projet3 GLCS: Projet

8/01/2021

Travail en binôme

Le projet sera réalisé en binômes. Vous avez le choix de la personne avec qui vous mettre en binôme, mais votre choix devra impérativement être fait et signalé par mail le 8 janvier.

Certaines parties du projet (notées [individuel (membre 1)] et [individuel (membre 2)]) devront être réalisées par un des deux membres du binôme et seront notées indépendamment. D'autres parties (notées [commun]) devront être réalisées en commun par les deux membres du binôme.

Rendu du projet

Date: 28 janvier 2021

Votre projet devra être hébergé sur github. Si vous le souhaitez, vous pouvez rendre votre projet privé, mais dans ce cas, vous devez ajouter l'utilisateur jbigot aux membres ayant accès au projet.

Vous devrez rendre votre projet pour le 28 janvier au plus tard. Ce rendu devra être fait sous la forme de deux emails à l'adresse julien.bigot@uvsq.fr:

- un premier mail avec en fichier attaché une archive (format tar.gz) de votre projet ne contenant que les fichiers source, pas d'exécutable ni de répertoire caché .git!,
- un second mail comportant uniquement l'identifiant (SHA-1) du commit correspondant à cette archive. Vos mails devront être adressés en CC au deux membres du binôme.

Mise en place

Comme pour les TDs 1 et 2, vous devrez au préalable avoir installé docker sur votre machine et autorisé votre utilisateur à le lancer. Sous Debian / Ubuntu, on obtient ce résultat avec les commandes :

```
$ sudo apt install docker.io
$ sudo gpasswd -a $USER docker
```

Le code du projet est hébergé dans le projet jbigot/Projet-GLCS-2020-2021 sur github accessible à l'adresse https://github.com/jbigot/Projet-GLCS-2020-2021. Chaque binôme devra créer son propre projet sur github basé sur ces fichier. Le plus simple est d'utiliser le bouton "Fork" en haut à droite de la page du projet d'origine.

Vous trouverez le fichier d'environnement du projet à l'adresse https://raw.githubusercontent.com/jbigot/glcs_2020-2021/master/glcs-td3-projet.sh. Comme pour les TDs 1 et 2, son exécution peut être un peu lente; elle télécharge tout l'environnement du projet.

```
$ wget https://raw.githubusercontent.com/jbigot/glcs_2020-2021/master/glcs-td3-projet.sh
$ bash glcs_td1.sh <chemin>/<vers>/projet
```

Cette commande ouvre un shell qui tourne dans un environnement docker (container) qui comporte des bibliothèques, outils, etc... différents de ceux de votre machine personnelle. Contrairement aux TDs 1 et 2, la commande ne crée pas les fichiers du projet. Il est de votre responsabilité de les récupérer en utilisant git.

```
$ git clone git@github.com:<MY_USER>/Projet-GLCS-2020-2021.git
```

Si vous préférez, il vous est tout à fait possible de travailler directement sur votre machine personnelle sans utiliser l'environnement fourni. Attention cependant, l'évaluation se déroulera dans l'environnement fourni. Il est donc impératif de tester votre projet dans cet environnement avant de le rendre!

1 Description du code

1.1 Équation de la chaleur

Le projet met en œuvre un solveur pour l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u$$

Où u est une fonction du temps et de l'espace qui donne la température en un point donné à un instant donné.

Dans notre cas, on travaille dans un espace cartésien 2D. Typiquement, on simule la diffusion de la température sur une plaque métallique. On a donc :

$$u: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$$

 $(t, x, y) \mapsto u(t, x, y).$

et

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2}.$$

1.2 Méthode des différences finies

La méthode des différences finies propose une solution pour calculer la valeur d'une dérivée dans un système discrétisé par un pas h suffisamment petit :

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Sa dérivation propre en utilisant la formule de Taylor est bien expliquée dans l'article Wikipedia¹. On se contentera ici de remarquer qu'elle ressemble fortement à la définition de la dérivée :

$$f'(x) = \lim_{x \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

En choisissant h' = -h, on obtient la formule à gauche :

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h') - f(x)}{h'}$$
$$\approx \frac{f(x-h) - f(x)}{-h}$$
$$\approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}.$$

Pour une dérivée seconde, on peut commencer par appliquer la formule à droite :

$$f''(x) \approx \frac{f'(x+h) - f'(x)}{h},$$

puis à gauche :

$$f''(x) \approx \frac{\frac{f(x+h) - f(x+h-h)}{h} - \frac{f(x) - f(x-h)}{h}}{h}$$
$$\approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}.$$

