可視化（第 2 回）

計算科学演習 I

神戸大学 システム情報学研究科 計算科学専攻 陰山

2015.06.25

事務連絡

可視化（第１回）のレポート受理通知

- 返信していない。
- 次回（今日の分と）まとめて確認する予定。

今後のスケジュール

- 6/25 可視化（第 2 回）　（陰山）
- 7/02 実践編 I （陰山）
- 7/09 休講
- 7/16 実践編 II （陰山）

環境設定

各自の端末で：

1. 全てのプログラム → Xming→Xming（特になにも起きない）
2. Tera term を立ち上げる
   - 2.1 → 最初のダイアログで「キャンセル」
   - 2.2 → Tera term の「設定」
   - 2.3 →「SSH 転送」
   - 2.4 → リモートの (X) アプリケーションを ••• にチェックが入っていなければチェック
   - 2.5 → ファイル → 「新しい接続」→ ログイン

（参考）Mac からの設定

1. X11 を立ち上げる（X11.app または XQuartz.app）。
2. `ssh -X my_id@pi.ircpi.kobeu.ac.jp`
3. （π-computer 上で）gnuplot と入力

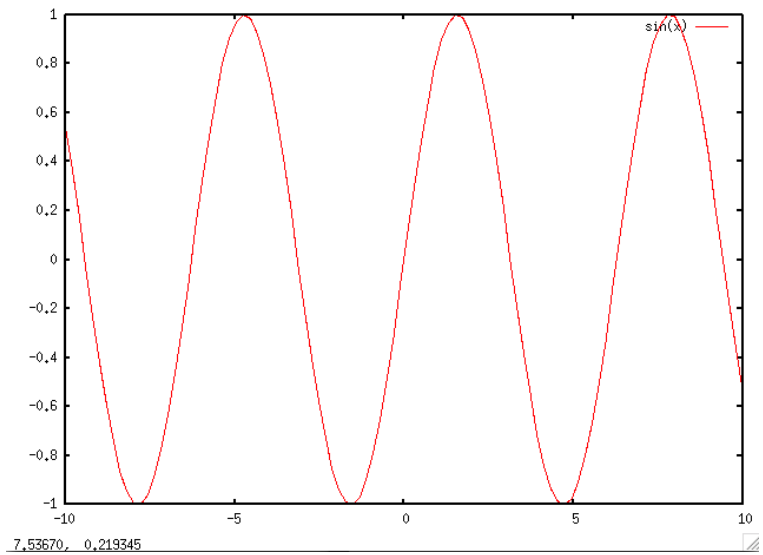
確認

以下のコマンドプロンプトが出るはず。

gnuplot>

ここで gnuplot> plot sin(x)

と入れてみよう。以下のようなグラフが表示されれば成功。



今日の演習の準備

```
cp -r /tmp/150625/  your_directory
```

`ls -l` で４つ（`data`, `sierpinski`, `src01d`, `src02d`）のディレクトリがあることを確認。

```
cd your_directory/src01d
```

サンプル 1D データ作成

ソースコードの確認。

data1d_generator.f95

ポイント

- module の活用
- 単精度・倍精度浮動小数点数の指定方法

【演習】

```
f95 data1d_generator.f95 && ./a.out > data.1d
```

代わりに `make data.1d` と打ってもよい。(make コマンドの使い方は後述。)

data.1d

kage — kage@pi:~/lect2014/src/data_sample_1d — ssh — 64×22

```
[kage@pi data_sample_1d]$ head data.1d
 # sample data 1d
  -10.000000000000000       0.54402111088936977
  -9.8000000000000007       0.36647912925192838
  -9.5999999999999996       0.17432678122297965
  -9.4000000000000004      -2.47754254533577647E-002
  -9.1999999999999993      -0.22288991410024764
  -9.0000000000000000      -0.41211848524175659
  -8.8000000000000007      -0.58491719289176169
  -8.5999999999999996      -0.73439709787411334
  -8.4000000000000004      -0.85459890808828043
[kage@pi data_sample_1d]$
```

