

Environnement de calcul scientifique et modélisation

Georges KOEPFLER

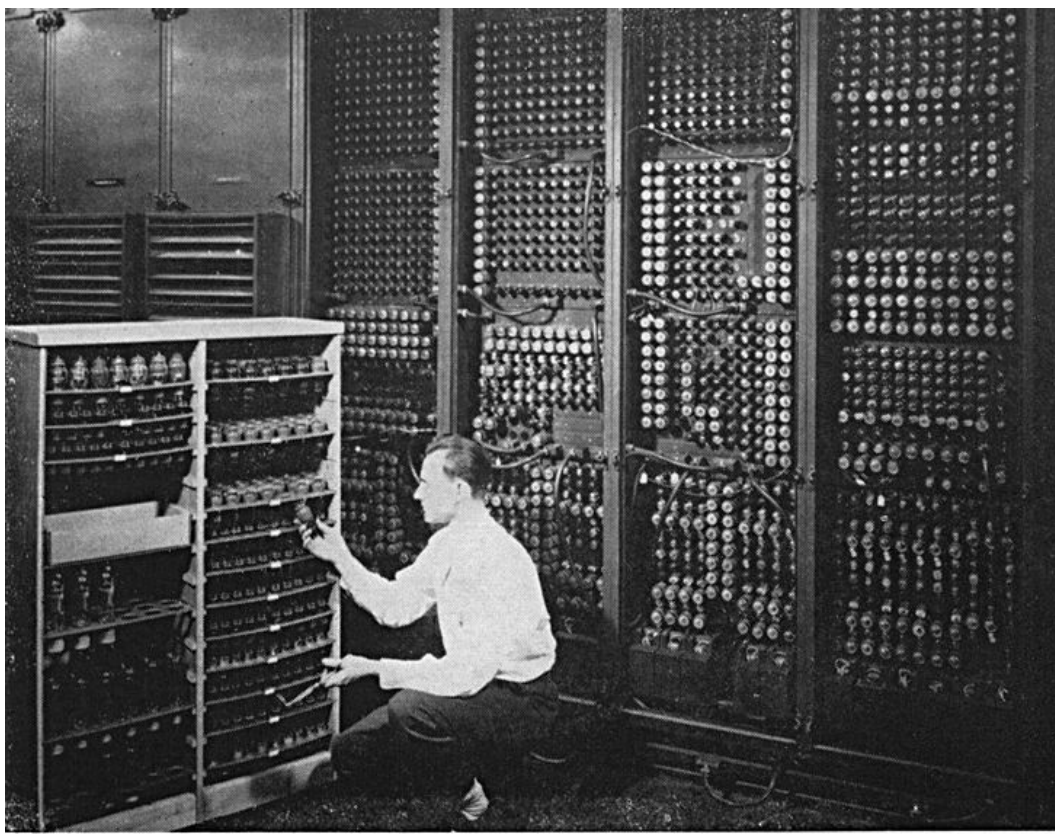
Université Paris Descartes

S4, 2012-13

Instruments de calcul

- ▶ Boulier (1100-) ;
- ▶ Règle à calcul (1650-1970) ;
- ▶ Machine à additionner, à multiplier, pour la “Pascaline” de Blaise Pascal (1642), voir le polycopié ;
- ▶ Machines électroniques, Z3 (1938), *ENIAC* (1946) ;
- ▶ Calculatrice (scientifique) de poche électronique (1972) ;
- ▶ Ordinateur personnel (1978).

Voir http://fr.wikipedia.org/wiki/Instrument_de_calcul



Replacing a bad tube meant checking among ENIAC's 19,000 possibilities.

ENIAC, Univ. de Pennsylvanie (1946-55), 30 tonnes sur 167 m².
Nombres signés de 10 chiffres : 5.000 additions simples/seconde,
357 multiplications/sec, 38 divisions/sec. (source Wikipedia).

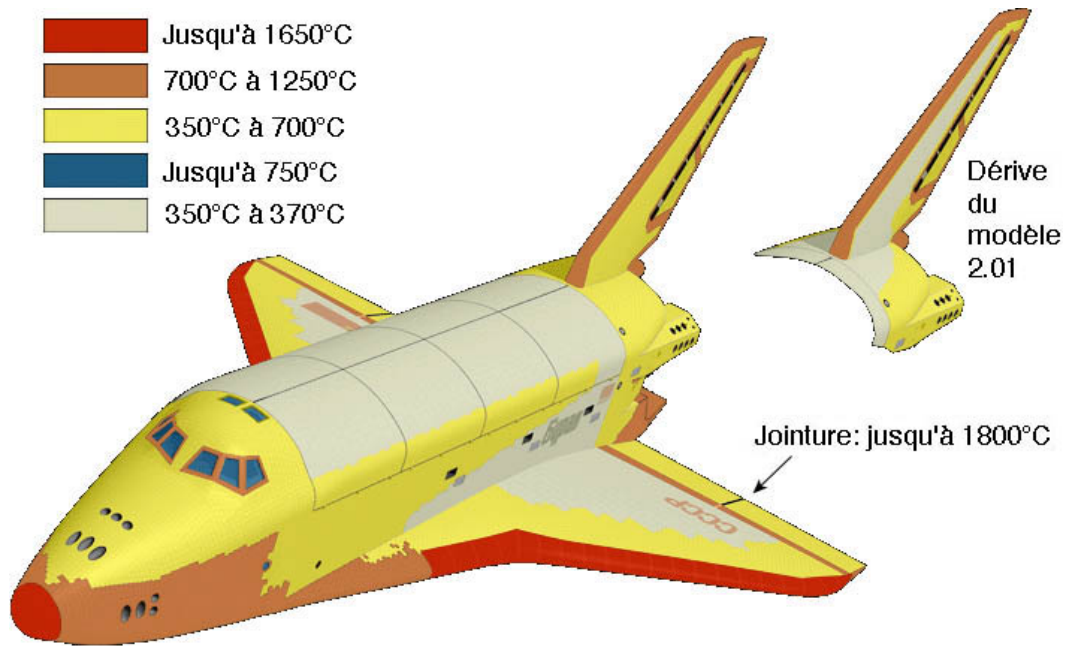
Environnements de calcul scientifique

Pour *modéliser* et *résoudre* des problèmes pratiques, souvent compliqués et faisant intervenir beaucoup de données et paramètres, les chercheurs et ingénieurs font appel

