

Introdução à Programação com Python

Semana da Computação - UFJF - 2018

Lucas Arantes Berg

Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional

UFJF

`berg@ice.ufjf.br`

Conteúdo

► Parte I

- Introdução e Motivação
- Sintaxe
- Tipos de Dados
- Construções básicas (if, while, for)
- Listas, Tuplas
- Funções

► Parte II

- Dicionário
- Orientação a Objetos
- Programação Funcional

► Parte III

- Computação científica com Python

► Parte IV

- Bibliotecas e programas interessantes

Parte I

Introdução à linguagem Python

Sobre a linguagem Python

- ▶ Criada por Guido van Rossum em 1991
- ▶ Linguagem de Alto Nível
- ▶ Interpretada
- ▶ Programação:
 - Modular
 - Orientada a objetos
 - Funcional
- ▶ Tipagem dinâmica e forte
- ▶ Vasta coleção de bibliotecas
- ▶ Código aberto (GPL)

Sobre a linguagem Python

- ▶ Diversas estruturas de dados nativas
 - lista, tupla, dicionário
- ▶ Gerenciamento de memória automático
- ▶ Tratamento de exceções
- ▶ Sobrecarga de operadores
- ▶ Indentação para estrutura de bloco
- ▶ Multiplataforma
- ▶ Bem documentada
- ▶ Muito usada
- ▶ Quem usa?
 - Blender, GIMP, Inkscape, YouTube, NASA, CERN
 - SPSS, ESRI, ArcGIS, Abaqus, OpenOffice
 - Google, YouTube
 - Battlefield 2, The Sims 4, Civilization IV, Overwatch

Porque usar Python?

- ▶ Fácil, simples
- ▶ Sintaxe limpa
- ▶ Diversas bibliotecas já inclusas
- ▶ Mais expressiva do que muitas linguagens (C/C++, Perl, Java)
- ▶ Interativa
- ▶ Protótipos rápidos
- ▶ Alta produtividade
- ▶ Interfaces para outras linguagens como C/C++ e Fortran

Vamos começar

- ▶ Python é uma linguagem interpretada
- ▶ Não existe uma etapa de compilação do código, como em C/C++, Fortran
- ▶ Você simplesmente executa o comando python e pode começar a executar código de forma interativa

```
berg@machine:~/Desktop/$ python
Python 2.7.15 (default, May 16 2018, 17:50:09)
[GCC 8.1.1 20180502 (Red Hat 8.1.1-1)] on linux2
Type help, copyright, credits ...
>>>
```

```
>>> print 2 + 2
4
```

```
>>> print ' pink' + ' floyd'
pinkfloyd
```

```
>>> x = 2**3
```

Alguns detalhes

- ▶ Não é preciso terminar comandos com ;
 - ▶ Não é preciso declarar o tipo de dado das variáveis
-

```
>>> a = 2**3
>>> a
8
```

```
>>> x = 2.9 + 6.5 + 1.1
>>> x
10.5
```

```
>>> print type(a)
<type 'int'>
>>> print type(x)
<type 'float'>
```

- ▶ Podemos executar códigos:
 - de forma interativa usando o interpretador python, como no exemplo acima
 - ou através da linha de comando (fazer uma demonstração):
 - `$ python programa.py`

Tipos de dados

- ▶ Tipos de dados básicos: `int`, `long`, `float`, `complex`, `bool`
 - ▶ O tipo de uma variável muda conforme o valor atribuído
-

```
>>> x / 2
4
>>> type(x)
int
>>> x = 10.5
>>> type(x)
float
>>> m = (6.8 + 9.4 + 8.4)/3
>>> m
8.2000000000000001
>>> m > 6.0
True
>>> (m >= 9.0) and (m <= 10.0)
False
>>> c1 = 3 + 1j
>>> c2 = complex(-3,2)
>>> c1 + c2
3j
```

Tipos de dados - bool

- ▶ Tipo de dados `bool`
- ▶ Valores: `True`, `False` e `None`
- ▶ Operadores: `is`, `not`, `and`, `or`

```
>>> x = 11
>>> x > 0
True
>>> x % 2 == 0
False
>>> y = True
>>> not y
False
>>> x is not None
True
```

Tipagem forte

```
>>> c = "5"  
>>> q = 4  
>>> print c, q  
5 4  
>>> print c + q
```

```
Traceback (most recent call last):  
File "<stdin>", line 1, in <module>  
TypeError: cannot concatenate 'str' and 'int'
```

- ▶ Isto é, Python é uma linguagem dinâmica, mas com tipagem forte, ao contrário de outras linguagens como Perl que é dinâmica e com tipagem fraca.
- ▶ Tipagem forte costuma ser a característica que não permite um mesmo dado ser tratado como se fosse de outro tipo.
- ▶ Isto dá mais robustez ao código.

Strings

- ▶ Python define um tipo de dados nativo para strings (**str**)
- ▶ Strings podem ser delimitadas por aspas simples, dupla ou tripla

```
>>> ' simples '  
' simples '
```

```
>>> " dupla "  
' dupla '
```

```
>>> """ tripla """  
' tripla '
```

```
>>> """ tripla possui uma propriedade especial: elas  
ignoram quebra de linha, portanto a string aparece  
ela eh escrita """  
' tripla possui uma propriedade especial: elas \n '
```

Strings

```
>>> print("C:\diretorio\novo\nada.exe")
C:\diretorio
ovo
ada.exe
```

- ▶ Como evitar a quebra de linha?

```
print("C:\\diretorio\\novo\\nada.exe")
```

- ▶ Modos especiais de strings:

- raw string
- unicode string

```
>>> print(r' C:\diretorio\novo\nada.exe' )
C:\diretorio\novo\nada.exe
>>> print(u" \u2192" )
```

Strings

- Strings são imutáveis

```
>>> " hello" + " world" # concatenacao
'helloworld'
>>> s = ' hello'
>>> s[0] = ' j '
```

```
Traceback (most recent call last):
File "<stdin>", line 1, in <module>
TypeError: 'str' object does not support
item assignment
```

```
>>> sn = 'j' + s[1:]
>>> sn
'jello'
```

Strings

- O operador '+' não converte automaticamente números ou outros tipos em strings. A função `str()` converte valores para sua representação em string.

```
>>> pi = 3.14
>>> text = 'o valor de pi eh = ' + pi
Traceback (most recent call last):
File "<stdin>", line 1, in <module>
TypeError: cannot concatenate 'str' and 'float'
>>> text = 'o valor de pi eh = ' + str(pi)
```

- Formataadores especiais

```
>>> text = 'o valor de pi eh = %f' % pi
>>> print text
>>> a = 10.2
>>> i = 100
>>> s = 'oi'
>>> text = "float=%f int=%d string=%s" % (a,i,s)
```

Strings

- ▶ Acesso sequencial, em fatias ou direto (índice)
- ▶ Slice: `s[start:end]`

```
>>> s = "hello"  
>>> s[0]  
'h'  
>>> s[1:]  
'ello'  
>>> s[1:4]  
'ell'  
>>> s[:]  
'hello'  
>>> s[1:100]  
'ello'
```

Strings

► Strings possuem uma grande variedade de métodos:

- lower, upper, capitalize
- split, strip, join
- , find, replace
- startswith, islower, ...

```
>>> ". ".join("PYTHON IS POWERFUL".lower().split())  
'python. is. powerful!!! s'
```

► Passo a passo

```
>>> s = "PYTHON IS POWERFUL"  
>>> s.lower()  
'python is powerful'  
>>> s.lower().split()  
['python', 'is', 'powerful']  
>>> a = s.lower().split()  
>>> ". ".join(a)  
'python. is. powerful'  
>>> ". ".join(a) + " !!! "  
'python. is. powerful!!!'
```

Strings

```
# split()
>>> s = 'monty python and the flying circus'
>>> print s.split()
['monty', 'python', 'and', 'the', 'flying', 'circu']
# count()
>>> print s.count("th")
# join()
>>> s = "em busca do calice sagrado"
>>> s2 = s.split()
>>> print " / ".join(s2)
em/busca/do/calice/sagrado
```

- Ainda é possível realizar diversas outras operações com strings

Listas e Tuplas

- ▶ Estruturas de dados nativas: list, tuple
- ▶ Coleções de objetos heterogêneos
- ▶ Crescem até o limite da memória
- ▶ Acesso sequencial, em fatias ou direto
- ▶ Métodos para adicionar, remover, ordenar, procurar, contar
- ▶ Listas são mutáveis e tuplas são imutáveis
- ▶ Tuplas não podem ser alteradas depois de criadas
- ▶ Listas são delimitadas por [e]
- ▶ Tuplas são delimitadas por (e)

Tuplas

- Uma tupla é uma coleção de objetos separados por vírgula

```
>>> primos = (2,3,5,7)
>>> print primos[0], primos[-1]
2 7
>>> t_vazia = ()
>>> print len(t_vazia)
0
>>> u_tupla = ('oi' ,)
>>> print len(u_tupla)
1
```

- Para uma tupla com 1 elemento apenas é preciso usar (val,)

Tuplas

- ▶ Pode ter ou não parênteses para delimitar a tupla
- ▶ Tupla aninhada
- ▶ Heterogênea

```
>>> t = 12345, 54321, 'hello!' # ou
```

```
>>> t = (12345, 54321, 'hello!')
```

```
>>> t[0]
```

```
12345
```

```
>>> t
```

```
(12345, 54321, 'hello!')
```

```
# tuplas podem ser aninhadas
```

```
>>> u = t, (1, 2, 3, 4, 5)
```

```
>>> u
```

```
((12345, 54321, 'hello!'), (1, 2, 3, 4, 5))
```

```
# desempacotar tupla
```

```
>>> x,y,z = t
```

```
>>> print y
```

```
54321
```

Listas

► "Arrays flexíveis"

```
>>> a = [ 'spam', 'eggs', 100, 1234]
>>> a
[ 'spam', 'eggs', 100, 1234]
>>> a[0]
'spam'
>>> a[3]
1234
>>> a[-2]
100
>>> a[1:-1]
[ 'eggs', 100]
>>> a[:2] + [ 'bacon', 2*2]
[ 'spam', 'eggs', 'bacon', 4]
>>> 2*a[:3] + ['Boo!']
['spam', 'eggs', 100, 'spam', 'eggs', 100, 'Boo!']
```

