Aula 8 - Carregando e manipulando dados com Pandas

Karl Jan Clinckspoor

2 de julho de 2018

Sumário

1	Introdução	1
2	Abrindo um arquivo	1
3	Operações sobre colunas	3
4	Seccionando dataframes	3
5	Máscaras lógicas	5
6	Exercícios 6.1 Calorimetria	

1 Introdução

Pandas é um pacote com base no numpy utilizado bastante para ciência de dados. Aqui, usaremos uma pequena fração de suas capacidades. A sintaxe do pandas é um pouquinho diferente do já utilizado, e pode ser um pouco frustrante de início. Com o tempo, as coisas começam a fazer um pouco mais de sentido.

2 Abrindo um arquivo

Nas aulas passadas, foram feitas funções para conseguir extrair o conteúdo de alguns arquivos. O processo foi um tanto trabalhoso. O pandas permite abrir dados .csv e .xls(x) com muito mais facilidade. Vamos reabrir o arquivo Consolidação1.txt e algum dos arquivos da pasta dados-1. Para isso, utilizamos a função **read_csv**, colocamos o resultado na variável df (de *dataframe*, o tipo de objeto no pandas) e visualizamos o começo do *dataframe* com a função **head**.

```
Out[5]: x y
0 0.0000 4.9332
1 0.3344 2.6304
2 0.6689 0.2616
3 1.0033 9.6285
4 1.3378 9.8156
```

Notamos que ele aparentemente não conseguiu diferenciar direito as duas colunas. Para nos assegurarmos, vamos ver as informações que o pandas nos dá para esse dataframe.

```
In [7]: df.info()

<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 300 entries, 0 to 299
Data columns (total 1 columns):
x y     300 non-null object
dtypes: object(1)
memory usage: 2.4+ KB
```

Vemos então que temos, de fato, somente 1 coluna, cujo nome é 'x y', que contém 300 'objetos'. Geralmente quando o pandas fala que há objetos numa coluna, ele quer dizer *strings*.

O ponto é que, por padrão, o pandas tenta abrir arquivos csv assumindo que o separador é uma vírgula (afinal, o nome do arquivo é *comma separated values*). Então, é necessário informar o separador com a keyword *sep*.

```
In [10]: df = pd.read_csv('Consolidação1.txt', sep=' ')
Out [10]:
                Х
        0 0.0000 4.9332
         1 0.3344 2.6304
         2 0.6689 0.2616
         3 1.0033 9.6285
         4 1.3378 9.8156
In [11]: df.info()
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 300 entries, 0 to 299
Data columns (total 2 columns):
     300 non-null float64
     300 non-null float64
dtypes: float64(2)
memory usage: 4.8 KB
```

Agora vemos que ele, de fato, conseguiu separar em duas colunas, com os nomes x e y, e que contém floats. Para acessar uma dessas colunas, utilizamos uma notação parecida com a de dicionários.

3 Operações sobre colunas

E também, parecido com o numpy, podemos aplicar operações nas colunas, abrangendo-as por inteiro. Vamos agora criar uma coluna 'x1' que contém os valores de 'x' somados a 1, e vamos calcular as médias dessas duas colunas.

Agora que essa operação foi feita, podemos ver que há uma nova coluna no dataframe.

4 Seccionando dataframes

Suponha que desejamos somente os pontos após o vigésimo ponto do dataframe. Fazemos isso utilizando a localização com base no índice, ou *iloc*. Note que é necessário usar colchetes ao invés de parênteses, pois iloc não é uma função.

O mesmo pode ser feito utilizando dois colchetes juntos, como se estivéssemos aplicando uma operação sobre arrays/listas 2D.

Podemos também selecionar somente algumas colunas para essa transição. Isso é feito passando uma lista com os nomes das colunas que serão copiadas.

É possível utilizar *loc* ao invés de *iloc*, que aceita os nomes das seções (*labels*) ao invés de seus índices. É necessário colocar na ordem *linha,coluna*.

```
In [27]: df.loc[:5, 'x':'y']
Out [27]:
        0 0.0000 4.9332
        1 0.3344 2.6304
        2 0.6689 0.2616
        3
          1.0033 9.6285
        4 1.3378 9.8156
        5 1.6722 3.4563
In [28]: df.loc[2:7, ['x', 'x1']]
Out [28]:
                Х
                       x1
        2 0.6689 1.6689
          1.0033 2.0033
          1.3378 2.3378
        5
          1.6722 2.6722
        6 2.0067 3.0067
        7 2.3411 3.3411
```

5 Máscaras lógicas

Suponha agora que desejemos selecionar somente os valores que obedecem uma regra. Se você se lembra, a coluna 'y' possui valores aleatórios entre 0 e 10, com média em torno de 5. Quais são os pontos de x onde o y correspondente é menor que a média?

