

Présentation ADT MAPHYS@EXA

Équipe HIEPACS

Présentation devant la CDT
4 Juillet 2013



Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

L'équipe HiePACS

HiePACS

High-End Parallel Algorithms for Challenging Numerical Simulations

Équipe conjointe entre deux entités

- ★ INRIA [Bordeaux]
- ★ UNIVERSITÉ BORDEAUX 1 [Bordeaux]
- ★ IPB [Bordeaux]

Recherche sur le calcul haute performance

- ★ Nouvelles méthodes numériques [Mathématiques appliquées]
- ★ Calcul parallèle et algorithmes qui passent à l'échelle [Informatique]

Logiciel cible

Personnes concernées

Porteur de l'ADT

Luc Giraud

Responsables techniques

Emmanuel Agullo et Pierre Ramet

Suivi scientifique et technique

Abdou Guermouche et Jean Roman

Suivi SED

François Rue, Florent Prevost

Période de l'ADT

1^{er} Janvier 2013 au 31 Décembre 2014

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- **Le solveur MAPHYS**
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Motivations

But: Résoudre $Ax = b$, où A est une matrice creuse



Avantages et inconvénients

Directes

- ★ Robustes/précises pour des problèmes généraux
- ★ Implémentations basées sur les BLAS-3
- ★ Coûteuses en mémoire/CPU pour des problèmes $3D$ larges

Itératives

- ★ Efficacité/précision dépendantes du problème
- ★ Basées sur des noyaux de calculs spécifiques
- ★ Moins coûteuses en mémoire et possiblement plus rapide

Motivations

But: Résoudre $Ax = b$, où A est une matrice **creuse**



Avantages et inconvénients

Directes

- ★ Robustes/précises pour des problèmes généraux
- ★ Implémentations basées sur les BLAS-3
- ★ Coûteuses en mémoire/CPU pour des problèmes $3D$ larges

Itératives

- ★ Efficacité/précision dépendantes du problème
- ★ Basées sur des noyaux de calculs spécifiques
- ★ Moins coûteuses en mémoire et possiblement plus rapide

Motivations

But: Résoudre $Ax = b$, où A est une matrice creuse



Avantages et inconvénients

Directes

- ★ Robustes/précises pour des problèmes généraux
- ★ Implémentations basées sur les BLAS-3
- ★ Coûteuses en mémoire/CPU pour des problèmes 3D larges

Itératives

- ★ Efficacité/précision dépendantes du problème
- ★ Basées sur des noyaux de calculs spécifiques
- ★ Moins coûteuses en mémoire et possiblement plus rapide

Motivations

But: Résoudre $Ax = b$, où A est une matrice creuse



Avantages et inconvénients

Directes

- ★ Robustes/précises pour des problèmes généraux
- ★ Implémentations basées sur les BLAS-3
- ★ Coûteuses en mémoire/CPU pour des problèmes 3D larges

Itératives

- ★ Efficacité/précision dépendantes du problème
- ★ Basées sur des noyaux de calculs spécifiques
- ★ Moins coûteuses en mémoire et possiblement plus rapide

Motivations

But: Résoudre $Ax = b$, où A est une matrice creuse



Avantages et inconvénients

Directes

- ★ Robustes/précises pour des problèmes généraux
- ★ Implémentations basées sur les BLAS-3
- ★ Coûteuses en mémoire/CPU pour des problèmes 3D larges

Itératives

- ★ Efficacité/précision dépendantes du problème
- ★ Basées sur des noyaux de calculs spécifiques
- ★ Moins coûteuses en mémoire et possiblement plus rapide

Solveurs hybrides

Autres projets sur la même thématique

- ★ PDSLIn (LBNL, USA)
- ★ ShyLU (Sandia NL)
- ★ MaPHyS (Inria, HiePACS)
- ★ HIPS (Inria, Bacchus)

Solveurs hybrides

Autres projets sur la même thématique

- ★ PDSLIn (LBNL, USA)
- ★ ShyLU (Sandia NL)
- ★ MaPHyS (Inria, HiePACS)
- ★ HIPS (Inria, **Bacchus** → **HiePACS**)

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- **Objectifs de l'ADT**
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Objectifs de l'ADT

Objectifs de l'ADT

- ★ Etude pour une convergence HIPS/MAPHYS
- ★ Mutualisation des briques logicielles communes
- ★ Ajouts de nouvelles méthodes pour le calcul du préconditionneur
- ★ Intégration de nouvelles méthodes de partitionnement
- ★ Parallélisme MPI + Thread

