Mémento Python 3 pour le calcul scientifique

Arts et Métiers Sciences et Technologies

Forme inspirée initialement du mémento de Laurent Pointal, disponible ici : https://perso.limsi.fr/pointal/python:memento

Cette version sur l'E.N.T. Arts et Métiers : https://savoir.ensam.eu/moodle/course/view.php?id=1428

Aide F1

`dir(`*nom*`)` liste des noms des méthodes et attributs de *nom*
`help(`*nom*`)` aide sur l'objet *nom*
`help("nom_module.nom")` aide sur l'objet `nom` du module `nom_module`

Types de base

Entier, décimal, complexe, booléen, rien — objets non mutables

`int`	`783`	`0` (zéro)	`-192`	`0b010` (binaire)	`0o642` (octal)	`0xF3` (hexadécimal)
`float`	`9.23`	`0.0`	`-1.7e-6` ($-1{,}7\times10^{-6}$)			
`complex`	`1j`	`0j`	`2+3j`	`1.3-3.5e2j`		
`bool`	`True`	`False`				
`NoneType`	`None`	(une seule valeur : « rien »)				

Identificateurs

Noms d'objets, de fonctions, de modules, de classes, etc.

`a…zA…Z_` suivi de `a…zA…Z_0…9`

- accents possibles mais à éviter
- mots clés du langage interdits
- distinction casse min/MAJ

☺ `a toto x7 y_max BigOne`
☹ ~~`8y and for`~~

Affectation/nommage

Symbole : `=`
affectation ⇔ **association** d'un *nom* à un objet

`nom_objet = `*<expression>*
1) *évaluation de l'expression de droite pour créer un objet*
2) *nommage de l'objet créé*

`x = 1.2 + 8 + sin(y)`

Affectations multiples
<n noms> `=` *<itérable de taille n>*

`u,v,w = 1j,"a",None`
`a,b = b,a` *échange de valeurs*

Affectations combinée avec une opération ✧
`x ✧= c` *équivaut à :* `x = x✧c`

Suppression d'un nom
`del x` *l'objet associé disparaît seulement s'il n'a plus de nom, par le mécanisme du « ramasse-miettes »*

Conteneurs : opérations génériques

`len(c)` `min(c)` `max(c)` `sum(c)`
nom `in c` → booléen, test de présence dans `c` *d'un élément identique (comparaison* `==`*) à nom*
nom `not in c` → *booléen, test d'absence*
`c1 + c2` → *concaténation*
`c * 5` → *5 répétitions* (`c+c+c+c+c`)
`c.index(`*nom*`)` → *position du premier élément identique à nom*
`c.index(`*nom*`,`*idx*`)` → *position du premier élément identique à nom à partir de la position idx*
`c.count(`*nom*`)` → *nombre d'occurrences*

Opérations sur listes

modification « en place » de la liste `L` ***originale***
ces méthodes ne renvoient rien en général

`L.append(`*nom*`)` *ajout d'un élément à la fin*
`L.extend(`*itérable*`)` *ajout d'un itérable converti en liste à la fin*
`L.insert(`*idx*`,`*nom*`)` *insertion d'un élément à la position idx*
`L.remove(`*nom*`)` *suppression du premier élément identique (comparaison* `==`*) à nom*
`L.pop()` *renvoie et supprime le dernier élément*
`L.pop(`*idx*`)` *renvoie et supprime l'élément à la position idx*
`L.sort()` *ordonne la liste (ordre croissant)*
`L.sort(reverse=True)` *ordonne la liste par ordre décroissant*
`L.reverse()` *renversement de la liste*
`L.clear()` *vide la liste*

Objets itérables

▪ **Conteneurs numérotés** (*listes, tuples, chaînes de caractères*)

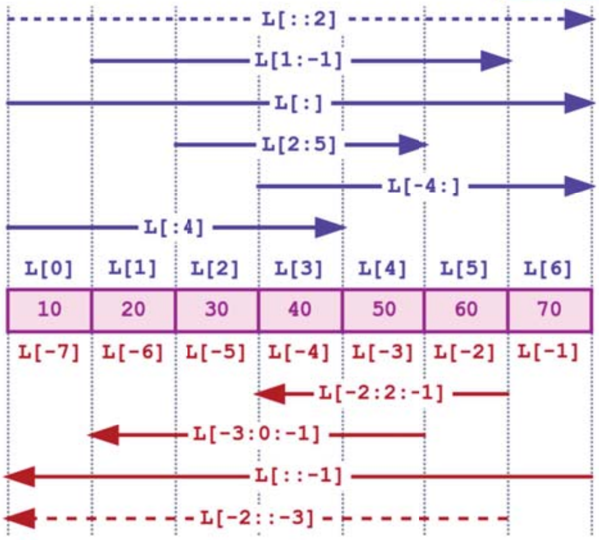
`list`	`[1,5,9]`	`["abc"]`	`[]`	`["x",-1j,["a",False]]`
`tuple`	`(1,5,9)`	`("abc",)`	`()`	`11,"y",[2-1j,True]`
`str`	`"abc"`	`"z"` Singleton	`""` Objet vide	
`len(`*objet*`)` donne :	`3`	`1`	`0`	`3`

Conteneurs hétérogènes — Objets non mutables — expression juste avec des virgules → `tuple` — *Nombre d'éléments*

▪ **Itérateurs** (*objets destinés à être parcourus par* `in`)

`range(`*n*`)` : pour parcourir les *n* premiers entiers naturels, de 0 à *n*-1 inclus.
`range(`*n*`,`*m*`)` : pour parcourir les entiers naturels de *n* inclus à *m* exclus par pas de 1.
`range(`*n*`,`*m*`,`*p*`)` : pour parcourir les entiers naturels de *n* inclus à *m* exclus par pas de *p*.
`reversed(`*itérable*`)` : pour parcourir un objet itérable à l'envers.
`enumerate(`*itérable*`)` : pour parcourir un objet itérable en ayant accès à la numérotation.
`zip(`*itérable1*`,`*itérable2*`,…)` : pour parcourir en parallèle plusieurs objets itérables.

