SciPy - Librairie d'algorithmes pour le calcul scientifique en Python

Alexandre Gramfort : alexandre.gramfort@telecom-paristech.fr
Slim Essid : slim.essid@telecom-paristech.fr

adapté du travail de J.R. Johansson (robert@riken.jp) http://dml.riken.jp/~rob/ (http://dml.riken.jp/~rob/)

Introduction

SciPy s'appuie sur NumPy.

SciPy fournit des implémentations efficaces d'algorithmes standards.

Certains des sujets couverts par SciPy:

- Fonctions Spéciales (scipy.special (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/special.html))
- Intégration (scipy.integrate (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/integrate.html))
- Optimisation (scipy.optimize (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/optimize.html))
- Interpolation (scipy.interpolate (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/interpolate.html))
- Transformées de Fourier (scipy.fftpack (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/fftpack.html))
- Traitement du Signal (scipy.signal (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/signal.html))
- Algèbre Linéaire (scipy.linalg (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/linalg.html))
- Matrices *Sparses* et Algèbre Linéaire Sparse (scipy.sparse (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/sparse.html))
- Statistiques (scipy.stats (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/stats.html))
- Traitement d'images N-dimensionelles (scipy.ndimage (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/ndimage.html))
- Lecture/Ecriture Fichiers IO (scipy.io (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/io.html))

Durant ce cours on abordera certains de ces modules.

Pour utiliser un module de SciPy dans un programme Python il faut commencer par l'importer.

Voici un exemple avec le module *linalg*

In [1]:
```
from scipy import linalg
```

On aura besoin de NumPy:

In [2]:
```
import numpy as np
```

Et de matplotlib/pylab:

In [3]:
```
# et JUSTE POUR MOI (pour avoir les figures dans le notebook)
%matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt
```

Fonctions Spéciales

Un grand nombre de fonctions importantes, notamment en physique, sont disponibles dans le module *scipy.special*

Pour plus de détails: http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/special.html#module-scipy.special (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/special.html#module-scipy.special).

Un exemple avec les fonctions de Bessel:

In [4]:
```
# jn : Bessel de premier type
# yn : Bessel de deuxième type
from scipy.special import jn, yn
```

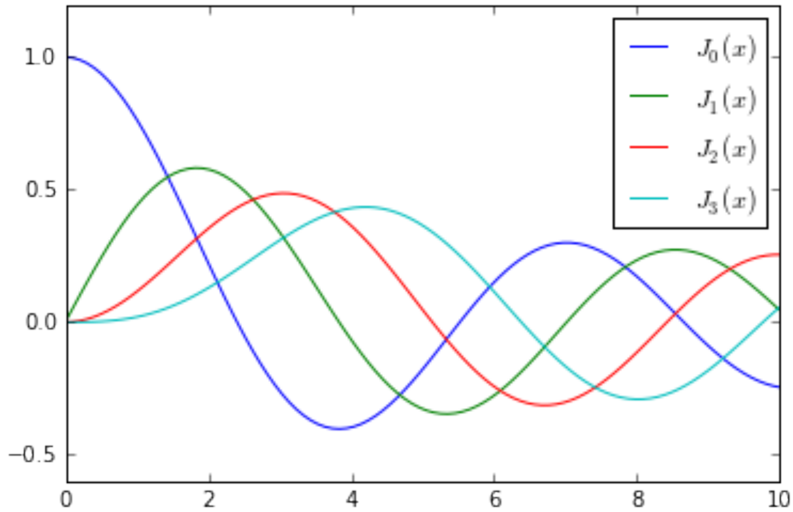
In [5]:
```
jn?
```

In [6]:
```
n = 0    # ordre
x = 0.0

# Bessel de premier type
print("J_%d(%s) = %f" % (n, x, jn(n, x)))

x = 1.0
# Bessel de deuxième type
print("Y_%d(%s) = %f" % (n, x, yn(n, x)))
```

```
J_0(0.0) = 1.000000
Y_0(1.0) = 0.088257
```

In [7]:
```
x = np.linspace(0, 10, 100)

for n in range(4):
    plt.plot(x, jn(n, x), label=r"$J_%d(x)$" % n)
plt.legend()
```

Out[7]: <matplotlib.legend.Legend at 0x10f0db550>



In [8]:
```
from scipy import special
special?
```

Intégration

intégration numerique

L'évaluation numérique de:

$$\int_a^b f(x)dx$$

est nommée *quadrature* (abbr. quad). SciPy fournit différentes fonctions: par exemple `quad`, `dblquad` et `tplquad` pour les intégrales simples, doubles ou triples.

In [9]:
```
from scipy.integrate import quad, dblquad, tplquad
```

In [10]:
```
quad?
```

L'usage de base:

In [11]:
```
# soit une fonction f
def f(x):
    return x
```

In [13]:
```
a, b = 1, 2 # intégrale entre a et b

val, abserr = quad(f, a, b)

print("intégrale =", val, ", erreur =", abserr)
```

```
('int\xc3\xa9grale =', 1.5, ', erreur =', 1.6653345369377348e-14)
```

EXERCICE: Intégrer la fonction de Bessel `jn` d'ordre 3 entre 0 et 10

In [ ]:

Exemple intégrale double:

$$\int_{x=1}^{2} \int_{y=1}^{x} (x + y^2) dxdy$$

In [14]:
```
dblquad?
```

In [16]:
```
def f(y, x):
    return x + y**2

def gfun(x):
    return 1

def hfun(x):
    return x

print(dblquad(f, 1, 2, gfun, hfun))
```

```
(1.7500000000000002, 1.9428902930940243e-14)
```

Equations différentielles ordinaires (EDO)

SciPy fournit deux façons de résoudre les EDO: Une API basée sur la fonction `odeint`, et une API orientée-objet basée sur la classe `ode`.

