

Projet en C : Utilisation de Lapack

On considère l'équation différentielle ordinaire $-u'' = f$ en dimension 1, sur l'intervalle $[0, 1]$, avec les conditions aux limites $u(0) = u(1) = 0$. On résoud cette équation par la méthode des différences finies, en divisant le domaine $[0, 1]$ en sous-intervalles de largeur $h = 1/(n + 1)$. On obtient un système linéaire, $Ax = b$ où A est une matrice $n \times n$, tridiagonale symétrique définie positive :

- les éléments diagonaux de A sont tous égaux à 2 ;
- les éléments sur la première extra-diagonale supérieure et la première extra-diagonale inférieure de A sont tous égaux à -1 ;
- les éléments du vecteur b sont tous égaux à h^2 .

On s'intéresse à la résolution du système linéaire pour différentes tailles du système ($n=5$ à 705 par pas de 50). L'objectif est de mettre en évidence, en fonction de n , l'erreur d'approximation du résultat, estimée par la norme relative du vecteur résidu $\|A\tilde{x} - b\|_1/\|b\|_1$ où \tilde{x} est la solution numérique du système. Dans ce projet, les calculs seront faits en simple précision pour volontairement exagérer les erreurs numériques et faciliter leur visualisation graphique.

Mise en oeuvre

La résolution de chaque système est faite à l'aide d'un sous-programme de la bibliothèque Lapack, qui fournit des fonctions permettant la résolution de systèmes linéaires par différentes méthodes. Nous choisissons d'utiliser ici la fonction Fortran **SGESV** qui traite des matrices Générales, sans structure particulière.

Conformément aux spécifications du langage Fortran, les éléments d'une matrice sont stockés dans un tableau bidimensionnel **A** et rangés consécutivement colonne par colonne. En mémoire, les colonnes ont une taille fixe **LDA**, appelée "Leading Dimension", correspondant à la première dimension dans l'instruction de déclaration du tableau **A** : **real A(LDA, *)**.

Pour le projet en langage C, on alloue une zone de mémoire de n^2 éléments (ce qui impose alors **LDA = n**), avec les valeurs de **A** aux emplacements corrects.

Le prototype en Fortran de la fonction à utiliser est :

```
void LAPACK_gesv(int* n,int* nrhs,float* a,int* lda,int* ipiv,float* b,int* ldb,int *info)
```

La description se trouve sur le site Web de référence de Lapack (<http://www.netlib.org/lapack>). Plus précisément, la documentation des fichiers sources est à l'adresse <http://www.netlib.org/lapack/explore-html>.

Lorsque l'interface avec le langage C est installée (comme sur les machines de l'université), il suffit d'inclure le fichier `lapacke.h` pour déclarer cette fonction. Dans ce cas, l'édition de liens se fait en ajoutant l'option `-llapack`. Pour l'usage de Lapack sous Nuvolos, nous vous renvoyons aux consignes données en cours-TD.

Les résultats seront regroupés dans un fichier dont chaque ligne est constituée par les deux valeurs :

$$n \quad \|A\tilde{x} - b\|_1 / \|b\|_1.$$

Travail à réaliser

- Ecrire un programme monolithique réalisant la mise en oeuvre demandée.
- Ecrire une deuxième version avec des fonctions séparées assurant les tâches suivantes :
 1. initialisation des vecteurs définissant A et b ,
 2. calcul du produit matrice-vecteur Ax , étant donnés une matrice A et un vecteur x ,
 3. calcul de la différence de deux vecteurs,
 4. calcul de la norme 1 d'un vecteur x .
- Ecrire un script `projet.sh` permettant de compiler, de créer l'exécutable et d'exécuter ce dernier.
- Répondre aux questions suivantes :
 1. Que peut-on conclure de l'observation sous forme graphique des résultats numériques ?
 2. Compte tenu de la structure de la matrice considérée, la mise en oeuvre choisie est-elle judicieuse ?
Indiquer pourquoi si c'est le cas ou au contraire comment l'améliorer.
 3. Quelles modifications doit-on apporter pour faire les calculs en double précision ?

Challenge donnant lieu à un bonus proportionnel à la qualité du travail supplémentaire : réaliser le programme avec une structure pour les matrices et vecteurs.

Pour rendre ce projet

- **Préliminaires** : Créer un répertoire. Y regrouper les fichiers sources nécessaires et le fichier de résultats obtenu. Dans chaque fichier source, préciser en commentaire vos nom et numéro d'étudiant. Ecrire un compte-rendu `rappor.pdf` (maximum 2 pages), à déposer également dans ce répertoire, qui contiendra les éventuelles réponses aux questions et précisera les commandes pour la réalisation de l'exécutable.
- **Procédure** : Créer une archive zip de votre répertoire et la déposer sous l'espace Moodle dédié.

En cas de problème, ne pas hésiter à envoyer un message à `eric.darrigrand-lacarrieu@univ-rennes.fr` et `mariko.dunseath-terao@univ-rennes.fr`.