

FDPS Fortran インタフェース ユーザチュートリアル

行方大輔, 岩澤全規, 似鳥啓吾, 谷川衝, 村主崇行, Long Wang, 細野七月, 野村昴太郎, and 牧野淳一郎

理化学研究所 計算科学研究センター 粒子系シミュレータ研究チーム

0 目次

1	変更記録	6
2	概要	7
3	入門：サンプルコードを動かしてみよう	8
3.1	動作環境	8
3.2	必要なソフトウェア	8
3.2.1	標準機能	8
3.2.1.1	逐次処理	8
3.2.1.2	並列処理	8
3.2.1.2.1	OpenMP	9
3.2.1.2.2	MPI	9
3.2.1.2.3	MPI+OpenMP	9
3.2.2	拡張機能	10
3.2.2.1	Particle Mesh	10
3.3	インストール	10
3.3.1	取得方法	10
3.3.1.1	最新バージョン	10
3.3.1.2	過去のバージョン	11
3.3.2	インストール方法	11
3.4	サンプルコードの使用方法	11
3.4.1	重力 N 体シミュレーションコード	11
3.4.1.1	概要	12
3.4.1.2	ディレクトリ移動	12
3.4.1.3	Makefile の編集	12

3.4.1.4	make の実行	15
3.4.1.5	実行	15
3.4.1.6	結果の解析	15
3.4.1.7	x86 版 Phantom-GRAPE を使う場合	16
3.4.1.8	PIKG を使う場合	17
3.4.2	SPH シミュレーションコード	17
3.4.2.1	概要	17
3.4.2.2	ディレクトリ移動	18
3.4.2.3	Makefile の編集	18
3.4.2.4	make の実行	18
3.4.2.5	実行	18
3.4.2.6	結果の解析	19
4	サンプルコードの解説	20
4.1	N 体シミュレーションコード	20
4.1.1	ソースファイルの場所と構成	20
4.1.2	ユーザー定義型・ユーザ定義関数	20
4.1.2.1	FullParticle 型	20
4.1.2.2	相互作用関数 calcForceEpEp	22
4.1.2.3	相互作用関数 calcForceEpSp	23
4.1.3	プログラム本体	24
4.1.3.1	fdps_controller 型オブジェクトの生成	24
4.1.3.2	開始、終了	25
4.1.3.3	オブジェクトの生成・初期化	25
4.1.3.3.1	オブジェクトの生成	25
4.1.3.3.2	領域情報オブジェクトの初期化	26
4.1.3.3.3	粒子群オブジェクトの初期化	26
4.1.3.3.4	ツリーオブジェクトの初期化	26
4.1.3.4	粒子データの初期化	27
4.1.3.5	ループ	28
4.1.3.5.1	領域分割の実行	28
4.1.3.5.2	粒子交換の実行	28
4.1.3.5.3	相互作用計算の実行	28
4.1.3.5.4	時間積分	29
4.1.3.6	粒子データの更新	30
4.1.4	ログファイル	30
4.2	固定長 SPH シミュレーションコード	31
4.2.1	ソースファイルの場所と構成	31
4.2.2	ユーザー定義型・ユーザ定義関数	31
4.2.2.1	FullParticle 型	31
4.2.2.2	EssentialParticleI 型	32

4.2.2.3	Force 型	33
4.2.2.4	相互作用関数 calcForceEpEp	34
4.2.3	プログラム本体	36
4.2.3.1	fdps_controller 型オブジェクトの生成	37
4.2.3.2	開始、終了	37
4.2.3.3	オブジェクトの生成・初期化	37
4.2.3.3.1	オブジェクトの生成	38
4.2.3.3.2	領域情報オブジェクトの初期化	38
4.2.3.3.3	粒子群オブジェクトの初期化	39
4.2.3.3.4	ツリーオブジェクトの初期化	39
4.2.3.4	ループ	39
4.2.3.4.1	領域分割の実行	39
4.2.3.4.2	粒子交換の実行	39
4.2.3.4.3	相互作用計算の実行	40
4.2.4	コンパイル	40
4.2.5	実行	40
4.2.6	ログファイル	41
4.2.7	可視化	41
5	サンプルコード	42
5.1	N 体シミュレーション	42
5.2	固定長 SPH シミュレーション	54
6	拡張機能の解説	70
6.1	P ³ M コード	70
6.1.1	サンプルコードの場所と作業ディレクトリ	70
6.1.2	ユーザー定義型	70
6.1.2.1	FullParticle 型	70
6.1.2.2	EssentialParticleI 型	71
6.1.2.3	Force 型	72
6.1.2.4	相互作用関数 calcForceEpEp	73
6.1.2.5	相互作用関数 calcForceEpSp	74
6.1.3	プログラム本体	75
6.1.3.1	fdps_controller 型オブジェクトの生成	76
6.1.3.2	開始、終了	76
6.1.3.3	オブジェクトの生成と初期化	77
6.1.3.3.1	オブジェクトの生成	77
6.1.3.3.2	オブジェクトの初期化	77
6.1.3.4	粒子分布の生成	78
6.1.3.4.1	領域分割の実行	79
6.1.3.4.2	粒子交換の実行	79

6.1.3.5	相互作用計算の実行	79
6.1.3.6	エネルギー相対誤差の計算	80
6.1.4	コンパイル	80
6.1.5	実行	80
6.1.6	結果の確認	81
7	より実用的なアプリケーションの解説	82
7.1	N 体/SPH コード	82
7.1.1	コードの使用方法	82
7.1.1.1	ディレクトリ移動	83
7.1.1.2	サンプルコードのファイル構成	83
7.1.1.3	Makefile の編集	84
7.1.1.4	MAGI を使った粒子データの生成	86
7.1.1.5	make の実行	87
7.1.1.6	実行	87
7.1.1.7	結果の解析	87
7.1.2	Springel の方法	88
7.1.3	ユーザー定義型	89
7.1.3.1	FullParticle 型	90
7.1.3.2	EssentialParticle 型	91
7.1.3.3	Force 型	92
7.1.4	相互作用関数	93
7.1.4.1	重力計算	93
7.1.4.2	密度計算	97
7.1.4.3	圧力勾配加速度計算	101
7.1.5	プログラム本体	103
7.1.5.1	fdps_controller 型オブジェクトの生成	104
7.1.5.2	開始、終了	104
7.1.5.3	オブジェクトの生成と初期化	105
7.1.5.3.1	粒子群オブジェクトの生成と初期化	105
7.1.5.3.2	領域情報オブジェクトの生成と初期化	105
7.1.5.3.3	ツリーオブジェクトの生成と初期化	105
7.1.5.4	初期条件の設定	106
7.1.5.5	領域分割の実行	107
7.1.5.6	粒子交換の実行	107
7.1.5.7	相互作用計算の実行	108
7.1.5.8	時間積分ループ	110
8	ユーザーサポート	111
8.1	コンパイルできない場合	111
8.2	コードがうまく動かない場合	111

8.3 その他	111
9 ライセンス	112

1 変更記録

- 2016/12/22
 - － 作成および初期リリース (FDPS バージョン 3.0 として)
- 2018/07/11
 - － 第 4 節の以下の記述の修正・改善
 - * ユーザ定義型のソースコードの一部が端切れしていた (第 4.1 節, 第 4.2 節)
 - * 一部のディレクトリ名に誤植
- 2018/08/29
 - － N 体/SPH サンプルコードの解説を追加 (第 7.1 節)
- 2018/08/31
 - － x86 用 Phantom-GRAPe ライブラリの節を追加 (第 3.4.1.7 節)
- 2019/07/19
 - － N 体/SPH サンプルコードの記述を改訂 (第 7.1 節)
- 2020/08/16
 - － PIKG の利用法を追加 (第 3.4.1.8 節)

2 概要

本節では、Framework for Developing Particle Simulator (FDPS) および FDPS Fortran インターフェースの概要について述べる。FDPS は粒子シミュレーションのコード開発を支援するフレームワークである。FDPS が行うのは、計算コストの最も大きな粒子間相互作用の計算と、粒子間相互作用の計算のコストを負荷分散するための処理である。これらはマルチプロセス、マルチスレッドで並列に処理することができる。比較的計算コストが小さく、並列処理を必要としない処理 (粒子の軌道計算など) はユーザーが行う。

FDPS が対応している座標系は、2次元直交座標系と3次元直交座標系である。また、境界条件としては、開放境界条件と周期境界条件に対応している。周期境界条件の場合、 x 、 y 、 z 軸方向の任意の組み合わせの周期境界条件を課することができる。

ユーザーは粒子間相互作用の形を定義する必要がある。定義できる粒子間相互作用の形には様々なものがある。粒子間相互作用の形を大きく分けると2種類あり、1つは長距離力、もう1つは短距離力である。この2つの力は、遠くの複数の粒子からの作用を1つの超粒子からの作用にまとめるか (長距離力)、まとめないか (短距離力) という基準でもって分類される。

長距離力には、小分類があり、無限遠に存在する粒子からの力も計算するカットオフなし長距離力と、ある距離以上離れた粒子からの力は計算しないカットオフあり長距離力がある。前者は開境界条件下における重力やクーロン力に対して、後者は周期境界条件下の重力やクーロン力に使うことができる。後者のためには Particle Mesh 法などが必要となるが、これは FDPS の拡張機能として用意されている。

短距離力には、小分類が4つ存在する。短距離力の場合、粒子はある距離より離れた粒子からの作用は受けない。すなわち必ずカットオフが存在する。このカットオフ長の決め方によって、小分類がなされる。すなわち、全粒子のカットオフ長が等しいコンスタントカーネル、カットオフ長が作用を受ける粒子固有の性質で決まるギャザーカーネル、カットオフ長が作用を与える粒子固有の性質で決まるスキッタカーネル、カットオフ長が作用を受ける粒子と作用を与える粒子の両方の性質で決まるシンメトリックカーネルである。コンスタントカーネルは分子動力学における LJ 力に適用でき、その他のカーネルは SPH などに適用できる。

ユーザーは、粒子間相互作用や粒子の軌道積分などを、Fortran 2003 を用いて記述する。

3 入門：サンプルコードを動かしてみよう

本節では、まずはじめに、FDPS および FDPS Fortran インターフェース の動作環境、必要なソフトウェア、インストール方法などを説明し、その後、サンプルコードの使用方法を説明する。サンプルコードの中身に関しては、次節 (第 4 節) で詳しく述べる。

3.1 動作環境

FDPS は Linux, Mac OS X, Windows などの OS 上で動作する。

3.2 必要なソフトウェア

本節では、FDPS を使用する際に必要となるソフトウェアを記述する。まず標準機能を用いるのに必要なソフトウェア、次に拡張機能を用いるのに必要なソフトウェアを記述する。

3.2.1 標準機能

本節では、FDPS の標準機能のみを使用する際に必要なソフトウェアを記述する。最初に逐次処理機能のみを用いる場合 (並列処理機能を用いない場合) に必要なソフトウェアを記述する。次に並列処理機能を用いる場合に必要なソフトウェアを記述する。

3.2.1.1 逐次処理

逐次処理の場合に必要なソフトウェアは以下の通りである。

- make
- C++ コンパイラ (gcc バージョン 4.8.3 以降なら確実, K コンパイラバージョン 1.2.0 で動作確認済)
- Fortran コンパイラ (Fortran 2003 標準をサポートし、上記 C++ コンパイラと相互運用可能なもの。gcc 4.8.3 以降の gfortran なら確実)
- Python 2.7.5 以上、または、Python 3.4 以上 (これ以外での正常動作は保証しない。特に、Python 2.7 以前では動作しない)

3.2.1.2 並列処理

本節では、FDPS の並列処理機能を用いる際に必要なソフトウェアを記述する。まず、OpenMP を使用する際に必要なソフトウェア、次に MPI を使用する際に必要なソフトウェア、最後に OpenMP と MPI を同時に使用する際に必要なソフトウェアを記述する。

3.2.1.2.1 OpenMP

OpenMP を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- OpenMP 対応の C++ コンパイラ (gcc version 4.8.3 以降なら確実, K コンパイラバージョン 1.2.0 で動作確認済)
- OpenMP 対応の Fortran コンパイラ (Fortran 2003 標準をサポートし、上記 C++ コンパイラと相互運用可能なもの。gcc 4.8.3 以降なら確実)
- Python 2.7.5 以上、または、Python 3.4 以上 (これ以外での正常動作は保証しない。特に、Python 2.7 以前では動作しない)

3.2.1.2.2 MPI

MPI を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- MPI version 1.3 対応の C++ コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済, K コンパイラバージョン 1.2.0 で動作確認済)
- MPI version 1.3 対応の Fortran コンパイラ (Fortran 2003 標準をサポートし、上記 C++ コンパイラと相互運用可能なもの。Open MPI 1.6.4 で動作確認済み)
- Python 2.7.5 以上、または、Python 3.4 以上 (これ以外での正常動作は保証しない。特に、Python 2.7 以前では動作しない)

3.2.1.2.3 MPI+OpenMP

MPI と OpenMP を同時に使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- MPI version 1.3 と OpenMP に対応の C++ コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済, K コンパイラバージョン 1.2.0 で動作確認済)
- MPI version 1.3 と OpenMP に対応の Fortran コンパイラ (Fortran 2003 標準をサポートし、上記 C++ コンパイラと相互運用可能なもの。Open MPI 1.6.4 で動作確認済み)
- Python 2.7.5 以上、または、Python 3.4 以上 (これ以外での正常動作は保証しない。特に、Python 2.7 以前では動作しない)

3.2.2 拡張機能

本節では、FDPS の拡張機能を使用する際に必要なソフトウェアについて述べる。FDPS の拡張機能には Particle Mesh がある。以下では Particle Mesh を使用する際に必要なソフトウェアを述べる。

3.2.2.1 Particle Mesh

Particle Mesh を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通りである。

- make
- MPI version 1.3 と OpenMP に対応の C++ コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済)
- FFTW 3.3 以降

3.3 インストール

本節では、FDPS および FDPS Fortran インターフェース のインストールについて述べる。取得方法、ビルド方法について述べる。

3.3.1 取得方法

ここでは FDPS の取得方法を述べる。最初に最新バージョンの取得方法、次に過去のバージョンの取得方法を述べる。

3.3.1.1 最新バージョン

以下の方法のいずれかで FDPS の最新バージョンを取得できる。

- ブラウザから
 1. ウェブサイト <https://github.com/FDPS/FDPS> で”Download ZIP”をクリックし、ファイル FDPS-master.zip をダウンロード
 2. FDPS を展開したいディレクトリに移動し、圧縮ファイルを展開
- コマンドラインから
 - Subversion を用いる場合：以下のコマンドを実行するとディレクトリ trunk の下を Subversion レポジトリとして使用できる

```
$ svn co --depth empty https://github.com/FDPS/FDPS
$ cd FDPS
$ svn up trunk
```

- Git を用いる場合：以下のコマンドを実行するとカレントディレクトリにディレクトリ FDPS ができ、その下を Git のレポジトリとして使用できる

```
$ git clone git://github.com/FDPS/FDPS.git
```

3.3.1.2 過去のバージョン

以下の方法でブラウザから FDPS の過去のバージョンを取得できる。

- ウェブサイト <https://github.com/FDPS/FDPS/releases> に過去のバージョンが並んでいるので、ほしいバージョンをクリックし、ダウンロード
- FDPS を展開したいディレクトリに移動し、圧縮ファイルを展開

3.3.2 インストール方法

C++ 言語で記述された FDPS 本体はヘッダライブラリ^{注 1)}のため、configure などを行う必要はない。基本的にはアーカイブを展開したあと、自分のソースファイルをコンパイルする時に適切なインクルードパスを設定すればよい。実際の手続きは第 3.4 節で説明するサンプルコードとその Makefile をみて欲しい。

Fortran の場合、コンパイル前に Fortran ソースファイルから FDPS とのインターフェースコードを生成する必要がある。その手順は仕様書 [doc.spec.ftn_ja.pdf](#) の第 6 章に記述されている。本サンプルコードの Makefile では、インターフェースコードが make コマンド実行中に自動的に生成されるようになっている。ユーザが自分のコードの Makefile を作る時にはサンプルコードの Makefile を参考にすることを推奨する。

3.4 サンプルコードの使用法

本節ではサンプルコードの使用法について説明する。サンプルコードには重力 N 体シミュレーションコードと、SPHシミュレーションコードがある。最初に重力 N 体シミュレーションコード、次に SPHシミュレーションコードの使用について記述する。サンプルコードは拡張機能を使用していない。

3.4.1 重力 N 体シミュレーションコード

本サンプルコードは、FDPS Fortran インターフェース を用いて書かれた無衝突系の N 体計算コードである。このコードでは一様球のコールドコラプス問題を計算し、粒子分布のスナップショットを出力する。

注 1) ヘッダファイルだけで構成されるライブラリのこと

3.4.1.1 概要

以下の手順で本コードを使用できる。

- ディレクトリ\$(FDPS)/sample/fortran/nbody に移動。これ以後、ディレクトリ\$(FDPS) はFDPS の最も上の階層のディレクトリを指す (\$(FDPS) は環境変数にはなっていない)。
\$(FDPS) はFDPS の取得によって異なり、ブラウザからなら FDPS-master, Subversion からなら trunk, Git からなら FDPS である。
- カレントディレクトリにある Makefile を編集
- コマンドライン上で make を実行
- nbody.out ファイルの実行
- 結果の解析

最後に x86 版 Phantom-GRAPE および PIKG を使う場合について述べる。

3.4.1.2 ディレクトリ移動

ディレクトリ\$(FDPS)/sample/fortran/nbody に移動する。

3.4.1.3 Makefile の編集

サンプルコードのディレクトリには 2 つの Makefile がある。1 つは GCC 用に書かれた Makefile であり、もう 1 つは Intel コンパイラ用に書かれた Makefile.intel である。ここでは Makefile について詳しく解説し、Makefile.intel に関しては使用上の注意点を本節最後で述べるのみとする。

まず、Makefile の初期設定について説明する。サンプルコードをコンパイルするにあたって、ユーザが設定すべき Makefile 変数は 4 つあり、Fortran コンパイラを表す FC、C++ コンパイラを表す CXX、それぞれのコンパイルオプションを表す FCFLAGS, CXXFLAGS である。これらの初期設定値は次のようになっている:

```
FC=gfortran
CXX=g++
FCFLAGS = -std=f2003 -O3 -ffast-math -funroll-loops -finline-functions
CXXFLAGS = -O3 -ffast-math -funroll-loops $(FDPS_INC)
```

ここで、\$(FDPS_INC) はFDPS 本体をインクルードするために必要なインクルード PATH が格納された変数であり、Makefile 内で設定済みである。したがって、ここで変更する必要はない。

上記 4 つの Makefile 変数の値を適切に編集し、make コマンドを実行することで実行ファイルが得られる。OpenMP と MPI を使用するかどうかで編集方法が変わるため、以下でそれを説明する。

- OpenMP も MPI も使用しない場合
 - 変数 FC に Fortran コンパイラを代入する
 - 変数 CXX に C++ コンパイラを代入する
- OpenMP のみ使用の場合
 - 変数 FC に OpenMP 対応の Fortran コンパイラを代入する
 - 変数 CXX に OpenMP 対応の C++ コンパイラを代入する
 - FCFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す
 - CXXFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す
- MPI のみ使用の場合
 - 変数 FC に MPI 対応の Fortran コンパイラを代入する
 - 変数 CXX に MPI 対応の C++ コンパイラを代入する
 - FCFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL の行のコメントアウトを外す
 - CXXFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL の行のコメントアウトを外す
- OpenMP と MPI の同時使用の場合
 - 変数 FC に MPI 対応の Fortran コンパイラを代入する
 - 変数 CXX に MPI 対応の C++ コンパイラを代入する
 - FCFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す
 - FCFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL の行のコメントアウトを外す
 - CXXFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す
 - CXXFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL の行のコメントアウトを外す

次に、ユーザが本 Makefile をユーザコードで使用する場合に便利な情報を記述する。ユーザコードで使用する場合に最も重要となる Makefile 変数は、FDPS_LOC, SRC_USER_DEFINED_TYPE, SRC_USER の 3 つである。まず、変数 FDPS_LOC には、FDPS のトップディレクトリの PATH を格納する。本 Makefile では、FDPS のソースディレクトリの PATH や Fortran とのインターフェースコードを生成するスクリプトの PATH 等、FDPS に関連する各種な設定がこの変数の値に基いて自動的に設定されるようになっている。したがって、

ユーザは適切に設定する必要がある。次に、変数 `SRC_USER_DEFINED_TYPE`, `SRC_USER` には、それぞれ、ユーザ定義型が記述された Fortran ファイル名と、ユーザ定義型以外の部分が記述された Fortran ファイル名を格納する。FDPS の Fortran インターフェースコードはユーザコードのクラス (派生型) を記述する部分から生成されるので、その部分が記述されたファイルを `SRC_USER_DEFINED_TYPE` で、それ以外を `SRC_USER` で指定する。これにより、`SRC_USER` で指定したファイルが変更されても FDPS の再コンパイルは起きなくなるので、コンパイル・リンクの時間が短くなる。但し、`SRC_USER_DEFINED_TYPE`、或いは、`SRC_USER` に格納された (複数の) ファイルの間に依存関係がある場合、依存関係を示すルールを Makefile に追記しなければならない点に注意して頂きたい。この記述方法に関しては、例えば、GNU make のマニュアル等を読んで頂きたい。

最後に、`Makefile.intel` を使用する上での注意点について説明する。変数の初期値が異なる点を除き、`Makefile.intel` の構造は `Makefile` と同じである。したがって、変数の値をユーザが利用する計算機システムにおける値に適切に設定すれば、`Makefile` と同様に利用可能である。以下に変更する上での注意点を述べる：

- `/opt/intel/bin` を、利用する計算機システムにおける Intel コンパイラの格納ディレクトリの `PATH` に変更する。
- `/opt/intel/include` を、Intel コンパイラに付属するヘッダファイル群を格納したディレクトリの `PATH` に変更する。
- `Makefile.intel` の `LD_FLAGS` は、`-L/opt/intel/lib/intel64 -L/usr/lib64 -lifport -lifcore -limf -lsvml -lm -lipgo -lirc -lirc_s` となっている。
この中の `-lifcore` ^{注2)} は、C++ コンパイラで C++ オブジェクトと Fortran オブジェクトをリンクするため必要である ^{注3)}。計算機システムのライブラリパスに、Intel コンパイラのライブラリ群が登録されていない場合、さらに、`-L/opt/intel/lib/intel64 -L/usr/lib64 -lifport -limf -lsvml -lm -lipgo -lirc -lirc_s` のような指定が必要である。
ここで、`/opt/intel/lib/intel64` は、Intel コンパイラのライブラリ群が格納されたディレクトリの `PATH` で、`/usr/lib64` はライブラリ `libm` を格納したディレクトリの `PATH` である。これらは利用する計算機システムに合わせて修正する必要がある。コンパイルに必要なライブラリ群 (`-l*`) は、Intel コンパイラのバージョンによって変わる可能性があるので確認して頂きたい。
- 本書を執筆時点 (2016/12/26) で、Intel コンパイラで OpenMP を有効にするオプションは `-openmp`、或いは、`-qopenmp` である。これは Intel コンパイラのバージョンによって異なり、より新しいバージョンのコンパイラは後者を使用する (前者を使用した場合、廃止予定の警告が出る)。
- 利用する計算機システムによっては、`-lifcore` の指定以外の設定が環境変数 (`PATH`, `CPATH`, `LD_LIBRARY_PATH` 等として) で既に行われていることもありえる。

注 2) `liblifcore` は、Fortran ランタイムライブラリである。

注 3) Intel コンパイラ (バージョン 17.0.0 20160721) において確認。

3.4.1.4 make の実行

make コマンドを実行する。このとき、まず FDPS の Fortran インターフェースプログラムが生成され、その後、インターフェースプログラムとサンプルコードと一緒にコンパイルされる。

3.4.1.5 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./nbody.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./nbody.out
```

ここで、MPIRUN には `mpirun` や `mpiexec` などが、NPROC には使用する MPI プロセスの数が入る。

正しく終了すると、以下のようなログを出力する。energy error は絶対値で 1×10^{-3} のオーダーに収まっていればよい。

```
time:      9.5000000000E+000, energy error:    -3.8046534069E-003
time:      9.6250000000E+000, energy error:    -3.9711750200E-003
time:      9.7500000000E+000, energy error:    -3.8223429428E-003
time:      9.8750000000E+000, energy error:    -3.8843099298E-003
MemoryPool::finalize() is completed!
***** FDPS has successfully finished. *****
```

3.4.1.6 結果の解析

ディレクトリ `result` に粒子分布を出力したファイル `"snap0000x-proc0000y.dat"` ができている。ここで `x` は整数で時刻に対応している。`y` は MPI プロセス番号を表しており、MPI 実行しなければ常に `y=0` である。

出力ファイルフォーマットは 1 列目から順に粒子の ID、粒子の質量、位置の `x`, `y`, `z` 座標、粒子の `x`, `y`, `z` 軸方向の速度である。

ここで実行したのは、粒子数 1024 個からなる一様球 (半径 3) のコールドコラプスである。コマンドライン上で以下のコマンドを実行すれば、時刻 9 における `xy` 平面に射影した粒子分布を見ることができる。

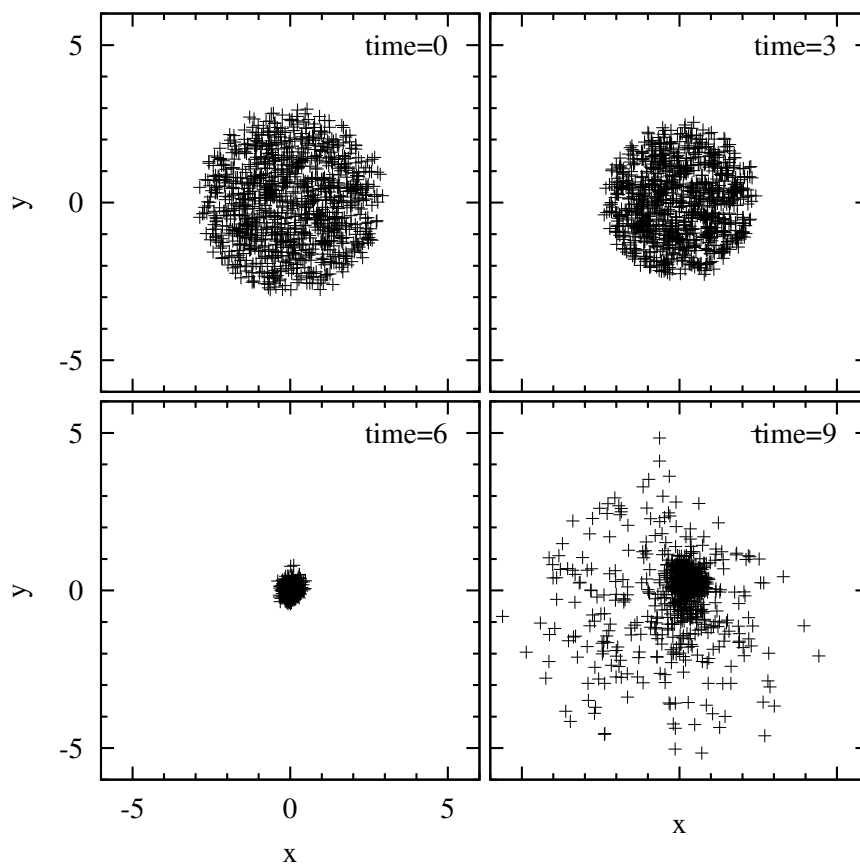


図 1:

```
$ cd result
$ cat snap00009-proc* > snap00009.dat
$ gnuplot
> plot "snap00009.dat" using 3:4
```

他の時刻の粒子分布をプロットすると、一様球が次第に収縮し、その後もう一度膨張する様子を見ることができる (図 1 参照)。

粒子数を 10000 個にして計算を行いたい場合には、ファイル `f_main.F90` 中のサブルーチン `f_main()` のパラメータ変数 `ntot` を 10000 に設定し、再度、コンパイルした上で実行すればよい。

3.4.1.7 x86 版 Phantom-GRAPE を使う場合

Phantom-GRAPE は SIMD 命令を効率的に活用することで重力相互作用の計算を高速に実行するライブラリである (詳細は Tanikawa et al.[2012, New Astronomy, 17, 82] と Tanikawa et al.[2012, New Astronomy, 19, 74] を参照のこと)。

まず、使用環境を確認する。SIMD 命令セット AVX をサポートする Intel CPU または AMD CPU を搭載したコンピュータを使用しているならば、x86 版 Phantom-GRAPe を使用可能である。

次にディレクトリ\$(FDPS)/src/phantom_grape_x86/G5/newton/libpg5 に移動して、ファイル Makefile を編集し、コマンド make を実行して Phantom-GRAPe のライブラリ libpg5.a を作る。

最後に、ディレクトリ\$(FDPS)/sample/fortran/nbody に戻り、ファイル Makefile 内の `''#use_phantom_grape_x86 = yes''` の `''#''` を消す。make を実行してコンパイルする (OpenMP, MPI の使用・不使用どちらにも対応) と、x86 版 Phantom-GRAPe を使用したコードができている。上と同様の方法で実行・結果の確認を行うとさきほどと同様の結果が得られる。

Intel Core i5-3210M CPU @ 2.50GHz の 2 コアで性能テスト (OpenMP 使用、MPI 不使用) をした結果、粒子数 8192 の場合に、Phantom-GRAPe を使うと、使わない場合に比べて、最大で 5 倍弱ほど高速なコードとなる。

3.4.1.8 PIKG を使う場合

PIKG は DSL(ドメイン固有言語) 記述から様々なアーキテクチャ向けに最適化された粒子間相互作用カーネルを生成するカーネルジェネレータである。

ディレクトリ\$(FDPS)/sample/fortran/nbody のファイル Makefile 内の `''#use_pikg_x86 = yes''` の `''#''` を消す。この状態で make を実行してコンパイルする (OpenMP, MPI の使用・不使用どちらにも対応) と、PIKG から生成されたカーネルを使用した実行ファイル nbody.out ができている。上と同様の方法で実行・結果の確認を行うとさきほどと同様の結果が得られる。

デフォルトでは、通常の Fortran コードと同等の reference モードの相互作用カーネルが生成される。Makefile 内の #CONVERSION_TYPE とその直後にある #CXXFLAGS の行のコメントアウトを外すと、別のアーキテクチャ (AVX2 や AVX-512) 向けにコードを生成できる。AVX2 モードを使う場合は、利用する CPU が AVX2 及び FMA に対応していなくてはならない。さらに AVX-512 モードを使う場合には利用する CPU が AVX-512F および AVX-512DQ に対応していなくてはならない。

3.4.2 SPH シミュレーションコード

本サンプルコードには標準 SPH 法が FDPS を使って実装されている。簡単のため、smoothing length は一定値を取ると仮定している。コードでは、3 次元の衝撃波管問題の初期条件を生成し、衝撃波管問題を実際に計算する。

3.4.2.1 概要

以下の手順で本コードを使用できる。

- ディレクトリ\$(FDPS)/sample/fortran/sph に移動

- カレントディレクトリにある Makefile を編集 (後述)
- コマンドライン上で make を実行
- sph.out ファイルの実行 (後述)
- 結果の解析 (後述)

3.4.2.2 ディレクトリ移動

ディレクトリ\$(FDPS)/sample/fortran/sph に移動する。

3.4.2.3 Makefile の編集

SPH サンプルコードにも、 N 体計算のサンプルコードの場合と同様、GCC と Intel コンパイラ用に 2 種類の Makefile が用意されている。編集の仕方は、 N 体計算の場合と同一なので、第 3.4.1.3 節を参照されたい。

3.4.2.4 make の実行

make コマンドを実行する。 N 体計算のときと同様、このとき、まず FDPS の Fortran インターフェースプログラムが生成され、その後、インターフェースプログラムとサンプルコードと一緒にコンパイルされる。

3.4.2.5 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./sph.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./sph.out
```

ここで、MPIRUN には mpirun や mpiexec などが、NPROC には使用する MPI プロセスの数が入る。

正しく終了すると以下のようなログを出力する。

```
***** FDPS has successfully finished. *****
```

3.4.2.6 結果の解析

実行するとディレクトリ `result` にファイルが出力されている。ファイル名は `snap0000x-proc0000y.dat` となっている。ここで、 x, y は整数で、それぞれ、時刻と MPI プロセス番号を表す。MPI 実行でない場合には、常に $y=0$ である。出力ファイルフォーマットは 1 列目から順に粒子の ID、粒子の質量、位置の x, y, z 座標、粒子の x, y, z 軸方向の速度、密度、内部エネルギー、圧力である。

コマンドライン上で以下のコマンドを実行すれば、横軸に粒子の x 座標、縦軸に粒子の密度をプロットできる (時刻は 40)。

```
$ cd result
$ cat snap00040-proc* > snap00040.dat
$ gnuplot
> plot "snap00040.dat" using 3:9
```

正しい答が得られれば、図 2 のような図を描ける。

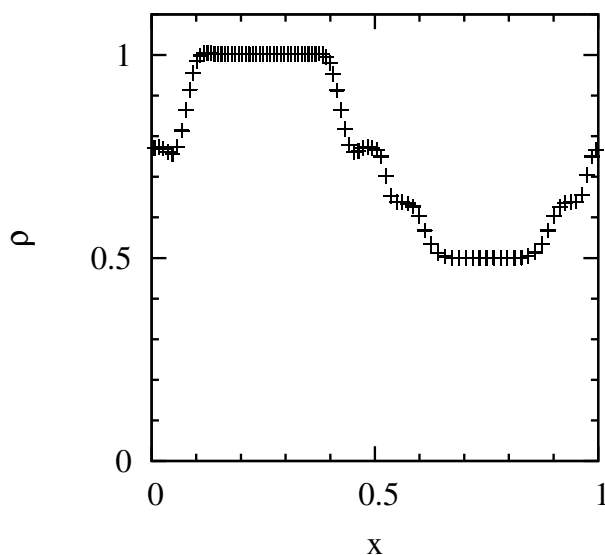


図 2: 衝撃波管問題の時刻 $t = 40$ における密度分布

4 サンプルコードの解説

本節では、前節(第3節)で動かしたサンプルコードについての解説を行う。特に、ユーザーが定義しなければならない派生データ型(以後、ユーザー定義型と呼ぶ)やFDPSの各種APIの使い方について詳しく述べる。説明の重複を避けるため、いくつかの事項に関しては、その詳細な説明が*N*体シミュレーションコードの節でのみ行われている。そのため、SPHシミュレーションだけに興味があるユーザーも、*N*体シミュレーションコードの節に目を通して頂きたい。

4.1 *N*体シミュレーションコード

4.1.1 ソースファイルの場所と構成

ソースファイルは\$(FDPS)/sample/fortran/nbody 以下にある。サンプルコードは、次節で説明するユーザー定義型が記述されたソースコード `user_defined.F90` と、*N*体シミュレーションのメインループ等が記述されたソースコード `f_main.F90` から構成される。この他に、GCCとIntelコンパイラ用のMakefileである `Makefile` と `Makefile.intel` がある。

4.1.2 ユーザー定義型・ユーザー定義関数

本節では、FDPSの機能を用いて*N*体計算を行う際、ユーザーが記述しなければならない派生データ型とサブルーチンについて記述する。

4.1.2.1 FullParticle 型

ユーザーはユーザー定義型の1つ `FullParticle` 型を記述しなければならない。`FullParticle` 型には、シミュレーションを行うにあたって、*N*体粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 1に本サンプルコードの `FullParticle` 型の実装例を示す(`user_defined.F90`を参照)。

Listing 1: `FullParticle` 型

```

1  type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP,EPI,EPJ,Force
2      !$fdps copyFromForce full_particle (pot,pot) (acc,acc)
3      !$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
4      !$fdps clear id=keep, mass=keep, pos=keep, vel=keep
5      integer(kind=c_long_long) :: id
6      real(kind=c_double) mass !$fdps charge
7      type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
8      type(fdps_f64vec) :: vel !$fdps velocity
9      real(kind=c_double) :: pot
10     type(fdps_f64vec) :: acc
11 end type full_particle

```

FDPS Fortran インターフェースを使ってユーザコードを開発する場合、ユーザは派生データ型がどのユーザ定義型 (FullParticle 型, EssentialParticleI 型, EssentialParticleJ 型, Force 型) に対応するかを FDPS に教えなければならない。本インターフェースにおいて、この指示は、派生データ型に決まった書式のコメント文を加えることによって行う (以後、この種のコメント文を FDPS 指示文と呼ぶ)。本サンプルコードでは、FullParticle 型が EssentialParticleI 型、EssentialParticleJ 型、そして、Force 型を兼ねている。そのため、派生データ型がすべてのユーザ定義型に対応すること指示する以下のコメント文を記述している:

```
type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP,EPI,EPJ,Force
```

また、FDPS は FullParticle 型のどのメンバ変数が質量や位置等の必須物理量 (どの粒子計算でも必ず必要となる物理量、或いは、特定の粒子計算において必要とされる物理量と定義する) に対応するのを知っていなければならない。この指示も決まった書式のコメント文をメンバ変数に対して記述することで行う。今回の例では、メンバ変数 mass, pos, vel が、それぞれ、質量、位置、速度に対応することを FDPS に指示するため、以下の指示文が記述されている:

```
real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
type(fdps_f64vec) :: vel !$fdps velocity
```

ただし、メンバ変数が速度であることを指示する !\$fdps velocity は予約語であり、指示は任意である (現時点で FDPS の振舞に一切影響しない)。

FullParticle 型は EssentialParticleI 型、EssentialParticleJ 型、Force 型との間でデータの移動 (データコピー) を行う。ユーザはこのコピーの仕方を指示する FDPS 指示文も記述しなければならない。本サンプルコードでは、以下のように記述している:

```
!$fdps copyFromForce full_particle (pot,pot) (acc,acc)
!$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
```

ここで、キーワード copyFromForce を含む指示文は、Force 型のどのメンバ変数を FullParticle 型のどのメンバ変数にコピーするかを指示するもので、FullParticle 型に常に記述しなければならない指示文である。一方、キーワード copyFromFP は FullParticle 型から EssentialParticleI 型および EssentialParticleJ 型へのデータコピーの仕方を指示するもので、EssentialParticleI 型と EssentialParticleJ 型には必ず記述しなければならない指示文である。今、FullParticle 型はこれら 2 つを兼ねているため、ここに記述している。

今、FullParticle 型は Force 型を兼ねている。Force 型にも必ず記述しなければならない指示文がある。それは、相互作用計算において、積算対象のメンバ変数をどのように 0 クリアするかを指示する指示文である。本サンプルコードでは、積算対象である加速度とポテンシャルのみを 0 クリアすることを指示するため、次の指示文を記述している:

```
!$fdps clear id=keep, mass=keep, pos=keep, vel=keep
```

ここで、キーワード `clear` の右に記述された構文 `mbr=keep` は、メンバ変数 `mbr` の値を変更しないことを指示する構文である。

FDPS 指示文の書式の詳細については、仕様書 `doc_specs_ftn_ja.pdf` をご覧頂きたい。

4.1.2.2 相互作用関数 `calcForceEpEp`

ユーザーは粒子間相互作用の仕方を記述した相互作用関数 `calcForceEpEp` を記述しなければならない。サブルーチン `calcForceEpEp` には、粒子-粒子相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。Listing 2 に、本サンプルコードでの実装を示す (`user_defined.F90` を参照)。

Listing 2: 関数 `calcForceEpEp`

```

1  #else
2      subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
3          implicit none
4          integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
5          type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
6          type(full_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
7          type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
8          !* Local variables
9          integer(c_int) :: i,j
10         real(c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
11         type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
12
13         !* Compute force
14         eps2 = eps_grav * eps_grav
15         do i=1,n_ip
16             xi = ep_i(i)%pos
17             ai = 0.0d0
18             poti = 0.0d0
19             do j=1,n_jp
20                 rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
21                 rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
22                 rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
23                 r3_inv = rij%x*rij%x &
24                     + rij%y*rij%y &
25                     + rij%z*rij%z &
26                     + eps2
27                 r_inv = 1.0d0/sqrt(r3_inv)
28                 r3_inv = r_inv * r_inv
29                 r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
30                 r3_inv = r3_inv * r_inv
31                 ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
32                 ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
33                 ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
34                 poti = poti - r_inv
35                 ! [IMPORTANT NOTE]
36                 !   In the innermost loop, we use the components of vectors
37                 !   directly for vector operations because of the following
38                 !   reason. Except for intel compilers with '-ipo' option,
39                 !   most of Fortran compilers use function calls to perform
40                 !   vector operations like rij = x - ep_j(j)%pos.

```

```

41         !      This significantly slow downs the speed of the code.
42         !      By using the components of vector directly, we can avoid
43         !      these function calls.
44     end do
45     f(i)%pot = f(i)%pot + poti
46     f(i)%acc = f(i)%acc + ai
47 end do

```

本サンプルコードでは、サブルーチン `calc_gravity_ep_ep` として実装されている。サブルーチンの仮引数は、`EssentialParticleI` の配列、`EssentialParticleI` の個数、`EssentialParticleJ` の配列、`EssentialParticleJ` の個数、`Force` 型の配列である。本サンプルコードでは、`FullParticle` 型がすべてのユーザ定義型を兼ねているため、引数のデータ型はすべて `full_particle` 型となっていることに注意して頂きたい。

4.1.2.3 相互作用関数 `calcForceEpSp`

ユーザーは粒子-超粒子間相互作用の仕方を記述した相互作用関数 `calcForceEpSp` を記述しなければならない。`calcForceEpSp` には、粒子-超粒子相互作用計算の具体的な内容を書く必要があり、サブルーチンとして実装しなければならない。Listing 3 に、本サンプルコードでの実装を示す (`user_defined.F90` を参照)。

Listing 3: 関数 `calcForceEpSp`

```

1  !**** Interaction function (particle-super particle)
2  subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
3      implicit none
4      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
5      type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
6      type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
7      type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
8      !* Local variables
9      integer(c_int) :: i,j
10     real(c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
11     type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
12
13     eps2 = eps_grav * eps_grav
14     do i=1,n_ip
15         xi = ep_i(i)%pos
16         ai = 0.0d0
17         poti = 0.0d0
18         do j=1,n_jp
19             rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
20             rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
21             rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
22             r3_inv = rij%x*rij%x &
23                     + rij%y*rij%y &
24                     + rij%z*rij%z &
25                     + eps2
26             r_inv = 1.0d0/sqrt(r3_inv)
27             r3_inv = r_inv * r_inv
28             r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
29             r3_inv = r3_inv * r_inv

```

```

30         ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
31         ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
32         ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
33         poti = poti - r_inv
34     end do
35     f(i)%pot = f(i)%pot + poti
36     f(i)%acc = f(i)%acc + ai
37 end do

```

本サンプルコードでは、サブルーチン `calc_gravity_ep_sp` として実装されている。サブルーチンの仮引数は、`EssentialParticleI` の配列、`EssentialParticleI` の個数、超粒子の配列、超粒子の個数、`Force` 型の配列である。本サンプルコードでは、`FullParticle` 型がすべてのユーザ定義型を兼ねているため、引数の `Force` 型は `full_particle` 型となっていることに注意して頂きたい。ここで指定する超粒子型はこの相互作用計算を実施するのに使用するツリーオブジェクトの種別と適合していなければならない。

4.1.3 プログラム本体

本節では、FDPS Fortran インターフェースを用いて N 体計算を行うにあたり、“メインルーチン” `f_main()` に書かれるべきサブルーチンや関数に関して解説する。ここで、メインルーチンとはっきり書かないのは、次の理由による：FDPS Fortran インターフェースを使用する場合、ユーザコードは必ずサブルーチン `f_main()` の下に記述されなければならない、ユーザコードは正しい意味でのメインルーチンを持たない(メインルーチンはインターフェースプログラムの C++ ソースコード内にある)。しかし、実質的にはサブルーチン `f_main()` がメインルーチンの役割を果たす。そのため、敢えて“メインルーチン”という言葉を使った。メインルーチンという言葉は、それがユーザコードの入り口であることを示すのに適しているので、以後、`f_main()` をメインルーチンと呼ぶことにする。本サンプルコードのメインルーチンは `f_main.F90` に記述されている。

4.1.3.1 fdps_controller 型オブジェクトの生成

FDPS Fortran インターフェースにおいて、FDPS の API はすべて Fortran 2003 のクラス `FDPS_controller` のメンバ関数として提供される。このクラスは、インターフェースプログラムの 1 つである `FDPS_module.F90` の中の、モジュール `fdps_module` 内で定義されている。したがって、ユーザは FDPS の API を使用するために、`FDPS_controller` 型オブジェクトを生成しなければならない。本サンプルコードでは、`FDPS_controller` 型オブジェクト `fdps_ctrl` をメインルーチンで生成している：

Listing 4: `fdps_controller` 型オブジェクトの生成

```

1  subroutine f_main()
2      use fdps_module
3      implicit none
4      !* Local variables
5      type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
6

```



```

7      ! Do something
8
9  end subroutine f_main

```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから必要な部分だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。

上記の理由から、以下の説明において、FDPS の API はこのオブジェクトのメンバ関数として呼び出されていることに注意されたい。

4.1.3.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メインルーチンに記述する。

Listing 5: FDPS の開始

```

1 call fdps_ctrl%ps_initialize()

```

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メインルーチンの最後に次のように記述する。

Listing 6: FDPS の終了

```

1 call fdps_ctrl%ps_finalize()

```

4.1.3.3 オブジェクトの生成・初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について解説する。

4.1.3.3.1 オブジェクトの生成

今回の計算では、粒子群オブジェクト、領域情報オブジェクトに加え、重力計算用のツリーオブジェクトを 1 個生成する必要がある。Fortran インターフェースでは、これらオブジェクトはすべて整数変数に格納された識別番号を使って操作する。したがって、まず識別番号を格納する整数変数を用意したあとに、オブジェクトを生成する API を呼び出す必要がある。以下にそのコードを記す。これらはサンプルコード `f_main.F90` のメインルーチン内に記述されている。

Listing 7: オブジェクトの生成

```

1 subroutine f_main()
2   use fdps_module
3   use user_defined_types
4   implicit none
5   !* Local variables
6   integer :: psys_num, dinfo_num, tree_num
7
8   !* Create FDPS objects

```

```

9      call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
10     call fdps_ctrl%create_psys(psys_num,'full_particle')
11     call fdps_ctrl%create_tree(tree_num, &
12                                "Long,full_particle,full_particle,
13                                full_particle,Monopole")
14 end subroutine f_main

```

ここでも、実際のサンプルコードから該当部分だけを抜き出していることに注意して頂きたい。

上に示すように、粒子群オブジェクトを生成するには FullParticle 型に対応する派生データ型名を文字列として API の引数に渡す必要がある。同様に、ツリーオブジェクト生成の際には、ツリーの種別を示す文字列を API の引数に渡す必要がある。両 API において、派生データ型 名は小文字で入力されなければならない。

4.1.3.3.2 領域情報オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを作成したら、そのオブジェクトの初期化を行う必要がある。本サンプルコードでは周期境界等是用いていないため、領域情報オブジェクトの初期化は API `init_dinfo` を実行するだけでよい:

Listing 8: 領域オブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num,coef_ema)

```

ここで、API `init_dinfo` の第 2 引数は領域分割に使用される指数移動平均の平滑化係数を表す。この係数の意味については仕様書に詳しい解説があるので、そちらを参照されたい。

4.1.3.3.3 粒子群オブジェクトの初期化

次に、粒子群オブジェクトの初期化を行う必要がある。粒子群オブジェクトの初期化は、API `init_psys` で行う:

Listing 9: 粒子群オブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_psys(psys_num)

```

4.1.3.3.4 ツリーオブジェクトの初期化

次に、ツリーオブジェクトの初期化を行う必要がある。ツリーオブジェクトの初期化は API `init_tree` で行う。この API には、引数として大雑把な粒子数を渡す必要がある。今回は、全体の粒子数 (`ntot`) をセットしておく事にする:

Listing 10: ツリーオブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_tree(tree_num,ntot,theta, &
2                           n_leaf_limit,n_group_limit)

```

この API には 3 つの省略可能引数が存在し、サンプルコードではこれらを省略せずに指定している:

- `theta` — ツリー法で力の計算をする場合の見込み角についての基準
- `n_leaf_limit` — ツリーを切るのをやめる粒子数の上限
- `n_group_limit` — 相互作用リストを共有する粒子数の上限

4.1.3.4 粒子データの初期化

初期条件の設定を行うためには、粒子群オブジェクトに粒子データを入力する必要がある。(既に API `init_psys` で初期化済みの) 粒子群オブジェクトに、`FullParticle` 型粒子のデータを格納するには、粒子群オブジェクトの API `set_nptcl_loc` と `get_psys_fptr` を用いて、次のように行う:

Listing 11: 粒子データの初期化

```

1  subroutine foo(fdps_ctrl,psys_num)
2      use fdps_vector
3      use fdps_module
4      use user_defined_types
5      implicit none
6      type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
7      integer, intent(IN) :: psys_num
8      !* Local variables
9      integer :: i,nptcl_loc
10     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
11
12     !* Set # of local particles
13     call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psys_num,nptcl_loc)
14
15     !* Get the pointer to full particle data
16     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
17
18     !* Initialize particle data
19     do i=1,nptcl_loc
20         ptcl(i)%pos = ! Do something
21     end do
22
23     !* Release the pointer
24     nullify(ptcl)
25
26 end subroutine foo

```

まず、粒子群オブジェクトに粒子データを保存するのに必要なメモリを確保しなければならない。これを行うには API `set_nptcl_loc` を実行すればよい。この API は指定された粒子群オブジェクトのローカル粒子数 (自プロセスが管理する粒子数) の値を設定し、かつ、その粒子数を格納するのに必要なメモリを確保する。粒子データを初期化するためには、確保されたメモリのアドレスを取得しなければならない。これには API `get_psys_fptr` を使用する。アドレスは Fortran ポインタで受け取る必要がある。そのため、上記の例では、ポインタを以下のように用意している:

```
type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
```

API `get_psys_fptr` によってポインタを設定した後は、ポインタを粒子配列のように使用することが可能である。上の例では、粒子データの設定が完了した後、ポインタを組込関数 `nullify` によって解放している。

4.1.3.5 ループ

本節では、時間積分ループの中で行わなければならないことについて、解説する。

4.1.3.5.1 領域分割の実行

まずは、粒子分布に基いて、領域分割を実行する。本サンプルコードでは、これを領域情報オブジェクトの API `decompose_domain_all` を用いて行っている:

Listing 12: 領域分割の実行

```
1 if (mod(num_loop,4) == 0) then
2   call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
3 end if
```

ここで、計算時間の節約のため、領域分割は 4 ループ毎に 1 回だけ行うようにしている。

4.1.3.5.2 粒子交換の実行

次に、領域情報に基いて、プロセス間の粒子の情報を交換する。これには、粒子群オブジェクトの API `exchange_particle` を用いる:

Listing 13: 粒子交換の実行

```
1 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
```

4.1.3.5.3 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。これには、ツリーオブジェクトの API `calc_force_all_and_write_back` を用いる:

Listing 14: 相互作用計算の実行

```
1 subroutine f_main()
2   use, intrinsic :: iso_c_binding
3   use user_defined_types
4   implicit none
5   !* Local variables
6   type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep,pfunc_ep_sp
7
8   ! Do something
```

```

9
10 pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_gravity_ep_ep)
11 pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_gravity_ep_sp)
12 call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
13                                              pfunc_ep_ep, &
14                                              pfunc_ep_sp, &
15                                              psys_num,    &
16                                              dinfo_num)
17
18 ! Do something
19
20 end subroutine f_main

```

ここで、API の第 2,3 引数には関数 `calcForceEpEp`, `calcForceEpSp` の (C 言語アドレス^{注 4)}としての) 関数ポインタを指定する。関数の C 言語アドレスは、Fortran 2003 で導入された組込関数 `c_funloc` を使って取得する (この組込み関数はモジュール `iso_c_binding` で提供されるため、`use` 文を使い、このモジュールを利用可能にしている)。C 言語アドレスを格納するためには、同じく Fortran 2003 で導入された派生データ型 `c_funptr` の変数が必要である。そのため、本サンプルコードでは、`c_funptr` 型変数として、`pfunc_ep_ep` と `pfunc_ep_sp` を用意している。ここに、`calc_gravity_ep_ep` と `calc_gravity_ep_sp` の C 言語アドレスを格納した上で、API に渡している。

4.1.3.5.4 時間積分

本サンプルコードでは、時間積分を Leapfrog 時間積分法によって行う。時間積分は形式的に、 $K(\frac{\Delta t}{2})D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$ と表される。ここで、 Δt は時間刻み、 $K(\cdot)$ は速度を指定された時間だけ時間推進するオペレータ、 $D(\cdot)$ は位置を指定された時間だけ時間推進するオペレータである。本サンプルコードにおいて、これらのオペレータは、サブルーチン `kick` とサブルーチン `drift` として実装している。

時間積分ループの最初で、最初の $D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$ の計算を行い、粒子の座標と速度の情報を更新している:

Listing 15: $D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$ オペレータの計算

```

1 !* Leapfrog: Kick-Drift
2 call kick(fdps_ctrl,psys_num,0.5d0*dt)
3 time_sys = time_sys + dt
4 call drift(fdps_ctrl,psys_num,dt)

```

時間積分ループの次の部分では、力の計算を行い、その後、最後の $K(\frac{\Delta t}{2})$ の計算を行っている:

Listing 16: $K(\frac{\Delta t}{2})$ オペレータの計算

```

1 !* Leapfrog: Kick
2 call kick(fdps_ctrl,psys_num,0.5d0*dt)

```

^{注 4)} C 言語方式で記述されたアドレス情報のこと。

4.1.3.6 粒子データの更新

上記で説明したkickやdrift等のサブルーチンで、粒子データを更新するためには、粒子群オブジェクトに格納されている粒子データにアクセスする必要がある。これは、第4.1.3.4節で説明した方法とほぼ同様に行う:

Listing 17: 粒子データの更新

```

1  subroutine foo(fdps_ctrl,psys_num)
2      use fdps_vector
3      use fdps_module
4      use user_defined_types
5      implicit none
6      type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
7      integer, intent(IN) :: psys_num
8      !* Local variables
9      integer :: i,nptcl_loc
10     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
11
12     !* Get # of local particles
13     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
14
15     !* Get the pointer to full particle data
16     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
17
18     !* Initialize or update particle data
19     do i=1,nptcl_loc
20         ptcl(i)%pos = ! Do something
21     end do
22
23     !* Release the pointer
24     nullify(ptcl)
25
26 end subroutine foo

```

API `get_psys_fptr` を使い、粒子群オブジェクトに格納された粒子データのアドレスをポインタとして受け取る。受け取ったポインタは要素数 `nptcl_loc` の粒子配列として振る舞うので、一般的な配列同様に値を更新すればよい。

4.1.4 ログファイル

計算が正しく開始すると、標準出力に、時間・エネルギー誤差の2つが出力される。以下はその出力の最も最初のステップでの例である。

Listing 18: 標準出力の例

