

Contribution à l'algorithmique parallèle Des bibliothèques de calcul au metacomputing

Frédéric Desprez
Projet CNRS - ENS Lyon - INRIA ReMaP
LIP ENS Lyon
INRIA Rhône-Alpes

Plan de l'exposé



- CV
- Introduction
- Recouvrements et pipelines
 - Projets LOCCS/OPIUM
- Parallélisation de programmes Fortran
 - Projet TransTool
- Problem Solving Environments
 - Projets Scilab_{//}, DIET
- Conclusions et perspectives

Curriculum Vitae



[1994] **Postdoctorat**

à l'Université du Tennessee à l'ICL

[1994-1995] Maître de Conférence à l'ENSEIRB

Recherche dans l'équipe ALiEnor

[1995-] Chargé de Recherche à l'INRIA, LIP ENS Lyon

projet CNRS-INRIA-ENS Lyon ReMaP

[Sep.2000-] Responsable du projet ReMaP



- Projets européens et internationaux EuroTOPS (93-98), TTN ProHPC (97-99) et Paralin (96-99)
- Projets nationaux ARC OURAGAN (98-00) et RNRT VTHD (99-01)
- Enseignement à l'ENS, à l'ENSEIRB, à SUPELEC,
- Comité d'édition de Parallel and Distributed Computing Practice
- Organisation des JIP'94-95, MSA'2000-01 dans ICPP

Introduction

- Calcul numérique utilisé dans de nombreuses applications
- Simulations toujours plus précises ⇒ besoins importants en puissance de calcul et en capacité de stockage

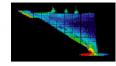
Evolution rapide des architectures

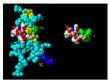
- Processeurs superscalaires (du commerce) + augmentation des fréquences d'horloge, mémoires de plus en plus hiérarchiques
- Machines parallèles (vectorielles, SM, DM, SIMD, MIMD, réseaux de stations, SMP, grappes de SMP, plates-formes de metacomputing) ⇒ de + en + d'hétérogénéité

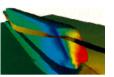
Evolution plus lente du logiciel

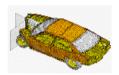
- Pas de langage vraiment adapté au parallélisme
- Pas de standard
- La plupart des applications programmées en C/F77 + MPI
- Problèmes de parallélisation automatique, debug, profiling, etc

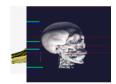


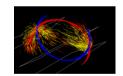


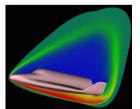












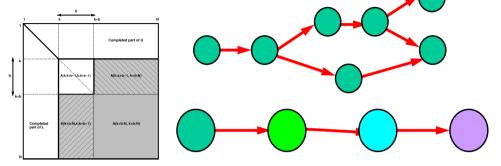


Parallélisation d'applications numériques



Plusieurs sources de parallélisme

- Parallélisme de données
- Parallélisme de tâches
- Parallélisme de flux



Plusieurs modèles de programmation en mémoire distribuée

- Passage de messages
- Parallélisation automatique
- Langages data-parallèles
- Bibliothèques parallèles
- Java ? OpenMP + threads?
- Mélanges de langages, de bibliothèques et de supports d'exécution à hautes performances

Bibliothèques numériques



Avantages

Le parallélisme est masqué à l'intérieur de la bibliothèque

Utilisation de noyaux numériques optimisés sur les processeurs

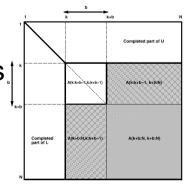
(BLAS de niveau 3, ATLAS, PhiPAC)

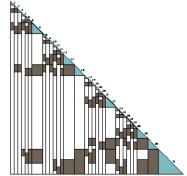
- Eviter le choix de l'algorithme de résolution
- Maintenance et mise à jour

Inconvénients

- Choix de la distribution laissé à l'utilisateur
- Insertion de redistributions entre les étapes de calcul
- Pas de choix de l'algorithme de résolution
- Transformation des structures de données;
 des applications
- Encore limitées (creux)

Problem type Ax = b	SDrv	EDrv	Factor	Solve	Inv	Cond Est	Iter Refir
Triangular				Х	X	X	X
SPD	X	X	X	X	X	X	X
SPD Banded	X		X	X			
SPD Tridiagonal	X		X	X			
General	X	X	X	Х	X	X	X
General Banded	X		X	X			
General Tridiagonal	X		X	X			
Least squares	X		X	X			
GQR			X				
GRQ			X				
$Ax = \lambda x$ or $Ax = \lambda Bx$	SDrv	Edrv	Reduct	Solution			
Symmetric (2 types)	X	X	X	X			
General (2 types)			X	X			
Generalized BSPD		X	X	X			
SVD			X	X			





Problem Solving Environments



Besoin des utilisateurs

- Applications simples à exécuter (parallélisme obligatoirement caché)
 dans un environnement intégré
- Exécuter n'importe quand des simulations sans limitation de taille
- Partager des codes entre les utilisateurs
- Pouvoir collaborer avec d'autres disciplines
- Utiliser efficacement et simplement des ressources disponibles à travers le réseau
- Mettre en commun des puissances de calcul
- Avoir des environnements intégrés à hautes performances
 - calcul, visualisation + couplage de codes

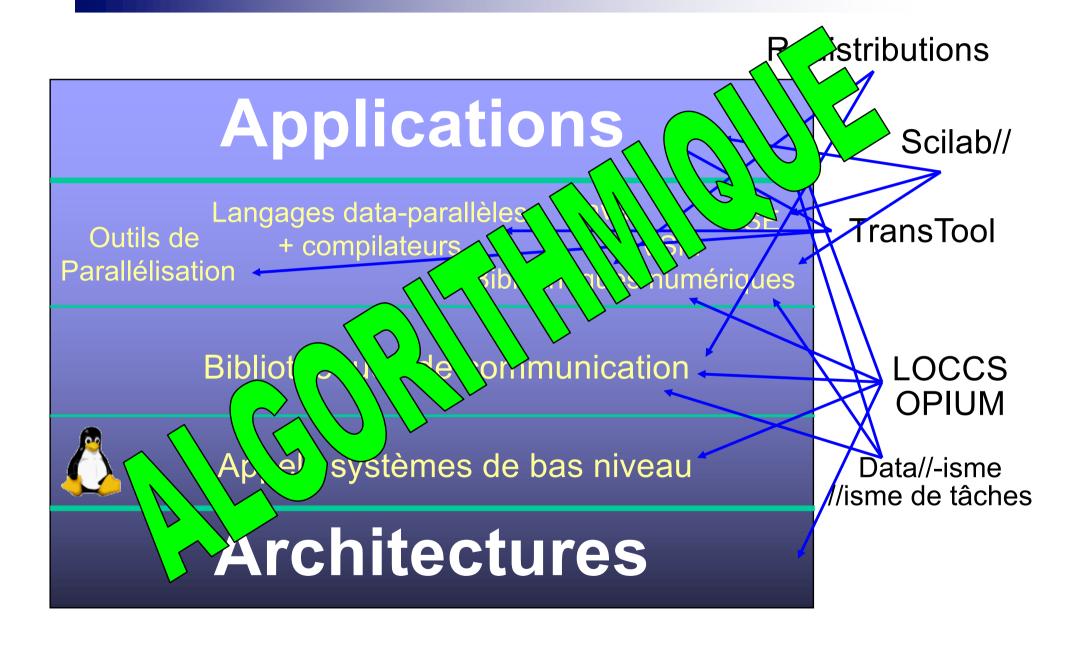
ASP (Application Service Provider)



