

Sujet : Intégration d'une méthode de multipôles rapide dans un code de dynamique moléculaire parallèle.

Responsables : B. bramas et O. Coulaud

Téléphones : 05 24 5740 80

Courriels : Olivier.Coulaud@inria.fr, berenger.baramas@inria.fr

Présentation du sujet :

Le développement de bibliothèques efficaces sur des architectures hybrides est un enjeu important pour préparer les codes aux futures machines Exascale. Au sein du projet HiePACS (Inria) on développe une bibliothèque, ScalFMM, pour calculer avec une complexité linéaire les interactions entre paire d'objets, par exemple les interactions coulombiennes. La méthode est basée sur la méthode des multipôles rapides avec plusieurs possibilités pour calculer le champ lointain (Harmoniques sphériques, Interpolation). La méthode a été parallélisée à l'aide d'un paradigme hybride (OpenMP/MPI) et un prototype est basé sur le moteur d'exécution StarPU. Par ailleurs, le CEA/DIF travaille sur le développement d'un code de dynamique moléculaire basé sur le potentiel de type EAM. Outre une version générique multithreads efficace, une version optimisée et spécifique pour coprocesseurs de type GPU et Intel Phi est en cours de développement. Le développement d'une telle version d'un algorithme nécessite une expertise très importante pour que le code réalisé soit performant et maintenable. L'introduction du potentiel de type Coulombien dans la nouvelle version de Stamp serait un plus important pour valider l'architecture de code réalisée dans le cadre du projet ExaStamp. En effet, ce type de potentiel a l'inconvénient majeur de nécessiter des interactions entre toutes les particules et peut donc nécessiter l'introduction d'un mode de parallélisme particulier.

L'objectif du stage est d'étudier l'intégration de la bibliothèque ScalFMM au sein du code exaStamp. Pour cela on étudiera les contraintes liées aux différentes structures de données, au parallélisme, ... Par exemple le code exaStamp est basé sur une décomposition en grille basée sur la taille des listes de Verlet qui conduit à des cellules de petites tailles tandis que la méthode multipôles utilise un octree avec des contraintes différentes concernant la taille des feuilles. Pour terminer un prototype couplant exaStamp et ScalFMM sera réalisé.

Mot-clés : méthode multipole, Octree, dynamique moléculaire, parallélisme

Commentaires : Le stage est rémunéré et se déroulera dans l'équipe projet Inria [HiePACS](https://team.inria.fr/hiepac) au centre Inria Sud-Ouest basé à Bordeaux.

Références :

[1] Greengard, L. & Rokhlin, V. A fast algorithm for particle simulations, Journal of Computational Physics, 1987, 73, 325 - 348

[2] ScalFMM <http://scalfmm-public.gforge.inria.fr>

[3] HiePACS <https://team.inria.fr/hiepac>