

Python i software lliure per a ús científic i en enginyeria (Part II)

Francesc Alted

18 i 25 d'Octubre, Universitat Jaume I

Objectius del taller (part I)

- Introducció al software lliure
- Introducció a Python
- Python i càlcul matricial: Numeric i numarray
- Generació de gràfics amb lPython i matplotlib
- Tractament bàsic d'imatges usant numarray i matplotlib

Objectius del taller (part II)

- Introducció a SciPy, MATLAB portat a Python (i lliure!)
- Salvaguarda i recuperació d'informació: PyTables
- Exercicis que combinen Python, IPython, numarray, Numeric, matplotlib i PyTables com a mostra de la seua productivitat i eficàcia.

SciPy http://www.scipy.org

- Llibreria de software obert orientada a càlcul científic
- És una col·lecció d'algorismes i funcions matemàtiques construïdes al voltant de NumPy.
- Combinat amb (I)Python i matplotlib es converteix en una ferrament molt potent per a manipular i visualitzar dades
- Aquesta combinació rivalitza en funcionalitat amb Matlab, IDL, Octave, R-Lab o SciLab.

Funcionalitat en SciPy

- Optimització
- Integració, càlcul de derivades
- Funcions especials (Kolmogorov, Beta, Gamma, Legendre, Chebyshev, Fresnel, etc...)
- Algorismes genètics
- Resolució d'equacions diferencials ordinàries
- Processament de senyals i imatges
- Gràfics (plotting), I/O

• ...

SciPy i la seua interacció amb NumPy

- Totes les funcions de NumPy (similars a les de numarray), s'han inclòs a SciPy
 no cal fer 'import Numeric'
- ◆ S'han alterat les ufuncs per a no donar excepcions quan es troben errors amb nombres reals (es tornen NaN i Inf's als resultats) ==> nous operadors: isnan, isfinite, isinf
- Els operadors de comparació suporten nombres complexos (comparen la part real)

Trucs inicials (I)

Conversió de tipus (casting):

```
In [1]: from scipy import *
In [2]: b=array([1,2])
In [3]: b.typecode()
Out[3]: 'l'
In [4]: a = cast['f'](b)
In [5]: a.typecode()
Out[5]: 'f'
```

Matrius

```
In [36]: pi
Out[36]: 3.1415926535897931
In [37]: cast['f'](pi)
Out[37]: 3.14159274101
In [38]: isscalar(cast['f'](pi))
Out[38]: True
```

Escalars

Trucs inicials (II)

Creació d'arrays amb diferents notacions

Algunes funcions útils

```
>>> a=r [1:10:100j]
>>> b=arange(10)
>>> c=reshape(arange(12, typecode = 'd'), (4,3))
>>> who
<function who at 0xb727c994>
>>> who()
                Shape
Name
                     Bytes
                                                  Type
                100
                                 800
                                                  double
а
b
                10
                                 40
                                                  long integer
               4 \times 3
                                 96
                                                  double
Upper bound on total bytes = 936
```

Proveu també (ipython -pylib):

```
factorial, comb, rand i randn
factorial(200, exact=1)
hist(randn(10000),100)
```

Vectorize()

Useu vectorize() per a convertir funcions
 Python que accepten i retornen paràmetres escalars per a "vectoritzar-les"

Derivades

```
In [41]: a = r [0:pi:5j]
In [42]: a
3.141592651)
In [43]: sin(a)
Out[43]:
array([ 0.00000000e+00, 7.07106781e-01, 1.00000000e+00,
7.07106781e-01, 1.22460635e-16])
In [44]: derivative(sin, a, 0.01, n=1)
Out[44]: array([ 0.99998333, 0.707095 , 0. , -0.707095 ,
-0.999983331)
In [45]: cos(a)
Out[45]:
array([1.00000000e+00, 7.07106781e-01, 6.12303177e-17, -7.07106781e-01,
-1.00000000e+001)
In [46]: derivative(sin, a, 0.01, n=2)
Out[46]: array([0.,-0.70710089,-0.99999167,-0.70710089,0.])
```

