

# レポート



## 計算科学連携教育研究センターHP 大規模並列数値計算特論

1. 今回および次回の講義の概要を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限り高速化・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	Input data
256粒子系	md_xe_pbc_256.f90	xe_ini_256.d
16384粒子系	md_xe_pbc_16384.f90	xe_ini_16384.d
1048576粒子系	md_xe_pbc_1048576.f90	xe_ini_1048576.d

- ・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計算実行後において、全エネルギーEが4～5ケタ程度一定に保たれ保存しており、バグがないことを確認すること。

・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。
- (1) 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。
- (2) 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9日(金)PM17:00まで

大規模並列数値計算特論