`odeint` est plus simple pour commencer.

Commençons par l'importer:

In [17]:
```
from scipy.integrate import odeint
```

Un système d'EDO se formule de la façon standard:

$y' = f(y, t)$

avec

$y = [y_1(t), y_2(t), \ldots, y_n(t)]$

et f est une fonction qui fournit les dérivées des fonctions $y_i(t)$. Pour résoudre une EDO il faut spécifier f et les conditions initiales, $y(0)$.

Une fois définies, on peut utiliser `odeint`:

```
y_t = odeint(f, y_0, t)
```

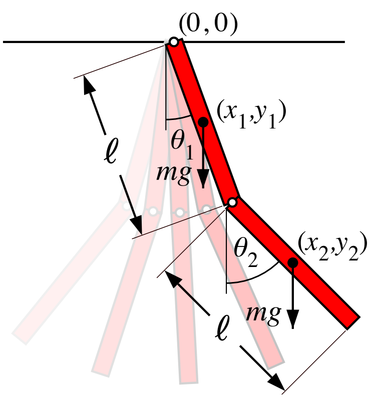
où `t` est un NumPy *array* des coordonnées en temps où résoudre l'EDO. `y_t` est un array avec une ligne pour chaque point du temps `t`, et chaque colonne correspond à la solution `y_i(t)` à chaque point du temps.

Exemple: double pendule

Description: [http://en.wikipedia.org/wiki/Double_pendulum (http://en.wikipedia.org/wiki/Double_pendulum)](http://en.wikipedia.org/wiki/Double_pendulum)

In [18]:
```
from IPython.core.display import Image
Image(url='http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c9/Double-compound-pendulum-dimensioned.svg')
```

Out[18]:



Les équations du mouvement du pendule sont données sur la page wikipedia:

$$\dot{\theta}_1 = \frac{6}{m\ell^2} \frac{2p_{\theta_1} - 3\cos(\theta_1 - \theta_2) p_{\theta_2}}{16 - 9\cos^2(\theta_1 - \theta_2)}$$

$$\dot{\theta}_2 = \frac{6}{m\ell^2} \frac{8p_{\theta_2} - 3\cos(\theta_1 - \theta_2) p_{\theta_1}}{16 - 9\cos^2(\theta_1 - \theta_2)}.$$

$$\dot{p}_{\theta_1} = -\frac{1}{2} m\ell^2 \left[\dot{\theta}_1 \dot{\theta}_2 \sin(\theta_1 - \theta_2) + 3\frac{g}{\ell} \sin\theta_1\right]$$

$$\dot{p}_{\theta_2} = -\frac{1}{2} m\ell^2 \left[-\dot{\theta}_1 \dot{\theta}_2 \sin(\theta_1 - \theta_2) + \frac{g}{\ell} \sin\theta_2\right]$$

où les p_{θ_i} sont les moments d'inertie. Pour simplifier le code Python, on peut introduire la variable $x = [\theta_1, \theta_2, p_{\theta_1}, p_{\theta_2}]$

$$\dot{x}_1 = \frac{6}{m\ell^2} \frac{2x_3 - 3\cos(x_1 - x_2) x_4}{16 - 9\cos^2(x_1 - x_2)}$$

$$\dot{x}_2 = \frac{6}{m\ell^2} \frac{8x_4 - 3\cos(x_1 - x_2) x_3}{16 - 9\cos^2(x_1 - x_2)}$$

$$\dot{x}_3 = -\frac{1}{2} m\ell^2 \left[\dot{x}_1 \dot{x}_2 \sin(x_1 - x_2) + 3\frac{g}{\ell} \sin x_1\right]$$

$$\dot{x}_4 = -\frac{1}{2} m\ell^2 \left[-\dot{x}_1 \dot{x}_2 \sin(x_1 - x_2) + \frac{g}{\ell} \sin x_2\right]$$

In [19]:

```
g = 9.82
L = 0.5
m = 0.1

def dx(x, t):
    """The right-hand side of the pendulum ODE"""
    x1, x2, x3, x4 = x[0], x[1], x[2], x[3]

    dx1 = 6.0/(m*L**2) * (2 * x3 - 3 * np.cos(x1-x2) * x4)/(16 - 9
* np.cos(x1-x2)**2)
    dx2 = 6.0/(m*L**2) * (8 * x4 - 3 * np.cos(x1-x2) * x3)/(16 - 9
* np.cos(x1-x2)**2)
    dx3 = -0.5 * m * L**2 * ( dx1 * dx2 * np.sin(x1-x2) + 3 * (g/L)
 * np.sin(x1))
    dx4 = -0.5 * m * L**2 * (-dx1 * dx2 * np.sin(x1-x2) + (g/L) * n
p.sin(x2))

    return [dx1, dx2, dx3, dx4]
```

In [20]:

```
# on choisit une condition initiale
x0 = [np.pi/4, np.pi/2, 0, 0]
```

In [21]:

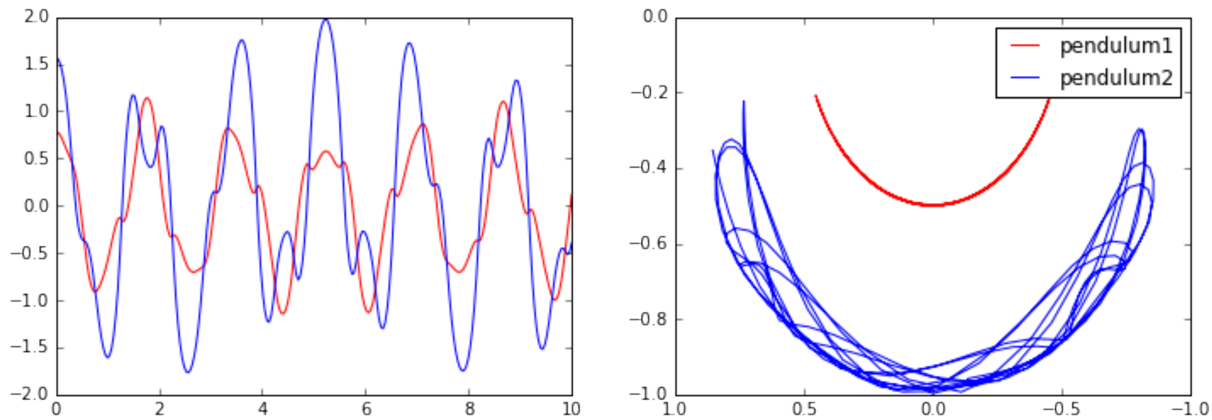
```
# les instants du temps: de 0 à 10 secondes
t = np.linspace(0, 10, 250)
```

In [22]:
```
# On résout
x = odeint(dx, x0, t)
print x.shape
```

```
(250, 4)
```

In [23]:
```
# affichage des angles en fonction du temps
fig, axes = plt.subplots(1,2, figsize=(12,4))
axes[0].plot(t, x[:, 0], 'r', label="theta1")
axes[0].plot(t, x[:, 1], 'b', label="theta2")

x1 = + L * np.sin(x[:, 0])
y1 = - L * np.cos(x[:, 0])
x2 = x1 + L * np.sin(x[:, 1])
y2 = y1 - L * np.cos(x[:, 1])

axes[1].plot(x1, y1, 'r', label="pendulum1")
axes[1].plot(x2, y2, 'b', label="pendulum2")
axes[1].set_ylim([-1, 0])
axes[1].set_xlim([1, -1])
plt.legend()
```

Out[23]: <matplotlib.legend.Legend at 0x112220f10>



Transformées de Fourier

SciPy utilise la librairie [FFTPACK (http://www.netlib.org/fftpack/)](http://www.netlib.org/fftpack/) écrite en FORTRAN.

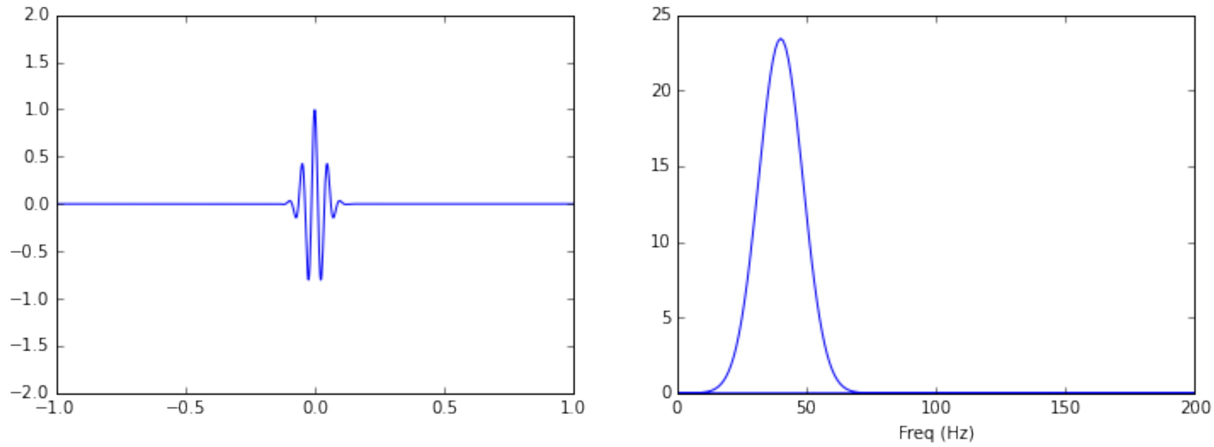
Commençons par l'import:

In [24]:
```
from scipy import fftpack
```

Nous allons calculer les transformées de Fourier discrètes de fonctions spéciales:

In [26]:

```
from scipy.signal import gausspulse

t = np.linspace(-1, 1, 1000)
x = gausspulse(t, fc=20, bw=0.5)

# Calcul de la TFD
F = fftpack.fft(x)

# calcul des fréquences en Hz si on suppose un échantillonage à 100
0Hz
freqs = fftpack.fftfreq(len(x), 1. / 1000.)
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(12,4))
axes[0].plot(t, x) # plot du signal
axes[0].set_ylim([-2, 2])

axes[1].plot(freqs, np.abs(F)) # plot du module de la TFD
axes[1].set_xlim([0, 200])
# mask = (freqs > 0) & (freqs < 200)
# axes[0].plot(freqs[mask], abs(F[mask])) # plot du module de la TF
D
axes[1].set_xlabel('Freq (Hz)')
plt.show()
```



EXERCICE : Le signal est réel du coup la TFD est symétrique. Afficher la TFD restreinte aux fréquences positives et la TFD restreinte aux fréquences entre 0 et 200Hz.

Algèbre linéaire

Le module de SciPy pour l'algèbre linéaire est `linalg`. Il inclut des routines pour la résolution des systèmes linéaires, recherche de vecteur/valeurs propres, SVD, Pivot de Gauss (LU, cholesky), calcul de déterminant etc.

Documentation : [http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/linalg.html (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/linalg.html)](http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/linalg.html)

Résolution d'equations linéaires

Trouver x tel que:

$$Ax = b$$

avec A une matrice et x, b des vecteurs.