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- **Vue d'ensemble de MAPHYS**

2. Travaux réalisés

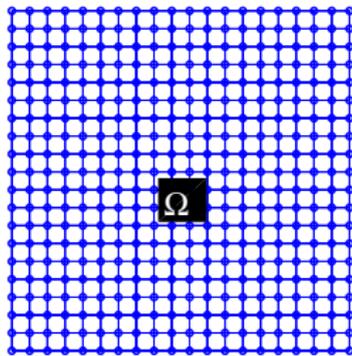
- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

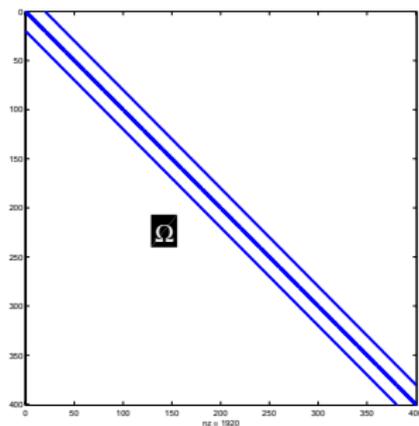
Décomposition de domaines

Graphe de la matrice



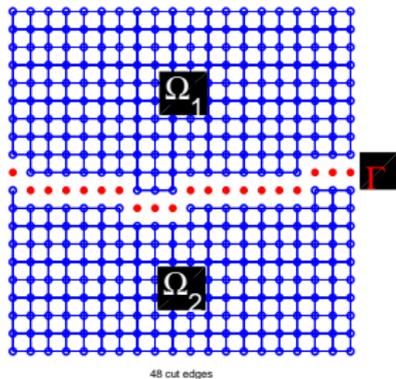
0 cut edges

Matrice

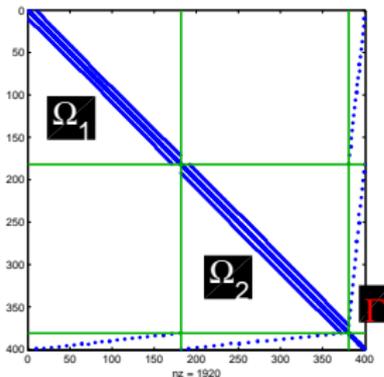


Décomposition de domaines

Graphe de la matrice

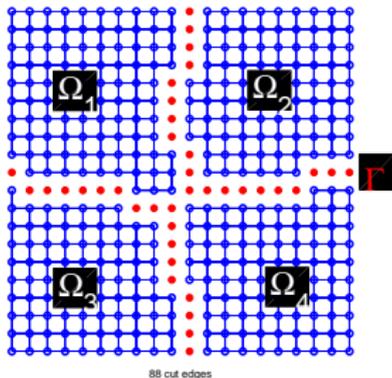


Matrice

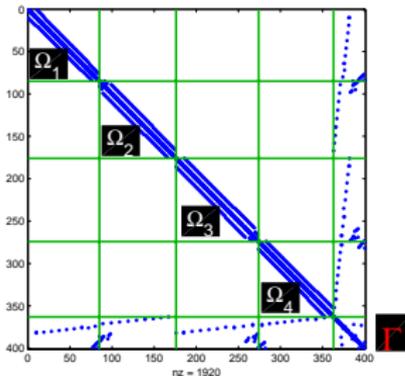


Décomposition de domaines

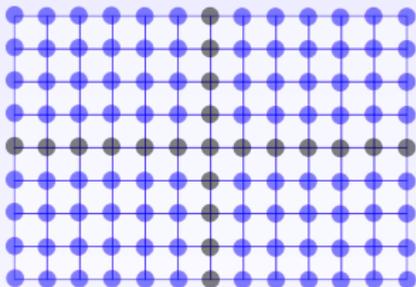
Graphe de la matrice



Matrice



MAPHYS vu depuis le processus 1



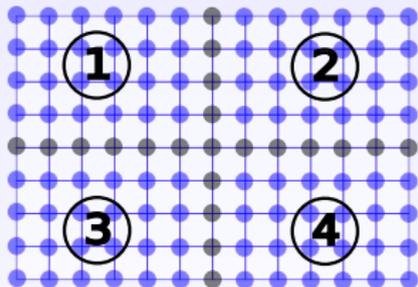
Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)

