Algorithmique numérique (LU3IN028)

Cours n° 1 : Introduction à MATLAB et à l'arithmétique à virgule flottante

Stef Graillat

Sorbonne Université

Format du cours

Responsable du cours : Stef Graillat (bureau 26-00/313)
`stef.graillat@sorbonne-universite.fr`

Évaluation des connaissances

- un partiel (25%), une note de TME (15%) et un examen final (60%)
- 11 séances de TD/TME (TME à rendre à la fin du semestre)

Horaire

- 6 cours : le jeudi de 8h45 à 10h30 (salle ??)
  → les 12/09, 19/09, 3/10, 17/10, 7/11, 28/11
- 11 TD/TME : le lundi de 16h00 à 17h45 (salle TD :??, salle TME :??)
  → alternance TD/TME, on commence par un TME

Site web : `http://www-pequan.lip6.fr/~graillat/teach/LU3IN028/`

Objectifs du cours

Objectifs :

- Concept mathématique : définition mathématique de concepts et de quantités
- Algorithme : comment calculer efficacement ces quantités sur ordinateur (via l'utilisation de MATLAB et Maple) ?
- Résolution de problème : utiliser les concepts et les algorithmes pour résoudre des problèmes concrets

Plan général du cours

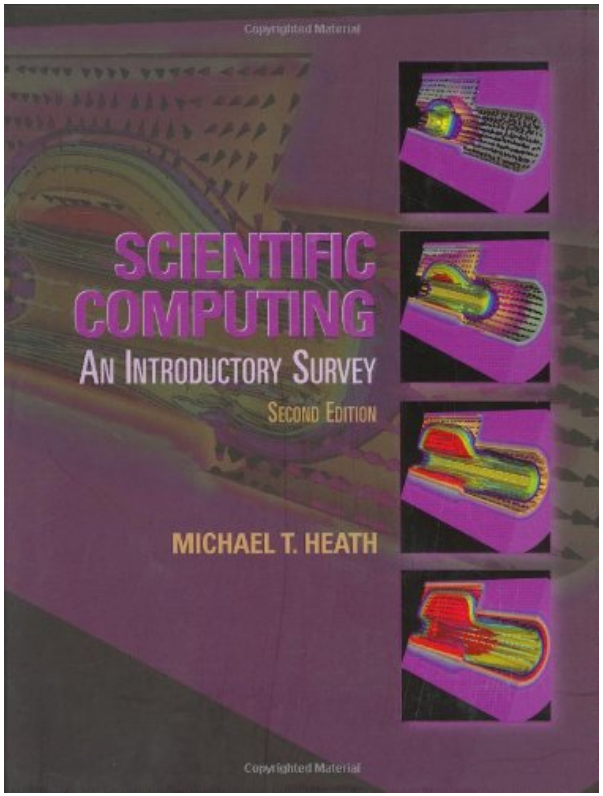
Algorithmique numérique

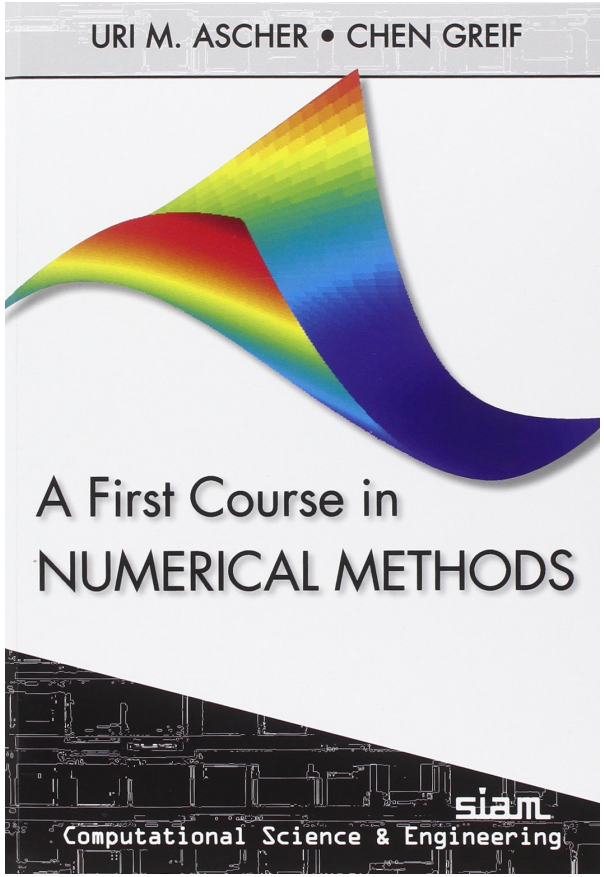
1. Introduction à Matlab et à l'arithmétique à virgule flottante
2. Introduction à l'optimisation (1/2)
3. Introduction à l'optimisation (2/2)
4. Résolution de systèmes nonlinéaires (méthode de Newton, méthode d'homotopie)
5. Méthodes itératives pour la résolution de systèmes linéaires
6. Transformée de Fourier discrète, application en traitement du signal et en calcul formel

