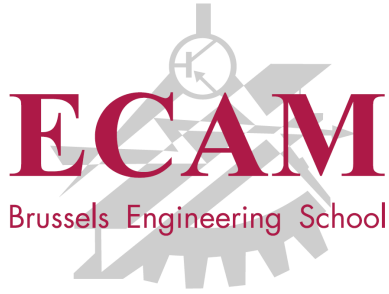


B216C Application de méthodes numériques

Séance 3

Calcul numérique en Python avec la librairie SciPy

Sébastien Combéfis

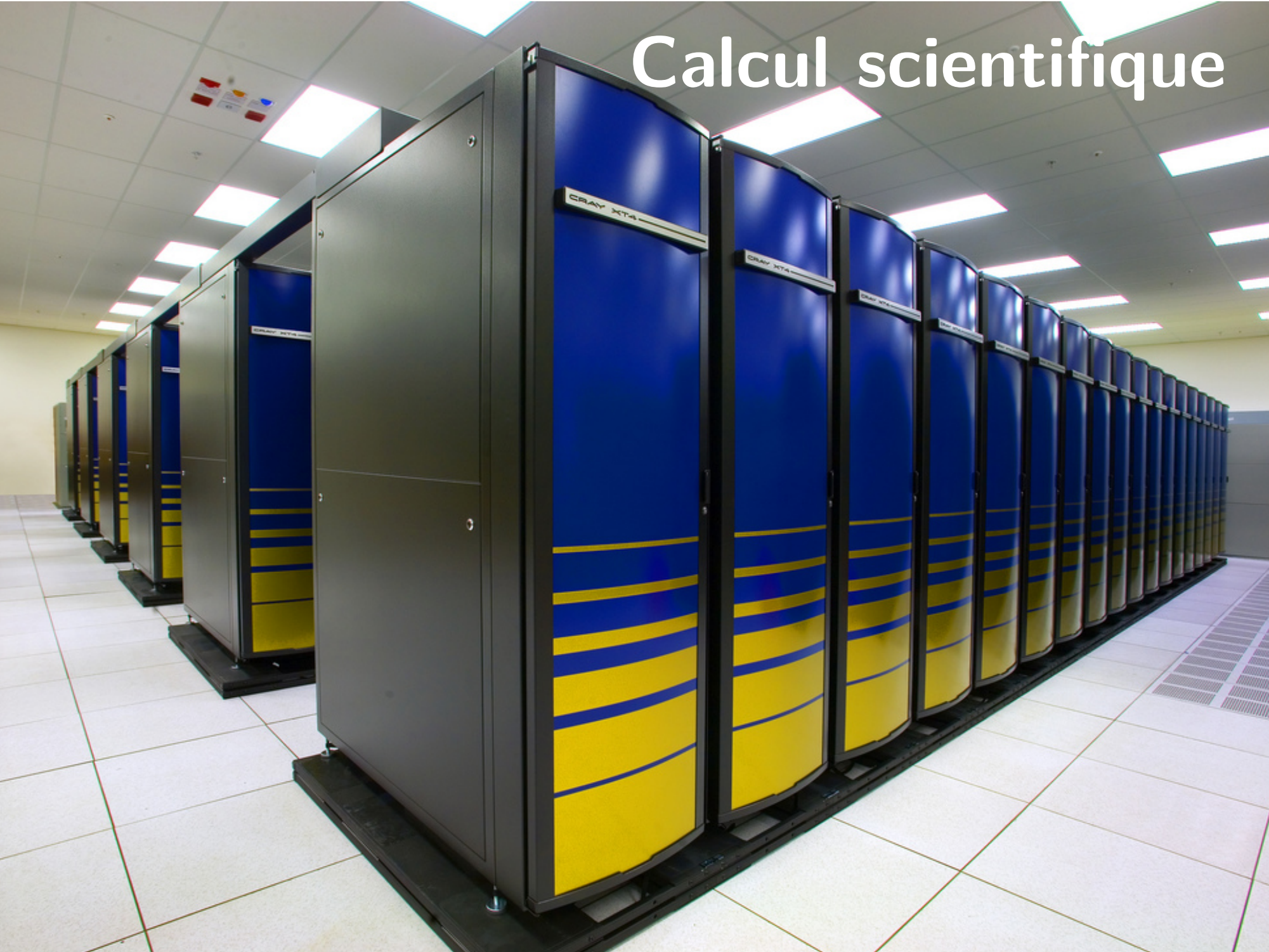
2017–2018

Objectifs

- Calcul numérique et symbolique avec la suite SciPy

  Présentation de l'écosystème logiciel scientifique

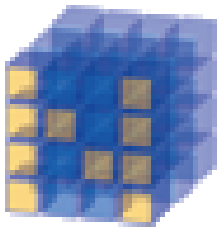
- Description détaillées de librairies de la suite SciPy
  - Librairie de base `numpy`
  - Dessin de graphes 2D avec `matplotlib`
  - Algorithmes et fonctions utilitaires dans `scipy`
  - Calcul symbolique à l'aide de `sympy`


Calcul scientifique

SciPy

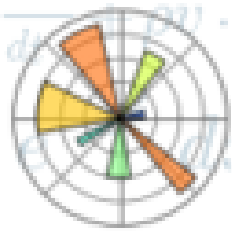
- Écosystème de logiciels pour les maths, sciences et ingénierie

  Collection de plusieurs librairies coordonnées



NumPy

SciPy



Matplotlib

IPython

SymPy

pandas

Librairie numpy

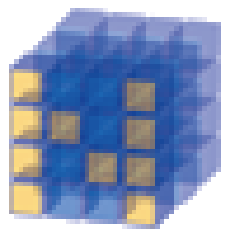
- Package de base pour le calcul scientifique

  Intégration facilitée de code C/C++ et Fortran

- De nombreuses fonctionnalités
  - Représentation de tableaux à N dimensions
  - Fonctions sophistiquées
  - Algèbre linéaire, transformée de Fourier
  - ...

- Disponible en open-source sur Sourceforge

