UNIVERSITÉ DE VERSAILLES ST-QUENTIN-EN-YVELINES

université PARIS-SACLAY

Université de Versailles Saint-Quentin-En-Yvelines

Master 2 Informatique Haute Performance et Simulation

❧

Module : Génie Logiciel pour le Calcul Scientifique

Rapport de projet

Par : **Nawal CHIBANE**
Khadimou DIOP

Encadré par: Mr. Julien BIGOT

28 janvier 2021

Table des matières

Table des figures

Indtroduction

Le projet Heat Solver [1] s'agit d'une simulation de la propagation de la température dans un espace cartésien 2D, il met en oeuvre un solveur de l'équation de chaleur discrétisée avec la méthode des différences finies. Dans ce rapport, dans un premier temps, nous allons expliquer le fonctionnement du code fourni en mettant l'accent sur des fonctions et des classes spécifiques. Le code fourni n'est pas parfait et contient des imperfections, que se soit en termes d'expérience utilisateur (difficulté de gérer les paramètres en ligne de commande, visualisation des résultats sur la console ...), ou de performances (rapporter les résultats de toutes les itérations, ce qui dégrade les performances pour de longues simulations). Nous allons remédier à ces problèmes avec notre contribution, dans un deuxième temps, nous allons présenter les modifications que nous avons effectuées dans le code et les démarches suivies. Ces modifications couvrent trois parties :

— Modification du système d'écriture des données [2].
— Modification du système de configuration [3].
— Post-traitement en ligne des données.

1. `https://github.com/jbigot/Projet-GLCS-2020-2021.`
2. Faite par le membre : Khadimou DIOP
3. Faite par le membre : Nawal CHIBANE

Partie 1

Description du code

1.1 Une vue globale

Le main du programme se trouve dans le fichier **simpleheat.cpp**, récupère les paramètres depuis la ligne de commande, fait les instanciations nécessaires et lance la simulation. Aussi, après les initialisations nécessaires dans la fonction **run()** de la classe **Simulation**, cette fonction, dans une boucle d'itérations, exécute la fonction **iter()** qui se trouve dans la classe **FinitediffHeatSolver**.

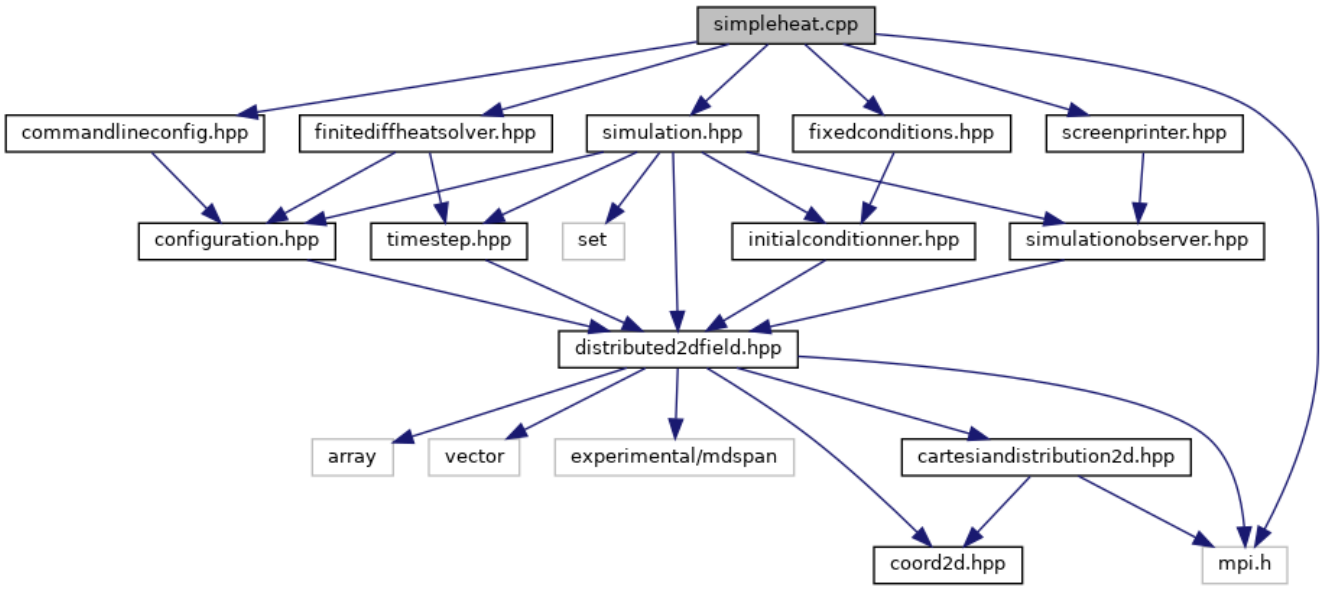


Figure 1.1 – Graphe de dépendances

Dans la classe **FinitediffHeatSolver** la fonction **iter** permet de calculer la chaleur au moment (t+pas) pour chaque élément d'un bloc de données courant **Distributed2DField cur** à l'instant t, et stocke les nouvelles valeurs dans un nouveau bloc **Distributed2DField next**. En effet chaque processus MPI s'occupe d'un bloc, et pour le calcul des nouvelles valeurs, a besoin d'accéder aux donnés des zones fantômes de son bloc, celles ci mises à jour par les processus voisins.

