Informations sur le projet c++ et sa soutenance

1) La soutenance du projet sera orale

2) l'enseignant corrigeant le projet et assumant sa soutenance sera celui qui l'a proposé

3) Le projet doit pouvoir s'exécuter sur les machines de la salle info

4) Il y a un dossier par étudiant et un programme par étudiant

5) Le dossier sera remis en temps au secretariat sur support papier, celui-ci contenant l'ensemble du projet en précisant le nom du correcteur

6) Le dossier du projet doit comporter :
   a) le compte rendu qui peut-être manuscrit ou tape
   b) le listing du programme judicieusement commenté
   c) le listing des fichiers constituant les jeux d'essai
   d) les dessins s'il y a lieu
   e) les commandes pour exécuter le ou les programmes et obtenir les dessins si il y a lieu

7) le compte rendu doit expliquer la ou les méthodes employées, les discussions des résultats obtenus
La justification du choix des jeux d'essai proposés. Les commentaires sur le programme doivent être dans le programme lui-même.
vous devrez indiquer les noms des fichiers concernés par votre projet et ce qu'ils contiennent.

8) les dessins doivent comporter un titre explicite, des axes avec leurs légendes et leurs unités

Equation de la chaleur

Le sujet est de résoudre l'Equation de la chaleur non stationnaire dans un milieu discontinu

Par raison de simplicité, je vous propose de résoudre un problème de conduction thermique à deux dimensions mettant en présence deux substances A et B qui sont en contact comme l'indique la figure ci-dessous. L'équation de diffusion dans chacun des milieux s'écrit:

$$\alpha(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial y^2}) = \frac{\partial\theta}{\partial t}$$

Le coefficient de diffusion thermique de A et B s'écrit respectivement α_A et α_B et les conductivités thermiques k_A et k_B. La condition de continuité à la frontière des deux domaines est déduite de la conservation du flux de chaleur qui s'écrit dans ce cas:

$$k_A(\frac{\partial\theta}{\partial x})_A = k_B(\frac{\partial\theta}{\partial x})_B$$

La relation liant k et α s'écrit:

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$$

Les conditions initiales et aux limites seront fixées oralement. La technique de résolution sera la méthode des lignes ou une méthode implicite et le laplacien sera évalué avec un schéma à neuf points.

Résolution d'équations intégrales

Dans de nombreux domaine de la physique (optique,diffusion ect..), on recontre des équations intégrales du type suivant:

$$f(s) = \eta(s) - \int_a^b K(s,t)\eta(t)dt$$

$K(s,t)$ est appelé le noyau de l'équation et η est la fonction inconnue.

Vous devez résoudre une équation intégrale en exprimant l'intégrale à l'aide d'une somme et l'on alors obtient un système linéaire qui nous fournit la valeur de la fonction en un certain nombre de points. Pour l'intégration vous appliquerez la méthode d'extrapolation.

Montrer que:

$$\varphi(x) = sin\frac{\pi x}{2}$$

est solution de l'équation intégrale suivante:

$$\varphi(x) - \frac{\pi^2}{4}\int_0^1 K(x,t)\varphi(t)dt = \frac{x}{2}$$

où le noyau est de la forme:

$$K(x,t) = \frac{x(2-t)}{2} \quad 0 \leq x \leq t$$

et

$$K(x,t) = \frac{t(2-x)}{2} \quad t \leq x \leq 1$$

vous comparerez plusieurs méthodes d'intégration notamment des méthodes de Gauss , enfin vous pourrez appliquer votre programme à une équation intgrale de votre choix.

Soit un atome d'hélium, l'interaction entre noyau et electrons est de la forme:

$$wep(r) = -\frac{z}{r} erf(\sqrt{\omega} * r)$$

le potentiel d'interaction entre electrons est de la forme

$$wee(r) = \frac{1}{r} erf(\sqrt{\frac{\omega}{2}} r)$$

ω est un paramètre positif de l'ordre de 1

En prenant comme conditions initiales les positions et les impulsions des electrons vous integrerez les equations classiques de mouvement dans un referentiel qui elimine le mouvement du centre d'inertie (Landau mecanique paragraphe masse reduite) Pour chaque electron vous dessinerez l'intersection de sa trajectoire avec un plan qui lui est perpendiculaire.(la trajectoire étant dans le referentiel initiale

Vous travaillerez a énergie totale constante, dans un premier temps, afin de vous simplifier la tâche vous travaillerez dans le même plan pour les deux électrons. Vous regarderez la stabilité des trajectoires en fonction de ω

Etat d'équilibre thermique d'une plaque

Soit une plaque carré, dont on veut connaitre l'état d'équilibre thermique, sachant que l'on impose une température de $T = 0$ sur trois des cotés et une température $T = 100$ sur le quatrième.

On va approximer les dérivées partielles de ce problème par des différences finies, par exemple au point (x, y), on peut écrire:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T(x+h, y) - 2T(x, y) + T(x-h, y)}{h^2}$$

Vous tiendrez compte du traitement particulier à appliquer aux points qui sont sur les bords.

