Programação II
+
Estruturas de Dados para Bioinformática

Análise de dados tabulares (pandas)
Parte 2

Hugo Pacheco

DCC/FCUP
22/23

Pandas

- Aula anterior = como migrar de *NumPy* para *Pandas*:
  - operações similares
  - diferenças na representação de dados
- Esta aula = funcionalidades adicionais *Pandas*:
  - limpeza de dados
  - transformação de *DataFrame*s

Pandas (Dados em falta)

- Dados em falta são assinalados com *NaN* para valores numéricos ou *None* para objetos

- Podemos verificar se há dados em falta

- Podemos apagar todas as linhas com dados em falta

- Podemos apagar todas as colunas com dados em falta

```
>>> df = pd.DataFrame({'age':
{'John':28,'Anne':35},'status':
{'John':'Married','Anne':None,'
Mary':'Single'}})
>>> df
       age   status
John  28.0  Married
Anne  35.0     None
Mary   NaN   Single

>>> df.isnull()
        age  status
John  False   False
Anne  False    True
Mary   True   False

>>> df.dropna()
       age   status
John  28.0  Married

>>> df.dropna(axis=1)
       age   status

>>> df.dropna(axis=0)
       age   status
John  28.0  Married
```

Pandas (Dados em falta)

- Podemos substituir dados em falta:
  - Por um valor fixo
  - A partir dos dados próximos
  - Utilizando uma função ou mapeamento

```
>>> df.fillna(0)
John  28.0  Married
Anne  35.0        0
Mary   0.0   Single
```

```
>>> df.fillna(method='ffill')
       age   status
John  28.0  Married
Anne  35.0  Married
Mary  35.0   Single

>>>
df.fillna({'age':0,'status':'
Unknown'})
John  28.0  Married
Anne  35.0  Unknown
Mary   0.0   Single
```

Pandas (Adicionar colunas)

- Pode-se adicionar colunas:

```
>>> df = pd.DataFrame([{'one':1},
{'one':5,'two':10}])
>>> df
   one   two
0    1   NaN
1    5  10.0
```

- com uma nova sequência

- a partir de colunas existentes

```
>>> df['three'] = pd.Series([True,False])
>>> df
   one   two  three
0    1   NaN   True
1    5  10.0  False

>>> df['four'] = df['one'] + df['two']
>>> df
   one   two  three  four
0    1   NaN   True   NaN
1    5  10.0  False  15.0
```

Pandas (Adicionar colunas)

- Pode-se adicionar colunas:

- Juntando um ou mais *DataFrames*

```
>>> df = pd.DataFrame([{'one':1},
{'one':5,'two':10}])
>>> df
   one   two
0    1   NaN
1    5  10.0

>>> df2 = pd.DataFrame([{'three':3},{}])
>>> df3 = pd.DataFrame([{},{'four':4}])
>>> df = df.join([df2,df3])
>>> df
   one   two  three  four
0    1   NaN    1.0   NaN
1    5  10.0    NaN   5.0
```

Pandas (Remover colunas)

- Pode-se remover colunas:
  - “in-place”
  - Criando um novo *DataFrame*

```
>>> df = pd.DataFrame([{'one':1,'two':2},
{'one':5,'three':10,'four':4}])
>>> df
   one  two  three  four
    1  2.0    NaN   NaN
1    5  NaN   10.0   4.0
```

```
>>> del df['one']
>>> df
   two  three  four
0  2.0    NaN   NaN
1  NaN   10.0   4.0

>>> df = df.drop(columns=['two','three'])
>>> df
   four
0   NaN
1   4.0
```

Pandas (Adicionar linhas)

- Pode-se adicionar linhas:
  - Juntando uma sequência
  - Alterando/criando um índice “in-place”
  - Concatenando com outro *DataFrame*

```
>>> df =
pd.DataFrame([[1,2,3]],index=list("a"))
   0  1  2
a  1  2  3

>>> df = df.append([[7,8,9]])
   0  1  2
a  1  2  3
0  7  8  9

>>> df.loc[0] = [10,11,12]
   0  1    2
a  1  2    3
0 10 11 12.0

>>> df2 = pd.DataFrame([[0,0],
[7,8]],index=list("ab"))
>>> df = pd.concat([df,df2])
   0  1    2
   1  2  3.0
0 10 11 12.0
a  0  0  NaN
b  7  8  NaN
```