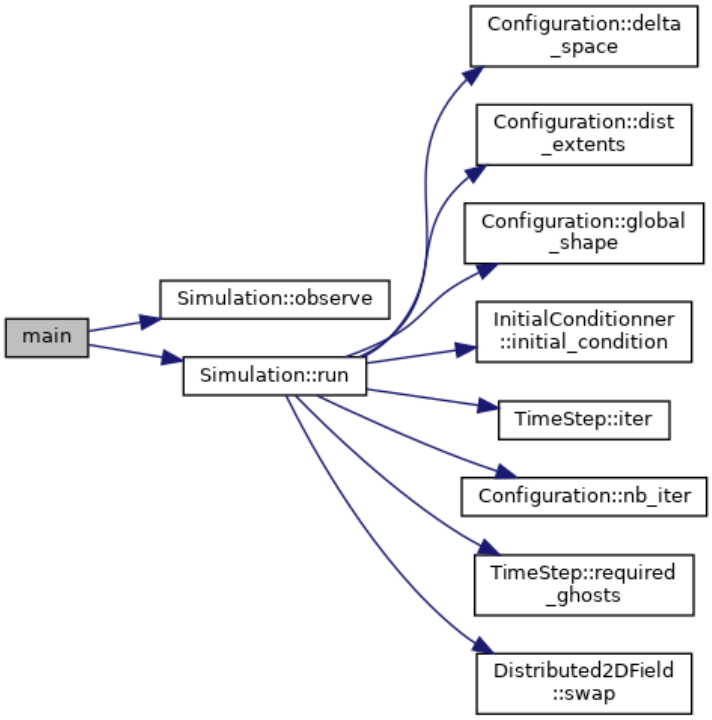


FIGURE 1.2 – Graphe des appels du main

1.2 La fonction Distributed2DField : :sync_ghosts

La fonction **Distributed2DField : :sync_ghosts** fait des échanges entre processus voisins dans chaque direction. Elle permet à chaque process de mettre a jour les zones fantômes des blocs voisins selon les directions (up, down, left, right). Pour cela, pour le processus MPI actuel, la fonction sync_gosts récupère le rang des processus voisins (up, down, left, right) en appelant la fonction **neighbour_rank**(direction) implémentée dans la classe **CartesianDistribution2D**. En effet, chaque instance de la classe **Distributed2DField** possède un objet du type **CartesianDistribution2D** qui décrit la distribution des données par rapport aux processus MPI. Une fois que les voisins sont identifiés, le processus actuel communique avec chacun d'eux et lui envoi le message qui contient la ligne/colonne qui sert de zone fantôme au voisin concerné avec la fonction MPI avec la fonction de MPI **MPI_Sendrecv**.

Ici on commence par la direction DY. On récupère les rangs des processus voisins en dessous et au dessus des domaines locaux. Puis on stocke la coordonnée du dernier bloc de données de la même taille que la zone fantôme dans la zone non fantôme. Par la suite en utilisant une distribution cartésienne, on envoie la première ligne de blocs de la zone fantôme en dessous dans la zone non fantôme puis on reçoit la ligne de la zone fantôme d'au dessus avec **MPI_Sendrecv()**. En suite on envoie la dernière ligne de blocs au dessus de la zone fantôme et on reçoit la zone fantôme d'en dessous avec **MPI_Sendrecv()** en utilisant une distribution cartésienne. Enfin on répète le même processus pour la di-

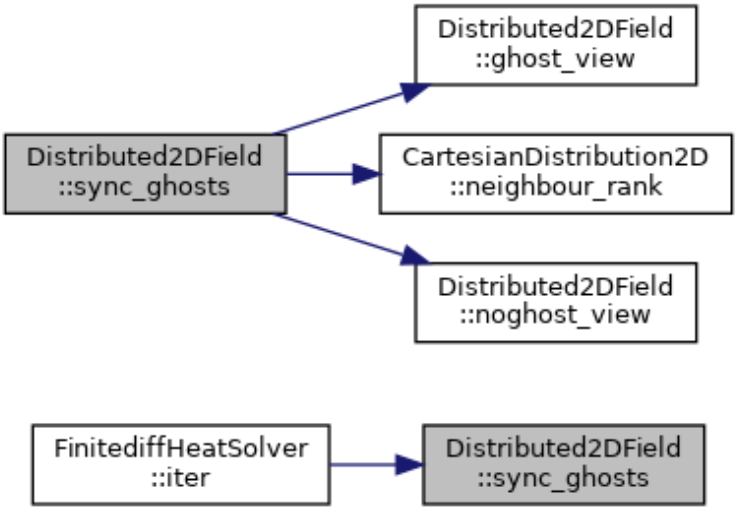


FIGURE 1.3 – Graphe des appels de la fonction sync_gosts

rection DX en remplaçant donc le UP et le DOWN par respectivement RIGHT et LEFT. On envoie de la gauche et reçoit de la droite et vice versa.

