Calcul Scientifique

Cours 2: Opération de base d'algèbre linéaire

Alexis Lechervy

université de Caen
Basse-Normandie

Sommaire

Problématique

Enjeux

Dans de nombreux problèmes scientifiques, **certaines opérations sont récurrentes**. (par exemple : une étude[1] de 1964 sur le supercalculateur IBM 7030 montre que 11% des calculs les plus fréquents sur les nombres à virgule flottante représentent la sommation simple.) $\Longrightarrow$ il devient important d'**optimiser ces opérations** (exemple : le circuit shifter de l'IBM 7030 pour la sommation en virgule flottante).

Exemple : le produit matricielle $C = AB$

Approche naïve :

- $\forall i, j \; c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{i,k} b_{k,j}$
- Nécessite trois boucles (sur les i,j et k).
- Pas du tout optimal en calcul, en accès mémoire, n'utilise pas bien les caches processeurs...
- Une implémentation plus performante est plus longue et nécessite une bonne connaissance des optimisations matérielles possibles.

BLAS : Basic Linear Algebra Subprograms

BLAS : Basic Linear Algebra Subprograms

BLAS est une **interface de programmation** réalisant des opérations de bases d'**algèbre linéaire** (addition de vecteurs, produit scalaire, norme de vecteur, multiplication matricielle ...). Ces fonctions sont largement utilisées pour du **calcul haut performance** et ont été largement optimisées par les constructeurs matériel comme Intel, AMD, Nvidia.

Historique

- Avant 1970, les codes utilisant du calcul rapide utilisaient des **fonctions optimisées écrite directement en langage machine**. => ces fonctions étaient généralement pas portable et le code les utilisant devaient être mis à jours à chaque évolution.
- Entre 1972-1978, à l'initiative de l'University of Tennessee, les fonctions les plus utilisés ont été identifiées et des sous-routines en Fortran 77 à nom génériques ont été créées. Les fonctions ont alors pu être utilisées en mode "boite noir" tout en s'améliorant en permanence.
- En 1979, publication de BLAS niveau 1 et première implémentation dans des librairies open source comme LAPACK.
- En 1984-1986, l'évolution matérielle comme l'apparition des co-processeurs, permettant d'effectuer des opérations (somme, produit...) en même temps, conduit à la publication de nouvelles fonctions : BLAS niveau 2.
- En 1987-1988, l'utilisation de mémoire cache à accès rapide, les progrès du calcul parallèle, on conduit les programmeurs à privilégier les calculs par blocs : BLAS niveau 3.

BLAS, trois niveaux de fonctions

BLAS, niveau 1

Regroupe les opérations sur les vecteurs et entre vecteurs dont le résultat est une valeur ou un vecteur `http://www.netlib.org/blas/#_level_1`.

Exemples

- Les opérations de la forme : $\alpha x + y$, avec x, y des vecteurs et α un scalaire,
- Les produits scalaires : $\langle x, y \rangle = \sum_i x_i y_i$,
- La norme euclidienne d'un vecteur : $\|x\|^2 = \sum_i {x_i}^2$,
- La norme 1 d'un vecteur : $\|x\|_1 = \sum_i |x_i|$,
- ...

BLAS, trois niveaux de fonctions

BLAS, niveau 2

Regroupe les opérations entre un vecteur et une matrice dont le résultat est un vecteur ou une matrice `http://www.netlib.org/blas/#_level_2`.

Exemples

- Les opérations de la forme : $\alpha Ax + \beta y$, avec x, y des vecteurs, α, β des scalaires et A une matrice,
- Résolution de l'équation $Tx = y$ avec x, y des vecteur et T une matrice triangulaire (x est l'inconnu retourné par la fonction),
- Les opérations de la forme $\alpha x y^\top$, avec x, y des vecteurs et α un scalaire,
- ...

BLAS, trois niveaux de fonctions

BLAS, niveau 3

Regroupe les opérations entre matrices dont le résultat est une matrice.
`http://www.netlib.org/blas/#_level_3`

Exemples

- Les opérations de la forme : $\alpha AB + \beta C$, avec α, β des scalaires et A, B, C des matrices,
- Résolution de l'équation $TX = \alpha B$, avec α un scalaire, T est une matrice triangulaire et B, X des matrices (X est l'inconnu retourné par la fonction),
- ...

