

Vérification numérique de code de calculs industriels

Séminaire Aristote

Christophe DENIS^{1,2}, François FEVOTTE¹, Bruno LATHUILIERE¹

¹ EDF Recherche et Développement - EDF Lab Clamart

² Chercheur Associé (HDR) - Centre de Mathématiques et de Leurs Applications (CMLA) - ENS Cachan
"There is more to life than increasing its speed.", Mahatma Gandhi

"The scientific community should always be able to *verify that a published program will produce correct results, or that a published calculation is correct, in the same way that it can check the truth of scientific theorems or experimental measurements*", K. Roberts. The publication of scientific fortran programs. Comput. Phys. Comm., 1, **1969**

15 décembre 2014

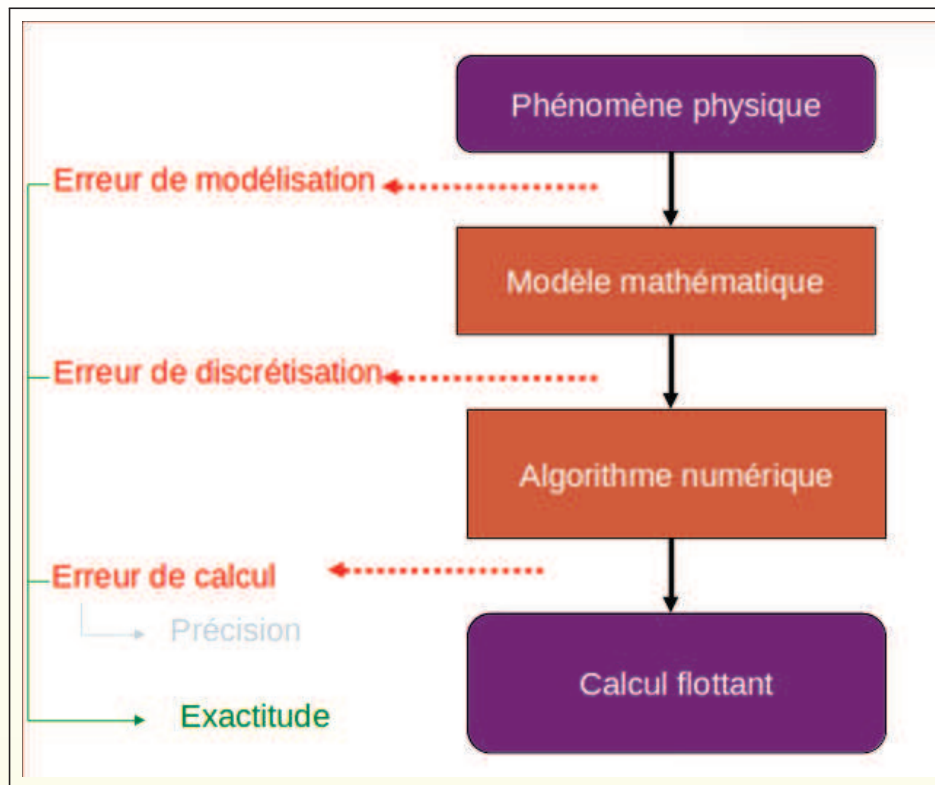


Plan de l'exposé I

- 1 Contexte
- 2 Besoins industriels
- 3 Méthodes et outils
- 4 Cas d'étude
 - Premier cas d'étude : vérification numérique en utilisant CADNA
 - Deuxième cas d'étude : vérification numérique de code de calcul industriels
 - Troisième cas d'étude : vérification numérique de ATHENA2D/ATHENA3D en utilisant Verrou
 - Quatrième cas d'étude : évaluation de la précision numérique en utilisant CADNA
- 5 Conclusion et perspectives



Approximations d'une simulation numérique



Calcul en arithmétique flottante

- Un calcul réel s'effectue sur un ensemble infini et continu de valeurs
- Sur un ordinateur, le calcul flottant est un **modèle du calcul réel** : ensemble discret et fini de valeurs
- Norme IEEE-754 (1985) : définition de l'encodage des nombres flottants ainsi que des modes d'arrondis

