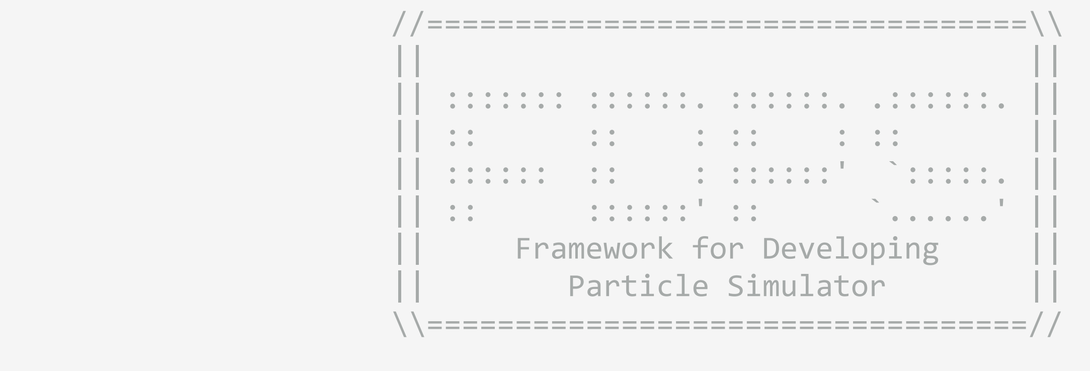
FDPS 講習会 C++編

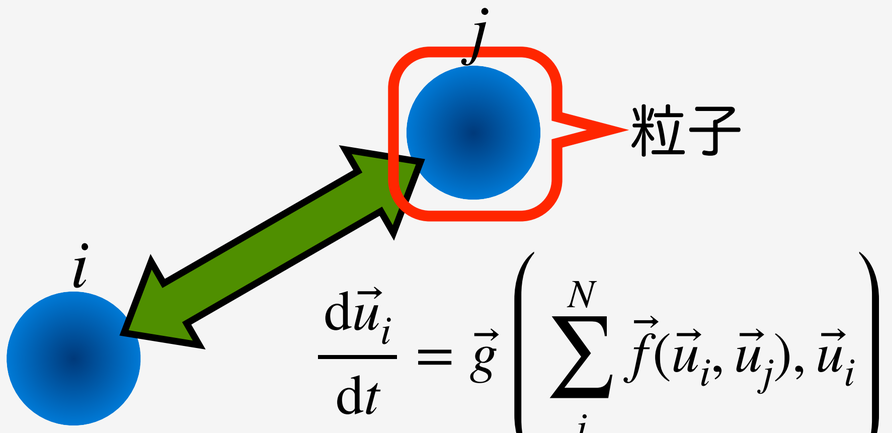
細野 七月



2023/09/08 FDPS講習会

FDPSが扱うもの

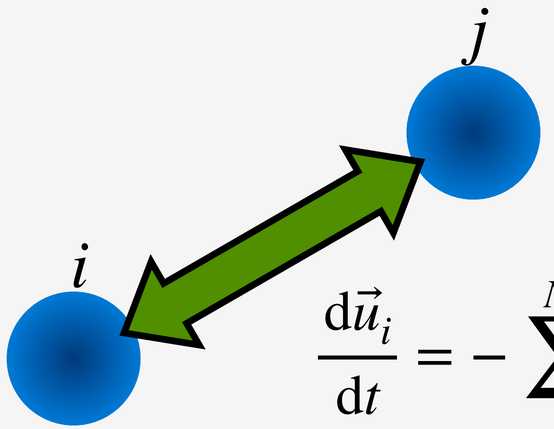
◆個々の要素(粒子)に作用する力が、粒子間相互作用の重ね合わせで記述できるもの



$$\frac{\mathrm{d}\vec{u}_i}{\mathrm{d}t} = \vec{g}\left(\sum_j^N \vec{f}(\vec{u}_i, \vec{u}_j), \vec{u}_i\right)$$

FDPSが扱うもの

◆個々の要素(粒子)に作用する力が、粒子間相互作用の重ね合わせで記述できるもの



$$\frac{\mathrm{d}\vec{u}_i}{\mathrm{d}t} = -\sum_j^N \frac{m_j}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^3}\left(\vec{x}_i - \vec{x}_j\right)$$

例：ニュートン重力

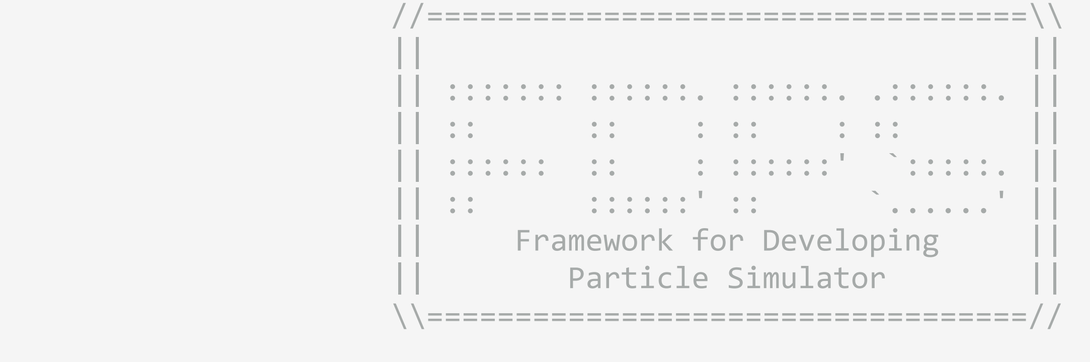
習得しておきたいC++の機能

◆FDPS用いるにおいて、知っておきたいC++の機能

- 名前空間
  - PS::F64 など
- クラス
  - メンバ変数とメンバ関数
- テンプレート
  - template <typename T> など
- 標準ライブラリ
  - std::vectorやstd::cout など

ただし今回のサンプルコードではI/O用のstd::coutなどが使われている程度なので省略

これ以上の事は基本的に必要ない。

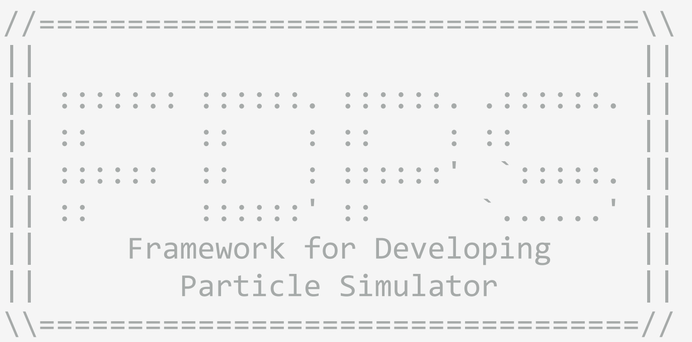


C++の機能：名前空間とは

◆グローバルな変数、関数、型名などの名前被りを防ぐ機能。
FDPSでは、F64vecといった型が存在している(後述)が、
これはFDPSが用意したPSという名前空間に含まれているので、
ユーザーが独自にF64vecという型を定義する事ができる。

◆名前空間へのアクセスは::演算子を用いる。

```
PS::F64vec v_FDPS; // FDPS組み込みベクトル型
F64vec v_user;     // ユーザー定義ベクトル型
```

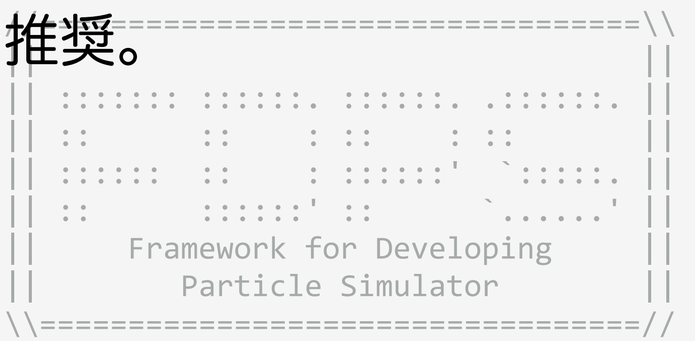


C++の機能：クラスとは

◆複数のデータをまとめたもの。
　Cで言うところの構造体。

◆クラスを使うと
　- 演算子を定義出来る。
　- サブルーチンに値を送るときに楽。
　- 後からデータ付け足すのも楽。

◆FDPSでは、ユーザーは粒子データをまとめた粒子クラスを記述する必要がある。
　また、2D/3Dベクトルをやりとりするのに便利なベクトルクラスが用意されている。
　位置や速度にはこのFDPSが用意したベクトルクラスを用いることを推奨。

