# Compléments de calcul numérique
# Projet 2017 – 2018

## Problème continu

On considère le problème de détermination de la fréquence d'oscillation fondamentale d'une membrane plane immobilisée le long de son bord, et du mode d'oscillation correspondant. Mathématiquement, le problème consiste à déterminer la valeur propre la plus basse de l'opposé de l'opérateur Laplacien à deux dimensions, et la fonction propre correspondante. Plus précisément, pour une membrane donnée $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, on cherche à déterminer le scalaire $\omega^2 > 0$ *le plus bas*, et la fonction $u$ suffisamment régulière tels que

$$\begin{cases} -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \omega^2 u & \text{sur } \Omega\,, \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega\,, \end{cases} \tag{1}$$

où $\partial\Omega$ est le bord de la membrane $\Omega$. Ici, la fonction $u$ décrit le déplacement maximal de la membrane – contenue à l'équilibre dans le plan $Oxy$ – dans la direction perpendiculaire à ce plan. Comme la membrane est immobilisée le long de son bord, le déplacement $u$ est nul le long de ce bord, ce qui correspond à la condition exprimée par la deuxième équation de (1). Pour ce qui est du facteur $\omega^2$, il représente le carré de la valeur normalisée de la fréquence d'oscillation.

Dans ce projet nous considérons la résolution numérique du problème (1).

Notons que ce problème est lié à la fameuse question de Mark Kac «Can You Hear the Shape of a Drum ?»[1], qui revient à se demander si deux membranes de forme différente peuvent avoir le même spectre, c'est-à-dire le même ensemble de valeurs propres $\omega_i^2$, $i = 1, 2, \ldots$, qui satisfont (1). Notons aussi que le problème aux valeurs propres continu (1) n'a que des valeurs propres positives, ce qui justifie la notation $\omega^2$.

## Discrétisation du problème

Les membranes considérées dans ce projet sont délimitées par des polygones à angles rectangles. La démarche de discrétisation est illustrée ici dans le cas simple où cette membrane a la forme d'un carré $L \times L$, voir Figure 1 (gauche) ; les autres membranes considérés dans le projet peuvent être obtenues à partir d'une membrane carrée en y supprimant une partie rectangulaire.

Dans le cas d'une membrane carrée, nous nous proposons de déterminer une approximation de la fonction propre $u$ du problème (1) aux points de la grille

$$(x_i, y_j) = (ih, jh)\,, \qquad i, j = 1, \ldots, m-2\,,$$

où $m$ est le nombre de points de la grille alignés dans une direction, et $h = L/(m-1)$ est le pas de discrétisation. Ces points couvrent uniformément l'intérieur de la membrane carrée, mais pas le bord de celle-ci, où la fonction propre s'annule, et donc est connue.

A chaque point de la grille nous associons une approximation $u_{i,j}$ de la fonction propre $u$ de la membrane au point $(x_i, y_j)$. Pour chaque point, nous établissons aussi dans ce qui suit une équation linéaire en des variables $u_{i,j}$ et en le scalaire $\omega^2$ ; l'ensemble de ces équations forment un problème aux valeurs propres discret. Pour obtenir ces équations nous utilisons notamment la formule de différence centrée pour la dérivée seconde qui, pour une fonction $u$ en la variable $x$, correspond à

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x) \approx \frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2}\,; \tag{2}$$

1. Mark Kac, *Can one hear the shape of a drum ?*, Amer. Math. Monthly 73 (1996), 1–23.

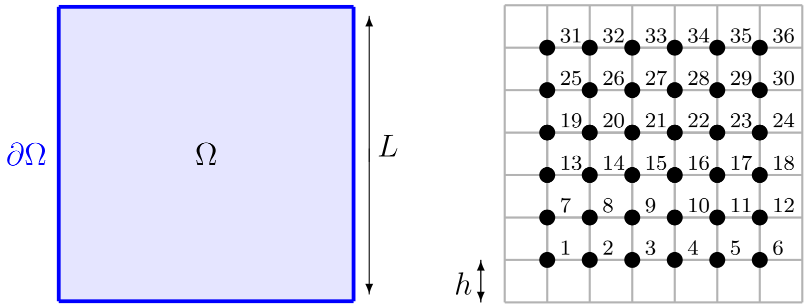


FIGURE 1 – La membrane carrée avec le bord mis en évidence (gauche) ; les points associés aux inconnues placés sur une grille $8 \times 8$ (droite) ; ces points sont numérotés dans l'ordre lexicographique.

on renvoie au Chapitre 9 du cours d'analyse numérique de BA2 pou sa dérivation et l'estimation d'erreur associées.

