Teil XII

Wissenschaftliches Rechnen in Python

Nochmal Modul `math`

- Konstanten `pi` und `e`
- Funktionen für `int` und `float`
- Alle Rückgabewerte sind `float`

```
ceil(x)
floor(x)
exp(x)
fabs(x)          # wie abs(), nur immer float
ldexp(x, i)      # x * 2**i
log(x [,base])
log10(x)         # == log(x, 10)
modf(x)          # (Nachkommateil, Integerteil)
pow(x, y)        # x**y
sqrt(x)
```

Trigonometrische Funktionen (Bogenmaß)

```
cos(x); cosh(x); acos(x)
sin(x); ...
tan(x); ...

degrees(x)   # rad -> deg
radians(x)   # deg -> rad
```

inf/nan

```
float("inf")
float("-inf")
float("nan")
isinf(x)          # Überprüfung auf Unendlichkeit
isnan(x)          # Überprüfung auf NaN
```

Complexe Zahlen: `cmath`

Und RICHTIGE Mathematik?

Bisherige Sequenztypen (`list`, `tuple`, `...`)

- Können als Arrays verwendet werden
- Können verschiedene beliebige Typen enthalten
  - Sehr flexibel, aber auch langsam
  - Schleifen sind nicht sehr effizient
- Vektoren/Matrizen und Operationen auf diesen sind extrem umständlich
- Für effizientes wissenschaftliches Rechnen sind andere Datentypen und Methoden nötig

Und RICHTIGE Mathematik?

Bisherige Sequenztypen (`list`, `tuple`, `...`)

- Können als Arrays verwendet werden
- Können verschiedene beliebige Typen enthalten
  - Sehr flexibel, aber auch langsam
  - Schleifen sind nicht sehr effizient
- Vektoren/Matrizen und Operationen auf diesen sind extrem umständlich
- Für effizientes wissenschaftliches Rechnen sind andere Datentypen und Methoden nötig

Module

- NumPy
- Matplotlib
- SciPy

Modul numpy

Homogene Arrays

- NumPy stellt beliebig-dimensionale Arrays bereit
- Alle Elemente des Arrays haben den gleichen Typ
- Beispiel

```
from numpy import *
a = array([[1,2,3],[4,5,6]])
print a
type(a)
a.shape
print a[0,2]
a[0,2] = -1
b = a*2
print b
```

Homogene Arrays (2)

- Arrays können aus (verschachtelten) Sequenztypen erstellt werden
- Direkter Zugriff mit `[]`

```
a = array([1,2,3,4,5,6,7,8])
a[1]
a = array([[1,2,3,4],[5,6,7,8]])
a[1,1]
a = array([[[1,2],[3,4]],[[5,6],[7,8]]])
a[1,1,1]
```

Homogene Arrays (2)

- Arrays können aus (verschachtelten) Sequenztypen erstellt werden
- Direkter Zugriff mit `[]`

```
a = array([1,2,3,4,5,6,7,8])
a[1]
a = array([[1,2,3,4],[5,6,7,8]])
a[1,1]
a = array([[[1,2],[3,4]],[[5,6],[7,8]]])
a[1,1,1]
```

- Eigenschaften von Arrays

```
a.ndim          # Anzahl Dimensionen
a.shape         # Anzahl Einträge in jeder Dimension
a.size          # Anzahl Elemente
a.dtype         # Datentyp der Elemente
a.itemsize      # Nötige Anzahl Bytes für den Datentyp
```

Datentypen

- Exakte Typen (ähnlich C/C++) können angegeben werden
- Ohne Angabe werden Standardtypen verwendet
- Einige Typen (v.a. unterschiedlicher Speicherbedarf):
  - `int`, `int8`, `int16`, `int32`, `int64`,
  - `float`, (`float8`, `float16`,) `float32`, `float64`,
  - `complex`, `complex64`,
  - `bool`, `character`, `object`

```
array([[1,2,3],[4,5,6]], dtype=int)
array([[1,2,3],[4,5,6]], dtype=complex)
array([[1,2,3],[4,5,6]], dtype=int8) # ints in [-128,127]
array([[1,2,3],[4,5,1000]], dtype=int8)  # falsch!
array([[1,2,3],[4,5,"hi"]], dtype=object)
```

