# FDPS議題

# 谷川

目	次		
1	15/02/10		2
2	15/02/18		4
3	15/02/24		5
4	15/03/03		6
5	15/03/10	1	0
6	15/03/17	1	0
7	15/03/23	1	0
8	15/04/01	1	0
9	15/06/17	1	2
10	15/06/24	1	2

### $1 \quad 15/02/10$

- ユーザーチュートリアル構成
  - 目次作った
- 外部仕様書構成
  - 目次作った
- テストスィート構成
  - 項目作った
- エラー処理素案
  - エラー処理の仕方 (わかりやすいメッセージを吐いて MPLAbort)
    - \* 例外処理 (メッセージを吐いて、throw しっぱなし/こっちが MPLabort)
    - \* 例外処理をやらないというオプション
  - エラーコードいる?(やりなおせないのでは?)
  - エラーメッセージの様式 (PSERROR: わかりやすいメッセージ、関数名、こまかいメッセージ)
  - エラー処理必要なところ
    - \* 入力ファイルない
    - \* メモリ確保失敗
    - \* 規定 (2G) より大きな配列
    - \* ツリーのルートセル外に粒子
    - \* ユーザーの不適切な初期設定(コンパイルエラーにできないものとかの場合)
    - \* 浮動小数点例外?
    - \* セグメンテーションフォールト?
  - signal handler 要検討
- API
  - 相互作用リスト (v1.0 ではスレッドセーフではないということを書く)
  - 通信データクラスにブロードキャストがほしい
- 実装
  - Paritice Mesh どういうテストすべきか? (検討)
  - 領域分割をユーザーが手で変更できるようにするか? (裏 API)
  - ツリー内の位置情報を 64bit にするか (する)

- 相互作用ツリークラスの高レベル関数について
- メルセンヌツイスターの名前空間
- テストスィート API ごと
- 最優先 3/1 までにアルファ版をつくる
  - インストールガイド
    - \* ソースの場所
    - \* 取得の仕方
    - \* 展開の仕方
    - \* サンプルコードの場所
    - \* サンプルコードのコンパイルの仕方
    - \* サンプルコードの動かし方

# $2 \quad 15/02/18$

- S64の typedefが long だけど大丈夫?
- clang を除くではなく、openmp 対応のコンパイラ
- C++03 以降対応のコンパイラ
- MPI 対応のコンパイラ
- configure についてはできてないならチュートリアルにはかかない (今のところ configure は必要でない)
- サンプルコードの結果の見方
- MPI データ型の修正 (これはなし)
- 来週までに github に上げる

# $3 \quad 15/02/24$

- FDPS 内の setPos の手前で shift を足すの危くない?
  - そもそも内部で桁落ちする
  - ユーザーが F32vec にしたときにも桁落ちする
- 詳細記述書 (fdps/document/document\_description/doc.pdf) の動作概略的なのがチュートリアルか仕様書のどこかに必要な気がする。縮小版をチュートリアルに、フルを仕様書に

### $4 \quad 15/03/03$

- ファイル
  - このファイル: \$(FDPS)/sandbox/tanikawa\_box/memo/memo\_tanikawa.pdf
  - 仕様書: \$(FDPS)/doc/doc\_specs.pdf
  - チュートリアル: \$(FDPS)/doc/doc\_tutorial.pdf
  - 論文下書き: \$(FDPS)/sc15/fdps\_sc15.pdf
- ユーザーの問い合せ先のメールアドレス (今は仮に ataru.tanikawa@riken.jp になっているが、専用のアドレスを作った方がよいのではないか) fdps-support@mail.jmlab.jp
- アルファ版について
- SC15 registration
  - Rules
    - \* Up to a maximum of 10 pages, not including references
  - Title
  - Author
  - Requested Areas (第2希望まで)
    - \* Algorithms
    - \* Applications 第 2 希望
    - \* Architecture and Networks
    - \* Clouds & Distributed Computing
    - \* Data Analytics, Visualization & Storage
    - \* Performance
    - \* Programming Systems 第 1 希望
    - \* State of the Practice
    - \* System Software
  - Keywords (2-5 in total, 1-3 per area from the above)
    - \* Applications: Computational earth and atmospheric sciences <a href="#">th</a>
    - \* Applications: Computational astrophysics/astronomy, chemistry, fluid dynamics, mechanics and physics = 1
    - \* Performance: Analysis, modeling or simulation for performance, power and/or resilience
    - \* Programming Systems: Parallel application frameworks = t
    - \* Programming Systems: Parallel programming languages, libraries, models and notations

