

3 月 ミーティングのレジューメ

植本光治@筑波大

本日ミーティングの議案

- ① 入力ファイルとNamelistについて
- ② 共有モジュールの変数名について
- ③ ディレクトリ構造について
- ④ MPIのラッパー関数について

テーマ① 入力ファイルとNAMELIST

- 前回のミーティングでNamelistによる、
入力ファイル構造の一元化が議題が上がった。
 - タイムスケジュールでは6月完成目標
- 今回（3月ミーティング）では
 - 入力ファイル構造のリストを出し合い共通変数の絞込を行う
 - 入力ファイルのNamelistおよび変数名を決める
- 最近、ARTED側で入力形式のNAMELIST化を行った

ARTEDの入力ファイル

```
&group_function
  cfunction='multiscale'
/
```

モード切替

```
&control
  entrance_option='new'
  Time_shutdown=1d10
  entrance_iter=0
  SYSname='Si'
  directory='./data/'
/
```

計算全体の制御

```
&system
  functional='PZ'
  cval=1.00d0
  aL=10.26d0
  ax=1.d0
  ay=1.d0
  az=1.d0
  Sym=8
  crystal_structure='diamond'
  NB=32
  Nelec=32
  MD_option='N'
  AD_RHO='No'
  NE=1
  NI=8
/
```

物質系の情報

```
&rgrid
  Nd=4
  NLx=16
  NLy=16
  NLz=16
/
```

実空間グリッド

```
&kgrid
  NKx=24
  NKy=24
  NKz=24
/
```

波数空間グリッド

```
&tstep
  Nt=100
  dt=0.08
/
```

時間発展

```
&pseudo
  ps_format='KY'
  PSmask_option='n'
  alpha_mask=0.8d0
  gamma_mask=1.8d0
  eta_mask=15.d0
/
```

擬ポテンシャル

ARTEDの入力ファイル

&electrons

```
NEwald=4
aEwald=0.5d0
KbTev=-1.0
Ncg=1
Nmemory_MB=8
alpha_MB=0.75
FSset_option='N'
NFSset_start=75
NFSset_every=25
Nscf=1
/
```

電子系最適化

&incident

```
dAc=0.005
AE_shape='Asin2cos'
IWcm2_1=1d12
tpulsefs_1=10.672
omegaev_1=1.55
phi_CEP_1=.0
Epdire_1=0.,0.,1.
IWcm2_2=0d11
tpulsefs_2=16.0
omegaev_2=1.55
phi_CEP_2=.0
Epdire_2=0.,0.,1.
T1_T2fs=19.0
/
```

入射光源

&response

```
Nomega=2000
domega=0.001
/
```

線形応答解析用

&multiscale

```
FDTDdim='1D'
TwoD_shape='periodic'
NX_m=0
NY_m=1
HX_m=250
HY_m=2500
NKsplit=4
NXYsplit=1
NXvacL_m=-2000
NXvacR_m=256
/
```

