

2016/03/08 [OVA]

MateriApps LIVE! の設定

MateriApps LIVE! 開発チーム

USB メモリに含まれているもの

- MateriApps LIVE! USB 
 - setup.pdf, setup-en.pdf
このドキュメント
 - README.html, README-en.html, github.css
(<https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/wiki/MateriAppsLive-ova> と同じもの)
 - VirtualBox インストーラ: VirtualBox-*-OSX.dmg, VirtualBox-*-Win.exe
(<https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads> からダウンロード可)
 - VirtualBox 設定スクリプト: vbconfig.*
(<https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/tree/master/ova> からダウンロード可)
 - MateriApps LIVE! VirtualBox 仮想ディスクイメージ: MateriAppsLive-*-i386.ova
(<http://sourceforge.net/projects/materiappslive/files/> からダウンロード可)

MateriApps — 物質科学シミュレーションのポータルサイト

- 公開ソフトウェア(アプリケーション)を核としたコミュニティ形成をめざして



- 170の物質科学アプリケーションやツールを紹介(2016年3月現在)
- 「やりたいこと」からアプリケーションを検索
 - 検索タグ: 「特徴」「対象」「手法・アルゴリズム」
- 開発者の声を利用者に届ける
 - アプリ紹介、開発者ページ、アプリの魅力・将来性・応用性
- フォーラム(掲示板)を利用した意見交換
- 講習会情報・web講習会・更新情報
- 月間8000+ページビュー、1500+ユニークユーザにまで成長

MateriApps 掲載アプリケーション

- 170の物質科学アプリケーションやツールを紹介 (2016年3月現在)

密度汎関数法

AkaiKKR★

OpenMX★

xTAPP★

ABINIT★

...

(40)

量子化学

FMO★

SMASH★

GAMESS★

DC★

...

(19)

分子動力学

MODYLAS★

Gromacs★

ERmod★

MDACP

...

(19)

格子模型

ALPS★

DSQSS★

BLOCK

DMRG++

...

(25)

連続体シミュレーション

ANSYS Multiphysics

Octa ...

(12)

データ解析

CLUPAN★

phonopy★ (29)

可視化

fu★

TAPIOCA★ (28)

物質材料データベース (3)

★ MateriApps LIVE! 収録 (一部予定) アプリ

物質科学アプリケーションの現状

- 開発者側の問題点

- 有益なプログラムはもっと使われるべきだが、多くのソフトは研究室内にとどまって終わる
- 公開・情報発信には手間がかかる
- アプリ開発を成果として主張しにくい(指標がない)



開発者

- 利用者側の問題点

- どんなプログラムがあるのかよくわからない
- インストール・使い方について知りたい
- 開発者の活動(特に講習会情報)をもっと知りたい



利用者

- MateriApps の目的

- アプリの見える化を通じて開発者と利用者をつなぐ役割を果たしたい

アプリケーションの普及にむけた三本柱

- アプリの情報発信
 - ポータルサイト **MateriApps web**
- 個人・研究室レベルでのアプリ利用の支援
 - **MateriApps LIVE!**
- スパコン上でのアプリ利用支援
 - 「京」や国内主要スパコンへのアプリのプレインストール **MateriApps Installer**
- インストールや入力ファイルの準備における「壁」を解消
- 計算科学の専門家だけではなく、実験家や企業内の利用、教育活動における活用へ

MateriApps LIVE! とは？



- USBメモリから直接ブートできる Linux システム (Debian Live Linux)
 - Windows、Mac などでも利用可
 - インストール作業なしで物質科学アプリを実行できる
- バージョン1.10公開 (2016年2月18日)
- MateriAppsで紹介している公開アプリ・ツールを収録
 - 2016年2月現在：ABINIT, AkaiKKR, ALPS, CP2K, Feram, ERmod, DSQSS, Gromacs, LAMMPS, OpenMX, Quantum Espresso, SMASH, xTAPP, VESTA 等
 - GAMESS, VMDには自動インストーラーを準備
- MateriApps LIVE! サイトからダウンロード可能



まずははじめてみましょう

✓USB メモリのファイルをハードディスクにコピー

- すべてのファイルをパソコン(デスクトップ等)にコピーしてください

• MateriApps LIVE! の起動方法は2種類あります

1. 仮想化ソフト VirtualBox 上で起動する (本日はこちらを説明)