Pandas (Remover linhas)

- Pode-se remover linhas:

```
>>> df = pd.DataFrame([[1,2],[3,4],
[3,4],[5,6]],index=list("abca"))
>>> df
   0  1
a  1  2
b  3  4
c  3  4
a  5  6
```

- Com uma sequência de índices

```
>>> df.drop(index='a')
   0  1
b  3  4
c  3  4
```

- Eliminando valores duplicados

```
>>> df.drop_duplicates()
   0  1
b  3  4
```

NumPy $\leq$ Pandas

- Algumas operações sobre matrizes *NumPy* têm similares em *Pandas*

- E.g., transposta de matrizes troca colunas com índices

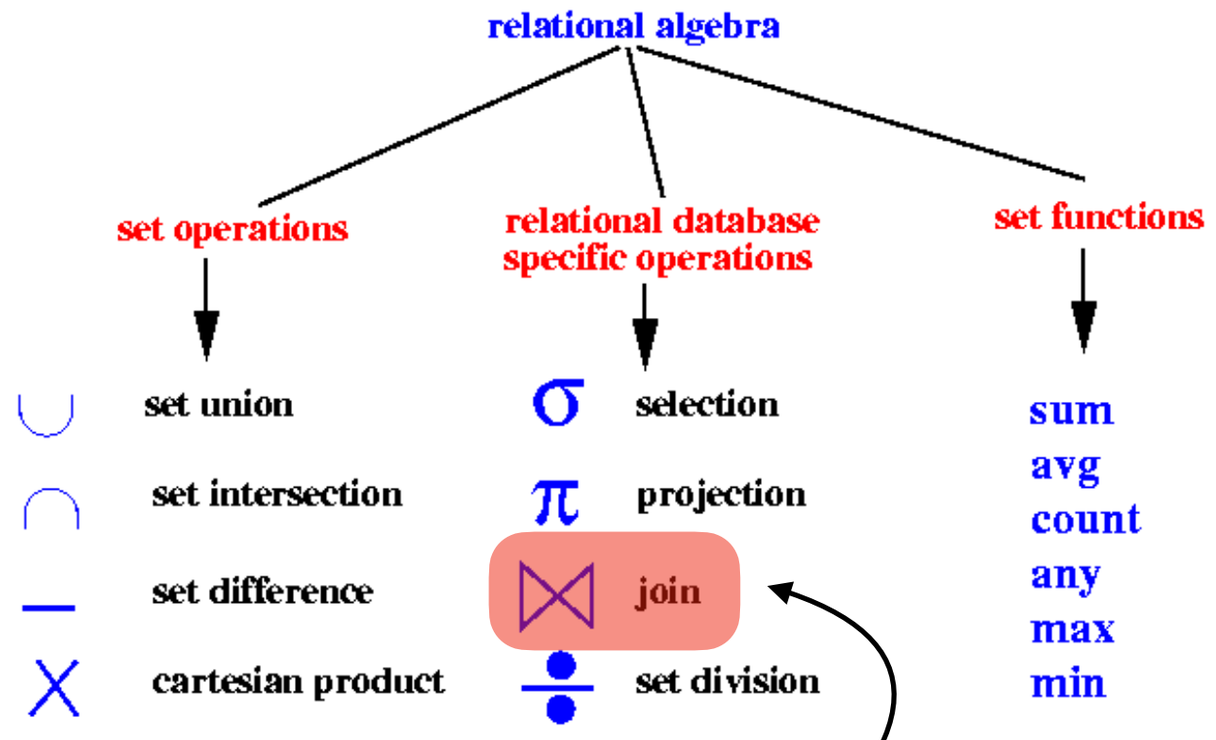
```
>>> df = pd.DataFrame({"A":[3,4],
"B":[5,6]},index=['a','b'])
>>> df
   A  B
a  3  5
b  4  6

>>> df.transpose()
     a    b
A  3.0  4.0
B  5.0  6.0
```

