Python Grundlagen

Julian Huber & Matthias Panny

Scientific Computing I

🎯 Lernziele

- Studierenden können Daten mit `numpy` auswerten
  - Zeitreihen
  - Matritzenmultiplikation
  - etc.
- Studierende können Daten mit `matplotlib` visualisieren

NumPy: Numeric Python

Warum ist `numpy` so wichtig für Python?

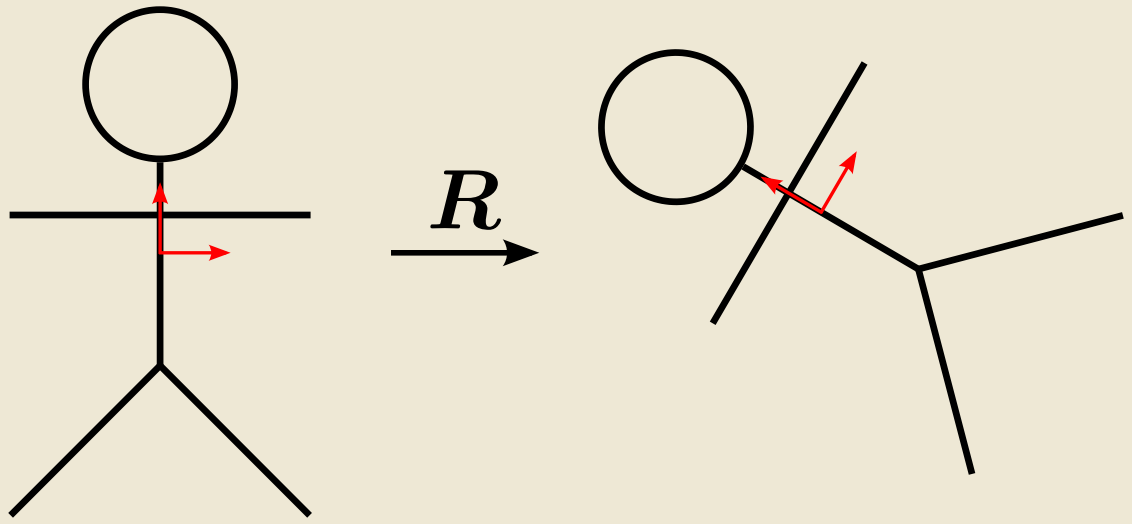
Motivation - Rotationsmatrix

Motivation - Rotationsmatrix

- um die aktuelle Position des Werkzeugs im Raum zu ermitteln, muss die Steuerung des Roboters ständig Matrixmultiplikationen durchführen
- wenn dies nicht schnell genug möglich ist, dann kann der Roboter nicht mehr präzise arbeiten

Drehung durch Matrixmultiplikation

$$\begin{bmatrix} x_{\text{neu}} \\ y_{\text{neu}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \boldsymbol{R}(\alpha) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$



Motivation - Rotationsmatrix

- Matrixmultiplikationen sind in der Regel sehr rechenintensiv
- Dies soll am Beispiel des Skalarproduktes verdeutlicht werden

Skalarprodukt als einfachste Matrixmultiplikation

$$\vec{a}\vec{b}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n$$

- Benötigt n Multiplikationen und $n - 1$ Additionen

✍️ Aufgabe

- Schreiben Sie ein Skript, das alle Zahlen zweier gleich langer Listen elementweise multipliziert und die Ergebnisse auf-addiert (entsprechend einer Matrixmultiplikation)

Ausgangslage - `matmul_start.py`

```python
import random
import time

#Set a random seed
random.seed(42)

# Define the range for random numbers
min_value = 1  # Minimum value
max_value = 100  # Maximum value

# Generate the two lists of 10_000_000 random numbers each
list1 = [random.randint(min_value, max_value) for _ in range(10000000)]
list2 = [random.randint(min_value, max_value) for _ in range(10000000)]

start_time = time.perf_counter()
# Continue here:
```

