

7月7～8日 SALMON ミーティングメモ

日時：2017年7月7日（金曜日）～8日（土曜日）

場所：分子研

参加：矢花、信定、野田、植本@書記、
（Skype セッションのみ：佐藤、廣川）

補足資料

1. 論文作成のプラン（矢花）
2. コーディングルール（野田）

議題

1. WEB ページの改善について
2. Publication の管理について
3. コード論文案について
4. サンプルファイルについて
5. 入力ファイルについて
6. 出力ファイルについて
7. コードの開発体制について
8. FORTRAN2008 コードの廃止について
9. SALMON の次期開発目標について
10. 議事録の管理方法について

議事概要

1. WEB ページの改善について

WIKI マニュアルについて変更の必要（英文校正等）があれば、開発者各位が適宜修正を行っても良いことが確認された。ただし Web の公開マニュアルは、原則として最新のリリース版と対応するように作成する。また、次期リリース版向けマニュアルの整備作業のため、開発者限定のアクセス制限付きページを WIKI 内に設けることが決定された。さらに、SALMON 関連論文の引用（後述）を掲載することが決定された。Beginner ユーザー向けに「インストールからサンプル入力ファイルの実行までを含めたチュートリアル」

の整備を行うこと、各種物質系の入力ファイルのデータベースを構築すること、などが提案された。さらに、サンプルに関連して「Gallery」ページを追加し、電子ダイナミクスの画像・動画を付け加えてはどうかなど意見があった。上記提案に関して継続して議論を行う。

2. Publication の管理について

SALMON に関連する Publication List の Web への掲載を行うことが提案された。「K. Yabana and G. F. Bertsch 以降のコードをベースとする文献とする」、「関連するテーマごとにタグ付けを行う」こと、また、将来的に Web サイト上で「文献ページで検索機能やソーティング機能を設けること」が提案された。掲載用の文献調査のため、近日中に文献リストを矢花宛にメールすることが決定された。なお、Web 掲載用の引用形式として下記のものを用いる。

分類タグ（複数選択可）

タイトル

著者、雑誌名、ボリューム、ページ、年

DOI アドレス

1. 文献の分類タグについて、

文献管理のためタグ付けを文献ごとに行うことが提起された。

1. 概要：「Code」「Algorithm」
2. サイズ：「Atom」「Molecule」「Cluster」「Nanostructure」「Solid」「Interface」「Surface」
3. 物質：「Metal」「Semiconductor」「Dielectric」「Organic」「Inorganic」個別物質名「Silicon」「Graphene」「Diamond」「SiO₂」など（ポピュラーな物質系については個別物質名タグを設ける）
4. 機構：「Optical nearfield」「Bias voltage」「Attosecond」「Laser damage」「Linear response」「Nonlinear optics」「Plasmon」「Optical current」「Raman」など

その他必要なタグの有無について継続して調査をすすめる

3. コード論文案について

提出先として Comm. Compt. Phys. 誌を第一案とし、タイトル案として「SALMON: Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience based on real-time TDDFT」とする。また、著者順序としては、冒頭部は主要開発者とし携わった期間順に並べることより、「野田、佐藤、廣川、植本、篠原、山口 (飯田、竹内) (Floss、乙部、李) 石村、朴、Bertsch、信定、矢花」とすることが提案された。

論文の構成および各著者による各担当箇所の受け持ちについても議論された。(詳細は付属資料「論文作成プラン」を参考されたい)。各著者に連絡を行い共著・担当可否について確認すること、またコード論文の各パートの草稿の完成目標を7月末とすることが決定された。

4. サンプルファイルについて

レポジトリ主ディレクトリ以下に「Samples」ディレクトリを作成し、「GS」「pulse」などの、複数条件に関する入力ファイル類を用意すること決定された。「ウェブサイトのサンプル集の構成と、アーカイブの対応関係をもたせるように構成してはどうか」などの意見があった。

また、MPI 不使用版コードが完成した場合は (注: 7月13日現在同機能実装済)、シングルプロセス向けの入力ファイルを MPI 用とは別に準備してはどうかなど意見があった。これに関連して、将来的にシングルプロセス・マルチプロセス環境で同一の入力ファイルを使用可能にすることが提案された。

5. 入力ファイルについて

1. 「Emfield」関連の変数名について、ユーザーからの統一性の向上のため、「Amplitude」「Rlaser_int」「Pulse_TW」などの名称を変えてはどうかとの提案がなされた
2. パルス形状として「Acos2」「Acos4」以降の高次 cos の包絡関数形の実装は (必ずしも) 必要ではないこと、また開発版マニュアルから削除してもかまわないことが確認された。

上記案件について継続して議論をすすめる。

6. 出力ファイルについて

1. 出力ファイル形式に関するデータ構造・単位系の統一化をすすめることが確認された。
2. 状態密度 (DoS) 出力に関して、Smearing 関数 (Lorentz/Gaussian) およびエネルギー単位系を整理することが提案された。

上記案件について継続して議論をすすめる。

7. コードの開発体制について

コアライブラリ作成に関して、「重複コードの作成の回避」、「サブルーチン名称にコアをつける」、「サブルーチンの引数化とモジュール変数使用可否」、「変数名規則」などのコーディングルールの文書化を実施し、WEB 上で開発者向けに公開することが提案された。これについて、暫定案 (作成: 野田) をもとに、コーディングルールを英語化して Wiki に載せる (担当: 矢花)。今後の努力目標として、コア開発等でコードを書き足す場合は、上記コーディング規則に従うことが望ましい。

8. FORTRAN2008 コードの廃止

PGI コンパイラサポートのため、FORTRAN2008 以降の文法をコードから除去をすすめることが決定された。

9. SALMON の次期開発目標

1. 古典 FDTD 計算コードの SALMON への組み込みを行い、計算モード切り替えスイッチを設けることが提案された。

上記案件について継続して議論をすすめる。

10. 議事録の管理方法について

開発者による議事録の確認作業のため、SALMON-TDDFT の WIKI にパスワードアクセス制限付き WEB ページを設け議事録のアップロードを行うことが決定された。

決議事項

1. 開発者によるマニュアル作成のためページを WIKI に設ける。
またチュートリアル・ギャラリーなど提案に関して継続して議論を行う。
2. 出版物リストの WEB への掲載のため、文献リストを矢花宛にメールする。
3. コード論文の共著者各位と連絡、著者・分担可否について確認する。
またコード論文の各パート草稿の完成目標を7月末とする。
4. 「Samples」ディレクトリ以下のサンプル整備をすすめる。
5. 入力ファイルについて継続して議論をすすめる。
6. 出力ファイルデータ構造・単位系について継続して議論をすすめる。
7. コーディングルールの英文化・公開を近日中に行う（担当：矢花）。
8. FORTRAN2008 コードの廃止する。
9. 古典 FDTD 等、次期開発目標について議論をすすめる。
10. WIKI への議事録のアップロードを行う。

以上