Programmation pour la physique

HAP608P, Faculté des Sciences de Montpellier, 2026
Felix Brümmer (felix.bruemmer@umontpellier.fr)

Introduction

Dans ce chapitre

Généralités

- Programmation scientifique et physique numérique
- Aperçu du langage Python

Python

- Instructions

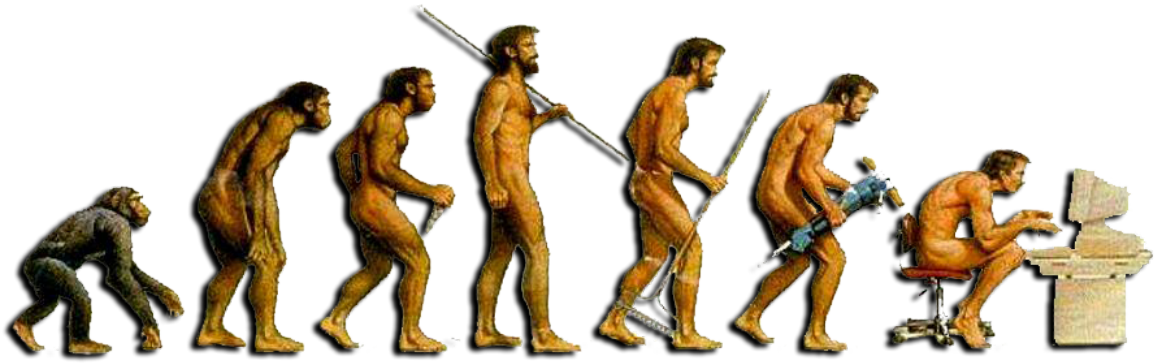
Pourquoi physique numérique ?

L'ordinateur est un outil indispensable en physique :

- Solution numérique des équations qui décrivent les systèmes physiques
- Simulation des systèmes complexes
- Assistance aux calculs analytiques
- Pilotage et surveillance des manip
- Analyse et traitement des données
- Visualisation des résultats, rédaction des publications scientifiques
- ...

Pourquoi apprendre à programmer ?

- Développer des programmes.
- Modifier et adapter à ses besoins des programmes et bibliothèques existants.
- Connaitre le mode de fonctionnement et les limitations des logiciels que l'on utilise.



Programmation et intelligence articificelle générative

Q : ChatGPT, Copilot, Gemini, Claude... produisent du code vraisemblement meilleur que le mien. Vaut-il toujours la peine d'apprendre à programmer ?

- L'IA est devenu un outil très apprécié en programmation. Mais il ne faut pas y faire confiance aveuglement.
- L'IA produira un ébauche de programme qu'un programmeur humain peut ensuite perfectionner, pourvu qu'il maitrise bien la programmation.
- Il faut avoir appris le calcul mental avant de se servir de la calculatrice
- Il faut avoir appris à écrire correctement avant de se servir de l'autocorrection
- Il faut avoir appris à programmer avant d'utiliser l'IA

I'd like to implement the game of Tic Tac Toe in Python, with a text-based interface. Can you do this for me?

Tic Tac Toe

```
1  def print_board(board):
2      """Prints the Tic Tac Toe board."""
3      for row in board:
4          print(" | ".join(row))
5          print("-" * 5)
6
```

Qu'est-ce qu'un programme ?

Un programme est un ensemble de commandes qui amènent l'ordinateur à changer l'état de sa mémoire interne et/ou de ses périphériques.

Typiquement nous commanderons l'ordinateur d'effectuer certaines opérations et d'afficher ou d'enregistrer les résultats.

Un langage de programmation est un ensemble de règles syntaxiques que les commandes doivent suivre afin qu'elles puissent être traduites en instructions au système d'exploitation (ou directement au matériel informatique).

Langages de programmation

```python
# Afficher "Hello World!" avec Python

print("Hello World!")
```

```cpp
// Afficher "Hello World!" avec C++

#include<iostream>
using namespace std;

int main() {
    cout << "Hello World!\n";
    return 0;
}
```

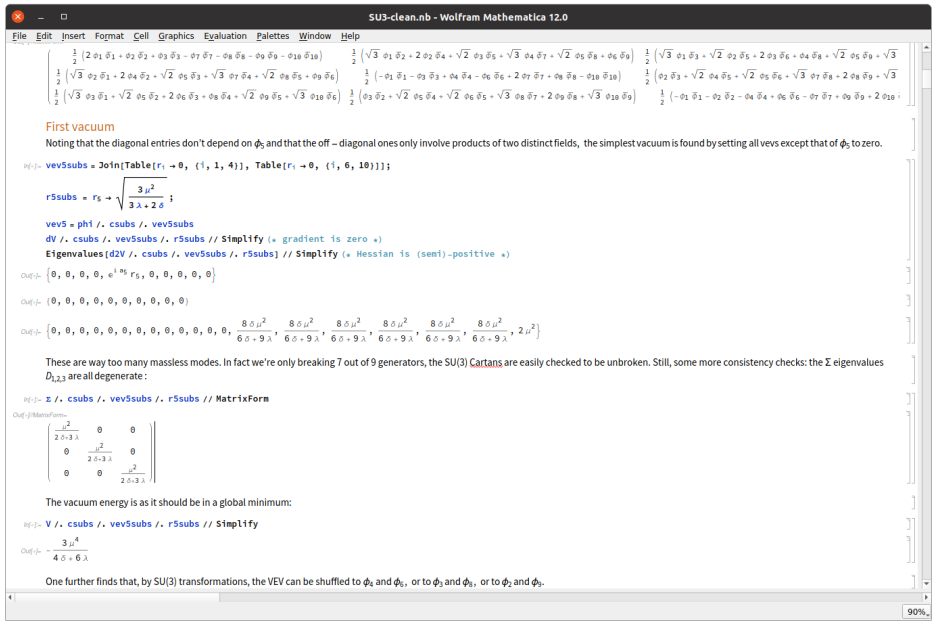
```fortran
! Afficher "Hello World!" avec Fortran 90

PROGRAM HelloWorld
   WRITE (*,*) 'Hello World!'
END PROGRAM HelloWorld
```

Pourqoui Python ?

- très courant : le standard universel en programmation scientifique pour la plupart des tâches
- facile à apprendre, syntaxe simple et intuitive $\Rightarrow$ on peut se concentrer sur le programme sans être encombré par les pièges du langage
- polyvalent, multiples domaines d'application
- beaucoup des bibliothèques incluses $\Rightarrow$ vaste fonctionnalité
- haut niveau d'abstraction (pas de manipulation directe du matériel informatique)
- moderne :
  - programmation orientée objet
  - programmation fonctionnelle
  - typage dynamique
  - gestion automatique de mémoire
  - ...

Quelques domaines de la programmation scientifique

Calcul symbolique / calcul formel



- Manipulation automatisée des objets mathématiques au niveau symbolique, c.à.d. sans forcement une application numérique : Algèbre, analyse, arithmétique...
- Les systèmes de calcul formel incluent typiquement des langages de programmation complets pour gérer le flot d'exécution. Pas seulement des "grandes calculatrices" !
- Interfaces typiquement interactives de type notebook (calepin / cahier de travail).
- Exemples : `Mathematica`, `Maple`, `MATLAB`, `SageMath/SymPy`

* propriétaire * basé sur `Python`

Quelques domaines de la programmation scientifique

Calcul numérique à haute performance

- Evaluation numérique des fonctions / des intégrales à haute précision, solution numérique de systèmes d'équations algébriques ou différentielles, optimisation, simulation de systèmes complexes avec un grand nombre de dégrés de liberté. . .
- Domaine classique de l'analyse numérique.
- Peut être très demandeur côté puissance de calcul : optimisation de code (automatisée ou de la part du programmeur) pour exploiter au mieux le matériel informatique.
- On utilise les langages de programmation compilés pour optimisation
- Interface : soit éditeur + console avec ses outils (compilateur, lieur, débogueur), soit environnement de développement intégré
- Exemples : `FORTRAN`, `C`, `C++`

Quelques domaines de la programmation scientifique

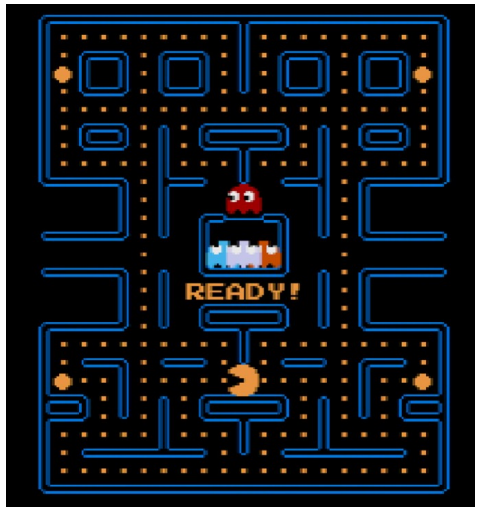
Gestion, traitement, analyse et visualisation des données

- Traitement automatisé des données expérimentales, observationnelles, numériques...
- Stockage, tri, analyse statistique, ajustement, représentation graphique (figures et animations)...
- Besoin surtout de fonctionnalités diverses (polyvalence)
- Typiquement domaine des langages de programmation interprétés.
- Interface :
  - soit fichiers de script (créés dans un éditeur)
  - soit interface interactif (notebook ou ligne de commande)
- Exemples de langages de script : script shell de Unix, `Perl`, `R`, `Julia`, `Python`
- Exemples de suites logicielles interactives : `MATLAB`, `Octave`, `IPython/Jupyter`

* propriétaire * basé sur `Python`

Quelques domaines de la programmation scientifique

Développement des logiciels et outils auxiliaires



- Programmation des interfaces, de l'environnement graphique, du web, des bases de données, du système d'exploitation...
- Interférences avec d'autres secteurs du développement des logiciels
- Domaine des langages universels, interprétés ou compilés selon l'objectif
- Interface : typiquement environnement de développement intégré
- Exemples : `C++`, `Java`, `Python`

Deux façons d'exécuter son programme : Compilation et interprétation

1. Programmes compilés :

Le code source est entièrement traduit en forme exécutable par un logiciel auxiliaire, le compilateur. Un autre logiciel auxiliaire, l'éditeur de liens, peut assister afin d'intégrer les composantes du programme et les bibliothèques externes dans le fichier exécutable.

Forces :

- Optimisation automatique
- Rapidité, efficacité augmentée
- Manque de transparence : plus facile de cacher les détails du fonctionnement $\rightarrow$ logiciels commerciaux

Faiblesses :

- Après toute modification du code source il faut recompiler.
- Manque de portabilité du code compilé
- Pas de possibilité d'exécuter seulement une partie d'un programme
- Manque de transparence : moins facile de savoir les détails du fonctionnement

Deux façons d'exécuter son programme : Compilation et interprétation

2. Programmes interprétés :

Le code source est traduit ligne par ligne lors de l'exécution par un logiciel auxiliaire, l'interpréteur.

Forces :

- Après une modification du code source on peut immédiatement réexécuter le nouveau programme.
- Les erreurs de programmation sont souvent plus faciles à détecter (débogage)
- Portabilité : les seuls fichiers de programme sont celles du code source, qui sont les mêmes sur tout système

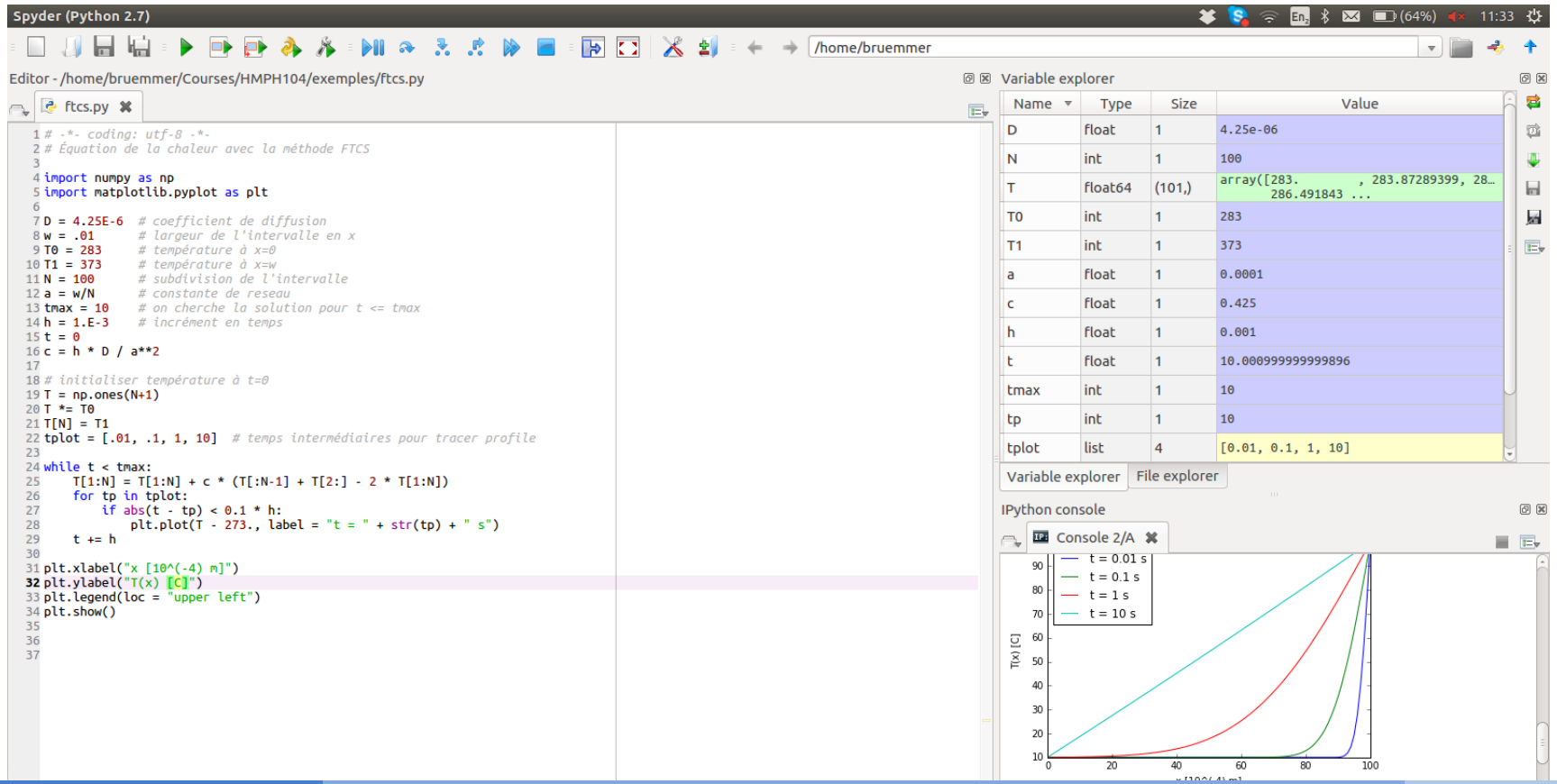
Faiblesses :

- Efficacité généralement inférieure à un programme compilé et optimisé.
  Mais un programme interprété peut utiliser des librairies compilés pour les parties les plus lourdes en calcul.

Deux façons de rédiger son code : Fichier de code source et notebook

1. Fichier de code classique / script :

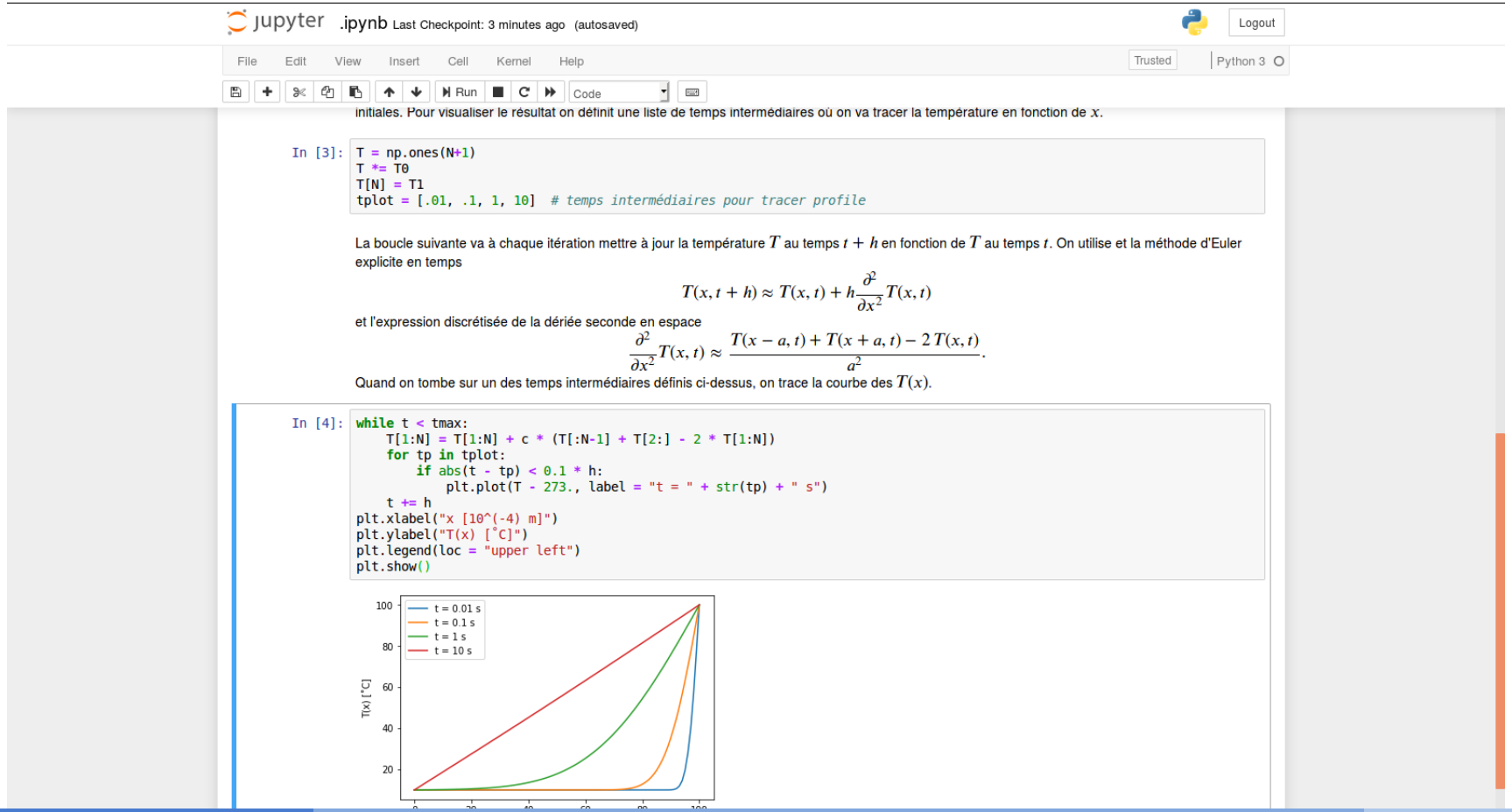
- Créé avec un éditeur de texte, éventuellement partie d'un environnement de développement intégré.
- Format : fichier de texte, ne contient que le code de source (et des commentaires).
- Le code est enregistré dans un ou plusieurs fichiers que l'on passe ensuite au compilateur ou à l'interpréteur.



Deux façons de rédiger son code : Fichier de code source et notebook

2. Notebook interactif :

- Créé avec un éditeur dédié.
- Format spécial, peut contenir du texte formaté, des équations, des résultats intermédiaires, des éléments graphiques. . .ainsi que le code de source
- Interpréteur toujours intégré, on peut exécuter le notebook entier ou juste une partie



Deux paradigmes de programmation : Procédurale et orientée objet

1. Programmation procédurale :

- Date des années '50
- Séparation entre les données et les procédures qui les gèrent
- Structure des programmes plus linéaire
- Mieux adaptée aux petits projets car moins d'overhead.
- Exemples de langages bien appropriés à la programmation procédurale : `FORTRAN`, `C`, `Python`

Deux paradigmes de programmation : Procédurale et orientée objet

2. Programmation orientée objet :

- Date des années '80
- Notion centrale : L'objet qui réunit les données et les méthodes, représentant une entité abstraite définie par son état et ses capacités
- Tout objet est instance d'une classe. Il y a une hiérarchie des classes avec des propriétés héritables.
- Structures plus abstraites.
- Programmes moins linéaires, favorisant la modularité
- Mieux adaptée aux grands projets de plusieurs contributaires.
- Exemples de langages bien adaptés à la programmation orientée objet : `C++`, `Java`, `Python`

Python

Le langage Python

- est un langage interprété

  Plus précisement, son implémentation standard CPython traduira le code source en “bytecode” qui est ensuite interprété.

- s’utilise soit en mode de script soit en mode interactif
- permet tant la programmation procédurale que la programmation orientée objet.

Aperçu du cours

Ce cours porte sur des sujets en programmation scientifique et en analyse numérique :

- Révision de la programmation procédurale avec Python
- Calcul matriciel avec NumPy, graphisme
- Recherche numérique de zéros
- Algèbre linéaire numérique
- Transformation de Fourier discrète
- Ajustement
- Résolution numérique d'équations différentielles ordinaires

Prérequis pour le suivre avec profit :

- Connaissances en programmation (UEs d'informatique en L1-L2)...
- ...en physique (mécanique, électrodynamique, physique quantique)...
- ...et en mathématiques (nombres complexes, analyse réelle, algèbre linéaire).

Matières à réviser indépendamment si besoin !

Bibliographie

Python :

- G. Swinnen, « Apprendre à programmer avec Python 3 », `http://www.inforef.be/swi/python.htm`
- D. Cassagne, « Introduction à Python pour la programmation scientifique », `http://wwww.courspython.com`
- « Python Tutorial », `https://docs.python.org/fr/3/tutorial/`
- beaucoup d'autres sources à trouver en ligne et hors ligne

Algorithmes pour la physique numérique :

- M. Newman, « Computational Physics », 2012 (en anglais)
- W. H. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling et B. Flannery, « Numerical Recipes », 3e édition 2007, Cambridge University Press (en anglais et C++)

Matériel du cours sur l'espace pédagogique

Vous trouverez sur Moodle :

- Ces notes de cours
- Tous les exemples de code apparaissant ci-dedans : répertoire `Exemples/`
- Toutes les fiches d'exercices

Exécuter son code avec Python

La démarche pour créer et faire tourner un programme :

- Rédiger votre code de source avec l'aide de votre éditeur de texte préféré
- L'enrégistrer dans un fichier, par exemple `exemple.py`
- Exécuter le script avec l'interpréteur Python :
  Entrer `python3 exemple.py` par la console (dans le dossier où se trouve le fichier)

Raccourci : Des environnements de développement intégrés (comme `spyder`) permettent de rédiger le code et de l'exécuter directement par un clic dans l'interface graphique.

Il faudra pourtant que vos programmes soient autonomes (ne dépendent pas des fonctionnalités de `spyder` pour générer leurs résultats) !

Un premier programme en Python

```
#!/usr/bin/python3
# Ecrit la phrase "Hello World!" sur l'écran

print("Hello World!")
```

Dans cet exemple il y a

- des commentaires : précédés par un croisillon #. Tout ce qu'y fait suite dans la même ligne du fichier est ignoré par l'interpréteur.
  On utilise des commentaires surtout pour rendre son code mieux lisible par les programmeurs (soi-même inclus). Il ne faut pas en économiser !
- une ligne blanche, ignorée par l'interpréteur
- une instruction : un appel de la fonction `print( )` qui fait apparaître sur l'écran la chaîne de caractères entre les parenthèses

Exercice

Exécuter ce script (`HelloWorld.py`)

Format et interprétation du code source

- Chaque ligne du script (à part les lignes blanches et celles ne contenant que des commentaires) correspond à une instruction.
- L'interpréteur exécutera toutes les instructions, une par une.
- Si l'interpréteur tombe sur une instruction fautive, le programme s'arrête avec un message d'erreur. Ce message peut être très utile pour identifier et réparer le problème.

```
pint("Oups!") # erreur: la bonne fonction s'appelle print()
              #
              # Le programme va s'arrêter avec le message
              #  "NameError: name 'pint' is not defined"
              # qui indique que 'pint' n'est pas défini
```

- Sinon, le programme termine dès qu'il n'y a plus d'instructions à exécuter.

Exceptions de la règle d'une instruction par ligne

- Une instruction incluant une parenthèse (ou un crochet [ou une accolade { non fermé se poursuit sur les lignes suivantes jusqu'à la clôture.

```
print("Malheureusement ce texte est trop long pour une "
"seule ligne de code source, mais on veut cependant "
"l'afficher dans une seule ligne sur l'écran.")
```

- Une ligne terminée par un anti-slash \ se poursuit sur la ligne suivante.
- Une ligne peut contenir plusieurs instructions séparées par des point-virgules ;

```
print("Flying"); print("Circus")
```

Pour améliorer la lisibilité du code il est fortement conseillé de mettre une instruction par ligne et une ligne par instruction si possible.

Le Zen de Python

```
import this
```

Préfère :
la beauté à la laideur,
l'explicite à l'implicite,
le simple au complexe
et le complexe au compliqué,
le déroulé à l'imbriqué,
l'aéré au compact.
Prends en compte la lisibilité.
Les cas particuliers ne le sont jamais assez pour violer les règles.
Mais, à la pureté, privilégie l'aspect pratique.
[...]

→ T. Peters, 1999

Les instructions : Erreurs fréquentes

- À la différence de Python 2, `print()` est une fonction en Python 3 — il faut impérativement mettre les parenthèses `()`

```
print("ça marche")          # ça marche
print "ça ne marche pas"    # ça ne marche pas
```

- Attention à l'orthographe. En particulier, Python est sensible à la casse (distingue entre les minuscules et les majuscules).
- Si un programme ne fonctionne pas : étudier le message d'erreur, qui contient des informations utiles
- Contrairement à beaucoup d'autres langages de programmation, des espaces blancs au début d'une ligne (indentation) ont une signification syntactique. Il ne faut pas commencer une ligne avec des espaces blancs
  (sauf si l'objectif est de créer un bloc ; voir "Structures de contrôle").

Les types de données

Dans ce chapitre

Python

- Variables et affectations
- Types de données numériques
- Opérations arithmétiques
- Types de données séquentiels
- Chaînes de caractères
- Saisie du clavier

Variables, types et affectations

Voici quelques exemples d'affectations qui attribuent des valeurs aux variables :

```
phrase = "Mais non!"
nombre = 25
somme = nombre + 5    # la valeur de 'somme' devient 30
racine4 = 2.0
ma_liste = ["lundi", "mardi", "mercredi"]
```

- Ici `phrase`, `nombre`, `somme`, `racine4` et `ma_liste` désignent des variables.
- Toute variable est d'un type qui est déterminé par le format utilisé dans l'affectation. Ici '`phrase`' est du type str (chaîne des caractéres), '`nombre`' et '`somme`' sont du type int (nombres entiers), '`racine4`' est du type float (nombre flottant) et '`ma_liste`' est du type list (liste d'objets).
- Une fois initialisée, la variable peut être utilisée, cf. l'usage de '`nombre`' dans la troisième ligne ci-dessus. En revanche, une commande comme

```
a = b
```

produit une erreur si la variable `b` n'a pas été donnée une valeur avant.

Les variables

Chaque variable est caractérisée par

- son nom (identifiant)
- son type
- sa valeur

Exemple :

```
ma_variable = 25
```

- Ici l'identifiant est `ma_variable`.
- Le type est déterminé automatiquement lors de l'initialisation, selon l'affectation. Ici le type est `int` (nombre entier). Si l'initialisation était `ma_variable = 25.0`, le type serait `float` (nombre à virgule décimale flottante). Si c'était `ma_variable = "vingt-cinq"`, le type serait `str` (chaîne des caractères).
- La valeur est 25, bien sûr.