Exercici

- Feu una funció que, donat un array 'x' com a paràmetre d'entrada, dóne com a eixida: sin(x[i]) − cos(x[i]) si sin(x[i]) > cos(x[i]) sin(x[i]) + cos(x[i]) si sin(x[i]) <= cos(x[i])</p>
- Després, calculeu la seua derivada primera i segona en el rang r [0:4*pi:100j]
- Representeu la funció inicial, la primera i la segona derivada en una sola gràfica (useu matplotlib)
- Pista: useu vectorize()

Integrals numèriques (I)

$$I = \int_{0}^{4.5} J_{2.5}(x) \ dx$$

```
In [10]: integrate.quad(lambda x: special.jv(2.5,x), 0, 4.5)
Out[10]: (1.1178179380783249, 7.8663171825372322e-09)
```

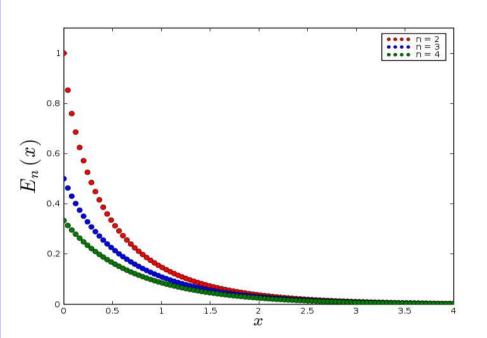


Valor de l'integral

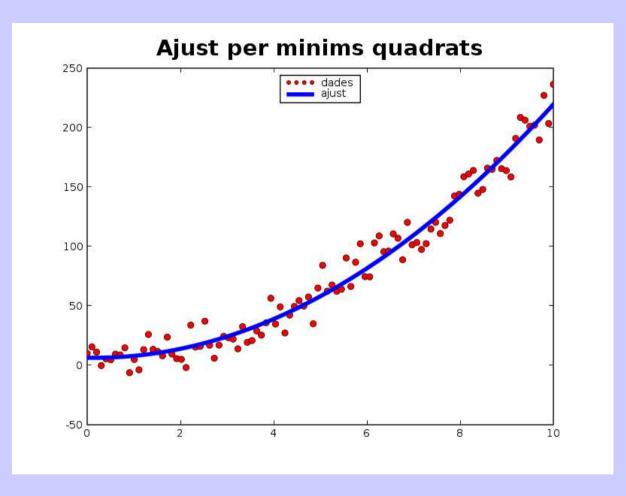
Valor absolut de l'error

Integrals numèriques (II)

$$E_n\left(x\right) = \int_1^\infty \frac{e^{-xt}}{t^n} \, dt$$



Optimització (minimització)



```
xdata = r_[0:10:100j]
ydata = 3 + 1.5*xdata + 2*xdata*xdata + 10*randn(len(xdata))
# construeix una matriu per ajustar y = a + b*x + c*x^2
matrix=transpose(array([[1]*len(xdata), xdata, xdata*xdata]))
coeffs = linalg.basic.lstsq(matrix, ydata)[0]
```

I/O en SciPy

- Diferents mètodes de lectura/escriptura:
 - Fitxers ASCII (read_array, write_array)
 - Fitxers binaris (fopen)
 - Fitxers Fortran
 - Conversió de big/little endian
 - loadmat: Ilig un fitxer MATLAB (v4 o v5)
 - savemat: guarda com un fitxer MATLAB (<= 4)
 - Suport per a format Matrix Market (http://math.nist.gov/MatrixMarket/)
- En general, el suport de I/O és poc flexible i no permet estructurar les dades de manera eficient. Si es vol més flexibilitat i potència
 => PyTables

PyTables (i família) http://www.pytables.org

- Fins ara hem vist un suport limitat per a entrada/eixida, tant en SciPy com en numarray
- Molts científics/enginyers tenen necessitat de manipular grans quantitats d'informació de manera ràpida i eficient
- Existeixen molts formats per a guardar informació, però un que últimament està adquirint gran rellevància és HDF5
- PyTables és una interfície en Python per a HDF5 però també moltes coses més

Què és PyTables?

