

MÉTHODES NUMÉRIQUES AVANCÉES ET CALCUL HAUTE PERFORMANCE POUR LA SIMULATION DE PHÉNOMÈNES COMPLEXES

TRAVAUX PRATIQUES II - MÉTHODE PARARÉEL

M. MASSOT L. SÉRIES
JEUDI 11 JANVIER 2018

1 Introduction et contexte

Ces travaux pratiques ont pour but d'expérimenter et de comprendre la mise en œuvre de l'algorithme Pararéel dans trois configurations de complexité croissante. Elles permettent d'aborder à la fois les cas de systèmes d'équations différentiels ordinaires et les équations aux dérivées partielles. Pendant la phase proposée en salle de classe, les premiers exemples ont été traités afin de s'assurer que les notions sont bien comprises et les codes bien utilisés. Le TP dans son ensemble doit ensuite faire l'objet d'une rédaction incluant un choix de résultats et une synthèse. L'évaluation sera faite sur la qualité des interprétations proposées de la mise en œuvre de l'algorithme et sur la pertinence des cas-tests choisis pour illustrer le propos. L'export de figure depuis les notebook permet de faciliter les choses mais ne remplace pas une analyse de ce qui se passe.

2 Brusselator

Présentation du modèle

Le modèle du Brusselator [7] est un exemple de modèle de réaction chimique autocatalytique [5, 2]. Il s'écrit sous la forme du système suivant :

$$\begin{cases} d_t y_1(t) = 1 + y_1^2(t)y_2(t) - 4y_1(t), \\ d_t y_2(t) = -y_1^2(t)y_2(t) + 3y_1(t), \\ y_1(0) = 1.5, \\ y_2(0) = 3. \end{cases} \quad (1)$$

Ce modèle présente une certaine raideur qui a été étudié au cours du premier TP et l'on peut voir une résolution quasi-exacte de la dynamique sur la Figure 1.

Le notebook Jupyter fourni permet de tester l'algorithme Pararéel en modifiant les schémas utilisés pour les intégrateurs grossiers et fins. Pour cet exemple, modérément raide, on testera les schémas d'intégration temporelle standards que sont les méthodes de Runge-Kutta d'ordre 1 (euler explicite), 2 et 4.

Travail demandé

1. Préciser vers quelle solution converge l'algorithme pararéel, justifier votre réponse et expliquer pourquoi on donne deux estimations à chaque itération. On illustrera le phénomène sur un graphique avec un choix adéquat de paramètres.
2. On justifiera l'évolution de l'erreur au cours des itérations et on s'attachera à montrer comment définir le critère d'arrêt.