Pandas (álgebra relacional)

- A biblioteca *pandas* também suporta algumas operações de transformação de *DataFrame*s reminescentes da **álgebra relacional**

  - permite relacionar e combinar dados de diferentes *DataFrames*

  - está no cerne das ditas bases de dados relacionais (SQL)



- Vamos olhar de forma informal para algumas delas

Pandas (join)

- Podemos juntar dois *DataFrame*s utilizando um índice ou coluna em comum como “chave”

  - Embora não obrigatório, é conveniente assumir que os valores da coluna em cada lado são únicos, daí a nomenclatura “chave”

  - Em álgebra relacional é o chamado “inner join”: o resultado corresponde à união para os elementos da coluna que existam nos dois lados

```
>>> df1 = pd.DataFrame({'employee': ['Bob', 'Jake', 'Lisa',
'Mary'],'group': ['Accounting', 'Engineering','Engineering', 'HR']})
>>> df2 = pd.DataFrame({'employee': ['Lisa', 'Bob', 'Jake', 'Sue'],
'hire_date': [2004, 2008, 2012, 2014]})
>>> df1; df2
  employee         group          employee  hire_date
0      Bob   Accounting        0     Lisa       2004
1     Jake  Engineering        1      Bob       2008
2     Lisa  Engineering        2     Jake       2012
3     Mary           HR        3      Sue       2014

>>> pd.merge(df1,df2)
  employee         group  hire_date
0      Bob   Accounting       2008
1     Jake  Engineering       2012
2     Lisa  Engineering       2004
```

Pandas (join)

- Podemos controlar o critério que determina quando uma linha aparece no resultado
  - “inner join” (por defeito) : resultado tem só os elementos existentes nos dois lados
  - “outer join”: resultado tem elementos existentes em qualquer um dos lados, com valores em falta
  - “left join”: resultado tem elementos existentes do lado esquerdo, com valores em falta do lado direito
  - “right join”: resultado tem elementos existentes do lado direito, com valores em falta do lado esquerdo

```
>>> pd.merge(df1,df2,how='inner')
  employee        group  hire_date
0      Bob   Accounting       2008
1     Jake  Engineering       2012
2     Lisa  Engineering       2004

>>> pd.merge(df1,df2,how='outer')
  employee        group  hire_date
0      Bob   Accounting     2008.0
1     Jake  Engineering     2012.0
2     Lisa  Engineering     2004.0
3     Mary           HR        NaN
4      Sue          NaN     2014.0
```

```
>>> pd.merge(df1,df2,how='left')
  employee        group  hire_date
0      Bob   Accounting     2008.0
1     Jake  Engineering     2012.0
2     Lisa  Engineering     2004.0
3     Mary           HR        NaN

>>> pd.merge(df1,df2,how='right')
  employee        group  hire_date
0     Lisa  Engineering       2004
1      Bob   Accounting       2008
2     Jake  Engineering       2012
3      Sue          NaN       2014
```

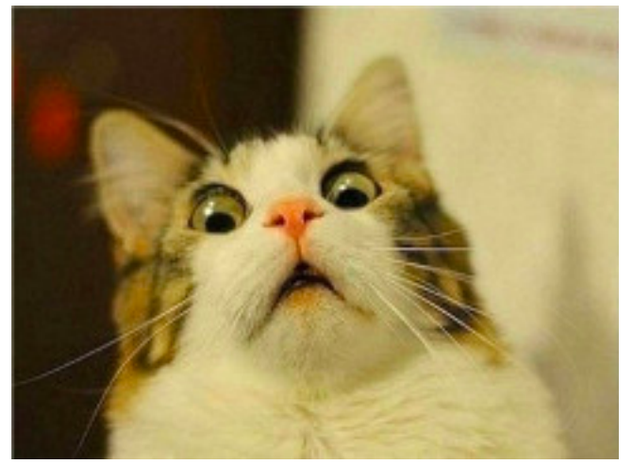
Pandas (group)

