Une pas si courte introduction au langage de programmation Python comme alternative à Matlab pour réaliser des calculs scientifiques ou d'autres applications.

G. Becq, N. Le Bihan

January 19, 2015

Description des paquets scientifiques

Distributions et Environnements de travail

Conclusion

Outline

Description des paquets scientifiques

Distributions et Environnements de travail

Conclusion

Quelques Paquets et Outils Scientifiques

- SciPy: scientific python
- Mayavi : objets 3D avancés
- Scikit-learn : machine learning.
- **.** . . .

SciPy

http://www.scipy.org/



Numpy

- http://www.numpy.org
- NumPy is the fundamental package for scientific computing with Python

```
>>> import numpy
>>> help(numpy)
Help on package numpy:
NAME
    numpy
FILE
    /Users/becgg/Library/Enthought/Canopy_64bit/User/lib/python2.7/site-packages
    /numpy/__init__.py
DESCRIPTION
    NumPv
    Provides
      1. An array object of arbitrary homogeneous items
      2. Fast mathematical operations over arrays
      3. Linear Algebra, Fourier Transforms, Random Number Generation
```

- N-dimensional array : ndarray
- Création d'un tableau vide et réservation de l'espace (empty)
- Accès aux éléments : A[i, j, ...]

► Rappel : accès aux propiétés et méthodes (dir)

```
>>> dir(A)
'T', ..., 'all', 'any', 'argmax', 'argmin', 'argpartition', 'argsort', 'astype',
'base', 'byteswap', 'choose', 'clip', 'compress', 'conj', 'conjugate', 'copy',
'ctypes', 'cumprod', 'cumsum', 'data', 'diagonal', 'dot', 'dtype', 'dump',
'dumps', 'fill', 'flags', 'flat', 'flatten', 'getfield', 'imag', 'item',
'itemset', 'itemsize', 'max', 'mean', 'min', 'nbytes', 'ndim', 'newbyteorder',
'nonzero', 'partition', 'prod', 'ptp', 'put', 'ravel', 'real', 'repeat',
'reshape', 'resize', 'round', 'searchsorted', 'setfield', 'setflags', 'shape',
'size', 'sort', 'squeeze', 'std', 'strides', 'sum', 'swapaxes', 'take',
'tofile', 'tolist', 'tostring', 'trace', 'transpose', 'var', 'view'
```

Attributs sur la forme du tableau

- Forme du tableau (shape), c'est un tuple.
- Nombre de dimension (ndim)
- Type des éléments (dtype)
- ► Taille du tableau (size), c'est le nombre de cellules totales.

```
>>> A.shape
(2, 2)
>>> (nRow, nCol) = A.shape
>>> nRow = A.shape[0]
>>> nCol = A.shape[1]
>>> A.ndim
2
>>> A.dtype
dtype('float64')
>>> A.size
4
```

Changement de forme

- Pour changer la forme (reshape)
- Transposition (T)

Copie de tableaux

- ► Les éléments de B sont les mêmes que ceux de A, seule la forme change.
- Si on veut une copie (copy)

Création de tableaux

- tableau vide et réservation de l'espace (empty)
- initialisation à zeros (zeros)
- initialisation avec des uns (ones)
- tableau identité (eye) avec la dimension.
- à partir de listes (array)
- suivant une étendue (arange)

```
>>> A = numpy.zeros((2, 4))
>>> print(A)
[[ 0. 0. 0. 0.]
[ 0. 0. 0. 0.11
>>> A = numpy.ones((3, 2))
>>> print(A)
[[ 1. 1.]
[1. 1.]
[ 1. 1.]]
>>> A = numpy.eye(2)
>>> print(A)
[[ 1. 0.]
[ 0. 1.]]
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> print(A)
[[ 1 2]
[11 12]]
>>> print(numpy.arange(0.5, 1.7, 0.1))
[ 0.5  0.6  0.7  0.8  0.9  1.  1.1  1.2  1.3  1.4  1.5  1.6]
                                                     4 D F 4 P F A B F A B F B
```

Types

- Définition du type à la création
- Changement de type (astype)
- Multiplication ou addition avec un scalaire typé.

```
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> print(A.dtype)
int64
>>> A = numpy.array([[1., 2], [11, 12]])
>>> print(A.dtype)
float64
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]], dtype="float")
>>> print(A.dtype)
float64
>>> A = A.astype("complex")
>>> print(A)
[[ 1.+0.i 2.+0.i]
[ 11.+0.j 12.+0.j]]
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]]) * 1.
>>> print(A.dtype)
float64
```

