

K12a 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

谷川衝, 岩澤全規, 細野七月, 似鳥啓吾, 村主崇行, 牧野淳一郎 (理化学研究所)

我々は大規模並列粒子シミュレーションコードの開発を容易にするフレームワークである FDPS (Framework for Developing Particle Simulator) を開発した。粒子シミュレーションとは、対象となる系を相互作用する粒子の集団としてみなし、その粒子の集団の進化を追うものである。この手法は、様々な学問分野で用いられており、その実例としては、重力 N 体シミュレーション、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) シミュレーション、分子動力学シミュレーション、粉体シミュレーションなどがある。FDPS の基本的なコンセプトは、粒子シミュレーションの大規模並列化に伴う複雑な処理を、実際の粒子間相互作用の計算や軌道積分のような簡単な処理から切離すことである。前者は FDPS が、後者はユーザーが行う。前者には、領域分割、領域分割に合せた粒子の再分配、粒子間相互作用を計算するための粒子データの交換、などが含まれる。FDPS を用いると、京コンピュータのような大規模並列環境下で動作する重力 N 体シミュレーションコードをたったの 117 行で記述できる。また、重力相互作用計算部分に SIMD 演算をほどこしたコードは、京コンピュータ 76,544 ノードで 4.5 PFLOPS の性能を達成した。

本講演では、FDPS の基本コンセプトと基本的な使い方を述べる。また、FDPS の実アプリケーションとして、白色矮星の合体シミュレーションなどで使用できる Helmholtz の状態方程式 (Timmes, Swesty 2000) を組み込んだ SPH コードについて報告する。