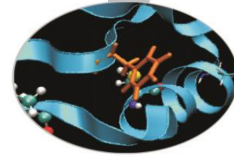
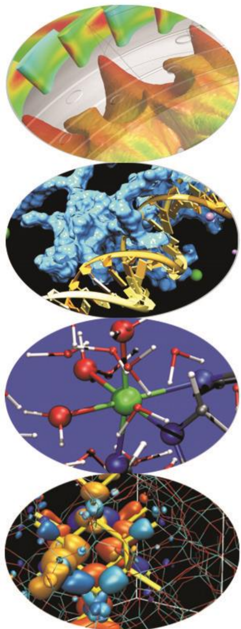
CINECA SCAI
SuperComputing Applications and Innovation

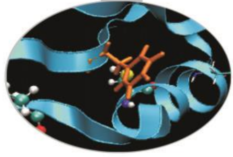


Python per il calcolo scientifico



CINECA

CINECA SCAI
SuperComputing Applications and Innovation

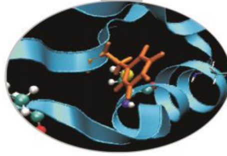


Indice

- Numpy
- Creazione di un array
- Reshape & Resize
- Indexing
- Operatori Aritmetici
- ufunc
- Broadcasting
- Cenni di vettorizzazione
- Efficienza e loop
- Array Copy
- Attributi e Metodi
- I/O con Array Numpy
- Matrix

CINECA

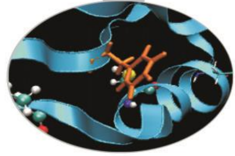
Python in ambito scientifico



Python è diventato accessibile a nuovi gruppi di utilizzatori. A dispetto della sua semplicità è un linguaggio abbastanza potente da permettere la gestione di applicazioni complesse

- Python ha una posizione forte nell'ambito del Computing Scientifico:
  - E' open-source!
  - Ci sono significative e diffuse comunità di utenti, quindi è piuttosto facile reperire in rete aiuto e documentazione
  - Ad oggi è disponibile un esteso ecosistema di *environment*, di *package* e di librerie scientifiche per Python ed è in rapida crescita
  - Si possono scrivere codici Python che ottengono ottime performance, grazie alla forte integrazione con prodotti altamente ottimizzati scritti in C e Fortran (BLAS, Atlas, Lapack, Intel MKL®, …)
  - E' possibile sviluppare applicazioni parallele che usino la comunicazione interprocesso (MPI), il multi-threading (OpenMP) ed il GPU computing (OpenCL e CUDA)

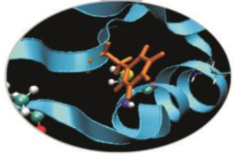
Python in ambito scientifico



A livello mondiale è sfruttato in ambito scientifico (e non solo) in diversi progetti:

- National Space Telescope Laboratory (Hubble Space Telescope)
- Lawrence Livermore National Laboratories (pyMPI)
- Enthought Corporation (Applicazioni Geofisiche ed Elettormagnetiche)
- Anaconda (RedHat Linux Installer)
- Google

Contenuti



Nello specifico verranno trattati:

- Introduzione base al modulo *numpy:* definizione di array e operazioni base.

  Scaricabile:

  https://sourceforge.net/projects/numpy/files/

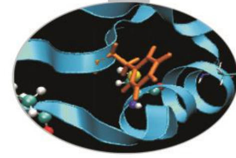
  Official web-site:

  http://numpy.scipy.org/

- Introduzione al modulo *pylab:* creazione di grafici

  Official web-site:

  http://matplotlib.sourceforge.net/



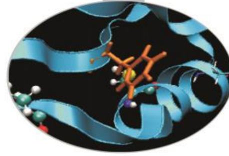
Numpy

PyOpenCL, NVIDIA CUDA PyCUDA, scikits-image (image processing in python), StatsModels (Statistics in Python), sage, pandas, matplotlib, RPy, NumPy, OpenCV, Mayavi (an ETS project), PyTables, SciPy, scikits learn (machine learning in Python), spyder

“Life is too short to write C++ code“

David Beazley - EuroScipy 2012 Bruxelles

NumPy

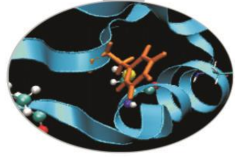


NumPy è l'abbreviazione di *Numerical Python:* un'estensione del linguaggio pensata per l'ottimizzazione della gestione di grosse moli di dati, utilizzata principalmente in ambito scientifico.

Il modulo NumPy ingloba le features dei moduli Numeric e Numarray e aggiunge nuove funzionalità.

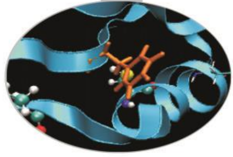
- In Python puro abbiamo a disposizione:
  - oggetti numerici di alto livello: interi, *floating point*
  - container: liste (*insert* ed *append* a costi bassi) e dizionari (operazioni di *lookup* veloci)
- NumPy
  - Introduce un modalità naturale ed efficiente per utilizzare array multi-dimensionali
  - Aggiunge una serie di utili funzioni matematiche di base (algebra lineare, FFT, *random number*, …)

Perché usare Numpy



- In NumPy funzioni e metodi agiscono su interi vettori e matrici, quindi raramente si ricorre a loop espliciti, tipicamente poco efficienti
- Gli algoritimi utilizzati sono estremamente testati e disegnati con l'obiettivo di fornire alte prestazioni
- NumPy gestisce lo store degli array in memoria in modo molto più efficiente, rispetto a quanto accade in Python puro per le liste e le liste di liste
- Le operazioni di I/O di array sono significativamente più veloci
- File di grandi dimensioni possono essere *memory-mapped*, consentendo così una lettura/scrittura ottimale di grosse moli di dati
- Molte parti di NumPy sono scritte in C, cosa che rende un codice NumPy più veloce dell'analogo in Python puro
- NumPy prevede una C API, che consente di estenderne le funzionalità (questo tema non viene trattato in questa introduzione a NumPy)

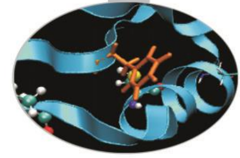
Quando non usare Numpy



- Al di fuori del contesto del calcolo tecnico scientifico, l'uso di NumPy è meno utile

- Principali limitazioni:
  - NumPy non è supportato per lo sviluppo di applicazioni Google App Engine, perché molte sue parti sono scritte in C
  - Gli utenti di Jython – l'implementazione Java di Python – non posso contare sul modulo NumPy: Jython gira all'interno di una Java Virtual Machine e non può importare NumPy, perché molte sue parti sono scritte in C

Import del modulo

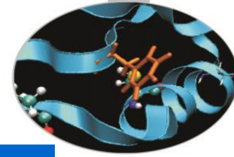


- Importiamo il modulo come di consueto

```
>>> import numpy
>>> from numpy import *
>>> import numpy as np      #default in molti codici e nella documentazione numpy
```

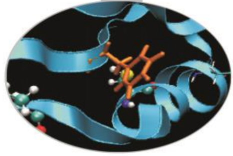
Numpy fornisce un nuovo tipo di dato: un array N-dimensionale (ndarray).

Organizzazione del modulo



Sub-Packages	Purpose	Comments
core	basic objects	all names exported to numpy
lib	Addintional utilities	all names exported to numpy
linalg	Basic linear algebra	LinearAlgebra derived from Numeric
fft	Discrete Fourier transforms	FFT derived from Numeric
random	Random number generators	RandomArray derived from Numeric
distutils	Enhanced build and distribution	improvements built on standard distutils
testing	unit-testing	utility functions useful for testing
f2py	Automatic wrapping of Fortran code	a useful utility needed by SciPy

ndarray



- NumPy fornisce il nuovo oggetto *ndarray*
- *ndarray* è una struttura dati omogenea (*fixed-type*) e multi-dimensionale.

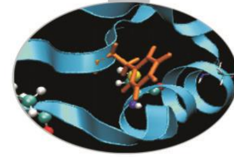
Teminologia:

Con *size* di un array intendiamo il numero di elementi presenti in un array.

Con *rank* di un array si intende il numero di assi/dimensioni di un array.

Con *shape* di un array intendiamo le dimensioni dell'array, cioè una tupla di interi contenente il numero di elementi per ogni dimensione, numero VARIABILE.

L' *itemsize* rappresenta la dimensione in memoria di ogni singolo elemento dell'array.