```

1 time:      0.0000000000E+000, energy error:    -0.0000000000E+000

```

4.2 固定長 SPH シミュレーションコード

本節では、前節 (第 3 節) で使用した、固定 smoothing length での標準 SPH 法のサンプルコードの詳細について解説する。

4.2.1 ソースファイルの場所と構成

ソースファイルは\$(FDPS)/sample/fortran/sph 以下にある。サンプルコードは、次節で説明するユーザ定義型が記述されたソースコード user_defined.F90 と、SPH シミュレーションのメインループ等が記述されたソースコード f_main.F90 から構成される。この他に、GCC と Intel コンパイラ用の Makefile である Makefile と Makefile.intel がある。

4.2.2 ユーザー定義型・ユーザー定義関数

本節では、FDPS の機能を用いて SPH の計算を行う際に、ユーザーが記述しなければならない派生データ型とサブルーチンについて記述する。

4.2.2.1 FullParticle 型

ユーザーはユーザ定義型の 1 つ FullParticle 型を記述しなければならない。FullParticle 型には、シミュレーションを行うにあたって、SPH 粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 19 に本サンプルコード中で用いる FullParticle 型の実装例を示す (user_defined.F90 を参照)。

Listing 19: FullParticle 型

```

1  !**** Full particle type
2  type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP
3      !$fdps copyFromForce force_dens (dens,dens)
4      !$fdps copyFromForce force_hydro (acc,acc) (eng_dot,eng_dot) (dt,dt)
5      real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
6      type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7      type(fdps_f64vec) :: vel
8      type(fdps_f64vec) :: acc
9      real(kind=c_double) :: dens
10     real(kind=c_double) :: eng
11     real(kind=c_double) :: pres
12     real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
13     real(kind=c_double) :: snds
14     real(kind=c_double) :: eng_dot
15     real(kind=c_double) :: dt
16     integer(kind=c_long_long) :: id
17     type(fdps_f64vec) :: vel_half
18     real(kind=c_double) :: eng_half
19 end type full_particle

```


SPH サンプルコードでは N 体サンプルコードと異なり、FullParticle 型が他のユーザ定義型を兼ねることはない。したがって、この派生データ型が FullParticle 型であることを示すため、次の指示文を記述している:

```
type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP
```

SPH シミュレーションにおける相互作用は短距離力である。そのため、必須物理量として探索半径が加わる。粒子位置等の指定も含め、どのメンバ変数がどの必須物理量に対応しているかの指定を次の指示文で行っている:

```
real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
```

N 体シミュレーションコードの節で述べたように、メンバ変数が粒子速度であることを指定するキーワード velocity は予約語でしかないため、本サンプルコードでは指定していない。

FullParticle 型は Force 型との間でデータコピーを行う。ユーザは指示文を使い、FDPS にデータコピーの仕方を教えなければならない。後述するように本 SPH サンプルコードには 2 つの Force 型が存在する。したがって、ユーザはそれぞれの Force 型に対して、指示文を記述する必要がある。本サンプルコードでは、以下のように記述している:

```
!$fdps copyFromForce force_dens (dens,dens)
!$fdps copyFromForce force_hydro (acc,acc) (eng_dot,eng_dot) (dt,dt)
```

4.2.2.2 EssentialParticleI 型

ユーザは EssentialParticleI 型を記述しなければならない。EssentialParticleI 型には、Force の計算を行う際、 i 粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本サンプルコード中では、EssentialParticleJ 型も兼ねているため、 j 粒子が持っているべき全ての物理量もメンバ変数として持っている必要がある。Listing 20 に、本サンプルコードの EssentialParticleI 型の実装例を示す (user_defined.F90 参照):

Listing 20: EssentialParticleI 型

```
1  !**** Essential particle type
2  type, public, bind(c) :: essential_particle !$fdps EPI,EPJ
3      !$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (pos,pos) (vel,vel) (mass,
4          mass) (smth,smth) (dens,dens) (pres,pres) (snds,snds)
5      integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
6      type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7      type(fdps_f64vec) :: vel
8      real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
9      real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
10     real(kind=c_double) :: dens
11     real(kind=c_double) :: pres
12     real(kind=c_double) :: snds
```

```
12     end type essential_particle
```

まず、ユーザは指示文を用いて、この派生データ型が `EssentialParticleI` 型かつ `EssentialParticleJ` 型であることを FDPS に教えなければならない。本サンプルコードでは、以下のよう記述している:

```
type, public, bind(c) :: essential_particle !$fdps EPI,EPJ
```

次に、ユーザはこの派生データ型のどのメンバ変数がどの必須物理量に対応するのかを指示文によって指定しなければならない。今回は SPH シミュレーションを行うので探索半径の指定も必要である。本サンプルコードでは、以下のよう記述している:

```
type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
```

`EssentialParticleI` 型と `EssentialParticleJ` 型は `FullParticle` 型からデータを受け取る。ユーザは `FullParticle` 型のどのメンバ変数を `EssentialParticle?` 型 ($?=I,J$) のどのメンバ変数にコピーするのかを、指示文を用いて指定する必要がある。本サンプルコードでは、以下のよう記述している:

```
!$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (pos,pos) (vel,vel) (mass,mass)
(smth,smth) (dens,dens) (pres,pres) (snds,snds)
```

4.2.2.3 Force 型

ユーザーは `Force` 型を記述しなければならない。`Force` 型には、`Force` の計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本サンプルコード中では、`Force` の計算は密度の計算と流体相互作用計算の 2 つが存在するため、`Force` 型は 2 つ書く必要がある。Listing 21 に、本サンプルコード中で用いる `Force` 型の実装例を示す。

Listing 21: `Force` 型

```
1  !**** Force types
2  type, public, bind(c) :: force_dens !$fdps Force
3      !$fdps clear smth=keep
4      real(kind=c_double) :: dens
5      real(kind=c_double) :: smth
6  end type force_dens
7
8  type, public, bind(c) :: force_hydro !$fdps Force
9      !$fdps clear
10     type(fdps_f64vec) :: acc
11     real(kind=c_double) :: eng_dot
12     real(kind=c_double) :: dt
13 end type force_hydro
```

まず、ユーザはこれらの派生データ型が Force 型であることを指示文によって指定する必要がある。この実装例では、それぞれの派生データ型に対して、以下のように記述している:

```
type, public, bind(c) :: force_dens !$fdps Force
type, public, bind(c) :: force_hydro !$fdps Force
```

これらの派生データ型は Force 型であるから、ユーザは必ず、相互作用計算における積算対象のメンバ変数の初期化方法を指定する必要がある。本サンプルコードでは、積算対象である密度、(圧力勾配による)加速度、エネルギー密度の変化率、時間刻みのみを 0 クリアする指示を出している:

```
!$fdps clear smth=keep
!$fdps clear
```

この例において、Force 型 force_dens には、smoothing length を表すメンバ変数 smth が用意されている。本来、固定長 SPH では、Force 型に smoothing length に対応するメンバを持たせる必要はない。しかし、ここでは、ユーザが将来的に可変長 SPH に移行することを想定して用意してある。可変長 SPH の formulation の 1 つである Springel [2005,MNRAS,364,1105] の方法では、密度計算と同時に smoothing length を計算する必要がある。そのような formulation を実装する場合には、この例のように、Force 型に smoothing length を持たせる必要が生じる。本サンプルコードでは固定長 SPH を使うため、smth を 0 クリアされないようにしている (0 クリアされては 2 回目以降の密度計算が破綻するため)。

4.2.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp

ユーザは粒子間相互作用の仕方を記述した相互作用関数 calcForceEpEp を記述しなければならない。相互作用関数 calcForceEpEp には、各 Force 型に対応する粒子-粒子相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。Listing 22 に、本サンプルコードでの実装を示す (user_defined.F90 を参照)。

Listing 22: 関数 calcForceEpEp

```
1  !**** Interaction function
2  subroutine calc_density(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
3      integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
4      type(essential_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
5      type(essential_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
6      type(force_dens), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
7      !* Local variables
8      integer(kind=c_int) :: i,j
9      type(fdps_f64vec) :: dr
10
11      do i=1,n_ip
12          f(i)%dens = 0.0d0
13          do j=1,n_jp
14              dr%x = ep_j(j)%pos%x - ep_i(i)%pos%x
15              dr%y = ep_j(j)%pos%y - ep_i(i)%pos%y
16              dr%z = ep_j(j)%pos%z - ep_i(i)%pos%z
```

```

17         f(i)%dens = f(i)%dens &
18             + ep_j(j)%mass * W(dr,ep_i(i)%smth)
19     end do
20 end do
21
22 end subroutine calc_density
23
24 !**** Interaction function
25 subroutine calc_hydro_force(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
26     integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
27     type(essential_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
28     type(essential_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
29     type(force_hydro), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
30     !* Local parameters
31     real(kind=c_double), parameter :: C_CFL=0.3d0
32     !* Local variables
33     integer(kind=c_int) :: i,j
34     real(kind=c_double) :: mass_i,mass_j,smth_i,smth_j, &
35         dens_i,dens_j,pres_i,pres_j, &
36         sn ds_i,sn ds_j
37     real(kind=c_double) :: povrho2_i,povrho2_j, &
38         v_sig_max,dr_dv,w_ij,v_sig,AV
39     type(fdps_f64vec) :: pos_i,pos_j,vel_i,vel_j, &
40         dr,dv,gradW_ij
41
42     do i=1,n_ip
43         !* Zero-clear
44         v_sig_max = 0.0d0
45         !* Extract i-particle info.
46         pos_i = ep_i(i)%pos
47         vel_i = ep_i(i)%vel
48         mass_i = ep_i(i)%mass
49         smth_i = ep_i(i)%smth
50         dens_i = ep_i(i)%dens
51         pres_i = ep_i(i)%pres
52         sn ds_i = ep_i(i)%sn ds
53         povrho2_i = pres_i/(dens_i*dens_i)
54         do j=1,n_jp
55             !* Extract j-particle info.
56             pos_j%x = ep_j(j)%pos%x
57             pos_j%y = ep_j(j)%pos%y
58             pos_j%z = ep_j(j)%pos%z
59             vel_j%x = ep_j(j)%vel%x
60             vel_j%y = ep_j(j)%vel%y
61             vel_j%z = ep_j(j)%vel%z
62             mass_j = ep_j(j)%mass
63             smth_j = ep_j(j)%smth
64             dens_j = ep_j(j)%dens
65             pres_j = ep_j(j)%pres
66             sn ds_j = ep_j(j)%sn ds
67             povrho2_j = pres_j/(dens_j*dens_j)
68             !* Compute dr & dv
69             dr%x = pos_i%x - pos_j%x
70             dr%y = pos_i%y - pos_j%y
71             dr%z = pos_i%z - pos_j%z

```

```

72      dv%x = vel_i%x - vel_j%x
73      dv%y = vel_i%y - vel_j%y
74      dv%z = vel_i%z - vel_j%z
75      !* Compute the signal velocity
76      dr_dv = dr%x * dv%x + dr%y * dv%y + dr%z * dv%z
77      if (dr_dv < 0.0d0) then
78          w_ij = dr_dv / sqrt(dr%x * dr%x + dr%y * dr%y + dr%z * dr%z
79                          )
79      else
80          w_ij = 0.0d0
81      end if
82      v_sig = snds_i + snds_j - 3.0d0 * w_ij
83      v_sig_max = max(v_sig_max, v_sig)
84      !* Compute the artificial viscosity
85      AV = - 0.5d0*v_sig*w_ij / (0.5d0*(dens_i+dens_j))
86      !* Compute the average of the gradients of kernel
87      gradW_ij = 0.5d0 * (gradW(dr,smth_i) + gradW(dr,smth_j))
88      !* Compute the acceleration and the heating rate
89      f(i)%acc%x = f(i)%acc%x - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
90                      gradW_ij%x
91      f(i)%acc%y = f(i)%acc%y - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
92                      gradW_ij%y
93      f(i)%acc%z = f(i)%acc%z - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
94                      gradW_ij%z
95      f(i)%eng_dot = f(i)%eng_dot &
96                      + mass_j * (povrho2_i + 0.5d0*AV) &
97                      *(dv%x * gradW_ij%x &
98                      +dv%y * gradW_ij%y &
99                      +dv%z * gradW_ij%z)
100      end do
101      f(i)%dt = C_CFL*2.0d0*smth_i/(v_sig_max*kernel_support_radius)
102  end do
103  ! [IMPORTANT NOTE]
104  !   In the innermost loop, we use the components of vectors
105  !   directly for vector operations because of the following
106  !   reason. Except for intel compilers with '-ipo' option,
107  !   most of Fortran compilers use function calls to perform
108  !   vector operations like rij = x - ep_j(j)%pos.
109  !   This significantly slows down the speed of the code.
110  !   By using the components of vector directly, we can avoid
111  !   these function calls.
112  end subroutine calc_hydro_force

```

本 SPH シミュレーションコードでは、2 種類の相互作用があるため、calcForceEpEp は 2 つ記述する必要がある。いずれの場合にも、サブルーチンの仮引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。

4.2.3 プログラム本体

本節では、FDPS を用いて SPH 計算を行う際に、メインルーチンに書かれるべき関数に関して解説する (本文書におけるメインルーチンの定義については、第 4.1.3 節を参照のこと)

。

4.2.3.1 fdps_controller 型オブジェクトの生成

ユーザは FDPS の API を使用するために、FDPS_controller 型オブジェクトを生成しなければならない。本サンプルコードでは、FDPS_controller 型オブジェクト fdps_ctrl をメインルーチンで生成している:

Listing 23: fdps_controller 型オブジェクトの生成

```
1 subroutine f_main()
2   use fdps_module
3   implicit none
4   !* Local variables
5   type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
6
7   ! Do something
8
9 end subroutine f_main
```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから必要な部分だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。

上記の理由から、以下の説明において、FDPS の API はこのオブジェクトのメンバ関数として呼び出されていることに注意されたい。

4.2.3.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メインルーチンに記述する。

Listing 24: FDPS の開始

```
1 call fdps_ctrl%ps_initialize()
```

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メインルーチンの最後に次のように記述する。

Listing 25: FDPS の終了

```
1 call fdps_ctrl%PS_Finalize()
```

4.2.3.3 オブジェクトの生成・初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

4.2.3.3.1 オブジェクトの生成

SPH では、粒子群オブジェクト、領域情報オブジェクトに加え、密度計算用に Gather 型の短距離力用ツリーを 1 本、流体相互作用計算用に Symmetry 型の短距離力用ツリーを 1 本生成する必要がある。以下にそのコードを記す。

Listing 26: オブジェクトの生成

```

1  subroutine f_main()
2      use fdps_vector
3      use fdps_module
4      use user_defined_types
5      implicit none
6      !* Local variables
7      integer :: psys_num, dinfo_num
8      integer :: dens_tree_num, hydro_tree_num
9
10     !* Create FDPS objects
11     call fdps_ctrl%create_psys(psys_num, 'full_particle')
12     call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
13     call fdps_ctrl%create_tree(dens_tree_num, &
14                               "Short, dens_force, essential_particle,
15                               essential_particle, Gather")
16     call fdps_ctrl%create_tree(hydro_tree_num, &
17                               "Short, hydro_force, essential_particle,
18                               essential_particle, Symmetry")
19
20 end subroutine f_main

```

ここでも、実際のサンプルコードから該当部分だけを抜き出していることに注意して頂きたい。API `create_psys` と `create_tree` には、それぞれ、粒子種別とツリー種別を示す文字列を渡す。これら文字列の中のすべての派生データ型名は小文字で記述されなければならないことに注意して頂きたい。

4.2.3.3.2 領域情報オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを作成したら、そのオブジェクトの初期化を行う必要がある。ここでは、まず領域情報オブジェクトの初期化について、解説する。領域情報オブジェクトの初期化が終わった後、領域情報オブジェクトに周期境界の情報と、境界の大きさをセットする必要がある。今回のサンプルコードでは、 x , y , z 方向に周期境界を用いる。

Listing 27: 領域情報オブジェクトの初期化

```

1  call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num, coef_ema)
2  call fdps_ctrl%set_boundary_condition(dinfo_num, fdps_bc_periodic_xyz)
3  call fdps_ctrl%set_pos_root_domain(dinfo_num, pos_ll, pos_ul)

```

4.2.3.3 粒子群オブジェクトの初期化

次に、粒子群オブジェクトの初期化を行う必要がある。粒子群オブジェクトの初期化は、次の一文だけでよい。

Listing 28: 粒子群オブジェクトの初期化

```
1 call fdps_ctrl%init_psys(psys_num)
```

4.2.3.4 ツリーオブジェクトの初期化

次に、ツリーオブジェクトの初期化を行う必要がある。ツリーオブジェクトの初期化を行う関数には、引数として大雑把な粒子数を渡す必要がある。今回は、粒子数の3倍程度をセットしておく事にする。

Listing 29: 相互作用ツリークラスの初期化

```
1 call fdps_ctrl%init_tree(dens_tree_num,3*ntot,theta,&
2                          n_leaf_limit,n_group_limit)
3 call fdps_ctrl%init_tree(hydro_tree_num,3*ntot,theta,&
4                          n_leaf_limit,n_group_limit)
```

4.2.3.4 ループ

本節では、時間積分ループの中で行わなければならないことについて、解説する。

4.2.3.4.1 領域分割の実行

まずは、粒子分布に基いて、領域分割を実行する。これには、領域情報オブジェクトの API `decompose_domain_all` を用いる。

Listing 30: 領域分割の実行

```
1 call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
```

4.2.3.4.2 粒子交換の実行

次に、領域情報に基いて、プロセス間の粒子の情報を交換する。これには、粒子群オブジェクトの API `exchange_particle` を用いる。

Listing 31: 粒子交換の実行

```
1 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
```

4.2.3.4.3 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。これには、ツリーオブジェクトの API `calc_force_all_and_write_back` を用いる。

Listing 32: 相互作用計算の実行

```

1  subroutine f_main()
2      use, intrinsic :: iso_c_binding
3      use user_defined_types
4      implicit none
5      !* Local variables
6      type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep
7
8      ! Do something
9
10     pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
11     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_dens, &
12                                                    pfunc_ep_ep, &
13                                                    psys_num, &
14                                                    dinfo_num)
15
16     call set_pressure(fdps_ctrl, psys_num)
17     pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_hydro_force)
18     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_hydro, &
19                                                    pfunc_ep_ep, &
20                                                    psys_num, &
21                                                    dinfo_num)
22
23     ! Do something
24 end subroutine f_main

```

ここで、API の第 2 引数には関数 `calcForceEpEp` の (C 言語アドレスとしての) 関数ポインタを指定する。

4.2.4 コンパイル

作業ディレクトリで `make` コマンドを打てばよい。Makefile としては、サンプルコードに付属の Makefile をそのまま用いる事にする。

```
$ make
```

4.2.5 実行

MPI を使用しないで実行する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行すればよい。

```
$ ./sph.out
```

もし、MPI を用いて実行する場合は、以下のコマンドを実行すればよい。


```
$ MPIRUN -np NPROC ./sph.out
```

ここで、MPIRUN には `mpirun` や `mpiexec` などの MPI 実行プログラムが、NPROC にはプロセス数が入る。

4.2.6 ログファイル

計算が終了すると、`result` フォルダ下にログが出力される。

4.2.7 可視化

ここでは、`gnuplot` を用いた可視化の方法について解説する。`gnuplot` で対話モードに入るために、コマンドラインから `gnuplot` を起動する。

```
$ gnuplot
```

対話モードに入ったら、`gnuplot` を用いて可視化を行う。今回は、50 番目のスナップショットファイルから、横軸を粒子の x 座標、縦軸を密度に取ったグラフを生成する。

```
gnuplot> plot "result/snap00050-proc00000.dat" u 3:9
```

ここで、文字列 `proc` の後の整数は MPI のプロセス番号を表す。

5 サンプルコード

5.1 N 体シミュレーション

N 体シミュレーションのサンプルコードを以下に示す。このサンプルは第3, 4節で用いた N 体シミュレーションのサンプルコードと同じものである。これをカット&ペーストしてコンパイルすれば、正常に動作する N 体シミュレーションコードを作ることができる。

Listing 33: N 体シミュレーションのサンプルコード (user_defined.F90)

```

1  !=====
2  !   MODULE: User defined types
3  !=====
4  module user_defined_types
5      use, intrinsic :: iso_c_binding
6      use fdps_vector
7      use fdps_super_particle
8      implicit none
9
10     !* Public variables
11     real(kind=c_double), public :: eps_grav ! gravitational softening
12
13     !**** Full particle type
14     type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP,EPI,EPJ,Force
15         !$fdps copyFromForce full_particle (pot,pot) (acc,acc)
16         !$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
17         !$fdps clear id=keep, mass=keep, pos=keep, vel=keep
18         integer(kind=c_long_long) :: id
19         real(kind=c_double) mass !$fdps charge
20         type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
21         type(fdps_f64vec) :: vel !$fdps velocity
22         real(kind=c_double) :: pot
23         type(fdps_f64vec) :: acc
24     end type full_particle
25
26     #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86) !defined(ENABLE_PIKG_KERNEL_X86)
27         contains
28
29         !**** Interaction function (particle-particle)
30     #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
31         subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
32     #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
33         use omp_lib
34     #endif
35         use phantom_grape_g5_x86
36         implicit none
37         integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
38         type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
39         type(full_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
40         type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
41         !* Local variables
42         integer(c_int) :: i,j
43         integer(c_int) :: nipipe,njpipe,devid
44         real(c_double), dimension(3,n_ip) :: xi,ai

```

```

45     real(c_double), dimension(n_ip) :: pi
46     real(c_double), dimension(3,n_jp) :: xj
47     real(c_double), dimension(n_jp) :: mj
48
49     npipe = n_ip
50     njpipe = n_jp
51     do i=1,n_ip
52         xi(1,i) = ep_i(i)%pos%x
53         xi(2,i) = ep_i(i)%pos%y
54         xi(3,i) = ep_i(i)%pos%z
55         ai(1,i) = 0.0d0
56         ai(2,i) = 0.0d0
57         ai(3,i) = 0.0d0
58         pi(i)   = 0.0d0
59     end do
60     do j=1,n_jp
61         xj(1,j) = ep_j(j)%pos%x
62         xj(2,j) = ep_j(j)%pos%y
63         xj(3,j) = ep_j(j)%pos%z
64         mj(j)   = ep_j(j)%mass
65     end do
66     #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
67         devid = omp_get_thread_num()
68         ! [IMPORTANT NOTE]
69         !   The subroutine calc_gravity_pp is called by a OpenMP thread
70         !   in the FDPS. This means that here is already in the parallel
71         !   region.
72         !   So, you can use omp_get_thread_num() without !$OMP parallel
73         !   directives.
74         !   If you use them, a nested parallel resions is made and the
75         !   gravity
76         !   calculation will not be performed correctly.
77     #else
78         devid = 0
79     #endif
80     call g5_set_xmjMC(devid, 0, n_jp, xj, mj)
81     call g5_set_nMC(devid, n_jp)
82     call g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, n_ip)
83     do i=1,n_ip
84         f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai(1,i)
85         f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai(2,i)
86         f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai(3,i)
87         f(i)%pot   = f(i)%pot   - pi(i)
88     end do
89     end subroutine calc_gravity_ep_ep
90
91     subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
92     #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
93         use omp_lib
94     #endif
95     use phantom_grape_g5_x86
96     implicit none
97     integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
98     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
99     type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j

```

```

97     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
98     !* Local variables
99     integer(c_int) :: i,j
100    integer(c_int) :: npipe,njpipe,devid
101    real(c_double), dimension(3,n_ip) :: xi,ai
102    real(c_double), dimension(n_ip) :: pi
103    real(c_double), dimension(3,n_jp) :: xj
104    real(c_double), dimension(n_jp) :: mj
105
106    npipe = n_ip
107    njpipe = n_jp
108    do i=1,n_ip
109        xi(1,i) = ep_i(i)%pos%x
110        xi(2,i) = ep_i(i)%pos%y
111        xi(3,i) = ep_i(i)%pos%z
112        ai(1,i) = 0.0d0
113        ai(2,i) = 0.0d0
114        ai(3,i) = 0.0d0
115        pi(i)   = 0.0d0
116    end do
117    do j=1,n_jp
118        xj(1,j) = ep_j(j)%pos%x
119        xj(2,j) = ep_j(j)%pos%y
120        xj(3,j) = ep_j(j)%pos%z
121        mj(j)   = ep_j(j)%mass
122    end do
123    #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
124        devid = omp_get_thread_num()
125        ! [IMPORTANT NOTE]
126        !   The subroutine calc_gravity_psp is called by a OpenMP thread
127        !   in the FDPS. This means that here is already in the parallel
128        !   region.
129        !   So, you can use omp_get_thread_num() without !$OMP parallel
130        !   directives.
131        !   If you use them, a nested parallel resions is made and the
132        !   gravity
133        !   calculation will not be performed correctly.
134    #else
135        devid = 0
136    #endif
137    call g5_set_xmjMC(devid, 0, n_jp, xj, mj)
138    call g5_set_nMC(devid, n_jp)
139    call g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, n_ip)
140    do i=1,n_ip
141        f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai(1,i)
142        f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai(2,i)
143        f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai(3,i)
144        f(i)%pot   = f(i)%pot   - pi(i)
145    end do
146    end subroutine calc_gravity_ep_sp
147    #else
148    subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
149        implicit none
150        integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
151        type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i

```

```

149     type(full_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
150     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
151     !* Local variables
152     integer(c_int) :: i,j
153     real(c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
154     type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
155
156     !* Compute force
157     eps2 = eps_grav * eps_grav
158     do i=1,n_ip
159         xi = ep_i(i)%pos
160         ai = 0.0d0
161         poti = 0.0d0
162         do j=1,n_jp
163             rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
164             rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
165             rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
166             r3_inv = rij%x*rij%x &
167                   + rij%y*rij%y &
168                   + rij%z*rij%z &
169                   + eps2
170             r_inv = 1.0d0/sqrt(r3_inv)
171             r3_inv = r_inv * r_inv
172             r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
173             r3_inv = r3_inv * r_inv
174             ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
175             ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
176             ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
177             poti = poti - r_inv
178             ! [IMPORTANT NOTE]
179             !   In the innermost loop, we use the components of vectors
180             !   directly for vector operations because of the following
181             !   reason. Except for intel compilers with '-ipo' option,
182             !   most of Fortran compilers use function calls to perform
183             !   vector operations like rij = x - ep_j(j)%pos.
184             !   This significantly slows down the speed of the code.
185             !   By using the components of vector directly, we can avoid
186             !   these function calls.
187         end do
188         f(i)%pot = f(i)%pot + poti
189         f(i)%acc = f(i)%acc + ai
190     end do
191
192 end subroutine calc_gravity_ep_ep
193
194 !**** Interaction function (particle-super particle)
195 subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
196     implicit none
197     integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
198     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
199     type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
200     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
201     !* Local variables
202     integer(c_int) :: i,j
203     real(c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv

```

```

204     type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
205
206     eps2 = eps_grav * eps_grav
207     do i=1,n_ip
208         xi = ep_i(i)%pos
209         ai = 0.0d0
210         poti = 0.0d0
211         do j=1,n_jp
212             rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
213             rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
214             rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
215             r3_inv = rij%x*rij%x &
216                   + rij%y*rij%y &
217                   + rij%z*rij%z &
218                   + eps2
219             r_inv = 1.0d0/sqrt(r3_inv)
220             r3_inv = r_inv * r_inv
221             r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
222             r3_inv = r3_inv * r_inv
223             ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
224             ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
225             ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
226             poti = poti - r_inv
227         end do
228         f(i)%pot = f(i)%pot + poti
229         f(i)%acc = f(i)%acc + ai
230     end do
231
232     end subroutine calc_gravity_ep_sp
233 #endif
234 #endif
235
236 end module user_defined_types

```

Listing 34: N 体シミュレーションのサンプルコード (f_main.F90)

