

MateriApps LIVE!

東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター 特任研究員 五十嵐 亮

計算物質科学シミュレーションのための高性能・高精度な手法を実装したソフトウェアは、国内外を問わず、数多く開発されています。しかし、残念ながら、その多くは実験家・企業研究者に存在が伝わっておらず、シミュレーションが必要な際には、主として海外製の公開ソフトウェア・商用ソフトウェアが使われているのが現状です。物性科学、分子科学、材料科学を母体とする計算科学研究者で構成されるネットワーク型組織である計算物質科学イニシアティブ(CMSI)では、世界一の性能をもつ「京」を頂点とするスーパーコンピュータを活用するだけでなく、物質科学の新たな世代を築いていくために、“物質科学シミュレーションのポータルサイト”MateriApps¹の整備を通じ、国内外を問わず、これまでにあまり知られていなかった物質科学アプリケーション、あるいは今後開発されるアプリケーションを紹介しています。特に、既に公開されているソフトウェアについては、充実したマニュアル・チュートリアルなど、利用者が直接ダウンロードして気軽に試すことのできる情報を提供しています。ポータルサイト MateriApps では、2014年6月現在、113のソフトウェアを紹介しており、2013年5月の正式オープン以来、累計10万ページビュー、のべ8000ユーザー(Google Analytics集計)を達成しています。



図1 MateriAppsのスクリーンショット

一方、物質科学分野の公開ソフトウェアを実際に試そうとした時には、ソフトウェアのインストールそのものが大きな障害となっています。CMSIでは、物性研の共同利用スパコンや「京」などの国内の代表的なスーパーコンピュータへのいくつかのアプリケーションのインストールなども進めていますが、必ずしも全ての人がそのような環境を利用できるわけではありません。MateriApps LIVE!²は、手持ちのノートPCなどを用いて、気軽に計算物質科学アプリケーションを試すための環境を提供するものです。ポータルサイト MateriAppsで紹介している物質科学アプリケーションを、OS (Debian GNU/Linux)、エディタ、可視化ツールなどとともにとまとめたもので、物質科学シミュレーションソフトウェア

¹ <http://ma.cms-initiative.jp/>
² <http://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>

のチュートリアルを始めるのに必要な環境は全て 1 本の USB メモリに収められています。この USB メモリは、MateriApps LIVE! の Web サイトからファイルをダウンロードし、自ら作成することもできますが、CMSI 神戸拠点および物性研などで定期的に開催している CMSI 主催のソフトウェア講習会などで教材として利用し、USB メモリの配布もしています。2014 年 6 月現在のバージョン 1.2 では、次のソフトウェアが利用可能です。

- CMSI の公開アプリ
 - AkaiKKR(旧 Machikaneyama2002), ALPS, ERmod, Feram, OpenMX, xTAPP
- 公開アプリ
 - ABINIT, CP2K, GAMESS(セットアップツール), Gromacs, Quantum Espresso
- 可視化ツール
 - gnuplot, OpenDX, Paraview, Pymol, Tapioca
- 開発ツール
 - Emacs, gcc, g++, gfortran, perl, python, ruby, vim 等

MateriApps LIVE! には密度汎関数法(DFT)のアプリケーションだけでも複数含まれていることから、気軽に比較することができるため、問題に適するアプリケーションを簡単に選定できます。また、可視化ツールも含まれていることから、シミュレーション結果をすぐに視覚的に確認することで、結果の直感的な理解にも役立ちます。

MateriApps LIVE! の起動に成功すると、まずは図 2 のような画面になります。

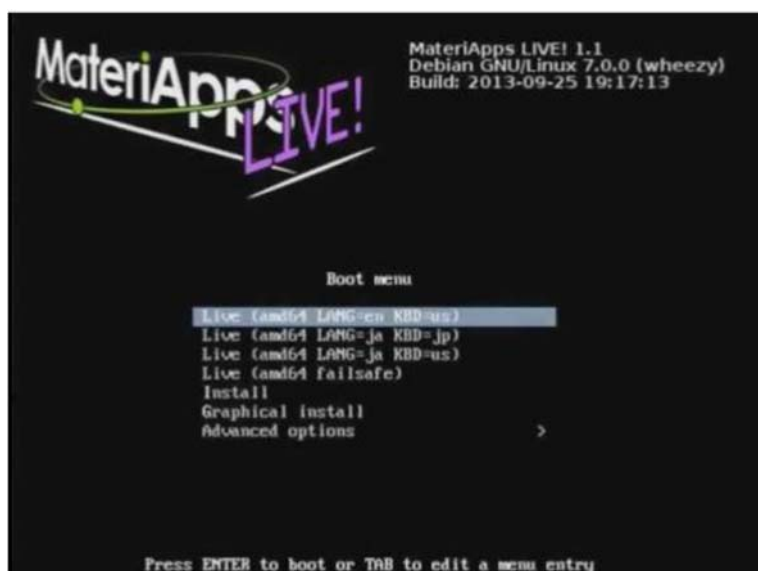


図 2 MateriApps LIVE! の起動画面

その後、言語やキーボードの選択をして起動後すると、図 3 のような Linux のデスクトップ画面となります。なお、MateriApps LIVE! 起動する際は、図 2 において、“Install”を選ばないでください。ご使用中の OS を上書きしてしまう可能性があります。起動後は、入力ファイルを準備することで、AkaiKKR³、OpenMX⁴や xTAPP⁵のような密度汎関数法(DFT)の計算ができるソフトウェアや、ALPS⁶のような量子格子模型のシミュレーションができます。入力ファイルの作成方法など、それぞれのアプリケーションのチュートリアルは、ポータルサイト MateriApps、またはオフィシャルサイトのドキュメントを参照してください。

³ <http://kkr.phys.sci.osaka-u.ac.jp/>

⁴ <http://www.openmx-square.org/>

⁵ <http://frodo.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/xtapp/index.html>

⁶ <http://alps.comp-phys.org/>





図 3 MateriApps LIVE! のデスクトップ

MateriApps LIVE! の改善には、利用者の声が重要です。MateriApps LIVE! で利用したいアプリケーションなどありましたら、MateriApps 開発チームへぜひフィードバックをお寄せください。今後、利用方法等、ドキュメントの拡充も行っていきます。