

意見抽出

講義の問題点

		コメント
B	講義で使うスライドと事前に配布されている資料が違っていたので、できれば、講義で使うスライドも事前に配布してほしい(同じスライドの方がメモを取りやすいため)	講義資料によっては著作権や未発表の資料があるため、事前公開は出来ないことがあります。
B	内容的には、大変勉強になるものですが、実習の時間が多い方が良いかと思いました。(特に1日目)実習を通じて理解が進むこともあるかと思います。	実習の時間は現状でぎりぎりまで増やしております。講義は、第一原理計算を実施するにあたって必要と思われる内容のみを取り入れております。もちろんこの講義を一度聞いただけでは十分な理解を得ることは難しいですが、計算コードの出した結果を正しく理解して解析するためには必要な知識でもありますので、ご理解頂ければと思います。
B	言語の統一をした方が良いと思う。	基本的には、結晶の対称性と電子状態、第一原理計算の基礎、先端研究事例及び特別講演は日本語で、その他の実習とそれに関連する講義は日本語と英語を併用する形になっています。ほとんどの場合日本人が参加者として多数であるため、日本語を使うほうがよりよい場合が多いのですが、少数でも海外からの参加者がおられる場合は英語での対応も可能な範囲で行うことしております。どちらかに、例えば英語に統一することも可能ですが、そうすると日本人の受講生からの不満が出るため、併用する形で行っています。
A	講義数がやや多いと思います。	講義数は人によってご意見が分かれますが、通常好評いただいている意見が多数ですので、プログラムに直接かかわる講義のみならず、様々な現在の第一原理計算に関わるトピックを知って頂く講義を用意しておりますので、ご理解頂ければと思います。
B	固体物理に関して1時間で話すのは、そもそも無理があるのは、承知だが、その場合、最後に読んでほしいリストをつけると、いろんな受講生にとって便利ではないか	講師にリストの作成を依頼することは可能ですので検討します。
B	Most of the Lectures,case studies were in Japanese which I did not understand.	Basically, the lectures of case study, crystal symmetry and electronic structure, and fundamentals of ab-initio calculations are given with Japanese because the most participants are Japanese. However, all the texts are prepared with English.

意見抽出

実習の問題点

コメント

S	<p>計算に時間がかかるため、待ち時間が発生したことが、もったいないと感じた。先生方にご指導いただけるので、できるだけ議論ができるように、軽い計算テーマを準備しておいた方が良かったように感じたので、次回参加することがあれば、そのように準備しておきたい(自分の問題です)</p>	<p>スパコンを使った計算でも、系が大きくなれば時間も当然かかってきます。ですから、いきなり最終目標の系を計算するのではなく、予備的な計算や、小さい系を準備しておかれると、時間を有効に使えるかと思えます。あくまで限られた期間での教育目的の実習ですので、本番の計算は実習後に適切な計算機で行われるのが良いと思います。それに筋道をつけるような計算をこの実習で出来ると考えて頂ければと思います。</p>
B	<p>自由実習の時間のもったいない気もするので、その時間の幾分かを他の講義にまわした方がよろしいかと</p>	<p>自由実習をもっとほしいという意見もある場合があります。実習中は講師の用意した計算をやるだけですので、少しでも自分の身になるような計算をおこなう意味では自由実習で練習をするのが良いと思います。時間の制約がありますので、限られた時間しか取れませんが、可能な範囲で自由に計算機を使える時間は確保するほうが良いと考えております。</p>
B	<p>AMの講義は短縮して、その分PMの実習時間を取っていただけたらと思います。</p>	<p>時間配分は各講師にお任せしていますが、場合によっては講義が長引いたこともあったかもしれません。極力実習時間を確保できるようにお願いしておきます。</p>
B	<p>UNIXの使用に関するトラブルが進行の妨げになっていたのでは、という印象もあったので事前にUNIXの勉強をさせておくと言ったことでもっとスムーズになったのではと思いました。</p>	<p>ビギナーコースではUNIXの操作に不慣れな方が多いため、UNIX講座を最初に行って、その後実習に入るプログラムになっております。それでも実際に実習を行った場合は戸惑うことがあると思いますので、その時はチューターがサポート出来るようにしておりますので、気軽に声をかけて頂ければと思います。あえてビギナーコースの参加者にはUNIXの知識を要求しておりませんが、事前にご自身でUNIXのコマンドを練習されておくほうが、実習がスムーズに進んで多くのものを得られる可能性が高いとは思われます。</p>
B	<p>例題をもう少し多く計算したかった。</p>	<p>同上。</p>