```

1  !-----
2  !////////// < MAIN ROUTINE > //////////
3  !-----
4  subroutine f_main()
5      use fdps_module
6      #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
7          use phantom_grape_g5_x86
8      #endif
9      #if defined(ENABLE_PIKG_KERNEL_X86)
10         use pikg_module_ep_ep
11         use pikg_module_ep_sp
12     #endif
13     use user_defined_types
14     implicit none
15     !* Local parameters
16     integer, parameter :: ntot=2**10
17     !-(force parameters)
18     real, parameter :: theta = 0.5
19     integer, parameter :: n_leaf_limit = 8
20     integer, parameter :: n_group_limit = 64

```

```

21  !-(domain decomposition)
22  real, parameter :: coef_ema=0.3
23  !-(timing parameters)
24  double precision, parameter :: time_end = 10.0d0
25  double precision, parameter :: dt = 1.0d0/128.0d0
26  double precision, parameter :: dt_diag = 1.0d0/8.0d0
27  double precision, parameter :: dt_snap = 1.0d0
28  !* Local variables
29  integer :: i,j,k,num_loop,ierr
30  integer :: psys_num,dinfo_num,tree_num
31  integer :: nloc
32  logical :: clear
33  double precision :: ekin0,epot0,etot0
34  double precision :: ekin1,epot1,etot1
35  double precision :: time_diag,time_snap,time_sys
36  double precision :: r,acc
37  type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
38  type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
39  type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep,pfunc_ep_sp
40  !-(IO)
41  character(len=64) :: fname
42  integer(c_int) :: np
43
44  !* Initialize FDPS
45  call fdps_ctrl%PS_Initialize()
46
47  !* Create domain info object
48  call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
49  call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num,coef_ema)
50
51  !* Create particle system object
52  call fdps_ctrl%create_psys(psys_num,'full_particle')
53  call fdps_ctrl%init_psys(psys_num)
54
55  !* Create tree object
56  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num, &
57                                "Long,full_particle,full_particle,
58                                full_particle,Monopole")
59  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num,ntot,theta, &
60                                n_leaf_limit,n_group_limit)
61
62  !* Make an initial condition
63  call setup_IC(fdps_ctrl,psys_num,ntot)
64
65  !* Domain decomposition and exchange particle
66  call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
67  call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
68
69  #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
70      call g5_open()
71      call g5_set_eps_to_all(eps_grav);
72  #elif defined(ENABLE_PIKG_KERNEL_X86)
73      call calc_gravity_ep_ep_initialize(eps_grav*eps_grav)
74      call calc_gravity_ep_sp_initialize(eps_grav*eps_grav)
75  #endif

```

```

75
76  !* Compute force at the initial time
77  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_gravity_ep_ep)
78  pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_gravity_ep_sp)
79  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
80                                              pfunc_ep_ep, &
81                                              pfunc_ep_sp, &
82                                              psys_num,    &
83                                              dinfo_num)
84  !* Compute energies at the initial time
85  clear = .true.
86  call calc_energy(fdps_ctrl,psys_num,etot0,ekin0,epot0,clear)
87
88  !* Time integration
89  time_diag = 0.0d0
90  time_snap = 0.0d0
91  time_sys  = 0.0d0
92  num_loop = 0
93  do
94      !* Output
95      !if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
96      !    write(*,50)num_loop,time_sys
97      !    50 format('(num_loop, time_sys) = ',i5,1x,1es25.16e3)
98      !end if
99      if ( (time_sys >= time_snap) .or. &
100          (((time_sys + dt) - time_snap) > (time_snap - time_sys)) ) then
101          call output(fdps_ctrl,psys_num)
102          time_snap = time_snap + dt_snap
103      end if
104
105      !* Compute energies and output the results
106      clear = .true.
107      call calc_energy(fdps_ctrl,psys_num,etot1,ekin1,epot1,clear)
108      if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
109          if ( (time_sys >= time_diag) .or. &
110              (((time_sys + dt) - time_diag) > (time_diag - time_sys)) )
111              then
112                  write(*,100)time_sys,(etot1-etot0)/etot0
113                  100 format("time:␣",1es20.10e3,"␣energy␣error:␣",1es20.10e3)
114                  time_diag = time_diag + dt_diag
115              end if
116          end if
117
118          !* Leapfrog: Kick-Drift
119          call kick(fdps_ctrl,psys_num,0.5d0*dt)
120          time_sys = time_sys + dt
121          call drift(fdps_ctrl,psys_num,dt)
122
123          !* Domain decomposition & exchange particle
124          if (mod(num_loop,4) == 0) then
125              call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
126          end if
127          call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
128
129          !* Force calculation

```



```

129     pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_gravity_ep_ep)
130     pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_gravity_ep_sp)
131     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
132                                                    pfunc_ep_ep, &
133                                                    pfunc_ep_sp, &
134                                                    psys_num,   &
135                                                    dinfo_num)
136     !* Leapfrog: Kick
137     call kick(fdps_ctrl,psys_num,0.5d0*dt)
138
139     !* Update num_loop
140     num_loop = num_loop + 1
141
142     !* Termination
143     if (time_sys >= time_end) then
144         exit
145     end if
146 end do
147
148 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
149     call g5_close()
150 #endif
151
152     !* Finalize FDPS
153     call fdps_ctrl%PS_Finalize()
154
155 end subroutine f_main
156
157 !-----
158 !//////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////
159 !//////////////////// < S E T U P _ I C > //////////////////////
160 !-----
161 subroutine setup_IC(fdps_ctrl,psys_num,nptcl_glb)
162     use fdps_vector
163     use fdps_module
164     use user_defined_types
165     implicit none
166     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
167     integer, intent(IN) :: psys_num,nptcl_glb
168     !* Local parameters
169     double precision, parameter :: m_tot=1.0d0
170     double precision, parameter :: rmax=3.0d0,r2max=rmax*rmax
171     !* Local variables
172     integer :: i,j,k,ierr
173     integer :: nprocs,myrank
174     double precision :: r2,cm_mass
175     type(fdps_f64vec) :: cm_pos,cm_vel,pos
176     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
177     character(len=64) :: fname
178
179     !* Get # of MPI processes and rank number
180     nprocs = fdps_ctrl%get_num_procs()
181     myrank = fdps_ctrl%get_rank()
182
183     !* Make an initial condition at RANK 0

```

```

184  if (myrank == 0) then
185      !* Set # of local particles
186      call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psys_num,nptcl_glb)
187
188      !* Create an uniform sphere of particles
189      !** get the pointer to full particle data
190      call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
191      !** initialize Mersenne twister
192      call fdps_ctrl%MT_init_genrand(0)
193      do i=1,nptcl_glb
194          ptcl(i)%id = i
195          ptcl(i)%mass = m_tot/nptcl_glb
196          do
197              ptcl(i)%pos%x = (2.0d0*fdps_ctrl%MT_genrand_res53()-1.0d0) *
198                  rmax
199              ptcl(i)%pos%y = (2.0d0*fdps_ctrl%MT_genrand_res53()-1.0d0) *
200                  rmax
201              ptcl(i)%pos%z = (2.0d0*fdps_ctrl%MT_genrand_res53()-1.0d0) *
202                  rmax
203              r2 = ptcl(i)%pos*ptcl(i)%pos
204              if ( r2 < r2max ) exit
205          end do
206          ptcl(i)%vel = 0.0d0
207      end do
208
209      !* Correction
210      cm_pos = 0.0d0
211      cm_vel = 0.0d0
212      cm_mass = 0.0d0
213      do i=1,nptcl_glb
214          cm_pos = cm_pos + ptcl(i)%mass * ptcl(i)%pos
215          cm_vel = cm_vel + ptcl(i)%mass * ptcl(i)%vel
216          cm_mass = cm_mass + ptcl(i)%mass
217      end do
218      cm_pos = cm_pos/cm_mass
219      cm_vel = cm_vel/cm_mass
220      do i=1,nptcl_glb
221          ptcl(i)%pos = ptcl(i)%pos - cm_pos
222          ptcl(i)%vel = ptcl(i)%vel - cm_vel
223      end do
224
225      !* Output
226      !fname = 'initial.dat'
227      !open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace', &
228      !    form='unformatted',access='stream')
229      !open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace')
230      !    do i=1,nptcl_glb
231      !        !write(9)ptcl(i)%pos%x,ptcl(i)%pos%y,ptcl(i)%pos%z
232      !        !    write(9,'(3es25.16e3)')ptcl(i)%pos%x,ptcl(i)%pos%y,ptcl(i)%pos
233      !            %z
234      !    end do
235      !close(unit=9)
236
237      !* Release the pointer
238      nullify( ptcl )

```

```

235
236     else
237         call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psys_num,0)
238     end if
239
240     !* Set the gravitational softening
241     eps_grav = 1.0d0/32.0d0
242
243 end subroutine setup_IC
244
245 !-----
246 !//////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////
247 !////////////////////           < K I C K >           //////////////////////
248 !-----
249 subroutine kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)
250     use fdps_vector
251     use fdps_module
252     use user_defined_types
253     implicit none
254     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
255     integer, intent(IN) :: psys_num
256     double precision, intent(IN) :: dt
257     !* Local variables
258     integer :: i,nptcl_loc
259     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
260
261     !* Get # of local particles
262     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
263
264     !* Get the pointer to full particle data
265     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
266     do i=1,nptcl_loc
267         ptcl(i)%vel = ptcl(i)%vel + ptcl(i)%acc * dt
268     end do
269     nullify(ptcl)
270
271 end subroutine kick
272
273 !-----
274 !//////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////
275 !////////////////////           < D R I F T >           //////////////////////
276 !-----
277 subroutine drift(fdps_ctrl,psys_num,dt)
278     use fdps_vector
279     use fdps_module
280     use user_defined_types
281     implicit none
282     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
283     integer, intent(IN) :: psys_num
284     double precision, intent(IN) :: dt
285     !* Local variables
286     integer :: i,nptcl_loc
287     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
288
289     !* Get # of local particles

```

```

290     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
291
292     !* Get the pointer to full particle data
293     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
294     do i=1,nptcl_loc
295         ptcl(i)%pos = ptcl(i)%pos + ptcl(i)%vel * dt
296     end do
297     nullify(ptcl)
298
299 end subroutine drift
300
301 !-----
302 !///////////////////////      S U B R O U T I N E      /////////////////////////
303 !/////////////////////// < C A L C _ E N E R G Y > /////////////////////////
304 !-----
305 subroutine calc_energy(fdps_ctrl,psys_num,etot,ekin,epot,clear)
306     use fdps_vector
307     use fdps_module
308     use user_defined_types
309     implicit none
310     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
311     integer, intent(IN) :: psys_num
312     double precision, intent(INOUT) :: etot,ekin,epot
313     logical, intent(IN) :: clear
314     !* Local variables
315     integer :: i,nptcl_loc
316     double precision :: etot_loc,ekin_loc,epot_loc
317     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
318
319     !* Clear energies
320     if (clear .eqv. .true.) then
321         etot = 0.0d0
322         ekin = 0.0d0
323         epot = 0.0d0
324     end if
325
326     !* Get # of local particles
327     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
328     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
329
330     !* Compute energies
331     ekin_loc = 0.0d0
332     epot_loc = 0.0d0
333     do i=1,nptcl_loc
334         ekin_loc = ekin_loc + ptcl(i)%mass * ptcl(i)%vel * ptcl(i)%vel
335         epot_loc = epot_loc + ptcl(i)%mass * (ptcl(i)%pot + ptcl(i)%mass/
336             eps_grav)
337     end do
338     ekin_loc = ekin_loc * 0.5d0
339     epot_loc = epot_loc * 0.5d0
340     etot_loc = ekin_loc + epot_loc
341     call fdps_ctrl%get_sum(ekin_loc,ekin)
342     call fdps_ctrl%get_sum(epot_loc,epot)
343     call fdps_ctrl%get_sum(etot_loc,etot)

```

```

344     !* Release the pointer
345     nullify(ptcl)
346
347 end subroutine calc_energy
348
349 !-----
350 !//////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////
351 !//////////////////// < O U T P U T > //////////////////////
352 !-----
353 subroutine output(fdps_ctrl,psys_num)
354     use fdps_vector
355     use fdps_module
356     use user_defined_types
357     implicit none
358     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
359     integer, intent(IN) :: psys_num
360     !* Local parameters
361     character(len=16), parameter :: root_dir="result"
362     character(len=16), parameter :: file_prefix_1st="snap"
363     character(len=16), parameter :: file_prefix_2nd="proc"
364     !* Local variables
365     integer :: i,nptcl_loc
366     integer :: myrank
367     character(len=5) :: file_num,proc_num
368     character(len=64) :: cmd,sub_dir,fname
369     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
370     !* Static variables
371     integer, save :: snap_num=0
372
373     !* Get the rank number
374     myrank = fdps_ctrl%get_rank()
375
376     !* Get # of local particles
377     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
378
379     !* Get the pointer to full particle data
380     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
381
382     !* Output
383     write(file_num,"(i5.5)")snap_num
384     write(proc_num,"(i5.5)")myrank
385     fname = trim(root_dir) // "/" &
386             // trim(file_prefix_1st) // file_num // "-" &
387             // trim(file_prefix_2nd) // proc_num // ".dat"
388     open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace')
389     do i=1,nptcl_loc
390         write(9,100)ptcl(i)%id,ptcl(i)%mass, &
391                 ptcl(i)%pos%x,ptcl(i)%pos%y,ptcl(i)%pos%z, &
392                 ptcl(i)%vel%x,ptcl(i)%vel%y,ptcl(i)%vel%z
393         100 format(i8,1x,7e25.16e3)
394     end do
395     close(unit=9)
396     nullify(ptcl)
397
398     !* Update snap_num

```

```

399     snap_num = snap_num + 1
400
401 end subroutine output

```

5.2 固定長 SPH シミュレーション

固定長 SPH シミュレーションのサンプルコードを以下に示す。このサンプルは第 3, 4 節で用いた固定長 SPH シミュレーションのサンプルコードと同じものである。これをカット&ペーストしてコンパイルすれば、正常に動作する固定長 SPH シミュレーションコードを作ることができる。

Listing 35: 固定長 SPH シミュレーションのサンプルコード (user_defined.F90)

```

1  !=====
2  !   MODULE: User defined types
3  !=====
4  module user_defined_types
5      use, intrinsic :: iso_c_binding
6      use fdps_vector
7      implicit none
8
9      !* Private parameters
10     real(kind=c_double), parameter, private :: pi=datan(1.0d0)*4.0d0
11     !* Public parameters
12     real(kind=c_double), parameter, public :: kernel_support_radius=2.5d0
13
14     !*** Force types
15     type, public, bind(c) :: force_dens !$fdps Force
16         !$fdps clear smth=keep
17         real(kind=c_double) :: dens
18         real(kind=c_double) :: smth
19     end type force_dens
20
21     type, public, bind(c) :: force_hydro !$fdps Force
22         !$fdps clear
23         type(fdps_f64vec) :: acc
24         real(kind=c_double) :: eng_dot
25         real(kind=c_double) :: dt
26     end type force_hydro
27
28     !*** Full particle type
29     type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP
30         !$fdps copyFromForce force_dens (dens,dens)
31         !$fdps copyFromForce force_hydro (acc,acc) (eng_dot,eng_dot) (dt,dt)
32         real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
33         type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
34         type(fdps_f64vec) :: vel
35         type(fdps_f64vec) :: acc
36         real(kind=c_double) :: dens
37         real(kind=c_double) :: eng
38         real(kind=c_double) :: pres
39         real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
40         real(kind=c_double) :: snds

```

```

41     real(kind=c_double) :: eng_dot
42     real(kind=c_double) :: dt
43     integer(kind=c_long_long) :: id
44     type(fdps_f64vec) :: vel_half
45     real(kind=c_double) :: eng_half
46 end type full_particle
47
48 !**** Essential particle type
49 type, public, bind(c) :: essential_particle !$fdps EPI,EPJ
50     !$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (pos,pos) (vel,vel) (mass,
51         mass) (smth,smth) (dens,dens) (pres,pres) (snds,snds)
52     integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
53     type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
54     type(fdps_f64vec) :: vel
55     real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
56     real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
57     real(kind=c_double) :: dens
58     real(kind=c_double) :: pres
59     real(kind=c_double) :: snds
60 end type essential_particle
61
62 !* Public routines
63 public :: W
64 public :: gradW
65 public :: calc_density
66 public :: calc_hydro_force
67
68 contains
69
70 !-----
71 pure function W(dr,h)
72     implicit none
73     real(kind=c_double) :: W
74     type(fdps_f64vec), intent(in) :: dr
75     real(kind=c_double), intent(in) :: h
76     !* Local variables
77     real(kind=c_double) :: s,s1,s2
78
79     s = dsqrt(dr%x*dr%x &
80         +dr%y*dr%y &
81         +dr%z*dr%z)/h
82     s1 = 1.0d0 - s
83     if (s1 < 0.0d0) s1 = 0.0d0
84     s2 = 0.5d0 - s
85     if (s2 < 0.0d0) s2 = 0.0d0
86     W = (s1*s1*s1) - 4.0d0*(s2*s2*s2)
87     W = W * 16.0d0/(pi*h*h*h)
88
89 end function W
90
91 !-----
92 pure function gradW(dr,h)
93     implicit none
94     type(fdps_f64vec) :: gradW
95     type(fdps_f64vec), intent(in) :: dr

```

```

95     real(kind=c_double), intent(in) :: h
96     !* Local variables
97     real(kind=c_double) :: dr_abs,s,s1,s2,coef
98
99     dr_abs = dsqrt(dr%x*dr%x &
100                +dr%y*dr%y &
101                +dr%z*dr%z)
102     s = dr_abs/h
103     s1 = 1.0d0 - s
104     if (s1 < 0.0d0) s1 = 0.0d0
105     s2 = 0.5d0 - s
106     if (s2 < 0.0d0) s2 = 0.0d0
107     coef = - 3.0d0*(s1*s1) + 12.0d0*(s2*s2)
108     coef = coef * 16.0d0/(pi*h*h*h)
109     coef = coef / (dr_abs*h + 1.0d-6*h)
110     gradW%x = dr%x * coef
111     gradW%y = dr%y * coef
112     gradW%z = dr%z * coef
113
114 end function gradW
115
116 !**** Interaction function
117 subroutine calc_density(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
118     integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
119     type(essential_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
120     type(essential_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
121     type(force_dens), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
122     !* Local variables
123     integer(kind=c_int) :: i,j
124     type(fdps_f64vec) :: dr
125
126     do i=1,n_ip
127         f(i)%dens = 0.0d0
128         do j=1,n_jp
129             dr%x = ep_j(j)%pos%x - ep_i(i)%pos%x
130             dr%y = ep_j(j)%pos%y - ep_i(i)%pos%y
131             dr%z = ep_j(j)%pos%z - ep_i(i)%pos%z
132             f(i)%dens = f(i)%dens &
133                 + ep_j(j)%mass * W(dr,ep_i(i)%smth)
134         end do
135     end do
136
137 end subroutine calc_density
138
139 !**** Interaction function
140 subroutine calc_hydro_force(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
141     integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
142     type(essential_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
143     type(essential_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
144     type(force_hydro), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
145     !* Local parameters
146     real(kind=c_double), parameter :: C_CFL=0.3d0
147     !* Local variables
148     integer(kind=c_int) :: i,j
149     real(kind=c_double) :: mass_i,mass_j,smth_i,smth_j, &

```



```

150                                dens_i,dens_j,pres_i,pres_j, &
151                                snds_i,snds_j
152    real(kind=c_double) :: povrho2_i,povrho2_j, &
153                                v_sig_max,dr_dv,w_ij,v_sig,AV
154    type(fdps_f64vec) :: pos_i,pos_j,vel_i,vel_j, &
155                                dr,dv,gradW_ij
156
157    do i=1,n_ip
158        !* Zero-clear
159        v_sig_max = 0.0d0
160        !* Extract i-particle info.
161        pos_i = ep_i(i)%pos
162        vel_i = ep_i(i)%vel
163        mass_i = ep_i(i)%mass
164        smth_i = ep_i(i)%smth
165        dens_i = ep_i(i)%dens
166        pres_i = ep_i(i)%pres
167        snds_i = ep_i(i)%snds
168        povrho2_i = pres_i/(dens_i*dens_i)
169        do j=1,n_jp
170            !* Extract j-particle info.
171            pos_j%x = ep_j(j)%pos%x
172            pos_j%y = ep_j(j)%pos%y
173            pos_j%z = ep_j(j)%pos%z
174            vel_j%x = ep_j(j)%vel%x
175            vel_j%y = ep_j(j)%vel%y
176            vel_j%z = ep_j(j)%vel%z
177            mass_j = ep_j(j)%mass
178            smth_j = ep_j(j)%smth
179            dens_j = ep_j(j)%dens
180            pres_j = ep_j(j)%pres
181            snds_j = ep_j(j)%snds
182            povrho2_j = pres_j/(dens_j*dens_j)
183            !* Compute dr & dv
184            dr%x = pos_i%x - pos_j%x
185            dr%y = pos_i%y - pos_j%y
186            dr%z = pos_i%z - pos_j%z
187            dv%x = vel_i%x - vel_j%x
188            dv%y = vel_i%y - vel_j%y
189            dv%z = vel_i%z - vel_j%z
190            !* Compute the signal velocity
191            dr_dv = dr%x * dv%x + dr%y * dv%y + dr%z * dv%z
192            if (dr_dv < 0.0d0) then
193                w_ij = dr_dv / sqrt(dr%x * dr%x + dr%y * dr%y + dr%z * dr%z
194                )
195            else
196                w_ij = 0.0d0
197            end if
198            v_sig = snds_i + snds_j - 3.0d0 * w_ij
199            v_sig_max = max(v_sig_max, v_sig)
200            !* Compute the artificial viscosity
201            AV = - 0.5d0*v_sig*w_ij / (0.5d0*(dens_i+dens_j))
202            !* Compute the average of the gradients of kernel
203            gradW_ij = 0.5d0 * (gradW(dr,smth_i) + gradW(dr,smth_j))
204            !* Compute the acceleration and the heating rate

```

```

204         f(i)%acc%x = f(i)%acc%x - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
                gradW_ij%x
205         f(i)%acc%y = f(i)%acc%y - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
                gradW_ij%y
206         f(i)%acc%z = f(i)%acc%z - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
                gradW_ij%z
207         f(i)%eng_dot = f(i)%eng_dot &
208                     + mass_j * (povrho2_i + 0.5d0*AV) &
209                     *(dv%x * gradW_ij%x &
210                     +dv%y * gradW_ij%y &
211                     +dv%z * gradW_ij%z)
212     end do
213     f(i)%dt = C_CFL*2.0d0*smth_i/(v_sig_max*kernel_support_radius)
214 end do
215 ! [IMPORTANT NOTE]
216 !   In the innermost loop, we use the components of vectors
217 !   directly for vector operations because of the following
218 !   reason. Except for intel compilers with '-ipo' option,
219 !   most of Fortran compilers use function calls to perform
220 !   vector operations like rij = x - ep_j(j)%pos.
221 !   This significantly slow downs the speed of the code.
222 !   By using the components of vector directly, we can avoid
223 !   these function calls.
224
225 end subroutine calc_hydro_force
226
227 end module user_defined_types

```

Listing 36: 固定長 SPH シミュレーションのサンプルコード (f_main.F90)

```

1  !-----
2  !////////// < MAIN ROUTINE > //////////
3  !-----
4  subroutine f_main()
5      use fdps_vector
6      use fdps_module
7      use user_defined_types
8      implicit none
9      !* Local parameters
10     !-(force parameters)
11     real, parameter :: theta = 0.5
12     integer, parameter :: n_leaf_limit = 8
13     integer, parameter :: n_group_limit = 64
14     !-(domain decomposition)
15     real, parameter :: coef_ema=0.3
16     !-(IO)
17     integer, parameter :: output_interval=10
18     !* Local variables
19     integer :: i,j,k,ierr
20     integer :: nstep
21     integer :: psys_num,dinfo_num
22     integer :: tree_num_dens,tree_num_hydro
23     integer :: ntot,nloc
24     logical :: clear
25     double precision :: time,dt,end_time
26     type(fdps_f64vec) :: pos_ll,pos_ul

```

```

27  type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
28  type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
29  type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep
30  !-(IO)
31  character(len=64) :: filename
32  !* External routines
33  double precision, external :: get_timestep
34
35  !* Initialize FDPS
36  call fdps_ctrl%PS_Initialize()
37
38  !* Make an instance of ParticleSystem and initialize it
39  call fdps_ctrl%create_psys(psys_num,'full_particle')
40  call fdps_ctrl%init_psys(psys_num)
41
42  !* Make an initial condition and initialize the particle system
43  call setup_IC(fdps_ctrl,psys_num,end_time,pos_ll,pos_ul)
44
45  !* Make an instance of DomainInfo and initialize it
46  call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
47  call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num,coef_ema)
48  call fdps_ctrl%set_boundary_condition(dinfo_num,fdps_bc_periodic_xyz)
49  call fdps_ctrl%set_pos_root_domain(dinfo_num,pos_ll,pos_ul)
50
51  !* Perform domain decomposition and exchange particles
52  call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
53  call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
54
55  !* Make two tree structures
56  ntot = fdps_ctrl%get_nptcl_glb(psys_num)
57  !** dens_tree (used for the density calculation)
58  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_dens, &
59                          "Short,force_dens,essential_particle,
59                          essential_particle,Gather")
60  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_dens,3*ntot,theta, &
61                          n_leaf_limit,n_group_limit)
62
63  !** hydro_tree (used for the force calculation)
64  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_hydro, &
65                          "Short,force_hydro,essential_particle,
65                          essential_particle,Symmetry")
66  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_hydro,3*ntot,theta, &
67                          n_leaf_limit,n_group_limit)
68
69  !* Compute density, pressure, acceleration due to pressure gradient
70  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
71  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_dens, &
72                                              pfunc_ep_ep, &
73                                              psys_num, &
74                                              dinfo_num)
75  call set_pressure(fdps_ctrl,psys_num)
76  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_hydro_force)
77  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_hydro, &
78                                              pfunc_ep_ep, &
79                                              psys_num, &

```

```

80                                     dinfo_num)
81  !* Get timestep
82  dt = get_timestep(fdps_ctrl,psys_num)
83
84  !* Main loop for time integration
85  nstep = 0; time = 0.0d0
86  do
87      !* Leap frog: Initial Kick & Full Drift
88      call initial_kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)
89      call full_drift(fdps_ctrl,psys_num,dt)
90
91      !* Adjust the positions of the SPH particles that run over
92      !   the computational boundaries.
93      call fdps_ctrl%adjust_pos_into_root_domain(psys_num,dinfo_num)
94
95      !* Leap frog: Predict
96      call predict(fdps_ctrl,psys_num,dt)
97
98      !* Perform domain decomposition and exchange particles again
99      call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
100     call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
101
102     !* Compute density, pressure, acceleration due to pressure gradient
103     pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
104     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_dens, &
105                                                  pfunc_ep_ep, &
106                                                  psys_num, &
107                                                  dinfo_num)
108
109     call set_pressure(fdps_ctrl,psys_num)
110     pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_hydro_force)
111     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_dens, &
112                                                  pfunc_ep_ep, &
113                                                  psys_num, &
114                                                  dinfo_num)
115
116     !* Get a new timestep
117     dt = get_timestep(fdps_ctrl,psys_num)
118
119     !* Leap frog: Final Kick
120     call final_kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)
121
122     !* Output result files
123     if (mod(nstep,output_interval) == 0) then
124         call output(fdps_ctrl,psys_num,nstep)
125         call check_cnsrvd_vars(fdps_ctrl,psys_num)
126     end if
127
128     !* Output information to STDOUT
129     if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
130         write(*,200)time,nstep
131         200 format("===== " / &
132                  "time_===",1es25.16e3/ &
133                  "nstep_===",i6/ &
134                  "===== ")
135     end if

```

