

High Performance Computing

Parallélisation de la Méthode de Jacobi

Plessia Stanislas

Mars 2018

Table des matières

1	Introduction	3
2	Methode de Jacobi	3
2.1	Problème	3
2.2	Méthode de résolution	3
2.3	Preuve et Convergence	4
2.4	Vecteur erreur et résidu	6
3	Implémentation	7
3.1	Architecture	7
3.2	Structures de données	7
3.3	Librairies	8
3.4	Tests	8
3.5	Données	8
3.6	Compilation et Lancement	9
3.7	Programme principal	9
3.8	Erreurs	10
4	Résultats	11
4.1	Performances	11
4.2	Génération de matrices creuses de grande taille	11
4.3	Analyse des performances et des résultats	12
5	Conclusion	13

1 Introduction

Dans cet article, nous allons nous attaquer à la résolution de systèmes linéaires.

Ces systèmes sont de la forme suivante :

$$\begin{cases} ax + by + cz = s_1 \\ dx + ey + fz = s_2 \\ gx + hy + iz = s_3 \end{cases}$$

On les rencontre par exemple lors de modélisation par éléments finis de la solution d'une équation différentielle, ou lors de problème d'optimisation linéaire ou de marches aléatoires.

Un exemple concret serait celui des chaînes de Markov pour représenter un mouvement aléatoire où la question serait de trouver une solution stationnaire. Dans un problème tel que celui du voyageur de commerce en utilisant la méthode du recuit simulé, le problème peut se modéliser par une telle chaîne :

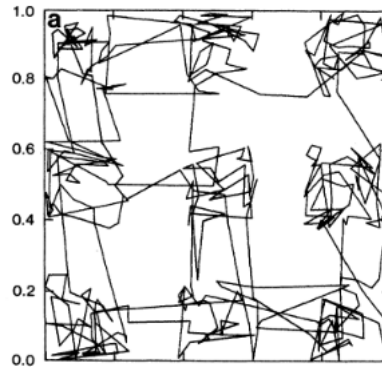


FIGURE 1 – Modélisation du problème du voyageur de commerce

2 Methode de Jacobi

2.1 Problème

Soit $n \in \mathbb{N}$, $A = (a_{i,j})_{i,j \in \llbracket 1, n \rrbracket^2}$ matrice carrée de taille n , $b = (b_i)_{i \in \llbracket 1, n \rrbracket}$ vecteur de taille n .

On cherche alors le vecteur $x = (x_i)_{i \in \llbracket 1, n \rrbracket}$ tel que :

$$Ax = b \tag{1}$$

2.2 Méthode de résolution

Afin de résoudre ce problème, on va utiliser une méthode itérative appelée Méthode de Jacobi.

Tout d'abord, on va séparer la matrice A en deux sous matrices D et R de la manière suivante :

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & 0 & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Notons D la matrice diagonale, et R la matrice du reste. Comme la matrice D est diagonale (qu'on suppose à coefficients non nuls dans notre problème), D est trivialement inversible d'inverse :

$$D^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{1,1}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_{2,2}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{a_{n,n}} \end{pmatrix}$$

On peut donc réécrire la formule (1) de la manière qui suit :

$$(D + R)x = b \quad (2)$$

$$\Leftrightarrow Dx = b - Rx \quad (3)$$

$$\Leftrightarrow x = D^{-1}(b - Rx) \quad (4)$$

La Méthode de Jacobi est alors une méthode itérative qui va chercher à trouver un point fixe à cette équation. On peut alors définir la suite $x^{(k)}$, $k \in \mathbb{N}$ telle que :

$$\begin{cases} x^{(0)} = \vec{0} \\ x^{(k+1)} = D^{-1}(b - Rx^{(k)}) \end{cases}$$

L'avantage flagrant de cette méthode de calcul, est que les éléments n'ont aucune dépendance verticale. Elle est donc très simple à paralléliser.

En effet, en écrivant la formule de récurrence pour un élément du vecteur $x^{(k+1)}$, on obtient :

$$\forall k \in \mathbb{N}, \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, \quad x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} (b_i - \sum_{j \neq i} a_{i,j} x_j^{(k)}) \quad (5)$$

La seule contrainte devient alors que chaque processeur doit connaître toutes les composantes de $x^{(k)}$ afin de pouvoir itérer, et il faut donc les communiquer, ce que nous ferons en utilisant la bibliothèque MPI.

