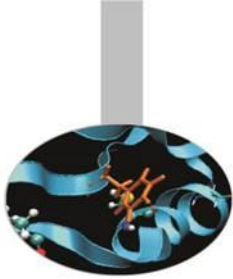
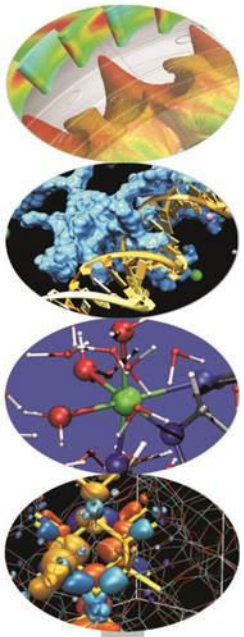
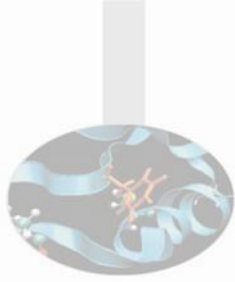


Introduzione a *SciPy*



Introduzione

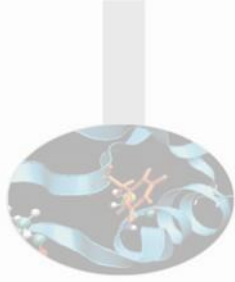


- Il pacchetto SciPy contiene diversi toolbox dedicati ai problemi più comuni del calcolo scientifico

- I suoi diversi sotto-moduli corrispondono a diverse applicazioni, come interpolazione, integrazione, ottimizzazione, elaborazione di immagini, statistica, funzioni speciali, algebra lineare, …

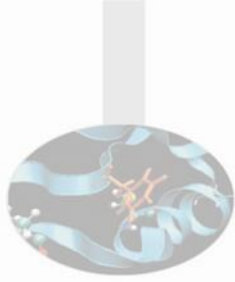
- SciPy può essere paragonato ad altre librerie standard largamente utilizzate nel calcolo scientifico come la GSL (GNU Scientific Library per C e C + +) o i toolbox di Matlab

Introduzione



- SciPy è il pacchetto di base per il calcolo scientifico in Python ed è disegnato per operare in modo efficiente su array NumPy
- Prima di implementare una nuova routine, vale la pena verificare se l'algoritmo desiderato non sia già implementato in SciPy
- Non di rado, i programmatori non professionisti tendono a "reinventare la ruota", una prassi che spesso porta alla produzione di codice *buggy*, non ottimizzato, difficile da condividere ed quasi impossibile da mantenere!
- Al contrario le routine di SciPy sono largamente testate e ben ottimizzate e, quindi, quando possibile, dovrebbe essere utilizzate

Warning

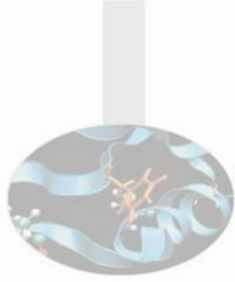


- Questo modulo del corso "*Python for Computational Science*" non vuole essere una introduzione al calcolo numerico, cosa che è al di la dei nostri compiti istituzionali.

- Una enumerazione dei diversi sottomoduli e delle funzioni di SciPy risulterebbe piuttosto noiosa, quindi ci *concentreremo su pochi esempi* per fornire un'idea generale su come si usa SciPy per il calcolo tecnico scientifico

- Per usare efficacemente le funzionalità di SciPy, è consigliabile fare largo uso delle funzionalità di help dei singoli moduli accessibili dall'interno di IPython

La struttura di SciPy



- Scipy è composto da sotto-moduli specifici per tipologia di applicazione; ad oggi la lista dei sotto-moduli disponibili è la seguente:

Sub-module	Task
scipy.cluster	Vector quantization / Kmeans
scipy.constants	Physical and mathematical constants
scipy.fftpack	Fourier transform
scipy.integrate	Integration routines
scipy.interpolate	Interpolation
scipy.io	Data input and output
scipy.linalg	Linear algebra routines
scipy.ndimage	n-dimensional image package

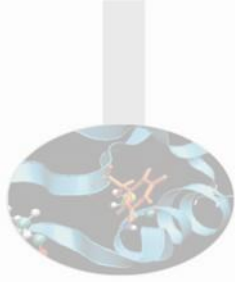
La struttura di SciPy

Sub-module	Task
scipy.odr	Orthogonal distance regression
scipy.optimize	Optimization
scipy.signal	Signal processing
scipy.sparse	Sparse matrices
scipy.spatial	Spatial data structures and algorithms
scipy.special	Any special mathematical functions
scipy.stats	Statistics

- Tutti i moduli dipendono da NumPy, ma sono praticamente indipendenti uno dall'altro; dunque il modo standard di utilizzarli è:

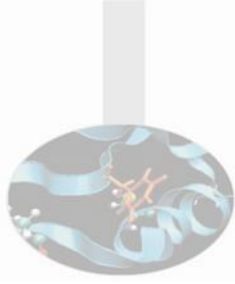
```
>>> import numpy as np
>>> from numpy import stats  #stat sub-mod.
```

File I/O: modulo scipy.io



```
>>> import numpy as np
>>> from scipy import io
>>> a = np.ones((3,3))
>>> io.savemat('file.mat', {'a': a}) # 2nd arg is a dict
>>> data = io.loadmat('file.mat', struct_as_record=True)
>>> data['a']
array([[ 1.,  1.,  1.],
       [ 1.,  1.,  1.],
       [ 1.,  1.,  1.]])
>>> from scipy import misc
>>> misc.imread('myImage.png')   # e' anche in matplotlib
```

Funzioni speciali: il modulo sciyy.special



- Il modulo contiene una vasta scelta di funzioni speciali

- Il suo help è molto bel fatto ed contiene un elenco completo delle funzioni disponibili, raggruppate per tipologia: è un ottimo riferimento per vedere cosa è presente nel modulo e come utilizzarlo

- Alcune delle principali (elenco breve e non esaustivo!) funzioni presenti:
  - Funzioni di Bessel (scipy.special.jn, …)
  - Funzioni ellittiche e funzioni integrali (scipy.special.ellipj, …)
  - Funzioni Gamma (scipy.special.gamma, scipy.special.gammaln)
  - Error Function (scipy.special.erf)
  - Diverse classi di polinomi ortonormali (Legendre, Laguerre, Hermite, …)

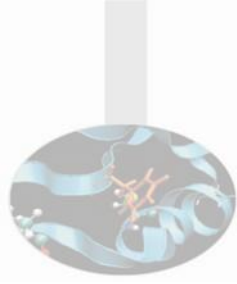
Linear algebra: calcolo del determinante

```
>>> from scipy import linalg
>>> arr = np.array([[1, 2],
...                 [3, 4]])
>>> linalg.det(arr)
-2.0
>>> arr = np.array([[3, 2],
...                 [6, 4]])
>>> linalg.det(arr)
0.0
>>> linalg.det(np.ones((3, 4)))
Traceback (most recent call last):
...
ValueError: expected square matrix
```