Les identifiants

- Un identifiant se compose de lettres minuscules et majuscules, chiffres (sauf comme premier caractère) et tirets bas _.
- On ne peut pas utiliser comme identifiants les mots clé du langage Python qui ont une signification spéciale, soient `and`, `as`, `assert`, `break`, `class`, `continue`, `def`, `del`, `elif`, `else`, `except`, `False`, `finally`, `for`, `from`, `global`, `if`, `import`, `in`, `is`, `lambda`, `None`, `nonlocal`, `not`, `or`, `pass`, `raise`, `return`, `True`, `try`, `while`, `with`, `yield`.
- On ne doit pas utiliser comme identifiants les noms des fonctions natives, p.ex. `abs`, `complex`, `float`, `input`, `int`, `list`, `max`, `min`, `print`, `str`
- Conseil : Utiliser les identifiants parlants pour les variables importantes pour améliorer la lisibilité du code.

```
x = "2 place Victor Hugo, 75000 Paris, France"   # pas idéal
adresse = "34 rue Jean Moulin, 30000 Nîmes, France"  # mieux
```

Les types de données numériques

type	description
`int`	nombre entier sans limite de taille théorique
`float`	nombre flottant, précision 64 bit soit ≈ 15 décimales
`complex`	nombre flottant complexe correspondant à deux `float`

Les types de données numériques : `int`

- Une variable du type `int` (nombre entier) se crée par une affectation sans point décimal comme

```
x = 25
y = -100
```

- Elle est également le résultat d'un appel à la fonction de conversion `int()` :

```
x = 3.8      # x est du type float avec valeur 3.8
y = int(x)   # y est du type int avec valeur 3

z = int("42") # z est du type int avec valeur 42 et a été
              #  construit partant de la chaîne de
              #  caractères "42"
```

Les types de données numériques : `float`

- Une variable du type `float` (qui représente un nombre à virgule flottante avec valeur absolue entre environ 10^{-300} et 10^{300} ou 0, précision numérique ≈ 15 décimales) se crée par une affectation soit avec point décimal soit en notation scientifique :

```
gamma = -5.77
c = 3E8
hbar = 1.05E-34
```

- Ici la notation '3E8' signifie 3×10^8 et la notation '1.05E-34' signifie 1.05×10^{-34}.
- Le résultat d'un appel à la fonction de conversion `float()` est également un nombre flottant :

```
x = 3           # x est entier avec valeur 3
y = float(x)    # y est un float avec valeur 3.0
```

Les types de données numériques : complex

- Une variable du type complex représente un nombre flottant complexe, c.à.d. un float pour la partie réelle et un pour la partie imaginaire. Notation en Python avec 'J' pour l'unité imaginaire $i = \sqrt{-1}$:

```
c = 3 + 4J              # le nombre complexe 3 + 4 i
d = -2.5 + 5.E-3J       # le nombre complexe -2.5 + 0.005 i
i = 1J                  # le nombre complexe i
```

- La conversion se fait avec la fonction de conversion complex() :

```
s = "3 + 2J"      # une chaîne de caractères
z = complex(s)    # un nombre complexe

re_z = 1.7        # un float
im_z = -2.8       # un deuxième float
z = complex(re_z, im_z)  # le nombre complexe 1.7 - 2.8 i
```

Les types de données numériques : complex

Pour obtenir la partie réelle ou imaginaire d'un nombre complexe :

```
z = -1 + 2.3J
partie_reelle = z.real      # donne -1.0
partie_imaginaire = z.imag # donne 2.3
```

Les opérations arithmétiques

Python connaît les opérations arithmétiques suivants :

`+`	addition	
`-`	soustraction	
`*`	multiplication	
`/`	division réelle	résultat toujours `float` ou `complex`
`//`	division entière	résultat `int` si les deux arguments sont `int`, `float` ou `complex` sinon
`%`	reste de la division entière	`int` ou `float` ou `complex` : voir div. entière
`**`	puissance	

Exemples :

```
x = 5 + 3      # x est du type int avec valeur 8
y = x / 5      # y est du type float la valeur 1.6
z = x // 5     # z est du type int avec valeur 1
yy = 8 % 5.0     # yy = 3.0 est du type float
xx = 2 ** 3      # xx = 8
zz = 16 * 4 - 2 * (10 + 1)    # zz = 42
```

Les affectations

Une affectation procède en deux pas :

- l'expression à droite du signe = est évaluée
  (calculée en fonction de l'état de la mémoire à cet instant)
- le résultat est affecté à la variable à gauche du signe =

Cela permet des instructions comme

```
x = 0          # x est du type int, sa valeur est 0
x = x + 1      # augmenter x de 1
```

(la 2nde ligne ne doit pas être confondue avec une équation algébrique !)
ou même

```
x = y = 7      # x et y sont du type int avec valeur 7
```

Les affectations

Combinaison des opérations arithmétiques avec des affectations, pour changer la valeur d'une variable :

```
x = 2    # x est initialement du type int avec valeur 2

x += 1   # ajouter 1 à x: x devient 3
         #  (équivalent: x = x + 1)
x *= 3   # multiplier x par 3: x devient 9
         #  (équivalent: x = x * 3)
x -= 1   # soustraire 1 de x: x devient 8
         #  (équivalent: x = x - 1)
x /= 4   # diviser x par 4: x devient 2.0
         #  (équivalent: x = x / 4)
```

Les types séquentiels ("sequence types")

type	description
`str`	chaîne de caractères
`list`	liste muable d'objets
`tuple`	collection immuable d'objets

Les chaînes de caractères

Le type de données `str` (“string” en anglais) représente des chaînes de caractères.

- Toute partie du code source entre apostrophes ' ou guillemets " est interprétée comme un `str`.

```
phrase = "Mon tailleur est riche."
titre_du_cours = 'Programmation pour la physique (HAP608P)'
```

- On peut convertir toute variable numérique en `str` avec la fonction `str()`. On peut convertir un `str` en `int` seulement s'il se compose des chiffres. Similairement, on peut convertir un `str` en `float` seulement si les caractères représentent un nombre flottant en notation Python.

```
nombre = "23"
print(nombre + nombre)    # affiche "2323"
print(int(nombre) + int(nombre)) # affiche "46"
```

Les opérations sur des chaînes de caractères

Avec l'opérateur + on peut composer les chaînes de caractères :

```
age = 12
phrase = "J'ai " + str(age) + " ans."
print(phrase)  # affiche "J'ai 12 ans."
```

Avec [ ] on accède aux caractères individuels. Attention : l'indice du premier caractère est toujours 0 !

```
print(phrase[0])      # affiche "J"
print(phrase[3])      # affiche "i"
```

L'opérateur `[a:b]` retourne la sous-chaîne de caractères à partir de l'indice `a` (inclu) jusqu'à l'indice `b` (exclu). Si on ne spécifie pas `a` et/ou `b`, on obtient la sous-chaîne à partir du début et/ou jusqu'au bout.

```
print(phrase[1:3])      # affiche "'a"
print(phrase[5:])       # affiche "12 ans"
print(phrase[:6])       # affiche "J'ai 1"
```

Le caractère d'échappement dans une chaîne de caractères

Dans une chaîne des caractères, la barre oblique inversée ou anti-slash \ a une rôle spéciale : c'est le caractère d'échappement.

- Dans un string littéral entouré des apostrophes ', les caractères " sont traités comme des caractères réguliers et vice-versa. Si on veut inclure le caractère ' (ou ") dans un string littéral qui commence et finit avec ' (ou "), il doit être précédé par un \ :

```
print("J'ai 12 ans")
print('J\'ai 12 ans')  # même résultat
print("\"Infâme !\" s'exclama Bastien.")
```

- La séquence \n dans une chaîne des caractères force la fin de la ligne.
- Pour explicitement écrire un anti-slash il faut en inclure deux :

```
print("Voici un anti-slash: \\")
```

(On rappelle que, hors d'une chaîne des caractères, le anti-slash indique par contre la continuation d'une instruction sur la ligne suivante)

Faire entrer une chaîne de caractères par le clavier

Pour récupérer des données du clavier on se sert de la fonction `input()` :

```
s = input("Entrez quelque chose:")
print("Vous avez entré \"" + s + "\"")
```

`input()` retourne toujours un str. Si on veut lire des données numériques du clavier, il faut les convertir :

```
s = input("Entrez un nombre entier:")
i = int(s)
print(s + " fois " + s + " font " + str(i**2))
```

Les types séquentiels : `list`

Le type `list` représente une liste d'objets. Les listes sont délimitées par des crochets `[ ]`. Leurs éléments sont séparés par des virgules `,`.

```
premiers_nombres_premiers = [2, 3, 5, 7, 11]
hiver = ["décembre", "janvier", "février"]
```

- Les éléments d'une liste ne sont pas forcement du même type. Il peut y avoir des doublons.

```
liste_bizarre = [2, 2.0, 2 + 0J, "deux"]
liste_nulle = [0, 0, 0]
```

- On peut même construire des listes dont les éléments sont des listes :

```
matrice3x2 = [[1, 2, 3], [6, 5, 4]]
```

Opérations sur les listes

Comme pour les `str` :
Avec l'opérateur + on peut fusionner des listes :

```
mois = ["Janvier", "Février", "Mars"]
mois2 = ["Avril", "Mai"]
print(mois + mois2)
# affiche "['Janvier', 'Février', 'Mars', 'Avril', 'Mai']"
```

Avec [ ] on accède aux éléments individuels. Attention : l'indice du premier est toujours 0 !

```
print(mois[1])     # affiche "Février"
print(mois[0][0]) # première lettre du premier élément = "J"
```

L'opérateur `[a:b]` retourne la sous-liste entre l'indice `a` (inclu) et l'indice `b` (exclu). Si on ne spécifie pas a (ou b), on obtient la sous-liste à partir du début (ou jusqu'au bout).

```
print(mois[:1])   # affiche "['Janvier']"
print(mois2[:])   # affiche une copie de toute la liste mois2
```

Les types séquentiels : `tuple`

Le type `tuple` représente une collection d'objets similaire à une liste, mais avec une différence importante : Les `tuple` sont immuables, ils ne peuvent pas être modifiés après initialisation. En pratique ils sont moins utilisés que les listes.

Un `tuple` est délimité par des parenthèses `( )` avec les éléments séparés par des virgules `,`. On peut supprimer les parenthèses si pas d'ambiguïté. Exemples :

```
t = (1, 2, 3)   # crée un tuple
u = 1, 2, 3     # le même tuple
print(u[2])     # affiche "3"

a, b = 1, 2     # affecte les valeurs 1 à a et 2 à b
```

Les variables et les types de données : Erreurs fréquentes

- Orthographe : `ma_var`, `Ma_var` et `mavar` sont trois identifiants différents.
- Effectuer une opération, puis ne rien faire avec le résultat ne sert à rien :

```
nombre = 5
nombre * 3  # calculer 5 * 3 et oublier le résultat
```

- Penser à convertir ses variables au bon type :

```
age = input("Quel est ton age ? ") # input() retourne un str
naissance = 2025 - age # erreur: faut convertir age en int
```

- L'indice du premier objet dans une séquence est 0. Si la séquence contient n objets, l'indice du dernier est alors $n - 1$.

```
ma_liste = ["un", "deux", "trois"]
print(ma_liste[1])  # affiche "deux"
print(ma_liste[3])  # erreur: pas de 4-ème élément
```

Les variables et les types de données : Erreurs fréquentes

- Notation scientifique : le `E` signifie "$\times 10$ à la puissance de". Alors pour convertir des nanomètres en mètres :

```
nm = 10E-9      # faux
nm = 10**-9     # pas strictement faux mais à éviter
nm = 1E-9       # correct
```

- Python utilise le point décimal, pas la virgule décimale. Alors

```
pi = 3.14       # pi est un float de valeur 3.14
pas_pi = 3,14 # pas_pi est un tuple de deux entiers 3 et 14
```

Les structures de contrôle

Dans ce chapitre

Python

- Les blocs d'instructions
- La structure conditionnelle
- Les expressions logiques
- La priorité des opérateurs
- La boucle `while`
- La boucle `for`

Les blocs d'instructions

Un bloc est une séquence de lignes d'instructions distinguées par leur indentation (décalage par rapport aux lignes qui les entourent). Une ou plusieurs lignes consécutives décalées au même niveau constituent un bloc. Un bloc est toujours précédé par une ligne d'en-tête qui se termine avec un deux-points :

```
...
LIGNE EN-TETE:                  # introduit un bloc
    INSTRUCTION 1
    INSTRUCTION 2
    ...
    DERNIERE INSTRUCTION        # ici le bloc se termine
INSTRUCTION SUIVANTE            # <- ne fait plus partie du bloc
...
```

Les structures de controle permettent d'exécuter toutes les instructions d'un bloc plusieurs fois, ou de les exécuter seulement en fonction d'une condition.

Les blocs d'instructions

Un bloc peut en contenir d'autres :

```
...
LIGNE EN-TETE:      # ici commence un bloc
    INSTRUCTION
    INSTRUCTION
    ...
    LIGNE EN-TETE: # ici commence un sous-bloc
        INSTRUCTION
        INSTRUCTION
        ...
        DERNIERE_INSTRUCTION  # fin du sous-bloc
    INSTRUCTION    # le 1er bloc se poursuit
    ...
    DERNIERE INSTRUCTION  # fin du 1er bloc
INSTRUCTION HORS BLOC
...
```

De même pour les sous-sous-blocs etc.

La structure conditionnelle

La structure conditionnelle (ou structure `if`) prend la forme suivante :

```
if CONDITION: # ligne d'en-tête caractérisée par mot clé if
    INSTRUCTION 1    # bloc à exécuter si CONDITION vérifiée,
    INSTRUCTION 2    #  à sauter sinon
    ...
    DERNIERE INSTRUCTION  # ici le bloc se termine
CONTINUER_ICI    # dans tous les cas le programme arrive ici
...
```

- Ici `CONDITION` est une expression logique de valeur `True` (vrai) ou `False` (faux).
- Le bloc d'instructions suivant est exécuté seulement si `CONDITION` est `True`.
- Sinon le programme saute le bloc et continue directement à `CONTINUER_ICI`.
- Les deux-points : dans la ligne d'en-tête font partie de la structure et ne doivent pas être omis

La structure conditionnelle

Exemples :

```
i = int(input("Entrez un nombre entier: "))
if i < 0: # ligne d'en-tête
    i = -i  # un bloc qui ne contient qu'une seule ligne
print("La valeur absolue de ce nombre est", i)
```

```
print("Tu veux qu'on te dise un sécret?")
reponse1 = input("Entre 'o' si oui: ")
if reponse1 == "o":
    reponse2 = input("Tu es sur? Entre 'o' si oui:")
    if reponse2 == "o":
        print("Le voici:\nLa cuillère n'existe pas.")
```

Parenthèse : Les expressions logiques

Le type de données `bool`

Ce type de données représente la valeur booléenne d'une expression logique. Les variables du type `bool` ne peuvent prendre que deux valeurs différentes : `True` (vrai) ou `False` (faux).

On peut définir des variables booléennes de la même manière que des variables numériques, par exemple

```
flag = True
...
if flag:
    FAIRE_QUELQUE_CHOSE
    ...
```

Par la fonction `bool()` on peut convertir un `str` en `bool` (s'il s'agît de la chaîne de caractères `"True"` ou `"False"`). De même pour une variable numérique (dans ce cas le résultat est `False` si le nombre est 0 et `True` sinon). (On peut même directement utiliser la valeur numérique correspondante dans une structure conditionnelle au lieu de la condition – normalement déconseillé car peu lisible.)

Les expressions logiques

Les opérateurs de comparaison :

expression	`True` si ...
`x == y`	`x` est égal à `y`
`x != y`	`x` est différent de `y`
`x > y`	`x` est strictement supérieur à `y`
`x < y`	`x` est strictement inférieur à `y`
`x >= y`	`x` est supérieur ou égal à `y`
`x <= y`	`x` est inférieur ou égal à `y`

Les opérateurs logiques : soient `a` et `b` du type bool (`True` ou `False`)

`not a`	`True` si `a` est `False` et vice-versa
`a and b`	`True` si `a` est `True` et `b` est `True`, `False` autrement
`a or b`	`True` si au moins un de `a` ou `b` est `True`, `False` autrement

Les opérateurs `in` et `is`

L'opérateur `in`

teste si un objet est contenu dans une séquence :

```
animaux = ["giraffe", "gazelle", "guépard"]
"giraffe" in animaux   # True
"gorille" in animaux   # False
"elle" in "gazelle"    # True
```

L'opérateur `is`

teste si deux identifiants désignent le même objet (il ne teste pas l'égalité des valeurs) :

```
x = [1, 2]      # une liste avec deux éléments
y = [1, 2]      # une autre liste avec les mêmes éléments
z = x     # z est un autre nom pour x
x is y    # False
x is z    # True
```

Cet opérateur peut parfois donner des résultats inattendus sur des variables immuables (types numériques, `str`...). On comprendra plus tard pourquoi.

Fin de parenthèse : La priorité des opérateurs

En ordre ascendant :

- `or`
- `and`
- `not`
- comparaisons : `==`, `!=`, `>`, `<`, `>=`, `<=`, `in`, `is`
- addition et soustraction : `+`, `-`
- multiplication et division : `*`, `/`, `//`, `%`
- signe : `+x`, `-x`
- exponentiation : `**`

Ainsi l'expression "`not x > y or - x ** y + 2 * y == 0`" est interprétée

$$(\neg(x > y)) \quad \vee \quad (((-(x^y)) \; + \; (2 \times y)) = 0)$$

On peut toujours insérer des parenthèses pour changer les priorités :
"`(-x) ** (y + 2) * y == 0`" devient

$$((-x)^{y+2} \times y) = 0$$

La structure conditionnelle augmentée

Ajouter un bloc `else` (“sinon”), à exécuter si `CONDITION` est `False` :

```
if CONDITION:
    INSTRUCTION # si CONDITION est True
    ...
else:
    AUTRE_INSTRUCTION  # si CONDITION est False
    ...
CONTINUER_ICI          # en tout cas on reprend ici
```

Exemple :

```
i = int(input("Entrez un nombre entier:"))
if i % 2 == 0:
    print(i, "est pair")
else:
    print(i, "est impair")
```

La structure conditionnelle augmentée

Ajouter des blocs `elif` (“sinon, si”) :

```
if CONDITION1:
    INSTRUCTION # si CONDITION1 est True
    ...
elif CONDITION2:
    AUTRE_INSTRUCTION  # si CONDITION1 est False
    ...                #    mais CONDITION2 est True
elif CONDITION3:       # etc.
    ENCORE_AUTRE_INSTRUCTION
    ...
else:
    DERNIERE_CHANCE    # si toutes CONDITIONs sont False
    ...
...
```

La boucle `while`

La boucle `while` (“tant que”) sert à répéter les instructions d'un bloc en fonction d'une condition :

```
while CONDITION:
    FAIRE_QUELQUE_CHOSE # ce bloc est répété tant que
    ...                 #   CONDITION est True
CONTINUER_ICI           # Après on arrive ici
...
```

Exemple :

```
i = 1
while i % 2 != 0:    # condition remplie si i est impair
    i = int(input("Entrez un nombre pair:"))
print("La moitié de", i, "est", i // 2)
```

La boucle `while`

Deuxième exemple : Conjecture de Collatz.

On définit la suite (n_k) par un $n_0 \in \mathbb{N}$ et la règle de récurrence

$$n_{k+1} = \begin{cases} \frac{n_k}{2}\,, & n_k \text{ pair} \\ 3n_k + 1\,, & n_k \text{ impair} \end{cases}$$

Conjecture : Pour toute valeur de départ n_0 on va ultérieurement tomber sur $n_i = 1$ (et puis $n_{i+1} = 4$, $n_{i+2} = 2$, $n_{i+3} = 1$ etc.)

En supposant que la conjecture soit vraie (sinon : boucle infinie, le programme ne terminera jamais !), on calcule le nombre minimal d'itérations i pour tomber sur $n_i = 1$, avec n_0 fourni par l'utilisateur :

```
n = int(input("Entrez n0: "))
i = 0    # compteur d'itérations
while n != 1: # ne termine que si la conjecture est vraie !
    if n % 2 == 0:  # n pair:
        n /= 2      # remplacer n <- n/2
    else:           # n impair:
        n *= 3      # remplacer n <- 3n + 1
        n += 1
    i += 1
print("Tombé sur 1 après", i, "itérations.")
```

La boucle `for`

La boucle `for` sert à répéter les instructions d'un bloc une fois pour chaque élément d'une séquence :

```
for VAR in SEQUENCE:
    FAIRE_QUELQUE_CHOSE # bloc repeté pour tous VAR
    ...                 #
CONTINUER_ICI           # après on arrive ici
...
```

L'utilisation du mot clé `in` est différente dans ce contexte qu'avant.

Exemple :

```
somme = 0
for x in [2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19]:
    print("On ajoute", x)
    somme = somme + x
print("La somme des nombres premiers < 20 est", somme)
```

La boucle `for`

La fonction `range()` retourne un n-uplet des nombres entiers :

- `range(y)` retourne `(0,1,2,..., y-1)`
- `range(x, y)` retourne `(x,x+1,x+2,..., y-1)`
- `range(x, y, s)` retourne `(x,x+s,x+2s,..., x+ns)` avec `x+ns<y` maximal

Application typique de `range()` dans une boucle `for` :

```
for x in range(ITER):
    FAIRE_QUELQUE_CHOSE  # bloc repeté ITER fois
    ...
```

Exemple :

```
print("Les carrés et les cubes des nombres entre 0 et 9:")
for x in range(10):
    print(x**2)
    print(x**3)
    print("\n")
```

La boucle `for`

Avec un str, une boucle `for` se répète pour tous les caractères :

```
for caractere in "jeu":
    print(caractere + caractere)    #    "jj
                                    #     ee
                                    #     uu"
```

Boucles `for` imbriquées :

```
animaux = ["Poisson", "Tortue", "Cachalot"]
compteur = 0
for animal in animaux:
    for caractere in animal:
        if caractere == "o":
            compteur += 1
print("Le nombre des 'o' dans la liste est", compteur)
```

Commandes utiles pour les boucles

La commande `break` abandonne une boucle. Exemple :

```
while True:                 # toujours vrai
    i = int(input("Entrer un nombre pair: "))
    if i % 2 == 0:    # vrai si i est pair
        print(i, "/ 2 = ", i / 2)
        break
```

Après une boucle, la commande `else` marque un bloc à exécuter seulement si la boucle n'a pas été abandonnée avec `break` mais s'est terminée régulièrement. Exemple :

```
binaire = input("Entrez un nombre binaire (des 0 et 1): ")
somme = 0
for i in range(len(binaire)): # len(x) = longueur du str x
    bit = int(binaire[i])
    if  bit == 0 or bit == 1:
        somme += bit * 2**(len(binaire) - i - 1)
    else:
        print("Expression non valide")
        break
else:
   print("Ce nombre en notation décimale est", somme)
```

Commandes utiles pour les boucles

Dans une boucle, la commande `continue` saute les instructions restants et continue avec la prochaine itération

```
s = input("Entrer une phrase: ")
for caractere in s:
    if caractere == "e":
        continue  # sauter l'instruction suivante
    print(caractere) # écrire toutes les lettres sauf les 'e'
```

Exemple : Boucles et structures conditionnelles

Un parachutiste est en chute libre pendant 20 s. Après il ouvre son parachute et il descend à une vitesse constante de 2 m/s. On s'intéresse à sa position en fonction du temps.

```
g = 9.81    # accélération gravitationnelle en m/s^2
v = 2.0     # vitesse après ouverture du parachute en m/s

h0 = float(input("Hauteur initiale en m: "))

for t in range(0, 22, 2):     # on affiche h tous les 2 s
    h = h0 - 0.5 * g * t**2   # nouvelle hauteur
    if h <= 0:                # ça fait mal !
        break
    print("A t =", t, "s, la hauteur est de", h, "m.")
else:
    print("Le parachute s'ouvre.")
    while h > 0:
        print("A t = ", t, "s, la hauteur est de", h, "m.")
        t += 10 # on affiche la hauteur tous les 10 s
        h -= 10 * v

print("Atterrissage!")
```

Les structures de contrôle : Erreurs fréquentes

- Deux-points oubliés après `if`, `while`, `for` etc.
- Pour l'indentation des blocs :
  Ne jamais mélanger les éspaces et les tabulatrices.
  Conseillé : eviter les tabulatrices, indentation 4 espaces par niveau
- L'opérateur d'affectation est =, l'opérateur de comparaison est ==
  Donc `a == b` est une expression logique (qui vaut `True` si les valeurs de `a` et `b` sont égales, et `False` sinon) tant que `a = b` est une affectation qui attribue à `a` la valeur de `b`.

```
cont = int(input("Combien y a-t-il de continents?"))
if cont = 6:          # Erreur ! Ici il faut utiliser ==
    print("C'est correct.")
```

- Boucles infinies : assurez-vous que vos boucles se terminent !

```
x_n, r, i = 0.5, 3.6, 1
while i < 100:
    print(x_n)
    x_n = r * x_n * (1 - x_n)
print("Ca y est !") # Jamais atteint car i ne change pas
```

Les fonctions

Dans ce chapitre

Python

- Les définitions de fonctions
- La commande `return`
- La portée des identifiants
- Les fonctions anonymes et la commande `lambda`
- Les modules et la bibliothèque standard
- Le module `math`

Généralités

- La récursivité
- Les fonctions d'ordre supérieur

Exemples de fonctions

On a déjà employé quelques fonctions intégrées dans Python comme `print()`, `input()` et `range()`. En général, une fonction est une partie du programme qui

- peut être appelée avec un ou plusieurs paramètre(s) dit argument(s)
- effectue une tâche en fonction de ces arguments
- peut retourner une valeur

Par exemple, comme nous l'avons vu, la fonction `range()` prend entre 1 et 3 arguments et retourne un n-uplet de nombres entiers.

Autres exemples :

fonction	argument(s)	tâche	valeur de retour
`print()`	plusieurs	affichage sur l'écran	aucune
`input()`	un str	affiche son argument, attend saisie du clavier	le `str` entré par le clavier
`int()`	un nombre ou `str` qui peut être converti en `int`	convertit son argument en `int`	le résultat de la conversion
`len()`	une séquence	compte le nombre d'élements	le nombre d'élements dans la séquence

Nouvelles fonctions

Voici un exemple d'une définition d'une fonction originale `cube()` :

```
def cube(x):          # un argument, nommé x
    return x ** 3     # retourne x au cube
```

Les instructions dans les définitions de fonction sont exécutées lorsque l'interpreteur tombe sur un appel de fonction :

```
c = cube(5) # appelle la fonction cube() avec l'argument
            #   x=5, affecte la valeur de retour à c
print(c)    # affiche "125"
```

Définir une fonction

La syntaxe pour une définition de fonction est

```
def NOM_DE_FONCTION(ARG1, ARG2, ...):
    INSTRUCTION1
    INSTRUCTION2
    ...
```

- Pour les noms des fonctions, les mêmes règles que pour les autres identifiants s'appliquent.
- Une fonction peut prendre un nombre quelconque d'arguments `ARG1`, `ARG2` etc. (mais des fonctions sans arguments sont aussi permises)
- Une fois la fonction définie, on l'appelle avec la commande
  `NOM_DE_FONCTION(VAL1, VAL2, ...)`
  où `VAL1`, `VAL2` etc. sont les valeurs à substituer pour les arguments `ARG1`, `ARG2` etc. pendant cet appel.
  La valeur de l'expression d'appel devient la valeur de retour de la fonction.
- Le bloc suivant la ligne d'en-tête, caractérisé par le mot clé `def`, contient les instructions à exécuter à chaque appel. Comme tous les blocs, il peut contenir des sous-blocs gérés par des structures de contrôle, des appels de fonctions...

Valeurs par défaut des arguments

Il est possible de spécifier des valeurs par défaut pour tous les arguments ou une partie :

```
def NOM_DE_FONCTION(ARG1=DEF1, ARG2=DEF2,...):
    ...
```

Si une valeur par défaut par un des arguments est spécifiée dans la définition, il n'est plus nécessaire de fournir cet argument lors de l'appel.

Exemple : Calculer une approximation de la fonction zêta de Riemann,

$$\zeta(z) = \lim_{N \to \infty} \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{k^z}$$

```
def zeta(z, N=100):
  somme = 0.
  for k in range(1, N+1): # k entre 1 et N inclus
    somme += 1/k**z  # ajouter le k-ème terme à la somme
  return somme
```

Possibles appels pour calculer $\zeta(2)$: `zeta(2)` ou `zeta(2, 1000)` ou `zeta(2, N=500)`

Valeurs par défaut des arguments

Si plusieurs arguments ont des valeurs par défaut : Dans un appel, les arguments non nommés doivent toujours précédér les arguments nommés, pour éviter toute ambiguïté.

Exemple :

```
# x n'a pas de valeur par défaut. z=0 et y=0 par défaut.
def pythagore(x, y=0, z=0):
    return (x**2 + y**2 + z**2)**0.5
```

Exemples d'appels de cette fonction :

- `pythagore(25, 5, 2)`
- `pythagore(-2, 16)` (en utilisant la valeur par défaut du dernier argument `z`)
- `pythagore(3)` (dans ce cas les valeurs par défaut pour `z` et `y` sont utilisées)
- `pythagore(17, z=5)` (ce qui pose $x = 17$, $z = 5$, et $y = 0$ sa valeur par défaut)

Par contre, `multiplier(z=5, 17)` est un appel invalide (un argument nommé ne peut pas précéder un argument non nommé)

La commande `return`

La commande `return` peut figurer à un ou plusieurs endroits dans la définition d'une fonction. Dès que l'interpréteur la rencontre, il abandonne la fonction et continue l'exécution du programme à l'endroit de l'appel.
L'expression derrière le `return` est retourné et devient la valeur de l'expression d'appel de fonction.

```
def heaviside(r):           # la définition d'une fonction
    if r >= 0:
        return 1.0
    else:
        return 0.0

print("Theta(1) =", heaviside(1))    # un premier appel
print("Theta(-1) =", heaviside(-1)) # un deuxième appel
```

Si une fonction n'est pas terminée par un `return`, ou pour un `return` sans argument, la fonction retourne l'objet abstrait `None` ("aucun").