MAPHYS vu depuis le processus 1



Analyse

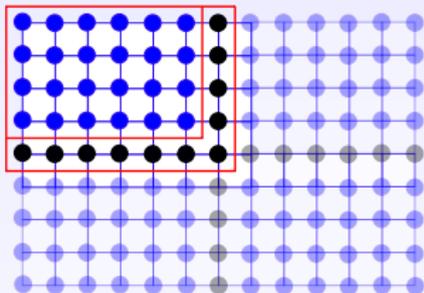
Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)

MAPHYS vu depuis le processus 1

1



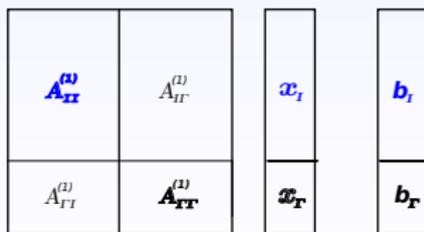
Analyse

Factorisation (+ Schur)

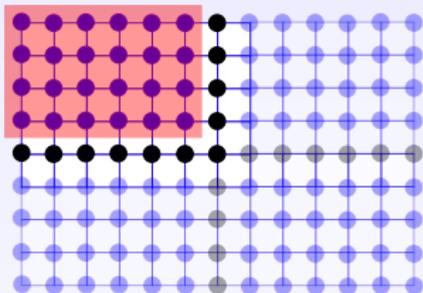
Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface + Intérieur)

1



MAPHYS vu depuis le processus 1

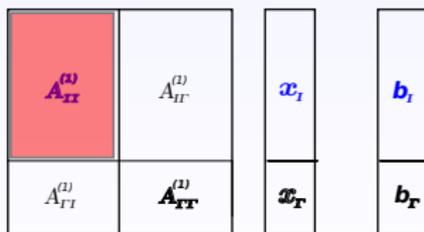


Analyse

Factorisation (+ Schur)

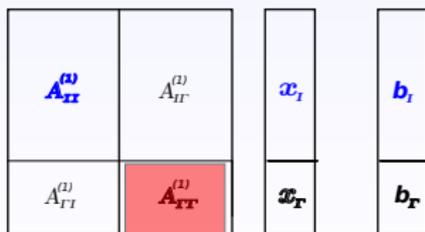
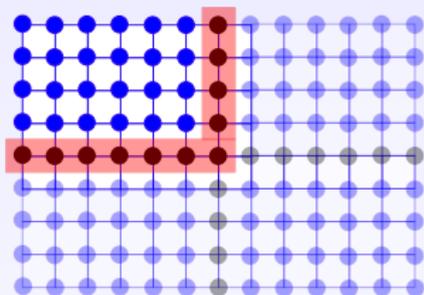
Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)



$$\mathcal{A}_{II}^{-1}$$

MAPHYS vu depuis le processus 1



Analyse

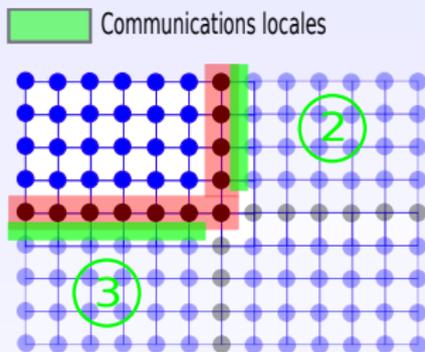
Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)

$$\mathcal{S}^{(1)} = \mathcal{A}_{\Gamma\Gamma}^{(1)} - \mathcal{A}_{\Gamma\Gamma}^{(1)} \mathcal{A}_{\Gamma\Gamma}^{(1)-1} \mathcal{A}_{\Gamma\Gamma}^{(1)}$$

MAPHYS vu depuis le processus 1

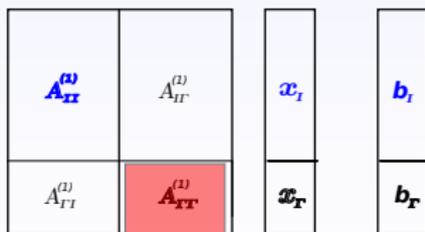


Analyse

Factorisation (+ Schur)

