



Département Informatique & Mathématiques Appliquées

Le numérique avec Python : NumPy, SciPy et matplotlib

J. Gergaud

28 avril 2014

Table des matières

1	NumPy : Création et manipulation de données numériques	1
I	Introduction	1
I.1	Pourquoi NumPy	1
I.2	Documentation	1
II	Type <code>ndarray</code>	1
II.1	Création	1
III	Opérations	4
III.1	Quelques opérations simples	4
III.2	Indices, extraction de sous matrice	4
III.3	Broadcasting	5
IV	Matrices	7
2	matplotlib	9
I	Premiers graphiques	9
3	SciPy	13
.1	Algèbre linéaire	13

Chapitre 1

NumPy : Création et manipulation de données numériques

I Introduction

I.1 Pourquoi NumPy

- Librairie pour les tableaux multidimensionnels, en particulier les matrices ;
- implémentation proche du hardware, et donc beaucoup plus efficace pour les calculs ;
- prévu pour le calcul scientifique.

I.2 Documentation

La documentation accessible sur le web est importante. Pour débiter avec NumPy, on peut citer la page web[1] et le document pdf[3]. Pour aller plus loin, il y a le Numpy User Guide réalisé par la communauté NumPy [2] et bien sûr la documentation officielle que l'on trouvera à la page <http://docs.scipy.org/doc/>

II Type ndarray

II.1 Création

NumPy définit de nouveaux types, en particulier le type `ndarray`.

Définition II.1 *Le type array est un tableau multidimensionnel dont tous les éléments sont de même type (en général ce sont des nombres). Les éléments sont indicés par un **T-uple** d'entiers positifs. Dans NumPy les dimensions s'appellent **axes** et le nombre de dimensions **rank**.*

```
>>> a = >>>
>>> import numpy as np
>>> A = np.array([[1, 2, 3], [4, 5, 6]]) # création à partir d'une liste
>>> A
array([[1, 2, 3],
       [4, 5, 6]])
>>> A.ndim # tableau à 2 dimensions
2
>>> A.shape # 2 lignes et 3 colonnes
(2, 3)
>>> A.dtype # tableau d'entiers
dtype('int64')
>>> A = np.array([[1, 2, .3], [4, 5, 6]]) # tableau de flottants car une
>>> A.dtype # valeur est de type float
dtype('float64')
>>>
```

Remarque II.2

Les types de bases sont plus complets. On peut par exemple avoir des entiers codés sur 8, 16 ou 32 bits au lieu de 64 bits. Mais, il faut faire attention (cf. encadré ci-après). Nous n'utiliserons ici que les valeurs par défauts et renvoyons à la documentation[2] pour plus de détails.

```
>>> import numpy as np
>>> A = np.array([1,1], dtype = np.int8)           # tableau d'entiers 8 bits
>>> A[0] = 127                                     # 127 = 01111111 en base 2
>>> A
array([127,    1], dtype=int8)
>>> A.dtype
dtype('int8')
>>> A[0] = A[0] + 1
>>> A
array([-128,    1], dtype=int8)
>>> A = np.array([1,1], dtype = int)               # tableau d'entiers
>>> A.dtype
dtype('int64')
>>> A[0] = 9223372036854775807                       # valeur maximum sur 64 bits
>>> A
array([9223372036854775807,    1])
>>> A[0] = A[0] + 1
__main__ :1 : RuntimeWarning : overflow encountered in long_scalars
```

For example, the coordinates of a point in 3D space $[1, 2, 1]$ is an array of rank 1, because it has one axis. That axis has a length of 3. In example pictured below, the array has rank 2 (it is 2-dimensional). The first dimension (axis) has a length of 2, the second dimension has a length of 3.

```
# -*- coding : utf-8 -*-
# import numpy as np
from math import pi, cos
x = pi
print("x =", x)
# print("math.pi", math.pi)           # math non connu
print("cos(pi) =", cos(pi))
# print("sin(pi) =", sin(pi))          # sin non connu par non importé
# print("sin(pi) =", math.sin(pi))     # math non connu
import math
print("sin(pi) =", math.sin(pi))       # appel de la fonction sin du
    module math

import numpy as np
print("np.pi =", np.pi)
import numpy
print("numpy.pi =", numpy.pi)           # numpy et np sont définis, mais si
    on ne met pas la ligne précédente
                                         # numpy n'est pas connu
```