2.3 Preuve et Convergence

D'après le théorème de la méthode du point fixe, on sait que la suite $x_{n+1} = f(x_n)$ converge si la fonction f est contractante i.e k -lipshitzienne avec $k < 1$

Notons $C = -D^{-1}R$, $d = D^{-1}b$ et

$$\begin{aligned}\mathcal{F} : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ u &\longrightarrow Cu + d\end{aligned}$$

On veut trouver une condition nécessaire et suffisante pour que \mathcal{F} soit une application contractante. Or, on a :

Soit a, b deux vecteurs dans \mathbb{R}^n ,

$$\begin{aligned}\|\mathcal{F}(a) - \mathcal{F}(b)\| &= \|Ca - Cb\| \\ &\leq \|C\|_{\infty} \cdot \|a - b\|\end{aligned}$$

On doit donc avoir $\|C\|_{\infty} < 1$ ce qui revient à dire que le rayon spectral de la matrice C noté $\rho(C)$ doit être strictement inférieur à 1

On peut donc affirmer que :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x \Leftrightarrow \rho(C) = \rho(-D^{-1}R) < 1$$

Cherchons une condition simple suffisante pour affirmer que le rayon spectral de la matrice C soit inférieur à 1.

Soit λ valeur propre de C ie $\forall y \in \mathbb{R}^n, Cy = \lambda y$

On a alors, $\forall (i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket^2$

$$\begin{aligned}\|\lambda y\|_{\infty} &= \left| \sum_{j=1}^n c_{i,j} y_j \right| \\ \Leftrightarrow \lambda \|y\|_{\infty} &= \left| \sum_{j \neq i} \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} y_j \right| \\ \Leftrightarrow \lambda \|y\|_{\infty} &= \left| \frac{1}{a_{i,i}} \right| \cdot \left| \sum_{j \neq i} a_{i,j} y_j \right| \\ \Leftrightarrow \lambda \|y\|_{\infty} &\leq \left| \frac{1}{a_{i,i}} \right| \cdot \sum_{j \neq i} |a_{i,j} y_j| \\ \Leftrightarrow \lambda \|y\|_{\infty} &\leq \left| \frac{1}{a_{i,i}} \right| \cdot \sum_{j \neq i} |a_{i,j}| \cdot \|y\|_{\infty} \\ \Leftrightarrow \lambda &\leq \left| \frac{1}{a_{i,i}} \right| \cdot \sum_{j \neq i} |a_{i,j}|\end{aligned}$$

Une condition suffisante pour que $\lambda < 1$ serait alors :

$$\forall (i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket^2 \quad |a_{i,i}| > \sum_{i \neq j} |a_{i,j}|$$

ie A est à diagonale strictement dominante

2.4 Vecteur erreur et résidu

Afin de mesurer la convergence de la méthode de Jacobi (et d'avoir une condition d'arrêt), on définit le vecteur erreur relative suivant :

$$e^{(k+1)} = \|x^{(k+2)} - x^{(k+1)}\|_\infty = \|C(x^{(k+1)} - x^{(k)})\|_\infty = \|C\|_\infty e^{(k)}$$

On a donc $e^{(k)} = \|C\|_\infty^k e^{(0)}$

On a de plus le vecteur erreur :

$$\epsilon^{(k)} = \|x - x^{(k)}\|_\infty$$

$e^{(k)}$ est l'erreur relative de la méthode à l'itération k , mais comme on a pas connaissance du véritable vecteur x , on l'utilise comme référence pour le test d'arrêt.

En effet,

$$\begin{aligned} e^{(k)} &= \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_\infty \\ &= \|Cx^{(k)} + d - x^{(k)}\|_\infty \\ &= \|Cx^{(k)} + x - Cx - x^{(k)}\|_\infty \\ &= \|x - x^{(k)} - C(x - x^{(k)})\|_\infty \\ &= \|(-C + I)(x - x^{(k)})\|_\infty \end{aligned}$$

On obtient alors par inégalité triangulaire :

$$e^{(k)} = \|I - C\|_\infty \epsilon^{(k)} \leq \epsilon^{(k)} + \|C\|_\infty \epsilon^{(k)}$$

Et comme on a vu précédemment la norme infinie de la matrice C est strictement inférieure à 1 on a donc :

$$e^{(k)} \leq 2\epsilon^{(k)}$$

On peut alors considérer que l'erreur relative est suffisamment proche de l'erreur réelle pour l'utiliser comme test d'arrêt.

