

Algorithmique hiérarchique parallèle haute performance pour les problèmes à N-corps

Pierre Fortin

LaBRI & INRIA Futurs
Université Bordeaux 1

27 novembre 2006

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

5. Conclusion & Perspectives

Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

5. Conclusion & Perspectives

Présentation du problème à N-corps

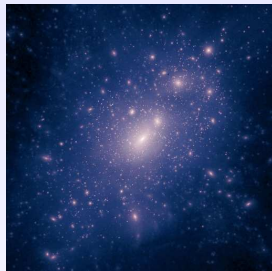
- ★ Calcul des interactions entre N-corps sur plusieurs pas de temps
- ★ Potentiels :
 - ▶ électrostatique → dynamique moléculaire
 - ▶ gravitationnel → astrophysique
- ★ Mais aussi : électromagnétisme, dynamique des fluides, calcul de capacitance, modélisation d'objets 3D, ...
- ★ Calcul direct entre les $N(N - 1)$ paires de complexité quadratique :

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \frac{q_i q_j}{|z_i - z_j|}$$

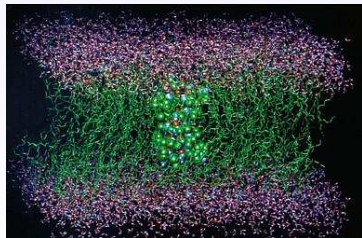
- ★ Principe des interactions réciproques :

$$\mathcal{F}_{A \rightarrow B} = -\mathcal{F}_{B \rightarrow A} \Rightarrow \sum_{i=1}^N \sum_{j < i} \frac{q_i q_j}{|z_i - z_j|}$$

- ★ Objectifs : milliards de particules



Astrophysique

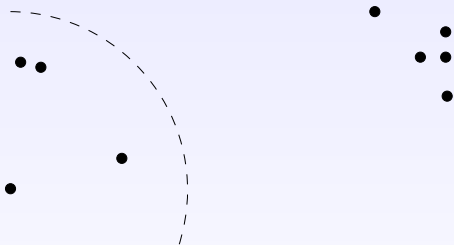


Dynamique moléculaire

Les méthodes hiérarchiques

Distinction entre :

- ★ le champ proche
→ calcul direct
- ★ le champ lointain
→ calcul approché



Décomposition du potentiel :

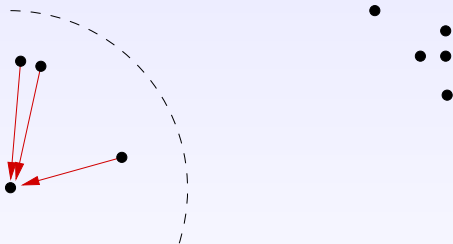
$$\Phi = \Phi_{\text{proche}} + \Phi_{\text{lointain}} \quad \text{car} \quad \lim_{r \rightarrow +\infty} \Phi(r) = \lim_{r \rightarrow +\infty} \left(\frac{q}{r} \right) = 0$$

→ comment distinguer les particules proches / lointaines ?

Les méthodes hiérarchiques

Distinction entre :

- ★ le champ proche
→ calcul direct
- ★ le champ lointain
→ calcul approché



Décomposition du potentiel :

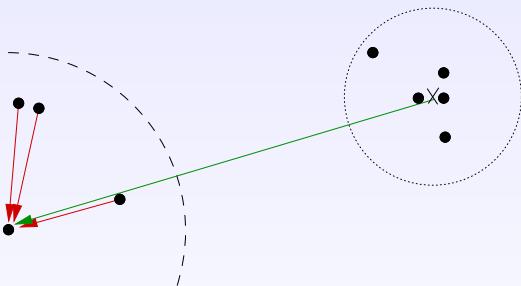
$$\Phi = \Phi_{\text{proche}} + \Phi_{\text{lointain}} \quad \text{car} \quad \lim_{r \rightarrow +\infty} \Phi(r) = \lim_{r \rightarrow +\infty} \left(\frac{q}{r} \right) = 0$$

→ comment distinguer les particules proches / lointaines ?

Les méthodes hiérarchiques

Distinction entre :

- ★ le champ proche
→ calcul direct
- ★ le champ lointain
→ calcul approché



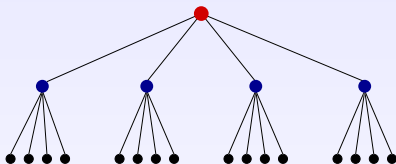
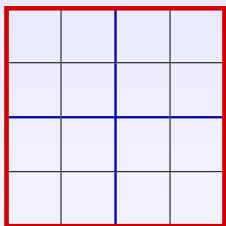
Décomposition du potentiel :

$$\Phi = \Phi_{\text{proche}} + \Phi_{\text{lointain}} \quad \text{car} \quad \lim_{r \rightarrow +\infty} \Phi(r) = \lim_{r \rightarrow +\infty} \left(\frac{q}{r} \right) = 0$$

→ comment distinguer les particules proches / lointaines ?

Les méthodes hiérarchiques

- ★ Décomposition hiérarchique de l'espace avec un octree :



- ★ Algorithme de Barnes-Hut :
 - ▶ interactions « particule \leftrightarrow cellule »
 - ▶ $\mathcal{O}(N \log N)$
 - ▶ basses précisions ($\sim 10^{-3}$)
- ★ Méthode Multipôle Rapide (*Fast Multipole Method*, FMM) :
 - ▶ interactions « cellule \leftrightarrow cellule »
 - ▶ $\mathcal{O}(N)$
 - ▶ toutes les précisions

Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- **La Méthode Multipôle Rapide (FMM)**
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

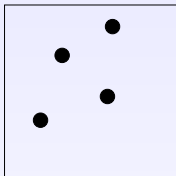
4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

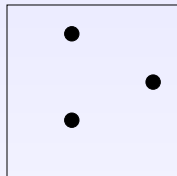
5. Conclusion & Perspectives

Principe

Développements en harmoniques sphériques Y_j^k du potentiel sous 2 formes



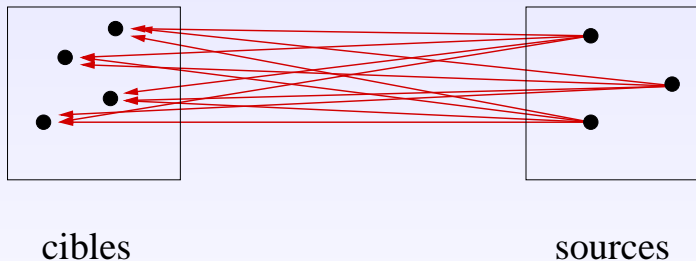
cibles



sources

Principe

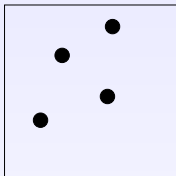
Développements en harmoniques sphériques Y_j^k du potentiel sous 2 formes



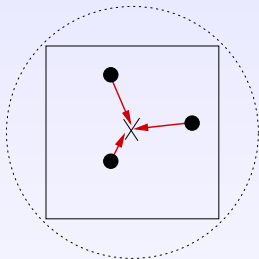
$$\mathcal{O}(N_{\text{cibles}} \times N_{\text{sources}})$$

Principe

Développements en harmoniques sphériques Y_j^k du potentiel sous 2 formes



cibles



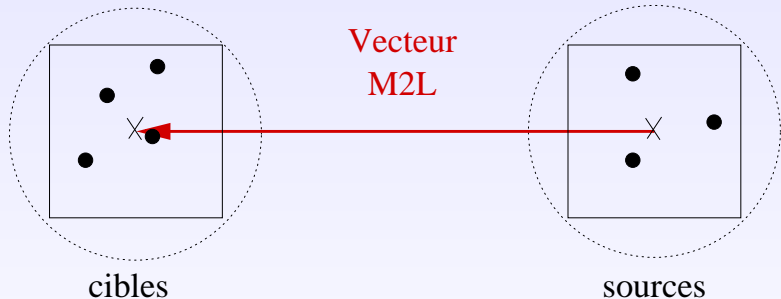
sources

Dév. multipôle M_j^k :

$$\Phi = \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=-j}^j M_j^k \frac{Y_j^k(\theta, \phi)}{r^{j+1}}$$

Principe

Développements en harmoniques sphériques Y_j^k du potentiel sous 2 formes



critère de « bonne séparation »

Dév. local L_j^k :

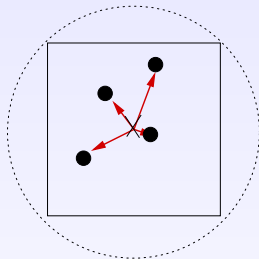
$$\Phi = \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=-j}^j L_j^k Y_j^k(\theta, \phi) r^j$$

Dév. multipôle M_j^k :

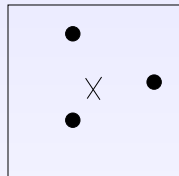
$$\Phi = \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=-j}^j M_j^k \frac{Y_j^k(\theta, \phi)}{r^{j+1}}$$

Principe

Développements en harmoniques sphériques Y_j^k du potentiel sous 2 formes



cibles



sources

critère de « bonne séparation »

Dév. local L_j^k :

