

バージョン管理と ソースコードホスティングサービスの 活用

ソフトウェア高度化推進チーム

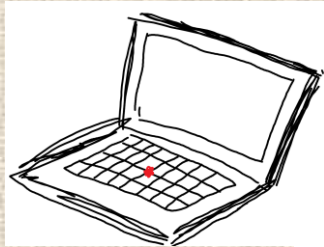
河村光晶

物性アプリオープンフォーラム
2015/5/27

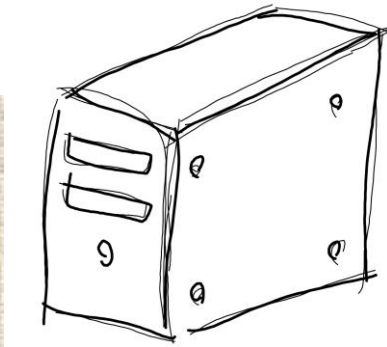
目次

- バージョン管理システムミニマム
 - なぜバージョン管理をするのか
 - 集中型バージョン管理
 - 分散型バージョン管理
- リポジトリサーバー
 - 機能
 - リポジトリサーバーの紹介
- いくつかの物性アプリのバージョン管理
- まとめと議論

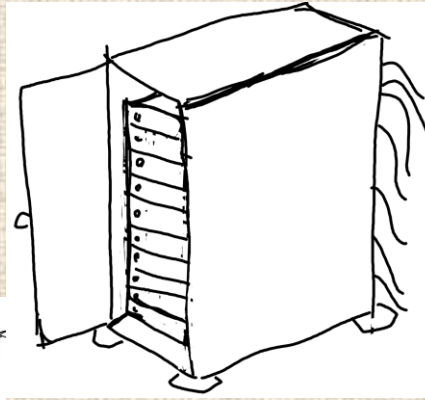
想定される状況



ノートPC



研究室PC



PCクラスター



システムC



システムB



自宅PC

- ・ どこに最新のソースコードがあるのか
- ・ ソースコードの改変を簡単に反映させたい

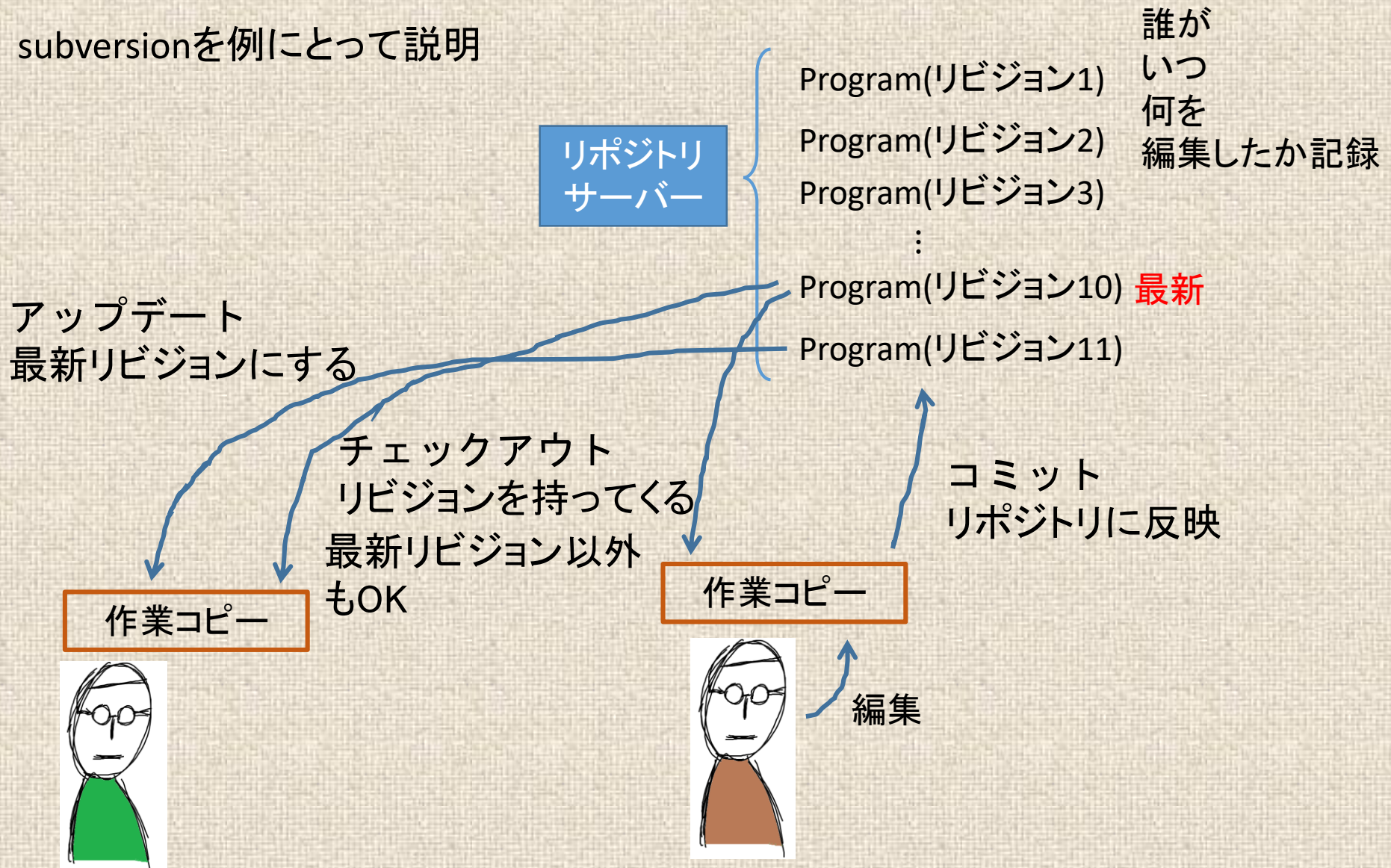
想定される状況2



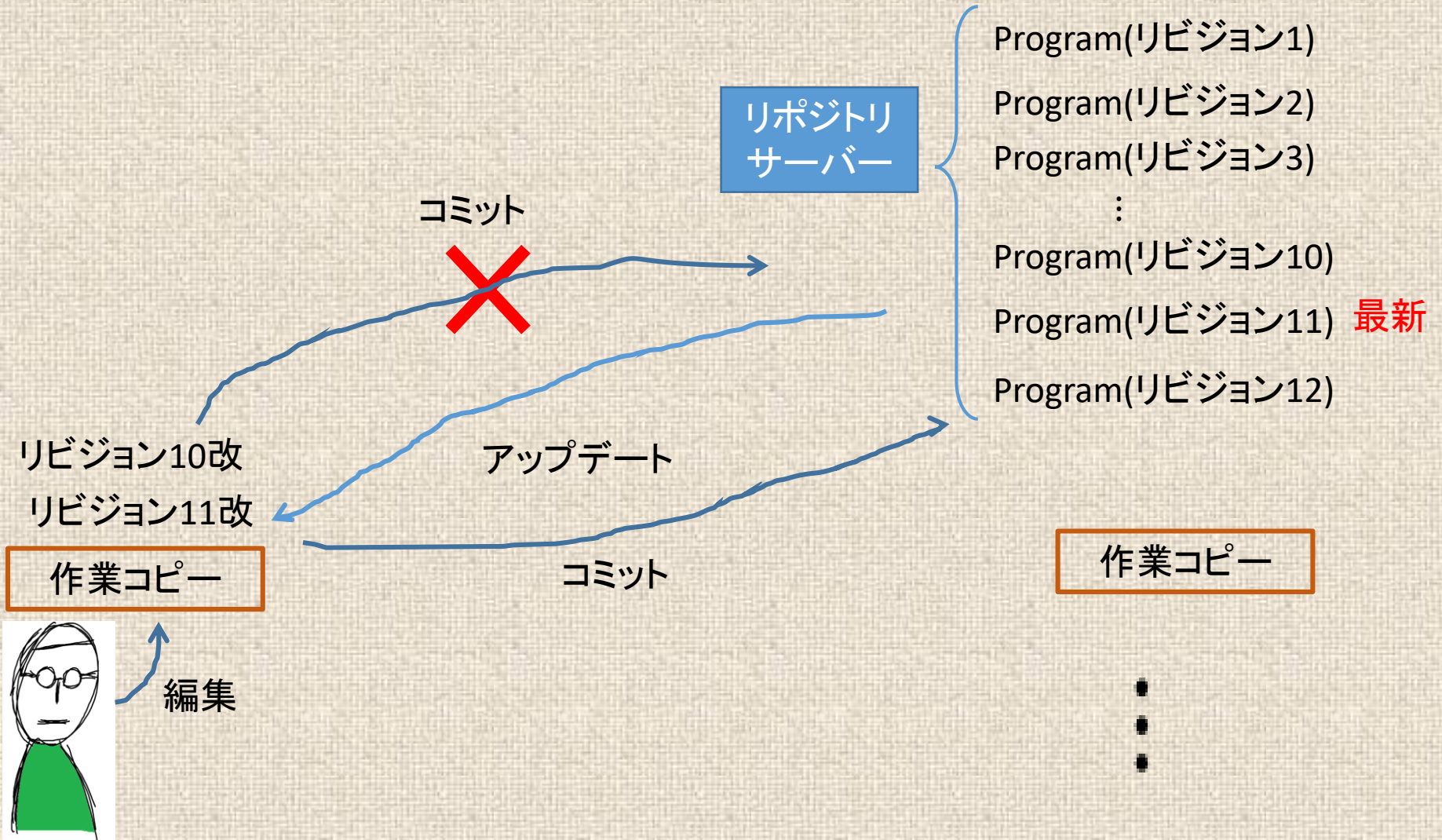
- ・ どこでダメになったか追跡できるように残しておく。
- ・ あとで「やっぱりあの時のやり方の方が良かった」というときに
すぐに戻せるようにする。

