

課題名 (タイトル) :

粒子系シミュレーター用フレームワークの開発

利用者氏名 : ○岩澤全規(1)、似鳥啓吾(2)、丸山豊(2)、谷川衝(2)、細野七月(1)、村主崇行(2)

所属 :

1) 計算科学研究機構 研究部門 粒子系シミュレータ研究チーム

2) 計算科学研究機構 フラッグシップ 2020 プロジェクト コデザイン推進チーム

<p>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</p> <p>粒子法を用いたシミュレーションは N 体シミュレーションや SPH、MPS、メッシュレス法等の手法を通して天文学や気象、生命科学やモノ作りに至るまで科学や工学の幅広い分野で広く使われている。しかし、「京」や HOKUSAI GW の様な大規模並列型計算機で効率よく動作する粒子法プログラムの開発は容易ではなく、多くの研究者はソフトウェアの開発に多大な時間と労力を割く必要がある。そこで、本課題では、大規模並列型計算機で効率よく動作する粒子法シミュレーションプログラムをユーザーが容易に開発できるフレームワーク (FDPS: Framework for Developing Particle Simulator) の開発を行った (FDPS の開発は理化学研究所計算科学研究機構粒子系シミュレータ研究チームの業務として開発している)。また、開発した FDPS を用いて、原始惑星同士の巨大衝突シミュレーションを行った。巨大衝突は地球などの固体惑星の重要な形成過程であると考えられているが未解明な部分が多い。巨大衝突による惑星形成過程を理解する上でシミュレーションは有効な手段であるが、多くのシミュレーションでは粒子数が少なく (1 万-100 万程度) 結果の収束性は見られていない。2 年ほど前にアメリカのチーム (NASA とロスアラモス国立研究所の混成チーム) 1 億粒子を用いた大規模計算を報告したが、その詳細な結果は未だ論文にはなっていない。そこで、本課題では FDPS の開発を行うと共に、FDPS を用いて 1 億粒子を用いた巨大衝突シミュレーションを行い、巨大衝突による惑星の形成過程を解明する。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>FDPS の開発を行い、その後 FDPS を用いた SPH 法により巨大衝突の数値計算を行う。本年度では巨大</p>	<p>衝突シミュレーションにおいては下記の 2 つの点を目標とした。(1) HOKUSAI GW-MPC 上 256 ノードを用いた高解像度の巨大衝突の計算を行い、FDPS が正しく動作している事を確認する。また、同時に現在の世界最高の解像度である 1 億粒子と同程度の粒子数を用いた巨大衝突の計算を行う。(2) いくつかの SPH 法に関して、先行研究と同程度の解像度の巨大衝突を行い、その結果を比較する。今回は、既に巨大衝突に関して適用されている、標準 SPH と、DISPH と呼ばれる方法を用いた。</p> <p>3. 結果</p> <p>図 1 は、HOKUSAI GW-MPC 上 256 ノードを用いて行った、巨大衝突の数値計算である。ただし、この計算結果は衝突の初期の時間のみを示しており、実際の計算はこれよりも長く計算する必要がある。この計算を進めて行くと、計算終了までにかかる時間は訳 2 ヶ月程度、ノード時間的には訳 35 万ノード時間程度になる。ただし、現在は HOKUSAI GW-MPC の SIMD 組み込み関数が使えない為、コードは SIMD ユニットを有効に使えていない。本計算は演算律速である為、SIMD 化が有効に行われれば、1 週間程度で計算が終了するはずである。図 2 は、4 ノードを用いた数値計算である。左のパネルは DISPH であり、右のパネルは標準 SPH である。この結果は先行研究の結果と比較的良く一致しており、FDPS は正しく動作していると考えられる。</p> <p>4. まとめ</p> <p>粒子法用フレームワーク FDPS の開発を行い、それを用いて、惑星科学における重要な現象である巨大衝突説の大規模数値流体計算を行った。結果、FDPS は HOKUSAI GW-MPC 上 256 ノードでは問題無く動作する事が確認された。また、FDPS を用いた SPH コードの結果は先行研究による結果とよく一致しており、FDPS は正しく動作していると考えられる。</p>
---	--