復習：gnuplot の入力ファイルフォーマット

- # 以降はコメント
- 1 行に x, y 値のペア
- デフォルトでは第 1 列が plot の x 座標、第 2 列が y 座標（変更可能）

演習

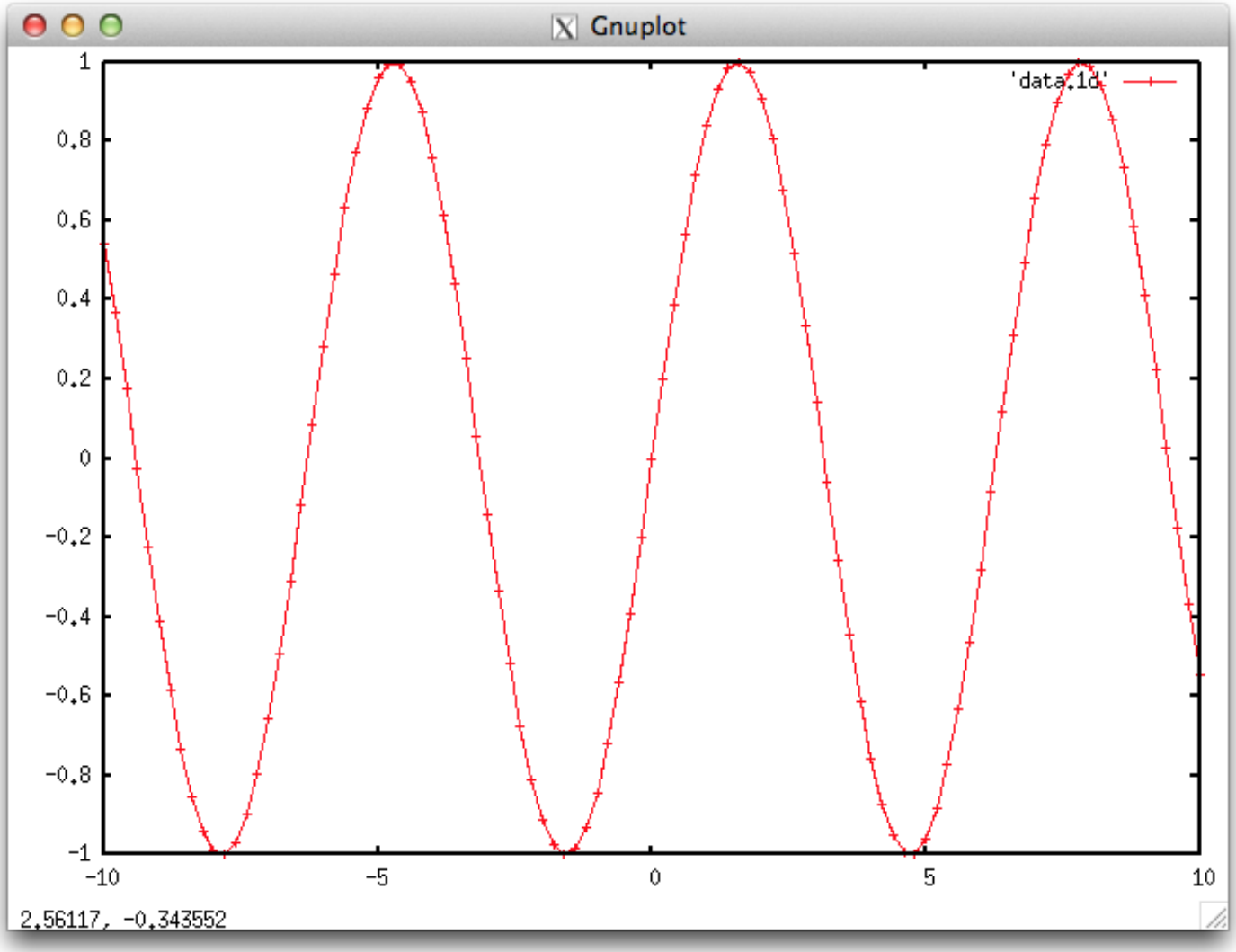
gnuplot を立ち上げて

```
gnuplot> plot 'data.1d' w lp
```

