NumPy

Thiago Teixeira Santos <thiago.santos@embrapa.br>

17 de novembro de 2017

1 NumPy

Previamente na Seção 2, *A Linguagem Python*, vimos que listas podem armazenar qualquer tipo de dado. Tal flexibilidade acarreta perdas em desempenho, uma vez que, internamente, o interpretador Python precisa lidar com questões de posicionamento em memória e tipagem de dados. Em computação científica, a maior parte dos dados consiste em valores numéricos, geralmente de mesmo tipo (inteiro ou real). Ganhos de desempenho consideráveis podem ser obtidos se houver uniformidade no tipo de dado que está sendo considerado.

Um **array NumPy** é um coleção multidimensional e uniforme de elementos, isto é, todos os elementos ocupam o mesmo número de bytes em memória (VAN DER WALT et al., 2011). Ele é a representação padrão para arrays *n*-dimensionais na SciPy Stack e é comumente utilizada na representação de vetores, matrizes, observações, sinais e imagens (e imagens (*arrays* de até 32 dimensões podem ser representados).

- NumPy é um módulo Python que fornece arrays multidimensionais
- Internamente, executa código nativo e otimizado
- Foi desenvolvido especialmente para computação científica

NumPy pode ser importado no ambiente com o comando import numpy, como no exemplo abaixo:

Se o interpretador IPython foi iniciado com a opção pylab, o módulo NumPy já estará carregado e não haverá necessidade, como no exemplo acima, do prefixo np.

```
In [4]: %pylab inline
    A = array([0,1,2,3])
A
```

Populating the interactive namespace from numpy and matplotlib

```
Out[4]: array([0, 1, 2, 3])
```

NumPy evita iterações custosas do interpretador Python quando opera com arrays, utilizando, no lugar, eficientes operações **vetorizadas** implementadas em código de máquina. Como um exemplo simples, suponha que tenhamos um vetor com 10000 valores e desejemos computar o quadrado de cada valor. Utilizando uma lista, o interpretador Python iria usar iterações para realizar a computação para cada membro da lista:

- NumPy utiliza operações vetorizadas
- São executadas de modo paralelo, aproveitando recursos do processador

A função range produz uma **lista** com 10000 valores, de 0 a 9999. A computação levou em média, para a máquina em questão, cerca de 500 *microssegundos*. Abaixo, utilizamos a função arange do módulo NumPy, que devolve um **array** com os mesmos 10000 valores:

The slowest run took 11.34 times longer than the fastest. This could mean that an intermediate r 100000 loops, best of 3: 7.67 μ s per loop

Utilizando código nativo e vetorização, NumPy levou cerca de 7 microssegundos para realizar toda a computação. Nos exemplos acima, a função "mágica" do IPython %timeit foi utilizada para calcular o desempenho do código. A operação v**2 computa um novo array com todos os elementos de v ao quadrado (mais detalhes na Seção *Operações com arrays*).

1.1 Criação de arrays

Arrays podem ser facilmente criados com a função array, que recebe como argumento uma lista contendo os dados que deverão ser armazenados. O número de dimensões de um array pode ser obtido pelo atributo ndim enquanto que as dimensões em si ficam armazenadas no atributo shape:

```
In [9]: v.ndim
Out[9]: 1
In [10]: v.shape
Out[10]: (4,)
```

A lista com os dados pode conter uma estrutura que permita ao método array inferir as dimensões pretendidas. Por exemplo, uma matriz 2D pode ser inicializada a partir de uma **lista de listas**:

Se for mais conveniente, é possível passar apenas uma lista com todos os elementos encadeados e as dimensões do array podem ser redefinidas posteriormente:

1.1.1 Utilitários para criação de arrays

Para criar um array contendo uma sequência com n elementos de 0 a n-1, podemos utilizar a função arange:

A função arange também permite definir os elementos inicial e final e um **passo** entre elementos sucessivos. Por exemplo, para produzir uma sequência de 1 (inclusivo) até 8 (exclusivo) na qual os números inteiros são tomados a cada 2 elementos, pode-se utilizar:

