TP de Calcul Numérique

Nicolas BOUTON

2020

1 Exercice 1

1.0.1 Question 1

Approximation de T'' au moyen d'un schéma centré d'ordre 2. Developpement limité :

$$T(x_i + h) = T(x_i) + h\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i + h^2\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i + O(h^2)$$
$$T(x_i - h) = T(x_i) - h\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i + h^2\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i + O(h^2)$$

On somme et on inverse le signe :

$$-T(x_i + h) + 2T(x_i) - T(x_i - h) = -h^2\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i + O(h^2)$$
$$\frac{-T(x_i + h) + 2T(x_i) - T(x_i - h)}{h^2} = -\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i$$

Donc

$$T'' = \frac{T(x + h) - 2T(x) + T(x - h)}{h^2}$$

1.0.2 Question 2

On a :

$$-k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i = g_i, k > 0$$

On se permet de négligé k car c'est une constante dans nos prochain calcul :

$$-T(x_i + h) + 2T(x_i) - T(x_i - h) = h^2 g_i$$

On écrit le système d'équation :

$$\begin{array}{ll} u_0 = T_0 & i = 0 \\ -u_0 + 2u_1 - u_2 = h^2 g_1 & i = 1 \\ ... & ... \\ -u_{k-1} + 2u_k - u_{k+1} = h^2 g_k & i = k \\ ... & ... \\ -u_{n-1} + 2u_n - u_{n+1} = h^2 g_n & i = n \\ u_n = T_n & i = n+1 \end{array}$$

Avec les conditions aux bords on obtient :

$$\begin{array}{l} 2u_1 - u_2 = h^2 g_1 + T_0 \\ -u_{n-1} + 2u_n = h^2 g_n + T_n \end{array}$$

Donc on explicite le système linéaire $Au = g$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & - & - & - & 0 \\ -1 & 2 & -1 & . & & & | \\ 0 & -1 & . & . & . & & | \\ | & . & . & . & . & . & | \\ | & & . & . & . & -1 & 0 \\ | & & & . & -1 & 2 & -1 \\ 0 & - & - & - & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$u = \begin{bmatrix} T_1 \\ | \\ T_n \end{bmatrix}$$

$$g = \begin{bmatrix} h^2 T_1 + T_0 \\ h^2 T_2 \\ | \\ h^2 T_{n-1} \\ h^2 T_n + T_1 \end{bmatrix}$$

Comme il n'y a pas de source de chaleur, on a $\forall i \in [1, n] : h^2 g_i = 0$

D'où $g = \begin{bmatrix} T_0 \\ 0 \\ | \\ 0 \\ T_1 \end{bmatrix}$
Et la solution analytique qui se déguage est :

$$T(x) = T_0 + x(T_1 - T_0)$$

2 Exercice 2

2.1 Arch

2.1.1 Bibliothèque

Pour l'intallation des bibliothèque **cblas** et **lapacke** :
$ sudo pacman -S cblas lapacke

2.1.2 Makefile

Il faut modifier la ligne qui link les librairie en linkant la bibliothèque **cblas**:
#
# – librairies
LIBS=-llapacke -lcblas -lm

3 Exercice 3

3.1 Question 1

Les matrices pour utiliser **BLAS** et **LAPACK** en **C** sont allouées et déclarées de la même manière que les tableaux en **C**. Mais elles doivent être stockées dans l'un des formats suivant :

- stockage conventionnel en 2 dimension (ex: int tab[10][10])
- stockage compact pour les matrices symétrique, hermitienne et triangulaire (stockage dans un tableau à 1 dimension des éléments de la matrice supérieur ou inférieur)

- stockage bandes pour les matrices à bandes (cad que les diagonales autour de la diagonale principale contiennent la plupart des NNZ) (GB et GE)
- utilisation de 2 ou 3 tableaux à 1 dimension pour stocker les matrices bidiagonale et tridiagonale respectivement

source : `http://performance.netlib.org/lapack/lug/node121`

3.2 Question 2

- Les constantes LAPACK_ROW_MAJOR et LAPACK_COL_MAJOR signifie la priorité ligne ou colonne respectivement de la représentation de la matrice.
- Effectivement, cet argument sert si on utilise un stockage par priorité ligne ou colonne car il faut préciser si on a utilisé une priorité ligne ou colonne pour stocker la matrice pour pouvoir faire les bons calculs.