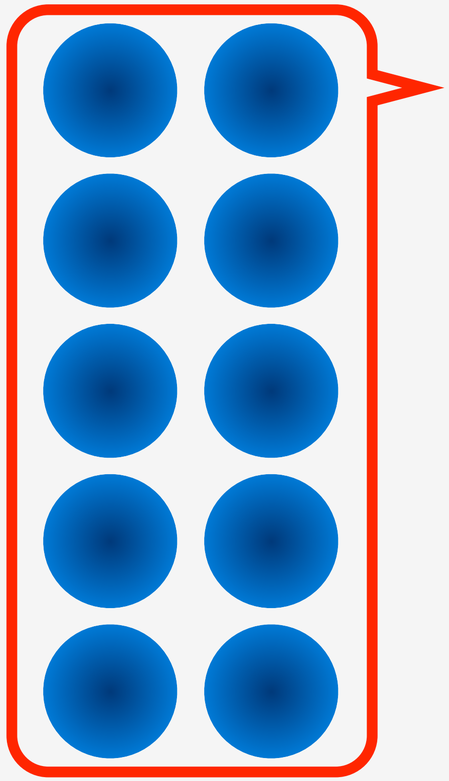


C++の機能：クラス例(ベクトルクラス)

◆数学演算子が既に定義済みのため、直感的に書ける。
C++のI/Oである、std::coutにわたす事も可能。

```
PS::F64vec v1 = PS::F64vec( 1.0,  2.5, -3.0);
PS::F64vec v2 = PS::F64vec(-2.0, -1.5,  2.0);

PS::F64vec v_add = v1 + v2;
PS::F64vec v_sub = v1 - v2;
PS::F64    inner = v1 * v2;
PS::F64vec outer = v1 ^ v2;

std::cout << v_add.x << std::endl;
std::cout << v_sub   << std::endl;
```

C++の機能：クラス例(粒子クラス)

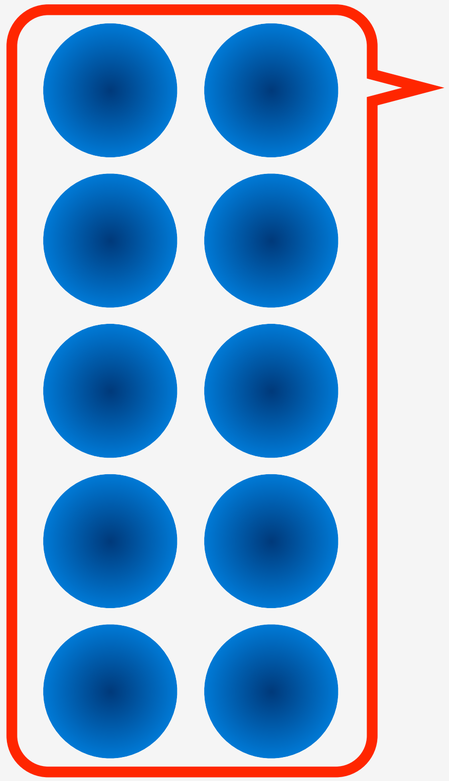


Nbody個の粒子

必要なデータは…

- mass
- position(x, y, z)
- velocity(x, y, z)
- acceleration(x, y, z)

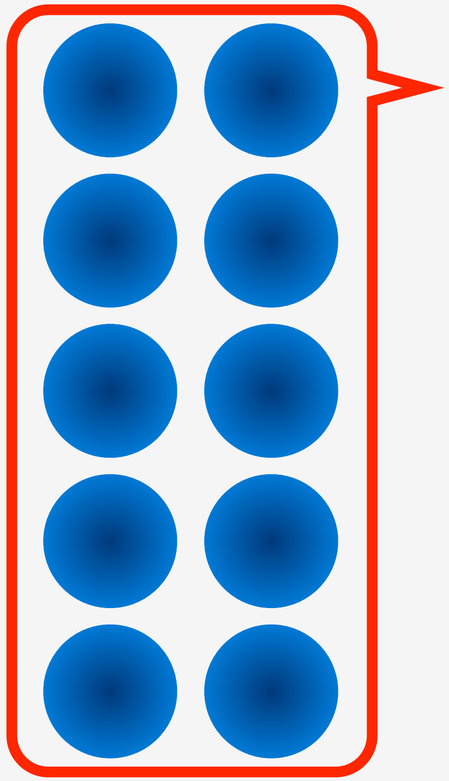
C++の機能：クラス例(粒子クラス)



Nbody個の粒子

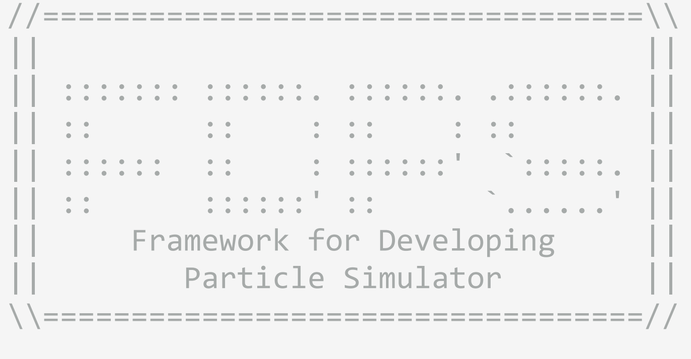
```
double mass[Nbody];
double position[Nbody][3];
double velocity[Nbody][3];
double acceleration[Nbody][3];
```

C++の機能：クラス例(粒子クラス)

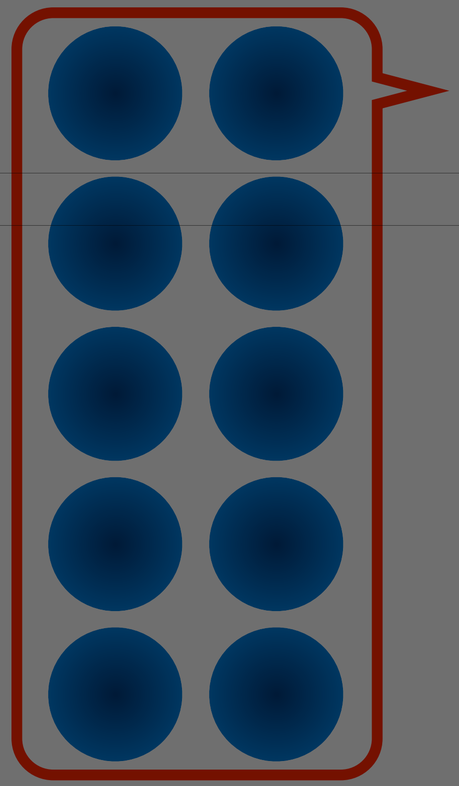


Nbody個の粒子

```
class FPGrav{
    double mass;
    double position[3];
    double velocity[3];
    double acceleration[3];
}body[Nbody];
```

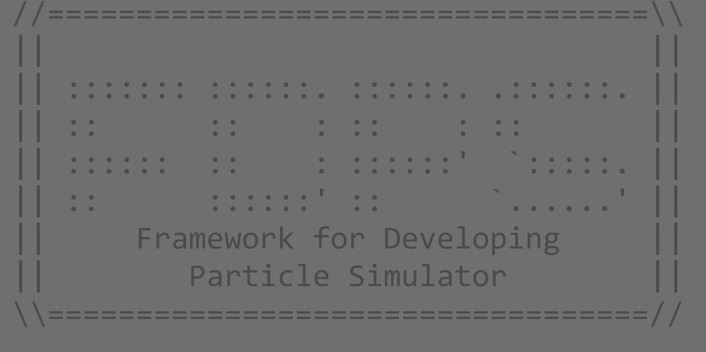


C++の機能：クラス例(粒子クラス)