Lösung - Python native

- Timing mit `time.perf_counter()`
- `zip()` um zwei Listen gleichzeitig zu durchlaufen

Musterlösung - `matmul_solution_native.py`

```
# Start the timer
start_time = time.perf_counter()

result = 0

for first_number, second_number in zip(list1, list2):
    multiplication_result= first_number * second_number
    result = result + multiplication_result

print("--- %s seconds ---" % (time.perf_counter() - start_time))
print(result)
```

- Resultat: ca. 2.8 Sekunden

Lösung - Numpy

- Import des Pakets `numpy` → normalerweise mit Alias `np`
- Umwandeln der Listen in `numpy` Arrays
- `np.matmul()` bzw. `@` für die Matrixmultiplikation

Musterlösung - `matmul_solution_numpy.py`

```
# Paket für numerische Aufgaben im Python
import numpy as np

# Umwandlung der Listen in numpy arrays
# vgl. Konstruktor
array1 = np.array(list1, dtype=np.int64)
array2 = np.array(list2, dtype=np.int64)

# %%
start_time = time.perf_counter()

# Aufruf der Funktion für Matrixmultiplikation des Pakets numpy
result = np.matmul(array1, array2)
print("--- %s seconds ---" % (time.perf_counter() - start_time))
print(result)
```

- Resultat: ca. 0.025 Sekunden → ca. 112-fach schneller

Lösung - C

- Ergebniss lässt sich auch mit C-Implementierung vergleichen
- Üblicherweise noch schneller als `numpy`
- Mit Compiler-Flag `-O3` optimieren

Musterlösung - `matmul_solution_c.c`

```c
int main(){
    int amt = 10000000;

    int* list1 = malloc(sizeof(int) * amt);
    int* list2 = malloc(sizeof(int) * amt);
    if(list1 == NULL) { printf("Not enough memory!"); return -1; }
    if(list2 == NULL) { printf("Not enough memory!"); return -1; }

    for(int i = 0; i < amt; i++){
        list1[i] = (rand() % 100) + 1;
        list2[i] = (rand() % 100) + 1;
    }

    //Start matrix multiplication
    long result = 0;
    clock_t begin = clock();
    for(int i = 0; i < amt; i++){
        result += list1[i] * list2[i];
    }
    clock_t end = clock();

    double time_spent = (double)(end - begin) / CLOCKS_PER_SEC;
    printf("Execution time: %f\n Result is %ld\n", time_spent, result);

    free(list1); free(list2);
    return 0;
}
```

- Resultat: ca. 0.0065 Sekunden → ca. 4-fach schneller als `numpy`

NumPy: Numeric Python

Praktisches Arbeiten mit `numpy` in Python

numpy - Arrays

- Arbeitet mit (mehrdimensionalen) Arrays (`numpy.ndarray`)
- Objekt, das numerische Daten eines gemeinsamen Types (`dtype`) sammelt → unterscheidet sich dadurch von Listen
- Klasse bietet verschiedene Attribute und Methoden an

Beispiel

```
# Zweidimensionales Array
a = np.array([[1, 2, 3, 4], [5, 6, 7, 8], [9, 10, 11, 12]])

# Form des Arrays
a.shape
#> (3,4)

# Typ der Zahlen im Array
a.dtype
#> dtype('int32')

# Zugriff auf erste Zeile
print(a[0])
#> array([1 2 3 4])

# Zugriff auf zweites Element der ersten Zeile
print(a[0][1])
#> 2
```