Linear algebra: calcolo dell'inversa

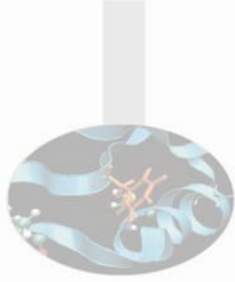
```
>>> from scipy import linalg
>>> arr = np.array([[1, 2],
...                 [3, 4]])

>>> iarr = linalg.inv(arr)
>>> iarr
array([[-2. ,  1. ],
       [ 1.5, -0.5]])

>>> np.allclose(np.dot(arr, iarr), np.eye(2))
True
```

Linear algebra: calcolo dell'inversa



```
>>> from scipy import linalg
>>> arr = np.array([[3, 2],
...                 [6, 4]])

>>> iarr = linalg.inv(arr)
Traceback (most recent call last):
...
LinAlgError: singular matrix
```

Linear algebra: singular-value decomposition



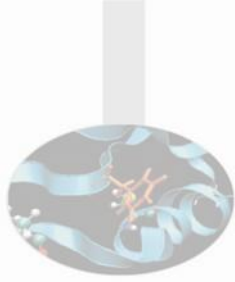
La *singular-value decomposition* di una matrice A consiste nel calcolo di 2 matrici unitarie U e V ed di un array s di valori singolari (reali e non negativi), tali che A = USV, in cui S è la matrice diagonale di elementi diagonali s

```
>>> from scipy import linalg
>>> a = np.arange(9).reshape((3,3)
>>> u, spec, v = linalg.svd(arr)

>>> s = np.diag(spec)
>>> svd = u.dot(s).dot(v)
>>> np.allclose(svd,a)
True
```

NB: se il calcolo non converge, è generato un LinAlgError

Sono disponibili anche altre decomposizioni standard: QR, LU, Cholesky, Schur

Linear algebra: soluzione di un sistema lineare



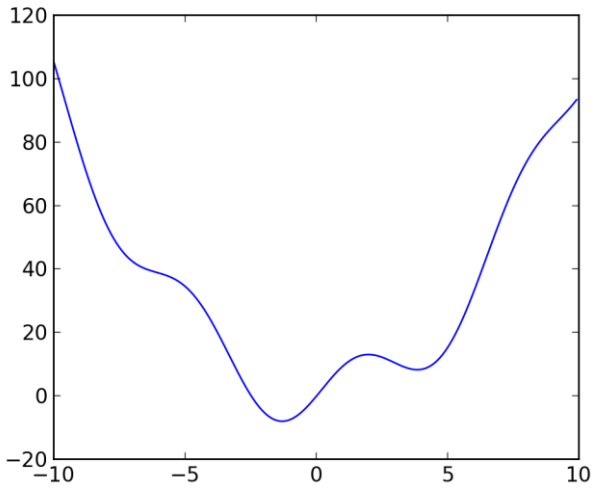
Data una matrice A (n,m) ed un vettore b (n), calcolare il vettore x (n) tale che Ax=b

```
>>> from scipy import linalg
>>> A = np.array([[1,2],[3,4]])
>>> b = np.array([[5],[6]])
>>> x = linalg.solve(A,b)
>>> x
array([[-4. ],
       [ 4.5]])
>>> np.allclose(A.dot(x)-b,np.zeros((2,2)))
True
```

Ottimizzazione e fit: scipy.optimize

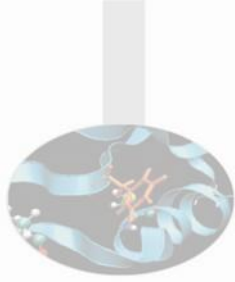
In generale, l'ottimizzazione consiste nella ricerca di una soluzione numerica a un problema di minimizzazione o nel calcolo degli zeri di una funzione

```
>>> def f(x):
...     return x**2 + 10*np.sin(x)
>>> import pylab as plt
>>> x = np.arange(-10, 10, 0.1)
>>> plt.plot(x, f(x))
>>> plot.show()
```



La funzione ha un minimo globale intorno a -1 ed un minimo locale intorno a 4!

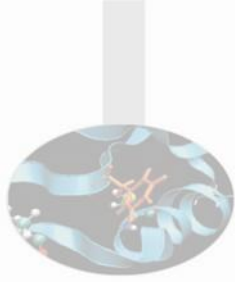
Ricerca del minimo assoluto



Un metodo generale ed efficiente per la ricerca del minimo della funzione scelta consiste nel condurre una discesa lungo il gradiente, partendo da un punto iniziale. L'algoritmo BFGS è una valida soluzione del problema!

```
>>> from scipy import optimize
>>> optimize.fmin_bfgs(f, 0)
Optimization terminated successfully.
         Current function value: -7.945823
         Iterations: 5
         Function evaluations: 24
         Gradient evaluations: 8
array([-1.30644003])
```

Ricerca del minimo assoluto



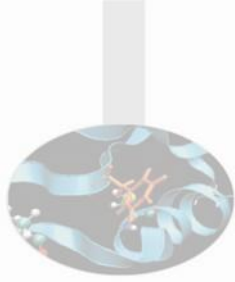
- Un possibile problema di questo approccio è che, se la funzione presenta minimi locali, l'algoritmo può giungere ad uno di questi ultimi, invece che al minimo assoluto, per certe scelte dello *starting point* della discesa

```
>>> optimize.fmin_bfgs(f, 3, disp=0)
array([3.83746663])
```

- Se non si conosce l'intorno in cui cade il minimo assoluto, è possibile ricorrere a più costosi metodi di ottimizzazione globale

- Per essere certi di aver trovato il minimo assoluto, il metodo più semplice consiste nell'algoritmo "*brute force*": valuta la funzione in tutti i punti di una data griglia e determina dove la funzione è minima

Ricerca del minimo assoluto

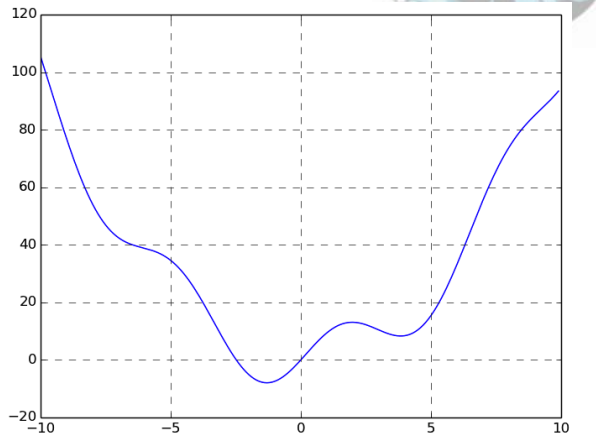


```
>>> grid = (-10, 10, 0.1)

>>> optimize.brute (f, (grid,),disp=True)
Optimization terminated successfully.
         Current function value: -7.945823
         Iterations: 11
         Function evaluations: 22
array([3.83746663])
```

- In caso di griglia con molti punti, questo metodo può diventare costoso
- La funzione optimize.anneal è una soluzione alternativa al problema, che usa il metodo del *simulated annealing*
- Esistono diversi algoritmi, non compresi in *SciPy*, che risultano più efficienti per differenti classi di problemi di ottimizzazione globale; in caso di necessità, segnaliamo *OpenOpt, IPOPT, PyGMO e PyEvolve*