- Podemos agrupar linhas de um *DataFrame* por categorias

```
>>> teams = {'Team': ['Riders', 'Riders', 'Devils', 'Devils',
'Kings','kings', 'Kings', 'Kings', 'Riders', 'Royals', 'Royals',
'Riders'],'Rank': [1, 2, 2, 3, 3,4 ,1 ,1,2 , 4,1,2],'Year':
[2014,2015,2014,2015,2014,2015,2016,2017,2016,2014,2015,2017],'Po
ints':[876,789,863,673,741,812,756,788,694,701,804,690]}
>>> df = pd.DataFrame(teams)
>>> df
      Team  Rank  Year  Points
0   Riders     1  2014     876
1   Riders     2  2015     789
2   Devils     2  2014     863
3   Devils     3  2015     673
4    Kings     3  2014     741
5    kings     4  2015     812
6    Kings     1  2016     756
7    Kings     1  2017     788
8   Riders     2  2016     694
9   Royals     4  2014     701
10  Royals     1  2015     804
11  Riders     2  2017     690
```

Pandas (group)

- Resultado é um "*DataFrame* de *DataFrames*"



```
>>> ddf = df.groupby('Team')
>>> ddf
<pandas.core.groupby.generic.DataFrameGroupBy
object at 0x10d406070>
>>> for i,df in ddf:
>>>     print(i)
>>>     print(df)
Devils
      Team  Rank  Year  Points
2   Devils     2  2014     863
3   Devils     3  2015     673
Kings
     Team  Rank  Year  Points
4   Kings     3  2014     741
6   Kings     1  2016     756
7   Kings     1  2017     788
```

Pandas (group)

- Podemos agrupar linhas de um *DataFrame* por categorias

```
# ranking e pontos médios por equipa
>>> df.drop(columns='Year').groupby('Team').mean()
             Rank      Points
Team
Devils   2.500000  768.000000
Kings    1.666667  761.666667
Riders   1.750000  762.250000
Royals   2.500000  752.500000
kings    4.000000  812.000000

# número de equipas por ano
>>> df.groupby('Year').size()
Year
2014    4
2015    4
2016    2
2017    2
```

Pandas (group)

- Podemos agrupar linhas de um *DataFrame* por categorias

```
# apenas anos com mais de 3
equipas
>>>
df.groupby('Year').filter(lambda
x : len(x) >= 3)
      Team  Rank  Year  Points
0   Riders     1  2014     876
1   Riders     2  2015     789
2   Devils     2  2014     863
3   Devils     3  2015     673
4    Kings     3  2014     741
5    kings     4  2015     812
9   Royals     4  2014     701
10  Royals     1  2015     804
```

```
# máximo de pontos por equipa por
rank
>>>
df.drop(columns='Year').groupby(['Te
am','Rank']).max()
Team    Rank
Devils  2          863
        3          673
Kings   1          788
        3          741
Riders  1          876
        2          789
Royals  1          804
        4          701
kings   4          812
```

Pandas (outras operações)

- Podemos criar uma nova coluna com a soma cumulativa de uma *Series* (e.g., copiada ou calculada a partir de outras colunas)

```
>>> standings = {'Matchday':[1,2,3,4],'Match':
['Win','Lose','Draw','Win'],'Matchpoints':[3,0,1,3]}
>>> df = pd.DataFrame(standings)
>>> df.set_index('Matchday',inplace=True,drop=True)
>>> df
           Match  Matchpoints
Matchday
1            Win            3
2           Lose            0
3           Draw            1
4            Win            3
>>> df['Points'] = df['Matchpoints'].cumsum()
>>> df
           Match  Matchpoints  Points
Matchday
1            Win            3       3
2           Lose            0       3
3           Draw            1       4
4            Win            3       7
```

Pandas (outras operações)

