Analyse scientifique avec Python

Version Février 2019

Yannick Copin

Table des matières

1	Intro	oduction 1
	1.1	Pourquoi un module d'analyse scientifique?
	1.2	Pourquoi Python?
	1.3	Informations pratiques 2019
	1.4	Index et recherche
2	Initi	ation à Python 5
	2.1	Introduction
	2.2	Types de base
	2.3	Structures de programmation
	2.4	Les chaînes de caractères
	2.5	Objets itérables
	2.6	Fonctions
	2.7	Bibliothèques et scripts
	2.8	Exceptions
	2.9	Classes
	2.10	Entrées-sorties
	2.11	Fonctionnalités avancées
3	Bibl	iothèque standard 25
	3.1	Gestion des arguments/options de la ligne de commande
	3.2	Pickle : sérialisation des données
	3.3	Batteries included
	3.4	Text/Graphical User Interfaces
4	Bibl	iothèques numériques de base 29
	4.1	Numpy
	4.2	Scipy
	4.3	Matplotlib
5	Bibl	iothèques scientifiques avancées 47
	5.1	Pandas et xarray
	5.2	Astropy
	5.3	Autres bibliothèques scientifiques
6	Dév	elopper en Python 63
J	6.1	Le zen du Python
	6.2	Développement piloté par les tests
	6.3	Outils de développement
	6.4	Python 2 vs. Python 3
	U.I	

7	Références supplémentaires	73
	7.1 Documentation générale	
	7.2 Listes de liens	
	7.3 Livres libres	
	7.4 Cours en ligne	. 74
8	Exemples	77
	3.1 Mean power (fonction, argparse)	. 77
	3.2 Formes (POO)	
	3.3 Cercle circonscrit (POO, argparse)	
	3.4 Matplotlib	. 88
9	Exercices	93
	0.1 Introduction	
	0.2 Manipulation de listes	
	Programmation	
	Manipulation de tableaux (arrays)	
	Méthodes numériques	
	0.6 Visualisation (matplotlib)	
	Mise en oeuvre de l'ensemble des connaissances acquises	
	5.8 Exercices en viac	. 100
10	Annales d'examen	103
	0.1 Simulation de chute libre (partiel nov. 2014)	. 103
	0.2 Examen janvier 2015	. 103
11	Projets	105
TT	1.1.1 Projets de physique	
	1.2 Projets astrophysiques	
	1.3 Projets divers	
	1.4 Projets statistiques	. 115
	1.5 Projets de visualisation	. 115
19	Démonstration Astropy	117
14	2.1 Fichiers FITS	
	2.2 Tables	
	2.3 Quantités et unités	
	2.4 Calculs cosmologiques	. 124
10		105
13	Pokémon Go! (démonstration Pandas/Seaborn) 3.1 Lecture et préparation des données	127 127 .
	3.2 Accès aux données	
	3.3 Quelques statistiques	
	3.4 Visualisation	
14	Méthode des rectangles	139
15	Fizz Buzz	141
16	Algorithme d'Euclide	143
	Crible d'Ératosthène	145
	Carré magique	147
	Suite de Syracuse	149
20	Flocon de Koch	151
2 1	Jeu du plus ou moins	155

22 Animaux	157
23 Particules	161
24 Jeu de la vie	171
25 Median Absolute Deviation	175
26 Distribution du $pull$	177
27 Quadrature	179
28 Zéro d'une fonction	181
29 Quartet d'Anscombe	183
30 Suite logistique	187
31 Ensemble de Julia	189
32 Trajectoire d'un boulet de canon	191
33 Équation d'état de l'eau	193
34 Solutions aux exercices	197
35 Examen final, Janvier 2015 35.1 Exercice 35.2 Le problème du voyageur de commerce 35.3 Correction	200
Bibliographie	203

CHAPITRE 1

Introduction

Version Master de Physique Fondamentale, Université Lyon 1 du 29/01/19, 18:52 Auteur Yannick Copin <ipnl.in2p3.fr>

1.1 Pourquoi un module d'analyse scientifique?

- Pour générer ses données, p.ex. simulations numériques, contrôle d'expériences.
- Pour traiter ses données, i.e. supprimer les artefacts observationnels.
- Pour *analyser* ses données, i.e. extraire les quantités physiques pertinentes, p.ex. en ajustant un modèle.
- Pour *visualiser* ses données, et appréhender leur richesse multi-dimensionnelle.
- Pour *présenter* ses données, p.ex. générer des figures prêtes à publier.

Ce module s'addresse donc avant tout aux futurs expérimentateurs, phénoménologistes ou théoriciens voulant se frotter à la réalité des observations.

1.2 Pourquoi Python?

Les principales caractéristiques du langage Python :

- syntaxe simple et lisible : langage pédagogique et facile à apprendre et à utiliser;
- langage interprété : utilisation interactive ou script exécuté ligne à ligne, pas de processus de compilation ;
- haut niveau : typage dynamique, gestion active de la mémoire, pour une plus grande facilité d'emploi;
- multi-paradigme : langage impératif et/ou orienté objet, selon les besoins et les capacités de chacun;
- logiciel libre et ouvert, largement répandu (multi-plateforme) et utilisé (forte communauté);
- riche bibliothèque standard : Batteries included ;
- riche bibliothèque externe : de nombreuses bibliothèques de qualité, dans divers domaines (y compris scientifiques), sont déjà disponibles.

L'objectif est bien d'apprendre un seul langage de haut niveau, permettant tout aussi bien des analyses rapides dans la vie de tous les jours – quelques lignes de code en intéractif – que des programmes les plus complexes (projets de plus de 100 000 lignes).

Liens:

- Getting Started
- Python Advocacy

1.3 Informations pratiques 2019

- Atelier Analyse scientifique avec Python
- Cours en ligne
- Responsable: Yannick Copin <ipnl.in2p3.fr>, Bureau 420 de l'IPNL (4 rue Fermi)

Calendrier

Toutes les séances ont lieu au bâtiment Ariane.

Date	TD	Salle
Lun. 04/02/2018	10h-12h30	XX
Lun. 04/02	14h-16h30	XX
Mar. 05/02/2018	10h-12h30	XX
Mar. 05/02	14h-16h30	XX
Jeu. 07/02/2018	10h-12h30	XX
Jeu. 07/02	14h-16h30	XX (projets)

Participants

Nom	Mail (prenom.nom+)	Statut
vivien.duboisdendien	etu.univ-lyon1.fr	M2 Astro
marion.farcy	etu.univ-lyon1.fr	M2 Astro
maxime.rey	etu.univ-lyon1.fr	M2 Astro
antoine.rocher	etu.univ-lyon1.fr	M2 Astro
deborah.polderman	etu.univ-lyon1.fr	M2 PAMMCO
fabien.rondepierre	etu.univ-lyon1.fr	M2 PAMMCO
antonin.pardon	univ-lyon1.fr	ILM

Installations locales

Avertissement: le cours utilise Python 3.

Si des programmes ou des librairies Python (p.ex. ipython) manquent sur votre ordinateur (p.ex. en salle Ariane), il est relativement aisé de les installer localement à l'aide du gestionnaire d'installation pip.

— Compléter votre ~/.bashrc :

```
export PATH=$PATH:$HOME/.local/bin/
export PYTHONPATH=$HOME/.local/lib/python3.6/site-packages/
```

— Installer p.ex. ipython:

```
pip3 install --user ipython
```

Si vous avez le contrôle de votre ordinateur, il peut être préférable d'utiliser le gestionnaire de paquets du système (p.ex. synaptic sur Ubuntu).

1.4 Index et recherche

- genindex
- search

1.4. Index et recherche 3

CHAPITRE 2

Initiation à Python

Table des matières

- Initiation à Python
 - Introduction
 - Installation
 - Notions d'Unix
 - L'invite de commande
 - Types de base
 - Structures de programmation
 - Les chaînes de caractères
 - $-- \ Indexation$
 - Sous-liste (slice)
 - -- $M\'{e}thodes$
 - Formatage
 - Objets itérables
 - Fonctions
 - Bibliothèques et scripts
 - $-- Biblioth\`e ques \ externes$
 - Bibliothèques personnelles et scripts
 - Exceptions
 - Classes
 - Entrées-sorties
 - Intéractif
 - Fichiers
 - Fonctionnalités avancées
 - Arguments anonymes
 - Dépaquetage des arguments
 - Dépaquetage des itérables
 - Décorateurs
 - Fonction anonyme
 - Éléments passés sous silence
 - Python 3.x

2.1 Introduction

2.1.1 Installation

Cette introduction repose essentiellement sur les outils suivants :

- Python 3.5+ (inclus l'interpréteur de base et la bibliothèque standard);
- les bibliothèques scientifiques Numpy et Scipy;
- la bibliothèque graphique Matplotlib;
- un interpréteur évolué, p.ex. ipython;
- un éditeur de texte évolué, p.ex. emacs, vi, gedit ou Atom.

Ces logiciels peuvent être installés indépendamment, de préférence sous Linux (p.ex. Ubuntu ou votre distribution préférée), ou sous Windows ou MacOS. Il existe également des distributions « clés en main » :

- Anaconda (multi-plateforme);
- Python(x,y) (Windows);
- Enthought Canopy (Windows, MacOS, Linux, gratuite pour les étudiants du supérieur).

2.1.2 Notions d'Unix

Les concepts suivants sont supposés connus :

- ligne de commande : éxécutables et options ;
- arborescence: chemin relatif ([./]...) et absolu (/...), navigation (cd);
- gestion des fichiers (ls, rm, mv) et répertoires (mkdir);
- gestion des éxécutables : \$PATH, chmod +x;
- gestion des processus : &, Control-c, Control-z + bg;
- variables d'environnement : export, .bashrc.

Liens:

- Quelques notions et commandes d'UNIX
- Introduction to Unix Study Guide

2.1.3 L'invite de commande

Il existe principalement deux interpréteurs intéractifs de commandes Python :

— python : interpréteur de base :

```
$ python3
Python 3.5.2 (default, Nov 23 2017, 16:37:01)
[GCC 5.4.0 20160609] on linux
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>>
```

- Control-d pour sortir;
- help(commande) pour obtenir l'aide d'une commande;
- a priori, pas d'historique des commandes ni de complétion automatique.

L'interpréteur de base permet également d'interpréter un « script », c.-à-d. un ensemble de commandes regroupées dans un fichier texte (généralement avec une extension .py) : python $mon_script.py$

— ipython : interpréteur évolué (avec historique et complétion automatique des commandes) :

```
$ ipython
Python 2.7.12 (default, Nov 19 2016, 06:48:10)
Type "copyright", "credits" or "license" for more information.
```

(suite sur la page suivante)

```
IPython 5.3.0 -- An enhanced Interactive Python.

? -> Introduction and overview of IPython's features.

%quickref -> Quick reference.
help -> Python's own help system.
object? -> Details about 'object', use 'object??' for extra details.

In [1]:
```

- Control-d pour sortir;
- Tab pour la complétion automatique;
- Haut et Bas pour le rappel des commandes;
- aide ipython : object? pour une aide sur un objet, object?? pour une aide plus complète (au niveau source);
- commandes magic (voir %magic):
 - %run mon_script.py pour éxecuter un script dans l'interpréteur,
 - %debug pour lancer le mode débogage intéractif post-mortem,
 - %cpaste pour coller et éxecuter un code préformaté.

Liens:

- Tutorial
- IPython Tips & Tricks

2.2 Types de base

```
- None (rien)
```

```
— Chaînes de caractères : str
```

- Entre (simples ou triples) apostrophes ' ou guillemets " : 'Calvin', "Calvin'n'Hobbes", '''Deux\nlignes''', """'Pourquoi?' demanda-t-il."""
- Conversion: str(3.2)

- Types numériques :

- Booléens bool (vrai/faux) : True, False, bool(3)
- Entiers int (pas de valeur limite explicite, correspond au moins au long du C): -2, int(2.1), int("4")
- Réels float (entre ±1.7e±308, correspond au double du C): 2., 3.5e-6, float(3)
- Complexes complex: 1+2j (sans espace), 5.1j, complex(-3.14), complex('j')

```
>>> 5 / 2  # Division réelle par défaut dans Python 3.x
2.5
>>> 6 // 2.5  # Division euclidienne explicite
2.0
>>> 6 % 2.5  # Reste de la division euclidienne
1.0
>>> (1 + 2j)**-0.5  # Puissance entière, réelle ou complexe
(0.5688644810057831-0.3515775842541429j)
```

Objets itérables :

- Listes list: ['a', 3, [1, 2], 'a']
- Listes immuables tuple : (2, 3.1, 'a', []) (selon les conditions d'utilisation, les parenthèses ne sont pas toujours nécessaires)
- Listes à clés dict: {'a':1, 'b':[1, 2], 3:'c'}
- Ensembles non ordonnés d'éléments uniques set : {1, 2, 3, 2}

```
>>> l = ['a', True]  # Définition d'une liste

>>> x, y = 1, 2.5  # Affectations multiples via tuples (les parenthèses ne sont pas∟

→nécessaires)
```

(suite sur la page suivante)

2.2. Types de base 7

```
>>> list(range(5))  # Liste de 5 entiers commençant par 0
[0, 1, 2, 3, 4]
>>> l + [x, y]  # Concaténation de listes
['a', True, 1, 2.5]
>>> {2, 1, 3} | {1, 2, 'a'}  # Union d'ensembles (non-ordonnés)
{'a', 1, 2, 3}
```

Attention : en Python 3, range() n'est plus un constructeur de liste, mais un *itérateur*, qui doit être converti en liste explicitement (équivalent à xrange de Python 2) :

```
>>> range(3)  # Itérateur
range(0, 3)
>>> list(range(3))  # Liste
[0, 1, 2]
```

— type(obj) retourne le type de l'objet, isinstance(obj, type) teste le type de l'objet.

```
>>> type(1)
<type 'list'>
>>> isinstance(1, tuple)
False
```

Liens:

- The Floating Point Guide
- What Every Computer Scientist Should Know About Floating-Point Arithmetic

2.3 Structures de programmation

— Les blocs sont définis par l'indentation (en général par pas de quatre espaces) ¹.

Avertissement : Évitez autant que possible les caractères de tabulation, source de confusion. Configurez votre éditeur de texte pour qu'il n'utilise que des espaces.

- Une instruction par ligne en général (ou instructions séparées par ;).
- Les commentaires commencent par #, et s'étendent jusqu'à la fin de la ligne.
- Expression booléenne : une condition est une expression s'évaluant à True ou False :
 - False: test logique faux (p.ex. 3 == 4), valeur nulle, chaîne vide (''), liste vide ([]), etc.
 - True : test logique vrai (p.ex. 2 + 2 == 4), toute valeur ou objet non nul (et donc s'évaluant par défaut à True sauf exception)
 - Tests logiques : ==, !=, >, >=, etc.

```
\bf Attention: Ne pas confondre « = » (affectation d'une variable) et « == » (test logique d'égalité).
```

— Opérateurs logiques : and, or, not

```
>>> (5 >= 6) or (not 3 > 4)

True
>>> x = 3; 0 < x <= 5  # Conditions chaînées

True
```

```
ou \ \mathtt{from} \ \_\mathtt{future} \_ \mathtt{import} \ \mathtt{braces} :-)
```

— Opérateur ternaire (PEP 308): value if condition else altvalue, p.ex.

```
>>> y = x**0.5 if (x > 0) else 0 # Retourne sqrt(max(x, 0))
```

— Expression conditionnelle : if condition: ... [elif condition2: ...] [else: ...], p.ex. :

```
if (i > 0):  # Condition principale
    print("positif")
elif (i < 0):  # Condition secondaire (si nécessaire)
    print("négatif")
else:  # Cas final (si nécessaire)
    print("nul")</pre>
```

— Boucle for : for element in iterable :, s'éxecute sur chacun des éléments d'un objet itérable :

```
>>> for val in ['un', (2, 3), 4]: # Itération sur une liste de 3 éléments
... print(val)
un
(2, 3)
4
```

- continue : interrompt l'itération courante, et reprend la boucle à l'itération suivante,
- break : interrompt complètement la boucle.

Note : la logique des boucles Python est assez différente des langages C[++]/fortran, pour lesquels l'itération porte sur les *indices* plutôt que sur les éléments eux-mêmes.

— **Boucle while**: while condition: se répéte tant que la condition est vraie, ou jusqu'à une sortie explicite avec break.

Attention : aux boucles infinies, dont la condition d'exécution reste invariablement vraie (typiquement un critère de convergence qui n'est jamais atteint). On peut toujours s'en protéger en testant *en outre* sur un nombre maximal (raisonnable) d'itérations :

```
niter = 0
while (error > 1e-6) and (niter < 100):
    error = ... # A priori, error va décroître, et la boucle s'interrompre...
    niter += 1 # ... mais on n'est jamais assez prudent!
if niter == 100: # Ne pas oublier de tester l'absence de convergence!!!
    print("Erreur de convergence!")</pre>
```

Note: Il n'y a pas en Python d'équivalent natif à l'instruction switch du C.

Exercices:

Intégration : méthode des rectangles *, Fizz Buzz *, PGCD : algorithme d'Euclide **

2.4 Les chaînes de caractères

2.4.1 Indexation

Les chaînes de caractères sont des objets it'erables – c.-à-d. constitués d'éléments (ici les caractères) sur lesquels il est possible de « boucler » (p.ex. avec for) – et immuables – c.-à-d. dont les éléments individuels ne peuvent pas être modifiés intrinsèquement.

Note : Comme en C[++], l'indexation en Python commence à 0 : le 1er élément d'une liste est l'élément n°0, le 2e est le n°1, etc. Les n éléments d'une liste sont donc indexés de 0 à n-1.

```
>>> alpha = 'abcdefghijklmnopqrstuvwxyz'
>>> len(alpha)
26
>>> alpha[0]  # 1er élément (l'indexation commence à 0)
'a'
>>> alpha[-1]  # = alpha[26-1=25], dernier élément (-2: avant-dernier, etc.)
'z'
```

2.4.2 Sous-liste (*slice*)

Des portions d'une chaîne peuvent être extraites en utilisant des slice (« tranches »), de notation générique [start=0]:[stop=len][:step=1]. P.ex.

```
>>> alpha[3:7] # De l'élément n°3 (inclus) au n°7 (exclu), soit 7-3=4 éléments
'defg'
>>> alpha[:3] # Du n°0 (défaut) au n°3 (exclu), soit 3 éléments
'abc'
>>> alpha[-3:] # Du n°26-3=23 (inclus) au dernier inclus (défaut)
'xyz'
>>> alpha[3:9:2] # Du n°3 (inclus) au n°9 (exclu), tous les 2 éléments
'dfh'
>>> alpha[::5] # Du 1er au dernier élément (défauts), tous les 5 éléments
'afkpuz'
```

2.4.3 Méthodes

Comme la plupart des objets en Python, les chaînes de caractères disposent de nombreuses fonctionnalités – appelées « méthodes » en POO (Programmation Orientée Objet) – facilitant leur manipulation :

```
>>> enfant, peluche = "Calvin", 'Hobbes'
                                                     # Affectations mutiples
>>> titre = enfant + ' et ' + peluche; titre # +: Concaténation de chaînes
'Calvin et Hobbes'
>>> titre.replace('et', '&') # Remplacement de sous-chaînes (\rightarrow nouvelle chaîne)
'Calvin & Hobbes'
>>> titre
                                  # titre est immuable et reste inchangé
'Calvin et Hobbes'
>>> ' & '.join(titre.split(' et ')) # Découpage (split) et jonction (join)
'Calvin & Hobbes'
>>> 'Hobbes' in titre
                                         # in: Test d'inclusion
True
>>> titre.find("Hobbes")
                                         # str.find: Recherche de sous-chaîne
10
>>> titre.center(30, '-')
'-----Calvin et Hobbes-----'
>>> dir(str)
                                          # Liste toutes les méthodes des chaînes
['__add__', '__class__', '__contains__', '__delattr__', '__dir__', '__doc__', '__eq__', '__
 \hspace{0.2in} \hookrightarrow \hspace{-0.2in} format\_', \hspace{0.2in} '\_get\_', \hspace{0.2in} '\_getattribute\_', \hspace{0.2in} '\_getitem\_', \hspace{0.2in} '\_getnewargs\_', \hspace{0.2in} '\_gt\_', \hspace{0.2in} '\_hash\_' 
→', '_init_', '_iter_', '_le_', '_len_', '_lt_', '__mod_', '__mul_', '__ne_', '_
→new__', '__reduce__', '__reduce_ex__', '__repr__', '__rmod__', '__rmul__', '__setattr__', '__
⇒sizeof__', '__str__', '__subclasshook__', 'capitalize', 'casefold', 'center', 'count',

→'encode', 'endswith', 'expandtabs', 'find', 'format', 'format_map', 'index', 'isalnum',
→'isalpha', 'isdecimal', 'isdigit', 'isidentifier', 'islower', 'isnumeric', 'isprintable',
\hookrightarrow 'isspace', 'istitle', 'isupper', 'join', 'ljust', 'lower', 'lstrip', 'maketrans', 'partition
→', 'replace', 'rfind', 'rindex', 'rjust', 'rpartition', 'rsplit', 'rstrip', 'split',
- 'splitlines', 'startswith', 'strip', 'swapcase', 'title', 'translate', 'uppre sur la fill's suivante
```

2.4.4 Formatage

Le système de formatage permet un contrôle précis de la conversion de variables en chaînes de caractères. Il s'appuie essentiellement sur la méthode str.format() :

```
>>> "{0} a {1} ans".format('Calvin', 6) # args énumérés
'Calvin a 6 ans'
>>> "{} a {} ans".format('Calvin', 6) # Raccourci
'Calvin a 6 ans'
>>> "{nom} a {age} ans".format(nom='Calvin', age=6) # kwargs
'Calvin a 6 ans'
>>> pi = 3.1415926535897931
>>> "{x:f} {x:.2f} {y:f} {y:g}".format(x=pi, y=pi*1e9) # Options de formatage
'3.141593 3.14 3141592653.589793 3.14159e+09'
```

print () affiche à l'écran (plus spécifiquement la sortie standard) la conversion d'une variable en chaîne de caractères :

```
>>> print("Calvin and Hobbes\nScientific progress goes 'boink'!")
Calvin and Hobbes
Scientific progress goes 'boink'!
>>> print("{0:2d} fois {1:2d} font {2}".format(3, 4, 3*4)) # Formatage et affichage
3 fois 4 font 12
```

Exercice:

Tables de multiplication *

2.5 Objets itérables

Les chaînes de caractères, listes, tuples et dictionnaires sont les objets itérables de base en Python. Les listes et dictionnaires sont modifiables (« mutables ») – leurs éléments constitutifs peuvent être changés à la volée – tandis que chaînes de caractères et les tuples sont immuables.

— Accès indexé : conforme à celui des chaînes de caractères

```
>>> 1 = list(range(1, 10, 2)); 1  # De 1 (inclus) à 10 (exclu) par pas de 2
[1, 3, 5, 7, 9]
>>> len(1)
                    # Nb d'éléments dans la liste (i varie de 0 à 4)
>>> 1[0], 1[-2]
                    # 1er et avant-dernier élément (l'indexation commence à 0)
(1, 7)
>>> 1[5]
                    # Erreur: indice hors-bornes
IndexError: list index out of range
>>> d = dict(a=1, b=2)  # Création du dictionnaire {'a':1, 'b':2}
                    # Accès à une entrée via sa clé
>>> d['a']
>>> d['c']
                    # Erreur: clé inexistante!
KeyError: 'c'
>>> d['c'] = 3; d # Ajout d'une clé et sa valeur
{'a': 1, 'c': 3, 'b': 2}
>>> # Noter qu'un dictionnaire N'est PAS ordonné!
```

— Sous-listes (slices):

— Modification d'éléments d'une liste (chaînes et tuples sont **immuables**) :

```
>>> 1[0] = 'a'; 1
                             # Remplacement du 1er élément
['a', 3, 5, 7, 9]
>>> 1[1::2] = ['x', 'y']; 1  # Remplacement d'éléments par *slices*
['a', 'x', 5, 'y', 9]
>>> 1 + [1, 2]; 1
                             # Concaténation (l reste inchangé)
['a', 'x', 5, 'y', 9, 1, 2]
['a', 'x', 5, 'y', 9]
>>> 1 += [1, 2]; 1
                             # Concaténation sur place (l est modifié)
['a', 'x', 5, 'y', 9, 1, 2]
>>> 1.append('z'); 1
                            # Ajout d'un élément en fin de liste
['a', 'x', 5, 'y', 9, 1, 2, 'z']
>>> 1.extend([-1, -2]); 1
                            # Extension par une liste
['a', 'x', 5, 'y', 9, 1, 2, 'z', -1, -2]
>>> del 1[-6:]; 1
                             # Efface les 6 derniers éléments de la liste
['a', 'x', 5, 'y']
```

```
Attention: à la modification des objets mutables:
>>> 1 = [0, 1, 2]
>>> m = 1; m
                  # m est un *alias* de la liste l: c'est le même objet
[0, 1, 2]
>>> id(1); id(m); m is 1
                 # id({obj}) retourne le n° d'identification en mémoire
171573452
171573452
                 # m et l ont le même id:
                 # ils correspondent donc bien au même objet en mémoire
>>> 1[0] = 'a'; m # puisque l a été modifiée, il en est de même de m
['a', 1, 2]
>>> m = 1[:]
                  # copie de tous les éléments de l dans une *nouvelle* liste mu
\hookrightarrow (clonage)
>>> id(1); id(m); m is 1
171573452
171161228
                  # m a un id différent de l: il s'agit de 2 objets distincts
False
                  # (contenant éventuellement la même chose!)
>>> del l[-1]; m # les éléments de m n'ont pas été modifiés
['a', 1, 2]
```

— Liste en compréhension : elle permet la construction d'une liste à la volée

```
>>> [ i**2 for i in range(5) ] # Carré de tous les éléments de [0, ..., 4]
[0, 1, 4, 9, 16]
>>> [ 2*i for i in range(10) if (i%3 != 0) ] # Compréhension conditionnelle
[2, 4, 8, 10, 14, 16]
>>> [ 10*i+j for i in range(3) for j in range(4) ] # Double compréhension
[0, 1, 2, 3, 10, 11, 12, 13, 20, 21, 22, 23]
>>> [ [ 10*i+j for i in range(3) ] for j in range(4) ] # Compréhensions imbriquées
[[0, 10, 20], [1, 11, 21], [2, 12, 22], [3, 13, 23]]
>>> { i: i**2 for i in range(1, 5) } # Dictionnaire en compréhension
{1: 1, 2: 4, 3: 9, 4: 16}
```

— Utilitaires sur les itérables :

```
>>> humans = ['Calvin', 'Wallace', 'Boule'] (suite sur la page suivante)
```

```
>>> for i in range(len(humans)): # Boucle sur les indices de humans
       print(i, humans[i])
                                 # Accès explicite, pas pythonique :-(
0 Calvin
1 Wallace
2 Boule
>>> for i, name in enumerate(humans): # Boucle sur (indice, valeur) de humans
       print(i, name)
                                      # Pythonique :-D
0 Calvin
1 Wallace
2 Boule
>>> animals = ['Hobbes', 'Gromit', 'Bill']
>>> for boy, dog in zip(humans, animals): # Boucle simultanée sur 2 listes (ou +)
       print(boy, 'et', dog)
Calvin et Hobbes
Wallace et Gromit
Boule et Bill
>>> sorted(zip(humans, animals)) # Tri, ici sur le 1er élément de chaque tuple de lau
[('Boule', 'Bill'), ('Calvin', 'Hobbes'), ('Wallace', 'Gromit')]
```

Exercices:

Crible d'Ératosthène *, Carré magique **

2.6 Fonctions

Une fonction est un regroupement d'instructions impératives – assignations, branchements, boucles, etc. – s'appliquant sur des arguments d'entrée. C'est le concept central de la programmation *impérative*.

def permet de définir une fonction : def fonction (arg1, arg2, ..., option1=valeur1, option2=valeur2, ...):. Les « args » sont des arguments nécessaires (c.-à-d. obligatoires), tandis que les « kwargs » – arguments de type option=valeur – sont optionnels, puisqu'ils possèdent une valeur par défaut. Si la fonction doit retourner une valeur, celle-ci est spécifiée par le mot-clé return.

Exemples:

```
def temp_f2c(tf):
2
        Convertit une température en d° Fahrenheit `tf` en d° Celsius.
3
4
        Exemple:
5
        >>> temp_f2c(104)
6
        40.0
         n n n
        tc = (tf - 32.)/1.8
                                    # Fahrenheit 
ightarrow Celsius
11
        return to
12
```

Dans la définition d'une fonction, la première chaîne de charactères (appelé docstring) servira de documentation pour la fonction, accessible de l'interpréteur via p.ex. help(temp_f2c), ou temp_f2c? sous ipython. Elle se doit d'être tout à la fois pertinente, concise et complète. Elle peut également inclure des exemples d'utilisation (doctests, voir Développement piloté par les tests).

2.6. Fonctions

```
def mean_power(alist, power=1):
1
2
        Retourne la racine `power` de la moyenne des éléments de `alist` à
3
        la puissance `power`:
4
        .. math:: \mu = (\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} x_i^p)^{1/p}
6
        `power=1` correspond à la moyenne arithmétique, `power=2` au *Root
        Mean Squared*, etc.
9
10
        Exemples:
11
        >>> mean power([1, 2, 3])
12
13
        >>> mean_power([1, 2, 3], power=2)
14
        2.160246899469287
15
16
17
        # *mean* = (somme valeurs**power / nb valeurs)**(1/power)
18
        mean = (sum( val ** power for val in alist ) / len(alist)) ** (1 / power)
19
20
        return mean
21
```

Il faut noter plusieurs choses importantes :

- Python est un langage à typage dynamique, p.ex., le type des arguments d'une fonction n'est pas fixé a priori. Dans l'exemple précédent, alist peut être une list, un tuple ou tout autre itérable contenant des éléments pour lesquels les opérations effectuées somme, exponentiation, division par un entier ont été préalablement définies (p.ex. des entiers, des complexes, des matrices, etc.) : c'est ce que l'on appelle le duck-typing ², favorisant le polymorphisme des fonctions;
- le typage est *fort*, c.-à-d. que le type d'une variable ne peut pas changer à la volée. Ainsi, "abra" + "cadabra" a un sens (concaténation de chaînes), mais pas 3 + "cochons" (entier + chaîne);
- la définition d'une fonction se fait dans un « espace parallèle » où les variables ont une portée (scope) locale ³. Ainsi, la variable s définie dans la fonction mean_power n'interfère pas avec le « monde extérieur »; inversement, la définition de mean_power ne connaît a priori rien d'autre que les variables explicitement définies dans la liste des arguments ou localement.

Exercice:

Suite de Syracuse (fonction) *

2.7 Bibliothèques et scripts

2.7.1 Bibliothèques externes

Une bibliothèque (ou module) est un code fournissant des fonctionnalités supplémentaires – p.ex. des fonctions prédéfinies – à Python. Ainsi, le module math définit les fonctions et constantes mathématiques usuelles (sqrt(), pi, etc.)

Une bibliothèque est « importée » avec la commande import module. Les fonctionnalités supplémentaires sont alors accessibles dans l'espace de noms module via module fonction :

```
>>> sqrt(2)  # sqrt n'est pas une fonction standard de python

NameError: name 'sqrt' is not defined
>>> import math  # Importe tout le module 'math'
>>> dir(math)  # Liste les fonctionnalités de 'math'
```

(suite sur la page suivante)

If it looks like a duck and quacks like a duck, it must be a duck. La notion de « portée » est plus complexe, je simplifie...

```
['__doc__', '__name__', '__package__', 'acos', 'acosh', 'asin',
'asinh', 'atan', 'atan2', 'atanh', 'ceil', 'copysign', 'cos', 'cosh',
'degrees', 'e', 'exp', 'fabs', 'factorial', 'floor', 'fmod', 'frexp',
'fsum', 'hypot', 'isinf', 'isnan', 'ldexp', 'log', 'log10', 'log1p',
'modf', 'pi', 'pow', 'radians', 'sin', 'sinh', 'sqrt', 'tan', 'tanh',
'trunc'l
>>> math.sqrt(math.pi)
                              # Les fonctionnalités sont disponibles sous 'math'
1.7724538509055159
                              # Importe 'math' dans l'espace 'M'
>>> import math as M
>>> M.sqrt(M.pi)
1.7724538509055159
>>> from math import sqrt, pi # Importe uniquement 'sqrt' et 'pi' dans l'espace courant
>>> sqrt(pi)
1.7724538509055159
```

Avertissement : Il est possible d'importer toutes les fonctionnalités d'une bibliothèque dans l'espace de noms courant :

```
>>> from math import * # Argh! Pas pythonique :-(
>>> sqrt(pi)
1.7724538509055159
```

Cette pratique est cependant fortement $d\acute{e}conseill\acute{e}e$ du fait des confusions dans les espaces de noms qu'elle peut entraı̂ner :

```
>>> from cmath import *
>>> sqrt(-1) # Quel sqrt: le réel ou le complexe?
```

Nous verrons par la suite quelques exemples de modules de la $Biblioth\`eque$ standard, ainsi que des $Biblioth\`eques$ num'eriques de base orient\'ees analyse num\'erique.

Exercice:

Flocon de Koch (programmation récursive) ***

2.7.2 Bibliothèques personnelles et scripts

Vous pouvez définir vos propres bibliothèques en regroupant les fonctionnalités au sein d'un même fichier monfichier.py.

- Si ce fichier est importé (p.ex. import monfichier), il agira comme une bibliothèque.
- Si ce fichier est exécuté p.ex. python ./monfichier.py il agira comme un *script*.

Attention: Toutes les instructions d'un module qui ne sont pas encapsulées dans le __main__ (voir plus bas) sont interprétées et exécutées lors de l'import du module. Elles doivent donc en général se limiter à la définition de variables, de fonctions et de classes (en particulier, éviter les affichages ou les calculs longs).

Un code Python peut donc être :

- un module s'il n'inclut que des définitions mais pas d'instruction exécutable en dehors d'un éventuel $__$ main $__^4$;
- un exécutable s'il inclut un $__$ main $_$ ou des instructions exécutables;
- ou les deux à la fois.

Parfois prononcé dunder main (dunder désigne le __).

Exemple:

Le code *mean_power.py* peut être importé comme une bibliothèque (p.ex. import mean_power) dans un autre code Python, ou bien être exécuté depuis la ligne de commande (p.ex. python mean_power.py), auquel cas la partie __main__ sera exécutée.

— #! (Hash-bang): la première ligne d'un script défini l'interpréteur à utiliser ⁵:

```
#!/usr/bin/env python3
```

— Un fichier incluant des caractères non-ASCII (p.ex. caractères accentués, ou symboles UTF tels que \pm) doit définir le système d'encodage, généralement utf-8 :

```
# -*- coding: utf-8 -*-
```

Notez que les noms de variables, fonctions, etc. doivent être purement ASCII ⁶ (a-zA-Z0-9_). De manière générale, favorisez la langue anglaise (variables, commentaires, affichages).

- """doc""": la chaîne de documentation de la bibliothèque (docstring, PEP 257), qui sera utilisée comme aide en ligne du module (help(mean_power)), doit être la 1re instruction du script.
- if __name__ == '__main__': permet de séparer le __main__ (c.-à-d. le corps du programme, à exécuter lors d'une utilisation en script) des définitions de fonctions et classes, permettant une utilisation en module.

2.8 Exceptions

Lorsqu'il rencontre une erreur dans l'exécution d'une instruction, l'interpréteur Python génère (raise) une erreur (Exception), de nature différente selon la nature de l'erreur : KeyError, ValueError, AttributeError, NameError, TypeError, IOError, NotImplementedError, KeyboardInterrupt, etc. La levée d'une erreur n'est cependant pas nécessairement fatale, puisque Python dispose d'un mécanisme de gestion des erreurs.

Il est d'usage en Python d'utiliser la philosophie EAFP (Easier to Ask for Forgiveness than Permission) 7 : plutôt que de tester explicitement toutes les conditions de validité d'une instruction, on « tente sa chance » d'abord, quitte à gérer les erreurs *a posteriori*. Cette gestion des exceptions se fait par la construction try ... except.

```
def lireEntier():
while True:
chaine = input('Entrez un entier: ') # Lecture du clavier → str

try:
# La conversion en type entier génère `ValueError` si nécessaire
return int(chaine)
except ValueError: # Gestion de l'exception ValueError
print("'{}' n'est pas un entier".format(chaine))
```

```
>>> lireEntier()
Entrez un entier: toto
'toto' n'est pas un entier
Entrez un entier: 3,4
'3,4' n'est pas un entier
Entrez un entier: 4
4
```

Il s'agit d'une fonctionnalité des *shells* d'Unix, pas spécifique à Python. En fait, Python 3 gère nativement les caractères Unicode :

```
>>> \alpha, \beta = 3, 4
>>> print("\alpha^2 + \beta^2 =", \alpha**2 + \beta**2)
\alpha^2 + \beta^2 = 25
```

Par opposition au LBYL (Look Before You Leap) du C/C++, basé sur une série exhaustive de tests a priori.

Dans l'élaboration d'un programme, gérez explicitement les erreurs que vous auriez pu tester *a priori* et pour lesquels il existe une solution de repli, et laissez passer les autres (ce qui provoquera éventuellement l'interruption du programme).

Danger : Évitez à tout prix les except *nus*, c.-à-d. ne spécifiant pas la ou les exceptions à gérer, car ils intercepteraient alors *toutes* les exceptions, y compris celles que vous n'aviez pas prévues! Trouvez l'erreur dans le code suivant :

Vos procédures doivent également générer des exceptions (document'ees) – avec l'instruction raise Exception() – si elles ne peuvent conclure leur action, à charge pour la procédure appelante de les gérer si besoin :

```
def diff_sqr(x, y):
1
2
        Return x**2 - y**2 for x \ge y, raise ValueError otherwise.
3
        Exemples:
        >>> diff_sqr(5, 3)
6
7
        16
        >>> diff_sqr(3, 5)
8
        Traceback (most recent call last):
9
10
        ValueError: x=3 < y=5
11
        HHHH
12
13
        if x < y:
14
            raise ValueError("x={} < y={}".format(x, y))</pre>
15
16
        return x**2 - y**2
```

Avant de se lancer dans un calcul long et complexe, on peut vouloir tester la validité de certaines hypothèses fondamentales, soit par une structure if ... raise, ou plus facilement à l'aide d'assert (qui, si l'hypothèse n'est pas vérifiée, génère une AssertionError):

```
def diff_sqr(x, y):
    """

Returns x**2 - y**2 for x >= y, AssertionError otherwise.
    """

assert x >= y, "x={} < y={}".format(x, y) # Test et msg d'erreur
    return x**2 - y**2</pre>
```

Note: La règle générale à retenir concernant la gestion des erreurs:

Fail early, fail often, fail better!

Exercice:

Jeu du plus ou moins (exceptions) *

2.8. Exceptions 17

2.9 Classes

Un objet est une entité de programmation, disposant de ses propres états et fonctionnalités. C'est le concept central de la Programmation Orientée Objet.

Au concept d'objet sont liées les notions de :

- Classe: il s'agit d'un modèle d'objet, dans lequel sont définis ses propriétés usuelles. P.ex. la classe Forme peut représenter une forme plane caractérisée par sa couleur, et disposant de fonctionnalités propres, p.ex. change_couleur();
- **Instanciation**: c'est le fait générer un objet concret (une *instance*) à partir d'un modèle (une classe). P.ex. rosie = Forme('rose') crée une instance *rosie* à partir de la classe Forme et d'une couleur (chaîne de caractères 'rose'):
- Attributs : variables internes décrivant l'état de l'objet. P.ex., rosie.couleur donne la couleur de la Forme rosie;
- Méthodes: fonctions internes, s'appliquant en premier lieu sur l'objet lui-même (self), décrivant les capacités de l'objet. P.ex. rosie.change_couleur('bleu') change la couleur de la Forme rosie;

Attention : Toutes les méthodes d'une classe doivent au moins prendre self – représentant l'objet lui-même – comme premier argument.

- Surcharge d'opérateurs : cela permet de redéfinir les opérateurs et fonctions usuels (+, abs(), str(), etc.), pour simplifier l'écriture d'opérations sur les objets. Ainsi, on peut redéfinir les opérateurs de comparaison (<, >=, etc.) dans la classe Forme pour que les opérations du genre forme1 < forme2 aient un sens (p.ex. en comparant les aires).
- **Héritage de classe :** il s'agit de définir une classe à partir d'une (ou plusieurs) classe(s) parente(s). La nouvelle classe *hérite* des attributs et méthodes de sa (ses) parente(s), que l'on peut alors modifier ou compléter. P.ex. la classe Rectangle hérite de la classe Forme (elle partage la notion de couleur et d'aire), et lui ajoute des méthodes propres à la notion de rectangle (p.ex. formule explicite de l'aire, étirement).

Exemple de définition de classe

```
class Forme:
2
        """Une forme plane, avec éventuellement une couleur."""
3
4
        def __init__(self, couleur=None):
5
             """Initialisation d'une Forme, sans couleur par défaut."""
6
            if couleur is None:
                self.couleur = 'indéfinie'
            else:
10
                self.couleur = couleur
11
12
        def __str__(self):
13
             11 11 11
14
            Surcharge de la fonction `str()`: l'affichage *informel* de
15
            l'objet dans l'interpréteur, p.ex. `print(a)` sera résolu comme
16
             `a.__str__()
17
18
            Retourne une chaîne de caractères.
19
20
21
            return "forme encore indéfinie de couleur {}".format(self.couleur)
22
23
        def change_couleur(self, newcolor):
24
            """Change la couleur de la Forme."""
25
```

(suite sur la page suivante)

```
26
            self.couleur = newcolor
27
28
        def aire(self):
29
30
            Renvoie l'aire de la Forme.
31
32
            L'aire ne peut pas être calculée dans le cas où la forme n'est
33
            pas encore spécifiée: c'est ce que l'on appelle une méthode
34
             'abstraite', qui pourra être précisée dans les classes filles.
35
36
37
            raise NotImplementedError(
38
                 "ATTENTION: impossible de calculer l'aire d'une forme indéfinie.")
39
```

Exemple d'héritage de classe

```
class Rectangle(Forme):
1
2
        Un Rectangle est une Forme particulière.
3
4
        La classe-fille hérite des attributs et méthodes de la
        classe-mère, mais peut les surcharger (i.e. en changer la
6
        définition), ou en ajouter de nouveaux:
        - la méthode `Rectangle.change_couleur()` dérive directement de
9
          `Forme.change_couleur()`;
10
        - `Rectangle.__str__()` surcharge `Forme.__str__()`;
11
        - `Rectangle.aire()` définit la méthode jusqu'alors abstraite
12
           `Forme.aire()`;
13
        - `Rectangle.allonger()` est une nouvelle méthode propre à
14
           `Rectangle`.
15
16
17
18
        def __init__(self, longueur, largeur, couleur=None):
19
            Initialisation d'un Rectangle longueur × largeur, sans couleur par
20
            défaut.
21
22
23
            # Initialisation de la classe parente (nécessaire pour assurer
24
            # l'héritage)
25
            Forme.__init__(self, couleur)
26
27
            # Attributs propres à la classe Rectangle
28
            self.longueur = longueur
29
            self.largeur = largeur
30
31
        def __str__(self):
32
            """Surcharge de `Forme. str ()`."""
33
34
            return "rectangle {}x{}, de couleur {} ".format(
35
                self.longueur, self.largeur, self.couleur)
36
37
        def aire(self):
38
39
            Renvoi l'aire du Rectangle.
40
41
            Cette méthode définit la méthode abstraite `Forme.area()`,
42
```

(suite sur la page suivante)

2.9. Classes 19

```
pour les Rectangles uniquement.

"""

return self.longueur * self.largeur

def allonger(self, facteur):

"""Multiplie la *longueur* du Rectangle par un facteur"""

self.longueur *= facteur
```

Note: Il est traditionnel de commencer les noms de classes avec une majuscule (Forme), et les noms d'instances de classe (les variables) avec une minuscule (rosie).