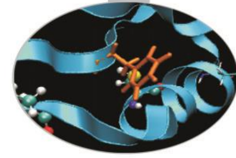


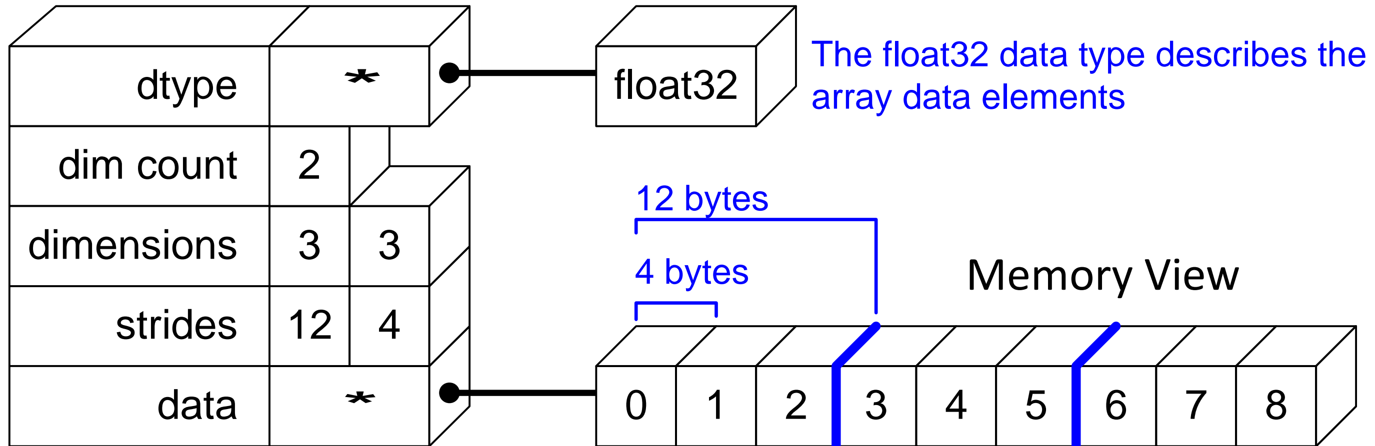
ndarray

La definizione del ndarray numpy/core/include/numpy/ndarrayobject.h

```
typedef struct PyArrayObject {
PyObject_HEAD
     char *data;             // pointer to raw data buffer
     int nd;                 // number of dimensions, also called ndim
     npy_intp *dimensions; // size in each dimension
     npy_intp *strides;     // bytes to jump to get to the next
                              //element in each dimension
     PyObject *base;
     PyArray_Descr *descr;    /* Pointer to type structure */
     int flags;               /* Flags describing array */
     PyObject *weakreflist;   /* For weakreferences */
} PyArrayObject;
```

ndarray

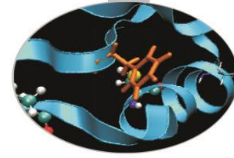




0	1	2
3	4	5
6	7	8

Python View

Creazione di un Array



Creazione di un array

Ci sono diverse modalità per generare un array. La più semplice consiste nell'utilizzo della funzione

array(object, dtype=None, copy=1,order=None) → *array*

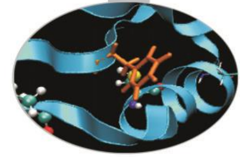
NOTA: allocazione in memoria per array multidimensionali.

1	2	3
4	5	6

1	4	2	5	3	6	Fortran - Style

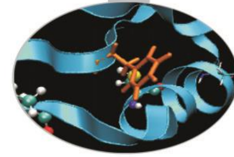
1	2	3	4	5	6	C-Style

Creazione di un Array



- Il modo più semplice per creare un array è di convertire altre strutture dati Python

```
>>>import numpy as np
>>>a=np.array([1,2,3,4])
>>>lista1=[1,2,3,4]
>>>tupla=(5,6,7,8)
>>>a=np.array(lista)        #from a list
>>>b=np.array(tupla)        #from a tupla
>>>c=np.array([lista,tupla]) #from a list and from a tupla
>>>a.dtype
dtype('int32')
```

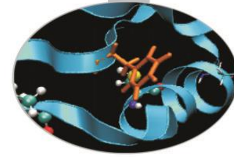


ndtype

- Ci sono *21 built-in data type* che possono essere usati per creare un array.
- *Numpy* supporta più tipi di dato rispetto a python puro.

Type	Description
bool	Boolean
int	Platforma integer
int8	Byte (-128,127)
int16	Integer (-32768,32767)
int32	Integer (-2147483648, 2147483647)
int64	Integer (-9223372036854775808, 9223372036854775807)
uint8	unsigned integer (0,255)
uint16	unsigned integer (0,65535)
uint32	unsigned integer (0,4294967295)
uint64	unsigned integer (0,18446744073709551615)
float	float64
float32	Single precision float
float64	Double precision float
complex	complex128
complex64	Complessi con 2 32-bits float
complex128	Complessi con 2 64-bits float

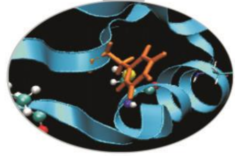
ndtype



- E’ possibile creare array con nuovi dtype definiti dall’utente.

```
>>>dt=dtype([('Name','S3'),('Anni', numpy.int64)])
>>a=array([('Chiara',3),('Marco',4)],dtype=dt)
>>> a
array([('Chi', 3L), ('Mar', 4L)],
      dtype=[('Name', '|S3'), ('Val', '<i8')])
>>>dt=dtype({'names':('Name','Anni','Cognome'),'formats':('S3','int64','S3')})
>>>a=array([('Chiara',3,'Bianchi'),('Marco',4,'Rossi')],dtype=dt)
>>> a
array([('Chiara', 3L, 'Bia'), ('Marco', 4L, 'Ros')],
      dtype=[('Name', '|S10'), ('Anni', '<i8'), ('Cognome', '|S10')])
```

Dimension e shape



```
int nd;      /* number of dimensions, also called ndim */
npy_intp *dimensions;      /* size in each dimension */
```

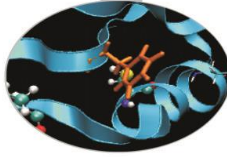
- L'attributo *shape* specifica la forma dell'array:

```
import numpy as np
a=np.array([[1,2],[2,2]])
a.shape
(2,2)
b=np.array([[[1,2],[3,4]],[[5,6],[7,8]]])
b.shape
(2,2,2)
```

- L'attributo *ndim* specifica la dimensione dell'array

```
a.ndim
2
b.ndim
3
```

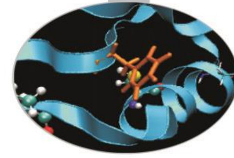
itemsize



L'itemsize ritorna la dimensione di ciascun elemento

```
>>>b=np.array([[1, 2,3],[3, 4,5]])
>>> b.itemsize
4
>>> b.dtype
dtype('int32')
>>> b.strides                    #bytes to jump to get to the next element
                                 #of each dimension
(12, 4)                          #skyp_byte_row, skype_byte_col
>>>c=np.array([[1,2,3],[4,5,6]],order='Fortran')
>>> c.strides
(4, 8)
```

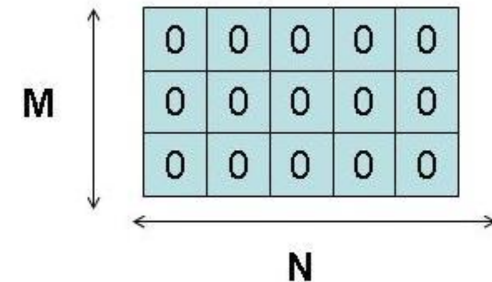
Creazione di un Array



Se il contenuto di un array è a priori ignoto, è utile utilizzare funzioni per riempire in modo sistematico l'array.

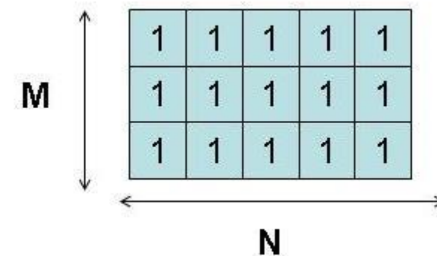
- La funzione *zeros* crea un array di dimensioni *shape* di soli zeri.

zeros(shape, dtype=float, order ='C')

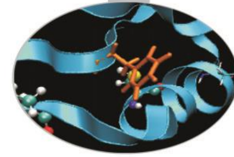


- La funzione *ones* crea un array di dimensione *shape* di soli uni.

ones(shape,dtype=None, order ='C')

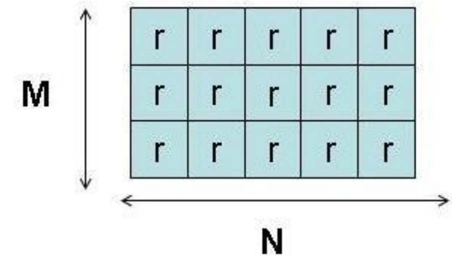


Creazione di un Array



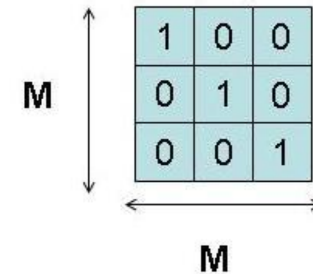
- La funzione *empty* crea un array di dimensioni *shape* senza inizializzazione.

  empty(shape, dtype=*None*, order =*'C'*)



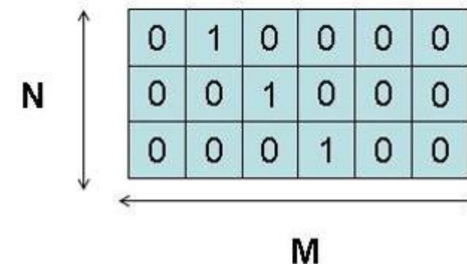
- La funzione *identity* genera la matrice identità *n X n*

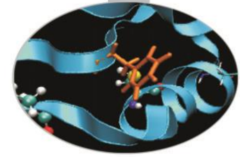
  identity(n, dtype=*None*)



- La funzione *eye* crea una matrice N X M riempendo di 1 la k-esima diagonale

  eye(N, M=*None*, k=*0*, dtype=*float*)





Creazione di un Array

In maniera analoga alla funzione *range* per le liste, esiste la possibilità di creare una sequenza di numeri anche per gli array.

