

2020/09/07 第7回東北大学知のフォーラム
実験家のためのデータ駆動科学オンラインセミナー
計算材料科学&マテリアルズ・インフォマティクス入門

MateriApps LIVE!による物質科学シミュレーション

藤堂眞治

東京大学 大学院理学系研究科 / 物性研究所

MateriApps

略歴 - 藤堂眞治

- 1968 四国 松山に生まれる
- 1996 東京大学大学院理学系研究科博士課程終了 博士(理学)
- 1996 東京大学物性研究所(六本木/柏)
- 2000 スイス連邦工科大学チューリッヒ校
- 2002 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻
- 2011 東京大学物性研究所(神戸)
- 2014 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

- 興味: 計算物理、統計物理、固体物理、データ科学、応用数学、他
- 趣味: 学生が書いたプログラムのデバッグ、オープンソースソフトウェアのインストール

物質科学のためのオープンソース・ソフトウェア(1/2)

• 電子状態計算 (固体物理分野)



QUANTUM ESPRESSO



- 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

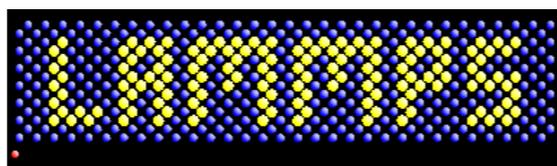
• 電子状態計算 (量子化学分野)



- 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

物質科学のためのオープンソース・ソフトウェア(2/2)

・分子動力学計算



GROMACS
fast, flexible & free



OCTA

- 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

・強相関係系・有効模型

ALPS



TeNeS

DSQSS



- 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

第一原理計算による物質科学シミュレーション

- どのアプリをどのように使えばよいのか？
 - 一口に「第一原理計算」といってもアプリにより用いる近似や解法が異なる
 - **内核電子**の取り扱い:
 - 全電子計算 vs 擬ポテンシャル法
 - 波動関数を表現する**基底**:
 - 平面波基底、原子局在基底、実空間基底、、、
 - **交換相関エネルギー汎関数**: LDA、LSDA、GGA、LDA+U、GW、、、、
 - **物理量**の計算: X線分光解析、フォノン分散、輸送特性係数、、、、
 - **ライセンス**(有償、無償)、ドキュメント、講習会
 - 専門家に**コンタクト**できるかどうか？

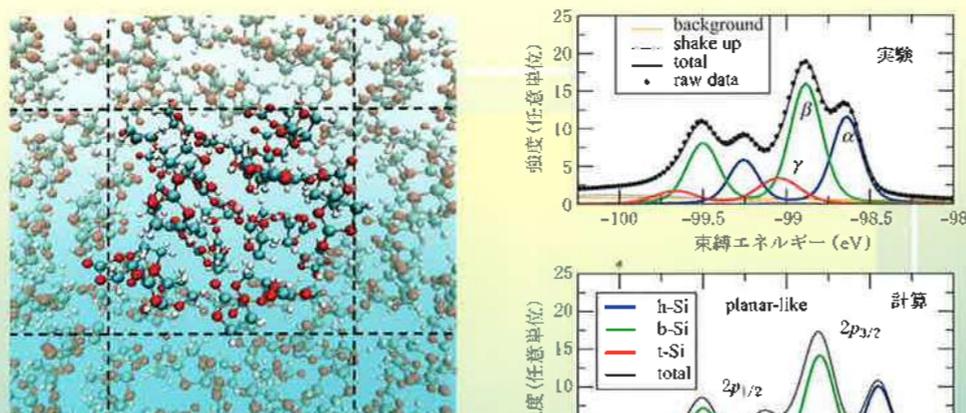
固体物理 11

SOLID STATE PHYSICS
Vol.52 2017

KOTBA 2 52 (11) 575-760 (2017)