L'équation pour un point $(x_i, y_j)$ de la grille de discrétisation, $1 \leq i, j \leq m-2$, est obtenue en utilisant l'approximation (2) dans l'équation aux dérivées partielles (la première équation) de (1) pour la dérivée partielle selon $x$ et pour celle selon $y$, ce qui donne

$$-\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} - \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h^2} \;=\; \lambda u_{i,j}\,, \quad i,j = 1, \ldots, m-2\,, \tag{3}$$

où, pour rappel, $u_{i,j}$ représente l'approximation de la solution $u$ au point $(x_i, y_j)$. Notons que dans le cas où un des termes $u_{i-1,j}h^{-2}$, $u_{i+1,j}h^{-2}$, $u_{i,j-1}h^{-2}$, ou $u_{i,j+1}h^{-2}$ correspond à un point sur le bord de la membrane, sa valeur est mise à zéro pour respecter la condition au bord (la deuxième équation) de (1) ; ce terme disparaît alors de l'équation considérée.

En regroupant toutes les équations ainsi dérivées on obtient le problème au valeurs propres discret suivant

$$A\mathbf{u} \;=\; \omega^2 \mathbf{u}\,, \tag{4}$$

dont on cherchera la valeur propre $\omega^2$ la plus basse. En pratique, les équations comme (3) peuvent être groupées ensemble de plusieurs manières dans un problème aux valeurs propres discret (4). Un regroupement particulier dépend de l'ordre dans lequel les équations et les inconnues sont numérotées. En particulier, dans le cas de la membrane carrée il est pratique de considérer l'ordre *lexicographique* à la fois pour les équations et pour les inconnues. L'ordre lexicographique consiste à partir du coin sud-ouest et de numéroter les équations (et les inconnues) de la première ligne de la grille dans l'ordre croissant de l'ouest à l'est, suivies des inconnues de la deuxième ligne (de nouveau, ordre croissant de l'ouest à l'est), et ainsi de suite, jusqu'à ce que toutes les équation (et les inconnues) soient numérotées. L'ordonnancement lexicographique est illustré à la Figure 1 (droite) pour le problème représenté sur la Figure 1 (gauche) et dans le cas où $m = 8$.

## Format CSR

Il est à noter que la grande majorité des éléments de la matrice $A$ du problème aux valeurs propres discret (1) sont nuls. En effet, dans l'équation (3) tout au plus 5 inconnues sont reliées entre elles. Dès lors, chaque ligne de la matrice contient tout au plus 5 éléments non-nuls.

Le format *Compressed Sparse Row* (CSR) permet de ne garder en mémoire que les éléments non nuls de la matrice associée. CSR utilise 3 tableaux unidimensionnels pour représenter la matrice : `ia`, `ja` et `a`. Les tableaux `ja` et `a` conservent respectivement l'indice colonne et la valeur des éléments de la matrice ; ces indices/éléments y sont conservés dans l'ordre suivant : d'abord ceux de la première ligne, puis ceux de la seconde, et ainsi de suite. La taille de ces tableaux correspond au nombre d'éléments non nuls, qui est noté $\mathrm{nnz}(A)$. Le tableau `ia` indique quant à lui le début de chaque ligne ; plus précisément, le `i`-ème élément du tableau indique le début de la `i`-ème ligne dans `ja` et `a` ; le dernier élément indique l'élément qui suit la fin de la dernière ligne dans ces mêmes tableaux.

