

Calcul scientifique parallèle

2^e édition

Frédéric Magoulès

Professeur à CentraleSupélec et professeur honoraire
à l'université de Pécs en Hongrie

François-Xavier Roux

Maître de recherche à l'ONERA et professeur associé
à l'UPMC, Paris

DUNOD

Tout le catalogue sur
www.dunod.com



ÉDITEUR DE SAVOIRS

Illustration de couverture : ©-izabell-istockphoto.com

Le pictogramme qui figure ci-contre mérite une explication. Son objet est d'alerter le lecteur sur la menace que représente pour l'avenir de l'écrit, particulièrement dans le domaine de l'édition technique et universitaire, le développement massif du photocopillage.

Le Code de la propriété intellectuelle du 1^{er} juillet 1992 interdit en effet expressément la photocopie à usage collectif sans autorisation des ayants droit. Or, cette pratique s'est généralisée dans les établissements

d'enseignement supérieur, provoquant une baisse brutale des achats de livres et de revues, au point que la possibilité même pour

les auteurs de créer des œuvres nouvelles et de les faire éditer correctement est aujourd'hui menacée. Nous rappelons donc que toute reproduction, partielle ou totale, de la présente publication est interdite sans autorisation de l'auteur, de son éditeur ou du Centre français d'exploitation du droit de copie (CFC, 20, rue des Grands-Augustins, 75006 Paris).



© Dunod, 2013, 2017

11, rue Paul Bert, 92240 Malakoff

www.dunod.com

ISBN 978-2-10-077223-0

Le Code de la propriété intellectuelle n'autorisant, aux termes de l'article L. 122-5, 2^o et 3^o a), d'une part, que les « copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective » et, d'autre part, que les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration, « toute représentation ou reproduction intégrale ou partielle faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droit ou ayants cause est illicite » (art. L. 122-4).

Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait donc une contrefaçon sanctionnée par les articles L. 335-2 et suivants du Code de la propriété intellectuelle.

Table des matières

Avant-propos	XI
Introduction	XIII
Chapitre 1 Architectures des calculateurs	1
1. Différents types de parallélisme	1
1.1 Recouvrement, concurrence et parallélisme	1
1.2 Parallélisme temporel et spatial pour les unités arithmétiques	3
1.3 Parallélisme et mémoire	5
2. Architecture mémoire	6
2.1 Mémoire multi-banc entrelacée	6
2.2 Mémoire hiérarchisée	7
2.3 Mémoire distribuée	11
3. Architectures hybrides	12
3.1 Accélérateurs graphiques GPU	12
3.2 Calculateurs hybrides	13
Chapitre 2 Parallélisation et modèles de programmation	15
1. Parallélisation	15
2. Critères de performance	17
2.1 Degré de parallélisme	17
2.2 Équilibrage des tâches	18
2.3 Granularité	19
2.4 Extensibilité	19
3. Parallélisme de données	20
3.1 Boucles de programmes	20
3.2 Dépendance	21
3.3 Exemples de dépendance	22
3.4 Opérations de réduction	24
3.5 Boucles imbriquées	25
3.6 OpenMP	27

4. Cas particulier : la vectorisation	29
4.1 Calculateurs vectoriels et vectorisation	29
4.2 Dépendance	30
4.3 Opérations de réduction	31
4.4 Chaînage des opérations pour des architectures pipe-linées	32
5. Tâches communicantes	34
5.1 Programmation par échanges de messages	34
5.2 Gestion de l'environnement parallèle	35
5.3 Échanges de messages point à point	35
5.4 Échanges collectifs	36
Entraînez-vous	42
Solutions	43
Chapitre 3 Notions d'algorithmique parallèle	45
1. Algorithmes parallèles pour les récurrences	46
1.1 Principe de la méthode de réduction	46
1.2 Surcoût et stabilité de la méthode de réduction	47
1.3 Réduction cyclique	48
2. Localisation et distribution : produit de matrices	49
2.1 Algorithmes par lignes ou par colonnes	49
2.2 Algorithmes par blocs	50
2.3 Algorithme distribué	53
2.4 Mise en œuvre	53
Entraînez-vous	58
Solutions	59
Chapitre 4 Généralités sur l'analyse numérique matricielle	61
1. Rappels d'algèbre linéaire	61
1.1 Espaces vectoriels, produit scalaire, projection orthogonale	61
1.2 Applications linéaires et matrices	64
2. Propriétés des matrices	67
2.1 Matrices, valeurs propres, vecteurs propres	67
2.2 Normes d'une matrice	68
2.3 Changements de base	70
2.4 Conditionnement d'une matrice	71
Entraînez-vous	77

