Nástroje na analýzu dát a numerické výpočty

Prečo potrebujeme knižnice na numerické výpočty?

- rýchlosť
- numerické algoritmy často sú netriviálne
- pohodlie používania - Python nie je jazyk navrhnutý pre vedcov

Naívne násobenie matíc

Matice je možné reprezentovať zoznamami:

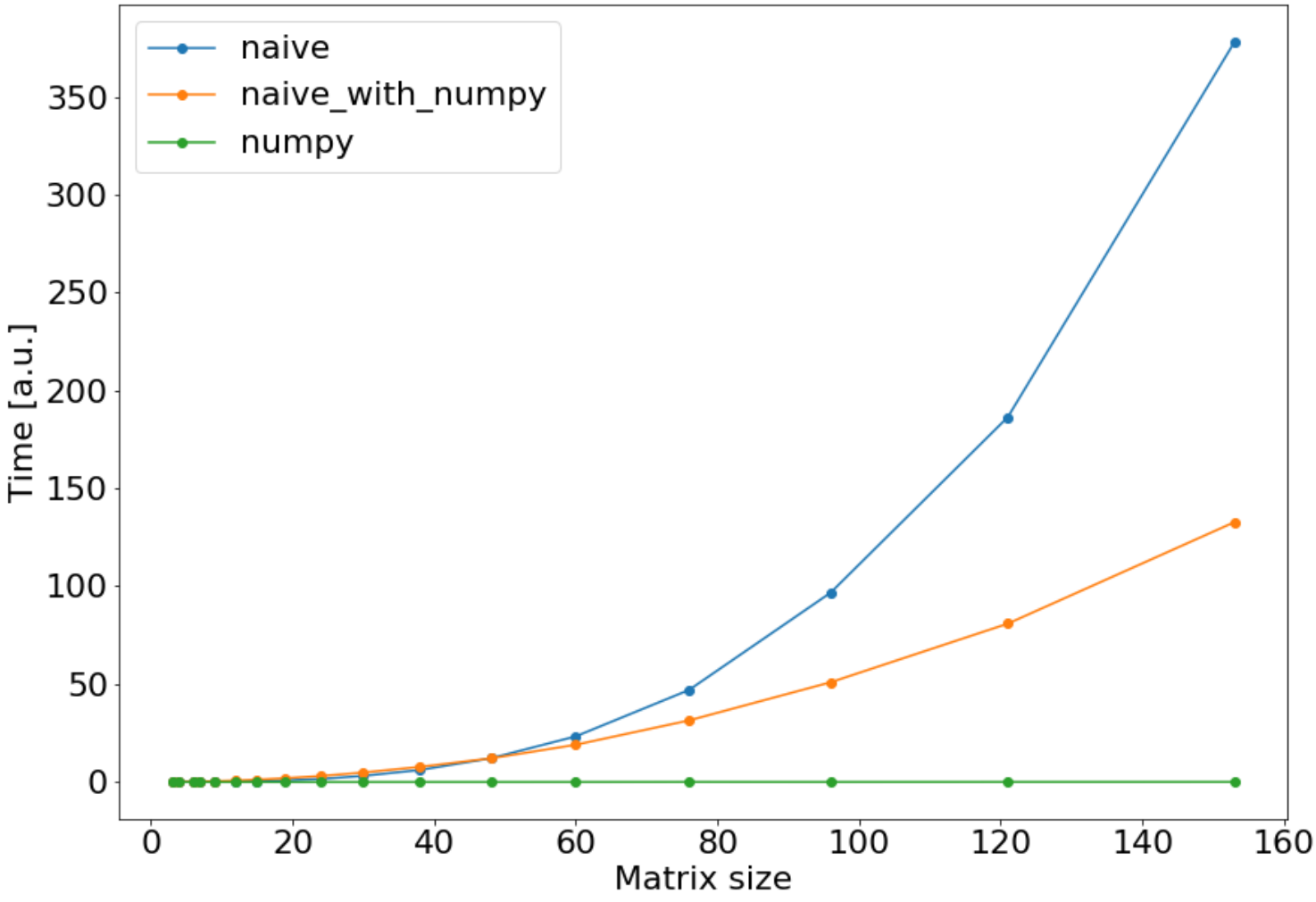
```
a = [[1, 2], [3, 4]]
b = [[0, 1], [1, 0]]
```

Naívne násobenie matíc

$$\mathbf{A}: \quad m \times n \qquad \mathbf{B}: \quad n \times p \qquad c_{ij} = \sum_{k=0}^{n-1} a_{ik} b_{kj} \qquad (1)$$