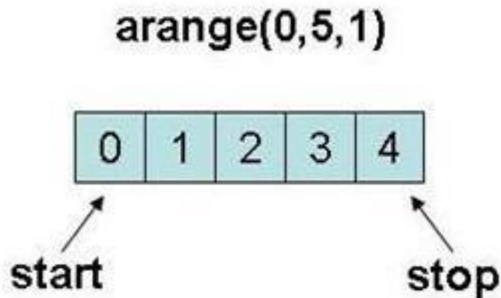
arange(*[start,] stop[, step,], dtype=None*)

- La funzione *arange* genera un array di numeri compresi tra *start* e *stop* con passo *step.*

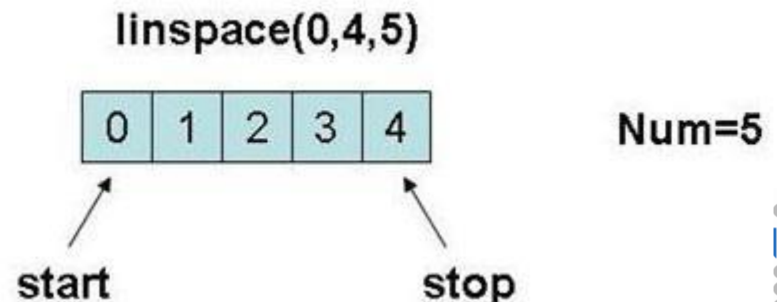
In alternativa:

linspace(*start, stop, num=50, endpoint=True, restep=False*)

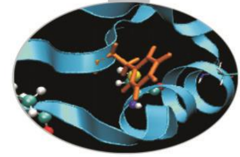
- Genera una sequenza di *num* numeri uniformemente distribuita compresa tra *start* e *stop.*



Step=1



Creazione di un Array

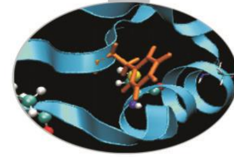


- E’ possibile creare array anche da stringhe con la funzione fromstring

```
>>> np.fromstring('1 2', dtype=int, sep=' ')
 array([1, 2])
>>> np.fromstring('1, 2', dtype=int, sep=',')
array([1, 2])
```

- E’ possibile creare array leggendo i dati da disco…

Reshape & Resize



Reshaping & Resizing Array

I metodi resize e reshape permettono di modificare la forma e la dimensione dell'array. Il metodo

reshape(shape, order='C')

Restituisce una nuova struttura dati ridistribuendo gli elementi dell'array secondo la nuova forma *shape* con ordine *order.*

La funzione reshape deve lasciare invariato il numero di elementi dell'array.

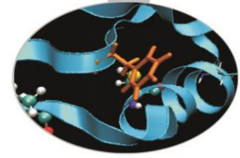
La funzione

resize(new_shape, refcheck=True, order=False)

Lavora direttamente *in-place* e permette di modificare la forma dell'array e di ridimensionarlo.

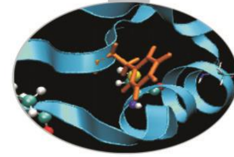
Resize funziona solo se l'array non è referenza o non è referenziato.

Reshape & Resize



Esempio

```
>>>a=np.arange(20)
>>>a.resize(5,6)              #Ok
>>>b=a
>>>a.resize(3,3)              #Error a is referenced by b
Traceback (most recent call last):
  File "<pyshell#160>", line 1, in <module>
    a.resize(3,3)
ValueError: cannot resize an array that has been referenced or is referencing
another array in this way.  Use the resize function
```



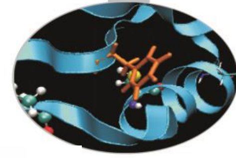
Reshape & Resize

Esempio *array_reshape.py*

```
>>>a=np.array(range(1,9))
>>>print “Shape” , a.shape
>>>c_style=a.reshape((2,2,2),order=‘C’)  # Array Method: Numpy Style
>>>f_style=np.reshape(a,(2,2,2),order=‘F’)       # Numpy Function
>>>print “C-style “, c_style
>>>print “Fortran-style “, f_style
>>>c_style=c_style.reshape((2,4))
>>>print “Reshape c_style“, c_style
>>>f_style=f_style.reshape((2,4))
>>>print “Reshape f_style”,f_style
```

1	2	3	4	5	6	7	8

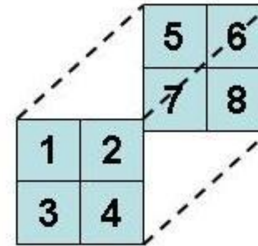
array(range(1,9))



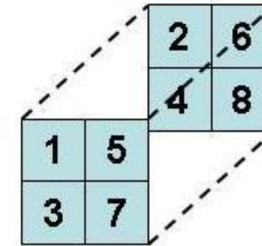
Reshape & Resize

OUTPUT

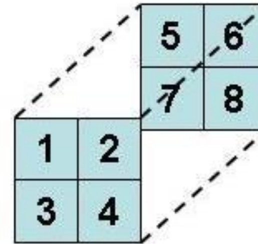
```
Shape (8,)

C-style   c_style [ [ [1, 2],
                      [3, 4] ],
                    [ [5, 6],
                      [7, 8] ] ]


Fortran-style  f_style [ [ [1, 5],
                           [3, 7] ]
                         [ [2, 6],
                           [4, 8] ] ]


Reshape c_style [[1, 2, 3, 4],
                  [5, 6, 7,8]]


Reshape f_style [[1, 5, 3, 7],
                  [2, 6, 4,8]]
```



C - Style



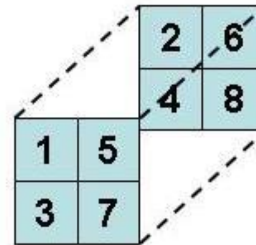
Fortran - Style



C - Style

1	2	3	4
5	6	7	8

Reshape

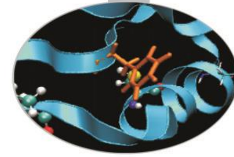


Fortran - Style

1	5	3	7
2	6	4	8

Reshape

Indexing - Slicing - Iteration



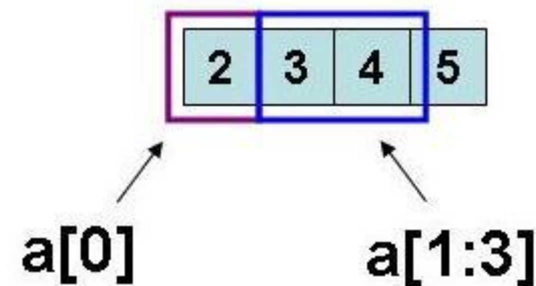
Array Indexing e Slicing

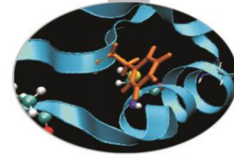
L’accesso agli elementi di un array avviene tramite l’operatore *[]* . Anche sugli array è applicabile l’operatore di slicing *[:]* .

Nel caso di array monodimensionali si adotta la stessa notazione delle liste.

Esempio

```
>>>a=np.ones(4)
>>>print “a[0] “, a[0]
    a[0] 2.0
>>>print a [1:3]
>>>[  3.,   4.]
```



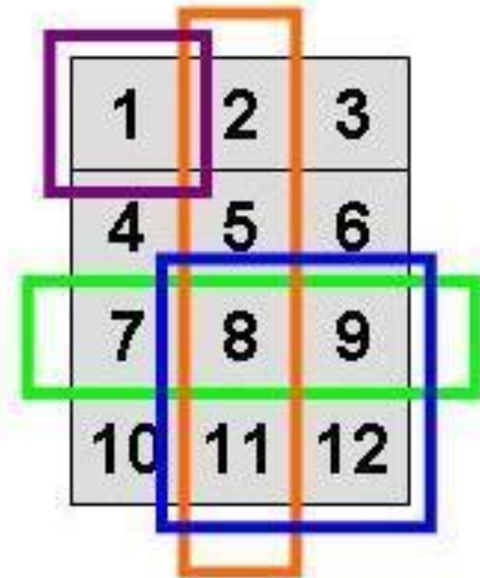


Indexing – Slicing - Iteration

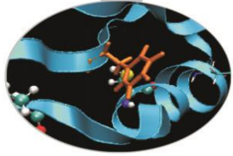
Nel caso di array multidimensionali:

Esempio

```
>>>a=np.array([[1,2,3],[4,5,6],[7,8,9],[10,11,12]])
>>>print a[0][0]
1
>>>print a[0,0]
1
>>>print a[2]
[7 8 9 ]
>>>print a[:,1]
a[ 2 , 5 , 8 , 11 ]
>>>print a[2:,1:3]
[[ 8  9]
 [11 12]]
```

