

COMMENT RENDRE LE
PARALLÉLISME ACCESSIBLE AUX
CHERCHEURS?

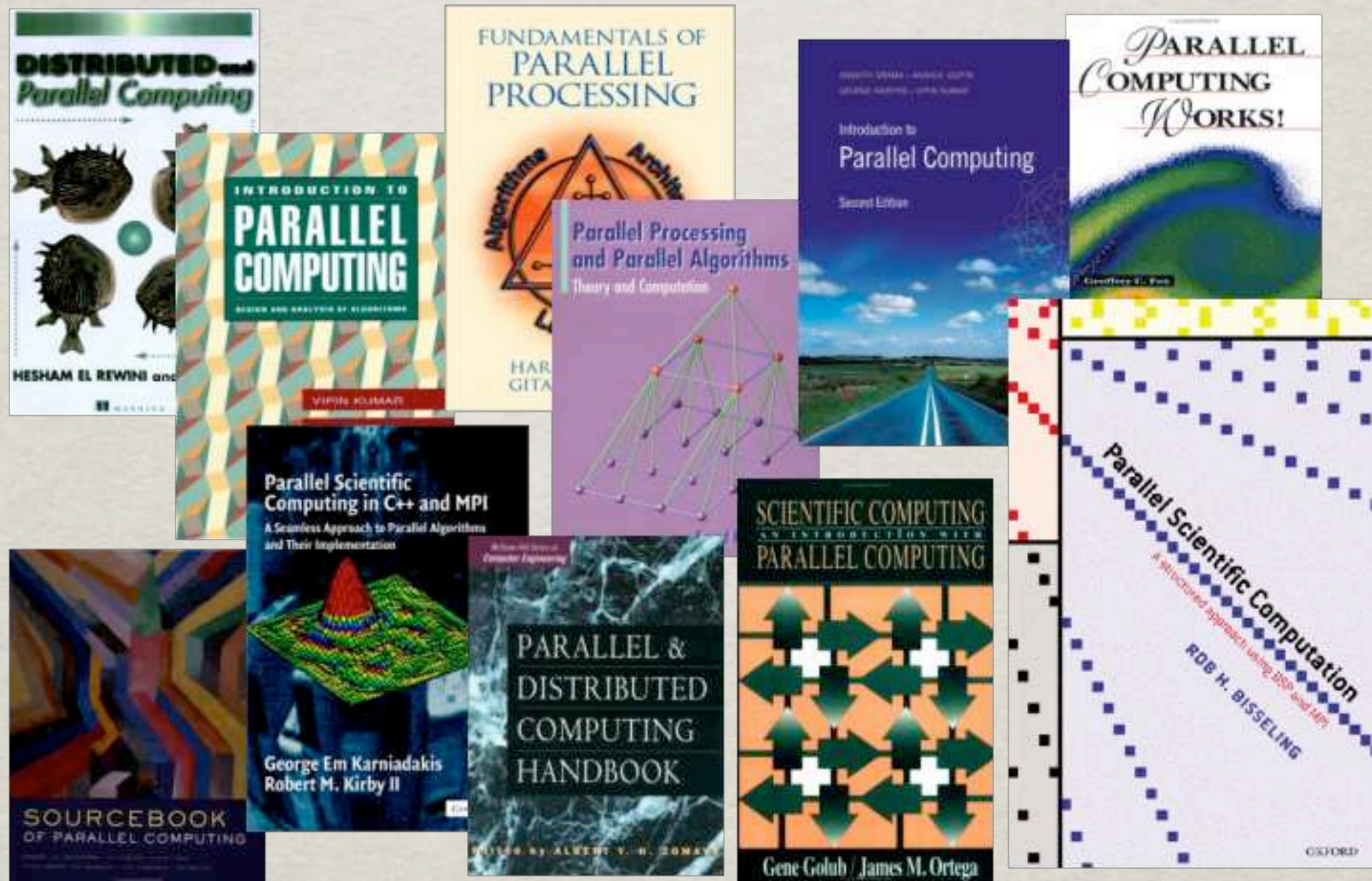
KONRAD HINSEN
LLB, CEA SACLAY

LES ORDINATEURS PARALLÈLES...



... sont omniprésents.

LES ALGORITHMES PARALLÈLES...

