

Librairies scientifiques

Yann JOBIC^{*}, René Ocelli[†], Olivier Debordes[‡]

Update : 5 Septembre 2005

* yann.jobic@polytech.univ-mrs.fr

† rene@polytech.univ-mrs.fr

‡ debordes@mn.esm2.imt-mrs.fr

Table des matières

1	Introduction	3
2	PETSc	3
3	SuperLU	4
4	Spooles	4
5	SLEPc	5
6	Pardiso	5
7	MUMPS	6
8	ARPACK	6
9	$\mathbb{R}^{\frac{1}{2}}\text{sum}\mathbb{R}^{\frac{1}{2}}$	7

1 Introduction

Dans le cadre de la réunion R3C (Réunion des Concepteurs de Codes de Calcul) initiée par Codiciel, nous essaierons de faire un point sur les bibliothèques scientifiques, tout d'abord en synthétisant les possibilités de chacune, et en donnant un avis sur chacune d'elles. Cette liste est bien sûr non exhaustive.

2 PETSc

- web : <http://www-unix.mcs.anl.gov/petsc/>
- Licence : GNU
- Langage : C (structuré de type objet)
- binding : C/C++/Fortran/Fortran 90
- interfacage : SuperLU, Spooles, SPEPc, Hypre, Matlab, ESSL, SAMG, ...
- Stockage matriciel : dense, creux (peut adapter la forme de la matrice au module externe utilisé)
- Fonction : PETSc est une bibliothèque permettant la résolution itérative (parallèle ou non) des systèmes d'équations linéaires et non-linéaires impliquant des matrices creuses. PETSc s'appuie sur les bibliothèques BLAS et LAPACK, permettant les opérations basiques matrices/vecteurs pour la première, et les solutions de systèmes linéaires pour la seconde. Les méthodes numériques implémentées sont les suivantes :

Notes pratiques :

- Les bibliothèques BLAS et Lapack ont des versions optimisées par les constructeurs.
- Compilation parfois difficile sur certaines plateformes.
- L'utilisation de bibliothèque externe n'implique pas une duplication des données.
- le LU (aussi bien Petsc que Lapack) est mono-processus.

Remarques :

- Dans les méthodes de Krylov implémentées, la plus utilisée est le Bi-CGStab. Les autres sont soit trop restrictives pour le problème considéré (comme le CG, la matrice doit être symétrique définie positive), ou alors peu efficace.
- la méthode ASM du package externe Hypre est bien, mais gourmande en ressource.

- La macro des solveurs non linéaire est un bon début pour comprendre le fonctionnement de la librairie. Une fois cette étape passée, on arrive à l'optimiser en réduisant la parallélisation du problème. On peut alors gagner jusqu'à 30%.

3 SuperLU

- web : <http://crd.lbl.gov/~xiaoye/SuperLU/>
- Licence : Libre
- Langage : C
- binding : C/Fortran
- interfacage avec PETSc
- Stockage matriciel : dense, creux.
- Séquentiel ou Parallèle, version diffuse suivant l'architecture (mémoire partagée ou distribuée)
- Fonction : SuperLU est une bibliothèque pour la résolution directe de systèmes non symétriques à matrices creuses. Les routines exécuteront une décomposition LU avec pivotement partiel.

Remarque : Par défaut, l'algorithme permute les pivots. Donc en plein calcul, il alloue de la mémoire, et il est arrivé plusieurs fois que l'on se retrouve sans mémoire. On a peu de contrôle sur ce paramètre.

4 Spooles

- web : <http://www.netlib.org/linalg/spooles/spooles.2.2.html>
- Licence : Domaine publique
- Langage : C
- binding : C/Fortran
- interfacage avec PETSc
- Stockage matriciel : dense, creux (adaptation de la matrice par Petsc en interne)
- Fonction : SPOOLES est une bibliothèque pour des systèmes linéaires réels ou complexe de matrices creuses. Elle a parmi ses fonctionnalités :
 - Factorise et résout des systèmes linéaires carrés pour des équations avec une structure symétrique, avec ou sans le pivotement. La factorisation peut être de type symétrique, hermitienne, ou non symétrique. Une factorisation directe ou un seuil de factorisation peut être calculé. Cette bibliothèque est parallèle.
 - Factorise et résout des systèmes surdéterminés de rang maximal en utilisant une factorisation QR multifrontal, en série ou en utilisant les threads POSIX.

