

2020/08/01 [for version 2.7/3.1]

MateriApps LIVE! の設定

MateriApps LIVE! 開発チーム

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

- ・ 273の物質科学アプリケーションやツールを紹介(2020年8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
- ・ 月間 26000+ ページビュー、9000+ ユーザー

MateriApps 掲載アプリケーション

- 273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☆

... (79)

量子化学

FMO☆

SMASH☆

GAMESS☆

DC☆

... (37)

分子動力学

MODYLAS☆

Gromacs☆

ERmod☆

MDACP

... (31)

格子模型

ALPS☆

DSQSS☆

BLOCK

DMRG++

... (53)

連続体シミュレーション

ANSYS Multiphysics

Octa ... (12)

データ解析

CLUPAN☆

phonopy☆ (58)

可視化

fu☆

TAPIOCA☆ (37)

データベース(11)、統合環境(4)、
機械学習(17)、量子計算(6)

☆ 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)



開発者

- 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



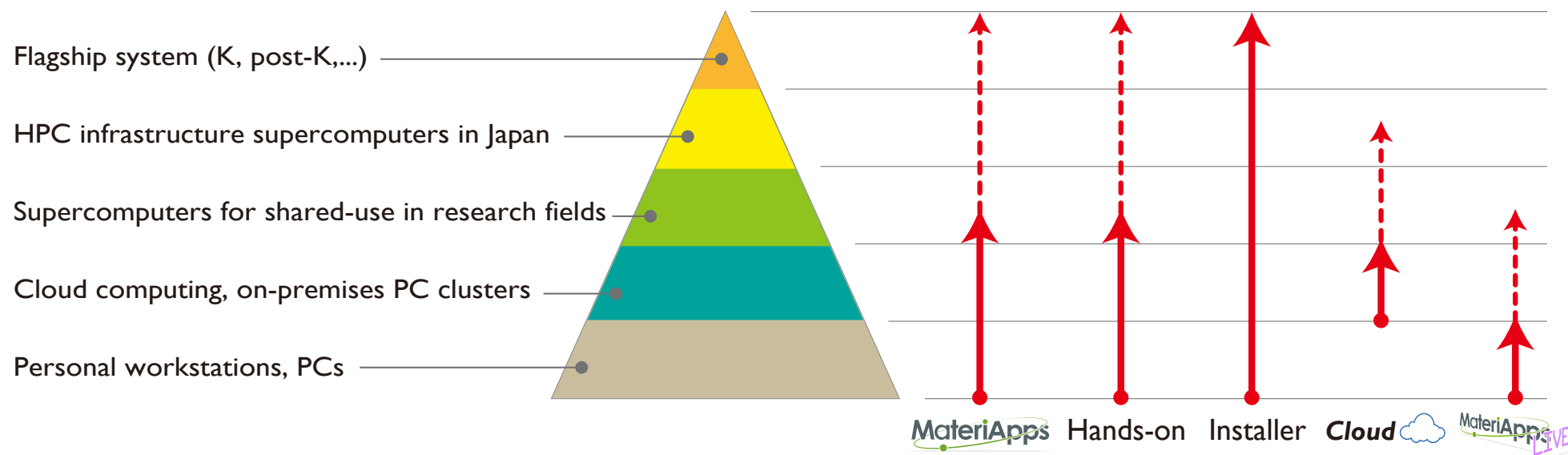
利用者

- 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**

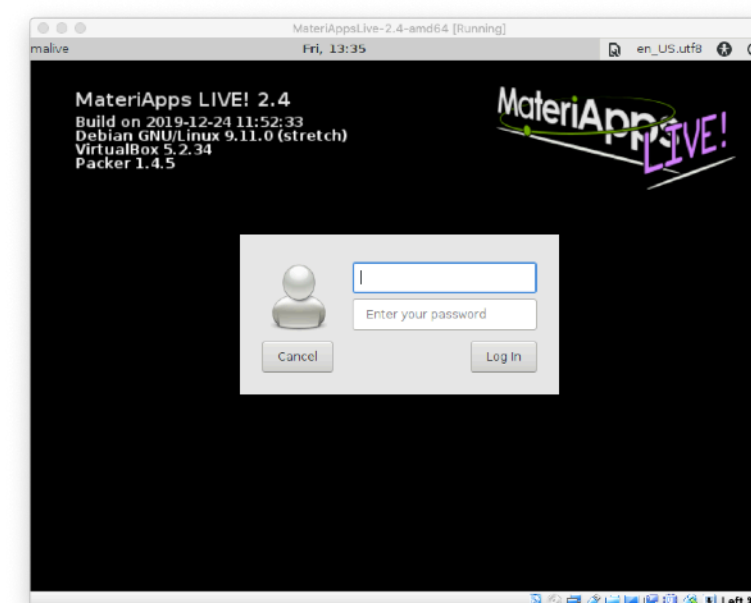