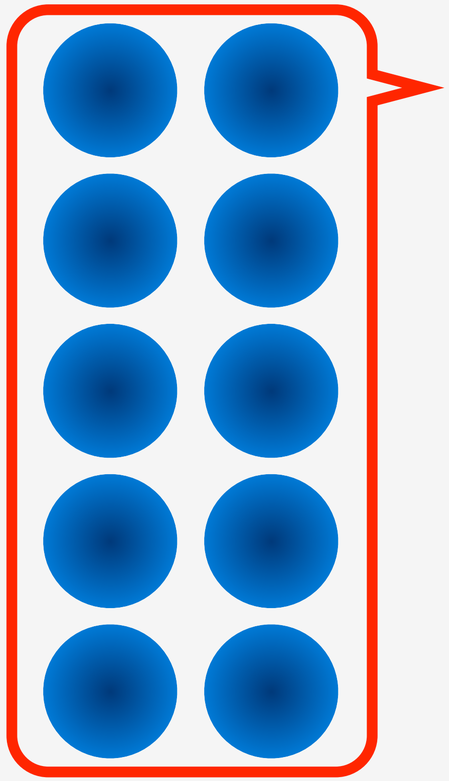


Nbody個の粒子

```
class FPGrav{
    double mass;
    double position[3];
    double velocity[3];
    double acceleration[3];
}body[Nbody];
```



C++の機能：クラス例(粒子クラス)



Nbody個の粒子

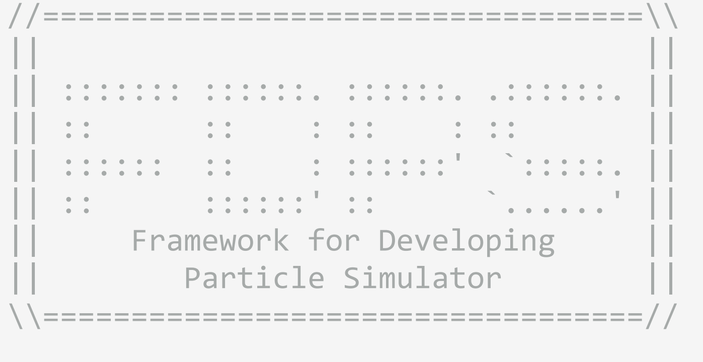
```
class FPGrav{
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec position;
    PS::F64vec velocity;
    PS::F64vec acceleration;
}body[Nbody];
```

クラス内クラスも可能

C++の機能：クラスのメリット

◆クラスを使うとサブルーチンに値を送るときに簡単に書ける。
　後からデータを付け足すのも楽。

```
void doSomething(double mass[],
                 double position[][3],
                 double velocity[][3],
                 double acceleration[][3]){
                 //do something here
}

void doSomething(FPGrav particle[]){
                 //do something here
}
```

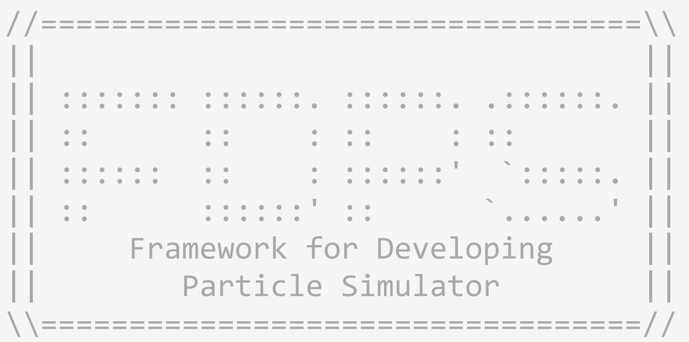


C++の機能：メンバ関数

◆クラス内の変数(メンバ変数)達に対して、何らかの処理を加えたい時に記述するもの。
アクセスには.演算子を用いる。

◆FDPSの場合、
FDPSとユーザーコード間でデータのやりとりをするためのメンバ関数を書く必要がある。

```
class FPGrav{
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec position;
    PS::F64vec velocity;
    PS::F64vec acceleration;
    PS::F64vec getPos(){
        return position;
    }
}body[Nbody];

PS::F64vec position = body[0].getPos();
```

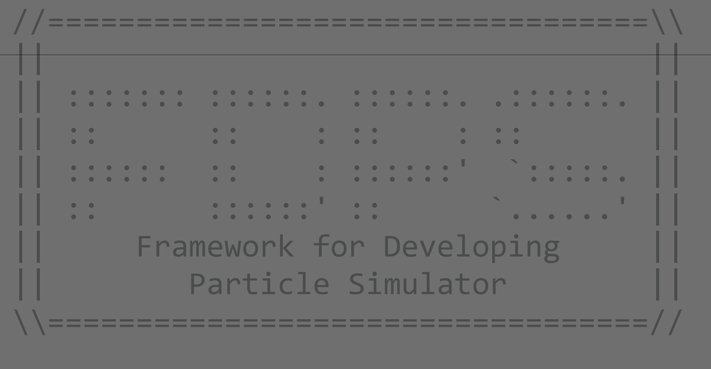


C++の機能：メンバ関数

◆クラス内の変数(メンバ変数)達に対して、何らかの処理を加えたい時に記述するもの。
アクセスには.演算子を用いる。

◆FDPSの場合、
FDPSとユーザーコード間でデータのやりとりをするためのメンバ関数を書く必要がある。

```
class FPGrav{
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec position;
    PS::F64vec velocity;
    PS::F64vec acceleration;
    PS::F64vec getPos(){
        return position;
    }
}body[Nbody];

PS::F64vec position = body[0].getPos();
```

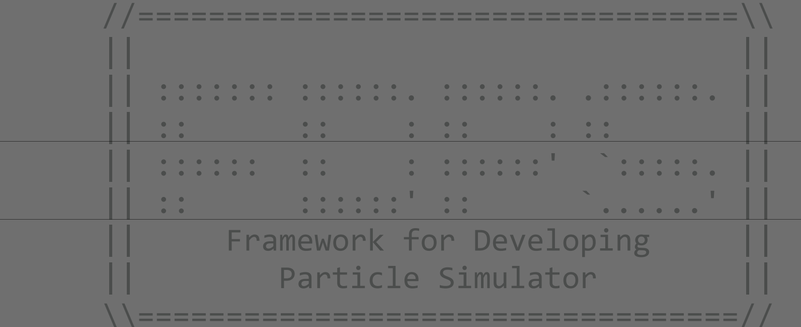


C++の機能：メンバ関数

◆クラス内の変数(メンバ変数)達に対して、何らかの処理を加えたい時に記述するもの。
アクセスには.演算子を用いる。

◆FDPSの場合、
FDPSとユーザーコード間でデータのやりとりをするためのメンバ関数を書く必要がある。

```
class FPGrav{
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec position;
    PS::F64vec velocity;
    PS::F64vec acceleration;
    PS::F64vec getPos(){
        return position;
    }
}body[Nbody];

PS::F64vec position = body[0].getPos();
```



C++の機能：テンプレート

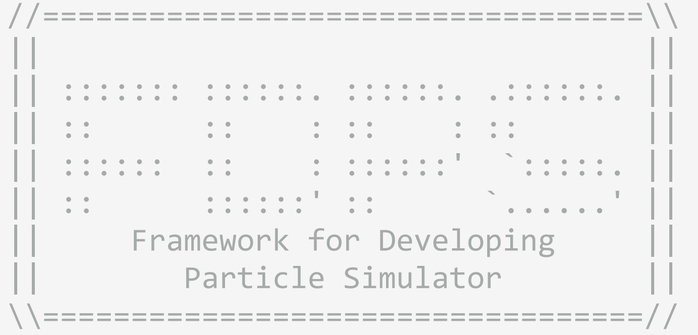
◆同じ処理を違う型に対して行いたい時に書くもの。
クラスをテンプレート化したクラステンプレートと、
関数をテンプレート化した関数テンプレートが存在する。

◆まずクラステンプレートについて解説し、その後関数テンプレートに関して解説する。

C++の機能：クラステンプレート

◆FDPSでは、粒子群クラステンプレートの< >の中に
粒子クラスを入れる事で、粒子群クラスの実体が作られる。
同様に、相互作用ツリークラスの実体も作られる。

```
//粒子群クラス
PS::ParticleSystem<FPGrav> system_grav;
//相互作用ツリークラス
PS::TreeForForceLong<FPGrav, FPGrav, FPGrav> Monopole tree_grav;
```



