
AMS X02 : Méthodes numériques avancées et calcul haute performance pour la simulation de phénomènes complexes

Encadrants :

- Marc Massot
- Laurent Series



Méthode Pararéel

Hugo Negrel

Janvier 2023

Table des matières

1	Introduction	3
2	Le modèle du Brusselator	3
3	Le modèle de l'Oregonator	5

1 Introduction

Dans ce TP, nous nous intéresserons à deux modèles déjà croisé plus tôt : le modèle du Brusselator et le modèle de l'Oregonator. Ces deux modèles-jouets serviront d'exemple pour la méthode du pararéel, une technique numérique pour paralléliser le calcul temporel, ce qui peut sembler contre-intuitif à première vue.

2 Le modèle du Brusselator

Le modèle du Brusselator est un système dynamique à deux degrés de liberté

$$\begin{cases} d_t y_1 = 1 + y_1^2 y_2 - 4y_1 \\ d_t y_2 = 3y_1 - y_1^2 y_2 \end{cases}$$

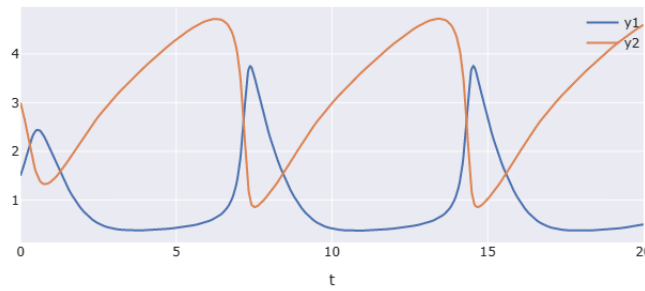


FIGURE 1 – Solution de référence du Brusselator

On souhaite déterminer vers quelle solution la méthode pararéel fait converger. On peut en imaginer deux : la solution de référence ou la solution exacte. La solution de référence est obtenue avec l'intégrateur DOP853 tandis que la solution fine est obtenue avec un Runge-Kutta d'ordre 4. DOP853 est une méthode de Runge-Kutta explicite d'ordre 8 avec pas de temps adaptatif intégré.

De ce qu'on peut voir, la solution tend vers la solution de référence, et non vers la solution exacte. On fait varier n_{sub} sur l'abscisse de la figure 3.

On constate alors bien que $\|Y_{parareel} - Y_{ref}\| \rightarrow 0$ lorsqu'on augmente la subdivision de l'intervalle. Comme prévu, la différence relative entre Y_i et Y_{i+1} diminue au fur et à mesure que l'on augmente le nombre d'itération. Cela est signe du caractère super-linéaire de l'algorithme. Ça explique par ailleurs pourquoi il faut uniquement 6 itérations. Cela veut dire entre autre qu'il a fallu faire tourner l'intégrateur fin sur un intervalle $\frac{\Delta T}{n_{sub}}$ 6 fois pour avoir converger. On définit le critère d'arrêt de manière suivante. Plaçons-nous au n -ième sous-intervalle t_n . A l'itération 0, l'algorithme utilise l'intégrateur grossier pour calculer des valeurs initiales proches de la variété d'équilibre (afin d'être dans le bon bassin d'attraction). Au fur et à mesure des itérations, la valeur en t_{n+1} aura deux valeurs différentes. Celle calculé par l'algorithme :

$$U_{n+1}^{i+1} = \mathcal{G}_{\Delta T_n}(U_n^{i+1}) + \mathcal{F}(U_n^i) - \mathcal{G}_{\Delta T_n}(U_n^i)$$

et celle à l'itération i . On arrête donc l'algorithme lorsque $|U_{n+1}^{i+1} - U_{n+1}^i| < \epsilon$, où ϵ est un terme d'arrêt fixé arbitrairement. Jusque-là, le propagateur grossier était un Runge-Kutta d'ordre 1, et le propagateur fin un Runge-Kutta d'ordre 4.

