計算科学演習 I

実践編 1

陰山

計算科学専攻

2015.07.02

内容

「床暖房問題」を例にとり、計算科学の実践的演習を行う。

- 問題の定式化
- 離散化
- コーディング
- 時間計測
- 可視化
- 並列化（MPI + OpenMP（ハイブリッド並列化））
- 大規模並列（最大 84 ノード＝ 1344 コア）計算

準備

gnuplot が使えるように

前回と同様に Xming と Tera term の設定をすること

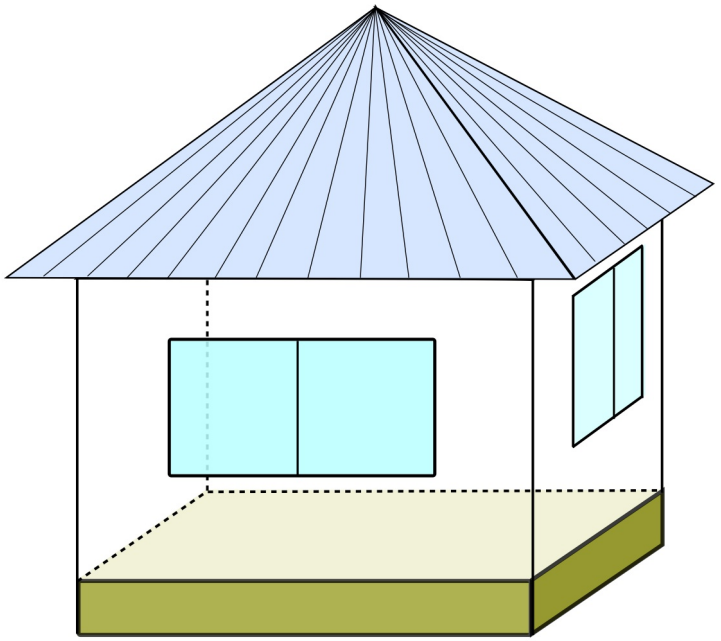
サンプルコードのコピー

cp -r /tmp/150702 自分のディレクトリ

問題設定

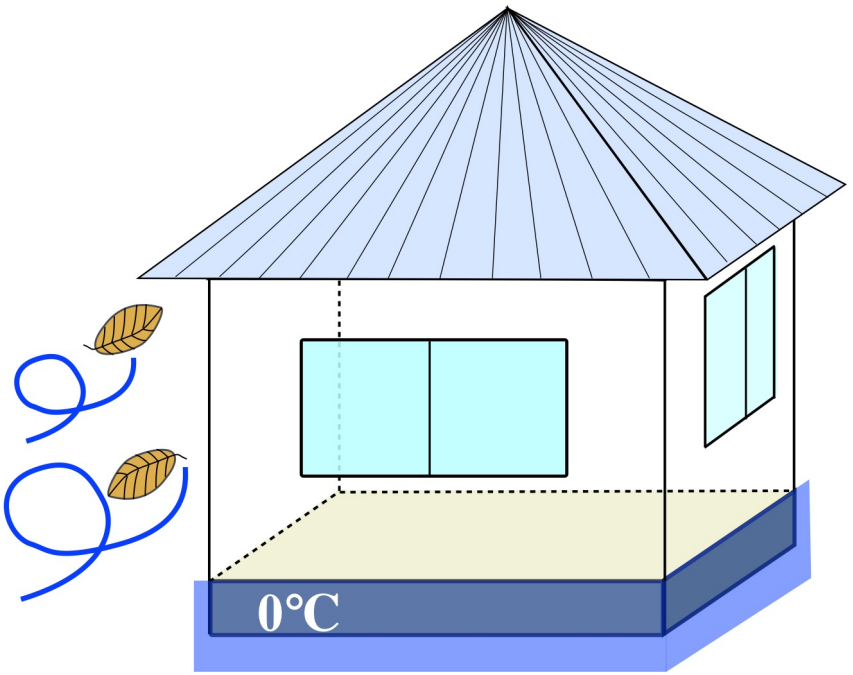
問題設定： 床暖房システム

一間の家がある。床は長方形。外は冬。床暖房システムがあるので、家の中は暖かい。



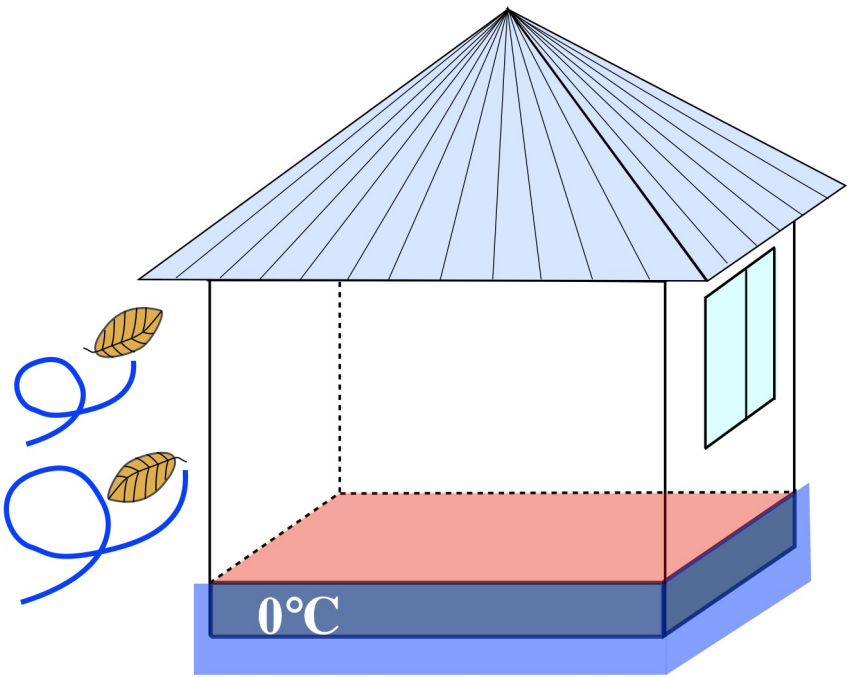
問題設定： 床暖房システム

外気温は０度。壁も０度。



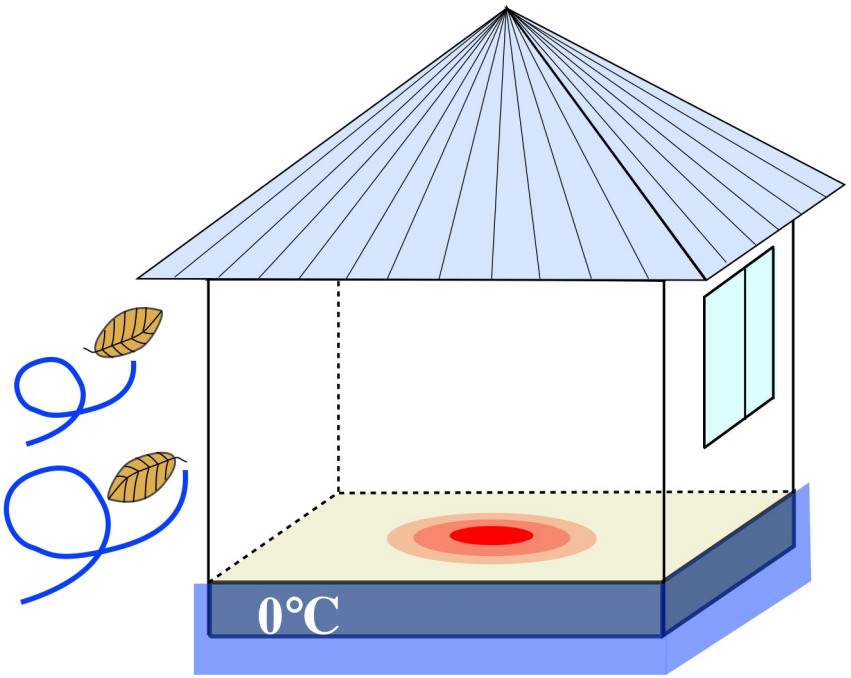
問題設定：床暖房システム

この床暖房システムは床全体を一様に加熱する。

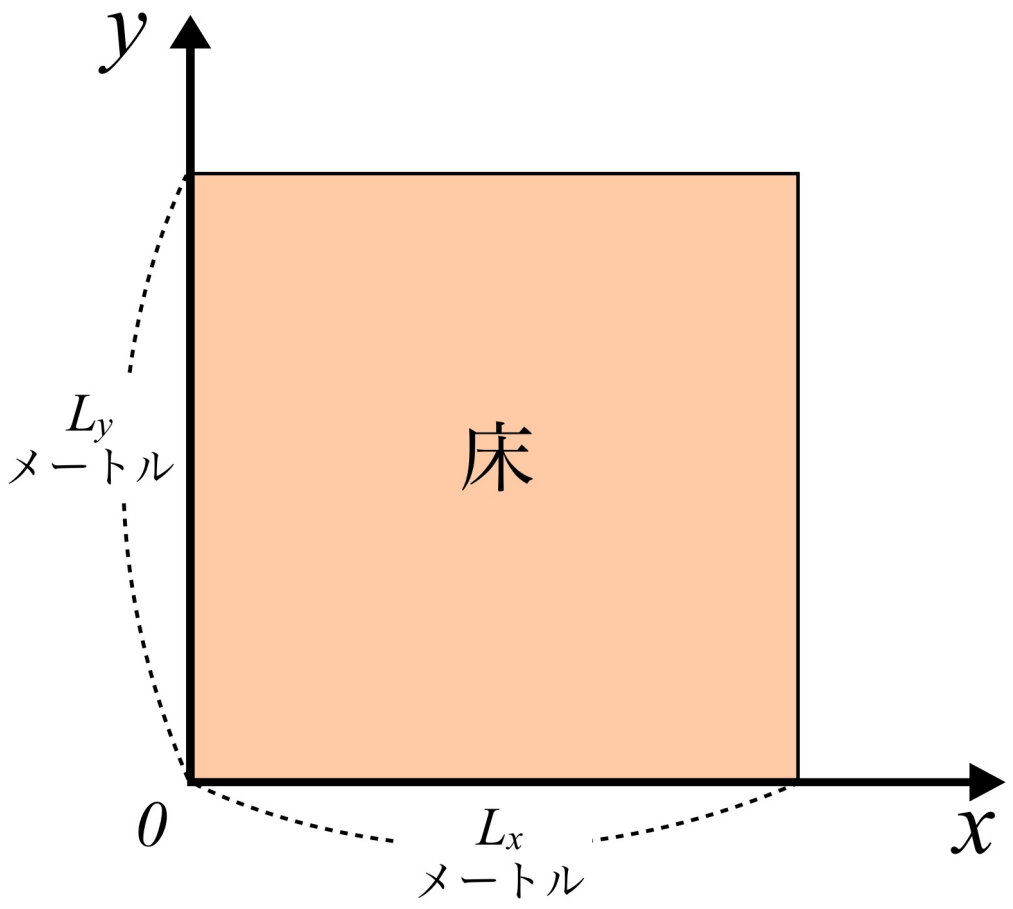


問題設定： 暖房問題

床暖房がオフだと、床面は全体が０度。床暖房をオンにすると床の温度は上がるが、壁に接している部分（床の周囲の長方形の辺上）は０度。問題： 最終的な温度分布は？



座標系



問題設定

- $L_x \times L_y$ 平方メートルの長方形領域
- 辺上の温度は常に 0° （固定）
- 面内に熱源が分布
- 面の熱拡散率 k
- 面内の温度分布は？

熱伝導（熱拡散）方程式

温度 $T(x,t)$ に対する基本方程式

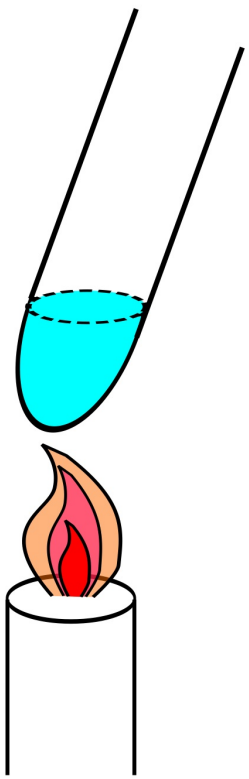
$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

k: 熱拡散係数

熱源があるとき

$$\frac{\partial T}{\partial t} = s$$

s :熱源　(heat source)
ろうそくで温度計を熱している図



熱拡散方程式

1D

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + s(x)$$

2D