  https://sourceforge.net/projects/numpy



Types de données

- Déclaration générale ou précision du nombre de bits

  Booléens et nombres entiers, flottants et complexes

```
1  import numpy as np
2
3  v = np.bool_(True)
4  w = np.int_(99)
5  x = np.int32(123)
6  y = np.float64(12.99)
7  z = np.complex_(3j+2)
8
9  print(x, y, z)
```

```
True 99 123 12.99 (2+3j)
```

Tableau

- Plusieurs manières de créer des tableaux de valeurs

  Depuis une structure Python, ou par des fonctions de `numpy`

```
1  print(np.array([1, 2, 3]))
2  print(np.array([[1, 2], [3, 4]]))
3  print(np.zeros(5))
4  print(np.ones((2, 3), dtype='int32'))
5  print(np.linspace(0, 2, 5))
```

```
[1 2 3]
[[1 2]
 [3 4]]
[ 0.  0.  0.  0.  0.]
[[1 1 1]
 [1 1 1]]
[ 0.   0.5  1.   1.5  2. ]
```

Opérations

- Plusieurs attributs disponibles sur les tableaux

Généralisation de l'opérateur d'indexation et de slicing

```
1  x = np.array([[1, 2], [3, 4], [5, 6]])
2
3  print(x.ndim)     # Dimension
4  print(x.shape)    # Forme
5  print(x.size)     # Nombre total d'éléments
6  print(x.dtype)    # Type de données stockées
7  print(x[0,1])
8  print(x[:,1])
```

```
2
(3, 2)
6
int64
2
[2 4 6]
```

Méthodes (1)