Ces spécifications s'appliquent avec une légère différence en FORTRAN et en C, de par le fait que les indices des tableaux commencent avec l'indice `1` en FORTRAN et avec l'indice 0 en C. Par exemple, en C la matrice qui suit s'écrira en format CSR de manière suivante

$$\begin{pmatrix} 1.0 & 2.0 & & & \\ 3.0 & 4.0 & 5.0 & & \\ & 6.0 & & & 7.0 \\ & & & 8.0 & \\ 9.0 & 10.0 & & & \end{pmatrix}$$

| | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| `a` | 1.0 | 2.0 | 3.0 | 4.0 | 5.0 | 6.0 | 7.0 | 8.0 | 9.0 | 10.0 | $\cdots$ |
| `ja` | 0 | 1 | 0 | 1 | 2 | 1 | 4 | 3 | 0 | 1 | $\cdots$ |
| `ia` | 0 | 2 | 5 | 7 | 8 | 10 | | | | | |

## Description des fichiers

Dans sa version actuelle, le code qui vous est fourni avec l'énoncé consiste à :

— générer la matrice $A$ du problème aux valeurs propres discret (4) tel qu'issu de la discrétisation du problème aux valeurs propres continu (1) pour la membrane carrée $[0,1]\times[0,1]$. La matrice du système est stockée dans le format CRS.

— déterminer la valeur propre $\omega^2$ la plus basse de $A$ avec le solveur PRIMME. Le temps de résolution est reporté à la fin de l'exécution du solveur.

Le code est composé des fichiers suivants :

— `prob.c` contient la fonction qui génère la matrice du problème aux valeurs propres en format CSR.

— `time.c` contient la fonction qui permet de mesurer le temps d'exécution (en secondes).

— `primme.c` est une interface avec le solveur PRIMME. Le solveur PRIMME est également fourni avec le code du projet ; il se trouve dans le répertoire `CodePub/primme`.

— `main.c` met ensemble le générateur de la matrice $A$ et le solveur PRIMME, tout en mesurant le temps de résolution ; c'est le fichier de base pour l'exécutable final.

**Note**. Avant de compiler les fichiers en utilisant `make` dans le répertoire `CodePub`, exécutez la commande `make` dans le répertoire `CodePub/primme` ; cela permettra de s'assurer que la bibliothèque des fonctions de PRIMME est crée et donc utilisable.

## Énoncé

Pour votre projet on vous demande d'effectuer les taches énumérées ci-dessous. Le code du projet doit être compilable à l'aide de la commande `make`.

1. (5 points) Modifier la fonction du fichier `prob.c` pour générer la matrice $A$ qui correspond à la membrane fournie en Annexe ; les membranes y sont répertoriées en fonction du numéro du projet.

   *Note :* La matrice au format CSR a été générée pour vous dans le cas $m = 9$. Vous pouvez les retrouver via le lien `http://metronu.ulb.ac.be/MATH-H-301/liste_projets.php`

2. (2 points) Écrivez une fonction qui évalue la norme du résidu

$$\frac{\|A\mathbf{u} - \omega^2\mathbf{u}\|_2}{\|\mathbf{u}\|_2} \tag{5}$$

   pour un couple formé d'une valeur propre $\omega^2$ et d'un vecteur propre $\mathbf{u}$. Calculez le résidu associé au couple $(\omega^2\,,\ \mathbf{u})$ fourni par le solveur PRIMME pour votre membrane.

3. (5 points) Écrivez une fonction qui permet d'affichez graphiquement l'approximation numérique du mode fondamental de votre membrane. Pour cela, vous pouvez interagir avec, par exemple, le programme `gnuplot`. Affichez le mode propre dans le cas où $m \geq 500$. Vérifiez que tous les vecteurs propres respectent bien les conditions aux limites du problème.
4. (5 points) Le problème connexe à celui considéré dans ce projet est le problème d'évolution de la température dans une membrane plane. Plus précisément, la solution $u = u(x, y, t)$ du problème suivant

$$\left\{ \begin{array}{rcll} D\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) & = & \frac{\partial u}{\partial t} & \text{sur } \Omega\,, \\ u & = & 0 & \text{sur } \partial\Omega\,, \\ u & = & u_0 & \text{en } t = 0\,, \end{array} \right.$$

donne la distribution de température dans le temps et dans l'espace pour une membrane plane $\Omega$ avec la température sur le bord $\partial\Omega$ de la membrane fixée à 0 et avec la distribution de température en $t = 0$ donnée partout en $\Omega$ par $u_0$. Ici $D$ est le coefficient de diffusion thermique ; les valeurs de $D$ et de $u_0$ sont fournies en Annexe. La version discrétisée de ce problème correspond au problème de Cauchy vectoriel suivant

$$\left\{ \begin{array}{rcl} -DA\mathbf{u}(t) & = & \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}\,, \quad t \in [0, \infty[\,, \\ \mathbf{u}(0) & = & \mathbf{u}_0\,, \end{array} \right.$$

où $A$ est la matrice obtenue au point (a).