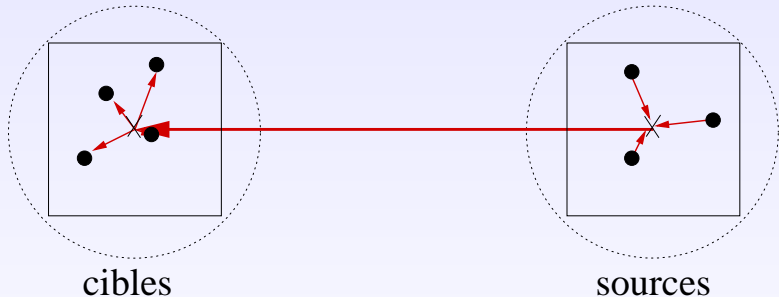
$$\Phi = \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=-j}^j L_j^k Y_j^k(\theta, \phi) r^j$$

Dév. multipôle M_j^k :

$$\Phi = \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=-j}^j M_j^k \frac{Y_j^k(\theta, \phi)}{r^{j+1}}$$

Principe

Développements en harmoniques sphériques Y_j^k du potentiel sous 2 formes



$$\mathcal{O}(N_{\text{cibles}} + N_{\text{sources}})$$

Dév. local L_j^k :

$$\Phi = \sum_{j=0}^P \sum_{k=-j}^j L_j^k Y_j^k(\theta, \phi) r^j$$

Erreur ε



degré max P



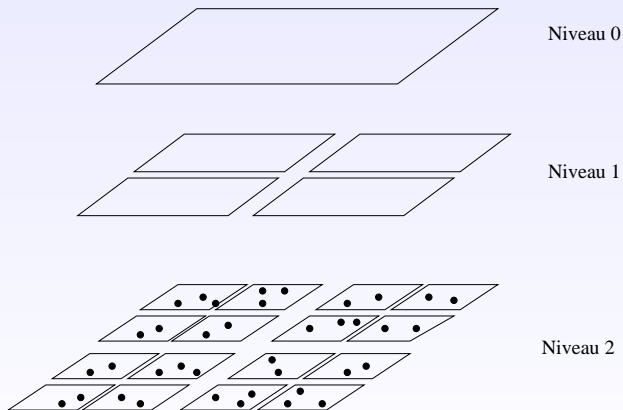
$\mathcal{O}(P^2)$ termes

Dév. multipôle M_j^k :

$$\Phi = \sum_{j=0}^P \sum_{k=-j}^j M_j^k \frac{Y_j^k(\theta, \phi)}{r^{j+1}}$$

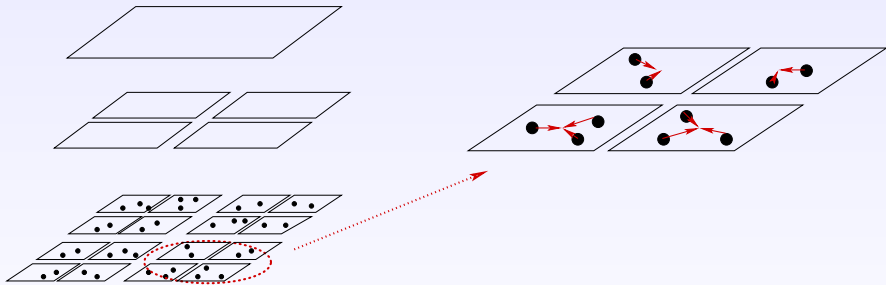
Principe : remontée

Les particules sont stockées au niveau des feuilles.



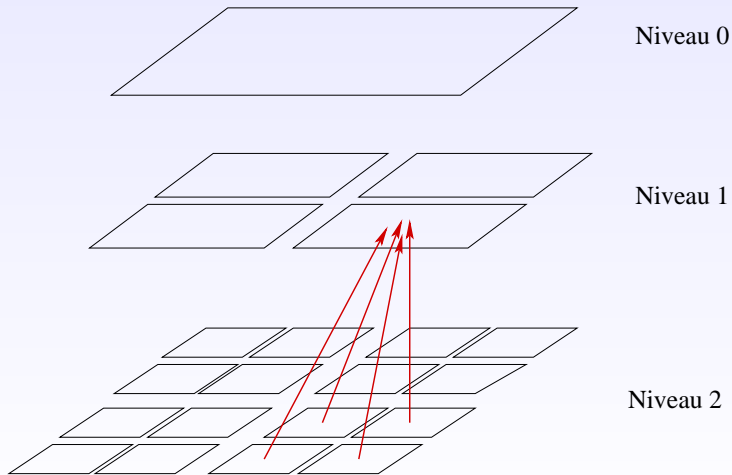
Principe : remontée

Particules \Rightarrow Dév. multipôles : **P2M**



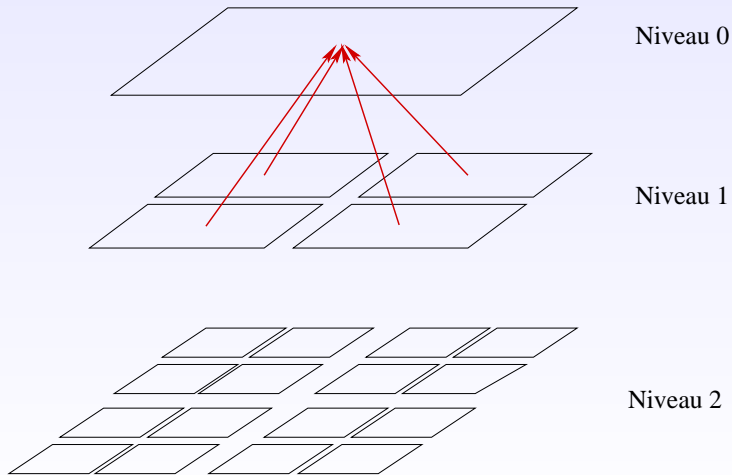
Principe : remontée

Dév. multipôle (enfant) \Rightarrow Dév. multipôle (père) : **M2M**



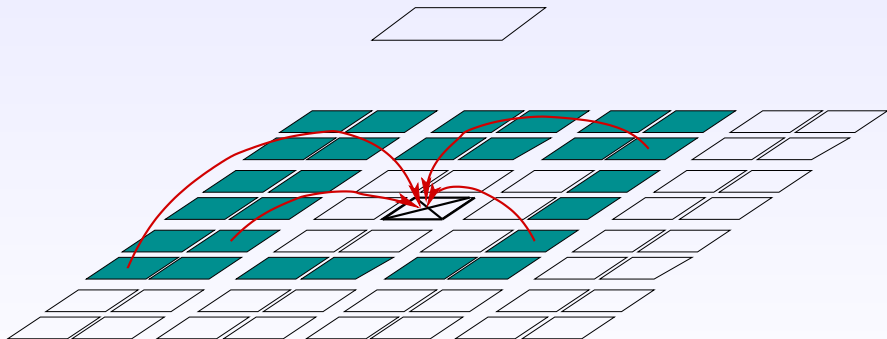
Principe : remontée

Dév. multipôle (enfant) \Rightarrow Dév. multipôle (père) : **M2M**



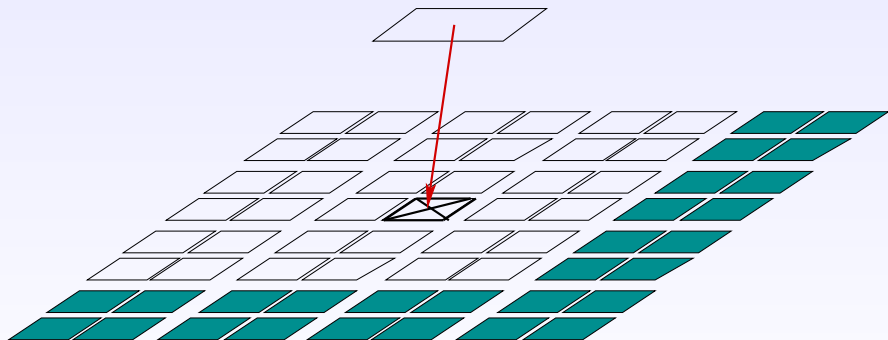
Principe : descente

Liste d'interaction : notion de « bonne séparation », 189 membres en 3D
Dév. multipôle \Rightarrow Dév. local : **M2L**



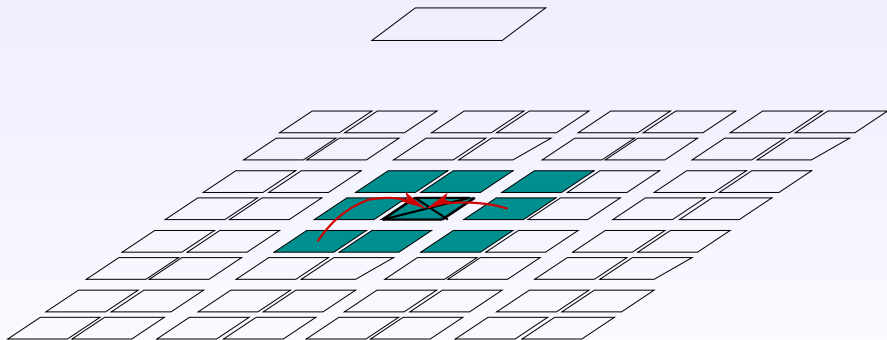
Principe : descente

Dév. local (père) \Rightarrow Dév. local (enfant) : **L2L**



Principe : descente

Au niveau des feuilles → calcul direct : **P2P**
Liste du calcul direct : voisins immédiats



Complexité et opérateur $M2L$

FMM uniforme :

- ★ $N \Rightarrow$ choix de la hauteur H de l'octree :

$$H \Rightarrow \left\{ \begin{array}{ll} \text{nombre de cellules} & \rightarrow \text{calcul champ lointain} \\ S_{moy} & \rightarrow \text{calcul champ proche} \end{array} \right.$$