Exemples

Formes (POO), Cercle circonscrit (POO, argparse)

Études de cas

```
turtle.Vec2Dfractions.Fraction
```

Exercices:

```
Animaux (POO/TDD) *, Jeu de la vie (POO) **
```

2.10 Entrées-sorties

2.10.1 Intéractif

Comme nous avons pu le voir précédemment, l'affichage à l'écran se fait par print, la lecture du clavier par input.

2.10.2 Fichiers

La gestion des fichiers (lecture et écriture) se fait à partir de la fonction open() retournant un objet de type file object :

```
# ====== ÉCRITURE ======
   outfile = open("carres.dat", 'w') # Ouverture du fichier "carres.dat" en écriture
2
   for i in range(1, 10):
       outfile.write("{} {}\n".format(i, i**2)) # Noter la présence du '\n' (non-automatique)
4
   outfile.close()
                                     # Fermeture du fichier (nécessaire)
5
6
   # ======= LECTURE =======
   infile = open("carres.dat") # Duverture du fichier "carres.dat" en lecture
   for line in infile:
                                # Boucle sur les lignes du fichier
9
       if line.strip().startswith('#'): # Ne pas considérer les lignes "commentées"
10
           continue
                                # Essayons de lire 2 entiers sur cette ligne
       try:
```

(suite sur la page suivante)

```
x, x2 = [ int(tok) for tok in line.split() ]
except ValueError: # Gestion des erreurs
print("Cannot decipher line '{}'".format(line))
continue
print("{}**3 = {}".format(x, x**3))
```

2.11 Fonctionnalités avancées

Cette brève introduction à Python se limite à des fonctionnalités relativement simples du langage. De nombreuses fonctionnalités plus avancées n'ont pas encore été abordées ⁸.

2.11.1 Arguments anonymes

Il est possible de laisser libre a priori le nombre et le nom des arguments d'une fonction, traditionnellement nommés args (arguments nécessaires) et kwargs (arguments optionnels). P.ex. :

```
>>> def f(*args, **kwargs):
...    print("args:", args)
...    print("kwargs:", kwargs)
>>> f()
args: ()
kwargs: {}
>>> f(1, 2, 3, x=4, y=5)
args: (1, 2, 3)
kwargs: {'y': 5, 'x': 4}
```

Attention : Cela laisse une grande flexibilité dans la signature de la fonction, mais au prix d'une d'une très mauvaise lisibilité de la signature de la fonction. À utiliser avec parcimonie...

2.11.2 Dépaquetage des arguments

Il est possible de dépaqueter les [kw] args d'une fonction à la volée à l'aide de l'opérateur [*]*. Ainsi, avec la même fonction f précédemment définie :

```
>>> my_args = (1, 2, 3)
>>> my_kwargs = dict(x=4, y=5)
>>> f(my_args, my_kwargs)  # 2 args (1 liste et 1 dict.) et 0 kwarg
args: ((1, 2, 3), {'x': 4, 'y': 5})
kwargs: {}
>>> f(*my_args, **my_kwargs)  # 3 args (1, 2 et 3) et 2 kwargs (x et y)
args: (1, 2, 3)
kwargs: {'x': 4, 'y': 5}
```

À partir de Python 3.5, il est encore plus facile d'utiliser un ou plusieurs de ces opérateurs conjointement aux [kw] args traditionnels (PEP 448), dans la limite où les args sont toujours situés avant les kwargs:

```
>>> f(0, *my_args, 9, **my_kwargs, z=6)
args: (0, 1, 2, 3, 9)
kwargs: {'x': 4, 'z': 6, 'y': 5}
```

Je ne parlerai pas ici des variables globales...

2.11.3 Dépaquetage des itérables

Il est également possible d'utiliser l'opérateur * pour les affectations multiples (PEP 3132) :

```
>>> a, b, c = 1, 2, 3, 4
ValueError: too many values to unpack (expected 3)
>>> a, *b, c = 1, 2, 3, 4
>>> a, b, c
(1, [2, 3], 4)
```

2.11.4 Décorateurs

Les fonctions (et méthodes) sont en Python des objets comme les autres, et peuvent donc être utilisées comme arguments d'une fonction, ou retournées comme résultat d'une fonction.

```
def compute_and_print(fn, *args, **kwargs):

print("Function: ", fn.__name__)
print("Arguments: ", args, kwargs)
result = fn(*args, **kwargs)
print("Result: ", result)

return result
```

Les décorateurs sont des fonctions s'appliquant sur une fonction ou une méthode pour en modifier le comportement : elles retournent de façon transparente une version « décorée » (augmentée) de la fonction initiale.

```
def verbose(fn):
                            # fonction 
ightarrow fonction décorée
1
2
        def decorated(*args, **kwargs):
3
            print("Function: ", fn.__name__)
4
            print("Arguments: ", args, kwargs)
5
            result = fn(*args, **kwargs)
6
            print("Result:
                               ", result)
            return result
10
        return decorated
                            # version décorée de la fonction initiale
11
```

```
>>> verbose_sum = verbose(sum) # Décore la fonction standard 'sum'
>>> verbose_sum([1, 2, 3])
Function: sum
Arguments: ([1, 2, 3],) {}
Result: 6
```

Il est possible de décorer une fonction à la volée lors de sa définition avec la notation @ :

```
@verbose
def null(*args, **kwargs):
    pass
```

qui n'est qu'une façon concise d'écrire null = verbose(null).

```
>>> null(1, 2, x=3)
Function: null
Arguments: (1, 2) {'x': 3}
Result: None
```

Noter qu'il est possible d'ajouter plusieurs décorateurs, et de passer des arguments supplémentaires aux décorateurs.

Lien

A guide to Python's function decorators

Python dispose de quelques décorateurs natifs d'intérêt pour les méthodes, notamment :

— staticmethod() transforme une méthode en une méthode statique, c.-à-d. ne s'appliquant pas à l'instance :

La méthode statique peut alors être invoquée via la classe C.f() ou via une instance C().f().

— classmethod() transforme une méthode en une méthode de classe, c.-à-d. s'appliquant à la classe plutôt qu'à l'instance :

```
class C:
    @classmethod
    def f(cls, arg1, arg2, ...): # La classe cls est le 1er argument!
    ...
```

Comme une méthode statique, une méthode de classe peut être invoquée via la classe C.f() ou via une instance C().f().

Les méthodes statiques sont souvent d'intérêt plus général, sans être spécifique à une instance particulière : c'est une fonction indépendante stockée à l'intérieur de la classe. Les méthodes de classe sont quant à elles souvent utilisées pour des initialisations alternatives (voir un exemple d'utilisation et discussion associée).

2.11.5 Fonction anonyme

Il est parfois nécéssaire d'utiliser une fonction intermédiaire *simple* que l'on ne souhaite pas définir explicitement et nommément à l'aide de def. Cela est possible avec l'opérateur fonctionnel lambda args: expression. P.ex.:

```
>>> compute_and_print(sum, [1, 2])  # Fn nommée à 1 argument
Function: sum
Arguments: ([1, 2],), {}
Result: 3
>>> compute_and_print(lambda x, y: x + y, 1, 2)  # Fn anonyme à 2 arguments
Function: <lambda>
Arguments: (1, 2) {}
Result: 3
```

La définition d'une fonction lambda ne peut inclure qu'une seule expression, et est donc contrainte de facto à être très simple, généralement pour être utilisée comme argument d'une autre fonction :

```
>>> pairs = [(1, 'one'), (2, 'two'), (3, 'three'), (4, 'four')]
>>> pairs.sort(key=lambda pair: pair[1])
>>> pairs
[(4, 'four'), (1, 'one'), (3, 'three'), (2, 'two')]
```

Note: il est possible de « nommer » une fonction anonyme, p.ex. :

```
>>> adder = lambda x, y: x + y
```

Cependant, cela est considéré comme une faute de style, puisque ce n'est justement pas l'objectif d'une fonction anonyme! Il n'y a p.ex. pas de docstring associée.

Voir également : Functional Programming

2.11.6 Éléments passés sous silence

Il existe encore beaucoup d'éléments passés sous silence :

```
iterator (next()) et generator (yield);
gestion de contexte : with (PEP 343);
héritages multiples et méthodes de résolution;
annotations de fonctions (PEP 484) et de variables (PEP 526);
f-strings (PEP 498);
etc.
```

Ces fonctionnalités peuvent évidemment être très utiles, mais ne sont généralement pas strictement indispensables pour une première utilisation de Python dans un contexte scientifique.

2.11.7 Python 3.x

Pour des raisons historiques autant que pratiques ⁹, ce cours présentait initialement le langage Python dans sa version 2. Cependant, puisque le développement actuel de Python (et de certaines de ses bibliothèques clés) se fait maintenant uniquement sur la branche 3.x, qui constitue une remise à plat *non rétrocompatible* du langage, et que la branche 2.x ne sera *a priori* plus supporté au-delà de 2020 (**PEP** 466), le cours a été porté sur Python 3 (voir *Python 2 vs. Python 3*).

Python 3 apporte quelques changements fondamentaux, notamment :

- print() n'est plus un mot-clé mais une fonction : print(...);
- l'opérateur / ne réalise plus la division euclidienne entre les entiers, mais toujours la division $r\'{e}elle$;
- la plupart des fonctions qui retournaient des itérables en Python 2 (p.ex. range()) retournent maintenant des itérateurs, plus légers en mémoire;
- un support complet (mais encore complexe) des chaînes Unicode;
- un nouveau système de formatage des chaînes de caractères (f-string du PEP 498 à partir de Python 3.6);
- la fonction de comparaison cmp (et la méthode spéciale associée __cmp__) n'existe plus ¹⁰.

De nombreuses distributions Linux sont encore basées sur Python 2.7 par défaut. Voir functools.total_ordering() pour une alternative.

Bibliothèque standard

Table des matières

- Bibliothèque standard
 - Gestion des arguments/options de la ligne de commande
 - Pickle : sérialisation des données
 - Batteries included
 - Text/Graphical User Interfaces

Python dispose d'une très riche bibliothèque de modules étendant les capacités du langage dans de nombreux domaines : nouveaux types de données, interactions avec le système, gestion des fichiers et des processus, protocoles de communication (internet, mail, FTP, etc.), multimédia, etc.

- The Python Standard Library (v3.x)
- Python Module of the Week (v3.x)

3.1 Gestion des arguments/options de la ligne de commande

Utilisation de sys.argv

Le module sys permet un accès direct aux arguments de la ligne de commande, via la liste sys.argv: sys.argv[0] contient le nom du script executé, sys.argv[1] le nom du 1er argument (s'il existe), etc. P.ex.:

```
# Gestion simplifiée d'un argument entier sur la ligne de commande
import sys

if sys.argv[1:]: # Présence d'au moins un argument sur la ligne de commande

try:

n = int(sys.argv[1]) # Essayer de lire le 1er argument comme un entier

except ValueError:

raise ValueError("L'argument '{}' n'est pas un entier"

format(sys.argv[1]))

else: # Pas d'argument sur la ligne de commande

n = 101 # Valeur par défaut
```

Module argparse

Pour une gestion avancée des arguments et/ou options de la ligne de commande, il est préférable d'utiliser le module argparse. P.ex. :

```
import argparse
2
        parser = argparse.ArgumentParser(
3
            usage="%(proq)s [-p/--plot] [-i/--input coordfile | x1,y1 x2,y2 x3,y3]",
4
            description="Compute the circumscribed circle to 3 points in the plan.")
5
        parser.add_argument('coords', nargs='*', type=str, metavar='x,y',
6
                            help="Coordinates of point")
        parser.add_argument('-i', '--input', nargs='?', type=argparse.FileType('r'),
                            help="Coordinate file (one 'x,y' per line)")
        parser.add_argument('-P', '--plot', action="store_true", default=False,
10
                            help="Draw the circumscribed circle")
11
        parser.add_argument('-T', '--tests', action="store_true", default=False,
12
                            help="Run doc tests")
13
        parser.add_argument('--version', action='version', version=_version__)
14
1.5
        args = parser.parse_args()
16
```

Cette solution génère automatiquement une aide en ligne, p.ex. :

```
$ python3 circonscrit.py -h
usage: circonscrit.py [-p/--plot] [-i/--input coordfile | x1,y1 x2,y2 x3,y3]
Compute the circumscribed circle to 3 points in the plan.
positional arguments:
                        Coordinates of point
 x,y
optional arguments:
 -h, --help
                       show this help message and exit
  -i [INPUT], --input [INPUT]
                       Coordinate file (one 'x,y' per line)
  -p, --plot
                       Draw the circumscribed circle
 -T, --tests
                       Run doc tests
  --version
                       show program's version number and exit
```

3.2 Pickle : sérialisation des données

Le module pickle permet la sauvegarde pérenne d'objets python (« sérialisation »).

```
>>> d = dict(a=1, b=2, c=3)
>>> l = ["Calvin", 6, 1.20]
>>> import pickle
>>> pkl = open('archive.pkl', 'wb')  # Overture du fichier en écriture binaire
>>> pickle.dump((d, 1), pkl, protocol=-1)  # Sérialisation du tuple (d, l)
>>> pkl.close()  # *IMPORTANT!* Fermeture du fichier
>>> d2, l2 = pickle.load(open('archive.pkl', 'rb'))  # Désérialisation (relecture)
>>> (d == d2) and (l == l2)
True
```

Attention : les pickles ne sont pas un format d'échange de données. Ils sont spécifiques à python, et peuvent dépendre de la machine utilisée. Ils peuvent en outre constituer une faille de sécurité.

3.3 Batteries included

Quelques modules de la bibliothèque standard qui peuvent être d'intérêt :

— math : accès aux fonctions mathématiques réelles

```
>>> math.asin(math.sqrt(2) / 2) / math.pi * 180
45.0000000000001
```

— cmath: accès aux fonctions mathématiques complexes

```
>>> cmath.exp(cmath.pi * 1j) + 1
1.2246467991473532e-16j
```

— fractions : définition des nombres rationnels

```
>>> print(fractions.Fraction(2, 3) + fractions.Fraction(5, 6))
3/2
>>> print(fractions.Fraction(*(3.5).as_integer_ratio()))
7/2
```

random : générateurs de nombres aléatoires

```
>>> random.sample(range(10), 3) # Échantillon de 3 éléments sans remplacement
[9, 1, 6]
>>> random.gauss(0, 1) # Distribution normale centrée réduite
0.1245612752121385
```

- autres modules numériques et mathématiques;
- collections définit de nouveaux types spécialisés, p.ex. collections.OrderedDict, un dictionnaire ordonné;
- itertools fournit des générateurs de boucle (itérateurs) et de combinatoire :

```
>>> [ ''.join(item) for item in itertools.combinations('ABCD', 2) ]
['AB', 'AC', 'AD', 'BC', 'BD', 'CD']
```

```
— interactions avec le système :
```

```
— sys, os : interface système,
```

- shutil: opérations sur les fichiers (copy, move, etc.),
- subprocess : éxécution de commandes système,
- glob: métacaractères du shell (p.ex. toto?.*);
- expressions rationnelles (ou regex) : re;
- warnings et logging : gestion des avertissements d'éxécution et mécanismes de logging
- gestion du temps (time) et des dates (datetime, calendar);
- fichiers compressés et archives : gzip, bz2, zipfile, tarfile;
- lecture et sauvegarde des données (outre pickle) :
 - pprint : affichage « amélioré » d'un objet,
 - csv: lecture/sauvegarde de fichiers CSV (Comma Separated Values),
 - ConfigParser: fichiers de configuration,
 - json: lightweight data interchange format;
- lecture d'une URL (p.ex. page web) : urllib2.

3.4 Text/Graphical User Interfaces

```
— TUI (Text User Interface) : curses
```

— GUI (Graphical User Interface): Tkinter,

3.3. Batteries included 27

Bibliothèques externes :

```
TUI : termcolor (texte coloré ANSII), blessed (mise en page)
GUI : PyGI (GTK3), PyQt / pySide (Qt), wxPython (wxWidgets)
```

CHAPITRE 4

Bibliothèques numériques de base

Table des matières — Bibliothèques numériques de base — Numpy — Tableaux — Création de tableaux — Manipulations sur les tableaux — Opérations de base — Tableaux évolués — Entrées/sorties — Sous-modules — Performances - Scipy — Tour d'horizon — Quelques exemples complets - Matplotlib — pylab vs. pyplot — Figure et axes — Sauvegarde et affichage interactif — Anatomie d'une figure — Visualisation 3D

4.1 Numpy

numpy est une bibliothèque num'erique apportant le support efficace de larges tableaux multidimensionnels, et de routines mathématiques de haut niveau (fonctions spéciales, algèbre linéaire, statistiques, etc.).

 ${\bf Note:} \ \ {\bf La \ convention \ d'import \ utilis\'e \ dans \ les \ exemples \ est \ \ {\bf `import \ numpy \ as \ N \ \ ``.}$

Liens:

- Numpy User Guide
- Numpy Reference

4.1.1 Tableaux

Un numpy ndarray (généralement appelé array) est un tableau multidimensionnel homogène: tous les éléments doivent avoir le même type, en général numérique. Les différentes dimensions sont appelées des axes, tandis que le nombre de dimensions -0 pour un scalaire, 1 pour un vecteur, 2 pour une matrice, etc. - est appelé le rang.

```
>>> import numpy as N
                            # Import de la bibliothèque numpy avec le surnom N
>>> a = N.array([1, 2, 3]) # Création d'un array 1D à partir d'une liste d'entiers
>>> a.ndim
               # Rang du tableau
1
               # Vecteur (1D)
              # Format du tableau: par définition, len(shape)=ndim
>>> a.shape
(3,)
               # Vecteur 1D de longueur 3
>>> a.dtype
              # Type des données du tableau
dtype('int32') # Python 'int' = numpy 'int32' = C 'long'
>>> # Création d'un tableau 2D de float (de 0. à 12.) de shape 4\times3
>>> b = N.arange(12, dtype=float).reshape(4, 3); b
array([[ 0., 1.,
                     2.],
        3.,
               4.,
                     5.],
               7.,
         6.,
                     8.1.
       [ 9., 10., 11.]])
>>> b.shape
                        # Nb d'éléments le long de chacune des dimensions
(4, 3)
                        # 4 lignes, 3 colonnes
>>> b.size
                        # Nb *total* d'éléments dans le tableau
12
                        # Par définition, size = prod(shape)
>>> b.dtype
dtype('float64')
                        # Python 'float' = numpy 'float64' = C 'double'
```

Création de tableaux

— numpy.array(): convertit une liste d'éléments homogènes ou coercibles

```
>>> N.array([[1, 2],[3., 4.]]) # Liste de listes d'entiers et de réels array([[ 1., 2.], # Tableau 2D de réels [ 3., 4.]])
```

— numpy.zeros() (resp. numpy.ones() et numpy.full()) : crée un tableau de format donné rempli de zéros (resp. de uns et d'une valeur fixe)

— numpy.arange() : crée une séquence de nombres, en spécifiant éventuellement le *start*, le *end* et le *step* (similaire à range() pour les listes)

```
>>> N.arange(10, 30, 5) # De 10 à 30 (exclu) par pas de 5, type entier par défaut array([10, 15, 20, 25])
```

(suite sur la page suivante)

```
>>> N.arange(0.5, 2.1, 0.3) # Accepte des réels en argument, DANGER!
array([ 0.5, 0.8, 1.1, 1.4, 1.7, 2. ])
```

— numpy.linspace() (resp. numpy.logspace()): répartition uniforme (resp. logarithmique) d'un nombre fixe de points entre un *start* et un *end* (préférable à numpy.arange() sur des réels).

```
>>> N.linspace(0, 2*N.pi, 5) # 5 nb entre 0 et 2π *inclus*, type réel par défaut array([ 0., 1.57079633, 3.14159265, 4.71238898, 6.28318531])
>>> N.logspace(-1, 1, 5) # 5 nb répartis log. entre 10**(±1) array([ 0.1 , 0.31622777, 1. , 3.16227766, 10. ])
```

— numpy.meshgrid() est similaire à numpy.linspace() en 2D ou plus :

```
>>> # 5 points entre 0 et 2 en "x", et 3 entre 0 et 1 en "y"
>>> x = N.linspace(0, 2, 5); x
                                        # Tableau 1D des x, (5,)
array([ 0. , 0.5, 1. , 1.5, 2. ])
>>> y = N.linspace(0, 1, 3); y
                                        # Tableau 1D des y, (3,)
array([ 0. , 0.5, 1. ])
>>> xx, yy = N.meshgrid(x, y)
                                        # Tableaux 2D des x et des y
                                        # Tableau 2D des x, (3, 5)
>>> xx
array([[ 0. , 0.5, 1. , 1.5, 2. ],
       [ 0., 0.5, 1., 1.5, 2. ],
       [0., 0.5, 1., 1.5, 2.]
>>> yy
                                         # Tableau 2D des y, (3, 5)
array([[ 0. , 0. , 0. , 0. , 0. ], [ 0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 0.5],
       [ 1. , 1. , 1. , 1. , 1.]])
```

— numpy.mgrid permet de générer des rampes d'indices (entiers) ou de coordonnées (réels) de rang arbitraire avec une notation évoluée faisant appel aux *Index tricks*. Équivalent à numpy. linspace() en 1D et similaire (mais différent) à numpy.meshgrid() en 2D.

```
>>> N.mgrid[0:4, 1:6:2]
                         # Grille 2D d'indices (entiers)
array([[[0, 0, 0],
                          # 0:4 = [0, 1, 2, 3] selon l'axe 0
        [1, 1, 1],
        [2, 2, 2],
        [3, 3, 3]],
       [[1, 3, 5],
                          # 1:6:2 = [1, 3, 5] selon l'axe 1
        [1, 3, 5],
        [1, 3, 5],
        [1, 3, 5]])
>>> N.mgrid[0:2*N.pi:5j] # Rampe de coordonnées (réels): 5 nb de 0 à 2\pi (inclus)
array([ 0., 1.57079633, 3.14159265, 4.71238898, 6.28318531])
>>> # 3 points entre 0 et 1 selon l'axe 0, et 5 entre 0 et 2 selon l'axe 1
>>> z = N.mgrid[0:1:3j, 0:2:5j]; z
\operatorname{array}([[[\ 0.\ ,\ 0.\ ,\ 0.\ ,\ 0.\ ],\ \# \ \text{Axe O variable, axe 1 constant}
        [0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 0.5],
        [1., 1., 1., 1., 1.]],
       [[ 0. , 0.5, 1. , 1.5, 2. ], \mbox{\tt\#} Axe O constant, axe 1 variable
        [0., 0.5, 1., 1.5, 2.],
        [0., 0.5, 1., 1.5, 2.]]])
>>> z.shape
            # 2 plans 2D (x, y) de 3 lignes (y) \times 5 colonnes (x)
(2, 3, 5)
>>> N.mgrid[0:1:5j, 0:2:7j, 0:3:9j].shape
(3, 5, 7, 9) # 3 volumes 3D (x, y, z) de 5 plans (z) × 7 lignes (y) × 9 colonnes (x)
```

Attention : à l'ordre de variation des indices dans les tableaux multidimensionnels, et aux différences entre numpy.meshgrid() et numpy.mgrid.

— numpy.random.rand() crée un tableau d'un format donné de réels aléatoires dans [0, 1[; numpy.

4.1. Numpy 31

random.randn() génère un tableau d'un format donné de réels tirés aléatoirement d'une distribution gaussienne (normale) standard $\mathcal{N}(\mu=0,\sigma^2=1)$.

Manipulations sur les tableaux

Les array 1D sont indexables comme les listes standard. En dimension supérieure, chaque axe est indéxable indépendamment.

```
>>> x = N.arange(10); # Rampe 1D

>>> x[1::3] *= -1; x # Modification sur place ("in place")

array([ 0, -1, 2, 3, -4, 5, 6, -7, 8, 9])
```

Slicing

Les sous-tableaux de rang < N d'un tableau de rang N sont appelées slices: le (ou les) axe(s) selon le(s)quel(s) la slice a été découpée, devenu(s) de longueur 1, est (sont) éliminé(s).

```
>>> y = N.arange(2*3*4).reshape(2, 3, 4); y # 2 plans, 3 lignes, 4 colonnes
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]]])
>>> y[0, 1, 2] # 1er plan (axe 0), 2e ligne (axe 1), 3e colonne (axe 2)
               # Scalaire, shape *()*, ndim 0
>>> y[0, 1]
               \# = y[0, 1, :] 1er plan (axe 0), 2e ligne (axe 1)
array([4, 5, 6, 7])
                         # Shape (4,)
>>> y[0]
               # = y[0, :, :] 1er plan (axe 0)
array([[ 0, 1, 2, 3],
       [4, 5, 6, 7],
       [ 8, 9, 10, 11]]) # Shape (3, 4)
>>> y[0][1][2] # = y[0, 1, 2] en ~4× plus lent (slices successives)
>>> y[:, -1] # = y[:, 2, :] Dernière slice selon le 2e axe
array([[ 8, 9, 10, 11],
       [20, 21, 22, 23]]) # Shape (2, 4)
>>> y[..., 0] # = y[:, :, 0] 1re slice selon le dernier axe
array([[ 0, 4, 8],
       [12, 16, 20]])
                          # Shape (2, 3)
>>> # On peut vouloir garder explicitement la dimension "tranchée"
>>> y[..., 0:1] # 1re slice selon le dernier axe *en gardant le rang originel*
array([[[ 0],
       [4],
       [8]],
       [[12],
       [16],
       [20]]])
>>> y[..., 0:1].shape
(2, 3, 1) # Le dernier axe a été conservé, il ne contient pourtant qu'un seul élément
```

Modification de format

numpy.ndarray.reshape() modifie le format d'un tableau sans modifier le nombre total d'éléments :

```
>>> y = N.arange(6).reshape(2, 3); y # Shape (6,) \rightarrow (2, 3) (*size* inchangé) array([[0, 1, 2],
```

```
[3, 4, 5]])
>>> y.reshape(2, 4)  # Format incompatible (*size* serait modifié)
ValueError: total size of new array must be unchanged
```

numpy.ndarray.ravel() « déroule » tous les axes et retourne un tableau de rang 1 :

numpy.ndarray.transpose() transpose deux axes, par défaut les derniers (raccourci : numpy.ndarray.
T) :

numpy.ndarray.squeeze() élimine tous les axes de dimension 1. $numpy.expand_dims()$ ajoute un axe de dimension 1 en position arbitraire. Cela est également possible en utilisant notation slice avec numpy.newaxis.

```
>>> y[..., 0:1].squeeze() # Élimine *tous* les axes de dimension 1
array([0, 3])
>>> N.expand_dims(y[..., 0], -1).shape # Ajoute un axe de dim. 1 en dernière position
(2, 1)
>>> y[:, N.newaxis].shape # Ajoute un axe de dim. 1 en 2de position
(2, 1, 3)
```

numpy.resize() modifie le format en modifiant le nombre total d'éléments :

Attention : N.resize(arr, shape) (complétion avec des copies de arr) est différent de arr. resize(shape) (complétion avec des 0).

Exercice:

Inversion de matrice *

Stacking

```
>>> a = N.arange(5); a
array([0, 1, 2, 3, 4])
>>> N.hstack((a, a)) # Stack horizontal (le long des colonnes)
array([0, 1, 2, 3, 4, 0, 1, 2, 3, 4])
>>> N.vstack((a, a)) # Stack vertical (le long des lignes)
```

(suite sur la page suivante)

4.1. Numpy 33

Broadcasting

L''array broadcasting définit les régles selon lesquelles deux tableaux de formats différents peuvent éventuellement s'apparier.

- 1. Deux tableaux sont compatibles (broadcastable) si, pour chaque axe, soit les tailles sont égales, soit l'une d'elles est exactement égale à 1. P.ex. (5, 3) et (1, 3) sont des formats broadcastable, (5, 3) et (5, 1) également, mais (5, 3) et (3, 1) ne le sont pas.
- 2. Si un tableau a un axe de taille 1, le tableau sera dupliqué à la volée autant de fois que nécessaire selon cet axe pour attendre la taille de l'autre tableau le long de cet axe. P.ex. un tableau (2, 1, 3) pourra être transformé en tableau (2, 5, 3) en le dupliquant 5 fois le long du 2e axe (axis=1).
- 3. La taille selon chaque axe après broadcast est égale au maximum de toutes les tailles d'entrée le long de cet axe. P.ex. $(5, 3, 1) \times (1, 3, 4) \rightarrow (5, 3, 4)$.
- 4. Si un des tableaux a un rang (ndim) inférieur à l'autre, alors son format (shape) est précédé d'autant de 1 que nécessaire pour atteindre le même rang. P.ex. $(5, 3, 1) \times (4,) = (5, 3, 1) \times (1, 1, 4) \rightarrow (5, 3, 4)$.

```
>>> a = N.arange(6).reshape(2, 3); a # Shape (2, 3)
array([[0, 1, 2],
       [3, 4, 5]])
>>> b = N.array([10, 20, 30]); b
                                     # Shape (3,)
array([10, 20, 30])
                               # Shape (3,) \sim (1, 3) \rightarrow (2, 3) = (1, 3) copié 2 fois
>>> a + b
array([[10, 21, 32],
       [13, 24, 35]])
                               # Shape (2, 3)
>>> c = N.array([10, 20]); c # Shape (2,)
array([10, 20])
>>> a + c
                               # Shape (2,) ~ (1, 2) incompatible avec (2, 3)
ValueError: shape mismatch: objects cannot be broadcast to a single shape
>>> c[:, N.newaxis]
                               \# = c.reshape(-1, 1) Shape (2, 1)
array([[10],
       [20]])
>>> a + c[:, N.newaxis]
                               # Shape (2, 1) \rightarrow (2, 3) = (2, 1) copié 3 fois
array([[10, 11, 12],
       [23, 24, 25]])
```

Voir également cette présentation.

Indexation évoluée

Opérations de base

Opérations sur les axes

```
>>> x = N.random.permutation(6).reshape(3, 2); x # 3 lignes, 2 colonnes
array([[3, 4],
       [5, 1],
       [0, 2]])
>>> x.min()
                     # Minimum qlobal (comportement par défaut: `axis=None`)
0
>>> x.min(axis=0) # Minima le long de l'axe 0 (i.e. l'axe des lignes)
array([0, 1])
                    # ce sont les minima colonne par colonne: (*3*, 2) \rightarrow (2,)
>>> x.min(axis=1)
                  # Minima le long de l'axe 1 (i.e. l'axe des colonnes)
array([3, 1, 0])
                   # ce sont les minima ligne par ligne (3, *2*) \rightarrow (3,)
>>> x.min(axis=1, keepdims=True) # Idem mais en *conservant* le format originel
array([[3],
       [1].
       [0]])
>>> x.min(axis=(0, 1)) # Minima le long des axes 0 *et* 1 (c.-à-d. ici tous les axes)
```

Opérations matricielles

Les opérations de base s'appliquent sur les *éléments* des tableaux, et n'ont pas une signification matricielle par défaut :

4.1. Numpy 35

Il est possible d'utiliser systématiquement les opérations matricielles en manipulant des numpy.matrix plutôt que de numpy.ndarray :

Le sous-module numpy.linalg fournit des outils spécifiques au calcul matriciel (inverse, déterminant, valeurs propres, etc.).

Ufuncs

numpy fournit de nombreuses fonctions mathématiques de base (numpy.exp(), numpy.atan2(), etc.) s'appliquant directement sur les éléments des tableaux d'entrée :

Exercices:

Median Absolute Deviation *, Distribution du pull ***

4.1.2 Tableaux évolués

Types composés

Par définition, tous les éléments d'un tableau homogène doivent être du même type. Cependant, outre les types scalaires élémentaires – bool, int, float, complex, str, etc. – numpy supporte les types composés, c.-à-d. incluant plusieurs sous-éléments de types différents :

```
>>> dt = N.dtype([('nom', 'S10'),
                                     # 1er élément: une chaîne de 10 caractères
                  ('age', 'i'),
                                    # 2e élément: un entier
                  ('taille', 'd')]) # 3e élément: un réel (double)
>>> arr = N.array([('Calvin', 6, 1.20), ('Hobbes', 5, 1.80)], dtype=dt); arr
array([('Calvin', 6, 1.2), ('Hobbes', 6, 1.8)],
      dtype=[('nom', '|S10'), ('age', '<i4'), ('taille', '<f8')])</pre>
>>> arr[0]
                                      # Accès par élément
('Calvin', 6, 1.2)
>>> arr['nom']
                                      # Accès par sous-type
array(['Calvin', 'Hobbes'], dtype='|S10')
>>> rec = arr.view(N.recarray); arr # Vue de type 'recarray'
rec.array([('Calvin', 6, 1.2), ('Hobbes', 5, 1.8)],
      dtype=[('nom', '|S10'), ('age', '<i4'), ('taille', '<f8')])</pre>
                                      # Accès direct par attribut
chararray(['Calvin', 'Hobbes'], dtype='|S10')
```

Les tableaux structurés sont très puissants pour manipuler des données (semi-)hétérogènes, p.ex. les entrées du catalogue CSV des objets de Messier Messier.csv :

```
# Messier, NGC, Magnitude, Size [arcmin], Distance [pc], RA [h], Dec [deg], Constellation, Season, Name

# Attention: les données n'ont pas vocation à être très précises!

# D'après http://astropixels.com/messier/messiercat.html

M,NGC,Type,Mag,Size,Distance,RA,Dec,Con,Season,Name

M1,1952,Sn,8.4,5.0,1930.0,5.575,22.017,Tau,winter,Crab Nebula

M2,7089,Gc,6.5,12.9,11600.0,21.558,0.817,Aqr,autumn,

M3,5272,Gc,6.2,16.2,10400.0,13.703,28.383,CVn,spring,

M4,6121,Gc,5.6,26.3,2210.0,16.393,-26.533,Sco,summer,
```

```
# N° catalogue Messier
>>> dt = N.dtype([('M', 'S3'),
                 ('NGC', 'i'),
                                  # N° New General Catalogue
. . .
                 ('Type', 'S2'),  # Code type
                 ('Mag', 'f'), # Magnitude
                 ('Size', 'f'),
                                   # Taille [arcmin]
                 ('Distance', 'f'), # Distance [pc]
                                # Ascension droite [h]
                 ('RA', 'f'),
                 ('Dec', 'f'),
                                    # Déclinaison [deq]
. . .
                 ('Con', 'S3'),
                                    # Code constellation
. . .
                 ('Season', 'S6'),
                                    # Saison
. . .
                 ('Name', 'S30')]) # Nom alternatif
>>> messier = N.genfromtxt("Messier.csv", dtype=dt, delimiter=',', comments='#')
>>> messier[1]
('M1', 1952, 'Sn', 8.39999962, 5., 1930., 5.57499981, 22.0170002, 'Tau', 'winter', 'Crabu
→Nebula')
>>> N.nanmean(messier['Mag'])
7.4927273
```

Tableaux masqués

Le sous-module numpy.ma ajoute le support des tableaux masqués ($Masked\ Arrays$). Imaginons un tableau $(4,\ 5)$ de réels (positifs ou négatifs), sur lequel nous voulons calculer pour chaque colonne la moyenne des éléments positifs uniquement :

```
>>> x = N.random.randn(4, 5); x
array([[-0.55867715, 1.58863893, -1.4449145 , 1.93265481, -0.17127422],
        \hbox{ $[-0.86041806, 1.98317832, -0.32617721, 1.1358607, -1.66150602],} \\
       \hbox{\tt [-0.88966893, \ 1.36185799, \ -1.54673735, \ -0.09606195, \ 2.23438981],}
        \hbox{\tt [0.35943269, -0.36134448, -0.82266202, 1.38143768, -1.3175115]]) }
>>> x[x >= 0]
                # Donne les éléments >0 du tableau, sans leur indice
array([ 1.58863893, 1.93265481, 1.98317832, 1.1358607, 1.36185799, 2.23438981, 0.35943269, 1.38143768])
>>> (x >= 0).nonzero() # Donne les indices ([i], [j]) des éléments positifs
(array([0, 0, 1, 1, 2, 2, 3, 3]), array([1, 3, 1, 3, 1, 4, 0, 3]))
>>> y = N.ma.masked_less(x, 0); y # Tableau où les éléments <0 sont masqués
masked_array(data =
[[-- 1.58863892701 -- 1.93265481164 --]
                                             # Données
 [-- 1.98317832359 -- 1.13586070417 --]
 [-- 1.36185798574 -- -- 2.23438980788]
 [0.359432688656 -- -- 1.38143767743 --]],
             mask =
 [[ True False True False True]
                                            # Bit de masquage
 [ True False True False True]
 [ True False True True False]
 [False True True False True]],
      fill_value = 1e+20)
>>> m0 = y.mean(axis=0); m0
                                             # Moyenne sur les lignes (axe 0)
masked_array(data = [0.359432688656 1.64455841211 -- 1.48331773108 2.23438980788],
             mask = [False False True False False],
```

(suite sur la page suivante)

4.1. Numpy 37

Note : Les tableaux *évolués* de numpy sont parfois suffisants, mais pour une utilisation avancée, il peut être plus pertinent d'invoquer les bibliothèques dédiées *Pandas et xarray*.

4.1.3 Entrées/sorties

 $\label{eq:local_sum} \begin{array}{l} \text{numpy peut lire-numpy.loadtxt()-ou sauvegarder-numpy.savetxt()-des tableaux dans un simple fichier ASCII:} \end{array}$

```
>>> x = N.linspace(-1, 1, 100)
>>> N.savetxt('archive_x.dat', x)  # Sauvegarde dans le fichier 'archive_x.dat'
>>> y = N.loadtxt("archive_x.dat")  # Relecture à partir du fichier 'archive_x.dat'
>>> (x == y).all()  # Test d'égalité stricte
True
```

Attention : numpy.loadtxt() supporte les types composés, mais ne supporte pas les données manquantes; utiliser alors la fonction numpy.genfromtxt(), plus robuste mais plus lente.

Le format texte n'est pas optimal pour de gros tableaux : il peut alors être avantageux d'utiliser le format binaire .npy, beaucoup plus compact (mais non human readable) :

```
>>> x = N.linspace(-1, 1, 1e6)
>>> N.save('archive_x.npy', x)  # Sauvegarde dans le fichier 'archive_x.npy'
>>> y = N.load("archive_x.npy")  # Relecture à partir du fichier 'archive_x.npy'
>>> (x == y).all()
True
```

Il est enfin possible de sérialiser les tableaux à l'aide de la bibliothèque standard pickle.

4.1.4 Sous-modules

numpy fournit en outre quelques fonctionnalités supplémentaires, parmis lesquelles les sous-modules suivants :

```
-- \ {\tt numpy.fft} : {\it Discrete Fourier Transform} \, ;
```

- numpy.random : valeurs aléatoires ;
- numpy.polynomial: manipulation des polynômes (racines, polynômes orthogonaux, etc.).

4.1.5 Performances

```
Avertissement: Premature optimization is the root of all evil – Donald Knuth
```

Même si numpy apporte un gain significatif en performance par rapport à du Python standard, il peut être possible d'améliorer la vitesse d'exécution par l'utilisation de bibliothèques externes dédiées, p.ex. :

— NumExpr est un évaluateur optimisé d'expressions numériques :

```
>>> a = N.arange(1e6)
>>> b = N.arange(1e6)
>>> %timeit a*b - 4.1*a > 2.5*b
100 loops, best of 3: 11.4 ms per loop
>>> %timeit numexpr.evaluate("a*b - 4.1*a > 2.5*b")
100 loops, best of 3: 1.97 ms per loop
>>> %timeit N.exp(-a)
10 loops, best of 3: 60.1 ms per loop
>>> timeit numexpr.evaluate("exp(-a)") # Multi-threaded
10 loops, best of 3: 19.3 ms per loop
```

- Bottleneck est une collection de fonctions accélérées, notamment pour des tableaux contenant des NaN ou pour des statistiques glissantes;
- theano, pour optimiser l'évaluation des expressions mathématiques sur les tableaux numpy, notamment par l'utilisation des GPU (Graphics Processing Unit) et de code C généré à la volée.

```
Attention: theano n'est officiellement plus soutenu.
```

Voir également Profilage et optimisation.

4.2 Scipy

scipy est une bibliothèque $num\'erique^1$ d'algorithmes et de fonctions mathématiques, basée sur les tableaux numpy.ndarray, complétant ou améliorant (en termes de performances) les fonctionnalités de numpy.

Note: N'oubliez pas de citer scipy & co. dans vos publications et présentations utilisant ces outils.

4.2.1 Tour d'horizon

```
scipy.special: fonctions spéciales (fonctions de Bessel, erf, gamma, etc.).
scipy.integrate: intégration numérique (intégration numérique ou d'équations différentielles).
scipy.optimize: méthodes d'optimisation (minimisation, moindres-carrés, zéros d'une fonction, etc.).
scipy.interpolate: interpolation (interpolation, splines).
scipy.fftpack: transformées de Fourier.
scipy.signal: traitement du signal (convolution, corrélation, filtrage, ondelettes, etc.).
scipy.linalg: algèbre linéaire.
scipy.stats: statistiques (fonctions et distributions statistiques).
scipy.ndimage: traitement d'images multi-dimensionnelles.
scipy.io: entrées/sorties.
```

Liens:

Scipy ReferenceScipy Cookbook

Voir également :

— Scikits : modules plus spécifiques étroitement liés à scipy, parmi lesquels :

Python dispose également d'une bibliothèque de calcul formel, sympy, et d'un environnement de calcul mathématique, sage.

