AMS-304 Résolution des problèmes de diffraction par équations intégrales (2017-2018)

Le compte-rendu de ce TP est à rendre au plus tard le **lundi 4 Décembre 2017** (un compte-rendu par personne). Le compte-rendu devra comprendre les réponses aux différentes questions, illustrées par vos résultats numériques. N'oubliez pas de mettre en avant les notions importantes vues en cours. Je ne demande pas les sources de votre code Matlab mais vous pouvez mettre du pseudo-code si vous le voulez.

Le but du TP est de vérifier numériquement les améliorations, en termes de temps de calcul et de coûts de stockage, apportées par la méthode multipôle rapide. Ce TP met également en évidence la précision de la méthode et sa dépendance à certains paramètres. On considère la FMM pour un nuage de points X. Ce nuage de points est défini comme les noeuds du maillage de la sphère utilisé dans le TP 4. Pour pouvoir effectuer les tests sur des cas les plus grands possibles, je vous rappelle qu'il faut impérativement éviter les boucles sous Matlab et vectoriser autant que possible.

Méthode multipôle rapide

On considère la fonction de Green G de l'équation de Helmholtz pour l'espace infini. On cherche à calculer de manière rapide le vecteur $\mathbf{V}$ ($\boldsymbol{\rho}$ est un vecteur aléatoire)

$$\mathbf{V}_i = \sum_{\mathbf{i}\neq\mathbf{j}} \frac{\exp(ik|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}\boldsymbol{\rho}_j, \quad \forall \mathbf{x_i} \in X.$$

Pour étudier la complexité de la méthode multipôle rapide, il est nécessaire de fixer la densité de points par longueur d'onde (i.e. augmenter à la fois le nombre de points et la fréquence du problème). Pour simplifier, voici les k à utiliser pour les différents maillages afin d'avoir environ dix points par longueur d'onde : $k = 4$ pour mesh 0, $k = 8$ pour mesh 1, $k = 16$ pour mesh 2 et $k = 40$ pour mesh 3.

Question 1 (Produit matrice-vecteur classique).
Coder la fonction qui effectue le produit matrice-vecteur de manière classique (i.e. le calcul du vecteur $\mathbf{V}$*). Tracer la courbe de complexité (temps de calcul en fonction du nombre de points du nuage, à densité de points fixée). Comparer à la complexité théorique (la tracer également). Quel est le plus grand* N *que vous pouvez traiter en 1mn ? en 5mn ? (n'attendez pas plus de 5mn). Quelle est l'influence de la fréquence sur le temps de calcul et pourquoi ?*

On va maintenant s'intéresser à l'évaluation de $\mathbf{V}$ par la méthode multipôle rapide.

Décomposition en ondes planes

On rappelle que la méthode s'appuie sur la décomposition

$$\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{y_0}-\boldsymbol{y})+(\boldsymbol{x_0}-\boldsymbol{y_0})-(\boldsymbol{x_0}-\boldsymbol{x})=\boldsymbol{r}_0+\boldsymbol{r}$$

et que le développement de la fonction de Green est donné par

$$\frac{\exp(ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|)}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}=\lim_{L\to+\infty}\int_{\hat{\boldsymbol{s}}\in S^2} e^{ik\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{r}}\mathcal{G}_L(\hat{\boldsymbol{s}};\boldsymbol{r_0}),$$

$$\mathcal{G}_L(\hat{\boldsymbol{s}};\boldsymbol{r_0})=\frac{ik}{16\pi^2}\sum_{p=0}^{L}(2p+1)i^p h_p^{(1)}(k|\boldsymbol{r_0}|)P_p\big(cos(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r_0})\big)$$

où $h_p^{(1)}$ est la fonction de Hankel sphérique et P_p le polynôme de Legendre.

Avant de coder la méthode multipôle rapide, on s'intéresse à la quadrature adaptée à l'intégration des harmoniques sphériques sur la sphère unité. On a vu dans le cours que cette quadrature est basée sur une quadrature de Gauss-Legendre.

Question 2 *Rappeler ce qu'est la quadrature de Gauss-Legendre à L points. Comment détermine-t-on les poids et les points de la quadrature ? Pourquoi cette quadrature est intéressante ? Redonner les quadratures de Gauss-Legendre à 1, 2 et 3 points.*

Le calcul des noeuds et poids de la quadrature de Gauss-Legendre (et plus généralement de toute famille de formules obtenue à partir d'une famille de polynômes orthogonaux) peut être effectué en résolvant un problème aux valeurs propres faisant intervenir une matrice tridiagonale. Cette approche est en général bien plus efficace qu'une méthode basée sur une recherche de racines. On introduit pour cela la matrice symétrique, définie positive et d'ordre infini appelée matrice de Jacobi

$$J_\infty=\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\beta_1} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & 0 & \sqrt{\beta_2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\beta_2} & 0 & \sqrt{\beta_3} & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}.$$

Alors les valeurs propres et vecteurs propres de la sous-matrice J_n $(n\geq 1)$ de J_∞, permettent de déterminer les noeuds et les poids de la quadrature d'ordre n.