En pratique, on crée rarement des tableaux à la main

```
>>> a = np.arange(10)                     # 0, 1, ... n-1
>>> a
array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])
>>> b = np.arange(1, 9, 2)
>>> b
array([1, 3, 5, 7])
>>> c = np.linspace(0, 1, 6)              # start, end, nombre de point
>>> c
array([ 0. ,  0.2,  0.4,  0.6,  0.8,  1. ])
>>> c = np.linspace(0, 1, 5, endpoint=False) # start, end, nombre de
    point
```

```

>>> c
array([ 0. ,  0.2,  0.4,  0.6,  0.8])
>>> a = np.ones((2,3))                # float par défaut
>>> a
array([[ 1.,  1.,  1.],
       [ 1.,  1.,  1.]])
>>> b = np.zeros((3,2))               # float par défaut
>>> b
array([[ 0.,  0.],
       [ 0.,  0.],
       [ 0.,  0.]])
>>> c = np.eye(3)                    # float par défaut
>>> c
array([[ 1.,  0.,  0.],
       [ 0.,  1.,  0.],
       [ 0.,  0.,  1.]])
>>> d = np.diag(np.array([1, 2, 3, 4]))
>>> d
array([[1, 0, 0, 0],
       [0, 2, 0, 0],
       [0, 0, 3, 0],
       [0, 0, 0, 4]])
>>> e = np.diag(d)
>>> e
array([1, 2, 3, 4])

```

Un premier graphique

```

>>> x = linspace(1, 3, 20)
>>> y = linspace(0, 9, 20)
>>> import matplotlib.pyplot as plt
>>> plt.plot(x,y)                    # on trace la droite
[<matplotlib.lines.Line2D object at 0x1191d08d0>]
>>> plt.plot(x,y,'o')                # on trace les point
[<matplotlib.lines.Line2D object at 0x106224ed0>]
>>> plt.show()                       # pour voir

```

On obtient alors la figure 3.1

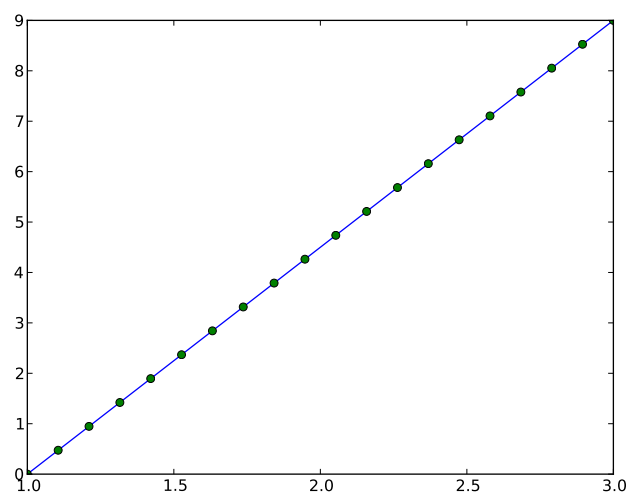


FIGURE 1.1 – *Notre première figure.*

III Opérations

III.1 Quelques opérations simples

<code>+, -, *, /, **</code>	opération termes à termes
<code>numpy.dot(a, b)</code>	multiplication matricielle
<code>numpy.cos(a), numpy.exp(a), ...</code>	opération termes à termes
<code>a.T</code> ou <code>a.transpose()</code>	transposition
<code>a.trace()</code> ou <code>np.trace(a)</code>	trace de a
<code>a.min(), a.sum, ...</code>	minimum, somme des éléments de a

```
>>> a
array([[1, 2, 3],
       [4, 5, 6]])
>>> a = np.array([[1, 2, 3], [4, 5, 6]])
>>> a > 2                                # c'est toujours termes à termes
array([[False, False,  True],
       [ True,  True,  True]], dtype=bool)
>>>
```