集中型バージョン管理

subversionを例にとって説明



同時に編集した場合

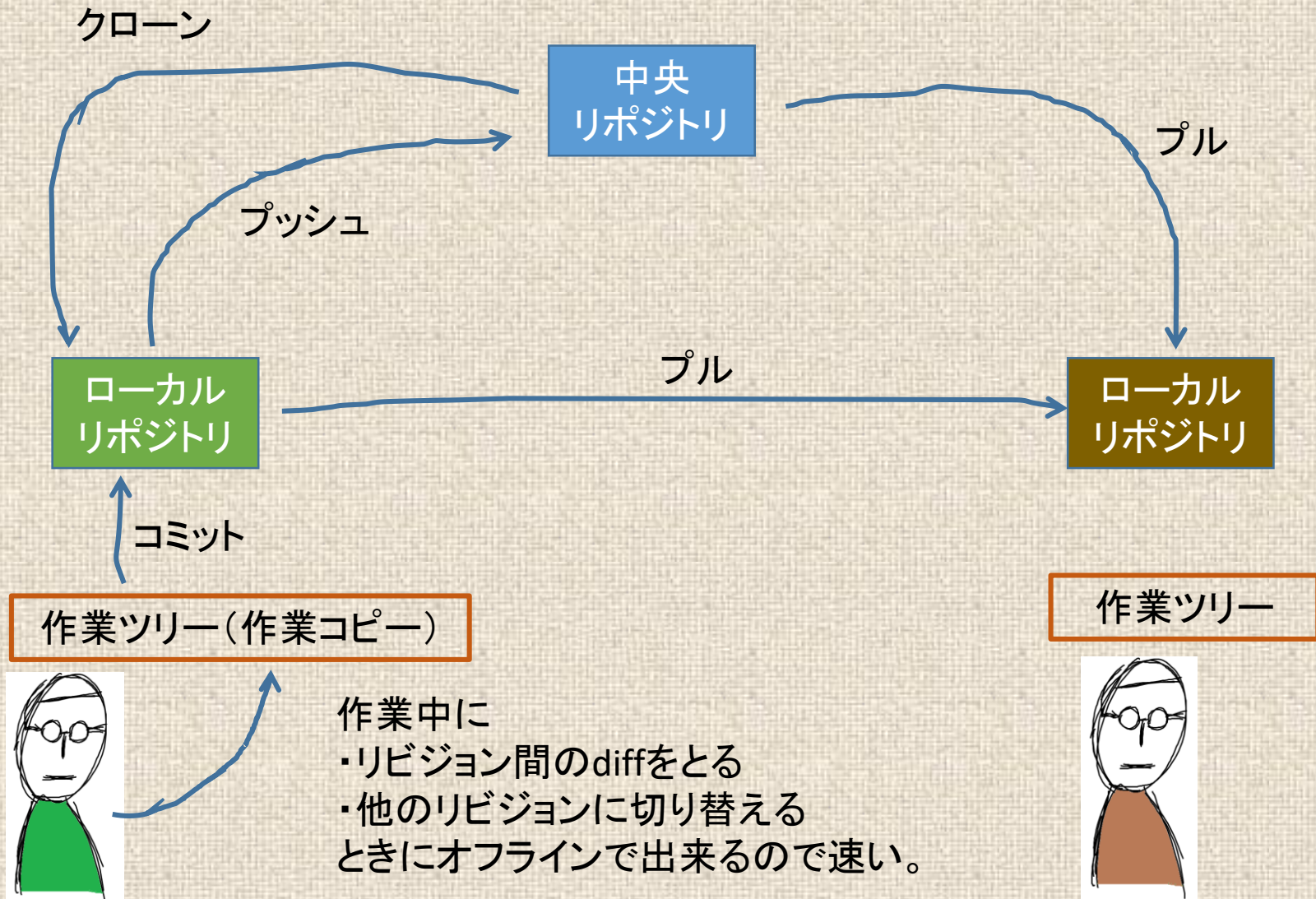


一般的なディレクトリ構造

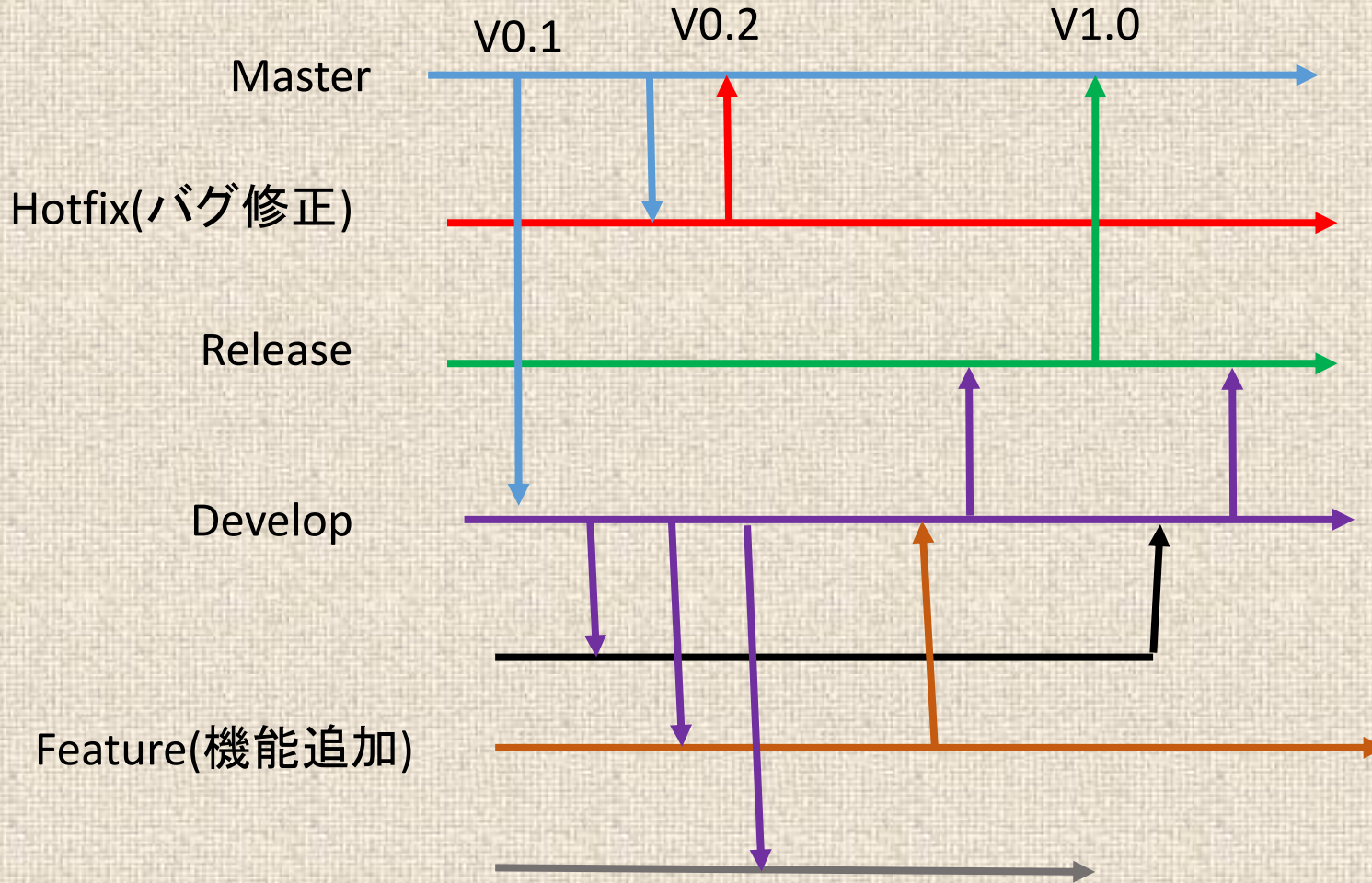
※必ずこうしなければならないわけではない

- trunk/ 現在メインに開発を行っている版
- branches/ 機能追加等大規模な改定を行うときに一旦ここにコピーして、ここで改訂を行い、完成後trunkに戻す。
- tag/ trunkのある時点でのコピーを置いておく。改訂はしない。

分散型バージョン管理



ランチの作り方の例



A successful branch in git を参考

リポジトリサーバーの機能

- Git, Subversion等のリポジトリサービス
(パブリック、プライベート)
- チケット(誰が、何を、いつまでにやるか。進捗)
- Wiki
- 文章
- アプリを見つけやすくする機能
- ファイル置き場
- アプリとの連動
など

ESDN (旧SourceForge.jp)

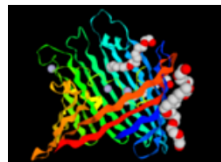
- Git, Subversion, Mercurial
- パブリック限定でいくつでもリポジトリを作れる。
- アプリを見つけやすい