- Plusieurs méthodes disponibles sur les tableaux

  Essentiellement opérations matricielles et d'accès aux éléments

```
1  x = np.array([[1, 2], [3, 4], [5, 6]])
2
3  print(x.ndim)     # Dimension
4  print(x.shape)    # Forme
5  print(x.size)     # Nombre total d'éléments
6  print(x.dtype)    # Type de données stockées
7  print(x[0,1])
8  print(x[:,1])
```

```
2
(3, 2)
6
int64
2
[2 4 6]
```

Méthodes (2)

```
1  x = np.array([[1, 2], [3, 4], [5, 6]])
2
3  print(x.reshape((2, 3)))
4  print(x.transpose())
5  print(x.flatten())
6
7  y = x[[0,2],:]
8
9  print(y)
10 print(y.diagonal())
11 print(y.trace())
12 print(y.sum(axis=1))
13 print(2 * y)
```

```
[[1 2 3]
 [4 5 6]]
[[1 3 5]
 [2 4 6]]
[1 2 3 4 5 6]
[[1 2]
 [5 6]]
[1 6]
7
[ 3 11]
[[ 2  4]
 [10 12]]
```

Librairie `matplotlib`

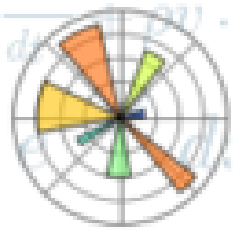
- Dessin de graphes 2D interactifs ou exportables

  Génération de figures de qualité prêtes pour publication

- De nombreuses fonctionnalités
  - Dessin de courbes
  - Histogrammes
  - Dessin 3D également possible
  - ...

- Disponible en open-source sur GitHub

  https://github.com/matplotlib/matplotlib



Dessin d'une fonction (1)

- Utilisation de la fonction `plot` pour dessiner des points

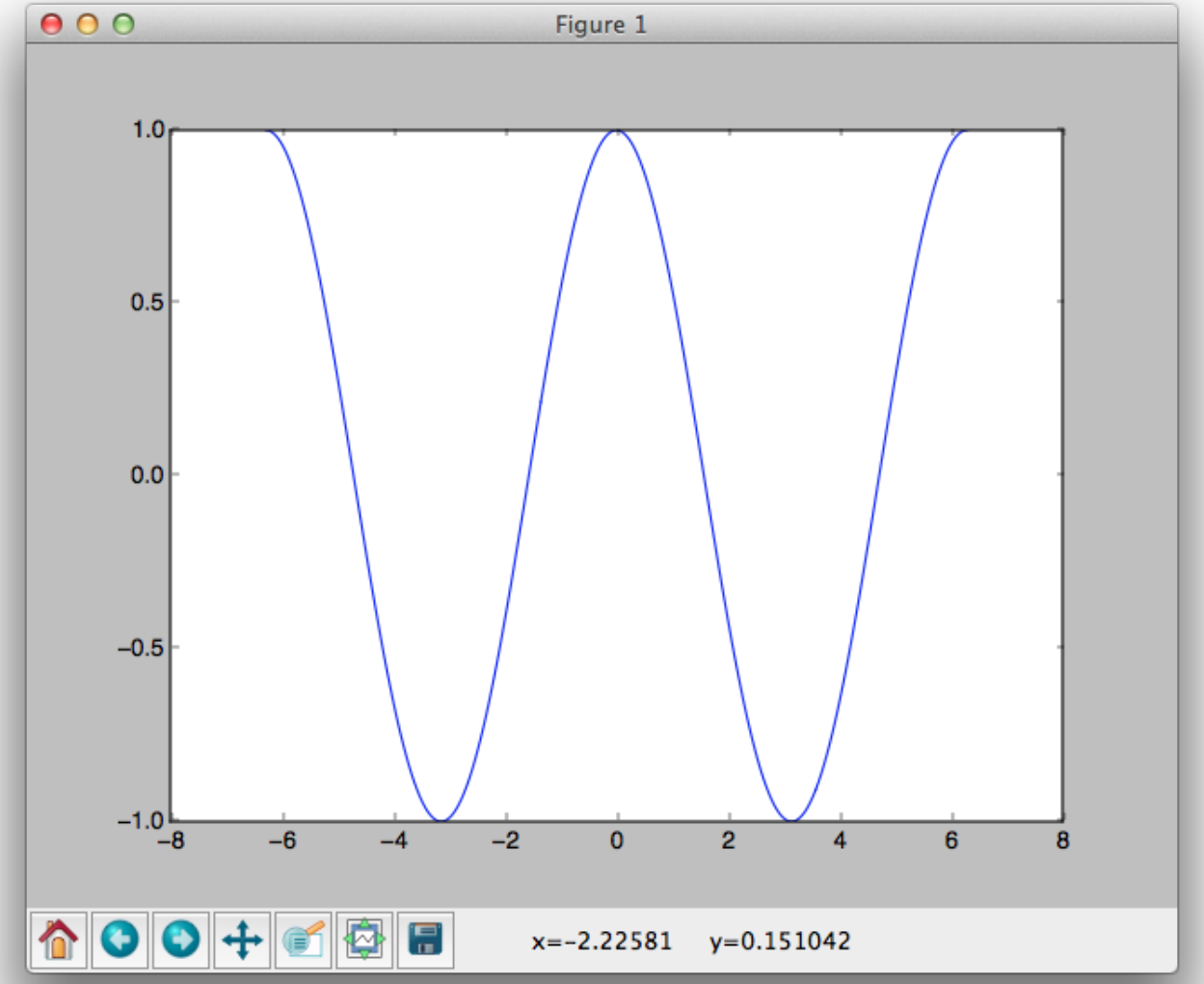
  Création des vecteurs de données avec `numpy`