- \* Programming Systems: Tools for parallel program development (e.g., debuggers and integrated development environments)
- Abstract
  - \* No more than 150 words
  - \* Paragraph breaks by a blank line in the text field
- Conference Presentations
- SC15 paper 色々
  - Categories and Subject Descriptors (http://www.acm.org/about/class/ccs98-html)
  - General Terms (Algorithms, Design, Documentation, Economics, Experimentation, Human Factors, Languages, Legal Aspects, Management, Measurement, Performance, Reliability, Security, Standardization, Theory, Verification) いくっても選べる (0 でもよい)
  - Keywords (選択肢なし?)
- SC15 paper 構成
  - Introduction (なんで FDPS みたいなものが必要か?)
    - \* 粒子シミュレーションは有用
      - ・構造が複雑な場合は格子法に比べて有利
      - ・様々な分野で利用
    - \* 粒子シミュレーションの大規模化に対する要請
      - ・より計算コストの大きい、複雑な現象を解きたい
      - ・大規模並列計算機の存在
    - \* 粒子シミュレーションを大規模化する時の問題点
      - ・プログラムが困難:ロードバランスのための動的領域分割、 領域分割に 合わせた粒子交換 ノード間通信の削減と最適化、 キャッシュ利用効率の 向上、SIMD ユニット利用効率の向上、アクセラレータ
      - ・やることは同じなのに各グループが個別に開発:
    - \* 共通のフレームワークを作ることで問題を解決
      - 利点:研究者がよりクリエイティブなことに専念できる
      - ・過去のアプローチとその問題点:アプリケーションごとにはある (Gadget, PAM-CRASH etc.), 汎用?(portable parallel particle program)
      - ・我々のアプローチとその利点:わかりやすいインターフェース、高い性能
    - \* 論文の構成:実装、サンプルコード、性能、デモ、結論
  - Implementation
    - \* 粒子シミュレーションのループの overview (我々による抽象化?)

#### ·概念式

$$\frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = \sum_{i} f(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) + \sum_{i} g(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_i)$$
(1)

f: 粒子-粒子相互作用, g: 粒子-超粒子 (相互?) 作用,  $u_i$ : 粒子の物理量ベクトル,  $v_i$ : 超粒子の物理量ベクトル

- ・ロードバランスのための領域分割(微分方程式の分担決め1)
- ・領域分割に合わせた粒子交換(微分方程式の分担決め2)
- ・相互作用リストの作成:ローカルツリー、LET 交換、グローバルツリー、i グループ作成、i グループに対する相互作用リスト作成 (シグマ内の j 決め)
- ・相互作用計算(シグマ内)
- · 時間積分, 組成進化, etc.
- \* 考え方、FDPS とユーザーの役割分担
  - · FDPS: 並列化がからんだ複雑な処理 (領域分割、粒子交換、相互作用リストの作成)、これらをモジュール化する
  - ・ユーザー: 特殊化 (粒子の定義、相互作用の定義など)、API の呼出、並列化のからまない単純な処理 (相互作用計算、時間積分、組成進化、外場など)
  - ・スキーマティックな図 (領域クラス、粒子群クラス、相互作用ツリークラス、ユーザー)

#### \* ユーザーの仕事

- ・特殊化: 粒子の定義 (粒子群クラスのテンプレート引数)、 相互作用の定義 (相互作用クラスのテンプレート引数 (既存のものから選択も可); 関数 オブジェクト; 境界条件)
- · API の呼出 (C++)
- ・時間積分とか
- \* 使用言語: C++ なくてもいい
- \* モジュール構成 なくてもいい
  - ・領域クラス (データ: 領域情報: API: decomposeDomainAll)
  - ・粒子群クラス (データ: 粒子情報; API: exchangeParticle; テンプレート引数: FP)
  - ・相互作用ツリークラス (データ: ツリー構造; API: calcForceAllAndWrite-Back; テンプレート引数: SEARCH\_MODE, Force, EPI, EPJ, MomentLocal, MomentGlobal, SPJ; 関数オブジェクト: calcForceEpEp, calcForce-SpEp; マクロ: 座標系指定, MPI/OpenMP のオンオフ; 動的指定: 境界条件)
  - 通信データクラス

