

2019/12/24 [version 2.4]

MateriApps LIVE! の設定

MateriApps LIVE! 開発チーム

配布物

- MateriApps LIVE! USB 
 - setup.pdf, setup-en.pdf
このドキュメント
- README.html, README-en.html
(<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-*-amd64.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



2013年5月公開

- ・ 268の物質科学アプリケーションやツールを紹介(2019年12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
 - ・ 開発者情報、アプリの魅力・将来性
- ・ 講習会情報・web講習会・更新情報
- ・ キーワード解説、アプリコンシェルジュ、レビュー記事 ← **New!**
- ・ 月間 16000+ ページビュー、5500+ ユーザー

MateriApps 掲載アプリケーション

- 268の物質科学アプリケーションやツールを紹介

密度汎関数法

AkaiKKR☆

OpenMX☆

xTAPP☆

ABINIT☆

...

(77)

量子化学

FMO☆

SMASH☆

GAMESS☆

DC☆

...

(36)

分子動力学

MODYLAS☆

Gromacs☆

ERmod☆

MDACP

...

(31)

格子模型

ALPS☆

DSQSS☆

BLOCK

DMRG++

...

(50)

連続体シミュレーション

ANSYS Multiphysics

Octa ...

(12)

データ解析

CLUPAN☆

phonopy☆ (57)

可視化

fu☆

TAPIOCA☆ (38)

データベース(11)、統合環境(3)、
機械学習(17)、量子計算(4)

☆ MateriApps LIVE! 収録 (一部予定) アプリ

MateriApps 活動の目的

- 開発者側からの問題点

- 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)