Problème intrinsèque du calcul flottant (souvent ignoré)

- Erreur de représentation des réels (la valeur 0.1 par exemple n'est pas représentée exactement en machine)
- Perte de propriétés mathématiques (non associativité de l'addition, d'élimination catastrophique, absorption)
- Perte de précision indépendante du choix des flottants (simple ou double précision par exemple)

Estimation de l'approximation du calcul en arithmétique flottante

- Importance de l'étude de l'effet de la propagation des erreurs d'arrondi sur les résultats
- Première étape d'un processus de V&V (Verification et Validation)

Plan de l'exposé I

- 1 Contexte
- 2 Besoins industriels
- 3 Méthodes et outils
- 4 Cas d'étude
 - Premier cas d'étude : vérification numérique en utilisant CADNA
 - Deuxième cas d'étude : vérification numérique de code de calcul industriels
 - Troisième cas d'étude : vérification numérique de ATHENA2D/ATHENA3D en utilisant Verrou
 - Quatrième cas d'étude : évaluation de la précision numérique en utilisant CADNA
- 5 Conclusion et perspectives



Besoins industriels sur l'estimation de la précision numérique

- Fournir un intervalle de confiance sur les résultats (par exemple visualisation X_d+P)
- Pouvoir optimiser la consommation mémoire et électrique en utilisant au mieux des calculs en simple ou double précision
- Combiner l'information sur la précision avec d'autres types d'incertitudes
- Aide à la qualification pour de logiciels pour comprendre les différences de résultats selon l'environnement de calcul utilisé (bug ou effet de l'arithmétique flottante
- ainsi que les vôtres !
- Deux grandes fonctionnalités souhaitées :
 - 1 Evaluation de la qualité numérique sans intervention d'un expert ("docteur")
 - 2 Debogage numérique avec intervention d'un expert ("spécialiste")



Plan de l'exposé I

- 1 Contexte
- 2 Besoins industriels
- 3 Méthodes et outils
- 4 Cas d'étude
 - Premier cas d'étude : vérification numérique en utilisant CADNA
 - Deuxième cas d'étude : vérification numérique de code de calcul industriels
 - Troisième cas d'étude : vérification numérique de ATHENA2D/ATHENA3D en utilisant Verrou
 - Quatrième cas d'étude : évaluation de la précision numérique en utilisant CADNA
- 5 Conclusion et perspectives



Méthodes d'analyse de l'effet de l'arithmétique flottante

- Analyse inverse [Wilkinson, 1986] [Higham, 1996]
 - ▶ La solution de calcul est considéré comme la solution exacte d'un problème approché.
 - ▶ + certaines bibliothèques scientifiques de calcul fournissent des estimateurs d'analyse inverse d'erreur
 - ▶ - ne peut pas être utilisée pour vérifier la totalité d'un code de calcul industriel
- Arithmétique d'intervalles
 - ▶ Le résultat d'une opération en arithmétique d'intervalle entre deux intervalles $X = [x_-, x_+]$ et $Y = [y_-, y_+]$ contient toutes les valeurs qui peuvent être calculées sur les éléments appartenant à ces intervalles.

$$C = A + B = [a_- + b_-, a_+ + b_+] \text{ avec } A = [a_-, a_+], B = [b_-, b_+] \quad (1)$$

- ▶ + résultat garanti : utilisation à EDF R&D modèle d'oxydo-réduction nécessite l'extraction précise de racines de degré 3
- ▶ - surestimation de l'erreur (par exemple non compensation des erreurs en mode d'arrondi au plus près)
- ▶ - utilisation d'algorithmes spécifiques nécessiterait de transformer le code de calcul pour le vérifier