Additions, soustractions, multiplications sur les tableaux

- Addition, soustraction de matrices ou d'un scalaire (+, -)
- Multiplication par un scalaire (*)
- Produit élément par élément (*)

```
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> B = numpy.array([[3, 4], [13, 14]])
>>> print(A + 10)
[[ 11. 12.]
[ 21. 22.]]
>>> print(A + B)
[[ 4. 6.]
[ 24. 26.]]
>>> print(A * 10)
[[ 10. 20.]
[ 110. 120.]]
>>> print(A * B)
[[ 3. 8.]
[ 143. 168.]]
>>> C = numpy.ones((10, ))
>>> print(A * C)
Traceback (most recent call last):
  File "<stdin>", line 1, in <module>
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (2,2) (10)
```

Produit scalaire

- Produit scalaire (dot)
- See also numpy.dot : en général, pour chaque méthode associée à un ndarray, il existe une fonction équivalente dans numpy.

```
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> B = numpy.array([[3, 4], [13, 14]])
>>> print(A.dot(B))
[[ 29.  32.]
  [ 189.  212.]]
>>> print(numpy.dot(A, B))
[[ 29.  32.]
  [ 189.  212.]]
>>> C = numpy.ones((10, ))
>>> print(A.dot(C))
Traceback (most recent call last):
  File "<stdin>", line 1, in <module>
ValueError: matrices are not aligned
>>>
```

N-dimensional array Object Division

- Division par un scalaire (/)
- Division éléments par éléments (/)
- Attention au type en Python 2.7!

Autres méthodes

max, min, sum, mean, std, cumsum, cumprod . . . sur tous les éléments ou sur une dimension particulière (kwarg axis).

```
>>> A = numpy.ones((2, 3, 4))
>>> print(A)
[[[ 1. 1. 1. 1.]
 [ 1. 1. 1. 1.]
 [ 1. 1. 1. 1.]]
 [ 1. 1. 1. 1.]
 [ 1. 1. 1. 1.]]]
>>> print(A.cumsum())
[ 1. 2. 3.
7. 8. 9. 10. 11. 12. 13.
14. 15.
 16. 17. 18. 19. 20. 21. 22.
    24.1
>>> print(A.cumsum(axis=0))
[[[ 1. 1. 1. 1.]
 [ 1. 1. 1. 1.]
 [ 1. 1. 1. 1.]]
 [[ 2. 2. 2. 2.]
 Γ 2. 2. 2. 2.1
              2.]]]
```

Sélection de sous-tableaux

découpage, slicing, comme pour les séquences.

```
>>> A = numpy.array([[1, 2, 3, 4], [11, 12, 13, 14]])
>>> print(A)
[[ 1 2 3 4]
[11 12 13 14]]
>>> print(A[1, :])
[11 12 13 14]
>>> print(A[:, 1:3])
[[ 2 3]
[12 13]]
```

Sélection de sous-tableaux

- Comparaison et opérateurs logiques
- Opérations logiques pour sélectionner des éléments (masking)
- Récupérer les indices (where)

```
>>> A = numpy.array([[1, 2, 3, 4], [11, 12, 13, 14]])
>>> print(A)
[[1 2 3 4]
 [11 12 13 14]]
>>> R = A > 2
>>> print(B)
[[False False True
                    Truel
[ True True True Truell
>>> print(A[B])
Γ 3 4 11 12 13 141
>>> indices = numpy.where(B)
>>> print(indices[0])
array([0, 0, 1, 1, 1, 1])
>>> print(indices[1])
arrav([2, 3, 0, 1, 2, 3])
>>> (i, j) = numpy.where(A > 2)
```

Concaténations

- Concaténation horizontale (hstack)
- Concaténation verticale (vstack)
- concatenate (concatenate, kwarg axis)

```
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> B = numpv.arrav([[3, 4], [13, 14]])
>>> C = numpy.vstack((A, B))
>>> print(C)
[[ 1 2]
 Γ11 12]
F 3 41
 [13 14]]
>>> D = numpy.hstack((A, B, A, A))
>>> print(D)
[[1 2 3 4 1 2 1 2]
[11 12 13 14 11 12 11 12]]
>>> E = numpy.concatenate((A, B, A, A), axis=1)
>>> print(E)
[[1 2 3 4 1 2 1 2]
 [11 12 13 14 11 12 11 12]]
```

Arrays

- Possibilité de mettre des éléments de types différents.
- Possibilité de tableaux structurés . . .