- ▶ au **calcul formel** qui permet des opérations abstraites comme la dérivation, l'intégration, . . .
Exemples : *Maple*, *Mathematica* (logiciels propriétaires).
- ▶ et au **calcul numérique**.
Des logiciels comme *Scilab* (libre) ou *Matlab* (propriétaire) sont capables d'effectuer de grandes quantités de calculs.
Des boîtes à outils permettent de résoudre des problèmes d'optimisation, de statistiques, . . .
Note : le logiciel *R* est spécialisé dans l'analyse statistique.

Combiné à des interfaces graphiques puissants, on obtient des logiciels de Conception Assistée par Ordinateur, CAO, et de CFA0, si des robots permettent la Fabrication.

Navette spatiale *Bourane* (bouclier thermique)



(source <http://www.buran.fr/>)

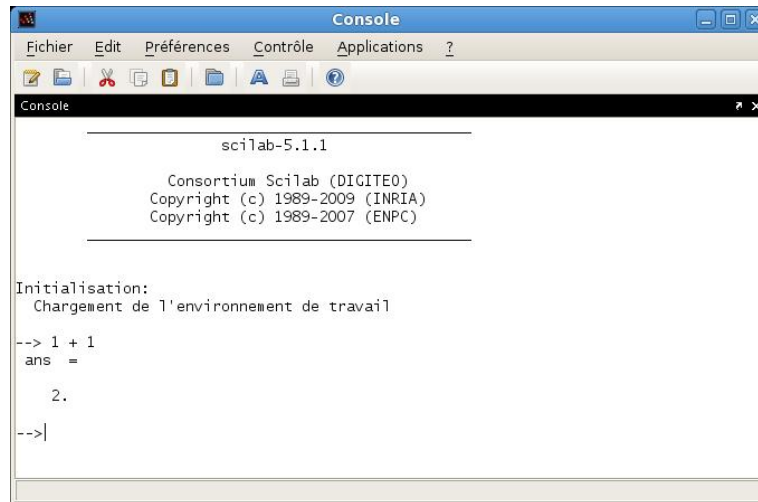
Plan du cours :

- ▶ Définition et opérations sur vecteurs, matrices et tableaux ;
- ▶ Représentations graphiques ;
- ▶ Programmation ;
- ▶ Calcul numérique :
méthode de Horner, résolution de systèmes linéaires,
intégration numérique,...

Objectifs du cours :

- ▶ Apprendre à utiliser un logiciel de calcul scientifique standard ;
- ▶ Introduction aux problèmes liés au calcul numérique :
 - > erreurs d'arrondi et précision,
 - > complexité des algorithmes et temps de calcul.

Lancer scilab par le menu : Applications -> Calcul -> Scilab



On obtient ainsi une ligne commande, indiquée par -->

Quelques objets scalaires de base :

- ▶ des constantes numériques prédéfinies : %e, %pi, %i ;
- ▶ des nombres réels : 2.56, 1000.5 ;
- ▶ des nombres complexes : %i, 1.05+2*%i ;

Les opérations et fonctions standards s'appliquent à ces quantités scalaires :

addition +, soustraction -, multiplication *, division /

De plus, toutes les fonctions standard sont disponibles :

sqrt, sin, cos, log, ...

On a accès, en un premier temps, à une calculatrice sophistiquée !

Grâce à la programmation, on obtient un logiciel pouvant résoudre des problèmes complexes.

Erreurs d'arrondi

```
|
-->%e | -->format("v",25)
%e = 2.7182818 |
| -->1/3
-->sqrt(-1) | ans = 0.33333333333333333148296
ans = i |
| -->100000/3
-->(2+%i*3)*(1-%i) | ans = 33333.333333333335758653
ans = 5. + i |
| -->tan(atan(1))
-->sin(%pi/2) | ans = 0.99999999999999998889777
ans = 1. |
|
```

Sur l'ordinateur, on a une précision finie et un temps limité !

Erreurs d'arrondi

La mémoire disponible étant finie, on ne peut pas représenter les nombres réels qui ont un développement décimal infini.

On peut représenter le rationnel $1/3$,

mais pas son écriture décimale,

on ne peut représenter π que par un nombre fini de décimales.

Un représentation fréquente est celle en *virgule flottante* des nombres réels :

$$f = (-1)^s \cdot 0, d_{-1}d_{-2} \dots d_{-r} \cdot b^j,$$

$$m \leq j \leq M \text{ et } 0 \leq d_{-i} \leq b - 1;$$

où s est le *signe*, $d_{-1}d_{-2} \dots d_{-r}$ la *mantisse*, b la *base* et r est le nombre de *chiffres significatifs*.

La *précision machine* pour un flottant est la distance entre 1 et le nombre flottant immédiatement plus grand $1 + b^{1-r}$.

En **Scilab** %eps = 2.220D-16.

Erreurs d'arrondi

Le résultat d'un calcul n'est pas nécessairement représentable dans la machine : on est obligé d'**arrondir**.