- ✓ Une idée à long terme : location de services de calcul via le réseau
 - Accès des performances en calcul et en capacité mémoire
 - Logiciels ou données protégés
 - Utilisation de serveurs de calcul accessibles via le(s) réseau(x)
 - Mais
 - Généralement autres domaines d'applications (BD, finances, ...)
- ✓ GridRPC (Netsolve, NINF, RCS, ...)
 - Toujours difficiles à utiliser pour les non-spécialistes
 - Pratiquement pas de transparence
 - Problèmes de sécurité généralement pas traités
 - Souvent dépendants des applications
 - Manque de standards (CORBA, JAVA/JINI, sockets, ...) pour construire les serveurs de calcul

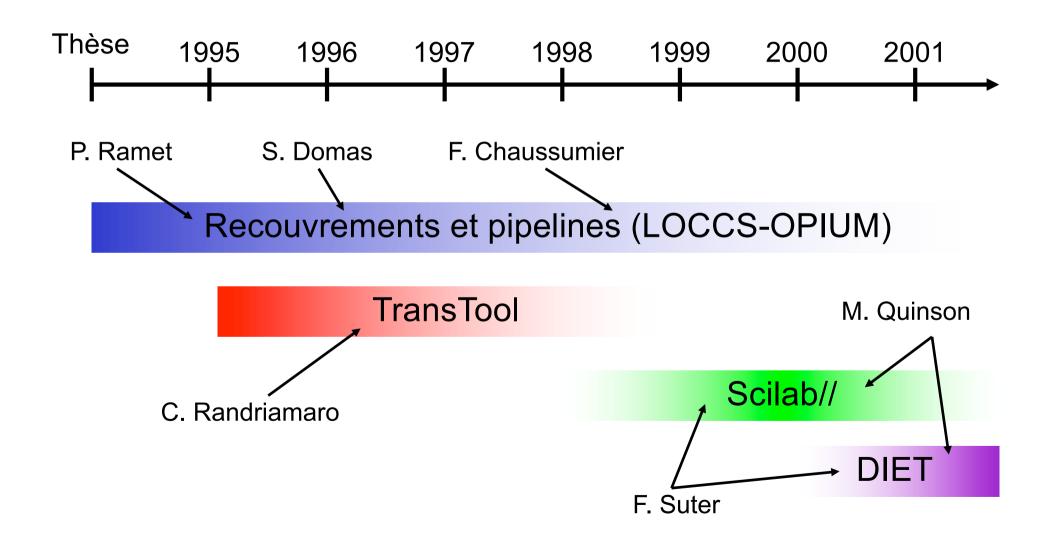
Positionnement de mes travaux





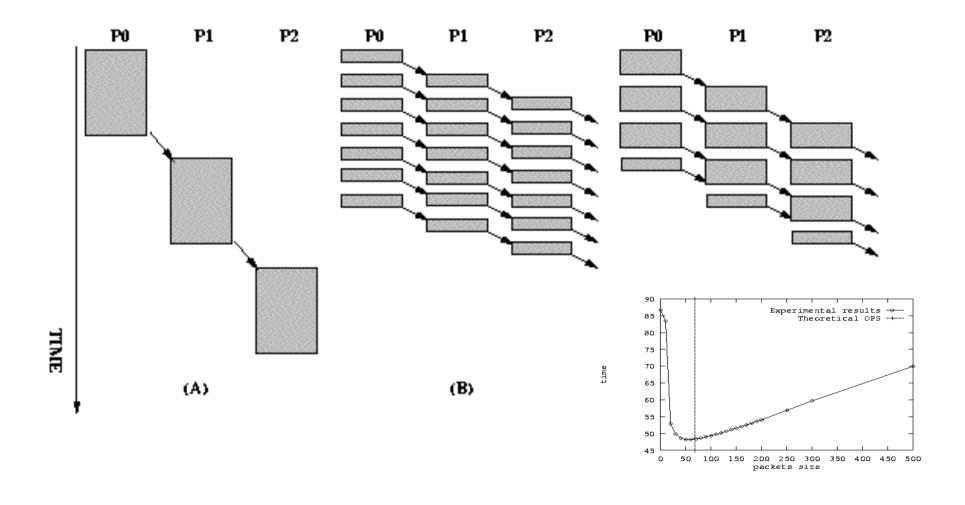
Projets de recherche et thèses







RECOUVREMENTS ET PIPELINES

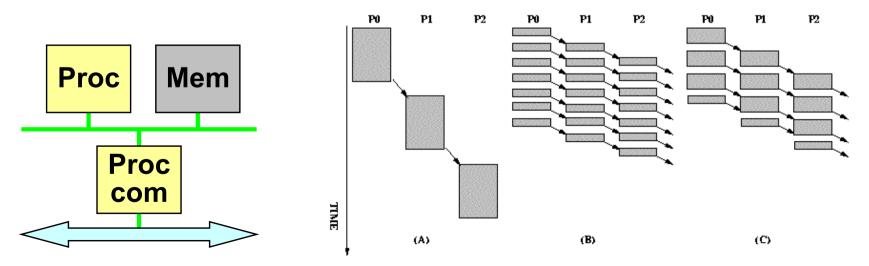


INRIA

Recouvrements et pipelines de calculs

Buts

- Cacher les communications
- Briser la séquentialité d'un noyau numérique
- Nombreuses applications dans le calcul numérique et l'imagerie
- Deux approches combinées
 - Recouvrements des communications (archi + support d'exécution)
 - Pipelines des calculs (algorithmique)