- Podemos ordenar um *DataFrame* por uma ou mais colunas ou índices.

```
>>> cars = {'Brand': ['Honda Civic', 'Toyota Corolla', 'Ford
Focus', 'Audi A4'],'Price': [22000, 25000, 27000,
35000],'Year': [2015, 2013, 2018, 2018]}
>>> df = pd.DataFrame(cars, columns=['Brand', 'Price', 'Year'])
>>> df
             Brand  Price  Year
0      Honda Civic  22000  2015
1   Toyota Corolla  25000  2013
2       Ford Focus  27000  2018
3          Audi A4  35000  2018

>>> df.sort_values(by=['Year', 'Price'])
             Brand  Price  Year
1   Toyota Corolla  25000  2013
0      Honda Civic  22000  2015
2       Ford Focus  27000  2018
3          Audi A4  35000  2018
```

Pandas (outras operações)

- Podemos “derreter” colunas por várias linhas

```
>>> data = pd.DataFrame({'Name':['José','Maria','Ana'],'House':
['A','B','A'],'Age':[32,46,25],'Books':[100,30,20],'Movies':[10,20,40]})
>>> data
    Name House  Age  Books  Movies
0   José     A   32    100      10
1  Maria     B   46     30      20
2    Ana     A   25     20      40
>>> data.melt(id_vars=['Name','House'],value_vars=['Age','Books','Movies']))
    Name House variable  value
0   José     A      Age     32
1  Maria     B      Age     46
2    Ana     A      Age     25
3   José     A    Books    100
4  Maria     B    Books     30
5    Ana     A    Books     20
6   José     A   Movies     10
7  Maria     B   Movies     20
8    Ana     A   Movies     40
```

Exemplo *Pandas*

- Relembrando uma das tabelas de novos testes diários COVID-19 calculada na aula anterior

```
>>> novas
            amostras_novas  amostras_pcr_novas  ...
data                                            ...
2020-02-26             0.0                 0.0  ...
2020-02-27             0.0                 0.0  ...
2020-02-28             0.0                 0.0  ...
2020-02-29             0.0                 0.0  ...
2020-01-03            25.0                25.0  ...
...                    ...                 ...  ...

>>> novas.info()
DatetimeIndex: 827 entries, 2020-02-26 to 2022-06-01
Data columns (total 3 columns):
 #   Column                  Non-Null Count  Dtype
---  ------                  --------------  -----
 0   amostras_novas          784 non-null    float64
 1   amostras_pcr_novas      784 non-null    float64
 2   amostras_antigenio_novas  784 non-null    float64
```