Ricerca degli zeri di una funzione

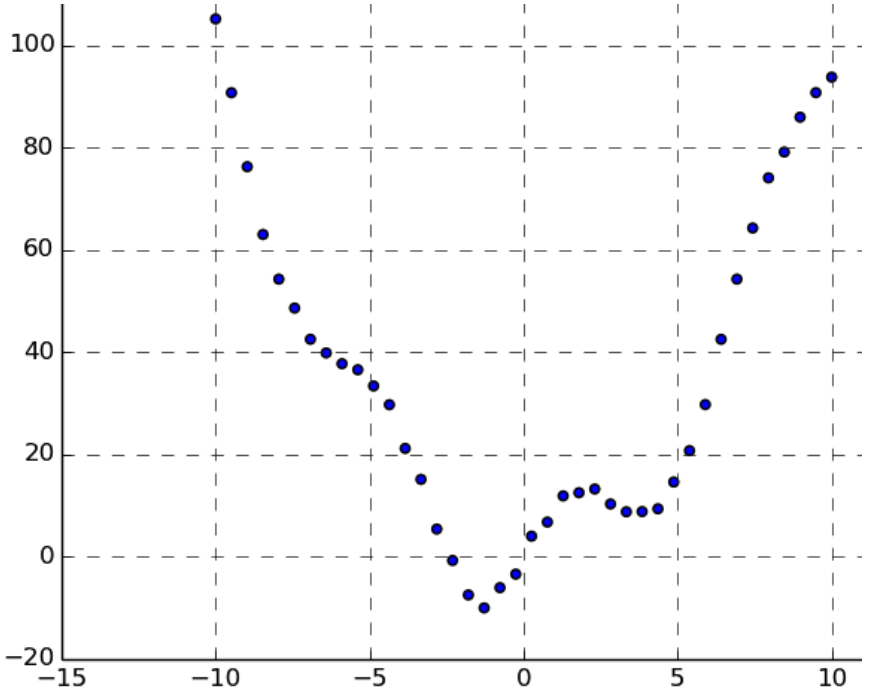
- La funzione scipy.optimize.fsolve consente di trovare lo zero di una funzione, ovvero una soluzione per l'equazione f(x) = 0
- Per semplicità utilizziamo la funzione vista per la ricerca del minimo assoluto




```
>>> from scipy import optimize
>>> x_1 = optimize.fsolve(f, 1) #starting point 1
>>> x_2 = optimize.fsolve(f,-3) #starting point -3
>>> x_1
array([0.])
>>> x_2
array([-2.47948183])
```

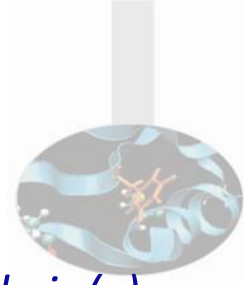
Fitting di una curva …

Per procurarci il set di dati di cui trovare il *best-fit,* partiamo dalla funzione f degli esempi precedenti, ed aggiungiamo un po' di rumore gaussiano




```
>>> xd = np.linspace(-10,10,40)
>>> yd = f(xd) + np.random.randn(xd.size)
```

Fitting di una curva

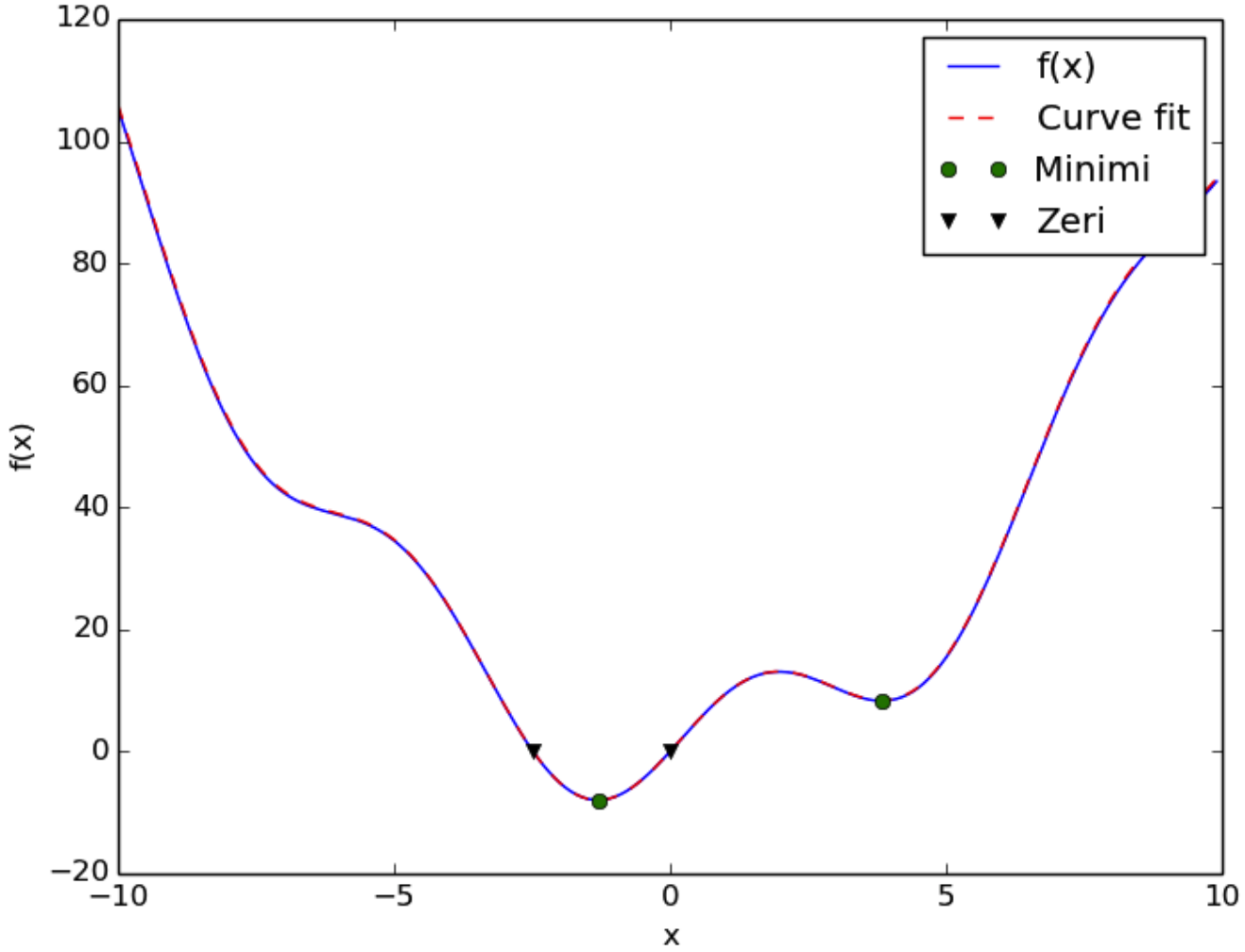


- La forma funzionale con cui fittare il campione evidentemente è $ax^2 + bsin(x)$
- Usiamo il *non linear least square fit* per determinare il valore ottimale dei parametri *a* e *b*