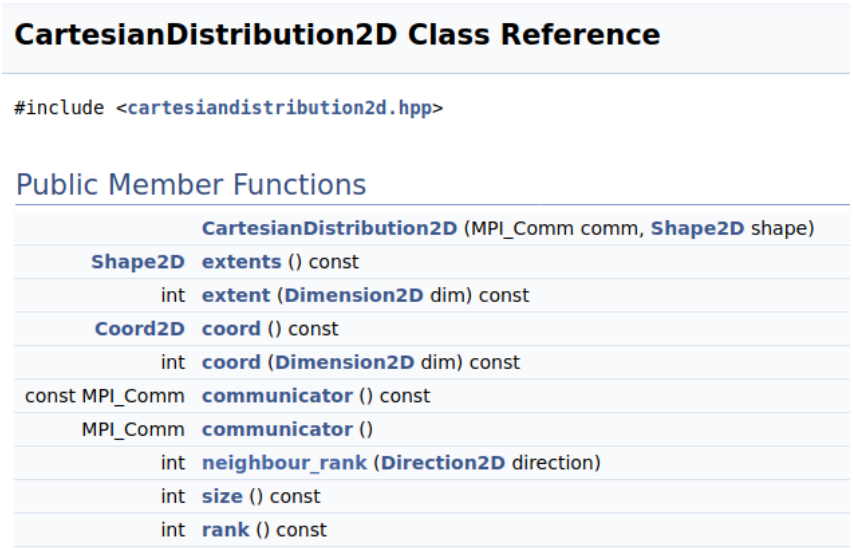
La fonction **MPI_Sendrecv** se définit comme suit :

```
int MPI_Sendrecv(const void *sendbuf, int sendcount,
       MPI_Datatype sendtype, int dest, int sendtag,
       void *recvbuf, int recvcount, MPI_Datatype recvtype,
       int source, int recvtag, MPI_Comm comm, MPI_Status * status)
```

Dans notre cas :
sendbuf :noghost_view : l'adresse de la ligne ou colonne à envoyer (vecteur :ligne/col)
sendcount : nombre d'éléments à envoyer = 1 dans notre cas
sendtype : m_ghost_row ou m_ghost_col
dest : rang du processus voisin
sendtag : COMM_TAG
recvbuf : ghost_view(direction) : l'adresse de la zone fantôme réceptrice
recvcount : nombre d'élements à recevoir
recvtype : m_ghost_row ou m_ghost_col
source : rang du processus actuel
recvtag : COMM_TAG
comm : MPI_Comm dans la "classe CartesianDistribution2D"

1.3 La classe CartesianDistribution2D

En effet, comme déjà mentionné, un objet **CartesianDistribution2D** est un descripteur de la distribution des données sur les processus MPI, une instance est créée pour chaque processus lors de l'appel au constructeur **Distributed2DField** lors de l'initialisation des données. Son constructeur prend en entrée le communicateur MPI et un objet 2D décrivant le nombre de processus MPI par ligne et pas colonne et crée un communicateur cartésien auquel les informations de topologie cartésienne sont attachées avec la fonction **MPI_Cart_create**, ie, le nombre de dimensions d'un bloc de données = 2 dimensions et le nombre de processus MPI dans chaque dimension.



CartesianDistribution2D Class Reference

`#include <cartesiandistribution2d.hpp>`

Public Member Functions

	CartesianDistribution2D (MPI_Comm comm, **Shape2D** shape)
Shape2D	**extents** () const
int	**extent** (**Dimension2D** dim) const
Coord2D	**coord** () const
int	**coord** (**Dimension2D** dim) const
const MPI_Comm	**communicator** () const
MPI_Comm	**communicator** ()
int	**neighbour_rank** (**Direction2D** direction)
int	**size** () const
int	**rank** () const

FIGURE 1.4 – La classe CartesianDistribution2D

MPI fournit une topologies cartésiennes permettant de décrire des découpages de grilles en 2D dans notre cas, ce découpage permet de :
Obtenir le rang du processus à partir de ses coordonnées
MPI_CART_RANK(COMM, COORDS, RANK, IERROR)
Obtenir les coordonnées du processus à partir de son rang
MPI_CART_COORDS(COMM, RANK, MAXDIMS, COORDS, IERROR)
Récuperer les informations de topologie
MPI_Cart_get(MPI_Comm comm, int maxdims, int dims[], int periods[], int coords[])
cette fonction est utilisée dans la classe **CartesianDistribution2D** par les fonctions **coord** et **extents** Renvoie les rangs des voisins, en fonction d'une direction et d'un décalage
MPI_CART_SHIFT(COMM, DIRECTION, DISP, RANK_SOURCE,RANK_DEST)
Cette dernière à été utilisée dans la classe **CartesianDistribution2D** par la fonction **neighbour_rank** afin de calculer les rang des quatre voisins en variant la direction de (DX et DY) et le décalage DISP de (-1 et 1).

Partie 2

Ajout de fonctionnalités au code

2.1 Modification du système d'écriture des données

J'ai écrit une nouvelle classe qui stocke les données au format HDF5 dans un dossier que j'ai appelé **writing_datahdf5**. Cette classe est inspirée de la classe **ScreenPrinter** à la différence près qu'on rajoute la bibliothèque <hdf5.h> grâce à laquelle on pourra écrire les données dans le format hdf5. Pour ce faire, on crée un dataspace qui contient les dimensions de la grille et leurs tailles actuelles. Ensuite on crée le dataset pour fixer les propriétés de notre jeux de données en utilisant le dataspace défini précédemment. Puis on utilise un simple hyperslab pour choisir l'endroit où l'on veut écrire dans le fichier dataspace. Enfin pour écrire dans la mémoire dataspace j'alloue une mémoire suffisante pour stocker les éléments de données à transférer en l'initialisant avec les données à écrire. Par ailleurs, on se place en mode data transfert pour contrôler les opérations I/O lors du transfert. Par la suite on a ajouté une fonction dans la classe Configuration pour gérer la fréquence des itérations de manière que cette fréquence soit configurable par l'utilisateur.

