Le calcul scientifique sous Python et Scilab

1. Les spécificités des langages pour le calcul scientifique

1.1. Python et Scilab

Le langage Python est un langage généraliste, disposant de bibliothèques puissantes en calcul numérique (scipy, numpy et matplotlib) permettant de l'utiliser dans le cadre du calcul scientifique. Plusieurs interfaces graphiques (Spyder, Eric, etc) permettent de travailler dans un environnement Python. Spyder est plus particulièrement conçu pour le calcul scientifique.

Scilab est d'abord un logiciel, proposant une interface graphique de travail et un langage de programmation. Semblable au logiciel Matlab, le logiciel Scilab est dédié au calcul scientifique pour la recherche et l'industrie. Il est moins généraliste que Python, mais dispose d'un outil de modélisation graphique (Xcos) permettant de manipuler des modèles numériques complexes, ce qui manque à Python.

1.2. Pourquoi un peu de C?

Le C et ses variantes est, de très loin, le langage le plus répandu en informatique. Il est néanmoins un peu plus rigide et complexe à manipuler pour l'apprentissage de la programmation (il n'est pas interactif par exemple).

Pour la programmation des micro-contrôleurs (utilisés en TP de SI), il est incontournable. C'est pourquoi le formulaire ci-dessous propose, pour un petit nombre de fonctionnalités indispensables pour la commande des systèmes embarqués, les expressions équivalentes en C.

1.3. Utilisation du formulaire

Le formulaire tente de couvrir en une page l'essentiel des commandes utiles dans le cadre du programme de CPGE. Chaque commande est illustrée en une ligne, permettant de se remémorer rapidement la syntaxe des fonctions dans chaque langage. Seules les commandes présentant le symbole \P sont raisonnablement à connaitre pour les concours.

Le symbole redirige vers une page proposant plus d'explications et d'exemples pour certaines commandes lorsque c'est utile. Le symbole renvoie vers une documentation officielle de la commande.

2. Formulaire

2.1. Manipulation globale

Description Python S		Scilab (
Importer un fichier	import file [2]	exec("fichier.sce") exec fichier.sce	
Lancer l'aide interactive	help()	help	
Afficher l'aide associée à la commande cosinus	help(cos)	help cos apropos cos	
Afficher x vsur la console interactive	print(x)	disp(x)	
Importer une bibliothèque	from bibliotheque import *	Menu > Applications ? > Gestionnaire de module - Atoms	
Définir • une fonction	<pre>def nomdelafonction(parametres): bloc d'instruction return resultat</pre>	<pre>function resultat=nomdelafonction(paramètres)? bloc d'instruction endfunction</pre>	
Interruption d'un programme pour débug	<pre>import pdb pdb.set_trace()</pre>	pause • ?	

2.2. Variables

Les variables sont dans les 3 langages, systématiquement associées à un type (et donc un espace mémoire alloué). Néanmoins, le typage est "dynamique" en Python et Scilab, c'est-à-dire que le type peut changer en fonction des besoins du calcul, tandis qu'il est statique en C (le type est choisi avant l'initialisation de la variable et ne peut plus être modifié par la suite, ce qui s'avère beaucoup plus simple et efficace pour la gestion de la mémoire).

Description	Python	Scilab	C
Obtenir le type d'une variable <i>a</i>	type(a) +?	type(a) typeof(a) inttype(a)	explicite dans le programme
Changement de type	int(a) float(a) str(a)	<pre>int(a) int8(a) int16(a) float32(a) float64(a)</pre>	?

Nombres

Nous passons sur les opérateurs classiques + - * / qui sont identiques dans les 3 langages (attention toutefois à la division de deux entiers qui est réalisée dans les entiers en C et en python 2.7, et dans R dans Scilab et en Python 3.3...). Il est nécessaire d'importer la bibliothèque math.h en C.

