

Q	A
どのコースを選択したら良いですか？基準は？	<p>ビギナーコースは大学院生の実習でもあることから、学部卒の基本的な知識があれば、UNIXの経験はなくても参加は可能です。コースの中にUNIX講座を設けています。ただし、もちろん自身である程度習得されているほうが望ましいです。</p> <p>アドバンストコースはビギナーコースの発展的な位置づけでUNIXの基礎はあるものとして進められます。最低限エディターでのファイル操作が問題なく出来る必要があります。</p> <p>エキスパートコース、スパコンコースには、第一原理計算での研究の経験がいくらかあることを前提とします。初歩的な説明などはなく、実践的な実習の身になります。研究の経験が豊富でもUNIXの操作の経験がない、第一原理計算コードでの計算の経験がない方は参加できません。</p>
アドバンストコースを考えていますが、コードのことが良く分かりません。どのコードを選択したら良いですか？	<p>HPに簡単なコードの説明と、その先に各コードのHPがリンクされていますので、そちらで各コードの特徴をご確認ください。参考までに各コードのカタログをHPに載せてあります。その中に、どのような実習をしたのかが書かれています。ご自身の研究やご関心と合うものをお選びください。なお、実習内容は毎回少しずつ更新されておりまして、必ずしも同じ内容の実習が行われるとは限りません。その時その時の受講生の興味に合わせて内容が選ばれることがあります。必ずしも希望がかなえられるわけではありませんが、申込書にある受講生の研究対象物質などの記述は講師には伝えられます。</p>
合宿形式での開催時、自宅から通える場合は、宿泊なしで参加することは可能ですか？	<p>原則合宿形式での参加ですので、通いで参加は基本的には認めておりません。自宅が近いということであれば特例として認めることもあります。ただし、自宅に帰るからという理由で懇親会や不参加などのことは認められません。受講生同士の交流の場もワークショップの大事なプログラムの一環と考えております。また、車やバイクでの通いも認めておりません。特別な事情がある場合のみ個別にご相談ください。</p>
ランプセッションはどのようなことを行うのでしょうか？	<p>ランプセッションでは基本的には自由な議論の場として時間を取っているだけで特に準備が必要なわけではありません。こちらで提供している内容以外の議論が講師や受講生としたいというのであれば、この時間を利用してやって頂ければと思います。また自由参加ですが、こちらで用意するものとしては、通常Windowsパソコンの環境しかない方が多いので、Linux環境を簡単にセットアップする方法のいくつかを紹介することもあります。ワークショップを終わった後も継続した勉強や計算のトレーニングがしたい場合どのようにするのかのアドバイスをしております。もしこの時間にワークショップのプログラムにない何かをやりたいというのであれば、その準備をされて臨まれてもよいかと思います。ただ出来ることと出来ないことがありますので、分からない場合は事前にご相談頂ければと思います。</p>
阪大社会人ナノプログラムのコース1ではCMDワークショップの参加が必修になっていますが、改めて申込書を送る必要があるでしょうか？	<p>ナノプログラム受講生の方でも必ずCMDワークショップ事務局に申し込みをお送りください。CMDワークショップは9月と3月の2回の開催で、どちらに参加されるか申し込み頂かないと把握できません。申し込みは、9月及び3月の開催のCMDワークショップのHPが6月及び12月ごろに更新されますので、そのころ以降に申し込んで頂ければと思います。ナノプログラム受講生は必修ですので、選考はありません。</p>
懇親会に参加しないという選択はありますか？	<p>懇親会は原則全員参加でお願いしています。参加者と講師、あるいは、参加者同士の交流を深めることは、ワークショップ期間のみならず、その後の各人の研究や仕事上プラスとなる可能性がありますし、学生であれば、社会人の方々との交流は就職活動の参考にもなるはずですので、不参加ということは、認めておりません。</p>

<p>私は、第一原理計算を用いた解析を業務としており、アドバンスコースか「エキスパートコース」の参加を検討しています。今回のワークショップに「エキスパートコース」は設置されないのでしょうか。HPにおいて、エキスパートコースのみプログラムが掲載されておられません。</p>	<p>エキスパートコースは受講生の希望内容と講師の都合により判断して開催するかどうか決めております。多くの場合、課題が明確で使うソフトウェアも決まっています。従って講師も決まっているという場合になります。ですので、いきなりのエキスパートコースの参加は普通ありません。また、UNIXのコマンドからということも含まれません。いきなり共同研究に近いレベルのテーマで、第一原理計算の経験がすでに少しはあることが前提です。そうでないと、ビギナーコースレベルの個人レッスンになってしまいます。また、仮にエキスパートコースが開設されたとしてもプログラムは先端研究事例の講義など以外はスパコンコースと同じ感じですが、スパコンコースでは、使うソフトウェアは決まっていますがテーマは各自のテーマを持ち寄って講師と相談しながら進める事になっていますので、各自のテーマが今回のソフトウェアで計算するのに適していればエキスパートコースに近い実習になると思います。つまり、これらのコースは第一原理計算のいくつかの手法の特徴が分かっている、自身のテーマにはどのコードが適しているかが分かっているレベルであるということです。すでに業務で第一原理計算での解析をされているというのであれば、その系を扱うに適している、あるいは講師が得意としているものを選ぶほうが良いと思います。それぞれのソフトウェアの概要はHPにありますので、それを参考にしてく</p>