Entre 1 et $1+\%eps$ aucun nombre de la droite réelle est représentable.

```
-->format("v",25)
-->%eps
%eps = 0.00000000000000002220446
-->a=1+%eps
a = 1.00000000000000002220446
-->m=(a+1)/2
m = 1. // erreur d'arrondi
-->n=(a-1)/2
n = 0.00000000000000001110223
-->2*(m-n)
ans = 1.9999999999999997779554 // erreur numérique
```

En effectuant un *grand* nombre d'opérations, les *erreurs* d'arrondi vont finir par *perturber* le résultat final.

Gestion d'erreurs

Si le résultat d'un calcul devient trop grand pour la machine, on obtient Inf, c'est la «valeur» de l'infini de Scilab.

Lorsque le résultat d'une opération n'est pas défini, le résultat est NaN (Not A Number).

Les *divisions par zéro* et les *singularités* d'une fonction donnent aussi lieu à des messages d'erreur.

La gestion des erreurs est importante lorsqu'un programme doit traiter de grandes quantités de données.

Exemple, calcul de $n/(n-1)$:

```
--> for n=1:1000, n/(n-1); end
      !--error 27
```

Division par zéro ...

L'erreur sur le premier calcul empêche les autres à être effectués !

Fichiers de commande

Pour pouvoir répéter et sauvegarder des commandes, on peut utiliser des *fichiers de commande* ou fichiers **exécutables**.

Dans Scilab, le nom d'un tel fichier se termine en **.sce**

On y écrit les commandes comme sur la ligne de commande de Scilab.

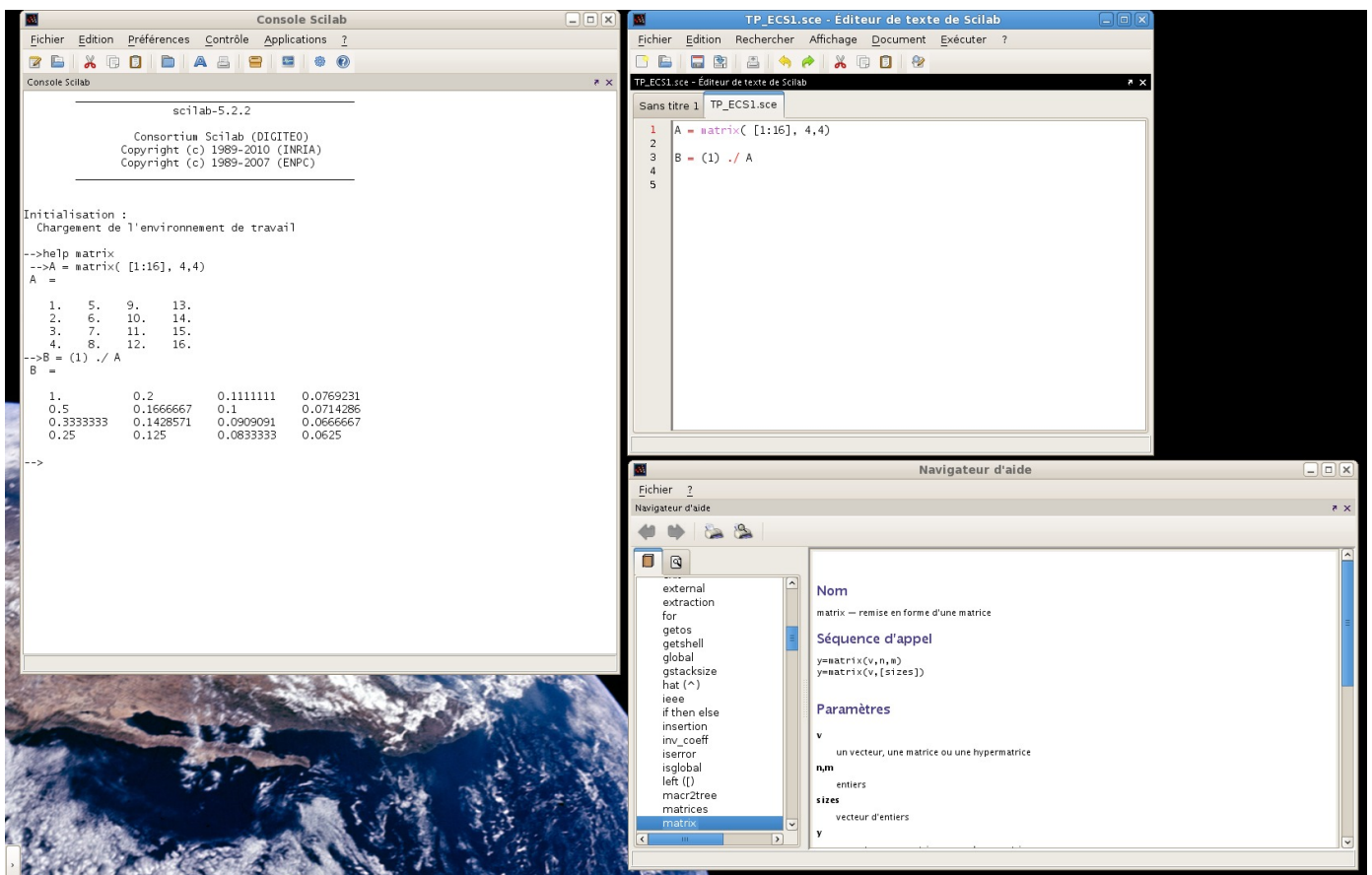
Grâce au "copier-coller", on les exécute dans le terminal Scilab.

Le meilleur outil pour créer ou modifier un fichier ".sce" est

l'éditeur de Scilab dans le menu **Applications** :

- ▶ les mots clefs de Scilab y apparaissent en **couleur**, ce qui permet d'éviter les fautes de frappe ;
- ▶ par le menu **Exécuter** de l'éditeur, on peut faire exécuter toutes les commandes **Chargez** ou une partie sélectionnée **Évaluez...** ;
- ▶ on utilisera l'éditeur en programmation pour la sauvegarde des fonctions définies par "fonction".