No.621

特集号 第一原理からの物性シミュレーション



VI. ソフトウェア普及

物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps

東京大学物性研究所 本山裕一・三澤貴宏・加藤岳生
 東京大学大学院理学系研究科, 東京大学物性研究所 藤堂眞治

§1 はじめに

「MateriApps(マテリアアップス)」とは、物質科学シミュレーションのためのポータルサイトである¹⁾。国内外で開発された200以上の計算物質科学関連のアプリ^{*)}についての情報を日本語・英語で紹介している(第1図)。アプリの簡易紹介リンク先の情報だけでなく、キーワードによって整理された検索機能や、ユーザが自由に質問を書き込むことのできるフォーラムなど、特色ある機能を備えたポータルサイトである。2013年5月に公

開を始めて以来、アプリの情報は徐々に増え、今では物質科学シミュレーションのポータルサイトとしては世界的に見ても最大規模となっている。

MateriApps 活動のそもそもの発端は、現在の計算物質科学分野のソフトウェア開発が置かれている状況に対する危機感である。日本では多くの大学・研究機関で、先進的な機能を備えたプログラムが日々開発されているが、多くの場合、そのプログラムは開発者の近くの研究者の間でのみ使われ、なかなか公開されるまでに至らない。アプリの公開には、ドキュメントの整備やインターフェースの整理など、開発者はかなりの負担を強いられる。さらに、周到的準備の末に公開したとしても、適切な宣伝の場所がないとそもそもその存在が認知されない。これは、開発者にとっても、

*1 MateriApps では、コンパイルが必要な計算プログラム・ライブラリなどもすべて「アプリ」と表現している。本稿では、「アプリ・ツール」、「プログラム」、「ソフトウェア」等を特に区別せずに用いる。



第1図
ポータルサイト MateriAppsのトップページ画面。
URL: <http://ma.cms-initiative.jp>

本山, 三澤, 加藤, 藤堂, 固体物理 **52**, 743 (2017)

井戸, 加藤, 三澤, 藤堂, 分子シミュレーション学会誌“アンサンブル” **22**, 74 (2020) [分子動力学法・可視化]

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

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

事例紹介・キーワード解説

The image shows two overlapping browser windows from the MaterApps website. The background window displays the 'PHASE' case study page, and the foreground window displays the 'X線分光解析' (X-ray Spectroscopy) keyword explanation page.

PHASE 事例紹介

現在位置: ホーム, アプリ一覧, PHASE, PHASE 事例紹介

PHASE を用いたリチウムイオン二次電池の第一原理計算と劣化原因の探索

(株)コベルコ科研 世木 隆さん

リチウムイオン二次電池は、正極、負極と電解質の間をリチウムイオンが行き来する事により充放電を行います。しかし、現在でも何回も使っていき事により副生成物の生成や変質が発生し、その性能が低下していく課題があります。

ニッケルマンガンコバルト酸化物正極材料は現在広く用いられている活物質ですが、この使用前後における原子配列の変化を確認する為に電子顕微鏡で調べました。その結果を図1へ示しましたが、図1(左)では試験前の観察結果であり、白い球で示された金属イオンがリチウムイオンと交互に規則正しく配列しています。一方で試験後の場合、図1(右)で示した様に、原子配列が変化している事が判ります。これは、カチオンミキシングとして知られる現象で、充放電を繰り返すとリチウムイオンと金属イオンが入れ替わってしまいます。