On observe immédiatement sur la figure 4 que le nombre d'itération est plus élevé pour un intégrateur fin 'rapide' que pour un intégrateur grossier 'précis'. De même, on observe que l'erreur globale reste plus faible lorsqu'on prend un intégrateur grossier en rk2 qu'un intégrateur fin en rk2. Il n'y a pas non plus de perte massive à utiliser un intégrateur fin en rk2 par rapport à rk4, on a en fait le même nombre d'itération. Cependant, avec un intégrateur grossier en rk2 (et donc un intégrateur fin en rk4), on a divisé par 2 le nombre d'itération, ce qui s'avère assez efficace. Par conséquent, avoir un intégrateur grossier assez précis peut tout de même accélérer significativement la convergence de l'algorithme.

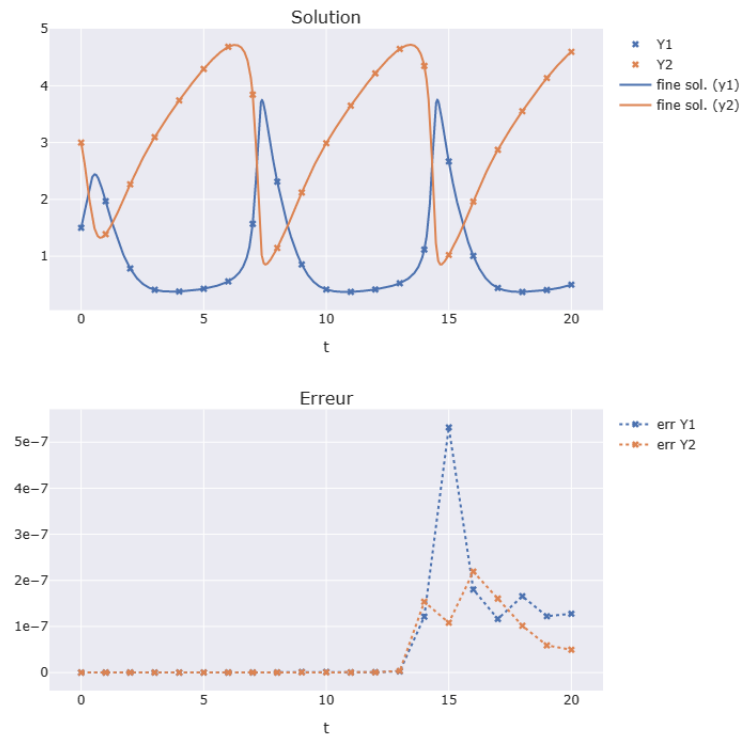


FIGURE 2 – Haut : comparaison entre solution fine et solution avec méthode pararéel. Bas : erreur entre la solution de référence et la solution avec méthode pararéel. L'intégrateur fin est un rk4.

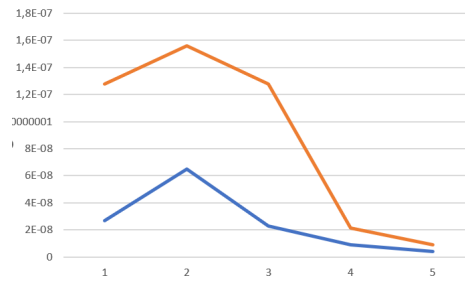


FIGURE 3 – En orange : erreur globale pour y_1 . Bleu : erreur globale pour y_2

	intégrateur grossier rk2	intégrateur fin rk2
nb d'iterations	4	8
nit/n	0,2	0,4
Tg/Tf	0,00798913	0,012266172
Tseq/Tpar	4,16761046	1,959264723
erreur globale y1	5,99E-08	0,00000561
erreur globale y2	2,51E-08	0,00000158

FIGURE 4 –

On peut montrer que :

$$\frac{T_{seq}}{T_{para}} = \frac{T_f}{\frac{n_{it}}{n}T_f + (n_{it} + 1)T_g}$$

	rk1 et rk4
nombre d'itérations	8
nit/n	0,4
Tg/Tf	0,003948967
Tseq/Tpar	2,295996675
erreur globale y1	0,000000128
erreur globale y2	0,000000023

