

## 3月3日 SALMON ミーティングメモ

日時：2017年3月3日（金曜日）9：00～

場所：筑波大学

参加：矢花、信定、野田、植本@書記、廣川（略敬称）

### 配布物

1. ARTED/GCEED 入力変数比較（野田）
2. 3月ミーティングのレジュメ（植本）

### 議題

1. プログラム統合の進捗状況について
2. 3月末を目標とした短期作業計画について
3. ビルド環境の整備について
4. コアライブラリ側サブルーチン統合の短期計画について
5. ソールリストのディレクトリ構成案について
6. MPI ラッパーライブラリの共通化について
7. タイムログ・パフォーマンス計測の共通化について
8. モジュール分割とインターフェース構文について
9. 計算モード切り替えスイッチの指定方法について
10. 単位系について
11. 入力ファイルのネームリスト構造について

### 議事概要

#### 1. プログラム統合の進捗状況について

3月3日時点で、①ARTED/GCEED 双方のソースリストを含むレポジトリの作成、②共通メインルーチンの整備、③単一の統合バイナリファイルの生成（GnuMake）までが達成済みである。また、CMakeList による汎用のビルド環境の準備も完了しつつあることが報告された。

#### 2. 3月末を目標とした短期作業計画について

4月以降開発者人数が増加することを鑑み、プログラムの大規模な修正に

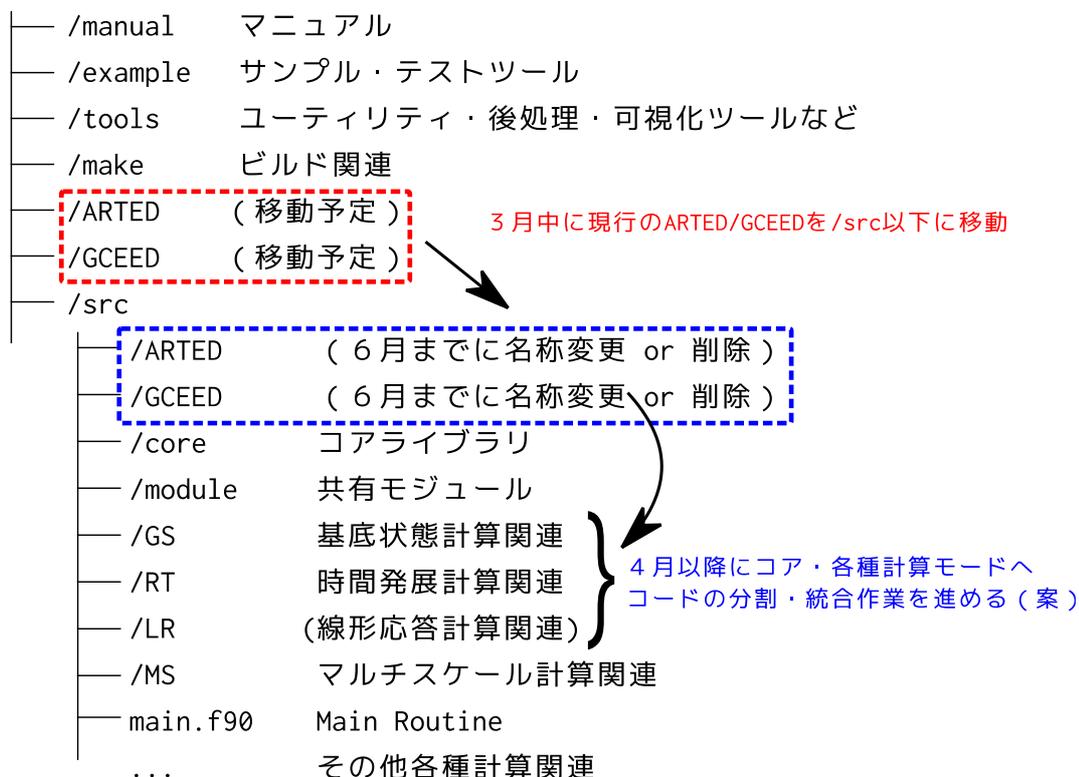
関わる可能性がある修正箇所を優先的に変更する。①レポジトリ内のディレクトリ構造整理（詳細後述）、②一部コアライブラリ側サブルーチンの名称及び仕様の策定、③MPI ラッパーの GCEED 側整備（詳細後述）、④タイムログ・パフォーマンス計測の共通化、が提案された。

### 3. ビルド環境について

現在は GNU Make および CMake をもちいたビルドが可能であり、当面の間は双方のビルド環境を維持する。なお、現行のビルドでは GCEED 側で SCALAPACK をリンクする必要があるが、同ライブラリは並列環境が必須であることから、非 MPI 環境向けに LAPACK のみのビルドも可能にすべきとの意見があった。また、ビルドの簡略化のためソースディレクトリ中のサブディレクトリ構造の整理を行う。

4. 一部の共有コアライブラリ（少なくとも「汎関数」「擬ポテンシャル」）について、①ファイル場所、モジュール・サブルーチン名およびサブルーチン機能に関する仕様決定を行うことが提案された。また、「MPI ラッパー（後述）」・「タイマー・パフォーマンス計測（後述）」も、コアライブラリに追加する計画のもと作業をすすめる。

