École Doctorale SMI Module "Calcul Scientique et Optimisation" 7 – 11 avril 2014

Calcul Scientifique avec



Jean-Luc Charles
Arts & Métiers ParisTech, 12M















- ▶ Python ne propose de base que le type list, conteneur dynamique hétérogène puissant, mais pas orienté calcul numérique.
- ▶ Le module **numpy** propose un ensemble de classes, d'objets et de fonctions dédiés aux calculs numériques.
- ▶ Le module scipy utilise numpy pour proposer une "boîte" à outil de calcul scientifique très complète.
- L'utilisation des modules numériques et de tracé (numpy, scipy et matplolib) avec l'IDE spyder fournit une solution puissante pour le calcul scientifique.
- ► Les docs complètes *Numpy Reference Guide*, *Numpy User Guide* et *Scipy Reference Guide* sont sur http://docs.scipy.org/doc/





- ▶ Le module **numpy** propose un ensemble de classes, d'objets et de fonctions dédiés aux calculs numériques :
 - ▷ classe **ndarray** (*N dimensional array*): tableaux homogènes multi-dimensionnels;
 - > numpy.linalg : un module d'algèbre linéaire basique ;
 - numpy.random : un module pour les générateurs aléatoires, ;
 - ▷ numpy.fft : un module basique de calculs FFT (Fast Fourier Transform).
- Le site web numpy est http://www.numpy.org.

 La doc en ligne de numpy est http://docs.scipy.org/doc/numpy-1.7.0/reference/.



► Création d'objets ndarray :

▶ La fonction array convertit un objet list en objet ndarray :



▶ Les fonctions numpy zeros et ones

▶ Les fonctions linspace, logspace créent des vecteurs de float :

```
>>> np.linspace(0, 10, 5)  # start, stop, number of points

array([ 0., 2.5, 5., 7.5, 10.])

>>> np.logspace(1, 2, 4)  # 4 points between 10**1 and 10**2

array([ 10., 21.5443469, 46.41588834, 100.])

>>> np.logspace(1, 2, 4, base=2)  # 4 points between 2**1 and 2**2

array([ 2. , 2.5198421, 3.1748021, 4.])
```

▶ Les fonctions numpy eye et identity :

```
>>> np.eye(3)
array([[ 1., 0., 0.],
       [0., 1., 0.],
       [0., 0., 1.]])
\rightarrow \rightarrow np.eye(3,k=1)
array([[ 0., 1., 0.],
       [0., 0., 1.],
       [0., 0., 0.]])
>>> np.eye(3,k=-1)
array([[ 0., 0., 0.],
       [1., 0., 0.],
       [0., 1., 0.]])
>>> np.identity(3)
array([[ 1., 0., 0.],
       [0., 1., 0.],
       [0., 0., 1.]])
```





Copies et références d'objets ndarray

>>> m2 = np.array([[1., 2., 3.], [4., 5., 6.]])

```
>>> m3 = m2

>>> id(m2), id(m3), m2 is m3

(20263504, 20263504, True)

>>> m3[1,1] = -1.; print m3

[[ 1. 2. 3.]

[ 3. -1. 5.]]

>>> print m2

[[ 1. 2. 3.]

[ 3. -1. 5.]]

>>> m4 = m2.copy()

>>> id(m2), id(m4), m4 is m2

(20263504, 21073360, False)

>>> m4[1,1] = -2.; print m4

[[ 1. 2. 3.]

[ 3. -2. 5.]]
```

► L'affectation de m3 par l'opérateur = crée une **référence** sur m2, pas une **copie** de m2

▶ Il faut utiliser explicitement la méthode copie de la classe ndarray pour obtenir une copie (*deep copy*)

>>> print m2
[[1. 2. 3.]
[3. -1. 5.]]