In [28]:
```
A = np.array([[1,0,3], [4,5,12], [7,8,9]], dtype=np.float)
b = np.array([[1,2,3]], dtype=np.float).T
print(A)
print(b)
```

```
[[  1.   0.   3.]
 [  4.   5.  12.]
 [  7.   8.   9.]]
[[ 1.]
 [ 2.]
 [ 3.]]
```

In [29]:
```
from scipy import linalg
x = linalg.solve(A, b)
print(x)
```

```
[[ 0.8       ]
 [-0.4       ]
 [ 0.06666667]]
```

In [30]:
```
print(x.shape)
print(b.shape)
```

```
(3, 1)
(3, 1)
```

In [31]:
```
# Vérifier le résultat
```

Valeurs propres et vecteurs propres

$Av_n = \lambda_n v_n$

avec v_n le $n$ème vecteur propre et λ_n la $n$ème valeur propre.

Les fonctions sont: `eigvals` et `eig`

In [32]:
```
A = np.random.randn(3, 3)
```

In [33]:
```
evals, evecs = linalg.eig(A)
```

In [34]:
```
evals
```

Out[34]:
```
array([-0.62446574+1.97855695j, -0.62446574-1.97855695j,  1.02893946
+0.j        ])
```

In [35]:
```
evecs
```

Out[35]:
```
array([[-0.07263496+0.54831147j, -0.07263496-0.54831147j,  0.3783169
6+0.j        ],
       [-0.80888273+0.j        , -0.80888273-0.j        , -0.4197660
1+0.j        ],
       [ 0.19786628+0.02522618j,  0.19786628-0.02522618j,  0.8250289
5+0.j        ]])
```

EXERCICE : vérifier qu'on a bien des valeurs et vecteurs propres.

In [ ]:
```

```

Si A est symmétrique

In [36]:
```
A = A + A.T
# A += A.T  # ATTENTION MARCHE PAS !!!!
evals = linalg.eigvalsh(A)
print(evals)
```

```
[-3.83544041  0.22487425  3.17058211]
```

In [37]:
```
print(linalg.eigh(A))
```

```
(array([-3.83544041,  0.22487425,  3.17058211]), array([[ 0.80748919
, -0.43025042,  0.40354154],
       [ 0.40167574,  0.90204961,  0.15799714],
       [-0.43199283,  0.03451186,  0.90121647]]))
```

Opérations matricielles

In [38]:
```
# inversion
linalg.inv(A)
```

Out[38]:
```
array([[ 0.70455316, -1.79034249,  0.13962165],
       [-1.79034249,  3.58424481,  0.22859031],
       [ 0.13962165,  0.22859031,  0.21280511]])
```

In [40]:
```
# vérifier
```

In [41]:
```
# déterminant
linalg.det(A)
```

Out[41]:
```
-2.734600998424457
```

In [42]:
```
# normes
print(linalg.norm(A, ord='fro'))  # frobenius
print(linalg.norm(A, ord=2))
print(linalg.norm(A, ord=np.inf))
```

```
4.98134143463
3.83544041032
5.55970464297
```

EXERCICE : Vérifier les résultats

La norme infinie est la norme infinie de la norme 1 de chaque ligne.

In [ ]:
```

```

Optimisation

Objectif: trouver les minima ou maxima d'une fonction

Doc : http://scipy-lectures.github.com/advanced/mathematical_optimization/index.html (http://scipy-lectures.github.com/advanced/mathematical_optimization/index.html)

On commence par l'import

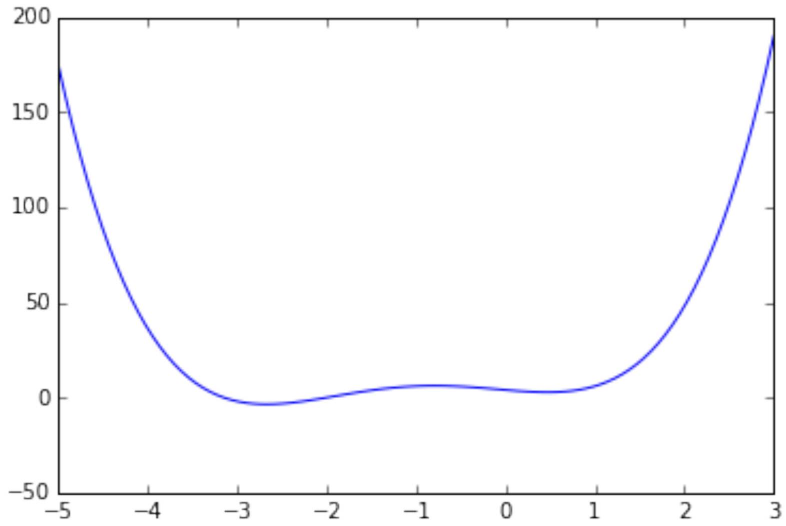
In [43]:
```
from scipy import optimize
```

Trouver un minimum

In [44]:
```
def f(x):
    return 4*x**3 + (x-2)**2 + x**4
```

In [45]:
```
x = np.linspace(-5, 3, 100)
plt.plot(x, f(x))
```

Out[45]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x1139e10d0>]



Nous allons utiliser la fonction `fmin_bfgs`:

In [46]:
```
x_min = optimize.fmin_bfgs(f, x0=-3)
x_min
```

```
Optimization terminated successfully.
         Current function value: -3.506641
         Iterations: 5
         Function evaluations: 24
         Gradient evaluations: 8
```

Out[46]: array([-2.67298149])

