Jupyter: um caderno computacional

1^a Semana de Workshops, ICMC - USP, 03/06/2021

Por Breno Lívio



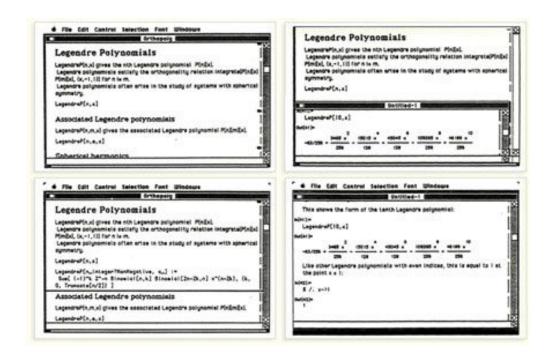
O que pretendo passar

- História e introdução dando diversos exemplos de como pode ser usado;
- As diversas formas de se usar o sistema Jupyter;
- Instalação;
- Aplicações com o Jupyter: Introdução às células, geração de imagens e widgets;
- Usando nbextensions;
- Usando nbconvert;
- JupyterLab.

História dos cadernos computacionais

Em 1987, foi desenvolvido uma espécie de caderno computacional pensando no software Mathematica.

Quando você observa como esses cadernos foram estruturados, você percebe que eles dependiam de uma hierarquia de células que permitia o esboço e a seção de documentos, que você agora também encontra nos cadernos Jupyter.



Retirado de https://www.wolfram.com/mathematica/scrapbook/

O que é o Jupyter?

Jupyter é uma ferramenta interativa de código aberto e conhecida como um caderno de anotações computacional, que os pesquisadores podem usar para combinar códigos de software, saídas computacionais, textos explicativos e recursos multimídia em um único documento [1].

Project Jupyter

O Projeto Jupyter é um projeto sem fins lucrativos e de código aberto, nascido do projeto IPython em 2014, à medida que evoluiu para apoiar a ciência dos dados interativos e a computação científica em todas as linguagens de programação [2].









JUlia + PYThon + R



IPython

No final de 2001, cerca de vinte anos depois que Guido van Rossum começou a desenvolver o Python no Instituto Nacional de Pesquisa em Matemática e Ciência da Computação na Holanda, Fernando Pérez começou a desenvolver o IPython.

IPython tem agora apenas dois papéis a cumprir: ser o backend Python para o Jupyter Notebook, que também é conhecido como o kernel, e um shell Python interativo [3].

```
ython 2.7.3 (default, Jul 10 2012, 18:48:25)
 Type "copyright", "credits" or "license" for more information.
IPython 0.13.1 -- An enhanced Interactive Python.
         -> Introduction and overview of IPython's features.
%quickref -> Ouick reference.
help -> Python's own help system.
object? -> Details about 'object', use 'object??' for extra details.
In [1]: import numpy as np
In [2]: N = 3000
In [3]: a = np.random.randn(N,N)
In [4]: b = np.random.randn(N,N)
In [5]: np.do
np.dot np.double
In [5]: np.dot(a, b)
array([[ 65.45670109, 64.96918252, -120.2955101 , ..., 46.52919413,
      [ 103.8332094 , -63.19741333, 25.63850851, ..., 10.43730591, -98.22728902, -9.16795735],
       [-36.45095805, 44.32128353, -17.58969917, ..., -125.12907291,
      [ -42.46168724, 36.45522834,
                                       28.8765628 , ..., 39.40943867,
        -16.43199427, -63.08194364],
      [ -84.46717927, 28.06738004,
                                       32.09026395, ..., -42.127647 ,
       -116.20291034, 32.02266909],
      [ 56.79843374, 23.60837948, 52.24793136, ..., -35.53881726,
        -21.19119431, -151.71414646]])
 n [6]: %timeit np.dot(a,b)
 loops, best of 3: 2.17 s per loop
Display all 551 possibilities? (y or n)
np. ALLOW THREADS
                          np.copy
                                                     np.iscomplexobj
```

Retirado de https://ipython.org/screenshots/index.html

Importância desses cadernos computacionais

Esses cadernos podem auxiliar em diversos tipos de casos:

- Ensino de programação;
- Produção de relatórios científicos;
- Desenvolvimento de aplicações de estatística e ciência de dados.

Crescimento do uso desses cadernos

Há cerca de 3 anos, havia 1.230.000 cadernos Jupyter publicados no GitHub. Em outubro de 2020, este número havia crescido 8 vezes, e conta com 9.720.000 cadernos [4].



R Markdown

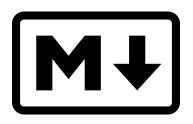


Outra "alternativa" ao Jupyter pode ser o RMarkdown. Ele funciona de forma análoga ao Jupyter pensando em células de texto e código.

