Stage CPP Python

Python et calcul scientifique

Jean-Baptiste Durand (Jean-Baptiste.Durand@imag.fr)

Contributions de Benjamin Wack, Matthieu Moy

Grenoble INP / Ensimag

Août 2014

Sommaire

1 Les outils
- Aide au développement en python
- Documentation et aide

2 Bibliothèque numpy
- Calcul matriciel
- Visualisation et tracé de courbes
- Équations, équations différentielles ordinaires

Environnement de développement intégré (IDE)

- Python
  - un simple interpréteur de commandes
  - pas d'éditeur
  - pas de rappel et complétion de commandes
- Spyder
  - inclut toutes les bibliothèques intéressantes
  - éditeur de texte adapté à python
  - facilite la compréhension de programmes à l'exécution

Un point fort des IDE : débogueur

- Pas à pas et explorateur de variables

Un point fort des IDE : débogueur

- Pas à pas et explorateur de variables
- Points d'arrêt

Un point fort des IDE : débogueur

- Pas à pas et explorateur de variables
- Points d'arrêt
- Appels de fonctions

Exemple : suite récurrente

$$U_0 = 0,1.$$

$$\forall n \in \mathbb{N},\ U_{n+1} = \exp\left(-\frac{1}{U_n^2}\right)$$

Sommaire

1 Les outils
- Aide au développement en python
- Documentation et aide

2 Bibliothèque numpy
- Calcul matriciel
- Visualisation et tracé de courbes
- Équations, équations différentielles ordinaires

Listing des fonctions et constantes

- Pour accéder au contenu d'un module :

```
>>> import math
>>> dir(math)
['__doc__', '__file__', '__name__', '__package__',
'acos', 'acosh', 'asin', 'asinh', 'atan'...]
```

- Mais aussi :

```
>>> l = [42, True, 3]
[42, True, 3]

>>> dir(l)
# renvoie la liste des methodes et attributs de l
```

Aide embarquée

- Un doute sur une fonction ?

```
>>> help(math.floor)
Help on built-in function floor in module math:

floor(...)
    floor(x)

    Return the floor of x as a float.
    This is the largest integral value <= x.
```

- On peut même le faire directement sur le module pour avoir toute l'aide :

```
>>> help(math)
```

Aide embarquée (suite)

- Et de même :

```
>>> help(l)
# la documentation de toutes les methodes de l

>>> help(l.append)
# la documentation d'une methode
```

- Ce n'est pas réservé aux modules/fonctions fournis.

```
>>> def f(x):
        "Voici une fonction peu utile."
        return x
>>> help(f)
Help on function f in module __main__:

f(x)
    Voici une fonction peu utile.
```

Sommaire

1 Les outils
- Aide au développement en python
- Documentation et aide

2 Bibliothèque numpy
- Calcul matriciel
- Visualisation et tracé de courbes
- Équations, équations différentielles ordinaires

numpy

```
from numpy import *
```

```
>>> exp(range(0, 3))
array([ 1.          ,  2.71828183,  7.3890561 ])
```

ou bien `import numpy as np`

```
>>> np.exp(range(0, 3)) # noter le np.exp
array([ 1.          ,  2.71828183,  7.3890561 ])
```

numpy.array

Objet central : `numpy.array`

- tableau homogène multidimensionnel

```
>>> a = zeros( (2,3) )
array([[0.,  0.,  0.],
       [0.,  0.,  0.]])
```

- Opérations naturelles sur les matrices

```
>>> 2*[1, 2] + [3, 4]
```

numpy.array

Objet central : numpy.array

- tableau homogène multidimensionnel

```
>>> a = zeros( (2,3) )
array([[0.,  0.,  0.],
       [0.,  0.,  0.]])
```

- Opérations naturelles sur les matrices

```
>>> 2*[1, 2] + [3, 4]
[1, 2, 1, 2, 3, 4]
>>> 2*array([1, 2]) + array([3, 4])
array([5, 8])
```

- Traitement (un peu) simplifié du partage
- `a[m:n]` est une *vue* d'une partie de `a`
- `a.copy()` est totalement disjoint de `a`

numpy.array (suite)

Utiliser `numpy.array`

- Création : un peu comme une liste de listes...

```
>>> A = np.array([[1, 2], [3, 4], [5,6]])
>>> A
array([[1, 2],
       [3, 4],
       [5, 6]])
```

numpy.array (suite)

Utiliser numpy.array

- Création : un peu comme une liste de listes...

```
>>> A = np.array([[1, 2], [3, 4], [5,6]])
>>> A
array([[1, 2],
       [3, 4],
       [5, 6]])
```

- ... mais l'indexation comme une matrice est possible

```
>>> A[0,1]
2
>>> A[0][1]
2
```

