Librairies pour le calcul numérique

Contexte

- Matlab (/Octave, Scilab)
  - Très bonnes fonctions calcul numérique

Mais ...

- Programmation non numérique laborieuse
  Pas de structures de données (hash, map, graph, etc)
- Lent
- Non interactif

=> Uniquement restreint à réaliser des prototypes

Contexte

- C++
  - Vrai language de programmation
    Structures données avancées
  - Rapide
  - Interactif (Qt, OpenGL, ...)
  - Standard en entreprise

Mais ...

- Pas de librairie numérique dans le standard (Matrices, vecteurs, ...)

=> Beaucoup de temps passé pour refaire
ce que fait un script Matlab
+ bugs

Librairies numériques

Il est possible de réécrire vos propres structures

Inversion matricielle, valeurs propres, matrices creuses, ...

Mais à éviter pour des vrais applications (sauf cas spécifique)

Préférer des librairies existantes

Testées, plus robustes et rapide qu'un code personnel

Une bonne librairie de calcul numérique, plusieurs mois/années
de developpement

Calcul numérique

A l'origine
un language est développé spécifiquement pour le calcul numérique

Fortran
(FORmula TRANslating system)

Fortan

Fortran : un des plus ancien language (1954)
(C 1970)

A beaucoup évolué
Fortan 66
Fortan 77
Fortan 90
Fortran 2008
Fortran 2015...

Autrefois très limité

Aujourd'hui language objet avancé
Surchage d'opérateur
Gestion mémoire dynamique
Héritage
polymorphisme
structure données abstraites

Fortan

Language très aggréable pour calcul numérique

Calcul vectoriel en standard
Array slicing
Matrice en standard
Parallélisme aisé

```
INTEGER N = ...

REAL, DIMENSION(N,N)   :: A
INTEGER, DIMENSION(N) :: v, w
DO i = 1, N
   w(i) = SUM ( A(i, : ) * v )
END DO
```

Ressemble à Matlab, + simple que C, C++, Java, ...

Avantage/limitation Fortran

+ Aggréable pour le calcul numérique
+ Portable
+ Standard le plus robuste et répendu
+ Très rapide (souvent + rapide que C ou C++)
+ Mise en place sur les supercalculateurs

- Uniquement centré sur le calcul numérique
- Gestion texte difficile
- Pas de *logiciel* en Fortran avec GUI, interaction
- Pas de graphique

Fortan et Lapack

Librairie numérique de référence

- Structure de donnée matrice

BLAS

Basic **L**inear **A**lgebra **S**ubprograms

(opérations somme, multiplication matricielles)

- Algorithmes d'algèbre linéaire

Lapack

Linear **A**lgebra **PACK**age

(inversion matrices, factorisation)

Lapack

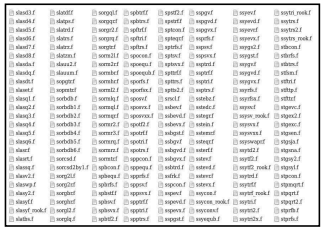
Lapack à été pendant longtemps le standard "de facto" du calcul numérique

Matlab était une *interface* au dessus de Lapack

Mais ...