3 Implémentation

3.1 Architecture

Le projet est divisé en plusieurs sous-dossiers

- `/lib` qui contient des bibliothèques pour manipuler les matrices et les vecteurs ainsi que les opérations basiques de manipulation de ces deux structures de données.
- `/src` qui contient le fichier *main* qui fait tourner le programme de l'algorithme de Jacobi.
- `/data` qui contient les fichiers des matrices et des vecteurs ainsi que les métadonnées contenant la taille des matrices considérées.
- `/bin` qui contient les binaires *main* et *test* afin de faire tourner le programme ou de tester les bibliothèques
- `/test` qui contient le code source du binaire de test dont l'objectif est de tester les fonctions des bibliothèques.

Le projet est de plus constitué d'un Makefile qui contient les procédures suivantes :

- *make all* (ou simplement *make*) pour compiler les bibliothèques, main et les tests
- *make test* pour compiler les tests
- *make clean* pour supprimer les fichiers objets

3.2 Structures de données

Dans ce projet, j'ai créé deux structures de données relativement similaires pour les vecteurs et les matrices. Chaque structure dispose d'un type complexe qui lui est associé pour des raisons d'ergonomie.

Ces structures sont contenues dans les fichiers `lib/matrix.h` et `lib/vector.h`.

La structure Matrice est composée de deux entiers non signés pour les dimensions et d'un tableau de *double* à 2 dimensions pour contenir les valeurs de la matrice.

```
typedef struct Matrix{  
    unsigned int col;  
    unsigned int rows;  
    double **matrix;  
5 }Matrix;
```

La structure Vecteur est très similaire mais n'a qu'une seule dimension :

```
typedef struct Vector{  
    unsigned int size;  
    double **vector;  
}Vector;
```

3.3 Bibliothèques

Ce projet est fourni avec 2 bibliothèques situées dans les fichiers C du dossier **/lib**.

Les deux bibliothèques (Matrix et Vector) sont analogues et possèdent des fonctions très similaires dont on remplacera le mot *structure* par la structure qui correspond (matrix/vector) :

- **build_structure** qui alloue dans la heap la structure avec la taille souhaitée
- **display_structure** qui affiche le contenu algébrique de la structure
- **randomize_structure** qui génère un contenu aléatoire (pas utilisée dans le projet en soit)
- **free_structure** qui désalloue la structure de la heap et la reset
- **read_structure_from_file** qui utilise un fichier pour remplir la structure

La fonction **read_structure_from_file** est la seule fonction non triviale (plusieurs sous structures de fonctionnements internes). Elle peut échouer (*cf.* partie 3.8 page 10)

```
function READ_STRUCTURE_FROM_FILE(structure, filename, first_line, size)
  Buffer of size 10000
  file ← open(filename)
  if file then
    while first_line not reached do
      buffer ← line
    end while
    build_structure(structure, size)
    if build failed then
      return error ENOMEM
    end if
    structure ← file values
    return 0
  else
    return error ENOENT
  end if
end function
```

3.4 Tests

Le fichier de test ne vérifie que le bon fonctionnement des bibliothèques en générant des matrices et vecteurs de manière aléatoire et en utilisant un fichier de test.

3.5 Données

Pour le problème, trois fichiers de données différents sont nécessaires :

- Un fichier de métadonnées (metadata.txt) qui contient les dimensions du problème
- Un fichier de matrice (matrix.txt) qui contient les données de la matrice A séparées par des espaces
- Un fichier de vecteur (vector.txt) qui contient le vecteur b du problème

3.6 Compilation et Lancement

Le Makefile n'est pas indispensable à la compilation du projet. Les bibliothèques doivent être compilées puis liées au main (cela peut se faire en utilisant seulement gcc car les bibliothèques n'utilisent pas MPI, mais mpicc est recommandé pour raison de compatibilité).

Le programme main est compilé en utilisant mpicc, le compilateur C de la bibliothèque MPI. Les différents flags de compilations sont (viennent de gcc) :

- `-Wall` qui active tout les messages de warning
- `-g` qui active les flags de debug
- `-O3` qui active toutes les optimisations de compilations

Pour lancer le programme :

```
mpirun -n n_proc bin/main [-v] [-h?]
```

3.7 Programme principal

Le programme principal est composé de `main.c` et `main.h`.

Celui ci à 3 fonctions :

- `main` qui initialise le programme et résoud le système linéaire
- `product_vector_matrix` qui effectue le produit final en mode verbose pour vérifier le résultat
- `usage` qui affiche l'usage de la Command Line Interface

Le programme peut recevoir les argument `"-v"` pour passer en mode verbose ou `"-h/-?"` pour afficher l'usage.