1 nm 金属イオン
カチオンミキシング
1 nm

X線分光解析

現在位置: ホーム, キーワード解説, X線分光解析

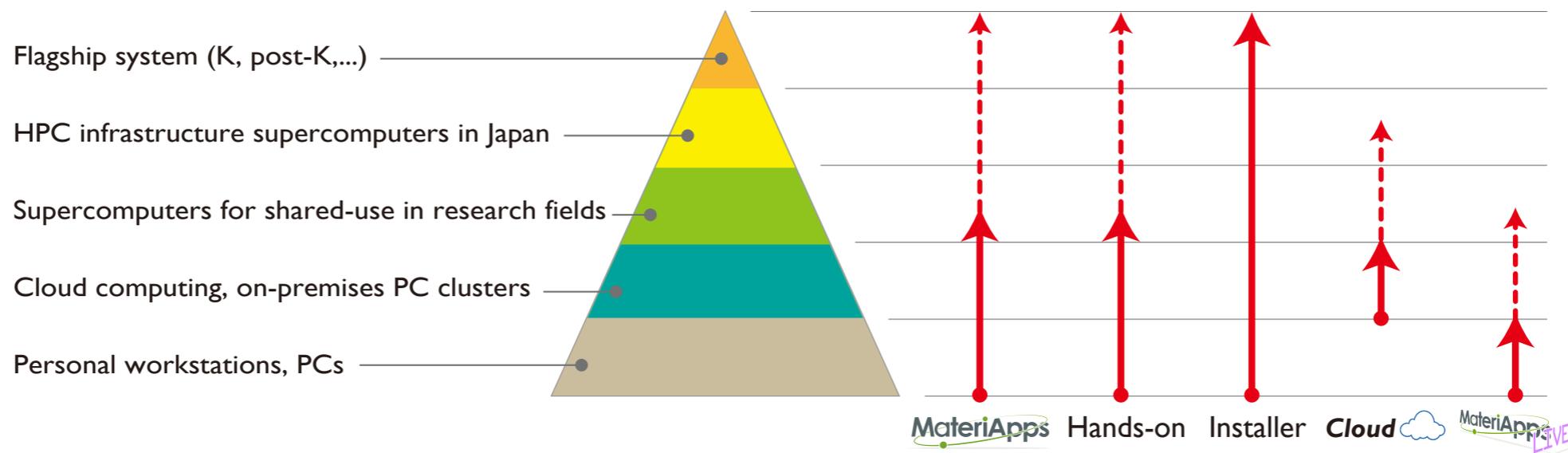
X線を物質に照射すると、物質に含まれる原子の内殻励起に起因する元素に特有なエネルギーでX線吸収が起こる。このX線吸収端における吸収スペクトルの微細構造をXAFS(X-ray Absorption Fine Structure, X線吸収微細構造)と呼び、これを解析することで原子の局所構造に関する情報を得ることができる。X線分光解析にあたって、着目する原子および隣接する原子の電子状態を計算し、実験と比較することが必要となる。X線分光解析用のアプリ(FEFF, Demeter, Missingなど)には電子状態計算を行う機能がついており、実験との比較を簡単に行うことができる。また、X線吸収スペクトルを計算する機能が付属している第一原理計算アプリ(WIEN2k, Exciting, Quantum ESPRESSO, ABINIT, AkaiKKR, SPRKKR, GPAWなど)を用いることで、より精度の高い分光解析を行うことも可能である。

関連ソフトウェア: WIEN2k, Exciting, Quantum ESPRESSO, ABINIT, AkaiKKR, SPRKKR, GPAW

タグ: キーワード解説, 先行, X線分光解析

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
 - 国内主要スパコンへのアプリのプレインストール **MateriApps Installer**

