

Les bases de NumPy

NumPy est une extension du langage de programmation Python, destinée à manipuler des matrices ou tableaux multidimensionnels ainsi que des fonctions mathématiques opérant sur ces tableaux.

NumPy permet la manipulations des vecteurs, matrices et polynômes.

Directive d'importation

- standard :

```
import numpy as np
```

Tableaux numériques

On convertit facilement des listes Python en tableau numpy. Essayez ceci :

```
import numpy as np
a = np.array([[1,2],[3,4]])
print(a)
print(a.dtype)
```

Sortie :

```
[[1 2]
 [3 4]]
<type 'numpy.ndarray'>
```

Pour définir un tableau, appelez simplement la fonction `.array` avec une liste ou un tuple. Des fonctions spéciales **zero**, **ones**, **rand** permettent d'initialiser à des valeurs particulières (0 ou 1), ou aléatoires.

Les fonctions `arange` et `shape` sont bien pratiques pour générer des nombres en séquences et réarranger des listes de nombres. La fonction `linspace` est utile parce qu'elle impose exactement le nombre de valeurs créées entre un minimum et un maximum.

Vous pouvez consulter [cette page](#) pour consulter d'autres fonctionnalités, ou [cette ancienne documentation](#).

[arrays_01.py](#)

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

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Divers codes à essayer pour créer des tableaux "array"
"""
import numpy as np

a = np.array(((1,2),(3,4))) # on peut créer un "array" à partir d'un
tuple
# afficher a, le nombre de dimensions, les dimensions, le type de
donnée
print(a, a.ndim, a.shape, a.dtype)
# avec des "floats" :
b = np.array([
    [1.1, 2.2, 3.3, 4.4],
    [5.5, 6.6, 7.7, 8.8],
    [9.9, 0.2, 1.3, 2.4],
])
print(b, b.ndim, b.shape, b.dtype)
# un tableau de zéros
c = np.zeros((4,2))
print(c, c.ndim, c.shape, c.dtype)
# un tableau tridimensionnel de 1 "complexe"
d = np.ones((2,3,4),dtype=complex)
print(d, d.ndim, d.shape, d.dtype)
# un tableau avec arange, et ensuite reshape
e1 = np.arange(1,36,1)
e = np.reshape(e1,(5,7))
print(e, e.ndim, e.shape, e.dtype)
f = np.random.rand(3,3)
print(f, f.ndim, f.shape, f.dtype)
# utilisation de linspace pour imposer le nombre d'éléments générés :
g = np.linspace(0.,np.pi,11)
print(g, g.ndim, g.shape, g.dtype)
```

Quelques manipulations élémentaires :

[arrays_02.py](#)

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Divers codes à essayer pour manipuler des tableaux "array"
"""
import numpy as np

a = np.array([[1,2],[3,4]])
b = np.array([[1,1],[1,1]])
c = a + b # addition terme à terme
print(c, c.ndim, c.shape, c.dtype)
```

```
d = a * b # multiplication terme à terme
print(d, d.ndim, d.shape, d.dtype)
e = np.dot(a,b) # multiplication matricielle
print(e, e.ndim, e.shape, e.dtype)
f = np.sin(np.pi*0.5*a) # fonction mathématique et adaptation
automatique du type
print(f, f.ndim, f.shape, f.dtype)
g = np.transpose(a) # transposition
print(g, g.ndim, g.shape, g.dtype)
print(np.sum(a), np.min(a), np.max(a)) # somme des éléments, minimum,
maximum
```

Fonctions mathématiques principales :

- abs, sign, sqrt
- logarithmes/exponentielles : log, log10, exp
- trigonométriques et inverses : sin, cos, tan, arcsin, arccos, arctan
- hyperboliques et inverses : sinh, cosh, tanh, arcsinh, arccosh, arctanh
- entiers inférieur, supérieur ou le plus proche : floor, ceil, rint

Autres fonctions

- *min* et *max* rendent le minimum et le maximum, *argmin* et *argmax* rendent les indices de ces éléments dans un tableau 1D (consulter la [documentation](#) pour les dimensions supérieures).
- *sorted* : tri
- *clip* : clipping permettant d'éliminer des valeurs inférieures à une borne minimale donnée ou supérieures à une borne maximale
- *unique* : élimine les "doublons"
- fonctions booléennes, pour des conditions, ou pour filtrer suivant des conditions (voir la documentation)
- *copy* : copie d'un tableau (pour éviter les modifications lors d'utilisation directe ou par référence)
- *.tolist()* : convertit un tableau numpy en liste standard de python

Algèbre linéaire

[simple_linear_system.py](#)

