
TRAVAUX PRATIQUES N° 1 : Prise en main de Python pour l'optimisation

Préambule Pour ce TP, on se basera sur le fichier `tp1.py`¹. On privilégiera le logiciel `Vscodium` sur les machines de l'université, avec le package `python` installé (taper `"ctrl + shift + p"`², puis `"Extensions: Install Extensions"`, et choisir `Python`). On pourra alors lancer des cellules de code en tapant sur `shift+enter` dans une cellule délimitée par les symboles `"# %%"` :

```
# %%  
# Début de cellule  
print(1+3)  # commentaire en ligne  
# %%  
# Une autre cellule  
print(2**3) # commentaire en ligne
```

On peut aussi utiliser lancer une cellule en cliquant sur le bouton `"run cell"` dans `Vscodium`.

Dans ce TP on utilisera beaucoup l'aide de base de `python` (en particulier les commandes `help(nom-de-la-fonction)` ou `?nom-de-la-fonction` seront bien utiles). On pourra aussi utiliser l'aide en ligne, plus agréable pour `matplotlib` et des éléments graphiques plus détaillés.


Enfin les questions notées **Pour aller plus loin**, peuvent être omise en première lecture.


1 Introduction à numpy et matplotlib

On charge les packages utiles de la manière classique suivante :


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


1.1 Test d'égalité et précision en numérique

Dans cette partie, on va faire un retour sur les nombres flottants ( : *floats*) dans un ordinateur, et quand est-ce que deux nombres flottants sont dits égaux.

QUESTION 1. (Dépassement) À l'aide de l'import `sys`, stocker le plus grand nombre représentable en machine : n_{\max} (obtenu avec `sys.float_info.max`). Tester l'égalité entre $n_{\max} + 1$ et n_{\max} . Multipliez ce nombre par une quantité très proche, mais supérieure, à 1. Qu'observez-vous ? Quel est le résultat de l'opération $1.1 \cdot n_{\max} - 1.1 \cdot n_{\max}$, comment l'expliquez-vous ? On parle de dépassement ( : *overflow*) quand un nombre dépasse le nombre le plus grand que l'ordinateur peut représenter en mémoire. Notez que les problèmes de dépassements mal gérés peuvent coûter très cher, même à d'excellents ingénieurs³.

1. `tp1.py` est disponible ici : <http://josephsalmon.eu/enseignement/Montpellier/HAX606X/TP/tp1.py>
2. La touche `shift` : https://fr.wikipedia.org/wiki/Touche_majuscule
3. https://fr.wikipedia.org/wiki/Vol_501_d%27Ariane_5

QUESTION 2. (Soupassement) Le soupassement ( : *underflow*) est le phénomène inverse du dépassement. Cela se produit quand un nombre est tellement proche de 0 que l'ordinateur ne le différencie plus de 0. Observez un cas d'*underflow* (on pourra notamment essayer de trouver à partir de quelle puissance négative de 2 ce phénomène apparaît).

 : La précision machine ne pose pas problème qu'à partir de ces limites. Manipuler des grandeurs extrêmes est un jeu à la fois dangereux et délicat. Quand les puissances résultent en des nombres "extrêmes", des arrondis sont effectués⁴.

QUESTION 3. (Arrondis) Utilisez la fonction `spacing` de `numpy` pour savoir à partir de quand cet arrondi est effectué sur une grandeur quelconque (cette fonction renvoie la distance entre un nombre et son plus proche voisin). Testez l'égalité entre :

- `10**9` et `10**9 + 10**(-8)`,
- `10**9` et `10**9 + 10**(-7)`,
- `10**9` et `10**9 + np.spacing(10**9)/2`,
- `10**9` et `10**9 + np.spacing(10**9)/1.9`,
- `0.6` et `0.3 + 0.2 + 0.1`,
- `0.6` et `0.1 + 0.2 + 0.3`.

Pour aller plus loin : <https://docs.python.org/3/tutorial/floatingpoint.html> approfondit les questions autour des nombres flottants.