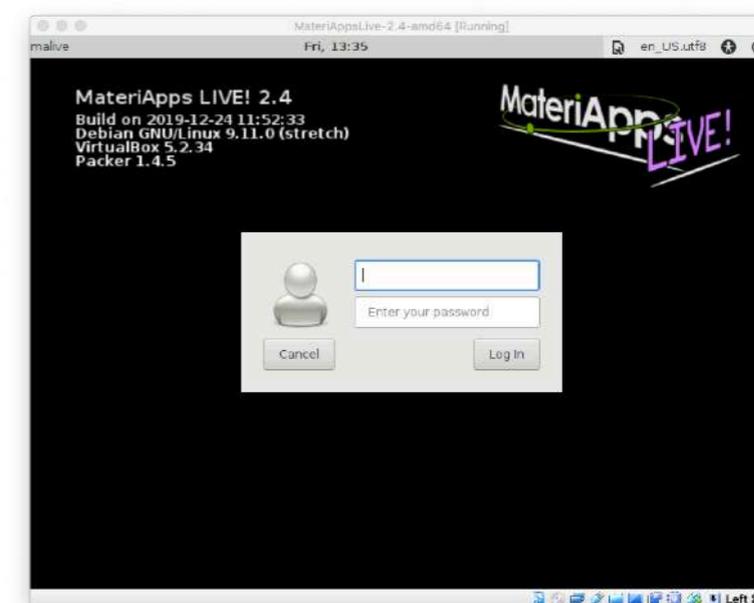


- インストールや入力ファイルの準備における「壁」を解消
- 計算科学の専門家だけでなく、実験家や企業内の利用、教育活動における活用へ

MateriApps LIVE! とは？



- 仮想化ソフトウェア VirtualBox 上で直接ブートできる Debian Linux
 - Windows、Mac などで利用可
 - 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!による第一原理シミュレーション