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Solve a system of simultaneous equation in two variables of the form
    2 * x + 7 * y = 17.
    3 * x - 5 * y = -21.

reference :
```

```

http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.linalg.solve.html
"""
#

import numpy as np
a = np.array([[2.,7.],[3.,-5.]]) # coefs matrice
b = np.array([[17.],[-21.]]) # independent coef vector
print(np.linalg.solve(a,b)) # solution

```

Quelques possibilités supplémentaires :

[arrays_linalg_03.py](#)

```

#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Divers codes à essayer pour de l'algèbre linéaire avec des tableaux
"array"
"""
import numpy as np

a = np.array([[1,2],[3,4]])
print(a, a.ndim, a.shape, a.dtype)
b = np.linalg.inv(a) # matrice inverse
print(b, b.ndim, b.shape, b.dtype)
unit = np.eye(2) # matrice unitaire
print(unit, unit.ndim, unit.shape, unit.dtype)
v = np.array([[10.], [14.]]) # vecteur colonne
x1 = np.dot(b,v) # multiplication de l'inverse de a par v
x2 = np.linalg.solve(a,v) # solution du système linéaire de
coefficients
# des inconnues a et de coefficients indépendants b
# les deux techniques donnent évidemment le même résultat !
print(x1, x1.ndim, x1.shape, x1.dtype)
print(x2, x2.ndim, x2.shape, x2.dtype)
# valeurs propres et vecteurs propres de matrices :
d = np.array([[1,1],[-1,1]])
print(np.linalg.eig(d))

```

Numpy dispose aussi d'une classe particulière de "arrays" pour des matrices.

Autres fonctions

- inner : produit scalaire (équivalent à dot sur des tableaux 1D)
- cross : produit vectoriel

- det : déterminant

Statistiques élémentaires

[arrays_stats_elem_04.py](#)

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Divers codes à essayer pour des statistiques élémentaires sur des
tableaux "array"
"""
import numpy as np

a = np.array([1.,2.,3.5,5.,6.,7.,7.4,7.8,8.2,8.4,8.5,9.,10.2,12.5])
print(a, a.ndim, a.shape, a.dtype)
print("médiane = ", np.median(a))
print("moyenne = ", np.mean(a))
print("variance = ", np.var(a))
print("Écart-type = ", np.std(a))
```

Références complémentaires

- [How to do Descriptives Statistics in Python using Numpy](#)

Itérations sur les tableaux

[arrays_iteration_05.py](#)

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
itérations sur des tableaux "array"
"""
import numpy as np

a = np.array([1.,2.,3.5,5.,6.,7.,7.4,7.8,8.2,8.4,8.5,9.,10.2,12.5])
for x in a:
    print(x)
# l'itération sur un tableau multidimensionnel se fait sur un premier
niveau de sous-listes
b = np.array([
    [1.1, 2.2, 3.3, 4.4],
    [5.5, 6.6, 7.7, 8.8],
    [9.9, 0.2, 1.3, 2.4],
```

```
    ])  
for x in b:  
    print(x)  
    for y in x:  
        print(y, ", ", ",")  
    print
```

Manipulation de polynômes

Une nouvelle bibliothèque [polynomial](#) devrait remplacer l'ancien "poly1d"

poly1d & polynomial ordonnent les coefficients en sens inverse !!!

[arrays_polynomes_06.py](#)

```
#!/usr/bin/env python  
# -*- coding: utf-8 -*-  
"""  
Utilisation de tableaux "array" pour des polynômes  
"""  
import numpy as np  
from numpy.polynomial import Polynomial as P  
  
# les coefficients du polynômes sont donnés par ordre décroissance des  
# degrés  
a = P([4., 3., 2., 1.]) # =  $x^3 + 2x^2 + 3x + 4$   
  
print("polynôme : \n", a, type(a))  
# les coefficients de a :  
print("coefficients : ", a.coef)  
# les racines de a :  
print("racines : ", a.roots())  
# l'ordre du polynôme :  
print("ordre : ", a.degree())  
# évaluations sur un vecteur  
x = np.linspace(0, 2., 21)  
print("x = ", x)  
print("évaluation en x : ", a(x))  
# dérivation  
print("dérivée : \n", a.deriv(1))  
print("dérivée seconde : \n", a.deriv(2))  
print("dérivée troisième : \n", a.deriv(3))  
print("dérivée quatrième : \n", a.deriv(4))  
# intégration
```

