

ALPS と量子多体問題 ②

藤堂眞治

東京大学大学院理学系研究科 / 物性研究所 / NIMS

wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp

「ALPS と量子多体問題」 Agenda (1/2)

- CMSI計算科学技術特論Cの全体像
 - 対象と目標、講義項目、プログラム
- ALPS (Applications and Libraries for Physics Simulations) とは?
 - 量子格子模型とは? 強相関量子多体系のためのシミュレーション手法
 - ALPS の生まれた背景、歴史と活用事例
- ALPS の設計
 - シミュレーションのワークフロー、ALPS階層構造
 - XML / HDF5 による入出力
 - C++言語のテンプレートとジェネリックアルゴリズム
 - Pythonによる後処理・可視化
 - アプリケーション・フレームワークとしての利用

「ALPS と量子多体問題」 Agenda (2/2)

- ALPS の開発
 - ALPLS開発の経緯と開発体制、ライセンスと「ビジネスモデル」
 - オープンソースのツールの利用 (ビルドシステム、バージョン管理、バグ追跡、ドキュメント作成、GUI・可視化)
- アプリケーション普及のために
 - ユーザサポート (ドキュメント、講習会、ワークショップ)
 - 公開と普及 (MateriApps と MateriApps LIVE!)
 - プロジェクトの普及と継続に不可欠なものは?

ALPS の特徴

- **任意の**格子
 - XML フォーマットによる格子構造の定義
 - ユニットセルの繰り返しによる格子生成
 - 格子を任意の有限グラフ (頂点と辺の集合) として定義することも可能
- **任意の**ハミルトニアン (模型)
 - XML フォーマットによる量子数、演算子の定義
 - 数式によるハミルトニアンの定義
- 様々な**最新の**解法 (アプリケーション): ED、CMC、QMC、DMRG、DMFT
- **全ての** ALPS アプリケーションに共通の入力形式
- **汎用的な**出力形式、Python による解析・グラフ作成ツール