- Es tracta d'una llibreria Python per a facilitar el manegament de grans quantitats de dades en el disc dur
- Està pensada tant per a un ús interactiu com en programes d'anàlisi
- ◆ Llicència BSD ==> Software obert i gratuït
- Un parell de "germans" en desenvolupament:
 - ViTables: Interfície gràfica basada en PyTables
 - CSTables: Versió Client-Servidor

PyTables: Trets bàsics

- Facilitat d'ús: Adopció de l'anomenat natural i la bona interacció amb Python
- ◆ Ús eficient de la memòria: 1 byte de dades al disc es representat per (1+x, x<<1) byte quan es carrega en memòria</p>
- Rapidesa d'execució: Les parts crítiques com ara la escriptura/lectura/selecció de dades estan fetes en C (usant Pyrex)
- Bona documentació: Disposa d'un manual amb tutorials, referència completa de la llibreria, una secció d'optimització, ...

Altres característiques interessants

- Base de dades orientada a grans quantitats d'informació
- Suporta de manera nativa objectes NumPy i numarray
- Permet classificar d'una manera jeràrquica els diferents objectes
- Suporta compressió on-line de les dades
- Totes les cel·les als contenidors de dades poden allotjar matrius multidimensionals

Què hi ha al darrere de PyTables?

- Python ==> Interactivitat i flexibilitat
- numarray ==> Manipulació efectiva de dades homogènies i heterogènies
- ◆ HDF5 ==> Format de fitxer de dades i llibreria (C, Fortran i Java) dissenyada per a manipular grans quantitats d'informació i estructurar-la de manera jeràrquica
- Pyrex ==> Permet l'elaboració de extensions en C per a Python d'una manera molt senzilla i eficient

Quin software suporta fitxers PyTables (HDF5)?

- Els fitxers PyTables, a l'estar basats en el format HDF5, estan suportats en una gran varietat de software usat en càlcul científic
- Software obert
 - OpenDX (Open Data Explorer)
 - Gnu Octave
 - R, un sistema de càlcul estadístic i gràfics
 - Visad, toolkit Java per a visualització i anàlisi de dades numèriques
 - Zori, programa de càlcul de propietats atòmiques i moleculars basat en tècniques de Montecarlo
- Programes comercials
 - MATLAB, IDL, Intel Array-Visualizer, TecPlot, LabView
- Molts més (http://hdf.ncsa.uiuc.edu/tools5.html)

On pot ser útil PyTables?

- En tots aquells on cal la manipulació de grans quantitats d'informació
 - Aplicacions científiques
 - Meteorologia, Oceanografia
 - Astrofísica
 - Simulació numèrica en general
 - Medicina (sensors biològics)
 - Aplicacions industrials
 - Adquisició de dades de sensors
 - Monitorització en temps real
 - Adquisició de dades en sistemes informàtics
 - Traces de dades de routers
 - Monitorització de sistemes de logs
 - ◆ Alertes de seguretat (Firewalls, IDS, ...)

