

Semana da Ciência de Dados 2024







Agenda do Minicurso

- Fundamentos de Análise de Dados
- Manipulação de Dados (NumPy e Pandas)
- Limpeza e Preparação de Dados
- Análise Exploratória de Dados (EDA)
- Visualização de Dados (Plotly)



Fundamentos de Análise de Dados

Fundamentos de Análise de Dados

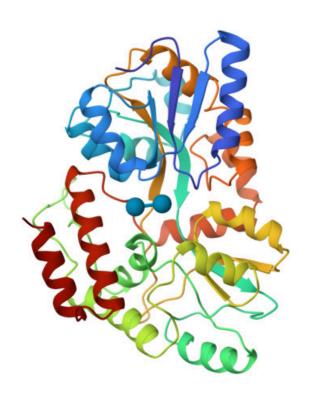
O que é Análise de Dados?

- Inspeção, limpeza e modelagem de dados
- Objetivo: extrair insights úteis
- Fundamental em:
 - Negócios
 - Pesquisa científica
 - Tomada de decisões

Exemplo de Ciclo de Utilização de Dados

- 1. **Objetivo**: Identificar padrões em geometrias de proteínas obtidas por RMN.
- 2. **Coleta**: Baixamos todas as proteínas do PDB geradas por RMN.
- 3. **Higienização**: Fragmentos ausentes foram ajustados criando subsequências contínuas.
- 4. **Processamento**: Transformamos geometrias em árvores binárias.





- 5. **Normalização**: Ajustamos a orientação do quarto átomo para evitar reflexões.
- 6. **Análise**: Medimos o desvio em relação a uma distribuição uniforme.
- 7. **Visualização**: Criamos histogramas das sequências binárias.
- 8. **Aplicação**: Propusemos um novo método de classificação de proteínas.

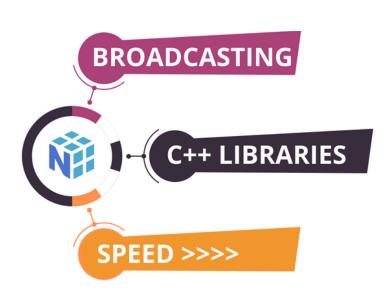
Ferramentas Python para Análise de Dados

- Computação numérica: NumPy
- Tabelas e Séries: Pandas
- Visualizações Estáticas: Matplotlib, Seaborn
- Visualizações Interativas: Plotly



O que é NumPy (Numerical Python)?

- Biblioteca fundamental para computação científica
- Suporte para arrays multidimensionais
- Funções matemáticas de alto desempenho
- Base para outras bibliotecas de análise de dados
 - Pandas
 - Matplotlib
 - Scikit-learn



Criação de Arrays NumPy

```
import numpy as np

# Criação básica
array_1d = np.array([1, 2, 3, 4, 5])
array_2d = np.array([[1, 2, 3], [4, 5, 6]])

# Funções de geração
zeros = np.zeros((3, 3)) # Matriz de zeros
uns = np.ones((2, 4)) # Matriz de uns
aleatorio = np.random.rand(3, 3) # Matriz aleatória
```

Tipos de Arrays

Unidimensionais, Bidimensionais, Multidimensionaiss

Propriedades dos Arrays

```
# Investigando características
print(array_2d.shape)  # Dimensões
print(array_2d.dtype)  # Tipo de dados
print(array_2d.ndim)  # Número de dimensões
print(array_2d.size)  # Número total de elementos
```

Características

- Tipagem estática
- Memória contígua
- Alta performance computacional

Broadcasting

```
# Operação com escalar
array = np.array([1, 2, 3])
resultado = array + 10 # [11, 12, 13]

# Operação com arrays de formas diferentes
a = np.array([[1], [2], [3]])
b = np.array([1, 2, 3])
resultado = a + b
```

Broadcasting em Ação

```
# Matriz de Distâncias
points = np.random.rand(num_points, 2) # Pontos no plano

# Compute the distance matrix using broadcasting
diff = points[:, np.newaxis, :] - points[np.newaxis, :, :]
dist_matrix = np.sqrt(np.sum(diff**2, axis=-1))
```

Exercício:

Compare a peformance do broadcasting com loops tradicionais.