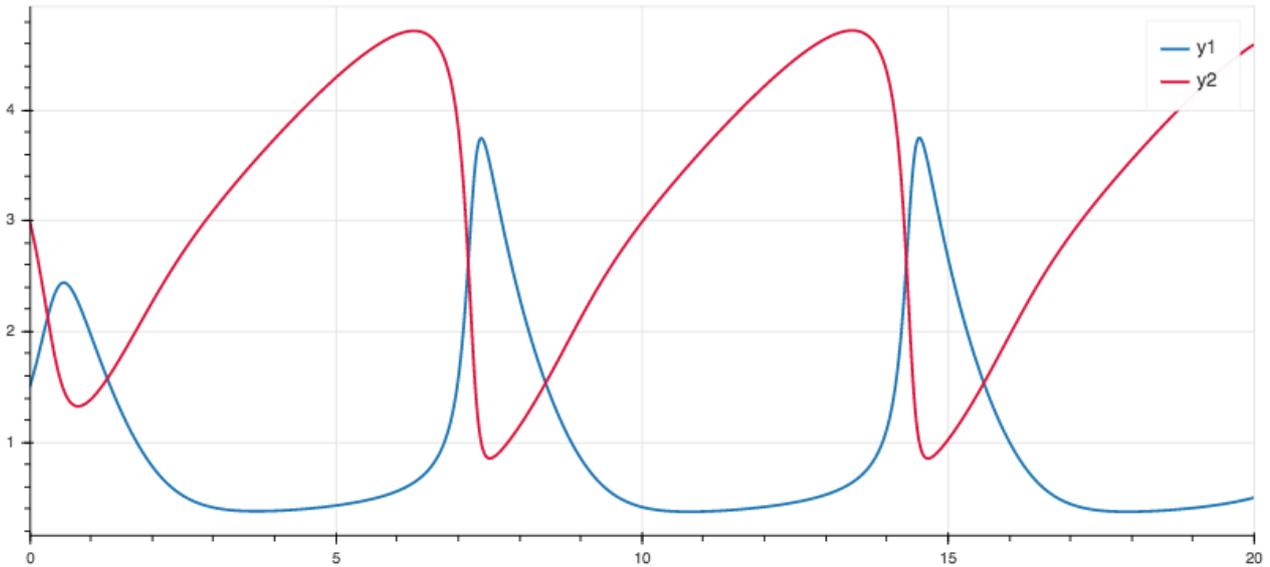


FIGURE 1 – Evolution des concentrations au cours du temps pour le modèle "Brusselator" des réactions chimiques oscillantes.

3. Etudier l'influence sur la convergence des choix possibles de propagateurs fin et grossier. On montrera en particulier l'impact du choix du solveur grossier.
4. Montrer que le rapport entre le temps de restitution séquentiel et le temps de restitution parallèle sur n unités de calcul peut s'écrire :

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

où n_{it} est le nombre d'itérations de l'algorithme pararéel, T_g le temps de restitution du solveur grossier sur un sous-domaine temporelle et T_f le temps de restitution du solveur fin sur un sous-domaine temporelle.

Tester l'efficacité de l'algorithme en fonction du rapport T_g/T_f (évalué théoriquement) et de nombre de sous-domaines temporelles, en isolant l'influence de de chaque paramètre.

Remarque : les méthodes de Runge-Kutta permettent de trouver une approximation de $y_t = f(t, y)$ en évaluant la fonction $f(t, y)$ en différents points. Ainsi, on pourra approximer le rapport T_g/T_f par le rapport du nombre d'évaluation de la fonction $f(t, y)$ des intégrateurs grossier et fin. Par exemple, si le solveur grossier est la méthode de Runge-Kutta d'ordre 1 et si le solveur grossier est la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, on pourra considérer que T_g/T_f est égal à 1/4 à pas de temps fixe et égal pour les deux méthodes.

5. Dans ce type d'algorithme, quelle est l'influence d'un choix de solveur fin de plus en plus précis ?

3 Oregonator

Présentation du modèle

Le modèle de l'Oregonator [3, 4] est comme celui du Brusselator un exemple de modèle de réaction chimique autocatalytique [5, 2]. Il s'écrit :

$$\begin{cases} d_{\tau}y_1 = y_2 - y_1 \\ \varepsilon d_{\tau}y_2 = q y_3 - y_3 y_2 + y_2(1 - y_2) \\ \mu d_{\tau}y_3 = -q y_3 - y_3 y_2 + f y_1 \end{cases} \quad (2)$$

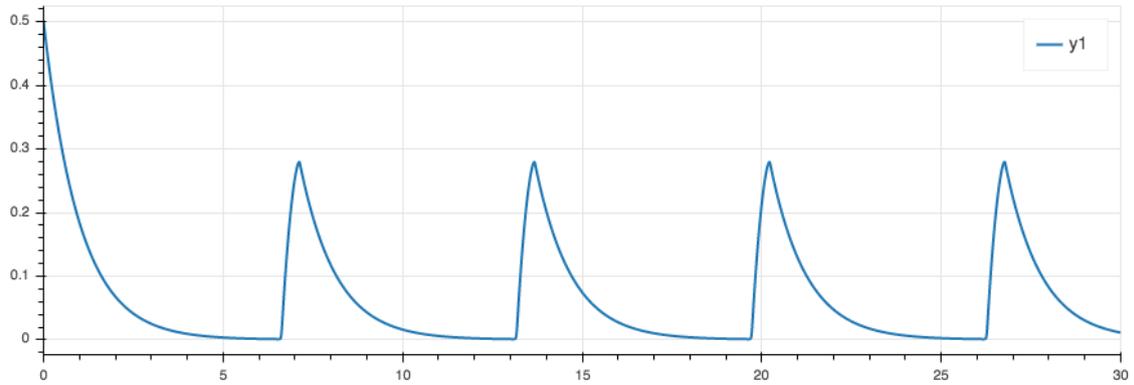


FIGURE 2 – Evolution en temps de la concentration de l'espèce y_1 pour le modèle "Oregonator".