Trouver les zéros d'une fonction

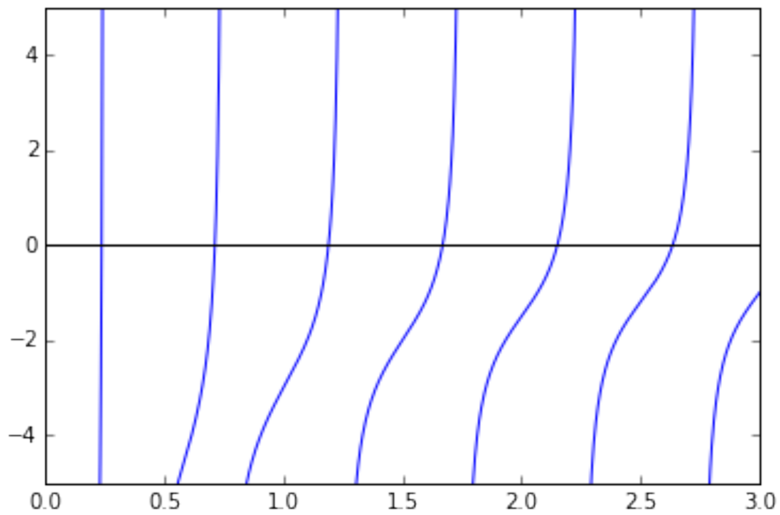
Trouver x tel que $f(x) = 0$. On va utiliser `fsolve`.

In [47]:
```
omega_c = 3.0
def f(omega):
    return np.tan(2*np.pi*omega) - omega_c/omega
```

In [48]:
```
x = np.linspace(0, 3, 1000)
y = f(x)
mask = np.where(abs(y) > 50)
x[mask] = y[mask] = np.nan # get rid of vertical line when the func
tion flip sign
plt.plot(x, y)
plt.plot([0, 3], [0, 0], 'k')
plt.ylim(-5,5)
```

```
-c:3: RuntimeWarning: divide by zero encountered in divide
```

Out[48]: (-5, 5)



In [49]:
```
np.unique(
    (optimize.fsolve(f, np.linspace(0.2, 3, 40))*1000).astype(int)
) / 1000.
```

Out[49]:
```
array([ 0.237,   0.712,   1.189,   1.669,   2.15 ,   2.635,   3.121,   3.61
  ])
```

In [50]:
```
optimize.fsolve(f, 0.72)
```

Out[50]: array([0.71286972])

In [51]:
```
optimize.fsolve(f, 1.1)
```

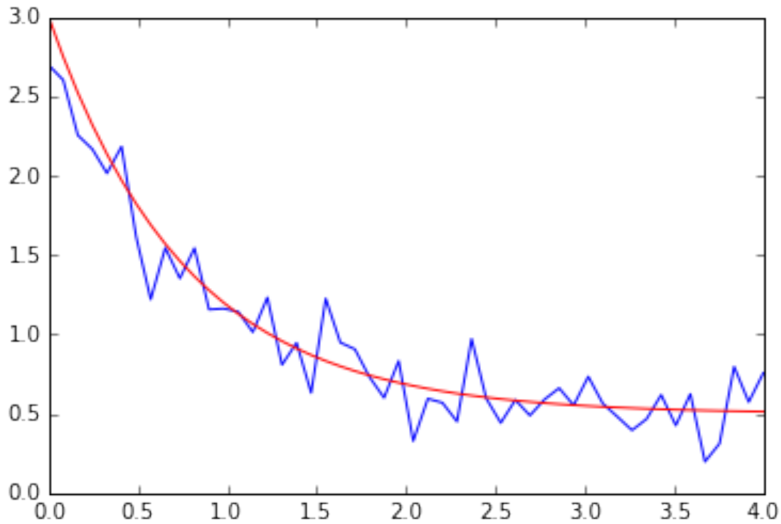
Out[51]: array([1.18990285])

Estimation de paramètres de fonctions

In [52]:
```
from scipy.optimize import curve_fit

def f(x, a, b, c):
    """
    f(x) = a exp(-bx) + c
    """
    return a*np.exp(-b*x) + c

x = np.linspace(0, 4, 50)
y = f(x, 2.5, 1.3, 0.5)
yn = y + 0.2*np.random.randn(len(x))  # ajout de bruit
```

In [53]:
```
plt.plot(x, yn)
plt.plot(x, y, 'r')
```

Out[53]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x1139edb90>]



In [54]:
```
(a, b, c), _ = curve_fit(f, x, yn)
print(a, b, c)
```

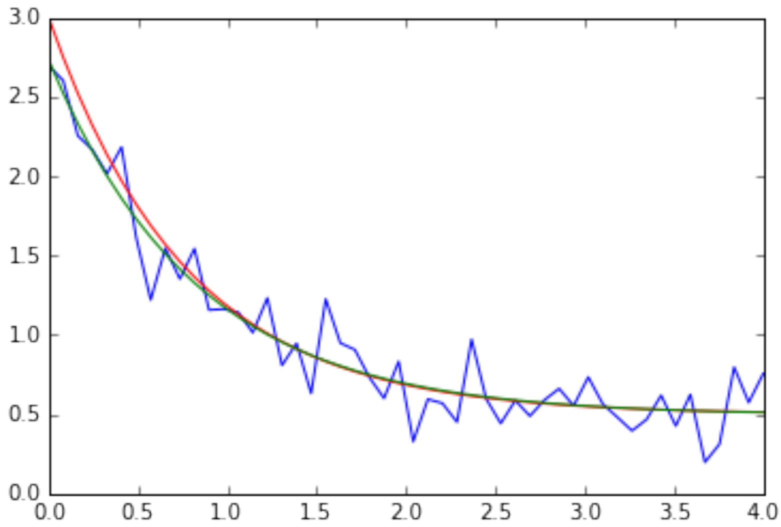
```
2.23756960904 1.21041192888 0.49442120282
```

