

Anleitung für das Kommandozeilen-Programm XtremA

B. Sc. Felix Krickl

17. Oktober 2021

Inhaltsverzeichnis

1	Disclaimer	2
2	Anwendungsbereich und Funktionalität	7
3	Installation und Aufrufen	8
3.1	Vor- und Nachteile der Nutzungsvarianten	8
3.2	Direkte Ansprechen des .py-files	8
3.3	Kompilierung zu einem binary file	8
4	Format	10
4.1	Eingabedatei	10
4.2	Ausgabedatei	10
5	Syntax	10
5.1	Allgemeines	10
5.2	Übersicht aller Argumente und Erläuterungen	10
6	Anwendungsbeispiele	12
6.1	Minimalbeispiel	12
6.2	Komplizierteres Beispiel	16

1 Disclaimer

GNU GENERAL PUBLIC LICENSE

Version 2, June 1991 Copyright (C) 1989, 1991 Free Software Foundation, Inc. 51 Franklin Street, Fifth Floor, Boston, MA 02110-1301, USA

Everyone is permitted to copy and distribute verbatim copies of this license document, but changing it is not allowed.

Preamble The licenses for most software are designed to take away your freedom to share and change it. By contrast, the GNU General Public License is intended to guarantee your freedom to share and change free software—to make sure the software is free for all its users. This General Public License applies to most of the Free Software Foundation’s software and to any other program whose authors commit to using it. (Some other Free Software Foundation software is covered by the GNU Lesser General Public License instead.) You can apply it to your programs, too.

When we speak of free software, we are referring to freedom, not price. Our General Public Licenses are designed to make sure that you have the freedom to distribute copies of free software (and charge for this service if you wish), that you receive source code or can get it if you want it, that you can change the software or use pieces of it in new free programs; and that you know you can do these things.

To protect your rights, we need to make restrictions that forbid anyone to deny you these rights or to ask you to surrender the rights. These restrictions translate to certain responsibilities for you if you distribute copies of the software, or if you modify it.

For example, if you distribute copies of such a program, whether gratis or for a fee, you must give the recipients all the rights that you have. You must make sure that they, too, receive or can get the source code. And you must show them these terms so they know their rights.

We protect your rights with two steps: (1) copyright the software, and (2) offer you this license which gives you legal permission to copy, distribute and/or modify the software.

Also, for each author’s protection and ours, we want to make certain that everyone understands that there is no warranty for this free software. If the software is modified by someone else and passed on, we want its recipients to know that what they have is not the original, so that any problems introduced by others will not reflect on the original authors’ reputations.

Finally, any free program is threatened constantly by software patents. We wish to avoid the danger that redistributors of a free program will individually obtain patent licenses, in effect making the program proprietary. To prevent this, we have made it clear that any patent must be licensed for everyone’s free use or not licensed at all.

The precise terms and conditions for copying, distribution and modification follow.

TERMS AND CONDITIONS FOR COPYING, DISTRIBUTION AND MODIFICATION

1. This License applies to any program or other work which contains a notice placed by the copyright holder saying it may be distributed under the terms of this General Public License. The "Program", below, refers to any such program or work, and a "work based on the Program" means either the Program or any derivative work under copyright law: that is to say, a work containing the Program or a portion of it, either verbatim or with modifications and/or translated into another language. (Hereinafter, translation is included without limitation in the term "modification".) Each licensee is addressed as "you".

Activities other than copying, distribution and modification are not covered by this License; they are outside its scope. The act of running the Program is not restricted, and the output from the Program is covered only if its contents constitute a work based on the Program (independent of having been made by running the Program). Whether that is true depends on what the Program does.

2. You may copy and distribute verbatim copies of the Program's source code as you receive it, in any medium, provided that you conspicuously and appropriately publish on each copy an appropriate copyright notice and disclaimer of warranty; keep intact all the notices that refer to this License and to the absence of any warranty; and give any other recipients of the Program a copy of this License along with the Program.

You may charge a fee for the physical act of transferring a copy, and you may at your option offer warranty protection in exchange for a fee.