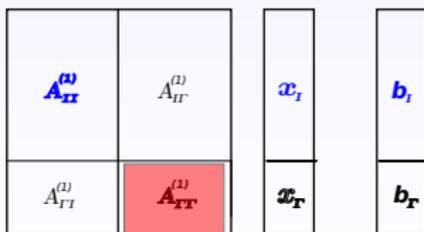
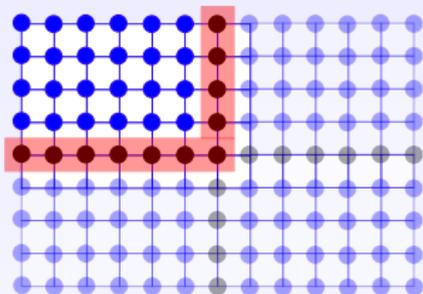
Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface + Intérieur)



$$S^{(1)} \implies \bar{S}^{(1)}$$

MAPHYS vu depuis le processus 1



$$\bar{\mathcal{S}}^{(1)} \implies \bar{\mathcal{S}}^{(1)-1}$$

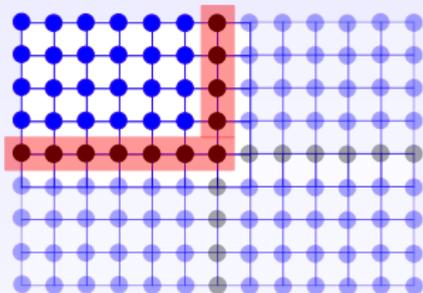
Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface + Intérieur)

MAPHYS vu depuis le processus 1

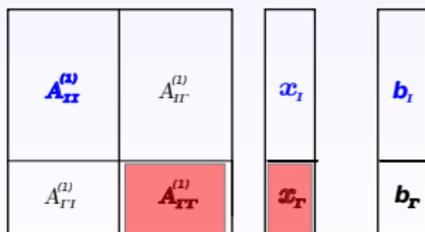


Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

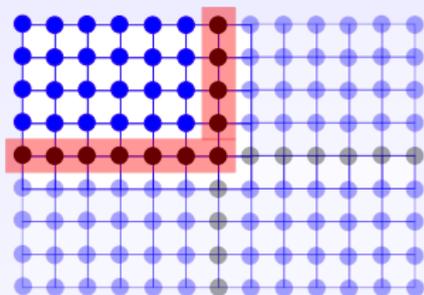
Résolution (**Interface** +
Intérieur)



$$x_{\Gamma}^{(1)} \leftarrow \mathcal{S}^{(1)} x_{\Gamma}^{(1)}$$

SPMV

MAPHYS vu depuis le processus 1

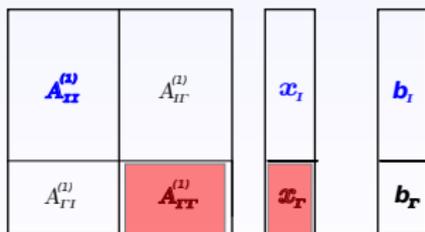


Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

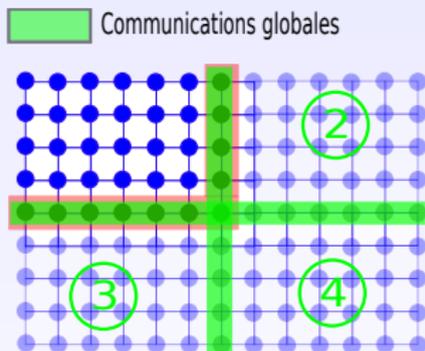
Résolution (**Interface** +
Intérieur)



$$x_{\Gamma}^{(1)} \leftarrow \bar{\mathcal{S}}^{(1)-1} x_{\Gamma}^{(1)}$$

Applcation du préconditionneur

MAPHYS vu depuis le processus 1

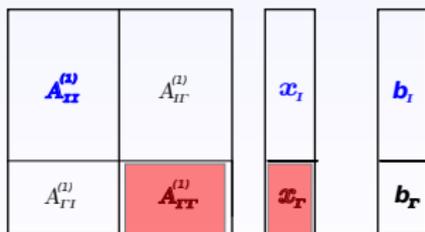


Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

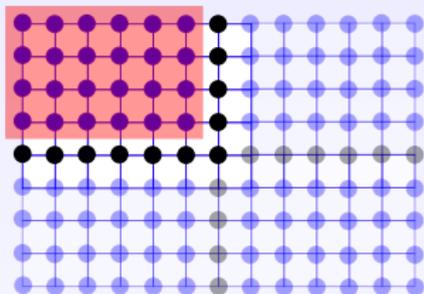
Résolution (**Interface** +
Intérieur)