FIGURE 5 – Intégrateur grossier en rk1 et intégrateur fin en rk4

En effet, le temps de calcul séquentiel est équivalent au temps de la méthode fine sur tout l'intervalle de temps. On a par conséquent : $T_{seq} = T_f$. Pour calculer le temps de l'algorithme pararéel, il faut compter combien de fois on utilise l'intégrateur grossier et fin. On utilise n_{it} fois l'opérateur fin sur chacun des intervalles, mais cela correspond à un temps T_f/n , car c'est là tout l'intérêt de la méthode parallèle. On utilise aussi $n_t + 1$ fois l'intégrateur grossier sur l'ensemble du domaine temporel (+1 car on l'utilise pour initialiser les conditions initiales). Ainsi, on arrive bien à $T_{para} = \frac{n_{it}}{n} T_f + (n_{it} + 1) T_g$, ce qui fournit la solution souhaitée. Le choix d'un intégrateur fin de bonne qualité a de l'importance pour l'erreur globale, mais n'a pas eu d'impact quant au nombre d'itération nécessaire. Par contre, avec un rk4 pour l'intégrateur grossier, on a $T_{seq} T_{par} = 14$, ce qui est 7 fois plus important que pour un rk2. Il est donc intéressant de faire une méthode pararéel lorsqu'on dispose d'un intégrateur de bonne qualité. La figure 5 permet de comparer à la figure 4 les éléments sensibles.

3 Le modèle de l'Oregonator

Le modèle de l'Oregonator est un modèle dynamique avec cette fois 3 degrés de libertés :

$$\begin{cases} d_t y_1 = y_2 - y_1 \\ \epsilon d_t y_2 = q y_3 - y_3 y_2 + y_2 (1 - y_2) \\ \mu d_t y_3 = -q y_3 - y_3 y_2 + f y_1 \end{cases}$$

avec les paramètres suivants : $q = 2 \cdot 10^{-4}$, $\epsilon = 10^{-2}$, $\mu = 10^{-5}$, $f = 3$ et $\epsilon = 10^{-2}$.

La méthode RADAU5, de par son caractère implicite, a besoin d'une méthode de Newton pour résoudre les équations. La méthode de Newton fait intervenir l'erreur relative, d'où son importance dans le cas présent pour surveiller la convergence. Plus précisément, on doit avoir

$$\frac{\Theta^k}{1 - \Theta^k} \|\Delta Z^k\| < \kappa Tol$$

avec $\Theta^k = \frac{\|Z^{k+1}\|}{\|Z^k\|}$. L'erreur absolue sert quant-à-elle à la convergence de la méthode pararéel, tout comme pour le modèle du Brusselator. La figure 6 affiche le résultat pour la solution de référence.

La figure 7 énonce les performances de la méthode pararéel pour différents intégrateurs grossiers. On observe que le choix de l'intégrateur a peu d'influence sur le nombre d'itération mis en jeu. Cependant, avec des intégrateurs grossiers performants, la méthode pararéel devient moins intéressante puisque le rapport $\frac{T_{seq}}{T_{par}}$ diminue. Bien sûr, l'erreur globale pour chacune des variables diminue tout de même significativement. Cependant, la convergence se trouve très fortement ralentie si on divise trop le domaine temporel. L'algorithme après plus de 150 itérations pour $n_{sub} = 200$. On ne peut donc pas diminuer la parallélisation comme on le souhaite, au risque de découpler le temps de calcul, contrairement au modèle du Brusselator, qui était plus relaxé de ce côté là. On voit sur la figure 8 que l'on gagne surtout en précision, mais le rapport temporel $\frac{T_g}{T_f}$ reste constant lorsqu'on modifie n_{sub} , $\frac{T_{seq}}{T_{par}}$ diminue légèrement, ce qui rend la méthode pararéel moins efficace par rapport à la méthode séquentiel.