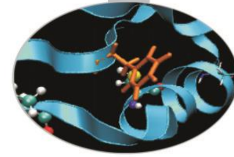


Indexing – Slicing - Iteration



```
>>> a=np.arange(25)
>>> a=a.reshape((5,5))
array([[ 0,  1,  2,  3,  4],
       [ 5,  6,  7,  8,  9],
       [10, 11, 12, 13, 14],
       [15, 16, 17, 18, 19],
       [20, 21, 22, 23, 24]])
>>> a[::,1]
array([ 1,  6, 11, 16, 21])
>>> a[1]
array([5, 6, 7, 8, 9])
>>> a[1,:]
array([5, 6, 7, 8, 9])
```

```
>>> a[1,::]
array([5, 6, 7, 8, 9])
>>> a[1,::2]
array([5, 7, 9])
>>> a[1,5::-1]
array([9, 8, 7, 6, 5])
```



Array Copy

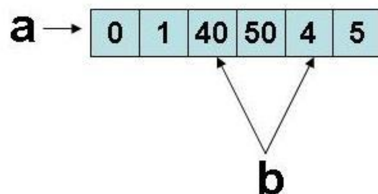
NOTA

- Lo slicing per gli array è profondamente differente rispetto alla slicing per le liste. Nel caso di array il sotto-array generato mediante slicing è una reference all’area originale di memoria. Un operazione di *slicing* crea una ***view*** dell’array originale, ovvero solo un modo differente per accedere ai dati dell’array. Quando viene modificata la *view*, viene modificato l’array originale

Nel caso delle liste la sotto-lista è una copia per valore della lista originale.

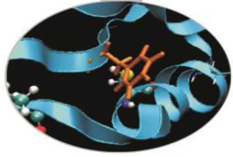
```
>>>a=np.arange(6)
>>>b=a[2:5]
>>>b[0]=40
>>>b[1]=50
>>>print “a:“, a , “b:”, b
```

a: [0 1 40 50 4 5] b: [40 50 4]




```
>>>a=range(6)
>>>b=a[2:5]
>>>b[0]=40
>>>b[1]=40
>>>print “a:“, a , “b:”, b
```

a: [0 1 2 3 4 5] b: [40 50 4]



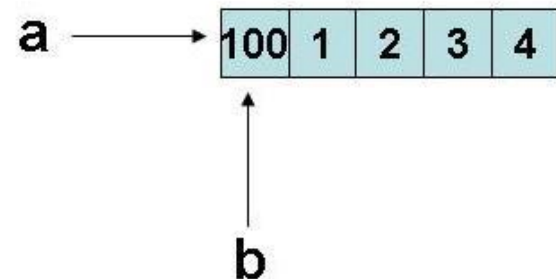
Array Copy

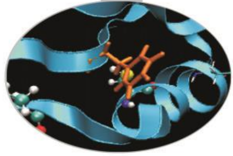
NOTA (copia per riferimento e per valore)

Nel caso degli array la copia è di default per referenza.

```
>>>a=np.arange(5)
>>>b=a
>>>b[0]=100
>>>print "a:", a , "b:" , b
```

a: [100,1,2,3,4] b: [100,1,2,3,4]



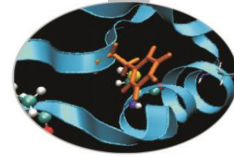


Array Copy

Per effettuare un assegnamento per valore, si utilizza la funzione *copy*

```
>>>c=a.copy()
>>>print “id(c): “, id(c), “id(a):”, id(a)
>>>c=np.copy(a)
>>>print “id(c): “, id(c), “id(a):”, id(a)

id(a): 18820584 id(c): 21335648
>>>c[0]=100
>>>print “c” , c , “a”, a
c  [100, 1, 2, 3, 4]    a [0, 1, 2, 3, 4]
```

Indexing – Slicing - Iteration



- La selezione degli elementi di un array può avvenire in modo più complesso:
  - Attraverso un array di indici
  - Tramite una maschera booleana

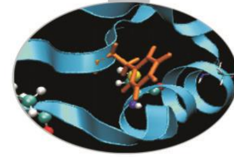
Questo metodo è noto come **fancy indexing**

```
>>> x = np.arange(10,1,-1)
array([10,  9,  8,  7,  6,  5,  4,  3,  2])
A=x[np.array([3,3,2,8])]
array([7,  7,  8,  2])
>>> AA=x[np.array([[3,3],[2,8]])]
    array([[7, 7],
      [3, 2]])
```

Il nuovo array:
➔ ha la shape dell'array di indici
➔ ha tipo e valori dell'array di partenza

SuperComputing Applications and Innovation

Indexing – Slicing - Iteration

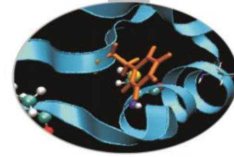


Usando una maschera booleana

```
>>> y
array([[ 0,  1,  2,  3,  4,  5],
       [ 6,  7,  8,  9, 10, 11],
       [12, 13, 14, 15, 16, 17]])
>>> y[y>10]
array([11, 12, 13, 14, 15, 16, 17]    # 1d array

a= array([10,  3,  8,  0, 19, 10, 11,  9, 10,  6])
>>> a[a % 3 == 0] = -2
>>> a
array([10,  -2,  8,  -2, 19, 10, 11,  -2, 10,  -2])
```

Modifica degli elementi di un array con fancy indexing

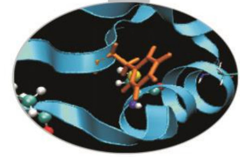
Altri *fancy indexing* illustrati



```
>>> a[(0,1,2,3,4),(1,2,3,4,5)]
array([ 1, 12, 23, 34, 45])

>>> a[3:,[0, 2, 5]]
array([[30, 32, 35],
       [40, 42, 45]])
       [50, 52, 55]])

>>> mask = array([1,0,1,0,0,1],
                 dtype=bool)
>>> a[mask,2]
array([2,22,52])
```

0	1	2	3	4	5
10	11	12	13	14	15
20	21	22	23	24	25
30	31	32	33	34	35
40	41	42	43	44	45
50	51	52	53	54	55

Indexing – Slicing - Iteration



Iteration

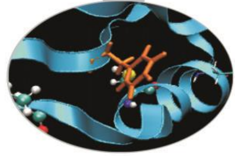
L'iterazione sugli elementi di un array può essere effettuata in diversi modi.

Attraverso il classico ciclo *for* lungo gli *assi* dell'array:

Esempio:

```
>>>a=np.arange(9)
>>>a.shape=(3,3)
>>>for i in xrange(a.shape[0]):
        for j in xrange(a.shape[1]):
            a[i,j]=i+j
```

Indexing – Slicing - Iteration

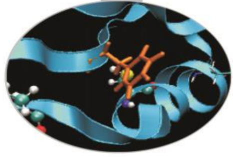


Il ciclo *for* applicato invece agli elementi di un array agisce di default sul primo asse.

Esempio:

```
>>>for el in a:
        print el
>>>[ 0 1 2]
   [ 1 2 3]
   [ 2 3 4]
```

Indexing – Slicing - Iteration



Attraverso l'iteratore *flat* su ogni elemento dell'array.

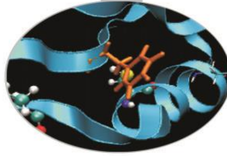
Esempio:

```
>>> for i in a.flat:
        print i
0 1 2 1 2 3 2 3 4
```

L'operazione di iterazione sugli array risulta tuttavia poco efficiente computazionalmente.

Per le operazioni sugli array Python dispone di funzioni scritte in C che operano direttamente sull'intero array…SEGUE

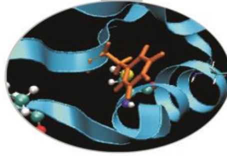
Operazioni numeriche su array



- Operazioni elementari con scalari:

```
>>> a = np.array([1, 2, 3, 4])
>>> a + 1                # somma di uno scalare
array([2, 3, 4, 5])
>>> a - 2                # sottrazione di uno scalare
array([-1, 0, 1, 2])
>>> 3*a                  # moltiplicazione per uno scalare
array([3, 6, 9, 12])
>>> 2**a                 # potenza (base scalare)
array([2, 4, 8, 16])
>>> a = np.array([1., 2., 3., 4.])
>>> a/2                  # divisione per uno scalare
array([0.5, 1., 1.5, 2.])
```

Operatori Aritmetici



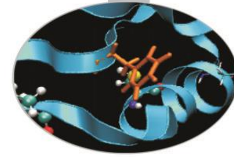
Operatori aritmetici

Gli operatori aritmetici agiscono in maniera *elementwise* sugli array.