Les fichiers de données sont hardcodés dans le code source, mais cette partie est facilement modifiable pour pouvoir spécifier le chemin des fichiers en question.

Ce programme effectue la méthode de Jacobi en asynchrone utilisant :

- `MPI_Isend` qui envoi des données de manière asynchrone
- `MPI_Irecv` qui reçoit des données de manière asynchrone
- `MPI_Wait` qui permet d'attendre la réalisation d'un requête asynchrone (send ou recv)

Le principe de communication est le suivant :

Les processeurs disposent d'une variable `mtx` qui contient une sous-matrice et `vect` le sous-vecteur de b associée à la sous matrice suivant un découpage par lignes distribué de manière équilibré sur ceux-ci.

Par exemple, une matrice 3×3 sur 2 processeurs serait découpées avec la distribution de lignes suivantes :

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix}$$

Ensuite, chaque processeur dispose d'une variable `global_result` qui contient $x^{(k)}$ à l'étape k et de `local_result` qui après itération contiendra les sous vecteurs de $x^{(k+1)}$ à l'étape k .

Il y'a également un tableau `continue_iterate` qui pour chaque ligne de chaque processeur contient un booléen qui permet de décider si l'on continue d'itérer sur la ligne en question.

Au début de chaque itération, les processeurs envoient la valeur locale de `global_result` dans lequel on a stocké l'itération que l'on viens de terminer, et l'on complète cette variable en recevant la valeur locale des autres processeurs.

Les appels à la fonction `MPI_Irecv` sont suivi généralement d'un appel à `MPI_Wait` qui va attendre que la reception soit effective car elle est nécessaire à l'opération qui suit.

En revanche nous ne mettons pas de `MPI_Wait` après `MPI_Isend` car les données ne sont mutés qu'après réception de la données suivante, et la requête d'envoi sera donc terminée à ce moment.

Ensuite on applique la formule de récurrence sur ces nouvelles données que l'on stock dans `local_result`.

Pour le test d'arrêt, comme nous somme en norme infinie, on peut calculer l'erreur relative de chaque composante $e_i^{(k)} = x^{(k+1)}[i] - x^{(k)}[i]$

On va alors tester chaque ligne de chaque processeur et ne continuer l'itération de celles-ci que si la convergence est atteinte :

$$e_i^{(k)} \leq 1.10^{-6}$$

Pour cela, on modifie à l'interieur de chaque processeur la tableau de booléens `continue_iterate`, puis une fois que le tableau ne contiens que des `false`, on envoi la valeur false au processeur root pour que celui ci fasse un masque binaire de tout les autres pour décider de stoper la boucle principale. La limite d'itérations fixée à 500 est arbitraire et pourrait certainement être abaissée.

3.8 Erreurs

L'architecture de code de ce programme suit les standard de développement basés sur le status d'une opération. En effet, dans ce programme beaucoup de fonctions sont susceptibles d'échouer (la manipulation de fichier, l'allocation mémoire, ...).

Dans cette optique, les fonctions des librairies utilisent des pointeurs sur les variables, qui sont alors mutées en place, et les fonctions renvoient un code stipulant la réussite ou l'échec de l'opération an utilisant les code d'erreurs standards de la librairie `errno.h`.

Les codes utilisés ici sont :

- Code Erreur 2, `ENOENT` : "No such file or directory"
- Code Erreur 12, `ENOMEM` : "Out of memory"
- Code Erreur 22, `EINVAL` : "Invalid argument"
- Code Erreur -1 : Erreur générique

4 Résultats

4.1 Performances

Pour mesurer les performances générales du programme, j'ai fait tourner le script bash suivant

```
for proco in {1..8}
do
    time mpirun -n $proco bin/main | grep "total"
done
```

J'ai mesuré les performances du programme sur différents sets de données (donc ceux fournis avec le projet)

- Les données fournies (de taille 7)
- une matrice creuse de taille 20
- une matrice creuse de taille 200
- une matrice creuse de taille 1000

Les matrices utilisées n'ont pas été fournies mais peuvent être générées à l'aide du script python fourni

Les résultats sont présentés dans l'image suivante :