Sauvegarde et lecture de données

- ► Enregistrement d'un tableau (save) dans un fichier ".npy"
- Enregistrement compressé de plusieurs tableaux (savez) au format ".npz"
- ► Eneregistrement (savetxt) et lecture (loadtxt) de fichier texte ".txt"
- ▶ Lecture (load) des fichiers ".npy", ".npz", ou ".txt"

```
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> numpy.save("save_A", A)
>>> del(A)
>>> A = numpy.load("save_A.npy")
>>> print(A)
[[ 1 2]
[11 12]]
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> B = numpy.array([[21, 22], [31, 32]])
>>> numpv.savez("save AB", tab1=A, B=B)
>>> del(A, B)
>>> data = numpy.load("save_AB.npz")
>>> print(data["tab1"])
[[ 1 2]
 [11 12]]
>>> print(data["B"])
[[21 22]
 [31 32]]
```

Matrix Définition

classe héritée de ndarray avec ndim = 2.

```
>>> help(numpy.matrix)
class matrix(numpy.ndarray)
| matrix(data, dtype=None, copy=True)
|
| Returns a matrix from an array-like object, or from a string of data.
| A matrix is a specialized 2-D array that retains its 2-D nature
| through operations. It has certain special operators, such as """
| (matrix multiplication) and "**" (matrix power).
```

Saisie

- ► Saisie directe de type ndarray avec des listes imbriquées.
- Possibilité de saisie type Matlab.

```
>>> A = numpy.matrix([[1, 2], [11, 12]])
>>> print(A)
[[1 2]
[11 12]]
>>> type(A)
<class 'numpy.matrixlib.defmatrix.matrix'>
>>> A = numpy.matrix("[1, 2, 3, 4; 11, 12, 13, 14]")
>>> print(A)
[[1 2 3 4]
[11 12 13 14]]
```

Matrix

Multiplication et exposant

- Produit de matrices (*)
- Exposant de matrice (**)

```
>>> A = numpy.matrix([[1, 2], [11, 12]])
>>> B = numpy.matrix([[3, 4], [13, 14]])
>>> print(A * B)
[[ 29 32]
[189 212]]
>>> print(A ** 2)
[[ 23 26]
[143 166]]
```

Matrix

Opérateurs matriciels courants

- Transposition (T)
- ► Inversion (I)
- Opérateur Hermitien (H)

```
>>> A = numpy.matrix([[1, 2], [11, 12]])
>>> print(A)
[[ 1 2]
 ſ11 12]]
>>> print(A.T)
[[ 1 11]
[ 2 12]]
>>> print(A.I)
print(A.I)
[[-1.2 0.2]
[ 1.1 -0.1]]
>>> B = numpy.matrix([[1, 2+1j], [11+1j, 12]])
>>> print(B)
[[ 1.+0.j 2.+1.j]
[ 11.+1.j 12.+0.j]]
>>> print(B.H)
[[ 1.-0.j 11.-1.j]
[ 2.-1.j 12.-0.j]]
```

Sous paquet linalg

Algèbre Linéaire

Interface vers Lapack (numpy.linalg)

```
>>> help(numpv.linalg)
   Linear algebra basics:
                     Vector or matrix norm
   - norm
   - inv
                     Inverse of a square matrix
   - solve
                     Solve a linear system of equations
   - det
                   Determinant of a square matrix
                   Solve linear least-squares problem
   - lstsq
                    Pseudo-inverse (Moore-Penrose)...
   - pinv
   - matrix_power
                    Integer power of a square matrix
   Eigenvalues and decompositions:
   - eig
                     Eigenvalues and vectors of a square matrix
                     Eigenvalues and eigenvectors of a Hermitian matrix
   - eigh
   - eigvals
                     Eigenvalues of a square matrix
   - eigvalsh
                     Eigenvalues of a Hermitian matrix
                     QR decomposition of a matrix
    - gr
                     Singular value decomposition of a matrix
    - svd

    cholesky

                     Cholesky decomposition of a matrix
   Tensor operations:
   - tensorsolve
                   Solve a linear tensor equation
   - tensoriny
                     Calculate an inverse of a tensor
```

Autres paquets de numpy

```
>>> help(numpy)
    doc
       Topical documentation on broadcasting, indexing, etc.
    lib
        Basic functions used by several sub-packages.
    random
        Core Random Tools
    linalg
        Core Linear Algebra Tools
    fft
        Core FFT routines
    polynomial
        Polynomial tools
    testing
        Numpy testing tools
   f2py
        Fortran to Python Interface Generator.
    distutils
        Enhancements to distutils with support for
        Fortran compilers support and more.
```

Autres paquets de numpy

Sous paquet random : générateurs de nombres aléatoires.