BLAS en pratique

Info

L'ensemble des fonctions de la norme est résumé ici :
`http://www.netlib.org/blas/blasqr.pdf`

Implémentations de BLAS

Il existe de nombreuses implémentations de BLAS commerciale et open source :

- ATLAS,
- Intel MKL,
- ACML (AMD Core Math Library),
- Accelerate (Apple framework for MacOs),
- cuBLAS (Optimized BLAS for NVIDIA),
- clBLAS (OpenCL implementation of BLAS),
- OpenBLAS,
- GotoBLAS,
- EigenBLAS...

BLAS et python

BLAS dans numpy et scipy

Les librairies python **numpy et scipy** s'appuient sur une implémentation BLAS pour fonctionner. Même s'il est possible d'appeler directement ces fonctions (`https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/linalg.blas.html`), on les **utilises généralement indirectement**.

Remarques d'optimisation

Lors d'une **installation basique** de numpy et scipy une **version non optimisée de BLAS** est utilisée. Pour optimiser vos temps de calculs, vous devez **installer une implémentations indépendante de BLAS** et la relier à votre installation de numpy et scipy.
`https://docs.scipy.org/doc/numpy-1.10.1/user/install.html`

Sommaire

Calculs vecteurs / vecteurs

Combinaison linéaire de vecteur

Si a est un nombre et v_1, v_2 des array numpy à d dimension, on peut écrire :

$$v = a * v1 + v2$$

Rq : $v1$ et $v2$ doivent avoir les même dimensions.

Produit terme à terme entre deux vecteurs v_1 et v_2

$v = v1 * v2$

Produit scalaire entre deux vecteurs v_1 et v_2

Rappel mathématique : Le produit scalaire correspond à la somme des produits des valeurs des deux vecteurs :

$$\langle v_1, v_2 \rangle = \sum_i v_{1i} v_{2i}.$$

Implémentation numpy :

```
p =v1.dot(v2)
p =v2.dot(v1)
p =np.dot(v1,v2)
```

Remarque sur le produit scalaire

Le produit scalaire

Le produit scalaire correspond à la formule :

$$\langle v_1, v_2 \rangle = \sum_i v_{1i} v_{2i}.$$

On peut l'implémenter avec la fonction *dot* de numpy.

Autre implémentation possible du Produit scalaire entre deux vecteurs v_1 et v_2

```
p =np.sum(v1 * v2)
```

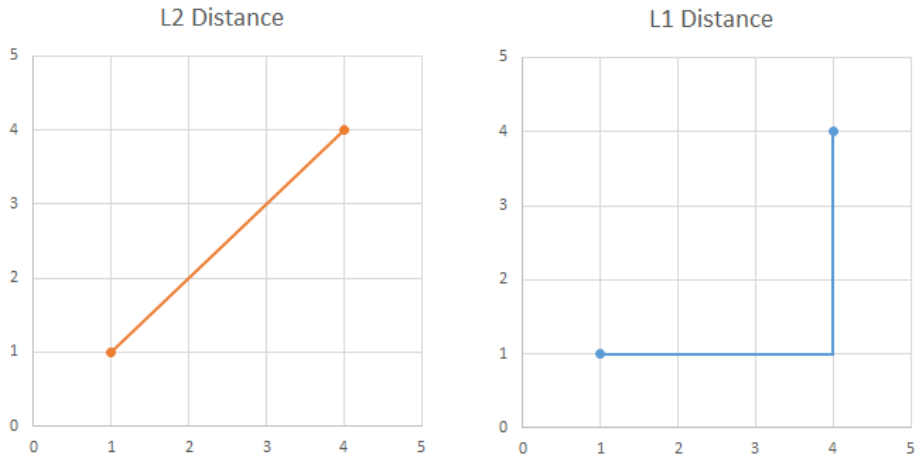
Norme d'un vecteur

Définition simplifié

La norme est l'extension de la notion de valeurs absolue aux vecteurs. Elle représente la «distance» entre le point 0 et le point à l'extrémité du vecteur mesuré.

La notion de distance

Il existe plusieurs façon de définir une distance entre deux poinst.