Parenthèse : Coding style

Récommandations pour créer du code plus lisible :

- Adopter des conventions cohérentes et les suivre partout.
- Ne pas économiser sur les commentaires.
- Une instruction par ligne. Eviter les point-virgules.
- 4 espaces par niveau d'indentation. Pas de tabulatrice.
- Pas d'espace juste après des parenthèses, crochets et accolades ([{
  ni juste avant)]}
  ni juste avant des virgules, point-virgules et deux-points
- un seul espace après , ; :
- un seul espace à chaque coté des opérateurs d'affectation et de comparaison
- Désignations parlantes pour les identifiants importants.
  Préférer des minuscules et éventuellement des chiffres et tirets bas _ pour les variables et fonctions.
- Préférer des majuscules pour les classes en programmation orientée objet.

Deuxième parenthèse : La portée des identifiants

La portée lexicale d'un nom de variable est la portion du code où la variable peut être adressée par ce nom. Pour une affectation à l'intérieur d'une définition de fonction, la portée de l'identifiant est limitée à cette même définition de fonction. Donc le code

```
def f():
    x = 0    # définir la variable x dans la portée de f()
f()
print(x)     # erreur: x pas défini dans cette portée
```

produira une erreur. En revanche, si une variable est définie hors d'une définition de fonction, on peut bien l'utiliser à son intérieur :

```
x = 0
def f():
    print(x)    # variable x définie hors de f()
f()             # mais pas de problème
```

La portée des identifiants

Quand on affecte, dans la portée locale d'une fonction, une valeur à une variable qui existe déjà en dehors de la fonction :
Cela crée une nouvelle variable. Dans la portée locale de la fonction, l'identifiant correspondant réfère toujours à cette nouvelle variable locale. Exemple :

```
x = 0       # définit variable globale x
def f():
    x = 1   # définit variable locale x
    print(x)    # "1" (priorité de la variable locale)
f()
print(x)    # "0" (hors portée de la variable locale)
```

Des affectations aux variables globales dans une définition de fonction sont toutefois possibles (mais déconseillées si évitable), avec la commande `global` :

```
x = 0
def f():
    global x # x correspondra à la variable globale x
    x = 1    # <- ne crée pas une nouvelle variable locale
f()
print(x)     # "1"
```

Récursivité

Une fonction peut s'appeler elle-même :

```
def factorielle(n): # calcule n! recursivement
    if n < 0:       # factorielle pas définie
        print("Erreur: factorielle pas définie.")
        return
    elif n == 0:      # 0! = 1
        return 1
    else:
        return n * factorielle(n - 1)   # n! = n (n-1)!
```

On parle de la récursivité.

- La récursivité permet parfois des codes courts et élégants.
- Mais un algorithme récursif est souvent moins rapide qu'un algorithme équivalent itératif (qui se sert des boucles).
- Le nombre d'appels récursives imbriqués est limité à 1000 par défaut.
- Faire attention d'inclure une condition de terminaison appropriée !

Fonctions comme arguments

On peut passer des fonctions comme arguments aux autres fonctions :

```
def iterer(f, depart, n_fois):  # f(f(...f(depart)))
    resultat = depart
    for n in range(n_fois):
        resultat = f(resultat)
    return resultat

def logistique(x, r=3.6):
    return r * x * (1 - x)

print(iterer(logistique, 0.5, 100)) #   0.43172
```

Dans l'appel de `iterer()`, le nom de la fonction `f` (`logistique` en ce cas) est traité comme un nom d'une variable.

Fonctions comme valeurs de retour

Une fonction peut renvoyer une autre :

```
def racine(n): # renvoie la fonction "racine n-ième"
    def f(x):
        return x**(1/n)
    return f

g = racine(5)    # g est la fonction "racine 5-ième"
print(g(32))     # affiche "2.0"
print(racine(3)(27)) # affiche "3.0"
```

Une fonction qui soit prend une autre fonction comme argument soit renvoye une fonction est dite une fonction d'ordre supérieur. Les fonctions d'ordre supérieur sont particulièrement importantes dans la programmation fonctionnelle.

Fonctions `lambda`, fonctions anonymes

La commande `lambda` permet des très courtes definitions de fonctions dans une seule ligne. Au lieu de

```
def carre(x):
    return x ** 2
```

on écrit

```
carre = lambda x: x ** 2
```

Plus généralement,

```
lambda ARGUMENTS: EXPRESSION
```

définit une fonction avec arguments `ARGUMENTS` qui retourne `EXPRESSION`.

Fonctions `lambda` : Exemples

Fonctions d'ordre supérieur :

```
def racine(n): # renvoie la fonction "racine n-ième"
    return lambda x: x**(1/n)

print(racine(4)(81))     # affiche "3.0"
```

Listes de fonctions :

```
# une fonction, sa dérivée et sa dérivée seconde
fonctions = [lambda x: 3*x**2 - 2*x,
             lambda x: 6*x - 2,
             lambda x: 6]
```

Les modules

La commande `import` sert à importer du code d'un autre fichier ou d'une bibliothèque.

Exemple : On enregistre dans un fichier `puissances.py` les définitions de fonctions

```
# fichier puissances.py
def carre(x):
    return x**2
def cube(x):
    return x**3
```

On peut ensuite les utiliser dans un autre projet

```
# fichier nouveauprojet.py (dans le même répertoire)
import puissances
print(puissances.carre(42))
```

sans recopier tout. Ou, si on veut seulement importer la fonction `carre()` :

```
from puissances import carre
print(carre(42))    # ici: pas 'puissances.carre(42)'
```

La bibliothèque standard

Python est fourni avec un grande bibliothèque standard de fonctions pré-definies pour toutes sortes de tâches. Entre autres il y a des modules pour

- la manipulation des chaînes de caractères
- la manipulation des tableaux de données (NumPy, voir plus tard)
- les fonctions mathématiques (math et cmath, voir ci-dessous, ainsi que NumPy)
- les nombres rationnelles
- l'accès aux fichiers et leur manipulation
- les interfaces aux bases de données
- la programmation fonctionnelle
- la compression et la sauvegarde des données
- les services cryptographiques
- les interactions avec le système d'exploitation
- les services de réseau
- les services internet et les pages web
- multimédia

La bibliothèque standard : les modules `math` et `cmath`

Fonctions et constantes utiles du module `math` de la bibliothèque standard :

```
import math  # pour importer toutes les fonctionnalités
             #  du module math

# Les constantes e et pi
math.e                  # 2.71828...
math.pi                 # 3.14159...

# Les fonctions trigonométriques
math.sin(1.2)
math.cos(math.pi)
math.tan(0)

# Les fonctions trigonométriques inverses
math.asin(1/2)
math.acos(0.5)
math.atan(-1)
```

La bibliothèque standard : les modules `math` et `cmath`

Fonctions et constantes utiles du module `math` de la bibliothèque standard :

```
import math

# Les fonctions exponentielle et logarithme
math.exp(-3.0)
math.log(1.0)      # logarithme naturel
math.log(4, 2)     # logarithme de 4 de base 2

# La racine carrée
math.sqrt(2.0)          # équivalent: 2**(1/2)
```

- Toutes ces fonctions prennent des arguments du type `float` (ou des arguments `int`, que Python convertit automatiquement en `float`).
- Si on veut les appliquer aux nombres complexes, il faut importer le module `cmath` au lieu de `math`.

Quelques autres modules de la bibliothèque standard

Le module `time` met à disposition des fonctions pour accéder à l'horloge interne de l'ordinateur. Exemples :

```
import time

# Retourner un str représentant la date et l'horaire
# présente
time.asctime()

# Retourner un float qui représente le nombre de secondes
# depuis 1 janvier 1970 0:00:00 UTC
time.time()

# Arrêter l'exécution du programme pendant 7.5 secondes
time.sleep(7.5)

# Mesurer le temps d'exécution d'un morceau de code
t = time.perf_counter()
appeler_une_fonction_qui_coute_cher()
temps_passe = time.perf_counter() - t
```

Quelques autres modules de la bibliothèque standard

Le module `random` contient des fonctions pour générer des nombres (pseudo-)aléatoires. Exemples :

```
import random

# Retourner un nombre pseudoaléatoire entre 0 et 1
# avec une distribution uniforme
random.random()

# Retourner un élément aléatoire d'une liste
L = [1, 19, 23, 47]
random.choice(L)

# Retourner un entier aléatoire entre a (inclu)
# et b (exclu) avec une distribution uniforme
a, b = 10, 20
random.randint(a, b) # un entier aléatoire entre 10 et 19
```

Les fonctions : Erreurs fréquentes

- Deux-points oubliés après la commande def
- Il faut qu'une fonction soit définie avant qu'on l'appelle.

```
x, y = ma_fonction() # erreur: ma_fonction
                     # pas encore definie ici !

def ma_fonction():   # définition trop tardive
    a = int(input("Entrez un nombre entier:"))
    return a // 5, a % 5
```

- Pour les fonctions importées :
  attention à la différence entre import et from ... import :

```
from math import sqrt
x = sqrt(10)          # pas math.sqrt()
import cmath
y = cmath.exp(1.0J) # pas exp()
```

- Une définition de fonction sans qu'elle soit appelée n'est pas un programme complet !

NumPy et graphisme

Dans ce chapitre

Python

- La bibliothèque `numpy`
- Manipulation des tableaux
- Calcul matriciel
- Importer et exporter des données
- Graphisme avec `matplotlib`

Les tableaux

On rappelle les caractéristiques d'une liste Python :

- contient plusieurs éléments qui ne sont pas forcement du même type
- taille variable, peut changer (p.ex. avec l'opérateur +=)
- 1-dimensionnel = 1 seul indice (sauf si les éléments sont eux-mêmes des listes)

La bibliothèque NumPy se base sur un objet similaire, le tableau (anglais : "array")

Caractéristiques d'un tableau NumPy :

- contient plusieurs éléments qui sont forcement du même type, toujours un type numérique (`int`, `float`, `complex` ...)
- taille fixe
- n-dimensionnel : vecteurs, matrices, tenseurs...
- optimisé pour le calcul numérique : plus rapide que les listes, beaucoup de fonctionnalité pour la manipulation efficace.

Créer un tableau

Exemples :

```
import numpy as np  # pour importer toute la bibliothèque

sigma3 = np.array([[1, 0], [0, -1]])  # matrice [[ 1  0]
                                      #          [ 0 -1]]

s = np.array([1, 0], dtype=complex) # vect. [ 1.+0.j 0.+0.j]

nul2x3 = np.zeros((2, 3))  # [[ 0. 0. 0.]
                           #  [ 0. 0. 0.]]

id3x3 = np.identity(3, dtype=int) # [[ 1 0 0]
                                  #  [ 0 1 0]
                                  #  [ 0 0 1]]

rng = np.arange(0.8, 2, 0.4)      # [ 0.8 1.2 1.6]
```

Créer un tableau

Un tableau peut se créer

- en spécifiant les éléments dans une liste (ou liste de listes...) avec la fonction `numpy.array()`
- en spécifiant les dimensions par un tuple `(x, y, z...)` des `int`
  - `numpy.zeros()` crée un tableau de zéros
  - `numpy.ones()` crée un tableau de uns
  - `numpy.empty()` crée un tableau sans initialiser les éléments
- cas spécial : la matrice d'identité $n \times n$, `numpy.identity(n)` ou `numpy.eye(n)`
- tableaux 1-dimensionnels de nombres uniformement espacés :
  - `numpy.arange(debut, fin, pas)` : comme `range` mais avec des `float`
  - `numpy.linspace(debut, fin, N)` : `N` nombres entre `debut` et `fin` (inclus)

```
import numpy as np
tab1 = np.arange(0, 1.2, 0.2) # [0.  0.2 0.4 0.6 0.8 1.0]
tab2 = np.linspace(0, 1, 6)   # [0.  0.2 0.4 0.6 0.8 1.0]
```

Si besoin, spécifier le type de données des éléments avec l'argument `dtype`

Opérations arithmétiques sur les tableaux

Les opérations arithmétiques `+ = * / // %` entre les tableaux `numpy` sont définies par élément :

```
import numpy as np
sigma3 = np.array([[1, 0], [0, -1]], dtype=float)
print(sigma3 * np.array([[2., 3.] [4., 5.]])) # [[ 2.  0.]
                                               #  [ 0. -5.]]
```

Si les dimensions ne se correspondent pas, une opération arithmétique impliquant deux tableaux produira une erreur.

En revanche, il est toujours possible de ajouter/soustraire/multiplier/diviser par un scalaire :

```
print(sigma3 - 1)   # [[  0. -1.]
                    #  [ -1. -2.]]
```

Indicer et couper un tableau

On peut indicer un tableau avec plusieurs indices selon ses dimensions :

```
sigma3 = np.array([[1, 0], [0, -1]], dtype=float)
print(sigma3[1, 1])    # "-1.0"
```

(avec la généralisation évidente pour des tableaux d-dimensionnels).

On peut aussi le couper comme une liste Python :

```
# tous les éléments de la deuxième colonne:
print(sigma3[:, 1])    # "[ 0. -1.]"
# tous les éléments de la première ligne
print(sigma3[0, :])    # "[ 1. 0.]"
```

Couper des tableaux (array slicing), méthodes avancées

Créer le vecteur $(0, 1, 2, \ldots, 11)$ et le réarranger dans une matrice 3×4 :

```
a = np.reshape(np.array(range(12)), (3, 4))
print(a)    # [[ 0  1  2  3]
            #  [ 4  5  6  7]
            #  [ 8  9 10 11]]
```

Avec l'opérateur `[i:j:k]` on accède aux éléments

- à partir de l'indice `i` (par défaut : début)
- jusqu'à l'indice `j` exclu (par défaut : fin)
- en sélectionnant un élément sur `k` (par défaut : 1)

Exemples :

```
print(a[1, ::2])   # [4 6] (2ème ligne, colonnes paires)
print(a[1, 1::2])  # [5 7] (2ème ligne, colonnes impaires)
print(a[0, 1:3])   # [1 2] (1ère ligne, colonnes 1 et 2)
print(a[1:,:2])    # [[4 5]  (derniers 2 éléments
                   #  [8 9]]  des premières 2 colonnes)
```

Multiplication matricielle avec les tableaux

Un tableau avec deux indices peut représenter une matrice. Un tableau avec un seul indice est un vecteur.
Les produits entre les matrices et vecteurs (produit scalaire entre deux vecteurs, action d'une matrice sur un vecteur, produit matriciel entre deux matrices) se calculent avec l'opérateur `@` (et non pas avec `*` qui est la multiplication élément par élément !)

Exemples :

```
M = np.array([[1., 2., 4.], [2., -1., 0.], [5., -2., 1.]])
v = np.array([0., 1., 2.])
w = np.array([1., -1., 1.])

print(v @ w) # produit scalaire v . w, résultat: 1.0

print(M @ v) # matrice agît sur vecteur, M . v
             #  résultat: [ 10. -1. 0.]

print(M @ M) # produit matriciel M . M
             #  résultat: [[ 25.  -8.   8.]
             #             [  0.   5.   8.]
             #             [  6.  10.  21.]]
```

Multiplication matricielle avec les tableaux

Exemple : Calcul des moyennes quantiques $\langle\psi|\sigma^{1,2,3}|\psi\rangle$ pour un système à deux niveaux

Pour rappel : définition des matrices de Pauli

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

et de la moyenne quantique d'un opérateur $\hat{A}$ pour un système dans l'état $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ (supposé normalisé, alors $||\psi||^2 = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 = 1$)

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = (\psi_1^* \ \psi_2^*)\, \hat{A} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

On va calculer les moyennes de σ^1, σ^2 et σ^3 dans un état fourni par l'utilisateur.

Multiplication matricielle avec les tableaux

```
import numpy as np

sigma = np.array([[[ 0, 1], [1, 0]], # les matrices de Pauli
                  [[ 0, -1j], [1j, 0]],
                  [[ 1, 0], [0, -1]]], dtype = complex)

def norme(psi):  # la norme d'un vecteur complexe
    psic = np.conjugate(psi)
    return np.sqrt(psic @ psi)

psi1 = complex(input("Entrer psi1: "))  # composantes de psi
psi2 = complex(input("Entrer psi2: "))
psi = np.array([psi1, psi2], dtype=complex)
psi /= norme(psi)           # normaliser le vecteur psi
psic = np.conjugate(psi)  # le vecteur conjugué complexe
vm = [psic @ sigma[i] @ psi for i in range(3)]

print("Valeurs moyennes:\n <sigma1> = ", vm[0].real,
                        "\n <sigma2> = ", vm[1].real,
                        "\n <sigma3> = ", vm[2].real)
```

Méthodes utiles pour le calcul matriciel

La classe `numpy.ndarray` contient quelques autres champs et méthodes utiles pour manipuler des vecteurs et matrices : si `A` est un tableau, alors

- `numpy.transpose(A)` représente la transposée de `A` (raccourci : `A.T`)
- `numpy.trace(A)` calcule la trace $\sum_i A_{ii}$
- `numpy.conjugate(A)` calcule le tableau conjuguée complexe
- `numpy.amax(A)` calcule l'élément maximal
- `numpy.sum(A)` calcule la somme des éléments
- ...

Voir `https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/routines.html` pour documentation complète.

Fonctions sur les tableaux

Les fonctions élémentaires `sin`, `cos`, `exp`, `log`, `sqrt` etc. des bibliothèques `math` et `cmath` existent aussi dans la bibliothèque `numpy`. Si on donne un tableau comme argument, la valeur de retour sera également un tableau avec les valeurs de fonction des éléments : "array broadcasting".

```
import numpy as np

x = np.array([-1, 0, 1])  # un tableau
print(np.arccos(x)) # "[ 3.14159265  1.57079633  0.]"
```

À préférer par rapport au code équivalent (mais moins vite et moins propre)

```
import math

x = [-1, 0, 1] # une liste
acosx = [math.acos(t) for t in x]  # lent sur des grandes
                                   #  listes !
print(acosx)
```

Fonctions sur les tableaux

Pour convertir une fonction ordinaire en fonction qui peut s'appliquer sur un tableau numpy, on utilise la fonction `numpy.vectorize`.

Exemple :

```
import numpy as np

# Une fonction ordinaire:
def f(x, y):  # retourne x si x>y et y-x sinon
    if x > y:
        return x
    return y - x

# La fonction vectorisée:
vf = np.vectorize(f)

x = np.array([1., 3., 7.])
vf(x, 4)  # array([ 3., 1., 7.])
```

Copier un tableau

Une copie par référence se fait avec l'opérateur d'affectation $=$, une copie "superficielle" avec `numpy.copy()` :

```
import numpy as np

a = sigma3          # permet d'accéder à sigma3
                    #  avec la novelle référence a
b = np.copy(a)      # crée un nouveau tableau
                    #  qui est une copie de sigma3
```

Importer et exporter des données

La fonction `numpy.loadtxt` permet d'importer des données d'un fichier.

```
# Fichier de données "donnees.dat"

3.14159 2.71828 0.57721   # commentaires seront ignorés
1.      -2.     3.e5
```

```
# Fichier du programme

import numpy as np

a = np.loadtxt("donnees.dat")
print(a) # [[ 3.1415900e+00  2.7182800e+00 5.7721000e-01]
         #  [ 1.0000000e+00 -2.0000000e+00 3.0000000e+05]]
```

Dans le fichier de données :

- éléments doivent être séparés par un ou plusieurs espaces blancs
- lignes blanches et commentaires # sont ignorés

Importer et exporter des données

La fonction `numpy.savetxt` permet d'enregistrer des données dans un fichier.

```
import numpy as np

a = np.arange(0.0, 4.0, 1.0) # le tableau [ 0., 1., 2., 3.]
np.savetxt("mydata.dat", a, header="Commentaire facultatif")
```

Fichier `mydata.dat` résultant :

```
# Commentaire facultatif
0.00000000000000000e+00
1.00000000000000000e+00
2.00000000000000000e+00
3.00000000000000000e+00
```

Visualisation avec matplotlib

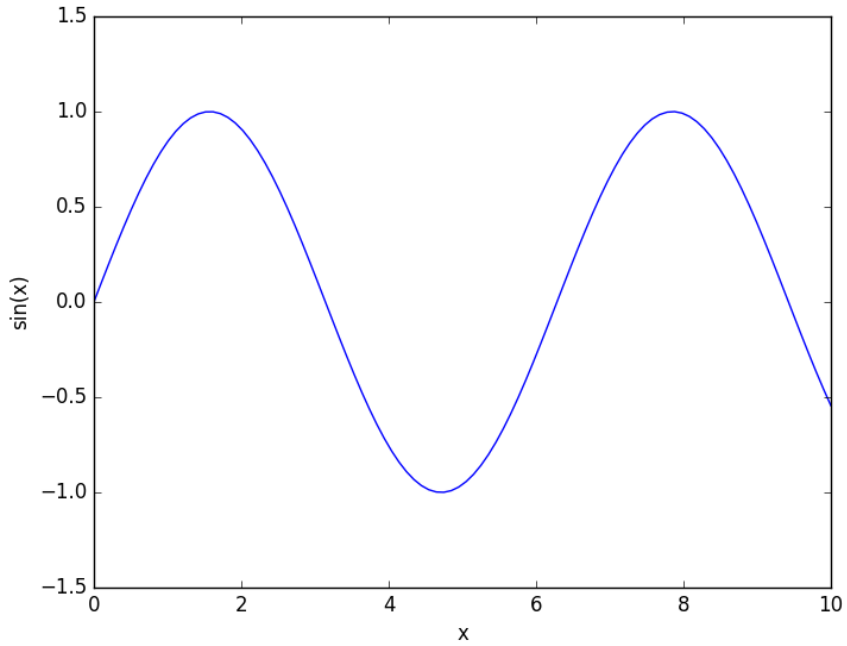
Python dispose d'une bibliothèque très puissante pour créer des graphiques : la bibliothèque `matplotlib.pyplot`.

Usage typique pour tracer le graphe d'une fonction :

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

xpts = np.linspace(0., 10., 100) # 100 points entre 0 et 10
ypts = np.sin(xpts)              # Les sinus de ces points

plt.plot(xpts, ypts)         # tracer ypts sur xpts
plt.ylim([-1.5, 1.5])        # pour y entre -1.5 et 1.5
plt.xlabel("x")              # étiquette de l'axe des x
plt.ylabel("sin(x)")         #    ... et de l'axe des y
plt.show()                   # afficher graphique
```

Visualisation avec matplotlib

Résultat :



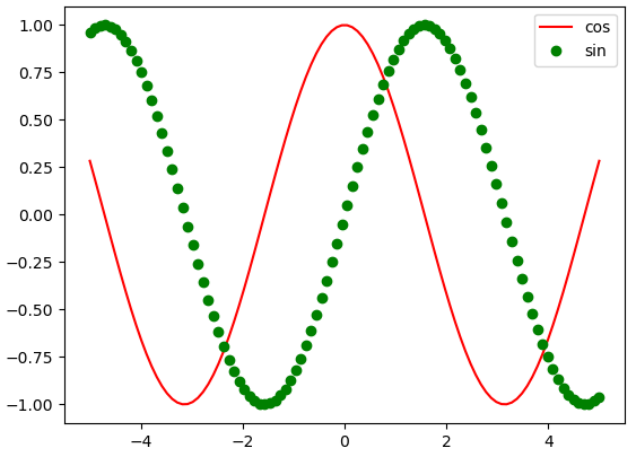
La fonction `matplotlib.pyplot.plot()`

Tracer des courbes ou des points : `matplotlib.pyplot.plot(x, y, m)`

- `x` = valeurs des x
- `y` = valeurs de fonction $y(x)$ à tracer
- optionnel : `m` = chaîne de caractères indiquant la couleur / le style, p.ex.
  - `'r'`, `'g'`, `'b'` = rouge, vert, bleu (défaut)
  - `'-'`, `'--'`, `':'` = ligne solide (défaut), interrompue, pointillée
  - pour tracer des points individuels plutôt qu'une courbe :
    `'.'`, `','`, `'o'`, `'*'`, `'s'` = marqueur point, pixel, cercle, étoile, carré
- d'autres arguments optionnels existent, p.ex. pour faire afficher une legende

Exemple :

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
x = np.linspace(-5, 5, 100)
cosx, sinx = np.cos(x), np.sin(x)
plt.plot(x, cosx, 'r', label='cos')
plt.plot(x, sinx, 'go', label='sin')
plt.legend()
plt.show()
```



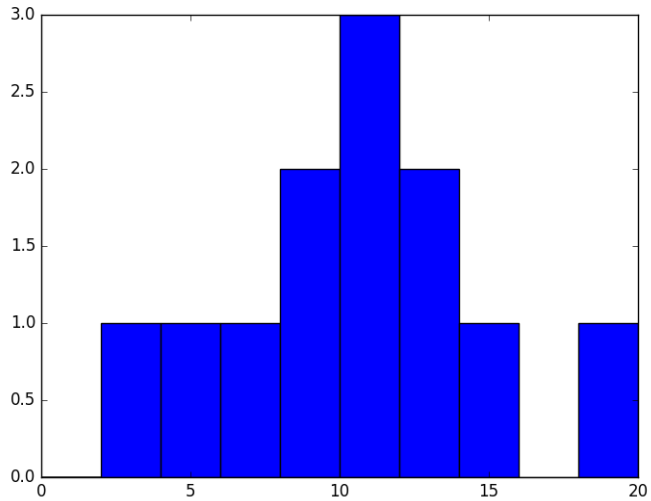
La fonction `matplotlib.pyplot.hist()`

Tracer des histogrammes : `matplotlib.pyplot.hist(x, bins, range)`

- `x` = valeurs à tracer
- optionnel : `bins` = nombre de barres
- optionnel : `range` = tuple `(x_minimal, x_maximal)`

Exemple :

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
notes = [13.5, 5.75, 10., 11.25,
         18., 7.5, 13., 8.75,
         10.5, 14., 9.25, 3.25]
plt.hist(notes, 10, (0, 20))
plt.show()
```



Tracer des fonctions de deux variables

Pour tracer une fonction $z(x, y)$ il faut d'abord créer un maillage (anglais : "meshgrid") pour représenter les binômes de coordonnées (x, y). Il convient de se servir de la fonction `numpy.meshgrid(x, y)`. Exemple :

```
import numpy as np

# 101 valeurs de x entre 0 et 10: [0.0 0.1 0.2 ... 10]
x = np.linspace(0, 10, 101)

# 10 valeurs de y,  3 <= y < 4: [3.0 3.1 3.2 ... 3.9]
y = np.arange(3.0, 4.0, 0.1)

X, Y = np.meshgrid(x, y)
```

Résultat : deux tableaux 10×101,

$$\mathtt{X} = \left.\begin{pmatrix} 0 & 0.1 & 0.2 & \dots & 10 \\ 0 & 0.1 & 0.2 & \dots & 10 \\ & & \dots & & \end{pmatrix}\right\} 10 \text{ lignes}, \quad \mathtt{Y} = \underbrace{\begin{pmatrix} 3 & 3 & \dots & 3 \\ 3.1 & 3.1 & \dots & 3.1 \\ \vdots & & & \vdots \\ 3.9 & 3.9 & \dots & 3.9 \end{pmatrix}}_{101 \text{ colonnes}}$$

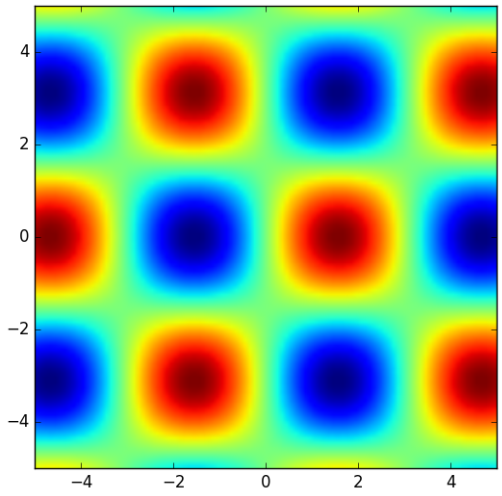
La fonction `matplotlib.pyplot.imshow()`

Tracer des cartes thermiques (heat map) : `matplotlib.pyplot.imshow(z, extent)`

- `z` = tableau 2D avec les valeurs de fonction
- argument facultatif : `extent` = liste avec les `x` et `y` minimales et maximales

Exemple :

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

x = y = np.linspace(-5, 5, 100)
X, Y = np.meshgrid(x, y)
z = np.sin(X) * np.cos(Y)
plt.imshow(z, extent=[-5,5,-5,5])
plt.show()
```



