trigonometrische Funktionen darstellen, wollen wir gerne die x -Achse in Vielfache von π einteilen. Dies kann dadurch geschehen, dass wir der `xticks`-Methode eine Liste von Punkten auf der x -Achse sowie ein Tupel mit den entsprechenden Beschriftungen übergeben. Außerdem können wir Schrifteigenschaften festlegen, zum Beispiel die Schriftgröße und die Schriftfarbe, die wir hier rot wählen.

```
In [38]: plt.xticks(np.pi*np.arange(0, 4), ('0', r'$\pi$', r'$2\pi$', r'$3\pi$'),
...:             size='x-large', color='r')
Out[38]: ([<matplotlib.axis.XTick at 0x7f48b0a011d0>,
<matplotlib.axis.XTick at 0x7f48b0178908>,
<matplotlib.axis.XTick at 0x7f48b016ada0>,
<matplotlib.axis.XTick at 0x7f48af92f8d0>],
<a list of 4 Text xticklabel objects>)
```

Das Ergebnis sieht dann folgendermaßen aus:



Hat man die optimale Form für die Grafik erreicht, so möchte man diese häufig auch abspeichern. Wie wir schon gesehen haben, lässt sich das mit dem entsprechenden Icon im Grafikfenster erreichen. Genauso gut kann man die Grafik aber auch mit Hilfe der `savefig`-Funktion in einer Datei speichern. Dabei ist zunächst das gewünschte Format festzulegen.

Für die Darstellung auf einem Bildschirm oder zum Beispiel für die Einbindung in eine Webseite eignet sich ein Bitmapformat, das die Abbildung in einer gerasterten Form abspeichert. Hierfür gibt es sehr viele verschiedene Formate. In matplotlib bietet sich die Verwendung des `png`-Formats² an.

In [39]: `plt.savefig('example.png')`

Der Nachteil von Bitmapformaten ist, dass die Pixelstruktur der Abbildung bei einer vergrößerten Darstellung mehr oder weniger stark sichtbar wird. Benötigt man eine höher aufgelöste Ausgabe, beispielsweise zum Druck, so wird man eher zu einem Vektorformat greifen. matplotlib bietet hier das Postscript-Format an, das sich im Encapsulated Postscript-Format für die Einbettung in andere Dokumente eignet. Ein heute weit verbreitetes Format ist PDF (»portable document format«). Dieses Format kann auch Bitmap-Anteile enthalten, die dann natürlich der beschriebenen Skalierungsproblematik unterliegen. SVG (»scalable vector graphics«) ist ein Vektorgrafikformat, das für die Verwendung von Vektorgrafiken im Internet entwickelt wurde und von modernen Webbrowsersn zumindest zu großen Teilen dargestellt werden kann.

In [40]: `plt.savefig('example.pdf')`

Die `savefig`-Funktion benötigt als zwingendes Argument den Namen der Datei, in der die Abbildung gespeichert werden soll. Sie akzeptiert außerdem eine Reihe weiterer Argumente, mit denen man zum Beispiel die Auflösung einer Bitmapgrafik oder die Hintergrundfarbe der Abbildung beeinflussen kann. Bei Bedarf empfiehlt sich ein Blick in die matplotlib-Dokumentation.

² png steht für »portable network graphics« und speichert die Abbildung erlustfrei, aber durch Komprimierung platzsparend.

Abschließend wollen wir aus dem breiten Spektrum der Möglichkeiten von matplotlib noch drei Problemstellungen ansprechen, die in einem wissenschaftlichen Umfeld häufig vorkommen. Als erstes wollen wir uns mit der Darstellung von zweidimensionalen Daten mit Hilfe eines Konturplots beschäftigen.

Zunächst löschen wir die noch vorhandene Abbildung mit Hilfe der `clf`-Funktion (»clear figure«) und fangen auf diese Weise neu an.

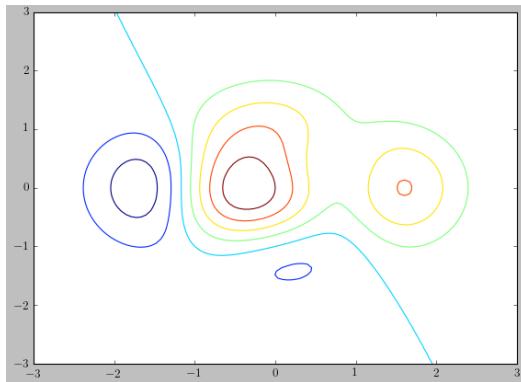
```
In [41]: plt.clf()
```

Um Daten zur Verfügung zu haben, die wir darstellen können, verwenden wir NumPy, mit dem wir zunächst ein regelmäßiges Koordinatengitter zu erzeugen, über dem dann eine Funktion von zwei Variablen ausgewertet wird.

```
In [42]: x, y = np.mgrid[-3:3:100j, -3:3:100j]
....: z = (1-x+x**5+y**3)*np.exp(-x**2-y**2)
```

Um eine Vorstellung vom Verhalten dieser Funktion anhand von Konturlinien zu erhalten, genügt es im einfachsten Fall, die x - und y -Koordinaten des Gitters und die zugehörigen Funktionswerte an die `contour`-Funktion zu übergeben.

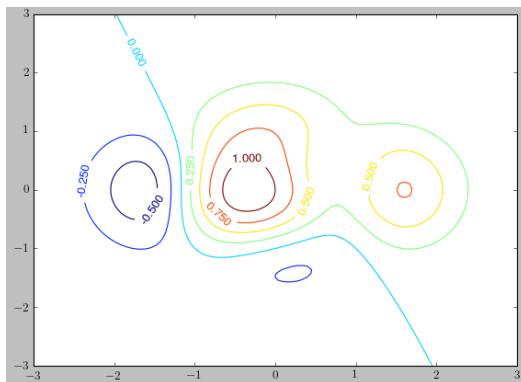
```
In [43]: contourset = plt.contour(x, y, z)
```



Wenn man jedoch nicht weiß, welche Farbe welchem Wert der Funktion zugeordnet ist, ist so ein Bild häufig nur eingeschränkt nützlich. Es ist daher sinnvoll, jede Konturlinie mit dem zugehörigen Funktionswert zu beschriften. Hierzu haben wir in der vorhergehenden Anweisung bereits die Konturlinien in der Variable `contourset` gespeichert, mit deren Hilfe wir nun die Beschriftung vornehmen können.

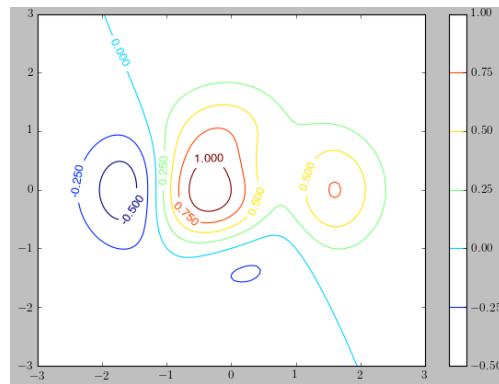
```
In [44]: plt.clabel(contourset, inline=1)
Out[44]: <a list of 8 Text objects>
```

Ist das Argument `inline` gleich `True` oder gleich `1`, so wird die Kontur unter der Beschriftung entfernt. Dies ist die Standardeinstellung und müsste daher nicht unbedingt explizit angegeben werden.



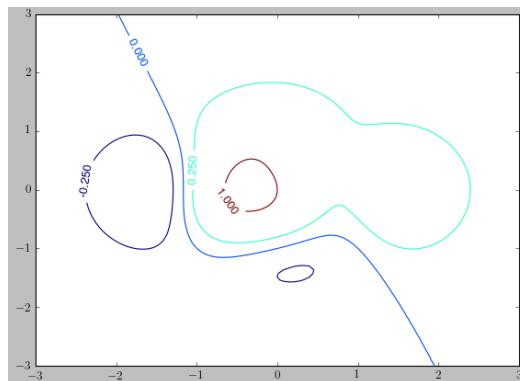
Eine andere Möglichkeit, eine Verbindung zwischen der Farbe der Konturlinien und dem entsprechenden Funktionswert herzustellen, besteht in der Verwendung eines Farbstreifens neben der eigentlichen Abbildung. Im Falle von Konturlinien sind hier nur einzelne Linien bei den entsprechenden Werten zu sehen. Füllt man die Flächen zwischen den Konturlinien, so ist dieser Farbstreifen durchgehend farbig dargestellt, wie wir gleich noch sehen werden.

```
In [45]: plt.colorbar(contourset)
Out[45]: <matplotlib.colorbar.Colorbar at 0x7f48aeda8a20>
```

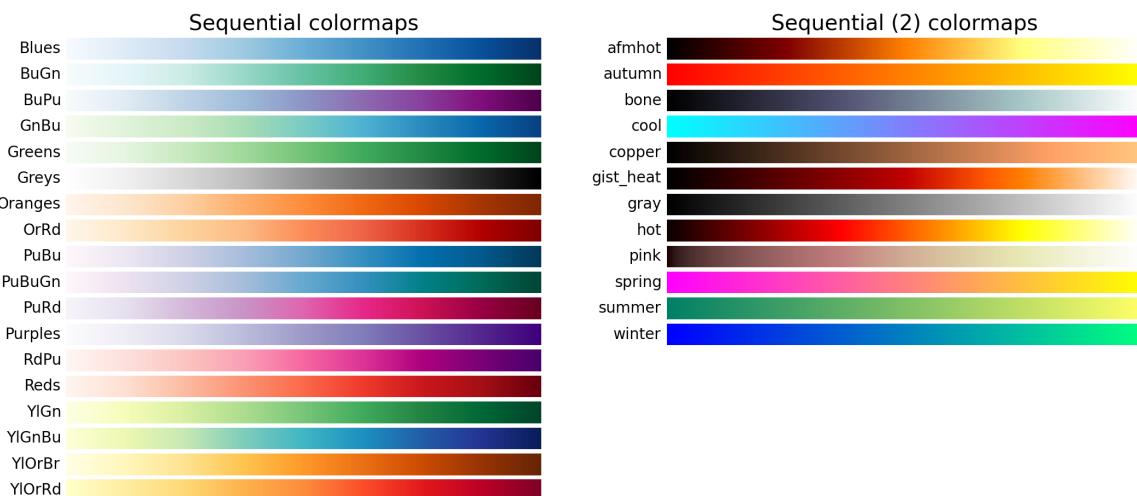


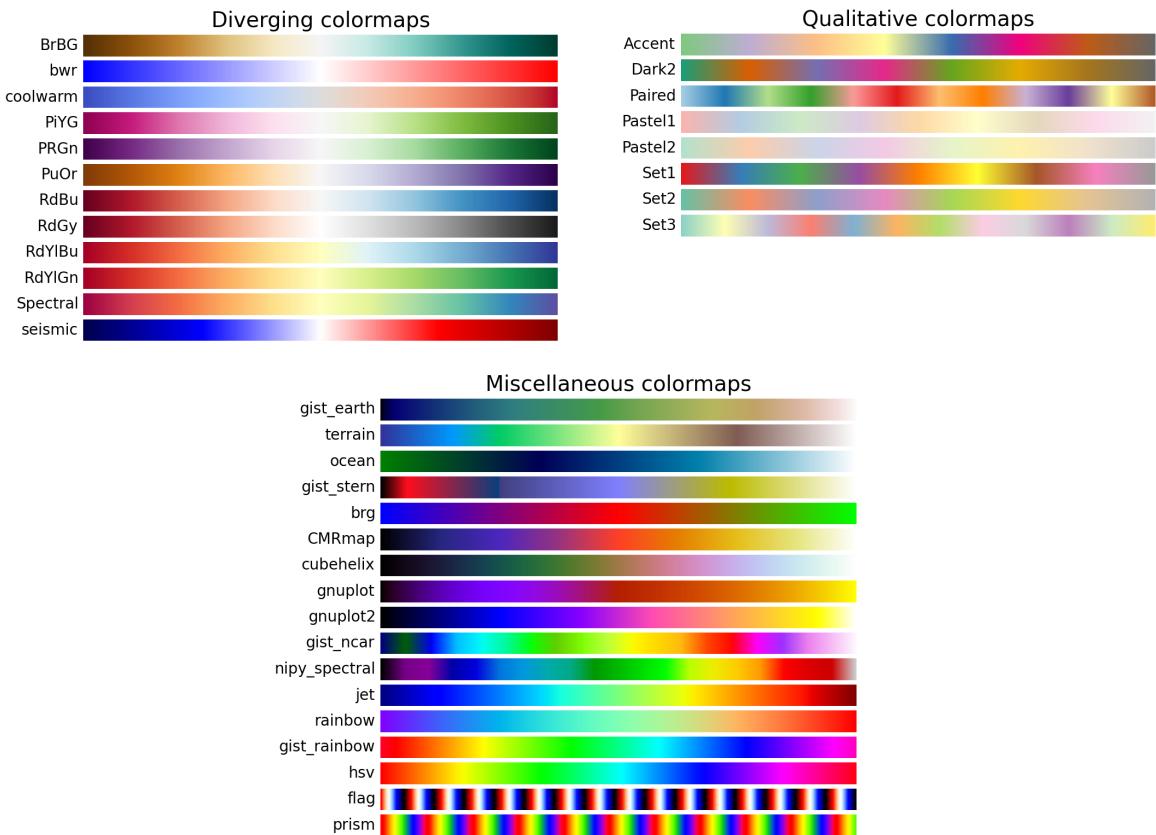
Bis jetzt hatten wir es matplotlib überlassen, die Werte für die einzelnen Konturlinien zu bestimmen. Es ist aber auch möglich, die entsprechenden Werte in einer Liste vorzugeben, wie das nächste Beispiel zeigt.

```
In [46]: plt.clf()
....: contourset = plt.contour(x, y, z, [-0.25, 0, 0.25, 1])
....: plt.clabel(contourset, inline=1)
Out[46]: <a list of 4 text.Text objects>
```



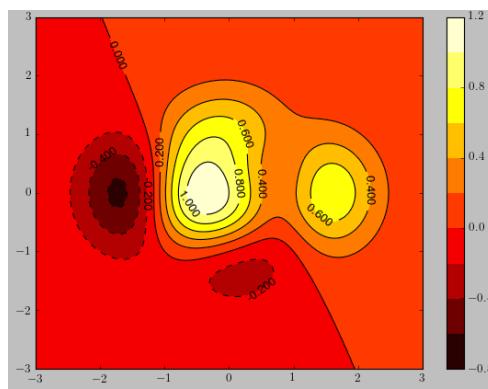
Der Zusammenhang zwischen Funktionswert und Farbe wird durch eine Farbpalette, eine so genannte »color map«, vermittelt. Die bisher verwendete Standardeinstellung läuft unter dem Namen `jet`. matplotlib stellt eine ganze Reihe verschiedener Farbpaletten zur Verfügung, von denen einige auch gut für Konturplots geeignet sind. Eine Zusammenstellung der Farbpaletten aus der matplotlib-Galerie ist nachfolgend abgebildet.





Im folgenden Beispiel wählen wir die Farbpalette `hot` und füllen mit Hilfe der Funktion `contourf` die Flächen zwischen den Konturlinien. Damit die Linien deutlicher sichtbar werden, werden sie in schwarz dargestellt.

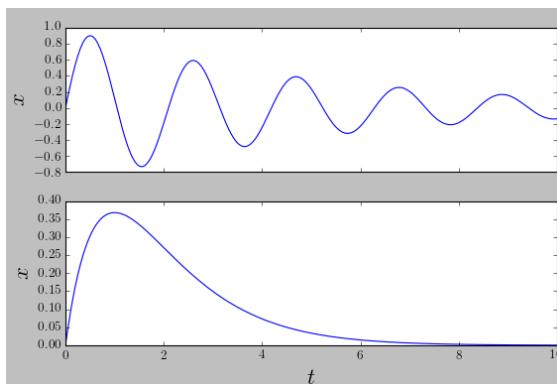
```
In [47]: plt.clf()
....: levels = 10
....: contourset = plt.contourf(x, y, z, levels, cmap='hot')
....: plt.colorbar(contourset)
....: contourlines = plt.contour(x, y, z, levels, colors=('k',))
....: plt.clabel(contourlines, inline=1)
Out[47]: <a list of 11 Text objects>
```



Vor allem bei der Erstellung von Grafiken für Publikationen steht man gelegentlich vor der Aufgabe, mehrere Abbildungen zu einer einzigen Abbildung zusammenzufassen. Man verwendet hierfür die `subplots`-Funktion, die in den ersten beiden Argumenten die Zahl der Zeilen und der Spalten enthält. Wir wollen zwei Grafiken übereinandersetzen und wählen daher 2 Zeilen und 1 Spalte. Neben der Gesamtgröße der Abbildung geben wir noch an, dass die x -Achse aus der unteren Abbildung auch für die obere Abbildung gelten soll. `subplots` gibt ein `figure`-Objekt zurück, das sich auf die ganze Abbildung bezieht sowie in unserem Fall zwei `axes`-Objekte, die sich jeweils auf die Unterabbildungen beziehen. Hier wird die Unterscheidung zwischen Abbildung und Unterabbildungen deutlich, die weiter oben bereits angedeutet wurde. Nachdem die Unterabbildungen angelegt wur-

den, können mit Hilfe des entsprechenden `axes`-Objekts Änderungen an den Unterabbildungen vorgenommen werden. Wir zeichnen hier konkret in jeder Unterabbildung einen Funktionsgraphen und nehmen eine Achsenbeschriftung vor.

```
In [48]: tvals = np.linspace(0, 10, 200)
....: x0vals = np.exp(-0.2*tvals)*np.sin(3*tvals)
....: x1vals = tvals*np.exp(-tvals)
....: fig, (ax0, ax1) = plt.subplots(2, 1, figsize=(8, 5), sharex=True)
....: ax0.plot(tvals, x0vals)
....: ax1.plot(tvals, x1vals)
....: ax1.set_xlabel('$t$', size='xx-large')
....: ax0.set_ylabel('$x$', size='xx-large')
....: ax1.set_ylabel('$x$', size='xx-large')
Out[48]: <matplotlib.text.Text at 0x7f48aeb96278>
```



Mit matplotlib sind auch dreidimensionale Darstellungen möglich, zumindest in einem gewissen Umfang, der für viele Zweck ausreicht. In dem folgenden Beispiel wird eine Funktion zweier Variablen dreidimensional dargestellt. Zusätzlich wird in der x - y -Ebene eine Projektion der Funktionsdaten gezeigt. Dreidimensionale Darstellungen erfordern einen Import aus dem matplotlib Toolkit, der zunächst vorgenommen wird. Anschließend wird die darzustellende Funktion auf einem Gitter ausgewertet. Zudem wählen wir eine Farbpalette, die wir sowohl für die dreidimensionale Darstellung als auch für die Projektion verwenden.

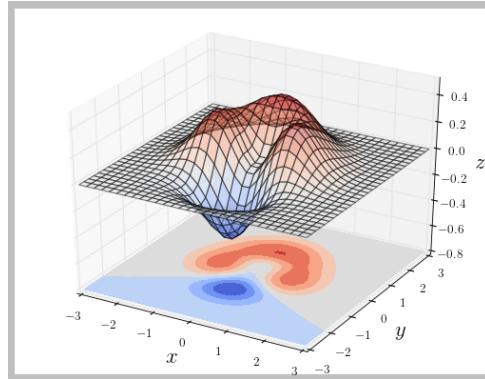
Nachdem wir eine Abbildung unter der Variable `fig` erzeugt haben, können wir für eine darin enthaltene Unterabbildung `ax` eine dreidimensionale Projektionsdarstellung festlegen. Anschließend können wir mit Hilfe der zuvor berechneten Funktionsdaten eine dreidimensionale Darstellung der Funktion zeichnen lassen. Die Argumente `rstride` und `cstride` geben an, in welchen Abständen bezogen auf die Gitterweite Schnittlinien gezeichnet werden. Das letzte Argument, `alpha`, betrifft einen Aspekt der Farbdarstellung, den wir bis jetzt noch nicht besprochen hatten. Der Alphakanal gibt zusätzlich beispielsweise zu den Farbkanälen R, G und B die Transparenz der Farbe an. Im Beispiel wird die Oberfläche also teilweise transparent dargestellt.

Die Projektion in die x - y -Ebene stellen wir wie bereits besprochen mit Hilfe der Funktion `contourf` dar, wobei wir in diesem Beispiel auf die Darstellung von Konturlinien verzichten. Bei der Anwendung in einer dreidimensionalen Darstellung müssen wir noch die Ausrichtung der Projektsebene mit Hilfe der Normalenrichtung `zdir` und die Lage mit Hilfe von `offset` spezifizieren. Durch eine entsprechende Wahl von `zdir` wäre es auch möglich, Projektionen in die x - z - und die y - z -Ebene vorzunehmen.

Abschließend setzen wir in unserem Beispiel die Achsenbeschriftung und erweitern den Wertebereich der z -Achse, um die Projektion darstellen zu können. Zum Schluss wird die Abbildung, die hier im Gegensatz zu den meisten Beispielen dieses Kapitels objektorientiert erstellt wurde, dargestellt.

```
In [49]: from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
....: x, y = np.mgrid[-3:3:30j, -3:3:30j]
....: z = (x**2+y**3)*np.exp(-x**2-y**2)
....: cmap = 'coolwarm'
....:
....: fig = plt.figure()
....: ax = fig.gca(projection='3d')
....: ax.plot_surface(x, y, z, rstride=1, cstride=1, cmap=cmap, alpha=0.5)
....: cset = ax.contourf(x, y, z, zdir='z', offset=-0.8, cmap=cmap)
```

```
....: ax.set_xlabel('x', size='xx-large')
....: ax.set_ylabel('y', size='xx-large')
....: ax.set_zlabel('z', size='xx-large')
....: ax.set_zlim(-0.8, 0.5)
....:
....: plt.draw()
```



Es sei noch angemerkt, dass sich die dreidimensionale Darstellung im grafischen Benutzerinterface nach Belieben in alle Richtungen drehen lässt, so dass sich bequem eine geeignete Blickrichtung finden lässt, die eine instruktive Sicht auf die dargestellten Daten ermöglicht.

In diesem Kapitel mussten wir uns auf einige für die Anwendung wichtige Problemstellungen konzentrieren und konnten daher keinen vollständigen Überblick über die Möglichkeiten von matplotlib geben. Um einen detaillierteren Einblick zu bekommen, bietet sich ein Blick in die bereits mehrfach erwähnte Beispiegalerie an. Dort ist auch der Code verfügbar, mit dem die in der Galerie gezeigten Beispiele erzeugt wurden. Weitere Informationen über die verfügbaren Funktionen und die jeweiligen Argumente liefert die umfangreiche Dokumentation, die ebenfalls auf der matplotlib-Webseite www.matplotlib.org bereitgestellt ist.

Erstellung von Grafiken mit PyX

In diesem Kapitel wollen wir als zweites Paket zur Erzeugung von Abbildungen PyX besprechen. Es handelt sich dabei um ein Paket, das zunächst von André Wobst und Jörg Lehmann während ihrer Doktorandenzeit an der Universität Augsburg entwickelt wurde. Zwischenzeitlich leistete Michael Schindler einige interessante Beiträge, und heute wird PyX von den beiden Erstgenannten weiterentwickelt.

PyX eignet sich im Gegensatz zu dem zuvor besprochenen matplotlib-Paket auch sehr gut zur Erstellung von schematischen Darstellungen. Wir wollen diesen Aspekt daher als erstes besprechen. Anschließend werden wir zeigen, wie in PyX auch grafische Darstellungen von Daten erzeugt werden können. Interessant ist, dass man für beide Anwendungen nur ein einziges Paket benötigt und die beiden Darstellungsarten auch kombinieren kann. Wie schon bei matplotlib würde es zu weit führen, alle Möglichkeiten von PyX zu diskutieren. Wir treffen daher im Folgenden eine Auswahl wichtiger anwendungsrelevanter Aspekte und verweisen ansonsten auf die Dokumentation unter pyx.sf.net sowie die Beispieleseiten und die Galerie. Letztere ist derzeit weniger umfangreich als bei matplotlib, was jedoch nichts über den Funktionalitätsumfang aussagt.