- Ouverture de la fenêtre de dessin avec `show`

  Possibilité d'avoir plusieurs dessins dans la même fenêtre

```
1  import numpy as np
2  import matplotlib.pyplot as plt
3
4  x = np.linspace(-2*np.pi, 2*np.pi, 256, endpoint=True)
5  y = np.cos(x)
6
7  plt.plot(x, y)
8  plt.show()
```

Dessin d'une fonction (2)



Paramétrage des dessins (1)

- Configuration des courbes

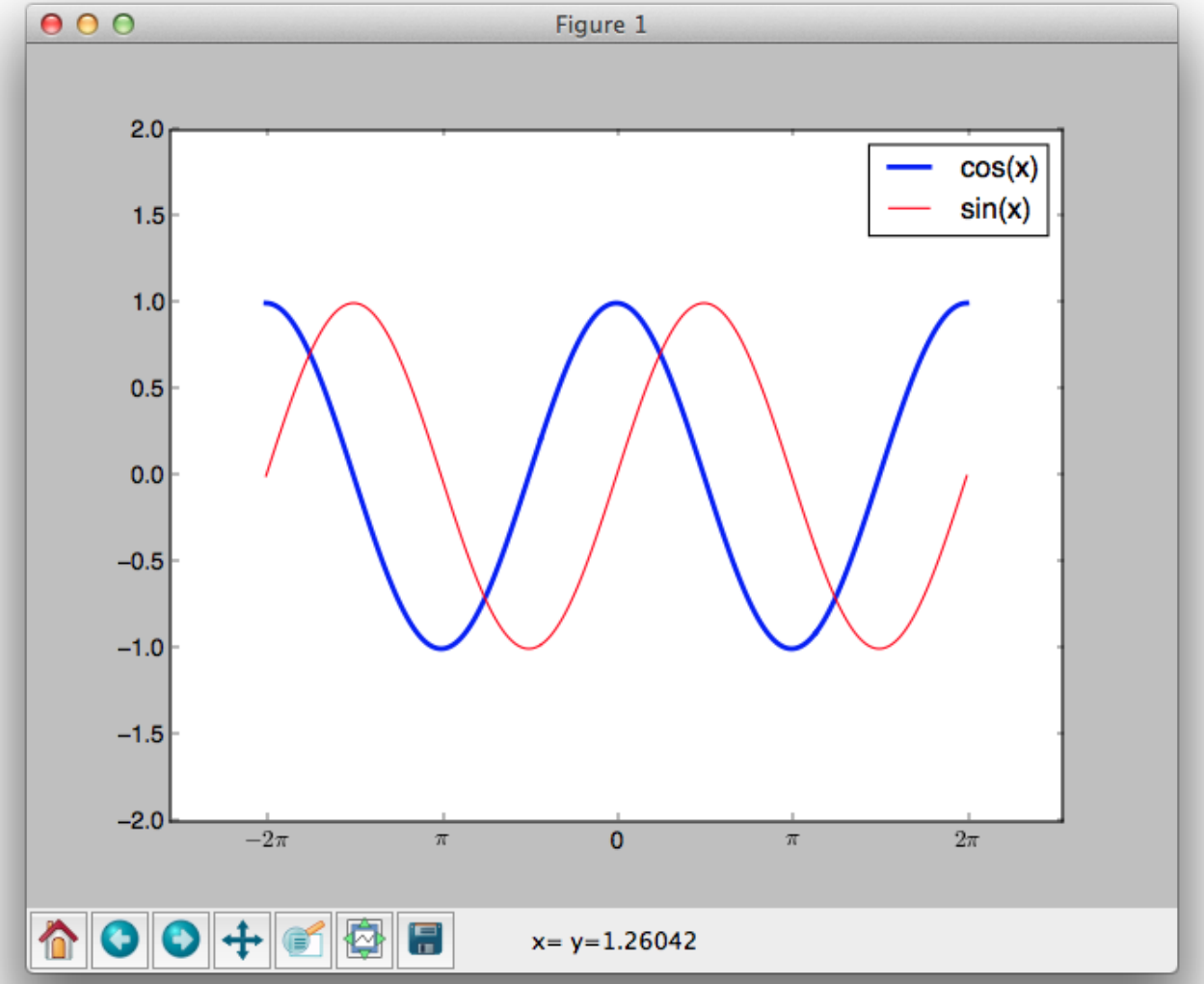
  Épaisseur et couleur du trait, texte légende

- Ajustement de la zone de dessin et autres éléments

  Limites des axes, ticks et texte (support LaTeX), légende

```
1  plt.plot(x, c, linewidth=2.5, label='cos(x)')
2  plt.plot(x, s, color='red', label='sin(x)')
3
4  plt.ylim(-2, 2)
5  plt.xticks(
6      [-2*np.pi, -np.pi, 0, np.pi, 2*np.pi],
7      [r'$-2\pi$', r'$\pi$', '0', r'$\pi$', r'$2\pi$']
8  )
9  plt.legend(loc='upper right')
```

Paramétrage des dessins (2)



Librairie `scipy`

- Package de base de la stack `scipy`

  Algorithmes et fonctions utilitaires construits sur `numpy`

- De nombreuses fonctionnalités
  - Intégration numérique
  - Optimisation
  - Distributions statistiques
  - ...

- Disponible en open-source sur GitHub

  https://github.com/scipy/scipy

Polynôme

- Polynôme représenté à l'aide de la fonction `poly1d`

Opérations et méthodes de manipulation des polynômes

```
1  from numpy import poly1d
2
3  p = poly1d([1, 2, -1])
4  print(p)
5  print(2 * p)
6  print(p ** 2)
7  print(p.deriv())
```

```
   2
1 x + 2 x - 1
   2
2 x + 4 x - 2
   4     3     2
1 x + 4 x + 2 x - 4 x + 1

2 x + 2
```

Vectorisation de fonction

- Transformer une fonction scalaire en fonction vectorielle

  Transformation complètement transparente

```
1  import numpy as np
2
3  def add(a, b):
4      return a + b
5
6  vec_add = np.vectorize(add)
7
8  x = [1, 2, 3]
9  y = [7, 8, 9]
10 print(vec_add(x, y))
```

```
[ 8 10 12]
```