ALPS の階層構造

tools

XML manipulation Python binding GUI

applications

MC QMC ED DMRG DMFT

**domain-specific
libraries**

lattice model observables scheduler

numerics

random ublas

Boost library

iterative eigenvalue solver

generic C++

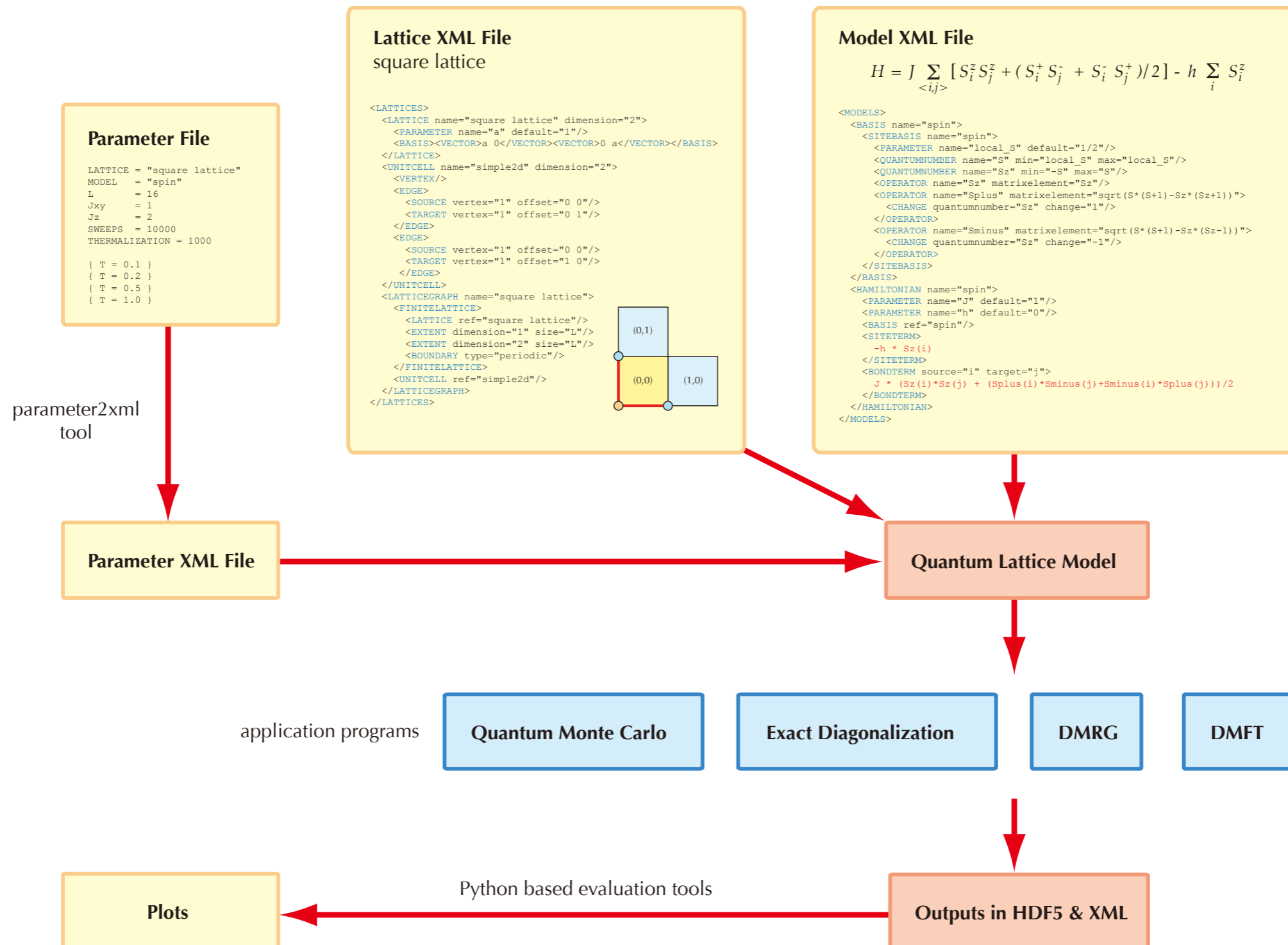
graph

serialization XML/XSLT

C / Fortran

BLAS LAPACK MPI

ALPS のワークフロー



ALPS ライブラリ・フレームワークを使う利点

- エラーバーと自己相関時間の自動計算 (ALPS/alea)
- 自動並列化 & ロードバランシング (ALPS/scheduler)
- チェックポイント作成とリスタート機能 (ALPS/scheduler)
- XML・HDF5形式による計算結果の自動出力とこれらを扱うツール
- 入力パラメータの柔軟な扱い (ALPS/parameter)
- 擬似乱数生成器 (ALPS/random)
- 格子の容易な取扱い (ALPS/lattice)
- 量子ハミルトニアンの容易な取扱い (ALPS/model)

- アプリケーションの「ALPS化」のチュートリアルを用意



ALPS 実行デモ

参考文献:

藤堂 「“実験技術”としての量子多体系シミュレーションソフトウェア ALPS」

日本物理学会誌 70, 275-282 (2015)

藤堂・加藤 「CMSIハンズオン 物質科学計算パッケージソフト MateriApps LIVE!」

http://www.slideshare.net/cms_initiative/20150902



ALPS の開発体制

ALPS の展開

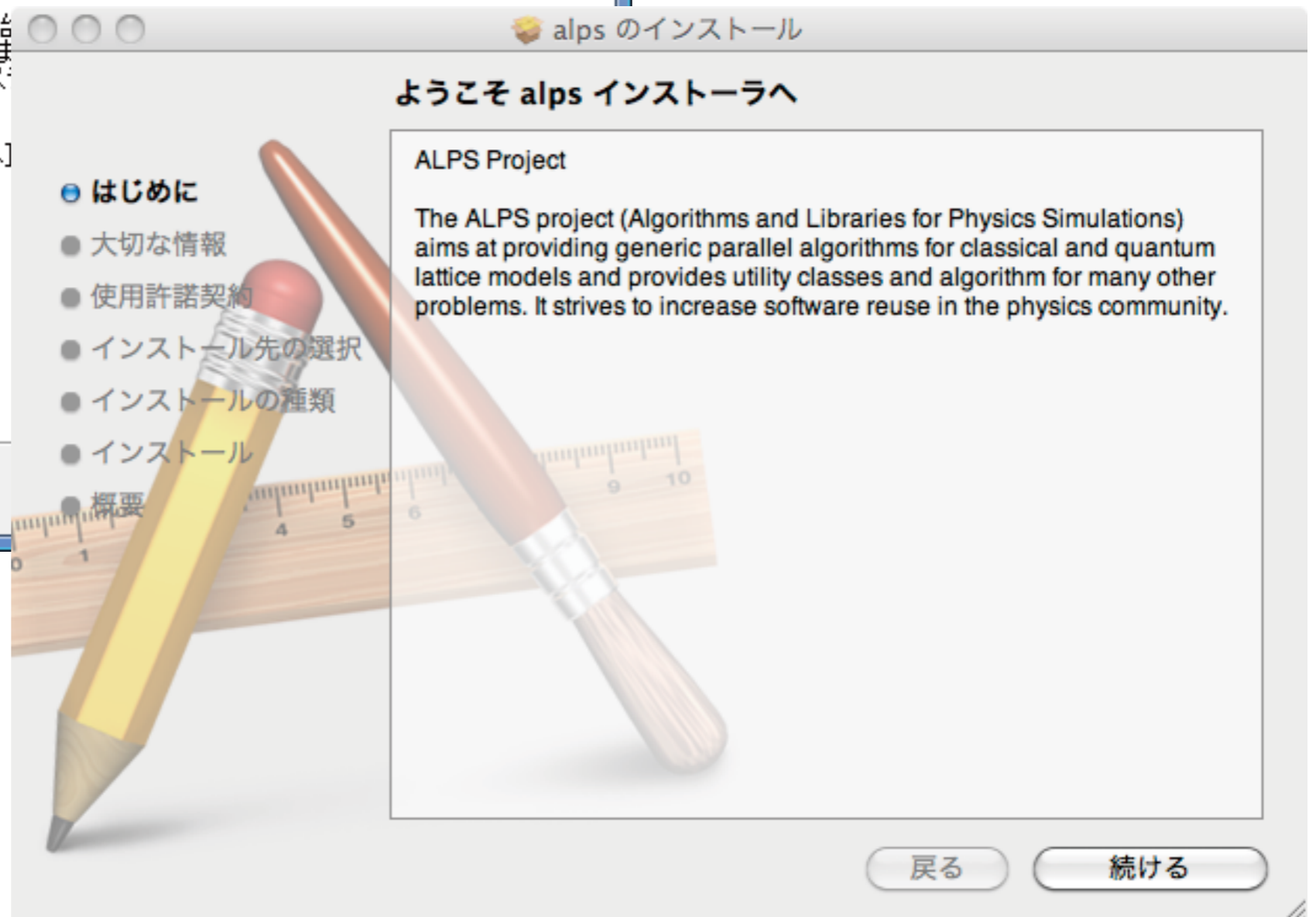
- 上方展開 (大規模化・高性能化・並列化)
 - 「大規模並列量子モンテカルロ法」 (ALPS/looper) の高度化
 - 高並列スケジューラ(ALPS/parapack)のハイブリッド多重並列化
 - Fortran, C プログラムのための API 作成
- 下方展開
 - 実験家・理論家による幅広い利用の促進
 - Windows/Macintosh 用バイナリインストーラの開発
 - ワークフロー・履歴管理システムとの統合
 - GUI (グラフィカルユーザインターフェース)の開発