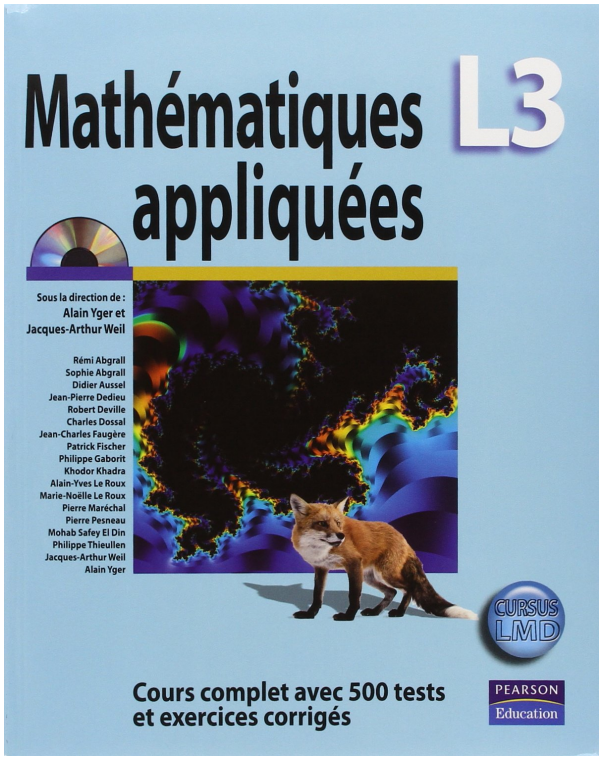
Références principales

- **A First Course in Numerical Methods, Uri M. Ascher, Chen Greif, SIAM, 2011**
- **Scientific Computing, An Introductory Survey, Michael T. Heath, McGraw-Hill, 2002**
- **Mathématiques appliquées L3, sous la direction de Jacques-Arthur Weil et Alain Yger, Pearson, 2009**
- Scientific Computing with Case Studies, Dianne P. O'Leary, SIAM, 2009
- Introduction to Scientific Computing and Data Analysis, Mark H. Holmes, Springer, 2016
- Numerical Computing with MATLAB, Cleve Moler, SIAM, 2004
- MATLAB Guide, Desmond J. Higham, Nicholas J. Higham, 3e édition, SIAM, 2017
- Scientific Computing, An Introduction using Maple and MATLAB, Walter Gander, Martin Gander, Felix Kwok, Springer, 2014
- Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing, William Press, Saul Teukolsky, William Vetterling et Brian Flannery, 3rd Edition, Cambridge University Press, 2007

Références principales







Champs d'application

Les notions vues dans ce cours interviennent dans :

- la robotique
- le traitement du signal
- le traitement d'image
- la finance
- la biologie
- etc.

1. Arithmétique à virgule flottante

Peut-on compter jusqu'à 6 avec un ordinateur ?

$2-1$		1.000000000000000
$\left(\frac{1}{\cos(100\pi+\pi/4)}\right)^2$		2.000000000000111
$3\frac{\tan(\arctan(10000))}{10000}$		2.999999999997162
$\left(\left(\cdots\left(\sqrt{\sqrt{\cdots\sqrt{4}}}\right)^2\cdots\right)^2\right)^2$	(20 fois)	4.000000000629434
$5\times\left\{\frac{(1+e^{-100})-1)}{(1+e^{-100})-1)}\right\}$		`NaN`
$\frac{\log(e^{6000})}{1000}$		`Inf`

Nombres à virgule flottante

Un nombre flottant normalisé $x \in \mathbb{F}$ est un nombre qui s'écrit sous la forme

$$x = \pm \underbrace{x_0.x_1 \ldots x_{p-1}}_{mantisse} \times b^e, \quad 0 \leq x_i \leq b-1, \quad x_0 \neq 0$$

b : la base, p : précision, e : exposant vérifiant $e_{\min} \leq e \leq e_{\max}$

Précision machine $\epsilon = b^{1-p}$, $|1^+ - 1| = \epsilon$

Approximation de $\mathbb{R}$ par $\mathbb{F}$, arrondi $\mathrm{fl} : \mathbb{R} \to \mathbb{F}$
Soit $x \in \mathbb{R}$ alors

$$\mathrm{fl}(x) = x(1+\delta), \quad |\delta| \leq \mathbf{u}.$$

L'unité d'arrondi $\mathbf{u}$ vaut $\mathbf{u} = \epsilon/2$ pour l'arrondi au plus près.

