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 16, 2015

Description des paquets scientifiques

Distributions et Environnements de travail

Conclusion

Outline

Description des paquets scientifiques

Distributions et Environnements de travail

Conclusion

Principales Paquets Scientifiques

- Numpy : essentiel en calcul numérique.
- Matplotlib, Pylab : tracé de figures et fonctions à la matlab.
- Scipy : outils scientifiques spécifiques.
- Maiavi : 3D avancée.

- ▶ ^{■ 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 de matrices 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.

N-dimensional array Object Division

- Division par un scalaire (/)
- Division de matrices éléments par éléments (/)
- Attention au type!

Autres méthodes

max, min, sum, mean, std, cumsum, cumprod . . . sur tous les éléments ou sur un axe donné.

```
>>> A = numpy.ones((2, 3, 4))
>>> print(A.cumsum())
Γ 1. 2. 3.
                4.
                   5. 6.
                            7. 8. 9. 10.
                                             11. 12. 13. 14. 15.
 16. 17. 18. 19. 20.
                        21.
                             22.
                                 23. 24.1
>>> print(A.cumsum(axis=0))
[[[ 1. 1. 1. 1.]
 [ 1. 1. 1. 1.]
 [ 1. 1. 1. 1.]]
 [[ 2. 2. 2. 2.]
 [ 2. 2. 2. 2.]
 [ 2. 2. 2. 2.111
print(A.cumsum(axis=1))
[[[ 1. 1. 1. 1.]
 [ 2. 2. 2. 2.]
 [ 3. 3. 3. 3.]]
 [[ 1. 1. 1.
 [ 2. 2. 2. 2.]
 ſ 3. 3. 3.
              3.111
>>> print(A.cumsum(2))
[[[ 1. 2. 3.
              4.]
 Γ 1. 2. 3.
              4.1
 Γ 1. 2. 3.
              4.11
 [[ 1. 2. 3.
             4.]
 Г 1. 2. 3.
             4.1
 [ 1. 2. 3.
              4.]]]
```

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 = \text{numpy.array}([[1, 2, 3, 4], [11, 12, 13, 14]])
>>> print(A)
[[1 2 3 4]
Γ11 12 13 14]]
>>> B = A > 2
>>> print(B)
[[False False True True]
[ True True True
                    Truell
>>> print(A[B])
Γ 3 4 11 12 13 14]
>>> indices = numpy.where(B)
>>> print(indices[0])
array([0, 0, 1, 1, 1, 1])
>>> print(indices[1])
array([2, 3, 0, 1, 2, 3])
```

Concaténations

- Concaténation horizontale (hstack)
- Concaténation verticale (vstack)
- Réduction (squeeze)

```
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> B = numpy.array([[3, 4], [13, 14]])
>>> C = numpy.hstack((A, B))
>>> print(C)
[[1 2 3 4]
 [11 12 13 14]]
>>> D = numpy.array([[[21, 22], [31, 32]], [[41, 42], [51, 52]]])
>>> print(B)
[[False False True True]
[ True True True
                     Truell
>>> print(A[B])
Γ 3 4 11 12 13 14]
>>> indices = numpy.where(B)
>>> print(indices[0])
array([0, 0, 1, 1, 1, 1])
>>> print(indices[1])
array([2, 3, 0, 1, 2, 3])
```

Arrays

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

Sauvegarde et lecture de données

n

```
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> numpy.save("save_A", A)
>>> del(A)
>>> A = numpy.load("saveA.npy")
>>> print(A)
[[ 1 2]
[11 12]]
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> B = numpy.array([[21, 22], [31, 32]])
>>> numpy.savez("save_AB", tab1=A, B=B)
>>> del(A. B)
>>> data = numpy.load("save_AB.npz")
>>> print(data["tab1"])
[[ 1 2]
 ſ11 12]]
>>> print(data["B"])
[[21 22]
 Γ31 3211
```

classe héritée de ndarray avec ndim = 2 et propriétés spéciales.