C++の機能：クラステンプレート

◆FDPSでは、粒子群クラステンプレートの< >の中に
粒子クラスを入れる事で、粒子群クラスの実体が作られる。
同様に、相互作用ツリークラスの実体も作られる。

```
//粒子群クラス
PS::ParticleSystem<FPGrav> system_grav;
//相互作用ツリークラス
PS::TreeForForceLong<FPGrav, FPGrav, FPGrav> Monopole tree_grav;
```

```
class FPGrav{
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec position;
    PS::F64vec velocity;
    PS::F64vec acceleration;
    PS::F64vec getPos(){
        return position;
    }
}body[Nbody];
```

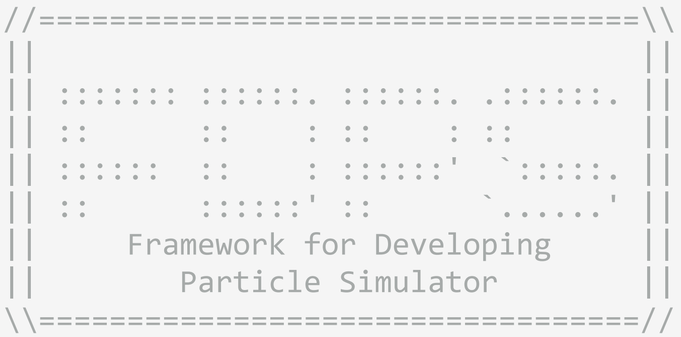
```
//==================================\\
||                                  ||
||  ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
||  ::      ::    : ::    : ::      ||
||  ::::::  ::    : ::::::'  `::::. ||
||  ::      ::::::' ::      `.....' ||
||     Framework for Developing     ||
||        Particle Simulator        ||
\\==================================//
```

C++の機能：関数テンプレート

◆FDPSでは相互作用関数は関数テンプレートを用いて記述出来る。

◆関数テンプレートを用いずに記述する事も可能だが、相互作用が長距離力の場合、
計算内容的には全く同じものにも関わらず、
近傍の粒子からの相互作用とツリーノードからの相互作用2つを書かなければならない。

◆関数テンプレートを用いると記述するのは1つだけで済むので、
今回は関数テンプレートを用いたサンプルコードを紹介する。

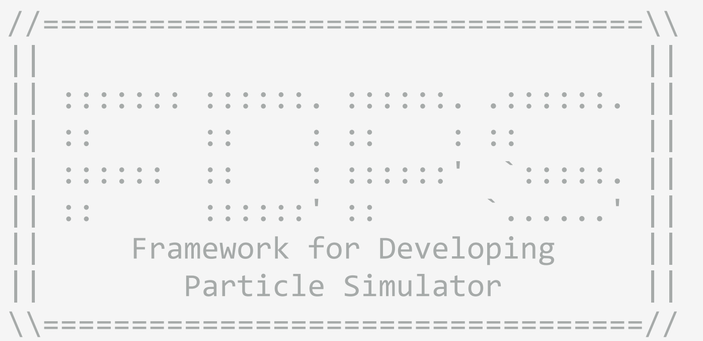


C++の機能：関数テンプレート(続き)

◆FDPSでは、ツリーノードクラスは既に用意されている(PS::SPJMonopole)ため、それを使う。

◆相互作用関数はSPJMonopoleも使うので、getPos();などを用いて書く必要がある。

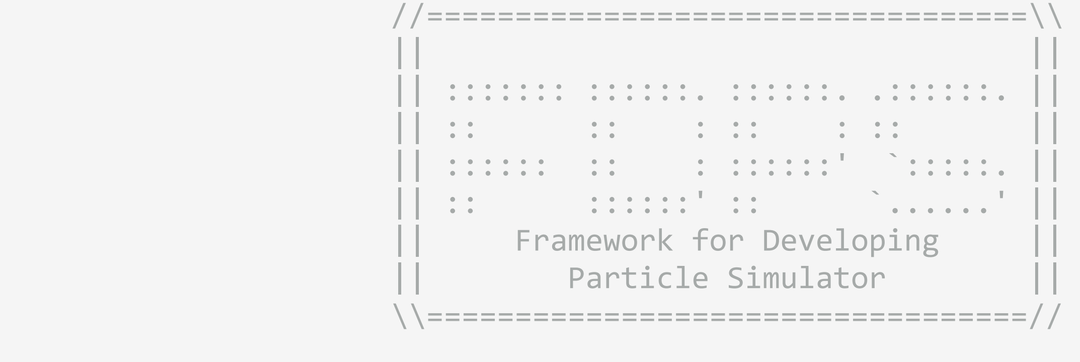
```
template <class TparticleJ>
void CalcGravity(const FPGrav * ep_i,
                 const PS::S32 n_ip,
                 const TParitcleJ * ep_j,
                 const PS::S32 n_jp,
                 FPGrav * force){
    for(PS::S32 i = 0 ; i < n_ip ; i ++){
    PS::F64vec xi = ep_i[i].getPos();
        for(PS::S32 j = 0 ; j < n_jp ; j ++){
            PS::F64vec rij = x_i - ep_j[j].getPos();
            //calc gravity
        }
    }
}
```



コード構成

◆ユーザーが書くべきものは、

- #include <particle_simulator.h>
- 粒子クラスと必要なメンバ関数
- 相互作用関数
- 時間積分ルーチン
- I/O (粒子クラスのI/Oと、FileHeaderクラス)

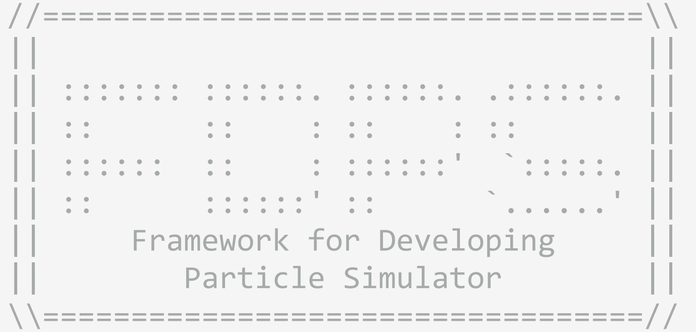


サンプルコード

◆今回のサンプルコードの内容
- 粒子間相互作用は、重力
  - Phantom-GRAPE (Tanikawa+, 2011; 2012) ありとなし両方
- 時間積分法はleap-frog法
- 初期条件はその場生成
  - ファイル読み込みではない

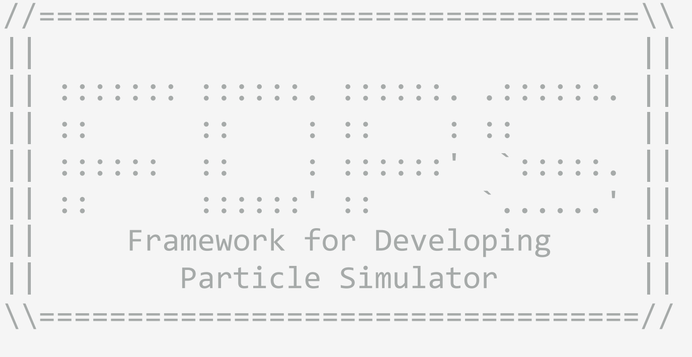
◆ファイル構成
- user-defined.hpp
- nbody.cpp

他にも色々入っているが必要なものはすべてこの2つの中にある



サンプルコード user_defined.hpp

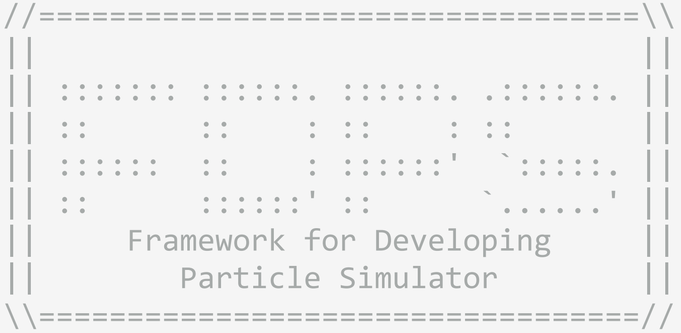
```
#pragma once
class FileHeader{
public:
    PS::S64 n_body;
    PS::F64 time;
    PS::S32 readAscii(FILE * fp) {
        fscanf(fp, "%lf\n", &time);
        fscanf(fp, "%lld\n", &n_body);
        return n_body;
    }
    void writeAscii(FILE* fp) const {
        fprintf(fp, "%e\n", time);
        fprintf(fp, "%lld\n", n_body);
    }
};

class FPGrav{
public:
    PS::S64    id;
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec pos;
    PS::F64vec vel;
```