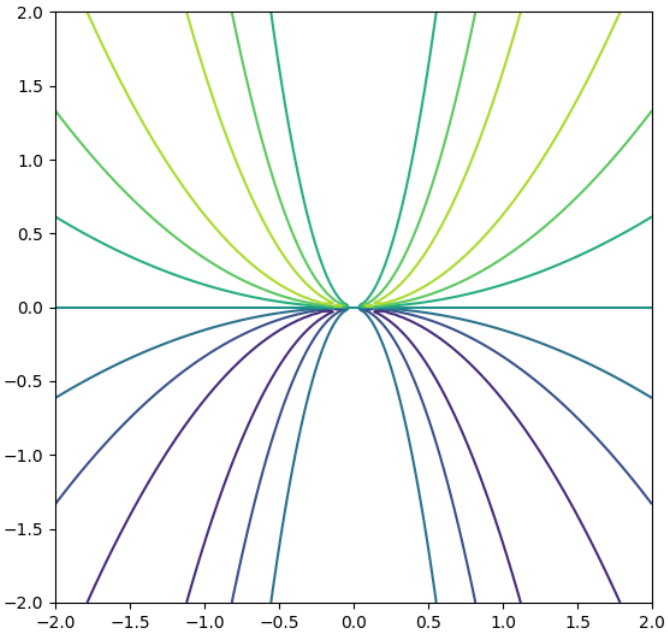
La fonction `matplotlib.pyplot.contour()`

Tracer des courbes de niveau : `matplotlib.pyplot.contour(x, y, z)`

- `z` = tableau 2D avec les valeurs de fonction
- arguments facultatifs : `x`, `y` = tableaux avec les `x` et `y` correspondants

Exemple :

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

def f(x, y):
  if x == 0 and y == 0:
    return 0.0
  return x**2 * y / (x**4 + y**2)
vf = np.vectorize(f)
x = y = np.linspace(-2, 2, 200)
X, Y = np.meshgrid(x, y)
Z = vf(X, Y)
plt.contour(X, Y, Z)
plt.show()
```



Recherche des zéros

Dans ce chapitre

Algorithmes

- Méthode de la bissection
- Méthode de relaxation
- Méthode de Newton
- Généralisations de la méthode de Newton

Zéros des fonctions

Problème : Etant donné une fonction réelle dont on sait qu'elle a un zéro sur l'intervalle $I = [a, b]$, on cherche une valeur approximative de ce zéro.

Plus formellement :

Soit $I = [a, b]$ un intervalle et $f : I \to \mathbb{R}$ continue (ou même dérivable si necessaire) sur I, avec $f(a)f(b) \leq 0$. Alors d'après le théorème des valeurs intermédiaires il existe $x_0 \in I$ tel que $f(x_0) = 0$. Si de plus f est monotone alors x_0 est unique.
Problème : déterminer (un des) x_0 numériquement avec une précision minimale donnée.

Théorème des valeurs intermédiares :
Soit $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ continue et soit y compris entre $f(a)$ et $f(b)$. Alors il existe $x \in [a, b]$ tel que $f(x) = y$.

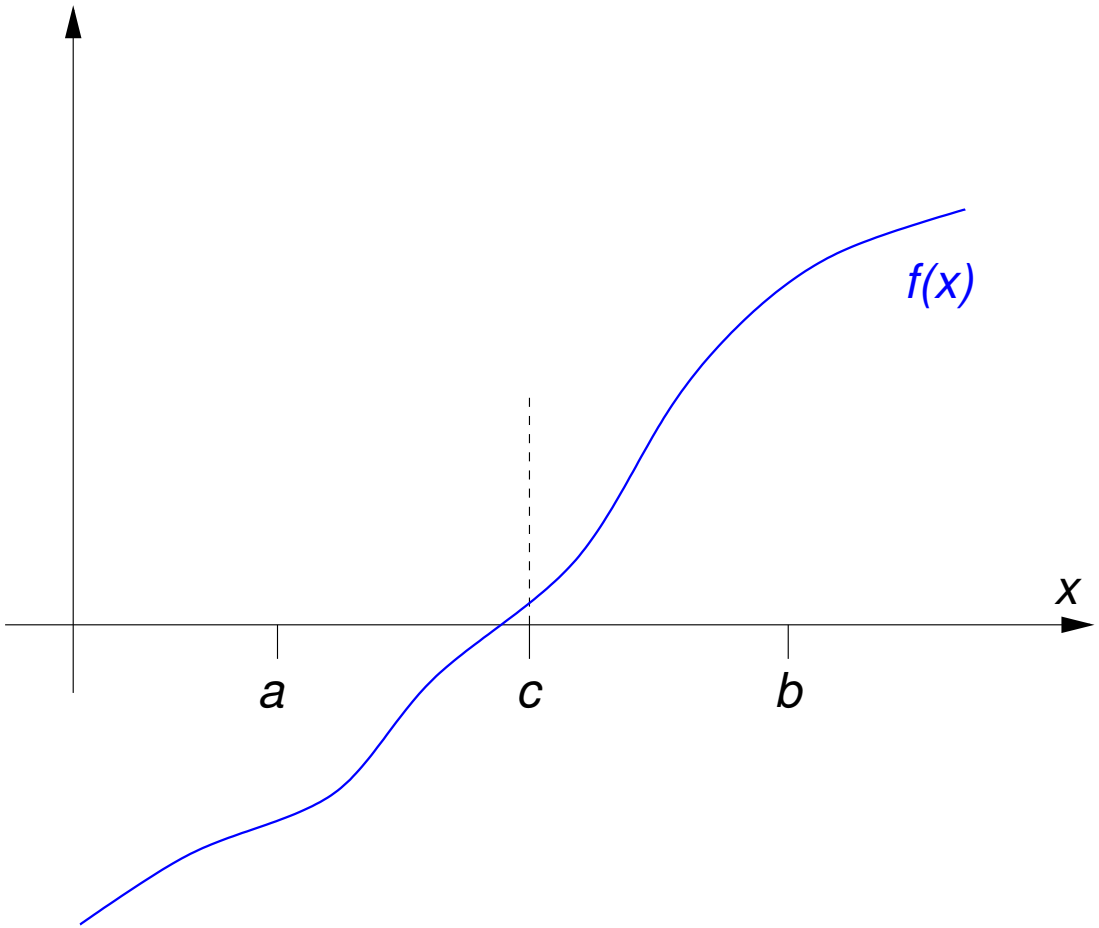
Méthode de la bissection

Soit $\epsilon > 0$ la précision souhaitée.

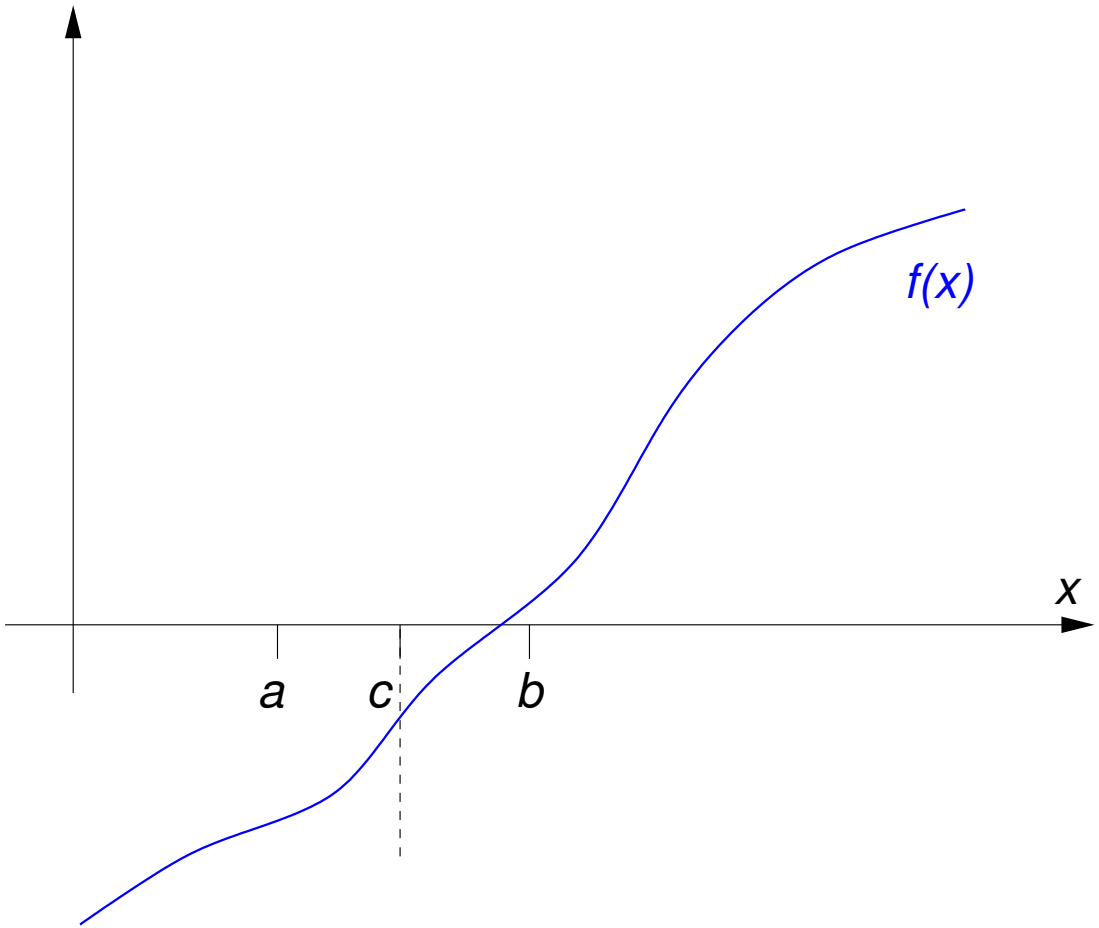
Algorithme :

1. Poser $c = (a + b)/2$, le milieu de l'intervalle I.
2. Si $b - a < 2\,\epsilon$: terminer et retourner $x_0 = c$.
3. Partager I en deux : $I_1 = [a,\, c]$ et $I_2 = [c,\, b]$.
4. Si $f(a)f(c) \leq 0$: il y a un zéro dans I_1, alors répéter avec $I = I_1$.
5. Sinon, répéter avec $I = I_2$.

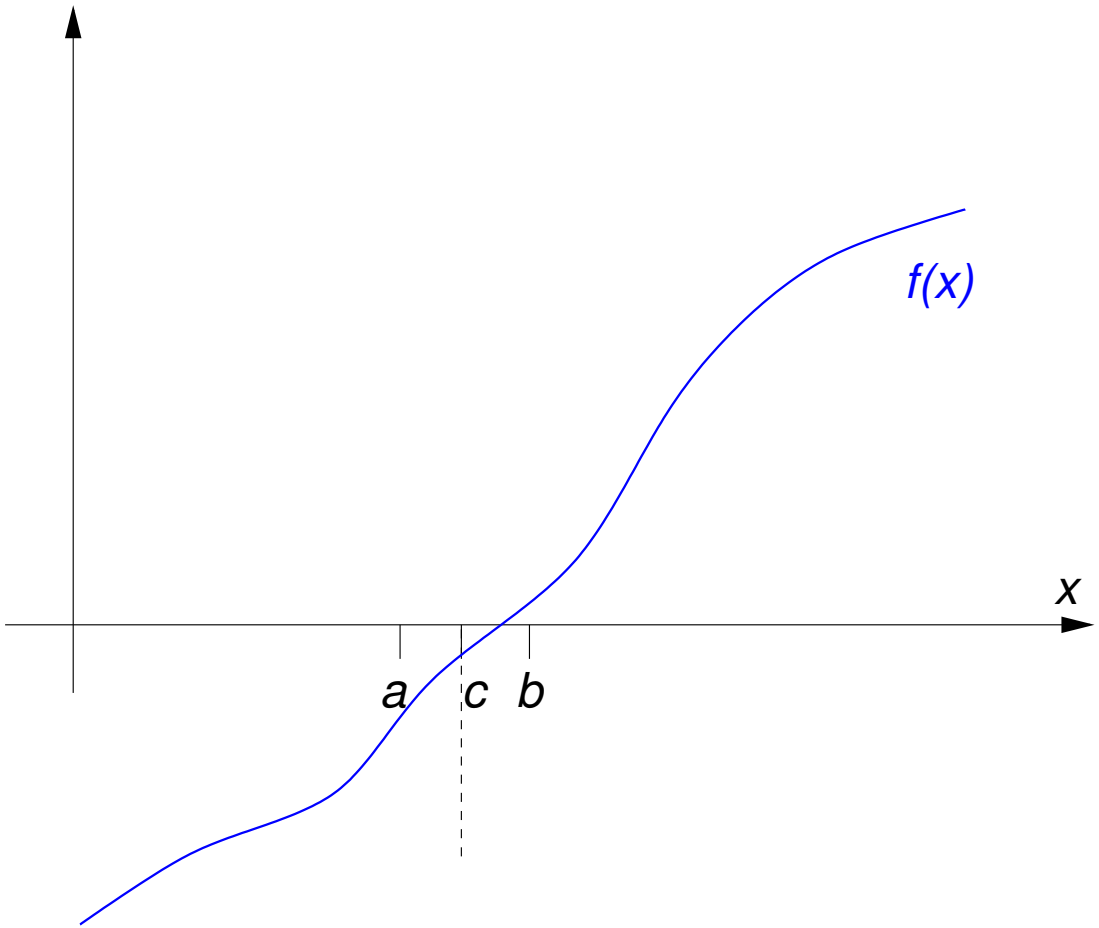
Méthode de la bissection



Méthode de la bissection



Méthode de la bissection



Implémentation en Python

Voici le code Python pour $f(x) = x^5 - x - 1$, $I = [1, 2]$, $\epsilon = 10^{-5}$:

```
def f(x):          # la fonction dont on cherche un zéro
    return x**5 - x - 1

a, b = 1.0, 2.0     # f(a) = -1 et f(b) = 29
                    #  => il y a un zéro dans [a, b]
c = (a + b) / 2     # point du milieu
epsilon = 1.0E-5    # tolérance

while b - a >= 2 * epsilon: # on est assez proche ? sinon:
    if f(a) * f(c) <= 0: # si zéro dans la moitié gauche:
        b = c               #  pt de droite <- pt du milieu
    else:                   # sinon:
        a = c               #  pt de gauche <- pt du milieu
    c = (a + b) / 2         # récalculer point du milieu

print("Le zéro est à x =", c)
```

Méthode de relaxation

Idée :

- Pour résoudre l'équation $f(x) = 0$, trouver une fonction $\phi(x)$ appropriée telle que

$$f(x) = 0 \;\Leftrightarrow\; \phi(x) = x$$

(il y a une infinité de choix pour ϕ — le succès de la méthode dépendra du choix).

- On cherche alors un point fixe x^* de la fonction ϕ.
- Essayer de trouver un point fixe par l'application repétée de la fonction ϕ sur un point de départ x_1 (qui est aussi au choix et doît être bien choisi pour que la méthode fonctionne)

$$\begin{aligned} x_2 &= \phi(x_1) \\ x_3 &= \phi(x_2) = \phi(\phi(x_1)) \\ x_4 &= \phi(x_3) = \phi(\phi(\phi(x_1))) \\ &\dots \\ \lim_{n \to \infty} x_n &\stackrel{?}{=} x^* \end{aligned}$$

Méthode de relaxation

Exemple :

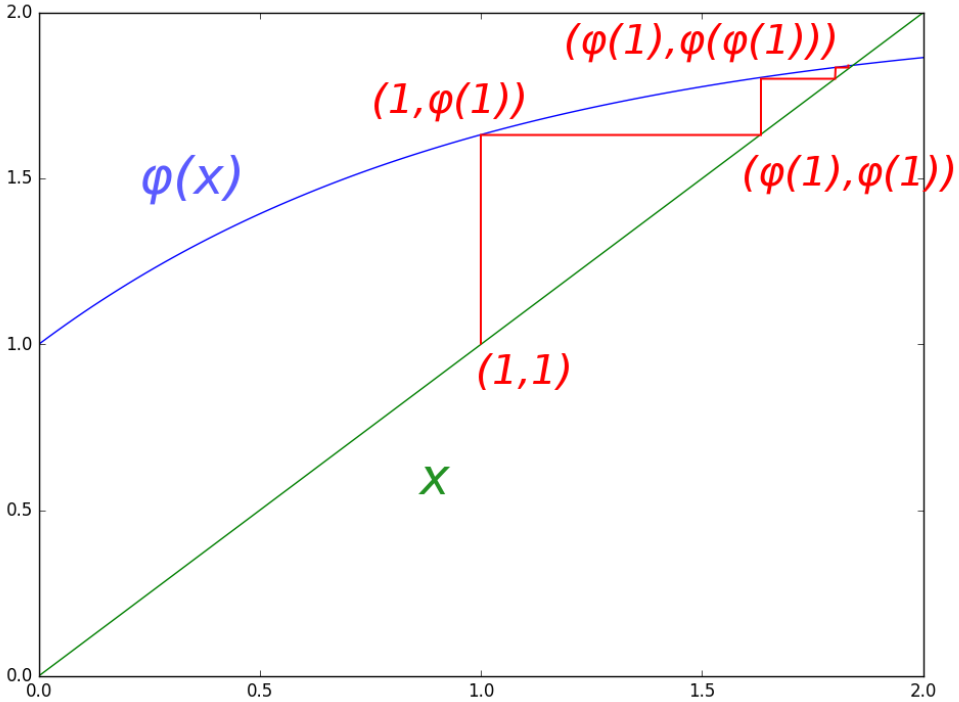
- On cherche un zéro x^* de la fonction $f(x) = 2e^x - xe^x - 1$.
- Équivalent : on cherche un point fixe x^* de la fonction $\phi(x) = 2 - e^{-x}$.
- Avec $x_1 = 1$ on trouve

$$
\begin{aligned}
x_2 &= \phi(x_1) = 1.63212 \\
x_3 &= \phi(x_2) = 1.80448 \\
&\dots \\
x_9 &= \phi(x_8) = 1.84141 \\
x_{10} &= \phi(x_9) = 1.84141 \\
x_{11} &= \phi(x_{10}) = 1.84141 \\
&\dots
\end{aligned}
$$

Conclusion : Pour $x^* \approx 1.84141$ on a

$$
\begin{aligned}
\phi(x^*) &= x^* \\
\Leftrightarrow \quad 2 - e^{-x^*} &= x^* \\
\Leftrightarrow \quad 2e^{x^*} - x^* e^{x^*} - 1 &= 0 \\
\Leftrightarrow \quad f(x^*) &= 0\,.
\end{aligned}
$$

Méthode de relaxation : Illustration



Condition suffisante pour la convergence : $|\phi'(x)| \leq k < 1$ partout ou bien : ϕ est une contraction.

Détails mathématiques

Théorème du point fixe :

Soit $I = [a, b]$ un intervalle, $0 \leq k < 1$, et $\phi : I \to I$ continue tel que $|\phi(x) - \phi(y)| \leq k|x - y| \quad \forall\, x, y \in I$ (on dit que ϕ est une contraction).

Alors il existe un point fixe unique $x^* \in I$.

De plus, une suite (x_n) dans I définie par un x_1 et par $x_{n+1} = \phi(x_n)$ convergera vers x^*.

Démonstration :

Soit $x_1 \in I$ quelconque et $x_{n>1}$ défini par récurrence : $x_{n+1} = \phi(x_n)$. On a $|x_{n+1} - x_n| \leq k^{n-1}|x_2 - x_1|$, donc

$$\begin{aligned} |x_{n+m} - x_n| \leq & |x_{n+1} - x_n| + |x_{n+2} - x_{n+1}| + \ldots + |x_{n+m} - x_{n+m-1}| \\ & \leq \left(k^{n-1} + k^n + \ldots + k^{n+m-1}\right) |x_2 - x_1| \\ & = k^{n-1} \frac{1 - k^m}{1 - k} |x_2 - x_1| \end{aligned}$$

Comme $k < 1$, l'expression dans la dernière ligne tend vers zero quand $n \to \infty$, alors les (x_n) forment une suite de Cauchy qui converge vers un x^*. On a $\phi(x^*) = x^*$ car ϕ est continue.

Méthode de Newton

Cas spécial : méthode de Newton

L'idée de la méthode de Newton est de linéariser f autour d'un point x_1, de trouver le zéro de la fonction tangente t_1 ainsi définie, et d'itérer :

- Poser
$$t_1(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1)$$
(= développement limité de f en x_1, alors $t_1(x) = f(x) + \mathcal{O}(|x - x_1|^2)$)
- Le zéro de $t_1(x)$ est à $x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$.
- Itérer cette procédure tant que la distance entre les deux valeurs consécutives x_n et x_{n+1} est $> \epsilon$. Quand $|x_{n+1} - x_n| < \epsilon$, terminer et renvoyer x_{n+1}.

D'après le théorème du point fixe, la suite des x_n convergera vers un point fixe x^* de la fonction auxiliaire $\phi : x \mapsto x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ (si cette dernière est une contraction).

Or $\phi(x^*) = x^*$, alors $\frac{f(x^*)}{f'(x^*)} = 0$, alors $f(x^*) = 0$.

Méthode de Newton

Zéro de la fonction f = point fixe de la fonction auxiliaire

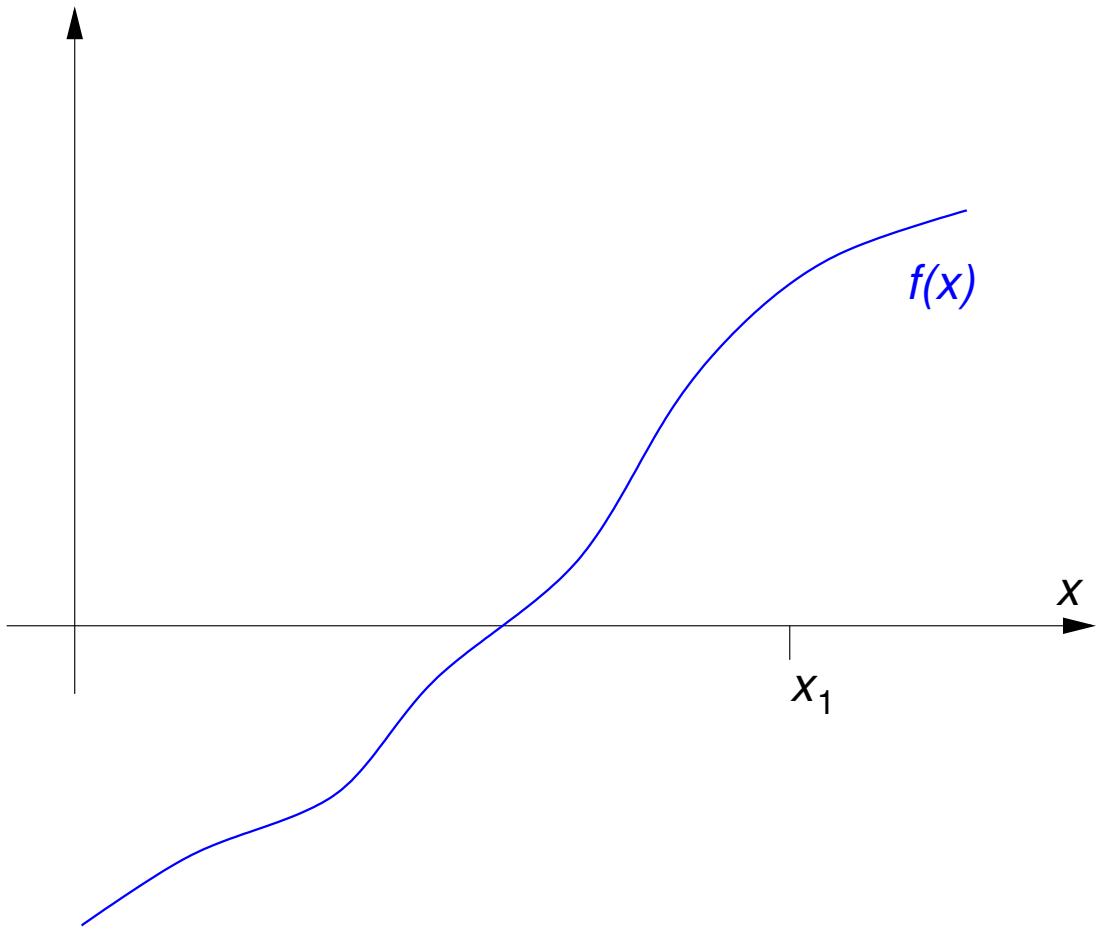
$$\phi : x \mapsto x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Remarques :

- Si f est deux fois dérivable et $f'(x) \neq 0 \; \forall \, x \in I$, alors $\phi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2}$.
- Dans ce cas : ϕ est une contraction $\Leftrightarrow \exists \, k < 1$ avec $|\phi'(x)| \leq k$, soit $\left| \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2} \right| \leq k$
  ("$\Leftarrow$" vient du théorème des accroissements finis, "$\Rightarrow$" de la définition de la dérivée)
- Pour que l'algorithme converge : Il est suffisant mais pas nécessaire que ϕ soit une contraction.

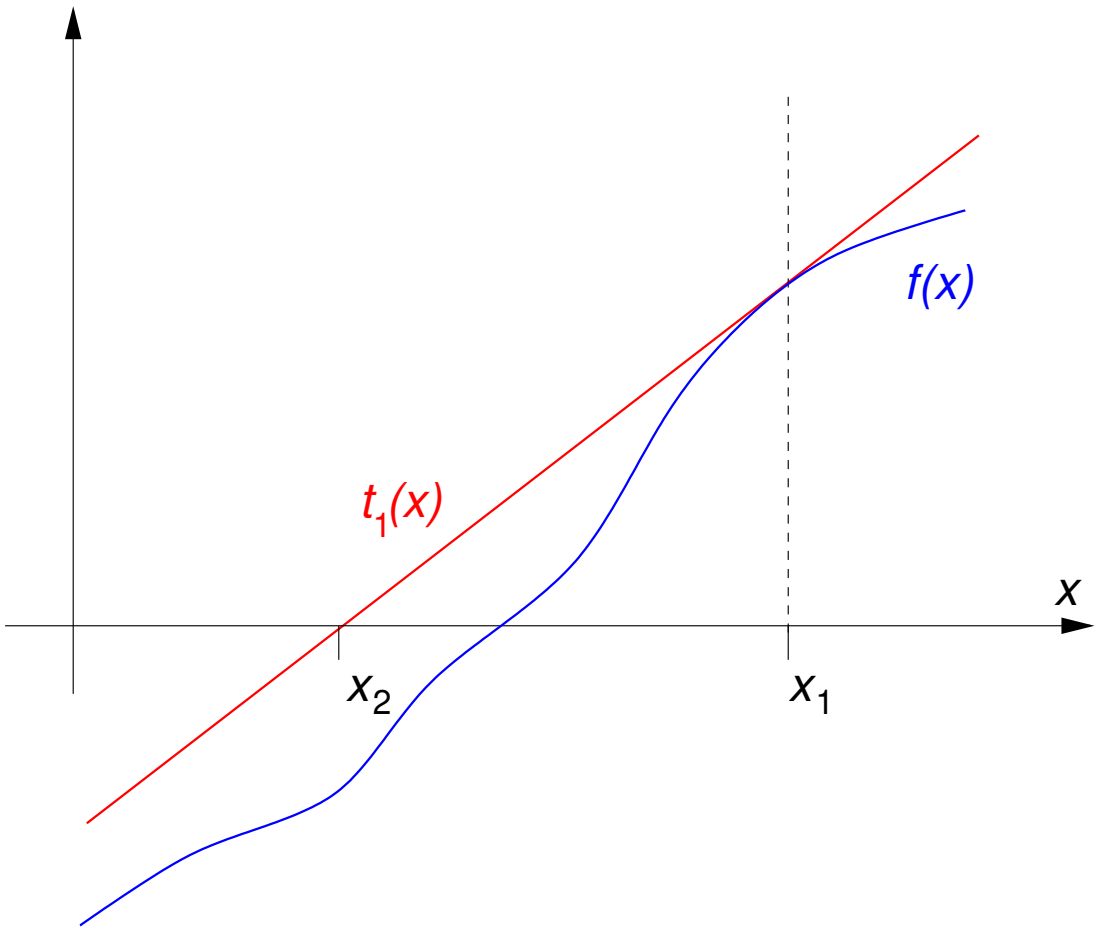
  Etablir un critère suffisant et nécessaire peut être très difficile voire impossible en pratique, voir exercices sur le cas complexe.
- Evidemment il faut bien choisir le point de départ (un extremum de f, par exemple, serait un très mauvais choix — pourquoi ?)

Méthode de Newton



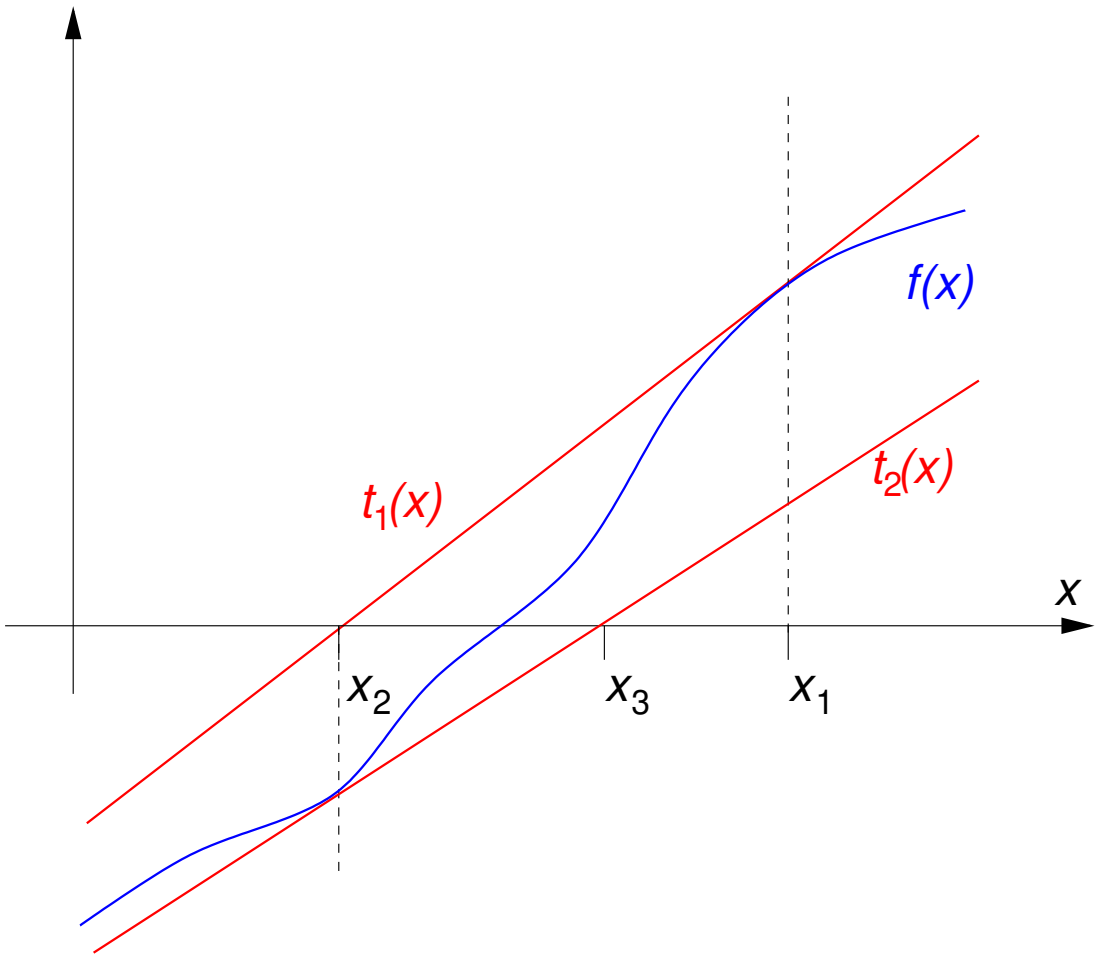
$$t_n(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

Méthode de Newton



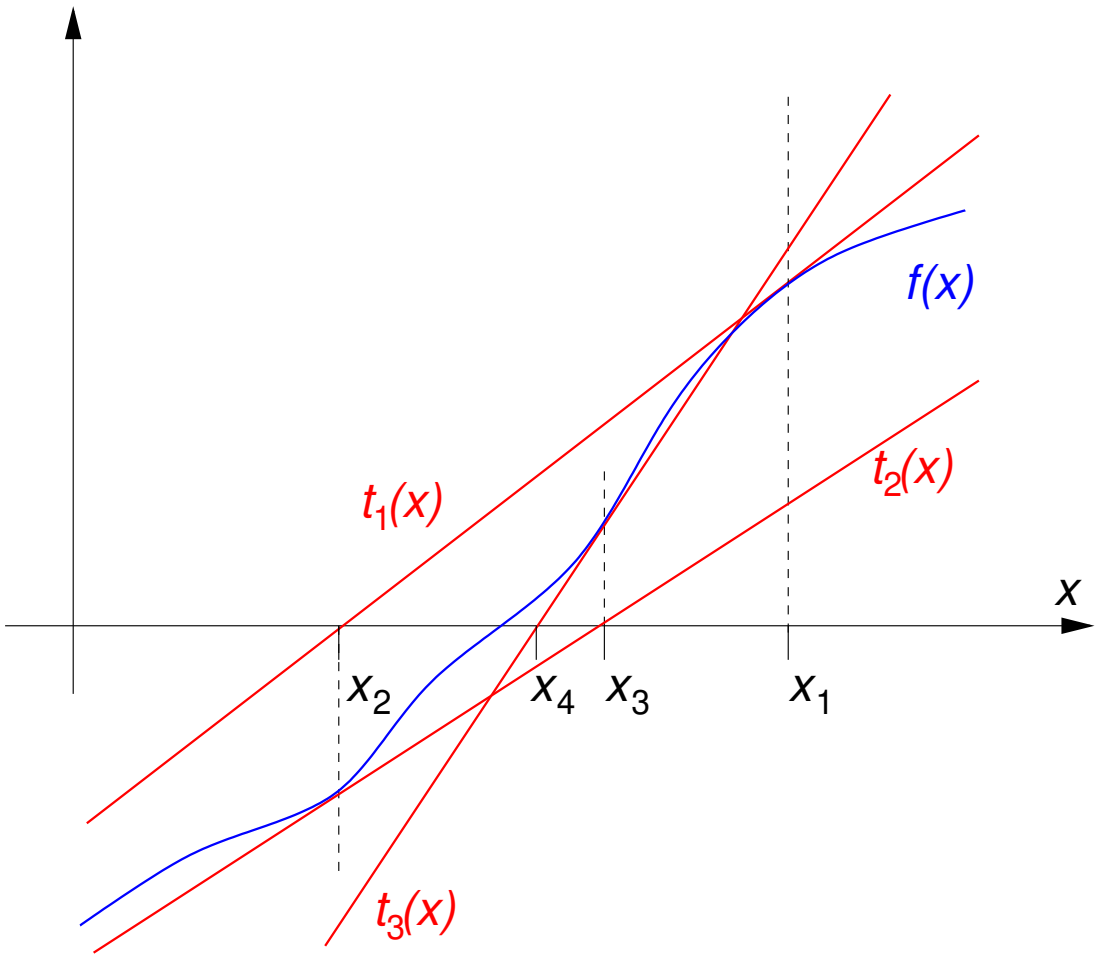
$$t_n(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

Méthode de Newton



$$t_n(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

Méthode de Newton



$$t_n(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

Méthode de Newton

Algorithme :

1. Partir avec x au choix (mais choisi de manière réfléchie : aussi proche du zéro que possible, pas un point critique...)
2. Remplacer $x_{\text{ancien}} \leftarrow x, \qquad x \leftarrow x - \frac{f(x)}{f'(x)}$.
3. Si $|x - x_{\text{ancien}}| < \epsilon$, on est suffisamment proche du zéro : terminer et renvoyer x. Sinon, répéter.

Pour tester la convergence, d'autres critères sont envisageables (par exemple, est-ce que $|f(x)| < \epsilon$?) en fonction du problème sous étude.

Méthode de Newton

Exemple :

On cherche un zéro de la fonction $f : x \mapsto x^5 - x - 1$ dont la dérivée est $f' : x \mapsto 5\,x^4 - 1$. La précision souhaitée est $\epsilon = 10^{-5}$ et le point de départ sera $x_0 = 1$.

