

受付ID	17a56
分野	宇宙

粒子法コード開発の為のフレームワークの開発 Development of framework for developing particle simulators

岩澤全規
理化学研究所

1. 研究目的

コンピュータシミュレーションの手法は大きく粒子法とメッシュ法の2つに大別される。粒子法ではシミュレーション対象となる系を相互作用する粒子の集団として表現し、粒子の時間発展を追うことで系の進化を表現する方法である。粒子法では系の進化に合わせて、粒子が自然に移動するため、大きく変形する様な系や密度コントラストの強い系のシミュレーションに適しており、科学や工学分野で幅広く使われている。しかし、粒子法を大規模並列計算機で効率良く動作するプログラムを作ることは容易ではない。例えば、粒子法によるシミュレーションでは計算負荷を均等にするような動的な領域分割等が必要であり、また粒子間相互作用を効率的に計算するために粒子を木構造で管理する必要がある。そこで本研究ではユーザーが容易に効率の良い並列プログラムの開発出来る粒子法用のフレームワーク(FDPS)の開発を行い、特にGPUやXeon Phi向けの最適化を行う。

2. 研究成果の内容

FDPSでは任意の粒子データや任意の相互作用関数を扱うため、c++のテンプレート機能を用いて実装されている。そのためユーザーはc++を用いてプログラムを記述する必要がある。しかし、Fortranを用いてプログラム開発を行うスーパーコンピュータユーザーも多数おり、彼らがFDPSを用いてプログラム開発を行うためにはc++を学ぶ必要があり、容易ではない。そのため我々はFortranからFDPSの様々なAPIを呼ぶことができるFortran Interfaceの開発を行った。また、我々はFortran Interfaceを用いていくつかのアプリケーションを実際にFortranで開発しc++を用いた場合との性能の比較を行った。結果、Fortranで書かれたアプリケーションもc++のものとほぼ同じ性能で動作することが分かった。

3. 学際共同利用として実施した意義

FDPSは様々な計算機上で効率よく大規模並列で動作する事を目指しており、Oakforest-PACSやHA-PACS/TCAなどの計算機環境での実験や最適化が不可欠である。Fortran Interfaceの開発や性能評価にはOakforest-PACSを用いた。

4. 今後の展望

今後はFDPSのさらなる高速化及びFDPSを用いたアプリケーションの開発を行っていく。

5. 成果発表

(1) 学会発表

※”粒子系シミュレータ開発フレームワーク FDPS のアクセラレータ対応”

岩澤全規、似鳥啓吾、行方大輔、谷川衝、細野七月、Long Wang、村主崇行、牧野淳一郎、天文学会秋季年会

※”大規模並列粒子シミュレーションコード開発用フレームワークFDPSのFortran インターフェースの開発”、行方大輔、岩澤全規、似鳥啓吾、谷川衝、村主崇行、Long Wang、細野七月、牧野淳一郎

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
HA-PACS/TCA	○	18630	
COMA			
Oakforest-PACS	○	131320	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			