

Stage LIESSE Python

Calcul Numérique

Matthieu Moy

Ensimag

octobre 2015



Sommaire

- 1 Résolution de $AX = Y$ par l'algorithme du pivot de Gauss
- 2 Formalisation
- 3 Mise en œuvre
- 4 Le pivot de Gauss en NumPy
- 5 Analyse, comparaison avec NumPy
- 6 Tracer de courbes avec matplotlib



Pivot de Gauss

- Méthode pour résoudre un système linéaire.
- Exemple : résolution dans \mathbb{R}^4 du système

$$(S_0) \begin{cases} x - y + 2z + t = 1 \\ 2x - 4y + z + t = 6 \\ x - y + z - t = 2 \\ 3x + y + z + 2t = 1 \end{cases}$$

- 1 Effectuer les opérations :
 - ★ $L_2 \leftarrow L_2 - 2L_1$
 - ★ $L_3 \leftarrow L_3 - L_1$
 - ★ $L_4 \leftarrow L_4 - 3L_1$
 - ★ \sim Résultat = (S_1) .
- 2 Effectuer la transformation $L_4 \leftarrow L_4 + 2L_2$ pour obtenir le système (S_2) .
- 3 Effectuer la transformation $L_4 \leftarrow L_4 - 11L_3$ pour obtenir le système triangulaire (S_3) .
- 4 Résoudre dans \mathbb{R}^4 le système (S_3) .



Exemple : solution

- Système final (S_3) :
$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -1 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & -3 & -1 & 4 \\ 0 & 0 & -1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 19 & -5 \end{array} \right)$$
- solution :
$$X = \frac{1}{19} \begin{pmatrix} 20 \\ -22 \\ -9 \\ -5 \end{pmatrix}$$

- Remarques :
 - ▶ Dans la ligne L_1 de (S_0) , le coefficient de x est le *premier pivot*.
 - ▶ Dans la ligne L_2 de (S_1) , le coefficient de y est le *deuxième pivot*.
 - ▶ Dans la ligne L_3 de (S_2) , le coefficient de z est le *troisième pivot*.
 - ▶ Existence et unicité de la solution si tous les pivots sont non nuls (système de Cramer).



En résumé

Deux phases :

- mise sous forme triangulaire
 - ▶ $L_j \leftarrow L_j - \lambda L_i =$ « transvection ».
 - ▶ En cas de pivot nul, échange avec une autre ligne (il y en a toujours au moins une dans un système de Cramer).
- résolution du système triangulaire (phase de remontée)
 - ▶ Si on rencontre l'équation $0 = \beta$ lors de la phase de remontée, le système n'a aucune solution.
 - ▶ Si on rencontre l'équation $0 = 0$, le système a une infinité de solutions.



Stabilité numérique

- Attention aux arrondis !

```
>>> 12 * (1/3 - 1/4) - 1
-2.220446049250313e-16
```
- Notion de "pivot non nul" assez fragile !
- Si le pivot est très petit (en valeur absolue), on va obtenir des nombres très grands lors des transvections.
- Solution : « pivot partiel ».
 - ▶ On sélectionne la ligne contenant le pivot le plus grand en valeur absolue.
 - ▶ Heuristique : marche bien en pratique, mais pas toujours !



Notations

- *Entrée* : $A = (a_{ij})$ est une matrice $n \times n$ composée de lignes L_i
- pour i de 0 à $n - 2$:
 - ▶ trouver $j, i \leq j \leq n - 1$, tel que $|a_{ij}|$ soit maximal
 - ▶ échanger L_i et L_j
 - ▶ pour k de $i + 1$ à $n - 1$:
 - ★ $L_k \leftarrow L_k - \frac{a_{ik}}{a_{ij}} L_j$
- *Sortie* : le résultat est dans A



Structure de données « matrice » : tableaux NumPy

- Bibliothèque très performante (code C optimisé callable depuis Python)
- Structure de base = tableau (homogène) multidimensionnel :
`numpy.array`
- <http://www.numpy.org/>



Construire un tableau NumPy

On peut créer un tableau (unidimensionnel : un vecteur) NumPy à partir d'une liste Python ou même d'une liste de listes (il sera alors bi-dimensionnel : une matrice) :

```
>>> import numpy
>>> numpy.array([1, 2, 3])
array([1, 2, 3])
>>> numpy.array([[1, 2], [3, 4], [5, 6]])
array([[1, 2],
       [3, 4],
       [5, 6]])
>>> a.shape[0]
3
>>> a.shape[1]
2
```



Opérations sur tableaux numpy

NumPy permet de faire des opérations directement sur ces tableaux, sans avoir à réécrire chaque fonction :

```
>>> 2 * numpy.array([1, 2, 3])
+ numpy.array([8, 10, 12])
array([10, 14, 18])
```

→ ce à quoi on s'attend en algèbre linéaire.