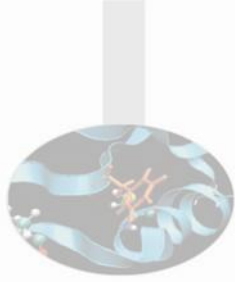
```
>>> from scipy import optimize
>>> def f2(x, a, b):
...     return a*x**2 + b*np.sin(x)
>>> guess = [2,2]
>>> par, par_cov = optimize.curve_fit(f2,xd,yd,guess)
>>> par
array([  1.00340129,  10.02551458])
>>> par_cov
array([[ 1.01523991e-05, -2.76706261e-16],
       [ -2.76706261e-16,   4.72408931e-02]])
```

Fitting di una curva

Visualizziamo tutto quanto abbiamo trovato sulla funzione f(x) in un unico plot



scipy.stats: istogramma e PDF

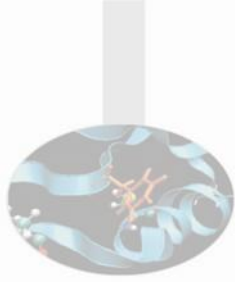


- scipy.stats contiene un gran numero di strumenti per descrivere campioni statistici, per lavorare con distribuzioni di probabilità - continue e discrete - e per eseguire diverse tipologie di test statistici

- Dato un campione di un processo random, il suo istogramma è un 'estimatore' della funzione densità di probabilità del processo.

```
>>> a = np.random.normal(size=10000) # our sample
>>> eb = np.arange(-4,4.25,0.25)     # binning edges
>>> eb.size
33
>>> h= np.histogram(a,bins=eb, normed=True)
>>> h[0].size
32
```

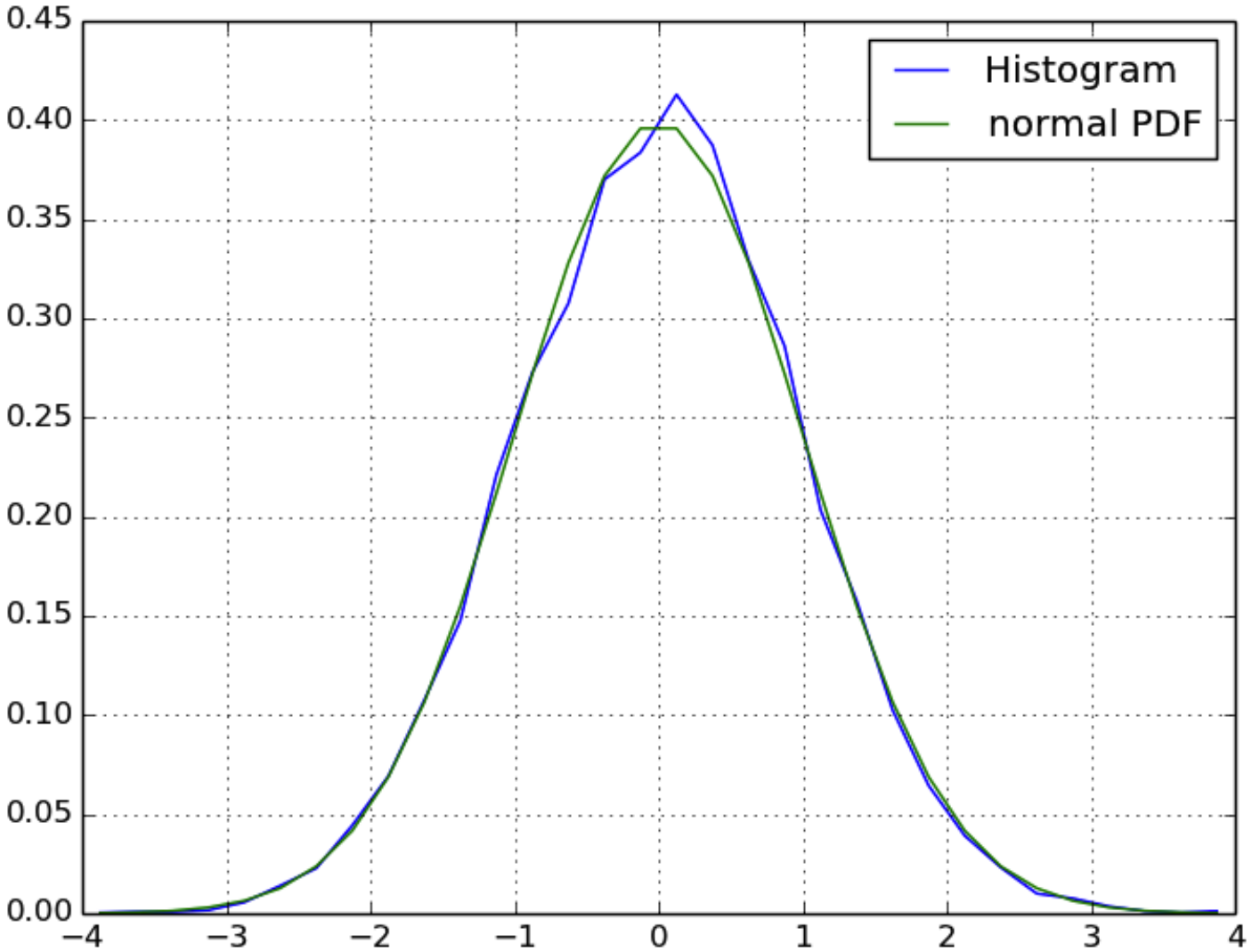
scipy.stats: istogramma e PDF



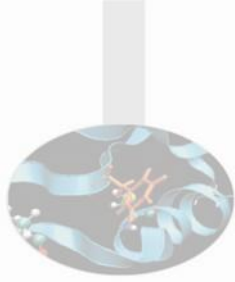
Costruiamo l'array dei punti medi di ogni bin; poi, usando scipy.stats, calcoliamo la PDF della normale sugli stessi punti ed infine confrontiamola, su un grafico, con l'istogramma prodotto

```
>>> b = 0.5 * (eb[1:] + eb[:-1])
>>> b.size
32
>>> from scipy import stats
>>> my_pdf = stats.norm.pdf(b)

>>> import pylab as pl
>>> pl.plot(b, h[0], label='Histogram')
>>> pl.plot(b, my_pdf, label='normal PDF')
```

scipy.stats: istogramma e PDF



Maximum-likelihood fit



Se il campione proviene da un processo random appartenente ad una data famiglia (i processi gaussiani, nel nostro caso), possiamo usare il *maximum-likelihood fit* del nostro campione per stimare i parametri della distribuzione sottostante

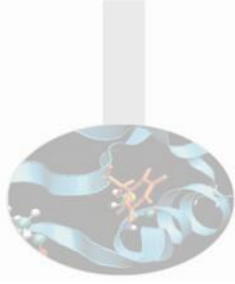
```
>>> from scipy import stats
>>> a = np.random.normal(size=10000)
>>> stats.norm.fit(a)
(0.0012754030661755386, 0.9956521185248 2849)
>>> b = np.random.normal(loc=1, scale=3, size=10000)
>>> stats.norm.fit(b)
(0.9661562674018123, 2.972593338204 7445)
```

Percentili

- La mediana di un campione è il numero *m* tale che il 50% degli elementi del campione sono più piccoli di *m* ed il restante 50% più grandi di *m*
- La mediana di un campione è chiamato anche percentile 50 perché il 50 degli elementi del campione ha un valore inferiore
- *Il percentile è un estimatore della densità di probabilità cumulativa (CDF)*