III.2 Indices, extraction de sous matrice

```
>>> a = np.arange(10)
>>> b = a[[2, 4, 2]]                      # [2, 4, 2] est une liste python
>>> b
array([2, 4, 2])
>>> a[[9, 2]] = -10
>>> a
array([ 0,  1, -10,  3,  4,  5,  6,  7,  8, -10])
```

```
>>> a = np.arange(12).reshape((4,3))
>>> a
array([[ 0,  1,  2],
       [ 3,  4,  5],
       [ 6,  7,  8],
       [ 9, 10, 11]])
>>> b = a.T
>>> b
array([[ 0,  3,  6,  9],
       [ 1,  4,  7, 10],
       [ 2,  5,  8, 11]])
>>> c = a[:2, :]
>>> c
array([[0, 1, 2],
       [6, 7, 8]])
>>> c[0,1] = 10
>>> c
array([[ 0, 10,  2],
       [ 6,  7,  8]])
>>> a                                # c'est toujours du python!
array([[ 0, 10,  2],
       [ 3,  4,  5],
       [ 6,  7,  8],
       [ 9, 10, 11]])
>>> b
array([[ 0,  3,  6,  9],
       [10,  4,  7, 10],
```

```
[ 2,  5,  8, 11]])
>>>
```

Pour vraiment copier, il faut utiliser la méthode `copy`

```
>>> a = np.arange(10)
>>> b = a[:2].copy()
>>> b[0] = 12
>>> b
array([12,  2,  4,  6,  8])
>>> a
array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9])
```

```
>>> a
array([[2, 3, 4],
       [4, 5, 6]])
>>> i = np.nonzero(a > 3)
>>> i                                     # i est un tuple qui contient les
                                         indices des valeurs recherchées
(array([0, 1, 1, 1]), array([2, 0, 1, 2]))
>>> b = a[i]
>>> b
array([4, 4, 5, 6])
>>> a[i] = 0
>>> a
array([[2, 3, 0],
       [0, 0, 0]])
>>>
```

```
>>> np.concatenate((a,np.eye(3)))      # concaténation
array([[ 2.,  3.,  0.],
       [ 0.,  0.,  0.],
       [ 1.,  0.,  0.],
       [ 0.,  1.,  0.],
       [ 0.,  0.,  1.]])
>>> np.concatenate((a,np.eye(2)),1)
array([[ 2.,  3.,  0.,  1.,  0.],
       [ 0.,  0.,  0.,  0.,  1.]])
```

III.3 Broadcasting

Attention lorsque l'on a des dimensions différentes !

```
>>> import numpy as np
>>> x = np.arange(4)
>>> x
array([0, 1, 2, 3])
>>> x.ndim
1
>>> x.shape
(4,)
>>> xx = x.reshape(4,1)
>>> xx
array([[0],
       [1],
       [2],
       [3]])
>>> xx.ndim
2
>>> xx.shape
```

```

(4, 1)
>>> xxx = x.reshape(1,4)
>>> xxx
array([[0, 1, 2, 3]])
>>> xxx.ndim
2
>>> xxx.shape
(1, 4)
>>> y = np.ones(5)
>>> y.shape
(5,)
>>> z = np.ones((3, 4))
>>> z.shape
(3, 4)
>>> x + y                                # plante car deux arrays de dimension 1 de longueurs
différentes
Traceback (most recent call last):
  File "<stdin>", line 1, in <module>
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (4) (5)
>>> xx
array([[0],
       [1],
       [2],
       [3]])
>>> y
array([ 1.,  1.,  1.,  1.,  1.])      # Surprise!
>>> (xx + y).shape
(4, 5)
>>> xx - y
array([[ -1.,  -1.,  -1.,  -1.,  -1.],
       [  0.,   0.,   0.,   0.,   0.],
       [  1.,   1.,   1.,   1.,   1.],
       [  2.,   2.,   2.,   2.,   2.]])
>>> (x + z).shape
(3, 4)
>>> x + z
array([[ 1.,  2.,  3.,  4.],
       [ 1.,  2.,  3.,  4.],
       [ 1.,  2.,  3.,  4.]])
>>> X = np.array([[0., 1, 2], [0, 1, 2], [0, 1, 2],[0, 1, 2]])
>>> x = np.zeros((2,3))
>>> X
array([[ 0.,  1.,  2.],
       [ 0.,  1.,  2.],
       [ 0.,  1.,  2.],
       [ 0.,  1.,  2.]])
>>> x
array([[ 0.,  0.,  0.],
       [ 0.,  0.,  0.]])
>>> X + x                                # plante car 2 arrays à 2 dimensions de
nombre de lignes et colonnes différentes
Traceback (most recent call last):
  File "<stdin>", line 1, in <module>
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (4,3) (2,3)
>>>

