



・iSALEは基本的にソースコードの内容を知らなく ても動くように設計されている

 インストール時に作成された実行ファイル(iSALE2D)が 初期条件(asteroid.inp)、物質の情報(material.inp)を
 読み込み計算

→毎回、コンパイルしなくてよい

・計算結果もpySALEPlot、VIMoDを使うことで図として 表示することができる



一方で、設定されている物理量以外を出力することはできない

・計算結果はバイナリで出力されるため、テキスト化や他の描画ソフト(gnuplot)で見るには一手間必要

コード内でどういう計算が行われているのかがわからない



・今回の発表では、ソースコードの場所やコードの 変更の仕方を簡単に紹介



 ソースコードはダウンロードしたディレクトリ内の /iSALE/src/に保管されている (私の場合~/iSALE-Dellen/work/iSALE/src/)

/iSALE/src/には以下の四つのディレクトリ





ptools 主にiSALEMatとiSALEParを作成するための プログラムを保管(一部iSALE2Dでも使用)

optional

] 不明(iSALE2Dの並列計算プログラム? ANEOSのtable作成プログラム?)



- 実行ファイルiSALE2Dを作成するためのプログラムを保管 (Makefileやメイン関数(iSALE2D.F90)など)
- ・出力を変更したい場合は、write.F90などの中身を変更すればいい

shared

 iSALEの2Dと3Dで共通して使われるプログラムを保管 (.inpファイルを読み込むプログラムなど)
 モジュールはこのディレクトリに保管されている 変数の多くはmod_isale.F90内で宣言

シースコードの場所

・ディレクトリ2D内の実行ファイルはデモ計算の実行ファイルとは別物(bin以下のiSALE2Dにリンク)

例 demo2D内で以下のコマンド入力

\$ Is -1

suetsugu@pc1606:~/iSALE-Dellen/in 合計 6188	nstall/share/examples/demo2D\$ ls -l	
drwxrwxr-x 2 suetsugu suetsugu	4096 10月 26 22:06 Plots	
drwxrwxr-x 2 suetsugu suetsugu	4096 10月 26 21:54 Plotting	
-rw-rr 1 suetsugu suetsugu	4610 10月 26 21:54 asteroid.inp	
drwxrwxr-x 5 suetsugu suetsugu	4096 10月 26 22:03 demo2D	
lrwxrwxrwx 1 suetsugu suetsugu	45 10月 26 21:54 eos -> /home/suetsugu/iSALE-Dellen/insta	ll/share/eos
lrwxrwxrwx 1 suetsugu suetsugu	47 10月 26 21:54 iSALE2D -> /home/suetsugu/iSALE-Dellen/i	.nstall/bin/iSALE2D
lrwxrwxrwx 1 suetsugu suetsugu	48 10月 26 21:54 iSALEMat -> /home/suetsugu/iSALE-Dellen/	install/bin/iSALEMat
lrwxrwxrwx 1 suetsugu suetsugu	48 10月 26 21:54 iSALEPar -> /home/suetsugu/iSALE-Dellen/	install/bin/iSALEPar

・更新したiSALE2Dをbin以下にコピーすることで、はじめて 更新したiSALE2Dの実行できる



 ディレクトリ2D以下のiSALE2D.F90がメイン関数 (iSALE-chicxulubの場合はmain.F90)

・一応、各サブルーチンについて、短く説明が書かれているので、慣れるまでは、このプログラムから目的の物理量が計算されているプログラムまで辿るのがおすすめ

*	
	iSALE2D.F90の中身
	35行目まで
	<pre>PROGRAM_ISALE</pre>
	Implicit none real :: time_start !< Wall time of simulation start real :: time_now !< Wall time now real :: time_cpu !< Duration of simulation (wall time) out = STDOUT ! for the very first beginning iSALE2D.F90でのみ使用する ioerr = STDOUT ! first start with initializing MPI (if required) call initialize_mpi() !DE flag analyzation must come before any text output ! to allow the use of help2man to generate a manpage. call analyze flags ! interprete user-defined command line statements