Arrays initialisieren

- Standard-Matrizen (optionaler Parameter: dtype)

```
arange([a,] b [,stride]) # analog zu range, 1D
zeros( (3,4) )
ones( (1,3,4) )
empty( (3,4) )              # keine Init. (schnell)
linspace(a, b [, n])        # n äquid. Werte in [a,b]
logspace(a, b [, n])        # log zw. 10^a und 10^b
identity(n)                 # Identität (Diagonalmat.)

fromfunction(lambda i,j: i+j, (3,4), dtype=int)
def f(i,j):
    return i+j
fromfunction(f, (3,4), dtype=int)
```

Arrays manipulieren

```
>>> a = arange(12); a
array([ 0,  1,  2,  3,  4,  5,  6,  7,  8,  9, 10, 11])
>>> b = a.reshape((3,4)); b; a
array([[ 0,  1,  2,  3],
       [ 4,  5,  6,  7],
       [ 8,  9, 10, 11]])
array([ 0,  1,  2,  3,  4,  5,  6,  7,  8,  9, 10, 11])
>>> a.resize((3,4))   # a wird verändert
>>> a.transpose()     # a wird nicht verändert
>>> a.flatten()       # a wird nicht verändert
```

Noch mehr Manipulations- und Initialisierungsmethoden

- Neue Matrizen aus existierenden Matrizen erstellen

```
a = arange(12); a.resize((3,4))
copy(a)
diag(a); tril(a); triu(a)

empty_like(a)                    # Kopiert nur die Form
zeros_like(a)
ones_like(a)

a = loadtxt("matrix2.txt")   # fromfile() (Binärdatei)
```

- Matrizen ausgeben

```
a.tolist()

savetxt("matrix3.txt", a)    # tofile() (Binärdatei)
```

Lesen und Schreiben von Array-Elementen

- Die von Listen bekannte Indizierung kann verwendet werden
- Dimensionen werden mit Komma separiert

Hands-On: Was geben die folgenden `print`-Befehle aus?

```
a = array([ [1,2,3,4,5], [6,7,8,9,10], \
            [11,12,13,14,15], [16,17,18,19,20]])
a[1]
a[1:3,:]
a[:,::2]
a[::2,::2]
a[::2,::2] = [[0, -2, -4],[-10, -12, -14]]
a[1::2,1::2] = -1*a[1::2,1::2]
```

Lesen und Schreiben von Array-Elementen

- Die von Listen bekannte Indizierung kann verwendet werden
- Dimensionen werden mit Komma separiert

Hands-On: Was geben die folgenden `print`-Befehle aus?

```
a = array([ [1,2,3,4,5], [6,7,8,9,10], \
            [11,12,13,14,15], [16,17,18,19,20]])
a[1]
a[1:3,:]
a[:,::2]
a[::2,::2]
a[::2,::2] = [[0, -2, -4],[-10, -12, -14]]
a[1::2,1::2] = -1*a[1::2,1::2]
```

- Selektiver Zugriff

```
a[a > 9]
a[a > 9] *= -1
```

Über Elemente von Matrizen iterieren

```
a = arange(20); a.resize((4,5))

for row in a:
    print row

b = arange(30); b.resize((2,3,5))
for row in b:
    for col in row:
        print col

for entry in a.flat: # Iterator
    print entry
```

Rechnen mit Arrays

- Schnelle built-in Methoden für Arrays

```
a = arange(12); a.resize((3,4))
3*a
a**2
sin(a)
sqrt(a)
prod(a)
sum(a)

it = transpose(a)

x = array([1,2,3])
y = array([10,20,30])
inner(x, y) # inner prod. (1D), od. inner prod.
            # für letzte "Achse" (N-D, N>1)
dot(it, x)  # dot prod. (1D),
            # äqu. zu Matrix-Mult. in 2D
cross(x,y)  # Kreuzprodukt
```

Rechnen mit Arrays (2)