Modèle standard de l'arithmétique à virgule flottante

Norme IEEE 754 (1985)

- Les opérations arithmétique ops $(+, -, \times, /, \sqrt{\ })$ sont effectuées comme si elles était calculées en précision infinie puis arrondies ensuite
- Par défault : arrondi au plus près

Type	Taille	Mantisse	Exposant	Unité d'arrondi	Intervalle
Simple	32 bits	23+1 bits	8 bits	$\mathbf{u} = 2^{-24} \approx 5,96 \times 10^{-8}$	$\approx 10^{\pm 38}$
Double	64 bits	52+1 bits	11 bits	$\mathbf{u} = 2^{-53} \approx 1,11 \times 10^{-16}$	$\approx 10^{\pm 308}$

Soient $x, y \in \mathbb{F}$,

$$\mathrm{fl}(x \circ y) = (x \circ y)(1+\delta), \quad |\delta| \leq \mathbf{u}, \quad \circ \in \{+, -, \cdot, /\}$$

Exceptions

L'arithmétique est ''fermée'' : chaque opération retourne un résultat.

Exception	Résultats
Invalid operation	NaN (Not a Number)
Overflow	$\pm\infty$
Divide by zero	$\pm\infty$
Underflow	Nombres dénormalisés
Inexact	Résultat arrondi correctement

NaN est généré par les opérations telles que $0/0$, $0 \times \infty$, ∞/∞, $(+\infty) + (-\infty)$ et $\sqrt{-1}$.
Les symbôles infinis vérifient $\infty + \infty = \infty$, $(-1) \times \infty = -\infty$ et $(\text{fini})/\infty = 0$.

Précision des calculs

À chaque arrondi, on perd a priori un peu de précision, on parle d'erreur d'arrondi.

Même si une opération isolée retourne le meilleur résultat possible (l'arrondi du résultat exact), une suite de calculs peut conduire à d'importantes erreurs du fait du cumul des erreurs d'arrondi.

Les deux sources principales d'erreur d'arrondis au cours des calculs sont l'élimination et l'absorption.

Exemple du phénomène d'élimination

Soit $f(x) = (1 - \cos(x))/x^2$, alors $0 \leq f(x) < 1/2$ pour tout $x \neq 0$.
Avec $x = 1.2 \times 10^{-5}$, le cosinus arrondi à 10 chiffres significatifs vaut

$$c = 0.9999\ 9999\ 99,$$

donc

$$1 - c = 0.0000\ 0000\ 01$$

Par conséquent $(1 - c)/x^2 = 10^{-10}/1.44 \times 10^{-10} =$ 0.6944 ...!!!!

Pourtant la soustraction $1 - c$ est exacte.

Pour éviter l'élimination, réécrire f sous la forme

$$f(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{\sin(x/2)}{x/2}\right)^2$$

Exemple du phénomène d'absorption

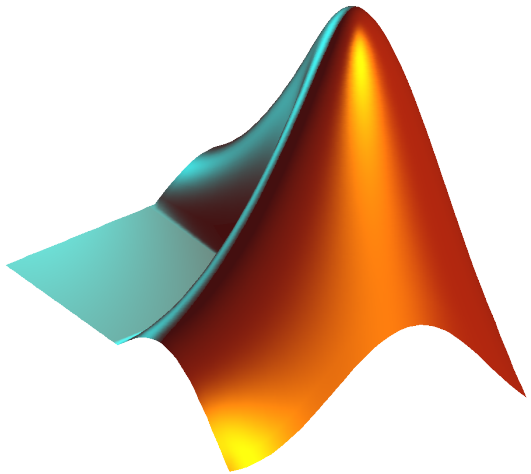
On calcule numériquement, pour de grandes valeurs de N, la somme :

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i}$$

Résultats d'un programme C (flottant SP) sur un processeur Pentium4 :

ordre	N			
	10^5	10^6	10^7	10^8
exacte	1.209015e+01	1.439273e+01	1.669531e+01	1.899790e+01
$1 \rightarrow N$	1.209085e+01	1.435736e+01	1.540368e+01	1.540368e+01
$N \rightarrow 1$	1.209015e+01	1.439265e+01	1.668603e+01	1.880792e+01