4.2. Scipy 39

```
— scikit-learn: machine learning,
   — scikit-image: image processing,
   — statsmodel: modèles statistiques (tutorial),

    Scipy Topical softwares.
```

Exercices:

Quadrature et zéro d'une fonction *, Schéma de Romberg **, Méthode de Runge-Kutta **

4.2.2 Quelques exemples complets

- Interpolation
- Integration (intégrales numériques, équations différentielles)
 - odeint notebook
 - Zombie Apocalypse
- Optimisation (moindres carrés, ajustements, recherche de zéros)
- Traitement du signal (splines, convolution, filtrage)
- Algèbre linéaire (systèmes linéaires, moindres carrés, décompositions)
- Statistiques (variables aléatoires, distributions, tests)

4.3 Matplotlib

Matplotlib est une bibliothèque graphique de visualisation 2D (avec un support pour la 3D, l'animation et l'interactivité), permettant des sorties de haute qualité « prêtes à publier ». C'est à la fois une bibliothèque de haut niveau, fournissant des fonctions de visualisation « clés en main » (échelle logarithmique, histogramme, courbes de niveau, etc., voir la galerie), et de bas niveau, permettant de modifier tous les éléments graphiques de la figure (titre, axes, couleurs et styles des lignes, etc., voir Anatomie d'une figure).

4.3.1 pylab vs. pyplot

Il existe deux interfaces pour deux types d'utilisation :

pylab: interface procédurale, originellement très similaire à MATLABTM et généralement réservée à l'analyse interactive :

```
>>> from pylab import *
                               # DÉCONSEILLÉ DANS UN SCRIPT!
>>> x = linspace(-pi, pi, 100) # pylab importe numpy dans l'espace courant
>>> plot(x, sin(x), 'b-', label="Sinus")
                                          # Trace la courbe y = sin(x)
>>> plot(x, cos(x), 'r:', label="Cosinus") # Trace la courbe y = cos(x)
>>> xlabel("x [rad]")
                                # Ajoute le nom de l'axe des x
>>> ylabel("y")
                                # Ajoute le nom de l'axe des y
>>> title("Sinus et Cosinus")
                               # Ajoute le titre de la figure
>>> legend()
                                # Ajoute une légende
>>> savefig("simple.png")
                                # Enregistre la figure en PNG
```

matplotlib.pyplot: interface orientée objet, préférable pour les scripts:

```
import numpy as N
import matplotlib.pyplot as P
x = N.linspace(-N.pi, N.pi, 100)
fig, ax = P.subplots() # Création d'une figure contenant un seul système d'axes
ax.plot(x, N.sin(x), c='b', ls='-', label="Sinus") # Courbe y = sin(x)
ax.plot(x, N.cos(x), c='r', ls=':', label="Cosinus") # Courbe y = cos(x)
```

```
ax.set_xlabel("x [rad]")  # Nom de l'axe des x

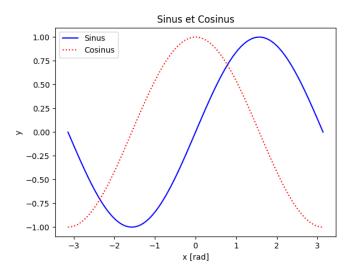
ax.set_ylabel("y")  # Nom de l'axe des y

ax.set_title("Sinus et Cosinus")  # Titre de la figure

ax.legend()  # Légende

fig.savefig("simple.png")  # Sauvegarde en PNG
```

Dans les deux cas, le résultat est le même :



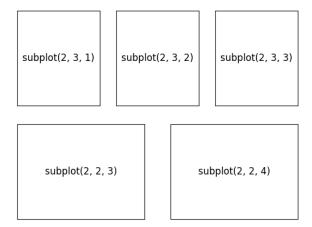
Par la suite, nous nous concentrerons sur l'interface OO (Orientée Objet) matplotlib.pyplot, plus puissante et flexible.

4.3.2 Figure et axes

L'élément de base est le système d'axes matplotlib.axes.Axes, qui définit et réalise la plupart des éléments graphiques (tracé de courbes, définition des axes, annotations, etc.). Un ou plusieurs de ces systèmes d'axes sont regroupés au sein d'une matplotlib.figure.Figure.

Ainsi, pour générer une figure contenant 2 (vertical) \times 3 (horizontal) = 6 systèmes d'axes (numérotés de 1 à 6) :

4.3. Matplotlib 41



Pour des mises en page plus complexes, il est possible d'utiliser le kit gridspec, p.ex. :

```
from matplotlib.gridspec import GridSpec

fig = P.figure()
fig.suptitle("grid = GridSpec(2, 3)", fontsize='x-large')

grid = GridSpec(2, 3)
ax1 = fig.add_subplot(grid[0, :-1], xticks=[], yticks=[])
ax1.text(0.5, 0.5, "grid[0, :-1]", ha='center', va='center', size='large')
ax2 = fig.add_subplot(grid[:, -1], xticks=[], yticks=[])
ax3.text(0.5, 0.5, "grid[:, -1]", ha='center', va='center', size='large')
ax3 = fig.add_subplot(grid[1, 0], xticks=[], yticks=[])
ax3.text(0.5, 0.5, "grid[1, 0]", ha='center', va='center', size='large')
ax4 = fig.add_subplot(grid[1, 1], xticks=[], yticks=[])
ax4.text(0.5, 0.5, "grid[1, 1]", ha='center', va='center', size='large')
```

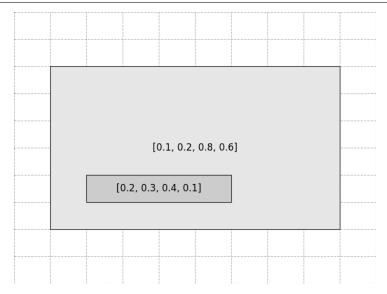
grid = GridSpec(2, 3)

grid[0, :-1]

grid[1, 0] grid[1, 1]

Enfin, il est toujours possible (mais peu pratique) de créer soi-même le système d'axes dans les coordonnées relatives à la figure :

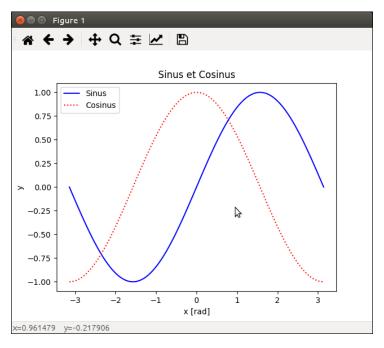
```
ax1 = fig.add_axes([0.1, 0.2, 0.8, 0.6], xticks=[], yticks=[], fc='0.9')
ax1.text(0.5, 0.5, "[0.1, 0.2, 0.8, 0.6]", ha='center', va='center', size='large')
ax2 = fig.add_axes([0.2, 0.3, 0.4, 0.1], xticks=[], yticks=[], fc='0.8')
ax2.text(0.5, 0.5, "[0.2, 0.3, 0.4, 0.1]", ha='center', va='center', size='large')
```



4.3.3 Sauvegarde et affichage interactif

La méthode matplotlib.figure.Figure.savefig() permet de sauvegarder la figure dans un fichier dont le format est automatiquement défini par son extension, png (raster), [e]ps, pdf, svg (vector), etc., via différents backends.

Il est également possible d'afficher la figure dans une fenêtre interactive avec la commande matplotlib. pyplot.show():



Note: Utiliser ipython --pylab pour l'utilisation intéractive des figures dans une session ipython.

4.3. Matplotlib 43

4.3.4 Anatomie d'une figure

L'interface OO matplotlib.pyplot donne accès à tous les éléments d'une figure (titre, axes, légende, etc.), qui peuvent alors être ajustés (couleur, police, taille, etc.).

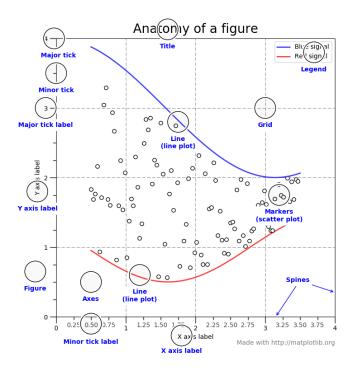


Fig. 4.1 – **Figure :** Anatomie d'une figure.

Note: N'oubliez pas de citer matplotlib (notamment [Matplotlib07]) dans vos publications et présentations utilisant cet outil.

Liens:

- User's Guide
- Gallery
- Tutorial matplotlib
- Tutoriel matplotlib

Voir également :

- MPLD3, un backend matplotlib interactif basé sur la bibliothèque web 3D.js;
- basemap et cartopy, bibliothèques de cartographie sphérique;
- Seaborn, une surcouche de visualisation statistique à matplotlib et *Pandas et xarray*;
- HoloViews, une surcouche de visualisation et d'analyse à matplotlib;
- ggplot, une surcouche orientée Grammar of Graphics à matplotlib;
- Bokeh, une bibliothèque graphique alternative à matplotlib plus orientée web/temps réel.

Exemples:

figure.py, filtres2ndOrdre.py

Exercices:

 $Quartet\ d'Anscombe\ ^*,\ Ensemble\ de\ Julia\ ^{**},\ Diagramme\ de\ bifurcation\ :\ la\ suite\ logistique\ ^{**}$

4.3.5 Visualisation 3D

Matplotlib fournit d'emblée une interface mplot3d pour des figures 3D assez simples :

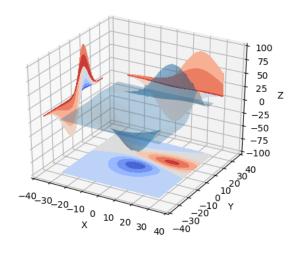


Fig. 4.2 – **Figure :** Exemple de figure matplotlib 3D.

Pour des visualisations plus complexes, mayavi.mlab est une bibliothèque graphique de visualisation 3D s'appuyant sur Mayavi.

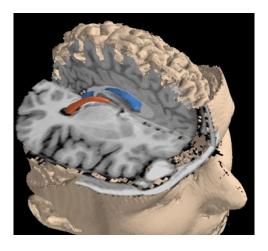


Fig. 4.3 – **Figure :** Imagerie par résonance magnétique.

Note: N'oubliez pas de citer mayavi dans vos publications et présentations utilisant cet outil.

Voir également :

— VPython: 3D Programming for Ordinary Mortals;

4.3. Matplotlib 45

— Glowscript : VPython dans le navigateur.

Notes de bas de page et références bibliographiques

Bibliothèques scientifiques avancées

Table des matières

- Bibliothèques scientifiques avancées
 - Pandas et xarray
 - Structures
 - Accès aux données
 - Manipulation des données
 - Regroupement et agrégation de données
 - Visualisations
 - Xarray
 - Astropy
 - Tour d'horizon
 - Démonstration
 - Autres bibliothèques scientifiques

5.1 Pandas et xarray

pandas est une bibliothèque pour la structuration et l'analyse avancée de données $h\acute{e}t\acute{e}rog\grave{e}nes$ (PANel DAta). Elle fournit notamment :

- des structures de données relationelles (« labellisées »), avec une indexation simple ou hiérarchique (c.-à-d. à plusieurs niveaux);
- des méthodes d'alignement et d'agrégation des données, avec gestion des données manquantes;
- un support performant des labels temporels (p.ex. dates, de par son origine dans le domaine de l'économétrie), et des statistiques « glissantes »;
- de nombreuses fonctions d'entrée/sortie, d'analyse statistiques et de visualisation.

Les fonctionnalités de pandas sont *très* riches et couvrent de nombreux aspects (données manquantes, dates, analyse statistiques, etc.) : il n'est pas question de toutes les aborder ici. Avant de vous lancer dans une manipulation qui vous semble complexe, bien inspecter la documentation, très complète (p.ex. les recettes du cookbook), pour vérifier qu'elle n'est pas déjà implémentée ou documentée, ou pour identifier l'approche la plus efficace.

Note: La convention utilisée ici est « import pandas as PD ».

Attention : Les bibliothèques pandas et xarray sont encore en phase de développement assez intense, et vont probablement être amenées à évoluer significativement, et pas nécessairement de manière rétro-compatible. Nous travaillons ici sur les versions :

```
pandas 0.21.xxarray 0.10.x
```

5.1.1 Structures

Références: Introduction to Data Structures

Pandas dispose de deux grandes structures de données ¹ :

Nom de la structure	Rang	Description
pandas.Series	1	Vecteur de données homogènes labellisées
pandas.DataFrame	2	Tableau structuré de colonnes homogènes

```
>>> PD.Series(range(3)) # Série d'entiers sans indexation
0
    0
1
    1
    2
dtype: int64
>>> PD.Series(N.random.randn(3), index=list('abc')) # Série de réels indexés
   -0.553480
    0.081297
   -1.845835
dtype: float64
>>> PD.DataFrame(N.random.randn(3, 4))
                 1 2
         Ω
0 1.570977 -0.677845 0.094364 -0.362031
1 -0.136712  0.762300  0.068611  1.265816
2 -0.697760 0.791288 0.449645 -1.105062
>>> PD.DataFrame([(1, N.exp(1), 'un'), (2, N.exp(2), 'deux'), (3, N.exp(3), 'trois')],
                index=list('abc'), columns='i val nom'.split())
a 1
     2.718282
                   un
b
  2
     7.389056
                 deux
c 3 20.085537 trois
```

Pour mettre en évidence la puissance de Pandas, nous utiliserons le catalogue des objets Messier vu précédemment. Le fichier peut être importé à l'aide de la function pandas.read_csv(), et le dataframe résultant est labellisé à la volée par la colonne M (pandas.DataFrame.set_index()):

(suite sur la page suivante)

Les structures pandas. Panel (de rang 3), pandas. Panel 4D (de rang 4) et pandas. Panel ND (de rang arbitraire) sont considérées comme **dépréciées** et seront retirées dans une version ultérieure. Utiliser une indexation hiérarchique ou xarray.

```
Size
           110 non-null float64
Distance
          110 non-null float64
           110 non-null float64
           110 non-null float64
           110 non-null object
Season
           110 non-null object
           31 non-null object
dtypes: float64(5), object(5)
memory usage: 9.5+ KB
>>> messier.head(3) # Par défaut les 5 premières lignes
    NGC Type Mag Size Distance
                                         Dec Con Season
                                  RA
                                                                    Name
М
M1
   1952
          Sn 8.4
                  5.0
                         1930.0
                                 5.575 22.017 Tau winter Crab Nebula
   7089
          Gc 6.5 12.9
                         11600.0 21.558
                                         0.817
                                                 Aqr
                                                     autumn
M3 5272
          Gc 6.2 16.2
                         10400.0 13.703 28.383
                                                 CVn
                                                     spring
                                                                     NaN
```

Un dataframe est caractérisé par son indexation pandas. DataFrame.index et ses colonnes pandas. DataFrame.columns (de type pandas.Index ou pandas.MultiIndex), et les valeurs des données pandas. DataFrame.values:

```
>>> messier.index
                     # Retourne un Index
Index([u'M1', u'M2', u'M3', ..., u'M108', u'M109', u'M110'],
     dtype='object', name=u'M', length=110)
>>> messier.columns # Retourne un Index
Index([u'NGC', u'Type', u'Mag', ..., u'Con', u'Season', u'Name'],
     dtype='object')
>>> messier.dtypes
                     # Retourne une Series indexée sur le nom des colonnes
NGC
            object
Туре
            object
           float64
Mag
Size
           float64
           float64
Distance
RA
           float64
           float64
            object
Season
            object
Name
            object
dtype: object
>>> messier.values
array([['1952', 'Sn', 8.4, ..., 'Tau', 'winter', 'Crab Nebula'],
       ['7089', 'Gc', 6.5, ..., 'Aqr', 'autumn', nan],
       ['3992', 'Ba', 9.8, ..., 'UMa', 'spring', nan],
       ['205', 'El', 8.5, ..., 'And', 'autumn', nan]], dtype=object)
>>> messier.shape
(110, 10)
```

Une description statistique sommaire des colonnes numériques est obtenue par pandas.DataFrame.describe():

```
>>> messier.drop(['RA', 'Dec'], axis=1).describe()
             Mag
                       Size
                                 Distance
count 110.000000 110.000000 1.100000e+02
                  17.719091 4.574883e+06
        7.492727
        1.755657
                  22.055100
                             7.141036e+06
std
                  0.800000 1.170000e+02
min
        1.600000
25%
                   6.425000 1.312500e+03
        6.300000
50%
        7.650000 9.900000 8.390000e+03
       8.900000 17.300000 1.070000e+07
75%
       10.200000 120.000000 1.840000e+07
max
```

5.1.2 Accès aux données

Référence: Indexing and Selecting Data

L'accès par colonne retourne une pandas. Series (avec la même indexation) pour une colonne unique, ou un nouveau pandas. DataFrame pour plusieurs colonnes :

```
>>> messier.NGC # Équivalent à messier['NGC']
Μ
М1
        1952
M2
        7089
        . . .
M109
        3992
M110
        205
Name: NGC, Length: 110, dtype: object
>>> messier[['RA', 'Dec']] # = messier.filter(items=('RA', 'Dec'))
         RA
                 Dec
Μ
M1
      5.575 22.017
M2
      21.558
             0.817
       . . .
M109 11.960 53.383
M110 0.673 41.683
[110 rows x 2 columns]
```

L'accès par slice retourne un nouveau dataframe :

```
>>> messier[:6:2]
                    # Lignes 0 (inclus) à 6 (exclu) par pas de 2
    NGC Type Mag Size Distance
                                 RA
                                        Dec Con Season
                                                               Name
Μ
M1 1952
        Sn 8.4
                5.0
                       1930.0 5.575 22.017 Tau winter Crab Nebula
M3 5272
        Gc 6.2 16.2 10400.0 13.703 28.383 CVn spring
                      7520.0 15.310 2.083 Ser summer
M5 5904 Gc 5.6 17.4
                                                               NaN
```

L'accès peut également se faire par labels via pandas.DataFrame.loc:

```
>>> messier.loc['M31'] # Retourne une Series indexée par les noms de colonne
NGC
                      224
Туре
                       Sp
Season
                   autumn
Name
         Andromeda Galaxy
Name: M31, Length: 10, dtype: object
>>> messier.loc['M31', ['Type', 'Name']]
                                                  # Retourne une Series
Туре
Name
        Andromeda Galaxy
Name: M31, dtype: object
>>> messier.loc[['M31', 'M51'], ['Type', 'Name']] # Retourne un DataFrame
   Type
                     Name
Μ
     Sp Andromeda Galaxy
M31
      Sp Whirlpool Galaxy
>>> messier.loc['M31':'M33', ['Type', 'Name']]  # De M31 à M33 inclu
   Type
                      Name
Μ
M31
      Sp Andromeda Galaxy
M32
     El
                       NaN
M33
      Sp Triangulum Galaxy
```

De façon symétrique, l'accès peut se faire par position (n° de ligne/colonne) via pandas.DataFrame.iloc, p.ex.:

```
>>> messier.iloc[30:33, [1, -1]] # Ici, l'indice 33 n'est PAS inclu!
                       Name
    Туре
Μ
M31
      Sp
           Andromeda Galaxy
M32
     El
M33
     Sp Triangulum Galaxy
>>> messier.iloc[30:33, messier.columns.get_loc('Name')] # Mix des 2 approches
М
M31
        Andromeda Galaxy
M32
                     NaN
M33
       Triangulum Galaxy
Name: Name, dtype: object
```

Les fonctions pandas.DataFrame.at et pandas.DataFrame.iat permettent d'accéder rapidement aux données individuelles :

```
>>> messier.at['M31', 'NGC']  # 20× plus rapide que messier.loc['M31']['NGC']
'224'
>>> messier.iat[30, 0]  # 20× plus rapide que messier.iloc[0][0]
'224'
```

Noter qu'il existe une façon de filtrer les données sur les colonnes ou les labels :

```
>>> messier.filter(regex='M.7', axis='index').filter('RA Dec'.split())
        RA
М
M17 18.347 -16.183
    19.993 22.717
M27
     5.873 32.550
M37
     7.610 -14.500
M47
M57 18.893 33.033
     8.840 11.817
M67
M77
     2.712
            0.033
M87 12.513 12.400
M97 11.247 55.017
```

Comme pour numpy, il est possible d'opérer une sélection booléenne :

```
>>> messier.loc[messier['Con'] == 'UMa', ['NGC', 'Name']]
      NGC
                      Name
M
M40
    Win4
                Winnecke 4
     3031
M81
            Bode's Galaxy
            Cigar Galaxy
M82
     3034
M97
     3587
                Owl Nebula
M101 5457 Pinwheel Galaxy
M108
     3556
                      NaN
>>> messier[messier['Season'].isin('winter spring'.split())].head(3)
     NGC Type Mag Size Distance
                                      RA
                                             Dec Con Season
                                                                      Name
Μ
M1
           Sn 8.4
                   5.0
                           1930.0 5.575 22.017 Tau winter Crab Nebula
    1952
                          10400.0 13.703 28.383 CVn spring
М3
    5272
           Gc 6.2 16.2
M35 2168
          Oc 5.3 28.0
                            859.0 6.148 24.333 Gem winter
>>> messier.loc[lambda df: N.radians(df.Size / 60) * df.Distance < 1].Name
Μ
             Dumbbell Nebula
M27
M40
                  Winnecke 4
M57
                 Ring Nebula
M73
M76
     Little Dumbbell Nebula
M78
```

```
Owl Nebula
Name: Name, dtype: object
>>> messier.query("(Mag < 5) & (Size > 60)").Name
Μ7
            Ptolemy's Cluster
M24
       Sagittarius Star Cloud
M31
            Andromeda Galaxy
M42
       Great Nebula in Orion
M44
             Beehive Cluster
M45
                    Pleiades
Name: Name, dtype: object
```

Sélection	Syntaxe	Résultat	
Colonne unique	df.col or df[col]	pandas.Series	
Liste de colonnes	df[[c1,]]	pandas.DataFrame	
Lignes par tranche	df[slice]	pandas.DataFrame	
Label unique	df.loc[label]	pandas.Series	
Liste de labels	df.loc[[lab1,]]	pandas.DataFrame	
Labels par tranche	df.loc[lab1:lab2]	pandas.DataFrame	
Ligne entière par n°	df.iloc[i]	pandas.Series	
Ligne partielle par n°	df.iloc[i, [j,]]	pandas.Series	
Valeur par labels	df.at[lab, col]	Scalaire	
Valeur par n°	df.iat[i, j]	Scalaire	
Ligne par sél. booléenne	<pre>df.loc[sel] or df[sel] or df.query("sel")</pre>	pandas.DataFrame	

pandas.DataFrame.drop() permet d'éliminer une ou plusieurs colonnes d'un dataframe :

```
>>> messier.drop(['RA', 'Dec'], axis=1).head(3)
                                             # Élimination de colonnes
    NGC Type Mag Size Distance Con Season
                                             Name
Μ
M1 1952
          Sn 8.4
                  5.0
                         1930.0 Tau winter Crab Nebula
M2 7089
         Gc 6.5 12.9
                        11600.0 Aqr autumn
  5272
         Gc 6.2 16.2
                        10400.0 CVn
                                                    NaN
                                     spring
```

pandas. Data
Frame.dropna() et pandas. Data
Frame.fillna() permettent de gérer les données manquantes
 (NaN):

```
>>> messier.dropna(axis=0, how='any', subset=['NGC', 'Name']).head(3)
    NGC Type Mag Size Distance
                                           Dec Con Season
                                                                        Name
                                    RA
M1 1952
         Sn 8.4
                  5.0
                         1930.0 5.575 22.017 Tau winter
                                                                 Crab Nebula
M6 6405
         Oc 4.2 25.0
                          491.0 17.668 -32.217 Sco summer Butterfly Cluster
M7 6475
          Oc 3.3 80.0
                          245.0 17.898 -34.817 Sco summer Ptolemy's Cluster
>>> messier.fillna('', inplace=True) # Remplace les NaN à la volée
>>> messier.head(3)
    NGC Type Mag Size Distance
                                    RA
                                           Dec Con Season
                                                                  Name
М
M1
   1952
          Sn 8.4
                  5.0
                         1930.0
                                 5.575 22.017
                                               Tau winter Crab Nebula
M2
   7089
          Gc 6.5 12.9
                        11600.0 21.558
                                        0.817
                                                Aqr autumn
         Gc 6.2 16.2
                       10400.0 13.703 28.383
                                                CVn spring
```

Référence: Working with missing data

Attention : par défaut, beaucoup d'opérations retournent une *copie* de la structure, sauf si l'opération se fait « sur place » (inplace=True). D'autres opérations d'accès retournent seulement une *nouvelle vue* des mêmes données.

```
>>> df = PD.DataFrame(N.arange(12).reshape(3, 4),
                     index=list('abc'), columns=list('ABCD')); df
         C
             D
  A B
  0
         2
             3
     1
а
b
  4
     5
         6
             7
c 8 9
        10
            11
>>> df.drop('a', axis=0)
  Α
     В
         C
             D
b
  4
     5
         6
c 8 9
        10 11
>>> colA = df['A']
                  # Nouvelle vue de la colonne 'A'
                   # Opération sur place
>>> colA += 1
                   # la ligne 'a' est tjs là, la colonne 'A' a été modifiée
>>> df
         С
             D
   A B
         2
             3
     1
a
  1
b
  5 5
         6
             7
c 9 9 10 11
Lien: Returning a view versus a copy
```

Indéxation hiérarchique

Références: Multi-index / Advanced Indexing

pandas.MultiIndex offre une indexation *hiérarchique*, permettant de stocker et manipuler des données avec un nombre arbitraire de dimensions dans des structures plus simples.

```
# Élimine l'indexation actuelle
>>> saisons = messier.reset_index()
>>> saisons.set_index(['Season', 'Type'], inplace=True) # MultiIndex
>>> saisons.head(3)
                NGC Mag Size Distance
                                              RA
                                                                      Name
                                                     Dec Con
Season Type
                           5.0
                                  1930.0
                                           5.575
                                                  22.017 Tau Crab Nebula
winter Sn
                1952 8.4
            M1
autumn Gc
            M2
                7089
                      6.5 12.9
                                  11600.0
                                          21.558
                                                   0.817
                                                          Aar
spring Gc
                5272
                      6.2
                          16.2
                                  10400.0
                                          13.703
```

Les informations contenues sont toujours les mêmes, mais structurées différemment :

```
>>> saisons.loc['spring'].head(3) # Utilisation du 1er label
          NGC Mag Size
                            Distance
                                         RA
                                               Dec Con
                                                               Name
Type
                             10400.0 13.703 28.383 CVn
Gc
      МЗ
          5272 6.2 16.2
Ds
                               156.0 12.373 58.083
     M40
          Win4
               8.4
                     0.8
                                                    UMa
                                                         Winnecke 4
                     8.2 18400000.0 12.497
          4472 8.4
                                              8.000 Vir
>>> saisons.loc['spring', 'El'].head(3) # Utilisation des 2 labels
                 NGC Mag Size
             M
                                  Distance
                                               RA
                                                     Dec Con Name
Season Type
               4472 8.4
                            8.2 18400000.0 12.497
                                                    8.00 Vir
spring El
            M49
      El
            M59
                4621 9.6
                            4.2 18400000.0 12.700 11.65
      El
            M60
                4649 8.8
                            6.5 18400000.0 12.728 11.55 Vir
```

 $La\ fonction\ pandas. Data Frame. xs. ()\ permet\ des\ s\'elections\ sur\ les\ diff\'erents\ niveaux\ d'indexation:$

```
>>> saisons.xs('spring', level='Season').head(3) # = saisons.loc['spring']
       М
           NGC Mag Size
                              Distance
                                            RA
                                                   Dec Con
Туре
\operatorname{Gc}
      М3
          5272 6.2 16.2
                               10400.0 13.703 28.383 CVn
Ds
          Win4 8.4
                      0.8
                                 156.0 12.373 58.083
                                                        UMa
                                                             Winnecke 4
     M40
El
           4472 8.4
                      8.2 18400000.0 12.497
                                                 8.000 Vir
```

```
>>> saisons.xs('El', level='Type').head(3) # Sélection sur le 2e niveau

M NGC Mag Size Distance RA Dec Con Name

Season
autumn M32 221 8.1 7.0 920000.0 0.713 40.867 And
spring M49 4472 8.4 8.2 18400000.0 12.497 8.000 Vir
spring M59 4621 9.6 4.2 18400000.0 12.700 11.650 Vir
```

Le (multi-)index n'est pas nécessairement trié à sa création, pandas.sort_index() permet d'y remédier:

```
>>> saisons[['M', 'NGC', 'Name']].head()
             M
                NGC
                            Name
Season Type
winter Sn
            M1 1952 Crab Nebula
autumn Gc
            M2 7089
spring Gc
            M3 5272
summer Gc
            M4 6121
    M5 5904
>>> saisons[['M', 'NGC', 'Name']].sort_index().head()
               M
                  NGC
                                         Name
Season Type
                   221
autumn El
             M32
      El
            M110
                  205
             M2 7089
      Gc
                 7078
      Gc
             M15
                        Great Pegasus Globular
                  7099
      Gc
             M30
```

5.1.3 Manipulation des données

Références : Essential Basic Functionality

Comme dans numpy, il est possible de modifier les valeurs, ajouter/retirer des colonnes ou des lignes, tout en gérant les données manquantes.

Note: l'interopérabilité entre pandas et numpy est totale, toutes les fonctions Numpy peuvent prendre une structure Pandas en entrée, et s'appliquer aux colonnes appropriées :

```
>>> N.random.seed(0)
>>> df = PD.DataFrame(
       {'one': PD.Series(N.random.randn(3), index=['a', 'b', 'c']),
         'two': PD.Series(N.random.randn(4), index=['a', 'b', 'c', 'd']),
         'three': PD.Series(N.random.randn(3), index=['b', 'c', 'd'])})
>>> df
               three
       one
                NaN 2.240893
 1.764052
 0.400157 -0.151357 1.867558
c 0.978738 -0.103219 -0.977278
       NaN 0.410599 0.950088
>>> df['four'] = df['one'] + df['two']; df # Création d'une nouvelle colonne
               three
                                    four
       one
                           two
```

```
a 1.764052
               NaN 2.240893 4.004946
b 0.400157 -0.151357 1.867558 2.267715
c 0.978738 -0.103219 -0.977278 0.001460
       NaN 0.410599 0.950088
>>> df.sub(df.loc['b'], axis='columns') # Soustraction d'une ligne à toutes les colonnes_
\hookrightarrow (axis=1)
             three
       one
                        two
                                  four
a 1.363895
              NaN 0.373335 1.737230
ъ 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
c 0.578581 0.048138 -2.844836 -2.266255
       NaN 0.561956 -0.917470
                                  NaN
>>> df.sub(df['one'], axis='index') # Soustraction d'une colonne à toutes les lignes (axis=0_1
→ou 'rows')
  one
         three
                     two
           NaN 0.476841 2.240893
 0.0 -0.551514 1.467401
                         1.867558
c 0.0 -1.081957 -1.956016 -0.977278
d NaN
          NaN
                 NaN
```

```
>>> df.sort_values(by='a', axis=1) # Tri des colonnes selon les valeurs de la ligne 'a'
       one
               two
                        three
a 1.764052 2.240893
b 0.400157 1.867558 -0.151357
c 0.978738 -0.977278 -0.103219
       NaN 0.950088 0.410599
>>> df.min(axis=1) # Valeur minimale le long des colonnes
   1.764052
   -0.151357
h
   -0.977278
С
    0.410599
dtype: float64
>>> df.idxmin(axis=1) # Colonne des valeurs minimales le long des colonnes
b
     three
С
      t.wo
d
    three
dtype: object
```

```
>>> df.mean(axis=0) # Moyenne sur toutes les lignes (gestion des données manquantes)
one 1.047649
three 0.052007
two 1.020315
dtype: float64
```

Note : Si les bibliothèques d'optimisation de performances Bottleneck et NumExpr sont installées, pandas en bénéficiera de façon transparente.

5.1.4 Regroupement et agrégation de données

Histogramme et discrétisation

Compter les objets Messier par constellation avec pandas.value_counts():

```
>>> PD.value_counts(messier['Con']).head(3)
Sgr 15
Vir 11
```

```
Com 8
Name: Con, dtype: int64
```

Partitionner les objets en 3 groupes de magnitude (par valeurs : pandas.cut(), par quantiles : pandas.qcut()), et les compter :

```
>>> PD.value_counts(PD.cut(messier['Mag'], 3)).sort_index() # Par valeurs
(1.591, 4.467] 6
(4.467, 7.333] 40
(7.333, 10.2] 64
Name: Mag, dtype: int64
>>> PD.value_counts(PD.qcut(messier['Mag'], [0, .3, .6, 1])).sort_index() # Par quantiles
(1.599, 6.697] 36
(6.697, 8.4] 38
(8.4, 10.2] 36
Name: Mag, dtype: int64
```

Group-by

Référence : Group By: split-apply-combine

Pandas offre la possibilité de regrouper les données selon divers critères (pandas.DataFrame.groupby()), de les agréger au sein de ces groupes et de stocker les résultats dans une structure avec indéxation hiérarchique (pandas.DataFrame.agg()).

```
>>> seasonGr = messier.groupby('Season') # Retourne un DataFrameGroupBy
>>> seasonGr.groups
{'autumn': Index([u'M2', u'M15', ..., u'M103', u'M110'],
      dtype='object', name=u'M'),
 'spring': Index([u'M3', u'M40', ..., u'M108', u'M109'],
      dtype='object', name=u'M'),
 'summer': Index([u'M4', u'M5', ..., u'M102', u'M107'],
      dtype='object', name=u'M'),
 'winter': Index([u'M1', u'M35', ..., u'M79', u'M93'],
      dtype='object', name=u'M')}
>>> seasonGr.size()
Season
autumn
         14
spring
         40
summer
winter
         18
dtype: int64
>>> seasonGr.get_group('winter').head(3)
           Dec Distance Mag NGC
    Con
                                            Name
                                                    RA Size Type
Μ
M1
    Tau 22.017
                 1930.0 8.4 1952 Crab Nebula 5.575
                                                         5.0
                                                               Sn
M35 Gem 24.333
                  859.0 5.3 2168
                                                  6.148 28.0
                                                               Ос
M36 Aur 34.133
                  1260.0 6.3 1960
                                                  5.602 12.0
                                                               Оc
>>> seasonGr['Size'].agg([N.mean, N.std]) # Taille moyenne et stddev par groupe
            mean
                       std
Season
autumn 24.307143 31.472588
        7.197368
spring
                  4.183848
summer 17.965000 19.322400
winter 34.261111 29.894779
>>> seasonGr.agg({'Size': N.max, 'Mag': N.min})
       Mag Size
Season
autumn 3.4 120.0
```

 $(suite \ de \ la \ page \ précédente)$

```
spring 6.2 22.0
summer 3.3 90.0
winter 1.6 110.0
```

```
>>> magGr = messier.groupby(
       [PD.qcut(messier['Mag'], [0, .3, .6, 1],
                labels='Bright Medium Faint'.split()),
. . .
       "Season"])
. . .
>>> magGr['Mag', 'Size'].agg({'Mag': ['count', 'mean'],
                             'Size': [N.mean, N.std]})
                                  Size
               Mag
             count
                                             std
                       mean
                                  mean
      {\tt Season}
Mag
Bright autumn
                6 5.316667 45.200000
                                       40.470878
                1 6.200000 16.200000
      spring
                                             NaN
               15 5.673333 30.840000
                                       26.225228
      summer
               13 5.138462 42.923077
                                       30.944740
      winter
Faint autumn
               4 9.225000
                                       4.768910
                             8.025000
               30 9.236667 5.756667
                                       2.272578
      spring
               7 8.971429 7.814286
      summer
                                       9.135540
      winter
              3 8.566667 9.666667
                                       6.429101
              4 7.500000
                            9.250000
Medium autumn
                                       3.304038
               7 7.714286 12.085714
                                       5.587316
      spring
      summer
               18 7.366667 11.183333
                                       4.825453
      winter
              2 7.550000 14.850000
                                       8.697413
```

Tableau croisé (Pivot table)

Référence : Reshaping and Pivot Tables

Calculer la magnitude et la taille moyennes des objets Messier selon leur type avec pandas.DataFrame.pivot_table():

```
>>> messier['Mag Size Type'.split()].pivot_table(columns='Type')
Type As Ba Di ... Pl Sn Sp
Mag 9.0 9.85 7.216667 ... 9.050 8.4 8.495652
Size 2.8 4.80 33.333333 ... 3.425 5.0 15.160870
```

5.1.5 Visualisations

Exemple:

Démonstration Pandas/Seaborn (pokemon.ipynb) sur le jeu de données Pokemon.csv.

Références:

- Visualization
- Seaborn: statistical data visualization

Autres exemples de visualisation de jeux de données complexes (utilisation de pandas et seaborn)

- Iris Dataset
- Histoire des sujets télévisés

Liens

- Pandas Tutorial
- Pandas Cookbook
- Pandas Lessons for New Users
- Practical Data Analysis

Exercices:

Exercices for New Users

5.1.6 Xarray

xarray est une bibliothèque pour la structuration de données homogènes de dimension arbitraire. Suivant la philosophie de la bibliothèque Pandas dont elle est issue (et dont elle dépend), elle permet notamment de nommer les différentes dimensions (axes) des tableaux (p.ex. x.sum(axis='time')), d'indexer les données (p.ex. x.loc['M31']), de naturellement gérer les opérations de broadcasting, des opérations de regroupement et d'agrégation (p.ex. x.groupby(time.dayofyear).mean()), une gestion plus facile des données manquantes et d'alignement des tableaux indexés (p.ex. align(x, y, join='outer')).

pandas excels at working with tabular data. That suffices for many statistical analyses, but physical scientists rely on N-dimensional arrays – which is where xarray comes in.

xarray fournit deux structures principales, héritées du format netCDF:

- xarray.DataArray, un tableau N-D indexé généralisant le pandas.Series;
- xarray.DataSet, un dictionnaire regroupant plusieurs DataArray alignés selon une ou plusieurs dimensions, et similaire au pandas.DataFrame.

Note: La convention utilisée ici est « import xarray as X ».

```
>>> N.random.seed(0)
>>> data = X.DataArray(N.arange(3*4, dtype=float).reshape((3, 4)), # Tableau de données
                      dims=('x', 'y'),
                                                 # Nom des dimensions
. . .
                      coords={'x': list('abc')}, # Indexation des coordonnées en 'x'
. . .
                      name='mesures',
                                                  # Nom du tableau
. . .
                      attrs=dict(author='Y. Copin')) # Métadonnées
>>> data
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 3, y: 4)>
array([[ 0., 1., 2., 3.],
       [4., 5., 6., 7.],
      [8., 9., 10., 11.]])
Coordinates:
            (x) |S1 'a' 'b' 'c'
 * x
Dimensions without coordinates: y
Attributes:
   author:
               Y. Copin
>>> data.to_pandas()
                        # Conversion en DataFrame à indexation simple
    0
       1
              2
У
X
a 0.0 1.0
            2.0
                   3.0
b 4.0 5.0
            6.0
                  7.0
c 8.0 9.0 10.0 11.0
>>> data.to dataframe() # Conversion en DataFrame multi-indexé (hiérarchique)
    mesures
х у
a 0
        0.0
 1
        1.0
  2
        2.0
```

```
3
          3.0
b 0
          4.0
          5.0
  1
          6.0
  3
          7.0
c 0
          8.0
 1
          9.0
  2
         10.0
  3
         11.0
>>> data.dims
('x', 'y')
>>> data.coords
Coordinates:
 * X
               (x) |S1 'a' 'b' 'c'
>>> data.values
array([[ 0., 1., 2., 3.],
        [ 4., 5., 6., 7.],
        [ 8., 9., 10., 11.]])
        [ 8.,
>>> data.attrs
OrderedDict([('author', 'Y. Copin')])
```

```
>>> data[:, 1]
                          # Accès par indices
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 3)>
array([ 1., 5., 9.])
Coordinates:
            (x) |S1 'a' 'b' 'c'
 * X
>>> data.loc['a':'b', -1] # Accès par labels
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 2)>
array([ 3., 7.])
Coordinates:
            (x) |S1 'a' 'b'
 * X
>>> data.sel(x=['a', 'c'], y=2)
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 2)>
array([ 2., 10.])
Coordinates:
            (x) |S1 'a' 'c'
 * X
```

```
>>> data.mean(dim='x') # Moyenne le long de la dimension 'x' = data.mean(axis=0)
<xarray.DataArray 'mesures' (y: 4)>
array([ 4., 5., 6., 7.])
Dimensions without coordinates: y
```

```
>>> data2 = X.DataArray(N.arange(6).reshape(2, 3) * 10,
                      dims=('z', 'x'), coords={'x': list('abd')})
>>> data2.to_pandas()
{\tt x} a b d
7
0 0 10 20
1 30 40 50
>>> data.to_pandas() # REMINDER
       1
             2
у
a 0.0 1.0 2.0 3.0
b 4.0 5.0 6.0
                 7.0
c 8.0 9.0 10.0 11.0
>>> data2.values + data.values # Opération sur des tableaux numpy incompatibles
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (2,3) (3,4)
>>> data2 + data
                             # Alignement automatique sur les coord. communes!
<xarray.DataArray (z: 2, x: 2, y: 4)>
array([[[ 0., 1., 2., 3.],
```

```
>>> data['isSmall'] = data.sum(dim='y') < 10; data # Booléen "Somme sur y < 10"
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 3, y: 4)>
array([[ 0., 1., 2.,
                          3.],
      [ 4.,
[ 8.,
              5.,
                          7.],
                    6.,
              9., 10., 11.]])
Coordinates:
            (x) |S1 'a' 'b' 'c'
   isSmall (x) bool True False False
Dimensions without coordinates: y
>>> data.groupby('isSmall').mean(dim='x') # Regroupement et agrégation
<xarray.DataArray 'mesures' (isSmall: 2, y: 4)>
array([[ 6., 7., 8., 9.],
      [ 0., 1., 2., 3.]])
Coordinates:
 * isSmall (isSmall) object False True
Dimensions without coordinates: y
```

Exemples plus complexes:

— Examples Data

Note: N'oubliez pas de citer xarray dans vos publications et présentations.

