

P50. Parallélisation de la méthode FDTD & photonique des diatomées

Année 2015

Encadrants : K. HEGGARTY (Département Optique) et Y. KERMARREC (Département LUSSI)

Partenaires : P-E. DURAND, Université de Bretagne-Sud

Mots clés : Programmation parallèle, méthodes numériques, photonique, diatomées, biomimétique, MPI, CUDA, FDTD, XSvit

Résumé :

L'étude des diatomées et notamment de l'interaction de la lumière avec leur frustule est un enjeu de recherche : c'est pourquoi ce projet est de déterminer le meilleur moyen de calculer cette interaction dans un temps raisonnable. Pour ce faire, nous nous sommes tournés vers la parallélisation. Le travail a été divisé en plusieurs étapes : un état de l'art avec un test des solutions existantes basées sur les technologies MPI (*Message Passing Interface*) et CUDA (*Compute Unified Device Architecture*), ainsi que la découverte de leurs limites et différences avec une nouvelle implémentation.

1. Présentation et contexte du projet.

Les diatomées sont des êtres microscopiques unicellulaires aquatiques qui possèdent un exosquelette siliceux nommé frustule. Ce dernier fait l'objet d'étude sur son rôle optique notamment pour la photosynthèse : afin de connaître les propriétés optiques de ces organismes, il est nécessaire de simuler le comportement optique de ces derniers et pour cela, la méthode FDTD (*Finite Difference Time Domain*) a été choisie. À cause de leur taille et de leur résolution, les calculs pour simuler l'interaction de la lumière et des frustules ne peuvent être calculés sur un seul processeur pour raison de temps et de mémoire. C'est ainsi que l'idée du calcul distribué est étudiée avec deux pistes : une par cluster de calcul et la technologie MPI ; l'autre par GPU (Graphics Processor Unit) sous CUDA.

2. Méthodologie développée pour aboutir.

Afin de répondre aux besoins du LBCM et de P-E. DURAND, nous avons tout d'abord formé l'équipe s'occupant du projet à la programmation parallèle avec une initiation à MPI. Puis, à l'aide d'un état de l'art qui s'est traduit par l'analyse de deux logiciels utilisant les deux technologies envisagées par le client : MEEP MPI d'une part et XSvit d'autre part. Le premier a été développé par le MIT afin d'utiliser la FDTD et des clusters alors que le second est un logiciel libre utilisant CUDA, les deux utilisant la FDTD. De plus, nous avons choisi de créer notre propre implémentation afin de pouvoir contrôler au plus la véracité des résultats et l'optimisation. Pour cela, nous avons développé une solution qui utilise MPI.

Afin de répondre à ces besoins, le groupe s'est réparti en trois pôles : un pôle MEEP, un XSvit, et un autre qui commençait l'implémentation logicielle. Enfin, le groupe s'est réuni pour finir l'implémentation, les différents rapports techniques, et vérifier la cohérence des résultats obtenus tout le long.

3. Développement des différentes tâches et principaux résultats.

3.1 Manipulation des logiciels et implémentation

Dans un premier temps, nous avons suivi une formation technique pour découvrir et apprendre à utiliser MPI, qui a été la base du travail qui a suivi. En se basant sur des cas bien connus de la physique, nous avons pu ensuite graduellement étudier des cas de plus en plus complexes avec les logiciels MEEP et XSvit, en 1 à 3D, parallèle ou non, ainsi que notre implémentation.

En parallèle, nous nous sommes intéressés à la méthode d'analyse numérique FDTD (*Finite Difference Time Domain*) avec l'algorithme de Yee, qui se base sur la discrétisation des équations de Maxwell pour obtenir une solution approchée.

Notre implémentation se base sur ces techniques et a produit une version 1 et 2D parallèle.

3.2 Performances obtenues et comparaison

Une fois cet outil développé et les logiciels maîtrisés, nous pouvons tester leurs performances dans plusieurs cas, et sur différents matériels. L'école dispose à la fois de grosses machines avec des CPU/GPU multi-cœur performants, et de clusters composés de nombreuses machines à la puissance modérée. Avec ce matériel, nous testons l'influence du nombre de machines, du réseau, et de plusieurs paramètres selon la taille des simulations souhaitée. Cela nous orientera sur la fin du projet et la suite à donner au projet. Enfin, nous pourrons comparer ces résultats avec ceux obtenus expérimentalement, après la fabrication de structures synthétiques similaires.

4. Conclusions et perspectives.

Ce projet apporte de nombreuses connaissances utiles et d'actualité à toute l'équipe liées au développement dans un contexte parallèle. Nous nous sommes familiarisés avec plusieurs outils et avons développé un programme parallèle capable de mener des simulations 2D parallèles.

Nous avons recueilli de nombreuses informations sur les performances d'un système parallèle appliqué à la simulation des propriétés optiques d'objets microscopiques.

A partir de cela, un choix pertinent de matériel et d'outils pourra être effectué. Le passage à la 3D est la prochaine étape.

Bibliographie

[1] Kane Yee "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media". 1966, available in IEEE Transactions on Antennas and Propagation (Volume:14 , Issue: 3), Page(s): 302–307 <http://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?tp=&arnumber=1138693>

[2] Guiffaut C. "A parallel FDTD algorithm using the MPI library", 2001, available in Antennas and Propagation Magazine, IEEE (Volume: 43 , Issue: 2), Page(s): 94-103 http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs_all.jsp?arnumber=924608&tag=1

[3] EE5390 *Electromagnetic analysis using Finite-Difference Time-Domain*, lecture 01- lecture 14 disponibles sur :