iSALE2D.F90の中身 35行目~50行目

iSALE2Dを実行すると端末に表示されるもの →実習1ではここに名前加えます

```
write(*,*)
write(*,*)
write(*,*)"
                                   iSALE
            +++
write(*,*)"
            +++
                    by Kai Wuennemann, Gareth Collins,
write(*,*)" +++
                    Dirk Elbeshausen and Tom Davison
if (verbose>0) then
   write(*,*)'
               +++
   write(*,*)"
               +++
                                    by Ivanov
                    based on SALEB
   write(*,*)
                +++
                              SALES
                                     by Melosh
               +++
   write(*,*)
                              SALE
                                     by Amsden et al.
               +++
   write(*,*)"
endif
write(*,*)" +++
                      Contact: isale@imperial.ac.uk
write(*,*)
write(*,*)
```

```
iSALE2D.F90の中身
                    50行目~73行目
call read param() ! generate log-files, open input-files
call setup derive param() ! compute derived parameters and prepare EOS, etc.
call setup info()
                     acquire some information
call decomp()
if (dumpname(1:4).eq.'NONE') then ! No restart requested
  call celset ! Generate Grid and set model
  call setup check() ! Perform setup sanity checks
else
  call restore
                   ! Check for restart
end if
                                      astroid.inp, material.inp
! Identify the materials in each cell...
                                      の読み込み、dumpfile
call identify mat(eps min)
                                      の有無の確認、
! If just performing a set-up check end here
call info stop after setup()
                                      初期状態を計算、
! aquire and store start time information
call CPU TIME(time start)
                                      端末への表示など
time cpu=0.
```

! Loop until reached end time, or reached wall time do while (time.lt.tend.and.time_cpu.lt.tlim)

if (dynamic_regrid .eq. 1) call update_dynamic_regrid ! Check for dynamic regrid then apply

73行日~108行日

- call update_state ! Initialize some values at the beginning of cycle
- **call** check_state_all() ! check the state/phase of the materials
- call savedata ! Save data
- call update_timestep ! Calculate timestep
- if (tracer_motion .eq. TR_VEL) call movetracer ! move tracer according to velocities
- call update_cycle ! Calls for data dumps, screen prints ...
- call update_velocity_stability ! Calc. artf. vicosity and alternate node coupling
- call update_velocity_pressure ! Explicit lagrangian calc. with respect to p
- call update_energy ! Update Energy

```
if (ALE_MODE /= EULERIAN) call update_mesh ! Move the mesh
if (ALE_MODE /= LAGRANGIAN) call advect ! Flux quantities
```

```
! mark pressure field as stored
! (for calculation of differential pressure required)
```

```
! Compute cpu time since job began
call CPU_TIME(time_now)
time_cpu = time_now-time_start
```

TimeがTEND以上に なるまでループし、 計算を続ける



・ループ終了後の後処理と計算終了

```
! Finish simulation...
call savedata
call write_dump(1) ! Make data dump on exit
call finalcycle(time_cpu)
call isale_finalize("<<<END OF SIMULATION>>>")
```

END PROGRAM ISALE



変更の仕方は極めて原始的

1. iSALE2D.F90やマニュアルを見て、変更したい物理量を 扱ってそうな変数及び、サブルーチン名をみつける

2.grepコマンドを使って当たりをつけた変数を含むプログラムを検索

\$grep "変数名" *.F90



3.検索した文字を含むプログラムが表示される

例

\$ grep "time_cpu" * .F90

suetsugu@pc1606:~/iSALE-Dellen/work/iSALE/src/2D\$ grep "time_cpu" *.F90
iSALE2D.F90: real :: time_cpu !< Duration of simulation (wall time)
iSALE2D.F90: time_cpu=0.
iSALE2D.F90: do while (time.lt.tend.and.time_cpu.lt.tlim)
iSALE2D.F90: time_cpu = time_now-time_start
iSALE2D.F90: call finalcycle(time_cpu)</pre>