$$\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t} = k \left\{ \frac{\partial^2 T(x,y,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x,y,t)}{\partial y^2} \right\} + s(x,y)$$

熱拡散方程式の表現

$$\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t} = k\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) T(x,y,t) + s(x,y)$$

あるいは

$$\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t} = k\,\nabla^2 T(x,y,t) + s(x,y)$$

∇^2: ラプラシアン

問題の数学的定式化

$(0,0) \leq (x,y) \leq (L_x, L_y)$ の長方形領域で

$T(0,y) = T(L_x,y) = T(x,0) = T(x,L_y) = 0$ という境界条件のもと

$$\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t} = k\,\nabla^2 T(x,y,t) + s(x,y)$$

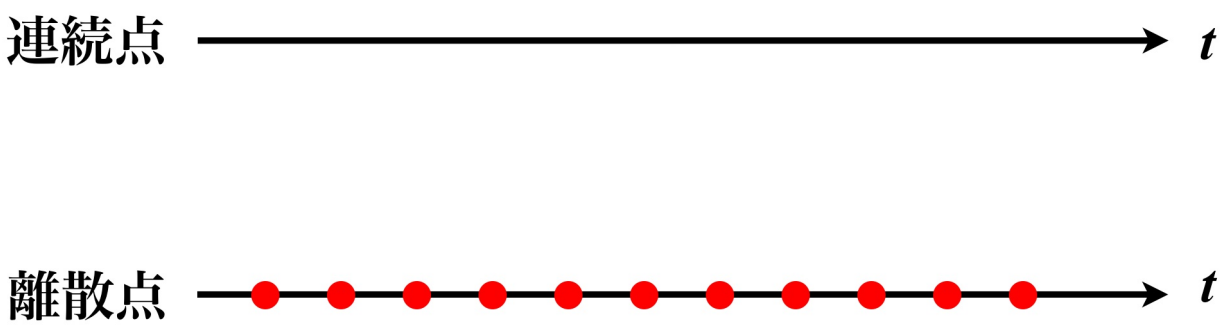
という熱拡散方程式を解き、

定常状態（$\frac{\partial T}{\partial t} = 0$）の温度分布

$T(x,y)$ を求めよ。

離散化

時間・空間の離散化

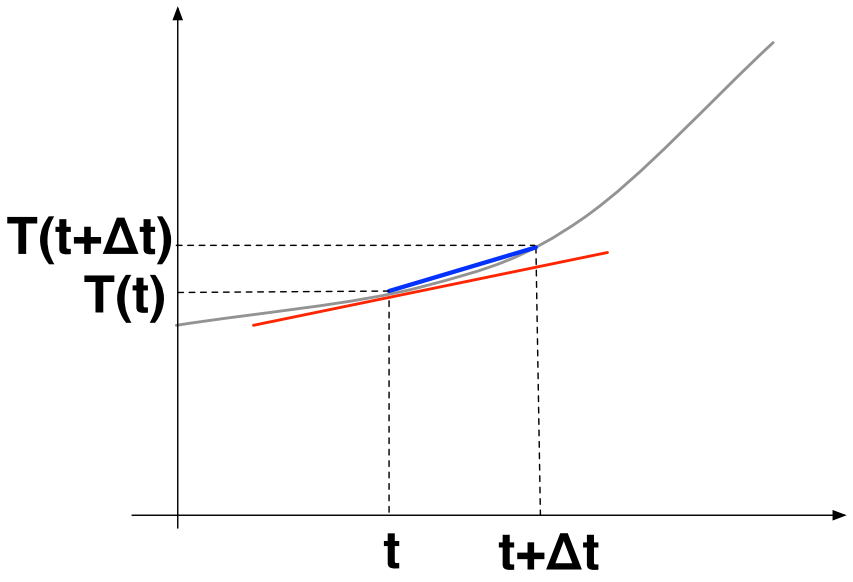


熱拡散方程式の離散化

$$\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t} = k\,\nabla^2 T(x,y,t) + s(x,y)$$

を差分法で離散化する。

時間微分



$$\frac{\partial T}{\partial t} \sim \frac{T(t+\Delta t) - T(t)}{\Delta t}$$

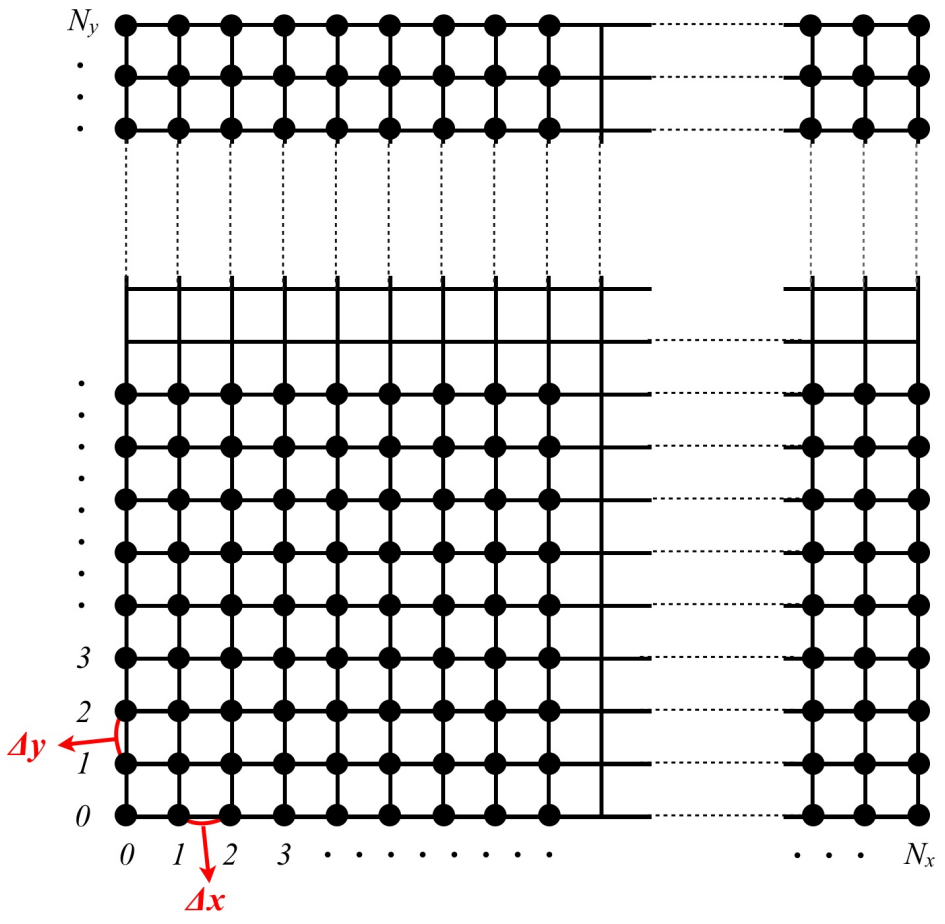
引き算１回＋割り算１回で微分を近似（$1/\Delta t$ をあらかじめ計算しておけば、割り算の代わりに掛け算）