Listas - Métodos

```
>>> a = range(5)
>>> print a
>>> a.append(5)
>>> print a
>>> a.insert(0,42)
>>> print a
>>> a.reverse()
>>> print a
>>> a.sort()
>>> print a
```

► Saída

[0, 1, 2, 3, 4]

[0, 1, 2, 3, 4, 5]

[42, 0, 1, 2, 3, 4, 5]

[5, 4, 3, 2, 1, 0, 42]

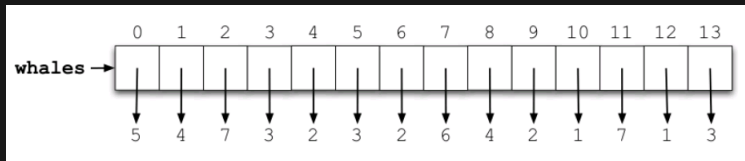
[0, 1, 2, 3, 4, 5, 42]

► Outros métodos:

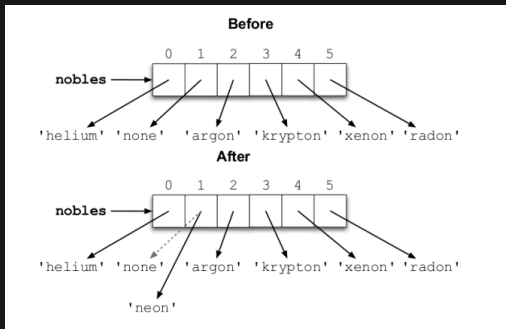
- `extend(L)`: append de uma lista L
- `remove(x)`: remove primeira ocorrência de x
- `index(x)`: retorna o índice da primeira ocorrência de x na lista

Listas - Métodos

- ▶ As listas contêm ponteiros para objetos que residem em algum lugar na memória



- ▶ Alterações



Listas

► Concatenação

```
>>> original = [ 'H', 'He', 'Li' ]  
>>> temp = [ 'Be' ]  
>>> final = original + temp  
>>> print final  
[ 'H', 'He', 'Li', 'Be' ]
```

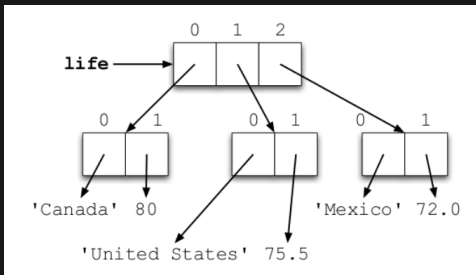
► Slice

```
>>> l = range(10)  
>>> l[2:6]  
[2, 3, 4, 5]
```

Listas

► Lista aninhada

```
>>> la = [['a', 'b'], [1, 2], [3, 4]]
>>> print la
[['a', 'b'], [1, 2], [3, 4]]
>>> print la[0]
['a', 'b']
>>> print la[1]
[1, 2]
>>> print la[2][1]
4
```



Built-ins

- ▶ A linguagem Python automaticamente importa algumas funções, tipos e símbolos que são conhecidos como built-ins.
- ▶ Mecanismos básicos da linguagem.
- ▶ Alguns exemplos
 - `range`: para listas
 - `all` e `any` para aplicar filtros booleanos em listas
 - `dict`, `list`, `set` e `object`
 - `sorted` e `reversed` para ordenar listas
 - `min`, `max` e `sum` para operações matemáticas em listas
 - `help`, `dir`
- ▶ Consulte a documentação completa:
 - <http://docs.python.org/library/functions.html>
 - <http://docs.python.org/>

A função range

► `help(range)`

Help on built-in function range in module `__builtin__`:

```
range(...)  
    range([start,] stop[, step]) -> list of integers
```

Return a list containing an arithmetic progression of integers.
`range(i, j)` returns `[i, i+1, i+2, ..., j-1]`; start (!) defaults to 0.
When step is given, it specifies the increment (or decrement).
For example, `range(4)` returns `[0, 1, 2, 3]`. The end point is omitted!
These are exactly the valid indices for a list of 4 elements.

```
>>> range(10)  
[0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]  
>>> range(10,20)  
[10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]  
>>> range(10,20,2)  
[10, 12, 14, 16, 18]  
>>> range(20,10,-1)  
[20, 19, 18, 17, 16, 15, 14, 13, 12, 11]
```

Indentação

- ▶ Aviso aos navegantes!
- ▶ Python não usa ; , begin, end para estrutura de bloco
- ▶ Código em C

```
if (num % 2 == 0)
{
    par = par + 1;
    printf("Par");
}
else
{
    impar = impar + 1;
    printf("Impar");
}
```

```
if (num % 2 == 0) {
    par = par + 1;
    printf("Par");
} else {
    impar = impar + 1;
    printf("Impar");
}
```

- ▶ Em Python a estrutura de bloco é definida pela **indentação** do código!

Indentação

- ▶ Isso mesmo!
- ▶ Tudo que pertence a um mesmo bloco fica alinhado no mesmo nível do código fonte.

```
if num % 2 == 0:
    par = par + 1
    print 'Par'
else:
    impar = impar + 1
    print 'Impar'
```

- ▶ Erro de indentação

```
if x % 2 == 0:
print 'par'
```

```
File " <stdin>", line 2
```

```
print 'par'
```

```
IndentationError: expected an indented block
```

Estruturas de Controle

► If-Else

```
if exp:
    comandos
else:
    comandos
```

► If-else-if-else

```
if exp:
    comandos
elif exp:
    comandos
else:
    comandos
```

Estruturas de Controle

► Exemplos

```
>>> x = int( raw_input("Numero: "))
>>> if x < 0:
...     print 'Negativo'
... elif x == 0:
...     print 'Zero'
... else:
...     print 'Positivo'

>>> if ((x >= 0) and (x <= 100)):
...     print "OK"
... else:
...     print "Fora do intervalo"

>>> if ((x<0) or (x>100)):
...     print "Fora do intervalo"
... else:
...     print "OK"
```

Estruturas de Controle

- ▶ Outras formas de if-else em Python

```
a = 10  
b = 20  
m = a if(a>b) else b
```

- ▶ Equivalente a

```
if(a>b):  
    m = a  
else:  
    m = b
```

- ▶ Similar ao operador ternário da linguagem C

```
m = (a > b) ? a : b;
```

Estruturas de Controle

For, While

► for

```
lst = [10,20,30, 'oi' , 'ciao' ]  
for item in lst:  
    print item  
  
for letra in "python":  
    print letra  
  
for k in range(100):  
    print k
```

► while sintaxe

```
while exp:  
    comandos  
  
while exp:  
    if exp2:  
        comandos1  
    comandos2
```

Estruturas de Controle

For, While

► Outro exemplo

```
>>> a = [ 'cat', 'spider', 'worm' ]
>>> for x in a:
...     print x, len(x)
...
cat 3
spider 6
worm 4
```

► De outra forma

```
>>> for i in range( len(a) ):
...     print i, a[i]
...
0 cat
1 spider
2 worm
```

Estruturas de Controle

enumerate()

- A função `enumerate()` cria pares uteis

```
>>> nomes = [ 'Ana', 'Maria', 'Carla' ]
>>> for par in enumerate(nomes):
...     print par
(0, 'Ana' )
(1, 'Maria' )
(2, 'Clara' )

>>> for i,nome in enumerate(nomes):
...     print i,nome
0 Ana
1 Maria
2 Clara
```

Estruturas de Controle

zip()

- A função `zip()` recebe um par de sequências como entrada e cria uma tupla com os seus elementos

```
>>> nomes = [ 'C.Ronaldo' , 'G.Jesus' , 'H.Kane' ]
>>> gols = [4,0,6]
>>> for n, g in zip(nomes,gols):
...     print '%s fez %d gols' % (n,g)
...
C.Ronaldo fez 4 gols
G.Jesus fez 0 gols
H.Kane fez 6 gols
```

Estruturas de Controle

Switch

- ▶ Python não possui uma estrutura do tipo switch, como C, C++ e Java.
- ▶ Podemos contornar a situação com uma cadeia de if-elses

```
>>> if n == 0:
...     print 'Voce digitou zero.'
... elif n == 1:
...     print 'Voce digitou um.'
... elif n == 2:
...     print 'Voce digitou dois.'
... elif n == 3:
...     print 'Voce digitou tres.'
... else:
...     print 'Voce digitou qualquer coisa.'
```

Funções

► Procedimento

```
def nome(arg1, arg2, ...):  
    comandos  
    return
```

► Função

```
def nome1(arg1, arg2, ...):  
    comandos  
    return expressao
```

```
def nome2(arg1, arg2, ...):  
    comandos  
    return exp1, exp2, exp3
```

```
def nome1(arg1, arg2, argx=valor):  
    comandos  
    return exp
```

Funções

► Exemplos

```
>>> def par(n):  
...     return (n % 2 == 0)
```

```
>>> def fib(n):  
...     """ Imprime ate n. """  
...     a, b = 0, 1  
...     while a < n:  
...         print a,  
...         a, b = b, a+b
```

```
>>> par(6)  
True
```

```
>>> fib(8)  
0 1 1 2 3 5
```

Funções

- Podemos criar funções com parâmetros opcionais que possuem um valor default pré-definido

```
>>> def mult(x, num=2):  
...     return x, x*num  
  
>>> a,b = mult(2)  
>>> print a,b # 2 4  
  
>>> a,b = mult(2, num=10)  
>>> print a,b # 2 20  
  
>>> a,b = mult(3, 5)  
>>> print a,b # 3 15
```

Funções

► Exemplo

```
def divide(a, b):  
    """  
    Divide operando a e b usando divisao inteira.  
    Retorna o quociente e resto da divisao  
    em uma tupla.  
    """  
    q = a / b  
    r = a - q * b  
    return q, r
```

► Uso

```
>>> divide(10,2)  
(5, 0)  
>>> mq, mr = divide(10,3)  
>>> print mq, mr  
3 1  
>>> help(divide)
```

Hands on

1. Escreva uma função que dada uma string que representa uma URL de uma página da web, obter apenas o endereço da página principal.
 - Exemplo

```
url_parse('http://www.facebook.com/fulano/photos')  
'www.facebook.com'
```