```
>>> help(numpy.matrix)
class matrix (numpy.ndarray)
    matrix(data, dtvpe=None, copv=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).
>>> A = numpy.matrix([[1, 2], [11, 12]])
>>> print(A)
[[ 1 2]
 ſ11 12]]
>>> type(A)
 <class 'numpy.matrixlib.defmatrix.matrix'>
>>> A = numpy.matrix("[1,_{\cup}2,_{\cup}3,_{\cup}4;_{\cup}11,_{\cup}12,_{\cup}13,_{\cup}14]")
>>> print(A)
[[1 2 3 4]
 [11 12 13 14]]
```

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

```
>>> help(numpy.matrix)
>>> A = numpy.matrix([[1, 2], [11, 12]])
>>> print(A)
[[ 1 2]
    [11 12]]
>>> type(A)
<class 'numpy.matrixlib.defmatrix.matrix'>
>>> A = numpy.matrix("[1,u2,u3,u4;u11,u12,u13,u14]")
>>> print(A)
[[ 1 2 3 4]
    [11 12 13 14]]
```

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]]
```

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

•

numpy.random

```
>>> 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.
>>> A = numpy.random.seed(0)
>>> A = numpy.random.randn(2, 3, 4)
>>> print(A)
[ 1.86755799 -0.97727788  0.95008842 -0.15135721]
 [-0.10321885 0.4105985
                          0.14404357 1.4542735111
 [[ 0.76103773  0.12167502
                          0.44386323 0.333674331
```

Sauvegarde et lecture de données

- Un tableau (save) : ".npy"
- Plusieurs tableaux (savez): ".npz"
- Fichier texte (loadtxt, savetxt)

```
>>> A = numpy.array([[1, 2], [11, 12]])
>>> numpy.save("save_A", A)
>>> del(A)
>>> A = numpy.load("saveA.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]]
>>> A = numpy.loadtxt("data.txt")
>>> A
array([[ 1., 2., 3., 4., 5.],
       [ 11., 12., 13., 14., 15.],
       [ 21., 22., 23., 24.,
>>> numpv.savetxt("data.txt", A)
```

Matplotlib

- matplotlib : http://www.matplotlib.org
- 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...

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("timeu(s)")
>>> matplotlib.pyplot.ylabel("xu($\mu\vert^*\)")
>>> matplotlib.pyplot.ylabel("xu($\mu\vert^*\)")
>>> matplotlib.pyplot.show()
```

Matplotlib

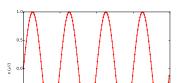
- ► Fonctions à la Matlab dans le sous-paquet pylab (matplotlib.pylab)
- Beaucoup de fonctions sous formes abbrégées . . .

```
>>> from matplotlib.pylab import *
>>> len(dir(mpl))
955
>>> x = sin(2 * numpy.pi * 3 * t)
>>> plot(t, x)
>>> xlabel("timeu(s)")
>>> ylabel("xu($\mu_UV$)")
>>> show()
```

Matplotlib

- matplotlib : http://www.matplotlib.org
- matplotlib is a python 2D plotting library which produces publication quality figures in a variety of hardcopy formats and interactive environments across platforms.
- ▶ fonction procédurale dans le sous-paquet pyplot
- programmation orientée objets avec différents backends pour différents graphical user interfaces (GUI): agg, gtk, qt, svg, ps, pdf...

```
>>> import matplotlib.pyplot
>>> t = numpy.arange(0, 2, 0.01)
>>> x = numpy.sin(2 * numpy.pi * 2 * t)
>>> matplotlib.pyplot.plot(t, x)
>>> matplotlib.pyplot.xlabel("timeu(s)")
>>> matplotlib.pyplot.ylabel("xu($\mu_UV$)")
>>> matplotlib.pyplot.show()
```



Tableaux ND et fonctions associées

Les exemples sont donnés dans l'Python avec les fonctions Pylab chargées.

```
>>> A = array([[1,2,3],[4,5,6],[7,8,9]])
>>> whos
Variable
        Type Data/Info
         ndarray 3x3: 9 elems, type 'int64', 72 bytes
>>> A
array([[1, 2, 3],
       [4, 5, 6],
       [7, 8, 9]])
>>> A.size
>>> A.shape
(3.3)
>>> B = array([[1,0,0],[0,1,0],[0,0,1]])
>>> A*B
array([[ 1., 0., 0.],
       [ 0., 5., 0.],
```

Tableaux ND et fonctions associées

- Méthodes
 - nonzero, max, min, mean, std ...
 - ▶ sum, cumprod, cumsum ...
 - reshape, resize, flatten, transpose ...
- Fonctions
 - * : produit élt./élt.
 - dot(.,.): produit matriciel
 - **•** ...

NDarray vs. matrix