$$blas_1(x_{\Gamma})$$

$${}^{\top}xx$$

MAPHYS vu depuis le processus 1

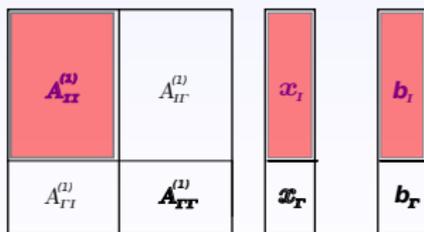


Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

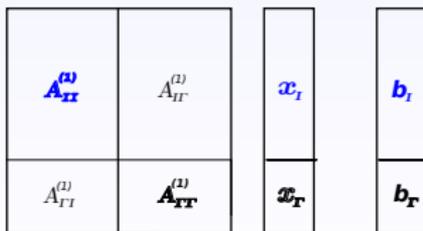
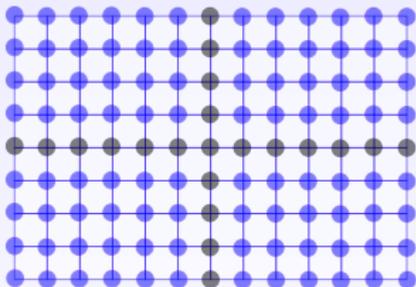
Résolution (Interface +
Intérieur)



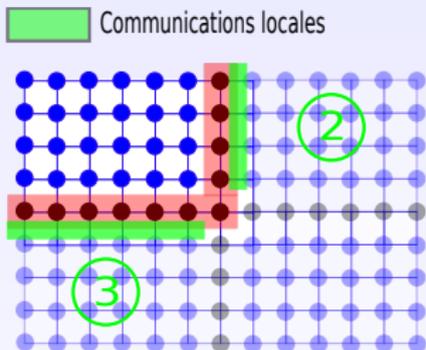
$$x_I = A_{II}^{-1} b'_I$$

MAPHYS vu depuis le processus 1

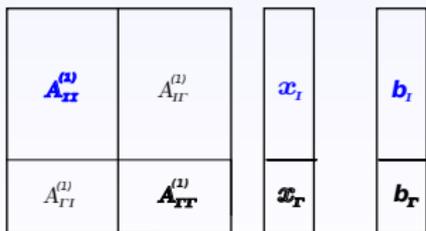
Analyse



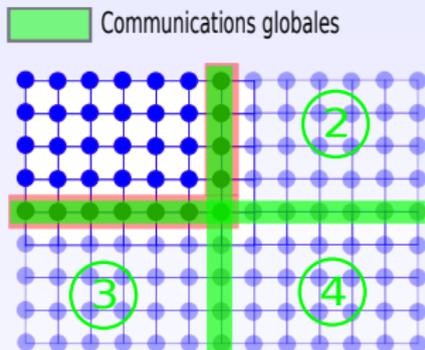
MAPHYS vu depuis le processus 1



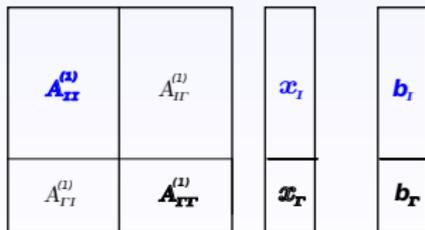
Analyse



MAPHYS vu depuis le processus 1



Analyse



Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Compréhension du logiciel et documentation

- ★ Compréhension des étapes d'analyse de MAPHYS et HIPS

- ★ Réalisation d'une documentation sur l'analyse de MAPHYS
 - Référence pour documentation développeur

- ★ Restructuration de cette étape d'analyse
 - ▶ Convention de nommage
 - ▶ Appel aux nouvelles versions de METIS
 - ▶ Ajout de commentaires

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- **Mutualisation de briques logicielles**
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Fusionner les étapes d'analyses

MaPHyS

- ★ Analyse
- ★ Factorisation
- ★ Calcul du préconditionneur
- ★ Résolution itérative

HIPS

- ★ Analyse
- ★ Factorisation
- ★ Calcul du préconditionneur
- ★ Résolution itérative

Étude exploratoire

Analyse des différentes structures

Deux langages différents

Solveur hiérarchique

Fusionner les étapes d'analyses

MaPHyS - HIPS

Analyse

MaPHyS

- ★ Factorisation
- ★ Calcul du préconditionneur
- ★ Résolution itérative

HIPS

- ★ Factorisation
- ★ Calcul du préconditionneur
- ★ Résolution itérative

Étude exploratoire

Analyse des différentes structures

Deux langages différents

Solveur hiérarchique

Tests de non-régression

Communauté HPC/Solveurs

- ★ Sortie correcte ($\frac{\|Ax-b\|}{\|b\|} < \epsilon$)
- ★ Comportement numérique souhaité ($\#iter$)
- ★ Performance attendue (temps)

