第 5 次课 数组计算和曲线绘图 Python 科学计算

周吕文

宁波大学, 机械工程与力学学院

2024年9月1日





提要

- ① 向量和数组
- ② 绘制函数曲线
- ③ 制作动画
- 4 二维数组
- 5 常见的线性代数运算

向量

中学数学的概念

 \bullet (x,y) 表示平面上的一个点,(x,y,z) 表示立体空间的一个点。

向量的数学定义

• 数学上,向量就是一个 n 元组: $v=(v_0,\cdots,v_{n-1})$

计算机中的向量

- 向量可以使用列表(list)或数组(array)存储, v_i 存储为 v[i]。
- 数组 ≈ 列表, 但比列表更高效。因此, 应尽可能使用数组来表示向量。

周昌文 宁波大学

向量和数氮

2024年9月1日 3/45

2024 年 9 月 1 日 4 / 45

数组

- ullet 数组可以看做是向量的一般形式,可能会有多个索引: $A_{i,j}$, $A_{i,j,k}$
- 例如表格 (矩阵), 有行索引和列索引

$$\begin{bmatrix} 1 & 9 & 9 & 4 \\ 0 & 7 & 2 & 9 \\ 3 & 0 & 2 & 9 \\ 9 & 3 & 8 & 4 \end{bmatrix} \qquad A = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,n} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdots & A_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m,1} & A_{m,2} & \cdots & A_{m,n} \end{bmatrix}$$

- ullet 索引的数量是数组的维度,向量是一维数组,A 是二维数组
- 在 Python 中,使用 Numerical Python 数组替代嵌套的列表,更高效

Notes

Notes			

Notes

使用数组存储由曲线点坐标构成的列表

```
使用列表存储
>>> f = lambda x: x**3
>>> n = 5 # 点的个数
>>> dx = 1/(n-1) # 步长
>>> xlist = [i*dx for i in range(n)]
>>> ylist = [f(x) for x in xlist]
```

转为数组存储

```
>>> import numpy as np # 要使用数组, 需要载入 numpy 库
>>> x = np.array(xlist)
>>> y = np.array(ylist)
>>> x
array([0. , 0.25, 0.5 , 0.75, 1. ])
>>> y
array([0. , 0.015625, 0.125 , 0.421875, 1. ])
```

周昌文 宁波大学

向量和数组

2024年9月1日 5/45

直接使用数组

```
使用循环计算 y
>>> x = np.linspace(0, 1, n)
>>> y = np.zeros(n)
>>> for i in range(n):
... y[i] = f(x[i])
...
>>> x
array([0. , 0.25, 0.5 , 0.75, 1. ])
>>> y
array([0. , 0.015625, 0.125 , 0.421875, 1. ])
```

直接计算y

```
>>> y = f(x)
>>> y
array([0. , 0.015625, 0.125 , 0.421875, 1. ])
```

周召文 宁波大学

向量和数组

2024年9月1日 6/45

数组和列表的差别

- 列表可以包含任意类型的对象, 一个数组只能包含同一类型的对象
- 数组的维度和尺寸不可更改, 在创建时就必需确定
- 如果数组的元素类型是整数、浮点数或复数时,存储和计算非常高效
- 数组不是标准 Python 的一部分, 需要额外的库 numpy
- 使用 numpy 可直接对数组进行数学运算,避免循环,这称为向量化

数组在索引、切片、修改上与列表类似

```
>>> import numpy as np
                               >>> a[0]
>>> r = [1, 1.5, 2, 2.5]
                               1.0
>>> a = np.array(r)
                               >>> b = a[1:-1]
>>> a
                               >>> b
array([1. , 1.5, 2. , 2.5])
                               array([1.5, 2.])
>>> c = np.zeros_like(r)
                               >>> a[1] = 0.1
>>> c
                               >>> a
                               array([1. , 0.1, 2. , 2.5])
array([0., 0., 0., 0.])
```

可以一次性操作整个数组 → 向量化

使用列表和 math 库中函数

```
>>> from math import pi, sin
>>> x = [pi, pi/2, pi/3]; y = [1, 2, 3]
>>> [sin(xi) for xi in x]
[1.2246467991473532e-16, 1.0, 0.8660254037844386]
>>> [x[i] + y[i] for i in range(len(x))]
[4.141592653589793, 3.5707963267948966, 4.047197551196597]
```