- お手軽、簡単、確実。ただしメモリが少ない環境では動作が重くなる

2. USB メモ리를差し込んで再起動する

- 計算は速いが PC によってはうまく起動しない。ネットの設定が少し面倒

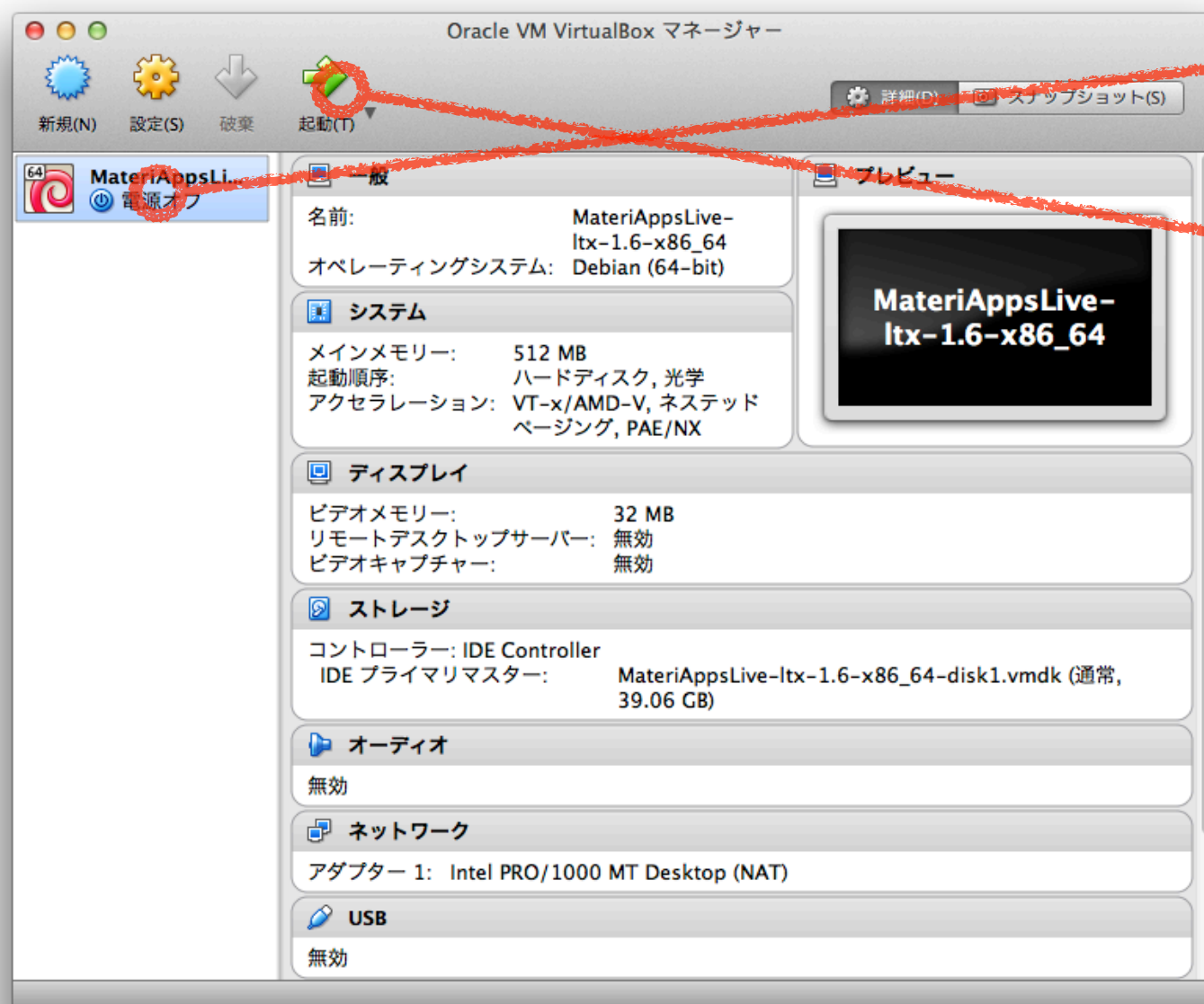
VirtualBox からの起動方法

- ✓ インストーラをダブルクリックして VirtualBox をインストール
 - Windows版: VirtualBox-5.*-Win.exe
 - Mac版: VirtualBox-5.*-OSX.dmg
 - 途中の質問には適当に答える
- ✓ MateriApps LIVE! のインポート
 - MateriAppsLive-*.i386.ova をダブルクリック
 - VirtualBox が起動してインポート画面が開くので、「インポート」ボタンを押す
 - 2～3分かかるが完了するとマネージャーが起動
- ホスト (ホストOS) : もともと動いている OS (Windows、Mac OS X など)のこと
- 仮想マシン (ゲストOS) : VirtualBox の中で動いている OS (= MateriApps LIVE!)

VirtualBox の設定

- ✓ 設定: 不要なポップアップメッセージを非表示にする
 - Windows: USBメモリからコピーした vbconfig.bat をダブルクリック
 - Mac OS X: vbconfig.command をダブルクリックあるいはターミナルで「`sh vbconfig.sh`」を実行
- ✓ 設定: ホストOSのディスクに仮想マシンからアクセスできるように
 1. VirtualBox マネージャー画面で MateriAppsLive-1.9 を選択し「設定」
 2. 「共有フォルダー」タブを開き、右側の「+」(新規共有フォルダーを追加します)をクリック
 3. 「フォルダーのパス」の右側の「v」マークをクリックし、「その他」を選択。さきほどUSBメモリからコピーしたフォルダーを選択する
 4. 「自動マウント」をチェックし「OK」⇒さらに「OK」
 5. 仮想マシンを起動(次頁)すると、3で選択したフォルダが、`/media/sf_...`の下に見える