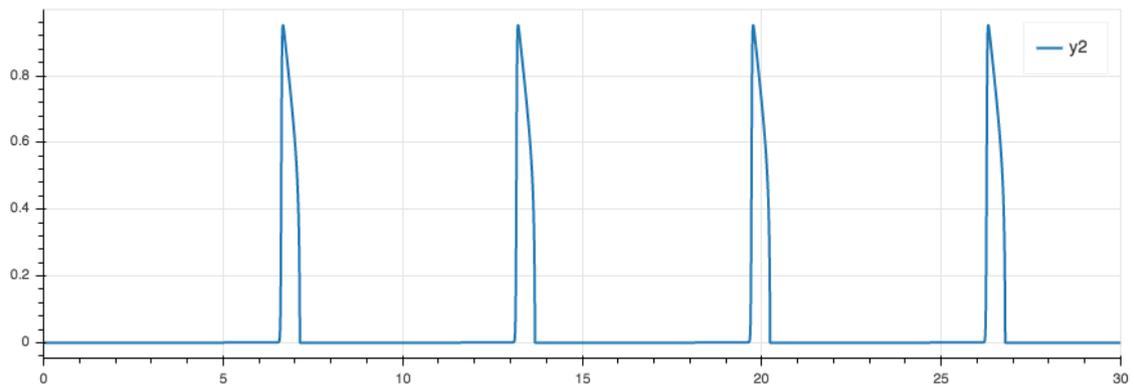


FIGURE 3 – Evolution en temps de la concentration de l'espèce y_2 pour le modèle "Oregonator".

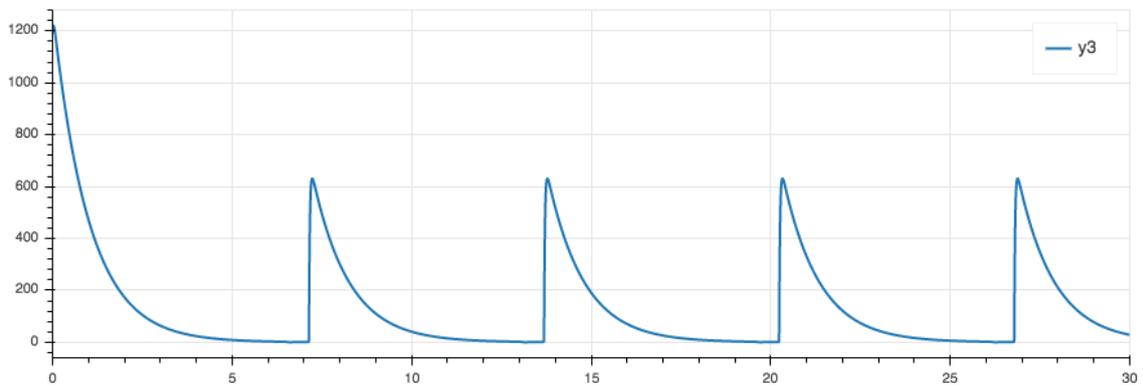


FIGURE 4 – Evolution en temps de la concentration de l'espèce y_3 pour le modèle "Oregonator".

On prendra les paramètres suivant :

$$\epsilon = 10^{-2}, \quad \mu = 10^{-5}, \quad f = 3, \quad q = 2.10^{-4}. \quad (3)$$

Ce modèle présente une forte raideur et l'on peut voir une résolution quasi-exacte de la dynamique sur les figures 2, 3 et 4.

Le notebook Jupyter fourni permet de tester l'algorithme Pararéel sur ce modèle. Pour les tests numériques, on utilisera la méthode RADAU5 pour les intégrateurs grossier et fin en choisissant une tolérance plus fine pour l'intégrateur fin que pour l'intégrateur grossier. On se placera sur l'intervalle de temps $[0, 30]$ comme indiqué sur les figures.

Travail demandé

1. On justifiera le choix de différencier les tolérances absolue et relative pour RADAU5 et de calculer les normes pour chaque variable du système avec un facteur d'échelle.
2. Etudier l'influence sur la convergence des choix possibles du propagateur grossier (par exemple : tolérance absolue fixée et variation de la tolérance relative du grossier) et du nombre de sous-domaine temporelle. Expliquer.

