

# FDPS 講習会 インTRODクシヨN

牧野淳一郎

理化学研究所 計算科学研究機構

エクサスケールコンピューティング開発プロジェクト

コデザイン推進チーム

兼 粒子系シミュレータ開発チーム

2015/07/22 AICS/FOCUS 共催 FDPS 講習会

# 今日の予定

- 講義 13:00-14:00
  1. イントロダクション (牧野)
  2. 概要説明 (谷川)
  3. FDPS 詳細 1—APIと内部構造 (岩澤)
  4. FDPS 詳細 2—サンプルコード解説 (細野)
  5. Q&A
- 実習 14:00-15:30
- 個別の議論、意見交換等 15:30-17:00

# イントロダクション残り: FDPS は何をするか？

というよりむしろ、何がしたくない人のためのものか:

- MPI でプログラムなんか書きたくない
- キャッシュ再利用のためのわけのわからないループ分割とかしたくない
- 通信量減らすためにわけのわからない最適化とかするのも勘弁して欲しい
- SIMD 命令ができるようにコードをいじりまわすとかやめたい
- 機械毎にどういう最適化すればいいか全然違うとか、それ以前に言語から違うとかはもういやだ

# そうはいっても—ではどうするか？

昔からある考え方はこんな感じ？

- 並列化コンパイラになんとかしてもらおう
- 共有メモリハードウェアになんとかしてもらおう
- 並列言語とコンパイラの組み合わせになんとかしてもらおう

しかし.....

- 若い人はそういう考え方があったことも既に知らないような気がする。「スパコンとはそういうものだ」みたいな。
- つまり、こういうアプローチはほぼ死滅した。
- 理由は簡単：性能がでない。安価なハードウェアで高い性能がでるものがプログラミングが大変でも長期的には生き残る。

# じゃあ本当のところどうするか？

1. 人生そういうものだと諦めて MPI でプログラム書いて最適化する  
難点: 普通の人の場合性能がでない。難しいことをしようとすると無限に時間がかかって人生が終わってしまう。
  2. 他人(学生、ポスドク、外注、ベンダ等)に MPI でプログラム書かせて最適化もさせる  
難点: 他人が普通の人の場合、やはり性能でない。無限に人と時間とお金がかかる。あとでいじるにも無限に人と時間とお金がかかる。
- どちらも今一つというか今百くらいである。
  - もちろん、「普通でない人」を確保できればなんとかなるがこれは希少資源である。

原理的には、「普通でない人」を有効利用すればいい？



細野 村主 岩澤 丸山 似鳥  
山本 Barnes 牧野 谷川 Rieder  
+坪内 (テクニカルスタッフ)、若松 (アシスタント)

# もうちょっと具体的には？

## 色々な粒子系計算

- 重力多体系
- 分子動力学
- 粒子法による流体 (SPH、MPS、MLS、その他)
- 構造解析等のメッシュフリー法

計算のほとんどは近傍粒子との相互作用 (遠距離力: Tree, FMM, PME その他)

# もうちょっと具体的には？

なので、粒子と相互作用の定義を与えると

- 領域分割 (ロードバランスも考慮した)
- 粒子の移動
- 相互作用の計算 (そのために必要な通信も)

を高い効率 (実行効率・並列化効率) でやってくれるプログラムを「自動生成」できればいい。時間積分とかは自分で書く。  
(独立時間刻み? P<sup>3</sup>T 実装して下さい)  
ということで、詳しくはこれからの説明をどうぞ。