

Design d'un solveur aux valeurs propres à base de tâches sur machines distribuées hétérogènes

Inria HiePACS

February 3, 2017

1 Encadrants

Emmanuel Agullo (Inria HiePACS - Emmanuel.Agullo@inria.fr) & Olivier Coulaud (Inria HiePACS - Olivier.Coulaud@inria.fr)

2 Scientific priorities (strategic plan)

Computing the future: models, software and digital systems.

3 Contexte scientifique

De nombreuses applications (chimie quantique, bio-diversité, ...) nécessitent de calculer un nombre de paires valeurs/vecteurs propres (< 300) pour des matrices de très grandes tailles provenant soit d'une discrétisation très fine du problème soit parce que le problème s'écrit dans des espaces de très grandes dimensions.

L'utilisation de méthodes itératives efficaces pour calculer ces valeurs est cruciale pour la réalisation de simulations numériques à grande échelle. Celles-ci ne nécessitent que des produits matrice-vecteur qui permettent de projeter le problème dans un espace de plus petite dimension (quelques dizaines de milliers) dans lequel des approximations de paires propres peuvent être plus facilement calculées. Le cœur de la méthode nécessite de calculer les valeurs propres de la matrice projetée et l'orthogonalisation d'une base de l'espace de recherche.

Pour le problème de plus petite dimension, on utilisera à nouveau une technique de projection pour réduire la dimension du problème afin de se ramener à des matrices pour lesquelles des noyaux d'algèbre linéaire dense

efficaces peuvent être utilisés pour calculer tout ou partie du spectre de ces matrices.

4 Objectif de la thèse

L'objectif de cette thèse est de développer un solveur aux valeurs propres au dessus d'un moteur d'exécution pour des machines hétérogènes à mémoire distribuée. Les briques de base utiliseront le solveur Chameleon [1] pour toutes les opérations d'algèbre linéaire dense, tel que le calcul de paires propres de la matrice projetée la plus interne et les étapes d'orthogonalisation des bases emboîtées. Ces nouvelles briques parallèles constitueront les noyaux de calcul élémentaires pour un solveur aux valeurs propres récemment développé dans l'équipe HiePACS basé sur l'algorithme proposé par [2] avec pour objectif de mettre au point un solveur parallèle haute performance qui passe à l'échelle. Le moteur d'exécution StarPU, déjà au coeur de Chameleon servira de support à l'exécution de l'ensemble de l'application résultante.

La méthode sera validée dans une application [2] de chimie vibrationnelle pour déterminer les fréquences de vibration de molécules à 6 et 7 atomes. Sa scalabilité sera évaluée sur des machines de très grande taille sur les machines du méso-centre dans un premier temps, puis nationale et Européenne (telle que PRACE).

5 Pré-requis

Connaissances ou curiosité en algèbre linéaire, connaissances en parallélisme, connaissances en C/C++

6 Supervision

Cette thèse sera effectuée dans l'équipe-projet INRIA HiePACS à Bordeaux. Le candidat sera encadré par Emmanuel Agullo et Olivier Coulaud (équipe-projet HiePACS).

7 Références

[1] Achieving High Performance on Supercomputers with a Sequential Task-based Programming Model. Emmanuel Agullo, Olivier Aumage, Math-

ieu Faverge, Nathalie Furmento, Florent Pruvost, Marc Sergent, Samuel Thibault, Inria RR-8927.

[2] Adaptive vibrational configuration interaction (A-VCI): a posteriori error estimation to efficiently compute anharmonic I R spectra. Romain Garnier, Marc Odunlami, Vincent Le Bris, Didier Bégué, Isabelle Baraille, d Olivier Coulaud and Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2016, 144 (20), preprint.