Bis zur Version 0.12.1 war PyX nur unter Python 2 lauffähig und seit der Version 0.13 ist es ausschließlich unter Python 3 funktionsfähig. Die installierte Version von PyX kann man folgendermaßen herausfinden:

```
In [1]: import pyx
...: pyx.__version__
Out[1]: '0.13'
```

Die folgende Diskussion bezieht sich auf die Version 0.13 für Python 3. Zu Beginn eines Python-skripts wird man zuerst PyX sowie bei Bedarf weitere Pakete importieren. Im Gegensatz zu matplotlib importieren wir alle Module, da die Auswirkung auf den Namensraum wesentlich überschaubarer ist als bei matplotlib. Natürlich kann man sich aber auch darauf beschränken, nur die jeweils benötigten Module zu importieren.

```
In [2]: from pyx import *
```

Ein wesentlicher Aspekt bei der Erstellung schematischer Abbildungen ist das Zeichnen von Pfaden, eine eventuelle Dekorierung von Pfaden sowie das Füllen von Flächen, die durch gegebene Pfade begrenzt werden. In PyX erfolgt das Zeichnen grundsätzlich auf einem »canvas«, also einer Leinwand. Wir werden später noch sehen, dass ein Canvas eine sehr flexible Struktur darstellt, die transformiert, also beispielsweise skaliert, gespiegelt oder geschnitten werden kann. Zudem kann ein Canvas in einen anderen Canvas eingefügt werden. Bei PyX wird man im Allgemeinen sehr früh einen Canvas bereitstellen, um darin zeichnen zu können. In unserem ersten Beispiel definieren wir uns einen Canvas. Diese Klasse ist im `canvas`-Modul definiert, so dass die Initialisierung mit der ersten Zeile aus dem folgenden Code erfolgt. Der Code in der zweiten Zeile verlangt, dass auf dem gerade definierten Canvas ein Kreis um den Ursprung mit Radius 1 gemalt wird. So lange nichts anderes angegeben wird, wird der Kreis mittels einer schwarzen durchgezogenen Linie mit der Defaultbreite dargestellt.

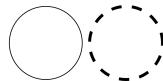
```
In [3]: c = canvas.canvas()
...: c.stroke(path.circle(0, 0, 1))
```



Abweichungen von den Defaulteinstellungen kann man in einer Attributliste angeben. Zu beachten ist, dass hier immer eine Liste anzugeben ist, selbst dann, wenn nur ein einziges Attribut neu definiert wird. Mit Hilfe der

folgenden Codezeile wird auf dem bereits existierenden Canvas ein weiterer Kreis gemalt, der nun durch eine dicke, gestrichelte Linie dargestellt wird.

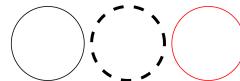
```
In [4]: c.stroke(path.circle(2.2, 0, 1),
...:                      [style.linestyle.dashed, style.linewidth.THICK])
```



Neben durchgezogenen und gestrichelten Linien gibt es auch punktierte und strichpunktisierte Linien, wobei sich die Strichlänge bei Bedarf einstellen lässt. Die Liniendicke wird umso größer, je mehr Buchstaben des Wortes »thick« groß geschrieben werden. Von »THIN« bis »THICK« ändert sich die Linienbreite in Schritten von $\sqrt{2}$ und umfasst dabei einen Umfang von etwa einem Faktor 45.

Ein weiterer Parameter beim Malen des Pfades ist die Farbe, die man ganz ähnlich wie bei matplotlib auf verschiedene Weisen festlegen kann. Im `rgb`-System sind wenige Farben per Namen ansprechbar. Es handelt sich um rot (`red`), grün (`green`), blau (`blue`), weiß (`white`) und schwarz (`black`). Eine wesentlich größere Anzahl von Farbnamen ist im `cmyk`-System definiert, wobei `cmyk` für Cyan, Magenta, Gelb (`Yellow`) und Schwarz (`black`) steht. Einen roten Kreis kann man also folgendermaßen erhalten:

```
In [5]: c.stroke(path.circle(4.4, 0, 1), [color.rgb.red])
```



Man kann aber Pfade nicht nur zeichnen, sondern auch füllen. Hierfür gibt es zwei Möglichkeiten, die wir nun ansehen wollen. Man kann den Pfad durch Füllen dekorieren, indem man zu den Attributen `deco.filled()` hinzufügt. Die Füllung kann man wiederum mit einer Liste von Attributen genauer spezifizieren. In unserem Beispiel wollen wir als Farbe ein helles Grau festlegen. Lässt man in `color.grey()` das Argument von 0 bis 1 laufen, so erhält man Graustufen zwischen Schwarz und Weiß. Anhand der Linienfarbe demonstriert unser Beispiel auch die Möglichkeit, Farben mit Hilfe des `hsb`-Systems festzulegen, wobei der »value« in dieser Bezeichnung durch »brightness« ersetzt wurde, ein ebenfalls übliches Akronym für dieses zusätzlich auf dem Farbwert und der Sättigung basierenden Farbsystems.

```
In [6]: c.stroke(path.circle(6.6, 0, 1),
...:                      [color.hsb(0.11, 1, 1), style.linewidth.THICK,
...:                      deco.filled([color.grey(0.7)])))
```



Ein alternativer Weg, einen gefüllten Kreis zu malen, der vollkommen äquivalent zu dem vorherigen Vorgehen ist, besteht darin, das Füllen des Kreises in den Vordergrund zu stellen. Dabei verwendet man statt der `stroke`-Methode die `fill`-Methode. Dabei hat man die Wahl, den Pfad selbst durch Angabe des `deco.stroked()`-Methode zu malen oder dies nicht zu tun. Das folgende Beispiel unterscheidet sich von dem vorhergehenden lediglich durch die Wahl der Farben, wobei wir hier noch die Verwendung des `rgb`-Systems demonstrieren, das wir bereits von matplotlib kennen.

```
In [7]: c.fill(path.circle(8.8, 0, 1), [color.rgb(1, 0.5, 0.5),
...:                      deco.stroked([style.linewidth.THICK, color.rgb(0.5, 0.5, 1)])))
```

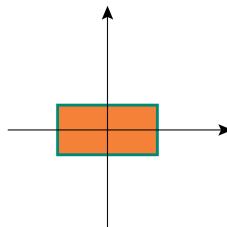


Selbstverständlich stehen als Pfade nicht nur Kreise zur Verfügung. Im folgenden Beispiel finden zwei weitere Pfade Verwendung, nämlich Linien (`path.line`) und Rechtecke (`path.rect`). Im ersten Fall sind die x - und y -Koordinate von Anfangs- und Endpunkt anzugeben, während im zweiten Fall die ersten beiden Argumente einen Eckpunkt angeben und die beiden folgenden Punkte die Breite und die Höhe des Rechtecks spezifizieren.

Zusätzlich zu diesen Pfaden demonstriert das Beispiel noch eine weitere Pfaddekoration, nämlich das Platzieren von Pfeilen am Anfang (`barrow`) und/oder Ende (`earrow`) eines Pfades. Dabei lässt sich die Größe des Pfeils

festlegen. Hier verlangen wir mit `large` Pfeile, die etwas größer als die Defaultpfeile sind. Mit Hilfe von Großbuchstaben lässt sich die Pfeilgröße weiter erhöhen, ähnlich wie dies bei der Linienbreite der Fall war. Kleinere Pfeile erhält man mit Hilfe von `small`. Schließlich demonstriert das Beispiel die Verwendung von benannten Farben im `cmyk`-System, das oben schon kurz erläutert wurde.

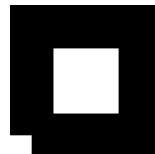
```
In [8]: c = canvas.canvas()
....: c.fill(path.rect(-1, -0.5, 2, 1),
....:         [color.cmyk.Orange, deco.stroked([color.cmyk.PineGreen,
....:                                         style.linewidth.THick])])
....: c.stroke(path.line(-2, 0, 2.5, 0), [deco.earrow.large])
....: c.stroke(path.line(0, 2.5, 0, -2), [deco.barrow.large])
```



Neben der Verwendung vordefinierter Pfade erlaubt es PyX auch, Pfade aus mehreren Pfadsegmenten zu bilden. Im folgenden Beispiel wird ein Pfad aus vier geraden Linien zusammengesetzt. Zunächst wird mit `path.moveto()` ein Startpunkt gewählt, der hier im Koordinatenursprung liegt. Von diesem Punkt ausgehend wird dann eine Linie zu einem weiteren Punkt gezogen, der in absoluten Koordinaten angegeben wird und als nächster Ausgangspunkt dient. Auf diese Weise wird hier ein Pfad konstruiert, der ein Quadrat beschreibt.

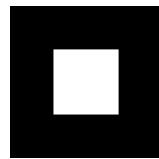
Obwohl der Pfad schließlich an den Ausgangspunkt zurückkehrt, handelt es sich nicht um einen geschlossenen Pfad. Dies wird deutlich, wenn man die Linienbreite sehr groß wählt, wie es hier der Fall ist. Die Funktionsweise von `wscale` und weiteren Längenskalen wird etwas weiter unten genauer besprochen. Die letzte Zeile in dem folgenden Beispiel führt zwar dazu, dass der eingangs definierte Pfad `p` gezeichnet wird, aber die Linie ist offenbar nicht geschlossen.

```
In [9]: p = path.path(path.moveto(0, 0),
....:                  path.lineto(2, 0),
....:                  path.lineto(2, 2),
....:                  path.lineto(0, 2),
....:                  path.lineto(0, 0))
....: unit.set(wscale=40)
....: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(p)
```



Das Schließen eines Pfades erreicht man durch Anhängen von `path.closepath()`, wobei es nicht einmal notwendig ist, zum Ausgangspunkt zurückzukehren. `closepath` fügt bei Bedarf selbstständig das fehlende Liniensegment zum Ausgangspunkt des Pfades ein. Die Quadratkontur wird jetzt vollständig dargestellt.

```
In [10]: p = path.path(path.moveto(0, 0),
....:                  path.lineto(2, 0),
....:                  path.lineto(2, 2),
....:                  path.lineto(0, 2),
....:                  path.closepath())
....: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(p)
```



Für die folgenden Beispiele stellen wir die stark erhöhte Linienbreite zunächst einmal wieder auf die Defaultbreite zurück.

```
In [11]: unit.set(wscale=1)
```

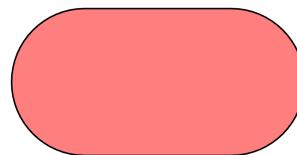
In den beiden vorhergehenden Beispielen haben wir die Pfadsegmente mit Hilfe von absoluten Koordinaten festgelegt. Statt `lineto` kann man aber auch `rlineto` verwenden, in dem eine Linie relativ zum aktuellen Endpunkt des Pfades angegeben wird. Das folgende Beispiel demonstriert dies anhand der Simulation einer Zufallsbewegung, bei der in jedem Schritt um einen festen Abstand in eine zufällige Richtung weitergegangen wird.

```
In [12]: from numpy import random
....: from math import pi, cos, sin
....:
....: directions = 2*pi*random.random(1000)
....: pathelems = [path.rlineto(0.1*cos(dir), 0.1*sin(dir)) for dir in directions]
....: p = path.path(path.moveto(0, 0), *pathelems)
....:
....: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(p)
```



Neben Geraden kann man auch Kreissegmente verwenden, um Pfade zu konstruieren. Dies wird hier an einer stadionförmigen Kontur gezeigt.

```
In [13]: p = path.path(path.moveto(-1, -1), path.lineto(1, -1),
....:                   path.arc(1, 0, 1, 270, 90), path.lineto(-1, 1),
....:                   path.arc(-1, 0, 1, 90, 270), path.closepath())
....: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(p, [deco.filled([color.rgb(1, 0.5, 0.5)])])
```

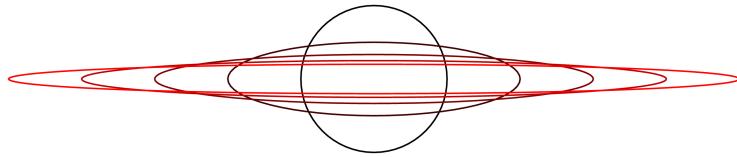


Zu Beginn hatten wir bereits darauf hingewiesen, dass es die Möglichkeit gibt, einen Canvas zu transformieren. Dabei müssen die Objekte im Canvas transformiert werden, also letztendlich die Pfade. Es ist auch möglich, Pfade vor dem Zeichnen einer Transformation zu unterwerfen, wie wir anhand einiger Beispiele demonstrieren wollen.

Aus dem vordefinierten Kreispfad lassen sich sehr einfach auch Ellipsen erzeugen, indem man die Skalierungstransformation anwendet und dabei unterschiedliche Skalierungsfaktoren in x - und y -Richtung verwendet. Das folgende Beispiel zeigt eine Reihe von Ellipsen mit unterschiedlicher Exzentrizität.

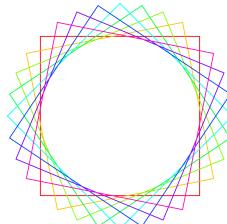
```
In [14]: p = path.circle(0, 0, 1)
....: ncircs = 5
....: c = canvas.canvas()
```

```
...: for n in range(ncircs):
...:     c.stroke(p, [trafo.scale(n+1, 1/(n+1)), color.hsb(1, 1, n/(ncircs-1))])
```



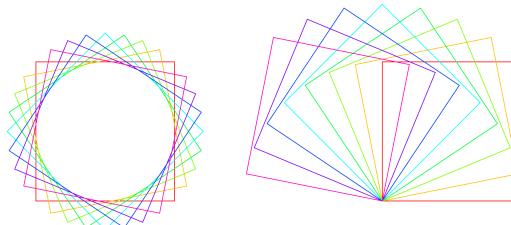
Will man die Hauptachsen der Ellipse nicht in Richtung der Koordinatenachsen legen, so kann man die Ellipse anschließend rotieren. Wir zeigen das Rotieren von Pfaden am Beispiel eines Quadrats, dessen Mittelpunkt im Ursprung liegt. Da die Rotation immer um den Ursprung herum erfolgt, wird das Quadrat um seinen Mittelpunkt gedreht.

```
In [15]: p = path.rect(-2, -2, 4, 4)
...: nrects = 8
...: c = canvas.canvas()
...: for n in range(nrects):
...:     c.stroke(p, [trafo.rotate(90*n/nrects), color.hsb(n/nrects, 1, 1)])
```



Möchte man stattdessen das Quadrat beispielsweise um seine linke untere Ecke drehen, so muss man diese Ecke zunächst in den Ursprung verschieben, um dann die Drehung durchzuführen. Anschließend erfolgt die Rückverschiebung an die ursprüngliche Position oder, wie in diesem Beispiel, an eine verschobene Position rechts neben der bereits existierenden Abbildung.

```
In [16]: for n in range(nrects):
...:     c.stroke(p, [trafo.translate(2, 2).rotated(
...:         90*n/nrects).translated(8, -2),
...:         color.hsb(n/nrects, 1, 1)])
```

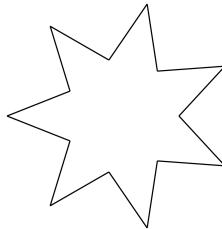


Dieses Beispiel zeigt die Hintereinanderausführung von Transformationen, wobei die Transformationen von links nach rechts abgearbeitet werden. Außerdem ist zu beachten, dass die erste Verschiebung hier mit `translate` aufgerufen wird, während die zweite sowie eventuell noch weiter folgende Verschiebungen mit `translated` aufgerufen werden. Entsprechend ist in dem obigen Beispiel auch statt `rotate` die Methode `rotated` zu verwenden.

Neben Verschiebungen, Skalierungen und Drehungen stehen in PyX auch noch Scherungen (`slant`) und Spiegelungen (`mirror`) zur Verfügung. Das folgende Beispiel zeigt, wie man aus einem einzigen Liniensegment durch Drehung und Spiegelung einen sternförmigen Pfad erzeugen kann. Das Argument der `mirror`-Methode gibt dabei den Winkel an, unter der die Spiegelachse durch den Ursprung verläuft.

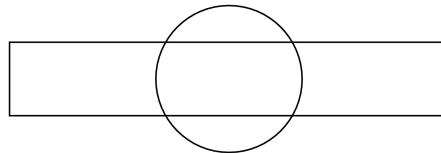
```
In [17]: nstar = 7
...: alpha = 360/nstar
...: p = path.line(1, 0, 2*cos(pi*alpha/360), 2*sin(pi*alpha/360))
...: c = canvas.canvas()
...: for n in range(nstar):
```

```
....:     c.stroke(p.transformed(trafо.rotate(alpha*n)))
....:     c.stroke(p.transformed(trafо.mirror(alpha/2).rotated(alpha*n)))
```



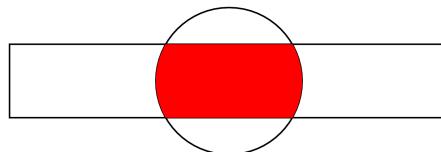
Gelegentlich ist es nützlich, Schnittpunkte von zwei Pfaden oder Pfadsegmenten zwischen zwei vorgegebenen Schnittpunkten zur Verfügung zu haben. Zur Veranschaulichung zeichnen wir zunächst die beiden Pfade, die geschnitten werden sollen. Das sind hier ein Kreis und ein Rechteck.

```
In [18]: c = canvas.canvas()
....: p1 = path.circle(0, 0, 1)
....: p2 = path.rect(-3, -0.5, 6, 1)
....: c.stroke(p1)
....: c.stroke(p2)
```



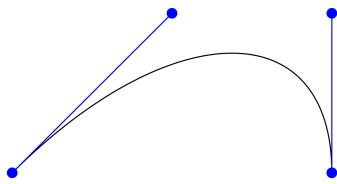
In der ersten Zeile des folgenden Codes wird der Pfad `p1`, also der Kreis, mit dem Pfad `p2`, dem Rechteck, geschnitten. Dabei werden zwei Tupel, hier `intersect_circle` und `intersect_rect` genannt, erzeugt, die entsprechend den vier Schnittpunkten jeweils vier Werte enthalten, die in einer Parametrisierung der Pfade die Schnittpunkte angeben. In der zweiten und dritten Zeile werden die beiden Pfade an den Schnittpunkten aufgetrennt, so dass zweimal vier Teilstücke entstehen. Diese werden anschließend so zusammengefügt, dass am Ende der Schnittbereich der beiden Pfade farbig gefüllt werden kann.

```
In [19]: intersect_circle, intersect_rect = p1.intersect(p2)
....: circle_subpaths = p1.split(intersect_circle)
....: rect_subpaths = p2.split(intersect_rect)
....: p = (circle_subpaths[0] << rect_subpaths[1]
....:       << circle_subpaths[2] << rect_subpaths[3])
....: c.fill(p, [color.rgb.red])
```



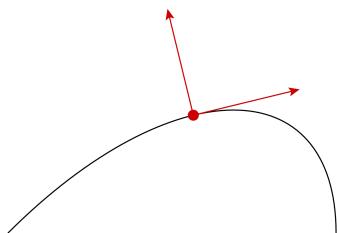
Bei komplizierteren Pfaden ist es unter Umständen nicht ganz einfach, die Tangenten- oder Normalenrichtung zu bestimmen. In solchen Fällen kann man sich von PyX helfen lassen. Zur Illustration konstruieren wir zunächst eine kubische Bézierkurve, die durch vier Punkte charakterisiert ist. Dabei handelt es sich um eine kubische Kurve, für die der erste und vierte Punkt den Anfangs- und den Endpunkt festlegen. Die Verbindungslinien vom ersten zum zweiten sowie vom dritten zum vierten Punkt bestimmen zudem die Kurvensteigung im Anfangs- und Endpunkt, wie im Beispiel durch die blauen Geraden dargestellt ist.

```
In [20]: x = (0, 3, 6, 6)
....: y = (0, 3, 3, 0)
....: p = path.curve(x[0], y[0], x[1], y[1], x[2], y[2], x[3], y[3])
....: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(p)
....: for xc, yc in zip(x, y):
....:     c.fill(path.circle(xc, yc, 0.1), [color.rgb.blue])
....:     c.stroke(path.line(x[0], y[0], x[1], y[1]), [color.rgb.blue])
....:     c.stroke(path.line(x[2], y[2], x[3], y[3]), [color.rgb.blue])
```



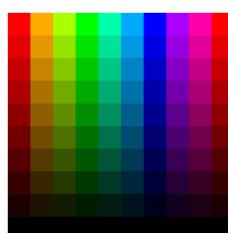
Im folgenden Beispiel soll bei der Hälfte der Kurve der Tangenten- und der Normalenvektor eingezeichnet werden. Dazu wird in der dritten Zeile zunächst mit `p.arclen()` die Länge des Pfads `p` bestimmt und dann mittels `p.arcloparam()` der Parameter berechnet, der der Hälfte der Pfadlänge entspricht. An diesem Punkt kann man dann mit `p.tangent()` ein Geradenstück mit vorgegebener Länge in Tangentialrichtung erzeugen, das hier mit einem Pfeil am Ende gezeichnet wird. Um den Normalenvektor zu zeichnen, wird der Tangentialvektor einfach um 90° im Gegenuhzeigersinn gedreht. Dabei ist allerdings zu beachten, dass der Vektor zunächst in den Ursprung verschoben, dort gedreht, und anschließend wieder in den Ausgangspunkt zurückverschoben werden muss.

```
In [21]: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(p)
....: paramhalf = p.arcloparam(0.5*p.arclen())
....: x, y = p.at(paramhalf)
....: mycolor = color.rgb(0.8, 0, 0)
....: c.fill(path.circle(x, y, 0.1), [mycolor])
....: c.stroke(p.tangent(paramhalf, length=2), [deco.earrow, mycolor])
....: c.stroke(p.tangent(paramhalf, length=2), [deco.earrow, mycolor,
....: trafo.translate(-x, -y).rotated(90).translated(x, y)])
```



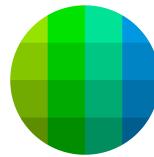
PyX bietet auch die Möglichkeit, mit Hilfe von Pfaden aus einem Canvas einen Teil herauszuschneiden. Zunächst zeigen wir den vollständigen Canvas, der eine matrixförmige Anordnung von gefärbten Quadraten im hsb-System enthält.

```
In [22]: c = canvas.canvas()
....: for nx in range(10):
....:     for ny in range(10):
....:         c.fill(path.rect(nx, ny, 1, 1), [color.hsb(nx/9, 1, ny/9)])
```



Nun legen wir beim Initialisieren des Canvas einen so genannten »clipping path« fest, in unserem Fall einen Kreis, der die Darstellung des Canvas auf das Innere dieses Pfads begrenzt. Damit wird innerhalb des Kreises der entsprechende Ausschnitt aus der zuvor dargestellten Farbmatrix gezeigt.

```
In [23]: c = canvas.canvas([canvas.clip(path.circle(4, 7, 2))])
....: for nx in range(10):
....:     for ny in range(10):
....:         c.fill(path.rect(nx, ny, 1, 1), [color.hsb(nx/9, 1, ny/9)])
```



Text ist ein wichtiger Bestandteil von grafischen Darstellungen, ganz gleich ob in Schemazeichnungen oder in Graphen. PyX überträgt die Aufgabe des Textsatzes an TeX oder LaTeX, woher auch das X im Namen des Pakets stammt. Damit bietet PyX die Möglichkeit, Grafiken mit komplexen Texten, bei Bedarf auch ganzen Paragraphen zu versehen. So ist es zum Beispiel möglich, Poster mit Hilfe von PyX zu gestalten. Im Folgenden werden wir einige grundlegende Aspekte von Text in PyX betrachten.

