Analyse scientifique avec Python

Version Juin 2017

Yannick Copin

30/06/17, 05:29

Table des matières

CHAPITRE 1

Introduction

Version École d'été Euclid 2017 du 29/06/17, 06 :38
Auteur Yannick Copin <ipnl.in2p3.fr>

Pourquoi un module d'analyse scientifique ?

— Pour *générer* ses données, p.ex. simulations numériques, contrôle d'expériences ;
— Pour *traiter* ses données, i.e. supprimer les artefacts observationnels ;
— Pour *analyser* ses données, i.e. extraire les quantités physiques pertinentes, p.ex. en ajustant un modèle ;
— Pour *visualiser* ses données, et appréhender leur richesse multi-dimensionnelle ;
— Pour *présenter* ses données, p.ex. générer des figures prêtes à publier.

Ce module s'addresse donc avant tout aux futurs expérimentateurs, phénoménologistes ou théoriciens voulant se frotter à la réalité des observations.

Pourquoi Python ?

Les principales caractéristiques du langage Python :
— Syntaxe simple et lisible : langage pédagogique et facile à apprendre et à utiliser ;
— Langage interprété : utilisation interactive ou script exécuté ligne à ligne, pas de processus de compilation ;
— Haut niveau : typage dynamique, gestion active de la mémoire, pour une plus grande facilité d'emploi ;
— Multi-paradigme : langage impératif et/ou orienté objet, selon les besoins et les capacités de chacun ;
— Logiciel libre et ouvert, largement répandu (multi-plateforme) et utilisé (forte communauté) ;
— Riche bibliothèque standard : *Batteries included* ;
— Riche bibliothèque externe : de nombreuses bibliothèques de qualité, dans divers domaines (y compris scientifiques), sont déjà disponibles.

L'objectif est bien d'apprendre *un seul* langage de haut niveau, permettant tout aussi bien des analyses rapides dans la vie de tous les jours – quelques lignes de code en intéractif – que des programes les plus complexes (projets de plus de 100000 lignes).

Liens :

— Getting Started
— Python Advocacy

Index

— genindex
— search

CHAPITRE 2

Initiation à Python

Table des matières

Introduction

Installation

Cette introduction repose essentiellement sur les outils suivants :

— Python 2.7 (inclus l'interpréteur de base et la bibliothèque standard)
— les bibliothèques scientifiques Numpy et Scipy,
— la bibliothèque graphique : Matplotlib,
— un interpréteur évolué, p.ex. ipython,
— un éditeur de texte évolué, p.ex. emacs, vi, gedit ou Atom.

Ces logiciels peuvent être installés indépendamment, de préférence sous Linux (p.ex. Ubuntu ou votre distribution préférée), ou sous Windows ou MacOS. Il existe également des distributions « clés en main » :

— Python(x,y) (Windows)
— Enthought Canopy (Windows, MacOS, Linux, gratuite pour les étudiants du supérieur)

Notions d'Unix

Les concepts suivants sont supposés connus :

— ligne de commande : éxécutables et options
— arborescence : chemin relatif (`[./]...`) et absolu (`/...`), navigation (**`cd`**)
— gestion des fichiers (**`ls`**, **`rm`**, **`mv`**) et répertoires (**`mkdir`**)
— gestion des éxécutables : `$PATH`, **`chmod +x`**
— gestion des processus : `&`, `Control-c`, `Control-z` + **`bg`**
— variables d'environnement : **`export`**, `.bashrc`

Liens :

— Quelques notions et commandes d'UNIX
— Introduction to Unix Study Guide

L'invite de commande

Il existe principalement deux interpréteurs intéractifs de commandes Python :

— **`python`** : interpréteur de base :

```
$ python
Python 2.7.6 (default, Mar 22 2014, 22:59:56)
[GCC 4.8.2] on linux2
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>>
```

  — `Control-d` pour sortir
  — `help(`*`commande`*`)` pour obtenir l'aide d'une commande
  — *A priori*, pas d'historique des commandes ni de complétion automatique.

  L'interpréteur de base permet également d'interpréter un « script », càd un ensemble de commandes regroupées dans un fichier texte (généralement avec une extension `.py`) : `python` *`mon_script.py`*

— **`ipython`** : interpréteur évolué (avec historique et complétion automatique des commandes) :

```
$ ipython
Python 2.7.12 (default, Nov 19 2016, 06:48:10)
Type "copyright", "credits" or "license" for more information.

IPython 5.3.0 -- An enhanced Interactive Python.
?         -> Introduction and overview of IPython's features.
%quickref -> Quick reference.
help      -> Python's own help system.
object?   -> Details about 'object', use 'object??' for extra details.

In [1]:
```

- `Control-d` pour sortir
- `Tab` pour la complétion automatique
- `Haut` et `Bas` pour le rappel des commandes
- Aide ipython : `object?` pour une aide sur un objet, `object??` pour une aide plus complète (au niveau source)
- Commandes *magic* (voir `%magic`) :
  - `%run` *`mon_script.py`* pour éxecuter un script *dans* l'interpréteur
  - `%debug` pour lancer le mode débogage intéractif *post-mortem*
  - `%cpaste` pour coller et éxecuter un code pré-formaté

Liens :

- Tutorial
- IPython Tips & Tricks

Types de base

- `None` (rien)
- **Chaînes de caractères** : `str`
  - Entre (simples ou triples) apostrophes `'` ou guillemets `"` : `'Calvin'`, `"Calvin'n'Hobbes"`, `'''Deux\nlignes'''`, `"""'Pourquoi?' demanda-t-il."""`
  - Conversion : `str(3.2)`
- **Types numériques** :
  - *Booléens* `bool` (vrai/faux) : `True`, `False`, `bool(3)`
  - *Entiers* `int` (pas de valeur limite explicite, correspond *au moins* au `long` du C) : `-2`, `int(2.1)`, `int("4")`
  - *Réels* `float` (entre ±1.7e±308, correspond au `double` du C) : `2.`, `3.5e-6`, `float(3)`
  - *Complexes* `complex` : `1+2j`, `5.1j`, `complex(-3.14)`, `complex('j')`

```
>>> 5 / 2       # !!! Division euclidienne par défaut dans Python 2.x !!!
2
>>> float(5)/2  # ou ajouter 'from __future__ import division' en début de script
2.5
>>> 6 // 2.5    # Division euclidienne explicite
2.0
>>> 6 % 2.5     # Reste de la division euclidienne
1.0
>>> (1 + 2j)**-0.5  # Puissance entière, réelle ou complexe
(0.5688644810057831-0.3515775842541429j)
```

- **Objets itérables** :
  - *Listes* `list` : `['a', 3, [1, 2], 'a']`
  - *Listes immuables* `tuple` : `(2, 3.1, 'a', [])` (selon les conditions d'utilisation, les parenthèses ne sont pas toujours nécessaires)
  - *Listes à clés* `dict` : `{'a':1, 'b':[1, 2], 3:'c'}`
  - *Ensembles* non ordonnés d'éléments uniques `set` : `{1, 2, 3, 2}`

```
>>> l = ['a', True] # Définition d'une liste
>>> x, y = 1, 2.5   # Affectations multiples via tuples (les parenthèses ne sont pas␣
↪nécessaires)
>>> range(5)        # Liste de 5 entiers commençant par 0
[0, 1, 2, 3, 4]
>>> l + [x, y]      # Concaténation de listes
['a', True, 1, 2.5]
>>> {2, 1, 3} | {1, 2, 'a'}  # Union d'ensembles
{'a', 1, 2, 3}
```

- `type(obj)` retourne le type de l'objet, `isinstance(obj, type)` teste le type de l'objet.

```
>>> type(l)
<type 'list'>
>>> isinstance(l, tuple)
False
```

Liens :

— The Floating Point Guide
— What Every Computer Scientist Should Know About Floating-Point Arithmetic

Structures de programmation

— Les blocs sont définis par l'**indentation** (en général par pas de 4 espaces)[1].

> **Avertissement :** Évitez autant que possible les caractères de tabulation, source de confusion. Configurez votre éditeur de texte pour qu'il n'utilise que des espaces.

— Une instruction par ligne *en général* (ou instructions séparées par `;`).
— Les commentaires commencent par `#`, et s'étendent jusqu'à la fin de la ligne.

— **Expression booléenne** : une condition est une expression s'évaluant à `True` ou `False` :
  — `False` : test logique faux (p.ex. `3 == 4`), valeur nulle, chaîne vide (`''`), liste vide (`[]`), etc.
  — `True` : test logique vrai (p.ex. `2 + 2 == 4`), toute valeur ou objet non-nul (et donc s'évaluant par défaut à `True` *sauf exception*)
  — Tests logiques : `==`, `!=`, `>`, `>=`, etc.

> **Attention :** Ne pas confondre « `=` » (affectation d'une variable) et « `==` » (test logique d'égalité).

  — Opérateurs logiques : `and`, `or`, `not`

```
>>> (5 >= 6) or (not 3 > 4)
True
```

  — Opérateur ternaire (**PEP 308**) : *value* `if` *condition* `else` *altvalue*, p.ex.

```
>>> y = x**0.5 if (x > 0) else 0  # Retourne sqrt(max(x, 0))
```

— **Expression conditionnelle** : `if` *condition*`: ... [elif` *condition2*`: ...] [else: ...]`, p.ex. :

```
if (i > 0):    # Condition principale
    print "positif"
elif (i < 0):  # Condition secondaire (si nécéssaire)
    print "négatif"
else:          # Cas final (si nécéssaire)
    print "nul"
```

— **Boucle for** : `for` *element* `in` *iterable*`:`, s'éxecute sur chacun des *éléments* d'un objet *itérable* :

```
>>> for val in ['un', (2, 3), 4]:  # Itération sur une liste de 3 éléments
...     print val
un
(2, 3)
4
```

[1] ou `from __future__ import braces` :-)

— `continue` : interrompt l'itération courante, et reprend la boucle à l'itération suivante,
— `break` : interrompt complètement la boucle.

Note : la logique des boucles Python est assez différente des langages C[++]/fortran, pour lesquels l'itération porte sur les *indices* plutôt que sur les éléments eux-mêmes.

— **Boucle while** : `while` *`condition`* : se répète tant que la *condition* est vraie, ou après une sortie explicite avec `break`.

Attention : aux boucles infinies, dont la condition d'exécution reste invariablement vraie (typiquement un critère de convergence qui n'est jamais atteint). On peut toujours s'en protéger en testant *en outre* sur un nombre maximal (raisonnable) d'itérations :

```
niter = 0
while (error > 1e-6) and (niter < 100):
    error = ...    # A priori, error va décroître, et la boucle s'interrompre
    niter += 1     # Mais on n'est jamais assez prudent!
```

Exercices :

*Intégration : méthode des rectangles **, *Fizz Buzz **, *PGCD : algorithme d'Euclide ***

Les chaînes de caractères

Indexation

Les chaînes de caractères sont des objets *itérables* – càd constitués d'éléments (ici les caractères) sur lesquels il est possible de « boucler » (p.ex. avec `for`) – et *immuables* – càd dont les éléments individuels ne peuvent pas être modifiés intrinsèquement.

Note : Comme en C[++], l'indexation en Python commence à 0 : le 1er élément d'une liste est l'élément n°0, le 2nd est le n°1, etc. Les *n* éléments d'une liste sont donc indexés de 0 à *n-1*.

```
>>> alpha = 'abcdefghijklmnopqrstuvwxyz'
>>> len(alpha)
26
>>> alpha[0]    # 1er élément (l'indexation commence à 0)
'a'
>>> alpha[-1]   # = alpha[26-1=25], dernier élément (-2: avant dernier, etc.)
'z'
```

Sous-liste (*slice*)

Des portions d'une chaîne peuvent être extraites en utilisant des `slice` (« tranches »), de notation générique *`[start=0]:[stop=len][:step=1]`*. P.ex.

```
>>> alpha[3:7]  # De l'élément n°3 (inclus) au n°7 (exclu), soit 7-3=4 éléments
'defg'
>>> alpha[:3]   # Du n°0 (défaut) au n°3 (exclu), soit 3 éléments
'abc'
>>> alpha[-3:]  # Du n°26-3=23 (inclus) au dernier inclus (défaut)
'xyz'
>>> alpha[8:23:3] # Du n°8 (inclus) au n°23 (exclu), tous les 3 éléments
```

```
'iloru'
>>> alpha[::5]    # Du 1er au dernier élément (défauts), tous les 5 éléments
'afkpuz'
```

Méthodes

Les chaînes de caractères disposent de nombreuses fonctionnalités – appelées « méthodes » en POO (Programmation Orientée Objet) – facilitant leur manipulation :

```
>>> enfant, peluche = "Calvin", 'Hobbes'      # Affectations mutiples
>>> titre = enfant + ' et ' + peluche; titre  # +: Concaténation de chaînes
'Calvin et Hobbes'
>>> titre.replace('et', '&')  # Remplacement de sous-chaînes (→ nouvelle chaîne)
'Calvin & Hobbes'
>>> titre                     # titre est immuable et reste inchangée
'Calvin et Hobbes'
>>> ' & '.join(titre.split(' et ')) # Découpage (split) et jonction (join)
'Calvin & Hobbes'
>>> 'Hobbes' in titre               # in: Test d'inclusion
True
>>> titre.find("Hobbes")            # str.find: Recherche de sous-chaîne
10
>>> titre.center(30, '-')
'-------Calvin et Hobbes-------'
>>> dir(str)                        # Liste toutes les méthodes des chaînes
```

Formatage

Le système de formatage permet un contrôle précis de la conversion de variables en chaînes de caractères. Il s'appuie essentiellement sur la méthode `str.format()` :

```
>>> "{0} a {1} ans".format('Calvin', 6)  # args
'Calvin a 6 ans'
>>> "{} a {} ans".format('Calvin', 6)    # Raccourci
'Calvin a 6 ans'
>>> "{nom} a {age} ans".format(nom='Calvin', age=6)  # kwargs
'Calvin a 6 ans'
>>> pi = 3.1415926535897931
>>> "{x:f}  {x:.2f}  {y:f}  {y:g}".format(x=pi, y=pi*1e9)  # Options de formatage
'3.141593  3.14  3141592653.589793  3.14159e+09'
```

`print()` affiche à l'écran (plus spécifiquement la sortie standard) la conversion d'une variable en chaîne de caractères :

```
>>> print "Calvin and Hobbes\nScientific progress goes 'boink'"
Calvin and Hobbes
Scientific progress goes 'boink'
>>> print "{0:2d} fois {1:2d} font {2}".format(3, 4, 3*4) # Formatage et affichage
 3 fois  4 font 12
```

Exercice :

*Tables de multiplication **

Objets itérables

Les chaînes de caractères, listes, tuples et dictionnaires sont les objets itérables de base en Python. Les listes et dictionnaires sont *modifiables* (« *mutables* ») – leurs éléments constitutifs peuvent être changés à la volée – tandis que chaînes de caractères et les tuples sont *immuables*.

— Accès indexé : conforme à celui des chaînes de caractères

```
>>> l = range(1, 10, 2); l  # De 1 (inclus) à 10 (exclu) par pas de 2
[1, 3, 5, 7, 9]
>>> len(l)          # Nb d'éléments dans la liste (i varie de 0 à 4)
5
>>> l[0], l[-2]     # 1er et avant-dernier élément (l'indexation commence à 0)
(1, 7)
>>> l[5]            # Erreur: indice hors-bornes
IndexError: list index out of range
>>> d = dict(a=1, b=2) # Création du dictionnaire {'a':1, 'b':2}
>>> d['a']          # Accès à une entrée via sa clé
1
>>> d['c']          # Erreur: clé inexistante!
KeyError: 'c'
>>> d['c'] = 3; d   # Ajout d'une clé et sa valeur
{'a': 1, 'c': 3, 'b': 2}
>>> # Noter qu'un dictionnaire N'est PAS ordonné!
```

— Sous-listes (*slices*) :

```
>>> l[1:-1]        # Du 2ème ('1') *inclus* au dernier ('-1') *exclu*
[3, 5, 7]
>>> l[1:-1:2]      # Idem, tous les 2 éléments
[3, 7]
>>> l[::2]         # Tous les 2 éléments (*start=0* et *stop=len* par défaut)
[1, 5, 9]
```

— Modification d'éléments d'une liste (chaînes et tuples sont **immuables**) :

```
>>> l[0] = 'a'; l            # Remplacement du 1er élément
['a', 3, 5, 7, 9]
>>> l[1::2] = ['x', 'y']; l  # Remplacement d'éléments par *slices*
['a', 'x', 5, 'y', 9]
>>> l + [1, 2]; l            # Concaténation (l reste inchangé)
['a', 'x', 5, 'y', 9, 1, 2]
['a', 'x', 5, 'y', 9]
>>> l += [1, 2]; l           # Concaténation sur place (l est modifié)
['a', 'x', 5, 'y', 9, 1, 2]
>>> l.append('z'); l         # Ajout d'un élément en fin de liste
['a', 'x', 5, 'y', 9, 1, 2, 'z']
>>> l.extend([-1, -2]); l    # Extension par une liste
['a', 'x', 5, 'y', 9, 1, 2, 'z', -1, -2]
>>> del l[-6:]; l            # Efface les 6 derniers éléments de la liste
['a', 'x', 5, 'y']
```

Attention : à la modification des objets *mutables* :

```
>>> l = range(3)  # l pointe vers la liste [0, 1, 2]
>>> m = l; m      # m est un *alias* de la liste l: c'est le même objet
[0, 1, 2]
>>> id(l); id(m); m is l
171573452         # id({obj}) retourne le n° d'identification en mémoire
171573452         # m et l ont le même id:
True              # ils correspondent donc bien au même objet en mémoire
>>> l[0] = 'a'; m # puisque l a été modifiée, il en est de même de m
['a', 1, 2]
>>> m = l[:]      # copie de tous les éléments de l dans une *nouvelle* liste m
↪(clonage)
>>> id(l); id(m); m is l
171573452
171161228         # m a un id différent de l: il s'agit de 2 objets distincts
False             # (contenant éventuellement la même chose!)
>>> del l[-1]; m  # les éléments de m n'ont pas été modifiés
['a', 1, 2]
```

— Liste en compréhension : elle permet la construction d'une liste à la volée

```
>>> [ i**2 for i in range(5) ] # Carré de tous les éléments de [0, ..., 4]
[0, 1, 4, 9, 16]
>>> [ 2*i for i in range(10) if (i%3 != 0) ]  # Compréhension conditionnelle
[2, 4, 8, 10, 14, 16]
>>> [ 10*i+j for i in range(3) for j in range(4) ]     # Double compréhension
[0, 1, 2, 3, 10, 11, 12, 13, 20, 21, 22, 23]
>>> [ [ 10*i+j for i in range(3) ] for j in range(4) ] # Compréhensions imbriquées
[[0, 10, 20], [1, 11, 21], [2, 12, 22], [3, 13, 23]]
>>> { i: i**2 for i in range(1, 5) }  # Dictionnaire en compréhension
{1: 1, 2: 4, 3: 9, 4: 16}
```

— Utilitaires sur les itérables :

```
>>> humans = ['Calvin', 'Wallace', 'Boule']
>>> for i in range(len(humans)):  # Boucle sur les indices de humans
...     print i, humans[i]        # Accès explicite, pas pythonique :-(
0 Calvin
1 Wallace
2 Boule
>>> for i, name in enumerate(humans):  # Boucle sur (indice, valeur) de humans
...     print i, name                  # Pythonique :-D
0 Calvin
1 Wallace
2 Boule
>>> animals = ['Hobbes', 'Gromit', 'Bill']
>>> for boy, dog in zip(humans, animals):  # Boucle simultanée sur 2 listes (ou +)
...     print boy, 'et', dog
Calvin et Hobbes
Wallace et Gromit
Boule et Bill
>>> sorted(zip(humans, animals))  # Tri, ici sur le 1er élément de chaque tuple de la␣
↪liste
[('Boule', 'Bill'), ('Calvin', 'Hobbes'), ('Wallace', 'Gromit')]
```

Exercices :

*Crible d'Ératosthène *, Carré magique ***

Fonctions

Une fonction est un regroupement d'instructions impératives – assignations, branchements, boucles, etc. – s'appliquant sur des arguments d'entrée. C'est le concept central de la programmation *impérative*.

`def` permet de définir une fonction : `def` *`fonction(arg1, arg2, ..., option1=valeur1, option2=valeur2, ...)`*:. Les « *args* » sont des arguments nécessaires (càd obligatoires), tandis que les « *kwargs* » – arguments de type *`option=valeur`* – sont optionnels, puisqu'ils possèdent une valeur par défaut. Si la fonction doit retourner une valeur, celle-ci est spécifiée par le mot-clé `return`.

Exemples :

```
1 def temp_f2c(tf):
2     """
3     Convertit une température en d° Fahrenheit `tf` en d° Celsius.
```

```
4
5       Exemple:
6       >>> temp_f2c(104)
7       40.0
8       """
9
10      tc = (tf - 32.)/1.8       # Fahrenheit → Celsius
11
12      return tc
```

Dans la définition d'une fonction, la première chaîne de charactères (appelé *docstring*) servira de documentation pour la fonction, accessible de l'interpréteur via p.ex. `help(temp_f2c)`, ou `temp_f2c?` sous `ipython`. Elle se doit d'être tout à la fois pertinente, concise *et* complète. Elle peut également inclure des exemples d'utilisation (*doctests*, voir *Développement piloté par les tests*).

```
1   def mean_power(alist, power=1):
2       """
3       Retourne la racine `power` de la moyenne des éléments de `alist` à
4       la puissance `power`:
5
6       .. math:: \mu = (\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} x_i^p)^{1/p}
7
8       `power=1` correspond à la moyenne arithmétique, `power=2` au *Root
9       Mean Squared*, etc.
10
11      Exemples:
12      >>> mean_power([1, 2, 3])
13      2.0
14      >>> mean_power([1, 2, 3], power=2)
15      2.160246899469287
16      """
17
18      s = 0.                  # Initialisation de la variable *s* comme *float*
19      for val in alist:       # Boucle sur les éléments de *alist*
20          s += val ** power   # *s* est augmenté de *val* puissance *power*
21      # *mean* = (somme valeurs / nb valeurs)**(1/power)
22      mean = (s / len(alist)) ** (1 / power)  # ATTENTION aux divisions euclidiennes!
23
24      return mean
```

Il faut noter plusieurs choses importantes :

- Python est un langage à typage *dynamique*, p.ex., le type des arguments d'une fonction n'est pas fixé *a priori*. Dans l'exemple précédent, `alist` peut être une `list`, un `tuple` ou tout autre itérable contenant des éléments pour lesquels les opérations effectuées – somme, exponentiation, division par un entier – ont été préalablement définies (p.ex. des entiers, des complexes, des matrices, etc.).
- Le typage est *fort*, càd que le type d'une variable ne peut pas changer à la volée. Ainsi, `"abra" + "cadabra"` a un sens (concaténation de chaînes), mais pas `3 + "cochons"` (entier + chaîne).
- La définition d'une fonction se fait dans un « espace parallèle » où les variables ont une portée (*scope*) locale[2]. Ainsi, la variable `s` définie *dans* la fonction `mean_power` n'interfère pas avec le « monde extérieur » ; inversement, la définition de `mean_power` ne connaît *a priori* rien d'autre que les variables explicitement définies dans la liste des arguments ou localement.

Exercice :

*Suite de Syracuse (fonction) **

[2] La notion de « portée » est plus complexe, je simplifie...

Bibliothèques et scripts

Bibliothèques externes

Une bibliothèque (ou module) est un code fournissant des fonctionnalités supplémentaires – p.ex. des fonctions prédéfinies – à Python. Ainsi, le module `math` définit les fonctions et constantes mathématiques usuelles (`sqrt()`, `pi`, etc.)

Une bibliothèque est « importée » avec la commande `import` *`module`*. Les fonctionnalités supplémentaires sont alors accessibles dans l'*espace de noms* *`module`* via *`module.fonction`* :

```
>>> sqrt(2)                   # sqrt n'est pas une fonction standard de python
NameError: name 'sqrt' is not defined
>>> import math               # Importe tout le module 'math'
>>> dir(math)                 # Liste les fonctionnalités de 'math'
['__doc__', '__name__', '__package__', 'acos', 'acosh', 'asin',
'asinh', 'atan', 'atan2', 'atanh', 'ceil', 'copysign', 'cos', 'cosh',
'degrees', 'e', 'exp', 'fabs', 'factorial', 'floor', 'fmod', 'frexp',
'fsum', 'hypot', 'isinf', 'isnan', 'ldexp', 'log', 'log10', 'log1p',
'modf', 'pi', 'pow', 'radians', 'sin', 'sinh', 'sqrt', 'tan', 'tanh',
'trunc']
>>> math.sqrt(math.pi)        # Les fonctionnalités sont disponibles sous 'math'
1.7724538509055159
>>> import math as M          # Importe 'math' dans l'espace 'M'
>>> M.sqrt(M.pi)
1.7724538509055159
>>> from math import sqrt, pi # Importe uniquement 'sqrt' et 'pi' dans l'espace courant
>>> sqrt(pi)
1.7724538509055159
```

Avertissement : Il est possible d'importer toutes les fonctionnalités d'une bibliothèque dans l'espace de noms courant :

```
>>> from math import *     # Argh! Pas pythonique :-(
>>> sqrt(pi)
1.7724538509055159
```

Cette pratique est cependant fortement *déconseillée* du fait des confusions dans les espaces de noms qu'elle peut entraîner :

```
>>> from cmath import *
>>> sqrt(-1)   # Quel sqrt: le réel ou le complexe?
```

Nous verrons par la suite quelques exemples de modules de la *Bibliothèque standard*, ainsi que des *Bibliothèques numériques de base* orientées analyse numérique.

Exercice :

*Flocon de Koch (programmation récursive) ****

Bibliothèques personnelles et scripts

Vous pouvez définir vos propres bibliothèques en regroupant les fonctionnalités au sein d'un même fichier *`monfichier`*`.py`.

— Si ce fichier est importé (p.ex. `import monfichier`), il agira comme une bibliothèque ;
— si ce fichier est exécuté – p.ex. `python ./monfichier.py` – il agira comme un *script*.

Attention : Toutes les instructions d'un module qui ne sont pas encapsulées dans le `__main__` (voir plus bas) sont interprétées et exécutées lors de l'`import` du module. Elles doivent donc en général se limiter à la définition de variables, de fonctions et de classes (en particulier, éviter les affichages ou les calculs longs).

Un code Python peut donc être :
- un module – s'il n'inclut que des définitions mais pas d'instruction exécutable en dehors d'un éventuel `__main__`,
- ou un exécutable – s'il inclut un `__main__` ou des instructions exécutables,
- ou les deux à la fois.

Exemple :

Le code *mean_power.py* peut être importé comme une bibliothèque (p.ex. `import mean_power`) dans un autre code Python, ou bien être exécuté depuis la ligne de commande (p.ex. `python mean_power.py`), auquel cas la partie `__main__` sera exécutée.

- `#!` (Hash-bang) : la première ligne d'un script défini l'interpréteur à utiliser [3] :

```
#!/usr/bin/env python
```

- Un fichier incluant des caractères non-ASCII (p.ex. caractères accentués, ou symboles UTF tel que ±) *doit* définir le système d'encodage, généralement `utf-8` :

```
# -*- coding: utf-8 -*-
```

  Notez que les noms de variables, fonctions, etc. doivent être purement ASCII (`a-zA-Z0-9_`). De manière générale, favorisez la langue anglaise (variables, commentaires, affichages).
- `"""doc"""` : la chaîne de documentation de la bibliothèque (*docstring*, **PEP 257**), qui sera utilisée comme aide en ligne du module (`help(mean_power)`), doit être la *1ère* instruction du script.
- `from __future__ import division` : permet de ne pas considérer les divisions entre entiers comme euclidiennes par défaut.
- `if __name__ == '__main__':` permet de séparer le `__main__` (càd le corps du programme, à exécuter lors d'une utilisation en script) des définitions de fonctions et classes, permettant une utilisation en module.

Exceptions

Lorsqu'il rencontre une erreur dans l'exécution d'une instruction, l'interpréteur Python génère (`raise`) une erreur (`Exception`), de nature différente selon la nature de l'erreur : `KeyError`, `ValueError`, `AttributeError`, `NameError`, `TypeError`, `IOError`, `NotImplementedError`, etc. La levée d'une erreur n'est cependant pas nécessairement fatale, puisque Python dispose d'un mécanisme de *gestion des erreurs*.

Il est d'usage en Python d'utiliser la philosophie EAFP (Easier to Ask for Forgiveness than Permission) [4] : plutôt que de tester explicitement toutes les conditions de validité d'une instruction, on « tente sa chance » d'abord, quitte à gérer les erreurs *a posteriori*. Cette gestion des `Exception` se fait par la construction `try ... except`.

```
1 def lireEntier():
2     while True:
3         chaine = raw_input('Entrez un entier: ') # Lecture du clavier
4         try:
5             # La conversion en type entier génère `ValueError` si nécessaire
6             return int(chaine)
```

Il s'agit d'une fonctionnalité des *shells* d'Unix, pas specifique à Python.
Par opposition au LBYL (Look Before You Leap) du C/C++, basé sur une série *exhaustive* de tests *a priori*.

```
        except ValueError:              # Gestion de l'exception ValueError
            print "'{}' n'est pas un entier".format(chaine)
```

```
>>> lireEntier()
Entrez un entier: toto
'toto' n'est pas un entier
Entrez un entier: 3,4
'3,4' n'est pas un entier
Entrez un entier: 4
4
```

Dans l'élaboration d'un programme, gérez explicitement les erreurs que vous auriez pu tester *a priori* et pour lesquels il existe une solution de replis, et laissez passer les autres (ce qui provoquera éventuellement l'interruption du programme).

Danger : Évitez à tout prix les `except` *nus*, càd ne spécifiant pas la ou les exceptions à gérer, car ils intercepteraient alors *toutes* les exceptions, y compris celles que vous n'aviez pas prévues ! Trouvez l'erreur dans le code suivant :

```
y = 2
try:
   x = z                    # Copie y dans x
   print "Tout va bien"
except:
   print "Rien ne va plus"
```

Vos procédures doivent également générer des exceptions (*documentées*) – avec l'instruction `raise` *`Exception`* – si elles ne peuvent conclure leur action, à charge pour la procédure appelante de les gérer si besoin :

```
def diff_sqr(x, y):
    """
    Return x**2 - y**2 for x >= y, raise ValueError otherwise.

    Exemples:
    >>> diff_sqr(5, 3)
    16
    >>> diff_sqr(3, 5)
    Traceback (most recent call last):
    ...
    ValueError: x=3 < y=5
    """

    if x < y:
        raise ValueError("x={} < y={}".format(x, y))

    return x**2 - y**2
```

Avant de se lancer dans un calcul long et complexe, on peut vouloir tester la validité de certaines hypothèses fondamentales, soit par une structure `if ... raise`, ou plus facilement à l'aide d'`assert` (qui, si l'hypothèse n'est pas vérifiée, génère une `AssertionError`) :

```
def diff_sqr(x, y):
    """
    Returns x**2 - y**2 for x >= y, AssertionError otherwise.
    """

    assert x >= y, "x={} < y={}".format(x, y) # Test et msg d'erreur
    return x**2 - y**2
```

Note : La règle générale à retenir concernant la gestion des erreurs :
Fail early, fail often, fail better !

Exercice :

*Jeu du plus ou moins (exceptions) **

Classes

Un objet est une entité de programmation, disposant de ses propres états et fonctionnalités. C'est le concept central de la Programmation Orientée Objet.

Au concept d'objet sont liées les notions de :

- **Classe :** il s'agit d'un *modèle* d'objet, dans lequel sont définis ses propriétés usuelles. P.ex. la classe `Forme` peut représenter une forme plane caractérisée par sa couleur, et disposant de fonctionnalités propres, p.ex. `change_couleur()`.
- **Instantiation :** c'est le fait générer un objet concret (une *instance*) à partir d'un modèle (une classe). P.ex. `rosie = Forme('rose')` crée une instance *rosie* à partir de la classe `Forme` et d'une couleur (chaîne de caractères `'rose'`).
- **Attributs :** variables internes décrivant l'état de l'objet. P.ex., `rosie.couleur` donne la couleur de la `Forme` *rosie*.
- **Méthodes :** fonctions internes, s'appliquant en premier lieu sur l'objet lui-même (`self`), décrivant les capacités de l'objet. P.ex. `rosie.change_couleur('bleu')` change la couleur de la `Forme` *rosie*.

  > **Attention :** Toutes les méthodes d'une classe doivent au moins prendre `self` – représentant l'objet lui-même – comme premier argument.

- **Surcharge d'opérateurs :** cela permet de redéfinir les opérateurs et fonctions usuels (`+`, `abs()`, `str()`, etc.), pour simplifier l'écriture d'opérations sur les objets. Ainsi, on peut redéfinir les opérateurs de comparaison (`<`, `>=`, etc.) dans la classe `Forme` pour que les opérations du genre `forme1 < forme2` aient un sens (p.ex. en comparant les aires).
  Liste des méthodes standard et des surcharges d'opérateur
- **Héritage de classe :** il s'agit de définir une classe à partir d'une (ou plusieurs) classe(s) parente(s). La nouvelle classe *hérite* des attributs et méthodes de sa (ses) parente(s), que l'on peut alors modifier ou compléter. P.ex. la classe `Rectangle` hérite de la classe `Forme` (elle partage la notion de couleur et d'aire), et lui ajoute des méthodes propres à la notion de rectangle (p.ex. formule explicite de l'aire, étirement).

  > **Attention :** Toutes les classes doivent au moins hériter de la classe principale `object`.

Exemple de définition de classe

```
1  class Forme(object):  # *object* est la classe dont dérivent toutes les autres
2
3      """Une forme plane, avec éventuellement une couleur."""
4
5      def __init__(self, couleur=None):
6          """Initialisation d'une Forme, sans couleur par défaut."""
7
8          if couleur is None:
9              self.couleur = 'indéfinie'
10         else:
```

```
            self.couleur = couleur

    def __str__(self):
        """
        Surcharge de la fonction `str()`: l'affichage *informel* de
        l'objet dans l'interpréteur, p.ex. `print a` sera résolu comme
        `a.__str__()`

        Retourne une chaîne de caractères.
        """

        return "Forme encore indéfinie de couleur {}".format(self.couleur)

    def change_couleur(self, newcolor):
        """Change la couleur de la Forme."""

        self.couleur = newcolor

    def aire(self):
        """
        Renvoi l'aire de la Forme.

        L'aire ne peut pas être calculée dans le cas où la forme n'est
        pas encore spécifiée: c'est ce que l'on appelle une méthode
        'abstraite', qui pourra être précisée dans les classes filles.
        """

        raise NotImplementedError(
            "Impossible de calculer l'aire d'une forme indéfinie.")

    def __cmp__(self, other):
        """
        Comparaison de deux Formes sur la base de leur aire.

        Surcharge des opérateurs de comparaison de type `{self} <
        {other}`: la comparaison sera résolue comme
        `self.__cmp__(other)` et le résultat sera correctement
        interprété.

        .. WARNING:: cette construction n'est plus supportée en Python3.
        """

        return cmp(self.aire(), other.aire())  # Opérateur de comparaison
```

Exemple d'héritage de classe

```
class Rectangle(Forme):

    """
    Un Rectangle est une Forme particulière.

    La classe-fille hérite des attributs et méthodes de la
    classe-mère, mais peut les surcharger (i.e. en changer la
    définition), ou en ajouter de nouveaux:

    - les méthodes `Rectangle.change_couleur()` et
      `Rectangle.__cmp__()` dérivent directement de
      `Forme.change_couleur()` et `Forme.__cmp__()`;
    - `Rectangle.__str__()` surcharge `Forme.__str__()`;
    - `Rectangle.aire()` définit la méthode jusqu'alors abstraite
```

```
15          `Forme.aire()`;
16      - `Rectangle.allonger()` est une nouvelle méthode propre à
17          `Rectangle`.
18      """
19
20      def __init__(self, longueur, largeur, couleur=None):
21          """
22          Initialisation d'un Rectangle longueur × largeur, sans couleur par
23          défaut.
24          """
25
26          # Initialisation de la classe parente (nécessaire pour assurer
27          # l'héritage)
28          Forme.__init__(self, couleur)
29
30          # Attributs propres à la classe Rectangle
31          self.longueur = longueur
32          self.largeur = largeur
33
34      def __str__(self):
35          """Surcharge de `Forme.__str__()`."""
36
37          return "Rectangle {}x{}, de couleur {}".format(
38              self.longueur, self.largeur, self.couleur)
39
40      def aire(self):
41          """
42          Renvoi l'aire du Rectangle.
43
44          Cette méthode définit la méthode abstraite `Forme.area()`,
45          pour les Rectangles uniquement.
46          """
47
48          return self.longueur * self.largeur
49
50      def allonger(self, facteur):
51          """Multiplie la *longueur* du Rectangle par un facteur"""
52
53          self.longueur *= facteur
```

Note : Il est traditionnel de commencer les noms de classes avec des majuscules (`Forme`), et les noms d'instances de classe (les variables) avec des minuscules (`rosie`).

Exemples

Formes (POO), *Cercle circonscrit (POO, argparse)*

Études de cas

- `turtle.Vec2D`
- `fractions.Fraction`

Exercices :

*Animaux (POO/TDD) **, *Jeu de la vie (POO) ***

Entrées-sorties

Intéractif

Comme nous avons pu le voir précédemment, l'affichage à l'écran se fait par *print*, la lecture du clavier par *raw_input*.

Fichiers

La gestion des fichiers (lecture et écriture) se fait à partir de la fonction `open()` retournant un objet de type file :

```
# ========== ÉCRITURE ==========
outfile = open("carres.dat", 'w') # Ouverture du fichier "carres.dat" en écriture
for i in range(1, 10):
    outfile.write("{}  {}\n".format(i, i**2)) # Noter la présence du '\n' (non-automatique)
outfile.close()                   # Fermeture du fichier (nécessaire)

# ========== LECTURE ==========
infile = open("carres.dat")  # Ouverture du fichier "carres.dat" en lecture
for line in infile:          # Boucle sur les lignes du fichier
    if line.strip().startswith('#'): # Ne pas considérer les lignes "commentées"
        continue
    try:                     # Essayons de lire 2 entiers sur cette ligne
        x, x2 = [ int(tok) for tok in line.split() ]
    except ValueError:       # Gestion des erreurs
        print "Cannot decipher line '{}'".format(line)
        continue
    print "{}**3 = {}".format(x, x**3)
```

Éléments passés sous silence

Cette (brève) introduction à Python se limite à des fonctionnalités relativement simples du langage. De nombreuses fonctionnalités du langage n'ont pas été abordées :

- Variables globales
- Arguments anonymes : `*args` and `**kwargs`
- Fonction anonyme : `lambda x, y: x + y`
- Itérateurs et générateurs : `yield`
- Gestion de contexte : `with ... as` (**PEP 243**)
- Décorateurs : fonction sur une fonction ou une classe (`@staticmethod`, etc.)
- Héritages multiples et méthodes de résolution
- Etc.

Ces fonctionnalités peuvent évidemment être très utiles, mais ne sont généralement pas strictement indispensables pour une première utilisation de Python dans un contexte scientifique.

Python 3.x

Pour des raisons historiques autant que pratiques[5], ce cours présente le langage Python dans sa version 2.x. Pourtant, le développement actuel de Python se fait uniquement sur la branche 3.x, qui constitue une remise à plat *non-rétrocompatible* du langage, et la branche 2.x ne sera *a priori* plus supporté au delà de 2020 (**PEP 466**). Il est donc préférable, si vous vous lancez dans un développement substantiel, de passer aussi rapidement que possible à Python 3 (voir *Python 2 vs. python 3*).

Python 3 apporte quelques changements fondamentaux, notamment :

[5] De nombreuses distributions Linux sont encore basées sur Python 2.7 par défaut.

— `print` n'est plus un mot-clé mais une fonction : `print(...)`
— l'opérateur `/` ne réalise plus la division euclidienne entre les entiers, mais toujours la division *réelle*
— un support complet (mais encore complexe) des chaînes Unicode
— un nouveau système de formatage des chaînes de caractères (`f-string` du **PEP 498** à partir de Python 3.6)

CHAPITRE 3

Bibliothèque standard

Table des matières

Python dispose d'une très riche bibliothèque de modules étendant les capacités du langage dans de nombreux domaines : nouveaux types de données, interactions avec le système, gestion des fichiers et des processus, protocoles de communication (internet, mail, FTP, etc.), multimédia, etc.

— The Python Standard Library (v2.7)
— Python Module of the Week

Gestion des arguments/options de la ligne de commande

Utilisation de `sys.argv`

Le module `sys` permet un accès direct aux arguments de la ligne de commande, via la liste `sys.argv` : `sys.argv[0]` contient le nom du script executé, `sys.argv[1]` le nom du 1er argument (s'il existe), etc. P.ex. :

```
# Gestion simplifiée d'un argument entier sur la ligne de commande
import sys

if sys.argv[1:]:  # Présence d'au moins un argument sur la ligne de commande
    try:
        n = int(sys.argv[1])  # Essayer de lire le 1er argument comme un entier
    except ValueError:
        raise ValueError("L'argument '{}' n'est pas un entier"
                         .format(sys.argv[1]))
else:                         # Pas d'argument sur la ligne de commande
    n = 101                   # Valeur par défaut
```

Module argparse

Pour une gestion avancée des arguments et/ou options de la ligne de commande, il est préférable d'utiliser le module argparse. P.ex. :

```
    import argparse

    parser = argparse.ArgumentParser(
        usage="%(prog)s [-p/--plot] [-i/--input coordfile | x1,y1 x2,y2 x3,y3]",
        description=__doc__)
    parser.add_argument('coords', nargs='*', type=str, metavar='x,y',
                        help="Coordinates of point")
    parser.add_argument('-i', '--input', nargs='?', type=file,
                        help="Coordinate file (one 'x,y' per line)")
    parser.add_argument('-p', '--plot', action="store_true", default=False,
                        help="Draw the circumscribed circle")
    parser.add_argument('--version', action='version', version=__version__)

    args = parser.parse_args()
```

Cette solution génère automatiquement une aide en ligne, p.ex. :

```
$ python circonscrit.py -h
usage: circonscrit.py [-p/--plot] [-i/--input coordfile | x1,y1 x2,y2 x3,y3]

Compute the circumscribed circle to 3 points in the plan.

positional arguments:
  x,y                   Coordinates 'x,y' of point

optional arguments:
  -h, --help            show this help message and exit
  -i [INPUT], --input [INPUT]
                        Coordinate file (one 'x,y' per line)
  -p, --plot            Draw the circumscribed circle
  --version             show program's version number and exit
```

[c]Pickle : sérialisation des données

Les modules pickle/cPickle permettent la sauvegarde pérenne d'objets python (« sérialisation »).

```
>>> d = dict(a=1, b=2, c=3)
>>> l = range(10000)
>>> import cPickle as pickle         # 'cPickle' est + rapide que 'pickle'
>>> pkl = open('archive.pkl', 'w')   # Overture du fichier en écriture
>>> pickle.dump((d, l), pkl, protocol=-1)  # Sérialisation du tuple (d, l)
>>> pkl.close()                      # *IMPORTANT!* Fermeture du fichier
>>> d2, l2 = pickle.load(open('archive.pkl')) # Désérialisation (relecture)
>>> (d == d2) and (l == l2)
True
```

Attention : les pickles ne sont pas un format d'échange de données. Ils sont spécifiques à python, et peuvent dépendre de la machine utilisée.