サンプルコード user_defined.hpp

```
#pragma once
class FileHeader{
public:
    PS::S64 n_body;
    PS::F64 time;
    PS::S32 readAscii(FILE * fp) {
        fscanf(fp, "%lf\n", &time);
        fscanf(fp, "%lld\n", &n_body);
        return n_body;
    }
    void writeAscii(FILE* fp) const {
        fprintf(fp, "%e\n", time);
        fprintf(fp, "%lld\n", n_body);
    }
};

class FPGrav{
public:
    PS::S64    id;
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec pos;
    PS::F64vec vel;
```

クラス



サンプルコード user_defined.hpp

```
#pragma once
class FileHeader{
public:
    PS::S64 n_body;
    PS::F64 time;
    PS::S32 readAscii(FILE * fp) {
        fscanf(fp, "%lf\n", &time);
        fscanf(fp, "%lld\n", &n_body);
        return n_body;
    }
    void writeAscii(FILE* fp) const {
        fprintf(fp, "%e\n", time);
        fprintf(fp, "%lld\n", n_body);
    }
};
```

ファイルヘッダークラス

```
class FPGrav{
public:
    PS::S64    id;
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec pos;
    PS::F64vec vel;
```


サンプルコード user_defined.hpp

```
#pragma once
class FileHeader{
public:
    PS::S64 n_body;
    PS::F64 time;
    PS::S32 readAscii(FILE * fp) {
        fscanf(fp, "%lf\n", &time);
        fscanf(fp, "%lld\n", &n_body);
        return n_body;
    }
    void writeAscii(FILE* fp) const {
        fprintf(fp, "%e\n", time);
        fprintf(fp, "%lld\n", n_body);
    }
};
```

名前空間

ファイルヘッダークラス

```
class FPGrav{
public:
    PS::S64    id;
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec pos;
    PS::F64vec vel;
```

```
//==================================\\
||                                  ||
||  ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
||  ::      ::    : ::    : ::      ||
||  ::::::  ::    : ::::::'  `::::. ||
||  ::      ::::::' ::      `.....' ||
||     Framework for Developing     ||
||        Particle Simulator        ||
\\==================================//
```

サンプルコード user_defined.hpp

```
class FPGrav{
public:
    PS::S64    id;
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec pos;
    PS::F64vec vel;
    PS::F64vec acc;
    PS::F64    pot;
    static PS::F64 eps;
    PS::F64vec getPos() const {
        return pos;
    }
    PS::F64 getCharge() const {
        return mass;
    }
    void copyFromFP(const FPGrav & fp){
        mass = fp.mass;
        pos  = fp.pos;
    }
    void copyFromForce(const FPGrav & force) {
        acc = force.acc;
        pot = force.pot;
```

粒子クラス

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
||  ::     ::    : ::    : ::      ||
||  ::::   ::    : ::::::'  `::::. ||
||  ::     ::::::' ::      `....' ||
||     Framework for Developing     ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード user_defined.hpp

```
class FPGrav{
public:
    PS::S64    id;
    PS::F64    mass;
    PS::F64vec pos;
    PS::F64vec vel;
    PS::F64vec acc;
    PS::F64    pot;
    static PS::F64 eps;
    PS::F64vec getPos() const {
        return pos;
    }
    PS::F64 getCharge() const {
        return mass;
    }
    void copyFromFP(const FPGrav & fp){
        mass = fp.mass;
        pos  = fp.pos;
    }
    void copyFromForce(const FPGrav & force) {
        acc = force.acc;
        pot = force.pot;
```

物理量

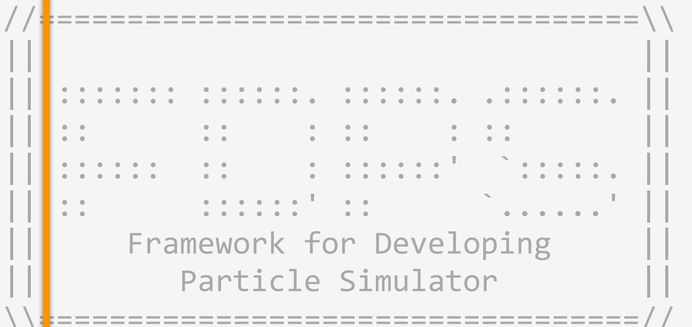
粒子クラス

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
||  ::     ::    : ::    : ::      ||
||  ::::   ::    : ::::::'  `::::. ||
||  ::     ::::::' ::      `....' ||
||     Framework for Developing     ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード user_defined.hpp

```
PS::F64vec getPos() const {
    return pos;
}
PS::F64 getCharge() const {
    return mass;
}
void copyFromFP(const FPGrav & fp){
    mass = fp.mass;
    pos  = fp.pos;
}
void copyFromForce(const FPGrav & force) {
    acc = force.acc;
    pot = force.pot;
}
void clear() {
    acc = 0.0;
    pot = 0.0;
}
void writeAscii(FILE* fp) const {
    fprintf(fp, "%lld\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\n",
            this->id, this->mass,
            this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
```

メンバー関数



サンプルコード user_defined.hpp

```
    void clear() {
        acc = 0.0;
        pot = 0.0;
    }
    void writeAscii(FILE* fp) const {
        fprintf(fp, "%lld\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\t%g\n",
                this->id, this->mass,
                this->pos.x, this->pos.y, this->pos.z,
                this->vel.x, this->vel.y, this->vel.z);
    }
    void readAscii(FILE* fp) {
        fscanf(fp, "%lld\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n",
               &this->id, &this->mass,
               &this->pos.x, &this->pos.y, &this->pos.z,
               &this->vel.x, &this->vel.y, &this->vel.z);
    }
};

#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86

template <class TParticleJ>
void CalcGravity(const EPGrav * iptcl,
                 const PS::S32 ni,
```

I/O用メンバー関数

```
//==================================\\
||                                  ||
||  ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
||  ::      ::    : ::    : ::      ||
||  ::::::  ::    : ::::::'  `::::.  ||
||  ::      ::::::' ::      `.....' ||
||     Framework for Developing     ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード user_defined.hpp

```
    }
};

#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86

template <class TParticleJ>
void CalcGravity(const FPGrav * iptcl,
                 const PS::S32 ni,
                 const TParticleJ * jptcl,
                 const PS::S32 nj,
                 FPGrav * force) {
    const PS::S32 nipipe = ni;
    const PS::S32 njpipe = nj;
    PS::F64 (*xi)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe * PS::DIMENSION);
    PS::F64 (*ai)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe * PS::DIMENSION);
    PS::F64  *pi     = (PS::F64  *    )malloc(sizeof(PS::F64) * nipipe);
    PS::F64 (*xj)[3] = (PS::F64 (*)[3])malloc(sizeof(PS::F64) * njpipe * PS::DIMENSION);
    PS::F64  *mj     = (PS::F64  *    )malloc(sizeof(PS::F64) * njpipe);
    for(PS::S32 i = 0; i < ni; i++) {
        xi[i][0] = iptcl[i].getPos()[0];
        xi[i][1] = iptcl[i].getPos()[1];
        xi[i][2] = iptcl[i].getPos()[2];
        ai[i][0] = 0.0;
```

関数テンプレート

Phantom GRAPEあり

サンプルコード user_defined.hpp

```
            force[i].acc[0] += ai[i][0];
            force[i].acc[1] += ai[i][1];
            force[i].acc[2] += ai[i][2];
            force[i].pot    -= pi[i];
        }
        free(xi);
        free(ai);
        free(pi);
        free(xj);
        free(mj);
    }