Description	Python	Scilab	C
Puissance <i>a</i> ^b	a**b	a^b	pow(a,b)
Reste ou modulo 🦞	a%b	modulo(a,b)	a%b
Division entière 🦞	a//b	floor(a/b)	a/b avec a et b entiers
Test égalité 💡	a == b	a == b	a == b
Inférieur (ou 🦞 égal)	a < b ; a <= b	a < b ; a <= b	a < b ; a <= b
Supérieur (ou	a > b ; a >= b	a > b ; a > =b	a>b ; a>=b
Différent 💡	a != b	a ~= b	a != b
ET 💡	a and b	a & b	a && b
ET bitwise	a & b	bitand(a,b)	a & b
OU 🦞	a or b	a b	a b
OU bitwise	a b	bitor(a,b)	a b
NON 💚	not a	~a	!a
NON bitwise	~a	bitcmp(a,8)	~a
OU exclusif	a ^ b	~(a == b)	!(a == b)
OU exclusif bitwise	a ^ b	bitxor(a,b)	a ^ b
décalage de 3	a << 3 ; a >> 3	a*2^3 ; floor(a/2^3)	a << 3 ; a >> 3
Affichage d'un mombre en binaire	bin(a)	dec2bin(a)	
Affichage d'un nombre en hexadécimal	hex(a)	dec2hex(a)	

Les fonctions mathématiques standards en python peuvent provenir de différents paquets. L'utilisation de l'option --pylab (automatiquement chargée sous Spyder) conduit à utiliser les fonctions des modules Numpy, Scipy et Matplotlib par défaut.

Description	Python	Scilab	С
	sqrt(a)	sqrt(a)	sqrt(a)
carrée			
cosinus 🦞	cos(a)	cos(a)	cos(a)
sinus	sin(a)	sin(a)	sin(a)
tangente	tan(a)	tan(<mark>a</mark>)	tan(a)
arcos arcsin	acos(a)	acos(a)	
	asin(a)	asin(<mark>a</mark>)	
arctangente	atan(a)	atan(<mark>a</mark>)	atan(a)
sur]-π/2,			
π/2[
arctangente	atan2(y,x)	atan(y,x)	atan2(x,y)
sur]-π, π]			
ch, sh, th	cosh(x)		cosh(x)
	sinh(x)		sinh(x)
	tanh(x)		tanh(x)
Logarithme	log(a)	log(a)	log(a)
Néperien (In)			
Logarithme	log10(a)	log10(a)	log10(a)
en base 10			
(log)			
Logarithme	log(a,n)	<pre>log(a)/log(n)</pre>	
en base <i>n</i>			
quelconque			
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·			<u> </u>

Calcul Scientifique sous Python et Scilab

Exponentielle e ^a	exp(a)	exp(a)	exp(a)
Arrondi entier	around(a) fix(a)	round(a) fix(a)	round(a)
Arrondi à l'entier supérieur	ceil(a)	ceil(a)	ceil(a)
Arrondi à l'entier inférieur	floor(a)	floor(a)	floor(a)
Générer un nombre ou une liste aléatoire	random.random() numpy.random.sample(10)	rand() rand(1,10)	<pre>int nb_rand; srand(time(NULL)); nb_rand=rand(); <module> Il peut</module></pre>
Constantes	pi e	%pi %e	

Le calcul en complexes est possible dans les langages Python et Scilab.

Description	Python	Scilab	С
imaginaire i	1j	%i	
Nombre complexes 3+4i	3+4j	3+4*%i	
Partie réelle de <i>a</i>	a.real	real(a)	
Partie imaginaire de <i>a</i>	a.imag	imag(a)	
Module	abs(a)	abs(a)	
Argument	arctan2(a.imag,a.real)	<pre>atan(imag(a),real(a))</pre>	
Conjugué de <i>a</i>	a.conj()	conj(a)	

Tableaux

Le calcul numérique s'appuie intensivement sur des tableaux de valeurs, soit pour représenter des signaux, soit pour représenter des vecteurs et des matrices. Les tableaux peuvent avoir une ou plusieurs dimensions

La syntaxe de Scilab est fortement orienté vers la manipulation de tableau. Elle est en ce sens très pratique et lisible.