Un primer exemple

~alted/taller/pt1.py

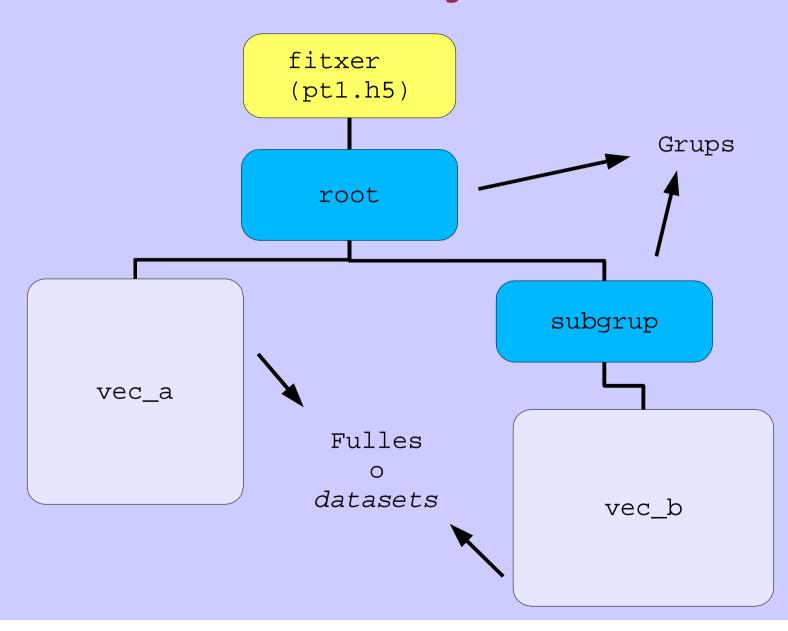
```
from scipy import *
import tables

fitxer = tables.openFile("pt1.h5", "w")
a=arange(10.)
b=arange(10.)*2
fitxer.createArray(fitxer.root, 'vec_a', a, "Vector a")
subgrup = fitxer.createGroup(fitxer.root, 'subgrup', "SG1")
fitxer.createArray(subgrup, 'vec_b', b, "Vector b")
fitxer.close()
```

I ara, proveu des de la shell el següent:

```
$ ptdump pt1.h5
$ ptdump -d pt1.h5
$ ptdump -v pt1.h5
$ ptdump -va pt1.h5
```

Estructura de fitxers PyTables: L'arbre d'objectes



Mètodes bàsics

Obrir o crear un fitxer:

Crear un grup:

```
f.createGroup(where, name, title='', filters=None)
```

Crear una fulla (o 'dataset'):

Un exemple més complet

- Copieu el fitxer ~alted/taller/pt2.py i executeu-lo (./pt2.py)
- ♦ Visualitzeu el contingut de l'eixida:
 \$ ptdump [-v] [-d] [-av] pt2.h5
- Entreu a ipython i navegueu pel seu contingut (feu ús de la tecla TAB):

```
In [1]: from tables import *
In [2]: f=openFile("pt2.h5")
In [3]: f.root
In [4]: f.root.taules # mostra info de grup
In [5]: f.root.taules.lectura # mostra propietats taula
In [6]: f.root.taules.lectura.attrs # Mostra atributs
In [7]: f.root.taules.lectura.cols # mostra columnes
In [8]: f.root.taules.lectura.cols.compteADC # info columna
In [9]: f.root.taules.lectura.cols.compteADC[:] # dades!
```

Classes bàsiques: File

És la que conté els mètodes per a crear, copiar, renomenar i esborrar els diferents nodes de l'arbre d'objectes:

createGroup, createArray, createEArray,
createVLArray, createTable, removeNode,
copyFile, copyChildren, removeNode, renameNode,
flush, close

També suporta mètodes per a fer la navegació més fàcil:

listNodes, walkGroups, walkNodes

Mètodes especials:

```
__iter__(), __repr__(), __str__()
```

Classes bàsiques: Group

- És l'objecte bàsic que permet dotar d'estructura a un fitxer
- Permet copiar, renomenar i esborrar els diferents nodes fills que allotja:

```
_f_remove, _f_rename, _f_copyChildren
```

Mètodes per a navegació:

```
_f_listNodes, _f_walkGroups, _f_walkNodes
```

Assignació d'atributs:

```
f getAttr, f setAttr
```

Mètodes especials:

```
__iter__(), __repr__(), __str__()
```

Exemple de navegació

http://pytables.sourceforge.net/html/tut/tutorial1-2.html # List all the nodes (Group and Leaf objects) on tree print h5file # ús de __str__() # List all the nodes (using File iterator) on tree print "Nodes in file:" for node in h5file: # ús de __iter__() print node # Now, only list all the groups on tree print "Groups in file:" for group in h5file.walkNodes(classname="Group"): print group # ús de __str__() # List only the arrays hanging from / print "Arrays in file (I):" for group in h5file.walkGroups("/"): for array in h5file.listNodes(group, classname = 'Array'): print array # ús de __str__()