Résolvez ce problème de Cauchy vectoriel par la méthode d'Euler progressive. Utilisez la valeur propre fournie par PRIMME pour déterminer le pas temporel limite pour lequel la méthode est encore stable. Vérifiez expérimentalement que les valeurs de pas supérieures rendent la méthode d'Euler progressive instable. Visualisez l'évolution de la température dans le temps.
5. (3 points) Utilisez un solveur aux valeurs propres pour matrices creause alternatif pour vérifier le calcul de la valeur et du vecteur propres. On demande à ce que ce solveur sois non payant et librement accessible en ligne. Comparez avec le solveur PRIMME utilisé dans ce projet.

   *Note :* Une liste des solveurs possibles est disponible via (voir la section *SPARSE EIGENVALUE SOLVERS*)

   `http://www.netlib.org/utk/people/JackDongarra/la-sw.html` .

   Alternativement, vous pouvez interfacer avec la librairie JADAMILU

   `http://homepages.ulb.ac.be/~jadamilu/` .

   Dans ce dernier cas, notez que le solveur est écrit en FORTRAN, ce qui implique un léger changement de format CRS de la matrice, comme discuté plus haut ; de plus, uniquement la partie triangulaire supérieure de la matrice est alors requise.

## Modalités et évaluation

Le projet est un **travail individuel**. Les codes du projet doivent être envoyés à l'adresse `anapov@ulb.ac.be` au plus tard le **vendredi 8 décembre 2017 à 17 heures**. **Un code de projet reçu après cette date recevra la note de 0/20 en première session.**

Une défense orale du projet sera organisée durant la semaine du 11 décembre, et comportera une présentation du travail réalisé de 7 minutes maximum suivie d'une discussion sur les codes (estimée à 18 minutes), qui peut en particulier exiger une modification du code réalisé (si demandée, elle durera 1 heure).

## Critères d'évaluation

Pour chaque question, on évaluera les points suivants :

— Le code fait-il ce qui est demandé ?
— Le code est-il assez efficace ?
— Le code est-il assez général ?
— Le code est-il lisible ? (proprement écrit et commenté ?)
— Le code est-il maîtrisé par son concepteur ? (défense orale)

A noter que le facteur «maîtrise» pondère la note de chaque question ; une maîtrise estimée à 0.5 impliquera donc la réduction par un facteur 2 de l'évaluation du code correspondant.

## Annexe

Le tableau suivant donne pour chaque projet la forme de la membrane (définie mathématiquement, et schématisée sur une figure plus bas), le coefficient de diffusion thermique $D$ (et le matériau auquel il correspond), et la température initiale $u_0$. Les dimensions de la membrane $\Omega$ sont renseignées en mètres (m).