Norme euclidienne d'un vecteur v

Formule de math : $\|v\| = \sqrt{\sum_i x_i^2}$
Implémentation :

```
n2 =np.linalg.norm(v)
n2 =np.linalg.norm(v,2)
n2 =np.sqrt(np.sum( v **2))
```

Norme L1 d'un vecteur

Formule de math : $|v|_1 = \sum_i |x_i|$
Implémentation :

```
n1 = np.linalg.norm(v,1)
n1 = np.sum( np.abs(v))
```

Cas de la somme d'un scalaire et d'un vecteur

Somme d'un scalaire *a* et d'un vecteur *v*

Sommer un nombre et un vecteur revient au même que de sommer le vecteur avec un vecteur de même taille où le nombre aurait été recopié sur toutes les dimensions.

Exemple

Les instructions suivantes sont quasi-équivalente en terme de résultat :

```
v + a
v + a*np.ones(v.shape)
```

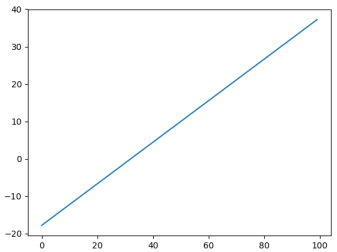
Exemples d'utilisation

Conversion d'un vecteur de température en Fahrenheit en Celsius

Il est possible de transformer une température en Fahrenheit en Celsius grâce à la formule $t_{\text{celsius}} = \frac{5}{9} t_{\text{Fahrenheit}} - \frac{160}{9}$.

Code correspondant

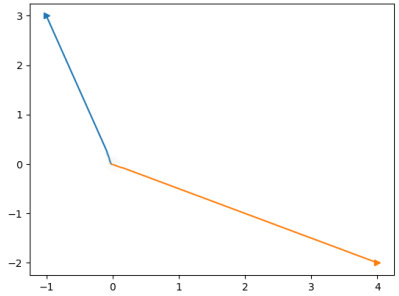
```
f = np.arange(0,100) # Fahrenheit entre 0 et 100
c = 5/9 * f - 160/9 # conversion en degree celsius
plt.plot(f,c) # affichage de c en fonction de f
plt.show()
```



Calcul d'angle entre deux vecteurs

Déclaration des vecteurs

```
x= np.array([-1,3])
y= np.array([4,-2])
```



Calcul du produit scalaire et des normes des vecteurs

```
p = np.dot(x,y) # produit scalaire entre x et y (⟨x, y⟩)
n_x = np.lialg.norm(x) # norme de x (‖x‖)
n_y = np.lialg.norm(y) # norme de y (‖y‖)
```

Calcul de l'angle entre les deux vecteurs

Rappel sur le cosinus : $cos(\vec{x}, \vec{y}) := \frac{\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle}{\|x\|\|y\|}$

Calcul de l'angle en degré : `np.arccos(p/(n_x * n_y)) * 180/np.pi`

Sommaire

Calculs matrice / vecteur

Combinaison linéaire de type $\alpha Ax + \beta y$

```
a * A.dot(x) + b*y
```

Attention A est une matrice mais x et y sont des vecteurs soit des **array numpy de dimension (d,)** et non (d,1) ou (1,d).

Exemple : Évaluation rapide d'un ensemble d'équation

Problème :

$$\begin{cases} 2x + 3y + 1 = ? \\ -4x + 12z = ? \\ 23x + 4y - 42z - 4 = ? \\ 17z - 2 = ? \end{cases} \quad \text{pour } x = -11, y = 13 \text{ et } z = 16 \tag{1}$$

Réécriture

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 \\ -4 & 0 & 12 \\ 23 & 4 & 42 \\ 0 & 0 & 17 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -4 \\ -2 \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} -11 \\ 13 \\ 16 \end{bmatrix}, Ax + b = ? \tag{2}$$

Solution numpy : A.dot(x)+b

Vecteur mathématique et array numpy

Remarque sur les array numpy

Un vecteur mathématique peut être représenté par différent array numpy ayant des comportements différents.

```
v1 = np.array([1,2]) \# vecteur generique
v1.shape
        -> (2,)
v2 = np.array([[1,2]]) \#vecteur ligne(1ligne|2colonnes)
v2.shape
        -> (1,2)
v3 = np.array([[1],[2]])\#vecteur colonne(2lignes|1colonne)
v3.shape
        -> (2,1)
```

Transposée

Mathématiquement

La matrice transposée est obtenue en échangeant les lignes et les colonnes.

$$\begin{bmatrix} 1 & 11 \\ 2 & 22 \\ 3 & 33 \end{bmatrix}^{\top} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 11 & 22 & 33 \end{bmatrix} \tag{3}$$