```

135
136     !* Termination condition
137     if (time >= end_time) exit
138
139     !* Update time & step
140     time = time + dt
141     nstep = nstep + 1
142
143 end do
144 call fdps_ctrl%ps_finalize()
145 stop 0
146
147 !* Finalize FDPS
148 call fdps_ctrl%PS_Finalize()
149
150 end subroutine f_main
151
152 !-----
153 !//////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////
154 !//////////////////// < S E T U P _ I C > //////////////////////
155 !-----
156 subroutine setup_IC(fdps_ctrl,psys_num,end_time,pos_ll,pos_ul)
157     use fdps_vector
158     use fdps_module
159     use user_defined_types
160     implicit none
161     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
162     integer, intent(IN) :: psys_num
163     double precision, intent(inout) :: end_time
164     type(fdps_f64vec) :: pos_ll,pos_ul
165     !* Local variables
166     integer :: i
167     integer :: nprocs,myrank
168     integer :: nptcl_glb
169     double precision :: dens_L,dens_R,eng_L,eng_R
170     double precision :: x,y,z,dx,dy,dz
171     double precision :: dx_tgt,dy_tgt,dz_tgt
172     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
173     character(len=64) :: fname
174
175     !* Get # of MPI processes and rank number
176     nprocs = fdps_ctrl%get_num_procs()
177     myrank = fdps_ctrl%get_rank()
178
179     !* Set the box size
180     pos_ll%x = 0.0d0
181     pos_ll%y = 0.0d0
182     pos_ll%z = 0.0d0
183     pos_ul%x = 1.0d0
184     pos_ul%y = pos_ul%x / 8.0d0
185     pos_ul%z = pos_ul%x / 8.0d0
186
187     !* Make an initial condition at RANK 0
188     if (myrank == 0) then
189         !* Set the left and right states

```

```

190     dens_L = 1.0d0
191     eng_L  = 2.5d0
192     dens_R = 0.5d0
193     eng_R  = 2.5d0
194     !* Set the separation of particle of the left state
195     dx = 1.0d0 / 128.0d0
196     dy = dx
197     dz = dx
198     !* Set the number of local particles
199     nptcl_glb = 0
200     *** (1) Left-half
201     x = 0.0d0
202     do
203         y = 0.0d0
204         do
205             z = 0.0d0
206             do
207                 nptcl_glb = nptcl_glb + 1
208                 z = z + dz
209                 if (z >= pos_ul%z) exit
210             end do
211             y = y + dy
212             if (y >= pos_ul%y) exit
213         end do
214         x = x + dx
215         if (x >= 0.5d0*pos_ul%x) exit
216     end do
217     write(*,*) 'nptcl_glb(L) = ', nptcl_glb
218     *** (2) Right-half
219     x = 0.5d0*pos_ul%x
220     do
221         y = 0.0d0
222         do
223             z = 0.0d0
224             do
225                 nptcl_glb = nptcl_glb + 1
226                 z = z + dz
227                 if (z >= pos_ul%z) exit
228             end do
229             y = y + dy
230             if (y >= pos_ul%y) exit
231         end do
232         x = x + (dens_L/dens_R)*dx
233         if (x >= pos_ul%x) exit
234     end do
235     write(*,*) 'nptcl_glb(L+R) = ', nptcl_glb
236     !* Place SPH particles
237     call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psys_num, nptcl_glb)
238     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num, ptcl)
239     i = 0
240     *** (1) Left-half
241     x = 0.0d0
242     do
243         y = 0.0d0
244         do

```

```

245         z = 0.0d0
246     do
247         i = i + 1
248         ptcl(i)%id      = i
249         ptcl(i)%pos%x = x
250         ptcl(i)%pos%y = y
251         ptcl(i)%pos%z = z
252         ptcl(i)%dens    = dens_L
253         ptcl(i)%eng     = eng_L
254         z = z + dz
255         if (z >= pos_ul%z) exit
256     end do
257     y = y + dy
258     if (y >= pos_ul%y) exit
259 end do
260 x = x + dx
261 if (x >= 0.5d0*pos_ul%x) exit
262 end do
263 write(*,*) 'nptcl(L)uuu=u', i
264 !** (2) Right-half
265 x = 0.5d0*pos_ul%x
266 do
267     y = 0.0d0
268     do
269         z = 0.0d0
270         do
271             i = i + 1
272             ptcl(i)%id      = i
273             ptcl(i)%pos%x = x
274             ptcl(i)%pos%y = y
275             ptcl(i)%pos%z = z
276             ptcl(i)%dens    = dens_R
277             ptcl(i)%eng     = eng_R
278             z = z + dz
279             if (z >= pos_ul%z) exit
280         end do
281         y = y + dy
282         if (y >= pos_ul%y) exit
283     end do
284     x = x + (dens_L/dens_R)*dx
285     if (x >= pos_ul%x) exit
286 end do
287 write(*,*) 'nptcl(L+R)u=u', i
288 !* Set particle mass and smoothing length
289 do i=1,nptcl_glb
290     ptcl(i)%mass = 0.5d0*(dens_L+dens_R)      &
291                  * (pos_ul%x*pos_ul%y*pos_ul%z) &
292                  / nptcl_glb
293     ptcl(i)%smth = kernel_support_radius * 0.012d0
294 end do
295
296 !* Check the initial distribution
297 !fname = "initial.dat"
298 !open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace')
299 !    do i=1,nptcl_glb

```

```

300      !      write(9,'(3es25.16e3)')ptcl(i)%pos%x, &
301      !      ptcl(i)%pos%y, &
302      !      ptcl(i)%pos%z
303      !      end do
304      !close(unit=9)
305
306      else
307          call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psys_num,0)
308      end if
309
310      !* Set the end time
311      end_time = 0.12d0
312
313      !* Inform to STDOUT
314      if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
315          write(*,*)"setup..."
316      end if
317      !call fdps_ctrl%ps_finalize()
318      !stop 0
319
320  end subroutine setup_IC
321
322  !-----
323  !///////////////////////      S U B R O U T I N E      /////////////////////////
324  !/////////////////////// < G E T _ T I M E S T E P > /////////////////////////
325  !-----
326  function get_timestep(fdps_ctrl,psys_num)
327      use fdps_vector
328      use fdps_module
329      use user_defined_types
330      implicit none
331      real(kind=c_double) :: get_timestep
332      type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
333      integer, intent(in) :: psys_num
334      !* Local variables
335      integer :: i,nptcl_loc
336      type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
337      real(kind=c_double) :: dt_loc
338
339      !* Get # of local particles
340      nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
341
342      !* Get the pointer to full particle data
343      call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
344      dt_loc = 1.0d30
345      do i=1,nptcl_loc
346          dt_loc = min(dt_loc, ptcl(i)%dt)
347      end do
348      nullify(ptcl)
349
350      !* Reduction
351      call fdps_ctrl%get_min_value(dt_loc,get_timestep)
352
353  end function get_timestep
354

```



```

355 !-----
356 !//////////////////////      S U B R O U T I N E      ////////////////////////
357 !////////////////////// < I N I T I A L _ K I C K > ////////////////////////
358 !-----
359 subroutine initial_kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)
360     use fdps_vector
361     use fdps_module
362     use user_defined_types
363     implicit none
364     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
365     integer, intent(in) :: psys_num
366     double precision, intent(in) :: dt
367     !* Local variables
368     integer :: i,nptcl_loc
369     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
370
371     !* Get # of local particles
372     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
373
374     !* Get the pointer to full particle data
375     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
376     do i=1,nptcl_loc
377         ptcl(i)%vel_half = ptcl(i)%vel + 0.5d0 * dt * ptcl(i)%acc
378         ptcl(i)%eng_half = ptcl(i)%eng + 0.5d0 * dt * ptcl(i)%eng_dot
379     end do
380     nullify(ptcl)
381
382 end subroutine initial_kick
383
384 !-----
385 !//////////////////////      S U B R O U T I N E      ////////////////////////
386 !////////////////////// < F U L L _ D R I F T > ////////////////////////
387 !-----
388 subroutine full_drift(fdps_ctrl,psys_num,dt)
389     use fdps_vector
390     use fdps_module
391     use user_defined_types
392     implicit none
393     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
394     integer, intent(in) :: psys_num
395     double precision, intent(in) :: dt
396     !* Local variables
397     integer :: i,nptcl_loc
398     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
399
400     !* Get # of local particles
401     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
402
403     !* Get the pointer to full particle data
404     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
405     do i=1,nptcl_loc
406         ptcl(i)%pos = ptcl(i)%pos + dt * ptcl(i)%vel_half
407     end do
408     nullify(ptcl)
409

```

```

410 end subroutine full_drift
411
412 !-----
413 !//////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////
414 !//////////////////// < P R E D I C T > //////////////////////
415 !-----
416 subroutine predict(fdps_ctrl,psys_num,dt)
417     use fdps_vector
418     use fdps_module
419     use user_defined_types
420     implicit none
421     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
422     integer, intent(in) :: psys_num
423     double precision, intent(in) :: dt
424     !* Local variables
425     integer :: i,nptcl_loc
426     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
427
428     !* Get # of local particles
429     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
430
431     !* Get the pointer to full particle data
432     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
433     do i=1,nptcl_loc
434         ptcl(i)%vel = ptcl(i)%vel + dt * ptcl(i)%acc
435         ptcl(i)%eng = ptcl(i)%eng + dt * ptcl(i)%eng_dot
436     end do
437     nullify(ptcl)
438
439 end subroutine predict
440
441 !-----
442 !//////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////
443 !//////////////////// < F I N A L _ K I C K > //////////////////////
444 !-----
445 subroutine final_kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)
446     use fdps_vector
447     use fdps_module
448     use user_defined_types
449     implicit none
450     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
451     integer, intent(in) :: psys_num
452     double precision, intent(in) :: dt
453     !* Local variables
454     integer :: i,nptcl_loc
455     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
456
457     !* Get # of local particles
458     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
459
460     !* Get the pointer to full particle data
461     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
462     do i=1,nptcl_loc
463         ptcl(i)%vel = ptcl(i)%vel_half + 0.5d0 * dt * ptcl(i)%acc
464         ptcl(i)%eng = ptcl(i)%eng_half + 0.5d0 * dt * ptcl(i)%eng_dot

```

```

465     end do
466     nullify(ptcl)
467
468 end subroutine final_kick
469
470 !-----
471 !///////////////////////      S U B R O U T I N E      /////////////////////////
472 !/////////////////////// < S E T _ P R E S S U R E > /////////////////////////
473 !-----
474 subroutine set_pressure(fdps_ctrl,psys_num)
475     use fdps_vector
476     use fdps_module
477     use user_defined_types
478     implicit none
479     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
480     integer, intent(in) :: psys_num
481     !* Local parameters
482     double precision, parameter :: hcr=1.4d0
483     !* Local variables
484     integer :: i,nptcl_loc
485     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
486
487     !* Get # of local particles
488     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
489
490     !* Get the pointer to full particle data
491     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
492     do i=1,nptcl_loc
493         ptcl(i)%pres = (hcr - 1.0d0) * ptcl(i)%dens * ptcl(i)%eng
494         ptcl(i)%snds = dsqrt(hcr * ptcl(i)%pres / ptcl(i)%dens)
495     end do
496     nullify(ptcl)
497
498 end subroutine set_pressure
499
500 !-----
501 !///////////////////////      S U B R O U T I N E      /////////////////////////
502 !///////////////////////      < O U T P U T >          /////////////////////////
503 !-----
504 subroutine output(fdps_ctrl,psys_num,nstep)
505     use fdps_vector
506     use fdps_module
507     use user_defined_types
508     implicit none
509     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
510     integer, intent(IN) :: psys_num
511     integer, intent(IN) :: nstep
512     !* Local parameters
513     character(len=16), parameter :: root_dir="result"
514     character(len=16), parameter :: file_prefix_1st="snap"
515     character(len=16), parameter :: file_prefix_2nd="proc"
516     !* Local variables
517     integer :: i,nptcl_loc
518     integer :: myrank
519     character(len=5) :: file_num,proc_num

```

```

520  character(len=64) :: cmd,sub_dir,fname
521  type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
522
523  !* Get the rank number
524  myrank = fdps_ctrl%get_rank()
525
526  !* Get # of local particles
527  nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
528
529  !* Get the pointer to full particle data
530  call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
531
532  !* Output
533  write(file_num,"(i5.5)")nstep
534  write(proc_num,"(i5.5)")myrank
535  fname = trim(root_dir) // "/" &
536          // trim(file_prefix_1st) // file_num // "-" &
537          // trim(file_prefix_2nd) // proc_num // ".dat"
538  open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace')
539  do i=1,nptcl_loc
540      write(9,100)ptcl(i)%id,ptcl(i)%mass, &
541              ptcl(i)%pos%x,ptcl(i)%pos%y,ptcl(i)%pos%z, &
542              ptcl(i)%vel%x,ptcl(i)%vel%y,ptcl(i)%vel%z, &
543              ptcl(i)%dens,ptcl(i)%eng,ptcl(i)%pres
544      100 format(i8,1x,10e25.16e3)
545  end do
546  close(unit=9)
547  nullify(ptcl)
548
549 end subroutine output
550
551 !-----
552 !//////////              S U B R O U T I N E              //////////
553 !////////// < C H E C K _ C N S R V D _ V A R S > //////////
554 !-----
555 subroutine check_cnsrzd_vars(fdps_ctrl,psys_num)
556     use fdps_vector
557     use fdps_module
558     use user_defined_types
559     implicit none
560     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
561     integer, intent(in) :: psys_num
562     !* Local variables
563     integer :: i,nptcl_loc
564     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
565     type(fdps_f64vec) :: mom_loc,mom
566     real(kind=c_double) :: eng_loc,eng
567
568     !* Get # of local particles
569     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
570
571     !* Get the pointer to full particle data
572     call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
573     mom_loc = 0.0d0; eng_loc = 0.0d0
574     do i=1,nptcl_loc

```

```
575      mom_loc = mom_loc + ptcl(i)%vel * ptcl(i)%mass
576      eng_loc = eng_loc + ptcl(i)%mass &
577                *(ptcl(i)%eng &
578                +0.5d0*ptcl(i)%vel*ptcl(i)%vel)
579  end do
580  nullify(ptcl)
581
582  !* Reduction & output
583  call fdps_ctrl%get_sum(eng_loc,eng)
584  call fdps_ctrl%get_sum(mom_loc%x,mom%x)
585  call fdps_ctrl%get_sum(mom_loc%y,mom%y)
586  call fdps_ctrl%get_sum(mom_loc%z,mom%z)
587  if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
588      write(*,100)eng
589      write(*,100)mom%x
590      write(*,100)mom%y
591      write(*,100)mom%z
592      100 format(1es25.16e3)
593  end if
594
595  end subroutine check_cnsrvd_vars
```

6 拡張機能の解説

6.1 P³M コード

本節では、FDPS の拡張機能 Particle Mesh (以下、PM と省略する) の使用方法について、P³M(Particle-Particle-Particle-Mesh) 法のサンプルコードを用いて解説を行う。このサンプルコードでは、塩化ナトリウム (NaCl) 結晶の系全体の結晶エネルギーを P³M 法で計算し、結果を解析解と比較する。P³M 法では、力、及び、ポテンシャルエネルギーの計算を、Particle-Particle (PP) パートと Particle-Mesh (PM) パートに split して行われる。このサンプルコードでは PP パートを FDPS 標準機能を用いて計算し、PM パートを FDPS 拡張機能を用いて計算する。なお、拡張機能 PM の仕様の詳細は、仕様書 9.2 節で説明されているので、そちらも参照されたい。

6.1.1 サンプルコードの場所と作業ディレクトリ

サンプルコードの場所は、\$(FDPS)/sample/fortran/p3m である。まずは、そこに移動する。

```
$ cd $(FDPS)/sample/fortran/p3m
```

サンプルコードはユーザ定義型と相互作用関数が実装された user_defined.F90、ユーザコードのそれ以外の部分が実装された f_main.F90、GCC と intel コンパイラ用の Makefile である Makefile と Makefile.intel から構成される。

6.1.2 ユーザー定義型

本節では、FDPS の機能を用いて P³M 法の計算を行うにあたって、ユーザーが記述しなければならない派生データ型について記述する。

6.1.2.1 FullParticle 型

ユーザーは FullParticle 型を記述しなければならない。Listing 37 に、サンプルコードの FullParticle 型を示す。FullParticle 型には、計算を行うにあたって、粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている必要がある。

Listing 37: FullParticle 型

```
1  type, public, bind(c) :: nbody_fp !$fdps FP
2  !$fdps copyFromForce nbody_pp_results (pot,pot) (agrv,agrv)
3  !$fdps copyFromForcePM agrv_pm
4  integer(kind=c_long_long) :: id
5  real(kind=c_double) :: m !$fdps charge
6  real(kind=c_double) :: rc !$fdps rsearch
7  type(fdps_f64vec) :: x !$fdps position
```

```

8      type(fdps_f64vec) :: v,v_half
9      type(fdps_f64vec) :: agrv
10     real(kind=c_double) :: pot
11     type(fdps_f32vec) :: agrv_pm
12     real(kind=c_float) :: pot_pm
13 end type nbody_fp

```

この派生データ型が FullParticle 型であることを示すため、次の指示文を記述している:

```
type, public, bind(c) :: nbody_fp !$fdps FP
```

P³M シミュレーションにおける相互作用はカットオフを持つ長距離力である。そのため、必須物理量としてカットオフ半径が加わる。現在の FDPS の仕様では、カットオフ半径の指定は探索半径の指定 (§ 4.2 参照) と同様に行う。次の指示文は、どのメンバ変数がどの必須物理量に対応するかを指定するものである:

```

real(kind=c_double) :: m !$fdps charge
real(kind=c_double) :: rc !$fdps rsearch
type(fdps_f64vec) :: x !$fdps position

```

FullParticle 型は Force 型との間でデータコピーを行う。ユーザは指示文を使い、FDPS にデータコピーの仕方を教えなければならない。また、拡張機能 PM を用いて相互作用計算を行う場合、FullParticle 型には PM モジュールで計算した相互作用計算の結果をどのメンバ変数で受け取るのか指示する指示文を記述する必要がある。本サンプルコードでは、以下のように記述している:

```

!$fdps copyFromForce nbody_pp_results (pot,pot) (agrv,agrv)
!$fdps copyFromForcePM agrv_pm

```

6.1.2.2 EssentialParticleI 型

ユーザは EssentialParticleI 型を記述しなければならない。EssentialParticleI 型には、PP パートの Force 計算を行う際、 i 粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本チュートリアル中では、EssentialParticleJ 型も兼ねているため、 j 粒子が持っているべき全ての物理量もメンバ変数として持っている必要がある。Listing 38 に、サンプルコードの EssentialParticleI 型を示す。

Listing 38: EssentialParticleI 型

```

1  type, public, bind(c) :: nbody_ep !$fdps EPI,EPJ
2      !$fdps copyFromFP nbody_fp (id,id) (m,m) (rc,rc) (x,x)
3      integer(kind=c_long_long) :: id
4      real(kind=c_double) :: m !$fdps charge
5      real(kind=c_double) :: rc !$fdps rsearch
6      type(fdps_f64vec) :: x !$fdps position
7  end type nbody_ep

```

まず、ユーザは指示文を用いて、この派生データ型が `EssentialParticleI` 型かつ `EssentialParticleJ` 型であることを FDPS に教えなければならない。本サンプルコードでは、以下のよう記述している:

```
type, public, bind(c) :: nbody_ep !$fdps EPI,EPJ
```

次に、ユーザはこの派生データ型のどのメンバ変数がどの必須物理量に対応するのかを指示文によって指定しなければならない。今回は相互作用がカットオフ有りの長距離力であるため、カットオフ半径の指定も必要である。本サンプルコードでは、以下のよう記述している:

```
real(kind=c_double) :: m !$fdps charge
real(kind=c_double) :: rc !$fdps rsearch
type(fdps_f64vec) :: x !$fdps position
```

`EssentialParticleI` 型と `EssentialParticleJ` 型は `FullParticle` 型からデータを受け取る。ユーザは `FullParticle` 型のどのメンバ変数を `EssentialParticle?` 型 ($?=I,J$) のどのメンバ変数にコピーするのかを、指示文を用いて指定する必要がある。本サンプルコードでは、以下のよう記述している:

```
!$fdps copyFromFP nbody_fp (id,id) (m,m) (rc,rc) (x,x)
```

6.1.2.3 Force 型

ユーザーは `Force` 型を記述しなければならない。`Force` 型は、PP パートの `Force` の計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。本サンプルコードの `Force` 型を Listing 39 に示す。このサンプルコードでは、`Force` は Coulomb 相互作用計算のみであるため、`Force` 型が 1 つ用意されている。

Listing 39: `Force` 型

```
1  type, public, bind(c) :: nbody_pp_results !$fdps Force
2      !$fdps clear
3      real(kind=c_double) :: pot
4      type(fdps_f64vec) :: agrv
5  end type nbody_pp_results
```

まず、ユーザはこの派生データ型が `Force` 型であることを指示文によって指定する必要がある。本サンプルコードでは、以下のよう記述している:

```
type, public, bind(c) :: nbody_pp_results !$fdps Force
```

この派生データ型は `Force` 型であるから、ユーザは必ず、相互作用計算における積算対象のメンバ変数の初期化方法を指定する必要がある。本サンプルコードでは `Force` 型のすべてのメンバ変数にデフォルトの初期化方法を指定するため、単に、キーワード `clear` の指示文を

記述している:

```
!$fdps clear
```

6.1.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp

ユーザーは相互作用関数 calcForceEpEp を記述しなければならない。calcForceEpEp には、PP パートの Force の計算の具体的な内容を書く必要がある。calcForceEpEp は、サブルーチンとして実装されなければならない。引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。本サンプルコードの calcForceEpEp の実装を Listing 40 に示す。

Listing 40: 相互作用関数 calcForceEpEp

```

1  subroutine calc_force_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
2      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
3      type(nbody_ep), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
4      type(nbody_ep), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
5      type(nbody_pp_results), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
6      !* Local variables
7      integer(c_int) :: i,j
8      real(c_double) :: rij,rinv,rinv3,xi
9      type(fdps_f64vec) :: dx
10
11      do i=1,n_ip
12          do j=1,n_jp
13              dx%x = ep_i(i)%x%x - ep_j(j)%x%x
14              dx%y = ep_i(i)%x%y - ep_j(j)%x%y
15              dx%z = ep_i(i)%x%z - ep_j(j)%x%z
16              rij = dsqrt(dx%x * dx%x &
17                      +dx%y * dx%y &
18                      +dx%z * dx%z)
19              if ((ep_i(i)%id == ep_j(j)%id) .and. (rij == 0.0d0)) cycle
20              rinv = 1.0d0/rij
21              rinv3 = rinv*rinv*rinv
22              xi = 2.0d0*rij/ep_i(i)%rc
23              f(i)%pot = f(i)%pot + ep_j(j)%m * S2_pcut(xi) * rinv
24              f(i)%agr%v%x = f(i)%agr%v%x + ep_j(j)%m * S2_fcut(xi) * rinv3 *
25                          dx%x
26              f(i)%agr%v%y = f(i)%agr%v%y + ep_j(j)%m * S2_fcut(xi) * rinv3 *
27                          dx%y
28              f(i)%agr%v%z = f(i)%agr%v%z + ep_j(j)%m * S2_fcut(xi) * rinv3 *
29                          dx%z
29              end do
30              !* Self-interaction term
31              f(i)%pot = f(i)%pot - ep_i(i)%m * (208.0d0/(70.0d0*ep_i(i)%rc))
32          end do
33      end subroutine calc_force_ep_ep

```

P³M 法の PP パートは、(距離に関する) カットオフ付きの 2 体相互作用である。そのため、ポテンシャルと加速度の計算にカットオフ関数 (S2_pcut(), S2_fcut()) が含まれていること

に注意されたい。ここで、各カットオフ関数は、粒子の形状関数 $S(r)$ が $S_2(r)$ のときのカットオフ関数である必要がある。ここで、 $S_2(r)$ は Hockney & Eastwood (1988) の式 (8.3) で定義される形状関数で、以下の形を持つ:

$$S_2(r) = \begin{cases} \frac{48}{\pi a^4} \left(\frac{a}{2} - r \right) & r < a/2, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 r は粒子からの距離、 a は形状関数のスケール長である。粒子の電荷量を q とすれば、この粒子が作る電荷密度分布 $\rho(r)$ は $\rho(r) = q S_2(r)$ と表現される。これは r に関して線形な密度分布を仮定していることを意味する。PP パートのカットオフ関数が $S_2(r)$ を仮定したものでなければならない理由は、PM パートのカットオフ関数が S_2 型形状関数を仮定して実装されているためである (PM パートと PP パートのカットオフ関数は同じ形状関数に基づく必要がある)。

カットオフ関数はユーザが定義する必要がある。サンプルコードの冒頭に `S2_pcut()` と `S2_fcut()` の実装例がある。これらの関数では、Hockney & Eastwood (1988) の式 (8-72),(8-75) が使用されている。カットオフ関数は、PP 相互作用が以下の形となるように定義されている:

$$\Phi_{PP}(\mathbf{r}) = \frac{m}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} S2_pcut(\xi) \quad (2)$$

$$\mathbf{f}_{PP}(\mathbf{r}) = \frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} S2_fcut(\xi) \quad (3)$$

ここで、 $\xi = 2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/a$ である。本サンプルコードでは a を変数 `rc` で表現している。

Hockney & Eastwood (1988) の式 (8-75) を見ると、 $r = 0$ のとき、メッシュポテンシャル ϕ^m が次の有限値を持つことがわかる (ここで、 $1/4\pi\epsilon_0$ の因子は省略した):

$$\phi^m(0) = \frac{208}{70a} \quad (4)$$

この項はサンプルコードの i 粒子のループの最後で考慮されている:

```
1 f(i)%pot = f(i)%pot - ep_i(i)%m * (208.0d0/(70.0d0*ep_i(i)%rc))
```

この項を考慮しないと解析解と一致しないことに注意する必要がある。

6.1.2.5 相互作用関数 `calcForceEpSp`

ユーザは相互作用関数 `calcForceEpSp` を記述しなければならない^{注 5)}。`calcForceEpSp` には、粒子-超粒子間相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。`calcForceEpSp` は、サブルーチンとして実装されなければならない。引数は、`EssentialParticleI` の配列、`EssentialParticleI` の個数、超粒子型の配列、超粒子型の個数、`Force` 型の配列である。本サンプルコードの `calcForceEpSp` の実装を Listing 41 に示す。

^{注 5)} 冒頭で述べたように、本サンプルコードでは相互作用計算に P^3M 法を用いる。FDPS の枠組み内で、これを実現するため、後述するように、見込み角の基準値 θ を 0 に指定して相互作用計算を行う。このため、粒子-超粒子相互作用は発生しないはずである。しかしながら、API `calc_force_all_and_write_back` に、粒子-超粒子間相互作用を計算する関数のアドレスを渡す必要があるため、相互作用関数 `calcForceEpSp` を定義する必要がある。

Listing 41: 相互作用関数 calcForceEpSp