Batteries included

Quelques modules de la librairie standard qui peuvent être d'intérêt :

- `math` : accès aux fonctions mathématiques réelles

```
>>> math.asin(math.sqrt(2) / 2) / math.pi * 180
45.00000000000001
```

- `cmath` : accès aux fonctions mathématiques complexes

```
>>> cmath.exp(cmath.pi * 1j) + 1
1.2246467991473532e-16j
```

- Autres modules numériques et mathématiques
- `collections` définit de nouveaux types spécialisés, p.ex. `collections.OrderedDict`, un dictionnaire *ordonné*.
- `itertools` fournit des générateurs de boucle (*itérateurs*) et de combinatoire :

```
>>> [ ''.join(item) for item in itertools.combinations('ABCD', 2) ]
['AB', 'AC', 'AD', 'BC', 'BD', 'CD']
```

- Interactions avec le système :
  - `sys`, `os` : interface système
  - `shutil` : opérations sur les fichiers (*copy*, *move*, etc.)
  - `subprocess` : éxécution de commandes système
  - `glob` : méta-caractères du *shell* (p.ex. `toto?.*`)
- Expressions rationnelles : `re`
- Gestion du temps (`time`) et des dates (`datetime`, `calendar`)
- Fichiers compressés et archives : `gzip`, `bz2`, `zipfile`, `tarfile`
- Lecture & sauvegarde des données (outre `pickle`/`cPickle`)
  - `csv` : lecture/sauvegarde de fichiers CSV (Comma Separated Values)
  - `ConfigParser` : fichiers de configuration
  - `json` : *lightweight data interchange format*
- Lecture d'une URL (p.ex. page web) : `urllib2`

Text/Graphical User Interfaces

- TUI (Text User Interface) : `curses`
- GUI (Graphical User Interface) : `Tkinter`,

Librairies externes :

- TUI : termcolor (texte coloré ANSII), blessings (mise en page)
- GUI : PyGI (GTK3), PyQt / pySide (Qt), wxPython (wxWidgets)

CHAPITRE 4

Bibliothèques numériques de base

Table des matières

Numpy

`numpy` est une bibliothèque *numérique* apportant le support efficace de larges tableaux multidimensionnels, et de routines mathématiques de haut niveau (fonctions spéciales, algèbre linéaire, statistiques, etc.).

Note : La convention d'import utilisé dans les exemples est « `import numpy as N` ».

Liens :

— Numpy User Guide
— Numpy Reference

Tableaux

Un `numpy.ndarray` (généralement appelé `array`) est un tableau multidimensionnel *homogène* : tous les éléments doivent avoir le même type, en général numérique. Les différentes dimensions sont appelées des *axes*, tandis que le nombre de dimensions – 0 pour un scalaire, 1 pour un vecteur, 2 pour une matrice, etc. – est appelé le *rang*.

```
>>> import numpy as N       # Import de la bibliothèque numpy avec le surnom N
>>> a = N.array([1, 2, 3])  # Création d'un array 1D à partir d'une liste d'entiers
>>> a.ndim      # Rang du tableau
1               # Vecteur (1D)
>>> a.shape     # Format du tableau: par définition, len(shape)=ndim
(3,)            # Vecteur 1D de longueur 3
>>> a.dtype     # Type des données du tableau
dtype('int32')  # Python 'int' = numpy 'int32' = C 'long'
>>> # Création d'un tableau 2D de float (de 0. à 12.) de shape 4×3
>>> b = N.arange(12, dtype=float).reshape(4, 3); b
array([[  0.,   1.,   2.],
       [  3.,   4.,   5.],
       [  6.,   7.,   8.],
       [  9.,  10.,  11.]])
>>> b.shape              # Nb d'éléments le long de chacune des dimensions
(4, 3)                   # 4 lignes, 3 colonnes
>>> b.size               # Nb *total* d'éléments dans le tableau
12                       # Par définition, size = prod(shape)
>>> b.dtype
dtype('float64')         # Python 'float' = numpy 'float64' = C 'double'
```

Création de tableaux

— `numpy.array()` : convertit une liste d'éléments homogènes ou coercitibles

```
>>> N.array([[1, 2],[3., 4.]]) # Liste de listes d'entiers et de réels
array([[ 1.,  2.],             # Tableau 2D de réels
       [ 3.,  4.]])
```

— `numpy.zeros()` (resp. `numpy.ones()` et `numpy.full()`) : crée un tableau de format donné rempli de zéros (resp. de uns et d'une valeur fixe)

```
>>> N.zeros((2, 1))  # Shape (2, 1): 2 lignes, 1 colonne, float par défaut
array([[ 0.],
       [ 0.]])
>>> N.ones((1, 2), dtype=bool) # Shape (1, 2): 1 ligne, 2 colonnes, type booléen
array([[True, True]], dtype=bool)
>>> N.full((2, 2), N.NaN)
array([[ nan,  nan],
       [ nan,  nan]])
```

— `numpy.arange()` : crée une séquence de nombres, en spécifiant éventuellement le *start*, le *end* et le *step* (similaire à `range()` pour les listes)

```
>>> N.arange(10, 30, 5) # De 10 à 30 (exclu) par pas de 5, type entier par défaut
array([10, 15, 20, 25])
```

```
>>> N.arange(0.5, 2.1, 0.3) # Accepte des réels en argument, DANGER!
array([ 0.5,  0.8,  1.1,  1.4,  1.7,  2. ])
```

— `numpy.linspace()` : répartition uniforme d'un nombre fixe de points entre un *start* et un *end* (préférable à `numpy.arange()` sur des réels).

```
>>> N.linspace(0, 2*N.pi, 5) # 5 nb entre 0 et 2π *inclus*, type réel par défaut
array([ 0.,  1.57079633,  3.14159265,  4.71238898,  6.28318531])
```

— `numpy.meshgrid()` est similaire à `numpy.linspace()` en 2D ou plus :

```
>>> # 5 points entre 0 et 2 en "x", et 3 entre 0 et 1 en "y"
>>> x = N.linspace(0, 2, 5); x           # Tableau 1D des x, (5,)
array([ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ])
>>> y = N.linspace(0, 1, 3); y           # Tableau 1D des y, (3,)
array([ 0. ,  0.5,  1. ])
>>> xx, yy = N.meshgrid(x, y)            # Tableaux 2D des x et des y
>>> xx                                   # Tableau 2D des x, (3, 5)
array([[ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ],
       [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ],
       [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ]])
>>> yy                                   # Tableau 2D des y, (3, 5)
array([[ 0. ,  0. ,  0. ,  0. ,  0. ],
       [ 0.5,  0.5,  0.5,  0.5,  0.5],
       [ 1. ,  1. ,  1. ,  1. ,  1. ]])
```

— `numpy.mgrid` permet de générer des rampes d'indices (entiers) ou de coordonnées (réels) de rang arbitraire avec une notation évoluée faisant appel aux *Index tricks*. Équivalent à `numpy.linspace()` en 1D et *similaire (mais différent)* à `numpy.meshgrid()` en 2D.

```
>>> N.mgrid[0:4, 1:6:2]   # Grille 2D d'indices (entiers)
array([[[0, 0, 0],        # 0:4 = [0, 1, 2, 3] selon l'axe 0
        [1, 1, 1],
        [2, 2, 2],
        [3, 3, 3]],
       [[1, 3, 5],        # 1:6:2 = [1, 3, 5] selon l'axe 1
        [1, 3, 5],
        [1, 3, 5],
        [1, 3, 5]]])
>>> N.mgrid[0:2*N.pi:5j]  # Rampe de coordonnées (réels): 5 nb de 0 à 2π (inclus)
array([ 0.,  1.57079633,  3.14159265,  4.71238898,  6.28318531])
>>> # 3 points entre 0 et 1 selon l'axe 0, et 5 entre 0 et 2 selon l'axe 1
>>> z = N.mgrid[0:1:3j, 0:2:5j]; z
array([[[ 0. ,  0. ,  0. ,  0. ,  0. ],  # Axe 0 variable, axe 1 constant
        [ 0.5,  0.5,  0.5,  0.5,  0.5],
        [ 1. ,  1. ,  1. ,  1. ,  1. ]],
       [[ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ],  # Axe 0 constant, axe 1 variable
        [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ],
        [ 0. ,  0.5,  1. ,  1.5,  2. ]]])
>>> z.shape
(2, 3, 5)    # 2 plans 2D (x, y) de 3 lignes (y) × 5 colonnes (x)
>>> N.mgrid[0:1:5j, 0:2:7j, 0:3:9j].shape
(3, 5, 7, 9) # 3 volumes 3D (x, y, z) de 5 plans (z) × 7 lignes (y) × 9 colonnes (x)
```

Attention : à l'ordre de variation des indices dans les tableaux multidimensionnel, et aux différences entre `numpy.meshgrid()` et `numpy.mgrid`.

— `numpy.random.rand()` crée un tableau d'un format donné de réels aléatoires dans $[0, 1[$; `numpy.random.randn()` génère un tableau d'un format donné de réels tirés aléatoirement d'une distribution gaussienne (normale) standard $\mathcal{N}(\mu = 0, \sigma^2 = 1)$. .. ($\mu$=0, σ^2=1).

Le sous-module `numpy.random` fournit des générateurs de nombres aléatoires pour de nombreuses distributions discrètes et continues.

Manipulations sur les tableaux

Les `array` 1D sont indexables comme les listes standard. En dimension supérieure, chaque axe est indéxable indépendamment.

```
>>> x = N.arange(10);   # Rampe 1D
>>> x[1::3] *= -1; x    # Modification sur place ("in place")
array([ 0, -1,  2,  3, -4,  5,  6, -7,  8,  9])
```

Slicing

Les sous-tableaux de rang $< N$ d'un tableau de rang N sont appelées *slices* : le (ou les) axe(s) selon le(s)quel(s) la *slice* a été découpée, devenu(s) de longueur 1, est (sont) éliminé(s).

```
>>> y = N.arange(2*3*4).reshape(2, 3, 4); y  # 2 plans, 3 lignes, 4 colonnes
array([[[ 0,  1,  2,  3],
        [ 4,  5,  6,  7],
        [ 8,  9, 10, 11]],
       [[12, 13, 14, 15],
        [16, 17, 18, 19],
        [20, 21, 22, 23]]])
>>> y[0, 1, 2]  # 1er plan (axe 0), 2ème ligne (axe 1), 3ème colonne (axe 2)
6               # Scalaire, shape *()*, ndim 0
>>> y[0, 1]     # = y[0, 1, :] 1er plan (axe 0), 2ème ligne (axe 1)
array([4, 5, 6, 7])        # Shape (4,)
>>> y[0]        # = y[0, :, :] 1er plan (axe 0)
array([[ 0,  1,  2,  3],
       [ 4,  5,  6,  7],
       [ 8,  9, 10, 11]])  # Shape (3, 4)
>>> y[0][1][2]  # = y[0, 1, 2] en ~4× plus lent (slices successives)
6
>>> y[:, -1]    # = y[:, 2, :] Dernière slice selon le 2ème axe
array([[ 8,  9, 10, 11],
       [20, 21, 22, 23]])  # Shape (2, 4)
>>> y[..., 0]   # = y[:, :, 0] 1ère slice selon le dernier axe
array([[ 0,  4,  8],
       [12, 16, 20]])      # Shape (2, 3)
>>> # On peut vouloir garder explicitement la dimension "tranchée"
>>> y[..., 0:1] # 1ère slice selon le dernier axe *en gardant le rang originel*
array([[[ 0],
        [ 4],
        [ 8]],
       [[12],
        [16],
        [20]]])
>>> y[..., 0:1].shape
(2, 3, 1)  # Le dernier axe a été conservé, il ne contient pourtant qu'un seul élément
```

Modification de format

`numpy.ndarray.reshape()` modifie le format d'un tableau sans modifier le nombre total d'éléments :

```
>>> y = N.arange(6).reshape(2, 3); y # Shape (6,) → (2, 3) (*size* inchangé)
array([[0, 1, 2],
       [3, 4, 5]])
```

```
>>> y.reshape(2, 4)        # Format incompatible (*size* serait modifié)
ValueError: total size of new array must be unchanged
```

numpy.ndarray.ravel() « déroule » tous les axes et retourne un tableau de rang 1 :

```
>>> y.ravel()              # *1st axis slowest, last axis fastest*
array([ 0, 1, 2, 3, 4, 5]) # Shape (2, 3) → (6,) (*size* inchangé)
>>> y.ravel('F')           # *1st axis fastest, last axis slowest* (ordre Fortran)
array([0, 3, 1, 4, 2, 5])
```

numpy.ndarray.transpose() transpose deux axes, par défaut les derniers (raccourci : numpy.ndarray.T) :

```
>>> y.T         # Transposition = y.transpose() (voir aussi *rollaxis*)
array([[0, 3],
       [1, 4],
       [2, 5]])
```

numpy.ndarray.squeeze() élimine tous les axes de dimension 1. numpy.expand_dims() ajoute un axe de dimension 1 en position arbitraire. Cela est également possible en utilisant notation *slice* avec numpy.newaxis.

```
>>> y[..., 0:1].squeeze()               # Élimine *tous* les axes de dimension 1
array([0, 3])
>>> N.expand_dims(y[..., 0], -1).shape  # Ajoute un axe de dim. 1 en dernière position
(2, 1)
>>> y[:, N.newaxis].shape               # Ajoute un axe de dim. 1 en 2nde position
(2, 1, 3)
```

numpy.resize() modifie le format en modifiant le nombre total d'éléments :

```
>>> N.resize(N.arange(4), (2, 4)) # Complétion avec des copies du tableau
array([[0, 1, 2, 3],
       [0, 1, 2, 3]])
>>> N.resize(N.arange(4), (4, 2))
array([[0, 1],
       [2, 3],
       [0, 1],
       [2, 3]])
```

Exercice :

*Inversion de matrice **

Stacking

```
>>> a = N.arange(5); a
array([0, 1, 2, 3, 4])
>>> N.hstack((a, a))  # Stack horizontal (le long des colonnes)
array([0, 1, 2, 3, 4, 0, 1, 2, 3, 4])
>>> N.vstack((a, a))  # Stack vertical (le long des lignes)
array([[0, 1, 2, 3, 4],
       [0, 1, 2, 3, 4]])
>>> N.dstack((a, a))  # Stack en profondeur (le long des plans)
array([[[0, 0],
        [1, 1],
        [2, 2],
        [3, 3],
        [4, 4]]])
```

Broadcasting

L'array broadcasting définit les régles selon lesquelles deux tableaux de formats *différents* peuvent éventuellement s'apparier :

1. Deux tableaux sont compatibles (*broadcastable*) si, pour chaque axe, soit les tailles sont égales, soit l'une d'elles est exactement égale à 1. P.ex. (5, 3) et (1, 3) sont des formats *broadcastable*, (5, 3) et (5, 1) également, mais (5, 3) et (3, 1) ne le sont pas.
2. Si un tableau a un axe de taille 1, le tableau sera dupliqué à la volée autant de fois que nécessaire selon cet axe pour attendre la taille de l'autre tableau le long de cet axe. P.ex. un tableau (2, 1, 3) pourra être transformé en tableau (2, 5, 3) en le dupliquant 5 fois le long du 2ème axe (`axis=1`).
3. La taille selon chaque axe après *broadcast* est égale au maximum de toutes les tailles d'entrée le long de cet axe. P.ex. (5, 3, 1) × (1, 3, 4) → (5, 3, 4).
4. Si un des tableaux a un rang (`ndim`) inférieur à l'autre, alors son format (`shape`) est précédé d'autant de 1 que nécessaire pour atteindre le même rang. P.ex. (5, 3, 1) × (4,) = (5, 3, 1) × (1, 1, 4) → (5, 3, 4).

```
>>> a = N.arange(6).reshape(2, 3); a # Shape (2, 3)
array([[0, 1, 2],
       [3, 4, 5]])
>>> b = N.array([10, 20, 30]); b     # Shape (3,)
array([10, 20, 30])
>>> a + b                       # Shape (3,) ~ (1, 3) → (2, 3) = (1, 3) copié 2 fois
array([[10, 21, 32],
       [13, 24, 35]])         # Shape (2, 3)
>>> c = N.array([10, 20]); c  # Shape (2,)
array([10, 20])
>>> a + c                       # Shape (2,) ~ (1, 2) incompatible avec (2, 3)
ValueError: shape mismatch: objects cannot be broadcast to a single shape
>>> c[:, N.newaxis]             # = c.reshape(-1, 1) Shape (2, 1)
array([[10],
       [20]])
>>> a + c[:, N.newaxis]       # Shape (2, 1) → (2, 3) = (2, 1) copié 3 fois
array([[10, 11, 12],
       [23, 24, 25]])
```

Voir également cette présentation.

Indexation évoluée

```
>>> a = N.linspace(-1, 1, 5); a
array([-1. , -0.5,  0. ,  0.5,  1. ])
>>> a >= 0                # Test logique: tableau de booléens
array([False, False,  True,  True,  True], dtype=bool)
>>> (a >= 0).nonzero()    # Indices des éléments ne s'évaluant pas à False
(array([2, 3, 4]),)       # Indices des éléments >= 0
>>> a[(a >= 0).nonzero()] # Indexation par un tableau d'indices, pas pythonique :-(
array([ 0. ,  0.5,  1. ])
>>> a[a >= 0]             # Indexation par un tableau de booléens, pythonique :-D
array([ 0. ,  0.5,  1. ])
>>> a[a < 0] -= 10; a     # Soustrait 10 à toutes les valeurs <0 = N.where(a < 0, a - 10, a)
```

Opérations de base

```
>>> a = N.arange(3); a # Shape (3,), type *int*
array([0, 1, 2])
>>> b = 1.              # ~ Shape (), type *float*
>>> c = a + b; c       # *Broadcasting*: () → (1,) → (3,)
array([ 1.,  2.,  3.]) # *Upcasting*: int → float
>>> a += 1; a          # Modification *in place* (plus efficace si possible)
array([ 1.,  2.,  3.])
>>> a.mean()           # *ndarray* dispose de nombreuses méthodes numériques de base
2.0
```

Opérations sur les axes

```
>>> x = N.random.permutation(6).reshape(3, 2); x # 3 lignes, 2 colonnes
array([[3, 4],
       [5, 1],
       [0, 2]])
>>> x.min()          # Minimum global (comportement par défaut: `axis=None`)
0
>>> x.min(axis=0)    # Minima le long de l'axe 0 (i.e. l'axe des lignes)
array([0, 1])        # ce sont les minima colonne par colonne: (*3*, 2) → (2,)
>>> x.min(axis=1)    # Minima le long de l'axe 1 (i.e. l'axe des colonnes)
array([3, 1, 0])     # ce sont les minima ligne par ligne (3, *2*) → (3,)
>>> x.min(axis=1, keepdims=True) # Idem mais en *conservant* le format originel
array([[3],
       [1],
       [0]])
>>> x.min(axis=(0, 1)) # Minima le long des axes 0 *et* 1 (càd ici tous les axes)
0
```

Opérations matricielles

Les opérations de base s'appliquent sur les *éléments* des tableaux, et n'ont pas une signification matricielle par défaut :

```
>>> m = N.arange(4).reshape(2, 2); m # Tableau de rang 2
array([[0, 1],
       [2, 3]])
>>> i = N.identity(2, dtype=int); i  # Tableau "identité" de rang 2 (type entier)
array([[1, 0],
       [0, 1]])
>>> m * i             # Attention! opération * sur les éléments
array([[0, 0],
       [0, 3]])
>>> N.dot(m, i)       # Multiplication *matricielle* des tableaux: M × I = M
array([[0, 1],
       [2, 3]])
```

Il est possible d'utiliser systématiquement les opérations matricielles en manipulant des `numpy.matrix` plutôt que de `numpy.ndarray` :

```
>>> N.matrix(m) * N.matrix(i)  # Opération * entre matrices
matrix([[0, 1],
        [2, 3]])
```

Le sous-module **numpy.linalg** fournit des outils spécifiques au calcul matriciel (inverse, déterminant, valeurs propres, etc.).

Ufuncs

numpy fournit de nombreuses fonctions mathématiques de base (`numpy.exp()`, `numpy.atan2()`, etc.) s'appliquant directement sur les éléments des tableaux d'entrée :

```
>>> x = N.linspace(0, 2*N.pi, 5)  # [0, π/2, π, 3π/2, 2π]
>>> y = N.sin(x); y               # sin(x) = [0, 1, 0, -1, 0]
array([  0.00000000e+00,   1.00000000e+00,   1.22460635e-16,
        -1.00000000e+00,  -2.44921271e-16])
>>> y == [0, 1, 0, -1, 0]         # Test d'égalité stricte (élément par élément)
array([ True,  True, False,  True, False], dtype=bool) # Attention aux calculs en réels␣
↪(float)!
>>> N.all(N.sin(x) == [0, 1, 0, -1, 0]) # Test d'égalité stricte de tous les éléments
False
>>> N.allclose(y, [0, 1, 0, -1, 0])     # Test d'égalité numérique de tous les éléments
True
```

Exercices :

*Median Absolute Deviation **, *Distribution du pull ****

Tableaux évolués

Types composés

Par définition, tous les éléments d'un tableau *homogène* doivent être du même type. Cependant, outre les types scalaires élémentaires – `bool`, `int`, `float`, `complex`, `str`, etc. – numpy supporte les types *composés*, càd incluant plusieurs sous-éléments de types différents :

```
>>> dt = N.dtype([('nom', 'S10'),    # 1er  élément: une chaîne de 10 caractères
...               ('age', 'i'),      # 2ème élément: un entier
...               ('taille', 'd')])  # 3ème élément: un réel (double)
>>> arr = N.array([('Calvin', 6, 1.20), ('Hobbes', 5, 1.80)], dtype=dt); arr
array([('Calvin', 6, 1.2), ('Hobbes', 6, 1.8)],
      dtype=[('nom', '|S10'), ('age', '<i4'), ('taille', '<f8')])
>>> arr[0]                          # Accès par élément
('Calvin', 6, 1.2)
>>> arr['nom']                      # Accès par sous-type
array(['Calvin', 'Hobbes'], dtype='|S10')
>>> rec = arr.view(N.recarray); arr  # Vue de type 'recarray'
rec.array([('Calvin', 6, 1.2), ('Hobbes', 5, 1.8)],
      dtype=[('nom', '|S10'), ('age', '<i4'), ('taille', '<f8')])
>>> rec.nom                         # Accès direct par attribut
chararray(['Calvin', 'Hobbes'], dtype='|S10')
```

Les tableaux structurés sont très puissants pour manipuler des données (semi-)hétérogènes, p.ex. les entrées du catalogue CSV des objets de Messier `Messier.csv` :

```
# Messier, NGC, Magnitude, Size [arcmin], Distance [pc], RA [h], Dec [deg], Constellation,␣
↪Season, Name
# Attention: les données n'ont pas vocation à être très précises!
# D'après http://astropixels.com/messier/messiercat.html
M,NGC,Type,Mag,Size,Distance,RA,Dec,Con,Season,Name
M1,1952,Sn,8.4,5.0,1930.0,5.575,22.017,Tau,winter,Crab Nebula
M2,7089,Gc,6.5,12.9,11600.0,21.558,0.817,Aqr,autumn,
M3,5272,Gc,6.2,16.2,10400.0,13.703,28.383,CVn,spring,
M4,6121,Gc,5.6,26.3,2210.0,16.393,-26.533,Sco,summer,
```

```
>>> dt = N.dtype([('M', 'S3'),         # N° catalogue Messier
...               ('NGC', 'i'),       # N° New General Catalogue
...               ('Type', 'S2'),     # Code type
...               ('Mag', 'f'),       # Magnitude
...               ('Size', 'f'),      # Taille [arcmin]
...               ('Distance', 'f'),  # Distance [pc]
...               ('RA', 'f'),        # Ascension droite [h]
...               ('Dec', 'f'),       # Déclinaison [deg]
...               ('Con', 'S3'),      # Code constellation
...               ('Season', 'S6'),   # Saison
...               ('Name', 'S30')])   # Nom alternatif
>>> messier = N.genfromtxt("Messier.csv", dtype=dt, delimiter=',', comments='#')
>>> messier[1]
('M1', 1952, 'Sn',  8.39999962,  5.,  1930.,  5.57499981,  22.0170002, 'Tau', 'winter', 'Crab␣
↪Nebula')
>>> N.nanmean(messier['Mag'])
7.4927273
```

Tableaux masqués

Le sous-module `numpy.ma` ajoute le support des tableaux masqués (*Masked Arrays*). Imaginons un tableau (4, 5) de réels (positifs ou négatifs), sur lequel nous voulons calculer pour chaque colonne la moyenne des éléments *positifs* uniquement :

```
>>> x = N.random.randn(4, 5); x
array([[-0.55867715,  1.58863893, -1.4449145 ,  1.93265481, -0.17127422],
       [-0.86041806,  1.98317832, -0.32617721,  1.1358607 , -1.66150602],
       [-0.88966893,  1.36185799, -1.54673735, -0.09606195,  2.23438981],
       [ 0.35943269, -0.36134448, -0.82266202,  1.38143768, -1.3175115 ]])
>>> x[x >= 0]        # Donne les éléments >0 du tableau, sans leurs indices
array([ 1.58863893,  1.93265481,  1.98317832,  1.1358607 ,  1.36185799,
        2.23438981,  0.35943269,  1.38143768])
>>> (x >= 0).nonzero() # Donne les indices ([i], [j]) des éléments positifs
(array([0, 0, 1, 1, 2, 2, 3, 3]), array([1, 3, 1, 3, 1, 4, 0, 3]))
>>> y = N.ma.masked_less(x, 0); y  # Tableau où les éléments <0 sont masqués
masked_array(data =
 [[-- 1.58863892701 -- 1.93265481164 --]   # Données
 [-- 1.98317832359 -- 1.13586070417 --]
 [-- 1.36185798574 -- -- 2.23438980788]
 [0.359432688656 -- -- 1.38143767743 --]],
             mask =
 [[ True False  True False  True]          # Bit de masquage
 [ True False  True False  True]
 [ True False  True  True False]
 [False  True  True False  True]],
       fill_value = 1e+20)
>>> m0 = y.mean(axis=0); m0               # Moyenne sur les lignes (axe 0)
masked_array(data = [0.359432688656 1.64455841211 -- 1.48331773108 2.23438980788],
             mask = [False False  True False False],
       fill_value = 1e+20)                 # Le résultat est un *Masked Array*
>>> m0.filled(-1)                         # Conversion en tableau normal
array([ 0.35943269,  1.64455841, -1.        ,  1.48331773,  2.23438981])
```

Note : Les tableaux *évolués* de `numpy` sont parfois suffisants, mais pour une utilisation avancée, il peut être plus pertinent d'invoquer les bibliothèque dédiées *Pandas & xarray*.

Entrées/sorties

numpy peut lire – `numpy.loadtxt()` – ou sauvegarder – `numpy.savetxt()` – des tableaux dans un simple fichier ASCII :

```
>>> x = N.linspace(-1, 1, 100)
>>> N.savetxt('archive_x.dat', x)    # Sauvegarde dans le fichier 'archive_x.dat'
>>> y = N.loadtxt("archive_x.dat")   # Relecture à partir du fichier 'archive_x.dat'
>>> (x == y).all()                   # Test d'égalité stricte
True
```

Attention : `numpy.loadtxt()` supporte les types composés, mais ne supporte pas les données manquantes ; utiliser alors la fonction `numpy.genfromtxt()`, plus robuste mais plus lente.

Le format texte n'est pas optimal pour de gros tableaux : il peut alors être avantageux d'utiliser le format binaire `.npy`, beaucoup plus compact (mais non *human readable*) :

```
>>> x = N.linspace(-1, 1, 1e6)
>>> N.save('archive_x.npy', x)    # Sauvegarde dans le fichier 'archive_x.npy'
>>> y = N.load("archive_x.npy")   # Relecture à partir du fichier 'archive_x.npy'
>>> (x == y).all()
True
```

Il est enfin possible de *sérialiser* les tableaux à l'aide de la bibliothèque standard *[c]Pickle*.

Sous-modules

numpy fournit en outre quelques fonctionnalités supplémentaires, parmis lesquelles les sous-modules suivants :

- `numpy.fft` : *Discrete Fourier Transform*
- `numpy.random` : valeurs aléatoires
- `numpy.polynomial` : manipulation des polynômes (racines, polynômes orthogonaux, etc.)

Performances

Avertissement : *Premature optimization is the root of all evil* – Donald Knuth

Même si numpy apporte un gain significatif en performance par rapport à du Python standard, il peut être possible d'améliorer la vitesse d'exécution par l'utilisation de librairies externes dédiées, p.ex.

- NumExpr est un évaluateur optimisé d'expressions numériques :

```
>>> a = N.arange(1e6)
>>> b = N.arange(1e6)
>>> %timeit a*b - 4.1*a > 2.5*b
100 loops, best of 3: 11.4 ms per loop
>>> %timeit numexpr.evaluate("a*b - 4.1*a > 2.5*b")
100 loops, best of 3: 1.97 ms per loop
>>> %timeit N.exp(-a)
10 loops, best of 3: 60.1 ms per loop
>>> timeit numexpr.evaluate("exp(-a)") # Multi-threaded
10 loops, best of 3: 19.3 ms per loop
```

- Bottleneck est une collection de fonctions accélérées, notamment pour des tableaux contenant des NaN ou pour des statistiques glissantes.
- theano, pour optimiser l'évaluation des expressions mathématiques sur les tableaux numpy, notamment par l'utilisation des GPU (Graphics Processing Unit) et de code C généré à la volée.

Voir également *Profilage et optimisation*.

Scipy

`scipy` est une bibliothèque *numérique*[1] d'algorithmes et de fonctions mathématiques, basée sur les tableaux `numpy.ndarray`, complétant ou améliorant (en terme de performances) les fonctionnalités de `numpy`.

Note : N'oubliez pas de citer scipy & co. dans vos publications et présentations utilisant ces outils.

Tour d'horizon

- `scipy.special` : fonctions spéciales (fonctions de Bessel, erf, gamma, etc.)
- `scipy.integrate` : intégration numérique (intégration numérique ou d'équations différentielles)
- `scipy.optimize` : méthodes d'optimisation (minimisation, moindres-carrés, zéros d'une fonction, etc.)
- `scipy.interpolate` : interpolation (interpolation, splines)
- `scipy.fftpack` : transformées de Fourier
- `scipy.signal` : traitement du signal (convolution, corrélation, filtrage, ondelettes, etc.)
- `scipy.linalg` : algèbre linéaire
- `scipy.stats` : statistiques (fonctions et distributions statistiques)
- `scipy.ndimage` : traitement d'images multi-dimensionnelles
- `scipy.io` : entrées/sorties

Liens :

- Scipy Reference
- Scipy Cookbook

Voir également :

- Scikits : modules plus spécifiques étroitement liés à `scipy`, parmi lesquels :
  - scikit-learn : *machine learning*
  - scikit-image : *image processing*
  - statsmodel : modèles statistiques (tutorial)
- Scipy Topical softwares

Exercices :

*Quadrature & zéro d'une fonction **, *Schéma de Romberg ***, *Méthode de Runge-Kutta ***

Quelques exemples complets

- Interpolation
- Integration (intégrales numériques, équations différentielles)
  - odeint notebook
  - Zombie Apocalypse
- Optimisation (moindres carrés, ajustements, recherche de zéros)
- Traitement du signal (splines, convolution, filtrage)

[1] Python dispose également d'une librairie de calcul *formel*, sympy, et d'un environnement de calcul mathématique, sage.

— Algèbre linéaire (systèmes linéaires, moindres carrés, décompositions)
— Statistiques (variables aléatoires, distributions, tests)

Matplotlib

Matplotlib est une bibliothèque graphique de visualisation 2D (avec un support pour la 3D, l'animation et l'interactivité), permettant des sorties de haute qualité « prêtes à publier ». C'est à la fois une bibliothèque de *haut niveau*, fournissant des fonctions de visualisation « clé en main » (échelle logarithmique, histogramme, courbes de niveau, etc., voir la galerie), et de *bas niveau*, permettant de modifier tous les éléments graphiques de la figure (titre, axes, couleurs et styles des lignes, etc., voir *Anatomie d'une figure*).

`pylab` vs. `pyplot`

Il existe deux interfaces pour deux types d'utilisation :

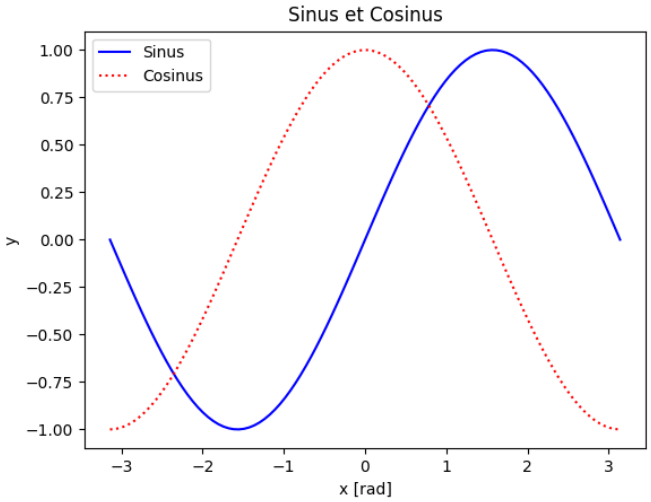
— `pylab` : interface procédurale, originellement très similaire à MATLAB™ et généralement réservée à l'analyse interactive :

```
>>> from pylab import *          # DÉCONSEILLÉ DANS UN SCRIPT!
>>> x = linspace(-pi, pi, 100)  # pylab importe numpy dans l'espace courant
>>> plot(x, sin(x), 'b-', label="Sinus")      # Trace la courbe y = sin(x)
>>> plot(x, cos(x), 'r:', label="Cosinus")    # Trace la courbe y = cos(x)
>>> xlabel("x [rad]")            # Ajoute le nom de l'axe des x
>>> ylabel("y")                  # Ajoute le nom de l'axe des y
>>> title("Sinus et Cosinus")    # Ajoute le titre de la figure
>>> legend()                     # Ajoute une légende
>>> savefig("simple.png")        # Enregistre la figure en PNG
```

— `matplotlib.pyplot` : interface orientée objet, préférable pour les scripts :

```
import numpy as N
import matplotlib.pyplot as P

x = N.linspace(-N.pi, N.pi, 100)

fig, ax = P.subplots()  # Création d'une figure contenant un seul système d'axes
ax.plot(x, N.sin(x), c='b', ls='-', label="Sinus")    # Courbe y = sin(x)
ax.plot(x, N.cos(x), c='r', ls=':', label="Cosinus")  # Courbe y = cos(x)
ax.set_xlabel("x [rad]")          # Nom de l'axe des x
ax.set_ylabel("y")                # Nom de l'axe des y
ax.set_title("Sinus et Cosinus")  # Titre de la figure
ax.legend()                       # Légende
fig.savefig("simple.png")         # Sauvegarde en PNG
```

Dans les deux cas, le résultat est le même :



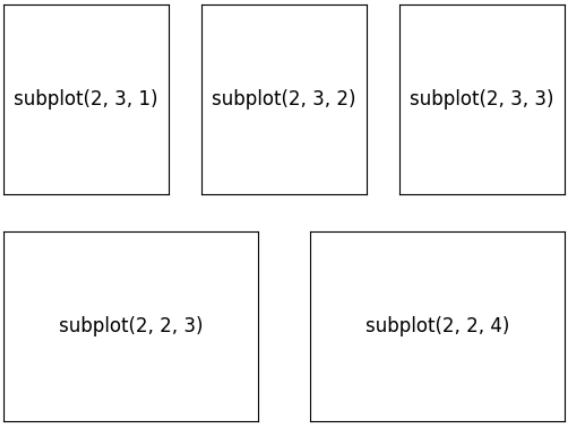
Par la suite, nous nous concentrerons sur l'interface OO (Orientée Objet) `matplotlib.pyplot`, plus puissante et flexible.

Figure et axes

L'élément de base est le système d'axes `matplotlib.axes.Axes`, qui définit et réalise la plupart des éléments graphiques (tracé de courbes, définition des axes, annotations, etc.). Un ou plusieurs de ces systèmes d'axes sont regroupés au sein d'une `matplotlib.figure.Figure`.

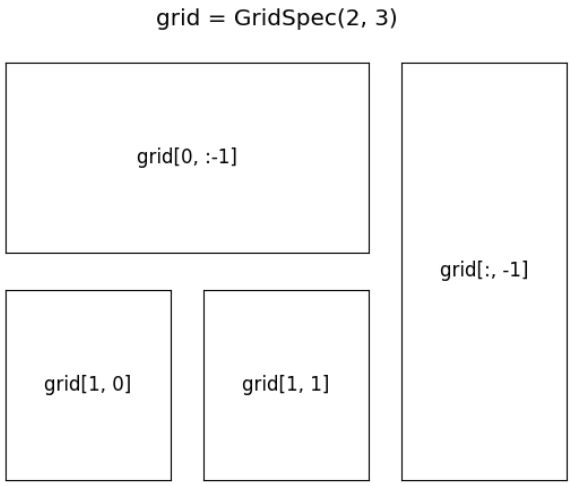
Ainsi, pour générer une figure contenant 2 (vertical) × 3 (horizontal) = 6 systèmes d'axes (numérotés de 1 à 6) :

```
fig = P.figure()
for i in range(1, 4):
    ax = fig.add_subplot(2, 3, i, xticks=[], yticks=[])
    ax.text(0.5, 0.5, "subplot(2, 3, {})".format(i),
            ha='center', va='center', size='large')
for i in range(3, 5):
    ax = fig.add_subplot(2, 2, i, xticks=[], yticks=[])
    ax.text(0.5, 0.5, "subplot(2, 2, {})".format(i),
            ha='center', va='center', size='large')
```



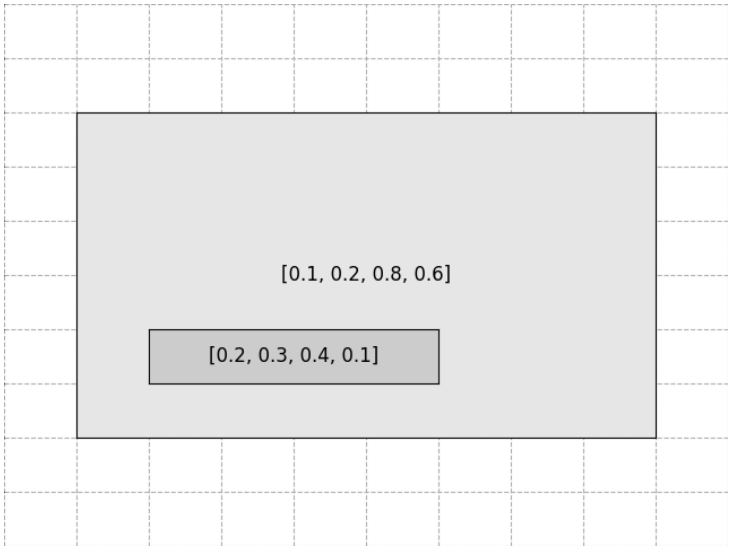
Pour des mises en page plus complexes, il est possible d'utiliser le kit gridspec, p.ex. :

```
from matplotlib.gridspec import GridSpec

fig = P.figure()
fig.suptitle("grid = GridSpec(2, 3)", fontsize='x-large')

grid = GridSpec(2, 3)
ax1 = fig.add_subplot(grid[0, :-1], xticks=[], yticks=[])
ax1.text(0.5, 0.5, "grid[0, :-1]", ha='center', va='center', size='large')
ax2 = fig.add_subplot(grid[:, -1], xticks=[], yticks=[])
ax3.text(0.5, 0.5, "grid[:, -1]", ha='center', va='center', size='large')
ax3 = fig.add_subplot(grid[1, 0], xticks=[], yticks=[])
ax3.text(0.5, 0.5, "grid[1, 0]", ha='center', va='center', size='large')
ax4 = fig.add_subplot(grid[1, 1], xticks=[], yticks=[])
ax4.text(0.5, 0.5, "grid[1, 1]", ha='center', va='center', size='large')
```



Enfin, il est toujours possible (mais peu pratique) de créer soi-même le système d'axes dans les coordonnées relatives à la figure :

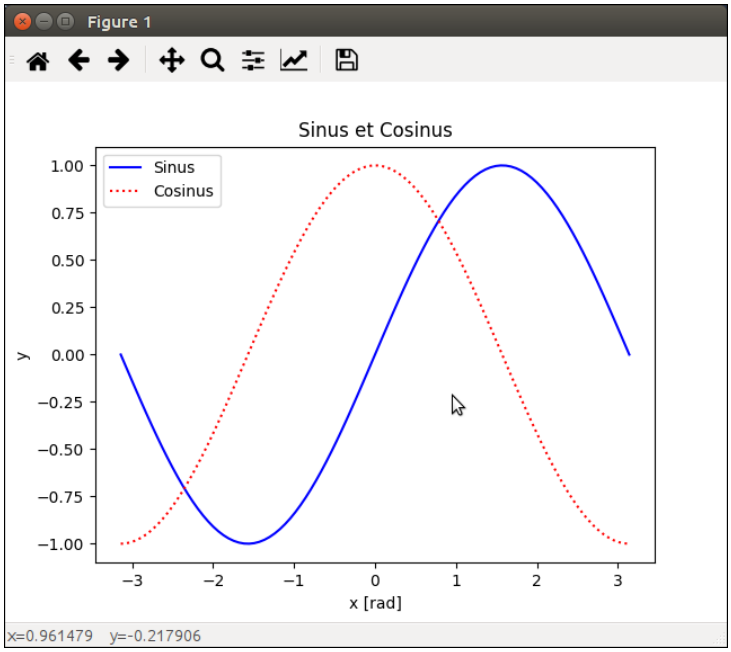
```
fig = P.figure()
ax0 = fig.add_axes([0, 0, 1, 1], frameon=False,
                   xticks=N.linspace(0, 1, 11), yticks=N.linspace(0, 1, 11))
ax0.grid(True, ls='--')
ax1 = fig.add_axes([0.1, 0.2, 0.8, 0.6], xticks=[], yticks=[], fc='0.9')
ax1.text(0.5, 0.5, "[0.1, 0.2, 0.8, 0.6]", ha='center', va='center', size='large')
ax2 = fig.add_axes([0.2, 0.3, 0.4, 0.1], xticks=[], yticks=[], fc='0.8')
ax2.text(0.5, 0.5, "[0.2, 0.3, 0.4, 0.1]", ha='center', va='center', size='large')
```



Sauvegarde et affichage interactif

La méthode `matplotlib.figure.Figure.savefig()` permet de sauvegarder la figure dans un fichier dont le format est automatiquement défini par son extension, `png` (*raster*), `[e]ps`, `pdf`, `svg` (*vector*), etc., via différents backends.

Il est également possible d'afficher la figure dans une fenêtre interactive avec la commande `matplotlib.pyplot.show()` :



Note : Utiliser `ipython --pylab` pour l'utilisation intéractive des figures dans une session `ipython`.

Anatomie d'une figure

L'interface OO `matplotlib.pyplot` donne accès à tous les éléments d'une figure (titre, axes, légende, etc.), qui peuvent alors être ajustés (couleur, police, taille, etc.).

Fig. 4.1 – **Figure :** Anatomie d'une figure.

Note : N'oubliez pas de citer matplotlib (notamment *[Matplotlib07]*) dans vos publications et présentations utilisant cet outil.

Liens :

— User's Guide
— Gallery
— Tutorial matplotlib
— Tutoriel matplotlib

Voir également :

— MPLD3, un *backend* matplotlib interactif basé sur la librairie *web* 3D.js ;
— basemap et cartopy, bibliothèques de cartographie sphérique ;
— Seaborn, une surcouche de visualisation statistique à matplotlib & *Pandas & xarray* ;
— HoloViews, une surcouche de visualisation et d'analyse à matplotlib ;
— ggplot, une surcouche orientée Grammar of Graphics à matplotlib ;
— Bokeh, une bibliothèque graphique alternative à matplotlib plus orientée *web*/temps réel.

Exemples :

figure.py, *filtres2ndOrdre.py*

Exercices :

*Quartet d'Anscombe **, *Ensemble de Julia ***, *Diagramme de bifurcation : la suite logistique ***

Visualisation 3D

Matplotlib fournit d'emblée une interface mplot3d pour des figures 3D assez simples :

Fig. 4.2 – **Figure :** Exemple de figure matplotlib 3D.

Pour des visualisations plus complexes, mayavi.mlab est une bibliothèque graphique de visualisation 3D s'appuyant sur Mayavi.

Fig. 4.3 – **Figure :** Imagerie par résonance magnétique.

Note : N'oubliez pas de citer mayavi dans vos publications et présentations utilisant cet outil.

Voir également :

— VPython : *3D Programming for Ordinary Mortals*
— Glowscript : VPython dans le navigateur

Notes de bas de page et références bibliographiques

CHAPITRE 5

Bibliothèques scientifiques avancées

Table des matières

Pandas & xarray

pandas est une bibliothèque pour la structuration et l'analyse avancée de données *hétérogènes* (`PANel DAta`). Elle fournit notamment :

— des structures de données relationelles (« labellisées »), avec une indexation simple ou hiérarchique (càd à plusieurs niveaux),
— des méthodes d'alignement et d'agrégation des données, avec gestion des données manquantes,
— un support performant des labels temporels (p.ex. dates, de par son origine dans le domaine de l'économétrie), et des statistiques « glissantes »,
— de nombreuses fonctions d'entrée/sortie, d'analyse statistiques et de visualisation.