Windows、Mac OS X 用バイナリインストーラ



for Windows

for Mac OS X



ワークフロー・履歴管理システムとの統合

The screenshot displays the VisTrails Builder interface for a workflow named 'dmft-05-osmt.vt*'. The main workspace shows a workflow diagram with several modules connected by arrows. The modules include 'PrepareDMFT', 'RunDMFT', 'PersistentDirectory', 'GetResultFiles', 'LoadAlpsMeasurements', 'TransformEachDataSet', 'Axis', and 'PreparePlot'. A 'Methods' panel on the right shows the signature for the 'SheetReference' method, with parameters: MinColumnCount (Integer), MinRowCount (Integer), and SheetName (String). The 'Set Methods' section shows the values: MinColumnCount: Integer 2, MinRowCount: Integer 2, and SheetName: String dmft-05. A plot window at the bottom right shows a graph with a blue curve and a red line, with axes labeled from 0 to 30. The plot window also displays coordinates: x=29.6649 and y=-0.401384. The Windows taskbar at the bottom shows the Start button, a search bar, and several open applications: '新しいタブ - Googl...', 'ALPS', 'crest.edo.jaea.go.j...', and '3 python.exe'. The system tray shows the time as 16:49.

<http://www.vistrails.org/>

「公開ソフト」への長い道のり

- ソースコード
- ビルドシステム
 - テストスイート
 - チュートリアル
 - Webページ
 - ユーザサポート
 - ライセンス
 - アプリ名
 - ロゴ
 - ドキュメント
 - 講習会、 、 、 、 、 、

ALPS プロジェクトの規模

- 開発者: 約30人 (7ヶ国)
- ソースコードの行数

Measuring programming progress by lines of code is like measuring aircraft building progress by weight. — Bill Gates

| | 言語 | 行数 |
|-----------------------------------|---------|---------|
| ALPS Libraries | C++ | 148,000 |
| | Python | 13,000 |
| ALPS Applications | C++ | 94,000 |
| | Fortran | 11,000 |
| examples, tutorials, tests | C++ | 34,000 |
| | Fortran | 16,000 |
| | Python | 1,000 |

- アプリケーションよりもライブラリの方が大きい
- サンプル、チュートリアル、テストもかなり大きな比重を占める

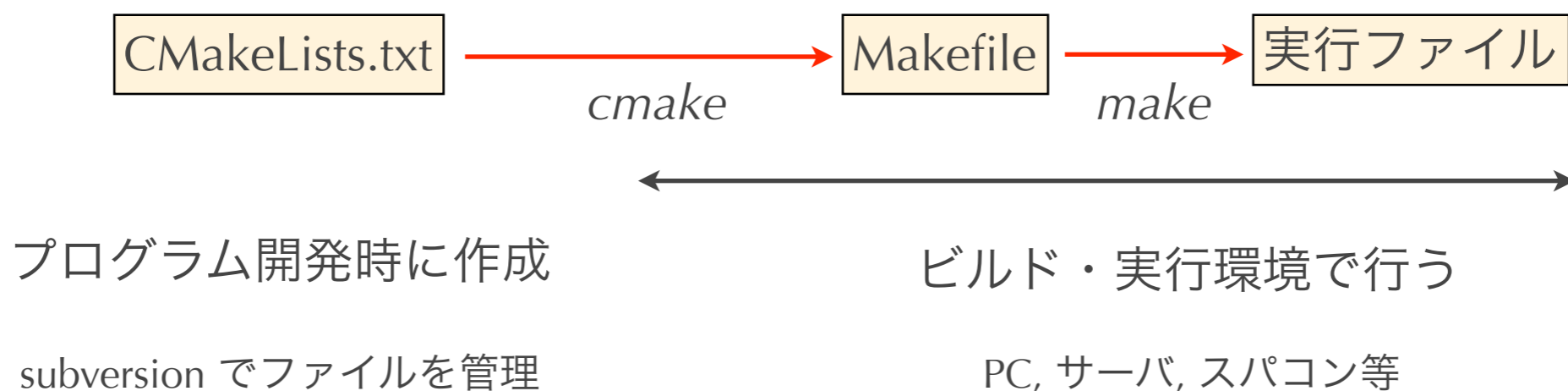
開発・サポート環境

- ソースコードの規模、開発体制が大きくなると今までの方法では破綻する
 - 開発・サポートのためのツールを一から作りあげるのは非現実的
 - フリーソフトウェアの利用
 - ビルドシステム: CMake
 - ソースコードの管理: Subversion
 - プロジェクト管理・バグ追跡: Trac
 - ドキュメント作成: MediaWiki
 - メーリングリスト: Mailman
- Linux ワークステーションが1台あれば、あるいは web サービスを利用すれば、これらの環境を整えるのは現在では比較的容易

