TP #3

Responsable: Antoine Allard

À remettre au plus tard le **14 avril à 8h00**

TP3.1 Décomposition QR par la méthode de Householder

La méthode de *Gram-Schmidt* vue en classe permettant d'obtenir la décomposition QR d'une matrice a l'avantage d'être visuelle et intuitive, mais elle est malheureusement instable numériquement (c.-à-d. elle est sensible aux troncatures numériques). Une autre méthode dite de *Householder*[1] est plus stable numériquement et est donc préférée en pratique. Elle consiste en l'application successive de matrices de réflexion (notées $\mathbf{Q}_i$) sur la matrice de départ (notée $\mathbf{A}$) pour la rendre triangulaire supérieure. Plus précisément, si la matrice $\mathbf{A}$ possède m rangées et n colonnes (on suppose que $m \geq n$), alors

$$\mathbf{Q}_{n-1}\mathbf{Q}_{n-2}\ldots\mathbf{Q}_1\mathbf{Q}_0\mathbf{A} = \mathbf{R} \tag{3.1}$$

est une matrice diagonale supérieure, aussi de dimensions $m \times n$. Les matrices de réflexion $\mathbf{Q}_i$ sont orthogonales, de dimension $m \times m$ et sont définies comme

$$\mathbf{Q}_i = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_i & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_{m,i} \end{bmatrix} , \tag{3.2}$$

où $\mathbf{I}_i$ est la matrice identité de dimension $i \times i$ et $\mathbf{H}_{m,i}$ est une matrice de réflexion de Householder. Cette dernière est définie comme

$$\mathbf{H}_{m,i} = \mathbf{I}_{m-i} - 2\frac{\mathbf{v}_{m,i}\mathbf{v}_{m,i}^T}{\mathbf{v}_{m,i}^T\mathbf{v}_{m,i}} , \tag{3.3}$$

où $\mathbf{v}_{m,i}$ est le vecteur de dimension $(m-i) \times 1$

$$\mathbf{v}_{m,i} = \mathrm{sign}([\mathbf{x}]_1)||\mathbf{x}||_2\mathbf{e}_1 + \mathbf{x} , \tag{3.4}$$

où $\mathbf{x}$ est un vecteur composé des $m-i$ derniers éléments de la i-ième colonne de la matrice $\mathbf{Q}_{i-1}\ldots\mathbf{Q}_0\mathbf{A}$ si $i > 1$ ou $\mathbf{A}$ si $i = 0$, où $\mathrm{sign}([\mathbf{x}]_1)$ est le signe du premier élément de $\mathbf{x}$[2], et où $\mathbf{e}_1 = [1\ 0\ 0\ \ldots\ 0]^T$ est un vecteur de dimension $(m-i) \times 1$. La matrice $\mathbf{Q}$ de la décomposition QR de la matrice $\mathbf{A}$ s'obtient à l'aide de ces mêmes matrices $\mathbf{Q}_i$ selon

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0^T\mathbf{Q}_1^T\ldots\mathbf{Q}_{n-2}^T\mathbf{Q}_{n-1}^T . \tag{3.5}$$

a. À l'aide des équations (3.2) et (3.3), démontrez que les matrices de réflexion $\mathbf{Q}_i$ sont orthogonales[3].

1. Voir le chapitre 10 de Trefethen & Bau III, *Numerical Linear Algebra* (SIAM, 1997) pour plus de détails.
2. On posera que $\mathrm{sign}(0) = 1$.
3. Indice : montrez d'abord que les matrices $\mathbf{H}_{m,i}$ sont orthogonales, puis utilisez ce résultat de même que la forme générale du produit de matrices par blocs pour démontrer que les $\mathbf{Q}_i$ sont orthogonales.

b. Démontrez l'équation (3.5) et que la matrice $\mathbf{Q}$ est orthogonale.

c. Implémentez la fonction `householder_qr` qui prend en argument une matrice $\mathbf{A}$ et qui retourne les matrices $\mathbf{Q}$ et $\mathbf{R}$ obtenues par la méthode de Householder.

d. À l'aide d'une matrice de dimension 4×3 de votre choix, testez votre fonction `householder_qr` et comparez les résultats obtenus avec ceux obtenus à l'aide de la fonction `numpy.linalg.qr`. Les matrices sont-elles exactement les mêmes ? Si non, est-ce un problème ?

e. À l'aide de la matrice utilisée en **d**, illustrez comment la multiplication successive des matrices $\mathbf{Q}_i$ triangularise progressivement la matrice $\mathbf{A}$. Dans l'élan, assurez-vous que les matrices $\mathbf{Q}$ et $\mathbf{R}$ obtenues sont bien orthogonale et triangulaire supérieure, respectivement.

