

Utilisation de polynômes orthogonaux avec NumPy

Voici un programme permettant d'obtenir le même graphe que celui obtenu précédemment, en utilisant les modules spécifiques de NumPy. Cet exemple montre tout l'intérêt d'utiliser des modules pré-existants. Le programme est réduit à 3 lignes pour l'importation, 4 pour la création des graphes et 4 pour commander la représentation.

```
<sxh python; title : polycheby.py> #!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*- """ Représentations
des polynômes de Chebyshev avec utilisation de matplotlib et numpy Références :
http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.polynomials.package.html
http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.polynomials.chebyshev.html
http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.polynomial.chebyshev.chebval.html
http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.linspace.html
http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.ones.html
http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.zeros.html
http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.append.html """ import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt from numpy.polynomial.chebyshev import chebval x = np.linspace(-1,
1, 100)
```

```
for n in range(10):
```

```
    y = chebval(x, np.append(np.zeros(n), np.ones(1)))
    plt.plot(x, y)
```

```
plt.axis([-1,1,-1,1]) # xmin, xmax, ymin, ymax plt.title('Polynomes de Tchebyshev') plt.legend()
plt.show()
```

```
</sxh>
```

Application : oscillateur harmonique quantique

La mécanique quantique permet de décrire la vibration de molécules biatomiques par le modèle de l'[oscillateur harmonique quantique](#).

Il serait facile d'écrire un programme représentant les fonctions d'ondes, et les présentant sous la même forme que cette [figure sur Wikimedia](#).

Application : orbitales atomiques

- cf. cet [exemple de l'orbitale 3p hydrogénoïde](#) avec le module [Mayavi](#)
- [Autre exemple avec Mayavi](#)

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

Permanent link:
<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:polynomes-12?rev=1456230673>

Last update: **2016/02/23 13:31**