マルチスケール計算用

ARTEDの入力ファイル

原子種・原子座標関連の情報

&atomic_species

1
/

14

2

ラベル・元素番号・角運動量

.atomic_species.tmpに分割保存

&atomic_positions

1
2
3
4
5
6
7
8
/

.0

.25

.5

.0

.5

.75

.25

.75

.0

.25

.0

.5

.5

.25

.75

.75

.0

.25

.5

.5

.0

.75

.75

.25

1

1

1

1

1

1

1

1

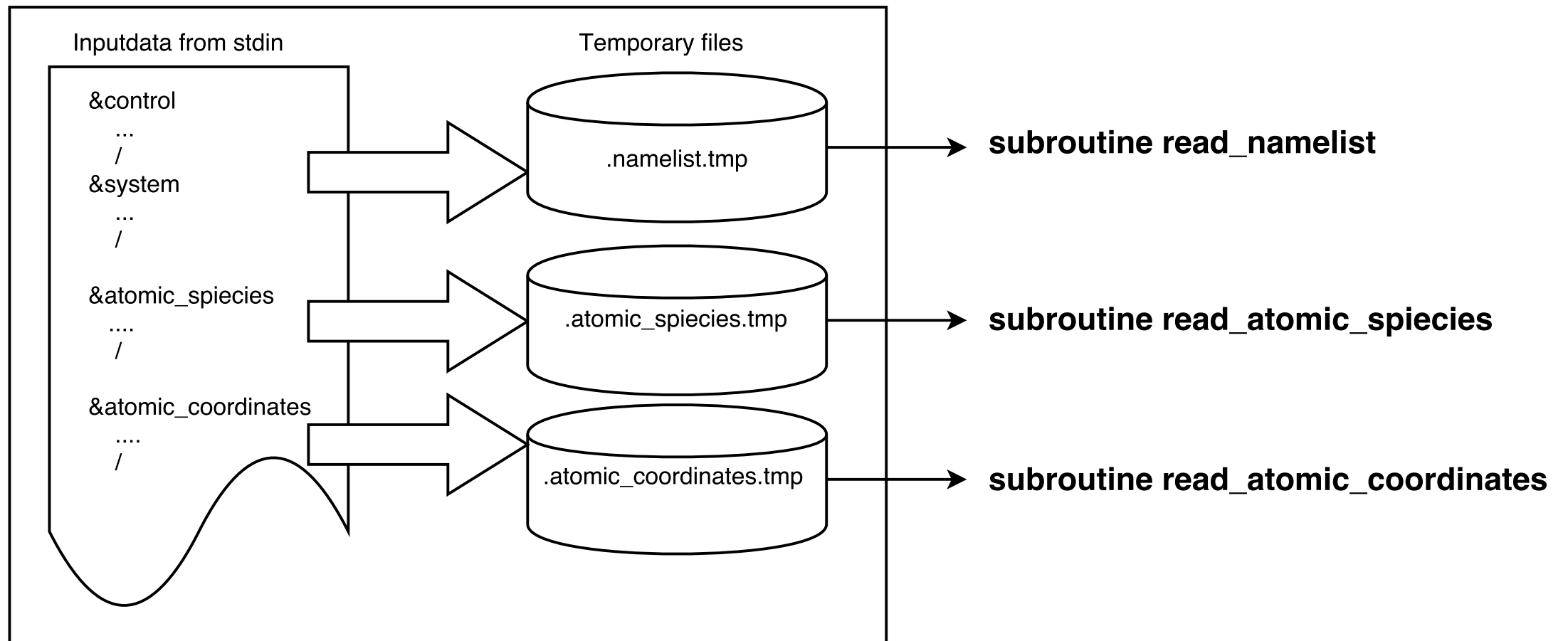
インデクス・原子座標・元素ラベル

.atomic_positions.tmpに分割保存

- いくつかの情報は可変長配列となる。→工夫が必要
- Namelist本来の文法ではないが、複数ファイルへの分割保存と組み合わせれば上記のサンプルのようなファイル構造が可能になる