Chapitre 5	Matrices creuses	79
1.	Origine des matrices creuses	79
2.	Formation parallèle des matrices creuses : mémoire partagée	83
2.1	Formation parallèle par ensemble de points	83
2.2	Formation parallèle par ensemble d'éléments	83
3.	Formation parallèle par blocs des matrices creuses : mémoire distribuée	84
3.1	Formation parallèle par ensemble de points	84
3.2	Formation parallèle par ensemble d'éléments	85
Chapitre 6	Résolution des systèmes linéaires	89
1.	Méthodes directes	89
2.	Méthodes itératives	90
Chapitre 7	Résolution de systèmes linéaires par méthodes <i>LU</i>	93
1.	Principe de la décomposition <i>LU</i>	93
2.	Factorisation de Gauss	96
3.	Factorisation de Gauss-Jordan	98
4.	Factorisation de Crout et de Cholesky pour des matrices symétriques	103
Chapitre 8	Parallélisation des méthodes <i>LU</i> pour les matrices pleines	107
1.	Factorisation par blocs	107
2.	Mise en œuvre de la factorisation par blocs dans un environnement de programmation par échanges de messages	111
3.	Parallélisation de la descente-remontée	115
	Entraînez-vous	117
	Solutions	120
Chapitre 9	Méthodes <i>LU</i> pour les matrices creuses	123
1.	Structure de la matrice factorisée	123

2. Factorisation symbolique et renumérotation	126
3. Arbre d'élimination	129
4. Arbre d'élimination et dépendance	134
5. Dissections emboîtées	135
6. Descente-remontée	140
Entraînez-vous	143
Solutions	149
Chapitre 10 Généralités sur les espaces de Krylov	155
1. Espaces de Krylov	155
2. Construction de la base d'Arnoldi	157
Chapitre 11 Méthodes avec orthogonalisation complète	161
1. Construction de la base de Lanczos pour des matrices symétriques	162
2. Méthode de Lanczos	162
3. Méthode du gradient conjugué	166
4. Comparaison avec la méthode du gradient	169
5. Principe du préconditionnement pour des matrices symétriques définies positives	171
Entraînez-vous	174
Solutions	176
Chapitre 12 Méthodes avec orthogonalisation exacte	179
1. Méthode GMRES	180
2. Cas des matrices symétriques : la méthode MINRES	186
3. Méthode ORTHODIR	188
4. Principe du préconditionnement pour des matrices non symétriques	189

Entraînez-vous	191
Solutions	192

Chapitre 13 Méthodes avec bi-orthogonalisation 193

1. Bases de Lanczos bi-orthogonales pour des matrices non symétriques	194
2. Méthode de Lanczos non symétrique	197
3. Méthode du gradient bi-conjugué : BiCG	198
4. Méthode du résidu quasi minimal : QMR	201
5. Méthode BiCGSTAB	205

Chapitre 14 Parallélisation des méthodes de Krylov 211

1. Parallélisation du produit matrice-vecteur plein	211
2. Parallélisation du produit matrice-vecteur creux par ensemble de points	213
3. Parallélisation du produit matrice-vecteur creux par ensemble d'éléments	214
3.1 Rappel des principes du découpage en sous-domaines	214
3.2 Produit matrice-vecteur	215
3.3 Échanges aux interfaces	216
4. Parallélisation du produit scalaire par ensemble d'éléments	217
5. Application : gradient conjugué parallèle par ensemble d'éléments	218

Chapitre 15 Méthodes de préconditionnement parallèles 221

1. Méthodes de factorisation incomplète	222
1.1 Principe	222
1.2 Parallélisation	224
2. Méthode du complément de Schur	225
2.1 Préconditionnement localement optimal	225
2.2 Principe de la méthode du complément de Schur	226
2.3 Propriétés de la méthode du complément de Schur	228

3. Méthodes de type multigrille algébrique	230
3.1 Préconditionnement par projection	230
3.2 Construction algébrique d'une grille grossière	231
3.3 Méthode multigrille algébrique	233
4. Méthode de preconditionnement de Schwarz additive	235
4.1 Principe du recouvrement	235
4.2 Méthode multiplicative versus méthode additive	236
4.3 Méthode de preconditionnement de Schwarz additive avec partition par ensemble de points	237
Entraînez-vous	241
Solutions	243
Bibliographie	245
Index	251

Avant-propos

Le calcul scientifique est devenu un outil indispensable dans de très nombreux domaines comme la physique, la mécanique, la biologie, la finance ou l'industrie. Il permet par exemple grâce à des algorithmes performants et adaptés aux ordinateurs actuels de simuler sans l'aide de maquettes ou d'expérimentations la déformation d'un toit sous le poids de la neige, le niveau sonore dans une salle de théâtre, ou l'écoulement d'un fluide autour d'une aile d'avion.