意見抽出

良かった講義

Machikaneyama講義&実習
先端事例 I II 特別講演III
赤井先生の講義(理論の説明が多く分かりやすかった)
先端研究事例で現状の技術を理解することができたのが良かった。特に宮本先生の講義が社会人向けの話であり、とてもよかった
特別講演III
Akai-KKRの講義
Akai-KKR
特別講演(×3)はとても良かったです。
先端事例と特別講演
Machikaneyama講習や先端事例紹介、特別講義は非常に良かったと思います。
京コンピュータについての講義
先端研究事例、特別講演は自身の専門とは異なるが、非常におもしろい内容で興味深かった。
AkaiKKR ABCAP
Machikaneyama概要講義
結晶の対称性と電子状態 特別講演 II、III 第一原理計算の基礎 先端研究事例 II
Akai-KKRに関する講義は良く準備されていながら、初学者にもなるべく伝えるように構成されていたと思います。
Machikaneyama2002講義 特別講演III
先端研究事例 Akai-KKR
結晶の対称性と電子状態 Machikaneyama講義 ABCAP講義 KKR法講義
全体的に良かったと思います。
CMD講義 Machikaneyama概要
一人だと勉強しにくいところを教えていただいた。
Lecture by Ogura
Introduce to Machikaneyama
Miyamoto-sensei's(!st principles simulation of excited state dynamics)

良かった実習

Akai-KKR
講義数を減らして、実習にまわした方が良いと思う、実習時間が増えれば、入力ファイル等の作成に時間がかける。今回はあらかじめ、用意された入力ファイルでの計算が多かった。
Osaka2K
もう少しフリーの実習時間を増やしてほしい。
良かった。 物足りない気がするが難しいところだと思う。初めて経験したのでよいイントロになった。
Hands-on by Ogura
Hands-on in Machikaneyama
Hands-on in Machikaneyama and ABCAP
Sato-Sensei's about (half) henschler alloy.

意見抽出

今後の希望テーマ

コメント

B	分子動力学／有機分子に関する第一原理計算を学びたい	本テーマについてはSTATE-Senriが得意としている分野です。アドバンスコースあるいはスパコンコースにご参加頂ければと思います。
B	GW	本ワークショップで提供しているコードではGWを組み込んでいるコードはございませんが、先端研究事例では取り扱うことは可能です。
B	計算負荷がおもいかもかもしれませんが、MDについてのテーマに入れていただければと思います。	第一原理MDを行うには計算時間がかかる場合が多いので、ビギナーコースで扱うことは時間的に不可能です。アドバンスコースでも難しいですが、アドバンスコースのほうが少人数で講師に直接相談出来ます。またスパコンコースでは自由なテーマを持ち寄って計算できますので、希望テーマを事前に相談して出来る範囲で可能な場合があります。もちろん、このレベルではUNIXの操作などは出来なければいけませんので、そこをクリアできればこちらの上級コースに申し込まれるのが良いと思います。
B	強相関係の計算、外場の取り扱い	これらのテーマは発展的な内容のため、ビギナーコースでは扱うことが時間的にできません。アドバンスコースでなら、この点についてアドバイスを受けてできる可能性はありますが、このテーマを扱えるコードでなければできません。KKRやFLAPW法なら可能性はあります。
A	非平衡系を記述できる第一原理計算、TDDFT等またその理論の講義	現在このような系を標準的に扱う計算コードは、こちらで提供している中にはありません。世界的に見ても非平衡系の第一原理計算が可能なパッケージはないと思います。TDDFTについてもこちらで提供しているコードでは扱っておりません。ただし、先端研究事例でこのテーマを扱うことは可能で、この方面の専門家をお呼びしたことは何度もあります。
B	計算対象を限定した講義(金属、半導体、絶縁体)など	CMDワークショップではいろいろな系で第一原理計算が適用可能であることを示すような講義や実習を行っておりますが、限定したテーマを扱うことはしておりません。これらはエキスパートコースやスパコンコースなどで自身でテーマを持ち寄って実習をされる場合にはある程度可能ですが、ワークショップではこのような限定したテーマに特化した講義は考えておりません。