ビルドシステム

- **CMake** - <http://www.cmake.org>  **CMake**

- Makefileを生成するためのユーティリティ (configureスクリプトに対応)
 - Windows の Visual C++ 用ソリューションファイル、Mac OS X の Xcode 用プロジェクトファイルの生成も可能
- 設定は CMakeLists.txt に記述する
- テスト(CTest)やバイナリ配布(CPack)の機能もある
- ファイルの依存関係の自動検出

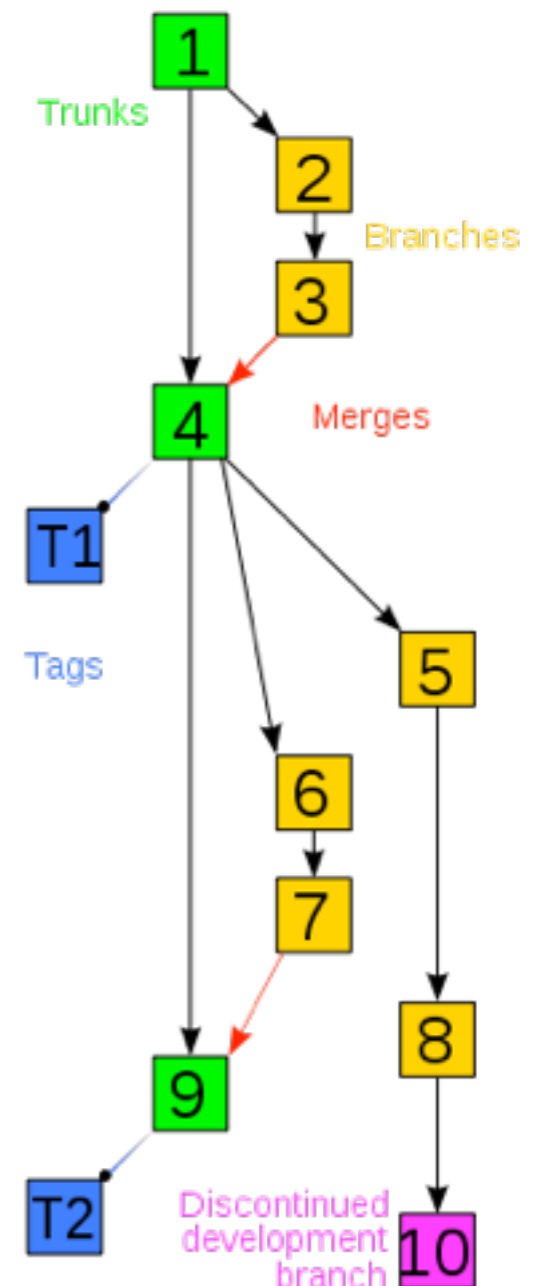


VCS (Version Control System) によるソース管理


- **Subversion** - <http://subversion.apache.org/>



- 開発者が複数になると、ディレクトリ名やログファイルによるバージョン管理はすぐに破綻する
- ソースコードをサーバー上で一括管理
 - ネットワーク経由でソースを check out/check in
- 更新毎に一意的なバージョン番号を付与
- 全ての修正履歴を保存
- 複数人が同時に更新した場合に衝突を回避するしくみ
- ブランチ・マージ・タグ付けなどが可能
- 開発者が一人、公開の予定がない場合でも積極的に使うべき
- 東大理学部物理3年の講義「計算機実験」でもVCSを教えている



BTS (Bug Tracking System) の利用

- **Trac** - <http://trac.edgewall.org/> 
 - プロジェクト管理とバグ追跡のためのツール
 - Web ブラウザからアクセス・操作
 - 開発者の情報共有のための wiki
 - Subversion との連携 (ソース、修正履歴の web 上での閲覧)
 - プロジェクト管理 (ロードマップ、マイルストーンの管理)
 - チケットシステム (issue 管理)
 - バグやタスクの登録
 - 担当者の決定
 - 修正状況の追跡

Wiki によるマニュアル作成・管理

- **MediaWiki** - <http://www.mediawiki.org/wiki/MediaWiki>



- もともとはウィキペディアのために開発された
- Wiki とは?
 - Webブラウザを利用してWeb文書を書き換えるシステム
 - ネットワーク上のどこからでも書き換えができる。共同作業が容易
 - Webブラウザがあれば編集作業が行える
 - HTMLよりも簡潔な書式
 - 文書間のリンクの作成が容易
- ALPS Wiki のコンテンツ
 - ニュース、インストール方法、ALPSに関連する論文、発表資料、ライブラリリファレンスマニュアル、チュートリアル