A função arange trabalha com números em \mathbb{Z} . Para uma sequência de números reais, igualmente espaçada dentro de um intervalo, pode-se utilizar linspace. Por exemplo, para obter 6 números reais igualmente espaçados no intervalo [0,1], utiliza-se:

```
In [27]: v = linspace(0, 1, 6)
        v

Out[27]: array([ 0. ,  0.2,  0.4,  0.6,  0.8,  1. ])
```

zeros, ones, identity Para produzir matrizes de dimensões variadas com um valor fixo, podemos utilizar as funções zeros e ones, informando as dimensões desejadas na forma de uma tupla como argumento:

Matrizes identidade são particularmente importantes em computação envolvendo álgebra linear. A função identity produz uma matriz quadrada do tamanho desejado, com todos os elementos em sua diagonal principal apresentando o valor 1, zero para todos os demais:

random Certas aplicações podem necessitar de valores aleatórios, por exemplo em testes com ruído sintético adicionado ao sinal. Arrays aleatórios podem ser produzidos utilizando-se o sub-módulo random da NumPy. Valores obtidos de uma distribuição uniforme no intervalo [0,1] são produzidos com rand:

Outra opção é utilizar uma distribuição Gaussiana através da função randn:

1.2 Tipos de dados

Diferente de listas, que podem armazenar elementos de tipos diferentes, arrays devem conter elementos de **mesmo tipo**, como especificado em dtype.

Acima, vemos que o tipo padrão para inteiros adotado pelo sistema em uso no exemplo utiliza 64 bits. Similarmente, vemos que o tipo padrão para ponto flutuante também se baseia em 64 bits:

Alternativamente, podemos especificar exatamente o tipo desejado, dentre os disponíveis na NumPy. O exemplo abaixo cria um array com elementos em ponto flutuante com 32 bits, apesar do argumento de entrada consistir em uma lista de inteiros:

Utilitários para criação de arrays também possibilitam especificar o tipo pretendido:

1.3 Carga de dados armazenados em arquivos

Na maior parte de seu trabalho, o pesquisador não irá inserir manualmente o conteúdo dos arrays, nem terá todas suas necessidades atentidas pelos utilitários de criação. São necessários mecanismos para a carga de dados armazenados em arquivo. Considere por exemplo o conteúdo do arquivo populations.txt:

```
In [41]: !cat ./data/populations.txt
```

# year	hare	lynx	carrot
1900	30e3	4e3	48300
1901	47.2e3	6.1e3	48200
1902	70.2e3	9.8e3	41500
1903	77.4e3	35.2e3	38200
1904	36.3e3	59.4e3	40600
1905	20.6e3	41.7e3	39800
1906	18.1e3	19e3	38600
1907	21.4e3	13e3	42300
1908	22e3	8.3e3	44500
1909	25.4e3	9.1e3	42100
1910	27.1e3	7.4e3	46000
1911	40.3e3	8e3	46800
1912	57e3	12.3e3	43800
1913	76.6e3	19.5e3	40900
1914	52.3e3	45.7e3	39400
1915	19.5e3	51.1e3	39000
1916	11.2e3	29.7e3	36700
1917	7.6e3	15.8e3	41800
1918	14.6e3	9.7e3	43300
1919	16.2e3	10.1e3	41300
1920	24.7e3	8.6e3	47300

Esta tabela pode ser facilmente carregada pelo ambiente como um array NumPy com o uso da função loadtxt:

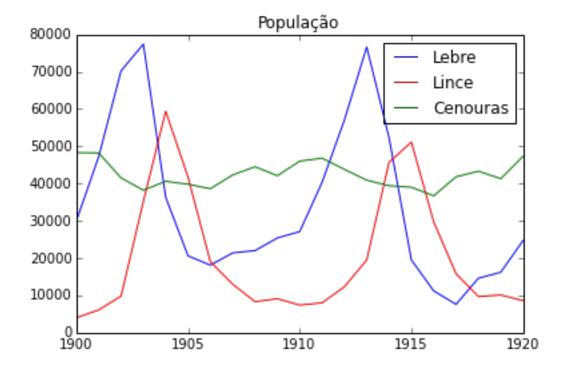
```
In [42]: populations = loadtxt('./data/populations.txt')
         populations
Out[42]: array([[ 1900.,
                           30000.,
                                      4000.,
                                              48300.],
                1901.,
                           47200.,
                                      6100.,
                                              48200.],
                   1902.,
                           70200.,
                                      9800.,
                                              41500.],
                   1903.,
                           77400.,
                                     35200.,
                                              38200.],
                   1904.,
                           36300.,
                                     59400.,
                                              40600.],
                                              39800.],
                   1905.,
                           20600.,
                                     41700.,
                   1906.,
                           18100.,
                                     19000.,
                                              38600.],
                [ 1907.,
                           21400.,
                                     13000.,
                                              42300.],
                [ 1908.,
                                     8300.,
                           22000.,
                                              44500.],
                   1909.,
                           25400.,
                                      9100.,
                                              42100.],
                                      7400.,
                [ 1910.,
                           27100.,
                                              46000.],
                                              46800.],
                  1911.,
                           40300.,
                                      8000.,
                   1912.,
                           57000.,
                                     12300.,
                                              43800.],
                   1913.,
                           76600.,
                                     19500.,
                                              40900.],
                [ 1914.,
                           52300.,
                                     45700.,
                                              39400.],
                [ 1915.,
                           19500.,
                                     51100.,
                                              39000.],
                [ 1916.,
                          11200.,
                                     29700.,
                                              36700.],
                [ 1917.,
                                     15800.,
                                              41800.],
                            7600.,
```

```
[ 1918., 14600., 9700., 43300.],
[ 1919., 16200., 10100., 41300.],
[ 1920., 24700., 8600., 47300.]])
```

Como ilustração, abaixo segue uma representação gráfica do desenvolvimento das populações de cenouras, lebres e linces ao longo do tempo, contida no array populations. A produção de gráficos será apresentada na Seção *Matplotlib*.

```
In [43]: year = populations[:,0]
    hare = populations[:,1]
    lynx = populations[:,2]
    carrot = populations[:,3]
    plot(year, hare, 'b-')
    plot(year, lynx, 'r-')
    plot(year, carrot, 'g-')
    title(u'População')
    legend(('Lebre', 'Lince', 'Cenouras'))
```

Out[43]: <matplotlib.legend.Legend at 0x7fc36dd46650>



De modo similar, savetxt pode ser utilizado para salvar um array em um **arquivo texto**. NumPy também possui uma funções save e load que respectivamente salvam e carregam arrays em um **formato binário** próprio.

1.3.1 Leitura de arquivos CSV

Considere que os dados estão no formato CSV (Comma Separated Values):

```
In [45]: !cat data/populations.csv
year, hare, lynx, carrot
1900,30000,4000,48300
1901,47.2e3,6.1e3,48200
1902,70.2e3,9.8e3,41500
1903,77.4e3,35.2e3,38200
1904,36.3e3,59.4e3,40600
1905,20.6e3,41.7e3,39800
1906,18.1e3,19000,38600
1907,21.4e3,13000,42300
1908,22000,8.3e3,44500
1909,25.4e3,9.1e3,42100
1910,27.1e3,7.4e3,46000
1911,40.3e3,8000,46800
1912,57000,12.3e3,43800
1913,76.6e3,19.5e3,40900
1914,52.3e3,45.7e3,39400
1915, 19.5e3, 51.1e3, 39000
1916,11.2e3,29.7e3,36700
1917,7.6e3,15.8e3,41800
1918,14.6e3,9.7e3,43300
1919,16.2e3,10.1e3,41300
1920,24.7e3,8.6e3,47300
  Novamente, podemos utilizar loadtxt
In [47]: populations = loadtxt('data/populations.csv', delimiter=',', skiprows=1)
        populations
                                     4000.,
Out[47]: array([[ 1900.,
                          30000.,
                                             48300.],
                [ 1901.,
                          47200.,
                                     6100.,
                                             48200.],
                  1902., 70200.,
                                     9800.,
                                             41500.],
                [ 1903., 77400.,
                                    35200.,
                                             38200.],
                1904., 36300.,
                                    59400.,
                                             40600.],
                                             39800.],
                [ 1905.,
                          20600.,
                                    41700.,
                [ 1906., 18100.,
                                    19000.,
                                             38600.],
                [ 1907.,
                                    13000.,
                          21400.,
                                             42300.],
                [ 1908.,
                           22000.,
                                    8300.,
                                             44500.],
                [ 1909., 25400.,
                                     9100.,
                                             42100.],
                [ 1910.,
                          27100.,
                                    7400.,
                                             46000.],
                [ 1911.,
                          40300.,
                                     8000.,
                                             46800.],
                [ 1912.,
                          57000.,
                                    12300.,
                                             43800.],
                [ 1913., 76600.,
                                    19500.,
                                             40900.],
                [ 1914., 52300.,
                                    45700.,
                                             39400.],
                [ 1915., 19500.,
                                    51100.,
                                             39000.],
                [ 1916., 11200.,
                                    29700.,
                                             36700.],
                [ 1917., 7600., 15800.,
                                             41800.],
```

```
[ 1918., 14600.,
                    9700.,
                           43300.],
[ 1919., 16200., 10100.,
                           41300.],
[ 1920., 24700.,
                    8600.,
                           47300.]])
```