Les fonctionnalités de `pandas` sont *très* riches et couvrent de nombreux aspects (données manquantes, dates, analyse statistiques, etc.) : il n'est pas question de toutes les aborder ici. Avant de vous lancer dans une manipulation qui vous semble complexe, bien inspecter la documentation, très complète (p.ex. les recettes du cookbook), pour vérifier qu'elle n'est pas déjà implémentée ou documentée, ou pour identifier l'approche la plus efficace.

Note : La convention utilisée ici est « `import pandas as PD` ».

Attention : Les bibliothèques pandas et xarray sont encore en phase de développement assez intense, et vont probablement être amenées à évoluer significativement, et pas nécessairement de manière rétro-compatible. Nous travaillons ici sur les versions :
- pandas 0.20.x
- xarray 0.9.x

Structures

Références : Introduction to Data Structures

Pandas dispose de deux grandes structures de données [1] :

Nom de la structure	Rang	Description
`pandas.Series`	1	Vecteur de données *homogènes* labellisées
`pandas.DataFrame`	2	Tableau structuré de colonnes *homogènes*

```
>>> PD.Series(range(3))  # Série d'entiers sans indexation
0    0
1    1
2    2
dtype: int64
>>> PD.Series(N.random.randn(3), index=list('abc'))  # Série de réels indexés
a   -0.553480
b    0.081297
c   -1.845835
dtype: float64
>>> PD.DataFrame(N.random.randn(3, 4))
          0         1         2         3
0  1.570977 -0.677845  0.094364 -0.362031
1 -0.136712  0.762300  0.068611  1.265816
2 -0.697760  0.791288  0.449645 -1.105062
>>> PD.DataFrame([(1, N.exp(1), 'un'), (2, N.exp(2), 'deux'), (3, N.exp(3), 'trois')],
...              index=list('abc'), columns='i val nom'.split())
   i        val    nom
a  1   2.718282     un
b  2   7.389056   deux
c  3  20.085537  trois
```

Pour mettre en évidence la puissance de Pandas, nous utiliserons le *catalogue des objets Messier* vu précédemment. Le fichier peut être importé à l'aide de la function `pandas.read_csv()`, et le *dataframe* résultant est labellisé *à la volée* par la colonne `M` (`pandas.DataFrame.set_index()`) :

```
>>> messier = PD.read_csv("Messier.csv", comment='#')  # Lecture du fichier CSV
>>> messier.set_index('M', inplace=True)  # Indexation sur la colonne "M"
>>> messier.info()                        # Informations générales
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
Index: 110 entries, M1 to M110
Data columns (total 10 columns):
NGC         108 non-null object
Type        110 non-null object
Mag         110 non-null float64
Size        110 non-null float64
Distance    110 non-null float64
```

[1] Les structures `pandas.Panel` (de rang 3), `pandas.Panel4D` (de rang 4) et `pandas.PanelND` (de rang arbitraire) sont considérées comme **dépréciées** et seront retirées dans une version ultérieure. Utiliser une indexation hiérarchique ou `xarray`.

```
RA          110 non-null float64
Dec         110 non-null float64
Con         110 non-null object
Season      110 non-null object
Name        31 non-null object
dtypes: float64(5), object(5)
memory usage: 9.5+ KB
>>> messier.head(3)  # Par défaut les 5 premières lignes
     NGC Type  Mag  Size  Distance      RA     Dec  Con  Season         Name
M
M1  1952   Sn  8.4   5.0    1930.0   5.575  22.017  Tau  winter  Crab Nebula
M2  7089   Gc  6.5  12.9   11600.0  21.558   0.817  Aqr  autumn          NaN
M3  5272   Gc  6.2  16.2   10400.0  13.703  28.383  CVn  spring          NaN
```

Un *dataframe* est caractérisé par son indexation `pandas.DataFrame.index` et ses colonnes `pandas.DataFrame.columns` (de type `pandas.Index` ou `pandas.MultiIndex`), et les valeurs des données `pandas.DataFrame.values` :

```
>>> messier.index    # Retourne un Index
Index([u'M1', u'M2', u'M3', ..., u'M108', u'M109', u'M110'],
      dtype='object', name=u'M', length=110)
>>> messier.columns  # Retourne un Index
Index([u'NGC', u'Type', u'Mag', ..., u'Con', u'Season', u'Name'],
      dtype='object')
>>> messier.dtypes   # Retourne une Series indexée sur le nom des colonnes
NGC          object
Type         object
Mag         float64
Size        float64
Distance    float64
RA          float64
Dec         float64
Con          object
Season       object
Name         object
dtype: object
>>> messier.values
array([['1952', 'Sn', 8.4, ..., 'Tau', 'winter', 'Crab Nebula'],
       ['7089', 'Gc', 6.5, ..., 'Aqr', 'autumn', nan],
       ...,
       ['3992', 'Ba', 9.8, ..., 'UMa', 'spring', nan],
       ['205', 'El', 8.5, ..., 'And', 'autumn', nan]], dtype=object)
>>> messier.shape
(110, 10)
```

Une description statistique sommaire des colonnes numériques est obtenue par `pandas.DataFrame.describe()` :

```
>>> messier.drop(['RA', 'Dec'], axis=1).describe()
              Mag        Size      Distance
count  110.000000  110.000000  1.100000e+02
mean     7.492727   17.719091  4.574883e+06
std      1.755657   22.055100  7.141036e+06
min      1.600000    0.800000  1.170000e+02
25%      6.300000    6.425000  1.312500e+03
50%      7.650000    9.900000  8.390000e+03
75%      8.900000   17.300000  1.070000e+07
max     10.200000  120.000000  1.840000e+07
```

Accès aux données

Référence : Indexing and Selecting Data

L'accès par colonne retourne une `pandas.Series` (avec la même indexation) pour une colonne unique, ou un nouveau `pandas.DataFrame` pour plusieurs colonnes :

```
>>> messier.NGC  # Équivalent à messier['NGC']
M
M1      1952
M2      7089
        ...
M109    3992
M110     205
Name: NGC, Length: 110, dtype: object
>>> messier[['RA', 'Dec']]  # = messier.filter(items=('RA', 'Dec'))
          RA     Dec
M
M1     5.575  22.017
M2    21.558   0.817
...      ...     ...
M109  11.960  53.383
M110   0.673  41.683
[110 rows x 2 columns]
```

L'accès par `slice` retourne un nouveau *dataframe* :

```
>>> messier[:6:2]       # Lignes 0 (inclus) à 6 (exclu) par pas de 2
     NGC Type  Mag  Size  Distance      RA     Dec  Con  Season         Name
M
M1  1952   Sn  8.4   5.0    1930.0   5.575  22.017  Tau  winter  Crab Nebula
M3  5272   Gc  6.2  16.2   10400.0  13.703  28.383  CVn  spring          NaN
M5  5904   Gc  5.6  17.4    7520.0  15.310   2.083  Ser  summer          NaN
```

L'accès peut également se faire par labels via `pandas.DataFrame.loc` :

```
>>> messier.loc['M31']  # Retourne une Series indexée par les noms de colonne
NGC                   224
Type                   Sp
                 ...
Season              autumn
Name      Andromeda Galaxy
Name: M31, Length: 10, dtype: object
>>> messier.loc['M31', ['Type', 'Name']]           # Retourne une Series
Type                  Sp
Name    Andromeda Galaxy
Name: M31, dtype: object
>>> messier.loc[['M31', 'M51'], ['Type', 'Name']]  # Retourne un DataFrame
    Type              Name
M
M31   Sp  Andromeda Galaxy
M51   Sp  Whirlpool Galaxy
>>> messier.loc['M31':'M33', ['Type', 'Name']]     # De M31 à M33 inclu
    Type               Name
M
M31   Sp   Andromeda Galaxy
M32   El                NaN
M33   Sp  Triangulum Galaxy
```

De façon symétrique, l'accès peut se faire par position (n° de ligne/colonne) via `pandas.DataFrame.iloc`, p.ex. :

```
>>> messier.iloc[30:33, [1, -1]]  # Ici, l'indice 33 n'est PAS inclu!
    Type               Name
M
M31   Sp   Andromeda Galaxy
M32   El                NaN
M33   Sp  Triangulum Galaxy
>>> messier.iloc[30:33, messier.columns.get_loc('Name')]  # Mix des 2 approches
M
M31     Andromeda Galaxy
M32                  NaN
M33    Triangulum Galaxy
Name: Name, dtype: object
```

Les fonctions pandas.DataFrame.at et pandas.DataFrame.iat permettent d'accéder *rapidement* aux données individuelles :

```
>>> messier.at['M31', 'NGC']  # 20× plus rapide que messier.loc['M31']['NGC']
'224'
>>> messier.iat[30, 0]        # 20× plus rapide que messier.iloc[0][0]
'224'
```

Noter qu'il existe une façon de filtrer les données sur les colonnes ou les labels :

```
>>> messier.filter(regex='M.7', axis='index').filter('RA Dec'.split())
         RA     Dec
M
M17  18.347 -16.183
M27  19.993  22.717
M37   5.873  32.550
M47   7.610 -14.500
M57  18.893  33.033
M67   8.840  11.817
M77   2.712   0.033
M87  12.513  12.400
M97  11.247  55.017
```

Comme pour numpy, il est possible d'opérer une sélection booléenne :

```
>>> messier.loc[messier['Con'] == 'UMa', ['NGC', 'Name']]
       NGC             Name
M
M40   Win4       Winnecke 4
M81   3031    Bode's Galaxy
M82   3034     Cigar Galaxy
M97   3587       Owl Nebula
M101  5457  Pinwheel Galaxy
M108  3556              NaN
M109  3992              NaN
>>> messier[messier['Season'].isin('winter spring'.split())].head(3)
      NGC Type  Mag  Size  Distance      RA     Dec  Con  Season         Name
M
M1   1952   Sn  8.4   5.0    1930.0   5.575  22.017  Tau  winter  Crab Nebula
M3   5272   Gc  6.2  16.2   10400.0  13.703  28.383  CVn  spring          NaN
M35  2168   Oc  5.3  28.0     859.0   6.148  24.333  Gem  winter          NaN
>>> messier.loc[lambda df: N.radians(df.Size / 60) * df.Distance < 1].Name
M
M27           Dumbbell Nebula
M40                Winnecke 4
M57               Ring Nebula
M73                       NaN
M76    Little Dumbbell Nebula
M78                       NaN
```

```
M97                Owl Nebula
Name: Name, dtype: object
>>> messier.query("(Mag < 5) & (Size > 60)").Name
M
M7          Ptolemy's Cluster
M24    Sagittarius Star Cloud
M31          Andromeda Galaxy
M42     Great Nebula in Orion
M44           Beehive Cluster
M45                  Pleiades
Name: Name, dtype: object
```

Sélection	Syntaxe	Résultat
Colonne unique	`df.col` or `df[col]`	`pandas.Series`
Liste de colonnes	`df[[c1, ...]]`	`pandas.DataFrame`
Lignes par tranche	`df[slice]`	`pandas.DataFrame`
Label unique	`df.loc[label]`	`pandas.Series`
Liste de labels	`df.loc[[lab1, ...]]`	`pandas.DataFrame`
Labels par tranche	`df.loc[lab1:lab2]`	`pandas.DataFrame`
Ligne entière par n°	`df.iloc[i]`	`pandas.Series`
Ligne partielle par n°	`df.iloc[i, [j,...]]`	`pandas.Series`
Valeur par labels	`df.at[lab, col]`	Scalaire
Valeur par n°	`df.iat[i, j]`	Scalaire
Ligne par sél. booléenne	`df.loc[sel]` or `df[sel]` or `df.query("sel")`	`pandas.DataFrame`

`pandas.DataFrame.drop()` permet d'éliminer une ou plusieurs colonnes d'un *dataframe* :

```
>>> messier.drop(['RA', 'Dec'], axis=1).head(3)  # Élimination de colonnes
     NGC Type  Mag  Size  Distance  Con  Season  Name
M
M1  1952   Sn  8.4   5.0    1930.0  Tau  winter  Crab Nebula
M2  7089   Gc  6.5  12.9   11600.0  Aqr  autumn          NaN
M3  5272   Gc  6.2  16.2   10400.0  CVn  spring          NaN
```

`pandas.DataFrame.dropna()` et `pandas.DataFrame.fillna()` permettent de gérer les données manquantes (*NaN*) :

```
>>> messier.dropna(axis=0, how='any', subset=['NGC', 'Name']).head(3)
     NGC Type  Mag  Size  Distance      RA     Dec  Con  Season               Name
M
M1  1952   Sn  8.4   5.0    1930.0   5.575  22.017  Tau  winter        Crab Nebula
M6  6405   Oc  4.2  25.0     491.0  17.668 -32.217  Sco  summer  Butterfly Cluster
M7  6475   Oc  3.3  80.0     245.0  17.898 -34.817  Sco  summer  Ptolemy's Cluster
>>> messier.fillna('', inplace=True)  # Remplace les NaN à la volée
>>> messier.head(3)
     NGC Type  Mag  Size  Distance      RA     Dec  Con  Season         Name
M
M1  1952   Sn  8.4   5.0    1930.0   5.575  22.017  Tau  winter  Crab Nebula
M2  7089   Gc  6.5  12.9   11600.0  21.558   0.817  Aqr  autumn
M3  5272   Gc  6.2  16.2   10400.0  13.703  28.383  CVn  spring
```

Référence : Working with missing data

Attention : par défaut, beaucoup d'opérations retournent une *copie* de la structure, sauf si l'opération se fait « sur place » (`inplace=True`). D'autres opérations d'accès retournent seulement une *nouvelle vue* des mêmes données.

```
>>> df = PD.DataFrame(N.arange(12).reshape(3, 4),
...                   index=list('abc'), columns=list('ABCD')); df
   A  B   C   D
a  0  1   2   3
b  4  5   6   7
c  8  9  10  11
>>> df.drop('a', axis=0)
   A  B   C   D
b  4  5   6   7
c  8  9  10  11
>>> colA = df['A']  # Nouvelle vue de la colonne 'A'
>>> colA += 1       # Opération sur place
>>> df              # la ligne 'a' est tjs là, la colonne 'A' a été modifiée
   A  B   C   D
a  1  1   2   3
b  5  5   6   7
c  9  9  10  11
```

Lien : Returning a view versus a copy

Indéxation hiérarchique

Références : Multi-index / Advanced Indexing

`pandas.MultiIndex` offre une indexation *hiérarchique*, permettant de stocker et manipuler des données avec un nombre arbitraire de dimensions dans des structures plus simples.

```
>>> saisons = messier.reset_index()                    # Élimine l'indexation actuelle
>>> saisons.set_index(['Season', 'Type'], inplace=True) # MultiIndex
>>> saisons.head(3)
              M   NGC  Mag  Size  Distance      RA     Dec  Con         Name
Season Type
winter Sn    M1  1952  8.4   5.0    1930.0   5.575  22.017  Tau  Crab Nebula
autumn Gc    M2  7089  6.5  12.9   11600.0  21.558   0.817  Aqr
spring Gc    M3  5272  6.2  16.2   10400.0  13.703  28.383  CVn
```

Les informations contenues sont toujours les mêmes, mais structurées différemment :

```
>>> saisons.loc['spring'].head(3)  # Utilisation du 1er label
        M   NGC  Mag  Size    Distance      RA     Dec  Con        Name
Type
Gc     M3  5272  6.2  16.2     10400.0  13.703  28.383  CVn
Ds    M40  Win4  8.4   0.8       156.0  12.373  58.083  UMa  Winnecke 4
El    M49  4472  8.4   8.2  18400000.0  12.497   8.000  Vir
>>> saisons.loc['spring', 'El'].head(3)  # Utilisation des 2 labels
              M   NGC  Mag  Size    Distance      RA    Dec  Con Name
Season Type
spring El    M49  4472  8.4   8.2  18400000.0  12.497   8.00  Vir
       El    M59  4621  9.6   4.2  18400000.0  12.700  11.65  Vir
       El    M60  4649  8.8   6.5  18400000.0  12.728  11.55  Vir
```

La fonction `pandas.DataFrame.xs()` permet des sélections sur les différents niveaux d'indexation :

```
>>> saisons.xs('spring', level='Season').head(3) # = saisons.loc['spring']
        M   NGC  Mag  Size    Distance      RA     Dec  Con        Name
Type
Gc     M3  5272  6.2  16.2     10400.0  13.703  28.383  CVn
Ds    M40  Win4  8.4   0.8       156.0  12.373  58.083  UMa  Winnecke 4
El    M49  4472  8.4   8.2  18400000.0  12.497   8.000  Vir
>>> saisons.xs('El', level='Type').head(3) # Sélection sur le 2eme niveau
```

```
          M   NGC  Mag  Size    Distance      RA     Dec  Con Name
Season
autumn  M32   221  8.1   7.0    920000.0   0.713  40.867  And
spring  M49  4472  8.4   8.2  18400000.0  12.497   8.000  Vir
spring  M59  4621  9.6   4.2  18400000.0  12.700  11.650  Vir
```

Le (multi-)index n'est pas nécessairement trié à sa création, `pandas.sort_index()` permet d'y remédier :

```
>>> saisons[['M', 'NGC', 'Name']].head()
              M   NGC         Name
Season Type
winter Sn    M1  1952  Crab Nebula
autumn Gc    M2  7089
spring Gc    M3  5272
summer Gc    M4  6121
Gc    M5  5904
>>> saisons[['M', 'NGC', 'Name']].sort_index().head()
                M   NGC                     Name
Season Type
autumn El     M32   221
       El    M110   205
       Gc      M2  7089
       Gc     M15  7078  Great Pegasus Globular
       Gc     M30  7099
```

Manipulation des données

Références : Essential Basic Functionality

Comme dans numpy, il est possible de modifier les valeurs, ajouter/retirer des colonnes ou des lignes, tout en gérant les données manquantes.

Note : l'interopérabilité entre pandas et numpy est totale, toutes les fonctions Numpy peuvent prendre une structure Pandas en entrée, et s'appliquer aux colonnes appropriées :

```
>>> N.mean(messier, axis=0)  # Moyenne sur les lignes → Series indexée sur les colonnes
Mag         7.492727e+00
Size        1.771909e+01
Distance    4.574883e+06
RA          1.303774e+01
Dec         9.281782e+00
dtype: float64
```

```
>>> N.random.seed(0)
>>> df = PD.DataFrame(
        {'one': PD.Series(N.random.randn(3), index=['a', 'b', 'c']),
         'two': PD.Series(N.random.randn(4), index=['a', 'b', 'c', 'd']),
         'three': PD.Series(N.random.randn(3), index=['b', 'c', 'd'])})
>>> df
        one     three       two
a  1.764052       NaN  2.240893
b  0.400157 -0.151357  1.867558
c  0.978738 -0.103219 -0.977278
d       NaN  0.410599  0.950088
>>> df['four'] = df['one'] + df['two']; df  # Création d'une nouvelle colonne
        one     three       two      four
a  1.764052       NaN  2.240893  4.004946
b  0.400157 -0.151357  1.867558  2.267715
c  0.978738 -0.103219 -0.977278  0.001460
```

```
d       NaN  0.410599  0.950088       NaN
>>> df.sub(df.loc['b'], axis='columns') # Soustraction d'une ligne à toutes les colonnes␣
↪(axis=1)
        one     three       two      four
a  1.363895       NaN  0.373335  1.737230
b  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
c  0.578581  0.048138 -2.844836 -2.266255
d       NaN  0.561956 -0.917470       NaN
>>> df.sub(df['one'], axis='index') # Soustraction d'une colonne à toutes les lignes (axis=0␣
↪ou 'rows')
   one     three       two      four
a  0.0       NaN  0.476841  2.240893
b  0.0 -0.551514  1.467401  1.867558
c  0.0 -1.081957 -1.956016 -0.977278
d  NaN       NaN       NaN       NaN
```

```
>>> df.sort_values(by='a', axis=1) # Tri des colonnes selon les valeurs de la ligne 'a'
        one       two     three
a  1.764052  2.240893       NaN
b  0.400157  1.867558 -0.151357
c  0.978738 -0.977278 -0.103219
d       NaN  0.950088  0.410599
>>> df.min(axis=1) # Valeur minimale le long des colonnes
a    1.764052
b   -0.151357
c   -0.977278
d    0.410599
dtype: float64
>>> df.idxmin(axis=1) # Colonne des valeurs minimale le long des colonnes
a      one
b    three
c      two
d    three
dtype: object
```

```
>>> df.mean(axis=0)  # Moyenne sur toutes les lignes (gestion des données manquantes)
one      1.047649
three    0.052007
two      1.020315
dtype: float64
```

Note : Si les bibliothèques d'optimisation de performances Bottleneck et NumExpr sont installées, pandas en bénéficiera de façon transparente.

Regroupement & agrégation de données

Histogramme et discrétisation

Compter les objets Messier par constellation avec `pandas.value_counts()` :

```
>>> PD.value_counts(messier['Con']).head(3)
Sgr    15
Vir    11
Com     8
Name: Con, dtype: int64
```

Partitionner les objets en 3 groupes de magnitude (par valeurs : `pandas.cut()`, par quantiles : `pandas.qcut()`), et les compter :

```
>>> PD.value_counts(PD.cut(messier['Mag'], 3)).sort_index() # Par valeurs
(1.591, 4.467]     6
(4.467, 7.333]    40
(7.333, 10.2]     64
Name: Mag, dtype: int64
>>> PD.value_counts(PD.qcut(messier['Mag'], [0, .3, .6, 1])).sort_index()  # Par quantiles
(1.599, 6.697]    36
(6.697, 8.4]      38
(8.4, 10.2]       36
Name: Mag, dtype: int64
```

Group-by

Référence : Group By: split-apply-combine

Pandas offre la possibilité de regrouper les données selon divers critères (`pandas.DataFrame.groupby()`), de les agréger au sein de ces groupes et de stocker les résultats dans une structure avec indéxation hiérarchique (`pandas.DataFrame.agg()`).

```
>>> seasonGr = messier.groupby('Season')  # Retourne un DataFrameGroupBy
>>> seasonGr.groups
{'autumn': Index([u'M2', u'M15', ..., u'M103', u'M110'],
      dtype='object', name=u'M'),
 'spring': Index([u'M3', u'M40', ..., u'M108', u'M109'],
      dtype='object', name=u'M'),
 'summer': Index([u'M4', u'M5', ..., u'M102', u'M107'],
      dtype='object', name=u'M'),
 'winter': Index([u'M1', u'M35', ..., u'M79', u'M93'],
      dtype='object', name=u'M')}
>>> seasonGr.size()
Season
autumn    14
spring    38
summer    40
winter    18
dtype: int64
>>> seasonGr.get_group('winter').head(3)
     Con     Dec  Distance  Mag   NGC         Name     RA  Size Type
M
M1   Tau  22.017    1930.0  8.4  1952  Crab Nebula  5.575   5.0   Sn
M35  Gem  24.333     859.0  5.3  2168               6.148  28.0   Oc
M36  Aur  34.133    1260.0  6.3  1960               5.602  12.0   Oc
>>> seasonGr['Size'].agg([N.mean, N.std])  # Taille moyenne et stddev par groupe
             mean        std
Season
autumn  24.307143  31.472588
spring   7.197368   4.183848
summer  17.965000  19.322400
winter  34.261111  29.894779
>>> seasonGr.agg({'Size': N.max, 'Mag': N.min})
        Mag   Size
Season
autumn  3.4  120.0
spring  6.2   22.0
summer  3.3   90.0
winter  1.6  110.0
```

```
>>> magGr = messier.groupby(
...     [PD.qcut(messier['Mag'], [0, .3, .6, 1],
...              labels='Bright Medium Faint'.split()),
...     "Season"])
```

```
>>> magGr['Mag', 'Size'].agg({'Mag': ['count', 'mean'],
...                           'Size': [N.mean, N.std]})
              Mag                Size
            count      mean       mean        std
Mag    Season
Bright autumn     6  5.316667  45.200000  40.470878
       spring     1  6.200000  16.200000        NaN
       summer    15  5.673333  30.840000  26.225228
       winter    13  5.138462  42.923077  30.944740
Faint  autumn     4  9.225000   8.025000   4.768910
       spring    30  9.236667   5.756667   2.272578
       summer     7  8.971429   7.814286   9.135540
       winter     3  8.566667   9.666667   6.429101
Medium autumn     4  7.500000   9.250000   3.304038
       spring     7  7.714286  12.085714   5.587316
       summer    18  7.366667  11.183333   4.825453
       winter     2  7.550000  14.850000   8.697413
```

Tableau croisé (*Pivot table*)

Référence : Reshaping and Pivot Tables

Calculer la magnitude et la taille moyennes des objets Messier selon leur type avec `pandas.DataFrame.pivot_table()` :

```
>>> messier['Mag Size Type'.split()].pivot_table(columns='Type')
Type    As    Ba         Di  ...     Pl   Sn         Sp
Mag    9.0  9.85   7.216667  ...  9.050  8.4   8.495652
Size   2.8  4.80  33.333333  ...  3.425  5.0  15.160870
```

Visualisations

Exemple :

Démonstration Pandas/Seaborn (notebook : `pokemon.ipynb`) sur le jeu de données :`Pokemon.csv`.

Références :

- Visualization
- Seaborn: statistical data visualization

Autres exemples de visualisation de jeux de données complexes (utilisation de pandas et seaborn)

- Iris Dataset
- Histoire des sujets télévisés

Liens

- Pandas Tutorial
- Pandas Cookbook
- Pandas Lessons for New Users
- Practical Data Analysis
- Modern Pandas
- Various tutorials

Exercices :

— Exercices for New Users

Xarray

xarray est une bibliothèque pour la structuration de données *homogènes* de dimension arbitraire. Suivant la philosophie de la bibliothèque Pandas dont elle est issue (et dont elle dépend), elle permet notamment de nommer les différentes dimensions (*axes*) des tableaux (p.ex. `x.sum(axis='time')`), d'indexer les données (p.ex. `x.loc['M31']`), de naturellement gérer les opérations de *broadcasting*, des opérations de regroupement et d'agrégation (p.ex. `x.groupby(time.dayofyear).mean()`), une gestion plus facile des données manquantes et d'alignement des tableaux indexés (p.ex. `align(x, y, join='outer')`).

> *pandas excels at working with tabular data. That suffices for many statistical analyses, but physical scientists rely on N-dimensional arrays – which is where xarray comes in.*

`xarray` fournit deux structures principales, héritées du format netCDF :

— `xarray.DataArray`, un tableau N-D indexé généralisant le `pandas.Series`,
— `xarray.DataSet`, un dictionnaire regroupant plusieurs `DataArray` alignés selon une ou plusieurs dimensions, et similaire au `pandas.DataFrame`.

Note : La convention utilisée ici est « `import xarray as X` ».

```
>>> N.random.seed(0)
>>> data = X.DataArray(N.arange(3*4, dtype=float).reshape((3, 4)), # Tableau de données
...                    dims=('x', 'y'),             # Nom des dimensions
...                    coords={'x': list('abc')},   # Indexation des coordonnées en 'x'
...                    name='mesures',              # Nom du tableau
...                    attrs=dict(author='Y. Copin'))  # Méta-données
>>> data
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 3, y: 4)>
array([[ 0.,  1.,  2.,  3.],
       [ 4.,  5.,  6.,  7.],
       [ 8.,  9., 10., 11.]])
Coordinates:
  * x        (x) |S1 'a' 'b' 'c'
Dimensions without coordinates: y
Attributes:
    author:     Y. Copin
>>> data.to_pandas()     # Conversion en DataFrame à indexation simple
y    0    1     2     3
x
a  0.0  1.0   2.0   3.0
b  4.0  5.0   6.0   7.0
c  8.0  9.0  10.0  11.0
>>> data.to_dataframe()  # Conversion en DataFrame multi-indexé (hiérarchique)
     mesures
x y
a 0      0.0
  1      1.0
  2      2.0
  3      3.0
b 0      4.0
  1      5.0
  2      6.0
  3      7.0
c 0      8.0
  1      9.0
  2     10.0
  3     11.0
>>> data.dims
```

```
('x', 'y')
>>> data.coords
Coordinates:
  * x        (x) |S1 'a' 'b' 'c'
>>> data.values
array([[  0.,   1.,   2.,   3.],
       [  4.,   5.,   6.,   7.],
       [  8.,   9.,  10.,  11.]])
>>> data.attrs
OrderedDict([('author', 'Y. Copin')])
```

```
>>> data[:, 1]             # Accès par indices
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 3)>
array([ 1.,  5.,  9.])
Coordinates:
  * x        (x) |S1 'a' 'b' 'c'
>>> data.loc['a':'b', -1]  # Accès par labels
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 2)>
array([ 3.,  7.])
Coordinates:
  * x        (x) |S1 'a' 'b'
>>> data.sel(x=['a', 'c'], y=2)
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 2)>
array([  2.,  10.])
Coordinates:
  * x        (x) |S1 'a' 'c'
```

```
>>> data.mean(dim='x')  # Moyenne le long de la dimension 'x' = data.mean(axis=0)
<xarray.DataArray 'mesures' (y: 4)>
array([ 4.,  5.,  6.,  7.])
Dimensions without coordinates: y
```

```
>>> data2 = X.DataArray(N.arange(6).reshape(2, 3) * 10,
...                     dims=('z', 'x'), coords={'x': list('abd')})
>>> data2.to_pandas()
x   a   b   d
z
0   0  10  20
1  30  40  50
>>> data.to_pandas()  # REMINDER
y    0    1     2     3
x
a  0.0  1.0   2.0   3.0
b  4.0  5.0   6.0   7.0
c  8.0  9.0  10.0  11.0
>>> data2.values + data.values  # Opération sur des tableaux numpy incompatibles
ValueError: operands could not be broadcast together with shapes (2,3) (3,4)
>>> data2 + data                # Alignement automatique sur les coord. communes!
<xarray.DataArray (z: 2, x: 2, y: 4)>
array([[[  0.,   1.,   2.,   3.],
        [ 14.,  15.,  16.,  17.]],
       [[ 30.,  31.,  32.,  33.],
        [ 44.,  45.,  46.,  47.]]])
Coordinates:
  * x        (x) object 'a' 'b'
Dimensions without coordinates: z, y
```

```
>>> data['isSmall'] = data.sum(dim='y') < 10; data  # Booléen "Somme sur y < 10"
<xarray.DataArray 'mesures' (x: 3, y: 4)>
array([[  0.,   1.,   2.,   3.],
       [  4.,   5.,   6.,   7.],
```

```
       [  8.,   9.,  10.,  11.]])
Coordinates:
  * x        (x) |S1 'a' 'b' 'c'
    isSmall  (x) bool True False False
Dimensions without coordinates: y
>>> data.groupby('isSmall').mean(dim='x')  # Regroupement et agrégation
<xarray.DataArray 'mesures' (isSmall: 2, y: 4)>
array([[ 6.,  7.,  8.,  9.],
       [ 0.,  1.,  2.,  3.]])
Coordinates:
  * isSmall  (isSmall) object False True
Dimensions without coordinates: y
```

Exemples plus complexes :

— Examples Data

Note : N'oubliez pas de citer xarray dans vos publications et présentations.

Astropy

Astropy est une librairie astronomique maintenue par la communauté et visant à fédérer les efforts jusque là disparates. Elle offre en outre une interface unifiée à des librairies affiliées plus spécifiques.

Tour d'horizon

— Structures de base :
  — `astropy.constants` : constantes fondamentales (voir également `scipy.constants`)
  — `astropy.units` : unités et quantités dimensionnées
  — `astropy.nddata` : extension des `numpy.ndarray` (incluant méta-données, masque, unité, incertitude, etc.)
  — `astropy.table` : tableaux hétérogènes
  — `astropy.time` : manipulation du temps et des dates
  — `astropy.coordinates` : systèmes de coordonnées
  — `astropy.wcs` : *World Coordinate System*
  — `astropy.modeling` : modèles et ajustements
  — `astropy.analytic_functions` : fonctions analytiques
— Entrées/sorties :
  — `astropy.io.fits` : fichiers FITS
  — `astropy.io.ascii` : tables ASCII
  — `astropy.io.votable` : XML VO-tables
  — `astropy.io.misc` : divers
  — `astropy.vo` : accès au *Virtual Observatory*
— Calculs astronomiques :
  — `astropy.cosmology` : calculs cosmologiques
  — `astropy.convolution` : convolution and filtrage
  — `astropy.visualization` : visualisation de données
  — `astropy.stats` : méthodes astro-statistiques

Démonstration

Démonstration Astropy (`astropy.ipynb`)

Voir également :

— AstroBetter tutorials

Note : n'oubliez pas de citer *[Astropy13]* ou de mentionner l'utilisation d'astropy dans vos publications et présentations.

Autres librairies scientifiques

Python est maintenant très largement utilisé par la communauté scientifique, et dispose d'innombrables librairies dédiées aux différents domaines de la physique, chimie, etc. :

— Astronomie : Kapteyn, AstroML, HyperSpy
— Mécanique quantique : QuTiP
— Électromagnétisme : EMpy
— *PDE solver* : FiPy, SfePy
— Analyse statistique bayesienne : PyStan
— *Markov Chain Monte-Carlo* : emcee, PyMC3,
— *Machine Learning* : mlpy, milk, MDP, et autres modules d'intelligence artificielle
— Calcul symbolique : sympy (voir également ce tutoriel sympy) et sage
— PyROOT
— High Performance Computing in Python
— Etc.

Notes de bas de page et références bibliographiques

CHAPITRE 6

Spécificités Euclid

Table des matières

Le consortium Euclid a mis en place un référentiel de développement propre, EDEN (Euclid Development ENvironment), visant à standardiser les formats utilisés, les règles de codage en vigueur, les outils accessibles aux développeurs, etc., dans le cadre du SGS (Science Ground Segment). Ce référentiel est incarné dans les environnements de production CODEEN (COllaborative DEvelopment Environment) et de développement LODEEN (LOcal DEvelopment ENvironment), livrés sous forme de machine virtuelle.

Note : Python est avec C++ l'un des deux langages de programmation officiels d'Euclid.

Attention : les contraintes de développement imposées par Euclid ne s'appliquent qu'aux codes développés dans le cadre du SGS. Un code d'analyse post-SGS n'est pas tenu de s'y plier, mais il peut gagner à s'en inspirer.

Developers' Workshops

— Developers' Workshop #1 (nov. 2014)
— Developers' Workshop #2 (oct. 2015)
— C++ and Python Programming Sessions (mai 2016)
— Developers' Workshop #3 (oct. 2016)
— Developers' Workshop #4 (**oct. 2017, Trieste**)

Avertissement : certains liens de cette page requièrent un accès à l'Euclid Redmine.

Librairies EDEN

EDEN est un environnement contraint incluant un nombre très restreint de bibliothèques Python. La liste **exhaustive** pour EDEN v2.0 (automne 2017) est la suivante :

- pile numérique usuelle : `numpy`, `scipy` et `matplotlib`
- les bibliothèques spécialisées pyFFTW (*Fastest Fourier Transform in the West*) et scikit-learn (*machine learning*)
- entrées/sorties FITS : fitsio
- librairies astronomiques : healpy (une interface à HEALPix, pour l'analyse et la visualisation de données sur une sphère), astropy et pyEphem (éphémérides)
- GUI : PyQt

Attention : Dans le cadre du SGS, vous ne devez donc pas développer de code dépendant d'autres bibliothèques que celles-ci.

Toutefois, si une librairie absolument cruciale manque, il est possible de demander son inclusion via une procédure de Change requests, qui sera examinée et arbitrée par le CCB (Change Control Board).

Git et GitLab

Le développement du code est dorénavant géré par git, et hebérgé par le euclid-gitlab.

CHAPITRE 7

Développer en python

Table des matières

Le zen du python

Le *zen du Python* (**PEP 20**) est une série de 20 aphorismes [1] donnant les grands principes du Python :

```
>>> import this
```

1. Beautiful is better than ugly.
2. Explicit is better than implicit.
3. Simple is better than complex.
4. Complex is better than complicated.
5. Flat is better than nested.
6. Sparse is better than dense.

[1] Dont seulement 19 ont été écrits.

7. Readability counts.
8. Special cases aren't special enough to break the rules.
9. Although practicality beats purity.
10. Errors should never pass silently.
11. Unless explicitly silenced.
12. In the face of ambiguity, refuse the temptation to guess.
13. There should be one– and preferably only one –obvious way to do it.
14. Although that way may not be obvious at first unless you're Dutch.
15. Now is better than never.
16. Although never is often better than *right* now.
17. If the implementation is hard to explain, it's a bad idea.
18. If the implementation is easy to explain, it may be a good idea.
19. Namespaces are one honking great idea – let's do more of those !

Une traduction libre en français :

1. Préfèrer le beau au laid,
2. l'explicite à l'implicite,
3. le simple au complexe,
4. le complexe au compliqué,
5. le déroulé à l'imbriqué,
6. l'aéré au compact.
7. La lisibilité compte.
8. Les cas particuliers ne le sont jamais assez pour violer les règles,
9. même s'il faut privilégier l'aspect pratique à la pureté.
10. Ne jamais passer les erreurs sous silence,
11. ou les faire taire explicitement.
12. Face à l'ambiguïté, ne pas se laisser tenter à deviner.
13. Il doit y avoir une – et si possible une seule – façon évidente de procéder,
14. même si cette façon n'est pas évidente à première vue, à moins d'être Hollandais.
15. Mieux vaut maintenant que jamais,
16. même si jamais est souvent mieux qu'immédiatement.
17. Si l'implémentation s'explique difficilement, c'est une mauvaise idée.
18. Si l'implémentation s'explique facilement, c'est peut-être une bonne idée.
19. Les espaces de nommage sont une sacrée bonne idée, utilisons-les plus souvent !

Us et coutumes

— *Fail early, fail often, fail better !* (`raise`)
— *Easier to Ask for Forgiveness than Permission* (`try ... except`)
— le *Style Guide for Python Code* (**PEP 8**)
— Idioms and Anti-Idioms in Python
— Code Like a Pythonista: Idiomatic Python
— Google Python Style Guide
— The Best of the Best Practices (BOBP) Guide for Python

Quelques conseils supplémentaires :

- « Ne réinventez pas la roue, sauf si vous souhaitez en savoir plus sur les roues » (Jeff Atwood [3]) : cherchez si ce que vous voulez faire n'a pas déjà été fait (éventuellement en mieux...) pour vous concentrer sur *votre* valeur ajoutée, réutilisez le code (en citant évidemment vos sources), améliorez le, et contribuez en retour si possible !
- Écrivez des programmes pour les humains, pas pour les ordinateurs : codez *proprement*, structurez vos algorithmes, commentez votre code, utilisez des noms de variable qui ont un sens, soignez le style et le formatage, etc.
- Codez proprement *dès le début* : ne croyez pas que vous ne relirez jamais votre code (ou même que personne n'aura jamais à le lire), ou que vous aurez le temps de le refaire mieux plus tard...
- « L'optimisation prématurée est la source de tous les maux » (Donald Knuth [4]) : mieux vaut un code lent mais juste et maintenable qu'un code rapide et faux ou incompréhensible. Dans l'ordre absolu des priorités :
  1. *Make it work.*
  2. *Make it right.*
  3. *Make it fast.*
- *Respectez* le zen du python, il vous le rendra.

Principes de conception logicielle

La bonne conception d'un programme va permettre de gérer efficacement la complexité des algorithmes, de faciliter la maintenance (p.ex. correction des erreurs) et d'accroître les possibilités d'extension.

Modularité Le code est structuré en répertoires, fichiers, classes, méthodes et fonctions. Les blocs ne font pas plus de quelques dizaines de lignes, les fonctions ne prennent que quelques arguments, la structure logique n'est pas trop complexe, etc.

En particulier, le code doit respecter le *principe de responsabilité unique* : chaque entité élémentaire (classe, méthode, fonction) ne doit avoir qu'une unique raison d'exister, et ne pas tenter d'effectuer plusieurs tâches sans rapport direct (p.ex. lecture d'un fichier de données *et* analyse des données).

Flexibilité Une modification du comportement du code (p.ex. l'ajout d'une nouvelle fonctionnalité) ne nécessite de changer le code qu'en un nombre restreint de points.

Un code *rigide* devient rapidement difficile à faire évoluer, puisque chaque changement requiert un grand nombre de modifications.

Robustesse La modification du code en un point ne change pas de façon inopinée le comportement dans une autre partie *a priori* non reliée.

Un code *fragile* est facile à modifier, mais chaque modification peut avoir des conséquences inattendues et le code tend à devenir instable.

Réutilisabilité La réutilisation d'une portion de code ne demande pas de changement majeur, n'introduit pas trop de dépendances, et ne conduit pas à une duplication du code.

L'application de ces principes de développement dépend évidemment de l'objectif final du code :

- une bibliothèque *centrale* (utilisée par de nombreux programmes) favorisera la robustesse et la réutilisabilité au dépend de la flexibilité : elle devra être particulièrement bien pensée, et ne pourra être modifiée qu'avec parcimonie ;
- inversement, un script d'analyse de haut niveau, d'utilisation restreinte, pourra être plus flexible mais plus fragile et peu réutilisable.

Développement piloté par les tests

Le *Test Driven Development* (TDD, ou en français « développement piloté par les tests ») est une méthode de programmation qui permet d'éviter des bugs *a priori* plutôt que de les résoudre *a posteriori*. Ce n'est pas une méthode propre à Python, elle est utilisée très largement par les programmeurs professionnels.

« *Don't reinvent the wheel, unless you plan on learning more about wheels* » – Jeff Atwood
« *Premature optimization is the root of all evil* » – Donald Knuth

Le cycle préconisé par TDD comporte cinq étapes :

1. écrire un premier test ;
2. vérifier qu'il échoue (puisque le code qu'il teste n'existe pas encore), afin de s'assurer que le test est valide et exécuté ;
3. écrire un code minimal pour passer le test ;
4. vérifier que le test passe correctement ;
5. éventuellement « réusiner » le code (*refactoring*), c'est-à-dire l'améliorer (rapidité, lisibilité) tout en gardant les mêmes fonctionnalités.

Diviser pour mieux régner : chaque fonction, classe ou méthode est testée indépendemment. Ainsi, lorsqu'un nouveau morceau de code ne passe pas les tests qui y sont associés, il est certain que l'erreur provient de cette nouvelle partie et non des fonctions ou objets que ce morceau de code utilise. On distingue ainsi hiérarchiquement :

1. Les tests unitaires vérifient individuellement chacune des fonctions, méthodes, etc.
2. Les tests d'intégration évaluent les interactions entre différentes unités du programmes.
3. Les tests système assurent le bon fonctionnement du programme dans sa globalité.

Il est très utile de transformer toutes les vérifications réalisées au cours du développement et du débogage sous forme de tests, ce qui permet de les réutiliser lorsque l'on veut compléter ou améliorer une partie du code. Si le nouveau code passe toujours les anciens test, on est alors sûr de ne pas avoir cassé les fonctionnalités précédentes (régréssions).

Nous avons déjà vu aux TD précédents plusieurs façon de rédiger des tests unitaires :

— Les doctest sont des exemples (assez simples) d'exécution de code inclus dans les *docstring* des classes ou fonctions :

```
def mean_power(alist, power=1):
    """
    Retourne la racine `power` de la moyenne des éléments de `alist` à
    la puissance `power`:

    .. math:: \mu = (\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} x_i^p)^{1/p}

    `power=1` correspond à la moyenne arithmétique, `power=2` au *Root
    Mean Squared*, etc.

    Exemples:
    >>> mean_power([1, 2, 3])
    2.0
    >>> mean_power([1, 2, 3], power=2)
    2.160246899469287
    """

    s = 0.                  # Initialisation de la variable *s* comme *float*
    for val in alist:       # Boucle sur les éléments de *alist*
        s += val ** power   # *s* est augmenté de *val* puissance *power*
    # *mean* = (somme valeurs / nb valeurs)**(1/power)
    mean = (s / len(alist)) ** (1 / power)  # ATTENTION aux divisions euclidiennes!

    return mean
```

Les *doctests* peuvent être exécutés de différentes façons (voir ci-dessous) :

— avec le module standard doctest : `python -m doctest -v mean_power.py`

— avec pytest : `py.test --doctest-modules -v mean_power.py`

— avec nose : `nosetests --with-doctest -v mean_power.py`

— Les fonctions dont le nom commence par `test_` et contenant des `assert` sont automatiquement détectées par pytest [2]. Cette méthode permet d'effectuer des tests plus poussés que les *doctests*, éventuellement dans un fichier séparé du code à tester. P.ex. :

pytest ne fait pas partie de la librairie standard. Il vous faudra donc l'installer indépendemment si vous voulez l'utiliser.

```python
def test_empty_init():
    with pytest.raises(TypeError):
        youki = Animal()


def test_wrong_init():
    with pytest.raises(ValueError):
        youki = Animal('Youki', 'lalala')


def test_init():
    youki = Animal('Youki', 600)
    assert youki.masse == 600
    assert youki.vivant
    assert youki.estVivant()
    assert not youki.empoisonne
```

Les tests sont exécutés via `py.test` *`programme.py`*.