```

print("intégrale : \n", a.integ(1))
# création d'un polynôme par ses racines
b = a.roots()
c = P.fromroots(b)
print("Polynômes recrées par les racines :\n", c)
#
# fitting polynomial
#
# utilisation de polyld (ancienne librairie)
#
# numpy.polyfit (polyld) :
#
https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.polynomials.polyld.html
#
https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.polyfit.html
#
xd = np.array([0., 1., 2., 3., 4., 5.])
yd = np.array([0.05, 0.99, 3.95, 9.17, 15.86, 24.93])
pfit = np.polyld(np.polyfit(xd, yd, 2))
print("fit d'une parabole (polynôme d'ordre 2) sur ces x et y :")
print(xd)
print(yd)
print("polynôme de fit : \n", pfit)
#
# "Unfortunately, np.polynomial.polynomial.polyfit returns the
coefficients
# in the opposite order of that for np.polyfit and np.polyval"
# →
https://stackoverflow.com/questions/18767523/fitting-data-with-numpy
#
#####
# Ajouter les fits utilisant numpy.polynomial... #
#####
#
# numpy.polynomial.polynomial.Polynomial.fit :
# https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.polynomials.html
#
https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.polynomials.package.html
#
https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.polynomials.classes.html
#
https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.polynomial.polynomial.Polynomial.fit.html
#
# numpy.polynomial.polynomial.polyfit :
#
https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.polynomial.polynomial.polyfit.html

```

```
#
```

Autres fonctions : voir [ici](#)

L'ordre des coefficients peut facilement être inversé par un slice avec les paramètres `[::-1]`

Transformées de Fourier

Le module de [transformée de Fourier discrète](#) de numpy comprend de nombreuses variantes, et les transformées peuvent aussi être effectuées via le [module équivalent fftpack de Scipy](#).

[fonctions-FT-04.py](#)

```
#!/usr/bin/env python
#-*- coding: utf-8 -*-
# graphes de fonctions et des transformées de Fourier, utilisant numpy
# et matplotlib pour les graphes

import numpy as np      # directive d'importation standard de numpy
from numpy import fft   # importation spécifique du module fft de numpy
import matplotlib.pyplot as plt
#from scipy import fftpack # directive d'importation standard du
#module équivalent de scipy
#
#https://docs.scipy.org/doc/scipy-0.15.1/reference/api.html#guidelines-f
#or-importing-functions-from-scipy
#from pylab import * # directive d'importation alternative en mode
#"pylab" --> supprimer les plt., fft.,

def f1(t):
    f = np.sin(np.pi*2.*t)
    return f

def f2(t):
    f = np.exp(-t/2.)*np.cos(np.pi*2.*t)
    return f

def f3(t):
    f =
(4./np.pi)*(np.sin(np.pi*2.*t)+np.sin(np.pi*6.*t)/3.+np.sin(np.pi*10.*t
)/5.+np.sin(np.pi*14.*t)/7.+np.sin(np.pi*18.*t)/9.)
    return f

# une TF peut se faire via :
# fft.fft() du fait de la directive from numpy import fft
# , ou np.fft.fft() du fait de import numpy as np
# , ou fftpack.fft(y1) si on utilise le module de scipy
```

```
x = np.arange(0.0,10.0,0.025)
y1 = f1(x)
z1 = fft.fft(y1)
w1 = np.abs(z1[:len(z1)//2])
y2 = f2(x)
z2 = fft.fft(y2)
w2 = np.abs(z2[:len(z2)//2])
y3 = f3(x)
z3 = fft.fft(y3)
w3 = np.abs(z3[:len(z3)//2])

# doc subplot :
http://matplotlib.org/api/pyplot\_api.html?highlight=subplot#matplotlib.pyplot.subplot
plt.subplot(3,2,1) # sous-graphes en 3 lignes et 2 colonnes, graphe 1
plt.title('Fonctions')
plt.plot(x,y1)
plt.xlabel("t/s")
plt.ylabel("A(t)")

plt.subplot(3,2,2) # sous-graphes en 3 lignes et 2 colonnes, graphe 2
plt.title(u'Transformées de Fourier')
plt.plot(w1)
plt.xlabel("f/Hz")
plt.ylabel("A(f)")

plt.subplot(3,2,3) # sous-graphes en 3 lignes et 2 colonnes, graphe 3
plt.plot(x,y2)
plt.xlabel("t/s")
plt.ylabel("A(t)")

plt.subplot(3,2,4) # sous-graphes en 3 lignes et 2 colonnes, graphe 4
plt.plot(w2)
plt.xlabel("f/Hz")
plt.ylabel("A(f)")

plt.subplot(3,2,5) # sous-graphes en 3 lignes et 2 colonnes, graphe 5
plt.plot(x,y3)
plt.xlabel("t/s")
plt.ylabel("A(t)")

plt.subplot(3,2,6) # sous-graphes en 3 lignes et 2 colonnes, graphe 6
plt.plot(w3)
plt.xlabel("f/Hz")
plt.ylabel("A(f)")

plt.savefig('fonctions-fft.png')
plt.show()
```

Figure obtenue :



Avantages de numpy

L'utilisation de la librairie nump permet souvent d'améliorer les performances par rapport à un code numérique écrit en "pure Python". Voici un exemple :

[direct_pi_multirun-timeit.py](#)