Parcours de conteneurs numérotés



index à partir de 0

▪ Accès à chaque **élément** par `L[`*index*`]`
`L[0]` → `10` ⇒ *le premier*
`L[1]` → `20` ⇒ *le deuxième*
`L[-1]` → `70` ⇒ *le dernier*
`L[-2]` → `60` ⇒ *l'avant-dernier*

▪ Accès à une **partie** par `L[`*début inclus*`:`*fin exclue*`:`*pas*`]`
`L[2:5]` → `[30,40,50]` ⇒ *indices 2,3 et 4*
`L[:4]` → `[10,20,30,40]` ⇒ *les 4 premiers*
`L[-4:]` → `[40,50,60,70]` ⇒ *les 4 derniers*
`L[::2]` → `[10,30,50,70]` ⇒ *de 2 en 2*
`L[:]` *tous : copie superficielle du conteneur*
`L[::-1]` *tous, de droite à gauche*
`L[-2::-3]` → `[60,30]` ⇒ *de -3 en -3 en partant de l'avant-dernier*

Sur les listes *(conteneurs mutables)*, ***suppression*** *d'un élément ou d'une partie par* `del`, *et* ***remplacement*** *par* `=`

`del L[4]` effet sur la liste `L` similaire à `L.pop(4)` → `L` devient `[10,20,30,40,60,70]`
`del L[1::2]` suppression des éléments d'indices impairs → `L` devient `[10,30,50,70]`
`L[4] = 99` → `L` devient `[10,20,30,40,99,60,70]`
`L[1::2] = "abc"` itérable ayant le même nombre d'éléments que la partie à remplacer, sauf si le pas vaut 1 → `L` devient `[10,"a",30,"b",50,"c",70]`
`L[1:-1] = range(2)` → `L` devient `[10,0,1,70]`

Chaînes de caractères

Caractères spéciaux :
`"\n"` *retour à la ligne*
`"\t"` *tabulation*
`"\\"` *« backslash \ »*
`"\""` *ou* `'"'` *guillemet "*
`"'"` *ou* `'\''` *apostrophe '*

Exemple :
`ch = "X\tY\tZ\n1\t2\t3"`
`print(ch)` *affiche :*
```
X	Y	Z
1	2	3
```
`print(repr(ch))` *affiche :* `'X\tY\tZ\n1\t2\t3'`

`r"dossier\sd\nom.py"` → `'dossier\\sd\\nom.py'`
Le préfixe `r` *signifie ``raw string" (tous les caractères sont considérés comme de vrais caractères)*

Méthodes sur les chaînes

Une chaîne n'est pas modifiable ; ces méthodes renvoient en général une nouvelle chaîne ou un autre objet

`"nomfic.txt".replace(".txt",".png")` → `'nomfic.png'`
`"b-a-ba".replace("a","eu")` → `'b-eu-beu'` *remplacement de toutes les occurrences*
`" \tUne phrase.\n ".strip()` → `'Une phrase.'` *nettoyage début et fin*
`"des  mots\tespacés".split()` → `['des','mots','espaces']`
`"1.2,4e-2,-8.2,2.3".split(",")` → `['1.2','4e-2','-8.2','2.3']`
`" ; ".join(["1.2","4e-2","-8.2","2.3"])` → `'1.2 ; 4e-2 ; -8.2 ; 2.3'`
`ch.lower()` *minuscules*, `ch.upper()` *majuscules*, `ch.title()`, `ch.swapcase()`
Recherche de position : `find` *similaire à* `index` *mais renvoie* `-1` *en cas d'absence, au lieu de soulever une erreur*
`"image.png".endswith(".txt")` → `False`
`"essai001.txt".startswith("essai")` → `True`

Formatage

La méthode `format` ***sur une chaîne contenant*** `"{`*<numéro>*`:`*<format>*`}"` **(accolades)**

`"{} ~ {}".format("pi",3.14)` → `'pi ~ 3.14'` *ordre et formats par défaut*
`"{1:} -> {0:}{1:}".format(3,"B")` → `'B -> 3B'` *ordre, répétition*
`"essai_{:04d}.txt".format(12)` → `'essai_0012.txt'` *entier, 4 chiffres, complété par des 0*
`"L : {:.3f} m".format(0.01)` → `'L : 0.010 m'` *décimal, 3 chiffres après la virgule*
`"m : {:.2e} kg".format(0.012)` → `'m : 1.20e-02 kg'` *scientifique, 2 chiffres après la virgule*

Mémento Python 3 pour le calcul scientifique

Arts et Métiers — Sciences et Technologies

Blocs d'instructions

```
instruction parente :
    bloc d'instructions 1…
        ⋮
    instruction parente :
        bloc d'instructions 2…
            ⋮

instruction suivant le bloc 1
    ⋮
```

indentation

☞ Symbole **:** puis indentation (4 espaces en général)

Instruction conditionnelle

```
if booléen1 :
    bloc d'instructions 1…
        ⋮
elif booléen2 :
    bloc d'instructions 2…
        ⋮
else :
    dernier bloc…
        ⋮
```

☞ Blocs `else` et `elif` facultatifs.

☞ `if`/`elif` *x* : si *x* n'est pas un booléen équivaut en Python à `if`/`elif bool(`*x*`)` : (voir conversions).

Définition de fonction

☞ Une fonction fait des actions et renvoie un ou plusieurs objets, ou ne renvoie rien.

```
def nom_fct(x,y,z=0,a=None) :
    bloc d'instructions…
        ⋮
    if a is None :
        ⋮
    else :
        ⋮
    return r0,r1,…,rk
```

x et **y** : arguments positionnels, obligatoires

z et **a** : arguments optionnels avec des valeurs par défaut, nommés

☞ Plusieurs `return` possibles (interruptions)

☞ Une absence de `return` signifie qu'à la fin, `return None` (rien n'est renvoyé)

Appel(s) de la fonction

☞ Autant de noms que d'objets renvoyés

```
a0,a1,…,ak = nom_fct(-1,2)
b0,b1,…,bk = nom_fct(3.2,-1.5,a="spline")
```

True/False Logique booléenne

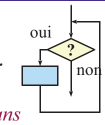
- *Opérations booléennes*
  - `not A` « non A »
  - `A and B` « A et B »
  - `A or B` « A ou B »
  - `(not A) and (B or C)` *exemple*
- *Opérateurs renvoyant un booléen*
  - *nom1* `is` *nom2* 2 noms du même objet ?
  - *nom1* `==` *nom2* valeurs identiques ?
  - Autres comparateurs : `<` `>` `<=` `>=` `!=` (≠)
  - *nom_objet* `in` *nom_iterable* — l'itérable **nom_iterable** contient-il un objet de valeur identique à celle de **nom_objet** ?

Boucle conditionnelle

Attention aux boucles sans fin !

