

MASTER | ÉCOLES D'INGÉNIEURS

SCIENCES SUP

Cours
Exercices
corrigés
Exemples avec
MPI et Open MP

Frédéric Magoulès • François-Xavier Roux

Calcul scientifique parallèle

2^e ÉDITION

Mathématiques appliquées
pour le Master / *SMIAI*

DUNOD



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 LU	93
1.	Principe de la décomposition LU	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 LU 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 LU 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

Table des matières

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 préconditionnement de Schwarz additive	235
4.1 Principe du recouvrement	235
4.2 Méthode multiplicative versus méthode additive	236
4.3 Méthode de préconditionnement de Schwarz additive avec partition par ensemble de points	237
Entraînez-vous	241
Solutions	243
Bibliographie	245
Index	251