Operações Matemáticas

```
# Operações elemento por elemento
a = np.array([1, 2, 3])
b = np.array([4, 5, 6])
# Soma
soma = a + b \# [5, 7, 9]
# Multiplicação
multiplicacao = a * b # [4, 10, 18]
# Operações universais
print(np.mean(a))  # Média
print(np.sum(a))  # Soma
print(np.max(a))  # Máximo
```

Indexação e Fatiamento (*Slice*)

```
# Indexação simples
array_2d = np.array([[1, 2, 3], [4, 5, 6], [7, 8, 9]])
# Seleção de elemento
print(array_2d[1, 2]) # Elemento na 2ª linha, 3ª coluna
# Fatiamento
print(array_2d[0:2, 1:3]) # Subarray
print(array_2d[:, 1]) # Coluna específica
print(array_2d[2, :]) # Linha específica
# Indexação booleana
print(array_2d[array_2d > 5])
```

Reshape e Operações de Transformação

```
# Mudança de formato
array_original = np.arange(12)
array_reshape = array_original.reshape((3, 4))

# Transposição
transposta = array_reshape.T

# Concatenação
a = np.array([1, 2, 3])
b = np.array([4, 5, 6])
concatenado = np.concatenate([a, b])
```

Funções Matemáticas Avançadas

```
# Funções trigonométricas
angulos = np.array([0, np.pi/2, np.pi])
senos = np.sin(angulos)
# Álgebra linear
matriz_a = np.array([[1, 2], [3, 4]])
matriz_b = np.array([[5, 6], [7, 8]])
# Multiplicação de matrizes
produto = np.dot(matriz_a, matriz_b)
# Autovalores e autovetores
autovalores, autovetores = np.linalg.eig(matriz_a)
```

Geração de Números Aleatórios

```
# Distribuições
uniforme = np.random.uniform(0, 1, 5)
normal = np.random.normal(0, 1, 5)
inteiros = np.random.randint(0, 10, 5)

# Semente para reprodutibilidade
np.random.seed(42)
aleatorio = np.random.rand(3)
```

Integração com Outras Bibliotecas

NumPy como Base Computacional

- Pandas: Conversão de estruturas
- Matplotlib: Fonte de dados para visualização

```
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

# Conversão NumPy para Pandas
serie_numpy = np.random.rand(50)
serie_pandas = pd.Series(serie_numpy)

# Plotagem direta
plt.plot(serie_numpy)
plt.show()
```

Boas Práticas

- Usar vetorização ao invés de loops
- Escolher tipos de dados apropriados
- Evitar cópias desnecessárias de arrays



Gargalo de Memória

CPU Specifications

• **Processor:** Intel i9-14900KS

• Cores: 24

• Clock Speed (Turbo): 6.2 GHz

• Instructions per Cycle: 2

• Data/Instruction: 8 bytes

• **CPU Data Rate:** 2380.8 GB/s

Memory Specifications

• Memory Type: DDR5-5600

• **2x Bandwidth:** 89.6 GB/s

Bottleneck

• **CPU Demand:** 2380.8 GB/s

• Memory Bandwidth: 89.6 GB/s

Bottleneck Ratio: 26.6x

Gargalo de Memória

```
import numpy as np

# Define the size of the array
array_size = 10_000_000

# Create arrays with different data types
int32_array = np.random.randint(0, 100, size=array_size, dtype=np.int32)
int64_array = np.random.randint(0, 100, size=array_size, dtype=np.int64)
float32_array = np.random.rand(array_size).astype(np.float32)
float64_array = np.random.rand(array_size).astype(np.float64)
```

Exercício:

Compare o tempo de execução para operações com diferentes tipos de dados.