Transposé de matrice

```
M = np.array([[1,11],[2,22],[3,33]])
Mt = M.T
        ->array([[ 1,  2,  3],
       [11, 22, 33]])
M.shape
        ->      (3,2)
Mt.shape
        ->      (2,3)
```

Transposée de vecteur

Définition d'un vecteur $v1$

Mathématiquement :

$$v1 = [1, 2] \tag{4}$$

Avec numpy : v1 =np.array([1,2])

Transposé sur $v1$

```
v1t = v1.T
v1t
        -> array([1,  2])
v1t.shape
        ->       (2,)
```

L'opérateur de transposé n'a pas d'effet sur le vecteur $v1$.

Définition d'un vecteur $v2$

Mathématiquement :

$$v2 = [1, 2] \tag{5}$$

Avec numpy : v2 =np.array([[1,2]])

Transposé sur $v2$

```
v2t = v2.T
v2t
        -> array([[1],
       [2]])
v2t.shape
        ->       (2,1)
```

L'opérateur de transposé s'est appliqué en transformant un vecteur ligne en vecteur colonne.

Définition d'un vecteur $v3$

Mathématiquement :

$$v3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{6}$$

Avec numpy : v3 =np.array([[1],[2]])

Transposé sur $v3$

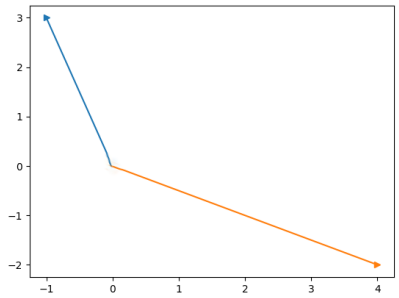
```
v3t = v3.T
v3t
        -> array([[1,2]])
v3t.shape
        ->       (1,2)
```

L'opérateur de transposé s'est appliqué en transformant un vecteur colonne en vecteur ligne.

Calcul d'angle entre deux vecteurs (une autre solution)

Déclaration des vecteurs

```
x= np.array([[-1],[3]])
y= np.array([[4],[-2]])
```



Calcul du produit scalaire et des normes des vecteurs

```
p = x.T.dot(y)
n_x = np.sqrt(x.T.dot(x))
n_y = np.sqrt(y.T.dot(y))
```

Calcul de l'angle entre les deux vecteurs

Rappel sur le cosinus : $cos(\vec{x}, \vec{y}) := \frac{\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle}{\|x\|\|y\|}$

Calcul de l'angle en degré : `np.arccos(p/(n_x * n_y)) * 180/np.pi`

Attention : Le résultat n'est plus une valeur, mais un tableau de dimensions (1,1).

Les opérations de la forme $\alpha x y^\top$

Résultat mathématique attendu

$$\alpha = 1,\ x = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \text{ et } y = \begin{bmatrix} 11 \\ 12 \end{bmatrix} \Longrightarrow \alpha x y^\top = \begin{bmatrix} 11 & 12 \\ 22 & 24 \end{bmatrix}$$

Implémentation correct

```
x = np.array([[1],[2]])
y = np.array([[11],[12]])
x.dot(y.T)
        -> array([[11,  12],
       [22,  24]])
```

Remarque avec des vecteurs numpy (2,)

```
x = np.array([1,2])
y = np.array([11,12])
x.dot(y.T)
        -> 35
```

Ne calcul pas la matrice attendu mais le produit scalaire entre les deux vecteurs.

Trouver la ville la plus proche à vol d'oiseau

Calcul de la distance la plus petit entre un point et un ensemble de point

- Les coordonnées des villes seront stockés ligne par ligne dans une matrice M.
- La coordonnée de l'utilisateur (point rouge) sera représenté par une vecteur v.

Distances

Distances entre deux points x et y

Mathématiquement :

$$d(x,y) = \|x-y\| \quad (7)$$

$$= \sqrt{\sum_i (x_i - y_i)^2} \quad (8)$$

En numpy :

```
np.sqrt(np.sum((x-y)**2))
```

Distances entre un point v et tout les points M d'un ensemble (solution "naïve")

```
d=np.zeros(n)
for i in range(n) :
   d[i] = np.sqrt(np.sum((M[i]-v)**2))
```

Problème : Les boucles for ne sont pas performante et doivent être évitées ! !