Avec F. Chaussumier, S. Domas, L. Prylli, P. Ramet et J. Roman

Pipelines de calculs

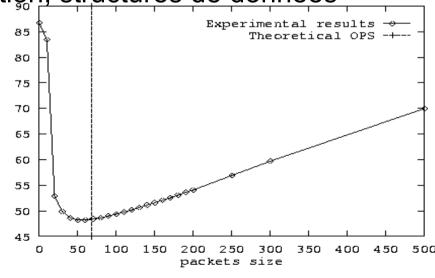


- Recherche de boucles « pipelinables »
 - Boucles cross-processors par analyse de dépendances
- Analyse du gain
 - Modélisation de l'architecture et de l'algorithme
- Calcul du grain de calcul optimal
 - Minimisation de la fonction de temps (OPIUM)
- Génération de code ou appel à une bibliothèque spécialisée

• Différents schémas de communication, structures de données régulières ou irrégulières,

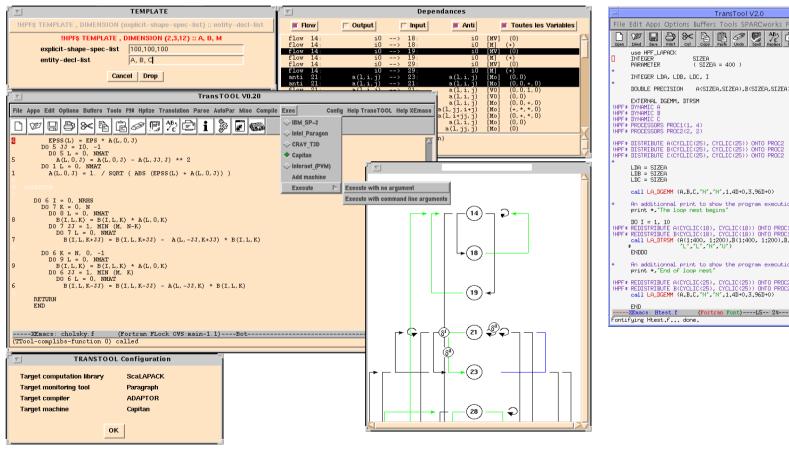
supports d'exécution, gestion des buffers (LOCCS)

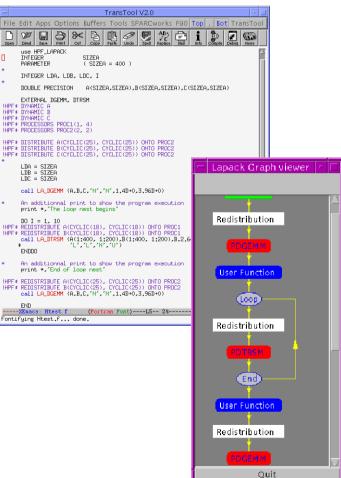
- Calcul de la taille de paquets pour différentes fonctions
- Génération de code HPF





PARALLELISATION DE PROGRAMMES FORTRAN

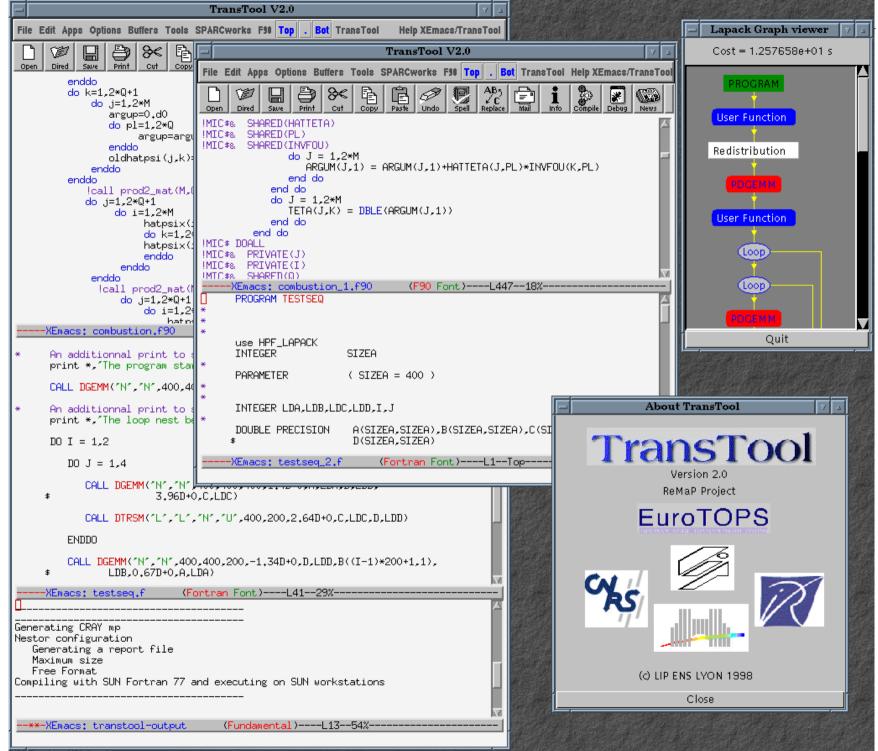




TransTool



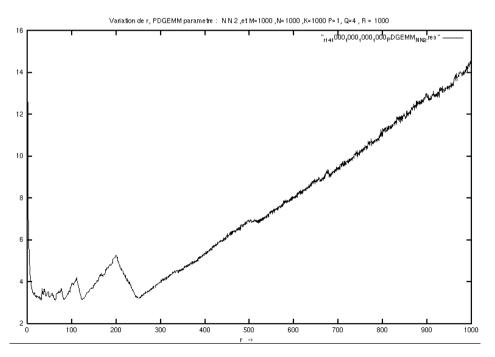
- Environnement intégré de parallélisation interactive de programmes Fortran et transformations source à source
- Développé au dessus de XEmacs
- Plate-forme de présentation de nos développements
 - Parallélisation et distribution automatique
 - Traduction d'appels de bibliothèques numériques
 - Optimisation de macro-pipelines
- Génération de code HPF (lié au compilateur cible)
- Plusieurs API pour l'intégration de nouveaux outils (édition, analyse de dépendances, génération d'arbre syntaxique, visualisation de données distribuées)
- Projet EuroTOPS

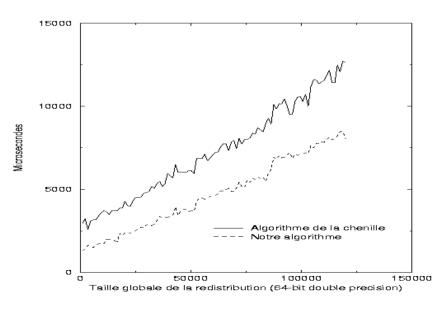


ALASca



- Optimisation des redistributions pour des distributions cycliques par blocs (de PxQ avec taille de bloc r vers P'xQ' avec r')
 - résultats optimaux en nombre et en volume de messages
- Traduction d'un code Fortran 77 contenant des appels BLAS et LAPACK vers
 - Un code F77 avec des appels à ScaLAPACK
 - Un code HPF avec des appels à l'interface HPF de ScaLAPACK
 - Trouver les meilleures (re)distributions



