

TITRE: Algorithmes numériques robustes pour la simulation exascale  
EQUIPE/THEME: HiePACS  
DIRECTEURS: Emmanuel Agullo et Luc Giraud en collaboration avec Abdou Guermouche  
et Jean Roman  
COURRIELS: Emmanuel.Agullo@inria.fr ; Luc.Giraud@inria.fr ;  
Abdou.Guermouche@labri.fr ; Jean.Roman@inria.fr  
MOTS-CLES: Calcul Haute-Performance ; Simulation à grande échelle ;  
Résilience ; Parallélisme many-core  
DIRECTEURS HABILITES: Luc Giraud ; Jean Roman

DESCRIPTION du SUJET:

-- Contexte scientifique --

L'avènement des machines exascale permettra de résoudre de nouveaux défis scientifiques. Ces machines seront probablement composées de plusieurs millions de ressources de calcul et seront donc soumises à une haute fréquence de pannes matérielles. Ainsi, les applications exascale devront-elles être résilientes. Cette thèse sera centrée sur la résolution de systèmes linéaires et non linéaires de très grande taille. Ce noyau de calcul intensif est critique en termes de performance et de mémoire pour de nombreuses applications scientifiques et simulations numériques industrielles à grande échelle.

-- Travail proposé --

Le but de ce travail est de développer de nouvelles méthodes numériques et des algorithmes robustes pour la résolution de systèmes linéaires creux de grande taille, convergeant en présence de pannes multiples et fréquentes. Le candidat étudiera d'abord l'état de l'art des algorithmes numériques robustes. Lorsqu'une panne survient, deux approches peuvent principalement être employées: régénérer la perte de données grâce à une interpolation locale ou bien recouvrir localement la perte grâce à des techniques dites ABFT (Algorithm-Based Fault Tolerant). Les approches basées sur l'interpolation régénèrent des données similaires (mais généralement pas égales) aux données perdues. L'approximation numérique peut conduire à un retard de convergence. À l'inverse, les algorithmes ABFT permettent de re-générer exactement les mêmes données que celles qui ont été perdus. La re-génération est alors souvent plus coûteuse mais la pénalité numérique allégée voire annihilée. Plusieurs méthodes basées sur ces deux types d'approches seront étudiées. Les schémas d'itération de point fixe seront considérés en premier afin de développer des solveurs linéaires et non linéaires efficaces basés sur l'interpolation de données. Ce travail sera étendu aux algorithmes où ces schémas de point fixe sont utilisés comme pré-conditionneurs pour les solveurs de Krylov, qui apparaissent comme des candidats prometteurs dans ce contexte.

Les techniques ABFT ont souvent été appliquées à des méthodes se basant sur des structures de données régulières et utilisant des schémas d'accès uniforme aux données tels que les solvers d'algèbre linéaire dense. Les problèmes structurés tels que ceux découlant de la discrétisation d'EDP ou de grilles cartésiennes, qui ont des propriétés similaires, représentent donc des candidats de premier choix pour l'extension des techniques ABFT aux méthodes creuses utilisant des solvers hybrides itératif-direct.

Le compromis entre les gains numériques et le surcoût calculatoire sera examiné et évalué lorsque le nombre de processeurs et le taux de panne varie. Le défi que représente la généralisation aux problèmes localement structurés et complètement non structurés sera également examiné.

La pertinence des nouveaux algorithmes résultant de ce travail, leur performance, ainsi que leur précision seront étudiés sur des modèles académiques mais également sur des applications industrielles à grande échelle. Les directions de recherche les plus prometteuses conduiront à l'implémentation de prototypes logiciels. Tous les nouveaux schémas numériques seront confrontés à différents taux de pannes grâce à l'utilisation de bibliothèques d'injection de fautes développées par nos partenaires académiques dans le cadre de l'ANR RESCUE. Des expérimentations à l'échelle seront également conduites sur des machines telles que celle réalisée dans le contexte du projet Blue Waters dont l'INRIA est partenaire et qui sera probablement l'une des machines les plus puissantes au monde en 2011.

-- Supervision --

Cette thèse sera effectuée dans l'équipe INRIA HiePACS à Bordeaux. L'équipe fait partie du laboratoire commun INRIA-CERFACS dont l'objectif est de répondre aux défis de la simulation numérique haute-performance. Le candidat sera encadré par Emmanuel Agullo et Luc Giraud.

-- Collaboration nationales et internationales --

Ce travail s'effectuera en collaboration avec les partenaires de l'ANR Rescue. En particulier, la collaboration avec l'équipe Roma (LIP / ÉNS Lyon) permettra de bénéficier de bibliothèques d'injection de fautes. Les algorithmes basés sur la régénération de données grâce à une interpolation locale seront étudiés en collaboration avec le LBNL (Lawrence Berkeley National Laboratory) dans le cadre d'un projet ``France-Berkeley Fund''. Les travaux basés sur l'ABFT seront effectués en collaboration avec des équipes de l'Université du Tennessee et de l'Université du Colorado avec qui HiePACS est associé. Une collaboration étroite avec nos partenaires industriels, au premier rang desquels BRGM, CEA-CESTA, EDF et Total, permettront

de valider nos méthodes sur des applications à grande échelle.