Questa regola si applica sia ad operatori unari che ad operatori binari. E' inoltre valida per funzioni matematiche unarie (*sin*, *cos*, etc.)

```
>>> a = np.array([1, 2, 3, 4])
>>> b = np.ones(4) + 1
>>> a - b                    # sottrazione tra array
array([-1., 0., 1., 2.])
>>> a*b                      # moltiplicazione tra array
array([2., 4., 6., 8.])
>>> a += 1;              # autoincremento di array
array([2, 3, 4, 5])
>>> 2**(a+1) - a             # espressione con array
array([ 6, 13, 28, 59])
```

Operatori Aritmetici



Esempio

```
b=array([5,6,7,8])
c=arange(1,5)
d=c+b
print “Somma “ ,b,”+”,c, “= “, b+c
b+=1
print “Autoincremento b +=1   b=“, b
print “Moltiplicazione  c*3  ” ,c, “* 3= ”,c*3
print “Sin (c)”, sin(c)
```

OUTPUT

Somma [5,6,7,8] + [1,2,3,4] = [6,8,10,12]

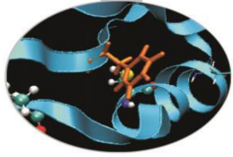
Autoincremento b+=1   b= [6,7,8,9]

Moltiplicazione c*3   [1,2,3,4] *3 = [3,6,9,12]

Sin(c) [0.84147098, 0.90929743, 0.14112001, -0.7568025]

SCAI
SuperComputing Applications and Innovation

Operatori di confronto



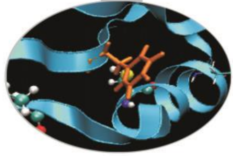
```
>>> a = np.array([1, 2, 3, 4])

>>> b = np.array([4, 2, 2, 4])

>>> a == b
array([False, True, False, True])

>>> a > b
array([True, False, True, True])

>>> c = np.array([1, 2, 3, 4])

>>> np.array_equal(a,b)
False

>>> np.array_equal(a,c)
True
```

Anche gli operatori standard di confronto lavorano *elementwise*

Per un confronto *arraywise* si usa il metodo `array_equal`

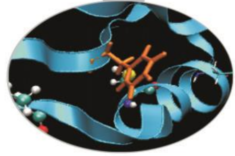
CINECA

Operatori logici



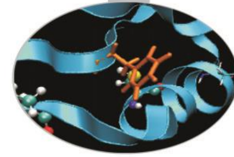
```
>>> a = np.array([1, 1, 0, 0], dtype=bool)

>>> b = np.array([1, 0, 1, 0], dtype=bool)

>>> np.logical_or(a,b)
array([True, True, True, False], dtype=bool)

>>> np.logical_and(a,b)
array([True, False, False, False], dtype=bool)
```

ufunc



- Numpy oltre alla definizione dell'oggetto `ndarray` definisce anche le funzioni universali `ufunc`
- Le funzioni `ufunc` permettono di operare elemento-elemento , sull'intero array senza dover usare dei loop espliciti.
- Queste funzioni sono dei wrapper a delle funzioni del core numpy tipicamente sviluppate in C o Fortran

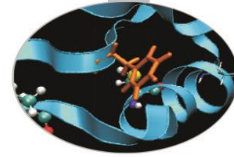
```
>>>a=np.arange(100)
>>>b=np.cos(a)
```



ufunc

Esempio della funzione ufunc_loop definita nel core di Numpy

```
void ufunc_loop(void **args, int *dimensions, int *steps,
                void *data) {
  char *input_1 = (char*)args[0];
  char *input_2 = (char*)args[1];
  char *output = (char*)args[2];
  int i;
  for (i = 0; i < dimensions[0]; ++i) {
    *output = elementwise_function(*input_1, *input_2);
    input_1 += steps[0];
    input_2 += steps[1];
    output += steps[2];
  }
}
```



ufunc

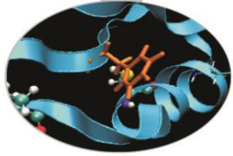
- Ci sono più di 60 ufuncs
- Alcune `ufunc` sono nascoste dietro gli operatori aritmetici: i.e. np.multiply(x,y)

è chiamata quando si effettua l'operazione a*b

- NumPy offre funzioni trigonometriche, esponenziali, logaritmiche, etc etc. Alcuni esempi:

```
>>> b = np.sin(a)
>>> b = np.arcsin(a)
>>> b = np.sinh(a)
>>> b = a**2.5  # power function
>>> b = np.log(a)
>>> b = np.exp(a)
>>> b = np.sqrt(a)
```

ufunc



- Funzione di confronto:

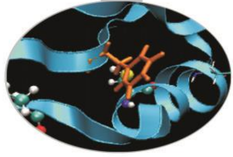
greater, less, equal, logical_and/_or/_xor/_nor, maximum, minimum, ...

```
>>> a = np.array([2,0,3,5])
>>> b = np.array([1,1,1,6])
>>> np.maximum(a,b)
array([2, 1, 3, 6])
```

- Funzioni floating point:

floor, ceil, isreal, iscomplex, ...

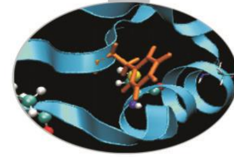
Broadcasting



- Visto che tutte le tipologie di operatori tra array lavorano elementwise, gli array operandi devono avere (sempre) la stessa shape

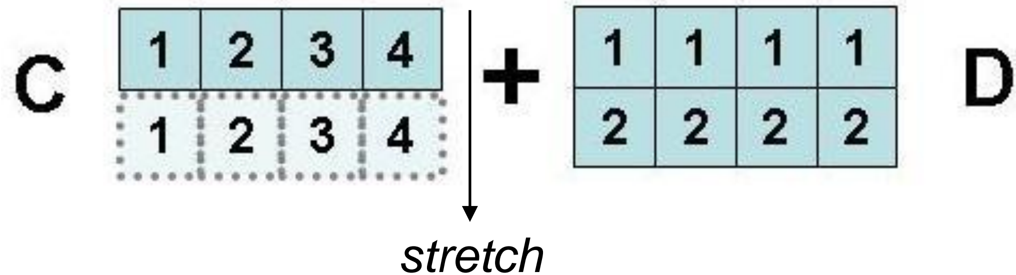
```
>>> a = np.arange(4)
>>> a + np.array([1,2])
Traceback (most recent call last):
  File "<stdin>", line 1, in <module>
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (4) (2)
```

Broadcasting



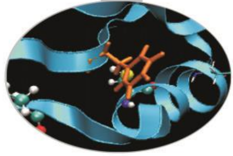
- E' possibile talvolta operare con array che non hanno le stesse dimensioni

```
c=np.arange(1,5)
d=np.array([[1,1,1,1],[2,2,2,2]])
print d, ”+”, c “= “ d+c
```



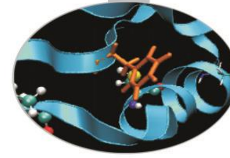
Questa modalità operativa viene definita di **broadcasting**

Broadcasting



- Il broadcasting quando applicabile permette di trattare con array che non hanno le stesse dimensioni.

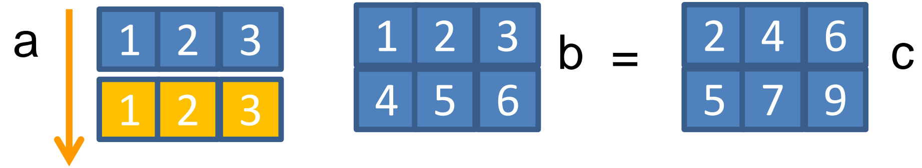
- Il broadcasting segue due regole:
  - Se gli array non hanno lo stesso numero di dimensioni, l’array più piccolo viene ridimensionato (aggiungendo dimensione ‘1’) fino a che entrambi gli array non hanno la stessa dimensione.
  - Array con dimensione ‘1’ lungo una particolare direzione si comportano come l’array più grande lungo quella dimensione. Il valore è ripetuto lungo la direzione di broadcast.



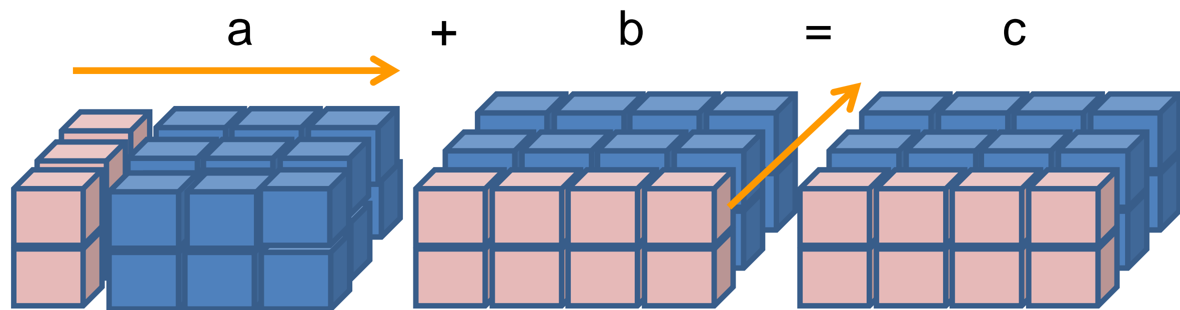
Broadcasting

- Sugli array 1d si può sempre usare il broadcast.

```
a=np.array([1,2,3])
a.shape # (3,)
b=np.array([[1,2,3],[4,5,6]])
b.shape #(2,3)
c=a+b        #OK!! Broadcastable
```