Analyse probabiliste de l'effet de la propagation des erreurs d'arrondi

- Bibliothèque CADNA [Jézéquel and Chesneaux, 2008] :
 - ▶ Utilisation d'un mode arrondi aléatoire parmi les modes d'arrondis définis par la norme IEEE-754
 - ▶ Chaque opération arithmétique flottante est calculée trois fois en utilisant un mode d'arrondi aléatoire (vers $\pm\infty$)
 - ▶ Le nombre de chiffres significatifs en commun des trois calculs fournissant la précision du calcul
 - ▶ + **debogage numérique** : détection des instabilités numériques au niveau des instructions arithmétiques flottantes
 - ▶ + **non transformation du code** : nécessite une traduction du code source et non sa transformation
 - ▶ - **évaluation de la qualité numérique** : un nombre important d'instabilités peuvent provenir uniquement de la perturbation utilisée par CADNA (faux positifs)
 - ▶ - **bibliothèques externes** : difficulté à utiliser CADNA dans des bibliothèques de calcul scientifiques (BLAS, LAPACK ...)
 - ▶ - **difficulté d'implémentation dans la totalité d'un code industriel** : par exemple passage de constantes flottantes lors d'appel de fonction



Analyse probabiliste de l'effet de la propagation des erreurs d'arrondi

- Arithmétique MonteCarlo (MCA) multiple précision
 - ▶ Différences avec CADNA
 - ★ Pas d'hypothèses sur la nature aléatoire des erreurs d'arrondi dans la justification théorique [Parker, 2011] : erreurs d'arrondi ne sont pas aléatoires et i.i.d [?]
 - ★ Test de normalité des distributions de résultats obtenues pour déterminer des IC, rejet sinon
 - ★ Taille de l'échantillon non fixé $N = 100$ typiquement pour que test de normalité OK
 - ★ Précision virtuelle > double précision

- Principe de base

- ▶ Transformation d'une opération arithmétique IEEE-754 en MCA

$$x \circ y \rightarrow \text{round}(\text{randomize}(\text{randomize}(x) \circ \text{randomize}(y))) \quad (2)$$

- ▶ Prise en compte des incertitudes sur les données d'entrée
- ▶ Précision multiple virtuelle



Arithmétique MonteCarlo (MCA) multiple précision

- Bibliothèque informatique existante MCALIB [Frechtling and Leong, 2014] développée par M. Frechtling and P. H. W. Leong
 - ▶ Utilisation de MPFR (multiple précision) encapsulée, l'utilisateur choisit uniquement la précision souhaitée
 - ▶ Transformation automatique du code source C++ avec MCA (source to source)
- Collaboration en cours (C. Denis, M. Frechtling, P. H. W. Leong)
 - ▶ Test en cours « en grandeur nature » sur un code en mécanique des fluides (C++) et de physique atomique (Fortran)
 - ★ Recherche également d'autres applications ... me contacter !
 - ▶ Transformation automatique du code source Fortran avec MCA
 - ▶ Distribution des simulations sur cluster ou vectorisation des opérations



Plan de l'exposé I

- 1 Contexte
- 2 Besoins industriels
- 3 Méthodes et outils
- 4 Cas d'étude**
 - Premier cas d'étude : vérification numérique en utilisant CADNA
 - Deuxième cas d'étude : vérification numérique de code de calcul industriels
 - Troisième cas d'étude : vérification numérique de ATHENA2D/ATHENA3D en utilisant Verrou
 - Quatrième cas d'étude : évaluation de la précision numérique en utilisant CADNA
- 5 Conclusion et perspectives



Premier cas d'étude : vérification numérique en utilisant CADNA

- Code de physique atomique 2DRMP nécessitant le calcul d'un nombre important d'intégrales doubles
- Connaissance *a priori* des instabilités numériques
- Utilisation de CADNA pour confirmer la présence d'instabilités, les analyser et les corriger (changement d'algorithme)

λ	I_λ version d'origine	I_λ version modifiée	I_λ^{exact}
0	0.1247937243912E+000	0.1247936614595E+000	0.12479372449E+000
2	0.471551365578E-001	0.4715511531988E-001	0.47155137140E-001
4	0.288813766E-001	0.2888136383162E-001	0.28881377469E-001
6	0.952431E-002	0.2093430472201E-001	0.20934314687E-001
8	0.3995087E+002	0.1648754288096E-001	0.16487550218E-001