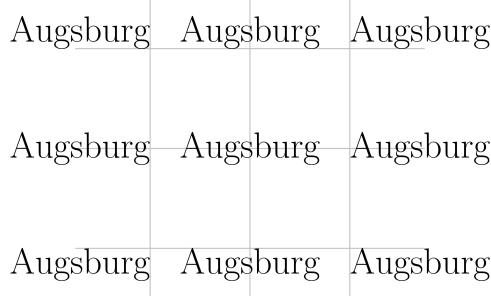
Im folgenden Beispiel wird zunächst ein Achsenkreuz am Ursprung gezeichnet, das hier lediglich zur Orientierung dienen soll. Von Bedeutung ist vor allem die letzte Zeile, in der der Text mit Hilfe der `text`-Methode gesetzt wird. Die ersten beiden Argumente geben den Punkt an, an dem der Text gesetzt wird, hier also der Koordinatenursprung. Das dritte Argument enthält den Text, der hier zunächst in einer Variable gespeichert wurde. Wie wir weiter unten noch sehen werden, kann dieser Text beispielsweise auch Mathematikanteile entsprechend der TeX- oder LaTeX-Syntax enthalten. Abschließend folgt eine Liste von Attributen. In diesem Fall wird lediglich dafür gesorgt, dass der Text etwas größer dargestellt wird. Die möglichen Größenattribute folgen dabei der Vorgabe von TeX wo in aufsteigender Größe die Einstellungen `tiny`, `scriptsize`, `footnotesize`, `small`, `normalsize`, `large`, `Large`, `LARGE`, `huge` und `Huge` definiert sind. Wie an der Ausgabe zu sehen ist, wird der Text mit dem linken Ende der Basislinie an dem im `text`-Aufruf angegebenen Punkt positioniert.

```
In [24]: c = canvas.canvas()
....: mytext = 'Augsburg'
....: mycolor = color.grey(0.7)
....: c.stroke(path.line(-1, 0, 1, 0), [mycolor])
....: c.stroke(path.line(0, -1, 0, 1), [mycolor])
....: c.text(0, 0, mytext, [text.size.huge])
```



Die Attributliste von `text` kann neben der Größenabgabe vor allem auch Angaben zur Positionierung des Textes relativ zum angegebenen Referenzpunkt enthalten. Im nächsten Beispiel werden jeweils drei wichtige Varianten der horizontalen und vertikalen Positionierung dargestellt. `halign.right`, `halign.center` und `halign.left` sorgen dafür, dass der Referenzpunkt rechts vom Text, in dessen Mitte oder links vom Text liegt. Die vertikale Positionierung mit `valign.top`, `valign.middle` und `valign.bottom` führt dazu, dass der Referenzpunkt am oberen Ende, in der Mitte bzw. am unteren Ende des den Text umschließenden Rahmens liegt. Auf diese Weise sind sehr flexible Positionierungen möglich.

```
In [25]: c = canvas.canvas()
....: mytext = 'Augsburg'
....: mycolor = color.grey(0.7)
....: for nx in range(3):
....:     c.stroke(path.line(2*nx, 0, 2*nx, 6), [mycolor])
....: for ny in range(3):
....:     c.stroke(path.line(-1.5, 2*ny+1, 5.5, 2*ny+1), [mycolor])
....: for nx, xpos in enumerate((text.halign.right,
....:                           text.halign.center,
....:                           text.halign.left)):
....:     for ny, ypos in enumerate((text.valign.top,
....:                               text.valign.middle,
....:                               text.valign.bottom)):
....:         c.text(2*nx, 2*ny+1, mytext, [xpos, ypos, text.size.huge])
```



Natürlich können Texte auch transformiert werden, wie wir hier anhand der Drehung des Textes illustrieren. Dabei wird der Text zunächst aus dem Ursprung, der als Drehpunkt fungiert, etwas herausgerückt.

```
In [26]: c = canvas.canvas()
....: for n in range(9):
....:     c.text(0, 0, mytext, [text.valign.middle,
....:                         trafo.translate(0.3, 0).rotated(40*n)])
```



Wie bereits erwähnt, unterstützt PyX sowohl den Textsatz mit TeX als auch mit LaTeX. Letzteres basiert auf TeX und stellt Funktionalität zur Verfügung, die den Textsatz erleichtert. In LaTeX kann man die TeX-Syntax verwenden, aber umgekehrt wird spezifische LaTeX-Syntax nicht von TeX verstanden. Daher sollte man sich zunächst überlegen, welche Syntax man verwenden möchte. Defaultmäßig ist TeX voreingestellt, das auch explizit mit Hilfe von `text.set(text.TexRunner)` verlangt werden kann. LaTeX wählt man mit Hilfe von `text.set(text.LatexRunner)` aus. Die folgenden beiden Beispiele sind äquivalent. Allerdings wird im ersten Beispiel die TeX-Syntax für einen Bruch benutzt, während im zweiten Beispiel die LaTeX-Syntax verwendet wird.

```
In [27]: text.set(text.TexRunner)
....: c = canvas.canvas()
....: c.text(0, 0, '$x = {1\over2}$')
```

$$x = \frac{1}{2}$$

```
In [28]: text.set(text.LatexRunner)
....: c = canvas.canvas()
....: c.text(0, 0, r'$x = \frac{1}{2}$')
```

$$x = \frac{1}{2}$$

Das letzte Textbeispiel zeigt, wie in LaTeX eine etwas komplexere mathematische Formel gesetzt werden kann. Außerdem ist in der letzten Zeile zu sehen, wie man die Textgröße ohne Verwendung der auf TeX zurückgehenden Schlüsselworte bei Bedarf stufenlos einstellen kann.

```
In [29]: c = canvas.canvas()
....: formula = r'$\displaystyle m\ddot{\vec{r}} = -\gamma\frac{Mm}{r^3}\vec{r}$
....: c.text(0, 0, formula, [text.size(2)])
```

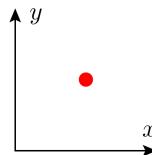
$$m\ddot{\vec{r}} = -\gamma\frac{Mm}{r^3}\vec{r}$$

Wir haben in verschiedenen Beispielen immer wieder Längen explizit festgelegt, zum Beispiel die Textgröße, die Linienbreite oder die Pfeilgröße. PyX stellt jedoch auch die Möglichkeit zur Verfügung, Längenskalen global zu definieren. Dabei wird Wert darauf gelegt, visuell unterschiedliche Längen auch unabhängig voneinander

verändern zu können. So gibt es `uscale`, `vscale`, `wscale` und `xscale`, die wir jetzt ausgehend von einer Referenzabbildung, in der alle Skalen auf Eins gesetzt sind, verändern wollen, um ihre Auswirkung vorzustellen.

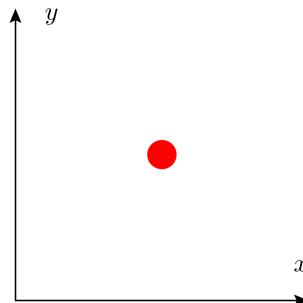
```
In [30]: def testfigure():
....:     c = canvas.canvas()
....:     c.stroke(path.path(path.moveto(2, 0), path.lineto(0, 0),
....:                       path.lineto(0, 2)), [deco.barrow, deco.earrow])
....:     c.fill(path.circle(1, 1, 0.1), [color.rgb.red])
....:     c.text(2, 0.2, '$x$', [text.halign.right])
....:     c.text(0.2, 2, '$y$', [text.valign.top])
....:     return c

In [31]: unit.set(uscale=1, vscale=1, wscale=1, xscale=1)
....: testfigure()
```



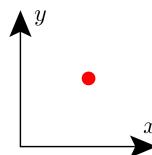
Zunächst verändern wir den Wert von `uscale`, wodurch Distanzen verändert werden. Dies betrifft in unserer Testabbildung die Länge der Achsen und die Größe der roten Kreisfläche. Unverändert bleiben die Linienbreite der Achsen, die Pfeilgröße sowie die Schriftgröße. Allerdings ist der Abstand der Achsenbeschriftung von der jeweiligen Achse nun größer geworden.

```
In [32]: unit.set(uscale=2, vscale=1, wscale=1, xscale=1)
....: testfigure()
```



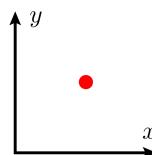
Im nächsten Beispiel wird `uscale` auf seinen ursprünglichen Wert zurückgesetzt und dafür `vscale` verdoppelt. Dadurch werden visuelle Elemente doppelt so groß dargestellt. In unserem Fall betrifft dies die Pfeile. Es würden aber zum Beispiel auch Symbole in einer Grafik oder Achsenticks vergrößert dargestellt werden.

```
In [33]: unit.set(uscale=1, vscale=2, wscale=1, xscale=1)
....: testfigure()
```



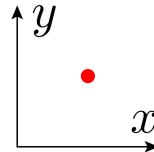
Der Parameter `wscale` beeinflusst alle Linienbreiten. Möchte man gleichzeitig auch die Pfeilgröße heraufsetzen, so könnte man zusätzlich noch `vscale` verändern.

```
In [34]: unit.set(uscale=1, vscale=1, wscale=2, xscale=1)
....: testfigure()
```



Als letztes verdoppeln wir den Wert von `xscale` und erreichen auf diese Weise, dass der gesamte Text in doppelter Größe ausgegeben wird. Damit spart man sich unter Umständen, Größenangaben in vielen `text`-Aufrufen zu ändern. Zudem sind die besprochenen Skalen nützlich, um über mehrere Abbildungen hinweg konsistente Längen zu verwenden.

```
In [35]: unit.set(uscale=1, vscale=1, wscale=1, xscale=2)
....: testfigure()
```

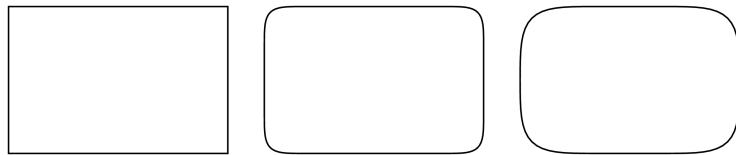


Für die folgenden Beispiele stellen wir alle Skalen wieder auf ihren Standardwert zurück.

```
In [36]: unit.set(xscale=1)
```

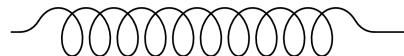
PyX stellt so genannte Deformer zur Verfügung, die es erlauben, Pfade zu deformieren. Dies kann in bestimmten Fällen sehr nützlich sein. Mit Hilfe eines Deformers ist es zum Beispiel sehr leicht möglich, Kanten mit einem vorgegebenen Radius abzurunden. Zu diesem Zweck fügen wir in der Attributliste im folgenden Beispiel einen Aufruf der `smoothed`-Methode hinzu.

```
In [37]: box = path.rect(0, 0, 3, 2)
....: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(box)
....: c.stroke(box, [deformer.smoothed(radius=0.5), trafo.translate(3.5, 0)])
....: c.stroke(box, [deformer.smoothed(radius=1), trafo.translate(7, 0)])
```



Besonders elegant ist die Erzeugung der Darstellung einer Feder aus einem Liniensegment durch die Verwendung des `cycloid`-Deformers, die im folgenden Beispiel dargestellt ist. Um einen optisch ansprechenden Eindruck zu erzielen, stellt man abhängig von der zur Verfügung stehenden Länge den Radius der Zykloide sowie die Zahl der halben Schleifen geeignet ein. Außerdem kann man mit `skipfirst` und `skiplast` dafür sorgen, dass ein Teil der Linie am Anfang und am Ende unverändert bleibt. Um den Übergang zwischen dem deformierten Teil und dem unveränderten Teil etwas zu glätten, kann wiederum der `smoothed`-Deformer zum Einsatz kommen.

```
In [38]: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(path.line(0, 0, 5, 0), [deformer.cycloid(radius=0.3,
....: halfloops=21,
....: skipfirst=0.3*unit.t_cm,
....: skiplast=0.6*unit.t_cm),
....: deformer.smoothed(radius=0.2)])
```



Eine Anwendung eines Deformers, bei der der ursprüngliche Pfad mit Hilfe einer »bounding box« erzeugt wird, zeigt das nächste Beispiel. Zunächst wird ein Text definiert, der erst später in einen Canvas eingefügt wird. Daher wird in der ersten Zeile statt `c.text` die Methode `text.text` verwendet. Dies erlaubt es uns, die »bounding box« dieses Textes zu bestimmen, anschließend mit `enlarged` zu vergrößern und uns mit `path` den zugehörigen Pfad zu beschaffen. Die Vergrößerung der »bounding box« wird hier mit `0.3*unit.t_cm` zu 0,3cm spezifiziert. In den Canvas wird dann zunächst der Pfad der vergrößerten »bounding box« in abgerundeter Form und mit roter Farbe gefüllt eingefügt. Anschließend kann dann der weiße Text zum Canvas hinzugefügt werden.

```
In [39]: mytext = text.text(0, 0, r'\textbf{\$ffamily Hallo}', [color.grey(1)])
....: textbox = mytext.bbox().enlarged(0.3*unit.t_cm).path()
....: c = canvas.canvas()
....: c.stroke(textbox, [deco.filled([color.rgb.red])],
```

```
....:         deformer.smoothed(radius=0.5) ])
....: c.insert(mytext)
```



In vielen Fällen wird man die erzeugte Grafik auch in einer Datei speichern wollen. Dies kann in PyX genauso wie in matplotlib entweder in einem Vektorgrafik- oder einem Bitmapformat erfolgen. Für ersteres stehen aktuell die Ausgaben im PDF-Format sowie in Postscript und Encapsulated Postscript zur Verfügung. Daneben gibt es eine ganze Reihe von Bitmapformaten. Welche Formate verfügbar sind, hängt von den Fähigkeiten des installierten `ghostscript`-Interpreters ab. Das folgende Beispiel zeigt das Abspeichern eines Canvas im PDF-, im EPS- und im PNG-Format. Verzichtet man in den ersten beiden Fällen auf die Angabe des Dateinamens, so wird der Name des erzeugenden Python-Skripts herangezogen, wobei die Endung `.py` je nach Ausgabeformat durch `.pdf`, `.ps` oder `.eps` ersetzt wird. Häufig ist dies ein sinnvolles Vorgehen, da man beim Kopieren von Skripten auf diese Weise vermeidet, bereits erzeugte Bilder des ursprünglichen Skripts zu überschreiben, wenn man vergisst, den Dateinamen anzupassen. Bei den Bitmapformaten wird das zu erzeugende Format aus der Endung des Dateinamens entnommen, sofern ein Name angegeben wurde. Andernfalls muss das Ausgabegerät spezifiziert werden. Unser Beispiel zeigt außerdem, wie die Auflösung der Bitmapgrafik beeinflusst werden kann.

```
In [40]: c.writePDFfile('hallo.pdf')
....: c.writeEPSfile('hallo.eps')
....: c.writeGSfile('hallo.png', resolution=300)
```

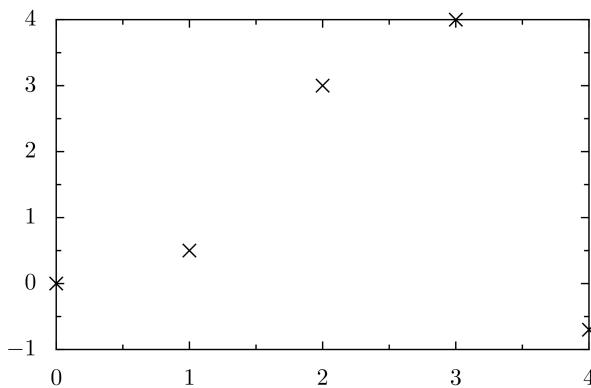
Weitere Informationen über mögliche Optionen beim Abspeichern von Grafiken kann man der Dokumentation entnehmen. Es sei hier nur erwähnt, dass man zum Beispiel beim PDF- und beim Postscript-Format die Papiergröße festlegen oder auch mehrseitige Dokumente erzeugen kann.

Bis jetzt haben wir nur Fähigkeiten von PyX besprochen, die von matplotlib nicht zur Verfügung gestellt werden. Mit PyX kann man jedoch auch genauso gut grafische Darstellungen von Daten erzeugen. Dies soll im Folgenden demonstriert werden.

Genauso wie bisher auch benötigt man für Graphen einen Canvas, allerdings mit erweiterten Fähigkeiten. Für eine gewöhnliche zweidimensionale Darstellung erzeugt man einen Canvas mit Hilfe von `graph.graphxy`. Wie wir noch sehen werden, lässt sich das Aussehen des Graphen durch geeignete Argumente sehr genau beeinflussen. In dem folgenden, sehr einfachen Beispiel legen wir lediglich die Breite des Graphen fest. Seine Höhe wird dann, da nichts anderes angegeben ist, mit Hilfe des goldenen Schnitts bestimmt. In unserem Beispiel wollen wir eine Reihe von Punkten darstellen, deren Lage durch eine Liste von Tupeln festgelegt wird.

Um der `plot`-Methode unseres Graphencanvas `g` die Datenquelle mitzuteilen, verwendet man in diesem Fall die `graph.data.points`-Methode, die als erstes Argument die Datenliste erhält. Die Argumente `x` und `y` geben die Spalte an. Die `x`-Werte sollen hier die ersten Werte der Tupel sein, die `y`-Werte die jeweils zweiten Werte. Man könnte aber auch die zweite Spalte gegen die erste Spalte darstellen oder aus längeren Tupeln die gewünschten Spalten nach Bedarf auswählen. Standardmäßig erfolgt nun eine Darstellung der Datenpunkte mit Hilfe von Kreuzen, die nicht durch eine Linie verbunden sind.

```
In [41]: g = graph.graphxy(width=8)
....: data = [(0, 0), (1, 0.5), (2, 3), (3, 4), (4, -0.7)]
....: g.plot(graph.data.points(data, x=1, y=2))
```

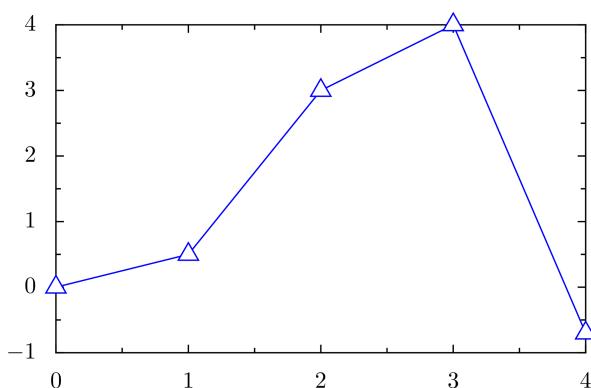


Im nächsten Beispiel wollen wir die Darstellung verbessern, indem wir die Datenpunkte durch blaue gerade Linien verbinden und als Symbole blaue umrandete Dreiecke verwenden, die nicht von den Linien durchschnitten werden. Um dies zu realisieren, übergibt man der `plot`-Methode eine Liste von entsprechenden Attributen, so wie wir es von der `stroke`- oder der `fill`-Methode des Canvas her kennen.

Um die Übersichtlichkeit des Codes zu verbessern, haben wir im folgenden Beispiel zwei Variablen definiert, die die Eigenschaften der Linie und der Symbole enthalten. Diese Information könnte man alternativ direkt in der `plot`-Methode in der letzten Zeile unterbringen. Stattdessen eine Variable zu verwenden, hat neben der Übersichtlichkeit auch den Vorteil, dass sich die Vorgaben in verschiedenen `plot`-Aufrufen verwenden lassen und so für eine einheitliche Darstellung sorgen sowie das Programmieren nach dem DRY-Prinzip¹ unterstützen.

Mit `graph.style.line` werden die Eigenschaften der zu zeichnenden Linien festgelegt. Diese werden im Argument als Liste angegeben, selbst wenn es sich, wie im folgenden Beispiel, nur um ein Attribut handelt, das hier die Farbe festlegt. Man könnte beispielsweise auch eine gestrichelte oder gepunktete Linie verlangen. Das Symbol wird mit Hilfe von `graph.style.symbol` festgelegt, wobei das Argument `symbol` die Form des Symbols, hier ein Dreieck, angibt. Zudem kann man mit `symbolattrs` eine Liste von Attributen übergeben, die das Aussehen des Symbols genauer festlegen. In unserem Fall wird verlangt, dass der Rand des Symbols blau ist und das Innere weiß gefüllt wird. Mit letzterem wird sichergestellt, dass die Linien die Symbole nicht schneiden.

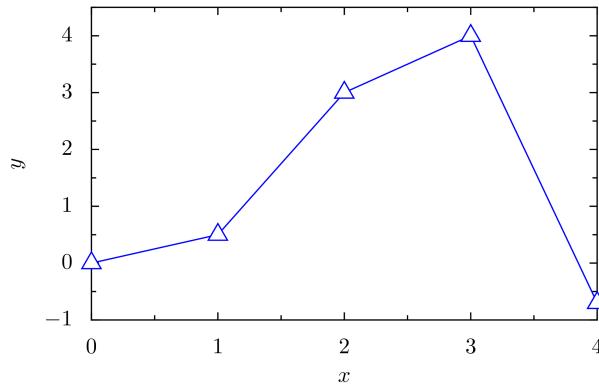
```
In [42]: g = graph.graphxy(width=8)
....: data = [(0, 0), (1, 0.5), (2, 3), (3, 4), (4, -0.7)]
....: myline = graph.style.line([color.rgb.blue])
....: mysymbol = graph.style.symbol(symbol=graph.style.symbol.triangle,
....:                                symbolattrs=[deco.filled([color.grey(1)]),
....:                                            deco.stroked([color.rgb.blue])])
....: g.plot(graph.data.points(data, x=1, y=2), [myline, mysymbol])
```



Im nächsten Beispiel nehmen wir Veränderungen an den Achsen vor. Hierzu definiert man im Graphencanvas mit Hilfe der Argumente `x` und `y` die Eigenschaften der zugehörigen Achsen. Mit `graph.axis.lin` erhält man eine linear eingeteilte Achse, deren Eigenschaften mit den zugehörigen Argumenten übergeben werden können. Dies ist zum Beispiel der Achsenumfang, der mit `min` und/oder `max` festgelegt werden kann, oder der Achsentitel, der mit `title` übergeben wird, wobei wie beim Text TeX- oder LaTeX-Syntax verwendet werden kann. In dem folgenden Beispiel wird unter anderem der Wertebereich der `y`-Achse vergrößert, damit das Symbol bei $x = 3$ im Innern des `y`-Wertebereichs liegt.

¹ DRY steht für »don't repeat yourself«. Das DRY-Prinzip fordert dazu auf, Codewiederholungen nach Möglichkeit zu vermeiden.

```
In [43]: g = graph.graphxy(width=8,
....:                     x=graph.axis.lin(title='$x$'),
....:                     y=graph.axis.lin(min=-1, max=4.5, title='$y$'))
....: data = [(0, 0), (1, 0.5), (2, 3), (3, 4), (4, -0.7)]
....: myline = graph.style.line([color.rgb.blue])
....: mysymbol = graph.style.symbol(symbol=graph.style.symbol.triangle,
....:                                symbolatrrs=[deco.filled([color.grey(1)]),
....:                                             deco.stroked([color.rgb.blue])])
....: g.plot(graph.data.points(data, x=1, y=2), [myline, mysymbol])
```



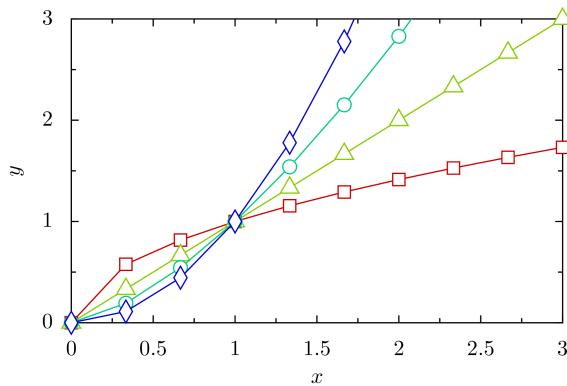
Bis jetzt haben wir als Datenquelle eine Liste von Tupeln verwendet. PyX kann alternativ auch Daten aus einer Datei einlesen oder aus vorgegebenen Funktionen berechnen. Dabei sind auch parametrisch definierte Funktionen möglich.

