Master 1 CHPS - Semestre 2

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 et explications

- But du projet
- Approche utilisée (partie mathématique et partie informatique)
- Outils utilisés (analyse numérique, algorithmique, programmation C, MPI, OpenMP, bibliothèque, ...)

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

Notations mathématiques

- N est le nombre de noeuds dans une direction
- $x_i := ih \text{ pour } i \in \{0, \ldots, N\}$
- $u(x_i) :\approx u_i$
- ullet $u:=egin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_{N-1} \end{pmatrix}^T$ est le vecteur de la solution approchée
- ullet h est le pas de discrétisation en espace, h_t est le pas de discrétisation en temps
- E_h est l'erreur de troncature

Équation de Poisson en

dimension 1

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

Trouver u de classe C^4 telle que :

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

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

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

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique Schéma numérique

Schéma sous forme matricielle

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique Schéma numérique

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).

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique 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 :

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

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

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique

Consistance du schéma et majoration de l'erreur de troncature

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

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

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

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

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique Convergence du schéma et majoration de l'erreur locale

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

Proposition Soit
$$e := (u_i - u(x_i))_{0 \le i \le N}$$
. 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 $\varepsilon := Ae \ (A^{-1}\varepsilon = e)$.

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique Convergence du schéma et majoration de l'erreur locale

Remarques

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

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique Convergence du schéma et majoration de l'erreur locale

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

$$(E+F) u^{(k)} + f = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} u_0^{(k)} + u_2^{(k)} \\ \vdots \\ u_0^{(k)} + u_1^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_1^{(k)} \\ \vdots \\ \vdots \\ f^{(k)} \end{pmatrix}.$$

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique Méthode de résolution itérative

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

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.

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique Méthode de résolution directe

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:

$$L|_{j=1} = \begin{pmatrix} \ell_{0,1} & \ell_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}^T$$
.

On calcule la colonne j=2: $L|_{j=2} = \begin{pmatrix} 0 & \ell_{1,2} & \ell_{2,2} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}^T.$

$$L|_{j=2} = \begin{pmatrix} 0 & \ell_{1,2} & \ell_{2,2} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Ainsi de suite...

Équation de Poisson en dimension 1 – Analyse numérique Méthode de résolution directe

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

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

et

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



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

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation 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).

Version de base

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
ſ	$\ e\ _{\infty}$	0.031916	0.008265	0.000329	0.000082	0.000009	0.000003	< 0.000001
ſ	Temps 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 $O(N^3)$.

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

Fonction principale

```
void calculer_u_jacobi(double *f, double *u){
    double h carre = 1.0 / (N * N):
    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 j = 1; j < nb_pt - 1; j ++){
            for (int i = 1; i < nb_pt - 1; i ++){
                u[IDX(i, i)] = schema(f, u, u anc, i, i):
        norme = norme_infty_iteration(u, u_anc);
        permut = u; u = u_anc; u_anc = permut; nb_iteration ++;
    terminaison(&permut, &u, &u_anc);
```

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

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;
}
```

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

Fonction pour calculer la norme infinie relative

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);
}
```

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

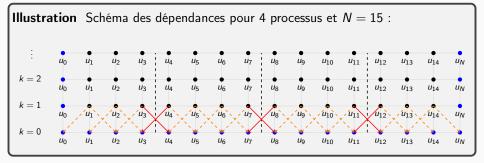
Commentaire On note ces résultats :

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
Temps d'ex (s)	< 0.01	< 0.01	< 0.01	0.01	0.14	0.54	11.83

Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec OpenMP

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.

Équation de Poisson en dimension 1 – Implémentation Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI



Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI

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);
}
```

Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI

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 \operatorname{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 ++){</pre>
            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);
```

Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI

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);
}
```

Version avec méthode de résolution directe en séguentiel

Structure mat 2bandes

}

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

Fonction pour allouer la structure

```
void init mat 2bandes(struct mat 2bandes *A){
    A \rightarrow 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);
```

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

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));
}
```

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Test pour avoir un aperçu de la compression

```
Illustration de la structure mat 2bandes (exemple pour N petit) :
Structure mat2 bandes :
N = 7
                         8.573214
                                     8.082904
                                                 7.826238
                                                            7.668116
                                                                         7.560864
diag
             9.899495
sou\bar{s}_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
```

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

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);
}
```

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];
}
```

```
Fonction pour résoudre L<sup>T</sup>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];
}
```

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Commentaires

- Cette méthode est impossible à paralléliser à cause des dépendances.
- 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).