```

Et si on extrait une colonne!

```

>>> X = np.array([[1, 2, 3, 4], [1, 2, 3, 4], [1, 2, 3, 4]])
>>> X
array([[1, 2, 3, 4],

```



```

        [1, 2, 3, 4],
        [1, 2, 3, 4]])
>>> y = X[:,1]
>>> y
array([2, 2, 2])
>>> y.ndim
1
>>> y.shape
(3,)
>>> z = X[:,1:2]
>>> z                                     # z est un array à 2 dimension et y un array à 1
                                     dimension !
array([[2],
       [2],
       [2]])
>>> z.ndim
2
>>> z.shape
(3, 1)
>>> y - z
array([[0, 0, 0],
       [0, 0, 0],
       [0, 0, 0]])
>>>

```

IV Matrices

Il existe aussi un type matrice qui a toujours 2 dimensions

```

A = np.matrix([[1, 2, 3, 4], [5, 6, 7, 8]])
>>> A
matrix([[1, 2, 3, 4],
        [5, 6, 7, 8]])
>>> b = np.matrix([1, 1, 1, 1])
>>> b.ndim                                     # une matrice a toujours 2
                                     dimensions
2
>>> A.ndim
2
>>> A.shape
(2, 4)
>>> b.shape
(1, 4)
>>> A*b                                     # * est la multiplication
                                     matricielle sur les matrices
Traceback (most recent call last):
  File "<stdin>", line 1, in <module>
  File "/Users/gergaud/.pythonbrew/pythons/Python-3.2/lib/python3.2/site-
    packages/numpy/matrixlib/defmatrix.py", line 330, in __mul__
    return N.dot(self, asmatrix(other))
ValueError: objects are not aligned
>>> A*b.T
matrix([[10],
        [26]])
>>>

```


Chapitre 2

matplotlib

I Premiers graphiques

```
# -*- coding : utf-8 -*-
"""
Created on Sun Apr 21 15 :48 :30 2013

@author : gergaud
"""
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt          # 2D
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # 3D
# figure 1
plt.figure(1)
n = 256                                # nombre de valeurs
X = np.linspace(-np.pi, np.pi, n, endpoint=True) # n valeurs entre -pi et pi
C, S = np.cos(X), np.sin(X)
plt.plot(X, C, label="cosinus")
plt.plot(X, S, label="sinus")
#
# placement des axes
ax = plt.gca()
ax.spines['right'].set_color('none')    # suppression axe droit
ax.spines['top'].set_color('none')     # suppression axe haut
ax.xaxis.set_ticks_position('bottom')  # marqueurs en bas seulement
ax.spines['bottom'].set_position(('data',0)) # déplacement axe horizontal
ax.yaxis.set_ticks_position('left')    # marqueurs axe vertical
ax.spines['left'].set_position(('data',0))

#
# limites des axes
plt.xlim(X.min()*1.1, X.max()*1.1)
plt.ylim(C.min()*1.1, C.max()*1.1)

#
# bornes des axes
# avec LaTeX pour le rendu
plt.xticks([-np.pi, -np.pi/2, 0, np.pi/2, np.pi],
           [r'$-\pi$', r'$-\pi/2$', r'$0$', r'$\pi/2$', r'$\pi$'])
plt.yticks([-1, 0, 1])

# Affichage
plt.legend(loc='upper left')
plt.savefig('fig2_matplotlib.pdf')
```



```
ax.set_zlim3d(-1,1)
# barre verticale à droite
fig.colorbar(surf, shrink=0.5, aspect=10)
plt.savefig('fig5_matplotlib.pdf')

plt.show()
```