Wir wollen nun eine Darstellung von verschiedenen Potenzfunktionen erzeugen. Um eine Funktion darzustellen, wählt man die `graph.data.function`-Methode, in der man den funktionalen Zusammenhang zwischen x und y in einer Zeichenkette angibt. Normalerweise wählt PyX selbst die Zahl der Punkte, an denen die Funktion ausgewertet wird. Da wir die zugehörigen Punkte mit Symbolen darstellen wollen, legen wir jedoch die Zahl der Punkte mit Hilfe des Arguments `points` fest.

In unserem Beispiel werden mittels eines einzigen Aufrufs der `plot`-Methode mehrere Funktionen gezeichnet. Hierzu wird eine ganze Liste von `function`-Aufrufen als erstes Argument übergeben. Dabei ist es in PyX sehr elegant möglich festzulegen, wie die einzelnen Funktionsgraphen dargestellt werden sollen. Wie schon im vorigen Beispiel benutzen wir `graph.style.line`, um die Attribute der Linien festzulegen. Die entsprechende Liste enthält zwei Aufrufe von `attr.changelist`, die festlegen, wie sich bestimmte Attribute beim Wechsel von einer Linie zur nächsten ändern. Der erste Aufruf geht die in der vierten Zeile definierte Farbliste der Reihe nach durch. Der zweite Aufruf enthält eine Liste, die nur aus einem Element besteht und in diesem Fall dazu führt, dass alle Linien durchgezogen sind.

Bei der Symbolart verwenden wir eine vordefinierte Symbolliste, die der Reihe nach Quadrat, Dreieck, Kreis, Raute, Kreuz und Pluszeichen verwendet. In unserem Beispiel mit nur vier Funktionen kommen nur die ersten vier Symbole zum Einsatz. Damit die Farbe der Symbole zur Farbe der Linien passt, übergeben wir unsere Farbliste auch an die Liste der Symbolattribute. Zudem legen wir, wie schon im vorigen Beispiel, fest, dass die Symbole weiß zu füllen sind. Damit ergibt sich insgesamt das unter dem Code dargestellte Bild.

```
In [44]: g = graph.graphxy(width=8,
....:                     x=graph.axis.lin(min=0, max=3, title='$x$'),
....:                     y=graph.axis.lin(min=0, max=3, title='$y$'))
....: colors = [color.hsb(2*n/9, 1, 0.8) for n in range(0, 4)]
....: mylines = graph.style.line(lineatrrs=[
....:     attr.changelist(colors), attr.changelist([style.linestyle.solid])
....: ])
....: mysymbols = graph.style.symbol(symbol=graph.style.symbol.changesquare,
....:                                 symbolatrrs=[
....:     attr.changelist(colors), deco.filled([color.grey(1)])
....: ])
....: g.plot([graph.data.function('y(x)=x**{0}'.format(exponent/2), points=10)
....:         for exponent in range(1, 5)],
....:        [mylines, mysymbols])
```

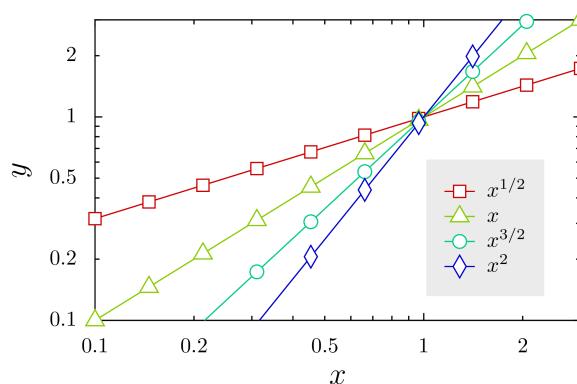


Im nächsten Schritt stellen wir die Abbildung des vorigen Beispiels auf eine doppelt-logarithmische Darstellung um und fügen zusätzlich eine Legende hinzu. Logarithmische Achsen erhält man einfach dadurch, dass man im Graphencanvas die x-Achse und/oder y-Achse mit Hilfe eines Aufrufs der `graph.axis.log`-Methode definiert. Beim Achsenumfang ist darauf achten, dass dieser eine logarithmische Darstellung erlauben muss. Negative Werte einschließlich der Null müssen also ausgeschlossen sein.

Um eine Legende zu erzeugen, definiert man das `key`-Argument des Graphencanvas entsprechend. Im Beispiel führt der Aufruf der `graph.key.key`-Methode dazu, dass die Legende unten rechts (`br = »bottom right«`) positioniert wird und die Angabe des Wertes für das Argument `dist` den Abstand zwischen den einzelnen Legendeinträgen gegenüber dem Standardwert verringert, die Legende also etwas komprimierter darstellt wird. Schließlich verlangen wir mit Hilfe der an `keyattrs` übergebenen Liste, dass die Legende grau hinterlegt wird.

Der in der Legende dargestellte Text ist für jeden Datensatz im `title`-Argument zu übergeben. Im Beispiel haben wir hierfür eine Funktion definiert, die je nach ganz- oder halbzahligem Argument die Darstellung unter Verwendung der TeX-Syntax geeignet wählt.

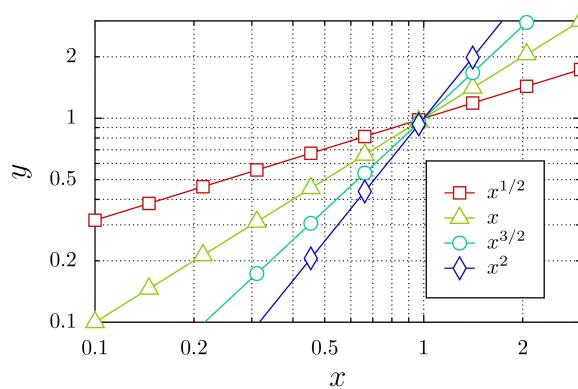
```
In [45]: def keytitle(dblexponent):
....:     if dblexponent == 2: return '$x$'
....:     if dblexponent % 2:
....:         return '$x^{{{{}}}/2}{{}}$'.format(dblexponent)
....:     else:
....:         return '$x^{{}}$'.format(dblexponent//2)
....:
....: g = graph.graphxy(width=8,
....:                     x=graph.axis.log(min=0.1, max=3, title='\Large $x$'),
....:                     y=graph.axis.log(min=0.1, max=3, title='\Large $y$'),
....:                     key=graph.key.key(pos="br", dist=0.1,
....:                                       keyattrs=[deco.filled([color.grey(0.9)])]))
....: g.plot([graph.data.function('y(x)=x**{}'.format(exponent/2),
....:                           points=10, title=keytitle(exponent))
....:                     for exponent in range(1, 5)],
....:       [mylines, mysymbols])
```



Gelegentlich möchte man die Ablesung von Werten in einem Graphen durch Gitterlinien unterstützen. Dies lässt sich unabhängig voneinander für beide Achsen mit Hilfe des `painter`-Arguments festlegen. Dazu geben wir dem Painter `graph.axis.painter.regular`, der schon bisher für die Darstellung der Achsen zuständig war, ein

Attributargument mit. Wie sonst auch muss es sich dabei um eine Liste handeln, die in unserem Fall nur vorgibt, dass die Gitterlinien gepunktet sein sollen. Außerdem modifizieren wir unser Beispiel noch dahingehend, dass der Hintergrund der Legende nun weiß gehalten ist. Dafür wird der Rahmen mit einer schwarzen Linie gezeichnet. Diese Änderungen erhält man durch eine entsprechende Anpassung der Liste des `keyattrs`-Arguments.

```
In [46]: mygridattns = [style.linestyle.dotted]
....: mypainter = graph.axis.painter.regular(gridattns=mygridattns)
....: g = graph.graphxy(width=8,
....:                     x=graph.axis.log(min=0.1, max=3, title='\Large $x$',
....:                                     painter=mypainter),
....:                     y=graph.axis.log(min=0.1, max=3, title='\Large $y$',
....:                                     painter=mypainter),
....:                     key=graph.key.key(pos="br", dist=0.1,
....:                                     keyattns=[deco.filled([color.grey(1)]),
....:                                               deco.stroked()]))
....: g.plot([graph.data.function('y(x)=x**{}'.format(exponent/2),
....:                           points=10, title=keytitle(exponent))
....:                      for exponent in range(1, 5)],
....:         [mylines, mysymbols])
```

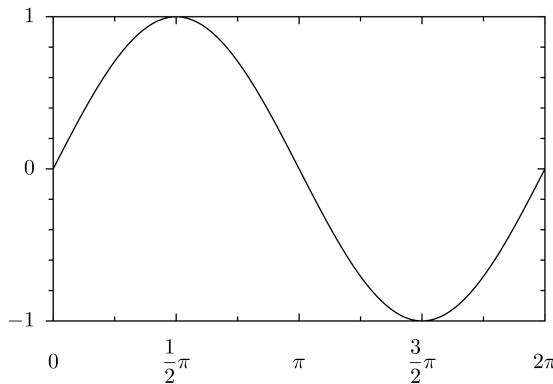


In matplotlib hatten wir gesehen, dass die Achseninteilung recht flexibel gestaltet werden kann. Dies ist auch in PyX möglich. Wir hatten schon im Zusammenhang mit der Erzeugung von Gitterlinien gesehen, wie sich Achsenegenschaften beeinflussen lassen. Bei der y -Achse modifizieren wir wieder die Darstellung der Achse, genauer der zugehörigen Ticks, mit Hilfe der `graph.axis.painter.regular`-Methode. Um die Ticks nach außen zeigen zu lassen, setzen wir die `innerticklength` auf `None` während die `outerticklength` auf den Standardwert gesetzt wird, den bisher `innerticklength` hatte.

Ein weiterer Aspekt, den wir an der y -Achse gegenüber dem Standardverhalten verändern wollen, ist der Abstand zwischen den Ticks. Für die Einteilung der Achsen ist der »parter« zuständig. Wir geben dem bereits bisher im Verborgenen für uns tätigen `graph.axis.parter.linear` über das Argument `tickdists` eine Liste mit, die den Abstand zwischen Ticks und Subticks enthält. Durch die Wahl der Werte in unserem Beispiele erreichen wir, dass der Abstand zwischen zwei Ticks in fünf Intervalle unterteilt wird.

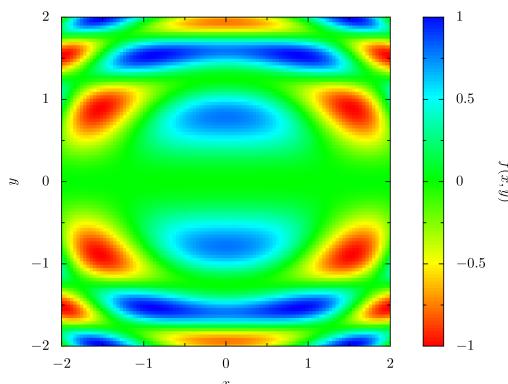
Schließlich wollen wir noch die Beschriftung der x -Achse modifizieren. Hierfür ist der »texter« zuständig. Wir verwenden hier `graph.axis.texter.rational`, der die Achsenbeschriftung mit Hilfe von Brüchen darstellt und stellen den Beschriftungen ein π hintenan. Damit die Beschriftung zum tatsächlichen Wert passt, müssen wir im Gegenzug die Werte durch π dividieren, was mit Hilfe des Arguments `divisor` eingestellt wird.

```
In [47]: mypainter = graph.axis.painter.regular(
....:                     innerticklength=None,
....:                     outerticklength=graph.axis.painter.ticklength.normal)
....: g = graph.graphxy(width=8,
....:                     x=graph.axis.linear(min=0, max=2*pi, divisor=pi,
....:                                         texter=graph.axis.texter.rational(suffix=r"\pi")),
....:                     y=graph.axis.linear(
....:                         parter=graph.axis.parter.linear(tickdists=[1, 0.2]),
....:                         painter=mypainter))
....: g.plot(graph.data.function('y(x)=sin(x)'))
```



Um eine Funktion zweier Variablen darzustellen, eignen sich neben Konturgrafiken, die wir im Zusammenhang mit matplotlib besprochen haben, auch zweidimensionale Farbdarstellungen. Der größte Teil des folgenden Beispielcodes dient dazu, eine Liste von Daten zu erzeugen, die nun aus Tupeln mit jeweils drei Einträgen besteht. Die ersten beiden Einträge geben den Ort in der Ebene an und der dritte Eintrag entspricht dem Funktionswert an dieser Stelle. Wie in unserem ersten Graphenbeispiel verwenden wir wieder `graph.data.points`. Für die Darstellung benötigen wir jedoch jetzt nicht mehr nur noch x - und y -Werte, sondern auch einen Farbwert, der sich aus dem Funktionswert ergibt. Das Argument `color` erhält daher den Wert 3, entsprechend der dritten Datenspalte. Außerdem müssen wir den Zeichenstil auf `graph.style.density` ändern. Damit wir keine Graustufendarstellung erhalten, geben wir dort noch den Farbgradienten an, der die Abbildungen von den Daten auf zugehörige Farben bewerkstellt.

```
In [48]: import numpy as np
....: def f(x, y):
....:     return cos(x**2+y**2)*sin(2*y**2)
....:
....: xmin = -2
....: xmax = 2
....: ymin = -2
....: ymax = 2
....: npts = 100
....: data = [(x, y, f(x, y)) for x in np.linspace(xmin, xmax, npts)
....:          for y in np.linspace(ymin, ymax, npts)]
....: g = graph.graphxy(height=8, width=8,
....:                     x=graph.axis.linear(title=r'$x$'),
....:                     y=graph.axis.linear(title=r'$y$'))
....: g.plot(graph.data.points(data, x=1, y=2, color=3, title='$f(x,y)$'),
....:        [graph.style.density(gradient=color.rgbgradient.Rainbow)])
```

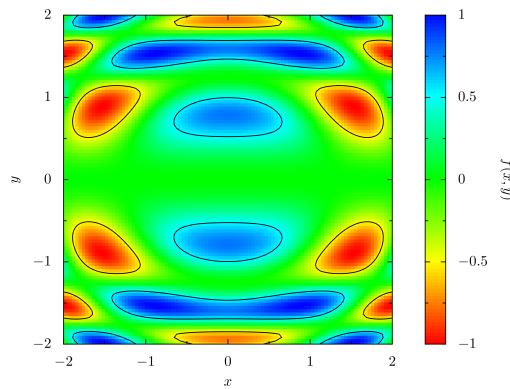


Konturlinien werden derzeit von PyX nicht unterstützt. Man kann sich allerdings bis zu einem gewissen Grad damit behelfen, dass man auf das Paket `scikit-image`² zurückgreift. Dieses Paket bietet eine Vielzahl interessanter Methoden zur Bildbearbeitung mit Python. Das `measure`-Paket bietet unter anderem die Möglichkeit, in einem zweidimensionalen Datensatz zu einem vorgegebenen Wert die Konturlinie oder gegebenenfalls mehrere Konturlinien zu bestimmen. Dabei ist allerdings zu beachten, dass sich die Funktion `find_contours` nicht um die in unserem Fall durchaus vorhandenen x - und y -Koordinaten kümmert, sondern mit Pixelpositionen arbeitet,

² Scikits sind Erweiterungen von SciPy. Informationen zu `scikit-image` findet man unter scikit-image.org.

wie es für ein gerastertes Bild adäquat ist. Daher müssen wir unsere in der Liste `data` gespeicherten Daten zunächst in ein NumPy-Array umbauen, das die richtigen Dimensionen besitzt und lediglich die Funktionswerte enthält. Anhand dieser Daten berechnet `find_contours` dann eine Liste von Konturdaten. Diese müssen wir vor der Verwendung noch in unsere Problemdaten zurückwandeln, was problemlos gelingt, da wir die Minimal- und Maximalwerte auf der x - und der y -Achse sowie die Zahl der Punkte kennen. Anschließend können wir die Konturen mit einem `plot`-Aufruf in unserem Farbbild einzeichnen lassen.

```
In [49]: from skimage.measure import find_contours
.....
....: data = [(x, y, f(x, y)) for x in np.linspace(xmin, xmax, npts)
....:           for y in np.linspace(ymax, ymin, npts)]
....: g = graph.graphxy(height=8, width=8,
....:                     x=graph.axis.linear(title=r'$x$'),
....:                     y=graph.axis.linear(title=r'$y$'))
....: g.plot(graph.data.points(data, x=1, y=2, color=3, title='$f(x,y)$'),
....:         [graph.style.density(gradient=color.rgbgradient.Rainbow)])
....:
....: for level in (-0.5, 0.5):
....:     contours = find_contours(np.array([d[2] for d in data]).reshape(
....:                                         npts, npts), level)
....:     for c in contours:
....:         c_rescaled = [(xmin+x*(xmax-xmin)/(npts-1),
....:                      ymin+y*(ymax-ymin)/(npts-1)) for x, y in c]
....:         g.plot(graph.data.points(c_rescaled, x=1, y=2),
....:                [graph.style.line()])
```



Wenn man zwei Graphen in einer Abbildung zusammenfassen will, so sollen häufig einander entsprechende Achsen gekoppelt werden, also den gleichen Achsenumfang und die gleiche Achseninteilung besitzen. Häufig soll zudem bei einer Achse die Beschriftung entfallen. Im folgenden Beispiel verwenden wir zwei Graphenkanvassen `g1` für den unteren Graphen und `g2` für den oberen Graphen, die in einen gemeinsamen Canvas `c` eingefügt werden. Dies kann, wie aus dem nachstehenden Code ersichtlich wird, bereits bei der Instantiierung der beiden Graphen geschehen. Dabei muss man allerdings darauf achten, dass die beiden Graphen relativ zueinander geeignet positioniert werden. Nachdem die untere linke Ecke des unteren Graphen im Ursprung liegt, können wir die vertikale Position `ypos` des oberen Graphen dadurch festlegen, dass wir die Höhe des unteren Graphen `g1.height` noch etwas vergrößern, hier um den Wert 0,5.

Da die beiden Graphen nun vertikal angeordnet sind, ist es sinnvoll, die x -Achse des oberen Graphen und die x -Achse des unteren Graphen zu koppeln. Dies geschieht, indem man für die x -Achse des oberen Graphen eine `graph.axis.linkedaxis` wählt, der man als Argument mit Hilfe von `g1.axes["x"]` die x -Achse des unteren Graphen über gibt.

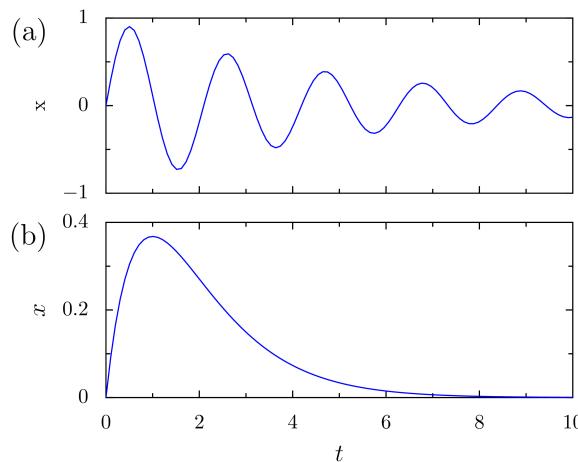
Schließlich möchte man häufig die einzelnen Graphen mit einer Bezeichnung versehen, um auf sie Bezug nehmen zu können. Zur Positionierung eignen sich die Attribute `xpos` und `ypos`, die die linke untere Ecke eines Graphen angeben, sowie `width` und `height`, die die Breite und Höhe des Graphen angeben. In diesem Zusammenhang sei noch darauf hingewiesen, dass wir in diesem Beispiel von der automatischen Bestimmung der Höhe aus der Breite mit Hilfe des goldenen Schnitts abgewichen sind, indem wir die Höhe explizit gesetzt haben.

```
In [50]: c = canvas.canvas()
....: g1 = c.insert(graph.graphxy(width=8, height=3,
```

```

....: x=graph.axis.lin(title='\\large $t$'),
....: y=graph.axis.lin(title='\\large $x$'))
....: g1.plot(graph.data.function("y(x)=x*exp(-x)", min=0, max=10),
....:          [graph.style.line(lineattrs=[color.rgb.blue])))
....: g1.text(g1.xpos-1, g1.height, '\\Large (b)',
....:          [text.halign.right, text.valign.top])
....: g2 = c.insert(graph.graphxy(width=8, height=3,
....:                             ypos=g1.height+0.5,
....:                             x=graph.axis.linkedaxis(g1.axes["x"]),
....:                             y=graph.axis.lin(title='x')))
....: g2.plot(graph.data.function("y(x)=exp(-0.2*x)*sin(3*x)"),
....:          [graph.style.line(lineattrs=[color.rgb.blue]))]
....: g2.text(g2.xpos-1, g2.ypos+g2.height, '\\Large (a)',
....:          [text.halign.right, text.valign.top])

```

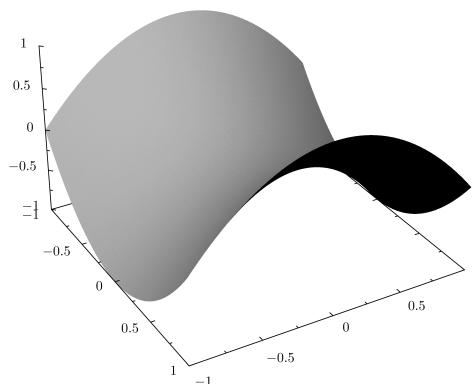


Abschließend wollen wir uns noch dreidimensionalen Darstellungen zuwenden und zu Beginn ein möglichst einfaches Beispiel betrachten. Zunächst werden Daten auf einem zweidimensionalen Gitter erzeugt und in einer Liste, die hier wieder den Namen `data` besitzt, mit Tupeln zu je drei Einträgen abgelegt. Im Unterschied zu den vorhergehenden Beispielen müssen wir den Canvas des Graphen nicht mit `graph.graphxy` sondern mit `graph.graphxyz` erzeugen, da wir ja drei Achsen x , y und z benötigen. Entsprechend müssen wir im Argument von `graph.data.points` auch die Spalte angeben, aus der die Daten für die z -Achse genommen werden sollen. In unserem Fall ist dies die Spalte 3. Schließlich muss man in der Attributliste der `plot`-Methode mit `graph.style.surface` angeben, dass die Daten in Form einer Fläche dargestellt werden sollen. So lange nichts anderes festgelegt wird, wird diese Fläche in Grautönen dargestellt.

```

In [51]: data = [(x, y, x**2-y**2)
....:           for x in np.linspace(-1, 1, 50) for y in np.linspace(-1, 1, 50)]
....: g = graph.graphxyz(size=4)
....: g.plot(graph.data.points(data, x=1, y=2, z=3), [graph.style.surface()])

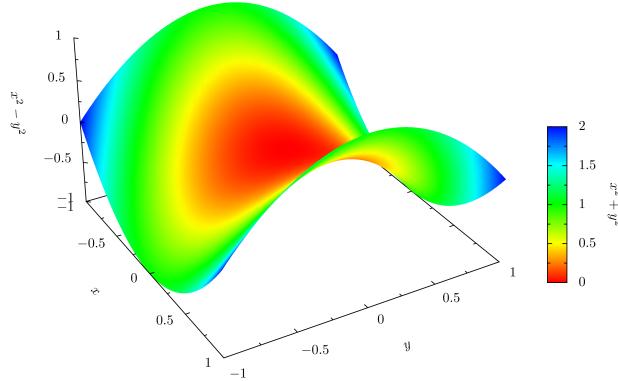
```