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

Ν	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 Comparaison des performances des méthodes

Discussion sur les performances...

Équation de Poisson en

dimension 2

Équation de Poisson en dimension 2 – Analyse numérique Présentation du 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 $u(x,y) = \frac{1}{8\pi^2}(2\pi x)\sin(2\pi y)$.

Discrétisation

$$u(x + h_{x}, y) + u(x - h_{x}, y)$$

$$= 2u(x, y) + h_{x}^{2} \frac{\partial^{2} u}{\partial x^{2}}(x, y) + \frac{1}{24} h_{x}^{4} \left(\frac{\partial^{4} u}{\partial x^{4}}(x + \theta_{x_{+}} h_{x}, y) + \frac{\partial^{4} u}{\partial x^{4}}(x + \theta_{x_{-}} h_{x}, y) \right),$$

$$- \frac{\partial^{2} u}{\partial x^{2}}(x, y) = \frac{1}{h_{x}^{2}} \left(-u(x - h_{x}, y) + 2u(x, y) - u(x + h_{x}, y) \right) + \frac{1}{12} h_{x}^{2} \frac{\partial^{4} u}{\partial x^{4}}(x + \theta_{x} h_{x}, y),$$

$$- \frac{\partial^{2} u}{\partial y^{2}}(x, y) = \frac{1}{h_{y}^{2}} \left(-u(x, y - h_{y}) + 2u(x, y) - u(x, y + h_{y}) \right) + \frac{1}{12} h_{y}^{2} \frac{\partial^{4} u}{\partial y^{4}}(x, y + \theta_{y} h_{y})$$

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

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

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

Schéma

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

Équation de Poisson en dimension 2 – Analyse numérique Schéma numérique

Schéma sous forme matricielle

$$Au = f$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 4 & -1 & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -1 & 4 & -1 & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -1 & 4 & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -1 & \cdot & \cdot & 4 & -1 & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & \cdot & \cdot & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & \cdot & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ \cdot & \cdot & -1 & -1 & -1 & -1 &$$

Équation de Poisson en dimension 2 – Analyse numérique Schéma numérique

Schéma sous forme matricielle par blocs

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

avec

$$M:=\left(egin{array}{ccccc} 4 & -1 & \cdot & \cdot \ -1 & \ddots & \ddots & \cdot \ \cdot & \ddots & \ddots & -1 \ \cdot & \cdot & -1 & 4 \end{array}
ight).$$

Équation de Poisson en dimension 2 – Analyse numérique Schéma numérique

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.

Équation de Poisson en dimension 2 – Analyse numérique

Existence et unicité de la solution approchée

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

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

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

Équation de Poisson en dimension 2 – Analyse numérique

Existence et unicité de la solution approchée

Démonstration (suite) avec

$$B:=rac{1}{h^2}\left(egin{array}{ccccc} 2 & -1 & \cdot & \cdot & \cdot \ -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -1 \ \cdot & \cdot & \cdot & -1 & 2 \end{array}
ight).$$

Donc on obtient :

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

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

Équation de Poisson en dimension 2 – Analyse numérique Consistance du schéma et majoration de l'erreur de troncature

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

Notation Soit
$$d \in \{1, ..., 4\}$$
. 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 $|E_h| \le \frac{1}{6} h^2 |C_{u,4}|$.

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

Équation de Poisson en dimension 2 – Analyse numérique Convergence du schéma et majoration de l'erreur locale

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

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

et

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

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

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

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

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

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

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 :

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

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 :

$$y_1 = \frac{f_1}{\ell_{1,1}}$$
 et pour i 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

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

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

Version de base

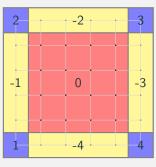
Étapes :

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

Version de base

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 :



Version de base

Commentaires (suite)

- Pour calculer 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	
Temps d'exécution (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 $O(N^6)$.