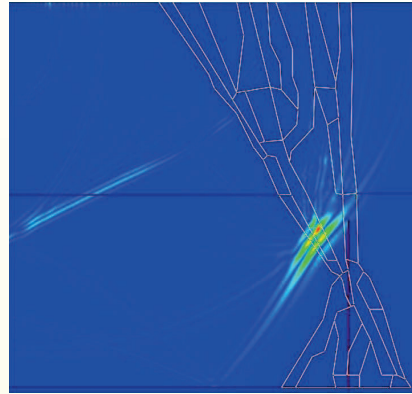
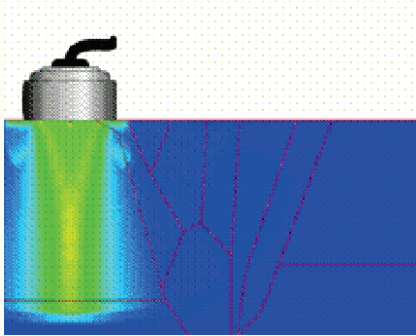
- HPC Prize 2006, UK Research Council (N.S. Scott, M.P Scott, L. Ixaru, C. Denis) : « The resulting algorithms are embodied in a new computational strategy that is more accurate and is between one and two orders of magnitude faster than the original implementation. »

Deuxième cas d'étude : vérification numérique de code de calcul industriels

- Travaux de thèse de S. Montan [Montan, 2013] [Denis and Montan, 2012]
- Thèse dirigée par J.M- Chesneaux (LIP6) et Christophe Denis
- Soutenue le 25 octobre 2013
- Principaux résultats
 - ▶ Implantation de CADNA dans les bibliothèques de communication MPI et BLACS
 - ▶ Implantation de CADNA dans la routine DGEMM et réduction de l'important surcoût en temps de calcul
 - ▶ Premier audit de la qualité numérique de Telemac-2D
 - ★ L'implémentation de CADNA a nécessité des modifications dans le code (appel de fonctions notamment prenant en entrée des constantes flottantes)
 - ★ Nécessite de mener une expertise sur les instabilités numériques détectées (un nombre important de faux positifs)
 - ★ un nombre important d'instabilités proviennent du calcul du produit scalaire
 - ★ premiers tests sur l'utilisation des algorithmes compensés
- Perspectives de ces travaux
 - ▶ Disposer d'un outil de post-traitement de CADNA pour faciliter l'audit (Travail de R. Picot)
 - ▶ Evaluation non intrusive de bibliothèques de calcul externes (Thèse prévue en 2015)

Troisième cas d'étude : vérification numérique de ATHENA2D/ATHENA3D en utilisant Verrou

- Outil Verrou développé par B. Lathuilière et F. Fevotte (version prototype)
- Athena est un outil permettant de simuler des contrôles non-destructifs par Ultra-Son.



- Propriété du code
 - ▶ Code Fortran
 - ▶ Nombre de lignes : 36K / 70K
 - ▶ Utilisation de bibliothèques externes (Lapack, Umfpack, MPI)
- Difficile d'utiliser CADNA



Développement de Verrou

- Méthode MCA asynchrone
 - ▶ Mode random : équivalent à CESTAC
 - ▶ Mode average : loi de probabilité dépendant de l'erreur commise
- Instrumentation du binaire par valgrind
 - ▶ Simplicité d'utilisation (valgrind -tool=verrou -rounding-mode=random athena2D-3.x)
 - ▶ Possibilité d'activer/déactiver le changement de mode d'arrondi
- Limitations
 - ▶ Le code doit pouvoir tourner avec Valgrind
 - ▶ Seules l'addition et la soustraction sont codées
 - ▶ L'utilisateur doit post-traiter les résultats mais pour des codes industriels possédant une base de non-régression ces outils existent déjà)