In [55]:
```
curve_fit?
```

On affiche la fonction estimée:

In [56]:
```
plt.plot(x, yn)
plt.plot(x, y, 'r')
plt.plot(x, f(x, a, b, c))
```

Out[56]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x113d25690>]

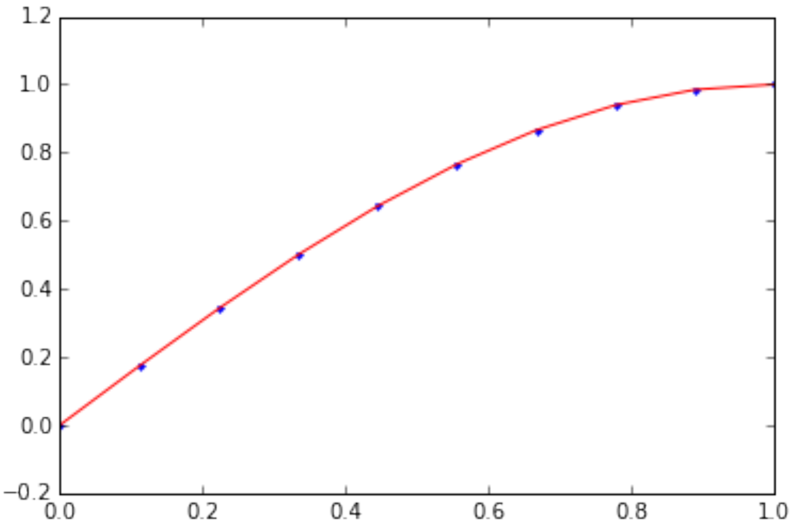


Dans le cas de polynôme on peut le faire directement avec NumPy

In [57]:
```
x = np.linspace(0,1,10)
y = np.sin(x * np.pi / 2.)
line = np.polyfit(x, y, deg=10)
plt.plot(x, y, '.')
plt.plot(x, np.polyval(line,x), 'r')
# xx = np.linspace(-5,4,100)
# plt.plot(xx, np.polyval(line,xx), 'g')
```

```
/Users/alex/anaconda/lib/python2.7/site-packages/numpy/lib/polynomia
l.py:594: RankWarning: Polyfit may be poorly conditioned
  warnings.warn(msg, RankWarning)
```

Out[57]:
```
[<matplotlib.lines.Line2D at 0x113d8f550>]
```



Interpolation

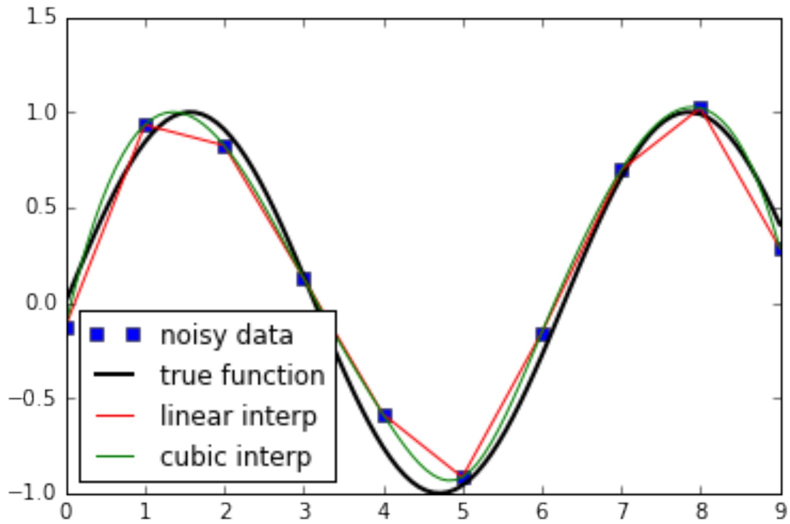
In [58]:
```
from scipy.interpolate import interp1d
```

In [59]:
```
def f(x):
    return np.sin(x)
```

In [60]:
```
n = np.arange(0, 10)
x = np.linspace(0, 9, 100)

y_meas = f(n) + 0.1 * np.random.randn(len(n)) # ajout de bruit
y_real = f(x)

linear_interpolation = interp1d(n, y_meas)
y_interp1 = linear_interpolation(x)

cubic_interpolation = interp1d(n, y_meas, kind='cubic')
y_interp2 = cubic_interpolation(x)
```

In [61]:
```
from scipy.interpolate import barycentric_interpolate, BarycentricI
nterpolator
BarycentricInterpolator??
```

In [62]:
```
plt.plot(n, y_meas, 'bs', label='noisy data')
plt.plot(x, y_real, 'k', lw=2, label='true function')
plt.plot(x, y_interp1, 'r', label='linear interp')
plt.plot(x, y_interp2, 'g', label='cubic interp')
plt.legend(loc=3);
```