    #else

    template <class TParticleJ>
    void CalcGravity(const FPGrav * ep_i,
                     const PS::S32 n_ip,
                     const TParticleJ * ep_j,
                     const PS::S32 n_jp,
                     FPGrav * force) {
        PS::F64 eps2 = FPGrav::eps * FPGrav::eps;
        for(PS::S32 i = 0; i < n_ip; i++){
            PS::F64vec xi = ep_i[i].getPos();
```

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
|| ::      ::    : ::    : ::      ||
|| ::::::  ::    : ::::::'  `::::. ||
|| ::      ::::::' ::      `....' ||
||    Framework for Developing     ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード user_defined.hpp

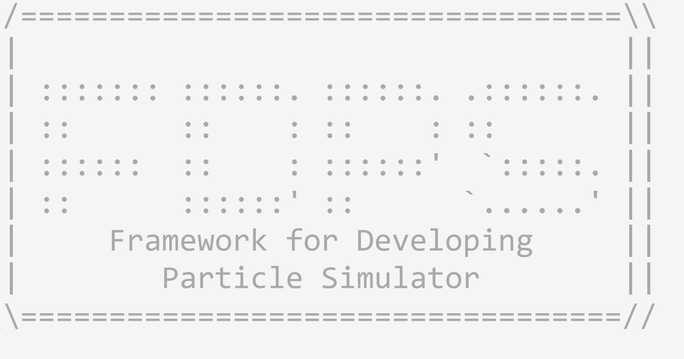
```
template <class TParticleJ>
void CalcGravity(const FPGrav * ep_i,
                 const PS::S32 n_ip,
                 const TParticleJ * ep_j,
                 const PS::S32 n_jp,
                 FPGrav * force) {
    PS::F64 eps2 = FPGrav::eps * FPGrav::eps;
    for(PS::S32 i = 0; i < n_ip; i++){
        PS::F64vec xi = ep_i[i].getPos();
        PS::F64vec ai = 0.0;
        PS::F64 poti = 0.0;
        for(PS::S32 j = 0; j < n_jp; j++){
            PS::F64vec rij    = xi - ep_j[j].getPos();
            PS::F64    r3_inv = rij * rij + eps2;
            PS::F64    r_inv  = 1.0/sqrt(r3_inv);
            r3_inv  = r_inv * r_inv;
            r_inv  *= ep_j[j].getCharge();
            r3_inv *= r_inv;
            ai     -= r3_inv * rij;
            poti   -= r_inv;
        }
        force[i].acc += ai;
```

相互作用関数テンプレート

メンバ関数呼び出し

サンプルコード user_defined.hpp

```
                PS::F64    r3_inv = rij * rij + eps2;
                PS::F64    r_inv  = 1.0/sqrt(r3_inv);
                r3_inv  = r_inv * r_inv;
                r_inv  *= ep_j[j].getCharge();
                r3_inv *= r_inv;
                ai     -= r3_inv * rij;
                poti   -= r_inv;
            }
            force[i].acc += ai;
            force[i].pot += poti;
        }
    }

    #endif
```



サンプルコード user_defined.hpp

◆user_defined.hppはこれだけ。

おおよそ150行。

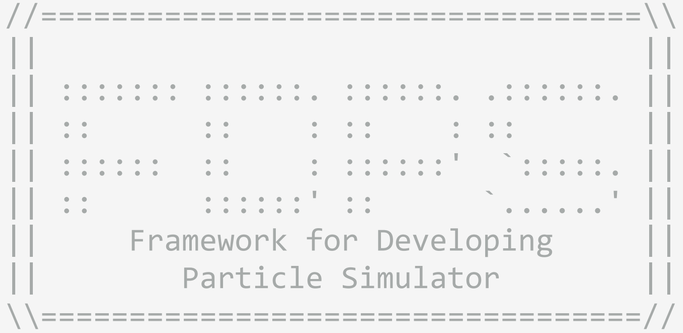
サンプルコード nbody.cpp

```
#include<iostream>
#include<fstream>
#include<unistd.h>
#include<sys/stat.h>
#include<particle_simulator.hpp>
#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
#include <gp5util.h>
#endif
#ifdef ENABLE_GPU_CUDA
#define MULTI_WALK
#include"force_gpu_cuda.hpp"
#endif
#include “user-defined.hpp"

void makeColdUniformSphere(const PS::F64 mass_glb,
                           const PS::S64 n_glb,
                           const PS::S64 n_loc,
                           PS::F64 *& mass,
                           PS::F64vec *& pos,
                           PS::F64vec *& vel,
                           const PS::F64 eng = -0.25,
                           const PS::S32 seed = 0) {
    assert(eng < 0.0);
    {
        PS::MTTS mt;
        mt.init_genrand(0);
```

サンプルコード nbody.cpp

```
#include<iostream>
#include<fstream>
#include<unistd.h>
#include<sys/stat.h>
#include<particle_simulator.hpp>
#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
#include <gp5util.h>
#endif
#ifdef ENABLE_GPU_CUDA
#define MULTI_WALK
#include"force_gpu_cuda.hpp"
#endif
#include “user-defined.hpp"

void makeColdUniformSphere(const PS::F64 mass_glb,
                           const PS::S64 n_glb,
                           const PS::S64 n_loc,
                           PS::F64 *& mass,
                           PS::F64vec *& pos,
                           PS::F64vec *& vel,
                           const PS::F64 eng = -0.25,
                           const PS::S32 seed = 0) {
    assert(eng < 0.0);
    {
        PS::MTTS mt;
        mt.init_genrand(0);
```

FDPSのヘッダー読み込み



サンプルコード nbody.cpp

```
}

template<class Tpsys>
void kick(Tpsys & system,
          const PS::F64 dt) {
    PS::S32 n = system.getNumberOfParticleLocal();
    for(PS::S32 i = 0; i < n; i++) {
        system[i].vel  += system[i].acc * dt;
    }
}

template<class Tpsys>
void drift(Tpsys & system,
           const PS::F64 dt) {
    PS::S32 n = system.getNumberOfParticleLocal();
    for(PS::S32 i = 0; i < n; i++) {
        system[i].pos  += system[i].vel * dt;
    }
}

template<class Tpsys>
void calcEnergy(const Tpsys & system,
                PS::F64 & etot,
                PS::F64 & ekin,
                PS::F64 & epot,
                const bool clear=true){
    if(clear){
```

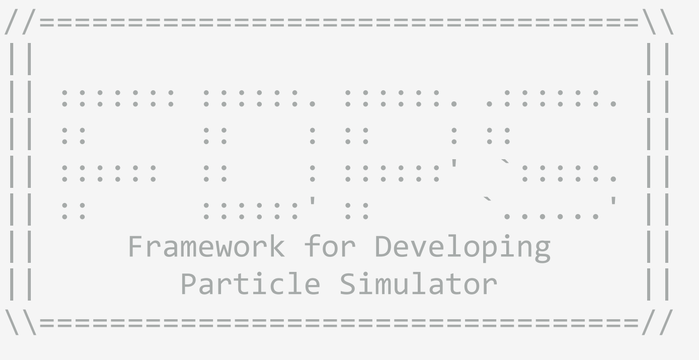
粒子数が取得可能

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
|| ::      ::    : ::    : ::      ||
|| ::::::  ::    : ::::::'  `::::. ||
|| ::      ::::::' ::      `....' ||
||    Framework for Developing      ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード nbody.cpp

```
}

template<class Tpsys>
void kick(Tpsys & system,
          const PS::F64 dt) {
    PS::S32 n = system.getNumberOfParticleLocal();
    for(PS::S32 i = 0; i < n; i++) {
        system[i].vel  += system[i].acc * dt;
    }
}

template<class Tpsys>
void drift(Tpsys & system,
           const PS::F64 dt) {
    PS::S32 n = system.getNumberOfParticleLocal();
    for(PS::S32 i = 0; i < n; i++) {
        system[i].pos  += system[i].vel * dt;
    }
}

template<class Tpsys>
void calcEnergy(const Tpsys & system,
                PS::F64 & etot,
                PS::F64 & ekin,
                PS::F64 & epot,
                const bool clear=true){
    if(clear){
```

粒子群クラスに[i]をつけると粒子データにアクセス可能



サンプルコード nbody.cpp

メイン関数開始

```
int main(int argc, char *argv[]) {
    std::cout<<std::setprecision(15);
    std::cerr<<std::setprecision(15);

