



L'Excellence Numérique

François Cassier

INRA CTIG

Mardi 9 juillet 2013

nag[®]

Experts in numerical algorithms
and HPC services

Agenda

- Présentation de NAG
- Les Bibliothèques NAG & Autres Solutions Logicielles
- Services NAG pour le HPC

Présentation de NAG

- Fondée en 1970 au Royaume Uni en tant que projet coopératif
- Société commerciale, à but non lucratif
- Représentations dans le monde
 - Oxford & Manchester, RU
 - Chicago, USA
 - Tokyo, Japon
 - Taipei, Taiwan
- Plus de 3000 sites clients dans le monde
- +100 collaborateurs, +50% techniques, +25 PhDs

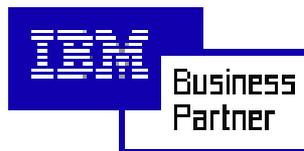
Notre Savoir Faire

- NAG est spécialisé dans le développement d'algorithmes mathématiques et statistiques de qualité industrielle
- Les mathématiciens et les numériciens les plus célèbres ont contribué au développement des algorithmes des bibliothèques NAG
- Les codes numériques NAG sont intégrés dans de nombreuses solutions logicielles tierces, comme par exemple AMD
- De nombreux projets en collaboration pour la recherche

De Nombreux Partenaires pour la Recherche

- **University of Aachen**
 - Prof. Uwe Naumann
 - Automatic Differentiation (AD)
- **Illinois Institute of Technology**
 - Prof. Fred Hickernell
- **University of Manchester**
 - Profs. Nick Higham (FRS), Peter Duck and Ser-Huang Poon
- **University of Oxford**
 - Profs. Mike Giles, Working with NAG to develop a Monte Carlo engine on high-end SIMD architectures (GPUs).
- **Universita di Roma I / NYC**
 - Prof. Peter Laurence
- **Stanford University**
 - Profs. Gill, Murray, Saunders, Wright
- **University of Tennessee**
 - Prof. Jack Dongarra et al
- **University of Warwick**

Quelques Partenaires



Solutions Logicielles NAG

- **Librairies Numériques**

- Des composants logiciels souples d'utilisation, pour de nombreux langages informatiques, environnements de développement et plateformes de déploiement. Optimisés pour le calcul hautes performances

- **Compilateur et Environnement de Développement Fortran : Fortran Builder**

- **Solution de Différenciation Algorithmique**

COMPILATEUR NAG FORTRAN

Compilateur NAG Fortran

- Premier compilateur Fortran 90 disponible au monde
- Support de Fortran 95 et de la plupart des fonctionnalités de Fortran 2003
- Régulièrement mis à jour et entièrement supporté
- EXCELLENT pour la vérification de code (le meilleur au monde dans ce domaine !)

NAG Fortran Builder (version Windows)

- Environnement de développement intégré pour le compilateur NAG sous Windows
- Utilisation facilitée des Bibliothèques Numériques NAG
 - Templates fournis pour les exemples
- Outils associés : Polisseur Fortran, Convertisseur Fortran , exemples LAPACK
- Débogueur intégré

LIBRAIRIES NUMÉRIQUES NAG

Notre Philosophie de Développement

- Nos priorités : *robustesse et performances*
- Les algorithmes NAG sont choisis pour leur(s) :
 - utilité
 - robustesse
 - précision
 - stabilité
 - performances

Pourquoi Utiliser les Librairies NAG ?

- Richesse incomparable en fonctionnalités math/stat
- Réputation de qualité - précision et robustesse
- Code testé intensivement, documenté et supporté
- Réduit les temps de développement
- Des composants logiciels
 - Qui s'intègrent parfaitement à la plupart des environnements informatiques
 - Des interfaces simples pour les outils préférés des utilisateurs
- Des performances continuellement améliorées
- Un support technique expert

Contenu des Bibliothèques NAG

- NAG fournit des composants haut niveau pour le calcul math/stat
 - Equations non linéaires
 - Sommes de série et transformées, FFTs
 - Quadrature
 - ODEs, PDEs et équations intégrales
 - Approximation et interpolation de courbes et de surfaces
 - Optimisation et recherche d'opérations
 - Algèbre linéaire dense, incluant LAPACK
 - Systèmes linéaires creux, vecteurs et valeurs propres
 - Fonctions spéciales
 - Génération de nombres aléatoires
 - ...

Nouveautés Mark 23 (2011-2012)

La Mark 23 propose +150 nouvelles fonctions...