2. Introduction à MATLAB

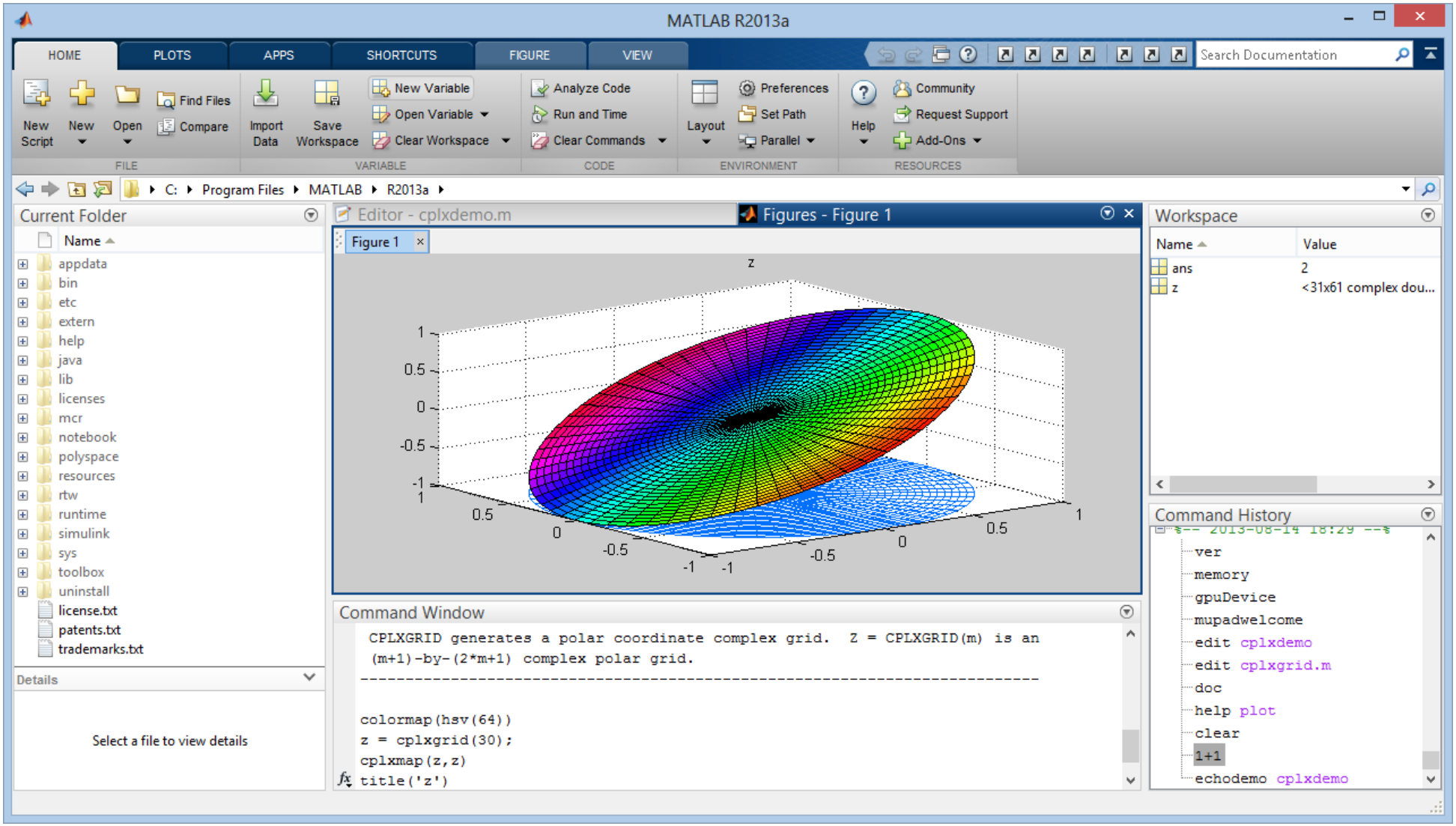


MATLAB

- MATLAB = MATrix LABoratory
- un langage de programmation et un environnement de développement
- MATLAB a été conçu par Cleve Moler à la fin des années 1970
- MATLAB est complété par de multiples boites à outils (toolboxes)
- le langage MATLAB supporte la POO
- Interaction possible avec les langages C et Fortran
- pour l'aide sur une commande `command`, utiliser `help command` ou `doc command`
- pour écrire des commentaires %

Référence : MATLAB Guide, Desmond J. Higham, Nicholas J. Higham, 3e édition, SIAM, 2017