Porém, é comum situações em que tabelas de dados apresentam alguns dados ausentes. Considere, por exemplo, o seguinte arquivo CSV:

```
In [48]: !cat data/populations-missing.csv
year, hare, lynx, carrot
1900,30000,4000,48300
1901,,5.1e3,48200
1902,70.2e3,9.8e3,41500
1903,77.4e3,35.2e3,38200
1904,36.3e3,59.4e3,40600
1905,,41.7e3,39800
1906,18.1e3,19000,38600
1907,21.4e3,13000,42300
1908,22000,,44500
1909,25.4e3,9.1e3,42100
1910,27.1e3,,46000
1911,40.3e3,8000,46800
1912,57000,12.3e3,43800
1913,76.6e3,19.5e3,
1914,52.3e3,45.7e3,
1915,19.5e3,51.1e3,39000
1916,11.2e3,29.7e3,36700
1917,7.6e3,15.8e3,41800
1918,14.6e3,9.7e3,43300
1919,,10.1e3,41300
1920,24.7e3,8.6e3,47300
```

Para essa situação, podemos utilizar genfromtxt:

```
In [51]: populations = genfromtxt('data/populations-missing.csv', delimiter=',', skiprows=1)
        populations
Out[51]: array([[ 1900., 30000.,
                                   4000.,
                                           48300.],
               [ 1901.,
                                   5100.,
                                           48200.],
                            nan,
               [ 1902., 70200.,
                                   9800.,
                                           41500.],
               [ 1903., 77400.,
                                  35200.,
                                           38200.],
                                  59400.,
                                           40600.],
               [ 1904., 36300.,
               [ 1905.,
                            nan,
                                  41700.,
                                           39800.],
               [ 1906., 18100.,
                                  19000.,
                                           38600.],
               [ 1907., 21400.,
                                  13000.,
                                           42300.],
               [ 1908., 22000.,
                                     nan,
                                           44500.],
               [ 1909., 25400.,
                                   9100.,
                                           42100.],
               [ 1910., 27100.,
```

46000.],

nan,

```
8000.,
[ 1911., 40300.,
                          46800.],
[ 1912., 57000.,
                  12300.,
                          43800.],
[ 1913., 76600.,
                  19500.,
                             nan],
[ 1914., 52300.,
                  45700.,
                             nan],
[ 1915., 19500.,
                  51100.,
                          39000.],
[ 1916., 11200.,
                  29700.,
                          36700.],
[ 1917., 7600.,
                  15800.,
                          41800.],
[ 1918., 14600.,
                   9700.,
                          43300.],
[ 1919., nan, 10100.,
                          41300.],
[ 1920., 24700., 8600.,
                          47300.]])
```

1.4 Sub-arrays

```
In [52]: import itertools as itts
          data = [10 * i + j for i, j in itts.product(range(6), range(6))]
          A = np.array(data)
          A.shape = 6,6
```

Considere a matriz A abaixo (representa como um array NumPy):

A matriz é bi-dimensional. Seus elementos podem ser indexados através de duas coordenadas, separadas por uma vírgula:

```
In [55]: A[2,3]
Out[55]: 23
```