■ Transformées en Ondelettes

- Transformée continue 1D
- Transformées 2D discrètes à 1 seul niveau ou multi niveaux

■ Equations Différentielles

- Solution BVP par la méthode Chebyshev pseudo-spectrale

■ Opérations de Matrice

- Exponentielles de matrice
- Fonctions de matrices symétriques réelles et hermitiennes
- Fonctions de matrices creuses
- Solveurs de Cholesky et factorisations par pivot à précision mixte LAPACK 3.2

■ Interpolation

- Méthode de Shepard modifiée pour 4D/5D

■ Nouvelles Fonctions de Vecteurs (dans G01 and S)

■ Optimisation

- Optimisation à points de départ multiples
- Minimisation par approximation quadratique (BOBYQA)
- Optimisation globale stochastique (PSO)

■ Nombres Aléatoires

- Générateurs de copules multivariés
- Mersenne Twister avec “skip-ahead”
- Générateur L’Ecuyer MRG32K3a

■ Statistiques

- Quantiles de données streamées, Student’s t bi-varies et fonctions de densité de deux probilités
- Matrice de corrélation la plus proche
- Régression quantile
- Détection de données aberrantes Pierce
- Ajustement Anderson–Darling

Nouveautés Mark 24 (2013-2014)

La Mark 24 propose +130 nouvelles fonctions...

- **Transformées**
 - FFT de données réelles 2D et 3D
 - Transformées en ondelettes 3D discrètes
- **Interpolation**
 - Méthode de Shepard pour n dimensions
- **Optimisation**
 - Moindres carrés non négatifs
- **Valeurs/Vecteurs Propres**
 - Driver pour les problèmes à matrices creuses
- **Séries Temporelles**
 - Séries non homogènes
- **Méthodes Multivariées**
 - Modèle de mélange gaussien
- **Fonctions Hypergéométriques**
 - 1F1
- **Nombres Aléatoires**
 - Pont brownien
 - Champ aléatoire
- **Statistiques**
 - Matrice de corrélation la plus proche avec pondération individuelle des éléments
 - Régression par sélection du meilleur sous-ensemble
- ...

Composants NAG pour le Datamining

- **Nettoyage de Données**
 - Imputation de Données
 - Détection des Données Abhérentes
- **Transformation de Données**
 - Rééchantillonnage
 - ACP
- **Analyse de Clusters**
 - Clusters K-means
 - Clusters Hiérarchiques
- **Classification**
 - Arbres de classification
 - Modèles Linéaires Généralisés
 - Plus Proches Voisins
- **Régression**
 - Arbres de régression
 - Régression linéaire
 - Réseaux de neurones
 - Plus Proches Voisins
 - Modèles de Fonctions Radiales
- **Règle d'Association**
- **Fonctions Utilitaires**
 - En complément des fonctions principales et pour aider au prototypage

Produits de la Gamme

- NAG Fortran Library (FL)
- NAG Library for SMP & Multicore (FS)
- NAG C Library (CL)
- NAG Library for .NET (DT)
- NAG Toolbox for MATLAB (MD)
- Routines NAG pour GPU

Disponibilité des Bibliothèques NAG

De nombreux O/S supportés

- Windows
- Linux
- Mac
- Solaris
- AIX
- HP-UX
- ...

Support des compilateurs leaders (Fortran, C & C++, C#/.NET)

- Intel, Pathscale, PGI
- GCC, GFortran
- Absoft, Lahey, Visual C++
- NAG
- ...

Une Intégration Aisée

- C++
 - C# / .NET
 - Visual Basic
 - Java
 - Borland Delphi
 - Python
 - F#
 - ...
 - Et bien plus encore
- Excel
 - MATLAB
 - et Octave, SciLab
 - Mathematica
 - Maple
 - LabVIEW
 - R & S-Plus
 - SAS
 - ...
 - Et bien plus encore

LICENCE INRA CTIG

■ Pour Les Librairies Numériques :

- NAG Fortran (FL Mark 24)
- NAG C (CL Mark 23)
- NAG Toolbox pour MATLAB (MB Mark 23)
- + interfaces (par exemple Java)

■ Accès direct pour les chercheurs :

- L'installation peut être faite sur n'importe quelle machine x86/Linux 64
- Accès complet au support de NAG support@nag.co.uk

DIFFÉRENCIATION ALGORITHMIQUE

Différenciation Algorithmique (AD)

- Solutions logicielles et expertise pour calculer les dérivées exactes d'une fonction de la manière la plus performante possible
- Proposée par NAG en partenariat avec l'Université d'Aix la Chapelle - RWTH (Prof. Uwe Naumann)

AD - Principe

- La Différenciation Algorithmique (AD) est une technique qui supporte la transformation d'un programme complexe qui implémente des fonctions vectorielles, multi-variées et non-linéaires en programmes pour le calcul de plusieurs types de dérivées.
- Les compilateurs de codes dérivés effectuent cette transformation sémantique au niveau du code source (C/C++, Fortran Matlab, ...). Les programmes adjoints sont d'un intérêt particulier car ils permettent que les gradients (par ex. Deltas) et les hessians projetés (par ex. Gammas projetés) soient calculés avec un faible nombre CONSTANT d'évaluations de la fonction sous-jacente (par ex. Une simulation de Monte Carlo).
- La méthode classique par approximation par différence finie est bien plus coûteuse.