- Es gibt noch viel mehr...

```
var()                cov()                std()
mean()               median()
min()                max()
tensordot()
...
```

- Matrizen (mit `mat`) sind Unterklassen von `ndarray`, aber strikt zweidimensional, mit zusätzlichen Attributen

```
m = mat(a)
m.T     # Transponierte
m.A     # Als 2d Array
m.H     # Konjugiert Transponierte
```

Untermodule

Modul `numpy.random`

- Zufallszahlen aus vielen unterschiedlichen Verteilungen
- Mächtiger als das Standard-Modul `random`
- Arbeitet auf Arrays und gibt Arrays zurück

```
from numpy.random import *
binomial(10, 0.5)          # 10 Versuche, Erfolg 50%
binomial(10, 0.5, 15)      # 15 Mal voriges
binomial(10, 0.5, (3,4)) # (3x4) Array
randint(0, 10, 15)         # [0,10), int

rand()                     # [0,1), float
rand(3,4)                  #        (3x4) Array
```

Untermodule (2)

Modul `numpy.linalg`

- Die wichtigsten Werkzeuge für lineare Algebra

```
from numpy import *
from numpy.linalg import *
a = arange(16); a.resize((4,4))
...
norm(a); norm(a,1) # Froben. und 1-norm
inv(a)             # Inverse der Matrix
solve(a, b)        # LAPACK LU Zerlegung
det(a)             # Determinante
eig(a)             # Eigenwerte und Eigenvektoren
cholesky(a)        # Cholesky-Zerlegung
```

Untermodule (2)

Modul `numpy.linalg`

- Die wichtigsten Werkzeuge für lineare Algebra

```
from numpy import *
from numpy.linalg import *
a = arange(16); a.resize((4,4))
...
norm(a); norm(a,1) # Froben. und 1-norm
inv(a)             # Inverse der Matrix
solve(a, b)        # LAPACK LU Zerlegung
det(a)             # Determinante
eig(a)             # Eigenwerte und Eigenvektoren
cholesky(a)        # Cholesky-Zerlegung
```