## SALMON@GitHub



### 5. レポジトリ内ディレクトリ構造について

公開版に向けた整理をすすめる(暫定案を上図に記載する)。ルート以下に、「ソースコード(/src)」、「サンプルデータ (/example)」、「ドキュメント (/manual)」、「ビルド関連 (/make)、ユーティリティ (/tools)」が配置される。また、ソースディレクトリ以下は機能単位でサブディレクトリによる細分化を行い、「コアライブラリ」、「共有モジュール (入力データ保持)」関連のディレクトリ、および「scf 計算」、「linear-response 計算」、「real-time 計算」、「multiscale 計算」などの各種計算関連のディレクトリを配置し、徐々に新ディレクトリ構造へのファイル移行作業をすすめる。6月までに、現行の ARTED/GCEED ディレクトリを削除 (または ARTED/GCEED を含まないように名称変更) する、等の提案が行われた。

### 6. MPI ラッパーライブラリの共通化について

MPI ラッパー (現「/ARTED/modules/communication.f90」) をベースに、SALMON 全体で共用可能な MPI 呼び出し用モジュールを作成することが提案された。(GCEED 側の袖通信への対応方法、既存の MPI ルーチンの使

用状況などの調査が必要である) 将来的には、MPI ラッパーをコアライブラリに移し、既存の MPI 直接呼び出し箇所の置き換えが行われる予定である。

#### 7. タイムログ・パフォーマンス計測の共通化について

ARTED の `timelog` ルーチンを使い GCEED 部分でのタイムライン測定を可能にする。これにより、「MPI\_WTIME」を用いた時間計測から、非 MPI 環境向けへの対応をすすめる。関連コードはコアライブラリへ移動させる。

#### 8. モジュール分割とインターフェースについて

コード統合にあわせ既存のモジュールの整理を行う。①Interface 構文を使用のためだけの module を減らすべきとの意見があった。また、ビルド・開発の効率化のため、②GCEED 側のソースファイル群を機能別にサブディレクトリに分割配置する (現行の ARTED の構造に似せる) ことが提案された。サブディレクトリ間で use 文による module の循環参照を避けるようディレクトリ配置を行うべきとの意見もあり、作業に先立って、まず GCEED 内におけるモジュール間依存関係の調査を行う。

「src/module」ディレクトリ以下には、プログラムが使用する共有モジュールを配置する。「`module_const` (定数類)」、「`module_input` (入力パラメータ類)」、「`module_parallel` (並列化関連パラメータ類)」などが提案された。

#### 9. 計算モード切り替えスイッチ

入力ファイルから各種計算モードを切り替え方法として、下記のような提案が行われた。(同案について ML でのコメントを集める)

入力ファイルネームリスト中の「`calc_mode` (計算モード指定用変数)」、「`iperiodic` (境界条件指定用変数)」、「`domain_parallel` (空間並列化指定用変数)」をもちいる。「`calc_mode`」は文字列変数であり下記のような計算モード指定を行う

- ・ `calc_mode = 'GS'` !基底状態計算のみ
- ・ `calc_mode = "RTPulse"` ! 時間発展計算のみ

- ・ *calc\_mode* = “RTL”！ 時間発展による線形応答のみ
  - ・ *calc\_mode* = “GS\_RTPulse”！ 基底状態計算と時間発展計算
  - ・ *calc\_mode* = “GS\_RTL”！ 基底状態計算と時間発展での線形応答計算
- また、RTPulse, GS\_RTPulse 有効時には、下記の入力オプションにより、分子動力学、マルチスケール計算モードの ON/OFF を行う。
- ・ *ehrenfest\_md* (エーレンフェスト MD 計算 : y/n)
  - ・ *multiscale\_maxwell* (TDDFT+Maxwell 計算 : y/n)

## 10. 入出力ファイルの単位系について

入出力ファイルの単位系として、長さ (Å)、時間 (fs) エネルギー・振動数 (eV) を用いる。電磁場に関わる量を記述する場合は、①MKSI 単位系を用いる (E:V/m)、②原子単位系を用いる (E:au)、③eV・Å に基づく単位系 (E:V/Å) などの意見があり、また、一部の計算でベクトルポテンシャルを出力する場合の単位系についても議論が行われた。複数の単位系での出力を可能にしてはどうかとの意見もあった。

## 11. 入力ファイルのネームリスト構造

共通入力ファイル形式向けネームリストの仕様について議論し、暫定版を製作した。近日中に ML にて意見を求める。また、出力ファイル形式の共通化についても議論を開始する。

## 決議事項

3月中を目標に以下の作業をすすめる

1. ディレクトリ構造の作成、ARTED/GCEED ディレクトリの「/src」以下への移動作業
2. 汎関数・擬ポテンシャル関連のコアライブラリの名称・機能の決定、および一部実装作業
3. MPI ラッパーの GCEED 向け移植のための事前調査及び一部実装作業
4. Timelog、パフォーマンス計測用コードの GCEED 向け移植作業
5. ①入力ファイルの仕様・②計算モード切り替えスイッチ・③使用単位系についてのコメントをメーリングリストにて集める

以上