TP 1: Contexte

Le code proposé dans ce TP calcule une solution approchée en 3 dimensions d'espace (x, y, z) de l'équation de la chaleur dans un cube $[0, 1]^3$:

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

avec conditions aux limites de Dirichlet au bord.

Le calcul se fait a l'aide d'une méthode explicite en temps (Euler) et discrtétisation par différences finies en espace.

Dans la derniere partie du TP, on peut ajouter un terme d'advection (linéaire) $\frac{\partial u}{\partial x}$.

TP 1 : Préparation

A chaque étape, regarder les messages affichés pour voir si tout s'est bien passé!

- 1. Récupérer l'archive TP1.tar.gz et extraire les fichiers.
- 2. Ouvrir un terminal et se placer dans le répertoire I03_TP1 qui vient d'être créé
- 3. préparer la compilation du code du TP avec les commandes :

```
mkdir -p build
cd build
cmake ../src
cd ..
```

4. Se remettre dans le répertoire I03_TP1 et compiler:

```
make -C build
```

- 5. Executer le code avec la commande: ./build/PoissonSeq
- 6. A la fin de l'exécution, les résultats sont sauvegardés au format VTK dans un répertoire "results_..." (le nom précis est affiché à l'écran)

Si on modifie un ou plusieurs fichiers sources (dans le sous-répertoire src), il faut recompiler (point 4).

Si on ajoute un nouveau fichier ou on enlève un fichier existant (dans le sous-répertoire src), il faut adapter les fichiers CMakeLists.txt et refaire les points 3 et 4.

Les commandes ci-dessus génerent une version optimisée par la compilateur ("Release"). Si nécessaire, on peut compiler une version "Debug" (non optimisée) qui permet d'utiliser un outil de débug (exécution pas à pas, afficher des valeurs en cours de calcul, etc).

Certains des outils donnent aussi plus de renseignements sur une version "Debug" que sur une version "Release".

Remplacer les commandes de 3. et 4. par:

```
mkdir -p build_debug
cd build_debug
cmake -DCMAKE_BUILD_TYPE=Debug ../src
cd ..
make -C build_debug
```

Mesure du temps de calcul global

Afficher le temps de calcul global avec time : time ./build/PoissonSeq

A l'écran (exemple): real 0m30,283s user 0m30,186s

sys 0m0,096s

- Avantage : n'est pas intrusif pas besoin de modifier le code, ni de le compiler avec des options spécifiques.
- ► Désavantage : donne une information globale on ne sait pas dans quelle partie du code, on passe peu/beaucoup de temps, ni pourquoi.

Mesure plus précise : outil de "profiling" gprof

Fait partie de la famille gcc/g++/gfortran.

- ► Avantage : calcule le nombre d'appels de chaque fonction et le (pourcentage du) temps qui y est passé
- Avantage : n'est pas très intrusif (pas besoin de modifier le code, mais il faut le recompiler avec une option spécifique: -pg).
- ► Désavantage : le temps passé dans une fonction est peu précis dans une fonction "courte"
- ▶ Désavantage : ne mesure pas le temps dans les différentes parties d'une fonction.
- ► Désavantage : ne rentre pas dans les librairies dynamiques.

Mode de fonctionnement:

Ajoute dans chaque fonction, un comptage du nombre d'appels de cette fonction et évalue statistiquement le temps passé dans cette fonction (tous les 0.01 secondes on enregistre dans quelle fonction on se trouve).

Utilisation de gprof

Recompiler en utilisant l'option -pg:

```
mkdir -p build_gprof
cd build_gprof
cmake -DCMAKE_CXX_FLAGS="-pg" ../src
cd ..
make -C build_gprof
```

Exécuter le code:

```
./build_gprof/PoissonSeq
```

Collecter les mesures

gprof ./build_gprof/PoissonSeq



Mesure plus précise : outil de "profiling" perf

Outil spécifique linux

- Avantage: très puissant (mesure le temps passé dans une fonction, une instruction C/C++/fortran, une instruction binaire, multiples indicateurs de performance)
- ► Avantage : non intrusif
- Désavantage : plus compliqué à utiliser
- ► Désavantage : ne rentre pas toujours dans les librairies dynamiques.
- Désavantage : nécessite que la machine soit configurée correctement.

Outil á privilégier quand c'est possible

Mode de fonctionnement:

Enregistre les événements dans le noyau Linux, évalue statistiquement le temps passé dans les fonctions et les instructions.

Utilisation simple de perf

Il n'est pas toujours nécessaire de recompiler. Sur certaines machines, une version "Debug" est préférable.

```
Instrumenter le code (générer les mesures):
    perf record ./build/PoissonSeq
    (ou perf record ./build_debug/PoissonSeq)
```

perf report

Voir la documentation de perf pour les (nombreuses) autres options.

Mesure plus précise : outil de "profiling" valgrind-callgrind

- ► Avantage : intermédiaire (mesure le temps passé dans une fonction, une instruction C/C++/fortran)
- ► Avantage : non intrusif
- ► Avantage : gère mieux les librairies dynamiques.
- Avantage : l'outil kcachegrind offre une interface graphique pratique à utiliser.
- ► Désavantage : temps d'exécution multiplié par ≈ 40

Mode de fonctionnement:

Le code s'exécute dans une machine virtuelle (simule une machine "idéale"). Permet de mesurer précisement un grand nombre d'indicateurs. Mais explique le facteur de ralentissement.