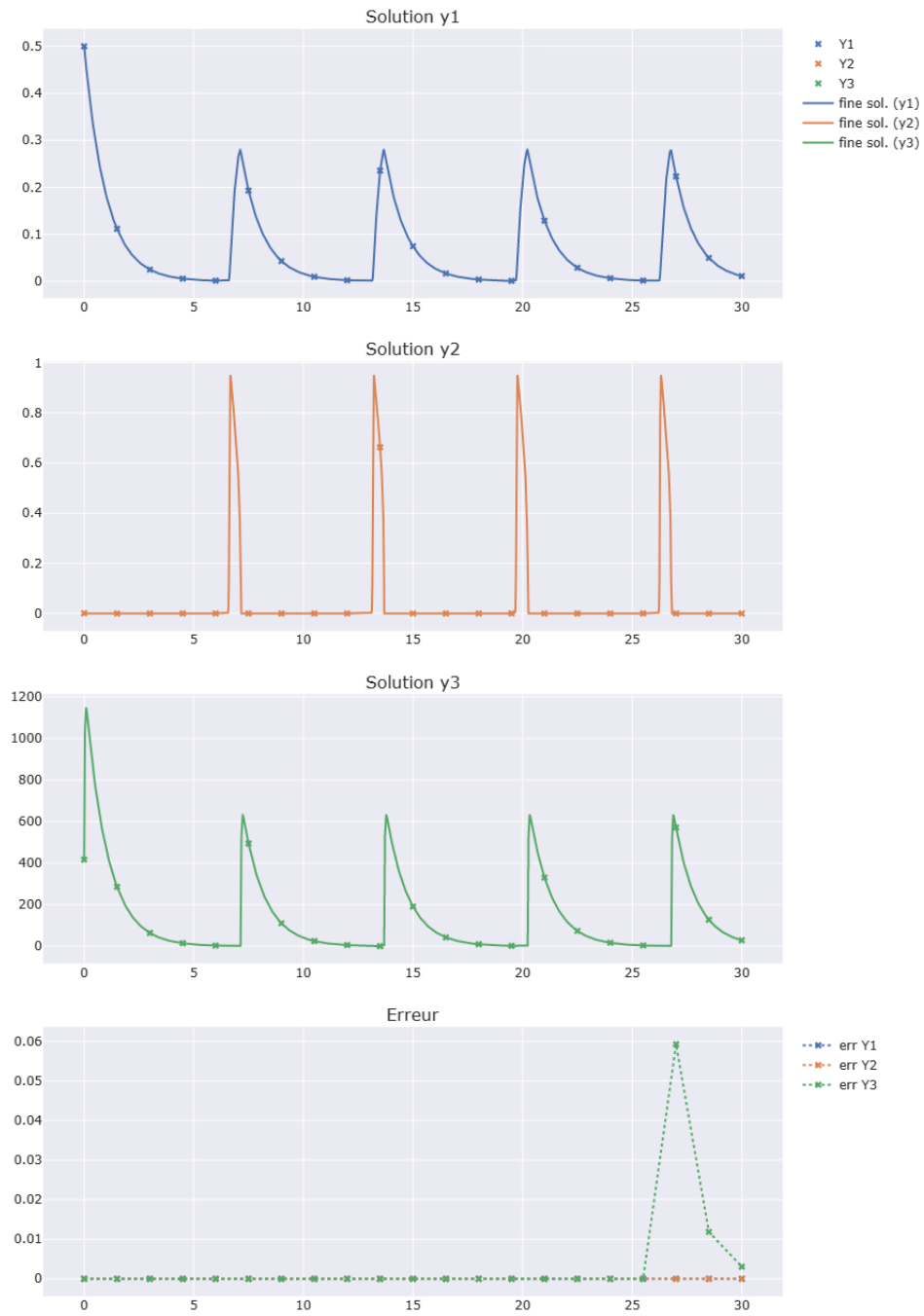


FIGURE 6 – Intégrateur fin et grossier en RADAU

	radau	RK23	RK45	DOP853
nombre d'itérations	16	17	19	20
nit/n	0,8	0,85	0,95	1
Tg/Tf	0,158327421	9,782055096	13,48945535	10,31684727
Tseq/Tpar	0,286404426	0,005652049	0,003693593	0,004594452
erreur globale y1	0,000119	0,0000526	1,39E-08	1,76E-11
erreur globale y2	0,0000318	0,0000104	0,0000227	4,63E-09
erreur globale y3	0,000149	0,000066	0,0000172	3,35E-09

FIGURE 7 – Tableau résumant les caractéristiques pour différents intégrateurs grossiers

	20	25	30	40
nombre d'itérations	20	25	27	37
nit/n	1	1	0,9	0,925
Tg/Tf	9,48336498	9,563864293	9,799554079	10,05398727
Tseq/Tpar	0,004996236	0,00400544	0,003632566	0,002611126
erreur globale y1	1,76E-11	4,13E-11	3,05E-08	7,49E-09
erreur globale y2	4,63E-09	1,64E-09	0,0000875	4,66E-05
erreur globale y3	3,35E-09	1,92E-09	0,000077	4,09E-05

FIGURE 8 – Tableau résumant les caractéristiques pour différents intervalles temporels