空間微分

$$\frac{\partial^2 T(x_i, y_j)}{\partial x^2} \sim \frac{T(x_{i+1}, y_j) - 2\,T(x_i, y_j) + T(x_{i-1}, y_j)}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 T(x_i, y_j)}{\partial y^2} \sim \frac{T(x_i, y_{j+1}) - 2\,T(x_i, y_j) + T(x_i, y_{j-1})}{\Delta y^2}$$

空間の離散化と格子点の番号付け



熱拡散方程式の差分表現

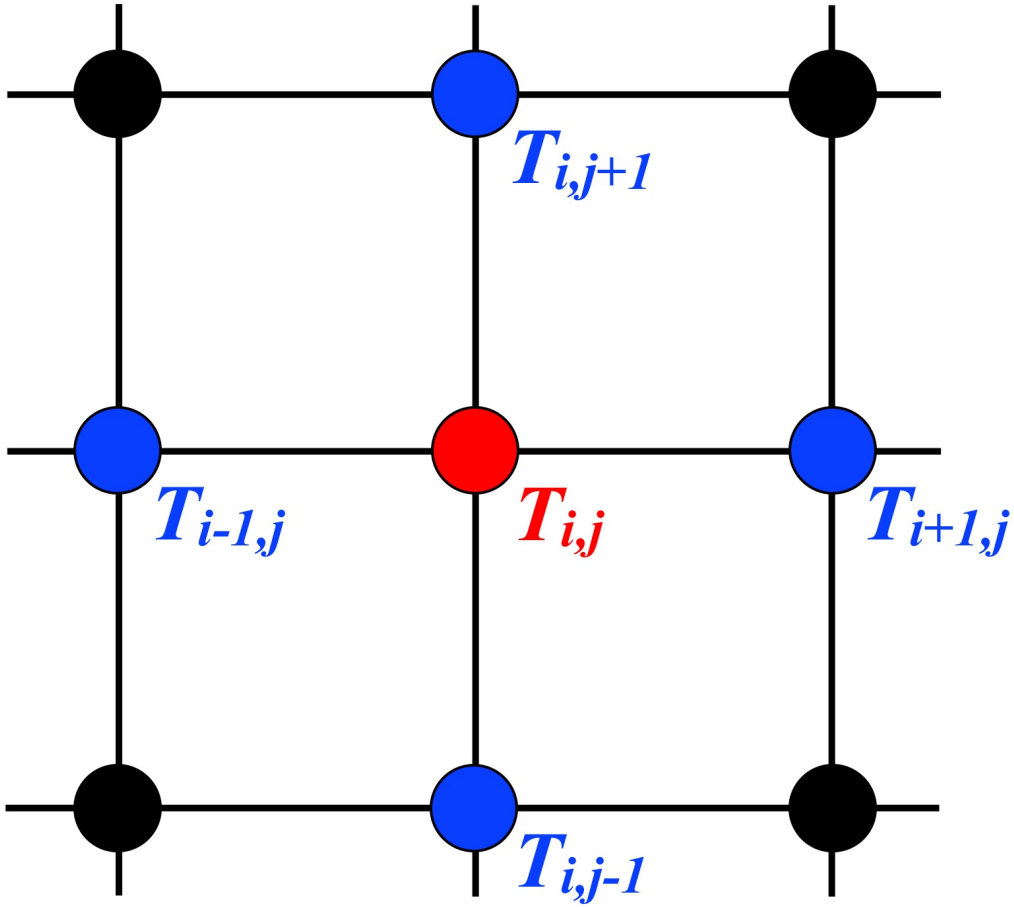
$$\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t} = k\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) T(x,y,t) + s(x,y)$$

$T(x_i, y_j, t) \Rightarrow T_{i,j}(t)$ と略記。

$$\begin{aligned}\frac{T_{i,j}(t+\Delta t) - T_{i,j}(t)}{\Delta t} &= k\left(\frac{T_{i+1,j}(t) - 2\,T_{i,j}(t) + T_{i-1,j}(t)}{\Delta x^2}\right. \\ &\quad \left. + \frac{T_{i,j+1}(t) - 2\,T_{i,j}(t) + T_{i,j-1}(t)}{\Delta y^2}\right) \\ &\quad + s_{i,j}\end{aligned}$$

差分ステンシル

$$\frac{T(x_{i+1},y_j)-2\,T(x_i,y_j)+T(x_{i-1},y_j)}{\Delta x^2}, \qquad \frac{T(x_i,y_{j+1})-2\,T(x_i,y_j)+T(x_i,y_{j-1})}{\Delta y^2}$$



時間発展の式

$$
\begin{aligned}
T_{i,j}(t+\Delta t) &= T_{i,j}(t) \\
&\quad + \frac{k\,\Delta t}{\Delta x^2}\left\{T_{i+1,j}(t) - 2\,T_{i,j}(t) + T_{i-1,j}(t)\right\} \\
&\quad + \frac{k\,\Delta t}{\Delta y^2}\left\{T_{i,j+1}(t) - 2\,T_{i,j}(t) + T_{i,j-1}(t)\right\} \\
&\quad + \Delta t\, s_{i,j}
\end{aligned}
$$

この式は
Δt だけ未来の温度 $=$ 現在の温度分布の四則演算

という形をしている。

式変形

$$
\begin{aligned}
T_{i,j}(t+\Delta t) &= \Delta t \left\{ \frac{k}{\Delta x^2} \left(T_{i+1,j} + T_{i-1,j}\right) \right. \\
&\qquad \left. + \frac{k}{\Delta y^2} \left(T_{i,j+1} + T_{i,j-1}\right) + s_{i,j} \right\} \\
&\quad + \left\{ 1 - \Delta t \cdot 2 \left(\frac{k}{\Delta x^2} + \frac{k}{\Delta y^2} \right) \right\} T_{i,j}
\end{aligned}
$$

最後の項（$T_{i,j}$ に比例する項）の係数がゼロになるように Δt を決める。

つまり

$$\alpha_x = \frac{k}{\Delta x^2}$$

$$\alpha_y = \frac{k}{\Delta y^2}$$

を定義した上で、

$$\Delta t = \frac{1}{2(\alpha_x + \alpha_y)}$$

とする。

熱拡散方程式の離散化

$$
\begin{aligned}
T_{i,j}(t+\Delta t) \quad = \quad & \Delta t \, \{\alpha_x \left(T_{i+1,j}(t) + T_{i-1,j}(t)\right) \\
& + \alpha_y \left(T_{i,j+1}(t) + T_{i,j-1}(t)\right) \\
& + s_{i,j}\}
\end{aligned}
$$

現在の時刻の温度分布から、Δt だけ未来の温度分布を計算。これを繰り返して定常状態になるまで計算すればよい。

$\Rightarrow$ ヤコビ（Jacobi）法

最も簡単な場合

熱拡散係数 $k = 1$ で、熱源 $s(x, y) = 4$、そして $\Delta x = \Delta y \equiv h$ の時

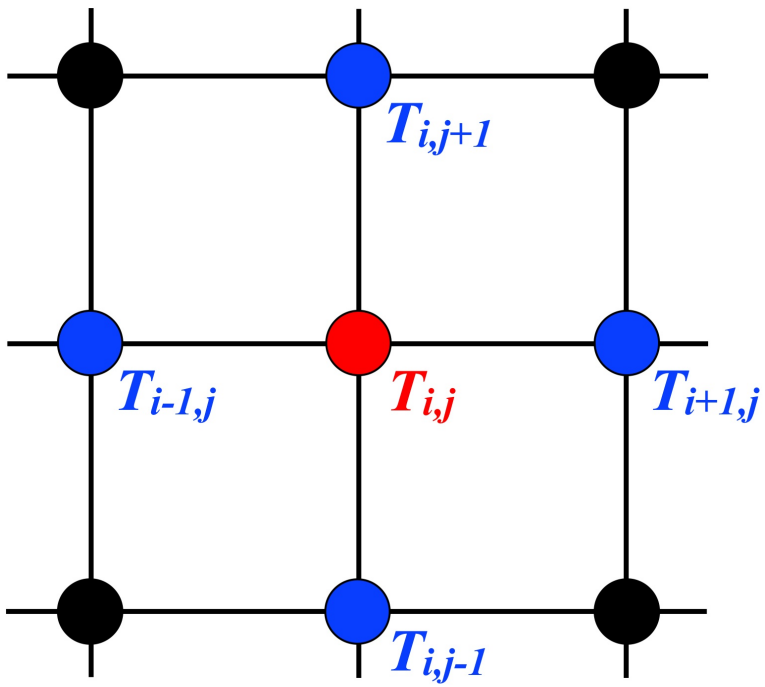
$$\alpha_x = \alpha_y = 1/h^2, \quad \Delta t = h^2/4$$

$$T_{i,j}(t + \Delta t) = \frac{T_{i+1,j}(t) + T_{i-1,j}(t) + T_{i,j+1}(t) + T_{i,j-1}(t)}{4} + h^2$$