- 利用者側からの問題点

- 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

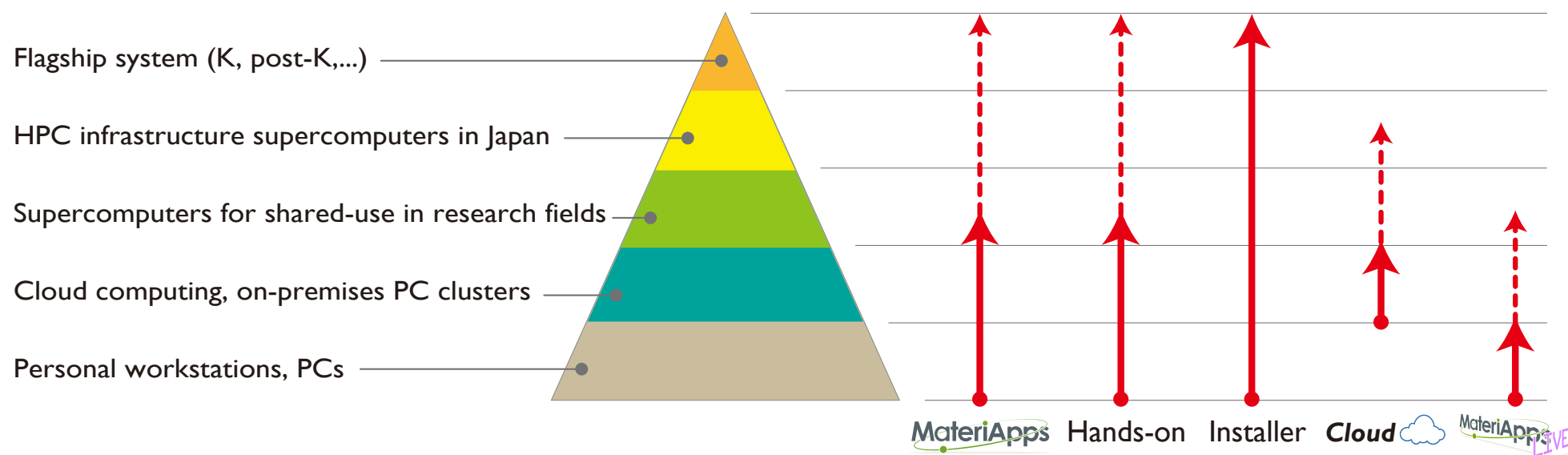


- MateriApps の目的

- アプリの見える化を通じて開発者と利用者をつなぐコミュニティを育てる

アプリケーション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**

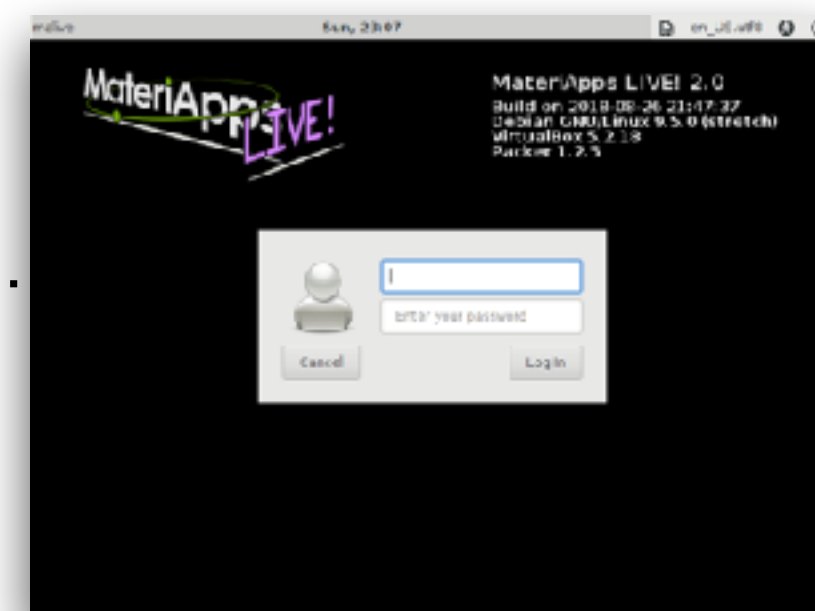


- インストールや入力ファイルの準備における「壁」を解消
- 計算科学の専門家だけでなく、実験家や企業内の利用、教育活動における活用へ

MateriApps LIVE! とは？



- 仮想マシン上で直接ブートできる 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2.4公開 (2019年12月)
- MateriAppsで紹介している公開アプリ・ツールを収録
 - abinit, AkaiKKR, ALAMODE, ALPS, CP2K, Feram, ERmod, DCore, DSQSS, HΦ, LAMMPS, mVMC, OpenMX, Quantum ESPRESSO, SMASH, xTAPP 等
 - OVITO, ParaView, Tapioca, VESTA, VMD, XCrysDen..
 - 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
 - 2013年7月以来、約6400コピーを配布



MateriApps LIVE! が役に立つシチュエーション

- MateriApps LIVE! を用いた講習会
 - MateriApps LIVE! ハンズオン
 - HΦ、xTAPP、ALPS、DCore、mVMC、ALAMODE、DDMRG、DSQSS、他
- 講義での利用例 (東大理、東工大、他)
 - 計算物理学
 - 計算機実験 (UNIX + C 実習環境、LaTeX、バージョン管理システム)
- 実験研究者・企業研究者による利用
- 計算機科学の研究者による利用
- 最近ではトラブルはほぼゼロ。15分程度でセットアップ完了
- 容易に環境を揃えることができるので、動作確認・トラブルシューティング・ユーザサポートに便利

