

Algorithmique et Programmation Parallèle

TD 2 OMP

Problème : Dynamique Moléculaire

Le code fourni (repertoire `MolDyn/`) est une maquette d'une simulation de dynamique moléculaire dans un gaz (interaction entre les molécules du gaz).

Makefile pour compiler :

```
% make NPART=MINI      => 1372 particules (i.e. molécules)
% make NPART=MEDIUM   => 4000 particules
% make NPART=MAXI      => 13500 particules
```

fichier binaire `md`.

La fonction `forces` (fichier `forces.c`) concentre une partie importante du coût calcul.

1. Paralléliser cette fonction en utilisant les directives `parallel for` et `atomic`. Classer attentivement les variables en fonction des statuts `shared`, `private`, `reduction`.
2. Faire des tests (en mode `NPART=MINI`) avec différentes politiques d'ordonnancement (utiliser `schedule(runtime)` et la variable d'environnement `OMP_SCHEDULE`) et avec différents nombres de threads

A partir de cette première version parallèle, sortir la région parallèle de la fonction `forces` pour entourer la boucle extérieure dans le fichier `main.c`

3. Version 1 : les fonctions dans le corps de la boucle autres que `forces` ne sont exécutées que par un seul thread
4. Version 2 : Paralléliser toutes les fonctions appelées dans le corps de la boucle

Les instructions `atomic` constituent un goulot d'étranglement sur la plupart des systèmes.

5. Pour éviter l'utilisation des `atomic`, utiliser un tableau temporaire pour accumuler les forces avec une dimension supplémentaire indexée par le numéro du thread. N'oublier pas l'accumulation finale dans le tableau `f`.
6. Faire une étude d'extensibilité en fonction du nombre de threads (en mode `NPART=MAXI`).