と簡単な式になる。

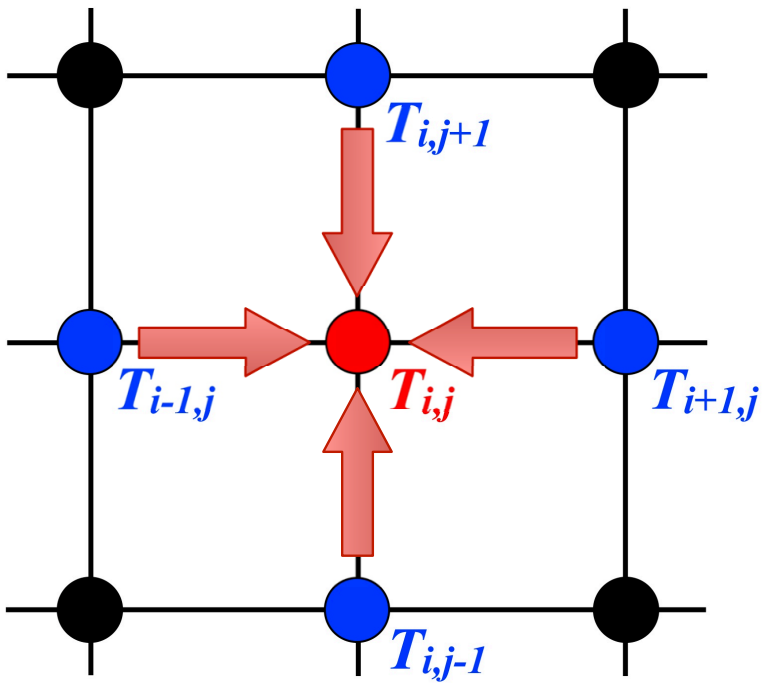
ヤコビ法のイメージ

$$T_{i,j}(t+\Delta t) = \frac{T_{i+1,j}(t) + T_{i-1,j}(t) + T_{i,j+1}(t) + T_{i,j-1}(t)}{4} + h^2$$



ヤコビ法のイメージ

$$T_{i,j}(t+\Delta t) = \frac{T_{i+1,j}(t) + T_{i-1,j}(t) + T_{i,j+1}(t) + T_{i,j-1}(t)}{4} + h^2$$



実装

サンプルコード: heat2.f90

- ヤコビ法で正方形領域の定常状態の温度分布を求める
- 100 ステップに一度、中心の温度を書き出す

コード解説: heat2.f90

```
do n=1, LOOP_MAX  ! 時間更新
  do j=1, NGRID
    do i=1, NGRID
      un(i,j)=(u(i-1,j)+u(i+1,j)+... ! 作業配列
    end do
  end do
  u ...= un ...  ! un を u にコピー
end do
```

演習

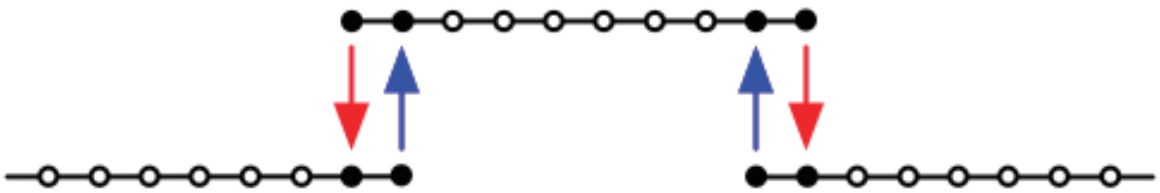
- heat2.f90 を理解しよう
- π–computer 上でシリアルで実行してみよう:
- まずは gfortran heat2.f90 && ./a.out > heat2.data
- そして gnuplot heat2.gp

ちなみに中心点の温度の収束値の解析解は 0.294...

並列化

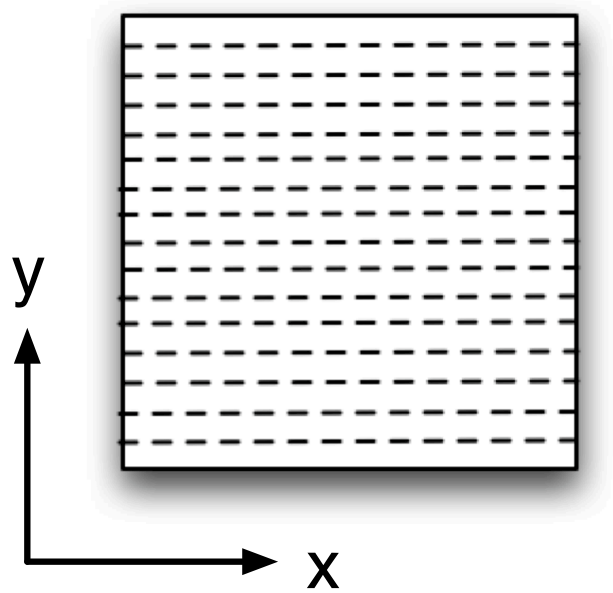
1 次元並列化

x 軸方向または y 軸方向の 1 次元空間を複数の領域に分割する（領域分割）。

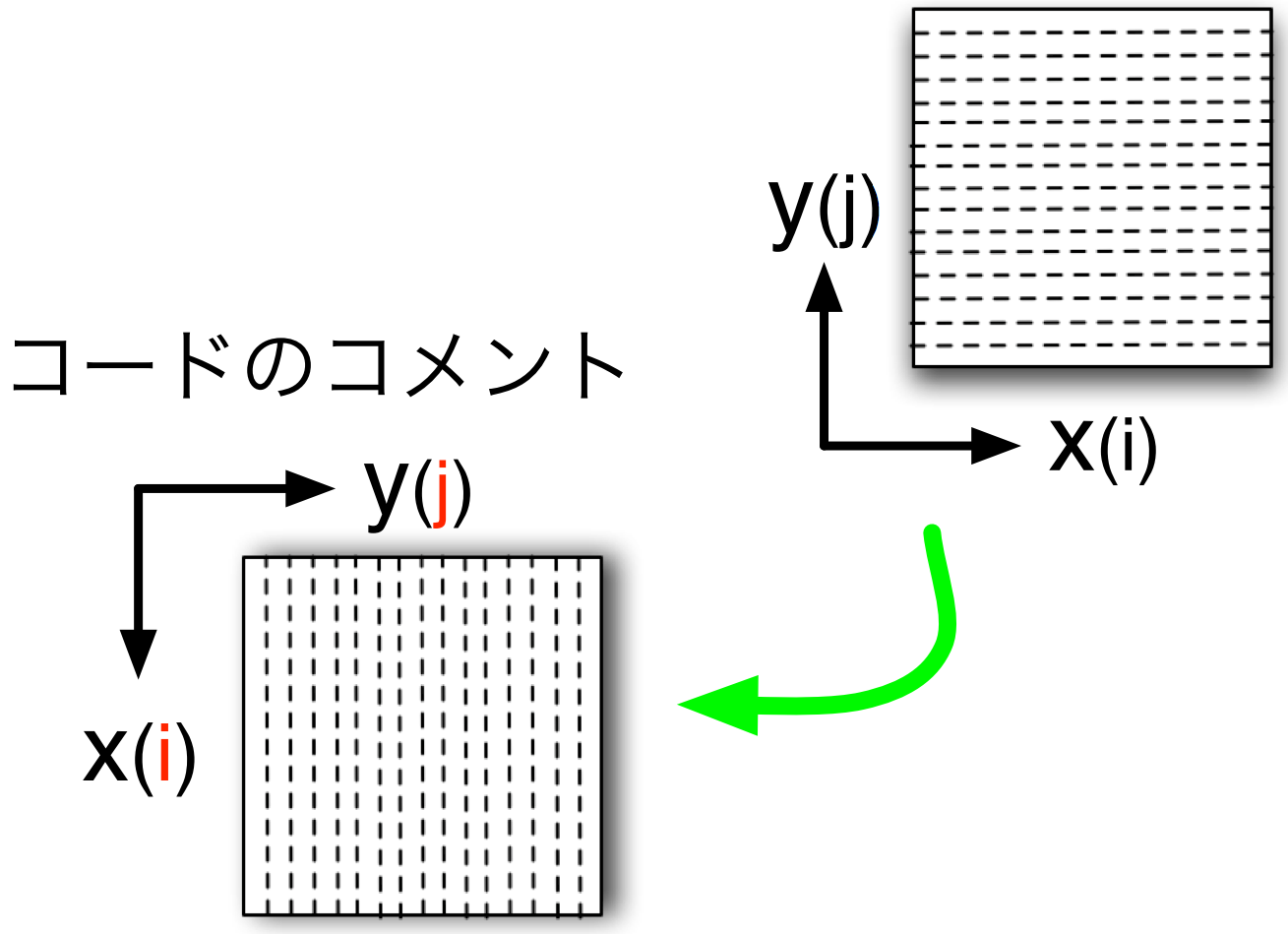


MPI の sendrecv で通信。
以下では y 軸方向に分割する。

1次元領域分割



1次元領域分割



サンプルコード: heat3.f90

```
!
!    When NGRID=11, nprocs=3
!
!     j=0  1   2   3   4   5   6   7   8   9  10  11  12
! i=0 +---+---+---+---+---+---+---+---+---+---+---+---+
!   1 |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |
!   2 |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |
!   3 |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |
!   .
!   .
!   .
!   .
!  11 |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |
!  12 +---+---+---+---+---+---+---+---+---+---+---+---+
!          | rank0 |   |           |   |   rank2   |
!        jstt-----jend |           |  jstt-------jend
!                      |   rank1   |
!                    jstt---------jend
```