Statt einer grauen Fläche kann man auch eine farbige Fläche erhalten, indem man eine geeignete Farbpalette in `graph.style.surface` mit Hilfe des Arguments `gradient` übergibt. Wird nichts Weiteres festgelegt, so wird die Farbe auf der Basis des lokalen Funktionswerts gewählt. Wir wollen jedoch in der Farbe noch eine

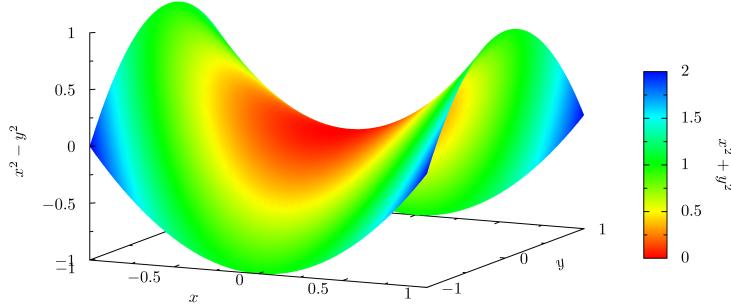
weitere Information kodieren. Dazu erweitern wir die Tupel in unserer Liste `data` um eine weitere Spalte, die wir in `graph.data.points` der Farbachse `color` zuordnen. Außerdem haben wir Achsenbeschriftungen in der gleichen Weise, wie wir das weiter oben schon getan haben, vorgegeben. In `graph.style.surface` haben wir noch zwei Argumente auf `None` gesetzt. Mit `gridcolor` kann eine Farbe für ein Koordinatengitter vorgegeben werden, das auf die Fläche gezeichnet wird. Hier verzichten wir explizit auf ein solches Gitter, auch wenn dies bereits die Defaulteinstellung ist. Zudem verhindern wir mit der Vorgabe für `backcolor`, dass die Rückseite der Fläche schwarz dargestellt wird wie es im vorigen Beispiel der Fall war.

```
In [52]: data = [(x, y, x**2-y**2, x**2+y**2)
....:           for x in np.linspace(-1, 1, 50) for y in np.linspace(-1, 1, 50)]
....: g = graph.graphxyz(size=4,
....:                     x=graph.axis.lin(title='$x$'),
....:                     y=graph.axis.lin(title='$y$'),
....:                     z=graph.axis.lin(title='$x^2-y^2$'))
....: g.plot(graph.data.points(data, x=1, y=2, z=3, color=4, title='$x^2+y^2$'),
....:         [graph.style.surface(gradient=color.rgbgradient(
....:                         color.gradient.Rainbow),
....:                         gridcolor=None,
....:                         backcolor=None)])
```



Das nächste Beispiel zeigt, dass man den Blick auf die Fläche den jeweiligen Bedürfnissen anpassen kann. Dazu gibt man im Argument `projector` des Graphencanvas den entsprechenden Projektor an. Dabei kann es sich um eine Parallelprojektion wie im folgenden Beispiel oder um eine Zentralprojektion wie im übernächsten Beispiel handeln. Bei der Parallelprojektion gibt man den Polarwinkel und den Azimutwinkel für den Normalenvektor auf der x - y -Ebene in Grad an. Bei der Zentralprojektion kommt noch eine Abstandsvariable hinzu.

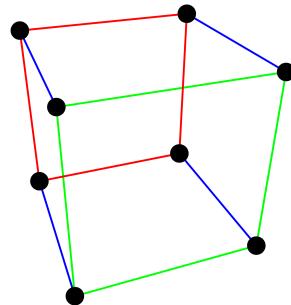
```
In [53]: g = graph.graphxyz(size=4,
....:                     x=graph.axis.lin(title='$x$'),
....:                     y=graph.axis.lin(title='$y$'),
....:                     z=graph.axis.lin(title='$x^2-y^2$'),
....:                     projector=graph.graphxyz.parallel(-65, 10))
....: g.plot(graph.data.points(data, x=1, y=2, z=3, color=4, title='$x^2+y^2$'),
....:         [graph.style.surface(gradient=color.rgbgradient(
....:                         color.gradient.Rainbow),
....:                         gridcolor=None,
....:                         backcolor=None)])
```



Projektoren kann man auch selbstständig verwenden, um Punkte im dreidimensionalen Raum auf eine Ebene zu projizieren. Der folgende Code berechnet für die Ecken eines Würfels die Projektion in die Ebene, und zeichnet

die Achsen und Kanten.

```
In [54]: import itertools
.... projector = graph.graphxyz.central(10, -20, 30).point
.... a = 2
.... cube = list(itertools.product((-a, a), repeat=3))
.... c = canvas.canvas()
.... for edge in ((0, 1), (1, 3), (3, 2), (2, 0)):
....     x1, y1 = projector(*cube[edge[0]])
....     x2, y2 = projector(*cube[edge[1]])
....     c.stroke(path.line(x1, y1, x2, y2),
....               [style.linewidth.Thick, color.rgb.red])
....     x1, y1 = projector(*cube[edge[0]+4])
....     x2, y2 = projector(*cube[edge[1]+4])
....     c.stroke(path.line(x1, y1, x2, y2),
....               [style.linewidth.Thick, color.rgb.green])
....     x1, y1 = projector(*cube[edge[0]])
....     x2, y2 = projector(*cube[edge[0]+4])
....     c.stroke(path.line(x1, y1, x2, y2),
....               [style.linewidth.Thick, color.rgb.blue])
.... for vertex in cube:
....     x, y = projector(*vertex)
....     c.fill(path.circle(x, y, 0.2))
```



Dieses Beispiel zeigt noch einmal, wie vielseitig man Grafiken mit PyX erstellen kann, wobei wir hier nur die wichtigsten Aspekte ansprechen konnten. Weitere Informationen findet man in der Dokumentation von PyX auf der Webseite des Projekts.

Versionskontrolle mit Git

6.1 Vorbemerkungen

Bei der Entwicklung von Programmen ist es sinnvoll, ein Versionskontrollsystem zu verwenden, das es erlaubt, alte Programmversionen systematisch aufzubewahren. Damit wird es beispielsweise möglich, auf definierte ältere Programmstände zurückzugehen. Es kann auch sinnvoll sein, die Versionsnummer in vom Programm erzeugten Daten abzuspeichern. Sollte sich später herausstellen, dass ein Programm fehlerhaft war, lässt sich auf diese Weise entscheiden, ob Daten von diesem Fehler betroffen sind oder nicht.

Das erste Versionskontrollsystem war das 1972 entwickelte SCCS. Später folgten Systeme wie RCS, CVS, Subversion, Git und Mercurial. Bei den aktuellen Versionskontrollsysteme lassen sich zwei Arten unterscheiden, solche die die Programmversionen zentral auf einem Server speichern und solche, bei denen die Programmversionen auf verschiedenen Rechnern verteilt vorliegen können. Die zweite Variante schließt den Fall mit ein, bei dem die Programmversionen ausschließlich lokal auf einem Rechner vorgehalten werden. Während bei einem zentralen Versionskontrollsystem eine Internetverbindung zum Server zwingend notwendig ist, lassen sich bei einem dezentralen Versionskontrollsystem Versionierungen auch ohne Internetanbindung vornehmen.

Ein Beispiel für ein modernes zentrales Versionskontrollsystem ist Subversion, während es sich bei Git und Mercurial um dezentrale Versionskontrollsysteme handelt. Obwohl Mercurial in Python geschrieben ist, wollen wir uns im Folgenden mit Git beschäftigen, das sich bei der Entwicklung freier Software großer Beliebtheit erfreut. Auch wenn es im Detail Unterschiede zwischen Mercurial und Git gibt, sind die beiden Versionskontrollsysteme einander sehr ähnlich.

Die Entwicklung von Git¹ wurde 2005 von Linus Torvalds begonnen, um ein geeignetes Versionskontrollsystem zur Entwicklung des Betriebssystemkerns von Linux zur Verfügung zu haben. Die Anforderungen ergaben sich vor allem daraus, dass Linux von einer sehr großen Zahl von Programmierern entwickelt wird, und somit die Übertragung von Code möglichst effizient, aber auch sicher vonstatten gehen muss. Im Hinblick auf den ersten Aspekt ist ein dezentrales System wesentlich besser geeignet als ein zentrales System. Detaillierte Informationen über Git findet man im Internet unter git-scm.com im Dokumentationsbereich.

6.2 Grundlegende Arbeitsschritte

Um für ein Verzeichnis sowie die darunterliegenden Verzeichnisse eine Versionierung zu ermöglichen, muss man zunächst die von Git benötigte Verzeichnisstruktur einrichten. Wir nehmen an, dass in unserem Benutzerverzeichnis, hier `/home/gert`, ein Verzeichnis `wd` für »working directory« existiert, in dem wir unsere Programmierung durchführen wollen. Dieses Verzeichnis kann im Prinzip jeden beliebigen geeigneten Namen haben. Wir gehen zunächst in dieses Verzeichnis und initialisieren es für die Benutzung mit Git:

```
$ cd ~/wd  
$ git init  
Initialisierte leeres Git-Repository in /home/gert/wd/.git/
```

¹ Zur Namensgebung sagte Linus Torvalds unter anderem „I'm an egoistical bastard, and I name all my projects after myself. First Linux, now git.“ Die Ironie dieses Satzes wird deutlich wenn man bedenkt, dass *git* im Englischen so viel wie Blödmann oder Depp bedeutet.

Im Unterverzeichnis `.git` werden alle relevanten Daten des Archivs liegen. So lange dieses Verzeichnis nicht modifiziert wird, was man ohnehin nicht tun sollte, oder gar gelöscht wird, sind die dort abgelegten Daten und damit alle Versionen noch verfügbar auch wenn alle anderen Dateien im Arbeitsverzeichnis gelöscht wurden.

Zu diesem Zeitpunkt ist es sinnvoll, Git auch den vollständigen Namen des Benutzers und eine zugehörige E-Mail-Adresse mitzuteilen:

```
$ git config user.name "Gert-Ludwig Ingold"  
$ git config user.email "gert.ingold@physik.uni-augsburg.de"
```

Diese Informationen legt Git im Hauptverzeichnis des Benutzers in der Datei `.gitconfig` ab und verwendet sie bei der Übernahme von Dateien in das Versionsarchiv. Bei Bedarf lassen sich noch weitere Parameter einstellen, beispielsweise der Editor, den Git aufrufen soll, um dem Benutzer beim Abspeichern einer neuen Version die Möglichkeit zu geben, einen Kommentar abzuspeichern.

Um das Arbeiten mit Git zu illustrieren, legen wir anschließend eine erste Version eines Skripts `hello.py` mit folgendem Inhalt

```
print('Hello world')
```

in unserem Verzeichnis an. Nun, aber auch zu jeder anderen Zeit, kann man den Zustand des Arbeitsverzeichnisses abfragen:

```
$ git status  
Auf Branch master  
  
Initialer Commit  
  
Unbeobachtete Dateien:  
(benutzen Sie "git add <Datei>...", um die Änderungen zum Commit vorzumerken)  
  
    hello.py  
  
nichts zum Commit vorgemerkt, aber es gibt unbeobachtete Dateien (benutzen Sie  
"git add" zum Beobachten)
```

Git gibt hier eine ganze Menge an Informationen einschließlich eines Vorschlags, was wir als Nächstes tun könnten. Doch gehen wir der Reihe nach vor. Wir befinden uns laut der ersten Zeile der Statusausgabe auf dem `master`-Zweig. Weiter unten werden wir sehen, dass wir unter Git weitere Zweige anlegen können, in denen wir beispielsweise bestimmte Aspekte eines Programms weiterentwickeln wollen. Solche Zweige können später auch wieder zusammengeführt werden. Ferner weist uns Git darauf hin, dass noch keine Dateien versioniert wurden. Dem unteren Teil der Ausgabe können wir entnehmen, dass die Versionierung in zwei Stufen vor sich geht und es demzufolge zwei verschiedene Arten von Dateien gibt.

Git hat sehr wohl bemerkt, dass es eine neue Datei `hello.py` gibt, beachtet diese jedoch zunächst nicht weiter. Es wird aber am Ende darauf hingewiesen, dass sich Dateien mit Hilfe von `git add` für einen *commit*, also eine Versionierung, vormerken lassen. Diese Dateien werden dabei in eine so genannte *staging area* gebracht. Wir führen diesen Schritt nun aus und sehen uns den neuen Status an:

```
$ git add hello.py  
$ git status  
Auf Branch master  
  
Initialer Commit  
  
zum Commit vorgemerkte Änderungen:  
(benutzen Sie "git rm --cached <Datei>..." zum Entfernen aus der Staging-Area)  
  
    neue Datei:      hello.py
```

Damit ist unsere Datei nun für einen *commit* vorgemerkt. Gleichzeitig gibt uns Git einen Hinweis, wie wir die Datei wieder aus der *staging area* entfernen können, falls wir doch keine Versionierung durchführen möchten. Bevor wir mit einem *commit* fortfahren, wollen wir zunächst erkunden, was es damit auf sich hat, wenn eine Datei in die *staging area* gebracht wird. Dazu sehen wir uns etwas im `.git`-Unterverzeichnis um:

```
$ ls .git
branches config description HEAD hooks index info objects refs
$ ls .git/objects
75 info pack
$ ls .git/objects/75
d9766db981cf4e8c59be50ff01e574581d43fc
```

Im Unterverzeichnis `.git/objects/75` liegt nun eine Datei mit der etwas merkwürdigen Bezeichnung `d9766db981cf4e8c59be50ff01e574581d43fc`. Stellt man noch die 75 aus dem Verzeichnisnamen voran, so handelt es sich hierbei um den so genannten SHA1-Hashwert² des Objekts, wie wir folgendermaßen überprüfen können³:

```
from hashlib import sha1
def githash(data):
    s = sha1()
    s.update(("blob %u\0" % len(data)).encode('utf8'))
    s.update(data)
    return s.hexdigest()

content = "print('hello world')\n"
print(githash(content))
```

SHA1-Hashwerte bestehen aus 40 Hexadezimalzahlen und charakterisieren den Inhalt eines Objekts eindeutig. Immerhin gibt es etwa 10^{48} verschiedene Hashwerte. Git benutzt diesen Hashwert, um schnell Objekte identifizieren und auf Gleichheit testen zu können. Meistens genügen die ersten sechs oder sieben Hexadezimalzahlen, um ein Objekt eindeutig auszuwählen. Wir können uns den Inhalt des erzeugten Objekts mit Hilfe von Git folgendermaßen ansehen:

```
$ git cat-file -p 75d9766
print('hello world')
```

Gemäß der obigen Statusanzeige müssen wir in einem zweiten Schritt noch einen *commit* ausführen:

```
$ git commit -m "ein erstes Skript"
[master (Basis-Commit) f442b34] ein erstes Skript
 1 file changed, 1 insertion(+)
   create mode 100644 hello.py
```

Mit Hilfe des Arguments `-m` haben wir noch einen Kommentar angegeben. Ohne dieses Argument hätte Git einen Editor geöffnet, um die Eingabe eines Kommentars zu ermöglichen. Es empfiehlt sich im Hinblick auf die Übersichtlichkeit von späteren längeren Ausgaben, Kommentare auf nicht zu lange Einzeiler zu beschränken.

Was hat sich durch den *commit* im Verzeichnis der Objekte getan? Wir stellen fest, dass unser altes Objekt noch vorhanden ist und zwei Objekte hinzugekommen sind:

```
$ ls -R .git/objects
.git/objects:
75 ed f4 info pack

.git/objects/75:
d9766db981cf4e8c59be50ff01e574581d43fc

.git/objects/ed:
868ae92a213b64de2ad627b27458537539bcd

.git/objects/f4:
42b34f6400811648a3c94a8ddd5bfb417e1cf5

.git/objects/info:

.git/objects/pack:
```

² Siehe zum Beispiel en.wikipedia.org/wiki/SHA-1.

³ Der folgende Code basiert auf einem Vorschlag auf stackoverflow.com/questions/552659/assigning-git-sha1s-without-git.

Sehen wir uns die neuen Objekte an:

```
$ git cat-file -p f442b34
tree ed868ae92a213b64de2ad627b27458537539bcd
author Gert-Ludwig Ingold <gert.ingold@physik.uni-augsburg.de> 1420469345 +0100
committer Gert-Ludwig Ingold <gert.ingold@physik.uni-augsburg.de> 1420469345 +0100

ein erstes Skript
$ git cat-file -p ed868ae
100644 blob 75d9766db981cf4e8c59be50ff01e574581d43fc    hello.py
```

Bei dem ersten Objekt handelt es sich um ein so genanntes *commit*-Objekt, das neben den Angaben zur Person und dem Kommentar einen Verweis auf ein *tree*-Objekt enthält. Das zweite neue Objekt ist genau dieses *tree*-Objekt. Es enthält Informationen über die Objekte, die zu dem betreffenden *commit* gehören. In unserem Fall ist dies das uns bereits bekannte *blob*-Objekt, das den Inhalt unseres Skripts *hello.py* enthält.

Nun ist es Zeit, unser Skript zu überarbeiten. Im Wort »hello« ersetzen wir das kleine h durch ein großes H. Git meldet dann den folgenden Status:

```
$ git status
Auf Branch master
Änderungen, die nicht zum Commit vorgemerkt sind:
  (benutzen Sie "git add <Datei>...", um die Änderungen zum Commit vorzumerken)
  (benutzen Sie "git checkout -- <Datei>...", um die Änderungen im Arbeitsverzeichnis
   zu verwerfen)

  geändert:      hello.py

keine Änderungen zum Commit vorgemerkt (benutzen Sie "git add" und/oder
                                              "git commit -a")
```

Git hat erkannt, dass wir unser Skript modifiziert haben, führt aber keinerlei Schritte im Hinblick auf eine Versionierung aus. Diese sind uns überlassen, wobei uns Git wieder Hilfestellung gibt. Nehmen wir an, dass wir die Änderungen wieder rückgängig machen wollen. Dies geht wie folgt:

```
$ git checkout -- hello.py
$ git status
Auf Branch master
nichts zu committen, Arbeitsverzeichnis unverändert
$ cat hello.py
print('hello world')
```

Tatsächlich liegt jetzt wieder die ursprüngliche Fassung des Skripts vor. Da wir die neue Fassung nicht zur *staging area* hinzugefügt haben, sind unsere Änderungen verloren gegangen. Sie können somit nicht wiederhergestellt werden, wie dies bei einer erfolgten Versionierung der Fall gewesen wäre. Man sollte daher mit dem beschriebenen Vorgehen besonders vorsichtig sein.

Wir wiederholen nun zur Wiederherstellung der geänderten Version die Umwandlung des h in einen Großbuchstaben. Anschließend könnten wir wieder die beiden Schritte `git add hello.py` und `git commit` ausführen. Alternativ lässt sich dies in unserem Fall in einem einzigen Schritt bewältigen:

```
$ git commit -a -m "fange mit Großbuchstabe an"
[master 79ff614] fange mit Großbuchstabe an
  1 file changed, 1 insertion(+), 1 deletion(-)
```

Zu beachten ist dabei allerdings, dass auf diese Weise alle Dateien, von denen Git weiß, dem *commit* unterzogen werden auch wenn dies vielleicht nicht gewünscht ist. Es ist daher oft sinnvoll, zunächst explizit mit `git add` die Dateien für einen *commit* festzulegen. Damit lassen sich gezielt thematisch zusammenhängende Änderungen auswählen.

Während der Hashwert des ersten *commit*-Objekts mit f442b34 begann, fängt der Hashwert des neuesten *commit*-Objekts mit 79ff614 an. Git bezieht sich auf Versionen mit Hilfe dieser Hashwerte und nicht mit zeitlich ansteigenden Versionsnummern. Letzteres ist für ein dezentral organisiertes Versionskontrollsystem nicht möglich, da im Allgemeinen nicht bekannt sein kann, ob andere Entwickler in der Zwischenzeit Änderungen am

gleichen Projekt durchgeführt haben.

Einen Überblick über die verschiedenen vorhandenen Versionen kann man sich folgendermaßen verschaffen:

```
$ git log
commit 79ff6141783ca76a5424271d2cede769ff45fb28
Author: Gert-Ludwig Ingold <gert.ingold@physik.uni-augsburg.de>
Date:   Mon Jan 5 16:30:22 2015 +0100
```

fangt mit Großbuchstabe an

```
commit f442b34f6400811648a3c94a8ddd5bfb417e1cf5
Author: Gert-Ludwig Ingold <gert.ingold@physik.uni-augsburg.de>
Date:   Mon Jan 5 15:49:05 2015 +0100
```

ein erstes Skript

Die Ausgabe kann mit Optionen sehr detailliert beeinflusst werden. Wir geben hier nur ein Beispiel:

```
$ git log --pretty=oneline
79ff6141783ca76a5424271d2cede769ff45fb28 fange mit Großbuchstabe an
f442b34f6400811648a3c94a8ddd5bfb417e1cf5 ein erstes Skript
```

Diese einzeilige Ausgabe funktioniert dann besonders gut, wenn man sich wie weiter oben bereits empfohlen bei der Beschreibung der Version auf eine einzige, möglichst informative Zeile beschränkt. Informationen über weitere Optionen von Git-Befehlen erhält man grundsätzlich mit `git help` und der anschließenden Angabe des gewünschten Befehls, in unserem Falle also `git help log`.

Details zu einer Version, im Folgenden die Version `79ff614`, erhält man folgendermaßen:

```
$ git show 79ff614
commit 79ff6141783ca76a5424271d2cede769ff45fb28
Author: Gert-Ludwig Ingold <gert.ingold@physik.uni-augsburg.de>
Date:   Mon Jan 5 16:30:22 2015 +0100
```

fangt mit Großbuchstabe an

```
diff --git a/hello.py b/hello.py
index 75d9766..f7d1785 100644
--- a/hello.py
+++ b/hello.py
@@ -1 +1 @@
-print('hello world')
+print('Hello world')
```

Dieser Ausgabe kann man entnehmen, dass das Objekt `75d9766...` in das Objekt `f7d1785...` umgewandelt wurde. Aus den letzten Zeilen kann man die Details der Änderung ersehen.

Wir hatten weiter oben darauf hingewiesen, dass man im Detail beeinflussen kann, welche Dateien beim nächsten `commit` berücksichtigt werden. Dazu werden die betreffenden Dateien mit einem `git add` in die *staging area* aufgenommen. In diesem Zusammenhang kann es passieren, dass man eine Datei versehentlich zu diesem Index hinzufügt. Im folgenden Beispiel sei dies eine Datei namens `spam.py`:

```
$ git add spam.py
$ git status
Auf Branch master
zum Commit vorgemerkte Änderungen:
(benutzen Sie "git reset HEAD <Datei>..." zum Entfernen aus der Staging-Area)

neue Datei:      spam.py
```

Diese Datei lässt sich nun wie angegeben wieder aus der *staging area* entfernen:

```
$ git reset HEAD spam.py
$ git status
```

```
Auf Branch master  
Unbeobachtete Dateien:  
(benutzen Sie "git add <Datei>...", um die Änderungen zum Commit vorzumerken)
```

```
spam.py
```

```
nichts zum Commit vorgemerkt, aber es gibt unbeobachtete Dateien (benutzen Sie  
"git add" zum Beobachten)
```

Im Arbeitsverzeichnis ist die Datei `spam.py` weiterhin vorhanden. Im `reset`-Befehl verweist HEAD hier auf die Arbeitsversion im aktuellen Zweig, deren Hashwert wir somit nicht explizit kennen müssen.