    PS::Initialize(argc, argv);
    PS::F32 theta = 0.5;
    PS::S32 n_leaf_limit = 8;
    PS::S32 n_group_limit = 64;
    PS::F32 time_end = 10.0;
    PS::F32 dt = 1.0 / 128.0;
    PS::F32 dt_diag = 1.0 / 8.0;
    PS::F32 dt_snap = 1.0;
    char dir_name[1024];
    PS::S64 n_tot = 1024;
    PS::S32 c;
    sprintf(dir_name,"./result");
    opterr = 0;
    while((c=getopt(argc,argv,"i:o:d:D:t:T:l:n:N:hs:")) != -1){
        switch(c){
        case 'o':
            sprintf(dir_name,optarg);
            break;
        case 't':
            theta = atof(optarg);
            std::cerr << "theta =" << theta << std::endl;
            break;
```

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
|| ::      ::    : ::    : ::      ||
|| ::::::  ::    : ::::::'  `::::. ||
|| ::      ::::::' ::      `....' ||
||    Framework for Developing      ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード nbody.cpp

```
int main(int argc, char *argv[]) {
    std::cout<<std::setprecision(15);
    std::cerr<<std::setprecision(15);

    PS::Initialize(argc, argv);
    PS::F32 theta = 0.5;
    PS::S32 n_leaf_limit = 8;
    PS::S32 n_group_limit = 64;
    PS::F32 time_end = 10.0;
    PS::F32 dt = 1.0 / 128.0;
    PS::F32 dt_diag = 1.0 / 8.0;
    PS::F32 dt_snap = 1.0;
    char dir_name[1024];
    PS::S64 n_tot = 1024;
    PS::S32 c;
    sprintf(dir_name,"./result");
    opterr = 0;
    while((c=getopt(argc,argv,"i:o:d:D:t:T:l:n:N:hs:")) != -1){
        switch(c){
        case 'o':
            sprintf(dir_name,optarg);
            break;
        case 't':
            theta = atof(optarg);
            std::cerr << "theta =" << theta << std::endl;
            break;
```

FDPSの初期化

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .:::::::. ||
|| ::      ::    : ::    : ::       ||
|| ::::::  ::    : ::::::'  `::::::. ||
|| ::      ::::::' ::      `......' ||
||    Framework for Developing      ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード nbody.cpp

```
        fprintf(stdout, "Number of threads per process: %d\n", PS::Comm::getNumberOfThread());
    }

    PS::ParticleSystem<FPGrav> system_grav;
    system_grav.initialize();
    PS::S32 n_loc     = 0;
    PS::F32 time_sys = 0.0;
    if(PS::Comm::getRank() == 0) {
        setParticlesColdUniformSphere(system_grav, n_tot, n_loc);
    } else {
        system_grav.setNumberOfParticleLocal(n_loc);
    }

    const PS::F32 coef_ema = 0.3;
    PS::DomainInfo dinfo;
    dinfo.initialize(coef_ema);
    dinfo.decomposeDomainAll(system_grav);
    system_grav.exchangeParticle(dinfo);
    n_loc = system_grav.getNumberOfParticleLocal();

#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
    g5_open();
    g5_set_eps_to_all(FPGrav::eps);
#endi
    PS::TreeForForceLong<FPGrav, FPGrav, FPGrav>::Monopole tree_grav;
    tree_grav.initialize(n_tot, theta, n_leaf_limit, n_group_limit);
#ifdef MULTI_WALK
```

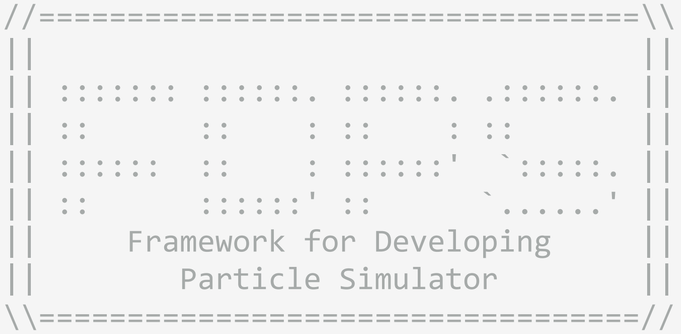
粒子群クラスの生成と初期化

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .::::::. ||
|| ::      ::    : ::    : ::       ||
|| ::::::  ::    : ::::::'  `::::.  ||
|| ::      ::::::' ::      `....'  ||
||    Framework for Developing      ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード nbody.cpp

```
        fprintf(stdout, "Number of threads per process: %d\n", PS::Comm::getNumberOfThread());
    }

    PS::ParticleSystem<FPGrav> system_grav;
    system_grav.initialize();
    PS::S32 n_loc    = 0;
    PS::F32 time_sys = 0.0;
    if(PS::Comm::getRank() == 0) {
        setParticlesColdUniformSphere(system_grav, n_tot, n_loc);
    } else {
        system_grav.setNumberOfParticleLocal(n_loc);
    }

    const PS::F32 coef_ema = 0.3;
    PS::DomainInfo dinfo;
    dinfo.initialize(coef_ema);
    dinfo.decomposeDomainAll(system_grav);
    system_grav.exchangeParticle(dinfo);
    n_loc = system_grav.getNumberOfParticleLocal();

#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
    g5_open();
    g5_set_eps_to_all(FPGrav::eps);
#endi
    PS::TreeForForceLong<FPGrav, FPGrav, FPGrav>::Monopole tree_grav;
    tree_grav.initialize(n_tot, theta, n_leaf_limit, n_group_limit);
#ifdef MULTI_WALK
```

ドメイン情報クラスの生成と初期化、領域分割



サンプルコード nbody.cpp

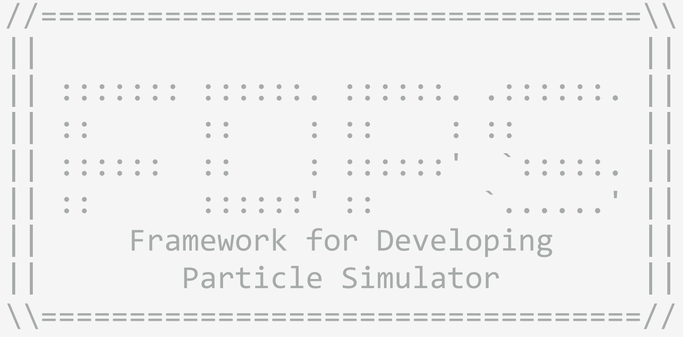
```
        fprintf(stdout, "Number of threads per process: %d\n", PS::Comm::getNumberOfThread());
    }

    PS::ParticleSystem<FPGrav> system_grav;
    system_grav.initialize();
    PS::S32 n_loc    = 0;
    PS::F32 time_sys = 0.0;
    if(PS::Comm::getRank() == 0) {
        setParticlesColdUniformSphere(system_grav, n_tot, n_loc);
    } else {
        system_grav.setNumberOfParticleLocal(n_loc);
    }

    const PS::F32 coef_ema = 0.3;
    PS::DomainInfo dinfo;
    dinfo.initialize(coef_ema);
    dinfo.decomposeDomainAll(system_grav);
    system_grav.exchangeParticle(dinfo);
    n_loc = system_grav.getNumberOfParticleLocal();

#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
    g5_open();
    g5_set_eps_to_all(FPGrav::eps);
#endi
    PS::TreeForForceLong<FPGrav, FPGrav, FPGrav>::Monopole tree_grav;
    tree_grav.initialize(n_tot, theta, n_leaf_limit, n_group_limit);
#ifdef MULTI_WALK
```

粒子交換

サンプルコード nbody.cpp

```
    n_loc = system_grav.getNumberOfParticleLocal();