Trois fenêtres : Terminal Scilab - Editeur Scilab - Aide Scilab



Les opérations $+$, $-$, $*$, $/$, sont interprétées comme

opérations matricielles

Soient A et B des matrices,

avec $\text{size}(A)=[l1,c1]$ et $\text{size}(B)=[l2,c2]$

- la matrice $C=A+B$, resp. $C=A-B$, est définie uniquement si $l1==l2$ et $c1==c2$, dans ce cas $\text{size}(C)=[l1,c1]$.
- la matrice $C=A*B$, est définie uniquement si $c1==l2$ et dans ce cas $\text{size}(C)=[l1,c2]$.
- si A est une matrice carrée,
 $A \wedge p$ calcule la puissance matricielle avec p réel.
Attention : pour des matrices rectangulaires, on applique la puissance élément par élément, cf. opération \wedge .
- l'opération $/$ est à interpréter comme résolution d'une équation matricielle : $x=u/v$ solution de $x * v = u$, c'est un problème d'algèbre linéaire.

Si l'on veut manipuler des *tableaux* on fait des opérations

élément par élément

Soient A et B de **même dimensions** : $\text{size}(A)==\text{size}(B)$.

Pour $1 \leq i \leq \text{NbLignes}$, $1 \leq j \leq \text{NbColonnes}$

- les opérations $A+B$, resp. $A-B$, restent inchangées :
 $C(i,j)=A(i,j) + B(i,j)$ et $C(i,j)=A(i,j) - B(i,j)$
- l'opération $A.*B$ calcule le produit élément par élément :
 $C(i,j)=A(i,j) * B(i,j)$;
- l'opération $A./B$ fait la division élément par élément :
 $C(i,j)=A(i,j) / B(i,j)$;
- l'opération $A.^B$ prend la puissance élément par élément :
 $C(i,j)=A(i,j) ^ B(i,j)$.

Remarques :

1. Pour A et B des *scalaires*, i.e. des matrices $(1, 1)$, les opérations matricielles et élément par élément sont identiques.
2. Si A est une matrice et B un scalaire, alors l'opération élément par élément considère que B vaut $B*\text{ones}(A)$.

De même si B est une matrice et A un scalaire.

Motivations :

Les opérations élément par élément sur les tableaux permettent souvent d'éviter les boucles.

⇒ *Facilite* l'écriture et la vérification de programmes.

⇒ Apporte un *gain* en temps de calcul.

```
-->A=rand(100,100);
-->B=rand(100,100);
-->tic(); C=A.*B; toc()
ans =      0.01          // temps CPU
-->clear C
-->tic(); for i=1:100,for j=1:100, ..
-->          C(i,j)=A(i,j)*B(i,j); end, end; toc()
ans =      0.12          // temps CPU
```

Manipulation par blocs de matrices

En algèbre linéaire, on utilise souvent des **partitions de matrices en blocs** pour simplifier les calculs. Nous allons donner quelques exemples de manipulation par blocs des matrices.

Exemple : résolution de $A * X = B$, où $A = (a_{ij})$, $X = (x_{ij})$ et $B = (b_{ij})$ sont des matrices carrées d'ordre n .

Notons, pour $1 \leq j \leq n$, $X_{1j} = \begin{pmatrix} x_{1j} \\ x_{2j} \\ \vdots \\ x_{n-1,j} \\ x_{nj} \end{pmatrix}$ et $B_{1j} = \begin{pmatrix} b_{1j} \\ b_{2j} \\ \vdots \\ b_{n-1,j} \\ b_{nj} \end{pmatrix}$.

L'équation $A * X = B$ s'écrit, grâce aux colonnes de X et B :

$$A * [X_{11} \ X_{12} \ \cdots \ X_{1n}] = [B_{11} \ B_{12} \ \cdots \ B_{1n}]$$

où encore

$$A * X_{1j} = B_{1j} \text{ pour } 1 \leq j \leq n .$$

Addition par blocs de matrices

Soient A et B des matrices de même dimensions avec

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1q} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{p1} & \dots & A_{pq} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad B = \begin{pmatrix} B_{11} & \dots & B_{1q} \\ \vdots & & \vdots \\ B_{p1} & \dots & B_{pq} \end{pmatrix}$$

où les blocs qui se correspondent, A_{ij} et B_{ij} , ont même dimensions.

L'addition par blocs de A et B s'écrit :

$$A + B = \begin{pmatrix} A_{11} + B_{11} & \dots & A_{1q} + B_{1q} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{p1} + B_{p1} & \dots & A_{pq} + B_{pq} \end{pmatrix} .$$

Multiplication par blocs de matrices

Soient A et B des matrices décomposées en blocs :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1r} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{q1} & \dots & A_{qr} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad B = \begin{pmatrix} B_{11} & \dots & B_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ B_{r1} & \dots & B_{rs} \end{pmatrix} ,$$

Si les produits AB , $A_{ik}B_{kj}$ ($1 \leq i \leq q$, $1 \leq j \leq s$, $1 \leq k \leq r$) sont définis, la multiplication par blocs de A et B s'écrit :

$$C = AB = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^r A_{1k}B_{k1} & \dots & \sum_{k=1}^r A_{1k}B_{ks} \\ \vdots & & \vdots \\ \sum_{k=1}^r A_{qk}B_{k1} & \dots & \sum_{k=1}^r A_{qk}B_{ks} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & \dots & C_{1s} \\ \vdots & & \vdots \\ C_{q1} & \dots & C_{qs} \end{pmatrix} .$$

Exemple :