GLmol

概要 ▾ [ダウンロード](#) [ソースコード](#) ▾ [チケット](#) ▾ [文書](#) ▾ [コミュニケーション](#) ▾ [ニュース](#)

[Hadoop、NoSQL、クラウドストレージ向けSQLエンジン「Apache Drill 1.0」が公開 \[Magazine\]](#)

プロジェクトの説明



🖼️ 画像一覧

WebGL を利用した分子構造ビューアを開発していきます。Java やプラグインを使わず Web ブラウザの機能だけで分子構造を提示できるようにするほか、科学データの可視化における Web GL の有効性を検証します。

🐛 [バグを報告する](#)

📖 [文書を見る](#)

💬 [フォーラムで情報交換](#)

📡 [RSSを取得](#)

システム要件

WebGL 版は Firefox, Chrome, Safari, Opera の新しいバージョンで動きます。Internet Explorer では動きません(WebGL をサポートしないため)。

Android 版は Android 1.6 以上で動作します。NDKmol も、国内で入手可能なほとんどの

↓ more ↓

ダウンロード

最新リリース

[GLmol 0.47](#) (日付: 2012-08-29)
[Android 0.90](#) (日付: 2012-08-29)
[GLmol 0.46](#) (日付: 2012-07-27)
[GLmol 0.44](#) (日付: 2012-05-30)
[GLmol 0.43](#) (日付: 2012-05-20)



ダウンロードファイル一覧



🔍 検索

👤 いいね!

0

🐦 ツイート

0

👍 +1

1

Microsoft Azure

マイクロソフトの
クラウド

Windows も Linux も。
シンプルな Web サイト構築から
大規模メディア配信まで対応。

Microsoft

今すぐ
無料トライアル

ニュース

データがありません

プロジェクト情報

最終更新

2015-02-23 18:01

登録日

2011-10-27 08:04

プロジェクトランキング

活発度順位: 圏外

ダウンロード順位: [2407位 \(2\)](#)

開発メンバー

👤 [biochem_fan](#)

メンバー一覧

ソフトウェアマップ

開発状況

5 - プロダクション/安定

対象ユーザ

開発者, エンドユーザ/デスクトップ,
科学/研究

ライセンス

GNU Lesser General Public License v
3 (LGPLv3)

主要対話語

英語, 日本語

オペレーティングシステム

📷 スクリーンショットを投稿する

チケット一覧/検索 (2 件が条件に合致)


現在表示されている一覧の検索条件:


- ・ 状況が次と等しい: オープン, 完了

新規チケット登録

検索条件をリセット

この検索条件のURLを表示

 プロジェクト チケットRSS

 この条件のチケット一覧RSS

検索条件

状況☒ オープン☒ 完了

検索条件の追加:

属性の値ごとまとめて表示:

検索

一覧表示項目の選択

ID	登録日時	概要	担当者	チケットの種類	マイルストーン	コンポーネント	優先度
29356	2012-08-26 14:11	Efvet file loader	 biochem_fan	パッチ			5 - 中
28016	2012-04-04 20:12	Use of canvas renderer	 biochem_fan	機能リクエスト			2

Use of canvas renderer

登録: 2012-04-04 20:12
最終更新: 2012-04-09 09:31



報告者:	dvhh	担当者:	biochem_fan
優先度:	2	マイルストーン:	(未割り当て)
チケットの種類:	機能リクエスト	重要度:	3
コンポーネント:	(未割り当て)	状況:	オープン [担当者決定済み]
解決法	なし		

チケットの詳細



Using the canvas renderer, would allow a larger audience of users, I understand the impact on performance, but I guess it could be used for lightweight models

添付ファイル

添付ファイルリスト

添付ファイルはありません。

新規添付ファイル追加

チケットの履歴 - 6 件中 6 件表示 [古い履歴を非表示にする]

チケット一覧へ戻る

2012-04-04 20:12 更新者: dvhh

- 新しいチケット "Use of canvas renderer" が作成されました。

ソフトウェアダウンロードマップ

OSDNで開発 プロジェクト作成 ソフトウェアマップ 開発者マップ 作業部屋マップ ランキング▼ 新着情報▼

米Microsoftが.NET Core向け「Windows Communication Foundation (WCF)」をオープンソース化 [1]

ソフトウェアダウンロードマップ

プロジェクトシンプルリスト

■ データベース環境 ■ 開発状況 ■ 対象ユーザ
■ ライセンス ■ 主要対話語 ■ オペレーティングシステム
■ プログラミング言語 ■ トピック ■ ユーザインタフェース

トピック
科学/工学
分子科学

308 件のプロジェクトが条件に合致します

< 1 2 3 4 5 ... 21 >

gMol

gMolは、分子構造や表面のような科学的データの3次元モデルを表示、操作するために使用される対話的可視化システムです。OpenGLと、柔軟なユーザーインターフェースのウェブブラウザウィジェットが含まれます。

詳細表示

平均評価

0.0

☆☆☆☆☆

投票数 0

ダウンロード

最終更新日: 2015-03-20 07:52

検索

いいね! 0 ツイート 0 g+ 0

Microsoft Azure

マイクロソフトのクラウド

Windows も Linux も。
シンプルな Web サイト構築から
大規模メディア配信まで対応。

Microsoft

今すぐ
無料トライアル

オープンソース・ダウンロード

- 1 CrystalDiskInfo (7,497)
- 2 CrystalDiskMark (5,820)
- 3 7-Zip (5,009)
- 4 Tera Term (2,496)
- 5 ffdshow (1,605)
- 6 Dumppper (814)
- 7 FileZilla (760)
- 8 Media Player Classic - Homecinema (696)



GitHub

- Git
- パブリックリポジトリはいくつでも作れる
- 有料の個人・グループ契約をするとプライベートリポジトリを作れる(個数限定)。
- アカデミックなメールアドレスを持っていれば、フォームから申請すると、個人で5個、グループで20個プライベートリポジトリを作れる。(承認まで時間がかかる?)