Ceci donne les figures

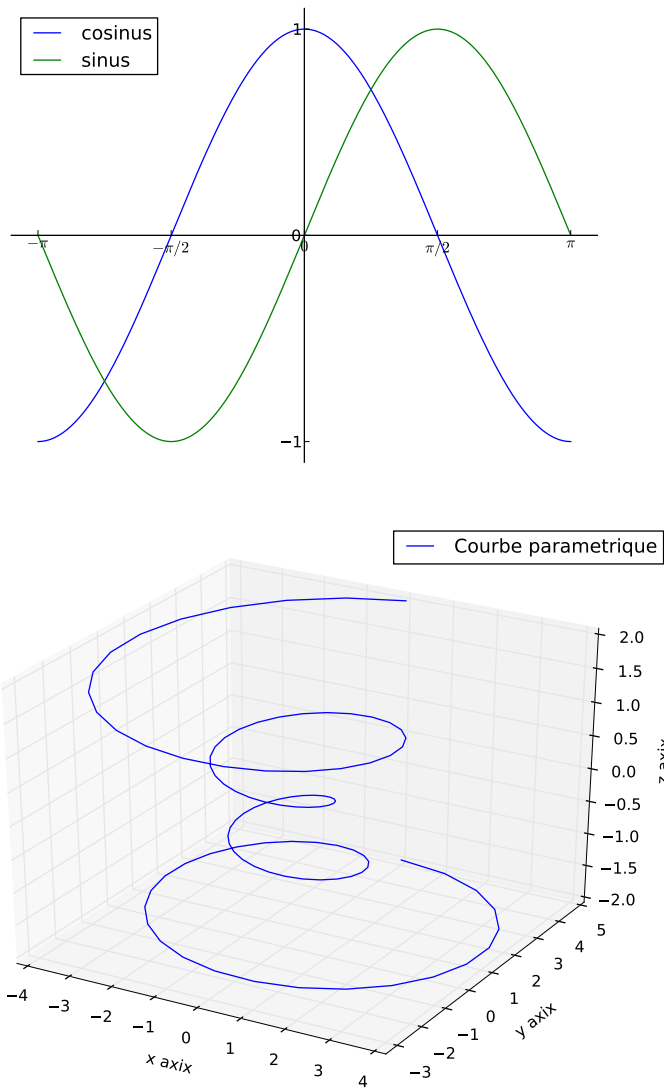


FIGURE 2.1 – *Premières figures.*

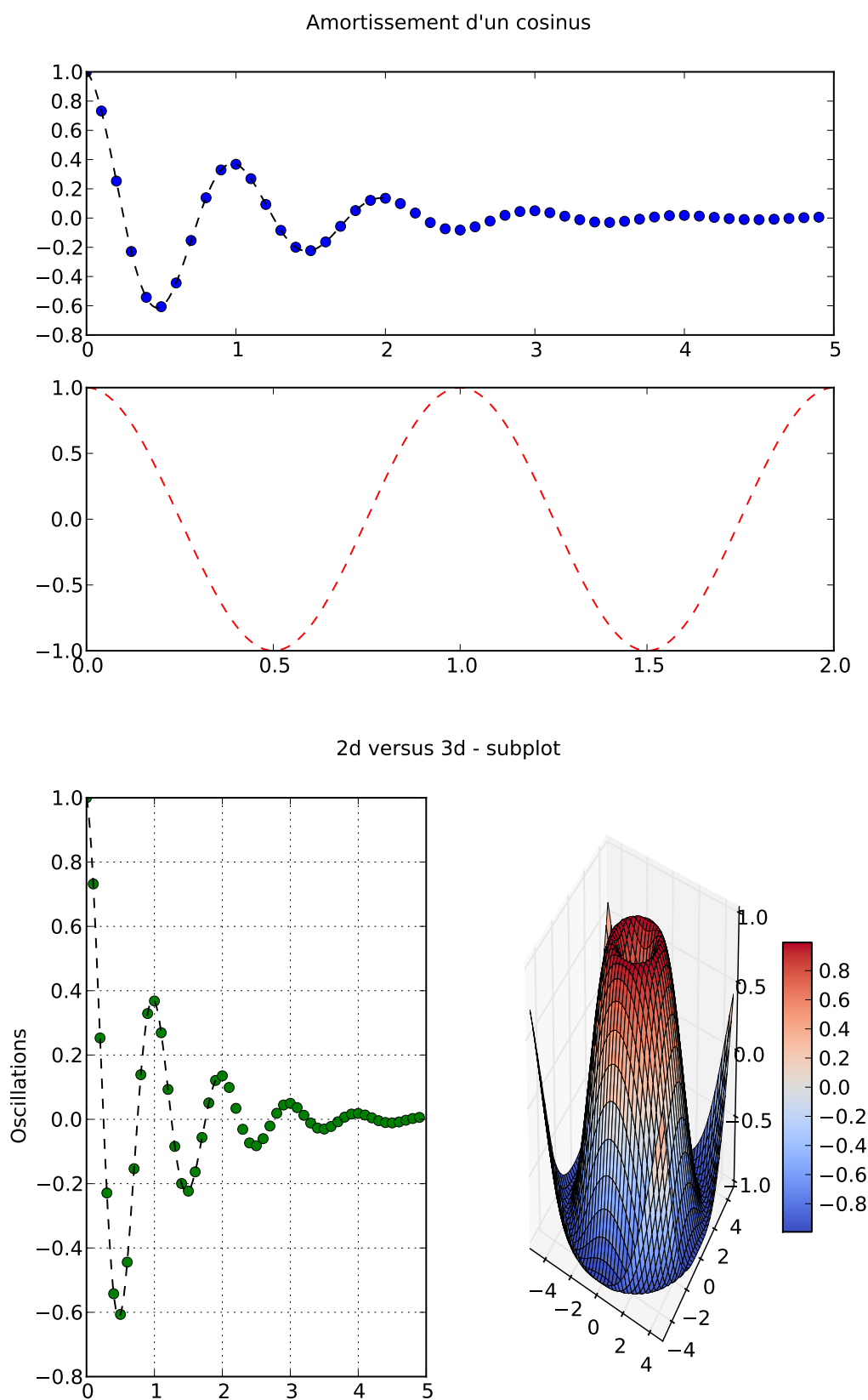


FIGURE 2.2 – Premières figures.

Chapitre 3

SciPy

.1 Algèbre linéaire

```
>>> from scipy import linalg
>>> A = np.random.rand(3,3)
>>> A
array([[ 0.00102176,  0.33477738,  0.79966335],
       [ 0.03907913,  0.50905322,  0.01842479],
       [ 0.47880221,  0.89798492,  0.32825253]])
>>> b = np.random.rand(3,1)
>>> b
array([[ 0.00188417],
       [ 0.89028083],
       [ 0.6127925 ]])
>>> x = linalg.solve(A, b)
>>> x
array([[ -1.76202966],
       [  1.91298333],
       [ -0.79625883]])
>>> np.dot(A,x) - b
array([[ 0.00000000e+00],
       [ 1.11022302e-16],
       [ 0.00000000e+00]])
```

<code>linalg.det(A)</code>	déterminant
<code>linalg.inv(A)</code>	inverse
<code>U, D, V = linalg.svd(A)</code>	décomposition en valeurs singulières
<code>norm(a[, ord])</code>	norme matricielle ou d'un vecteur
<code>lstsq(a, b[, cond, ...])</code>	Solution aux moindres carrés de $Ax = b$
<code>expm(A[, q])</code>	exponentielle de matrice utilisant approximant de padé

Voici un petit exemple de régression linéaire.¹ On désire prédire la hauteur (en feet) d'un arbre d'une essence donnée à partir de la connaissance de son diamètre à 1m30 (en inches). Pour cela on a collecté les données suivantes :

