

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の富岳向け最適化とFDPSを用いたハミルトニアン分割法に基づく銀河形成シミュレーションコードの開発

利用者氏名:○行方 大輔(1)、岩澤 全規(1,3)、野村 昴太郎(1,4)^{*1}、石原陽平(2,5)^{*2}

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) 松江工業高等専門学校
- (4) 神戸大学 大学院 理学研究科 惑星科学研究センター
- (5) 京都大学 基礎物理学研究所 宇宙グループ

^{*1} 2021年1月31日までの所属。同日理研を離職。

^{*2} 利用申請時の所属。2020年4月1日に理研を離職。

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。

2021年3月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、これまでにない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。2019年度の利用でFDPSにハミルトニアン分割をサポートする機能を追加した。本プロジェクト(G20013)では、この機能を用いて具体的なアプリケーションであるハミルトニアン分割に基づく銀河形成シミュレーションコードの開発を行い、性能評価および富岳向けのチューニングを行う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

コード開発はHOKUSAIに加え、富岳の共用前評価環境及び九州大学情報基盤開発センターが提供するITOを使って行った。2020年4月末までに富岳の共用前開発環境で、銀河形成シミュレーションコードの基本的な部分の開発を行い、チューニングと銀河形成をシミュレートするために必要な物理過程の実装が大きな課題となっていた。HOKUSAIは2020年5月から7月の2ヶ月間利用させて頂き、性能を上げるための新しい機能の実装を行った。以下に利用内容を具体的に示す。

(1) 我々が開発する銀河形成シミュレーションコードはN体/SPH計算と呼ばれる計算方法を用いるが、この種のコードを超大規模並列実行したときに、性能を大きく低下させる要因の1つは全体通信(例えばMPLAlltoallなど)の間のプロセス間ロードインバランスである。全体通信の場所で自動的に同期が取られてしまうため、全体通信と全体通信の間のロードバランスをうまく取らねば余計な待ち時間が発生し

てしまう。このような待ち時間の合計は全体通信の回数が多ければ多いほど長くなる。ロードバランスを改善する一つの方法は、全体通信で分け隔たれたコードの部分の間でタスクを移動/交換できるようにすることである。FDPS は相互作用計算にツリー法を用いるが、従来の FDPS では相互作用に必要なすべての情報を持った単一のツリーを構築してから相互作用計算を行う実装になっていた。この単一のツリーの構築には全体通信を必要とする。相互作用計算を分割できるようにするため、我々はツリー構築の方法に新しいモードを加え、ローカル粒子だけからなるツリー(ローカルツリー)と、他のプロセスから送られてくる粒子だけからなるツリー(LET ツリー)に分けて行うようにできるようにした。ローカルツリーを使った相互作用計算は全体通信と関係なく行えるため、実行が完了していなければならないタイミングの前の任意の箇所で行うことができる。

(2) 上記と関係して、相互作用計算を分割実行できるように FDPS を改良した。(1)と合わせることで、全体通信で隔てられた部分の間で、タスクを任意の比で分けることが可能となった。これによって、ロードバランス調節機能が向上した。

3. 結果

前節(1)(2)で説明した機能を用いることによって、開発中の銀河形成シミュレーションコードのロードバランスは大きく改善した。

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 を用いて、銀河形成シミュレーションコードの性能向上に必要な機能の実装を行った。

5. 今後の計画・展望

6. 利用がなかった場合の理由

2020年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

○行方大輔、岩澤全規、野村昴太郎、平居悠、斎藤貴之、牧野淳一郎、坪内美幸、「ASURA-FDPS コードの開発状況および富岳の利用状況について」、富岳計算宇宙惑星・計算資源利用に関する課題内ワークショップ、2020年6月5日、オンライン開催.

○行方大輔、岩澤全規、野村昴太郎、平居悠、斎藤貴之、牧野淳一郎、坪内美幸、「ASURA-FDPS の開発進捗状況」、富岳計算宇宙惑星・計算資源利用に関する課題内ワークショップ(第2回)、2020年10月27日、オンライン開催.