

Scalabilité et robustesse numérique des solveurs hybrides pour machines parallèles exa-scale

Du fait des quantités considérables de données et de calculs mises en jeu, la résolution des simulations numériques en vraie grandeur imaginées aujourd'hui par les chercheurs n'est réalisable qu'en ayant recours au calcul parallèle haute performance au sens large. Dans la plupart des simulations numériques utilisant un schéma implicite, l'étape la plus consommatrice en ressources (CPU et mémoire) est la résolution de systèmes linéaires creux de très grandes tailles. En plus de la difficulté numérique inhérente à certains modèles physiques employés, l'augmentation de la taille des systèmes linéaires conduit même les méthodes réputées scalables, telles que les méthodes itératives classiques, à ne plus converger de manière efficace.

Le projet Bacchus de l'INRIA a déjà développé depuis de nombreuses années des solveurs linéaires creux parallèles, utilisant tant des méthodes directes qu'itératives. Ces solveurs, d'une grande robustesse, ont déjà permis de traiter des problèmes de très grandes tailles.

Le solveur PaStiX intègre une gestion fine et efficace des multiples niveaux de parallélisme exploitables dans un solveur linéaire creux. En effet, les nouvelles architectures de calcul intensif intègrent de plus en plus de microprocesseurs qui eux-mêmes intègrent un nombre croissant de cœurs de calcul. Cette multiplication des unités de calcul dans les architectures a fait apparaître des topologies fortement hiérarchiques (NUMA). Nous avons donc travaillé sur les problèmes d'ordonnancement dynamique adaptés à ces architectures. Nous nous intéresserons également à l'adaptation dynamique du grain de calcul pour exploiter au mieux les architectures multicœurs et la mémoire partagée. L'écriture générique du schéma de résolution, sous la forme d'un graphe de tâches, permet de disposer d'une plateforme efficace pour concevoir et développer des ordonnancements pour des architectures encore plus hétérogènes, comme celles qui mixent CPUs et GPGPUs.

Dans le solveur HIPS, nous nous sommes intéressés à des méthodes hybrides directes/itératives, qui utilisent une approche de type « complément de Schur » basée sur une décomposition de domaines : l'intérieur des sous-domaines est éliminé de manière directe pour se ramener à un problème sur l'interface. Ce problème est résolu grâce à une méthode itérative préconditionnée par une factorisation incomplète. Un réordonnancement adapté de l'interface permet la construction d'un préconditionneur global du complément de Schur, compatible avec la décomposition de domaine. Cette méthode procure un fort degré de parallélisme naturel car elle est basée sur une décomposition de domaines tout en procurant une bonne robustesse par rapport à des approches plus classiques telles que les méthodes « Schwarz additive » et les factorisations ILU classiques.

Cependant, l'arrivée des architectures exa-scale, de type Blue Waters (celle-ci comprenant 150.000 cœurs) nous incite à anticiper de nouveaux challenges. Par exemple le partitionneur de graphes et de maillages Scotch a déjà permis de traiter des cas à 2 milliards d'inconnues. L'étape limitante pour atteindre ce nombre d'inconnues dans les simulations numériques est maintenant clairement la résolution des systèmes linéaires. L'objet du travail proposé est la conception et la réalisation d'un solveur linéaire creux capable d'exploiter les nouvelles architectures de ces machines exa-scale. Il s'agira entre autres de proposer des solutions aux problèmes suivants :

- pré-traitement parallèle scalable (étapes de renumérotation et de factorisation symbolique) ;
- couplage algorithmique efficace des méthodes directe et itérative, permettant une gestion optimale de tous les niveaux de parallélisme ;
- adaptation de l'ordonancement des tâches de calcul pour tirer parti d'un environnement d'exécution exploitant les architectures mixte CPUs / GPGPUs.

Mots clés

Algèbre linéaire creuse, calcul haute performance, méthode hybride directe-itérative

Références

[1]

M. Faverge and P. Ramet.
Dynamic Scheduling for sparse direct Solver on NUMA architectures.
In *Proceedings of PARA'2008*, Trondheim, Norway, May 2008.

[2]

P. Hénon, P. Ramet, and J. Roman.
PaStiX: A High-Performance Parallel Direct Solver for Sparse Symmetric Definite Systems.
Parallel Computing, 28(2):301-321, January 2002.

[3]

J. Gaidamour and P. Hénon.
Algorithms To Build Robust Hybrid Direct/Iterative Sparse Linear Solvers.
In *International Conference On Preconditioning Techniques For Scientific And Industrial Applications*, Hong-Kong, August 2009.

[4]

P. Hénon and Y. Saad.
A Parallel Multilevel ILU Factorization based on a Hierarchical Graph Decomposition.
SIAM Journal of Scientific Computing, 2006.