- インストールや入力ファイルの準備における「壁」を解消
- 計算科学の専門家だけでなく、実験家や企業内の利用、教育活動における活用へ

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3.1公開 (2020年8月)
- MateriAppsで紹介している公開アプリ・ツールを収録
 - abinit, AkaiKKR, ALAMODE, ALPS, CONQUEST, Feram, DCore, DSQSS, HΦ, LAMMPS, mVMC, OpenMX, Quantum ESPRESSO, SMASH, xTAPP 等
 - OVITO, ParaView, Tapioca, VESTA, VMD, XCrysDen...
 - CASINO, GAMESS, VMDは自動インストーラーあり
- MateriApps LIVE! サイトからダウンロード可能
 - 2013年7月以来、約8700コピーを配布



MateriApps LIVE! が役に立つシチュエーション

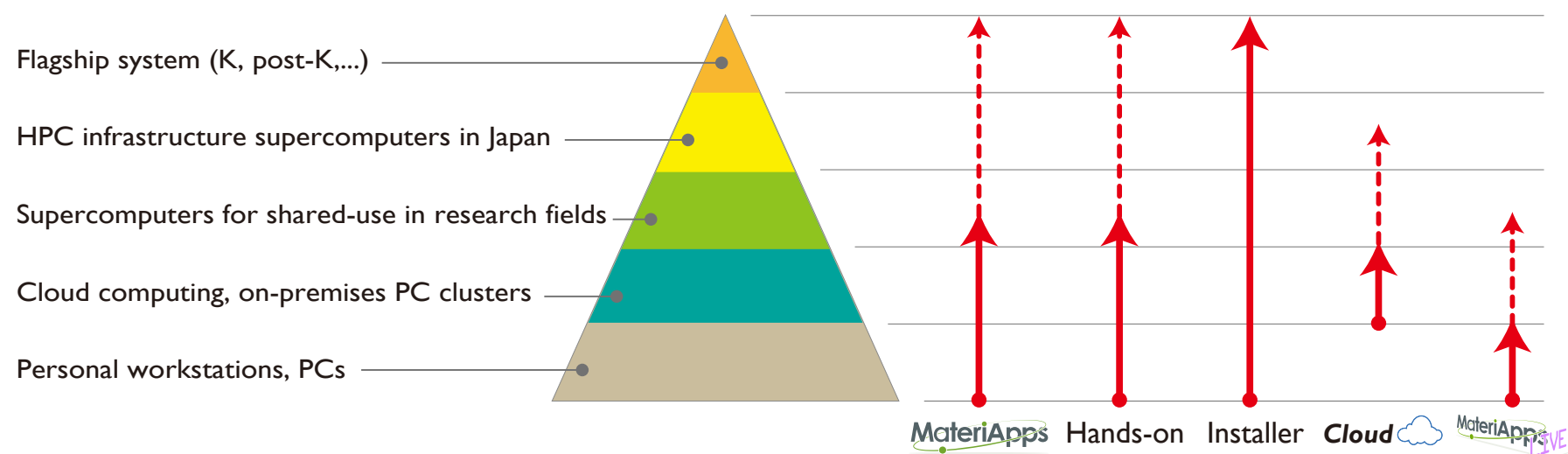
- MateriApps LIVE! を用いた講習会
 - MateriApps LIVE! ハンズオン
 - HΦ、xTAPP、ALPS、DCore、mVMC、ALAMODE、DDMRG、DSQSS、SALMON、CASINO他
- 講義での利用例 (東大、東工大、他)
 - 計算物理学、計算科学概論
 - 計算機実験 (UNIX + C 実習環境、LaTeX、バージョン管理システム)
- 実験研究者・企業研究者による利用
- 計算機科学の研究者による利用
- 最近ではトラブルはほぼゼロ。15分程度でセットアップ完了
- 容易に環境を揃えることができるので、動作確認・トラブルシューティング・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