3. You may modify your copy or copies of the Program or any portion of it, thus forming a work based on the Program, and copy and distribute such modifications or work under the terms of Section 1 above, provided that you also meet all of these conditions:
 - (a) You must cause the modified files to carry prominent notices stating that you changed the files and the date of any change.
 - (b) You must cause any work that you distribute or publish, that in whole or in part contains or is derived from the Program or any part thereof, to be licensed as a whole at no charge to all third parties under the terms of this License.
 - (c) If the modified program normally reads commands interactively when run, you must cause it, when started running for such interactive use in the most ordinary way, to print or display an announcement including an appropriate copyright notice and a notice that there is no warranty (or else, saying that you provide a warranty) and that users may redistribute the program under these conditions, and telling the user how to view a copy of this License. (Exception: if the Program itself is interactive but does not normally print such an announcement, your work based on the Program is not required to print an announcement.)

These requirements apply to the modified work as a whole. If identifiable sections of that work are not derived from the Program, and can be reasonably considered independent and separate works in themselves, then this License, and its terms, do not apply to those sections when you distribute them as separate works. But when you distribute the same

sections as part of a whole which is a work based on the Program, the distribution of the whole must be on the terms of this License, whose permissions for other licensees extend to the entire whole, and thus to each and every part regardless of who wrote it.

Thus, it is not the intent of this section to claim rights or contest your rights to work written entirely by you; rather, the intent is to exercise the right to control the distribution of derivative or collective works based on the Program.

In addition, mere aggregation of another work not based on the Program with the Program (or with a work based on the Program) on a volume of a storage or distribution medium does not bring the other work under the scope of this License.

4. You may copy and distribute the Program (or a work based on it, under Section 2) in object code or executable form under the terms of Sections 1 and 2 above provided that you also do one of the following:
 - (a) Accompany it with the complete corresponding machine-readable source code, which must be distributed under the terms of Sections 1 and 2 above on a medium customarily used for software interchange; or,
 - (b) Accompany it with a written offer, valid for at least three years, to give any third party, for a charge no more than your cost of physically performing source distribution, a complete machine-readable copy of the corresponding source code, to be distributed under the terms of Sections 1 and 2 above on a medium customarily used for software interchange; or,
 - (c) Accompany it with the information you received as to the offer to distribute corresponding source code. (This alternative is allowed only for noncommercial distribution and only if you received the program in object code or executable form with such an offer, in accord with Subsection b above.)

The source code for a work means the preferred form of the work for making modifications to it. For an executable work, complete source code means all the source code for all modules it contains, plus any associated interface definition files, plus the scripts used to control compilation and installation of the executable. However, as a special exception, the source code distributed need not include anything that is normally distributed (in either source or binary form) with the major components (compiler, kernel, and so on) of the operating system on which the executable runs, unless that component itself accompanies the executable.

If distribution of executable or object code is made by offering access to copy from a designated place, then offering equivalent access to copy the source code from the same place counts as distribution of the source code, even though third parties are not compelled to copy the source along with the object code.

5. You may not copy, modify, sublicense, or distribute the Program except as expressly provided under this License. Any attempt otherwise to copy, modify, sublicense or distribute the Program is void, and will automatically terminate your rights under this License. However, parties who have received copies, or rights, from you under this License will not have their licenses terminated so long as such parties remain in full compliance.

6. You are not required to accept this License, since you have not signed it. However, nothing else grants you permission to modify or distribute the Program or its derivative works. These actions are prohibited by law if you do not accept this License. Therefore, by modifying or distributing the Program (or any work based on the Program), you indicate your acceptance of this License to do so, and all its terms and conditions for copying, distributing or modifying the Program or works based on it.
7. Each time you redistribute the Program (or any work based on the Program), the recipient automatically receives a license from the original licensor to copy, distribute or modify the Program subject to these terms and conditions. You may not impose any further restrictions on the recipients' exercise of the rights granted herein. You are not responsible for enforcing compliance by third parties to this License.
8. If, as a consequence of a court judgment or allegation of patent infringement or for any other reason (not limited to patent issues), conditions are imposed on you (whether by court order, agreement or otherwise) that contradict the conditions of this License, they do not excuse you from the conditions of this License. If you cannot distribute so as to satisfy simultaneously your obligations under this License and any other pertinent obligations, then as a consequence you may not distribute the Program at all. For example, if a patent license would not permit royalty-free redistribution of the Program by all those who receive copies directly or indirectly through you, then the only way you could satisfy both it and this License would be to refrain entirely from distribution of the Program.

If any portion of this section is held invalid or unenforceable under any particular circumstance, the balance of the section is intended to apply and the section as a whole is intended to apply in other circumstances.