On définit

$$A_{11} = [1, 2; 3, 4] = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, A_{22} = A'_{11},$$

$$A_{12} = A_{21} = B_{11} = \text{eye}(2, 2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$B_{21} = \text{zeros}(2, 2), B_{12} = \text{zeros}(2, 1) \text{ et } B_{22} = \text{ones}(2, 1).$$

$$\text{On pose } A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \text{ et } B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}.$$

Écrire A , B et calculer

$$A * B = \begin{pmatrix} A_{11} * B_{11} + A_{12} * B_{21} & A_{11} * B_{12} + A_{12} * B_{22} \\ A_{21} * B_{11} + A_{22} * B_{21} & A_{21} * B_{12} + A_{22} * B_{22} \end{pmatrix}$$

Déterminant par blocs

Soit A une *matrice carrée* et diagonale par blocs :

$$A = (A_{ij})_{1 \leq i, j \leq p} \text{ avec } A_{ij} = 0 \text{ pour } i \neq j.$$

Les blocs A_{ii} sont *carrés*, de taille $(n_i, n_i)_{1 \leq i \leq p}$,
on calcule alors le déterminant par blocs de A :

$$\det(A) = \begin{vmatrix} A_{11} & O & O & \dots & O \\ O & A_{22} & O & \dots & O \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ O & & O & A_{p-1,p-1} & O \\ O & & \dots & O & A_{pp} \end{vmatrix} = \prod_{i=1}^p \det(A_{ii}).$$

Note :

1. les dimensions p_i des blocs A_{ii} peuvent varier ;
2. par O , on désigne des blocs rectangulaires de zéros, de dimensions adaptées et obtenus par la commande `zeros(n, m)`

Exemples :

- On suppose les blocs de A et x compatibles :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \in \mathcal{M}(d, d) \text{ et } x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d :$$

$$Ax = \begin{pmatrix} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 \end{pmatrix} .$$

- Soit $\alpha \in \mathbb{R}$, $v \in \mathbb{R}^d$ et $B \in \mathcal{M}(d, d)$.

On pose $A = \begin{pmatrix} \alpha & v^t \\ v & B \end{pmatrix} \in \mathcal{M}(d+1, d+1)$, calculer A^2 .

- On définit $B = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ et ensuite on exécute :

$$A=B, \quad A(3:4, 3:4)=B, \quad A(5:6, 5:6)=B$$

Écrire A et calculer le déterminant de A .

Temps de calcul et architecture

- ▶ Il ne suffit pas d'augmenter la *vitesse de calcul* et la *mémoire centrale des processeurs* pour obtenir des programmes rapides !
- ▶ Lors de la multiplication de très grandes matrices, une grande partie du temps de traitement est utilisé pour *transférer des données* et non *pas pour les calculs* !
- ▶ Des bibliothèques spécialisées (BLAS, LAPACK) implémentent des **opérations par blocs** en tenant compte de l'architecture du processeur et du bus de données :
 - les blocs transférés sont adaptés à la taille des mémoires d'accès rapide,
 - on fait moins de transferts lents, on passe plus de temps sur les calculs.
- ▶ Des logiciels interprétés tels que **Scilab** ou **Matlab**©, utilisent des opérations par blocs pour accroître leur performances.

Temps de calcul et algorithmes

Soient A , B et C des matrices réelles rectangulaires, de dimensions respectives $[n, m]$, $[m, p]$ et $[p, q]$.

Combien d'opérations sur des nombres réels sont nécessaires pour calculer le produit ABC ?

Deux possibilités d'évaluation car $(AB)C = A(BC)$!

Le calcul de AB nécessite $m - 1$ additions et m multiplications pour chacun des np termes de AB . D'où en tout $O(2nmp)$ opérations.

Le calcul de $(AB)C$ nécessite $O(2np(m + q))$ opérations, tandis que le calcul de $A(BC)$ se fait en $O(2mq(n + p))$ opérations.

Exemple : pour $n = p = 10$ et $m = q = 100$, on trouve $4 \cdot 10^4$ opérations pour $(AB)C$ et $4 \cdot 10^5$ pour $A(BC)$.

La multiplication des matrices rectangulaires est *associative*, mais le nombre d'opérations nécessaires peut varier avec la position des parenthèses !

Temps de calcul et algorithmes

Pour des matrices carrées A et B , de taille $n = 2^p$, on peut diminuer le nombre de multiplications nécessaires pour calculer $C = A * B$.

```
function C=mult_matrices(A,B)
    n=size(A,1);
    C=zeros(n,n); // initialisation
    for i=1:n
        for j=1:n
            for k=1:n
                C(i,j)= C(i,j)+A(i,k)*B(k,j);
            end
        end
    end
end
endfunction
```

Algorithme classique en $O(n^3)$ multiplications.

Temps de calcul et algorithmes

Algorithme de Strassen (1969)

```
// A et B des matrices carrées de même taille  $n=2^p$ 
function C=strassen(A,B)
    n=size(A,1);
    if (n==1) // fin de récurrence
        C=A*B;
        return;
    end
    n2=n/2;
// Décomposition en blocs
    A11=A(1:n2,1:n2);    A12=A(1:n2,n2+1:n);
    A21=A(n2+1:n,1:n2);  A22=A(n2+1:n,n2+1:n);

    B11=B(1:n2,1:n2);    B12=B(1:n2,n2+1:n);
    B21=B(n2+1:n,1:n2);  B22=B(n2+1:n,n2+1:n);
```

Temps de calcul et algorithmes

```
// évaluation récurrente de 7 produits matriciels
M1=strassen((A11+A22),(B11+B22));
M2=strassen((A21+A22),B11);
M3=strassen(A11,(B12-B22));
M4=strassen(A22,(B21-B11));
M5=strassen((A11+A12),B22);
M6=strassen((A21-A11),(B11+B12));
M7=strassen((A12-A22),(B21+B22));

C=[(M1+M4-M5+M7),(M3+M5);(M2+M4),(M1-M2+M3+M6)];
endfunction
```

Algorithme en $O(7^p) = O(n^{\log_2 7}) = O(n^{2.807})$ multiplications.