MATLAB (suite)



MATLAB (suite)

- MATLAB a été créé dans les années 70 par Cleve Moler alors professeur de mathématiques à l'Université du Nouveau-Mexique
- MATLAB a été crée à partir des bibliothèques Fortran, LINPACK et EISPACK
- MATLAB a ensuite évolué, en intégrant la bibliothèque LAPACK en 2000
- Il y a des alternatives libres à MATLAB telles que GNU Octave, FreeMat et Scilab
- La version actuelle de MATLAB est MATLAB R2019a (version 9.6)

Vecteurs et matrices en MATLAB

Les variables de MATLAB sont principalement des vecteurs et des matrices

- Les vecteurs :

  - vecteur ligne

```
>> format compact
>> x = [1.1 10.1 100.1]
x =
    1.1000 10.1000 100.1000
```

  - vecteur colonne

```
>> x = [1.1; 10.1; 100.1]
x =
    1.1000
   10.1000
  100.1000
```

Vecteurs en MATLAB (suite)

- Affichage et affectation

```
>> x = [1.1; 10.1; 100.1];
>> x
x =
    1.1000
   10.1000
  100.1000
>> x(3) = -1.1
x =
    1.1000
   10.1000
   -1.1000
```

Les vecteurs sont indicés à partir de 1 (et pas 0 comme en C)

Vecteurs en MATLAB (suite)

- Transposition d'un vecteur

```
>> x = [1.1 10.1 100.1]'
x =
    1.1000
   10.1000
  100.1000
```

- Pour entrer un vecteur ou une commande occupant plus d'une ligne

```
>> x = [0 .05 .10 .15 .20 .25 .30 .35 .40 .45 .50 ...
    .55 .60 .65 .70 .75 .80 .85 .90 .95 1];
```

- Longueur d'un vecteur

```
>> length(x)
ans =
    21
```

Vecteurs en MATLAB (suite)

- Vecteur de taille quelconque (par défaut les vecteurs sont en ligne)

```
n = 20;
h = 1/n;
for k=1:n
    x(k) = k*h;
end
```

- Initialisation d'un vecteur colonne

```
x = zeros(n,1);
```

- les deux-points. La notation `a:b` dénote le vecteur ligne allant de `a` à `b` par pas de 1 tandis que pour `a:s:b` le pas est `s`

```
>> x = 1:5
x =
    1  2  3  4  5
>> x = 4:-1:0
x =
    4  3  2  1  0
```

Vecteurs en MATLAB (suite)

- `>> x = 0:0.05:1;  % vecteur à 21 composantes.`
  `>> x = 0.05*(0:20) % autre façon de générer le même vecteur`
- Accéder à des parties d'un vecteur
  `x(1:4)` extrait les 4 premiers éléments de `x`
- `linspace(a,b,n)` produit un vecteur ligne avec n composantes qui divise [a,b] en $n-1$ intervalles égaux.

  ```
  x = linspace(0,1,21);
  ```

Les matrices en MATLAB

La puissance de MATLAB provient de ses opérations matricielles

- rapide
- et précise (qualité numérique)

2 façons d'entrer des matrices

```
>> A = [1 2 3
        2 4 7
       -1 0 5]
A =
    1 2 3
    2 4 7
   -1 0 5
>> a = [1 2 3; 1 4 8; 3 -1 0]
a =
    1 2 3
    1 4 8
    3 -1 0
```

Les matrices en MATLAB (suite)

Fonctions spéciales pour créer des matrices

- `zeros(m,n)` produit une matrice de 0 de taille $m \times n$

```
>> A = zeros(2,4)
A =
    0 0 0 0
    0 0 0 0
```

- `ones(m,n)` produit une matrice de 1 de taille $m \times n$

```
>> A = ones(3)
A =
    1 1 1
    1 1 1
    1 1 1
```

Les matrices en MATLAB (suite)

- `eye(n)` produit la matrice identité de taille n

```
>> A = eye(3)
A =
    1  0  0
    0  1  0
    0  0  1
```

- Résolution d'un système linéaire $Ax = b$

```
>> A = [1 2 3; 2 4 7; -1 0 5];
>> b = [1 1 1]';
>> x =A\b
x =
     -6
      5
     -1
```

Les matrices en MATLAB (suite)

- Autre utilisation des deux-points :

```
>> C = A([1 3],:)
C =
     1     2     3
    -1     0     5
```

- Fonctions « vectorisées »
  On veut évaluer une fonctions sur un vecteur de valeur x_i :
  $a = x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$.
  Les fonctions standard acceptent des vecteurs en argument et revoie un vecteur.

```
n=21;
x = linspace(0,2*pi,n);
y = cos(x);
```

