

# Sujet : Construction et partage d'un arbre en parallélisation hybride.

**Responsables : B. bramas et O. Coulaud**

**Téléphones : 05 24 5740 80**

**Courriels : [Olivier.Coulaud@inria.fr](mailto:Olivier.Coulaud@inria.fr), [berenger.baramas@inria.fr](mailto:berenger.baramas@inria.fr)**

## Présentation du sujet :

De nombreux problèmes issus de la chimie ou de la physique moléculaire, de la physique des particules, de l'astrophysique,... nécessitent de calculer rapidement des interactions paire à paire, par exemple les interactions coulombiennes ou gravitationnelles. Les algorithmes classiques conduisent à des complexités en  $O(N^2)$  où  $N$  est le nombre de particules du système. La méthode des multipôles rapide (FMM : fast multipole methods, 1987 introduite par L. Greengard [1]) permet d'évaluer le potentiel et les forces avec une complexité linéaire. Cette méthode s'est fortement développée dans beaucoup d'autres domaines (équations intégrales, mécanique des fluides, élasticité, électromagnétisme...) et sont désormais indispensables pour traiter des problèmes de très grande taille. La parallélisation du calcul du potentiel et des forces est maintenant très efficace. Le goulot d'étranglement réside dans la construction de l'octree et dans sa mise à jour au cours des itérations. La parallélisation de cette construction conduisant à un bon équilibrage de la charge est un enjeu majeur pour cette méthode.

L'objectif de ce stage est donc de développer une implémentation efficace de la construction d'un octree dans un parallélisme hybride mémoire partagée (OpenMP) et mémoire distribuée (MPI). La construction de l'arbre en parallèle n'a été que récemment revisitée lors du portage de la méthode sur les accélérateurs (cartes graphiques). Dans un premier temps, un état de l'art sur la construction des octrees en parallèle devra être réalisés. A partir de celui-ci, une première parallélisation sera réalisée indépendamment des noyaux de calculs. Pour optimiser l'équilibrage de la charge, on introduira lors de la construction de l'arbre une fonction de coût dépendante des différents opérateurs impliqués dans le calcul pour garantir un équilibrage de charge optimal pour les simulations en mémoire distribuée. Les développements s'effectueront dans la bibliothèque ScalFMM et seront validés sur le noyau Coulombien ( $1/r$ ) et avec le code de dynamique des dislocations OptiDis-ScalFMM. Les tests se feront sur la plate-forme PlaFRIM (544 cœurs) et sur le mésocentre Bordelais MCIA (3000 cœurs).

**Mot-clés :** méthode multipole, Octree, simulation à grande échelle, parallélisme

**Commentaires :** Le stage est rémunéré et se déroulera dans l'équipe projet Inria [HiePACS](#) 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/hiepacs>