1.3 Équation de la chaleur discrétisée

Pour l'équation de la chaleur, on commence par appliquer la formule à gauche pour la dérivée en temps avec $h=d_t$:

$$\begin{split} \frac{u(t+d_t,x,y)-u(t,x,y)}{d_t} &\approx \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(t+d_t,x,y) &\approx d_t * \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) + u(t,x,y) \end{split}$$

¹https://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference_method

On applique ensuite la formule centrée pour les dérivées en espace $(h = d_x \text{ et } h = d_y)$:

$$u(t + d_t, x, y) \approx u(t, x, y) + d_t * \left(\frac{u(t, x + d_x, y) - 2u(t, x, y) + u(t, x - d_x, y)}{d_x^2} + \frac{u(t, x, y + d_y) - 2u(t, x, y) + u(t, x, y - d_y)}{d_y^2}\right)$$

On discrétise u en temps avec un pas d_t et en espace (d_x, d_y) pour obtenir sa version discrétisée $U_t(i, j)$:

$$U_{t+}(i,j) = U_{t}(i,j) + d_{t} * \left(\frac{U_{t}(i+1,j) - 2U_{t}(i,j) + U_{t}(i-1,j)}{d_{y}^{2}} + \frac{U_{t}(i,j+1) - 2U_{t}(i,j) + U_{t}(i,j-1)}{d_{x}^{2}} \right).$$

C'est cette équation qui est implémentée par la fonction FinitediffHeatSolver::iter avec U_{t+} stocké dans la variable next et U_t dans dans la variable cur. On parle d'un *stencil* car le calcul des valeurs à chaque coordonnée dépend des valeurs aux coordonnées voisines au pas de temps précédent.

1.4 Distribution de domaine et conditions aux limites

Le code est parallélisé avec MPI. Le domaine global est distribué en 2D dans l'ensemble des processus comme illustré sur la figure 1. Chaque processus est en charge d'un bloc de données identifié par le code couleur sur la figure. De plus, comme on a affaire à un *stencil*, pour calculer les valeurs aux frontières du domaine, il est nécessaire de définir des valeurs juste à l'extérieur du domaine. Dans le code on implément des condition aux limites de Dirichlet en fixant des valeurs à l'extérieur du domaine qui ne sont jamais modifiées.

	0	0	0	0	0	0	0	0	 х	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	 0	

Fig. 1 : Domaine global distribué ; un processus (rang) MPI est en charge des données colorées en vert, un de celles en jaune, un de celles en rouge, un de celles en bleu, etc.

On retrouve ce problème si on s'intéresse au domaine local d'un processus tel qu'illustré sur la figure 2. Pour calculer les valeurs à la limite du domaine local, il faut accéder aux valeurs calculées par le processus voisin.

	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	

Fig. 2 : Domaine local (bleu) incluant des zones fantômes pour accéder aux valeurs calculées par le voisin de gauche (rouge), droite (orange), du haut (jaune) et du bas (violet).

Pour gérer ces deux cas, on alloue un tableau plus grand que le domaine local. Le domaine inclue des zones fantômes. Pour les domaines au centre du domaine global, ces zones fantômes servent à stocker les valeurs claculées par les processus voisins communiquées par MPI. Pour les domaines à la limite du domaine global, ces zones fantômes stockent les valeurs au limites.

Cette distribution de domaine est implémentée par les classes Distributed2DField qui représente un bloc local de données et CartesianDistribution2D qui identifie la distribution du domaine local au sein du domaine global. La classe Distributed2DField expose des "vues" (view) sous la forme de fonctions membres :

- full_view donne accès aux données avec un système de coordonnées qui commence à 0 au début des zones fantômes,
- noghost_view donne accès aux données avec un système de coordonnées qui commence à 0 après les zones fantômes et n'expose que le domaine local,
- ghost_view donne accès aux données avec un système de coordonnées qui commence à 0 au début de chaque zone fantôme et donne accès à cette zone fantôme spécifique.

La fonction sync_ghosts synchronise les zones fantômes entre processus voisins.

2 Objectif du projet

2.1 Prise en main [commun]

Étudiez le code, essayez d'en comprendre la logique globale. Exécutez le code sur un petit exemple pour en comprendre et vérifier le résultat, par exemple avec les paramètres suivant :

- Nb iter = 10
- height = 4
- width = 8
- process_height = 1 ou 2
- process_width = 1 ou 2
- delta t = 0.125
- delta x = 1
- $delta_y = 1$

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

2.2 Rapport [commun]

Vous devrez rendre un rapport qui traite deux aspects.

