

新プログラム SALMON 開発打ち合わせ議事録

2017/2/3-4

参加者 矢花、信定、野田、植本、廣川、石村

プログラム名

SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulation for Optics and Nanoscience)

公開版と開発版の言葉の定義

論文として発表した機能は公開版に入れる

論文にしていない機能は開発版とする

スケジュール

開発環境の統合(2017 年 3 月末)

- ・一つのディレクトリに両方のコードを入れ、1つのリポジトリにする
- ・なるべく1つのバイナリにする(main program を一つ作る,make と cmake で)
- ・開発者用メーリングリストを作る
- ・自動検証システムを作る
- ・同じ機能のサブルーチンは統合する
- ・Pseudopot,Excorr の統一
- ・input を読むサブルーチンを作る(ARTED と GCEED のインプットをすべて出し合って調整する、大文字小文字どちらにも対応するか決める)

公開版を作る、論文を出す(2017 年6月末)

- ・マニュアル作成
- ・入出力の統一(特に入力)
- ・MPI ラッパー導入

2017 年 6 月末までに方針を決める

Module 化

サブルーチン従属するかどうか(module contains)

プログラム構成

Main

-main

-input module-input を作る

主プログラム群

- Pulse propagation
- Near Field
- Linear response
- SCF

コアサブルーチン(引数渡し,module は使わない,cube ファイルデータとエラーメッセージ以外出力はしない)

- CG,DIIS,Broyden,部分対角化,Gram-Schmidt
- Hpsi, current, density, 時間発展
- Pseudopot, force
- Exchcorr
- Density 出力(cube ファイル)

コーディングルールの統一

- ・implicit none を必ず使う
- ・整数の変数は i-n で始める
- ・(長期目標)複素数の変数は z で始める
- ・Global 変数及び意味を持つ重要な変数は 2 文字以上の文字列にする
- ・小文字しか使わない(アンダースコアは使ってよい)
- ・自由形式
- ・subroutine 文及び end 文は 1 カラム目から、中身は 3 カラム目から始める
- ・ループ内などは 2 カラムインデント
- ・intent(in),(out),(inout)は必ず入れる
- ・サブルーチンの引数の配列のサイズをきちんと書く(アスタリスクを使わない)
- ・I/O 装置番号は主プログラム群で管理し、コアプログラムに関しては I/O 用サブルーチンの引数に番号を渡して入出力する

(努力目標)

(長期目標)メモリのカウンターは必要に応じて入れる

(長期目標)3 次元空間の配列は(x,y,z)にする

(長期目標)似たような変数名は相談してできれば揃える

コアサブルーチンの機能と引数には doxygen に対応したコメントを入れる

(長期目標)コアサブルーチン以外のコメントはできるだけ入れるよう努力する

(長期目標)コアプログラム以外でも I/O 用サブルーチンをできるだけ用意する

Module 変数

新規作成

Module-parallel(並列用) (2017 年 3 月末)

Module-constants(物理定数) (2017 年 3 月末)

Module-input(インプットデータ) (2017 年 6 月末)

現在使われている module 変数の扱いは Pending

インプットファイルの仕様統一

Namelist を使って、旧 ARTED、旧 GCEED どちらの計算でも使用を統一する

出力

大きなファイルの出力では、主プログラム群のどれを使ったかや version をファイルに書く

電子密度は cube ファイルのフォーマットにする

エラー出力

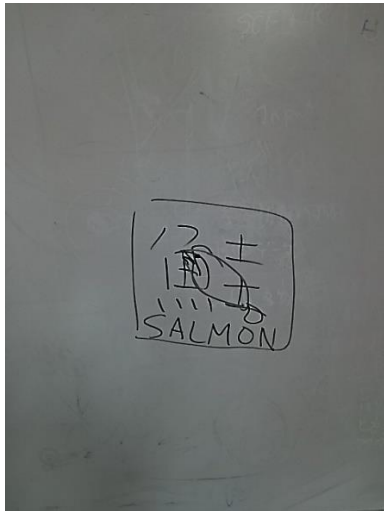
SALMON 側が自ら計算を止める(stop や abort)場合、エラーメッセージと対応方法を出してから止める

Web の URL や git の organization の名前

salmon だけでは取れないので、salmon-tddft

ロゴ(業者(揚羽)に注文)

- ・パッと見て鮭とわかるように
- ・ロゴに込めたいイメージ 光、原子、made in Japan をイメージできるように
- ・白黒印刷でもわかりやすいように
- ・すべて大文字で SALMON(単色)を入れる
- ・鮭の絵を中心に、鮭の漢字は薄い虹色で



Web ページ

- ・置き場所 筑波大 学情センターのレンタルサーバー(年間 20 万円)
- ・お名前.com でドメイン名 salmon-tddft.jp を取得
- ・メールリングリストも作る
- ・Wordpress で作成
- ・スタートは英語のみ、余裕ができれば日本語も?

メールリングリスト

- ・開発者用 salmon-developers@salmon-tddft.jp
- ・アーカイブはパスワード管理
- ・users 用(forum)は subscribe した人のみ投稿可、アーカイブは誰でも閲覧可

自動検証(2017 年 3 月末まで)

- ・Git と Jenkins を連動させ検証する
- ・10 分くらいで終わるテストジョブを用意する

Git リポジトリ

salmon 公開(open)

| | | |

個々の 個々の

リポジトリ リポジトリ

(closed) (closed)

Git の管理者追加(pull request OK にする人)

矢花、廣川、植本、佐藤、信定、野田

次回打ち合わせ

3/3(金)9:00-12:00, 16:00-18:00

3/4(土)9:00-

具体的な作業

2/4

- ・Github に organization salmon-tddft を作る(廣川)
- ・公開用リポジトリ salmon を作成する
- ・メンバーの取得する(各自 Github アカウントを作る)(廣川)
- ・salmon リポジトリに ARTED と GCEED のディレクトリを作り、ソースコードをコピーする
- ・2/3,4 に決めた内容を github の wiki に貼る

3/3 までに

- ・重複するサブルーチンの削除と可能なものからコアへの移行(共通するサブルーチン(pseudopot, excor)などを統一する)
- ・ARTED, GCEED の input のリストを作成して、比較する
- ・input の namelist 及びその変数名を決める

3 月

- ・make を統一

4 月以降

- ・有償 organization に移行する(矢花、廣川)
- ・開発用プライベートリポジトリはプロジェクトごとに作成する