Python propose quant à lui trois types possibles pour manipuler des données sous forme de tableaux : les listes (à une ou plusieurs dimensions), le type "array", et le type "matrix". Des conversions sont possibles entre ces types. Il est conseillé dans le cadre du calcul numérique (pour des raisons pratiques et d'efficacité des calculs) d'utiliser le type "array". C'est ce qui est considéré par la suite.

Attention, en Python et en C, les indices des tableaux commencent à 0 tandis qu'en Scilab, ils commencent à 1.

Description	Р	Python	Scilab	С
Vecteur ligne	₩ V:	r=array([1, 2, 3])	v=[1, 2, 3] ou	v=[1, 2, 3] ??
			[1 2 3]	
Vecteur	₩ V:	r=array([[1],[2],[3]])	v=[1; 2; 3]	
colonne		r=array([1, 2, 3])[:,newaxis]		
	V	=array([1, 2, 3]).reshape(-1,1)		

Tableau à 2 dimensions	•	M=array([[1,2,3],[4,5,6]])	M=[1, 2, 3; 4, 5, 6]	
Accéder à un élément		v[0], M[0,1]	v(1), M(1,2)	v(3) ????
Accéder au dernier élément, et l'avant dernier		v[-1], v[-2]	v(\$), v(\$-1)	
Dimensions d'un tableau	•	M. shape	size(M)	
Extraire la 2ème ligne ou 2ème colonne		M[1,:] ou M[:,1]	M(2,:) ou M(:,2)	
Extraire une portion de tableau (2 premières colonnes)	₩	M[:,0:2]	M(:,1:2)	
Extraire des éléments d'un tableau par leur indices		M[0,(2,1)]	M([1],[3,2])	
Séquence équirépartie d'entiers	€	range(1,11)	1:10	
Séquence équirépartie quelconque		arange(0,10.1,0.1)	0:0.1:10	
Tableau de zéros		zeros((2,3),float)	zeros(2,3)	
Tableau de uns	•	ones((2,3),float)	ones(2,3)	
Copier un tableau dans une autre variat		w=v.copy()	W=V	
Multiplication élément par élément	€	V*W	v.*w	
Maximum et minimum d'un tableau		v.max(0), v.min(0)	<pre>max(v), min(v)</pre>	
Indice <i>i</i> du maximum		v.argmax(0)	[m,i] = max(v)	

Matrices

Description	Python	Scilab	С
Produit matriciel 💡	dot(v,w)	v*w	
Transposée 💗	M.transpose()	M'	
Résolution de système watriciel M.X=Y	linalg.solve(M,Y)	X=M\Y	?
Produit scalaire de deux vecteurs	vdot(v,w)	v'*w	
Produit vectoriel	cross(v,w)	cross(v,w)	?
Déterminant	linalg.det(M)	det(M)	
Inverse	linalg.inv(M)	inv(M)	
Valeurs propres	<pre>linalg.eig(M)[0]</pre>	spec(M)	
Vecteurs propres	linalg.eig(M)[1]	[v,l] = spec(M)	?
Rang	rank(M)	rank(M)	

Listes

Description	Python	Scilab	С
Définir une liste	liste1 = [M,v]	<pre>liste1 = list(M,v)</pre>	?
Sélectionner par position	listel[i]	listel(i)	
Supprimer un élément	<pre>del liste1[i]</pre>	L(i)=null()	

Dictionnaires et structures

Ce sont des listes un peu plus complexes en ce que chacun des éléments qui le compose est au moins composé de 2 membres, l'un étant la clé, l'autre la valeur.

En python, le dictionnaire est embrassé par des accolades { }.

Scilab propose aussi des structures indicées (cell()) qui ne seront pas développées ci-dessous (car plus ou moins équivalentes à une liste).

Description	Python	Scilab
Définir un dictionnaire	D1 = {'Scal': 5, 'Vect': array([1,2,3])}	S1=struct('Scal', 5, 'Vect', [1,2,3])
Obtenir ou changer un élément	D1['Scal'] = 1 + D1['Vect'][2]	S1.Scal = 1 + S1.Vect(3)
Supprimer un élément		S1.Scal=null()

Chaînes de caractères

En C il faut utiliser la bibliothèque string.h.