としてみよう。(PDF からコピペするとシングルクォートが変わってしまうかも。)

w lp は with linespoints の略で、線（line）と点（point）を表示することを意味する。(w linespoints と書いてもよい。)

出力例


Gnuplot
'data.1d'
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1
-10
-5
0
5
10
2.56117, -0.343552

復習：gnuplot スクリプト

gnuplot ではコマンドプロンプトに手で入力する内容をファイルから読み込ませることが出来る。⇒ gnuplot script

ディレクトリ src01d の中に graph1d.gp がある。

```
#
# A simple sample gnuplot script: graph1d.gp
#
#
# set size square                  # same side lengths for x and y
# set size 0.65, 1                 # other way to set regular rectar
set xlabel 'x'                     # x-axis
set ylabel 'func'                  # y-axis
set xrange[-10:10]                 # x coords range
set yrange[-1:1]                   # y coords range
set title 'graph 1d'
plot 'data.1d' w lp
pause -1
```

【演習】

gnuplot がまだ立ち上がっていたら quit コマンドで終了し、改めて shell で

```
gnuplot graph1d.gp
```

と入力。

```
make graph
```

としてもよい。

Makefile（make コマンド）入門

target を source から作る方法を記述。

```
target: source
[___タブ___] command_to_make_target_from_source
```

target と source のタイムスタンプを比較して、source の方が新しい時のみ target を新たに作る。

Makefile（make コマンド）入門

再帰的記述

```
target: source01
[___タブ___] command_to_make_target_from_source01

source01: source02
[___タブ___] command_to_make_source01_from_source02

source02: source03
[___タブ___] ...
```

アニメーション

【コード解説】

$\mathrm{recsin}(x, n)$ を計算するプログラム

anim_data_generator.f95

ポイント

- 再帰関数
- 連番ファイルの作成

【準備】

- ソースコード： anim_data_generator.f95
- 実行： make anim.data

連番ファイルが 50 個生成されたことを確認。

gnuplot によるアニメーション

- アニメーション＝静止画の連続。
- gnuplot のスクリプトを使えばアニメーションも簡単にできる。
- pause t とすると t 秒待ってから表示。
- pause t 小数の t がサポートされるかどうかはプラットフォーム依存。

アニメーション用スクリプトの例

```
set xlabel 'x'                  # x-axis
set ylabel 'func'               # y-axis
set xrange[-10:10]              # x coords range
set yrange[-1:1]                # y coords range
set title 'anim 1d'
plot 'data.1d.000' w lp
pause 5
plot 'data.1d.001' w lp
pause 0.5
plot 'data.1d.002' w lp
pause 0.5
plot 'data.1d.003' w lp
.
.
pause -1    # Enter キーが押されるまで待つ
```

アニメーション用スクリプト

- 100 フレームのアニメーション → plot コマンドを 100 行
- 手で書くのは大変！

スクリプト作成プログラム: anim_plotscript_generator.f95

make anim.gp

anim.gp が生成される。中身を確認。

2 次元可視化

2 次元可視化

これまでは 1 次元データの可視化であった。

これから gnuplot を利用して 2 次元データの可視化を行う。

plot コマンドではなく splot コマンドを使う

`gnuplot > splot [関数 f(x,y)]`

例： `gnuplot > splot x**2 + y**2`

演習

splot コマンドで様々な f(x,y) を描いてみよう。

splot のパラメータ

gnuplot のプロンプトに以下を入力せよ。

```
splot exp(-x**2-y**2)
set isosamples 50    # 描画に使われる線の数
replot
set xrange[-2:2]    # x の定義域
replot
set yrange[-2:2]   # y の定義域
replot
```

視点の設定

```
show view    # 現在の視点の表示
set view 60,0   # x 軸の周りに 60 度回転
replot
set view 60,30   # x 軸の周りに 60 度回転し、その後に z 軸の周りに 30 度回転
```