It is not the purpose of this section to induce you to infringe any patents or other property right claims or to contest validity of any such claims; this section has the sole purpose of protecting the integrity of the free software distribution system, which is implemented by public license practices. Many people have made generous contributions to the wide range of software distributed through that system in reliance on consistent application of that system; it is up to the author/donor to decide if he or she is willing to distribute software through any other system and a licensee cannot impose that choice.

This section is intended to make thoroughly clear what is believed to be a consequence of the rest of this License.

9. If the distribution and/or use of the Program is restricted in certain countries either by patents or by copyrighted interfaces, the original copyright holder who places the Program under this License may add an explicit geographical distribution limitation excluding those countries, so that distribution is permitted only in or among countries not thus excluded. In such case, this License incorporates the limitation as if written in the body of this License.
10. The Free Software Foundation may publish revised and/or new versions of the General Public License from time to time. Such new versions will be similar in spirit to the present version, but may differ in detail to address new problems or concerns.

Each version is given a distinguishing version number. If the Program specifies a version number of this License which applies to it and "any later version", you have the option of following the terms and conditions either of that version or of any later version published by the Free Software Foundation. If the Program does not specify a version number of this License, you may choose any version ever published by the Free Software Foundation.

11. If you wish to incorporate parts of the Program into other free programs whose distribution conditions are different, write to the author to ask for permission. For software which is copyrighted by the Free Software Foundation, write to the Free Software Foundation; we sometimes make exceptions for this. Our decision will be guided by the two goals of preserving the free status of all derivatives of our free software and of promoting the sharing and reuse of software generally.

NO WARRANTY

12. BECAUSE THE PROGRAM IS LICENSED FREE OF CHARGE, THERE IS NO WARRANTY FOR THE PROGRAM, TO THE EXTENT PERMITTED BY APPLICABLE LAW. EXCEPT WHEN OTHERWISE STATED IN WRITING THE COPYRIGHT HOLDERS AND/OR OTHER PARTIES PROVIDE THE PROGRAM "AS IS" WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EITHER EXPRESSED OR IMPLIED, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. THE ENTIRE RISK AS TO THE QUALITY AND PERFORMANCE OF THE PROGRAM IS WITH YOU. SHOULD THE PROGRAM PROVE DEFECTIVE, YOU ASSUME THE COST OF ALL NECESSARY SERVICING, REPAIR OR CORRECTION.
13. IN NO EVENT UNLESS REQUIRED BY APPLICABLE LAW OR AGREED TO IN WRITING WILL ANY COPYRIGHT HOLDER, OR ANY OTHER PARTY WHO MAY MODIFY AND/OR REDISTRIBUTE THE PROGRAM AS PERMITTED ABOVE, BE LIABLE TO YOU FOR DAMAGES, INCLUDING ANY GENERAL, SPECIAL, INCIDENTAL OR CONSEQUENTIAL DAMAGES ARISING OUT OF THE USE OR INABILITY TO USE THE PROGRAM (INCLUDING BUT NOT LIMITED TO LOSS OF DATA OR DATA BEING RENDERED INACCURATE OR LOSSES SUSTAINED BY YOU OR THIRD PARTIES OR A FAILURE OF THE PROGRAM TO OPERATE WITH ANY OTHER PROGRAMS), EVEN IF SUCH HOLDER OR OTHER PARTY HAS BEEN ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES.

END OF TERMS AND CONDITIONS

2 Anwendungsbereich und Funktionalität

XtremA ist ein Kommandozeilenprogramm zur Bestimmung von lokalen Extremstellen in einem csv-Datensatz. Dies schließt sowohl Minima, Maxima, als auch Wendestellen ein. Prinzipiell lässt sich das Programm für jeden Datensatz anwenden, der mindestens x,y-Wertepaare enthält.

Die Erkennung der Extremstellen funktioniert über simple numerische Differentiation des Eingabedatensatzes. Nach dem notwendigen und hinreichenden Kriterium wird entschieden, um welche Art von Extremstelle es sich handelt. Dieser Ansatz ist natürlich sehr empfindlich und wird bei verrauschten Datensätzen zur Erkennung zahlreicher Extremstellen im Rauschen führen. Für viele Anwendungen genügt dieser Ansatz aber bereits. In jedem Fall sollte man die Ausgabe sichten und prüfen bevor man damit weiterarbeitet. In zukünftigen Versionen soll, wenn möglich, das Prinzip der Prominenz von Extremstellen implementiert werden, um die Empfindlichkeit der Erkennung kontrollieren zu können.