Le but de cet ouvrage est d'expliquer et d'illustrer par des exemples concrets les techniques récentes de calcul scientifique pour la simulation numérique de problèmes de grandes tailles issus de systèmes modélisés par des équations aux dérivées partielles. Les différentes méthodes de formation et de résolution des grands systèmes linéaires sont présentées. La conception des méthodes récentes et les algorithmes associés sont étudiés en détail. Des techniques de mise en œuvre et de programmation sont exposées pour les solveurs directs, les solveurs itératifs, et les méthodes de décomposition de domaine. Les techniques de programmation par échanges de messages et de parallélisme de boucle sont illustrées par des exemples avec MPI et OpenMP.

L'objectif principal de l'ouvrage est l'étude des techniques numériques appliquées au parallélisme pour des machines à très grands nombres de processeurs et à mémoire distribuée. Des connaissances en analyse numérique ainsi que des notions de base en informatique sont requises pour une compréhension optimale. Toutefois, même si le fonctionnement des calculateurs scientifiques est présenté, l'ouvrage ne va pas au-delà de ce qui est utile pour écrire des programmes efficaces. Le principe est donc de faire un exposé assez complet des méthodes numériques récentes en calcul scientifique en insistant évidemment sur leur adaptation au calcul parallèle. Un certain nombre d'exemples d'algorithmes parallèles plus ou moins classiques en calcul scientifique sont présentés. La plupart de ces exemples sont tirés de problèmes provenant de la mise en œuvre de la méthode des éléments finis.

Une approche didactique, qui consiste à introduire les notions mathématiques et informatiques au fur et à mesure que leur besoin se fait sentir, a été suivie. C'est le cas notamment du fait de l'introduction de nouvelles caractéristiques architecturales des machines, ou de nouveaux problèmes de gestion du parallélisme posés par la complexité croissante des applications présentées en exemple. L'objectif de ce livre n'est donc pas d'apparaître comme un ouvrage de référence sur le calcul parallèle du point de vue informatique, mais d'être une introduction à cette question pour des utilisateurs de calculateurs scientifiques.

Cet ouvrage s'adresse principalement aux étudiants en Master de mathématiques appliquées mais aussi de mécanique numérique et plus généralement aux étudiants dans tous les domaines des sciences de l'ingénieur qui s'intéressent au calcul à haute performance. Il pourra également intéresser tout ingénieur confronté à la simulation

numérique de problèmes de grandes tailles issus de systèmes modélisés par des équations aux dérivées partielles mais aussi plus généralement à la résolution de grands systèmes linéaires. Des parties de ce livre ont d'ailleurs été utilisées pendant plusieurs années par les auteurs comme support de cours sur le calcul scientifique à l'Université Pierre et Marie Curie, à l'Université Henri Poincaré, au Conservatoire National des Arts et Métiers, à l'École Centrale des Arts et Manufactures, à CentraleSupélec, à l'École Normale Supérieure de Cachan, à l'École Supérieure des Sciences et Technologies de l'Ingénieur de Nancy et à l'Institut des Sciences de l'Ingénieur de Toulon et du Var.

Introduction

Le développement récent des architectures informatiques (fréquence d'horloge, mémoire cache, mémoire hiérarchique, multi-cœur, etc.) a abouti ce jour à des calculateurs scientifiques disposant de centaines de milliers si ce n'est de plusieurs millions de cœurs, qui peuvent réaliser jusqu'à des dizaines de millions de milliards d'opérations flottantes par seconde. À titre de comparaison, ce chiffre correspondrait à plus d'opérations en une seconde, que ne pourrait en faire la population mondiale pendant un mois, à raison d'une opération flottante par seconde par personne ! Toutefois, disposer de calculateurs scientifiques ayant une puissance de calcul aussi élevée n'est pas tout... encore faut-il disposer d'algorithmes adéquats pour utiliser de telles ressources.

Ce livre constitue une introduction au calcul à haute performance. Son objectif est de présenter quelques méthodes numériques permettant de résoudre sur calculateurs scientifiques certains problèmes issus des sciences de l'ingénieur qui ne peuvent être traités sur un ordinateur classique. Les questions courantes du calcul à haute performance sont successivement abordées : le parallélisme de données, la vectorisation, les tâches communicantes, la formation parallèle des matrices, la parallélisation du produit de matrices, les méthodes directes et itératives parallèles de résolution de grands systèmes linéaires, etc. La présentation de ces méthodes est rendue vivante par le recours systématique aux environnements de programmation MPI et OpenMP dont les principales commandes sont introduites progressivement. Tous les algorithmes sont ici présentés sous la forme de pseudo-codes. Ceci permet de visualiser très rapidement les propriétés de ces algorithmes, en particulier l'enchaînement des opérations, les dépendances entre les données, etc. La résolution de divers problèmes, souvent motivés par des applications concrètes, fait l'objet de nombreux exemples et exercices. Afin de guider le lecteur dans la résolution des exercices proposés, des pistes et des idées de corrections sont fournies. À la fin de chaque chapitre, une section présente des aspects plus avancés et fournit des indications bibliographiques qui permettront au lecteur d'approfondir les connaissances acquises. Dans ce but, l'ouvrage s'articule autour de quatre parties distinctes.

