Librairies pour le calcul numérique

Contexte

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

Mais ...

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

=> Uniquement restreint à réaliser des prototypes

Contexte

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

Mais ...

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

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

Librairies numériques

Il est possible de réécrire vos propres structures

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

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

Préférer des librairies existantes

Testées, plus robustes et rapide qu'un code personnel

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

Calcul numérique

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

Fortran

(FORmula TRANslating system)

Fortan

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

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

Autrefois très limité

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

Fortan

Language très aggréable pour calcul numérique

- Calcul vectoriel en standard
- Array slicing
- Matrice en standard
- Parallélisme aisé

```
INTEGER N = ...

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

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

Avantage/limitation Fortran

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

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

Fortan et Lapack

Librairie numérique de référence

- Structure de donnée matrice

BLAS

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

(opérations somme, multiplication matricielles)

- Algorithmes d'algèbre linéaire

Lapack

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

(inversion matrices, factorisation)

Lapack

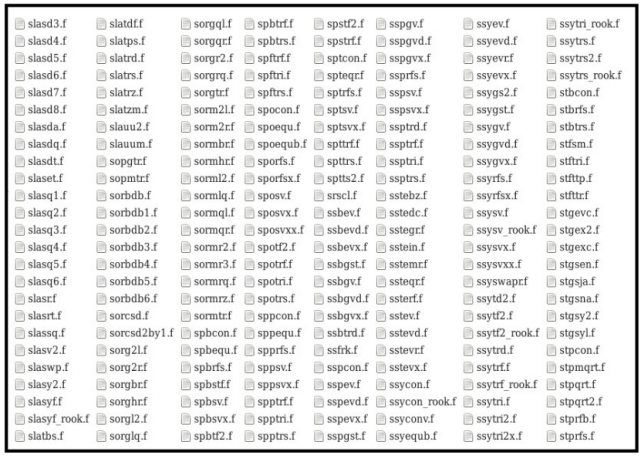
Lapack à été pendant longtemps le standard "de facto" du calcul numérique

Matlab était une *interface* au dessus de Lapack

Mais ...

Blas et Lapack sont bas niveau. Peu aggréable à utiliser

~1800 fichiers



slasd3.f	slatdf.f	sorgql.f	spbtrf.f	spstf2.f	sspgv.f	ssyev.f	ssytri_rook.f
slasd4.f	slatps.f	sorgqr.f	spbtrs.f	spstrf.f	sspgvd.f	ssyevd.f	ssytrs.f
slasd5.f	slatrd.f	sorgr2.f	spftrf.f	sptcon.f	sspgvx.f	ssyevr.f	ssytrs2.f
slasd6.f	slatrs.f	sorgrq.f	spftri.f	spteqrf	ssprfs.f	ssyevx.f	ssytrs_rook.f
slasd7.f	slatrz.f	sorgtr.f	spftrs.f	sptrfs.f	sspsv.f	ssygs2.f	stbcon.f
slasd8.f	slatzm.f	sorm2l.f	spocon.f	sptsv.f	sspsvx.f	ssygst.f	stbrfs.f
slasda.f	slauu2.f	sorm2r.f	spoequ.f	sptsvx.f	ssptrd.f	ssygv.f	stbtrs.f
slasdq.f	slauum.f	sormbr.f	spoequb.f	spttrf.f	ssptrf.f	ssygvd.f	stfsm.f
slasdt.f	sopgtr.f	sormhr.f	sporfs.f	spttrs.f	ssptri.f	ssygvx.f	stftri.f
slaset.f	sopmtr.f	sorml2.f	sporfsx.f	sptts2.f	ssptrs.f	ssyrfs.f	stfttp.f
slasq1.f	sorbdb.f	sormlq.f	sposv.f	srscl.f	sstebz.f	ssyrfsx.f	stfttr.f
slasq2.f	sorbdb1.f	sormql.f	sposvx.f	ssbev.f	sstedc.f	ssysv.f	stgevc.f
slasq3.f	sorbdb2.f	sormqr.f	sposvxx.f	ssbevd.f	sstegr.f	ssysv_rook.f	stgex2.f
slasq4.f	sorbdb3.f	sormr2.f	spotf2.f	ssbevx.f	sstein.f	ssysvx.f	stgexc.f
slasq5.f	sorbdb4.f	sormr3.f	spotrf.f	ssbgst.f	sstemr.f	ssysvxx.f	stgsen.f
slasq6.f	sorbdb5.f	sormrq.f	spotri.f	ssbgv.f	ssteqr.f	ssyswapr.f	stgsja.f
slasrf	sorbdb6.f	sormrz.f	spotrs.f	ssbgvd.f	ssterf.f	ssytd2.f	stgsna.f
slasrt.f	sorcsd.f	sormtr.f	sppcon.f	ssbgvx.f	sstev.f	ssytf2.f	stgsy2.f
slassq.f	sorcsd2by1.f	spbcon.f	sppequ.f	ssbtrd.f	sstevd.f	ssytf2_rook.f	stgsyl.f
slasv2.f	sorg2l.f	spbequ.f	spprfs.f	ssfrk.f	sstevr.f	ssytrd.f	stpcon.f
slaswp.f	sorg2r.f	spbrfs.f	sppsv.f	sspcon.f	sstevx.f	ssytrf.f	stpmqrt.f
slasy2.f	sorgbr.f	spbstf.f	sppsvx.f	sspev.f	ssycon.f	ssytrf_rook.f	stpqrt.f
slasyf.f	sorghr.f	spbsv.f	spptrf.f	sspevd.f	ssycon_rook.f	ssytri.f	stpqrt2.f
slasyf_rook.f	sorgl2.f	spbsvx.f	spptri.f	sspevx.f	ssyconv.f	ssytri2.f	stprfb.f
slatbs.f	sorglq.f	spbtf2.f	spptrs.f	sspgst.f	ssyequb.f	ssytri2x.f	stprfs.f