Die Nützlichkeit insbesondere der Wendestellen-Erkennung wird maßgeblich durch die Auflösung im Datensatz bestimmt. Bei geringer Auflösung um die Extremstellen herum werden mitunter auch Minima und Maxima als Wendepunkt erkannt. Für Messkurven geringer Komplexität und hoher Auflösung ist die Erkennung aber gut.

Hauptaugenmerk sind bei diesem Programm jedoch tatsächlich nur die Minima und Maxima. Besonders empfehlenswert ist es bei der Analyse von Spektrendaten wie IR-Spektren. Hier gilt es, aus einem relative langen Datensatz eine Reihe von lokalen Extremstellen auszulesen, was mit gängiger Tabellenkalkulation machbar ist, aber mit **XtremA** schneller geht.

Die Ausgabe des Programms ist wiederum ein csv-Datensatz, in dem die x,y-Wertepaare wiedergegeben werden und in zusätzlichen Spalten die gewählten Extremstellen-Arten (Eine Spalte pro Extremstellenart). Die Extremstellen werden dabei dargestellt durch den y-Wert des Datenpunkts, an dem sie erkannt wurden. Dieser y-Wert erscheint dann auch in der Zeile, in der das entsprechende Wertepaar steht. Bei den Zeilen, in denen keine Extremstelle erkannt wurde, wird stattdessen ein *leerer String* geschrieben.

Dieses Format erlaubt es, die Ausgabe in einem Tabellenkalkulationsprogramm direkt einzulesen und ist auch praktisch bei der Verwendung von plotting Programmen wie zum Beispiel *Gnuplot*. Hier könnte man sich etwa mit dem plot-style *impulses* die Extremstellen anzeigen lassen und mit *lines* das Spektrum (oder den sonstigen Datensatz).

XtremA ändert nie die Eingabedatei und löscht diese auch nicht. Gibt man als Ausgabedatei einen bereits existierende Datei an, wird man gefragt ob tatsächlich in diese Datei geschrieben werden soll, oder nicht. Wenn man die Abfrage verneint, muss der Befehl noch einmal eingegeben werden.

3 Installation und Aufrufen

3.1 Vor- und Nachteile der Nutzungsvarianten

Es gibt im Wesentlichen zwei Arten, **XtremA** zu installieren und zu verwenden. Beide setzen eine vorhandene Python-Installation voraus. Bestenfalls wäre das die Version 3.6. Andere Versionen werden auch funktionieren. Die erste Art ist das

3.2 Direkte Ansprechen des .py-files

also des source codes, aus einer Python-Shell heraus, oder durch die Eingabe von

```
python3 xtrema.py
```

in der Kommandozeile. Diese Art hat den Vorteil, dass sie eigentlich keinen Installationsvorgang benötigt. Der Nachteil ist jedoch, dass hierfür das xtrema.py-file immer im selben Verzeichnis sein muss, wie die Eingabedatei. Ein weiterer Nachteil ist, dass man jedes mal python3 und die Dateiendung .py mitschreiben muss. Wegen diesen Nachteilen empfehle ich bei längerer Benutzung eine

3.3 Kompilierung zu einem binary file

Diese ist zunächst etwas komplizierter, was durch spätere Einfachheit der Benutzung entlohnt wird. Die Kompilierung von python code ist wenigstens unter Linux mit dem Programm PyInstaller möglich. Um den PyInstaller zu installieren, muss man aber erst pip installieren (eine python-utility). Das funktioniert in ubuntu-basierten Distributionen mit dem Befehl (root Rechte vorausgesetzt)

```
sudo apt-get install python3-pip
```

Als nächstes kann man den PyInstaller selbst installieren mit:

```
python3 -m pip install pyinstaller
```

Dann folgt der eigentliche Kompilierungsschritt. Hierzu legt man sich im besten Fall ein neues Arbeitsverzeichnis an, in welches man das .py-file kopiert. Nach Navigation in dieses Verzeichnis benutzt man den Befehl

```
pyinstaller --onefile xtrema.py
```

dies wird eine Menge an Dateien und Unterverzeichnissen produzieren. Wichtig ist - solange alles richtig funktioniert hat - nur die Datei xtrema (ohne Dateiendung) im dist-Unterverzeichnis. Dies ist die gewünschte binär Datei und sie sollte 5,7 MB groß sein. Dieses binary sollte jetzt zum Abschluss in ein Verzeichnis verlegt werden, das in der \$PATH Variable gespeichert ist. In den meisten Fällen wird /usr/bin funktionieren (was die Konvention ist). Im Zweifelsfall lässt man sich die \$PATH Variable mit

```
echo $PATH
```

anzeigen.