As diferenças notáveis é que o arquivo do RMarkdown é possível editar como texto, enquanto o Jupyter gera um código em JSON (JavaScript Object Notation), como se o caderno já fosse pensado como uma "aplicação web".

Além disso, para reproduzir widgets como o Jupyter, recomenda-se o uso do pacote Shiny.

Markdown no Jupyter



O Markdown é uma linguagem de marcação (*markup language*) para formatar textos, tal como HTML, XML e LaTeX, que podem ser também consideradas linguagens de marcação.

Para células de texto no Jupyter, a formatação é em Markdown.



Imagem: Célula de texto e de código no Jupyter, pelo Google Colab

Diversas formas de se usar o Jupyter



Online, por um servidor que armazena o sistema Jupyter:

Google Colab, Binder.

Instalando no computador:

- Instalar diretamente pelo pip ou conda;
- Instalar extensão de Python no Visual Studio Code;
- Docker;
- IDE PyCharm.



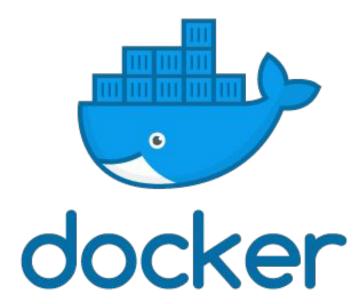




https://pip.pypa.io/en/stable/installing/#

https://conda.io/projects/conda/en/latest/user -quide/install/index.html

https://jupyter.org/install

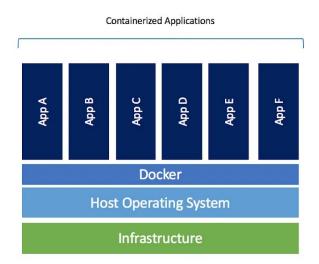


Usando o Docker

Usar o Jupyter com o Docker é provavelmente o melhor caminho.

Instruções de como instalar o Docker Compose em qualquer Sistema Operacional:

https://docs.docker.com/compose/install/



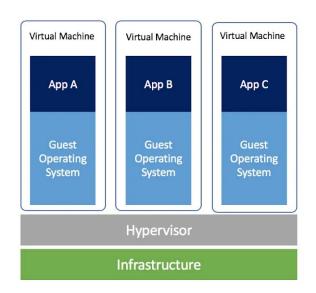


Imagem: Virtualização pelo Docker

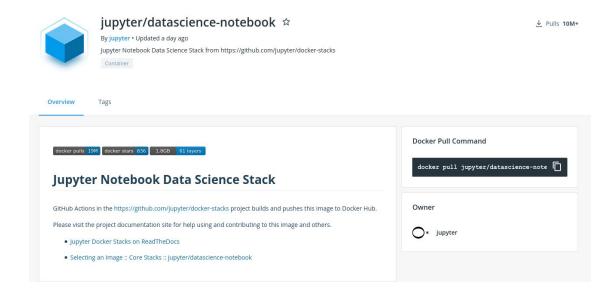
Imagem: Arquivo docker-compose.yml

Abrindo o Jupyter no Docker

```
brenoslivio@ahimsa:~/Jupyter-Docker$ sudo docker-compose up
Creating network "jupyter-docker_default" with the default driver
Pulling datascience-notebook (jupyter/datascience-notebook:)...
latest: Pulling from jupyter/datascience-notebook
345e3491a907: Already exists
57671312ef6f: Already exists
5e9250ddb7d0: Already exists
18e0cd5c22a2: Pull complete
fb91722153c4: Pull complete
4f4fb700ef54: Pull complete
e0cf732eaa04: Pull complete
2d873d0aa884: Pull complete
7a4d4f7ceefb: Pull complete
cff312d53339: Pull complete
a61947d156cf: Pull complete
efdbcb08f6d9: Pull complete
ebf8dc021f87: Pull complete
35b10f0d930b: Pull complete
904a1dccec9f: Pull complete
```

Imagem: Comando docker-compose up

Imagem do Jupyter



https://hub.docker.com/r/jupyter/datascience-notebook/

COCO

nbextensions

O pacote jupyter_contrib_nbextensions contém uma coleção de extensões não-oficiais com contribuições da comunidade que adicionam funcionalidade ao caderno Jupyter. Estas extensões são em sua maioria escritas em Javascript e serão carregadas localmente em seu navegador.