使用 numpy 库及其函数:底层计算和循环使用 C 语言实现,更高效

```
>>> import numpy as np
>>> x = np.array(x); y = np.array(y)
>>> np.sin(x)
array([1.22464680e-16, 1.00000000e+00, 8.66025404e-01])
>>> x + y
array([4.14159265, 3.57079633, 4.04719755])
```

-		

Notes			

Notes		

Notes			

向量化:程序更短、可读性更好、运行更快,更接近数学

作用于单个数值的函数 f(x) 通常对适用于数组

```
>>> from numpy import sin, exp, linspace
>>> f = lambda x: x**3 + sin(x)*exp(-3*x)
>>> f(1.2)
1.7534667772949966
>>> x = linspace(0, 2, 3)
>>> f(x)
array([0. , 1.04189437, 8.00225392])
```

math 用于数值计算, numpy 用于数组计算

```
>>> import math, numpy
>>> x = numpy.linspace(0, 1, 3)
>>> math.sin(x[1]) # 注意, math.sin(x) 会报错
0.479425538604203
>>> numpy.sin(x)
array([0. , 0.47942554, 0.84147098])
```

周昌文 宁波夫学

向量和数组

2024年9月1日 10/45

数组运算被分解为一系列的单目/双目数组操作

考虑计算 y = f(x), 其中 $f(x) = x**3 + \sin(x)*\exp(-3)$

```
① r1 = x**3
for i in range(len(x)): r1[i] = x[i]**3
② r2 = sin(x)
③ r3 = -3*x
③ r4 = exp(r3)
③ r5 = r3*r4
④ r6 = r1 + r5
④ y = r6

① (由 C 语言实现)
```

注意

● 注意:数组运算的过程与在计算器上对单个数字 x 执行的操作相同

周吕文 宁波大学 向量和数组 2024年9月1日 11/-

例子: 曲线上的点坐标的向量化计算

$$f(x) = x^2 e^{-x/2} \sin\left(x - \frac{1}{3}\pi\right), \quad x \in [0, 4\pi]$$

```
計算函数 f(x) 曲线上 n+1 个点 vec_cmpt_xy.py
from numpy import *
n = 5
x = linspace(0, 4*pi, n+1)
y = x**2*exp(-x/2)*sin(x-pi/3)
print('x =' + ' '.join(['%7.4f'%i for i in x]))
print('y =' + ' '.join(['%7.4f'%i for i in y]))
>>>
x = 0.0000 2.5133 5.0265 7.5398 10.0531 12.5664
y =-0.0000 1.7879 -1.5209 0.2725 0.2697 -0.2554
```

Notes

Notes

Notes

- 标量: 一个数
- 向量或数组:数的序列(数学中的向量或矩阵)
- 标量计算:一次算一个数
- 向量计算:一次算一个数组,不使用 python 循环
- 向量化:将循环操作数组的算法转化为直接对整个数组进行操作的过程
- 在 Python 中,不含条件判断的数学函数可以自动处理标量和向量(数组)参数(即程序员无需手动进行向量化)

周昌文 宁波大学

向量和数组

2024年9月1日 13/45

例子: 阶跃函数的向量化

阶跃函数常用于工程和科学领域

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x \ge 0 \end{cases}$$

```
>>> def H(x):
...    return (0 if x < 0 else 1)
...
>>> H(1)
1
>>> x = np.linspace(-10, 10, 5)
>>> H(x)
Traceback (most recent call last):
   File "<stdin>", line 1, in <module>
   File "<stdin>", line 2, in H
ValueError: The truth value of an array with more than one el
```

ValueError: The truth value of an array with more than one element is ambiguous. Use a.any() or a.all()

周昌文 宁波夫学

向量和数组

2024年9月1日 14/45

例子: 阶跃函数的向量化

```
vectorize_heaviside_fun.py (接下页)
import numpy as np; from timeit import timeit

def H(x):
    return (0 if x < 0 else 1)

def H_loop(x): # 当 len(x) 很大时, 会很慢
    r = np.zeros_like(x, dtype=int)
    for i in range(len(x)):
        r[i] = H(x[i])
    return r

H_vec1 = np.vectorize(H) # 当 len(x) 很大时, 也很慢

def H_vec2(x):
    return np.where(x < 0, 0.0, 1.0)</pre>
```