```
def f(x):
    return x**5 - x - 1

def df(x):
    return 5 * x**4 - 1

epsilon = 1.E-5
x = 1.
x_ancien = x + 2 * epsilon  # valeur initiale pas importante

while abs(x - x_ancien) > epsilon:
    x_ancien = x
    x = x - f(x) / df(x)

print("Le zéro est à x =", x)
```

Il est souvent une bonne idée de limiter le nombre d'itérations pour éviter des boucles infinies (au cas où la méthode ne converge pas avec le point de départ choisi).

Méthode de la sécante

Pour appliquer la méthode de Newton, il faut connaître la dérivée de la fonction f, de préférence analytiquement.

Sinon : approximer la dérivée par le taux d'accroissement

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Au point $x = x_n$ avec $h = x_n - x_{n-1}$:

$$f'(x_n) = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} + \mathcal{O}\left(|x_n - x_{n-1}|\right)$$

Insérer $f'(x_n)$ dans la formule de récurrence de la méthode de Newton $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$, en supprimant le terme $\mathcal{O}\left(|x_n - x_{n-1}|\right)$:

$$\boxed{x_{n+1} = x_n - f(x_n) \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}}$$

Méthode de la sécante.

Algorithme :

- Commencer par deux points au choix x_0 et x_1 ; poser $n = 1$.
- Calculer x_{n+1} avec la formule de récurrence ci-dessus.
- Itérer avec $n \leftarrow n + 1$; quand $|x_{n+1} - x_n|$ est suffisamment petit, terminer et renvoyer x_{n+1}.

Comparaison des méthodes

La table suivante montre l'erreur absolu après n itérations pour le zéro de $x^5 - x - 1$ (avec le choix $\phi(x) = (x+1)^{1/5}$ pour la méthode de relaxation) :

Itérations	Bissection	Relaxation	Newton
1	-8.27e-02	-7.84e-02	-4.66e-01
2	4.23e-02	-8.33e-03	-2.06e-01
3	-2.02e-02	-8.96e-04	-5.63e-02
4	1.11e-02	-9.65e-05	-5.43e-03
5	-4.57e-03	-1.04e-05	-5.59e-05
6	3.24e-03	-1.12e-06	-6.01e-09

On voit que la méthode de Newton a besoin de beaucoup moins d'itérations que les deux autres. Le gain du temps n'est pas signifiant pour cet exemple (implémentation pas optimisée, fonction f pas très compliquée). Voici le temps en secondes requis sur un ordinateur portable générique pour atteindre une précision fixe :

Precision	Bissection	Relaxation	Newton
1.00e+00	5.51e-07	3.17e-07	4.48e-07
1.00e-02	2.47e-06	5.24e-07	1.40e-06
1.00e-04	4.71e-06	7.45e-07	1.64e-06
1.00e-06	6.57e-06	9.51e-07	1.87e-06

Généralisations de la méthode de Newton

- La méthode peut être appliquée sans modifications pour des fonctions complexes. Les domaines de convergence vers les zéros forment des structures géométriques intéressantes : les "fractales de Newton" $\rightarrow$ exercices.
- Méthode de Halley : basée sur l'itération

$$x_{n+1} = x_n - \frac{2\, f(x_n)\, f'(x_n)}{2\, f'(x_n)^2 - f(x_n)\, f''(x_n)}$$

  pour des fonctions au moins deux fois dérivables. Converge plus rapidement que la méthode de Newton, mais nécéssite l'évaluation de la dérivée seconde.
- Méthodes de Householder : Soit f k-fois dérivable avec des dérivées continues. On itère

$$x_{n+1} = x_n + k\, \left. \frac{\frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} \left(\frac{1}{f(x)} \right)}{\frac{d^k}{dx^k} \left(\frac{1}{f(x)} \right)} \right|_{x=x_n}$$

  Pour $k = 1$ on retrouve la méthode de Newton, pour $k = 2$ celle de Halley.

La méthode de Newton n-dimensionnelle

Étant donnée une fonction $\vec{f}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, un zéro de $\vec{f}$ peut être trouvé par la généralisation de la méthode de Newton : on itére

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - J^{-1}(\vec{x}_n)\,\vec{f}(\vec{x}_n)$$

où J est la matrice jacobienne des dérivées de $\vec{f}$,

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

et J^{-1} est son inverse. Voir le chapitre sur l'ajustement plus tard pour une application.

Application : Structure de bandes dans le modèle de Kronig-Penney, voir notebook kronig-penney.ipynb

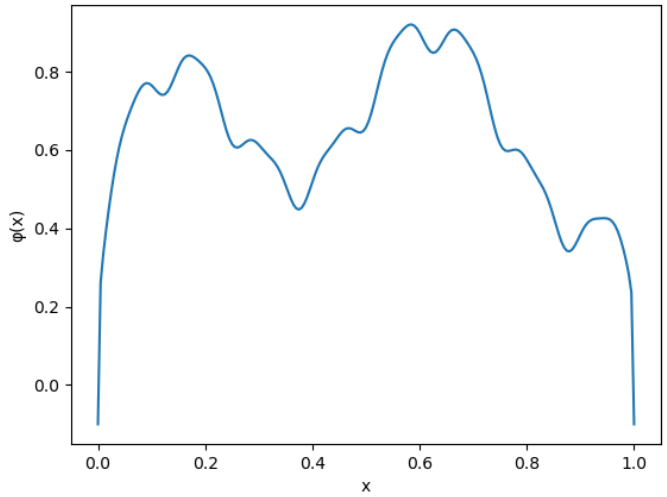
Transformation de Fourier discrète

Rappel : Série de Fourier

La **série de Fourier** est d'importance centrale pour la physique quantique, l'acoustique, l'électronique, la traitement de signal et d'images, la compression de données. . .

On étudie une fonction $\phi(x)$ sur l'intervalle $I \subset \mathbb{R}$.

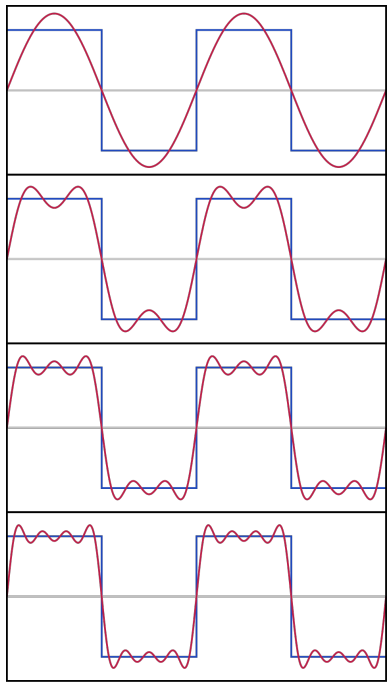
Supposons que $I = [0, 1]$ (sinon changement de variables).



Rappel : Série de Fourier

ϕ est décomposée en fonctions trigonométriques $\sin(2\pi nx)$, $\cos(2\pi nx)$ ou bien exponentielles complexes $\exp(2\pi i\, nx) = \cos(2\pi\, nx) + i \sin(2\pi\, nx)$:

$$\phi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(2\pi i\, nx\right) .$$



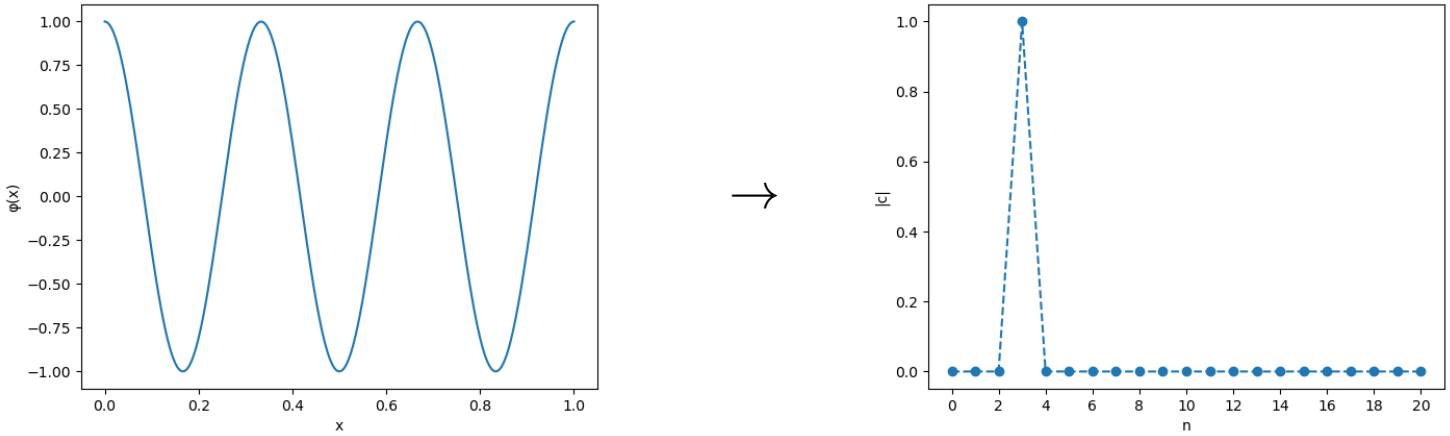
Calcul des coefficients :

$$c_n = \int_0^1 \mathrm{d}x\ \phi(x) e^{-2\pi i\, nx}$$

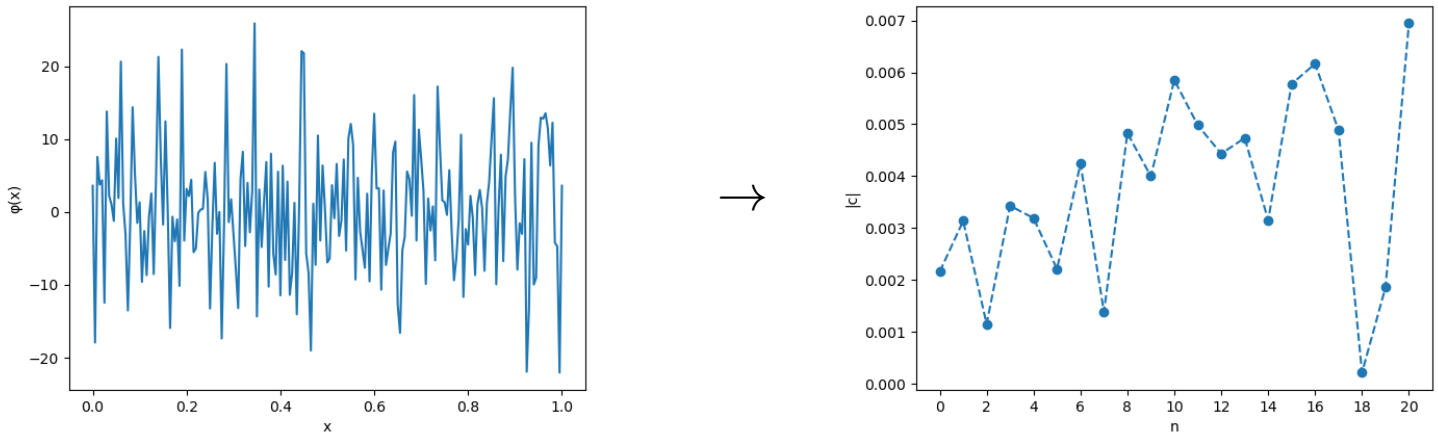
Rappel : Série de Fourier

La décomposition de Fourier d'un signal permet d'étudier ses fréquences.

Ainsi, un signal sinusoïdal (dominé par une seule fréquence) donne un pic marqué



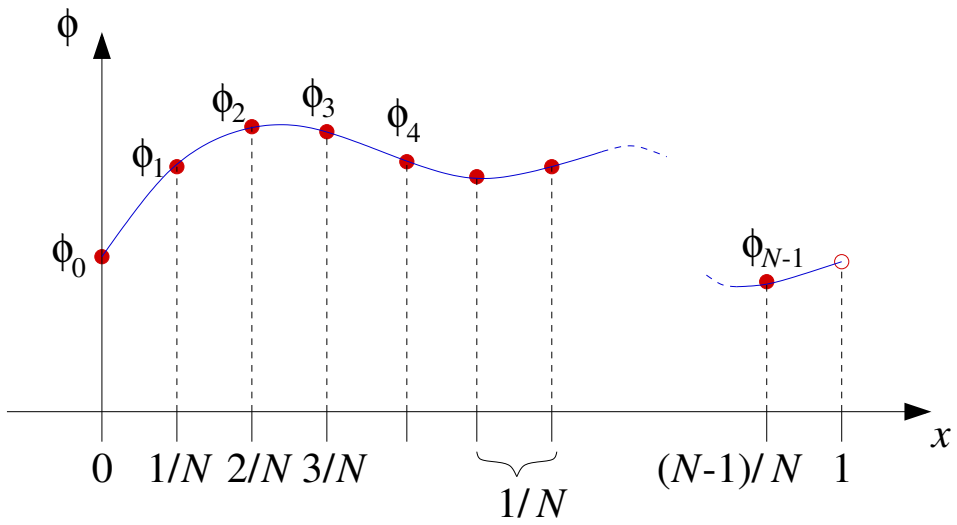
tant qu'un signal bruité donne un spectre bruité



Transformation de Fourier discrète

Calcul numérique des coefficients de Fourier, étant donné les valeurs de ϕ à N points $x = m/N$ entre 0 et 1 :

$$\phi_0 = f(0), \quad \phi_1 = \phi(1/N), \quad \phi_2 = \phi(2/N), \quad \ldots \quad \phi_{N-1} = \phi((N-1)/N)$$



L'intégrale est approximée par une somme de Riemann discrète,

$$c_n = \int_0^1 \mathrm{d}x\, \phi(x) e^{-2\pi i\, nx} \approx \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} \phi_m e^{-2\pi i n \frac{m}{N}}$$

Transformation de Fourier discrète

Transformation de Fourier discrète :
données d'entrée = un vecteur $\vec{\phi}$ à N composantes
données de sortie = un vecteur $\vec{c}$ (on supprime la normalisation $1/N$)

$$\vec{\phi} \rightarrow \vec{c}, , \qquad c_n = \sum_{m=0}^{N-1} e^{-i\frac{2\pi nm}{N}} \phi_m$$

Équivalent : transformation matricielle

$$\vec{\phi} \rightarrow \vec{c} = F\vec{\phi}$$

avec la matrice de Fourier, $F_{nm} = \omega^{nm}$, $\omega = e^{-2\pi i/N}$:

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \omega^3 & \omega^4 & \cdots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 & \omega^8 & \cdots & \omega^{2(N-1)} \\ 1 & \omega^3 & \omega^6 & \omega^9 & \omega^{12} & \cdots & \omega^{3(N-1)} \\ 1 & \omega^4 & \omega^8 & \omega^{12} & \omega^{16} & \cdots & \omega^{4(N-1)} \\ \vdots & \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{N-1} & \cdots & & & \cdots & \omega^{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}$$

Transformation de Fourier discrète

$$\vec{\phi} \to \vec{c} = F\vec{\phi}, \qquad F_{nm} = \left(e^{-2\pi i/N}\right)^{nm}$$

Analyse d'algorithme

Comptons le nombre de multiplications et additions que l'ordinateur doit effectuer pour un calcul direct de la TFD.

Multiplication d'un vecteur à N composantes $\vec{\phi}$ par une matrice de Fourier $N \times N$:

- N composantes de $\vec{c}$ à calculer
- chaque composante nécessite N multiplications et additions
- nombre total d'opérations $= \alpha\, N^2$, avec $\alpha =$ constante indépendante de N

Vu que N peut être assez grand dans des applications réalistes : peut-on trouver un algorithme plus efficace pour faire le même calcul ?

Transformation de Fourier rapide

Algorithme de (Gauss-)Cooley-Tukey

Au lieu d'une multiplication matricielle explicite : un algorithme récursif de type "divide and conquer" (diviser et régner).

Supposons que N soit pair. Séparons la somme en indices pairs et impairs :

$$c_n = \left(F\vec{\phi}\right)_n = \sum_{m=0}^{N-1} e^{-i\frac{2\pi nm}{N}}\phi_m = \underbrace{\sum_{j=0}^{N/2-1} e^{-i\frac{2\pi n(2j)}{N}}\phi_{2j}}_{m=2j \text{ pair}} + \underbrace{\sum_{l=0}^{N/2-1} e^{-i\frac{2\pi n(2l+1)}{N}}\phi_{2l+1}}_{m=2l+1 \text{ impair}}$$

$$= \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{-i\frac{2\pi nj}{N/2}}\phi_{2j} + e^{-2\pi in/N}\sum_{l=0}^{N/2-1} e^{-i\frac{2\pi nl}{N/2}}\phi_{2l+1}$$

On reconnaît la transformée de Fourier discrète du vecteur $\vec{\phi}^{(p)}$ (des composantes de $\vec{\phi}$ avec indices pairs)
et, au facteur $e^{-2\pi in/N}$ près, celle du vecteur $\vec{\phi}^{(i)}$ (des composantes de $\vec{\phi}$ avec indices impairs) :

$$\left(F\vec{\phi}\right)_n = \left(F\vec{\phi}^{(p)}\right)_n + e^{-2\pi in/N}\left(F\vec{\phi}^{(i)}\right)_n$$

Algorithme de (Gauss-)Cooley-Tukey

Pour $N = 2^q$ une puissance de 2, calcul de la TFD d'un vecteur $\vec{\phi}$ à N composantes :

1. Si $N = 1$ $(q = 0)$: renvoyer le "vecteur" à une composante (ϕ_0).
2. Si $N \geq 2$:
   - Construire les deux vecteurs à $N/2$ composantes $\vec{\phi}^{(p)}$ et $\vec{\phi}^{(i)}$.
   - Calculer leurs TFD récursivement.
   - Renvoyer un vecteur à N composantes données par $\left(F\vec{\phi}^{(p)}\right)_n + e^{-2\pi i n/N}\left(F\vec{\phi}^{(i)}\right)_n$.

     Ici $0 \leq n \leq N-1$: l'indice n dans les vecteurs à $N/2$ composantes $F\vec{\phi}^{(p)}$ et $F\vec{\phi}^{(i)}$ doit se comprendre mod$(N/2)$.

Si N n'est pas une puissance de 2 : le plus simple est d'ajouter des zéros à la fin du signal avant de commencer (mais il y a aussi des modifications plus efficaces de la méthode)

Transformation de Fourier rapide

Exemple

On prend $N = 4$ pour illustrer l'algorithme. On cherche alors la TFD du vecteur $\vec{\phi} = (\phi_0, \phi_1, \phi_2, \phi_3)$.

- Au premier niveau de récurrence, $\vec{\phi}^{(p)} = (\phi_0, \phi_2)$ et $\vec{\phi}^{(i)} = (\phi_1, \phi_3)$.
- On calcule la TFD de $\vec{\phi}^{(p)} = (\phi_0, \phi_2)$:
  - Au deuxième niveau de récurrence, $\vec{\phi}^{(p)^{(p)}} = (\phi_0)$ et $\vec{\phi}^{(p)^{(i)}} = (\phi_2)$.
  - Au troisième niveau, leurs TFD sont (ϕ_0) et (ϕ_2) respectivement.
  - La TFD de $\vec{\phi}^{(p)} = (\phi_0, \phi_2)$ est donc $(\phi_0 + \phi_2, \phi_0 + e^{-2\pi i/2}\phi_2) = (\phi_0 + \phi_2, \phi_0 - \phi_2)$.
- On calcule la TFD de $\vec{\phi}^{(i)} = (\phi_1, \phi_3)$:
  le calcul est identique, le résultat sera alors $(\phi_1 + \phi_3, \phi_1 - \phi_3)$.
- Le résultat final est

$$F\vec{\phi} = \begin{pmatrix} \phi_0 + \phi_2 + \phi_1 + \phi_3 \\ \phi_0 - \phi_2 + e^{-2\pi i\,\frac{1}{4}}(\phi_1 - \phi_3) \\ \phi_0 + \phi_2 + e^{-2\pi i\,2/4}(\phi_1 + \phi_3) \\ \phi_0 - \phi_2 + e^{-2\pi i\,3/4}(\phi_1 - \phi_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_0 + \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 \\ \phi_0 - i\phi_1 - \phi_2 + i\phi_3) \\ \phi_0 - \phi_1 + \phi_2 - \phi_3 \\ \phi_0 + i\phi_1 - \phi_2 - i\phi_3 \end{pmatrix}$$

Transformation de Fourier rapide

Toujours en supposant que $\vec{\phi}$ soit un vecteur à $N = 2^q$ composantes :