Bloc d'instructions répété tant que *condition* est vraie

```
while condition :
    instructions…
        ⋮
    (valeurs impliquées dans
     condition modifiées)
        ⋮
```



Exemple

```
from random import randint
somme,nombre = 0,0
while somme < 100 :
    nombre += 1
    somme += randint(1,10)
print(nombre,";",somme)
```

Le nombre d'itérations n'est pas connu à l'avance

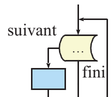
Contrôle de boucle

- `break` sortie immédiate
- `continue` itération suivante

Boucle par itérations

Bloc d'instructions répété pour chaque élément de l'itérable, désigné par nom

```
for nom in itérable :
    instructions…
        ⋮
```



Variantes avec parcours en parallèle

```
for a,b in itérable :
    bloc d'instructions
```
Itérations sur des couples

```
for numéro,nom in enumerate(itérable) :
    bloc d'instructions
```
Numérotation en parallèle, à partir de 0

```
for numéro,nom in enumerate(itérable,d) :
    bloc d'instructions
```
Numérotation en parallèle, à partir de d

```
for e1,e2,… in zip(itérable1,itérable2,…) :
    bloc d'instructions
```
Parcours en parallèle de plusieurs itérables ; s'arrête dès qu'on arrive à la fin de l'un d'entre eux

Liste en compréhension

- *Inconditionnelle / conditionnelle*

```
L = [ f(e) for e in itérable ]
L = [ f(e) for e in itérable if b(e)]
```

Conversions

`bool(`*x*`)` → `False` pour *x* : `None`, `0` (`int`), `0.0` (`float`), `0j` (`complex`), *itérable vide*

→ `True` pour *x* : *valeur numérique non nulle, itérable non vide*

- `int("15")` → `15`
- `int("15",7)` → `12` (*base 7*)
- `int(-15.56)` → `-15` (*troncature*)
- `round(-15.56)` → `-16` (*arrondi*)
- `float(-15)` → `-15.0`
- `float("-2e-3")` → `-0.002`
- `complex("2-3j")` → `(2-3j)`
- `complex(2,-3)` → `(2-3j)`
- `list(`*x*`)` *Conversion d'un itérable en liste* — exemple : `list(range(12,-1,-1))`
- `sorted(`*x*`)` *Conversion d'un itérable en liste ordonnée (ordre croissant)*
- `sorted(x,reverse=True)` *Conversion d'un itérable en liste ordonnée (ordre décroissant)*
- `tuple(`*x*`)` *Conversion en tuple*
- `"{}".format(`*x*`)` *Conversion en chaîne de caractères*
- `ord("A")` → `65` ; `chr(65)` → `'A'`

Mathématiques

- *Opérations*
  - `+ - * /`
  - `**` *puissance* `2**10` → `1024`
  - `//` *quotient de la division euclidienne*
  - `%` *reste de la division euclidienne*
- *Fonctions intrinsèques*
  - `abs(`*x*`)` *valeur absolue / module*
  - `round(`*x*`,`*n*`)` *arrondi du* `float` *x à n chiffres après la virgule*
  - `pow(a,b)` *équivalent à* `a**b`
  - `pow(`*a*`,`*b*`,`*p*`)` *reste de la division euclidienne de a^b par p*
  - *z*`.real` → *partie réelle de z*
  - *z*`.imag` → *partie imaginaire de z*
  - *z*`.conjugate()` → *conjugué de z*

Fichiers texte

☞ N'est indiquée ici que l'ouverture avec fermeture automatique, au format normalisé UTF-8.

☞ Le « *chemin* » d'un fichier est une chaîne de caractères (voir module `os` ci-dessous)

- *Lecture intégrale d'un seul bloc*

```
with open(chemin,"r",encoding="utf8") as f:
    texte = f.read()
```

- *Lecture ligne par ligne*

```
with open(chemin,"r",encoding="utf8") as f:
    lignes = f.readlines()
```

(Nettoyage éventuel des débuts et fins de lignes)

```
lignes = [c.strip() for c in lignes]
```

- *Écriture dans un fichier*

```
with open(chemin,"w",encoding="utf8") as f:
    f.write(début) …
        ⋮
    f.write(suite) …
        ⋮
    f.write(fin)
```

Gestion basique d'exceptions

```
try :
    bloc à essayer
except :
    bloc exécuté en cas d'erreur
```

Affichage

```
x,y = -1.2,0.3
print("Pt",2,"(",x,",",y+4,")")
```
→ `Pt 2 ( -1.2 , 4.3 )`

☞ Un espace est inséré à la place de chaque virgule séparant deux objets consécutifs. Pour mieux maîtriser l'affichage, utiliser la méthode de formatage `str.format`

Saisie

```
s = input("Choix ? ")
```

☞ `input` *renvoie toujours une **chaîne de caractères** ; la convertir si besoin vers le type désiré*

Importation de modules

Module `mon_mod` ⇔ Fichier `mon_mod.py`

- *Importation d'objets par leurs noms*

```
from mon_mod import nom1,nom2
```

- *Importation avec renommage*

```
from mon_mod import nom1 as n1
```

- *Importation du module complet*

```
import mon_mod
    ⋮
… mon_mod.nom1 …
```

- *Importation du module complet avec renommage*

```
import mon_mod as mm
    ⋮
… mm.nom1 …
```

Programme utilisé comme module

- *Bloc-Test (non lu en cas d'utilisation du programme* `mon_mod.py` *en tant que module)*

```
if __name__ == "__main__" :
    Bloc d'instructions
        ⋮
```

Quelques modules internes de Python (The Python Standard Library)

os

```
import os
```

`os.getcwd()` → *Chemin absolu du « répertoire de travail »* (working directory), *à partir duquel on peut donner des chemins relatifs.*

Chemin absolu : chaîne commençant par une lettre majuscule suivie de `":"` *(Windows), ou par* `"/"` *(autre)*

Chemin relatif par rapport au répertoire de travail wd :

- *nom de fichier ⇔ fichier dans wd*
- `"."` ⇔ *wd* ; `".."` ⇔ *père de wd*
- `"../.."` ⇔ *grand-père de wd*
- `"sous-dossier/image.png"`

☞ *Le séparateur* `"/"` *fonctionne pour tous les systèmes, au contraire du* `\("\\")`

`os.listdir(`*chemin*`)` → *liste des sous-dossiers et fichiers du dossier désigné par chemin.*

`os.path.isfile(`*chemin*`)` → Booléen : est-ce un fichier ?