Question 3 *Calculer les poids et points de la quadrature de Gauss-Legendre à L points à l'aide de l'algorithme ci-après. Pour vérifier que ce que vous avez codé est correct, comparez les quadratures à 1, 2 et 3 points avec celles obtenues dans la question 2. Essayer de tirer parti du fait que la matrice est tridiagonale symétrique pour minimiser le nombre d'opérations requises. Quelle est la complexité pour générer une quadrature à L points ?*

Algorithme pour la dérivation d'une Quadrature de Gauss-Legendre à L points

1. Assembler la matrice tridiagonale T de taille $L \times L$ définie par :

$$\begin{cases} T_{i,i} = 0, & i = 1, ..., L, \\ T_{i,i+1} = T_{i+1,i} = \dfrac{i}{\sqrt{4i^2 - 1}} & i = 1, \ldots, L-1. \end{cases}$$

2. Calculer les valeurs propres λ_i et vecteurs propres V_i de T.
3. Extraire les points et poids de quadrature :

$$\cos(\theta_i) = \lambda_i, \quad \omega_i = 2(V_i)_0^2$$

où $(V_i)_0$ est la première coordonnée du i-ème vecteur propre V_i.

Les variables θ et φ étant séparées dans les harmoniques sphériques, on cherche une quadrature sous la forme d'une grille (θ_i, φ_j) et les poids sous la forme de produits $\omega_i^\theta \omega_j^\varphi$.

Quadrature pour l'intégration des harmoniques sphériques sur la sphère unité

Les harmoniques sphériques sont données par

$$Y_{\ell m}(\boldsymbol{s}) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\varphi}.$$

On a montré en cours que la quadrature optimale est donnée par :
- une quadrature uniforme sur $[0, 2\pi]$, à $2L+1$ points pour φ ;
- une quadrature de Gauss-Legendre à $L+1$ points pour θ.

On note $\hat{\boldsymbol{s}}_p = (\theta_j, \varphi_i)$ avec $0 < i \leq L+1$ et $0 < j \leq 2L+1$.

Question 4 (Intégration des harmoniques sphériques).
Coder la quadrature pour l'intégration des harmoniques sphériques sur la sphère unité. Vérifier sa précision pour les harmoniques sphériques $Y_{\ell m}$ ($0 \leq \ell \leq 2L$; $-\ell \leq m \leq \ell$). Rappeler les égalités que doit satisfaire la quadrature ? Quelles sont les autres possibilités de quadrature ? Quels sont les avantages de cette quadrature ?

Question 5 (Développement en ondes planes pour un couple de points).
Coder le développement en ondes planes de la fonction de Green G.

Attention quand vous calculez les fonctions de Hankel sphériques avec Matlab, la fonction besselh donne les fonctions de Hankel et non pas les fonctions de Hankel sphériques. Pour évaluer les polynômes de Legendre, vous pouvez utiliser la récurrence

$$(1 + n)P_{n+1}(x) - (2n + 1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) = 0.$$

Question 6 (Précision et coût de calcul). *Vérifier la précision du développement pour différentes valeurs de L ainsi que pour différents couples de points $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$. Comment faut-il choisir les points $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$? Pourquoi ? Comment choisissez vous $\mathbf{x}_0$ et $\mathbf{y}_0$?*

Ont-ils une influence sur la précision du résultat ? Quelle est l'influence de L sur le temps de calcul (la qualifier précisément) ?

Nous avons maintenant presque tous les outils pour mettre en oeuvre la méthode multipôle rapide (mono-niveau) pour calculer le produit matrice-vecteur. Il ne reste plus qu'à construire le découpage en boîtes nécessaire pour conduire l'algorithme.

Question 7 (Méthode multipôle rapide mono-niveau).
Construire le découpage en boîte. La taille des boîtes est déterminée par la longueur d'onde ($d \geq \gamma\lambda$; on prendra $\gamma = 0.3$). Quelle est la différence entre les interactions proches et lointaines ? Pourquoi faut-il les distinguer ? Mettre en place une fonction qui détermine les listes d'interactions proches et lointaines. Mettre en oeuvre la méthode multipôle rapide pour calculer de manière rapide le produit matrice-vecteur pour tous les couples de points $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$ (mais en veillant bien à vérifier $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$).

Encore une fois, pour étudier la complexité de la méthode, il est nécessaire de fixer la densité de points par longueur d'onde (i.e. augmenter à la fois le nombre de points et la fréquence du problème). On rappelle que le temps à prendre en compte est seulement celui qui correspond au produit-matrice vecteur lors d'une itération du solveur itératif. Il ne faut donc pas prendre en compte toutes les étapes d'initialisation qui ne sont pas effectuées à toutes les itérations.

Question 8 (Complexité de la FMM). *Déterminer quelles sont les étapes d'initialisation qui ne doivent pas être prises en compte dans l'estimation de la complexité. Tracer la courbe de complexité qui représente le temps en fonction du nombre de points. Comparer à la complexité théorique (la tracer également). Quel est le plus grand N que vous pouvez traiter en 1mn ? en 5mn ?*

Question 9 (Comparaison méthode classique/méthode FMM). *Comparer les temps de calcul entre la méthode classique et la méthode FMM. Commenter.*