Résultats sur une base de non-regression

	Référence	Random1	Random2	Average
I35macro2mm_amor ins1.dat ascan.dat	9.99s	135.45s (x13) 0.000/0.000 0.000/0.000	136.18s (x13) 0.000/0.000 0.000/0.000	147.04s (x14) 0.000/0.000 0.000/0.000
CapteurImmersion ins1.dat enerloc.dat sismo.dat ascan.dat	1.04s	22.02s (x21) 0.000/0.000 0.000/0.000 0.000/0.000 0.168/0.190	22.04s (x21) 0.305/0.187 0.180/0.048 0.174/0.164 0.342/0.388	20.37s (x19) 0.204/0.065 0.146/0.020 0.030/0.027 0.036/0.043
fauhomoaniso3D ascan.dat ins2.dat	21.80s	9940.35s (x455) 0.000/0.000 0.000/0.000	10054.61s (x461) 0.000/0.000 0.000/0.000	9767.47s (x448) 0.000/0.000 0.000/0.000
PPGV_TOFD_ES23_e15 sismo.dat ascan.dat	57.46s	1071.96s (x18) 0.000/0.000 0.000/0.000	1075.67s (x18) 0.000/0.000 0.000/0.000	1188.90s (x20) 0.000/0.000 0.000/0.000

Résultats sur la base de cas tests 2D de deux exécutions en mode random et une en mode average : pour chaque fichier ayant des écarts avec la référence la norme infinie et la norme 2 relative de l'ecart est affichée



Résultats obtenus

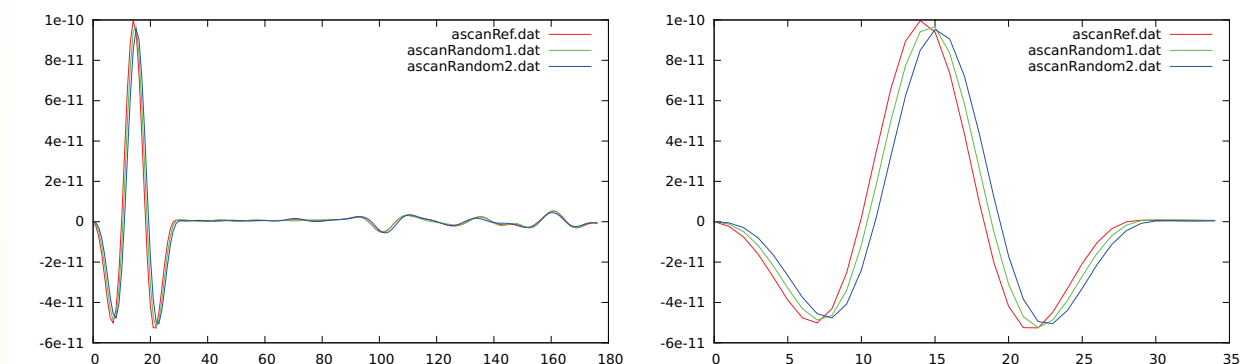
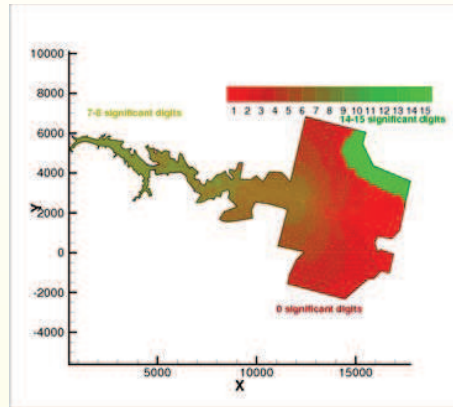


FIGURE: Comparaison entre un Ascan de référence (mode d'arrondi au plus proche avec des Ascan verrou) sur le cas CapteurImmersion