GitHub の利用

- **git** - <https://git-scm.com> 
 - 分散型バージョン管理システム
 - Linux カーネルの開発に使うために開発された
 - 近年、subversion の後継として普及が進んでいる
- **GitHub** - <https://github.com> **GitHub**
 - git を核とした OSS 開発ポータル (例: [MateriApps LIVE!](#))
 - git + ソースコードブラウザ + wiki + issue 管理 + 統計 + リリースページ作成
 - 無料 + 教育機関所属者は無料で非公開リポジトリを作成可 ([GitHub Education](#))
- git & GitHub を使ってみたい人 ⇒ [CMSIハンズオン「バージョン管理システム」](#)
 - 神戸 & 柏で開催、[CMSI web](#) でも資料公開中

ALPS メーリングリスト

- **Mailman** - <http://www.gnu.org/software/mailman/index.html>



- 開発者メーリングリスト
 - 1.7通/日 (2010年～2014年)
 - 開発方針に関する意見交換、リリーススケジュール調整、担当者調整
 - Tracチケットの変更ログも自動的にここに流れる
- ユーザーメーリングリスト
 - 1.1通/日 (2010年～2014年)
 - Web からの自動登録
 - 開発者 + ユーザコミュニティによるサポートの場
 - FAQ ⇒ Wiki ドキュメントへ
 - バグレポート、要望など ⇒ Trac チケットへ

ワークショップ・講習会

- ALPS developers workshop
 - 今後の開発方針についてブレインストーミング & ディスカッション
- ALPS users workshop
 - アルゴリズムについてのレビュートーク
 - Wiki のチュートリアルを用いて ALPS の実習
- ALPS ハンズオン (CMSI ハンズオン)
 - 半日程度のチュートリアル
 - とにかく ALPS を動かしてみることを目標に

ライセンス = ビジネスモデル

- ALPS Library License, ALPS Application License
 - **GNU General Public License (GPL)** を基本としたライセンス
 - Non-commercial academic use の場合自由に利用可能
 - Commercial use の場合は要相談
 - 自由に再配布可
 - ユーザが変更を施したコードも同じライセンスの下で再配布可
 - ALPSを用いた研究成果を公表する場合には **acknowledgement** と論文の引用が義務 (ALPSをユーザーコードのテストのみに使った場合を含む)

1. In any scientific publication based wholly or in part on the Library, the use of the Library must be acknowledged and the publications listed in the accompanying CITATIONS.txt document must be cited.

ALPS 論文

- ALPS Library に関する論文
 - B. Bauer et al. *The ALPS project release 2.0: Open source software for strongly correlated systems*, J. Stat. Mech., P05001 (2011).
 - A. F. Albuquerque et al. *The ALPS project release 1.3: open source software for strongly correlated systems*, J. Mag. Mag. Mat. 310, 1187 (2007).
 - F. Alet et al. *The ALPS Project: Open Source Software for Strongly Correlated Systems*, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 74, 30 (2005).
- 加えて、ALPS Application ごとに引用文献が定められている
- 誰を(どこまで)アプリの著作者に含めるか? 論文の著者に含めるか?
 - ⇒ 永遠の課題

ALPS 2.0 Paper

Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment
An IOP and SISSA journal

The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems

B Bauer¹, L D Carr², H G Evertz³, A Feiguin⁴, J Freire⁵, S Fuchs⁶, L Gamper¹, J Gukelberger¹, E Gull⁷, S Guertler⁸, A Hehn¹, R Igarashi^{9,10}, S V Isakov¹, D Koop⁵, P N Ma¹, P Mates^{1,5}, H Matsuo¹¹, O Parcollet¹², G Pawłowski¹³, J D Picon¹⁴, L Pollet^{1,15}, E Santos⁵, V W Scarola¹⁶, U Schollwöck¹⁷, C Silva⁵, B Surer¹, S Todo^{10,11}, S Trebst¹⁸, M Troyer^{1,21}, M L Wall², P Werner¹ and S Wessel^{19,20}

Abstract. We present release 2.0 of the ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations) project, an open source software project to develop libraries and application programs for the simulation of strongly correlated quantum lattice models such as quantum magnets, lattice bosons, and strongly correlated fermion systems. The code development is centered on common XML and HDF5 data formats, libraries to simplify and speed up code development, common evaluation and plotting tools, and simulation programs. The programs enable non-experts to start carrying out serial or parallel numerical simulations by providing basic implementations of the important algorithms for quantum lattice models: classical and quantum Monte Carlo (QMC) using non-local updates, extended ensemble simulations, exact and full diagonalization (ED), the density matrix renormalization group (DMRG) both in a static version and a dynamic time-evolving block decimation (TEBD) code, and quantum Monte Carlo solvers for dynamical mean field theory (DMFT). The ALPS libraries provide a powerful framework for programmers to develop their own applications, which, for instance, greatly simplify the steps of porting a serial code onto a parallel, distributed memory machine. Major changes in release 2.0 include the use of HDF5 for binary data, evaluation tools in Python, support for the Windows operating system, the use of CMake as build system and binary installation packages for Mac OS X and Windows, and integration with the VisTrails workflow provenance tool. The software is available from our web server at <http://alps.comp-phys.org/>.