Parsers and algorithms for computational chemistry logfiles <http://cclib.github.io>

1,726 commits

6 branches

7 releases

6 contributors



branch: master

cclib / +



Merge pull request #190 from langner/master



berquist authored 19 days ago

latest commit 4a8a9525d8

data	Move regressions to cclib-data (#152)	2 months ago
old	We can archive the wiki download script	7 months ago
src	For now, fail silently when importing external dependencies.	26 days ago
test	Tests: add two stubs for testing writer module	a month ago
.gitignore	Merge pull request #148 from langner/nonumbers	6 months ago
.travis.yml	Travis: remove problematic bridges tests, add writer tests	19 days ago
ANNOUNCE	New DOI from Zenodo	3 months ago
CHANGELOG	Bump 1.3->1.3.1	3 months ago
INSTALL	Update INSTALL	7 months ago
LICENSE	Changed version number from 0.5b to 0.5. Replaced the LICENSE file wi...	9 years ago
README.md	Add the logo to the README.	28 days ago
THANKS	Bump 1.3->1.3.1	3 months ago
logo.png	Add the logo to the README.	28 days ago
logo_for_readme.png	Importing a script to download the text from the wiki, and also import...	6 years ago

<> Code

Issues

30

Pull requests

1

Wiki

Pulse

Graphs

HTTPS clone URL

<https://github.com/cclib/cclib>

You can clone with [HTTPS](#), [SSH](#), or [Subversion](#).

Clone in Desktop

Download ZIP

Branches



cclib / cclib

Watch 8

Star 22

Fork 18

Overview

Active

Stale

All branches

Search branches...

Default branch

master Updated 19 days ago by berquist



Default

Stale branches

turbomoleparser Updated 4 years ago by ATenderholt

964 | 38

Compare

molcas Updated a year ago by langner

815 | 4

Compare

cbridge Updated a year ago by ATenderholt

817 | 11

Compare

mopac Updated a year ago by ATenderholt

647 | 2

Compare

fragments Updated 4 months ago by langner



206 | 0

Compare

Issue



cclib / cclib

Watch ▾

8

★ Star

22

Fork

18

Issues

Pull requests

Labels

Milestones

Filters ▾

is:issue is:open

New issue

30 Open ✓ 52 Closed

Author ▾

Labels ▾

Milestones ▾

Assignee ▾

Sort ▾

Test bridges with Travis bridge tests

#200 opened 19 days ago by langner

0

Symmetry in test jobs parsers question

#197 opened on Apr 6 by berquist

4

Towards v1.4 maintenance

#196 opened on Apr 1 by langner v1.4

4

Parsing multiconfigurational/multireference outputs feature parsers

#195 opened on Mar 25 by berquist

2

Molcas parser feature Molcas parsers

#191 opened on Mar 22 by berquist



1

Tests and coverage for aonames tests

#184 opened on Mar 9 by langner v1.4

7

Atom labels in NWChem (aonames) NWChem

#181 opened on Mar 3 by ATenderholt v1.4

0

Support Cfour output feature parsers

#180 opened on Feb 27 by ATenderholt v2.x

1

Basic tests in ADF ADF parsers

0



DALTON: expand parser capabilities and test coverage

#198



berquist wants to merge 15 commits into `cclib:master` from `berquist:dalton`

Conversation 5

Commits 15

Files changed 38



berquist commented 29 days ago

Collaborator

Work on extending the parser and tests will continue in this pull request; I've decided to open it now so progress can be tracked.



berquist added some commits 29 days ago

- DALTON: all old and new test jobs pass opening with ccget. ... ✗ e9ee719
- Update the README to be a bit cleaner, using badges. 1f17050
- Add the Markdown extension for the README file. f1189be
- Add the logo to the README. ✓ a142747



berquist added `parsers` `tests` `DALTON` labels 29 days ago



berquist added this to the **v1.4** milestone 29 days ago



langner and others added some commits 22 days ago

- Merge pull request #199 from berquist/master ... ✗ 5449f68
- Merge pull request #190 from langner/master ... ✓ 4a8a952
- Merge remote-tracking branch 'eric/dalton' into dalton ... 3135ec2
- Tests: fix typo in summary of test_data d2019ea
- Dalton: work on geoopt-related attributes (geovalues, optdone, atomco... 73e6887



langner commented 14 days ago

Owner

As I mentioned in [berquist/cclib#4](#), DALTON does not seem to support UHF, so we can remove those data tests.

自家サーバー

- Linux(Debian,CentOS)ならパッケージを何個か入れるだけ。
- redmineを入れるとOSDNとよく似たものができる。
- GitLabを入れるとGithubっぽく出来る。
- 機能や制限は自分の好きなように出来る。
- 施設の停電
- メンテナンス(セキュリティーアップデート、ディスクのバックアップ、機器の故障対応など)
- 外からアクセスできるか



- Git、Mercurial
- 共同開発人数制限ありでパブリック/プライベートリポジトリをいくつでも作れる(5人まで無料)。
- アカデミックなメールアドレスを登録すると無制限になる。

価格概要

[価格表を見る](#) ➡

5 ユーザー 無料	10 ユーザー \$10/月	25 ユーザー \$25/月	50 ユーザー \$50/月	100 ユーザー \$100/月	無制限 \$200/月
--------------	-------------------	-------------------	-------------------	---------------------	----------------



mitsuaki1987

FermiSurfer

アクション

クローン

ブランチの作成

プルリクエストを作成

比較

フォーク

NAVIGATION

概要

ソース

コミット

ブランチ

プルリクエスト

課題

Wiki

ダウンロード

Settings

コミット

All branches ▾

🔍 コミットの検索

作成者	コミット	メッセージ	日付
Mitsuaki Kawa...	f5a4f9e	.gitignore : マニュアル用pdf, doxygen, opensdf(VisualStudio)を無視	2015-05-12
Mitsuaki Kawa...	52baff7	*.eps, *.odg : 新しいメニュー(Mouse Drag)の画像の追加.	2015-05-10
Mitsuaki Kawa...	8bd4e30	dvi,toc,aux,manual_*.log : texタイプセットの時に出てくるファイル	2015-05-08
Mitsuaki Kawa...	7dc632c	src/fermisurfer.c : 右クリックメニューに「mouse drag」を追加し、ドラッグ時の動作を「回	2015-05-08
Kazuyoshi Yos...	75f790e	doxygenのコマンド例を追加。	2015-04-17
Mitsuaki Kawa...	480aed4	本体ソースコードはsrcへ、マニュアルソースコードはdoc/へ、マニュアル内の画像は	2015-04-15
Mitsuaki Kawa...	8151d9e	Sources of manuals in English and Japanese	2015-04-15
Mitsuaki Kawa...	2f09127	TEST	2015-04-15
Kazuyoshi Yos...	08f0e2b	.DS_Storeをgitで管理しないように設定。	2015-04-15