例子: 阶跃函数的向量化

vectorize_heaviside_fun.py (接上页) x = np.linspace(-100, 100, 201) t1 = timeit('y = H_loop(x)', globals=globals(), number=100) t2 = timeit('y = H_vec1(x)', globals=globals(), number=100) t3 = timeit('y = H_vec2(x)', globals=globals(), number=100) print('loop: %2.4f, vec1: %2.4f, vec2: %2.4f' % (t1,t2,t3)) >>> loop: 0.0043, vec1: 0.0028, vec2: 0.0003

含判断的一般向量化方法

Note	

Notes

数组赋值不是数组元素的拷贝:避免修改可以使用拷贝

```
>>> import numpy as np
>>> x = np.array([1, 3, 2, 4, 6])
>>> x
array([1, 3, 2, 4, 6])
                            >>> a = x[2:] # 切片不同于列表
>>> a = x
           #与列表相似
                            >>> a[-1] = 0
>>> a[-1] = 9
                             >>> x
>>> x
array([1, 3, 2, 4, 9])
                            array([1, 3, 2, 4, 0])
>>> b = x.copy()
                            >>> b = x[2:].copy()
>>> b[0] = 7
                            >>> b[-1] = 8
>>> b
                             >>> b
array([7, 3, 2, 4, 9])
                            array([2, 4, 8])
                             array([1, 3, 2, 4, 0])
array([1, 3, 2, 4, 9])
```

确保某个对象是数组(如果不是,把它变成数组)

```
>>> c = np.asarray(x, dtype=float)
>>> c
array([1, 0.])
>>> type(x)
<class 'numpy.ndarray'>
>>> isinstance(x, np.ndarray)
True
```

周昌文 宁波夫学

向量和数组

2024年9月1日 18/45

例子: 常函数的向量化

```
vectorize_constant_fun.py
import numpy as np

def fs(x): return 2

def fv(x): return np.zeros(x.shape, x.dtype) + 2

def f(x):
    if isinstance(x, (float, int)): return fs(x)
    elif isinstance(x, np.ndarray): return fv(x)
    else: raise TypeError('x 必需数字或数组')

print(fs(12))
print(fv(np.array([1,2,3])))
print(f(12))
print(f(np.array([1,2,3])))
```

数组下标的批量操作

```
>>> a = linspace(1,7,7)
>>> a
array([1., 2., 3., 4., 5., 6., 7.])
>>> a[[1,3,5]]
array([2., 4., 6.])
>>> a[[1,3,5]] = 10
>>> a
array([ 1., 10., 3., 10., 5., 10., 7.])
>>> a[2:6:2] #等价于 a[range(2,6,2)]
array([3., 5.])
>>> a[2:6:2] = -2 #等价于 a[range(2,6,2)] = -2
>>> a
array([ 1., 10., -2., 10., -2., 10., 7.])
```

-	Notes
-	
-	

Notes

Notes			

Notes		

使用布尔表达式作为数组下标

```
>>> a
array([ 1., 10., -2., 10., -2., 10., 7.])
>>> b = a<0
>>> b
array([False, False, True, False, True, False, False])
>>> a[b]
array([-2., -2.])
>>> a[a<0]
array([-2., -2.])
>>> a[a<0] = a.max()
>>> a
array([ 1., 10., 10., 10., 10., 7.])
```