QUESTION 4. (Précision relative / absolue) Pour éviter que des erreurs d'arrondis, on contrôle l'égalité d'un point de vue numérique en acceptant une certaine marge d'erreur


$$a \approx b \iff |a - b| \leq \text{atol} + \text{rtol} |b| \quad .$$

Utilisez la fonction `isclose` de `numpy` en choisissant des paramètres `atol`, `rtol` pour que l'égalité dans le dernier cas de la question ci-dessus soit vraie puis fausse. Rem : on pourra aussi utiliser la fonction `allclose`, qui fonctionne de manière similaire pour des tableaux.

1.2 Opérations matricielles et visualisation 1D

Pour cette partie, un rappel visuel des créations/transformation usuelles de matrices est disponible ici : <https://github.com/josephsalmon/HAX712X/tree/main/Courses/ScipyNumpy>.

QUESTION 5. (Algèbre linéaire) Manipulez les opérations classiques sur des matrices (arrays) de `numpy` (si vous êtes déjà habitué à `numpy`, vous pouvez passer à la question 2).

- Additions (+) / soustractions (-)
- Multiplications : terme à terme (*) / matricielle (@ ou `np.dot(A, B)`)
- Puissance : terme à terme (**) / matricielle (`np.linalg.matrix_power(A,n)`)
- Inversion matricielle : (`np.linalg.inv(A)`)
- Résolution de système (`np.linalg.solve(A, b)`)
- Matrices usuelles : `np.zeros(m, n)`, `np.eye(n)`, `np.empty(n)`, `a.fill(np.pi)`, `np.ones(n)`.
- Extraction de parties d'une matrice : mettre à zero une ligne sur deux de la matrice identité de taille 5×5 . Voir le "tranchage" ( : *slicing*).
- Grille de nombres : `np.linspace`, `np.logspace`, `np.arange`, etc. Créer un vecteur qui contient toutes les puissances de 10 de l'exposant 1 à l'exposante 9.

4. Plus d'information : <https://pythonnumericalmethods.berkeley.edu/notebooks/Index.html> chapitre 9

- Tailles / changement de taille : `np.shape(A)` ou `A.shape`; `np.reshape(A, (n1, n2))`.
- Partant de `d=np.arange(6)`, quelles sont les dimensions de `d`, `d.reshape(2, 3)`, `d.reshape(3,2)`, `d.reshape(6,)`, `d.reshape(1, 6)`. Commentez.
- ⚠ : `numpy` utilise pour les vecteurs des tableaux n'ayant pas de deuxième dimension (car dans la mémoire de l'ordinateur la seconde dimension n'existe pas, il y a donc une simple instruction qui dit si l'on parcourt le tableau en ligne ou en colonne).
- Transposition `A.T` ou `np.transpose(A)`.

Pour aller plus loin : On pourra découvrir les différences entre copies et vues d'une matrice :
<https://www.geeksforgeeks.org/copy-and-view-in-numpy-array/>

Pour aller plus loin : Les `numpy` arrays peuvent être parcourus / stockés soit en convention "lecture en colonne" (*F-order*, F pour FORTRAN) soit "lecture en ligne" (*C-order*, C pour le langage C). Par défaut `numpy` utilise cette dernière convention :
<https://numpy.org/doc/stable/dev/internals.html#numpy-internals>

QUESTION 6. (Affichage de fonctions 1D) Le but ici est de tracer les graphes de fonctions avec `matplotlib` et de mettre en valeurs plusieurs points intéressants.

- Tracez la fonction $f : x \mapsto \cos(x)$ sur l'intervalle $[-10, 10]$.
- Utilisez la fonction `hlines` de `matplotlib` pour tracer les droites $y = \pm 1$ (on pourra modifier `linestyles` pour faire un trait pointillé).
- Utilisez la fonction `scatter` pour mettre en valeur ses points critiques (modifier l'option "s" pour modifier la taille des marqueurs).
- **Tout graphique doit contenir un titre, être légendé et être lisible!** Modifiez la taille de l'image avec l'argument `figsize` et rendez ce graphique présentable. En modifiant le paramètre `zorder` faire en sorte que les points apparaissent au-dessus de la courbe.