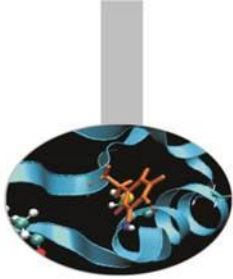
```
>>> from scipy import stats
>>> a = np.random.normal(size=1000)
>>> np.median(a)
0.038398647271696326
>>> stats.scoreatpercentile(a,50)  # percentile 50
0.038398647271696326
>>> stats.scoreatpercentile(a,95)  # percentile 95
1.72982274247371
```

Il T-test

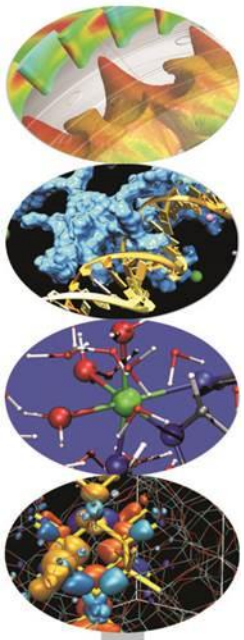


- Un test statistico tipicamente è utile per calcolare un indicatore da associare alla bontà di un'ipotesi su uno o più campioni di dati
- Dati 2 campioni gaussiani, vogliamo verificare se sono significativamente differenti: usiamo il cosiddetto T-test

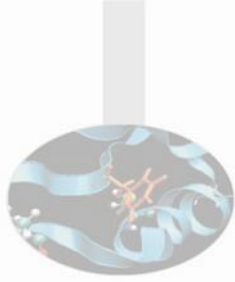
```
>>> a = np.random.normal(0,1,size=100)
>>> b = np.random.normal(1,1,size=80)  # diverso da a
>>> stats.ttest_ind(a,b)
(array(-7.676065328644207), 1.0441890418905031e-12)

>>> c = np.random.normal(0.1,1,size=80) # simile ad a

>>> stats.ttest_ind(a,b)
(array(-0.7067713387921485), 0.4806327650275017 4)
```



Introduzione a ***SciPy***: esercizi proposti



Interpolazione: scipy.interpolate

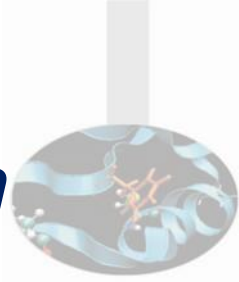


- Il modulo contiene funzionalità per il *fitting* di una funzione (1D e 2D) a partire da dati esperimentali e per la successiva valutazione della funzione in punti in cui il dato sperimentale è mancante

- Generiamo un “dato sperimentale” prossimo alla funzione seno

```
>>> t = np.linspace(0,1,10)
>>> noise = 0.1 * (2 * np.random.random(10) -1)
>>> measures = np.sin(2* np.pi * t) + noise
```

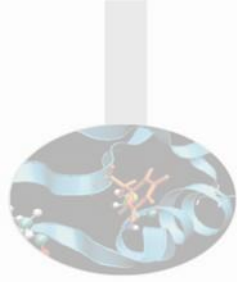
Interpolazione 1D lineare e cubica



Eseguiamo un'interpolazione sia lineare che cubica dei dati sperimentali, per poi confrontarle con i dati misurati in un plot

```
>>> from scipy.interpolate import interp1d
>>> l_interp = interp1d(t, measures)
>>> c_interp = interp1d(t, measures, kind='cubic')
>>> computed_t = np.linspace(0,1,50)
>>> linear_res = l_interp(computed_t)
>>> cubic_res  = c_interp(computed_t)
```

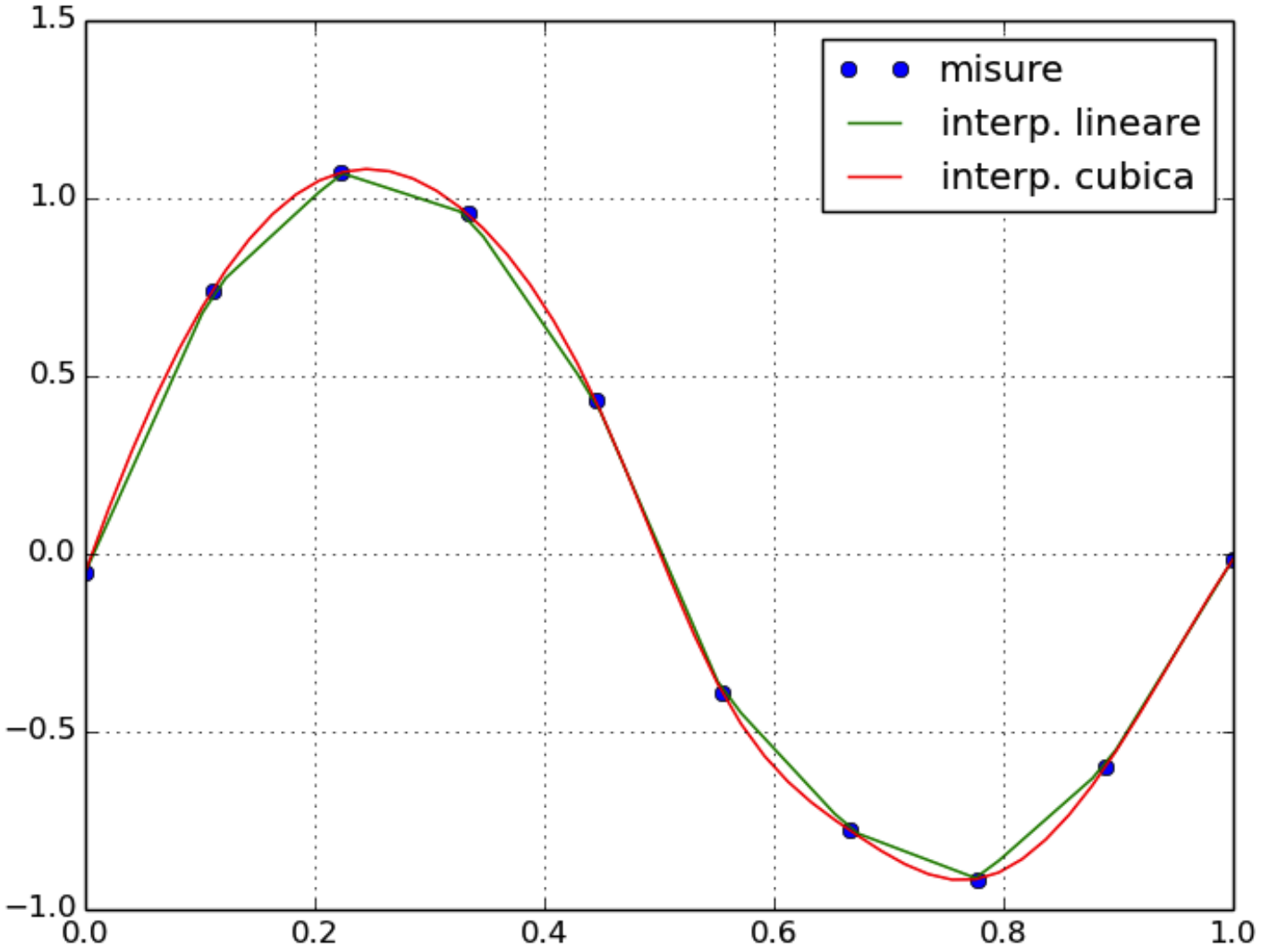
Interpolazione 1D: plot per confronto con i dati