— Le module `unittest` de la librairie standard permet à peu près la même chose que pytest, mais avec une syntaxe souvent plus lourde. `unittest` est étendu par le module non-standard nose.

Outils de développement

Je fournis ici essentiellement des liens vers des outils pouvant être utiles pour développer en python.

Integrated Development Environment

— idle, l'IDE intégré à Python
— **`emacs`** + **`python-mode`** pour l'édition, et **`ipython`** pour l'execution de code (voir Python Programming In Emacs)
— spyder
— PythonToolkit
— pyCharm (la version **`community`** est gratuite)
— Etc.

Vérification du code

Il s'agit d'outils permettant de vérifier *a priori* la validité stylistique et syntaxique du code, de mettre en évidence des constructions dangereuses, les variables non-définies, etc. Ces outils ne testent pas nécessairement la validité des algorithmes et de leur mise en oeuvre...

— pycodestyle (ex-**`pep8`**) et autopep8
— pyflakes
— pychecker
— pylint

Débogage

Les débogueurs permettent de se « plonger » dans un code en cours d'exécution ou juste après une erreur (analyse post-mortem).

— Module de la bibliothèque standard : pdb
Pour déboguer un script, il est possible de l'exécuter sous le contrôle du débogueur pdb en s'interrompant dès la 1ère instruction :

```
python -m pdb script.py
(Pdb)
```

Commandes (très similaires à gdb) :
- `h[elp]` *`[command]`* : aide en ligne
- `q[uit]` : quitter
- `r[un]` *`[args]`* : exécuter le programme avec les arguments
- `d[own]/u[p]` : monter/descendre dans le stack (empilement des appels de fonction)
- `p` *`expression`* : afficher le résultat de l'expression (`pp` : *pretty-print*)
- `l[ist]` *`[first[,last]]`* : afficher le code source autour de l'instruction courante (`ll` : *long list*)
- `n[ext]/s[tep]` : exécuter l'instruction suivante (sans y entrer/en y entrant)
- `unt[il]` : continuer l'exécution jusqu'à la ligne suivante (utile pour les boucles)
- `c[ont[inue]]` : continuer l'exécution (jusqu'à la prochaine interruption ou la fin du programme)
- `r[eturn]` : continuer l'exécution jusqu'à la sortie de la fonction
- `b[reak]` *`[[filename:]lineno | function[, condition]]`* : mettre en place un point d'arrêt (`tbreak` pour un point d'arrêt *temporaire*). Sans argument, afficher les points d'arrêts déjà définis.
- `disable/enable` *`[bpnumber]`* : désactiver/réactiver tous ou un point d'arrêt
- `cl[ear]` *`[bpnumber]`* : éliminer tous ou un point d'arrêt
- `ignore` *`bpnumber [count]`* : ignorer un point d'arrêt une ou plusieurs fois
- `condition` *`bpnumber`* : ajouter une condition à un point d'arrêt
- `commands` *`[bpnumber]`* : ajouter des instructions à un point d'arrêt

— Commandes `ipython` : `%run` *`monScript.py`*, `%debug`, `%pdb`
Si un script exécuté sous `ipython` (commande `%run`) génère une exception, il est possible d'inspecter l'état de la mémoire au moment de l'erreur avec la commande `%debug`, qui lance une session pdb au point d'arrêt. `%pdb on` lance systématiquement le débogueur à chaque exception.

L'activité de débogage s'intégre naturellement à la nécessité d'écrire des tests unitaires :

1. trouver un bug
2. écrire un test qui aurait du être validé en l'absence du bug
3. corriger le code jusqu'à validation du test

Vous aurez alors au final corrigé le bug, *et* écrit un test s'assurant que ce bug ne réapparaîtra pas inopinément.

Profilage et optimisation

Avertissement : *Premature optimization is the root of all evil* – Donald Knuth

Avant toute optimisation, s'assurer extensivement que le code fonctionne et produit les bons résultats dans tous les cas. S'il reste trop lent ou gourmand en mémoire *pour vos besoins*, il peut être nécessaire de l'optimiser.

Le profilage permet de déterminer le temps passé dans chacune des sous-fonctions d'un code (ou ligne par ligne : line profiler, ou selon l'utilisation de la mémoire : memory profiler), afin d'y identifier les parties qui gagneront à être optimisées.

— `python -O`, `__debug__`, `assert`
Il existe un mode « optimisé » de python (option `-O`), qui pour l'instant ne fait pas grand chose (et n'est donc guère utilisé....) :
- la variable interne `__debug__` passe de `True` à `False`,
- les instructions `assert` ne sont pas exécutés.

— `timeit` et `%timeit` *`statement`* sous `ipython` :

```
In [1]: def t1(n):
...:     l = []
...:     for i in range(n):
...:         l.append(i**2)
...:     return l
```

```
...:
...: def t2(n):
...:     return [ i**2 for i in xrange(n) ]
...:
...: def t3(n):
...:     return N.arange(n)**2
...:
In [2]: %timeit t1(10000)
1000 loops, best of 3: 950 µs per loop
In [3]: %timeit t2(10000)
1000 loops, best of 3: 599 µs per loop
In [4]: %timeit t3(10000)
10000 loops, best of 3: 18.1 µs per loop
```

— cProfile & pstats, et %prun *statement* sous **ipython** :

```
$ python -m cProfile -o output.pstats monScript.py
$ python -m pstats output.pstats
```

— Tutoriel de profilage

Une fois identifiée la partie du code à optimiser, quelques conseils généraux :

— En cas de doute, favoriser la lisibilité aux performances
— Utiliser des opérations sur les tableaux, plutôt que sur des éléments individuels (*vectorization*) : listes en compréhension, tableaux numpy (qui ont eux-mêmes été optimisés)
— cython est un langage de programmation **compilé** très similaire à python. Il permet d'écrire des extensions en C avec la facilité de python (voir notamment Working with Numpy)
— numba permet *automagiquement* de compiler *à la volée* (JIT (Just In Time)) du pur code python via le compilateur LLVM, avec une optimisation selon le CPU (éventuellement le GPU) utilisé, p.ex. :

```
from numba import guvectorize

@guvectorize(['void(float64[:], intp[:], float64[:])'], '(n),()->(n)')
def move_mean(a, window_arr, out):
    ...
```

— À l'avenir, l'interpréteur CPython actuel sera éventuellement remplacé par pypy, basé sur une compilation JIT.

Lien : Performance tips

Documentation

— Outils de documentation, ou comment transformer *automagiquement* un code-source bien documenté en une documentation fonctionnelle.
  — Sphinx
  — reStructuredText for Sphinx
  — Awesome Sphinx
  — apidoc (documentation automatique)
— Conventions de documentation :
  — *Docstring convention* : **PEP 257**
  — Documenting Your Project Using Sphinx
  — A Guide to NumPy/SciPy Documentation
  — Sample doc (matplotlib)

Lien :

Documentation Tools

Python packages

Comment installer/créer des modules externes :
- pip
- Hitchhiker's Guide to Packaging
- Packaging a python library
- Cookiecutter est un générateur de squelettes de projet via des *templates* (pas uniquement pour python).

Système de gestion de versions

La gestion des versions du code permet de suivre avec précision l'historique des modifications du code (ou de tout autre projet), de retrouver les changements critiques, de développer des branches alternatives, de faciliter le travail collaboratif, etc.

Git est un VCS (Version Controling System) particulièrement performant (p.ex. utilisé pour le développement du noyau Linux [5]). Il est souvent couplé à un dépôt en ligne faisant office de dépôt de référence et de solution de sauvegarde, et offrant généralement des solutions d'intégration continue, p.ex.
- Les très célèbres GitHub et GitLab, gratuits pour les projets libres
- Pour des projets liés à votre travail, je conseille plutôt des dépôts directement gérés par votre institution, p.ex. GitLab-IN2P3

Git mérite un cours en soi, et devrait être utilisé très largement pour l'ensemble de vos projets (p.ex. rédaction d'articles, de thèse de cours, fichiers de configuration, tests numériques, etc.)

Quelques liens d'introduction :
- Pro-Git book, le livre « officiel »
- Git Immersion
- Git Magic

Intégration continue

L'intégration continue est un ensemble de pratiques de développement logiciel visant à s'assurer de façon systématique que chaque modification du code n'induit aucune *régression*, et passe l'ensemble des tests. Cela passe généralement par la mise en place d'un système de gestion des sources, auquel est accolé un mécanisme automatique de compilation (*build*), de déploiement sur les différentes infrastructures, d'éxecution des tests (unitaires, intégration, fonctionnels, etc.) et de mise à disposition des résultats, de mise en ligne de la documentation, etc.

La plupart des développements des logiciels *open source* majeurs se fait maintenant sous intégration continue en utilisant des services en ligne directement connectés au dépôt source. Exemple sur **astropy_** :
- Travis CI intégration continue
- Coveralls taux de couverture des tests unitaires
- Readthedocs documentation en ligne
- Depsy mise en valeur du développement logiciel dans le monde académique (*measure the value of software that powers science*)

Python 2 vs. python 3

Il existe de nombreux outils permettant de faciliter la transition 2.x → 3.x :
- L'interpréteur Python 2.7 dispose d'une option `-3` mettant en évidence dans un code les parties qui devront être modifiées pour un passage à Python 3.
- Le script 2to3 permet également d'automatiser la conversion du code 2.x en 3.x.
- La bibliothèque standard `__future__` permet d'utiliser nativement des constructions 3.x dans un code 2.x, p.ex. :

[5] Et maintenant du code Windows!

```
from __future__ import print_function  # Fonction print()
from __future__ import division        # Division non-euclidienne

print(1/2)                             # Affichera '0.5'
```

— La librairie *non* standard six fournit une couche de compatibilité 2.x-3.x, permettant de produire de façon transparente un code compatible simultanément avec les 2 versions.

Liens

— Python 2 or python 3?
— Porting Python 2 Code to Python 3
— Python 2/3 compatibility

CHAPITRE 8

Références supplémentaires

Voici une liste très partielle de documents Python disponibles en ligne. La majorité des liens sont en anglais, quelques uns  sont en français.

Documentation générale

— Python
— Python Wiki
— Python Frequently Asked Questions
— Python 2.7 Quick Reference
— The Python Package Index

Listes de liens

— Python facile (2005) 
— Python: quelques références, trucs et astuces: (2014) 
— Improving your programming style in Python (2014)
— Starter Kit (py4science) (2010)
— Learning Python For Data Science (2016)
— Awesome Python
— A curated list of courses on Python

ipython

— IPython tutorial
— IPython cookbook
— IPython en ligne
— IPython quick refsheet

Expressions rationnelles

— regex tester

Python 3.x

— 10 awesome features of Python that you can't use because you refuse to upgrade to Python 3

Livres libres

— How to Think Like a Computer Scientist
  — Wikibook
  — Interactive edition
— Dive into Python
— 10 Free Python Programming Books
— A Python Book
— Start Programming with Python
— Learn Python the Hard Way
— Python for Informatics: Exploring Information
— Intermediate Python
— Apprendre à programmer avec Python 
— Programmation Python 

Cours en ligne

Python

— Python Tutorial (v2.7)
— Tutoriel Python (v2.4) 
— Apprenez à programmer en Python
— Débuter avec Python au lycée 
— Présentation de Python 
— Introduction à Python pour la programmation scientifique 
— Begginer's Guide
— DIY python workshop
— Google's Python Class
— CheckIO, pour apprendre la programmation Python en s'amusant !
— Python Testing Tools
— Python Programming (Code Academy)

Scientifique

— Python Scientific Lecture Notes
— Handbook of the Physics Computing Course (2002)
— Practical Scientific Computing in Python
— Computational Physics with Python (avec exercices)
— *SciPy tutorials* (`numpy`, `scipy`, `matplotlib`, `ipython`) : 2011, 2012, 2013,
— Scipy Central (*code snippets*)
— Advance Scientific Programming in Python
— Lectures on Computational Economics (avec exercices)

— Intro to Python for Data Science (DataCamp avec vidéos & exercices)
— Python for Data Science
— Learning Python For Data Science
— Computational Statistics in Python
— Python Data Science Handbook

En français

— Formation à Python scientifique 
— NumPy et SciPy 
— L'informatique scientifique avec Python 
— La programmation scientifique avec Python 

Astronomie

— Practical Python for Astronomers
— Astropy tutorials
— Python for Euclid 2016
— Advanced software programming for astrophysics and astroparticle physics (*1st ASTERICS-OBELICS International School*, voir *Timetable/Vue détaillée*)

Snippets

— Python cheatsheets
— Scipy Central (*code snippets*)

CHAPITRE 9

Exemples

Mean power (fonction, argparse)

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

"""
Exemple de script (shebang, docstring, etc.) permettant une
utilisation en module (`import mean_power`) et en exécutable (`python
mean_power.py -h`);
"""

from __future__ import division  # Les divisions entre entiers ne sont pas euclidiennes

def mean_power(alist, power=1):
    """
    Retourne la racine `power` de la moyenne des éléments de `alist` à
    la puissance `power`:

    .. math:: \mu = (\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} x_i^p)^{1/p}

    `power=1` correspond à la moyenne arithmétique, `power=2` au *Root
    Mean Squared*, etc.

    Exemples:
    >>> mean_power([1, 2, 3])
    2.0
    >>> mean_power([1, 2, 3], power=2)
    2.160246899469287
    """

    s = 0.                  # Initialisation de la variable *s* comme *float*
    for val in alist:       # Boucle sur les éléments de *alist*
        s += val ** power   # *s* est augmenté de *val* puissance *power*
    # *mean* = (somme valeurs / nb valeurs)**(1/power)
    mean = (s / len(alist)) ** (1 / power)  # ATTENTION aux divisions euclidiennes!

    return mean

```

```
37
38 if __name__ == '__main__':
39
40     # start-argparse
41     import argparse
42
43     parser = argparse.ArgumentParser()
44     parser.add_argument('list', nargs='*', type=float, metavar='nombres',
45                         help="Liste de nombres à moyenner")
46     parser.add_argument('-i', '--input', nargs='?', type=file,
47                         help="Fichier contenant les nombres à moyenner")
48     parser.add_argument('-p', '--power', type=float, default=1.,
49                         help="'Puissance' de la moyenne (%default)")
50
51     args = parser.parse_args()
52     # end-argparse
53
54     if args.input:        # Lecture des coordonnées du fichier d'entrée
55         # Le fichier a déjà été ouvert en lecture par argparse (type=file)
56         try:
57             args.list = [float(x) for x in args.input
58                          if not x.strip().startswith('#')]
59         except ValueError:
60             parser.error(
61                 "Impossible de déchiffrer la ligne '{}' du fichier '{}'".format(
62                     x, args.input))
63
64     # Vérifie qu'il y a au moins un nombre dans la liste
65     if not args.list:
66         parser.error("La liste doit contenir au moins un nombre")
67
68     # Calcul
69     moyenne = mean_power(alist, args.power)
70
71     # Affichage du résultat
72     print "La moyenne des {} nombres à la puissance {} est {}".format(
73         len(alist), args.power, moyenne)
```

Source : mean_power.py

Formes (POO)

```
1  #!/usr/bin/env python
2  # -*- coding: utf-8 -*-
3
4  """
5  Exemple de Programmation Orientée Objet.
6  """
7
8  __author__ = "Mathieu Leocmach <mathieu.leocmach@ens-lyon.fr>"
9  __version__ = "Time-stamp: <2014-10-03 10:54 mathieu.leocmach@ens-lyon.fr>"
10
11
12 # Définition d'une classe ==============================
13
14 class Forme(object):  # *object* est la classe dont dérivent toutes les autres
15
16     """Une forme plane, avec éventuellement une couleur."""
17
18     def __init__(self, couleur=None):
```

```
        """Initialisation d'une Forme, sans couleur par défaut."""

        if couleur is None:
            self.couleur = 'indéfinie'
        else:
            self.couleur = couleur

    def __str__(self):
        """
        Surcharge de la fonction `str()`: l'affichage *informel* de
        l'objet dans l'interpréteur, p.ex. `print a` sera résolu comme
        `a.__str__()`

        Retourne une chaîne de caractères.
        """

        return "Forme encore indéfinie de couleur {}".format(self.couleur)

    def change_couleur(self, newcolor):
        """Change la couleur de la Forme."""

        self.couleur = newcolor

    def aire(self):
        """
        Renvoi l'aire de la Forme.

        L'aire ne peut pas être calculée dans le cas où la forme n'est
        pas encore spécifiée: c'est ce que l'on appelle une méthode
        'abstraite', qui pourra être précisée dans les classes filles.
        """

        raise NotImplementedError(
            "Impossible de calculer l'aire d'une forme indéfinie.")

    def __cmp__(self, other):
        """
        Comparaison de deux Formes sur la base de leur aire.

        Surcharge des opérateurs de comparaison de type `{self} <
        {other}`: la comparaison sera résolue comme
        `self.__cmp__(other)` et le résultat sera correctement
        interprété.

        .. WARNING:: cette construction n'est plus supportée en Python3.
        """

        return cmp(self.aire(), other.aire())  # Opérateur de comparaison


class Rectangle(Forme):

    """
    Un Rectangle est une Forme particulière.

    La classe-fille hérite des attributs et méthodes de la
    classe-mère, mais peut les surcharger (i.e. en changer la
    définition), ou en ajouter de nouveaux:

    - les méthodes `Rectangle.change_couleur()` et
      `Rectangle.__cmp__()` dérivent directement de
      `Forme.change_couleur()` et `Forme.__cmp__()`;
    - `Rectangle.__str__()` surcharge `Forme.__str__()`;
```

```
    - `Rectangle.aire()` définit la méthode jusqu'alors abstraite
      `Forme.aire()`;
    - `Rectangle.allonger()` est une nouvelle méthode propre à
      `Rectangle`.
    """

    def __init__(self, longueur, largeur, couleur=None):
        """
        Initialisation d'un Rectangle longueur × largeur, sans couleur par
        défaut.
        """

        # Initialisation de la classe parente (nécessaire pour assurer
        # l'héritage)
        Forme.__init__(self, couleur)

        # Attributs propres à la classe Rectangle
        self.longueur = longueur
        self.largeur = largeur

    def __str__(self):
        """Surcharge de `Forme.__str__()`."""

        return "Rectangle {}x{}, de couleur {}".format(
            self.longueur, self.largeur, self.couleur)

    def aire(self):
        """
        Renvoi l'aire du Rectangle.

        Cette méthode définit la méthode abstraite `Forme.area()`,
        pour les Rectangles uniquement.
        """

        return self.longueur * self.largeur

    def allonger(self, facteur):
        """Multiplie la *longueur* du Rectangle par un facteur"""

        self.longueur *= facteur


if __name__ == '__main__':

    s = Forme()                     # Forme indéfinie et sans couleur
    print "s:", str(s)              # Interprété comme `s.__str__()`
    s.change_couleur('rouge')       # On change la couleur
    print "s après change_couleur:", str(s)
    try:
        print "Aire de s:", s.aire()  # La méthode abstraite lève une exception
    except NotImplementedError as err:
        print err

    q = Rectangle(1, 4, 'vert')     # Rectangle 1×4 vert
    print "q:", str(q)
    print "Aire de q:", q.aire()

    r = Rectangle(2, 1, 'bleu')     # Rectangle 2×1 bleu
    print "r:", str(r)
    print "Aire de r:", r.aire()

    print "r >= q:", (r >= q)       # Interprété comme r.__cmp__(q)

```

```
    r.allonger(2)                       # r devient un rectangle 4×1
    print "Aire de r apres l'avoir allongé d'un facteur 2:", r.aire()
    print "r >= q:", (r >= q)
```

Source : formes.py

Cercle circonscrit (POO, argparse)

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

"""
Calcule le cercle circonscrit à 3 points du plan.

Ce script sert d'illustration à plusieurs concepts indépendants:

- un exemple de script (shebang, docstring, etc.) permettant une
  utilisation en module (`import circonscrit`) et en exécutable
  (`python circonscrit.py -h`);
- des exemples de Programmation Orientée Objet: classe `Point` et la
  classe héritière `Vector`;
- un exemple d'utilisation du module `argparse` de la bibliothèque
  standard, permettant la gestion des arguments de la ligne de
  commande;
- l'utilisation de tests unitaires sous la forme de `doctest` (tests
  inclus dans les *docstrings* des éléments à tester).

  Pour exécuter les tests unitaires du module:

  - avec doctest: `python -m doctest -v circonscrit.py`
  - avec pytests: `py.test --doctest-modules -v circonscrit.py`
  - avec nose:    `nosetests --with-doctest -v circonscrit.py`
"""

__author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"
__version__ = "Time-stamp: <2014-01-12 22:19 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>"

# Définition d'une classe ==============================


class Point(object):  # *object* est la classe dont dérivent toutes les autres

    """
    Classe définissant un `Point` du plan, caractérisé par ses
    coordonnées `x`,`y`.
    """

    def __init__(self, x, y):
        """
        Méthode d'instanciation à partir de deux coordonnées réelles.

        >>> Point(0,1)          # doctest: +ELLIPSIS
        <circonscrit.Point object at 0x...>
        >>> Point(1+3j)
        Traceback (most recent call last):
        ...
        TypeError: __init__() takes exactly 3 arguments (2 given)
        """

        try:  # Convertit les coords en `float`
```

```
            self.x = float(x)
            self.y = float(y)
        except (ValueError, TypeError):
            raise TypeError("Invalid input coordinates ({},{})".format(x, y))

    def __str__(self):
        """
        Surcharge de la fonction `str()`: l'affichage *informel* de l'objet
        dans l'interpréteur, p.ex. `print self` sera résolu comme
        `self.__str__()`

        Retourne une chaîne de caractères.

        >>> print Point(1,2)
        Point (x=1.0, y=2.0)
        """

        return "Point (x={p.x}, y={p.y})".format(p=self)

    def isOrigin(self):
        """
        Test si le point est à l'origine en testant la nullité des deux
        coordonnées.

        Attention aux éventuelles erreurs d'arrondis: il faut tester
        la nullité à la précision numérique près.

        >>> Point(1,2).isOrigin()
        False
        >>> Point(0,0).isOrigin()
        True
        """

        import sys

        eps = sys.float_info.epsilon  # Le plus petit float non nul

        return ((abs(self.x) <= eps) and (abs(self.y) <= eps))

    def distance(self, other):
        """
        Méthode de calcul de la distance du point (`self`) à un autre point
        (`other`).

        >>> A = Point(1,0); B = Point(1,1); A.distance(B)
        1.0
        """

        from math import hypot

        return hypot(self.x - other.x, self.y - other.y)  # sqrt(dx**2 + dy**2)


# Définition du point origine O
O = Point(0, 0)


# Héritage de classe ============================


class Vector(Point):

    """
```

```
    Un `Vector` hérite de `Point` avec des méthodes additionnelles
    (p.ex. la négation d'un vecteur, l'addition de deux vecteurs, ou
    la rotation d'un vecteur).
    """

    def __init__(self, A, B):
        """
        Définit le vecteur `AB` à partir des deux points `A` et `B`.

        >>> Vector(Point(1,0), Point(1,1)) # doctest: +ELLIPSIS
        <circonscrit.Vector object at 0x...>
        >>> Vector(0, 1)
        Traceback (most recent call last):
        ...
        AttributeError: 'int' object has no attribute 'x'
        """

        # Initialisation de la classe parente
        Point.__init__(self, B.x - A.x, B.y - A.y)

        # Attribut propre à la classe dérivée
        self.sqnorm = self.x ** 2 + self.y ** 2  # Norme du vecteur au carré

    def __str__(self):
        """
        Surcharge de la fonction `str()`: `print self` sera résolu comme
        `Vector.__str__(self)` (et non pas comme
        `Point.__str__(self)`)

        >>> A = Point(1,0); B = Point(1,1); print Vector(A,B)
        Vector (x=0.0, y=1.0)
        """

        return "Vector (x={v.x}, y={v.y})".format(v=self)

    def __add__(self, other):
        """
        Surcharge de l'opérateur binaire `{self} + {other}`: l'instruction
        sera résolue comme `self.__add__(other)`.

        On construit une nouvelle instance de `Vector` à partir des
        coordonnées propres à l'objet `self` et à l'autre opérande
        `other`.

        >>> A = Point(1,0); B = Point(1,1)
        >>> print Vector(A,B) + Vector(B,O) # = Vector(A,O)
        Vector (x=-1.0, y=0.0)
        """

        return Vector(O, Point(self.x + other.x, self.y + other.y))

    def __sub__(self, other):
        """
        Surcharge de l'opérateur binaire `{self} - {other}`: l'instruction
        sera résolue comme `self.__sub__(other)`.

        Attention: ne surcharge pas l'opérateur unaire `-{self}`, géré
        par `__neg__`.

        >>> A = Point(1,0); B = Point(1,1)
        >>> print Vector(A,B) - Vector(A,B) # Différence
        Vector (x=0.0, y=0.0)
        >>> -Vector(A,B)                    # Négation
```

```
        Traceback (most recent call last):
        ...
        TypeError: bad operand type for unary -: 'Vector'
        """

        return Vector(O, Point(self.x - other.x, self.y - other.y))

    def __eq__(self, other):
        """
        Surcharge du test d'égalité `{self}=={other}`: l'instruction sera
        résolue comme `self.__eq__(other)`.

        >>> Vector(O,Point(0,1)) == Vector(Point(1,0),Point(1,1))
        True
        """

        # On teste ici la nullité de la différence des 2
        # vecteurs. D'autres tests auraient été possibles -- égalité
        # des coordonnées, nullité de la norme de la différence,
        # etc. -- mais on tire profit de la méthode héritée
        # `Point.isOrigin()` testant la nullité des coordonnées (à la
        # précision numérique près).
        return (self - other).isOrigin()

    def __abs__(self):
        """
        Surcharge la fonction `abs()` pour retourner la norme du vecteur.

        >>> abs(Vector(Point(1,0), Point(1,1)))
        1.0
        """

        # On pourrait utiliser sqrt(self.sqnorm), mais c'est pour
        # illustrer l'utilisation de la méthode héritée
        # `Point.distance`...
        return Point.distance(self, O)

    def rotate(self, angle, deg=False):
        """
        Rotation (dans le sens trigonométrique) du vecteur par un `angle`,
        exprimé en radians ou en degrés.

        >>> Vector(Point(1,0),Point(1,1)).rotate(90,deg=True) == Vector(O,Point(-1,0))
        True
        """

        from cmath import rect  # Bibliothèque de fonctions complexes

        # On calcule la rotation en passant dans le plan complexe
        z = complex(self.x, self.y)
        phase = angle if not deg else angle / 57.29577951308232  # [rad]
        u = rect(1., phase)  # exp(i*phase)
        zu = z * u  # Rotation complexe

        return Vector(O, Point(zu.real, zu.imag))


def circumscribedCircle(M, N, P):
    """
    Calcule le centre et le rayon du cercle circonscrit aux points
    M,N,P.

    Retourne: (centre [Point],rayon [float])
```

```
242
243     Lève une exception `ValueError` si le rayon ou le centre du cercle
244     circonscrit n'est pas défini.
245
246     >>> M = Point(-1,0); N = Point(1,0); P = Point(0,1)
247     >>> C,r = circumscribedCircle(M,N,P) # Centre O, rayon 1
248     >>> print C.distance(O), r
249     0.0 1.0
250     >>> circumscribedCircle(M,O,N)       # Indéfini
251     Traceback (most recent call last):
252     ...
253     ValueError: Undefined circumscribed circle radius.
254     """
255
256     from math import sqrt
257
258     MN = Vector(M, N)
259     NP = Vector(N, P)
260     PM = Vector(P, M)
261
262     # Rayon du cercle circonscrit
263     m = abs(NP)  # |NP|
264     n = abs(PM)  # |PM|
265     p = abs(MN)  # |MN|
266
267     d = (m + n + p) * (-m + n + p) * (m - n + p) * (m + n - p)
268     if d > 0:
269         rad = m * n * p / sqrt(d)
270     else:
271         raise ValueError("Undefined circumscribed circle radius.")
272
273     # Centre du cercle circonscrit
274     d = -2 * (M.x * NP.y + N.x * PM.y + P.x * MN.y)
275     if d == 0:
276         raise ValueError("Undefined circumscribed circle center.")
277
278     om2 = Vector(O, M).sqnorm  # |OM|**2
279     on2 = Vector(O, N).sqnorm  # |ON|**2
280     op2 = Vector(O, P).sqnorm  # |OP|**2
281
282     x0 = -(om2 * NP.y + on2 * PM.y + op2 * MN.y) / d
283     y0 = (om2 * NP.x + on2 * PM.x + op2 * MN.x) / d
284
285     return (Point(x0, y0), rad)  # (centre [Point], R [float])
286
287
288 if __name__ == '__main__':
289
290     # start-argparse
291     import argparse
292
293     parser = argparse.ArgumentParser(
294         usage="%(prog)s [-p/--plot] [-i/--input coordfile | x1,y1 x2,y2 x3,y3]",
295         description=__doc__)
296     parser.add_argument('coords', nargs='*', type=str, metavar='x,y',
297                         help="Coordinates of point")
298     parser.add_argument('-i', '--input', nargs='?', type=file,
299                         help="Coordinate file (one 'x,y' per line)")
300     parser.add_argument('-p', '--plot', action="store_true", default=False,
301                         help="Draw the circumscribed circle")
302     parser.add_argument('--version', action='version', version=__version__)
303
304     args = parser.parse_args()
```

```
    # end-argparse

    if args.input:  # Lecture des coordonnées du fichier d'entrée
        # Le fichier a déjà été ouvert en lecture par argparse (type=file)
        args.coords = [coords for coords in args.input
                       if not coords.strip().startswith('#')]

    if len(args.coords) != 3:  # Vérifie le nb de points
        parser.error("Specify 3 points by their coordinates 'x,y' (got {})"
                     .format(len(args.coords)))

    points = []  # Liste des points
    for i, arg in enumerate(args.coords, start=1):
        try:  # Déchiffrage de l'argument 'x,y'
            x, y = (float(t) for t in arg.split(','))
        except ValueError:
            parser.error(
                "Cannot decipher coordinates #{}: '{}'".format(i, arg))

        points.append(Point(x, y))  # Création du point et ajout à la liste
        print "#{:d}: {}".format(i, points[-1])  # Affichage du dernier point

    # Calcul du cercle cisconscrit (lève une ValueError en cas de problème)
    center, radius = circumscribedCircle(*points)  # Délistage
    print "Circumscribed circle: {}, radius: {}".format(center, radius)

    if args.plot:  # Figure
        import matplotlib.pyplot as P

        fig = P.figure()
        ax = fig.add_subplot(1, 1, 1, aspect='equal')
        # Points
        ax.plot([p.x for p in points], [p.y for p in points], 'ko')
        for i, p in enumerate(points, start=1):
            ax.annotate("#{}".format(i), (p.x, p.y),
                        xytext=(5, 5), textcoords='offset points')
        # Cercle circonscrit
        c = P.matplotlib.patches.Circle((center.x, center.y), radius=radius,
                                        fc='none')
        ax.add_patch(c)
        ax.plot(center.x, center.y, 'r+')

        P.show()
```

Source : `circonscrit.py`

Matplotlib

Figure (relativement) simple

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2014-12-15 16:06:44 ycopin>

"""
Exemple un peu plus compexe de figure, incluant 2 axes, légendes, axes, etc.
"""

import numpy as N
```

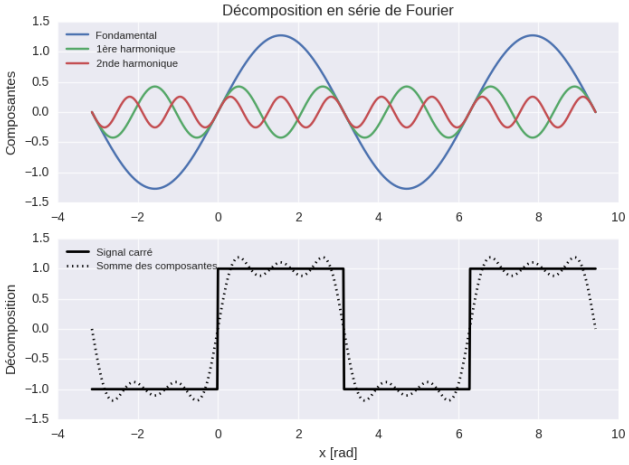


Fig. 9.1 – **Figure :** exemple de figure (charte graphique : seaborn)

```
10 import matplotlib.pyplot as P
11 try:
12     import seaborn              # Amélioration de la charte graphique
13 except ImportError:
14     print u"Seaborn n'est pas accessible, charte graphique par défaut."
15
16 x = N.linspace(-N.pi, 3*N.pi, 2*360)
17
18 # Signal carré
19 y = N.sign(N.sin(x))            # = ± 1
20
21 # 3 premiers termes de la décomposition en série de Fourier
22 y1 = 4/N.pi * N.sin(x)          # Fondamentale
23 y2 = 4/N.pi * N.sin(3*x) / 3    # 1ère harmonique
24 y3 = 4/N.pi * N.sin(5*x) / 5    # 2nde harmonique
25 # Somme des 3 premières composantes
26 ytot = y1 + y2 + y3
27
28 # Figure
29 fig = P.figure()                # Création de la Figure
30
31 # 1er axe: composantes
32 ax1 = fig.add_subplot(2, 1, 1,  # 1er axe d'une série de 2 × 1
33                       ylabel="Composantes",
34                       title=u"Décomposition en série de Fourier")
35 ax1.plot(x, y1, label="Fondamental")
36 ax1.plot(x, y2, label=u"1ère harmonique")
37 ax1.plot(x, y3, label=u"2nde harmonique")
38 ax1.legend(loc="upper left", fontsize="x-small")
39
40 # 2nd axe: décomposition
41 ax2 = fig.add_subplot(2, 1, 2,  # 2nd axe d'une série de 2 × 1
42                       ylabel=u"Décomposition",
43                       xlabel="x [rad]")
44 ax2.plot(x, y, lw=2, color='k', label=u"Signal carré")
45 ax2.plot(x, ytot, lw=2, ls=':', color='k', label=u"Somme des composantes")
46 ax2.legend(loc="upper left", fontsize="x-small")
47
48 # Sauvegarde de la figure (pas d'affichage intéractif)
49 fig.savefig("figure.png")
```

Source : `figure.py`

Filtres du 2nd ordre

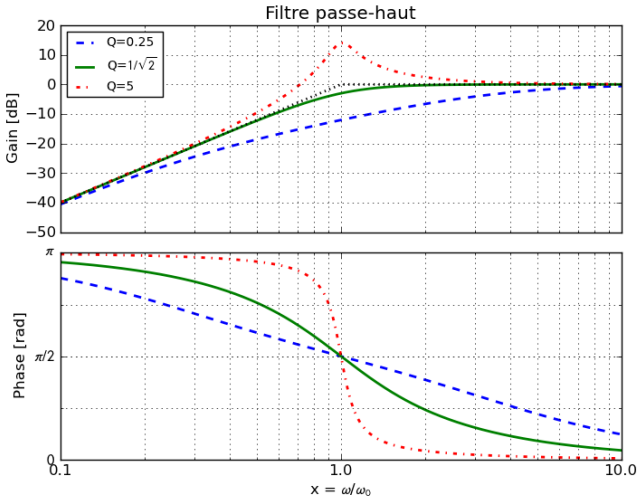


Fig. 9.2 – **Figure :** Filtre passe-haut du 2nd ordre.

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

import numpy as N
import matplotlib.pyplot as P


def passeBas(x, Q=1):
    """
    Filtre passe-bas en pulsation réduite *x* = omega/omega0, facteur de
    qualité *Q*.
    """

    return 1 / (1 - x ** 2 + x / Q * 1j)


def passeHaut(x, Q=1):

    return -x ** 2 / (1 - x ** 2 + x / Q * 1j)


def passeBande(x, Q=1):

    return 1 / (1 + Q * (x - 1 / x) * 1j)


def coupeBande(x, Q=1):

    return (1 - x ** 2) / (1 - x ** 2 + x / Q * 1j)


def gainNphase(f, dB=True):
    """
    Retourne le gain (éventuellement en dB) et la phase [rad] d'un
    filtre de fonction de transfert complexe *f*.
    """

    g = N.abs(f)                        # Gain
    if dB:                              # [dB]
```

```
        g = 20 * N.log10(g)
    p = N.angle(f)                      # [rad]

    return g, p


def asympGain(x, pentes=(0, -40)):

    lx = N.log10(x)
    return N.where(lx < 0, pentes[0] * lx, pentes[1] * lx)


def asympPhase(x, phases=(0, -N.pi)):

    return N.where(x < 1, phases[0], phases[1])


def diagBode(x, filtres, labels,
             title='', plim=None, gAsymp=None, pAsymp=None):
    """
    Trace le diagrame de Bode -- gain [dB] et phase [rad] -- des filtres
    de fonction de transfert complexe *filtres* en fonction de la pulsation
    réduite *x*.
    """

    fig = P.figure()
    axg = fig.add_subplot(2, 1, 1,        # Axe des gains
                          xscale='log',
                          ylabel='Gain [dB]')
    axp = fig.add_subplot(2, 1, 2,        # Axe des phases
                          sharex=axg,
                          xlabel=r'x = $\omega$/$\omega_0$', xscale='log',
                          ylabel='Phase [rad]')

    lstyles = ['--', '-', '-.', ':']
    for f, label, ls in zip(filtres, labels, lstyles):  # Tracé des courbes
        g, p = gainNphase(f, dB=True)       # Calcul du gain et de la phase
        axg.plot(x, g, lw=2, ls=ls, label="Q=" + str(label))  # Gain
        axp.plot(x, p, lw=2, ls=ls)                           # Phase

    # Asymptotes
    if gAsymp is not None:              # Gain
        axg.plot(x, asympGain(x, gAsymp), 'k:', lw=2, label='_')
    if pAsymp is not None:              # Phase
        #axp.plot(x, asympPhase(x,pAsymp), 'k:')
        pass

    axg.legend(loc='best', prop=dict(size='small'))

    # Labels des phases
    axp.set_yticks(N.arange(-2, 2.1) * N.pi / 2)
    axp.set_yticks(N.arange(-4, 4.1) * N.pi / 4, minor=True)
    axp.set_yticklabels([r'$-\pi$', r'$-\pi/2$', r'$0$', r'$\pi/2$', r'$\pi$'])
    # Domaine des phases
    if plim is not None:
        axp.set_ylim(plim)

    # Ajouter les grilles
    for ax in (axg, axp):
        ax.grid()                           # x et y, majors
        ax.grid(which='minor')              # x et y, minors

    # Ajustements fins
```

```
103     gmin, gmax = axg.get_ylim()
104     axg.set_ylim(gmin, max(gmax, 3))
105 
106     fig.subplots_adjust(hspace=0.1)
107     axg.xaxis.set_major_formatter(P.matplotlib.ticker.ScalarFormatter())
108     P.setp(axg.get_xticklabels(), visible=False)
109 
110     if title:
111         axg.set_title(title)
112 
113     return fig
114 
115 if __name__ == '__main__':
116 
117     #P.rc('mathtext', fontset='stixsans')
118 
119     x = N.logspace(-1, 1, 1000)              # de 0.1 à 10 en 1000 pas
120 
121     # Facteurs de qualité
122     qs = [0.25, 1 / N.sqrt(2), 5]            # Valeurs numériques
123     labels = [0.25, r'$1/\sqrt{2}$', 5]      # Labels
124 
125     # Calcul des fonctions de transfert complexes
126     pbs = [ passeBas(x, Q=q) for q in qs ]
127     phs = [ passeHaut(x, Q=q) for q in qs ]
128     pcs = [ passeBande(x, Q=q) for q in qs ]
129     cbs = [ coupeBande(x, Q=q) for q in qs ]
130 
131     # Création des 4 diagrames de Bode
132     figPB = diagBode(x, pbs, labels, title='Filtre passe-bas',
133                      plim=(-N.pi, 0),
134                      gAsymp=(0, -40), pAsymp=(0, -N.pi))
135     figPH = diagBode(x, phs, labels, title='Filtre passe-haut',
136                      plim=(0, N.pi),
137                      gAsymp=(40, 0), pAsymp=(N.pi, 0))
138     figPC = diagBode(x, pcs, labels, title='Filtre passe-bande',
139                      plim=(-N.pi / 2, N.pi / 2),
140                      gAsymp=(20, -20), pAsymp=(N.pi / 2, -N.pi / 2))
141     figCB = diagBode(x, cbs, labels, title='Filtre coupe-bande',
142                      plim=(-N.pi / 2, N.pi / 2),
143                      gAsymp=(0, 0), pAsymp=(0, 0))
144 
145     P.show()
```

Source : `filtres2ndOrdre.py`

CHAPITRE 10

Exercices

Note : Les exercices sont de difficulté variable, de * (simple) à *** (complexe).

Introduction

Intégration : méthode des rectangles *

La méthode des rectangles permet d'approximer numériquement l'intégrale d'une fonction `f` :

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx h\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \quad \text{avec} \quad h=(b-a)/n \quad \text{et} \quad x_i = a+(i+1/2)h.$$

On définit la fonction `sq` renvoyant le carré d'un nombre par (cf. *Fonctions*) :

```
def sq(x) :
    return x*x
```

Écrire un programme calculant l'intégrale de cette fonction entre *a=0* et *b=1*, en utilisant une subdivision en *n=100* pas dans un premier temps. Quelle est la précision de la méthode, et comment dépend-elle du nombre de pas ?

Fizz Buzz *

Écrire un programme jouant au Fizz Buzz jusqu'à 99 :

```
1 2 Fizz! 4 Buzz! Fizz! 7 8 Fizz! Buzz! 11 Fizz! 13 14 Fizz Buzz! 16...
```

PGCD : algorithme d'Euclide **

Écrire un programme calculant le PGCD (Plus Grand Commun Dénominateur) de deux nombres (p.ex. 306 et 756) par l'algorithme d'Euclide.

Tables de multiplication *

Écrire un programme affichant les tables de multiplication :

```
1 x 1 = 1
1 x 2 = 2
...
9 x 9 = 81
```

Manipulation de listes

Crible d'Ératosthène *

Implémenter le crible d'Ératosthène pour afficher les nombres premiers compris entre 1 et un entier fixe, p.ex. :

```
Liste des entiers premiers <= 41
[2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29, 31, 37, 41]
```

Carré magique **

Un carré magique d'ordre n est un tableau carré $n \times n$ dans lequel on écrit une et une seule fois les nombres entiers de 1 à n^2, de sorte que la somme des n nombres de chaque ligne, colonne ou diagonale principale soit constante. P.ex. le carré magique d'ordre 5, où toutes les sommes sont égales à 65 :

11	18	25	2	9
10	12	19	21	3
4	6	13	20	22
23	5	7	14	16
17	24	1	8	15

Pour les carrés magiques d'ordre impair, on dispose de l'algorithme suivant – *(i,j)* désignant la case de la ligne i, colonne j du carré ; on se place en outre dans une indexation « naturelle » commençant à 1 :

1. la case *(n,(n+1)/2)* contient 1 ;
2. si la case *(i,j)* contient la valeur k, alors on place la valeur *k+1* dans la case *(i+1,j+1)* si cette case est vide, ou dans la case *(i-1,j)* sinon. On respecte la règle selon laquelle un indice supérieur à n est ramené a 1.

Programmer cet algorithme pour pouvoir construire un carré magique d'ordre impair quelconque.