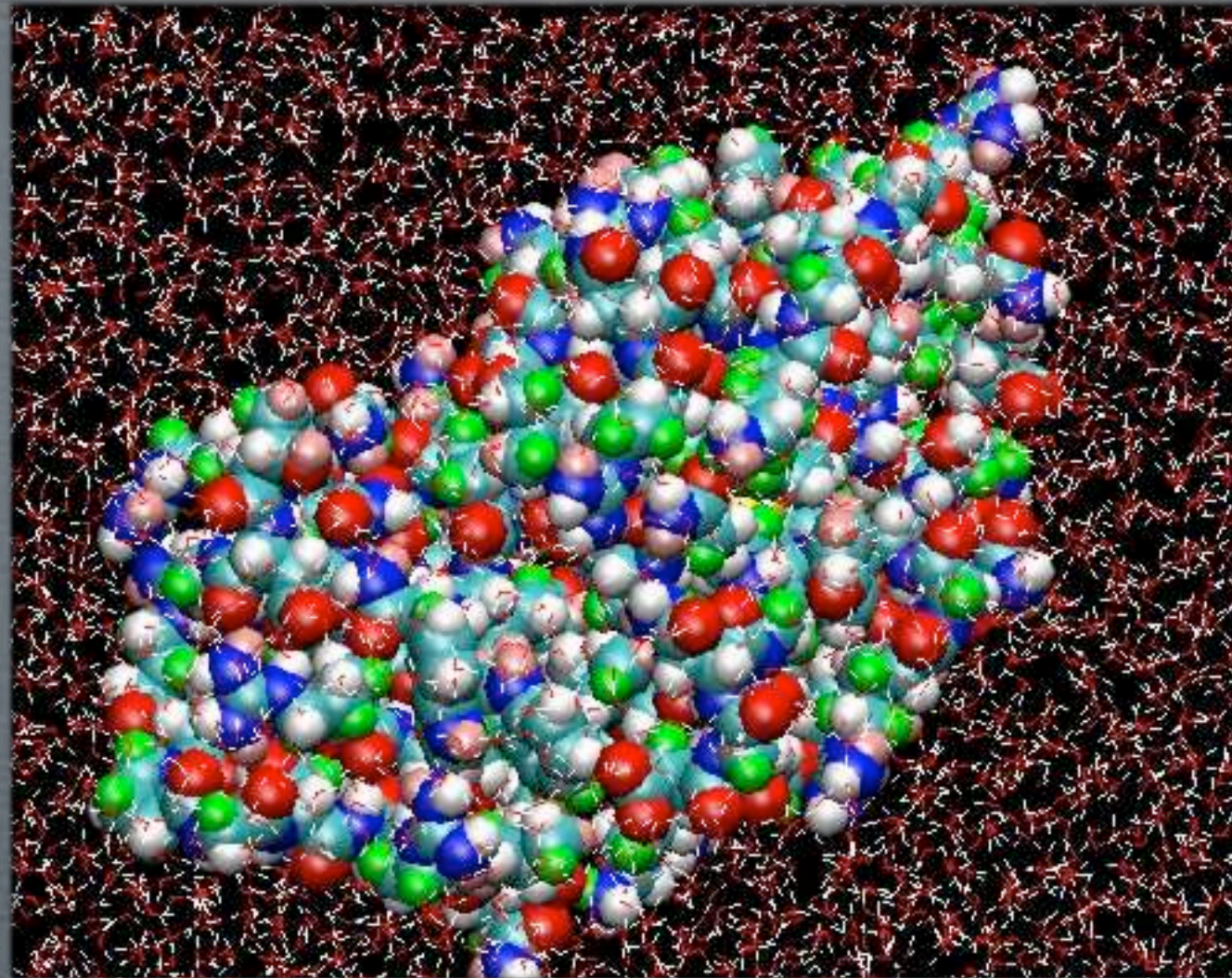


... sont bien documentés.

LA PROGRAMMATION PARALLÈLE...



... reste difficile.



SYSTÈMES BIOMOLÉCULAIRES

DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE

- ✱ Principe: suivre les mouvements de tous les atomes en tout détail.
- ✱ Partie coûteuse: calcul des interactions
- ✱ Resultat: fichier de trajectoire (1 GO)
- ✱ Algorithmes standards et parallélisés

ANALYSE DES TRAJECTOIRES

- ✻ Spécifique à chaque projet de recherche
- ✻ Souvent très coûteuse
- ✻ Souvent facile à paralléliser **en principe**
- ✻ Rarement parallélisée en pratique à cause de la **difficulté** de l'**implémentation**

EXEMPLE

- ✪ Calculer $\sum_{i=1}^N \frac{1}{w_i} D(\mathbf{R}_i(k\Delta t))$
- ✪ Parallélisation de la somme triviale
- ✪ Structures de données complexes à distribuer
- ✪ Gestion de la lecture d'un fichier de 1 GO

APPROCHE PRATIQUE

LANGAGE PYTHON

- ✻ Développement rapide
- ✻ Orienté objet
- ✻ Gestion de mémoire automatique
- ✻ Bibliothèques scientifiques disponibles
- ✻ Facile à interfacer avec C et Fortran

MODÈLE BSP

- ✻ Simple
- ✻ Pas d'interblocages
- ✻ Permet réarrangement du code pour débougage interactif

PYTHON + BSP

- ✻ Développement rapide et interactif
- ✻ Communication d'objets quelconques
- ✻ Bibliothèques d'objets parallèles

EXPÉRIENCE
PRATIQUE

APPLICATIONS

- ✻ Analyse de trajectoires de Dynamique Moléculaire du lysozyme: K. Hinsen, V. Hamon & G. Kneller, CBM Orléans
- ✻ Equations différentielles partielles: A. Odegard, O. Skavhaug & H.P. Langtangen, Simula Research Lab, Oslo

CONCLUSIONS

- ☀ Ça marche assez bien
- ☀ Apprentissage rapide
- ☀ Mode interactif très pratique
- ☀ Implémentation à améliorer
- ☀ Besoin d'une librairie scientifique plus complète