"time_cpu"が書かれているプログラム

4.定義等が見つからなければ、別の変数等に変更して プログラムを絞り込んで見つける



5. プログラムを変更する

例 time_cpuを端末に表示する

```
! Compute cpu time since job began
   call CPU_TIME(time_now)
    time cpu = time now-time start
    time output = time output + dt
                                                         ---R.S
   if(time output>0.1)then
                                                        ---R.S
      write(*,*) 'TIME[s]=', time,'CPU TIME[s]=', time cpu
                                                        ---R.S.
      ---R.S
   end if
    end do
 ! Finish simulation...
 call savedata
 call write_dump(1) ! Make data dump on exit
 call finalcycle(time_cpu)
 call isale_finalize("<<<END OF SIMULATION>>>")
END PROGRAM ISALE
```



6. プログラムを更新したので、コンパイルする

\$ make

7. 実行ファイル(iSALE2D)が更新されたので、 実行ファイルをリンク先に移動する

\$ cp iSALE2D /home/suetsugu/iSALE-Dellen/install/bin/

これでどのデモ計算を行った場合でも、 更新したiSALE2Dが実行されることになる



- ・実習1:名前の追加
- ・実習2:output.txt0への出力回数の変更
- ・実習3:端末への計算時間の表示(時間があれば)

・iSALE2Dを実行すると以下のように表示される

suetsugu@pc1606:~/iSALE-Dellen/install/share/examples/demo2D\$./iSALE2D

+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++				
+++ iSALE	+++			
+++ by Kai Wuennemann, Gareth Col	.lins, +++			
+++ Dirk Elbeshausen and Tom Dav	vison +++			
+++	+++			
+++ based on SALEB by Ivanov	+++			
+++ SALES by Melosh	+++			
+++ SALE by Amsden et al	+++			
+++	+++			
+++ Contact: isale@imperial.ac.	uk +++			
+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++				

コードをいじるので自分の名前を追加しよう



・ソースコードの保管されているディレクトリに移動

\$ cd ~<u>/iSALE-Dellen/work</u>/iSALE/src/2D

人によって異なる

 iSALE2D.F90を変更するので、変更前にバック アップをとっておく

\$ cp iSALE2D.F90 iSALE2D_bk.F90

(iSALE-chicxulubの場合はmain.F90なのでmain_bk.F90などにする)

・適当なテキストエディタでiSALE2D.F90を開く

\$emacs iSALE2D.F90 -nw

テキストエディタが emacsの場合

write(*,*)					
write(*,*)" +++++	+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++	+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++	+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++	++++ "	
write(*,*)" +++		iSALE		+++ "	
write(*,*)" +++	by Kai Wuen	nnemann, (Gareth Collins,	+++ "	
write(*,*)" +++	Dirk Elbes	shausen ar	nd Tom Davison	+++ "	
if (verbose>0) the	en				
<pre>write(*,*)" ++</pre>	+			+++	•••
<pre>write(*,*)" ++</pre>	+ based on S	SALEB by	Ivanov	+++	••
<pre>write(*,*)" ++</pre>	+ S	SALES by	Melosh	+++	
<pre>write(*,*)" ++</pre>	+ S	SALE by	Amsden et al.	+++	••
<pre>write(*,*)" ++</pre>	+			+++	•••
endif					
<pre>write(*,*)" +++</pre>	Contact:	isale@imp	perial.ac.uk	+++ "	
write(*,*)" +++++	+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++	+++++++++	+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++	++++ "	
write(*,*)					

・適当なテキストエディタでiSALE2D.F90を開く

\$emacs iSALE2D.F90 -nw

テキストエディタが emacsの場合



・例えば

write(*,*)	
write(*,*)" ++++++++++++++++++++++++++++++++++++	++++ "
<pre>write(*,*)" +++ iSALE</pre>	+++ "
<pre>write(*,*)" +++ by Kai Wuennemann, Gareth Collins,</pre>	+++ "
<pre>write(*,*)" +++ Dirk Elbeshausen, Tom Davison</pre>	+++ "
<pre>write(*,*)" +++ and Ryo Suetsugu</pre>	+++ "
if (verbose>0) then	
write(*,*)" +++	+++ "
<pre>write(*,*)" +++ based on SALEB by Ivanov</pre>	+++ "
<pre>write(*,*)" +++ SALES by Melosh</pre>	+++ "
<pre>write(*,*)" +++ SALE by Amsden et al.</pre>	+++ "
write(*,*)" +++	+++ "
endif	
<pre>write(*,*)" +++ Contact: isale@imperial.ac.uk</pre>	+++ "
<pre>write(*,*)" ++++++++++++++++++++++++++++++++++++</pre>	+++++ "