2.2 Modification du système de configuration

2.2.1 Définition du besoin

La simulation étudiée nécessite un ensemble de paramètres en entrée, il s'agit essentiellement de :

- Le nombre d'itérations à exécuter.
- Les dimensions 2D de l'espace objet de simulation.
- La distribution 2D des processus MPI sur cet espace.
- La valeur δt : pas de discrétisation temporel.
- La valeur δx : pas de discrétisation spatial par rapport à la première dimension.
- La valeur δy : pas de discrétisation spatial par rapport à la deuxième dimension.

Nous rappelons que l'implémentation donnée récupère ces paramètres depuis la ligne de commande comme suit :

```
$ mpirun -n 2 ./simpleheat 10 4 8 1 2 0.125 1 1
```

Cette manière de faire présente plusieurs inconvénients :

— Nous n'avons pas d'information sur l'identité des paramètres.
— Obligation de respecter l'ordre défini.
— Difficulté de gérer un grand nombre de paramètres.
— On peut se perdre facilement si on oubli un paramètre et chercher sa place.
— Pas de gestion de paramètres pas défaut.
— Mauvaise UX.

Le but de cette partie est de proposer une solution aux problèmes cités ci-dessous, nous allons détailler dans ce qui suit notre approche.

2.2.2 Conception

Nommage des paramètres :

Nous allons en premier temps donner une identité à nos paramètres dans la ligne de commande comme suit :

— **nb_iter** : le nombre d'itérations
— **height** : longueur de l'espace de données global.
— **width** : largeur de l'espace de données global.
— **process_height** : la distribution des données selon la largeur.
— **process_width** : la distribution des données selon la longueur.
— **delta_t** : pas de discrétisation temporel.
— **delta_x** : pas de discrétisation spatial selon la longueur.
— **delta_y** : pas de discrétisation spatial selon la largeur.
— **file** : le fichier de configuration.
— **freq** : frequence d'écriture des données.

Dans la ligne de commande, nous allons introduire chaque paramètre en indiquant son identifiant précédé par "–" suivi par = sa valeur, ainsi la commande précédente devient :

```
mpirun -n 2 ./simpleheat --nb_iter=10 --height=4 --width=8
--process_height=1 --process_width=2 --delta_t=0.125 --delta_x=1
--delta_y=1
```

Paramètres par défaut :

Nous allons fournir à l'utilisateur un fichier de configuration default.ini qui va contenir les valeurs par défaut des paramètres. Si l'utilisateur n'introduit pas en ligne de commande les paramètres ou bien il introduit que certains d'entre eux, les paramètres manquant vont avoir les valeurs du fichier.

```
mpirun -n 2 ./simpleheat
```

Choix d'un fichier de configuration :

Nous allons fournir à l'utilisateur l'option de choisir un fichier de configuration qui va contenir les valeurs des paramètres personnalisées. Il pourra l'introduire au programme

avec l'option "file" en indiquant dans la ligne de commande le chemin du fichier comme valeur à l'option –file, exemple :

```
mpirun -n 2 ./simpleheat --file=config.ini
```

Si l'utilisateur n'introduit pas dans son fichier tout les paramètres, les valeurs manquantes vont être complétée par leurs options en ligne de commande si elles sont présente, sinon par les valeurs par défaut dans le fichier default.ini.

2.2.3 Réalisation

Outils utilisés :

Il existe plusieurs librairies qui peuvent répondre à notre besoin, nous citons Boost, Clara, CLI11, The Lean Mean C++, getopt, Ketopt, args ...

Pour implémenter la solution proposée, nous avons utilisé l'API QT5. La classe **QCommandLineParser** pour analyser les options en ligne de commande et la classe **QSettings** pour gérer les fichiers de configuration.

Qt5 est un framework initialement prévu pour faciliter la création d'interfaces graphiques pour le langage de programmation C++. Au fil du temps et des nouveaux apports aux bibliothèques de Qt, ce framework s'est étendu progressivement au delà des interfaces graphiques pour fournir une bibliothèques de composants facilitant l'utilisation du langage C++ (sockets, fichiers, structure de données, threads, synchronisation, ...), allant jusqu'à permettre la portabilité du code source à différentes plateformes. La portabilité des applications n'utilisant que des composants Qt se fait par simple recompilation du code source. Les environnements supportés sont les Unix (dont Linux) qui utilisent le système graphique X Window System, Windows et Mac OS X. [1]

Qt support depuis sa version 5 l'analyse de la ligne de commande avec un niveau d'abstraction élevé, les deux classes **QCommandLineParser** et **QSettings** sont très simples et faciles à utiliser, et répondent à notre besoin.

Installation sur ubuntu

```
$ sudo apt-get install qt5-default
```

Ajour d'une bibliothèque CLIPARSER :

Nous avons implémenté une bibliothèque indépendante que nous avons appelé **CLIPARSER** qui contient une classe **CmdParse**,celle ci implémente la classe **Configuration** et redéfinit les fonctions virtuelles de cette dernière. Ceci dans le but de ne pas effectuer beaucoup de changement dans le code.

