

P3PACK-MPI 使用の手引 (version 0.0)

石岡 圭一 (2002/05/02)

1 概要

これは、周期境界条件を持つ 3 次元流体方程式を解くためのサブルーチンパッケージ P3PACK を MPI で並列化したものである。従って、基本的な変換の定義等については P3PACK 使用の手引を参照すること。

本サブルーチンパッケージは内部で MPI のサブルーチンを CALL しているので、本サブルーチンパッケージに属するサブルーチンを CALL する場合は MPI_INIT と MPI_FINALIZE で囲まれた枠組中である必要がある。また、もちろんヘッダファイル (mpif.h) の読み込みもされている必要がある。これら MPI の一般的な使用法に関しては当該システムにおける MPI のマニュアルを参照のこと。

1.1 計算の並列化について

並列化においては、 $LM+1$ の計算と JM の計算を与えられたプロセス数でできるだけ等分配して並列化を行うようになっている (LM, JM の意味については P3PACK 使用の手引を参照のこと)。具体的には、 NP をプロセス数とすると、前者については、 $LM+1$ の計算を $LM/NP+1$ の計算を行う $(LM+1)/(LM/NP+1)$ 個のプロセスと、もし $MOD(LM+1, LM/NP+1)$ が非零ならその計算を行う 1 プロセス、さらに余りのプロセスがある場合はそれらは計算を行わないというように計算が並列化される (ここで除算は整数の範囲で行って余りは切り捨てるものとする)。例えば $LM=10$ で $NP=5$ なら、3 個のプロセスで 3 の量の計算が行われ、1 個のプロセスで 2 の量の計算が行われ、残りの 1 個のプロセスは何もしない、というように並列化される。また、後者についても同様で、 LM を $JM-1$ で置き換えて考えればよいだけである。従って、 NP がもし $LM+1$ と JM の公約数になっている場合には計算の分配が均等に行われるが、 NP の値が大きい場合には $LM+1$ と JM の値によっては計算の分配に不均衡が大きくなって NP の値を増してもプロセス間通信のコストの方が増えて全体の演算速度が低下する可能性もあるので注意すること。

1.2 データの分散配置について

不要なプロセス間通信を極力減らすため、P3PACK-MPI ではスペクトルデータおよびグリッドデータはプロセス毎に分散配置される (P3PACK との互換性のために用意した P3SMGA, P3GMSA は除いて)。

スペクトルデータについては、P3PACK では $S(-NM:NM, -MM:MM, -LM:LM)$ のように格納しているものを各プロセスが波数 L が $LS \leq ABS(L) \leq LE$ の範囲にあるものを $S(*, *, LS), \dots, S(*, *, LE), S(*, *, -LE), \dots, S(*, *, -LS)$ の順に保持しているとして扱う。ここに、 $*$ は N, M の並びを略記し

たもので、LS および LE はプロセス数 NP およびプロセス番号 IP ($IP = 0, 1, \dots, NP - 1$) を使って $LS = (LM/NP+1)*IP$, $LE = \min((LM/NP+1)*(IP+1)-1, LM)$ のように計算される。ただし、この式で $LE < LS$ となってしまうようなプロセスにはデータは置かれない。また、LS=0 の場合、最後の要素である $S(*, *, -LS)$ は先頭要素と同一のものであるので参照あるいは代入されることはない。

グリッドデータについては、P3PACK では $G(0:KM-1, 0:JM-1, 0:IM-1)$ のように格納していたものを各プロセスが波数 J が $JS \leq J \leq JE$ の範囲にあるものを $G(0:KM-1, 0:IM-1, JS, \dots, G(0:KM-1, 0:IM-1, JE)$ の順に保持しているものとして扱う (P3PACK では K, J, I の順序だったものが K, I, J になっていることに注意)。ここに、 $JS = ((JM-1)/NP+1)*IP$, $JE = \min(((JM-1)/NP+1)*(IP+1)-1, JM-1)$ のように計算される。ただし、この式で $JE < JS$ となってしまうようなプロセスにはデータは置かれない。