対話的視点移動

グラフをマウスでドラッグしてみよう。

自分の描いたグラフを「下」から見てみよう。

隠面処理

```
set hidden3d    #隠面処理
replot
```

等高線の表示

```
set contour base    # 等高線の表示
replot
set cntrparam levels 30    # 等高線の数の変更
replot
```

等高線だけの表示

```
unset surface    # 等高線だけの表示
replot
```

色分布による表示

```
set pm3d at b      # draw with colored contour
replot
```

データの 2D 表示

2D データフォーマット

```
x00 y00 関数値
x01 y00 関数値
x02 y00 関数値
  .
  .
  .
x09 y00 関数値
 (空行)
x00 y01 関数値
x01 y01 関数値
  .
  .
x09 y01 関数値
 (空行)
  .
  .
x09 y09 関数値
```

サンプルデータの作成

cd [your directory]/src02d

ソースコード解説

heat4.f95

2D データ出力ルーチン（前半）

正方形上（x,y 平面上）に分布する温度をすべて書き出す。

```
subroutine print__profile_2d(p,jj,f)
  type(ranks_t), intent(in) :: p
  type(span_t),  intent(in) :: jj
  real(DP), dimension(0:NGRID+1, &
     jj%stt-1:jj%end+1), intent(in) :: f
  real(DP), dimension(0:NGRID+1,0:NGRID+1) &
                              :: f_global ! 2d prof to be saved
  integer   :: counter = 0  ! has save attrib.
  type(span_t)  :: jj2  ! used for f_global
  character(len=4)  :: serial_num  ! put on file name
  character(len=*), parameter :: base = "../data/temp.2d."
  integer :: i, j
```

2D データ出力ルーチン（後半）

```
  jj2 = adjust_jstart_and_jend(p,jj)
  write(serial_num,'(i4.4)') counter
  f_global(:,:) = set_prof_2d(jj,jj2,f)
  if ( p%myrank==0 ) then
     open(10,file=base//serial_num)
     do j = 0 , NGRID+1
        do i = 0 , NGRID+1
           write(10,*) i, j, f_global(i,j)
        end do
        write(10,*)' ' ! gnuplot requires a blank line here.
     end do
     close(10)
  end if
  counter = counter + 1
end subroutine print__profile_2d
```

データ作成

1. mpifrtpx heat4.f95
2. pjsub heat4.sh

../data ディレクトリにデータ（temp.2d.0000）が出力されるはず。

上の二つのステップは

make data

だけでも OK

出力データの確認

../data ディレクトリ中の連番つきファイル temp.2d.0000 の中身は以下のようになっているはず。確認せよ。

```
 55          35    0.1165598588705999
 56          35    9.9624877672293416E-002
 57          35    8.1734108631726782E-002
 58          35    6.2857224006520482E-002
 59          35    4.2963409431420671E-002
 60          35    2.2021479795155254E-002
 61          35     0.000000000000000

  0          36     0.000000000000000
  1          36    2.1867122785152873E-002
  2          36    4.2655284590767971E-002
  3          36    6.2396502500601705E-002
  4          36    8.1122529495226178E-002
  .
  .
  .
```