La classe CmdParse :

Pour éviter quelques erreurs dans le programme, nous avons initialisé des constantes qui

1. https://fr.wikibooks.org/wiki/Programmation_Qt/Introduction

représentent les valeurs pas défauts des paramètres.

```
// the default values
static int DEFAULT_ITER = 0;
static int DEFAULT_HEIGHT = 0;
static int DEFAULT_WIDTH = 0;
static int DEFAULT_PROC_HEIGHT = 0;
static int DEFAULT_PROC_WIDTH = 0;
static int DEFAULT_DELTA_X = 0;
static int DEFAULT_DELTA_Y = 0;
static QString DEFAULT_DELTA_T = "0";
static QString DEFAULT_CONFIG_FILE="../default.ini";
static int DEFAULT_WRITE_FREQ=0;
```

CmdParse dans son constructeur,grâce à la classe **QSettings** lit le fichier **default.ini** s'il existe, et récupère les valeurs et met à jour ces constantes.

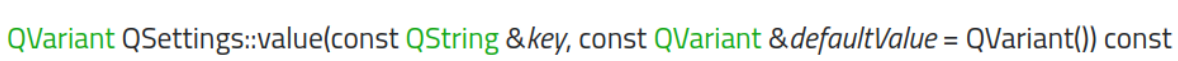


FIGURE 2.1 – Entete de la fonction value de QSettings

```
// Update the default values with those in the default config file if it
    exists
if (QFile(DEFAULT_CONFIG_FILE).exists())
{
  QSettings settings(DEFAULT_CONFIG_FILE, QSettings::IniFormat);
  // retrieve the setting
  DEFAULT_DELTA_T = settings.value("params/delta_t",DEFAULT_DELTA_T).
   toString();
  DEFAULT_DELTA_X = settings.value("params/delta_x", DEFAULT_DELTA_X).
   toInt();
  DEFAULT_DELTA_Y = settings.value("params/delta_y", DEFAULT_DELTA_Y).
   toInt();
  DEFAULT_ITER = settings.value("params/nb_iter", DEFAULT_ITER).toInt();
  DEFAULT_HEIGHT = settings.value("params/height", DEFAULT_HEIGHT).toInt
   ();
  DEFAULT_WIDTH = settings.value("params/width", DEFAULT_WIDTH).toInt();
  DEFAULT_PROC_HEIGHT = settings.value("params/process_height",
   DEFAULT_PROC_HEIGHT).toInt();
  DEFAULT_PROC_WIDTH = settings.value("params/process_width",
   DEFAULT_PROC_WIDTH).toInt();
  DEFAULT_WRITE_FREQ = settings.value("params/freq", DEFAULT_WRITE_FREQ)
   .toInt();
}
```

La classe **QCommandLineOption** permet de rajouter une option avec une valeur par défaut, puis chaque option est rajoutée au parseur instance de **QCommandLineParser**.

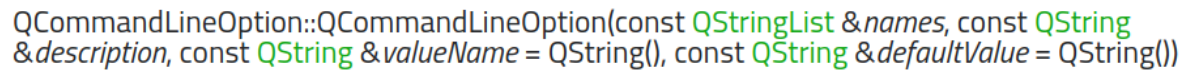


FIGURE 2.2 – Constructeur de la classe QCommandLineOption

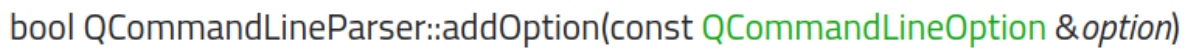


FIGURE 2.3 – Entete de la fonction addOption

```
1  // Add config file option (--file)
2    QCommandLineOption fileOption("file",
3      QCoreApplication::translate("simpleheat", "config file name"),
4      QCoreApplication::translate("simpleheat", "file name"),
5      std::to_string(DEFAULT_DELTA_Y).c_str());
6    parser.addOption(fileOption);
```

Enfin, dans le cas ou l'utilisateur introduit un fichier de configuration, nous lisons les valeurs depuis celci-ci et mettons à jour les variables locales de la classe, sinon à partir des options.

```
1  // if the user introduces a config file with the option --file
2    if (parser.isSet(fileOption))
3    {
4      QString file_name=parser.value(fileOption);
5      QSettings settings(file_name, QSettings::IniFormat);
6      // get the values from the choosen config file if it exist
7      // if one value miss in the file, get it from the default values
8      if (QFile(file_name).exists())
9      {
10       m_nb_iter = (parser.isSet(nbIterOption)) ? parser.value(
     nbIterOption).toDouble() : settings.value("params/nb_iter",
     DEFAULT_ITER).toDouble();
11                .
12                .
13                .
14     }
15     else
16     {
17       cerr << "ERROR: file " << file_name.toStdString().c_str() << "
     doesn't exist! \n"<< endl;
18       exit(1);
19     }
20   }
```

```
21   else
22   {
23     // get the values from their options
24     // if one option miss, the default value will be returned
25     m_nb_iter = parser.value(nbIterOption).toInt();
26                 .
27                 .
28                 .
29   }
```

Nous présentons dans la figure 2.4 un résumé de la classe implémentée ainsi que le graphe de dépendances généré par doxygen.