また、スペクトルデータではあるが、P3PACK の P3ELNL 等に現れる渦度ベクトルの 2 成分のスペクトルデータをまとめたデータ $Z(-NM:NM, -MM:MM, -LM:LM, 2)$ については、P3PACK-MPI の P3EMNL 等では $Z(*, *, 2, LS), \dots, S(*, *, 2, LE), Z(*, *, 2, -LE), \dots, Z(*, *, 2, -LS)$ のように格納されているものとして扱う。すなわち、渦度ベクトルの 2 成分のうちいずれかを指定する添字と L を指定する添字の順序を入れ替えただけで、普通のスペクトルデータと同様に各プロセスに分散配置する。

2 サブルーチンのリスト

P3SMGA	スペクトルデータからグリッドデータへの変換 (通常配置)
P3GMSA	グリッドデータからスペクトルデータへの変換 (通常配置)
P3SMGB	スペクトルデータからグリッドデータへの変換 (分散配置)
P3GMSB	グリッドデータからスペクトルデータへの変換 (分散配置)
P3EMNL	3 次元非圧縮 Euler 流体の渦度方程式に従った時間変化率の計算
P3CMSV	3 次元非圧縮 Euler 流体の保存量の計算
P3EMPT	3 次元非圧縮 Euler 流体のエネルギースペクトルを計算する
P3GMT0	渦度ベクトルの展開係数を求める
P3GMTU	流速ベクトルの展開係数を求める

2.1 P3SMGA

1. 機能

スペクトルデータからグリッドデータへの変換を行う (通常配置)。このサブルーチンは、P3PACK の P3S2GA と互換に使えるように、すべてのプロセスに (重複して) 通常配置されたスペクトルデータからグリッドデータへの変換を行いすべてのプロセスに (重複して) 通常配置する。このため、P3S2GA と違いを意識せずに使うことができるが、そのかわりプロセス間通信量が多く並列化による速度向上性は良くないので、速度を重視する局面では用いるべきではない。

2. 定義

スペクトル逆変換 (概要を参照) によりスペクトルデータ (s_{lmn}) から格子点上のグリッドデータ ($g(x_i, y_j, z_k)$) を求める。

3. 呼び出し方法

P3SMGA(NM,MM,LM,KM,JM,IM,S,G,W,ITK,TK,ITJ,TJ,ITI,II)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
KM	(I)	入力. z 方向の格子点数
JM	(I)	入力. y 方向の格子点数
IM	(I)	入力. x 方向の格子点数
S	(D(LMNM))	入力. s_{lmn} が格納されている配列
G	(D(KM*JM*IM))	出力. $g(x_i, y_j, z_k)$ が格納される配列
W	(D(KM*JM*IM))	作業領域
ITK	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TK	(D(KM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITJ	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TJ	(D(JM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITI	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
II	(D(IM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列

5. 備考

- (a) G(0:KM-1,0:JM-1,0:IM-1) と宣言されている場合, G(K,J,I) には $g(x_i, y_j, z_k)$ が格納される (I, J, K の順番に注意).
- (b) LMNM = (2*NM+1)*(2*MM+1)*(2*LM+1) と略記している.

2.2 P3GMSA

1. 機能

グリッドデータからスペクトルデータへの変換を行う (通常配置). このサブルーチンは, P3PACK の P3G2SA と互換に使えるように, すべてのプロセスに (重複して) 通常配置されたグリッドデータからスペクトルデータへの変換を行いすべてのプロセスに (重複して) 通常配置する. このため, P3G2SA と違いを意識せずに使うことができるが, そのかわりプロセス間通信量が多く並列化による速度向上性は良くないので, 速度を重視する局面では用いるべきではない.

2. 定義

スペクトル正変換 (概要を参照) により格子点上のグリッドデータ ($g(x_i, y_j, z_k)$) からスペクトルデータ (s_{lmn}) を求める.

3. 呼び出し方法

P3GMSA(NM,MM,LM,KM,JM,IM,G,S,W,ITK,TK,ITJ,TJ,ITI,II)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
KM	(I)	入力. z 方向の格子点数
JM	(I)	入力. y 方向の格子点数
IM	(I)	入力. x 方向の格子点数
G	(D(KM*JM*IM))	入力. $g(x_i, y_j, z_k)$ が格納されている配列
S	(D(LMNM))	出力. s_{lmn} が格納される配列
W	(D(KM*JM*IM))	作業領域
ITK	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TK	(D(KM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITJ	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TJ	(D(JM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITI	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TI	(D(IM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列

5. 備考

- (a) P3GMSA において, 入力 G は保存されない.