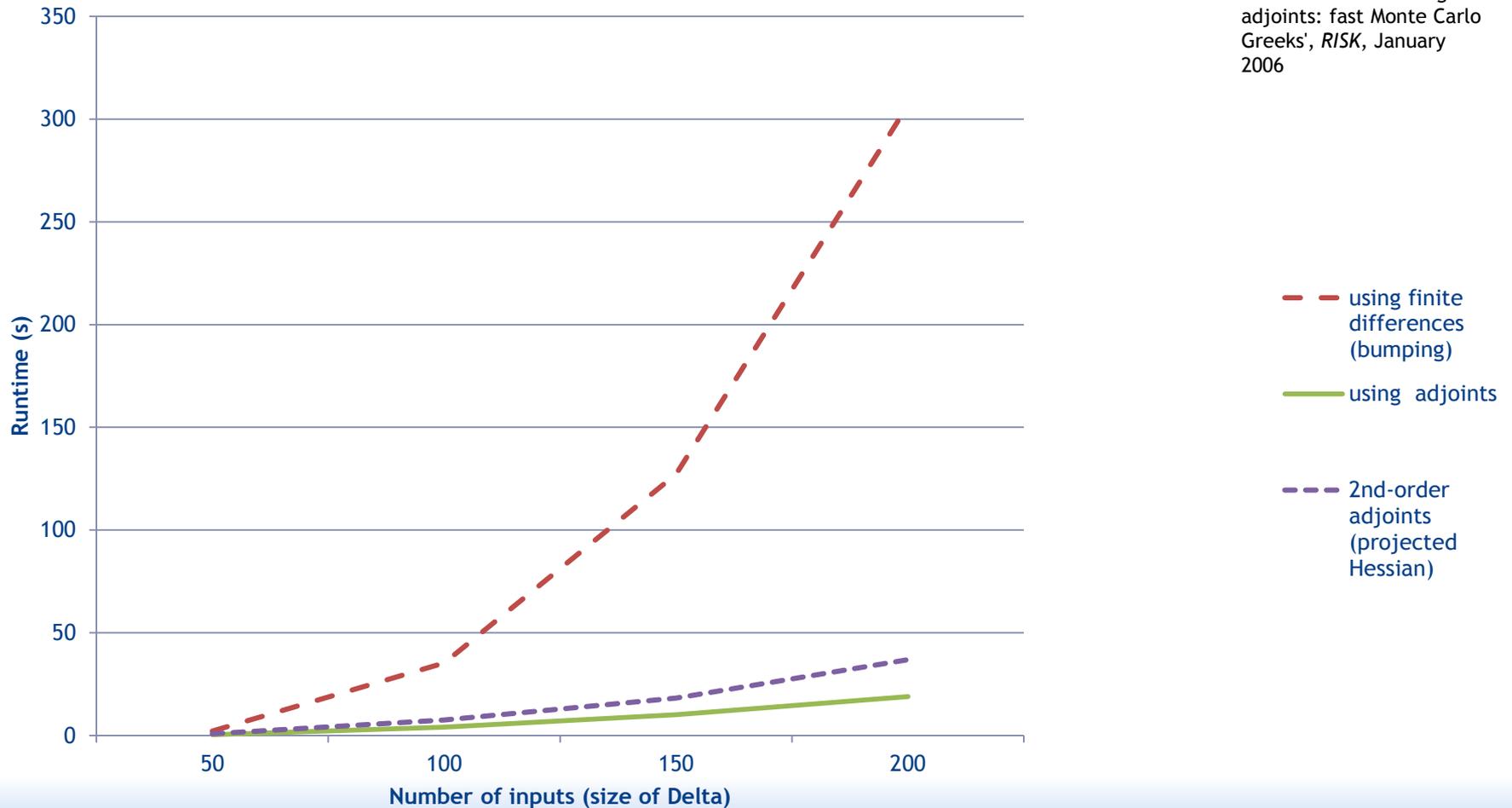
AD – 3 Raisons pour l'Utiliser !

- **Besoin de sensibilités exactes**
 - i.e. l'imprécision de la différence finie peut avoir un impact lourd sur la convergence
- **Besoin de gradients peu couteux**
 - Particulièrement si le problème est à grande dimension (voir planche suivante)
- **Besoin d'automatisation**

AD - Réduction du Temps de Calcul

5000 gradient evaluations of LIBOR Market Model*

*M.B. Giles and P. Glasserman. 'Smoking adjoints: fast Monte Carlo Greeks', *RISK*, January 2006



SERVICES NAG POUR LE HPC

Les Services HPC et de Consulting de NAG

■ Support à l'activité

- Stratégie HPC, veille et évaluation, support à l'expression de besoins, planification et revue

■ Support aux développeurs et aux utilisateurs

- Parallélisation & optimisation
- Développement d'algorithmes et innovation
- Améliorations fonctionnelles et re-engineering
- Expertise logicielle pour plus de robustesse

■ Formations

- Technologies HPC: MPI, OpenMP, CUDA, OpenCL, etc.
- Produits NAG

Résumé

- **NAG : des logiciels de haute qualité pour le calcul scientifique**
 - Les Bibliothèques Numériques NAG
 - Le Compilateur NAG Fortran
- **NAG : des prestations de services expertes pour le HPC**

Les Contacts Clés chez NAG

www.nag.co.uk

Support Technique et Aide à l'Utilisation

support@nag.co.uk

Commercial: fcassier@nag.com

NAGNews <http://www.nag.co.uk/NAGNews/Index.asp>