- Résoudre des systèmes linéaires carrés en utilisant diverses méthodes itératives de type Krylov. Le préconditionneur est une factorisation avec seuil de tolérance, construit avec ou sans pivot.

Remarques : Contrairement à la librairie SuperLU, on a plus de contrôle sur les permutations, grâce à l'implémentation d'un seuil défini par l'utilisateur. Le but est alors d'essayer de garder les permutations dans la matrice locale au processeur considérant, évitant alors de catastrophiques envois de données.

5 SLEPc

- web : <http://www.grycap.upv.es/slep>
- Licence : Semble libre
- Langage : C
- binding en C, C++ et Fortran (pas complètement testé)
- interfacage obligatoire avec PETSc
- Programmation du type PETSc
- Stockage matriciel : creux
- Fonction : Problèmes de valeurs propres. Cette bibliothèque est parallèle. Elle permet une certaine latitude sur les paramètres de solution. Graphique des fonctions utilisable :

Remarques : Cette librairie est en cours de test. Elle permettra de repérer les problèmes d'instabilités en composant le problème en valeur propre/mode propre.

6 Pardiso

- web : <http://www.computational.unibas.ch/cs/scicomp/software/pardiso>
- Licence : libre pour la recherche non commerciale
- Langage : Fortran / C
- binding en Fortran, C, C++
- Stockage matriciel : sparse (Morse)
- Séquentiel ou Parallèle (OpenMP seulement)
- Fonction : solveur sparse direct parallèle

Remarques :

- Utilise en interne les BLAS

- Portable (IA32, AMD64, Power4, Alpha EV6/7, MIPS 4, Ultra sparcs, OSX)
- On n'a pas les sources, on a les versions compilées pour les architectures ci-dessus
- Très facile à interfacer
- efficace pour de gros systèmes
- Lent pour de petits systèmes ou systèmes à faible largeur de bande

7 MUMPS

- nom : MULTifrontal Massively Parallel sparse direct Solver
- web : <http://graal.ens-lyon.fr/MUMPS/>
- Langage : Fortran 90
- binding en C
- Stockage matriciel : sparse
- Séquentiel ou Parallèle (MPI seulement)
- S'appuie sur les libraires suivantes : BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, BLACS, MPI
- Portable
- Fonction : solveur LU avec pivot partiel

Remarques :

- Il faut 2 versions différentes suivant si elle a été compilée pour le parallèle ou non
- ...

8 ARPACK

- web : <http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>
- Langage : Fortran 77, version en C++ (pour ARPACK++)
- binding en C
- Stockage matriciel : dense, bande, sparse
- Séquentiel ou Parallèle
- S'appuie sur les libraires suivantes : BLACS, ScaLAPACK
- Portable
- Fonction : Problèmes de valeurs propres, et solveur matriciel par méthode d'Arnoldi implicite redimensionnée (IRAM)

9 Résumé

On rassemble dans un tableau les principales fonctionnalités des bibliothèques abordées :

Acronyme	Direct	Itératif	Parallèle	Utilisateur(s)
PETSc	X	X	X	Marc Medale Stephan Guignard
SuperLU	X	-	-	Marc Medale
SuperLU DIST	X	-	X	Marc Medale
SuperLU MT	X	-	X	Marc Medale
Spooles	X	X	X	Marc Medale Stephan Guignard
SLEPc	-	-	X	Marc Medale
Pardiso	X	-	X	Romain Boman
ARPACK	-	X	X	Norber Deleutre Olivier Diot
MUMPS	X	-	X	-

Il serait alors intéressant de comparer ces diverses bibliothèques en terme de performances, avec par exemple la résolution de systèmes linéaires issus des matrices Harwell-Boeing.