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

もっと大規模な計算をしたい？

- Debian や Ubuntu がインストールされた Linux ワークステーション
 - MateriApps LIVE! の Debian Package が利用可能
 - <https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/wiki/UsingMateriAppsInDebian>
 - (Google Colabにもインストール可)
- PCクラスタ、クラウド、物性研や情報基盤センターのスパコン、富岳など
 - MateriApps Installer を利用 <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/268>
 - 2020年度 東大物性研ソフトウェア開発・高度化プロジェクトとして、リニューアル中



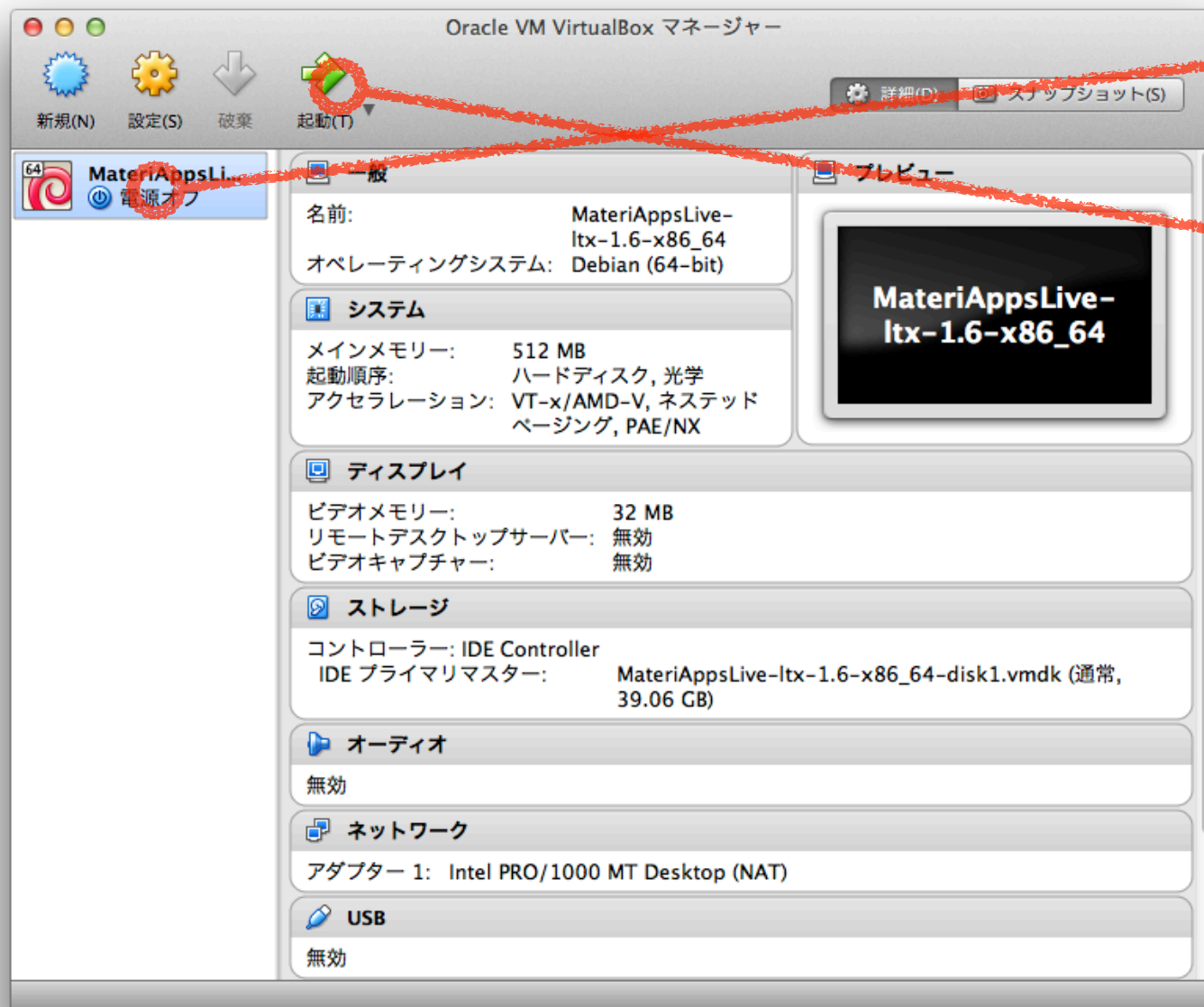
MateriApps LIVE! 配布物

- 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)
 - MateriApps LIVE! VirtualBox 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)

さあ、はじめましょう

- ✓ 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-*-Win.exe
 - Mac版: VirtualBox-*-OSX.dmg
- ✓ MateriApps LIVE! のインポート
 - MateriAppsLive-*.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 からの起動