2.3 P3SMGB

1. 機能

スペクトルデータからグリッドデータへの変換を行う (分散配置).

2. 定義

スペクトル逆変換によりスペクトルデータから格子点上のグリッドデータを求める.

3. 呼び出し方法

P3SMGB(NM,MM,LM,KM,JM,IM,SG,W,ITK,TK,ITJ,TJ,ITI,TI)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
KM	(I)	入力. z 方向の格子点数
JM	(I)	入力. y 方向の格子点数
IM	(I)	入力. x 方向の格子点数
SG	(D(ISIZE1))	入力. スペクトルデータを格納 (分散配置) 出力. グリッドデータを格納 (分散配置) ISIZE1 の与え方については備考を参照
W	(D(ISIZE1))	作業領域
ITK	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TK	(D(KM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITJ	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TJ	(D(JM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITI	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TI	(D(IM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列

5. 備考

- (a) 配列 SG および W の大きさ ISIZE1 は $KM \cdot \max(IM \cdot ((JM-1)/NP+1), JM \cdot 2 \cdot (LM/NP+1))$ 以上の大きさにしておく必要がある. ここに, NP はプロセス数である.

2.4 P3GMSB

1. 機能

グリッドデータからスペクトルデータへの変換を行う (分散配置).

2. 定義

スペクトル正変換により格子点上のグリッドデータからスペクトルデータを求める.

3. 呼び出し方法

P3GMSB(NM,MM,LM,KM,JM,IM,GS,W,ITK,TK,ITJ,TJ,ITI,TI)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
KM	(I)	入力. z 方向の格子点数
JM	(I)	入力. y 方向の格子点数
IM	(I)	入力. x 方向の格子点数
GS	(D(ISIZE1))	入力. グリッドデータを格納 (分散配置) 出力. スペクトルデータを格納 (分散配置) ISIZE1 の与え方については備考を参照
W	(D(ISIZE1))	作業領域
ITK	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TK	(D(KM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITJ	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TJ	(D(JM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITI	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TI	(D(IM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列

5. 備考

- (a) 配列 GS および W の大きさ ISIZE1 は $KM \cdot \max(IM \cdot ((JM-1)/NP+1), JM \cdot 2 \cdot (LM/NP+1))$ 以上の大きさにしておく必要がある. ここに, NP はプロセス数である.

2.5 P3EMNL

1. 機能

3次元非圧縮 Euler 流体の渦度方程式に従った時間変化率を計算する.

2. 定義

P3ELNL の項を参照.

3. 呼び出し方法

P3EMNL(NM,MM,LM,KM,JM,IM,Z,DZ,W,ITK,TK,ITJ,TJ,ITI,TI)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
KM	(I)	入力. z 方向の格子点数
JM	(I)	入力. y 方向の格子点数
IM	(I)	入力. x 方向の格子点数
Z	(D(ISIZE2))	入力. $(\hat{\zeta}_1)_{lmn}$ および $(\hat{\zeta}_2)_{lmn}$ が格納されている配列 (分散配置)
DZ	(D(ISIZE2))	出力. $(\hat{\zeta}_1)_{lmn}$ および $(\hat{\zeta}_1)_{lmn}$ が格納される配列 (分散配置)
W	(D(ISIZE1*4))	作業領域
ITK	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TK	(D(KM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITJ	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TJ	(D(JM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列
ITI	(I(5))	入力. P3INIT で与えられる配列
TI	(D(IM*2))	入力. P3INIT で与えられる配列

5. 備考

(a) 入力 Z および出力 DZ の意味については P3ELNL の項を参照のこと. また, これらの分散配置での格納形態については概要を参照のこと. なお, ISIZE2 は各プロセスで Z および DZ を保持するのに必要な配列の大きさである.