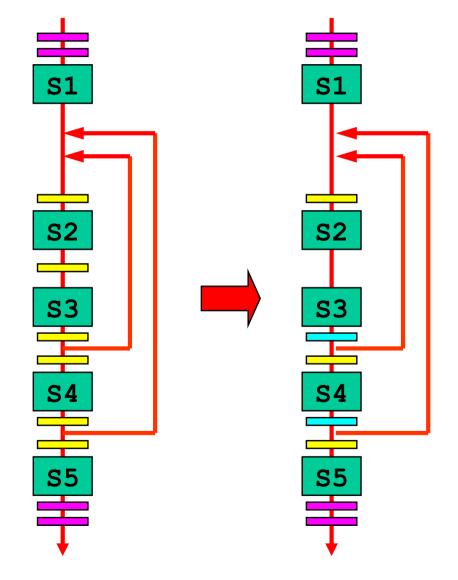


Avec S. Domas, J. Dongarra, J.-C. Mignot, A. Petitet, C. Randriamaro, Y. Robert

Exemple



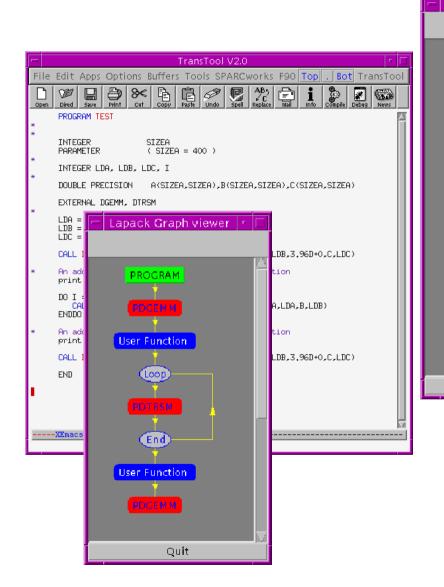
```
begin
  Initialize A
  Initialize B
  DGEMM(A, B, C)
                      S1
  do i=1, m
    do j=1, n
      DGEMM(C, C, D) S2
      DGEMM(A, B, C) S3
    enddo
    (E,F) = LU(D)
                      S4
  enddo
  DSYMM(F,A,C)
                      S5
  Gather matrices C, E, F
end
```

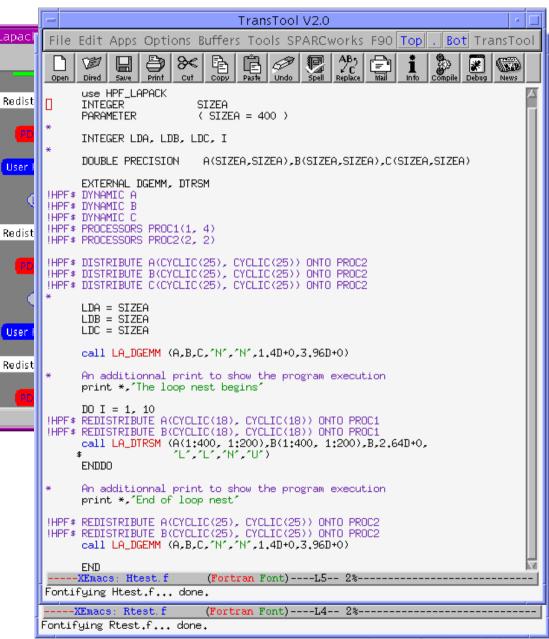


Avec C. Randriamaro

Integration d'ALASca



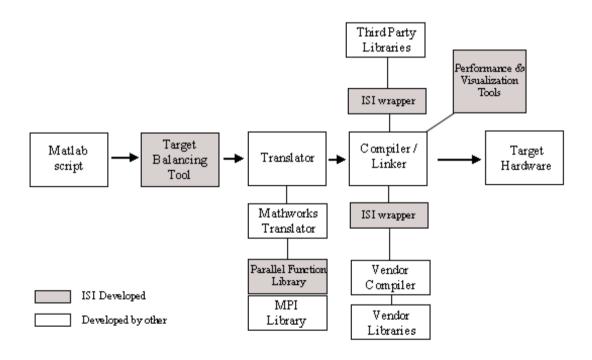


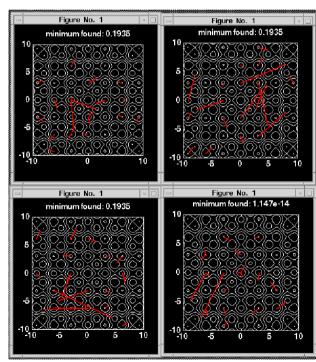


Avec C. Randriamaro



PARALLELISATION D'OUTILS de type MATLAB





Approche compilation



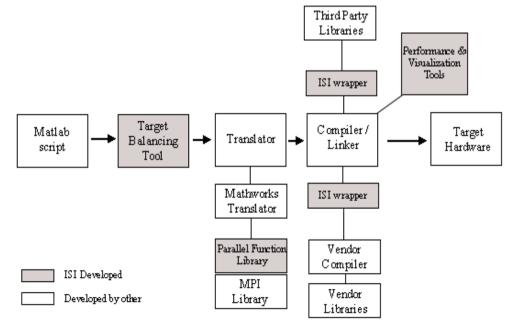
- Entrée: un script Matlab
- On ajoute des directives de compilation
- On le compile vers un langage de type Fortran ou C (en s'occupant des problèmes de type et de tailles de variables)

On ajoute des appels à des bibliothèques séquentielles ou

parallèles

Buts:

- Eviter l'interprétation
- Plus de problèmes de types
- Appels à des bibliothèques à hautes performances
- Utiliser la technologie des compilateurs paralléliseurs



Falcon, Menhir, Match, Paradigm, Conlab, ...