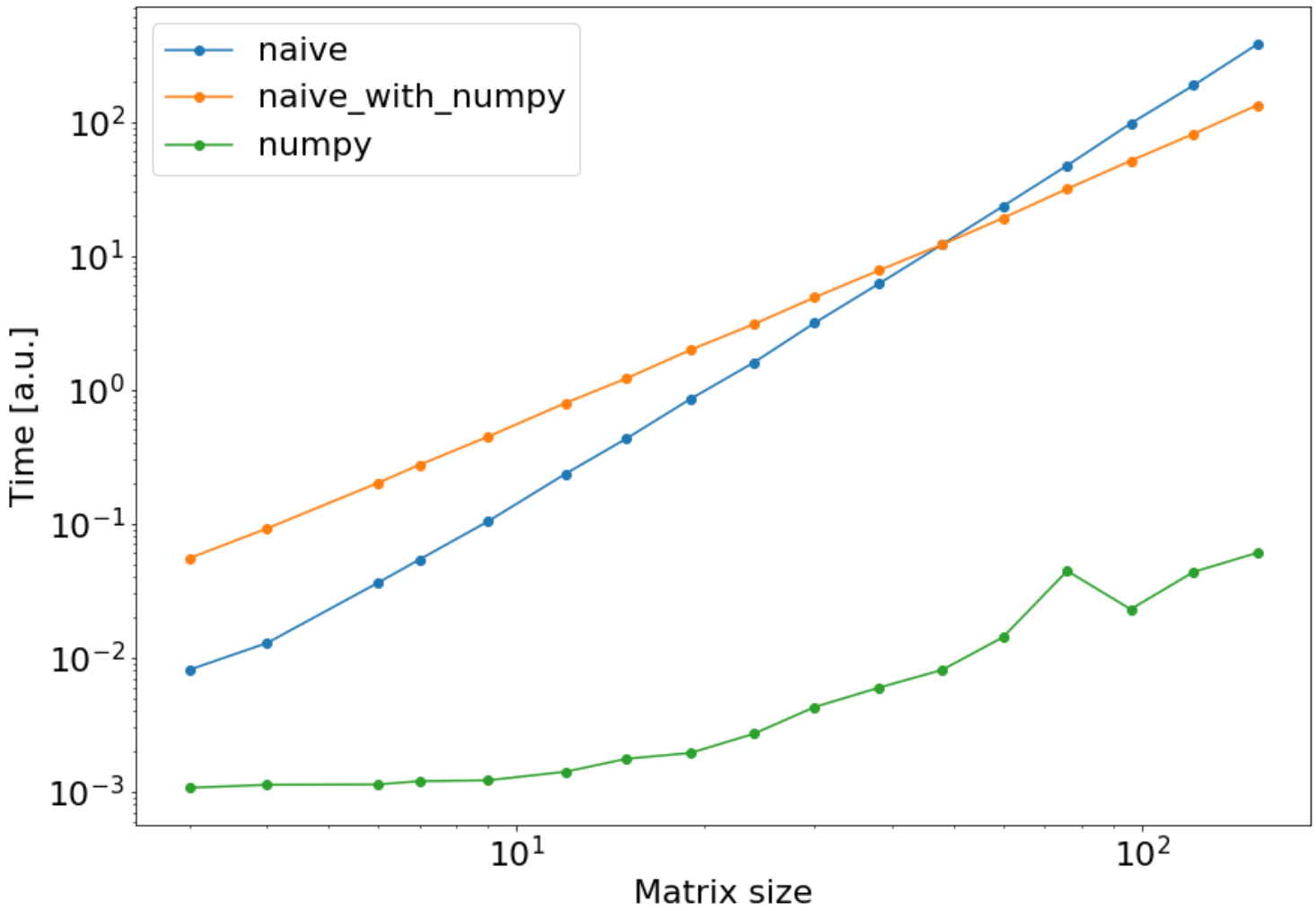
```
def naive_matmul(a, b):
    res = []
    for i in range(len(a)):
        new_row = []
        res.append(new_row)
        for j in range(len(b[0])):
            val = 0
            for k in range(len(a[0])):
                val += a[i][k] * b[k][j]
            new_row.append(val)
    return res

c = naive_matmul(a, b)
```

Naívne násobenie matíc



Obr. 1: Lineárna škála

Naívne násobenie matíc



Obr. 2: Logaritmická škála

Knižnica numpy

Stránka numpy

Knižnica na základné numerické výpočty, to znamená:

- pohodlné používanie vektorov a matíc
- lineárna algebra – násobenie matíc, výpočet vlastných hodnot, atď
- štatistika – priemer, odchyľka, atď
- FFT (Fast Fourier Transform)
- Veľa iných vecí – čítajte dokumentáciu (nie moje slidy)!