Accéder aux éléments d'un tableau NumPy

- Accès aux éléments comme pour une liste : `a[i]`
- Numérotation à partir de 0
- Matrices : `M[ligne][colonne]`

```
>>> b = numpy.array([1.414, 0.5, 3.14, 2.718])
>>> b[2]
3.1400000000000001
>>> a = numpy.array([[ 0.19,  0.14,  0.21],
...                 [ 0.79,  0.43,  0.74],
...                 [ 0.12,  0.40,  0.30]])
>>> a[2, 1]
0.40000000000000002
```



Accès aux lignes et aux colonnes

```
>>> a = numpy.array([[ 0.19,  0.14,  0.21],
...                 [ 0.79,  0.43,  0.74],
...                 [ 0.12,  0.40,  0.30]])
```

```
>>> a[:, 1]
array([ 0.14,  0.43,  0.4 ])
```

```
>>> a[0, :]
array([ 0.19,  0.14,  0.21])
```



Accès aux lignes et aux colonnes

⚠ NumPy ne retourne pas une copie des données dans ce cas mais seulement une *vue* sur celles-ci :

```
>>> a = numpy.array([[ 0.19,  0.14,  0.21],
...                 [ 0.79,  0.43,  0.74],
...                 [ 0.12,  0.40,  0.30]])

>>> v = a[:, 2]
>>> v
array([ 0.21,  0.74,  0.3 ])
```

```
>>> v[1] = 1.0
>>> v
array([ 0.21,  1. ,  0.3 ])
```

```
>>> a
array([[ 0.19,  0.14,  0.21],
       [ 0.79,  0.43,  1. ],
       [ 0.12,  0.4 ,  0.3 ]])
```



Tranches de tableaux

```
>>> v = numpy.array([-1, -2, -3, -4, -5])
# elements entre les indices 2 (inclus) et 4 (exclu)
>>> v[2:4]
array([-3, -4])
# elements entre les indices 0 (inclus) et 3 (exclu)
>>> v[:3]
array([-1, -2, -3])
# elements entre les indices 2 (inclus)
# et fin (inclus)
>>> v[2:]
array([-3, -4, -5])
```

→ Là aussi, on ne possède que des *vues* sur les données et pas des copies de celles-ci.



Exercice 1 : échange de lignes

Solution naïve

Étant donné une matrice NumPy `a` et deux entiers `i` et `j`, échanger les lignes `i` et `j` de `a`.

- 1ere tentative :

```
>>> i = 0
>>> j = 2
>>> tmp = a[i, :]
>>> a[i, :] = a[j, :]
>>> a[j, :] = tmp
>>> a
array([[ 0.12,  0.4 ,  0.3 ],
       [ 0.79,  0.43,  1. ],
       [ 0.12,  0.4 ,  0.3 ]])
```

- Oups, ne fonctionne pas ! (rien changé)
 - ▶ `tmp = a[i, :]` ne fait pas de copie, juste une vue
 - ▶ `a[i, :] = a[j, :]` écrase la ligne
- ⇒ Il faut copier explicitement



Exercice 1 : échange de lignes

Solution avec recopie¹

```
>>> a = numpy.array([[ 0.19,  0.14,  0.21],
...                 [ 0.79,  0.43,  1. ],
...                 [ 0.12,  0.4 ,  0.3 ]])
>>> tmp = a[i, :].copy() # <-- là
>>> a[i, :] = a[j, :]
>>> a[j, :] = tmp
>>> a
array([[ 0.12,  0.4 ,  0.3 ],
       [ 0.79,  0.43,  1. ],
       [ 0.19,  0.14,  0.21]])
```

1. En fait, la "bonne" manière de faire en NumPy n'est pas de faire une copie mais plutôt d'utiliser l'indexation avancée : `a[[i, j], :] = a[[j, i], :]`.