3.3 Question 3

La **leading dimension** permet de savoir qu'elle élément correspond à la prochaine colonne ou la prochaine ligne suivant le stockage colonne ou ligne respectivement.

- Si on choisis un stockage priorité ligne, alors la **leading dimension** correspond au nombre d'élément d'une ligne pour pouvoir accéder à la ligne suivante.
- Si on choisis un stockage priorité colonne, alors la **leading dimension** correspond au nombre d'élément d'une colonne pour pouvoir accéder à la colonne suivante.

3.4 Question 4

3.4.1 Résumé

La fonction LAPACKE_dgbsv permet de calculer le résultat d'un système linéaire du type $A * X = B$, avec $\mathbf{X}$ l'inconnu, $\mathbf{A}$ une matrice et $\mathbf{B}$ le second membre, où $\mathbf{X}$ et $\mathbf{B}$ peuvent être des vecteurs ou des matrices.

3.4.2 Argument

Elle prend en argument la dimension de la matrice, le nombre du sous-diagonnale ainsi que de sur-diagonnale, la leading dimension de **A** et de **B**, le nombre de colonne de **B** ainsi que tableau d'entier pour stoker les indices de permutation.

3.4.3 Implémentation

Cette fonction implémente une décomposition **LU** à pivot partiel et la méthode de dessente et de remonté.

3.4.4 Note importante

Pour la factorisation **LU**, la fonction a besoin d'un vecteur de travail ou il stockera les pivots. Suivant le stockage choisis on rajoutera une ligne ou une colonne avant de stocker notre matrice car le vecteur doit apparaître en premier.

3.4.5 Sources

`http://www.math.utah.edu/software/lapack/lapack-d/dgbsv.html`

3.5 Question 5

A titre comparatif nous prendrons une matrice de taille 10 x 10.

3.5.1 Stockage priorité colonne

$$
\begin{array}{rrrr}
0.000000 & 0.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & -1.000000 \\
0.000000 & -1.000000 & 2.000000 & 0.000000
\end{array}
$$

3.5.2 Stockage priorité ligne

$$\begin{array}{rrrrrrrrrr}
0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 \\
0.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 \\
2.000 & 2.000 & 2.000 & 2.000 & 2.000 & 2.000 & 2.000 & 2.000 & 2.000 & 2.000 \\
-1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & -1.000 & 0.000
\end{array}$$

Pour que le tableau soit affichable nous avons dû enlever les 3 derniers 0 de la sortie, mais cela ne change pas le résultat.

3.5.3 Remarques

Nous pouvons apercevoir que nous avons le bon résultat, étant donné que la première ligne qui réservé à **BlAS** pour son vecteur de travail est constitué de zéro ainsi que le premier élément de la diagonale supérieur et le dernier élément de le diagonale inférieur.
De plus pour vérifier le résultat il suffit de calculer la transposé de l'une des matrices et la comparé à la deuxième car elles doivent être égales. Ici la transposé d'une des 2 matrices est égales à la deuxième.

4 Exercice 5

4.1 Question 1

4.1.1 Equation

La fonction **cblas_dgbmv** permet de calculer l'équation suivante :

$$y = \alpha * A * x + \beta * y$$

Dans notre cas on a l'équation suivante :

$$A * u = b$$

Qu'on peut écrire avec les notations de l'équation juste au dessus :

$$A * y = x$$

Avec la question précédente on a calculer y. On peut donc tester la fonction sur l'équation suivante :

$$x = 1 * A * y + 0 * x$$

4.1.2 Argument

La fonction **cblas_dgbmv** prends à peut près les mêmes paramètres que **LAPACKE_dgbsv** plus les coefficient α et *beta*, le nombre de ligne et de colonne de la matrice en format classic ainsi qu'un paramètre qui indique si la matrice est une transposé ou non.
La fonction prend comme précondition que y et x soit des vecteurs.

4.1.3 Note importante

Contrairement à la fonction **LAPACKE_dgbsv**, la fonction **cblas_dgbmv** n'attend pas à ce qu'on lui laisse un vecteur au début de la matrice.

4.2 Question 2

Comme méthode de validation, nous proposons de calculé l'erreur relative suivante.
Etant donné que nous calculons l'équation suivante :

$$b = A * u$$

Nous allons calculer l'erreur relative suivante :

$$relres = \frac{\|EX\_SOL - B\|}{\|B\|}$$

où **B** est en fait le résultat calculé et **EX_SOL** la solution exacte.
Le résultat exacte de **B** est stocké dans le fichier **B.dat**.