2.6 P3CMSV

1. 機能

3 次元非圧縮 Euler 流体の保存量を計算する.

2. 定義

P3CNSV の項を参照.

3. 呼び出し方法

P3CMSV(NM,MM,LM,Z,E,H)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
Z	(D(ISIZE2))	入力. $(\hat{\zeta}_1)_{lmn}$ および $(\hat{\zeta}_2)_{lmn}$ が格納されている配列 (分散配置)
E	(D)	出力. E の値
H	(D)	出力. H の値

5. 備考

(a) 入力 Z の意味については P3ELNL の項を参照のこと. また, 分散配置での格納形態については概要を参照のこと. なお, ISIZE2 は各プロセスで Z を保持するのに必要な配列の大きさである.

(b) 出力 E および H はすべてのプロセスに同じ値が返される.

2.7 P3EMPT

1. 機能

3次元非圧縮 Euler 流体のエネルギースペクトルを計算する.

2. 定義

P3CMSV の項を参照.

3. 呼び出し方法

P3EMPT(NM,MM,LM,KMAX,Z,ES,W)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
KMAX	(I)	入力. エネルギースペクトルを求める波数の範囲
Z	(D(ISIZE2))	入力. $(\hat{\zeta}_1)_{lmn}$ および $(\hat{\zeta}_2)_{lmn}$ が格納されている配列 (分散配置)
ES	(D(KMAX))	出力. エネルギースペクトルが格納される配列
W	(D(KMAX))	作業領域.

5. 備考

(a) 入力 Z の意味については P3ELNL の項を参照のこと. また, 分散配置での格納形態については概要を参照のこと. なお, ISIZE2 は各プロセスで Z を保持するのに必要な配列の大きさである.

(b) 出力 ES はすべてのプロセスに同じ値が返される.

2.8 P3GMTO

1. 機能

渦度ベクトルの展開係数を求める.

2. 定義

P3GETO の項を参照.

3. 呼び出し方法

P3GETO(NM,MM,LM,Z,0,ISW)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
Z	(D(ISIZE2))	入力. $(\hat{\zeta}_1)_{lmn}$ および $(\hat{\zeta}_2)_{lmn}$ が格納されている配列 (分散配置)
O	(D(ISIZE3))	出力. $(\hat{\omega}_\alpha)_{lmn}$ が格納される配列 (分散配置)
ISW	(I)	入力. $(\hat{\omega}_\alpha)_{lmn}$ の添字 α (1, 2, 3 のいずれか) を指定する.

5. 備考

(a) 入力 Z の意味については P3ELNL の項を参照のこと. また, 分散配置での格納形態については概要を参照のこと. なお, ISIZE2 は各プロセスで Z を保持するのに必要な配列の大きさである.

(b) O へのスペクトルデータの格納法 (分散配置) については概要を参照. なお, ISIZE3 は各プロセスで O を保持するのに必要な配列の大きさである.

2.9 P3GMTU

1. 機能

流速ベクトルの展開係数を求める.

2. 定義

P3GETU の項を参照.

3. 呼び出し方法

P3GMTU(NM, MM, LM, Z, U, ISW)

4. パラメーターの説明

NM	(I)	入力. z 方向の切断波数
MM	(I)	入力. y 方向の切断波数
LM	(I)	入力. x 方向の切断波数
Z	(D(ISIZE2))	入力. $(\hat{\zeta}_1)_{lmn}$ および $(\hat{\zeta}_2)_{lmn}$ が格納されている配列 (分散配置)
U	(D(ISIZE3))	出力. $(\hat{u}_\alpha)_{lmn}$ が格納される配列 (分散配置)
ISW	(I)	入力. $(\hat{u}_\alpha)_{lmn}$ の添字 α (1, 2, 3 のいずれか) を指定する.

5. 備考

(a) 入力 Z の意味については P3ELNL の項を参照のこと. また, 分散配置での格納形態については概要を参照のこと. なお, ISIZE2 は各プロセスで Z を保持するのに必要な配列の大きさである.

(b) U へのスペクトルデータの格納法 (分散配置) については概要を参照. なお, ISIZE3 は各プロセスで U を保持するのに必要な配列の大きさである.