2. Escreva uma função `somaCumulativa()` que recebe uma lista de inteiros como parâmetro e retorna uma lista com a soma cumulativa dos elementos. Exemplo:

```
l = [1,2,3,4]  
r = somaCumulativa(l)  
print(r)  
[1, 3, 6, 10]
```

Hands on

► Dicas:

- Crie um arquivo texto `exercicio1.py` para codificar sua solução.
- Use o exemplo a seguir como base.

```
def url_parse(url):  
    """  
    Implemente a funcao abaixo  
    """  
  
def main():  
    urlteste = raw_input()  
    print url_parse(urlteste)  
  
if __name__ == "__main__":  
    main()
```

Hands on

- ▶ Módulo
- ▶ Vamos supor que você tenha codificado a função `url_parse()` em um arquivo fonte chamado `parser.py`
- ▶ Como posso usar essa função em outros programas?
- ▶ Basta usar os comandos `from` e `import` da seguinte forma

```
from parser import url_parse
```

```
a = url_parse("http://www.ufjf.br/deptocomputacao")  
print(a)
```

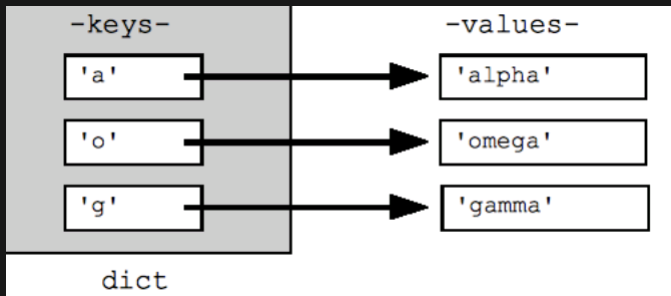
```
www.ufjf.br
```

Parte II

Aspectos um pouco mais avançados

Dicionário

- ▶ Dicionário é uma estrutura de dados muito útil que permite armazenar e recuperar pares de chaves-e-valores.
- ▶ Arrays associativos.
- ▶ De forma grosseira podemos dizer que um dicionário é uma lista que podemos acessar seus elementos através de strings.



Dicionário

```
>>> d = {}
>>> d[ 'paulo' ] = 25
>>> d[ 'jose' ] = 16
>>> d[ 'alice' ] = 21
>>> print d
{'paulo' : 25, 'jose' : 16, 'alice' : 21}
>>> print d[ 'alice' ]
21
>>> d[ 'alice' ] = 'Paris'
>>> print d
{'paulo' : 25, 'jose' : 16, 'alice' : 'Paris' }
>>> 'jose' in d
True
>>> c = { 'MG' : 25.0, 'SP' : 'rain' , 'RJ' : 40.0}
>>> print c[ 'JF' ] # KeyError
>>> if 'JF' in c: print c[ 'JF' ] # evita KeyError
>>> print c.get( 'ES' ) # retorna None
None
>>> novo = dict(a=10, b=20, c=30)
>>> print novo
{'a' : 10, 'c' : 30, 'b' : 20}
```

Dicionário

► Percorrendo dicionários

```
>>> d = dict(c=10, b=20, a=30)
```

```
>>> for key in d:  
...     print key
```

```
>>> print d.keys()  
[ 'a', 'c', 'b' ]
```

```
>>> print d.values()  
[30, 10, 20]
```

```
# loop sobre as chaves de forma ordenadas
```

```
>>> for key in sorted(d.keys()):  
...     print key, d[key]
```

```
# retorna uma lista onde cada elemento
```

```
# eh uma tupla (chave, valor)
```

```
>>> print d.items()  
[( 'a', 10), ( 'c', 30), ( 'b', 20)]
```

```
>>> for k,v in d.items():  
...     print k, '->', v
```

List comprehension

- Como vimos podemos trabalhar com listas da seguinte forma

```
>>> lista = [2,4,6,8,10]
>>> nova = []
>>> for x in lista:
...     nova.append(x*x)
```

- Entretanto a linguagem Python fornece uma sintaxe mais compacta para realizar esse tipo de operação.

```
>>> nova = [ x*x for x in lista ]
>>> print nova
[4, 16, 36, 64]
```

List comprehension

- ▶ Vejamos agora como realizar a seguinte operação usando list comprehension

```
>>> lista = [2,3,6,7,8,9,10,11]
>>> nova = []
>>> for x in lista:
...     if (x%2)==0:
...         nova.append( str(x))
...
>>> print nova
[ '2', '6', '8', '10' ]
>>>
```

- ▶ Podemos reescrever da seguinte forma

```
>>> nova = [ str(x) for x in lista if (x%2==0)]
```

- ▶ Essa nova versão introduz uma expressão que atua como uma espécie de filtro.
- ▶ Muito mais simples e elegante, não?

List comprehension

► Outro exemplo

```
>>> txt = "There is someone in my head".split()
>>> nova = [(p.upper(),p.lower(),len(p)) for p in txt]
>>> print nova
[( 'THERE', 'there' , 5),
 ( 'IS', 'is' , 2),
 ( 'SOMEONE', 'someone', 7),
 ...
]
```

► Lista com todos arquivos .py de um diretório

```
>>> import os
>>> from glob import glob
>>> files = [f for f in glob( '*.py' )]
[ 'plotPerfusionCoefs.py', 'findSurf.py' , ...]
```

Classes

- ▶ Vamos apresentar de forma rápida como construir classes em Python através de alguns exemplos.
- ▶ A classe mais simples do mundo

```
class Ponto:  
    pass
```

```
>>> p = Ponto()  
>>> print p  
<__main__.Ponto instance at 0x7f891f392098>
```

- ▶ Com construtor

```
class Ponto:  
    def __init__( self, x, y):  
        self.xCoord = x  
        self.yCoord = y
```

- ▶ Assim

```
p = Ponto(2.0, 1.0)
```

Classes

- ▶ **self** é um parâmetro especial que precisa ser incluído na definição de cada método e precisa ser o primeiro parâmetro.
- ▶ Quando um método é invocado, esse parâmetro é automaticamente preenchido com a referência ao objeto no qual o método foi invocado

```
class Ponto:
    def __init__( self, x, y):
        self.xCoord = x
        self.yCoord = y

    def getX( self):
        return self.xCoord

    def getY( self):
        return self.yCoord
```

```
p = Ponto(3.0, 1.5)
print p.getX(), p.getY()
```

Classes

- Vamos criar um método para alterar o estado de um Ponto

```
class Ponto:
    # ...
    def shift(self, xInc, yInc):
        self.xCoord += xInc
        self.yCoord += yInc
```

- Calcular a distância

```
class Ponto:
    # ...
    def distancia(self, pt):
        dx = self.xCoord - pt.xCoord
        dy = self.yCoord - pt.yCoord
        return math.sqrt(dx**2 + dy**2)
```

- Exemplo

```
p1 = Ponto(0,0); p2 = Ponto(1.0,1.0)
p2.shift(1.0, 1.0)
print "Distancia = ", p2.distancia(p1)
```

Classes

Usando módulos

```
# Arquivo ponto.py
import math

class Point:
    def __init__( self, x, y ):
        self.xCoord = x
        self.yCoord = y

    def getX( self ):
        return self.xCoord

    def getY( self ):
        return self.yCoord

    def shift( self, xInc, yInc ):
        self._xCoord += xInc
        self._yCoord += yInc

    def distance( self, otherPoint ):
        xDiff = self.xCoord - otherPoint.xCoord
        yDiff = self.yCoord - otherPoint.yCoord
        return math.sqrt( xDiff**2 + yDiff**2 )
```


Classes

Usando módulos

- Podemos usar a classe Ponto da seguinte forma:

```
from ponto import Ponto

p1 = Ponto(5,7)
p2 = Ponto(0,0)

x = p1.getX()
y = p1.getY()

print( "(" + str(x) + ", " + str(y) + ")" )

p1.shift(4, 12)
d = p1.distancia(p2)
```

Classes

Escondendo atributos

- ▶ Ao contrário da maioria das linguagens que suportam orientação a objetos, Python não possui um mecanismo para esconder ou proteger os atributos de uma classe de acessos externos.
- ▶ Em C++ temos os modificadores: `protected`, `public`, `private`
- ▶ O responsável pela classe é que deve indicar quais atributos e quais métodos devem ser protegidos.
- ▶ E fica como responsabilidade do usuário da classe, não violar essa proteção.
- ▶ Ainda assim é possível "emular" esse tipo de proteção, basta acrescentar dois underlines na frente do nome de um atributo ou método.

Classes

Escondendo atributos

- ▶ Repare que na implementação anterior da classe `Ponto` não protegemos os atributos `xCoord` e `yCoord`.
- ▶ Isso permite que um usuário altere os atributos internos:

```
class Ponto:
    def __init__(self, x, y):
        self.xCoord = x
        self.yCoord = y
```

```
>>> p = Ponto(2.0, 2.0)
>>> print p.xCoord
2.0
```

```
>>> p.xCoord = 'zebra'
>>> print p.xCoord
zebra
```

- ▶ O ideal é que o usuário só altere o estado do objeto através de métodos que operem sobre o mesmo, e não manipulando os seus atributos.