6.3 Verzweigen und Zusammenführen

Bei der Entwicklung von Software ist es häufig sinnvoll, gewisse Weiterentwicklungen vom Hauptentwicklungsstrang zumindest zeitweise abzukoppeln. Dies erreicht man durch Verzweigungen. Ein typischer Fall wäre ein öffentliches Release, das im Hauptzweig zum nächsten Release weiterentwickelt wird. Daneben kann es aber noch einen Zweig geben, in dem ausschließlich Fehler des Releases korrigiert und dann wieder veröffentlicht werden. In einem anderen Szenario behinhaltet der Hauptzweig, der in Git unter dem Namen `master` läuft, immer eine lauffähige Version, während zur Entwicklung gewisser Programmaspekte separate Zweige benutzt werden. Um ein auf diese Weise entwickeltes Feature in die Version des Hauptzweiges einfließen zu lassen, muss man Zweige auch wieder zusammenführen können. Das Verzweigen und Zusammenführen geht in Git sehr einfach, da lediglich Markierungen gesetzt werden. Daher gehört das Verzweigen und Zusammenführen bei der Arbeit mit Git zu den Standardverfahren, die regelmäßig zum Einsatz kommen.

Zu Beginn gibt es nur einen Zweig, der, wie wir bereits wissen, den Namen `master` besitzt. Im vorigen Kapitel haben wir in diesem Zweig zwei Versionen erzeugt. Eine graphische Darstellung, die hier mit dem Git-Archive-Betrachter `gitg` erzeugt wurde, sieht dann folgendermaßen aus:



Die Information über die vorhandenen Zweige lässt sich auch direkt auf der Kommandozeile erhalten. In der folgenden Ausgabe ist zu erkennen, dass es nur einen Zweig, nämlich `master` gibt. Der Stern zeigt zudem an, dass wir uns gerade in diesem Zweig befinden.

```
$ git branch  
* master
```

Die Situation wird interessanter, wenn wir einen weiteren Zweig anlegen, der von `master` abzweigt. Wir nennen ihn `develop`, da dort die Programmentwicklung erfolgen soll, während in `master` immer eine lauffähige Version enthalten sein soll. Damit ist es unproblematisch, wenn das Programm im `develop`-Zweig zeitweise nicht funktionsfähig ist.

```
$ git branch develop  
$ git branch  
  develop  
* master
```



Der neue Zweig `develop` tritt zunächst nur als weitere Bezeichnung neben `master` in Erscheinung. Die Verzweigung wird erst später deutlich werden, wenn wir Dateien in den jeweiligen Zweigen verändern.

Um nun in `develop` arbeiten zu können, müssen wir in diesen Zweig wechseln:

```
$ git checkout develop  
Zu Branch 'develop' gewechselt  
$ git branch
```

```
* develop
  master
```

Der Stern zeigt an, dass der Zweigwechsel tatsächlich vollzogen wurde.

Bearbeitet man nun eine Datei im `develop`-Zweig und führt ein *commit* durch, so wird die Trennung der beiden Zweige deutlich.



Wir wechseln nun in den `master`-Zweig zurück und führen ein *merge*, also eine Vereinigung von zwei Zweigen durch. Git sucht in diesem Fall nach dem gemeinsamen Vorfahren der beiden Zweige und baut die im `develop`-Zweig durchgeführten Änderungen auch im `master`-Zweig ein:

```
$ git checkout master
Zu Branch 'master' gewechselt
$ git merge develop
Aktualisiere 79ff614..79f695b
Fast-forward
  hello.py | 1 +
    1 file changed, 1 insertion(+)
```

Da im `master`-Zweig in der Zwischenzeit keine Änderungen vorgenommen wurden, linearisiert Git die Vorgeschichte. Es sind aber nach wie vor beide Zweige vorhanden.



Möchte man festhalten, dass die Entwicklung im `develop`-Zweig durchgeführt wurde, so kann man dieses so genannte *fast forward* mit der Option `--no-ff` beim Zusammenführen der beiden Zweige verhindern. Um dies zu zeigen, wechseln wir zunächst in den `develop`-Zweig.

```
$ git checkout develop
Zu Branch 'develop' gewechselt
```

Dort führen wir die gewünschten Änderungen und einen anschließenden *commit* durch. Nach dem Wechsel in den `master`-Zweig benutzen wir nun beim Zusammenführen die Option `--no-ff`.

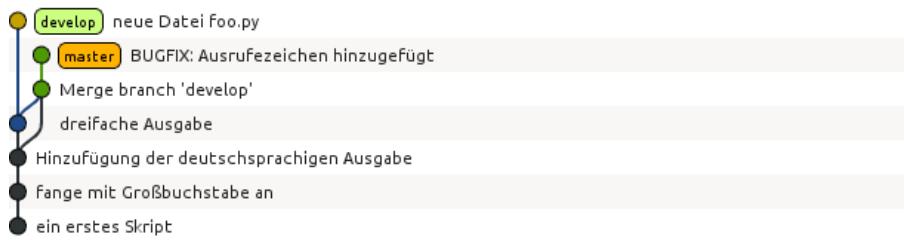
```
$ git commit -a -m 'dreifache Ausgabe'
[develop d2bfce0] dreifache Ausgabe
  1 file changed, 3 insertions(+), 2 deletions(-)
$ git checkout master
Zu Branch 'master' gewechselt
$ git merge --no-ff develop
Merge made by the 'recursive' strategy.
  hello.py | 5 +---
    1 file changed, 3 insertions(+), 2 deletions(-)
```

Die folgende Abbildung zeigt, dass die Versionsgeschichte jetzt den Zweig darstellt, in dem die Änderung tatsächlich erfolgte.



Genauso wie man Änderungen aus dem `develop`-Zweig in den `master`-Zweig übernehmen kann, kann man auch Änderungen vom `master`-Zweig in den `develop`-Zweig übernehmen. Eine typische Situation besteht darin, dass im `master`-Zweig ein Fehler korrigiert wird, der auch in der Entwicklungsversion vorliegt. Zunächst

nehmen wir an, dass im `develop`-Zweig weiter gearbeitet wird. Im `master`-Zweig wird der Fehler korrigiert, so dass jetzt in beiden Zweigen Änderungen vorliegen.



Um Änderungen aus dem `master`-Zweig in den `develop`-Zweig zu übernehmen, wechseln wir in Letzteren und führen dort ein *merge* des `master`-Zweigs durch:

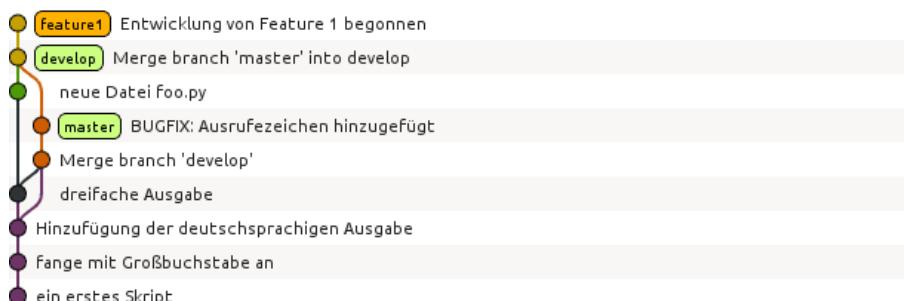
```
$ git checkout develop
Zu Branch 'develop' gewechselt
$ git merge master
Merge made by the 'recursive' strategy.
 hello.py | 4 +--- 
 1 file changed, 2 insertions(+), 2 deletions(-)
```

Damit sieht unser Verzweigungsschema folgendermaßen aus:



Um ein neues Feature für ein Programm zu entwickeln, wird häufig ein Zweig vom `develop`-Zweig abgespalten und nach der Entwicklung mit Letzterem wieder zusammengeführt. Sollte die Entwicklung nicht erfolgreich gewesen sein, so verzichtet man auf die Zusammenführung oder löscht den überflüssig gewordenen Zweig. Bei dieser Gelegenheit zeigen wir, wie man das Anlegen eines neuen Zweigs und das Wechseln in diesen Zweig mit einem Kommando erledigen kann:

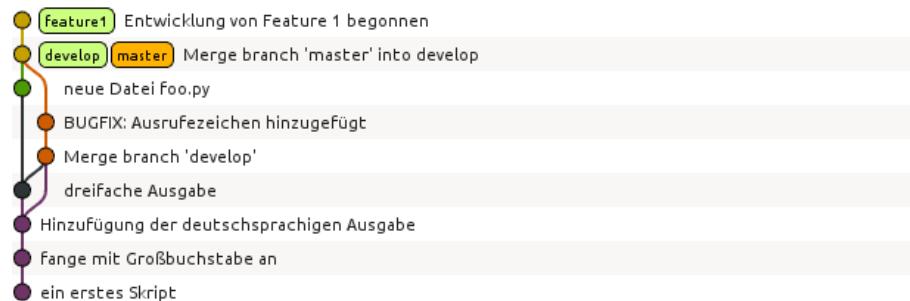
```
$ git checkout -b feature1
Gewechselt zu einem neuen Branch 'feature1'
```



Unabhängig von der Entwicklung im `feature1`-Zweig kann man nun Änderungen zwischen dem `master`- und dem `develop`-Zweig austauschen:

```
$ git branch
  develop
* feature1
  master
$ git checkout master
Zu Branch 'master' gewechselt
$ git merge develop
```

```
Aktualisiere 70f9136..5b5d1e9
Fast-forward
 foo.py | 1 +
 1 file changed, 1 insertion(+)
 create mode 100644 foo.py
```



Bis jetzt gingen alle Zusammenführungen problemlos von statthen. Es kann aber durchaus zu Konflikten kommen, die sich für Git nicht eindeutig auflösen lassen. Dann muss der Konflikt von Hand gelöst werden. Um dies zu illustrieren, führen wir im `develop`-Zweig eine Änderung ein, die beim Zusammenführen mit dem `feature1`-Zweig zu einem Konflikt führt.

develop	Entwicklung von <code>foo.py</code> zur Erzeugung eines Konflikts	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:52:09 CET
feature1	zweite Funktion hinzugefügt	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:48:03 CET
master	Hello-World-Ausgabe in Funktion verschoben	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:47:01 CET
	Entwicklung von Feature 1 begonnen	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:44:21 CET
	Merge branch 'master' into develop	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:42:00 CET
	bug fix: Ausrufezeichen hinzugefügt	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:40:57 CET
	neue Datei <code>foo.py</code>	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:39:24 CET
	Merge branch 'develop'	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:36:27 CET
	dreifache Ausgabe	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:36:02 CET
	Hinzufügung der deutschsprachigen Ausgabe	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:33:46 CET
	erste Version eines Hello-World-Skripts	Gert-Ludwig Ingold	Do 06 Dez 2012 16:30:39 CET

Die folgende Ausgabe zeigt, wie Git einen Konflikt anzeigt. In der konfliktbehafteten Datei `hello.py` sind die kritischen Stellen gegenübergestellt. Zunächst wird die problematische Codestelle in der Arbeitsversion des `develop`-Zweigs angezeigt. Getrennt von ===== folgt dann der Code aus dem `feature1`-Zweig, der im `develop`-Zweig aufgenommen werden soll.

```
$ git branch
* develop
  feature1
  master
$ git merge feature1
automatischer Merge von hello.py
KONFLIKT (Inhalt): Merge-Konflikt in hello.py
Automatischer Merge fehlgeschlagen; beheben Sie die Konflikte und committen Sie
dann das Ergebnis.
$ cat hello.py
<<<<< HEAD
for n in range(4):
    print('Hello world!')
    print('Hallo Welt!')
=====
def myfunc1(n):
    for _ in range(3):
        print('Hello world!')
        print('Hallo Welt!')
>>>>> feature1
```

In einer solchen Situation muss der Benutzer entscheiden, welche Version die gewünschte ist. Unter Umständen kann es erwünscht, Teile jeweils aus dem einen oder dem anderen Zweig zu entnehmen. Hat man eine zufriedenstellende Version erstellt, kann man einen *commit* durchführen.

```
$ git add hello.py
$ git commit -m'Konflikt behoben'
[develop ef71e70] Konflikt behoben
```

Um abschließend die drei Zweige zu zeigen, die in der Diskussion eine Rolle gespielt haben, führen wir noch je eine Änderung im master- und im feature1-Zweig durch und erhalten damit das folgende Bild:



Der Umstand, dass wir bereits in wenigen Schritten ein relativ komplexes Verzweigungsdiagramm erhalten haben, legt es insbesondere für größere Projekte nahe, sich eine Strategie für das Anlegen von Zweigen und die darin auszuführenden Aufgaben zu überlegen. Bei Projekten mit mehreren Entwicklern ist andererseits gerade die Möglichkeit, Zweige einzurichten, nützlich, um die anderen Entwickler nicht unnötig mit Code zu belasten, der nur lokal für einen Entwickler von Bedeutung ist.

6.4 Umgang mit entfernten Archiven

Bis jetzt haben wir uns nur mit der Arbeit mit einem lokalen Archiv beschäftigt. Wenn mehrere Entwickler zusammenarbeiten, muss es jedoch die Möglichkeit des Austauschs von Code geben. Unter einem zentralen Versionskontrollsystem wie Subversion dient hierzu das Archiv auf dem zentralen Server, über den ohnehin die gesamte Versionskontrolle läuft. Auch unter Git ist es sinnvoll, ein zentrales Archiv zu haben, das jedoch vor allem für den Datenaustausch und nicht so sehr für die Versionskontrolle herangezogen wird. Somit benötigt man nur für den Datenaustausch mit dem zentralen Archiv eine funktionierende Internetanbindung, während die Versionskontrolle auch ohne sie möglich ist.

Je nachdem welches Protokoll für den Datenzugriff zugelassen ist und welche Zugriffsrechte man besitzt, kann man auf das zentrale Archiv lesend oder eventuell auch schreibend zugreifen. In den folgenden Beispielen wollen wir einen Zugriff per `ssh`, also *secure shell*, annehmen, der uns, nach entsprechender Authentifizierung, sowohl Lese- als auch Schreibzugriff ermöglicht. Das zentrale Archiv soll auf dem Rechner `nonexistent` liegen, der, wie der Name schon andeutet, in Wirklichkeit nicht existiert. Der Name ist also entsprechend anzupassen. Der Zugriff erfolge über einen Benutzer namens `user`. Auch der Benutzername muss an die tatsächlichen Gegebenheiten angepasst werden.

Als erstes erzeugen wir uns lokal ein Git-Arbeitsverzeichnis, indem wir das zentrale Archiv klonen. Zur Illustration haben wir dort zunächst wieder nur eine Version eines einfachen Skripts abgelegt.

```
$ git clone ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git dummy
Klone nach 'dummy'...
remote: Counting objects: 3, done.
remote: Total 3 (delta 0), reused 0 (delta 0)
Empfange Objekte: 100% (3/3), Fertig.
Prüfe Konnektivität... Fertig
$ cd dummy
$ git branch -va
* master          96ffbf6 hello world Skript
```

```
remotes/origin/HEAD    -> origin/master
remotes/origin/master 96ffbf6 hello world Skript
$ cat hello.py
print('hello world')
```

Nach dem Wechsel in das Arbeitsverzeichnis sehen wir, dass neben dem gewohnten master-Zweig noch zwei remote-Zweige existieren. Hierbei handelt es sich um Zweige, die auf das zentrale Archiv verweisen, das standardmäßig mit origin bezeichnet wird. Um die remote-Zweige angezeigt zu bekommen, muss die Option -a angegeben werden. Andernfalls beschränkt sich die Ausgabe auf die lokal vorhandenen Zweige. Informationen über entfernte Archive und den zugehörigen Zugriffsweg erhält man mit:

```
$ git remote -v
origin  ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git (fetch)
origin  ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git (push)
```

Nehmen wir an, dass auf dem zentralen Server eine Datei verändert wurde, so können wir diese von dort in unser Arbeitsverzeichnis holen:

```
$ git fetch origin
remote: Counting objects: 5, done.
remote: Total 3 (delta 0), reused 0 (delta 0)
Entpacke Objekte: 100% (3/3), Fertig.
Von ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git
  96ffbf6..26f3c10  master      -> origin/master
```

Dabei wird nur der origin-Zweig aktualisiert, wie am Ausrufezeichen, das in der aktuellen Version von hello.py hinzugefügt wurde, zu sehen ist:

```
$ git branch -a
* master
  remotes/origin/HEAD -> origin/master
  remotes/origin/master
$ cat hello.py
print('hello world')
$ git checkout origin
Note: checking out 'origin'.
```

You are in 'detached HEAD' state. You can look around, make experimental changes and commit them, and you can discard any commits you make in this state without impacting any branches by performing another checkout.

If you want to create a new branch to retain commits you create, you may do so (now or later) by using -b with the checkout command again. Example:

```
git checkout -b new_branch_name

HEAD ist jetzt bei 26f3c10... mit Ausrufezeichen
$ cat hello.py
print('hello world!')
```

Wie uns Git informiert, können wir im origin-Zweig keine Änderungen vornehmen. Wir können uns dort aber umsehen und uns auf diese Weise davon überzeugen, dass das Skript dort das Aufrufezeichen enthält. Die Änderung können wir wie im vorigen Kapitel beschrieben in den master-Zweig unseres lokalen Archivs übernehmen:

```
$ git checkout master
Vorherige Position von HEAD war 26f3c10... mit Ausrufezeichen
Zu Branch 'master' gewechselt
Ihr Branch ist zu 'origin/master' um 1 Commit hinterher, und kann vorgespult werden.
  (benutzen Sie "git pull", um Ihren lokalen Branch zu aktualisieren)
$ git merge origin
Aktualisiere 96ffbf6..26f3c10
Fast-forward
  hello.py | 2 ++
  ++++
```

```
1 file changed, 1 insertion(+), 1 deletion(-)
$ cat hello.py
print('hello world!')
```

Die Aktualisierung auf den Stand des zentralen Archivs haben wir hier in zwei Schritten durchgeführt. Es ist jedoch auch möglich, dies in einem Schritt zu erledigen. Wir nehmen an, dass ein anderer Entwickler das Skript mit einem weiteren Ausrufezeichen versehen hat, und führen dann eine so genannte *pull*-Operation aus:

```
$ git pull origin
remote: Counting objects: 5, done.
remote: Total 3 (delta 0), reused 0 (delta 0)
Entpacke Objekte: 100% (3/3), Fertig.
Von ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git
  26f3c10..10f6489  master      -> origin/master
Aktualisiere 26f3c10..10f6489
Fast-forward
 hello.py | 2 ++
 1 file changed, 1 insertion(+), 1 deletion(-)
$ cat hello.py
print("hello world!!")
```

Schreibzugriff vorausgesetzt kann man umgekehrt auch neue Dateiversionen im zentralen Archiv ablegen. Hierzu dient die *push*-Operation. Hierzu ändern wir den Ausgabetext unseres Skripts und legen das neue Skript in unser lokales Archiv. Anschließend kann die Übertragung in das zentrale Archiv erfolgen:

```
$ cat hello.py
print "Hallo Welt!!"
$ git commit hello.py -m"deutsche Variante"
[master d2b98d1] deutsche Variante
 1 file changed, 1 insertion(+), 1 deletion(-)
$ git push origin
Zähle Objekte: 3, Fertig.
Schreibe Objekte: 100% (3/3), 290 bytes | 0 bytes/s, Fertig.
Total 3 (delta 0), reused 0 (delta 0)
To ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git
  10f6489..d2b98d1  master -> master
```

Problematisch wird die Situation, wenn zwischen einer *pull*-Operation und einer *push*-Operation ein anderer Entwickler das zentrale Archiv verändert hat:

```
$ git commit hello.py -m"Ausgabe deutsch und englisch"
[master 8e5577d] Ausgabe deutsch und englisch
 1 file changed, 1 insertion(+)
$ git push origin
To ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy
 ! [rejected]      master -> master (fetch first)
error: Fehler beim Versenden einiger Referenzen nach
       'ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git'
Hinweis: Aktualisierungen wurden zurückgewiesen, weil das Remote-Repository Commits
Hinweis: enthält, die lokal nicht vorhanden sind. Das wird üblicherweise durch einen
Hinweis: "push" von Commits auf dieselbe Referenz von einem anderen Repository aus
Hinweis: verursacht. Vielleicht müssen Sie die externen Änderungen zusammenzuführen
Hinweis: (z.B. 'git pull ...') bevor Sie erneut "push" ausführen.
Hinweis: Siehe auch die Sektion 'Note about fast-forwards' in 'git push --help'
Hinweis: für weitere Details.
```

Wir folgen dem Hinweis und holen uns zunächst die veränderte Version:

```
$ git pull origin
remote: Counting objects: 10, done.
remote: Compressing objects: 100% (2/2), done.
remote: Total 6 (delta 0), reused 0 (delta 0)
Entpacke Objekte: 100% (6/6), Fertig.
Von ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git
```

```
d2b98d1..a2e308b  master      -> origin/master
automatischer Merge von hello.py
KONFLIKT (Inhalt): Merge-Konflikt in hello.py
Automatischer Merge fehlgeschlagen; beheben Sie die Konflikte und committen Sie dann
das Ergebnis.
```

Dabei kommt es zu einem Konflikt, da das gleiche Skript in verschiedener Weise verändert wurde. Zunächst muss nun dieser Konflikt beseitigt werden, damit anschließend die gewünschte Fassung der Datei versioniert werden kann:

```
$ git add hello.py
$ git commit
[master c189281] Merge branch 'master' of
  ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git
```

Anschließend kann diese Version erfolgreich im zentralen Archiv abgelegt werden:

```
$ git push origin
Zähle Objekte: 4, Fertig.
Delta compression using up to 4 threads.
Komprimiere Objekte: 100% (2/2), Fertig.
Schreibe Objekte: 100% (4/4), 515 bytes | 0 bytes/s, Fertig.
Total 4 (delta 1), reused 0 (delta 0)
To ssh://user@nonexistent.physik.uni-augsburg.de/home/user/dummy.git
  a2e308b..c189281  master -> master
```

An diesem Beispiel wird deutlich, dass es durchaus problematisch sein kann, wenn viele Entwickler Schreibzugriff auf ein zentrales Archiv haben. Daher wird häufig einem breiteren Personenkreis lediglich Lesezugriff gewährt. Nur ein einzelner Entwickler oder eine kleine Gruppe hat Schreibzugriff auf das zentrale Archiv und kann so neuen Code dort ablegen. Dies geschieht mit einer *pull*-Operation von einem Archiv des Entwicklers, der den Code zur Verfügung stellt. Hierzu ist wiederum eine Leseberechtigung nötig. Möchte ein Entwickler bei diesem Verfahren Code für das zentrale Archive zur Verfügung stellen, so stellt er eine *pull*-Anfrage (*pull request*). Eventuell nach einer Diskussion und Prüfung entscheidet der Verantwortliche für das zentrale Archiv über die Aufnahme in das zentrale Archiv und führt die *pull*-Operation durch (oder auch nicht). Eine häufig verwendete Infrastruktur, die in dieser Weise insbesondere auch für die Entwicklung freier Software benutzt wird, ist [GitHub](#).