Classe Array

- Pensada per albergar objectes NumPy i numarray de manera molt senzilla
- Atributs més importants:

flavor, nrows, nrow, type, itemsize

Mètodes de lectura:

```
iterrows(start=None, stop=None, step=1)
Exemple:
result = [ row for row in array.iterrows(step=4) ]
read(start=None, stop=None, step=1)
Exemple:
result = array.read(start=2, stop=40)
```

Mètodes especials:

```
__iter__(), __getitem__()
Exemple:
array4 = array[1, ..., ::2, 1:4, 4:]
```

Exercici: Repositori d'imatges

Copieu el fitxer ~alted/taller/imatges.h5, obriu-lo i navegueu per ell:

```
$ ipython -pylab
import tables
f=tables.openFile("imatges.h5")
imshow(f.root.venus[:]) # vella amiga
print f.root.microsoft
f.root.microsoft.attrs
f.root.microsoft.attrs.observ
imshow(f.root.microsoft[:]) # Hola!
```

- Mireu el contingut del grup 'forges' :-)
- ◆ Afegiu al fitxer HDF5 la imatge: ~alted/taller/volca.png

Classe declarativa: <u>Atom</u>

S'usa per a definir propietats de l'element base en EArrays i VLArrays, com ara el tipus, el shape, o el "sabor":

Classe EArray

- És filla de Array i per tant, hereta les seues propietats
- A l'igual que Array, conté arrays de nombre homogenis, però al contrari que Array, EArray es pot <u>expandir</u> (encara que en una sola dimensió) i suporta <u>filtres</u>.
- Atributs més importants: atom, extdim, nrows
- Mètodes:

```
append(object)
Exemple:
atom = tables.StringAtom(shape=(0,), length=8)
array_c = fileh.createEArray(fileh.root, 'array_c', atom)
array_c.append(strings.array(['a'*2, 'b'*4], itemsize=8))
```

Classe VLArray

- ◆ Té files formades per objectes homogenis (els àtoms), però contenint un nombre variable d'aquests.
- Atributs:
 atom, nrow, nrows
- Mètodes: append, iterrows, read

Classe declarativa: <u>Col</u> i <u>IsDescription</u>

S'usen per a definir propietats bàsiques de les columnes en objectes **Table**, com ara el tipus, el shape, o la indexació:

```
Col(dtype="Float64", shape=1, dflt=None, pos=None, indexed=0)

StringCol(length=None, dflt=None, shape=1, pos=None, indexed=0)

BoolCol(dflt=0, shape=1, pos=None, indexed=0)

IntCol(dflt=0, shape=1, itemsize=4, sign=1, pos=None, indexed=0)

FloatCol(dflt=0.0, shape=1, itemsize=8, pos=None, indexed=0)

ComplexCol(dflt=0.+0.j, shape=1, itemsize=16, pos=None)

class MD(IsDescription):
    string16_1D = StringCol(20, shape=(2,))
    uint16_2D = UInt16Col(shape=(3,4))
    float_64_3D = Float64Col(shape=(2,3,4))
    complex32_1D = Complex32Col(shape=(3,))
```

Classe <u>Table</u>

- Es fa servir per a guardar dades inhomogènies
- ◆ Atributs més importants: description, row, nrows, rowsize, cols, colnames, coltypes, colshapes, indexed
- Mètodes:

```
append, iterrows, itersequence, read,
modifyRows, modifyColumns, removeRows,
removeIndex, where, getWhereList
```

Mètodes especials:

```
__iter__, __getitem__, __setitem__
```

Classe d'ajuda: Filters

Filters(complevel=0, complib="zlib", shuffle=1, fletcher32=0)

- Utilitzada per a definir filtres aplicats a fulles (excepte la classe Array), grups, subjerarquies o fitxers complets
- Paràmetres:
 - complevel: nivell de compressió
 - complib: compressor ("zlib", "lzo", "ucl")
 - shuffle: si s'usa el pre-filtre "shuffle" o no
 - fletcher32: si s'usa un checksum o no
- Què fa el pre-filtre "shuffle"?
 Reordena els bytes de enters o nombres reals de manera que optimitza la compressió del conjunt de dades

Efecte dels diferents filtres de compressió

Table 5.2: Comparison between different compression libraries, with and without shuffling. The tests have been conducted on a Pentium 4 at 2 GHz and a hard disk at 4200 RPM.