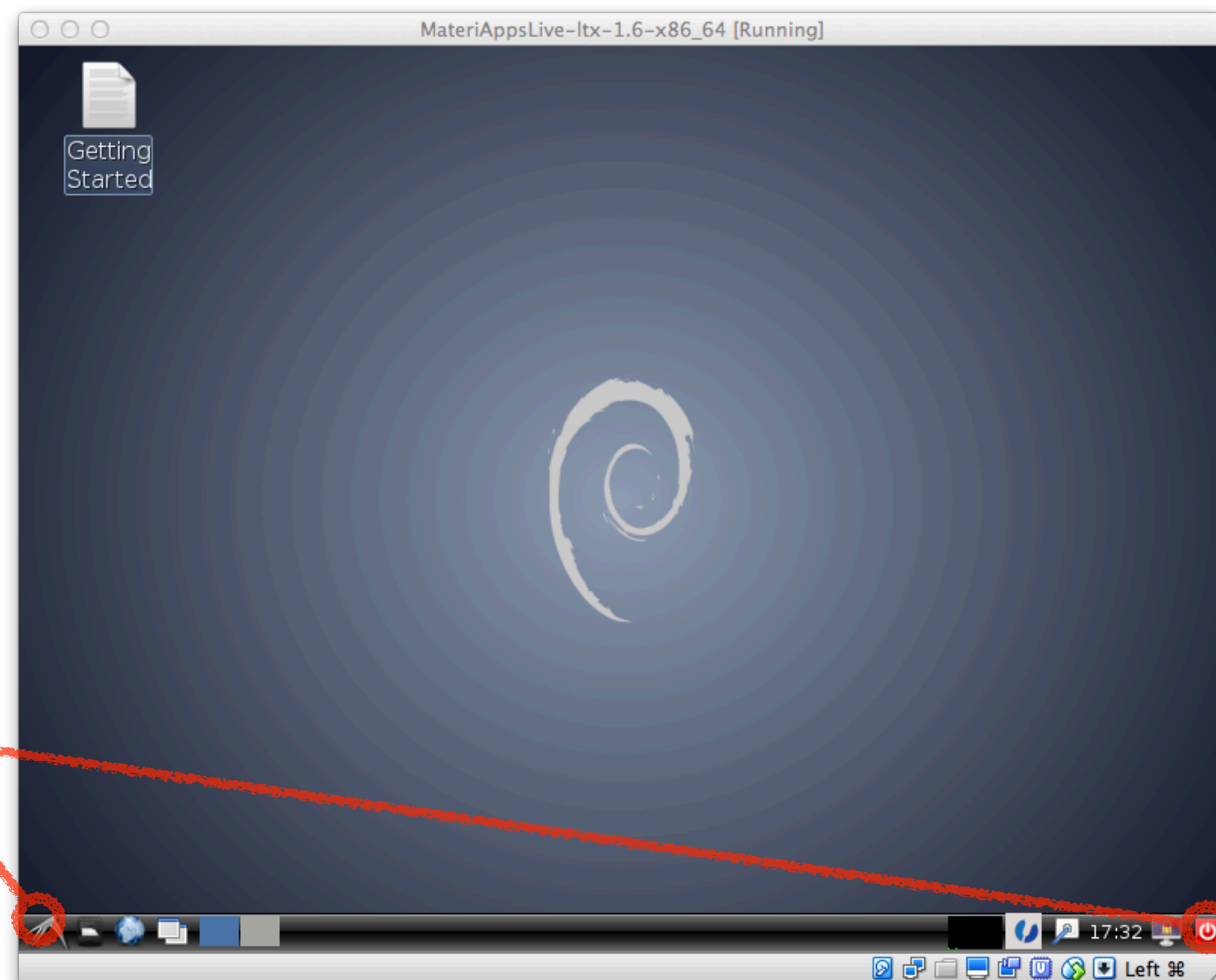
VirtualBox からの起動



1. 「MateriAppsLive...」を選択
2. 起動ボタンを押す
3. ログイン画面がでるまでそのまま待つ

MateriApps LIVE! へのログイン

- しばらくするとログイン画面が表示される
- 下記の情報を使ってログイン
 - ユーザ名(login): *user*
 - パスワード(password): *live*
- 右の画面が出れば成功
- 重要なボタン
 - スタートメニュー
 - 終了



日本語キーボード、コピー&ペースト

- 日本語キーボード(「@」が「P」の右にあるタイプ)では、記号が正しく入力できません。その場合、以下の設定を行ってください
 - 「スタートメニュー」⇒「Accessories」⇒「LXTerminal」
 - ターミナル(端末)が立ち上がるので「`setxkbmap -layout jp`」と入力しリターン
 - 「@」が正しく入力できることを確認
 - (英語配列に戻したいとき:「`setxkbmap -layout us`」)
- ホストOSでPDFファイルからコピーした文字列を、仮想マシンの端末でペーストする方法
 - 端末上で右クリック ⇒「Paste」
 - あるいは、「shift」と「control」を同時に押しながら「V」
 - 文字列のコピーは、右クリック ⇒「Copy」あるいは「shift + control + C」

MateriApps LIVE! ハンズオン

- MateriApps LIVE! の起動方法の説明
- 第一原理計算手法によるバンド計算
 - 第一原理計算ソフト: OpenMX
 - 入力補助: C-Tools、可視化: VESTA、フェルミ面: XCrysDen
