

Formation Python ILL

Calcul Numérique avec NumPy, SciPy et Matplotlib

Matthieu Moy

Ensimag

octobre 2016

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

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 :

- ★ $L_2 \leftarrow L_2 - 2L_1$

- ★ $L_3 \leftarrow L_3 - L_1$

- ★ $L_4 \leftarrow L_4 - 3L_1$

- ★ $\leadsto \text{Résultat} = (S_1).$

- 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
 - ▶ $L_j \leftarrow L_j - \lambda L_i = \text{« transvection »}$.
 - ▶ 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 !

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

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 $|a_{ji}|$ soit maximal
 - ▶ échanger L_i et L_j
 - ▶ pour k de $i + 1$ à $n - 1$:
 - ★ $L_k \leftarrow L_k - \frac{a_{ik}}{a_{ji}} L_j$
- *Sortie* : le résultat est dans A

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

Sommaire de cette section

3

Mise en œuvre

- Quelle structure de données utiliser ?
- Introduction à NumPy

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/>

Sommaire de cette section

3

Mise en œuvre

- Quelle structure de données utiliser ?
- Introduction à NumPy

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]` ou `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 ! (copie au lieu d'échange)

- ▶ `tmp = a[i, :]` ne fait pas de copie, juste une vue
- ▶ `a[i, :] = a[j, :]` écrase la ligne

- \Rightarrow Il faut copier explicitement

Exercice 1 : échange de lignes

Solution avec `recopie`¹

```
>>> 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 donnés 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, :] #  $L_j \leftarrow L_j + xL_i$ 
>>> 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 : $-$, \times , $/$, 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. $|a_{ji}|$ est maximal.

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. $|a_{ji}|$ 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 donnés 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):  
        #  $x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j=i+1}^{n-1} a_{ij}x_j \right)$   
        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 ...
```

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

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: # echanges  
            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):  
    A, b = gauss(A0, b0)  
    return solve_triangular(A, b)
```

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
```


Algorithme du pivot de Gauss : expérimentons

`gauss/ gauss.py`

- Regarder le code
- Exécuter `gauss.py`
- Exécuter `stability.py` pour tester sur une matrice problématique (erreur attendue ≈ 33)
- Si le temps le permet : modifier `gauss.py` pour remplacer le pivot partiel (recherche du plus petit pivot) par un pivot naïf (utilisation du premier pivot non-nul) et re-tester (erreur attendu $\approx 10^{16}$).

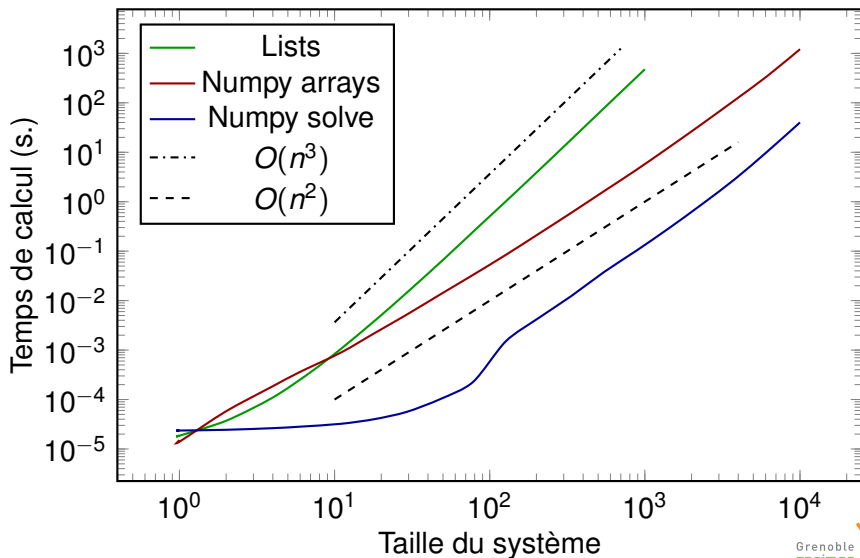
Sommaire

- 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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

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 ?

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

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 ?

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

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

Et la stabilité numérique ?

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

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

Et la stabilité numérique ?

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

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

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 = 10^{16} (33 seulement avec un pivot partiel)

Vous voulez des détails ?