Compr. Lib	File size (MB)	Time writing (s)	Time reading (s)	Speed writing (MB/s)	Speed reading (MB/s)
NO COMPR	165.4	24.5	17.13	6.6	9.6
Zlib (lyl 1)	26.4	22.2	5.77	7.3	28.4
Zlib+shuffle	4.0	19.0	5.94	8.6	27.6
LZ0 (lvl 1)	44.9	17.8	4.13	9.2	39.7
LZO+shuffle	4.3	16.4	5.03	9.9	32.6
UCL (lvl 1)	27.4	48.8	5.02	3.3	32.7
UCL+shuffle	3.5	38.1	5.31	4.3	30.9

- En general, s'usa 'Izo' quan es vol gran velocitat de descompressió i 'zlib' per a una relació òptima nivell de compressió/velocitat de descompressió
- 'shuffle' pot millorar molt el nivell de compressió a costa d'una lleugera pèrdua de velocitat en lectura

Classe AttributeSet: afegint meta-informació

- Facilita afegir atributs d'usuari als diferents objectes de l'arbre
- S'accedeix a través de la variable de classe attr per a les fulles i _v_attr per als grups
- Molt senzill d'usar:

```
In [2]: f=openFile("pt2.h5", "a")
In [3]: lectura = f.root.taules.lectura
In [4]: lectura.attrs.data = "2004-10-25 18:05 CEST"
In [5]: lectura.attrs.observ = "Feia molta calor"
In [6]: lectura.attrs.npersones = 2
In [7]: lectura.attrs.altres = ["sds", 1.2, 4.4]
In [8]: lectura.attrs.dicc = {"lloc":[12,34], "mes":"prou"}
```

Selecció d'informació en taules

Donada la definició de taula següent:

```
Menuda = {
  "var1" : Int8(),
  "var2" : IntCol(),
  "var3" : FloatCol(),
 Què penses que tornaran les següents expressions?:
[row['var1'] for row in table if 3 < row['var2'] <= 20])</pre>
 2)
sum([row['var1'] for row in table if 3<row['var2']<= 20])</pre>
 3)
sum(row['var1'] for row in table if 3<row['var2']<= 20)</pre>
 Pista: 3) usa expressions generadores (Python 2.4)
```

Indexació: Accelerant la búsqueda

Adoneu-vos del paràmetre indexed a la següent definició:

```
Menuda = {
    "var1" : Int8Col(),
    "var2" : IntCol(indexed=1),
    "var3" : FloatCol(),
    }
```

Ara podem usar l'indexació sobre la columna "var2":

1) Ús d'indexació sobre columna "var2"

```
[row['var1'] for row in table.where(if 3<row['var2']<= 20)]</pre>
```

2) "where" també es pot usar sobre columnes no indexades per a més velocitat ==> seleccions in-kernel

```
[row['var1'] for row in table.where(if 3<row['var3']<= 20)]</pre>
```

3) Tan sols es pot passar una condició a where

==> Seleccions mixtes

```
[row['var1'] for row in table.where(3<table.cols.var2<=20)
    if row['var3'] >= 2. and row['var1'] > 4]
```

Nota: Passeu sempre la condició més restrictiva a where

Exercici: Diferents seleccions

- Proveu a fer diferents seleccions sobre la taula: pt2.h5:/taules/lectura
- Useu les seleccions estàndard i in-kernel
 - Estàndard

```
lectura = f.root.taules.lectura
row = lectura.row
[row['compteADC'] for row in lectura if row['pressio'] < 20]</pre>
```