Fragmentos do array podem ser obtidos pelo mesmo tipo de *slicing* visto anteriormente para listas Python. Suponha que desejemos obter apenas as colunas 3 e 4 na linha 4. Podemos utilizar slicing nas colunas de A:

```
In [56]: A[4,3:6]
Out[56]: array([43, 44, 45])
```

Suponha agora que desejemos todas as linhas a partir da linha 4 e todas as colunas a partir da coluna 3:

Outros exemplos:

Essas operações de *slicing* criam um **visão** (*view*) do *array* original, não uma cópia. Quando a visão é modificada, o array original é modificado também:

```
In [44]: B = A[0,3:5]

B[0] = 99

print B

print A

[99 4]

[[0 1 2 99 4 5]

[10 11 12 13 14 15]

[20 21 22 23 24 25]

[30 31 32 33 34 35]

[40 41 42 43 44 45]

[50 51 52 53 54 55]]
```

Para evitar sobreescrita, se necessário, podemos criar uma **cópia do array**. No exemplo abaixo, as matrizes A e B são representadas por arrays que não compartilham memória, não havendo sobre-escrita:

1.5 Fancy indexing

Podemos utilizar máscaras para selecionar os elementos de um array:

No exemplo abaixo, mask é um **array booleano** no qual cada elemento recebe o valor "Verdadeiro" (*True*) se e somente se seu elemento equivalente no array A for divisível por 3:

O array booleano mask pode ser utilizado para selecionar elementos de A (no caso, apenas os elementos múltiplos de 3):

```
In [62]: A[mask]
Out[62]: array([ 0,  3, 12, 15, 21, 24, 30, 33, 42, 45, 51, 54])
```

Podemos também aplicar a máscara booleana diretamente:

Fancy indexing também pode ser realizado a partir de um array ou uma sequência de índices (na forma de listas ou tuplas). No exemplo abaixo, utilizamos a lista [1,5,6,8] como índice, recuperando assim os elemento nas posições 1, 5, 6 e 8 no array v:

```
In [65]: v[[1,5,6,8]]
Out[65]: array([10, 50, 60, 80])
```

No exemplo abaixo, duas sequências são fornecidas, na forma de tuplas. A primeira indexa as linhas da matriz A, enquanto a segunta indexa as colunas:

1.6 Operações com arrays

Escalar e array:

Entre arrays, elemento por elemento:

```
In [76]: A + B
Out[76]: array([[ 3., 3., 3.],
               [3., 3., 3.],
               [3., 3., 3.]])
In [77]: A * B
Out[77]: array([[ 2., 2., 2.],
               [2., 2., 2.],
                [2., 2., 2.]
  Importante: multiplicação de arrays não equivale à multiplicação de matrizes. A multiplação
de matrices, como definida em álgebra, é obtida com a função dot:
In [78]: dot(A, B)
Out[78]: array([[ 6., 6., 6.],
               [6., 6., 6.],
               [6., 6., 6.]])
  Transposição:
In [79]: A = arange(12).reshape(3,4)
Out[79]: array([[ 0, 1, 2, 3],
               [4, 5, 6, 7],
               [8, 9, 10, 11]])
In [80]: A.T
Out[80]: array([[ 0, 4, 8],
               [1, 5, 9],
               [2, 6, 10],
               [3, 7, 11]])
  Comparações:
In [81]: u = random.rand(5)
        u
Out[81]: array([ 0.77096045,  0.42731738,  0.73113641,  0.9227403 ,  0.12002013])
In [82]: v = random.rand(5)
Out[82]: array([ 0.05566669, 0.15759572, 0.36029857, 0.01489561, 0.69945966])
In [83]: u > v
Out[83]: array([ True, True, True, True, False], dtype=bool)
```

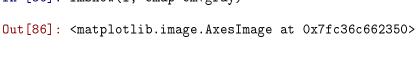
1.6.1 Álgebra linear

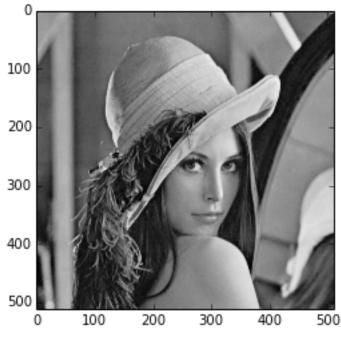
Operações de álgebra linear são implementadas em numpy.linalg. Porém, no geral, essas implementações não são eficientes e o módulo scipy.linalg deve ser preferido, por ser melhor otimizado.