QE forge

- 物質科学関連の計算にかぎる
- プライベート・パブリック両方とも特に制限なく作れる。
- アカウント作成、リポジトリ作成の時に承認を得る必要がある。

Quantum ESPRESSO

- >> サマリー
- >> レポーティング
- >> 検索
- >> フォーラム

トラッカー

- Support
- Patches
- Bugs
- Next Release
- To Do

Feature Requests

- 閲覧
- 新規トラッカー...
- クエリ
- E-mail Gateway
- モニター トラッ...
- Users monitoring...
- Workflow rules

ドキュメント

- >> News
- >> ファイル
- >> リスト
- >> Wiki

[ホーム](#) » [プロジェクト](#) » [Quantum ESPRESSO](#) » [トラッカー](#) » [Feature Requests](#) » [トラッカー アイテムの閲覧](#)


ID サマリー 優先度: 割り当て先: Status: 優先されるキー 順序 [閲覧](#)

Use Query...

ID	サマリー	優先度	割り当て先:	送信者	Status	オープン日	クローズ日	最後に変更した日付
7	Add printout of convergence thresholds	3	Paolo Giannozzi	Paolo Giannozzi	Closed	2009-03-11	2009-03-20	2009-03-20
8	Use inversion symmetry	3	Layla Martin-Samos	Paolo Giannozzi	Open	2009-03-11		2009-03-14
9	Reduce I/O in CP	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Closed	2009-03-19	2013-02-13	2013-02-13
15	Projected DOS with tetrahedra	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2009-06-11		2009-06-11
17	constant of motion in CP dynamics	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Closed	2009-07-16	2009-09-29	2009-09-29
98	ph.x: Avoiding the recalculation of the band structure in distributed phonon dispersion jobs	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2013-02-13		2013-02-13
112	More flexible I/O directories	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2014-04-02		2014-04-02
146	manycp.x	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Closed	2014-12-07	2014-12-22	2014-12-22
148	Analytical HGH pseudopotential	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2014-12-08		2014-12-08
151	More efficient minimization at very strict thresholds	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2014-12-12		2014-12-24
155	XSpectra and Gamma-only grid	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2014-12-22		2014-12-22
156	Efficient structural optimization (bfgs) with tqr option	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2014-12-24		2014-12-24
157	PAW with spin polarized BLYP	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Closed	2015-01-15	2015-02-17	2015-02-17
158	Automatic choice of parallelization levels	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2015-01-16		2015-01-16
159	variable-cell with electric fields	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2015-01-16		2015-01-16
161	NEB with no I/O	3	Nobody	Paolo Giannozzi	Open	2015-01-23		2015-01-23
174	band plotting	3	Nobody	Giovanni Cantele	Open	2015-03-23		2015-03-23

[新規トラッカー アイテムの追加](#)

1

フルネーム 	アカウント名 (小文字) 	詳細 	
Yambo	yambo	Yambo is a FORTRAN/C code for Many-Body calculations in solid state and molecular physics. Yambo can calculate in an Ab-Initio manner absorption, energy loss and quasiparticles properties. Yambo is parallel and interfaced with Abinit and PWscf.	
Wyckoff Positions Parser	wpp	Wyckoff Positions Parser...	
WanT	want	WanT is a GNU-GPL software aimed at the calculation from first principles of electronic and transport properties of nanojunctions making use of maximally localized Wannier functions.	
VIBrational TOOLS	vibtools	VIBTOOLS is a suite of small programs performing post-processing of ab-initio forces and positions to calculate infrared, Raman, vdos , neutron effective density of states, dynamic structure factor, etc.	
vdW-DF Exchange-Correlation Functional	vdw-df	The objective of this project is to completely self-consistently implement the truly non-local van der Waals exchange-correlation functional vdW-DF (see M. Dion et al., PRL 92, 246401 (2004) and T. Thonhauser et al., PRB 76, 125112 (2007)).	
Unfold	unfold	A post-processing tool for QuantumESPRESSO to unfold energy bands of supercell calculations.	
TSMD	tsmd	A classical molecular dynamics code using polarizable force fields and including tools for generating ab-initio parametrized force fields and for trajectories analysis.	
Third order DFPT	d3g	Compute the third order derivative of the total energy with respect to three monochromatic lattice perturbation. This project uses the "2n+1" extension of Density Functional Perturbation Theory.	
thermo_pw	thermo_pw	The purpose of this project is to build and test a set of fortran drivers for the parallel and/or automatic computation of material properties using the QE routines as the underlying engine.	
TDDFPT	tddftp	Time Dependent Density Functional Perturbation Theory using Lanczos chains for calculating photo-spectral properties of molecules or extended systems . Tightly integrated to Quantum Espresso. See http://arxiv.org/abs/0801.1393 for detailed explanation.	
Solvent Models and Electrochemistry	electroemb	The objective of the project is to develop computational tools for the description of quantum systems in complex environments.	
Shirley	shirley	Shirley enables fast, efficient, accurate, and fully-automated k-point interpolation of electronic structure.	
Self-energies And eXcitations	sax-project	SaX is a package for the calculation of electronic and optical properties in the framework of many-body perturbation theory (GW approximation). SaX implementation is based on periodic cells, plane-waves and pseudopotentials.	
RECOMBinations	recomb	Recomb is a Fortran code for Coulomb-driven recombination rates calculations, based on density-functional theory, plane waves and pseudopotentials. Lifetimes are calculated using Fermi's golden rule.	
Quasiharmonic Approximation	gha	Calculation of Thermodynamics properties using the Quasi - Harmonic Approximation	
Quantum Monte Carlo	turborvb	TurboRVB is a very efficient quantum Monte Carlo package, based on a geminal wave-function (AGP) and a highly accurate Jastrow factor. These ingredients allow to implement the RVB theory of electronic correlation.	
Quantum ESPRESSO	q-e	Quantum ESPRESSO is an integrated suite of computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials (both norm-conserving and ultrasoft).	
QMMM wrapper	qmmmw	QMMM wrapper is based on the original idea and code MS2 of Riccardo Di Meo. QMMMW, works as an interface between the Born-Oppenheimer DFT engine of Quantum ESPRESSO and the classical Dynamics engine of LAMMPS.	
QE-tutorial	qe-tutorial	Repository for material useful in organizing Quantum ESPRESSO tutorials	
QE+MBH	qembh	QE+MBH stands for Quantum Espresso + Many Body Hamiltonian. The project aims to extend the DFT+U scheme to deal with spin-orbit coupling and non-collinear magnetism. Other model Hamiltonians will be introduced to treat more accurately e-e interactions.	
QE live distribution	qe-live	This project aim to build and maintain a simple Linux live distribution including open-source scientific tools, binary and source of the most recent QE version and a installer for fast deploy.	
QE-GPU	q-e-gpu	This independent repository collects various GPU piece of codes related to the Quantum ESPRESSO suite in order to exploit new hybrid CPU+GPU high performance computing systems.	
QE-GIPAW	qe-gipaw	This is the new home of GIPAW (Gauge-Including Projector-Augmented Wave). GIPAW allows to calculate NMR and EPR spectra.	
PWTk	pwtk	The PWTk stands for PWscf ToolKit. PWTk is a Tcl scripting interface to PWscf set of programs contained in the Quantum Espresso distribution.	
Public EPW	epw-public	Public EPW is the public branch of the project EPW	
PSlibrary	pslibrary	The purpose of the project is to provide a library of inputs of the ld1.x code for the generation of a standard set of norm conserving, ultrasoft and PAW pseudopotentials.	
phiGEMM	phigemm	The phiGEMM library is a numerical library that implement Level 3 BLAS GEMM routines (S/D/C/Z) that take advantage of heterogeneous multi-core compute nodes (or workstation) equipped with NVIDIA GPU cards.	
NKC SIC	nkc	This project is aimed to the development and testing of a new self-interaction scheme.	
Multi Scale Modeling Simulation	ms2	Software platform for the modelling of nano-materials with simulations that range from the meso-scale to the quantum scale, employing the Quantum Espresso suite and the LAMMPS engine.	
MiniDFT	minidft	MiniDFT is a minimalist version of Quantum ESPRESSO that performs only LDA total energy and gradient calculations. The purpose of miniDFT is to explore new parallelization schemes, programming languages, programming models and computer architectures, and evaluate their suitability for plane-wave DFT calculations. These types of experiments will be more easily done with MiniDFT than with QE, because the current version of MiniDFT is significantly smaller than QE.	
iotk	iotk	This is a library to perform input/output on xml files from FORTRAN.	
GW+Wannier	qww	GWW or the computation of the GWa quasi-particle energies, based on the use of Wannier-like orbitals.	