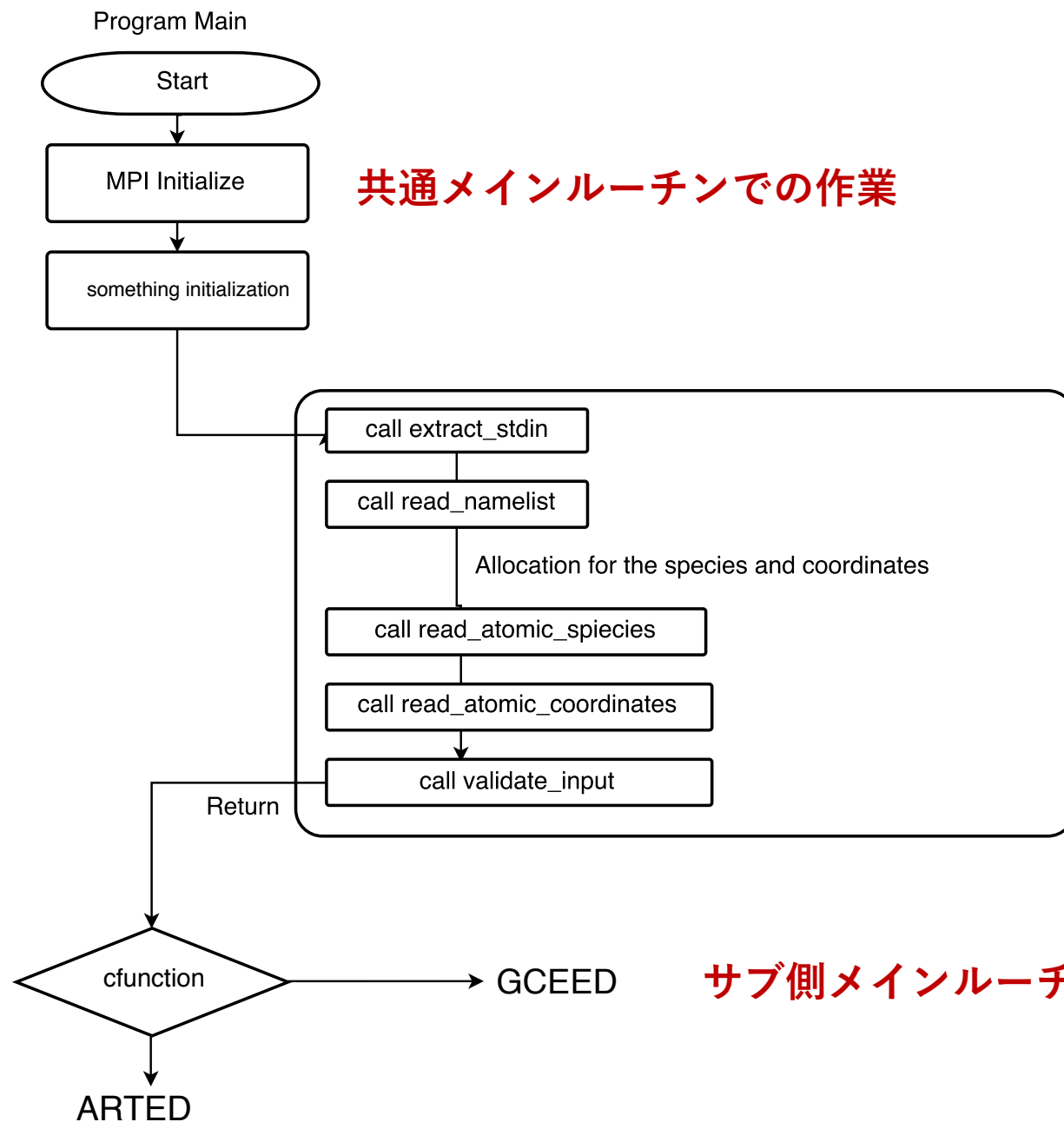
入力ファイル分割の流れ（概念図）

subroutine extract_stdin

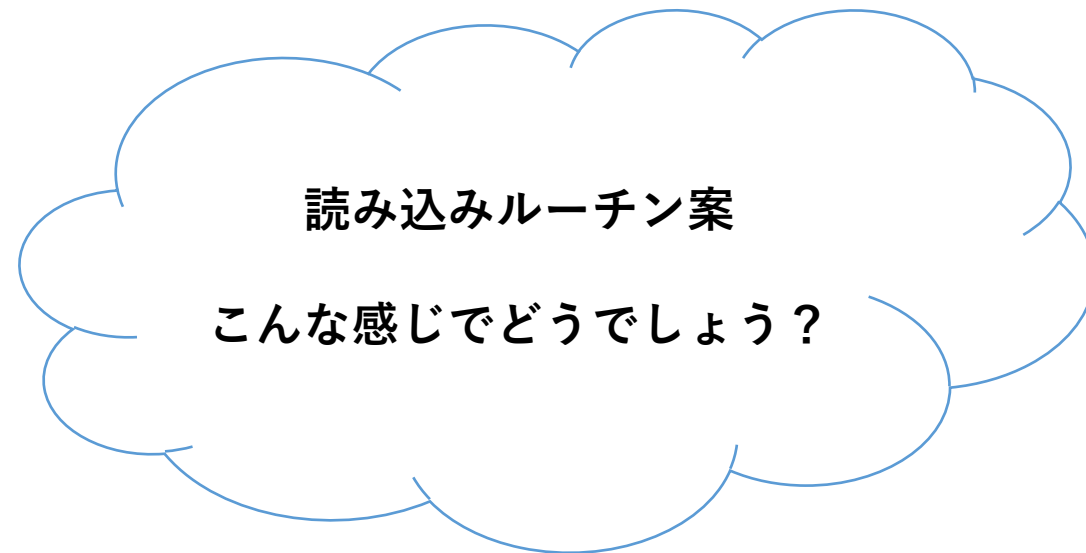


入力ファイルに関する提案

- 基本的なパラメータ部分はNamelistを使う
(一時ファイルに書き出すことでrewindを使えるようにする)
- 「&atomic_(species|positions)」から「/」までの範囲
(原子座標など) 外部の別ファイルに分割出力する
 - 可変長数列などのマトリクスなど、namelistでは書きにくい
(不可能ではないが…) データもreadで直接読めるようになる
 - 「&グループ名…/」が1ブロックとなる基本形式が守られるため、
入力ファイル構造に一貫性が現れ、とても読みやすい
- 一種のNamelistの拡張になっている
→ 「拡張ネームリスト？」便利なのでSALMONでも使ってみては？



共通メインルーチンでの作業



入力ファイル読み込みモジュール内

(読み込んだパラメタは同モジュール内変数に
保持させてはどうか？)

サブ側メインルーチンへの移行

その他入力ファイル周りで（１）

- パラメータ名称の統一案（叩き台？）を作れないか？
- グループ名称に規則を設けるべきか？（「group_*」など）
- パラメータ名称を、ARTED/GCEEDでどこまで共通化できるか？
 - 例：同じ機能を提供するが指定方法がことなるもの（交換相関など）
 - 例：概念的には近い機能を提供するもの（偏光ベクトルなど）
- Cfunctionなど「モード切替パラメタ」の代わりに、
並列化有無等の情報をスイッチに使う案があるかどうか？