2 次元表示 gnuplot スクリプト

heat4_lines.gp

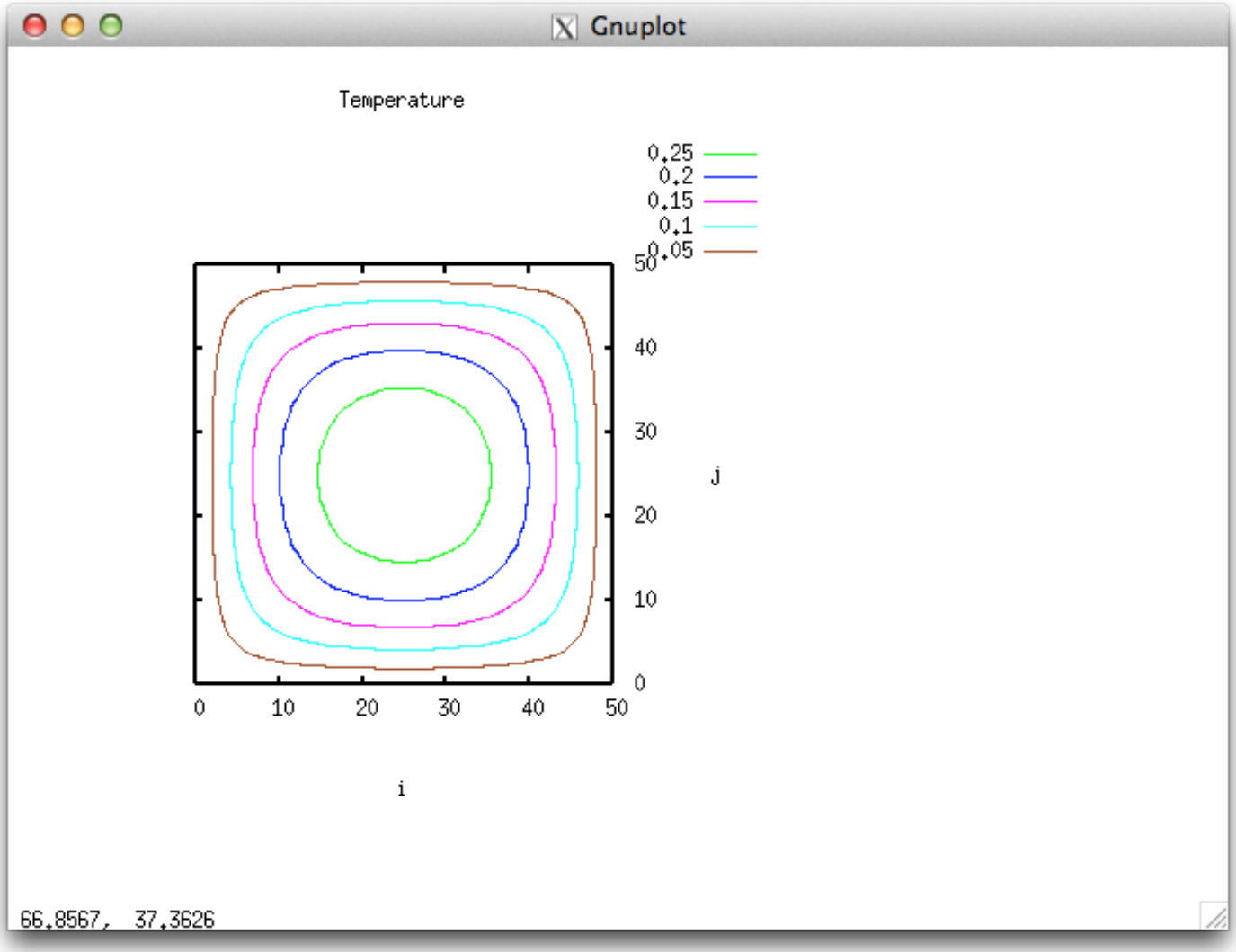
```
 #
 # A sample gnuplot script: heat4_lines.gp
 #
 #   [ line contours ]
 #
# set size square              # same side lengths for x and y
set size 0.65, 1              # same side lengths for x and y
 set xlabel "i"               # x-axis
 set ylabel "j"               # y-axis
 set xrange[0:50]             # i-grid min & max
 set yrange[0:50]             # j-grid min & max
 set nosurface                # do not show surface plot
 unset ztics                  # do not show z-tics
 set contour base             # enables contour lines
 set cntrparam levels 10      # draw 10 contours
 set view 0,0                 # view from the due north
 set title "Temperature"
 splot "../data/temp_2d_0000" using 1:2:3 w l # with lines
```

描画

もしもまだ gnuplot の対話モード（プロンプトが出ている状態）ならそこから抜けて、UNIX シェルから以下を入力。

gnuplot 'heat4_lines.gp'

結果の例


Gnuplot
Temperature
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0
10
20
30
40
50
i
j
66.8567, 37.3626