```
def fft(phi): # "fast Fourier transform" ou TFD rapide
    N = len(phi)
    if N == 1:
        return phi
    phi_p = phi[::2]  # les composantes avec indices pairs
    phi_i = phi[1::2] # les composantes avec indices impairs
    Fphi_p = fft(phi_p) # calcul récursif de la TFD
    Fphi_i = fft(phi_i)
    racines = np.exp(-2 * np.pi * 1j * np.arange(N//2) / N)
    c = np.empty((N), dtype=complex)
    c[:N//2] = Fphi_p + racines * Fphi_i
    c[N//2:] = Fphi_p - racines * Fphi_i
    return c
```

Ici `racines` représente les premières $(N/2)$ racines N-ièmes de l'unité $e^{-2\pi in/N}$.
Dans la ligne `c[N//2:] = Fphi_p - racines * Fphi_i`, on a utilisé le fait que

$$e^{-2\pi i(n-N/2)/N} = e^{\pi i} e^{-2\pi in/N} = -e^{-2\pi in/N}$$

Transformation de Fourier rapide

Analyse d'algorithme

Combien de opérations arithmétiques et branchements l'ordinateur doit-il effectuer pour faire tourner cet algorithme ?

- Pour $N = 2^q$: $q = \log_2 N$ niveaux de récursion
- À chaque niveau de récursion : le nombre d'opérations est $\propto N$ en moyenne
- Ensemble : nombre total d'opérations $= \alpha' \, N \log N$, avec $\alpha' =$ constante indépendante de N.

À comparer avec le calcul direct de la TFD par une multiplication matricielle : αN^2 opérations. La transformation de Fourier rapide est beaucoup plus efficace.

Le gain de temps de calcul peut être très important pour des grands N.

P.ex. si $N = 2^{20} \approx 10^6$: il faudra des heures pour $N^2 \approx 10^{12}$ opérations sur un ordinateur standard, une fraction d'une seconde pour $N \log N \approx 10^7$ opérations.

. . . et cette valeur de N n'est pas extraordinairement grande : $N = 10^6 \approx$ 20 sec. d'audio (échantillonnage 44.1 kHz)

Transformation de Fourier rapide dans SciPy

À préférer pour des grands projets de physique numérique : les routines inclus dans la bibliothèque `scipy.fft`

```
import numpy as np
import scipy.fft

signal = np.loadtxt("signal.txt")

fourier = scipy.fft.fft(signal)
```

`fft` = “fast Fourier transform”. Fonctionne pour une longueur quelconque des données d’entrée. Méthode = une variante de l’algorithme Cooley-Tukey.

Transformation de Fourier rapide

Application : TFD d'un signal audio, voir notebook fft.ipynb

Calcul matriciel et algèbre linéaire numérique

Dans ce chapitre

Généralités

- Systèmes d'équations linéaires
- Décompositions matricielles
- Diagonalisation numérique

Algorithmes

- La méthode de Gauss

Résoudre un système d'équations linéaires

On cherche une solution des n équations linéaires à n inconnues x_n

$$
\begin{aligned}
a_{11}\,x_1 + a_{12}\,x_2 + \ldots + a_{1n}\,x_n &= b_1 \\
a_{21}\,x_1 + a_{22}\,x_2 + \ldots + a_{2n}\,x_n &= b_2 \\
&\ldots \\
a_{n1}\,x_1 + a_{n2}\,x_2 + \ldots + a_{nn}\,x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

L'algorithme de Gauss

L'algorithme de Gauss est une méthode pour résoudre ces systèmes d'équations linéaires. En notation matricielle :

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Regardons la matrice $n \times (n+1)$ suivante :

$$M = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

Observation : La solution $(x_1, \ldots, x_n)$ du système est inchangée par les transformations élémentaires :

- échange de deux lignes de M
- multiplication d'une ligne de M par un nombre $\neq 0$
- ajout d'une ligne de M à une autre

L'algorithme de Gauss

Par une suite de transformations élémentaires, on transforme M en forme triangulaire supérieure :

$$M' = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & \cdots & a'_{1,n-1} & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & a'_{22} & \cdots & \cdots & a'_{2,n-1} & a'_{2n} & b'_2 \\ 0 & 0 & \ddots & \cdots & a'_{3,n-1} & a'_{3n} & b'_3 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a'_{n-1,n-1} & a'_{n-1,n} & b'_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & a'_{nn} & b'_n \end{pmatrix}$$

Ici $a'_{ij} = 0$ si $i > j$.

L'algorithme de Gauss

Pour transformer M en matrice triangulaire supérieure :

1. Si la matrice ne contient qu'une seule ligne, rien à faire : terminer.
2. S'il y a au moins un coefficient non nul dans la première colonne :
   - Si $a_{11} = 0$, échanger la première ligne avec une autre dont le premier coefficient est $\neq 0$. On appellera a_{11} le coefficient pivot, il est désormais $\neq 0$.
   - Éliminer tous les coefficients a_{k1} de la première colonne au-dessous du pivot : Ajouter $(-a_{k1}/a_{11})$ fois la première ligne à la k-ème ligne.
3. Répéter à partir de 1. avec la sous-matrice de M que l'on obtient en supprimant la première ligne et la première colonne.

En pratique, on choisit souvent comme pivot le plus grand coefficient de chaque colonne, pour minimiser les erreurs d'arrondi. Pour nous il suffira de choisir un élément quelconque (non nul).

L'algorithme de Gauss

On a maintenant transformé M en forme triangulaire supérieure,

$$M' = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1,n-1} & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & a'_{22} & \cdots & a'_{2,n-1} & a'_{2n} & b'_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a'_{n-1,n-1} & a'_{n-1,n} & b'_{n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a'_{nn} & b'_n \end{pmatrix}$$

sans avoir changé la solution $(x_1, \ldots, x_n)$. Ensuite on calcule successivement les x_i :

- $x_n = b'_n / a'_{nn}$
- $x_{n-1} = (b'_{n-1} - a'_{n-1,n} x_n)/a'_{n-1,n-1}$, avec x_n déjà connu
- ...
- $x_i = \left(b'_i - \sum_{k>i} a'_{ik} x_k\right) / a'_{ii}$, avec les x_k pour $k > i$ déjà connus
- ...
- $x_1 = \left(b'_1 - \sum_{k>1} a'_{1k} x_k\right) / a'_{11}$, avec les x_k pour $k > 1$ déjà connus

Si un des a'_{ii} est zéro, il n'y a pas de solution, sauf si le numérateur $b'_i - \sum_{k>i} a'_{ik} x_k$ est aussi zéro (dans ce cas la solution pour x_i n'est pas unique).

L'algorithme de Gauss

Exemple : On cherche la solution $\vec{x}$ du système d'équations $A\vec{x} = \vec{b}$ avec

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ -1 & 1 & 2 & 2 \\ 0 & 3 & -2 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ -3 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Au début :

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & -3 \\ -1 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 3 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- Première colonne : le pivot est 2. On ajoute donc $(-1/2)$-fois la première ligne à la deuxième et $(1/2)$-fois la première ligne à la troisième. Pour la quatrième ligne il n'y a rien à faire.

L'algorithme de Gauss

$$M' = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & \frac{7}{2} & -3 \\ 0 & 3 & 1 & \frac{5}{2} & 2 \\ 0 & 3 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- Deuxième colonne : on ne peut pas prendre 0 comme pivot. Alors on échange d'abord la deuxième ligne avec la troisième :

$$M' = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & \frac{5}{2} & 2 \\ 0 & 0 & 4 & \frac{7}{2} & -3 \\ 0 & 3 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

  Puis, rien à faire pour la troisième ligne. Ajouter (-1)-fois la deuxième à la quatrième pour éliminer M'_{42}.

L'algorithme de Gauss

$$M' = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & \frac{5}{2} & 2 \\ 0 & 0 & 4 & \frac{7}{2} & -3 \\ 0 & 0 & -3 & -\frac{5}{2} & -2 \end{pmatrix}$$

- Troisième colonne : le pivot est 4. Ajouter $(3/4)$ de la troisième ligne à la quatrième :

$$M' = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & \frac{5}{2} & 2 \\ 0 & 0 & 4 & \frac{7}{2} & -3 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{8} & -\frac{17}{4} \end{pmatrix}$$

Maintenant M' est triangulaire supérieure et on peut calculer la solution $\vec{x}$:

- $\frac{1}{8}\, x_4 = -\frac{17}{4} \qquad \Rightarrow \; x_4 = -34$
- $4\, x_3 + \frac{7}{2}\, x_4 = 4\, x_3 - 119 = -3 \qquad \Rightarrow \; x_3 = 29$
- $3\, x_2 + x_3 + \frac{5}{2}\, x_4 = 3\, x_2 + 29 - 85 = 2 \qquad \Rightarrow \; x_2 = \frac{58}{3}$
- $2\, x_1 + 4\, x_2 - 2\, x_3 + x_4 = 2\, x_1 + \frac{232}{3} - 58 - 34 = 0 \qquad \Rightarrow \; x_1 = \frac{22}{3}$

L'algorithme de Gauss

Une procédure auxiliaire :

```
import numpy as np

# Transforme une matrice n*(n+1) en forme triang. supérieure
def triangulariser(M):
  n = M.shape[0]       # le nombre de lignes
  for i in range(n):  # boucle sur les premières n colonnes
    for k in range(i, n): # chercher pivot sous la diagonale
      if M[k, i] != 0:          # pivot trouvé dans ligne k ?
        M[[i, k], :] = M[[k, i], :] # échanger lignes i et k
        pivot = M[i, i]                # mémoriser pivot
        break                          # quitter boucle sur k
    else:  # tous les éléments sous la diagonale étaient 0 ?
      continue    # alors rien à faire pour cette colonne
    for k in range(i+1, n): # éliminer tout sous la diag.:
      facteur = -M[k, i]/pivot       # ajouter (facteur)
      M[k, :] += facteur * M[i, :]   #      *(ligne du pivot)
                                     #   à la ligne k.
```

L'algorithme de Gauss

```
def gauss(A, b): # trouver la solution x de Ax = b
  n = A.shape[0]           # le nombre de lignes
  M = np.empty((n, n+1)) # la matrice M
  M[:, :n] = np.copy(A) # copier A dans les 1ères n colonnes
  M[:, n] = np.copy(b)  # copier b dans la dernière colonne
  triangulariser(M)      # M devient triangulaire supérieure

  x = np.empty(n)     # on mettra la solution ici
  for i in range(n-1, -1, -1): # parcourir lignes en arrière
    sigma = M[i, i+1:] @ x[i+1:] # la somme des a'_ik x_k
    if M[i, i] == 0: # Matrice singulière?
      if M[i, n] - sigma == 0: # faut résoudre 0*x[i] = 0 ?
        print("Attention, solution pas unique!")
        x[i] = 42
      else:  # faut résoudre 0*x[i] = (non nul) ?
        print("Erreur, pas de solution")
        return
    else: # sinon on peut diviser par M[i, i]
      x[i] = (M[i, n] - sigma) / M[i, i]
  return x
```

L'algorithme de Gauss dans SciPy

La bibliothèque `SciPy` fournit, dans sa sous-bibliothèque `scipy.linalg`, des méthodes d'algèbre linéaire, dont une qui implémente l'algorithme de Gauss pour résoudre des systèmes linéaires.

Pour des vraies applications en physique numérique, on de se servira de ces méthodes optimisées au lieu de l'implémentation du cours « faite maison ».

```
import numpy as np
import scipy.linalg as la
A = np.array([[5, 3, -1], [3, 2, -4], [-1, -4, 0]])
b = np.array([1,2,3])
x = la.solve(A, b) # résoudre le système A.x = b
print(x) # [ 0.65517241 -0.9137931  -0.46551724]
```

Le travail de calcul dans cette bibliothèque est fait avec des routines en C, C++ et FORTRAN optimisées, plus rapides que du code Python.

La décomposition LU

La décomposition LU d'une matrice $n \times n$ A est la décomposition

$$A = PLU$$

- U est une matrice $n \times n$ triangulaire supérieure
  (zéro au-dessous de la diagonale principale)
- L est une matrice $n \times n$ triangulaire inférieure
  (zéro au-dessus de la diagonale principale)
- P est une matrice de permutation $n \times n$
  ($PM = M$ à une permutation de lignes près)

La matrice U resulte de l'application de l'algorithme de Gauss à la matrice A. En prenant note des transformations effectuées pendant le déroulement de l'algorithme, on peut aussi déterminer L et P.

La décomposition LU dans SciPy

La décomposition LU peut s'obtenir avec l'aide de la bibliothèque `SciPy` :

```
import numpy as np
import scipy.linalg as la

A = np.array([[5, 3, -1], [3, 2, -4], [-1, -4, 0]])

P, L, U = la.lu(A)
```

Utilité de la décomposition LU

Applications :

- Résoudre N systèmes linéaires $A\vec{x}_i = \vec{b}_i$ avec A fixe et différents $\vec{b}_i$ $(i = 1, \ldots, N)$.

  Plus efficace de calculer la décomposition LU de A, puis de résoudre $A\vec{x}_i = \vec{b}_i$ N fois que d'effectuer N fois la méthode de Gauss.

  Démarche, si P, L et U connus, sachant que $P^T P = \mathbb{1}$:

  $$A\vec{x} = \vec{b} \quad \Leftrightarrow \quad PLU\vec{x} = \vec{b} \quad \Leftrightarrow \quad LU\vec{x} = P^T\vec{b} \quad \Leftrightarrow \quad L\vec{y} = P^T\vec{b} \qquad (\vec{y} = U\vec{x})\,.$$

  - Résoudre $L\vec{y} = P^T\vec{b}$ pour $\vec{y}$ (facile car $L =$ triangulaire inférieure)
  - Résoudre $U\vec{x} = \vec{y}$ pour $\vec{x}$ (facile car $U =$ triangulaire supérieure)

- Calcul efficace de l'inverse de A

  Soit $\vec{a}_k$ la k-ième colonne de A^{-1}, alors elle vérifie

  $$A\vec{a}_k = \vec{e}_k\,, \qquad \vec{e}_k = k\text{-ième vecteur unitaire}$$

  $\rightarrow$ il faut résoudre ces $N = n$ systèmes linéaires comme ci-dessus pour trouver les $\vec{a}_k$

- Calcul efficace du déterminant de A

La décomposition QR

La décomposition QR d'une matrice $n \times n$ A est la décomposition

$$A = QR$$

- Q est une matrice $n \times n$ orthogonale (vérifiant $Q^T Q = \mathbb{1}$)
- R est une matrice $n \times n$ triangulaire supérieure

Avec `SciPy` :

```
import numpy as np
import scipy.linalg as la

A = np.array([[5, 3, -1], [3, 2, -4], [-1, -4, 0]])

Q, R = la.qr(A)
```

Application de la décomposition QR : diagonalisation

L'algorithme QR est une méthode classique pour trouver les valeurs propres et les vecteurs propres d'une matrice diagonalisable A.

Il repose sur la décomposition QR. On définit la suite A_k par

$$A_0 = A\,, \qquad A_{n+1} = R_n Q_n$$

avec $A_n = Q_n R_n$ la décomposition QR de A_n. Cette suite converge, sous certains conditions, vers une matrice triangulaire dont les coefficients diagonaux sont les valeurs propres de A.

La matrice

$$S = \lim_{N \to \infty} Q_0 Q_1 Q_2 \dots Q_N$$

est orthogonale, $S^T S = \mathbb{1}$, et vérifie $S^T A S =$ diagonale ; ses colonnes sont les vecteurs propres de A.

L'algorithme QR

Algorithme pour trouver les valeurs propres et les vecteurs propres d'une matrice diagonalisable A :

1. Démarrer avec $S = \mathbb{1}$.
2. Si A est triangulaire supérieure (à une petite erreur numérique près) : terminer.
   Valeurs propres = coefficients sur la diagonale principale de A.
   Vecteurs propres = colonnes de S.
3. Trouver la décomposition QR de A, $A = QR$.
4. Répéter à partir de (2) avec $A \leftarrow RQ$ et $S \leftarrow SQ$.

À vous de l'implémenter ($\rightarrow$ exercices) !

Algèbre linéaire avec SciPy

La bibliothèque scipy.linalg contient des méthodes pour l'algorithme de Gauss, la décomposition LU, la décomposition QR comme on a vu.

Elle contient aussi de nombreuses autres : décomposition en valeurs singulières, décomposition de Cholesky, fonctions matricielles, méthodes optimisées pour des matrices spéciales... voir la documentation.

```
import numpy as np
import scipy.linalg as la
A = np.array([[5, 3, -1], [3, 2, -4], [-1, -4, 0]])
Ainv = la.inv(A)          # inverse
d = la.det(A)             # déterminant
vals, vecs = la.eig(A)    # valeurs/vecteurs propres
```

Le travail de calcul dans cette bibliothèque reste sur des routines en C, C++ et FORTRAN optimisées qui sont beaucoup plus vite que des routines en Python.

Ajustement

Dans ce chapitre

Généralités

- La méthode des moindres carrés

Algorithmes

- Régression linéaire
- Régression nonlinéaire : Méthodes de Gauss-Newton et de Levenberg-Marquardt

Ajustement

Description du problème :

Soient

- $(t_1, y_1) \dots (t_n, y_n)$ des données, p. ex. des données expérimentales,
- $f(t; \beta_1, \dots, \beta_p)$ une fonction (un "modèle") qui dépend de certains paramètres $\beta_1, \dots, \beta_p$.

On cherche les valeurs des paramètres telles que la fonction f correspondante décrit le mieux les données :

$$f(t_i; \vec{\beta}) \approx y_i \qquad \forall\, i\,.$$

Ajustement

Exemple : La trajectoire d'un objet en chute libre est donnée par une fonction quadratique f du temps t,

$$f(t; \beta_1, \beta_2, \beta_3) = \beta_1 + \beta_2\, t + \beta_3\, t^2 \stackrel{!}{=} y(t)$$

Ici

- $\beta_1 = y_0$ est la hauteur initiale à $t = 0$,
- $\beta_2 = v_0$ est la vitesse initiale,
- $\beta_3 = -g/2$ avec g l'accélération gravitationnelle.

Lors d'une expérience, on mesure

t[s]	y [m]
0	1
0.31	3
0.59	4
1.02	4
1.32	3
1.74	0

Comment en obtient-on les valeurs numériques de y_0, v_0 et g ?

Méthode des moindres carrés

Méthode standard : Méthode des moindres carrés.

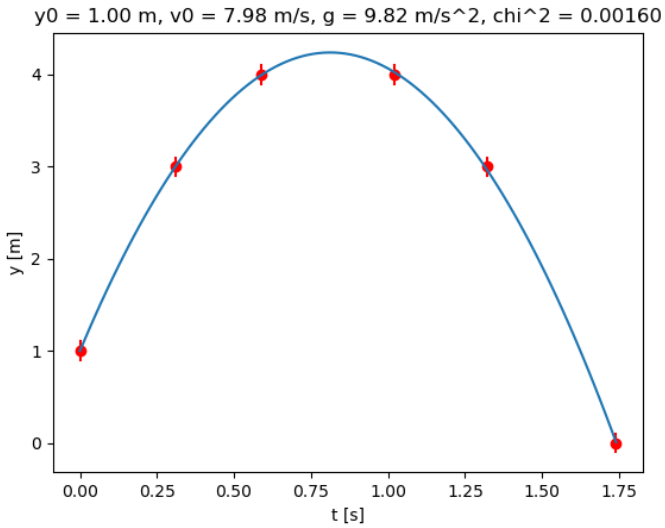
On définit le résidu r_i du point de données (t_i, y_i) par

$$r_i(\vec{\beta}) = f(t_i; \vec{\beta}) - y_i$$

et on cherche les valeurs des paramètres $\beta_1 \dots \beta_p$ telles que χ^2, défini par

$$\chi^2(\vec{\beta}) \equiv \sum_{i=1}^{n} r_i^2(\vec{\beta})$$

est minimisé. Ces valeurs donnent le meilleur ajustement des paramètres aux données.



Méthode des moindres carrés

Généralisation pour incertitudes variables

Si les données sont de la forme $(t_i, y_i \pm \sigma_i)$ avec des σ_i tous différents, alors il faut minimiser

$$\chi^2(\vec{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{r_i(\vec{\beta})}{\sigma_i} \right)^2 , \qquad r_i(\vec{\beta}) = f(t_i; \vec{\beta}) - y_i \, .$$

Méthode des moindres carrés pondérés.

Ainsi, les points de données avec grandes incertitudes σ_i contribuent à l'ajustement avec un poids moins important.

Généralisation pour des erreurs de mesure sur t

On a supposé que l'incertitude sur les t_i est négligeable ; sinon, il faut encore adapter la méthode.

Régression linéaire

Problème numérique : Comment minimiser χ^2 ?

Dans l'exemple de la chute libre, la fonction f dépend des paramètres β_1, β_2, β_3 linéairement,

$$f(t;\,\vec{\beta}) = \beta_1 + \beta_2\, t + \beta_3\, t^2\,.$$

Problème de régression linéaire : on cherche β_1, β_2, β_3 tels que

$$y_i \approx f(t_i;\vec{\beta}) \;\Leftrightarrow\; A\vec{\beta} \approx \vec{y}$$

où

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1(t_1) & x_2(t_1) \\ 1 & x_1(t_2) & x_2(t_2) \\ 1 & x_1(t_3) & x_2(t_3) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_1(t_6) & x_2(t_6) \end{pmatrix} \qquad \text{avec } x_1(t) = t, \quad x_2(t) = t^2\,.$$

Le système linéaire $A\vec{\beta} = \vec{y}$ est surdéterminé (6 équations pour seulement 3 inconnues ; $\chi^2 > 0$ génériquement). Le meilleur ajustement est donné par la solution d'un système linéaire de seulement 3 équations :

$$\boxed{A^T A\vec{\beta} = A^T\vec{y}}\,.$$

Preuve :

On souhaite minimiser $\vec{r}^{\,2} = (A\vec{\beta} - \vec{y})^2$ par rapport à $\vec{\beta}$, alors on cherche le $\vec{\beta}$ où le gradient s'annule :

$$\frac{\partial}{\partial \beta_i} \left(A\vec{\beta} - \vec{y} \right)^2 = 0 \,.$$

Explicitement :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \beta_i} \left(A\vec{\beta} - \vec{y} \right)^2 &= \frac{\partial}{\partial \beta_i} \sum_{ajk} \left(A_{aj}\beta_j - y_a \right) \left(A_{ak}\beta_k - y_a \right) \\
&= \sum_{ak} A_{ai} A_{ak} \beta_k + \sum_{aj} A_{aj} \beta_j A_{ai} - \sum_a y_a A_{ai} - \sum_a A_{ai} y_a \\
&= 2(A^T A\vec{\beta})_i - 2(A^T \vec{y})_i
\end{aligned}$$

ce qui s'annule si $\vec{\beta}$ vérifie

$$A^T A\vec{\beta} = A^T \vec{y} \,.$$

Régression linéaire

```
import numpy as np
import numpy.linalg as la

# Les données:
t = np.array([0., .31, .59, 1.02, 1.32, 1.74])
y = np.array([1., 3., 4., 4., 3., 0.])

def x1(t):          # les variables prédicteur
    return t
def x2(t):
    return t**2

A = np.ones((6, 3)) # la matrice de coefficients
A[:, 1] = x1(t)     # (2ème colonne)
A[:, 2] = x2(t)     # (3ème colonne)

# Résoudre le système linéaire pour trouver les paramètres:
beta = la.solve(A.T @ A, A.T @ y)
y0, v0, g = beta[0], beta[1], -2 * beta[2]
```

Régression linéaire

Calculer χ^2 et tracer le résultat :

```
def f(t):
    return y0 + v0 * t - g/2 * t**2

r = f(t) - y          # les résidus
chi2 = np.sum(r**2)
print("chi^2 =", chi2)

import matplotlib.pyplot as plt
tpoints = np.linspace(0, 1.74, 100)
plt.plot(t, y, 'ro') # tracer les données
plt.plot(tpoints, f(tpoints)) # tracer la courbe théorique
plt.xlabel("t [s]")
plt.ylabel("y [m]")
plt.show()
```

Régression linéaire : plusieurs variables indépendantes

Similaire pour plusieurs variables indépendantes

Exemple : on propose le modèle empirique

$$(\text{Note d'examen}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

$x_1 =$ pourcentage de TD manqués
$x_2 =$ pourcentage de CM manqués
$x_3 =$ heures de révision

Note	x_1	x_2	x_3
8	10	25	2
19.5	0	0	6
6	30	100	3
12.5	10	37.5	4
14.5	10	25	4
10	80	62.5	5
0	100	100	2
2.5	20	50	4
6.5	60	50	0

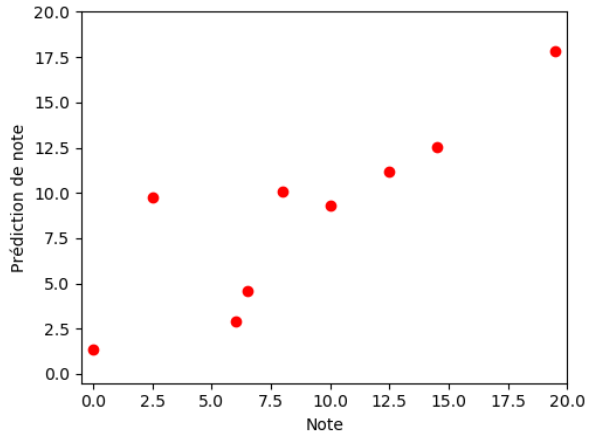
Régression linéaire : plusieurs variables indépendantes

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \vec{x}_1 & \vec{x}_2 & \vec{x}_3 \\ 1 & & & \\ \vdots & & & \\ \vdots & & & \\ 1 & & & \end{pmatrix}$$

Matrice 9×4 (9 points de données, 4 paramètres à ajuster).

La solution de $A^T A\vec{\beta} = A^T \vec{y}$ donne $\beta_0 = 10.4\,,\ \beta_1 = -0.05\,,\ \beta_2 = -0.11\,,\ \beta_3 = 1.24.$



Régression linéaire

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

data = np.loadtxt("Regression_Notes")
datapoints = data.shape[0]

A = np.empty((datapoints, 4)) # matrice de coefficients
A[:, 0] = np.ones(datapoints) # première colonne = 1
A[:, 1:] = data[:, 1:]        # autres=variables prédicteur
y = data[:, 0]                # variables réponse

beta = np.linalg.solve(A.T @ A, A.T @ y) # ajustement

print("beta =", beta) # afficher résultat

def pred_y(x):        # prédiction pour un prédicteur donné
    return beta[0] + beta[1:] @ x

predictions = [pred_y(A[i, 1:]) for i in range(datapoints)]
plt.plot(y, predictions, 'ro')
plt.show()
```

Méthodes plus avancés :

Au lieu de directement résoudre les équations normales

$$A^T A\vec{\beta} = A^T \vec{y}$$

il peut être préférable de calculer la décomposition en valeurs singulières de la matrice A,

$$A = U\,D\,V^T\,, \qquad U = \text{orthogonale}\,,\ D = \text{diagonale}\,,\ V = \text{orthogonale}$$

et de calculer $\vec{\beta}$ avec U, V, D et $\vec{y}$.

Raison : stabilité numérique, problématique si $A^T A$ est (proche d'être) singulière.

Régression non linéaire

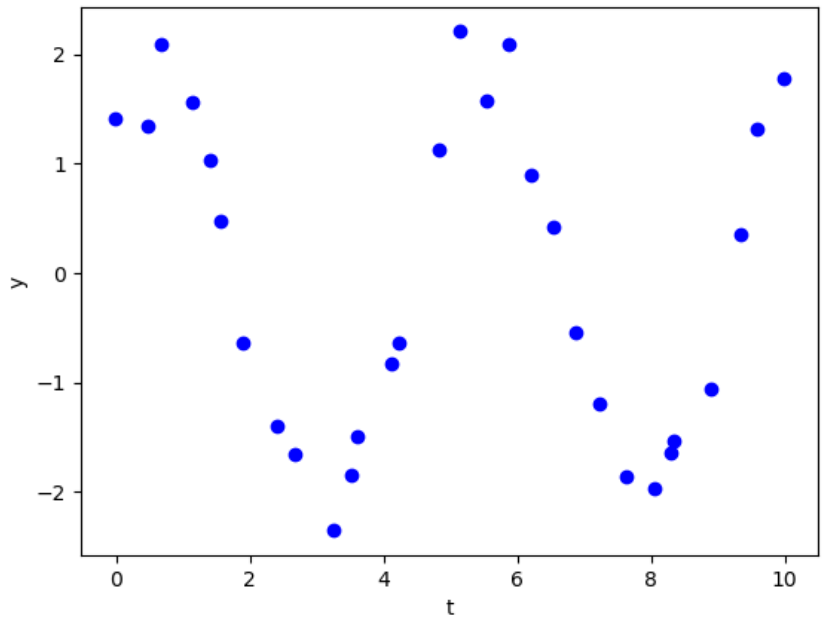
Dans les exemples avant, la fonction d'ajustement $f(t;\,\vec{\beta})$ dépend des paramètres $\beta_1 \ldots \beta_p$ linéairement.

