

Etude de la qualité numérique de codes de calcul industriels

Christophe DENIS, EDF R&D SINETICS

Jean-Luc LAMOTTE, UPMC-LIP6

Philippe LANGLOIS, DALI (UPVD) - LIRMM (CNRS - UM2)

Sethy MONTAN, EDF R&D SINETICS

Mots-clés : qualité numérique, HPC, analyse de performance, code industriel

Le résultat d'un code de simulation numérique subit plusieurs approximations effectuées lors de la modélisation mathématique du problème physique, de la discrétisation du modèle mathématique et de la résolution numérique en arithmétique flottante. Les deux premières approximations sont bien connues et maîtrisées par l'ingénieur numéricien. Malheureusement, on ne peut pas effectuer de calcul numérique flottant sans risque de produire des résultats erronés. La qualité numérique d'un code (c'est-à-dire sa capacité à produire des résultats précis malgré les erreurs d'arrondi) est primordiale pour des codes industriels tels que ceux développés à EDF R&D. Ceci est encore plus important sur des architectures massivement parallèles pour lesquelles des milliards d'opérations arithmétiques flottantes sont exécutées chaque seconde. Les quatre exposés suivants seront présentés lors de ce mini-symposia :

- **Etude de la qualité numérique de codes de calcul industriels : problématique, premiers résultats et perspectives** présenté par Christophe Denis.

Christophe Denis présentera la problématique de l'évaluation de la qualité numérique d'un code industriel. Certaines simulations telles que celles menées en hydrodynamique des écoulements à surfaces libres nécessitent de très larges domaines et un nombre très important de pas de temps, ce qui impose une parallélisation massive de ces codes. Il est donc important de connaître l'effet de la propagation des erreurs d'arrondi sur la qualité des résultats. Il sera présenté des résultats en cours visant à coupler calcul haute performance et validation numérique, l'outil utilisé étant la bibliothèque CADNA.

- **L'approche probabiliste pour la validation des logiciels numériques** présenté par Jean-Luc Lamotte.

Jean-Luc Lamotte présentera la méthode CESTAC qui permet d'estimer la propagation des arrondis de calcul dans un programme. La notion de zéro informatique et de nouvelles relations d'égalités et d'ordre seront introduites. La méthode CESTAC a été implémentée dans le logiciel CADNA. Quelques programmes numériques seront étudiés afin de montrer ses apports dans l'estimation de la propagation des erreurs d'arrondis mais aussi en terme de méthodologies de programmation.

- **Performance des algorithmiques précis** par Philippe Langlois.

Des nouveaux algorithmes de sommation précise et validée en arithmétique flottante ont été introduits. Philippe Langlois exposera notamment les développements effectués autour de l'outil PerPI pour obtenir une analyse de performance validée. Il permet une analyse reproductible du potentiel de performance d'un algorithme numérique.

- **Implémentation efficace de la bibliothèque CADNA dans les bibliothèques de calcul et de communication scientifiques** par Sethy Montan.

Les codes de calcul industriels utilisent le plus souvent des bibliothèques de communication (par exemple MPI ou BLACS) et de calcul (BLAS, LAPACK). Afin d'étudier la propagation des erreurs d'arrondi, il a été décidé d'implémenter efficacement CADNA dans ces bibliothèques. Ce travail est mené par Sethy Montan dans le cadre d'une thèse co-financée par EDF et l'UPMC. La recherche d'efficacité nécessite une nouvelle conception des algorithmes numériques définies dans ces bibliothèques en utilisant par exemple à bon escient les registres SSE des processeurs. Sethy Montan présentera ses résultats de début de thèse notamment ceux concernant l'implémentation efficace de CADNA dans MPI.

Références

- [1] Bernard Goossens, Philippe Langlois, and David Parello. Processor simulation: a new way for the performance analysis of numerical algorithms. In B. M. Brown, E. Kaltofen, S. Oishi, and S. M. Rump, editors, *Computer-assisted Proofs – tools, methods and applications*, Dagstuhl Seminar 9471, November 2009.
- [2] Philippe Langlois. Compensated algorithms in floating point arithmetic. In *12th GAMM - IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics, Duisburg, Germany*, September 2006. (Invited plenary speaker).
- [3] Jean-Luc Lamotte, Jean-Marie Chesneaux, and Fabienne Jézéquel. CADNA.C: A version of CADNA for use with C or C++ program. In *Computer Physics Communications*, volume 181(11), pages 1925–1926, 2010.
- [4] Fabienne Jézéquel, Jean-Marie Chesneaux, and Jean-Luc Lamotte. A new version of the CADNA library for estimating round-off error propagation in Fortran programs. In *Computer Physics Communications*, volume 181(11), pages 1927–1928, 2010.
- [5] Christophe Denis, Charles Moulinec, Nathalie Durand, Robert W. Barber, David R. Emerson, Xiaojun J. Gu, Emile Razafindrakoto, Rezza. Issa and Jean-Michel Hervouet. Simulate Accurately and Efficiently Large Scale Hydrodynamic Events. In *34th World Congress of the International Association for Hydro-Environment Engineering and Research*, Australia, 2011.
- [6] Sethy Montan. Développement de CADNA//. Une bibliothèque d'étude de la propagation des erreurs d'arrondi dans un code parallèle sur machines à mémoire distribuée. Rapport de projet de fin d'études, Polytech'Paris-UPMC, 2010.

Christophe DENIS, EDF R&D - Département SINETICS - 1, avenue du général de Gaulle - 92141 Clamart Cedex - France

`christophe.denis@edf.fr`

Jean-Luc LAMOTTE, Laboratoire CALSCI/LIP6 - Université P. et M. Curie - 4 place Jussieu - 75252 Paris cedex 05 - France

`jean-luc.lamotte@lip6.fr`

Philippe LANGLOIS, Equipe-Projet DALI - Université de Perpignan Via Domitia

Laboratoire LIRMM - UMR 5506 : CNRS - Université Montpellier 2

`langlois@univ-perp.fr`

Sethy MONTAN, EDF R&D - Département SINETICS - 1, avenue du général de Gaulle - 92141 Clamart Cedex - France

`sethy.montan@edf.fr`