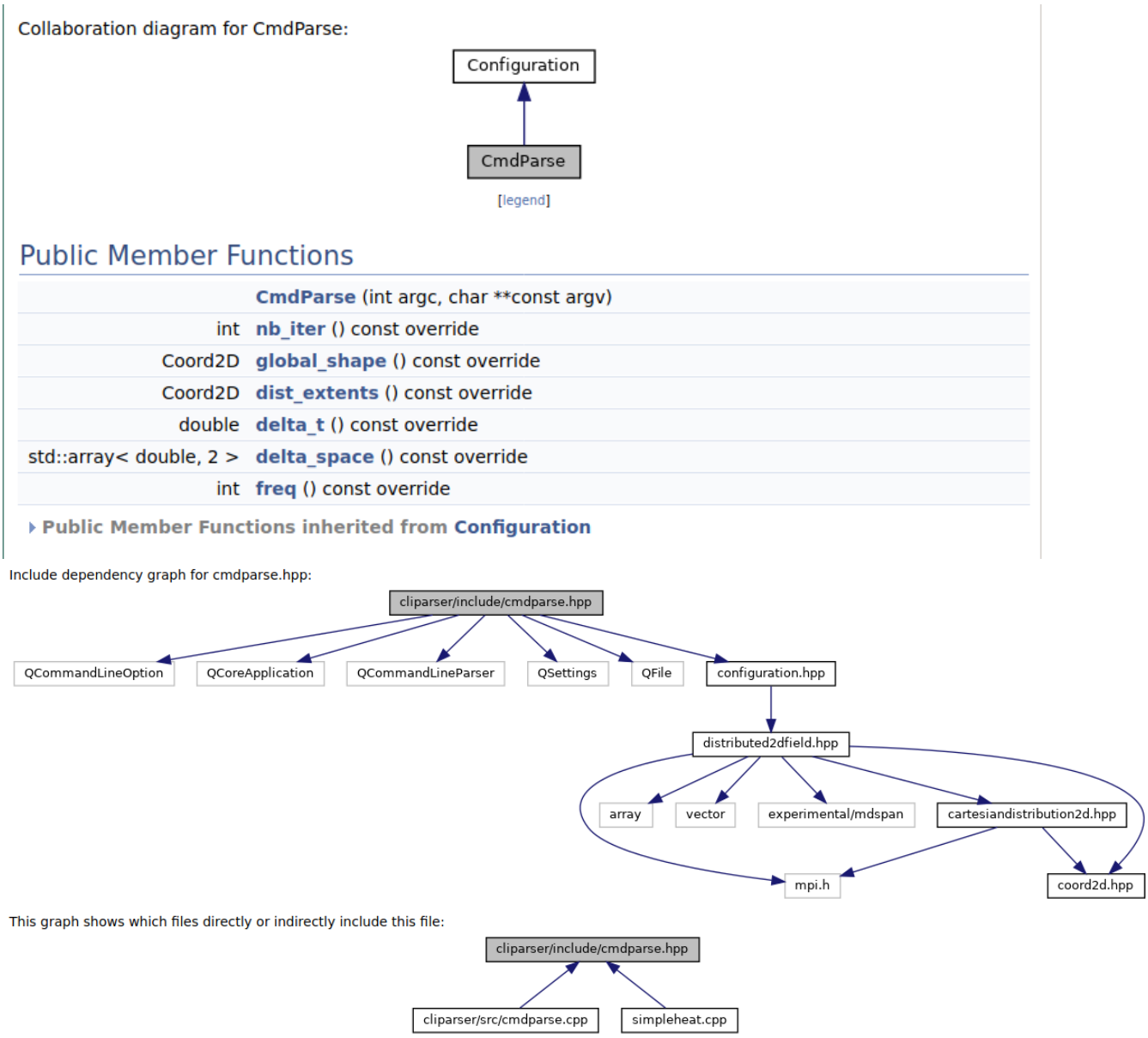


FIGURE 2.4 – Classe CmdParse et le graphe de dépendances

Nous montrons dans la capture 2.5 le résultat de la commande –**help**
et un exemple d'exécution en utilisant un fichier de configuration en modifiant un des

```
Projet_NK/ProjetGLCS/Projet-GLCS-2020-2021/build$ ./simpleheat --help
Usage: ./simpleheat [options]
This is a simple heat solver

Options:
  -h, --help                          Displays this help.
  -v, --version                       Displays version information.
  --file <file name>                  config file name
  --nb_iter <nb_iter>                 number of iterations to execute
  --height <height>                   height of the global data field
  --width <width>                     width of the global data field
  --process_height <process_height>   height of the data distribution
  --process_width <process_width>     width of the data distribution
  --delta_t <delta_t>                 time difference between two consecutive
                                      points
  --delta_x <delta_x>                 width difference between two consecutive
                                      points
  --delta_y <delta_y>                 heignt difference between two consecutive
                                      points
  --freq <frequence>                  frequence of writting to the hdf5 file
(base) noelle@noelle-HP-EliteBook-Folio-1040-G1:~/Desktop/S2/GLCS/Projet_glcs/Pr
```

FIGURE 2.5 – Ensemble des options du programme

paramètres dans la ligne de commandes, la figure 2.6 présente le fichier de configuration utilisé, la figure 2.7 montre le résultat de l'exécution, les valeurs des paramètres ainsi que la moyenne des données en fonction du temps et du process (voir la section suivante)

config.ini

```
1  [params]
2  nb_iter=20
3  height=4
4  width=8
5  process_height=2
6  process_width=1
7  delta_t=0.125
8  delta_x=1
9  delta_y=1
10 freq=1
```

FIGURE 2.6 – Exemple de fichier de configuration

```
$ mpirun -n 2 ./simpleheat --file=../config.ini --nb_iter=3
Executing application with:
nb_iter = 3
height = 4
width = 8
process_height = 2
process_width = 1
delta_t = 0.125
delta_x = 1
delta_y = 1
freq = 1


 at t=0 process 1 mean data=0
 at t=0 process 0 mean data=0
 at t=0.125 process 1 mean data=32.768
 at t=0.125 process 0 mean data=32.768
 at t=0.25 process 1 mean data=92.16
 at t=0.25 process 0 mean data=92.16
 at t=0.375 process 1 mean data=173.824 at t=0.375 process 0 m
an data=173.824(base) n(base) noelle@noelle-HP-EliteBook-Folio
```