- · Particle Mesh クラス
- Sample codes
  - \* N-body こちらだけ; 記述は、粒子定義、相互作用定義、(main 関数)
  - \* SPH
- Performance
  - \* N-body (weak scaling, strong scaling)
  - \* SPH+N-body, giant impact (weak scaling, strong scaling)
  - \* MD 無しで
  - \* 長時間やっても動くと一言
  - \* なんかきれいな絵(スパイラル?)
- Discussion and Conclusion
  - \* 補足
    - ・独立時間刻みへの対応
    - · SIMD, アクセラレータへの対応
    - · etc.
- SC15 paper 予定
  - - 4/3 (UTC-12) (アブストラクト締切)
    - \* Introduction, Implementation, Sample code 完成
    - \* Performance の数字
  - -4/3 (UTC-12) 4/17 (UTC-12)
    - \* Performance, Demonstration, Conclusion 完成

#### • 役割責任者

- Performance(N-body):岩澤
- Performance(SPH)、きれいな図作成:細野
- 本文、他細々したこと:谷川
- SIMD: 似鳥
- 英語チェック: 村主

### $5 \quad 15/03/10$

- 今日のファイル
  - このファイル: \$(FDPS)/sandbox/tanikawa\_box/mem/memo\_tanikawa.pdf
  - このファイル: \$(FDPS)/doc/doc\_specs.pdf
- Phantom-GRAPE とかをライブラリとして加える?

### $6 \quad 15/03/17$

- 今日のファイル
  - このファイル: \$(FDPS)/sandbox/tanikawa\_box/memo/memo\_tanikawa.pdf
  - SC15メモ: \$(FDPS)/sc15/memo/memo\_sc15.pdf
- 性能がでない場合の相談をユーザーサポートに加えるか?
- 相互作用計算用の関数オブジェクトの高速化についての相談をユーザーサポートに加えるか?

### $7 \quad 15/03/23$

- 今日のファイル
  - このファイル: \$(FDPS)/sandbox/tanikawa\_box/memo/tanikawa\_memo.pdf
  - SC15 ≯ **E**: \$(FDPS)/sandbox/tanikawa\_box/sc15\_memo/sc15\_memo.pdf
- SC15 メモ見る
  - 概念式確認 (sec.2)
  - サンプルコード相談 (sec.3)
  - 性能評価の役割確認とチケット発行 (sec.4)

## 8 15/04/01

- 今日のファイル
  - このファイル: \$(FDPS)/sandbox/tanikawa\_box/memo/tanikawa\_memo.pdf
  - SC15メモ: \$(FDPS)/sandbox/tanikawa\_box/sc15\_memo/sc15\_memo.pdf
- fdps-support にメールが来たときの対応 (済)

- 担当決め: 谷川
- 自動返信はあり。
- 解決法: 担当者はチケットのところに対応を書く。対応がOKかどうかは牧野さん。
- 返信先: メール作成は担当者。宛先は質問者への返信。Cc に fdps-support。差出 人は fdps-support。
- 変更履歴について (済)
  - ソースコードの変更は src のしたの CHANGELOG へ
- リリースのバージョンについて
  - 微修正として ver. 1.0.1
  - 一 微修正しましたと README.md に書く。文書の変更履歴はここ、ソースの変更 履歴はここ。
  - 来週くらいにリリース
- SC15 Technical paper
  - Title: FDPS: A Novel Framework for Developing High-Performance Particle Simulation Codes for Distributed-Memory Systems
  - Author Information: SC15 メモヘ
  - Requested Areas: 第1希望 Programming Systems, 第2希望 Applications
  - Keywords (2-5):
    - \* Algorithm: Numerical methods, linear and nonlinear systems
    - \* Applications: Computational earth and atmospheric sciences
    - \* Applications: Computational astrophysics/astronomy, chemistry, fluid dynamics, mechanics and physics
    - \* Programming Systems: Parallel application frameworks
    - \* Programming System: Tools for parallel program development (e.g., debuggers and integrated development environments)
  - Abstract: SC15メモへ
  - Conference Presentations: Yes
- 論文のサンプルコードまでを来週の水曜までに

### $9 \quad 15/06/17$

- 仕様書の節7について
  - getPos は位置を返すことが仕様
  - 前提、備考は実装例の説明(実装例は付録もしくは別の節)

# $10 \quad 15/06/24$

- Appendix に実装例のサンプルを加える
- 実習の手引 (レジュメ的なもの) (-7/7)
- FDPS 概要のスライド (- 7/7)
- 実際のテスト (-7/7)
- PS::SEARCH\_MODE [

PS::SEARCH\_MODE\_LONG\_SCATTER,

PS::SEARCH\_MODE\_LONG\_CUTOFF\_SCATTER,

PS::SEARCH\_MODE\_LONG\_SYMMETRY,

PS::SEARCH\_MODE\_LONG\_CUTOFF\_SYMMETRY を追加