Version avec méthode de résolution itérative en séquentiel

```
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, j + 1)]
    + 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
Temps d'ex. (s)	< 0.1	< 0.1	0.1	4.8	34.6	128.4

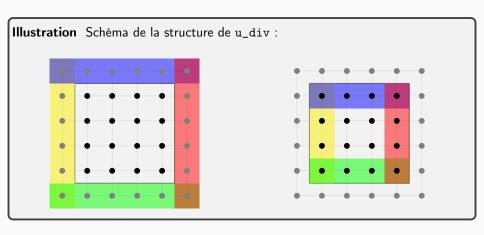
Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec OpenMP

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

Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI



Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI

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(&colonne);
    MPI_Type_commit(&bloc_send);

    MPI_Barrier(comm_2D);
}
```

Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI

```
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
    \texttt{MPI\_Sendrecv}(\&(\texttt{u\_div}[\texttt{IDX}(1,\ 1)]),\ 1,\ \texttt{colonne},\ \texttt{voisins}[\texttt{0}],\ \texttt{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):
}
```

Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI

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

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution itérative en parallèle avec MPI

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.

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

```
Structure mat_Nbandes
```

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

Fonction pour allouer la structure

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);
}
```

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

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 ++){</pre>
        for (int d = 0; d < N && j + d < idx_max; d ++) {
            int i = d + i:
            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 \rightarrow diags)[0][j] -= pow((L \rightarrow 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];
       }
```

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

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;
}
```

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
                                                              7.6995
                                                                               7.3139
                                                     7.3668
                                                                       7.3261
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
         7.7460
                  0.0000
                          0.0000
                                  0.0000
                                           0.0000
                                                   0.0000
                                                            0.0000
                                                                    0.0000
-2.0000
 0.0000
        -2.0656
                 7.7287
                          0.0000
                                  0.0000
                                           0.0000
                                                   0.0000
                                                            0.0000
                                                                    0.0000
        -0.5164
                 -0.1380
                          7.7275
                                  0.0000
                                           0.0000
                                                            0.0000
                                                                    0.0000
-2.0000
                                                    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
                        -2.0705
                                 -0.6222
                                          -0.2074
                                                   7.6995
                                                                    0.0000
 0.0000
                 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
```

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Fonction principale

```
void resoudre_cholesky(double *f, double *u){
    struct mat_Nbandes L;
    double *v, *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);
    v = (double *)malloc(idx_max * sizeof(double));
    init mat Nbandes(&L):
    calculer_cholesky(&L);
    resoudre_cholesky_descente(&L, f_int, y);
    resoudre cholesky remontee (&L. v. u int):
    inserer_interieur(u_int, u, nb_pt);
    liberer mat Nbandes(&L):
    free(u_int);
    free(f_int):
    free(y);
}
```

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];
}
```

```
Fonction pour résoudre L<sup>T</sup>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];
}
```

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

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
Temps 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 $O(N^4)$.

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

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);
    memcpv(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):
    memcpv(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);
}
```

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Version avec méthode de résolution directe en séquentiel

Commentaires

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

Ν	1000	2000	3000	4000	5000
$\ e\ _{\infty}$	0.00000004	0.00000001	< 0.00000001	< 0.00000001	< 0.00000001
Temps d'exécution (s)	0.7	15.7	39.3	79.3	174.5

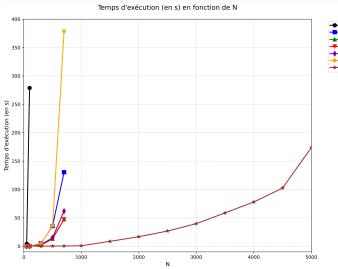
Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation Comparaison des performances des méthodes

Discussion sur les performances...

- La version de base est inutilisable en pratique.
- Les versions itératives, en particulier avec le parallélisme, donnent de bien meilleurs résultats.
- La version avec la bibliothèque cholmod donne d'excellents résultats.

Équation de Poisson en dimension 2 – Implémentation

Comparaison des performances des méthodes





Équation des ondes en

dimension 1

Équation des ondes en dimension 1 – Analyse numérique Présentation du problème

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

Trouver u de classe C^2 telle que :

$$\begin{cases} \frac{\partial^{2} u}{\partial t^{2}} - c^{2} \frac{\partial^{2} u}{\partial x^{2}} = 0 & x \in D \ \forall \ t \in]0, T], c > 0 \\ u(x) = 0 & \forall \ x \in \partial D \ \forall \ t \in [0, T] \\ u(x, 0) =: u_{0}(x) & \forall \ x \in D \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) =: u_{1}(x) & \forall \ x \in D \end{cases}$$

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

Discrétisation

$$u\left(x,t+h_{t}\right)+u\left(x,t-h_{t}\right)=2u\left(x,t\right)+h_{t}^{2}\frac{\partial^{2}u}{\partial t^{2}}\left(x,t\right)+\frac{1}{24}h_{t}^{4}\left(\frac{\partial^{4}u}{\partial t^{4}}\left(x,t+\theta_{+}h\right)+\frac{\partial^{4}u}{\partial t^{4}}\left(x,t+\theta_{-}h\right)\right),$$

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

avec

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

Schéma

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

Remarques

- Le schéma est explicite : il dépend de valeurs connues et ne nécessite pas de résoudre un système linéaire.
- Pour k > 0, le schéma dépend de valeurs en k 1 et en k 2.