4.2.1 Priorité Ligne

Le résultat est stocké dans le fichier **Y_row.dat**.

```
---------- Poisson 1D ----------


 INFO DGBSV = 0

The relative residual error is relres = 1.764638e-16

 DGBSV :

The relative residual error is relres = 5.102197e-16
```

```
———————— End ————————
```

Pour la priorité ligne il faut stocké les lignes en colonne et mettre comme leading dimension la leading dimension des colonnes donc conformément au code FORTRAN de BLAS qui stipule que la transposé de la matrice est calculé et utilisé à la place de la matrice d'entré si jamais on entre l'argument **CblasNoTrans**.

4.2.2 Priorité Colonne

Le résultat est stocké dans le fichier **Y_col.dat**.

```
———————— Poisson 1D ————————

 INFO DGBSV = 0

The relative residual error is relres = 1.764638e-16

 DGBSV :

The relative residual error is relres = 5.102197e-16


———————— End ————————
```

4.2.3 Explication

L'erreur relative de la fonction **cblas_dgbmv** est un peut plus élevé que l'erreur relative de la fonction **LAPACKE_dgbsv** qui peut être expliqué par le fait que le bit de signe ne change pas et nous nous retrouvons avec des zéro négatif au lieu de positif mais l'erreur reste acceptable car il est de l'ordre de la précision machine.

4.2.4 Conclusion

Nous pouvons donc validé l'appelle a blas pour la priorité colonne mais pas pour la priorité ligne pour le moment.

5 Exercice 5

5.1 Question 1

5.1.1 Implémentation scilab

Voir le premier rapport.

5.1.2 Implémentation C

5.1.3 Code

Le code est séparé en deux fichier, un contenant le code des fonction qui se trouve dans **src/lib_lu.c**, et un fichier qui contient le code de test qui est dans **src/tp2_facto_lu.c**.
Pour compiler : $ make tp2facto_lu
Pour executer : $ make run_tp2facto_lu

5.1.4 Explication

Nous avons effectuer une résolution d'un sytème linéaire tel que $A * x = b$ ou bien même $LU * x = b$ grâce à une factorisation LU.

Puis avec une méthode de dessente : $L * y = b$.
Puis avex une méthode de remonté : $U * x = y$.

Pour cela nous avons dû utiliser 1 matrice A et deux vecteurs X et B où A est une matrice tridiagonnale stocké en format général bandes priorité colonne de taille $3 * la$ (où **la** est la leading dimension de A), X un vecteur de taille **la** ainsi que B un vecteur de taille **la**.

Et nous effecturons les opérations suivantes :

$$\begin{cases} A = LU(A) \\ L * X = B \\ U * B = X \end{cases}$$

- on effectue la factorisation LU de A que l'on stocke dans A
- on effectue la méthode de dessente sur L et B et l'on stocke le résultat dans X

- on effectue la méthode de remonté sur U et X et l'on stocke le résultat dans B
- le résultat est bien dans le second membre c'est-à-dire B

5.2 Question 2

Pour la méthode de validation, nous allons calculer l'erreur relative avant et s'assurer que l'erreur est proche de la précision machine.

5.2.1 Calcul

$$relres = \frac{\|EX\_SOL - B\|}{\|B\|}$$

où EX_SOL est la solution exacte et B la solution calculé.

5.2.2 Résultat

```
———————— Facto LU ————————

The relative residual error is relres = 1.764638e-16

———————— End ————————
```

5.2.3 Conclusion

Le résultat de l'erreur est bien proche de la précision machine donc on peut valider notre algorithme et notre implémentation.

5.2.4 Comparaison avec cblas_dgbmv

L'erreur relative pour les deux calculs sont les mêmes, en effet la fonction de BLAS fait les mêmes que ce que l'ont a fait pour le cas particulier d'une matrice tridiagonnale mais sur des matices avec plus ou moins de diagonales. Il faudrai étudier le temps que prends les deux méthodes pour pouvoir mieux les comparer.