\Rightarrow équilibre : coût champ proche / coût champ lointain

- ★ complexité :

$$\left. \begin{array}{l} \text{remontée : } \mathcal{O}(N) \text{ cellules} \\ \text{descente : } \mathcal{O}(N) \text{ cellules} \\ \text{calcul direct : } \mathcal{O}(N) \text{ feuilles} \end{array} \right\} \text{ FMM en } \mathcal{O}(N)$$

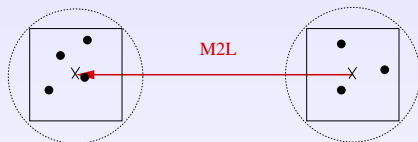
Opérateur $M2L$:

- ★ 189 $M2L$ par cellule \Rightarrow majeure partie du calcul du champ lointain
- ★ complexité en $\mathcal{O}(P^4)$:

$$\forall 0 \leq j \leq P, |k| \leq j, \quad L_j^k = \sum_{n=0}^P \sum_{l=-n}^n M_n^l O_{j+n}^{-k-l}$$

- ★ O_j^k : fonction de transfert

Améliorations existantes :



	<i>M2L</i> classique	FFT par blocs	rotations	ondes planes
complexité	$\mathcal{O}(P^4)$	$\mathcal{O}(P^3)$	$\mathcal{O}(P^3)$	$\mathcal{O}(P^3) + \mathcal{O}(P^2)$
stable	Oui	Non	Oui	Oui
mémoire / classique		+++	+	++

Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- **Positionnement & Contributions**

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

5. Conclusion & Perspectives

Positionnement & contributions

Positionnement :

- ★ équation de Laplace :
 - ▶ dynamique moléculaire : distributions uniformes ou non, moyennes précisions (entre 10^{-5} et 10^{-7} $\Rightarrow P \leq 15$)
 - ▶ astrophysique : distributions hautement non uniformes, basses précisions (entre 10^{-2} et 10^{-3} $\Rightarrow P \leq 3$)
- ★ 1 seul pas de temps
- ★ passage à l'échelle \Rightarrow parallélisme

Contributions :

- ★ algorithmique et structures de données
- ★ calcul *M2L* haute performance : routines BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)
 - ▶ interface standardisée, 3 niveaux : matrice - matrice (\rightarrow efficacité optimale)
 - ▶ pipelines \leftrightarrow mémoire hiérarchique (caches & localité des données) \Rightarrow performance crête
 - ▶ portabilité \Rightarrow approche matricielle du calcul *M2L*
 $\Rightarrow \mathcal{O}(P^4)$ mais $P \leq 15$
- ★ parallélisme : mode multi-*thread* et mode multi-processus
- ★ code FMB (*Fast Multipole with BLAS*) : ~ 70 K lignes

Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

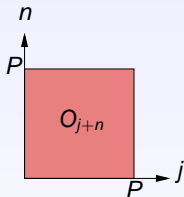
5. Conclusion & Perspectives

Noyaux M2L de hauteur simple et double

- ★ 2 « noyaux » possibles : $\forall 0 \leq j \leq P, |k| \leq j,$

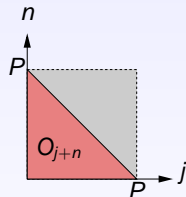
Hauteur double

$$L_j^k = \sum_{n=0}^P \sum_{l=-n}^n M_n^l O_{j+n}^{-k-l}$$



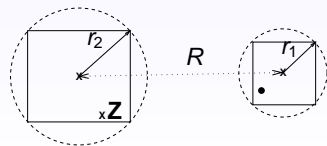
Hauteur simple

$$L_j^k = \sum_{n=0}^{P-j} \sum_{l=-n}^n M_n^l O_{j+n}^{-k-l}$$



- ★ Hauteur simple \Rightarrow borne d'erreur précise :

$$\|\Phi(\mathbf{Z}) - \Phi_P(\mathbf{Z})\| \leq \frac{1}{R - (r_1 + r_2)} \left(\frac{r_1 + r_2}{R} \right)^{P+1}$$



Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- **Formulation matricielle et routines BLAS**
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

5. Conclusion & Perspectives

Cas de la hauteur double

M2L :

$$L_j^k = \sum_{n=0}^P \sum_{l=-n}^n M_n^l O_{j+n}^{-k-l}$$

Avec $P = 3$:

$$\begin{bmatrix} L_0^0 \\ L_0^{-1} \\ L_0^{-2} \\ L_1^0 \\ L_1^{-1} \\ L_1^{-2} \\ L_2^0 \\ L_2^{-1} \\ L_2^{-2} \\ L_3^0 \\ L_3^{-1} \\ L_3^{-2} \\ L_3^{-3} \\ L_3^{-4} \\ L_3^{-5} \\ L_3^{-6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O_0^0 & O_1^1 & O_1^0 & O_1^{-1} & O_2^2 & O_2^1 & O_2^0 & O_2^{-1} & O_2^{-2} & O_3^3 & O_3^2 & O_3^1 & O_3^0 & O_3^{-1} & O_3^{-2} & O_3^{-3} \\ O_1^0 & O_2^1 & O_2^0 & O_2^{-1} & O_3^2 & O_3^1 & O_3^0 & O_3^{-1} & O_3^{-2} & O_4^3 & O_4^2 & O_4^1 & O_4^0 & O_4^{-1} & O_4^{-2} & O_4^{-3} \\ O_1^{-1} & O_2^0 & O_2^{-1} & O_2^{-2} & O_3^1 & O_3^0 & O_3^{-1} & O_3^{-2} & O_3^{-3} & O_4^2 & O_4^1 & O_4^0 & O_4^{-1} & O_4^{-2} & O_4^{-3} & O_4^{-4} \\ O_2^0 & O_3^1 & O_3^0 & O_3^{-1} & O_4^2 & O_4^1 & O_4^0 & O_4^{-1} & O_4^{-2} & O_5^3 & O_5^2 & O_5^1 & O_5^0 & O_5^{-1} & O_5^{-2} & O_5^{-3} \\ O_2^{-1} & O_3^0 & O_3^{-1} & O_3^{-2} & O_4^1 & O_4^0 & O_4^{-1} & O_4^{-2} & O_4^{-3} & O_5^2 & O_5^1 & O_5^0 & O_5^{-1} & O_5^{-2} & O_5^{-3} & O_5^{-4} \\ O_2^{-2} & O_3^{-1} & O_3^{-2} & O_3^{-3} & O_4^0 & O_4^{-1} & O_4^{-2} & O_4^{-3} & O_4^{-4} & O_5^1 & O_5^0 & O_5^{-1} & O_5^{-2} & O_5^{-3} & O_5^{-4} & O_5^{-5} \\ O_3^0 & O_4^1 & O_4^0 & O_4^{-1} & O_5^2 & O_5^1 & O_5^0 & O_5^{-1} & O_5^{-2} & O_6^3 & O_6^2 & O_6^1 & O_6^0 & O_6^{-1} & O_6^{-2} & O_6^{-3} \\ O_3^{-1} & O_4^0 & O_4^{-1} & O_4^{-2} & O_5^1 & O_5^0 & O_5^{-1} & O_5^{-2} & O_5^{-3} & O_6^2 & O_6^1 & O_6^0 & O_6^{-1} & O_6^{-2} & O_6^{-3} & O_6^{-4} \\ O_3^{-2} & O_4^{-1} & O_4^{-2} & O_4^{-3} & O_5^0 & O_5^{-1} & O_5^{-2} & O_5^{-3} & O_5^{-4} & O_6^1 & O_6^0 & O_6^{-1} & O_6^{-2} & O_6^{-3} & O_6^{-4} & O_6^{-5} \\ O_3^{-3} & O_4^{-2} & O_4^{-3} & O_4^{-4} & O_5^{-1} & O_5^{-2} & O_5^{-3} & O_5^{-4} & O_5^{-5} & O_6^0 & O_6^{-1} & O_6^{-2} & O_6^{-3} & O_6^{-4} & O_6^{-5} & O_6^{-6} \\ O_3^{-4} & O_4^{-3} & O_4^{-4} & O_4^{-5} & O_5^{-2} & O_5^{-3} & O_5^{-4} & O_5^{-5} & O_5^{-6} & O_6^{-1} & O_6^{-2} & O_6^{-3} & O_6^{-4} & O_6^{-5} & O_6^{-6} & O_6^{-7} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0^0 \\ M_1^{-1} \\ M_1^0 \\ M_1^1 \\ M_1^2 \\ M_2^{-1} \\ M_2^0 \\ M_2^1 \\ M_2^2 \\ M_2^3 \\ M_3^{-2} \\ M_3^{-1} \\ M_3^0 \\ M_3^1 \\ M_3^2 \\ M_3^3 \end{bmatrix}$$