Testen von Programmen

7.1 Wozu braucht man Tests?

Ein offensichtliches Ziel beim Programmieren besteht darin, letztlich ein funktionierendes Programm zu haben. Funktionierend heißt hierbei, dass das Programm die gewünschte Funktionalität korrekt bereitstellt. Im Bereich des numerischen Rechnens heißt dies insbesondere, dass die erhaltenen Ergebnisse korrekt sind. Versucht man, mit numerischen Methoden noch ungelöste naturwissenschaftliche Fragestellungen zu bearbeiten, so lässt sich normalerweise die Korrektheit nicht direkt überprüfen. Andernfalls wäre das gesuchte Ergebnis ja bereits bekannt. Immerhin hat man häufig die Möglichkeit, das Ergebnis auf seine Plausibilität hin zu überprüfen, aber auch hier sind Grenzen gesetzt. Es kann ja durchaus vorkommen, dass eine Problemstellung zu einem völlig unerwarteten Ergebnis führt, dessen Hintergründe nicht ohne Weiteres verständlich sind.

Um die Korrektheit der Ergebnisse möglichst weitgehend abzusichern, sollte man daher alle sich bietenden Testmöglichkeiten wahrnehmen. Nicht selten geschieht dies in der Praxis in einer sehr informellen Weise. Tests werden zwar durchgeführt, aber nicht dokumentiert und auch nicht wiederholt, nachdem der Code geändert wurde. Als Abhilfe ist es sinnvoll, einen Testrahmen aufzubauen, der es zum einen erlaubt, Tests zu definieren und damit zu dokumentieren, und zum anderen diese Tests in einfacher Weise auszuführen.

Beim Formulieren von Tests sollte man sich Gedanken darüber machen, was alles schief gehen könnte, um möglichst viele Problemfälle detektieren zu können. In diesem Prozess können sich schon Hinweise auf Möglichkeiten zur Verbesserung eines Programms ergeben. Im Rahmen des so genannten *test driven developments* geht man sogar so weit, zunächst die Tests zu formulieren und dann das zugehörige Programm zu schreiben. Allerdings sind gerade im naturwissenschaftlichen Bereich die Anforderungen zu Beginn nicht immer so klar zu definieren, dass dieses Verfahren regelmäßig zur Anwendung kommen kann.

Tests können aber sehr wohl auch während des Entwicklungsprozesses geschrieben werden. Entdeckt man einen Fehler, der nicht von einem der Tests angezeigt wurde, so sollte man es sich zur Regel machen, einen Test zu schreiben, der diesen Fehler feststellen kann. Auf diese Weise kann man verhindern, dass sich dieser Fehler nochmals unbemerkt in das Programm einschleicht.

Man sollte nicht nur auf eine möglichst vollständige Abdeckung der Funktionalität durch Tests achten, sondern auch darauf, dass diese Tests möglichst unabhängig voneinander sind, also jeweils spezifische Aspekte des Codes überprüfen. Außerdem sollte das Fehlschlagen eines Tests schon einen Hinweis darauf geben, wo der Fehler zu suchen ist. Hierfür ist es sinnvoll, den Code in überschaubare Funktionen mit einer klaren Aufgabe zu zerlegen, die jeweils für sich getestet werden können. Das Schreiben von Tests kann hier dazu beitragen, die logische Gliederung des Codes zu verbessern.

Aus den verschiedenen Möglichkeiten, in Python einen Testrahmen aufzubauen, wollen wir zwei herausgreifen. Die erste basiert auf dem `doctest`-Modul, das es erlaubt, einfache Tests in den Dokumentationsstrings unterzubringen. Diese Tests erfüllen somit neben ihrer eigentlichen Aufgabe auch noch die Funktion, die Möglichkeiten der Verwendung beispielsweise einer Funktion oder einer Klasse zu dokumentieren. Die zweite Möglichkeit, die wir besprechen wollen, basiert auf dem `unittest`-Modul, das auch komplexere Testszenarien ermöglicht.

7.2 Das doctest-Modul

In Python ist die Dokumentation von Code nicht nur mit Kommentaren, die mit `#` eingeleitet werden, möglich, sondern auch mit Hilfe von Dokumentationsstrings. So können zum Beispiel Funktionen dokumentiert werden, indem nach der Kopfzeile ein typischerweise mehrzeiliger Dokumentationstext eingefügt wird. Dieses Vorgehen wird in Python unter anderem dadurch belohnt, dass dieser Text mit Hilfe der eingebauten `help`-Methode verfügbar gemacht wird. Ein weiterer Bonus besteht darin, dass im Dokumentationsstring Tests untergebracht werden können, die zugleich die Verwendung des dokumentierten Objekts illustrieren.

Während der Dokumentationsaspekt alleine durch die Anwesenheit des entsprechenden Textteils im Dokumentationsstring erfüllt wird, benötigen wir für den Test das `doctest`-Modul. Die Vorgehensweise soll an dem folgenden Beispiel erläutert werden, das auf dem Quicksort-Code aus dem Abschnitt [List comprehensions](#) basiert.

```
1 def quicksort(x):
2     """sortiere Liste x mit dem Quicksort-Verfahren
3
4     Beispiele:
5     >>> quicksort([2, 5, 3, 7, -1])
6     [-1, 2, 3, 5, 7]
7     >>> quicksort([2.25, -1.5])
8     [-1.5, 2.25]
9
10    Komplexe Zahlen lassen sich nicht sortieren
11    >>> quicksort([2j, 1-3j])
12    Traceback (most recent call last):
13        ...
14    TypeError: unorderable types: complex() < complex()
15    """
16
17    if len(x)<2: return x
18    return (quicksort([y for y in x[1:] if y<x[0]])
19            +x[0:1]
20            +quicksort([y for y in x[1:] if x[0]<=y]))
21
22 if __name__=="__main__":
23     import doctest
24     doctest.testmod()
```

Unsere alte Funktionsdefinition wurde hier um einen Dokumentationsstring in den Zeilen 2-15 erweitert. Die erste Zeile gibt eine kurze Beschreibung dessen, was die Funktion tut. Danach folgen einige Beispiele, deren Format dem entspricht, was man bei der interaktiven Arbeit in der Python-Shell vor sich hätte. Auf diese Weise hat man hier zwei Anwendungsbeispiele illustriert, die in der Python-Shell direkt nachvollzogen werden können. Das dritte Beispiel dient dazu, auf einen nicht zulässigen Aufruf hinzuweisen und den zugehörigen Grund kurz zu erläutern.

Die Verwendung des Formats der Python-Shell besitzt jedoch nicht nur einen besonderen Wiedererkennungswert für den Betrachter, sondern auch für das `doctest`-Modul, das genau hiernach in Dokumentationsstrings sucht. Unser Beispiel ist so aufgebaut, dass es bei einem direkten Aufruf das `doctest`-Modul lädt und mit dem Aufruf der `testmod`-Methode die Dokumentationsstrings von Funktionen und Klassen nach Testdefinitionen durchsucht und diese ausführt. Führt man das Skript aus, so erhält man das folgende Ergebnis:

```
$ python doctest_example.py
$
```

Der Umstand, dass hier keine Ausgabe erzeugt wird, ist ein gutes Zeichen, denn er bedeutet, dass es bei der Durchführung der Tests keine Fehler gab. Das Auftreten eines Fehlers hätte dagegen zu einer entsprechenden Ausgabe geführt. Vielleicht will man aber wissen, ob und, wenn ja, welche Tests durchgeführt wurden. Hierzu verwendet man die Kommandozeilenoption `-v` für *verbose*:

```
$ python doctest_example.py -v
Trying:
    quicksort([2, 5, 3, 7, -1])
Expecting:
    [-1, 2, 3, 5, 7]
```

```

ok
Trying:
    quicksort([2.25, -1.5])
Expecting:
    [-1.5, 2.25]
ok
Trying:
    quicksort([2j, 1-3j])
Expecting:
    Traceback (most recent call last):
    ...
    TypeError: no ordering relation is defined for complex numbers
ok
1 items had no tests:
    __main__
1 items passed all tests:
    3 tests in __main__.quicksort
3 tests in 2 items.
3 passed and 0 failed.
Test passed.

```

Der Ausgabe entnimmt man, dass in der Tat die erwarteten drei Tests durchgeführt wurden und zu dem erwarteten Ergebnis geführt haben. Will man diese ausführliche Ausgabe unabhängig von einer Kommandozeilenoption erzwingen, kann man beim Aufruf von `testmod` die Variable `verbose` auf `True` setzen.

Alternativ zu der bisher beschriebenen Vorgehensweise könnte man die Zeilen 20-23 unseres Beispielcodes weglassen und das `doctest`-Modul beim Aufruf des Skripts laden. Will man eine ausführliche Ausgabe erhalten, so hätte der Aufruf die folgende Form:

```
$ python -m doctest -v doctest_example.py
```

Die Einfachheit, mit der Tests in Dokumentationsstring eingebaut und damit zugleich auch an andere Nutzer weitergegeben werden können, sollte dazu ermutigen, sich dieses Verfahrens zu bedienen. Allerdings gibt es bereits in unserem einfachen Beispiel gewisse Punkte, die zu beachten sind. Der erste der drei Tests ist unproblematisch, aber bereits beim zweiten Test ergibt sich aus dem Umstand, dass hier Gleitkommazahlen auftreten, ein potentielles Problem. Aufgrund von Rundungsfehlern kann es nämlich unter Umständen sein, dass die Darstellung der entsprechenden Zahlen in der Ein- und Ausgabe voneinander abweichen und dass dieser Unterschied von der konkreten Rechnerumgebung abhängt. In diesem Falle würde der Test fehlschlagen. Daher wurden die Gleitkommazahlen in unserem Beispiel so gewählt, dass die Binärdarstellung nur wenige Nachkommastellen besitzt, so dass Rundungsfehler ausgeschlossen werden können.

Der dritte Test im obigen Beispiel bezieht sich auf eine Eingabe, die keine Sortierung zulässt und somit zu einer `TypeError`-Ausnahme führt. Die tatsächliche Ausgabe ist in diesem Fall etwas ausführlicher, wobei die Details jedoch irrelevant sind. Daher sind in Zeile 13 im Dokumentationsstring drei Auslassungspunkte, auf Englisch *ellipsis* zu finden, die als Platzhalter für beliebigen Inhalt fungieren. Man könnte nun auf die Idee kommen, die Beschreibung nach dem Doppelpunkt in Zeile 14 ebenfalls durch drei Punkte zu ersetzen. Dies würde jedoch nicht zum Erfolg führen. In diesem Fall müsste man am Ende von Zeile 11 noch einen Kommentar anfügen, der die Auslassungspunkte explizit zulässt.

```

"""
>>> quicksort([2j, 1-3j]) # doctest: +ELLIPSIS
"""

```

Für eine detailliertere Diskussion der verschiedenen Optionen und Direktiven im `doctest`-Modul verweisen wir auf die zugehörige [Dokumentation](#).

- + Das `doctest`-Modul kann auch eingesetzt werden, um Python-Code zu testen, der in Textdokumente eingebettet ist, die unter Verwendung von `reStructuredText` erstellt wurden. Letzteres ist unter anderem bei diesem Vorlesungsskript der Fall.

7.3 Das `unittest`-Modul

Für umfangreichere Testszenarien sind die Möglichkeiten, die das `doctest`-Modul bietet, meistens nicht ausreichend. So hatten wir im vorigen Abschnitt bereits gesehen, dass Tests mit Gleitkommazahlen Schwierigkeiten bereiten können. Auch ist es nicht unbedingt sinnvoll, einen Dokumentationsstring mit einer zu großen Zahl an Tests zu versehen. Ferner kann man sich Testszenarien vorstellen, die eine Vorbereitung und Abschlussarbeiten erfordern. In solchen Fällen bietet es sich an, die Möglichkeiten zu nutzen, die das `unittest`-Modul bietet. Wie schon im vorigen Abschnitt werden wir uns auf die wesentlichen Aspekte konzentrieren und verweisen für Details auf die [Dokumentation des unittest-Moduls](#).

Wir beginnen mit einem Beispiel, das die `quicksort`-Funktion aus dem vorigen Abschnitt testet. Dazu nehmen wir an, dass die Funktion in einem Skript `myquicksort.py` definiert sei. Der folgende Code befindet sich in einem Skript `test_quicksort.py`. Dieses Namenswahl ist sinnvoll, da Testskripten standardmäßig in Dateien gesucht werden, deren Namen mit `test` beginnt. Wir definieren die folgenden vier Tests:

```
from myquicksort import quicksort
from unittest import TestCase

class testQuicksort(TestCase):
    def test_sort_integers(self):
        """test sorting of integers

        """
        list_unsorted = [7, 2, 3, 1]
        list_sorted = [1, 2, 3, 7]
        self.assertEqual(quicksort(list_unsorted),
                         list_sorted)

    def test_equal_elements(self):
        """test whether equal elements are lost

        """
        list_unsorted = [2, 3, 4, -1, 3]
        self.assertEqual(len(quicksort(list_unsorted)),
                         len(list_unsorted))

    def test_sort_floats(self):
        """test sorting of floats

        """
        list_unsorted = [2.13, 3.12, 2.14, 2.12]
        list_sorted = [2.12, 2.13, 2.14, 3.12]
        self.assertEqual(quicksort(list_unsorted),
                         list_sorted)

    def test_sort_complex(self):
        """test sorting failure for complex numbers

        """
        with self.assertRaises(TypeError):
            quicksort([3.5+1j, 2+3.5j])
```

Vier Tests sind hier als Methoden einer Unterklasse der Klasse `unittest.TestCase` definiert und werden bei der Ausführung des Testskripts automatisch abgearbeitet. Jeder Test soll nach Möglichkeit einen unabhängigen Aspekt des zu testenden Skripts überprüfen. So überprüft zum Beispiel der zweite Test, dass bei der Sortierung keine Elemente verloren gehen. Die Überprüfung der Testbedingung erfolgt jeweils mit `assert`-Anweisungen, von denen das `unittest`-Modul eine ganze Reihe für die verschiedensten Zwecke bereitstellt.

Lässt man die Tests laufen, so erhält man die folgende Ausgabe:

```
$ python -m unittest discover
...
```

```
Ran 4 tests in 0.000s
```

```
OK
```

Bei diesem Aufruf wird das `unittest`-Modul geladen und mit dem Schlüsselwort `discover` aufgefordert, selbst nach Testskripten zu suchen. Es findet unsere Datei `test_quicksort.py` und führt die vier darin enthaltenen Test aus. Alternativ hätte man statt `discover` auch einfach den Namen der Testdatei ohne Endung angeben können, also:

```
$ python -m unittest test_quicksort
```

Die Ausgabe zeigt die erfolgreiche Ausführung jedes Tests jeweils durch einen Punkt in der zweiten Zeile an. Das abschließende `OK` weist nochmals darauf hin, dass kein Fehler aufgetreten ist.

Zu Illustration bauen wir nun in unsere `quicksort`-Funktion einen Fehler ein.

```
def quicksort(x):
    if len(x)<2: return x
    return (quicksort([y for y in x[1:] if y<x[0]])
            +x[0:1]
            +quicksort([y for y in x[1:] if x[0]<y]))
```

In der letzten Zeile lassen wir fälschlicherweise nur `y`-Werte zu, die größer als `x[0]` sind. Die Ausführung der Tests resultiert in folgender Ausgabe:

```
F...
=====
FAIL: test_equal_elements (test_quicksort.testQuicksort)
test whether equal elements are lost
-----
Traceback (most recent call last):
  File "test_quicksort.py", line 20, in test_equal_elements
    len(list_unsorted))
AssertionError: 4 != 5
-----
Ran 4 tests in 0.001s
FAILED (failures=1)
```

Die erste Zeile gibt an, dass vier Tests ausgeführt wurden, wobei jedoch nur drei davon, die mit Punkten dargestellt sind, erfolgreich waren. Ein Test schlug fehl und ist daher mit einem `F` gekennzeichnet. Details zu diesem Test sind im Hauptteil der Ausgabe zu finden. Ganz am Ende wird nochmals darauf hingewiesen, dass ein Test fehlschlug.

In diesem Fall kann es auch hilfreich sein, die Möglichkeit zu nutzen, eine zusätzliche Nachricht auszugeben. Wir modifizieren dazu den zweiten Test.

```
def test_equal_elements(self):
    """test whether equal elements are lost

    """
    list_unsorted = [2, 3, 4, -1, 3]
    list_sorted = quicksort(list_unsorted)
    self.assertEqual(len(list_sorted), len(list_unsorted),
                    msg="\n  ursprüngliche Liste: {}".format(list_unsorted) +
                        "\n  sortierte Liste:   {}".format(list_sorted))
```

Damit erhalten wir die folgende Fehlerausgabe:

```
F...
=====
FAIL: test_equal_elements (test_quicksort.testQuicksort)
test whether equal elements are lost
-----
```

```
Traceback (most recent call last):
  File "test_quicksort.py", line 22, in test_equal_elements
    "\n  sortierte Liste:      {}".format(list_sorted))
AssertionError: 4 != 5 :
  ursprüngliche Liste: [2, 3, 4, -1, 3]
  sortierte Liste:     [-1, 2, 3, 4]

-----
Ran 4 tests in 0.001s

FAILED (failures=1)
```

Damit wird deutlich, dass die beiden Listen in der Tat ungleich lang sind, weil ein doppelt vorkommendes Element nicht mehrfach eingesortiert wurde.

Beim Test von Gleitkommazahlen auf Gleichheit oder Ungleichheit ist wegen der Möglichkeit von Rundungsfehlern immer Vorsicht angebracht. Von numerischen Funktionen wird man zudem normalerweise nicht verlangen können, dass das Ergebnis bis zur letzten Stelle korrekt ist. Das `unittest`-Modul stellt aus diesem Grunde die `assertAlmostEqual`- und `assertNotAlmostEqual`-Anweisungen zur Verfügung. Dabei wird standardmäßig die Differenz zwischen den beiden Vergleichswerten auf sieben Nachkommastellen gerundet und mit Null verglichen. Bei Bedarf kann die Zahl der gerundeten Stellen oder eine maximale bzw. minimale Differenz zwischen den Vergleichswerten vorgegeben werden.

Das folgende Beispiel illustriert das Vorgehen bei Tests für Gleitkommazahlen.

```
from unittest import TestCase

def square(x):
    return x*x

class testNumeric(TestCase):
    def test_equal(self):
        xsquare = square(1.3)
        x2 = 1.69
        self.assertEqual(xsquare, x2)

    def test_almost_equal(self):
        xsquare = square(1.3)
        x2 = 1.69
        self.assertAlmostEqual(xsquare, x2)
```

Dabei ergibt sich die folgende Ausgabe:

```
.F
=====
FAIL: test_equal (test_square.testNumeric)
-----
Traceback (most recent call last):
  File "test_square.py", line 10, in test_equal
    self.assertEqual(xsquare, x2)
AssertionError: 1.6900000000000002 != 1.69

-----
Ran 2 tests in 0.000s

FAILED (failures=1)
```

Tatsächlich schlägt der Test auf Gleichheit wegen des Auftretens von Rundungsfehlern fehl, während der Vergleich auf sieben Stellen erfolgreich ist.

Gelegentlich kommt es vor, dass ein Test eine Vorbereitung sowie Nacharbeit erfordert. Dies ist zum Beispiel beim Umgang mit Datenbanken der Fall, wo Tests nicht an Originaldaten durchgeführt werden. Stattdessen müssen zunächst Datentabellen für den Test angelegt und am Ende wieder entfernt werden. In dem folgenden Beispiel schreiben wir Daten in eine temporäre Datei und überprüfen damit eine Funktion zum Einlesen dieser Daten.

```

import os
from unittest import TestCase
from tempfile import NamedTemporaryFile

def convert_to_float(datalist):
    return list(map(float, datalist.strip("\n").split(";")))

def read_floats(filename):
    with open(filename, "r") as file:
        data = list(map(convert_to_float, file.readlines()))
    return data

class testReadData(TestCase):
    def setUp(self):
        """speichere Testdaten in temporärer Datei

        """
        file = NamedTemporaryFile("w", delete=False)
        self.filename = file.name
        self.data = [[1.23, 4.56], [7.89, 0.12]]
        for line in self.data:
            file.write(";" . join(map(str, line)))
            file.write("\n")
        file.close()

    def test_read_floats(self):
        """teste korrektes Einlesen der Gleitkommazahlen

        """
        self.assertEqual(self.data,
                        read_floats(self.filename))

    def tearDown(self):
        """lösche temporäre Datei

        """
        os.remove(self.filename)

```

Zunächst werden die beiden zum Einlesen verwendeten Funktionen definiert, wobei aus dem Test heraus die Funktion `read_floats` aufgerufen wird. In der Testklasse gibt es neben der Methode `test_read_floats`, die die Korrektheit des Einlesens überprüft, noch zwei weitere Methoden. Die Methode `setUp` bereitet den Test vor. In unserem Beispiel wird dort eine temporäre Datei erzeugt, von der im Laufe des Tests Daten gelesen werden. Die Methode `tearDown` wird nach dem Test ausgeführt und dient hier dazu, die temporäre Datei wieder zu entfernen.

Insbesondere wenn man Tests schreibt, bevor die entsprechende Funktionalität implementiert ist, kann es sein, dass Tests fehlschlagen, ohne dass dies als Problem gewertet werden muss. In diesem Fall kann man mit Hilfe von Dekoratoren dafür sorgen, dass der betreffende Test nicht durchgeführt wird (`skip`) oder einen Hinweis auf den erwarteten Fehler erhält (`expectedFailure`). Das folgende Beispiel illustriert den zweiten Fall.

```

from unittest import expectedFailure, TestCase

def square(x):
    """fehlerhafte Implementierung

    """
    return 0.5*x**x

def cube(x):
    """noch nicht implementiert

    """
    pass

```

```
class testNumeric(TestCase):
    def test_square(self):
        xsquare = square(1.3)
        x2 = 1.69
        self.assertAlmostEqual(xsquare, x2)

    @expectedFailure
    def test_cube(self):
        xcube = cube(1.3)
        x3 = 2.197
        self.assertAlmostEqual(xcube, x3)
```

Von den beiden Funktionen `square` und `cube` ist die erste fehlerhaft implementiert und die zweite ist bis jetzt noch überhaupt nicht implementiert. Daher ist zu erwarten, dass der zweite Test fehlschlagen wird. Er ist entsprechend mit dem `expectedFailure`-Dekorator versehen. Lässt man den Test laufen, so erhält man die folgende Ausgabe:

```
xF
=====
FAIL: test_square (square.testNumeric)
-----
Traceback (most recent call last):
  File "test_powers.py", line 19, in test_square
    self.assertAlmostEqual(xsquare, x2)
AssertionError: 0.8450000000000001 != 1.69 within 7 places

-----
Ran 2 tests in 0.001s

FAILED (failures=1, expected failures=1)
```

Hier wird also zwischen dem echten Fehler, der in `test_square` entdeckt wird, und dem erwarteten Fehler in `test_cube` unterschieden. Letzterer ist in der ersten Zeile mit einem x statt einem F markiert.

Auch ohne dass wir alle Möglichkeiten des `unittest`-Moduls besprochen haben, dürfte klar geworden sein, dass diese deutlich über die Möglichkeiten des `doctest`-Moduls hinausgehen. Eine Übersicht über weitere Anwendungsmöglichkeiten des `unittest`-Moduls findet man in der zugehörigen [Dokumentation](#), wo insbesondere auch eine vollständige Liste der verfügbaren `assert`-Anweisungen angegeben ist.

7.4 Testen mit NumPy

Das Programmieren von Tests ist gerade beim numerischen Arbeiten sehr wichtig. Bei der Verwendung von NumPy-Arrays ergibt sich allerdings das Problem, dass man normalerweise nicht für jedes Arrayelement einzeln die Gültigkeit einer Testbedingung überprüfen möchte. Wir wollen daher kurz diskutieren, welche Möglichkeiten man in einem solchen Fall besitzt. Da es in erster Linie auf die `assert`-Anweisung ankommt, können wir hier darauf verzichten, ganze Testfälle zu programmieren.