5.2 Astropy

Astropy est une bibliothèque astronomique maintenue par la communauté et visant à fédérer les efforts jusque là disparates. Elle offre en outre une interface unifiée à des bibliothèques affiliées plus spécifiques.

5.2.1 Tour d'horizon

```
— Structures de base :
  — astropy.constants: constantes fondamentales (voir également scipy.constants);
  — astropy.units: unités et quantités dimensionnées;
  — astropy.nddata: extension des numpy.ndarray (incluant métadonnées, masque, unité, incer-
     titude, etc.);
  astropy.table: tableaux hétérogènes;
  — astropy.time: manipulation du temps et des dates;
  — astropy.coordinates : systèmes de coordonnées ;
  — astropy.wcs : World Coordinate System;
  — astropy.modeling : modèles et ajustements;
  — astropy.analytic_functions : fonctions analytiques.
— Entrées/sorties :
  — astropy.io.fits: fichiers FITS;
  — astropy.io.ascii: tables ASCII;
  — astropy.io.votable : XML VO-tables;
  — astropy.io.misc : divers;
```

```
astropy.vo: accès au Virtual Observatory.
Calculs astronomiques:
astropy.cosmology: calculs cosmologiques;
astropy.convolution: convolution et filtrage;
astropy.visualization: visualisation de données;
astropy.stats: méthodes astrostatistiques.
```

5.2.2 Démonstration

Démonstration Astropy (astropy.ipynb)

Voir également :

AstroBetter tutorials

Note : N'oubliez pas de citer [Astropy13] ou de mentionner l'utilisation d'astropy dans vos publications et présentations.

5.3 Autres bibliothèques scientifiques

Python est maintenant très largement utilisé par la communauté scientifique, et dispose d'innombrables bibliothèques dédiées aux différents domaines de la physique, chimie, etc. :

```
Astronomie: Kapteyn, AstroML, HyperSpy;
Mécanique quantique: QuTiP;
Électromagnétisme: EMpy;
Optique physique: Physical Optics Propagation in PYthon, OpticsPy;
PDE solver: FiPy, SfePy;
Analyse statistique bayesienne: PyStan;
Markov Chain Monte-Carlo: emcee, PyMC3;
Machine Learning: mlpy, milk, MDP, Keras et autres modules d'intelligence artificielle;
Calcul symbolique: sympy (voir également ce tutoriel sympy) et sage;
PyROOT;
High Performance Computing in Python;
Etc.
```

Notes de bas de page et références bibliographiques

Analyse scientifique avec Python, Version	Février 2010	
Analyse scientifique avec Fython, Version	I SALIGI ZOTA	

CHAPITRE 6

Développer en Python

Table des matières

- Développer en Python
 - Le zen du Python
 - Us et coutumes
 - Principes de conception logicielle
 - Développement piloté par les tests
 - Outils de développement
 - Integrated Development Environment
 - Vérification du code
 - Débogage
 - Profilage et optimisation
 - Documentation
 - Python packages
 - Système de gestion de versions
 - Intégration continue
 - Python 2 vs. Python 3

6.1 Le zen du Python

Le $zen\ du\ Python\ (PEP\ 20)$ est une série de 20 aphorismes 1 donnant les grands principes du Python :

>>> import this

- 1. Beautiful is better than ugly.
- 2. Explicit is better than implicit.
- 3. Simple is better than complex.
- 4. Complex is better than complicated.
- 5. Flat is better than nested.
- 6. Sparse is better than dense.

Dont seulement 19 ont été écrits.

- 7. Readability counts.
- 8. Special cases aren't special enough to break the rules.
- 9. Although practicality beats purity.
- 10. Errors should never pass silently.
- 11. Unless explicitly silenced.
- 12. In the face of ambiguity, refuse the temptation to guess.
- 13. There should be one—and preferably only one—obvious way to do it.
- 14. Although that way may not be obvious at first unless you're Dutch.
- 15. Now is better than never.
- 16. Although never is often better than right now.
- 17. If the implementation is hard to explain, it's a bad idea.
- 18. If the implementation is easy to explain, it may be a good idea.
- 19. Namespaces are one honking great idea let's do more of those!

Une traduction libre en français:

- 1. Préfèrer le beau au laid,
- 2. l'explicite à l'implicite,
- 3. le simple au complexe,
- 4. le complexe au compliqué,
- 5. le déroulé à l'imbriqué,
- 6. l'aéré au compact.
- 7. La lisibilité compte.
- 8. Les cas particuliers ne le sont jamais assez pour violer les règles,
- 9. même s'il faut privilégier l'aspect pratique à la pureté.
- 10. Ne jamais passer les erreurs sous silence,
- 11. ou les faire taire explicitement.
- 12. Face à l'ambiguïté, ne pas se laisser tenter à deviner.
- 13. Il doit y avoir une et si possible une seule façon évidente de procéder,
- 14. même si cette façon n'est pas évidente à première vue, à moins d'être Hollandais.
- 15. Mieux vaut maintenant que jamais,
- 16. même si jamais est souvent mieux qu'immédiatement.
- 17. Si l'implémentation s'explique difficilement, c'est une mauvaise idée.
- 18. Si l'implémentation s'explique facilement, c'est peut-être une bonne idée.
- 19. Les espaces de nommage sont une sacrée bonne idée, utilisons-les plus souvent!

6.1.1 Us et coutumes

- Fail early, fail often, fail better! (raise)
- Easier to Ask for Forgiveness than Permission (try ... except)
- le Style Guide for Python Code (PEP 8)
- Google Python Style Guide
- The Best of the Best Practices (BOBP) Guide for Python
- The hitchhiker's guide to Python Code Style

Quelques conseils supplémentaires :

- « Ne réinventez pas la roue, sauf si vous souhaitez en savoir plus sur les roues » (Jeff Atwood ³) : cherchez si ce que vous voulez faire n'a pas déjà été fait (éventuellement en mieux...) pour vous concentrer sur *votre* valeur ajoutée, réutilisez le code (en citant évidemment vos sources), améliorez le, et contribuez en retour si possible!
- Écrivez des programmes pour les humains, pas pour les ordinateurs : codez *proprement*, structurez vos algorithmes, commentez votre code, utilisez des noms de variable qui ont un sens, soignez le style et le formatage, etc.
- Codez proprement dès le début : ne croyez pas que vous ne relirez jamais votre code (ou même que personne n'aura jamais à le lire), ou que vous aurez le temps de le refaire mieux plus tard...
- « L'optimisation prématurée est la source de tous les maux » (Donald Knuth ⁴) : mieux vaut un code lent mais juste et maintenable qu'un code rapide et faux ou incompréhensible. Dans l'ordre absolu des priorités :
 - 1. Make it work.
 - 2. Make it right.
 - 3. Make it fast.
- Respectez le zen du python, il vous le rendra.

6.1.2 Principes de conception logicielle

La bonne conception d'un programme va permettre de gérer efficacement la complexité des algorithmes, de faciliter la maintenance (p.ex. correction des erreurs) et d'accroître les possibilités d'extension.

Modularité Le code est structuré en répertoires, fichiers, classes, méthodes et fonctions. Les blocs ne font pas plus de quelques dizaines de lignes, les fonctions ne prennent que quelques arguments, la structure logique n'est pas trop complexe, etc.

En particulier, le code doit respecter le *principe de responsabilité unique* : chaque entité élémentaire (classe, méthode, fonction) ne doit avoir qu'une unique raison d'exister, et ne pas tenter d'effectuer plusieurs tâches sans rapport direct (p.ex. lecture d'un fichier de données *et* analyse des données).

Flexibilité Une modification du comportement du code (p.ex. l'ajout d'une nouvelle fonctionnalité) ne nécessite de changer le code qu'en un nombre restreint de points.

Un code rigide devient rapidement difficile à faire évoluer, puisque chaque chaque chaque requiert un grand nombre de modifications.

Robustesse La modification du code en un point ne change pas de façon inopinée le comportement dans une autre partie *a priori* non reliée.

Un code fragile est facile à modifier, mais chaque modification peut avoir des conséquences inattendues et le code tend à devenir instable.

Réutilisabilité La réutilisation d'une portion de code ne demande pas de changement majeur, n'introduit pas trop de dépendances, et ne conduit pas à une duplication du code.

L'application de ces principes de développement dépend évidemment de l'objectif final du code :

- une bibliothèque de bas niveau, utilisée par de nombreux programmes (p.ex. numpy), favorisera la robustesse et la réutilisabilité aux dépends de la flexibilité : elle devra être particulièrement bien pensée, et ne pourra être modifiée qu'avec parcimonie;
- inversement, un script d'analyse de haut niveau, d'utilisation restreinte, pourra être plus flexible mais plus fragile et peu réutilisable.

6.2 Développement piloté par les tests

Le *Test Driven Development* (TDD, ou en français « développement piloté par les tests ») est une méthode de programmation qui permet d'éviter des bogues *a priori* plutôt que de les résoudre *a posteriori*. Ce n'est pas une méthode propre à Python, elle est utilisée très largement par les programmeurs professionnels.

 $^{{\}it ~~Non't~reinvent~the~wheel,~unless~you~plan~on~learning~more~about~wheels~~} {\it ~~} - {\it ~Jeff~Atwood}$

 $[\]ll$ Premature optimization is the root of all evil » – Donald Knuth

Le cycle préconisé par TDD comporte cinq étapes :

- 1. Écrire un premier test;
- 2. Vérifier qu'il échoue (puisque le code qu'il teste n'existe pas encore), afin de s'assurer que le test est valide et exécuté;
- 3. Écrire un code minimal pour passer le test;
- 4. Vérifier que le test passe correctement;
- 5. Éventuellement « réusiner » le code (*refactoring*), c'est-à-dire l'améliorer (rapidité, lisibilité) tout en gardant les mêmes fonctionnalités.

«~Diviser pour mieux régner~» : chaque fonction, classe ou méthode est testée indépendemment. Ainsi, lorsqu'un nouveau morceau de code ne passe pas les tests qui y sont associés, il est certain que l'erreur provient de cette nouvelle partie et non des fonctions ou objets que ce morceau de code utilise. On distingue ainsi hiérarchiquement :

- 1. Les tests unitaires vérifient individuellement chacune des fonctions, méthodes, etc.;
- 2. Les tests d'intégration évaluent les interactions entre différentes unités du programmes;
- 3. Les tests système assurent le bon fonctionnement du programme dans sa globalité.

Il est très utile de transformer toutes les vérifications réalisées au cours du développement et du débogage sous forme de tests, ce qui permet de les réutiliser lorsque l'on veut compléter ou améliorer une partie du code. Si le nouveau code passe toujours les anciens tests, on est alors sûr de ne pas avoir cassé les fonctionnalités précédentes (régréssions).

Nous avons déjà vu aux TD précédents plusieurs façons de rédiger des tests unitaires.

— Les doctest sont des exemples (assez simples) d'exécution de code inclus dans les *docstring* des classes ou fonctions :

```
def mean_power(alist, power=1):
1
2
        Retourne la racine `power` de la moyenne des éléments de `alist` à
3
        la puissance `power`:
        .. math:: \mu = (\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} x_i^p)^{1/p}
        `power=1` correspond à la moyenne arithmétique, `power=2` au *Root
        Mean Squared*, etc.
10
        Exemples:
11
        >>> mean_power([1, 2, 3])
12
13
        >>> mean_power([1, 2, 3], power=2)
14
        2.160246899469287
15
16
17
        # *mean* = (somme valeurs**power / nb valeurs)**(1/power)
18
        mean = (sum( val ** power for val in alist ) / len(alist)) ** (1 / power)
19
20
        return mean
21
```

Les doctests peuvent être exécutés de différentes façons (voir ci-dessous) :

```
— avec le module standard doctest : python -m doctest -v mean_power.py
```

— Les fonctions dont le nom commence par test_ et contenant des assert sont automatiquement détectées par pytest ². Cette méthode permet d'effectuer des tests plus poussés que les doctests, éventuellement dans un fichier séparé du code à tester. P.ex. :

```
def test_empty_init():
with pytest.raises(TypeError):

(suite sur la page suivante)
```

(since sur to page survance)

pytest ne fait pas partie de la bibliothèque standard. Il vous faudra donc l'installer indépendemment si vous voulez l'utiliser.

[—] avec pytest : py.test --doctest-modules -v mean_power.py

[—] avec nose : nosetests --with-doctest -v mean_power.py

```
Animal()
3
4
5
    def test_wrong_init():
        with pytest.raises(ValueError):
            Animal('Youki', 'lalala')
10
    def test_init():
11
        youki = Animal('Youki', 600)
12
        assert youki.masse == 600
13
        assert youki.vivant
14
        assert youki.estVivant()
15
        assert not youki.empoisonne
```

Les tests sont exécutés via py.test programme.py.

— Le module unittest de la bibliothèque standard permet à peu près la même chose que pytest, mais avec une syntaxe souvent plus lourde. unittest est étendu par le module non-standard nose.

6.3 Outils de développement

Je fournis ici essentiellement des liens vers des outils pouvant être utiles pour développer en Python.

6.3.1 Integrated Development Environment

- idle, l'IDE intégré à Python
- emacs + python-mode pour l'édition, et ipython pour l'execution de code (voir Python Programming In Emacs)
- spyder
- PythonToolkit
- pyCharm (la version community est gratuite)
- Etc.

6.3.2 Vérification du code

Il s'agit d'outils permettant de vérifier *a priori* la validité stylistique et syntaxique du code, de mettre en évidence des constructions dangereuses, les variables non-définies, etc. Ces outils ne testent pas nécessairement la validité des algorithmes et de leur mise en oeuvre...

- pycodestyle (ex-pep8) et autopep8
- pyflakes
- pychecker
- pylint

6.3.3 Débogage

Les débogueurs permettent de se « plonger » dans un code en cours d'exécution ou juste après une erreur (analyse post-mortem).

— Module de la bibliothèque standard : pdb

Pour déboguer un script, il est possible de l'exécuter sous le contrôle du débogueur pdb en s'interrompant dès la 1re instruction :

```
python -m pdb script.py
(Pdb)
```

Commandes (très similaires à gdb):

```
h[elp] [command]: aide en ligne;
q[uit]: quitter;
r[un] [args]: exécuter le programme avec les arguments;
d[own]/u[p]: monter/descendre dans le stack (empilement des appels de fonction);
p expression: afficher le résultat de l'expression (pp: pretty-print);
l[ist] [first[, last]]: afficher le code source autour de l'instruction courante (11: long list);
n[ext]/s[tep]: exécuter l'instruction suivante (sans y entrer/en y entrant);
unt[il]: continuer l'exécution jusqu'à la ligne suivante (utile pour les boucles);
c[ont[inue]]: continuer l'exécution (jusqu'à la prochaine interruption ou la fin du programme);
```

- r[eturn] : continuer l'exécution jusqu'à la sortie de la fonction ;
- b[reak] [[filename:]lineno / function[, condition]] : mettre en place un point d'arrêt (tbreak pour un point d'arrêt temporaire). Sans argument, afficher les points d'arrêts déjà définis;
- disable/enable [bpnumber] : désactiver/réactiver tous ou un point d'arrêt;
- cl[ear] [bpnumber] : éliminer tous ou un point d'arrêt;
- ignore bpnumber [count]: ignorer un point d'arrêt une ou plusieurs fois;
- condition bpnumber : ajouter une condition à un point d'arrêt;
- commands [bpnumber]: ajouter des instructions à un point d'arrêt.
- Commandes ipython: %run monScript.py, %debug, %pdb Si un script exécuté sous ipython (commande %run) génère une exception, il est possible d'inspecter l'état de la mémoire au moment de l'erreur avec la commande %debug, qui lance une session pdb au point d'arrêt. %pdb on lance systématiquement le débogueur à chaque exception.

L'activité de débogage s'intégre naturellement à la nécessité d'écrire des tests unitaires :

- 1. trouver un bogue;
- 2. écrire un test qui aurait du être validé en l'absence du bogue;
- 3. corriger le code jusqu'à validation du test.

Vous aurez alors au final corrigé le bug, et écrit un test s'assurant que ce bogue ne réapparaîtra pas inopinément.

6.3.4 Profilage et optimisation

```
Avertissement: Premature optimization is the root of all evil – Donald Knuth
```

Avant toute optimisation, s'assurer extensivement que le code fonctionne et produit les bons résultats dans tous les cas. S'il reste trop lent ou gourmand en mémoire *pour vos besoins*, il peut être nécessaire de l'optimiser.

Le profilage permet de déterminer le temps passé dans chacune des sous-fonctions d'un code (ou ligne par ligne : line profiler, ou selon l'utilisation de la mémoire : memory profiler), afin d'y identifier les parties qui gagneront à être optimisées.

```
python -0, __debug__, assert
Il existe un mode « optimisé » de python (option -0), qui pour l'instant ne fait pas grand chose (et n'est donc guère utilisé....):
la variable interne __debug__ passe de True à False;
les instructions assert ne sont pas évaluées.
timeit et %timeit statement sous ipython:
```

```
...: def t2(n):
...: return [ i**2 for i in range(n) ]
...:
...: def t3(n):
...: return N.arange(n)**2
...:
In [2]: %timeit t1(10000)
2.7 ms ± 12.4 µs per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 100 loops each)
In [3]: %timeit t2(10000)
2.29 ms ± 13.2 µs per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 100 loops each)
In [4]: %timeit t3(10000)
15.9 µs ± 120 ns per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 100000 loops each)
```

— cProfile et pstats, et %prun statement sous ipython:

```
$ python -m cProfile calc_pi.py
3.1415925580959025
        10000005 function calls in 4.594 seconds
  Ordered by: standard name
  ncalls tottime percall cumtime percall filename: lineno(function)
            1.612
                            4.594
                                       4.594 calc_pi.py:10(approx_pi)
       1
                     1.612
            0.000
                     0.000
                              4.594
                                       4.594 calc_pi.py:5(<module>)
       1
10000000
            2.982
                     0.000
                              2.982
                                       0.000 calc_pi.py:5(recip_square)
            0.000
                              4.594
                                       4.594 {built-in method builtins.exec}
       1
                     0.000
            0.000
                     0.000
                              0.000
                                       0.000 {built-in method builtins.print}
       1
       1
            0.000
                     0.000
                              0.000
                                       0.000 {method 'disable' of '_lsprof.Profiler'_
→objects}
```

— Tutoriel de profilage

Une fois identifiée la partie du code à optimiser, quelques conseils généraux :

- en cas de doute, favoriser la lisibilité aux performances;
- utiliser des opérations sur les tableaux, plutôt que sur des éléments individuels (*vectorization*) : listes en compréhension, tableaux numpy (qui ont eux-mêmes été optimisés);
- cython est un langage de programmation **compilé** très similaire à python. Il permet d'écrire des extensions en C avec la facilité de python (voir notamment Working with Numpy);
- numba permet automagiquement de compiler à la volée (JIT (Just In Time)) du pur code python via le compilateur LLVM, avec une optimisation selon le CPU (éventuellement le GPU) utilisé, p.ex. :

```
from numba import guvectorize

@guvectorize(['void(float64[:], intp[:], float64[:])'], '(n),()->(n)')
def move_mean(a, window_arr, out):
    ...
```

— à l'avenir, l'interpréteur CPython actuel sera éventuellement remplacé par pypy, basé sur une compilation JIT.

Lien:

Performance tips

6.3.5 Documentation

- Outils de documentation, ou comment transformer *automagiquement* un code-source bien documenté en une documentation fonctionnelle.
 - Sphinx;

- reStructuredText for Sphinx;
 Awesome Sphinx;
 apidoc (documentation automatique).
 Conventions de documentation:
 Docstring convention: PEP 257;
 Documenting Your Project Using Sphinx;
 A Guide to NumPy/SciPy Documentation;
 - Sample doc (matplotlib).

Lien:

Documentation Tools

6.3.6 Python packages

Comment installer/créer des modules externes :

- pip;
- Hitchhiker's Guide to Packaging;
- Packaging a python library;
- Cookiecutter est un générateur de squelettes de projet via des *templates* (pas uniquement pour Python);
- cx-freeze http://cx-freeze.readthedocs.io/>, pour générer un exécutable à partir d'un script.

6.3.7 Système de gestion de versions

La gestion des versions du code permet de suivre avec précision l'historique des modifications du code (ou de tout autre projet), de retrouver les changements critiques, de développer des branches alternatives, de faciliter le travail collaboratif, etc.

Git est un VCS (Version Controling System) particulièrement performant (p.ex. utilisé pour le développement du noyau ${\rm Linux}^5$). Il est souvent couplé à un dépôt en ligne faisant office de dépôt de référence et de solution de sauvegarde, et offrant généralement des solutions d'intégration continue, p.ex. :

- les très célèbres GitHub et GitLab, gratuits pour les projets libres;
- pour des projets liés à votre travail, je conseille plutôt des dépôts directement gérés par votre institution, p.ex. GitLab-IN2P3.

Git mérite un cours en soi, et devrait être utilisé très largement pour l'ensemble de vos projets (p.ex. rédaction d'articles, de thèse de cours, fichiers de configuration, tests numériques, etc.).

Quelques liens d'introduction :

- Pro-Git book, le livre « officiel »;
- Git Immersion;
- Git Magic.

6.3.8 Intégration continue

L'intégration continue est un ensemble de pratiques de développement logiciel visant à s'assurer de façon systématique que chaque modification du code n'induit aucune r'egression, et passe l'ensemble des tests. Cela passe généralement par la mise en place d'un système de gestion des sources, auquel est accolé un mécanisme automatique de compilation (build), de déploiement sur les différentes infrastructures, d'éxecution des tests (unitaires, intégration, fonctionnels, etc.) et de mise à disposition des résultats, de mise en ligne de la documentation, etc.

La plupart des développements des logiciels *open source* majeurs se fait maintenant sous intégration continue en utilisant des services en ligne directement connectés au dépôt source. Exemple sur Astropy :

Et maintenant du code Windows!

- Travis CI intégration continue;
- Coveralls taux de couverture des tests unitaires;
- Readthedocs documentation en ligne;
- Depsy mise en valeur du développement logiciel dans le monde académique (measure the value of software that powers science).

6.4 Python 2 vs. Python 3

Si votre code est encore sous python-2.x, il existe de nombreux outils permettant de faciliter la transition vers 3.x:

- L'interpréteur Python 2.7 dispose d'une option -3 mettant en évidence dans un code les parties qui devront être modifiées pour un passage à Python 3.
- Le script 2to3 permet également d'automatiser la conversion du code 2.x en 3.x.
- La bibliothèque standard __future__ permet d'introduire des constructions 3.x dans un code 2.x, p.ex. :

```
from __future__ import print_function # Fonction print()
from __future__ import division # Division non-euclidienne

print(1/2) # Affichera '0.5'
```

— La bibliothèque non standard six fournit une couche de compatibilité 2.x-3.x, permettant de produire de façon transparente un code compatible simultanément avec les deux versions.

Avertissement : Si vous vous lancez dans un nouveau développement, il est dorénavant indispensable d'utiliser exclusivement Python 3.

Liens

- Py3 Readiness: liste (réduite) des bibliothèques encore non-compatibles avec Python 3
- Porting Python 2 Code to Python 3
- The Conservative Python 3 Porting Guide
- Python 2/3 compatibility

CHAPITRE 7

Références supplémentaires

Voici une liste très partielle de documents Python disponibles en ligne. La majorité des liens sont en anglais, quelques-uns sont en français.

7.1 Documentation générale

- Python
- Python Wiki
- Python Frequently Asked Questions
- The Python Package Index

7.2 Listes de liens

- Python facile (2005)
- Python: quelques références, trucs et astuces: (2014)
- Improving your programming style in Python (2014)
- Starter Kit (py4science) (2010)
- Learning Python For Data Science (2016)
- Awesome Python
- A curated list of courses on Python
- Real Python tutorials

ipython

- IPython tutorial
- IPython cookbook
- IPython en ligne
- IPython quick refsheet

Expressions rationnelles

— regex tester

Python 3.x

— 10 awesome features of Python that you can't use because you refuse to upgrade to Python 3

7.3 Livres libres

- How to Think Like a Computer Scientist
 - Wikibook
 - Interactive edition
- Dive into Python
- 10 Free Python Programming Books
- A Python Book
- Start Programming with Python
- Learn Python the Hard Way
- Python for Informatics: Exploring Information
- Intermediate Python
- The Best Python Books
- Apprendre à programmer avec Python
- Programmation Python

7.4 Cours en ligne

7.4.1 Python

- Python Tutorial (v3.7)
- Apprenez à programmer en Python
- Débuter avec Python au lycée
- Présentation de Python
- Introduction à Python pour la programmation scientifique
- Begginer's Guide
- DIY python workshop
- Google's Python Class
- CheckIO, pour apprendre la programmation Python en s'amusant!
- Python Testing Tools
- Python Programming (Code Academy)

7.4.2 Scientifique

- Python Scientific Lecture Notes
- Handbook of the Physics Computing Course (2002)
- Practical Scientific Computing in Python
- Computational Physics with Python (avec exercices)
- SciPy tutorials (numpy, scipy, matplotlib, ipython): 2011, 2012, 2013,
- Advance Scientific Programming in Python
- Lectures on Computational Economics (avec exercices)
- Intro to Python for Data Science (DataCamp avec vidéos et exercices)
- Python for Data Science
- Learning Python For Data Science

- Computational Statistics in Python
- Python Data Science Handbook

En français

- Formation à Python scientifique
- NumPy et SciPy
- La programmation scientifique avec Python \blacksquare

Astronomie

- Practical Python for Astronomers
- Astropy tutorials
- Python for Euclid 2016
- Advanced software programming for astrophysics and astroparticle physics (1st ASTERICS-OBELICS International School, voir Timetable/Vue détaillée)

7.4.3 Snippets

— Python cheatsheets

7.4. Cours en ligne

CHAPITRE 8

Exemples

8.1 Mean power (fonction, argparse)

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
4
    {\it Exemple de script (shebang, docstring, etc.) permettant une}
5
    utilisation en module ('import mean_power') et en exécutable ('python
    mean_power.py -h`);
10
11
    def mean_power(alist, power=1):
12
        Retourne la racine `power` de la moyenne des éléments de `alist` à
13
        la puissance `power`:
14
15
        .. math:: \mu = (\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} x_i^p)^{1/p}
16
17
        `power=1` correspond à la moyenne arithmétique, `power=2` au *Root
18
19
        Mean Squared*, etc.
20
        Exemples:
21
        >>> mean_power([1, 2, 3])
23
        >>> mean_power([1, 2, 3], power=2)
24
        2.160246899469287
25
26
27
        # *mean* = (somme valeurs**power / nb valeurs)**(1/power)
28
        mean = (sum( val ** power for val in alist ) / len(alist)) ** (1 / power)
29
30
31
        return mean
33
    if __name__ == '__main__':
34
35
```

```
# start-argparse
36
        import argparse
37
38
        parser = argparse.ArgumentParser()
39
        parser.add_argument('list', nargs='*', type=float, metavar='nombres',
40
                             help="Liste de nombres à moyenner")
41
        parser.add_argument('-i', '--input', nargs='?', type=argparse.FileType('r'),
42
                             help="Fichier contenant les nombres à moyenner")
43
        parser.add_argument('-p', '--power', type=float, default=1.,
44
                             help="'Puissance' de la moyenne (%default)")
45
46
        args = parser.parse_args()
47
        # end-argparse
48
49
        if args.input:
                              # Lecture des coordonnées du fichier d'entrée
50
            # Le fichier a déjà été ouvert en lecture par argparse (type=file)
51
52
                 args.list = [float(x) for x in args.input
53
                              if not x.strip().startswith('#')]
54
            except ValueError:
55
56
                parser.error(
                     "Impossible de déchiffrer la ligne '\{\}' du fichier '\{\}'"
57
                     .format(x, args.input))
58
59
        # Vérifie qu'il y a au moins un nombre dans la liste
60
        if not args.list:
61
            parser.error("La liste doit contenir au moins un nombre")
62
63
        # Calcul
64
65
        moyenne = mean_power(args.list, args.power)
66
        # Affichage du résultat
67
        print("La moyenne puissance 1/{} des {} nombres à la puissance {} est {} f".format(
68
            args.power, len(args.list), args.power, moyenne))
69
```

Source: mean_power.py

8.2 Formes (POO)

```
#!/usr/bin/env python3
   # -*- coding: utf-8 -*-
3
4
5
    Exemple de Programmation Orientée Objet.
6
7
8
    # Définition d'une classe =================
9
10
    class Forme:
11
12
        """Une forme plane, avec éventuellement une couleur."""
13
14
        def __init__(self, couleur=None):
15
            """Initialisation d'une Forme, sans couleur par défaut."""
16
17
            if couleur is None:
18
                self.couleur = 'indéfinie'
19
            else:
20
```

```
self.couleur = couleur
21
22
        def __str__(self):
23
24
            Surcharge de la fonction `str()`: l'affichage *informel* de
25
             l'objet dans l'interpréteur, p.ex. `print(a)` sera résolu comme
             `a.__str__()`
27
28
            Retourne une chaîne de caractères.
29
30
31
            return "forme encore indéfinie de couleur {}".format(self.couleur)
32
33
        def change_couleur(self, newcolor):
34
             """Change la couleur de la Forme."""
35
36
37
            self.couleur = newcolor
        def aire(self):
39
40
            Renvoie l'aire de la Forme.
41
42
            L'aire ne peut pas être calculée dans le cas où la forme n'est
43
            pas encore spécifiée: c'est ce que l'on appelle une méthode
44
             'abstraite', qui pourra être précisée dans les classes filles.
45
             11 11 11
46
            raise NotImplementedError(
                 "ATTENTION: impossible de calculer l'aire d'une forme indéfinie.")
49
50
51
    class Rectangle(Forme):
52
53
        Un Rectangle est une Forme particulière.
54
55
        La classe-fille hérite des attributs et méthodes de la
56
        classe-mère, mais peut les surcharger (i.e. en changer la
57
        définition), ou en ajouter de nouveaux:
58
        - la méthode `Rectangle.change_couleur()` dérive directement de
60
           `Forme.change_couleur()`;
61
        - `Rectangle.__str__()` surcharge `Forme.__str__()`;
62
        - `Rectangle.aire()` définit la méthode jusqu'alors abstraite
63
           `Forme.aire()`;
64
        - `Rectangle.allonger()` est une nouvelle méthode propre à
65
           `Rectangle`.
66
67
68
        def __init__(self, longueur, largeur, couleur=None):
69
70
            Initialisation d'un Rectangle longueur × largeur, sans couleur par
71
            défaut.
72
73
74
            # Initialisation de la classe parente (nécessaire pour assurer
75
             # l'héritage)
76
            Forme.__init__(self, couleur)
77
78
             # Attributs propres à la classe Rectangle
79
            self.longueur = longueur
            self.largeur = largeur
```

```
82
         def __str__(self):
83
             """Surcharge de `Forme.__str__()`."""
 84
 85
             return "rectangle {}x{}, de couleur {}".format(
 86
                 self.longueur, self.largeur, self.couleur)
 87
 88
         def aire(self):
 89
90
             Renvoi l'aire du Rectangle.
91
92
             Cette méthode définit la méthode abstraite `Forme.area()`,
93
             pour les Rectangles uniquement.
94
95
96
             return self.longueur * self.largeur
97
98
         def allonger(self, facteur):
             """Multiplie la *longueur* du Rectangle par un facteur"""
100
101
             self.longueur *= facteur
102
103
104
     if __name__ == '__main__':
105
106
         s = Forme()
                                             # Forme indéfinie et sans couleur
107
         print("s:", str(s))
                                             # Interprété comme `s.__str__()`
108
         s.change_couleur('rouge')
                                             # On change la couleur
109
         print("s après change_couleur:", str(s))
110
111
         try:
             print("aire de s:", s.aire()) # La méthode abstraite lève une exception
112
         except NotImplementedError as err:
113
             print(err)
114
115
         q = Rectangle(1, 4, 'vert')
                                             # Rectangle 1×4 vert
116
         print("q:", str(q))
117
         print("aire de q:", q.aire())
118
119
         r = Rectangle(2, 1, 'bleu')
                                             # Rectangle 2×1 bleu
120
         print("r:", str(r))
121
         print("aire de r:", r.aire())
122
123
         print("allongement de r d'un facteur 2")
124
         r.allonger(2)
                                             # r devient un rectangle 4×1
125
         print("r:", str(r))
126
```

Source: formes.py

8.3 Cercle circonscrit (POO, argparse)

```
#!/usr/bin/env python3
# -*- coding: utf-8 -*-

"""

Calcule le cercle circonscrit à 3 points du plan.

Ce script sert d'illustration à plusieurs concepts indépendants:

- un exemple de script (shebang, docstring, etc.) permettant une
```

```
utilisation en module ('import circonscrit') et en exécutable
10
      (`python circonscrit.py -h`);
11
    - des exemples de Programmation Orientée Objet: classe `Point` et la
12
      classe héritière `Vector`;
13
    - un exemple d'utilisation du module `argparse` de la bibliothèque
14
      standard, permettant la gestion des arguments de la ligne de
      commande;
    - l'utilisation de tests unitaires sous la forme de `doctest` (tests
17
      inclus dans les *docstrings* des éléments à tester).
18
19
      Pour exécuter les tests unitaires du module:
20
21
      - avec doctest: `python -m doctest -v circonscrit.py`;
22
      - avec pytests: `py.test --doctest-modules -v circonscrit.py`;
23
      - avec nose:
                       `nosetests --with-doctest -v circonscrit.py`.
24
25
27
    __author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"
    __version__ = "Time-stamp: <2014-01-12 22:19 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>"
28
29
    # Définition d'une classe ==========
30
31
32
    class Point:
33
34
35
        Classe définissant un 'Point' du plan, caractérisé par ses
36
        coordonnées `x`, `y`.
37
38
39
40
        def __init__(self, x, y):
41
            Méthode d'instanciation à partir de deux coordonnées réelles.
42
43
                                      # doctest: +ELLIPSIS
            >>> Point(0, 1)
44
            <....Point object at Ox...>
45
            >>> Point(1 + 3j)
46
            Traceback (most recent call last):
47
48
            TypeError: __init__() missing 1 required positional argument: 'y'
49
50
51
            try: # Convertit les coords en `float`
52
                self.x = float(x)
53
                self.v = float(v)
54
            except (ValueError, TypeError):
55
                raise TypeError("Invalid input coordinates ({}, {})".format(x, y))
56
57
        def __str__(self):
            Surcharge de la fonction `str()`: l'affichage *informel* de l'objet
60
            dans l'interpréteur, p.ex. `str(self)` sera résolu comme
61
             `self.__str__()`
62
63
            Retourne une chaîne de caractères.
64
65
            >>> str(Point(1,2))
66
            'Point (x=1.0, y=2.0)'
67
68
            return "Point (x=\{p.x\}, y=\{p.y\})".format(p=self)
```

 $(suite \ de \ la \ page \ précédente)$

```
71
         def isOrigin(self):
72
73
             Teste si le point est à l'origine en testant la nullité des deux
 74
             coordonnées.
 75
             Attention aux éventuelles erreurs d'arrondis: il faut tester
 77
             la nullité à la précision numérique près.
79
             >>> Point(1,2).isOrigin()
 80
             False
 81
             >>> Point(0,0).isOrigin()
 82
             True
 83
84
85
             import sys
86
 87
             eps = sys.float_info.epsilon # Le plus petit float non nul
 88
 89
             return ((abs(self.x) <= eps) and (abs(self.y) <= eps))</pre>
90
91
         def distance(self, other):
92
93
             Méthode de calcul de la distance du point (`self`) à un autre point
94
95
96
             >>> A = Point(1,0); B = Point(1,1); A.distance(B)
97
             1.0
98
99
100
             # hypot(dx, dy) = sqrt(dx**2 + dy**2)
101
             return ((self.x - other.x)**2 + (self.y - other.y)**2)**0.5
102
103
104
     # Définition du point origine O
105
     0 = Point(0, 0)
106
107
108
     # Héritage de classe =============
109
110
111
     class Vector(Point):
112
113
         11 11 11
114
         Un `Vector` hérite de `Point` avec des méthodes additionnelles
115
         (p.ex. la négation d'un vecteur, l'addition de deux vecteurs, ou
116
         la rotation d'un vecteur).
117
118
119
         def __init__(self, A, B):
120
121
             Définit le vecteur `AB` à partir des deux points `A` et `B`.
122
123
             >>> Vector(Point(1,0), Point(1,1)) # doctest: +ELLIPSIS
124
             <.... Vector object at Ox...>
125
             >>> Vector(0, 1)
126
             Traceback (most recent call last):
127
128
             AttributeError: 'int' object has no attribute 'x'
131
```

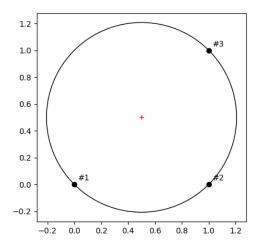
```
# Initialisation de la classe parente
132
             Point.__init__(self, B.x - A.x, B.y - A.y)
133
134
             # Attribut propre à la classe dérivée
135
             self.sqnorm = self.x ** 2 + self.y ** 2 # Norme du vecteur au carré
136
137
         def __str__(self):
138
139
             Surcharge de la fonction `str()`: `str(self)` sera résolu comme
140
              `Vector.__str__(self)` (et non pas comme `Point.__str__(self)`)
141
142
             \Rightarrow A = Point(1, 0); B = Point(1, 1); str(Vector(A, B))
143
              'Vector (x=0.0, y=1.0)'
144
145
146
             return "Vector (x=\{v.x\}, y=\{v.y\})".format(v=self)
147
148
         def __add__(self, other):
150
             Surcharge de l'opérateur binaire `{self} + {other}`: l'instruction
151
             sera résolue comme `self.__add__(other)`.
152
153
             On construit une nouvelle instance de `Vector` à partir des
154
             coordonnées propres à l'objet `self` et à l'autre opérande
155
              `other`.
156
157
             >>> A = Point(1, 0); B = Point(1, 1)
158
             >>> str(Vector(A, B) + Vector(B, O)) # = Vector(A, O)
159
              'Vector (x=-1.0, y=0.0)'
160
              11 11 11
161
162
             return Vector(0, Point(self.x + other.x, self.y + other.y))
163
164
         def __sub__(self, other):
165
166
             Surcharge de l'opérateur binaire `{self} - {other}`: l'instruction
167
             sera résolue comme `self.__sub__(other)`.
168
169
             Attention: ne surcharge pas l'opérateur unaire `-{self}`, géré
170
171
             par `__neg__`
172
             >>> A = Point(1, 0); B = Point(1, 1)
173
             >>> str(Vector(A, B) - Vector(A, B))
                                                      # Différence
174
             'Vector (x=0.0, y=0.0)'
175
             >>> -Vector(A, B)
                                                      # Négation
176
             Traceback (most recent call last):
177
178
             TypeError: bad operand type for unary -: 'Vector'
179
180
181
             return Vector(0, Point(self.x - other.x, self.y - other.y))
182
183
         def __eq__(self, other):
184
185
             Surcharge du test d'éqalité `{self}=={other}`: l'instruction sera
186
             résolue comme `self.__eq__(other)`.
187
188
             >>> Vector(0, Point(0, 1)) == Vector(Point(1, 0), Point(1, 1))
189
             True
190
192
```

```
# On teste ici la nullité de la différence des 2
193
             # vecteurs. D'autres tests auraient été possibles -- égalité
194
             # des coordonnées, nullité de la norme de la différence,
195
             # etc. -- mais on tire profit de la méthode héritée
196
             # `Point.isOrigin()` testant la nullité des coordonnées (à la
197
             # précision numérique près).
198
             return (self - other).isOrigin()
199
200
201
         def __abs__(self):
202
             Surcharge la fonction `abs()` pour retourner la norme du vecteur.
203
204
             >>> abs(Vector(Point(1, 0), Point(1, 1)))
205
206
              11 11 11
207
208
             # On pourrait utiliser sqrt(self.sqnorm), mais c'est pour
             # illustrer l'utilisation de la méthode héritée
             # `Point.distance`..
211
             return Point.distance(self, 0)
212
213
         def rotate(self, angle, deg=False):
214
215
             Rotation (dans le sens trigonométrique) du vecteur par un `angle`,
216
             exprimé en radians ou en degrés.
217
218
             \Rightarrow \Rightarrow Vector(Point(1, 0), Point(1, 1)).rotate(90, deg=True) == Vector(0, Point(-1, 0))
219
             True
220
221
222
             from cmath import rect # Bibliothèque de fonctions complexes
223
224
             # On calcule la rotation en passant dans le plan complexe
225
             z = complex(self.x, self.y)
226
             phase = angle if not deg else angle / 57.29577951308232 # [rad]
227
             u = rect(1., phase) # exp(i*phase)
228
             zu = z * u
                                    # Rotation complexe
229
230
             return Vector(0, Point(zu.real, zu.imag))
231
232
233
     def circumscribedCircle(M, N, P):
234
235
         Calcule le centre et le rayon du cercle circonscrit aux points
236
         M, N, P.
237
238
         Retourne: (centre [Point], rayon [float])
239
240
         Lève une exception `ValueError` si le rayon ou le centre du cercle
241
         circonscrit n'est pas défini.
242
243
         >>> M = Point(-1, 0); N = Point(1, 0); P = Point(0, 1)
244
         >>> C, r = circumscribedCircle(M, N, P) # Centre O, rayon 1
245
         >>> C.distance(0), round(r, 6)
246
         (0.0, 1.0)
247
         >>> circumscribedCircle(M, O, N)
                                                     # Indéfini
248
         Traceback (most recent call last):
249
250
         ValueError: Undefined circumscribed circle radius.
253
```

