

HPC, introduction à Kokkos

3 mars 2025

1 Installation de kokkos

1. Compiler kokkos en suivant les instructions ici :
<https://kokkos.org/kokkos-core-wiki/get-started/building-from-source.html>
Ne compiler qu'avec l'option OpenMP
2. Installer dans un répertoire personnel (par exemple \$HOME/local/) avec la commande :
`cmake --install builddir --prefix $HOME/local/`
3. Télécharger le fichier kfrog-main.zip, le décompresser. Modifier le CMakeLists.txt pour tenir compte du dossier d'installation de kokkos.
4. Compiler kfrog, vérifier la correction des résultats suivants diverses implémentations de la boucle en temps (avec les fonctions `leapfrog_step_tiling`, `leapfrog_step_kokkos`, `leapfrog_step`).

2 Tiling

1. Chercher les paramètres optimaux pour l'algorithme de tiling.
2. Comparer les temps de calcul avec la version kokkos de l'algorithme. Faire varier les paramètres du calcul. Présenter les résultats dans un tableau. Commenter les résultats.
3. Recompiler kokkos avec l'option CUDA. Modifier le code pour faire tourner le calcul sur GPU. Commenter l'accélération observée.

3 Calcul 3D

1. Modifier le code C++ pour résoudre l'équation des ondes 3D avec un maillage en (i,j,k).
2. Ajouter la prise en compte des termes source.

3. Pour des validations numériques, il est utile de prévoir une option de gestion des maillages périodiques. Modifier le programme pour résoudre l'équation des ondes

$$\partial_t u - \Delta u = s,$$

avec

$$u(x + L, y + L, z + L, t) = u(x, y, z, t).$$

4. Valider le programme au moyen d'une solution "fabriquée" : choisir une fonction périodique quelconque $u(x, y, z, t)$, calculer le terme source associé : $s = \partial_t u - \Delta u$. Vérifier que le schéma est bien d'ordre 2 en temps et en espace sur grille périodique 2D et 3D.
5. Proposer un cas de calcul physiquement réaliste (intégrer un terme source représentant un vrai son).