J. Stat. Mech. (2011) P05001

| | | | |
|--|-----------|--|-----------|
| 1. Introduction | 4 | 10. License | 17 |
| 2. The ALPS project | 5 | 11. Future development plans | 18 |
| 2.1. Overview | 5 | Acknowledgments | 19 |
| 2.2. New features in version 2.0 | 6 | Appendix A. Scientific workflows and VisTrails | 20 |
| 3. Building and installing ALPS | 6 | A.1. Workflows | 20 |
| 3.1. Build system | 6 | A.2. Data provenance | 20 |
| 3.2. Building ALPS from source | 6 | A.3. Caching and persistent storage | 23 |
| 3.3. Binary installation packages | 7 | A.4. Sharing content and reproducible research | 24 |
| 3.4. LiveALPS | 7 | Appendix B. Python examples | 24 |
| 4. Data formats | 7 | Appendix C. ALPS installation with CMake | 26 |
| 4.1. XML | 7 | C.1. Prerequisites | 26 |
| 4.2. HDF5 | 8 | C.2. The CMake build system | 27 |
| 5. ALPS libraries | 8 | C.3. Installation steps | 28 |
| 6. Evaluation tools in Python | 9 | Appendix D. The ALPS XML schemas | 29 |
| 6.1. The Python language | 9 | D.1. Lattice definitions | 31 |
| 6.2. The pyalps package | 10 | D.2. Model definitions | 32 |
| 7. Applications | 10 | References | 33 |
| 7.1. Exact diagonalization | 11 | | |
| 7.1.1. Sparse diagonalization code <code>sparseddiag</code> | 11 | | |
| 7.1.2. Full diagonalization code <code>fulldiag</code> | 11 | | |
| 7.2. Classical Monte Carlo simulations | 11 | | |
| 7.2.1. Classical Monte Carlo codes for spin models <code>spinmc</code> | 11 | | |
| 7.3. Quantum Monte Carlo simulations | 12 | | |
| 7.3.1. The looper code. | 12 | | |
| 7.3.2. The directed loop algorithm code <code>dirloop_sse</code> | 12 | | |
| 7.3.3. The worm algorithm code <code>worm</code> | 12 | | |
| 7.3.4. The extended ensemble code <code>qwl</code> | 12 | | |
| 7.4. Density matrix renormalization group (DMRG) algorithms | 12 | | |
| 7.4.1. The <code>dmrg</code> code. | 12 | | |
| 7.4.2. Time-evolving block decimation code <code>tebd</code> | 12 | | |
| 7.5. Dynamical mean field theory QMC solvers <code>dmft</code> | 13 | | |
| 8. Integration with the VisTrails workflow and computational provenance tools | 13 | | |
| 8.1. Computational provenance | 13 | | |
| 8.2. The ALPS VisTrails package | 14 | | |
| 9. Tutorials and examples | 15 | | |
| 9.1. Tutorials on using the ALPS codes | 15 | | |
| 9.2. Tutorials on writing codes with ALPS | 16 | | |

アプリケーション普及のために

アプリケーション普及のための条件

- そもそも、なぜ普及させる必要があるのか？
- 「良いソフトウェア」を公開することは必須の条件、だが十分条件ではない
- 公開後もユーザに「関わり続ける」ことが重要
 - ソフトが「生きている」と感じてもらう
 - バグフィックス、機能追加、バージョンアップ
 - ユーザーサポート、リアクション
 - チュートリアル、事例紹介の充実
- 結局のところ、普及するかどうかはタイミングや運によるところが大きい
 - それでも「打率」を上げることは可能

「公開アプリ」プロジェクトの立ち上げ

- 最初から「公開」を前提に立ち上げる
- 最初は小さく、素早く、簡潔に

Debugging is twice as hard as writing the code in the first place. Therefore, if you write the code as cleverly as possible, you are, by definition, not smart enough to debug it. — Brian W. Kernighan

- 最初の三ヶ月で公開までもっていく
- お金を取ってくるなら、プロジェクトを立ち上げた後で
- シニア(40歳以上)やお金を持っている人抜きで始める
- 実際に書く(書ける)人だけでチームを組む

- アプリの「名前」や「ロゴ」は重要(かも)

開発・普及に役立つツールや仕組みの利用

- GitHub、SourceForge、SlideShare、YouTube
- MateriApps <http://ma.cms-initiative.jp/>
 - MateriApps web
 - MateriApps LIVE!
 - MateriApps Installer
 - MateriApps Cloud (coming soon?)
- コミュニティによるサポート
 - CMSIハンズオン開催サポート
 - 物性研 ソフトウェア高度化プロジェクト

物性研ソフトウェア高度化 第1号: HΦ (エイチファイ)

- 並列計算機に対応した**数値厳密対角化法**による有効模型ソルバーパッケージ。広汎な多体量子系の有効模型(多軌道ハバード模型、ハイゼンベルグ模型、近藤格子模型など)の基底状態及び低励起状態の波動関数を並列計算によって求める。ランチョス法による基底状態計算、熱的純粋量子状態を利用した比熱・帯磁率の温度依存性計算が可能
- 開発代表: 山地洋平(東大院工)
- **2015/10/09 (明日!) 17:00 (JST) 公開予定**
- MateriApps <http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/hphi>
- GitHub <https://github.com/QLMS/HPhi/releases>



It always takes longer than you expect, even when you take into account Hofstadter's Law. — Hofstadter's Law

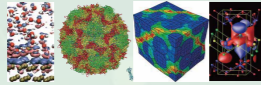
MateriApps a Portal to Materials Science Simulation