```
MN = Vector(M, N)
254
        NP = Vector(N, P)
255
        PM = Vector(P, M)
256
257
         # Rayon du cercle circonscrit
258
        m = abs(NP) # /NP/
        n = abs(PM) # /PM/
         p = abs(MN) # /MN/
261
262
         d = (m + n + p) * (-m + n + p) * (m - n + p) * (m + n - p)
263
         if d > 0:
264
            rad = m * n * p / d**0.5
265
         else:
266
            raise ValueError("Undefined circumscribed circle radius.")
267
268
         # Centre du cercle circonscrit
269
         d = -2 * (M.x * NP.y + N.x * PM.y + P.x * MN.y)
         if d == 0:
             raise ValueError("Undefined circumscribed circle center.")
272
273
         om2 = Vector(0, M).sqnorm # /OM/**2
274
         on2 = Vector(0, N).sqnorm # |ON|**2
275
         op2 = Vector(0, P).sqnorm # /OP/**2
276
277
        x0 = -(om2 * NP.y + on2 * PM.y + op2 * MN.y) / d
278
        y0 = (om2 * NP.x + on2 * PM.x + op2 * MN.x) / d
279
280
         return (Point(x0, y0), rad) # (centre [Point], R [float])
281
282
283
    if __name__ == '__main__':
284
285
         # start-argparse
286
         import argparse
287
288
         parser = argparse.ArgumentParser(
289
             usage="%(proq)s [-p/--plot] [-i/--input coordfile | x1,y1 x2,y2 x3,y3]",
290
             description="Compute the circumscribed circle to 3 points in the plan.")
291
         parser.add_argument('coords', nargs='*', type=str, metavar='x,y',
292
                              help="Coordinates of point")
293
         parser.add_argument('-i', '--input', nargs='?', type=argparse.FileType('r'),
294
                              help="Coordinate file (one 'x,y' per line)")
295
         parser.add_argument('-P', '--plot', action="store_true", default=False,
296
                              help="Draw the circumscribed circle")
297
         parser.add_argument('-T', '--tests', action="store_true", default=False,
298
                              help="Run doc tests")
299
         parser.add_argument('--version', action='version', version=_version__)
300
         args = parser.parse_args()
302
         # end-argparse
303
304
                                                             # Auto-test mode
         if args.tests:
305
             import sys, doctest
306
307
             fails, tests = doctest.testmod(verbose=True) # Run doc tests
308
             sys.exit(fails > 0)
309
310
         if args.input: # Lecture des coordonnées du fichier d'entrée
311
             # Le fichier a déjà été ouvert en lecture par argparse (type=file)
             args.coords = [coords for coords in args.input
                             if not coords.strip().startswith('#')]
314
```

```
315
         if len(args.coords) != 3: # Vérifie le nb de points
316
             parser.error("Specify 3 points by their coordinates 'x,y' (got {})"
317
                           .format(len(args.coords)))
318
319
         points = [] # Liste des points
320
         for i, arg in enumerate(args.coords, start=1):
321
             try: # Déchiffrage de l'argument 'x,y'
322
                 x, y = (float(t) for t in arg.split(','))
323
             except ValueError:
324
                 parser.error(
325
                     "Cannot decipher coordinates #{}: '{}'".format(i, arg))
326
327
             points.append(Point(x, y)) # Création du point et ajout à la liste
328
             print("#{:d}: {}".format(i, points[-1])) # Affichage du dernier point
329
330
331
         # Calcul du cercle cisconscrit (lève une ValueError en cas de problème)
         center, radius = circumscribedCircle(*points) # Délistage
         print("Circumscribed circle: {}, radius: {}".format(center, radius))
333
334
                                           # Figure
         if args.plot:
335
             import matplotlib.pyplot as P
336
337
             fig = P.figure()
338
             ax = fig.add_subplot(1, 1, 1, aspect='equal')
339
             # Points
340
             ax.plot([p.x for p in points], [p.y for p in points], 'ko')
341
             for i, p in enumerate(points, start=1):
342
                 ax.annotate("#{}".format(i), (p.x, p.y),
343
344
                              xytext=(5, 5), textcoords='offset points')
345
             # Cercle circonscrit
             c = P.matplotlib.patches.Circle((center.x, center.y), radius=radius,
346
                                              fc='none', ec='k')
347
             ax.add_patch(c)
                                                  # Cercle
348
             ax.plot(center.x, center.y, 'r+') # Centre
349
350
             P.show()
351
```

Source: circonscrit.py



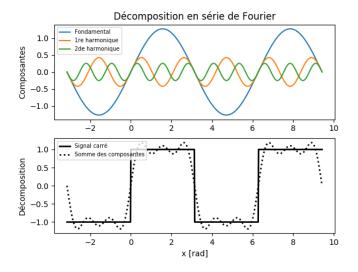


Fig. 8.1 – **Figure :** exemple de figure (charte graphique : seaborn)

8.4. Matplotlib

8.4 Matplotlib

8.4.1 Figure (relativement) simple

```
#!/usr/bin/env python3
1
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
    # Time-stamp: <2018-01-09 15:03:52 ycopin>
3
5
    Exemple un peu plus complexe de figure, incluant 2 axes, légendes, axes, etc.
6
    import numpy as N
9
    import matplotlib.pyplot as P
10
11
    x = N.linspace(-N.pi, 3*N.pi, 2*360)
12
13
    # Signal carré
14
                                     \# = \pm 1
    y = N.sign(N.sin(x))
15
16
    \# 3 premiers termes de la décomposition en série de Fourier
17
    y1 = 4/N.pi * N.sin(x)
                                    # Fondamentale
18
                                   # 1re harmonique
    y2 = 4/N.pi * N.sin(3*x) / 3
19
    y3 = 4/N.pi * N.sin(5*x) / 5 # 2de harmonique
20
    # Somme des 3 premières composantes
21
    ytot = y1 + y2 + y3
22
23
    # Figure
24
25
    fig = P.figure()
                                     # Création de la Figure
27
    # 1er axe: composantes
    ax1 = fig.add_subplot(2, 1, 1, # 1er axe d'une série de 2 × 1
28
                           ylabel="Composantes",
29
                           title="Décomposition en série de Fourier")
30
    ax1.plot(x, y1, label="Fondamental")
31
    ax1.plot(x, y2, label=u"1re harmonique")
32
    ax1.plot(x, y3, label=u"2de harmonique")
33
    ax1.legend(loc="upper left", fontsize="x-small")
34
35
    # 2nd axe: décomposition
36
37
    ax2 = fig.add_subplot(2, 1, 2, # 2d axe d'une série de 2 × 1
38
                           ylabel=u"Décomposition",
                           xlabel="x [rad]")
39
    ax2.plot(x, y, lw=2, color='k', label="Signal carré")
40
    ax2.plot(x, ytot, lw=2, ls=':', color='k', label="Somme des composantes")
41
    ax2.legend(loc="upper left", fontsize="x-small")
42
43
    # Sauvegarde de la figure (pas d'affichage intéractif)
44
    fig.savefig("figure.png")
```

Source: figure.py

8.4.2 Filtres du 2nd ordre

```
#!/usr/bin/env python3
# -*- coding: utf-8 -*-

import numpy as N
import matplotlib.pyplot as P
```

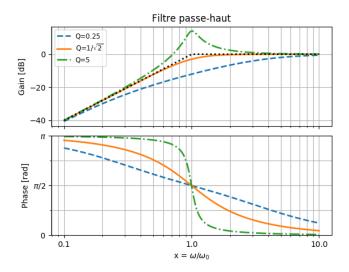


Fig. 8.2 – **Figure :** Filtre passe-haut du 2nd ordre.

```
6
7
    def passeBas(x, Q=1):
8
9
        Filtre passe-bas en pulsation réduite *x* = omega/omegaO, facteur de
10
         qualité *Q*.
11
12
13
        return 1 / (1 - x ** 2 + x / Q * 1j)
14
15
16
    def passeHaut(x, Q=1):
17
18
        return -x ** 2 / (1 - x ** 2 + x / Q * 1j)
19
20
21
    def passeBande(x, Q=1):
22
23
        return 1 / (1 + Q * (x - 1 / x) * 1j)
24
25
26
    def coupeBande(x, Q=1):
27
28
        return (1 - x ** 2) / (1 - x ** 2 + x / Q * 1j)
29
30
31
    def gainNphase(f, dB=True):
32
33
        Retourne le gain (éventuellement en dB) et la phase [rad] d'un
34
35
        filtre\ de\ fonction\ de\ transfert\ complexe\ *f*.
36
37
        g = N.abs(f)
                                                # Gain
38
        if dB:
                                                # [dB]
39
             g = 20 * N.log10(g)
40
        p = N.angle(f)
                                                # [rad]
41
42
        return g, p
```

(suite sur la page suivante)

8.4. Matplotlib

```
44
45
    def asympGain(x, pentes=(0, -40)):
46
47
         lx = N.log10(x)
48
         return N.where(lx < 0, pentes[0] * lx, pentes[1] * lx)
49
50
51
    def asympPhase(x, phases=(0, -N.pi)):
52
53
         return N.where(x < 1, phases[0], phases[1])
54
55
56
    def diagBode(x, filtres, labels,
57
                  title='', plim=None, gAsymp=None, pAsymp=None):
58
59
         Trace le diagramme de Bode -- gain [dB] et phase [rad] -- des filtres
60
61
         de fonction de transfert complexe *filtres* en fonction de la pulsation
         réduite *x*.
62
         11 11 11
63
64
        fig = P.figure()
65
         axg = fig.add_subplot(2, 1, 1,
                                                 # Axe des gains
66
                                xscale='log',
67
                                ylabel='Gain [dB]')
68
         axp = fig.add_subplot(2, 1, 2,
                                                 # Axe des phases
69
70
                                sharex=axg,
                                xlabel=r'x = $\omega$/$\omega_0$', xscale='log',
71
                                ylabel='Phase [rad]')
72
73
         lstyles = ['--', '-', '-.', ':']
74
         for f, label, ls in zip(filtres, labels, lstyles): # Tracé des courbes
75
             g, p = gainNphase(f, dB=True)
                                                  # Calcul du gain et de la phase
76
             axg.plot(x, g, lw=2, ls=ls, label="Q=" + str(label)) # Gain
77
             axp.plot(x, p, lw=2, ls=ls)
                                                                      # Phase
78
79
         # Asymptotes
80
         if gAsymp is not None:
                                               # Gain
81
             axg.plot(x, asympGain(x, gAsymp), 'k:', lw=2, label='_')
82
                                               # Phase
83
         if pAsymp is not None:
             # axp.plot(x, asympPhase(x, pAsymp), 'k:')
84
85
             pass
86
         axg.legend(loc='best', prop=dict(size='small'))
87
88
         # Labels des phases
89
         axp.set_yticks(N.arange(-2, 2.1) * N.pi / 2)
90
         axp.set_yticks(N.arange(-4, 4.1) * N.pi / 4, minor=True)
91
         axp.set\_yticklabels([r'$-\pi$', r'$-\pi/2$', r'$0$', r'$\pi/2$', r'$\pi$'])
92
         # Domaine des phases
93
         if plim is not None:
94
             axp.set_ylim(plim)
95
96
         # Ajouter les grilles
97
         for ax in (axg, axp):
98
             ax.grid()
                                                   # x et y, majors
99
             ax.grid(which='minor')
                                                   # x et y, minors
100
101
         # Ajustements fins
102
         gmin, gmax = axg.get_ylim()
         axg.set_ylim(gmin, max(gmax, 3))
104
```

```
105
         fig.subplots_adjust(hspace=0.1)
106
         axg.xaxis.set_major_formatter(P.matplotlib.ticker.ScalarFormatter())
107
         P.setp(axg.get_xticklabels(), visible=False)
108
109
         if title:
110
             axg.set_title(title)
111
112
113
         return fig
114
115
     if __name__ == '__main__':
116
117
         x = N.logspace(-1, 1, 1000)
                                                     # de 0.1 à 10 en 1000 pas
118
119
         # Facteurs de qualité
120
         qs = [0.25, 1 / N.sqrt(2), 5]
121
                                                     # Valeurs numériques
         labels = [0.25, r'$1/\sqrt{2}$', 5]
                                                     # Labels
123
         # Calcul des fonctions de transfert complexes
124
         pbs = [ passeBas(x, Q=q) for q in qs ]
125
         phs = [ passeHaut(x, Q=q) for q in qs ]
126
         pcs = [ passeBande(x, Q=q) for q in qs ]
127
         cbs = [ coupeBande(x, Q=q) for q in qs ]
128
129
         # Création des 4 diagrammes de Bode
130
         figPB = diagBode(x, pbs, labels, title='Filtre passe-bas',
131
                           plim=(-N.pi, 0),
132
                           gAsymp=(0, -40), pAsymp=(0, -N.pi))
133
134
         figPH = diagBode(x, phs, labels, title='Filtre passe-haut',
135
                           plim=(0, N.pi),
                           gAsymp=(40, 0), pAsymp=(N.pi, 0))
136
         figPC = diagBode(x, pcs, labels, title='Filtre passe-bande',
137
                           plim=(-N.pi / 2, N.pi / 2),
138
                           gAsymp=(20, -20), pAsymp=(N.pi / 2, -N.pi / 2))
139
         figCB = diagBode(x, cbs, labels, title='Filtre coupe-bande',
140
                           plim=(-N.pi / 2, N.pi / 2),
141
                           gAsymp=(0, 0), pAsymp=(0, 0))
142
143
         P.show()
```

Source: filtres2nd0rdre.py

8.4. Matplotlib 91

CHAPITRE 9

Exercices

Note: Les exercices sont de difficulté variable, de * (simple) à *** (complexe).

9.1 Introduction

9.1.1 Intégration : méthode des rectangles *

La méthode des rectangles permet d'approximer numériquement l'intégrale d'une fonction f:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \text{ avec } h = (b-a)/n \text{ et } x_i = a + (i+1/2)h.$$

On définit la fonction sq renvoyant le carré d'un nombre par (cf. Fonctions) :

```
def sq(x) :
    return x**2
```

Écrire un programme calculant l'intégrale de cette fonction entre a=0 et b=1, en utilisant une subdivision en n=100 pas dans un premier temps. Quelle est la précision de la méthode, et comment dépend-elle du nombre de pas?

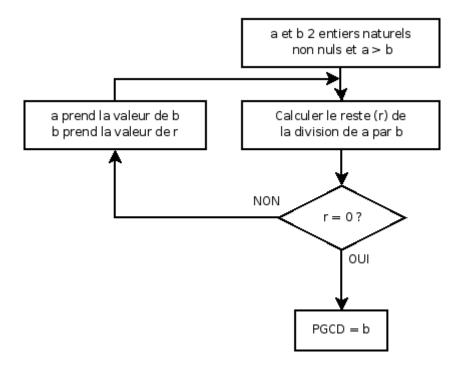
9.1.2 Fizz Buzz *

Écrire un programme jouant au Fizz Buzz jusqu'à 99 :

```
1 2 Fizz! 4 Buzz! Fizz! 7 8 Fizz! Buzz! 11 Fizz! 13 14 Fizz Buzz! 16...
```

9.1.3 PGCD: algorithme d'Euclide **

Écrire un programme calculant le PGCD (Plus Grand Commun Dénominateur) de deux nombres (p.ex. 306 et 756) par l'algorithme d'Euclide.



9.1.4 Tables de multiplication *

Écrire un programme affichant les tables de multiplication :

9.2 Manipulation de listes

9.2.1 Crible d'Ératosthène *

Implémenter le crible d'Ératosthène pour afficher les nombres premiers compris entre 1 et un entier fixe, p.ex. :

```
Liste des entiers premiers <= 41
[2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29, 31, 37, 41]
```

9.2.2 Carré magique **

Un carré magique d'ordre n est un tableau carré $n \times n$ dans lequel on écrit une et une seule fois les nombres entiers de 1 à n^2 , de sorte que la somme des n nombres de chaque ligne, colonne ou diagonale principale soit constante. P.ex. le carré magique d'ordre 5, où toutes les sommes sont égales à 65 :

11	18	25	2	9
10	12	19	21	3
4	6	13	20	22
23	5	7	14	16
17	24	1	8	15

Pour les carrés magiques d'ordre impair, on dispose de l'algorithme suivant -(i,j) désignant la case de la ligne i, colonne j du carré; on se place en outre dans une indexation « naturelle » commençant à 1:

- 1. la case (n,(n+1)/2) contient 1;
- 2. si la case (i,j) contient la valeur k, alors on place la valeur k+1 dans la case (i+1,j+1) si cette case est vide, ou dans la case (i-1,j) sinon. On respecte la règle selon laquelle un indice supérieur à n est ramené à 1.

Programmer cet algorithme pour pouvoir construire un carré magique d'ordre impair quelconque.

9.3 Programmation

9.3.1 Suite de Syracuse (fonction) *

Écrire une fonction $suite_syracuse(n)$ retournant la (partie non-triviale de la) suite de Syracuse pour un entier n. Écrire une fonction $temps_syracuse(n, altitude=False)$ retournant le temps de vol (éventuellement en altitude) correspondant à l'entier n. Tester ces fonctions sur n=15:

```
>>> suite_syracuse(15)
[15, 46, 23, 70, 35, 106, 53, 160, 80, 40, 20, 10, 5, 16, 8, 4, 2, 1]
>>> temps_syracuse(15)
17
>>> temps_syracuse(15, altitude=True)
10
```

9.3.2 Flocon de Koch (programmation récursive) ***

En utilisant les commandes left, right et forward de la bibliothèque graphique standard turtle dans une fonction récursive, générer à l'écran un flocon de Koch d'ordre arbitraire.

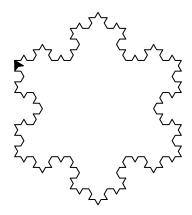


Fig. 9.1 – **Figure :** Flocon de Koch d'ordre 3.

9.3.3 Jeu du plus ou moins (exceptions) *

Écrire un jeu de « plus ou moins » :

```
Vous devez deviner un nombre entre 1 et 100.
Votre proposition: 27
C'est plus.
[...]
Vous avez trouvé en 6 coups!
```

La solution sera générée aléatoirement par la fonction random.randint(). Le programme devra être robuste aux entrées invalides (« toto », 120, etc.), et aux lâches abandons par interruption (KeyboardInterrupt).

9.3.4 Animaux (POO/TDD) *

Téléchargez animaux.py et complétez les classes Animal et Chien pour qu'elles passent avec succès tous les tests (voir Développement piloté par les tests). On appellera les tests via la ligne de commande :

```
py.test animaux.py
```

9.3.5 Jeu de la vie (POO) **

On se propose de programmer l'automate cellulaire le plus célèbre, le Jeu de la vie.

Pour cela, vous créerez une classe Life qui contiendra la grille du jeu ainsi que les méthodes qui permettront son évolution. Vous initialiserez la grille aléatoirement à l'aide de la fonction random.choice(), et vous afficherez l'évolution de l'automate dans la sortie standard du terminal, p.ex.:

Astuce : Pour que l'affichage soit agréable à l'oeil, vous marquerez des pauses entre l'affichage de chaque itération grâce à la fonction time.sleep().

9.4 Manipulation de tableaux (arrays)

9.4.1 Inversion de matrice *

Créer un tableau carré réel r aléatoire (numpy.random.randn()), calculer la matrice hermitienne $\mathbf{m} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}^T$ (numpy.dot()), l'inverser (numpy.linalg.inv()), et vérifier que $\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}^{-1} = \mathbf{m}^{-1} \cdot \mathbf{m} = 1$ (numpy.eye()) à la précision numérique près (numpy.allclose()).

9.4.2 Median Absolute Deviation *

En statistique, le $Median\ Absolute\ Deviation\ (MAD)$ est un estimateur robuste de la dispersion d'un échantillon 1D : MAD = median(| x - median(x) |).

À l'aide des fonctions numpy.median() et numpy.abs(), écrire une fonction mad(x, axis=None) calculant le MAD d'un tableau, éventuellement le long d'un ou plusieurs de ses axes.

9.4.3 Distribution du pull ***

Le pull est une quantité statistique permettant d'évaluer la conformité des erreurs par rapport à une distribution de valeurs (typiquement les résidus d'un ajustement). Pour un échantillon $\mathbf{x} = [x_i]$ et les erreurs associées $d\mathbf{x} = [\sigma_i]$, le pull est défini par :

— moyenne optimale (pondérée par la variance) : $E = (\sum_i x_i/\sigma_i^2)/(\sum_i 1/\sigma_i^2)$; — erreur sur la moyenne pondérée : $\sigma_E^2 = 1/\sum_i (1/\sigma_i^2)$; — définition du pull : $p_i = (x_i - E_i)/(\sigma_{E_i}^2 + \sigma_i^2)^{1/2}$, où E_i et σ_{E_i} sont calculées sans le point i.

Si les erreurs σ_i sont correctes, la distribution du pull est centrée sur 0 avec une déviation standard de

Écrire une fonction pull(x, dx) calculant le pull de tableaux 1D.

9.5 Méthodes numériques

9.5.1 Quadrature et zéro d'une fonction *

À l'aide des algorithmes disponibles dans scipy:

- calculer numériquement l'intégrale $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1} \mathrm{d}x = \pi^4/15$; résoudre numériquement l'équation $x \, e^x = 5(e^x 1)$.

9.5.2 Schéma de Romberg **

Écrire une fonction integ_romberg(f, a, b, epsilon=1e-6) permettant de calculer l'intégrale numérique de la fonction f entre les bornes a et b avec une précision epsilon selon la méthode de Romberg.

Tester sur des solutions analytiques et en comparant à scipy.integrate.romberg().

9.5.3 Méthode de Runge-Kutta **

Développer un algorithme permettant d'intégrer numériquement une équation différentielle du 1er ordre en utilisant la méthode de Runge-Kutta d'ordre quatre.

Tester sur des solutions analytiques et en comparant à scipy.integrate.odeint().

9.6 Visualisation (matplotlib)

9.6.1 Quartet d'Anscombe *

Après chargement des données, calculer et afficher les propriétés statistiques des quatres jeux de données du Quartet d'Anscombe:

- moyenne et variance des x et des y (numpy.mean() et numpy.var());
- corrélation entre les x et les y (scipy.stats.pearsonr());
- équation de la droite de régression linéaire y = ax + b (scipy.stats.linregress()).

I	II		III		IV		
X	У	X	У	Х	у	X	у
10.0	8.04	10.0	9.14	10.0	7.46	8.0	6.58
8.0	6.95	8.0	8.14	8.0	6.77	8.0	5.76
13.0	7.58	13.0	8.74	13.0	12.74	8.0	7.71
9.0	8.81	9.0	8.77	9.0	7.11	8.0	8.84
11.0	8.33	11.0	9.26	11.0	7.81	8.0	8.47
14.0	9.96	14.0	8.10	14.0	8.84	8.0	7.04
6.0	7.24	6.0	6.13	6.0	6.08	8.0	5.25
4.0	4.26	4.0	3.10	4.0	5.39	19.0	12.50
12.0	10.84	12.0	9.13	12.0	8.15	8.0	5.56
7.0	4.82	7.0	7.26	7.0	6.42	8.0	7.91
5.0	5.68	5.0	4.74	5.0	5.73	8.0	6.89

Tableau 9.1 – Quartet d'Anscombe

Pour chacun des jeux de données, tracer y en fonction de x, ainsi que la droite de régression linéaire.

9.6.2 Diagramme de bifurcation : la suite logistique **

Écrivez une fonction qui calcule la valeur d'équilibre de la suite logistique pour un x_0 (nécessairement compris entre 0 et 1) et un paramètre r (parfois noté μ) donné.

Générez l'ensemble de ces points d'équilibre pour des valeurs de r comprises entre 0 et 4:

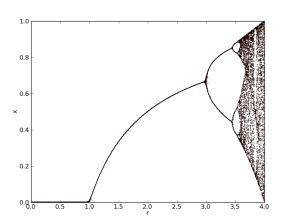


Fig. 9.2 – ${\bf Figure}$: Diagramme de bifurcation.

 ${\bf N.B.}$ Vous utiliserez la bibliothèque ${\it Matplotlib}$ pour tracer vos résultats.

9.6.3 Ensemble de Julia **

Représentez l''ensemble de Julia pour la constante complexe c=0.284+0.0122j :

On utilisera la fonction numpy.meshgrid() pour construire le plan complexe, et l'on affichera le résultat grâce à la fonction matplotlib.pyplot.imshow().

Voir également : Superposition d'ensembles de Julia

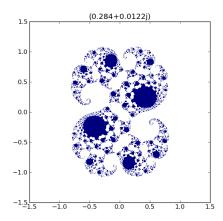


Fig. 9.3 – **Figure :** Ensemble de Julia pour c = 0.284 + 0.0122j.

9.7 Mise en oeuvre de l'ensemble des connaissances acquises

9.7.1 Équation différentielle *

À l'aide de la fonction scipy.integrate.odeint(), intégrer les équations du mouvement d'un boulet de canon soumis à des forces de frottement « turbulentes » (en v^2):

$$\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{g} - \frac{\alpha}{m} v \times \mathbf{v}.$$

Utiliser les valeurs numériques pour un boulet de canon de 36 livres :

```
g = 9.81  # Pesanteur [m/s2]

cx = 0.45  # Coefficient de frottement d'une sphère

rhoAir = 1.2  # Masse volumique de l'air [kg/m3]

rad = 0.1748/2  # Rayon du boulet [m]

rho = 6.23e3  # Masse volumique du boulet [kg/m3]

mass = 4./3.*N.pi*rad**3 * rho  # Masse du boulet [kg]

alpha = 0.5*cx*rhoAir*N.pi*rad**2 / mass # Coeff. de frottement / masse

v0 = 450.  # Vitesse initiale [m/s]

alt = 45.  # Inclinaison du canon [deg]
```

Voir également : Équations de prédation de Lotka-Volterra

9.7.2 Équation d'état de l'eau à partir de la dynamique moléculaire ***

Afin de modéliser les planètes de type Jupiter, Saturne, ou même des exo-planètes très massives (dites « super-Jupiters »), la connaissance de l'équation d'état des composants est nécessaire. Ces équations d'état doivent être valables jusqu'à plusieurs centaines de méga-bar; autrement dit, celles-ci ne sont en aucun cas accessibles expérimentalement. On peut cependant obtenir une équation d'état numériquement à partir d'une dynamique moléculaire.

Le principe est le suivant : on place dans une boite un certain nombre de particules régies par les équations microscopiques (Newton par exemple, ou même par des équations prenant en considération la mécanique quantique) puis on laisse celles-ci évoluer dans la boite; on calcule à chaque pas de temps l'énergie interne à partir des intéractions électrostatiques et la pression à partir du tenseur des contraintes. On obtient en sortie l'évolution du système pour une densité fixée (par le choix de taille de la boite) et une température fixée (par un algorithme de thermostat que nous ne détaillerons pas ici).

On se propose d'analyser quelques fichiers de sortie de tels calculs pour l'équation d'état de l'eau à très haute pression. Les fichiers de sortie sont disponibles ici; leur nom indique les conditions thermodynamiques correspondant au fichier, p.ex. $6000 \,\mathrm{K}_{20}$ gcc. out pour $T=6000 \,\mathrm{K}_{20}$ gcc. Le but est,

pour chaque condition température-densité, d'extraire l'évolution de l'énergie et de la pression au cours du temps, puis d'en extraire la valeur moyenne ainsi que les fluctuations. Il arrive souvent que l'état initial choisi pour le système ne corresponde pas à son état d'équilibre, et qu'il faille donc « jeter » les quelques pas de temps en début de simulation qui correspondent à cette relaxation du système. Pour savoir combien de temps prend cette relaxation, il sera utile de tracer l'évolution au cours du temps de la pression et l'énergie pour quelques simulations. Une fois l'équation d'état $P(\rho, T)$ et $E(\rho, T)$ extraite, on pourra tracer le réseau d'isothermes.

Indication: Vous écrirez une classe Simulation qui permet de charger un fichier de dynamique moléculaire, puis de tracer l'évolution de a température et de la densité, et enfin d'en extraire la valeur moyenne et les fluctuations. À partir de cette classe, vous construirez les tableaux contenant l'équation d'état.

9.8 Exercices en vrac

- Exercices de baseEntraînez-vous !
- Learn Python The Hard Way
- Google Code Jam
- CheckIO

9.8.1 Points matériels et ions (POO/TDD)

Pour une simulation d'un problème physique, on peut construire des classes qui connaissent elles-mêmes leurs propriétés physiques et leurs lois d'évolution.

La structure des classes est proposée dans ce squelette. Vous devrez *compléter* les définitions des classes Vector, Particle et Ion afin qu'elles passent toutes les tests lancés automatiquement par le programme principal main. À l'exécution, la sortie du terminal doit être :

9.8.2 Protein Data Bank

On chercher a réaliser un script qui analyse un fichier de données de type Protein Data Bank.

La banque de données Worldwide Protein Data Bank regroupe les structures obtenues par diffraction aux rayons X ou par RMN. Le format est parfaitement defini et conventionnel (documentation).

On propose d'assurer une lecture de ce fichier pour calculer notamment :

- le barycentre de la biomolécule
- le nombre d'acides aminés ou nucléobases
- le nombre d'atomes
- la masse moléculaire
- les dimensions maximales de la protéine
- etc.

On propose de considerer par exemple la structure resolue pour la GFP ($Green\ Fluorescent\ Protein,\ Prix\ Nobel\ 2008)$ (Fichier PDB)

9.8. Exercices en vrac 101

CHAPITRE 10

Annales d'examen

10.1 Simulation de chute libre (partiel nov. 2014)