```

1  subroutine calc_force_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
2      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
3      type(nbody_ep), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
4      type(fdps_spj_monopole_cutoff), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
5      type(nbody_pp_results), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
6      !* Local variables
7      integer(c_int) :: i,j
8      real(c_double) :: rij,rinv,rinv3,xi
9      type(fdps_f64vec) :: dx
10
11     do i=1,n_ip
12         do j=1,n_jp
13             dx%x = ep_i(i)%x%x - ep_j(j)%pos%x
14             dx%y = ep_i(i)%x%y - ep_j(j)%pos%y
15             dx%z = ep_i(i)%x%z - ep_j(j)%pos%z
16             rij = dsqrt(dx%x * dx%x &
17                       +dx%y * dx%y &
18                       +dx%z * dx%z)
19             rinv = 1.0d0/rij
20             rinv3 = rinv*rinv*rinv
21             xi = 2.0d0*rij/ep_i(i)%rc
22             f(i)%pot = f(i)%pot + ep_j(j)%mass * S2_pcut(xi) * rinv
23             f(i)%agrv%x = f(i)%agrv%x + ep_j(j)%mass * S2_fcut(xi) * rinv3
24                       * dx%x
25             f(i)%agrv%y = f(i)%agrv%y + ep_j(j)%mass * S2_fcut(xi) * rinv3
26                       * dx%y
27             f(i)%agrv%z = f(i)%agrv%z + ep_j(j)%mass * S2_fcut(xi) * rinv3
28                       * dx%z
29         end do
30     end do
31 end subroutine calc_force_ep_sp

```

6.1.3 プログラム本体

本節では、サンプルコード本体について解説を行う。詳細な説明に入る前に、サンプルコードの内容と全体構造について説明を与える。6.1節で述べたように、このサンプルコードではNaCl結晶の結晶エネルギーをP³M法によって計算し解析解と比較する。NaCl結晶は一樣格子状に並んだ粒子として表現される。NaとClは互い違いに並んでおり、Naに対応する粒子は正の電荷を、Clに対応する粒子は負の電荷を持っている。この粒子で表現された結晶を、大きさが $[0,1)^3$ の周期境界ボックスの中に配置し、結晶エネルギーを計算する。結晶エネルギーの計算精度は周期境界ボックスの中の粒子数や粒子の配置に依存するはずなので、サンプルコードでは、これらを変えてエネルギーの相対誤差を調べ、結果をファイルに出力する内容となっている。

コードの全体構造は以下のようにになっている:

- (1) FDPS で使用するオブジェクトの生成と初期化
- (2) 指定された粒子数と配置の結晶を生成 (メインルーチンの `setup_NaCl_crystal()`)

- (3) 各粒子のポテンシャルエネルギーを P³M 法で計算 (メインルーチン内)
- (4) 系全体のエネルギーを計算し、解析解と比較 (メインルーチンの `calc_energy_error()`)
- (5) (2) ~ (4) を繰り返す

以下で、個々について詳しく説明を行う。

6.1.3.1 fdps_controller 型オブジェクトの生成

FDPS Fortran インターフェースにおいて、FDPS の API はすべて Fortran 2003 のクラス `FDPS_controller` のメンバ関数として提供される。このクラスは、インターフェースプログラムの 1 つである `FDPS_module.F90` の中の、モジュール `fdps_module` 内で定義されている。したがって、ユーザは FDPS の API を使用するために、`FDPS_controller` 型オブジェクトを生成しなければならない。本サンプルコードでは、`FDPS_controller` 型オブジェクト `fdps_ctrl` をメインルーチンで生成している:

Listing 42: `fdps_controller` 型オブジェクトの生成

```

1  subroutine f_main()
2      use fdps_module
3      implicit none
4      !* Local variables
5      type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
6
7      ! Do something
8
9  end subroutine f_main

```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから必要な部分だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。

上記の理由から、以下の説明において、FDPS の API はこのオブジェクトのメンバ関数として呼び出されていることに注意されたい。

6.1.3.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メインルーチンに記述する。

Listing 43: FDPS の開始

```

1  fdps_ctrl%ps_initialize();

```

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メインルーチンの最後に次のように記述する。

Listing 44: FDPS の終了

```

1  fdps_ctrl%ps_finalize();

```

6.1.3.3 オブジェクトの生成と初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

6.1.3.3.1 オブジェクトの生成

P³M 法の計算では、粒子群クラス、領域クラスに加え、PP パートの計算用の tree を 1 本、さらに PM パートの計算に必要な ParticleMesh オブジェクトの生成が必要である。

Listing 45: オブジェクトの生成

```
1 call fdps_ctrl%create_psys(psys_num,'nbody_fp')
2 call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
3 call fdps_ctrl%create_pm(pm_num)
4 call fdps_ctrl%create_tree(tree_num, &
5                               "Long,nbody_pp_results,nbody_ep,nbody_ep,
                               MonopoleWithCutoff")
```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから該当箇所だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。

6.1.3.3.2 オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを生成したら、そのオブジェクトを使用する前に、初期化を行う必要がある。以下で、各オブジェクトの初期化の仕方について解説を行う。

(i) 粒子群オブジェクトの初期化 粒子群オブジェクトの初期化は、以下のように行う:

Listing 46: 粒子群オブジェクトの初期化

```
1 call fdps_ctrl%init_psys(psys_num)
```

サンプルコードではメインルーチンの冒頭で呼び出されている。

(ii) 領域オブジェクトの初期化 領域オブジェクトの初期化は、以下のように行う:

Listing 47: 領域オブジェクトの初期化

```
1 call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num,coef_ema)
```

サンプルコードではメインルーチンの冒頭で呼び出されている。

初期化が完了した後、領域オブジェクトには境界条件と境界の大きさをセットする必要がある。サンプルコードでは、この作業は粒子分布を決定するサブルーチン `setup_NaCl_crystal` の中で行われている:

```
1 call fdps_ctrl%set_boundary_condition(dinfo_num,fdps_bc_periodic_xyz)
2 pos_ll%x = 0.0d0; pos_ll%y = 0.0d0; pos_ll%z = 0.0d0
3 pos_ul%x = 1.0d0; pos_ul%y = 1.0d0; pos_ul%z = 1.0d0
4 call fdps_ctrl%set_pos_root_domain(dinfo_num,pos_ll,pos_ul)
```

(iii) ツリーオブジェクトの初期化 相互作用ツリーオブジェクトの初期化も、API `init_tree` を使って、以下のように行う:

Listing 48: ツリーオブジェクトの初期化

```
1 call fdps_ctrl%init_tree(tree_num,3*nptcl_loc,theta, &
2                           n_leaf_limit,n_group_limit)
```

ツリーオブジェクトの API `init_tree` には引数として、大雑把な粒子数を渡す必要がある。これは API の第 2 引数として指定する。上記の例では、API が呼ばれた時点でのローカル粒子数の 3 倍の値がセットされるようになっている。一方、API の第 3 引数は省略可能引数で、tree 法で力を計算するときの opening angle criterion θ を指定する。本サンプルコードでは PP パートの計算で粒子-超粒子相互作用を発生させないようにするため、 $\theta = 0$ を指定している。

(iv) ParticleMesh オブジェクトの初期化 特に明示的に初期化を行う必要はない。

6.1.3.4 粒子分布の生成

本節では、粒子分布を生成するサブルーチン `setup_NaCl_crystal` の動作とその中で呼ばれている FDPS の API について解説を行う。このサブルーチンは、周期境界ボックスの 1 次元あたりの粒子数と、原点 $(0, 0, 0)$ に最も近い粒子の座標を引数として、3 次元粒子分布を生成する。サンプルコードでは、これらのパラメータは派生データ型 `crystal_parameters` のオブジェクト `NaCl_params` を使って渡されている:

```
1 ! In user_defined.F90
2 type, public, bind(c) :: crystal_parameters
3   integer(kind=c_int) :: nptcl_per_side
4   type(fdps_f64vec) :: pos_vertex
5 end type crystal_parameters
6 ! In f_main.F90
7 type(crystal_parameters) :: NaCl_params
8 call setup_NaCl_crystal(fdps_ctrl, &
9                         psys_num, &
10                        dinfo_num, &
11                        NaCl_params)
```

`setup_NaCl_crystal` の前半部分において、渡されたパラメータを使って粒子分布を生成している。この結晶の系全体のエネルギーは

$$E = -\frac{N\alpha m^2}{R_0} \quad (5)$$

と解析的に書ける。ここで、 N は分子の総数 (原子の数は $2N$ 個)、 m は粒子の電荷量、 R_0 は最隣接原子間距離、 α はマーデリング (Madelung) 定数である。NaCl 結晶の場合、 $\alpha \approx 1.747565$ である (例えば、 Kittel 著「固体物理学入門 (第 8 版)」を参照せよ)。計算結果をこの解析解と比較するとき、系全体のエネルギーが粒子数に依存しては不便である。そこで、サンプルコードでは、系全体のエネルギーが粒子数に依存しないように、粒子の電荷量 m を

$$\frac{2Nm^2}{R_0} = 1 \quad (6)$$

となるようにスケールしていることに注意されたい。

粒子分布の生成後、FDPSのAPIを使って、領域分割と粒子交換を行っている。以下で、これらのAPIについて解説する。

6.1.3.4.1 領域分割の実行

粒子分布に基いて領域分割を実行するには、領域オブジェクトのAPI `decompose_domain_all` を使用する:

Listing 49: 領域分割の実行

```
1 call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
```

6.1.3.4.2 粒子交換の実行

領域情報に基いてプロセス間の粒子の情報を交換するには、粒子群オブジェクトのAPI `exchange_particle` を使用する:

Listing 50: 粒子交換の実行

```
1 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
```

6.1.3.5 相互作用計算の実行

粒子分布を決定し、領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。サンプルコードでは、この作業をメインルーチンで行っている:

Listing 51: 相互作用計算の実行

```
1  !* [4] Compute force and potential with P3M method
2  !* [4-1] Get the pointer to FP and # of local particles
3  nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
4  call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
5  !* [4-2] PP part
6  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_force_ep_ep)
7  pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_force_ep_sp)
8  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
9                                              pfunc_ep_ep, &
10                                             pfunc_ep_sp, &
11                                             psys_num,      &
12                                             dinfo_num)
13 !* [4-3] PM part
14 call fdps_ctrl%calc_pm_force_all_and_write_back(pm_num,      &
15                                             psys_num, &
16                                             dinfo_num)
17 do i=1,nptcl_loc
18   pos32 = ptcl(i)%x
19   call fdps_ctrl%get_pm_potential(pm_num,pos32,ptcl(i)%pot_pm)
20 end do
21 !* [4-4] Compute the total acceleration and potential
```

```
22 do i=1,nptcl_loc
23     ptcl(i)%pot = ptcl(i)%pot - ptcl(i)%pot_pm
24     ptcl(i)%agrv = ptcl(i)%agrv - ptcl(i)%agrv_pm
25 end do
```

PP パートの相互作用計算には API `calc_force_all_and_write_back`、PM パートの相互作用計算には API `calc_pm_force_all_and_write_back` を用いている。PM パートの計算の後に、加速度とポテンシャルの総和を計算している。この総和計算を引き算で行っていることに注意して頂きたい。引き算を使用する理由は、FDPS の拡張機能 PM は重力を想定してポテンシャルを計算するからである。すなわち、拡張機能 PM では、電荷 $m(>0)$ は正のポテンシャルを作るべきところを、質量 $m > 0$ の重力ポテンシャルとして計算する。このポテンシャルは負値である。したがって、拡張機能 PM を Coulomb 相互作用で使用するには符号反転が必要となる。

6.1.3.6 エネルギー相対誤差の計算

エネルギーの相対誤差の計算は関数 `calc_energy_error` で行っている。ここでは、解析解の値としては $E_0 \equiv 2E = -1.7475645946332$ を採用した。これは、PM³(Particle-Mesh Multipole Method) で数値的に求めた値である。

6.1.4 コンパイル

本サンプルコードでは FFTW ライブラリ (<http://www.fftw.org>) を使用するため、ユーザ環境に FFTW3 をインストールする必要がある。コンパイルは、付属の Makefile 内の変数 `FFTW_LOC` と `FDPS_LOC` に、FFTW と FDPS のインストール先の PATH をそれぞれ指定し、`make` コマンドを実行すればよい。

```
$ make
```

コンパイルがうまく行けば、`work` ディレクトリに実行ファイル `p3m.x` が作成されているはずである。

6.1.5 実行

FDPS 拡張機能の仕様から、本サンプルコードはプロセス数が 2 以上の MPI 実行でなければ、正常に動作しない。そこで、以下のコマンドでプログラムを実行する:

```
$ MPIRUN -np NPROC ./p3m.x
```

ここで、“MPIRUN”には `mpirun` や `mpiexec` などの mpi 実行プログラムが、“NPROC”にはプロセス数が入る。

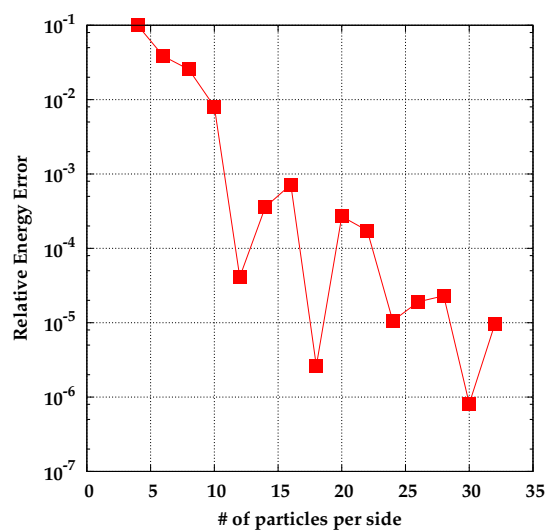


図 3: 1 辺あたりの粒子数とエネルギー相対誤差の関係 (メッシュ数は 16^3 、カットオフ半径は $3/16$)

6.1.6 結果の確認

計算が終了すると、work フォルダ下にエネルギーの相対誤差を記録したファイルが出力される。結果をプロットすると、図 3 のようになる。

7 より実用的なアプリケーションの解説

前節までは、比較的単純なサンプルコードを用いて、FDPS の基本的な機能について解説を行ってきた。しかしながら、実際の研究では、複数の粒子種の取り扱いが必要になる等、より複雑なアプリケーションを書く必要がある。そこで、本節では、より実用的なサンプルコードを使って、FDPS の他の機能について解説を行う。記述を簡潔にするため、読者は前節までの内容を理解しているものと仮定する。

7.1 N 体/SPH コード

本節では、より実用的なアプリケーションの一例として円盤銀河の時間発展を計算する N 体/SPH サンプルコードの解説を行う。このサンプルコードは、重力のみで相互作用するダークマターと星を N 体粒子、重力及び流体相互作用を行うガスを SPH 粒子として表現する。重力計算は Tree 法で、流体計算は SPH 法を用いて行う。SPH 法は [Springel & Hernquist \[2002, MNRAS, 333, 649\]](#) 及び [Springel \[2005, MNRAS, 364, 1105\]](#) で提案された方法 (以下、簡単のため、Springel の方法と呼ぶ) を使用している。本解説を読むことにより、ユーザは、FDPS で複数の粒子種を扱う方法を学ぶことができる。

以下では、まずはじめにコードの使用方法について説明を行う。次に Springel の方法について簡単な解説を行った後、サンプルコードの中身について具体的に解説する。

7.1.1 コードの使用方法

前節で述べた通り、本コードは円盤銀河の N 体/SPH シミュレーションを行うコードである。ダークマターと星の初期条件は、銀河の初期条件を作成するソフトウェア [MAGI \(Miki & Umemura \[2018, MNRAS, 475, 2269\]\)](#) で作成したファイルを読み込んで設定する。一方、ガスの初期条件は本コードの内部で作成する。したがって、以下の手順で本コードを使用する。

- ディレクトリ \$(FDPS)/sample/fortran/nbody+sph に移動
- カレントディレクトリにある Makefile を編集
- [MAGI](#) を使って初期条件に対応する粒子データを生成し、./magi_data/dat 以下に配置
- コマンドライン上で make を実行
- nbodysph.out ファイルの実行
- 結果の解析

以下、順に説明していく。

7.1.1.1 ディレクトリ移動

サンプルコードの場所は、\$(FDPS)/sample/fortran/nbody+sph である。まずは、そこに移動する。

7.1.1.2 サンプルコードのファイル構成

以下はサンプルコードのファイル構成である。

```
$ ls | awk '{print $0}'
Makefile
Makefile.K
Makefile.intel
Makefile.ofp
f_main.F90
ic.F90
job.K.sh
job.ofp.sh
leapfrog.F90
macro_defs.h
magi_data/
mathematical_constants.F90
physical_constants.F90
test.py
tipsy_file_reader.cpp
tipsy_file_reader.h
user_defined.F90
```

各ソースファイルの内容について簡単に解説を行う。まず、ic.F90 には初期条件を作成するサブルーチンが実装されている。初期条件は円盤銀河の他、複数用意されている (後述)。leapfrog.F90 には粒子の軌道の時間積分を Leapfrog 法を用いて行うサブルーチンが実装されている。macro_defs.h には計算を制御するためのマクロが定義されている。f_main.F90 はアプリケーションのメインルーチンが実装されている。mathematical_constants.F90 には数学定数が、physical_constants.F90 には物理定数が定義されている。tipsy_file_reader.cpp 及び tipsy_file_reader.h には MAGI が出力した粒子データを読むための関数が定義されている。user_defined.F90 には、ユーザ定義型や相互作用関数が実装されている。

ディレクトリ magi_data には、銀河の初期条件を作成するソフトウェア MAGI に入力するパラメータファイル (magi_data/cfg/*) と MAGI を動作させるスクリプト (magi_data/sh/run.sh) が格納されている。

7.1.1.3 Makefile の編集

Makefile の編集項目は以下の通りである。

- 変数 CXX に使用する C++ コンパイラを代入する。
- 変数 FC に使用する Fortran コンパイラを代入する。
- 変数 CXXFLAGS に C++ コンパイラのコンパイルオプションを指定する。
- 変数 FCFLAGS に Fortran コンパイラのコンパイルオプションを指定する。
- 本コードでは計算を制御するためにいくつかのマクロを用意している。表 1 にマクロ名とその定義の対応を示した。また、本コードには、INITIAL_CONDITION の値に応じて自動的に設定されて使用されるマクロも存在する。これらは一般に変更する必要はないが、詳細は macro_defs.h を参照して頂きたい。
- 本コードでは重力計算に x86 版 Phantom-GRAPe ライブラリを使用することができる。Phantom-GRAPe ライブラリを使用する場合、Makefile の変数 use_phantom_grape_x86 の値を yes にする。

OpenMP や MPI の使用/不使用の指定に関しては、第 3 節を参照して頂きたい。

マクロ名	定義
INITIAL_CONDITION	初期条件の種類指定、或いは、コードの動作の指定に使用されるマクロ。0 から 3 までのいずれかの値を取る必要がある。値に応じて、次のように指定される。0:円盤銀河の初期条件を選択、1:Cold collapse 問題の初期条件を選択、2:Evrard test 問題の初期条件を選択、3:ガラス状に分布した SPH 粒子データを生成するモードで実行ファイルを作成
ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH	smoothing length が可変/固定を制御するマクロ。定義されている場合、可変となり Springel の方法で SPH 計算が行われる。未定義の場合、固定長カーネルの SPH コードとなる。
USE_ENTROPY	流体の熱力学状態を記述する独立変数としてエントロピーを使うか単位質量あたりの内部エネルギーを使用するかを指定するマクロ。定義されている場合エントロピーが用いられる。但し、後述するマクロ ISOTHERMAL_EOS が定義されている場合には、単位質量あたりの内部エネルギーが強制的に使用される (圧力の計算に内部エネルギーを使用する)。
USE_BALSARA_SWITCH	Balsara switch (Balsara [1995, JCP, 121, 357]) の使用/不使用を制御するマクロ。定義されている場合は使用する。
USE_PRESCR_OF_THOMAS_COUCHMAN_1992	Thomas & Couchman [1992, MNRAS, 257, 11] で提案された SPH 計算の tensile 不安定を防ぐ簡便な方法を使用するかを制御するマクロ。定義されている場合は使用する。
ISOTHERMAL_EOS	流体を等温で取り扱うかどうかを指定するマクロ。定義されている場合は等温で扱い、未定義の場合にはエントロピー方程式、或いは、内部エネルギー方程式が解いて、熱力学的状态を時間発展させる。
READ_DATA_WITH_BYTESWAP	MAGI の粒子データを読み込む際に基本データ型単位で byteswap してデータを読み込むかを制御するマクロ。定義されている場合は byteswap する。

表 1: コンパイル時マクロの種類と定義

7.1.1.4 MAGI を使った粒子データの生成

前述した通り、ユーザは事前に銀河の初期条件を作成するソフトウェア MAGI を使い、以下に指定する手順でデータを作成する必要がある。MAGI を利用できないユーザは、指定するサイトからこちらが用意したデータをダウンロードすることも可能である。以下、各場合について詳しく述べる。

MAGI を使ってデータ作成を行う場合 以下の手順でデータ作成を行う。

1. <https://bitbucket.org/ymiki/magi> から MAGI をダウンロードし、Web の “How to compile MAGI” に記載された手順に従って、適当な場所にインストールする。但し、本サンプルコードは TIPSy ファイルの粒子データ読み込みしかサポートしていないため、MAGI は `USE_TIPSY_FORMAT=ON` の状態でビルドされている必要がある。
2. `./magi_data/sh/run.sh` を開き、変数 `MAGI_INSTALL_DIR` にコマンド `magi` がインストールされたディレクトリを、変数 `NTOT` に希望する N 体粒子の総数をセットする (ダークマターと星への振り分けは MAGI が自動的に行う)。
3. `./magi_data/cfg/*` を編集し、ダークマターと銀河のモデルを指定する。指定方法の詳細は上記サイトか、或いは、[Miki & Umemura \[2018, MNRAS, 475, 2269\]](#) の第 2.4 節を参照のこと。デフォルトの銀河モデル (以下、デフォルトモデル) は次の 4 成分から構成される:
 - (i) **ダークマターハロー** (NFW profile, $M = 10^{12} M_{\odot}$, $r_s = 21.5$ kpc, $r_c = 200$ kpc, $\Delta_c = 10$ kpc)
 - (ii) **バルジ** (King モデル, $M = 5 \times 10^{10} M_{\odot}$, $r_s = 0.7$ kpc, $W_0 = 5$)
 - (iii) **thick disk** (Sérsic profile, $M = 2.5 \times 10^{10} M_{\odot}$, $r_s = 3.5$ kpc, $n = 1.5$, $z_d = 1$ kpc, $Q_{T,\min} = 1.0$)
 - (iv) **thin disk** (exponential disk, $M = 2.5 \times 10^{10} M_{\odot}$, $r_s = 3.5$ kpc, $z_d = 0.5$ kpc, $Q_{T,\min} = 1.0$)

デフォルトモデルでは、2 つの星円盤は bar モードに対してわずかに不安定であるため、弱い棒状構造を持つ渦巻き銀河になることが期待される初期条件となっている。MAGI の最新のリリース (version 1.1.1 [2019 年 7 月 19 日時点]) では、従来のリリースとデフォルトの動作モードが変更されたため、thick disk と thin disk のパラメータ指定の仕方が FDPS 5.0d 以前から変わっていることに注意されたい。具体的には、従来の MAGI では disk 成分の速度分散をパラメータ f を通して指定する形になっていたが (FDPS 5.0d 以前に付属するサンプルコードでは、 $f = 0.125$)、最新のリリースでは Toomre Q value の最小値 $Q_{T,\min}$ を通して指定する方式になっている。

4. ディレクトリ `magi_data` に移動し、以下のコマンドを実行:

```
$ ./sh/run.sh
```

5. MAGI が正しく終了しているなら、magi_data/dat 以下に、拡張子が tipsy の粒子データが生成されているはずである。

データをダウンロードする場合 以下のサイトからダウンロードし、./magi_data/dat/以下に置く。各粒子データの銀河モデルはすべてデフォルトモデルで、粒子数だけ異なる。

- $N = 2^{21}$: http://particle.riken.jp/~fdps/magi_data/Galaxy/21/Galaxy.tipsy
- $N = 2^{22}$: http://particle.riken.jp/~fdps/magi_data/Galaxy/22/Galaxy.tipsy
- $N = 2^{23}$: http://particle.riken.jp/~fdps/magi_data/Galaxy/23/Galaxy.tipsy
- $N = 2^{24}$: http://particle.riken.jp/~fdps/magi_data/Galaxy/24/Galaxy.tipsy

7.1.1.5 make の実行

make コマンドを実行する。

7.1.1.6 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./nbodysph.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./nbodysph.out
```

ここで、MPIRUN には mpirun や mpiexec などが、NPROC には使用する MPI プロセスの数が入る。

7.1.1.7 結果の解析

ディレクトリ result に N 体粒子と SPH 粒子の粒子データファイル “nbody0000x-proc0000y.dat” と “sph0000x-proc0000y.dat” が出力される。ここで x は時刻に対応する整数、 y は MPI のプロセス番号 (ランク番号) を表す。 N 体粒子データの出力フォーマットは、1 列目から順に粒子の ID, 粒子の質量、位置の x, y, z 座標、粒子の x, y, z 軸方向の速度となっている。一方、SPH 粒子データの出力フォーマットは、1 列目から順に粒子の ID, 粒子の質量、位置の x, y, z 座標、粒子の x, y, z 軸方向の速度、密度、単位質量あたりの内部エネルギー、エントロピー、圧力となっている。

図 4 は、 N 体粒子数 2^{21} 、SPH 粒子数 2^{18} で円盤銀河のシミュレーションを行ったときの $T = 0.46$ における星分布とガス分布である。

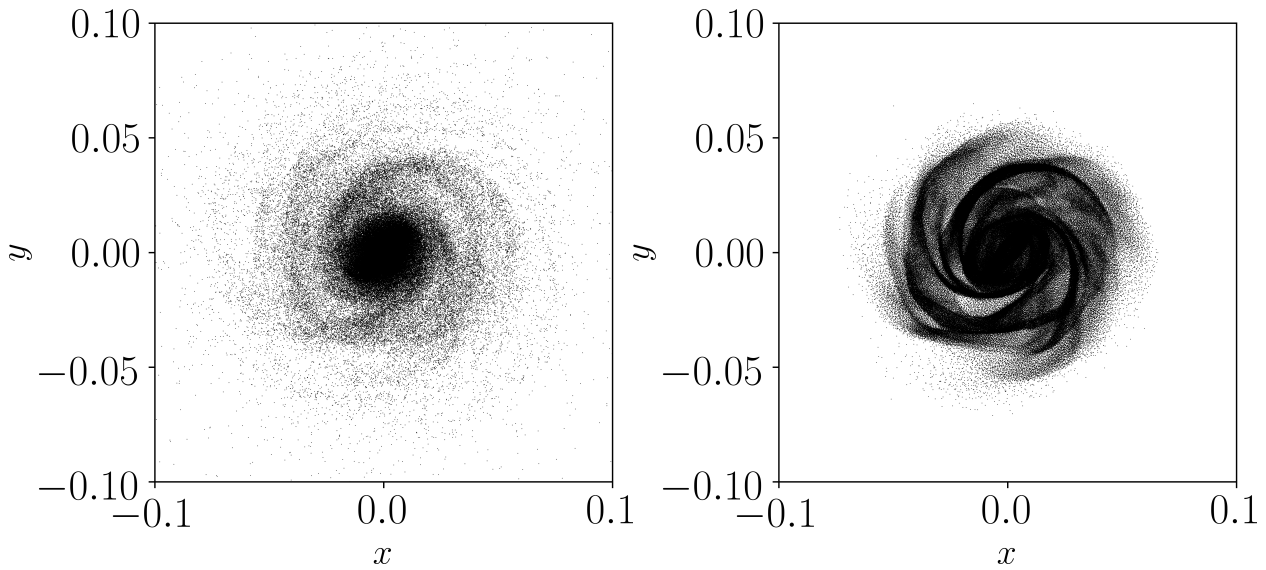


図 4: $T = 0.46$ における星分布 (左) とガス分布 (右) (計算は以下の条件で実施した: N 体粒子数 2^{21} 、SPH 粒子数 2^{18} 、等温、ガス温度 10^4 K、平均分子量 $\mu = 0.5$)

以下では、まず Springel の方法について解説し、その後、サンプルコードの実装について説明していく。

7.1.2 Springel の方法

Springel & Hernquist [2002, MNRAS, 333, 649] では、smoothing length が可変な場合でも、系のエネルギーとエントロピーが保存するようなスキーム (具体的には運動方程式) を定式化した。以下、彼らの定式化を手短に説明する。導出方針としては、smoothing length も独立変数とみて系の Lagrangian を立て、それを粒子数個の拘束条件の下、Euler-Lagrange 方程式を解く、というものである。