6 Exercice 6

6.1 Question 1

6.1.1 Jacobi

Algorithm 1: Applique le méthode de Jacobi

Data: $A \in \mathbb{R}^{n \cdot n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, $\epsilon \in \mathbb{R}$
Result: $x \in \mathbb{R}^n$
for $i = 1 : n$ **do**
    $D(i,i) = \frac{1}{A(i,i)}$;
    $x(i) = 1$;
end
do
    r = b - A * x;
    x = x + D * r;
while $\|r\| > \epsilon$;

6.1.2 Gauss Seidel

Algorithm 2: Applique le méthode de Gauss Seidel

Data: $A \in \mathbb{R}^{n \cdot n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, $\epsilon \in \mathbb{R}$
Result: $x \in \mathbb{R}^n$
for $i = 1 : n$ **do**
    $D(i,i) = A(i,i)$;
    $x(i) = 1$;
end
for $i = 2 : n$ **do**
    $E(i, i-1) = -A(i, i-1)$;
end
$DE = inverse(D - E)$;
do
    r = b - A * x;
    x = x + DE * r;
while $\|r\| > \epsilon$;

6.2 Question 2

Pour nos deux algorithme, nous voyons que la complexité en temps ne peux pas être explicite car tout dépend de l'erreur. D'après le cours on

était réduit à la formule ci dessous :

Pour Jacobi :

$$k = -\frac{p}{2 * log(cos(\pi * h))}$$

Pour Gauss Seidel :

$$k = -\frac{p}{log(cos(\pi * h))}$$

avec

- k le nombre d'itération
- p le nombre de chiffre significatif de l'erreur
- h un entier quelconque

6.2.1 Jacobi

Complexité :

- en temps : indéterminé (dépend des paramètre d'entré)
- en espace : $O(2n^2 + 3n)$ (2 matrice + 3 vecteur)

6.2.2 Gauss Seidel

Complexité :

- en temps : indéterminé (dépend des paramètre d'entré)
- en espace : $O(4n^2 + 3n)$ (4 matrice + 3 vecteur)

Pour amèliorer nos algorithmes d'un point de vu mémoire ainsi qu'en tant on pourrai transformé les matrices en format général bandes, on pourrai facilement calculé l'inverse des matrices pour les 2 méthodes car ici on est dans un cas particuliers des matrices tridiagonnales. Et dans la boucle **do...while** on fera appelle à la fonction de blas **dgvsv** pour nos 2 opérations car se sont en faites des systèmes linéaires. Il faudra juste multiplié par -1 le produit **matrice x vecteur** de la deuxième opération pour les 2 méthodes.

6.3 Question 3

Pour $n = 3$ on obtient le nombre d'itération suivante :

ϵ	jacobi	gauss seidel
10^{-1}	9	5
10^{-2}	16	8
10^{-3}	22	12
10^{-4}	29	15
10^{-5}	36	18
10^{-6}	42	22
10^{-7}	49	25
10^{-8}	56	28

6.4 Question 4

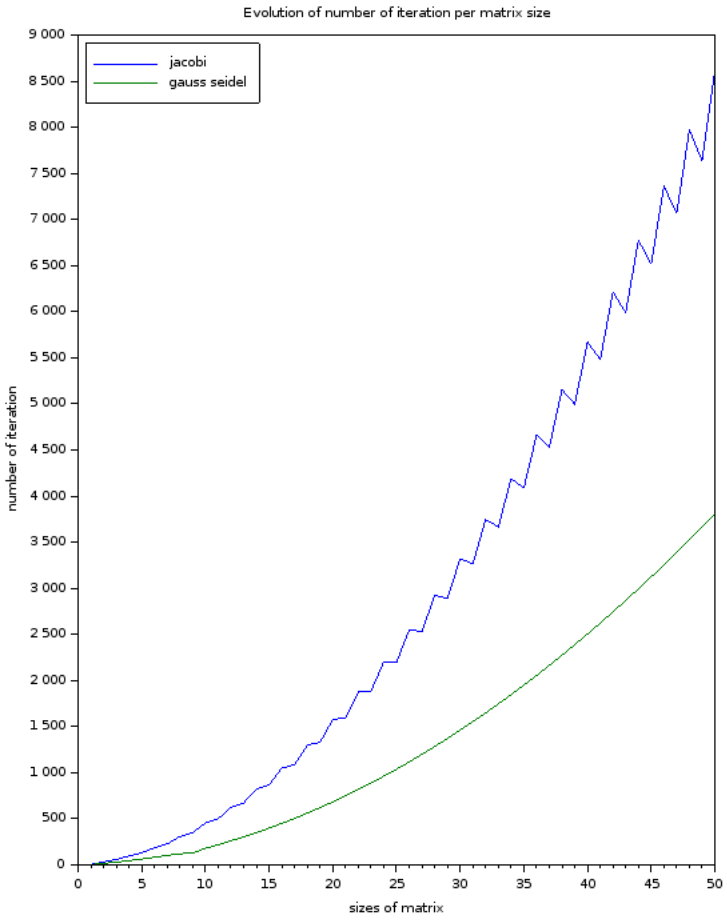
librairie : voir dans le fichier **src/iterative.sci**