- La première partie doit décrire le fonctionnement du code fourni concernant la synchronisation des zones fantômes. Elle doit expliquer dans le détail le fonctionnement de la fonction qui vous est fournie dans ce but : Distributed2DField::sync_ghosts. Elle doit décrire la classe CartesianDistribution2D et expliquer en quoi consiste le concept de communicateur MPI cartésien utilisé dans cette classe.
- La seconde partie du rapport doit décrire les modifications que vous avez effectuées dans le code. Elle doit expliquer leur fonctionnement et décrire d'éventuelles limitations ou problèmes de vos modifications. Elle doit identifier et justifier les choix d'implémentation que vous avez fait.

2.3 Ajout de fonctionnalités au code

Vos modifications devront respecter l'architecture du projet proposé. Elles devront minimiser les modifications dans le code déjà fourni. Pour chaque nouvel ensemble de fonctionnalités, vous devrez fournir un nouvel exécutable les utilisant et vous devrez vous assurer que l'exécutable fourni continuent de fonctionner.

Vous veillerez à garder à l'esprit les objectifs de génie logiciel étudiés dans le cours. Vous serez évalués sur l'ensemble de ces critères, incluant notamment (en plus de la correction de la solution) :

- utilisation du gestionnaire de versions,
- qualité de la documentation et des commentaires, essayez de commenter l'interface de vos fonctions avec le format Doxygen, comme dans le code fourni,
- propreté et structuration du code,
- réutilisabilité et réutilisation de code,
- performances,
- etc.

2.3.1 Modification du système d'écriture des données [individuel (membre 1)]

Cette modification devra être fournie sous la forme d'une première bibliothèque indépendante, comme heatlib ou simpleui.

L'objectif est de fournir une nouvelle classe pour remplacer l'écriture des données sur la console mise en œuvre par la classe ScreenPrinter. En effet, ScreenPrinter propose une implémentation fragile inefficace et qui ne peut pas assurer que l'ordre des données sur la console soit bien respectée.

Vous devrez à la place fournir une nouvelle classe qui stocke les données au format HDF5. Les itérations auxquelles stocker les données devraient être configurable par l'utilisateur. Une ou plusieurs nouvelles options de configuration devront pour ça être ajoutées à la classe Configuration. Vous permettrez d'utiliser les données ainsi écrites comme conditions initiales d'une nouvelle simulation.

2.3.2 Modification du système de configuration [individuel (membre 2)]

Cette modification devra être fournie sous la forme d'une seconde bibliothèque indépendante, comme heatlib ou simpleui.

L'objectif est de remplacer la classe CommandLineConfig qui analyse les options passées sur la ligne de commande. En effet, la ligne telle que demandée est longue, peu lisible et l'ajout de nouveaux paramètres est rendue complexe par l'impossibilité d'avoir des valeurs par défaut.

Vous proposerez une nouvelle implémentation qui supporte des paramètres par défaut et qui permet d'avoir plus de lisibilité sur les paramètres que chaque valeur défini. Il est conseillé pour celà de baser votre nouvelle version au choix sur la bibliothèque Boost.Program_options² ou Boost.PropertyTree³. Vous pouvez utiliser une autre bibliothèque de votre choix, mais dans ce cas, pensez à bien préciser dans votre rapport la bibliothèque à installer.

2.3.3 Post-traitement en ligne des données [commun]

Cette modification devra être fournie sous la forme d'une troisième bibliothèque indépendante, comme heatlib ou simpleui. En cas de manque de temps, vous devrez finir les deux modifications précédentes avant d'effectuer celle-ci.

Dans cette dernière fonctionnalité, il s'agit d'ajouter une nouvelle classe permettant d'effectuer un posttraitement simple des données avant de les écrire. Pour réduire la quantité de données à écrire et ainsi pouvoir effectuer cette opération plus fréquemment sans sur-charger le système de fichier on va appliquer une réduction aux données. Vous fournirez simplement une nouvelle classe qui calcule la moyenne globale des données avant de l'écrire au format HDF5. Comme pour les données brutes, vous délèguerez l'écriture à une classe dédiée, distincte de la classe responsable du calcul de la moyenne.

2.4 Soutenance [commun]

Vous devrez présenter votre rapport sous la forme d'une présentation de 15 minutes + 5 de questions qui aura lieu le 29 janvier. Vous vous appuierez sur des transparents pour votre présentation. Cette présentation devra reprendre le contenu de votre rapport et proposer une explication rapide du code en se focalisant particulièrement sur les fonctions d'échange de données et sur vos modifications. Vous prêterez particulièrement attention à ce que le temps de présentation soit équilibré entre les membres du binôme.

²https://www.boost.org/doc/libs/1_74_0/doc/html/program_options.html

 $^{^3 \}texttt{https://www.boost.org/doc/libs/1_74_0/doc/html/property_tree.html}$