Description	Python	Scilab	С
Définir une vana chaîne de caractères	mot="Python et Scilab"	mot="Python et Scilab"	mot="Python et Scil
Longueur v d'une chaîne	len(mot)	length(mot)	strlen(mot)
Extraire	mot[2:7]	part(mot,[1,2,11:16])	
9	<pre>mot="python" + "/" + "Scilab"</pre>	<pre>mot="python" + "/" + "Scilab"</pre>	strcat(mot1,mot2)
Concaténation			
Replacer une portion de chaîne	<pre>mot.replace("Scilab","C")</pre>	<pre>strsubst(mot, "Scilab", "C")</pre>	
Découper une chaîne de caractères	<pre>mot.split(" ")</pre>	<pre>strsplit(mot," ")</pre>	
Supprimer des caractères de retour à la ligne	<pre>mot.rstrip("\n\r")</pre>		

2.3. Structures de contrôle

Boucles

Description	Python	Scilab	C
Boucle FOR	<pre>for i in range(10): print(i)</pre>	<pre>for i=1:10 disp(i); end</pre>	<pre>for (i=1;i<=10;i++){ printf("%d",i); }</pre>
Boucle WHILE	<pre>i=0 while (i<10): i+=1 print(i)</pre>		<pre>int i =10; while (i<10){ printf("%d",i); i++; }</pre>
Interruption d'une boucle	break	break [2	break

Conditions

Description	Python	Scilab	С
Condition IF	<pre>if (i>3): print(i) else print("hello")</pre>	<pre>if (i>3) then disp(i) else disp("hello") end</pre>	<pre>if (i>3){ printf("%d",i); } else{ printf("hello"); }</pre>
Condition CASE		<pre>select i, case 1 then disp("Egal à 1"); case 2 then disp("Egal à 2"); else disp("Aucun des deux"); end</pre>	<pre>switch(i) { case 2: { b=b+1; } break; case 3: { b=b+5; } break; default: { b=0; } }</pre>

Fonctions

Descripti	on Pyt	:hon	Scilab	(
Définir	₩ def	nomdelafonction(param <mark>è</mark> tres):	<pre>function resultat=nomdelafonction(paramètres</pre>) ?
une		bloc d'instructions	bloc d'instructions	
fonction		return resultat	endfunction	

2.4. Courbes

Courbes 2D

En Python, il est parfois nécessaire d'exécuter la commande show() pour afficher le graphique après l'appel à la commande plot().

Description	Python	Scilab	С
Tracé d'une courbe $y \in \mathcal{A}$ ou (x,y)	plot(y) ou plot(x,y)	plot(y) ou plot(x,y)	?
Tracé de points (o) rouges (r) reliés par des lignes (-)	plot(x,y,"-or")	plot(x,y,"-or")	?
Effacer le graphique 🦞	clf()	clf	?

Calcul Scientifique sous Python et Scilab

Ouvrir une nouvelle figure	figure(3)	figure(3)	
Échelle logarithmique en X	semilogx(x,y)	plot2d("ln",x,y)	
Échelle logarithmique en X et Y	loglog(x,y)	plot2d("ll",x,y)	

Courbes 3D

2.5. Fichiers

Fichiers textes

Description	Python	Scilab C
Ouvrir un fichier texte en lecture/écriture	<pre>fic=open("fichier.txt","r") fic=open("fichier.txt","w")</pre>	<pre>fic=mopen("fichier.txt","r") fic=mopen("fichier.txt","w")</pre>
Fermer un 💗 fichier	fic.close()	close(fic)
Lire une ou Plusieurs lignes	<pre>ligne=fic.readline() lignes=fic.readlines()</pre>	<pre>ligne=mgetl(f,1) lignes=mgetl(f)</pre>
Lire un tableau formaté	<pre>a,b=loadtxt("Fichier.txt", usecols = (0,2), dtype={ 'names': ('numero', 'consigne'), 'formats': ('i2', 'f4')}, delimiter=',', unpack=True)</pre>	Tableau=mfscanf(-1,fic,"%d,%f,%f")
Écrire une 🦞 ligne	<pre>fic.write("il fait {:f} degres.\n"\ .format(10))</pre>	<pre>mfprintf(fic,"il fait %f degres.\n",10)</pre>
Écrire un tableau formaté	<pre>for i in range(len(x)) fic.write("{:d},{:f},{:f}\n"\ .format(i,x[i],y[i])</pre>	mfprintf(fic,"%d,%f,%f",1:100,x,y)

