

計算物質科学アプリの利用者と開発者をつなぐ

MateriApps

<http://ma.cms-initiative.jp/>



物質科学シミュレーションのポータルサイト



150 を超えるアプリケーション

- 国内外の第一原理計算、分子動力学法などの代表的物質計算アプリを掲載

サイト活用によるメリット

- 利用したいアプリが見つかる
- アプリの使い方をサポート
- フォーラムでの意見交換

機能

- 「やりたいこと」からアプリを検索できるシステム
- アプリ紹介、開発者ページ

MateriApps LIVE!

- アプリケーションをインストールせずに使用できるフリーの Linux Live 環境を提供
- MateriApps に掲載されているアプリの一部が使える





物質科学シミュレーションのポータルサイト

五十嵐亮¹, 藤堂真治^{1,2}, 吉澤香奈子³, 加藤岳生¹, 川島直輝¹, 小西優祐¹, 笠松秀輔¹,
吉見一慶¹, 佐々木翔一⁴, 土田成宏⁴, 野田真史⁵, 河津励^{5,6}, 寺田弥生⁷
(¹ 東大物性研, ² 東大理, ³ RIST, ⁴ (株) 揚羽, ⁵ 分子研, ⁶ 横浜市大, ⁷ 東北大金研)

MateriApps の目標と公開ソフトウェア

「計算」物質科学ソフトウェアの普及
ソフトウェア自身の公開
開発者へフォーカスし、正当な評価を
利用者と開発者をつなぐ

ソフトウェアの公開を推進
結果の再現性の担保
コミュニティ標準をめざして
連携ソフトウェアの発展

2013 年の公開から PV 数 54 万以上

見える化



公開ソフトウェアを核にした、新しい
物質科学シミュレーションのコミュニティ

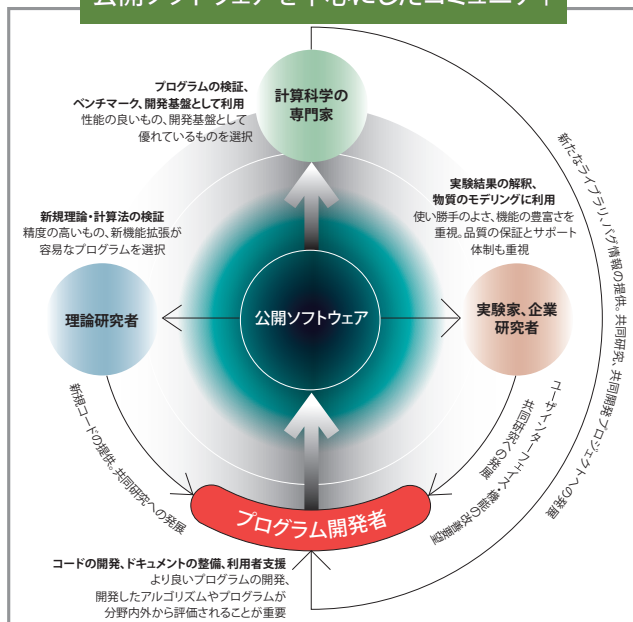
MateriApps LIVE!

<http://cmsi.github.io/MateriAppsLive>

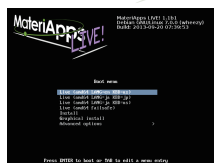
- USB メモリでどこでも物質科学シミュレーション!
- MateriApps の公開ソフトウェアをすぐに利用
ABINIT, ALPS, CP2K, feram, ERmod, FU, GAMESS, Gromacs, xTAPP
AkaiKKR, OpenMX, QUANTUM ESPRESSO (拡充中)
- 手持ちの PC(Windows, Mac) で副作用なく利用可能
- CMSI 主催講習会などで利用・配布

まずはソフトウェアに「触ってもらう」ための
ソフトウェアがプリインストールされた環境

公開ソフトウェアを中心にしたコミュニティ

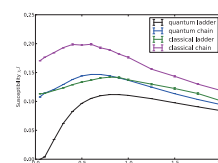


MateriApps LIVE!



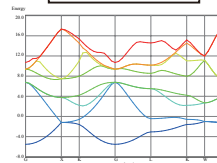
起動画面のスナップショット

ALPS



ALPS で磁化率計算

xTAPP
Tokyo Ab-initio Program Package



xTAPP でバンド計算

MateriApps のソフトウェア

- 第一原理・量子化学計算 (DFT, HF 近似, CI 法, CC 法)
計 56 ソフトウェア
- 分子動力学法
計 19 ソフトウェア
- 格子模型 (QMC, DMRG, ED 等)
計 23 ソフトウェア
- CMSI 後援「公開」ソフトウェア
計 18 ソフトウェア 計 163 ソフトウェア (2016 年 1 月 現在)

MateriApps の機能

開発者の立場から

ライセンス選択の指針
パッケージング方法
ドキュメントへのフィードバック
ソフトウェア講習会の開催

ソフトウェアの公開をサポート

利用者の立場から

ソフトウェアを検索
フォーラムでコミュニケーション
ソフトウェア講習会への参加
MateriApps LIVE! でのソフトウェア試用

利用したいアプリが見つかる!

MateriApps での DFT ソフトウェア

- MateriApps LIVE! で利用可能なもの
xTAPP, OpenMX, AkaiKKR, ABINIT など
- 詳細に紹介しているソフトウェア
xTAPP, CONQUEST, OpenMX, RSPACE など

今後の方針

- コミュニティルーム (フォーラム) の運営の拡大
- DFT の方法論の比較
- 並列性能の調査と比較 (一部)