

# Simulation numériques hautes performances pour le calcul

B. DI PIERRO

Année 2020-2021

- *Le travail se déroule seul. Chaque élève sera noté indépendamment tout au long des séances de TP sur sa participation.*
- *La clarté, la lisibilité ainsi que les commentaires du code source auront une part importante dans la notation. Argumentez vos choix lors de l'écriture des codes sources.*

## Rappel:

- Pensez à commenter (intelligemment) vos codes.
- Commencez par écrire l'algorithme AVANT d'écrire le code.
- L'ordinateur est bête et méchant : il ne fera que ce que vous lui demanderez de faire, ni plus, ni moins.

## Objectif:

L'objectif de ce TP est de se familiariser avec les commandes de bases de linux et de développer des programmes simples pour appliquer les notions vues en cours.

## 1 Premiers pas avec linux

- Créez un répertoire de travail dans votre répertoire personnel et placez vous y.
- Copiez cet énoncé dans ce répertoire de travail
- Créez un fichier vierge et renommez le en "TP1.c" (ou TP1.f)
- Modifiez les droits de ce fichier pour qu'il soit accessible en lecture et écriture pour vous et lecture uniquement pour les membres du groupe et les autres
- Vérifiez ces droits
- A l'aide de la commande "gedit", modifiez le contenu de ce fichier pour écrire un programme simple (ex : hello world)
- Compilez ce fichier avec le compilateur gcc (ou gfortran) :  
gcc TP1.c -o exo1
- exécutez ce fichier et vérifiez le bon fonctionnement

## 2 Calcul de pi

On souhaite calculer une valeur approchée de  $\pi$  par l'intégrale suivante :

$$\pi \approx I = \int_0^1 f(x)dx, \quad f(x) = \frac{4}{1+x^2}$$

par la méthode des trapèzes (tel qu'illustré sur la figure 1):

$$I \approx \sum_{i=0}^{N-1} \delta x \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2} \quad (1)$$

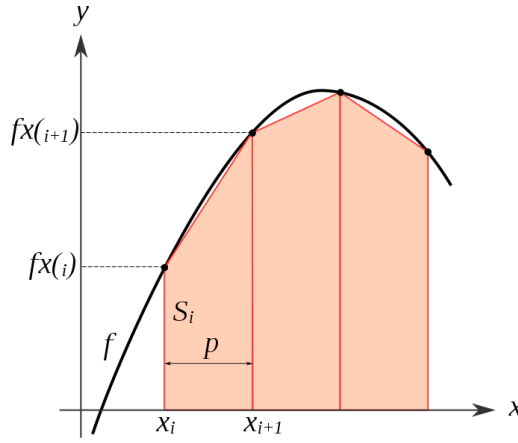


Figure 1: Illustration de la méthode des trapèzes

- Créez un fichier C (ou Fortran)
- Ecrivez une fonction “fint”, qui pour un point  $x_i$  donné calcule  $f(x_i)$ .
- Ecrivez une fonction “trapz”, qui pour un vecteur (tableau)  $x$  calcule l’intégrale par la formule 1
- Ecrivez finalement une fonction “main” qui déclarera un tableau dynamique  $x$  contenant  $N + 1$  points de discrétisation entre 0 et 1.
- Vérifiez finalement la valeur calculée de pi.

### 3 Equation d’advection diffusion

On souhaite maintenant résoudre une équation d’advection-diffusion :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = F(f(x, t)) = -V \frac{\partial f}{\partial x} + D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (2)$$

avec des conditions aux limites périodiques sur  $x \in [-1, 1]$  et une condition initiale :

$$f(x, t = 0) = 2 + \cos(\pi x) \quad (3)$$

Cette résolution se fera pas les schémas algébriques suivants :

- Dérivées spatiales : différences finies

$$f'(x, t) \approx \frac{f(x_i, t) - f(x_{i-1}, t)}{\delta x} \quad (4)$$

$$f''(x, t) \approx \frac{f(x_{i+1}, t) - 2.f(x_i, t) + f(x_{i-1}, t)}{\delta x^2} \quad (5)$$

- Intégration temporelle : Euler explicite

$$f(x, t_{i+1}) = f(x, t_i) + \delta t.F(f(x, t_i)) \quad (6)$$

Organisation du code :

- Créez un nouveau fichier source
- Ecrivez une fonction “init” qui pour un vecteur  $x$  donné remplit un tableau  $f0$  selon la condition initiale 3
- Ecrivez une fonction “smb” qui pour un vecteur  $f$  donné calcule le second membre  $F(f(x, t))$  selon l’équation 2 selon le schéma 5
- Ecrivez une fonction “integre” qui pour un vecteur  $smb$  donné, intègre l’équation 2 selon le schéma 6.
- Ecrivez une fonction “main” qui déclarera 2 tableaux en allocation dynamique  $xi$  et  $fi$  qui calculera  $Nt$  évolution de l’équation d’advection-diffusion avec un pas de temps  $\delta t$  (pour lequel on assurera une stabilité numérique).