

FDPS 講習会 イントロダクション

行方 大輔

理化学研究所 計算科学研究機構

粒子系シミュレータ開発チーム

兼 コデザイン推進チーム

今日の予定

- 13:00 – 14:15 FDPSの講義
 - 13:00 – 13:05 イントロダクション (行方大輔)
 - 13:05 – 13:20 概要説明 (行方大輔)
 - 13:20 – 13:35 FDPSで必要なC++解説 (細野七月)
 - 13:35 – 13:50 FDPS 詳細1 – APIと内部構造 (谷川衝)
 - 13:50 – 14:00 FDPS 詳細2 – サンプルコード解説 (細野七月)
 - 14:00 – 14:15 Q&A
- 14:30 – 16:30 FDPSの実習
 - FDPSのインストール
 - サンプルコードの使用1 (重力N体シミュレーションコード)
 - サンプルコードの使用2 (SPHシミュレーションコード)
- 16:00 – 17:00 FDPS使用に関する相談

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して諦めて MPI でプログラム書いて最適化もする
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？

どうやって有効利用するか？

色々な考え方がありえるが、我々の(というか私の)考え方:

- 「普通でない人」がやった方法を一般化して、色々な問題に適用する。
- 例えば「粒子系一般」という程度
- DRY (Don't Repeat Yourself) の原則の徹底
- 「神戸人外王国」が詳細仕様策定及び実装

(神戸花鳥園は2014年7月から神戸どうぶつ王国に生まれ変わりました)

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? P³T 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。