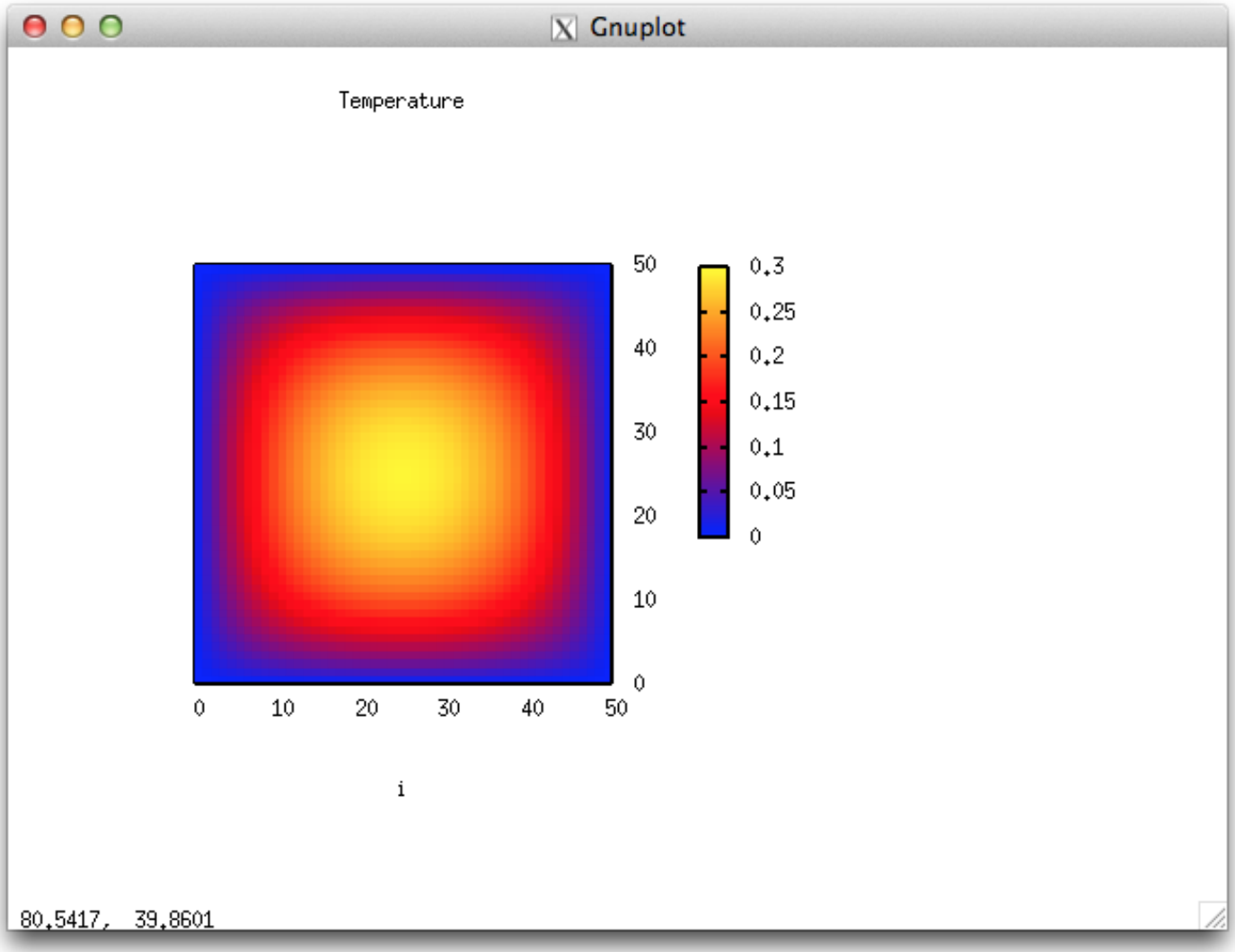
色分布による可視化（静止画）

gnuplot 'heat4_colors.gp'

heat4_colors.gp

```
#
# A sample gnuplot script: heat4_plot_contour_colors.gp
#
#   [ color contours ]
#
# set size square             # same side lengths for x and y
set size 0.65, 1             # same side lengths for x and y
set xlabel "i"               # x-axis
set ylabel "j"               # y-axis
set xrange[0:50]             # i-grid min & max
set yrange[0:50]             # j-grid min & max
set palette defined (0 "blue", 0.15 "red", 0.3 "yellow")
set nosurface                # do not show surface plot
unset ztics                  # do not show z-tics
set pm3d at b                # draw with colored contour
set view 0,0                 # view from the due north
set title "Temperature "
splot "../data/temp.2d.0000" using 1:2:3
pause -1
```