Programmation

Suite de Syracuse (fonction) *

Écrire une fonction `suite_syracuse(n)` retournant la (partie non-triviale de la) suite de Syracuse pour un entier n. Écrire une fonction `temps_syracuse(n, altitude=False)` retournant le temps de vol (éventuellement en altitude) correspondant à l'entier n. Tester ces fonctions sur *n=15* :

```
>>> suite_syracuse(15)
[15, 46, 23, 70, 35, 106, 53, 160, 80, 40, 20, 10, 5, 16, 8, 4, 2, 1]
>>> temps_syracuse(15)
17
>>> temps_syracuse(15, altitude=True)
10
```

Flocon de Koch (programmation récursive) ***

En utilisant les commandes `left`, `right` et `forward` de la bibliothèque graphique standard `turtle` dans une fonction *récursive*, générer à l'écran un flocon de Koch d'ordre arbitraire.

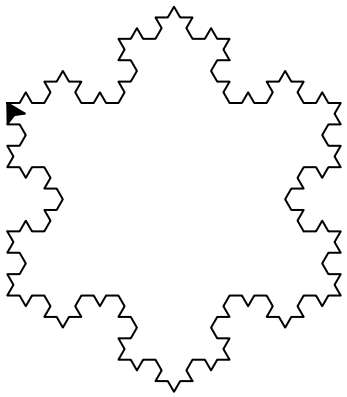


Fig. 10.1 – **Figure :** Flocon de Koch d'ordre 3.

Jeu du plus ou moins (exceptions) *

Écrire un jeu de « plus ou moins » :

```
Vous devez deviner un nombre entre 1 et 100.
Votre proposition: 27
C'est plus.
[...]
Vous avez trouvé en 6 coups!
```

La solution sera générée aléatoirement par la fonction `random.randint()`. Le programme devra être robuste aux entrées invalides (« toto », 120, etc.), et aux lâches abandons par interruption (`KeyboardInterrupt`).

Animaux (POO/TDD) *

Téléchargez `animaux.py` et complétez les classes `Animal` et `Chien` pour qu'elles passent avec succès tous les tests (voir *Développement piloté par les tests*). On appellera les tests via la ligne de commande :

```
py.test animaux.py
```

Jeu de la vie (POO) **

On se propose de programmer l'automate cellulaire le plus célèbre, le Jeu de la vie.

Pour cela, vous créerez une classe `Life` qui contiendra la grille du jeu ainsi que les méthodes qui permettront son évolution. Vous initialiserez la grille aléatoirement à l'aide de la fonction `random.choice()`, et vous afficherez l'évolution de l'automate dans la sortie standard du terminal, p.ex. :

```
...#..#.....##.......
.....###.............
#........#...........
.....#...#...........
..................##...
.....#.#......##..#..
..............##.##..
```

```
..............##.##..
.................#....
```

Astuce : Pour que l'affichage soit agréable à l'oeil, vous marquerez des pauses entre l'affichage de chaque itération grâce à la fonction `time.sleep()`.

Manipulation de tableaux (`arrays`)

Inversion de matrice *

Créer un tableau carré réel `r` aléatoire (`numpy.random.randn()`), calculer la matrice hermitienne $\mathsf{m} = \mathsf{r} \cdot \mathsf{r}^T$ (`numpy.dot()`), l'inverser (`numpy.linalg.inv()`), et vérifier que $\mathsf{m} \cdot \mathsf{m}^{-1} = \mathsf{m}^{-1} \cdot \mathsf{m} = 1$ (`numpy.eye()`) à la précision numérique près (`numpy.allclose()`).

Median Absolute Deviation *

En statistique, le *Median Absolute Deviation* (MAD) est un estimateur robuste de la dispersion d'un échantillon 1D : `MAD = median(| x - median(x) |)`.

À l'aide des fonctions `numpy.median()` et `numpy.abs()`, écrire une fonction `mad(x, axis=None)` calculant le MAD d'un tableau, éventuellement le long d'un ou plusieurs de ses axes.

Avant d'implémenter la fonction, on commencera par écrire quelques tests de cas simples, facilement calculables à la main. On les écrira sous un format compris par *py.test*, p.ex. :

```
def test_1D():
    assert mad([0]) == 0.
    assert mad([1, 2, 6, 9]) == 2.5
```

Distribution du *pull* ***

Le *pull* est une quantité statistique permettant d'évaluer la conformité des erreurs par rapport à une distribution de valeurs (typiquement les résidus d'un ajustement). Pour un échantillon $\mathbf{x} = [x_i]$ et les erreurs associées $\mathrm{d}\mathbf{x} = [\sigma_i]$, le *pull* est défini par :

— Moyenne optimale (pondérée par la variance) : $E = (\sum_i x_i/\sigma_i^2)/(\sum_i 1/\sigma_i^2)$
— Erreur sur la moyenne pondérée : $\sigma_E^2 = 1/\sum(1/\sigma_i^2)$
— Définition du *pull* : $p_i = (x_i - E_i)/(\sigma_{E_i}^2 + \sigma_i^2)^{1/2}$, où E_i et σ_{E_i} sont calculées *sans* le point i.

Si les erreurs σ_i sont correctes, la distribution du *pull* est centrée sur 0 avec une déviation standard de 1.

Écrire une fonction `pull(x, dx)` calculant le *pull* de tableaux 1D.

Méthodes numériques

Quadrature & zéro d'une fonction *

À l'aide des algorithmes disponibles dans `scipy`,

— calculer numériquement l'intégrale $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}\mathrm{d}x = \pi^4/15$;
— résoudre numériquement l'équation $x\,e^x = 5(e^x - 1)$.

Schéma de Romberg **

Écrire une fonction `integ_romberg(f, a, b, epsilon=1e-6)` permettant de calculer l'intégrale numérique de la fonction f entre les bornes a et b avec une précision *epsilon* selon la méthode de Romberg.

Tester sur des solutions analytiques et en comparant à `scipy.integrate.romberg()`.

Méthode de Runge-Kutta **

Développer un algorithme permettant d'intégrer numériquement une équation différentielle du 1er ordre en utilisant la méthode de Runge-Kutta d'ordre quatre.

Tester sur des solutions analytiques et en comparant à `scipy.integrate.odeint()`.

Visualisation (matplotlib)

Quartet d'Anscombe *

Après chargement des données, calculer et afficher les propriétés statistiques des quatres jeux de données du `Quartet d'Anscombe` :

- Moyenne et variance des x et des y (`numpy.mean()` et `numpy.var()`)
- Corrélation entre les x et les y (`scipy.stats.pearsonr()`)
- Équation de la droite de régression linéaire $y = ax + b$ (`scipy.stats.linregress()`)

Tableau 10.1 – Quartet d'Anscombe

I		II		III		IV	
x	y	x	y	x	y	x	y
10.0	8.04	10.0	9.14	10.0	7.46	8.0	6.58
8.0	6.95	8.0	8.14	8.0	6.77	8.0	5.76
13.0	7.58	13.0	8.74	13.0	12.74	8.0	7.71
9.0	8.81	9.0	8.77	9.0	7.11	8.0	8.84
11.0	8.33	11.0	9.26	11.0	7.81	8.0	8.47
14.0	9.96	14.0	8.10	14.0	8.84	8.0	7.04
6.0	7.24	6.0	6.13	6.0	6.08	8.0	5.25
4.0	4.26	4.0	3.10	4.0	5.39	19.0	12.50
12.0	10.84	12.0	9.13	12.0	8.15	8.0	5.56
7.0	4.82	7.0	7.26	7.0	6.42	8.0	7.91
5.0	5.68	5.0	4.74	5.0	5.73	8.0	6.89

Pour chacun des jeux de données, tracer y en fonction de x, ainsi que la droite de régression linéaire.

Diagramme de bifurcation : la suite logistique **

Écrivez une fonction qui calcule la valeur d'équilibre de la suite logistique pour un x_0 (nécessairement compris entre 0 et 1) et un paramètre r (parfois noté μ) donné.

Générez l'ensemble de ces points d'équilibre pour des valeurs de r comprises entre 0 et 4 :

N.B. : Vous utiliserez la bibliothèque *Matplotlib* pour tracer vos résultats.

Ensemble de Julia **

Représentez l'ensemble de Julia pour la constante complexe $c = 0.284 + 0.0122j$:

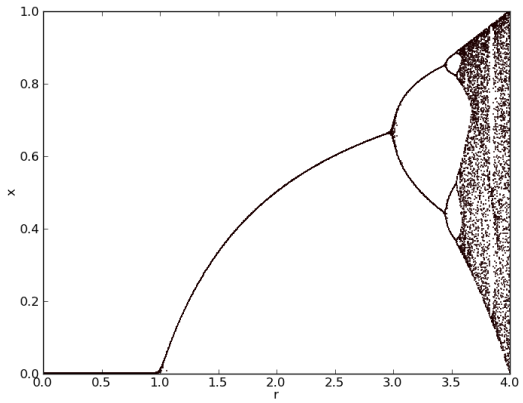


Fig. 10.2 – **Figure :** Diagramme de bifurcation.

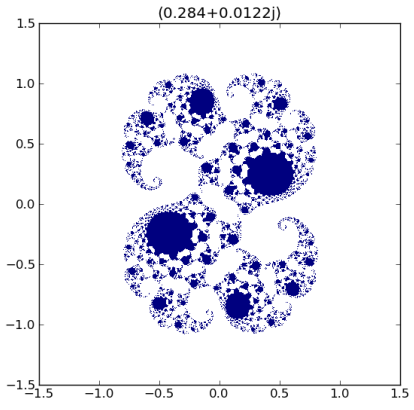


Fig. 10.3 – **Figure :** Ensemble de Julia pour $c = 0.284 + 0.0122j$.

On utilisera la fonction `numpy.meshgrid()` pour construire le plan complexe, et l'on affichera le résultat grâce à la fonction `matplotlib.pyplot.imshow()`.

Voir également : Superposition d'ensembles de Julia

Mise en oeuvre de l'ensemble des connaissances acquises

Équation différentielle *

À l'aide de la fonction `scipy.integrate.odeint()`, intégrer les équations du mouvement d'un boulet de canon soumis à des forces de frottement « turbulentes » (en v^2) :

$$\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{g} - \frac{\alpha}{m} v \times \mathbf{v}.$$

Utiliser les valeurs numériques pour un boulet de canon de 36 livres :

```
g = 9.81        # Pesanteur [m/s2]
cx = 0.45       # Coefficient de frottement d'une sphère
rhoAir = 1.2    # Masse volumique de l'air [kg/m3]
rad = 0.1748/2 # Rayon du boulet [m]
rho = 6.23e3    # Masse volumique du boulet [kg/m3]
mass = 4./3.*N.pi*rad**3 * rho           # Masse du boulet [kg]
alpha = 0.5*cx*rhoAir*N.pi*rad**2 / mass # Coeff. de frottement / masse
v0 = 450.       # Vitesse initiale [m/s]
alt = 45.       # Inclinaison du canon [deg]
```

Équation d'état de l'eau à partir de la dynamique moléculaire ***

Afin de modéliser les planètes de type Jupiter, Saturne, ou même des exo-planètes très massives (dites « super-Jupiters »), la connaissance de l'équation d'état des composants est nécessaire. Ces équations d'état doivent être valables jusqu'à plusieurs centaines de méga-bar ; autrement dit, celles-ci ne sont en aucun cas accessibles expérimentalement. On peut cependant obtenir une équation d'état numériquement à partir d'une dynamique moléculaire.

Le principe est le suivant : on place dans une boite un certain nombre de particules régies par les équations microscopiques (Newton par exemple, ou même par des équations prenant en considération la mécanique quantique) puis on laisse celles-ci évoluer dans la boite ; on calcule à chaque pas de temps l'énergie interne à partir des intéractions électrostatiques et la pression à partir du tenseur des contraintes. On obtient en sortie l'évolution du système pour une densité fixée (par le choix de taille de la boite) et une température fixée (par un algorithme de thermostat que nous ne détaillerons pas ici).

On se propose d'analyser quelques fichiers de sortie de tels calculs pour l'équation d'état de l'eau à très haute pression. Les fichiers de sortie sont disponibles `ici` ; leur nom indique les conditions thermodynamiques correspondant au fichier, p.ex. `6000K_30gcc.out` pour $T = 6000$ K et $\rho = 30$ gcc. Le but est, pour chaque condition température-densité, d'extraire l'évolution de l'énergie et de la pression au cours du temps, puis d'en extraire la valeur moyenne ainsi que les fluctuations. Il arrive souvent que l'état initial choisi pour le système ne corresponde pas à son état d'équilibre, et qu'il faille donc « jeter » les quelques pas de temps en début de simulation qui correspondent à cette relaxation du système. Pour savoir combien de temps prend cette relaxation, il sera utile de tracer l'évolution au cours du temps de la pression et l'énergie pour quelques simulations. Une fois l'équation d'état $P(\rho, T)$ et $E(\rho, T)$ extraite, on pourra tracer le réseau d'isothermes.

Indice : Vous écrirez une classe `Simulation` qui permet de charger un fichier de dynamique moléculaire, puis de tracer l'évolution de a température et de la densité, et enfin d'en extraire la valeur moyenne et les fluctuations. À partir de cette classe, vous construirez les tableaux contenant l'équation d'état.

Exercices en vrac

— Exercices de base 
— Entraînez-vous ! 
— Learn Python The Hard Way
— Google Code Jam
— CheckIO

Points matériels et ions (POO/TDD)

Pour une simulation d'un problème physique, on peut construire des classes qui connaissent elles-mêmes leurs propriétés physiques et leurs lois d'évolution.

La structure des classes est proposée dans ce `squelette`. Vous devrez *compléter* les définitions des classes `Vector`, `Particle` et `Ion` afin qu'elles passent toutes les tests lancés automatiquement par le programme principal `main`. À l'exécution, la sortie du terminal doit être :

```
********** Test functions **********
Testing Vector class... ok
Testing Particle class... ok
Testing Ion class... ok
********** Test end **********

********** Physical computations **********
** Gravitationnal computation of central-force motion for a Particle with mass 1.00, position␣
↪(1.00,0.00,0.00) and speed (0.00,1.00,0.00)
=> Final system : Particle with mass 1.00, position (-1.00,-0.00,0.00) and speed (0.00,-1.00,0.
↪00)
** Electrostatic computation of central-force motion for a Ion with mass 1.00, charge 4,␣
↪position (0.00,0.00,1.00) and speed (0.00,0.00,-1.00)
=> Final system : Ion with mass 1.00, charge 4, position (0.00,0.00,7.69) and speed (0.00,0.00,
↪2.82)
********** Physical computations end **********
```

Protein Data Bank

On chercher a réaliser un script qui analyse un fichier de données de type Protein Data Bank.

La banque de données Worldwide Protein Data Bank regroupe les structures obtenues par diffraction aux rayons X ou par RMN. Le format est parfaitement defini et conventionnel (documentation).

On propose d'assurer une lecture de ce fichier pour calculer notamment :
— le barycentre de la biomolécule
— le nombre d'acides aminés ou nucléobases
— le nombre d'atomes
— la masse moléculaire
— les dimensions maximales de la protéine
— etc.

On propose de considerer par exemple la structure resolue pour la GFP (*Green Fluorescent Protein*, Prix Nobel 2008) (Fichier PDB)

CHAPITRE 11

Annales d'examen

Simulation de chute libre (partiel nov. 2014)

— `Énoncé` (PDF) et `fichier d'entrée`
— `Corrigé`

Examen janvier 2015

— `Énoncé` (PDF) ou *Examen final, Janvier 2015*.
  — Exercice : `velocimetrie.dat`
  — Problème : `exam_1501.py`, `ville.dat`
— `Corrigé`, `figure`

CHAPITRE 12

Projets

Table des matières

Projets de physique

Formation d'agrégats

La formation d'agrégats est par essence un sujet interdisciplinaire, ou la modélisation joue un rôle certain comme « microscope computationel ». Pour un projet en ce sens, un soin particulier sera donné à la

contextualisation. P.ex., on pourra tester les limites de la règle de Wade pour la structure de clusters métalliques, ou bien dans un contexte plus biologique.

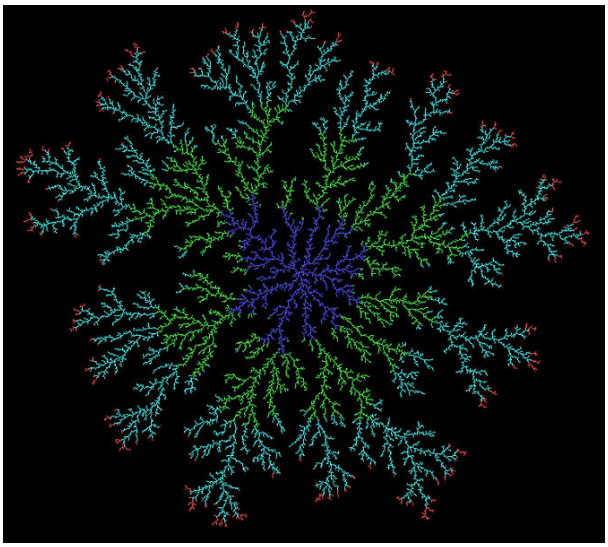


Fig. 12.1 – **Figure :** Résultat d'une agrégation limitée par la diffusion d'environ 33 000 particules obtenue en permettant à des marcheurs aléatoires d'adhérer à une semence centrale. Les couleurs indiquent le temps d'arrivée des marcheurs. Source : WingkLEE (Own work) [Public domain], via Wikimedia Commons.

Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est le modèle le plus simple du magnétisme. Le modèle 1D est exactement soluble par la méthode de la matrice de transfert. La généralisation à 2 dimensions a été faite par Lars Onsager en 1944, mais la solution est assez compliquée. Il n'existe pas de solution analytique en 3D. On va ici considérer un système de spins sur réseau. Chaque spin σ_i peut prendre 2 valeurs (« *up* » et « *down* »). L'hamiltonien du système,

$$H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$

contient deux contributions : l'interaction entre premiers voisins et le couplage à un champ magnétique. On va considérer un réseau carré avec une interaction ferromagnétique ($J > 0$). L'objectif du projet sera d'étudier le diagramme de phase du système en fonction de la température et du champ magnétique par simulation de Monte-Carlo.

Modèle de Potts 3D

Modèle de Potts en 3D dans un univers carré à condition périodique. Le but est la mise en évidence de la transition de phase pour plusieurs jeux de paramètres avec 3 types de spins différents.

1. Reproduire des résultats connus du modèle d'Ising en 2D pour valider le code.
2. Passer à un algorithme en *cluster* pour évaluer la différence avec un algorithme classique.
3. Passer en 3D
4. Changer le nombre de type de spins (de 2 à 3).

Jeux de paramètres à tester :

— Ising en 2D (2 types de spins, algorithme de Glauber) : Transition de phase attendue à T~227K pour un couplage J=100 et un champ externe nul
— Toujours Ising, mais avec l'algorithme de Wolff
— Ising en 3D avec Wolff
— Potts (changer q=2 par q=3) en 3D avec Wolff

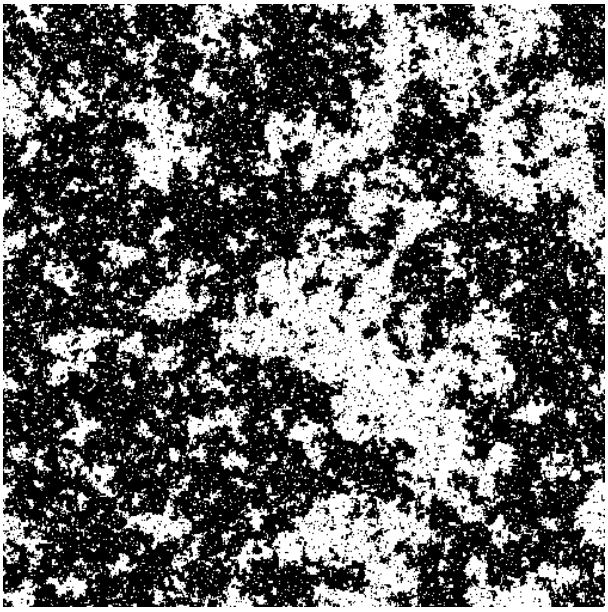


Fig. 12.2 – **Figure :** Modèle d'Ising au point critique. Source : Paul Coddington.

Références :

Computational Studies of Pure and Dilute Spin Models

Méthode de Hückel

La spectroscopie et la réactivité des électrons π est centrale en chimie. Un outil efficace pour les appréhender est l'approche développé par Hückel. Il vous est demande ici de mettre en oeuvre cette méthode pour l'analyse des orbitales et de l'énergie d'une famille de molécules répondant aux hypothèse sous-jacentes. On discutera notamment du choix de la paramétrisation du système.

Densité d'états d'un nanotube

Les nanotubes de carbone ont été découverts bien avant celle du graphène. Ce sont des matériaux très résistants et durs qui possèdent une conductivité électrique et thermique élevées. Un nanotube de carbone monofeuillet consiste d'une couche de graphène enroulé selon un certain axe. L'axe d'enroulement détermine la chiralité du nanotube et, par la suite, les propriétés électroniques : selon la chiralité, le nanotube peut être soit semi-conducteur, soit métallique. L'objectif du projet sera de calculer la densité d'états de nanotubes de carbone de différentes chiralités et d'établir le lien entre la chiralité et le fait que le nanotube soit semiconducteur ou métallique.

Solitons

On considère un câble sous tension auquel sont rigidement et régulièrement attachés des pendules. Les pendules sont couplés grâce au câble à travers sa constante de torsion. Dans un tel système on peut observer une large gamme de phénomènes ondulatoires. Le but de cet projet est d'étudier une solution très particulière : le *soliton*.

Imaginons qu'une des extrémités du câble est attachée à une manivelle qui peut tourner librement. Il est alors possible de donner une impulsion au système en faisant un tour rapide ce qui déclenche la propagation d'un soliton. Dans ce projet, on considérera les pendules individuellement. Il n'est pas demandé de passer au modèle continu et de résoudre l'équation obtenue.

Pour chaque pendule n dont la position est décrite par θ_n, l'équation d'évolution s'écrit :

$$\frac{d^2\theta_n}{dt^2} = \alpha \sin\theta_n + \beta(\theta_{n-1} + \theta_{n+1} - 2\theta_n)$$

où α, β sont des paramètres physiques. On résoudra numériquement cette équation pour chaque pendule. En donnant un « tour de manivelle numérique », on essayera d'obtenir la solution soliton. On cherchera en particulier à ajuster la solution par une équation du type $\theta_n = a\tan^{-1}(\exp(b(n-n_0)))$ où a, b, n_0 sont des paramètres à déterminer.

De très nombreuses questions se posent (il ne vous est pas demandé de répondre à chacune d'entre elle) :

- Est-il toujours possible d'obtenir un soliton ?
- Sa vitesse est-elle constante ?
- Le soliton conserve-t-il sa forme ?
- Que se passe-t-il avec des pendules plus lourds ? ou plus rapprochés ? avec un câble plus rigide ? avec un frottement ?
- Comment le soliton se réfléchit-il si l'extrémité du câble est rigidement fixée ? et si elle tourne librement ?
- Dans ce système, le soliton est chiral. En effet, on peut tourner la manivelle à gauche ou à droite. Un anti-soliton a-t-il les mêmes propriétés (taille, vitesse, énergie) qu'un soliton ?
- Si on place une manivelle à chaque extrémité, on peut faire se collisionner des solitons. Cette étude est très intéressante et pleine de surprises. Que se passe-t-il lors de la collision de deux solitons ? Entre un soliton et un anti-soliton ?

Fig. 12.3 – **Figure :** Un mascaret, une vague soliton, dans un estuaire de Grande Bretagne. *Source* : Arnold Price [CC-BY-SA-2.0], via Wikimedia Commons.

Diagramme de phase du potentiel de Lennard-Jones

Auteur de la section : Mathieu Leocmach <mathieu.leocmach@ens-lyon.fr>

Le potentiel de Lennard-Jones est souvent utilisé pour décrire les interactions entre deux atomes au sein d'un système monoatomique de type gaz rare. Son expression en fonction de la distance r entre les deux noyaux atomiques est :

$$E_p(r) = 4E_0\left[\left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r}\right)^{6}\right]$$

avec r_0 la distance pour laquelle $E_p(r_0) = 0$.

On programmera un simulateur de dynamique moléculaire pour N particules identiques dans un cube periodique de taille fixe L et à une température T. On prendra soin d'adimentionner toutes les grandeurs et d'imposer des conditions aux limites periodiques. On se renseignera sur les façons possibles de déterminer les conditions initiales et d'imposer la température.

Les positions et vitesses des particules seront exportées de façon régulières pour visualisation (par exemple dans Paraview).

— On pourra observer les collisions de 2 ou 3 particules à différentes températures avant de passer à des N plus grands (100 particules ?).
— On fera varier $V = L^3$ et T pour déterminer les frontières des différentes phases.
— On pourra aussi essayer d'aller vers de plus grands N pour tester l'influence de la taille finie de l'échantillon. Des optimisations seront alors sûrement nécessaires pour accélérer le programme.
— On pourra aussi tester d'autres types de potentiels comme celui de Weeks-Chandler-Anderson et discuter des différences observées.

États de diffusion pour l'équation de Schrödinger 1D stationnaire

On s'intéresse à la diffusion d'une particule de masse m à travers un potentiel carré défini par $V(x) = V_0$ pour $0 \leq x \leq a$, et 0 sinon.

Les solutions de cette équation en dehors de la région où règne le potentiel sont connues. Les paramètres d'intégration de ces fonctions d'onde peuvent se déterminer par les relations de continuité aux frontières avec la région où règne le potentiel. En résolvant l'équation différentielle dans la région du potentiel pour x allant de a à 0 on peut obtenir une autre valeur pour ces paramètre d'intégration. Il faut ensuite appliquer un algorithme de minimisation pour déterminer les constantes d'intégration.

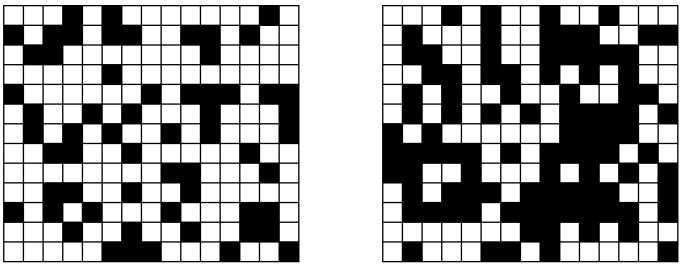
Les objectifs de ce projet sont :
— Écrire un programme qui résolve l'équation de Schrödinger.
— En déduire les coefficients de transmission et de réflexion.

Références :

— *A numerical method for quantum tunnelling*, Pang T., Computers un Physics, 9, p 602-605.
— Équation de Schrödinger 1D
— Quantum Python: Animating the Schrodinger Equation

Percolation

Ce sujet propose d'étudier le phénomène de percolation. La percolation est un processus physique qui décrit pour un système, une transition d'un état vers un autre. Le système que nous étudierons est composé ici d'une grille carrée dont les cases sont soit vides, soit pleines. Initialement, la matrice est vide et l'on tire aléatoirement une case que l'on rempli. On défini la concentration comme le rapport du nombre de cases noires sur le nombre total de cases. À partir d'une certaine concentration critique un chemin continu de cases noires s'établit entre deux bords opposés du système (haut et bas, ou gauche et droite) et on dit alors que le système percole. Le but du sujet est d'étudier la transition d'un système qui ne percole pas (à gauche sur la figure) vers un système qui percole (à droite). Pour ce faire, on établira un algorithme qui pour une configuration donnée détermine si le réseau de cases noires percole ou non. On étudiera également la taille et le nombre des amas de cases noires en fonction de la concentration. On étudiera aussi les effets de la taille du système.



Cette étude repose sur un tirage pseudo aléatoire et pas conséquent nécessite un traitement statistique. On ne pourra pas se contenter d'étudier un cas particulier mais on prendra soin au contraire d'effectuer des moyennes sur un très grand nombre de tirages (plusieurs centaines).

Références :

— Percolation theory
— Concepts fondamentaux de la percolation
— Percolation exercises : 2006, 2012

Autres possibilités

— Reaction-Diffusion by the Gray-Scott Model
— Équation de Cahn–Hilliard (voir l'exemple NIST sous FiPy: A Finite Volume PDE Solver Using Python)
— Computational Methods for Nonlinear Systems

Projets astrophysiques

Auteur de la section : Méthodes numériques pour la physique et les SPI

Relation masse/rayon d'une naine blanche

D'après la théorie de l'évolution stellaire, les naines blanches sont l'un des états possibles d'une étoile (peu massive) à la fin de sa vie, lorsque les réactions de fusion thermonucléaire s'arrêtent.

En première approximation un corps astrophysique est essentiellement soumis à la force de gravitation (qui tend à le contracter) et une force interne de pression qui vient équilibrer la première. Ainsi on peut approcher le problème par un équilibre hydrostatique caractérisé par :

$$\boldsymbol{\nabla} P(r) = -\rho(r)\frac{GM(r)}{r^2}\boldsymbol{e}_r$$

où G est la constante de gravitation, $P(r)$, $\rho(r)$ et $M(r)$ respectivement la pression, la densité à la distance r du centre et la masse dans une sphère de rayon r.

Il s'agit d'étudier ici quelle force peut équilibrer la gravitation pour une naine blanche et mettre en évidence une masse limite en étudiant la relation rayon/masse.

Modélisation

La masse et le rayon d'équilibre de ce système sont entièrement déterminés par l'équation d'état thermodynamique $P = P(\rho)$ et la densité centrale. En effet on montre facilement que :

$$\frac{d\rho}{dr} = -\left(\frac{dP}{d\rho}\right)^{-1}\frac{GM}{r^2}\rho$$
$$\frac{dM}{dr} = 4\pi r^2\rho$$

Une fois que les réactions thermonucléaires s'arrêtent, la première des forces empêchant l'étoile de s'effondrer vient de la pression due aux électrons. Le modèle que nous utiliserons sera donc un simple gaz d'électrons (masse m_e et de nombre par unité de volume n) plongé dans un gaz de noyaux (on note Y_e

le nombre d'électrons par nucléon et M_n la masse d'un nucléon) d'équation d'état :

$$\begin{aligned}
\frac{E}{V} &= n_0 m_e c^2 x^3 \varepsilon(x), \\
\text{avec} \quad x &= \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\frac{1}{3}}, \\
n_0 &= \frac{m_e^3 c^3}{3\hbar^3 \pi^2}, \\
\rho_0 &= \frac{M_n n_0}{Y_e} \\
\text{et} \quad \varepsilon(x) &= \frac{3}{8x^3}\left[x(1+2x^2)\sqrt{1+x^2} - \ln\left(x+\sqrt{1+x^2}\right)\right]
\end{aligned}$$

Si tous les noyaux sont du ^{12}C, alors $Y_e = 1/2$.

1. Montrer que le système d'équations à résoudre est

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho}{dr} &= -\left(\frac{3M_n G}{Y_e m_e c^2}\frac{\sqrt{1+x^2}}{x^2}\right)\frac{M}{r^2}\rho \\
\frac{dM}{dr} &= 4\pi r^2 \rho
\end{aligned}$$

2. En fixant la densité centrale $\rho(r=0) = \rho_c$ tracer $\rho(r)$ et en déduire une méthode pour calculer le rayon R de l'étoile et sa masse M.
3. En faisant varier la densité centrale tracer la relation $M(R)$.
4. Discuter la validité numérique et physique des résultats par exemple en changeant la composition de l'étoile, la définition du rayon de l'étoile, etc.

Section de Poincaré

Les équations du mouvement [1] $\boldsymbol{r}(t) = (x(t), y(t))$ d'une particule de masse m plongée dans un potentiel $\Phi(x, y)$ s'écrivent :

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = -\nabla\Phi.$$

En coordonnées polaires :

$$\begin{aligned}
a_r &= \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 \\
&= -\frac{1}{m}\frac{\partial\Phi}{\partial r} \\
a_\theta &= 2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta} \\
&= -\frac{1}{mr}\frac{\partial\Phi}{\partial\theta}
\end{aligned}$$

Le système peut donc s'écrire :

$$\begin{aligned}
\ddot{r} &= r\dot{\theta}^2 - \frac{1}{m}\frac{\partial\Phi}{\partial r} \\
\ddot{\theta} &= -\frac{2}{r}\dot{r}\dot{\theta} - \frac{1}{mr^2}\frac{\partial\Phi}{\partial\theta}
\end{aligned}$$

ou en posant $r_p = \dot{r}$ et $\theta_p = \dot{\theta}$:

$$\begin{aligned}
\dot{r} &= r_p \\
\dot{\theta} &= \theta_p \\
\dot{r_p} &= r\theta_p^2 - \frac{1}{m}\frac{\partial\Phi}{\partial r} \\
\dot{\theta_p} &= -\frac{2}{r}r_p\theta_p - \frac{1}{mr^2}\frac{\partial\Phi}{\partial\theta}
\end{aligned}$$

[1] On se place dans toute la suite du problème dans un espace à deux dimensions.

L'intégration – analytique ou numérique – de ces équations pour des conditions initiales ($\boldsymbol{r}(t=0), \dot{\boldsymbol{r}}(t=0)$) particulières caractérise une *orbite*. Le tracé de l'ensemble des points d'intersection de différentes orbites de même énergie avec le plan, p.ex., $(x, \dot{x})$ (avec $y = 0$ et $\dot{y} > 0$) constitue une *section de Poincaré*.

Nous étudierons plus particulièrement le cas particulier $m = 1$ et les deux potentiels :

1. le potentiel intégrable de Sridhar & Touma (1997 ; MNRAS, **287**, L1) [2], qui s'exprime naturellement dans les coordonnées polaires (r, θ) :

$$\Phi(r, \theta) = r^{\alpha} \left[(1 + \cos\theta)^{1+\alpha} + (1 - \cos\theta)^{1+\alpha} \right].$$

   avec p.ex. $\alpha = 1/2$;
2. le potentiel de Hénon-Heiles :

$$\Phi(r, \theta) = \frac{1}{2} r^2 + \frac{1}{3} r^3 \sin(3\theta).$$

Objectif

1. Écrire un intégrateur numérique permettant de résoudre les équations du mouvement pour un potentiel et des conditions initiales données.
2. Les performances de cet intégrateur seront testées sur des potentiels intégrables (p.ex. potentiel képlerien $\Phi \propto 1/r$), ou en vérifiant la stabilité des constantes du mouvement (l'énergie $E = \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2 + \Phi$).
3. Pour chacun des potentiels, intégrer et stocker une grande variété d'orbites de même énergie, en prenant soin de bien résoudre la zone d'intérêt autour de $(y = 0, \dot{y} > 0)$.
4. À l'aide de fonctions d'interpolation et de recherche de zéro, déterminer pour chacune des orbites les coordonnées $(x, \dot{x})$ de l'intersection avec le plan $(y = 0, \dot{y} > 0)$.
5. Pour chacun des potentiels, regrouper ces points par orbite pour construire la section de Poincaré de ce potentiel.

Projets divers

Formation de pistes de fourmis sur un pont à 2 branches

Si on propose à une colonie de fourmis de choisir entre 2 branches pour rejoindre une source de nourriture la branche finalement choisie est toujours la plus courte. Le projet consiste à modéliser et caractériser ce comportement.

Indication : on peut étudier ce système avec des EDOs. Cela peut aussi donner lieu à une simulation individu centré et éventuellement une comparaison entre les deux types de modèle.

Auto-organisation d'un banc de poisson

Auteur de la section : Hanna Julienne <hanna.julienne@gmail.com>

La coordination d'un banc de poissons ou d'un vol d'oiseaux est tout à fait frappante : les milliers d'individus qui composent ces structures se meuvent comme un seul. On observe aussi, dans les bancs de poisson, d'impressionnants comportements d'évitement des prédateurs (flash expansion, fountain effect).

Pourtant ces mouvements harmonieusement coordonnés ne peuvent pas s'expliquer par l'existence d'un poisson leader. Comment pourrait-il être visible par tous ou diriger les *flash expansion* qui ont lieu à un endroit précis du banc de poisson ? De la même manière on ne voit pas quelle contrainte extérieure pourrait expliquer le phénomène.

[2] Nous utiliserons toutefois les notations de l'appendice de Copin, Zhao & de Zeeuw (2000; MNRAS, **318**, 781).

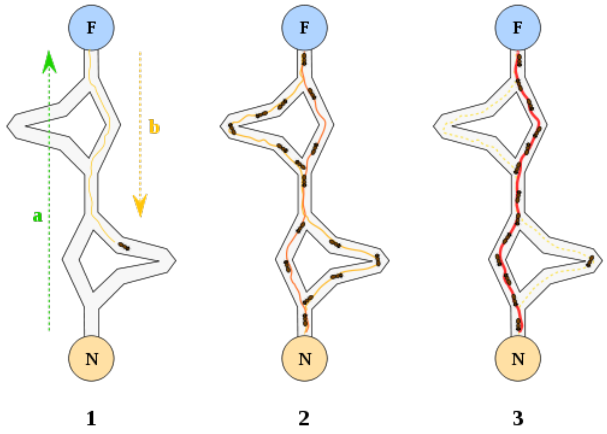


Fig. 12.4 – **Figure :** 1) la première fourmi trouve la source de nourriture (F), via un chemin quelconque (a), puis revient au nid (N) en laissant derrière elle une piste de phéromone (b). 2) les fourmis empruntent indifféremment les 4 chemins possibles, mais le renforcement de la piste rend plus attractif le chemin le plus court. 3) les fourmis empruntent le chemin le plus court, les portions longues des autres chemins voient la piste de phéromones s'évaporer. Source : Johann Dréo via Wikimedia Commons.

Une hypothèse plus vraisemblable pour rendre compte de ces phénomènes est que la cohérence de l'ensemble est due à la somme de comportements individuels. Chaque individu adapte son comportement par rapport à son environnement proche. C'est ce qu'on appelle *auto-organisation*. En effet, on a établi expérimentalement que les poissons se positionnent par rapport à leurs k plus proches voisins de la manière suivante :

— ils s'éloignent de leurs voisins très proches (zone de répulsion en rouge sur la figure ci-dessous)
— ils s'alignent avec des voisins qui sont à distance modérée (zone jaune)
— ils s'approchent de leur voisins s'ils sont à la fois suffisamment proches et distants (zone verte)

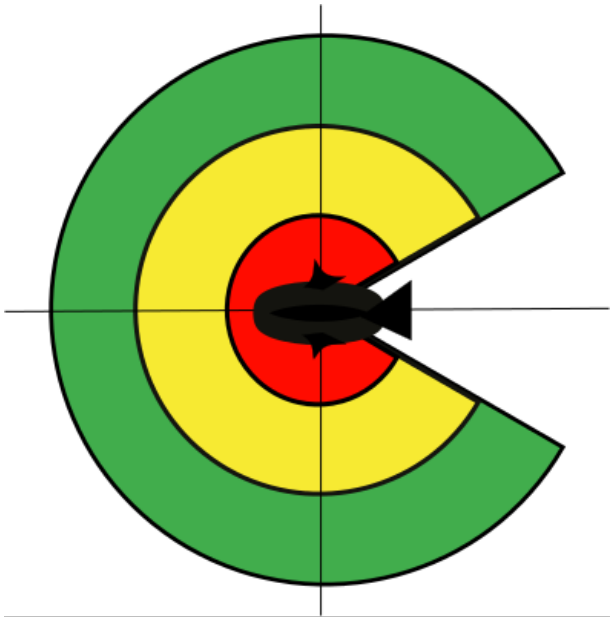


Fig. 12.5 – **Figure :** Environnement proche du poisson : zones dans lesquelles le positionnement d'un voisin provoque une réponse de la part de l'individu au centre

Dans notre modèle, nous allons prendre en compte l'influence des k plus proches voisins. On calculera la contribution de chaque voisin selon la zone dans laquelle il se situe. Le déplacement du poisson sera la moyenne de ces contributions. Il est à noter qu'un voisin en dehors des trois zones d'influence n'a pas d'effet.

L'environnement proche d'un poisson est modélisé par des sphères imbriquées qui présentent une zone aveugle (voir figure).

Par ailleurs, si un individu n'a pas de voisins dans son environnement proche il adopte un comportment de recherche. Il explore aléatoirement les alentours jusqu'à ce qu'il repère le banc de poissons et finalement s'en rapproche.

Ce projet vise à :

- Coder le comportement des poissons et à les faire évoluer dans un environnement **2D**.
- On essaiera d'obtenir un comportement collectif cohérent (similaire à un banc de poisson) et d'établir les conditions nécessaires à ce comportement.
- On étudiera notamment l'influence du nombre d'individus pris en compte. Est-ce que le positionnement par rapport au plus proche voisin ($k = 1$) est suffisant ?
- On pourra se servir de la visualisation pour rendre compte de la cohérence du comportment et éventuellement inventer des mesures pour rendre compte de manière quantifier de cette cohérence.

Liens :

- Craig Reynolds Boids
- Décrypter les interactions entre poissons au sein d'un banc

Évacuation d'une salle & déplacement d'une foule dans une rue

Le comportement d'une foule est un problème aux applications multiples : évacuation d'une salle, couloir du métro aux heures de pointes, manifestations... On peut en imaginer des modèles simples. P. ex., on peut décrire chaque individu par sa position, sa vitesse, et comme étant soumis à des « forces » :

- Une force qui spécifie la direction dans laquelle l'individu *veut* se déplacer, $\mathbf{f}_{dir} = (\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}(t))/\tau$, où $\mathbf{v}_0$ est la direction et la vitesse que la personne veut atteindre, $\mathbf{v}$ sa vitesse actuelle, et τ un temps caractéristique d'ajustement.
- Une force qui l'oblige à éviter des obstacles qui peuvent être fixes (un mur, un massif de fleurs, ...), ou qui peuvent être les autres individus eux-mêmes. On pourra essayer $f_{obs}(d) = a \exp(-d/d_0)$, où d est la distance entre le piéton et l'obstacle, d_0 la « portée » de la force, et a son amplitude.

On pourra varier les différents paramètres apparaissant ci-dessus, tout en leur donnant une interprétation physique réelle, et étudier leur influence dans des situations concrètes. P. ex., à quelle vitesse, en fonction de $\mathbf{v}_0$ et de la densité de piétons, se déplace une foule contrainte à avancer dans un couloir si chaque individu veut maintenir une vitesse $\mathbf{v}_0$? Comment s'organise l'évacuation d'une salle initialement uniformément peuplée, avec une ou plusieurs sorties, et en la présence éventuels d'obstacles ?

Il est également possible d'essayer d'autres expressions pour les forces.

Il existe une littérature conséquente sur le sujet, que l'on pourra explorer si besoin (p. ex : Décrypter le mouvement des piétons dans une foule).

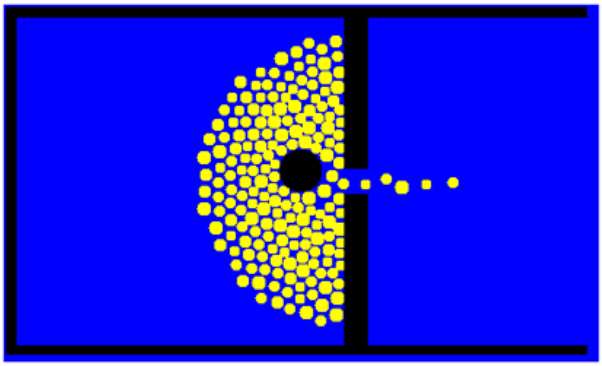


Fig. 12.6 – **Figure :** Un obstacle aide à l'évacuation. Source : Crowd Behavior.

Suivi de particule(s)

Auteur de la section : Mathieu Leocmach <mathieu.leocmach@ens-lyon.fr>

Dans de nombreux domaines de recherche expérimentale, on a besoin de localiser des particles dans une image ou de reconstituer leurs trajectoires à partir d'une vidéo. Il peut s'agir de virus envahissant une cellule, de traceurs dans un écoulement, d'objets célestes fonçant vers la terre pour la détruire, etc.

Dans ce projet, on essayera d'abord de localiser une particule unique dans une image à 2 dimensions (niveaux de gris) en utilisant l'algorithme de Crocker & Grier décrit ici. On utilisera sans retenue les fonctions de la bibliothèque `scipy.ndimage`.

On essayera d'obtenir une localisation plus fine que la taille du pixel. On essayera ensuite de détecter plusieurs particules dans une image.