La discrétisation de ce problème conduit à un système linéaire que vous résoudrez. Une fois ce problème résolu refaites le calcul pour des conditions sur les bords de votre choix. Comparer les résultats pour plusieurs maillages et plusieurs approximations des opérateurs différentiels, notamment le schéma à neuf points. Vous résoudrez le schéma obtenu par une méthode multigrille. vous pourrez aussi essayer de résoudre le schéma aux différences par la méthode de transformée de Fourier discrète

Modèle de Thomas-Fermi

En suivant Landau et Lifchitz (Mécanique quantique), on montre que dans le modèle de Thomas-Fermi pour tous les atomes, la répartition des charges et des potentiels est semblable. On assimile chaque atome à une sphère de rayon r_0

On montre que φ potentiel total répond à l'équation de Thomas-Fermi qui s'écrit sous la forme suivante qui ne dépend pas de l'atome considéré.

$$\triangle\varphi = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi}\varphi^{3/2}$$

L'équation de Thomas-Fermi en coordonnées sphériques après quelques transformations s'écrit:

$$x^{1/2}\frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{3/2}$$

Les conditions aux limites imposées à ce problème sont $\chi(0) = 1$, le potentiel total tend vers le potentiel coulombien du noyau au voisinage de celui-ci, d'autre part l'électroneutralité de la cellule sphérique impose sur son bord la relation suivante:

$$\chi(x) = x\chi'(x)$$

pour $x = x_0$

La résolution de cette équation différentielle à valeurs sur les bords se fait à l'aide d'une méthode de tir.

Modèle de proie prédateur

Un modèle simple d'interaction de population de proie et de prédateur (dans notre exemple renard et lapin). Soit r(t) et l(t) les densités (nombre par km^2 de renard et de lapin. Soit p_r et p_l le taux de croissance de ces deux populations ; c'est-à-dire que p_l suppose qu'il n'y a pas de renard mangeant des lapins et p_r suppose qu'il y a une infinité de lapin à manger (on supposera que les renards ne mangent que les lapins et que les lapins ne sont mangés que par les renards). Soit m le nombre de lapin qu'aimerait manger par an un renard, soit s(t)=l(t)/(m*r(t)) et on définit par repas(t)= nombre de lapins mangés effectivement mangés par un renard en une année et décès(t)= le nombre de renard qui meure de faim par an par manque de lapin. On modélise l'interaction entre les populations en prenant
Repas(t)=m*min (1, l(t)/α)
décès(t)= exp(-β s(t))
Les paramètres α et β nous permettent d'ajuster le modèle à l'expérience. Le rôle de α est que une fois que la densité de lapins décroît en dessous de α, alors les renards commence à abandonner la chasse aux lapins et la densité des renards commence à décroître. Le rôle de β est illustré par le fait que quand s(t)=1 (il y a juste assez de lapins pour nourrir les renards pour un an), nous avons décès(1)= exp(-β)
Les équations différentielles qui représentent l'évolution des populations sont :
l'= p_l*l –repas(t)*r
r'=p_r*r –décès(t)*r

Avec comme conditions initiales : r(0)=r0 et l(0)=l0 ; vous étudierez un certain nombre de cas avec :

Cas	α	β	P_l	P_r	M	l0	r0
A	30	3.4	0.2	0.2	110	12	0.4
B	30	2.0	0.2	0.2	50	50	0.2
C	30	3.4	0.2	0.2	100	12	0.005
D	30	3.4	0.26	0.2	110	120	3.0
E	30	1.0	0.2	0.2	110	12	3.0
F	30	2.0	0.2	0.2	100	300	1.0

On étudiera le système sur 100 ans, vous dessinerez l'évolution des deux populations pour ces différents cas.

Nous allons maintenant différent cas tel que :

- Migration brutale de lapin : la valeur de l s'accroît de M pendant une période d, cet accroissement peut-être modélisé de la façon suivante, on ajoute un terme m(t) défini de la façon suivante :
  - m(t)=k pour C<= t <= C+d
  - m(t)=0 autrement où K*d=M
- Migration brutale de renard ou un soudain exode
- Renard plus efficace, supposons que par magie (ou suite à un entraînement spécifique), les renards soient devenus plus performants, la nouvelle formule de repas(t) devient :
  repas(t)= m*min (1, l(t)/α) pour A<= t <=C
  repas(t)= 2*m*min (1,2*l(t)/α) pour C<= t <=B
- Variations dans les taux de croissance des populations de renard et/ou de lapin (différentes variations peuvent être étudiées)
- Nouvelles sources de nourriture pour les renards, m peut varier brutalement ou de façon plus douce tel que :
  m = 100 pour A <= t <= C
  m = 100 / (1 + $(t – C)^d$) pour C <= t <= B
  d = 1, 2, 3

Vous pourrez aussi à votre convenance, envisagez toutes autres situations, de nombreux documents concernant le modèle proie-prédateur existant sur internet.

Estimation d'une intégrale par la méthode de Monte-Carlo

Les générateurs de nombre aléatoire tirent des nombres aléatoires dans l'intervalle [0,1], par une transformation linéaire on peut se ramener à un intervalle [a,b],

Pour estimer la valeur d'une intégrale sur l'intervalle [a,b], on tire un certain nombre de valeur de x dans [a,b] on en déduit les valeurs de f(x)

- Vous étudierez l'influence de la précision obtenue en fonction du nombre de valeur tirée, vous ferez plusieurs tirages pour un nombre de valeur donnée, en changeant d'amorce
- Refaites la même expérience en prenant à chaque tirage, les variables x et 1-x, (variables antithétiques), si l'on travaille sur l'intervalle [0,1].
- Refaites la même expérience pour calculer I(f)= I(f-h) + I(h), on h est une fonction proche de f dont on sait calculer l'intégrale, on appliquera la méthode de Monte-Carlo sur I(f-h)
- Refaites la même expérience avec un échantillonnage stratifié, vous étudierez l'influence du nombre d'éléments de découpage de l'intervalle de départ
- Refaites la même expérience en combinant les deux méthodes précédentes

PS : vous pouvez écrire vous-même vos propre générateur de nombres aléatoires, on en trouve un grand nombre sur internet, vous pouvez aussi utiliser des méthodes quasi-aléatoires