周吕文 宁波夫学 向董和数组

数组的一些方法和函数

array(ld)	将列表 1d 的数据复制建立 numpy 数组
asarray(d)	使用 d 创建数组,如果 d 是数组,则不拷贝
zeros(n), zeros(n, int)	创建包含 n 个浮点、整数 0 的数组
zeros((m,n))	创建 m×n 的 0 数组
zeros_like(x)	创建数组, 维度和数据都和 x 一样
linspace(a,b,m)	返回从 a 到 b (含)的 m 个等间距样本的数组
arange(a,b,d)	返回从 a 到 b (不含) 固定步长 d 的排列数组
len(a), a.shape, a.dtype	数组 a 的长度、维度(元组)、元素类型
a.reshape(3,2)	将 a 中的数据组织成 3×2 的数组
a[i]	访问序号为 i 的元素
a[i,j]	二维数组元素的访问
a[1:8:3]	切片: 1,4,7
b = a.copy()	数组拷贝
sin(a), exp(a),	可作用于数组的 numpy 函数
<pre>c = concatenate((a, b))</pre>	连接 a 和 b,赋值给 c
c_[a,b] \ r_[a,b]	按列或行增加拼接两个数组 a 和 b
c = where(cond, a1, a2)	<pre>c[i] = a1[i] if cond[i] else a2[i]</pre>
isinstance(a, ndarray)	如果 a 是 numpy 数组,则返回真

课堂练习

1数组切片

文件名: array_slicing.py

- 创建一个值为 0, 0.1, 0.2, ···, 1.5 的数组 w。
- 打印出 w[:]、w[:-2]、w[::5]、w[2:-2:3],并确保搞清楚输出的每种切片的具体含意。

2 填充数组

文件名: fill_arrays.py

在区间 [-4,4] 上等间隔地取 11 个坐标值,存储在数组 x 中。根据下式

$$h(x) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

计算相应的 h(x) 存储在数组 y 中。使用以下两种方式实现以上操作:

- 使用 for 循环计算 x 和 y 数组的每一个元素。
- 使用 Numpy 包中的 linspace 函数产生 x, y 则使用向量参数 x 计算。

周昌文 宁波大学

向量和数组

2024年9月1日 23/45

- ① 向量和数组
- ② 绘制函数曲线
- ③ 制作动画
- 4 二维数组
- 5 常见的线性代数运算

Notes

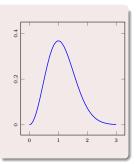
Notes		

Notes			

绘制曲线图

pyplot_basic.py import numpy as np import matplotlib.pyplot as plt t = np.linspace(0, 3, 51) y = t**2*np.exp(-t**2) plt.plot(t, y) # 可保成图像为指定格式 plt.savefig('fig.pdf') plt.savefig('fig.png') plt.savefig('fig.eps')

$y(t) = t^2 e^{-t^2}$



plt.show()

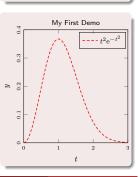
绘制函数曲线

2024年9月1日 25/4

Notes

装饰图形

$$y(t) = t^2 e^{-t^2}$$

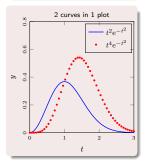


Notes

在一个图中画多条曲线

$$y_1 = f(t) = t^2 e^{-t^2}$$

 $y_2 = h(t) = t^4 e^{-t^2}$

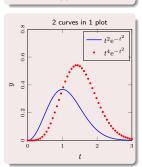


Notes

一条 plot 命令同时画两条曲线

$$y_1 = f(t) = t^2 e^{-t^2}$$

 $y_2 = h(t) = t^4 e^{-t^2}$



3 绘制公式

文件名: plot_ball.py

Notes

绘制函数图像:

$$y(t) = v_0 t - \frac{1}{2}gt^2, \quad g = 9.8, \quad t \in [0, 2v_0/g]$$

具体要求如下:

- 编写带参数的函数实现上式,并使用数组向量化计算曲线上的点坐标。
- 用不同的颜色分别绘制 $v_0 = 10$ 和 $v_0 = 12$ 的两条曲线。
- 为两条曲线添加相应的图例。
- 将坐标轴标签设置为 "time (s)" 和 "height (m)"。
- 将坐标轴的显示范围调整到合适的区间。
- 添加图名为 "Position of the ball"。

提要

- 1 向量和数组
- ② 绘制函数曲线
- ③ 制作动画
- 4 二维数组
- 5 常见的线性代数运算

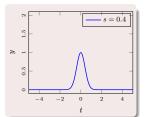
制作动画

高斯/贝尔函数:m对称轴,s函数的宽度

$$f(x, m, s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - m}{s} \right)^2 \right]$$