Classes

Escondendo atributos

- Python permite emular esse ocultamento de informação da seguinte forma:

```
class Linha:
    def __init__(self, pA, pB):
        self.__pontoA = pA    # atributo protegido
        self.__pontoB = pB    # atributo protegido

    def pontoA(self):
        return self.__pontoA

    def pontoB(self):
        return self.__pontoB

    def comprimento(self):
        return self.__pontoA.distancia(self.__pontoB)

    def mesmoX(self):
        ax = self.__pontoA.getX()
        bx = self.__pontoB.getX()
        return ax == bx
```

Classes

Sobrecarga de operadores

- Em Python podemos implementar e definir a funcionalidade de diversos operadores como `+`, `*`, `==` como parte de nossas classes.

```
class Ponto:
    # ...
    def __eq__(self, outroPonto):
        r = self.xCoord == outroPonto.xCoord and \
            self.yCoord == outroPonto.yCoord
        return r
```

- Exemplo

```
>>> p1 = Ponto(1.0,1.0)
>>> p2 = Ponto(0.0,0.0)
>>> p2.shift(1.0,1.0)
>>> if p1 == p2:
...     print "Os pontos sao iguais."
```

Classes

Sobrecarga de operadores

► Mais um exemplo

```
class Ponto:
    # ...
    def __str__(self):
        x,y = self.xCoord, self.yCoord
        return " ( %f , %f ) " % (x,y)
```

```
>>> p = Ponto(1.5, 2.5)
>>> print(p)
(1.500000, 1.500000)
```

str(obj)	__str__(self)	obj + rhs	__add__(self, rhs)
len(obj)	__len__(self)	obj - rhs	__sub__(self, rhs)
item in obj	__contains__(self, item)	obj * rhs	__mul__(self, rhs)
y = obj[ndx]	__getitem__(self, ndx)	obj / rhs	__truediv__(self, rhs)
obj[ndx] = value	__setitem__(self, ndx, value)	obj // rhs	__floordiv__(self, rhs)
obj == rhs	__eq__(self, rhs)	obj % rhs	__mod__(self, rhs)
obj < rhs	__lt__(self, rhs)	obj ** rhs	__pow__(self, rhs)
obj <= rhs	__le__(self, rhs)	obj += rhs	__iadd__(self, rhs)
obj != rhs	__ne__(self, rhs)	obj -= rhs	__isub__(self, rhs)
obj > rhs	__gt__(self, rhs)	obj *= rhs	__imul__(self, rhs)
obj >= rhs	__ge__(self, rhs)	obj /= rhs	__itruediv__(self, rhs)
		obj //= rhs	__ifloordiv__(self, rhs)
		obj %= rhs	__imod__(self, rhs)
		obj **= rhs	__ipow__(self, rhs)

Programação Funcional

- ▶ Além de suportar programação estruturada e orientação a objetos, Python também possui recursos de programação funcional.
- ▶ Vamos apresentar de forma prática alguns destes mecanismos:
 - Funções `lambda`
 - `map`, `filter` e `reduce`
- ▶ Existem muitos outros recursos de programação funcional como iterators e generators, que não teremos tempo de discutir.

Programação Funcional

map

- ▶ A função `map` recebe uma sequência (ex: lista) e aplica uma função a cada um de seus elementos e retorna uma sequência com o resultado da aplicação da função.
- ▶ Calcular o quadrado dos elementos de uma lista

```
>>> def square(num): return num*num
>>> print map(square, range(5))
[0, 1, 4, 9, 16]
```

- ▶ Somar elemento a elemento de duas listas

```
>>> def sum(a,b): return a + b
>>> print range(5)
[0, 1, 2, 3, 4]
>>> print range(10,15)
[10, 11, 12, 13, 14]
>>> print map(sum, range(5), range(10,15))
[10, 12, 14, 16, 18]
```

Programação Funcional

filter

- ▶ A função `filter` recebe um predicato e retorna apenas os elementos da sequência para os quais o predicado resulta no valor `True`.

```
>>> def is_even(num): return num % 2 == 0
>>> print filter(is_even, range(5))
[0, 2, 4]
```

Programação Funcional

reduce

- ▶ A função reduce começa com um valor inicial, e reduz a sequência até um único valor aplicando a função em cada um dos elementos da sequência junto com o valor atual reduzido.
- ▶ Calcular a soma dos quadrados dos números de 0 a 4 de uma lista

```
>>> def soma(reduced, num):  
...     return reduced + num*num  
>>> print reduce(soma, range(5), 0)  
30
```

- ▶ Outro exemplo

```
>>> a = list([10, 72, 40, 60])  
>>> reduce(lambda r,x: x if(x>r) else r, a)  
72
```

Programação Funcional

- Compare com as seguintes versões

```
# map
seq = []
for num in range(5):
    seq = seq + [num * num]
print seq

# filter
seq = []
for num in range(5):
    if num % 2 == 0:
        seq = seq + [num]
print seq

# reduce
total = 0
for num in range(5):
    total = total + (num * num)
print total
```

Programação Funcional

- Python suporta a criação de funções anônimas (i.e: funções que não estão ligadas a um nome) em tempo de execução, usando uma construção através da palavra chave `lambda`.

```
>>> def f (x):  
...     return x**2  
>>> print f(8)  
64  
  
>>> g = lambda x: x**2  
>>> print g(8)  
>>> 64
```

- Funções `lambda` não precisam de usar a palavra chave `return`

Programação Funcional

- Vejamos um exemplo mais interessante

```
>>> def make_incrementor (n):  
...     return lambda x: x + n
```

```
>>> f = make_incrementor(2)  
>>> g = make_incrementor(6)
```

```
>>> print f(42), g(42)  
44 48
```

- O uso de funções lambda com map, filter e reduce é muito prático

```
>>> print map(lambda x: x**2, range(5))  
[0, 1, 4, 9, 16]
```

```
>>> print filter(lambda x: x % 2 == 0, range(5))  
[0, 2, 4]
```

```
>>> print reduce(lambda r, n: r + n*n, range(5), 0)  
30
```

Programação Funcional

- ▶ **Python 3**
- ▶ Some well-known APIs no longer return lists:
 - `map()` and `filter()` return iterators. If you really need a list, a quick fix is e.g. `list(map(...))`, but a better fix is often to use a list comprehension (especially when the original code uses `lambda`), or rewriting the code so it doesn't need a list at all. Particularly tricky is `map()` invoked for the side effects of the function; the correct transformation is to use a regular for loop (since creating a list would just be wasteful).
- ▶ Builtins
 - Removed `reduce()`. Use `functools.reduce()` if you really need it; however, 99 percent of the time an explicit for loop is more readable.

Programação Funcional

► No Python 2

```
>>> def square(num):  
...     return num*num  
  
>>> print map(square, range(5))  
[0, 1, 4, 9, 16]
```

► No Python 3

```
>>> def square(num):  
...     return num*num  
  
>>> print( list(map(square, range(5)) ) )  
[0, 1, 4, 9, 16]
```

Arquivos

- ▶ Arquivos são um tipo built-in do Python que são representados por objetos.
- ▶ Ou seja, não é preciso de importar módulos para trabalhar com arquivos em seu programa.
- ▶ Antes de um arquivo ser usado é preciso primeiro criar um objeto que representa o arquivo e então abrir o mesmo.

```
infile = open('dados.txt', 'r')  
outfile = open('notas.txt', 'w')
```

- ▶ Processamento (lê do arquivo/escreve no arquivo)
- ▶ Depois que o processamento com os arquivos termina, é preciso fechar os mesmos

```
infile.close()  
outfile.close()
```

Arquivos

► Escrevendo em arquivos

```
ofile = open('notas.txt', 'w')
ofile.write('Notas da Prova\n')
ofile.write(' - ' * 40 + '\n')

for e in estudantes:
    ofile.write('%s \t %6.2f\n' % (e.nome, e.nota))

ofile.write(' - ' * 40 + '\n')
ofile.close()
```

- É preciso colocar explicitamente a quebra de linha `n` no comando `write`, diferentemente do `print`

Arquivos

- ▶ Lendo de arquivos

```
infile = open("dados.txt", "r")  
line = infile.readline()  
data_count = int(line)  
for i in range(data_count):  
    line = infile.readline()  
infile.close()
```

- ▶ Podemos usar o metodo `rstrip()` para remover espacos em branco à direita

```
line = infile.readline()  
sline = line.rstrip()
```

Arquivos

► Lendo de arquivos

```
infile = open("dados.txt", "r")
line = infile.readline()
data_count = int(line)
for i in range(data_count):
    line = infile.readline()
infile.close()
```

► Podemos usar o metodo `rstrip()` para remover espacos em branco à direita

```
line = infile.readline()
sline = line.rstrip()
```

► Ou podemos quebrar a linha em várias partes

```
# linhas no formato: nome idade nota
line = infile.readline()
temp = line.split()
nome, idade, nota = temp[0], temp[1], temp[2]
```

Hands on

1. Dada uma lista com palavras (strings), escreva um programa que crie uma lista de inteiros que corresponda ao tamanho das palavras. Escreva duas versões do programa: (i) usando um loop `for` e (ii) usando a função `map()`.
2. Escreva uma função `maior_palavra()` que recebe uma lista de palavras e retorna o comprimento da maior palavra da lista. Use apenas as funções `map`, `filter`, `reduce` e `lambda` para implementação.

Hands on

3. Vamos implementar uma função `le_pontos()` que recebe a string com o nome de um arquivo texto, contendo as coordenadas de um conjunto de pontos 2D, lê o seu conteúdo e retorna uma listas com objetos Ponto.

Teremos que usar a classe Ponto definida anteriormente.

Exemplo:

```
>>> arquivo = "pontos.txt"
>>> pts = le_pontos(arquivo)
>>> for pt in pts:
>     print pt
(x1,y1)
(x2,y2)
.
.
.
(xn,yn)
```

Hands on

- Considere arquivos de entrada no formato

```
9
0.0 0.0
1.0 0.0
2.0 0.0
0.0 1.0
1.0 1.0
2.0 1.0
0.0 2.0
1.0 2.0
2.0 2.0
```

Parte III

Computação Científica com Python

Workflow Científico

- ▶ Gerar dados (simulação, experimentos)
- ▶ Manipular e processar os dados
- ▶ Visualizar os resultados
 - Para entender, interpretar e validar o que estamos fazendo
- ▶ Comunicar os resultados
 - Produzir figuras para relatórios e publicações
 - Apresentações
- ▶ Objetivo: apresentar os elementos básicos da linguagem Python para escrever programas para solução computacional de problemas científicos, manipular, processar e visualizar os dados.

O que é NumPy?

- ▶ Numerical Python
- ▶ Biblioteca para manipulação de arrays multidimensionais e matrizes.
- ▶ Operações rápidas em arrays (funções vetorizadas)
- ▶ Diferença com relação a listas tradicionais do Python
 - Vetor homogêneo
 - Muito mais eficientes do que as listas
 - Número de elemento deve ser conhecido a priori.
 - O array pode ser redimensionado posteriormente.
 - Muito eficiente (implementado em C)



Python Puro VS NumPy

```
# Python puro
import time
l = 10000000
start = time.time()

a, b = range(1), range(1)
c = []
for i in a:
    c.append(a[i] * b[i])

t = time.time() - start
print( " Tempo: %s" % t)
```

Tempo: 2.46 s

```
# NumPy
import time
import numpy as np
l = 10000000
start = time.time()

a = np.arange(1)
b = np.arange(1)
c = a * b

t = time.time() - start
print( " Tempo: %s" % t)
```

Tempo: 0.13 s

Criando vetores NumPy

- Arrays NumPy podem ser criados a partir de estruturas de dados do Python (listas, tuplas) ou a partir de funções específicas para criação de arrays.