TP3.2 Mesures imprécises dans un jeu de bataille navale

Une amie, riche héritière et excentrique, vous invite à un jeu de bataille navale grandeur nature. À bord d'une embarcation, votre rôle est de prédire le point d'impact des projectiles. Vous avez accès à de l'équipement de pointe, et pouvez donc connaître la position des projectiles, mais ces mesures sont entachées d'une certaine incertitude.

De vos cours de mécanique classique, vous savez que

$$x(t) = x_0 + v_{x0} t \tag{3.6a}$$

$$y(t) = y_0 + v_{y0} t + \frac{a_y t^2}{2} \tag{3.6b}$$

où $x(t)$ correspond à la distance *horizontale* vous séparant du projectile, $y(t)$ correspond à l'altitude du projectile, x_0 et y_0 aux coordonnées de la position initiale, v_{x0} et v_{y0} aux composantes horizontale et verticale de la vitesse initiale, et a_y à l'accélération verticale.

Puisque seules les positions vous sont connues, vous paramétrez l'altitude, y, en fonction de la distance horizontale, x, comme suit

$$y(x) - y_0 = \frac{v_{y0}}{v_{x0}}\Big(x - x_0\Big) + \frac{a_y}{2v_{x0}^2}\Big(x - x_0\Big)^2 . \tag{3.7}$$

Cette équation peut s'écrire en fonction de trois paramètres $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2]^T$ inconnus,

$$y(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 , \tag{3.8}$$

dont la valeur devra être inférée à partir de vos mesures. Ces mesures prendront la forme de n points (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$, où x_i correspond à la distance horizontale mesurée et y_i à l'altitude mesurée. Autrement dit, vous souhaiteriez résoudre le problème matriciel suivant

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{X}} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{Y}} , \tag{3.9}$$

qui n'a pas de solution en général. Vous optez donc pour une solution approximative, dite des moindres carrés, qui consiste à trouver $\boldsymbol{\alpha}$ minimisant l'erreur quadratique

$$||\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\alpha}||_2 . \tag{3.10}$$

Cette solution approximative s'obtient en résolvant par rétrosubstitution le système linéaire triangulaire

$$\hat{\mathbf{R}}\boldsymbol{\alpha} = \hat{\mathbf{Q}}^T\mathbf{Y} \ , \tag{3.11}$$

où $\mathbf{X} = \hat{\mathbf{Q}}\hat{\mathbf{R}}$ est la décomposition QR *réduite* de $\mathbf{X}$. La décomposition QR réduite de $\mathbf{X}$ s'obtient de la décomposition QR dite *complète* en retirant les $m-n$ dernière lignes (nulles) de $\mathbf{R}$ et les colonnes correspondantes de $\mathbf{Q}$. Autrement dit, $\hat{\mathbf{Q}}$ est de dimension $m \times n$ et $\hat{\mathbf{R}}$ est une matrice triangulaire supérieure de dimension $n \times n$.

a. Modifiez votre code de décomposition QR pour qu'il retourne la décomposition QR réduite de la matrice d'entrée lorsque l'argument additionnel `reduite=True` lui est passé.

b. Utilisez votre code pour résoudre approximativement l'équation (3.9). Vous utiliserez les données fournies dans le fichier `bataille_navale_equipe0XX.csv` où vous remplacerez `0XX` par votre numéro d'équipe dans la boîte de dépôt sur MonPortail.

c. Tracez les données (cercles noirs) et la solution estimée de la trajectoire(ligne pleine de la couleur de votre choix) donnée par l'équation (3.8).

d. Obtenez la position d'impact du projectile (à $y = 0$) en résolvant l'équation quadratique (3.8) pour x à l'aide d'une implémentation personnelle de la méthode de la bissection. Comparez votre solution avec celle obtenue en résolvant cette même équation analytiquement. Considérant que votre embarcation se situe à la position $(x, y) = (0, 0)$, quelle est la distance horizontale vous séparant du point d'impact ?