`os.path.isdir(`*chemin*`)` → Booléen : est-ce un dossier ?

```
for sdp,Lsd,Lnf in os.walk(chemin) :
```

Parcourt récursivement chaque sous-dossier, de chemin relatif `sdp`*, dont la liste des sous-dossiers est* `Lsd` *et celle des fichiers est* `Lnf`

sys

```
import sys
```

- `sys.path` → *liste des chemins des dossiers contenant des modules Python*
- `sys.path.append(`*chemin*`)` *Ajout du chemin absolu d'un dossier contenant des modules*
- `sys.platform` → *nom du système d'exploitation*

time

```
from time import time
debut = time()
: (instructions)
duree = time() - debut
```

Évaluation d'une durée d'exécution, en secondes

Mémento Python 3 pour le calcul scientifique

Arts et Métiers — Sciences et Technologies

Aide numpy/scipy

`np.info(`*nom_de_la_fonction*`)`

Fonctions mathématiques

`import numpy as np`

☞ *En calcul scientifique, il est préférable d'utiliser les fonctions de* `numpy`*, au lieu de celles des modules basiques* `math` *et* `cmath`*, puisque* ***les fonctions de*** `numpy` ***sont vectorisées*** *: elle s'appliquent aussi bien à des scalaires (*`float`*,* `complex`*) qu'à des vecteurs, matrices, tableaux, avec des durées de calculs minimisées.*

- `np.pi, np.e` → *Constantes π et e*
- `np.abs, np.sqrt, np.exp, np.log, np.log10, np.log2` → `abs` *, racine carrée, exponentielle, logarithmes népérien, décimal, en base 2*
- `np.cos, np.sin, np.tan` → *Fonctions trigonométriques (angles en radians)*
- `np.degrees, np.radians` → *Conversion radian→degré, degré→radian*
- `np.arccos, np.arcsin` → *Fonctions trigonométriques réciproques*
- `np.arctan2(y,x)` → *Angle dans]−π,π]*
- `np.cosh, np.sinh, np.tanh` / `np.arcsinh, np.arccosh, np.arctanh` *(trigonométrie hyperbolique)*

Tableaux numpy.ndarray : généralités

☞ *Un tableau* `T` *de type* `numpy.ndarray` *(« n-dimensional array ») est un* ***conteneur homogène*** *dont les valeurs sont stockées en mémoire de façon séquentielle.*

- `T.ndim` → *« dimension* ***d*** *» = nombre d'indices (1 pour un vecteur, 2 pour une matrice)*
- `T.shape` → *« forme » = plages de variation des indices, regroupées en* `tuple` $(n_0, n_1, \ldots, n_{d-1})$ *: le premier indice varie de* `0` *à* n_0`-1`*, le deuxième de* `0` *à* n_1`-1`*, etc.*
- `T.size` → nombre d'éléments, valant $n_0 \times n_1 \times \cdots \times n_{d-1}$
- `T.dtype` → *type des données contenues dans le tableau (*`np.bool, nb.int32, np.uint8, np.float, np.complex, np.unicode`*, etc.)*

générateurs

☞ ***shp*** *est la forme du tableau créé,* ***data_type*** *le type de données contenues dans le tableau (*`np.float` *si l'option* `dtype` *n'est pas utilisée)*

- `T = np.empty(`*shp*`,dtype=`*data_type*`)` → *pas d'initialisation*
- `T = np.zeros(`*shp*`,dtype=`*data_type*`)` → *tout à* `0`/`False`
- `T = np.ones(`*shp*`,dtype=`*data_type*`)` → *tout à* `1`/`True`
- ***Tableaux de même forme que*** `T` *(même type de données que* `T` *si ce n'est pas spécifié) :*

```
S = np.empty_like(T,dtype=data_type)
S = np.zeros_like(T,dtype=data_type)
S = np.ones_like(T,dtype=data_type)
```

Vecteurs

- ***Un vecteur*** `V` ***est un tableau à un seul indice***
- *Comme pour les listes,* `V[`*i*`]` *est le $(i+1)^{ème}$ coefficient, et l'on peut extraire des sous-vecteurs par :* `V[:2]`, `V[-3:]`, `V[::-1]`, etc.

Si `c` est un nombre, les opérations `c*V, V/c, V+c, V-c, V//c, V%c, V**c` *se font sur chaque coefficient*

Si `U` est un vecteur de même dimension que `V`, les opérations `U+V, U-V, U*V, U/V, U//V, U%V, U**V` *sont des* ***opérations terme à terme***

- ***Produit scalaire*** : `U.dot(V)` *ou* `np.dot(U,V)` *ou* `U@V`

générateurs

- `np.linspace(`*a*`,`*b*`,`*n*`)` → *n valeurs régulièrement espacées de* ***a*** *à* ***b*** *(bornes incluses)*
- `np.arange(`x_{min}`,`x_{max}`,`*dx*`)` → *de x_{min} inclus à x_{max}* ***exclu*** *par pas de* ***dx***

Statistiques

☞ *Sans l'option* `axis`*, un tableau est considéré comme une simple séquence de valeurs*

- `T.max(), T.min(), T.sum()`
- `T.argmax(), T.argmin()` *indices séquentiels des extremums*
- `T.sum(axis=`*d*`)` → *sommes sur le (*d*-1)-ème indice*
- `T.mean(),T.std(),T.std(ddof=1)` *moyenne, écart-type*
- `V = np.unique(T)` *valeurs distinctes, sans ou avec les effectifs*
- `V,N = np.unique(T,return_counts=True)`
- `np.cov(T), np.corrcoef(T)` *matrices de* ***covariance*** *et de* ***corrélation*** *;* `T` *est un tableau* ***k***×***n*** *qui représente* ***n*** *répétitions du tirage d'un vecteur de dimension* ***k*** *; ces matrices sont* ***k***×***k***.

Tirages pseudo-aléatoires

Modules `random` *et* `numpy.random`

`import random`

- `random.random()` → *Valeur flottante dans l'intervalle [0,1[(loi uniforme)*
- `random.randint(`*a*`,`*b*`)` → *Valeur entière entre* ***a*** *inclus et* ***b*** *inclus (équiprobabilité)*
- `random.choice(`*L*`)` → *Un élément de la liste* ***L*** *(équiprobabilité)*
- `random.shuffle(`*L*`)` → `None`*, mélange la liste* ***L*** *«* ***en place*** *»*