```
— Énoncé (PDF) et fichier d'entrée — Corrigé
```

10.2 Examen janvier 2015

```
Énoncé (PDF) ou Examen final, Janvier 2015.
Exercice: velocimetrie.dat
Problème: exam_1501.py, ville.dat
Corrigé, figure
```

CHAPITRE 11

Projets

Table des matières

- Projets
 - Projets de physique
 - Formation d'agrégats
 - Modèle d'Ising
 - Modèle de Potts 3D
 - Méthode de Hückel
 - Densité d'états d'un nanotube
 - Solitons
 - Diagramme de phase du potentiel de Lennard-Jones
 - États de diffusion pour l'équation de Schrödinger 1D stationnaire
 - Percolation
 - Autres possibilités
 - Projets astrophysiques
 - Relation masse/rayon d'une naine blanche
 - Section de Poincaré
 - Projets divers
 - Formation de pistes de fourmis sur un pont à 2 branches
 - Auto-organisation d'un banc de poisson
 - Évacuation d'une salle & déplacement d'une foule dans une rue
 - Suivi de particule(s)
 - Projets statistiques
 - Projets de visualisation

11.1 Projets de physique

11.1.1 Formation d'agrégats

La formation d'agrégats est par essence un sujet interdisciplinaire, ou la modélisation joue un rôle certain comme « microscope computationel ». Pour un projet en ce sens, un soin particulier sera donné à la

contextualisation. P.ex., on pourra tester les limites de la règle de Wade pour la structure de clusters métalliques, ou bien dans un contexte plus biologique.

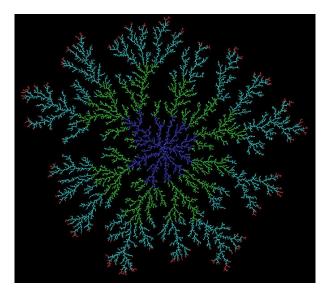


Fig. 11.1 – **Figure :** Résultat d'une agrégation limitée par la diffusion d'environ 33 000 particules obtenue en permettant à des marcheurs aléatoires d'adhérer à une semence centrale. Les couleurs indiquent le temps d'arrivée des marcheurs. Source : WingkLEE (Own work) [Public domain], via Wikimedia Commons.

11.1.2 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est le modèle le plus simple du magnétisme. Le modèle 1D est exactement soluble par la méthode de la matrice de transfert. La généralisation à 2 dimensions a été faite par Lars Onsager en 1944, mais la solution est assez compliquée. Il n'existe pas de solution analytique en 3D. On va ici considérer un système de spins sur réseau. Chaque spin σ_i peut prendre 2 valeurs (« up » et « down »). L'hamiltonien du système,

$$H = -J\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j - h\sum_i\sigma_i$$

contient deux contributions : l'interaction entre premiers voisins et le couplage à un champ magnétique. On va considérer un réseau carré avec une interaction ferromagnétique (J>0). L'objectif du projet sera d'étudier le diagramme de phase du système en fonction de la température et du champ magnétique par simulation de Monte-Carlo.

11.1.3 Modèle de Potts 3D

Modèle de Potts en 3D dans un univers carré à condition périodique. Le but est la mise en évidence de la transition de phase pour plusieurs jeux de paramètres avec 3 types de spins différents.

- 1. Reproduire des résultats connus du modèle d'Ising en 2D pour valider le code.
- 2. Passer à un algorithme en *cluster* pour évaluer la différence avec un algorithme classique.
- 3. Passer en 3D
- 4. Changer le nombre de type de spins (de 2 à 3).

Jeux de paramètres à tester :

- Ising en 2D (2 types de spins, algorithme de Glauber) : Transition de phase attendue à $T\sim227K$ pour un couplage J=100 et un champ externe nul
- Toujours Ising, mais avec l'algorithme de Wolff
- Ising en 3D avec Wolff
- Potts (changer q=2 par q=3) en 3D avec Wolff

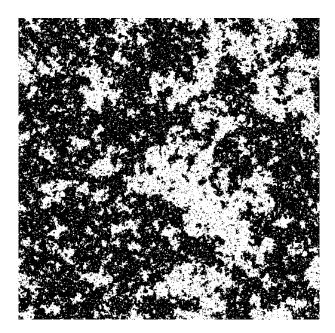


Fig. 11.2 - Figure: Modèle d'Ising au point critique. Source: Paul Coddington.

Références:

Computational Studies of Pure and Dilute Spin Models

11.1.4 Méthode de Hückel

La spectroscopie et la réactivité des électrons π est centrale en chimie. Un outil efficace pour les appréhender est l'approche développé par Hückel. Il vous est demande ici de mettre en oeuvre cette méthode pour l'analyse des orbitales et de l'énergie d'une famille de molécules répondant aux hypothèse sous-jacentes. On discutera notamment du choix de la paramétrisation du système.

11.1.5 Densité d'états d'un nanotube

Les nanotubes de carbone ont été découverts bien avant celle du graphène. Ce sont des matériaux très résistants et durs qui possèdent une conductivité électrique et thermique élevées. Un nanotube de carbone monofeuillet consiste d'une couche de graphène enroulé selon un certain axe. L'axe d'enroulement détermine la chiralité du nanotube et, par la suite, les propriétés électroniques : selon la chiralité, le nanotube peut être soit semi-conducteur, soit métallique. L'objectif du projet sera de calculer la densité d'états de nanotubes de carbone de différentes chiralités et d'établir le lien entre la chiralité et le fait que le nanotube soit semiconducteur ou métallique.

11.1.6 Solitons

On considère un câble sous tension auquel sont rigidement et régulièrement attachés des pendules. Les pendules sont couplés grâce au câble à travers sa constante de torsion. Dans un tel système on peut observer une large gamme de phénomènes ondulatoires. Le but de cet projet est d'étudier une solution très particulière : le *soliton*.

Imaginons qu'une des extrémités du câble est attachée à une manivelle qui peut tourner librement. Il est alors possible de donner une impulsion au système en faisant un tour rapide ce qui déclenche la propagation d'un soliton. Dans ce projet, on considérera les pendules individuellement. Il n'est pas demandé de passer au modèle continu et de résoudre l'équation obtenue.

Pour chaque pendule n dont la position est décrite par θ_n , l'équation d'évolution s'écrit :

$$\frac{d^2\theta_n}{dt^2} = \alpha \sin \theta_n + \beta(\theta_{n-1} + \theta_{n+1} - 2\theta_n)$$

où α, β sont des paramètres physiques. On résoudra numériquement cette équation pour chaque pendule. En donnant un « tour de manivelle numérique », on essayera d'obtenir la solution soliton. On cherchera en particulier à ajuster la solution par une équation du type $\theta_n = a \tan^{-1}(\exp(b(n-n_0)))$ où a, b, n_0 sont des paramètres à déterminer.

De très nombreuses questions se posent (il ne vous est pas demandé de répondre à chacune d'entre elle) :

- Est-il toujours possible d'obtenir un soliton?
- Sa vitesse est-elle constante?
- Le soliton conserve-t-il sa forme?
- Que se passe-t-il avec des pendules plus lourds? ou plus rapprochés? avec un câble plus rigide? avec un frottement?
- Comment le soliton se réfléchit-il si l'extrémité du câble est rigidement fixée? et si elle tourne librement?
- Dans ce système, le soliton est chiral. En effet, on peut tourner la manivelle à gauche ou à droite. Un anti-soliton a-t-il les mêmes propriétés (taille, vitesse, énergie) qu'un soliton?
- Si on place une manivelle à chaque extrémité, on peut faire se collisionner des solitons. Cette étude est très intéressante et pleine de surprises. Que se passe-t-il lors de la collision de deux solitons? Entre un soliton et un anti-soliton?



Fig. 11.3 – **Figure :** Un mascaret, une vague soliton, dans un estuaire de Grande Bretagne. *Source* : Arnold Price [CC-BY-SA-2.0], via Wikimedia Commons.

11.1.7 Diagramme de phase du potentiel de Lennard-Jones

Auteur de la section : Mathieu Leocmach <mathieu.leocmach@ens-lyon.fr>

Le potentiel de Lennard-Jones est souvent utilisé pour décrire les interactions entre deux atomes au sein d'un système monoatomique de type gaz rare. Son expression en fonction de la distance r entre les deux noyaux atomiques est :

$$E_p(r) = 4E_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

avec r_0 la distance pour laquelle $E_p(r_0) = 0$.

On programmera un simulateur de dynamique moléculaire pour N particules identiques dans un cube periodique de taille fixe L et à une température T. On prendra soin d'adimentionner toutes les grandeurs et d'imposer des conditions aux limites periodiques. On se renseignera sur les façons possibles de déterminer les conditions initiales et d'imposer la température.

Les positions et vitesses des particules seront exportées de façon régulières pour visualisation (par exemple dans Paraview).

- On pourra observer les collisions de 2 ou 3 particules à différentes températures avant de passer à des N plus grands (100 particules?).
- On fera varier $V = L^3$ et T pour déterminer les frontières des différentes phases.
- On pourra aussi essayer d'aller vers de plus grands N pour tester l'influence de la taille finie de l'échantillon. Des optimisations seront alors sûrement nécessaires pour accélérer le programme.
- On pourra aussi tester d'autres types de potentiels comme celui de Weeks-Chandler-Anderson et discuter des différences observées.

11.1.8 États de diffusion pour l'équation de Schrödinger 1D stationnaire

On s'intéresse à la diffusion d'une particule de masse m à travers un potentiel carré défini par $V(x) = V_0$ pour $0 \le x \le a$, et 0 sinon.

Les solutions de cette équation en dehors de la région où règne le potentiel sont connues. Les paramètres d'intégration de ces fonctions d'onde peuvent se déterminer par les relations de continuité aux frontières avec la région où règne le potentiel. En résolvant l'équation différentielle dans la région du potentiel pour x allant de a à 0 on peut obtenir une autre valeur pour ces paramètre d'intégration. Il faut ensuite appliquer un algorithme de minimisation pour déterminer les constantes d'intégration.

Les objectifs de ce projet sont :

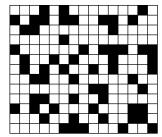
- Écrire un programme qui résolve l'équation de Schrödinger.
- En déduire les coefficients de transmission et de réflexion.

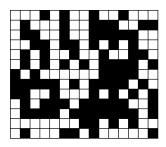
Références:

- A numerical method for quantum tunnelling, Pang T., Computers un Physics, 9, p 602-605.
- Équation de Schrödinger 1D
- Quantum Python: Animating the Schrodinger Equation

11.1.9 Percolation

Ce sujet propose d'étudier le phénomène de percolation. La percolation est un processus physique qui décrit pour un système, une transition d'un état vers un autre. Le système que nous étudierons est composé ici d'une grille carrée dont les cases sont soit vides, soit pleines. Initialement, la matrice est vide et l'on tire aléatoirement une case que l'on rempli. On défini la concentration comme le rapport du nombre de cases noires sur le nombre total de cases. À partir d'une certaine concentration critique un chemin continu de cases noires s'établit entre deux bords opposés du système (haut et bas, ou gauche et droite) et on dit alors que le système percole. Le but du sujet est d'étudier la transition d'un système qui ne percole pas (à gauche sur la figure) vers un système qui percole (à droite). Pour ce faire, on établira un algorithme qui pour une configuration donnée détermine si le réseau de cases noires percole ou non. On étudiera également la taille et le nombre des amas de cases noires en fonction de la concentration. On étudiera aussi les effets de la taille du système.





Cette étude repose sur un tirage pseudo aléatoire et pas conséquent nécessite un traitement statistique. On ne pourra pas se contenter d'étudier un cas particulier mais on prendra soin au contraire d'effectuer des moyennes sur un très grand nombre de tirages (plusieurs centaines).

Références:

Percolation theory

— Concepts fondamentaux de la percolation

— Percolation exercises: 2006, 2012

11.1.10 Autres possibilités

— Reaction-Diffusion by the Gray-Scott Model

- Équation de Cahn-Hilliard (voir l'exemple NIST sous FiPy: A Finite Volume PDE Solver Using Python)
- Computational Methods for Nonlinear Systems

11.2 Projets astrophysiques

Auteur de la section : Méthodes numériques pour la physique et les SPI

11.2.1 Relation masse/rayon d'une naine blanche

D'après la théorie de l'évolution stellaire, les naines blanches sont l'un des états possibles d'une étoile (peu massive) à la fin de sa vie, lorsque les réactions de fusion thermonucléaire s'arrêtent.

En première approximation un corps astrophysique est essentiellement soumis à la force de gravitation (qui tend à le contracter) et une force interne de pression qui vient équilibrer la première. Ainsi on peut approcher le problème par un équilibre hydrostatique caractérisé par :

$$\nabla P(r) = -\rho(r) \frac{GM(r)}{r^2} e_r$$

où G est la constante de gravitation, P(r), $\rho(r)$ et M(r) respectivement la pression, la densité à la distance r du centre et la masse dans une sphère de rayon r.

Il s'agit d'étudier ici quelle force peut équilibrer la gravitation pour une naine blanche et mettre en évidence une masse limite en étudiant la relation rayon/masse.

Modélisation

La masse et le rayon d'équilibre de ce système sont entièrement déterminés par l'équation d'état thermodynamique $P = P(\rho)$ et la densité centrale. En effet on montre facilement que :

$$\frac{d\rho}{dr} = -\left(\frac{dP}{d\rho}\right)^{-1} \frac{GM}{r^2} \rho$$

$$\frac{dM}{dr} = 4\pi r^2 \rho$$

Une fois que les réactions thermonucléaires s'arrêtent, la première des forces empêchant l'étoile de s'effondrer vient de la pression due aux électrons. Le modèle que nous utiliserons sera donc un simple gaz d'électrons (masse m_e et de nombre par unité de volume n) plongé dans un gaz de noyaux (on note Y_e

le nombre d'électrons par nucléon et M_n la masse d'un nucléon) d'équation d'état :

$$\frac{E}{V} = n_0 m_e c^2 x^3 \varepsilon(x),$$
avec
$$x = \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\frac{1}{3}},$$

$$n_0 = \frac{m_e^3 c^3}{3\hbar^3 \pi^2},$$

$$\rho_0 = \frac{M_n n_0}{Y_e}$$
et
$$\varepsilon(x) = \frac{3}{8x^3} \left[x(1+2x^2)\sqrt{1+x^2} - \ln\left(x+\sqrt{1+x^2}\right) \right]$$

Si tous les noyaux sont du ^{12}C , alors $Y_e = 1/2$.

1. Montrer que le système d'équations à résoudre est

$$\frac{d\rho}{dr} = -\left(\frac{3M_nG}{Y_e m_e c^2} \frac{\sqrt{1+x^2}}{x^2}\right) \frac{M}{r^2} \rho$$

$$\frac{dM}{dr} = 4\pi r^2 \rho$$

- 2. En fixant la densité centrale $\rho(r=0) = \rho_c$ tracer $\rho(r)$ et en déduire une méthode pour calculer le rayon R de l'étoile et sa masse M.
- 3. En faisant varier la densité centrale tracer la relation M(R).
- 4. Discuter la validité numérique et physique des résultats par exemple en changeant la composition de l'étoile, la définition du rayon de l'étoile, etc.

11.2.2 Section de Poincaré

Les équations du mouvement 1 $\boldsymbol{r}(t)=(x(t),y(t))$ d'une particule de masse m plongée dans un potentiel $\Phi(x,y)$ s'écrivent :

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = -\nabla\Phi.$$

En coordonnées polaires :

$$\begin{split} a_r &= \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 = -\frac{1}{m}\frac{\partial\Phi}{\partial r} \\ a_\theta &= 2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta} = -\frac{1}{mr}\frac{\partial\Phi}{\partial \theta} \end{split}$$

Le système peut donc s'écrire :

$$\begin{split} \ddot{r} &= r\dot{\theta}^2 - \frac{1}{m}\frac{\partial\Phi}{\partial r} \\ \ddot{\theta} &= -\frac{2}{r}\dot{r}\dot{\theta} - \frac{1}{mr^2}\frac{\partial\Phi}{\partial\theta} \end{split}$$

ou en posant $r_p = \dot{r}$ et $\theta_p = \dot{\theta}$:

$$\begin{split} \dot{r} &= r_p \\ \dot{\theta} &= \theta_p \\ \dot{r_p} &= r\theta_p^2 - \frac{1}{m} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \\ \dot{\theta_p} &= -\frac{2}{r} r_p \theta_p - \frac{1}{m r^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \end{split}$$

On se place dans toute la suite du problème dans un espace à deux dimensions.

L'intégration – analytique ou numérique – de ces équations pour des conditions initiales $(\mathbf{r}(t=0), \dot{\mathbf{r}}(t=0))$ particulières caractérise une *orbite*. Le tracé de l'ensemble des points d'intersection de différentes orbites de même énergie avec le plan, p.ex., (x, \dot{x}) (avec y=0 et $\dot{y}>0$) constitue une section de Poincaré.

Nous étudierons plus particulièrement le cas particulier m=1 et les deux potentiels :

1. le potentiel intégrable de Sridhar & Touma (1997; MNRAS, 287, L1)², qui s'exprime naturellement dans les coordonnées polaires (r, θ) :

$$\Phi(r,\theta) = r^{\alpha} \left[(1 + \cos \theta)^{1+\alpha} + (1 - \cos \theta)^{1+\alpha} \right].$$

avec p.ex. $\alpha = 1/2$;

2. le potentiel de Hénon-Heiles :

$$\Phi(r,\theta) = \frac{1}{2}r^2 + \frac{1}{3}r^3\sin(3\theta).$$

Objectif

- 1. Écrire un intégrateur numérique permettant de résoudre les équations du mouvement pour un potentiel et des conditions initiales données.
- 2. Les performances de cet intégrateur seront testées sur des potentiels intégrables (p.ex. potentiel képlerien $\Phi \propto 1/r$), ou en vérifiant la stabilité des constantes du mouvement (l'énergie $E = \frac{1}{2}\dot{r}^2 + \Phi$).
- 3. Pour chacun des potentiels, intégrer et stocker une grande variété d'orbites de même énergie, en prenant soin de bien résoudre la zone d'intérêt autour de $(y = 0, \dot{y} > 0)$.
- 4. À l'aide de fonctions d'interpolation et de recherche de zéro, déterminer pour chacune des orbites les coordonnées (x, \dot{x}) de l'intersection avec le plan $(y = 0, \dot{y} > 0)$.
- 5. Pour chacun des potentiels, regrouper ces points par orbite pour construire la section de Poincaré de ce potentiel.

11.3 Projets divers

11.3.1 Formation de pistes de fourmis sur un pont à 2 branches

Si on propose à une colonie de fourmis de choisir entre 2 branches pour rejoindre une source de nourriture la branche finalement choisie est toujours la plus courte. Le projet consiste à modéliser et caractériser ce comportement.

Indication : on peut étudier ce système avec des EDOs. Cela peut aussi donner lieu à une simulation individu centré et éventuellement une comparaison entre les deux types de modèle.

11.3.2 Auto-organisation d'un banc de poisson

Auteur de la section : Hanna Julienne hanna.julienne@gmail.com

La coordination d'un banc de poissons ou d'un vol d'oiseaux est tout à fait frappante : les milliers d'individus qui composent ces structures se meuvent comme un seul. On observe aussi, dans les bancs de poisson, d'impressionnants comportements d'évitement des prédateurs (flash expansion, fountain effect).

Pourtant ces mouvements harmonieusement coordonnés ne peuvent pas s'expliquer par l'existence d'un poisson leader. Comment pourrait-il être visible par tous ou diriger les *flash expansion* qui ont lieu à un endroit précis du banc de poisson? De la même manière on ne voit pas quelle contrainte extérieure pourrait expliquer le phénomène.

Nous utiliserons toutefois les notations de l'appendice de Copin, Zhao & de Zeeuw (2000; MNRAS, 318, 781).

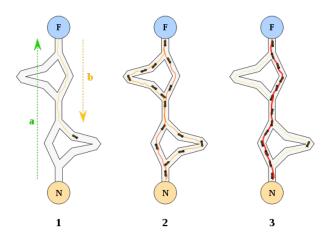


Fig. 11.4 – **Figure :** 1) la première fourmi trouve la source de nourriture (F), via un chemin quelconque (a), puis revient au nid (N) en laissant derrière elle une piste de phéromone (b). 2) les fourmis empruntent indifféremment les 4 chemins possibles, mais le renforcement de la piste rend plus attractif le chemin le plus court. 3) les fourmis empruntent le chemin le plus court, les portions longues des autres chemins voient la piste de phéromones s'évaporer. Source : Johann Dréo via Wikimedia Commons.

Une hypothèse plus vraisemblable pour rendre compte de ces phénomènes est que la cohérence de l'ensemble est due à la somme de comportements individuels. Chaque individu adapte son comportement par rapport à son environnement proche. C'est ce qu'on appelle auto-organisation. En effet, on a établi expérimentalement que les poissons se positionnent par rapport à leurs k plus proches voisins de la manière suivante :

- ils s'éloignent de leurs voisins très proches (zone de répulsion en rouge sur la figure ci-dessous)
- ils s'alignent avec des voisins qui sont à distance modérée (zone jaune)
- ils s'approchent de leur voisins s'ils sont à la fois suffisamment proches et distants (zone verte)

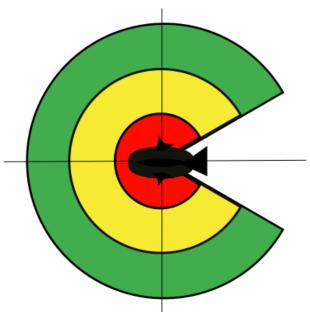


Fig. 11.5 – **Figure :** Environnement proche du poisson : zones dans lesquelles le positionnement d'un voisin provoque une réponse de la part de l'individu au centre

Dans notre modèle, nous allons prendre en compte l'influence des k plus proches voisins. On calculera la contribution de chaque voisin selon la zone dans laquelle il se situe. Le déplacement du poisson sera la moyenne de ces contributions. Il est à noter qu'un voisin en dehors des trois zones d'influence n'a pas d'effet.

11.3. Projets divers

L'environnement proche d'un poisson est modélisé par des sphères imbriquées qui présentent une zone aveugle (voir figure).

Par ailleurs, si un individu n'a pas de voisins dans son environnement proche il adopte un comportment de recherche. Il explore aléatoirement les alentours jusqu'à ce qu'il repère le banc de poissons et finalement s'en rapproche.

Ce projet vise à :

- Coder le comportement des poissons et à les faire évoluer dans un environnement 2D.
- On essaiera d'obtenir un comportement collectif cohérent (similaire à un banc de poisson) et d'établir les conditions nécessaires à ce comportement.
- On étudiera notamment l'influence du nombre d'individus pris en compte. Est-ce que le positionnement par rapport au plus proche voisin (k = 1) est suffisant?
- On pourra se servir de la visualisation pour rendre compte de la cohérence du comportment et éventuellement inventer des mesures pour rendre compte de manière quantifier de cette cohérence.

Liens:

- Craig Reynolds Boids
- Décrypter les interactions entre poissons au sein d'un banc

11.3.3 Évacuation d'une salle & déplacement d'une foule dans une rue

Le comportement d'une foule est un problème aux applications multiples : évacuation d'une salle, couloir du métro aux heures de pointes, manifestations... On peut en imaginer des modèles simples. P. ex., on peut décrire chaque individu par sa position, sa vitesse, et comme étant soumis à des « forces » :

- Une force qui spécifie la direction dans laquelle l'individu veut se déplacer, $\mathbf{f}_{dir} = (\mathbf{v}_0 \mathbf{v}(t))/\tau$, où \mathbf{v}_0 est la direction et la vitesse que la personne veut atteindre, \mathbf{v} sa vitesse actuelle, et τ un temps caractéristique d'ajustement.
- Une force qui l'oblige à éviter des obstacles qui peuvent être fixes (un mur, un massif de fleurs, ...), ou qui peuvent être les autres individus eux-mêmes. On pourra essayer $f_{obs}(d) = a \exp(-d/d_0)$, où d est la distance entre le piéton et l'obstacle, d_0 la « portée » de la force, et a son amplitude.

On pourra varier les différents paramètres apparaissant ci-dessus, tout en leur donnant une interprétation physique réelle, et étudier leur influence dans des situations concrètes. P. ex., à quelle vitesse, en fonction de \mathbf{v}_0 et de la densité de piétons, se déplace une foule contrainte à avancer dans un couloir si chaque individu veut maintenir une vitesse \mathbf{v}_0 ? Comment s'organise l'évacuation d'une salle initialement uniformément peuplée, avec une ou plusieurs sorties, et en la présence éventuels d'obstacles?

Il est également possible d'essayer d'autres expressions pour les forces.

Il existe une littérature conséquente sur le sujet, que l'on pourra explorer si besoin (p. ex : Décrypter le mouvement des piétons dans une foule).

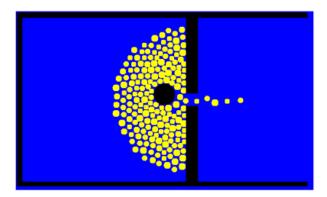


Fig. 11.6 – Figure: Un obstacle aide à l'évacuation. Source: Crowd Behavior.

11.3.4 Suivi de particule(s)

Auteur de la section : Mathieu Leocmach <mathieu.leocmach@ens-lyon.fr>

Dans de nombreux domaines de recherche expérimentale, on a besoin de localiser des particles dans une image ou de reconstituer leurs trajectoires à partir d'une vidéo. Il peut s'agir de virus envahissant une cellule, de traceurs dans un écoulement, d'objets célestes fonçant vers la terre pour la détruire, etc.

Dans ce projet, on essayera d'abord de localiser une particule unique dans une image à 2 dimensions (niveaux de gris) en utilisant l'algorithme de Crocker & Grier décrit ici. On utilisera sans retenue les fonctions de la bibliothèque scipy.ndimage.

On essayera d'obtenir une localisation plus fine que la taille du pixel. On essayera ensuite de détecter plusieurs particules dans une image.

Afin de pouvoir traiter efficacement une séquence d'images de même taille, on privilégiera une implémentation orientée objet. L'objet de la classe Finder sera construit une seule fois en début de séquence et il contiendra les images intermédiaires nécessaire au traitement. On nourrira ensuite cet objet avec chaque image de la séquence pour obtenir les coordonnées des particules.

Enfin, on pourra essayer de relier les coordonnées dans des images successives pour constituer des trajectoires.

On contactera le créateur du sujet pour obtenir des séquences d'images expérimentales de particules Browniennes.

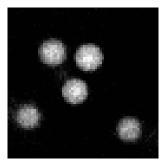


Fig. 11.7 – **Figure :** Exemple d'image test où on voudra localiser les particules.

11.4 Projets statistiques

- Tests statistiques du NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods, p.ex. Comparisons based on data from two processes
- Statistiques robustes, p.ex. Beers et al. (1990)

11.5 Projets de visualisation

L'objectif premier de ces projets est de développer des outils de visualisation sous Python/Matplotlib.

- Coordonnées parallèles
 - Sources éventuelles d'inspiration : Parallel Coordinates plot in Matplotlib, XDAT
 - Exemples de jeu de données multi-variables : Iris flower data set, Cars (source)
- Andrew Curves (voir également Rip's Applied Mathematics Blog)
 - À appliquer sur les mêmes jeux de données que pour les coordonnées parallèles.
- Stacked graphs
 - Source éventuelle d'inspiration : Python recipe
- Diagramme de Hertzprung-Russel

L'objectif est de développer une classe permettant de tracer des diagrammes HR à partir de diverses quantités observationnelles (magnitudes apparentes ou absolues, couleurs) ou théoriques (luminosité, températures effectives), ainsi que des isochrones.

- Source éventuelle d'inspiration : Stellar evolutionary tracks
- Données photométriques : p.ex. M55 (source : BVI photometry in M55)
- Données théoriques : p.ex. Padova database of stellar evolutionary tracks and isochrones
- Treemaps
 - Source éventuelle d'inspiration : Treemaps under pylab
- De façon plus générale, l'ensemble des visualisations proposées sous :
 - Flare
 - D3
 - Periodic Table of Vizualisation Methods

Démonstration Astropy

Nous présentons ici quelques possibilités de la bibliothèque Astropy.

Référence : cette démonstration est très largement inspirée de la partie Astropy du cours Python Euclid 2016.

```
[1]: import numpy as N
   import matplotlib.pyplot as P
   try:
        import seaborn
        seaborn.set_color_codes() # Override default matplotlib colors 'b', 'r', 'g', etc.
   except ImportError:
        pass

# Interactive figures
# %matplotlib notebook
# Static figures
%matplotlib inline
```

12.1 Fichiers FITS

Le format FITS (Flexible Image Transport System) constitue le format de données historique (et encore très utilisé) de la communauté astronomique. Il permet le stockage simultané de données – sous forme de tableaux numériques multidimensionnels (spectre 1D, image 2D, cube 3D, etc.) ou de tables de données structurées (texte ou binaires) – et des métadonnées associées – sous la forme d'un entête ASCII nommé header. Il autorise en outre de combiner au sein d'un même fichier différents segments de données (extensions, p.ex. le signal et la variance associée) sous la forme de HDU (Header-Data Units).

Le fichier FITS de test est disponible ici : image.fits (données Herschel Space Observatory)

12.1.1 Lire un fichier FITS

```
[2]: from astropy.io import fits as F

filename = "image.fits"
hdulist = F.open(filename)
```

hdulist est un objet HDUList de type liste regroupant les différents HDU du fichier :

```
[3]: hdulist.info()

Filename: image.fits

No. Name Ver Type Cards Dimensions Format

0 PRIMARY 1 PrimaryHDU 151 ()

1 image 1 ImageHDU 52 (273, 296) float64

2 error 1 ImageHDU 20 (273, 296) float64

3 coverage 1 ImageHDU 20 (273, 296) float64

4 History 1 ImageHDU 23 ()

5 HistoryScript 1 BinTableHDU 39 105R x 1C [300A]

6 HistoryTasks 1 BinTableHDU 46 77R x 4C [1K, 27A, 1K, 9A]

7 HistoryParameters 1 BinTableHDU 74 614R x 10C [1K, 20A, 7A, 46A, 1L, 1K, 1L, 1]
```

Chaque HDU contient:

- un attribut data pour la partie données sous la forme d'un numpy.array ou d'une structure équivalente à un tableau à type structuré;
- un attribut header pour la partie métadonnées sous la forme « KEY = value / comment ».

```
[4]: imhdu = hdulist['image']
    print(type(imhdu.data), type(imhdu.header))

<class 'numpy.ndarray'> <class 'astropy.io.fits.header.Header'>
```

Il est également possible de lire directement les données et les métadonnées de l'extension image:

```
[5]: ima, hdr = F.getdata(filename, 'image', header=True)
    print(type(ima), type(hdr))

<class 'numpy.ndarray'> <class 'astropy.io.fits.header.Header'>
```

data contient donc les données numériques, ici un tableau 2D :

```
[6]: N.info(ima)

class: ndarray
shape: (296, 273)
strides: (2184, 8)
itemsize: 8
aligned: True
contiguous: True
fortran: False
data pointer: 0x7fc7b6551ec0
byteorder: big
byteswap: True
type: >f8
```

L'entête hdr est un objet de type Header similaire à un OrderedDict (dictionnaire ordonné).

```
[7]: hdr[:5] # Les 5 premières clés de l'entête

[7]: XTENSION= 'IMAGE ' / Java FITS: Wed Aug 14 11:37:21 CEST 2013

BITPIX = -64

NAXIS = 2 / Dimensionality

NAXIS1 = 273

NAXIS2 = 296
```

Attention: les axes des tableaux FITS et NumPy arrays sont inversés!

```
[8]: print("FITS: ", (hdr['naxis1'], hdr['naxis2'])) # format de l'image FITS print("Numpy:", ima.shape) # format du tableau numpy
```

```
FITS: (273, 296)
Numpy: (296, 273)
```

12.1.2 World Coordinate System

L'entête d'un fichier FITS peut notamment inclure une description détaillée du système de coordonnées lié aux données, le World Coordinate System.

```
[9]: from astropy import wcs as WCS

wcs = WCS.WCS(hdr)  # Décrypte le WCS à partir de l'entête

print(wcs)

WCS Keywords

Number of WCS axes: 2

CTYPE: 'RA--TAN' 'DEC-TAN'

CRVAL: 30.07379502155236 -24.903630299920962

CRPIX: 134.0 153.0

NAXIS: 273 296

[10]: ra, dec = wcs.wcs_pix2world(0, 0, 0)  # Coordonnées réelles du px (0, 0)

print("World:", ra, dec)

x, y = wcs.wcs_world2pix(ra, dec, 0)  # Coordonnées dans l'image de la position (ra, dec)

print("Image:", x, y)

World: 30.31868700299246 -25.156760607162152

Image: -3.211653165635653e-12 -1.0516032489249483e-12
```

12.1.3 Visualisation dans matplotlib

```
Les tableaux 2D (image) se visualisent à l'aide de la commande imshow:

— cmap: table des couleurs;

— vmin, vmax: valeurs minimale et maximale des données visualisées;

— origin: position du pixel (0, 0) ("lower" = en bas à gauche).

[11]: fig, ax = P.subplots(figsize=(6, 6))

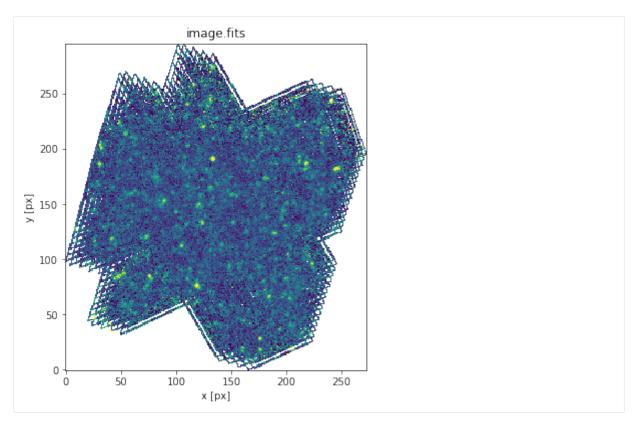
ax.imshow(ima, cmap='viridis', origin='lower', interpolation='None', vmin=-2e-2, vmax=5e-2)

ax.set_xlabel("x [px]")

ax.set_ylabel("y [px]")

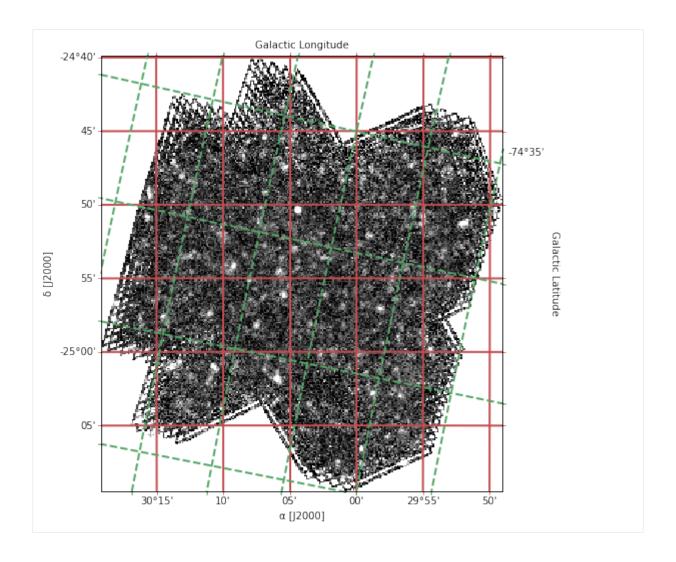
ax.set_title(filename);
```

12.1. Fichiers FITS 119



Il est possible d'ajouter d'autres systèmes de coordonnées via WCS.

```
[12]: import astropy.visualization as VIZ
      {\tt from\ astropy.visualization.mpl\_normalize\ import\ ImageNormalize}
     fig = P.figure(figsize=(8, 8))
      ax = fig.add_subplot(1, 1, 1, projection=wcs)
      # 10th and 99th percentiles
      vmin, vmax = VIZ.AsymmetricPercentileInterval(10, 99).get_limits(ima)
      # Linear normalization
      norm = ImageNormalize(vmin=vmin, vmax=vmax, stretch=VIZ.LinearStretch())
      ax.imshow(ima, cmap='gray', origin='lower', interpolation='None', norm=norm)
      # Coordonnées équatoriales en rouge
      ax.coords['ra'].set_axislabel(u'\alpha [J2000]')
      ax.coords['dec'].set_axislabel(u'\delta [J2000]')
      ax.coords['ra'].set_ticks(color='r')
      ax.coords['dec'].set_ticks(color='r')
      ax.coords.grid(color='r', ls='-', lw=2)
      # Coordonnées galactiques en vert
      overlay = ax.get_coords_overlay('galactic')
      overlay['1'].set_axislabel('Galactic Longitude')
      overlay['b'].set_axislabel('Galactic Latitude')
      overlay['l'].set_ticks(color='g')
      overlay['b'].set_ticks(color='g')
      overlay.grid(color='g', ls='--', lw=2)
```



12.2 Tables

Outre les tables FITS, astropy permet lire et écrire des Tables dans de nombreux formats ASCII usuels en astronomie (LaTeX, HTML, CDS, SExtractor, etc.).

Le fichier ASCII de test est disponible ici : sources.dat

```
[13]: from astropy.io import ascii
      catalog = ascii.read('sources.dat')
      catalog.info()
      <Table length=167>
          name
                    dtype
                ra float64
               dec float64
                 x float64
                 y float64
         raPlusErr float64
        decPlusErr float64
        raMinusErr float64
       decMinusErr float64
          xPlusErr float64
          yPlusErr float64
                                                                                    (suite sur la page suivante)
```

12.2. Tables 121

(suite de la page précédente)

```
xMinusErr float64
yMinusErr float64
flux float64
fluxPlusErr float64
fluxMinusErr float64
background float64
bgPlusErr float64
bgMinusErr float64
quality float64
```

```
[14]: catalog.sort('flux') # Ordonne les sources par 'flux' croissant
      catalog.reverse()
                              # Ordonne les sources par 'flux' décroissant
      #catalog.show_in_notebook(display_length=5)
                              # Les cinq sources les plus brillantes du catalogue
      catalog[:5]
[14]: <Table length=5>
                                                             {\tt bgMinusErr}
                           dec
         float64
                         float64
                                         float64
                                                              float64
                                                                                float64
      30.0736543481 -24.8389847181 133.076596062 ... 0.00280563968109 24.0841967062
      30.0997563127 \quad -25.030193106 \quad 118.886083699 \quad \dots \quad 0.00310958937187 \quad 16.5084425251
      30.2726211379 \ -25.0771584874 \ 24.9485847511 \ \dots \ 0.00603800958334 \ 6.67900541976
      29.8763509609 -24.7518860739 240.583543382 ... 0.00466051306854 9.08251222505
      29.8668948822 \ -24.8539846811 \ 245.642862323 \ \dots \ 0.00330155226713 \ 8.43689223988
```

Histogramme des flux, avec choix automatique du nombre de bins :

```
[15]: import astropy.visualization as VIZ
      fig, ax = P.subplots()
      VIZ.hist(catalog['flux'], bins='freedman', ax=ax, histtype='stepfilled')
      ax.set(xlabel="Flux", title="%d sources" % len(catalog));
                                167 sources
       50
       40
       30
       20
       10
        0
            20
                                                             160
                           60
                                        100
                                               120
                                                      140
                                    Flux
```

Après conversion des coordonnées RA-Dec de la table en coordonnées, on peut superposer la position des 5 sources les plus brillantes du catalogue à l'image précédente :

(suite de la page précédente)

```
x, y = wcs.wcs_world2pix(catalog['ra'][:5], catalog['dec'][:5], 0)
ax.scatter(x, y, color='r', label="Brightest sources")
ax.legend();
                              image.fits
                                            Brightest sources
   250
   200
<u>X</u> 150
   100
     50
      0
                 50
                          100
                                    150
                                             200
                                                       250
                                x [px]
```

12.3 Quantités et unités

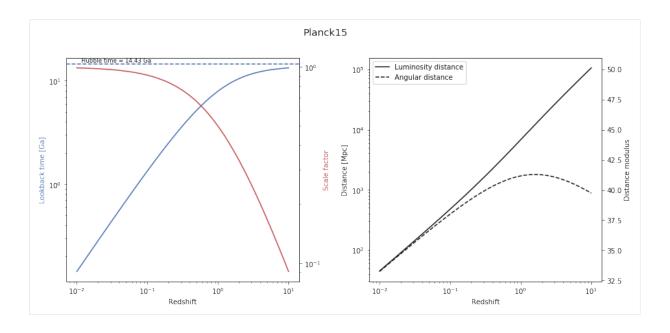
Astropy permet de définir des Quantités dimensionnées et de gérer les conversions d'unités.

 ${
m HO}$ = 70.0 km / (Mpc s) = 71.6 nm / (a km) = 71.6 Mpc / (Ga Gpc) = 2.27e-18 1 / s

12.4 Calculs cosmologiques

Astropy permet des calculs de base de cosmologie.

```
[21]: z = N.logspace(-2, 1, 100)
     fig = P.figure(figsize=(14, 6))
      # Ax1: lookback time
      ax1 = fig.add_subplot(1, 2, 1,
                            xlabel="Redshift", xscale='log')
      ax1.plot(z, cosmo.lookback_time(z), 'b-')
      ax1.set_ylabel("Lookback time [Ga]", color='b')
      ax1.set_yscale('log')
      ax1.xaxis.set_minor_locator(P.matplotlib.ticker.LogLocator(subs=range(2,10)))
      ax1.yaxis.set_minor_locator(P.matplotlib.ticker.LogLocator(subs=range(2,10)))
      ax1.grid(which='minor', color='w', linewidth=0.5)
      # En parallèle: facteur d'échelle
     ax1b = ax1.twinx()
      ax1b.plot(z, cosmo.scale_factor(z), 'r-')
      ax1b.set_ylabel("Scale factor", color='r')
      ax1b.set_yscale('log')
      ax1b.grid(False)
     ht = (1/cosmo.H0).to('Ga') # Hubble time
      ax1.axhline(ht.value, c='b', ls='--')
      ax1.annotate("Hubble time = \{:.2f\}".format(ht), (z[1], ht.value), (3,3),
                   textcoords='offset points', size='small');
      # Ax2: distances de luminosité et angulaire
      ax2 = fig.add_subplot(1, 2, 2,
                            xlabel="Redshift", xscale='log')
      \verb|ax2.plot(z, cosmo.luminosity_distance(z), 'k-', label="Luminosity distance"|)| \\
      ax2.plot(z, cosmo.angular_diameter_distance(z), 'k--', label="Angular distance")
      ax2.set_ylabel("Distance [Mpc]")
      ax2.set_yscale('log')
      ax2.legend()
      ax2.xaxis.set_minor_locator(P.matplotlib.ticker.LogLocator(subs=range(2,10)))
      ax2.yaxis.set_minor_locator(P.matplotlib.ticker.LogLocator(subs=range(2,10)))
      ax2.grid(which='minor', color='w', linewidth=0.5)
      # En parallèle, module de distance
      ax2b = ax2.twinx()
      \verb|ax2b.plot(z, cosmo.distmod(z), 'k-', visible=False)| \textit{# Just to get the scale}|\\
      ax2b.set_ylabel("Distance modulus")
      fig.subplots_adjust(wspace=0.3)
      fig.suptitle(cosmo.name, fontsize='x-large');
```



The following section was generated from Cours/astropy.ipynb

Pokémon Go! (démonstration Pandas/Seaborn)

Voici un exemple d'utilisation des libraries Pandas (manipulation de données hétérogène) et Seaborn (visualisations statistiques), sur le Pokémon dataset d'Alberto Barradas.

Références:

- Visualizing Pokémon Stats with Seaborn
- Pokemon Stats Analysis And Visualizations

```
[1]: import pandas as PD
import seaborn as SNS
import matplotlib.pyplot as P

%matplotlib inline
```

13.1 Lecture et préparation des données

Pandas fournit des méthodes de lecture des données à partir de nombreux formats, dont les données $Comma\ Separated\ Values$:

```
[2]: df = PD.read_csv('./Pokemon.csv', index_col='Name')
                                                          # Indexation sur le nom (unique)
                                                           # Informations générales
    df.info()
    <class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
    Index: 800 entries, Bulbasaur to Volcanion
    Data columns (total 12 columns):
                  800 non-null int64
    Type 1
                  800 non-null object
    Type 2
                  414 non-null object
                  800 non-null int64
    Total
                  800 non-null int64
    Attack
                  800 non-null int64
    Defense
                  800 non-null int64
    Sp. Atk
                  800 non-null int64
    Sp. Def
                  800 non-null int64
    Speed
                  800 non-null int64
                  800 non-null int64
    Generation
    Legendary
                  800 non-null bool
```

(suite sur la page suivante)

(suite de la page précédente)

```
dtypes: bool(1), int64(9), object(2)
memory usage: 75.8+ KB
```

Les premières lignes du DataFrame (tableau 2D) qui en résulte :

df.head(10) # Les 10 premières lignes								
:	#	Type 1	Type 2	Total	HP	Attack	Defense	\
Name								
Bulbasaur	1	Grass	Poison	318	45	49	49	
Ivysaur	2	${\tt Grass}$	Poison	405	60	62	63	
Venusaur	3	Grass	Poison	525	80	82	83	
VenusaurMega Venusaur	3	Grass	Poison	625	80	100	123	
Charmander	4	Fire	NaN	309	39	52	43	
Charmeleon	5	Fire	NaN	405	58	64	58	
Charizard	6	Fire	Flying	534	78	84	78	
CharizardMega Charizard X	6	Fire	Dragon	634	78	130	111	
CharizardMega Charizard Y	6	Fire	Flying	634	78	104	78	
Squirtle	7	Water	NaN	314	44	48	65	
	Sp	. Atk	Sp. Def	Speed	Gen	eration	Legendary	7
Name	•		•	•			0 ,	
Bulbasaur		65	65	45		1	False	9
Ivysaur		80	80	60		1	False	•
Venusaur		100	100	80		1	False	•
VenusaurMega Venusaur		122	120	80		1	False	9
Charmander		60	50	65		1	False	9
Charmeleon		80	65	80		1	False	9
Charizard		109	85	100		1	False	9
CharizardMega Charizard X		130	85	100		1	False	9
CharizardMega Charizard Y		159	115	100		1	False	9
Squirtle		50	64	43		1	False	9

Le format est ici simple :

- nom du Pokémon (utilisé comme indice) et son n° (notons que le n° n'est pas unique)
- type primaire et éventuellement secondaire str
- différentes caractéristiques int (p.ex. points de vie, niveaux d'attage et défense, vitesse, génération)
- type légendaire bool

Nous appliquons les filtres suivants directement sur le dataframe (inplace=True):

- simplifier le nom des mega pokémons
- remplacer les NaN de la colonne « Type 2 »
- éliminer les colonnes « # » et « Sp. »

```
[4]: df.set_index(df.index.str.replace(".*(?=Mega)", ''), inplace=True) # Supprime la chaîne avantu
    df['Type 2'].fillna('', inplace=True)
                                                                         # Remplace NaN par ''
    df.drop(['#'] + [ col for col in df.columns if col.startswith('Sp.')],
            axis=1, inplace=True) # "Laisse tomber" les colonnes commençant par 'Sp.'
    df.head()
                                     # Les 5 premières lignes
[4]:
                  Type 1 Type 2 Total HP Attack Defense Speed Generation \setminus
    Name
    Bulbasaur
                                    318 45
                                                  49
                                                          49
                                                                  45
                   Grass Poison
                                                                               1
    Ivysaur
                   Grass Poison
                                     405 60
                                                  62
                                                          63
                                                                  60
                                                                               1
    Venusaur
                   Grass Poison
                                    525 80
                                                 82
                                                          83
                                                                  80
                                                                               1
    Mega Venusaur Grass Poison
                                     625
                                         80
                                                 100
                                                          123
                                                                  80
                                                                               1
    Charmander
                                     309 39
                                                 52
                                                          43
                                                                  65
                    Fire
                   Legendary
    Name
    Bulbasaur
                       False
```

(suite sur la page suivante)

(suite de la page précédente)

Ivysaur	False
IVybaai	TUIDO
Venusaur	False
venusaur	raise
Mega Venusaur	False
nega venusaur	1 0126
Charmander	False
Charmander	raise

13.2 Accès aux données

Pandas propose de multiples façons d'accéder aux données d'un DataFrame, ici : — via le nom (indexé) :

```
[5]: df.loc['Bulbasaur', ['Type 1', 'Type 2']] # Seulement 2 colonnes

[5]: Type 1    Grass
    Type 2    Poison
    Name: Bulbasaur, dtype: object
```

— par sa position dans la liste :

```
[6]: df.iloc[-5:, :2] # Les 5 dernières lignes, et les 2 premières colonnes
[6]:
                           Type 1 Type 2
    Name
    Diancie
                             Rock Fairy
    Mega Diancie
                             Rock Fairy
    HoopaHoopa Confined Psychic
                                   Ghost
    HoopaHoopa Unbound
                         Psychic
                                   Dark
    Volcanion
                             Fire
                                   Water
```

— par une sélection booléenne, p.ex. tous les pokémons légendaires de type herbe :

```
[7]: df[df['Legendary'] & (df['Type 1'] == 'Grass')]
[7]:
                       Type 1
                                  Type 2 Total
                                                  ΗP
                                                       Attack Defense Speed \
    ShayminLand Forme
                        Grass
                                            600
                                                 100
                                                          100
                                                                   100
                                                                           100
    ShayminSky Forme
                        Grass
                                  Flying
                                            600
                                                 100
                                                          103
                                                                    75
                                                                           127
                                                                    72
    Virizion
                        Grass Fighting
                                            580
                                                  91
                                                           90
                                                                           108
                        Generation Legendary
    Name
    ShayminLand Forme
                                  4
                                          True
    ShayminSky Forme
                                  4
                                          True
    Virizion
                                  5
                                          True
```

13.3 Quelques statistiques

```
[8]: df[['Total', 'HP', 'Attack', 'Defense']].describe() # Description statistique des différentesu
     \hookrightarrow colonnes
[8]:
                Total
                                HP
                                        Attack
                                                    {\tt Defense}
     count
           800.00000
                       800.000000
                                    800.000000
                                                800.000000
     mean
            435.10250
                        69.258750
                                     79.001250
                                                 73.842500
                                                  31.183501
            119.96304
                        25.534669
                                     32.457366
     std
            180,00000
                         1.000000
                                      5.000000
                                                  5.000000
     min
            330.00000
                        50.000000
                                     55.000000
                                                  50.000000
     25%
     50%
            450.00000
                        65.000000
                                     75.000000
                                                  70.000000
     75%
            515.00000
                        80.000000
                                    100.000000
                                                  90.000000
     max
            780.00000
                       255.000000
                                    190.000000
                                                230.000000
```

```
[9]: df.loc[df['HP'].idxmax()] # Pokémon ayant le plus de points de vie
[9]: Type 1
                   Normal
    Type 2
    Total
                      540
    HP
                      255
    Attack
                       10
    Defense
                       10
    Speed
                       55
    Generation
                        2
    Legendary
                    False
    Name: Blissey, dtype: object
```

```
[10]: df.sort_values('Speed', ascending=False).head(3) # Les 3 pokémons plus rapides
[10]:
                          Type 1 Type 2 Total HP Attack Defense Speed \
     Name
     DeoxysSpeed Forme
                         Psychic
                                            600
                                                 50
                                                         95
                                                                  90
                                                                        180
     Ninjask
                             Bug Flying
                                            456 61
                                                         90
                                                                  45
                                                                        160
     DeoxysNormal Forme
                         Psychic
                                            600 50
                                                        150
                                                                  50
                                                                        150
                         Generation Legendary
     Name
     DeoxysSpeed Forme
                                  3
                                          True
     Ninjask
                                  3
                                         False
     DeoxysNormal Forme
                                  3
                                          True
```

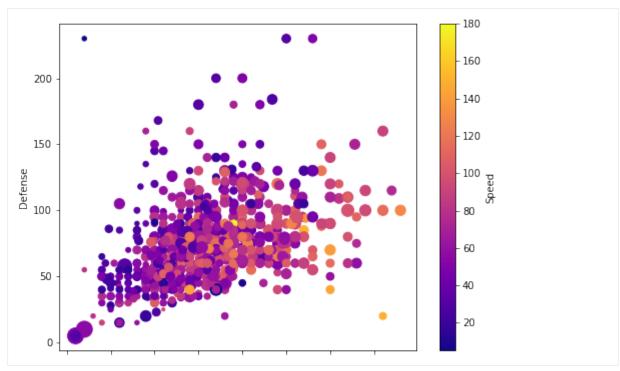
Statistiques selon le statut « légendaire » :

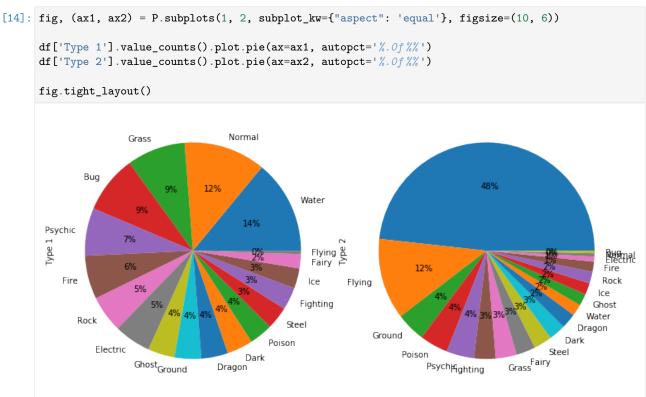
```
[11]: legendary = df.groupby('Legendary')
     legendary.size()
[11]: Legendary
     False
     True
               65
     dtype: int64
[12]: legendary['Total', 'HP', 'Attack', 'Defense', 'Speed'].mean()
[12]:
                                                      Defense
                                                                    Speed
                      Total
                                    HP
                                            Attack
     Legendary
                            67.182313
                                         75.669388 71.559184
                                                                65.455782
     False
                 417.213605
     True
                 637.384615 92.738462 116.676923 99.661538
                                                               100.184615
```

13.4 Visualisation

Pandas intègre de nombreuses fonctions de visualisation interfacées à matplotlib.