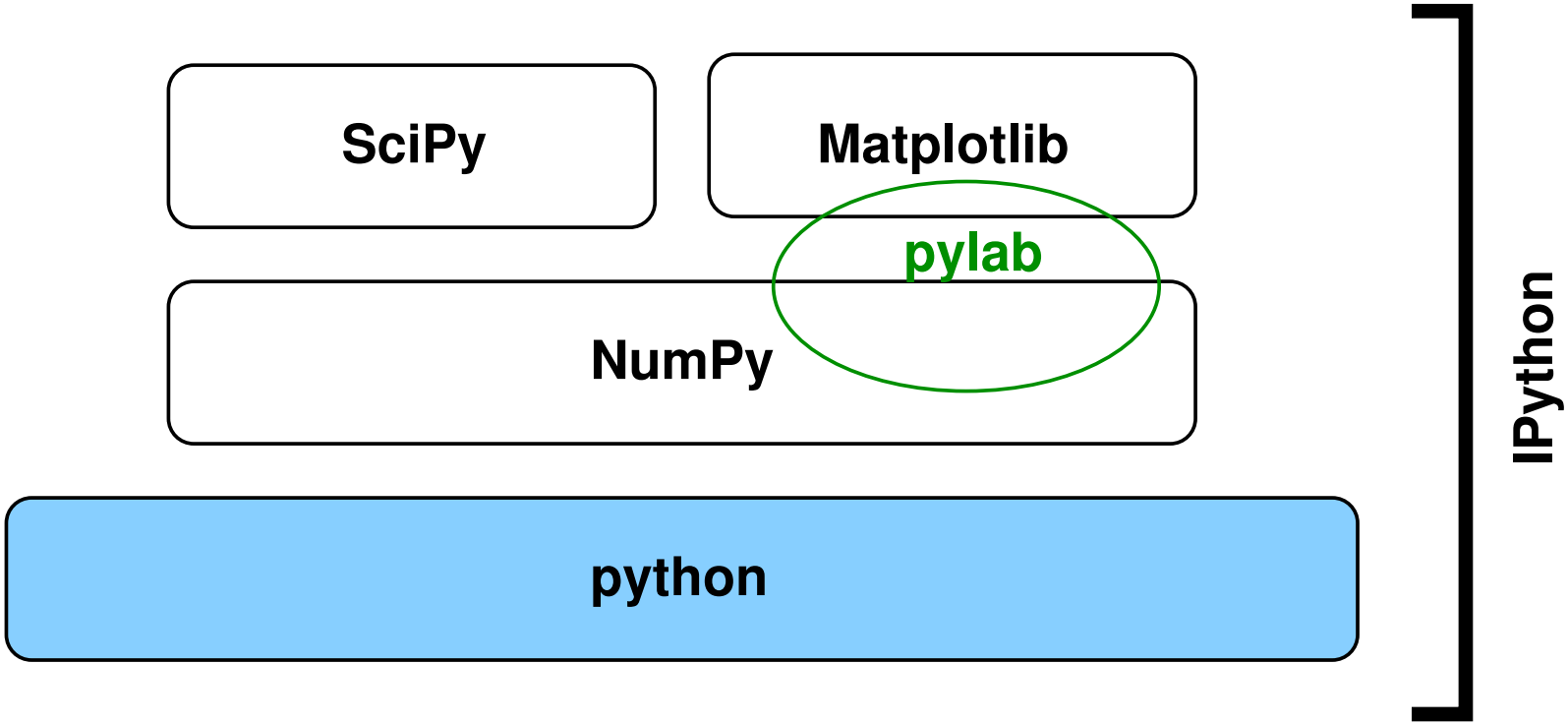
Modul `numpy.fft`

- Fourier-Transformation

Und weitere . . .

Version Mania

Aktuelle Situation



Version Mania

Probleme:

- Numpy, scipy, pylab, ipython und matplotlib werden oft gleichzeitig benutzt
- Die Pakete hängen voneinander ab (matplotlib benutzt z.B. numpy-Arrays
- Je nach Betriebssystem(sversion) müssen evtl. unterschiedliche Pakete installiert werden (D.h. Der Modulname im import-Befehl kann auch unterschiedlich sein).

Vision: Alles in einem (neuen) Modul PyLab vereinigen!

- gibt es als inoffizielles Paket
- Achtung Name: wieder pylab!

Matplotlib

Matplotlib

Wozu Matplotlib?

- Objektorientierte Bibliothek für zweidimensionale plots
- Entworfen mit den Ziel einer ähnlichen Funktionalität wie Matlab plots
- Insbesondere zum Darstellen wissenschaftlicher Daten, baut auf numpy-Datenstrukturen auf

Möglichkeiten zum Importieren

ipython interaktiv

```
> ipython
import scipy, matplotlib.pylab
x = scipy.randn(10000)
matplotlib.pylab.hist(x, 100)
matplotlib.pylab.show()
```

```
> ipython
import numpy.random, matplotlib.pylab
x = numpy.random.randn(10000)
matplotlib.pylab.hist(x, 100)
matplotlib.pylab.show()
```

ipython mit pylab-Modus

```
> ipython --pylab
x = randn(10000)
hist(x, 100)
```

Beispiel - Erster Plot

http://matplotlib.sourceforge.net/users/screenshots.html

```
from pylab import *

x = arange(0.0, 2*pi, 0.01)
y = sin(x)
plot(x, y)

xlabel('Label fuer x-Achse')
ylabel('Label fuer y-Achse')
title('Einfacher sin plot')
grid(True)
show()
```

Beispiel - Subplots verwenden

```
from pylab import *
def f(t):
    s1 = cos(2*pi*t)
    e1 = exp(-t)
    return multiply(s1,e1)

t1 = arange(0.0, 5.0, 0.1)
t2 = arange(0.0, 5.0, 0.02)
t3 = arange(0.0, 2.0, 0.01)

subplot(2,1,1) # Zeilen, Spalten, welche anzuzeigen
plot(t1, f(t1), 'go', t2, f(t2), 'k--')
subplot(2,1,2)
plot(t3, cos(2*pi*t3), 'r.')
```