In-kernel

```
pressio = lectura.cols.pressio
[row['compteADC'] for row in lectura.where(pressio < 20)]</pre>
```

Exercici: Creació d'indexos

Indexeu les columns 'pressio' i 'seqid' a la taula: pt2.h5:/taules/lectura

Pista: Useu el mètode createIndex() de la classe Cols:

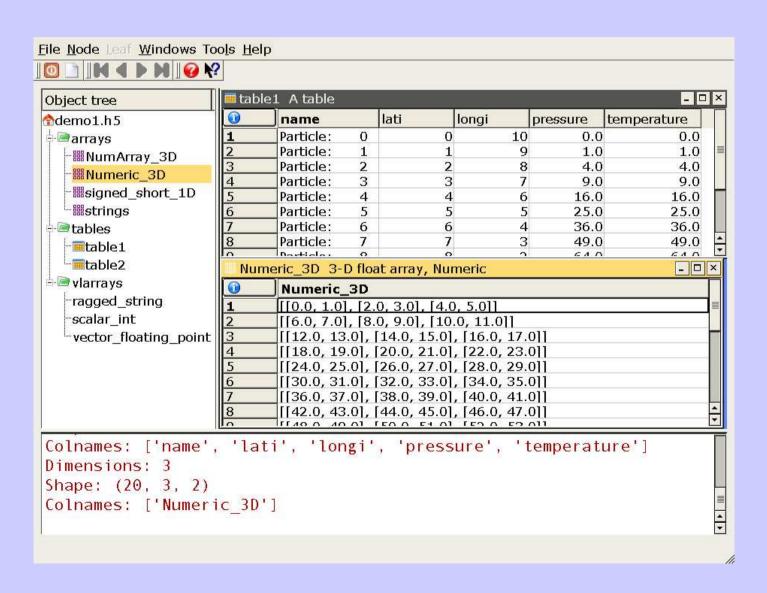
lectura.cols.pressio.createIndex()

Exercici: seleccionant dades d'una taula enorme (10^9 files)

- Des de ipython, obriu el fitxer: /scratch1/alted/data/test1G.h5
- Proveu a fer unes lectures i seleccions:

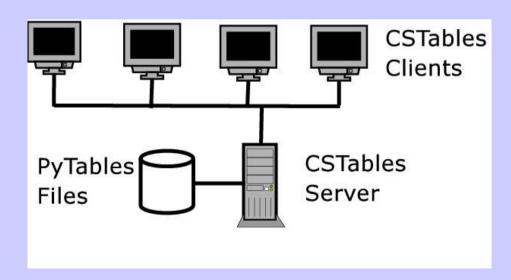
```
fcl2=f.root.table.cols.FCl2[:]
fcl2=f.root.table.cols.FCl2[300:350]
taula = f.root.table
fila = f.root.table.row
IC = taula.cols.IntCol
# Cerca per primera vegada
[fila['FCl2'] for fila in taula.where(10<IC<30)]
# Cerca per segona vegada (index a la caché)
[fila['FCl2'] for fila in taula.where(20<IC<50)]
# Búsqueda sense indexació
[fila['FCl2'] for fila in taula if 20<IntCol<50]</pre>
```

ViTables: Una interfície gràfica per a PyTables



CSTables: PyTables esdevé Client-Servidor

 CSTables és un software addicional que permet fer aplicacions que guarden/recuperen les seues dades emmagatzemades en un servidor des d'un client a través de TCP/IP



Per acabar...

- Existeix molt de software lliure a la Xarxa per tal de facilitar l'adquisició i anàlisi de les dades que obté el científic/enginyer
- El propòsit d'aquest curs ha estat introduirvos algunes d'aquestes ferramentes per que les pugueu afegir al vostre repositori
- ◆ El software lliure **no és**, de cap manera, un competidor del software comercial. Un ús equilibrat de la funcionalitat proveïda pels dos mons és, normalment, la millor opció

Preguntes? Sugerències?

Coses que se'n vagen un poc del temari?