

Intégration et Optimisation d'Algorithmes pour un Code Massivement Parallèle sur Calculateurs Exafopiques : Application à la Dynamique Moléculaire Classique

Les futures générations de supercalculateurs exaflopiques nécessiteront des logiciels de plus en plus performants afin de tirer parti de la puissance de calcul colossale de ces machines. La conception de codes massivement parallèle adaptés requiert ainsi de retravailler les algorithmes déjà existants et d'optimiser la gestion des ressources.

Intégré au sein d'une équipe de développeurs pluridisciplinaire, le candidat prendra part au développement d'ExaStamp, un logiciel de dynamique moléculaire classique conçu pour tourner sur les machines de demain. Ce code massivement parallèle (MPI + multithreading) permet de simuler le comportement des matériaux à l'échelle atomique. L'objectif de ce stage est de compléter le code existant en y intégrant différents algorithmes permettant d'améliorer la description des matériaux en gérant de nouveaux mécanismes : algorithmes de variation de volume (ensemble thermodynamique NPT), gestion des forces électrostatiques (somme d'Ewald avec transformées de Fourier), algorithmes pour l'échelle mésoscopique (DPD)...

Une attention particulière sera accordée aux performances, à la gestion des ressources et à l'optimisation des algorithmes d'une manière générale. Les résultats obtenus seront validés sur les supercalculateurs du CEA et comparés avec des résultats issus d'autres codes de dynamique moléculaire.

Le sujet sera précisé avec le candidat en fonction de ses préférences et des besoins de l'équipe.

Domaine de spécialité : HPC

Langages / Logiciels : C++, une connaissance des outils de programmation parallèle serait un plus (MPI, OpenMP ou TBB)

Contacts : aude.giard@cea.fr, laurent.colombet@cea.fr, laurent.soulard@cea.fr

Lieu du stage : CEA/DIF, Bruyères le Chatel (<http://www-dam.cea.fr>)