Beispiel - Subplots verwenden

```
# Fortsetzung der vorigen Folie

subplot(2,1,1)
grid(True)
title('A␣tale␣of␣2␣subplots')
ylabel('Gedaempfte␣Oszillation')

subplot(2,1,2)
grid(True)
xlabel('Zeit␣(s)')
ylabel('Ungedaempft')

show()
```

Beispiel - Histogramm

```
from numpy import *
from matplotlib.mlab import *
from matplotlib.pyplot import *

mu, sigma = 100, 15
x = mu + sigma*random.randn(10000)
n, bins, patches = hist(x, 50, normed=1, \
   facecolor='green', alpha=0.75)

# Linie mit 'best fit' einzeichnen
y = normpdf( bins, mu, sigma)
plot(bins, y, 'r--', linewidth=1)

axis([40, 160, 0, 0.03])
show()
```

SciPy

Mehr als NumPy?

- SciPy hängt von NumPy ab
- SciPy arbeiten mit NumPy arrays
- Stellt Funktionalität für Mathematik, Naturwissenschaft und Ingenieursanwendungen zur Verfügung
- Noch in Entwicklung
- Bei NumPy geht es im Wesentlichen um (N-dimensionale) Arrays.
- SciPy stellt eine große Zahl an Werkzeugen zur Verfügung, die diese Arrays verwenden.
- SciPy beinhaltet die NumPy Funktionalität (nur ein import nötig).
- Es gibt noch einige weitere Bibliothen für wissenschaftliches Rechnen (teilweise aufbauend auf NumPy und SciPy).
- Hier daher nur eine kurze Übersicht
- Weitere Informationen auf `www.scipy.org`

SciPy - Unterpakete

cluster	Clustering Algorithmen
constants	Physikalische und mathematische Konstanten
fftpack	Fast Fourier Transformation
integrate	Integration und Löser für gewöhnliche DGLs
interpolate	Interpolation und Splines
io	Ein- und Ausgaberoutinen
linalg	Lineare Algebra
misc	Verschiedenes
ndimage	N-dimensionale Bildverarbeitung
odr	Orthogonal distance regression
optimize	Optimierung und Nullstellensuche
signal	Signalverarbeitung
sparse	Dünne Matrizen und zugehörige Routinen
spatial	Räumliche Datenstrukturen und Algorithmen
special	Spezielle Funktionen
stats	Statistische Verteilungen und Funktionen
weave	Integration von C/C++ Programmen

Spezielle Funktionen

- Airy-Funktion
- Elliptische Integralfunktion
- Bessel-Funktionen (+ Nullstellen, Integrale, Ableitungen,...)
- Struve-Funktion
- Jede Menge statistische Funktionen
- Gamma-Funktion
- Hypergeometrische Funktionen
- Orthogonale Polynome (Legendre, Chebyshev, Jacobi,...)
- Parabolische Zylinderfunktion
- Mathieu-Funktion
- Kelvin-Funktion
- ...

Beispiel: Interpolation - Linear

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import interpolate

x = np.arange(0, 2.25*np.pi, np.pi/4)
y = np.sin(x)
f = interpolate.interp1d(x, y)

xnew = np.arange(0,2.25*np.pi, np.pi/4)
ynew = f(xnew)
plt.plot(x,y,'o',xnew,ynew,'-')
plt.title('Lineare Interpolation')
plt.show()
```

Beispiel: Interpolation - Kubische Splines

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import interpolate

x = np.arange(0, 2.25*np.pi, np.pi/4)
y = np.sin(x)
spline = interpolate.splrep(x,y,s=0)
xnew = np.arange(0,2.02*np.pi,np.pi/50)
ynew = interpolate.splev(xnew, spline)

plt.plot(x,y,'o',xnew,ynew)
plt.legend(['Interp-Punkte','Kubischer␣Spline'])
plt.axis([-0.05,6.33,-1.05,1.05])
plt.title('Interpolation␣mit␣kubischen␣Splines')
plt.show()
```