<code>zeros((M,N))</code> <code>ones((M,N))</code> <code>empty((M,N))</code>	vetor com zeros, M linhas, N colunas vetor com uns, M linhas, N colunas vetor vazio, M linhas, N colunas
<code>zeros_like(A)</code> <code>ones_like(A)</code> <code>empty_like(A)</code>	vetor com zeros, mesmo formato de A vetor com uns, mesmo formato de A vetor vazio, mesmo formato de A
<code>random.random((M,N))</code> <code>identity(N)</code> <code>array([[1.5,2,3],[4,5,6]])</code>	vetor com numeros aleatorios, MxN matriz identidade NxN, ponto flutuante cria a partir de lista ou tupla
<code>arange(I, F, P)</code> <code>linspace(I, F, N)</code>	vetor com inicio I, fim F, passo P vetor com N números de I até F

Criando vetores NumPy

```
>>> import numpy as np

# np.float64
>>> a = np.array( [36.4, 21.6, 15.6, 27.5] )
>>> a
array([ 36.4,  21.6,  15.6,  27.5])

# np.float64
>>> az = np.zeros(4)
>>> az
array([ 0.,  0.,  0.,  0.])

# np.int32
>>> a = np.arange(10)
>>> a
array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])

# np.float64
>>> a = np.arange(0.0, 1.0, 0.2)
>>> a
array([ 0. ,  0.2,  0.4,  0.6,  0.8])
```

Criando vetores NumPy

```
>>> a = np.linspace(0.0, 1.0, 6)
>>> print a
[ 0.    0.2  0.4  0.6  0.8  1. ]
>>> print a.size, a.ndim, a.shape
6 1 (6,)
```

```
>>> m = a.reshape(2,3)
>>> print m
[[ 0.    0.2  0.4]
 [ 0.6  0.8  1. ]]
>>> print m.size, m.ndim, m.shape
6 2 (2, 3)
```

```
>>> Z = np.zeros((3,3))
>>> print Z
[[ 0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.]]
```

Acessando arrays

- ▶ Exemplo com array bidimensional

```
>>> a = np.arange(24)
>>> a = a.reshape((4,6))
>>> a[2,4]
16
```

Acessando arrays

```
>>> a = np.arange(24)
>>> a = a.reshape((4,6))
>>> a[2,4]
16

>>> a[1]
array([ 6,  7,  8,  9, 10, 11])
```

Acessando arrays

```
>>> a = np.arange(24)
>>> a = a.reshape((4,6))
>>> a[2,4]
16
>>> a[1]
array([ 6,  7,  8,  9, 10, 11])

>>> a[-1]
array([18, 19, 20, 21, 22, 23])
```

Acessando arrays

```
>>> a = np.arange(24)
>>> a = a.reshape((4,6))
>>> a[2,4]
16
>>> a[1]      # ou a[1,:]
array([ 6,  7,  8,  9, 10, 11])
>>> a[-1]
array([18, 19, 20, 21, 22, 23])

>>> a[:,1]
array([ 1,  7, 13, 19])
```

Acessando arrays

```
>>> a = np.arange(24)
>>> a = a.reshape((4,6))
>> a[2,4]
16
>>> a[1]      # ou a[1,:]
array([ 6,  7,  8,  9, 10, 11])
>>> a[-1]
array([18, 19, 20, 21, 22, 23])
>>> a[:,1]
array([ 1,  7, 13, 19])

>>> a[1:3,:]
array([[ 6,  7,  8,  9, 10, 11],
       [12, 13, 14, 15, 16, 17]])
```

Acessando arrays

```
>>> a = np.arange(24)
>>> a = a.reshape((4,6))
>>> a[2,4]
16
>>> a[1]      # ou a[1,:]
array([ 6,  7,  8,  9, 10, 11])
>>> a[-1]
array([18, 19, 20, 21, 22, 23])
>>> a[:,1]
array([ 1,  7, 13, 19])
>>> a[1:3,:]
array([[ 6,  7,  8,  9, 10, 11],
       [12, 13, 14, 15, 16, 17]])

>>> a[1:4,2:5]
array([[ 8,  9, 10],
       [14, 15, 16],
       [20, 21, 22]])
```

Acessando arrays

```
>>> a = np.arange(24)
>>> a = a.reshape((4,6))
>>> a[2,4]
16
>>> a[1]      # ou a[1,:]
array([ 6,  7,  8,  9, 10, 11])
>>> a[-1]
array([18, 19, 20, 21, 22, 23])
>>> a[:,1]
array([ 1,  7, 13, 19])
>>> a[1:3,:]
array([[ 6,  7,  8,  9, 10, 11],
       [12, 13, 14, 15, 16, 17]])

>>> a[:, :2, :3]
array([[ 0,  3],
       [12, 15]])
```

Operações com arrays

- NumPy suporta operações aritméticas entre arrays sem o uso de loops com `for` (implementado em C)

```
>>> import numpy as np
>>> a,b = np.arange(1,11), np.arange(1,11)
>>> a
array([ 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10])
>>> a + 1
array([ 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11])
>>> a * 2
array([ 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20])
>>> a * b
array([ 1, 4, 9, 16, 25, 36, 49, 64, 81, 100])
>>> a ** 3
array([ 1, 8, 27, 64, 125, 216, 343, 512, 729, 1000])
```

Operações com arrays

► Outras operações

```
>>> a=np.array([1,0,1])
>>> b=np.array([2,2,4])
>>> np.dot(a,b)
6
```

```
>>> a = np.array([1,0,0])
>>> b = np.array([0,1,0])
>>> np.cross(a,b)
array([0, 0, 1])
```

```
>>> a,b = np.array([1,2,3]), np.array([1,2,3])
>>> np.outer(a,b)
array([[1, 2, 3],
       [2, 4, 6],
       [3, 6, 9]])
```

Funções e Arrays NumPy

- ▶ Avaliar funções usando arrays NumPy

- ▶ Exemplo:
 $f(x) = e^{\sin(x)}$

- ▶ Loops em vetores NumPy muito grandes são lentos

- ▶ Alternativas:

- *Vectorization*
- NumPy oferece diversas funções prontas

```
from math import exp, sin
import numpy as np
```

```
def f(x):
    return exp(sin(x))
```

```
x = np.linspace(0.0, 6.0, 100)
y = np.zeros(x.size)
```

```
for i in range(x.size):
    y[i] = f(x[i])
```

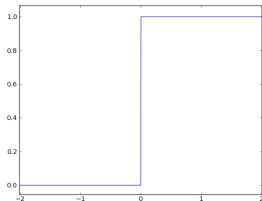
Vectorization

- ▶ Aplicar f diretamente em todo o vetor
- ▶ Muito mais eficiente
- ▶ Mais compacto e fácil de ler
- ▶ Nem todas funções `def func(x)` estão prontas para serem usadas desta forma

```
import numpy as np
```

```
def f(x):  
    return np.exp(np.sin(x))
```

```
x = np.linspace(0.0, 6.0, 1000)  
y = f(x)
```



Vectorization

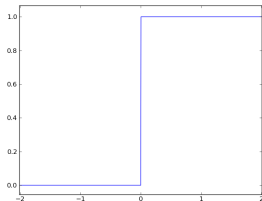
- ▶ Aplicar f diretamente em todo o vetor
- ▶ Muito mais eficiente
- ▶ Mais compacto e fácil de ler
- ▶ Nem todas funções `def func(x)` estão prontas para serem usadas desta forma

```
import numpy as np
```

```
def f(x):  
    return np.exp(np.sin(x))
```

```
x = np.linspace(0.0, 6.0, 1000)  
y = f(x)
```

```
# funcao degrau  
def H(x):  
    if (x<0):  
        return 1  
    else:  
        return 0
```



Vectorization

```
>>> x = np.linspace(-1,1,5)
array([-1. , -0.5, 0. , 0.5, 1. ])
>>> x < 0
array([ True,  True, False, False, False])
```

- ▶ Como vetorizar funções assim?
- ▶ Usar a função `where`
- ▶ Uso: `where(condition, x1, x2)`
- ▶ Retorna um array do mesmo tamanho de `condition`, onde o elemento `i` é igual a `x1[i]` se `condition[i]` é `True`, ou igual a `x2[i]` caso contrário (`False`).

Vectorization

► Forma geral

```
def fun_vec(x):  
    cond = <exp_condicao>  
    x1 = <expressao1>  
    x2 = <expressao2>  
    return np.where(cond, x1, x2)
```

► Para o exemplo anterior temos

```
def Hv(x):  
    cond = x < 0  
    return np.where(cond, 0.0, 1.0)
```

Alguns métodos dos vetores

<code>a.sum()</code>	soma todos elementos
<code>a.min()</code>	menor elemento
<code>a.max()</code>	maior elemento
<code>a.mean()</code>	média aritmética
<code>a.std()</code>	desvio padrão
<code>a.var()</code>	variância
<code>a.trace()</code>	traço
<code>a.copy()</code>	retorna cópia
<code>a.conjugate()</code>	complexo conjugado

```
>>> notas = np.array([6., 7.5, 8., 9.2, 4.3])
>>> notas.mean()
7.0
>>> notas.max()
9.2
>>> notas.min()
4.3
```

Copiando Arrays

- A expressão $a = x$ faz com que a aponte para o mesmo array que x . Logo, mudanças em a também irão afetar x

```
>>> x = np.array([1., 2., 3.5])
>>> a = x
>>> a[-1] = 3 # tambem altera x[-1]
>>> x
array([1., 2., 3.])
```

```
>>> x = np.array([1.,2.,3.5])
>>> a = x.copy()
>>> a[-1] = 9
>>> a
array([ 1.,  2.,  9.])
>>> x
array([ 1. ,  2. ,  3.5])
```