Afin de pouvoir traiter efficacement une séquence d'images de même taille, on privilégiera une implémentation orientée objet. L'objet de la classe `Finder` sera construit une seule fois en début de séquence et il contiendra les images intermédiaires nécessaire au traitement. On nourrira ensuite cet objet avec chaque image de la séquence pour obtenir les coordonnées des particules.

Enfin, on pourra essayer de relier les coordonnées dans des images successives pour constituer des trajectoires.

On contactera le créateur du sujet pour obtenir des séquences d'images expérimentales de particules Browniennes.

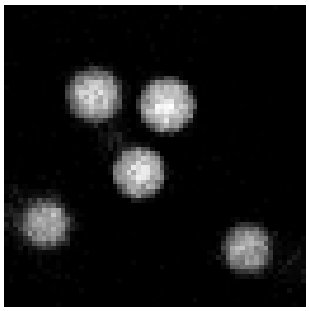


Fig. 12.7 – **Figure :** Exemple d'image test où on voudra localiser les particules.

Projets statistiques

- Tests statistiques du NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods, p.ex. Comparisons based on data from two processes
- Statistiques robustes, p.ex. Beers et al. (1990)

Projets de visualisation

L'objectif premier de ces projets est de développer des outils de visualisation sous Python/Matplotlib.

- Coordonnées parallèles
  - Sources éventuelles d'inspiration : Parallel Coordinates plot in Matplotlib, XDAT
  - Exemples de jeu de données multi-variables : Iris flower data set, `Cars` (source)
- Andrew Curves (voir également Rip's Applied Mathematics Blog)
  - À appliquer sur les mêmes jeux de données que pour les coordonnées parallèles.
- Stacked graphs
  - Source éventuelle d'inspiration : Python recipe

- Diagramme de Hertzprung-Russel
  L'objectif est de développer une classe permettant de tracer des diagrammes HR à partir de diverses quantités observationnelles (magnitudes apparentes ou absolues, couleurs) ou théoriques (luminosité, températures effectives), ainsi que des isochrones.
  - Source éventuelle d'inspiration : Stellar evolutionary tracks
  - Données photométriques : p.ex. `M55` (source : BVI photometry in M55)
  - Données théoriques : p.ex. Padova database of stellar evolutionary tracks and isochrones
- Treemaps
  - Source éventuelle d'inspiration : Treemaps under pylab
- De façon plus générale, l'ensemble des visualisations proposées sous :
  - Flare
  - D3
  - Periodic Table of Vizualisation Methods

CHAPITRE 13

Démonstration Astropy

Nous présentons ici quelques possibilités de la bibliothèque Astropy.

Référence : cette démonstration est très largement inspirée de la partie `Astropy` du cours Python Euclid 2016.

```
In [1]: # Mimic Python-3.x
        from __future__ import print_function, division

        import numpy as N
        import matplotlib.pyplot as P
        try:
            import seaborn
            seaborn.set_color_codes()  # Override default matplotlib colors 'b', 'r', 'g', etc.
        except ImportError:
            pass

        # Interactive figures
        # %matplotlib notebook
        # Static figures
        %matplotlib inline
```

Fichiers FITS

Le format FITS (*Flexible Image Transport System*) constitue le format de données historique (et encore très utilisé) de la communauté astronomique. Il permet le stockage simultané de données – sous forme de tableaux numériques multidimensionnels (spectre 1D, image 2D, cube 3D, etc.) ou de tables de données structurées (texte ou binaires) – et des méta-données associées – sous la forme d'un entête ASCII nommé *header*. Il autorise en outre de combiner au sein d'un même fichier différents segments de données (*extensions*, p.ex. le signal et la variance associée) sous la forme de HDU (*Header-Data Units*).

Le fichier FITS de test est disponible ici : image.fits (données *Herschel Space Observatory*)

Lire un fichier FITS

```
In [2]: from astropy.io import fits as F
```

```
filename = "image.fits"
hdulist = F.open(filename)
```

`hdulist` est un objet HDUList de type liste regroupant les différents HDUs du fichier :

```
In [3]: hdulist.info()
```

```
Filename: image.fits
No.    Name         Type      Cards   Dimensions   Format
0    PRIMARY     PrimaryHDU     151   ()
1    image       ImageHDU        52   (273, 296)   float64
2    error       ImageHDU        20   (273, 296)   float64
3    coverage    ImageHDU        20   (273, 296)   float64
4    History     ImageHDU        23   ()
5    HistoryScript  BinTableHDU     39   105R x 1C    [300A]
6    HistoryTasks  BinTableHDU     46   77R x 4C     [1K, 27A, 1K, 9A]
7    HistoryParameters  BinTableHDU     74   614R x 10C   [1K, 20A, 7A, 46A, 1L, 1K, 1L, 74A, 11A, 41A]
```

Chaque HDU contient :

- un attribut `data` pour la partie *données* sous la forme d'un `numpy.array` ou d'une structure équivalente à un tableau à type structuré,
- un attribut `header` pour la partie *méta-données* sous la forme "`KEY = value / comment`".

```
In [4]: imhdu = hdulist['image']
        print(type(imhdu.data), type(imhdu.header))
```

```
<type 'numpy.ndarray'> <class 'astropy.io.fits.header.Header'>
```

Il est également possible de lire *directement* les données et les méta-données de l'extension `image` :

```
In [5]: ima, hdr = F.getdata(filename, 'image', header=True)
        print(type(ima), type(hdr))
```

```
<type 'numpy.ndarray'> <class 'astropy.io.fits.header.Header'>
```

`data` contient donc les données numériques, ici un tableau 2D :

```
In [6]: N.info(ima)
```

```
class:  ndarray
shape:  (296, 273)
strides:  (2184, 8)
itemsize:  8
aligned:  True
contiguous:  True
fortran:  False
data pointer: 0x7f43bce3bec0
byteorder:  big
byteswap:  True
type: >f8
```

L'entête `hdr` est un objet de type Header similaire à un `OrderedDict` (dictionaire ordonné).

```
In [7]: hdr[:5]  # Les 5 premières clés de l'entête
```

```
Out[7]: XTENSION= 'IMAGE   '           / Java FITS: Wed Aug 14 11:37:21 CEST 2013
        BITPIX  =                  -64
        NAXIS   =                    2 / Dimensionality
        NAXIS1  =                  273
        NAXIS2  =                  296
```

Attention : les axes des tableaux FITS et NumPy arrays sont inversés !

```
In [8]: print("FITS: ", (hdr['naxis1'], hdr['naxis2']))  # format de l'image FITS
        print("Numpy:", ima.shape)                       # format du tableau numpy
```

```
FITS:  (273, 296)
Numpy: (296, 273)
```

World Coordinate System

L'entête d'un fichier FITS peut notamment inclure une description détaillée du système de coordonnées lié aux données, le World Coordinate System.

```
In [9]: from astropy import wcs as WCS

        wcs = WCS.WCS(hdr)  # Décrypte le WCS à partir de l'entête
        print(wcs)
```

```
WCS Keywords

Number of WCS axes: 2
CTYPE : 'RA---TAN'  'DEC--TAN'
CRVAL : 30.07379502155236  -24.903630299920962
CRPIX : 134.0  153.0
NAXIS    : 273 296
```

```
In [10]: ra, dec = wcs.wcs_pix2world(0, 0, 0)  # Coordonnées réelles du px (0, 0)
         print("World:", ra, dec)
         x, y = wcs.wcs_world2pix(ra, dec, 0)  # Coordonnées dans l'image de la position (ra, dec)
         print("Image:", x, y)
```

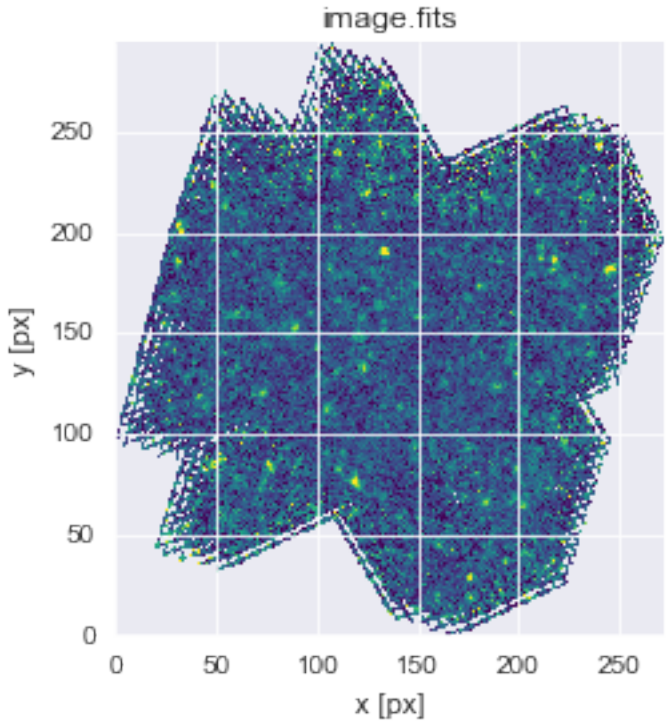
```
World: 30.318687003 -25.1567606072
Image: -3.21165316564e-12 -1.05160324892e-12
```

Visualisation dans matplotlib

Les tableaux 2D (*image*) se visualise à l'aide de la commande `imshow` :

- `cmap` : table des couleurs,
- `vmin`, `vmax` : valeurs minimale et maximale des données visualisées,
- `origin` : position du pixel (0, 0) ('lower' = en bas à gauche)

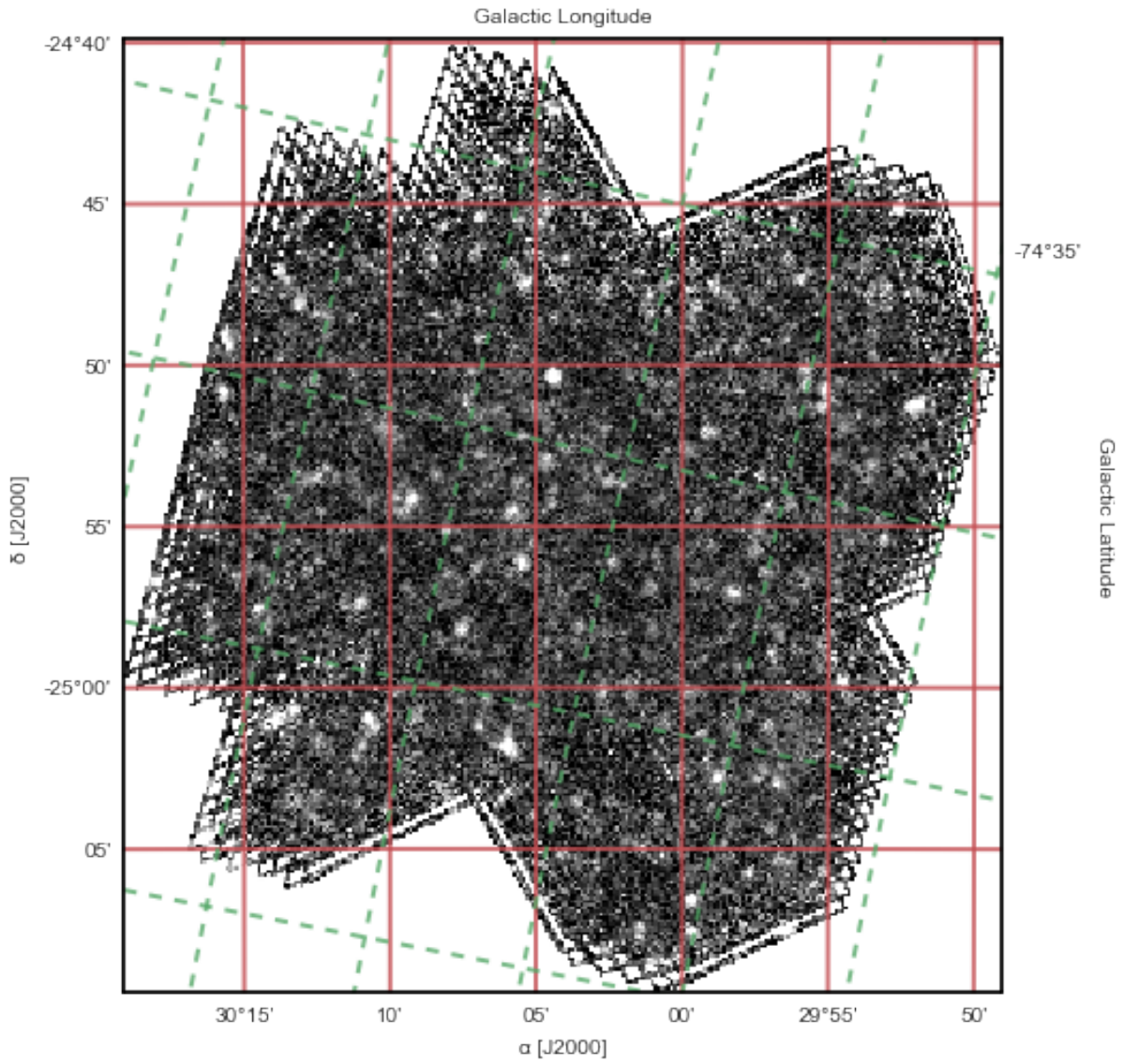
```
In [11]: fig, ax = P.subplots()
         ax.imshow(ima, cmap='viridis', origin='lower', interpolation='None', vmin=-2e-2, vmax=5e-2)
         ax.set_xlabel("x [px]")
         ax.set_ylabel("y [px]")
         ax.set_title(filename);
```



Il est possible d'ajouter d'autres système de coordonnées via WCS.

Attention : requiert WCSaxes, qui n'est pas encore intégré d'office dans `astropy`.

```
In [12]: import astropy.visualization as VIZ
         from astropy.visualization.mpl_normalize import ImageNormalize

         fig = P.figure(figsize=(8, 8))
         ax = fig.add_subplot(1, 1, 1, projection=wcs)

         # 10th and 99th percentiles
         vmin, vmax = VIZ.AsymmetricPercentileInterval(10, 99).get_limits(ima)
         # Linear normalization
         norm = ImageNormalize(vmin=vmin, vmax=vmax, stretch=VIZ.LinearStretch())

         ax.imshow(ima, cmap='gray', origin='lower', interpolation='None', norm=norm)

         # Coordonnées équatoriales en rouge
         ax.coords['ra'].set_axislabel(u'α [J2000]')
         ax.coords['dec'].set_axislabel(u'δ [J2000]')

         ax.coords['ra'].set_ticks(color='r')
         ax.coords['dec'].set_ticks(color='r')

         ax.coords.grid(color='r', ls='-', lw=2)

         # Coordonnées galactiques en vert
         overlay = ax.get_coords_overlay('galactic')

         overlay['l'].set_axislabel('Galactic Longitude')
         overlay['b'].set_axislabel('Galactic Latitude')

         overlay['l'].set_ticks(color='g')
         overlay['b'].set_ticks(color='g')

         overlay.grid(color='g', ls='--', lw=2)
```



Tables

Outre les tables FITS, `astropy` permet lire et écrire des Tables dans de nombreux formats ASCII usuels en astronomie (LaTeX, HTML, CDS, SExtractor, etc.).

Le fichier ASCII de test est disponible ici : sources.dat

```
In [13]: from astropy.io import ascii

         catalog = ascii.read('sources.dat')
         catalog.info()
```

```
<Table length=167>
    name      dtype
----------- -------
         ra float64
        dec float64
          x float64
          y float64
   raPlusErr float64
  decPlusErr float64
  raMinusErr float64
```

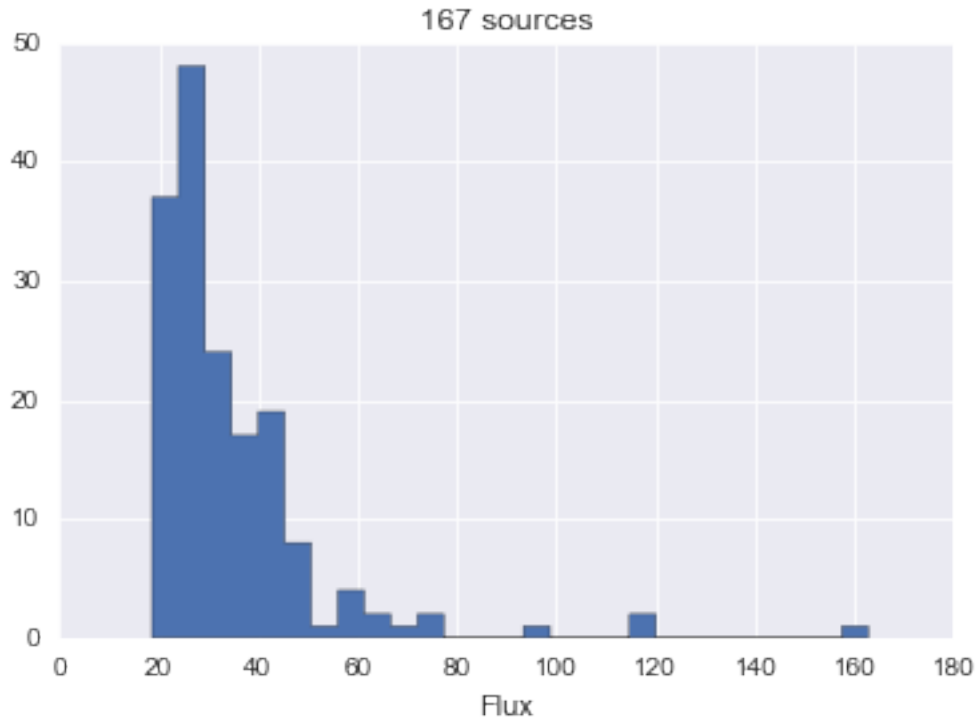
```
 decMinusErr float64
    xPlusErr float64
    yPlusErr float64
   xMinusErr float64
   yMinusErr float64
        flux float64
 fluxPlusErr float64
fluxMinusErr float64
  background float64
   bgPlusErr float64
  bgMinusErr float64
     quality float64

/usr/local/lib/python2.7/dist-packages/astropy/table/column.py:263: FutureWarning: elementwise comparison faile
  return self.data.__eq__(other)
/usr/local/lib/python2.7/dist-packages/astropy/table/info.py:93: UnicodeWarning: Unicode equal comparison faile
  if np.all(info[name] == ''):
```

In [14]:
```
catalog.sort('flux')  # Ordonne les sources par 'flux' croissant
catalog.reverse()     # Ordonne les sources par 'flux' décroissant

#catalog.show_in_notebook(display_length=5)
catalog[:5]           # Les 5 sources les plus brillantes du catalogue
```

Out[14]:
```
<Table length=5>
      ra           dec             x        ...    bgMinusErr       quality
   float64       float64        float64     ...     float64         float64
------------ -------------- ------------- ... ---------------- -------------
30.0736543481 -24.8389847181 133.076596062 ... 0.00280563968109 24.0841967062
30.0997563127  -25.030193106 118.886083699 ... 0.00310958937187 16.5084425251
30.2726211379 -25.0771584874 24.9485847511 ... 0.00603800958334 6.67900541976
29.8763509609 -24.7518860739 240.583543382 ... 0.00466051306854 9.08251222505
29.8668948822 -24.8539846811 245.642862323 ... 0.00330155226713 8.43689223988
```

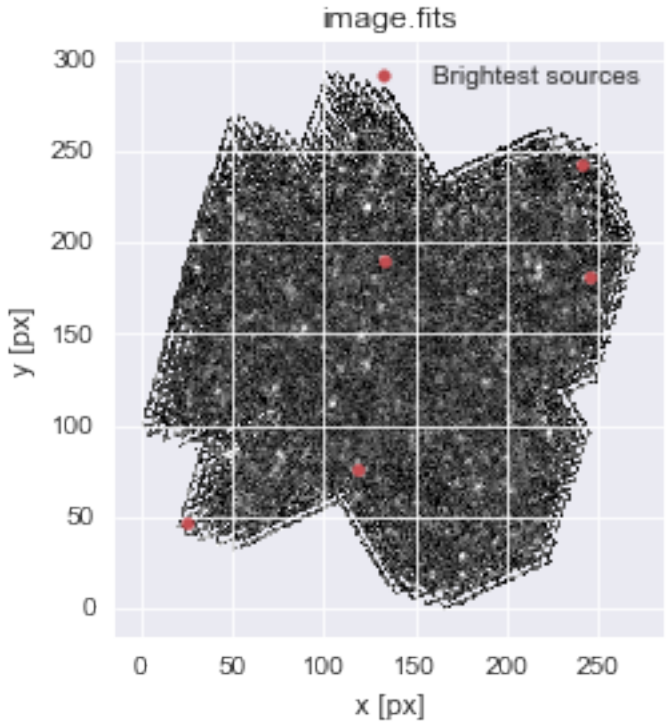
Histogramme des flux, avec choix automatique du nombre de *bins* :

In [15]:
```
import astropy.visualization as VIZ

fig, ax = P.subplots()
VIZ.hist(catalog['flux'], bins='freedman', ax=ax, histtype='stepfilled')
ax.set(xlabel="Flux", title="%d sources" % len(catalog));
```



Après conversion des coordonnées RA-Dec de la table en coordonnées, on peut superposer la position des 5 sources les plus brillantes du catalogue à l'image précédente :

```
In [16]: fig, ax = P.subplots()
         ax.imshow(ima, cmap='gray', origin='lower', interpolation='None', vmin=-2e-2, vmax=5e-2)
         ax.set(xlabel="x [px]", ylabel="y [px]", title=filename)

         x, y = wcs.wcs_world2pix(catalog['ra'][:5], catalog['dec'][:5], 0)
         ax.scatter(x, y, color='r', label="Brightest sources")
         ax.legend();
```



Quantités et unités

Astropy permet de définir des Quantités *dimensionnées* et de gérer les conversions d'unités.

```
In [17]: from astropy import units as U
         from astropy import constants as K

         print("Vitesse de la lumière: {} = {}".format(K.c, K.c.to("Mpc/Ga")))
```

```
Vitesse de la lumière: 299792458.0 m / s = 306.601393788 Mpc / Ga
```

```
In [18]: H0 = 70 * U.km / U.s / U.Mpc
         print ("H0 = {} = {} = {} = {}".format(H0, H0.to("nm/(a*km)"), H0.to("Mpc/(Ga*Gpc)"), H0.decompose()))
```

```
H0 = 70.0 km / (Mpc s) = 71.5898515538 nm / (a km) = 71.5898515538 Mpc / (Ga Gpc) = 2.26854550263e-18 1 / s
```

```
In [19]: l = 100 * U.micron
         print("{} = {}".format(l, l.to(U.GHz, equivalencies=U.spectral())))

         s = 1 * U.mJy
         print ("{} = {} à {}".format(s, s.to('erg/(cm**2 * s * angstrom)',
                                               equivalencies=U.spectral_density(1 * U.micron)), 1 * U.micron))
```

```
100.0 micron = 2997.92458 GHz
1.0 mJy = 2.99792458e-16 erg / (Angstrom cm2 s) à 1.0 micron
```

Calculs cosmologiques

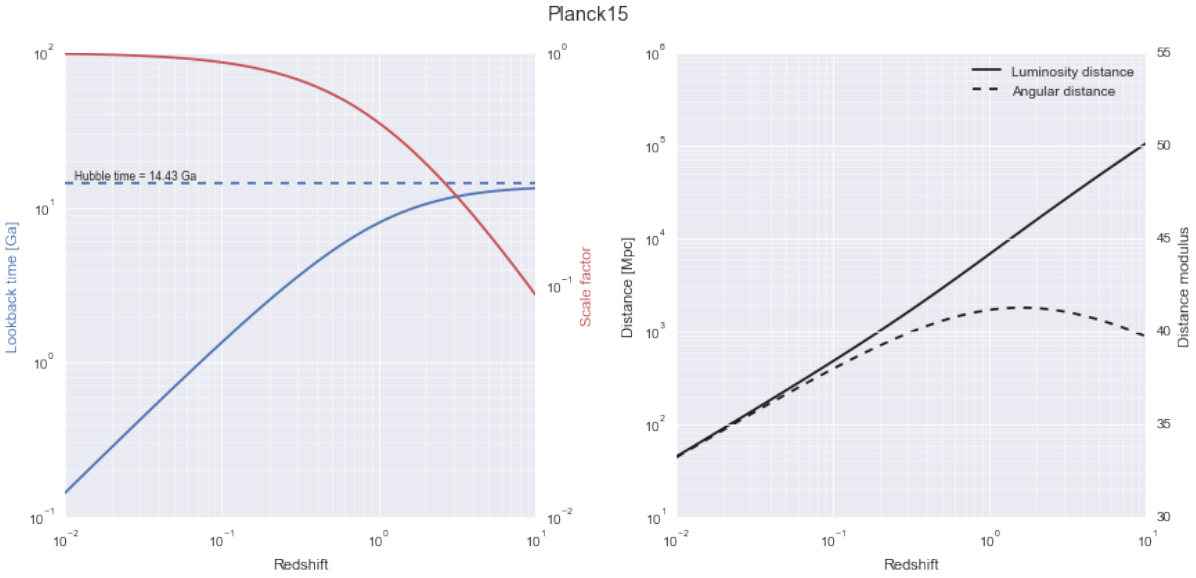
Astropy permet des calculs de base de cosmologie.

```
In [20]: from astropy.cosmology import Planck15 as cosmo
         print(cosmo)
```

```
FlatLambdaCDM(name="Planck15", H0=67.7 km / (Mpc s), Om0=0.307, Tcmb0=2.725 K, Neff=3.05, m_nu=[ 0.    0.    0.
```

```
In [21]: z = N.logspace(-2, 1, 100)

         fig = P.figure(figsize=(14, 6))

         # Ax1: lookback time
         ax1 = fig.add_subplot(1, 2, 1,
                               xlabel="Redshift", xscale='log')
         ax1.plot(z, cosmo.lookback_time(z), 'b-')
         ax1.set_ylabel("Lookback time [Ga]", color='b')
         ax1.set_yscale('log')

         ax1.xaxis.set_minor_locator(P.matplotlib.ticker.LogLocator(subs=range(2,10)))
         ax1.yaxis.set_minor_locator(P.matplotlib.ticker.LogLocator(subs=range(2,10)))
         ax1.grid(which='minor', color='w', linewidth=0.5)

         # En parallèle: facteur d'échelle
         ax1b = ax1.twinx()
         ax1b.plot(z, cosmo.scale_factor(z), 'r-')
         ax1b.set_ylabel("Scale factor", color='r')
         ax1b.set_yscale('log')
         ax1b.grid(False)

         ht = (1/cosmo.H0).to('Ga')  # Hubble time
         ax1.axhline(ht.value, c='b', ls='--')
         ax1.annotate("Hubble time = {:.2f}".format(ht), (z[1], ht.value), (3,3),
                      textcoords='offset points', size='small');

         # Ax2: distances de luminosité et angulaire
         ax2 = fig.add_subplot(1, 2, 2,
```

```
                        xlabel="Redshift", xscale='log')
ax2.plot(z, cosmo.luminosity_distance(z), 'k-', label="Luminosity distance")
ax2.plot(z, cosmo.angular_diameter_distance(z), 'k--', label="Angular distance")
ax2.set_ylabel("Distance [Mpc]")
ax2.set_yscale('log')
ax2.legend()

ax2.xaxis.set_minor_locator(P.matplotlib.ticker.LogLocator(subs=range(2,10)))
ax2.yaxis.set_minor_locator(P.matplotlib.ticker.LogLocator(subs=range(2,10)))
ax2.grid(which='minor', color='w', linewidth=0.5)

# En parallèle, module de distance
ax2b = ax2.twinx()
ax2b.plot(z, cosmo.distmod(z), 'k-', visible=False)  # Just to get the scale
ax2b.set_ylabel("Distance modulus")

fig.subplots_adjust(wspace=0.3)
fig.suptitle(cosmo.name, fontsize='x-large');
```



CHAPITRE 14

Pokémon Go ! (pandas & seaborn)

Voici un exemple d'utilisation des libraries Pandas (manipulation de données hétérogène) et Seaborn (visualisations statistiques), sur le Pokémon dataset d'Alberto Barradas.

Références :

— Visualizing Pokémon Stats with Seaborn
— Pokemon Stats Analysis And Visualizations

```
In [1]: from __future__ import division, print_function

        import pandas as PD
        import seaborn as SNS
        import matplotlib.pyplot as P

        %matplotlib inline
```

Lecture et préparation des données

Pandas fournit des méthodes de lecture des données à partir de nombreux formats, dont les données *Comma Separated Values* :

```
In [2]: df = PD.read_csv('./Pokemon.csv', index_col='Name')  # Indexation sur le nom (unique)
        df.info()                                           # Informations générales
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
Index: 800 entries, Bulbasaur to Volcanion
Data columns (total 12 columns):
#             800 non-null int64
Type 1        800 non-null object
Type 2        414 non-null object
Total         800 non-null int64
HP            800 non-null int64
Attack        800 non-null int64
Defense       800 non-null int64
Sp. Atk       800 non-null int64
Sp. Def       800 non-null int64
Speed         800 non-null int64
Generation    800 non-null int64
Legendary     800 non-null bool
```

```
dtypes: bool(1), int64(9), object(2)
memory usage: 75.8+ KB
```

Les premières lignes du DataFrame (tableau 2D) qui en résulte :

```
In [3]: df.head(10)  # Les 10 premières lignes
```

```
Out[3]: # Type 1  Type 2  Total  HP  Attack  Defense  \
        Name
        Bulbasaur                  1  Grass  Poison    318  45      49       49
        Ivysaur                    2  Grass  Poison    405  60      62       63
        Venusaur                   3  Grass  Poison    525  80      82       83
        VenusaurMega Venusaur      3  Grass  Poison    625  80     100      123
        Charmander                 4   Fire     NaN    309  39      52       43
        Charmeleon                 5   Fire     NaN    405  58      64       58
        Charizard                  6   Fire  Flying    534  78      84       78
        CharizardMega Charizard X  6   Fire  Dragon    634  78     130      111
        CharizardMega Charizard Y  6   Fire  Flying    634  78     104       78
        Squirtle                   7  Water     NaN    314  44      48       65

                                   Sp. Atk  Sp. Def  Speed  Generation  Legendary
        Name
        Bulbasaur                       65       65     45           1      False
        Ivysaur                         80       80     60           1      False
        Venusaur                       100      100     80           1      False
        VenusaurMega Venusaur          122      120     80           1      False
        Charmander                      60       50     65           1      False
        Charmeleon                      80       65     80           1      False
        Charizard                      109       85    100           1      False
        CharizardMega Charizard X      130       85    100           1      False
        CharizardMega Charizard Y      159      115    100           1      False
        Squirtle                        50       64     43           1      False
```

Le format est ici simple :

- nom du Pokémon (utilisé comme indice) et son n° (notons que le n° n'est pas unique)
- type primaire et éventuellement secondaire *str*
- différentes caractéristiques *int* (p.ex. points de vie, niveaux d'attage et défense, vitesse, génération)
- type légendaire *bool*

Nous appliquons les filtres suivants directement sur le dataframe (`inplace=True`) :

- simplifier le nom des *mega* pokémons
- remplacer les `NaN` de la colonne "`Type 2`"
- éliminer les colonnes "#" et "Sp."

```
In [4]: df.set_index(df.index.str.replace(".*(?=Mega)", ''), inplace=True)  # Supprime la chaîne avant Mega
        df['Type 2'].fillna('', inplace=True)                              # Remplace NaN par ''
        df.drop(['#'] + [ col for col in df.columns if col.startswith('Sp.')],
                axis=1, inplace=True)   # "Laisse tomber" les colonnes commençant par 'Sp.'
        df.head()                       # Les 5 premières lignes
```

```
Out[4]: Type 1  Type 2  Total  HP  Attack  Defense  Speed  Generation  \
        Name
        Bulbasaur      Grass  Poison    318  45      49       49     45           1
        Ivysaur        Grass  Poison    405  60      62       63     60           1
        Venusaur       Grass  Poison    525  80      82       83     80           1
        Mega Venusaur  Grass  Poison    625  80     100      123     80           1
        Charmander      Fire            309  39      52       43     65           1

                      Legendary
        Name
        Bulbasaur         False
        Ivysaur           False
        Venusaur          False
        Mega Venusaur     False
        Charmander        False
```

Accès aux données

Pandas propose de multiples façons d'accéder aux données d'un DataFrame, ici :

— via le nom (indexé) :

```
In [5]: df.loc['Bulbasaur', ['Type 1', 'Type 2']]  # Seulement 2 colonnes
```

```
Out[5]: Type 1     Grass
        Type 2    Poison
        Name: Bulbasaur, dtype: object
```

— par sa position dans la liste :

```
In [6]: df.iloc[-5:, :2]  # Les 5 dernières lignes, et les 2 premières colonnes
```

```
Out[6]: Type 1 Type 2
        Name
        Diancie                 Rock  Fairy
        Mega Diancie            Rock  Fairy
        HoopaHoopa Confined  Psychic  Ghost
        HoopaHoopa Unbound   Psychic   Dark
        Volcanion               Fire  Water
```

— par une sélection booléenne, p.ex. tous les pokémons légendaires de type herbe :

```
In [7]: df[df['Legendary'] & (df['Type 1'] == 'Grass')]
```

```
Out[7]: Type 1    Type 2  Total   HP  Attack  Defense  Speed  \
        Name
        ShayminLand Forme  Grass              600  100     100      100    100
        ShayminSky Forme   Grass    Flying    600  100     103       75    127
        Virizion           Grass  Fighting    580   91      90       72    108

                           Generation  Legendary
        Name
        ShayminLand Forme           4       True
        ShayminSky Forme            4       True
        Virizion                    5       True
```

Quelques statistiques

```
In [8]: df[['Total', 'HP', 'Attack', 'Defense']].describe()  # Description statistique des différentes colonnes
```

```
Out[8]: Total          HP      Attack     Defense
        count  800.00000  800.000000  800.000000  800.000000
        mean   435.10250   69.258750   79.001250   73.842500
        std    119.96304   25.534669   32.457366   31.183501
        min    180.00000    1.000000    5.000000    5.000000
        25%    330.00000   50.000000   55.000000   50.000000
        50%    450.00000   65.000000   75.000000   70.000000
        75%    515.00000   80.000000  100.000000   90.000000
        max    780.00000  255.000000  190.000000  230.000000
```

```
In [9]: df.loc[df['HP'].argmax()] # Pokémon ayant le plus de points de vie
```

```
Out[9]: Type 1        Normal
        Type 2
        Total            540
        HP               255
        Attack            10
        Defense           10
        Speed             55
        Generation         2
        Legendary      False
        Name: Blissey, dtype: object
```

```
In [10]: df.sort_values('Speed', ascending=False).head(3)  # Les 3 pokémons plus rapides
```

```
Out[10]: Type 1  Type 2  Total  HP  Attack  Defense  Speed  \
         Name
         DeoxysSpeed Forme   Psychic            600  50      95       90    180
         Ninjask                 Bug  Flying    456  61      90       45    160
         DeoxysNormal Forme  Psychic            600  50     150       50    150

                             Generation  Legendary
         Name
         DeoxysSpeed Forme            3       True
         Ninjask                      3      False
         DeoxysNormal Forme           3       True
```

Statistiques selon le statut “légendaire” :

```
In [11]: legendary = df.groupby('Legendary')
         legendary.size()
```

```
Out[11]: Legendary
         False    735
         True      65
         dtype: int64
```

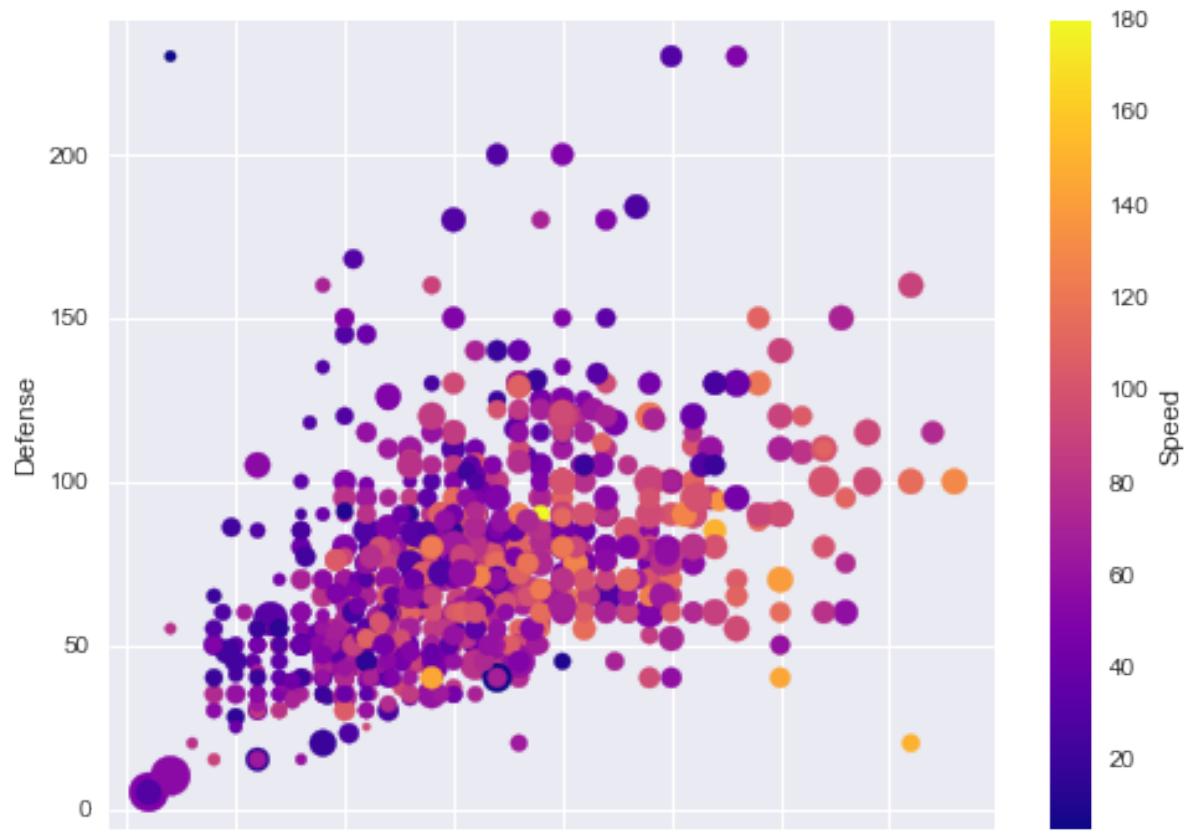
```
In [12]: legendary['Total', 'HP', 'Attack', 'Defense', 'Speed'].mean()
```

```
Out[12]: Total         HP      Attack    Defense       Speed
         Legendary
         False      417.213605  67.182313   75.669388  71.559184   65.455782
         True       637.384615  92.738462  116.676923  99.661538  100.184615
```

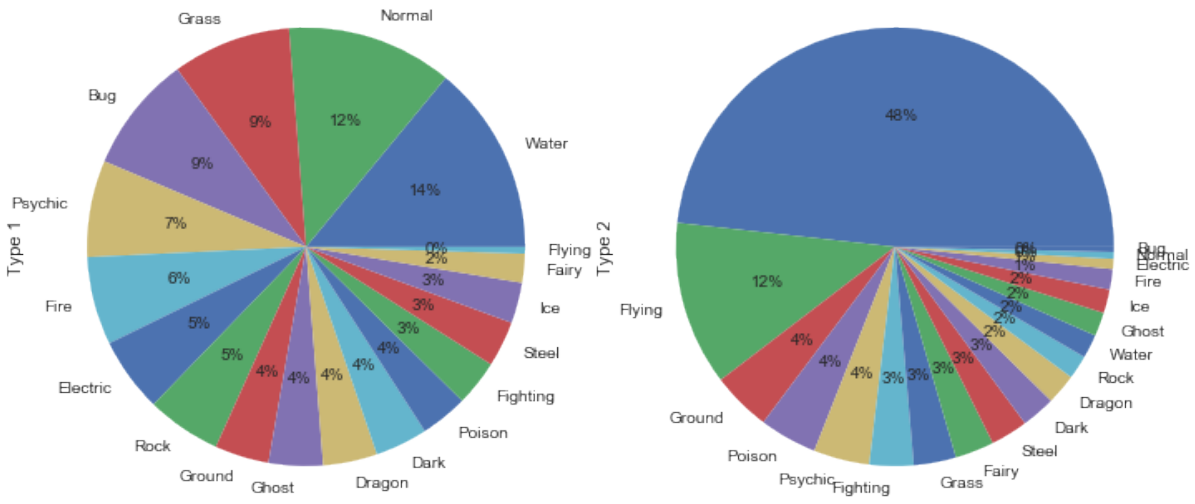
Visualisation

Pandas intègre de nombreuses fonctions de visualisation interfacées à matplotlib.

```
In [13]: ax = df.plot.scatter(x='Attack', y='Defense', s=df['HP'], c='Speed', cmap='plasma')
         ax.figure.set_size_inches((8, 6))
```




```
In [14]: fig, (ax1, ax2) = P.subplots(1, 2, subplot_kw={"aspect": 'equal'}, figsize=(10, 6))

         df['Type 1'].value_counts().plot.pie(ax=ax1, autopct='%.0f%%')
         df['Type 2'].value_counts().plot.pie(ax=ax2, autopct='%.0f%%')

         fig.tight_layout()
```

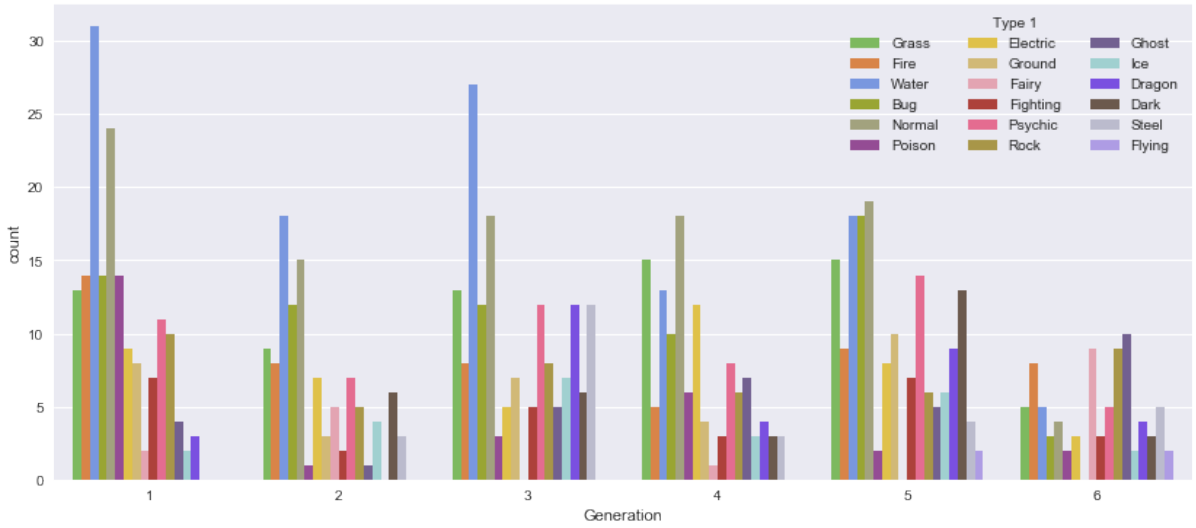


Il est également possible d'utiliser la librairie seaborn, qui s'interface naturellement avec Pandas.