Utilisation: Utiliser une version "Debug".

Instrumenter le code

valgrind --tool=callgrind ./build_debug/PoissonSeq

Crée un fichier callgrind.out.XXXX où XXXX est le numéro de processus qu'on vient d'exécuter.

Afficher et explorer les résultats de mesure:

kcachegrind callgrind.out.XXXX

Mesure "manuelle" des temps de calcul.

Principe:

- encadrer le bloc d'instructions que l'on veut mesurer par des appels à des fonctions qui renvoient la valeur de l'horloge interne de la machine,
- calculer le temps d'exécution dans ce bloc en faisant la différence des valeurs ci-dessus.

Fonctions système disponibles:

- ► clock() (fonction système C)
- ► gettimeofday(...) (fonction système C)
- ▶ system_clock(...) (fonction système fortran)
- ▶ high_resolution_clock (classe C++ 11)
- ▶ ...

Librairies externes (timers haute résolution) :

- ► PAPI: http://icl.cs.utk.edu/papi
- ► BoostTimers: http://www.boost.org/doc/libs/1_65_1/libs/timer/doc/cpu_timers.html

Remarques

Chaque fonction système est utilisable ou non suivant le langage de programmation utilisé.
La précision n'est pas la même: consulter la documentation.

Exemple avec la fonction C système clock:

```
#include < stdio . h>
#include < math. h>
#include < time . h >
int main()
  clock_t t1, t2;
  t1 = clock();
  int n=100000:
  double s = 0.0:
  for (int i = 0; i < n; i++) s += sin((0.2*i)/n);
  t2 = clock();
  float diff = (float)(t2 - t1)/CLOCKS_PER_SEC;
  printf("temps calcul : %f s", diff);
  return 0:
```

On fournit une classe C++ Timer avec les fonctionnalités suivantes:

```
//definit une variable "chronometre"
Timer T;
//demarrer le chronometre T
T. start();
//arreter le chronometre T
T. stop();
//remettre a zero
T. reset();
// retourne le temps mesure
// entre un appel start() et un stop()
// (utiliser juste apres le stop()
double dt = T.elapsed();
```

Se mettre dans le répertoire I03_TP1, faire une copie du répertoire src dans Q1/src et compiler:

```
mkdir -p Q1/build
cp -rf src Q1/src
cd Q1/build && cmake ../src && cd ..
make -C build
```

Q1. Utiliser la classe Timer pour mesurer séparément

- ▶ le temps d'initialisation (lignes 31-32 du fichier src/main.cxx)
- ► la moyenne du temps d'exécution d'une itération de calcul (lignes 43-45 du fichier src/main.cxx)

Executer le code avec et sans l'option out=10:

```
./build/PoissonSeq
./build/PoissonSeq out=10
```

(la seconde exécution sauvegarde les résultats sur fichier)

Se mettre dans le répertoire I03_TP1, faire une copie du répertoire Q1/src dans Q2/src et compiler:

```
mkdir -p Q2/build
cp -rf Q1/src Q2/src
cd Q2/build && cmake ../src && cd ..
make -C build
```

- Q2. La classe Values repésente un ensemble de $n_0 \times n_1 \times n_2$ valeurs et possède des fonctions (operator()) qui retournent la composante $v_{i,j,k}$ où v est de type Values.
 - Décrire comment sont rangées en mémoire les composantes v_{i,j,k} (examiner les fichiers src/values.cxx et src/values.hxx).
 - Changer la façon de ranger les composantes en mémoire (il y a plusieurs possibilités)
 - Comparer les résultats et les temps de calcul avec la version dans Q1.
 - ► Expliquer les différences éventuelles de temps calcul (examiner aussi le fichier scheme.cxx).

Se mettre dans le répertoire I03_TP1, faire une copie du répertoire src_Q3a dans Q3a/src et compiler:

```
mkdir -p Q3a/build
cp -rf src_Q3a Q3a/src
cd Q3a/build && cmake ../src && cd ..
make -C build
```

Q3a. Le fichier scheme.cxx a été modifié pour pouvoir traiter des équations avec ou sans termes de diffusion (laplacien) et d'advection

- ► Examiner le fichier scheme.cxx: on utilise 2 variables logiques (bool) pour incorporer ou non les termes de diffusion-convection dans le calcul
- ► Exécuter le code sous les 4 formes ci-dessus et comparer :

- ./build/PoissonSeq
 ./build/PoissonSeq convection
 ./build/PoissonSeq diffusion
 ./build/PoissonSeq convection diffusion
- ► Comparer et commenter les résultats..

Se mettre dans le répertoire IO3_TP1, faire une copie du répertoire src_Q3b dans Q3b/src et compiler:

```
mkdir -p Q3b/build
cp -rf src_Q3b Q3b/src
cd Q3b/build && cmake ../src && cd ..
make -C build
```

Q3b. Le fichier scheme.cxx contient une variante de l'algorithme vu en Q3a

- ► Examiner le fichier scheme.cxx: on utilise 2 variables de type (double) qui multiplient les termes de convection et diffusion pour les incorporer ou non dans le calcul (ces variables sont égales a 0.0 ou a 1.0.
- ► Faire les tests analogues au Q3a, comparer et commenter les résultats.

- ./build/PoissonSeq
 ./build/PoissonSeq convection
 ./build/PoissonSeq diffusion
 ./build/PoissonSeq convection diffusion
- ► Comparer et commenter les résultats..