具体的には、彼らは系の Lagrangian として次のようなものを選んだ:

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 - \frac{1}{\gamma - 1} \sum_{i=1}^N m_i A_i \rho_i^{\gamma-1} \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{q} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, h_1, \dots, h_N)$ であり、下付きの整数はすべて粒子番号を表す。 \mathbf{r}_i は位置、 h_i は smoothing length、 m_i は質量、 γ は比熱比、 ρ_i は密度、 A_i はエントロピー関数と呼ばれ、単位質量あたりの内部エネルギー u_i と次の関係がある:

$$u_i = \frac{A_i}{\gamma - 1} \rho_i^{\gamma-1} \quad (8)$$

式 (7) の第 1 項目は運動エネルギー、第 2 項目は内部エネルギーを表す。この Lagrangian をそのまま Euler-Lagrangian 方程式を使って解くと、 $4N$ 個の方程式になってしまうので、彼らは次の N 個の拘束条件を導入した。

$$\phi_i = \frac{4\pi}{3} h_i^3 \rho_i - \bar{m} N_{\text{neigh}} = 0 \quad (9)$$

ここで、 \bar{m} はSPH 粒子の平均質量^{注 6)}、 N_{neigh} は近傍粒子数 (定数) である。この拘束条件の下、Lagrange の未定乗数法を使って、Euler-Lagrange 方程式をとけば、以下の運動方程式が得られる:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left[f_i \frac{P_i}{\rho_i^2} \nabla_i W(r_{ij}, h_i) + f_j \frac{P_j}{\rho_j^2} \nabla_i W(r_{ij}, h_j) \right] \quad (10)$$

ここで、 P_i は圧力、 $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ 、 W はカーネル関数、 f_i は ∇h term と呼ばれる量で、

$$f_i = \left(1 + \frac{h_i}{3\rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial h_i} \right)^{-1} \quad (11)$$

と定義される。

系の熱力学的状態はエントロピー A_i を独立変数として記述される。断熱過程の場合、エントロピーは衝撃波以外のところでは流れに沿って一定である。Springel [2005, MNRAS, 364, 1105] では、衝撃波でのエントロピー増加と速度の変化を人工粘性を使って次のようにモデル化している:

$$\frac{dA_i}{dt} = \frac{1}{2} \frac{\gamma - 1}{\rho_i^{\gamma-1}} \sum_{j=1}^N m_j \Pi_{ij} \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i \bar{W}_{ij} \quad (12)$$

$$\left. \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right|_{\text{visc}} = - \sum_{j=1}^N m_j \Pi_{ij} \nabla_i \bar{W}_{ij} \quad (13)$$

ここで、 $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ 、 \mathbf{v}_i は速度、 $\bar{W}_{ij} = \frac{1}{2}(W(r_{ij}, h_i) + W(r_{ij}, h_j))$ である。 Π_{ij} に関しては、原論文を参照して頂きたい。

したがって、SPH 計算の手順は次のようになる:

- (1) 式 (9) と以下の式を無矛盾に解き、密度 ρ_i と h_i を決定する。

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W(r_{ij}, h_i) \quad (14)$$

- (2) 式 (11) で定義される ∇h term を計算する。
- (3) 式 (10)、(12)、(13) の右辺を計算する。
- (4) SPH 粒子の位置、速度、エントロピーを時間積分する。

以下、まずユーザ定義クラスと相互作用関数の実装について解説を行い、次にメインルーチンの実装について解説を行う。複数粒子種の取扱は後者で解説する。

7.1.3 ユーザー定義型

本サンプルコードのユーザ定義型はすべて `user_defined.F90` に定義されている。はじめに用意されているユーザ定義型の種類について簡単に説明しておく。冒頭で述べたように、

^{注 6)} 拘束条件に使用していることから、定数扱いであることに注意。

本サンプルコードは2種類の粒子 (N 体粒子, SPH 粒子) を扱う。そのため、FullParticle 型も2種類用意している (N 体粒子用に 派生データ型 fp_nbody を、SPH 粒子用に 派生データ型 fp_sph)。相互作用は重力相互作用と流体相互作用の2種類ある。そのため、Force 型を3種類用意している (重力計算用に 派生データ型 force_grav を、密度計算用に 派生データ型 force_dens を、そして、圧力勾配による加速度 (以下、単に圧力勾配加速度) の計算用に 派生データ型 force_hydro を; 第4節も参照のこと)。本サンプルコードでは、簡単のため、EssentialParticleI 型と EssentialParticleJ 型を1つの派生データ型で兼ねることにし (以下、単に EssentialParticle 型)、密度計算と圧力勾配加速度計算に同じ EssentialParticle 型を使用する。したがって、EssentialParticle 型の種類は2種類となっている (重力計算用に 派生データ型 ep_grav を、SPH 計算用に 派生データ型 ep_hydro)。

以下、各ユーザ定義型の実装について説明する。

7.1.3.1 FullParticle 型

まず、 N 体粒子用の FullParticle 型である 派生データ型 fp_nbody について解説する。この派生データ型には、 N 体粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 52 に、この派生データ型の実装を示す。メンバ変数の構成は、第3-4節で紹介した N 体計算サンプルコードとほぼ同じであり、詳細はそちらを参照されたい。

Listing 52: FullParticle 型 (派生データ型 fp_nbody)

```

1  !**** Full particle type
2  type, public, bind(c) :: fp_nbody !$fdps FP
3      !$fdps copyFromForce force_grav (acc,acc) (pot,pot)
4      integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
5      real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
6      type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7      type(fdps_f64vec) :: vel
8      type(fdps_f64vec) :: acc
9      real(kind=c_double) :: pot
10 end type fp_nbody

```

次に、SPH 粒子用の FullParticle 型である 派生データ型 fp_sph について解説する。この派生データ型には、SPH 粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 53 に、この派生データ型の実装を示す。メンバ変数の内、主要な変数の意味は次の通りである: id (識別番号)、mass (質量)、pos (位置 $[r_i]$)、vel (速度 $[v_i]$)、acc_grav (重力加速度)、pot_grav (重力ポテンシャル)、acc_hydro (圧力勾配加速度)、dens (密度 $[\rho_i]$)、eng (単位質量あたりの内部エネルギー $[u_i]$)、ent (エントロピー関数 [以下、単にエントロピー] $[A_i]$)、pres (圧力 $[P_i]$)、smth (smoothing length^{注 7)} $[h_i]$)、gradh (∇h term $[f_i]$)、divv ($(\nabla \cdot \mathbf{v})_i$ 、ここで下付きの i は粒子 i の位置での微分を示している)、rotrv ($(\nabla \times \mathbf{v})_i$)、balsw (Balsara switch のための係数で、定義式は Balsara [1995, JCP, 121, 357] の $f(a)$)、snds (音速)、eng_dot (eng の時間変化率)、ent_dot (ent の時間変化率)、dt (この粒子の軌道を時間積分するときに許される最大の時間刻み幅)。

以下の点に注意して頂きたい。

注 7) カーネル関数が 0 になる距離と定義。

- SPH 粒子が関わる相互作用計算は、重力計算、密度計算、圧力勾配加速度計算の3種類あるので、それに応じて copyFromForce 指示文も3つ用意されている。

Listing 53: FullParticle 型 (派生データ型 fp_sph)

```

1  type, public, bind(c) :: fp_sph !$fdps FP
2      !$fdps copyFromForce force_grav (acc,acc_grav) (pot,pot_grav)
3      !$fdps copyFromForce force_dens (flag,flag) (dens,dens) (smth,smth)
4      !$fdps copyFromForce force_hydro (acc,acc_hydro) (eng_dot,eng_dot) (
5          ent_dot,ent_dot) (dt,dt)
6      integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
7      real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
8      type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
9      type(fdps_f64vec) :: vel
10     type(fdps_f64vec) :: acc_grav
11     real(kind=c_double) :: pot_grav
12     type(fdps_f64vec) :: acc_hydro
13     integer(kind=c_int) :: flag
14     real(kind=c_double) :: dens
15     real(kind=c_double) :: eng
16     real(kind=c_double) :: ent
17     real(kind=c_double) :: pres
18     real(kind=c_double) :: smth
19     real(kind=c_double) :: gradh
20     real(kind=c_double) :: divv
21     type(fdps_f64vec) :: rotv
22     real(kind=c_double) :: balsw
23     real(kind=c_double) :: snds
24     real(kind=c_double) :: eng_dot
25     real(kind=c_double) :: ent_dot
26     real(kind=c_double) :: dt
27     type(fdps_f64vec) :: vel_half
28     real(kind=c_double) :: eng_half
29     real(kind=c_double) :: ent_half
30 end type fp_sph

```

7.1.3.2 EssentialParticle 型

まず、重力計算用の EssentialParticle 型である 派生データ型 ep_grav について解説する。この派生データ型には、重力計算を行う際、 i 粒子と j 粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持たせている。Listing 54 に、この派生データ型の実装を示す。ユーザは EssentialParticle 型の定義部に、FullParticle 型からのデータコピーの方法を指示するため指示文 (copyFromFP 指示文) を書く必要があるが、本サンプルコードでは粒子種が2種類のため、2つの copyFromFP 指示文が実装されていることに注意されたい。

Listing 54: EssentialParticle 型 (派生データ型 ep_grav)

```

1  type, public, bind(c) :: ep_grav !$fdps EPI,EPJ
2      !$fdps copyFromFP fp_nbody (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
3      !$fdps copyFromFP fp_sph (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
4      integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id

```

```

5      real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
6      type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7  end type ep_grav

```

次に、密度計算と圧力勾配加速度計算用の EssentialParticle 型である 派生データ型 ep_hydro について解説する。この派生データ型には、密度計算と圧力勾配加速度計算を行う際、 i 粒子と j 粒子が持つべき全ての物理量をメンバ変数として持たせている。Listing 55 に、この派生データ型の実装を示す。

Listing 55: EssentialParticle 型 (派生データ型 ep_hydro)

```

1  type, public, bind(c) :: ep_hydro !$fdps EPI,EPJ
2      !$fdps copyFromFP fp_sph (id,id) (pos,pos) (vel,vel) (mass,mass) (
3          smth,smth) (dens,dens) (pres,pres) (gradh,gradh) (snds,snds) (
4          balsw,balsw)
5      integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
6      type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7      type(fdps_f64vec) :: vel
8      real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
9      real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
10     real(kind=c_double) :: dens
11     real(kind=c_double) :: pres
12     real(kind=c_double) :: gradh
13     real(kind=c_double) :: snds
14     real(kind=c_double) :: balsw
15 end type ep_hydro

```

7.1.3.3 Force 型

まず、重力計算用の Force 型である 派生データ型 force_grav について解説する。この派生データ型は、重力計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 56 にこの派生データ型の実装を示す。

Listing 56: Force 型 (派生データ型 force_grav)

```

1  type, public, bind(c) :: force_grav !$fdps Force
2      !$fdps clear
3      type(fdps_f64vec) :: acc
4      real(kind=c_double) :: pot
5  end type force_grav

```

次に、密度計算用の Force 型である 派生データ型 force_dens について解説する。この派生データ型は、密度計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 57 に、この派生データ型の実装を示す。本サンプルコードの SPH 法では、smoothing length は固定ではなく、密度に応じて変化する。そのため、メンバ変数として smth を持つ。また、密度計算と同時に、 ∇h term および $(\nabla \cdot \mathbf{v})_i$ 、 $(\nabla \times \mathbf{v})_i$ の計算を同時行うため、メンバ変数に gradh, divv, rotv を持つ。メンバ変数 flag は ρ_i と h_i を決定するイテレーション計算が収束したかどうかの結果を格納する変数である (詳細は、相互作用関数の節を参照のこと)。

Listing 57: Force 型 (派生データ型 force_dens)

```

1  type, public, bind(c) :: force_dens !$fdps Force
2      !$fdps clear smth=keep
3      integer(kind=c_int) :: flag
4      real(kind=c_double) :: dens
5      real(kind=c_double) :: smth
6      real(kind=c_double) :: gradh
7      real(kind=c_double) :: divv
8      type(fdps_f64vec) :: rotv
9  end type force_dens

```

最後に、圧力勾配加速度計算用の Force 型である 派生データ型 `force_hydro` について解説する。この派生データ型は、圧力勾配加速度計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 58 に、この派生データ型の実装を示す。

Listing 58: Force 型 (派生データ型 force_hydro)

```

1  type, public, bind(c) :: force_hydro !$fdps Force
2      !$fdps clear
3      type(fdps_f64vec) :: acc
4      real(kind=c_double) :: eng_dot
5      real(kind=c_double) :: ent_dot
6      real(kind=c_double) :: dt
7  end type force_hydro

```

7.1.4 相互作用関数

本サンプルコードで使用する相互作用関数はすべて `user_defined.F90` に実装されている。全部で 4 種類あり、重力計算 (粒子間相互作用及び粒子-超粒子間相互作用)、密度計算、圧力勾配加速度計算に使用される。以下、順に説明していく。

7.1.4.1 重力計算

重力計算用の相互作用関数は サブルーチン `calc_gravity_ep_ep` 及び `calc_gravity_ep_sp` として実装されている。Listing 59 にこれらの実装を示す。実装は第 3-4 節で紹介した N 体計算サンプルコードのものとほぼ同じであり、詳細はそちらを参照されたい。

Listing 59: 相互作用関数 (重力計算用)

```

1  #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
2      subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
3  #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
4      use omp_lib
5  #endif
6      use phantom_grape_g5_x86
7      implicit none
8      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
9      type(ep_grav), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
10     type(ep_grav), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j

```

```

11     type(force_grav), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
12     !* Local variables
13     integer(c_int) :: i,j
14     integer(c_int) :: npipe,njpipe,devid
15     real(c_double), dimension(3,n_ip) :: xi,ai
16     real(c_double), dimension(n_ip) :: pi
17     real(c_double), dimension(3,n_jp) :: xj
18     real(c_double), dimension(n_jp) :: mj
19
20     npipe = n_ip
21     njpipe = n_jp
22     do i=1,n_ip
23         xi(1,i) = ep_i(i)%pos%x
24         xi(2,i) = ep_i(i)%pos%y
25         xi(3,i) = ep_i(i)%pos%z
26         ai(1,i) = 0.0d0
27         ai(2,i) = 0.0d0
28         ai(3,i) = 0.0d0
29         pi(i)   = 0.0d0
30     end do
31     do j=1,n_jp
32         xj(1,j) = ep_j(j)%pos%x
33         xj(2,j) = ep_j(j)%pos%y
34         xj(3,j) = ep_j(j)%pos%z
35         mj(j)   = ep_j(j)%mass
36     end do
37     #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
38         devid = omp_get_thread_num()
39         ! [IMPORTANT NOTE]
40         !   The subroutine calc_gravity_ep_ep is called by a OpenMP thread
41         !   in the FDPS. This means that here is already in the parallel
42         !   region.
43         !   So, you can use omp_get_thread_num() without !$OMP parallel
44         !   directives.
45         !   If you use them, a nested parallel resions is made and the
46         !   gravity
47         !   calculation will not be performed correctly.
48     #else
49         devid = 0
50     #endif
51     call g5_set_xmjMC(devid, 0, n_jp, xj, mj)
52     call g5_set_nMC(devid, n_jp)
53     call g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, n_ip)
54     do i=1,n_ip
55         f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai(1,i)
56         f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai(2,i)
57         f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai(3,i)
58         f(i)%pot   = f(i)%pot   - pi(i)
59     end do
60     end subroutine calc_gravity_ep_ep
61
62     subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
63     #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
64         use omp_lib
65     #endif

```

```

63      use phantom_grape_g5_x86
64      implicit none
65      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
66      type(ep_grav), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
67      type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
68      type(force_grav), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
69      !* Local variables
70      integer(c_int) :: i,j
71      integer(c_int) :: npipe,njpipe,devid
72      real(c_double), dimension(3,n_ip) :: xi,ai
73      real(c_double), dimension(n_ip) :: pi
74      real(c_double), dimension(3,n_jp) :: xj
75      real(c_double), dimension(n_jp) :: mj
76
77      npipe = n_ip
78      njpipe = n_jp
79      do i=1,n_ip
80          xi(1,i) = ep_i(i)%pos%x
81          xi(2,i) = ep_i(i)%pos%y
82          xi(3,i) = ep_i(i)%pos%z
83          ai(1,i) = 0.0d0
84          ai(2,i) = 0.0d0
85          ai(3,i) = 0.0d0
86          pi(i)   = 0.0d0
87      end do
88      do j=1,n_jp
89          xj(1,j) = ep_j(j)%pos%x
90          xj(2,j) = ep_j(j)%pos%y
91          xj(3,j) = ep_j(j)%pos%z
92          mj(j)   = ep_j(j)%mass
93      end do
94      #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
95          devid = omp_get_thread_num()
96          ! [IMPORTANT NOTE]
97          !   The subroutine calc_gravity_ep_sp is called by a OpenMP thread
98          !   in the FDPS. This means that here is already in the parallel
99          !   region.
100          !   So, you can use omp_get_thread_num() without !$OMP parallel
101          !   directives.
102          !   If you use them, a nested parallel resions is made and the
103          !   gravity
104          !   calculation will not be performed correctly.
105      #else
106          devid = 0
107      #endif
108      call g5_set_xmjMC(devid, 0, n_jp, xj, mj)
109      call g5_set_nMC(devid, n_jp)
110      call g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, n_ip)
111      do i=1,n_ip
112          f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai(1,i)
113          f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai(2,i)
114          f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai(3,i)
115          f(i)%pot   = f(i)%pot   - pi(i)
116      end do
117  end subroutine calc_gravity_ep_sp

```



```

115 #else
116     subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
117         integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
118         type(ep_grav), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
119         type(ep_grav), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
120         type(force_grav), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
121         !* Local variables
122         integer(kind=c_int) :: i,j
123         real(kind=c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
124         type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
125         !* Compute force
126         eps2 = eps_grav * eps_grav
127         do i=1,n_ip
128             xi%x = ep_i(i)%pos%x
129             xi%y = ep_i(i)%pos%y
130             xi%z = ep_i(i)%pos%z
131             ai%x = 0.0d0
132             ai%y = 0.0d0
133             ai%z = 0.0d0
134             poti = 0.0d0
135             do j=1,n_jp
136                 rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
137                 rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
138                 rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
139                 r3_inv = rij%x*rij%x &
140                     + rij%y*rij%y &
141                     + rij%z*rij%z &
142                     + eps2
143                 r_inv = 1.0d0/dsqrt(r3_inv)
144                 r3_inv = r_inv * r_inv
145                 r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
146                 r3_inv = r3_inv * r_inv
147                 ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
148                 ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
149                 ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
150                 poti = poti - r_inv
151             end do
152             f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai%x
153             f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai%y
154             f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai%z
155             f(i)%pot = f(i)%pot + poti
156         end do
157     end subroutine calc_gravity_ep_ep
158
159     subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
160         integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
161         type(ep_grav), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
162         type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
163         type(force_grav), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
164         !* Local variables
165         integer(kind=c_int) :: i,j
166         real(kind=c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
167         type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
168         !* Compute force
169         eps2 = eps_grav * eps_grav

```



```

170      do i=1,n_ip
171          xi%x = ep_i(i)%pos%x
172          xi%y = ep_i(i)%pos%y
173          xi%z = ep_i(i)%pos%z
174          ai%x = 0.0d0
175          ai%y = 0.0d0
176          ai%z = 0.0d0
177          poti = 0.0d0
178          do j=1,n_jp
179              rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
180              rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
181              rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
182              r3_inv = rij%x*rij%x &
183                      + rij%y*rij%y &
184                      + rij%z*rij%z &
185                      + eps2
186              r_inv = 1.0d0/dsqrt(r3_inv)
187              r3_inv = r_inv * r_inv
188              r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
189              r3_inv = r3_inv * r_inv
190              ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
191              ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
192              ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
193              poti = poti - r_inv
194          end do
195          f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai%x
196          f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai%y
197          f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai%z
198          f(i)%pot = f(i)%pot + poti
199      end do
200  end subroutine calc_gravity_ep_sp
201 #endif

```

7.1.4.2 密度計算

密度計算用の相互作用関数は サブルーチン `calc_density` として実装されている。Listing 60 に、実装を示す。実装はマクロ `ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH` が定義されているかどうかで分かれる。このマクロが未定義の場合には、固定長カーネルコードとなり、実装は第 3-4 節で紹介した SPH サンプルコードとほぼ同じであるので、そちらを参照されたい。以下、このマクロが定義されている場合の実装について解説する。

第 7.1.2 節で説明したように、密度 ρ_i と smoothing length h_i は式 (14) と式 (9) を無矛盾に解いて決定する必要がある。これには 2 つの方程式を反復的に解く必要がある。このイテレーションを無限 `do-endo` ループの中で行っている。本サンプルコードでは ρ_i と h_i の計算を効率的に行うため、smoothing length の値を定数 `scf_smth` 倍してから密度計算を実行している。このため、定数倍する前の smoothing length の値を $h_{i,0}$ とすると、このイテレーションの間に h_i を 0 から $h_{\max, \text{alw}} \equiv \text{scf_smth} \times h_{i,0}$ までの間なら変化させてもよいことになる。なぜなら、 j 粒子リストの取りこぼしは発生しないからである。逆にこの範囲でイテレーションが収束しなければ、求めたい h_i は $h_{\max, \text{alw}}$ よりも大きいということになり、既存

の j 粒子リストでは ρ_i と h_i を決定できないということになる。この場合、 $h_{i,0}$ を大きくした上で、密度計算をやり直す必要がある。この外側のイテレーションは `f_main.F90` のサブルーチン `calc_density_wrapper` で行われている。このサブルーチンの詳細は第 7.1.5 節で行う。

無限 `do-endo` ループの後には、 ∇h term の計算、 $(\nabla \cdot v)_i$ 及び $(\nabla \times v)_i$ の計算を行っている。

Listing 60: 相互作用関数 (密度計算用)

```

1  subroutine calc_density(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
2      integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
3      type(ep_hydro), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
4      type(ep_hydro), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
5      type(force_dens), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
6      !* Local parameters
7      real(kind=c_double), parameter :: eps=1.0d-6
8      !* Local variables
9      integer(kind=c_int) :: i,j
10     integer(kind=c_int) :: n_unchanged
11     real(kind=c_double) :: M,M_trgt
12     real(kind=c_double) :: dens,drho_dh
13     real(kind=c_double) :: h,h_max_alw,h_L,h_U,dh,dh_prev
14     type(fdps_f64vec) :: dr,dv,gradW_i
15
16     #if defined(ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH)
17         real(kind=c_double), dimension(n_jp) :: mj,rij
18         M_trgt = mass_avg * N_neighbor
19         do i=1,n_ip
20             dens = 0.0d0
21             h_max_alw = ep_i(i)%smth ! maximum allowance
22             h = h_max_alw / SCF_smth
23             ! Note that we increase smth by a factor of scf_smth
24             ! before calling calc_density().
25             h_L = 0.0d0
26             h_U = h_max_alw
27             dh_prev = 0.0d0
28             n_unchanged = 0
29             ! Software cache
30             do j=1,n_jp
31                 mj(j) = ep_j(j)%mass
32                 dr%x = ep_i(i)%pos%x - ep_j(j)%pos%x
33                 dr%y = ep_i(i)%pos%y - ep_j(j)%pos%y
34                 dr%z = ep_i(i)%pos%z - ep_j(j)%pos%z
35                 rij(j) = dsqrt(dr%x * dr%x &
36                             +dr%y * dr%y &
37                             +dr%z * dr%z)
38             end do
39             iteration_loop: do
40                 ! Calculate density
41                 dens = 0.0d0
42                 do j=1,n_jp
43                     dens = dens + mj(j) * W(rij(j), h)
44                 end do
45                 ! Check if the current value of the smoohting length

```

```

        satisfies
46      ! Eq.(5) in Springel (2005).
47      M = 4.0d0 * pi * h * h * dens / 3.0d0
48      if ((h < h_max_alw) .and. (dabs(M/M_trgt - 1.0d0) < eps))
          then
49          ! In this case, Eq.(5) holds within a specified accuracy
          .
50          f(i)%flag = 1
51          f(i)%dens = dens
52          f(i)%smth = h
53          exit iteration_loop
54      end if
55      if (((h == h_max_alw) .and. (M < M_trgt)) .or. (n_unchanged
          == 4)) then
56          ! In this case, we skip this particle forcibly.
57          ! In order to determine consistently the density
58          ! and the smoothing length for this particle,
59          ! we must re-perform calcForceAllAndWriteBack().
60          f(i)%flag = 0
61          f(i)%dens = dens
62          f(i)%smth = h_max_alw
63          exit iteration_loop
64      end if
65      ! Update h_L & h_U
66      if (M < M_trgt) then
67          if (h_L < h) h_L = h
68      else if (M_trgt < M) then
69          if (h < h_U) h_U = h
70      end if
71      dh = h_U - h_L
72      if (dh == dh_prev) then
73          n_unchanged = n_unchanged + 1
74      else
75          dh_prev = dh
76          n_unchanged = 0
77      end if
78      ! Update smoothing length
79      h = ((3.0d0 * M_trgt)/(4.0d0 * pi * dens))*(1.0d0/3.0d0)
80      if ((h <= h_L) .or. (h == h_U)) then
81          ! In this case, we switch to the bisection search.
82          ! The inclusion of '=' in the if statement is very
83          ! important to escape a limit cycle.
84          h = 0.5d0 * (h_L + h_U)
85      else if (h_U < h) then
86          h = h_U
87      end if
88      end do iteration_loop
89      ! Calculate grad-h term
90      if (f(i)%flag == 1) then
91          drho_dh = 0.0d0
92          do j=1,n_jp
93              drho_dh = drho_dh + mj(j) * dWdh(rij(j), h)
94          end do
95          f(i)%gradh = 1.0d0 / (1.0d0 + (h * drho_dh) / (3.0d0 * dens)
          )

```

```

96         else
97             f(i)%gradh = 1.0d0 ! dummy value
98         end if
99         ! Compute \div v & \rot v for Balsara switch
100 #if defined(USE_BALSARA_SWITCH)
101     do j=1,n_jp
102         dr%x = ep_i(i)%pos%x - ep_j(j)%pos%x
103         dr%y = ep_i(i)%pos%y - ep_j(j)%pos%y
104         dr%z = ep_i(i)%pos%z - ep_j(j)%pos%z
105         dv%x = ep_i(i)%vel%x - ep_j(j)%vel%x
106         dv%y = ep_i(i)%vel%y - ep_j(j)%vel%y
107         dv%z = ep_i(i)%vel%z - ep_j(j)%vel%z
108         gradW_i = gradW(dr, f(i)%smth)
109         f(i)%divv = f(i)%divv - mj(j) * (dv%x * gradW_i%x &
110                                         +dv%y * gradW_i%y &
111                                         +dv%z * gradW_i%z)
112         f(i)%rotv%x = f(i)%rotv%x - mj(j) * (dv%y * gradW_i%z - dv%z
113                                         * gradW_i%y)
114         f(i)%rotv%y = f(i)%rotv%y - mj(j) * (dv%z * gradW_i%x - dv%x
115                                         * gradW_i%z)
116         f(i)%rotv%z = f(i)%rotv%z - mj(j) * (dv%x * gradW_i%y - dv%y
117                                         * gradW_i%x)
118     end do
119     f(i)%divv = f(i)%divv / f(i)%dens
120     f(i)%rotv%x = f(i)%rotv%x / f(i)%dens
121     f(i)%rotv%y = f(i)%rotv%y / f(i)%dens
122     f(i)%rotv%z = f(i)%rotv%z / f(i)%dens
123 #endif
124 end do
125 #else
126 double precision :: mj,rij
127 do i=1,n_ip
128     f(i)%dens = 0.0d0
129     do j=1,n_jp
130         dr%x = ep_j(j)%pos%x - ep_i(i)%pos%x
131         dr%y = ep_j(j)%pos%y - ep_i(i)%pos%y
132         dr%z = ep_j(j)%pos%z - ep_i(i)%pos%z
133         rij = dsqrt(dr%x * dr%x &
134                   +dr%y * dr%y &
135                   +dr%z * dr%z)
136         f(i)%dens = f(i)%dens &
137                   + ep_j(j)%mass * W(rij,ep_i(i)%smth)
138     end do
139     f(i)%smth = ep_i(i)%smth
140     f(i)%gradh = 1.0d0
141     ! Compute \div v & \rot v for Balsara switch
142 #if defined(USE_BALSARA_SWITCH)
143     do j=1,n_jp
144         mj = ep_j(j)%mass
145         dr%x = ep_i(i)%pos%x - ep_j(j)%pos%x
146         dr%y = ep_i(i)%pos%y - ep_j(j)%pos%y
147         dr%z = ep_i(i)%pos%z - ep_j(j)%pos%z
148         dv%x = ep_i(i)%vel%x - ep_j(j)%vel%x
149         dv%y = ep_i(i)%vel%y - ep_j(j)%vel%y
150         dv%z = ep_i(i)%vel%z - ep_j(j)%vel%z

