

4月19～20日 SALMON ミーティングメモ

日時：2017年4月19日（水曜日）～20日（木曜日）

場所：分子研

参加：矢花、信定、野田、植本@書記、山田、廣川（略敬称）

配布物

1. ARTED/GCEED 入力ファイル構造案（修正版）

議題

1. プログラム統合の進捗状況について
2. コアモジュール実装に関する進捗状況について
3. 公開に向けた準備作業について
4. 入力ファイル形式の共通化について
5. 出力ファイル形式の共通化について
6. 公開後のコード開発体制について（ソースコードの公開体制について）
7. 開発者メーリングリストについて
8. マニュアル整備について
9. 表面系大規模計算にむけたコアライブラリ実装計画について
10. ソースコード規約について
11. ソースコードのモジュール分割について
12. FORTRAN90 の非標準機能の使用箇所について
13. エンドユーザー向けビルド環境について

議事概要

1. プログラム統合の進捗状況について
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を生成(GnuMake)までが達成済みであることが報告された。また、近日中に CMake によるビルド環境が整備される予定である。
2. コアモジュール実装に関する進捗状況について
「/src/core/」以下に、①交換関連汎関数計算用ルーチンの実装作業、②擬

ポテンシャル読み込みルーチンの準備作業が行われた件が報告された。引き続き擬ポテンシャル関連のコアライブラリの実装作業を行うことが確認された。

3. 公開に向けた準備作業について

Salmon 公開（6月末予定）までに、ウェブサイト整備、開発者 ML 設置、マニュアル整備、入力ファイル共通化、出力ファイル共通化、ビルド環境整備を行うことが確認された。また、同時期までに、ソースリストの整理を行い、ソース・ディレクトリ名から ARTED/GCEED の名称の消去（または名称変更）を行うことが提案された。

4. 入力ファイル形式の共通化について

また、入力ファイル中物理量の単位系について議論が行われた。①「長さ Å、時間 fs、エネルギー eV、電場 V/Å、電磁エネルギー流密度 W/cm² を使用」、②「(レーザーパルス以外は)Hartree 原子単位系を使用」などの案が提示された。また、③「入力ファイル中にオプションを設け単位系を切り替え可能」としてはどうかなど意見も出された。本件について、継続して調査をすすめ次回ミーティングにて審議を行うことが確認された。

5. 出力ファイル形式の共通化について

出力ファイル形式の共通化をすすめるため、ARTED/GCEED 側双方での出力データ内容、ファイル構造、使用単位系などの調査を行うことが提案された。本件については、次回ミーティングにて審議を行うことが確認された。

6. 公開後のコード開発体制について

GitHub のプライベートレポジトリ上での開発作業をすすめる。レポジトリおよびコード配布の方法として下記の提案が行われた。

①Web サイト：一般ユーザー向け配布およびダウンロード数集計に用いる。

②GitHub 公開レポジトリ：一般ユーザーから閲覧可能な GitHub 上のレポジトリにもちいる。ただし、ユーザーによるコードダウンロードは①を推奨とする。ユーザーからのパッチの受取などへ使用する。

③GitHub 非公開・開発レポジトリ：salmon-developers による開発作業にもちいられる。開発者が個人個人に PR を行えるようにする。ただし、影響が広範囲に波及しうる変更箇所（コア等）については事前に調整を行う。

④GitHub 非公開・開発 WG レポジトリ：SALMON に関するクローズドなコード開発（論文化前コード等）のため必要に応じて作成する。Salmon-

developers 一部メンバー及び外部共同研究者からなるワーキンググループに限定した、アクセス制限付きレポジトリを提供する。上記、開発環境のためのGitHubまわりの整備をすすめる。

・開発体制に関する前回議論からの変更箇所：

- (イ) β版・過去バージョン・(バイナリ?)を公開サイトに配置
- (ロ) 開発作業をGitHub公開レポジトリから非公開レポジトリへ変更

公開Webサイト

① ダウンロードページ (暫定案 : Sourceforge)



最新安定版、β版、過去バージョンのソース
(およびビルド済みバイナリ?) 配布サイト
ダウンロード集計処理に使用する

GitHub

② 公開レポジトリ



外部ユーザーからのバグ報告
修正パッチのPR受付



外部ユーザー

③ 非公開・開発レポジトリ



Salmon-developerによる
コード開発作業用

All Developers

④ 非公開・開発WG向けレポジトリ (必要時)



Developers
Team #1



Developers
Team #2

Salmon-developer内部ワーキンググループと、その
共同研究者によるクローズドな開発作業用レポジトリ



外部共同研究者

7. 開発者 ML について

近日中にメーリングリスト : salmon-developers@salmon-tddft.jp の立ち上げを行うことが確認された。①ML は原則的に英語を使用すること、②ML のログを保存しアクセス制限付きで閲覧可能にすること、が決定された。また ML

参加者として、分子研より、信定、野田、竹内、飯田、山口、安池、石村ら(敬称略)、筑波大より、矢花、植本、山田、廣川、Tong ら(敬称略)および学外より、佐藤、篠原、乙部、李、Floss ら(敬称略)を含めることが提案された。

