

大規模並列数値計算特論 課題（7/18、25分）

1. 7/18および7/25の講義の概要をA4用紙1枚にまとめて提出。
2. 計算科学連携教育研究センターHPの本講義箇所にあるLennard-Jones粒子系のMD計算プログラムをどのような方法を用いてもいいので、できるかぎり高速に実行できるように高速化・並列化すること。

Lennard-Jones粒子系のMD計算プログラム

粒子数の異なる3つのインプットと対応するプログラム(Fortran,C)を用意した。

	program (Fortran,C)	Input data
256粒子系	md_xe_pbc_256.f90 (.c)	xe_ini_256.d
16384粒子系	md_xe_pbc_16384.f90 (.c)	xe_ini_16384.d
1048576粒子系	md_xe_pbc_1048576.f90 (.c)	xe_ini_1048576.d

コンパイル、実行例

```
[Fortran]
gfortran md_xe_pbc_256.f90
./a.out
[C]
gcc md_xe_pbc_256.c
./a.out
```

なお、インプットデータを自分で作りたいときはmd_xe_initial.fを利用すること。

- ・どのプログラムを用いてもよい。複数を用いて比較をおこなってもよい。
 - ・MPI、OpenMP、ハイブリッド、どのような並列化でもOK。
 - ・使用するコア数の上限も問わない。
ただし、MD計算10000ステップ後において、全エネルギー（標準出力のE）がシミュレーションの全ステップを通して2～5ケタ程度保存していることを確認すること。
（MD開始時は保存が悪いが、平衡状態に近づくと保存がよくなる。大きな系の方が保存がよい。）
 - ・レポートには、
 - (1) どのプログラムを用いたか、こういった計算環境かを記す。
 - (2) 改変前後でどれだけ速くなったか、実行時間の計測結果を記す。
 - (3) どのような並列・高速化を行ったか、また行った工夫を記す。
- 注意: 1048576粒子系は、そのままでは実行にかなりの時間を要するので、並列化が必須となる。

提出 工学部3号館南棟260室前のボックス
8月3日(金)PM17:00まで