

8月8～10日 SALMON ミーティングメモ

日時：2017年8月8日（火曜日）～10日（木曜日）

場所：筑波大学計算科学研究センター

参加：矢花、佐藤、野田、植本@書記、廣川、山田 A&S、(略敬称)

配布物

なし

議題

1. ディレクトリ構造変更について
2. 出力ディレクトリ作成について
3. ソースコードのコピーライト文について
4. Example の整備について
5. Web サイトについて
6. 共通ルーチン（旧コア）の整備について
7. バージョン番号について
8. ダウンロード係数について
9. 入出力ファイルの使用単位系について
10. メーリングリストの整備について
11. 擬ポテンシャルについて
12. コミット番号に基づくバージョン表示について
13. コーディングルールについて
14. 多極子展開について

議事概要

1. 現行の SALMON のディレクトリ構造を変更し、あらたに、「src」ディレクトリ以下に下記のサブディレクトリとファイルを設けることが決まった。
 - ARTED: 旧 ARTED ディレクトリ
 - GCEED: 旧 GCEED ディレクトリ
 - parallel: 並列計算関連
 - io: 入出力関連

- math：数学（線形代数・特殊関数関連）
 - GS：基底状態計算
 - RT：実時間発展
 - atom：ポテンシャル関連
 - xc：交換相関関連
 - poisson：ポアソン方程式
 - maxwell：電磁界関連
 - common：GS や RT に区分できないもの一般
 - hpsi：Hamiltonian の演算
 - main.f90: メインルーチン
 - constant.f90: 定数モジュール
2. 出力ファイル用ディレクトリの自動生成について議論がなされ、(PGI コンパイラの対応状況を鑑み) FORTRAN2008 以前の機能をもちいた(C-Binding をもちいた)ディレクトリ生成用サブルーチンを新たに設けることが決定された。(担当：廣川) (8月20日時点で処理済み)
 3. ソースコードに対する著作権文について議論が行われ、当面の間は「Copyright(c) SALMON developers 2017」を用いることが決定された。また、2018年以降にファイルが修正された場合には、それらのファイルにのみ copyright の年についての変更を適用することとなった。
 4. ソースコード中の Examples の整備について議論が行われた。(1) 固体計算では対称性なし (ISYM=1) の入力ファイルをもちいる。(2) 混乱をさけるためジョブスクリプトをサンプルに含めない (8月20日時点で処理済み) (3) リグレッションテスト用のディレクトリとテンプレートを別に設ける (担当：植本)。
 5. Web サイトの構成の改善案について提案がなされた。(1) トップページ他、更新頻度の低い一部ページについて業者への Web ページ制作を外注する。(2) ドキュメントを次の構成として「About SALMON」「Documents」は「Manual」「Install and Run」「Tutorial」「Samples」、またチュートリアルページの充実をはかる。上記作業と並行してギャラリーページの整備をすすめる。ギャラリー用動画データを準備の際に外部動画共有サイトを使用する可能性について議論がなされた。また、wiki のサンプルは mediawiki の形式で書いたものと、DL 可能なファイルにしたものを両方用意することが

決定された。

6. 共通ルーチン (旧コア) 実装について議論をおこない、また、現在拡張中作業の hpsi ルーチンの現状について情報共有を行った。
 - 継続して HPSI 計算ルーチンの整備作業をすすめることが決定された。(担当：山田 S)
 - ARTED/GCEED 共用に向けた Broyden 法ルーチンの開発整備を行うことが決定された。(担当：野田) また、Broyden 法については、基底状態計算において電子密度における計算以外にも用いられる可能性があることから、引数に x, y, z の 3 次元ではなく 1 次元にすることが提言された。
 - ARTED から共通交換相関関数の呼び出しを行えるようにする。(担当：植本)
 - 逆行列のルーチンは math ライブラリに入れることが決まった。また、8/9 に逆行列の計算は LU 分解のみを使うほうが一般的で速いのではとの提言があった。(8/10 に統合済み)
7. バージョン番号について、次期リリース版を SALMON v.1.0.0 とすることが決定された。
8. SALMON コードのダウンロード計数のために、Google Analytics をもちいたダウンロードのカウントを行うことが提案された。
9. 入出力ファイルで使用の単位系について議論が行われ、現行の指定方法にかわり、「unit_system」もちいた単位系一括指定が提案された。また入射パルス強度を指定するあらたな変数として「Rlaser_int_wcm2_?」を設けることが決定された。(担当：野田) (8月20日時点で処理済み)
10. メーリングリストとして、salmon-announce, salmon-users, salmon-developers を作成する。salmon-announce はこちらからバージョンアップ情報などを送る、salmon-users はユーザ間で情報交換を行う。
11. 擬ポテンシャルの最も標準的なフォーマットを.cpi とし、Tutorial ではこれを用いる。
12. プログラム実行時にどのバージョンのプログラムが実行されたかがわかるように、標準出力にバージョン番号と Github での番号が出力されるようにする。(8月20日時点で処理済み)
13. コーディングルールについて再検討をおこなった。共通ルーチンを作る際

に、は x,y,z 以外の変数については全て 4 次元目にまとめることとした。

14. 孤立系の multipole 展開について提案がなされ、提案手法に基づく実装が行われることが決定された。(担当：野田)

以上