Diamètres	2.3	2.5	2.6	3.1	3.4	3.7	3.9	4.0	4.1	4.1
Hauteurs	7	8	4	4	6	6	12	8	5	7
Diamètres	4.2	4.4	4.7	5.1	5.5	5.8	6.2	6.9	6.9	7.3
Hauteurs	8	7	9	10	13	7	11	11	16	14

```
# -*- coding : utf-8 -*-
"""
Created on Sun Apr 21 22 :35 :37 2013

@author : gergaud
```

1. Données provenant de BRUCE et SCHUMACHER Forest mensuration - Mc Graw-Hill book company, ine - 1950 - 3e édition

```

Linear regression example
Donn\ees provenant de BRUCE\ et SCHUMACHER Forest mensuration - Mc
Graw-Hill book company, ine - 1950 - 3e \edition}On d\esire pr\edire la
hauteur (en feet) d'un arbre d'une essence donn\ee \a partir de la
connaissance de son diam\etre \a 1m30 (en inches). Pour cela on a
collect\e les donn\ees suivantes :
"""
import numpy as np
from scipy import linalg
import matplotlib.pyplot as plt

# Datas
y = np.array([7, 8, 4, 4, 6, 6, 12, 8, 5, 7, 8, 7, 9, 10, 13, 7, 11, 11, 16,
              14], dtype=float)
x = np.array([[2.3, 2.5, 2.6, 3.1, 3.4, 3.7, 3.9, 4, 4.1, 4.1, 4.2, 4.4, 4.7,
              5.1, 5.5, 5.8, 6.2, 6.9, 6.9, 7.3]]).T
n = y.size
print(x.shape,y.shape, np.ones((n,1)).shape)
X = np.concatenate((np.ones((n,1)),x),1)
print(X)
#beta, res, r, s = linalg.lstsq(X,y)
#print(beta, res, r, s)
beta = linalg.lstsq(X,y)      # renvoie une liste avec tous les paramètres en
                               sortie
print(beta[0][0],beta[0][1])
print("beta = ", beta)
beta2 = linalg.solve(np.dot(X.T,X),np.dot(X.T,y))
print("beta2 = ", beta2)

plt.figure()
plt.plot(x,y, 'bo')
xx = np.linspace(min(x),max(x),2)
yy = beta[0][0] + beta[0][1]*xx
plt.plot(xx,yy,label="rk42")

plt.xlabel('$x$')
plt.ylabel('$y$')
#plt.legend(loc='upper left')

print('fin du programme')

plt.savefig("fig1_scipy.pdf")
plt.show()

```

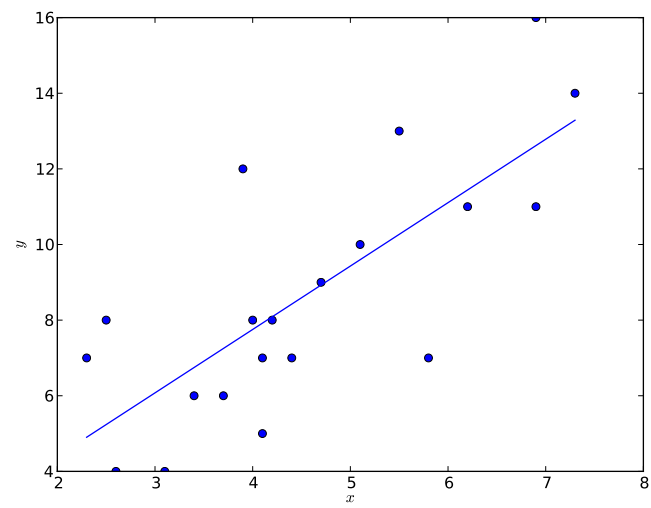



FIGURE 3.1 – *Exemple de régression linéaire.*

Bibliographie

- [1] Tentative numpy tutorial, document web, 2013. http://www.scipy.org/Tentative_NumPy_Tutorial.
- [2] NumPy community. Numpy user guide, release 1.8.0.dev-fd6f038, 2013. <http://docs.scipy.org/doc/numpy-dev/numpy-user.pdf>.
- [3] Valentin Haenel, Emmanuelle Gouillart, and Gaël Varoquaux editors. Python scientific lecture notes, release 2013.1. <http://scipy-lectures.github.com>, 2013.