Exercice : transvection

Étant donné une matrice NumPy a , deux entiers i et j et un flottant x , appliquer la transvection $L_j \leftarrow L_j + xL_i$ sur la matrice a .

```
>>> a
array([[ 0.12,  0.4 ,  0.3 ],
       [ 0.79,  0.43,  1.  ],
       [ 0.19,  0.14,  0.21]])
>>> i = 0
>>> j = 1
>>> x = -a[j, i] / a[i, i] # pivot : a[i, i]
>>> a[j, :] = a[j, :] + x * a[i, :] # L_j ← L_j + xL_i
>>> a
array([[ 0.12,  0.4,  0.3 ],
       [ 0., -2.20333333, -0.975 ],
       [ 0.19,  0.14,  0.21 ]])
```



Opérations sur les tableaux NumPy (1/2)

- Déjà vu : $M1 + M2$, scalaire $\times M$
- Opérations classiques, composante par composante : $-$, $*$, $/$, abs

```
>>> u = numpy.array([1, 2, 3, 4])
>>> v = numpy.array([4, 3, 2, 1])
>>> u * v
array([4, 6, 6, 4])
>>> u / v
array([ 0.25,  0.66666667,  1.5,  4.])
>>> abs(u - v)
array([3, 1, 1, 3])
```



Opérations sur les tableaux NumPy (2/2)

- produits matriciels, produits scalaires : `numpy.dot`

```
>>> u = numpy.array([1, 2, 3, 4])
>>> v = numpy.array([4, 3, 2, 1])
>>> numpy.dot(u, v) #  $\sum_{i=0}^{n-1} u_i \cdot v_i$ 
20
>>> w = u * v
>>> w.sum()
20
>>> a = numpy.array([[1, 2], [3, 4]])
>>> x = numpy.array([1, -1])
>>> b = numpy.dot(a, x)
>>> b
array([-1, -1])
```



Exercice : Valeur maximale dans une colonne

Étant donnée une matrice A et un indice i , écrire la fonction `pivot_index(A, i)` qui renvoie l'indice $j \geq i$ t.q. $|a_{ij}|$ est maximal.

```
def pivot_index(A, i):
    n = A.shape[0] # nombre de lignes
    j = i
    for k in range(i + 1, n):
        if abs(A[k, i]) > abs(A[j, i]):
            j = k
    return j
```



Résolution de système triangulaire supérieur

Étant donné une matrice A triangulaire supérieure, et un vecteur b de même taille, implémenter la résolution de $Ax = b$.

```
def solve_triangular(A, b):
    n = len(b)
    x = numpy.zeros([n]) # vecteur de n zeros
    for i in range(n - 1, -1, -1):
        #  $x_i = \frac{1}{a_{ii}} (b_i - \sum_{j=i+1}^{n-1} a_{ij}x_j)$ 
        sum = numpy.dot(A[i, :], x)
        x[i] = (b[i] - sum) / A[i, i]
    return x
>>> M = numpy.array([[1, 2], [0, 4]])
>>> x = numpy.array([1, -1])
>>> v = numpy.dot(M, x) # array([-1, -4])
>>> solve_triangular(M, v)
array([ 1., -1.]) # on retrouve x ...
```



Algorithme du pivot de Gauss (1/3)

Presque tout est fait !

```
import numpy
def pivot_index(A, i):
    n = A.shape[0] # nombre de lignes
    j = i
    for k in range(i + 1, n):
        if abs(A[k, i]) > abs(A[j, i]):
            j = k
    return j
def swap_lines(A, i, j):
    tmp = A[i, :].copy()
    A[i, :] = A[j, :]
    A[j, :] = tmp
def transvection_lines(A, i, k, factor):
    A[k, :] = A[k, :] + A[i, :] * factor
```



Algorithme du pivot de Gauss (2/3)

```
def gauss(A0, b0):
    A = A0.copy() # pour ne pas détruire A
    b = b0.copy()
    n = len(b) # on pourrait aussi la taille de a
    for i in range(n - 1):
        ipiv = pivot_index(A, i)
        if ipiv != i: # échanges
            swap_lines(A, i, ipiv)
            tmp = b[ipiv]
            b[ipiv] = b[i]
            b[i] = tmp
        for k in range(i + 1, n): # pivotage
            factor = -A[k, i] / A[i, i]
            transvection_lines(A, i, k, factor)
            b[k] = b[k] + b[i] * factor
    return [A, b]
```



Algorithme du pivot de Gauss (3/3 : programme principal)

```
def solve_triangular(A, b):
    n = len(b)
    x = numpy.zeros([n])
    for i in range(n - 1, -1, -1):
        sum = numpy.dot(A[i, :], x)
        x[i] = (b[i] - sum) / A[i, i]
    return x
# Fonction principale
def solve(A0, b0):
    Ab = gauss(A0, b0)
    return solve_triangular(Ab[0], Ab[1])
```



Algorithme du pivot de Gauss : test

```
>>> n = 5
# les matrices inversibles sont denses
>>> M = numpy.random.random([n, n])
>>> x = numpy.random.random([n])
>>> v = numpy.dot(M, x)
>>> x_solved = solve(M, v)
>>> abs(x - x_solved).max()
7.2164496600635175e-16
```