La première partie introduit dans le chapitre 1, l'architecture des calculateurs scientifiques, les différents types de parallélisme, et l'architecture mémoire des calculateurs scientifiques. Le chapitre 2 présente les modèles de programmation, les critères de performances et la parallélisation de données. Pour sa part, le chapitre 3, présente l'exemple concret du produit de matrices pour illustrer la démarche de parallélisation, de localisation temporelle et spatiale des données puis de distribution.

La deuxième partie consiste en un bref et succinct complément d'analyse numérique matricielle. Le chapitre 4 rappelle tout d'abord quelques notions de base en algèbre linéaire, les propriétés des matrices, ainsi que les notations utilisées dans la suite de l'ouvrage. Le chapitre 5 s'intéresse plus particulièrement aux matrices creuses, notamment à l'origine et à la formation en parallèle de ces matrices dans le cadre de méthodes

d'éléments finis. Le chapitre 6 présente succinctement les principales méthodes de résolution des systèmes linéaires. La mise en œuvre parallèle de ces méthodes étant détaillée dans les parties suivantes.

La troisième partie étudie les méthodes de résolution de grands systèmes linéaires. Après avoir présenté dans le chapitre 7 le principe des méthodes directes (LU, Cholesky, Gauss-Jordan, factorisation de Crout), le chapitre 8, puis le chapitre 9 s'intéressent respectivement à la parallélisation des méthodes LU pour les matrices pleines, puis creuses.

La quatrième partie traite des méthodes itératives de résolution de grands systèmes linéaires par les méthodes de Krylov. Un rapide rappel des espaces de Krylov et de la construction de la base d'Arnoldi est détaillé au chapitre 10. Le chapitre 11 présente les méthodes de Krylov avec orthogonalisation complète pour des matrices symétriques définies positives. Le chapitre 12 s'intéresse aux méthodes avec orthogonalisation exacte pour des matrices quelconques, suivi au chapitre 13 des méthodes avec bi-orthogonalisation pour des matrices non symétriques. Les techniques de parallélisation des méthodes de Krylov sont abordées et détaillées au chapitre 14. Les techniques de préconditionnement et les méthodes hybrides de type décomposition de domaines sont ensuite brièvement décrites au chapitre 15.

L'utilisation efficace des calculateurs parallèles pour la simulation numérique exige un effort de conception des logiciels qui doit nécessairement s'appuyer sur la connaissance et l'analyse des méthodes mathématiques. Cette question des méthodes est primordiale et présente un champ très actif de la recherche dans le domaine des mathématiques appliquées ; comme par exemple les méthodes de décomposition de domaines introduites à la fin de l'ouvrage. Cet ouvrage aura atteint son but si le lecteur a compris d'une part pourquoi le parallélisme était incontournable pour les grandes applications et d'autre part que les problèmes posés par la parallélisation demandaient de repenser les méthodes mathématiques et algorithmes numériques.

Architectures des calculateurs

Introduction

Certaines caractéristiques architecturales des ordinateurs ne sont pas transparentes pour l'utilisateur, c'est-à-dire qu'elles doivent être prises en compte pour écrire des codes de calcul capables de tirer les meilleures performances possibles des machines. Il n'est cependant pas nécessaire de rentrer dans le détail des technologies matérielles et logicielles des systèmes informatiques pour comprendre les principes des architectures des calculateurs. Le point le plus important réside en fait dans l'organisation des accès aux données dans la mémoire, ou plutôt les mémoires.

Objectifs

Connaître les principes des architectures parallèles.

Identifier les types de parallélisme présents à différents niveaux dans les calculateurs et les différentes architectures mémoire.

Définir la localisation temporelle et spatiale des données.

Expliquer pourquoi l'adaptation des codes aux architectures mémoire est fondamental.

Plan

- 1 Différents types de parallélisme
- 2 Architecture mémoire
- 3 Architectures hybrides

1 Différents types de parallélisme

1.1 Recouvrement, concurrence et parallélisme

L'objectif de la simulation numérique est d'approcher le mieux possible la réalité physique à l'aide de modèles discrets. Plus le modèle est riche, plus il compte de paramètres et plus il requiert une quantité de calcul importante. La fonction des calculateurs scientifiques est de permettre la réalisation de ces calculs en un temps suffisamment court pour que l'outil de simulation soit exploitable dans le cadre d'un processus de conception ou de prévision.