追加できたら保存する(emacsだとCtrl + X, Ctrl + S)



•iSALE2D.F90を更新したので、コンパイルする

\$make

・実行ファイル(iSALE2D)が更新されたので、 実行ファイルをリンク先に移動する

\$cp iSALE2D /home/suetsugu/iSALE-Dellen/install/bin

・確認のためdemo2Dを実行してみると、

suetsugu@pc1606:~/iSALE-Dellen/install/share/examples/demo2D\$./iSALE2D

+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++	++
+++ iSALE ++	++
+++ by Kai Wuennemann, Gareth Collins, ++	++
+++ Dirk Elbeshausen, Tom Davison ++	++
+++ and Ryo Suetsugu ++	++
+++ ++	++
+++ based on SALEB by Ivanov ++	++
+++ SALES by Melosh ++	++
+++ SALE by Amsden et al. ++	++
+++ ++	++
+++ Contact: isale@imperial.ac.uk ++	++
+++++++++++++++++++++++++++++++++++++++	++

•output.txt0には、様々な情報が記録される

demo2Dの場合、demo2D/demo2D/以下

Initial total energy and mass:			
IE: 7.1180726904816678E+020	KE:	2.00868504777407	37E+019
TE: 7.3189411952590756E+020	M:	1799741142126422	.2
CYC= 0 T= 0.0000E+00) C	DT= 1.000E-03 FLAG=0	i
TE= 100.0000 KE= 100.0000	0]	IE= 0.0000 TM=	100.0000
GMESH= 0.00E+00 GTARG= 0.00E+00		PERCENT COMPLETE:	0.000%
LIMITING CELL: I= 1 J= 111			
CONC= 1.0000 1.000	00		
VERTEX 14= 1.0000 1.000	00	1.0000 1.0000	
C SOUND= 4012.53 C MAT	Γ=	6500.00	
SAVE DATA (jpeg-format):		10 1.257789253	5548835E-002
wrote 'Cm1' : (113: 141), min/max	x =	0.00000E+00	1.00000E+00
wrote 'Den' : (113: 141), min/max	x =	0.00000E+00	3.43755E+03
wrote 'Pre' : (113: 141). min/max	x =	-8.26891E+06	2.98189E+10
wrote 'Tmp' : (113: 141). min/max	x =	0.00000E+00	5.22904E+03
wrote 'Yld' : (113: 141). min/max	x =	0.00000E+00	1.84336E+09
wrote 'Dam' : (113: 141). min/max	x =	0.00000E+00	9.97620E-01
wrote 'Ert' : (113: 141), min/max	x =	0.00000E+00	1.62985E+01
wrote 'Vib' : (113: 141), min/max	x =	0.00000E+00	2.00000E+02
wrote 'YAc' : (113: 141), min/max	x =	0.00000E+00	1.00000E-08
wrote 'PVb' : (113: 141), min/max	x =	0.00000E+00	3.54556E+09
wrote $V x'$: (113: 141), min/may	× =	-1.93512E+01	9.26335E+02
wrote $V_{v'}$: (113: 141), min/may	× =	-6.64471E+03	2.81579E-01
finished writing cycle			21020102 03
Terreshed in ceering cycle			

•output.txt0には、様々な情報が記録される

demo2Dの場合、demo2D/demo2D/以下

Initial	l total en	ergy and m	ass:			
IE:	7.1180726	904816678E	+020 KE	: 2.0086	585047774073	7E+019
TE:	7.3189411	952590756E	+020 M	: 179974	1142126422.	2
CYC=	O	T= 0.0	000E+00	DT= 1.000E	-03 FLAG=G	
TE=	100.000	0 KE= 1	00.0000	IE= 0.	.0000 TM=	100.0000
GMESH=	0.00E+00	GTARG= 0.0	0E+00	PERCENT	COMPLETE:	0.000%
LIMITIN	NG CELL: I	= 1 J= 1	11			
	CONC=	1.0000	1.0000			
VERTE	EX 14=	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	
(C_SOUND=	4012.53	C_MAT=	6500.00		