Ist das binary im korrekten Verzeichnis macht man es ausführbar, beispielsweise durch

```
sudo chmod a+x xtrema
```

wenn alle user **XtremA** benutzen können sollen oder

```
sudo chmod u+x xtrema
```

wenn nur der aktuell angemeldete user **XtremA** benutzen können soll. In letzterem Fall müsste man das u vor dem + nicht mal mitschreiben.

Hat man alles richtig gemacht müsste es nun möglich sein, von jedem working directory aus xtrema direkt aufzurufen, indem man schlicht

```
xtrema
```

eingibt.

Bemerkung: Mit pip und Pyinstaller bekommt man leider häufiger mal verschiedenste Probleme. Diese kann ich hier nicht alle beschreiben. Sollte etwas nicht funktionieren muss ich daher generisch auf die jeweilige offizielle Quelle und auf Foren verweisen. Man könnte argumentieren dass diese Art der Installation und Verwendung schlechter ist, weil die Größe der binary Datei die des python-Codes deutlich überschreitet. Allerdings sind 5,7 MB nicht wirklich ein Argument.

4 Format

4.1 Eingabedatei

Die Dateieindung der Eingabedatei spielt für XtremA keine Rolle. Wichtig ist nur die Formatierung innerhalb der Datei. Im Wesentlichen ist dies die Formatierung von csv-Dateien (comma separated values):

1. Der zu verarbeitende Datensatz muss mit Punkten als Dezimalinterpunktation dargestellt werden (angelsächsische Darstellung).
2. Hilfsinterpunktationen für bessere Lesbarkeit in den Zahlen können nicht verwendet werden.
3. Die einzelnen Zahlen in einer Spalte müssen entweder durch Kommata, Freizeichen (Leerzeichen) oder Tabulator (default) voneinander getrennt sein.
4. Die Zeilen dürfen nicht von Leerzeilen unterbrochen werden. Eine freie Zeile am Ende des Datensatzes führt zu einem „Traceback“-Fehler.
5. Eine Kopfzeile kann eingebaut werden, muss aber nicht. Wenn eine Kopfzeile verwendet wird, muss diese durch ein voraus gestelltes „#“ gekennzeichnet werden.
6. Datensätze, die mehr als zwei Spalten besitzen, können auch verarbeitet werden. Allerdings immer nur 2 Spalten davon gleichzeitig (ein Wertepaar). Die restlichen Spalten werden dann ignoriert.

4.2 Ausgabedatei

In der Ausgabedatei werden die Wertepaare, von denen die Extremstellen bestimmt wurden in den ersten beiden Spalten erneut wiedergegeben. Die Spalten rechts davon sind den Extremstellen zugeordnet; in der Reihenfolge, in der diese in der Kommandozeile erfragt wurden. In den Spalten der Extremstellen wird jeweils an der Position der Extremstelle ihr y-Wert wiedergegeben. Somit ist es möglich, wahlweise den Datensatz selbst, oder auch die Extremstellen als einzelne Datenpunkt aus der Ausgabedatei heraus zu plotten.

5 Syntax

5.1 Allgemeines

Die Reihenfolge der angegebenen Argumente spielt für XtremA keine Rolle. Man kann sich an die Reihenfolge in untenstehender Liste halten, aber man kann stattdessen zum Beispiel auch erst die Ausgabedatei angeben, dann die Eingabedatei und zuletzt das **xtype**-Argument.

5.2 Übersicht aller Argumente und Erläuterungen

-d, --delimiter Der Delimiter ist das Trennsymbol, mit dem die einzelnen Werte in der Eingabedatei voneinander getrennt sind. Mögliche Werte sind: **comma**, **space**, **tab**. Der Delimiter aus der Eingabedatei wird auch bei der Ausgabedatei wieder verwendet.
Default: **tab**.

-i, --input Dateinamen der Eingabedatei mit Dateiendung angeben. Wie die Dateiendung lautet ist egal. Wichtig ist die Formatierung innerhalb des Eingabedokuments. Die Endung ist dabei beliebig. **txt**-Dateien zum Beispiel werden auch problemlos eingelesen.
Nutzungsbeispiel: **-i input.csv**.
Die Angabe des input-Arguments und des output-Arguments ist obligatorisch.