- **TP6 du cours d'informatique CPP Semestre 3 :**

`http://chamilo2.grenet.fr/inp/courses/CPPL1A1CMINFO/
document/S2/index.html`

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

« Infinity » et « Not a Number »

- Exercice : quel est précisément le type des éléments de `np.array([0.0, 1.1])` ? (indice : utiliser `type`)
- $+\infty = \text{np.inf}$, $-\infty = -\text{np.inf}$.
- Exercice : combien valent
 - ▶ $\infty - \infty$?
 - ▶ $\frac{1}{+\infty}$?
 - ▶ $\frac{1}{-\infty}$?
 - ▶ $1.0 / 0.0$?
 - ▶ `np.float64(1.0) / np.float64(0.0)` ?
- Exercice (dur) : comment distinguer `0.0` et `-0.0` ?

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

Intégration

- En maths : $\int_a^b f(x)dx$
- En Python :

```
import numpy as np
import scipy.integrate as integrate

result = integrate.quad(lambda x: np.sin(x),
                        0, np.pi)
print "Result =", result[0]
print "Estimated error =", result[1]

# np.inf for infinity
result = integrate.quad(lambda x: np.exp(-x**2),
                        -np.inf, np.inf)
print "Result =", result[0]
print "Estimated error =", result[1]
print "sqrt(pi) =", np.sqrt(np.pi)
```

Exercice

Calculer $\int_0^{+\infty} e^{-t} dt$.

Exercice

Calculer $\int_0^{+\infty} e^{-t} dt$.

```
# import ...
# result = ...
# START CUT
import numpy as np
import scipy.integrate as integrate

result = integrate.quad(lambda x: np.exp(-x),
                        0, np.inf)

# END CUT
print "Result =", result[0]
print "Estimated error =", result[1]
```

Préliminaire aux équations différentielles

Opérations sur vecteurs

- `np.linspace(a, b, n)` : vecteur de n valeurs entre a et b (inclus).
- Exemple :
`np.linspace(0, 5, 3) == array([0., 2.5, 5.]).`

Préliminaire aux équations différentielles

Opérations sur vecteurs

- Les opérations NumPy marchent composante par composante sur les vecteurs :

```
>>> np.sin(np.linspace(0, 5, 3))  
array([ 0. ,  0.59847214, -0.95892427])
```

- Les autres opérations, pas toujours :

```
>>> math.sin(np.linspace(0, 5, 3))  
Traceback (most recent call last):  
  File "<stdin>", line 1, in <module>  
TypeError: only length-1 arrays can be converted  
to Python scalars
```

- Solution :

```
>>> s = np.vectorize(math.sin)  
>>> s(np.linspace(0, 5, 3))  
array([ 0. ,  0.59847214, -0.95892427])
```

Généralisation : équations différentielles

- $\int_a^b f(t)dt = y(b)$ avec $y(a) = 0$ et $y' = f(t)$.
- Généralisation : $y' = f(t) \rightsquigarrow y' = f(y, t)$.
- En Python :

```
#  $y' = f(y, t)$ 
def f(y, t):
    return ...

# Intervalle et pas d'intégration
t = np.linspace(a, b, n)
# Valeur initiale :  $y(a)$ 
y0 = 0
# Résolution numérique de l'équation
y = scipy.integrate.odeint(f, y0, t)
```

- Exercice : recalculer $\int_0^\pi \sin(x)dx$ avec
scipy.integrate.odeint
(Squelette : `scipy/integral_sin_odeint.py`).

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

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
```


Tracé 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 / 10.0) * y1

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

Tracé 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)')
```

```
# Tracé de l'axe y=0 et grille
```

```
plt.axhline(y=0, color='k')
```

```
plt.grid()
```

```
plt.show()
```

Matplotlib et Notebook

- `%matplotlib inline` pour afficher inline
- `%matplotlib` pour revenir au comportement par défaut
- Cf. `matplotlib-et-notebook.ipynb` pour un exemple

Tracé 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)
```

Tracé 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 ?

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 fenêtre
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)
```


Animations

matplotlib/oscilateur_anim.py

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

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

Équations différentielles du second ordre

- Jusqu'ici : $y' = f(y, t)$
- Comment faire $y'' = f(y', y, t)$?