- Voir aussi : ex_numpy.py

Fonctions utiles

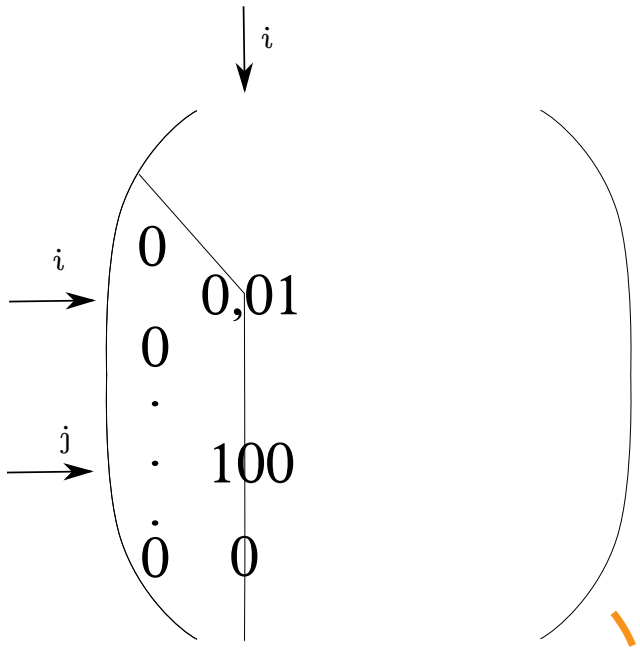
- Création et manipulation des tableaux
  - `zeros((n, p))`
  - `eye(n)`
  - `random.random((n, p))`
  - `fromfunction(f, (n, p))`
  - `a.transpose()` ou `a.T`
  - `dot(a, b)`
- Voir aussi : TP 5 CPP (pivot de Gauss).
  PDF protégé par mot de passe.
- Sous-bibliothèque `numpy.linalg`
  - `inv(a)`
  - `solve(a, b)`
  - `qr(a)`
  - `scipy.linalg.lu(a)`
  - `eigvals(a)`

Le TP pivot de Gauss en bref

- Résolution de systèmes d'équations linéaires.

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -1 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & -4 & 1 & 1 & 6 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 2 \\ 3 & 1 & 1 & 2 & 1 \end{array}\right) \Leftrightarrow \left\{\begin{array}{l} x - y + 2z + t = 1 \\ 2x - 4y + z + t = 6 \\ x - y + z - t = 2 \\ 3x + y + z + 2t = 1 \end{array}\right.$$

- Itérations sur les lignes de la matrice
- À l'itération i, matrice de la forme $\longrightarrow$
- Choix du pivot :
  * coefficient $A[i,i]$ (si $\neq 0$, sinon permuter la ligne L_i avec une ligne L_j, $j > i$) $\rightarrow$ pivot normal.
  * systématiquement permuter la ligne L_i avec la ligne L_j, $j > i$ de $|A[i,j]|$ maximal $\rightarrow$ pivot partiel.



Sommaire

1 Les outils
- Aide au développement en python
- Documentation et aide

2 Bibliothèque numpy
- Calcul matriciel
- Visualisation et tracé de courbes
- Équations, équations différentielles ordinaires

matplotlib

- Utilisation générale

```
import matplotlib.pyplot as pl

pl.plot([x1, x2, x3], [y1, y2, y3])

pl.title('Une jolie ligne brisée')
pl.grid()
pl.ylabel('Cette grandeur dépend')
pl.xlabel('de celle-ci')
...
pl.savefig('mongraphe.pdf')
pl.show()
```

matplotlib (suite)

- Discrétisation :

```
>>> x = numpy.arange(0, 1.1, 0.2)
array([ 0., 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1. ])
```

- Remarque utile : on peut appliquer toutes les fonctions de numpy à un tableau.

```
>>> sin([ 0, pi/4, pi/3, pi/2 ])
array([ 0. , 0.70710678, 0.8660254 , 1. ])

>>> pl.plot(x, sin(x))
```

- Et sinon `fv = np.vectorize(f)` fait l'affaire !
- `y = list(map(f, x))` fonctionne aussi pourvu que `x` soit une liste.

Sommaire

1 Les outils
- Aide au développement en python
- Documentation et aide

2 Bibliothèque numpy
- Calcul matriciel
- Visualisation et tracé de courbes
- Équations, équations différentielles ordinaires

scipy

- Résolution numérique d'équations `scipy.optimize`
  - dichotomie : `scipy.optimize.bisect(f, a, b)`
  - Newton : `scipy.optimize.newton(f, x0 [, f', f''])`
  - plusieurs variables :

```
def f(x) : return (x[0] + x[1]**2,
                   1 - x[1] + x[0]**2)
scipy.optimize.fsolve(f, (0, 0))
```

- Calcul d'intégrales `scipy.integrate` (trapèzes, Simpson)
- Equations différentielles `scipy.integrate.odeint`

Équations différentielles : `odeint`

- L'équation est donnée sous la forme $Y'(t) = F(Y(t), t)$ où F prend t comme *deuxième* argument :

```
>>> def f(y, t): y
```

ou encore

```
>>> f = lambda y, t: y
```

- On renvoie un tableau `ndarray` de valeurs approchées pour y.

```
>>> odeint(f, y0=1, t=np.linspace(0,10,1000))
array([[1.00000000e+00],[1.01006030e+00], ... ,
       [2.20264698e+04]])
```

- Condition initiale : $y(t[0]) = y0$
- En toute généralité y est un vecteur (pour pouvoir se ramener à l'ordre 1) donc `odeint` renvoie un tableau bidimensionnel.
- Pour ne récupérer ensuite qu'une composante on utilise un slice : `y[:,0]`