

10月 SALMON ミーティングメモ

日時：2017年10月11日（水）—12日（木）

場所：筑波大学計算科学研究センター

参加：矢花、野田、植本@書記、山田 A&S、竹内（略敬称）

配布物

1. 講習会叩き台：野田
2. 板書（の写真）：植本

議題(AGENDA)

1. 講習会実施に関わる計算機環境について
2. 受講生向けのネットワーク環境について
3. 実習内容について
4. Web サイトの修正作業について
5. 配布可能な擬ポテンシャルファイルの調達について
6. ML の整備について

議事概要(DISCUSSION)

1. 講習会実施に関わる計算機環境について
実習用計算機として筑波大 COMA システムの使用が決定された。実習生用にグループ「salmon-tutorial」とアカウント「guest??(番号)」を作成すること、大規模一般利用枠を申請し4ノード・最大実行時間1時間程度のキューを割り当てることなどが提案された。また、ログイン用認証のため、受講生には事前に SSH 公開鍵の準備をもとめるなどの提案があった。
2. 受講生向けのネットワーク環境について
無線 LAN の通信環境として、①センター提供 WIFI (SSID「ccsrb」) を使用する、②独自に無線アクセスポイントを準備する、などが提案された。センターの WIFI を使用する場合は、受講生に対して MAC アドレスを事前に問い合わせる必要があること、などが指摘された。
3. 実習内容について
Opt-MD, MS など機能的にまだ不完全なものについては、現状で使用可能

な箇所のみ使うように実習をおこなう。また講習資料は PowerPoint ベースで、ネット上の参考可能なチュートリアル (OpenMX 等) を参考に各自分担当作成する。

(ア) 講習会事前準備

- ① Windows ユーザー向けにターミナルソフトウェア「MobaXterm」などの事前インストールのアナウンスを行う。公開鍵の事前準備について知らせる。
- ② 講習会用資料を PowerPoint で準備する。(分担)
スライドのテンプレートファイルを土曜までに作成する。(植本)
- ③ 講習会用入力ファイルを準備する。ファイルを COMA の講師用ホームディレクトリに配置・または外部サイトへアップロードする。

(イ) 講習会の計画

2017年11月24日(金) 10:00～(筑波大学計科セ)

- ① 午前中 (10:00～12:00)
 1. General Introduction : 野田
キーワード : 紹介、歴史、応用対象、機能、展望
 2. 理論 : 野田+植本
 - (ア) 孤立系・周期系共通部分 : 野田
キーワード : TDDFT、電磁場 (パルス形状)、ゲージ、擬ポテンシャル、汎関数、空間グリッド、並列化、
 - (イ) 孤立系関連箇所 : 野田
キーワード : 振動子強度、
 - (ウ) 周期系関連箇所 : 植本
キーワード : k 空間グリッド、誘電関数、励起エネルギー、電流、マルチスケール、Transverse-Logitudinal
 - (エ) UNIX 講座 : 山田 S
キーワード : COMA、ログイン、CMAKE、ビルド、ジョブサブミット、ジョブキャンセル
- ② 昼食 (12:00～13:00)
- ③ 午後 (13:00～17:00)
 1. 全体実習

(ア) 孤立系：竹内

キーワード：C2H2、GS、LR、Pulse、入力ファイル、結果可視化、振動子強度、双極子モーメント、

(イ) 周期系：山田 A

キーワード：Si、GS、LR、Pulse、入力ファイル、結果可視化、誘電関数、基底状態収束、電場、電流、

④ 個別対応（～17：00）

1. MS 計算コース：植本
2. OptMD 計算コース：山田 A、竹内
3. 可視化コース：山田 S

⑤ その他質問への対応

4. Web サイトの修正作業について

①OpenMP の環境依存性の説明を記入すること、②MPI なしでのビルドについて説明を加筆することが決定された（担当：植本）。また、力の計算・MD 計算についての説明を追加してはどうかなどの提案がなされた。また、Version 1.0.0 の配布に向けて Wiki の説明箇所の修正をすすめる。

5. 配布可能な擬ポテンシャルファイルの調達について

FHI98PP で生成した CPI ファイルをサンプル用に準備することが決定された（担当：野田）。一般ユーザー向けに、Web ページ上で「pspnc 形式」の擬ポテンシャルファイルの入手先情報を記載することが提案された。

6. ML の整備について

salmon-users のメーリングリストの整備を行うことが決定された。

決議事項(CONCLUSION)

1. 実習用に筑波大 COMA システム使用の予定で準備をすすめる。
2. 受講生向けネットワーク環境（センター無線 LAN、独自 AP）について継続して議論をする。
3. 実習計画について継続して議論をすすめる。
4. Version.1.0.0 配布にむけて Web サイトの修正をすすめる。
5. 擬ポテンシャルファイルの準備をすすめる。
6. ML 整備をおこなう。

以上