Intégration numérique

- Intégration numérique avec `scipy.integrate`

  Spécification de la fonction à intégrer et des bornes

- Plusieurs méthodes d'intégration disponibles
  - `quad` calcule une intégrale définie
  - `romberg`, `trapz`, `simps`...

```
1 import scipy.integrate as integrate
2
3 r = integrate.quad(lambda x: -x + 1, 0, 1)
4 print(r)
```

```
(0.5, 5.551115123125783e-15)
```

Optimisation

- Optimisation de fonction avec `scipy.optimize`

  Spécification de la fonction à optimiser et de la méthode

```
1  from scipy.optimize import minimize
2
3  def obj(x):
4      return x ** 2 - x + 1
5
6  r = minimize(obj, 0, method='nelder-mead', options={'disp': True})
7  print(r.x)
```

```
Optimization terminated successfully.
         Current function value: 0.750000
         Iterations: 23
         Function evaluations: 46
[ 0.5]
```

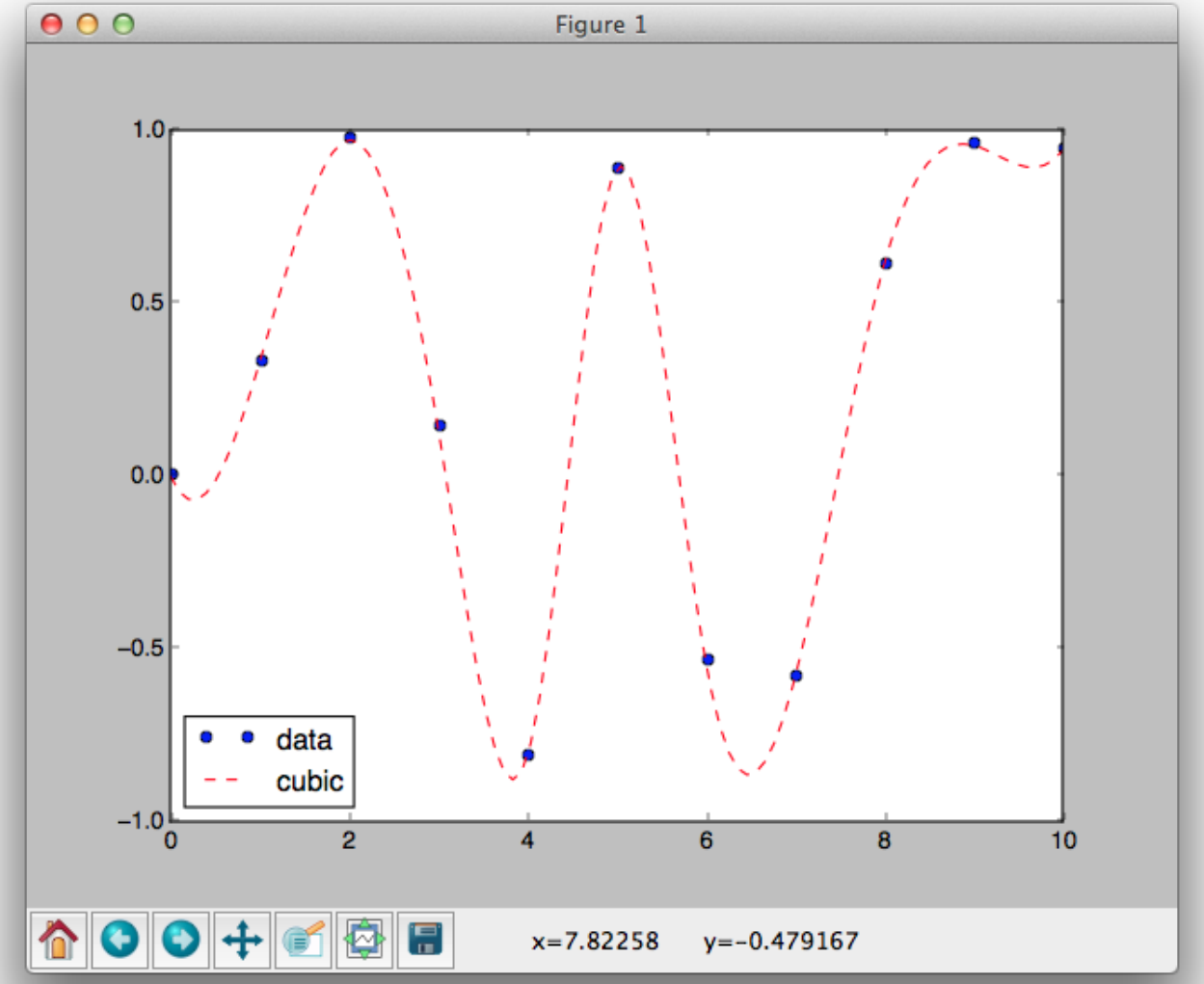
Interpolation

- Interpolation de points avec `scipy.interpolate`

  Plusieurs types de fonctions possibles

```
1  import matplotlib.pyplot as plt
2  import numpy as np
3  from scipy.interpolate import interp1d
4
5  x1 = np.linspace(0, 10, 11, endpoint=True)
6  y1 = np.sin(x1 ** 2 / 3)
7
8  f = interp1d(x1, y1, kind='cubic')
9  x2 = np.linspace(0, 10, 100, endpoint=True)
10
11 plt.plot(x1, y1, 'o', color='blue', label='data')
12 plt.plot(x2, f(x2), '--', color='red', label='cubic')
13 plt.legend(loc='best')
14 plt.show()
```

Interpolation (2)



Algèbre linéaire (1)

- Différences entre `numpy.arrays` et `numpy.ndarray`

```
1  import numpy as np
2  from scipy import linalg
3
4  A = np.array([[1, 2], [3, 4]])
5  b = np.array([[5], [6]])