`import numpy.random as rd`

- `rd.rand(`$n_0, \ldots, n_{d-1}$`)` → *Tableau de forme (*$n_0, \ldots, n_{d-1}$*), de flottants dans l'intervalle [0,1[(loi uniforme)*
- `rd.randint(`*a*`,`*b*`,`*shp*`)` → Tableau de forme ***shp***, d'entiers entre ***a*** inclus et ***b*** exclu (équiprobabilité)
- `rd.randint(`*n*`,size=`*d*`)` → Vecteur de dimension ***d***, d'entiers entre **0** et ***n*** **-1** (équiprobabilité)
- `rd.choice(`*Omega*`,`*n*`,p=`*probas*`)` → *Tirage* ***avec remise*** *d'un échantillon de taille* ***n*** *dans* ***Omega****, avec les probabilités* ***probas***
- `rd.choice(`*Omega*`,`*n*`,replace=False)` → *Tirage* ***sans remise*** *d'un échantillon de taille* ***n*** *dans* ***Omega*** *(équiprobabilité)*
- `rd.normal(`*m*`,`*s*`,`*shp*`)` → *Tableau de forme* ***shp*** *de flottants tirés selon une loi normale de moyenne* ***m*** *et d'écart-type* ***s***
- `rd.uniform(`*a*`,`*b*`,`*shp*`)` → *Tableau de forme* ***shp*** *de flottants tirés selon une loi uniforme sur l'intervalle [****a*** *,* ***b*** *[*

Conversions

☞ *Le passage maîtrisé* `list` ↔ `ndarray` *permet de bénéficier des avantages des 2 types*

- `T = np.array(L)` → *Liste en tableau, type de données automatique*
- `T = np.array(L,dtype=`*data_type*`)` → *Idem, type spécifié*
- `L = T.tolist()` → *Tableau en liste*
- `new_T = T.astype(`*data_type*`)` → *Conversion des données*
- `S = T.flatten()` → *Conversion en vecteur (la séquence des données telles qu'elles sont stockées en mémoire)*
- `np.unravel_index(`n_S`,T.shape)` *donne la position dans le tableau* `T` *à partir de l'index séquentiel* n_S *(indice dans* `S`*)*

Matrices

- ***Une matrice*** `M` ***est un tableau à deux indices***
- `M[`*i*`,`*j*`]` *est le coefficient de la (*i*+1)-ième ligne et (*j*+1)-ième colonne*
- `M[`*i*`,:]` *est la (*i*+1)-ième ligne,* `M[:,`*j*`]` *la (*j*+1)-ième colonne,* `M[`*i*`:`*i+h*`,`*j*`:`*j+l*`]` *une sous-matrice* $h \times l$
- ***Opérations : voir Vecteurs***
- ***Produit matriciel*** : `M.dot(V)` *ou* `np.dot(M,V)` *ou* `M@V`

`M.transpose(),M.trace()` → *transposée, trace*

générateurs

- `np.eye(`*n*`)` → *matrice identité d'ordre* ***n***
- `np.eye(`*n*`,k=`*d*`)` → *matrice carrée d'ordre* ***n*** *avec des* **1** *décalés de* ***d*** *vers la droite par rapport à la diagonale*
- `np.diag(`*V*`)` → *matrice diagonale dont la diagonale est le vecteur* `V`

☞ ***Matrices carrées*** *uniquement (algèbre linéaire) :*

`import numpy.linalg as la` ("Linear algebra")

- `la.det(M), la.inv(M)` → *déterminant, inverse*
- `vp = la.eigvals(M)` → `vp` *vecteur des valeurs propres*
- `vp,P = la.eig(M)` → `P` *matrice de passage*
- `la.matrix_rank(M), la.matrix_power(M,`*p*`)`
- `X = la.solve(M,V)` → *Vecteur solution de* `M X = V`

Tableaux booléens, comparaison, tri

- `B = (T==1.0)`
- `B = (abs(T)<=1.0)` → `B` *est un tableau de booléens, de même forme que* `T`
- `B = (T>0)*(T<1)` *Par exemple* `B*np.sin(np.pi*T)` *renverra un tableau de* $\sin(\pi x)$ *pour tous les coefficients* x *dans* **]0,1[** *et de 0 pour les autres*
- `B.any(), B.all()` → *booléen « Au moins un* `True` *», « Que des* `True` *»*
- `indices = np.where(B)` → `tuple` *de vecteurs d'indices donnant les positions des* `True`
- `T[indices]` → *extraction séquentielle des valeurs*
- `T.clip(`v_{min}`,`v_{max}`)` → *tableau dans lequel les valeurs ont été ramenées entre* v_{min} *et* v_{max}
- `np.allclose(T1,T2)` → *booléen indiquant si les tableaux sont numériquement égaux*

Intégration numérique

`import scipy.integrate as spi`

- `spi.odeint(F,Y0,Vt)` → *renvoie une solution numérique du problème de Cauchy* $\mathbf{Y}'(t) = \mathbf{F}(\mathbf{Y}(t),t)$ *, où* $\mathbf{Y}(t)$ *est un vecteur d'ordre n, avec la condition initiale* $\mathbf{Y}(t_0) =$ `Y0`*, pour les valeurs de t dans le vecteur* `Vt` *commençant par* t_0*, sous forme d'une matrice* $n \times k$
- `spi.quad(f,a,b)[0]` → *renvoie une évaluation numérique de l'intégrale :* $\int_a^b f(t)\,dt$

Mémento Python 3 pour le calcul scientifique

Arts et Métiers — Sciences et Technologies

Graphiques Matplotlib

`import matplotlib.pyplot as plt`

`plt.figure(`*mon_titre*`, figsize=(`*W*`,`*H*`))` *crée ou sélectionne une figure dont la barre de titre contient* *mon_titre* *et dont la taille est* $W\times H$ *(en inches, uniquement lors de la création de la figure)*

`plt.plot(X,Y,`*dir_abrg*`)` *trace le nuage de points d'abscisses dans* `X` *et d'ordonnées dans* `Y` *;* *dir_abrg* *est une chaîne de caractères qui contient une couleur (*`"r"`*-ed,* `"g"`*-reen,* `"b"`*-lue,* `"c"`*-yan,* `"y"`*-ellow,* `"m"`*-agenta,* `"k"` *black), une marque (voir ci-dessous) et un type de ligne (*`""` *pas de ligne,* `"-"` *plain,* `"--"` *dashed,* `":"` *dotted, ...)*

- **Options courantes :**
  - `label=`... *étiquette pour la légende*
  - `linewidth=`... *épaisseur du trait (0 pour aucun trait)*
  - `dashes=`... *style de pointillé (liste de longueurs)*
  - `color=`... *couleur du trait :* `(`*r*`,`*g*`,`*b*`)` *ou* `"m"`, `"c"`, ...
  - `marker=`... *forme de la marque :*

○ ∘ ☆ ▷ ◁ △ ▽ □ ◇ ◇ ⬠ ⬡ ⬡ ○ Y ⅄ ≺ ≻ + ×

`"o"` `"."` `"*"` `">"` `"<"` `"^"` `"v"` `"s"` `"d"` `"D"` `"p"` `"h"` `"H"` `"8"` `"1"` `"2"` `"3"` `"4"` `"+"` `"x"`