今日の課題

- heat3.f90 にはバグ（足りない部分）がある。それを修正せよ。【ヒント： MPI 通信部分】
- 実行方法は冒頭のコメント行にある通り：
  mpifrtpx heat3.f90 をしてから、pjsub -o heat3.data heat3.sh

提出方法： もとのコードを heat3_bug.f90、修正したコードを heat3.f90 とし、以下のコマンドで提出。

```
diff heat3_bug.f90 heat3b.f90 | mail kage
```

〆切： 7/9 （木） 23:59

ジョブスクリプト heat3.sh

```
#!/bin/bash
#PJM -N "heat3"
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=4"
#PJM -L "elapse=02:00"
#PJM -j

drawLine()
{
  echo "#"{1..50} | sed 's/[ 0-9]//g'
}

drawLine
mpiexec ./a.out
drawLine
```

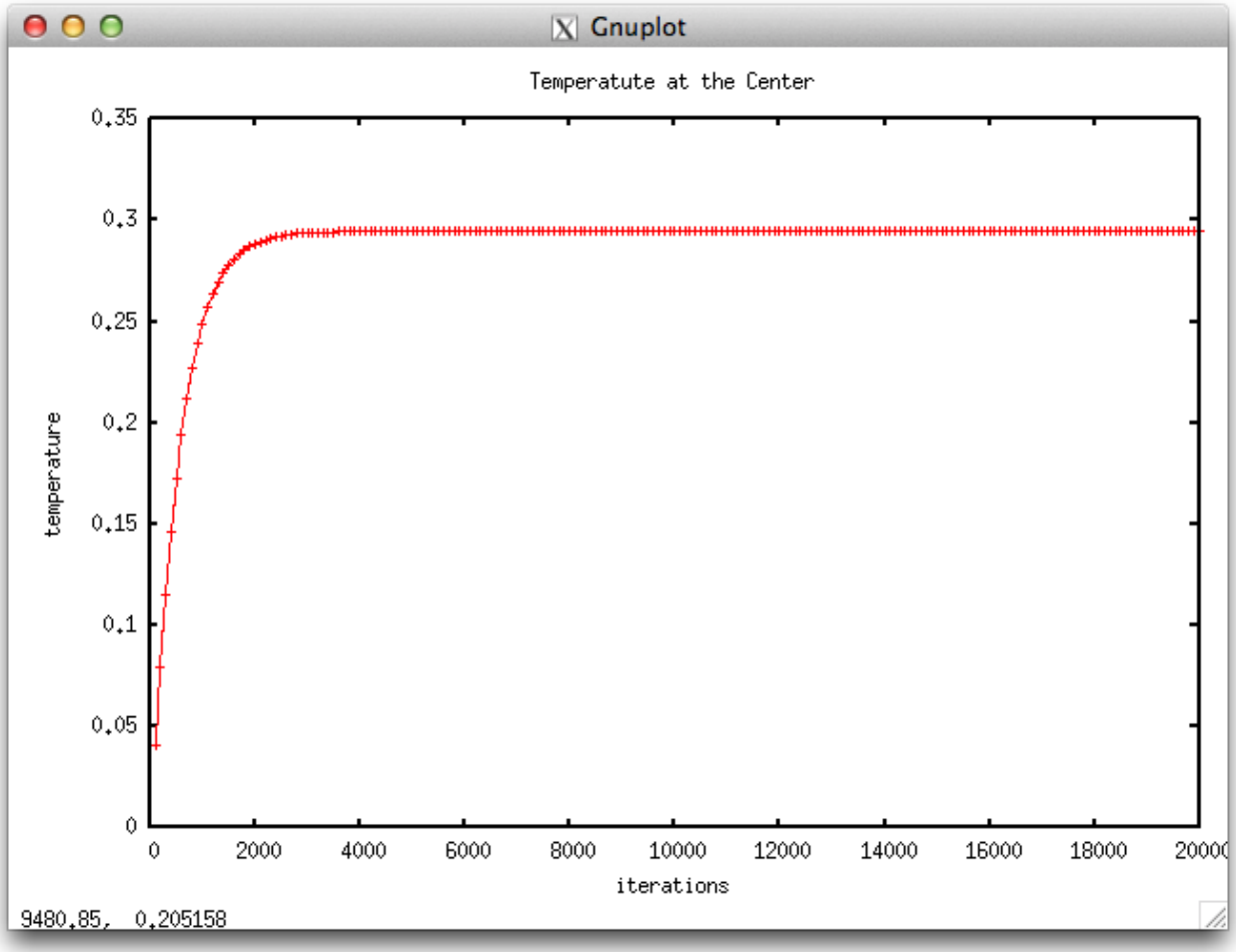
heat3.data の確認

```
##################################################
 # myrank= 1  jstart & jend =  13 24
 # myrank= 2  jstart & jend =  25 36
 # myrank= 3  jstart & jend =  37 49
 # myrank= 0  jstart & jend =  1 12
 100 3.999301081967088E-02
 200 7.924913771637861E-02
 300 0.1152443143128371
 400 0.1463953538713233
 500 0.1725844298183796
 600 0.1943135320532408
```

時間発展のグラフ

（標準）出力ファイル heat3.data の中身を確認せよ
（エディタで開くよりも more / less / head / tail コマンドで見る方が早い。）
gnuplot を立ち上げ、コマンドプロンプトに
gnuplot> plot 'heat3.data' w lp
と入れよ。
あるいは
gnuplot heat3.gp
でもよい。

出力例


Gnuplot
Temperatute at the Center
temperature
iterations
0.35
0.3
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0
0
2000
4000
6000
8000
10000
12000
14000
16000
18000
20000
9480.85, 0.205158

最終温度分布の可視化

heat3.f90 で計算された最終的な平衡温度分布を gnuplot で見てみよう。

正方形を真ん中で横に切る y=0.5 の線上での温度の x 分布をグラフにする。

グリッド番号 i ではなく、x 座標の値を書き出す。i 番目の格子点の x 座標は

$$x_i = h \times (i - n_{\mathsf{mid}})$$

という関係にある。

data ディレクトリ

これからの演習でデータファイルを多数生成するので、データファイル出力専用のディレクトリを用意しよう。
最初にコピーした ../data
というディレクトリを使う。

heat3.f90 にデータ書き出し機能をつける

heat3_print_final_x_prof.f90

diff heat3.f90 heat3_print_final_x_prof.f90

```
! heat3_print_final_x_prof.f90
!   + open/close file 10
!   + print out cross section 1D data.
!   + integer jcut  (cross section for output)
!   + function this_process_has()
!   usage (on pi-computer)
!    1) mkdir ../data  (unless there is already.)
!    2) mpifrtpx heat3_print_final_x_prof.f90
!    3) pjsub heat3.sh (share the jobscript with heat3.f90
```

演習

(1) heat3_print_final_x_prof.f90 をコンパイルし、実行せよ。
- コンパイル mpifrtpx heat3_print_final_x_prof.f90
- ジョブ投入 pjsub heat3.sh （同じジョブスクリプトを使う）
(2) うまくいけば ディレクトリ ../data/ に temp.final_profile_x というファイルができているはず。
(3) more / less / head / tail コマンドで確認。
(4) gnuplot を立ち上げる
(5) `plot "../data/temp.final_profile_x" w lp`