Approche maître-esclave

Conserver l'interactivité de Matlab

Example 1 Dupliquer des processus Matlab sur chaque processeur et échanger des messages entre eux (en SPMD ou en maître-esclave)

© Facile à développer

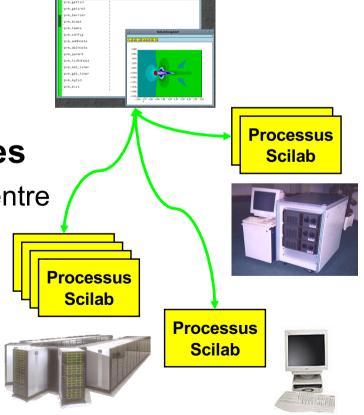
Surcoût d'interprétation

3 Utiliser des serveurs de bibliothèques

Besoin d'un protocole de communication entre le client (la fenêtre Matlab) et les serveurs

© Plus simple à modifier et à améliorer

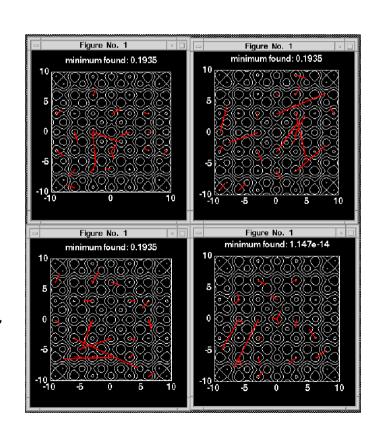
Indépendant de Matlab







- MultiMatlab (Cornell): Duplication + PVM, MPI, BLACS
- PPServer (MIT): Serveurs
 - Interfaces ScaLAPACK, PLAPACK et PETSc
 - Pas de transparence complète
 - Environnement homogène
 - ⊗ Serveurs non-partagés
- Matpar (JPL)
 - Serveur ScaLAPACK
- PSI (U. Austin)
 - Interface PLAPACK avec serveur
- NETSOLVE



Plusieurs approches



Passage de messages entre tâches Scilab R (PVM, MPI),

Interface Netsolve (outil de Metacomputing, UT et ORNL),

. |pvm_exit

Gestion de parallélisme mixte (tâche/data-parallélisme)

Exécution asynchrone de routines et persistance des données

Interfaces de bibliothèques parallèles, (ScaLAPACK),

Parallélisme out-of-core (LARIA, Amiens)

Approche mixte interactivité/compilation

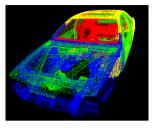
Serveurs de bibliothèques parallèles, (ScaLAPACK, PETSc, PaStiX),

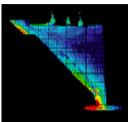
Approche CORBA (LIB, Besançon)

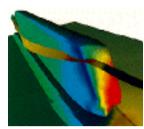
Approche multi-threads (ordonnancement + migration)

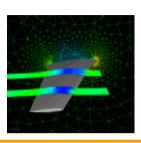
Les différentes couches

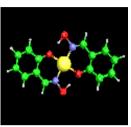


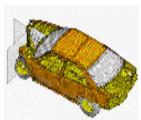


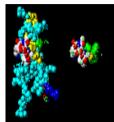












SCILAB_{//}

PM-2 High-Perf Serveurs de calcul / Netsolve

Bibliothèques denses

Bibliothèques creuses

BIP-MPI / MADELEINE / PACX-MPI / PVM / coms Netsolve / CORBA

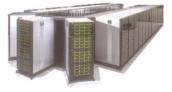
Outils d 'évaluation de performances NWS, ...

















Versions actuelles

Passage de messages

- PVM and MPI
- Assembleur du parallélisme !

Interface Netsolve

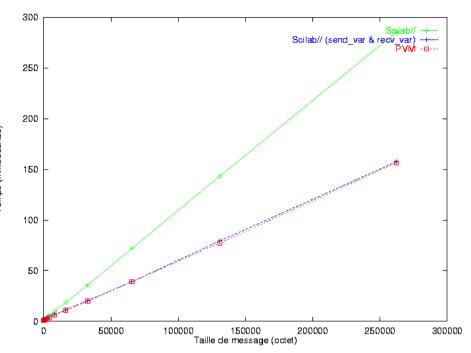
- Facile à développer
- Netsolve limité

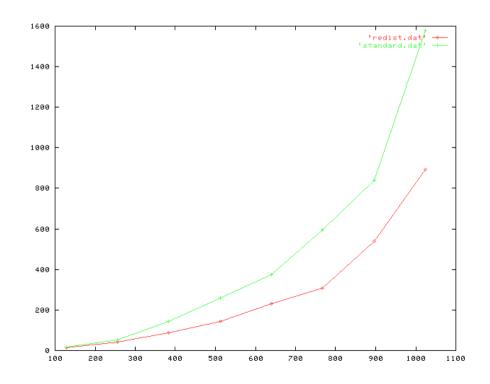
Interface ScaLAPACK + duplication Scilab

- In-core (ScaLAPACK) et out-of-core
- Relativement facile à développer
- Ouplication de Scilab
- Types à rajouter (matrice distribuées)

Serveurs de calculs

- Style client-serveur
- Plus souple
- Choix des couches de liaisons
- Utilisable avec d'autres interfaces





Metacomputing

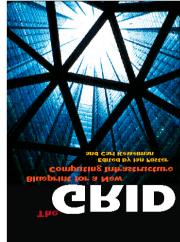


- De la recherche de la vie extraterrestre aux applications numériques les plus classiques
- De PACX-MPI à Globus
- Des grappes de grappes à l'Internet dans son ensemble

Idées:

- Utiliser les ressources inutilisées
- Mettre en commun (et agréger) des ressources de calcul
- Offrir à l'utilisateur de la puissance de calcul et de la capacité de stockage de manière (relativement) transparente
- Nombreux problèmes liés à l'hétérogénéité et à la mise en commun de ressources dispersées
- Mais focalisation des travaux sur les couches logicielles et « utilisation » (un peu trop) massive de Globus