```
>>> A = array([[1.,2,3],[4,5,6],[7,8,9]])
>>> B = array([[1,0,0],[0,1,0],[0,0,1]])
>>> C = matrix([[1.,2,3],[4,5,6],[7,8,9]])
>>> D = matrix([[1,0,0],[0,1,0],[0,0,1]])
>>> whos
Variable Type
                   Data/Info
          ndarray 3x3: 9 elems, type 'float64', 72 bytes
B
C
          ndarray 3x3: 9 elems, type 'int64', 72 bytes
          matrix
                   [[ 1. 2. 3.]\n [ 4. 5. 6.]\n [ 7. 8. 9.]]
                    [[1 0 0]\n [0 1 0]\n [0 0 1]]
          matrix
>>> dot(A,B)
array([[ 1., 2., 3.],
      [4., 5., 6.],
      [7., 8., 9.]])
>>> C*D
matrix([[ 1., 2., 3.],
       [4., 5., 6.],
       [7., 8., 9.]])
```

matrix

- Méthodes
 - ▶ min, max, mean, std, ...
 - ▶ .T, .H, .I, ...
 - reshape, flatten, ...
- Fonctions
 - ▶ inv, svd, eig, ...

Différences entre array et matrix

NDarray vs. matrix

```
>>> A = array([[1.,2,3],[4,5,6],[7,8,9]])
>>> B = array([[1,0,0],[0,1,0],[0,0,1]])
>>> C = matrix([[1.,2,3],[4,5,6],[7,8,9]])
>>> D = matrix([[1,0,0],[0,1,0],[0,0,1]])
>>> whos
Variable Type
                   Data/Info
          ndarray 3x3: 9 elems, type 'float64', 72 bytes
B
C
          ndarray 3x3: 9 elems, type 'int64', 72 bytes
          matrix
                   [[ 1. 2. 3.]\n [ 4. 5. 6.]\n [ 7. 8. 9.]]
                    [[1 0 0]\n [0 1 0]\n [0 0 1]]
          matrix
>>> dot(A,B)
array([[ 1., 2., 3.],
      [4., 5., 6.],
      [7., 8., 9.]])
>>> C*D
matrix([[ 1., 2., 3.],
       [4., 5., 6.],
       [7., 8., 9.]])
```

matrix

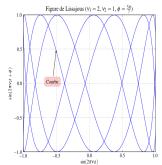
- Méthodes
 - ▶ min, max, mean, std, ...
 - ▶ .T, .H, .I, ...
 - reshape, flatten, ...
- Fonctions
 - ▶ inv, svd, eig, ...

Différences entre array et matrix

Matplotlib

Librairie graphique

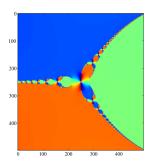
- Outils graphiques 2D
- ► Toolkits : Basemap, Axesgrid, mplot3d
- Beaucoup d'exemples : www.matplotlib.org



Matplotlib

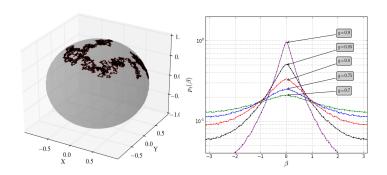
Exemples

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



${\sf Matplotlib}$

Exemples



Pylab

- Module de Matplotlib : matplotlib/pylab.py
- Redéfinit des fonctions à la Matlab.
- Raccourci : "import pylab" au lieu de "import matplotlib.pylab"
- En général, et exceptionnellement, s'utilise : "from pylab import *"

```
>>> from pylab import *
>>> plot([1, 5, 2, 4, 3])
[(matplotlib.lines.Line2D object at 0x4ec05b0>]
>>> show()
>>> a = randn(100, 10)
>>> type(a)
<type 'numpy.ndarray'>
>>> a.shape
(100, 10)
>>> help(matplotlib.pylab)
```

Scipy Scientific library

SciPy.org : http://www.scipy.org

Clustering package scipv.cluster Constants Discrete Fourier transforms scipy.fftpack Integration and ODEs Interpolation scipy.interpolate Input and output Linear algebra scipy.linalg Miscellaneous routines Multi-dimensional image proscipv.ndimage Orthogonal distance regrescessing sion Optimization and root findscipy.optimize Signal processing ing Sparse matrices Sparse linear algebra scipy.sparse Spatial algorithms and data Compressed Sparse Graph scipv.sparse.csgraph Routines structures Special functions scipy.special Statistical functions Statistical C/C++ integration functions for scipy.stats.mstats masked arrays

scipy.constants

scipy.integrate

scipy.io

scipy.misc

scipv.signal

scipy.spatial

scipy.stats

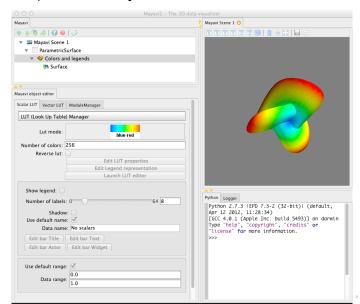
scipy.weave

scipy.sparse.linalg

scipv.odr

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)
```