动画是由一组图像构成

- 目的: 制作动画, 演示当 s 变小时, 函数 f 的变化
- 方法: 绘制 s 取不同值时的一组图像
- 实现: s 从 2 循环到 0.2, 为每个值 绘制一幅图像, 组合起来就是动画
- 注意: 坐标轴范围不要变, 否则会 有影响效果



制作动画:生成每一帧图像

movie_mpl.py import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt def f(x, s, m=0): return 1/(2*np.pi)**0.5/s * np.exp(-1/2*((x-m)/s)**2)S = np.linspace(2, 0.2, 31)x = np.linspace(-5, 5, 1000)lines = plt.plot(x, f(x,2))plt.axis([-5, 5, -0.1, 2.1]) for i, s in enumerate(S): lines[0].set_ydata(f(x,s)) # $set_data(x, f(x,s))$ plt.legend(['s = %4.2f' % s]) plt.savefig('tmp_%04d.png' % i) plt.pause(0.1)

Notes

Notes

制作动画:将一组图像组合起来就是动画

Windows 系统:使用系统自带的 Movie Maker

- 导入所有图片(Home Add Videos and Photos)
- 设置每个图片的播放时间,如 0.3 秒(Edit Duration)
- 存储动画文件(File Save Movie For computer)

Linux 系统: 使用 convert 和 ffmpeg 命令 nbu@ubuntu:~# convert -delay 20 tmp_*.png movie.gif nbu@ubuntu:~# ffmpeg -framerate 5 -i tmp_%4d.png movie.mp4

在线工具: ezgif.com/maker

- 上传所有图片 (Upload images Choose Files Upload files!)
- 设置每个图片的播放时间(Delay time)
- 生成动画文件(Make a GIF!)

周昌文 宁波大学

3024 年 9 月

制作动画:另一种方法 - 使用 FuncAnimation

```
movie_FuncAnimation.py
import matplotlib.animation as animation
fig = plt.figure()
lines = plt.plot(x, f(x,2))
plt.axis([-5, 5, -0.1, 2.1])

def frame(args): # 返回初画中的一帧图像
    i, s, x, lines = args
    y = f(x, s)
    lines[0].set_data(x, y)
    return lines

args = [(i, s, x, lines) for i, s in enumerate(S)]
m = animation.FuncAnimation(fig, frame, args, interval=150)
m.save('movie.gif', fps=5)
plt.show()
```

提要

- 1 向量和数组
- ② 绘制函数曲线
- ③ 制作动画
- 4 二维数组
- 5 常见的线性代数运算

二维数组的表示

周昌文 宁波大学

Notes

Notes			

Notes			

将嵌套列表转换为二维数组

```
      获 至列表

      >>> Cdegrees = [-30 + i*10 for i in range(3)]

      >>> Fdegrees = [9/5*C + 32 for C in Cdegrees]

      >>> table = [[C, F] for C, F in zip(Cdegrees, Fdegrees)]

      >>> print(table)

      [[-30, -22.0], [-20, -4.0], [-10, 14.0]]
```

```
= 维数组
>>> arr2d = np.array(table)
>>> print(arr2d)
[[-30. -22.]
[-20. -4.]
[-10. 14.]]
>>> arr2d.shape
(3, 2)
```

周昌文 宁波大学

二维数组

2024年9月1日 37/45

循环遍历二维数组

```
>>> for i in range(arr2d.shape[0]): # 使用二重循环
... for j in range(arr2d.shape[1]):
... print('arr2d[%d,%d] = %g' % (i, j, arr2d[i,j]))
...
arr2d[0,0] = -30
...
arr2d[2,1] = 14
```

```
>>> for i, value in np.ndenumerate(arr2d): # 使用单重循环
... print(' 索引 %s 值为 %g' % (i, value))
...
索引 (0, 0) 值为 -30
...
索引 (2, 1) 值为 14
```

获取二维数组的切片:对每一维分别使用 start:stop:inc

课堂练习

4 绘制双列文件中的数值

文件名: read_2cols.py

文件 xy. dat 包含两列数据,对应曲线的 x、y 从标。编写程序,用以下两种方式将数据读入二维数组,并绘制相应的图像:

- 使用之前学过方式的读取文件。
- 函数 numpy.loadtxt 可读取表格数据文件,并返回二维数组。

5 用多项式拟合数据

文件名: density_air_polyfit.py

文件 density_water.dat 包含水的温度和密度,请根据以下找到水的密度 与温度的简单数学多项式关系:

• Numpy 中的函数 polyfit(x, y, n) 可以找到阶数为 n 的多项式

$$y = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_{n-1} x + a_n$$

最大程度(最小二乘)地拟合数组 x 和 y 中的数据。

• y = polyval(a, x)则可以根据多项式系数 a 和数组 x 求相应的 y。

Notes

Notes

Notes

-			
-			
_			

提要	Notes
① 向量和数组	
2 绘制函数曲线	
③ 制作动画	
4 二维数组	
5 常见的线性代数运算	
逆、行列式和特征值	Notes
>>> import numpy as np >>> A = np.array([[2, 0], [0, 5]], dtype=float)	
>>> np.linalg.inv(A) # 逆矩阵 array([[0.5, 0.], [0., 0.2]])	
>>> np.linalg.det(A) # 行列式	
9.99999999999998 >>> eig_vals, eig_vecs = np.linalg.eig(A) # 特征值和特征向量	
>>> eig_vals, eig_vecs = ip.imaig.eig(n) # गुग्नाह्मणगुग्नाण # >>> eig_vals array([2., 5.])	
>>> eig_vecs array([[1., 0.],	
「	
乘积和范数	Notes
>>> a = np.array([4, 0])	
>>> b = np.array([0, 1]) >>> np.dot(A, a) # 矩阵点积向量	
array([8., 0.]) >>> np.dot(a, b) # 向量点积向量	
0 >>> B = np.ones((2, 2))	
>>> np.dot(A, B) # 矩阵点积矩阵 array([[2., 2.],	
[5., 5.]])	
>>> np.linalg.norm(A) # 范数 5.385164807134504	
周吕文 宁波大学 常见的线性代数运算 2024 年 9 月 1 日 43/45	
	Notes
求和与极值	Notes
	Notes
求和与极值 >>> B = np.array([[1, 2], [3, -4]]) >>> np.sum(B) # 求和,等价于 B.sum() 2 >>> np.sum(B, axis=0) # 沿着第 0 维索(行)引求和 array([4, -2])	Notes
求和与极值 >>> B = np.array([[1, 2], [3, -4]]) >>> np.sum(B) # 求和,等价于 B.sum() 2 >>> np.sum(B, axis=0) # 沿着第 0 维索(行) 引求和	Notes
求和与极值 >>> B = np.array([[1, 2], [3, -4]]) >>> np.sum(B) #求和,等价于 B.sum() 2 >>> np.sum(B, axis=0) #沿着第 0 维索(行) 引求和 array([4, -2]) >>> np.sum(B, axis=1) #沿着第 1 维索(列) 引求和 array([3, -1]) >>> np.max(B) #最大值,等价于 B.max() 3	Notes
求和与权值 >>> B = np.array([[1, 2], [3, -4]]) >>> np.sum(B) #求和,等价于 B.sum() 2 >>> np.sum(B, axis=0) #沿着第 0 维索(行) 引求和array([4, -2]) >>> np.sum(B, axis=1) #沿着第 1 维索(列) 引求和array([3, -1]) >>> np.max(B) #最大值,等价于 B.max()	Notes

>>> np.min(B, axis=1) # 沿着第 1 维索 (列) 引最小值 array([1, -4])

课堂练习

6 验证线性代数结果

文件名: verify_linalg.py

生成三个 $n \times n$ 的随机矩阵 $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ 和 \mathbf{C} ,然后验证以下线性代数等式:

- $\bullet (\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{C} + \mathbf{B}\mathbf{C}$
- $\bullet \ (AB)C = A(BC)$
- $\bullet \ \det(AB) = \det\! A \det\! B$

7 求解线性方程组

文件名: linear_eqs.py

用 numpy 库中矩阵求逆的方式求解以下线性方程组:

$$\begin{cases} x + y + z = 6 \\ 2y + 5z = -4 \\ 2x + 5y - z = 27 \end{cases}$$

周昌文 宁波大学

か S AA SE JA JE SE 25 質

2024 % 0 8 1 11 45 /45

The End!

Notes		
N		
Notes		
Notes		