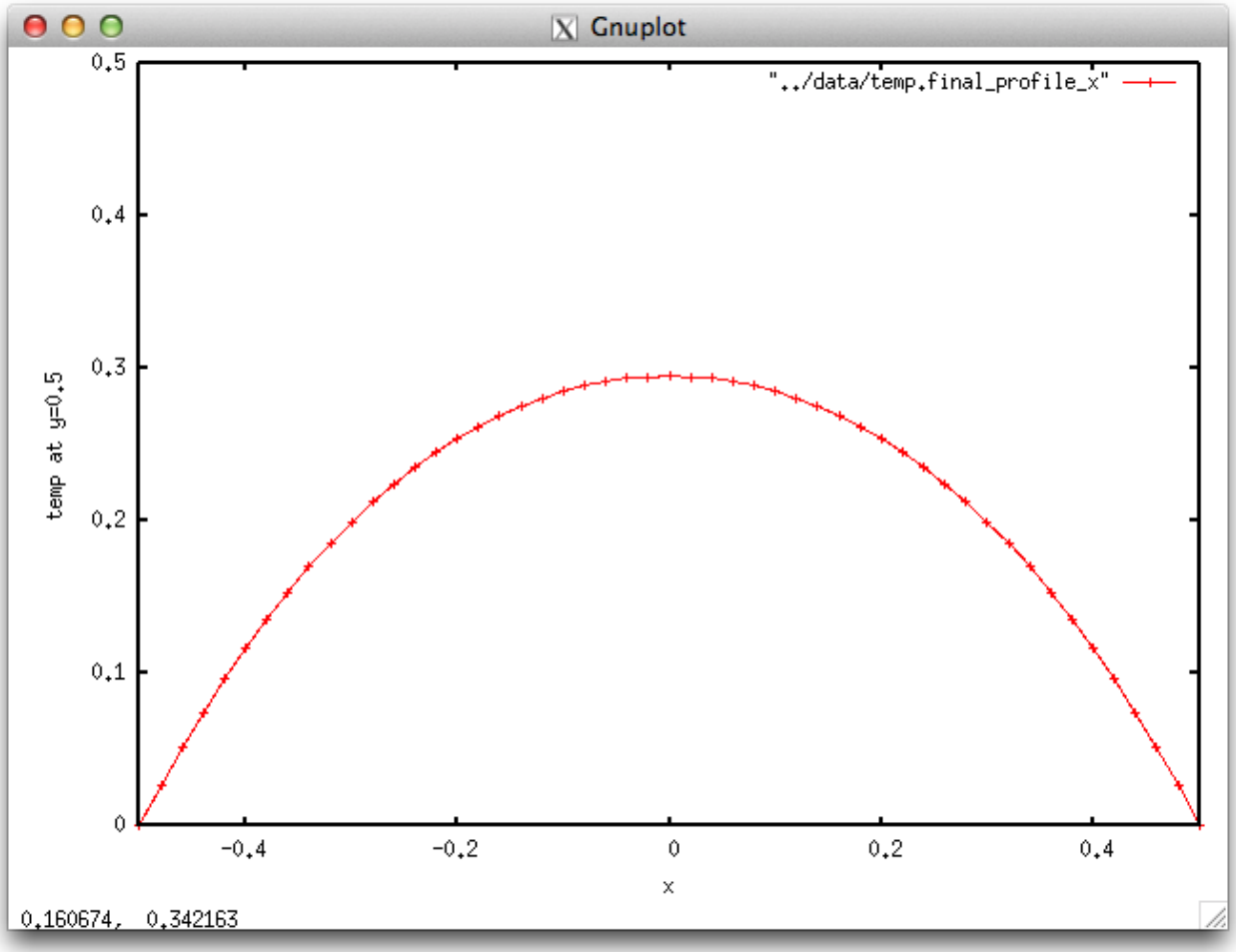
—

最後の 2 ステップは `gnuplot heat3_print_final_x_prof.gp` でも OK.

gnuplot スクリプト src/heat3_print_final_x_prof.gp

```
# heat3_print_final_x_prof.gp
#
# final temperature profile at y=0.5 as a function of x
#
set xrange [-0.5:0.5]
set yrange [0:0.5]
set xlabel "x"
set ylabel "temp at y=0.5"
plot "../data/temp.final_profile_x" w lp
pause -1
```

結果例


Gnuplot
"../data/temp.final_profile_x"
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
temp at y=0.5
-0.4
-0.2
0
0.2
0.4
x
0.160674, 0.342163

アニメーション

アニメーションによって収束の様子を確認しよう。そのためのデータ（連番つきファイル群）を書き出すためのプログラム
heat3_print_x_prof_for_animation.f90
このプログラムをコンパイル＋実行せよ。
ジョブスクリプト（これまで同様）heat3.sh
うまくいけば data ディレクトリに連番ファイルが出力されるはず。ls -l 等で確認せよ。

アニメーション用スクリプトサンプル

```
#
# gnuplot script generated by heat3_animation_x_prof_gp_ge
#

set xlabel "x"                  # x-axis
set ylabel "temperature"        # y-axis
set xrange [-0.5:0.5]           # x-coordinate
set yrange [0.0:0.5]            # temperature min & max
plot "../data/temp.j=middle.0000" w lp
pause 5
plot "../data/temp.j=middle.0001" w lp
pause 1
plot "../data/temp.j=middle.0002" w lp
pause 1
.
.
```

【演習】1次元グラフ アニメーション

- heat3_print_x_prof_for_animation_plotscript_generator.f90 を確認せよ。
- 変数 NGRID と counter_end をチェックせよ。
- gfortran heat3_print_x_prof_for_animation_plotscript_generator.f90
- ./a.out > automatically_generated.gp
- ファイル automatically_generated.gp の中身を確認する
- gnuplot automatically_generated.gp で実行

2次元可視化

diff heat3_print_x_prof_for_animation.f90 heat4_print_final_2d_prof.f90

```
! heat4_print_final_2d_prof.f90
!    + subroutine print__profile_2d
!    c module constants --> module common
!    + type ranks_t :: p
!    + type span_t :: jj
!    - myrank, nprocs, left, right (combined into "p")
!    - jstart, jend (combined into "jj")
!    + function adjust_jstart_and_jend
!    + function set_prof_2d
```

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 sav
  type(span_t)                  :: jj2                    ! used fo
  character(len=4)              :: serial_num             ! put on
  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
```

演習

heat4_print_final_2d_prof.f90 をコンパイル＆実行してみよう。
うまくいけば ../data/temp.2d.0000 ができているはず。

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
 .
```

gnuplot スクリプト生成

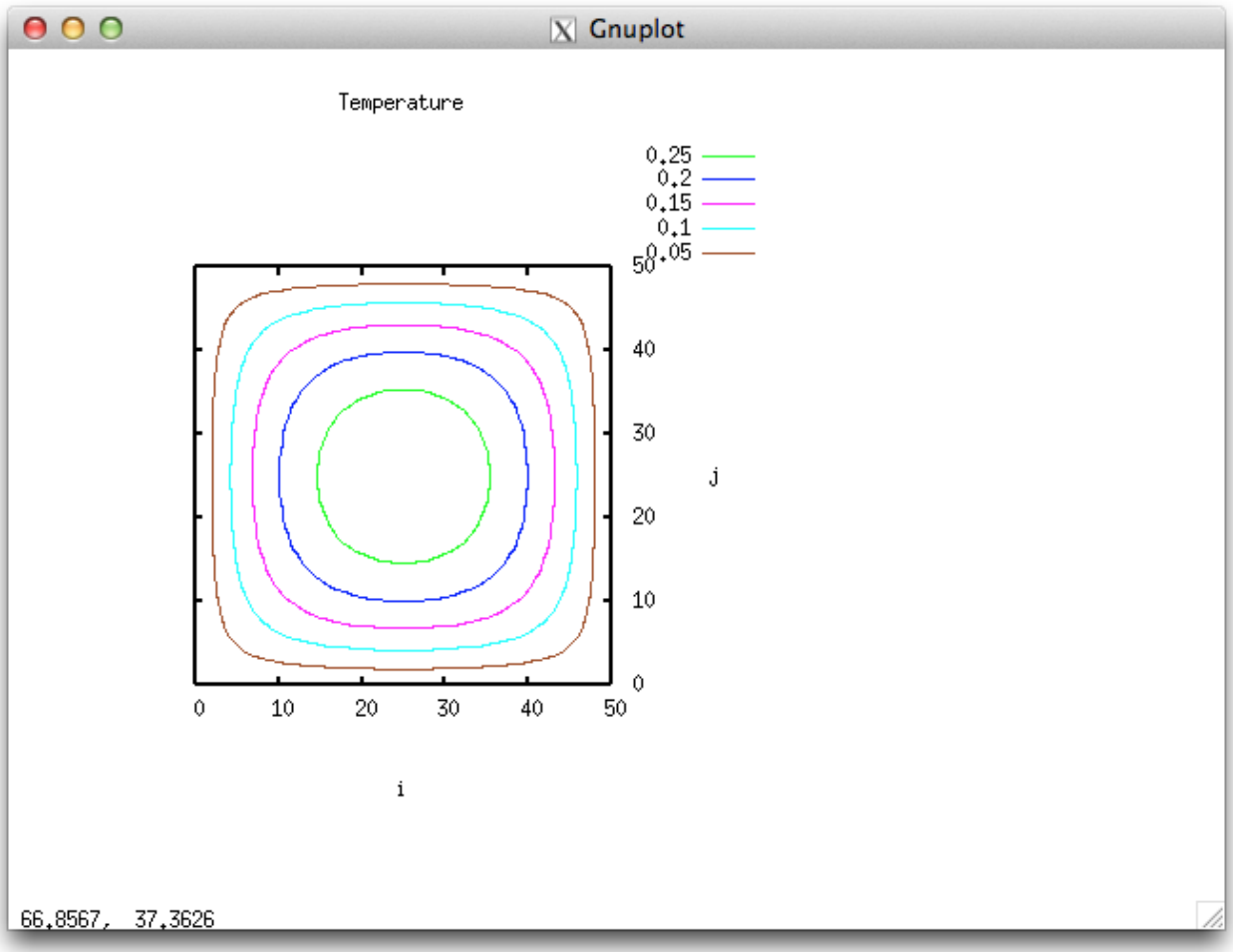
heat4_plot_contour_lines

```
 #
 # A sample gnuplot script: heat4_plot_contour_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"
```