-o, --output Dateinamen der Ausgabedatei mit Dateiendung angeben. Wie input Argument.

-t, --xtype Art der Extremstellen, die erkannt werden sollen. Es kann ausgewählt werden aus **min**, **max**, **inf**.
min bezieht sich auf Minima, **max** auf Maxima und **inf** auf Wendepunkte (Inflections). Es können auch mehrere Optionen in beliebiger Reihenfolge ausgewählt werden. Die Angabe dieses Arguments mit wenigstens einer Option ist obligatorisch. Es existiert **kein Default**.

-u, --using Das using-Argument bezieht sich auf die einzulesenden Spalten aus der Eingabedatei. Beginnend links mit eins wird erst die Spalte, welche den Definitionswert enthält angegeben, dann ein Doppelpunkt geschrieben und dann die Spalte, welche den Funktionswert enthält angegeben.
Nutzungsbeispiel: **-u 3:4** sagt XtremA, dass die dritte Spalte in der Eingabedatei die x-Werte enthält und die vierte Spalte die y-Werte. Es kann auch eine spätere Zeile als x-Wert-Zeile definiert werden und eine frühere als y-Wert-Zeile.
Default: **1:2**.

6 Anwendungsbeispiele

6.1 Minimalbeispiel

Wir beginnen mit dem Datensatz. Hier wurde die Funktion $-(x-5)^2+5(x-7)^3+8$ verwendet, um mit LibreOffice Calc die Datei „Datenreihe_minimal.csv“ zu kreieren:

0.00	-360
0.25	-322
0.50	-287
0.75	-254
1.00	-224
1.25	-196
1.50	-171
1.75	-147
2.00	-126
2.25	-107
2.50	-89.4
2.75	-73.8
3.00	-60.0
3.25	-47.8
3.50	-37.1
3.75	-27.9
4.00	-20.0
4.25	-13.4
4.50	-7.88
4.75	-3.45
5.00	0.00
5.25	2.58
5.50	4.38
5.75	5.48
6.00	6.00
6.25	6.02
6.50	5.63
6.75	4.92
7.00	4.00
7.25	2.95
7.50	1.88
7.75	0.86
8.00	0.00
8.25	-0.61
8.50	-0.88
8.75	-0.70
9.00	0.00
9.25	1.33
9.50	3.38
9.75	6.23
10.00	10.0

Wir navigieren nun in das Verzeichnis dieser Datei und geben folgendes Kommando ein:

```
xtrema -i Datenreihe_minimal.csv -o Datenreihe_minimal_Maxima.csv  
-t max
```

Dies sollte folgenden output im Terminal ergeben:

```
Eingabedatei eingelesen  
Differenziale berechnet  
Ausgabedatei geschrieben  
Programm ohne XtremA Errors beendet.
```

Und die Datei „Datenreihe_minimal_Maxima.csv“ mit folgendem Inhalt sollte erzeugt werden:

0.00	-360	
0.25	-322	
0.50	-287	
0.75	-254	
1.00	-224	
1.25	-196	
1.50	-171	
1.75	-147	
2.00	-126	
2.25	-107	
2.50	-89.4	
2.75	-73.8	
3.00	-60.0	
3.25	-47.8	
3.50	-37.1	
3.75	-27.9	
4.00	-20.0	
4.25	-13.4	
4.50	-7.88	
4.75	-3.45	
5.00	0.00	
5.25	2.58	
5.50	4.38	
5.75	5.48	
6.00	6.00	
6.25	6.02	6.02
6.50	5.63	
6.75	4.92	
7.00	4.00	
7.25	2.95	
7.50	1.88	
7.75	0.86	
8.00	0.00	
8.25	-0.61	
8.50	-0.88	
8.75	-0.70	
9.00	0.00	
9.25	1.33	
9.50	3.38	
9.75	6.23	
10.00	10.0	

Der Unterschied zur Eingabedatei ist nun die 6.02 in der dritten Spalte, welche das Maximum markiert.'