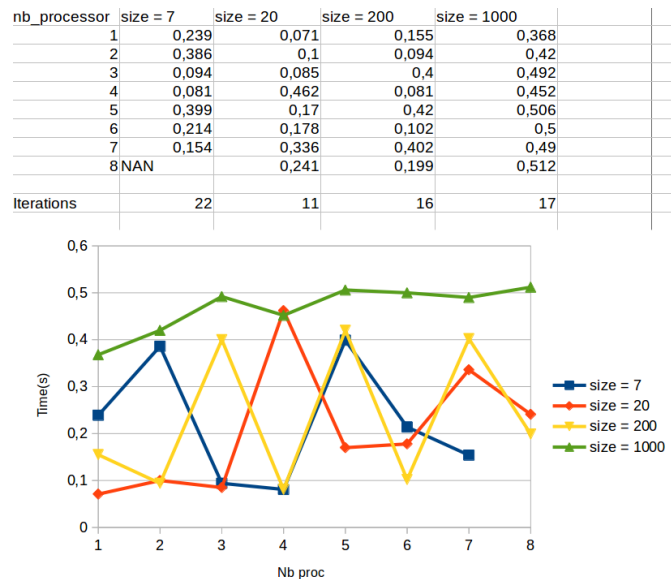


FIGURE 2 – Performances et vitesse de convergence du programme avec différents sets de données

4.2 Génération de matrices creuses de grande taille

Afin de générer des matrices de grandes tailles pour tester les performances du programme, j'ai écrit un script python qui construisait des matrices creuses aléatoires afin de conserver la caractéristique de matrice à diagonale strictement dominante.

Ce programme se situe dans le dossier `/data` et se nomme `generate_random_mtx_vec.py`.

Lancement : `python3 generate_random_mtx_vec.py <size>`

Il génère une matrice carrée et un vecteur de taille `argv[1]`, avec des coefficients entre 100 et 150 pour la diagonale, et entre -2 et 2 pour les 9 lignes de chaque côté de la diagonale (on a bien $2 * 2 * 9 < 100$)

4.3 Analyse des performances et des résultats

Les résultats d'analyse des performances sont à première vue perturbants. En effet, on remarque que pour la méthode de Jacobi purement asynchrone, la performance n'augmente pas linéairement en fonction du nombre de processeur.

Cela peut s'expliquer par l'overhead dû à la communication entre les processeurs que j'ai obligé à attendre avant de muter les données ; plus on augmente le nombre de processeurs plus le nombre de communications et donc d'attentes est important.

On observe par contre de manière quasi-systématique une meilleure performance sur un nombre de processeur pair par rapport à sur un nombre de processeurs impair.

Une réinjection de la solution trouvée pour le set de données fourni dans l'équation d'origine en utilisant la fonction de produit vectoriel activé en mode debug, nous obtenons un résultat encourageant :

```
Converged in 22 iterations
Solution found:
Result : ( 0.297889 0.195119 -0.068976 0.934209 1.053966 -0.419333 -0.057344 )
Injection of solution into equation : ( 6.000008 7.000008 5.000007 8.000004 6.000005 1.000010 3.000007 )
```

FIGURE 3 – Réinjection de la solution itérative dans l'équation

Le vecteur d'origine étant $b = (6, 7, 5, 8, 6, 1, 3)$

Je n'ai pas testé le debug sur des matrices de grande taille, mais il est probable qu'une désynchronisation se produise pouvant conduire à une erreur lors du calcul de l'erreur relative (éventuellement du fait que je n'attends pas après les `MPI_Isend`).

5 Conclusion

J'ai réalisé un programme en *C* utilisant la librairie MPI afin d'utiliser la Méthode de Jacobi parallélisée de manière asynchrone pour résoudre un système linéaire.

Ce programme a fourni des résultats très satisfaisants, convergeant rapidement et semblant rester relativement synchronisé.

J'ai beaucoup appris, surtout sur la manière de paralléliser un programme en langage bas niveau, et j'ai pu me réaffirmer sur ma maîtrise du langage (même si cela ne fait peut-être pas partie des objectifs du cours).

J'ai de plus plusieurs remarques sur les pistes d'améliorations du programme ou de la démarche :

Je n'ai réalisé que l'implémentation purement asynchrone du programme, j'aurais pu le rendre plus modulaire et lui permettre de fonctionner en synchrone ou en asynchrone + `MPI_Barrier` afin de comparer les différence performance et de m'assurer de l'absence de désynchronisations.

Je n'ai pas permis la modification des fichiers de données via command line arguments, cela aurait rajouté de l'implémentation inutile de vérification d'existence de fichier, etc ..., Ce qui n'est pas l'objectif de l'exercice.

De plus, le script python génère des fichiers nommés `object_t.txt` (object pouvant être matrix, vector ou metadata), alors que dans le code source, nous chargeons `object.txt`.

Cela peut être aisément changé dans le code source, ou alors il faut remplacer les fichiers de données fournis.