Calcul Haute Performance

Projet de Programmation

Alexis TARDIEU

Valentin PANNETIER

Utilisation de la Bibliothèque MPI pour la Résolution de l'Equation de la Chaleur 2D en Différences Finies

Université de Bordeaux – M1 EDP & Modélisation

1 Analyse du problème

⋆ **Le schéma numérique :**

On étudie ici l'équation de la chaleur 2D avec conditions de Dirichlet :

$$\forall\ t \geq 0, \forall\ (x,y) \in [0,Lx] \times [0,Ly], \quad \begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}(x,y,t) - D\Delta u(x,y,t) = f(x,y,t) \\ u|_{\Gamma_0} = g(x,y,t) \\ u|_{\Gamma_1} = h(x,y,t) \end{cases}$$

Comme le Laplacien en 2D s'écrit

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \ ,$$

le schéma d'Euler implicite centré en différences finies est :

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n}}{\Delta t} - D\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} - D\frac{u_{i,j+1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = f_{i,j}^{n} \ .$$

⋆ **Mise sous forme matricielle :**

En convenant de poser

$$a := 1 + \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{2D\Delta t}{\Delta y^2}, \quad b := -\frac{D\Delta t}{\Delta x^2}, \quad c := -\frac{D\Delta t}{\Delta y^2} \ ,$$

le schéma numérique précédent peut se réécrire sous la forme

$$a \cdot u_{i,j}^{n+1} + b \cdot [u_{i+1,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1}] + c \cdot [u_{i,j+1}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}] = u_{i,j}^{n} + \Delta t f_{i,j}^{n} \ .$$

Notons maintenant, pour tout $j \in \{1, \dots, Ny\}$,

$$U_j := \begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{Nx,j} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad F_j := \begin{pmatrix} f_{1,j} \\ f_{2,j} \\ \vdots \\ f_{Nx,j} \end{pmatrix} \ ,$$

puis construisons les deux vecteurs de taille $Nx \times Ny$:

$$U := \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{Ny} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad F := \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_{Ny} \end{pmatrix}.$$

Définissons également les deux matrices de $\mathcal{M}_{Nx}(\mathbb{R})$:

$$T := \begin{pmatrix} a & b & & & \\ b & a & b & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b & a & b \\ & & & b & a \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad M := \begin{pmatrix} c & & & \\ & c & & \\ & & \ddots & \\ & & & c \end{pmatrix} = c \cdot I_{Nx} \ .$$

Avant de mettre le schéma numérique sous forme matricielle, il convient d'expliquer convenablement ce qu'il se passe sur les quatre bords, en prenant en compte les conditions aux limites de Dirichlet données. On a :

— Bord inférieur Γ_0 : Pour tout $i \in \{1, \ldots, Nx\}$ et pour $j = 1$,

$$a \cdot u_{i,1}^{n+1} + b \cdot [u_{i+1,1}^{n+1} + u_{i-1,1}^{n+1}] + c \cdot u_{i,2}^{n+1} = u_{i,1}^{n} + \Delta t f_{i,1}^{n} - c \cdot g_{i,0}^{n}$$

— Bord supérieur Γ_0 : Pour tout $i \in \{1, \ldots, Nx\}$ et pour $j = Ny$,

$$a \cdot u_{i,Ny}^{n+1} + b \cdot [u_{i+1,Ny}^{n+1} + u_{i-1,Ny}^{n+1}] + c \cdot u_{i,Ny-1}^{n+1} = u_{i,j}^{n} + \Delta t f_{i,j}^{n} - c \cdot g_{i,Ny+1}^{n}$$

— Bord gauche Γ_1 : Pour tout $j \in \{1, \ldots, Ny\}$ et pour $i = 1$,

$$a \cdot u_{1,j}^{n+1} + b \cdot u_{2,j}^{n+1} + c \cdot [u_{1,j+1}^{n+1} + u_{1,j-1}^{n+1}] = u_{1,j}^{n} + \Delta t f_{1,j}^{n} - b \cdot h_{0,j}^{n}$$

— Bord droit Γ_1 : Pour tout $j \in \{1, \ldots, Ny\}$ et pour $i = Nx$,

$$a \cdot u_{Nx,j}^{n+1} + b \cdot u_{Nx,j}^{n+1} + c \cdot [u_{Nx,j+1}^{n+1} + u_{Nx,j-1}^{n+1}] = u_{Nx,j}^{n} + \Delta t f_{Nx,j}^{n} - b \cdot h_{Nx+1,j}^{n}$$

Autrement dit, pour tous les points de l'intérieur qui sont au voisinage du bord Γ_0, ie. pour les noeuds contenus dans U_1 et U_{Ny}, il faut ajouter les termes $-c \cdot g_{i,j}^{n}$ correspondants dans un vecteur B_0. De même, pour tous les points de l'intérieur qui sont au voisinage du bord Γ_1, ie. ceux pour lesquels $i \in \{1, Nx\}$ (la première et la dernière coordonnée de U_j pour tout j), il faut ajouter les termes $-b \cdot h_{i,j}^{n}$ adéquats dans un vecteur B_1. Le schéma numérique se met ainsi sous la forme matricielle suivante :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} T & M & & & \\ M & T & M & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & M & T & M \\ & & & M & T \end{pmatrix}}_{=:\, A} \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ U_{Ny-1}^{n+1} \\ U_{Ny}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_1^{n} \\ U_2^{n} \\ \vdots \\ U_{Ny-1}^{n} \\ U_{Ny}^{n} \end{pmatrix} + \Delta t \begin{pmatrix} F_1^{n} \\ F_2^{n} \\ \vdots \\ F_{Ny-1}^{n} \\ F_{Ny}^{n} \end{pmatrix} + B_0 + B_1 \ ,$$

où les vecteurs de termes aux bord B_0 et B_1 sont définis par

$$
B_0 := -c \begin{pmatrix} {}^t(g^n_{1,0}, \dots, g^n_{Nx,0}) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ {}^t(g^n_{1,Ny+1}, \dots, g^n_{Nx,Ny+1}) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad B_1 := -b \begin{pmatrix} {}^t(h^n_{0,1}, \dots, h^n_{Nx+1,1}) \\ {}^t(h^n_{0,2}, \dots, h^n_{Nx+1,2}) \\ \vdots \\ {}^t(h^n_{0,Ny}, \dots, h^n_{Nx+1,Ny}) \end{pmatrix}
$$

Finalement, le schéma d'Euler implicite centré est ici

$$
A \cdot U^{n+1} = \underbrace{U^n + \Delta t F + B_0 + B_1}_{=:\, W^n}
$$

$\star$ **Structure et propriétés de A :**

La matrice $A \in \mathcal{M}_{Nx \times Ny}(\mathbb{R})$, qu'on peut réécrire d'une façon plus extensive et explicite :

$$
A = \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
a & b & & & c & & & & & & & & & & & \\
b & a & b & & & c & & & & & & & & & & \\
& \ddots & \ddots & b & & & \ddots & & & & & & & & & \\
& & b & a & & & & c & & & & & & & & \\
\hline
c & & & & a & b & & & & & & & & & & \\
& c & & & b & a & b & & & & & & & & & \\
& & \ddots & & & \ddots & \ddots & b & & \ddots & & & & & & \\
& & & c & & & b & a & & & & & & & & \\
\hline
& & & & & & & & & & & & c & & & \\
& & & & & & & & & & & & & c & & \\
& & & & & \ddots & & & & \ddots & & & & & \ddots & \\
& & & & & & & & & & & & & & & c \\
\hline
& & & & & & & & c & & & & a & b & & \\
& & & & & & & & & c & & & b & a & b & \\
& & & & & & & & & & \ddots & & & \ddots & \ddots & b \\
& & & & & & & & & & & c & & & b & a
\end{array}\right)
$$

est tri-diagonale par blocs, avec T elle-même tri-diagonale, et M diagonale. Par conséquent, A est *penta-diagonale* : ceci est intéressant car elle est essentiellement *creuse*. On pourrait au choix :

— Utiliser une "sparse matrix" pour la stocker car elle est penta-diagonale (mais on ne retiendra pas cette solution car elle est moins naturelle pour la parallélisation qui va suivre).

— Remarquer que toutes ses lignes sont identiques modulo une translation des coefficients vers la droite (à l'exception des débuts et fins de blocs) ; il suffira donc de travailler avec cette ligne (on retiendra cette solution).

D'autre part, en comparant le module du coefficient diagonal de A (ie. $|a|$) au module de la somme des autres coordonnées d'une ligne (ie. au maximum $|2b + 2c|$ car les lignes proches de 0 et de $Nx \times Ny$ ont ce module encore inférieur), on remarque que

$$|a| \geq |2b + 2c|.$$

Par conséquent, cette matrice est dite à diagonale strictement dominante. Le théorème de Hadamard assure son inversibilité, et ainsi l'unicité de la solution U^{n+1} du problème $A \cdot U^{n+1} = W^n$ pour un temps n donné. L'inversion du système sera effectuée avec la méthode du *gradient conjugué*.

2 Implémentation informatique

2.1 Le code séquentiel

2.2 Le code parallèle

3 Validation et conclusions