5. 今後の計画・展望

FDPS の開発はほぼ完成している。また、FDPS を用いた巨大衝突用 SPH コードも正確に動作している事を確認した。しかし、HOKUSAI GW-MPC の現在のコンパイラでは、SIMD 組込み関数が未サポートであり本 SPH コードでは SIMD 演算ユニットが有効に使えていない。そのため、現在のコードでは 256 ノード用いた場合、1 億粒子の計算に 2 ヶ月程度の時間がかかると予想される。来年度以降は SIMD 組込み関数が正式にサポートされたコンパイラが入ることが期待されるので、本 SPH コードにも組み込み関数を用い、世界最高解像度である 1 億粒子の巨大衝突シミュレーションを行う予定である。また、FDPS を用いた重力多体問題などのアプリケーションについても SIMD 組み込み関数を用いて HOKUSAI GW-MPC への移植を行い、その性能評価などを行いたい。

比較。左は DISPH、右は標準 SPH を用いたもの。

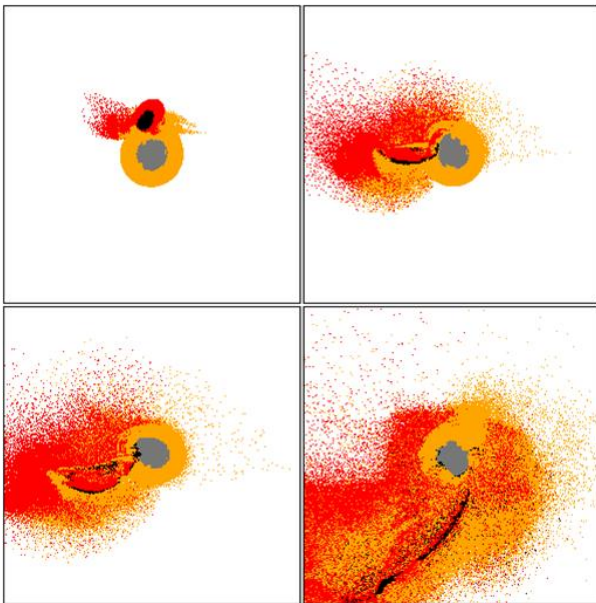


図 1) 1 億粒子を用いて行った巨大衝突の数値計算の結果

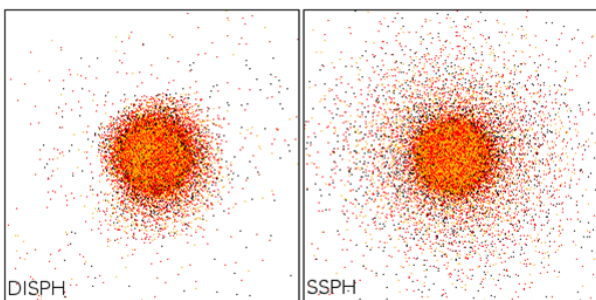


図 2) 異なる SPH を用いて行った巨大衝突の結果の

平成 27 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

岩澤全規、谷川衝、細野七月、似鳥啓吾、村主崇行、牧野淳一郎

FDPS(Framework for Developing Particle Simulator): 大規模分散メモリー環境下での粒子系シミュレーション用フレームワークの開発、研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング、2015-HPC-150、9、1

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Iwasawa, M., Tanikawa, A., Hosono, N., Nitadori, K., Muranushi, T. & Makino, J.,

FDPS: A Novel Framework for Developing High-Performance Particle Simulation Codes for Distributed-Memory Systems、WOLFHPC 2015、2015 年 11 月

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Iwasawa, M., Tanikawa, A., Hosono, N., Nitadori, K., Muranushi, T. & Makino, J.,

FDPS: Framework for Developing Particle Simulator、IWACOMM-III、2015 年 10 月、両国

岩澤全規、谷川衝、細野七月、似鳥啓吾、村主崇行、牧野淳一郎

**FDPS(Framework for Developing Particle Simulator): 大規模分散メモリー環境下での粒子系シミュレーション用フレームワークの開発
2015 年度日本天文学会秋季年会、2015 年 11 月、甲南大学**

谷川衝、岩澤全規、細野七月、似鳥啓吾、村主崇行、牧野淳一郎

**大規模並列粒子シミュレーションコード開発フレームワーク FDPS の開発とそのアプリケーション
2015 年度日本天文学会秋季年会、2015 年 11 月、甲南大学**

細野七月、岩澤全規、谷川衝、似鳥啓吾、村主崇行、牧野淳一郎

**FDPS を用いた巨大衝突の SPH 法による大規模数値計算
日本惑星科学会 2015 年度秋季講演会、2015 年 11 月、東京工業大学**

岩澤全規、谷川衝、細野七月、似鳥啓吾、村主崇行、牧野淳一郎

**大規模分散メモリー環境下での粒子系シミュレーション用フレームワーク(FDPS)の開発
理論懇シンポジウム、2015 年 12 月、大阪大学**