Exemplo *Pandas*

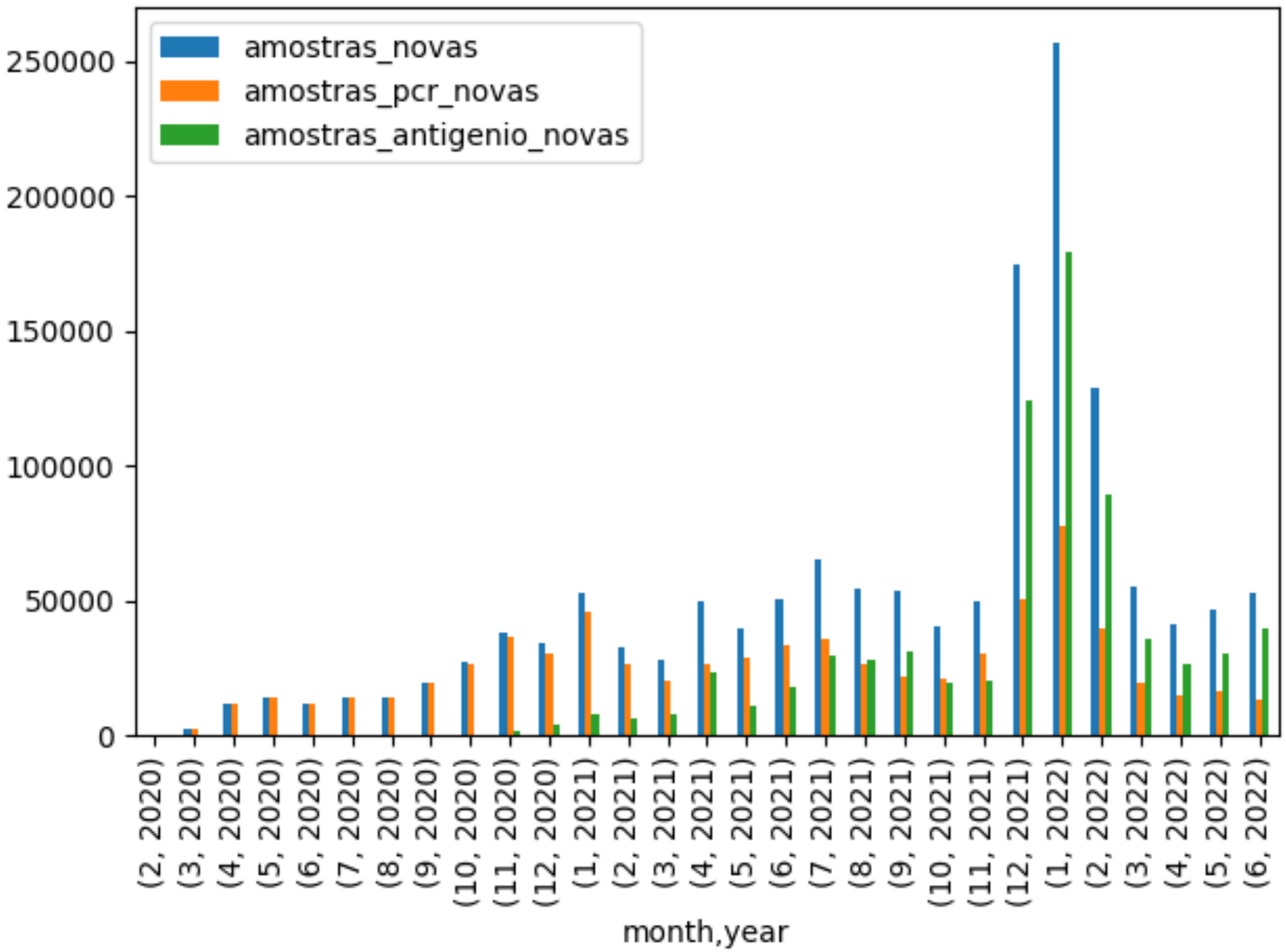
- Calcular a média de novos testes por mês

```
# adicionar duas novas colunas para mês e ano
>>> novas['month'] = novas.index.month
>>> novas['year'] = novas.index.year
# agrupar linhas por (mês,ano)
>>> meses = novas.groupby(['month','year']).mean()
# ordenar por data crescente
>>> meses.sort_values(by=['year','month'], inplace=True)
>>> meses
             amostras_novas  amostras_pcr_novas  amostras_antigenio_novas
month year
1     2020    15182.000000        15113.200000                 68.800000
2     2020    12055.642857        11757.214286                298.428571
3     2020     9034.862069         8901.413793                133.448276
4     2020    15008.285714        14843.142857                165.142857
...    ...     ...                 ...                         ...
```

Exemplo *Pandas*

- Calcular a média de novos testes por mês

```
meses.plot(kind='bar')
plt.tight_layout()
plt.show()
```



Exemplo *Pandas*

- Cruzar os dados de números de testes e o número de casos confirmados, disponível aqui

```
>>> amostras = pd.read_csv('amostras.csv',index_col='data')
>>> amostras = amostras['amostras_novas']
>>> amostras.fillna(0,inplace=True)

>>> dados = pd.read_csv('data.csv',index_col='data')
>>> confirmados = dados['confirmados_novos']

>>> amostras_confirmados =
pd.merge(amostras,confirmados,how='inner',left_index=True,righ
t_index=True)
>>> amostras_confirmados
            amostras_novas  confirmados_novos
data
26-02-2020             0.0                0.0
27-02-2020             0.0                0.0
...                    ...                ...
```

Exemplo *Pandas*

```
>>> amostras_confirmados.corr()
                  amostras_novas  confirmados_novos
amostras_novas          1.000000           0.816434
confirmados_novos       0.816434           1.000000
```

- Verificar que existe uma forte correlação entre testagem e casos COVID-19