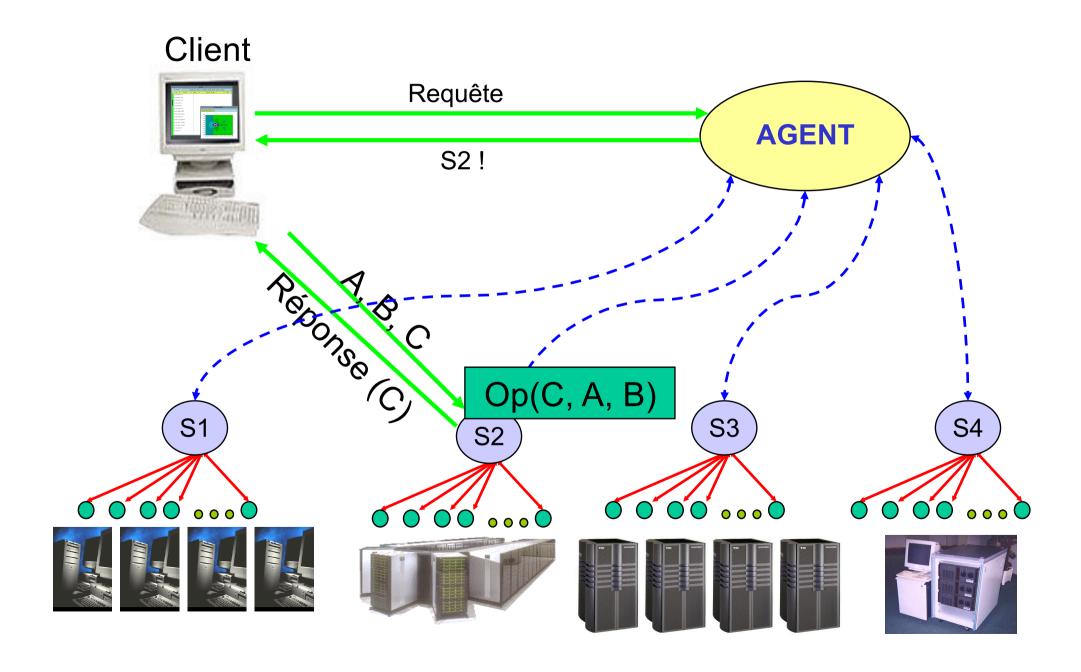




« Mon équipe a développé une solution très innovante, mais nous sommes encore en train de chercher un problème qui va avec. »

RPC Big picture V1







RPC et grid-computing : GridRPC

Une idée simple

Implémenter le modèle de programmation RPC sur la grille

Fonctionnalités nécessaires

 Équilibrage des charges (localisation de ressources et évaluation de performances, ordonnancement), sécurité, tolérance aux pannes, IDL, distribution et migration de données, interopérabilité avec d'autres systèmes, ...

Outils existants

- Ninf (Electrotechnical Lab, Umezono, Japon)
 - · Calcul numérique
- Netsolve (University of Tennessee, USA)
 - Calcul numérique
- NEOS (Argonne National Lab., USA)
 - Problèmes d'optimisation
- RCS (ETH Zürich)
 - Serveurs ScaLAPACK
- NIMROD-G (Monash University in Melbourne, Australie)
 - Au dessus de Globus
- OVM (LRI)
 - Orienté grappes







DIET



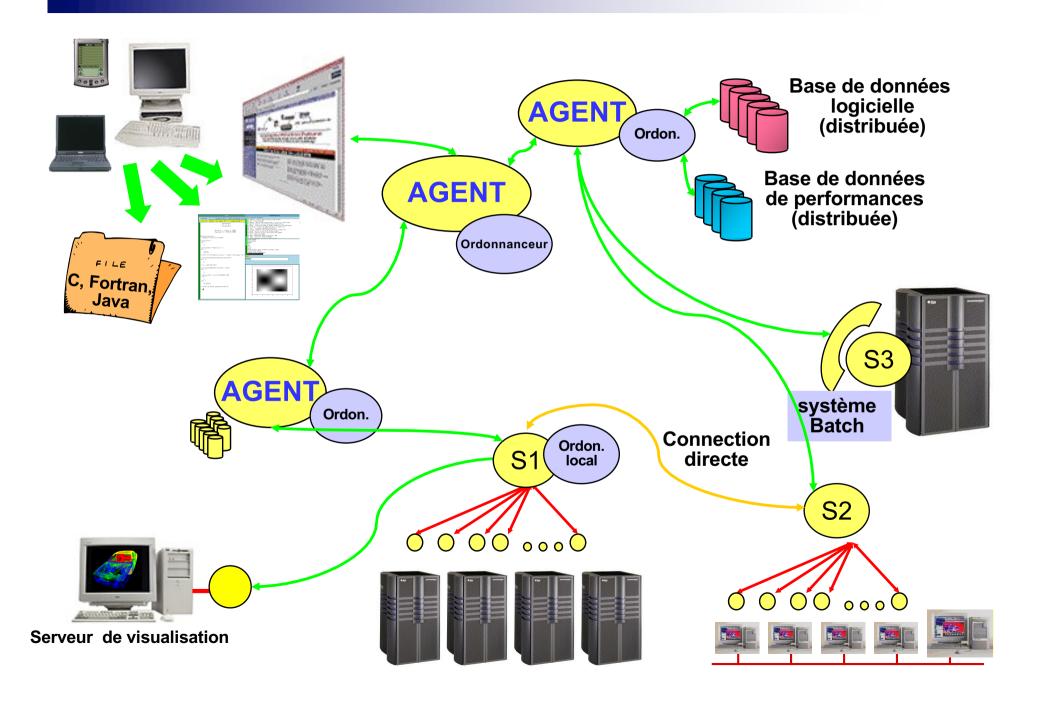
- Distributed Interactive Engineering Toolbox
- Bâtir une infrastructure logicielle générique pour un ensemble portails de supercalcul et de *Problem Solving Environments*
- En utilisant des couches logicielles portables (Java, JINI, CORBA, bibliothèques à hautes performances, ...)
- Plusieurs composants
 - Ordonnanceur à hautes performances (heuristiques dépendantes des applications)
 - Localisation de ressources
 - Evaluation et prédiction de performances (basé sur NWS)
- VTHD comme plate-forme cible



RNTL GASP et ACI GRID GRID-ASP

Big picture améliorée







Améliorer l'agent(s)

- Ordonnanceur
 - Heuristiques générales ou dépendantes de l'application
- Localisation de ressources logicielles (SLiM)

Basé sur LDAP

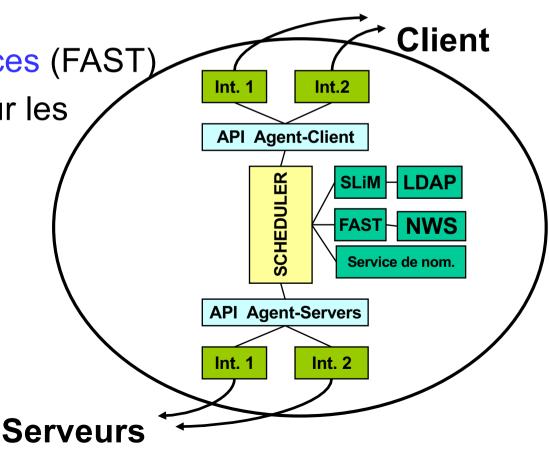
Evaluation de performances (FAST)

