



# Stage de Master

## CEA-DAM/DIF

### ***Optimisation d'un code HPC de dynamique moléculaire massivement parallèle***

#### **Sujet de stage :**

La dynamique moléculaire classique permet d'étudier des phénomènes à l'échelle atomique difficilement observables expérimentalement. Pour ses besoins propres, le CEA-DAM a développé le code ExaStamp, spécialement adapté aux architectures des calculateurs actuels et futurs. Nos échantillons de simulations peuvent ainsi atteindre plusieurs milliards d'atomes. Cela permet d'une part de se rapprocher des échelles expérimentales, et d'autre part d'accroître la précision de certaines données par l'amélioration de la statistique dont elles sont extraites. Néanmoins, l'un des coûts de cette montée en échelle est l'augmentation de la quantité de données générées. Un pas de temps de simulation peut représenter de l'ordre de la centaine de Giga octet de données et une simulation typique comporte aisément plusieurs centaines de milliers pas de temps. Ne pouvant pas stocker une telle quantité de données, elles doivent être traitées à la volée. Pour cela, nous avons besoin de codes d'analyses performants pour ne pas surcharger la simulation. Participer au développement de ces outils sera le but de ce stage.

#### **Description de l'offre :**

L'un des outils d'analyse de nos simulations de dynamique moléculaire repose sur la projection des atomes sur une grille régulière 3D sur laquelle on applique ensuite des algorithmes de traitement d'image. La structure mémoire de cette grille régulière commence à montrer ses limites en terme de performance. Le premier objectif de ce stage sera donc d'optimiser la structure mémoire de cette dernière, et d'en mesurer les performances. L'optimisation de la structure mémoire impliquera une modification des communications MPI ainsi que ses fonctions d'accès. Dans un second temps, le temps gagné grâce à cette première optimisation devrait permettre d'améliorer la précision de la projection des atomes en utilisant des fonctions plus coûteuses mais plus représentatives dont on évaluera les performances. Ces améliorations permettront par exemple aux physiciens de pouvoir étudier la nucléation de pores dans un métal ayant été parcouru par une onde de choc intense car actuellement l'incertitude de projection est trop grande pour quantifier ce phénomène.

Le stage se fera au sein d'une équipe mixte rassemblant physiciens et informaticiens.

#### **Profil du candidat :**

Calcul Haute Performance  
C++, MPI, OpenMP  
Bac +4/5

Contact : [killian.babilotte@cea.fr](mailto:killian.babilotte@cea.fr)

Lieu : CEA/DAM/DIF Bruyères-le-Chatel