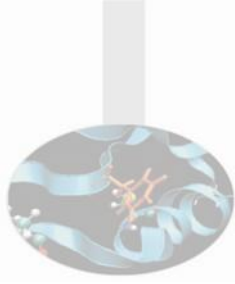
Costruiamo il plot per il confronto tra le curve calcolate e i dati sperimentali di partenza

```
>>> import pylab as pl
>>> pl.plot(t, measures,'o', ms=6, label='misure')
>>> pl.plot(computed_t, linear_res, \
        label=’interp. lineare')
>>> pl.plot(computed_t, cubic_res, \
        label=’interp. cubica')
>>> pl.grid()
>>> pl.legend()
>>> pl.show()
```

… Interpolazione 1D: plot per confronto con i dati



scipy.integrate: integrazione numerica

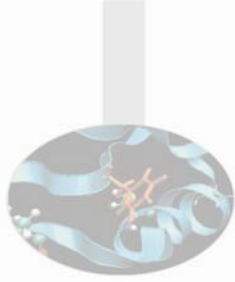


scipy.integrate.quad() è la più generica funzione per l'integrazione numerica 1D presente in SciPy

```
>>> from scipy.integrate import quad
>>> result, error = quad(np.sin, 0, 0.5*np.pi)
>>> np.allclose(result, 1)  # check del risultato
True
>>> np.allclose(err, 1 - result) # check dell'errore
True
```

- Oltre al semplice integrale definito, quad sa fare molte altre cose (*cfr. help*)
- dblquad e tplquad sono usate nel caso 2D e 3D rispettivamente
- In scipy.integrate sono disponibili anche altri schemi d'integrazione numerica (cfr. fixed_quad, quadrature, romberg)

scipy.integrate: ODE



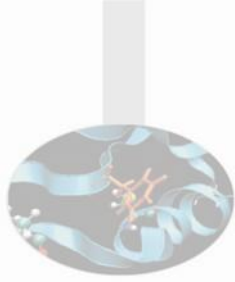
- Il sotto-modulo scipy.integrate contiene anche routine per l'integrazione di equazioni differenziali ordinarie (ODE)

- In particolare scipy.integrate.odeint() è un integratore general-purpose di ODE che usa LSODA - *Livermore Solver for Ordinary Differential equations with Automatic method switching for stiff and non-stiff problems* - (cfr. documentazione di ODEPACK per dettagli)

- odeint risolve ODE del prim'ordine della forma

$$y' = f(y,t) \quad \text{con} \quad y = [y_1(t), y_2(t), \ldots, y_n(t)]$$

scipy.integrate: ODE



- Come primo esempio, risolviamo l'equazione

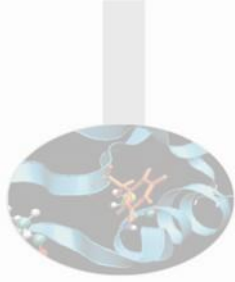
$$\frac{dy}{dt} = -2y \quad \text{con} \quad t \in [0,4] \quad \text{e} \quad y(0) = 1$$

- Iniziamo con lo scrivere in Python la funzione che calcola la derivata rispetto al tempo della funzione y

```
>>> def calc_derivative(ypos, time, arr_counter):
        arr_counter += 1
        return -2 * ypos
```

NB: Abbiamo aggiunto l'ulteriore argomento e_counter, per illustrare come la funzione sia chiamata più volte ad ogni passo d'integrazione, fino a che il solutore raggiunge la convergenza

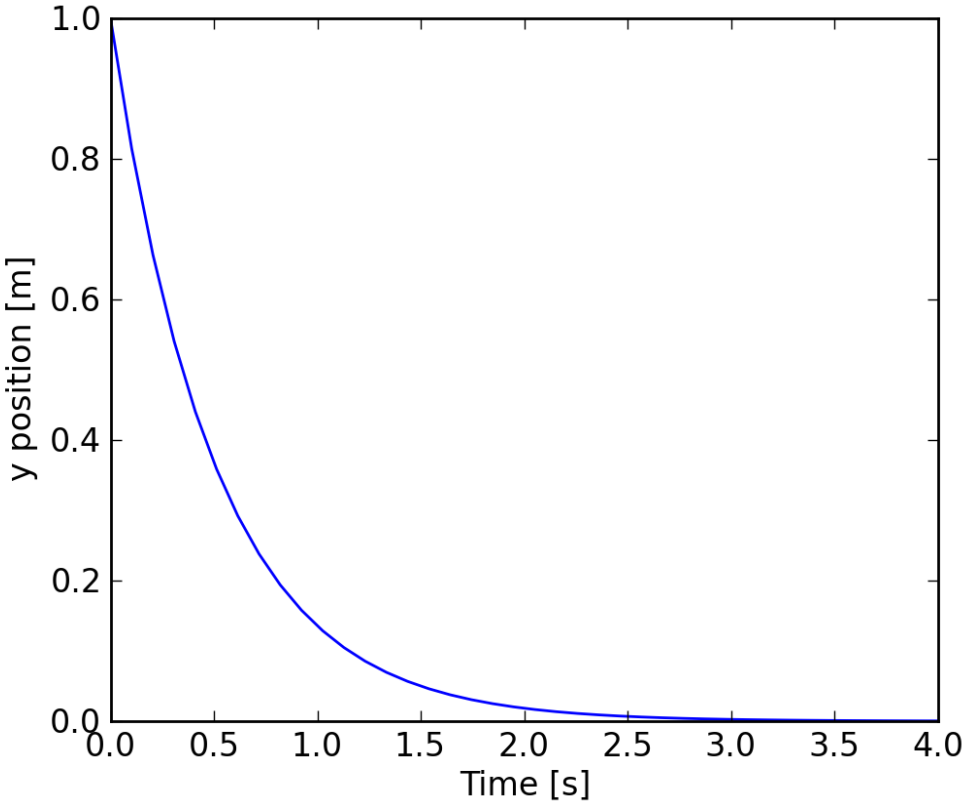
scipy.integrate: ODE



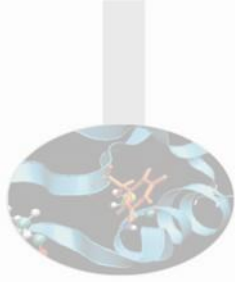
```
>>> counter = np.zeros((1,), dtype=np.uint16)
>>> time_vec = np.linspace(0,4,40)
>>> from scipy.integrate import odeint
>>> yvec, info = odeint(calc_derivative, 1,
...                     time_vec, args=(counter,),
...                     full_output=True)

>>> counter              # numero di chiamate a calc_derivative
array([129], dtype=uint16)

# n°   d'interazioni per i primi 5 time-step
>>> info['nfe'][:5]
array([31, 35, 43, 49, 53], dtype=int32)
```

scipy.integrate: ODE

```
>>> import pylab as pl
>>> pl.plot(time_vec, yvec)
>>> pl.xlabel('Time [s]')
>>> pl.ylabel('y position [m]‘)
>>> show()
```



scipy.integrate: ODE



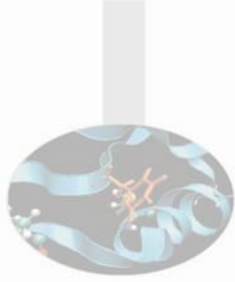
- Come secondo esempio, usiamo odeint() per risolvere un ODE di secondo grado, l'equazione di un oscillatore armonico *damped*:

$$x'' + 2\varepsilon\omega_0 x' + \omega_0^2 x = 0$$

in cui $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$ e $\varepsilon = \frac{c}{2m\omega_0}$

con *k* costante elastica della molla, *m* massa del oscillatore e *c* coefficiente di *damping*

... scipy.integrate: ODE ...