• Service de nommage pour les

données génériques

 Différentes API pour différentes interfaces

 Structure hiérarchique pour la scalabilité

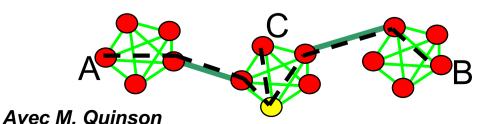


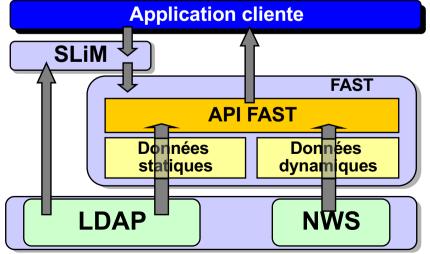


FAST: Fast Agent's System Timer

- Evaluation des performances de la plate-forme pour être capable de trouver un serveur efficace (coûts de redistribution et de calcul) sans tester toutes les configurations → base de données de performances pour l'ordonnanceur
- Basé sur NWS (Network Weather Service)
- Performances de calcul
 - Charge de la machine, capacité mémoire et performances des queues de batch (données dynamique)
 - Tests des bibliothèques pour différentes données (statique)
- Performances de communication
 - Pour être capable de deviner le coût de la redistribution de données entre deux serveurs en fonction de l'architecture réseau et des informations dynamiques

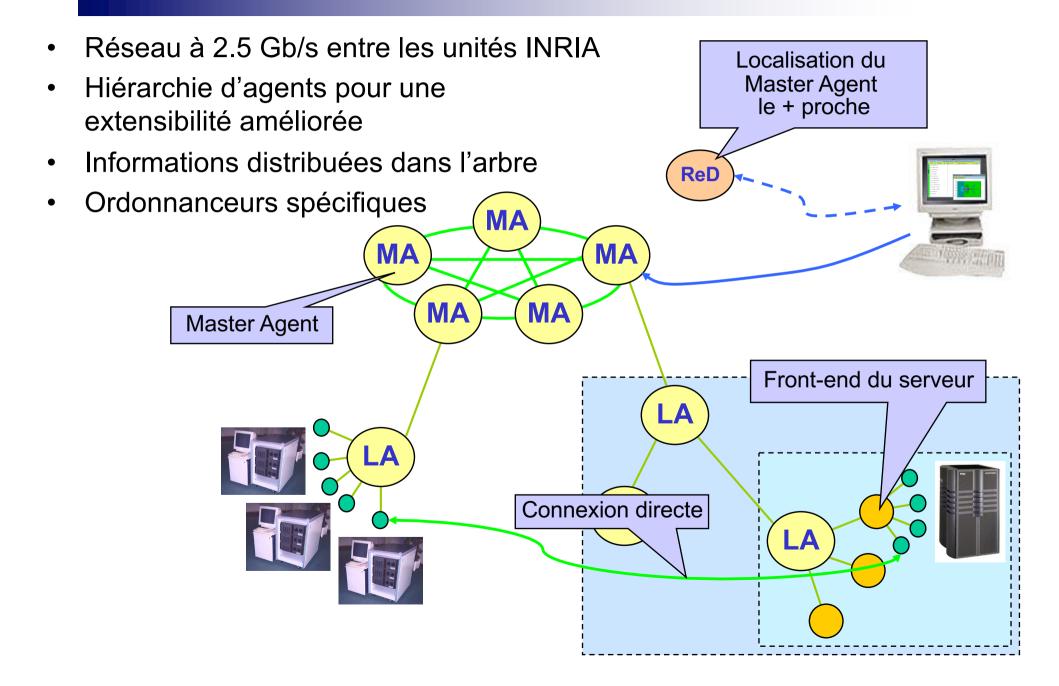
 Application cliente
 - Latence et bande-passante (hiérarchique)
- Ensemble hiérarchique d'agents
 - Problèmes de scalabilité







Architecture hiérarchique pour VTHD



Et après?

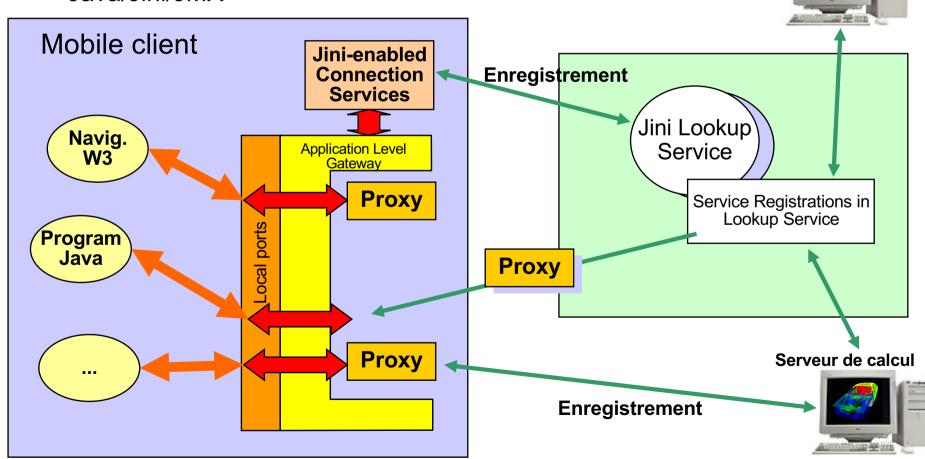


Technologie Java pour le portal supercomputing

 Utilisation de Jini pour l'enregistrement de serveurs, lookup service, gestion d'événements, ...

Connexion Java/CORBA pour de meilleures performances

Java/Jini/JMX



Problèmes liés



- Sécurité
 - Comptes utilisateurs et accès
 - Transferts de données
- Tolérance aux pannes
 - Serveurs ou agents
- Intéropérabilité
 - Description de problèmes
 - Redistributions de données entre les serveurs
- Check-pointing
 - Entrées/sorties parallèles rapides
- Scalabilité
 - Hiérarchie de serveurs/agents

- Recherche de ressources
 - Matériel et logiciel
- Ordonnancement
 - Ordonnancement on-line d'ordonnancements off-line
- Partage de serveurs entre utilisateurs
 - Problèmes de sécurité
 - Lock/unlock, consistence des données, race conditions
- Evaluation de performances
 - Hétérogénéité
 - Systèmes batch
- Visualisation de données
 - Problèmes d'extensibilité
- ...