Scipy library

Librairie scientifique

- ▶ S http://www.scipy.org/scipylib/index.html
- ▶ It provides many user-friendly and efficient numerical routines such as routines for numerical integration and optimization.

```
>>> import scipy
>>> help(scipy)
     cluster
                                   --- Vector Quantization / Kmeans
    fftpack
                                       Discrete Fourier Transform algorithms
     integrate
                                   --- Integration routines
                                   --- Interpolation Tools
     interpolate
                                   --- Data input and output
     iο
                                       Python wrappers to external libraries
     1 i b
                                   --- Wrappers to LAPACK library
    lib.lapack
                                   --- Linear algebra routines
    linalg
                                   --- Various utilities that don't have
     misc
                                       another home.
     ndimage
                                   --- n-dimensional image package
                                   --- Orthogonal Distance Regression
     odr
                                   --- Optimization Tools
     optimize
                                   --- Signal Processing Tools
     signal
     sparse
                                   --- Sparse Matrices
     sparse.linalg
                                   --- Sparse Linear Algebra
```

Scipy

▶ Optimisation, Intégration, Interpolation, Algèbre linéaire, Algèbre linaire creuse, Signal, Image, Statistiques, Fonctions spéciales (Γ, ψ) ...

```
sparse.linalg.dsolve
                              --- Linear Solvers
sparse.linalg.dsolve.umfpack --- : Interface to the UMFPACK library:
                                  Conjugate Gradient Method (LOBPCG)
                                  Locally Optimal Block Preconditioned
sparse.linalg.eigen.lobpcg
                                  Conjugate Gradient Method (LOBPCG) [*]
special
                              --- Airv Functions [*]
lib.blas
                              --- Wrappers to BLAS library [*]
sparse.linalg.eigen
                              --- Sparse Eigenvalue Solvers [*]
                              --- Statistical Functions [*]
stats
                                  Python wrappers to external libraries
1 i b
lib.lapack
                              --- Wrappers to LAPACK library [*]
                              --- Integration routines [*]
integrate
                              --- n-dimensional image package [*]
ndimage
linalg
                              --- Linear algebra routines [*]
spatial
                              --- Spatial data structures and algorithms
                              --- Airy Functions
special
                              --- Statistical Functions
stats
```

Scipy lecture de fichiers Matlab

 Exemple, lectures de fichiers Matlab dans le subpackage io (scipy.io)

```
>>> help(scipy)
>>> import scipy.io
>>> data = scipy.io.loadmat('file.mat')
```

Matplotlib

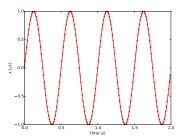
- matplotlib is a python 2D plotting library which produces publication quality figures in a variety of hardcopy formats and interactive environments across platforms.
- Programmation orientée objets avec différents backends pour différents graphical user interfaces (GUI): agg, gtk, qt, svg, ps, pdf...

${\sf Matplotlib}$

pyplot

 Fonctions procédurales dans le sous-paquet pyplot (matplotlib.pyplot)

```
>>> import matplotlib.pyplot
>>> t = numpy.arange(0, 10, 0.01)
>>> x = numpy.sin(2 * numpy.pi * 3 * t)
>>> matplotlib.pyplot.plot(t, x)
>>> matplotlib.pyplot.xlabel("time (s)")
>>> matplotlib.pyplot.ylabel("x ($\mu V$)")
>>> matplotlib.pyplot.ylabel("x ($\mu V$)")
```