Perguntas?



O que é o Pandas?

- **Pandas** é uma biblioteca de código aberto para a linguagem Python.
- Fornece estruturas de dados de alto desempenho e ferramentas de análise de dados.
- Baseado no NumPy, oferece estruturas como Series e DataFrame para manipulação eficiente de dados.





Principais Funcionalidades do Pandas

- Manipulação e análise de dados tabulares e estruturados.
- Leitura e escrita de dados em vários formatos (CSV, Excel, SQL, etc.).
- Limpeza e preparação de dados.
- Seleção, filtragem e agregação de dados.
- Manipulação de séries temporais.



Estruturas de Dados Principais

Series

- Vetor unidimensional rotulado, capaz de armazenar qualquer tipo de dado.
- Similar a um array do NumPy, mas com rótulos de índice.

```
import pandas as pd

# Criando uma Series a partir de uma lista
numeros = pd.Series([10, 20, 30, 40, 50])
print(numeros)
```

Trabalhando com Séries Temporais

- Manipulação eficiente de dados baseados em tempo.
- Funções para resampling, time shifting e windowing.

```
import pandas as pd
import numpy as np

# Criando uma Series temporal
datas = pd.date_range('2024-01-01', periods=5, freq='D')
valores = np.random.rand(5)
serie_temporal = pd.Series(valores, index=datas)
print(serie_temporal)
```

DataFrame

- Estrutura de dados bidimensional com rótulos nas linhas e colunas.
- Equivalente a uma planilha ou tabela SQL.

```
import pandas as pd

# Criando um DataFrame a partir de um dicionário
dados = {
    'Nome': ['Ana', 'Carlos', 'Maria'],
    'Idade': [25, 30, 22],
    'Salário': [5000, 6000, 4500]
}

df = pd.DataFrame(dados)
print(df)
```

Carregando Dados de Fontes Externas

- CSV: Arquivos de valores separados por vírgulas.
- Excel: Planilhas do Microsoft Excel.
- **SQL**: Bancos de dados relacionais.

```
import pandas as pd

# Leitura de um arquivo CSV
df_csv = pd.read_csv('dados.csv')

# Leitura de um arquivo Excel
df_excel = pd.read_excel('planilha.xlsx')
```

Seleção e Filtragem de Dados

- Seleção de colunas: Acessar uma ou mais colunas por nome.
- Filtragem de linhas: Selecionar linhas que atendem a certas condições.

```
# Selecionando uma coluna
nomes = df['Nome']
print(nomes)

# Selecionando múltiplas colunas
nome_salario = df[['Nome', 'Salário']]
print(nome_salario)

# Filtrando linhas com base em uma condição
jovens = df[df['Idade'] < 28]
print(jovens)</pre>
```

Operações de Agregação

- Estatísticas descritivas: mean, sum, count, min, max, etc.
- Agrupamento de dados: groupby para agrupar e agregar dados.

```
# Calculando a média dos salários
media_salario = df['Salário'].mean()
print(f"Média salarial: {media_salario}")

# Agrupando por departamento e calculando a média salarial
df['Departamento'] = ['RH', 'TI', 'Vendas']
media_por_departamento = df.groupby('Departamento')['Salário'].mean()
print(media_por_departamento)
```

Manipulação de Dados

- Adição de colunas: Criar novas colunas baseadas em cálculos ou condições.
- Ordenação: Organizar os dados com base em uma ou mais colunas.
- Tratamento de valores ausentes: dropna, fillna.

```
# Adicionando uma nova coluna de bônus
df['Bônus'] = df['Salário'] * 0.1

# Ordenando o DataFrame por idade decrescente
df_ordenado = df.sort_values('Idade', ascending=False)
print(df_ordenado)

# Tratando valores ausentes
df_limpo = df.dropna()  # Remove linhas com valores ausentes
df_preenchido = df.fillna(0) # Substitui valores ausentes por 0
```