Distance

Distances entre deux points x et y

Mathématiquement :

$$
\begin{aligned}
d(x,y) &= \|x-y\| && (9)\\
&= \sqrt{\sum_i (x_i - y_i)^2} && (10)\\
&= \sqrt{\sum_i x_i^2 - 2x_i y_i + y_i^2} && (11)\\
&= \sqrt{\sum_i x_i^2 - 2\sum_i x_i y_i + \sum_i y_i^2} && (12)\\
& && (13)\\
&= \sqrt{\|x\|^2 - 2\langle x, y\rangle + \|y_i\|^2} && (14)\\
& && (15)
\end{aligned}
$$

En numpy :

```
np.sqrt(np.sum(x**2) - 2*x.T.dot(y) + np.sum(y**2) )
```

Distance

Distances entre deux points x et y

Mathématiquement :

$$d(x,y) = \sqrt{\|x\|^2 - 2\langle x,y\rangle + \|y_i\|^2} \quad (16)$$

(17)

En numpy :

```
np.sqrt(np.sum(x**2) - 2* x.T.dot(y) + np.sum(y**2) )
```

Distances entre un point v et tout les points M d'un ensemble (bonne solution)

```
d=np.sqrt(np.sum(M**2,axis=1) - 2*M.dot(v) + np.sum(v**2) )
```

Distances entre un point v et un ensemble de points M

```
np.min(d)
```

Sommaire

Le produit matriciel de Hadamard

Définition mathématique

Le produit de Hadamard M des matrice A et B est le produit terme à terme des deux matrices.

$$M_{ij} = A_{ij} B_{ij}$$

En numpy

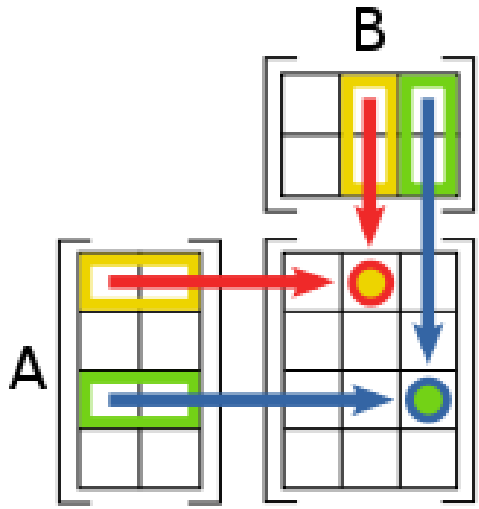
$$M = A * B$$

Le produit matricielle

Définition mathématique

Le produit matricielle M des matrice A et B est :

$$M_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$$



En numpy

$$M = A.dot(B)$$

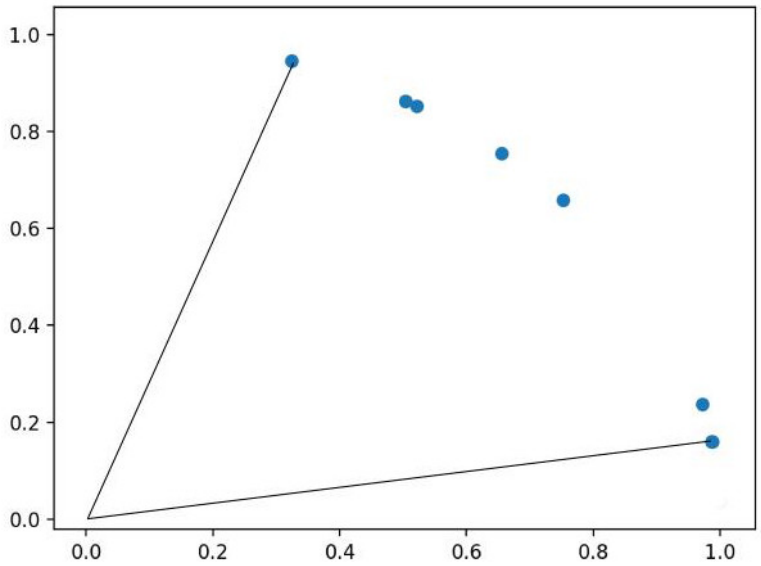
ou

$$M = np.dot(A, B)$$

Angle d'un cône englobant

Problématique

Calculer l'angle max entre un groupe de vecteur de norme 1.



Solution

```
angle = np.arccos(x.dot(x.T) ) * 180/np.pi
print('Solution : ',np.max(angle))
```