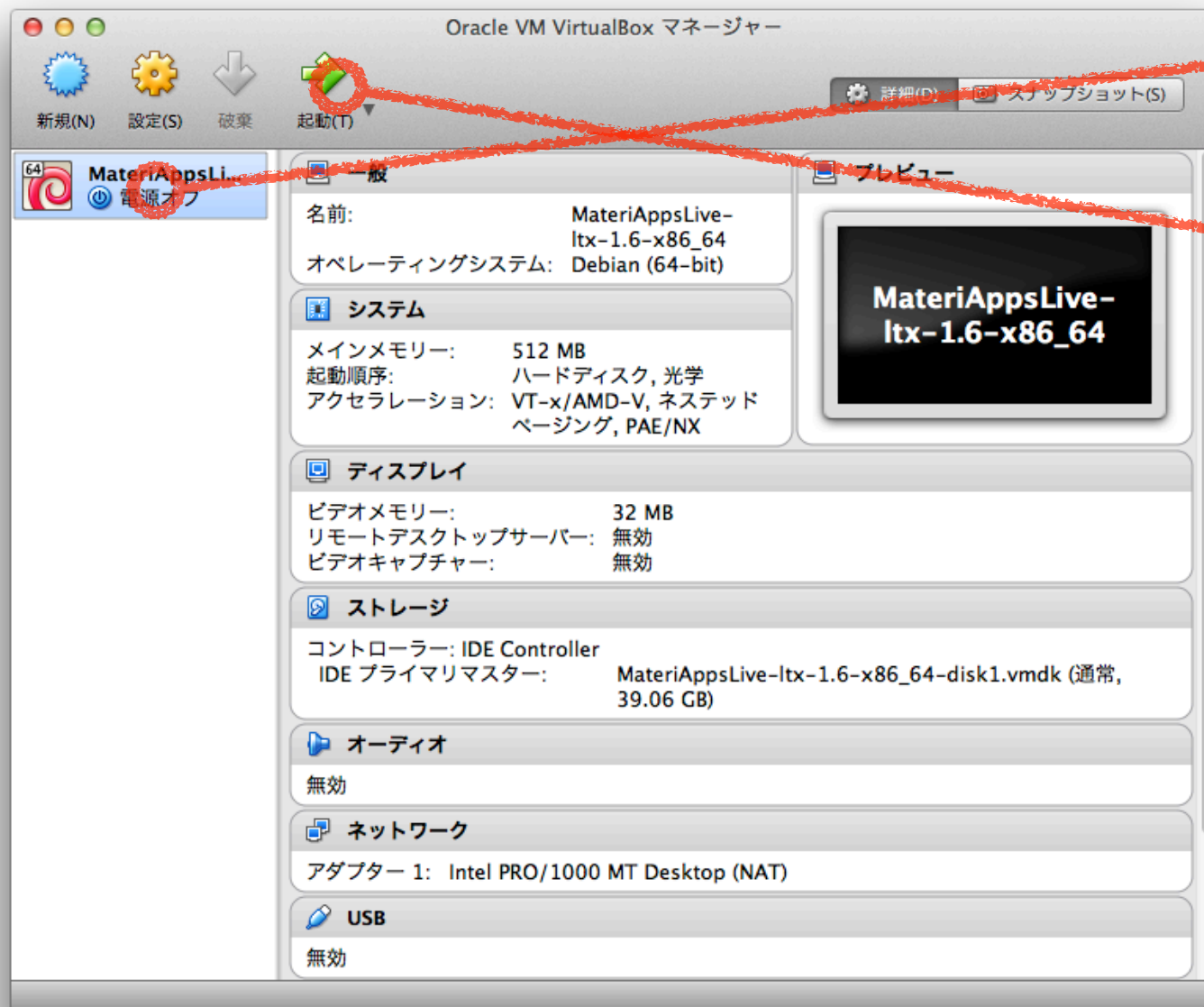
まずははじめてみましょう

- ✓ 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
- ✓ 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: VirutalBox-5.*-Win.exe
 - Mac版: VirtualBox-5.*-OSX.dmg
- ✓ MateriApps LIVE! のインポート
 - MateriAppsLive-*.amd64.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.command`」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-* 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