Conversão entre Estruturas de Dados

- Series para DataFrame
- DataFrame para NumPy array
- DataFrame para dicionário

```
# Series para DataFrame
serie = pd.Series([1, 2, 3], name='Números')
df_from_series = serie.to_frame()
print(df_from_series)
# DataFrame para NumPy array
array_numerico = df.to_numpy()
print(array_numerico)
# DataFrame para dicionário
dict_dados = df.to_dict()
print(dict_dados)
```

Limpeza e Preparação de Dados

- Tratamento de valores ausentes
- Remoção de duplicatas
- Conversão de tipos de dados
- Normalização e padronização

```
# Removendo valores ausentes
df_sem_na = df.dropna()

# Removendo duplicatas
df_unico = df.drop_duplicates()

# Convertendo tipos de dados
df['Idade'] = df['Idade'].astype(float)
```

Integração com Outras Bibliotecas

- NumPy: Operações numéricas de baixo nível.
- Matplotlib e Seaborn: Visualização de dados.
- Scikit-learn: Aprendizado de máquina.

```
import matplotlib.pyplot as plt

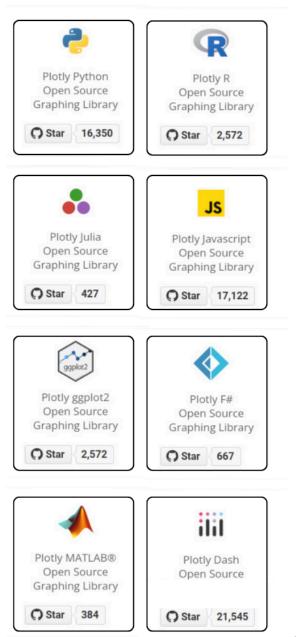
# Gráfico de barras do salário por nome
df.plot.bar(x='Nome', y='Salário')
plt.show()
```

Perguntas?



Plotly

- Biblioteca de visualização de código aberto.
- Gráficos estáticos, animados e interativos.
- Portabilidade para outras linguagens.



Instalação

```
!pip install plotly  # Instalação
import plotly.express as px  # Importação
import pandas as pd  # Importação

# Leitura de Dados
df = pd.read_excel('dados.csv')
```

1. Gráfico de Barras

• Uso: Comparar valores entre diferentes categorias.

```
# Gráfico de Barras
fig = px.bar(df, x='Categoria', y='Valores', title='Gráfico de Barras')
fig.show()
```

2. Histograma

• Uso: Mostrar a distribuição de uma variável numérica.

```
# Dados para o histograma
df_hist = pd.DataFrame({'Dados': np.random.randn(500)})
# Histograma
fig = px.histogram(df_hist, x='Dados', nbins=20, title='Histograma')
fig.show()
```

3. Boxplot

• Uso: Resumir a distribuição de dados e identificar outliers.

```
# Boxplot por Grupo
fig = px.box(df_extra, x='Grupo', y='Salário', title='Boxplot de Salários por Grupo')
fig.show()
```

4. Gráfico de Dispersão (Scatter Plot)

• Uso: Visualizar a relação entre duas variáveis numéricas.

```
# Gráfico de Dispersão
fig = px.scatter(df_extra, x='Idade', y='Salário', color='Grupo', title='Idade vs. Salário')
fig.show()
```

5. Gráfico de Linha

• Uso: Representar dados sequenciais ou séries temporais.

```
# Gráfico de Linha
fig = px.line(df_extra, x='Data', y='Valor_Temporal', title='Tendência ao Longo do Tempo')
fig.show()
```

Perguntas?

Análise Exploratória de Dados

Exploratory Data Analysis (EDA)



Análise Exploratória de Dados (EDA)

Estatísticas Descritivas (Medidas)

Centralidade

- Média
- Mediana
- Moda

Dispersão

- Desvio padrão
- Variância

Correlação

- Determinação
- Pearson

UFC 灣緣

Obrigado!