物性アプリ開発における実例

- ALPS
- DSQSS
- QuantumESPRESSO
- ALAMODE
- Octopus

Welcome to the ALPS developer wiki

This site is meant as primary ALPS development coordination center. We can now use Trac to

- track bugs,
- plan and cooperate on new projects,
- view the source code.

You need to log in to use almost all features. The usernames and passwords are identical to those for the Subversion repositories.

Repository

The ALPS repository is open and can be accessed at:

```
svn co https://alps.comp-phys.org/svn/alps1/trunk/alps
```

Starting Points

- [TracGuide](#) -- Built-in Documentation
- [The Trac project](#) -- Trac Open Source Project
- [Trac FAQ](#) -- Frequently Asked Questions
- [TracSupport](#) -- Trac Support
- Mailing list comp-phys-alps-devel@list.comp-phys.org

Documentation

- [ETH](#) -- HOWTOs and guides for the ETH group
- [Archive](#) -- How to obtain the persistent file archive for Vistrails to speed up tutorials
- [CustomCMake](#) -- How to build a CMake environment for a custom application
- [AlpsPython](#) -- How to use ALPS within Python
- [Plot3D](#) -- How to make 3D plots
- [ALPS NGS Documentation](#) -- Documentation of the new alps interfaces
- [NewDocumentation](#) -- Development of new ALPS documentation

Guides and HOWTOs for the ETH computational physics groups

You always store things on the correct shelf..."

Welcome to the ALPS developer wiki
[Repository](#)
[Starting Points](#)
[Documentation](#)
[Guides and HOWTOs for the ETH computational physics groups](#)
[Advanced builds](#)
[ALPS infrastructure](#)
[HDF 5 schemas](#)
[Provenance discussion notes](#)
[ALPS developer meeting notes](#)

- Subversion
- 独自サーバー



Home

Edit

New Page

yomichi edited this page on Oct 7 2014 · 6 revisions



Discrete Space Quantum Systems Solver

DSQSSは、格子などの離散空間上で定義された量子多体問題を解くためのプログラムです。ファインマン経路積分をワーム更新法でサンプリングする量子モンテカルロ法を使っています。単位格子の情報、2体相互作用ハミルトニアン of 行列要素などを入力ファイルとして、広い範囲のモデルに対応しています。

Table of Contents

- [利用者マニュアル](#)
- [リリース情報](#)
- [ダウンロード](#)
- [開発者](#)
- [開発協力者](#)

qss/wiki

Pages 10

[Home](#)[Q&A](#)[インストール手順](#)[付録](#)[利用者マニュアル](#)[原理・アルゴリズム](#)[参考文献](#)[実行方法](#)[概要](#)[計算例](#)

Wiki



Clone this wiki locally

<https://github.com/qmc/dsqss.1>

Clone in Desktop

ALAMODE

- 非調和格子モデルソルバー
- Github (sourceforgeで公開)

Program package for anharmonic phonon calculations <http://sourceforge.net/projects/alamode>

625 commits

2 branches

5 releases

1 contributor



branch: **develop**

alamode / +



Merge branch 'release/v.0.9.4' into develop

ttadano authored on Feb 16

latest commit d2199fbbb1

alm	Change 0.9.3 --> 0.9.4	3 months ago
anphon	Change 0.9.3 --> 0.9.4	3 months ago
docs	Change 0.9.3 --> 0.9.4	3 months ago
example/Si	Changed 0.9.1 --> 0.9.2	7 months ago
external	combination.hpp is moved to the external folder	a year ago
include	Tentative modifications for replacing .info file to .xml file.	a year ago
tools	Fixed issues of displace.py for QE.	4 months ago
ChangeLog.md	Changes for version 0.9.4	3 months ago
LICENSE.txt	Add license descriptions to all *.cpp and *.h files.	a year ago
README.md	Change 0.9.3 --> 0.9.4	3 months ago
alamode.sln	Added setting files for Visual studio	8 months ago