Mais em:

https://jupyter-contrib-nbextensions.readthedocs.io/en/latest/

💢 Jupyter			Quit Logout
Files Running Clusters Nbex	ctensions		
Canfinusable aboutonaione			2
Configurable nbextensions	;		
disable configuration for nbextensions without	out explicit compatibility (they may break your	notebook environment, but can be useful to show f	or nbextension development)
filter: by description, section, or tags			
(some) LaTeX environments for Jupyter	□ 2to3 Converter	☐ AddBefore	☐ Autopep8
□ AutoSaveTime	□ Autoscroll	☐ Cell Filter	☐ Code Font Size
☐ Code prettify	□ Codefolding	☐ Codefolding in Editor	□ CodeMirror mode extensions
	☐ Comment/Uncomment Hotkey		□ datestamper
☐ Equation Auto Numbering	□ ExecuteTime	☐ Execution Dependencies	□ Exercise
□ Exercise2	□ Export Embedded HTML	☐ Freeze	☐ Gist-it
☐ Help panel	☐ Hide Header	☐ Hide input	☐ Hide input all
☐ Highlight selected word	□ highlighter	☐ Hinterland	☐ Initialization cells
□ isort formatter			☐ Keyboard shortcut editor
☐ Launch QTConsole	☐ Limit Output	☐ Live Markdown Preview	☐ Load TeX macros
☐ Move selected cells	□ Navigation-Hotkeys	Nbextensions dashboard tab	
□ nbTranslate	□ Notify	☐ Printview	☐ Python Markdown
□ Rubberband	□ Ruler	☐ Ruler in Editor	□ Runtools
☐ Scratchpad	□ ScrollDown	□ Select CodeMirror Keymap	□ SKILL Syntax
☐ Skip-Traceback	☐ Snippets	☐ Snippets Menu	□ spellchecker
☐ Split Cells Notebook	☐ Table of Contents (2)	☐ table_beautifier	☐ Toggle all line numbers
☐ Tree Filter	☐ Variable Inspector	□ zenmode	19897/

Imagem: Aba para o nbextensions no Jupyter

A little extension to give Zenmode functionality to the IPython notebook

nbextensions

Ele não vem de padrão na imagem do Docker, podemos instalar com:

pip

pip3 install jupyter_contrib_nbextensions

jupyter contrib nbextension install --user

Conda

conda install -c conda-forge jupyter_contrib_nbextensions

nbconvert

Como podemos observar o Jupyter tem uma habilidade muito boa quando se trata de interagir com diferente linguagens de marcação e afins. Dessa forma, é fácil imaginar que existem opções bem simples de convertemos nossos cadernos para formatos como PDF, LaTeX, HTML e assim por diante.

nbconvert

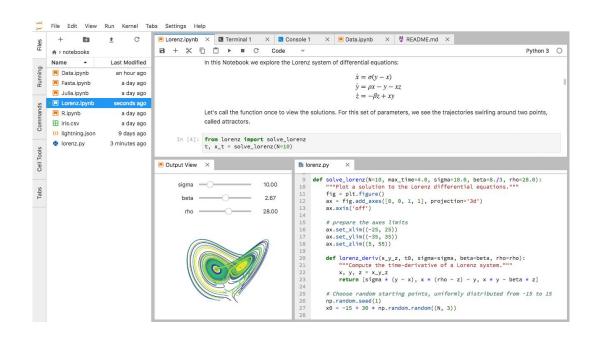
O comando base para utilizar do nbconvert é:

jupyter nbconvert SEUNOTEBOOK.ipynb --to FORMATO

JupyterLab

O JupyterLab é a próxima geração do Jupyter Notebook. Seu objetivo é resolver muitos problemas de usabilidade do Notebook, e expande muito seu escopo.

Além de fornecer uma interface melhorada aos notebooks existentes, o JupyterLab também traz dentro da mesma interface um navegador de arquivos, consoles, terminais, editores de texto, editores Markdown, editores CSV, editores JSON, mapas interativos, widgets e assim por diante.



Teste o JupyterLab no Binder

```
1 version: "3"
2 services:
3  datascience-notebook:
4   image: jupyter/datascience-notebook
5   volumes:
6    - /SEU/DIRETORIO/AQUI:/home/jovyan/work
7   environment:
8    GRANT_SUDO: "yes"
9    JUPYTER_ENABLE_LAB: "yes"
10   user: root
11   ports:
12    - 8888:8888
13   container_name: datascience-notebook-container
```

Imagem: Ativando o JupyterLab no Docker

Resumo sobre usar o Jupyter

Há como usar o Jupyter em servidores que hospedam o serviço, como o Colab e o Binder.

Para instalar localmente, existem diversas opções. O mais recomendado para conseguir aproveitar das visualizações de dados que podem ser geradas é utilizar do Jupyter Notebook clássico ou uma IDE de sua escolha com um bom suporte para elas.

Referências

- [1] https://www.nature.com/articles/d41586-018-07196-1
- [2] https://jupyter.org/about
- [3] https://www.datacamp.com/community/blog/ipython-jupyter

[4]

https://blog.jetbrains.com/datalore/2020/12/17/we-downloaded-10-000

-000-jupyter-notebooks-from-github-this-is-what-we-learned/

Dúvidas?









Espero que tenham gostado:)