8. マニュアルの整備について

6月を目標に一般ユーザー向けマニュアルの整備をすすめることが確認され、次回までにマニュアルの構成を準備することが提案された。

9. HPSI 計算ルーチンのコアモジュール実装について

大規模計算向けの空間並列な HPSI 計算ルーチンのコアモジュールへの実装をすすめることが提案された。同コードは①2次元周期系(可能であれば0・1・3次元も)、②通常の周期系計算とガンマ点計算、③(非マルチスケール)Maxwell-Schrodinger 計算への対応を目指す。事前調査作業および一部コード実装をすすめる(担当:山田)ことが決定された。

また、前述の HPSI コア実装に関連し、一部のグローバル変数については将来的に次のような命名にしてはどうかとの提案があった。

- ・波動関数: `zpsi(ix, iy, iz, iob, ik)`
- ・ベクトルポテンシャル場: `ac(1:3, ix, iy, iz)`
- ・物質流: `rjmatter(1:3, ix, iy, iz)`

実空間の引数は `ix, iy, iz` の順番とする。`iob`=軌道、`ik`=波数空間インデックスを表す。(スピン成分を表すため、配列に `is` インデックスを付け加え「`zpsi(ix, iy, iz, is, iorb, ik)`」とする意見もあり)

10. ソースコード規約について

コード可読性を向上させるため、Salmon (とくにコアライブラリ) 開発の際の、コーディングルールや変数名規則などの制定を行うべきとの意見があった。先行する決定事項(グローバル変数名の命名規則として、整数型は「ijklmn」から始まるようにする)に付け加え、①実数型で上記のいずれかの文字から始まる単語を用いる場合は、「r」の一文字を変数名冒頭に付け加える。(複素数は「z」始まりにしてはどうかとの提案があった。また、(3月ミーティング)「不要なモジュールの使用をできるだけ避ける」をあらため、②原則として副プログラムをモジュールで被覆する(下記「ソースコードのモジュール分割について」を参照)ことが提案された。その他、コーディングルールの文書化のために調査作業を行うことが決定された。

11. ソースコードのモジュール分割について

コンパイル時にサブルーチンの引数不整合が見過ごされバグ混入に至る問題を防ぐ目的のため、原則的にすべての副プログラムをモジュール以下に配置することが提起され、以降のコード実装において採用されることが決定された。なお、既存のコードについても適宜モジュール化をすすめる。

12. FORTRAN90 非標準機能の使用箇所について

現行の ARTED 内で F90 の非標準的機能が下記 2 箇所で使用されている。

①ファイル出力用のプロセス別ディレクトリ作成(system 関数)

②allocatable 属性を持つ引数の副プログラム内における領域確保

(同機能は Fortran2003 以降の文法に含まれる)

①は大規模計算(数千ノード並列時)におけるファイルシステム負荷の軽減を目的としたものである。これに対して、SALMON では通常時の出力ディレクトリ生成を廃止し、プロセス別出力ファイルは同一ディレクトリへの書き出しを行う(大規模計算時のための拡張機能必要に応じて提供する)ことが提案された。また、②については、コードの動作原理上除去が困難であるため、今後、SALMON では FORTRAN2003 までの文法仕様を容認することが決定された。

13. エンドユーザー向けビルド環境の整備

前回議論では、安定版コードには CMake および Gnu Make をもちいたビルド環境を用意することが提案されていた。ただし、毎回の PR で複数のビルド環境向けに Makefile を用意する労力を減らすため、①GitHub の開発レポジトリでは最低限 CMake のみでビルド可能とする、②β版および安定版では Gnu Make の整備を行う、ことが新たに提起された。上記案に基づき、継続してビルド環境の整備をすすめる。

決議事項

1. 擬ポテンシャル関連のコアモジュールの実装作業をすすめる
2. ウェブサイト整備に向けて準備作業をすすめる
3. 入力ファイル共通化、及び入力ファイル単位系について継続して調査をすすめる、次回ミーティングにて審議を行う
4. 出力ファイル共通化のため出力データ内容、ファイル構造、使用単位系などの調査を行い、次回ミーティングにて審議を行う
5. メーリングリスト salmon-developers@salmon-tddft.jp の立ち上げを行う

6. マニュアル整備をすすめる
7. 開発環境のための GitHub まわりの整備をすすめる
8. 一般ユーザー向けマニュアルの整備をすすめる
9. 大規模計算向けの空間並列な HPSI 計算ルーチンのコアモジュールへの実装のため事前調査作業および一部コード実装をすすめる（担当：山田）
10. コーディングルールの制定のために調査作業を行う
11. 副プログラムをモジュール以下への配置をすすめる
12. FORTRAN2003 までの文法仕様を容認し、その他非標準機能のコードからの除去をすすめる。プロセス別出力ファイルのディレクトリ生成ルーチンを（通常時は）使用しないよう変更する
13. CMake/GnuMake に関するビルド環境の整備をすすめる
14. 次回ミーティングを 5 月 23 日@分子研に予定する

以上