numpy - Erstellen von Arrays

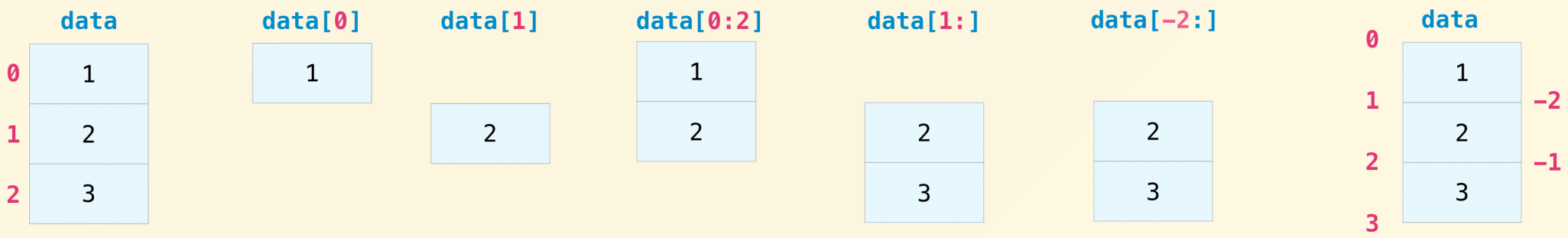
- Können direkt aus Python `list`-Objekten erstellt werden
- Weitere standardisierte Methoden zur Erstellung von Arrays als Funktionen in `numpy` enthalten

Beispiel

```
np.zeros(2)
#> array([0., 0.])

np.arange(4)
#> array([0, 1, 2, 3]

np.linspace(0, 10, num=5)
#> array([ 0., 2.5, 5., 7.5, 10.])

np.eye(3)
#>array([[1., 0., 0.],
#>       [0., 1., 0.],
#>       [0., 0., 1.]])

np.logspace(1, 3, num=5)
#> array([10., 31.6227766, 100., 316.22776602, 1000.])

np.empty([2, 2]) # uninitialisierte Werte --> wie in C(++)
#> array([[ -9.74499359e+001,   6.69583040e-309],
#>        [  2.13182611e-314,   3.06959433e-309]])
```

numpy - Slicing

- das Auswählen von Teilbereichen (Slices) funktioniert analog zu Listen



- Filtern ist ebenfalls durch die Eingabe von Filter-Kriteria in die eckigen Klammern möglich
- Dabei beziehen sich die Zahlen auf die Werte im Array und nicht auf die Indexpositionen

Beispiel - Filtern

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

c = a[(a > 2) & (a < 11)]
print(c)
#> [ 3  4  5  6  7  8  9 10]
```

Bildquelle

numpy - Nützliche Funktionen/Methoden

- Viele Funktionen sind direkt als Methoden der `numpy.ndarray`-Klasse verfügbar
- Andere als Funktionen des `numpy`-Pakets
- Teils sind beide Varianten verfügbar → Methode operiert direkt auf dem Array, Funktion erstellt neues Array als Kopie

Weitere nützliche Methoden

```
data = np.array([1, 2, -3, 10, 15, -20])
data.max()
#> 15.0
data.min()
#> -20.0
data.sum()
#> 5.0
data.mean()
#> 0.8333333333333334
```

Weitere nützliche Funktionen

```
np.argmax(data)
#> 4
np.resize(data, (2, 3))
#>array([[  1,   2,  -3],
#>       [ 10,  15, -20]])
```

numpy - math. Operationen

- Die meisten Operationen der linearen Algebra sind für `numpy` Arrays implementiert
  - Multiplikation mit einem Skalar: `scalar * matrix`
  - Elementweise Addition zweier gleich dimensionaler Matritzen `matrix + matrix`
  - Elementweises Anwenden von Funktionen `np.square(...)`

Arbeiten mit Formeln

$$\hat{\vec{y}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \quad \text{und} \quad \vec{y} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$$

$$MeanSquaredError = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - y_i)^2$$

predictions labels

```
error = (1/3) * np.sum(np.square( | 1 | - | 1 | ))
                                  | 1 |   | 2 |
                                  | 1 |   | 3 |
```

Bildquelle

numpy - Broadcasting

- `numpy` ermöglicht Operationen auf Arrays unterschiedlicher Form
- Arrays werden automatisch erweitert, um die Operation durchzuführen

Beispiel