Matrice de transfert pleine \Rightarrow BLAS : ZGEMV

Cas de la hauteur simple

M2L :

$$L_j^k = \sum_{n=0}^{P-j} \sum_{l=-n}^n M_n^l O_{j+n}^{-k-l}$$

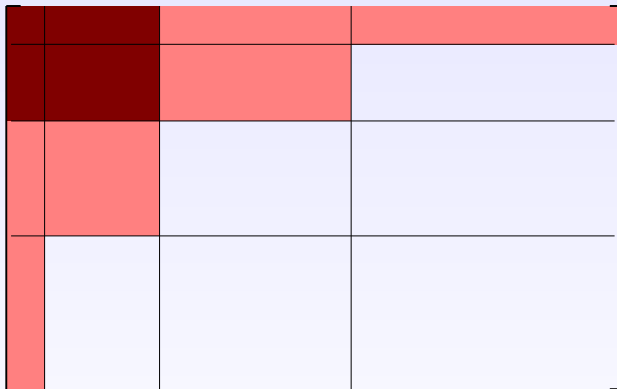
Avec $P = 3$:

$$\begin{bmatrix} L_0^0 \\ L_1^0 \\ L_1^{-1} \\ L_2^0 \\ L_2^{-1} \\ L_2^{-2} \\ L_3^0 \\ L_3^{-1} \\ L_3^{-2} \\ L_3^{-3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O_0^0 & O_1^0 & O_1^0 & O_1^{-1} & O_2^0 & O_2^0 & O_2^0 & O_2^{-1} & O_2^{-2} & O_3^0 & O_3^0 & O_3^0 & O_3^0 & O_3^{-1} & O_3^{-2} & O_3^{-3} \\ O_1^0 & O_1^0 & O_2^0 & O_2^{-1} & O_2^0 & O_3^0 & O_3^0 & O_3^{-1} & O_3^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O_1^{-1} & O_2^0 & O_2^{-1} & O_2^{-2} & O_3^0 & O_3^0 & O_3^{-1} & O_3^{-2} & O_3^{-3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O_2^0 & O_3^0 & O_3^0 & O_3^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O_2^{-1} & O_3^0 & O_3^{-1} & O_3^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O_2^{-2} & O_3^{-1} & O_3^{-2} & O_3^{-3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O_3^0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O_3^{-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O_3^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ O_3^{-3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0^0 \\ M_1^{-1} \\ M_1^0 \\ M_1^1 \\ M_2^{-2} \\ M_2^{-1} \\ M_2^0 \\ M_2^1 \\ M_2^2 \\ M_2^3 \\ M_3^{-3} \\ M_3^{-2} \\ M_3^{-1} \\ M_3^0 \\ M_3^1 \\ M_3^2 \\ M_3^3 \end{bmatrix}$$

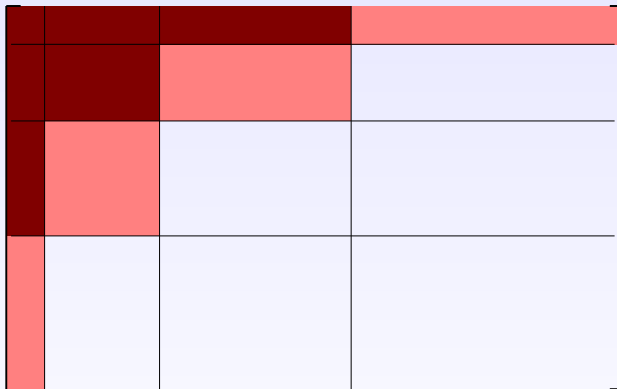
Matrice de transfert creuse : pas de BLAS adapté ...

⇒ découpage du produit matrice-vecteur
en blocs rectangulaires traités avec ZGEMV .

M2L block blas

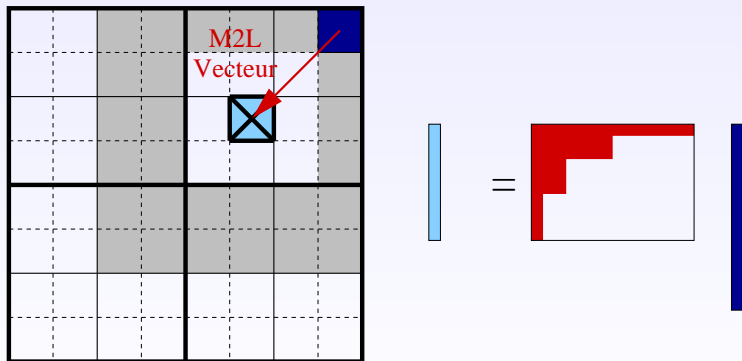


M2L block blas

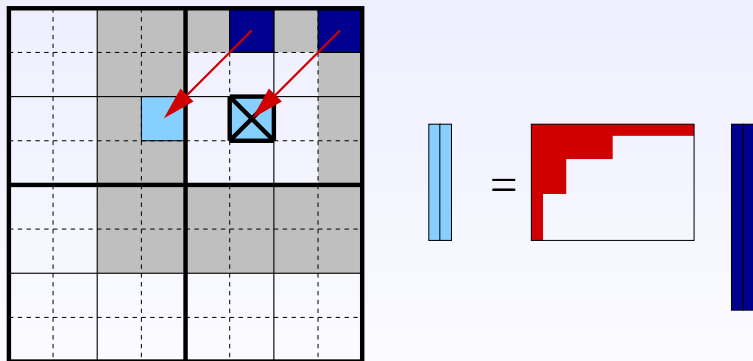


Cas terminal déterminé par des tests de performance
Routines BLAS 2 ...

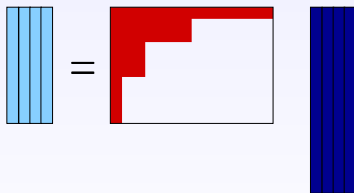
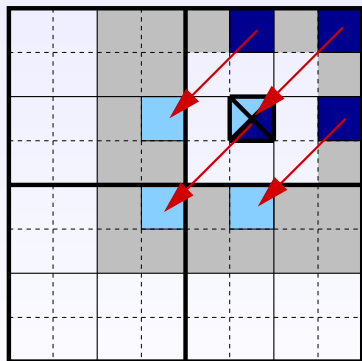
Efficacité optimale : BLAS niveau 3



Efficacité optimale : BLAS niveau 3



Efficacité optimale : BLAS niveau 3



Stockage par *ligne*

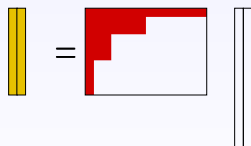
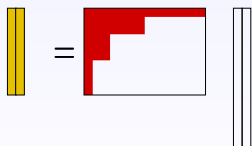
0	1	4	5	16	17	20	21
2	3	6	7	18	19	22	23
8	9	12	13	24	25	28	29
10	11	14	15	26	27	30	31
32	33	36	37	48	49	52	53
34	35	38	39	50	51	54	55
40	41	44	45	56	57	60	61
42	43	46	47	58	59	62	63

Vecteurs locaux

12	24
36	48
13	25
37	49
14	26
38	50
15	27
39	51

Vecteurs multipoles

0	4	16	20
8	12	24	28
32	36	48	52
40	44	56	60
1	5	17	21
9	13	25	29
33	37	49	53
41	45	57	61
2	6	18	22
10	14	26	30
34	38	50	54
42	46	58	62
3	7	19	23
11	15	27	31
35	39	51	55
43	47	59	63

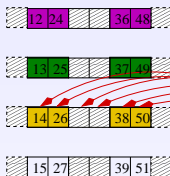


- ★ Eviter les recopies (P faibles)
- ★ H faible \Rightarrow peu de colonnes ...

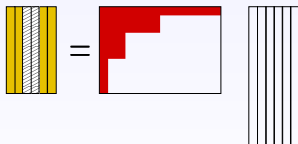
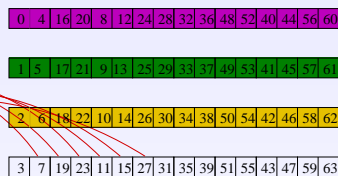
Stockage par *tranche*

0	1	4	5	16	17	20	21
2	3	6	7	18	19	22	23
8	9	12	13	24	25	28	29
10	11	14	15	26	27	30	31
32	33	36	37	48	49	52	53
34	35	38	39	50	51	54	55
40	41	44	45	56	57	60	61
42	43	46	47	58	59	62	63

Vecteurs locaux



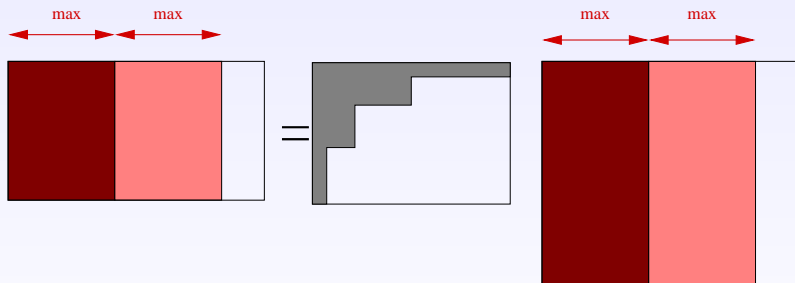
Vecteurs multipoles



- ★ Nombre de colonnes \uparrow \Rightarrow meilleure efficacité BLAS
- ★ Besoin de développements locaux “vides” \Rightarrow compromis : $\frac{\text{efficacité BLAS}}{\text{calculs inutiles}}$

Implémentation avec BLAS 3

- ★ Hauteur double : *ZGEMM*.
- ★ Hauteur simple : limitation du nombre de colonnes traitées



- ★ *max* déterminé par des tests de performance

Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

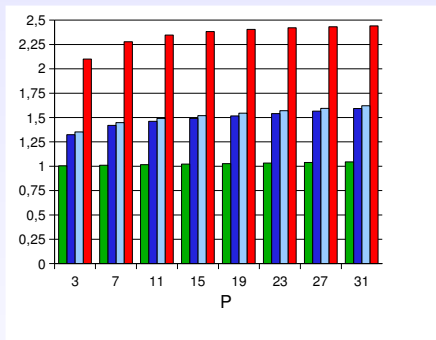
- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