4 Le modèle de propagation de front de type KPP/Nagumo

On se propose dans cette partie de travailler sur la résolution numérique d'une onde progressive modélisant la propagation d'un virus au moyen d'une équation de réaction-diffusion non-linéaire. On trouvera des détails sur le modèle utilisé et sa résolution dans la thèse de Max Duarte qui est fourni avec les notes de cours [1].

L'introduction de ce type de modèle remonte aux travaux de Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov dans leur travail original de 1937 [6]. Il s'agissait de modéliser la propagation des virus et ils ont proposé la première analyse théorique d'existence et de stabilité d'une onde progressive pour une équation de réaction-diffusion [5, 8]. Nous nous focalisons sur une équation relativement proche avec une non-linéarité dite bistable que l'on appelle équation de Nagumo. L'équation est la suivante :

$$\partial_t u - D \Delta u = k u^2(1 - u), \quad (4)$$

avec des conditions aux limites de type Neumann homogène.

La description du modèle sous forme non-dimensionnelle et la structure de la solution exacte peut être trouvée dans [5, 1]. Ainsi, l'analyse montre que dans le cas $D = 1$ et $k = 1$, la vitesse c de l'onde auto-similaire appelée onde progressive $u(t, x) = \beta(x - ct)$ est $c = 1/\sqrt{2}$ et le gradient maximal vaut $-1/\sqrt{32}$. De manière générale, la vitesse de l'onde s'écrit $c = (kD)^{1/2}/\sqrt{2}$ et le gradient maximal est proportionnel à $(k/D)^{1/2}$. La structure de l'onde peut être observée sur la Figure 5 avec une discrétisation de 5001 points sur l'intervalle $[-70, 70]$ et un temps variant dans l'intervalle $[0, 30]$ divisé en 8 sous-intervalles. Le profil d'onde progressive auto-similaire est donné par l'expression analytique :

$$\beta(z) = \frac{\exp\left(-\sqrt{\frac{k}{2D}}(z - z_0)\right)}{1 + \exp\left(-\sqrt{\frac{k}{2D}}(z - z_0)\right)},$$

où z_0 fixe le positionnement de l'onde à l'instant initial.

Le point important est ici que l'on peut jouer avec les coefficients pour maintenir une vitesse d'onde constante en prenant un produit Dk fixé tout en changeant le gradient maximal qui se

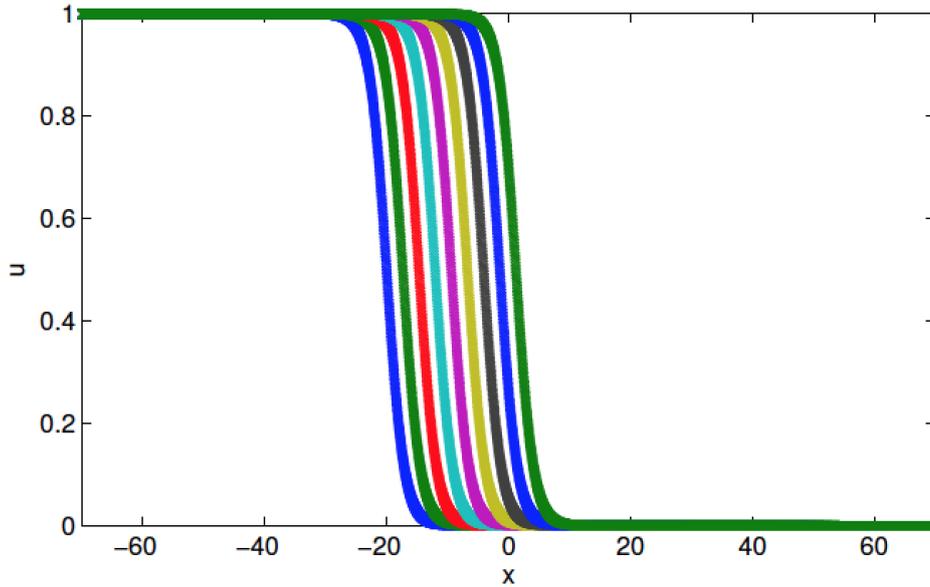


FIGURE 5 – Onde progressive Nagumo dans le cas standard avec 2001 points sur $[-70, 70]$. Solution auto-similaire avec huit intervalles de temps.

trouve être proportionnel à $(k/D)^{1/2}$. Ainsi dans le cas $k = 10.0$ et $D = 0.1$, la vitesse de l'onde est toujours $c = 1/\sqrt{2}$ mais le gradient maximal est multiplié par un facteur de 10 et introduit une raideur supplémentaire de l'opérateur de diffusion comme présenté sur la Figure 6. Pour la discrétisation choisie, même si l'onde est "mildly stiff", modérément raide, le profil est toujours bien résolu sur la grille choisie.