```
[13]: ax = df.plot.scatter(x='Attack', y='Defense', s=df['HP'], c='Speed', cmap='plasma')
ax.figure.set_size_inches((8, 6))
```



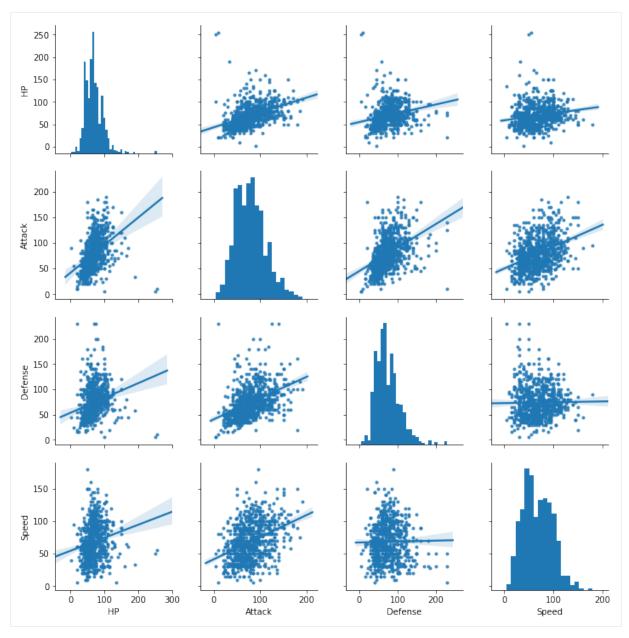


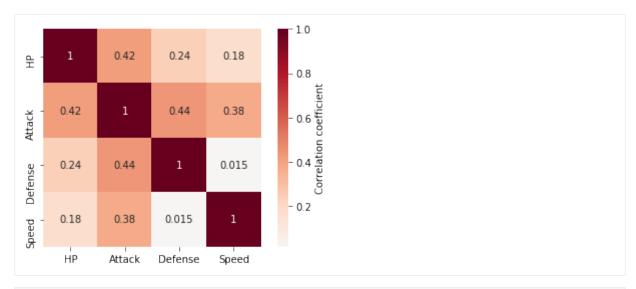
Il est également possible d'utiliser la librairie seaborn, qui s'interface naturellement avec Pandas.

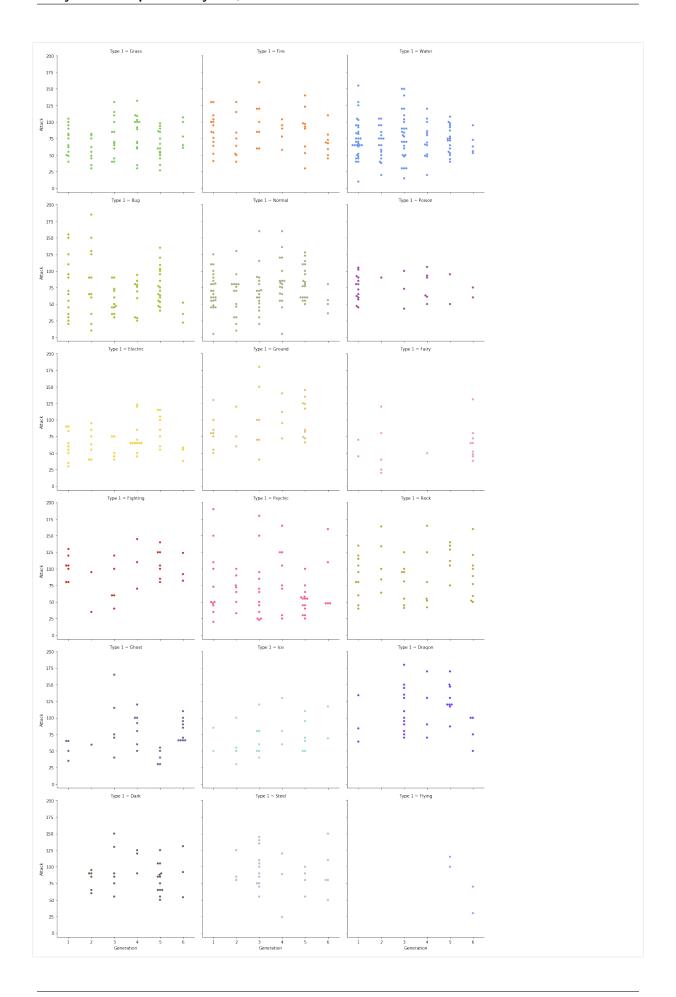
```
(suite de la page précédente)
         'Electric': '#F8D030',
        'Ground': '#E0C068',
        'Fairy': '#EE99AC',
        'Fighting': '#C03028',
        'Psychic': '#F85888',
        'Rock': '#B8A038',
        'Ghost': '#705898',
        'Ice': '#98D8D8',
        'Dragon': '#7038F8',
        'Dark': '#705848',
        'Steel': '#B8B8D0',
         'Flying': '#A890F0',
[16]: ax = SNS.countplot(x='Generation', hue='Type 1', palette=pok_type_colors, data=df)
      ax.figure.set_size_inches((14, 6))
      ax.legend(ncol=3, title='Type 1');
                                                                                              Type 1
Electric
         30
                                                                                    Grass
                                                                                                           Ghost
                                                                                               Ground
                                                                                    Fire
                                                                                                           lce
                                                                                     Water
                                                                                                           Dragon
                                                                                               Fairy
                                                                                                           Dark
                                                                                    Bug
                                                                                               Fighting
         25
                                                                                    Normal
                                                                                               Psychic
                                                                                                           Steel
                                                                                               Rock
                                                                                                           Flying
         20
       #
15
         10
[17]: ax = SNS.boxplot(x='Generation', y='Total', data=df, color='0.5');
      SNS.swarmplot(x='Generation', y='Total', data=df, color='0.2', alpha=0.8)
      ax.figure.set_size_inches((14, 6))
         800
         700
         600
         500
       Tota
         400
         300
         200
                    i
                                                                                                        6
                                                           Generation
```

```
[18]: ax = SNS.violinplot(x="Type 1", y="Attack", data=df, hue="Legendary", split=True, inner='quart
       ' )
      ax.figure.set_size_inches((14, 6))
                                                                                                           False
                                                                                                             True
         200
       Affac, 100
              Grass
                         Water
                               Bug
                                   Normal Poison Electric Ground Fairy Fighting Psychic Rock
                                                                                  Ghost
                                                                                         lce
                                                                                             Dragon Dark
                                                                                                         Steel
                                                                                                               Flying
                                                              Type 1
[19]: df2 = df.drop(['Total', 'Generation', 'Legendary'], axis=1)
```

SNS.pairplot(df2, markers='.', kind='reg');







The following section was generated from Cours/pokemon.ipynb

Analyse scientifique avec Python, Version Février 2019									

Méthode des rectangles

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
    # Time-stamp: <2018-07-16 18:07:22 ycopin>
3
    Calcul de l'intégrale de x**2 entre 0 et 1 par la méthode des rectangles
6
    (subdivision en 100 pas)
    def sq(x):
10
        "Définition de la fonction sq: x \rightarrow x**2."
11
12
        return x**2
13
14
    a, b = 0, 1
                                     # Bornes d'intégration
15
                                     # Nombre de pas
    n = 100
16
17
    h = (b - a) / n
                                     # Largeur des rectangles
18
19
                                     # Cette variable accumulera les aires des rectangles
20
    total = 0
                                     # Boucle de O \hat{a} n - 1
    for i in range(n):
21
        x = a + (i + 0.5) * h
                                     # Abscisse du rectangle
22
        total += sq(x) * h
                                     # On ajoute l'aire du rectangle au total
23
24
    print("Intégrale de x**2 entre a =", a, "et b =", b, "avec n =", n, "rectangles")
25
    # On affiche les résultats numérique et analytique, ainsi que l'erreur relative
26
   print("Résultat numérique: ", total)
27
    theorie = (b ** 3 - a ** 3) / 3
28
   print("Résultat analytique:", theorie)
   print("Erreur relative:", (total / theorie - 1))
```

Source: integ.py

Fizz Buzz

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
    # Time-stamp: <2018-07-26 16:46 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>
3
5
    Jeu du Fizz Buzz
6
    __author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"
9
10
11
   for i in range(1, 100):
                                                # Entiers de 1 à 99
12
        if ((i \% 3) == 0) and ((i \% 5) == 0): # Multiple de 3 *et* de 5
13
           print('FIZZ BUZZ!', end=' ')
                                               # Affichage sans retour à la ligne
14
        elif (i % 3) == 0:
                                                # Multiple de 3 uniquement
15
           print('Fizz!', end=' ')
16
        elif (i % 5) == 0:
                                                # Multiple de 5 uniquement
17
           print('Buzz!', end=' ')
18
19
        else:
           print(i, end=' ')
20
   print()
                                                # Retour à la ligne final
```

```
$ python3 fizz.py
1 2 Fizz! 4 Buzz! Fizz! 7 8 Fizz! Buzz! 11 Fizz! 13 14 FIZZ BUZZ! 16...
```

Source: fizz.py

Algorithme d'Euclide

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
    # Time-stamp: <2018-07-26 16:56 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>
3
4
5
    Calcul du PGCD de deux entiers.
6
    # Entiers dont on calcule le PGCD
    a = 306
10
    b = 756
11
12
    \# Test usuels : les nombres sont bien positifs et a > b
13
    assert (a > 0) and (b > 0)
14
    if a < b:
15
       a, b = b, a
                                       # Interversion: on suppose a >= b
16
17
    a0, b0 = a, b
                                       # On garde une copie des valeurs originales
18
19
    # On boucle jusqu'à ce que le reste soit nul, d'où la boucle while. Il faut
20
    # être sûr que l'algorithme converge dans tous les cas!
21
    while b != 0:
        # On remplace a par b et b par le reste de la division euclidienne
23
        # de a par b
24
        a, b = b, a \% b
25
26
   print('Le PGCD de', a0, 'et', b0, 'vaut', a) # On affiche le résultat
27
    # Vérifications
28
   print(a0 // a, 'x', a, '=', (a0 // a * a)) # a//b: division euclidienne
29
   print(b0 // a, 'x', a, '=', (b0 // a * a))
```

```
$ python3 pgcd.py
Le PGCD de 756 et 306 vaut 18
42 x 18 = 756
17 x 18 = 306
```

Source: pgcd.py

Crible d'Ératosthène

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
4
    Crible d'Ératosthène.
5
    Source: http://fr.wikibooks.org/wiki/Exemples_de_scripts_Python#Implémentation_du_crible_d
    → 'Ératosthène
    __author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"
10
11
    # start-sys
12
    # Gestion simplifiée d'un argument entier sur la ligne de commande
13
    import sys
14
15
    if sys.argv[1:]: # Présence d'au moins un argument sur la ligne de commande
16
17
            n = int(sys.argv[1]) # Essayer de lire le 1er argument comme un entier
18
19
        except ValueError:
            raise ValueError("L'argument '{}' n'est pas un entier"
20
                              .format(sys.argv[1]))
21
                                   # Pas d'argument sur la ligne de commande
22
    else:
       n = 101
                                   # Valeur par défaut
23
    # end-sys
24
25
    # Liste des entiers *potentiellement* premiers. Les nb non premiers
26
    # seront étiquetés par 0 au fur et à mesure.
27
    l = list(range(n + 1))
                                              \# <0,\ldots,n>, 0 n'est pas premier
28
    1[1] = 0
                                              # 1 n'est pas premier
29
30
    i = 2
31
                                              # Entier à tester
    while i**2 <= n:
                                              # Inutile de tester jusqu'à n
32
        if 1[i] != 0:
                                              # Si i n'est pas étiqueté (=0)...
33
            # ...étiqueter tous les multiples de i
34
            1[2 * i::i] = [0] * len(1[2 * i::i])
35
        i += 1
                                              # Passer à l'entier à tester suivant
36
37
```

```
# Afficher la liste des entiers premiers (c-â-d non étiquetés)

print("Liste des entiers premiers <= {} : ".format(n))

print([i for i in l if i != 0])
```

Source: crible.py

Carré magique

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
    # Time-stamp: <2018-07-16 18:13:01 ycopin>
3
4
5
    Création et affichage d'un carré magique d'ordre impair.
6
    __author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"
10
                                             # Ordre du carré magique
11
    n = 5
12
    # On vérifie que l'ordre est bien impair
13
    assert n % 2 == 1, "L'ordre {} n'est pas impair".format(n)
14
15
    # Le carré sera stocké dans une liste de n listes de n entiers
16
    # Initialisation du carré: liste de n listes de n zéros.
17
    array = [[0 for j in range(n)] for i in range(n)]
18
19
    # Initialisation de l'algorithme
20
    i, j = n, (n + 1) // 2 # Indices de l'algo (1-indexation)
21
    array[i - 1][j - 1] = 1
                                  # Attention: python utilise une O-indexation
22
23
    # Boucle sur valeurs restant à inclure dans le carré (de 2 à n**2)
24
    for k in range(2, n**2 + 1):
25
        # Test de la case i+1, j+1 (modulo n)
26
        i2 = (i + 1) \% n
27
        j2 = (j + 1) \% n
28
        if array[i2 - 1][j2 - 1] == 0: # La case est vide: l'utiliser
29
            i, j = i2, j2
30
31
        # La case est déjà remplie: utiliser la case i-1, j
32
        else:
            i = (i - 1) \% n
33
                                       # Remplissage de la case
34
        array[i - 1][j - 1] = k
35
    # Affichage, avec vérification des sommes par ligne et par colonne
36
    print("Carré magique d'ordre {}:".format(n))
37
    for row in array:
```

```
print(' '.join('{:2d}'.format(k) for k in row), '=', sum(row))
print(' '.join('==' for k in row))
print(' '.join(str(sum(array[i][j] for i in range(n))) for j in range(n)))
```

Source: carre.py

Suite de Syracuse

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
     \begin{tabular}{ll} \# \ Time-stamp: &<&2018-07-26 \ 16:57 \ ycopin@lyonovae03.in2p3.fr> \end{tabular} 
3
4
    __author__ = "Adrien Licari <adrien.licari@ens-lyon.fr>; Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"
5
6
    def suite_syracuse(n):
        Retourne la suite de Syracuse pour l'entier n.
10
11
        >>> suite_syracuse(15)
12
         [15, 46, 23, 70, 35, 106, 53, 160, 80, 40, 20, 10, 5, 16, 8, 4, 2, 1]
13
14
15
        seq = [n]
                                          # La suite de Syracuse sera complétée...
16
        while seq[-1] != 1:
                                         # ...jusqu'à tomber sur 1
17
             if seq[-1] \% 2 == 0:
                                          # u_n est pair
18
19
                 seq.append(seq[-1] // 2) # Division euclidienne par 2
20
             else:
                                          # u_n est impair
                 seq.append(seq[-1] * 3 + 1)
21
23
        return seq
24
25
    def temps_syracuse(n, altitude=False):
26
27
         Calcule le temps de vol (éventuellement en altitude) de la suite
28
         de Syracuse pour l'entier n.
29
30
31
        >>> temps_syracuse(15)
32
        >>> temps_syracuse(15, altitude=True)
33
34
         10
35
36
        seq = suite_syracuse(n)
37
        if not altitude:
                                       # Temps de vol total
38
```

```
return len(seq) - 1
39
                                     # Temps de vol en altitude
        else:
40
            # Construction de la séquence en altitude
41
            alt = []
42
            for i in seq:
43
                if i \ge n:
                    alt.append(i)
                else:
                    break
47
            return len(alt) - 1
48
49
    if __name__ == '__main__':
50
51
        n = 15
52
        print("Suite de Syracuse pour n =", n)
53
        print(suite_syracuse(n))
54
                                        ", temps_syracuse(n))
55
        print("Temps de vol total:
        print("Temps de vol en altitude:", temps_syracuse(n, altitude=True))
```

```
Suite de Syracuse pour n = 15
[15, 46, 23, 70, 35, 106, 53, 160, 80, 40, 20, 10, 5, 16, 8, 4, 2, 1]
Temps de vol total: 17
Temps de vol en altitude: 10
```

Source: syracuse.py

Flocon de Koch

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
    from __future__ import division # Pas de division euclidienne par défaut
4
5
6
    Tracé (via 'turtle') d'un flocon de Koch d'ordre arbitraire.
7
    Dans le même genre:
9
10
    - courbe de Peano (http://fr.wikipedia.org/wiki/Courbe_de_Peano)
11
    - courbe de Hilbert (http://fr.wikipedia.org/wiki/Courbe_de_Hilbert)
12
    - île de Gosper (http://fr.wikipedia.org/wiki/Île_de_Gosper)
13
14
    Voir également:
15
16
    - L-système: http://fr.wikipedia.org/wiki/L-système
17
    - Autres exemples: http://natesoares.com/tutorials/python-fractals/
18
19
20
21
    import turtle as T
22
    __version__ = "Time-stamp: <2013-01-14 00:49 ycopin@lyopc469>"
23
    __author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"
24
25
26
    def koch(ordre=3, niveau=0, taille=100, delta=0):
27
28
        Tracé du flocon de Koch d'ordre 'ordre', de taille 'taille'
29
30
31
32
        Cette fonction récursive permet d'initialiser le flocon (niveau=0,
        par défaut), de tracer les branches fractales (0 < niveau <= ordre) ou
33
34
        bien juste de tracer un segment (niveau > ordre).
35
36
                                                  # Dessine le triangle de niveau 0
        if niveau == 0:
37
            T.title("Flocon de Koch - ordre {}".format(ordre))
38
```

```
koch(niveau=1, ordre=ordre, taille=taille, delta=delta)
39
            T.right(120)
40
            koch(niveau=1, ordre=ordre, taille=taille, delta=delta)
41
            T.right(120)
42
            koch(niveau=1, ordre=ordre, taille=taille, delta=delta)
43
        elif niveau <= ordre:</pre>
                                                  # Trace une section \_/\setminus\_ du flocon
            koch(niveau=niveau + 1, ordre=ordre, taille=taille, delta=delta)
            T.left(60 + delta)
46
            koch(niveau=niveau + 1, ordre=ordre, taille=taille, delta=delta)
47
            T.right(120 + 2 * delta)
48
            koch(niveau=niveau + 1, ordre=ordre, taille=taille, delta=delta)
49
            T.left(60 + delta)
50
            koch(niveau=niveau + 1, ordre=ordre, taille=taille, delta=delta)
51
        else:
                                              # Trace le segment de dernier niveau
52
            T.forward(taille / 3 ** (ordre + 1))
53
54
    if __name__ == '__main__':
55
56
        # start-argparse
57
        # Exemple d'utilisation de la bibliothèque de gestion d'arguments 'argparse'
58
        import argparse
59
60
        desc = "Tracé (via 'turtle') d'un flocon de Koch d'ordre arbitraire."
61
62
        # Définition des options
63
        parser = argparse.ArgumentParser(description=desc)
64
        parser.add_argument('ordre', nargs='?', type=int,
65
                             help="Ordre du flocon, >0 [%(default)s]",
66
                             default=3)
67
        parser.add_argument('-t', '--taille', type=int,
68
                             help="Taille de la figure, >0 [%(default)s px]",
69
                             default=500)
70
        parser.add_argument('-d', '--delta', type=float,
71
                             help="Delta [%(default)s deg]",
72
                             default=0.)
73
        parser.add_argument('-f', '--figure', type=str,
74
                             help="Nom de la figure de sortie (format EPS)")
75
        parser.add_argument('-T', '--turbo',
76
                             action="store_true", default=False,
77
                             help="Mode Turbo")
78
79
        # Déchiffrage des options et arguments
80
        args = parser.parse_args()
81
82
        # Quelques tests sur les args et options
83
        if not args.ordre > 0:
84
            parser.error("Ordre requis '{}' invalide".format(args.ordre))
85
86
        if not args.taille > 0:
87
            parser.error("La taille de la figure doit être positive")
        # end-argparse
89
90
        if args.turbo:
91
            T.hideturtle()
92
            T.speed(0)
93
94
        # Tracé du flocon de Koch d'ordre 3
95
        koch(ordre=args.ordre, taille=args.taille, delta=args.delta)
96
        if args.figure:
97
             # Sauvegarde de l'image
98
            print("Sauvegarde de la figure dans '{}'".format(args.figure))
```

T.getscreen().getcanvas().postscript(file=args.figure)

T.exitonclick()

Source: koch.py

Jeu du plus ou moins

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
    import random
4
   nmin, nmax = 1, 100
6
   nsol = random.randint(nmin, nmax)
   print("Vous devez deviner un nombre entre {} et {} .".format(nmin, nmax))
   ncoups = 0
10
11
    try:
       while True:
12
           proposition = input("Votre proposition: ")
13
14
           try:
               ntest = int(proposition)
15
               if not nmin <= ntest <= nmax:</pre>
16
                   raise ValueError("Proposition invalide")
17
           except ValueError:
18
               print("Votre proposition \{!r\} n'est pas un entier compris entre \{\} et \{\}."
19
20
                     .format(proposition, nmin, nmax))
21
               continue
           ncoups += 1
           if nsol > ntest:
23
               print("C'est plus.")
24
           elif nsol < ntest:</pre>
25
               print("C'est moins.")
26
           else:
27
               print("Vous avez trouvé en {} coup{}!".format(
28
                   ncoups, 's' if ncoups > 1 else ''))
29
               break # Interrompt la boucle while
30
    31
32
       print("\nVous abandonnez après seulement {} coup{}!"
              .format(ncoups, 's' if ncoups \geq 1 else ''))
```

Source: pm.py

Animaux

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
4
    Exercice: programmation orientée objet, développement dirigé par les tests.
5
6
    import pytest
                                      # Module (non standard) de tests
10
    class Animal:
11
12
        Classe définissant un `Animal`, caractérisé par son nom et son
13
        poids.
14
         11 11 11
15
16
        def __init__(self, nom, masse):
17
18
            Méthode d'instanciation à partir d'un nom (str) et d'un poids (float).
19
20
21
            \# Ici, convertir les paramètres pour être sûr qu'il ont le bon
22
            # type. On utilisera `str` et `float`
23
            self.nom = str(nom)
24
            self.masse = float(masse)
25
26
            self.vivant = True
                                     # Les animaux sont vivants à l'instanciation
27
            self.empoisonne = False # Animal empoisonné ?
28
29
        def __str__(self):
30
31
            Surcharge de l'opérateur `str`: l'affichage *informel* de l'objet
32
            dans l'interpréteur, p.ex. `print self` sera résolu comme
33
34
             `self.__str__()`
35
            Retourne une chaîne de caractères.
36
37
38
```

```
return "{a.nom} ({a.masse:.1f} kg)".format(a=self)
39
40
        def estVivant(self):
41
             """Méthode booléenne, vraie si l'animal est vivant."""
42
43
            return self.vivant
        def mourir(self):
46
             """Change l'état interne de l'objet (ne retourne rien)."""
47
48
            self.vivant = False
49
50
        def __lt__(self, other):
51
52
            Surcharge l'opérateur de comparaison '<' uniquement, sur la
53
            base de la masse des animaux.
54
55
            Note: Py3 impose de surcharger *explicitement* tous les opérateurs
            de comparaison: '__lt__' pour '<', __le__ pour '<=', '__eq__'
57
            pour '==', etc.
58
59
60
            return self.masse < other.masse
61
62
        def __call__(self, other):
63
64
            Surcharge de l'opérateur '()' pour manger un autre animal (qui
65
            meurt s'il est vivant) et prendre du poids (mais pas plus que
66
            la masse de l'autre ou 10% de son propre poids). Attention aux
67
68
            animaux empoisonnés!
69
            L'instruction `self(other)` sera résolue comme
70
             `self.\_call\_(other).
71
             11 11 11
72
73
            other.mourir()
74
            poids = min(other.masse, self.masse * 0.1)
75
            self.masse += poids
76
            other.masse -= poids
77
            if other.empoisonne:
78
                 self.mourir()
79
80
81
    class Chien(Animal):
82
83
        Un 'Chien' hérite de 'Animal' avec des méthodes additionnelles
84
         (p.ex. l'aboiement et l'odorat).
85
86
87
        def __init__(self, nom, masse=20, odorat=0.5):
             """Définit un chien plus ou moins fin limier."""
89
90
            # Initialisation de la classe parente
91
            Animal.__init__(self, nom, masse)
92
93
            # Attribut propre à la classe dérivée
94
            self.odorat = float(odorat)
95
96
        def __str__(self):
97
            return "{a.nom} (Chien, {a.masse:.1f} kg)".format(a=self)
```

```
100
        def aboyer(self):
101
             """Une méthode bien spécifique aux chiens."""
102
103
            print("Ouaf ! Ouaf !")
104
105
        def estVivant(self):
106
            """Quand on vérifie qu'un chien est vivant, il aboie."""
107
108
            vivant = Animal.estVivant(self)
109
110
            if vivant:
111
                self.aboyer()
112
113
            return vivant
114
115
    116
    # Il est *INTERDIT* de modifier les tests ci-dessous!!! #
117
    118
119
    # start-tests
120
    def test_empty_init():
121
        with pytest.raises(TypeError):
122
            Animal()
123
124
125
    def test_wrong_init():
126
        with pytest.raises(ValueError):
127
            Animal('Youki', 'lalala')
128
129
130
    def test_init():
131
        youki = Animal('Youki', 600)
132
        assert youki.masse == 600
133
        assert youki.vivant
134
        assert youki.estVivant()
135
        assert not youki.empoisonne
136
    # end-tests
137
138
139
    def test_str():
140
        youki = Animal('Youki', 600)
141
        assert str(youki) == 'Youki (600.0 kg)'
142
143
144
    def test_mort():
145
        youki = Animal('Youki', 600)
146
        assert youki.estVivant()
147
        youki.mourir()
148
        assert not youki.estVivant()
149
150
151
    def test_lt():
152
        medor = Animal('Medor', 600)
153
        kiki = Animal('Kiki', 20)
154
        assert kiki < medor
155
        with pytest.raises(AttributeError):
156
            medor < 1
157
    def test_mange():
```

```
medor = Animal('Medor', 600)
161
         kiki = Animal('Kiki', 20)
162
                                       # Médor mange Kiki
         medor(kiki)
163
         assert medor.estVivant()
164
         assert not kiki.estVivant()
165
         \verb"assert kiki.masse == 0
166
         assert medor.masse == 620
167
         kiki = Animal("Kiki Jr.", 20)
168
                                       # Kiki Jr. mange Médor
         kiki(medor)
169
         assert not medor.estVivant()
170
         assert kiki.estVivant()
171
         assert kiki.masse == 22
172
         assert medor.masse == 618  # Médor a perdu du poids en se faisant manger!
173
174
175
     def test_init_chien():
176
         medor = Chien('Medor', 600)
177
178
         assert isinstance(medor, Animal)
         assert isinstance(medor, Chien)
179
         \verb"assert medor.odorat" == 0.5
180
         assert str(medor) == 'Medor (Chien, 600.0 kg)'
181
         assert medor.estVivant()
182
```

Source: animauxSol.py

Particules

```
#!/usr/bin/env python3
   # -*- coding: utf-8 -*-
2
   # Time-stamp: <2018-07-19 10:34 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>
3
4
5
                                 # pytest importé pour les tests unitaires
   import pytest
6
   import math
   Définition d'une classe point matériel, avec sa masse, sa position et sa
10
   vitesse, et des méthodes pour le déplacer. Le main test applique cela à un
11
   problème à force centrale gravitationnel ou électrostatique.
12
13
   Remarque : Toutes les unités ont été choisies adimensionnées.
14
15
16
   __author__ = "Adrien Licari <adrien.licari@ens-lyon.fr>"
17
18
19
   # Un critère pour déterminer l'égalité entre réels
20
   tolerance = 1e-8
21
22
23
   24
   ### Définition de la classe Vector, utile pour la position et la vitesse. ###
25
   26
27
   class Vector:
28
29
       Une classe-structure simple contenant 3 coordonnées.
30
31
       Une méthode est disponible pour en calculer la norme et
32
       une surcharge des opérateurs ==, !=, +, - et * est proposée.
33
34
       def __init__(self, x=0, y=0, z=0):
35
36
          Constructeur de la classe vector.
37
          Par défaut, construit le vecteur nul.
38
```

```
39
             Args:
40
                      x,y,z(float): Les composantes du vecteur à construire.
41
42
             Raises:
43
                      TypeError en cas de composantes non réelles
             try:
46
                 self.x = float(x)
47
                 self.y = float(y)
48
                 self.z = float(z)
49
             except (ValueError, TypeError, AttributeError):
50
                 raise TypeError("The given coordinates must be numbers")
51
52
         def __str__(self):
53
54
55
             Surcharge de l'opérateur `str`.
57
             Returns:
                      "(x,y,z)" avec 2 décimales
58
59
             return "\{\{:.2f\},\{:.2f\},\{:.2f\}\}".format(self.x, self.y, self.z)
60
61
         def __eq__(self, other):
62
63
             Surcharge de l'opérateur `==` pour tester l'égalité
64
             entre deux vecteurs.
65
66
67
             Args :
                      other(Vector): Un autre vecteur
68
69
             Raises :
70
                      TypeError si other n'est pas un objet Vector
71
72
             try:
73
                 return abs(self.x - other.x) < tolerance and \
74
                      abs(self.y - other.y) < tolerance and \ abs(self.z - other.z) < tolerance
75
76
             except (ValueError, TypeError, AttributeError):
77
                 raise TypeError("Tried to compare Vector and non-Vector objects")
78
79
         def __ne__(self, other):
80
81
             Surcharge de l'opérateur `!=` pour tester l'inégalité
82
             entre deux vecteurs.
83
84
             Args :
85
                      other(Vector): Un autre vecteur
86
87
             Raises :
                      TypeError si other n'est pas un objet Vector
89
90
             return not self == other
91
92
         def __add__(self, other):
93
94
             Surcharge de l'opérateur `+` pour les vecteurs.
95
96
             Args:
97
                      other(Vector): Un autre vecteur
98
99
```

```
Raises :
100
                     TypeError si other n'est pas un objet Vector
101
             11 11 11
102
            try:
103
                return Vector(self.x + other.x, self.y + other.y, self.z + other.z)
104
            except (ValueError, TypeError, AttributeError):
105
                raise TypeError("Tried to add Vector and non-Vector objects")
106
107
        def __sub__(self, other):
108
109
            Surcharge de l'opérateur `-` pour les vecteurs.
110
111
            Args :
112
                     other(Vector): Un autre vecteur
113
114
            Raises :
115
116
                     TypeError si other n'est pas un objet Vector
             11 11 11
117
118
            try:
                return Vector(self.x - other.x, self.y - other.y, self.z - other.z)
119
            except (ValueError, TypeError, AttributeError):
120
                raise TypeError("Tried to substract Vector and non-Vector objects")
121
122
        def __mul__(self, number):
123
124
            Surcharge de l'opérateur `*` pour la multiplication entre
125
            un vecteur et un nombre.
127
            Args :
128
                     number(float): Un nombre à multiplier par le Vector.
129
130
            Raises :
131
                     TypeError si other n'est pas un nombre
132
             11 11 11
133
            try:
134
                return Vector(number * self.x, number * self.y, number * self.z)
135
            except (ValueError, TypeError, AttributeError):
136
                raise TypeError("Tried to multiply Vector and non-number objects")
137
138
        __rmul__ = __mul__ # Ligne pour autoriser la multiplication à droite
139
140
        def norm(self):
141
             11 11 11
142
            Calcul de la norme 2 d'un vecteur.
143
144
            Returns :
145
                     sqrt(x**2 + y**2 + z**2)
146
            return (self.x ** 2 + self.y ** 2 + self.z ** 2) ** (1 / 2)
148
149
        def clone(self):
150
151
            Méthode pour construire un nouveau Vecteur, copie de self.
152
153
            return Vector(self.x, self.y, self.z)
154
155
156
    157
    ##### Quelques test pour la classe Vector #####
158
    160
```

```
def test_VectorInit():
161
         with pytest.raises(TypeError):
162
             vec = Vector('Test', 'avec', 'strings')
163
             vec = Vector(Vector())
164
             vec = Vector([])
165
         vec = Vector(0, -53.76, math.pi)
166
         assert vec.x == 0
167
         assert vec.y == -53.76
168
         assert vec.z == math.pi
169
170
171
     def test_VectorStr():
172
         vec = Vector(0, 600, -2)
173
         assert str(vec) == (0.00,600.00,-2.00)
174
175
176
177
     def test_VectorEq(): # teste aussi l'opérateur !=
         vec = Vector(2, 3, -5)
178
         vec2 = Vector(2, 3, -4)
179
         assert vec != vec2
180
         assert vec != Vector(0, 3, -5)
181
         with pytest.raises(TypeError):
182
             Vector(2, 1, 4) == "Testing strings"
183
             Vector(2, 1, 4) == 42
184
             Vector(2, 1, 4) == ['list']
185
186
187
     def test_VectorAdd():
188
         vec = Vector(2, 3, -5)
189
190
         vec2 = Vector(2, -50, 5)
         assert (vec + vec2) == Vector(4, -47, 0)
191
192
193
     def test_VectorSub():
194
         vec = Vector(1, -7, 9)
195
         vec2 = Vector()
196
         assert (vec - vec) == Vector()
197
         assert (vec - vec2) == vec
198
199
200
     def test_VectorMul():
201
         vec = Vector(1, -7, 9) * 2
202
         vec2 = 6 * Vector(1, -1, 2)
203
         assert vec == Vector(2, -14, 18)
204
         assert vec2 == Vector(6, -6, 12)
205
206
207
     def test_VectorNorm():
208
         assert Vector().norm() == 0
         assert Vector(1, 0, 0).norm() == 1
210
         assert Vector(2, -5, -4).norm() == 45 ** (1 / 2)
211
212
213
     def test_VectorClone():
214
         vec = Vector(3, 2, 9)
215
         vec2 = vec.clone()
216
         assert vec == vec2
217
         vec2.x = 1
218
         assert vec != vec2
219
221
```

```
222
    ##### Une classe point matériel qui se gère en interne #####
223
    224
225
    class Particle:
226
        La classe Particle représente un point matériel doté d'une masse,
229
        d'une position et d'une vitesse. Elle possède également une méthode
230
        pour calculer la force gravitationnelle exercée par une autre particule.
231
        Enfin, la méthode update lui permet de mettre à jour sa position et
232
        sa vitesse en fonction des forces subies.
233
234
235
        def __init__(self, mass=1, position=Vector(), speed=Vector()):
236
237
            Le constructeur de la classe Particle.
            Définit un point matériel avec une position et une vitesse initiales.
240
241
            Args :
                    mass(float): La masse de la particule (doit être
242
                            strictement positive)
243
                    position(Vector): La position initiale de la particule
244
                    speed(Vector): La vitesse initiale de la particule
245
246
            Raises :
247
                     TypeError si la masse n'est pas un nombre, ou si la position ou
                             la vitesse ne sont pas des Vector
                    ValueError si la masse est négative ou nulle
250
             11 11 11
251
252
            try:
                self.mass = float(mass)
253
                self.position = position.clone()
254
                self.speed = speed.clone()
255
            except (ValueError, TypeError, AttributeError):
256
                raise TypeError("The mass must be a positive float number. "
257
                                 "The position and speed must Vector objects.")
258
259
            try:
                assert mass > 0 # une masse négative ou nulle pose des problèmes
260
261
            except AssertionError:
                raise ValueError("The mass must be strictly positive")
262
            self.force = Vector()
263
264
        def __str__(self):
265
             11 11 11
266
            Surcharge de l'opérateur `str`.
267
268
            Returns :
                    "Particle with mass m, position (x,y,z) and speed (vx,vy,vz)"
270
                            with 2 decimals
271
272
            return "Particle with mass \{:.2f\}, position \{\} " \
273
                "and speed {}".format(self.mass, self.position, self.speed)
274
275
        def computeForce(self, other):
276
277
            Calcule la force gravitationnelle exercée par une Particule
278
            other sur self.
            Args :
                    other(Particle): Une autre particule, source de l'interaction
282
```

```
283
            Raises :
284
                     TypeError si other n'est pas un objet Vector
285
286
287
            try:
                r = self.position - other.position
                self.force = -self.mass * other.mass / r.norm() ** 3 * r
            except AttributeError:
                raise TypeError("Tried to compute the force created by "
291
                                 "a non-Particle object")
292
293
        def update(self, dt):
294
295
            Mise à jour de la position et la vitesse au cours du temps.
296
297
            Args :
298
                     dt(float): Pas de temps d'intégration.
301
            try:
                d = float(dt)
302
            except (ValueError, TypeError, AttributeError):
303
                raise TypeError("The integration timestep must be a number")
304
            self.speed += self.force * dt * (1 / self.mass)
305
            self.position += self.speed * dt
306
307
308
     309
     ##### Des tests pour la classe Particle #####
310
     311
312
    def test_ParticleInit():
313
        with pytest.raises(TypeError):
314
            p = Particle("blabla")
315
            p = Particle(2, position='hum') # on vérifie les erreurs sur Vector
316
            p = Particle([])
317
        p = Particle(3, Vector(2, 1, 4), Vector(-1, -1, -1))
318
        assert p.mass == 3
319
        assert p.position == Vector(2, 1, 4)
320
        assert p.speed == Vector(-1, -1, -1)
321
        assert p.force == Vector()
322
323
324
    def test_ParticleStr():
325
        p = Particle(3, Vector(1, 2, 3), Vector(-1, -2, -3))
326
        assert str(p) == "Particle with mass 3.00, position (1.00,2.00,3.00) " \
327
            "and speed (-1.00, -2.00, -3.00)"
328
329
330
    def test_ParticleForce():
331
        p = Particle(1, Vector(1, 0, 0))
332
        p2 = Particle()
333
        p.computeForce(p2)
334
        assert p.force == Vector(-1, 0, 0)
335
        p.position = Vector(2, -3, 6)
336
        p.mass = 49
337
        p.computeForce(p2)
338
        assert p.force == Vector(-2 / 7, 3 / 7, -6 / 7)
339
340
    def test_ParticleUpdate():
342
        dt = 0.1
343
```

```
p = Particle(1, Vector(1, 0, 0), Vector())
344
        p.computeForce(Particle())
345
        p.update(dt)
346
        assert p.speed == Vector(-0.1, 0, 0)
347
        assert p.position == Vector(0.99, 0, 0)
348
    351
    ##### Une classe Ion qui hérite de point matériel #####
352
    353
354
    class Ion(Particle):
355
356
         Un Ion est une particule ayant une charge en plus de sa masse et
357
         intéragissant électrostatiquement plutôt que gravitationnellement.
358
        La méthode computeForce remplace donc le calcul de la force
359
        gravitationnelle de Newton par celui de la force électrostatique de
        Coulomb.
362
363
        def __init__(self, mass=1, charge=1, position=Vector(), speed=Vector()):
364
365
            Le constructeur de la classe Ion.
366
367
            Args:
368
                    mass(float): La masse de l'ion (doit être strictement positive)
369
                    charge(float): La charge de l'ion (doit être entière et
                            strictement positive)
371
                    position(Vector): La position initiale de la particule
372
                    speed(Vector): La vitesse initiale de la particule
373
374
            Raises :
375
                     ValueError si charge < 0
376
                    TypeError si la masse n'est pas un réel,
377
                            si la charge n'est pas un entier,
378
                            si position ou speed ne sont pas des Vector
379
380
            Particle.__init__(self, mass, position, speed)
381
                self.charge = int(charge)
383
            except (ValueError, AttributeError, TypeError):
384
                raise TypeError("The charge must be an integer.")
385
            trv:
386
                assert self.charge > 0
387
            except AssertionError:
388
                raise ValueError("The charge must be positive.")
389
390
        def __str__(self):
392
            Surcharge de l'opérateur `str`.
393
394
            Returns :
395
                     "Ion with mass m, charge q, position (x,y,z)
396
                    and speed (vx,vy,vz)" avec q entier et le reste à 2 décimales
397
398
            return "Ion with mass \{:.2f\}, charge \{:d\}, position \{\}"
399
                 "and speed {}".format(self.mass, self.charge,
400
                                      self.position, self.speed)
401
        def computeForce(self, other):
403
404
```

```
Calcule la force électrostatique de Coulomb exercée par un Ion other
405
            sur self. Masque la méthode de Particle.
406
407
            Args :
408
                     other(Ion): Un autre Ion, source de l'interaction.
409
            Raises :
410
                     TypeError si other n'est pas un objet Ion
412
413
            try:
                r = self.position - other.position
414
                 self.force = self.charge * other.charge / r.norm() ** 3 * r
415
            except (AttributeError, TypeError, ValueError):
416
                raise TypeError("Tried to compute the force created by "
417
                                 "a non-Ion object")
418
419
420
    ##### Des test pour la classe Ion #####
    423
424
    def test_IonInit():
425
        with pytest.raises(TypeError):
426
            ion = Ion("blabla")
427
            ion = Ion(2, position='hum') # on vérifie une erreur sur Vector
428
                                           # on vérifie une erreur sur la charge
            ion = Ion(2, 'hum')
429
        ion = Ion(2, 3, Vector(2, 1, 4), Vector(-1, -1, -1))
430
        assert ion.mass == 2
431
        assert ion.charge == 3
432
        assert ion.position == Vector(2, 1, 4)
433
434
        assert ion.speed == Vector(-1, -1, -1)
        assert ion.force == Vector()
435
436
437
    def test_IonStr():
438
         ion = Ion(3, 2, Vector(1, 2, 3), Vector(-1, -2, -3))
439
         assert str(ion) == "Ion with mass 3.00, charge 2, " \
440
             "position (1.00, 2.00, 3.00) and speed (-1.00, -2.00, -3.00)"
441
442
    def test_IonForce():
444
        ion = Ion(mass=1, charge=1, position=Vector(1, 0, 0))
445
        ion2 = Ion(charge=3)
446
        ion.computeForce(ion2)
447
        assert ion.force == Vector(3, 0, 0)
448
        ion = Ion(charge=49, position=Vector(2, -3, 6))
449
        ion.computeForce(ion2)
450
        assert ion.force == Vector(6 / 7, -9 / 7, 18 / 7)
451
452
453
    ###############################
454
    ##### Un main de test #####
455
    #############################
456
457
    if __name__ == '__main__':
458
459
         # On lance tous les tests en bloc pour commencer
460
        print(" Test functions ".center(50, "*"))
461
        print("Testing Vector class...", end=' ')
462
        test_VectorInit()
463
        test_VectorStr()
        test_VectorEq()
465
```

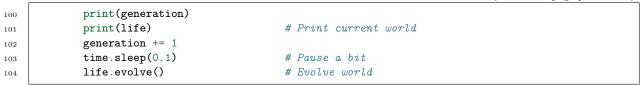
```
test_VectorAdd()
466
         test_VectorSub()
467
         test_VectorMul()
468
         test_VectorNorm()
469
         test_VectorClone()
470
         print("ok")
         print("Testing Particle class...", end=' ')
         test_ParticleInit()
473
         test_ParticleStr()
474
         test_ParticleForce()
475
         test_ParticleUpdate()
476
         print("ok")
477
         print("Testing Ion class...", end=' ')
478
         test_IonInit()
479
         test_IonStr()
480
         test_IonForce()
481
482
         print("ok")
         print(" Test end ".center(50, "*"), "\n")
484
         # Un petit calcul physique
485
         print(" Physical computations ".center(50, "*"))
486
         dt = 0.0001
487
488
         # Problème à force centrale gravitationnelle, cas circulaire
489
         ntimesteps = int(10000 * math.pi) # durée pour parcourir pi
490
         center = Particle()
491
         M = Particle(mass=1, position=Vector(1, 0, 0), speed=Vector(0, 1, 0))
492
         print("** Gravitationnal computation of central-force motion for a {}" \
493
             .format(str(M)))
494
         for i in range(ntimesteps):
495
             M.computeForce(center)
496
             M.update(dt)
497
         print("\t => Final system : {} ".format(str(M)))
498
499
         # problème à force centrale électrostatique, cas rectiligne
500
         center = Ion()
501
         M = Ion(charge=4, position=Vector(0, 0, 1), speed=Vector(0, 0, -1))
502
         print("** Electrostatic computation of central-force motion for a ⟨⟩" \
503
             .format(str(M)))
         for i in range(ntimesteps):
505
             M.computeForce(center)
506
             M.update(dt)
507
         print("\t => Final system : {}".format(str(M)))
508
509
         print(" Physical computations end ".center(50, "*"))
510
```