環境の構築・キーボード設定

データベースMatNavi

構造ファイル^{***}.cif取得

補助ツールC-tools

入力ファイル^{***}.dat生成

ターミナル

`$ openmx ***.dat`

可視化ツールVESTA

電子密度の可視化

可視化ツールXCrysDen

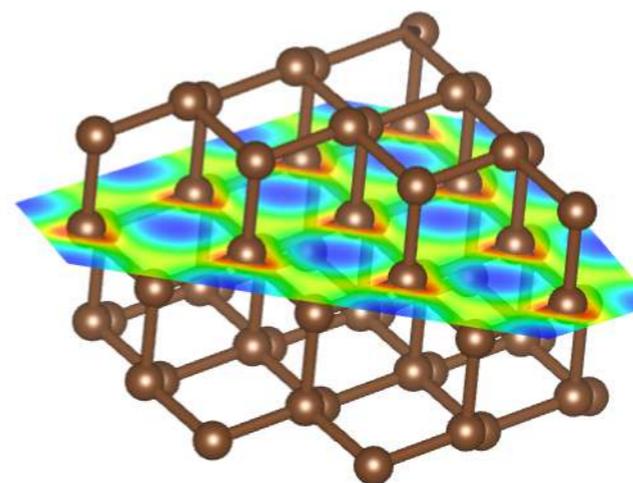
フェルミ面の可視化



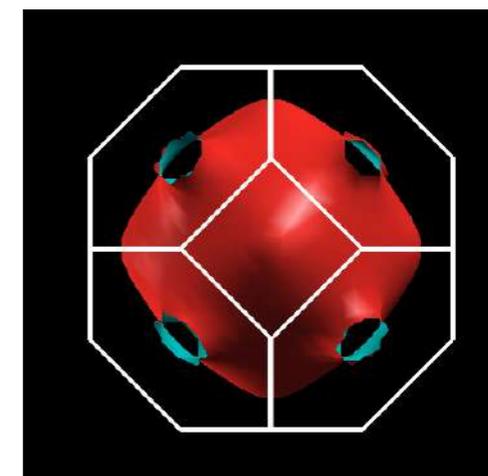
MatNavi



VESTA



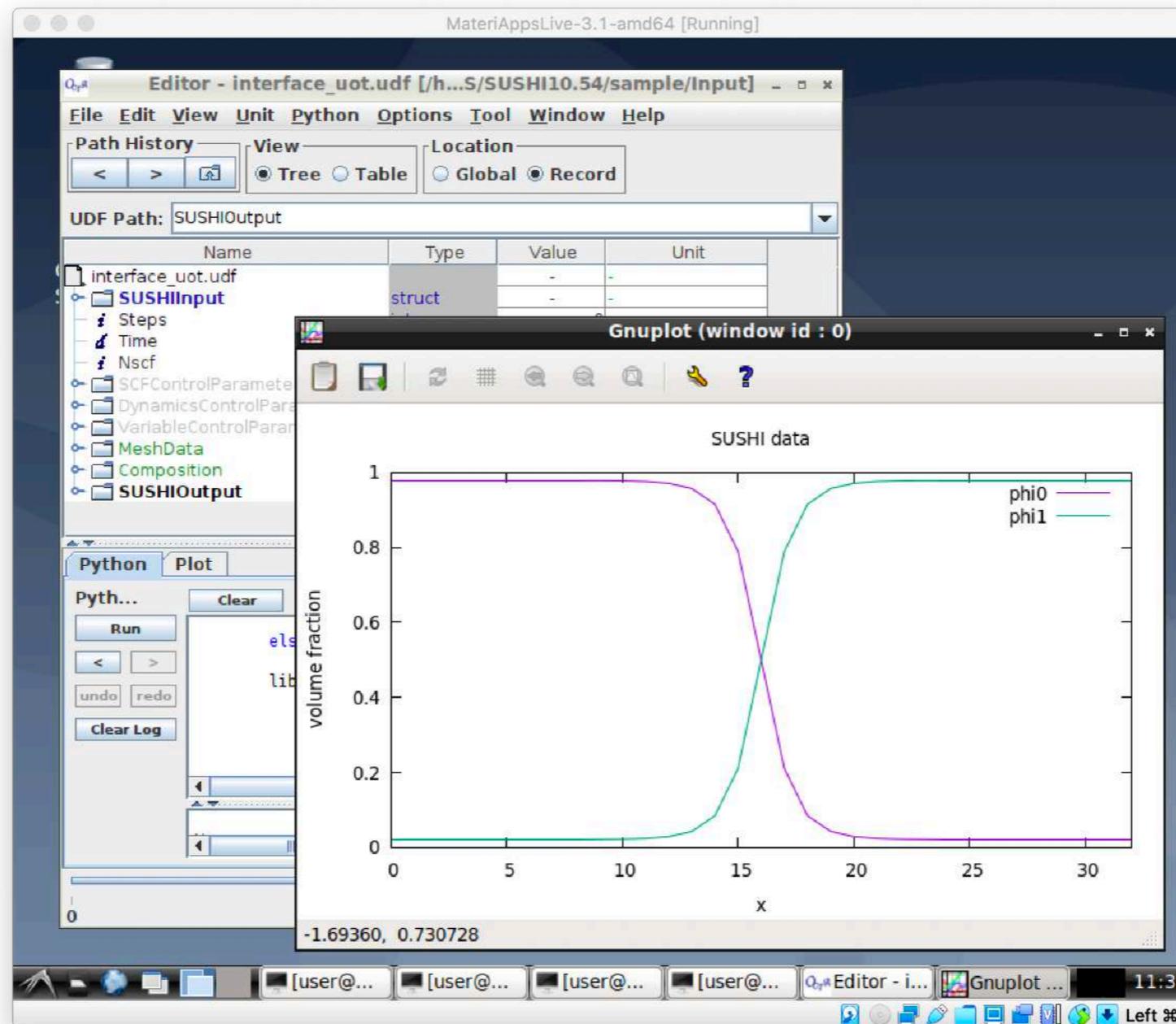
XCrysDen



コマンドは
ここだけ

Octa on MateriApps LIVE!

- 現在鋭意作業中



- MateriApps LIVE! バージョン3.2 (2020年10月1日リリース)に収録予定

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 (Quantum ESPRESSO, LAMMPS, 他)
 - 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

CCMS Webハンズオン MateriApps LIVE!講習会

- 2020/4/23, 2020/5/14 Quantum ESPRESSOによる第一原理電子状態計算
- 2020/6/18, 2020/8/6 LAMMPSによる分子動力学計算
- 毎回100名の受講生を集めてオンラインで開催 (毎回2,3日で定員に)

- 配信: Webex or Zoom
- 質疑応答: 講師・TAがSlackで対応
- 実習環境: MateriApps LIVE!

職種をお選びください



専門をお選びください



この講習会へ申込をした一番の理由はなんですか？



- 参考: 井戸 「オンラインのソフトウェア講習会をやってみた」 日本物理学会誌 (投稿中)

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 <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