Matplotlib Saving figures

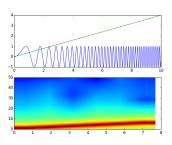
- Sauvegarde manuelle à partir de la fenêtre ouverte sur l'icône save.
- sauvegarde en ligne de commande (savefig) sans passage par un affichage à l'écran.

```
...
>>> matplotlib.pyplot.ylabel("x ($\mu V$)")
>>> # matplotlib.pyplot.show()
>>> matplotlib.pyplot.savefig("./sinus.ps")
>>> matplotlib.pyplot.savefig("./sinus.pdf")
>>> matplotlib.pyplot.savefig("./sinus.svg")
>>> matplotlib.pyplot.savefig("./sinus.tiff")
>>> matplotlib.pyplot.savefig("./sinus.tiff")
>>> matplotlib.pyplot.savefig("./sinus.tiff")
>>> matplotlib.pyplot.savefig("./sinus.jpg")
```

- ► Fonctions à la Matlab dans le sous-paquet pylab (matplotlib.pylab)
- Beaucoup de fonctions sous formes abbrégées . . .

```
>>> import matplotlib.pylab as mpl
>>> len(dir(mpl))
955

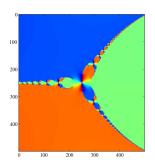
>>> from pylab import *
>>> t = arange(0, 10, 0.01)
>>> f = arange(0, 20, 0.02)
>>> x = sin(2 * pi * f * t)
>>> res = specgram(x, NFFT=16, Fs=100,
>>> show()
```



Matplotlib

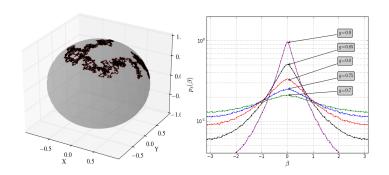
Pylab

```
>>> (X, Y) = meshgrid(linspace(-2, 2, 500), \
... linspace(-2, 2, 500))
>>> Z = X + Y * 1j
>>> while (k <= 75):
... Z -= (Z / 3 - 1) / (3 * Z ** 2)
... k += 1
>>> close("all")
>>> imshow(angle(Z))
>>> # savefig('/MonChemin/Lenom.pdf')
>>> show()
```



Matplotlib

Exemples de Nicolas Le Bihan



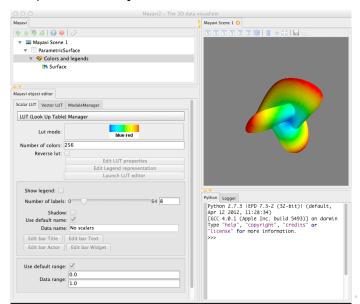
IPython

- ► IP[y]: IPython
 Interactive Computing
 - http://www.scipy.org/scipylib/index.html
- Enhanced python console
- ► Attention, ce n'est pas un paquet mais une console améliorée !
- Accessible à partir d'un terminal (ipython)

Python 2.7.3 | 64-bit | (default, Jun 14 2013, 18:17:36) Type "copyright", "credits" or "license" for more information. IPython 2.2.0 -- 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]:

Mayavi

Manipulation des objets 3D améliorée.



Mayavi import mayavi.engine

Dans une console Python : import mayavi. . . .

```
>>> from numpy import array
>>> from mayavi.api import Engine
>>> engine = Engine()
>>> engine.start()
>>> engine.new_scene()
>>> from mayavi.sources.parametric_surface import ParametricSurface
>>> parametric_surface1 = ParametricSurface()
>>> scene = engine.scenes(0)
>>> engine.add_source(parametric_surface1, scene)
>>> from mayavi.modules.surface import Surface
>>> surface1 = Surface()
>>> engine.add_filter(surface1, parametric_surface1)
```

Importation de bibliothèques de fonction écrites en C Exemple using module ctypes

```
import ctypes
myLib = ctypes.LoadLibray('myLib.lib')
fun c = mvLib.fun
fun c.argtvpes = [ctvpes.c double, ctvpes.c int]
fun_c.restype = ctypes.c_int (default)
n = len(s)
pathFile = os.path.dirname(__file__)
libName = os.path.join(pathFile, 'clz.lib')
print('libName + ' + libName)
libCLZ = ctypes.CDLL(libName)
clz_c = libCLZ.clz
clz c.restvpe = ctvpes.c uint
sequence = numpy.ctypeslib.ndpointer(dtype=numpy.int)
clz_c.argtypes = ([sequence, ctypes.c_uint])
# conversion of s into sequence with numpy.asarray
c = clz c(numpy.asarray(s, dtvpe='int'), n)
```

Scikit-learn

pas vu encore