Parallélisme mixte



Exploitation simultanée du parallélisme de tâches et du parallélisme de données

• Entrée:

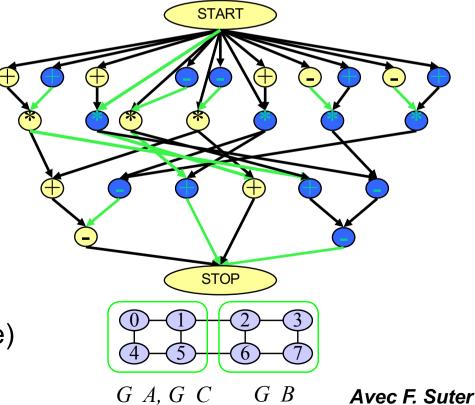
- Un graphe de tâches
- Un ensemble fini de processeurs connectés par un réseau
- Des données (potentiellement) déjà placées sur des sous-grilles

Sortie:

- Un ordonnancement des calculs
- Un placement des données
- Première application sur Strassen et Winograd

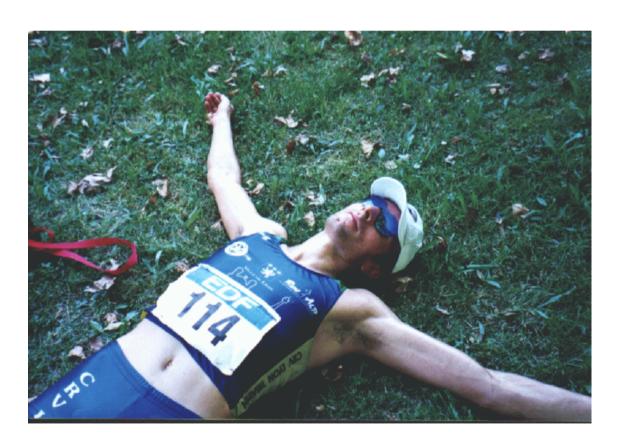
Perspectives:

- Automatisation (heuristiques)
- Intégration dans Scilab//
- Approche mixte (compil., run-time)





CONCLUSION ET PERSPECTIVES



« Quelques » défis logiciels et autres problèmes difficiles



- Les applications « classiques » du parallélisme supposaient
 - Une architecture homogène de processeurs (processeurs, réseaux)
 - Des ressources statiques
 - Encore de nombreux problèmes ouverts!

Sur la grille

- Architecture totalement hétérogène (de collections d'éléments homogènes à l'Internet), ressources connues à l'exécution
- Comportement dynamique (ajout et disparition de ressources)
- Encore plus de problèmes ouverts

Trop de projets actuels oublient

- L'algorithmique
- La modélisation des algorithmes

« Quelques » défis logiciels et autres problèmes difficiles, suite



Hétérogénéité

- Réseaux (couches de communications multi-protocoles), processeurs, hiérarchies mémoire profondes
- Equilibrage des charges (ordonnancement)
- Distribution des données (statique et dynamique)
- Informations sur la charge en temps réel
- Evaluation des performances
- Modélisation des architectures (déjà des modèles pour les grappes de SMP, cf P. Fraigniaud (HiHCoHP))
- Couplage de codes
- Interopérabilité de logiciels
- Bases de données de codes (GAMS, Netlib)

Administration

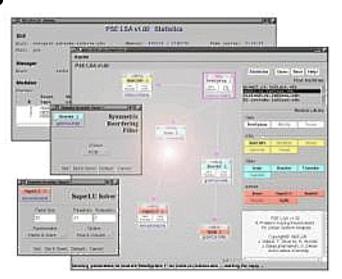
- Sécurité (transferts, accès, firewalls)
- Equité, disponibilité, équilibrage des charges

Quelques défis logiciels et autres problèmes difficiles, suite



Algorithmique numérique et bibliothèques

- Algorithmique pour le creux
- Interopérabilité entre les logiciels (redistributions de données, structures de données)
- Méthodes hybrides (directes, itératives)
- Liaisons plus importantes avec les supports d'exécution à hautes performances
- Auto-adaptabilité des logiciels à tous les niveaux (voir ATLAS)
- Analyse de problèmes et recherche de solveurs
- Abstraction (programmation par composants)!

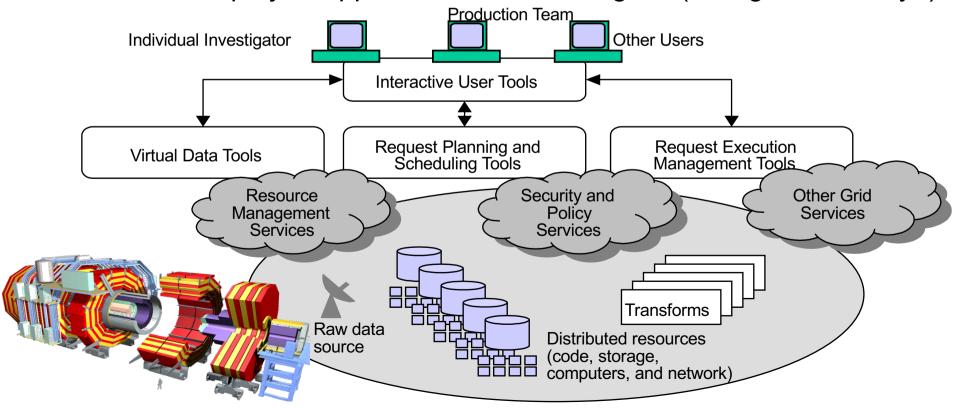


Quelques défis logiciels et autres problèmes difficiles, suite



Problem Solving Environments

- Plus de transparence, généricité, sécurité
- Unification des couches logicielles (Grid Forum)
- Couplage algorithmique et modèles avec les supports d'exécution et les architectures
- Nombreux projets applicatifs autour de la grille (Datagrid, GridPhyn)



Conclusions et perspectives



- De l'algorithmique parallèle homogène et des aspects bas niveaux des couches de communications
- ... aux environnements de parallélisation et aux Problem Solving Environments
- Orientation vers les aspects middleware pour les PSE ...
- ... tout en regardant l'algorithmique liée au Grid Computing (notamment autour du creux)
- Etudier d'autres applications (MNT) et d'autres domaines (travail collaboratif, télé-enseignement, ...)
- RNRT VTHD++, RNTL GASP et ACI GRID-ASP



Remerciements



Les étudiants en DEA et en thèse

- Pierre Ramet
- Stéphane Domas
- Julien Zory
- Frédérique Chaussumier
- Fabrice Rastello
- Cyrille Randriamaro
- Frédéric Suter
- Martin Quinson, ...
- Les ingénieurs et postdocs
 - Jean-Christophe Mignot
 - Eddy Caron



© 2000 Randy Glasbergen. www.glasbergen.com

"Stop whining — most people do their best work under pressure!"

- Les stagiaires de tous horizons
 - Nicolas Bert, Lionel Tricon, ...