```
a = np.array([1, 2, 3])
b = 2
print(a * b)
#> array([2, 4, 6])
```

- Funktioniert auch in der Anwendung auf Funktionen → in `f(x)` wird der Skalar `b` "ausgedehnt" auf die Größe von `a`

Beispiel

```
def f(a):
  b = 1
  return a + b

arr = np.array([1, 2, 3, 4, 5])
print(f(arr))
```

✍️ Aufgabe

- Wir wollen nun ein Beispiel aus der Mechatronik mit `numpy` lösen
  - Die Übertragungsfunktion $H(\omega)$ eines RC-Tiefpassfilters soll bestimmt werden
  - Der Frequenzgang soll mit `numpy` berechnet werden
  - Der Frequenzgang soll geplottet werden → muss den Anforderungen an einen wissenschaftlichen Plot entsprechen
  - 🤓 Fehlerfortpflanzung für Bauteiltoleranzen (R & C) soll berechnet werden

Start - `numpy_example_filters_inclass_start.ipynb`

- Auf dieses Notebook soll aufgebaut werden

Vollständige Musterlösung - `numpy_example_filters.ipynb`

- Klasse für RC-Tiefpassfilter
- Berechnung des Frequenzgangs
- etc.

Matplotlib: Visualization with Python

Motivation - Wissenschaftliche Plots

- Wir wollen in der Lage sein Daten zu visualiseren
- Dabei wollen wir uns an wissenschaftlichen Standards orientieren
  → z.B.: für Laborberichte, BA-Arbeiten, etc.
- Hier gibt es einige Regeln, die es zu beachten gilt → viel davon schon automatisch mit `matplotlib` umsetzbar

Leitfaden: Zitieren und Abbildungen

- Achsen mit Einheiten beschriften ($10.0\,\mathrm{mm}$)
- Transparenter oder weißer Hintergrund
- Unterschiedliche Linien auch in schwarz-weiß Kopie unterscheidbar (z.B. durch gestrichelte Linien)
- Vektorgrafik (nicht verpixelt)

Matplotlib - Erster Plot

- `matplotlib` Plots sind aus "Bausteinen" (siehe rechts) aufgebaut

Beispiel `scatter.py`

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# generate data to be plotted
x = np.arange(0, 10, 0.1)
y = np.random.rand(100)

# create figure and axis
# to plot on
fig, ax = plt.subplots()

ax.plot(
  x, #data to plot
  y, #data to plot
  marker='o', #opt. marker style
  linestyle='None' #opt. linestyle
)
plt.show() #actually show it
```

