Python para el cálculo científico

Daniel Lubián Arenillas

12 de febrero de 2018

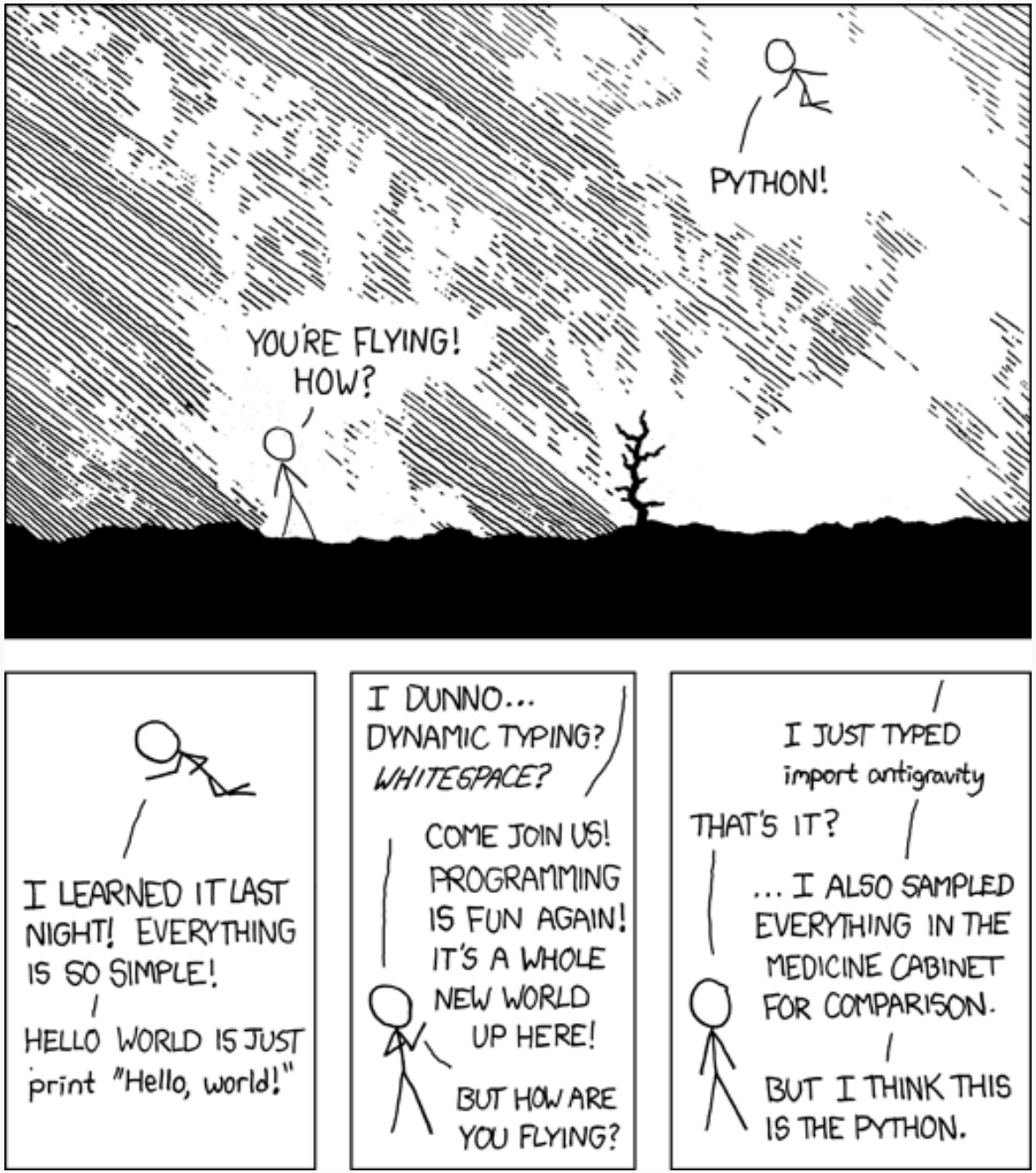
Hoy veremos

- Presentando Python
  - Librerías importantes
  - Programación orientada a objetos
- Sintaxis básica de Python
  - Sentencias de control
- Numpy: el `ndarray`
- Scipy
- Matplotlib.pyplot

Presentando Python

Presentando Python

- Creado por Guido van Rossum en 1991.
- Lenguaje de propósito general:
  - Cálculo científico
  - Desarrollo web
  - Administración de sistemas
  - GUIs
  - Inteligencia artificial
  - Todo es posible
- Lenguaje multiparadigma, permite programación estructurada, orientada a objetos, funcional,...
- Lenguaje interpretado, no compilado.