| projet N° | $\Omega$ – définition | $\Omega$ – figure | $D$ ($m^2/s$) | $u_0$ ($^o$C) |
|---|---|---|---|---|
| 1 | $[0,1]^2 \setminus [\frac{1}{2},1]^2$ | Figure P1 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 2 | $[0,2]^2 \setminus [\frac{5}{4},2] \times [\frac{1}{2},2]$ | Figure P2 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 3 | $[0,1]^2 \setminus [\frac{5}{8},1] \times [\frac{1}{4},\frac{5}{8}]$ | Figure P3 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 4 | $[0,2]^2 \setminus [\frac{1}{2},\frac{3}{2}]^2$ | Figure P4 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 5 | $[0,1]^2 \setminus [\frac{1}{4},\frac{5}{8}] \times [0,\frac{5}{8}]$ | Figure P5 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 6 | $[0,2]^2 \setminus [0,\frac{5}{4}]^2$ | Figure P6 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 7 | $[0,4]^2 \setminus [\frac{3}{2},\frac{5}{2}] \times [1,3]$ | Figure P7 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 8 | $[0,1]^2 \setminus [\frac{3}{8},1] \times [0,\frac{1}{4}]$ | Figure P8 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 9 | $[0,1]^2 \setminus [0,\frac{5}{8}] \times [\frac{1}{4},\frac{1}{2}]$ | Figure P9 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 10 | $[0,2]^2 \setminus [\frac{1}{2},\frac{3}{4}]^2$ | Figure P10 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 11 | $[0,1]^2 \setminus [0,\frac{1}{4}] \times [\frac{5}{8},1]$ | Figure P11 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |
| 12 | $[0,2]^2 \setminus [\frac{1}{2},\frac{3}{2}] \times [\frac{5}{4},\frac{3}{2}]$ | Figure P12 | $9.7\,10^{-5}$ (aluminium) | 10 |

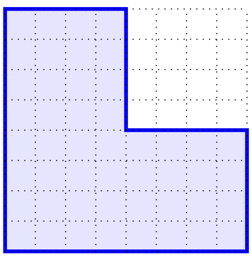
Figure P1

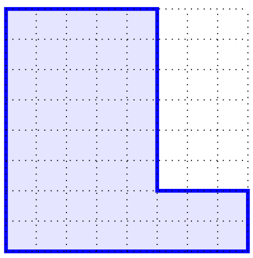
Figure P2

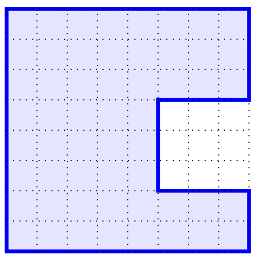
Figure P3

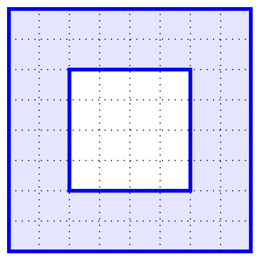
Figure P4

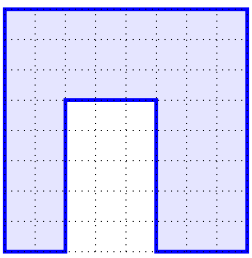
Figure P5

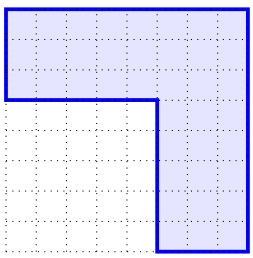
Figure P6

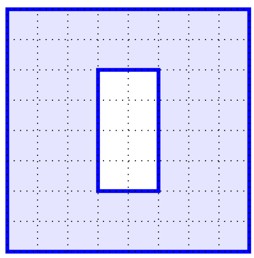
Figure P7

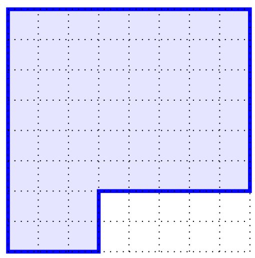
Figure P8

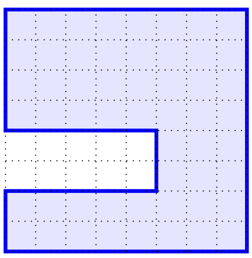
Figure P9

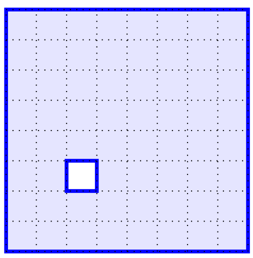
Figure P10

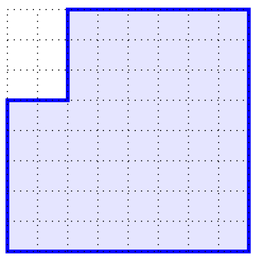
Figure P11

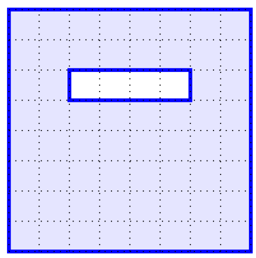
Figure P12