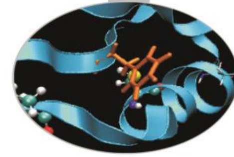



```
a=np.arange(6)
a=a.reshape((2,1,3))
b=np.arange(8)
b=b.reshape((2,4,1))
c=a+b #OK!! Broadcastable
```




```
a=a.arange(30)
a=a.reshape((2,5,3))
b=arange(8)
b=b.reshape((2,4,1)) #No Broadcastable
```

Array performance

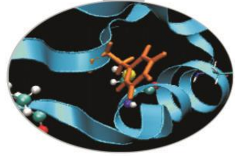


- Le funzioni Numpy sono efficienti per lavorare sugli array, ma possono lavorare anche sugli scalari.
- Le funzioni contenute in *math* sono più efficienti **sugli scalari** rispetto alle funzioni Numpy.

```
>>> t=timeit.Timer('math.sin(math.pi)','import math')
>>> t.timeit()
0.20885155671521716
t=timeit.Timer('np.sin(np.pi)','import numpy as np')
>>> t.timeit()
1.3546336814836621
```

7 times faster

Efficienza di Calcolo



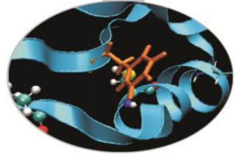
I cicli for non sono perfomanti in Python. Evitare di utilizzarli se non necessari!

```
def for_array(a):
    for i in xrange(a.shape[0]):
        for j in xrange(a.shape[1]):
                a[i,j]=3*a[i,j]+1

def no_loop(a):
    a=a*3+1
```

Tempi di calcolo:

for_array	on 1000 X 1000 array	= 3.52 s
no_loop	on 1000 X 1000 array	= 0.015 s

Efficienza di Calcolo



Per la stessa motivazione le strutture dati *array* risultano più efficienti delle *liste*.

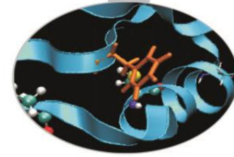
```
def somma_array(v1,v2):
        v=v1+v2
def somma_liste(l1,l2):
        l=[]
        for i in xrange(len(l1)):
                l.append(l1[i]+l2[i])
```

Tempo di calcolo:

somma_array(v1,v2) con 10^7 elementi = 0.05 s

somma_liste(l1,l2) con 10^7 elementi = 10.49 s

Cenni di vettorizzazione



I cicli *for* sono piuttosto lenti in Python. Uno dei vantaggi nell'utilizzo degli array consiste nel fatto che molte operazioni possono essere svolte evitando loop espliciti. Questo procedimento prende il nome di *vettorizzazione.*

Esempi:

VECTORIZED VERSION

```
a=np.arange(0,4*pi,0.1)
y=np.sin(a)*2
```

Anziché

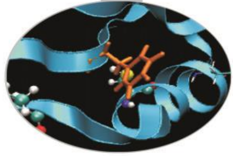
SCALAR VERSION

```
y=zeros(len(a))
for i in xrange(len(a)):
    y[i]=sin(a[i])*2
```

In alcuni casi è necessario vettorizzare esplicitamente l'algoritmo:

- Direttamente: vectorize(function) # piuttosto lento!
- Manualmente: con tecniche opportune, p.e. slicing

Cenni di vettorizzazione



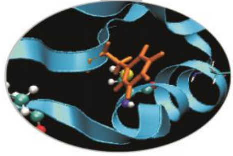
Solo in alcuni casi è possibile vettorizzare un'espressione:

ESEMPIO:

```
def func(x):
        if x<0: return 1
        else: return sin(x)
func(3)
func(array([1,-2,9]))
Traceback (most recent call last):
ValueError: The truth value of an array with more than one element is ambiguous. Use a.any() or a.all()
```

Versione scalare per lavorare con gli array:

Cenni di vettorizzazione

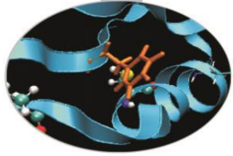


```
def func_NumPy(x):
        r = x.copy() # allocate result array
        for i in xrange(size(x)):
                if x[i] < 0:
                        r[i] = 0.0
                else:
                        r[i] = sin(x[i])
                return r
```

- Implementazione penalizzante: molto lenta in Python
- Funziona solo per array monodimensionali

Utilizzo dello statement `where`

Cenni di vettorizzazione



```
def f(x):
        if condition:
                x = <expression1>
        else:
                x = <expression2>
        return x
```

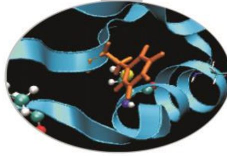
```
def f_vectorized(x):

        x1 = <expression1>
        x2 = <expression2>

        return np.where(condition, x1, x2)
```

Nel caso precedente

```
def func_NumPyV2(x):
        return np.where(x < 0, 0.0, sin(x))
```

- Evito l'utilizzo di cicli for
- Funziona su strutture dati multidimensionali

Cenni di vettorizzazione



Lo slicing di array è spesso utilizzato per la vettorizzazione di operazioni. In ambito scientifico, per esempio, per applicazioni che riguardano schemi alle differenze finite o processamento di immagini è comune incontrare schemi del tipo:

$$x_k = x_{k-1} + 2x_k + x_{k+1} \qquad k=1,2,\dots,n-1$$

Che possono essere trattati tramite funzioni scalari con

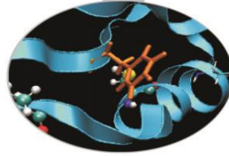
```
for i in xrange(1,len(x)-1):
    x[i]=x[i-1]+2*x[i]+x[i+1]
```

Oppure tramite vettorizzazione con:

```
x[1:n-1]=x[0:n-2]+2*x[1:n-1]+x[2:n]
```

CINECA SCAI
SuperComputing Applications and Innovation

Attributi e Metodi



L'object class *array* dispone di utili funzionalità implementate come propri metodi e attributi.

Attributi:

Gli attributi della classe *array* forniscono informazioni sulla struttura dell'array. Si ricordano:

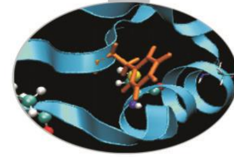
- *dtype* tipo di dato
- *flat* array di (rank-1)
- *itemsize e nbytes* bytes usati da ogni singolo elemento e dall'intero array
- *ndim* numero di dimensioni dell'array
- *size* numero totale di elementi nell'array
- *shape* forma dell'array

Metodi

I metodi built-in implementano funzionalità che operano direttamente sull'array. Si ricordano:

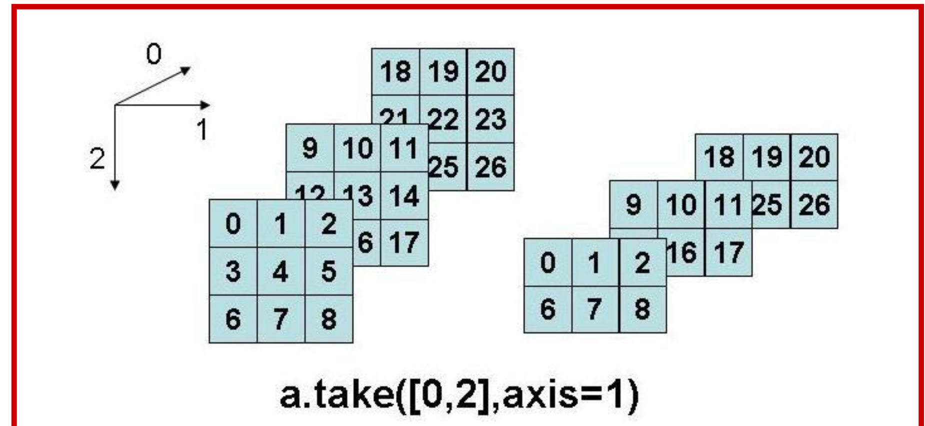
CINECA

Attributi e Metodi



take(indices, axis=None, out=None, mode='raise')

La funzione *take* estrapola un sottoarray costituito dagli elementi in posizione *indices* secondo l'asse *axis*



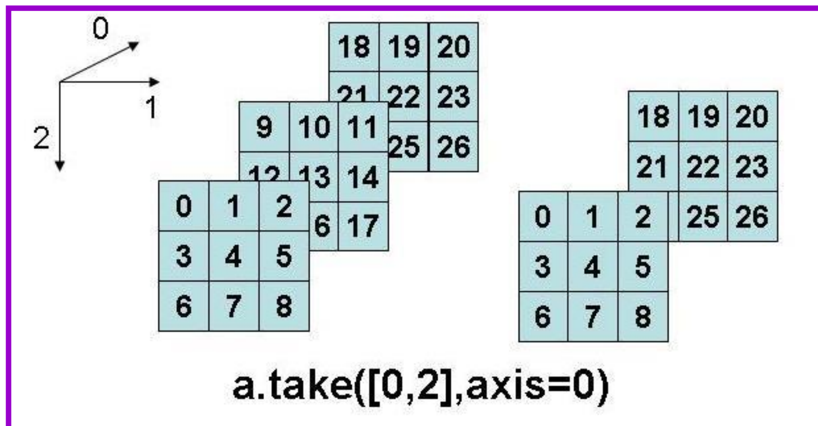
Esempio:

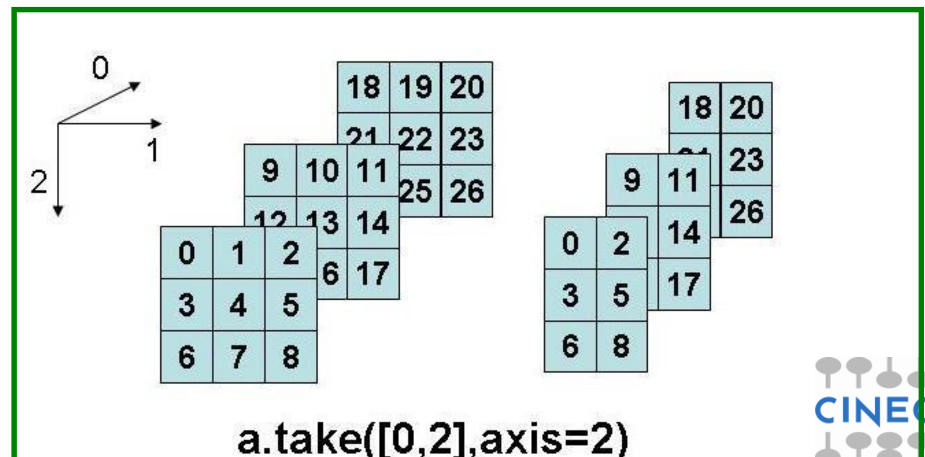
>>>a=arange(27)

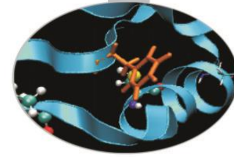
>>>a.resize(3,3,3)

>>>y=a.take([0,2],axis=1)

>>>y2=a.take([0,2],axis=2)



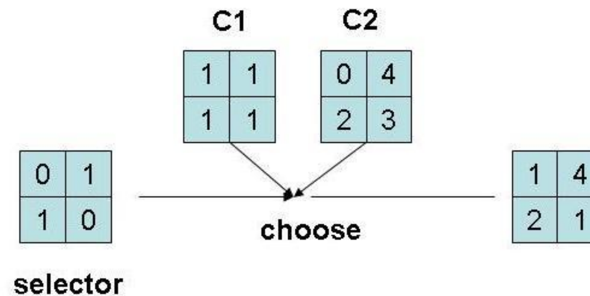




Attributi e Metodi

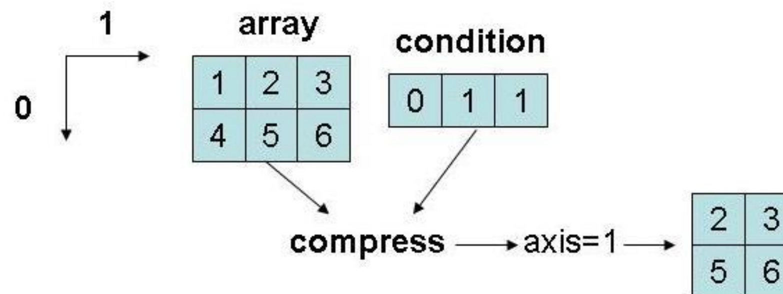
choose(choices, out=None, mode='raise')

La funzione *choose* restituisce un array costruito dalle *choices* sulla base di un filtro selettore.

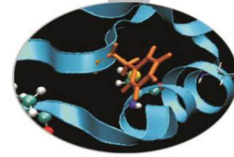


compress(condition,axis=None, out=None)

La funzione compress restituisce un array di elementi che soddisfano *condition* lungo l'asse axis



Attributi e Metodi



fill(value)

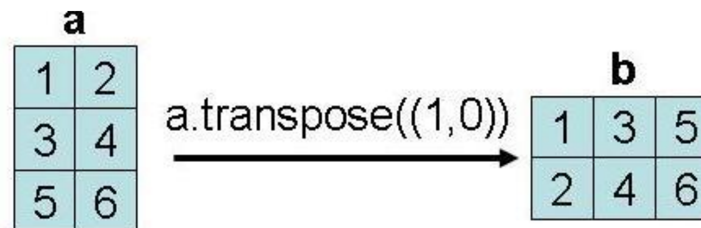
La funzione *fill* riempe l'array con il valore *value.*

sort(axis=-1, kind='quicksort', order=None)

La funzione *sort* riordina *inplace* i valori dell'array lungo *axis* con il metodo *kind.*

*transpose(*axis)*

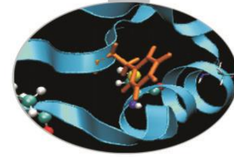
La funzione *transpose* traspone gli elementi dell'array secondo la permutazione specificata da *axis.*



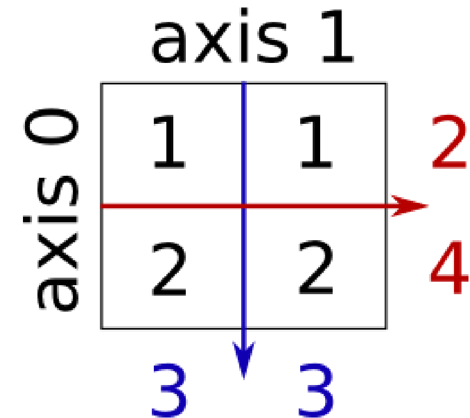
Per una lista completa di metodi e attributi si faccia riferimento a:

http://www.scipy.org/Numpy_Example_List

Operazioni di riduzione

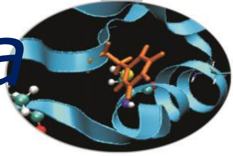


```
>>> x = np.array([[1, 1], [2, 2]])
>>> x.sum(axis=0)  # somma per colonna
array([3, 3])
>>> x.sum(axis=1)  # somma per riga
array([2, 4])
>>> x.sum()          # somma sull'intero array
6
```



- Tutte le altre operazioni di riduzione di array lavorano come la somma
- Sono disponibili operatori di riduzione di array di diverse tipologie:
- Statistica: ndarray.mean(), ndarray.std(), ndarray.median(), …
- Calcolo di estremi: ndarray.max(), ndarray.min(), ndarray.argmax() – ritorna l'indice dell'elemento massimo -, ndarray.argmin()…
- Logiche: ndarray.all() – ritorna True se tutti gli elementi dell'array, o lungo un asse, sono True – e ndarray.any() – ritorna True se almeno un elemento dell'array, o di un suo asse, è True

Valutare una funzione 2D su griglia



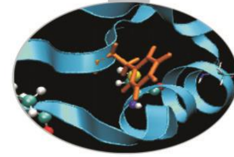
- Nelle scienze computazionali spesso capita di dover valutare una funzione su una griglia
- Data la griglia dei punti (x_i,y_i) con x_i = [0, 1, 2, 3] e y_i = [0, 1, 2, 3], vogliamo calcolare, per ciascun punto della griglia, il valore di una funzione f(x,y)
- Ingenuamente, potremmo pensare ad una soluzione NumPy come questa:

```
>>> x = np.arange(4)

>>> y = np.arange(4)

>>> def f(x,y):
...     return x**2+y

>>> f(x,y)
array([0, 2, 6, 12])
```

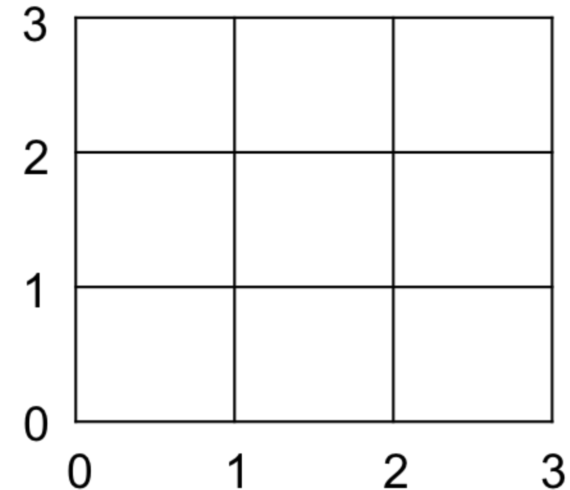
ma, il risultato è lungi da essere quello aspettato!