  - `markersize=`... *taille de la marque*
  - `markeredgewidth=`... *épaisseur du contour*
  - `markeredgecolor=`... *couleur du contour*
  - `markerfacecolor=`... *couleur de l'intérieur*

`plt.axis("equal")`, `plt.grid()` *repère orthonormé, quadrillage*

`plt.xlim(a,b)`, `plt.ylim(a,b)` *plages d'affichage ; si a > b, inversion de l'axe*

`plt.xlabel(`*axe_x*`,size=`*s*`,color=(`*r*`,`*g*`,`*b*`))`, `plt.ylabel(`*axe_y*`,...)` *étiquettes sur les axes, en réglant la taille* *s* *et la couleur de la police de caractères (r, g et b dans [0,1])*

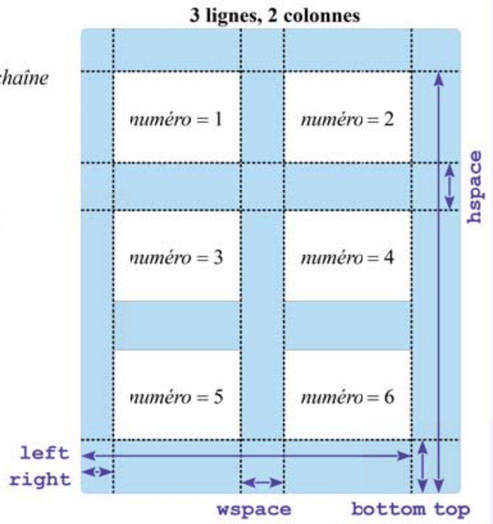
`plt.legend(loc="best",fontsize=`*s*`)` *affichage des labels des* `"plot"` *en légende*

`plt.show()` *affichage des différentes figures et remise à zéro*

`plt.twinx()` *bascule sur une deuxième échelle des ordonnées apparaissant à droite du graphique*

`plt.xticks(Xt)`, `plt.yticks(Yt)` *réglage des graduations des axes*

`plt.subplot(nbL,nbC,numero)` *début de tracé dans un graphique situé dans un* ***tableau de graphiques*** *à* `nbL` *lignes,* `nbC` *colonnes ;* `numero` *est le numéro séquentiel du graphique dans le tableau (voir ci-contre).*



`plt.subplots_adjust(left=`*L*`,right=`*R*`,bottom=`*B*`,top=`*T*`,wspace=`*W*`,hspace=`*H*`)` *ajustement des marges (voir ci-contre)*

`plt.title(`*Titre_du_graphique*`)` *rajout d'un titre au graphique en cours de tracé*

`plt.suptitle(`*Titre_général*`)` *rajout d'un titre à la fenêtre de graphiques*

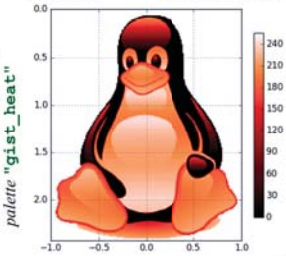
`plt.text(`*x*`,`*y*`,`*texte*`,fontdict=`*dico*`,horizontalalignment=`*HA*`,verticalalignment=`*HV*`)` *tracé du texte* *texte* *à la position (x,y), avec réglage des alignements (*$HA\in$ `{"center","left","right"}`*,* $HV\in$ `{"center","top","bottom"}`*) ;* *dico* *est un dictionnaire (voir ci-contre)*

`plt.axis("off")` *suppression des axes et du cadre*

`plt.imshow(T,interpolation="none",extent=(`*gauche*`,`*droite*`,`*bas*`,`*haut*`))` *tracé d'une image pixélisée* *<u>non lissée</u>* *à partir d'un tableau* `T` *(*$n_L{\times}n_C{\times}4$ *format* ***RGBA***, $n_L{\times}n_C{\times}3$ *format* ***RGB****) ; l'option* `extent` *permet de régler la plage correspondant à l'image (* $(-0.5,\ n_C-0.5,\ n_L-0.5,\ -0.5)$ *par défaut)*

`plt.imshow(T,interpolation="none",vmin=`v_{min}`,vmax=`v_{max}`,cmap=`*palette*`,extent=(`*gauche*`,`*droite*`,`*bas*`,`*haut*`))` *tracé d'une image pixélisée* *<u>non lissée</u>* *à partir d'un tableau* `T` *rectangulaire* $n_L{\times}n_C$ *correspondant à des niveaux de gris sur la plage* $[v_{min}, v_{max}]$, *avec la palette de couleurs* *palette* *: voir* `https://matplotlib.org/examples/color/colormaps_reference.html)`

`plt.colorbar(schrink=c)` *Affichage de l'échelle des couleurs du tracé précédent sur la plage* $[v_{min}, v_{max}]$



Exemple de tracé avec `plt.imshow` *et* `plt.colorbar`*, avec la palette* `"gist_heat"`

Dictionnaires

Un dictionnaire `D`*, de type* `dict` *(type itérable), se présente sous la forme :*
`{clef_0:valeur_0,clef_1:valeur_1,...}`
On peut accéder aux clefs par `D.keys()`*, aux valeurs par* `D.values()`*, et obtenir un itérateur sur les couples par* `D.items()` :

Parcours des clefs et valeurs du dictionnaire :

```
for key,val in D.items() :
    (bloc d'instructions)
```

Extraire une valeur par sa clef : `D[key]`

Compléter le dictionnaire :

```
D[new_key] = new_val
dict1.update(dict2)
```

Supprimer un entrée : `del D[key]`

Dictionnaire vide : `D = dict()` *ou* `D = {}`

Exemple pour la fonction `plt.text` :

```
{ "family" : "Courier New",
  "weight" : "bold",
  "style" : "normal",
  "size" : 18,
  "color" : (0.0,0.5,0.8) }
```

Calcul formel avec sympy

Il est conseillé d'utiliser un **notebook jupyter** (voir `https://jupyter.readthedocs.io/en/latest/`) avec en en-tête pour avoir de belles formules mathématiques à l'écran les instructions ci-contre :

```
import sympy as sb
sb.init_printing()
```

Nombres exacts

Rationnels : `sb.Rational(2,7)` ou `sb.S(2)/7`

Irrationnels :