Die im folgenden Beispiel definierte Matrix hat nur positive Eigenwerte:

```
In [1]: import numpy as np

In [2]: import numpy.linalg as LA

In [3]: a = np.array([[5, 0.5, 0.1], [0.5, 4, -0.1], [0.1, -0.1, 3]])

In [4]: a
Out[4]:
array([[ 5. ,  0.5,  0.1],
       [ 0.5,  4. , -0.1],
       [ 0.1, -0.1,  3.]])
```

```
In [5]: LA.eigvalsh(a)
Out[5]: array([ 2.97774394,  3.81381575,  5.20844031])

In [6]: np.all(LA.eigvalsh(a)>0)
Out[6]: True
```

Dies lässt sich in Ausgabe 5 direkt verifizieren. Für einen automatisierten Test ist es günstig, die Positivitätsbedingung für jedes Element auszuwerten und zu überprüfen, ob sie für alle Elemente erfüllt ist. Dies geschieht in Eingabe 6 mit Hilfe der `all`-Funktion, die man in einem Test in der `assert`-Anweisung verwenden würde.

Wir hatten im letzten Kapitel darauf hingewiesen, dass man bei Tests von Floats die Möglichkeit von Rundungsfehlern bedenken muss. Dies gilt natürlich genauso, wenn man ganze Arrays von Floats erzeugt und testen will. In diesem Fall ist es sinnvoll, auf die Unterstützung zurückzugreifen, die NumPy durch sein `testing`-Modul¹ gibt. Wir demonstrieren dies an einem kleinen Beispiel, das die Berechnung des Sinus für einige Argumente testet.

```
In [7]: import math

In [8]: a = np.linspace(0, math.pi, 5)

In [9]: a
Out[9]: array([ 0.           ,  0.78539816,  1.57079633,  2.35619449,  3.14159265])

In [10]: result = np.sin(a)

In [11]: correct = np.array([0, math.sqrt(0.5), 1, math.sqrt(0.5), 0])

In [12]: np.testing.assert_array_almost_equal(result, correct, 7)
```

In Eingabe 10 wird das zu testende Resultat berechnet, während Eingabe 11 die auf den analytischen Ausdrücken basierende Erwartung an das Ergebnis bestimmt. Mit der `assert_array_almost_equal`-Funktion erfolgt dann in Eingabe 12 der Vergleich. Dabei haben wir die Genauigkeitsanforderung auf 7 Dezimalstellen festgelegt. Die Tatsache, dass es zu keiner `AssertionError`-Ausnahme kommt, bedeutet, dass alle Arrayelemente im Rahmen der geforderten Genauigkeit übereinstimmen.

¹ Eine detaillierte Liste der verschiedenen Funktionen findet man in der Dokumentation zum Test Support.

Laufzeituntersuchungen

8.1 Allgemeine Vorbemerkungen

Python wird immer wieder vorgeworfen, dass es im Vergleich zu einer Reihe anderer Programmiersprachen langsam sei. Häufig stellt dies kein echtes Problem dar, aber bei Bedarf gibt es zur Optimierung von Python-Skripten eine Reihe von Möglichkeiten. Die konsequente Verwendung von NumPy kann bei dazu geeigneten Anwendungen einen erheblichen Geschwindigkeitsvorteil bringen. Unter Umständen kann es auch sinnvoll sein, besonders zeitkritische Programmteile in C zu implementieren. In diesem Fall bietet sich die Verwendung des bereits in einem früheren Kapitel erwähnten Cython an. Mit dessen Hilfe ist es auch sehr einfach möglich, die Rechenzeit durch das Festlegen des Datentyps von Variablen zu reduzieren. Alternativ bietet sich auch die »just in time«-Kompilierung zum Beispiel mit PyPy¹ oder Numba² an, die die Programmausführung beschleunigen kann.

Im Einzelfall sollte man zunächst überlegen, ob das Laufzeitproblem wirklich schwerwiegend ist oder ob man für die Optimierung letztlich mehr Zeit investieren muss als man gewinnt. Es lohnt sich dabei, auf den Altmeister Donald E. Knuth zu hören, der schon vor mehr als 40 Jahren schrieb:

There is no doubt that the grail of efficiency leads to abuse. Programmers waste enormous amounts of time thinking about, or worrying about, the speed of noncritical parts of their programs, and these attempts at efficiency actually have a strong negative impact when debugging and maintenance are considered. We *should* forget about small efficiencies, say about 97 % of the time: premature optimization is the root of all evil.

Yet we should not pass up our opportunities in that critical 3 %. A good programmer will not be lulled into complacency by such reasoning, he will be wise to look carefully at the critical code; but only *after* that code has been identified.³

Bevor man also überhaupt mit der Optimierung eines Programms beginnt, sollte man zunächst immer erst feststellen, wo das Programm die meiste Zeit verbringt. Es lohnt sich nicht, Zeit in die Optimierung von Programmteilen zu investieren, deren Laufzeit im Vergleich zur gesamten Laufzeit unerheblich ist. Nach jeder Optimierung wird man erneut den laufzeitkritischsten Programmteil identifizieren, um so in eventuell mehreren Schritten zu einer hoffentlich akzeptablen Laufzeit zu kommen.

Vor der Optimierung eines Programms sollte man immer bedenken, dass sich dabei Fehler einschleichen können. Es nützt alles nicht, wenn man das Programm geändert hat, so dass es viel schneller läuft, dann aber nicht mehr das tut was es eigentlich tun soll. Daher sollte man mindestens eine funktionstüchtige Version des Programms aufbewahren, z.B. eine Kopie, die eine Endung `.bak` erhält. Wesentlich besser ist es natürlich, ein Versionskontrollsystem zu verwenden, beispielsweise Subversion oder Git, das wir im Kapitel *Versionskontrolle mit Git* beschrieben haben. Außerdem ist es sinnvoll, Tests zu programmieren, die es erlauben, die neue Programmversion auf Korrektheit zu überprüfen. Techniken hierfür hatten wir im Kapitel *Testen von Programmen* besprochen.

Wenden wir uns nun einigen wichtigen Möglichkeiten zu, die Laufzeit von Python-Skripten zu analysieren.

¹ Weitere Informationen zu diesem Projekt findet man unter www.pypy.org.

² Weitere Informationen zu diesem Projekt findet man unter numba.pydata.org.

³ D. E. Knuth, Computing Surveys **6**, 261 (1974). Das angegebene Zitat befindet sich auf Seite 268.

8.2 Das Modul `timeit`

Um die Laufzeit von Einzelrtern oder kleineren Codeteilen zu testen, kann man das Python-Modul `timeit` heranziehen. Dies ist zum Beispiel dann nützlich, wenn man sich ein Bild davon machen möchte, welche Codevariante die schnellere sein wird. Die wohl einfachste Möglichkeit, `timeit` einzusetzen, besteht in der Benutzung der IPython-Shell.

Einen Laufzeitvergleich zwischen zwei Arten eine Zahl zu quadrieren, kann man in IPython folgendermaßen vornehmen:

```
In [1]: n = 5
```

```
In [2]: %timeit n*n
10000000 loops, best of 3: 166 ns per loop
```

```
In [3]: %timeit n**2
1000000 loops, best of 3: 252 ns per loop
```

Das Prozentzeichen wird `timeit` vorangestellt, um es als so genannten »magischen Befehl« zu kennzeichnen, also einen Befehl der IPython-Shell und nicht ein Python-Kommando. Da `timeit` in diesem Fall nicht als Python-Kommando interpretiert werden kann, könnte man sogar auf das Prozentzeichen verzichten. Wie im obigen Beispiel zu sehen ist, wird der Befehl, dessen Laufzeit bestimmt werden soll, mehrfach ausgeführt, wobei die Zahl der Wiederholungen von der Laufzeit abhängt. Es zeigt sich, dass die Quadrierung durch Multiplikation mit 166 Nanosekunden schneller ausgeführt wird als die Quadrierung durch Potenzierung, die 252 Nanosekunden benötigt. Natürlich hängt die Laufzeit vom verwendeten Prozessor ab und ist auch nicht unbedingt auf die letzte Stelle genau reproduzierbar.

Um die Laufzeit von mehrzeiligem Code zu untersuchen, wendet man den magischen `timeit`-Befehl auf eine ganze Zelle an, indem man ein zweites Prozentzeichen voranstellt. Dies ist in folgendem Beispiel gezeigt.

```
In [4]: %%timeit
....: summe = 0
....: for n in range(1000):
....:     summe = summe+n
....:
10000 loops, best of 3: 104 us per loop
In [5]: %timeit sum(range(1000))
10000 loops, best of 3: 22.2 us per loop
```

Im ersten Fall verwenden wir `%%timeit` mit zwei Prozentzeichen, damit sich dieser Befehl auf die nächsten drei Zeilen und nicht nur die nächste Zeile bezieht. Im zweiten Fall genügt dagegen wiederum `%timeit`. In diesem Beispiel liegt die Ausführungszeit im Mikrosekundenbereich, wobei die explizite Schleife fast fünfmal mehr Zeit benötigt.

Auch wenn man mit der IPython-Shell sehr bequem die Laufzeit von Codestücken untersuchen kann, mag es gelegentlich notwendig sein, das `timeit`-Modul direkt in einem Python-Skript einzusetzen. Daher wollen wir uns nun die Anwendung dieses Moduls ansehen.

Das folgende Beispiel untersucht den Laufzeitunterschied bei der Berechnung des Sinus mit Hilfe des `math`-Moduls und mit NumPy in Abhängigkeit von der Anzahl der Funktionsargumente.

```
1 import numpy as np
2 import math
3 import timeit
4 import matplotlib.pyplot as plt
5
6 def f_numpy(nmax):
7     x = np.linspace(0, np.pi, nmax)
8     result = np.sin(x)
9
10 def f_math(nmax):
11     dx = math.pi/(nmax-1)
12     result = [math.sin(n*dx) for n in range(nmax)]
```

```

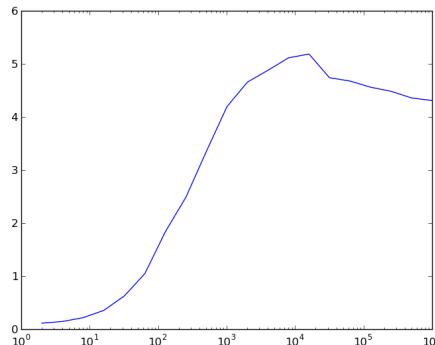
13
14 x = []
15 y = []
16 for n in np.logspace(0.31, 6, 20):
17     nint = int(n)
18     t_numpy = timeit.timeit("f_numpy({})".format(nint),
19                             "from __main__ import f_numpy",
20                             number=20)
21     t_math = timeit.timeit("f_math({})".format(nint),
22                            "from __main__ import f_math",
23                            number=20)
24     x.append(nint)
25     y.append(t_math/t_numpy)
26 plt.plot(x, y)
27 plt.xscale("log")
28 plt.show()

```

Zunächst definieren wir in den Zeilen 6 bis 12 zwei Funktionen, die jeweils den Sinus für eine vorgegebene Anzahl von Argumenten berechnen, einmal mit Hilfe von NumPy und einmal mit Hilfe des `math`-Moduls. In den Zeilen 16 bis 25 wird für verschiedene Argumentanzahlen die Laufzeit für die beiden Varianten bestimmt. Sehen wir uns einen der Aufrufe zur Laufzeitbestimmung genauer an, konkret den Code in den Zeilen 18 bis 20. Nachdem wir in Zeile 3 das `timeit`-Modul geladen hatten, können wir in Zeile 18 die `timeit`-Funktion aus diesem Modul aufrufen. Das erste Argument enthält den auszuführenden Code, in unserem Fall also einfach den Funktionsaufruf von `f_numpy`.

Nachdem der Code als String zu übergeben ist, können wir problemlos in der gezeigten Weise ein Argument oder auch mehrere übergeben. Da die von `timeit` aufgerufenen Funktion keinen Zugriff auf den Namensraum des umgebenden Skripts besitzt, würde es nicht funktionieren, das Argument einfach als `nint` in dem String unterzubringen. Tatsächlich ist nicht einmal die Funktion `f_numpy` bekannt. Der `timeit`-Funktion wird daher in Zeile 19 explizit mitgeteilt, das zunächst aus unserem Hauptskript, auf das mit `__main__` Bezug genommen wird, `f_numpy` zu importieren ist. In Zeile 20 verlangen wir schließlich noch, dass zwanzig Funktionsläufe durchgeführt werden sollen, um eine gemittelte Laufzeit berechnen zu können.

Wie die folgende Abbildung zeigt, bietet NumPy für sehr kleine Argumentanzahlen keinen Geschwindigkeitsvorteil, ganz im Gegenteil. Dies hängt damit zusammen, dass im Zusammenhang mit der Verwendung von Arrays einiges an Zusatzarbeit anfällt. Bei mehr als etwa 100 Argumenten erlaubt NumPy in unserem Fall jedoch eine schnellere Berechnung des Sinus. Der Geschwindigkeitsvorteil kann auf der hier verwendeten Hardware immerhin einen Faktor 4 bis 5 betragen.



Das nächste Beispiel bietet bezüglich des `timeit`-Moduls nichts Neues. Es soll vielmehr zeigen, dass es auch jenseits von NumPy noch Optimierungsmöglichkeiten gibt. Dies hängt damit zusammen, dass NumPy beispielsweise beim Berechnen von Polynomen temporäre Arrays anlegt, was man bei einer genaueren Analyse des Codes vermeiden könnte. Damit wird die Laufzeit also unnötig lang. Sofern man es mit großen Arrays zu tun hat, kann das Modul `numexpr` Vorteile bieten. Es bekommt den auszuwertenden Ausdruck als String übergeben und analysiert diesen zunächst, um eine effizientere Auswertung zu ermöglichen.

```

import numpy as np
import numexpr as ne

```

```

import timeit
import matplotlib.pyplot as plt

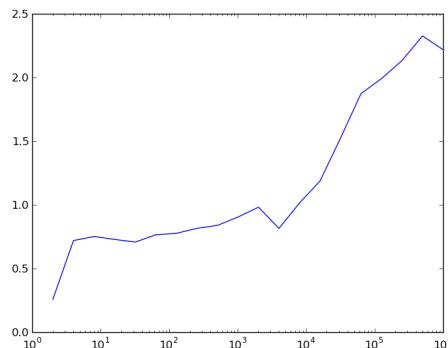
def f_numpy(nmax):
    x = np.linspace(0, 1, nmax)
    result = ((5*x-2)*x+1)*x-7

def f_numexpr(nmax):
    x = np.linspace(0, 1, nmax)
    result = ne.evaluate("5*x**3-2*x**2+x-7")

x = []
y = []
for n in np.logspace(0.31, 6, 20):
    nint = int(n)
    t_numpy = timeit.timeit("f_numpy({})".format(nint),
                            "from __main__ import f_numpy",
                            number=20)
    t_numexpr = timeit.timeit("f_numexpr({})".format(nint),
                             "from __main__ import f_numexpr",
                             number=20)
    x.append(nint)
    y.append(t_numpy/t_numexpr)
plt.plot(x, y)
plt.xscale("log")
plt.show()

```

Die folgende Abbildung zeigt, dass man auf diese Weise unter Umständen die Laufzeit halbieren kann. Zu beachten ist allerdings, dass das Polynom in `f_numpy` bereits geschickt geschrieben wurde, um die aufwändige Berechnung von Potenzen zu vermeiden. Sonst könnte man auf der hier verwendeten Hardware sogar eine Beschleunigung von etwa einem Faktor 4 erhalten.



8.3 Das Modul cProfile

Das `timeit`-Modul, das wir gerade beschrieben haben, ist sehr gut geeignet, um die Laufzeit eines bestimmten Codesegments zu untersuchen. Bei der Optimierung eines Programms interessiert man sich jedoch vor allem dafür, welche Teile des Programms wieviel Zeit benötigen. Dann können die rechenintensiven Codeteile identifiziert und gezielt optimiert werden. Man kann hier bis auf einzelne Codezeilen heruntergehen, wenn man zum Beispiel `line_profiler` benutzt⁴.

Häufig ist dies jedoch nicht nötig, und es genügt festzustellen, wieviel Zeit in den einzelnen Funktionen oder Methoden verbracht wurde. Dies funktioniert dann besonders gut, wenn man den Code gut modularisiert, was ja auch im Hinblick auf das Testen von Vorteil ist, wie wir im Kapitel *Testen von Programmen* betont hatten. Im

⁴ Für eine genauere Beschreibung siehe `line_profiler` and `kernprof`.

Folgenden werden wir beschreiben, wie man mit Hilfe des Moduls `cProfile` feststellen kann, wieviel Zeit in welchen Funktionen während des Programmlaufs verbracht wird.

Als zu analysierendes Beispielprogramm benutzen wir im Folgenden `pystone.py`⁵, ein Programm zur Geschwindigkeitsbeurteilung von Hardware. Ob und in welchem Umfang der eigentliche Zweck des Programms erfüllt wird, ist hier nicht von Interesse. Es geht vielmehr darum herauszufinden, wieviel Rechenzeit in den einzelnen Funktionen, die sich auch untereinander aufrufen, benötigt wird. Um die Rechenzeiten etwas deutlicher zu machen, haben wir die Zahl der Schleifen in `pystone.py` um einen Faktor 10 hochgesetzt⁶.

Von den verschiedenen Varianten, `cProfile` zu benutzen, wählen wir hier eine, bei der wir das zu untersuchende Programm nicht modifizieren müssen. Dazu rufen wir das Modul mit geeigneten Argumenten auf:

```
$ python -m cProfile -o pystone.prof pystone.py
```

Hierbei wird das Programm `pystone.py` unter der Kontrolle des `cProfile`-Moduls ausgeführt. Die Option `-o` legt fest, dass die Ergebnisse in der Datei `pystone.prof` gespeichert werden sollen. Dabei handelt es sich um eine Binärdatei, die mit Hilfe des `pstats`-Moduls analysiert werden kann. Dazu geht man folgendermaßen vor:

```
In [1]: import pstats

In [2]: p = pstats.Stats("pystone.prof")

In [3]: p.sort_stats("time").print_stats(10)

Sun Jan 18 19:46:17 2015      pystone.prof

    10500020 function calls in 23.829 seconds

Ordered by: internal time
List reduced from 29 to 10 due to restriction <10>

  ncalls  tottime  percall  cumtime  percall   filename:lineno(function)
        1    7.358    7.358    23.829   23.829  pystone.py:86(Proc0)
  500000    3.602    0.000     8.764    0.000  pystone.py:144(Proc1)
  500000    2.644    0.000     2.644    0.000  pystone.py:219(Proc8)
  500000    1.498    0.000     2.404    0.000  pystone.py:60(copy)
  500000    1.336    0.000     1.674    0.000  pystone.py:240(Func2)
  500000    0.959    0.000     1.271    0.000  pystone.py:171(Proc3)
 1500000    0.950    0.000     0.950    0.000  pystone.py:232(Func1)
  500002    0.906    0.000     0.906    0.000  pystone.py:52(__init__)
 1500000    0.894    0.000     0.894    0.000  pystone.py:214(Proc7)
  500000    0.893    0.000     1.208    0.000  pystone.py:195(Proc6)
```

Nachdem in Eingabe 1 das `pstats`-Modul geladen wurde, wird in Eingabe 2 die zuvor erzeugte binäre Datei `pystone.prof` eingelesen. Man erhält so eine `pstats.Stats`-Instanz, die nun analysiert werden kann. In den meisten Fällen wird man die Daten nach der benötigten Zeit sortieren und auch nur die obersten Daten ausgeben wollen, da die Gesamtliste unter Umständen recht lang sein kann. In Eingabe 3 sortieren wir mit der `sort_stats`-Methode nach der Zeit, die in der jeweiligen Funktion verbracht wurde. Anschließend wird mit der `print_stats`-Methode dafür gesorgt, dass nur die ersten zehn Zeilen ausgegeben werden.

Das Schlüsselwort "time" in der `sort_stats`-Methode verlangt eine Sortierung nach der totalen Zeit, die in der jeweiligen Funktion verbracht wurde. Nun ruft aber beispielsweise die Funktion `Proc0` eine Reihe anderer Funktionen auf. Mit totaler Zeit ist dann die Zeit gemeint, die tatsächlich in `Proc0` verbracht wurde. Wird zwischendurch Zeit in einer anderen Funktion verbracht, so wird gewissermaßen die Uhr für `Proc0` angehalten.

Nicht immer ist diese Art der Zeitmessung erwünscht. Daher gibt es auch die Möglichkeit, mit dem Schlüsselwort "cumtime" die kumulative Zeit zu betrachten. Dies ist die Zeit, die in einer Funktion vom Eintreten bis zum Verlassen verbracht wird. Die für `Proc0` angegebenen 23.829 Sekunden in der folgenden Übersicht enthalten daher auch die bei `Proc1` angegebenen 8.764 Sekunden, da `Proc1` von `Proc0` und sonst von keiner weiteren Funktion aufgerufen wird.

⁵ `pystone.py` befindet sich im Verzeichnis `Lib/test` des Python-Quellcodes.

⁶ Hierzu wurde die Variable `LOOPS` zu Beginn des Skripts auf den Wert 500000 gesetzt.

```
In [4]: p.sort_stats("cumtime").print_stats(10)
Sun Jan 18 19:46:17 2015      pystone.prof

    105000020 function calls in 23.829 seconds

Ordered by: cumulative time
List reduced from 29 to 10 due to restriction <10>

ncalls  tottime  percall  cumtime  percall  filename:lineno(function)
      1    0.000    0.000   23.829   23.829  {built-in method exec}
      1    0.000    0.000   23.829   23.829  pystone.py:40(<module>)
      1    0.000    0.000   23.829   23.829  pystone.py:67(main)
      1    0.000    0.000   23.829   23.829  pystone.py:74(pystones)
      1    7.358    7.358   23.829   23.829  pystone.py:86(Proc0)
  500000   3.602    0.000    8.764    0.000  pystone.py:144(Proc1)
  500000   2.644    0.000    2.644    0.000  pystone.py:219(Proc8)
  500000   1.498    0.000    2.404    0.000  pystone.py:60(copy)
  500000   1.336    0.000    1.674    0.000  pystone.py:240(Func2)
  500000    0.959    0.000    1.271    0.000  pystone.py:171(Proc3)
```

Die Ausgabe zeigt auch, dass Funktionen, in denen je Aufruf (Spalte percall) nur sehr wenig Zeit verbracht wird, relevant sein können, wenn die Zahl der Aufrufe (Spalte ncalls) entsprechend groß wird. Es empfiehlt sich, für die Funktionen, die für die Rechenzeit besonders relevant ist, die Zahl der Aufrufe zu überprüfen. Dabei stellt man gelegentlich fest, dass eine Funktion scheinbar unerklärliech oft aufgerufen wird, beispielsweise weil sie unnötigerweise in einer Schleife statt außerhalb der Schleife aufgerufen wird.

Mit den beschriebenen Ausgaben lässt sich nun feststellen, in welchen Teilen des Programms der größte Anteil der Rechenzeit verstreicht. Man kann sich somit bei der Optimierung des Programms auf diese Teile konzentrieren. Dabei kann es natürlich vorkommen, dass nach einer Optimierung andere Programmteile in den Fokus rücken. Es kann aber auch sein, dass man feststellen muss, dass die meiste Rechenzeit in einem Programmteil benötigt wird, der sich nicht mehr optimieren lässt. Dann muss man sich die Frage stellen, ob es sinnvoll ist, die Optimierungsbemühungen überhaupt fortzusetzen, da eine Optimierung der anderen Programmteile kaum eine Auswirkung auf die Gesamtrechenzeit haben wird. Um die Situation einschätzen zu können, sind Laufzeitanalysen, wie wir sie hier vorgestellt haben, praktisch unerlässlich.