【演習】2次元等高線の表示

- data/temp.2d.0000 のファイルに記された温度の分布を gnuplot の等高線で可視化してみよう。
- ファイル名：heat4_plot_contour_lines.gp
- 実行方法： gnuplot heat4_plot_contour_lines.gp
- ファイル名やパラメータ等を自由に変更してその効果を試せ。

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

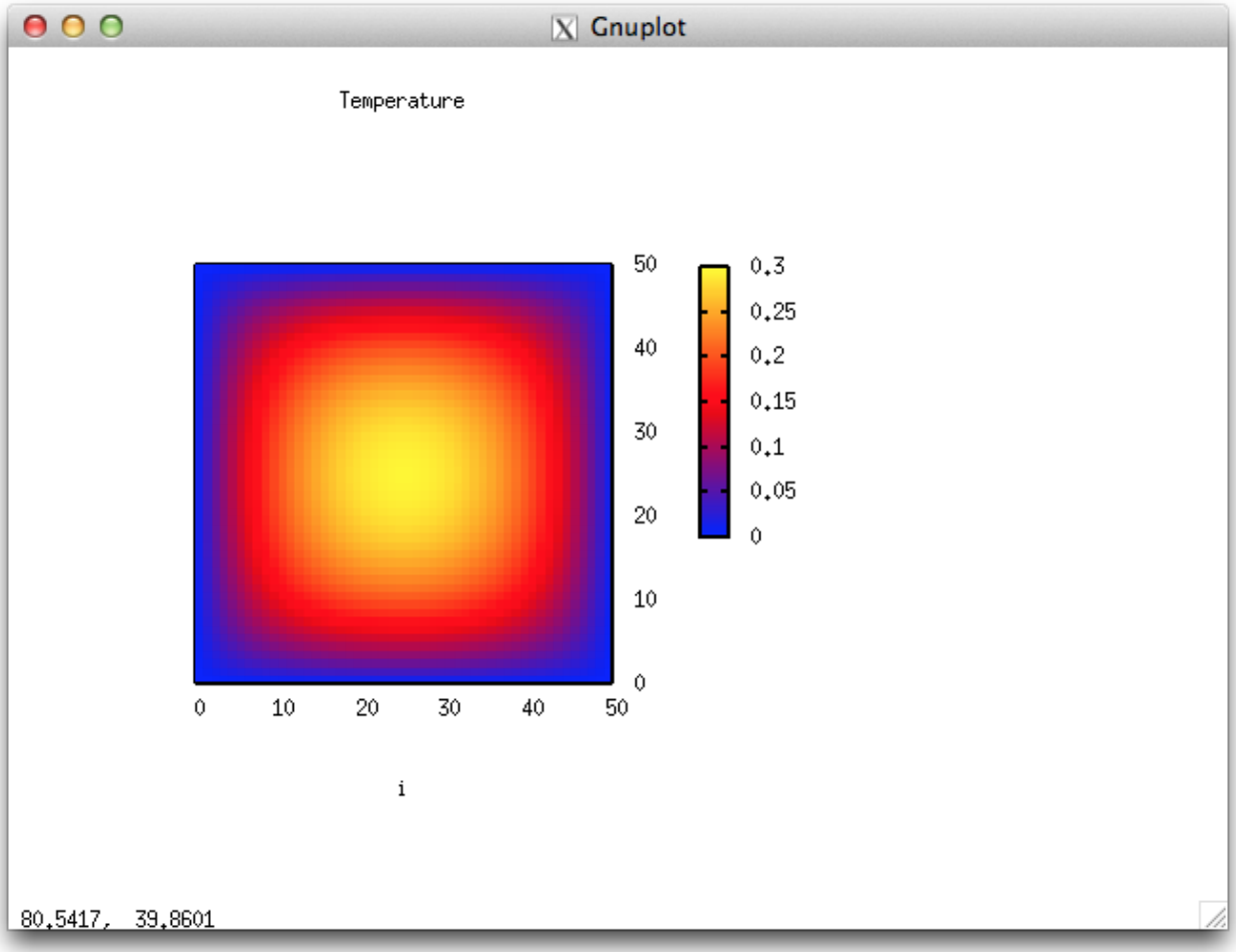
色分布による可視化（静止画）

- 等高線を描く代わりに正方形領域内部各点の温度を色で表現することも可能である。
- 実際に描いてみよう。
- gnuplot のサンプルスクリプトは次のとおり。

heat4_plot_contour_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
```

結果の例


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

gnuplot による鳥瞰図（静止画）

- 2 次元温度分布 T(x,y) を高さ (z) で表す（height plot）
- 鳥瞰図（bird's eye view）

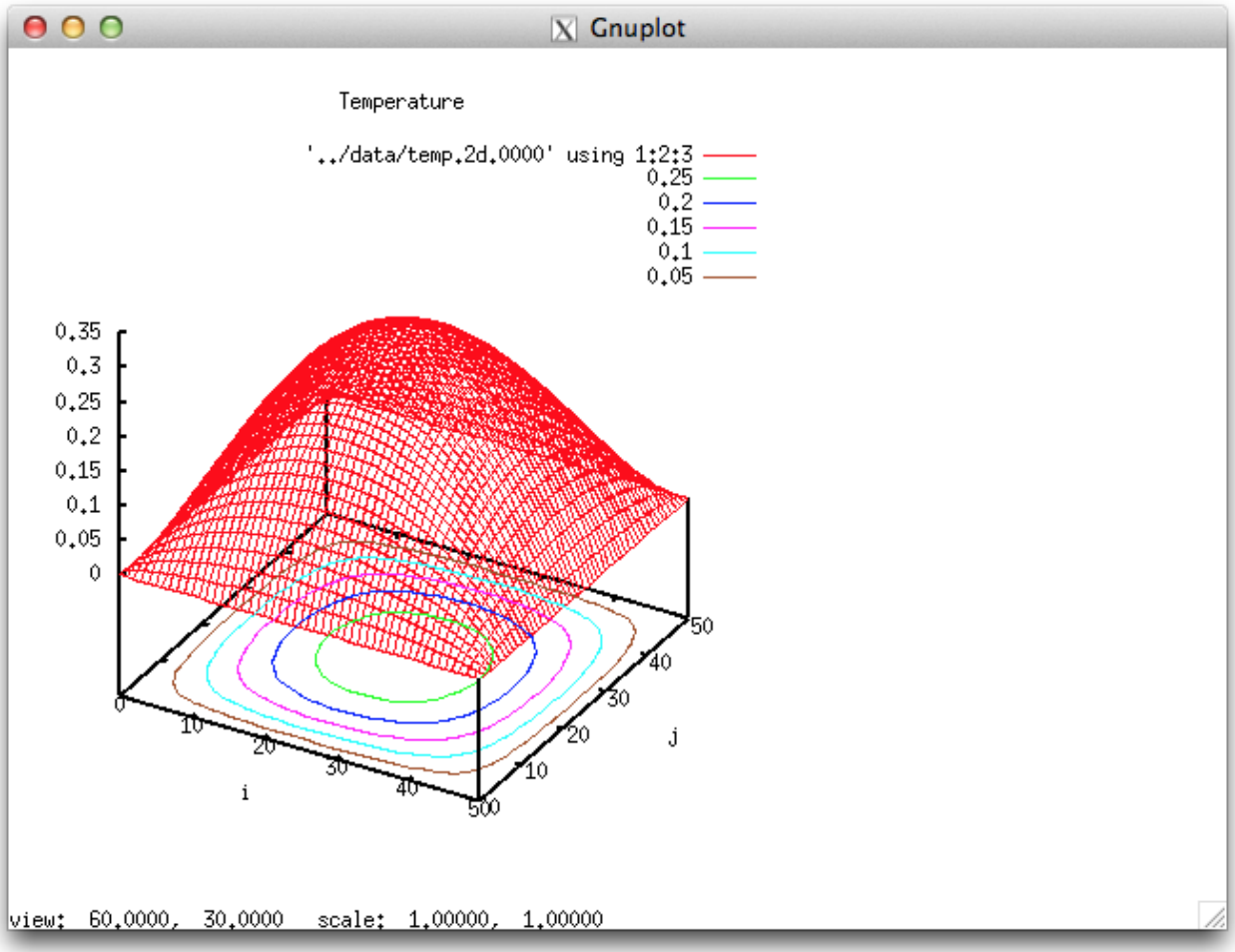
gnuplot スクリプト

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
```

結果の例

マウスで回転できることに注意。



gnuplot による鳥瞰図（回転のアニメーション）

gnuplot の view パラメータで視線の方向を変更したアニメーションを作ってみよう。

gnuplot スクリプト生成プログラム

heat4_plot_rotating_birdseyeview_generator.f90

ジョブキュー

ジョブキュー

これまでジョブスクリプトでは、

```
#PJM -L "rscgrp=small"
```

としてきた。これはジョブキューの種別の指定。
π-computer のジョブキュー：

- `small`: 1〜12 ノード
- `medium`: 1〜48 ノード
- `large`: 48〜84 ノード　　$\Rightarrow$ 最大 $84 \times 16 = 1344$ 並列