- GCEEDのように原子座標を外部ファイルから与える方式とどう共存
させればよいか？（また入力形式の共通化は可能か）
 - 例）「外部ファイル/一時ファイル」を切り替える仕組みを設ける

その他入力ファイル周りで（２）

- 原子座標・軌道角運動量など、可変長配列が必要になるデータは他にもあるか？

共有モジュールの変数名

- 入力データ共有モジュールが用いる変数名に一定の命名規則を与えるべきか？（例「inp_*」や「nearfield_*」「ms_*」など）
- 入力データ共有モジュールの変数名はネームリストのパラメータ名と揃えるべきか？
 - （揃えない場合は、読み込みサブルーチン内でローカル変数を持ちいてネームリストの定義を行う方法が考えられる）
- グローバル変数名が既存のGlobal_Variablesと衝突するケースはどう回避するか？
 - （useのassociationを使ってサブルーチン内のローカルな名称を変え、衝突を防ぐ手はある。）

ディレクトリの名前について

/SALMON

 /source

 /nearfield

 /propagation

 ...

 /example

 /utility

 /document

 ...

- ディレクトリ構成をどうするか？
- ソースリストをsourceディレクトリ以下に入れるべきか？（前回のミーティングより）
- 他にどのようなディレクトリをつくるか？

MPIのラッパ関数

- ARTEDではMPIをWrapするためのモジュールが追加されている。 (/ARTED/communication.f90)
- プログラムにほとんど依存しないライブラリ形式で書かれているため、SALMON全体でこちらを使ってはどうか？