Sauvegarder votre travail

- En général, on écrit la liste des commandes tapées dans un fichier texte (via l'éditeur `edit` intégré à MATLAB) ou via votre éditeur de texte préféré

- Pour sauvegarder des variables, utilisez la fonction `save`. Sauvegarder les variable `A`, `b` dans le fichier `svar.mat` se fait par :

  ```
  save svar A b
  ```

  On les recharge par la commande :

  ```
  load svar
  ```

Aide

- taper `help command`.

```
>> help length
 LENGTH   Length of vector.
    LENGTH(X) returns the length of vector X.  It is
    equivalent to MAX(SIZE(X)) for non-empty arrays
    and 0 for empty ones.
```

- pour l'avoir en mode graphique, taper `doc`

```
>> doc length
```

M-files

2 types de fichier (qui portent l'extension `.m`) :

- script M-files : ni entrée, ni sortie et utilise les variables de l'espace de travail
- fonction M-files : contient une fonction qui accepte des arguments en entrée et renvoie des arguments en sortie et les variables internes sont locales à la fonction

Exemple de fonction (à stocker dans un fichier `sumprod.m`) :

```
function [s,p]= sumprod(x)
   n = length(x);
   s=0;
   p=1;
   for i=1:n
      s = s + x(i);
      p = p*x(i);
   end
```

M-files (suite)

Structure d'une fonction M-files

1. le mot-clé `function`
2. liste des arguments en sortie (entre crochets `[ ]` s'il y en a plusieurs)
3. le symbole =
4. le nom de la fonction (qui doit être le même que le nom du fichier `.m`)
5. la liste entre parenthèse des entrées
6. le corps de la fonction

Pour éditer les fichiers, taper `edit`

Commandes utiles : `dir`, `ls`, `cd`, `type`, `lookfor`, `path`

Affichage

- Format numérique : commande `format` pour afficher des nombres en virgule fixe ou flottante

```
>> format short, pi^4 % fixe, 5 chiffres
ans =
   97.4091
>> format shortE, pi^4 % flottante, 5 chiffres
ans =
   9.7409e+001
>> format long, pi^4 % fixe, 15 chiffres
ans =
   97.40909103400242
>> format longE, pi^4 % flottante, 15 chiffres
ans =
   9.740909103400242e+001
```

Affichage (suite)

- Affichage de chaînes de caractère
  - la commande `disp` permet d'afficher une chaîne de caractère ou une variable

```
>> x=3;
>> disp(x);
     3
>> disp('test');
test
```