Matrizes

- ▶ Os arrays usados até então são do tipo **ndarray**
- ▶ NumPy também possui um tipo chamado **matrix**
- ▶ Sempre bidimensional
- ▶ Algumas propriedades especiais de matrizes:
 - `matrix.I` (inversa)
 - `matrix.T` (transposta)
 - `matrix.H` (conjugada)
 - `matrix.A` (converte para array)
- ▶ Operador de multiplicação (*) efetua as operações usuais da Álgebra Linear
 - `matriz-matriz`
 - `matriz-vetor`
 - `vetor-matriz`

Matrices

```
>>> import numpy as np
>>> m=np.matrix([[1, 2], [3,4]])
>>> m
matrix([[1, 2],
        [3, 4]])
>>> m.I
matrix([[ -2. ,  1. ],
        [ 1.5, -0.5]])
>>> m.T
matrix([[1, 3],
        [2, 4]])

# continua ...
```

Matrizes

```
>>> b = np.array([2,1])
>>> b = np.matrix(b)

>>> b                                # vetor linha
matrix([[2, 1]])

>>> b * m                            # vet * mat
matrix([[5, 8]])

>>> b = b.T                          # vetor coluna
>>> b
array([[2],
       [1]])

>>> m * b                            # mat * vet
matrix([[ 4],
       [10]])

>>> m * m.I                          # mat * mat
matrix([[1.0000e+00, 1.1102e-16],
       [0.0000e+00, 1.0000e+00]])
```

Matrizes e Álgebra Linear

- ▶ O módulo **numpy.linalg** possui diversas funções de Álgebra Linear
- ▶ Solução de Sistema de Equações Lineares

$$3x + 2y + 4z = 1$$

$$1x + 1y + 2z = 2$$

$$4x + 3y - 2z = 3$$

```
>>> import numpy.linalg as linalg
>>> A = np.matrix([[3.,2.,4.],
                  [1.,1.,2.],
                  [4.,3.,-2.]])

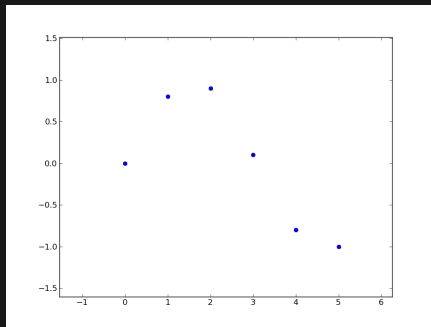
>>> A
matrix([[ 3.,  2.,  4.],
        [ 1.,  1.,  2.],
        [ 4.,  3., -2.]])

>>> b = np.matrix([[1.],[2.],[3.]])
>>> b
matrix([[ 1.],
        [ 2.],
        [ 3.]])

>>> x = linalg.solve(A,b)
>>> x
matrix([[ -3.],
        [  5.],
        [  0.]])
```

Ajuste de Curvas

- ▶ Dado os valores de uma função $f(x)$ em um conjunto de pontos, encontrar uma função $g(x)$ que melhor se aproxime de $f(x)$.
- ▶ Aproximação polinomial pelo método dos mínimos quadrados
- ▶ $g(x) \Rightarrow$ combinação de funções polinomiais
- ▶ `numpy.polyfit(x,y,degree)`



x	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0
$f(x)$	0.0	0.8	0.9	0.1	-0.8	-1.0

Ajuste de Curvas

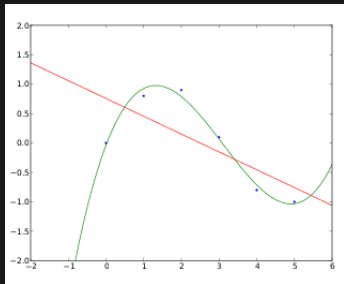
```
>>> import numpy as np

>>> x=np.array([0.0, 1.0, 2.0,
3.0, 4.0, 5.0])

>>> y=np.array([0.0, 0.8, 0.9,
0.1, -0.8, -1.0])

>>> c1 = np.polyfit(x, y, 1)
>>> c1
array([-0.30285714,
0.75714286])
>>> p1 = np.poly1d(c1)

>>> c3 = np.polyfit(x, y, 3)
>>> c3
array([ 0.08703704, -0.81349206,
1.69312169, -0.03968254])
>>> p1 = np.poly1d(c3)
```



- ▶ Coleção de algoritmos matemáticos e funções utilitárias
- ▶ Implementado em cima do NumPy
- ▶ Dividido em sub-módulos
 - constants: Constantes físicas
 - fftpack: Transformada Rápida de Fourier
 - integrate: Integração numérica e ODE solvers
 - interpolate: Interpolação (Splines)
 - stats: Distribuições e funções estatísticas
 - optimize: Otimização
 - sparse: Matrizes esparsas
 - linalg: Álgebra Linear
 - io: Entrada e Saída
 - signal: Processamento digital de sinais
 - ndimage: Processamento digital de imagens

Integração Numérica com SciPy

- Exemplo: $\int_0^4 x^2 dx$

```
>>> from scipy import integrate
>>> def fx2(x):
>>>     return x*x

>>> integrate.quad(fx2, 0.0, 4.0)
(21.333333333333332, 2.3684757858670003e-13)

>> print 4.**3/3
21.3333333333
```

- **integrate.quad** usa um método de quadratura adaptativa implementado em Fortran no pacote QUADPACK

Integração Numérica com SciPy

- ▶ Mais métodos disponíveis
 - `fixed_quad`: quadratura Gaussiana
 - `odeint`: integrar Equações Diferenciais Ordinárias
- ▶ Integrar dados discretos
 - `trapz`, `simps` e `romb`

```
>>> x = linspace(0.0, 4.0, 25)
>>> y = fx2(x)
array([0.0, 0.16667, 0.3333, ..., 4.0])

>>> integrate.trapz(y, dx=x[1]-x[0])
21.351851851851851
```

Visualização de dados com matplotlib

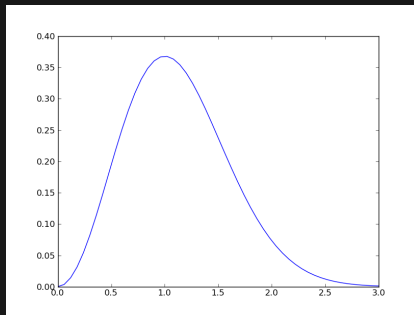
- ▶ A biblioteca matplotlib permite a visualização de dados 2D seguindo o estilo do MATLAB
- ▶ Gráficos de qualidade para publicações
- ▶ Exporta para diversos formatos
- ▶ Possibilidade de embutir em interfaces gráficas (Qt, GTK, ...)
- ▶ Baseado no NumPy e SciPy
- ▶ **pylab**: módulo com diversas funções para plotar gráficos de forma fácil



matplotlib

- ▶ Exemplo mais simples de uso: **plot(x,y)**
- ▶ Gráficos são gerados sucessivamente, i.e., cada chamada a função **plot** altera o gráfico

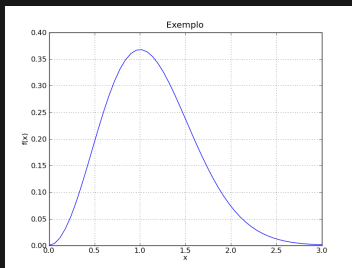
```
>>> import numpy as np
>>> from pylab import *
>>> x = np.linspace(0,3,51)
>>> y = x**2 * np.exp(-x**2)
>>> plot(x,y)
>>> show()
```



matplotlib

► Decorando o gráfico

```
>>> import numpy as np
>>> from pylab import *
>>> x = np.linspace(0,3,51)
>>> y = x**2 * np.exp(-x**2)
>>> plot(x,y)
>>> grid(True)
>>> xlabel('x')
>>> ylabel('f(x)')
>>> title("Exemplo")
>>> show()
```

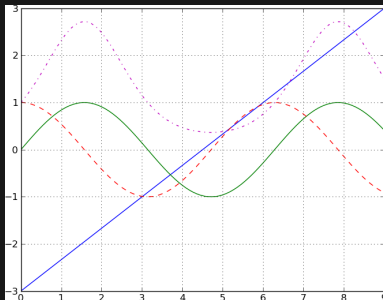


matplotlib

► Várias curvas

```
>>> y = np.linspace(-3, 3, 10)
>>> plot(y)

>>> x = np.linspace(0, 9, 100)
>>> plot(x, sin(x))
>>> plot(x, cos(x), linestyle='--', color='r')
>>> plot(x, exp(sin(x)), linestyle='-.', color='m')
>>> grid(True)
>>> show()
```



matplotlib

- ▶ Controlando o estilo do plot
- ▶ A função plot aceita uma string especificando o estilo da linha e do símbolo usando o seguinte formato:
'<color><linestyle><marker>'

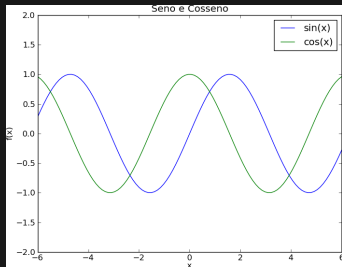
Cores (color)			
r	vermelho	c	ciano
g	verde	m	magenta
b	azul	y	amarelo
w	branco	k	preto

Símbolos (marker)			
.	pontos	o	circulo
s	quadrados	+	cruz
x	"xis"	*	estrela
D	diamante	d	diamante peq.
		^	triangulo baixo
		v	triangulo cima
		<	triangulo esq
		>	triangulo dir

Estilo da Linha (linestyle)	
-	solid line
- -	dashed line
- .	dash-dot line
:	dotted line

```
import numpy as np
from pylab import *

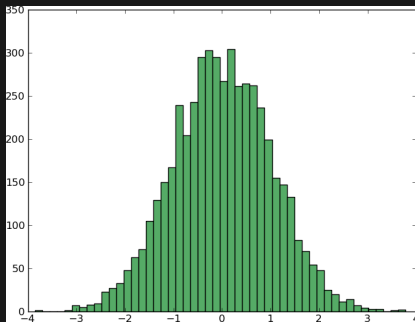
x = np.linspace(-6, 6, 500)
plot(x, sin(x), label='sin(x)')
>>> plot(x, cos(x), label='cos(x)')
>>> title('Seno e Cosseno')
>>> xlabel('x')
>>> ylabel('f(x)')
>>> axis([-6,6,-2,2])
>>> legend(loc="upper right")
```



matplotlib

- ▶ Histogramas
- ▶ `hist(x, bins=10)`
- ▶ Distribuição normal $N(0, 1)$

```
>>> import numpy as np
>>> from pylab import *
>>> y = np.random.randn(1000)
>>> hist(y, bins=50)
```