50ステップに 1回出力 ソースコード内で 決められており 変更不可

SAVE DATA (jpeg-format):	10 1.2577892535548835E-002
vrote 'Cm1' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 1.00000E+00
vrote 'Den' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 3.43755E+03
vrote 'Pre' : (113: 141), min/max =	-8.26891E+06 2.98189E+10
vrote 'Tmp' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 5.22904E+03
vrote 'Yld' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 1.84336E+09
vrote 'Dam' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 9.97620E-01
vrote 'Ert' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 1.62985E+01
vrote 'Vib' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 2.00000E+02
vrote 'YAc' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 1.00000E-08
vrote 'PVb' : (113: 141), min/max =	0.00000E+00 3.54556E+09
vrote 'V x' : (113: 141), min/max =	-1.93512E+01 9.26335E+02
vrote 'V y' : (113: 141), min/max =	-6.64471E+03 2.81579E-01
finished writing cycle	

asteroid.inp内の DTSAVEで 出力頻度の 変更可

•PROGRESS以下には保存量の時間変化が記録

demo2Dの場合、demo2D/demo2D/以下

- * 質量保存はmass.txt0
 - 1行目:時間
 - 2行目:現在の質量
 - 3行目:(現在の質量-初期質量)/初期質量
- *エネルギー保存はenergy.txt0

1行目:時間

- 2行目:現在の全エネルギー 初期の全エネルギー
- 3行目:現在の内部エネルギー 初期の内部エネルギー

4行目:現在の運動エネルギー – 初期の運動エネルギー



- ・50ステップに1回から10ステップに1回に変更する
- ・ディレクトリ2D内のupdate_cycle.F90をコピーする

cp update_cycle.F90 update_cycle_bk.F90

(iSALE-chicxulubの場合はnewcyc.F90なので、newcyc_bk.F90などにする)

・テキストエディタでupdate_cycle.F90を開く

emacs update_cycle.F90 -nw

```
use mod timestep
use mod grind
use mod_conservation
implicit none
integer i,j,step,m
step=50 ← この変数の値を変える
     Calculate initial energy and mass
if (ncyc.eq.0) then
   call grind init() ! initialize grind calculation
   ! compute initial total energy and mass
   call conservation calc(1)
   write(OUT,*) 'Initial total energy and mass:'
  write(OUT,*) 'IE: ',toti0,' KE: ',totk0
  write(OUT,*) 'TE: ',tote0,' M: ',totm0
endif
     Calculate the grind (mean processing time per cell)
call grind calc()
     Produce some moniter print to assess progress and stability...
if (mod(ncyc,step).eq.0) then ステップ数が50で割りきれた
                             時に出力している
   call conservation calc(0)
   call conservation record(ioener, iomass, time)
```





•step=10に変更したら保存(emacsだとCtrl + X, Ctrl + S)

•update_cycle.F90を更新したのでコンパイルする

make

・実行ファイルをリンク先に移動する

cp iSALE2D /home/suetsugu/iSALE-Dellen/install/bin





実習3:端末への時間表示 ・端末への計算時間とCPU時間の表示 適当な時間間隔で計算時間を端末に表示するよう 出力文を追加する iSALE2D.F90 出力用の時間を宣言 初期状態を計算 do while(計算時間<TEND) 出力用の時間にdtを足す If(出力用の時間>0.1) then 結果の出力&保存 タイムステップの計算 計算時間を出力する文 様々な物理量の計算