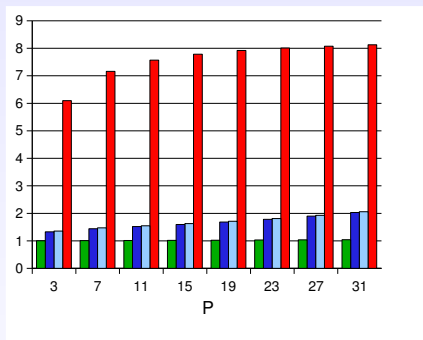
- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

5. Conclusion & Perspectives

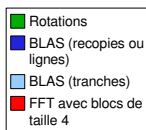
Espace mémoire



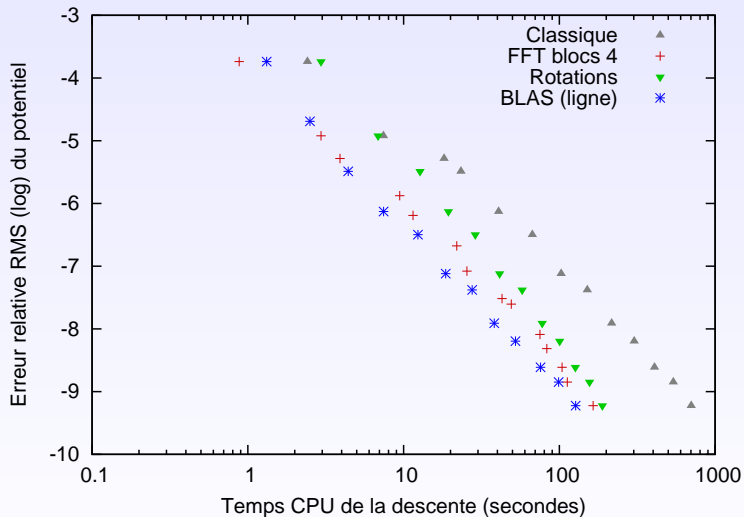
Noyau simple



Noyau double



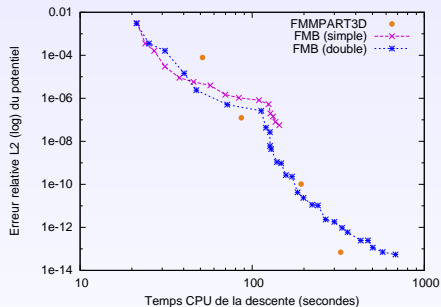
Temps CPU et précision



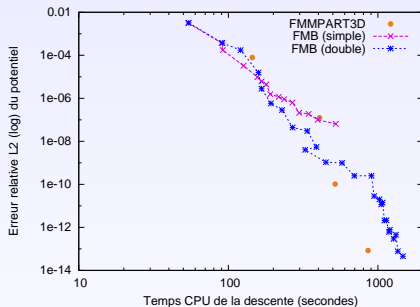
Uniforme 100 000, IBM Power3, 375 MHz

$\varepsilon \leq 10^{-6} \Rightarrow$ gain BLAS / FFT = 35 %

Distribution uniforme : comparaison avec les ondes planes



$$\varepsilon \leq 10^{-4} \Rightarrow \text{gain FMB (simple) / FMMPART3D} = 39 \%$$



Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

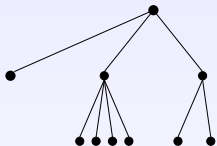
- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

5. Conclusion & Perspectives

Choix de la version adaptative

Greengard *et al.*

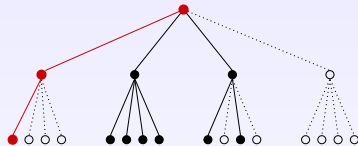
- ★ s_{max} particules par feuille



- ★ Cellules vides : n'existent pas
- ★ 4 listes :
 - ▶ non bornées \Rightarrow complexité en $O(N)$ non garantie
 - ▶ construction & stockage moins efficaces
 - ▶ communications difficilement prévisibles

Nabors *et al.*

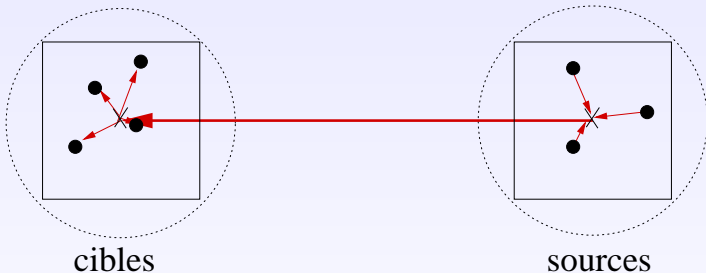
- ★ Hauteur de l'octree H fixée



- ★ Cellules vides : existent, mais omises
- ★ Complexité en $O(N)$ prouvée :
 - ▶ développements $\Leftrightarrow s < s_{min}$
 - ▶ réduction des opérations le long des "chaînes"
- ★ 2 listes :
 - ▶ bornées
 - ▶ construction aisée
 - ▶ communications régulières & prévisibles

Améliorations algorithmiques :

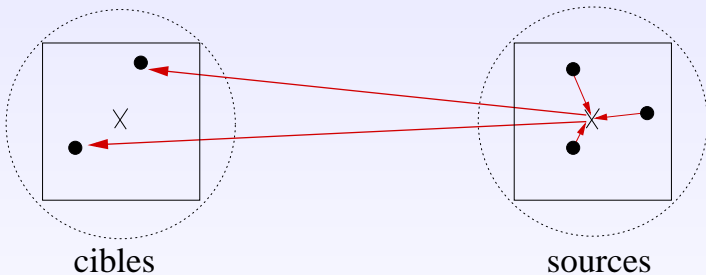
★ S_{min} \Rightarrow S_{min}^M & S_{min}^L



M2L

Améliorations algorithmiques :

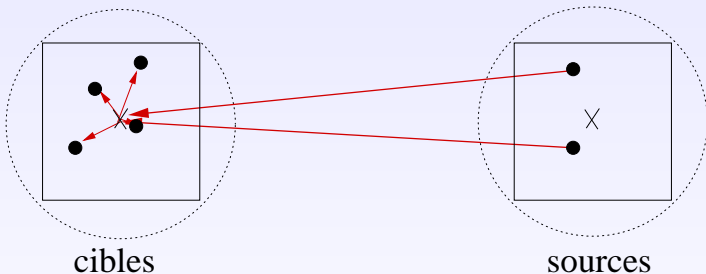
$$\star S_{min} \Rightarrow S_{min}^M \ \& \ S_{min}^L$$



$$s < S_{min}^L \Rightarrow \mathbf{M2P}$$

Améliorations algorithmiques :

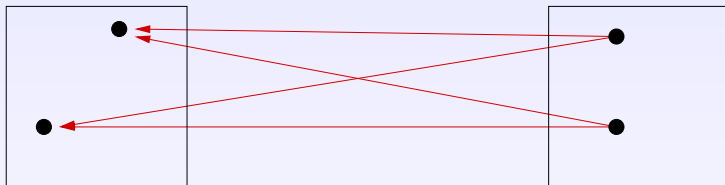
$$\star S_{min} \Rightarrow S_{min}^M \ \& \ S_{min}^L$$



$$s < S_{min}^M \Rightarrow P2L$$

Améliorations algorithmiques :

★ $s_{min} \Rightarrow s_{min}^M$ & s_{min}^L



cibles

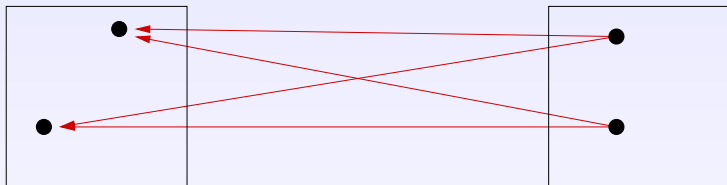
sources

$s < s_{min}^M$ et $s < s_{min}^L \Rightarrow P2P$

s_{min}^M et s_{min}^L déterminés par des tests de performance

Améliorations algorithmiques :

★ $s_{min} \Rightarrow s_{min}^M \text{ \& \ } s_{min}^L$



cibles

sources

$s < s_{min}^M \text{ et } s < s_{min}^L \Rightarrow P2P$

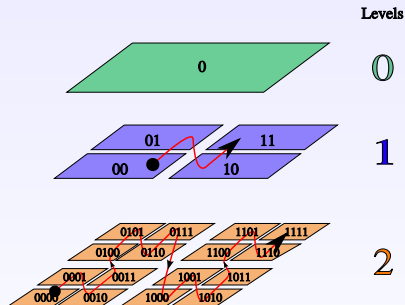
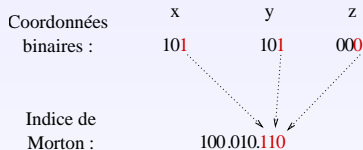
s_{min}^M et s_{min}^L déterminés par des tests de performance

★ Abandon du traitement spécial le long des chaînes

Structures de données pour l'octree

But

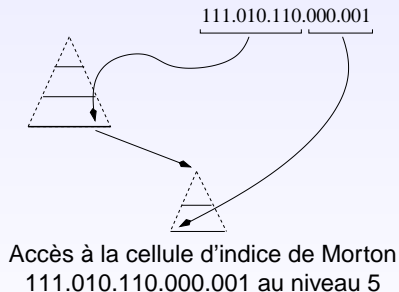
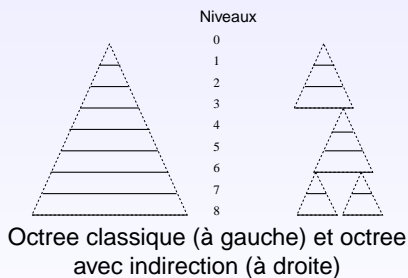
- ★ distributions uniformes et non uniformes
- ★ accès rapide aux cellules → ordre de Morton



- ★ Distributions uniformes (ou presque) \Rightarrow tableaux unidimensionnels :
 - ▶ niveau $l \Rightarrow$ tableau de 8^l pointeurs
 - ▶ hauteur maximale : 10 \Rightarrow 4,6 Go
- ★ Distributions non uniformes \Rightarrow *hashed octree* (Warren & Salmon) :
 - ▶ hauteur maximale : 20
 - ▶ pas efficace avec des distributions uniformes


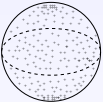

Octree avec indirection : principe

- ★ Seuil d'indirection h
- ★ Niveaux d'indirection $h, 2h, 3h \dots \Rightarrow$ seulement les sous-octrees non vides
- ★ Exemples ($h = 3$) :



- ★ Dans chaque sous-octree : taille des tableaux $\leq 8^h$

Octree avec indirection : efficacité

	H	Mémoire		Temps CPU
		Sans indirection	Avec indirection	
Cylindre (3M, $P = 3$) 	9	593 MB	12 MB	-1.4 %
Sphère (2M, $P = 5$) 	8	95 MB	26 MB	0.6 %
hcg027 (1.5M, $P = 3$) 	13	-	329 MB	-

Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- **Formulation BLAS**
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

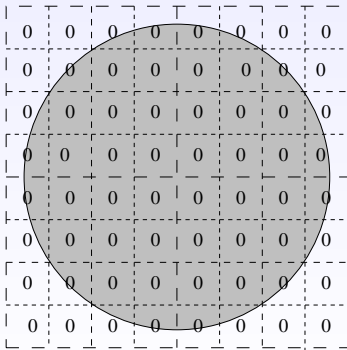
5. Conclusion & Perspectives

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

- ★ forme cubique / rectangulaire 3D \Rightarrow stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille \uparrow \Rightarrow efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



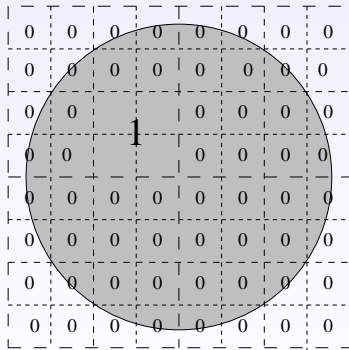
Remontée : étiquettes au niveau des feuilles ($l = 3$)

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

- ★ forme cubique / rectangulaire 3D \Rightarrow stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille \uparrow \Rightarrow efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



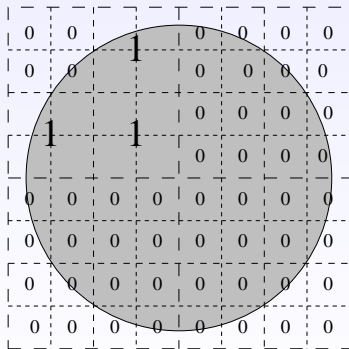
Remontée : étiquettes au niveau $l = 2$

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

- ★ forme cubique / rectangulaire 3D \Rightarrow stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille $\uparrow \Rightarrow$ efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



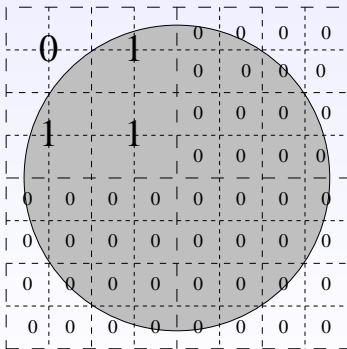
Remontée : étiquettes au
niveau $l = 2$

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

- ★ forme cubique / rectangulaire 3D \Rightarrow stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille \uparrow \Rightarrow efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



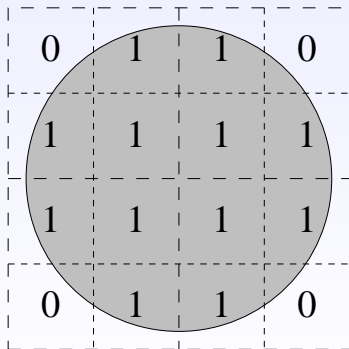
Remontée : étiquettes au
niveau $l = 2$

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

- ★ forme cubique / rectangulaire $3D \Rightarrow$ stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille $\uparrow \Rightarrow$ efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



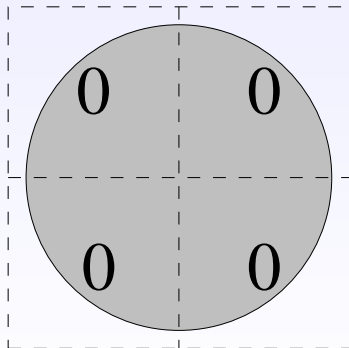
Remontée : étiquettes au
niveau $l = 2$

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

- ★ forme cubique / rectangulaire $3D \Rightarrow$ stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille $\uparrow \Rightarrow$ efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



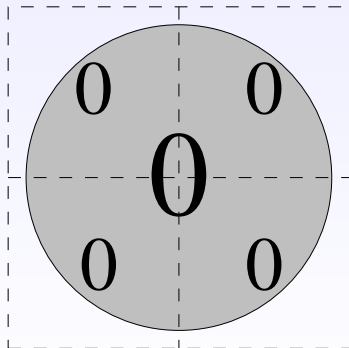
Remontée : étiquettes aux
niveaux 1

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

- ★ forme cubique / rectangulaire $3D \Rightarrow$ stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille $\uparrow \Rightarrow$ efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



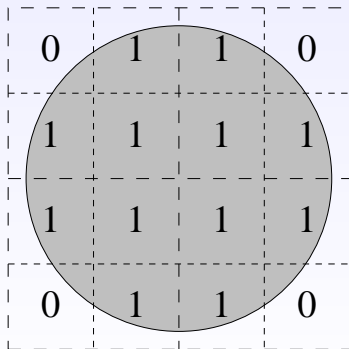
Remontée : étiquettes aux niveaux 1 et 0

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

- ★ forme cubique / rectangulaire $3D \Rightarrow$ stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille $\uparrow \Rightarrow$ efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



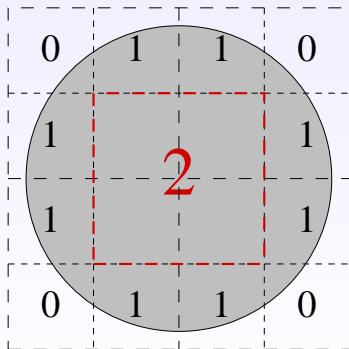
Descente : étiquettes au niveau $l = 2$

Détection des zones uniformes (ZU)

Intérêt :

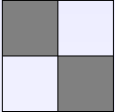
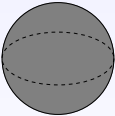
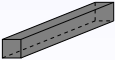
- ★ forme cubique / rectangulaire $3D \Rightarrow$ stockage par *ligne* et par *tranche*
- ★ taille $\uparrow \Rightarrow$ efficacité BLAS \uparrow

Utilisation de l'octree : 2 parcours



Descente : étiquettes finales

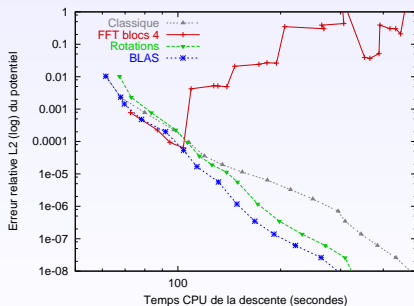
Détection des zones uniformes (ZU)

		Temps de la phase de descente (secondes)			Gain
		Sans BLAS	BLAS sans ZU	BLAS ZU	
Deux Octants (3M, $P = 7$)		1271	338	232	31 %
Balle (3M, $P = 7$)		2158	596	540	9,4 %
Barre (3M, $P = 7$)		2641	684	440	36 %

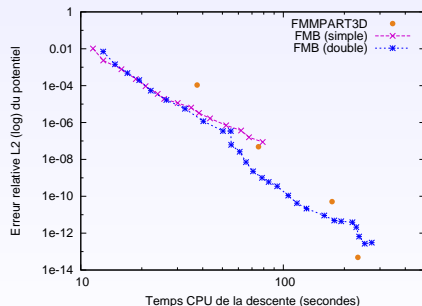
Comparaisons : sans zone uniforme

Stratégie de calcul :

- $P \leq 3 \Rightarrow$ calcul $M2L$ classique
 $3 < P < 7 \Rightarrow$ BLAS 2
 $P \geq 7 \Rightarrow$ BLAS 3 avec *recopies*



Cylindre 1M, IBM Power3, 375 MHz

 $\varepsilon \approx 10^{-6} \Rightarrow$ gain BLAS / Rotations = 13 %

Cylindre 1M, PC linux, 2, 6 GHz

 $\varepsilon \approx 10^{-4} \Rightarrow$ gain FMB / FMMPART3D = 44 %

Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- Mode multi-processus

5. Conclusion & Perspectives

Comparaisons en astrophysique

Construction de l'octree et du calcul des forces et du potentiel (PC linux, 2,6 GHz)