Tests de non-régression

Communauté HPC/Solveurs

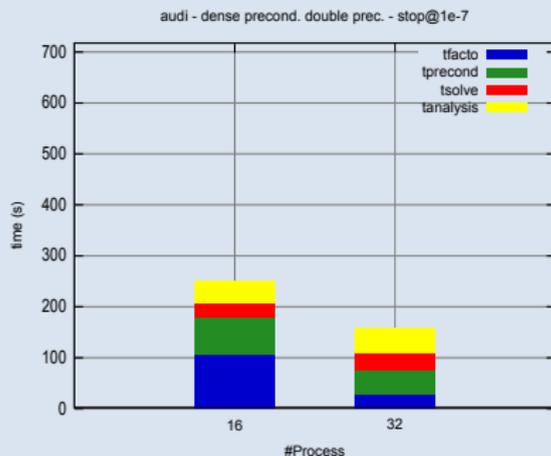
- ★ Sortie correcte ($\frac{\|Ax-b\|}{\|b\|} < \epsilon$)
- ★ Comportement numérique souhaité ($\#iter$)
- ★ Performance attendue (temps)

Contrainte

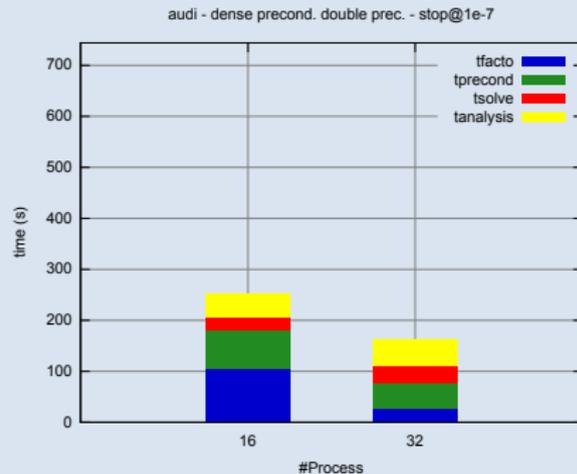
Sur des cas dimensionnant (1 M d'inconnues)

Tests de non-régression

Performance avant modifications

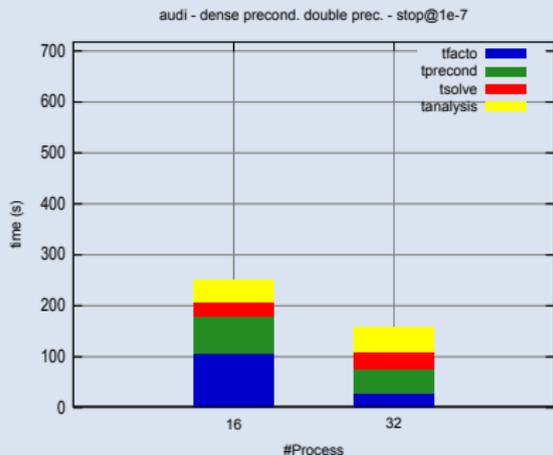


Performance après modifications

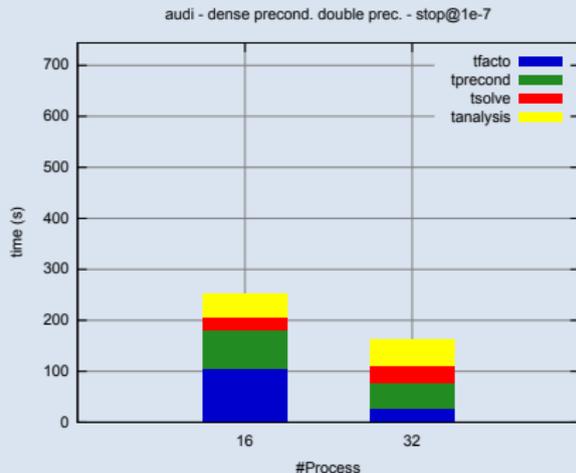


Tests de non-régression

Performance avant modifications



Performance après modifications



Résultat

Faible overhead < 3%

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

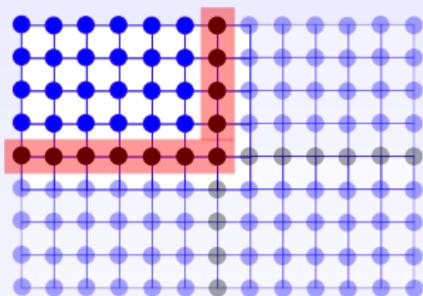
2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- **Préconditionneur global**

