

課題名(タイトル): 粒子シミュレータ開発フレームワーク FDPS への富岳向け新機能の研究開発

利用者氏名: ○行方 大輔(1)、岩澤 全規(3)、野村 昴太郎(3)、石原 陽平(2,4)

理研における所属研究室名:

- (1) 理化学研究所 計算科学研究センター 粒子系シミュレーター研究チーム
- (2) 理化学研究所 計算科学研究センター フラグシップ 2020 プロジェクト コデザイン推進チーム
- (3) 神戸大学 大学院 理学研究科 惑星科学研究センター
- (4) 京都大学 基礎物理学研究所 宇宙グループ

#### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

現代において、数値シミュレーションによる研究は物理現象を理解する上で欠かせない手法となっている。中でも粒子シミュレーションと呼ばれるシミュレーションは、天文学から工学分野まで、非常に幅広い分野で使われている。コンピュータの計算能力の向上に伴い、大規模な粒子シミュレーションが行われることが一般的になりつつある。しかしながら、現在の HPC システムのアーキテクチャは非常に複雑であり、効率的に動作するシミュレーションコードの開発に必要な時間は増大する一方である。これが研究の停滞を招いている。このような状況を改善するため、我々の研究チームでは、FDPS (Framework for Developing Particle Simulators) と呼ばれる、大規模並列粒子シミュレーションコードの開発のためのフレームワークを開発してきた。FDPS は粒子シミュレーションを並列で行うために必要な領域分割、粒子交換、相互作用計算に必要な情報の収集などの機能を FDPS 利用者に提供するライブラリのようなものである。FDPS 利用者はこれらの機能を使って、あたかも非並列プログラムを書くように並列プログラムを書くことができる。FDPS を使って開発したコードは、京コンピュータや x86 プロセッサを搭載したスーパーコンピュータで効率的に動作することが示されている。

次年度から理化学研究所で運用することが決定されている富岳では、これまでになく規模のシミュレーションが可能となる。富岳のような超大規模並列計算システム上でプログラムを効率的に動作させるには、大域的な通信がより少ない新しいアルゴリズムを採用した粒子シミュレーションコードの開発が必要となってくる。系の中で時間スケールが短い領域が空間的に局在する場合、ハミルトニアン分割と呼ばれる方法を適用することで計算を加速できる可能性がある。この方法では、系に存在する相互作用を似た時間スケールのもの同士に分割し(ハミルトニアンの分割)、分割された

ハミルトニアンを使って、真の時間積分作用素の近似を構成する。これによって、時間スケールの短い領域を独立に時間積分することが可能となる。本プロジェクト(G19031)では、ハミルトニアン分割を用いた粒子シミュレーションコードの開発に必要な機能を FDPS に追加する。

#### 2. 具体的な利用内容、計算方法

ハミルトニアン分割を用いた粒子シミュレーションコードを FDPS でサポートするためには、次の作業が必要である:

- (1) FDPS で複数の MPI コミュニケーターを扱えるようにする(現在の公開版 FDPS は、MPI\_COMM\_WORLD のみが使われることを想定した実装になっている)
- (2) 空間的に孤立した時間スケールが短い領域を自動的に同定し、各領域にその領域の計算を担当する MPI コミュニケーターを割り付ける機能
- (3) 上記機能の性能評価用の実アプリの開発

#### 3. 結果

報告書執筆時点で、前節で述べた作業の内、(1)(2)については完了し、現在(3)の作業を行っているところである。(3)の作業が完了次第、(1)の機能に求められる性能を調べ、必要であればより効率的な実装に改善する作業を行う予定である。

#### 4. まとめ

本課題では、我々の研究チームが開発している大規模並列粒子シミュレーションコードの開発を支援するためのフレームワーク FDPS に、ハミルトニアン分割を適用した粒子シミュレーションコードをサポートするための機能の実装を行った。現時点で、実装した機能の実アプリに基づく性能評価は未実施であり、今後それを行う。