Exemplo: imagens representadas como arrays

Imagens podem ser pensadas como arrays nos quais cada elemento representa uma intensidade luminosa naquela posição:

```
In [84]: from scipy.misc import lena
In [85]: I = lena()
         Ι
Out[85]: array([[162, 162, 162, ..., 170, 155, 128],
                [162, 162, 162, ..., 170, 155, 128],
                [162, 162, 162, \ldots, 170, 155, 128],
                . . . ,
                [ 43,
                       43, 50, ..., 104, 100, 98],
                       44, 55, ..., 104, 105, 108],
                [ 44,
                [ 44,
                       44, 55, ..., 104, 105, 108]])
In [86]: imshow(I, cmap=cm.gray)
```





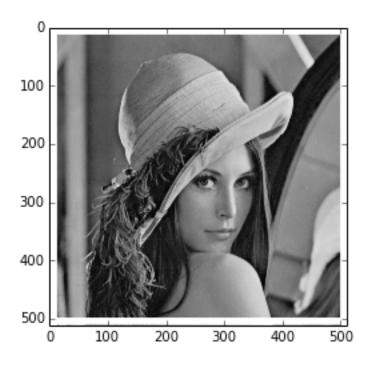
1.7.1 Exercício 5.1

As intensidades luminosas estão representadas inteiros entre 0 (preto) e 255 (branco). Utilize *slicing* para criar um **borda branca** na imagem, isto é, modificar as bordas da matriz para que assumam o valor 255 (branco).

Solução

```
In [87]: B = I.copy()
    B[0:13, :] = 255
    B[:, 0:13] = 255
    B[-13:-1, :] = 255
    B[:, -13:-1] = 255
    imshow(B, cmap=cm.gray)
```

Out[87]: <matplotlib.image.AxesImage at 0x7fc3615f4590>



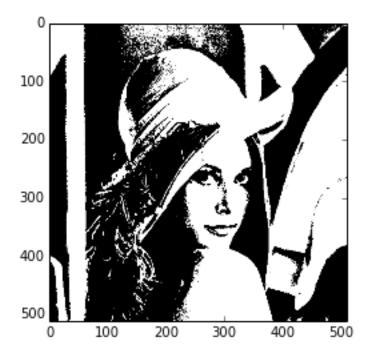
Exemplo Limiarização (*thresholding*) - uma operação comum em processamento de imagens, chamada de limiarização, consiste em realizar o seguinte procedimento em cada pixel:

$$I'[x,y] \leftarrow$$
 255; sse $I[x,y] > k$, 0 caso contrário

o valor k é chamado de **limiar** (*threshold*). Tal operação pode ser facilmente implementada utilizando-se os recursos da NumPy.

```
In [88]: R = zeros_like(I) # Cria um array de zeros com as mesmas dimensões de I
    R[I > 128] = 255
    imshow(R, cmap=cm.gray)
```

Out[88]: <matplotlib.image.AxesImage at 0x7fc361523750>



1.8 Exemplo: Cadeias de Markov e um modelo de clima muito simples

Considere um modelo bastante simplificado de predição climática. As probabilidades do dia ser *chuvoso* ou *ensolarado*, dado o clima do dia anterior, podem ser representadas a partir de uma **matriz de transição**:

A matriz P representa um modelo de clima no qual há uma chance de 90% de um dia ensolarado se seguido por outro dia de sol e uma chance de 50% de um dia chuvoso se seguir a outro dia de chuva. As *colunas* podem ser rotuladas como *ensolarado* e *chuvoso* e as linhas na mesma ordem. Assim, P[i,j] é a probabilidade de um dia do tipo i ser seguido por um dia do tipo j (note que as linhas somam 1).

Considere que o tempo no primeiro dia foi ensolarado. Podemos representar este dia através de um **vetor de estado x** $_0$ no qual o campo *ensolarado* é 100% e o campo *chuvoso* é 0:

```
In [90]: x0 = array([1., 0])
```

A previsão do tempo para o dia seguinte pode ser dada por: