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 detalles

- ▶ 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
>>> type(x)
>>> x = 10.5
>>> type(x)
>>> m = (6.8 + 9.4 + 8.4)/3
>>> m
8.20000000000001
>>> m > 6.0
True
>>> (m >= 9.0) and (m <= 10.0)
False
>>> c1 = 3 + 1j
>>> c2 = complex(-3,2)
>>> c1 + c2
3 ј
```

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. É muito comum linguagens estáticas terem tipagem forte. Mas existem exceções.
- ► Isto dá mais robustez ao código.

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

```
>>> 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 são imutáveis

```
>>> " hello" + " world" # concatenacao
>>> 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
```

▶ 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)
```

► Formatadores 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)
```

- ► 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 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!!!'
```

```
# 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)
>>> 11
((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]
>>> 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

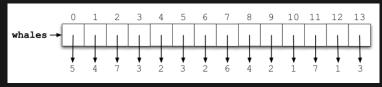
```
[0, 1, 2, 3, 4]
[0, 1, 2, 3, 4, 5]
[42, 0, 1, 2, 3, 4, 5]
[5, 4, 3, 2, 1, 0, 42]
[0, 1, 2, 3, 4, 5, 42]
```

► Outros métodos:

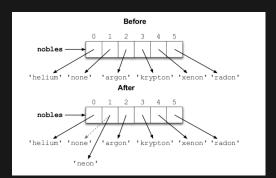
- extend(L): append de uma lista L
- remove(x): remove primeira ocorrência de x
- index(x): retorna o índice da primeira ocorrência de x na lista

Listas - Métodos

► As listas contém 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' ]
```

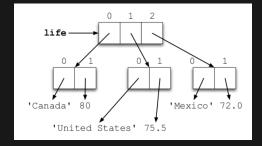
► Slice

```
>>> 1 = range(10)
>>> 1[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

► 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:
\dots elif x == 0:
... print 'Zero'
>>> if ((x >= 0) \text{ and } (x <= 100)):
   print "OK"
... else:
        print "Fora do intervalo"
>>> if ((x<0) or (x>100)):
        print "Fora do intervalo"
... else:
```

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

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.'
```

► 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
```

► Exemplos

```
>>> def par(n):
    \frac{\text{return}}{\text{return}} \quad (n \% 2 == 0)
>>> def fib(n):
                                11 11 11
        """ Imprime ate n.
... a, b = 0, 1
\dots while a < n:
         print a,
             a, b = b, a+b
>>> par(6)
True
>>> fib(8)
0 1 1 2 3 5
```

➤ 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
```

► 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:

```
1 = [1,2,3,4]
r = somaCumulativa(1)
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

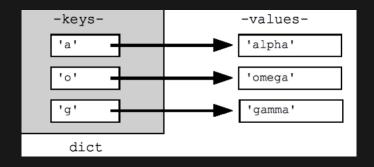
```
from parser import url_parse
a = url_parse("http://www.ufjf.br/deptocomputacao")
print(a)
www.ufjf.br
```

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
{\text{('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^{\circ}, 10), ( , c^{\circ}, 30), ( , b^{\circ}, 20)]
>>> for k,v in d.items():
\dots print k, \rightarrow
```

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', ...]
```

- ▶ 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)
```

- ▶ 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()
```

► 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

```
# Arguivo 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.

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.

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)

- 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.

- ▶ 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
```

► 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
```

▶ 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

▶ 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
```

- ► 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.

► 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().
- 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:

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

```
Tempo: 4.49 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: 0.37 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.

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

Criando vetores NumPy

```
>>> import numpy as np
# np.float64
\Rightarrow \Rightarrow 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
\overline{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.]
[0.0.0.0.]
```

► Exemplo com array bidimensional

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

```
>>> a = np.arange(24)

>>> a = a.reshape((4,6))

>>> a[2,4]

16

>>> a[1]

array([6,

7, 8, 9, 10, 11])
```

```
>>> 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])
```

```
>>> 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 = 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 = 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]])
```

```
>>> 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]
                 >>> 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,
```

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])
```

- ► 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

```
08 - 04 - 02 - 1 0 1
```

```
import numpy as np
def f(x):
    return np.exp(np.sin(x))
x = linspace(0.0, 6.0, 1000)
y = f(x)
```

- ► 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 = linspace(0.0, 6.0, 1000)
y = f(x)
```

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

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

- ► Como vetorizar funções assim?
- ▶ Usar a função where
- ightharpoonup 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).

► Forma geral

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

► Para o exemplo anterior temos

```
def Hv(x):
    cond = x < 0
    return where(cond, 0.0, 1.0)</pre>
```

Alguns métodos dos vetores

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

```
>>> 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

ightharpoonup 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
\Rightarrow \Rightarrow 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

Matrizes

Matrizes

```
\Rightarrow \Rightarrow 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
>>> h
array([[2],
        \lceil 1 \rceil \rceil \rangle
>>> 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

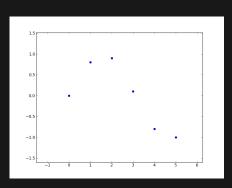
1x + 1y + 2z = 2

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.],
         [ 3.11)
>>> x = linalg.solve(A,b)
>>> x
matrix([[-3.],
         [ 5.],
         [0.11)
```

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
                                    1.0
                >>> x=np.array([0
                3.0, 4.0, 5.0
                                    -0.5
                 >>> y=np.array([0
                0.1, -0.8, -1.0
                 >>> c1 = np.polyfi
                 >>> 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)
```

SciPy

- ► 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
 - interpolação (Splines)
 - stats: Distribuições e funções estatísticas
 - optimize: Otimização
 - sparse: Matrizes esparsas
 - linalg: Álgebra Linear
 - io: Entrada e Saída
 - signal: Processamendo digital de sinais
 - ndimage: Processamento digital de imagens

Integração Numérica com SciPy

 \blacktriangleright 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
21.333333333333
```

▶ 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
```

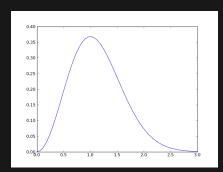
Visualização de dados com matplotlib

- ➤ 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



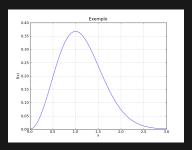
- ightharpoonup Exemplo mais simples de uso: $\mathbf{plot}(\mathbf{x},\mathbf{y})$
- ▶ Gráficos são gerados sucessivamente, i.e., cada chamada a função plot altera o gráfico

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



► Decorando o gráfico

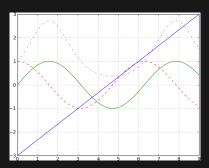
```
>>> import numpy as np
>>> from pylab import *
>>> x = np.linspace(0,3,51)
>>> y = x**2 * np.exp(-x**2)
>>> plot(x,y)
>>> grid(True)
>>> xlabel('x')
>>> ylabel('f(x)')
>>> title("Exemplo")
>>> show()
```



Várias curvas

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

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



- ► Controlando o estilo do plot
- ➤ A função plot aceita uma string especificando o estilo da linha e do símbolo usando o seguinte formato:
 - <color><line><symbol>'

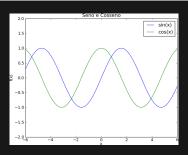


Símbolos						
	pontos	0	circulo	T ^	triangulo baixo	
s	quadrados		cruz	v	triangulo cima	
x	"xis"		estrela	<	triangulo esq	
D	diamante	d	diamante peq.	>	triangulo dir	

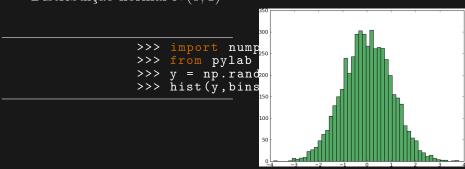
Estilo da Linha				
-	solid line			
_	dashed line			
	dash-dot line			
:	dotted line			

```
import numpy as np
from pylab import *

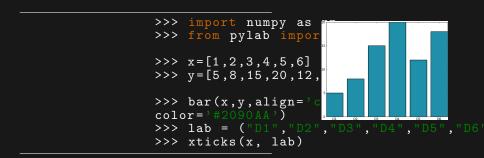
x = np.linspace(-6, 6, 500)
plot(x,sin(x), label='sin(x)')
>>> plot(x,cos(x), label='cos(x)')
>>> title('Seno e Cosseno')
>>> xlabel('x')
>>> ylabel('f(x)')
>>> axis([-6,6,-2,2])
>>> legend(loc="upper right")
```



- ► Histogramas
- \rightarrow hist(x, bins=10)
- ightharpoonup Distribuição normal N(0,1)



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



- Salvando os gráficos em figuras
- ► savefig(filename):

Salva a figura atual usando o formato.

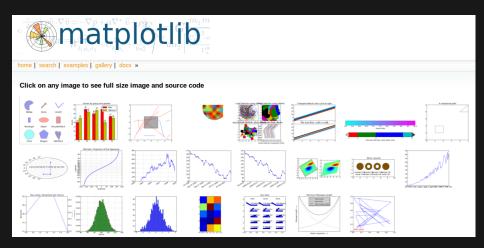
Alguns parâmetros opcionais:

```
- format: 'png', 'pdf', 'ps', 'eps', 'svg'
```

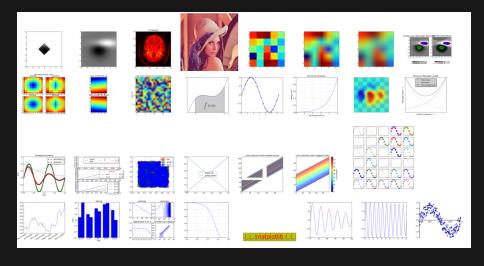
- transparent: True ou False

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

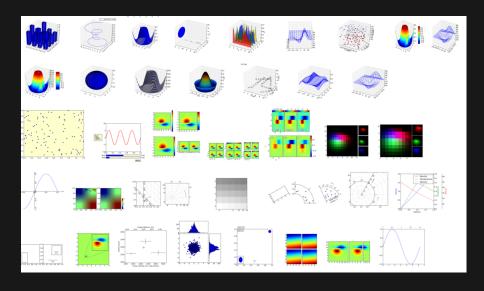
Galeria do matplotlib



Galeria do matplotlib



Galeria do matplotlib



Exemplo Completo

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

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

▶ dada a condição Inicial

$$u(0) = u_0$$

► Exemplo: Crescimento exponencial (população)

$$u'(t) = au$$

 \blacktriangleright 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
 - $-\Delta t$ 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, Δt
- ► Calcular n (número de passos de tempo)
- ▶ Para k de 0 até n faça
 - Calcular u_{k+1} usando

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

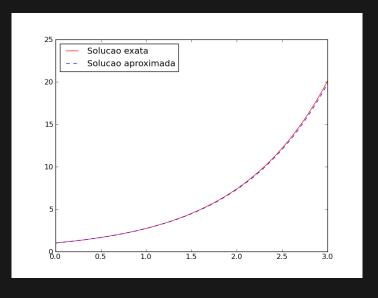
► Exibir os resultados

Exemplo Completo - Python

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

```
import numpy as np
                                         # loop no tempo
                from pylab import *
                                         for k in range(n)
                                         u[k+1] = u[k] + c
                u0 = 1
                                         t[k+1] = t[k] + c
= 3.0
                                         # calcula soluca
                dt = 0.1
                                         v = u0 * exp(t)
= int(T/dt)
                                          print v
                                          print u
                 # inicializa vetores
                u = np.zeros(n+1)
                                         # exibe grafico
                                         plot(t,v, r-r)
                v = np.zeros(n+1)
                t = np.zlearboesl(=n+1)lucao
                                        <u>e</u>xata')
                                         plot(t,u, 'b--',
                 # condicao inicial
                                          legend(loc="upper
                t[0] = 0.0
                                          show()
                u[0] = u0
```

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
T = 3.0
u0 = 1.0
dt = 0.01
n = int(T/dt)
def f(u,t):
return u
t = np.linspace(0.0, T, n)
u = odeint(f,u0,t)
plot(t,u)
```

Parte IV

Outras bibliotecas e projetos com Python

Sympy



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

```
>>> from sympy import * >>> x = Sym
>>> x = Symbol('x') >>> limit(s
>>> f = 2 * cos(x) 1
>>> diff(f, x) >>> limit(1
-2*sin(x) 0
```

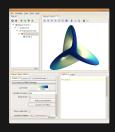
Sage

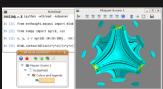


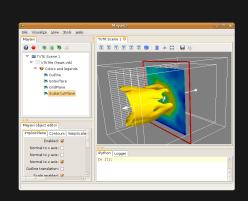
- ► Software matemático livre com liçenca GPL.
- ► Alternativa livre aos softwares Maple, Mathematica e Matlab.
- ► Re-utiliza pacotes como Maxima, GAP, Pari/GP, softwares de renderização de imagens e outros.
- ▶ Disponível para uso online via browser.

Visualização Científica

► MayaVi



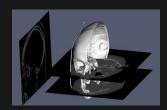




Computação Gráfica, Visualização



- ► 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.shoguntoolbox.org/



- ► Construído sobre NumPy, SciPy e Matplotlib
- ► Diversas técnicas como p. ex. SVM, K-Means, etc
- ► http://scikitlearn.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.







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
 - $-\ \mathrm{http://numpy.org}$
 - $-\ http://ark4n.wordpress.com/python/$
 - http://fperez.org/py4science/
- ► Equipe da Semana da Computação/Prof. Rafael Sachetto



Pós-Graduação em Modelagem Computacional

- ► UFJF
- ► Mestrado e Doutorado
- ► Inscrições abertas até 27/08/2015
- ► www.ufjf.br/pgmc



Agradecimentos

- ▶ Prof. Rafael Sachetto Oliveira
- ► Equipe da Semana da Computação
- ► Departamento de Ciência da Computação UFSJ

Fim