Vektory v numpy

```
import numpy as np

python_list = [1.0, 2.0, 3.0, 4.0]
numpy_array = np.array(python_list)

print(3 * numpy_array)
print(numpy_array / 3)
print(numpy_array**3)
print(np.linalg.norm(numpy_array))
print(numpy_array * numpy_array)

# Toto je TypeError:
print(python_list / 3)
```

Maticové násobenie v numpy

```
import numpy as np

a = np.array([[1, 2], [3, 4]])
b = np.array([[0, 1], [1, 0]])

c = a @ b
# alebo
c = np.matmul(a, b)
```

Maticové násobenie nie je to isté čo normálne násobenie:

```
c = a * b     # nasobi po prvkoch
```

Iterovanie

```
a = np.array([[1, 2], [3, 4]])
for i in a:
    print(i)

for i in range(a.shape[0]):
    for j in range(a.shape[1]):
        print(a[i][j])
```

Indexovanie

```
a = np.array([[1, 2], [3, 4]])
a[0]  # -> array([1, 2])
a[0][1] # -> 1

a[0][1] = 32

a[0,1] # -> 1
a[:,1] # -> array([2, 4])
a[:,1] = 32
a[:,1] = [2, 4]

a[a > 2] += 10

b = np.array([1,2,3,4])
b[[1,2]]
```

Matematické funkcie

```
x = np.array([0.1, 0.5, 2.0])

print("sin",       np.sin(x))
print("sqrt",      np.sqrt(x))
print("exp",       np.exp(x))
print("rad2deg",   np.rad2deg(x))
print("sum",       np.sum(x))
print("cumsum",    np.cumsum(x))
print("cumprod",   np.cumprod(x))
print("diff",      np.diff(x))
```

a veľa iných.

Nové “čísla”

```
np.pi    # 3.141...
np.e     # 2.718...

np.inf
np.log(0) == -np.inf

0.1**np.inf == 0
1.1**np.inf == np.inf
```

NaN nie je číslo:

```
np.log(-1) == np.nan

np.nan + 1            # -> np.nan
np.nan > 1            # -> False
np.nan < 1            # -> False
np.nan == np.nan      # -> False
```

Iné užitočné veci:

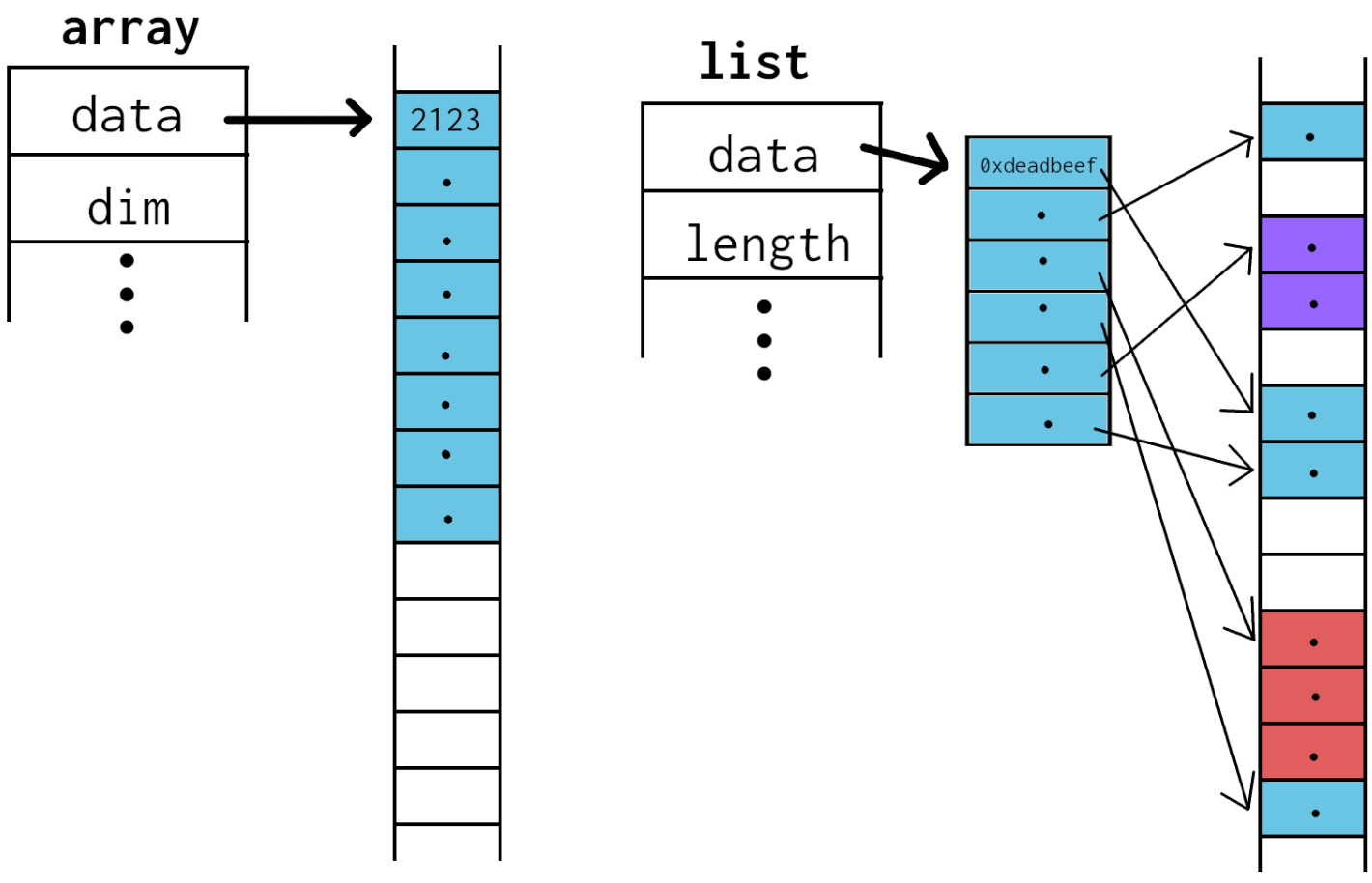
Knižnica numpy obsahuje hlavne funkcie (metódy moc nie):