再来週（最終回)、この演習の時間は `large` キューが諸君だけに解放されている。

ハイブリッド並列化

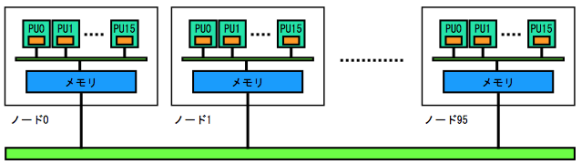
MPI + OpenMP = ハイブリッド並列化

- 一つのノード（プロセッサ）に一つの MPI プロセスを走らせる。
- 各 MPI プロセスで OpenMP によるスレッド並列をする。
- 計算時間の最もかかる do-loop 部分（いまの場合はヤコビ法の部分）だけを本演習の「 OpenMP を使った並列計算」で学んだ方法でコアの数（π-computer の場合は 1 プロセッサあたり 16 コア）だけ fork させて計算すればよい。

本演習の講義資料から引用

本演習で用いる並列計算機

- 富士通 FX10
  - 16コア／プロセッサ
  - 1プロセッサ／ノード
  - メモリ32GB ／ノード
  - 全96ノード

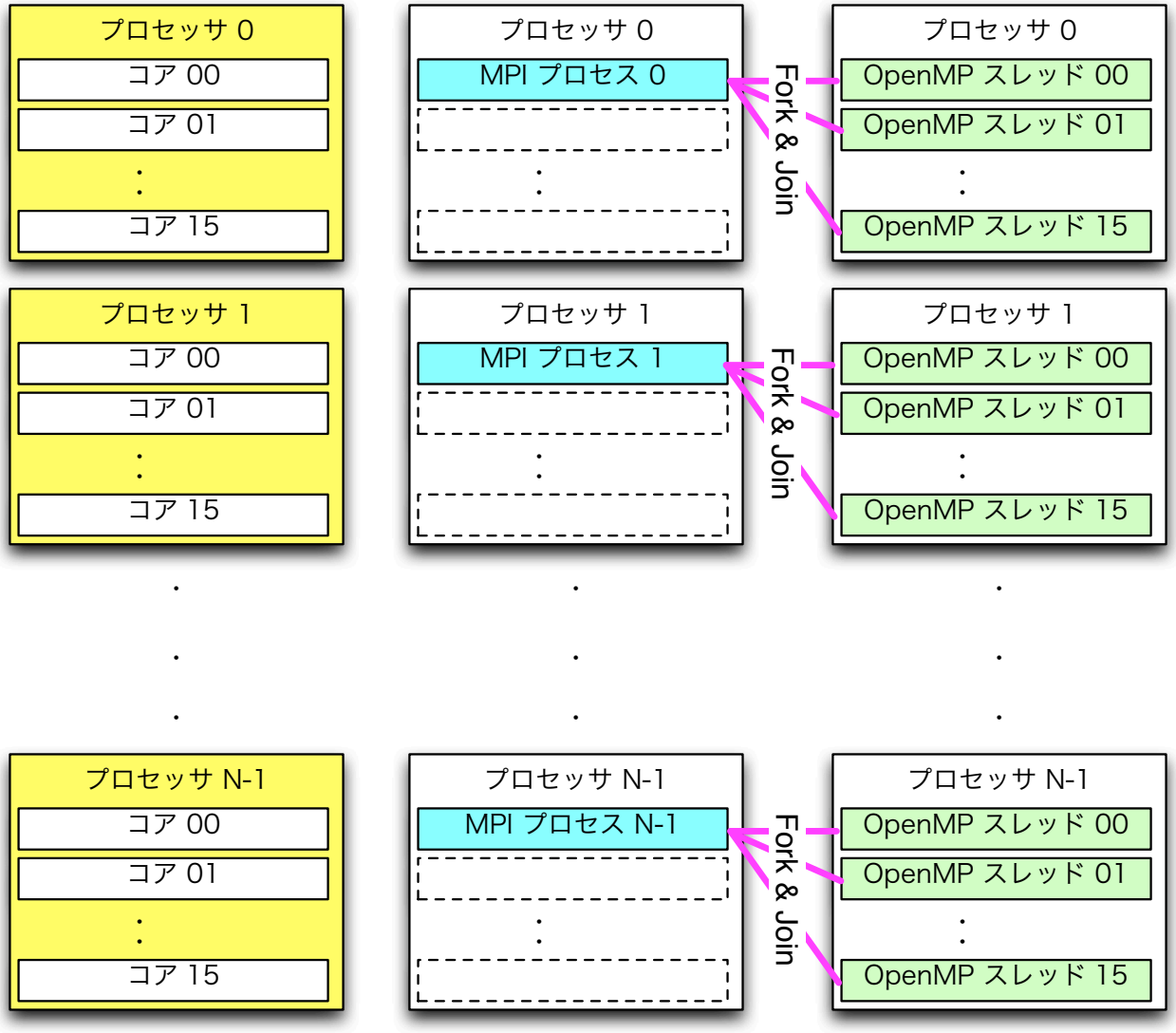


ネットワーク

富士通FX10（96ノード）

- 本セミナーでの利用法
  - 各ノードを使い，OpenMP の練習
  - 複数ノードを使い，MPI の練習
    - この場合，ノード内も含めて MPI で並列化

ハイブリッド並列化


プロセッサ 0
コア 00
コア 01
コア 15
プロセッサ 0
MPI プロセス 0
プロセッサ 0
OpenMP スレッド 00
OpenMP スレッド 01
OpenMP スレッド 15
Fork & Join
プロセッサ 1
コア 00
コア 01
コア 15
プロセッサ 1
MPI プロセス 1
プロセッサ 1
OpenMP スレッド 00
OpenMP スレッド 01
OpenMP スレッド 15
Fork & Join
プロセッサ N-1
コア 00
コア 01
コア 15
プロセッサ N-1
MPI プロセス N-1
プロセッサ N-1
OpenMP スレッド 00
OpenMP スレッド 01
OpenMP スレッド 15
Fork & Join

時間計測

計算時間を測る方法

- CPU 時間
  - Fortran95 ⇒ cpu_time()
- 実時間 (wall clock time)
  - MPI ⇒ MPI_WTIME()
  - OpenMP ⇒ omp_get_wtime()
  - Fortran90 ⇒ system_clock()

heat5.f90

これまで使ってきた heat4...f90 に、system_clock() 関数を使った
時間計測モジュール stopwatch_m を組み込んだ。

```
!
! heat5.f90
!   + module stopwatch, to monitor time.
!   + many calls to stopwatch__stt and ..__stp.
!   - data output calls for profile 1d and 2d (commented out.)
!!   usage (on pi-computer)
!!    1) mkdir ../data  (unless there is already.)
!!    2) mpifrtpx -O3 heat5.f90  (copy un to u is slow in defaul
!!    3) pjsub heat5.sh
```

演習

heat5.f90 をコンパイル・実行せよ。実行方法は コードの冒頭、usage を参照。

—

注意： このコンパイラでは-O3 オプションを付けないと以下の部分の処理（次のページの stopwatch 出力の copy un to u ラベルの部分）が遅い。

```
u(1:NGRID,jj%stt:jj%end)=un(1:NGRID,jj%stt:jj%end)
```

実行例

```
##################################################
job start at Tue Jul 16 21:07:29 JST 2013
##################################################
 # myrank= 3  jj%stt & jj%end =  751 1001
 # myrank= 0  jj%stt & jj%end =  1 250
 # myrank= 2  jj%stt & jj%end =  501 750
 # myrank= 1  jj%stt & jj%end =  251 500
 //=============<stop watch>===============\\
        profile 1d:    0.000 sec
         main loop:    8.334 sec
      mpi sendrecv:    0.409 sec
             jacobi:    4.103 sec
      copy un to u:    3.799 sec
  ------------------------------------
              Total:    8.386 sec
 \\=============<stop watch>===============//
##################################################
job end at Tue Jul 16 21:07:39 JST 2013
```

演習

heat5.f90 で中心部分（最も時間のかかる部分）の do-loop を OpenMP でスレッド並列化したコードを作れ。それを heat6.f90 とせよ。

—

注意：heat5.f90 で行っていた便利な配列演算

```
u(1:NGRID,jj%stt:jj%end)=un(1:NGRID,jj%stt:jj%end)
```

の部分は、omp parallel do では並列化されないので（本演習の OpenMP の回参照）、2 重 do loop に展開する必要がある。

ジョブの投入方法

（１）コンパイル mpifrtpx -Kopenmp heat6.f90
（２）ジョブスクリプト heat6.sh のジョブキュー指定を medium に変更
（３）pjsub heat6.sh ジョブ投入
（４）結果をみる

ジョブスクリプト：heat6.sh（中心部分）

```
#!/bin/bash
#PJM -N "heat6"
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=4"
#PJM -L "elapse=02:00"
#PJM -j
export FLIB_CNTL_BARRIER_ERR=FALSE
.
.
for opn in 1 2 4 8 16
do
export OMP_NUM_THREADS=$opn
echo "# omp_num_threads = " $opn
mpiexec -n 4 ./a.out
done
.
```

スケーリングの確認

heat6.f90 を使い、

- 1 ノード M (≤ 16) スレッドのハイブリッド並列で、
- N (≤ 84) ノードを使い、
- スレッド総数 $P(= M \times N)$ v.s. 計算速度 S のグラフ（S は stopwatch module の出力の “Total” で表示される秒数の逆数と定義する）を、

gnuplot で描く。並列化のスケールが悪い時には、格子点数 NGRID を増やすとよい。