FIGURE 2.7 – Résultat d'exécution

Partie 3

Post traitement des données

Nous avons crée une nouvelle bibliothèque pour appelée **posttreat** pour le post-traitement des données, cette bibliothèque contient une classe **DataAvg** qui implémente une interface **DataReduce** et redéfini ses fonctions. La moyenne de l'ensemble des données d'un bloc est calculée lors de l'appel au constructeur, la classe contient une variable **m_data_avg** qui contient la moyenne calculée, sa valeur est retournée en appelant le getter **average()**. Ce calcul de la moyenne peut être utilisé pour réduire les écritures dans le fichier hdf5, nous pouvons, en la comparant à un seuil (introduit par l'utilisateur comme paramètre) décider si les données méritent d'être écrites ou pas.
Les figures 3.1 et 3.2 montrent la classe rajoutée ainsi que ses dépendances.

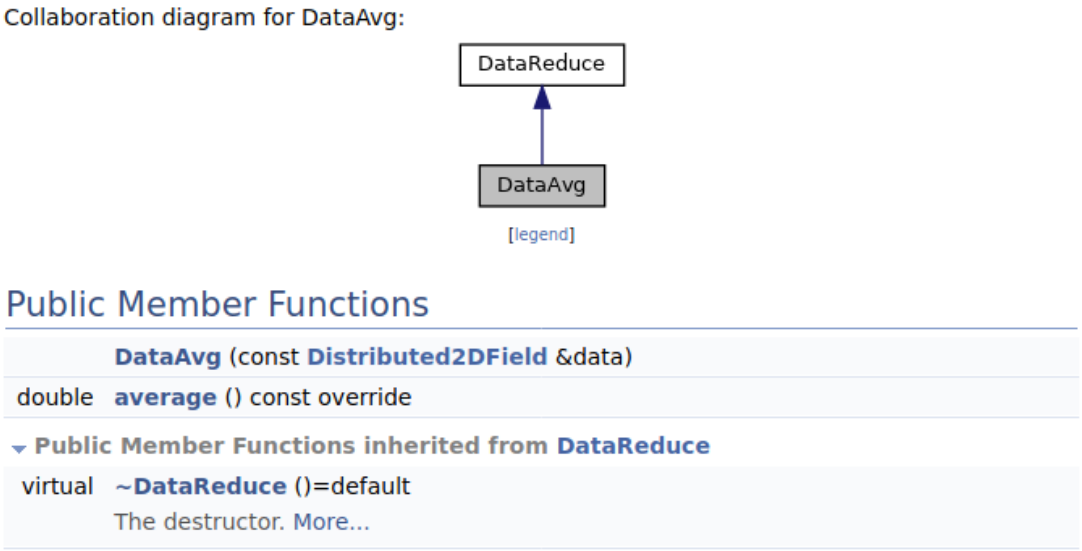


Figure 3.1 – La classe DataAvg

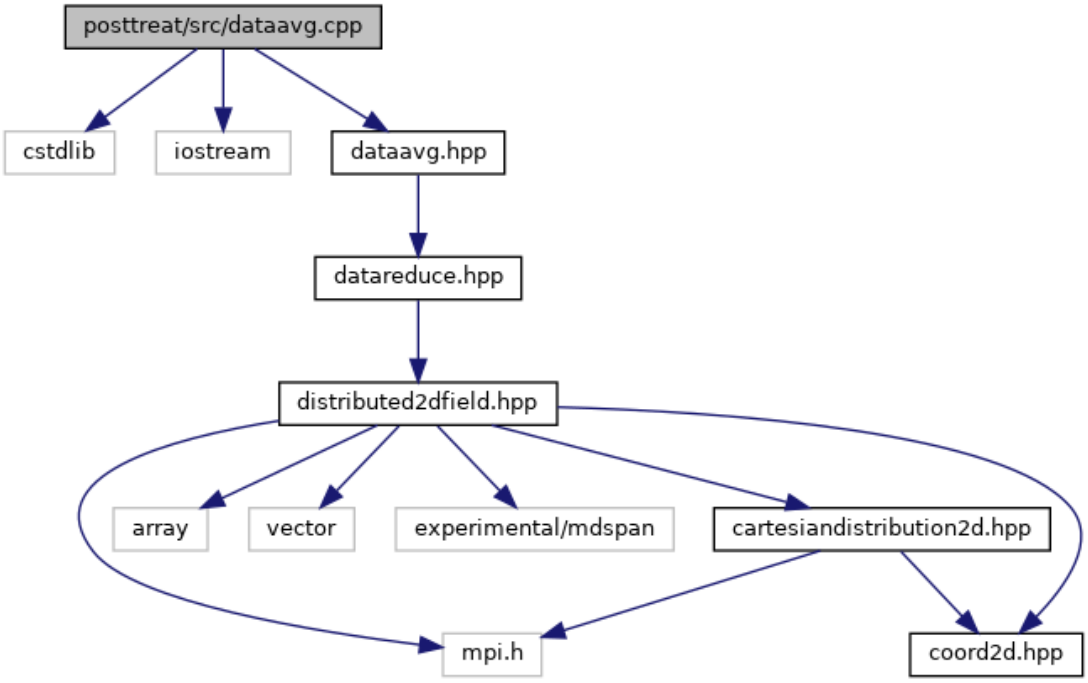


FIGURE 3.2 – Graphe de dépendances de la classe DataAvg

Nous avons ensuite rajouter une classe **Write** pour écrire les moyennes dans un fichier hdf5. La figure 3.4 montre les dépendances de la classe et la figure 3.5 montre le résultat du fichier hdf5 résultant.