script test : voir dans le fichier **src/tp2_iterative.sci**

6.5 Question 5

6.5.1 Varié la taille de la matrice

Ici un graphe qui montre l'évolution du nombre d'itération nécessaire en fonction de la taille de la matrice A afin d'atteindre la convergence pour une erreur de 10^{-8}.

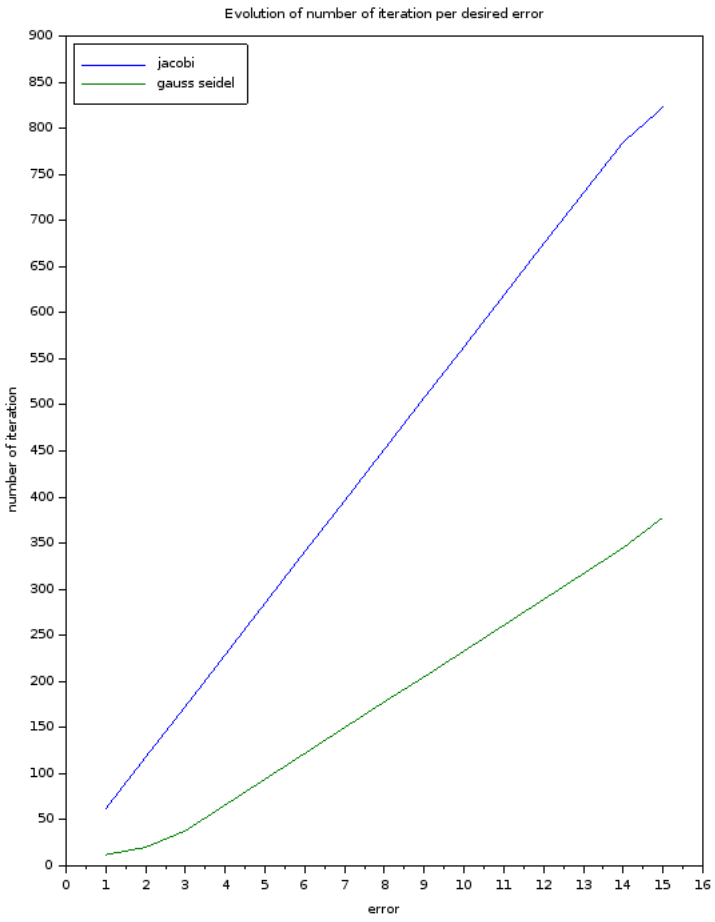


Nous pouvons appercevoir que le nombre d'itération évolue de manière **quadratique** ce qui est normal car nous stockons les matrices en format classique et donc elle augmente le nombre d'élément de façon quadratique et c'est donc plus difficiles d'arrivé à convergeance.

6.5.2 Varié l'erreur souhaité

Ici un graphe qui montre l'évolution du nombre d'itération nécessaire en fonction de l'erreur souhaité afin d'atteindre la convergence pour une taille

de matrice $n = 10$, soit une matrice $10x10$.



Nous pouvons apercevoir que lorsque l'on diminu l'erreur souhaité le nombre d'itération évolue de manière **linéaire** car le fait de diminuer l'erreur souhaité peut être écrit de façon linéaire tel que $e = e * 10^{-1}$.

6.5.3 Conclusion

Ces 2 graphiques confirmes que la méthode de Gauss Seidel converge plus rapidement que celle de Jacobi en termes de nombre d'itération de la méthode.

Mais cela ne veut pas dire qu'elle est plsu rapide.

7 Annexe

Dépôt github : `https://github.com/Sholde/CN/tree/master/partie_2/poisson`