`sb.sqrt(2)`	$\sqrt{2}$
`sb.pi`, `sb.E`	π et e
`sb.I`	i tel que $i^2=-1$

Fonction indéfinie

`f = sb.Function("f")`

L'infini

`sb.oo` → ∞

Fonctions mathématiques

`sb.sqrt`, `sb.exp`	→ *Racine carrée, exponentielle,*
`sb.log`, `sb.factorial`	→ *Logarithme népérien, factorielle*
`sb.cos`, `sb.sin`, `sb.tan`	→ *Fonctions trigonométriques*
`sb.acos`, `sb.asin`, `sb.atan`	→ *Fonctions trigonométriques réciproques*
`sb.atan2(y,x)`	→ *Angle dans* $]-\pi,\pi]$
`sb.cosh`, `sb.sinh`, `sb.tanh` `sb.acosh`, `sb.asinh`, `np.atanh`	*(trigonométrie hyperbolique)*

Symboles

`sb.symbols("a,a_0,a^*")`	→ (a, a_0, a^*) (`tuple`)
`sb.symbols("x", real=True)`	→ *réel* x
`sb.symbols("y", nonzero=True)`	→ *réel* y *non nul*
`sb.symbols("j,k", integer=True)`	→ *entiers relatifs* j *et* k
`sb.symbols("m", integer=True, positive=True)`	→ $m\in\mathbb{N}^*$
`sb.symbols("n", integer=True, nonzero=True)`	→ $m\in\mathbb{Z}^*$
`sb.symbols("s", zero=False)`	→ *symbole* s *non nul*
`sb.symbols(..., nonnegative=True)`	→ *positif ou nul*
`sb.symbols(..., negative=True)`	→ *strictement négatif*
`sb.symbols(..., nonpositive=True)`	→ *négatif ou nul*
`sb.symbols(..., complex=True)`	→ *complexe*
`sb.symbols(..., imaginary=True)`	→ *imaginaire pur*

Égalités et équations

Expressions symboliques `A` *et* `B`

`A == B`	→ *Booléen : identité parfaite des expressions*
`A.equals(B)`	→ *Booléen : égalité après simplifications*
`sb.Eq(A,B)`	→ ***Équation :*** *booléen seulement si l'équation peut être identifiée comme vraie ou fausse*
`sb.Ne(A,B)` *ou* `Lt`, `Le`, `Gt`, `Ge`	→ *Inéquations* $\neq\ <\ \leq\ >\ \geq$

Manipulation d'expressions

Expressions symboliques `A` *et* `B`

`A+B`, `A-B`, `A*B`, `A/B`, *etc.*	→ *Opérations mathématiques*
`A.diff(x)`, `A.diff(x,`*n*`)`, `A.diff(x,3,y,2,z)`	→ $\dfrac{\partial A}{\partial x}$, $\dfrac{\partial^n A}{\partial x^n}$, $\dfrac{\partial^6 A}{\partial x^3\partial y^2\partial z}$
`A.expand()`, `A.simplify()`	→ *Développer, simplifier*
`A.factor()`, `A.together()`	→ *Factoriser, réduire une fraction*
`A.collect(x)`	→ *Regrouper les termes par rapport à* x
`A.apart(x)`	→ *Décomposition en élément simples par rapport à* x

Mémento Python 3 pour le calcul scientifique

Arts et Métiers Sciences et Technologies

Calcul formel avec sympy (suite)

Il est conseillé d'utiliser un **notebook jupyter** (voir `https://jupyter.readthedocs.io/en/latest/`) avec en en-tête pour avoir de belles formules mathématiques à l'écran les instructions ci-contre :

```
import sympy as sb
sb.init_printing()
```

Intégrales et primitives

Expr. symboliques **A** (de t) et **B** (de x et y)

`x,y,t = sb.symbols("x,y,t", real=True)`

`A.integrate(t)` *ou* `sb.integrate(A,t)`
→ *primitive de* **A** *par rapport à* **t**

`B.integrate(x,y)` *ou* `sb.integrate(B,x,y)`
→ *primitive de* **B** *par rapport à* **x** *et à* **y**

`A.integrate((t,`t_{inf}`,`t_{sup}`))` *ou* `sb.integrate(A,(t,`t_{inf}`,`t_{sup}`))`
→ *intégrale de* t_{inf} *à* t_{sup} *de* **A**

`sb.integrate(B,(x,a,b),(y,c,d))`
→ *intégrale double de* **B** *sur* $[a,b]\times[c,d]$

`sb.integrate(t**x,(t,1,sb.oo))` → $\begin{cases} -\frac{1}{x+1} & \text{for } x < -1 \\ \int_1^{\infty} t^x\, dt & \text{otherwise} \end{cases}$

`sb.integrate(t**x,(t,1,sb.oo),conds="none")` → $\frac{-1}{x+1}$
(*on se place dans le cas où l'intégrale est définie*)

Sommes, finies ou infinies

Si **L** *est une séquence d'expressions symboliques,* `sum(L)` *renvoie leur somme*
Ak *est une expression symbolique de* **k**

`k,n = sb.symbols("k,n", integer=True)`

`sb.summation(Ak,(k,`k_{min}`,`k_{max}`))` → $\sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} A_k$

Exemple : `sb.summation(k**2,(k,0,n)).factor()` → $\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$

Résolution algébrique d'équations

`sb.solve(`*équations*`,`*inconnues*`)` où *équations* est une séquence d'équations, ou d'expressions qui doivent s'annuler, et *inconnues* l'inconnue ou la liste des inconnues. Renvoie la liste des solutions, si elles sont calculables par **sympy**, chaque solution étant soit une expression, soit un tuple d'expressions, soit un dictionnaire (option « `dict=True` »).

Exemples :
`sb.solve(sb.Eq(x**4,1),x)` → $[-1,1,-i,i]$
`sb.solve(x**2-3,x,dict=True)` → $[\{x:-\sqrt{3}\},\{x:\sqrt{3}\}]$
`sb.solve([x**2+y**2-5,x-y-1],[x,y])` → $[(-1,-2),(2,1)]$

- **Calcul de constantes en fonction des conditions initiales sur une expression :**

```
a,b,x,u0,v0 = sb.symbols("a,b,x,u_0,v_0")
U = a*sb.exp(x) + b*sb.exp(-2*x)
CI = [ sb.Eq(U.replace(x,0), u0), \
       sb.Eq(U.diff(x).replace(x,0),v0) ]
sb.solve(CI,[x,y],dict=True)
```
→ $[\{a:\frac{2u_0}{3}+\frac{v_0}{3}, b:\frac{u_0}{3}-\frac{v_0}{3}\}]$

Équations différentielles

L'ensemble des équations différentielles que sympy sait résoudre est pour l'instant assez limité.
Il faut procéder en 2 temps : 1/ Résolution des équations différentielles ;
2/ Détermination des constantes en fonction des conditions initiales et/ou aux bords.