SCAI
SuperComputing Applications and Innovation

La soluzione: meshgrid

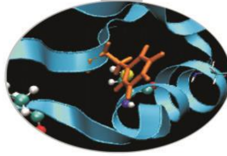


```
>>> x = np.arange(4)

>>> y = np.arange(4)

>>> xx, yy = np.meshgrid(x,y)

>>> xx
array([[0, 1, 2, 3],
       [0, 1, 2, 3],
       [0, 1, 2, 3],
       [0, 1, 2, 3]])

>>> yy
array([[0, 0, 0, 0],
       [1, 1, 1, 1],
       [2, 2, 2, 2],
       [3, 3, 3, 3]])

>>> def f(x,y):
...     return x**2+y
```




```
>>> f(xx,yy)
array([[ 0,  1,  4,  9],
       [ 1,  2,  5, 10],
       [ 2,  3,  6, 11],
       [ 3,  4,  7, 12]])
```

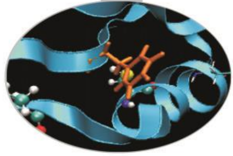
I/O con Array Numpy



- Si possono usare le funzioni `eval` e `repr` per scrivere e leggere in formato `ASCII` (ma solo se si usa `from numpy import *`)

```
a = linspace(1, 21, 21)
a.shape = (2,10)
# ASCII format:
file = open('tmp.dat', 'w')
file.write('Here is an array a:\n')
file.write(repr(a)) # dump string representation of a
file.close()
# load the array from file into b:
file = open('tmp.dat', 'r')
file.readline() # load the first line (a comment)
b = eval(file.read())
file.close()
```

I/O con Array Numpy



- L'I/O su file può essere anche gestito loadtxt e savetxt

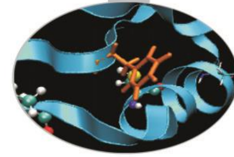
Lettura:

```
numpy.loadtxt(fname, dtype=<type
'float'>,  comments='#', delimiter=None, converters=None, skiprows=0,
usecols=None, unpack=False, ndmin=0)
```

Scrittura:

```
numpy.savetxt(fname, X, fmt='%.18e', delimiter='
', newline='\n', header='', footer='', comments='#)
```

I/O con Array Numpy

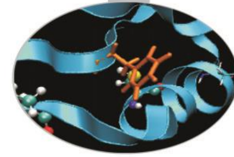


- Text.txt

```
Student Test1    Test2    Test3    Test4

Jane    98.3     94.2     95.3     91.3
Jon     47.2     49.1     54.2     34.7
Jim     84.2     85.3     94.1     76.4
```

```
>>>a = loadtxt('textfile.txt',skiprows=2,usecols=range(1,5))

>>>print a
[[ 98.3   94.2   95.3   91.3]
 [ 47.2   49.1   54.2   34.7]
 [ 84.2   85.3   94.1   76.4]]

>>>b = loadtxt('textfile.txt',skiprows=2,usecols=(1,-2))

>>> print b
[[ 98.3   95.3]
 [ 47.2   54.2]
 [ 84.2   94.1]]
```

I/O con Array Numpy

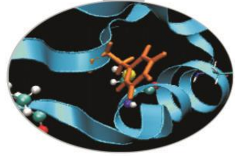


- Per lavorare con molti dati è più conveniente scrivere e leggere in formato binario.
- Il modo più semplice è usare il modulo *cPickle*

Esempio *salva_val_dump.py*

```
#Write to File
    # a1 and a2 are two arrays
    import cPickle
    file = open('tmp.dat', 'wb')
    file.write('This is the array a1:\n')
    cPickle.dump(a1, file)
    file.write('Here is another array a2:\n')
    cPickle.dump(a2, file)
    file.close()
```

I/O con Array Numpy

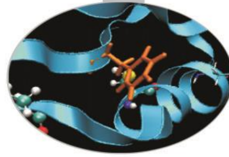


```
#Read from File
file = open('tmp.dat', 'rb')
file.readline() # swallow the initial comment line
b1 = cPickle.load(file)
file.readline() # swallow next comment line
b2 = cPickle.load(file)
file.close()
```

Il modulo cPickle garantisce I/O più rapido e un metodo di immagazzinamento dati a minor costo.

SuperComputing Applications and Innovation

I/O con Array Numpy



- NumPy prevede anche un proprio formato, non portabile, ma piuttosto efficiente nelle operazioni di I/O

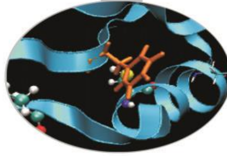
Scrittura e lettura binaria nel formato NumPy

```
>>> my_data = np.ones((3,3))

>>> np.save('myData.npy', my_data)

>>> r_data = np.load('myData.npy')
```

In Python è possibile eseguire operazioni di I/O nei formati binari più diffusi in ambito tecnico scientifico:

- Il supporto al formato HDF5 è disponibile nel modulo ad-hoc *h5py* (http://code.google.com/p/h5py/) ed in *PyTables*
- *SciPy* dispone del supporto per l'IO nei formati *NetCDF, Matlab e MatrixMarket*

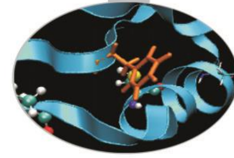
Matrix



- Numpy fornisce delle classi standard che ereditano da array e che usano la sua struttura interna.

- *Matrix* eredita da *ndarray* → stessi metodi e attributi
- La classe *Matrix* ha degli attributi speciali
  - .T trasposta
  - .H coniugata trasposta
  - .I inversa
  - .A array bidimensionale

- *Matrix* definisce oggetti esclusivamente bidimensionali
- *Matrix* ridefinisce l'operatore * per la moltiplicazione matriciale.
- Gli oggetti *Matrix* hanno la precedenza rispetto agli array semplici



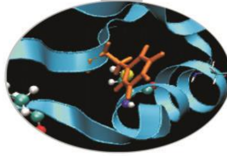
Matrix

Esempio *matrix_mult.py*

```
>>>import numpy as np
>>>a=np.arange(16)
>>>a=a.reshape((4,4))
>>>b=2*np.arange(16)
>>> b=b.reshape((4,4))
>>>c=a*b            #element by element
>>> ma=np.matrix(a)
>>> mb=np.matrix(b)
>>> mc=ma*mb       #matrixmul
>>>mmc=ma*b        #matrixmul
```

```
array([[  0,   2,   8,  18],
       [ 32,  50,  72,  98],
       [128, 162, 200, 242],
       [288, 338, 392, 450]])
```

```
matrix([[ 112,  124,  136,  148],
        [ 304,  348,  392,  436],
        [ 496,  572,  648,  724],
        [ 688,  796,  904, 1012]])
```



linalg

- Il modulo Numpy contiene oltre alla definizione dell’object array anche alcuni moduli.

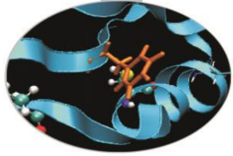
`linalg`

Il modulo `linalg` è un modulo che contiene alcuni algoritmi di algebra lineare all’interno di numpy.

Contiene funzioni per risolvere sistemi lineari, calcolare autovalori e autovettori, fattorizzazioni, inverse di matrici, prodotto matriciale.

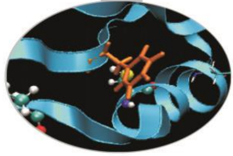
```
>>> dir(linalg)
['LinAlgError', 'Tester', '__builtins__', '__doc__', '__file__', '__name__', '__package__', '__path__', 'bench', 'cholesky', 'cond', 'det', 'eig', 'eigh', 'eigvals', 'eigvalsh', 'info', 'inv', 'lapack_lite', 'linalg', 'lstsq', 'matrix_power', 'matrix_rank', 'norm', 'pinv', 'qr', 'slogdet', 'solve', 'svd', 'tensorinv', 'tensorsolve', 'test']
```

linalg



Esempio:

```
A = np.zeros((10,10))   # arrays initialization
x = np.arange(10)/2.0
for i in range(10):
...   for j in range(10):
...      A[i,j] = 2.0 + float(i+1)/float(j+i+1)
b = np.dot(A, x)
y = np.linalg.solve(A, b) # A*y=b → y=x
# eigenvalues only:
>>> A_eigenvalues = np.linalg.eigvals(A)
# eigenvalues and eigenvectors:
>>> A_eigenvalues, A_eigenvectors = np.linalg.eig(A)
```

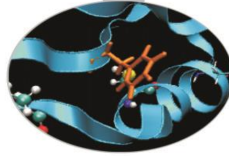


random

`random` è un altro modulo definito dentro numpy, per la generazione di numeri casuali

dir(random)

['RandomState', 'Tester', '__RandomState_ctor', '__all__', '__builtins__', '__doc__', '__file__', '__name__', '__package__', '__path__', 'bench', 'beta', 'binomial', 'bytes', 'chisquare', 'dirichlet', 'exponential', 'f', 'gamma', 'geometric', 'get_state', 'gumbel', 'hypergeometric', 'info', 'laplace', 'logistic', 'lognormal', 'logseries', 'mtrand', 'multinomial', 'multivariate_normal', 'negative_binomial', 'noncentral_chisquare', 'noncentral_f', 'normal', 'np', 'pareto', 'permutation', 'poisson', 'power', 'rand', 'randint', 'randn', 'random', 'random_integers', 'random_sample', 'ranf', 'rayleigh', 'sample', 'seed', 'set_state', 'shuffle', 'standard_cauchy', 'standard_exponential', 'standard_gamma', 'standard_normal', 'standard_t', 'test', 'triangular', 'uniform', 'vonmises', 'wald', 'weibull', 'zipf']



random

Generare un array di numeri casuali usando il modulo standard numpy è inefficiente, meglio usare il modulo numpy.random

```
>>> np.random.seed(100)
>>> x = np.random.random(4)
array([ 0.89132195,  0.20920212,  0.18532822,
0.10837689])
>>> y = np.random.uniform(0, 1, n) # n uniform
numbers in interval (0,1)
```

Distribuzione normale

```
>>> mean = 0.0; stdev = 1.0
>>> u = np.random.normal(mean, stdev, n)
```