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Préconditionneur global



Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du preconditionneur

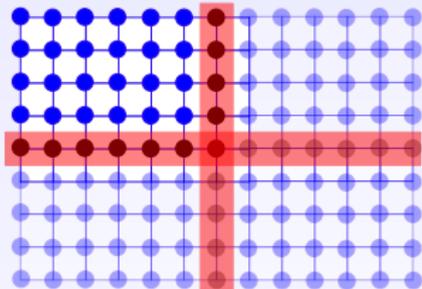
Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

$$\mathcal{M} = \sum(\bar{\mathcal{S}}^{(i)-1}) \rightarrow \mathcal{M} = (\sum \tilde{\mathcal{S}}^{(i)})^{-1}$$

Proposer une alternative numérique plus robuste mais potentiellement plus coûteuse (Méthode PDSLIN)

Préconditionneur global



Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)

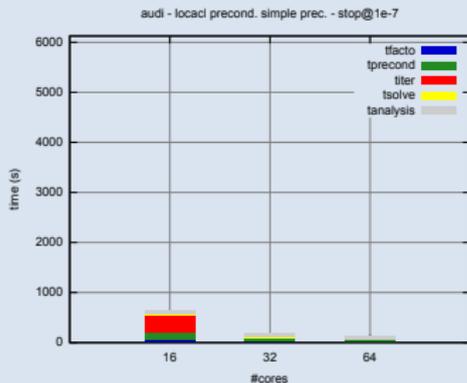
Objectif :

$$\mathcal{M} = \sum(\bar{\mathcal{S}}^{(i)-1}) \rightarrow \mathcal{M} = (\sum \tilde{\mathcal{S}}^{(i)})^{-1}$$

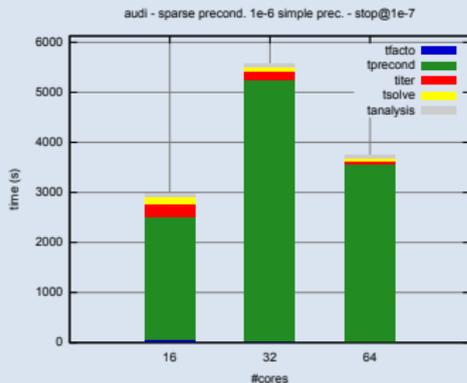
Proposer une alternative numérique plus robuste mais potentiellement plus coûteuse (Méthode PDSLIN)

Préconditionneur global

Ancien preconditionneur



Nouveau preconditionneur



Nombre d'itérations

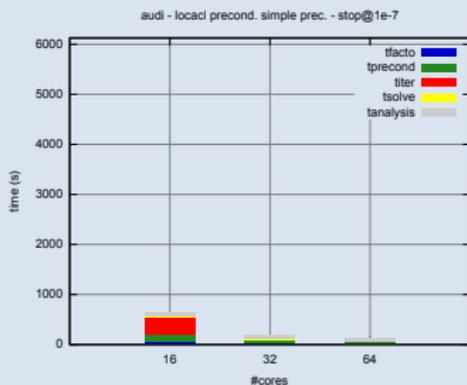
Itérations	90	136	217
nb procs	16	32	64

Nombre d'itérations

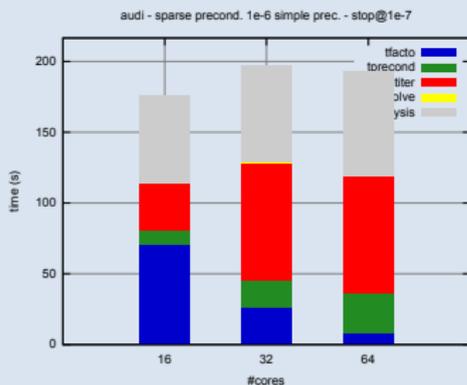
Itérations	9	9	9
nb procs	16	32	64

Préconditionneur global

Ancien preconditionneur



Nouveau preconditionneur



Nombre d'itérations

Itérations	90	136	217
nb procs	16	32	64

Nombre d'itérations

Itérations	273	358	466
nb procs	16	32	64

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- **Release et mise à jour documentation**
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Release et mise à jour documentation

But

Obtenir une version distribuable de MAPHYS

Objectifs

Mettre à jour la documentation suite au changement logiciel effectué et terminer les parties non finies.