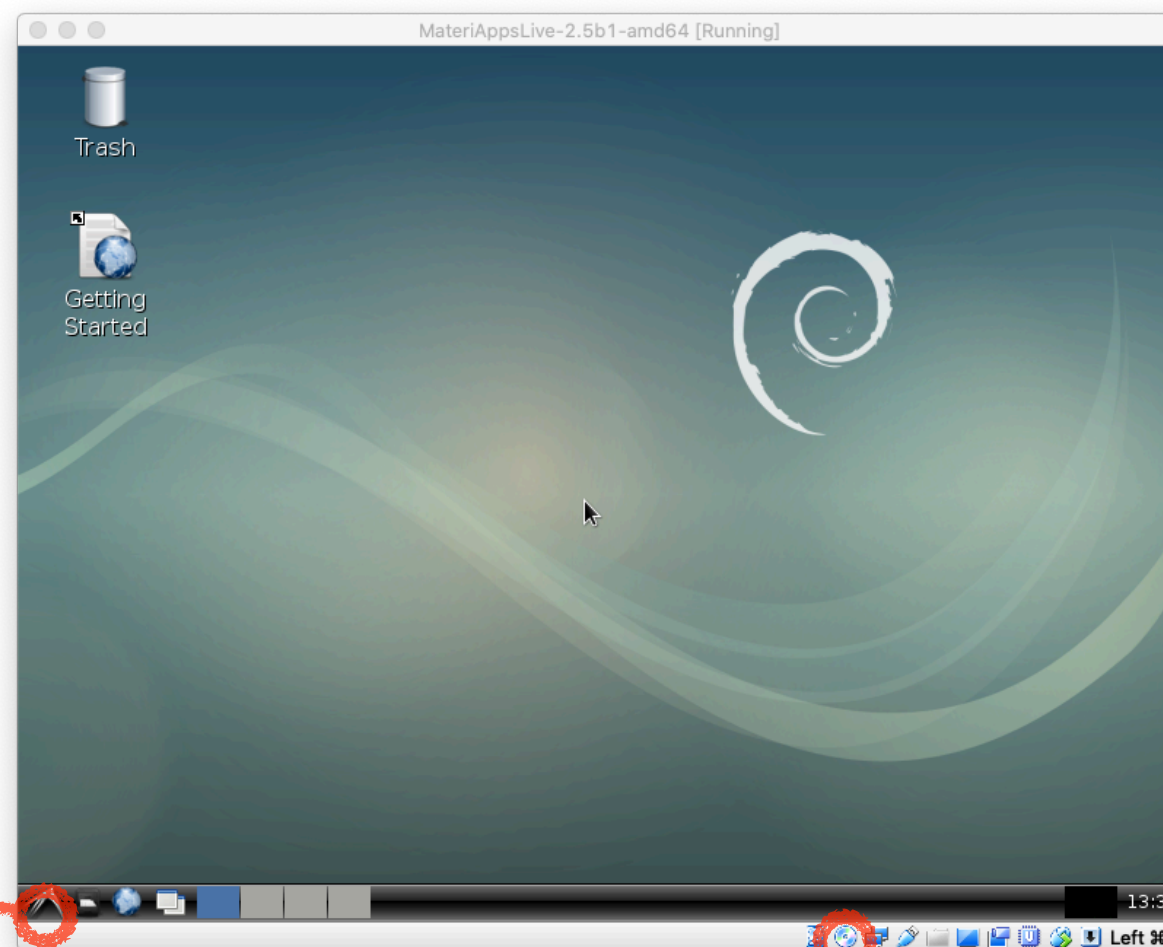
1. 「MateriAppsLive...」を選択

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

- 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*
- 右のデスクトップ画面が出れば成功



- スタートメニュー
- ターミナルの開き方
「スタートメニュー」⇒「System Tools」⇒「LXTerminal」
- 仮想マシンの終了 (シャットダウン)
「スタートメニュー」⇒「Logout」→「Shutdown」

CD-ROMボタン

追加の設定 (1/2)

- ✓ キーボード: 日本語キーボード(「@」が「P」の右にある)を使っている場合
 - 「スタートメニュー」⇒「System Tools」⇒「Switch to Japanese Keyboard Layout」
 - 「@」が正しく入力できることを確認
- ✓ 仮想マシンウィンドウの解像度・スケールの変更
 - 解像度 (画素数): デフォルトでは「800 x 600」
 - スケール(画素密度): デフォルトでは「200%」
 - 解像度とスケールはホストOSの「ビュー」メニュー⇒「仮想スクリーン 1」から変更できる
 - VESTA, OVITO, ParaViewなどの可視化ソフトを使う場合は解像度を「1024 x 768」以上に設定するとよい
 - 文字が小さくて見にくい場合にはスケールを大きくする

追加の設定 (2/2)

- ✓ ファイル共有: ホストOSと仮想マシン間のファイル共有
 - 仮想マシンをいったんシャットダウン
 - VirtualBox マネージャー画面で MateriAppsLive-* を選択し「設定」
 - 「共有フォルダー」タブを開き、右側の「+」をクリック
 - 「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。共有するフォルダーを選択、「自動マウント」をチェックし「OK」