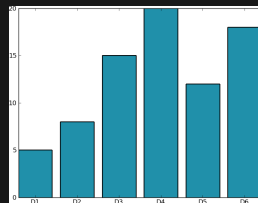
matplotlib

- ▶ Gráfico de barras
- ▶ `bar(x, height)`: plota um gráfico de barras com retângulos
- ▶ `xticks(x, labels)`: posiciona rótulos dos retângulos

```
>>> import numpy as np
>>> from pylab import *

>>> x=[1,2,3,4,5,6]
>>> y=[5,8,15,20,12,18]

>>> bar(x,y,align='center',
color='#2090AA')
>>> lab = ("D1","D2","D3","D4","D5","D6")
>>> xticks(x, lab)
```



matplotlib

- ▶ Salvando os gráficos em figuras

- ▶ `savefig(filename):`

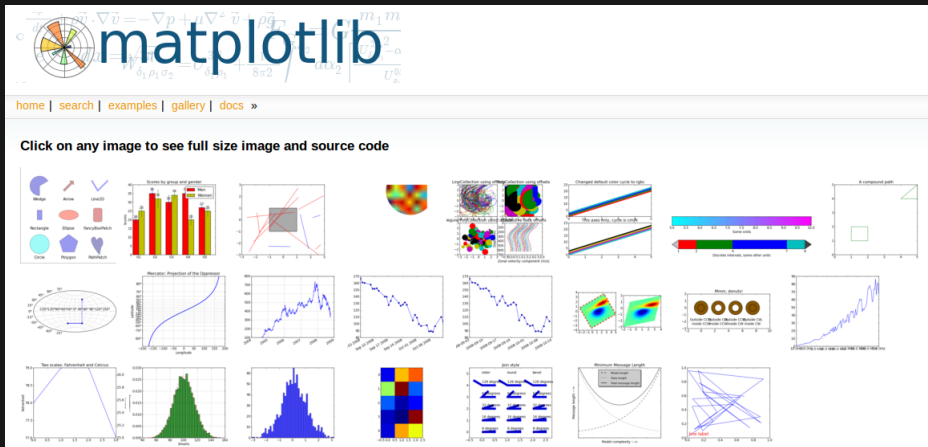
Salva a figura atual usando o formato.

Alguns parâmetros opcionais:

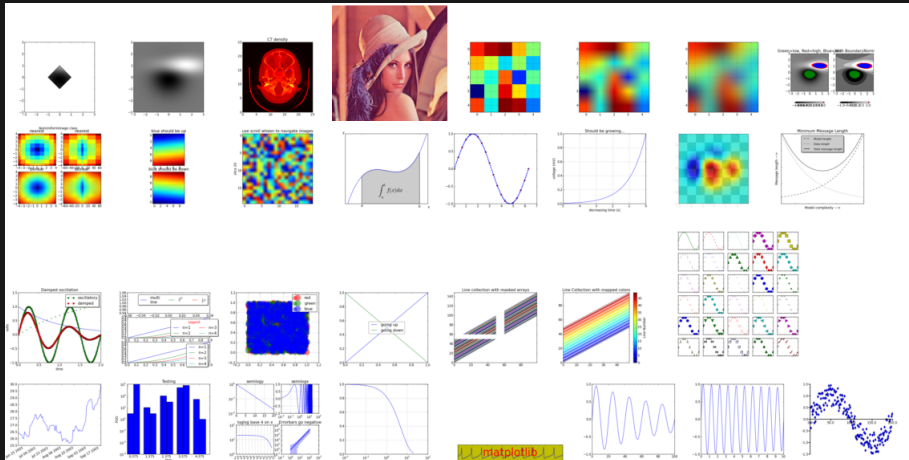
- `format`: 'png', 'pdf', 'ps', 'eps', 'svg'
- `transparent`: True ou False

```
>>> import numpy as np
>>> from pylab import *
>>> x = np.linspace(-3,3,1000)
>>> y = sin(1/x)
>>> plot(x,y)
>>> savefig("seno1sx", format="eps")
```

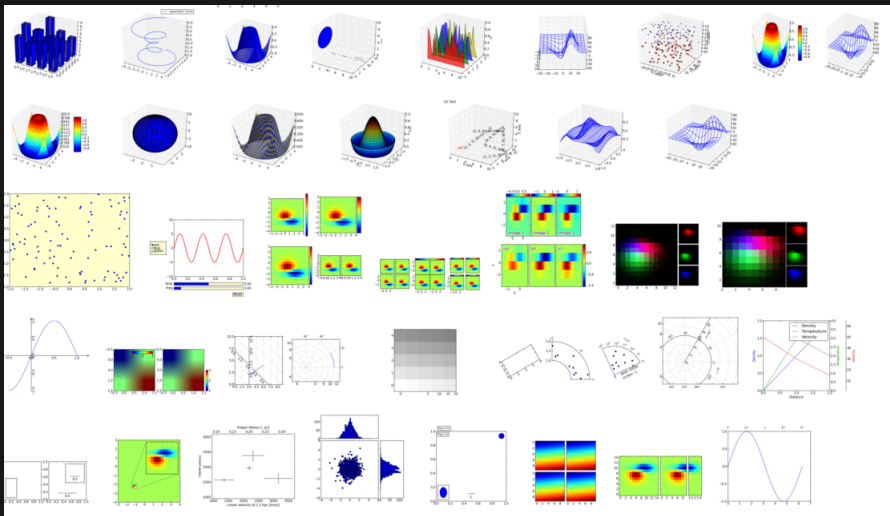
Galeria do matplotlib



Galeria do matplotlib



Galeria do matplotlib



Exemplo Completo

- ▶ Problema: Resolver uma Equação Diferencial Ordinária (EDO)
- ▶ Encontrar $u(t)$ tal que

$$u'(t) = f(u(t), t)$$

- ▶ dada a condição Inicial

$$u(0) = u_0$$

- ▶ Exemplo: Crescimento exponencial (população)

$$u'(t) = au$$

- ▶ onde a é uma constante dada que representa a taxa de crescimento de u .

Exemplo Completo

- ▶ Método de Euler Explícito

$$u_{k+1} = u_k + \Delta t \, f(u_k, t_k)$$

- ▶ onde:

- u_k é a aproximação numérica da solução exata $u(t)$ no tempo t_k
- Δt é o passo de tempo
- $t_k = k\Delta t$, $k = 0, \dots, n$

- ▶ Solução analítica para o exemplo

$$u(t) = u_0 e^{at}$$

Exemplo Completo - Algoritmo

- ▶ Dado: $u_0, a, T, \Delta t$
- ▶ Calcular n (número de passos de tempo)
- ▶ Para k de 0 até n faça
 - Calcular u_{k+1} usando

$$u_{k+1} = u_k + f(u_k, t_k)\Delta t$$

- ▶ Exibir os resultados

Exemplo Completo - Python

► $u'(t) = u, \quad u_0 = 1, \quad T = 3$

```
import numpy as np
from pylab import *

u0 = 1
T = 3.0
dt = 0.01
n = int(T/dt)

# inicializa vetores
u = np.zeros(n+1)
v = np.zeros(n+1)
t = np.zeros(n+1)

# condicao inicial
t[0] = 0.0
u[0] = u0
```

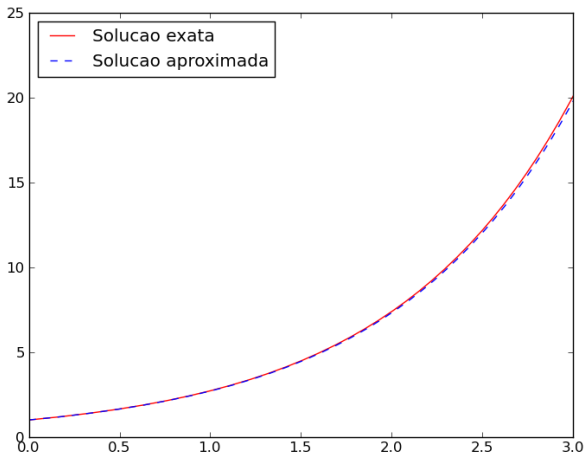
```
# loop no tempo
for k in range(n):
    u[k+1] = u[k] + dt * u[k]
    t[k+1] = t[k] + dt

# calcula solucao exata:
# u(t) = u0 exp(at)
v = u0 * exp(t)

print v
print u

# exibe grafico da solucao
plot(t,v,color="r",
label="Solucao exata")
plot(t,u,
linestyle="--",color="b",
label="Solucao aproximada")
legend(loc="best")
show()
```

Exemplo Completo



Exemplo Completo com SciPy

- ▶ `scipy.integrate.odeint(func, y0, t)`
- ▶ Usa a biblioteca **odepack** escrita em FORTRAN.

```
from pylab import *
from scipy.integrate import odeint

def f(u,t):
    return u

T = 3.0
u0 = 1.0
dt = 0.01
n = int(T/dt)

t = np.linspace(0.0, T, n)
u = odeint(f,u0,t)

plot(t,u)
```

Parte IV

Outras bibliotecas e projetos com Python



- ▶ Computação Simbólica
- ▶ Alternativa livre aos softwares Maple, Mathematica e Matlab.
- ▶ Aritmética básica, expansões, funções, derivadas, integrais, substituições, limite, matrizes, etc.

```
>>> from sympy import *  
>>> x = Symbol('x')  
>>> f = 2 * cos(x)  
>>> diff(f, x)  
-2*sin(x)
```

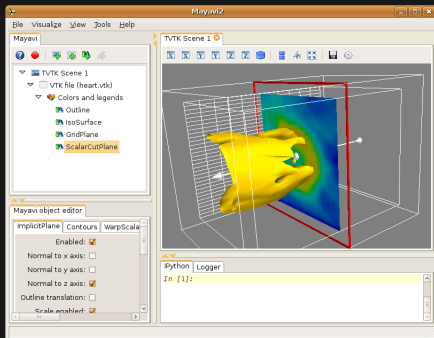
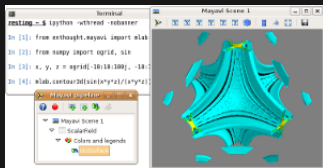
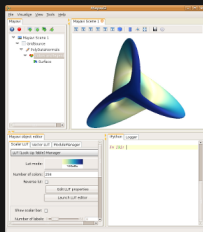
```
>>> x = Symbol("x")  
>>> limit(sin(x)/x, x, 0)  
1  
>>> limit(1/x, x, oo)  
0
```



- ▶ Software matemático livre com licença GPL.
- ▶ Alternativa livre aos softwares Maple, Mathematica e Matlab.
- ▶ Re-utiliza pacotes como Maxima, GAP, Pari/GP, softwares de renderização de imagens e outros.
- ▶ Disponível para uso online via browser.