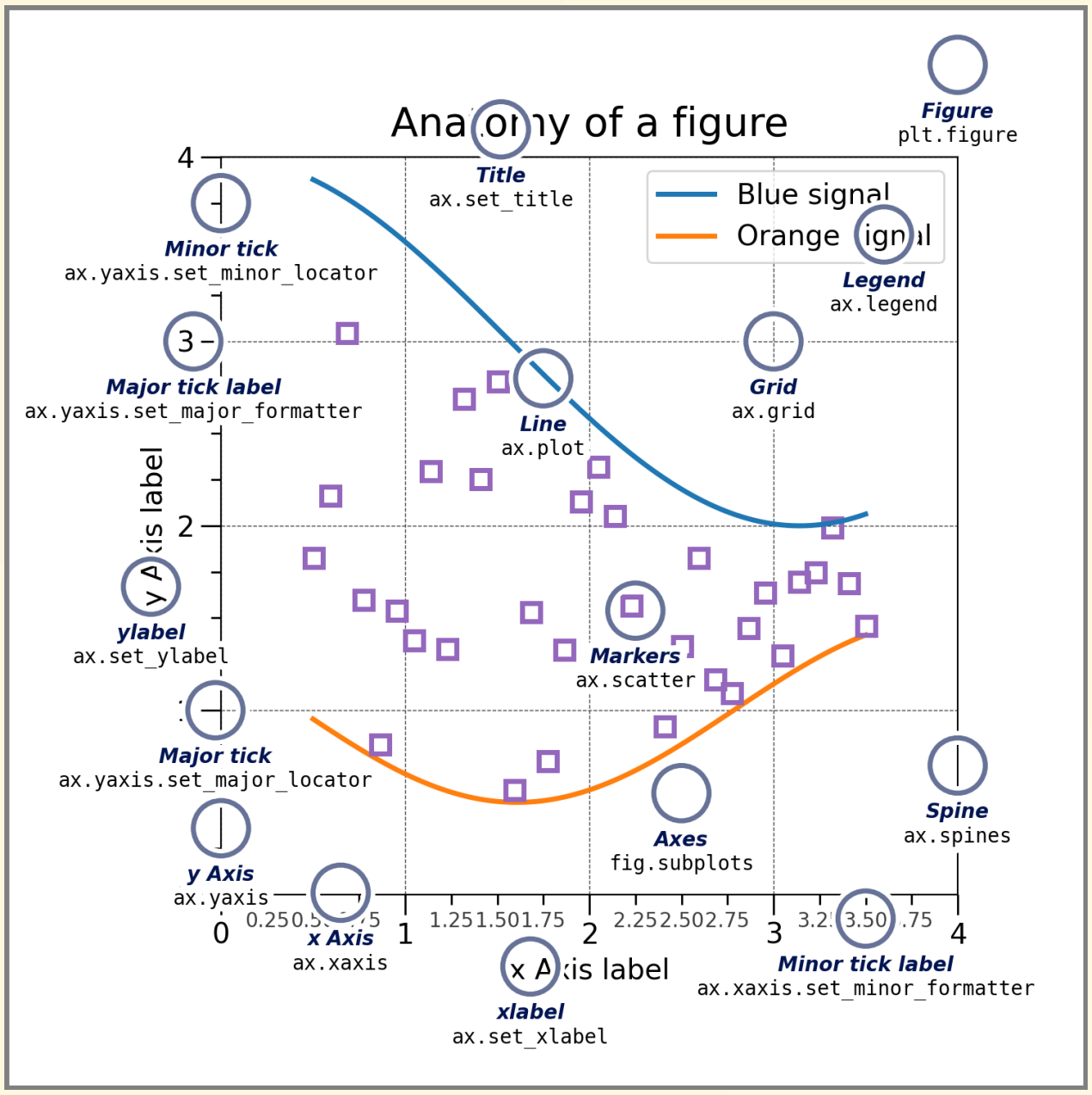


Bild: matplotlib.org

Matplotlib - Cheat Sheets

- Matplotlib Cheatsheets bzw. Examples/Cheat Sheets

Matplotlib for beginners

Matplotlib is a library for making 2D plots in Python. It is designed with the philosophy that you should be able to create simple plots with just a few commands:

1 Initialize

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

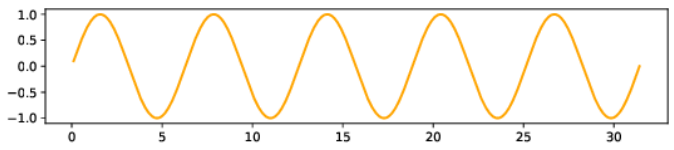
2 Prepare

```
X = np.linspace(0, 4*np.pi, 1000)
Y = np.sin(X)
```

3 Render

```
fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(X, Y)
plt.show()
```

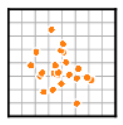
4 Observe



Choose

Matplotlib offers several kind of plots (see Gallery):

```
X = np.random.uniform(0, 1, 100)
Y = np.random.uniform(0, 1, 100)
ax.scatter(X, Y)
```



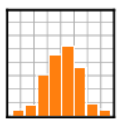
```
X = np.arange(10)
Y = np.random.uniform(1, 10, 10)
ax.bar(X, Y)
```

```
Z = np.random.uniform(0, 1, (8,8))

ax.imshow(Z)
```

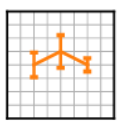
```
Z = np.random.uniform(0, 1, (8,8))

ax.contourf(Z)
```

```
Z = np.random.uniform(0, 1, 4)

ax.pie(Z)
```

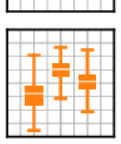
```
Z = np.random.normal(0, 1, 100)

ax.hist(Z)
```



```
X = np.arange(5)
Y = np.random.uniform(0, 1, 5)
ax.errorbar(X, Y, Y/4)
```



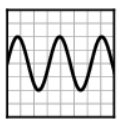
```
Z = np.random.normal(0, 1, (100,3))

ax.boxplot(Z)
```



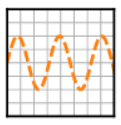
Tweak

You can modify pretty much anything in a plot, including limits, colors, markers, line width and styles, ticks and ticks labels, titles, etc.

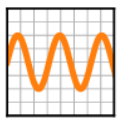
```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, color="black")
```



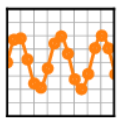
```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, linestyle="--")
```



```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, linewidth=5)
```



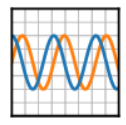
```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y = np.sin(X)
ax.plot(X, Y, marker="o")
```



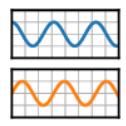
Organize

You can plot several data on the the same figure, but you can also split a figure in several subplots (named *Axes*):

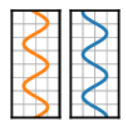
```
X = np.linspace(0, 10, 100)
Y1, Y2 = np.sin(X), np.cos(X)
ax.plot(X, Y1, X, Y2)
```



```
fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2,1)
ax1.plot(X, Y1, color="C1")
ax2.plot(X, Y2, color="C0")
```

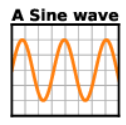


```
fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1,2)
ax1.plot(Y1, X, color="C1")
ax2.plot(Y2, X, color="C0")
```

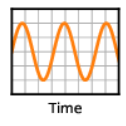


Label (everything)

```
ax.plot(X, Y)
fig.suptitle(None)
ax.set_title("A Sine wave")
```




```
ax.plot(X, Y)
ax.set_ylabel(None)
ax.set_xlabel("Time")
```



Explore

Figures are shown with a graphical user interface that allows to zoom and pan the figure, to navigate between the different views and to show the value under the mouse.

Save (bitmap or vector format)

```
fig.savefig("my-first-figure.png", dpi=300)
fig.savefig("my-first-figure.pdf")
```

Matplotlib - Styling

- `matplotlib` bietet viele Möglichkeiten zur Anpassung der Plots

```
ax.plot(
    x, y,
    color='g',
    marker='o',
    markersize=12,
    markevery=25,
    markerfacecolor='b',
    markeredgecolor='r',
    linestyle='--',
    linewidth=2,
    label="Datenpunkte"
)
```

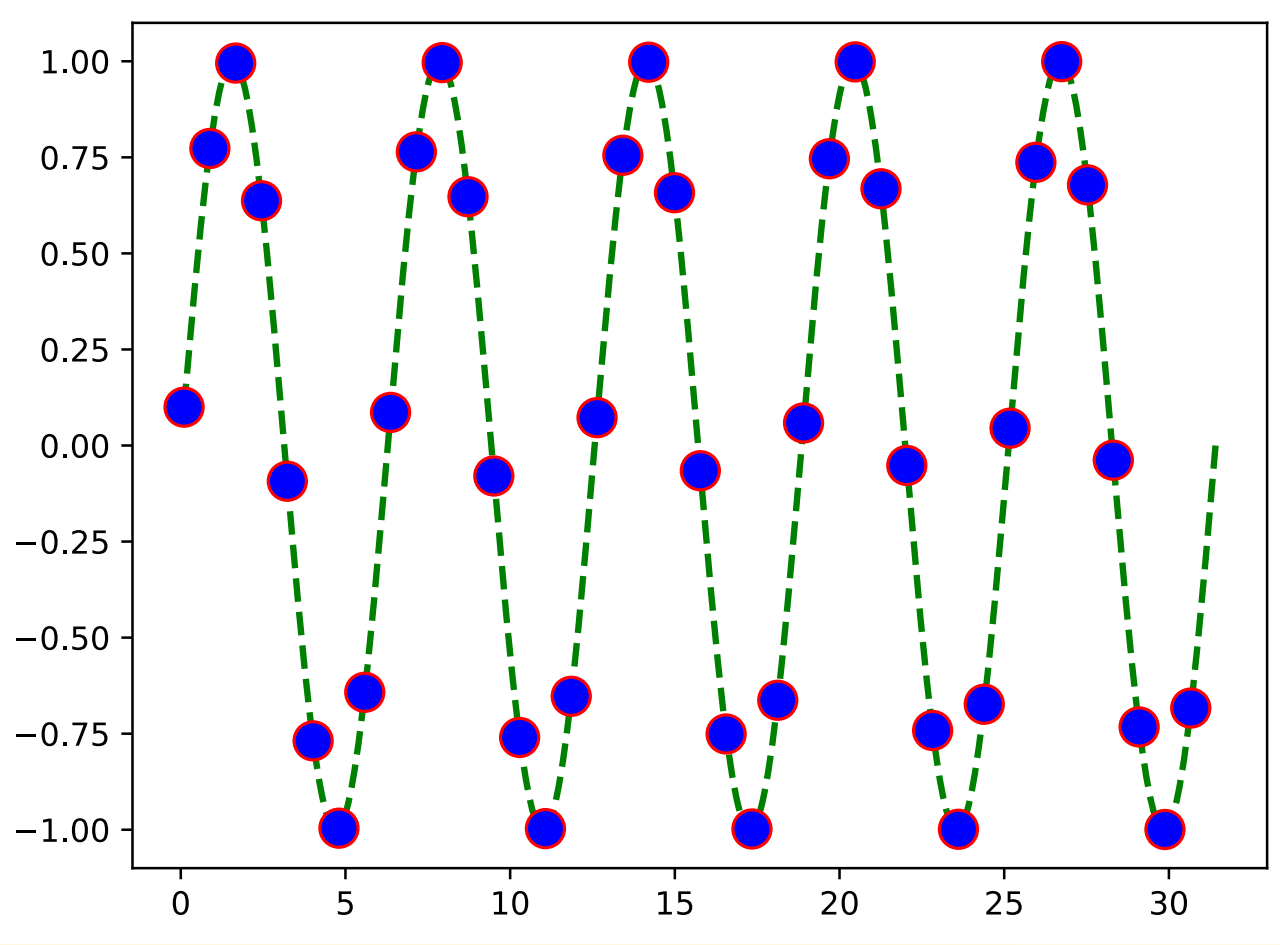
- `color`: Gibt Farbe an
- `marker` & `markersize`: Geben Form & Größe der Marker an
- `markevery`: Gibt an, wie oft ein Marker gezeichnet wird
- `markerfacecolor` & `markeredgecolor`: Farbe des Markers
- `linestyle` & `linewidth`: Geben Stil & Breite der Linie an
- `label`: Legendeneintrag für dieses Element

Matplotlib - Styling

- Beispiel von oben

Beispiel - styling.py

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

x = np.linspace(0.1, 10*np.pi, 1e3)
y = np.sin(x)

 #create figure and axis
fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(
    x, y,
    color='g',
    marker='o',
    markersize=12,
    markevery=25,
    markerfacecolor='b',
    markeredgecolor='r',
    linestyle='--',
    linewidth=2,
    label="Datenpunkte"
)
plt.tight_layout()
plt.show()
#plt.savefig("plot.svg")
```



Matplotlib - Farbdarstellung

- Farben können in verschiedenen Formaten angegeben werden
- Eingebaute (Grund-)farben über einzelne Buchstaben verwendbar:
  - `color = b`: blau
  - `color = g`: grün
  - `color = k`: schwarz
  - `color = "mediumseagreen"`: ■ → Liste aller Farben
- Grautöne als String im Bereich von 0-1 → `color = "0.75"`
- Allgemeine Farben als Hex-Code oder RGB-Tupel im Bereich [0, 1]
  - `color = "#eeefff"`
  - `color = [0.1, 0.3, 0.9]`

Matplotlib - Farbdarstellung

Beispiel: MCI-Blau

- Gewöhnliches RGB-Tupel wie in z.B. GIMP oder Photoshop → `color = [28, 69, 113]` → sind mit 8-Bit Farbtiefe kodiert
- Übliche RGB-Farbwerte umrechnen → `color = [28/255, 69/255, 113/255]`
- Angabe für matplotlib: `color = [0.11, 0.27, 0.44]`

Matplotlib - Bildformate

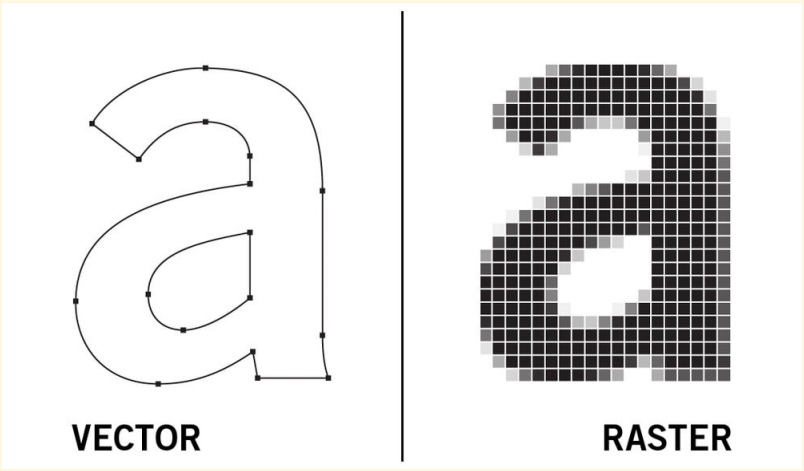
Rastergrafiken

- Bild wird über Raster von einzelnen Pixeln dargestellt → beim Vergrößern muss interpoliert werden → siehr unprofessionell aus
- Übliche Rasterformate: `*.bmp`, `*.png`, `*.jpg`, `*.gif`, `*.tiff`, etc.

Vektorgrafiken

- Speichern Bilder auf der Grundlage von Regeln (normalerweise in einer Auszeichnungssprache) → Linien, Polygone, etc. werden definiert → kann beliebig vergrößert werden
- Übliche Vektorformate: `*.pdf`, `*.svg`, `*.eps`, etc.

```
# Beispiel für das Speichern als Vektorgrafik
plt.savefig("test.pdf")
```



Alternativen zu Matplotlib

- In Python gibt es drei große Module, die häufig zur Erstellung von Diagrammen verwendet werden:

Module zur Visualisierung

- matplotlib:
  - wirkt etwas altmodisch, komplizierte Befehle, wenig aufgeräumt
- seaborn:
  - baut auf matplotlib auf, man erhält schneller schöne Graphen, basierend auf `"tidy data"` Prinzipien
- plotly:
  - modernes Design, ermöglicht interaktive Grafiken

 Aufgabe

- Um das Verständnis für `matplotlib` weiter zu vertiefen kann das hier verlinkte Notebook bearbeitet werden.
- Notebook: matplotlib - Daten visuell darstellen

🏆 Hausübung

- Erweitern Sie die Datenverarbeitungs-Pipeline aus der letzten Hausübung um die Möglichkeit Polynome auf die Daten zu fitten
- Nutzen Sie hierzu NICHT die direkten Funktionen von `numpy` sondern implementieren Sie die Berechnung selbst → dies ist durch aufstellen & lösen eines linearen Gleichungssystems möglich
- Plotten Sie anschließend die Datenpunkte und das gefittete Polynom