Si la dépendence est plus compliquée, la minimisation de χ^2 devient plus difficile.

Exemple : Ajuster une fonction sinusoïdale,

$$f(t;\,\beta_1, \beta_2, \beta_3) = \beta_1\,\sin\left(\beta_2 t + \beta_3\right)$$

où β_1 est l'amplitude, β_2 la fréquence, β_3 la phase à $t = 0$.



Régression non linéaire : L'algorithme de Gauss-Newton

On cherche un minimum de $\chi^2(\vec{\beta})$.

- Méthode de Newton (rappel) : pour trouver un zéro de $g(x)$, on itère

$$x \leftarrow x - \frac{g(x)}{g'(x)}$$

- Pour trouver un point critique (potentiellement un minimum) de $g(x)$, on cherche un zéro de $g'(x)$: on itère

$$x \leftarrow x - \frac{g'(x)}{g''(x)}$$

- Généralisation à plusieurs variables : soit $g(\vec{\beta})$ une fonction de p variables $\vec{\beta}$. Pour trouver un point critique, itérer

$$\vec{\beta} \leftarrow \vec{\beta} - H^{-1}(\vec{\beta})\vec{\nabla} g(\vec{\beta})$$

où la matrice hesséenne $H(\vec{\beta})$ est

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_1^2} & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_1 \partial \beta_2} & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_1 \partial \beta_3} & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_1 \partial \beta_p} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_2 \partial \beta_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_2^2} & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_2 \partial \beta_3} & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_2 \partial \beta_p} \\ \vdots & & & & \vdots \\ \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_p \partial \beta_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_p \partial \beta_2} & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_p \partial \beta_3} & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_p^2} \end{pmatrix}$$

Régression non linéaire : L'algorithme de Gauss-Newton

L'algorithme de Gauss-Newton évite le calcul de H en exploitant le fait que la fonction à minimiser est une somme de carrés :

$$\chi^2(\beta_1 \dots \beta_p) = r_1(\vec{\beta})^2 + r_2(\vec{\beta})^2 + \dots + r_n(\vec{\beta})^2 = \vec{r} \cdot \vec{r}$$

avec les n résidus

$$r_i(\vec{\beta}) = f(t_i; \vec{\beta}) - y_i$$

Alors

$$\vec{\nabla}\chi^2 = \begin{pmatrix} 2\,r_1 \frac{\partial r_1}{\partial \beta_1} + 2\,r_2 \frac{\partial r_2}{\partial \beta_1} + \dots + 2\,r_n \frac{\partial r_n}{\partial \beta_1} \\ 2\,r_1 \frac{\partial r_1}{\partial \beta_2} + 2\,r_2 \frac{\partial r_2}{\partial \beta_2} + \dots + 2\,r_n \frac{\partial r_n}{\partial \beta_2} \\ \vdots \\ 2\,r_1 \frac{\partial r_1}{\partial \beta_p} + 2\,r_2 \frac{\partial r_2}{\partial \beta_p} + \dots + 2\,r_n \frac{\partial r_n}{\partial \beta_p} \end{pmatrix} = 2\,\vec{r}\,J$$

Ici J est la matrice jacobienne $n \times p$

$$J_{ij} = \frac{\partial r_i}{\partial \beta_j}\,.$$

De plus,

$$H_{ij} = \frac{\partial}{\partial \beta_i}\left(\nabla\chi^2\right)_j = \frac{\partial}{\partial \beta_i}\left(2\,\vec{r}\,J\right)_j = 2\left(J^T\,J\right)_{ij} + 2\vec{r}\cdot\frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial \beta_i \partial \beta_j} \approx 2\left(J^T\,J\right)_{ij}$$

(en supposant que les termes $\vec{r}\cdot\frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial \beta_i \partial \beta_j}$ sont négligeables).

Régression non linéaire : L'algorithme de Gauss-Newton

Résumé : On a trouvé

$$\vec{\nabla}\chi^2 = 2\,\vec{r}\,J$$

et

$$H \approx 2\left(J^T\,J\right)$$

où $\vec{r}$ est le vecteur à n composantes des résidus (fonctions des paramètres β_i)

$$r_i(\vec{\beta}) = f(t_i;\vec{\beta}) - y_i$$

et J est la matrice jacobienne $n \times p$ de $\vec{r}$ par rapport à $\vec{\beta}$,

$$J = \frac{\partial \vec{r}}{\partial \vec{\beta}} = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{\beta}}\,.$$

L'itération de la méthode de Newton pour trouver un point critique de $\chi^2 = \vec{r}\cdot\vec{r}$ devient

$$\boxed{\vec{\beta} \leftarrow \vec{\beta} - (J^T J)^{-1}\vec{r}\,J}$$

Méthode de Gauss-Newton.

Regression non linéaire : L'algorithme de Gauss-Newton

En pratique :

- Calculer analytiquement les dérivées $\frac{\partial f}{\partial \beta_j}$.
- Commencer avec un ensemble de paramètres $\vec{\beta}$ au choix
  (mais aussi proche que possible de l'optimum pour améliorer la convergence)
- Mettre à jour les $r_i = f(t_i; \vec{\beta}) - y_i$ et les $J_{ij} = \frac{\partial f}{\partial \beta_j}(t_i; \vec{\beta})$.
- Remplacer $\vec{\beta} \leftarrow \vec{\beta} - (J^T J)^{-1} \vec{r}\, J$.

  Équivalent, à préférer en pratique (car plus stable) : calculer le nouveau $\vec{\beta}$ avec la solution d'un système linéaire, trouvée p.ex. par la méthode de Gauss :

$$\vec{\beta}_{\text{nouveau}} = \vec{\beta}_{\text{ancien}} + \vec{\delta}\,, \qquad \vec{\delta} = \text{ (solution de } J^T J\, \vec{\delta} = -\vec{r}\, J)\,.$$

- Itérer ces dernières deux étapes jusqu'à la convergence.
  S'arrêter lorsque $||\vec{\delta}|| < \epsilon$.

Régression non linéaire : L'algorithme de Gauss-Newton

Avec les fonctions $\frac{\partial f}{\partial \beta_j}$ données dans une liste `gradf` :

```
import numpy as np
import gauss   # pour la fonction gauss() du cours

def gauss_newton(t, y, f, gradf, beta0, epsilon=1.E-4):
  beta = np.copy(beta0)       # les paramètres à ajuster
  delta = np.ones(len(beta)) # diff. entre deux itérations

  while np.sqrt(np.sum(delta**2)) > epsilon:
    r = f(t, beta) - y      # les résidus
    J = np.array([df(t, beta) for df in gradf]).T # matr. J
    delta = gauss.gauss(J.T @ J, - r @ J) # sol. du système
    beta += delta

  chi2 = np.sum(r**2)         # chi^2 après minimisation
  return beta, chi2
```

Algorithme de Gauss-Newton : Exemple d'application

Par exemple, pour la fonction sinusoïdale ci-dessus :

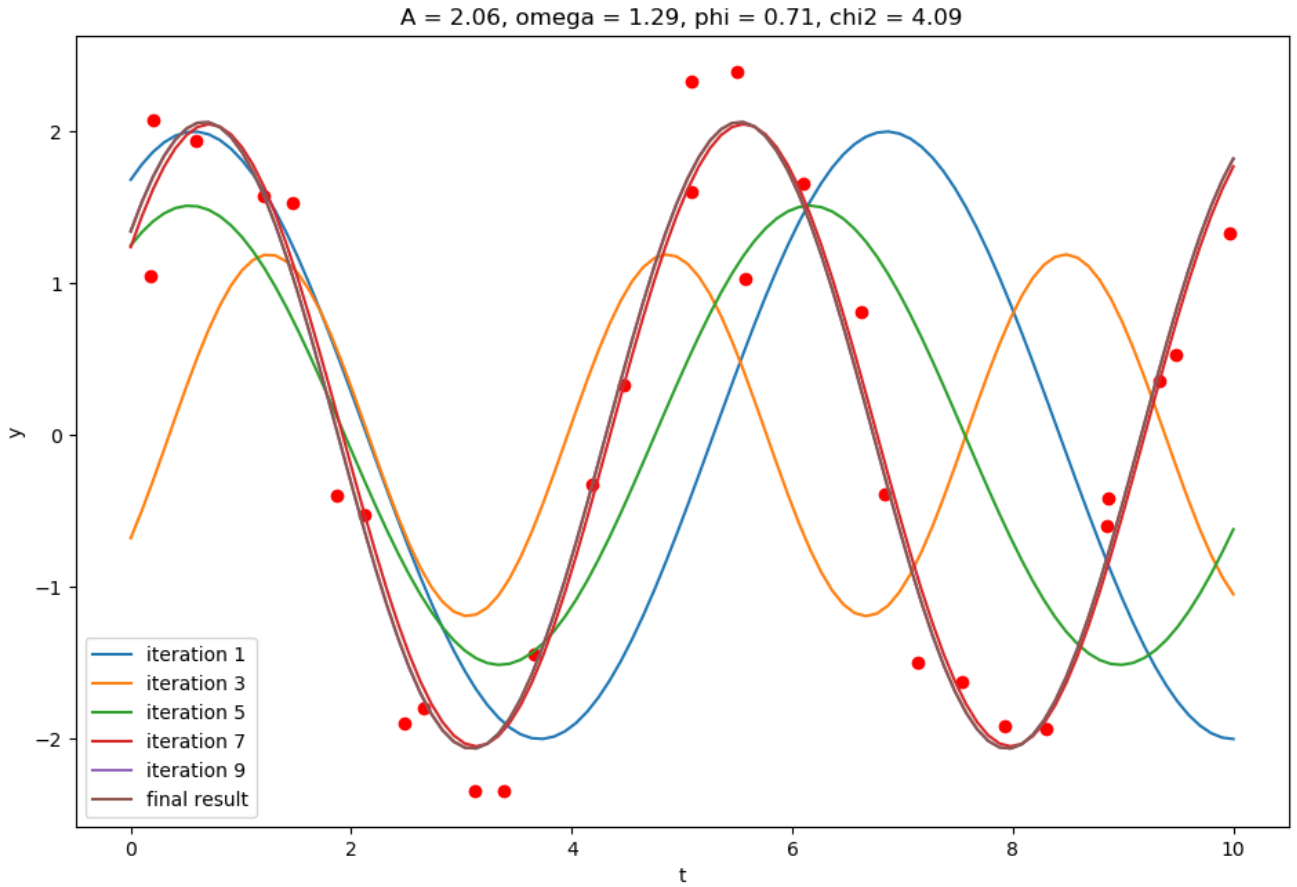
$$f(t;\vec{\beta}) = \beta_1 \sin(\beta_2 t + \beta_3)$$

et donc

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_1}(t;\vec{\beta}) = \sin(\beta_2 t + \beta_3), \quad \frac{\partial f}{\partial \beta_2}(t;\vec{\beta}) = \beta_1 \cos(\beta_2 t + \beta_3)\, t,$$
$$\frac{\partial f}{\partial \beta_3}(t;\vec{\beta}) = \beta_1 \cos(\beta_2 t + \beta_3).$$

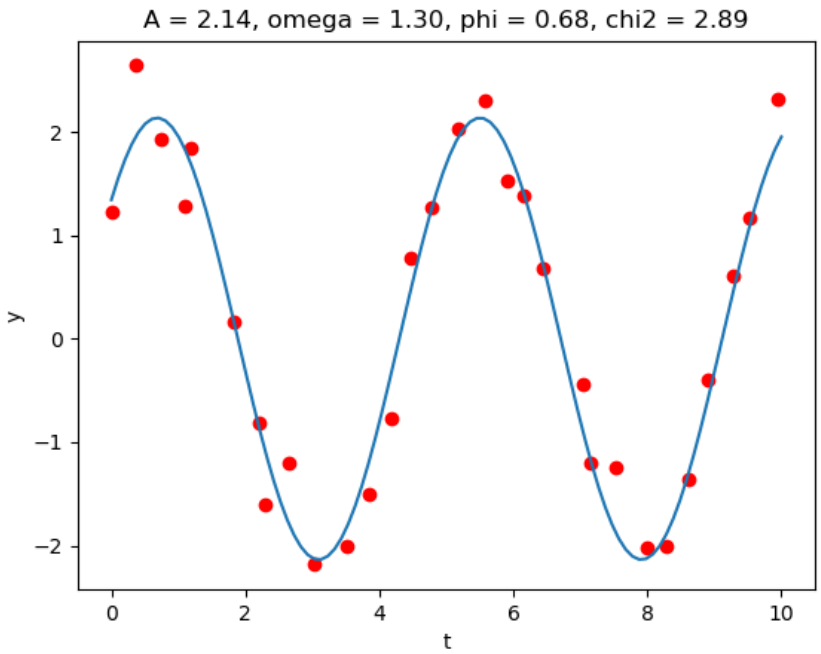
```
# la fonction modèle
def f(t, beta):
    return beta[0] * np.sin(beta[1] * t + beta[2])

# ses dérivées partielles par rapport aux paramètres
df = [lambda t, beta: np.sin(beta[1]*t + beta[2]),
      lambda t, beta: beta[0]*np.cos(beta[1]*t + beta[2])*t,
      lambda t, beta: beta[0]*np.cos(beta[1]*t + beta[2])]

data = np.loadtxt('noisysin.txt')  # les données
beta, chi2 = gauss_newton(data[:, 0], data[:, 1], f, df,
                          np.array([2., 1., 0.]))
```

Algorithme de Gauss-Newton : Exemple d'application



Algorithme de Gauss-Newton : Exemple d'application

$$f(t;\, A, \omega, \phi) = A\, \sin\left(\omega t + \phi\right)$$



Régression non linéaire : Algorithme de Levenberg-Marquardt

Faiblesse de la méthode de Gauss-Newton : si on commence avec des valeurs de départ pour $\vec{\beta}$ trop loin du minimum, alors l'itération ne le trouvera pas.

Ce problème est amélioré avec une modification de l'algorithme menant à la méthode de Levenberg-Marquardt.

Gauss-Newton :

$$\vec{\beta}_{\text{nouveau}} = \vec{\beta}_{\text{ancien}} + \vec{\delta}\,, \qquad J^T J\vec{\delta} = -\vec{r}J$$

Levenberg-Marquardt :

$$\vec{\beta}_{\text{nouveau}} = \vec{\beta}_{\text{ancien}} + \vec{\delta}\,, \qquad \left(J^T J + \lambda \mathbb{1}\right)\vec{\delta} = -\vec{r}J$$

où $\lambda \geq 0$ est un paramètre dit d'amortissement, à adapter à chaque itération.

- Si $\lambda \to 0$, la méthode s'approche à celle de Gauss-Newton.
- Pour des grands λ, on s'approche à la méthode du gradient : la variation $\vec{\delta}$ suit la direction de la plus forte pente $-\vec{r}J \propto -\vec{\nabla}\chi^2$.

Régression non linéaire : Algorithme de Levenberg-Marquardt

Algorithme :

- Choisir une assez petite valeur initiale de λ (disons 10^{-4}).
- Faire tourner l'algorithme modifié de Gauss-Newton en remplaçant $J^T J \rightarrow J^T J + \lambda \mathbb{1}$.
- A chaque itération, calculer χ^2.
  - Si χ^2 a grandi par rapport à l'itération précédente, retourner à l'ancien $\vec{\beta}$ et refaire avec $\lambda \leftarrow 10\,\lambda$.
  - Si χ^2 a diminué, garder le nouveau $\vec{\beta}$ et continuer avec $\lambda \leftarrow \lambda/10$.
- S'arrêter dès que χ^2 ne diminue quasiment plus entre deux itérations (p.ex. diminue par moins que $\approx 10^{-2}$).

Régression non linéaire : Algorithme de Levenberg-Marquardt

Propriétés de la méthode de Levenberg-Marquardt :

- Par rapport à Gauss-Newton, convergence légèrement moins rapide mais plus stable.
- Beaucoup de variations et d'optimisations existent, par exemple :
  - d'autres préscriptions pour adapter le paramètre d'amortissement λ
  - utiliser la combinaison $J^T J + \lambda \operatorname{diag}(J^T J)$ au lieu de $J^T J + \lambda \mathbb{1}$, où $\operatorname{diag}(J^T J)$ a les mêmes valeurs que $J^T J$ sur la diagonale et est 0 ailleurs

Equations différentielles ordinaires

Dans ce chapitre

Algorithmes

- Méthode d'Euler
- Méthode de Runge-Kutta classique

Généralités

- Application aux équations de mouvement des systèmes en mécanique classique

Equations différentielles ordinaires

Une équation différentielle ordinaire du premier ordre est une équation

- dont l'inconnue est une fonction $x(t)$ d'un seul paramètre t ("ordinaire")
- qui implique la dérivée de cette fonction inconnue, $\dot{x}(t) \equiv \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$ ("différentielle")
- mais qui n'implique pas les dérivées d'ordre supérieur ("premier ordre").

On s'intéressera ici aux problemes de Cauchy (ou "problèmes aux valeurs initiales") où on donne une EDO et une condition initiale $x(0) = x_0$.

Théorème de Cauchy-Lipschitz : On donne l'EDO

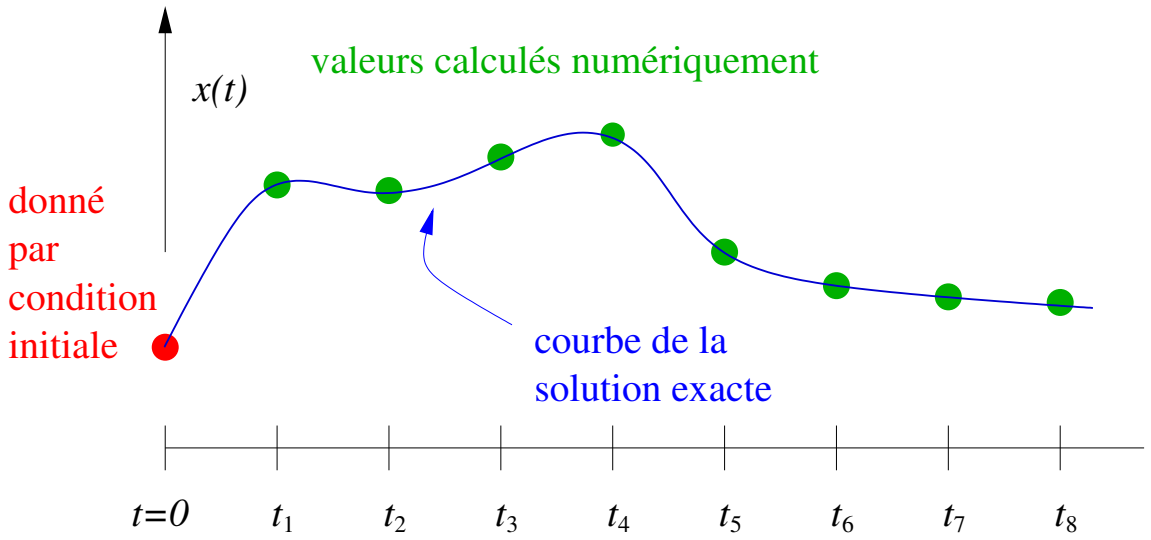
$$\dot{x}(t) = f(x(t), t)$$

avec f une fonction suffisamment régulière (par exemple, dérivable par rapport à son premier argument). Alors, pour tout $x_0 \in \mathbb{R}$, il existe un voisinage U de $t = 0$ et une fonction unique x sur U qui vérifie l'EDO ainsi que la condition initiale $x(0) = x_0$.

Equations différentielles ordinaires

Notre objectif sera de trouver une approximation numérique de la fonction inconnue $x(t)$ = un tableau de valeurs de fonction approximatives $x(t_1)$, $x(t_2)$, ..., $x(t_n)$.

Ces valeur seront successivement calculées à partir de la première valeur x_0 à $t = 0$, qui est donnée par la condition initiale.



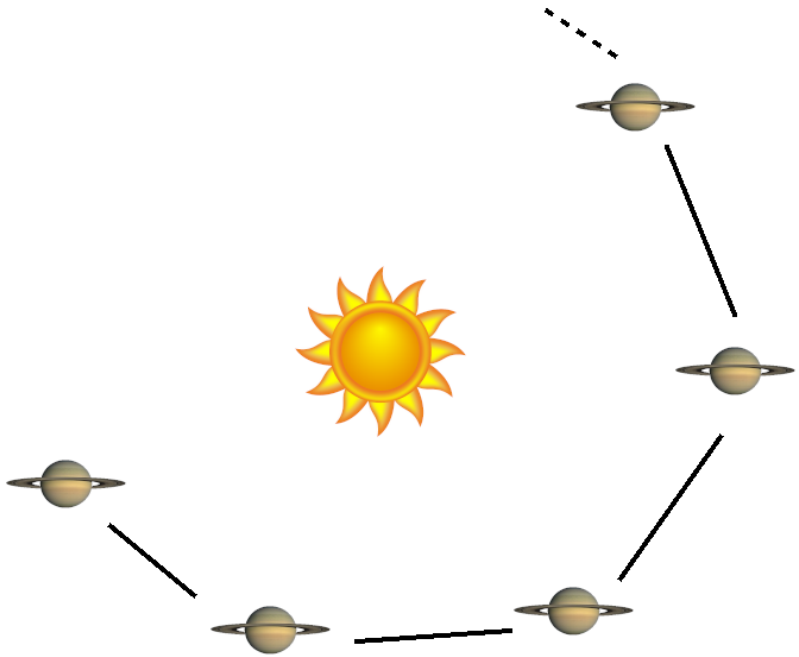
Equations différentielles ordinaires

Motivation physique importante : Les équations de mouvement

$$\vec{F} = m\vec{a}$$

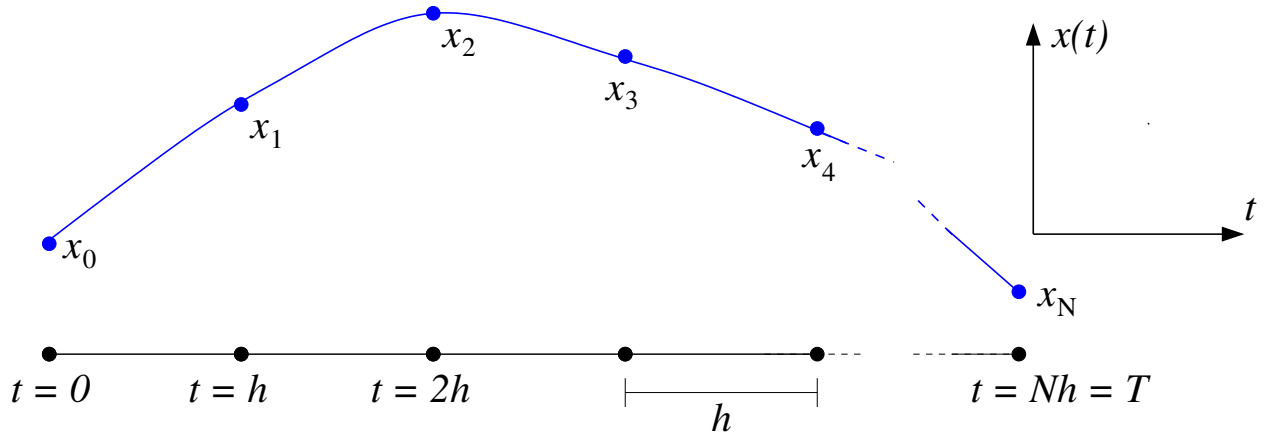
en mécanique peuvent s'écrire comme un système d'EDO du premier ordre. Les fonctions inconnues sont les positions et les vitesses (ou plus généralement les coordonnées généralisées et leurs moments conjugués).

Avec les positions et vitesses donnés à $t = 0$, on pourra les trouver pour tout t numériquement.



Méthode d'Euler

Pour l'EDO $\dot{x}(t) = f(x(t), t)$ avec la condition initiale $x(0) = x_0$, on cherche la solution sur l'intervalle $[0, T]$. Notre objectif sera alors de créer un tableau de N valeurs de fonction $x_1 = x(h), x_2 = x(2h), x_3 = x(3h), \ldots, x_N = x(Nh)$ avec $Nh = T$.



Méthode d'Euler : Développement limité pour h suffisamment petit,

$$x(h) = x(0) + \dot{x}(0)\, h + \frac{1}{2}\ddot{x}(0)\, h^2 + \frac{1}{3!}\dddot{x}(0)\, h^3 + \ldots$$

On néglige les termes $\mathcal{O}(h^2)$ et supérieurs ; on substitue l'EDO $\dot{x}(0) = f(x(0), 0)$ et la condition initiale $x(0) = x_0$:

$$x_1 = x_0 + h\, f(x_0, 0)\,.$$

De même : Une fois x_n connu, on obtient x_{n+1} par développement limité et substitution,

$$x_{n+1} = x_n + \dot{x}_n\, h = x_n + h\, f(x_n, nh)\,.$$

Méthode d'Euler

On obtient ainsi successivement les x_1, x_2, x_3,...$x_N = x(T)$:

$$\boxed{x_{n+1} = x_n + h\, f(x_n, nh)}$$

```
# Résoudre l'EDO dx/dt = f(x(t), t) avec la méthode d'Euler
#
# Arguments:
# f = fonction à deux arguments = membre de droite de l'EDO
# x0 = x(0) condition initiale
# h = pas d'incrément en t
# N = nombre de points à calculer
#
# Renvoie une liste de N+1 valeurs [x(0),...,x(Nh)]
def euler(f, x0, h, N):
    x = [x0] # une liste qui au début contient seulement x0
    xn = x0
    for n in range(N):
        xn += h * f(xn, h*n)
        x += [xn] # ajouter xn à la liste des x
    return x
```

Méthode d'Euler : Un simple exemple

Pour p.ex. $f(x(t), t) = x(t) + t$ et $x_0 = 0$:

$$\dot{x}(t) = x(t) + t\,, \qquad x(0) = 0\,.$$

Solution analytique :

$$x(t) = e^t - t - 1\,.$$

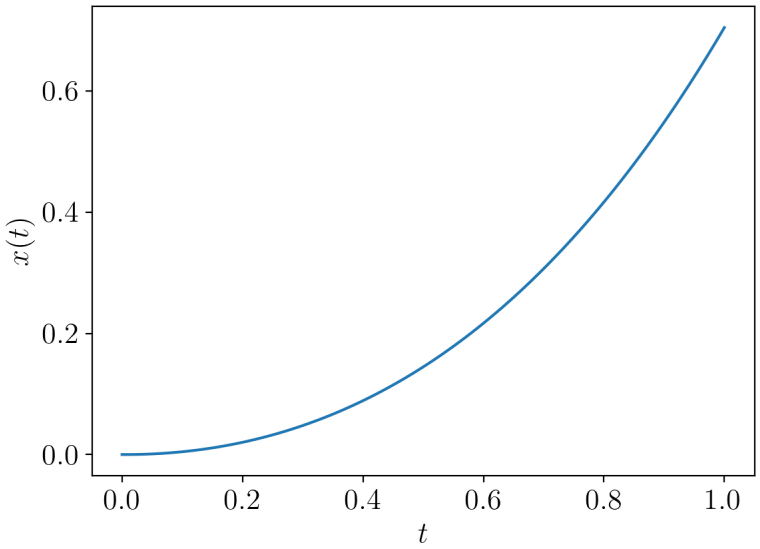
Solution numérique sur $[0,\,1]$ avec incrément $h = 10^{-2}$:

```
from euler import euler  # la fct. euler du fichier euler.py

def f(x, t):
    return x + t

solution = euler(f, 0.0, 1.E-2, 100)
```

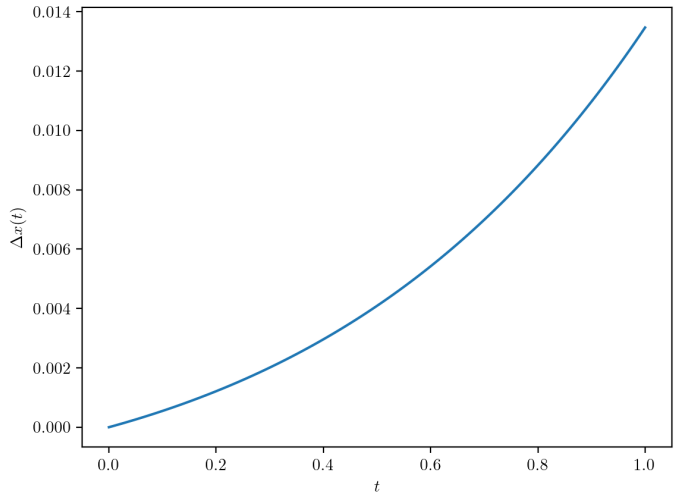
Affichage :

```
import matplotlib.pyplot as plt

plt.plot(np.linspace(0, 1, 101), solution)
plt.show()
```

Méthode d'Euler : Un simple exemple



Solution numérique $x(t)$



$\Delta x(t) = |x_{\text{numérique}}(t) - x_{\text{analytique}}(t)|$

- L'erreur numérique Δx à $t = T = 1$ est ≈ 0.014 et alors du même ordre que $h = 0.01$. Explication : à chaque pas on néglige des termes $\mathcal{O}(h^2)$ dans le développement limité ; il y a $N = 1/h$ pas pour arriver à $t = 1$.
- La méthode d'Euler est une méthode du premier ordre : l'erreur numérique globale est de l'ordre h.
- Pour améliorer la précision numérique par un facteur 2, il faudrait calculer $\sim 2\times$ plus de points.