- vytváranie array-ov: `numpy.zeros`, `numpy.ones`, `numpy.linspace`, iné
- manipulácia: `numpy.concatenate`, `numpy.reshape`, iné
- skalárny a vektorový súčin: `numpy.dot`, `numpy.cross`
- štatistika: `numpy.mean`, `numpy.std`, iné
- tranpozícia matice: `numpy.transpose` alebo jednoducho `a.T` (`a` je nejaký `numpy.array`).

Existuje príliš veľa funkcií v numpy, aby ste si všetko zapamätali – použite internetový vyhľadávač, napr.:

"numpy how to solve linear system"

numpy.array vs list



dtype a shape

Z predchádzajúceho obrázku plynú dve implikácie.

- Celý array musí byť jedného datového typu:

```
a = np.array([1, 2])
print(a.dtype) # int64
a = np.array([1, 2.0])  # vsimnite si desatinnej bodky
print(a.dtype) # float64
```

- Pamäť uvažujeme lineárnu -> matica je v skutočnosti vektor + tvar:

```
a = np.array([[1, 2], [3, 4]])
print("2x2", a)
a.shape = (4, 1)
print("4x1", a)
a.shape = (4,)
print("vektor", a)
a.shape = (2, 2, 1)
print("3D: 2x2x1", a)
```

matplotlib

Pravedepodobne najpokročilejšia knižnica na vizualizáciu dát je matplotlib.