Images

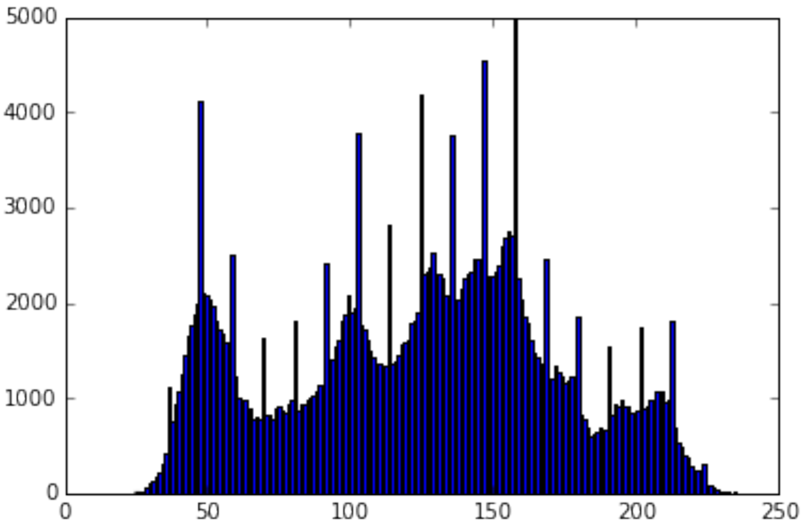
In [63]:
```
from scipy import ndimage
from scipy import misc
img = misc.lena()
print img
type(img), img.dtype, img.ndim, img.shape
```

```
[[162 162 162 ..., 170 155 128]
 [162 162 162 ..., 170 155 128]
 [162 162 162 ..., 170 155 128]
 ...,
 [ 43  43  50 ..., 104 100  98]
 [ 44  44  55 ..., 104 105 108]
 [ 44  44  55 ..., 104 105 108]]
```

Out[63]:
```
(numpy.ndarray, dtype('int64'), 2, (512, 512))
```

In [64]:
```
plt.imshow(img, cmap=plt.cm.gray)
plt.axis('off')
plt.show()
```

In [65]:
```
_ = plt.hist(img.reshape(img.size),200)
```

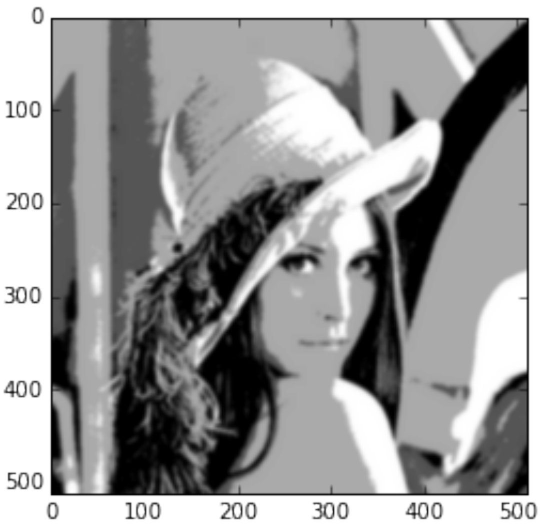


In [66]:
```
img[img < 70] = 50
img[(img >= 70) & (img < 110)] = 100
img[(img >= 110) & (img < 180)] = 150
img[(img >= 180)] = 200
plt.imshow(img, cmap=plt.cm.gray)
plt.axis('off')
plt.show()
```

Ajout d'un flou

In [67]:
```
img_flou = ndimage.gaussian_filter(img, sigma=2)
plt.imshow(img_flou, cmap=plt.cm.gray)
```

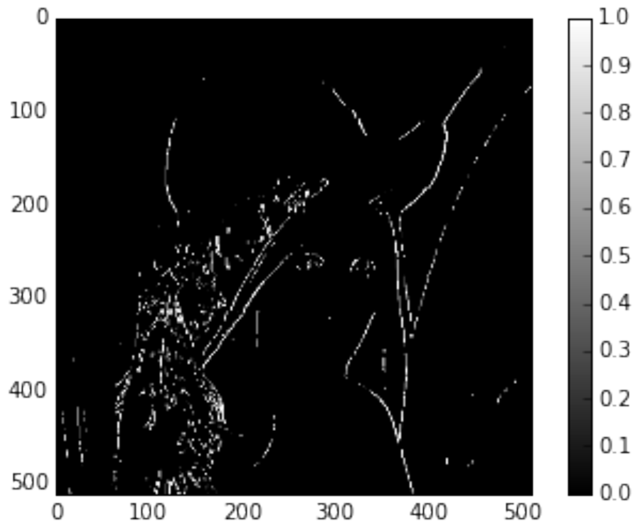
Out[67]: <matplotlib.image.AxesImage at 0x116e45190>



Application d'un filtre

In [69]:
```
img_sobel = ndimage.filters.sobel(img)
plt.imshow(np.abs(img_sobel) > 200, cmap=plt.cm.gray)
plt.colorbar()
```

Out[69]: <matplotlib.colorbar.Colorbar instance at 0x11793f680>

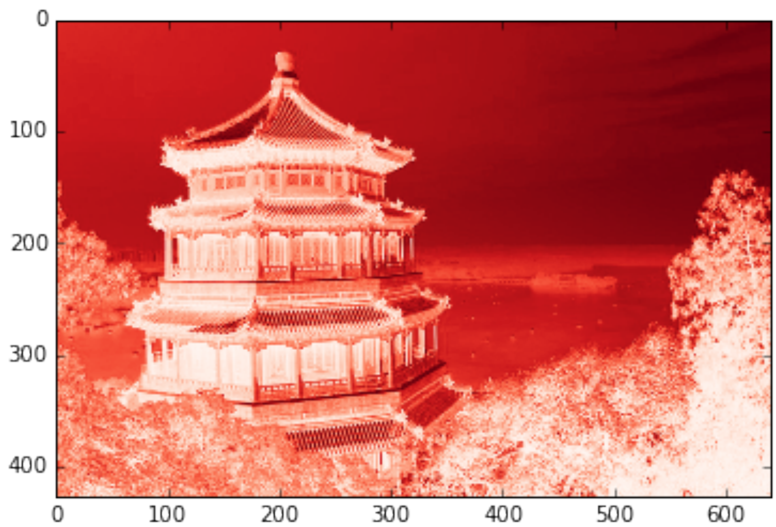


Accéder aux couches RGB d'une image:

In [70]:
```
img = ndimage.imread('china.jpg')
print(img.shape)
plt.imshow(img[:,:,0], cmap=plt.cm.Reds)
```

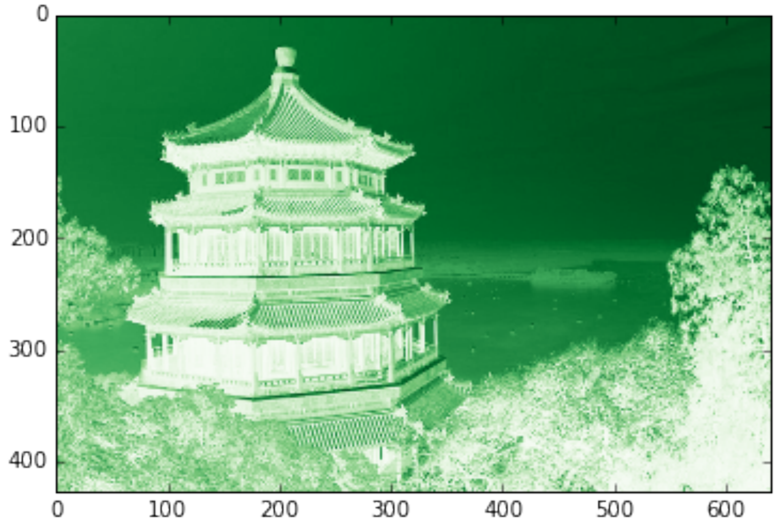
```
(427, 640, 3)
```

Out[70]: <matplotlib.image.AxesImage at 0x117dcb890>



In [71]:
```
plt.imshow(img[:,:,1], cmap=plt.cm.Greens)
```

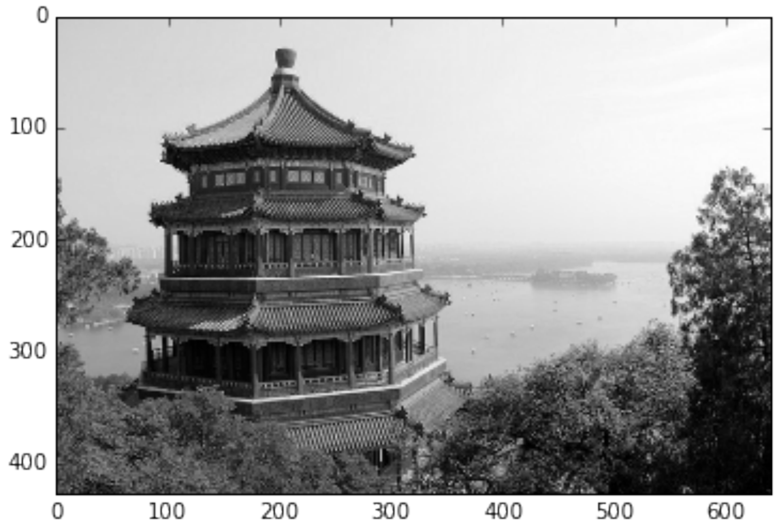
Out[71]: <matplotlib.image.AxesImage at 0x119159610>



Conversion de l'image en niveaux de gris et affichage:

In [72]:
```
a = np.mean(img, axis=2)
plt.imshow(a, cmap=plt.cm.gray)
```

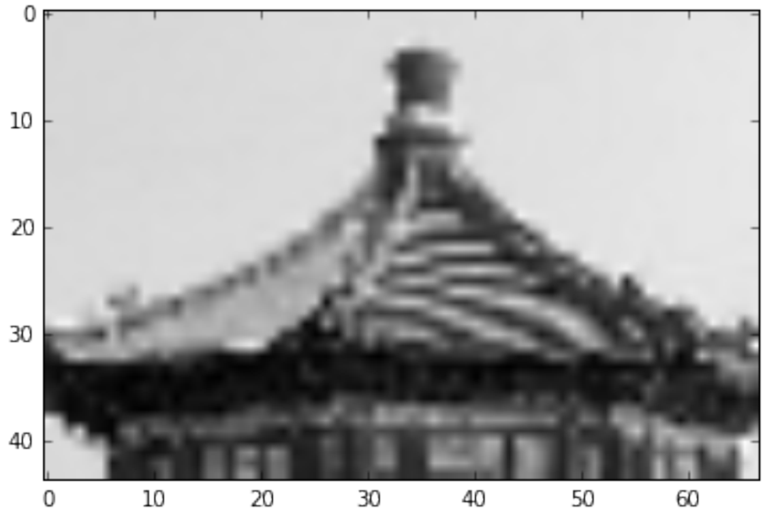
Out[72]: <matplotlib.image.AxesImage at 0x1134d71d0>



Observer le repliement spectral (aliasing)

In [73]:
```
a = a[20:150, 100:300]
plt.imshow(a[::3, ::3], cmap=plt.cm.gray)
```

Out[73]: <matplotlib.image.AxesImage at 0x116b791d0>



Pour aller plus loin

- http://www.scipy.org (http://www.scipy.org) - The official web page for the SciPy project.
- http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/tutorial/index.html (http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/tutorial/index.html) - A tutorial on how to get started using SciPy.
- https://github.com/scipy/scipy/ (https://github.com/scipy/scipy/) - The SciPy source code.
- http://scipy-lectures.github.io (http://scipy-lectures.github.io)

In [ ]: