Présentation du stage

Analyse numérique d'équations aux dérivées partielles par différences finies et implémentation optimisée pour le calcul haute performance

par Jean-Baptiste Gaillot

Introduction

Explications

- Projet mathématique et informatique
- Résolution d'EDP par la méthode des différences finies
- Utilisation d'outils :
  - Analyse numérique
  - Calcul numérique
  - Algorithmique séquentielle
  - Algorithmique parallèle
  - Programmation C, OpenMP, MPI

Introduction – Partie mathématiques

Organisation

- Concevoir un schéma numérique pour obtenir une solution approchée du problème
- S'assurer de l'existence et de l'unicité de la solution approchée
- S'assurer des bonnes propriétés du schéma (consistance, convergence, erreur locale, ...)
- Concevoir des schémas de résolution de l'éventuel système linéaire associé à cette méthode

Introduction – Partie mathématiques

Conventions

Notations

- $N+1$ est le nombre de noeuds dans une direction, N_t+1 est le nombre de noeuds en temps,
- $x_i := ih, y_j := jh$ et $t_k := kh_t$ pour $i,j \in \{0,\ \ldots,\ N\}, t \in \{0,\ \ldots,\ N_t\}$,
- $u\left(x_i, y_j, t_k\right) :\approx u_{i,j}^k$,
- $u := \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_{N-1} \end{pmatrix}^T$ est le vecteur de la solution approchée (en 1D),
- $u_j := \begin{pmatrix} u_{1,j} & \cdots & u_{N-1,j} \end{pmatrix}^T$ est le vecteur de la solution approchée (en 2D),
- h est le pas de discrétisation en espace, h_t est le pas de discrétisation en temps,
- E_h est l'erreur de troncature en espace, E_{h_t} est l'erreur de troncature en temps,
- $\|e\|_\infty$ est l'erreur locale.

Introduction – Partie mathématiques

Définitions

- Un schéma numérique est *consistant en espace* lorsque $\lim_{h \to 0} |E_h| = 0$ et est *consistant en temps* lorsque $\lim_{h_t \to 0} |E_{h_t}| = 0$.
- Un schéma numérique est *convergent* lorsque $\lim_{h \to 0} \|e\|_\infty = 0$.

Introduction – Partie informatique

Organisation

- Le dossier `Fonctions-communes` contient des fichiers de fonctions qui seront appelées pour chaque problème
- Pour chaque problème, il y a les dossiers `Sources`, `Objets`, `Librairies`, `Binaires` et `Textes`. A l'intérieur de chaque dossier, il y a des sous-dossiers pour chaque version du problème.
- Pour chaque problème, il y a un Makefile et un script.
- Pour chaque version d'un problème, il y a les fichiers suivants :
  - `main.c` : programme principal
  - `resolution.c` : fonctions de résolution
  - `parallele.c` : fonctions pour préparer les données MPI
- Certaines fonctions qui sont appelées de nombreuses fois sont mises inline.
- Les flags de compilations utilisés à chaque fois sont `-O3` et `-Wall`.
- Les résultats qui seront présentés ont été exécutés sur une machine ordinaire (8 CPU, 16 Go de mémoire) et non un cluster de calcul.

Problèmes étudiés

Équation de Poisson en dimension 1

Équation de Poisson en dimension 2

Équation des ondes en dimension 1

Équation de la chaleur en dimension 2

Équation de Poisson en dimension 1

Problème

Soit $f :]0,1[\to \mathbb{R}$ continue. Soit le problème suivant :

Trouver u de classe C^4 telle que :

$$\begin{cases} -u''(x) = f(x) \quad \forall\, x \in]0,1[\\ u(0) = 0,\ u(1) = 0 \end{cases}.$$

Si $f \equiv 1$, alors $u(x) = \frac{1}{2}x(1-x)$, ou si $f(x) = \pi^2 \sin(\pi x)$, alors $u(x) = \sin(\pi x)$.

Discrétisation

$$-u''(x) = \frac{1}{h^2}\left(-u(x+h) + 2u(x) - u(x-h)\right) + E_h$$

avec

$$E_h := \frac{1}{12} h^2 u^{(4)}(x + \theta h)$$

Schéma

$$\boxed{\frac{1}{h^2}\left(-u_{i+1} + 2u_i - u_{i-1}\right) = f_i}.$$

Schéma sous forme matricielle

$$\boxed{Au = f}$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ -1 & 2 & -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & -1 & 2 & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 & 2 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & 2 \end{pmatrix}}_{=:A} \underbrace{\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_{N-1} \end{pmatrix}}_{=u} = \underbrace{\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_{N-1} \end{pmatrix}}_{=f}.$$

Remarques

- La valeur en un point du maillage dépend de valeurs d'au plus 3 points du maillage.
- A est une matrice creuse : elle comporte 3 diagonales (centrales).

Existence et unicité de la solution approchée

Proposition A est définie-positive et $Au = f$ admet une unique solution.

Démonstration Soit $x \in \mathbb{R}^N$, alors :

$$x^T A x = \frac{1}{h^2} \left(\sum_{i=1}^{N-2} (x_i - x_{i+1})^2 + x_1^2 + x_{N-1}^2 \right) \geq 0.$$

Si $\sum_{i=1}^{N-2} (x_i - x_{i+1})^2 + x_1^2 + x_{N-1}^2 = 0$, alors $x = 0_{\mathbb{R}^N}$.

Proposition Le schéma est consistant : $\lim_{h\to 0} |E_h| = 0$ et $|E_h| \leq \frac{1}{12} h^2 \sup_{x\in[0,1]} |f''(x)|$.

Démonstration Comme on a $x + \theta h \in [0,1]$ et $-u^{(4)} = -f''$, alors on peut majorer l'erreur de troncature comme ceci :

$$|u^{(4)}(x+\theta h)| = |f''(x+\theta h)| \leq \sup_{x\in[0,1]} |f''(x)|,$$

on obtient :

$$\left|\frac{1}{12} h^2 u^{(4)}(x+\theta h)\right| \leq \frac{1}{12} h^2 \sup_{x\in[0,1]} |f''(x)| \underset{h\to 0}{\longrightarrow} 0.$$

Proposition *(admise)* $\forall\ i,j \in \{0,\dots,N\} : a^{-1}_{i,j} \geq 0.$

Proposition Soit $e := (u_i - u(x_i))_{0\leq i\leq N}$. Alors, le schéma est convergent :

$$\lim_{h\to 0} \|e\|_\infty = 0$$

et

$$\|e\|_\infty \leq \frac{1}{96} h^2 \sup_{x\in[0,1]} |f''(x)|.$$

Démonstration
Poser $\varepsilon := Ae$ $(A^{-1}\varepsilon = e)$.

Remarques

- On vérifiera cette propriété avec un exemple qui utilise une implémentation utilisant une méthode de résolution directe.
- On a aussi montré que $\|A^{-1}\|_\infty \leq \frac{1}{8}$.

Proposition Si u est de classe C^2, alors le schéma est convergent : $\lim_{h \to 0} \|e\|_\infty = 0$.

Méthode de Jacobi

$$Du^{(k+1)} = (E+F)\,u^{(k)} + f.$$

Schéma

$$Du^{(k+1)} = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2u_1^{(k+1)} \\ \vdots \\ \vdots \\ 2u_{N-1}^{(k+1)} \end{pmatrix}$$

et

$$(E+F)\,u^{(k)} + f = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} u_0^{(k)} + u_2^{(k)} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-2}^{(k)} + u_N^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_1^{(k)} \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{N-1}^{(k)} \end{pmatrix}.$$

Méthode de résolution itérative

$$Du^{(k+1)} = (E+F)\,u^{(k)} + f \Leftrightarrow \frac{2}{h^2}\,u_i^{(k+1)} = \frac{1}{h^2}\left(u_{i-1}^{(k)} + u_{i+1}^{(k)}\right) + f_i$$

$$\Leftrightarrow \boxed{u_i^{(k+1)} = \frac{1}{2}\left(u_{i-1}^{(k)} + u_{i+1}^{(k)} + h^2 f_i\right)}.$$

Factorisation de Cholesky

$$\ell_{i,i} = \sqrt{a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{i,k}^2} \quad \text{et} \quad \ell_{i,j} = \frac{1}{\ell_{j,j}} \left(a_{i,j} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{i,k}\ell_{j,k} \right).$$

On calcule d'abord en colonnes puis en lignes.

Proposition Soit A une matrice tridiagonale, symétrique et définie-positive. Alors, la matrice L de la décomposition de Cholesky de A est bidiagonale inférieure.

Démonstration On a : Si $i > j+1$, alors $a_{i,j} = 0$.
On calcule la colonne $j = 1$:
$L|_{j=1} = \begin{pmatrix} \ell_{1,1} & \ell_{2,1} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}^T$.
On calcule la colonne $j = 2$:
$L|_{j=2} = \begin{pmatrix} 0 & \ell_{2,2} & \ell_{3,2} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}^T$.
Ainsi de suite...

On peut résoudre $Au = f$ en résolvant $Ly = f$ puis $L^T u = y$ avec :

$$y_1 = \frac{f_1}{\ell_{1,1}} \quad \text{et} \quad \text{pour } i \text{ de } 2 \text{ à } N-1 : y_i = \frac{f_i - \ell_{i,j-1} y_{i-1}}{\ell_{i,i}}$$

et

$$\boxed{u_{N-1} = \frac{y_{N-1}}{\ell_{N-1,N-1}} \quad \text{et} \quad \text{pour } i \text{ de } N-2 \text{ à } 1 : u_i = \frac{y_i - \ell_{i,j+1} u_{i+1}}{\ell_{i,i}}}.$$

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation

Pour la suite, la fonction à approcher sera $f(x) := \pi^2 \sin(\pi x)$ et $\varepsilon := 1 \cdot 10^{-10}$.

Version de base

Étapes :

- créer des fonctions qui font le travail :
  - construire la matrice `A` (voir la fonction `construire_matrice`),
  - calculer le second membre `f`,
  - calculer la solution approchée `u` (voir la fonction `resoudre_gauss`).

Commentaires

- Pour calculer u, on résout le système linéaire avec la méthode de Gauss.
- On note ces résultats :

N	5	10	50	100	300	500	1500
$\|e\|_\infty$	0.031916	0.008265	0.000329	0.000082	0.000009	0.000003	$<$0.000001
Tps d'ex. (s)	$<$0.01	$<$0.01	$<$0.01	$<$0.01	0.01	0.05	1.00

- A est de taille $O(N)$ et la méthode de Gauss est $O(N^3)$ donc la complexité algorithmique est $O(N^3)$.

Commentaire On vérifie la proposition énoncée avec $f(x) = \pi^2 \sin(\pi x)$, d'après la proposition : $\|e\|_\infty \leq \frac{1}{96}\pi^4 h^2$.

N	2	3	4	5	10	100	1000
$\|e\|_\infty$ max. th.	0.253669	0.112742	0.063417	0.040587	0.010146	0.000101	0.000001
$\|e\|_\infty$ obs.	0.233701	0.083678	0.053029	0.031916	0.008265	0.000082	0.000001

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

Fonction principale :

```
void calculer_u_jacobi(double *f, double *u){

    nb_iteration = 0;
    h_carre = 1.0 / pow(N, 2);
    int nb_iteration_max = INT_MAX; double norme = DBL_MAX;
    double *u_anc; double *permut;

    init_u_anc(&u_anc);

    for (int iteration = 0 ; iteration < nb_iteration_max && norme > 1e-10 ;
         iteration ++){

        for (int i = 1 ; i < nb_pt - 1 ; i ++){
            u[i] = schema(f, u_anc, i);
        }

        norme = norme_infty_iteration(u, u_anc);

        permut = u; u = u_anc; u_anc = permut; nb_iteration ++;

    }

    terminaison(&permut, &u, &u_anc);

}
```

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

Rappel du schéma : $\boxed{u_i^{(k+1)} = \frac{1}{2}\left(u_{i-1}^{(k)} + u_{i+1}^{(k)} + h^2 f_i\right)}$.

Fontion qui applique le schéma à un point

```
static inline __attribute__((always_inline))
double schema(double *f, double *u_anc, int i){

    double res = 0.5 * ((u_anc[i - 1] + u_anc[i + 1]) + h_carre * f[i]);

    return res;

}
```

Fonction pour calculer la norme infinie relative :

```
static inline __attribute__((always_inline))
double norme_infty_iteration(double *u, double *u_anc){

    double norme_nume = 0.0; double norme_deno = 0.0; double norme;

    for (int i = 0 ; i < nb_pt * nb_pt ; i ++){
        double diff = fabs(u[i] - u_anc[i]);
        if (diff > norme_nume){
            norme_nume = diff;
        }
        if (fabs(u_anc[i]) > norme_deno){
            norme_deno = fabs(u_anc[i]);
        }
    }

    norme = norme_nume / norme_deno;

    return norme;

}
```

(Le test d'arrêt est défini avec formule suivante : $\frac{\|u^{(k+1)} - u^{(k)}\|_\infty}{\|u^{(k)}\|_\infty} < \varepsilon$.)

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

Fonction pour terminer :

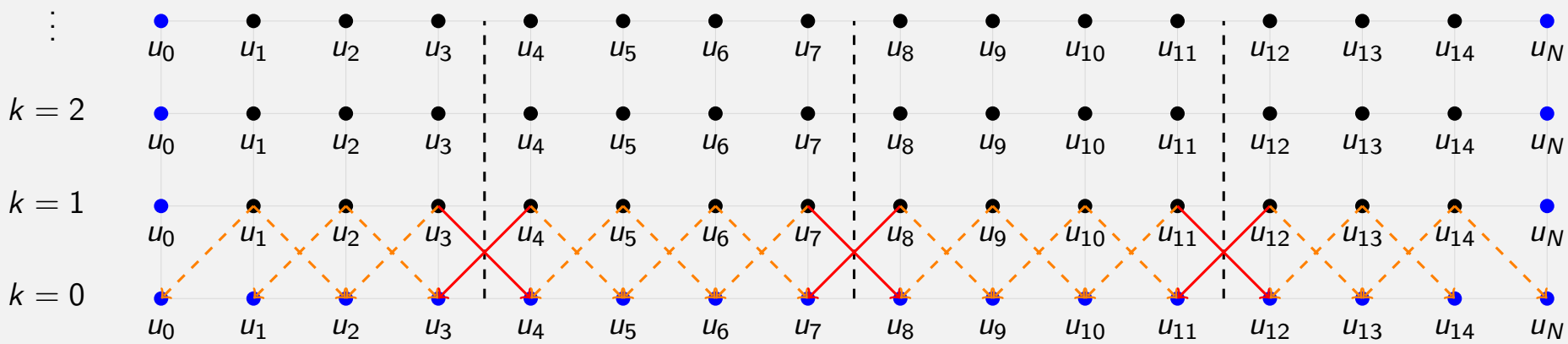
```
void terminaison(double **permut, double **u, double **u_anc){

    if (nb_iteration % 2 != 0){
        *permut = *u; *u = *u_anc; *u_anc = *permut;
    }

    free(*u_anc);

}
```

Commentaire On note ces résultats :

N	5	10	50	100	300	500	1500
Nb. d'itérations	102	400	8506	31227	241002	617699	4557543
$\|e\|_\infty$	0.031916	0.008265	0.000329	0.000082	0.000007	0.000002	0.000045
Tps d'ex. (s)	<0.01	<0.01	<0.01	0.01	0.14	0.54	11.83

Commentaire On ajoute une directive `for` dans la boucle de la fonction `calculer_u_jacobi` et une directive `for` dans la boucle du calcul de la norme relative.

Illustration Schéma des dépendances pour 4 processus et $N = 15$:



Fonctions pour MPI

```
void creer_topologie(){

    int tore = 0;
    dims = 0;

    MPI_Dims_create(nb_cpu, 1, &dims);

    MPI_Cart_create(MPI_COMM_WORLD, 1, &dims, &tore, 0, &comm_1D);

    MPI_Barrier(comm_1D);

}
```

```
void infos_processus(){

    i_debut = (coords * nb_pt) / dims;
    i_fin = ((coords + 1) * nb_pt) / dims - 1;
    nb_pt_div = i_fin - i_debut + 1;

    MPI_Barrier(comm_1D);

}
```

Fonction principale :

```
void calculer_u_jacobi(double *f_div, double *u_div){

    nb_iteration = 0; h_carre = 1.0 / pow(N, 2);
    int nb_iteration_max = INT_MAX; double norme = DBL_MAX;
    int i_boucle_debut; int i_boucle_fin;
    double *u_div_anc; double *permut;

    init_u_div_anc(&u_div_anc);
    for (int i = 0 ; i < nb_pt_div + 2 ; i ++){
        u_div[i] = 0.0;
    }

    infos_bornes_boucles(&i_boucle_debut, &i_boucle_fin);

    for (int iteration = 0 ; iteration < nb_iteration_max && norme > 1e-10 ;
         iteration ++){

        echanger_halos(u_div_anc);

        for (int i = i_boucle_debut ; i < i_boucle_fin ; i ++){
            u_div[i] = schema(f_div, u_div, u_div_anc, i);
        }

        norme = norme_infty_iteration(u_div, u_div_anc);

        permut = u_div; u_div = u_div_anc; u_div_anc = permut; nb_iteration ++;

    }

    terminaison(&permut, &u_div, &u_div_anc);

}
```

Fonction pour obtenir les indices de départ et d'arrivé de la boucle principale :

```
void infos_bornes_boucles(int *i_boucle_debut, int *i_boucle_fin){

    *i_boucle_debut = 1;
    *i_boucle_fin = nb_pt_div + 1;

    if (i_debut == 0){
        (*i_boucle_debut) ++;
    }
    if (i_fin == nb_pt - 1){
        (*i_boucle_fin) --;
    }

}
```

Fonction pour échanger les halos :

```
void echanger_halos(double *u_div){

    // Envoi gauche, reception droite
    MPI_Sendrecv(&(u_div[1]), 1, MPI_DOUBLE, voisins[0], etiquette,
    &(u_div[nb_pt_div + 1]), 1, MPI_DOUBLE, voisins[1], etiquette, comm_1D,
    &statut);

    // Envoi droite, reception gauche
    MPI_Sendrecv(&(u_div[nb_pt_div]), 1, MPI_DOUBLE, voisins[1], etiquette,
    &(u_div[0]), 1, MPI_DOUBLE, voisins[0], etiquette, comm_1D, &statut);

}
```

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Structure mat_2bandes :

```
struct mat_2bandes{
    int N;
    double *diag; // taille N - 1
    double *sous_diag; // taille N - 2
};
```

Fonction pour allouer la structure :

```
void init_mat_2bandes(struct mat_2bandes *A){

    A -> N = N;
    A -> diag = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));
    A -> sous_diag = (double *)malloc((idx_max - 1) * sizeof(double));

}
```

Fonction pour libérer la structure :

```
void liberer_mat_2bandes(struct mat_2bandes *A){

    free(A -> diag);
    free(A -> sous_diag);

}
```

Fonction pour obtenir la décomposition de Cholesky en utilisant la structure :

```
void calculer_cholesky(struct mat_2bandes *L){

    h_carre = 1.0 / pow(N, 2);
    double alpha = 2.0 / h_carre;
    double beta = -1.0 / h_carre;

    (L -> diag)[0] = sqrt(alpha);
    (L -> sous_diag)[0] = beta / (L -> diag)[0];

    for (int i = 1 ; i < idx_max - 1 ; i ++){
        (L -> diag)[i] = sqrt(alpha - pow((L -> sous_diag[i - 1]), 2));
        (L -> sous_diag)[i] = beta / (L -> diag[i]);
    }

    (L -> diag)[idx_max - 1] =
    sqrt(alpha - pow((L -> sous_diag[idx_max - 2]), 2));

}
```

Test pour avoir un aperçu de la compression

```
Illustration de la structure mat_2bandes (exemple pour N petit) :

Structure mat2_bandes :
N = 7
diag      =  9.899495   8.573214   8.082904   7.826238   7.668116   7.560864
sous_diag = -4.949747  -5.715476  -6.062178  -6.260990  -6.390097

Matrice reelle correspondante :
  9.899495   0.000000   0.000000   0.000000   0.000000   0.000000
 -4.949747   8.573214   0.000000   0.000000   0.000000   0.000000
  0.000000  -5.715476   8.082904   0.000000   0.000000   0.000000
  0.000000   0.000000  -6.062178   7.826238   0.000000   0.000000
  0.000000   0.000000   0.000000  -6.260990   7.668116   0.000000
  0.000000   0.000000   0.000000   0.000000  -6.390097   7.560864
```

Fonction principale :

```
void resoudre_cholesky(double *f, double *u){

    struct mat_2bandes L;
    double *y = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));

    u[0] = 0; u[nb_pt - 1] = 0;

    init_mat_2bandes(&L);
    calculer_cholesky(&L);

    resoudre_cholesky_descente(&L, &(f[1]), y);
    resoudre_cholesky_remontee(&L, y, &(u[1]));
    liberer_mat_2bandes(&L);
    free(y);

}
```

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Fonction pour résoudre $Ly = f$:

```
void resoudre_cholesky_descente(struct mat_2bandes *L, double *f, double *y){

    y[0] = f[0] / (L -> diag)[0];

    for (int i = 1 ; i < idx_max ; i ++){
        y[i] = (f[i] - (L -> sous_diag)[i - 1] * y[i - 1]) / (L -> diag)[i];
    }

}
```

Rappel du schéma : $u_{N-1} = \dfrac{y_{N-1}}{\ell_{N-1,N-1}}$ et pour i de $N-2$ à 1 : $u_i = \dfrac{y_i - \ell_{i,j+1} u_{i+1}}{\ell_{i,i}}$.

Fonction pour résoudre $L^T u = y$:

```
void resoudre_cholesky_remontee(struct mat_2bandes *L, double *y, double *u){

    u[idx_max - 1] = y[idx_max - 1] / (L -> diag)[idx_max - 1];

    for (int i = idx_max - 2 ; i >= 0 ; i --){
        u[i] = (y[i] - (L -> sous_diag)[i] * u[i + 1]) / (L -> diag)[i];
    }

}
```

Commentaires

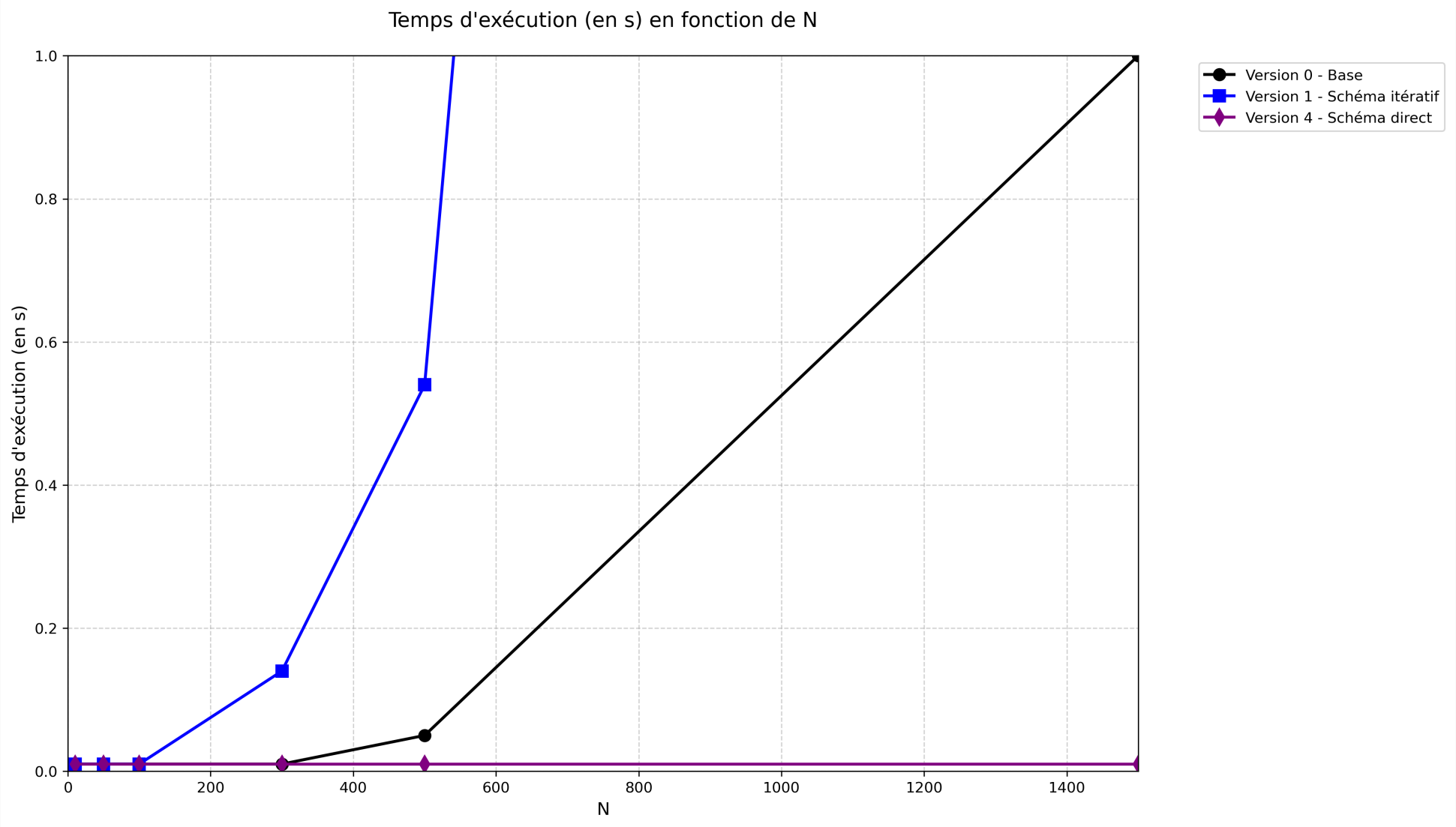
- Cette méthode est impossible à paralléliser à cause des dépendances.
- On note ces résultats :

N	5	10	50	100	300	500	1500
$\|e\|_\infty$	0.031916	0.008265	0.000329	0.000082	0.000009	0.000003	<0.000001
Tps d'ex. (s)	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01

- A possède $O(N)$ colonne. Pour chaque colonne, il y a $O(1)$ lignes à calculer. Pour chaque case, il y a $O(1)$ opérations. Donc la complexité algorithmique est $O(N)$.

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation

Comparaison des performances des méthodes



Équation de Poisson en dimension 2

Problème

Soit $f :]0,1[\times]0,1[\to \mathbb{R}$ continue Soit $D :=]0,1[\times]0,1[$. Soit le problème suivant :

Trouver u de classe C^4 telle que :

$$\begin{cases} -\Delta u(x,y) = f(x,y) & \forall (x,y) \in D \\ u(x,y) = 0 & \forall (x,y) \in \partial D \end{cases}.$$

Si $f(x,y) = \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)$, alors $u(x,y) = \dfrac{1}{8\pi^2}(2\pi x)\sin(2\pi y)$.

Discrétisation

$$-\Delta u(x,y) = \frac{1}{h_x^2}\delta_x^2 + \frac{1}{h_y^2}\delta_y^2 + E_{h_x,h_y}$$

avec :

$$\delta_x^2 := -u(x-h_x,y) + 2u(x,y) - u(x+h_x,y),$$
$$\delta_y^2 := -u(x,y-h_y) + 2u(x,y) - u(x,y+h_y)$$

et

$$E_{h_x,h_y} := \frac{1}{12}\left(h_x^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x+\theta_x h_x,y) + h_y^2\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}(x,y+\theta_y h_y)\right).$$

Schéma

$$\boxed{\frac{1}{h^2}\left(-u_{i-1,j} - u_{i,j-1} + 2u_{i,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j+1}\right) = f_{i,j}}.$$

Schéma sous forme matricielle

$$\boxed{Au = f}$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 4 & -1 & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -1 & 4 & -1 & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -1 & 4 & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ -1 & \cdot & \cdot & 4 & -1 & \cdot & -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & \cdot & \cdot & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & 4 & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 \end{pmatrix}}_{=:A} \underbrace{\begin{pmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ u_{3,1} \\ u_{1,2} \\ u_{2,2} \\ u_{3,2} \\ u_{1,3} \\ u_{2,3} \\ u_{3,3} \end{pmatrix}}_{=u} = \underbrace{\begin{pmatrix} f_{1,1} \\ f_{2,1} \\ f_{3,1} \\ f_{1,2} \\ f_{2,2} \\ f_{3,2} \\ f_{1,3} \\ f_{2,3} \\ f_{3,3} \end{pmatrix}}_{=f}.$$

Schéma sous forme matricielle par blocs

$$\underbrace{\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} \boxed{M} & \boxed{-I} & \cdot & \cdot \\ \boxed{-I} & \ddots & \ddots & \cdot \\ \cdot & \ddots & \ddots & \boxed{-I} \\ \cdot & \cdot & \boxed{-I} & \boxed{M} \end{pmatrix}}_{=A} \underbrace{\begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix}}_{=u} = \underbrace{\begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{N-1} \end{pmatrix}}_{=f}$$

avec

$$M := \begin{pmatrix} 4 & -1 & \cdot & \cdot \\ -1 & \ddots & \ddots & \cdot \\ \cdot & \ddots & \ddots & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Remarques

- La valeur en un point du maillage dépend de valeurs d'au plus 5 points du maillage.
- A est une matrice creuse : elle comporte 5 diagonales (dont 3 centrales) et 3 blocs de diagonales, où les blocs sont M et $-I$.

Proposition A est définie-positive et $Au = f$ admet une unique solution.

Démonstration Soit $x \in \mathbb{R}^{(N-1)\times(N-1)}$ avec $x = (x_j)_{1\leq j\leq N-1}$ et $x_j = (x_{i,j})_{1\leq i\leq N-1}$, alors :

$$x^T Ax = \frac{1}{h^2}\left(\sum_{j=1}^{N-1} x_j^T M x_j - 2\sum_{j=1}^{N-2} x_j^T x_{j+1}\right).$$

De plus,

$$x_j^T M x_j = x_j^T\left(h^2 B + 2I\right)x = h^2 x_j^T B x_j + 2\sum_{i=1}^{N-1} x_{i,j}^2 = h^2 x_j^T B x_j + 2\|x_j\|^2$$

Démonstration *(suite)* avec

$$B := \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & \cdot & \cdot \\ -1 & \ddots & \ddots & \cdot \\ \cdot & \ddots & \ddots & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Donc on obtient :

$$x^T Ax = \frac{1}{h^2}\left(\sum_{j=1}^{N-2}\|x_j + x_{j+1}\|^2 + \|x_1\|^2 + \|x_{N-1}\|^2 + h^2\sum_{j=1}^{N-1} x_j^T Bx_j\right)$$

et B est définie-positive donc $\forall\, x_j \in \mathbb{R}^N : x_j^T Bx_j \geq 0$, donc $x^T Ax \geq 0$.

Notation Soit $d \in \{1, \dots, 4\}$. Alors,

$$C_{u,d} := \max \left\{ \sup_{(x,y)\in[0,1]^2} \left| \frac{\partial^d u}{\partial x^d}(x,y) \right|, \sup_{(x,y)\in[0,1]^2} \left| \frac{\partial^d u}{\partial y^d}(x,y) \right| \right\}.$$

Proposition Le schéma est consistant : $\lim_{h\to 0} |E_h| = 0$ et $|E_h| \leq \frac{1}{6} h^2 \, |C_{u,4}|$.

Démonstration Majoration...

Remarque Le schéma est d'ordre 2 pour x et pour y.

Proposition *(admise)* Soit $e_j := \left(\|u_j - u(x_j)\|_\infty\right)_{0 \leq j \leq N}$. Alors, le schéma utilisé est convergent :

$$\forall\, j \in \{1, \ldots, N-1\} : \lim_{h \to 0} \|e_j\|_\infty = 0$$

et

$$\exists\, C > 0,\ \forall\, j \in \{1, \ldots, N-1\} : \|e_j\|_\infty \leq C h^2 \left(C_{u,4} + h C_{u,3}\right).$$

Méthode de Jacobi

$$Du^{(k+1)} = (E+F)\,u^{(k)} + f.$$

$$D = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} \boxed{D_0} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \ddots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \ddots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \boxed{D_0} \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad D_0 := 4I,$$

$$E+F = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} \boxed{D_\star} & \boxed{I} & \cdot & \cdot \\ \boxed{I} & \ddots & \ddots & \cdot \\ \cdot & \ddots & \ddots & \boxed{I} \\ \cdot & \cdot & \boxed{I} & \boxed{D_\star} \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad D_\star := \begin{pmatrix} \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \ddots & \cdot \\ \cdot & \ddots & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot \end{pmatrix}.$$

$$\left(Du^{(k+1)}\right)_{i,j} = \frac{1}{h^2} 4 u_{i,j}^{(k+1)},$$

$$\left((E+F)\,u^{(k)} + f\right)_{i,j} = \frac{1}{h^2}\left(u_{i,j-1}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)}\right) + f_{i,j},$$

$$\Leftrightarrow \boxed{u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left(u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)} + u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)} + h^2 f_{i,j}\right)}.$$

Proposition Soit A une matrice avec N diagonales inférieures, symétrique et définie-positive. Alors, la matrice L de la décomposition de Cholesky de A de A possède N diagonales inférieures.

On remarque que la structure de A est telle que :

$$a_{i,j} = \begin{cases} \alpha & \text{si } i = j \\ \beta & \text{si } i = j+1 \text{ et } j \not\equiv 0 \pmod{N-1} \\ \gamma & \text{si } i = j+N-1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

avec

$$\alpha := \frac{4}{h^2} \quad \text{et} \quad \beta := \gamma := -\frac{1}{h^2}.$$

Factorisation de Cholesky

Soit $d := i - j$ la diagonale de A ($i = d + j$, $d \in \{0, \ldots, N-1\}$). On calcule : pour j de 1 à $(N-1)^2$ puis pour d de 0 à $N-1$. Si $d = 0$, alors on calcule $\ell_{i,i}$, sinon, on calcule $\ell_{i,j}$. Avec la structure de A, on obtient :

$$\begin{cases} \ell_{i,i} = \sqrt{\alpha - \displaystyle\sum_{k=\max\{1,j-N+d+1\}}^{i-1} \ell_{i,k}^2} & \text{si } d = 0 \\ \ell_{i,j} = \left(a_{i,j} - \displaystyle\sum_{k=\max\{1,j-N+d+1\}}^{j-1} \ell_{i,k}\ell_{j,k} \right) / \ell_{j,j} & \text{si } d > 0. \end{cases}.$$

Remarque Si A était pleine, la complexité algorithmique du calcul de L aurait été $O(N^6)$. Ici, on calcule $O(N^2)$ colonnes comportants $O(N)$ diagonales. Le calcul d'une case est $O(N)$. Donc on a réduit la complexité algorithmique du calcul de L à $O(N^4)$.

On peut résoudre $Au = f$ en résolvant $Ly = f$ puis $L^T u = y$ avec :

$$y_1 = \frac{f_1}{\ell_{1,1}} \quad \text{et} \quad \text{pour } i \text{ de 2 à } (N-1)^2 : y_i = \left(f_i - \sum_{k=\max\{1,i-N+1\}}^{i-1} \ell_{i,k} y_k \right) / \ell_{i,i}$$

et

$$u_{(N-1)^2} = \frac{y_{(N-1)^2}}{\ell_{(N-1)^2,(N-1)^2}} \quad \text{et} \quad \text{pour } i \text{ de } (N-1)^2 - 1 \text{ à } 1 : u_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{\min\{i+N-1,(N-1)^2\}} \ell_{k,i} u_k \right) / \ell_{i,i}.$$

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

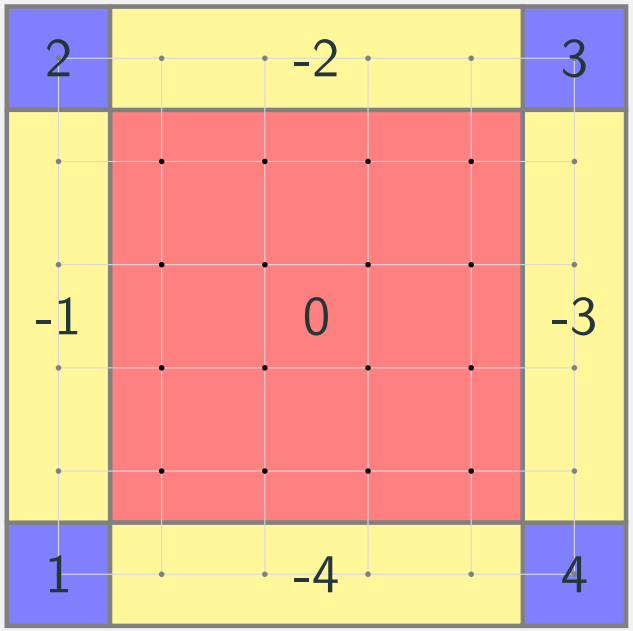
Pour la suite, la fonction à approcher sera $f(x, y) := \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)$ et $\varepsilon := 1 \cdot 10^{-10}$.

Étapes :

- créer des fonctions qui font le travail :
  - construire la matrice `A` (voir les fonctions `connaitre_bord` et `construire_matrice`),
  - calculer le second membre `f`,
  - calculer la solution approchée `u` (voir la fonction `resoudre_gauss`).

Commentaires

- Tout les tableaux utilisés sont linéarisés pour garantir la contiguité.
- Les numéros du type de bord de la fonction `connaitre_bord` sont les suivants :



Commentaires *(suite)*

- Pour calculer $\mathtt{u}$, on résout le système linéaire avec la méthode de Gauss.
- On note ces résultats :

N	10	50	100
$\|e\|_\infty$	0.00038444	0.00001661	0.00000417
Tps d'ex. (s)	<0.1	4.1	278.9

- A est de taille $O(N^2)$ et la méthode de Gauss est $O(N^3)$ donc la complexité algorithmique est $O(N^6)$.

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

Rappel du schéma : $$\boxed{u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left(u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)} + u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)} + h^2 f_{i,j}\right)}.$$

Fonction qui applique le schéma à un point :

```
static inline __attribute__((always_inline))
double schema(double *f, double *u_anc, int i, int j){

    double res =
    0.25 *
    (u_anc[IDX(i - 1, j)]
    + u_anc[IDX(i, j - 1)]
    + u_anc[IDX(i + 1, j)]
    + u_anc[IDX(i, j + 1)]
    + h_carre * f[IDX(i, j)]);

    return res;

}
```

Commentaire On note ces résultats :

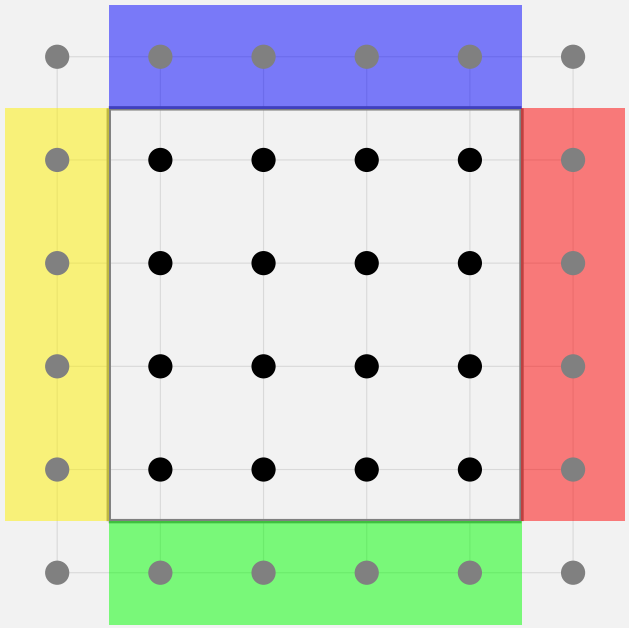
N	10	50	100	300	500	700
Nb. d'itérations	102	2298	8506	66569	171980	320379
$\|e\|_\infty$	0.00038444	0.00001661	0.00000417	0.00000046	0.00000015	0.00000005
Tps d'ex. (s)	<0.1	<0.1	0.1	4.8	34.6	128.4

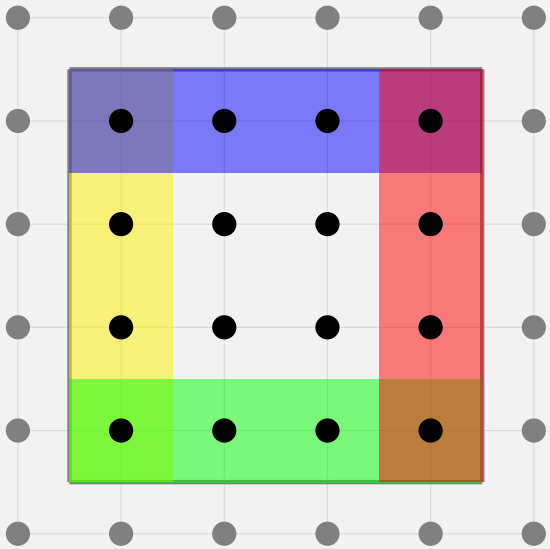
Commentaires

- On ajoute une directive `for` dans la boucle interne de la fonction `calculer_u_jacobi` et une directive `for` dans la boucle du calcul de la norme relative.
- On note ces résultats du temps d'exécution (en s) en fonction de N et du nombre de threads :

↓ Nombre de threads $N \rightarrow$	300	500	700
1	5.1	35.7	130.0
2	4.2	21.4	80.0
4	3.1	13.3	53.5
6	3.6	18.0	62.5
8	4.0	15.9	56.3

Illustration Schéma de la structure de `u_div` :





Fonctions MPI

```
void creer_types(){

    int taille_send[2] = {nb_pt_div_j + 2, nb_pt_div_i + 2};
    int sous_taille_send[2] = {nb_pt_div_j, nb_pt_div_i};
    int debut_send[2] = {1, 1};

    MPI_Type_contiguous(nb_pt_div_i, MPI_DOUBLE, &ligne);
    MPI_Type_vector(nb_pt_div_j, 1, nb_pt_div_i + 2, MPI_DOUBLE, &colonne);

    MPI_Type_create_subarray(2, taille_send, sous_taille_send, debut_send,
    MPI_ORDER_C, MPI_DOUBLE, &bloc_send);

    MPI_Type_commit(&ligne);
    MPI_Type_commit(&colonne);
    MPI_Type_commit(&bloc_send);

    MPI_Barrier(comm_2D);

}
```

```
void echanger_halos(double *u_div){

    // Envoi haut, reception bas
    MPI_Sendrecv(&(u_div[IDX(1, nb_pt_div_j)]), 1, ligne, voisins[1],
    etiquette, &(u_div[IDX(1, 0)]), 1, ligne, voisins[3], etiquette, comm_2D,
    &statut);

    // Envoi bas, reception haut
    MPI_Sendrecv(&(u_div[IDX(1, 1)]), 1, ligne, voisins[3], etiquette,
    &(u_div[IDX(1, nb_pt_div_j + 1)]), 1, ligne, voisins[1], etiquette,
    comm_2D, &statut);

    // Envoi gauche, reception droite
    MPI_Sendrecv(&(u_div[IDX(1, 1)]), 1, colonne, voisins[0], etiquette,
    &(u_div[IDX(nb_pt_div_i + 1, 1)]), 1, colonne, voisins[2], etiquette,
    comm_2D, &statut);

    // Envoi droite, reception gauche
    MPI_Sendrecv(&(u_div[IDX(nb_pt_div_i, 1)]), 1, colonne, voisins[2],
    etiquette, &(u_div[IDX(0, 1)]), 1, colonne, voisins[0], etiquette, comm_2D,
    &statut);

}
```

Commentaires

- Pour regrouper les résultats sur le rang 0, on utilise un type dérivé `bloc_recv` crée dynamiquement par le rang 0 (voir la fonction `regrouper_u`).
- On note ces résultats du temps d'exécution (en s) en fonction de N et du nombre de processus :

↓ Nombre de processus $N \rightarrow$	300	500	700
1	5.3	37.1	133.4
2	3.0	20.8	76.8
4	1.9	12.8	47.1
6	2.7	18.1	62.5
8	2.5	18.9	110.4

Version avec un mode de communication non bloquant

Commentaires

- Dès que la communication est lancée, on fait les calculs sur l'intérieur du sous-domaine (en excluant les bords locaux), après on vérifie / attend que la communication soit terminée et on fait les calculs sur les bords locaux avec la fonction `test_fin_echange_halos`.
- Pour calculer sur les bords du sous-domaine (2 bandes verticales, 2 bandes horizontales et 4 coins), on utilise la fonction `calculer_u_jacobi_bords`.

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Structure mat_Nbandes :

```
struct mat_Nbandes{
    int N;
    double **diags;
};
```

Fonction pour allouer la structure :

```
void init_mat_Nbandes(struct mat_Nbandes *A){

    A -> N = N;
    A -> diags = (double **)malloc(N * sizeof(double *));
    for (int i = 0 ; i < N ; i ++){
        (A -> diags)[i] = (double *)malloc((idx_max - i) * sizeof(double));
    }

}
```

Fonction pour libérer la structure :

```
void liberer_mat_Nbandes(struct mat_Nbandes *A){

    int N = A -> N;
    for (int i = 0 ; i < N ; i ++){
        free((A -> diags)[i]);
    }
    free(A -> diags);

}
```

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Rappel du schéma :

$$\begin{cases} \ell_{i,i} = \sqrt{\alpha - \sum_{k=\max\{1,j-N+d+1\}}^{i-1} \ell_{i,k}^2} & \text{si } d = 0 \\ \ell_{i,j} = \left(a_{i,j} - \sum_{k=\max\{1,j-N+d+1\}}^{j-1} \ell_{i,k}\ell_{j,k} \right) / \ell_{j,j} & \text{si } d > 0. \end{cases}$$

Fonction pour obtenir la décomposition de Cholesky en utilisant la structure :

```
void calculer_cholesky(struct mat_Nbandes *L){

    h_carre = 1.0 / pow(N, 2);
    double alpha = 4.0 / h_carre;

    for (int j = 0 ; j < idx_max ; j ++){
        for (int d = 0 ; d < N && j + d < idx_max ; d ++){

            int i = d + j;

            if (d == 0){
                (L -> diags)[0][j] = alpha;
                for (int k = max(0, j - N + d + 1) ; k < i ; k ++){
                    int d_1 = i - k;
                    (L -> diags)[0][j] -= pow((L -> diags)[d_1][k], 2);
                }
                (L -> diags)[0][j] = sqrt((L -> diags)[0][j]);
            }

            else{
                (L -> diags)[d][j] = valeur_a(i, j);
                for (int k = max(0, j - N + d + 1) ; k < j ; k ++){
                    int d_1 = i - k;
                    int d_2 = j - k;
                    (L -> diags)[d][j] -= (L -> diags)[d_1][k] * (L -> diags)[d_2][k];
                }
                (L -> diags)[d][j] /= (L -> diags)[0][j];
            }

        }
    }

}
```

Fonction pour obtenir la valeur de $a_{i,j}$ en fonction des paramètres i et j :

```
static inline __attribute__((always_inline)) double valeur_a(int i, int j){

    double res;

    if (i == j){
        res = 4.0 / h_carre;
    }
    else if (i == j + 1 && j % (N - 1) != (N - 2)){
        res = -1.0 / h_carre;
    }
    else if (i == j + N - 1){
        res = -1.0 / h_carre;
    }
    else{
        res = 0.0;
    }

    return res;

}
```

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Test pour avoir un aperçu de la compression

```
Illustration de la structure mat_Nbandes (exemple pour N petit) :

Structure mat_Nbandes :
N = 4
diag[0] =  8.0000  7.7460  7.7287  7.7275  7.3829  7.3668  7.6995  7.3261  7.3139
diag[1] = -2.0000 -2.0656 -0.1380 -2.2184 -2.3331 -0.2074 -2.2717 -2.4056
diag[2] =  0.0000 -0.5164 -0.5521 -0.0370 -0.6222 -0.6863 -0.0585
diag[3] = -2.0000 -2.0656 -2.0702 -2.0705 -2.1672 -2.1719

Matrice reelle correspondante :
 8.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
-2.0000  7.7460  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
 0.0000 -2.0656  7.7287  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
-2.0000 -0.5164 -0.1380  7.7275  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
 0.0000 -2.0656 -0.5521 -2.2184  7.3829  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
 0.0000  0.0000 -2.0702 -0.0370 -2.3331  7.3668  0.0000  0.0000  0.0000
 0.0000  0.0000  0.0000 -2.0705 -0.6222 -0.2074  7.6995  0.0000  0.0000
 0.0000  0.0000  0.0000  0.0000 -2.1672 -0.6863 -2.2717  7.3261  0.0000
 0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000 -2.1719 -0.0585 -2.4056  7.3139
```

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Fonction principale :

```
void resoudre_cholesky(double *f, double *u){

    struct mat_Nbandes L;
    double *y, *u_int, *f_int;

    init_u_bord(u);
    u_int = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));
    f_int = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));
    extraire_interieur(u, u_int, nb_pt);
    extraire_interieur(f, f_int, nb_pt);
    y = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));

    init_mat_Nbandes(&L);
    calculer_cholesky(&L);

    resoudre_cholesky_descente(&L, f_int, y);
    resoudre_cholesky_remontee(&L, y, u_int);
    inserer_interieur(u_int, u, nb_pt);

    liberer_mat_Nbandes(&L);
    free(u_int);
    free(f_int);
    free(y);

}
```

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Fonction pour résoudre $Ly = f$:

```
void resoudre_cholesky_descente(struct mat_Nbandes *L, double *f, double *y){

    y[0] = f[0] / (L -> diags)[0][0];

    for (int i = 1 ; i < idx_max ; i ++){
        y[i] = f[i];
        for (int k = max(0, i - N + 1) ; k < i ; k ++){
            int d = i - k;
            y[i] -= (L -> diags)[d][k] * y[k];
        }
        y[i] /= (L -> diags)[0][i];
    }

}
```

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Rappel du schéma : $$u_{(N-1)^2} = \frac{y_{(N-1)^2}}{\ell_{(N-1)^2,(N-1)^2}} \quad \text{et} \quad \text{pour } i \text{ de } (N-1)^2 - 1 \text{ à } 1 : u_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{\min\{i+N-1,(N-1)^2\}} \ell_{k,i} u_k \right) / \ell_{i,i}.$$

Fonction pour résoudre $L^T u = y$:

```
void resoudre_cholesky_remontee(struct mat_Nbandes *L, double *y, double *u){

    u[idx_max - 1] = y[idx_max - 1] / (L -> diags)[0][idx_max - 1];

    for (int i = idx_max - 2 ; i >= 0 ; i --){
        u[i] = y[i];
        for (int k = i + 1 ; k < min(i + N, idx_max) ; k ++){
            int d = k - i;
            u[i] -= (L -> diags)[d][i] * u[k];
        }
        u[i] /= (L -> diags)[0][i];
    }

}
```

Commentaires

- Comme on calcule u sur l'intérieur, on fait la résolution avec $u|_{\text{int}}$ et $f|_{\text{int}}$. On utilise les fonctions `extraire_interieur` pour extraire l'intérieur d'une matrice linéarisée et `inserer_interieur` pour remettre l'intérieur d'une matrice linéarisé dans la matrice initiale.
- On note ces résultats :

N	10	50	100	300	500	700
$\|e\|_\infty$	0.00038444	0.00001661	0.00000417	0.00000046	0.00000017	0.00000009
Tps d'ex. (s)	<0.1	<0.1	<0.1	4.6	35.8	383.5

- A possède $O(N^2)$ colonne. Pour chaque colonne, il y a $O(N)$ lignes à calculer. Pour chaque case, il y a $O(N)$ opérations. Donc la complexité algorithmique est $O(N^4)$.

Bibliothèque Cholmod

Étapes :

- créer une fonction pour définir la structure de matrice creuse en créant des tableaux :
  - `lignes` qui contient les indices des lignes où se trouve une valeur non nulle,
  - `valeurs` qui contient les valeurs aux indices stockés,
  - `offsets` qui contient le nombre de valeurs non nulles d'une colonne,

  (voir les fonctions `construire_matrice_creuse` et `connaitre_bord`).
- créer une fonction qui fait le travail

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Fonction principale :

```
void resoudre(cholmod_sparse *A, double *f, double *u){

    h_carre = 1.0 / pow(N, 2);
    double *f_int = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));
    double *u_int = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));

    extraire_interieur(f, f_int, nb_pt);
    extraire_interieur(u, u_int, nb_pt);

    cholmod_dense *f_dense =
    cholmod_allocate_dense(A -> nrow, 1, A -> nrow, CHOLMOD_REAL, &c);
    memcpy(f_dense -> x, f_int, A -> nrow * sizeof(double));

    cholmod_factor *L = cholmod_analyze(A, &c);
    cholmod_factorize(A, L, &c);

    cholmod_dense *u_dense = cholmod_solve(CHOLMOD_A, L, f_dense, &c);

    memcpy(u_int, u_dense -> x, A -> nrow * sizeof(double));

    inserer_interieur(u_int, u, nb_pt);

    cholmod_free_factor(&L, &c);
    cholmod_free_dense(&f_dense, &c);
    cholmod_free_dense(&u_dense, &c);

    free(f_int);
    free(u_int);

}
```

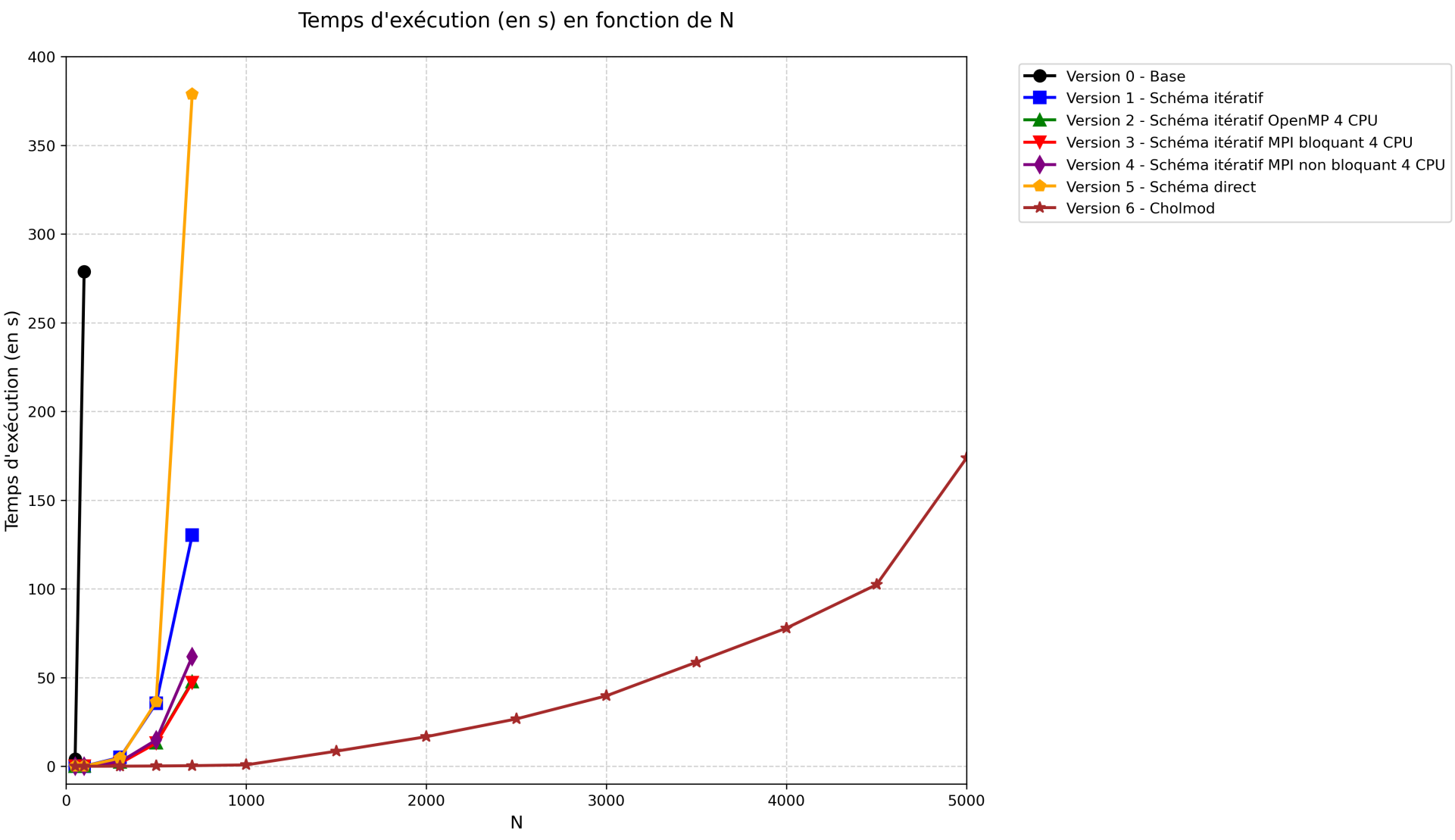
Commentaires

- Le nombre d'éléments non nuls de A est de $(5N+1)(N-3)+12$.
- On note ces résultats :

N	1000	2000	3000	4000	5000
$\|e\|_\infty$	0.00000004	0.00000001	<0.00000001	<0.00000001	<0.00000001
Tps d'ex. (s)	0.7	15.7	39.3	79.3	174.5

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Comparaison des performances des méthodes



Équation des ondes en dimension 1

Problème

Soient $L, T > 0, D :=]0, L[$. Soit le problème suivant :

Trouver u de classe C^2 telle que :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad x \in D \ \forall \ t \in]0, T], c > 0 \\ u(x) = 0 \quad \forall \ x \in \partial D \ \forall \ t \in [0, T] \\ u(x, 0) =: u_0(x) \quad \forall \ x \in D \\ \dfrac{\partial u}{\partial t}(x, 0) =: u_1(x) \quad \forall \ x \in D \end{cases}.$$

Si $u_0(x) = \sin(\pi x)$ et $u_1(x) = 0$, alors $u(x, t) = \cos(\pi x) \sin(\pi x)$.

Discrétisation

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t) = \frac{1}{h_t^2}\left(u(x,t+h_t) - 2u(x,t) + u(x,t-h_t)\right) + E_{h_t}.$$

avec

$$E_{h_t} := -\frac{1}{12} h_t^2 \frac{\partial^4 u}{\partial t^4}(x, t+\theta h_t).$$

Schéma

$$\boxed{\begin{cases} u_i^1 = h_t u_1(x_i) + u_0(x_i) \\ u_i^{k+1} = -u_i^{k-1} + 2\left(1 - \dfrac{c^2 h_t^2}{h^2}\right) u_i^k + \dfrac{c^2 h_t^2}{h^2}\left(u_{i-1}^k + u_{i+1}^k\right) \quad \text{si } k > 0 \end{cases}}.$$

Remarques

- Le schéma est explicite.
- Pour $k > 0$, le schéma dépend de valeurs en $k-1$ et en $k-2$.

Proposition *(admise)* Le schéma est convergent si $c\dfrac{h_t}{h} \leq 1$.

Remarques

- On vérifiera cette propriété avec un exemple.
- Cette proposition s'appelle la condition de Courant-Friedrich-Levy (CFL).

Équation des ondes en dimension 1 – Implémentation

Fonction principale :

```
void calculer_u(double *u){

    const_1 = pow(c, 2) * pow(h_t, 2) / pow(h, 2);
    double *u_anc_0; double *u_anc_1; double *permut;
    init_u_0(u_0, &u_anc_1); init_u_1(u_1, u_anc_1, &u_anc_0);
    for (int i = 0 ; i < nb_pt ; i ++){
        u[i] = 0.0;
    }

    for (int k = 1 ; k <= N_t ; k ++){

        # ifdef ECRITURE
        ecrire_double_iteration(u_anc_0);
        # endif

        for (int i = 1 ; i < nb_pt - 1 ; i ++){
            u[i] = schema(u_anc_0, u_anc_1, i, k);
        }

        permut = u_anc_1; u_anc_1 = u_anc_0; u_anc_0 = u; u = permut;

    }

    # ifdef ECRITURE
    ecrire_double_iteration(u);
    # endif

    terminaison(&permut, &u, &u_anc_0, &u_anc_1);

}
```

- Un tableau pour u à chaque pas de temps.
- 2 fonctions de résolutions : une qui calcule uniquement la solution approchée (pour mesurer le temps et/ou faire des entrées/sorties pour la visualisation) et une qui calcule la solution approchée en même temps que la solution exacte à chaque itération pour avoir l'erreur.
- On définiera l'erreur `erreur_infty` comme : $\|e\|_\infty^\infty := \max_{1 \leq k \leq N_t} \|e_k\|_\infty$ avec $\|e_k\|_\infty = \|e\|_\infty$ à l'itération k.
- Différents modes d'exécution pour le stockage et le choix du calcul (macros `EXACTE` et `ECRITURE`).

Équation des ondes en dimension 1 – Implémentation

Rappel du schéma :

$$\begin{cases} u_i^1 = h_t u_1(x_i) + u_0(x_i) \\ u_i^{k+1} = -u_i^{k-1} + 2\left(1 - \dfrac{c^2 h_t^2}{h^2}\right) u_i^k + \dfrac{c^2 h_t^2}{h^2}(u_{i-1}^k + u_{i+1}^k), \quad \text{si } k > 0 \end{cases}.$$

Fonctions qui appliquent le schéma à un point (pour $k > 0$ puis pour $k = 0$)

```
static inline __attribute__((always_inline))
double schema(double *u_anc_0, double *u_anc_1, int i, int k){

    double res = // const_1 = pow(c, 2) * pow(h_t, 2) / pow(h, 2)
    -u_anc_1[i]
    + 2 * (1 - const_1) * u_anc_0[i]
    + const_1 * (u_anc_0[i - 1] + u_anc_0[i + 1]);

    return res;

}
```

```
void init_u_1(double (*u_1)(double), double *u_anc_1, double **u_anc_0){

    *u_anc_0 = (double *)malloc(nb_pt * sizeof(double));

    (*u_anc_0)[0] = 0.0; (*u_anc_0)[nb_pt - 1] = 0.0;

    for (int i = 1; i < nb_pt - 1; i++) {
        (*u_anc_0)[i] = h_t * u_1(i * h) + u_anc_1[i];
    }

}
```

Équation des ondes en dimension 1 – Implémentation

Fonction pour terminer :

```
void terminaison(double **permut, double **u, double **u_anc_0, double **
    u_anc_1){

    int nb_permut = 0;

    if (N_t % 3 == 1){
        nb_permut = 2;
    }
    else if (N_t % 3 == 2){
        nb_permut = 1;
    }

    for (int i = 0 ; i < nb_permut ; i ++){
        *permut = *u_anc_1; *u_anc_1 = *u_anc_0; *u_anc_0 = *u; *u = *permut;
    }

    free(*u_anc_0); free(*u_anc_1);

}
```

Commentaires

- $\|e\|_\infty^\infty$ en fonction de h et de h_t (avec $L = 1$, $T = 1$ et $c = 1$) :

$\downarrow h \quad h_t \rightarrow$	1/100	1/200	1/500	1/1000
1/100	0.01570926	0.00780545	0.00307972	0.00150733
1/200	∞_f	0.00785414	0.00312801	0.00155531
1/500	∞_f	∞_f	0.00314160	0.00156886
1/1000	∞_f	∞_f	∞_f	0.00157080

  où ∞_f est ou bien l'infini des flottants double précision (`inf`), ou bien une valeur très élevée. On vérifie la proposition énoncée, les valeurs ∞_f sont bien atteintes lorsque $c\dfrac{h_t}{h} > 1$.
- Lorsque h/h_t est fixé, le schéma semble bien converger.
- On ne s'intéresse pas ici aux temps d'exécutions.
- La complexité algorithmique est $O(N \cdot N_t)$.

Équation de la chaleur en dimension 2

Problème

Soient $L, T > 0, f :]0, L[\times]0, L[\times]0, T] \to \mathbb{R}$ continue et bornée, $D :=]0, L[\times]0, L[$. Soit le problème suivant :

Trouver u de classe C^2 telle que :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - a\Delta u = f(x, y, t) \quad \forall\, (x, y) \in D \;\forall\; t \in]0, T], a > 0 \\ u(x, y, t) = 0 \quad \forall\, (x, y) \in \partial D \;\forall\; t \in [0, T] \\ u(x, y, 0) =: u_0(x, y) \quad \forall\, (x, y) \in D \end{cases}.$$

Si $f(x, y, t) = \left(-\lambda + 2a\pi^2\right) \sin(\pi x) \sin(\pi y)\, e^{-\lambda t}$ et $u_0(x, y) = \sin(\pi x) \sin(\pi y)$, alors $u(x, y, t) = \sin(\pi x) \sin(\pi y)\, e^{-\lambda t}$.

Discrétisation

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, y, t) = \frac{1}{h_t}\left(-u(x, y, t) + u(x, y, t + h_t)\right) + E_{h_t}$$

avec :

$$E_{h_t} := -\frac{1}{2} h_t \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, y, t + \theta_t h_t).$$

Schéma

$$\boxed{u_{i,j}^{k+1} = \alpha u_{i,j}^k + \beta\left(u_{i-1,j}^k + u_{i,j-1}^k + u_{i+1,j}^k + u_{i,j+1}^k\right) + h_t f_{i,j}^k}$$

avec :

$$\alpha := 1 - \frac{4 a h_t}{h^2} \quad \text{et} \quad \beta := \frac{a h_t}{h^2}.$$

Discrétisation

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, y, t + h_t) = \frac{1}{h_t}\left(u(x, y, t + h_t) - u(x, y, t)\right) + E_{h_t}$$

avec :

$$E_{h_t} := \frac{1}{2} h_t \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, y, t + (\theta_t + 1) h_t).$$

Schéma

$$\boxed{\alpha u_{i,j}^{k+1} + \beta\left(u_{i-1,j}^{k+1} + u_{i,j-1}^{k+1} + u_{i+1,j}^{k+1} + u_{i,j+1}^{k+1}\right) = u_{i,j}^{k} + h_t f_{i,j}^{k+1}}$$

avec :

$$\alpha := 1 + \frac{4ah_t}{h^2} \quad \text{et} \quad \beta := -\frac{ah_t}{h^2}.$$

Schéma sous forme matricielle par blocs

$$\boxed{Au^{k+1} = b^k} \Leftrightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} \boxed{M} & \boxed{N} & \cdot & \cdot \\ \boxed{N} & \ddots & \ddots & \cdot \\ \cdot & \ddots & \ddots & \boxed{N} \\ \cdot & \cdot & \boxed{N} & \boxed{M} \end{pmatrix}}_{=:A} \underbrace{\begin{pmatrix} u_1^{k+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1}^{k+1} \end{pmatrix}}_{=u^{k+1}} = \underbrace{\begin{pmatrix} b_1^{k+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ b_{N-1}^{k+1} \end{pmatrix}}_{=b^{k+1}}$$

avec

$$M := \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \cdot & \cdot \\ \beta & \ddots & \ddots & \cdot \\ \cdot & \ddots & \ddots & \beta \\ \cdot & \cdot & \beta & \alpha \end{pmatrix}, \qquad N := \beta I \quad \text{et} \quad b^k := u^k + h_t f^{k+1}.$$

Méthode explicite

Évident.

Méthode implicite

Proposition A est définie-positive et $Au = f$ admet une unique solution.

Démonstration Montrer que A est à diagonale strictement dominante.

Proposition Les schémas explicite et et implicite sont consistants en espace et en temps : $\lim_{h \to 0} |E_h| = 0$ et $\lim_{h_t \to 0} |E_{h_t}| = 0$.

Remarque Les schémas explicite et implicite sont d'ordre 2 pour x et pour y et d'ordre 1 pour t.

Proposition *(admise)* Le schéma explicite est convergent $\Leftrightarrow \beta \leq \frac{1}{4}$.

Remarques

- On vérifiera cette propriété avec un exemple.
- Cette proposition s'appelle la condition de Courant-Friedrich-Levy (CFL).

Proposition *(admise)* Soit $(\lambda_i)_{1 \leq i \leq N-1}$ l'ensemble des valeurs propres de A avec $\lambda_1 < ... < \lambda_{N-1}$. Alors, $\lambda_1 \geq 1$.

Proposition Si $f \equiv 0$, alors le schéma implicite est stable :
$\forall\ k \geq 0 : \|u^{k+1}\| \leq \|u^0\|$.

Démonstration

- Définir $\langle u, v \rangle := \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} u_{i,j} v_{i,j}$ une application produit scalaire.
- Multiplier le schéma par $u_{i,j}^{k+1}$.
- Passer à la somme.
- Reconnaitre le produit scalaire défini et utiliser le fait que A est diagonalisable.
- Utiliser l'inégalité de Cauchy-Schwarz.
- Faire une récurrence.

Équation de la chaleur en dimension 2 – Implémentation

Pour la suite, la fonction à approcher sera
$f(x, y, t) = \left(-\lambda + 2a\pi^2\right) \sin(\pi x) \sin(\pi y)\, e^{-\lambda t}$ avec $u_0(x, y) = \sin(\pi x) \sin(\pi y)$.

Équation de la chaleur en dimension 2 – Implémentation

Version avec schéma explicite en séquentiel

Fonction principale :

```
void calculer_u(double *u){

    double *u_anc; double *permut;
    init_u_zero(u_zero, &u_anc);
    for (int i = 0 ; i < nb_pt * nb_pt ; i ++){
        u[i] = 0.0;
    }

    for (int k = 1 ; k <= N_t ; k ++){

        # ifdef ECRITURE
        ecrire_double_iteration(u_anc);
        # endif

        for (int j = 1 ; j < nb_pt - 1 ; j ++){
            for (int i = 1 ; i < nb_pt - 1 ; i ++){
                double f = f_source(i * h, j * h, k * h_t);
                u[IDX(i, j)] = schema(f, u_anc, i, j, k);
            }
        }

        permut = u; u = u_anc; u_anc = permut;

    }

    # ifdef ECRITURE
    ecrire_double_iteration(u);
    # endif

    terminaison(&permut, &u, &u_anc);

}
```

Équation de la chaleur en dimension 2 – Implémentation

Version avec schéma explicite en séquentiel

Rappel du schéma : $$\boxed{\alpha u_{i,j}^{k+1} + \beta \left(u_{i-1,j}^{k+1} + u_{i,j-1}^{k+1} + u_{i+1,j}^{k+1} + u_{i,j+1}^{k+1} \right) = u_{i,j}^{k} + h_t f_{i,j}^{k+1}}.$$

Fonction qui applique le schéma à un point :

```
static inline __attribute__((always_inline))
double schema(double *f, double *u_anc, int i, int j, int k){

    double res = alpha * u_anc[IDX(i, j)]
    + beta *
    (u_anc[IDX(i - 1, j)] + u_anc[IDX(i, j - 1)] + u_anc[IDX(i + 1, j)]
    + u_anc[IDX(i, j + 1)])
    + h_t * f[IDX(i, j)];

    return res;

}
```

Commentaires

– $\|e\|_\infty^\infty$ en fonction de h et de h_t (avec $L = 1$, $T = 1$, $a = 1$ et $\lambda = 2a\pi^2$) :

$\downarrow h \quad h_t \rightarrow$	1/10000	1/20000	1/50000	1/100000
1/10	0.00266777	0.00284805	0.00295614	0.00299216
1/20	0.00039394	0.00057533	0.00068410	0.00072034
1/50	0.00024223	0.00006052	0.00004843	0.00008473
1/100	∞_f	∞_f	0.00004237	0.00000605

On vérifie la proposition énoncée, les valeurs ∞_f sont bien atteintes lorsque $\beta > 1/4$.

Commentaires *(suite)*

- Temps d'exécution (en s) pour $N = 200$ et $N_t = 160000$ en fonction de l'activation ou non de l'écriture dans un fichier :

Mode	Sans écriture	Avec écriture
Temps d'exécution (en s)	52.1	57.8

- La condition sur β est très contraignante : si l'on souhaite diviser par 2 le pas spatial, alors il faut diviser par 4 le pas temporel. Et la constante $1/4$ implique que $h_t \leq \frac{1}{4a} h^2$, forçant des pas temporel très petits comparés aux pas spatiaux.
- La complexité algorithmique est $O(N^2 \cdot N_t)$.

Équation de la chaleur en dimension 2 – Implémentation

Version avec schéma explicite en parallèle avec OpenMP

Fonction principale :

```
void calculer_u(double *u){

    double *u_anc; double *permut;
    init_u_zero(u_zero, &u_anc);
    for (int i = 0 ; i < nb_pt * nb_pt ; i ++){
        u[i] = 0.0;
    }

    # pragma omp parallel firstprivate(u, u_anc, permut)
    {

        for (int k = 1 ; k <= N_t ; k ++){

            # ifdef ECRITURE
            # pragma omp single
            ecrire_double_iteration(u_anc);
            # endif

            # pragma omp for schedule(static)
            for (int j = 1 ; j < nb_pt - 1 ; j ++){
                for (int i = 1 ; i < nb_pt - 1 ; i ++){
                    double f = f_source(i * h, j * h, k * h_t);
                    u[IDX(i, j)] = schema(f, u_anc, i, j, k);
                }
            }

            permut = u; u = u_anc; u_anc = permut;

        }

        # ifdef ECRITURE
        ecrire_double_iteration(u);
        # endif

        terminaison(&permut, &u, &u_anc);

    }

}
```

Fonction pour terminer :

```
void terminaison(double **permut, double **u, double **u_anc){

    if (N_t % 2 != 0){
        *permut = *u; *u = *u_anc; *u_anc = *permut;
    }

    # pragma omp single
    free(*u_anc);

}
```

Commentaires

- A la différence des implémentations OpenMP des problèmes stationnaires, on définit la zone parallèle (de fork) à l'extérieur des boucles. Les tableaux `u` et `u_anc` sont toujours sur le tas mais chaque thread possède une copie privée des pointeurs. Un seul thread effectue la libération de `u_anc`.

Commentaires *(suite)*

- L'écriture dans un fichier se fait en séquentiel.
- Temps d'exécution (en s) pour $N = 200$ et $N_t = 160000$ en fonction du nombre de threads de l'activation ou non de l'écriture dans un fichier :

↓ Nombre de threads Mode →	Sans écriture	Avec écriture
1	52.0	58.2
2	30.1 1.7	36.4 1.6
4	20.9 2.5	24.3 2.4
6	25.0 2.1	28.5 2.0
8	21.7 2.4	25.6 2.3

Fonction pour écrire u^k dans un fichier en parallèle (qui utilise un type dérivé `vue_fichier`) :

```
static inline __attribute__((always_inline, unused))
void ecrire_double_iteration(double *u, int k){

    uint64_t offset = (uint64_t)k * (uint64_t)nb_pt * (uint64_t)nb_pt *
    (uint64_t)sizeof(double);
    int taille[2] = {nb_pt, nb_pt};
    int sous_taille[2]  = {nb_pt_div_j, nb_pt_div_i};
    int debut[2] = {j_debut, i_debut};

    MPI_Datatype vue_fichier;
    MPI_Type_create_subarray(2, taille, sous_taille, debut, MPI_ORDER_C,
    MPI_DOUBLE, &vue_fichier);
    MPI_Type_commit(&vue_fichier);

    MPI_File_set_view(descripteur, offset, MPI_DOUBLE, vue_fichier, "native",
    MPI_INFO_NULL);

    MPI_File_write_all(descripteur, u, 1, bloc_send, MPI_STATUS_IGNORE);

    MPI_Type_free(&vue_fichier);

}
```

Commentaires

- Pour le calcul de la solution exacte (en séquentiel), on réutilise la fonction `regrouper_u` (voir la fonction `calculer_u_u_exact`.
- Temps d'exécution (en s) pour $N = 200$ et $N_t = 160000$ en fonction du nombre de processus de l'activation ou non de l'écriture dans un fichier :

↓ Nombre de processus Mode →	Sans écriture	Avec écriture
1	53.3	98.3
2	33.7 1.6	63.7 1.5
4	25.9 2.1	74.2 1.3
6	35.4 1.5	88.5 1.1
8	38.4 1.4	132.0 0.7

Équation de la chaleur en dimension 2 – Implémentation

Version avec schéma implicite en séquentiel

Fonction principale :

```
void resoudre(cholmod_sparse *A, double *u){

    double *b_int = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));
    double *u_int = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));

    init_u_zero(u_zero, u);

    cholmod_dense *b_dense = cholmod_allocate_dense(A -> nrow, 1, A -> nrow, CHOLMOD_REAL, &c);
    cholmod_dense *u_dense;
    cholmod_factor *L = cholmod_analyze(A, &c);
    cholmod_factorize(A, L, &c);

    for (int k = 1 ; k <= N_t ; k ++){

        # ifdef ECRITURE
        ecrire_double_iteration(u);
        # endif

        extraire_interieur(u, u_int, nb_pt);
        calculer_b(k + 1, u_int, b_int);

        memcpy(b_dense -> x, b_int, A -> nrow * sizeof(double));

        u_dense = cholmod_solve(CHOLMOD_A, L, b_dense, &c);

        memcpy(u_int, u_dense -> x, A -> nrow * sizeof(double));

        inserer_interieur(u_int, u, nb_pt);

    }

    # ifdef ECRITURE
    ecrire_double_iteration(u);
    # endif

    cholmod_free_factor(&L, &c);
    cholmod_free_dense(&b_dense, &c);
    cholmod_free_dense(&u_dense, &c);
    free(b_int);
    free(u_int);

}
```

Équation de la chaleur en dimension 2 – Implémentation

Version avec schéma implicite en séquentiel

Fonction pour calculer b^k :

```
static inline __attribute__((always_inline))
void calculer_b(double t, double *u, double *b){

    for (int i = 0 ; i < idx_max ; i ++){
        int x = i % (N - 1);
        int y = i / (N - 1);
        b[i] = u[i] + h_t * f_source(x, y, t + 1);
    }

}
```

Commentaires

– $\|e\|_\infty^\infty$ en fonction de h et de h_t (avec $L = 1, T = 1, a = 1$ et $\lambda = 2a\pi^2$) :

$\downarrow h \quad h_t \rightarrow$	1/10000	1/20000	1/50000	1/100000
1/10	0.00338798	0.00320815	0.00310018	0.00306418
1/20	0.00111862	0.00093767	0.00082903	0.00079281
1/50	0.00048370	0.00030244	0.00019361	0.00015732
1/100	0.00039301	0.00021171	0.00010286	0.00006656

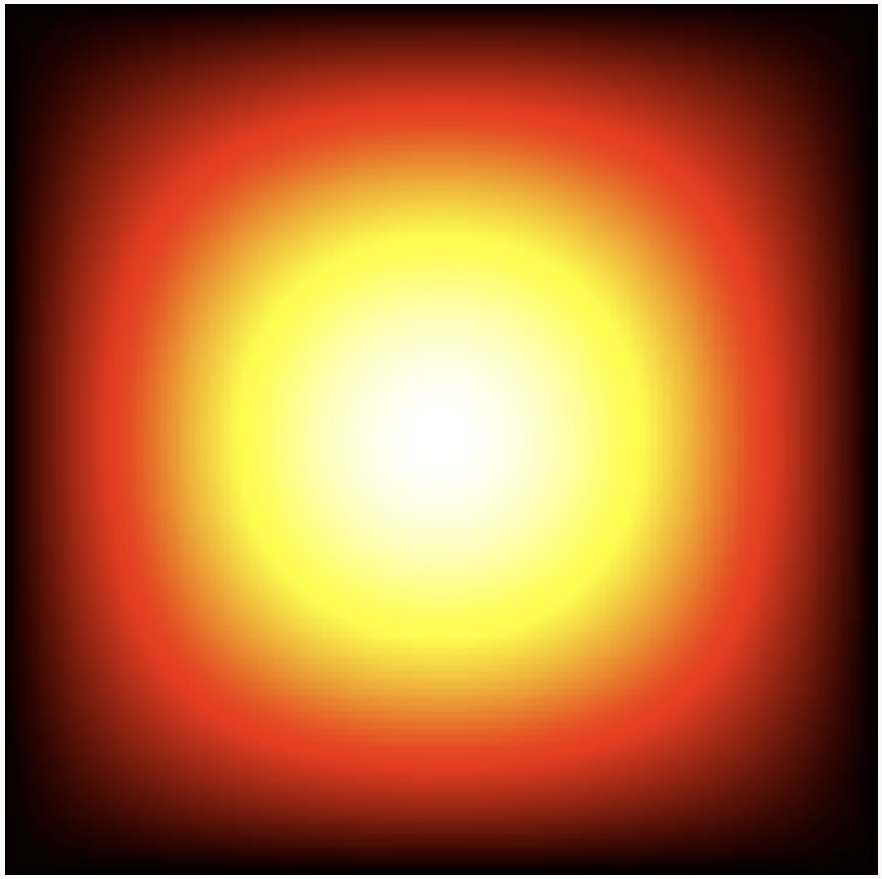
Commentaires

- Temps d'exécution (en s) en fonction de N (avec $N_t = N$) et de l'activation ou non de l'écriture dans un fichier :

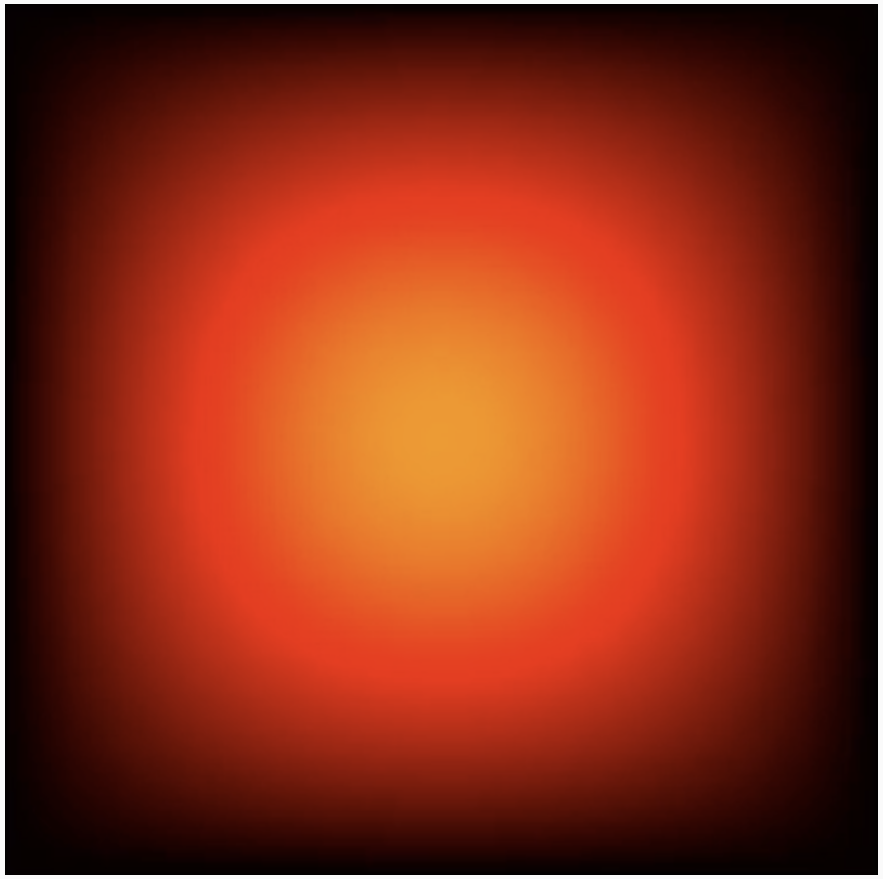
$\downarrow N(= N_t)$ Mode $\rightarrow$	Sans écriture	Avec écriture
600	12.6	12.3
800	32.0	29.2
1000	60.4	58.4
1200	97.7	99.0
1400	159.1	162.8

- Discussion sur les pas entre le schéma explicite et le schéma implicite.
- Il y a la possibilité de paralléliser certaines parties du code (hors calcul principal).

Diffusion de la chaleur



État initial



État après diffusion

Bibliographie et supports

- *Rappels de calcul scientifique.* (2008) par Patrick Ciarlet
- *Finite-Difference Approximations to the Heat Equation* (2004) par Gerald W. Recktenwald
- *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations* par Habib Ammari et Konstantinos Alexopoulos
- *Lecture 6: Finite difference methods* par Habib Ammari
- *SUITESPARSE : A SUITE OF SPARSE MATRIX SOFTWARE*
- *Direct Methods for Sparse Linear Systems* par Timothy A. Davis
- Cours de calcul numérique (M1 CHPS) par Serge Dumont
- Cours d'analyse et calcul numérique (L3 Maths) par Francesco Bonaldi
- Cours d'algorithmique et programmation parallèle (M1 CHPS) par David Defour
- Forums d'aides

Conclusion

Lien vers le GitHub du projet

`https://github.com/gaillot18/Stage-EDP.git`

(contient le rapport écrit, la présentation et le projet)

Merci pour votre attention. Des questions ?