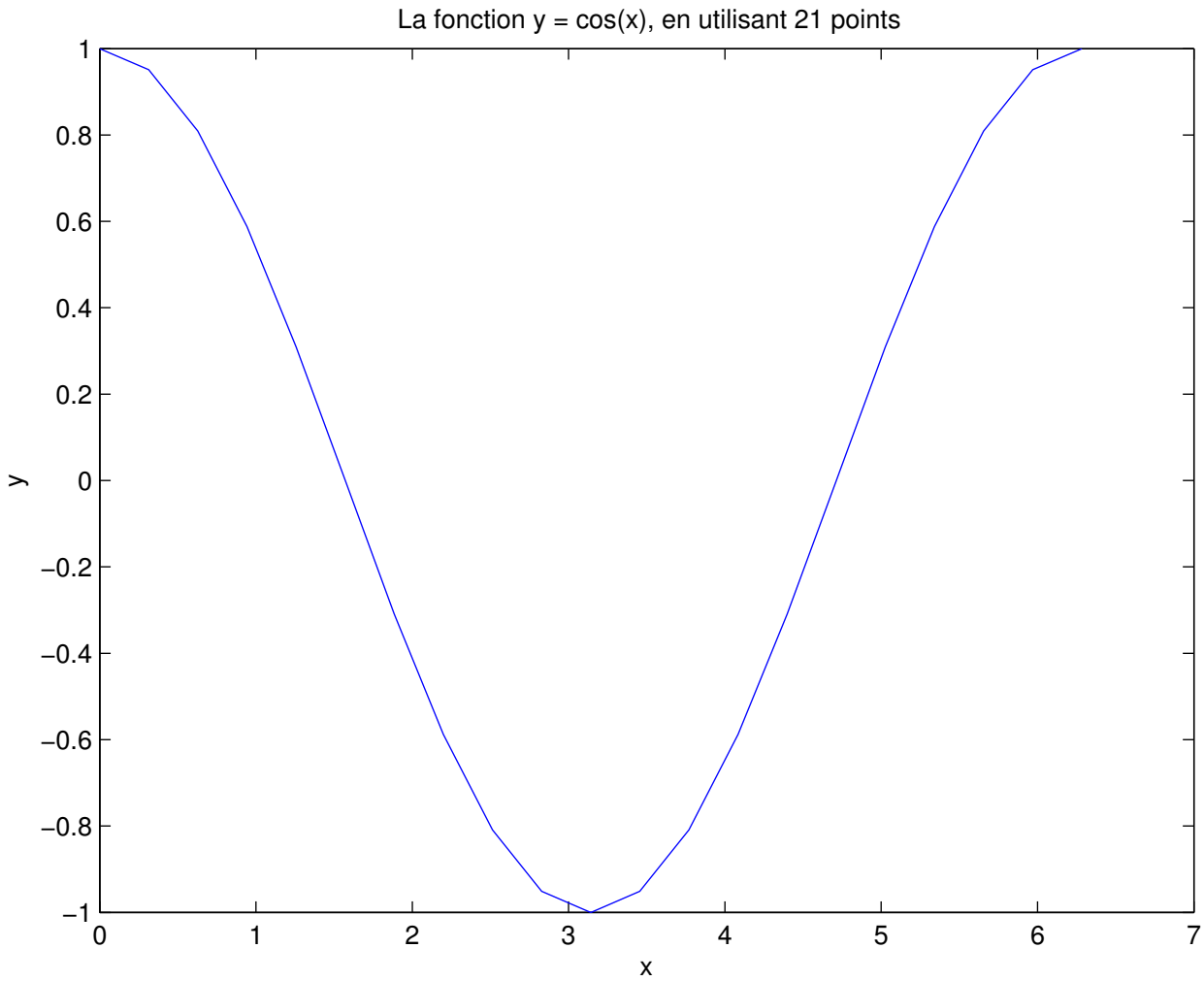
  - la commande `fprintf` permet d'afficher les chaînes de caractère et des chiffres (similaire à la commande `printf` de C)

Graphiques

Tracé d'une fonction $y = f(x)$ sur un intervalle $[a, b]$

```
n = 21;
x = linspace(0,2*pi,n);
y = cos(x);
plot(x,y)
title('La fonction y = cos(x), en utilisant 21 points')
xlabel('x')
ylabel('y')
```

Graphiques


La fonction y = cos(x), en utilisant 21 points
y
x
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
−0.2
−0.4
−0.6
−0.8
−1
0
1
2
3
4
5
6
7

Structures de contrôle et tests

- boucle `for`

```
for variable = expression
    instructions
end
```

- boucle `while`

```
while expression
    instructions
end
```

- test `if`

```
if expression
    instructions
end
```

```
if expression
    instructions
else
    instructions
end
```

Structures de contrôle et tests

- opérations relationnelles

==	égal
~=	différent
<	strictement inférieur
>	strictement supérieur
<=	inférieur ou égal
>=	supérieur ou égal

- opérations logiques

&	et
|	ou
~	non

Symbolic Math Toolbox

- La toolbox contient le noyau de MuPAD et des fonctions MATLAB qui communiquent avec ce noyau
- Nouveau type d'objet : les objets `sym` créés par les commandes `sym` et `syms`
- Créer une variable symbolique `x`

```
>> syms x
```

Symbolic Math Toolbox (suite)

- Manipulation symbolique d'expression en x

```
>> f = 1/(1+x^2)
f =
   1/(1+x^2)

>> g = int(f) % intégration
g =
   atan(x)

>> diff(g) % dérivation
ans =
   1/(1+x^2)

>> syms a
>> y = solve(f-a) % résoud f(x)-a=0
y = [ 1/a*(-a*(-1+a))^(1/2)]
    [ -1/a*(-a*(-1+a))^(1/2)]
```

Symbolic Math Toolbox (suite)

- Arithmétique multiprécision : fonction vpa

```
>> digits % par défaut
Digits = 32
>> vpa('sqrt(2)')
ans =
1.4142135623730950488016887242097
>> digits(50)
>> vpa('sqrt(2)')
ans =
1.4142135623730950488016887242096980785696718753769
```

- Arithmétique exacte : on travaille avec des expressions symboliques

```
>> z = sym('sqrt(2)')
z =
sqrt(2)
>> z^2-2
ans =
0
```

Stockage des matrices

Pour programmer efficacement des algorithmes sur les matrices, il est très important de savoir comment sont stockées les matrices en mémoire !