Exemple physique

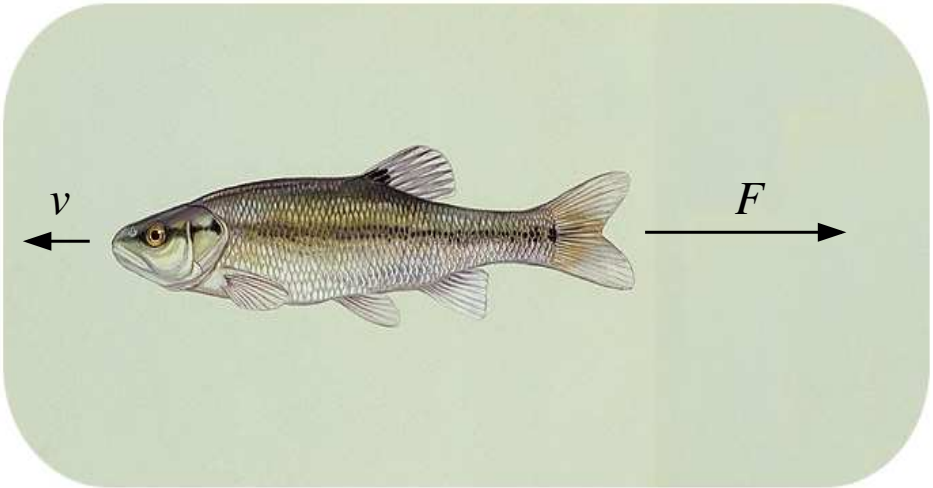
On regarde un objet qui se déplace dans un milieu fluide et qui est ralenti par une force de traînée dépendant de la vitesse, $F(v)$,

$$F(v) = f_1\, v + f_2\, v^2\,, \qquad\qquad f_i = \text{ctes.}$$

L'équation de mouvement est alors $F = ma = m\dot{v} = f_1\, v + f_2\, v^2$, ou

$$\boxed{\dot{v} = -\alpha\, v - \beta\, v^2}$$

$\alpha = -\dfrac{f_1}{m}$, $\beta = -\dfrac{f_2}{m}$ positives (traînée opposée au mouvement).



Exemple physique

$$\boxed{\dot{v} = -\alpha\, v - \beta\, v^2}$$

- Petites vitesses, écoulement laminaire : $\dot{v} = -\alpha\, v$ (loi de Stokes) avec solution $v(t) = v_0\, e^{-\alpha\, t}$.
- Grandes vitesses, écoulement turbulent : traînée $\propto v^2$, $\dot{v} = -\beta v^2$ donc $v(t) = \frac{v_0}{1+\beta\, v_0\, t}$.
- Cas général : exemple d'une équation différentielle de Bernoulli,

$$v(t) = \frac{\alpha v_0}{e^{\alpha t}(\alpha + \beta v_0) - \beta v_0}\,.$$

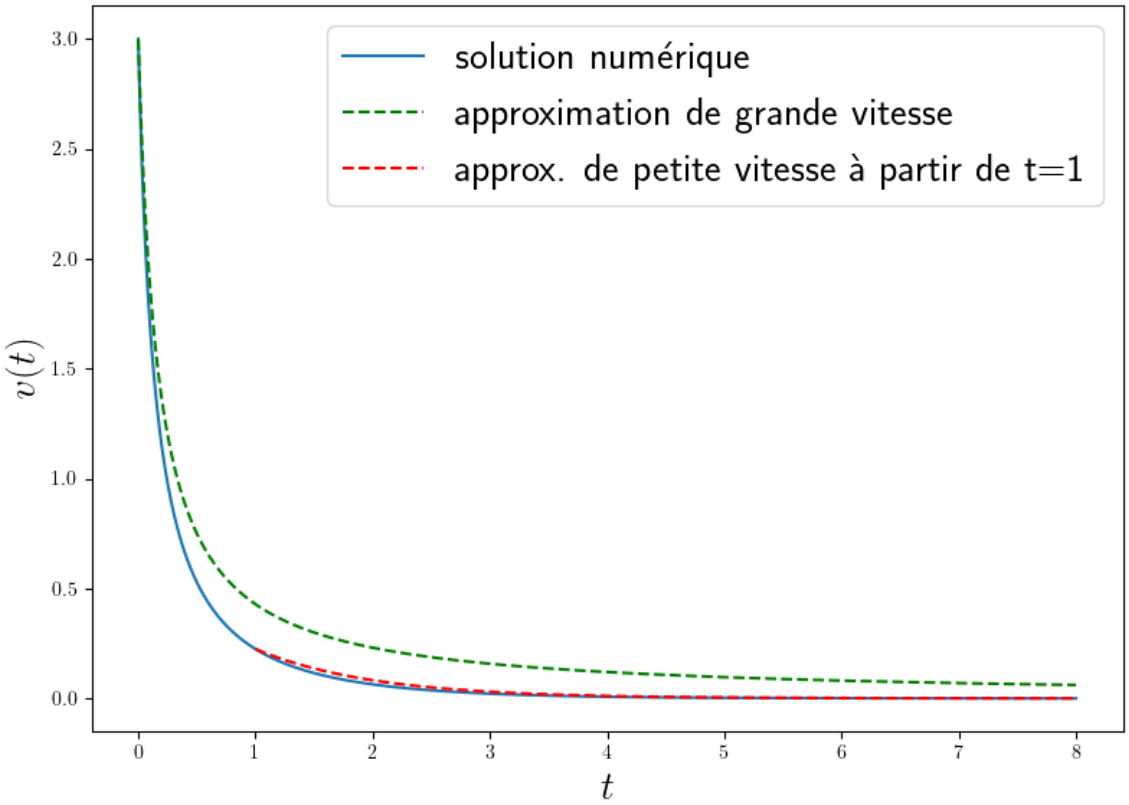
Calculons une solution numérique pour comparer avec la solution exacte.

Exemple physique

```
# Constantes physiques:
alpha = 1.
beta = .5
v0 = 2.
# Constantes numériques:
T = 5.      # intervalle de temps
N = 1000    # nombre de pas à calculer
h = T / N   # pas d'incrément

def f(v, t):
    return -alpha * v - beta * v**2

from euler import euler
solution = euler(f, v0, h, N)

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
plt.plot(np.linspace(0, T, N+1), solution)
plt.show()
```

Exemple physique

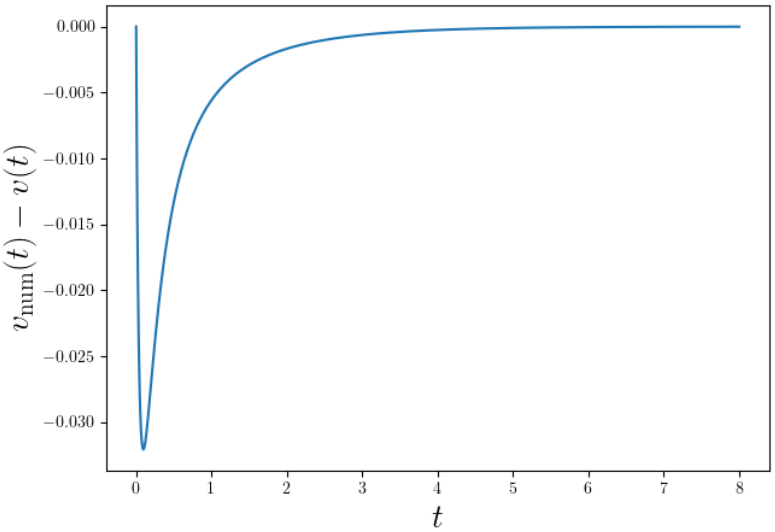
Solution numérique pour $\alpha = 1$, $\beta = 2$, $v_0 = 3$ calculée avec $N = 1000$ points :



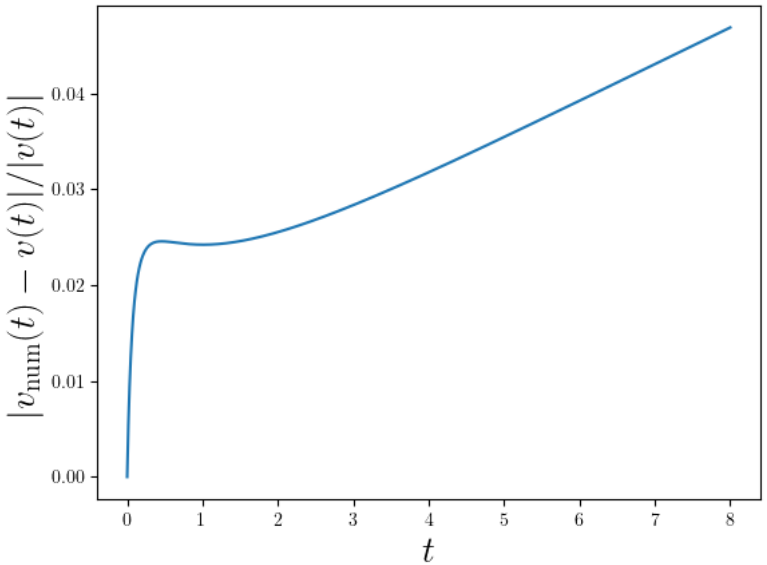
Exemple physique

Différence entre la solution numérique pour $\alpha = 1$, $\beta = 2$, $v_0 = 3$ avec $N = 1000$ points et la solution exacte $v(t) = \frac{\alpha v_0}{e^{\alpha t}(\alpha + \beta v_0) - \beta v_0}$

Erreur absolue



Erreur relative



Systèmes d'EDO

Un système de n équations différentielles du premier ordre avec n fonctions inconnues :

$$\begin{aligned}
\dot{x}(t) &= f_x(x(t),\, y(t),\, z(t), \ldots,\, t) \\
\dot{y}(t) &= f_y(x(t),\, y(t),\, z(t), \ldots,\, t) \\
\dot{z}(t) &= f_z(x(t),\, y(t),\, z(t), \ldots,\, t) \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Il faut n conditions initiales $x(0) = x_0$, $y(0) = y_0$, $z(0) = z_0, \ldots$ pour un problème de Cauchy bien posé.

Pour le résoudre, on se sert de la même méthode qu'avant, en regroupant les n fonctions inconnues x, y, $z, \ldots$ et les n fonctions des membres de droite f_x, f_y, $f_z, \ldots$ dans des fonctions vectorielles $\vec{u}$ et $\vec{f}$:

$$\dot{\vec{u}}(t) = \vec{f}(\vec{u}(t),\, t)$$

Après développement limité et substitution :

$$\boxed{\vec{u}(t+h) = \vec{u}(t) + h\,\vec{f}(\vec{u}(t),\, t) + \mathcal{O}(h^2)}$$

Méthode d'Euler n-dimensionnelle.

EDO du second ordre

Application importante : équations du second ordre qui peuvent toujours se transformer en deux équations du premier ordre. Par exemple :

$$\ddot{x} = \frac{1}{m} F(x, \dot{x}, t)$$

Introduire une fonction inconnue auxiliaire $v(t)$ par

$$v = \dot{x}$$

On obtient un système de deux EDO du premier ordre :

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = \frac{1}{m} F(x, v, t)$$

Plus généralement : en d dimensions,

$$\ddot{\vec{x}} = \frac{1}{m} \vec{F}(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)$$

équivalent aux $2d$ équations du premier ordre

$$\dot{\vec{x}} = \vec{v}$$

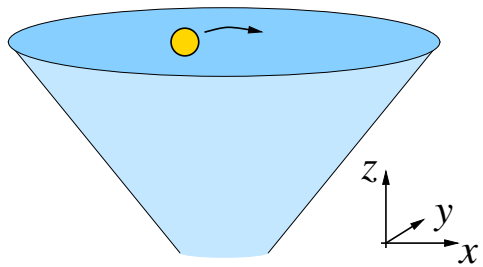
$$\dot{\vec{v}} = \frac{1}{m} \vec{F}(\vec{x}, \vec{v}, t)$$

Exemple

Une bille de masse m se déplace sans friction sur l'intérieur d'un étonnoir conique, dont la surface est décrite, en coordonnées cartésiennes, par

$$x^2 + y^2 = \tan^2(\alpha)\, z^2$$

avec $2\alpha =$ l'angle d'ouverture du cône. La gravité agît en direction négative des z. On souhaite résoudre les équations de mouvement.



On utilise des coordonnées cylindriques (r, ϕ, z). Avec la vitesse radiale $v_r = \dot{r}$ et le moment cinétique $\ell = mr^2\dot{\phi}$ (conservé ici) on obtient

$$\begin{aligned} \dot{r} &= v_r \\ \dot{v}_r &= \frac{\ell^2 \sin^2\alpha}{m^2}\frac{1}{r^3} - g\sin\alpha\cos\alpha \\ \dot{\phi} &= \frac{\ell}{mr^2} \end{aligned}$$

Exemple

Importer la bibliothèque numpy, initialiser les constantes :

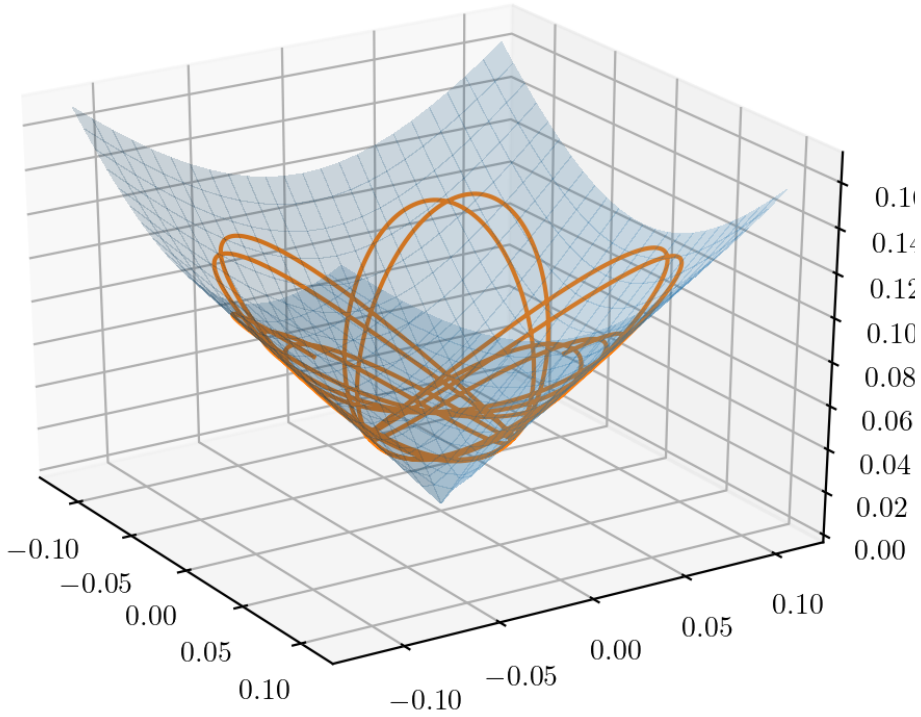
```
import numpy as np

# Constantes physiques:
g = 9.81     # accélération gravitationnelle en m/s^2
alpha = np.pi/4  # 1/2 * angle d'ouverture
m = 1.E-3    # masse de la bille en kg
# Constantes numériques:
h = 1.E-4    # pas d'incrément
N = 50000    # nombre de pas à calculer
# Conditions initiales:
r0 = .1      # rayon
v0 = .2      # vitesse radiale
phi0 = 0.0   # angle
omega0 = 4. # vitesse angulaire
# Constantes dépendantes:
L = m * r0**2 * omega0 # moment cinétique
sa, ca = np.sin(alpha), np.cos(alpha)
```

Exemple

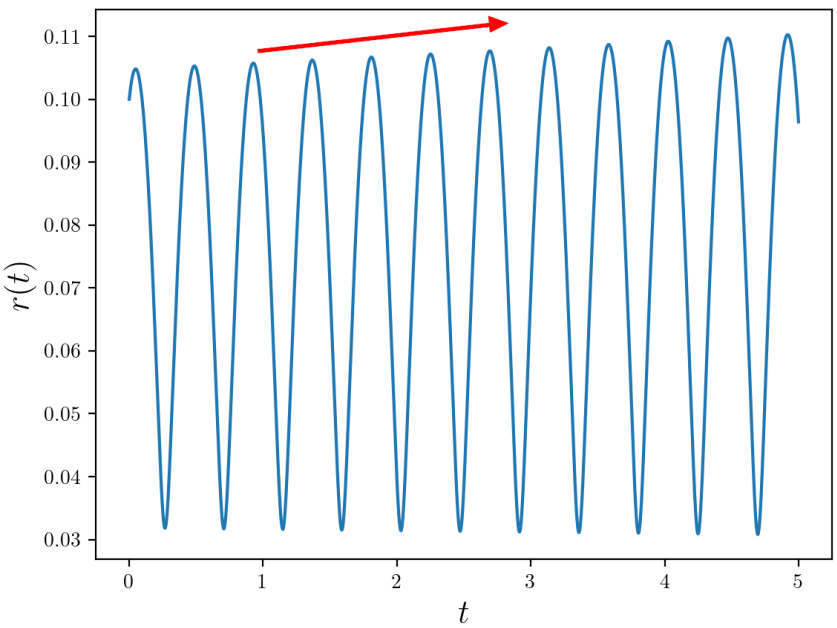
Résoudre les équations de mouvement par la méthode d'Euler :

```
def euler(f, u0, h, N):
    u = np.empty([N+1, 3])  # variables dynamiques
    u[0] = u0               # u[i] = ligne i du tableau u
    for n in range(N):
        u[n+1] = u[n] + h * f(u[n])
    return u

# La fonction vectorielle des membres de droite des e.d.m.
# u = un vecteur à 3 composantes (r, v et phi au temps t)
def f(u):
    r, v, phi = u
    fr = v
    fv = L**2 * sa**2 / (m**2  * r**3) - g * sa * ca
    fphi = L / (m * r**2)
    return np.array([fr, fv, fphi])

u0 = np.array([r0, v0, phi0])
solution = euler(f, u0, h, N)
```

Exemple



Trajectoire pendant 5 s



$r(t)$

Visiblement l'amplitude de la solution numérique pour r est croissante (voir flêche) malgré la conservation d'énergie : artéfact numérique. Pour l'éviter on peut soit réduire h et augmenter N soit utiliser une méthode numérique plus puissante.

Méthode de Runge-Kutta classique

Problème : Résoudre le problème de Cauchy $\dot{x} = f(x(t), t)\,, \quad x(0) = x_0\,.$

Euler : Étant donné $x(t)$, pour obtenir $x(t+h)$: développement limité autour de $x(t)$, ne retenir que le premier terme,

$$x(t+h) = x(t) + h\,\dot{x}(t) + \mathcal{O}(h^2) = x(t) + h\,f(x(t), t) + \mathcal{O}(h^2)\,.$$

Runge-Kutta : Étant donné $x(t)$, pour obtenir $x(t+h)$: combinaisons linéaires de plusieurs développements limités autour des valeurs intermédiaires $x(t+\tau_i)$ avec $0 \leq \tau_i \leq h$. Pour p_i, ξ_i, τ_i bien choisis, l'erreur local devient $\mathcal{O}(h^N)$ avec $N > 1$:

$$x(t+h) = x(t) + h \sum_{i=1}^{r} p_i\,k_i + \mathcal{O}(h^N)\,, \qquad k_i = f(x + \xi_i, t + \tau_i)\,, \quad 0 < p_i < 1\,.$$

Variante la plus importante : Méthode de R-K du 4ème ordre, "RK4", "RK classique"

$$\begin{aligned}
x(t+h) &= x(t) + h\left(\frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4\right) + \mathcal{O}(h^5) \\
k_1 &= f(x(t),\ t)\,, \qquad k_2 = f\left(x(t) + \frac{h}{2}k_1,\ t + \frac{h}{2}\right)\,, \\
k_3 &= f\left(x(t) + \frac{h}{2}k_2,\ t + \frac{h}{2}\right)\,, \qquad k_4 = f\left(x(t) + h\,k_3,\ t + h\right)\,.
\end{aligned}$$

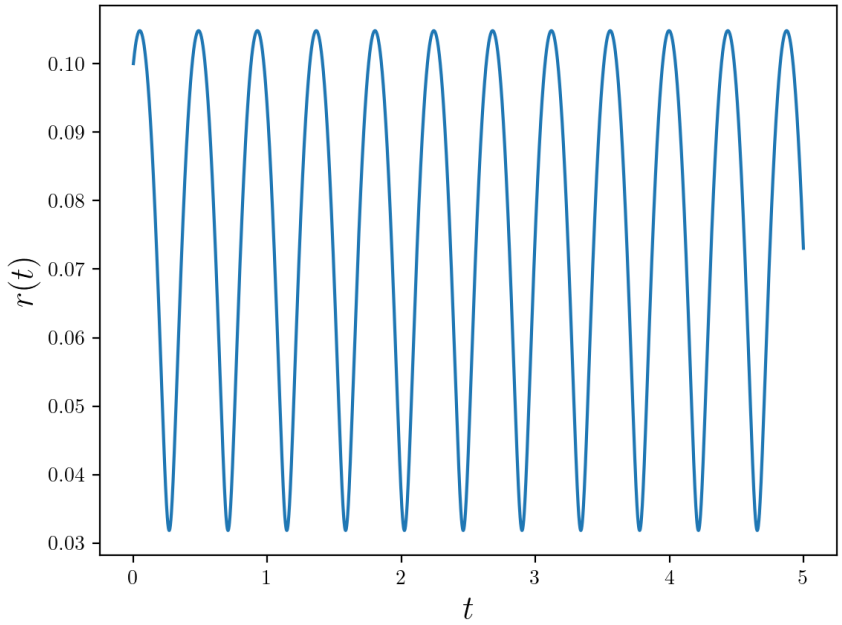
Méthode de Runge-Kutta classique

- La méthode RK4 est beaucoup plus précise que celle d'Euler.
- Elle nécessite plus d'évaluations de la fonction `f` (4 par pas — une seule par pas pour Euler), mais en pratique cela est plus que compensée par le fait qu'il faut beaucoup moins de pas pour atteindre la même précision.
- Elle est presque aussi facile à implémenter que la méthode d'Euler (4 lignes de plus).
- Elle aussi peut être appliquée aux systèmes de plusieurs EDO.

Exemple : Pour l'exemple de la bille dans l'étonnoir, remplacer la fonction `euler` par une fonction `rk4` :

```
def rk4(f, u0, h, N):
    u = np.empty([N+1, 3]) # variables dynamiques
    u[0] = u0              # u[i] = ligne i du tableau u
    for n in range(N):
        k1 = f(u[n])
        k2 = f(u[n] + h/2 * k1)
        k3 = f(u[n] + h/2 * k2)
        k4 = f(u[n] + h * k3)
        u[n+1] = u[n] + h * (k1/6 + k2/3 + k3/3 + k4/6)
    return u
```

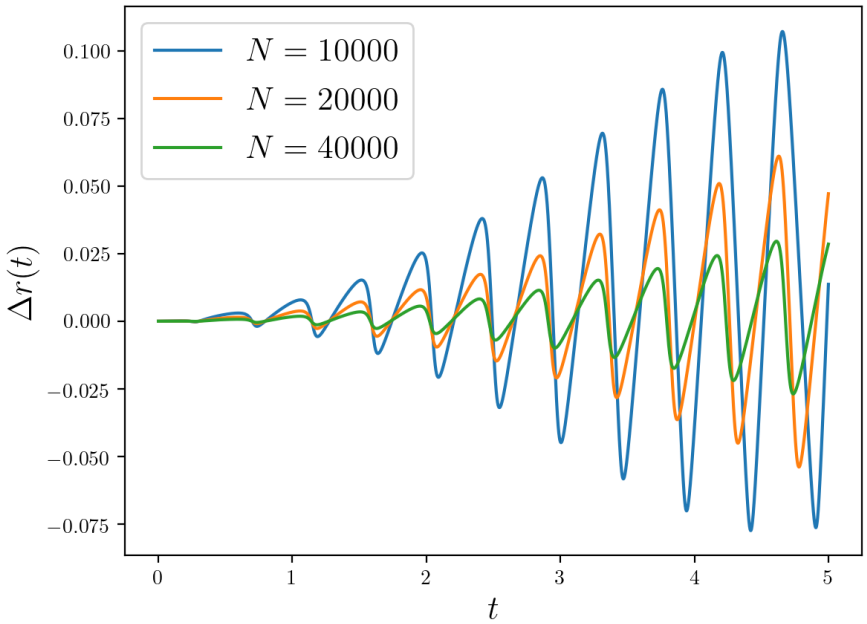
Méthode de Runge-Kutta classique

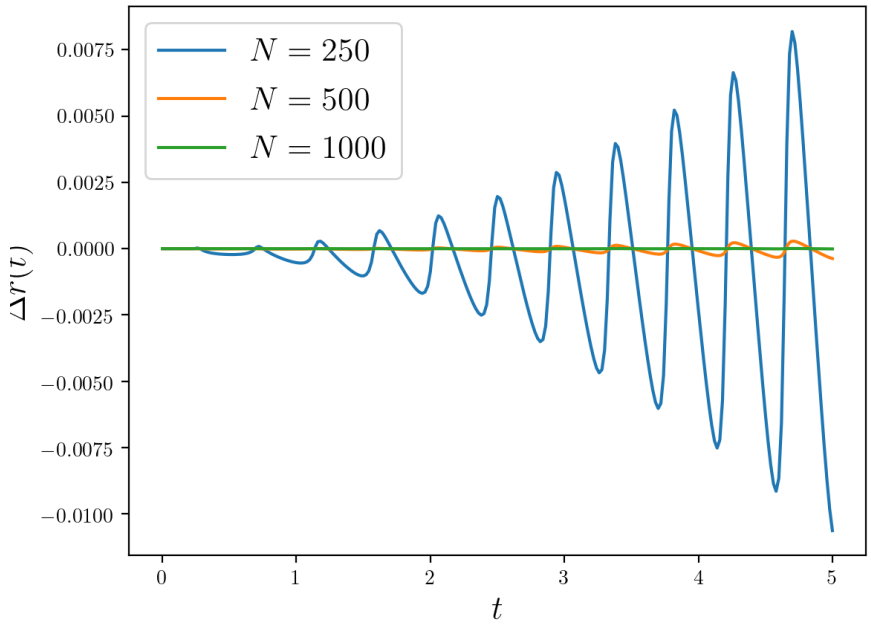


Plus de croissance artificielle visible de l'amplitude grace à une meilleure précision de l'algorithme.

Précision numérique, Euler vs. RK4

- Avec la méthode d'**Euler** on néglige des termes $\mathcal{O}(h^2)$ à chaque pas. Après $N = \mathcal{O}(1/h)$ pas, l'erreur accumulée est alors $\mathcal{O}(h)$.
- Redoubler le nombre de pas $\Rightarrow$ l'erreur est réduite par la moitié
- Avec la méthode **RK4** les termes négligés sont $\mathcal{O}(h^5)$, l'erreur accumulée est $\mathcal{O}(h^4)$ ("methode du 4ème ordre")
- Redoubler le nombre de pas $\Rightarrow$ l'erreur est réduite par un facteur $2^4 = 16$.





Erreur en fonction de N : Euler RK4

Résumé : EDO, problèmes de Cauchy

Pour numériquement résoudre un problème un problème aux valeurs initiales en mécanique :

- Choisir un système de coordonnées (en prenant en compte la symétrie du système, les contraintes éventuelles...)
- Trouver les équations de mouvement, par exemple avec $\vec{F} = m\vec{a}$.
- Les transformer en système d'équations du premier ordre.
- Résoudre les e.d.m. avec la ~~méthode d'Euler~~ méthode RK4 (plus puissante).
- Résultat : un tableau de coordonnées et vitesses/quantités de mouvement à différents t.