```

```

148      gradW_i = gradW(dr, f(i)%smth)
149      f(i)%divv = f(i)%divv - mj * (dv%x * gradW_i%x &
150                                   +dv%y * gradW_i%y &
151                                   +dv%z * gradW_i%z)
152      f(i)%rotr%x = f(i)%rotr%x - mj * (dv%y * gradW_i%z - dv%z *
153                                   gradW_i%y)
154      f(i)%rotr%y = f(i)%rotr%y - mj * (dv%z * gradW_i%x - dv%x *
155                                   gradW_i%z)
156      f(i)%rotr%z = f(i)%rotr%z - mj * (dv%x * gradW_i%y - dv%y *
157                                   gradW_i%x)
158
159      end do
160      f(i)%divv = f(i)%divv / f(i)%dens
161      f(i)%rotr%x = f(i)%rotr%x / f(i)%dens
162      f(i)%rotr%y = f(i)%rotr%y / f(i)%dens
163      f(i)%rotr%z = f(i)%rotr%z / f(i)%dens
164
165 #endif
166 end do
167 #endif

```

7.1.4.3 圧力勾配加速度計算

圧力勾配加速度用の相互作用関数は サブルーチン `calc_hydro_force` として実装されている。Listing 61 に、実装を示す。このサブルーチンでは、式 (10)、(12)、(13) の右辺の計算、及び、Springel [2005, MNRAS, 364, 1105] の式 (16) に従って `dt` の計算を行っている (`dt` については 派生データ型 `fp_sph` の説明を参照のこと)。

Listing 61: 相互作用関数 (圧力勾配加速度計算用)

```

1  !**** Interaction function
2  subroutine calc_hydro_force(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
3      integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
4      type(ep_hydro), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
5      type(ep_hydro), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
6      type(force_hydro), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
7      !* Local variables
8      integer(kind=c_int) :: i,j
9      real(kind=c_double) :: mass_i,mass_j,smth_i,smth_j, &
10                          dens_i,dens_j,pres_i,pres_j, &
11                          gradh_i,gradh_j,balsw_i,balsw_j, &
12                          snds_i,snds_j
13      real(kind=c_double) :: povrho2_i,povrho2_j, &
14                          v_sig_max,dr_dv,w_ij,v_sig,AV
15      type(fdps_f64vec) :: pos_i,pos_j,vel_i,vel_j, &
16                          dr,dv,gradW_i,gradW_j,gradW_ij
17      do i=1,n_ip
18          !* Zero-clear
19          v_sig_max = 0.0d0
20          !* Extract i-particle info.
21          pos_i = ep_i(i)%pos
22          vel_i = ep_i(i)%vel
23          mass_i = ep_i(i)%mass
24          smth_i = ep_i(i)%smth
25          dens_i = ep_i(i)%dens

```

```

26     pres_i = ep_i(i)%pres
27     gradh_i = ep_i(i)%gradh
28     balsw_i = ep_i(i)%balsw
29     snds_i = ep_i(i)%snds
30     povrho2_i = pres_i/(dens_i*dens_i)
31     do j=1,n_jp
32         !* Extract j-particle info.
33         pos_j%x = ep_j(j)%pos%x
34         pos_j%y = ep_j(j)%pos%y
35         pos_j%z = ep_j(j)%pos%z
36         vel_j%x = ep_j(j)%vel%x
37         vel_j%y = ep_j(j)%vel%y
38         vel_j%z = ep_j(j)%vel%z
39         mass_j = ep_j(j)%mass
40         smth_j = ep_j(j)%smth
41         dens_j = ep_j(j)%dens
42         pres_j = ep_j(j)%pres
43         gradh_j = ep_j(j)%gradh
44         balsw_j = ep_j(j)%balsw
45         snds_j = ep_j(j)%snds
46         povrho2_j = pres_j/(dens_j*dens_j)
47         !* Compute dr & dv
48         dr%x = pos_i%x - pos_j%x
49         dr%y = pos_i%y - pos_j%y
50         dr%z = pos_i%z - pos_j%z
51         dv%x = vel_i%x - vel_j%x
52         dv%y = vel_i%y - vel_j%y
53         dv%z = vel_i%z - vel_j%z
54         !* Compute the signal velocity
55         dr_dv = dr%x * dv%x + dr%y * dv%y + dr%z * dv%z
56         if (dr_dv < 0.0d0) then
57             w_ij = dr_dv / sqrt(dr%x * dr%x + dr%y * dr%y + dr%z * dr%z
58                 )
59         else
60             w_ij = 0.0d0
61         end if
62         v_sig = snds_i + snds_j - 3.0d0 * w_ij
63         v_sig_max = max(v_sig_max, v_sig)
64         !* Compute the artificial viscosity
65         AV = - 0.5d0*v_sig*w_ij / (0.5d0*(dens_i+dens_j)) * 0.5d0*(
66             balsw_i+balsw_j)
67         !* Compute the average of the gradients of kernel
68         gradW_i = gradW(dr,smth_i)
69         gradW_j = gradW(dr,smth_j)
70         gradW_ij%x = 0.5d0 * (gradW_i%x + gradW_j%x)
71         gradW_ij%y = 0.5d0 * (gradW_i%y + gradW_j%y)
72         gradW_ij%z = 0.5d0 * (gradW_i%z + gradW_j%z)
73         !* Compute the acceleration and the heating rate
74         f(i)%acc%x = f(i)%acc%x - mass_j*(gradh_i * povrho2_i *
75             gradW_i%x &
76                 +gradh_j * povrho2_j *
77                 gradW_j%x &
78                 +AV * gradW_ij%x)
79         f(i)%acc%y = f(i)%acc%y - mass_j*(gradh_i * povrho2_i *
80             gradW_i%y &

```

```

76                                     +gradh_j * povrho2_j *
77                                     gradW_j%y &
78 f(i)%acc%z = f(i)%acc%z - mass_j*(gradh_i * povrho2_i *
79                                     gradW_i%z &
80                                     +gradh_j * povrho2_j *
81                                     gradW_j%z &
82                                     +AV * gradW_ij%z)
83                                     +gradh_j * povrho2_j *
84                                     gradW_j%z &
85                                     +AV * gradW_ij%z)
86                                     &
87                                     + mass_j * gradh_i * povrho2_i * (dv%x * gradW_i%
88                                     x &
89                                     +dv%y * gradW_i%
90                                     y &
91                                     +dv%z * gradW_i%
92                                     z) &
93                                     + mass_j * 0.5d0 * AV * (dv%x * gradW_ij%x
94                                     &
95                                     +dv%y * gradW_ij%y
96                                     &
97                                     +dv%z * gradW_ij%z)
98 f(i)%ent_dot = f(i)%ent_dot
99                                     &
100                                    + 0.5 * mass_j * AV * (dv%x * gradW_ij%x &
101                                    +dv%y * gradW_ij%y &
102                                    +dv%z * gradW_ij%z)
103 end do
104 f(i)%ent_dot = f(i)%ent_dot
105                                     &
106                                     * (specific_heat_ratio - 1.0d0) &
107                                     / dens_i**(specific_heat_ratio - 1.0d0)
108 f(i)%dt = CFL_hydro*2.0d0*smth_i/v_sig_max
109 end do

```

7.1.5 プログラム本体

本節では、主に `f_main.F90` に実装されたサンプルコード本体について解説を行う。詳細な説明に入る前に、サンプルコードの内容と全体構造について説明を与える。7.1 節冒頭で述べたように、このサンプルコードでは円盤銀河の N 体/SPH シミュレーションを行うものであるが、初期条件としては円盤銀河の他、簡単なテスト計算用の初期条件も用意されている。具体的に以下の 4 つの場合に対応している:

- (a) 円盤銀河用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に `-DINITIAL_CONDITION=0` が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.F90` のサブルーチン `galaxy_IC` で行われる。ダークマターと星の分布は事前に MAGI で作成されたファイルを読み込んで設定される。一方、ガスの初期分布はこのサブルーチン内部で生成される。デフォルトでは粒子数 2^{18} で exponential disk ($M = 10^{10} M_{\odot}$, $R_s = 7$ kpc [scale radius], $R_t = 12.5$ kpc [truncation radius], $z_d = 0.4$ kpc [scale height], $z_t = 1$ kpc [truncation height]) が生成される。
- (b) Cold collapse 問題用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に `-DINITIAL_CONDITION=1` が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.F90` のサブルーチン

cold_collapse_test_IC で行われる。

- (c) Evrard test ([Evrard \[1988,MNRAS,235,911\]](#) の第 3.3 節) 用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に `-DINITIAL_CONDITION=2` が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.F90` のサブルーチン `Evrard_test_IC` で行われる。作成方法は 2 つあり、サブルーチンの最後の引数の値を手動で 0 か 1 にして指定する。0 の場合、格子状に並んだ SPH 粒子から Evrard 球の密度分布を作成する。1 の場合、ガラス状に分布した SPH 粒子から Evrard 球の密度分布を作成する。1 を選択するためには、事前に次項で説明するモードで SPH 粒子のデータを作成しておく必要がある。
- (d) $[-1, 1]^3$ の立方体中に一様密度のガラス状の SPH 粒子分布を作成するための初期条件/動作モード。この初期条件はコンパイルオプション時に `-DINITIAL_CONDITION=3` が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.F90` のサブルーチン `make_glass_IC` で行われる。

コード全体の構造は以下になっている:

- (1) FDPS で使用するオブジェクトの生成と初期化
- (2) (必要であれば) Phantom-GRAPe ライブラリの初期化
- (3) 初期条件ファイルの読み込み、或いは、初期条件の作成
- (4) 終了時刻まで粒子の運動を計算

以下で、個々について詳しく説明を行う。

7.1.5.1 fdps_controller 型オブジェクトの生成

ユーザは FDPS の API を使用するために、`FDPS_controller` 型オブジェクトを生成しなければならない。本サンプルコードでは、`FDPS_controller` 型オブジェクト `fdps_ctrl` をメインルーチンで生成している:

Listing 62: `fdps_controller` 型オブジェクトの生成

```

1  subroutine f_main()
2      use fdps_module
3      implicit none
4      !* Local variables
5      type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
6
7      ! Do something
8
9  end subroutine f_main

```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから必要な部分だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。上記の理由から、以下の説明において、FDPS の API はこのオブジェクトのメンバ関数として呼び出されていることに注意されたい。

7.1.5.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メインルーチンに記述する。

Listing 63: FDPS の開始

```
1 call fdps_ctrl%ps_initialize();
```

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メインルーチンの最後に次のように記述する。

Listing 64: FDPS の終了

```
1 call fdps_ctrl%ps_finalize();
```

7.1.5.3 オブジェクトの生成と初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

7.1.5.3.1 粒子群オブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、 N 体粒子と SPH 粒子のデータを異なる粒子群オブジェクトを用いて管理する。2つの整数 `psys_num_nbody` と `psys_num_sph` は、それぞれ、 N 体粒子と SPH 粒子の粒子群オブジェクトの識別番号を格納する変数である。これら2つの整数を使い、粒子群オブジェクトを生成・初期化を以下のように行っている。

Listing 65: 粒子群オブジェクトの生成・初期化

```
1 call fdps_ctrl%create_psys(psys_num_nbody, 'fp_nbody')
2 call fdps_ctrl%init_psys(psys_num_nbody)
3 call fdps_ctrl%create_psys(psys_num_sph, 'fp_sph')
4 call fdps_ctrl%init_psys(psys_num_sph)
```

7.1.5.3.2 領域情報オブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、計算領域の分割を、 N 体粒子と SPH 粒子を合わせた粒子全体が等分割されるように行うこととする。この場合、必要な領域情報オブジェクトは1つである。したがって、本コードでは領域情報オブジェクトの識別番号を格納する整数変数 `dinfo_num` を用意し、それを用いて生成・初期化を次のように行っている。

Listing 66: 領域情報オブジェクトの生成・初期化

```
1 call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
2 call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num, coef_ema)
```

7.1.5.3.3 ツリーオブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、重力計算用、密度計算、圧力勾配加速度計算のそれぞれに1つずつツリーを用意している。ツリーオブジェクトの初期化の際には、API `init_tree` の第2

引数に計算で使用する大雑把な粒子数を渡す必要がある。重力計算用のツリーオブジェクト (変数 `tree_num_grav` を介して制御される) では、ローカル粒子数の3倍の値を渡している。一方、密度計算と圧力勾配加速度計算に使用されるツリーオブジェクト (それぞれ変数 `tree_num_dens` と `tree_num_hydro` を介して制御される) では、ローカルの SPH 粒子数の3倍の値を渡している。

Listing 67: ツリーオブジェクトの生成・初期化

```

1  nptcl_loc_sph   = max(fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num_sph),1)
2  nptcl_loc_nbody = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num_nbody)
3  nptcl_loc_all   = nptcl_loc_nbody + nptcl_loc_sph
4  !** tree for gravity calculation
5  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_grav, &
6                               "Long,force_grav,ep_grav,ep_grav,Monopole")
7  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_grav, 3*nptcl_loc_all, theta, &
8                               n_leaf_limit, n_group_limit)
9  !** tree for the density calculation
10 call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_dens, &
11                              "Short,force_dens,ep_hydro,ep_hydro,Gather")
12 call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_dens, 3*nptcl_loc_sph, theta, &
13                              n_leaf_limit, n_group_limit)
14
15 !** tree for the hydrodynamic force calculation
16 call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_hydro, &
17                              "Short,force_hydro,ep_hydro,ep_hydro,
18                               Symmetry")
19 call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_hydro, 3*nptcl_loc_sph, theta, &
20                              n_leaf_limit, n_group_limit)

```

7.1.5.4 初期条件の設定

初期条件の設定は サブルーチン `setup_IC` で行われる。このサブルーチンはマクロ `INITIAL_CONDITION` の値に応じて、内部でさらに別のサブルーチンを呼び出しており、呼び出されるサブルーチンとマクロの値の対応は、既に述べた通りである。引数の `time_dump`, `dt_dump`, `time_end` は、データ出力の最初の時刻、出力時間間隔、シミュレーション終了時間を表す変数であり、個々の初期条件作成関数の中で設定すべきものである。また、境界条件、重力ソフトニングの値 (`eps_grav`)、系に許される最大の時間刻み (`dt_max`) も設定する必要がある (`dt_max` に関しては必ずしも設定する必要はない)。

Listing 68: 初期条件の設定

```

1  call setup_IC(psys_num_nbody, psys_num_sph, dinfo_num, &
2               time_dump, dt_dump, time_end)

```

以下、円盤銀河の初期条件を設定する サブルーチン `galaxy_IC` について、留意事項を述べておく。

- MAGI が作成する粒子データは MAGI のコード内単位系で出力される。単位系の情報は MAGI を実行したときに出力されるファイル `doc/unit.txt` に記述されている。こ

のファイルに記載された単位質量、単位長さ、単位時間の値と、定数 `magi_unit.mass`, `magi_unit.leng`, `magi_unit.time` は一致させなければならない。

- 関数が読み込むファイルは `./magi_data/dat/Galaxy.tipsy` である。別なファイルを読み込ませたい場合、手動でソースコードを変更する必要がある。
- 関数が生成するガス分布は $R (\equiv \sqrt{x^2 + y^2})$ 方向と z 方向に exponential な密度分布を持つガス円盤である。それぞれの方向のスケール長が変数 `Rs`, `zd` で、分布を打ち切る距離は変数 `Rt`, `zt` である。
- 初期のガスの熱力学的状態はガス温度 `temp` と水素原子に対する平均分子量 `mu` を与えて指定する。コンパイル時マクロ `USE_ENTROPY` が定義済み/未定義に関わらず、粒子の熱力学的状態は単位質量あたりの内部エネルギーとして与える必要がある (`fp_sph` のメンバ変数 `eng`)。 `USE_ENTROPY` が定義済みの場合、メインルーチン `f_main()` で呼び出されている サブルーチン `set_entropy` によって、計算された密度と内部エネルギーの初期値から初期エントロピーが自動的に決定される。未定義の場合、ここで設定した `eng` の値がそのまま内部エネルギーの初期値となる。

7.1.5.5 領域分割の実行

複数の粒子種がある場合に、これらを合わせた粒子分布に基づいて領域分割を実行するには、領域情報オブジェクト用の2つのAPI `collect_sample_particle` と `decompose_domain` を併用する必要がある。まず、API `collect_sample_particle` でそれぞれの粒子群オブジェクトからサンプル粒子を集める。このとき、2種類目以降の粒子種に対する呼び出しでは、第3引数に `.false.` を指定する必要がある。この指定がないと、1種類目の粒子群オブジェクトの情報がクリアされてしまうからである。すべての粒子群オブジェクトに対して、このAPIの呼び出しが終わったら、API `decompose_domain` で領域分割を実行する。

Listing 69: 領域分割の実行

```
1 call fdps_ctrl%collect_sample_particle(dinfo_num, psys_num_nbody, clear)
2 call fdps_ctrl%collect_sample_particle(dinfo_num, psys_num_sph, unclear)
3 call fdps_ctrl%decompose_domain(dinfo_num)
```

7.1.5.6 粒子交換の実行

先程計算した領域情報に基づいてプロセス間の粒子の情報を交換するには、粒子群オブジェクト用API `exchange_particle` を使用する:

Listing 70: 粒子交換の実行

```
1 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num_nbody, dinfo_num)
2 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num_sph, dinfo_num)
```

7.1.5.7 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が完了したら、計算開始時の加速度を決定するため、相互作用計算を行う必要がある。以下に、本サンプルコードにおける初期条件作成後最初の相互作用計算の実装を示す。最初に重力計算をし、その後、密度計算・圧力勾配加速度計算を行っている。

Listing 71: 相互作用計算の実行

```

1  /** Gravity calculation
2  t_start = fdps_ctrl%get_wtime()
3  #if defined(ENABLE_GRAVITY_INTERACT)
4  call fdps_ctrl%set_particle_local_tree(tree_num_grav, psys_num_nbody)
5  call fdps_ctrl%set_particle_local_tree(tree_num_grav, psys_num_sph,
    unclear)
6  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_gravity_ep_ep)
7  pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_gravity_ep_sp)
8  call fdps_ctrl%calc_force_making_tree(tree_num_grav, &
9                                          pfunc_ep_ep, &
10                                         pfunc_ep_sp, &
11                                         dinfo_num)
12  nptcl_loc_nbody = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num_nbody)
13  call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num_nbody, ptcl_nbody)
14  do i=1,nptcl_loc_nbody
15      call fdps_ctrl%get_force(tree_num_grav, i, f_grav)
16      ptcl_nbody(i)%acc%x = f_grav%acc%x
17      ptcl_nbody(i)%acc%y = f_grav%acc%y
18      ptcl_nbody(i)%acc%z = f_grav%acc%z
19      ptcl_nbody(i)%pot    = f_grav%pot
20  end do
21  offset = nptcl_loc_nbody
22  nptcl_loc_sph = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num_sph)
23  call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num_sph, ptcl_sph)
24  do i=1,nptcl_loc_sph
25      call fdps_ctrl%get_force(tree_num_grav, i + offset, f_grav)
26      ptcl_sph(i)%acc_grav%x = f_grav%acc%x
27      ptcl_sph(i)%acc_grav%y = f_grav%acc%y
28      ptcl_sph(i)%acc_grav%z = f_grav%acc%z
29      ptcl_sph(i)%pot_grav    = f_grav%pot
30  end do
31  #endif
32  t_grav = fdps_ctrl%get_wtime() - t_start
33  /** SPH calculations
34  t_start = fdps_ctrl%get_wtime()
35  #if defined(ENABLE_HYDRO_INTERACT)
36  call calc_density_wrapper(psys_num_sph, dinfo_num, tree_num_dens)
37  call set_entropy(psys_num_sph)
38  call set_pressure(psys_num_sph)
39  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_hydro_force)
40  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_hydro, &
41                                                  pfunc_ep_ep, &
42                                                  psys_num_sph, &
43                                                  dinfo_num)
44  #endif
45  t_hydro = fdps_ctrl%get_wtime() - t_start

```

まず重力計算の方法について説明する。重力計算は、 N 体粒子と SPH 粒子の両方が関わる。このような複数の粒子種の間で 1 つの相互作用計算を行うには、ツリーオブジェクト用の API `set_particle_local_tree` と `calc_force_making_tree` を合わせて使用する必要がある。まず、各粒子群オブジェクトに対して、API `set_particle_local_tree` を使って、粒子情報をツリーオブジェクトに渡す。このとき、2 種類目以降の粒子群オブジェクトに対する呼び出しでは、第 3 引数に `.false.` を指定する必要がある。この指定が無いと、これまでツリーオブジェクトに渡した粒子情報がクリアされてしまうからである。重力計算に関係するすべての粒子群オブジェクトに対して、この API の呼び出しが完了したら、API `calc_force_making_tree` で相互作用計算を行う。相互作用計算の結果を取得するためには、API `get_force` を使う。この API は引数に整数 i を取り、API `set_particle_local_tree` で i 番目に読み込んだ粒子が受ける相互作用を返す。したがって、2 種類目以降の粒子種の相互作用の結果を取得する場合、適切にオフセット値を指定する必要があることに注意されたい。

次に密度計算と圧力勾配加速度計算について説明する。これらの計算は 1 粒子種しか関わらないため、本チュートリアルでこれまで使ってきた API `calc_force_all_and_write_back` が使用できる。圧力勾配加速度に関しては、サブルーチン `f_main` 内でこの API を直接呼び出している。一方、密度計算は、第 7.1.4 節でも述べた通り、 ρ_i と h_i のイテレーション計算が収束しなかったときのための対処が必要であり、これをサブルーチン `calc_density_wrapper` の中で行っている。実装は次のようになっている。実装はマクロ `ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH` が定義済みか未定義かで分岐しており、未定義の場合には固定長カーネルの SPH コードとなるので、単に、API `calc_force_all_and_write_back` を 1 回だけ実行している。一方、上記マクロが定義済みの場合、すべての粒子の ρ_i と h_i が無矛盾に決定されるまで、API `calc_force_all_and_write_back` を繰り返し実行する。各粒子が収束したかの情報は派生データ型 `fp_sph` のメンバ変数 `flag` に格納されており、値が 1 のときに収束していることを示す。`flag` が 1 を取る粒子数が全 SPH 粒子数に一致したときに計算を終わらせている。

Listing 72: サブルーチン `calc_density_wrapper` の実装

```

1  subroutine calc_density_wrapper(psys_num,dinfo_num,tree_num)
2      use fdps_vector
3      use fdps_module
4      use user_defined_types
5      implicit none
6      integer, intent(in) :: psys_num,dinfo_num,tree_num
7      !* Local variables
8      integer :: i,nptcl_loc,nptcl_glb
9      integer :: n_compl_loc,n_compl
10     type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
11     type(fp_sph), dimension(:), pointer :: ptcl
12     type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep
13
14     #if defined(ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH)
15         nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
16         nptcl_glb = fdps_ctrl%get_nptcl_glb(psys_num)
17         call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num, ptcl)
18         pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)

```

```

19  ! Determine the density and the smoothing length
20  ! so that Eq.(6) in Springel (2005) holds within a specified accuracy.
21  do
22      ! Increase smoothing length
23      do i=1,nptcl_loc
24          ptcl(i)%smth = scf_smth * ptcl(i)%smth
25      end do
26      ! Compute density, etc.
27      call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
28                                                    pfunc_ep_ep, &
29                                                    psys_num,    &
30                                                    dinfo_num)
31      ! Check convergence
32      n_compl_loc = 0; n_compl = 0
33      do i=1,nptcl_loc
34          if (ptcl(i)%flag == 1) n_compl_loc = n_compl_loc + 1
35      end do
36      call fdps_ctrl%get_sum(n_compl_loc, n_compl)
37      if (n_compl == nptcl_glb) exit
38  end do
39  !* Release the pointer
40  nullify(ptcl)
41 #else
42  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
43  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
44                                                    pfunc_ep_ep, &
45                                                    psys_num,    &
46                                                    dinfo_num)
47 #endif
48
49 end subroutine calc_density_wrapper

```

サブルーチン `set_entropy` は、初期条件作成後1回だけ呼び出されるサブルーチンで、エントロピーの初期値をセットする。式 (8) から、エントロピーを計算するには初期密度が必要である。そのため、サブルーチン `calc_density_wrapper` の後に配置されている。サブルーチン `set_entropy` では、計算された密度と u_i の初期値を使って、エントロピーをセットする。これ以降は、エントロピーが独立変数となる。

7.1.5.8 時間積分ループ

本サンプルコードでは、時間積分を Leapfrog 時間積分法によって行っている (この方法に関しては、第 4.1.3.5.4 節を参照されたい)。粒子位置を時間推進する $D(\cdot)$ オペレータはサブルーチン `full_drift`、粒子速度を時間推進する $K(\cdot)$ オペレータはサブルーチン `initial_kick`, `final_kick` として実装されている。

8 ユーザーサポート

FDPS を使用したコード開発に関する相談は [fdps-support<at>mail.jmlab.jp](mailto:fdps-support@mail.jmlab.jp) で受け付けています (<at>は@に変更お願い致します)。以下のような場合は各項目毎の対応をお願いします。

8.1 コンパイルできない場合

ユーザーには以下の情報提供をお願いします。

- コンパイル環境
- コンパイル時に出力されるエラーメッセージ
- ソースコード (可能ならば)

8.2 コードがうまく動かない場合

ユーザーには以下の情報提供をお願いします。

- 実行環境
- 実行時に出力されるエラーメッセージ
- ソースコード (可能ならば)

8.3 その他

思い通りの性能がでない場合やその他の相談なども、上のメールアドレスにお知らせください。

9 ライセンス

MIT ライセンスに準ずる。標準機能のみ使用する場合は、Iwasawa et al. (PASJ, 68, 54)、Namekata et al. (PASJ, 70, 70) の引用をお願いします。

拡張機能の Particle Mesh クラスは GreeM コード (開発者: 石山智明、似鳥啓吾) (Ishiyama, Fukushige & Makino 2009, Publications of the Astronomical Society of Japan, 61, 1319; Ishiyama, Nitadori & Makino, 2012 SC'12 Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking Storage and Analysis, No. 5) のモジュールを使用している。GreeM コードは Yoshikawa & Fukushige (2005, Publications of the Astronomical Society of Japan, 57, 849) で書かれたコードをベースとしている。Particle Mesh クラスを使用している場合は、上記 3 つの文献の引用をお願いします。

拡張機能のうち x86 版 Phantom-GRAPe を使用する場合は Tanikawa et al.(2012, New Astronomy, 17, 82) と Tanikawa et al.(2012, New Astronomy, 19, 74) の引用をお願いします。

Copyright (c) <2015-> <FDPS development team>

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the “Software”), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED “AS IS”, WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.