 - 仮想マシンを起動。上で選択したフォルダが、/media/sf_... の下に見える
- ✓ ISOイメージファイル(*.iso)の中身を仮想マシンから参照する
 - 仮想マシンウィンドウの枠の下にあるCD-ROMのアイコンをクリック、「Choose disk image...」を選択し、ISOイメージファイルを開く
 - ISOイメージファイルの中身が、/media/cdrom0 の下に見える

Tips

- ✓ コピー & ペースト: ホストOSでPDFファイルからコピーした文字列を、仮想マシンのターミナル等でペーストする方法
 - ・ターミナル上で右クリック ⇒ 「Paste」 (あるいは「shift + control + V」)
 - ・文字列のコピーは、右クリック ⇒ 「Copy」 (あるいは「shift + control + C」)
- ✓ コマンド名やファイル名の補完・履歴・逐次検索
 - ・ターミナル入力中に、途中で tab キーを叩くと、コマンド名やファイル名を補完することができる
 - ・ターミナルで「↑」キーを叩くと、これまでに実行したコマンド履歴を遡ることができる
 - ・ターミナルで「history」コマンドを実行すると、これまでに実行したコマンド一覧が表示される
 - ・ターミナルで「Ctrl + r」を叩くと、これまでに実行したコマンドを逆逐次検索 (reverse incremental search できる)

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 (山形大理)、加藤岳生 (ISSP)、川島直輝 (ISSP)、古宇田光 (ISSP)、藤堂眞治 (東大理/ISSP)、福田将大 (ISSP)、吉澤香奈子 (RIST)
 - (委託) 小西優祐、山田五太
- 協力:
 - 高度情報科学技術研究機構 (RIST)
- スポンサー
 - 元素戦略プロジェクト＜拠点形成型＞
 - 「富岳」成果創出加速プログラム「大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発」