Équation des ondes en dimension 1 – Analyse numérique Stabilité et convergence du schéma

Proposition (admise) Le schéma est convergent si $c \frac{h_t}{h} \le 1$.

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 \le 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):
}
```

Équation des ondes en dimension 1 – Implémentation

Fonction qui applique le schéma à un point :

```
static inline __attribute__((always_inline))
double schema(double *u_anc_0, double *u_anc_1, int i, int k){
    // const_1 = pow(c, 2) * pow(h_t, 2) / pow(h, 2)
    double res = -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;
}
```

Fonction pour initialiser u_1

Équation des ondes en dimension 1 - Implémentation

Fonction pour terminer

Équation des ondes en dimension 1 - Implémentation

Commentaires

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

$\downarrow h h_t \rightarrow$	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 $c\frac{h_t}{h}>1$.

- 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 $O(N \cdot N_t)$.

dimension 2

Équation de la chaleur en

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

Trouver u de classe C^2 telle que :

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

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

Équation de la chaleur en dimension 2 – Analyse numérique

Schémas numériques - Méthode explicite

Discrétisation

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

avec:

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

Schéma

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

avec :

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

Équation de la chaleur en dimension 2 – Analyse numérique

Schémas numériques - Méthode implicite

Discrétisation

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

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

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

avec:

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

Équation de la chaleur en dimension 2 – Analyse numérique

Schémas numériques - Méthode implicite

Schéma sous forme matricielle par blocs

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

avec

Équation de la chaleur en dimension 2 – Analyse numérique Existence et unicité des solutions approchées

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.

Équation de la chaleur en dimension 2 – Analyse numérique Consistance des schémas

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.

Équation de la chaleur en dimension 2 – Analyse numérique Stabilité et convergence des schémas – Méthode explicite

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).

Équation de la chaleur en dimension 2 – Analyse numérique Stabilité et convergence des schémas – Méthode implicite

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

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

 $N-1 \ N-1$

Démonstration

- ullet Définir $\langle u,v
 angle:=\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^nu_{i,j}v_{i,j}$ 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.

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

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, i * h, k * h t):
                u[IDX(i, i)] = schema(f, u anc, i, i, k);
        }
        permut = u: u = u anc: u anc = permut:
    }
    # ifdef ECRITURE
    ecrire_double_iteration(u);
    # endif
    terminaison(&permut, &u, &u_anc);
```

Version avec schéma explicite en séquentiel

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;
}
```

Version avec schéma explicite en séquentiel

Commentaires

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

$\downarrow h h_t \rightarrow$	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 $\beta > 1/4$.

Version avec schéma explicite en séquentiel

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 $O(N^2 \cdot N_t)$.

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, i * h, k * h t):
                    u[IDX(i, j)] = schema(f, u_anc, i, j, k);
            3
            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 parallèle avec OpenMP

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.

Équation de la chaleur en dimension 2 – Implémentation Version avec schéma explicite en parallèle avec OpenMP

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 N	Mode o	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

Version avec schéma explicite en parallèle avec MPI

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);
}
```

Équation de la chaleur en dimension 2 – Implémentation Version avec schéma explicite en parallèle avec MPI

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 :

\downarrow Nombre de processus $Mode \to$	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

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);
        memcpv(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);
7
```

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);
}</pre>
```

Version avec schéma implicite en séquentiel

Commentaires

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

$\downarrow h h_t ightarrow$	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

Version avec schéma implicite en séquentiel

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 :

$\downarrow N (= N_t) \mod \rightarrow$	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).

Équation de la chaleur en dimension 2 - Visualisation avec Python

Diffusion de la chaleur





État initial

État après diffusion

Bibliographie

- 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
- 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 (contient le rapport écrit) : https://github.com/gaillot18/Stage-EDP.git

Merci pour votre attention. Questions?