`sb.dsolve(`*équations*`,`*inconnues*`)` renvoie une équation ou une liste d'équations. De chaque équation **eq**, de la forme `sb.Eq(f(x),solu)`, on peut extraire la solution **solu** par `eq.rhs` (right-hand side).

Exemple d'équation différentielle :

```
r = sb.symbols("r") ; f = sb.Function("f")
EDO = sb.Eq(f(r).diff(r,2)+f(r).diff(r)/r+f(r)/r**2,0)
solu = sb.dsolve(EDO,f(r)).rhs
```
→ $C_1\sin(\log(r))+C_2\cos(\log(r))$

Exemple de système différentiel (linéaire à coefficients constants) :

```
x,y,z = [sb.Function(c) for c in "xyz"]
t = sb.symbols("t")
SDO = [sb.Eq(x(t).diff(t),y(t)-z(t)), \
       sb.Eq(y(t).diff(t),x(t)+z(t)), \
       sb.Eq(z(t).diff(t),x(t)+y(t)+z(t))]
Leq = sb.dsolve(SDO,[x(t),y(t),z(t)])
[ e.rhs for e in Leq ]
```
→ $[-C_1 e^{-t}-C_2 e^{t}-C_3(t-1)e^{t},$
$C_1 e^{-t}+C_2 e^{t}+C_3(t+1)e^{t},$
$2C_2 e^{t}+C_3(2t+1)e^{t}\ ]$

Les constantes à trouver ensuite sont définies par :
`sb.symbols("C1,C2,C3[etc]")`

Exemple :
```
sb.solve( [ solu.replace(r,1)-a, \
            solu.diff(r).replace(r,1)-b ], \
          sb.symbols("C1,C2") )
```
→ $\{C_1:b, C_2:a\}$

Développement limité

Expression symbolique **A** (**de** x)

`A.series(x,`x_0`,`n`)` → *Développement limité de* **A** *en* x_0 *à l'ordre* n

Exemple : `sb.cos(2*x).series(x,0,6)` → $1-2x^2+2x^4/3+O(x^6)$

`A.series(x,`x_0`,`n`).replace(sb.O,lambda *args : 0)`
→ *Développement limité sans le* $O((x-x_0)^n)$

Approximation par différences finies

On cherche à approcher la dérivée d-ième d'une fonction indéfinie f au point x à l'ordre n.
Le nombre de points discrétisés à considérer est $d+n$.
Ces points sont donnés dans une séquence **S**, par exemple `(x-h,x,x+h,x+2*h)`

```
f = sb.Function("f")
x,h = sb.symbols("x,h", real=True)
```

`f(x).diff(x,d).as_finite_difference(S)` → *approx. de* $f^{[d]}(x)$

Exemple : `S = [x,x+h,x+2*h]`
`f(x).diff(x).as_finite_difference(S).together()`
→ $\frac{-3f(x)+4f(h+x)-f(2h+x)}{2h}$

Réécriture par substitution

Expression symbolique **A**

`B = A.replace(`x`,`y`)` → **B** *s'obtient en remplaçant* x *par* y *dans* **A**
x *peut être un symbole, une fonction, ou autre chose**

Exemples :
`f(x).replace(x,y)` → `f(y)`
`(x**2).replace(x,x+y)` → `(x+y)**2`
`(x**2).replace(2,y+1)` → `x**(y+1)`
`f(x).replace(f,g)` → `g(x)`
`sb.cos(x).replace(sb.cos,lambda t : t**2)` → `x**2`

dico est un dictionnaire

`B = A.xreplace(dico)` → **B** *s'obtient en remplaçant simultanément dans* **A** *toutes les clefs de* **dico** *par les expressions correspondantes ; ces clefs sont des symboles, ou des « sous-expressions complètes »**

Exemples :
`(x+2*y).xreplace({x:y,y:x})` → `2*x+y`
`(x+2*y).xreplace({x:y,y:y+1})` → `3*y+2`
`(x+x**2).xreplace({x**2:y})` → `x+y`

Calcul littéral `V = sb.pi*r**2*h` **suivi d'une application numérique :**
`float(V.xreplace({r:0.1,h:0.2}))` → `≈ 6.283e-03`

(*) Voir ci-dessous : « Manipulation avancée d'expressions ».

Résultat symbolique → Fonction numérique

A est une expression symbolique contenant les symboles `x,y,z`

`Fnum = sb.lambdify((x,y,z), A, "numpy")` *définit une fonction numérique des variables* x, y *et* z

`Fnum = sb.lambdify((x,y,z), A, (dico,"numpy"))` *indique, à l'aide du dictionnaire* **dico**, *la correspondance entre les fonctions de* **sympy** *(en chaîne de caractères) et les fonctions numériques à utiliser. Des exemples sont donnés dans le tableau ci-dessous.*

Tableau de correspondance de quelques fonctions

`import scipy.special as sf`	(*certaines sont automatiques avec* `numpy`)
`"factorial" : sf.factorial`	`"atan2" : np.arctan2`
`"binomial" : sf.binom`	`"besselj" : sf.jn`
`"erf" : np.erf` *ou* `sf.erf`	`"bessely" : sf.yn`
`"erfinv" : sf.erfinv`	`"zeta" : sf.zeta`
`"sinc" : lambda x : np.sinc(x/np.pi)`	
`"lowergamma" : lambda s,x : sf.gamma(s)*sf.gammainc(s,x)`	

Matrices

`M = sb.Matrix(`*liste de listes*`)`

`M.det(), M.trace(), M.inv()` → *déterminant, trace, inverse*

`M.eigenvals()` → *valeurs propres, avec ordres de multiplicité*

`sb.diag(`$a_1,\ldots,a_n$`)` → *matrice diagonale de coef. diagonaux* $a_1, \ldots, a_n$

`M+N, a*M, M@N` → *somme, produit par un scalaire, produit matriciel*

La notion de vecteur n'existe pas en sympy ; il est assimilé indûment et confusément à une matrice-colonne et/ou à une matrice-ligne.

Manipulation avancée d'expressions

`A = 2*a*x+y**3`

`sb.srepr(A)` → $\underbrace{\text{Add(Mul(Integer(2),Symbol('a'),Symbol('x'))}}_{\text{sous-expression complète}},\underbrace{\text{Pow(Symbol('y'),Integer(3)))}}_{\text{sous-expression complète}}$

`A.func, A.args` → `sympy.core.add.Add, (2*a*x, y**3)`

`X,Y = sb.Wild("X"),sb.Wild("Y")` *symboles indéfinis*

`A.match(a*X+Y)` → `{X:2*x, Y:y**3}` (*dictionnaire*)

`A.replace(y**3,4*sb.sin(y))` → $2ax+4\sin(y)$