Blas et Lapack sont bas niveau. Peu aggréable à utiliser

~1800 fichiers



```
      DO I = 1, M-Q

         IF( I .EQ. 1 ) THEN
            DO J = 1, M
               PHANTOM(J) = ZERO
            END DO
            CALL ZUNBDB5( P, M-P, Q, PHANTOM(1), 1, PHANTOM(P+1), 1,
     $                    X11, LDX11, X21, LDX21, WORK(IORBDB5),
     $                    LORBDB5, CHILDINFO )
            CALL ZSCAL( P, NEGONE, PHANTOM(1), 1 )
            CALL ZLARFGP( P, PHANTOM(1), PHANTOM(2), 1, TAUP1(1) )
            CALL ZLARFGP( M-P, PHANTOM(P+1), PHANTOM(P+2), 1, TAUP2(1) )
            THETA(I) = ATAN2( DBLE( PHANTOM(1) ), DBLE( PHANTOM(P+1) ) )
            C = COS( THETA(I) )
            S = SIN( THETA(I) )
            PHANTOM(1) = ONE
            PHANTOM(P+1) = ONE
            CALL ZLARF1F( 'L', P, Q, PHANTOM(1), 1, DCONJG(TAUP1(1)), X11,
     $                    LDX11, WORK(ILARF) )
            CALL ZLARF1F( 'L', M-P, Q, PHANTOM(P+1), 1, DCONJG(TAUP2(1)),
     $                    X21, LDX21, WORK(ILARF) )
         ELSE
            CALL ZUNBDB5( P-I+1, M-P-I+1, Q-I+1, X11(I,I-1), 1,
     $                    X21(I,I-1), 1, X11(I,I), LDX11, X21(I,I),
     $                    LDX21, WORK(IORBDB5), LORBDB5, CHILDINFO )
            CALL ZSCAL( P-I+1, NEGONE, X11(I,I-1), 1 )
            CALL ZLARFGP( P-I+1, X11(I,I-1), X11(I+1,I-1), 1, TAUP1(I) )
            CALL ZLARFGP( M-P-I+1, X21(I,I-1), X21(I+1,I-1), 1,
     $                    TAUP2(I) )
            THETA(I) = ATAN2( DBLE( X11(I,I-1) ), DBLE( X21(I,I-1) ) )
            C = COS( THETA(I) )
            S = SIN( THETA(I) )
            X11(I,I-1) = ONE
            X21(I,I-1) = ONE
```


Autres librairies

- Souvent une surcouche au dessus de Lapack
- Souvent spécialisé sur un domaine
  - Conteneur matriciel
  - Décomposition matrice pleine
  - Décomposition matrice creuse
  - Fitting non linéaire
  - ODE / PDE

Les grands acteurs: Vue d'ensemble

GPU *Pour la puissance de calcul*

+ Le plus performant

- Codage long et difficile
- Portabilité

Python + **Numpy** *Remplace de plus en plus Fortran + Lapack*

+ Interfacage aisé avec graphique (Qt) et GPU
- Par défaut plus lent que Fortran

Librairies C **Librairies C++**

+ Interfaçage direct sur un logiciel complet (Qt, drivers, OS, interaction, etc)

- Apprentissage plus long
- Pas de standard
- Portabilité

Pour développer des logiciels

Matlab / Octave / Scilab *Pour les protos*

+ Très simple d'utilisation

- Limitées aux prototypes
- Lenteur du code

Fortran + **Lapack** *Pour le standard*

+ Standard
+ Robuste et vérifié

- Limité au calcul

Exemple de librairies

GSL: GNU Scientific Library

+ Librairie open source complète

- En C (utilisation fastidieuse)
- Moins robuste, vérifiée que Lapack
  (lib issu de l'open source écrite par des informaticiens)

- Complex Numbers:
- Polynomials:
- Special Functions:
- Vectors and Matrices:
- Permutations:
- Linear Algebra:
- Eigensystems:
- Fast Fourier Transforms:
- Numerical Integration:
- Statistics:
- Monte Carlo Integration:
- Ordinary Differential Equations:
- Interpolation:
- Numerical Differentiation:
- Series Acceleration:
- Wavelet Transforms:
- Multidimensional Root-Finding:
- Least-Squares Fitting:
- Basis Splines:

```
int
gsl_schur_solve_equation_z(double ca, const gsl_matrix *A, gsl_complex *z,
                           double d1, double d2,
                           const gsl_vector_complex *b,
                           gsl_vector_complex *x, double *s, double *xnorm,
                           double smin)
{
  size_t N = A->size1;
  double scale = 1.0;
  double bnorm;

  if (N == 1)
    {
      double cr,    /* denominator */
             ci,
             cnorm; /* |c| */
      gsl_complex bval, c, xval, tmp;

      /* we have a 1-by-1 (complex) scalar system to solve */

      /* c = ca*a - z*d1 */
      cr = ca * gsl_matrix_get(A, 0, 0) - GSL_REAL(*z) * d1;
      ci = -GSL_IMAG(*z) * d1;
      cnorm = fabs(cr) + fabs(ci);

      if (cnorm < smin)
        {
          /* set c = smin*I */
          cr = smin;
          ci = 0.0;
          cnorm = smin;
        }
```