結果の例


Gnuplot
Temperature
50
40
30
20
10
0
0
10
20
30
40
50
0.3
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0
i
80.5417, 39.8601

鳥瞰図

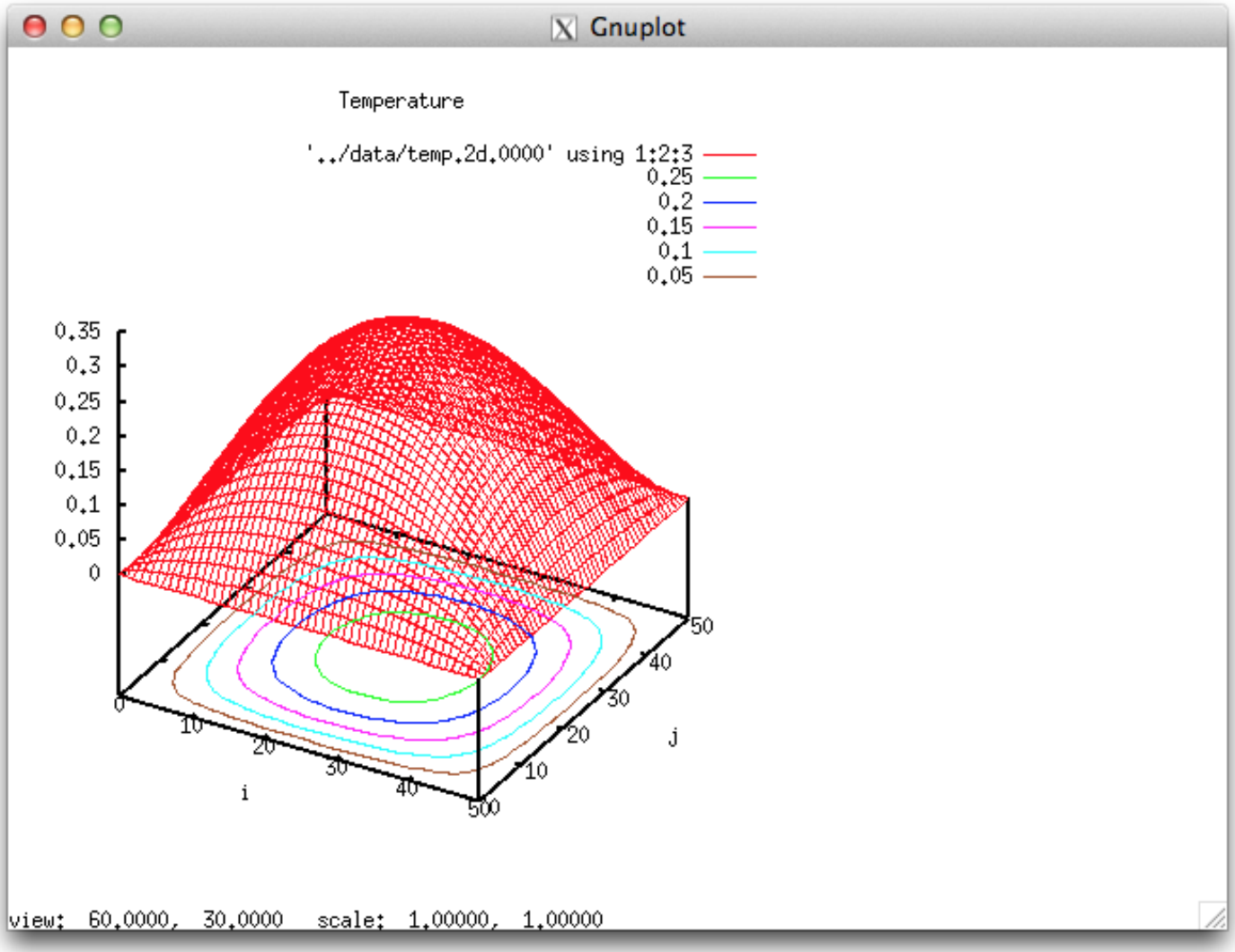
空をとぶ鳥から見下ろしたような図は一般に鳥瞰図（bird's eye view）と呼ぶ。