Visualização Científica

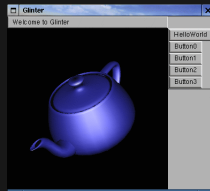
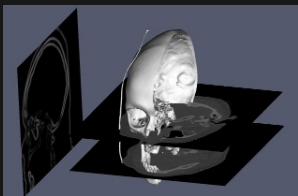
► MayaVi



Computação Gráfica, Visualização

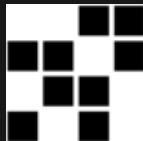


- ▶ Computação gráfica, processamento de imagens e visualização.
- ▶ Escrito em C++ com interface em Tcl/Tk, Java e Python.



- ▶ PyOpenGL: binding de OpenGL para Python
- ▶ OpenGL: API livre utilizada na computação gráfica
- ▶ Aplicativos gráficos, ambientes 3D, jogos.

Álgebra Linear Computacional



- ▶ Algebraic Multigrid Solvers in Python
- ▶ Diversas implementações do AMG
- ▶ Fácil de usar, rápido, eficiente
- ▶ <http://code.google.com/p/pyamg/>
- ▶ PySparse: Biblioteca de matrizes esparsas
- ▶ Diversos formatos e métodos para conversão
- ▶ *Solvers* iterativos (CG)
- ▶ Precondicionadores

Solução Numérica de Equações Diferenciais



- ▶ FEniCS Project
 - ▶ Solução automatizada de EDPs usando o método dos elementos finitos
 - ▶ Alto nível de abstração (Muito próximo da formulação matemática)
 - ▶ Paralelismo, adaptatividade, estimativa de erro, etc
- ▶ FiPy (A finite volume PDE solver written in Python)
 - ▶ Solver de EDPs usando o método dos volumes finitos
 - ▶ Orientado a objetos
 - ▶ Computação paralela

Apredizagem de Máquina



- ▶ Shogun: A Large Scale Machine Learning Toolbox
- ▶ SVM (Support Vector Machines)
- ▶ <http://www.shogun-toolbox.org/>



- ▶ Construído sobre NumPy, SciPy e Matplotlib
- ▶ Diversas técnicas como p. ex. SVM, K-Means, etc
- ▶ <http://scikit-learn.sourceforge.net>

Python para Física

- ▶ Astropysics: <http://packages.python.org/Astropysics/>
 - Utilitários de astrofísica em Python
- ▶ PyFITS: <http://packages.python.org/pyfits/>
 - Manipulação de imagens FITS em Python
- ▶ YT: <http://yt-project.org/>
 - yt é um toolkit para manipular dados de simulações astrofísicas com suporte para análise e visualização.



ASTROPYSICS

ASTROPYSICS
FOR PYTHON



Python para Química

- ▶ Cheminformatics: OpenBabel (Pybel), RDKit, OEChem, Daylight (PyDaylight), Cambios Molecular Toolkit, Frowns, PyBabel and MolKit
- ▶ Computational chemistry: OpenBabel, cclib, QMForge, GaussSum, PyQuante, NWChem, Maestro/Jaguar, MMTK
- ▶ Visualisation: CCP1GUI, PyMOL, PMV, Zeobuilder, Chimera, VMD

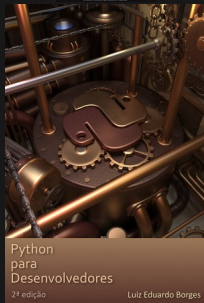


The zen of Python

Beautiful is better than ugly.
Explicit is better than implicit.
Simple is better than complex.
Complex is better than complicated.
Flat is better than nested.
Sparse is better than dense.
Readability counts.
Special cases aren't special enough to break the rules.
Although practicality beats purity.
Errors should never pass silently.
Unless explicitly silenced.
In the face of ambiguity, refuse the temptation to guess.
There should be one- and preferably only one -obvious way to do it.
Although that way may not be obvious at first unless you're Dutch.
Now is better than never.
Although never is often better than *right* now.
If the implementation is hard to explain, it's a bad idea.
If the implementation is easy to explain, it may be a good idea.
Namespaces are one honking great idea - let's do more of those!

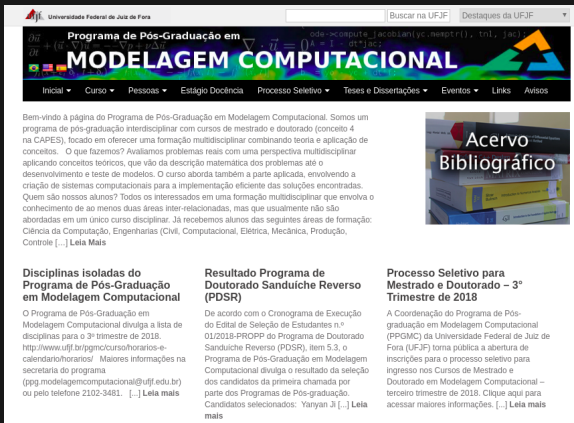
Referências

- ▶ Hans Petter Langtangen - "A Primer on Scientific Computing with Python"
- ▶ Hans Petter Langtangen - "Python Scripting"
- ▶ Mark Lutz - "Learning Python"
- ▶ Slides de Rafael Sachetto Oliveira (UFSJ)
- ▶ Slides de Felix Steffenhagen (Uni Freiburg)
- ▶ Mais informações:
 - <http://www.python.org>
 - <http://numpy.org>
 - <http://ark4n.wordpress.com/python/>
 - <http://fperez.org/py4science/>
- ▶ Equipe da Semana da Computação/Prof. Rafael Sachetto



Pós-Graduação em Modelagem Computacional

- ▶ UFJF
- ▶ Mestrado e Doutorado
- ▶ www.ufjf.br/pgmc



The screenshot shows the official website of the Postgraduate Program in Computational Modeling (PPGMC) at the Federal University of Juiz de Fora (UFJF). The header features the UFJF logo and navigation links. The main banner includes the program name in Portuguese and English, along with mathematical symbols like $\frac{\partial T}{\partial t}$, $\nabla \cdot \vec{u}$, and $\vec{u} \cdot \vec{u}$. Below the banner is a navigation menu with options like 'Inicial', 'Curso', 'Pessoas', 'Estágio Docência', 'Processo Seletivo', 'Teses e Dissertações', 'Eventos', 'Links', and 'Avisos'. The main content area contains a welcome message, a description of the program's interdisciplinary nature, and a list of disciplines. On the right, there is a section for the 'Acervo Bibliográfico' (Bibliographic Collection) showing a stack of books. At the bottom, there are three columns of information: 'Disciplinas isoladas do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional', 'Resultado Programa de Doutorado Sanduiche Reverso (PDSR)', and 'Processo Seletivo para Mestrado e Doutorado – 3º Trimestre de 2018'.

Programa de Pós-Graduação em MODELAGEM COMPUTACIONAL

Bem-vindo à página do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional. Somos um programa de pós-graduação interdisciplinar com cursos de mestrado e doutorado (conceito 4 na CAPES), focado em oferecer uma formação multidisciplinar combinando teoria e aplicação de conceitos. O que fazemos? Avaliamos problemas reais com uma perspectiva multidisciplinar aplicando conceitos teóricos, que vão da descrição matemática dos problemas até o desenvolvimento e teste de modelos. O curso aborda também a parte aplicada, envolvendo a criação de sistemas computacionais para a implementação eficiente das soluções encontradas. Quem são nossos alunos? Todos os interessados em uma formação multidisciplinar que envolva o conhecimento de ao menos duas áreas inter-relacionadas, mas que usualmente não são abordadas em um único curso disciplinar. Já recebemos alunos das seguintes áreas de formação: Ciência da Computação, Engenharias (Civil, Computacional, Elétrica, Mecânica, Produção, Controle [...] [Leia Mais](#)

Disciplinas isoladas do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional

O Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional divulga a lista de disciplinas para o 3º trimestre de 2018. <http://www.ufjf.br/pgmc/cursos/horarios-e-calendario/horarios/> Majoires informações na secretaria do programa (pgp.modelagemcomputacional@ufjf.edu.br) ou pelo telefone 2102-3481. [...] [Leia mais](#)

Resultado Programa de Doutorado Sanduiche Reverso (PDSR)

De acordo com o Cronograma de Execução do Edital de Seleção de Estudantes n.º 01/2018-PROPP do Programa de Doutorado Sanduiche Reverso (PDSR), item 5.3, o Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional divulga o resultado da seleção dos candidatos da primeira chamada por parte dos Programas de Pós-graduação. Candidatos selecionados: Yanyan Ji [...] [Leia mais](#)

Processo Seletivo para Mestrado e Doutorado – 3º Trimestre de 2018

A Coordenação do Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional (PPGMC) da Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF) torna pública a abertura de inscrições para o processo seletivo para ingresso nos Cursos de Mestrado e Doutorado em Modelagem Computacional – terceiro trimestre de 2018. Clique aqui para acessar maiores informações. [...] [Leia mais](#)

Agradecimentos

- ▶ Prof. Rafael Sachetto Oliveira
- ▶ Prof. Bernardo Martins Rocha
- ▶ Prof. Ruy Freitas Reis
- ▶ Profa. Bárbara de Melo Quintela
- ▶ Prof. Igor de Oliveira Knop
- ▶ Equipe da Semana da Computação
- ▶ Departamento de Ciência da Computação - UFSJ
- ▶ Departamento de Ciência da Computação - UFJF