B	半導体や、結晶欠陥に関する応用テーマを実際に扱われても面白いかと思いました。	ビギナーコースの実習では典型的な半導体の電子状態計算くらいは可能ですが、欠陥があるような系をいくつも扱うことは時間的に難しいです。アドバンスコースやスパコンコースなら十分可能です。KKR法, FLAPW法, 擬ポテンシャル法それぞれの扱いがありますので、それぞれ体験することも可能です。時間の都合もありますが、少なくとも講師に相談してアドバイスを受けることは可能です。
B	薄膜の輸送特性	本テーマはかなり先端的な内容ですので、アドバンスコースあるいはスパコンコースで直接講師に相談されるのが良いと思います。輸送現象についてはRSPACEが得意としております。
B	Photovoltaics	It is difficult to treat this topic in the WS because it is a quite advanced topic. If you participate the advanced course, you can get useful information from the teachear.
B	I would like to know about the application of Machikaneyama on the intermetallic formation ob Nb3Sn superconductor.	If you'd like to know a specific application of the code, you should participate the advanced course and discuss the teachears about materials that you'd like to caculate.
B	Metal oxide Material,conducting materials	If you'd like to know a specific application of the code, you should participate the advanced course and discuss the teachears about materials that you'd like to caculate.
A	Excited states calculation(photocatalytic properties) Linear scaling method and multi-scale simulation.	The excited states calculation is quite advanced. If you'd like to know this, you should participate the advanced course and discuss about the topic with teachears.
A	Fuel cell & solar cell application.	The fuel cell and solar cell application are quite advanced. If you'd like to know this, you should participate the advanced course and discuss about the topic with teachears. These kinds of topics are treated in Kasai Laboratory or Katayama-Yoshida Laboratory. You can consult with them about these topics.

意見抽出

今後に対する提言/要望

コメント

B	一週間連続で仕事を休むのは、なかなか難しいところがあります。分散していただくか、ご配慮いただけると助かります。	このご要望は以前からありますが、5日間の形式を変更することはいたしません。会社を休まれるのは大変なことは重々理解しておりますが、どうしても難しい場合はナノプログラム受講生の方についてはCMDワークショップ事務局に直接ご相談ください。
B	理論からのその実装(主要な部分のプログラミング)までの講義/解説と余裕があれば、実習	この内容はコード開発に関わる内容ですので、本ワークショップの趣旨とは異なります。別のワークショップや講習会をご検討ください。ただ、アドバンスコースやスパコンコースでは、そのあたりの内容を講師から直接聞くことは可能です。
B	ひとつのコードに集中するワークショップもあつたらと思いました。	一つのコードに集中するコースはスパコンコースがそれにあたります。ただし、UNIXの操作やエディターの操作、ある程度の第一原理計算の経験が必要です。
B	自由実習の時間が少ないように思いました。先生の教えでやっていると分かっていたことが、いざ、自分でやってみると分からなかったりするので、その日習ったプログラムはその日に実習したいと思います。火曜日にやったことは金曜日になると忘れてしまう内容もあるので。	ビギナーコースは密度汎関数理論をもとにした典型的なコードを一通り体験することを目的としています。その中でも可能な限り自由実習も確保していますが、現在の5日間の時間ではこれ以上の自由実習の時間を取ることは難しいです。それ以上の自由実習となると、ワークショップ後の各自の計算練習になると思います。
A	高等研のほうが良かったです。	3月は高等研で開催しておりますので、そちらにご参加ください。
B	私自身学生で、勉強不足な部分が多いのですが、バンド理論や状態密度の評価などに関して、分からない部分があったので、簡単な講義または資料などを用意していただけると非常にありがたいとおもいます。	現状で、これ以上の講義を増やすことは実習時間を減らすこととなりますのでできません。第一原理計算の基礎についての書籍もいくつかはHPにありますし、書店にも並んでおります。もちろん図書館にもあります。これらのリストを用意することは可能ですが、ワークショップ内でこれらの説明をすることは時間的にできません。
B	懇親会が2回は多い(家から通っているものには時間の負担になる。)	懇親会は貴重な情報交流、人材交流の場と考えております。特に学生にとっては企業研究者と直接話が出来る場ですので、就職を考えている学生にとってはその貴重な場を十分生かして頂くことを願っています。
B	(モデル等)を図示する等、直観的に何をしているのか、分かりやすい工夫があればいいと思いました。	講師に今後の改善案としてお伝えしておきます。

意見抽出

意見/感想など自由に・・・。

コメント

B	自由実習を他のソフトの実習時間にしていだければと思います。	実習の流れでその日のコードの実習になってしまったかもしれませんが、自由実習の時間は各自で自由に進めて頂いて結構です。
S	もう少し実習時間が取れるとありがたいです。	スパコンコースは現状最大の時間をかけることが出来るコースです。これ以上となると、自身でスパコン利用を開始されるか、共同研究という形で進められてはと思います。