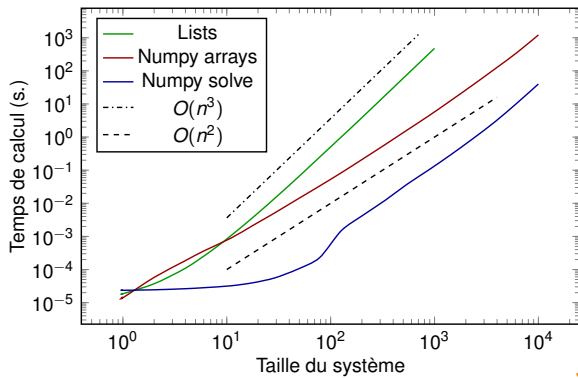


Performances

- Coût en $O(n^3)$ (démonstration dans Wack *et al.* pour les curieux).
- En général, il vaut mieux faire confiance aux algorithmes proposés par les bibliothèques de Python : plus rapides, plus robustes aux cas limites



Performances : comparaison avec numpy



Et la stabilité numérique ?

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1 & 5/4 & 12 & 0 \\ 1 & 1/3 & 1 & 1 \\ 1 & 5/4 & 13 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 5/4 - 1/4 & 12 & 0 \\ 0 & 1/3 - 1/4 & 1 & 1 \\ 0 & 5/4 - 1/4 & 13 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Et la stabilité numérique ?

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1 & 5/4 & 12 & 0 \\ 1 & 1/3 & 1 & 1 \\ 1 & 5/4 & 13 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 12 & 0 \\ 0 & 1/3 - 1/4 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 13 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Et la stabilité numérique ?

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1 & 5/4 & 12 & 0 \\ 1 & 1/3 & 1 & 1 \\ 1 & 5/4 & 13 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - 12 * (1/3 - 1/4) = 2.2e-16 & 1 \\ 0 & 1 & 13 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Et la stabilité numérique ?

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1 & 5/4 & 12 & 0 \\ 1 & 1/3 & 1 & 1 \\ 1 & 5/4 & 13 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 2.2e-16 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Et la stabilité numérique ?

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 1 & 5/4 & 12 & 0 \\ 1 & 1/3 & 1 & 1 \\ 1 & 5/4 & 13 & 1 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 2.2e-16 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - 1/2.2e-16 = -4.5e15 \end{pmatrix} \cdot x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1e16 \\ 4.7e31 \end{pmatrix}$$

Erreur = 10¹⁶ (33 seulement avec un pivot partiel)



Vous voulez des détails ?

- TP6 du cours d'informatique CPP Semestre 3.



Tracer une courbe avec un ensemble de points

matplotlib/courbe_simple.py

```
# plt devient l'abrege de matplotlib.pyplot:
import matplotlib.pyplot as plt

x = [0, 1, 3] # liste des abscisses
y = [1, -1, 0] # liste des ordonnees

plt.plot(x, y) # trace y en fonction de x
plt.show() # affiche la fenetre du trace
```



Tracer de Fonction

matplotlib/oscilateur.py

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

# Valeurs sur lesquelles on va calculer
x = np.linspace(0, 10 * np.pi, 1000)
# application d'une fonction à chaque point
y1 = np.cos(x) # np.cos s'applique sur des tableaux
y2 = np.exp(-x/10) * y1

# y1 en fonction de x, y2 en fonction de y
plt.plot(x, y1)
plt.plot(x, y2)
```



Tracer de Fonction (suite)

matplotlib/oscilateur.py

```
# Titres sur les axes
plt.title('Oscillateurs harmoniques libre et amorti')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y = f(x)')

# Tracer de l'axe y=0 et grille
plt.axhline(y=0, color='k')
plt.grid()

plt.show()
```



Tracer de courbes paramétrées

- Jusqu'ici :

```
x = np.linspace(...)
y1 = f1(x)
y2 = f2(x)
plt.plot(x, y1)
plt.plot(x, y2)
```

- Courbes paramétrées :

```
x = np.linspace(...) # ou t = ...
y1 = f1(x) # ou x = ...
y2 = f2(x) # ou y = ...
plt.plot(y1, y2)
```



Tracer de courbes paramétrées

matplotlib/spirale.py

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

t = np.linspace(0, 10 * np.pi, 1000)
x = np.cos(t) * t
y = np.sin(t) * t

plt.plot(x, y)
```



Joli, mais on peut faire bouger
tout ça ?

~> Oui!!!