Fichiers binaires

Description	Python	Scilab	С
Sauver des variables dans un fichier binaire	<pre>import pickle fic=open("fichier.pick","wb") pickle.dump(a,fic) pickle.dump(b,fic) fic.close()</pre>	save("fichier.dat",a,b)	
Recharger des variables du fichier binaire	<pre>import pickle fic=open("fichier.pick","rb") pickle.load(a,fic) pickle.load(b,fic) fic.close()</pre>	<pre>load("fichier.dat","a","b") [2]</pre>	
Ouvrir un fichier binaire en lecture/écriture	<pre>fic=open("fichier.txt","rb") fic=open("fichier.txt","wb")</pre>	<pre>fic=mopen("fichier.txt","rb") fic=mopen("fichier.txt","wb")</pre>	
Lire 3 octets dans un fichier binaire	octets=fic.read(3)	octets=mget(3,"c",fic)	
Écrire des octets dans un fichier binaire	<pre>fic.write("PCSI") fic.write(int8(83)) fic.write(float32(2.3))</pre>	<pre>mput(ascii("PCSI"),"c",fic) mput(83,"i",fic) mput(2.3,"f",fic)</pre>	

Images

La lecture et l'écriture d'image sous python est relativement simple par la bibliothèque scipy.misc, chargé automatiquement par l'option --pylab ou par spyder. Les formats supportés sont jpg, bmp, ????. Des bibliothèques plus élaborées existent (PIL par exemple) mais ne sont pas abordées ici.

La lecture et l'écriture d'image sous Scilab nécessite l'installation par Atoms du module SIVP (image and vidéo processing). La plupart des formats sont supportés.

Les images sont ensuite manipulées dans le programme sous forme de tableau.

Description	Python	Scilab	С
Ouvrir une image	<pre>im=imread("image.jpg")</pre>	<pre>im=imread("image.jpg")</pre>	?
Enregistrer une image	<pre>imsave("image.jpg",im)</pre>	<pre>imwrite(im,"image.jpg")</pre>	?
Afficher une image	imshow(im)	imshow(im)	?
Taille de l'image	im.shape	size(im)	?

2.6. Calcul numérique

Description	Python	Scilab	C
Intégration numérique d'une fonction $f(x)$ de x_0 à	??	<pre>integrate("sin(x)","x",x0,x1)</pre>	
x_1			
Intégration par la méthode des trapèzes	<pre>trapz(y[, x, dx, axis])</pre>	<pre>inttrap(x,y)</pre>	
Dérivation numérique d'une fonction f(x)	??	derivative(f,x)	
Différences finies	diff(a[, n, axis])	numdiff(y,x)	
Solution d'une équation non linéaire $f(x)=0$??	fsolve(x0,f)	
Minimisation d'une fonction f(x)	??	optim(f,x0)	
Intégration numérique d'une équation différentielle ordinaire (ODE) $\frac{dx}{dt}$ = f(x,t)	??	ode(x0,t0,t,f)	
Intégration numérique d'une équation différentielle algébrique (DAE) $f(x, \frac{dx}{dt}, t) = 0$	<u>??</u>	dae(x0,t0,t,f)	

préparatoires.

Sommaire

- 1. Les spécificités des langages pour le calcul scientifique

 - 1.1. Python et Scilab1.2. Pourquoi un peu de C ?
 - 1.3. Utilisation du formulaire
- 2. Formulaire
 - 2.1. Manipulation globale
 - 2.2. Variables

Nombres

Tableaux

Matrices

Listes

Dictionnaires et structures

Chaînes de caractères

2.3. Structures de contrôle

Boucles

Conditions

Fonctions

2.4. Courbes

Courbes 2D

Courbes 3D

2.5. Fichiers

Fichiers textes

Fichiers binaires

Images

2.6. Calcul numérique