Rapport du TP Calcul numérique Méthodes itératives de base

Bowen LIU

bowen.liu@ens.uvsq.fr

1. Introduction

L'objectif de ce TD/TP est d'appliquer un ensemble d'algorithmes étudiés en cours et TD pour la résolution d'un système linéaire obtenu par discrétisation par la méthode des différences finies de l'équation de la chaleur 1D stationnaire. Les implémentations seront faites en C avec BLAS et LAPACK. Afin de valider on peut nous reposer sur les implémentations Scilab réalisées en TD. Une analyse critique de résultats est demandée à partir de l'étude des complexités en temps et en espace. Pour chaque algorithme, le temps d'exécution en fonction de la taille de la matrice devra être mesuré et des courbes de performances devront être présentées.

2. Travail préliminaire : Etablissement d'un cas de test

2.1 Exercice 2

Pour un calcul efficace, installer d'abord les bibliothèques BLAS et LAPACK sur le système Ubuntu. Configurer ensuite le fichier hôte (.mk) et le document makefile pour tester l'environnement de travail. Après l'exécution, on obtient les résultats suivants :

bin/tp_testenv
----- Test environment of execution for Practical exercises of Numerical Algorithmics -----

The exponantial value is e = 2.718282

The maximum single precision value from values.h is maxfloat = 3.402823e+38

The maximum single precision value from float.h is flt_max = 3.402823e+38

The maximum double precision value from float.h is dbl_max = 1.797693e+308

The epsilon in single precision value from float.h is flt epsilon = 1.192093e-07

The epsilon in double precision value from float.h is dbl epsilon = 2.220446e-16

Test of ATLAS (BLAS/LAPACK) environment

$$x[0] = 1.000000, y[0] = 6.000000$$

$$x[1] = 2.000000, y[1] = 7.000000$$

$$x[2] = 3.000000, y[2] = 8.000000$$

$$x[3] = 4.000000, y[3] = 9.000000$$

$$x[4] = 5.000000, y[4] = 10.000000$$

$$y[0] = 1.000000$$

$$y[1] = 2.000000$$

$$y[2] = 3.000000$$

$$y[3] = 4.000000$$

$$y[4] = 5.000000$$

----- End -----

Le programme de test s'exécute avec succès, ce qui prouve que notre environnement de travail est normal et que nous pouvons continuer à terminer les prochains travaux dans cet environnement de travail.

3. Méthode directe et stockage bande

3.1 Exercice 3

- Q1. En langage C, un pointeur vers un type double et la fonction malloc sont utilisés pour allouer dynamiquement de la mémoire à la matrice.
- Q2. LAPACK_COL_MAJOR est une constante de LAPACK, utilisée pour préciser que l'ordre de stockage de la matrice est colonne majeure. Il s'agit de la méthode de stockage par défaut de LAPACK.

- Q3.1d fait référence à la dimension principale de la matrice, spécifiant la taille de chaque colonne dans la matrice de stockage.
- Q4. dgbmv est la fonction dans BLAS pour la multiplication matrice-vecteur à une matrice bandes.
- Q5. dgbtrf effectue une décomposition LU sur une matrice en bandes et renvoie le résultat stocké dans la matrice d'entrée.
- Q6. dgbtrs utilise les résultats de dgbtrf pour résoudre le système linéaire AX=B.
- Q7. dgbsv décompose directement la matrice LU et résout le système AX=B.
- Q8. Utiliser d'abord dgbmv pour calculer la multiplication matrice-vecteur, puis utiliser la soustraction matricielle pour calculer le résidu, puis appeler dnrm2 pour calculer la norme.

3.2 Exercice 4

- Q1. Dans le fichier lib_poisson1D.c, j'ai complété la définition de la fonction set_GB_operator_colMajor_poisson1D, qui permet de stocker la matrice Poisson1D au format GB colonne majeure.
- Q2. Dans tp_poisson1D_direct.c, lorsque set_GB_operator_colMajor_poisson1D est appelé, nous appelons cblas_dgbmv dans la bibliothèque BLAS pour calculer la multiplication matricielle et vectorielle et écrire le résultat dans le fichier MatrixVectorResult.dat.
- Q3. Nous pouvons utiliser la fonction relative_forward_error qui a été définie dans lib_poisson1D.c pour calculer l'erreur entre la solution numérique et la solution analytique. Si l'erreur est inférieure à une valeur spécifique (ici je définis la valeur comme 1e-10), alors la vérification est réussie.

3.3 Exercise 5

Q1. Nous pouvons effectuer une décomposition LU et résoudre ce système linéaire directement via dgbsv dans tp poisson1D direct.c.

Q2.

Afin d'évaluer les performances des méthodes que nous utilisons dans LAPACK,

nous devons mesurer le temps d'exécution du programme et analyser la complexité temporelle.

Pour la décomposition LU (dgbtrf), la complexité temporelle est O (n·kl·ku), où kl et ku sont respectivement la bande inférieure et la bande supérieure. Parce que la matrice tridiagonale kl=ku=1, la complexité temporelle peut être simplifiée en O(n)

Pour résoudre des systèmes triangulaires (dgbtrs), la complexité temporelle est similaire à la décomposition LU, qui est O(n·kl·ku), et peut être simplifiée en O(n) pour les matrices tridiagonales.

En résumé, on peut penser que la complexité temporelle dépend de la taille de la matrice et de la largeur de la bande.

Une autre base importante pour évaluer les performances est de mesurer le temps d'exécution du programme. En chronométrant l'exécution de l'appel de la fonction LAPACK, nous pouvons observer qu'il existe des différences de temps évidentes selon le type d'implémentation (IMPLEM), la taille de la matrice et aussi leur structure de bande.

3.4 Exercise 6

Q1. Dans le fichier lib_poisson1D.c, je définis la fonction dgbtrftridiag pour compléter la décomposition matricielle tridiagonale LU au format GB.