S. Todo^{1,2}, R. Igarashi², S. Kasamatsu², T. Kato², N. Kawashima², T. Kawatsu³, Y. Konishi², H. Kouta², H. Matsu⁴, M. Noda⁵, S. Sasaki⁶, Y. Terada⁷, S. Tsuchida⁶, K. Yoshimi², K. Yoshizawa² (MateriApps collaboration) (¹UTokyo, ²ISSP, ³YCU, ⁴RIST, ⁵IMS, ⁶Ageha, ⁷IMR)

Computational Materials Science in Japan

CMSI - Computational Materials Science Initiative

- Promoting cutting-edge researches on wide topics ranging from strongly correlated electrons, electric devices, molecules to structural materials
- State-of-the-art algorithms developed and optimized for massively parallel supercomputers: the K computer, HPCI systems, etc.
- Faster, more stable, and more accurate simulations of larger systems
- Provides advanced functionality for leading-edge researches: conductivity, excited states, extended ensembles, downfolding, etc.



Current status and issues in Computational Materials Science

From **Developers'** viewpoint:

- New algorithms should be implemented and used, or it will be forgotten and lost
- "In-house" code will be left uncontrolled once the graduate student or PostDoc leaves the group
- Costs too much to write and maintain the documents
- Development of software itself is hardly considered as scientific achievements
- Little idea about potential "customers" and their needs

"How and where can we distribute our codes?"

From **Users'** viewpoint:

- Trade-off between "initial cost" and "scalability, functionality, accuracy, performance"
- What kind of applications? Who develops them?
- Which application should we use for our problem?
- Manual and documentation are not well prepared
- How can we evaluate the accuracy of the results?

"How and where can we find and learn the best Apps?"

mismatch between seeds and needs

CMSI Open-source Application Software

Electronic structure calculation (solid state physics)



- Performs electronic structure calculation for a wide range of materials including crystals, interfaces, liquids, etc. For example, OpenMX is able to deal with non-collinear magnetism and non-equilibrium Green's function calculations for electron transport

Electronic structure calculation (quantum chemistry)



- Performs quantum-mechanical simulations of large molecular systems efficiently, and calculates various information regarding the structure and function of biopolymers, such as the interaction between a protein and a ligand

Molecular dynamics



- Equipped with most of standard MD techniques including free energy calculations based on thermodynamic integration method, and enables investigations of large-scale real systems such as viruses, liposomes, assemblies of proteins and micelles, and polymers

Strongly correlated systems/ effective model calculation



- Performs simulations of strongly correlated systems such as magnetic materials or correlated electrons. Heat capacities, susceptibilities, magnetization processes in interacting spin systems, the density of states of strongly correlated electrons, etc. can be calculated

Goal of MateriApps Project

Formation of **community** in the field of computational materials science through the promotion of open-source software...

Establishment of **infrastructure** for easily starting materials science simulations for theoreticians, experimentalists, researchers in companies, students, and more...

Sustainable **development** of materials science applications for future HPC systems including post-K flagship system and beyond...

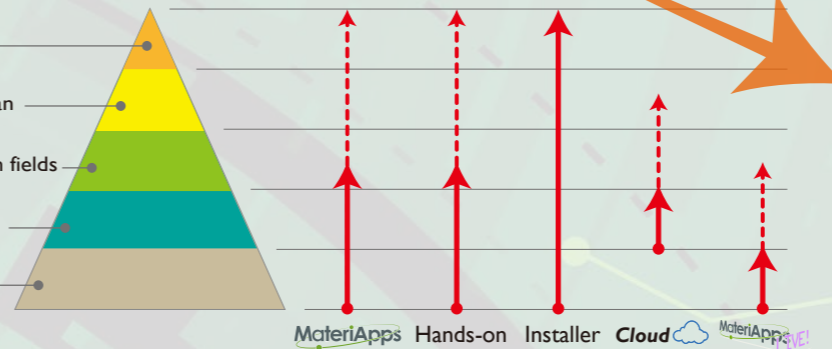


What MateriApps will Provide

- To **find** application software
- catalog of application/tool on **MateriApps web**
- To **learn** application software
- CMSI hands-on session at Kobe and other places
- web tutorials, distant learning
- To **start** using application software
- **MateriApps LIVE!**
- MateriApps Cloud (coming soon!)
- To actively **use** application software
- **MateriApps Installer**
- MateriApps Forum

HPC Hierarchy and MateriApps

- Flagship system (K, post-K,...)
- HPC infrastructure supercomputers in Japan
- Supercomputers for shared-use in research fields
- Cloud computing, on-premises PC clusters
- Personal workstations, PCs



MateriApps a Portal Site for Materials Science Simulation

- Introduces materials science applications/tools/databases
- Search from category, features, targets, methods/algorithms
- Information of applications/tools
- brief introductions, links to homepage, installation, usage, online hands-on, developer's voice, updates, license, etc.
- Forum for exchanging experiences between users and developers
- Voice from users



- "A lot of information, careful explanation ..." "Plain design and rich contents ..."
- "... able to know the applications I did not know before, ... nice to widely advertise their own application software for developers ..."
- "... hope that you can further lower the barrier to start materials simulation ..."
- "... would be great if one can connect to a supercomputer directly and execute simulations just after trial on USB ..."
- "... would like to see the comparison of simulation results for the same system using different application software ..."
- ✓ 150+ applications/tools on the list
- ✓ 8000+PV, 1300+ unique visitors / months
- ✓ Review articles on applications in each category will start soon