Quatrième cas d'étude : évaluation de la précision numérique en utilisant CADNA

- Evaluation de la qualité numérique d'un code numérique sans connaissance a priori des instabilités numériques
- Code cible : Telemac-2D, Telemac-3D [Hervouet, 2007]
- Première utilisation : visualisation de la qualité numérique des résultats de calcul (Approche xD+P [Denis, 2013])



- La zone "zéro chiffre significatif" ne met pas en lumière un problème numérique, faux positifs
- Non automatique, nécessite une intervention d'un expert avec CADNA



Exemple de faux positif fourni par Prof. W. Kahan

- Prof. W. Kahan, spécialiste des calculs en virgule flottante, principal architecte de la norme IEEE 754, ACM Turing Award (1989)

$$r = \frac{\text{Aire_Triangle}(x, y, z)}{\text{Aire_Triangle}(x, y, 2z)} \quad (3)$$

$$r = \sqrt{\frac{(x + y + z) * (z - (x - y)) * (z + (x - y)) * (x + (y - z))}{(x + y + 2z) * (2z - (x - y)) * (2z + (x - y)) * (x + (y - 2z))}} \quad (4)$$

- avec $x = 1.234568 \times 10^6$, $y = 1.234567 \times 10^6$, $z = 1.00000000023$
- Code original (Fortran 90 DP) : $r = 1.2382784256533526 \times 10^5$
- Code avec CADNA DP : $r = @.0$ (bruit numérique)
- Que conclure ? Le calcul de r est-il faux ?



Exemple de faux positif fourni par Prof. W. Kahan

- Calcul en MCA, échantillon de taille 74, en précision multiple

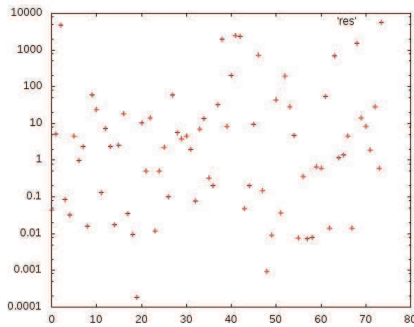


FIGURE: 53 bits

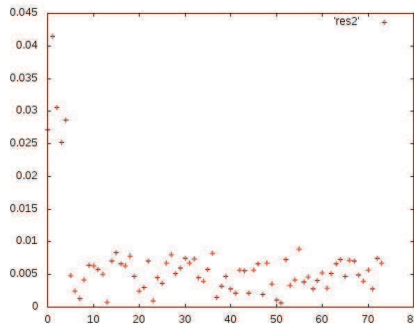


FIGURE: 88 bits

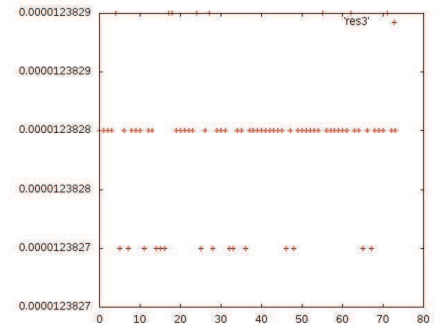


FIGURE: 123 bits

- Recommandation de W. Kahan sur l'évaluation de la qualité numérique « Almost foolproof is extendable-precision Interval Arithmetic » [Kahan, 2006]
 - ▶ Mais difficulté d'implémenter l'arithmétique d'intervalles dans un code industriel
- Une alternative : MCA avec précision multiple et un nombre d'échantillon assez élevé (coût réduit en distribuant l'échantillon sur une machine parallèle)



Plan de l'exposé I

- 1 Contexte
- 2 Besoins industriels
- 3 Méthodes et outils
- 4 Cas d'étude
 - Premier cas d'étude : vérification numérique en utilisant CADNA
 - Deuxième cas d'étude : vérification numérique de code de calcul industriels
 - Troisième cas d'étude : vérification numérique de ATHENA2D/ATHENA3D en utilisant Verrou
 - Quatrième cas d'étude : évaluation de la précision numérique en utilisant CADNA
- 5 Conclusion et perspectives



Perspectives de recherche à EDF R&D (BL,FV)