Source: particleSol.py

Jeu de la vie

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
     \begin{tabular}{ll} \# \ Time-stamp: &<&2018-07-26 \ 16:54 \ ycopin@lyonovae03.in2p3.fr> \end{tabular} 
3
4
5
    Jeu de la vie (programmation orientée objet).
6
    import random
9
10
11
    class Life:
12
13
        cells = {False: ".", True: "#"} # Dead and living cell representations
14
15
        def __init__(self, h, w, periodic=False):
16
17
             Create a 2D-list (the game grid *G*) with the wanted size (*h*
18
             rows, *w* columns) and initialize it with random booleans
19
             (dead/alive). The world is periodic if *periodic* is True.
20
21
             self.h = int(h)
23
             self.w = int(w)
24
             assert self.h > 0 and self.w > 0
25
             # Random initialization of a h×w world
26
             self.world = [[random.choice([True, False])
27
                             for j in range(self.w)]
28
                            for i in range(self.h)] # h rows of w elements
29
             self.periodic = periodic
30
31
32
        def get(self, i, j):
33
             This method returns the state of cell (*i*,*j*) safely, even
34
             if the (*i*,*j*) is outside the grid.
35
36
37
             if self.periodic:
38
```

```
return self.world[i % self.h][j % self.w] # Periodic conditions
39
            else:
40
                 if (0 <= i < self.h) and (0 <= j < self.w): # Inside grid
41
                     return self.world[i][j]
42
                 else:
                                               # Outside grid
43
                     return False
                                               # There's nobody out there...
        def __str__(self):
46
47
            Convert the grid to a visually handy string.
48
49
50
            return '\n'.join([''.join([self.cells[val] for val in row])
51
                                for row in self.world])
52
53
        def evolve_cell(self, i, j):
54
55
             Tells if cell (*i*,*j*) will survive during game iteration,
            depending on the number of living neighboring cells.
57
58
59
            alive = self.get(i, j)
                                                # Current cell status
60
            # Count living cells *around* current one (excluding current one)
61
            count = sum(self.get(i + ii, j + jj)
62
                         for ii in [-1, 0, 1]
63
                         for jj in [-1, 0, 1]
64
                         if (ii, jj) != (0, 0))
65
66
            if count == 3:
67
                 # A cell w/ 3 neighbors will either stay alive or resuscitate
68
69
                 future = True
            elif count < 2 or count > 3:
70
                 # A cell w/ too few or too many neighbors will die
71
                 future = False
72
73
                 # A cell w/ 2 or 3 neighbors will stay as it is (dead or alive)
74
                 future = alive
                                             # Current status
75
76
            return future
77
78
        def evolve(self):
79
80
            Evolve the game grid by one step.
81
             HHHH
82
83
            # Update the grid
84
            self.world = [[self.evolve_cell(i, j)
85
                             for j in range(self.w)]
86
                           for i in range(self.h)]
87
    if __name__ == "__main__":
89
90
        import time
91
92
        h, w = (20, 60)
                                                 # (nrows, ncolumns)
93
94
         # Instantiation (including initialization)
95
        life = Life(h, w, periodic=True)
96
97
        generation = 0
        while True:
                                               # Infinite loop! (Ctrl-C to break)
```



Source: life.py

Median Absolute Deviation

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
    import numpy as N
4
5
6
    def mad(a, axis=None):
7
        Compute *Median Absolute Deviation* of an array along given axis.
9
10
11
        \# Median along given axis, but *keeping* the reduced axis so that
12
        # result can still broadcast against a.
13
        med = N.median(a, axis=axis, keepdims=True)
14
        mad = N.median(N.absolute(a - med), axis=axis) # MAD along given axis
15
16
        return mad
17
18
    if __name__ == '__main__':
19
20
        x = N.arange(4 * 5, dtype=float).reshape(4, 5)
21
        print("x = \n", x)
23
        print("MAD(x, axis=None) =", mad(x))
24
                                    =", mad(x, axis=0))
        print("MAD(x, axis=0)
25
                                    =", mad(x, axis=1))
        print("MAD(x, axis=1)
26
        print("MAD(x, axis=(0, 1)) = ", mad(x, axis=(0, 1)))
27
```

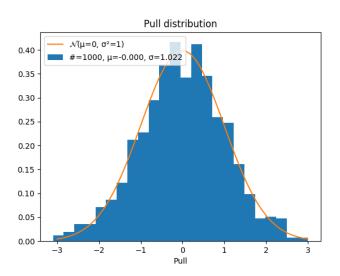
Source: mad.py

alyse scientifique a	ivec Python, V	ersion Févri	er 2019		

Distribution du pull

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
    import numpy as N
4
5
6
    def pull(x, dx):
7
        Compute the pull from x, dx.
9
10
        * Input data: x = [x_i], error dx = [s_i] Optimal
11
         * (variance-weighted) mean: E = sum(x_i/s_i^2)/sum(1/s_i^2) Variance
12
         * on weighted mean: var(E) = 1/sum(1/s_i^2) Pull: p_i = (x_i - 1)
13
         * E_i)/sqrt(var(E_i) + s_i^2) where E_i and var(E_i) are computed
14
         * without point i.
15
16
        If errors s_i are correct, the pull distribution is centered on \theta
17
        with standard deviation of 1.
18
19
20
        assert x.ndim == dx.ndim == 1, "pull works on 1D-arrays only."
21
        assert len(x) == len(dx), "dx should be the same length as x."
23
        n = len(x)
24
25
        i = N.resize(N.arange(n), n * n) # 0, ..., n-1, 0, ..., n times (n<sup>2</sup>,)
26
                                            # Mark successively 0,1,2,\ldots,n-1
        i[::n + 1] = -1
27
        # Remove marked indices \mathcal{E} reshape (n, n-1)
28
        j = i[i >= 0].reshape((n, n - 1))
29
30
31
        v = dx ** 2
                                            # Variance
32
        w = 1 / v
                                            # Variance (optimal) weighting
33
        Ei = N.average(x[j], weights=w[j], axis=1) # Weighted mean (n,)
34
        vEi = 1 / N.sum(w[j], axis=1)
                                                        # Variance of mean (n,)
35
36
        p = (x - Ei) / N.sqrt(vEi + v)
                                                         # Pull (n,)
37
38
```

```
return p
39
40
    if __name__ == '__main__':
41
42
        import matplotlib.pyplot as P
43
        import scipy.stats as SS
        n = 1000
46
        mu = 1.
47
        sig = 2.
48
49
        # Normally distributed random sample of size n, with mean=mu and std=sig
50
        x = N.random.normal(loc=mu, scale=sig, size=n)
51
        dx = N.full_like(x, sig)
                                                 # Formal (true) errors
52
53
        p = pull(x, dx)
                                                 # Pull computation
54
55
        m, s = p.mean(), p.std(ddof=1)
        print("Pull (\{\} entries): mean=\{:.2f\}, std=\{:.2f\}".format(n, m, s))
57
        fig, ax = P.subplots()
59
        _, bins, _ = ax.hist(p, bins='auto', normed=True,
60
                               histtype='stepfilled',
61
                               label="#={}, \mu={:.3f}, \sigma={:.3f}".format(n, m, s))
62
        y = N.linspace(-3, 3)
63
        ax.plot(y, SS.norm.pdf(y), label=r"{\mathbb{N}} (\mu=0, \sigma^2=1)")
64
        ax.set(title='Pull distribution', xlabel='Pull')
65
        ax.legend(loc='upper left')
66
67
        P.show()
68
```



Source: pull.py

```
[1]: import numpy as N
  import matplotlib.pyplot as P
# Insert figures within notebook
  %matplotlib inline
```

Quadrature

Calcul de l'intégrale

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} \mathrm{d}x = \frac{\pi^4}{15}$$

Zéro d'une fonction

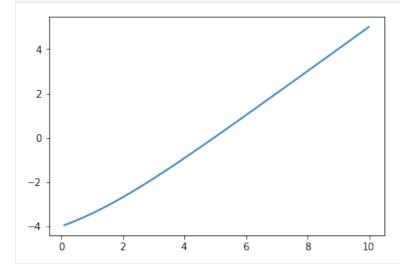
Résolution numérique de l'équation

$$f(x) = \frac{x e^x}{e^x - 1} - 5 = 0$$

[5]: def func(x):
return x * N.exp(x) / (N.exp(x) - 1) - 5

Il faut d'abord déterminer un intervalle contenant la solution, c.-à-d. le zéro de func. Puisque $f(0^+) = -4 < 0$ et $f(10) \simeq 5 > 0$, il est intéressant de tracer l'allure de la courbe sur ce domaine :

[6]: x = N.logspace(-1, 1) # 50 points logarithmiquement espacé de 10**-1 = 0.1 à 10**1 = 10 P.plot(x, func(x));



[7]: import scipy.optimize as SO

[8]: zero = SO.brentq(func, 1, 10)
print("Solution:", zero)

Solution: 4.965114231744277

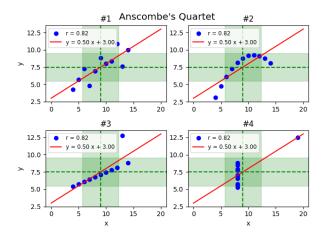
The following section was generated from ${\tt Exercices/numerique.ipynb}$

Quartet d'Anscombe

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
3
    import numpy as N
4
    import scipy.stats as SS
5
    import matplotlib.pyplot as P
6
    def printStats(x, y):
9
10
        Print out means and variances for x and y, as well as correlation
11
        coeff. (Pearson) and linear regression for y vs. x.
12
13
14
        assert N.shape(x) == N.shape(y), "Incompatible input arrays"
15
16
        \label{eq:print("x: mean={:.2f}, variance={:.2f}".format(N.mean(x), N.var(x)))} \\
17
        print("y: mean=\{:.2f\}, variance=\{:.2f\}".format(N.mean(y), N.var(y)))
18
        print("y vs. x: corrcoeff={:.2f}".format(SS.pearsonr(x, y)[0]))
19
20
        # slope, intercept, r_value, p_value, std_err
21
        a, b, _, _ = SS.linregress(x, y)
        print("y vs. x: y = \{:.2f\} x + \{:.2f\}".format(a, b))
23
24
    def plotStats(ax, x, y, title='', fancy=True):
25
26
        Plot y vs. x, and linear regression.
27
28
29
        assert N.shape(x) == N.shape(y), "Incompatible input arrays"
30
31
32
        \# slope, intercept, r\_value, p\_value, std\_err
33
        a, b, r, _{-}, _{-} = SS.linregress(x, y)
34
        # Data + corrcoeff
35
        ax.plot(x, y, 'bo', label="r = {:.2f}".format(r))
36
37
        # Linear regression
38
```

```
xx = N.array([0, 20])
39
        yy = a * xx + b
40
        ax.plot(xx, yy, 'r-', label="y = \{:.2f\} x + \{:.2f\}".format(a, b))
41
42
        leg = ax.legend(loc='upper left', fontsize='small')
43
        if fancy:
                                      # Additional stuff
            # Add mean line \pm stddev
46
            m = N.mean(x)
47
            s = N.std(x, ddof=1)
48
            ax.axvline(m, color='g', ls='--', label='_')
                                                                # Mean
49
            ax.axvspan(m - s, m + s, color='g', alpha=0.2) # Std-dev
50
51
            m = N.mean(y)
52
            s = N.std(y, ddof=1)
53
            ax.axhline(m, color='g', ls='--', label='_')
                                                                # Mean
54
55
            ax.axhspan(m - s, m + s, color='g', alpha=0.2) # Std-dev
            # Title and labels
57
            if title:
58
                ax.set_title(title)
59
            if ax.is_last_row():
60
                ax.set_xlabel("x")
61
            if ax.is_first_col():
62
                ax.set_ylabel("y")
63
64
65
    if __name__ == '__main__':
66
67
        quartet = N.genfromtxt("anscombe.dat") # Read Anscombe's Quartet
68
69
        fig = P.figure()
70
71
        for i in range(4):
                                               # Loop over quartet sets x,y
72
            ax = fig.add_subplot(2, 2, i + 1)
73
            print(" Dataset #{} ".format(i + 1).center(40, '='))
74
            x, y = quartet[:, 2 * i:2 * i + 2].T
75
            printStats(x, y)
                                               # Print main statistics
76
            plotStats(ax, x, y, title='#'+str(i + 1)) # Plots
77
78
        fig.suptitle("Anscombe's Quartet", fontsize='x-large')
79
        fig.tight_layout()
80
81
        P.show()
82
```

```
$ python3 anscombe.py
======== Dataset #1 ========
x: mean=9.00, variance=10.00
y: mean=7.50, variance=3.75
y vs. x: corrcoeff=0.82
y vs. x: y = 0.50 x + 3.00
======= Dataset #2 ========
x: mean=9.00, variance=10.00
y: mean=7.50, variance=3.75
y vs. x: corrcoeff=0.82
y vs. x: y = 0.50 x + 3.00
======= Dataset #3 ========
x: mean=9.00, variance=10.00
y: mean=7.50, variance=3.75
y vs. x: corrcoeff=0.82
```



Source: anscombe.py

Suite logistique

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
    # Time-stamp: <2018-07-19 10:42 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>
3
    import numpy as np
5
    import random
6
    import matplotlib.pyplot as plt
    def iteration(r, niter=100):
10
11
        x = random.uniform(0, 1)
12
13
        while i < niter and x < 1:
14
            x = r * x * (1 - x)
15
16
17
        return x if x < 1 else -1
18
19
20
    def generate_diagram(r, ntrials=50):
21
22
         Cette fonction retourne (jusqu'à) *ntrials* valeurs d'équilibre
23
         pour les *r* d'entrée. Elle renvoie un tuple:
24
25
         + le premier élément est la liste des valeurs prises par le paramètre *r*
26
         + le second est la liste des points d'équilibre correspondants
27
28
29
        r_v = []
30
31
         x_v = []
32
         for rr in r:
             j = 0
33
34
             while j < ntrials:</pre>
                 xx = iteration(rr)
35
                  \  \  \, \text{if xx > 0:} \  \  \, \textit{\# Convergence: il s'agit d'une valeur d'équilibre} 
36
                      r_v.append(rr)
37
                      x_v.append(xx)
38
```

```
j += 1  # Nouvel essai

return r_v, x_v

r = np.linspace(0, 4, 1000)
x, y = generate_diagram(r)

plt.plot(x, y, 'r,')
plt.xlabel('r')
plt.ylabel('x')
plt.show()

# Nouvel essai

# Nouv
```

 ${\bf Source:} {\tt logistique.py}$

Ensemble de Julia

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
    # Time-stamp: <2018-07-19 10:43 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>
3
4
5
    Visualisation de l'ensemble de julia
6
    <http://fr.wikipedia.org/wiki/Ensemble_de_Julia>`_.
    Exercice: proposer des solutions pour accélerer le calcul.
9
10
11
    import numpy as np
12
    import matplotlib.pyplot as plt
13
14
    c = complex(0.284, 0.0122)
                                        # Constante
15
16
    xlim = 1.5
                                         \# [-xlim,xlim] \times i[-xlim,xlim]
17
    nx = 1000
                                         # Nb de pixels
18
                                         # Nb d'itérations
19
    niter = 100
20
    x = np.linspace(-xlim, xlim, nx)
                                        # nx valeurs de -xlim à +xlim
21
                                        # Tableaux 2D
    xx, yy = np.meshgrid(x, x)
    z = xx + 1j * yy
                                        # Portion du plan complexe
23
                                        # Itération: z(n+1) = z(n)**2 + c
   for i in range(niter):
24
        z = z ** 2 + c
25
26
    # Visualisation
27
   plt.imshow(np.abs(z), extent=[-xlim, xlim, -xlim, xlim], aspect='equal')
28
   plt.title(c)
29
   plt.show()
```

Source: julia.py

Trajectoire d'un boulet de canon

Nous allons intégrer les équations du mouvement pour un boulet de canon soumis à des forces de frottement « turbulentes » (non-linéaires) :

$$\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{g} - \frac{\alpha}{m} v \times \mathbf{v}.$$

Cette équation différentielle non linéaire du 2d ordre doit être réécrite sous la forme de deux équations différentielles couplées du 1er ordre :

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v} \\ \dot{\mathbf{v}} &= \mathbf{g} - \frac{\alpha}{m} v \times \mathbf{v}. \end{cases}$$

Il s'agit donc de résoudre une seule équation différentielle du 1er ordre en $\mathbf{z} = (\mathbf{r}, \mathbf{v})$.

```
[1]: %matplotlib inline

import numpy as N

import scipy.integrate as SI

import matplotlib.pyplot as P
```

Valeurs numériques pour un boulet de canon de 36 livres :

```
[2]: g = 9.81  # Pesanteur [m/s2]
cx = 0.45  # Coefficient de frottement d'une sphère
rhoAir = 1.2  # Masse volumique de l'air [kg/m3] au niveau de la mer, T=20°C
rad = 0.1748/2  # Rayon du boulet [m]
rho = 6.23e3  # Masse volumique du boulet [kg/m3]
mass = 4./3.*N.pi*rad**3 * rho  # Masse du boulet [kg]
alpha = 0.5*cx*rhoAir*N.pi*rad**2 / mass  # Coefficient de frottement par unité de masse
print("Masse du boulet: {:.2f} kg".format(mass))
print("Coefficient de frottement par unité de masse: {} S.I.".format(alpha))

Masse du boulet: 17.42 kg
Coefficient de frottement par unité de masse: 0.0003718994604243878 S.I.
```

Conditions initiales:

Temps caractéristique du système : $t = \sqrt{\frac{m}{g\alpha}}$ (durée du régime transitoire). L'intégration des équations se fera sur un temps caractéristique, avec des pas de temps significativement plus petits.

```
[4]: tc = N.sqrt(mass / (g * alpha))
    print("Temps caractéristique: {:.1f} s".format(tc))
    t = N.linspace(0, tc, 100)

Temps caractéristique: 69.1 s
```

Définition de la fonction $\dot{\mathbf{z}}$, avec $\mathbf{z} = (\mathbf{r}, \mathbf{v})$

```
[5]: def zdot(z, t):
    """Calcul de la dérivée de z=(x, y, vx, vy) à l'instant t."""

x, y, vx, vy = z
    alphav = alpha * N.hypot(vx, vy)

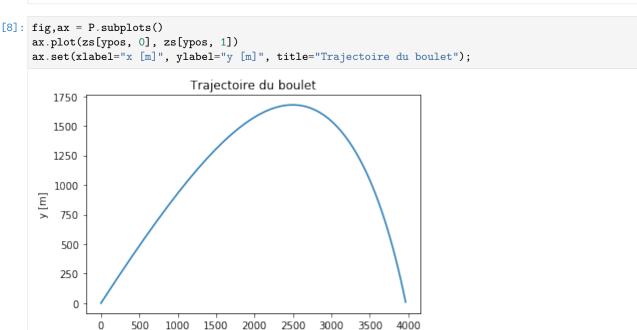
return (vx, vy, -alphav * vx, -g - alphav * vy) # dz/dt = (vx,vy,x..,y..)
```

Intégration numérique des équations du mouvement à l'aide de la fonction scipy.integrate.odeint :

```
[6]: zs = SI.odeint(zdot, z0, t)
```

Le tableau zs contient les valeurs de z à chaque instant t: il est donc de taille (len(t),4).

```
[7]: ypos = zs[:,1]>=0 # y>0? print("temps de coll. t(y~0) = {:.0f} s".format(t[ypos][-1])) # Dernier instant pour lequel y>0 print("portée x(y~0) = {:.0f} m".format(zs[ypos, 0][-1])) # Portée approximative du canon #print "y(y~0) = {:.0f} m".format(zs[ypos, 1][-1]) # ~0 print("vitesse(y~0): {:.0f} m/s".format(N.hypot(zs[ypos, 2][-1], zs[ypos, 3][-1]))) temps de coll. t(y~0) = 36 s portée x(y~0) = 3966 m vitesse(y~0): 140 m/s
```



The following section was generated from Exercices/canon.ipynb

x [m]

Équation d'état de l'eau

```
#!/usr/bin/env python3
    # -*- coding: utf-8 -*-
2
    # Time-stamp: <2018-07-19 10:38 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>
3
4
5
    import numpy as N
6
    import matplotlib.pyplot as P
    import pytest
                                    # pytest importe pour les tests unitaires
10
11
    {\it Construction~d'un~syst\`eme~d'extraction~et~d'analyse~de~fichiers~de~sortie~de}
12
    dynamique moléculaire afin d'extraire les grandeurs thermodynamiques.
13
    On affichera les ensuite isothermes.
14
15
16
    __author__ = "Adrien Licari <adrien.licari@ens-lyon.fr>"
17
18
19
    tolerance = 1e-8 # Un seuil de tolérance pour les égalités sur réels
20
21
    23
    ##### A Simulation class #####
24
    25
26
    class Simulation:
27
28
        La classe Simulation représente une simulation de dynamique
29
        moléculaire, donc un point de l'équation d'état. Son constructeur
30
31
        doit impérativement être appelé avec le chemin du fichier output
32
        correspondant. Elle possède des méthodes pour extraire les grandeurs
        thermodynamiques et afficher la run, en pouvant enlever certains pas
33
        de temps en début de simulation.
34
35
36
        def __init__(self, temp, dens, path):
37
38
```

 $(suite \ de \ la \ page \ précédente)$

```
Le constructeur doit impérativement être appelé avec le chemin du
39
            fichier décrivant la simulation, ainsi que ses conditions
40
             thermodynamiques.
41
42
43
            Args :
                     temp, dens (float): La température et la densité de la simulation
                     path(string): Le chemin vers le fichier décrivant la simulation
46
47
            Raises :
                     TypeError si temp ou dens ne sont pas des réels
48
                     IOError si le fichier n'existe pas
49
             11 11 11
50
            self.temp = float(temp)
51
            self.dens = float(dens)
52
            tmp = N.loadtxt(path, skiprows=1).T
53
            self.pot = tmp[0]
54
55
            self.kin = tmp[1]
            self.tot = self.pot + self.kin
            self.press = tmp[2]
57
58
        def __str__(self):
59
60
            Surcharge de l'opérateur str.
61
62
            return "Simulation at \{:.0f\} g/cc and \{:.0f\} K; \{:d\} timesteps".
63
                 format(self.dens, self.temp, len(self.pot))
64
65
        def thermo(self, skipSteps=0):
66
67
68
             Calcule l'énergie et la pression moyenne au cours de la simulation.
            Renvoie un dictionnaire.
69
70
71
            Args:
                     skipSteps(int): No de pas à enlever en début de simulation.
72
73
            Returns:
74
                     {'T':temperature, 'rho':density,
75
                      'E':energy, 'P':pressure,
76
                      'dE':dEnergy, 'dP':dPressure}
             11 11 11
78
            return {'T': self.temp,
79
                     'rho': self.dens,
80
                     'E': self.tot[skipSteps:].mean(),
81
                     'P': self.press[skipSteps:].mean(),
82
                     'dE': self.tot[skipSteps:].std(),
83
                     'dP': self.press[skipSteps:].std()}
84
85
        def plot(self, skipSteps=0):
86
            Affiche l'évolution de la Pression et l'énergie interne au cours de
             la simulation.
89
90
            Args:
91
                     skipSteps(int): Pas de temps à eneleur en début de simulation.
92
93
            Raises:
94
                     TypeError si skipSteps n'est pas un entier.
95
96
            fig, (axen, axpress) = P.subplots(2, sharex=True)
97
            axen.plot(list(range(skipSteps, len(self.tot))), self.tot[skipSteps:],
                        'rd--')
```

```
axen.set_title("Internal energy (Ha)")
100
             axpress.plot(list(range(skipSteps, len(self.press))), self.press[skipSteps:],
101
                           'rd--')
102
             axpress.set_title("Pressure (GPa)")
103
             axpress.set_xlabel("Timesteps")
104
             P.show()
107
     ##### Tests pour Simulation #####
108
109
110
    def mimic_simulation(filename):
111
         with open(filename, 'w') as f:
112
             f.write("""Potential energy (Ha)
                                                       Kinetic Energy (Ha)
                                                                                    Pressure (GPa)
113
     -668.2463567264
                                     0.7755612311
                                                                      9287.7370229824
114
     -668.2118514558
                                     0.7755612311
                                                                   9286.1395903265
115
    -668.3119088218
                                     0.7755612311
                                                                   9247.6604398856
    -668.4762735176
                                     0.7755612311
                                                                   9191.8574820856
    -668.4762735176
                                     0.7755612311
                                                                   9191.8574820856
118
    """)
119
120
121
    def test_Simulation_init():
122
        mimic_simulation("equationEtat_simuTest.out")
123
         s = Simulation(10, 10, "equationEtat_simuTest.out")
124
         assert len(s.kin) == 5
125
         assert abs(s.kin[2] - 0.7755612311) < tolerance
         assert abs(s.pot[1] + 668.2118514558) < tolerance
127
128
129
    def test_Simulation_str():
130
        mimic_simulation("equationEtat_simuTest.out")
131
         s = Simulation(10, 20, "equationEtat_simuTest.out")
132
         assert str(s) == "Simulation at 20 g/cc and 10 K; 5 timesteps"
133
134
135
    def test_Simulation_thermo():
136
        mimic_simulation("equationEtat_simuTest.out")
137
         s = Simulation(10, 20, "equationEtat_simuTest.out")
138
        assert abs(s.thermo()['T'] - 10) < tolerance</pre>
139
        assert abs(s.thermo()['rho'] - 20) < tolerance</pre>
140
        assert abs(s.thermo()['E'] + 667.56897157674) < tolerance
141
        assert abs(s.thermo()['P'] - 9241.0504034731) < tolerance
142
         assert abs(s.thermo(3)['E'] + 667.7007122865) < tolerance
143
         assert abs(s.thermo(3)['P'] - 9191.8574820856) < tolerance
144
145
     ###################
146
    ### Main script ###
147
    ###################
    if __name__ == '__main__':
150
151
         On définit un certain nombre de pas de temps à sauter, puis on
152
         charge chaque simulation et extrait les informaions thermodynamiques
153
         associées. On affiche enfin les isothermes normalisées (E/NkT et P/nkT).
154
155
156
         ### Definitions ###
157
         a0 = 0.52918
                           # Bohr radius in angstrom
158
         amu = 1.6605
                           # atomic mass unit in e-24 g
        k_B = 3.16681e-6 # Boltzmann's constant in Ha/K
160
```

```
# normalization factor for P/nkT
161
         nk_GPa = a0 ** 3 * k_B * 2.942e4 / 6 / amu
162
         nsteps = 200  # define skipped timesteps (should be done for
163
         # each simulation...)
164
         temps = [6000, 20000, 50000]
                                           # define temperatures
165
         colors = {6000: 'r', 20000: 'b', 50000: 'k'}
166
         denss = [7, 15, 25, 30] # define densities
167
         keys = ['T', 'rho', 'E', 'dE', 'P', 'dP']
168
         eos = dict.fromkeys(keys, N.zeros(0)) # {key:[]}
169
170
         ### Extract the EOS out of the source files ###
171
         for t, rho in [(t, rho) for t in temps for rho in denss]:
172
             filenm = "outputs/{}K_{:0>2d}gcc.out".format(t, rho)
173
             s = Simulation(t, rho, filenm)
174
             for key in keys:
175
                 eos[key] = N.append(eos[key], s.thermo(nsteps)[key])
176
         ### Plot isotherms ###
         fig, (axen, axpress) = P.subplots(2, sharex=True)
179
         fig.suptitle("High-pressure equation of state for water", size='x-large')
         axen.set_title("Energy")
181
         axen.set_ylabel("U / NkT")
182
         axpress.set_title("Pressure")
183
         axpress.set_ylabel("P / nkT")
184
         axpress.set_xlabel("rho (g/cc)")
185
         for t in temps:
186
             sel = eos['T'] == t
187
             axen.errorbar(x=eos['rho'][sel], y=eos['E'][sel] / k_B / t,
188
                            \label{eq:colors} \mbox{yerr=eos['dE'][sel] / k_B / t, fmt=colors[t] + '-')}
189
190
             axpress.errorbar(x=eos['rho'][sel],
                               y=eos['P'][sel] / eos['rho'][sel] / nk_GPa / t,
191
                               yerr=eos['dP'][sel] / eos['rho'][sel] / nk_GPa / t,
192
                               fmt=colors[t] + '-',
193
                               label="{} K".format(t))
194
         axpress.legend(loc='best')
195
         P.show()
196
```

Source: equationEtatSol.py

Solutions aux exercices

- Méthode des rectangles
- Fizz Buzz
- Algorithme d'Euclide
- Crible d'Ératosthène
- Carré magique
- Suite de Syracuse
- Flocon de Koch
- Jeu du plus ou moins
- Animaux
- Particules
- Jeu de la vie
- Median Absolute Deviation
- Distribution du pull
- Calculs numériques (numerique.ipynb)
- $-- \ Quartet \ d'Anscombe$
- $-- Suite \ logistique$
- Ensemble de Julia
- Trajectoire d'un boulet de canon (canon.ipynb)
- Équation d'état de l'eau

Examen final, Janvier 2015

Consignes:

- Vous avez accès à tout l'internet « statique » (hors mail, tchat, forum, etc.), y compris donc au cours en ligne.
- Ne soumettez pas de codes non-fonctionnels (i.e. provoquant une exception à l'interprétation, avant même l'exécution) : les erreurs de syntaxe seront lourdement sanctionnées.
- Respectez scrupuleusement les directives de l'énoncé (nom des variables, des méthodes, des fichiers, etc.), en particulier concernant le nom des fichiers à renvoyer aux correcteurs.

35.1 Exercice

Un appareil de vélocimétrie a mesuré une vitesse à intervalle de temps régulier puis à sorti le fichier texte velocimetrie.dat (attention à l'entête). Vous écrirez un script python « exo_nom_prénom.py » (sans accent) utilisant matplotlib qui générera, affichera et sauvegardera sous le nom « exo_nom_prénom. pdf » une figure composée de trois sous-figures, l'une au dessus de l'autre :

- 1. la vitesse en mm/s mesurée en fonction du temps,
- 2. le déplacement en mètres en fonction du temps. On utilisera volontairement une intégration naïve à partir de zéro via la fonction numpy.cumsum(),
- 3. l'accélération en $\rm m/s^2$ en fonction du temps. On utilisera volontairement une dérivation naı̈ve à deux points :

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

via la fonction numpy.diff(). Attention, si l'entrée de cette fonction est un tableau de taille N, sa sortie est un tableau de taille N-1.

Le script doit lire le fichier velocimetrie.dat stocké dans le répertoire courant. On prendra soin des noms des axes et des unités physiques. Si les trois axes des abscisses sont identiques, seul celui de la troisième sous-figure peut être nommé.

35.2 Le problème du voyageur de commerce

35.2.1 Introduction

Le problème du voyageur de commerce est un problème d'optimisation consistant à déterminer le plus court chemin reliant un ensemble de destinations. Il n'existe pas d'algorithme donnant la solution optimale en un temps raisonnable (problème NP-complet), mais l'on peut chercher à déterminer des solutions approchées.

On va se placer ici dans le cas d'un livreur devant desservir une seule fois chacune des n destinations d'une ville américaine où les rues sont agencées en réseau carré (Figure). On utilise la « distance de Manhattan » (norme L1) entre deux points $A(x_A, y_A)$ et $B(x_B, y_B)$:

$$d(A,B) = |x_B - x_A| + |y_B - y_A|.$$

En outre, on se place dans le cas où les coordonnées des destinations sont *entières*, comprises entre 0 (inclus) et TAILLE = 50 (exclus). Deux destinations peuvent éventuellement avoir les mêmes coordonnées.

Les instructions suivantes doivent permettre de définir les classes nécessaires (Ville et Trajet) et de développer deux algorithmes approchés (heuristiques) : l'algorithme du plus proche voisin, et l'optimisation 2-opt. Seules la librairie standard et la librairie numpy sont utilisables si nécessaire.

Un squelette du code, définissant l'interface de programmation et incluant des tests unitaires (à utiliser avec py.test), vous est fourni : exam_1501.py. Après l'avoir renommé « pb_nom_prénom.py » (sans accent), l'objectif est donc de compléter ce code progressivement, en suivant les instructions suivantes.

Une ville-test de 20 destinations est fournie : ville.dat (Fig.), sur laquelle des tests de lecture et d'optimisation seront réalisés.

35.2.2 Classe Ville

Les n coordonnées des destinations sont stockées dans l'attribut destinations, un tableau numpy d'entiers de format (n, 2).

- 1. __init__() : initialisation d'une ville sans destination (déjà implémenté, ne pas modifier).
- 2. aleatoire(n): création de n destinations aléatoires (utiliser numpy.random.randint()).
- 3. lecture (nomfichier) : lecture d'un fichier ASCII donnant les coordonnées des destinations.
- 4. ecriture (nomfichier) : écriture d'un fichier ASCII avec les coordonnées des destinations.
- 5. $nb_trajet()$: retourne le nombre total (entier) de trajets: (n-1)!/2 (utiliser math.factorial()).
- 6. distance(i, j) : retourne la distance (Manhattan-L1) entre les deux destinations de numéro i et j.

35.2.3 Classe Trajet

L'ordre des destinations suivi au cours du trajet est stocké dans l'attribut etapes, un tableau numpy d'entiers de format (n,).

- 1. __init__(ville, etapes=None) : initialisation sur une ville. Si la liste etapes n'est pas spécifiée, le trajet par défaut est celui suivant les destinations de ville.
- 2. longueur() : retourne la longueur totale du trajet bouclé (i.e. revenant à son point de départ).

35.2.4 Heuristique Plus proche voisin

- 1. $Ville.plus_proche(i, exclus=[])$: retourne la destination la plus proche de la destination i (au sens de Ville.distance()), hors les destinations de la liste exclus.
- 2. Ville.trajet_voisins(depart=0) : retourne un Trajet déterminé selon l'heuristique des plus proches voisins (i.e. l'étape suivante est la destination la plus proche hors les destinations déjà visitées) en partant de l'étape initiale depart.

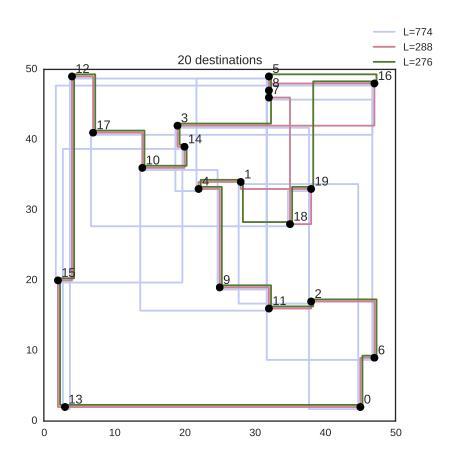


Fig. 35.1 – **Figure :** Ville-test, avec 20 destinations et trois trajets de longueurs différentes : un trajet aléatoire (L=774), un trajet plus proche voisins (L=288), et un trajet après optimisation opt-2 (L=276).

35.2.5 Heuristique *Opt-2*

- 1. Trajet.interversion(i, j) : retourne un nouveau Trajet résultant de l'interversion des 2 étapes i et j.
- 2. Ville.optimisation_trajet(trajet) : retourne le Trajet le plus court de tous les trajets « voisins » à trajet (i.e. résultant d'une simple interversion de 2 étapes), ou trajet lui-même s'il est le plus court.
- 3. Ville.trajet_opt2(trajet=None, maxiter=100) : à partir d'un trajet initial (par défaut le trajet des plus proches voisins), retourne un Trajet optimisé de façon itérative par interversion successive de 2 étapes. Le nombre maximum d'itération est maxiter.

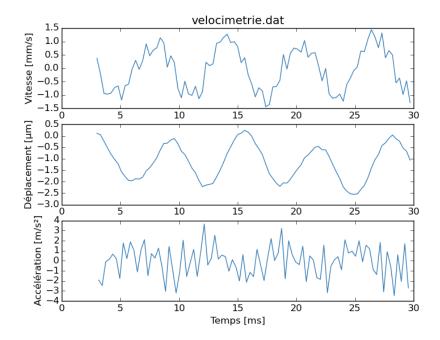
35.2.6 Questions hors-barême

À l'aide de la librairie matplotlib:

- 1. Ville.figure() : trace la figure représentant les destinations de la ville (similaire à la Figure).
- 2. Ville.figure(trajet=None) : compléter la méthode précédente pour ajouter un trajet au plan de la ville (utiliser matplotlib.step() pour des trajets de type « Manhattan »).

35.3 Correction

Corrigé





	• • •				hie
~	ıhı	-	~r	\sim	hın
1)		11()	, וע	41)	1110
_	\sim		\sim · ·	9	

204 Bibliographie

Symbols	С
*	class, 18
dépaquetage, 21, 22	columns
**	pandas, 49
dépaquetage, 21	complex
**kwargs, 21	type numérique, 7
*args, 21	continue, 9
@	cut
décorateur, 22	pandas, 55
\$PATH, 6	5
	D
A	décorateur
agg	@, 22
pandas, 56	dépaquetage
all	*, 21, 22
numpy, 36	**, 21
allclose	DataArray
numpy, 36	xarray, 58
any	DataFrame
numpy, 36	pandas, 48
arange	DataSet
numpy, 30	xarray, 58
argparse	def, 13
module, 26	dict
args, 13	itérables, 7
array	dir, 10
numpy, 30	dot
assert	numpy, 35
exceptions, 17	drop
astropy	pandas, 52
module, 60	dropna
at	pandas, 52
pandas, 50	dstack
Axes	numpy, 33
matplotlib, 41	dtype
axis	numpy, 36
numpy, 35	_
D	Е
В	exceptions
bool	assert, 17
type numérique, 7, 8	raise, 17
break, 9	try except, 16
broadcasting	${ m expand_dims}$
numpy, 34	numpy, 33

F	K
Figure	kwargs, 13
matplotlib, 41	•
file, 20	L
fillna	lambda, 23
pandas, 52	len
filter	itérables, 9
pandas, 50	linspace
float	numpy, 31
type numérique, 7	list
for in, 9	itérables, 7
full	loc
numpy, 30	pandas, 50
G	xarray, 58
	logspace
genfromtxt	numpy, 31
numpy, 36, 38	M
GridSpec	
matplotlib, 42	matplotlib
groupby pandas, 56	Axes, 41
pandas, 50	Figure, 41
H	GridSpec, 42 module, 40
hstack	mplot3d, 45
numpy, 33	pylab, 40
патру, оо	pyplot, 40
1	savefig, 43
iat	show, 43
pandas, 50	matrix
identity	numpy, 35
numpy, 35	mayavi/mlab
idxmin	module, 45
pandas, 55	meshgrid
if elif else, 9	numpy, 31
iloc	mgrid
pandas, 50	numpy, 31
import, 14	module
Index	argparse, 26
pandas, 49	astropy, 60
index	matplotlib, 40
pandas, 49	mayavi/mlab, 45
input, 20	numpy, 29
int	numpy.fft, 38
type numérique, 7	numpy.linalg, 35
interpréteur	numpy.ma, 37
ipython, 6	numpy.polynomial, 38
python, 6	numpy.random, 31 pandas, 47
isinstance, 7	pickle, 26
itérables, 11	scipy, 39
dict, 7 len, 9	seaborn, 57
list, 7	sys, 25
set, 7	turtle, 95
slice, 10	xarray, 58
str, 7, 9	mplot3d
tuple, 7	matplotlib, 45
r	· · · I. · · · · · · · · · · · · · · · ·

206 Index

8

N	0
	O
ndarray	ones
numpy, 30	numpy, 30
newaxis	opérateur ternaire (if else),
numpy, 33, 34	open, 20
None, 7	Р
nonzero	•
numpy, 34	pandas
numpy	agg, 56
all, 36	at, 50
allclose, 36	columns, 49
any, 36	cut, 55
arange, 30	DataFrame, 48
array, 30	drop, 52
axis, 35	dropna, 52
broadcasting, 34	fillna, 52
dot, 35	filter, 50
dstack, 33	groupby, 56
dtype, 36	iat, 50
expand_dims, 33	idxmin, 55
full, 30	iloc, 50
genfromtxt, 36, 38	Index, 49
hstack, 33	index, 49
identity, 35	loc, 50
linspace, 31	module, 47
logspace, 31	pivot_table, 57
matrix, 35	qcut, 55
meshgrid, 31	query, 50
mgrid, 31	reset_index, 53
module, 29	Series, 48
ndarray, 30	set_index, 53
newaxis, 33, 34	sort_index, 53, 55
nonzero, 34	sort_values, 55
ones, 30	value_counts, 55
ravel, 32	values, 49
recarray, 36	xs, 53
reshape, 32	pickle
resize, 33	module, 26
rollaxis, 33	pivot_table
save/load, 38	pandas, 57
savetxt/loadtxt, 38	print, 11, 20
slicing, 32	pylab
squeeze, 33	matplotlib, 40
transpose, 33	pyplot
ufuncs, 36	matplotlib, 40
vstack, 33	Python Enhancement Proposals
where, 34	PEP 20, 63
zeros, 30	PEP 257, 16, 70
numpy.fft	PEP 308, 9
module, 38	PEP 3132, 22
numpy.linalg	PEP 343, 24
module, 35	PEP 448, 21
numpy.ma	PEP 466, 24
module, 37	PEP 484, 24
numpy.polynomial	PEP 498, 24
module, 38	PEP 526, 24
numpy.random	PEP 8, 64
module, 31	

Index 207

Q	Т
qcut	transpose
pandas, 55	numpy, 33
query	try except
pandas, 50	exceptions, 16
-	tuple
R	itérables, 7
raise	turtle
exceptions, 17	module, 95
range, 7	type, 7
ravel	type numérique
numpy, 32	bool, 7, 8
recarray	complex, 7
numpy, 36	float, 7
reset_index	int, 7
pandas, 53	
reshape	U
numpy, 32	ufuncs
resize	numpy, 36
numpy, 33	
rollaxis	V
numpy, 33	$value_counts$
	pandas, 55
S	values
save/load	pandas, 49
numpy, 38	variable d'environnement
savefig	\$PATH, 6
matplotlib, 43	vstack
savetxt/loadtxt	numpy, 33
numpy, 38	
scipy	W
module, 39	where
seaborn	numpy, 34
module, 57	while, 9
sel	
xarray, 58	X
Series	xarray
pandas, 48	DataArray, 58
set	DataSet, 58
itérables, 7	loc, 58
set_index	module, 58
pandas, 53	sel, 58
show	XS
matplotlib, 43	pandas, 53
slice	
itérables, 10	Z
slicing	Zen du Python, 63
numpy, 32	zeros
sort_index	numpy, 30
pandas, 53 , 55	107
sort_values	
pandas, 55	
squeeze	
numpy, 33	
str	
itérables, 7, 9	
sys	
module 25	

208 Index