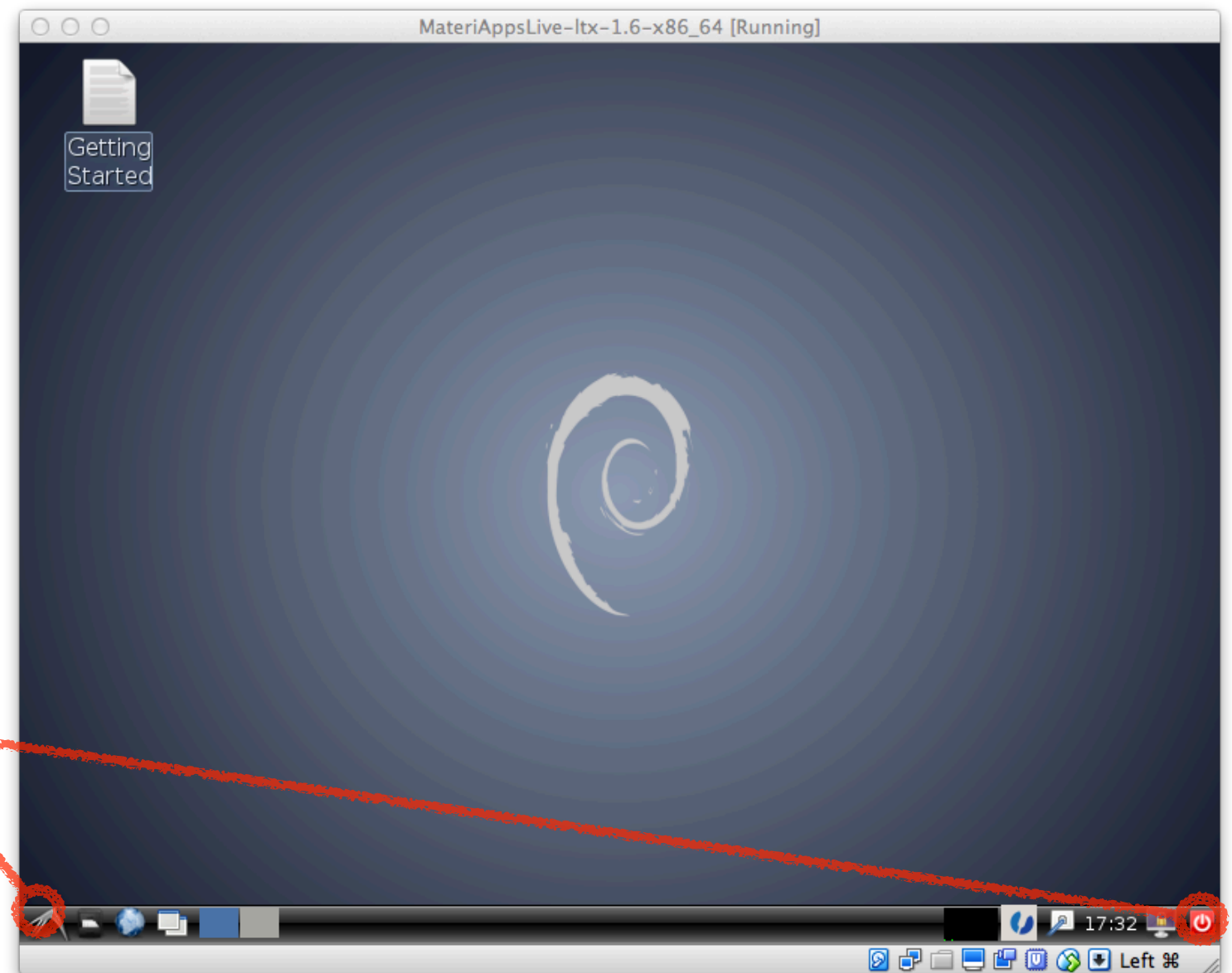
1. 「MateriAppsLive...」を選択

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



コピー&ペースト、日本語キーボード

- 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」
- 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」⇒「System Tools」⇒「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`」)

MateriApps LIVE! による物質科学シミュレーション

- イントロダクション / 準備
- 第一原理計算手法によるバンド計算 (OpenMX / Quantum ESPRESSO / xTAPP)
- 分子動力学法による溶液のシミュレーション (LAMMPS / Gromacs)
- 格子模型シミュレーション (ALPS / HΦ / mVMC)
- 量子化学計算 (準備中)
- <https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/wiki/MaLiveTutorial> にリンク集を整備中

MateriApps 企画・制作

- 運営:
 - 東京大学物性研究所計算物質科学研究センター (ISSP-CCMS)
- MateriApps 開発チーム
 - 井戸康太 (ISSP)、笠松秀輔 (ISSP)、加藤岳生 (ISSP)、川島直輝 (ISSP)、古宇田光 (ISSP)、藤堂眞治 (東大理/ISSP)、三澤貴宏 (ISSP)、本山裕一 (ISSP)、吉澤香奈子 (RIST)
- 協力:
 - 高度情報科学技術研究機構 (RIST)
 - 物質材料研究機構 情報統合型物質開発イニシアティブ (Mi2i)
- スポンサー
 - ポスト「京」重点課題7
 - 元素戦略プロジェクト＜拠点形成型＞
 - 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS)
 - TIA連携プログラム探索推進事業『かけはし』