Para isso, utilizamos as máscaras lógicas. A criação de uma máscara é parecida com uma simples operação de comparação.

```
In [35]: media = df['y'].mean()
         filtro_menor_media = df['v'] < media</pre>
         filtro_menor_media.head(n=10)
Out[35]: 0
                True
         1
                True
         2
                True
         3
               False
         4
               False
         5
                True
         6
                True
         7
                True
         8
                True
         9
               False
         Name: y, dtype: bool
```

Agora colocamos esse filtro lógico para selecionar os valores desejados.

```
In [37]: df_filtrado = df[filtro_menor_media]
        df_filtrado.head(n=10)
Out [37]:
                                x1
                 Х
                         У
        0
            0.0000 4.9332 1.0000
            0.3344 2.6304 1.3344
        1
        2
            0.6689 0.2616 1.6689
        5
            1.6722 3.4563 2.6722
        6
            2.0067 4.2851 3.0067
        7
            2.3411 2.9700 3.3411
        8
            2.6756 2.6107 3.6756
        10 3.3445 0.4337 4.3445
        11 3.6789 3.1854 4.6789
        14 4.6823 1.1816 5.6823
```

Note que as linhas com os índices 3, 4 e 9 não estão presentes no dataframe filtrado, mostrando que o filtro ocorreu.

Essas funções por si só já permitem que você faça muitas operações complexas.

6 Exercícios

Os exercícios a seguir utilizam dados reais e problemas que eu encontrei durante meu doutorado. O foco dos exercícios é no carregamento dos dados. O tratamento é algo muito específico e fora do escopo desse curso.

6.1 Calorimetria

Dificuldade: ***

Conceitos utilizados:

- Nomear colunas
- Separadores de colunas
- Separadores decimais
- Cabeçalho (*header*)

Nome do arquivo: 'Calorimetria.csv'

Tarefa: Carregar o dataframe inteiro, depois separar somente as colunas Xt e $\Delta H.\,$

Dicas:

- 1. Observe o formato do arquivo antes de começar a importar. Veja quais são os separadores decimais e de coluna. Conte quantos ';' existem na primeira linha e nas linhas subsequentes.
- 2. Quando você for tratar os seus dados, talvez seja mais fácil fazer pequenas alterações em todos eles, utilizando uma ferramenta como o Notepad++, que permite realizar substituições em todos os arquivos abertos. Veja se isso será útil neste caso.

In []: %load ./respostas/Pandas-ITC.py

6.2 DSC

Dificuldade: **

Conceitos utilizados:

- Linhas de cabeçalho
- Nomear colunas manualmente
- Separador de colunas

Nome do arquivo: 'DSC.txt' Descrição do experimento:

Com o passar do tempo (t), a temperatura (T) de uma amostra é aumentada. O equipamento fornece uma energia (Q) para que a amostra fique nessa temperatura. Há um fluxo de gás inerte (f). As colunas nos dados estão nessa ordem.

Tarefa: Carregar o dataframe e separar somente a temperatura e a taxa de calor, que são as colunas centrais.

In []: %load ./respostas/Pandas-DSC.py

6.3 Reologia

Dificuldade: ****

Conceitos:

- Nomear colunas
- Codificação
- Cabeçalho
- Separador de colunas

- Separador decimal
- Valores que não significam um número (NA)
- Funções de string em dataframes, semelhantes à funções de string normais.
- Extração de dados por filtros

Nome do arquivo: 'Reologia.txt' Descrição do experimento: São feitos três experimentos em sequência.

- 1. No primeiro, chamado de varredura de tensão, é aplicada uma tensão (Tau) e mede-se os parâmetros G' e G" (melhor simbolizar por G1 e G2 por conveniencia).
- 2. No segundo, chamado de varredura de frequência, é aplicada uma tensão constante variando-se a frequência, omega (simbolizar por w é conveniente), e mede-se os parâmetros G' e G" (simbolize por G1 e G2)
- 3. No terceiro, chamado de curva de fluxo, é aplicada uma taxa de cisalhamento (GP) e é medida a viscosidade (Eta).

Os três experimentos podem ser separados pela primeira coluna, que contém valores do tipo 1 | 2, 3 | 7, etc. O primeiro número é o número do experimento, sendo 1 o oscilatório de tensão, 2 o oscilatório de frequência e 3 a curva de fluxo. Os valores após | se referem ao número do ponto, e não são muito relevantes.

Tarefa: Carregar o arquivo, tomando cuidado com os nomes das colunas, os separadores e a codificação do arquivo (dica: é latin1). Separar o dataframe em três dataframes referentes aos três experimentos, possivelmente pelo uso de filtros, que contém somente as colunas de interesse para aquele experimento. Dica: utilize o fato de que a diferença mais marcante entre eles é a presença de um 1, 2 ou 3 no primeiro valor da primeira coluna. Utilize a função .str.startswith('1').

In []: %load ./respostas/Pandas-reologia.py