Équations différentielles du second ordre

- Jusqu'ici : $y' = f(y, t)$
- Comment faire $y'' = f(y', y, t)$?
- On pose $Y = (y, y')$
- On remarque que $Y' = (y', y'') = (y', f(y', y, t))$
- On pose $F(Y, t) = (Y[1], f(Y[1], Y[0], t))$
et on a $Y' = F(Y, t)$
(équation d'ordre 1 sur variables de dimensions 2)

Application : pendule libre

$$\theta'' + \omega_0^2 \sin \theta = 0 \quad (\text{avec } \omega_0^2 = \text{constante})$$

- On pose $Y = (y_1, y_2) = (\theta, \theta')$
- Exprimer Y' en fonction de y_1 et y_2 (on n'a pas besoin de t)
- Écrire la fonction $F(Y, t)$ avec Y de dimension 2.
- Résoudre le système avec `scipy.integrate.odeint`.
- Squelette : `matplotlib/pendule_anim_simple.py`

Animations : dessinons un peu

matplotlib/pendule_anim_simple.py

```
w02 = 10
y0 = np.array([np.pi / 2.0, 0]) # angle, vitesse

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, sin(y0[0])), (0, -cos(y0[0])), '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)
```

- $\theta'' + \omega_0^2 \sin \theta = 0$

- On pose

$$Y = (y_1, y_2) = (\theta, \theta')$$

- On remarque

$$Y' = (y_2, -\omega_0^2 \sin y_1)$$

- On résout cette équation

(θ en fonction de t) :

`scipy.integrate.odeint`

- On trace le segment

$(0, 0) \rightarrow (\sin(\theta), -\cos(\theta))$ à chaque instant :

`animation.FuncAnimation`

Animations : amusons-nous un peu

`matplotlib/pendule_anim.py`

- 2 pendules
- Lois de la physique différentes pour les deux (frottement)
- Jouez avec les paramètres (position initiale, frottement, ...)

Diagramme de phase

matplotlib/diagramme_de_phase.py

```
# y' = f(y, t)
def f(y, t):
    # y[0] = angle, y[1] = vitesse angulaire
    # On renvoie : (vitesse, accélération)
    frottement = - .5 * y[1]
    return np.array([y[1], -w02 * np.sin(y[0])
                    + frottement])
```

```
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=(-5, 5), ylim=(-5, 5))
ax.grid()
```

```
plt.title('Pendule : diagramme de phase')
# Le mode mathématique LaTeX est reconnu ($...$).
# Astuce Python : r'...' pour faire une chaîne de caractères où les \
# ne sont pas des caractères d'échappement : r'$\theta$ == '$\theta$'
plt.xlabel(r'$\theta$')
plt.ylabel(r"$\theta'$")
```

```
# On n'utilise pas t, mais on trace theta et theta' l'un en fonction
# de l'autre.
plt.plot(theta, thetadot)
```

- Même equa-diff
- On a θ et θ'
- `plt.plot(theta, thetadot)`

Diagramme de phase

matplotlib/diagramme_de_phase_anim.py

```
w02 = 10
y0 = np.array([np.pi, 0])
frict = 0.5

#  $y' = f(y, t)$ 
def f(y, t):
    #  $y[0]$  = angle,  $y[1]$  = vitesse angulaire
    # On renvoie : (vitesse, accélération)
    frottement = - frict * y[1]
    return np.array([y[1], -w02 * np.sin(y[0]) + frottement])

...

def animate(i):
    global frict
    frict = i / float(200)
    y = scipy.integrate.odeint(f, y0, t)
    theta, thetadot = y[:, 0], y[:, 1]
    plt.title('Pendule : diagramme de phase (frict = '
+ str(frict) + ')')
    curves[0].set_data(theta, thetadot)

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

plt.show()
```

- 1 résolution d'équa-diff à chaque itération

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 Vers l'infini et au delà ...
- 7 SciPy : algorithmes de calcul numérique
- 8 Tracés de courbes avec matplotlib
- 9 Conclusion

Autres outils intéressants

- SymPy : Calcul Symbolique

<http://www.sympy.org/>

- SageMath (anciennement SAGE) : calcul symbolique et numérique, accès unifié à ≈ 100 bibliothèques de calcul

<http://www.sagemath.org/>

- Aide au débbug : pylint, pychecker, pyflakes, pep8, flake8

<http://www.scipy-lectures.org/advanced/debugging/>

- Interfaçage avec C ou C++

http://www.scipy-lectures.org/advanced/interfacing_with_c/interfacing_with_c.html

- IDE plus évolués que Spyder : PyCharm, Eclipse (ou retour aux sources avec `vi` + terminal)

Pour aller plus loin

- **Double pendule :**
`matplotlib/double_pendulum_animated.py`,
- **Beaucoup d'autres exemples :**
<http://matplotlib.org/examples/>
- **Une documentation très bien faite (NumPy, SciPy, Matplotlib, ...) :**
<http://www.scipy-lectures.org/>

Merci de votre attention !