#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
    g5_open();
    g5_set_eps_to_all(FPGrav::eps);
#endi
    PS::TreeForForceLong<FPGrav, FPGrav, FPGrav>::Monopole tree_grav;
    tree_grav.initialize(n_tot, theta, n_leaf_limit, n_group_limit);
#ifdef MULTI_WALK
    const PS::S32 n_walk_limit = 200;
    const PS::S32 tag_max = 1;
    tree_grav.calcForceAllAndWriteBackMultiWalk(DispatchKernelWithSP,
                                                RetrieveKernel,
                                                tag_max,
                                                system_grav,
                                                dinfo,
                                                n_walk_limit);
#else
    tree_grav.calcForceAllAndWriteBack(CalcGravity<FPGrav>,
                                       CalcGravity<PS::SPJMonopole>,
                                       system_grav,
                                       dinfo);
#endif
    PS::F64 Epot0, Ekin0, Etot0, Epot1, Ekin1, Etot1;
    calcEnergy(system_grav, Etot0, Ekin0, Epot0);
    PS::F64 time_diag = 0.0;
    PS::F64 time_snap = 0.0;
```

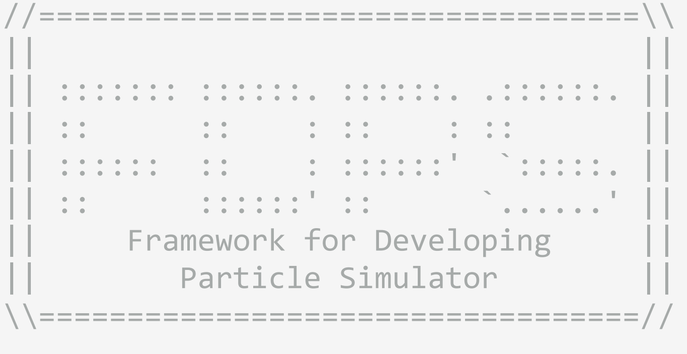
相互作用ツリークラスの
生成と初期化



サンプルコード nbody.cpp

```
                                                tag_max,
                                                system_grav,
                                                dinfo,
                                                n_walk_limit);
#else
    tree_grav.calcForceAllAndWriteBack(CalcGravity<FPGrav>,
                                       CalcGravity<PS::SPJMonopole>,
                                       system_grav,
                                       dinfo);
#endif
    PS::F64 Epot0, Ekin0, Etot0, Epot1, Ekin1, Etot1;
    calcEnergy(system_grav, Etot0, Ekin0, Epot0);
    PS::F64 time_diag = 0.0;
    PS::F64 time_snap = 0.0;
    PS::S64 n_loop = 0;
    PS::S32 id_snap = 0;
    while(time_sys < time_end){
        if( (time_sys >= time_snap) || ( (time_sys + dt) - time_snap ) > (time_snap - time_sys) ){
            char filename[256];
            sprintf(filename, "%s/%04d.dat", dir_name, id_snap++);
            FileHeader header;
            header.time   = time_sys;
            header.n_body = system_grav.getNumberOfParticleGlobal();
            system_grav.writeParticleAscii(filename, header);
            time_snap += dt_snap;
        }
        calcEnergy(system_grav, Etot1, Ekin1, Epot1);
```

相互作用関数を用いた力の計算



サンプルコード nbody.cpp

```
    PS::S32 id_snap = 0;
    while(time_sys < time_end){
        if( (time_sys >= time_snap) || ( (time_sys + dt) - time_snap ) > (time_snap - time_sys) ){
            char filename[256];
            sprintf(filename, "%s/%04d.dat", dir_name, id_snap++);
            FileHeader header;
            header.time   = time_sys;
            header.n_body = system_grav.getNumberOfParticleGlobal();
            system_grav.writeParticleAscii(filename, header);
            time_snap += dt_snap;
        }
        calcEnergy(system_grav, Etot1, Ekin1, Epot1);
        if(PS::Comm::getRank() == 0){
            if( (time_sys >= time_diag) || ( (time_sys + dt) - time_diag ) > (time_diag - time_sys) ){
                fout_eng << time_sys << "   " << (Etot1 - Etot0) / Etot0 << std::endl;
                fprintf(stdout, "time: %10.7f energy error: %+e\n",
                        time_sys, (Etot1 - Etot0) / Etot0);
                time_diag += dt_diag;
            }
        }
        kick(system_grav, dt * 0.5);
        time_sys += dt;
        drift(system_grav, dt);
        if(n_loop % 4 == 0){
            dinfo.decomposeDomainAll(system_grav);
        }
        system_grav.exchangeParticle(dinfo);
```

時間積分

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
|| ::      ::    : ::    : ::      ||
|| ::::::  ::    : ::::::'  `::::. ||
|| ::      ::::::' ::      `.....' ||
||    Framework for Developing      ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード nbody.cpp

```
            tree_grav.calcForceAllAndWriteBack(CalcGravity<PFGrav>,
                                               CalcGravity<PS::SPJMonopole>,
                                               system_grav,
                                               dinfo);
#endif
        kick(system_grav, dt * 0.5);
        n_loop++;
    }
#ifdef ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86
    g5_close();
#endif
    PS::Finalize();
    return 0;
}
```

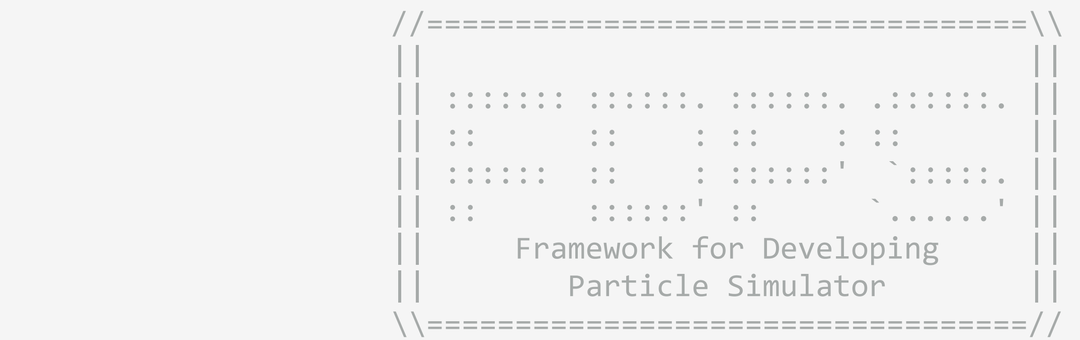
FDPS終了

```
//==================================\\
||                                  ||
|| ::::::: ::::::. ::::::. .:::::. ||
|| ::      ::    : ::    : ::      ||
|| ::::::  ::    : ::::::'  `::::. ||
|| ::      ::::::' ::      `....' ||
||    Framework for Developing      ||
||       Particle Simulator         ||
\\==================================//
```

サンプルコード nbody.cpp

◆nbody.cppはこれだけ。

おおよそ350行。

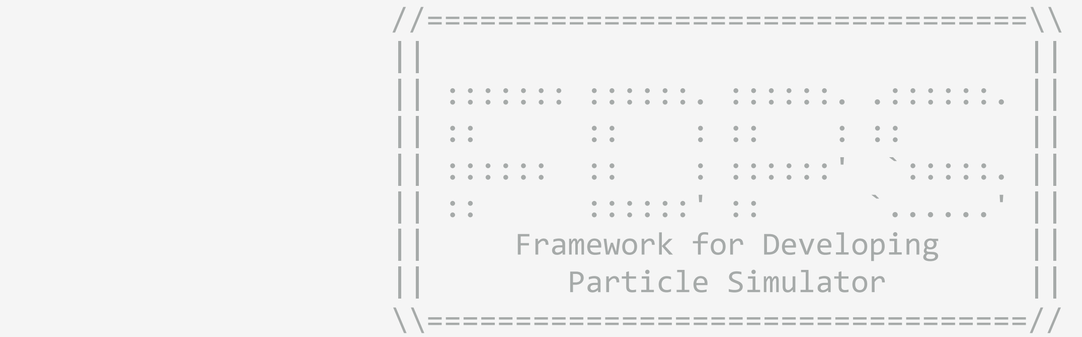


最後に

◆ユーザーが書かなくてはいけないのは、150+350 = 500行 程度。

この500行の中には、コマンドライン引数などの解析も含むため、
そのようなものが必要なければ実際には更に少なくて済む。

◆コード内に、並列化を意識しなくてはならないような場所は無かった。
つまり、コンパイルの方法だけでOpenMPやMPIを切り替えられる。



実習の流れ

◆サンプルコードを
(1)並列化なし (2)OpenMP (3)OpenMP + MPI
の3パターンに関してコンパイルし、実行
サンプルコードは以下の2つ
- 重力 cold collapse
- 流体 (Smoothed Particle Hydrodynamics法) adiabatic sphere collapse
実行が終わったら、結果の解析

詳しくは、以下の講習会URLを参照
http://www.jmlab.jp/?p=1188