Temps de calcul et algorithmes

```
-->A=rand(256,256); B=A';
```

```
-->timer(); C = strassen(A,B); timer()  
ans = 1.12
```

```
-->timer(); C = mult_matrices(A,B); timer()  
ans = 143.21
```

Mais les routines de **Scilab** sont bien sûr les mieux adaptées !

```
-->timer(); C=A*B; timer()  
ans = 0.06
```

Représentation graphique d'une fonction

Pour représenter une fonction $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ sur $[a, b]$:

1. on discrétise $[a, b]$ en N points, grâce à `x=linspace(a,b,N)` ;
2. on calcule les $y_i = f(x_i)_{(1 \leq i \leq N)}$, grâce à `y=f(x)` ;
3. la commande `plot2d` relie les points $(x_i, y_i)_{(1 \leq i \leq N)}$ par des segments (choix par défaut).

Important : Il faut avoir une bonne compréhension de ce que l'on doit obtenir pour ne pas mal interpréter ce qui s'affiche !

À connaître :

- ▶ **Domaine de définition** de la fonction et éventuelles **singularités** ;
- ▶ **Ensemble image** ou l'étendue des *valeurs* que peut prendre la fonction ;
- ▶ **Échantillonnage** ou le nombre de points discrets nécessaires pour avoir une "bonne" représentation.

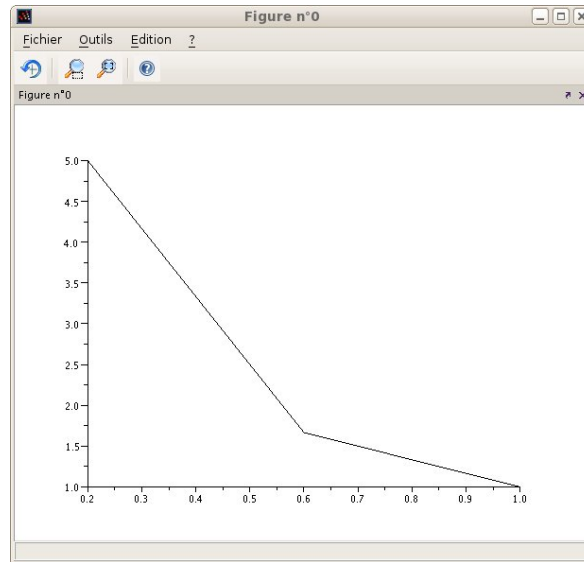
Étude et représentation graphique de fonctions

On considère la fonction définie par $f(x) = \frac{1}{x}$ sur $]0, 1]$.

```
--> x = linspace(0,1,3)'; y = (1)./x ;  
      !--error 27
```

Division par zéro ...

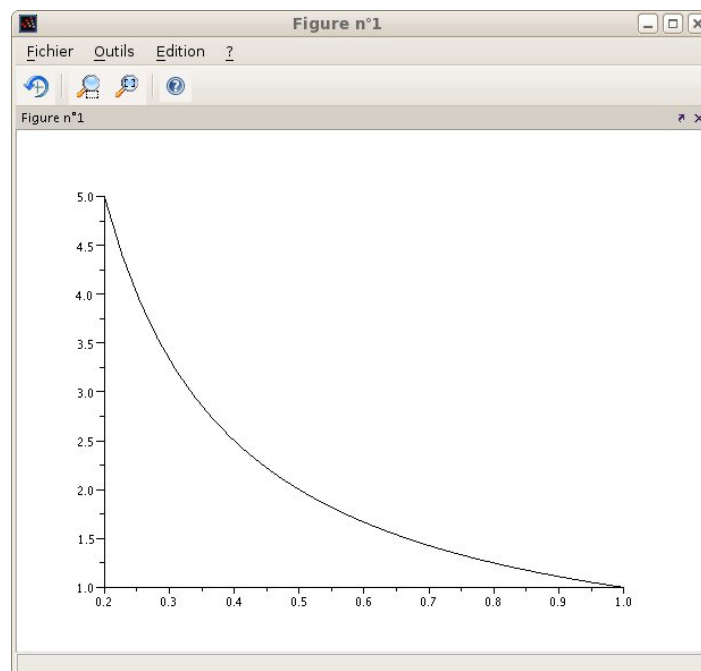
```
--> x = linspace(0.2,1,3)'; y = (1)./x ; plot2d(x,y)
```



Pas assez de points.

Étude et représentation graphique de fonctions

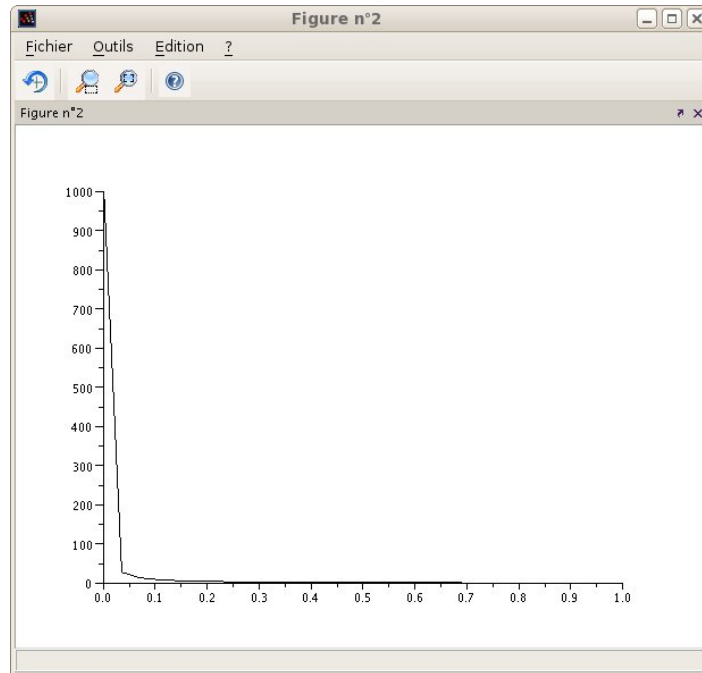
```
--> x = linspace(0.2,1,30)'; y = (1)./x ; plot2d(x,y)
```



Graphe lisse, mais sur $[0.2, 1]$.