QUESTION 7. (Graphes multiples)

- En utilisant `subplot`, affichez une double figure représentant les fonctions $f : x \mapsto \exp(-\lambda x)$ sur l'intervalle $[0, 10]$, pour $\lambda = 1, 2, 3, 4, 5$. Le premier graphe (en haut) sera en échelle habituelle et le second (en bas) sera en échelle semi-logarithmique sur l'axe des y, pour mieux visualiser les convergences vers 0. On choisira une palette continue pour afficher chaque valeur de λ de manière graduelle, voir :
<https://matplotlib.org/stable/tutorials/colors/colormaps.html>
- Ajouter des titres et sous-titres.

Pour aller plus loin : Afficher un troisième graphique reproduisant la version avec échelle semi-logarithmique en transformant directement les données. Pour plus d'informations sur les différents types d'échelles et une gestion plus fine des transformations (par exemple quand il y a des valeurs négatives, la base logarithmique utilisée, etc.) voir :
<https://matplotlib.org/stable/tutorials/introductory/pyplot.html#logarithmic-and-other-nonlinear-axes>

2 Fonctions à plusieurs variables

2.1 Fonctions contre-exemples

Rappel : Théorème 1.2.2 : « Pour tout ouvert U de \mathbb{R}^2 , si $x_0 \in U$ est un minimum local de la fonction $f \in \mathcal{C}^2(U)$, alors $f'(x_0) = 0$ et $f''(x_0)$ est semi-définie positive. » La réciproque de ce théorème est fausse : on considère ainsi $f_{\text{selle}}(x, y) := x^2 - y^4$ en $(0, 0)$ définie de \mathbb{R}^2 dans \mathbb{R} .

QUESTION 8. (Conditions du premier et deuxième ordre) Ajouter le point à l'origine sur les graphiques des courbes de niveaux et la surface 3D de la fonction f_{selle} . On pourra utiliser la fonction `plt.scatter`. Interpréter visuellement le comportement de la surface en $(0, 0)$

QUESTION 9. (Dérivées directionnelles) On considère maintenant la fonction :

$$f_{\text{directionnelle}} : (x, y) \mapsto \begin{cases} \frac{xy}{x^2+y^2}, & \text{si } (x, y) \neq (0, 0) \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}.$$

Expliquer pourquoi cette fonction admet des dérivées partielles en tout point. Est-ce que la fonction $f_{\text{directionnelle}}$ est continue en tout point (en particulier à l'origine) ? Visualiser les lignes de niveau de cette fonction (en afficher 12) et la surface engendrée.

3 La gestion de l'aléa dans Python

Le module `random` de `numpy` permet d'utiliser l'aléatoire et des lois usuelles en Python. On crée d'abord un générateur qui nous permettra ensuite d'appeler les lois voulues comme suit :

```
generateur = np.random.default_rng()
generateur.normal()
```

QUESTION 10. (Random)

- Créer une matrice de taille 4×5 dont les entrées sont *i.i.d.* de loi de Laplace d'espérance 0 et de variance 2. Lancez plusieurs fois la cellule et observez les changements. Vous pourrez consulter l'aide de `numpy` pour cela : <https://numpy.org/doc/stable/reference/random/generator.html>
- Pour produire des résultats reproductibles ou déboguer un code, il est utile de "figer" l'aléa. On utilise pour cela une graine (🇬🇧 : *seed*) dans la création du générateur. Fixez la graine à 0 dans la création du générateur et relancez plusieurs fois la cellule. Qu'observez-vous ?
- Afficher avec `plt.subplot` un histogramme comparant : 100 tirages de loi gaussienne (centrée-réduite) ; 100 tirages de loi de Cauchy ; 100 tirages de loi de Laplace. On choisira les mêmes paramètres de centrage et d'échelle pour les trois lois.

Pour aller plus loin : Toutes les lois usuelles disponibles sont dans la documentation <https://numpy.org/doc/stable/reference/random/generator.html>, et vous pourrez en manipuler avec des widgets ici : <https://github.com/josephsalmon/Random-Widgets>.⁵

Ressources utiles

- https://numpy.org/doc/stable/user/absolute_beginners.html
- <https://scipy-lectures.org/intro/numpy/operations.html>

5. En ligne, vous trouverez parfois des codes qui utilisent l'ancienne manière de générer de l'aléa avec `numpy` : `np.random.laplace(...)`. C'est une manière dépréciée de générer des tirages aléatoires qui n'est plus recommandée (même si encore fréquemment rencontrée, notamment sur internet).