

計算の概略：電磁流体（MHD）コード

使用言語：Fortran 90

問題：

MHD コードの最適化。経験的に slope limiter 部分が遅いような気がするので、効率的な実装方法があれば助言をいただきたい。また、配列の添字の順番を変えると高速化できるか？変数を引数で渡すのではなく、Fortran 90 のモジュールを使ってグローバル変数化すると速くなるのか？コードの構造への助言がほしい。将来の発展（3次元および円柱・極座標系への拡張）を考えて、今のうちにコードの構造を整理しておきたい。

解決方法・参考情報：

limiter の部分についてですが、おそらく if 文などの分岐処理が入ることによって計算は遅くなると思います。たとえば、minmod limiter の場合、

$$\begin{aligned} \text{minmod}(a,b) &= 0 \quad (\text{if } a*b < 0) \\ &= \text{sign}(a)*\min(|a|, |b|) \quad (\text{if } a*b > 0) \end{aligned}$$

ですが、

$$\text{minmod}(a,b) = \text{sign}(a)*\max(0, \min(|a|, \text{sgn}(a)*b))$$

のように、max と min 関数を組み合わせることで表現できます。if 文の場合とどちらが速いかは計算環境によるかと思いますが、後者のやり方をお試してください。

最適化に関して、プロファイラを使ってより詳細に各ルーチンにかかる時間を計測することをお奨めします。大型計算機では商用のプロファイラが利用可能で、詳細な情報（FLOPS 等）を得ることができます。それ以外の個人 PC 等をご利用の場合は、以下の 3 つが使えるかと思います。

・ gprof：これは各サブルーチンの時間計測を行ってくれますが、FLOPS の計測までは行いません。利用にはコンパイル時に -pg をつけてください。

<<http://sourceware.org/binutils/docs/gprof/>>

・ intel VTune:商用です。<<http://software.intel.com/en-us/articles/serial-parallel-profilers/>>

・ papi (Performance Application Programming Interface) : フリーですが、OS にパッチを当てて必要があり。 <<http://icl.cs.utk.edu/papi/index.html>>

添字の順番ですが、これは計算機のアーキテクチャに依るようです。最近ではスカラ計算機でもベクトル演算の機能を持つものもあるので、1次元目に長い配列を用意したほうが良い場合もありますし、キャッシュに乗るように、変数の番号を先頭に持ってきたほうが速くなる場合もあります。領域分割の仕方と配列順序による MHD コードの並列化効率を調べた論文がありますので、ご参照ください。

cf. Fukazawa et al., "Performance measurement of magneto-hydro-dynamic code for space plasma on the various scalar type supercomputer systems ", IEEE Trans. Plasma Sci., 38, 9, 2254-2259, 2010.

引数で受け渡す方法とグローバル変数化する方法の違いですが、後者のほうが若干速いということを聞いたことがあります。ただし、グローバル変数でやりとりする方法は、次のご質問と関係して、おすすめしません。

ご質問「コードの構造への助言がほしい。将来の発展（3次元および円柱・極座標系への拡張）を考えて、今のうちにコードの構造を整理しておきたい。」に対してですが、もしコードの公開と共同開発をお考えのようでしたら、CANS<<http://www.astro.phys.s.chiba-u.ac.jp/netlab/astro/index.html>>の構造が参考になるかと思います。CANS では、MHD シミュレーションのエンジン部分 (Roe's, HLLD, CIP など) のサブルーチンはライブラリ化して、各課題ごとにリンクして使うようになっています。従って、エンジン部分に対しては、引数で変数を渡しています。これは、ライブラリ化するためには、サブルーチン (モジュール) の独立性を高める必要があるからです。