6
7  print(A.T)
8  print(linalg.inv(A))
9  print(A * b)
10 print(A.dot(b))
11 print(linalg.det(A))
```

```
[[1 3]
 [2 4]]
[[-2.   1. ]
 [ 1.5 -0.5]]
[[ 5 10]
 [18 24]]
[[17]
 [39]]
 -2.0
```

Algèbre linéaire (2)

- Résolution de systèmes d'équations linéaires

  Résolution explicite lente ou spécifique rapide

```
1  import numpy as np
2  from scipy import linalg
3
4  A = np.array([[1, 2], [3, 4]])
5  b = np.array([[5], [6]])
6
7  print(linalg.inv(A).dot(b))
8  print(linalg.solve(A, b))
```

```
[[-4. ]
 [ 4.5]]
[[-4. ]
 [ 4.5]]
```

Librairie sympy

- Système de type Computer Algebra System (CAS)

  Complètement écrite en Python

- De nombreuses fonctionnalités
  - Polynôme, dérivée, intégrale, résolution équations
  - Combinatoire, math discrètes, algèbre matricielle
  - Géométrie, dessin de graphe
  - ...

- Disponible en open-source sur GitHub

  https://github.com/sympy/sympy

Déclaration des symboles

- Déclaration de symboles avec la fonction `symbols`

  Symboles séparés par un espace sous forme d'un `str`

- Importance de l'ordre de déclaration des symboles

  Objet de type `sympy.core.symbol.Symbol`

```
1  from sympy import *
2
3  x, y = symbols('x y')
4  print(x)
5  print(type(y))
```

```
x
<class 'sympy.core.symbol.Symbol'>
```

Substitution (1)

- Remplacement d'un symbole par une expression avec `subs`

  Appel de la méthode sur une expression

- La méthode `subs` renvoie des expressions symboliques

```
1  expr1 = 2 * x**2 - y + 1
2  expr2 = expr1.subs(x, 2)
3
4  print(expr1)
5  print(expr1.subs(x, y**2))
6  print(expr1.subs([(x, 2), (y, 9)]))
```

```
-y + 9
2*y**4 - y + 1
0
```