Animations

matplotlib/oscilateur_anim.py

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.animation as animation

# figure = tout le contenu de la fenetre
fig = plt.figure() # A appeler avant de tracer autre chose

# Une courbe fixe
x = np.linspace(0, 10 * np.pi, 500)
y1 = np.cos(x)

parfait = plt.plot(x, y1)
y2 = y1 # Pas d'amortissement pour l'instant
amorti = plt.plot(x, y2)

plt.title('Oscillateurs libre et amorti')
```



Animations

matplotlib/oscilateur_anim.py

```
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y = f(x)')

# Fonction appelée à chaque pas de l'animation
def animate(i):
    C = i + 1 # i vaut successivement 0, 1, 2, ...
    # On peut changer le titre
    plt.title('Oscillateurs libre et amorti (C = '
              + str(C) + ')')
    # Et changer les données
    y2 = np.exp(-x/C) * y1
    # Attention, amorti est une liste a 1 élément.
    amorti[0].set_data(x, y2)

ani = animation.FuncAnimation(fig, animate, interval=100)

plt.show()
```



Animations : à essayer

matplotlib/oscilateur_anim.py

- Ajouter une instruction **print** (i) dans la fonction animate
- Jouer avec les paramètres de FuncAnimation :
 - ▶ interval (en milliseconde)
 - ▶ frames (arguments passés à animate, par exemple np.linspace(...))
 - ▶ repeat=False (s'arrêter à la fin au lieu de répéter)

http://matplotlib.org/api/animation_api.html#matplotlib.animation.FuncAnimation



Animations : dessinons un peu

matplotlib/pendule_graphique.py

```
amplitude = 1
dt = 0.05

fig = plt.figure()
# 111 : découpage 1x1, sous-figure numéro 1
# (i.e. pas de découpage, mais on doit utiliser add_subplot
# pour utiliser xlim et ylim)
ax = fig.add_subplot(111, autoscale_on=False,
                    xlim=(-1.5, 1.5), ylim=(-1.5, .5))
ax.grid()

x = [0, 0]
y = [0, -1]
# y = f(x). 'o-' pour afficher des ronds sur les points.
parfait = plt.plot(x, y, 'o-')

plt.title('Pendule')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
```



Animations : dessinons un peu

matplotlib/pendule_graphique.py

```
def animate(i):
    t = i * dt # t = 0, 0.05, 0.10, ...
    # On s'autorise quelques libertés par rapport
    # à la physique ...
    angle = sin(t) * amplitude
    x = (0, sin(angle))
    y = (0, -cos(angle))
    plt.title('Pendule parfait (t = ' +
              str(round(t * 10) / 10) + ')')
    # Attention, parfait est une liste a 1 élément.
    parfait[0].set_data(x, y)

ani = animation.FuncAnimation(fig, animate,
                              interval=10)

plt.show()
```



Résolution d'équation différentielle

matplotlib/odeint.py

```
import scipy.integrate
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# y' = f(y, x)
def f(y, x):
    return np.cos(10 * y) * np.cos(x)

x = np.linspace(0, 10, 100)
# Résolution numérique de l'équation
y = scipy.integrate.odeint(f, 0, x)

# Tracer du résultat
plt.plot(x, y)
plt.show()
```



Animations : dessinons un peu

matplotlib/pendule_anim_simple.py

```
w02 = 10
y0 = np.array([np.pi / 2, 0])

def f(y, t):
    # y[0] - angle, y[1] - vitesse angulaire
    # On renvoie : (vitesse, accélération)
    return np.array([y[1], -w02 * np.sin(y[0])])

t = np.linspace(0, 100, 10000)
y = scipy.integrate.odeint(f, y0, t)
theta, thetadot = y[:, 0], y[:, 1]

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, autoscale_on=False,
                    xlim=(-1.5, 1.5), ylim=(-1.5, .5))
ax.grid()

plt.title('Pendule')
plt.xlabel('x'); plt.ylabel('y')
pendules = plt.plot((0, y0[0]), (0, y0[1]), 'o-')

def animate(i):
    angle = theta[i]
    x = (0, sin(angle))
    y = (0, -cos(angle))
    pendules[0].set_data(x, y)

anim = animation.FuncAnimation(fig, animate, interval=10)
```



```
anim.save('pendules_anim_simple.mp4', writer='avconv', fps=30)
# En cas de problème avec writer, essayer writer='mencoder'
```

plt.show()

Animations : amusons-nous un peu

matplotlib/pendule_anim.py

- 2 pendules
- Lois de la physique différentes pour les deux (frottement)
- Pour aller plus loin :
matplotlib/double_pendulum_animated.py,
<http://matplotlib.org/examples/>