```
      DO I = 1, M-Q

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

Autres librairies

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

Les grands acteurs: Vue d'ensemble

GPU

Pour la puissance de calcul

+ Le plus performant

- Codage long et difficile
- Portabilité

Python + Numpy

Remplace de plus en plus Fortran + Lapack

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

Librairies C Librairies C++

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

- Apprentissage plus long
- Pas de standard
- Portabilité

Pour développer des logiciels

Matlab / Octave / Scilab

Pour les protos

+ Très simple d'utilisation

- Limitées aux prototypes
- Lenteur du code

Fortran + Lapack

Pour le standard

+ Standard
+ Robuste et vérifié

- Limité au calcul

Exemple de librairies

GSL: GNU Scientific Library

+ Librairie open source complète

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

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

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

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

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

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

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

Exemple de librairies

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

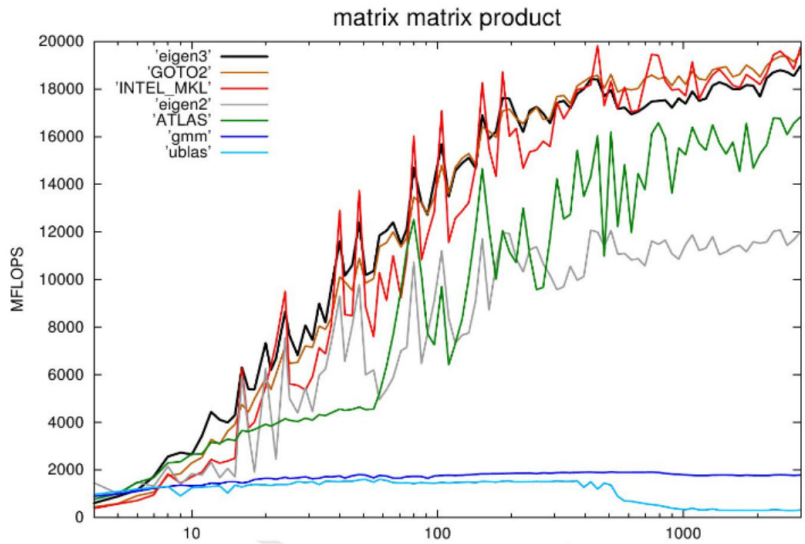
...

Eigen

- **Eigen**

  librairie C++ d'algèbre linéaire récente

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



Eigen: Utilisation

Support vecteur nD

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

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

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

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

Eigen: Utilisation

Support matrices

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

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

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

2.4 9
-8.4 4.4

Eigen: Utilisation

Support inversion de matrices

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

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

Eigen: Utilisation

Support résolution de système linéaire $Ax=b$

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

Choix des approches

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

Eigen: Utilisation

http://eigen.tuxfamily.org/

Support pour:

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