- 分子動力学法による溶液のシミュレーション
 - 汎用分子動力学ソフト: Gromacs
 - 可視化ツール: VMD
- モンテカルロ法によるスピン模型の相転移シミュレーション
 - 強相関格子模型のシミュレーションパッケージ: ALPS
 - 可視化ツール: ParaView
- 量子化学計算 (準備中)
- http://www.slideshare.net/cms_initiative/clipboards/materiappslive で公開中

MateriApps 企画・制作

- 運営:
 - 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)、東京大学物性研究所 (ISSP)、自然科学研究機構 分子科学研究所 (IMS)、東北大学金属材料研究所 (IMR)
- 計算物質科学イニシアティブ(CMSI) 広報小委員会
- MateriApps 開発チーム
 - 藤堂眞治 (東大理/ISSP)、加藤岳生 (ISSP)、五十嵐亮 (CMSI-ISSP)、笠松秀輔 (ISSP)、川島直輝 (ISSP)、古宇田 光 (CMSI-ISSP)、小西優祐 (CMSI-ISSP)、寺田弥生 (CMSI-IMR)、野田真史 (CMSI-IMS)、松尾春彦 (RIST)、吉澤香奈子 (RIST)、吉見一慶 (ISSP)
 - (委託) 佐々木翔一、土田成宏
- 協力:
 - CMSI元素戦略拠点、東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター、自然科学研究機構 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点、東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点、高度情報科学技術研究機構