Die gefundene Extremstelle könnte nun grafisch dargestellt werden, indem wir die Datei „plot-Minimal“ mit folgenden Anweisungen für GNUPLOT erstellen:

```
set xlabel "x"
set ylabel "y"
set xrange [0:20]
set yrange [-10:10]
set key bottom right

plot 'Datenreihe_minimal_Maxima.csv' u 1:2 t "$-(x-5)^2+5(x-7)^3+8$"
w l lw 2 lc '#00008800', \
'Datenreihe_minimal_Maxima.csv' u 1:3 t "Maxima" w imp lw 2
lc '#00880000'
```

```
set terminal epslatex
set size 1
set output "graphDatenreihe_minimal.tex"
replot
set output
```

Dies ergäbe den Plot in Abbildung 1.

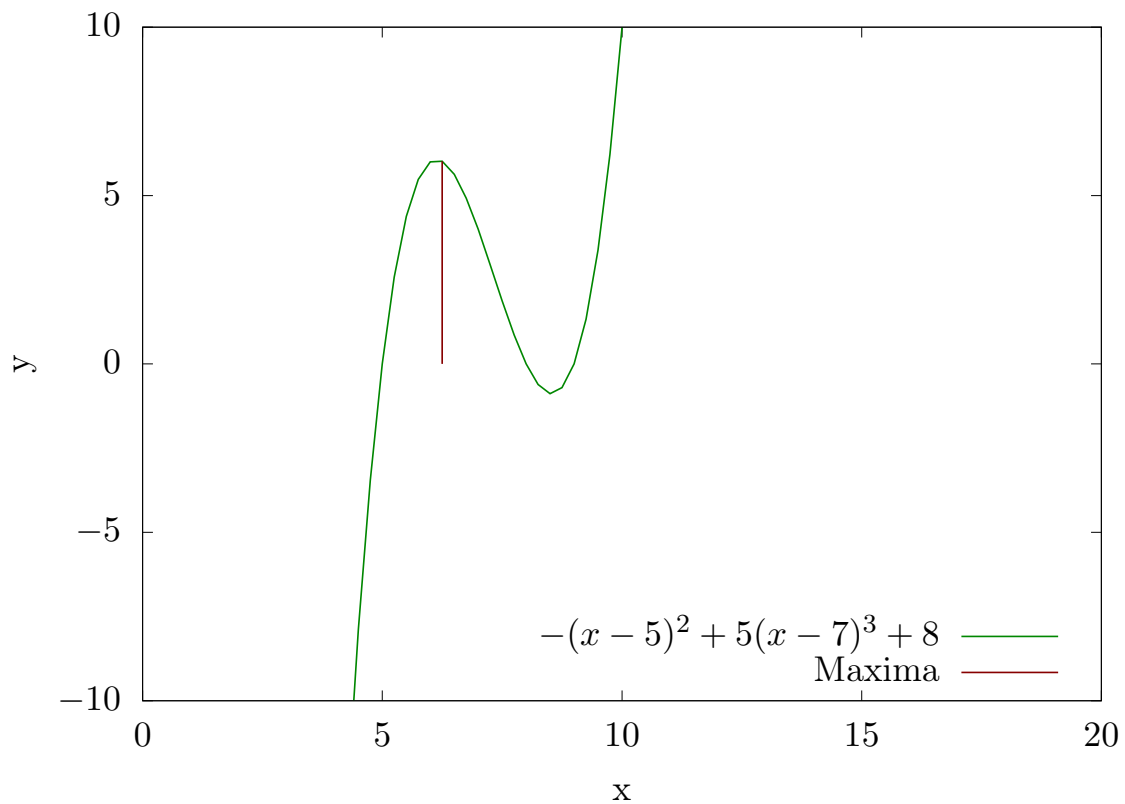


Abbildung 1: Plot einer simplen ganzrationalen Funktion mit Markierung des lokalen Maximums.

6.2 Komplizierteres Beispiel

Wir haben einen csv-Datensatz vorliegen, welcher einen Ausschnitt aus dem Infrarot-Spektrum einer bestimmten Substanz entspricht. Um die Positionen der Absorptionsbanden herauszufinden, benutzen wir **XtremA** mit der Option -t min:

```
xtrema -i IR-Daten.csv -o IR-Daten_Minima.csv -t min
```

Die generierten Daten in „IR-Daten_Minima.csv“ könnten wir gemäß dem folgenden GNU-**PLOT**-Code visualisieren:

```
set xlabel "Wellenzahl  $[cm^{-1}]$ "
set ylabel "Transmission  $[\%]$ "
set xrange [1500:1000]
set yrange [80:100]

set key box

plot 'IR-Daten_Minima.csv' u 1:2 w l lw 2 lc
'#00008800' t "Spektrum", \
      'IR-Daten_Minima.csv' u 1:3 w imp lw 2 lc '#00880000'
t "Absorptionsbanden"

set terminal epslatex
set size 1
set output 'graphKompliziert.tex'
replot
set output
```

Das Ergebnis ist in Abbildung 2 zu sehen. Es ist zu erkennen, das **XtremA** nur echte Peaks erkennt. Schultern werden nicht beachtet.