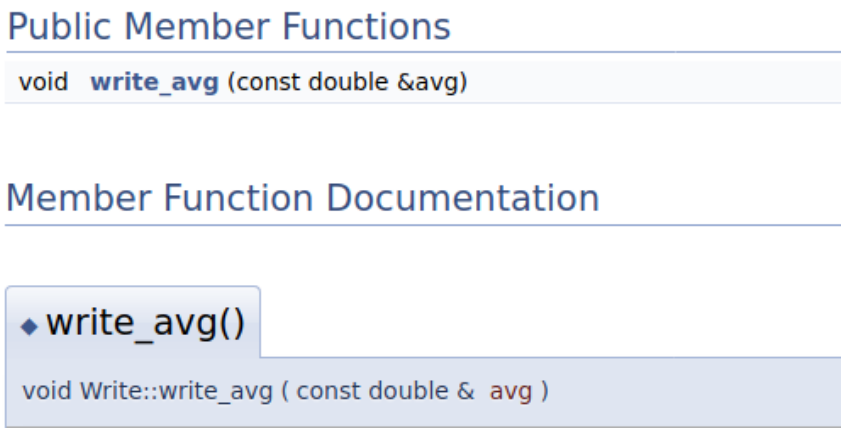


FIGURE 3.3 – Classe Write

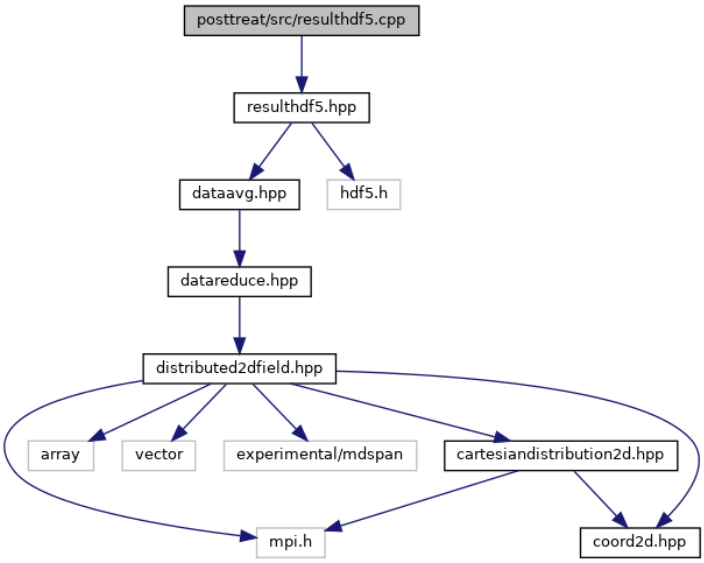


FIGURE 3.4 – Dépendances de la classe Write

```
glcs@97286e8b8d53:/data/build$ mpirun -np 2 ./simpleheat --file=../config.ini --nb_iter=2
Executing application with:
nb_iter = 2
height = 4
width = 8
process_height = 1
process_width = 2
delta_t = 0.125
delta_x = 1
delta_y = 1
freq = 1
at t=0 : [
  [ . . . . . ]
  [ . . . . . ]
  [ . . . . . ]
  [ . . . . . ]
]

 at t=0 process 1 mean data=0

 at t=0 process 0 mean data=0
at t=0.125 : [
  [ 262.144 . . . . . ]
  [ 262.144 . . . . . ]
  [ 262.144 . . . . . ]
  [ 262.144 . . . . . ]
]

 at t=0.125 process 1 mean data=0

 at t=0.125 process 0 mean data=65.536
at t=0.25 : [
  [ 425.984 32.768 . . . . . ]
  [ 458.752 32.768 . . . . . ]
  [ 458.752 32.768 . . . . . ]
  [ 425.984 32.768 . . . . . ]
]

 at t=0.25 process 1 mean data=0

 at t=0.25 process 0 mean data=184.32
glcs@97286e8b8d53:/data/build$ h5dump result.h5
HDF5 "result.h5" {
GROUP "/" {
   DATASET "data" {
      DATATYPE  H5T_IEEE_F64LE
      DATASPACE  SIMPLE { ( 2, 2 ) / ( 2, 2 ) }
      DATA {
      (0,0): 184.32, 184.32,
      (1,0): 1.58101e-322, 1.90215e-321
      }
   }
}
}
```

FIGURE 3.5 – Ecriture des moyennes dans un fichier hdf5

Conclusion

Nous avons, grâce à ce projet, pu voir un exemple de simulation dans un contexte scientifique ainsi que l'usage des bonnes pratiques du génie logiciel et des patterns de conception pour la réalisation de telles applications (Inversion de contrôle, pattern Observer, gestion automatique des versions avec git, génération automatique de la documentation avec Doxygen, utilisation de la technologie de conteneurisation docker ...). Cet exemple nous a permit d'avoir une vision sur le calcul scientifique parallèle, sur un cas plus au moins concret, nous avons manipulé deux bibliothèques indispensables qui sont **MPI** et **Hdf5**, et découvert d'autres durant le projet (Qt5).