Faire un packaging de la version de MAPHYS afin qu'elle puisse être diffusée plus facilement.

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- **Etude sur les goulets mémoires**
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Etude sur les goulets mémoires

But

Analyse des problèmes lié à l'utilisation de la mémoire au sein de MAPHYS, plus particulièrement dans le calcul du complément de Schur.

Objectifs

Identifier les différents goulets d'étranglement mémoire pour permettre de résoudre des problèmes plus importants dans le futur.

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- **Précision mixte**
- Analyse parallèle
- Travaux potentiels

Précision mixte

64bit → 32bit/64bit

Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

Possibilités d'utiliser une précision mixte

Précision mixte

64bit \rightarrow 32bit/64bit

Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

Possibilités d'utiliser une précision mixte

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- **Analyse parallèle**
- Travaux potentiels

Analyse totalement parallèle



Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

Réduire le goulet mémoire introduit par l'analyse

Analyse totalement parallèle



Analyse



Factorisation (+ Schur)



Calcul du préconditionneur



Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

Réduire le goulet mémoire introduit par l'analyse

Sommaire

1. Contexte de l'ADT

- L'équipe HIEPACS
- Le solveur MAPHYS
- Objectifs de l'ADT
- Vue d'ensemble de MAPHYS

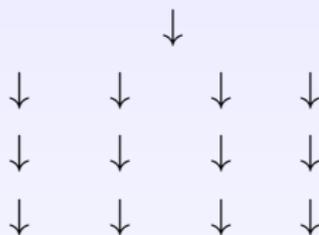
2. Travaux réalisés

- Compréhension du logiciel et documentation
- Mutualisation de briques logicielles
- Préconditionneur global

3. Travail restant à faire

- Release et mise à jour documentation
- Etude sur les goulets mémoires
- Précision mixte
- Analyse parallèle
- **Travaux potentiels**

Double niveau de parallélisme (MPI + Threads)



Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

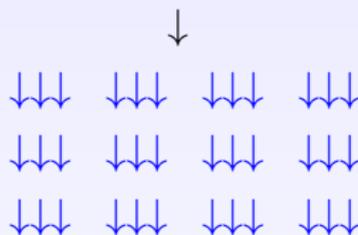
Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

Contrôler l'utilisation mémoire
Utilisation machine multicoeurs

Cadre de la thèse Stojce Nakov
(Thèse DIP/Total)

Double niveau de parallélisme (MPI + Threads)



Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

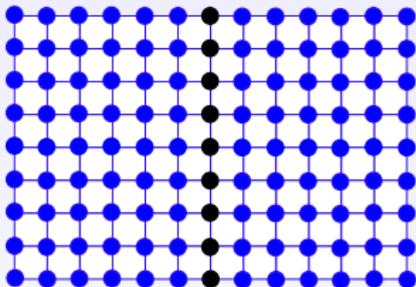
Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

Contrôler l'utilisation mémoire
Utilisation machine multicoeurs

Cadre de la thèse Stojce Nakov
(Thèse DIP/Total)

Nouvelles techniques de partitionnement



Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

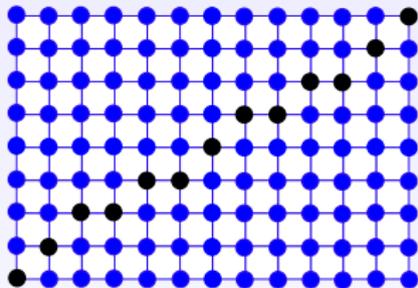
Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

Assurer une interface plus petite
afin d'améliorer les performances

Cadre de la thèse d'Astrid
Casadéi

Nouvelles techniques de partitionnement



Analyse

Factorisation (+ Schur)

Calcul du préconditionneur

Résolution (Interface +
Intérieur)

Objectif :

Assurer une interface plus petite
afin d'améliorer les performances

Cadre de la thèse d'Astrid
Casadéi

Conclusion

Court-terme

Réalisation d'une version distribuable et analyse des goulets mémoires

Accompagnement

- ★ C2S@exa
- ★ EDF
- ★ École sur les solveurs, Maison de la simulation/PATC (Octobre 2013, Mars 2014)