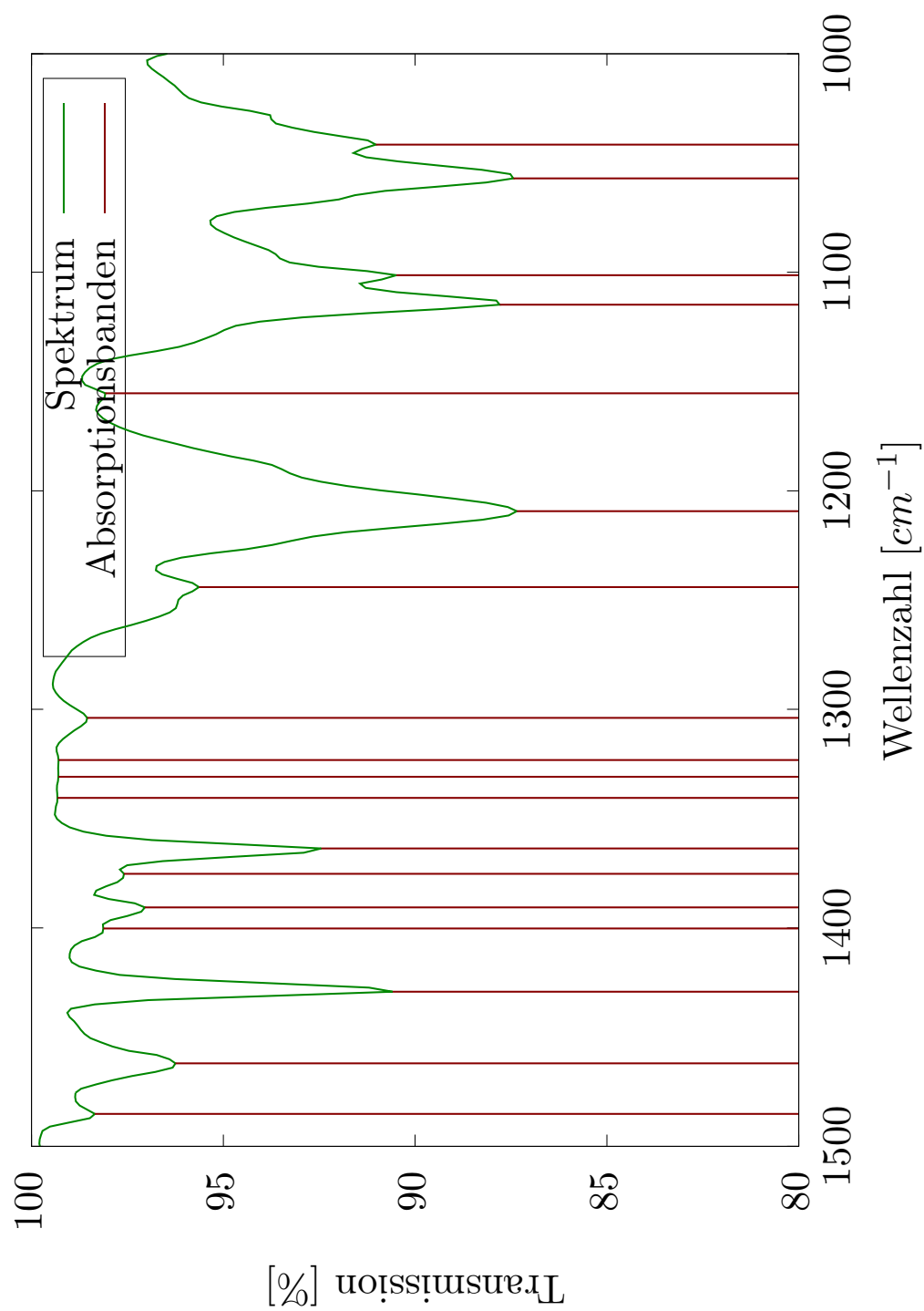


Abbildung 2: Plot eines Ausschnitts eines IR-Spektrums mit Markierung der Absorptionsbanden.