Étude et représentation graphique de fonctions

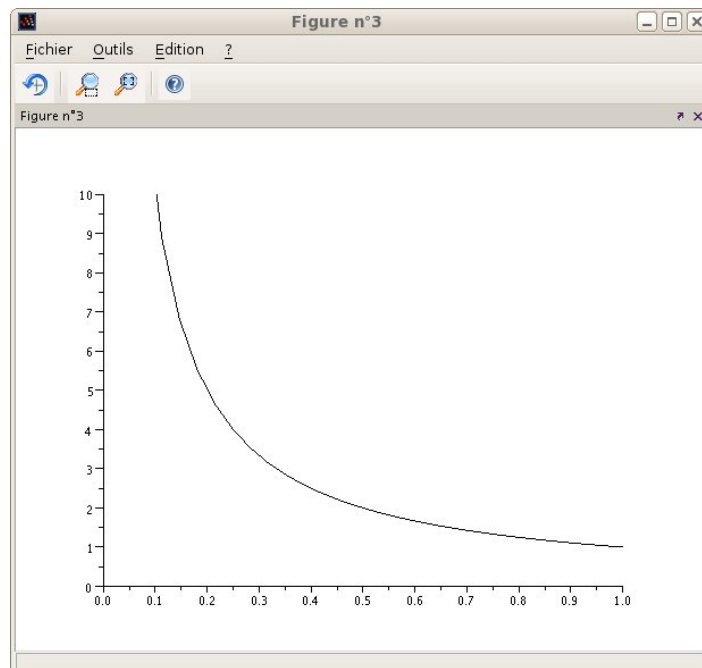
```
--> x = linspace(0.001,1,30)' ; y = (1)./x ; plot2d(x,y)
```



Près de $x = 0$ la fonction devient trop grande : graphe écrasé.

Étude et représentation graphique de fonctions

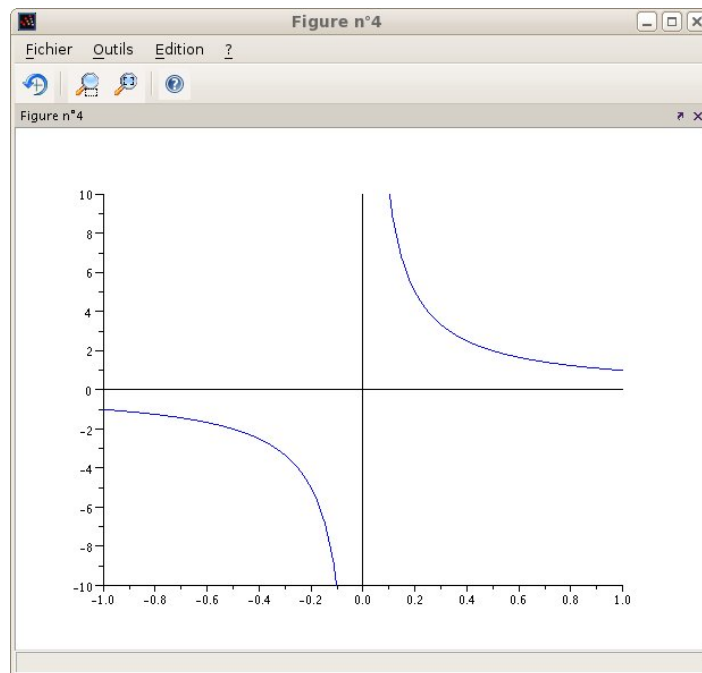
```
--> x = linspace(0.001,1,30)' ; y = (1)./x ;  
--> plot2d(x,y,rect=[0,0,1,10])
```



Graphe correct.

Étude et représentation graphique de fonctions

```
--> x = linspace(0.001,1,30)'; y = (1)./x ;  
--> plot2d([-x,x], [-y,y], rect=[-1,-10,1,10], style=[2,2])  
--> plot2d([-1, 0; 1, 0], [0, 10; 0, -10], style=[1, 1])
```



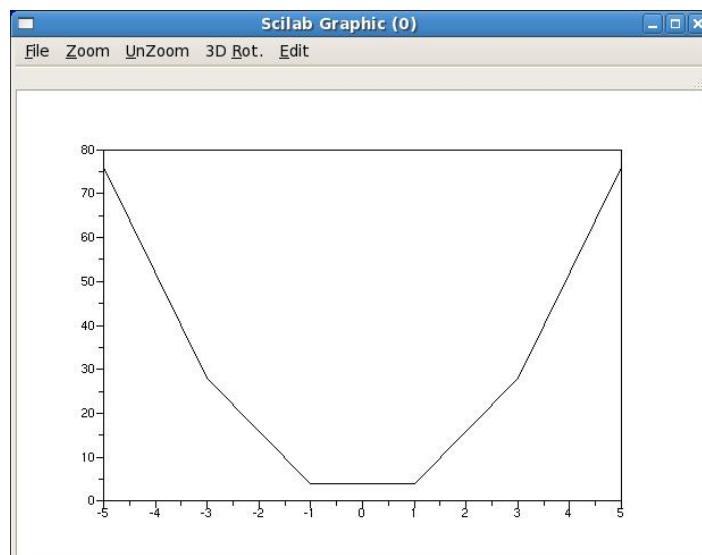
Bonne représentation de la fonction impaire $f(x) = \frac{1}{x}$ avec axes.