```
# -*- coding: utf-8 -*-  
"""  
In the introduction of his MOOC "SMAC" (Statistical Mechanics:  
Algorithms and  
Computations - https://www.coursera.org/learn/statistical-mechanics),  
Werner  
Krauth propose a simple method to compute pi using a direct sampling  
Monte Carlo simulation. A program is proposed in Python, in a version  
which  
allows to do many runs of the function direct_pi(N). The code is  
written in a  
style close to pseudocode used for algorithms, or classical coding  
style used  
in C, Fortran, ...  
  
It is possible to write the function in a more "pythonic" way, or to  
use the  
numpy numerical library, to improve compactness and efficiency.  
  
Function direct_pi_DV(N) use pure python with list comprehension to  
eliminate  
the for loop. The sum is directly made on the boolean comparison  
results to count  
the number of true trials.  
  
Function direct_pi_DV_np(N) use the numpy library to vectorize the  
loop, directly  
square values and sum the array elements over the smaller axis. Again  
the sum  
is directly made on the boolean comparisons.  
  
Finally, in order to compare efficiency, the execution times of the  
three  
versions have been measured using the timeit library.  
  
Here is value obtain for a sample run :  
direct_pi      : 3.5209695600005944 s  
direct_pi_DV   : 4.000994963998892 s  
direct_pi_Dv_np : 0.19237353700009407 s
```

```
The use of the numpy library clearly improve the computer speed
performance by
a factor about 20.
"""
import random, timeit
import numpy as np

def direct_pi(N):
    n_hits = 0
    for i in range(N):
        x, y = random.uniform(-1.0, 1.0), random.uniform(-1.0, 1.0)
        if x ** 2 + y ** 2 < 1.0:
            n_hits += 1
    return n_hits

def direct_pi_DV(N):
    return sum((random.uniform(-1,1)**2 + random.uniform(-1,1)**2) < 1
for i in range(N))

def direct_pi_DV_np(N):
    return np.sum((np.random.uniform(-1,1,(N,2))**2).sum(1)<1)

n_runs = 1000
n_trials = 4000

# running :
for run in range(n_runs):
    print(run, 4.0 * direct_pi(n_trials) / n_trials)

for run in range(n_runs):
    print(run, 4.0 * direct_pi_DV(n_trials) / n_trials)

for run in range(n_runs):
    print(run, 4.0 * direct_pi_DV_np(n_trials) / n_trials)

# timing three versions :
print(timeit.timeit('direct_pi('+str(n_trials)+)')', "from __main__
import direct_pi", number=n_runs))
print(timeit.timeit('direct_pi_DV('+str(n_trials)+)')', "from __main__
import direct_pi_DV", number=n_runs))
print(timeit.timeit('direct_pi_DV_np('+str(n_trials)+)')', "from
__main__ import direct_pi_DV_np", number=n_runs))
```

Références

- [Site officiel](#)
- [NumPy reference](#)
- [Page Wikipédia](#)

Last update:

2020/12/27 10:45 teaching:progappchim:numpy_simple https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:numpy_simple?rev=1609062354

- [Guide to NumPy](#)
- [Tutoriel via l'exemple du jeu de la vie \(+ ici\)](#)
- http://wiki.scipy.org/Tentative_NumPy_Tutorial
- [Introduction à Numpy, Scipy et Matplotlib](#)
- [NumPy: creating and manipulating numerical data](#), de Emmanuelle Gouillart, Didrik Pinte, Gaël Varoquaux, and Pauli Virtanen
- [Getting the Best Performance out of NumPy](#)
- [Two cool features of Python NumPy: Mutating by slicing and Broadcasting](#)
- [Numpy Tutorial Part 1: Introduction to Arrays](#)
- [101 NumPy Exercises for Data Analysis](#)
- [Numpy—Python made efficient](#)
- [Array programming with NumPy](#) Harris, C.R., Millman, K.J., van der Walt, S.J. et al., Nature 585, 357–362 (2020) DOI: 10.1038/s41586-020-2649-2
- [NumPy Illustrated: The Visual Guide to NumPy](#)

From:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:

https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:numpy_simple?rev=1609062354

Last update: **2020/12/27 10:45**