Les attributs de la classe ndarray :

```
>>> m3 = np.array([[1, 2, 3],[4, 5, 6]]) # list of lists gives matrix
>>> print m3
ΓΓ1 2 3 T
 Γ4 5 611
>>> m.dtvpe
                 # the element type
dtype('int64')
>>> m.shape
                 # the length of the array along each dimension
(2, 3)
                 # 2 lines, 3 columns
>>> m.itemsize
                 # the element size in bytes element type
                 # integer of 8 bytes (64 bits)
>>> m.size
                 # the number of elements
6
>>> m.ndim
                 # the number dimensions (axes)
>>> m.nbytes
                 # the number of bytes used by array data
                 # 6 elements of 8 bytes each
48
```



La méthode tolist crée un objet list, copie de l'objet ndarray :

```
>>> m3.tolist()
[[1, 2, 3], [4, 5, 6]]
>>> L1 = m3.tolist()
>>> type(L1)
<type 'list'>
```

▶ La méthode copy permet de copier (*deep copy*) un objet ndarray :

```
>>> c = m.copy()

>>> print c

[[1 2 3]

[4 5 6]]

>>> id(m), id(c), c is m

(51720800, 69723584, False)
```



▶ Opérations élémentaires avec les ndarray :

```
>>> a, b = np.array([1, 2, 3, 4]), np.array([2, 3, 4, 5])
>>> a+b
array([3, 5, 7, 9])
>>> a-b
array([-1, -1, -1, -1])
>>> a**2
array([ 1, 4, 9, 16])
>>> 4*a, a*4
(array([4, 8, 12, 16]), array([4, 8, 12, 16]))
>>> a*b
array([ 2, 6, 12, 20])
>>> A=np.array([a,b])
>>> A
array([[1, 2, 3, 4],
       [2, 3, 4, 5]])
>>> A*A # * fait une multiplication terme à terme
array([[ 1, 4, 9, 16],
       [4, 9, 16, 25]
```



▶ Opérations élémentaires avec les ndarray :

```
>>> a < 3
array([ True, True, False, False], dtype=bool)
>>> a <= 3
array([ True, True, True, False], dtype=bool)
>>> a==2
array([False, True, False, False], dtype=bool)
>>> a <= 3
array([ True, True, True, False], dtype=bool)
>>> (a <= 3).all()
False
>>> (a <= 3).anv()
True
>>> yes, no = np.ones_like(a), np.zeros_like(a)
>>> yes, no
(array([1, 1, 1, 1]), array([0, 0, 0, 0]))
>>> np.where(a % 3 == 0, yes, no)
array([0, 0, 1, 0])
```



▶ Méthodes utiles de la classe ndarray :

```
\rightarrow \rightarrow m = np.linspace(1,12,12).reshape((3,4)); print m
[[ 1, 2, 3, 4.]
Γ 5. 6. 7. 8.1
 Γ 9. 10. 11. 12.]]
>>> m.sum(), m.min(), m.max()
                                 # somme, max, min de tous les éléments
(78.0, 1.0, 12.)
>>> m.sum(axis=0)
                                 # somme des lignes
array([ 15., 18., 21., 24.])
>>> m.min(axis=0)
                                 # min des lignes
array([ 1., 2., 3., 4.])
>>> m.cumsum(axis=0)
                                 # somme cumulée des lignes
array([[ 1., 2., 3., 4.],
       [ 6., 8., 10., 12.],
       [ 15., 18., 21., 24.]])
>>> m.cumsum(axis=1)
                                    # somme cumulée des colonnes
array([[ 1., 3., 6., 10.],
       Γ 5.. 11.. 18.. 26.].
       [ 9., 19., 30., 42.]])
```



Les Ufunction (*Universal functions*)

- Les ufunc sont des fonctions mathématiques courantes (sin, cos, exp...):

 - ⊳ qui renvoient l'objet ndarray résultant.

```
\rightarrow \rightarrow m = np.linspace(1,6,6).reshape((2,3)); print m
ΓΓ 1. 2. 3. ]
Γ 4. 5. 6.11
>>> s = np.sqrt(m); s
array([[ 1. , 1.41421356, 1.73205081],
       [ 2. , 2.23606798, 2.44948974]])
>>> np.exp(m)
array([[ 2.71828183, 7.3890561, 20.08553692],
       [ 54.59815003, 148.4131591, 403.42879349]])
>>> m = np.linspace(30,180,6).reshape((2,3)); print m
ΓΓ 30. 60. 90. ]
 Γ 120, 150, 180, 7
>>> np.radians(m)
array([[ 0.52359878, 1.04719755, 1.57079633],
       [ 2.0943951 , 2.61799388, 3.14159265]])
>>> np.cos(np.radians(m))
array([[ 8.66025404e-01, 5.00000000e-01, 6.12323400e-17],
       [-5.00000000e-01, -8.66025404e-01, -1.00000000e+00]]
```

Algébre linéaire avec numpy et numpy.linalg

- ► La doc en ligne du module numpy.linalg est sur http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.linalg.html
- Quelques exemples :
 - ▶ np.dot multiplication matricielle
 - ► np.inner produit scalaire
 - Inp.diag création matrice diagonale
 - ► np.transpose matrice transposée
 - np.linalg.det déterminant de la matrice
 - ▶ np.linalg.inv inverse de la matrice
 - ► np.linalg.solve résolution du sytème linéaire A x = B
 - ► np.linalg.eig valeurs propres, vecteurs propres
 - ► np.linalg.eigvals valeurs propres



▲ Produit terme à terme et produit matriciel :

$$\mathbf{R} \, = \, \mathrm{np.dot}(\mathbf{A} \, , \, \, \mathbf{B}) \, \Longleftrightarrow \, R[i,j] = \sum_k A[i,k] \; B[k,j]$$



▲ Produit interne :

```
\mathbf{R} \, = \, \mathrm{np.inner}(\mathbf{A}, \; \mathbf{B}) \, \Longleftrightarrow \, R[i,j] = \sum_k A[i,k] \; B[j,k]
```



▲ Matrices diagonales :



▲ importation de tout numpy dans l'espace de nom courant :

```
>>> from numpy import *
>>> from numpy.linalg import *
\rightarrow \rightarrow m = random.random(4).reshape((2,2)); m
array([[ 0.57401918, 0.64990241],
       [ 0.02683847, 0.01328225]])
>>> print det(m)
-0.00981811548021
>>> m.transpose() # ne modifie pas m
array([[ 0.57401918, 0.02683847],
       [ 0.64990241, 0.01328225]])
>>> mi = inv(m); print mi
[[ -1.35283131 66.19421103]
 [ 2.73356598 -58.46531103]]
>>> residu = dot(m, mi) - identity(2); print residu
ΓΓ 0.00000000e+00 -7.10542736e-15]
 [ 0.00000000e+00 -1.11022302e-16]]
>>> norm(residu)
7.1062946664058918e-15
```



▲ importation de numpy et numpy.linalg avec des alias :

```
>>> import numpy as np
>>> import numpy.linalg as npl
>>> m = np.random.random(4).reshape((2,2)); m
array([[ 0.29983518, 0.24003911],
       [ 0.63791418, 0.97157407]])
>>> print npl.det(m)
0.138187733609
>>> m.transpose()
array([[ 0.29983518, 0.63791418],
       [ 0.24003911, 0.97157407]])
>>> mi = npl.inv(m); print mi
[[ 7.03082713 -1.73705074]
 Γ-4.6162866 2.16976696]]
>>> residu = np.dot(m, mi) - np.identity(2); print residu
[[ 4.44089210e-16 0.00000000e+00]
 [ 0.00000000e+00 0.00000000e+00]]
>>> npl.norm(residu)
4.4408920985006262e-16
```



▲ Algébre linéaire avec numpy :



▼ Valeurs propres, vecteurs propres :

```
>>> npl.eigvals(m)
array([ 1.63893416+0.j , 0.26596997+0.5535386j, 0.26596997-0.5535386j])
>>> m = np.random.random(9).reshape((3,3)); m
array([[ 0.83998644, 0.24385328, 0.5285008 ],
       [0.79324559, 0.42156439, 0.67233731],
       [0.06364909, 0.97863566, 0.80485252]])
>>> vvp = eig(m)
>>> vvp[0]
array([-0.03068944, 0.30647658, 1.7906162])
>>> vvp[1]
array([[-0.27711595, -0.5789238, 0.5012003],
       [-0.61339946, -0.33980812, 0.59770115],
       [0.73955923, 0.74120016, 0.62574084]]
>>> v0, v1, v2 = vvp[1][:,0], vvp[1][:,1], vvp[1][:,2]
>>> dot(m, v0) - vvp[0][0]*v0
array([ -2.08166817e-17, 4.51028104e-17, -4.16333634e-17])
>>> dot(m, v1) - vvp[0][1]*v1
array([ 1.94289029e-16, 8.32667268e-17, -1.66533454e-16])
>>> dot(m, v2) - vvp[0][2]*v2
array([ -6.66133815e-16, -2.22044605e-16, 0.00000000e+00])
```



- ► La doc en ligne du module numpy.random est disponible sur http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.random.html
- Exemples de générateurs aléatoires uniformes :
 - ▶ np.random.rand tirage uniforme continu dans [0,1[
 - ▶ np.random.random tirage uniforme continu dans [0,1[
 - ▶ np.random.randint tirage uniforme discret dans [a, b[
 - ▶ np.random.random_integers tirage uniforme discret dans [a, b]
 - ▶ np.random.randn tirage gaussien dans [0,1[
- ▶ Générateurs aléatoires suivant des distributions classiques
 - ▶ vaste catalogue (beta, binomial, chisquare, dirichlet, gamma...)



▲ Générateurs aléatoires (loi uniforme) :

```
>>> import numpy.random as npr
>>> npr.rand(3,2)  # matrice 3X2, tirages uniformes dans [0,1[
array([[ 0.14022471, 0.96360618],
       [0.37601032, 0.25528411],
       [ 0.49313049, 0.94909878]])
>>> np.random.randint(5,10, size=10)
array([6, 6, 8, 6, 6, 6, 5, 9, 7, 5])
>>> np.random.randint(5, size=(2, 4)) # tuple pour donner la dimension
array([[4, 0, 2, 4],
       [3, 3, 0, 3]])
>>> np.random.random_integers(1,5,10)# 10 values in [1,5]
array([2, 2, 3, 4, 4, 1, 2, 2, 3, 3])
>>> npr.random()
0.47108547995356098
>>> npr.random((5,)) # tuple pour donner la dimension (shape)
array([ 0.30220482, 0.86820401, 0.1654503, 0.11659149, 0.54323428])
>>> 5 * npr.random((3, 2)) - 5 # 3 X 2 array of random reals
array([[-3.99149989, -0.52338984], # in [-5, 0[
       [-2.99091858, -0.79479508],
       [-1.23204345, -1.75224494]]
```



▲ Générateurs aléatoires (loi normale):



➤ Vaste catalogue de générateurs aléatoires disponible sur docs.scipy.org/doc/numpy-1.7.0/reference/routines.random.html#distributions

Distributions	
Distributions	
beta(a, b[, size])	The Beta distribution over [0, 1].
binomial(n, p[, size])	Draw samples from a binomial distribution.
chisquare(df[, size])	Draw samples from a chi-square distribution.
dirichlet(alpha[, size])	Draw samples from the Dirichlet distribution.
exponential([scale, size])	Exponential distribution.
f(dfnum, dfden[, size])	Draw samples from a F distribution.
gamma(shape[, scale, size])	Draw samples from a Gamma distribution.
<pre>geometric(p[, size])</pre>	Draw samples from the geometric distribution.
gumbel([loc, scale, size])	Gumbel distribution.
hypergeometric(ngood, nbad, nsample[, size])	Draw samples from a Hypergeometric distribution.
laplace([loc, scale, size])	Draw samples from the Laplace or double exponential distribution with
logistic([loc, scale, size])	Draw samples from a Logistic distribution.
lognormal([mean, sigma, size])	Return samples drawn from a log-normal distribution.
logseries(p[, size])	Draw samples from a Logarithmic Series distribution.
multinomial(n, pvals[, size])	Draw samples from a multinomial distribution.
multivariate_normal(mean, cov[, size])	Draw random samples from a multivariate normal distribution.
negative_binomial(n, p[, size])	Draw samples from a negative_binomial distribution.
noncentral_chisquare(df, nonc[, size])	Draw samples from a noncentral chi-square distribution.
noncentral_f(dfnum, dfden, nonc[, size])	Draw samples from the noncentral F distribution.
normal([loc, scale, size])	Draw random samples from a normal (Gaussian) distribution.
pareto(a[, size])	Draw samples from a Pareto II or Lomax distribution with specified shape
poisson([lam, size])	Draw samples from a Poisson distribution.



Calculs FFT avec numpy.fft

- ► La doc en ligne est disponible sur http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.fft.html
- ► Calculs de FFT :
 - Ift Transformée de Fourier discrète 1D
 - ▶ ifft Transformée de Fourier discrète inverse 1D
 - ▶ fft2 Transformée de Fourier discrète 2D
 - ▶ ifft2 Transformée de Fourier discrète inverse 2D
 - ▶ fftn Transformée de Fourier discrète ND
 - ▶ ifftn Transformée de Fourier discrète inverse ND



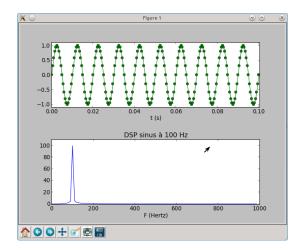
Calculs de FFT avec numpy.fft [fft_sin100.py]

```
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
# 512 points, 100. Hertz
N, F0 = 201, 100
# Te, Fe : période, fréquence d'échantillonnage :
Fe = 20.*F0
Te, deltaF = 1./Fe, Fe/N
# vecteur temps, fréquence:
vT, vF = np.arange(N)*Te, np.arange(N)*deltaF
# échantillonnage du sinus :
Se = np.sin(2*np.pi*F0*vT)
TF_Se = np.fft.fft(Se)
plt.subplots_adjust(hspace=0.5); plt.subplot(211)
plt.plot(vT, Se, 'o-g')
plt.xlabel('t (s)'); plt.axis([0, N*Te, -1.1, 1.1])
plt.subplot(212)
plt.plot(vF[:N//2], abs(TF_Se[:N//2]))
plt.ylim(-1, 1.1*max(abs(TF_Se[:N//2])))
plt.xlabel('F (Hertz)') ; plt.title(u'DSP sinus à 100 Hz')
plt.show()
```



Scipy

Calculs de fft avec numpy.fft





28



Numpy

- Le module scipy utilise numpy pour proposer une "boîte" à outil de calcul scientifique
- Le module scipy contient un grand nombre de sous-modules, classes, objets, fonctions... dédiés aux calculs numériques
- La prise en main du module module scipy fait l'objet du tutoriel http://docs.scipy.org/doc/scipy-0.12.0/reference/tutorial/index.html
- Le site web **scipy** est http://www.scipy.org La doc en ligne de scipy est ici: http://docs.scipy.org/doc/scipy-0.12.0/reference/





Le module Scipy

▶ Tutoriel de prise en main

http://docs.scipy.org/doc/scipy-0.12.0/reference/tutorial/index.html





Numpy numpy.ndarray numpy.linalg numpy.random numpy.fft Scipy v1.0

Références bibliographiques

http://docs.python.org/2/index.html

 $fr. open class rooms. com/informatique/python/cours\ fr. open class rooms. com/info$



Apprenez à programmer en Python Vincent Le Goff Simple IT éd. (Le livre du zéro) ISBN 979-10-90085-03-9 ≈25 €



Python Essential Reference David M. Beazley Addison Wesley ISBN 0-672-32978-4



Matplotlib for Python Developers Sandro Tosi PACTK publishing ISBN 1847197906



Apprendre à programmer avec Python Gérard Swinnen Télécharger le PDF



Programmation en Python pour les mathématiques A. Casamayou-Boucau Dunod ISBN 978-2-10-057422-3



Python Scripting for Computational Science T.J. Barth Springer ISBN 978-3-540-73915-9