Exemple : produit matrice-vecteur

Étant donnés une matrice A de taille $m \times n$ et un vecteur x de longueur n, on veut calculer $y = Ax$

- Le vecteur y est défini par des produits scalaire entre les lignes de A et x

$$y_i = A(i,:)x$$

```
[m,n]=size(A);
y = zeros(m,1);
for i=1:m,
    for j=1:n,
        y(i) = y(i) + A(i,j)*x(j);
    end
end
```

Stockage des matrices (suite)

- On peut exprimer Ax en utilisant plutôt les colonnes de A

$$Ax = x_1 A(:,1) + x_2 A(:,2) + \cdots + x_n A(:,n)$$

Ce qui revient à calculer la transposée de $(Ax)^T$

```
[m,n]=size(A);
y = zeros(m,1);
for j=1:n,
    for i=1:m,
        y(i) = y(i) + A(i,j)*x(j);
    end
end
```

Stockage des matrices (suite)

Les deux algorithmes font mn multiplications et mn additions !

- L'ordinateur stocke les informations dans des pages mémoire.
- Une partie des informations est stockée dans des caches
- Ce qui ne rentre pas dans le cache est stocké dans la mémoire centrale (plus lente d'accès)
- Enfin ce qui ne tient pas en mémoire centrale est stocké sur le disque dur

Pour utiliser des données, il faut transférer en cache la page contenant les données (par conséquent, d'autres données doivent être effacées du cache). Ces pages étant au mieux dans la mémoire vive (la plupart du temps lorsque les calculs sont raisonnables) ou au pire dans le disque dur (par exemple pour la multiplication de matrices carrées de plusieurs millions de lignes).
Pour qu'un algorithme soit efficace, il faut limiter le nombre de fois qu'une page est chargée en cache !

Stockage des matrices (suite)

Question à se poser lorsque l'on veut multiplier une matrice et un vecteur :
Quel est l'algorithme que vous allez utiliser pour que l'algorithme soit efficace ?

La vraie question à se poser est en fait :

Est-ce que les matrices sont rangées par ligne ou par colonne ?

Langage	schéma de stockage
C, C++	par ligne
Fortran	par colonne
Java	par ligne
MATLAB	par colonne

Outils de base pour manipuler des matrices : les BLAS

Il y a des taches qui sont effectuées dans presque toutes les opérations matricielles !

Des fonctions ont été développées pour éviter que les programmeurs n'aient à les reprogrammer à chaques fois

Ces Basic Linear Algebra Subroutines ou BLAS sont maintenant accessibles pour presque tous les langages de programmation

Les BLAS sont partitionnées par niveau. Les BLAS de niveau k effectuent $\mathcal{O}(n^k)$ opérations (ici n est la dimension des vecteurs ou des matrices)

Outils de base pour manipuler des matrices : les BLAS (suite)

Exemple 1

- *BLAS de niveau 1*
  1. *sscal calcule ax où a est un scalaire et x un vecteur*
  2. *saxpy calcule ax + y*
  3. *sdot calcule $x^* y$*
- *BLAS de niveau 2*
  1. *produit matrice-vecteur*
  2. *solution d'un système linéaire triangulaire*
- *BLAS de niveau 3*
  1. *produit matrice-matrice*
  2. *solution de multiples systèmes linéaires triangulaires*

Quand une BLAS existe, il est important de l'utiliser dans votre programme

MATLAB utilise automatiquement les BLAS. Dans les autres langages, on doit les appeler explicitement

MATLAB et Maple à la PPTI

- Il y a une licence de site MATLAB à la PPTI. Il s'agit de MATLAB R2018b (version 9.5) avec la Symbolic Math Toolbox.

  Pour lancer MATLAB, il suffit de taper dans un terminal
  `/usr/local/Matlab-2018/R2018b/bin/matlab`

- Il y a Maple à la PPTI. Il s'agit de Maple 2019.

  Pour lancer Maple, il suffit de taper
  `/usr/local/maple2019/bin/xmaple`

Accord cadre MATLAB et Maple à SU

- SU met aujourd'hui à votre disposition (pour les personnels et les étudiants) le logiciel de calcul interactif MATLAB
  `http://logiciels.upmc.fr/fr/marches_conclus_par_l_upmc/matlab.html`
- Que vous soyez enseignant, chercheur, étudiant, vous pouvez disposer d'une licence Maple sur vos machines personnelles, de travail, ou salles informatiques.
  `http://logiciels.upmc.fr/fr/marches_conclus_par_l_upmc/maple.html`

Conclusion

Pour avoir un aperçu des fonctionnalités de MATLAB, taper `demo`