	<i>treecode</i> mono	GADGET-2	<i>falcON</i>	FMB classique $P = 2$	rapport
	$\theta = 0,7$				
Plummer 100k	15,84	11,74	0,77	5,07	
Plummer 1M	202,32	142,69	7,68	52,75	
<i>hcg027</i>	-	174,75	10,63	98,72	
<i>wde475</i> (t=0)	152,58	98,17	8,67	70,99	
<i>wde475</i> (t=600)	291,96	193,09	8,95	107,68	
Uniforme (500k)	32,70	27,01	3,99	11,50	

Comparaisons en astrophysique

Construction de l'octree et du calcul des forces et du potentiel (PC linux, 2,6 GHz)

	<i>treecode</i> mono	GADGET-2	<i>falcON</i>	FMB classique	rapport
	$\theta = 0,7$			$P = 2$	
Plummer 100k	15,84	11,74	0,77	5,07	3,1
Plummer 1M	202,32	142,69	7,68	52,75	3,8
<i>hcg027</i>	-	174,75	10,63	98,72	-
<i>wde475</i> (t=0)	152,58	98,17	8,67	70,99	2,2
<i>wde475</i> (t=600)	291,96	193,09	8,95	107,68	2,7
Uniforme (500k)	32,70	27,01	3,99	11,50	2,8

treecode : algorithme de Barnes-Hut

Comparaisons en astrophysique

Construction de l'octree et du calcul des forces et du potentiel (PC linux, 2,6 GHz)

	<i>treecode</i> mono	GADGET-2	<i>falcON</i>	FMB classique	rapport
	$\theta = 0,7$			$P = 2$	
Plummer 100k	15,84	11,74	0,77	5,07	2,3
Plummer 1M	202,32	142,69	7,68	52,75	2,7
<i>hcg027</i>	-	174,75	10,63	98,72	1.8
<i>wde475</i> (t=0)	152,58	98,17	8,67	70,99	1.4
<i>wde475</i> (t=600)	291,96	193,09	8,95	107,68	1.8
Uniforme (500k)	32,70	27,01	3,99	11,50	2,3

GADGET-2 : algorithme de Barnes-Hut amélioré

Comparaisons en astrophysique

Construction de l'octree et du calcul des forces et du potentiel (PC linux, 2,6 GHz)

	<i>treecode</i> mono	GADGET-2	<i>falcON</i>	FMB classique	rapport
	$\theta = 0,7$			$P = 2$	
Plummer 100k	15,84	11,74	0,77	5,07	0,15
Plummer 1M	202,32	142,69	7,68	52,75	0,14
<i>hcg027</i>	-	174,75	10,63	98,72	0,11
<i>wde475</i> (t=0)	152,58	98,17	8,67	70,99	0,12
<i>wde475</i> (t=600)	291,96	193,09	8,95	107,68	0,08
Uniforme (500k)	32,70	27,01	3,99	11,50	0,34

falcON : algorithme hybride Barnes-Hut / FMM

Comparaisons en astrophysique

Construction de l'octree et du calcul des forces et du potentiel (PC linux, 2,6 GHz)

	<i>treecode</i> mono	GADGET-2	<i>falcON</i>	FMB classique	rapport
	$\theta = 0,7$			$P = 2$	
Plummer 100k	15,84	11,74	0,77	5,07	0,15
Plummer 1M	202,32	142,69	7,68	52,75	0,14
<i>hcg027</i>	-	174,75	10,63	98,72	0,11
<i>wde475</i> (t=0)	152,58	98,17	8,67	70,99	0,12
<i>wde475</i> (t=600)	291,96	193,09	8,95	107,68	0,08
Uniforme (500k)	32,70	27,01	3,99	11,50	0,34

falcON : algorithme hybride Barnes-Hut / FMM

- ★ développements spécifiques (centre de masse), plus rapides
- ★ moins de calcul direct
- ★ parallélisme potentiel ?

	<i>falcON</i>	FMB	$\frac{\text{FMB}}{\text{falcON}}$
Plummer 10k	$3,37 \times 10^5$	$5,18 \times 10^6$	15,37
Uniforme 1M	$3,6 \times 10^7$	$3,86 \times 10^8$	10,72

Nombre de racines carrées.

Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- **Mode multi-thread**
- Mode multi-processus

5. Conclusion & Perspectives

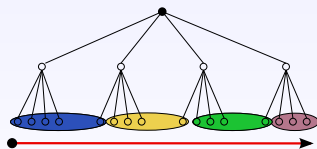
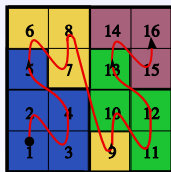
Principe

- ★ *Threads* POSIX en mémoire partagée
- ★

Décomposition de l'octree entre les *threads* \Rightarrow $\left\{ \begin{array}{l} \text{équilibre de charge} \\ \text{localité des données} \end{array} \right.$

★ **Décomposition de Morton :**

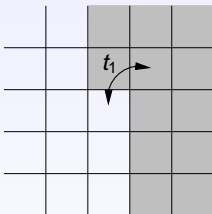
octree +
ordre de Morton +
fonction de coût
 \Rightarrow 1 intervalle par *thread*



Décomposition entre 4 *threads*

Principe

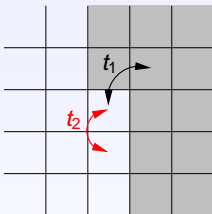
- ★ Décomposition indépendante entre les niveaux
 - ★ Coûts et intervalles spécifiques :
 - ▶ $P2P$ → nb particules + liste du calcul direct
 - ▶ $M2L-L2L$ → liste d'interaction
 - ▶ $P2M-M2M-L2P$ → cellule vide ou non
- ⇒ distributions non uniformes



- ★ Interactions réciproques : conflit
 - ⇒ exclusion mutuelle
au niveau de chaque feuille
 - + traitement différé des conflits

Principe

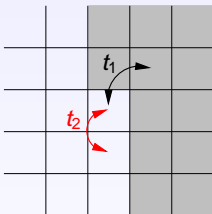
- ★ Décomposition indépendante entre les niveaux
 - ★ Coûts et intervalles spécifiques :
 - ▶ $P2P$ → nb particules + liste du calcul direct
 - ▶ $M2L-L2L$ → liste d'interaction
 - ▶ $P2M-M2M-L2P$ → cellule vide ou non
- ⇒ distributions non uniformes



- ★ Interactions réciproques : conflit
⇒ exclusion mutuelle
au niveau de chaque feuille
+ traitement différé des conflits

Principe

- ★ Décomposition indépendante entre les niveaux
 - ★ Coûts et intervalles spécifiques :
 - ▶ $P2P$ → nb particules + liste du calcul direct
 - ▶ $M2L-L2L$ → liste d'interaction
 - ▶ $P2M-M2M-L2P$ → cellule vide ou non
- ⇒ distributions non uniformes



- ★ Interactions réciproques : conflit
 - ⇒ exclusion mutuelle au niveau de chaque feuille
 - + traitement différé des conflits

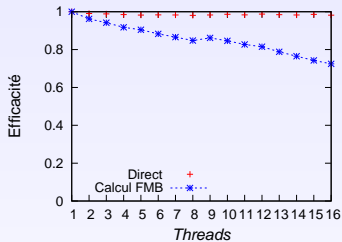
BLAS :

- ★ plusieurs appels mono-*thread* en parallèle (1 appel multi-*thread* à la fois)
- ★ décomposition des lignes / tranches / recopies

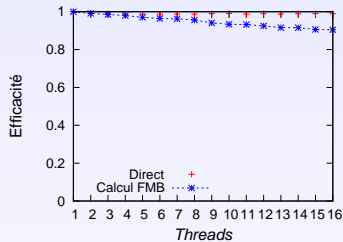
Résultats : calcul $M2L$ par BLAS

Nœud SMP IBM p575 : 8 processeurs Power5 dual-core (1,5 GHz)

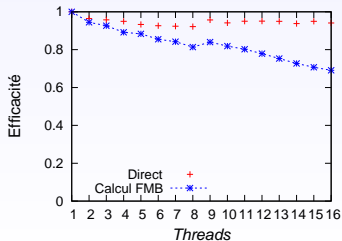
Balle 2M ($P = 3$, tranche) : 16 threads \rightarrow 5,2 s



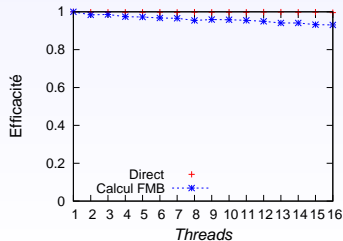
Barre 3M ($P = 7$, tranche) : 16 threads \rightarrow 13,5 s



Cylindre 1M ($P = 3$, recopies) : 16 threads \rightarrow 2,0 s

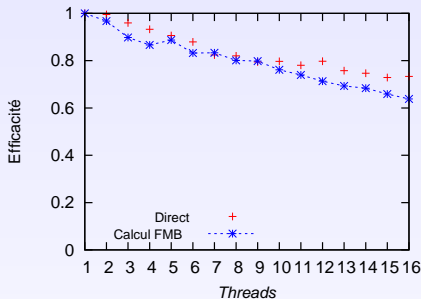


Cylindre 1M ($P = 7$, recopies) : 16 threads \rightarrow 2,0 s

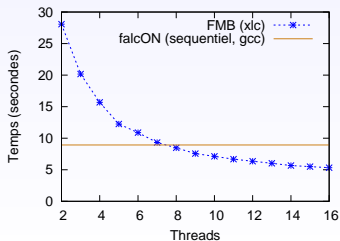


Résultats en astrophysique

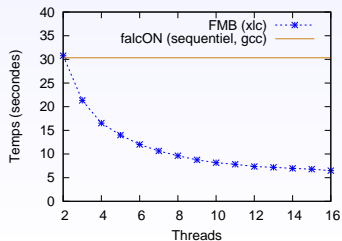
Plummer 1M ($P = 2$, M2L classique) : 16 threads \rightarrow 5,3 s



Plummer 1M ($P = 2$, M2L classique)



Uniforme 3M ($P = 2$, M2L BLAS par tranche)



Plan

1. Introduction

- Le problème à N-corps
- La Méthode Multipôle Rapide (FMM)
- Positionnement & Contributions

2. Schémas de calcul M2L pour la FMM uniforme

- Opérateur M2L
- Formulation matricielle et routines BLAS
- Comparaisons

3. Formulation BLAS pour la FMM adaptative

- Algorithmique et structure de données
- Formulation BLAS
- Comparaisons en astrophysique

4. Parallélisation

- Mode multi-thread
- **Mode multi-processus**

5. Conclusion & Perspectives

Principe

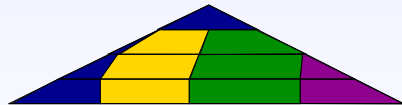
- ★ standard MPI (portabilité, implémentations efficaces)
- ★ mémoire distribuée : *cluster* de nœuds SMP
- ★ 1 *thread* de calcul par processus

Décomposition de Morton :

- ★ liste d'interaction / du calcul direct \Rightarrow localité des données
- ★ communications \Rightarrow décomposition uniquement au niveau des feuilles



multi-thread



multi-processus

- ★ fonction de coût unique : nb particules
 \rightarrow distributions non uniformes ...

Principe

Gestion des communications :

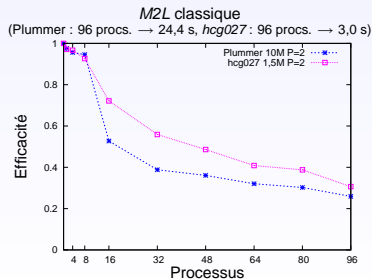
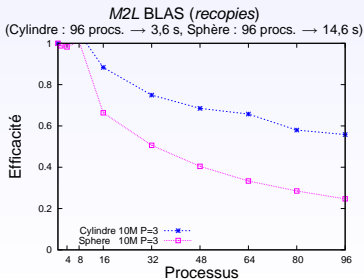
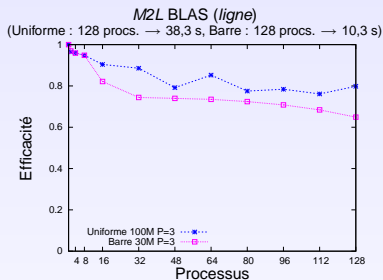
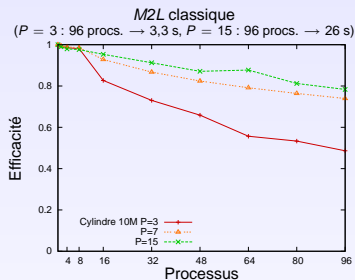
- ★ empaquetage / dépaquetage des données
- ★ recouvrement par le calcul :
 - ▶ appels MPI non bloquants en émission
 - ▶ 1 *thread* supplémentaire dédié à la réception
- ★ dirigées par l'émetteur (choix FMM adaptative)
- ★ envois à un même destinataire :
 - ▶ groupés pour liste d'interaction / du calcul direct
 - ▶ non groupés pour *M2M* et *L2L*: envoi immédiat

Abandon du **principe des interactions réciproques** :

→ redondance mais 1 seule phase de communications

BLAS : détection des zones uniformes locales

8 nœuds IBM p575 (réseau Federation)



Conclusion & perspectives

Validation de notre approche haute performance pour :

- ★ précisions requises en astrophysique et en dynamique moléculaire
- ★ distributions uniformes et non uniformes
- ★ en séquentiel et en parallèle

Conclusion & perspectives

Validation de notre approche haute performance pour :

- ★ précisions requises en astrophysique et en dynamique moléculaire
- ★ distributions uniformes et non uniformes
- ★ en séquentiel et en parallèle

Perspectives

- ★ Intégration dans un code complet (astrophysique, dynamique moléculaire)
- ★ Parallélisme :
 - ▶ couplage MPI-*threads* :
 - meilleur équilibrage de charge
 - plus grandes zones uniformes
 - déjà anticipé !
 - ▶ équilibrage de charge dynamique
 - ▶ corrections de l'équilibrage de charge sur plusieurs pas de temps
- ★ Application de notre approche à d'autres types de potentiels (Lennard-Jones, électromagnétisme, ...)

Merci !

Annexes

Harmoniques sphériques

Polynômes de Legendre :

$$\frac{1}{\|\mathbf{X} - \mathbf{X}'\|} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{r_{<}^n}{r_{>}^{n+1}} P_n(\cos \gamma).$$

Harmoniques sphériques : $\forall (l, m) \in \mathbb{N}^2, l \geq 0, |m| \leq l,$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{i.m.\phi}.$$

Théorème d'addition pour les harmoniques sphériques : avec
 $\cos \gamma = \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_1 - \phi_2),$

$$P_l(\cos \gamma) = \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta_1, \phi_1) Y_l^{-m}(\theta_2, \phi_2).$$

Outer et Inner fonctions

$$\forall (l, m) \in \mathbb{N}^2 / 0 \leq |m| \leq l,$$

$$O_l^m(r, \theta, \phi) = \frac{(-1)^l i^{|m|}}{A_l^m} Y_l^m(\theta, \phi) \frac{1}{r^{l+1}}$$

$$I_l^m(r, \theta, \phi) = i^{-|m|} A_l^m Y_l^m(\theta, \phi) r^l$$

$$\text{avec : } A_l^m = \frac{(-1)^l}{\sqrt{((l-m)!(l+m)!)}}.$$

“Classical translation theorem” : avec l’hypothèse $\|\mathbf{X}\| > \|\mathbf{X}'\|$,

$$\frac{1}{\|\mathbf{X} - \mathbf{X}'\|} = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{l=-n}^n (-1)^n I_n^{-l}(\mathbf{X}') O_n^l(\mathbf{X}).$$

Théorèmes spécifiques :

Outer-to-Outer / Outer-to-Inner Laplace translation theorem :

avec $\|\mathbf{X}\| > \|\mathbf{X}'\|$,

$$O_n^l(\mathbf{X} - \mathbf{X}') = \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=-j}^j (-1)^j I_j^{-k}(\mathbf{X}') O_{n+j}^{l+k}(\mathbf{X}) \quad \forall (n, l) \in \mathbb{N}^2 / 0 \leq |l| \leq n.$$

Inner-to-Inner Laplace translation theorem :

$$I_n^l(\mathbf{X} - \mathbf{X}') = \sum_{j=0}^n \sum_{k=-j}^j (-1)^j I_j^k(\mathbf{X}') I_{n-j}^{l-k}(\mathbf{X}) \quad \forall (n, l) \in \mathbb{N}^2 / 0 \leq |l| \leq n.$$

Opérateur $P2M$

Avec :

- ★ m charges $(q_i)_{i \in \llbracket 1, m \rrbracket}$ situées en $\mathbf{Q}_i = (\rho_i, \alpha_i, \beta_i)$,
- ★ \mathbf{z}_0 centre du développement multipole ($\mathbf{Q}_i - \mathbf{z}_0 = (\rho'_i, \alpha'_i, \beta'_i)$),

on définit alors $\forall (j, k) \in \mathbb{N}^2 / 0 \leq |k| \leq j$,

$$M_j^k = (-1)^j \sum_{i=1}^m q_i l_j^k(\rho'_i, \alpha'_i, \beta'_i)$$

et on obtient :

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=-j}^j M_j^k O_j^{-k}(\mathbf{x} - \mathbf{z}_0).$$

Opérateur $M2M$

Avec :

- ★ \mathbf{z}_0 ancien centre,
- ★ \mathbf{z}_1 nouveau centre,
- ★ $\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_0 = (\rho, \alpha, \beta)$,

$$\forall (j, k) \in \mathbb{N}^2 / 0 \leq |k| \leq j,$$

$$M_j^k = \sum_{n=0}^j \sum_{\substack{l=-n, \\ |k-l| \leq j-n}}^n M_n^l I_{j-n}^{k-l}(\rho, \alpha, \beta)$$

Opérateur $M2L$

Avec :

- ★ \mathbf{z}_1 centre du développement multipole,
- ★ \mathbf{z}_2 centre du développement local,
- ★ $\mathbf{z}_2 - \mathbf{z}_1 = (\rho, \alpha, \beta)$,

on a $\forall (j, k) \in \mathbb{N}^2 / 0 \leq |k| \leq j$,

$$L_j^k = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{l=-n}^n M_n^l O_{j+n}^{-k-l}(\rho, \alpha, \beta)$$

Et on obtient :

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{k=-j}^j L_j^k l_j^k(\mathbf{x} - \mathbf{z}_2).$$

Opérateur L_2L

Avec :

- ★ \mathbf{z}_2 ancien centre,
- ★ \mathbf{z}_3 nouveau centre,
- ★ $\mathbf{z}_3 - \mathbf{z}_2 = (\rho, \alpha, \beta)$,

on a $\forall (j, k) \in \mathbb{N}^2 / 0 \leq |k| \leq j$,

$$L_j^k = \sum_{n=j}^{+\infty} \sum_{\substack{l=-n, \\ |l-k| \leq n-j}}^n L_n^l L_{n-j}^{l-k}(\rho, \alpha, \beta)$$