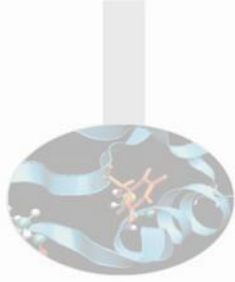


Per poter usare odeint() trasformiamo la ODE di secondo grado in un sistema di ODE di primo grado:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = p \\ \dfrac{dp}{dt} = -2\varepsilon w_0 p - w_0^2 x \end{cases}$$

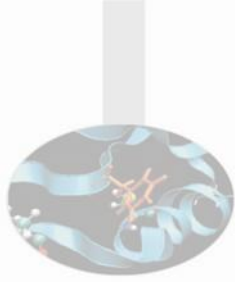
```
>>> def dy(y, t, eps, w0):
        x, p = y[0], y[1]
        dx = p
        dp = -2*eps*w0*p – w0**2*x
        return [dx, dp]
```

scipy.integrate: ODE



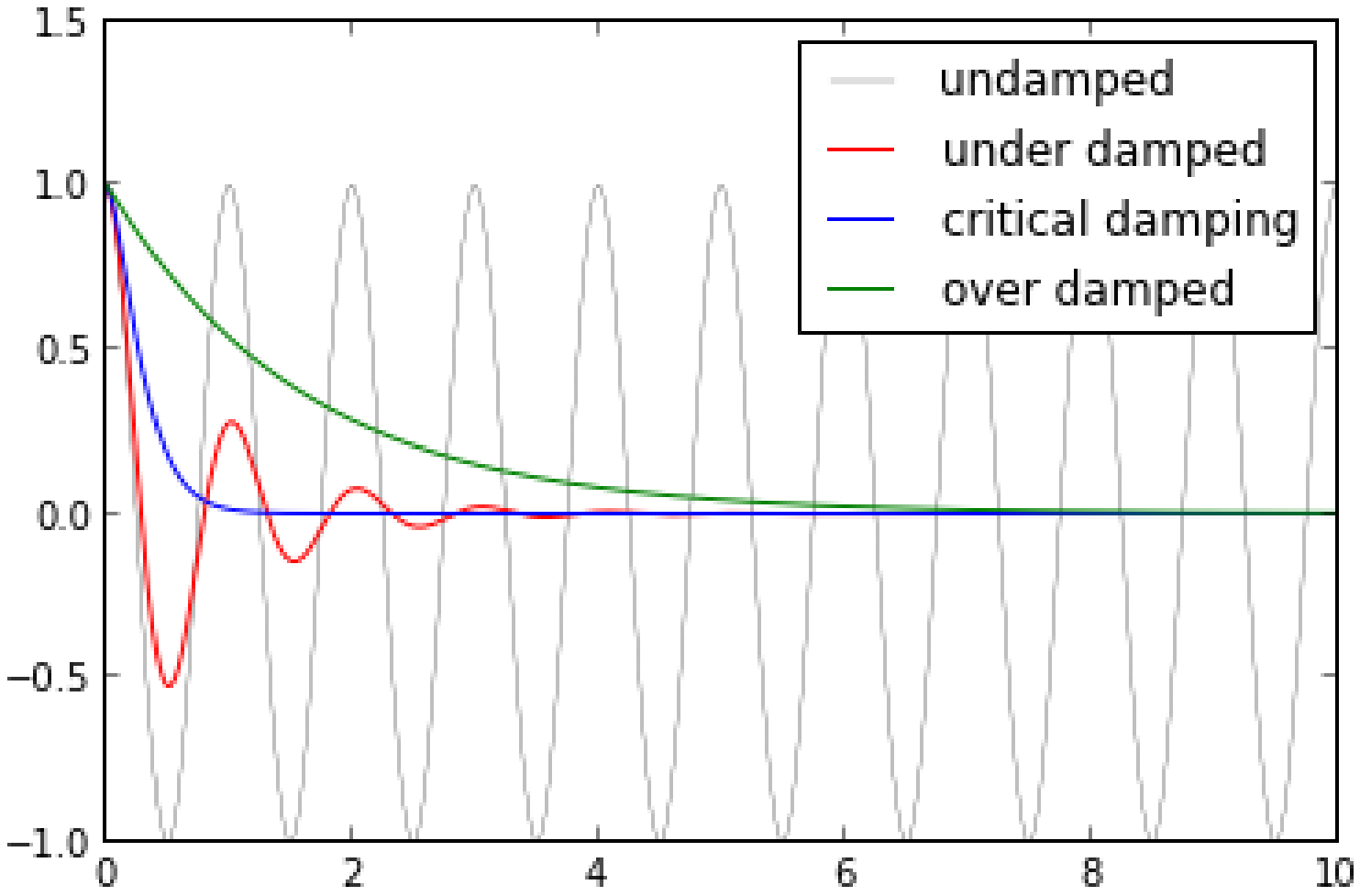
```
# condizione iniziale
>>> y0 = [1.0, 0.0]

# coordinate temporali in cui trovare la soluzione
>>> t = np.linspace(0,10,1000)

>>> wo = 2*np.pi

>>> from scipy.integrate import odeint

# risolviamo ls ODE per 4 valori diversi di eps

>>> y1 = odeint(dy,y0,t,args=(0.0,w0)) # undamped

>>> y2 = odeint(dy,y0,t,args=(0.2,w0)) # under damped

>>> y3 = odeint(dy,y0,t,args=(1.0,w0)) # critial damping

>>> y4 = odeint(dy,y0,t,args=(5.0,w0)) # over damped
```

scipy.integrate: ODE

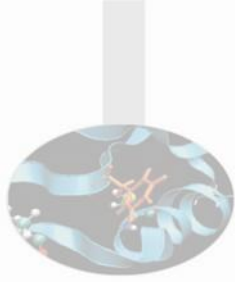


```
>>> from pylab import *
>>> fig, ax = subplots()
>>> ax.plot(t, y1[:,0],'k',label="undamped",
...         linewidth=0.25)

>>> ax.plot(t, y2[:,0], 'r', label="under damped")
>>> ax.plot(t, y3[:,0], 'b', label=r"critical damping")
>>> ax.plot(t, y4[:,0], 'g', label="over damped")
>>> ax.legend()
>>> show()
```