TP3.3 Modèle épidemiologique SIR sur réseau

Le modèle susceptible-infecté-rétabli (SIR) est un modèle épidémiologique compartimental simple qui simule la propagation d'un agent pathogène contagieux au sein d'une population (ex. : influenza). Dans ce modèle, un individu est d'abord susceptible à se faire infecter via un contact avec une personne infectée et contagieuse. L'individu devient alors contagieux et peut à son tour transmettre la maladie aux autres individus susceptibles avec qui il est en contact. Finalement, l'individu infecté se rétablit et devient immunisé à la maladie. Chaque individu sera donc infecté au plus une fois (c.-à-d. il n'est pas possible d'être infecté une seconde fois).

On modélise le nombre de contacts n que les individus ont à l'aide de la distribution géométrique

$$P(n) = \frac{1}{\kappa - 1}\left[\frac{\kappa - 1}{\kappa}\right]^n \ , \tag{3.12}$$

de moyenne $\kappa = 5$, et on suppose qu'un individu contagieux infectera chacun de ses voisins indépendamment avec une probabilité $0 \leq T \leq 1$.

Un indicateur de la contagiosité d'une maladie infectieuse est R_∞, soit la fraction de la population qui sera infectée à un moment ou à un autre pendant l'épidémie. Dans le cas qui nous concerne ici, cette quantité est

$$R_\infty = 1 - \frac{1 - T(1-u)}{1 + T(\kappa - 1)(1-u)}, \tag{3.13}$$

où u est la plus petite solution non négative de

$$u = \frac{1}{[1 + T(\kappa - 1)(1-u)]^2} \equiv f(u) \ . \tag{3.14}$$

a. Trouvez analytiquement toutes les solutions de l'équation cubique (3.14).

b. Démontrez laquelle des solutions obtenues précédemment (ou une combinaison de celles-ci) correspond à u, soit la solution recherchée de l'équation (3.14).

c. Tracez R_∞ en fonction de T et identifiez tout changement qualitatif de R_∞. Comment interprétez-vous ce changement (ou cette absence de changement) ?

d. Résolvez numériquement l'équation (3.14) à l'aide d'implémentations personnelles de la méthode par relaxation et de la méthode de Newton-Raphson pour 20 valeurs de T uniformément distribuées dans l'intervalle $[0, 1]$. Illustrez vos résultats à l'aide d'un graphique comparant les solutions analytiques (indiquées avec des lignes de couleurs distinctes) aux solutions numériques obtenues avec différentes valeurs initiales de l'algorithme (symboles ; choisissez bien vos symboles pour que vos solutions soient bien visibles). Arrivez-vous à obtenir les trois solutions identifiées en **a** ? Pourquoi ? Considérez tracer l'équation (3.14) de même que la dérivée de $f(u)$ en fonction de u et ce, pour quelques valeurs de T, pour appuyer vos conclusions. Vous pouvez aussi tracer les itérations successives de chacune des méthodes afin d'illustrer la manière dont elles convergent vers l'une ou l'autre des solutions (ex. : tracer un diagramme en toile d'araignée).

Le travail devra être complété en équipe d'au plus quatre personnes sous format de cahier de bord « jupyter » (`*.ipynb`) et remis dans la boîte de dépôt prévue à cette fin sur le portail du cours. Ce document contiendra **toutes informations pertinentes** permettant au lecteur d'apprécier vos résultats et conclusions, incluant le code `Python` utilisé et d'éventuelles références bibliographiques. La qualité de la présentation est très importante (utilisation de sections, de graphiques appropriés, de mise en contexte, etc.).

Prenez soin de bien indiquer vos noms dans le cahier de bord. Pour faciliter la tâche de classification, utilisez la nomenclature suivante pour le fichier transmis (un seul): `TP3_nom1_nom2_nom3_nom4.ipynb`