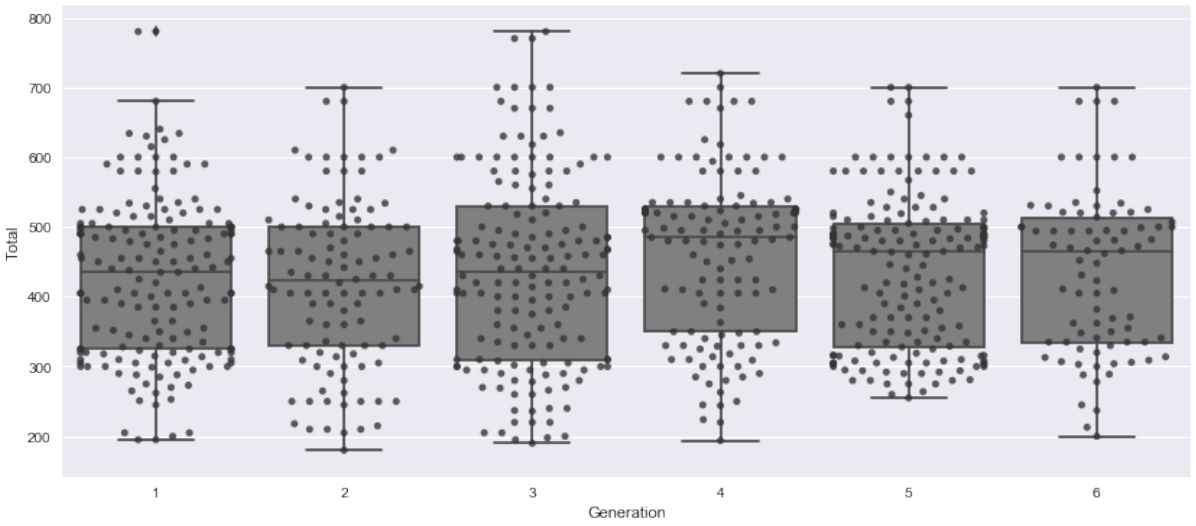
```
In [15]: pok_type_colors = {    # http://bulbapedia.bulbagarden.net/wiki/Category:Type_color_templates
           'Grass': '#78C850',
           'Fire': '#F08030',
           'Water': '#6890F0',
           'Bug': '#A8B820',
```

```
    'Normal': '#A8A878',
    'Poison': '#A040A0',
    'Electric': '#F8D030',
    'Ground': '#E0C068',
    'Fairy': '#EE99AC',
    'Fighting': '#C03028',
    'Psychic': '#F85888',
    'Rock': '#B8A038',
    'Ghost': '#705898',
    'Ice': '#98D8D8',
    'Dragon': '#7038F8',
    'Dark': '#705848',
    'Steel': '#B8B8D0',
    'Flying': '#A890F0',
}
```

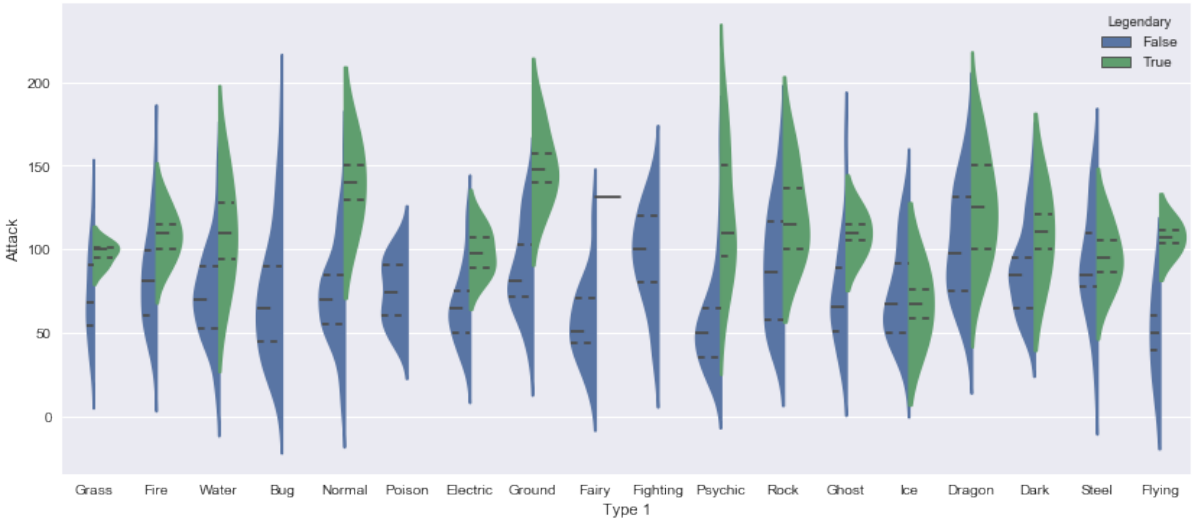
In [16]:
```
ax = SNS.countplot(x='Generation', hue='Type 1', palette=pok_type_colors, data=df)
ax.figure.set_size_inches((14, 6))
ax.legend(ncol=3, title='Type 1');
```



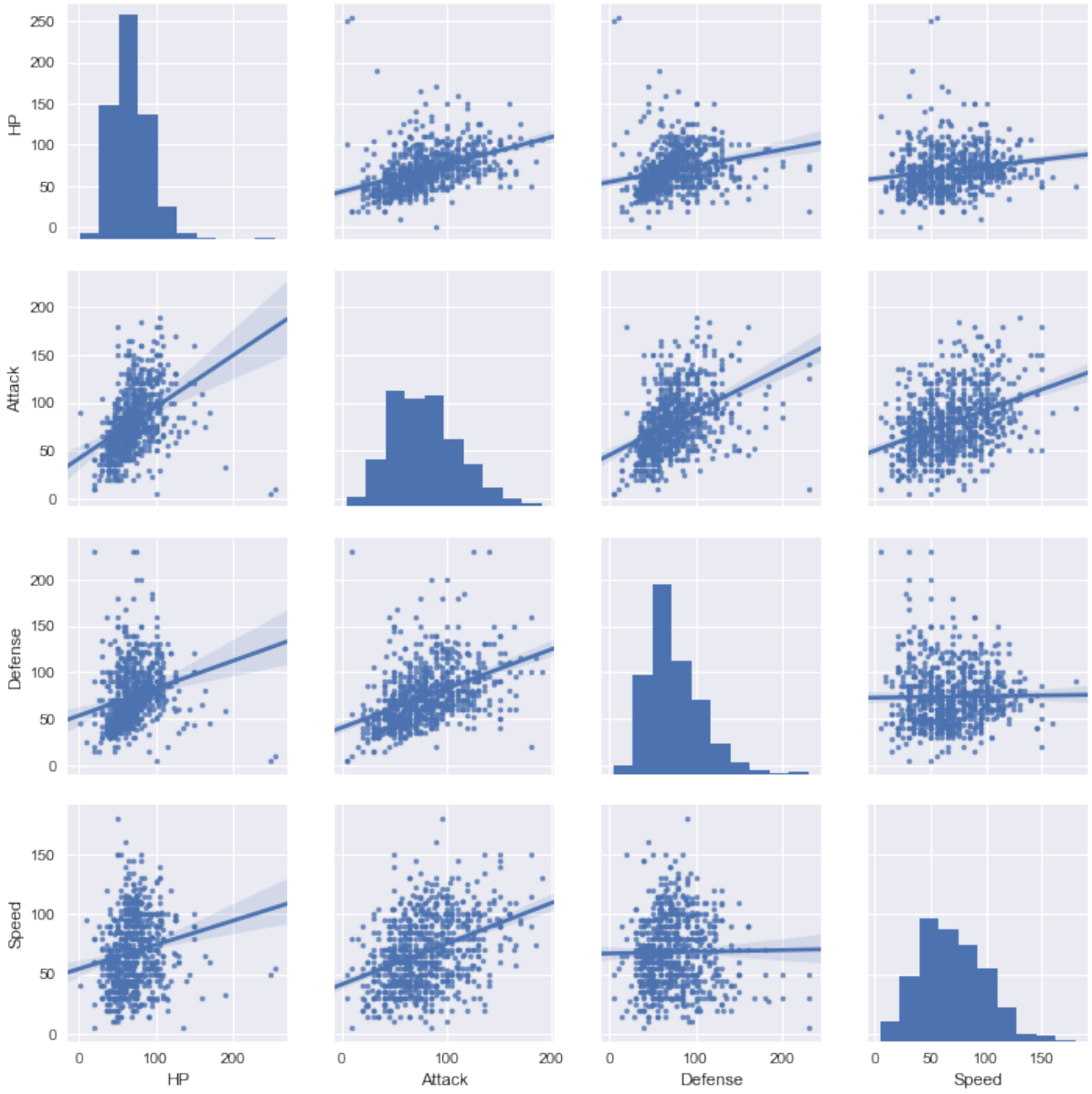
In [17]:
```
ax = SNS.boxplot(x='Generation', y='Total', data=df, color='0.5');
SNS.swarmplot(x='Generation', y='Total', data=df, color='0.2', alpha=0.8)
ax.figure.set_size_inches((14, 6))
```



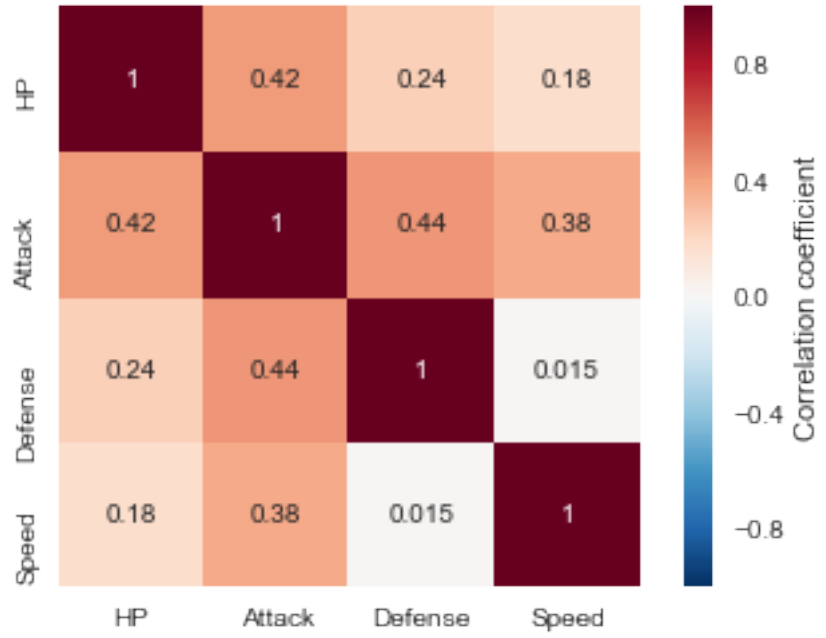
In [18]:
```
ax = SNS.violinplot(x="Type 1", y="Attack", data=df, hue="Legendary", split=True, inner='quart')
ax.figure.set_size_inches((14, 6))
```




```
In [19]: df2 = df.drop(['Total', 'Generation', 'Legendary'], axis=1)
         SNS.pairplot(df2, markers='.', kind='reg');
```



```
In [20]: ax = SNS.heatmap(df2.corr(), annot=True,
                          cmap='RdBu_r', center=0, cbar_kws={'label': 'Correlation coefficient'})
         ax.set_aspect('equal')
```




```
In [21]: SNS.factorplot(x='Generation', y='Attack', data=df,
                         hue='Type 1', palette=pok_type_colors, col='Type 1', col_wrap=3, kind='swarm');
```


Type 1 = Grass
Type 1 = Fire
Type 1 = Water
Type 1 = Bug
Type 1 = Normal
Type 1 = Poison
Type 1 = Electric
Type 1 = Ground
Type 1 = Fairy
Type 1 = Fighting
Type 1 = Psychic
Type 1 = Rock
Type 1 = Ghost
Type 1 = Ice
Type 1 = Dragon
Type 1 = Dark
Type 1 = Steel
Type 1 = Flying
Attack
0
25
50
75
100
125
150
175
200

CHAPITRE 15

Méthode des rectangles

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2014-09-17 19:30:18 ycopin>

# Division réelle de type Python 3 - ligne admise
from __future__ import division

"""
Définition de la fonction carré et calcul de son intégrale entre 0
et 1 dans le main par la méthode des rectangles (subdivision en 100
pas)
"""

__author__ = "Adrien Licari <adrien.licari@ens-lyon.fr>"

# Définition de la fonction sq, admise au stade du TD 1


def sq(x):
    return x * x

# Début du programme principal (main)

# On définit les bornes d'intégration a et b, le nombre de pas n
a = 0
b = 1
n = 100

# Largeur des rectangles dx
h = (b - a) / n      # Division réelle!

integ = 0         # Cette variable accumulera les aires des rectangles

# On sait déjà que l'on va calculer n aires de rectangles, donc une
# boucle for est appropriée
for i in range(n):            # Boucle de 0 à n-1
    x = a + (i + 0.5) * h         # Abscisse du rectangle
    integ += sq(x) * h        # On ajoute au total l'aire du rectangle

```

```
40 print "Intégrale de x**2 entre a =", a, "et b =", b, "avec n =", n
41 # On affiche le résultat numérique
42 print "Résultat numérique: ", integ
43 theorie = (b ** 3 - a ** 3) / 3                    # Résultat analytique
44 # On affiche le résultat analytique
45 print "Résultat analytique:", theorie
46 print "Erreur relative:", (integ / theorie - 1)  # On affiche l'erreur
```

```
$ python integ.py

Intégrale de x**2 entre a = 0 et b = 1 avec n = 100
Résultat numérique:  0.333325
Résultat analytique: 0.333333333333
Erreur relative: -2.49999999998e-05
```

Source : integ.py

CHAPITRE 16

Fizz Buzz

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2017-05-28 21:42 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>

"""
Jeu du Fizz Buzz
"""

__author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"


for i in range(1, 100):                     # Entiers de 1 à 99
    if ((i % 3) == 0) and ((i % 5) == 0):   # Multiple de 3 et 5
        print 'Fizz Buzz!',                 # Affichage sans retour à la ligne
    elif ((i % 3) == 0):                    # Multiple de 3 uniquement
        print 'Fizz!',
    elif ((i % 5) == 0):                    # Multiple de 5 uniquement
        print 'Buzz!',
    else:
        print i,
```

```
$ python fizz.py

1 2 Fizz! 4 Buzz! Fizz! 7 8 Fizz! Buzz! 11 Fizz! 13 14 Fizz Buzz! 16...
```

Source : `fizz.py`

CHAPITRE 17

Algorithme d'Euclide

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2014-09-17 18:25:00 ycopin>

"""
Calcul du PGCD de deux entiers
"""

__author__ = "Adrien Licari <adrien.licari@ens-lyon.fr>"

# Entiers dont on calcule le PGCD
a = 306
b = 756

# Test usuels : les nombres sont bien positifs et a > b
assert a > 0
assert b > 0
if (a < b):
    a, b = b, a                   # Interversion

a0, b0 = a, b                     # On garde une copie des valeurs originales

# On boucle jusqu'à ce que le reste soit nul, d'où la boucle while. Il
# faut etre sur que l'algorithme converge dans tous les cas!
while (b != 0):
    # On remplace a par b et b par le reste de la division euclidienne
    # de a par b
    a, b = b, a % b

print 'Le PGCD de', a0, 'et', b0, 'vaut', a  # On affiche le résultat
# Vérifications
print a0 // a, 'x', a, '=', (a0 // a * a)  # a//b: division euclidienne
print b0 // a, 'x', a, '=', (b0 // a * a)
```

```
$ python pgcd.py

Le PGCD de 756 et 306 vaut 18
42 x 18 = 756
17 x 18 = 306
```

Source : `pgcd.py`

CHAPITRE 18

Crible d'Ératosthène

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

"""
Crible d'Ératosthène.

Source: http://fr.wikibooks.org/wiki/Exemples_de_scripts_Python#Implémentation_du_crible_d'Ératosthène
"""

__author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"

# start-sys
# Gestion simplifiée d'un argument entier sur la ligne de commande
import sys

if sys.argv[1:]:  # Présence d'au moins un argument sur la ligne de commande
    try:
        n = int(sys.argv[1])  # Essayer de lire le 1er argument comme un entier
    except ValueError:
        raise ValueError("L'argument '{}' n'est pas un entier"
                         .format(sys.argv[1]))
else:                         # Pas d'argument sur la ligne de commande
    n = 101                   # Valeur par défaut
# end-sys

# Liste des entiers *potentiellement* premiers. Les nb non-premiers
# seront étiquetés par 0 au fur et à mesure.
l = range(n + 1)                            # <0,...,n>, 0 n'est pas premier
l[1] = 0                                    # 1 n'est pas premier

i = 2                                       # Entier à tester
while i ** 2 <= n:                          # Inutile de tester jusqu'à n
    if l[i] != 0:                           # Si i n'est pas étiqueté (=0)...
        # ...étiqueter tous les multiples de i
        l[2 * i::i] = [0] * len(l[2 * i::i])
    i += 1                                  # Passer à l'entier à tester suivant

# Afficher la liste des entiers premiers (c-à-d non-étiquetés)
```

```
39 print "Liste des entiers premiers <= {} :".format(n)
40 print [i for i in l if i != 0]
```

```
$ python crible.py

Liste des entiers premiers <= 101
[2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29, 31, 37, 41, 43, 47, 53, 59, 61, 67, 71, 73, 79, 83, 89,␣
↪97, 101]
```

Source : `crible.py`

CHAPITRE 19

Carré magique

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2014-09-24 15:58:02 ycopin>

"""
Création et affichage d'un carré magique d'ordre impair.
"""

__author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"

n = 5                                   # Ordre du carré magique

# On vérifie que l'ordre est bien impair
assert n % 2 == 1, "L'ordre {} n'est pas impair".format(n)

# Le carré sera stocké dans une liste de n listes de n entiers
# Initialisation du carré: liste de n listes de n zéros.
array = [[0 for j in range(n)] for i in range(n)]

# Initialisation de l'algorithme
i, j = n, (n + 1) / 2           # Indices de l'algo (1-indexation)
array[i - 1][j - 1] = 1       # Attention: python utilise une 0-indexation
# Boucle sur valeurs restant à inclure dans le carré (de 2 à n**2)
for k in range(2, n ** 2 + 1):
    # Test de la case i+1,j+1 (modulo n)
    i2 = (i + 1) % n
    j2 = (j + 1) % n
    if array[i2 - 1][j2 - 1] == 0:  # La case est vide: l'utiliser
        i, j = i2, j2
    # La case est déjà remplie: utiliser la case i-1,j
    else:
        i = (i - 1) % n
    array[i - 1][j - 1] = k       # Remplissage de la case

# Affichage, avec vérification des sommes par ligne et par colonne
print "Carré magique d'ordre {}:".format(n)
for row in array:
    print '  '.join('{:2d}'.format(k) for k in row), '=', sum(row)
print '  '.join('==' for k in row)
```

```
40 print '  '.join(str(sum(array[i][j] for i in range(n))) for j in range(n))
```

```
$ python carre.py

Carré magique d'ordre 5:
11  18  25   2   9 = 65
10  12  19  21   3 = 65
 4   6  13  20  22 = 65
23   5   7  14  16 = 65
17  24   1   8  15 = 65
==  ==  ==  ==  ==
65  65  65  65  65
```

Source : carre.py

CHAPITRE 20

Suite de Syracuse

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2014-09-24 17:31:53 ycopin>

__author__ = "Adrien Licari <adrien.licari@ens-lyon.fr>; Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"


def suite_syracuse(n):
    """
    Retourne la suite de Syracuse pour l'entier n.

    >>> suite_syracuse(15)
    [15, 46, 23, 70, 35, 106, 53, 160, 80, 40, 20, 10, 5, 16, 8, 4, 2, 1]
    """

    seq = [n]                       # La suite de syracuse sera complétée...
    while (seq[-1] != 1):           # ...jusqu'à tomber sur 1
        if seq[-1] % 2 == 0:        # u_n est pair
            seq.append(seq[-1] // 2)  # Division euclidienne par 2
        else:                       # u_n est impair
            seq.append(seq[-1] * 3 + 1)

    return seq


def temps_syracuse(n, altitude=False):
    """
    Calcule le temps de vol (éventuellement en altitude) de la suite
    de Syracuse pour l'entier n.

    >>> temps_syracuse(15)
    17
    >>> temps_syracuse(15, altitude=True)
    10
    """

    seq = suite_syracuse(n)
    if not altitude:            # Temps de vol total
        return len(seq) - 1
```

```
    else:                       # Temps de vol en altitude
        # Construction de la séquence en altitude
        alt = []
        for i in seq:
            if i >= n:
                alt.append(i)
            else:
                break
        return len(alt) - 1

if __name__ == '__main__':

    n = 15
    print "Suite de Syracuse pour n =", n
    print suite_syracuse(n)
    print "Temps de vol total:      ", temps_syracuse(n)
    print "Temps de vol en altitude:", temps_syracuse(n, altitude=True)
```

```
Suite de Syracuse pour n = 15
[15, 46, 23, 70, 35, 106, 53, 160, 80, 40, 20, 10, 5, 16, 8, 4, 2, 1]
Temps de vol total:       17
Temps de vol en altitude: 10
```

Source : syracuse.py

CHAPITRE 21

Flocon de Koch

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

from __future__ import division  # Pas de division euclidienne par défaut

"""
Tracé (via 'turtle') d'un flocon de Koch d'ordre arbitraire.

Dans le même genre:

- courbe de Peano (http://fr.wikipedia.org/wiki/Courbe_de_Peano)
- courbe de Hilbert (http://fr.wikipedia.org/wiki/Courbe_de_Hilbert)
- île de Gosper (http://fr.wikipedia.org/wiki/Île_de_Gosper)

Voir également:

- L-système: http://fr.wikipedia.org/wiki/L-système
- Autres exemples: http://natesoares.com/tutorials/python-fractals/
"""

__version__ = "Time-stamp: <2013-01-14 00:49 ycopin@lyopc469>"
__author__ = "Yannick Copin <y.copin@ipnl.in2p3.fr>"

import turtle as T


def koch(niveau=3, iter=0, taille=100, delta=0):
    """
    Tracé du flocon de Koch de niveau 'niveau', de taille 'taille'
    (px).

    Cette fonction récursive permet d'initialiser le flocon (iter=0,
    par défaut), de tracer les branches fractales (0<iter<=niveau) ou
    bien juste de tracer un segment (iter>niveau).
    """

    if iter == 0:                       # Dessine le triangle de niveau 0
        T.title("Flocon de Koch - niveau {}".format(niveau))
        koch(iter=1, niveau=niveau, taille=taille, delta=delta)
```

```
40          T.right(120)
41          koch(iter=1, niveau=niveau, taille=taille, delta=delta)
42          T.right(120)
43          koch(iter=1, niveau=niveau, taille=taille, delta=delta)
44      elif iter <= niveau:                  # Trace une section _/\_ du flocon
45          koch(iter=iter + 1, niveau=niveau, taille=taille, delta=delta)
46          T.left(60 + delta)
47          koch(iter=iter + 1, niveau=niveau, taille=taille, delta=delta)
48          T.right(120 + 2 * delta)
49          koch(iter=iter + 1, niveau=niveau, taille=taille, delta=delta)
50          T.left(60 + delta)
51          koch(iter=iter + 1, niveau=niveau, taille=taille, delta=delta)
52      else:                               # Trace le segment de dernier niveau
53          T.forward(taille / 3 ** (niveau + 1))
54
55  if __name__ == '__main__':
56
57      # start-argparse
58      # Exemple d'utilisation de la librairie de gestion d'arguments 'argparse'
59      import argparse
60
61      desc = u"Tracé (via 'turtle') d'un flocon de Koch d'ordre arbitraire."
62
63      # Définition des options
64      parser = argparse.ArgumentParser(description=desc)
65      parser.add_argument('ordre', nargs='?', type=int,
66                          help="Ordre du flocon, >0 [%(default)s]",
67                          default=3)
68      parser.add_argument('-t', '--taille', type=int,
69                          help="Taille de la figure, >0 [%(default)s px]",
70                          default=500)
71      parser.add_argument('-d', '--delta', type=float,
72                          help="Delta [%(default)s deg]",
73                          default=0.)
74      parser.add_argument('-f', '--figure', type=str,
75                          help="Nom de la figure de sortie (format EPS)")
76      parser.add_argument('-T', '--turbo',
77                          action="store_true", default=False,
78                          help="Mode Turbo")
79
80      # Déchiffrage des options et arguments
81      args = parser.parse_args()
82
83      # Quelques tests sur les args et options
84      if not args.ordre > 0:
85          parser.error("Ordre requis '{}' invalide".format(args.ordre))
86
87      if not args.taille > 0:
88          parser.error("La taille de la figure doit être positive")
89      # end-argparse
90
91      if args.turbo:
92          T.hideturtle()
93          T.speed(0)
94
95      # Tracé du flocon de Koch de niveau 3
96      koch(niveau=args.ordre, taille=args.taille, delta=args.delta)
97      if args.figure:
98          # Sauvegarde de l'image
99          print "Sauvegarde de la figure dans '{}'".format(args.figure)
100         T.getscreen().getcanvas().postscript(file=args.figure)
101
102     T.exitonclick()
```

Source : `koch.py`

CHAPITRE 22

Jeu du plus ou moins

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

import random

nmin, nmax = 1, 100
nsol = random.randint(nmin, nmax)

print "Vous devez deviner un nombre entre {} et {}.".format(nmin, nmax)
ncoups = 0
try:
    while True:
        proposition = raw_input("Votre proposition: ")
        try:
            ntest = int(proposition)
            if not nmin <= ntest <= nmax:
                raise ValueError("Proposition invalide")
        except ValueError:
            print "Votre proposition {!r} n'est pas un entier " \
                "compris entre {} et {}.".format(proposition, nmin, nmax)
            continue
        ncoups += 1
        if nsol > ntest:
            print "C'est plus."
        elif nsol < ntest:
            print "C'est moins."
        else:
            print "Vous avez trouvé en {} coup{}!".format(
                ncoups, 's' if ncoups > 1 else '')
            break  # Interrompt la boucle while
except (KeyboardInterrupt, EOFError):  # Interception de Ctrl-C et Ctrl-D
    print "\nVous abandonnez après seulement {} coup{}!".format(
        ncoups, 's' if ncoups > 1 else '')
```

Source : pm.py

CHAPITRE 23

Animaux

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

import pytest                    # Module (non-standard) de tests


class Animal(object):  # *object* est la classe dont dérivent toutes les autres

    """
    Classe définissant un `Animal`, caractérisé par son nom et son
    poids.
    """

    def __init__(self, nom, masse):
        """
        Méthode d'instanciation à partir d'un nom (str) et d'un poids (float).
        """

        # Ici, convertir les paramètres pour être sûr qu'il ont le bon
        # type. On utilisera `str` et `float`
        self.nom = str(nom)
        self.masse = float(masse)

        self.vivant = True       # Les animaux sont vivant à l'instantiation
        self.empoisonne = False  # Animal empoisonné?

    def __str__(self):
        """
        Surcharge de l'opérateur `str`: l'affichage *informel* de l'objet
        dans l'interpréteur, p.ex. `print self` sera résolu comme
        `self.__str__()`

        Retourne une chaîne de caractères.
        """

        return "{a.nom} ({a.masse:.1f} kg)".format(a=self)

    def estVivant(self):
        """Méthode booléenne, vraie si l'animal est vivant."""
```

```
40
41          return self.vivant
42
43      def mourir(self):
44          """Change l'état interne de l'objet (ne retourne rien)."""
45
46          self.vivant = False
47
48      def __cmp__(self, other):
49          """
50          Surcharge des opérateurs de comparaison, sur la base de la masse
51          des animaux.
52          """
53
54          return cmp(self.masse, other.masse)
55
56      def __call__(self, other):
57          """
58          Surcharge de l'opérateur '()' pour manger un autre animal (qui
59          meurt s'il est vivant) et prendre du poids (mais pas plus que
60          la masse de l'autre ou 10% de son propre poids).  Attention aux
61          animaux empoisonnés!
62
63          L'instruction `self(other)` sera résolue comme
64          `self.__call__(other).
65          """
66
67          other.mourir()
68          poids = min(other.masse, self.masse * 0.1)
69          self.masse += poids
70          other.masse -= poids
71          if other.empoisonne:
72              self.mourir()
73
74
75  class Chien(Animal):
76
77      """
78      Un `Chien` hérite de `Animal` avec des méthodes additionnelles
79      (p.ex. l'aboyement et l'odorat).
80      """
81
82      def __init__(self, nom, masse=20, odorat=0.5):
83          """Définit un chien plus ou moins fin limier."""
84
85          # Initialisation de la classe parente
86          Animal.__init__(self, nom, masse)
87
88          # Attribut propre à la classe dérivée
89          self.odorat = float(odorat)
90
91      def __str__(self):
92
93          return "{a.nom} (Chien, {a.masse:.1f} kg)".format(a=self)
94
95      def aboyer(self):
96          """Une méthode bien spécifique aux chiens."""
97
98          print("Ouaf ! Ouaf !")
99
100     def estVivant(self):
101         """Quand on vérifie qu'un chien est vivant, il aboie."""
102
```

```
        vivant = Animal.estVivant(self)

        if vivant:
            self.aboyer()

        return vivant

# start-tests


def test_empty_init():
    with pytest.raises(TypeError):
        Animal()


def test_wrong_init():
    with pytest.raises(ValueError):
        Animal('Youki', 'lalala')


def test_init():
    youki = Animal('Youki', 600)
    assert youki.masse == 600
    assert youki.vivant
    assert youki.estVivant()
    assert not youki.empoisonne
# end-tests


def test_str():
    youki = Animal('Youki', 600)
    assert str(youki) == 'Youki (600.0 kg)'


def test_mort():
    youki = Animal('Youki', 600)
    assert youki.estVivant()
    youki.mourir()
    assert not youki.estVivant()


def test_lt():
    medor = Animal('Medor', 600)
    kiki = Animal('Kiki', 20)
    assert kiki < medor
    with pytest.raises(AttributeError):
        medor < 1


def test_mange():
    medor = Animal('Medor', 600)
    kiki = Animal('Kiki', 20)
    medor(kiki)                 # Médor mange Kiki
    assert medor.estVivant()
    assert not kiki.estVivant()
    assert kiki.masse == 0
    assert medor.masse == 620
    kiki = Animal("Kiki Jr.", 20)
    kiki(medor)                 # Kiki Jr. mange Médor
    assert not medor.estVivant()
    assert kiki.estVivant()
    assert kiki.masse == 22
    assert medor.masse == 618   # Médor a perdu du poids en se faisant manger!
```

```
166
167
168 def test_init_chien():
169     medor = Chien('Medor', 600)
170     assert isinstance(medor, Animal)
171     assert isinstance(medor, Chien)
172     assert medor.odorat == 0.5
173     assert str(medor) == 'Medor (Chien, 600.0 kg)'
174     assert medor.estVivant()
```

```
========================== test session starts ===========================
platform linux2 -- Python 2.7.6 -- py-1.4.24 -- pytest-2.6.2
collected 8 items

animauxSol.py ........

======================== 8 passed in 0.04 seconds ========================
```

Source : animauxSol.py

CHAPITRE 24

Particules

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2014-09-04 16:56:47 alicari>


from __future__ import division  # division réelle de type python 3, admis
import pytest                    # pytest importé pour les tests unitaires
import math

"""
Définition d'une classe point matériel, avec sa masse,
sa position et sa vitesse, et des méthodes pour le déplacer.
Le main test applique cela à un problème à force centrale
gravitationnel ou électrostatique.
Remarque : toutes les unités ont été choisies adimensionnées.
"""

__author__ = "Adrien Licari <adrien.licari@ens-lyon.fr>"


# Un critère pour déterminer l'égalité entre réels
tolerance = 1e-8


################################################################################
### Définition de la classe Vector, utile pour la position et la vitesse. ###
################################################################################

class Vector(object):

    """
    Une classe-structure simple contenant 3 coordonées.
    Une méthode est disponible pour en calculer la norme et
    une surcharge des opérateurs ==, !=, +, - et * est proposée.
    """

    def __init__(self, x=0, y=0, z=0):
        """
        Constructeur de la classe vector.
```

```
        Par défaut, construit le vecteur nul.

        Args:
                x,y,z(float): Les composantes du vecteur à construire.

        Raises:
                TypeError en cas de composantes non réelles
        """
        try:
            self.x = float(x)
            self.y = float(y)
            self.z = float(z)
        except (ValueError, TypeError, AttributeError):
            raise TypeError("The given coordinates must be numbers")

    def __str__(self):
        """
        Surcharge de l'opérateur `str`.

        Returns :
                "(x,y,z)" with 2 decimals
        """
        return "({:.2f},{:.2f},{:.2f})".format(self.x, self.y, self.z)

    def __eq__(self, other):
        """
        Surcharge de l'opérateur `==` pour tester l'égalité
        entre deux vecteurs.

        Args :
                other(Vector): Un autre vecteur

        Raises :
                TypeError si other n'est pas un objet Vector
        """
        try:
            return abs(self.x - other.x) < tolerance and \
                abs(self.y - other.y) < tolerance and \
                abs(self.z - other.z) < tolerance
        except (ValueError, TypeError, AttributeError):
            raise TypeError("Tried to compare Vector and non-Vector objects")

    def __ne__(self, other):
        """
        Surcharge de l'opérateur `!=` pour tester l'inégalité
        entre deux vecteurs.

        Args :
                other(Vector): Un autre vecteur

        Raises :
                TypeError si other n'est pas un objet Vector
        """
        return not self == other

    def __add__(self, other):
        """
        Surcharge de l'opérateur `+` pour les vecteurs.

        Args :
                other(Vector): Un autre vecteur

        Raises :
```

```
                TypeError si other n'est pas un objet Vector
        """
        try:
            return Vector(self.x + other.x, self.y + other.y, self.z + other.z)
        except (ValueError, TypeError, AttributeError):
            raise TypeError("Tried to add Vector and non-Vector objects")

    def __sub__(self, other):
        """
        Surcharge de l'opérateur `-` pour les vecteurs.

        Args :
                other(Vector): Un autre vecteur

        Raises :
                TypeError si other n'est pas un objet Vector
        """
        try:
            return Vector(self.x - other.x, self.y - other.y, self.z - other.z)
        except (ValueError, TypeError, AttributeError):
            raise TypeError("Tried to substract Vector and non-Vector objects")

    def __mul__(self, number):
        """
        Surcharge de l'opérateur `*` pour la multiplication entre
        un vecteur et un nombre.

        Args :
                number(float): Un nombre à multiplier par le Vector.

        Raises :
                TypeError si other n'est pas un nombre
        """
        try:
            return Vector(number * self.x, number * self.y, number * self.z)
        except (ValueError, TypeError, AttributeError):
            raise TypeError("Tried to multiply Vector and non-number objects")

    __rmul__ = __mul__  # Ligne pour autoriser la multiplication à droite

    def norm(self):
        """
        Calcul de la norme 2 d'un vecteur.

        Returns :
                sqrt(x**2 + y**2 + z**2)
        """
        return (self.x ** 2 + self.y ** 2 + self.z ** 2) ** (1 / 2)

    def clone(self):
        """
        Méthode pour construire un nouveau Vecteur, copie de self.
        """
        return Vector(self.x, self.y, self.z)


################################################
##### Quelques test pour la classe Vector #####
################################################

def test_VectorInit():
    with pytest.raises(TypeError):
        vec = Vector('Test', 'avec', 'strings')
```

```
        vec = Vector(Vector())
        vec = Vector([])
    vec = Vector(0, -53.76, math.pi)
    assert vec.x == 0
    assert vec.y == -53.76
    assert vec.z == math.pi


def test_VectorStr():
    vec = Vector(0, 600, -2)
    assert str(vec) == '(0.00,600.00,-2.00)'


def test_VectorEq():  # teste aussi l'opérateur !=
    vec = Vector(2, 3, -5)
    vec2 = Vector(2, 3, -4)
    assert vec != vec2
    assert vec != Vector(0, 3, -5)
    with pytest.raises(TypeError):
        Vector(2, 1, 4) == "Testing strings"
        Vector(2, 1, 4) == 42
        Vector(2, 1, 4) == ['list']


def test_VectorAdd():
    vec = Vector(2, 3, -5)
    vec2 = Vector(2, -50, 5)
    assert (vec + vec2) == Vector(4, -47, 0)


def test_VectorSub():
    vec = Vector(1, -7, 9)
    vec2 = Vector()
    assert (vec - vec) == Vector()
    assert (vec - vec2) == vec


def test_VectorMul():
    vec = Vector(1, -7, 9) * 2
    vec2 = 6 * Vector(1, -1, 2)
    assert vec == Vector(2, -14, 18)
    assert vec2 == Vector(6, -6, 12)


def test_VectorNorm():
    assert Vector().norm() == 0
    assert Vector(1, 0, 0).norm() == 1
    assert Vector(2, -5, -4).norm() == 45 ** (1 / 2)


def test_VectorClone():
    vec = Vector(3, 2, 9)
    vec2 = vec.clone()
    assert vec == vec2
    vec2.x = 1
    assert vec != vec2


############################################################
##### Une classe point matériel qui se gère en interne #####
############################################################

class Particle(object):
```

```
    """
    La classe Particle représente un point matériel doté d'une masse,
    d'une position et d'une vitesse. Elle possède également une méthode
    pour calculer la force gravitationnelle exercée par une autre particule.
    Enfin, la méthode update lui permet de mettre à jour sa position et
    sa vitesse en fonction des forces subies.
    """

    def __init__(self, mass=1, position=Vector(), speed=Vector()):
        """
        Le constructeur de la classe Particle.
        Définit un point matériel avec une position et une vitesse initiales.

        Args :
                mass(float): La masse de la particule (doit être
                        strictement positive)
                position(Vector): La position initiale de la particule
                speed(Vector): La vitesse initiale de la particule

        Raises :
                TypeError si la masse n'est pas un nombre, ou si la position ou
                        la vitesse ne sont pas des Vector
                ValueError si la masse est négative ou nulle
        """
        try:
            self.mass = float(mass)
            self.position = position.clone()
            self.speed = speed.clone()
        except (ValueError, TypeError, AttributeError):
            raise TypeError("The mass must be a positive float number. "
                            "The position and speed must Vector objects.")
        try:
            assert mass > 0  # une masse négative ou nulle pose des problèmes
        except AssertionError:
            raise ValueError("The mass must be strictly positive")
        self.force = Vector()

    def __str__(self):
        """
        Surcharge de l'opérateur `str`.

        Returns :
                "Particle with mass m, position (x,y,z) and speed (vx,vy,vz)"
                        with 2 decimals
        """
        return "Particle with mass {:.2f}, position {} " \
            "and speed {}".format(self.mass, self.position, self.speed)

    def computeForce(self, other):
        """
        Calcule la force gravitationnelle exercée par une Particule
        other sur self.

        Args :
                other(Particle): Une autre particule, source de l'interaction

        Raises :
                TypeError si other n'est pas un objet Vector
        """
        try:
            r = self.position - other.position
            self.force = -self.mass * other.mass / r.norm() ** 3 * r
```

```
292         except AttributeError:
293             raise TypeError("Tried to compute the force created by "
294                             "a non-Particle object")
295 
296     def update(self, dt):
297         """
298         Mise à jour de la position et la vitesse au cours du temps.
299 
300         Args :
301                 dt(float): Pas de temps d'intégration.
302         """
303         try:
304             d = float(dt)
305         except (ValueError, TypeError, AttributeError):
306             raise TypeError("The integration timestep must be a number")
307         self.speed += self.force * dt * (1 / self.mass)
308         self.position += self.speed * dt
309 
310 
311 ################################################
312 ##### Des tests pour la classe Particle #####
313 ################################################
314 
315 def test_ParticleInit():
316     with pytest.raises(TypeError):
317         p = Particle("blabla")
318         p = Particle(2, position='hum')  # on vérifie less erreurs sur Vector
319         p = Particle([])
320     p = Particle(3, Vector(2, 1, 4), Vector(-1, -1, -1))
321     assert p.mass == 3
322     assert p.position == Vector(2, 1, 4)
323     assert p.speed == Vector(-1, -1, -1)
324     assert p.force == Vector()
325 
326 
327 def test_ParticleStr():
328     p = Particle(3, Vector(1, 2, 3), Vector(-1, -2, -3))
329     assert str(p) == "Particle with mass 3.00, position (1.00,2.00,3.00) " \
330         "and speed (-1.00,-2.00,-3.00)"
331 
332 
333 def test_ParticleForce():
334     p = Particle(1, Vector(1, 0, 0))
335     p2 = Particle()
336     p.computeForce(p2)
337     assert p.force == Vector(-1, 0, 0)
338     p.position = Vector(2, -3, 6)
339     p.mass = 49
340     p.computeForce(p2)
341     assert p.force == Vector(-2 / 7, 3 / 7, -6 / 7)
342 
343 
344 def test_ParticleUpdate():
345     dt = 0.1
346     p = Particle(1, Vector(1, 0, 0), Vector())
347     p.computeForce(Particle())
348     p.update(dt)
349     assert p.speed == Vector(-0.1, 0, 0)
350     assert p.position == Vector(0.99, 0, 0)
351 
352 
353 ######################################################
354 ##### Une classe Ion qui hérite de point matériel #####
```

```
355 ########################################################
356
357 class Ion (Particle):
358
359     """
360     Un Ion est une particle ayant une charge en plus de sa masse et
361     intéragissant électrostatiquement plutôt que gravitationnellement.
362     La méthode computeForce remplace donc le calcul de la force
363     gravitationnelle de Newton par celui de la force
364     électrostatique de Coulomb.
365     """
366
367     def __init__(self, mass=1, charge=1, position=Vector(), speed=Vector()):
368         """
369         Le constructeur de la classe Ion.
370
371         Args :
372                 mass(float): La masse de l'ion (doit être strictement positive)
373                 charge(float): La charge de l'ion (doit être entière et
374                         strictement positive)
375                 position(Vector): La position initiale de la particule
376                 speed(Vector): La vitesse initiale de la particule
377
378         Raises :
379                 ValueError si charge < 0
380                 TypeError si la masse n'est pas un réel,
381                         si la charge n'est pas un entier,
382                         si position ou speed ne sont pas des Vector
383         """
384         Particle.__init__(self, mass, position, speed)
385         try:
386             self.charge = int(charge)
387         except (ValueError, AttributeError, TypeError):
388             raise TypeError("The charge must be an integer.")
389         try:
390             assert self.charge > 0
391         except AssertionError:
392             raise ValueError("The charge must be positive.")
393
394     def __str__(self):
395         """
396         Surcharge de l'opérateur `str`.
397
398         Returns :
399                 "Ion with mass m, charge q, position (x,y,z)
400                 and speed (vx,vy,vz)" avec q entier et le reste à 2 décimales
401         """
402         return "Ion with mass {:.2f}, charge {:d}, position {} " \
403             "and speed {}".format(self.mass, self.charge,
404                                   self.position, self.speed)
405
406     def computeForce(self, other):
407         """
408         Calcule la force électrostatique de Coulomb exercée par un Ion other
409         sur self. Masque la méthode de Particle.
410
411         Args :
412                 other(Ion): Un autre Ion, source de l'interaction.
413         Raises :
414                 TypeError si other n'est pas un objet Ion
415         """
416         try:
417             r = self.position - other.position
```

```
            self.force = self.charge * other.charge / r.norm() ** 3 * r
        except (AttributeError, TypeError, ValueError):
            raise TypeError("Tried to compute the force created by "
                            "a non-Ion object")


#######################################
##### Des test pour la classe Ion #####
#######################################

def test_IonInit():
    with pytest.raises(TypeError):
        ion = Ion("blabla")
        ion = Ion(2, position='hum')  # on vérifie une erreur sur Vector
        ion = Ion(2, 'hum')           # on vérifie une erreur sur la charge
    ion = Ion(2, 3, Vector(2, 1, 4), Vector(-1, -1, -1))
    assert ion.mass == 2
    assert ion.charge == 3
    assert ion.position == Vector(2, 1, 4)
    assert ion.speed == Vector(-1, -1, -1)
    assert ion.force == Vector()


def test_IonStr():
    ion = Ion(3, 2, Vector(1, 2, 3), Vector(-1, -2, -3))
    assert str(ion) == "Ion with mass 3.00, charge 2, " \
        "position (1.00,2.00,3.00) and speed (-1.00,-2.00,-3.00)"


def test_IonForce():
    ion = Ion(mass=1, charge=1, position=Vector(1, 0, 0))
    ion2 = Ion(charge=3)
    ion.computeForce(ion2)
    assert ion.force == Vector(3, 0, 0)
    ion = Ion(charge=49, position=Vector(2, -3, 6))
    ion.computeForce(ion2)
    assert ion.force == Vector(6 / 7, -9 / 7, 18 / 7)


############################
##### Un main de test #####
############################

if __name__ == '__main__':

    # On lance tous les tests en bloc pour commencer
    print " Test functions ".center(50, "*")
    print "Testing Vector class...",
    test_VectorInit()
    test_VectorStr()
    test_VectorEq()
    test_VectorAdd()
    test_VectorSub()
    test_VectorMul()
    test_VectorNorm()
    test_VectorClone()
    print "ok"
    print "Testing Particle class...",
    test_ParticleInit()
    test_ParticleStr()
    test_ParticleForce()
    test_ParticleUpdate()
    print "ok"
```

```
481     print "Testing Ion class...",
482     test_IonInit()
483     test_IonStr()
484     test_IonForce()
485     print "ok"
486     print " Test end ".center(50, "*"), "\n"
487 
488     # Un petit calcul physique
489     print " Physical computations ".center(50, "*")
490     dt = 0.0001
491 
492     # problème à force centrale gravitationnel, cas circulaire
493     ntimesteps = int(10000 * math.pi)  # durée pour parcourir pi
494     center = Particle()
495     M = Particle(mass=1, position=Vector(1, 0, 0), speed=Vector(0, 1, 0))
496     print "** Gravitationnal computation of central-force motion for a {}" \
497         .format(str(M))
498     for i in range(ntimesteps):
499         M.computeForce(center)
500         M.update(dt)
501     print "\t => Final system : {}".format(str(M))
502 
503     # problème à force centrale électrostatique, cas rectiligne
504     center = Ion()
505     M = Ion(charge=4, position=Vector(0, 0, 1), speed=Vector(0, 0, -1))
506     print "** Electrostatic computation of central-force motion for a {}" \
507         .format(str(M))
508     for i in range(ntimesteps):
509         M.computeForce(center)
510         M.update(dt)
511     print "\t => Final system : {}".format(str(M))
512 
513     print " Physical computations end ".center(50, "*")
```

Source : particleSol.py

CHAPITRE 25

Jeu de la vie

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2017-06-27 18:59 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>

import random


class Life(object):

    cells = {False: ".", True: "#"}  # Dead and living cell representations

    def __init__(self, h, w, periodic=False):
        """
        Create a 2D-list (the game grid *G*) with the wanted size (*h*
        rows, *w* columns) and initialize it with random booleans
        (dead/alive). The world is periodic if *periodic* is True.
        """

        self.h = int(h)
        self.w = int(w)
        assert self.h > 0 and self.w > 0
        # Random initialization of a h×w world
        self.world = [[random.choice([True, False])
                       for j in range(self.w)]
                      for i in range(self.h)]  # h rows of w elements
        self.periodic = periodic

    def get(self, i, j):
        """
        This method returns the state of cell (*i*,*j*) safely, even
        if the (*i*,*j*) is outside the grid.
        """

        if self.periodic:
            return self.world[i % self.h][j % self.w]  # Periodic conditions
        else:
            if (0 <= i < self.h) and (0 <= j < self.w):  # Inside grid
                return self.world[i][j]
            else:                       # Outside grid
```

```
                return False            # There's nobody out there...

    def __str__(self):
        """
        Convert the grid to a visually handy string.
        """

        return '\n'.join([''.join([self.cells[val] for val in row])
                          for row in self.world])

    def evolve_cell(self, i, j):
        """
        Tells if cell (*i*,*j*) will survive during game iteration,
        depending on the number of living neighboring cells.
        """

        alive = self.get(i, j)           # Current cell status
        # Count living cells *around* current one (excluding current one)
        count = sum(self.get(i + ii, j + jj)
                    for ii in [-1, 0, 1]
                    for jj in [-1, 0, 1]
                    if (ii, jj) != (0, 0))

        if count == 3:
            # A cell w/ 3 neighbors will either stay alive or resuscitate
            future = True
        elif count < 2 or count > 3:
            # A cell w/ too few or too many neighbors will die
            future = False
        else:
            # A cell w/ 2 or 3 neighbors will stay as it is (dead or alive)
            future = alive              # Current status

        return future

    def evolve(self):
        """
        Evolve the game grid by one step.
        """

        # Update the grid
        self.world = [[self.evolve_cell(i, j)
                       for j in range(self.w)]
                      for i in range(self.h)]

if __name__ == "__main__":

    import time

    h, w = (20, 60)                       # (nrows,ncolumns)

    # Instantiation (including initialization)
    life = Life(h, w, periodic=True)

    while True:                         # Infinite loop! (Ctrl-C to break)
        print life                      # Print current world
        print "\n"
        time.sleep(0.1)                 # Pause a bit
        life.evolve()                   # Evolve world
```

Source : `life.py`

CHAPITRE 26

Median Absolute Deviation

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

import numpy as N


def mad(a, axis=None):
    """
    Compute *Median Absolute Deviation* of an array along given axis.
    """

    # Median along given axis, but *keeping* the reduced axis so that
    # result can still broadcast against a.
    med = N.median(a, axis=axis, keepdims=True)
    mad = N.median(N.absolute(a - med), axis=axis)  # MAD along given axis

    return mad

if __name__ == '__main__':

    x = N.arange(4 * 5, dtype=float).reshape(4, 5)

    print "x =\n", x
    print "MAD(x, axis=None)   =", mad(x)
    print "MAD(x, axis=0)      =", mad(x, axis=0)
    print "MAD(x, axis=1)      =", mad(x, axis=1)
    print "MAD(x, axis=(0, 1)) =", mad(x, axis=(0, 1))
```

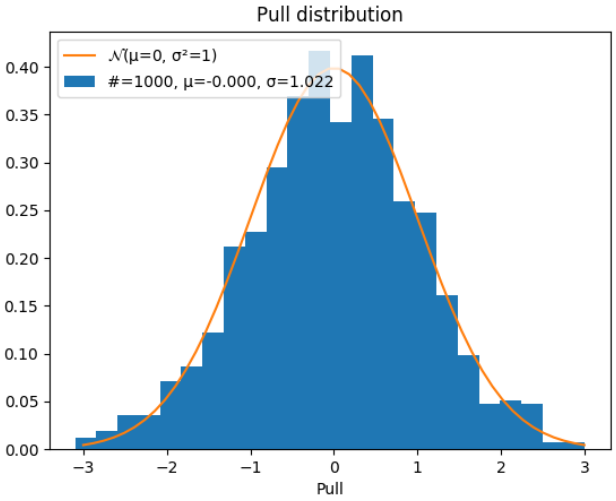
Source : `mad.py`

CHAPITRE 27

Distribution du *pull*

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

import numpy as N


def pull(x, dx):
    """
    Compute the pull from x, dx.