- Outil Verrou
 - ▶ Prises en compte de toutes les erreurs générées par toutes les opérations arithmétiques
 - ▶ Ajout de fonctionnalités afin que Verrou puisse contrôler un large spectre de codes.
- Co-encadrement d'une thèse sur la vérification numérique (Directeur de thèse : F. Jézéquel (LIP6))
 - ▶ Définir une méthodologie pour vérifier numériquement un code numérique utilisant des bibliothèques externes de calcul dont on ne dispose pas toujours des sources
 - ▶ Optimiser la performance de codes de calcul utilisant des méthodes de vérification numérique



Perspectives de recherche en cours au CMLA (CD)

- Reproductibilité numérique
 - ▶ Co-encadrement de la thèse de R. Nheilli démarrés depuis fin novembre 2013 à l'Université de Perpignan (Directeur de Thèse P. Langlois)
 - ★ Détecter les sources de non reproductibilité d'un code industriel parallèle Telemac-2D (modélisation par élément fini)
 - ★ Proposer et tester une méthodologie pour augmenter la reproductibilité numérique du logiciel numérique Telemac-2D
- Evaluation de la qualité numérique de code de calcul industriel sans intervention de l'utilisateur
 - ▶ Utilisation et participation au développement de MCALIB e'une bibliothèque dans un contexte industriel pour des codes écrits en C et Fortran
 - ▶ Analyse statistique des erreurs et détermination d'intervalle de confiance
 - ▶ Prise en compte de la qualité numérique lors du processus de développement logiciel
- Vérification numérique de code de calcul à base d'oracle utilisant l'arithmétique d'intervalles multi-précision.








Conclusion et perspectives

- Il existe des outils et des méthodes académiques pour effectuer du débogage numérique et de l'amélioration de la qualité numérique
- Au niveau industriel
 - ▶ Un transfert technologique est requis pour les utiliser efficacement dans un contexte industriel
 - ▶ Cette activité transverse peut être mutualisée
- Volonté de créer d'un groupe de travail au CMLA (industriels + universitaires) sur la vérification numérique et la reproductibilité numérique
 - ▶ Echange de bonnes pratiques
 - ▶ Définition des besoins
 - ▶ Retour d'expérience de méthodes de vérification numérique en « condition réelle industrielle.
 - ▶ ...
- N'hésitez pas à me contacter (christophe.denis@cmla.ens-cachan.fr) pour participer à ce groupe de travail ou pour lancer une activité de vérification numérique.
- Besoin de cas d'études !







References I

-  Denis, C. (2013).
Numerical verification of an industrial code to simulate accurately large scale hydrodynamics events.
International Water Journal, (2) :46–51.
-  Denis, C. and Montan, S. (2012).
Numerical verification of industrial numerical codes.
ESAIM : Proc., 35 :107–113.
-  Frechtling, M. and Leong, P. H. W. (2014).
Mcalib - a tool for automated rounding error analysis.
ACM Transactions on Programming Languages and Systems.
-  Hervouet, J.-M. (2007).
Hydrodynamics of Free Surface Flows.
Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
-  Higham, N. J. (1996).
Accuracy and Stability of Numerical Algorithms.
SIAM, Philadelphia.




References II

-  Jézéquel, F. and Chesneaux, J.-M. (2008).
CADNA : a library for estimating round-off error propagation.
Computer Physics Communications, 178(12) :933–955.
-  Kahan, W. (2006).
How futile are mindless assessments of round-off in floating point computation.
Technical report, <http://www.eecs.berkeley.edu/wkahan/Mindless.pdf>.
-  Montan, S. (2013).
Sur la validation numérique des codes de calcul industriels.
Thèse de doctorat, LIP6, Université Paris 6.
-  Parker, S. (2011).
Monte carlo arithmetic : exploiting randomness in floating-point arithmetic.
Technical Report CSD-970002, UCLA Computer Science Dept.



References III

-  Wilkinson, J. (1986).
Error analysis revisited.
IMA Bulletin, 22.