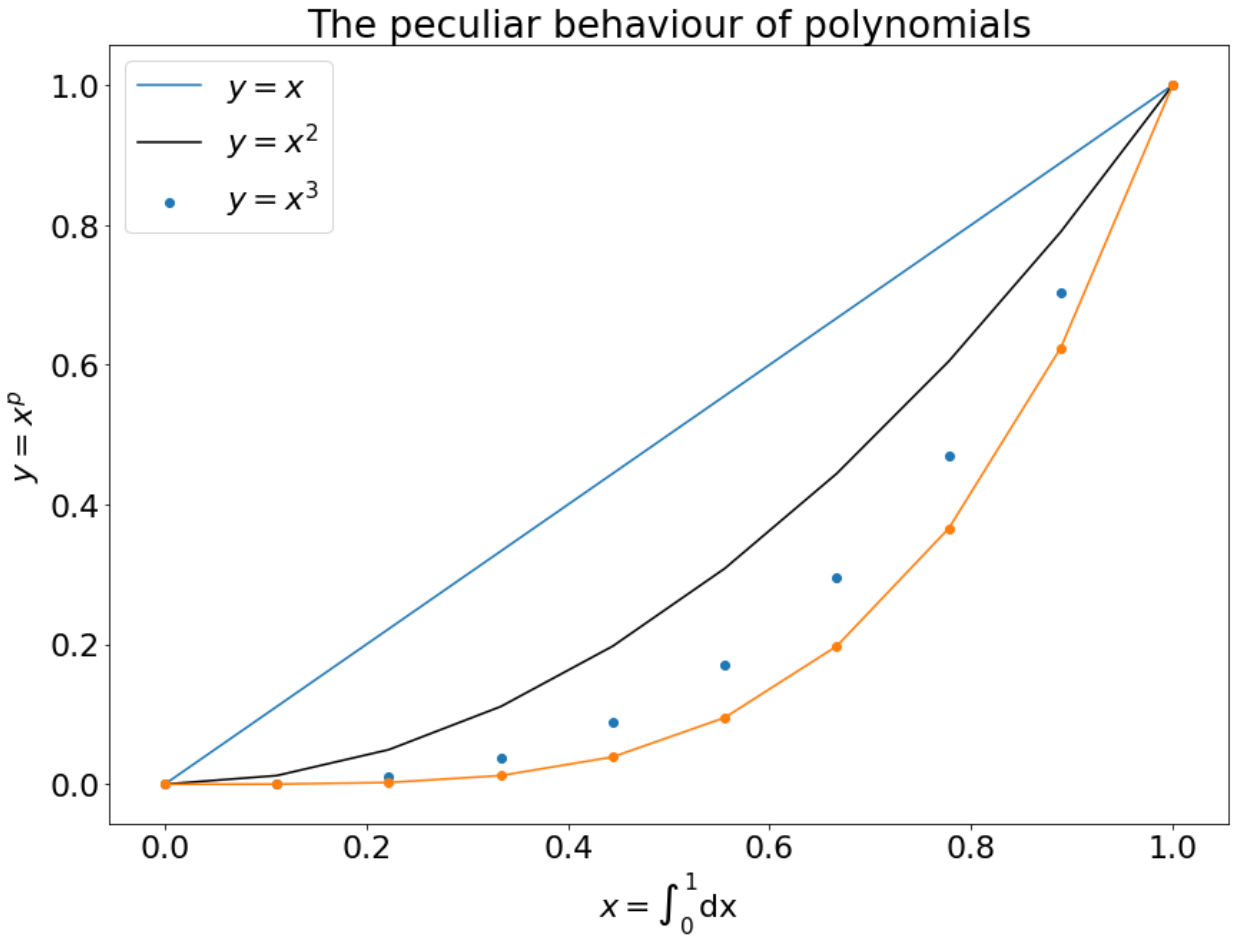
- všetky možné 2D grafy
- jednoduché 3D grafy
- animácie
- interaktívne tlačítka

Pozrite sa na príklady.

matplotlib

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np  # ale plot funguje aj na zoznam
x = np.linspace(0, 1, 10)
y, y2, y3, y4 = x, x**2, x**3, x**4

plt.plot(x, y, label=r'$y = x$') # popis s TeXom
plt.plot(x, y2, color='k',label=r'$y = x^2$') # farba
plt.scatter(x, y3, label=r'$y = x^3$') # body
plt.plot(x, y4, 'o-') # styl

plt.legend()
plt.xlabel(r'$x = \int_0^1 \rm{d} x$')
plt.ylabel(r'$y = x^p$')
plt.title('The peculiar behaviour of polynomials')
plt.savefig('polynomials.png') # uloz do suboru
plt.show() # otvor okno z obrazkom
```

matplotlib



Obr. 3: Výsledok

scipy

Zložitejšie numerické algoritmy sú v `scipy`. Pre ich **správne** použitie by ste mali pozorne čítať dokumentáciu, alebo zapísať si predmet na numerické metódy.

- špeciálne funkcie
- riešenie obyč. dif. rovníc
- interpolácia
- fitovanie
- integrácia
- niektoré veci sa doplňujú / prekrývajú s `numpy` (štatistika, lin. alg., FFT)

sympy

Ak poznáte wolframalpha.com, tak sympy je podobný nástroj.

Príklad zo stránky sympy – analytické riešenie obyč. dif. rovnice:

```
from sympy import Function, dsolve
from sympy import Eq, Derivative
from sympy import sin, cos, symbols
from sympy.abc import x

y = Function('y')(x)

dy_dx = Derivative(y, x)
d2y_dx2 = Derivative(dy_dx, x)
eq = d2y_dx2 + 9*y

print(dsolve(eq, y))
# -> Eq(y(x), C1*sin(3*x) + C2*cos(3*x))
```