Exemple de librairies

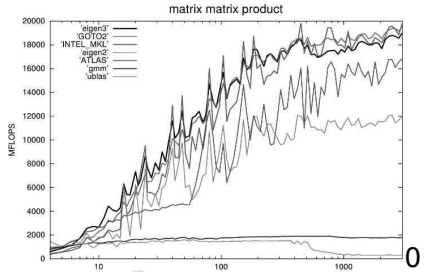
- Blitz++ — Vecteur/Matrice dense. Librairie très rapide (utilisation métaprogrammation/template)
- Boost — Conteneurs pour matrice
- Dlib — Optimisation non linéaire, fitting. Simple d'utilisation
- IML++, SparseLib++ — Inversion matrices creuses

...

Eigen

- **Eigen**
  librairie C++ d'algèbre linéaire récente

  - Conteneur matrice, vecteur, matrice creuses
    Algorithme de résolution de systèmes et décomposition matricielles
  - Repose sur les templates / métaprogrammation
    Peut être plus rapide qu'un code C/Fortran équivalent
  - Utilisation instructions vectorielles, SSE



Eigen: Utilisation

Support vecteur nD

```
Eigen::Array2d p0(1.0,1.1);
Eigen::Array2d p1(0.4,-1.2);

std::cout<<p0+p1<<std::endl;
```

```
Eigen::ArrayXd p0(4);
p0[0]=1.0;p0[1]=2.2;p0[2]=4.7;p0[3]=-1.2;
p0=8.1*p0;

std::cout<<p0<<std::endl;
```

Eigen: Utilisation

Support matrices

```
Eigen::Matrix2f M;
M<<1.2,4.5,
  -0.1,2.2;

M(1,0)=-4.2;
M=2.0*M;

std::cout<<M<<std::endl;
```

2.4 9
-8.4 4.4

Eigen: Utilisation

Support inversion de matrices

```
Eigen::Matrix3f A;
A << 1,2,3, 4,5,6, 7,8,10;

std::cout<<A.inverse()<<std::endl;
```


Eigen: Utilisation

Support résolution de système linéaire Ax=b

```
Eigen::Matrix3f A;
Eigen::Vector3f b;
A << 1,2,3, 4,5,6, 7,8,10;
b << 3, 3, 4;
std::cout << "Here is the matrix A:\n" << A << std::endl;
std::cout << "Here is the vector b:\n" << b << std::endl;
Eigen::Vector3f x = A.colPivHouseholderQr().solve(b);
std::cout << "The solution is:\n" << x << std::endl;
```

Choix des approches

Decomposition	Method	Requirements on the matrix	Speed	Accuracy
PartialPivLU	partialPivLu()	Invertible	++	+
FullPivLU	fullPivLu()	None	-	+++
HouseholderQR	householderQr()	None	++	+
ColPivHouseholderQR	colPivHouseholderQr()	None	+	++
FullPivHouseholderQR	fullPivHouseholderQr()	None	-	+++
LLT	llt()	Positive definite	+++	+
LDLT	ldlt()	Positive or negative semidefinite	+++	++

Eigen: Utilisation

http://eigen.tuxfamily.org/

Support pour:

- Décompositions: LU, QR, valeurs singulières, Cholesky, Shur
- Matrices creuses
- Transformation géométriques