Substitution (2)

- Récupération d'un nombre flottant avec `evalf`

  Possibilité de substituer des valeurs et donner la précision

```
1  expr = 2 * x**2 - y + 1
2
3  expr.evalf(subs={x: 1, y: 1/3})
4  expr.evalf(4, subs={x: 1, y: 1/3})
```

```
2.66666666666667
2.667
```

Simplification

- Simplification d'une expression avec `simplify`

  Fonction générique qui choisit la meilleure technique

- Plusieurs types de simplifications spécialisés
  - Pour les polynômes : `factor` et `expand`
  - Pour les formules trigonométriques : `trigsimp`
  - ...

```
1 expr = 3 * x**2 + y * x**2 - 4 + sin(x)**2 + cos(x)**2
2 print(simplify(expr))
3 print(factor(simplify(expr), x))
```

```
x**2*y + 3*x**2 - 3
x**2*(y + 3) - 3
```

Analyse (1)

- Calcul de dérivée, intégrale et limite d'une expression

  Avec les fonctions `diff`, `integrate` et `limit`

- Spécification de la variable de dérivation, intégration...

```
1  expr = sin(x + 2*y)
2  print(diff(expr, x))
3  print(integrate(expr, y))
4  print(integrate(expr, (y, 0, pi/2)))
5  print(limit(expr, x, 0))
```

```
cos(x + 2*y)
-cos(x + 2*y)/2
cos(x)
sin(2*y)
```

Analyse (2)

- Fonction non évaluée avec `Derivative`, `Integral` et `Limit`

  Calcul avec la méthode `doit`

```
1  expr1 = Derivative(sin(x + 2*y), x)
2  print(type(expr1))
3  print(expr1.doit())
4
5  expr2 = diff(expr1, x)
6  print(expr2)
7  print(expr2.doit())
```

```
<class 'sympy.core.function.Derivative'>
cos(x + 2*y)
Derivative(sin(x + 2*y), x, x)
-sin(x + 2*y)
```

Résolution d'équations (1)

- Résolution d'équations et systèmes d'équations avec `solve`

  Spécification des équations et des variables

- Utilisation d'un objet `Eq` pour représenter une équation

  Mais pas nécessaire pour la résolution d'équations

```
1  expr = Eq(x ** 2, -4)
2  print(solve(expr))
3
4  print(solve([x + y - 2, 2*x - 1], (x, y)))
```

```
[-2*I, 2*I]
{x: 1/2, y: 3/2}
```

Résolution d'équations (2)

- Définition du domaine de recherche avec `solveset`

  Par exemple `S.Reals`, `S.Complexes`...

```
1  expr = Eq(x ** 2, -4)
2
3  print(solveset(expr, x, domain=S.Complexes))
4  print(solveset(expr, x, domain=S.Reals))
```

```
{-2*I, 2*I}
EmptySet()
```

Matrice

- Matrices représentées avec l'objet `Matrix`

  Éléments déclarés comme un liste de listes

- Plusieurs méthodes d'interrogation et manipulation

```
1  m = Matrix([[1, 2], [3, 4], [5, 6]])
2
3  print(M.shape)
4  M.row(0)
5  M.col(-1)
```

```
(3, 2)
Matrix([[1, 2]])
Matrix([
[2],
[4],
[6]])
```

Opérations matricielles

- Plusieurs opérations utilisables avec des opérateurs
  - Addition, soustraction, multiplication par un scalaire
  - Multiplication matricielle, exponentiation
- Transposition avec l'opérateur `.T`

```
1  A = Matrix([[1, 2], [3, 4]])
2  B = eye(2)
3
4  print(A + B)
5  print(2 * A)
6  print(A * B)
7  print(A ** 3)
8
9  print(A.T)
```

Crédits

- https://www.flickr.com/photos/berkeleylab/3592326251