scipy.integrate: ODE



Fast Fourier trasform: scipy.fftpack



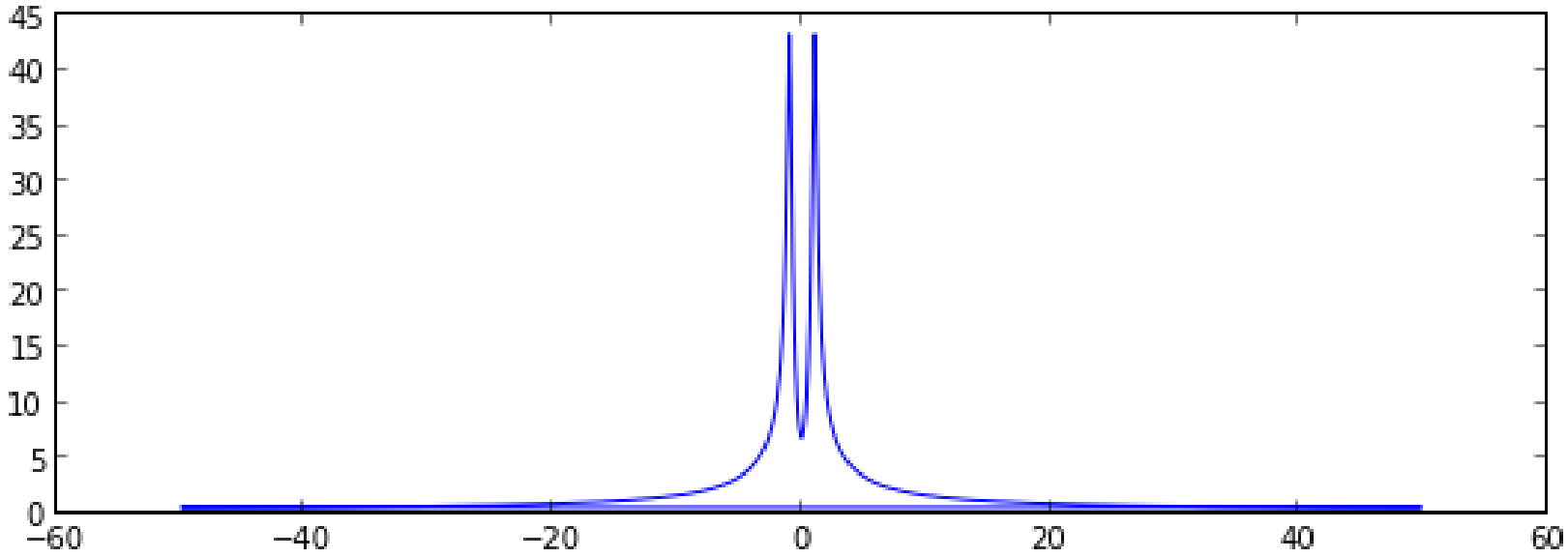
- scipy.fftpack fornisce essenzialmente le funzioni per utilizzare in Python la libreria FFTPACK -disponibile su *NetLib*-, che è un'efficiente e ben testata libreria per FFT scritta in Fortran.

- Come esempio d'uso delle funzioni FFT di SciPy, calcoliamo la Trasformata di Fourier di una delle soluzioni del *dumped oscillator*, appena calcolate

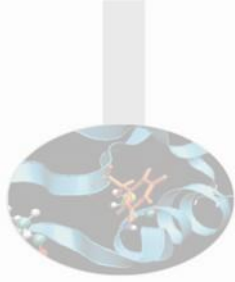
```
>>> N = len(t); dt = t[1]-t[0]
>>> import scipy.fftpack as fftpack
>>> F = fftpack.fft(y2[:,0])
>>> w = fftpack.fftfreq(N,dt)
```

Fast Fourier trasform: scipy.fftpack

```
>>> fig, ax = subplots(figsize=(9,3))
>>> ax.plot(w, abs(F));
```



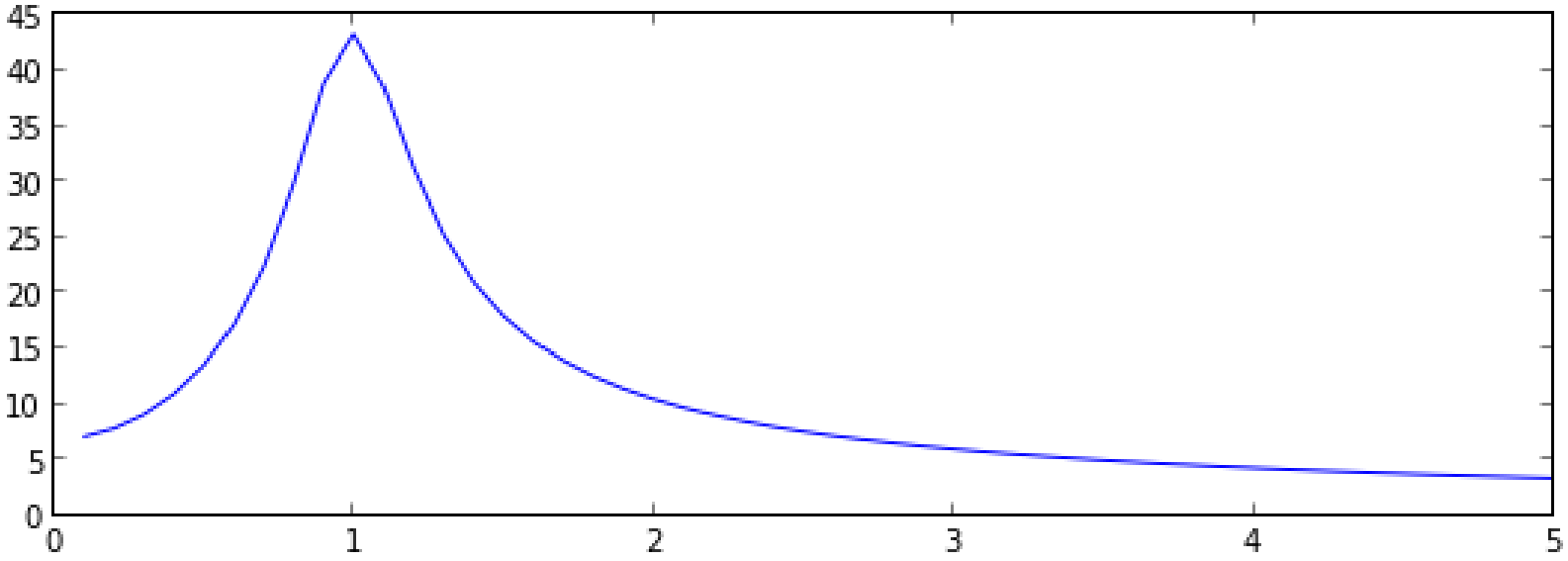
Fast Fourier trasform: scipy.fftpack



- Poiché il segnale è reale, lo spettro è simmetrico; dunque abbiamo possiamo disegnare il grafico della Trasformata di Fourier calcolata solo in corrispondenza delle frequenze positive

```
>>> indices = where(w>0)
>>> w_pos = w[indices]
>>> F_pos = F[indices]
>>> fig, ax = subplots(figsize=(9,3))
>>> ax.plot(w_pos, abs(F_pos))
>>> ax.set_xlim(0, 5);
```

Fast Fourier trasform: scipy.fftpack



Come c'era da aspettarsi, lo spettro presenta un solo picco centrato intorno ad 1, il valore corrispondente alla frequenza dell'oscillatore del nostro esempio