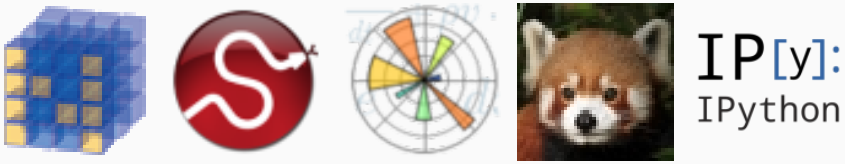

PYTHON!
YOU'RE FLYING! HOW?
I LEARNED IT LAST NIGHT! EVERYTHING IS SO SIMPLE!
HELLO WORLD IS JUST print "Hello, world!"
I DUNNO... DYNAMIC TYPING? WHITESPACE?
COME JOIN US! PROGRAMMING IS FUN AGAIN! IT'S A WHOLE NEW WORLD UP HERE!
BUT HOW ARE YOU FLYING?
I JUST TYPED import antigravity
THAT'S IT?
... I ALSO SAMPLED EVERYTHING IN THE MEDICINE CABINET FOR COMPARISON.
BUT I THINK THIS IS THE PYTHON.

Presentando Python

- Dos versiones: 2.7 y **3.6**
- Libre, abierto y gratuito, con una comunidad enorme $\rightarrow$ todo a golpe de Google.
- Mil y una librerías abiertas y gratuitas.
- Rápido y fácil de escribir, puede ser lento de ejecutar.

Para escribirlo: Spyder, cuadernos Jupyter, Pycharm, VS Code, Atom, Geany, Notepad++...

Librerías importantes



Numpy: cálculo numérico

Scipy: cálculo científico

Matplotlib: graficado

Pandas: análisis de datos

IPython: consola interactiva

Programación orientada a objetos

Un **objeto** tiene **métodos** (“funciones”) y **atributos** (“variables”) que lo constituyen.

- `A.shape`
- `z.conjugate()`
- `v.reshape((3,4))`

Todo Python trabaja con objetos[1]

[1] (hasta donde yo sé)

Sintaxis básica de Python

Tipos

Entero	`integer`	`1`
Con coma flotante	`float`	`1.`
Complejo	`complex`	`1. + 2j`
Booleano	`boolean`	`True`

División de enteros

```
1 print(3 / 2)
2 print(3 / 2.)
3 print(3.0 // 2)
4
5 ## SALIDA
6 # 1.5
7 # 1.5
8 # 1
```

Contenedores

Cadenas → `s = "perro"`

Listas → `l = [1, 'perro', True]`

Tuplas → `t = (1, 'perro', True)`

Diccionarios → `d = { '1': 2, 'el': 'perro'}`

Ojo: los índices van de `0` a `n-1`, como en C

- `s[0] = 'p'`
- `l[-1] = True`
- `t[3]` no existe
- `d['el'] = 'dog'`

Sentencias de control

Condición: `if-elif-else`

```
1 if 1 in x:
2         haz esto
3 elif 2 < 7 and 2 > 1:
4         haz esto otro
5 else:
6         o esto
```

Sentencias de control

Bucle: for

```
1  x = [2, "muse"]
2  n = 2
3
4  for i in range(0, n):
5      for x_i in x:
6          print(i, x_i)
7
8  ## SALIDA:
9  # 0 2
10 # 0 muse
11 # 1 2
12 # 1 muse
```

Sentencias de control

List comprehensions

```
1 x = [i**2 for i in range(6)]
2 print(x)
3
4 ## SALIDA
5 # [0, 1, 4, 9, 16, 25]
```

Funciones

Definición

```
1 # funciones normales
2 def mi_funcion(x, z=2):
3     return x**2 + z
4
5 # funciones anonimas
6 f = lambda x: x**3 + 5
```

Paso por referencia

Los argumentos de las funciones se pasan por referencia, no por parámetro. Se mete la variable, no una copia, por lo que si se hace alguna modificación a `x` en el ámbito de la función, `x` cambiará fuera de la función.

Módulos

Importar

```
1  import function
2  import numpy as np
3  from scipy.linalg import inv as hazme_inversa
4  import matplotlib.pyplot as plt
5  from math import *
6
7  e = function.mi_funcion(5, z=3)
8  z = np.linspace(0, 1, 3)
9  i = hazme_inversa(np.eye(3))
10 plt.plot(z)
11 e = sqrt(e)
```

Numpy: el `ndarray`

Scipy

Matplotlib.pyplot