MateriApps LIVE! a Debian USB Live Linux System

- Bootable directly from USB stick (or in virtual machine)
- just boot and get ready for materials science simulations without installation!
- Version 1.7 was published in July 2015
- Pre-installed software
- ABINIT, AkaiKKR, ALPS, CP2K, Feram, ERmod, GAMESS, Gromacs, OpenMX, Quantum ESPRESSO, SMASH, xTAPP, and various visualization tools
- ✓ 800+ copies downloaded/distributed since July 2013



Applications/Tools/Databases Introduced in MateriApps

| Electronic Structure | Quantum Chemistry | Molecular Dynamics | Lattice Models |
|---|---|---|---|
| AkaiKKR [*]
OpenMX [*]
xTAPP [*]
ABINIT [*]
... | FMO [*]
SMASH [*]
GAMESS [*]
DC [*]
... | MODYLAS
Gromacs [*]
ERmod [*]
MDACP
... | ALPS [*]
DSQS
BLOCK
DMRG++
... |
| (37) | (19) | (16) | (21) |
| Continuum Models | Data Analysis | Visualization | Database |
| ANSYS Multiphysics
Octa ... | CLUPAN
BSA | TAPIOCA [*]
ParaView [*] | MatNavi [*]
AFOWLIB [*] |
| (8) | (25) | (28) | (3) |

Bold: CMSI Applications ☆: included in MateriApps LIVE!

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



- 155の物質科学アプリケーションやツールを紹介(2015年9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 ページビューにまで成長

2013年5月公開

MateriApps 掲載アプリケーション

- 155の物質科学アプリケーションやツールを紹介 (2015年9月現在)

密度汎関数法

AkaiKKR[☆]

OpenMX[☆]

xTAPP[☆]

ABINIT[☆]

...

(37)

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++

...

(22)

連続体シミュレーション

ANSYS Multiphysics

Octa ...

(8)

データ解析

CLUPAN[☆]

phonopy[☆] (26)

可視化

fu[☆]

TAPIOCA[☆] (28)

☆ MateriApps LIVE! 収録 (一部予定) アプリ

MateriApps 活動の目的

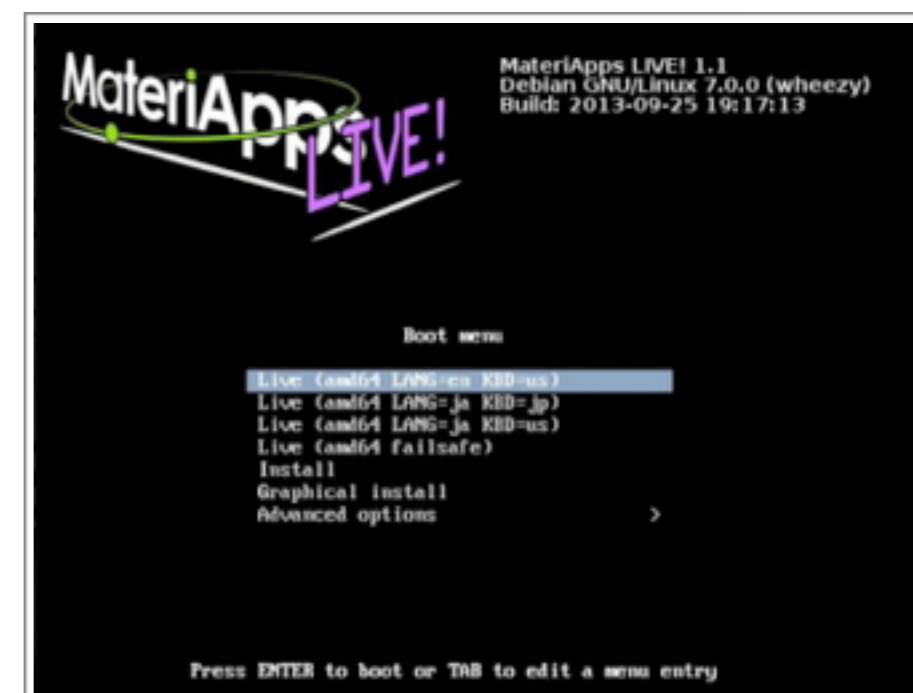
- 開発者側の問題点
 - 有益なプログラムはもっと使われるべきだが、多くのソフトは研究室内にとどまって終わる
 - 公開・情報発信には手間がかかる
 - アプリ開発を成果として主張しにくい(指標がない)
 - 利用者側の問題点
 - どんなプログラムがあるのかよくわからない
 - インストール・使い方について知りたい
 - 開発者の活動(特に講習会情報)をもっと知りたい
- 両者をつなぐ役割を果たしたい

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
- 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
- 個人・研究室レベルでのアプリ利用の支援
 - MateriApps LIVE!
- 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1.8公開 (2015年8月31日)
- MateriAppsで紹介している公開アプリ・ツールを収録
 - 2015年8月現在：ABINIT, AkaiKKR, ALPS, CP2K, Feram ,ERmod, Gromacs, 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
- 900以上のコピーを配布済、学部講義でも利用



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