    * Input data: x = [x_i], error dx = [s_i] Optimal
    * (variance-weighted) mean: E = sum(x_i/s_i^2)/sum(1/s_i^2) Variance
    * on weighted mean: var(E) = 1/sum(1/s_i^2) Pull: p_i = (x_i -
    * E_i)/sqrt(var(E_i) + s_i^2) where E_i and var(E_i) are computed
    * without point i.

    If errors s_i are correct, the pull distribution is centered on 0
    with standard deviation of 1.
    """

    assert x.ndim == dx.ndim == 1, "pull works on 1D-arrays only."
    assert len(x) == len(dx), "dx should be the same length as x."

    n = len(x)

    i = N.resize(N.arange(n), n * n)  # 0,...,n-1,0,...n-1,..., n times (n^2,)
    i[::n + 1] = -1                   # Mark successively 0,1,2,...,n-1
    # Remove marked indices & reshape (n,n-1)
    j = i[i >= 0].reshape((n, n - 1))

    v = dx ** 2                       # Variance
    w = 1 / v                         # Variance (optimal) weighting

    Ei = N.average(x[j], weights=w[j], axis=1)  # Weighted mean (n,)
    vEi = 1 / N.sum(w[j], axis=1)                # Variance of mean (n,)

    p = (x - Ei) / N.sqrt(vEi + v)               # Pull (n,)

    return p
```

```
40
41  if __name__ == '__main__':
42
43      import matplotlib.pyplot as P
44      import scipy.stats as SS
45
46      n = 1000
47      mu = 1.
48      sig = 2.
49
50      # Normally distributed random sample of size n, with mean=mu and std=sig
51      x = N.random.normal(loc=mu, scale=sig, size=n)
52      dx = N.full_like(x, sig)              # Formal (true) errors
53
54      p = pull(x, dx)                       # Pull computation
55
56      m, s = p.mean(), p.std(ddof=1)
57      print "Pull ({} entries): mean={:.2f}, std={:.2f}".format(n, m, s)
58
59      fig, ax = P.subplots()
60      _, bins, _ = ax.hist(p, bins='auto', normed=True,
61                           histtype='stepfilled',
62                           label=u"#={}, μ={:.3f}, σ={:.3f}".format(n, m, s))
63      y = N.linspace(-3, 3)
64      ax.plot(y, SS.norm.pdf(y), label=ur"$\mathcal{N}$(μ=0, σ$^2$=1)")
65      ax.set(title='Pull distribution', xlabel='Pull')
66      ax.legend(loc='upper left')
67
68      P.show()
```



Source : `pull.py`

```
In [1]: import numpy as N
        import matplotlib.pyplot as P
        # Insert figures within notebook
        %matplotlib inline
```

CHAPITRE 28

Quadrature

Calcul de l'intégrale

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} \mathrm{d}x = \frac{\pi^4}{15}$$

```
In [2]: import scipy.integrate as SI
```

```
In [3]: def integrand(x):

            return x**3 / (N.exp(x) - 1)
```

```
In [4]: q, dq = SI.quad(integrand, 0, N.inf)
        print "Intégrale:", q
        print "Erreur estimée:", dq
        print "Erreur absolue:", (q - (N.pi ** 4 / 15))
```

```
Intégrale: 6.49393940227
Erreur estimée: 2.62847076684e-09
Erreur absolue: 1.7763568394e-15
```

```
/data/ycopin/Softs/local/lib/python2.7/site-packages/ipykernel/__main__.py:3: RuntimeWarning: overflow encounte
  app.launch_new_instance()
```

CHAPITRE 29

Zéro d'une fonction

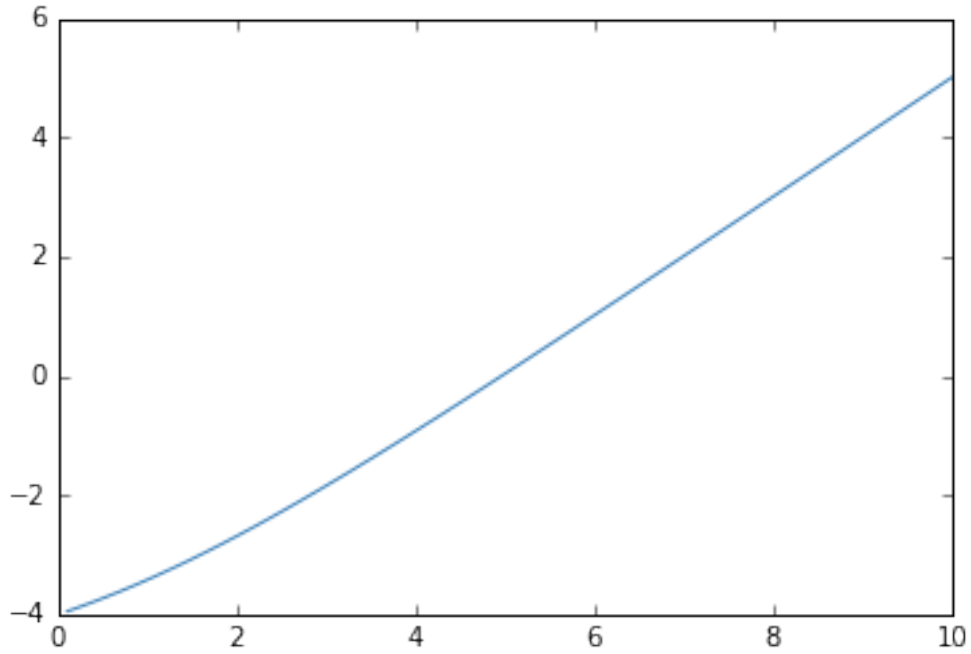
Résolution numérique de l'équation

$$f(x) = \frac{x\,e^x}{e^x - 1} - 5 = 0$$

```
In [5]: def func(x):

            return x * N.exp(x) / (N.exp(x) - 1) - 5
```

Il faut d'abord déterminer un intervalle contenant la solution, c.-à-d. le zéro de `func`. Puisque $f(0^+) = -4 < 0$ et $f(10) \simeq 5 > 0$, il est intéressant de tracer l'allure de la courbe sur ce domaine :

```
In [6]: x = N.logspace(-1, 1)  # 50 points logarithmiquement espacé de 10**-1 = 0.1 à 10**1 = 10
        P.plot(x, func(x));
```




```
In [7]: import scipy.optimize as SO
```

```
In [8]: zero = SO.brentq(func, 1, 10)
        print "Solution:", zero
```

```
Solution: 4.96511423174
```

CHAPITRE 30

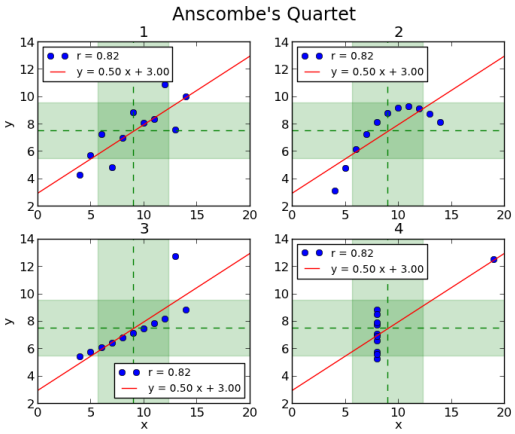
Quartet d'Anscombe

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-

import numpy as N
import scipy.stats as SS
import matplotlib.pyplot as P


def printStats(x, y):

    assert N.shape(x) == N.shape(y), "Incompatible input arrays"

    print "x: mean={:.2f}, variance={:.2f}".format(N.mean(x), N.var(x))
    print "y: mean={:.2f}, variance={:.2f}".format(N.mean(y), N.var(y))
    print "y vs. x: corrcoeff={:.2f}".format(SS.pearsonr(x, y)[0])
    # slope, intercept, r_value, p_value, std_err
    a, b, r, p, s = SS.linregress(x, y)
    print "y vs. x: y = {:.2f} x + {:.2f}".format(a, b)


def plotStats(ax, x, y, title=''):

    assert N.shape(x) == N.shape(y), "Incompatible input arrays"

    # slope, intercept, r_value, p_value, std_err
    a, b, r, p, s = SS.linregress(x, y)

    # Data + corrcoeff
    ax.plot(x, y, 'bo', label="r = {:.2f}".format(r))

    # Add mean line ± stddev
    m = N.mean(x)
    s = N.std(x, ddof=1)
    ax.axvline(m, color='g', ls='--', label='_')  # Mean
    ax.axvspan(m - s, m + s, color='g', alpha=0.2, label='_')  # Std-dev

    m = N.mean(y)
    s = N.std(y, ddof=1)
    ax.axhline(m, color='g', ls='--', label='_')  # Mean
```

```
    ax.axhspan(m - s, m + s, color='g', alpha=0.2, label='_')  # Std-dev

    # Linear regression
    xx = N.array([0, 20])
    yy = a * xx + b
    ax.plot(xx, yy, 'r-', label="y = {:.2f} x + {:.2f}".format(a, b))

    # Title and labels
    ax.set_title(title)
    if ax.is_last_row():
        ax.set_xlabel("x")
    if ax.is_first_col():
        ax.set_ylabel("y")
    leg = ax.legend(loc='upper left', fontsize='small')

if __name__ == '__main__':

    quartet = N.genfromtxt("anscombe.dat")  # Read Anscombe's Quartet

    fig = P.figure()

    for i in range(4):                  # Loop over quartet sets x,y
        ax = fig.add_subplot(2, 2, i + 1)
        print "Dataset #{} ".format(i + 1) + "=" * 20
        x, y = quartet[:, 2 * i:2 * i + 2].T
        printStats(x, y)                # Print main statistics
        plotStats(ax, x, y, title=str(i + 1))  # Plots

    fig.suptitle("Anscombe's Quartet", fontsize='x-large')

    P.show()
```

```
$ python anscombe.py

Dataset 1 ====================
x: mean=9.00, variance=10.00
y: mean=7.50, variance=3.75
y vs. x: corrcoeff=0.82
y vs. x: y = 0.50 x + 3.00
Dataset 2 ====================
x: mean=9.00, variance=10.00
y: mean=7.50, variance=3.75
y vs. x: corrcoeff=0.82
y vs. x: y = 0.50 x + 3.00
Dataset 3 ====================
x: mean=9.00, variance=10.00
y: mean=7.50, variance=3.75
y vs. x: corrcoeff=0.82
y vs. x: y = 0.50 x + 3.00
Dataset 4 ====================
x: mean=9.00, variance=10.00
y: mean=7.50, variance=3.75
y vs. x: corrcoeff=0.82
y vs. x: y = 0.50 x + 3.00
```

Source : anscombe.py


Anscombe's Quartet
1
2
3
4
r = 0.82
y = 0.50 x + 3.00
x
y

CHAPITRE 31

Suite logistique

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2012-09-05 02:37 ycopin@lyopc469>

import numpy as np
import random
import matplotlib.pyplot as plt


def iteration(r, niter=100):

    x = random.uniform(0, 1)
    i = 0
    while i < niter and x < 1:
        x = r * x * (1 - x)
        i += 1

    return x if x < 1 else -1


def generate_diagram(r, ntrials=50):
    """
    Cette fonction retourne (jusqu'à) *ntrials* valeurs d'équilibre
    pour les *r* d'entrée.  Elle renvoit un tuple:

    + le premier élément est la liste des valeurs prises par le paramètre *r*
    + le second est la liste des points d'équilibre correspondants
    """

    r_v = []
    x_v = []
    for rr in r:
        j = 0
        while j < ntrials:
            xx = iteration(rr)
            if xx > 0:  # A convergé: il s'agit d'une valeur d'équilibre
                r_v.append(rr)
                x_v.append(xx)
            j += 1                      # Nouvel essai
```

```
40
41      return r_v, x_v
42
43  r = np.linspace(0, 4, 1000)
44  x, y = generate_diagram(r)
45
46  plt.plot(x, y, 'r,')
47  plt.xlabel('r')
48  plt.ylabel('x')
49  plt.show()
```

Source : `logistique.py`

CHAPITRE 32

Ensemble de Julia

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2012-09-05 02:10 ycopin@lyopc469>

"""Visualisation de l'`ensemble de julia
<http://fr.wikipedia.org/wiki/Ensemble_de_Julia>`_.

Exercice: proposer des solutions pour accélerer le calcul.
"""

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

c = complex(0.284, 0.0122)           # Constante

xlim = 1.5                           # [-xlim,xlim] × i[-xlim,xlim]
nx = 1000                            # Nb de pixels
niter = 100                          # Nb d'itérations

x = np.linspace(-xlim, xlim, nx)     # nx valeurs de -xlim à +xlim
xx, yy = np.meshgrid(x, x)           # Tableaux 2D
z = xx + 1j * yy                     # Portion du plan complexe
for i in range(niter):               # Itération: z(n+1) = z(n)**2 + c
    z = z ** 2 + c

# Visualisation
plt.imshow(np.abs(z), extent=[-xlim, xlim, -xlim, xlim], aspect='equal')
plt.title(c)
plt.show()
```

Source : `julia.py`

CHAPITRE 33

Trajectoire d'un boulet de canon

Nous allons intégrer les équations du mouvement pour un boulet de canon soumis à des forces de frottement "turbulentes" (non-linéaires) :

$$\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{g} - \frac{\alpha}{m} v \times \mathbf{v}.$$

Cette équation différentielle non-linéaire du 2nd ordre doit être réécrite sous la forme de deux équations différentielles couplées du 1er ordre :

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}} & = \mathbf{v} \\ \dot{\mathbf{v}} & = \mathbf{g} - \frac{\alpha}{m} v \times \mathbf{v}. \end{cases}$$

Il s'agit donc de résoudre *une seule* équation différentielle du 1er ordre en $\mathbf{z} = (\mathbf{r}, \mathbf{v})$.

```
In [9]: import numpy as N
        import scipy.integrate as SI
        import matplotlib.pyplot as P
```

Valeurs numériques pour un boulet de canon de 36 livres :

```
In [10]: g = 9.81 # Pesanteur [m/s2]
         cx = 0.45 # Coefficient de frottement d'une sphère
         rhoAir = 1.2 # Masse volumique de l'air [kg/m3] au niveau de la mer, T=20°C
         rad = 0.1748/2 # Rayon du boulet [m]
         rho = 6.23e3 # Masse volumique du boulet [kg/m3]
         mass = 4./3.*N.pi*rad**3 * rho # Masse du boulet [kg]
         alpha = 0.5*cx*rhoAir*N.pi*rad**2 / mass # Coefficient de frottement par unité de masse
         print "Masse du boulet: {:.2f} kg".format(mass)
         print "Coefficient de frottement par unité de masse: {} S.I.".format(alpha)
```

```
Masse du boulet: 17.42 kg
Coefficient de frottement par unité de masse: 0.000372 S.I.
```

Conditions initiales :

```
In [11]: v0 = 450. # Vitesse initiale [m/s]
         alt = 45. # Inclinaison du canon [deg]
         alt *= N.pi/180. # Inclinaison [rad]
         z0 = (0.,0.,v0*N.cos(alt),v0*N.sin(alt)) # (x0,y0,vx0,vy0)
```

Temps caractéristique du système : $t = \sqrt{\frac{m}{g\alpha}}$ (durée du régime transitoire). L'intégration des équations se fera sur un temps caractéristique, avec des pas de temps significativement plus petits.

```
In [12]: dt = N.sqrt(mass/(g * alpha))
         print "Temps caractéristique: {:.1f} s".format(dt)
         t = N.linspace(0, dt, 100)
```

```
Temps caractéristique: 69.1 s
```

Définition de la fonction $\dot{\mathbf{z}}$, avec $\mathbf{z} = (\mathbf{r}, \mathbf{v})$

```
In [13]: def zdot(z, t):
             """Calcul de la dérivée de z=(x,y,vx,vy) à l'instant t."""

             x,y,vx,vy = z
             alphav = alpha * N.hypot(vx, vy)

             return (vx,vy,-alphav*vx,-g-alphav*vy) # dz/dt = (vx,vy,x..,y..)
```

Intégration numérique des équations du mouvement à l'aide de la fonction scipy.integrate.odeint :

```
In [14]: zs = SI.odeint(zdot, z0, t, printmessg=True)
```

```
Integration successful.
```

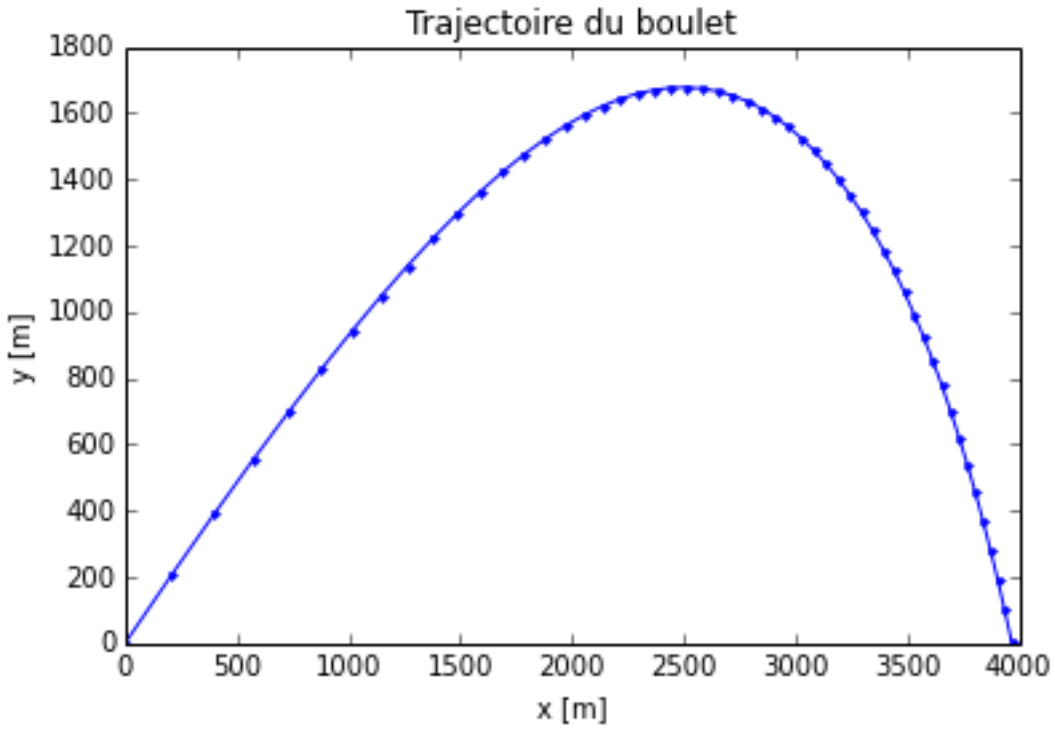
Le tableau `zs` contient les valeurs de z à chaque instant t : il est donc de taille `(len(t),4)`.

```
In [15]: ypos = zs[:,1]>=0 # y>0?
         print "t(y~0) = {:.0f} s".format(t[ypos][-1]) # Dernier instant pour lequel y>0
         print "x(y~0) = {:.0f} m".format(zs[ypos,0][-1]) # Portée approximative du canon
         #print "y(y~0) = {:.0f} m".format(zs[ypos,1][-1]) # ~0
         print "vitesse(y~0): {:.0f} m/s".format(N.hypot(zs[ypos,2][-1],zs[ypos,3][-1]))
```

```
t(y~0) = 36 s
x(y~0) = 3966 m
vitesse(y~0): 140 m/s
```

```
In [16]: fig,ax = P.subplots()
         ax.plot(zs[ypos,0],zs[ypos,1], 'b.-')
         ax.set_xlabel("x [m]")
         ax.set_ylabel("y [m]")
         ax.set_title("Trajectoire du boulet")
```

```
Out[16]: <matplotlib.text.Text at 0x2ef3290>
```



CHAPITRE 34

Équation d'état de l'eau

```python
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Time-stamp: <2014-10-09 01:19 ycopin@lyonovae03.in2p3.fr>


from __future__ import division  # division reelle de type python 3, admis

import numpy as N
import matplotlib.pyplot as P

import pytest                    # pytest importe pour les tests unitaires

"""
Construction d'un système d'extraction et d'analyse de fichiers de sortie de
dynamique moléculaire afin d'extraire les grandeurs thermodynamiques.
On affichera les ensuite isothermes.
"""

__author__ = "Adrien Licari <adrien.licari@ens-lyon.fr>"


tolerance = 1e-8  # Un seuil de tolérance pour les égalités sur réels


################################
##### A Simulation class #####
################################

class Simulation(object):

    """
    La classe Simulation représente une simulation de dynamique
    moléculaire, donc un point de l'équation d'état. Son constructeur
    doit impérativement être appelé avec le chemin du fichier output
    correspondant. Elle possède des méthodes pour extraire les grandeurs
    thermodynamiques et afficher la run, en pouvant enlever certains pas
    de temps en début de simulation.
    """

```

```
40      def __init__(self, temp, dens, path):
41          """
42          Le constructeur doit impérativement être appelé avec le chemin du
43          fichier décrivant la simulation, ainsi que ses conditions
44          thermodynamiques.
45
46          Args :
47                  temp,dens(float): La température et la densité de la simulation
48                  path(string): Le chemin vers le fichier décrivant la simulation
49
50          Raises :
51                  TypeError si temp ou dens ne sont pas des réels
52                  IOError si le fichier n'existe pas
53          """
54          self.temp = float(temp)
55          self.dens = float(dens)
56          tmp = N.loadtxt(path, skiprows=1).T
57          self.pot = tmp[0]
58          self.kin = tmp[1]
59          self.tot = self.pot + self.kin
60          self.press = tmp[2]
61
62      def __str__(self):
63          """
64          Surcharge de l'opérateur str.
65          """
66          return "Simulation at {:.0f} g/cc and {:.0f} K ; {:d} timesteps". \
67              format(self.dens, self.temp, len(self.pot))
68
69      def thermo(self, skipSteps=0):
70          """
71          Calcule l'énergie et la pression moyenne au cours de la simulation.
72          Renvoie un dictionnaire.
73
74          Args:
75                  skipSteps(int): Nb de pas à enlever en début de simulation.
76
77          Returns:
78                  {'T':temperature, 'rho':density,
79                   'E':energy, 'P':pressure,
80                   'dE':dEnergy, 'dP':dPressure}
81          """
82          return {'T': self.temp,
83                  'rho': self.dens,
84                  'E': self.tot[skipSteps:].mean(),
85                  'P': self.press[skipSteps:].mean(),
86                  'dE': self.tot[skipSteps:].std(),
87                  'dP': self.press[skipSteps:].std()}
88
89      def plot(self, skipSteps=0):
90          """
91          Affiche l'évolution de la Pression et l'énergie interne au cours de
92          la simulation.
93
94          Args:
95                  skipSteps(int): Pas de temps à enelevr en début de simulation.
96
97          Raises:
98                  TypeError si skipSteps n'est pas un entier.
99          """
100         fig, (axen, axpress) = P.subplots(2, sharex=True)
101         axen.plot(range(skipSteps, len(self.tot)), self.tot[skipSteps:],
102                   'rd--')
```

```
        axen.set_title("Internal energy (Ha)")
        axpress.plot(range(skipSteps, len(self.press)), self.press[skipSteps:],
                     'rd--')
        axpress.set_title("Pressure (GPa)")
        axpress.set_xlabel("Timesteps")

        P.show()

##### Tests pour Simulation #####


def mimic_simulation(filename):
    with open(filename, 'w') as f:
        f.write("""Potential energy (Ha)        Kinetic Energy (Ha)        Pressure (GPa)
-668.2463567264               0.7755612311                  9287.7370229824
-668.2118514558               0.7755612311               9286.1395903265
-668.3119088218               0.7755612311               9247.6604398856
-668.4762735176               0.7755612311               9191.8574820856
-668.4762735176               0.7755612311               9191.8574820856
""")


def test_Simulation_init():
    mimic_simulation("equationEtat_simuTest.out")
    s = Simulation(10, 10, "equationEtat_simuTest.out")
    assert len(s.kin) == 5
    assert abs(s.kin[2] - 0.7755612311) < tolerance
    assert abs(s.pot[1] + 668.2118514558) < tolerance


def test_Simulation_str():
    mimic_simulation("equationEtat_simuTest.out")
    s = Simulation(10, 20, "equationEtat_simuTest.out")
    assert str(s) == "Simulation at 20 g/cc and 10 K ; 5 timesteps"


def test_Simulation_thermo():
    mimic_simulation("equationEtat_simuTest.out")
    s = Simulation(10, 20, "equationEtat_simuTest.out")
    assert abs(s.thermo()['T'] - 10) < tolerance
    assert abs(s.thermo()['rho'] - 20) < tolerance
    assert abs(s.thermo()['E'] + 667.56897157674) < tolerance
    assert abs(s.thermo()['P'] - 9241.0504034731) < tolerance
    assert abs(s.thermo(3)['E'] + 667.7007122865) < tolerance
    assert abs(s.thermo(3)['P'] - 9191.8574820856) < tolerance

####################
### Main script ###
####################

if __name__ == '__main__':
    """
    On définit un certain nombre de pas de temps à sauter, puis on
    charge chaque simulation et extrait les informaions thermodynamiques
    associées. On affiche enfin les isothermes normalisées (E/NkT et P/nkT).
    """

    ### Definitions ###
    a0 = 0.52918      # Bohr radius in angstrom
    amu = 1.6605      # atomic mass unit in e-24 g
    k_B = 3.16681e-6  # Boltzmann's constant in Ha/K
    # normalization factor for P/nkT
    nk_GPa = a0 ** 3 * k_B * 2.942e4 / 6 / amu
```

```
    nsteps = 200  # define skipped timesteps (should be done for
    # each simulation...)
    temps = [6000, 20000, 50000]    # define temperatures
    colors = {6000: 'r', 20000: 'b', 50000: 'k'}
    denss = [7, 15, 25, 30]  # define densities
    keys = ['T', 'rho', 'E', 'dE', 'P', 'dP']
    eos = dict.fromkeys(keys, N.zeros(0))   # {key:[]}

    ### Extract the EOS out of the source files ###
    for t, rho in [(t, rho) for t in temps for rho in denss]:
        filenm = "outputs/{}K_{:0>2d}gcc.out".format(t, rho)
        s = Simulation(t, rho, filenm)
        for key in keys:
            eos[key] = N.append(eos[key], s.thermo(nsteps)[key])

    ### Plot isotherms ###
    fig, (axen, axpress) = P.subplots(2, sharex=True)
    fig.suptitle("High-pressure equation of state for water", size='x-large')
    axen.set_title("Energy")
    axen.set_ylabel("U / NkT")
    axpress.set_title("Pressure")
    axpress.set_ylabel("P / nkT")
    axpress.set_xlabel("rho (g/cc)")
    for t in temps:
        sel = eos['T'] == t
        axen.errorbar(x=eos['rho'][sel], y=eos['E'][sel] / k_B / t,
                      yerr=eos['dE'][sel] / k_B / t, fmt=colors[t] + '-')
        axpress.errorbar(x=eos['rho'][sel],
                         y=eos['P'][sel] / eos['rho'][sel] / nk_GPa / t,
                         yerr=eos['dP'][sel] / eos['rho'][sel] / nk_GPa / t,
                         fmt=colors[t] + '-',
                         label="{} K".format(t))
    axpress.legend(loc='best')
    P.show()
```

Source : `equationEtatSol.py`

CHAPITRE 35

Solutions aux exercices

— *Méthode des rectangles*
— *Fizz Buzz*
— *Algorithme d'Euclide*
— *Crible d'Ératosthène*
— *Carré magique*
— *Suite de Syracuse*
— *Flocon de Koch*
— *Jeu du plus ou moins*
— *Animaux*
— *Particules*
— *Jeu de la vie*
— *Median Absolute Deviation*
— *Distribution du pull*
— *Calculs numériques* (`numerique.ipynb`)
— *Quartet d'Anscombe*
— *Suite logistique*
— *Ensemble de Julia*
— *Trajectoire d'un boulet de canon* (`canon.ipynb`)
— *Équation d'état de l'eau*

CHAPITRE 36

Examen final, Janvier 2015

Consignes :

— Vous avez accès à tout l'internet « statique » (hors mail, tchat, forum, etc.), y compris donc au cours en ligne.
— Ne soumettez pas de codes non-fonctionnels (i.e. provoquant une exception à l'interprétation, avant même l'exécution) : les erreurs de syntaxe seront lourdement sanctionnées.
— Respectez scrupuleusement les directives de l'énoncé (nom des variables, des méthodes, des fichiers, etc.), en particulier concernant le nom des fichiers à renvoyer aux correcteurs.

Exercice

Un appareil de vélocimétrie a mesuré une vitesse à intervalle de temps régulier puis à sorti le fichier texte `velocimetrie.dat` (attention à l'entête). Vous écrirez un script python « `exo_nom_prénom.py` » (sans accent) utilisant `matplotlib` qui générera, affichera et sauvegardera sous le nom « `exo_nom_prénom.pdf` » une figure composée de trois sous-figures, l'une au dessus de l'autre :

1. la vitesse en mm/s mesurée en fonction du temps,
2. le déplacement en mètres en fonction du temps. On utilisera volontairement une intégration naïve à partir de zéro via la fonction `numpy.cumsum()`,
3. l'accélération en m/s^2 en fonction du temps. On utilisera volontairement une dérivation naïve à deux points :

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

via la fonction `numpy.diff()`. Attention, si l'entrée de cette fonction est un tableau de taille *N*, sa sortie est un tableau de taille *N-1*.

Le script doit lire le fichier `velocimetrie.dat` stocké dans le répertoire courant. On prendra soin des noms des axes et des unités physiques. Si les trois axes des abscisses sont identiques, seul celui de la troisième sous-figure peut être nommé.

Le problème du voyageur de commerce

Introduction

Le problème du voyageur de commerce est un problème d'optimisation consistant à déterminer le plus court chemin reliant un ensemble de destinations. Il n'existe pas d'algorithme donnant la solution optimale en un temps raisonnable (problème NP-complet), mais l'on peut chercher à déterminer des solutions approchées.

On va se placer ici dans le cas d'un livreur devant desservir une seule fois chacune des n destinations d'une ville américaine où les rues sont agencées en réseau carré (Figure). On utilise la « distance de Manhattan » (norme L1) entre deux points $A(x_A, y_A)$ et $B(x_B, y_B)$:

$$d(A, B) = |x_B - x_A| + |y_B - y_A|.$$

En outre, on se place dans le cas où les coordonnées des destinations sont *entières*, comprises entre `0` (inclus) et `TAILLE = 50` (exclus). Deux destinations peuvent éventuellement avoir les mêmes coordonnées.

Les instructions suivantes doivent permettre de définir les classes nécessaires (`Ville` et `Trajet`) et de développer deux algorithmes approchés (heuristiques) : l'algorithme du plus proche voisin, et l'optimisation 2-opt. Seules la librairie standard et la librairie `numpy` sont utilisables si nécessaire.

Un squelette du code, définissant l'interface de programmation et incluant des tests unitaires (à utiliser avec `py.test`), vous est fourni : `exam_1501.py`. Après l'avoir renommé « `pb_nom_prénom.py` » (sans accent), l'objectif est donc de compléter ce code progressivement, en suivant les instructions suivantes.

Une ville-test de 20 destinations est fournie : `ville.dat` (Fig.), sur laquelle des tests de lecture et d'optimisation seront réalisés.

Classe `Ville`

Les n coordonnées des destinations sont stockées dans l'attribut `destinations`, un tableau `numpy` d'entiers de format `(n, 2)`.

1. `__init__()` : initialisation d'une ville sans destination (déjà implémenté, ne pas modifier).
2. `aleatoire(n)` : création de n destinations aléatoires (utiliser `numpy.random.randint()`).
3. `lecture(nomfichier)` : lecture d'un fichier ASCII donnant les coordonnées des destinations.
4. `ecriture(nomfichier)` : écriture d'un fichier ASCII avec les coordonnées des destinations.
5. `nb_trajet()` : retourne le nombre total (entier) de trajets : $(n-1)!/2$ (utiliser `math.factorial()`).
6. `distance(i, j)` : retourne la distance (Manhattan-L1) entre les deux destinations de numéro i et j.

Classe `Trajet`

L'ordre des destinations suivi au cours du trajet est stocké dans l'attribut `etapes`, un tableau `numpy` d'entiers de format `(n,)`.

1. `__init__(ville, etapes=None)` : initialisation sur une `ville`. Si la liste `etapes` n'est pas spécifiée, le trajet par défaut est celui suivant les destinations de `ville`.
2. `longueur()` : retourne la longueur totale du trajet *bouclé* (i.e. revenant à son point de départ).

Heuristique *Plus proche voisin*

1. `Ville.plus_proche(i, exclus=[])` : retourne la destination la plus proche de la destination i (au sens de `Ville.distance()`), *hors* les destinations de la liste `exclus`.
2. `Ville.trajet_voisins(depart=0)` : retourne un `Trajet` déterminé selon l'heuristique des plus proches voisins (i.e. l'étape suivante est la destination la plus proche hors les destinations déjà visitées) en partant de l'étape initiale `depart`.

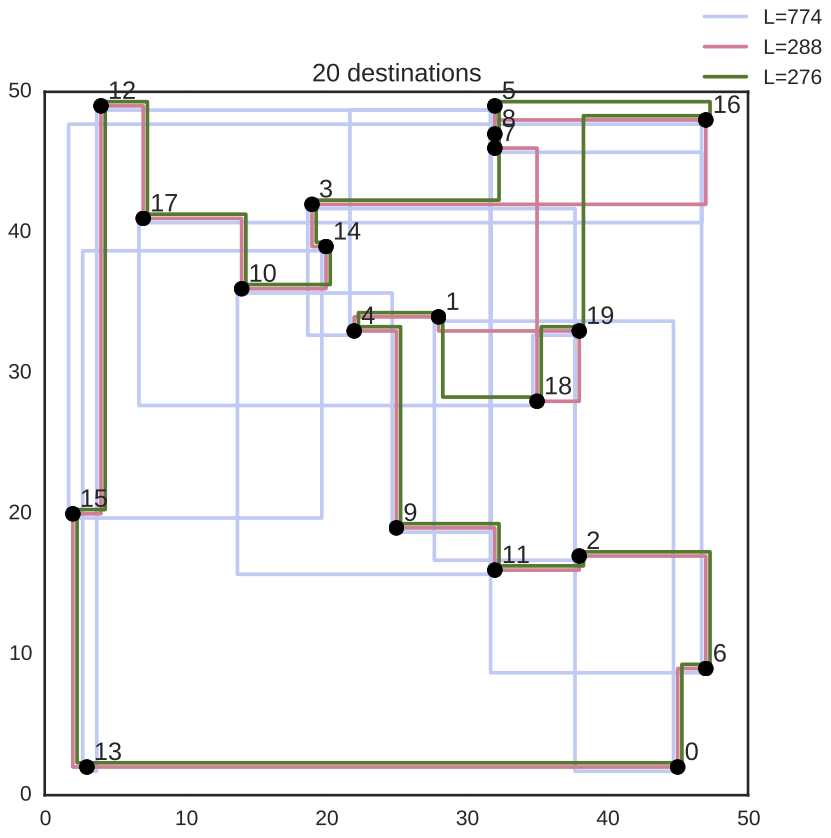


Fig. 36.1 – **Figure :** Ville-test, avec 20 destinations et trois trajets de longueurs différentes : un trajet aléatoire (*L=774*), un trajet *plus proche voisins* (*L=288*), et un trajet après optimisation *opt-2* (*L=276*).

Heuristique *Opt-2*

1. `Trajet.interversion(i, j)` : retourne un *nouveau* `Trajet` résultant de l'interversion des 2 étapes i et j.
2. `Ville.optimisation_trajet(trajet)` : retourne le `Trajet` le plus court de tous les trajets « voisins » à `trajet` (i.e. résultant d'une simple interversion de 2 étapes), ou `trajet` lui-même s'il est le plus court.
3. `Ville.trajet_opt2(trajet=None, maxiter=100)` : à partir d'un `trajet` initial (par défaut le trajet des plus proches voisins), retourne un `Trajet` optimisé de façon itérative par interversion successive de 2 étapes. Le nombre maximum d'itération est `maxiter`.

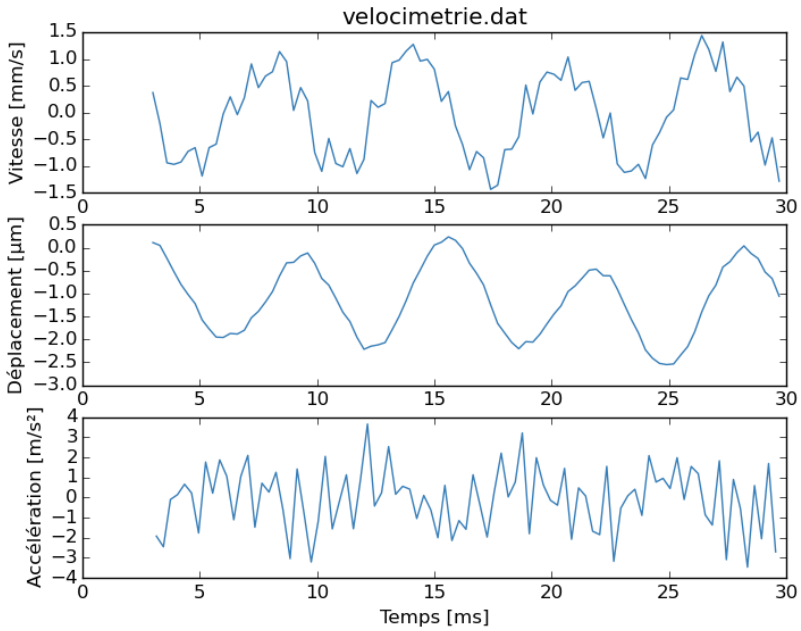
Questions hors-barême

À l'aide de la librairie `matplotlib` :

1. `Ville.figure()` : trace la figure représentant les destinations de la ville (similaire à la Figure).
2. `Ville.figure(trajet=None)` : compléter la méthode précédente pour ajouter un trajet au plan de la ville (utiliser `matplotlib.step()` pour des trajets de type « Manhattan »).

Correction

Corrigé 



Bibliographie

[Matplotlib07] 2007CSE.....9...90H
[Astropy13] 2013A&A...558A..33A

Index

Symbols

A

B

C

D

E

F

G

H

I

L

M

N

T

U

V

W

X

Z