gnuplot スクリプト

ファイル名：plot4_plot_birdseyeview.gp

```
#
# a sample gnuplot script: plot4_plot_birdseyeview.gp
#
#   [ Bird"s Eye View ]
#
# set size square              # same side lengths for x and y
set size 0.65, 1
set xlabel "i"               # x-axis
set ylabel "j"               # y-axis
set xrange[0:50]             # i-grid min & max
set yrange[0:50]             # j-grid min & max
set contour base             # enables contour lines
set cntrparam levels 10      # draw 10 contours
# set palette defined (0 "blue", 0.15 "red", 0.3 "yellow")
# set pm3d                   # draw with colored contour
set title "Temperature  "
splot "../data/temp.2d.0000" using 1:2:3 w l
pause -1
```

結果の例


Gnuplot
Temperature
'../data/temp.2d.0000' using 1:2:3
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0.35
0.3
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0
0
10
20
30
40
50
i
10
20
30
40
50
j
view: 60.0000, 30.0000 scale: 1.00000, 1.00000

鳥瞰図のアニメーション

splot の view パラメータを調整してアニメーションを作る。

- スクリプト生成プログラム heat4_plot_rotating_birdseyeview_generator.f95 を確認せよ。
- gfortran heat4_plot_rotating_birdseyeview_generator.f95
- `./a.out > anim.gp`
- anim.gp の中身を確認
- gnuplot anim.gp と入力（最初に 5 秒間静止）

上のステップは

make anim

だけで OK（make clean してから make data とし、../data にデータができたのを確認してから make anim と打ってみよ）。

レポート課題

シェルピンスキーギャスケット

cd [your_directory]/sierpinski

ここに「OpenMP 第 2 回」（谷口先生）で見たプログラム sierp.f95 がある。

復習しよう。

アニメーション用にコードを改訂

sierp.f95 ⇒ sierp2.f95

ポイント

- omp section による並列計算
- ギャスケット生成過程全体を関数化（引数：何回乱数を振るか）
- 連番ファイルの生成（整数から 3 桁の文字列）
- module の利用（private と public）

実行

ソースコード：sierp2.f95 ジョブスクリプト：enshu.sh（谷口先生作成）

- コンパイル：frtpx -Kopenmp sierp2.f95
- ジョブ投入：pjsub enshu.sh

上の一連の操作は make data で実行してもよい。（Makefile を見よ。）

ジョブ実行結果: 連番ファイル（data.000 ... data.099）

data.??? の中身を見てみよう。

make graph を実行しよう。

課題

課題

sierp2.f95 では

- 確率 1/3 で $(x^{n+1}, y^{n+1}) = (x^n/2 + 1, y^n/2)$
- 確率 1/3 で $(x^{n+1}, y^{n+1}) = (x^n/2 - 1, y^n/2)$
- 確率 1/3 で $(x^{n+1}, y^{n+1}) = (x^n/2, y^n + 1)$

としている。これを

- 確率 1/10 で $(x^{n+1}, y^{n+1}) = (x^n/2 + 1, y^n/2)$
- 確率 1/10 で $(x^{n+1}, y^{n+1}) = (x^n/2 - 1, y^n/2)$
- 確率 8/10 で $(x^{n+1}, y^{n+1}) = (x^n/2, y^n + 1)$

と変更したプログラム sierp3.f95 を作成し、その結果を gnuplot で確認せよ。

【提出方法】

提出方法： diff sierp2.f95 sierp3.f95 | mail kage

締め切り： 7/1（水曜日） 午前 10:00