<p>事務局でご用意いただいたPCで動作環境を修得後、実習中のデータをその後、自前のPCで使用するためにいただけるのでしょうか。</p>	<p>ソフトウェアやデータも全てお持ち帰りいただけます。</p>
<p>持込ノートPCはLinux環境でもよろしいのでしょうか。また、Cygwinという、Windowsオペレーティングシステム上で動作するUNIXライクな環境があるとのことですが、この環境でもよろしいのでしょうか。</p>	<p>Linuxなんでも結構です。X Window Systemが動いていれば大丈夫です。普通に使う上でUNIXとLinuxの差を感じることはありません。Cygwinをインストールして持ってきていただいても構いませんが、X Windowが起動している状態でないと実習はできません。そこまでご自分で用意出来るようでしたら構いませんが、単にCygwinを入れただけでは当日困るかもしれません。あるいはデュアルブートになりますが、Ubuntuをインストールする方法もあります。Windows側から見れば単にUbuntuというソフトがあるように認識されていますので、気に入らなければコントロールパネルのアンインストールで削除できます。一番簡単なのは、Macを用意していただくことです。デフォルトでX Windowが使えます。このような環境設定に時間がかかるようでしたら、こちらで用意するPCを利用していただくほうが無難です。そして、こちらでどういうふうにご用意するのか聞いて頂ければ良いと思います。</p>
<p>持込ノートPCにつきまして、私の使っているノートPCはLinuxのUbuntuですが、こちらでも問題はございませんでしょうか。Ubuntu自体に自分でソフトのインストールなどをした経験はございませんが、自前のPCを持ち込んだ方用にこちらでお配りいただくデータのインストールの仕方の説明などはいただけるのでしょうか。</p>	<p>ビギナーコースでの実習では特にUbuntuに何かをインストールしておく必要はありません。単なる端末として使うだけです。PC自体にもほとんど負荷はかかりません。計算はすべてこちらのPCクラスターで行います。その結果を見たりファイルを変更したりするのにX Window Systemがある方が圧倒的に便利です。UNIXやLinuxの端末で我々は使っています。Ubuntuにはターミナルがデフォルトでありますので、それをサイドパネルに出しておいていつでも使えるようにしておけば、それだけで十分です。MachikaneyamaならFortranコンパイラのgfortranをインストールしておけば、同じ計算がUbuntu上でできますが、ほかのソフトはライブラリが必要ですので、それをインストールできれば可能ではありますが、ごく小さい系以外は事実上計算時間がかかりすぎて大変です。自前のPCを持ち込むということは、データをそこにコピーしてそのまま持ち帰って簡単な練習はできるということがメリットとしてあります。インストールの仕方などはランブセッションでチューターなどに聞いてもらえればUbuntu上でコンパイルするサポートはできます。やることは、コンパイラを入れているかを確認し、Makefileをそれに合わせて書き直すだけです。ライブラリをインストールする方法もできなくはないですが、STATE-SenriやABCAPをご自身のPCで使うというはあまりお勧めしません。計算時間がかかるからです。それならば、こちらで一般の方向けのPCクラスターを用意していますので、こちらでアカウントを作ったほうがずっと簡単です。詳しくは当日でもご利用にあたって料金はおかかりません。まだ実際に計算している人は少ないので、あまり制限を設けず計算してもらって構いませんが、多くなるとCMDワークショップの延長の教育的な目的の使用に限るとし、直接研究に関わることが出来るレベルになったらそれなりの施設の計算機に移っていただくことは考えています。ただ、現状はあまりそう固いこと言わずに使ってもらって結構です。CMSIで用意したPCクラスターで計算するにあたっては、同じインテル系のCPUですのでそのまま実行ファイルが動くかもしれませんが、基本的に動かないものですので、各自でコンパイルして実行できるようにLinuxやmakefileの中を変更するなど勉強していただくこととなります。質問があれば答えられる範囲で答えます。</p>
<p>ワークショップ終了後も計算を継続して行いたいのですが、PCクラスターが使える状況にないため、CMSIのPCクラスターにアカウントを用意していただきたいのですが、利用するにあたって、PCクラスターの使用料金などの条件はありますか。</p>	<p>利用にあたって料金はおかかりません。まだ実際に計算している人は少ないので、あまり制限を設けず計算してもらって構いませんが、多くなるとCMDワークショップの延長の教育的な目的の使用に限るとし、直接研究に関わることが出来るレベルになったらそれなりの施設の計算機に移っていただくことは考えています。ただ、現状はあまりそう固いこと言わずに使ってもらって結構です。CMSIで用意したPCクラスターで計算するにあたっては、同じインテル系のCPUですのでそのまま実行ファイルが動くかもしれませんが、基本的に動かないものですので、各自でコンパイルして実行できるようにLinuxやmakefileの中を変更するなど勉強していただくこととなります。質問があれば答えられる範囲で答えます。</p>