end do

計算終了の処理

出力用の時間をリセット

endif

実習3:端末への時間表示 • time, time_cpultiSALE2D.F90内ですでに宣言済み

- dtもモジュール内で宣言されている
- •time_outputのみ新たに宣言する

real :: time_output=0.0

```
time_output = time_output + dt
```

```
if(time_output>0.1) then
    write(*,*) 'TIME[s]=', time, 'CPUTIME[s]=', time_cpu
    time_output = 0.0
endif
```

```
ROGRAM ISALE
 USE MOD_ISALE, only : dumpname,&
     out. ioerr, STDOUT, ioinit, ioener, iomass, iostep, &
     time, tend, tlim, ale_mode, lagrangian, eulerian, &
     tracer_motion, TR_VEL, stop_after_setup, verbose,vl,ncyc, eps_min, dt
 use ptool interface, only : io out, io oin, ptool text, ptool text int
use mod parallel
use mod strength routines, only : check state all
use mod identify mat
use mod_regrid, only : dynamic_regrid
implicit none
real :: time start !< Wall time of simulation start</pre>
 real :: time now !< Wall time now
                          tion of simulation (wall time)
real :: time output = 0.0 !---R.S.
       ! Compute cpu time since job began
       call CPU TIME(time now)
       time cpu = time now-time start
       time output = time output + dt
                                                               !---R.S.
       if(time_output>0.1)then
          write(*,*) 'TIME[s]=', time,'CPU TIME[s]=', time cpu
          time output = 0.0
                                                                 --R.S
       end if
    end do
```

```
! Finish simulation...
call savedata
call write_dump(1) ! Make data dump on exit
call finalcycle(time_cpu)
call isale_finalize("<<<END OF SIMULATION>>>")
```

```
END PROGRAM ISALE
```

実習3:端末への時間表示

.START JOB

6

SETTINGS FINISHED.

TIME[s]=	0.10155292062315720	CPU TIME[s]=	2.05200005
TIME[s]=	0.20169808489705784	CPU TIME[s]=	3.95199990
TIME[s]=	0.30301174513443768	CPU TIME[s]=	5.61999989
TIME[s]=	0.40357199351875195	CPU TIME[s]=	6.98799992
TIME[s]=	0.50510114347969681	CPU TIME[s]=	8.29599953
TIME[s]=	0.60581518550657010	CPU TIME[s]=	9.47599983
TIME[s]=	0.70693318863838173	CPU TIME[s]=	10.5599995
TIME[s]=	0.80720307829126348	CPU TIME[s]=	11.5880003
TIME[s]=	0.91020272480366005	CPU TIME[s]=	12.6199999
TIME[s]=	1.0105720429103993	CPU TIME[s]=	13.5839996
TIME[s]=	1.1115367795138853	CPU TIME[s]=	14.5880003
TIME[s]=	1.2127105170616108	CPU TIME[s]=	15.5439997
TIME[s]=	1.3141941368832579	CPU TIME[s]=	16.4759998
TIME[s]=	1.4178545230496820	CPU TIME[s]=	17.4440002
TIME[s]=	1.5210108024769766	CPU TIME[s]=	18.4080009
TIME[s]=	1.6250520907059414	CPU TIME[s]=	19.3720016
TIME[s]=	1.7256110494423331	CPU TIME[s]=	20.3439999
TIME[s]=	1.8287578784077527	CPU TIME[s]=	21.3240013
TIME[s]=	1.9290049996850289	CPU TIME[s]=	22.3040009
TIME[s]=	2.0326928220552705	CPU TIME[s]=	23.2520008
TIME[s]=	2.1331031904730793	CPU TIME[s]=	24.2400017
TIME[s]=	2.2367526772855197	CPU TIME[s]=	25.2000008
TIME[s]=	2.3412216656210267	CPU TIME[s]=	26.1680012
TIME[s]=	2.4456811493628536	CPU TIME[s]=	27.2639999



・iSALE2Dの小さな改良は比較的簡単にできる

 今回は割愛したが出力先の変更やテキストでの 出力も出力先の番号にさえ注意すれば可能
 (shared/mod_io.F90を参照)

iSALEの開発者であるGareth Collins, Kai Wünnemann, Boris Ivanov, H. Jay Melosh, Dirk Elbeshausenの各氏に 感謝致します