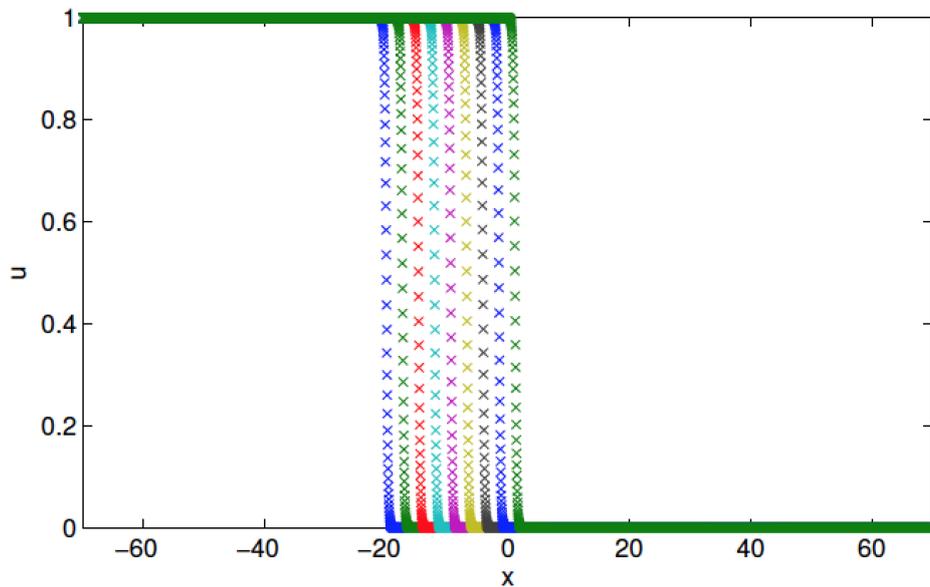


FIGURE 6 – Onde progressive Nagumo dans le cas "raide" KPP avec 2001 points sur $[-70, 70]$. Solution auto-similaire avec huit intervalles de temps.

Pour résoudre l'équation (4), on commence par effectuer une semi-discrétisation spatiale par différences finies d'ordre deux pour aboutir à un système d'équations différentielles ordinaires

Références

- [1] M. Duarte. *Méthodes numériques adaptatives pour la simulation de la dynamique de fronts de réaction multi-échelles en temps et en espace*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, France, 2011. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00667857>.
- [2] I.R. Epstein and J.A. Pojman. *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics*. Oxford University Press, 1998. Oscillations, Waves, Patterns and Chaos.
- [3] R.J. Field, E. Koros, and R.M. Noyes. Oscillations in chemical systems. II. Thorough analysis of temporal oscillation in the bromate-cerium-malonic acid system. *J. Amer. Chem. Soc.*, 94(25) :8649–8664, 1972.
- [4] R.J. Field and R.M. Noyes. Oscillations in chemical systems IV. limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction. *J. Chem. Phys.*, 60 :1877–1884, 1974.
- [5] P. Gray and S.K. Scott. *Chemical Oscillations and Instabilities*. Oxford Univ. Press, 1994.
- [6] A.N. Kolmogoroff, I.G. Petrovsky, and N.S. Piscounoff. Etude de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application a un problème biologique. *Bulletin de l'Université d'état Moscou, Série Internationale Section A Mathématiques et Mécanique*, 1 :1–25, 1937.
- [7] R. Lefever and G. Nicolis. Chemical instabilities and sustained oscillations. *J. Theoretical Biology*, 30(2) :267–284, 1971.
- [8] A.I. Volpert, V.A. Volpert, and V.A. Volpert. *Traveling Wave Solutions of Parabolic Systems*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1994.