README.md

ALAMODE

- Version 0.9.4 (Beta)



branch: master ▾

Commits on Apr 16, 2015

**Avoid some compilers to warn the usage of std::pow(int, int)**

ttadano authored on Apr 16



1830c82



Commits on Feb 16, 2015

**Merge branch 'release/v.0.9.4'**

ttadano authored on Feb 16



859fcec

**Change 0.9.3 --> 0.9.4**

ttadano authored on Feb 16



7851147

**Changes for version 0.9.4**

ttadano authored on Feb 16



f0fb881



Commits on Feb 13, 2015

**Since "nzero" may be a little confusing, fcs.cpp was modified** ...

ttadano authored on Feb 13



635a895



Commits on Feb 12, 2015

**Migration of PRINTV3 that print the matrix element $|V_3(q;q;q)|^2$ w...** ...

ttadano authored on Feb 12



3070f14

**Implement SPS=2 that calculate three-phonon scattering phase space wi...** ...

ttadano authored on Feb 12



2093661



 検索[ログイン](#) | [ヘルプ/ガイド](#) | [Tracについて](#) | [個人設定](#)

Wiki

タイムライン

ロードマップ

リポジトリブラウザ

チケットを見る

検索

[最終更新内容](#) | [更新履歴](#)

source:

ジャンプ: リビジョン指定: 次に対して差分を表示:

名称 ▲	サイズ	Rev	時期	更新者	最終更新内容
▶ branches		14056	6日	dstrubbe	Backport of 14041 to branches/5.0.x: ...
▶ buildbot		14018	8日	micael	Reverting #14014. After a more careful analysis of the logs, it seems that ...
▶ tags		12002	14ヵ月	micael	Removed all Libxc sources. Note that the new Libxc repository can be ...
▶ trunk		14065	3日	xavier	Two new functions: * ps_has_density: returns true if the pseudopotential ...

※ 詳しい使い方は [TracBrowser](#) を参照してください。Powered by Trac 1.0.1
By Edgewall Software.Visit the Trac open source project at
<http://trac.edgewall.com/>

- Time-dependent DFTなど
- Subversion
- 独自サーバー

[Wiki](#)[タイムライン](#)[ロードマップ](#)[リポジトリブラウザ](#)[チケットを見る](#)[検索](#)[レポート一覧](#) | [カスタムクエリ](#)

{1} Active Tickets (30件が該当)

- List all active tickets by priority.
- Color each row based on priority.

1ページに表示する件数 [更新](#)

Ticket	概要	コンポーネント	バージョン	マイルストーン	分類	担当者	ステータス	Created
#42	Write documentation for Curvilinear Coordinates	doc	trunk	future	task	anonymous	new	2006/07/05
#85	Write some tutorials for Sternheimer linear response	doc	trunk	future	task	xavier	new	2007/12/02
#82	Curvilinear coordinates test fails with domain parallelization	testsuite	trunk	future	defect	xavier	assigned	2007/10/26
#104	Complete tutorial on solids	doc	trunk		enhancement	dstrubbe	new	2015/02/20
#120	Add a test for the species_charge_density	testsuite	trunk	5.0.0	task	anonymous	new	2015/03/24
#102	Fix Poisson solver and implement Ewald sums for partially periodic systems	octopus-core	trunk	5.1.0	defect	rozzi	new	2015/02/20
#105	Parallelization of photoemission	octopus-core	trunk	5.1.0	defect	umberto	new	2015/02/20
#111	Make LCAO work properly for spinors	octopus-core	trunk	5.1.0	defect	anonymous	new	2015/02/20
#119	Add a test for the species_from_file	testsuite	trunk	5.1.0	defect	anonymous	new	2015/03/24
#99	Replace oct_parser C-Fortran interface with Fortran 2003 interface	parser	trunk	5.1.0	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#103	Include LibISF as external library	octopus-core		5.1.0	enhancement	joseba	new	2015/02/20
#106	Non-orthogonal unit-cells	octopus-core	trunk	5.1.0	enhancement	ravindra	new	2015/02/20
#107	Use fxc from Libxc for GGAs	octopus-core	trunk	5.1.0	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#108	Implement exchange term in Casida for Hartree-Fock and hybrids	octopus-core		5.1.0	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#109	Implement constraints in geometry optimization	octopus-core	trunk	5.1.0	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#110	Parallelize exact exchange in states	octopus-core	trunk	5.1.0	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#112	Make Sternheimer equation parallel in states	octopus-core	trunk	5.1.0	enhancement	dstrubbe	new	2015/02/20
#118	Add a test for the species_jellium_slab	testsuite	trunk	5.1.0	task	anonymous	new	2015/03/24
#122	Add a slave with support for libpspio	testsuite	trunk	5.1.0	task	anonymous	new	2015/03/24
#80	Double grid doesn't work with domain parallelization	octopus-core	trunk	future	defect	xavier	assigned	2007/09/26
#91	Full OEP is not tested	octopus-core	trunk	future	defect	anonymous	new	2008/02/15
#94	Problems with FFTW3 and memory alignment	external_libs		future	defect	anonymous	new	2008/07/23
#113	Implement PAW	octopus-core	trunk	future	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#114	Implement range-separated hybrids	octopus-core	trunk	future	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#115	Implement vdW-DF functionals	octopus-core	trunk	future	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#116	Implement Tkatchenko's van der Waals functional	octopus-core	trunk	future	enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#90	Careful check of the EXX potential calculation	octopus-core	trunk	future	task	anonymous	new	2008/01/20
#101	Merge the different versions of the Octopus/APE/BerkeleyGW testsuite scripts	testsuite	trunk		enhancement	anonymous	new	2015/02/20
#121	Merge species_charge_density into species_user_defined	octopus-core	trunk	5.1.0	enhancement	anonymous	new	2015/03/24

まとめ

- バージョン管理システムは導入した方が良い。
- Git,subversionが良く使われている
- どのリポジトリサービスを使うか、自分でサーバーをたてるか？
- アカデミックでの利用はかなり優遇されている。
- アプリの内容によってはQEforgeも良い。他の分野でもこのようなリポジトリサービスはあるか。