Étude et représentation graphique de fonctions

On considère la fonction $f(x) = 3x^2 + 1 + \frac{1}{\pi^4} \log[(\pi - x)^2]$.
On a $\text{dom}(f) = \mathbb{R} \setminus \{\pi\}$ et $\lim_{x \rightarrow \pi} f(x) = -\infty$.

Essayons un tracé "naïf" :

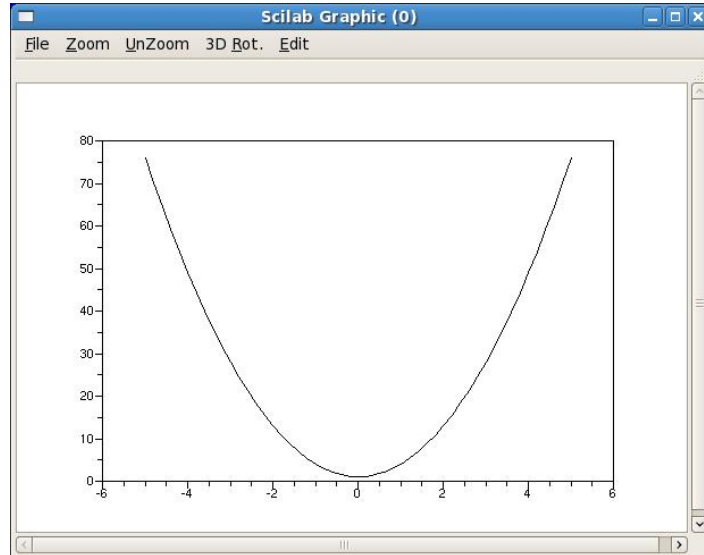
```
--> x = [-5 : 2 : 5] ;  
--> y = 3* x.^2 + 1 + log( (%pi-x).^2 ) / (%pi^4) ;  
--> plot2d(x,y)
```



Représentation graphique de fonctions (suite)

Il faut utiliser suffisamment de points pour avoir un graphe lisse.

```
--> x = [-5 : 0.2 : 5] ;  
--> y = 3 *x.^2 + 1 + log( (%pi-x).^2) /(%pi^4) ;  
--> plot2d(x,y)
```



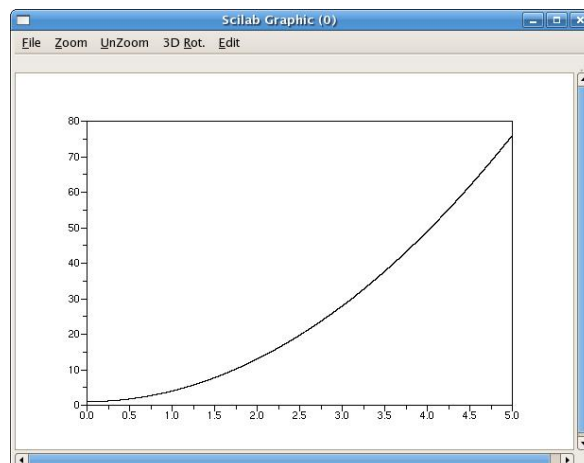
Représentation graphique : singularités invisibles

Même avec 50001 points, la singularité de

$$f(x) = 3x^2 + 1 + \frac{1}{\pi^4} \log[(\pi - x)^2]$$

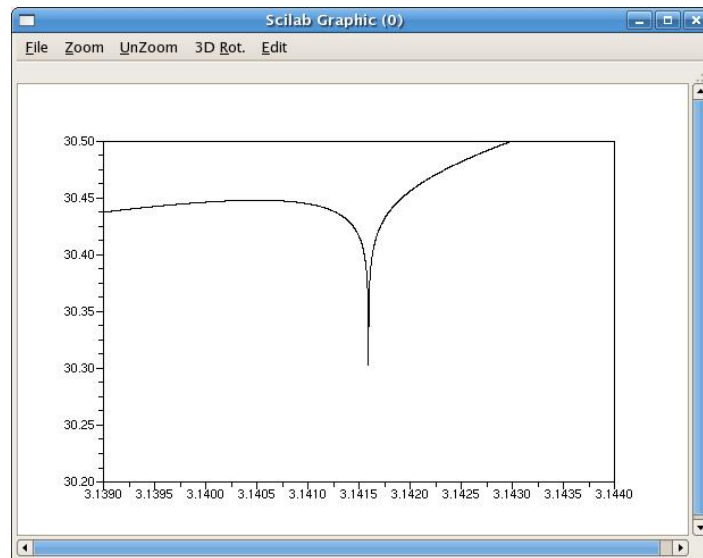
reste "invisible" !

```
--> x=[0:0.0001:5] ;  
--> y = 3 *x.^2 + 1 + log( (%pi-x).^2) /(%pi^4) ;  
--> plot2d(x,y)
```



Représentation graphique : singularités

Il faut utiliser la fonction `Zoom` pour commencer à apercevoir la variation au voisinage de $x = \pi$:



Explication :

On montre que f est négative sur $[\pi - \varepsilon_1, \pi[$ et $] \pi, \pi + \varepsilon_2]$, où les ε_i sont de l'ordre de $e^{-\pi^6} \sim 10^{-418}$, ce qui est largement en dessous de la précision machine `%eps` de **Scilab**.

Représentation graphique : échantillonnage

On veut représenter $f(t) = \cos(\omega t)$ sur $[0, 10]$, avec $\omega = 4\pi$.

```
--> x = linspace(0,10,21); y = cos(4*%pi*x);  
--> scf(0); plot2d(x,y)  
--> scf(1); plot2d(x,y,style=[0])
```

