物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps

井戸 康太 (東大物性研)

東京大学 物性研究所
THE INSTITUTE FOR SOLID STATE PHYSICS
THE UNIVERSITY OF TOKYO

MateriApps: https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp
MateriApps LIVE!: https://cmsi.github.io/MateriAppsLive/
MateriApps Installer: https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/mainstaller/

謝辞：MateriApps開発チーム、大型計算機室

自己紹介: 井戸 康太

- 経歴
  - 2018年3月: 東京大学 物理工学専攻 博士課程 修了
  - 2018年4月~ 2019年10月: 東大物性研 計算物質科学研究センター 特任研究員
  - 2019年11月~現在:東大物性研 大型計算機室 助教

- 研究内容
  - 数値計算による強相関電子系における現象予測・解明
  - 第一原理計算と機械学習を用いた強相関物質の物性予測
  - 数値計算手法・アプリケーションソフトウェア(アプリ)の開発

アウトライン

- アプリを探す: MateriApps ポータルサイト

- アプリを試す：MateriApps LIVE!, MateriApps Installer

- アプリで得られたデータを公開する：
  物性研 データリポジトリ/ポータルサイト

MateriApps活動の目的

- 開発者側からの要望・問題点
  - 開発したアプリの公開・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
    - 近年では投稿先のジャーナルが増えてきている

- 利用者側からの要望・問題点
  - やりたいことに合致したプログラムがあるのか？
  - とりあえず試しに使ってみたい
  - アプリ開発活動、講習会情報をもっと知りたい

- 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形成

アプリを見つける：MateriApps ポータルサイト

https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp

- HPCI戦略プログラム「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)」でスタート
  - 東京大学物性研究所、自然科学研究機構 分子科学研究所、東北大学 金属材料研究所による運営
  - 現在は主に東京大学物性研究所が運営・管理
- 300+の物質科学アプリを紹介
- 電子状態、分子動力学などのカテゴリ別に検索
- 月間22000+ページビュー、6000+ユーザ(2021年度)

「やりたいこと」からアプリを検索

- 検索タグ：「カテゴリ」「特徴」「対象」「手法・アルゴリズム」

アプリ情報ページ

- 概要、公開度・ドキュメント充実度、並列化対応、物理量などを掲載

https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/339

	プレインストール済みの環境: 東京工業大学 学術国際情報センター 名古屋大学　情報基盤センター 九州大学　情報基盤研究開発センター 詳細は以下のページにあります。 http://www.hpci-office.jp/pages/appli_hphi
開発者	山地洋平(東京大学 大学院工学系研究科), 三澤貴宏(東京大学 物性研究所), 藤堂眞治(東京大学 大学院理学系研究科), 吉見一慶(東京大学 物性研究所), 河村光晶(東京大学 物性研究所), 川島直輝(東京大学 物性研究所), 井戸康太(東京大学 物性研究所)
対象となる物質・モデル	ハバード模型, ハイゼンベルグ模型, 近藤格子模型, キタエフ模型, キタエフ-ハイゼンベルグ模型, 多軌道ハバード模型
求められる物理量	比熱, 磁化率, 磁化, 基底エネルギー, 自由エネルギー, 構造因子
手法	Lanczos法, 熱的純粋量子状態, 厳密対角化, 完全対角化法
並列化対応	MPI/OpenMPハイブリッド並列に対応。 ver. 3.1より完全対角化法でGPGPUが使用可能。
関連アプリ	• mVMC

アプリを選ぶための参考情報の拡充

- アプリコンシェルジュ
  - 計算物質科学やアプリに関するよくある質問・要望にMateriApps開発チームが解答

現在アプリ掲載数 303件
お問合せ / アプリ掲載依頼
JP / EN
MateriApps
物質科学シミュレーションのポータルサイト
MateriApps について　レビュー募集
Google 提供
もっと詳しく探す

NEWS / 講習会・イベント　アプリ一覧　アプリ詳細検索　キーワード解説　レビュー　事例　アプリコンシェルジュ

便利です (MateriApps では検索画面で「… 続きを読む

第一原理計算の計算手法の違いがわからないのですが。。。

第一原理計算の計算手法について、最低限知っておくべきキーワードをまとめておきます。コーン・シャム方程式には,交換相関エネルギー汎関数と呼ばれる汎関数が含まれています。この汎関数の形を厳密に決める理論手法は知られていないの… 続きを読む

第一原理計算の基底の違いってなんですか？

実際の第一原理計算では、波動関数を表現する基底の数は有限に留めざるを得ません。基底をどのようにとるか、基底数をどこまでとるかにより、第一原理計算の速度・精度が大きくかわります。基底のとり方は、アプリの得意とする (または… 続きを読む

全電子計算法と擬ポテンシャル法の違いはなんですか？

全電子計算法と擬ポテンシャル法の違いは内殻電子をどう取り扱うかです。内殻電子をすべて考慮してコーン・シャム方程式を解く方法は全電子計算法と呼ばれています。一方、内殻電子の方程式は解かずに、フェルミ面に近い軌道 (価電子軌… 続きを読む

MateriAppsで第一原理計算のアプリをどう探したらいいですか？

MateriAppsでは,計算手法,対象となる物質,興味のある現象・物理量などの視点から「キーワード」が整理さ れており,各々のアプリには関連するキーワードがタグ付 けられています。これにより,ユーザは「やりたいこと」に… 続きを読む

テンソルネットワークって何ですか？何の役に立つんですか？

物性分野で登場するテンソルネットワークというのは、何らかの物理的対象を多数のテン

混晶の第一原理計算をしたいのですが

完全に不規則に配置する場合

単位胞（ユニットセル）で計算する方法と、スーパーセル近似を利用する方法があります。**ユニットセルで計算する方法**としては主に、virtual crystal approximation (**VCA**) とcoherent potential approximation (**CPA**) があります。**VCA**は構成元素のポテンシャルを組成比で混合して利用するという最も素朴かつ簡便な近似手法で、計算コストは通常の単位胞の計算と変わりません。その代わり、種々の物性値について精度はあまり期待できないと考えられます。全電子計算法でVCAを利用するには、組成比で加重平均した原子番号を指定し、対応するように電子数を指定する必要があります。一方、擬ポテンシャル法の場合は、適切に混合した擬ポテンシャルを用意する必要があります。多くの第一原理計算プログラムでは実験的隠れ機能のような扱いのようで、公式ドキュメントに明確な記述はないものの、関連メーリングリストなどで利用方法が説明されています。

- WIEN2k : https://www.mail-archive.com/search?l=wien@zeus.theochem.tuwien.ac.at&q=subject:%22%5C%5BWien%5C%5D+virtual+crystal+approximation%22&o=newest&f=1
- Quantum ESPRESSO: https://lists.quantum-espresso.org/pipermail/users/2009-May/012600.html

一方、**CPA**では電子散乱理論を基にランダム合金の有効ポテンシャルを決めます。このため、ポテンシャルを単純に混合するVCAより高い精度が期待できます。AkaiKKRに実装されていますが、2020年5月現在では格子歪みの影響は取り込めないようです。

スーパーセルを利用する方法はどの第一原理計算プログラムでも利用可能です。格子歪みの影響も自然に取り込むことができます。方法は単純で、可能な限り大きなスーパーセルを取り、ランダム

アプリを選ぶための参考情報の拡充

- レビュー記事
  - アプリのインストール方法や簡単な利用法、サンプルコードなどをアプリ情報のページに掲載

https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/652

とすればlocalの環境にインストールできる。

3. Pythonスクリプトの内容・使い方

今回作ってみたのはABO3系のcifファイルダウンロードといくつかの物質についての物理量をMaterials Projectから持ってくるPythonスクリプトである。スクリプトはここからダウンロードできる。もしくはターミナル上で

Bash
```
wget https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/wp-content/uploads/sites/3/2020/
```

を実行してもダウンロードできる。以下、簡単に中身の説明をしていく

・**1-4行目**：importとAPI keyの設定。5行目の”USER API KEY”のところにMaterials ProjectのAPI keyを入力する。

Python
```
1  from pymatgen.ext.matproj import MPRester
2  import os
3
```

アウトライン

- アプリを探す: MateriApps ポータルサイト

- アプリを試す：MateriApps LIVE!, MateriApps Installer

- アプリで得られたデータを公開する：
  物性研 データリポジトリ/ポータルサイト

アプリを試す: MateriApps LIVE!

- MateriApps LIVE!とは？
  - 物質科学アプリがインストールされるLinux OS
  - 仮想マシンVirtualBox版とdocker版
  - 主なターゲットシステムは個人PC
  - PCの環境に依存しにくい&アプリのインストール作業せずに試せる

    Y. Motoyama , K. Yoshimi, T. Kato, S. Todo, SoftwareX **20** 101210 (2022).

- 対応アプリ
  - 計算アプリ：abinit, AkaiKKR, ALAMODE, ALPS, CONQUEST, Feram, DCore, DSQSS, HΦ, LAMMPS, mVMC, OCTA, OpenMX, Quantum ESPRESSO, PHYSBO, SMASH, TeNeS, xTAPP など
  - 可視化ツール(VirtualBox版)：OVITO, ParaView, Tapioca, VESTAなど

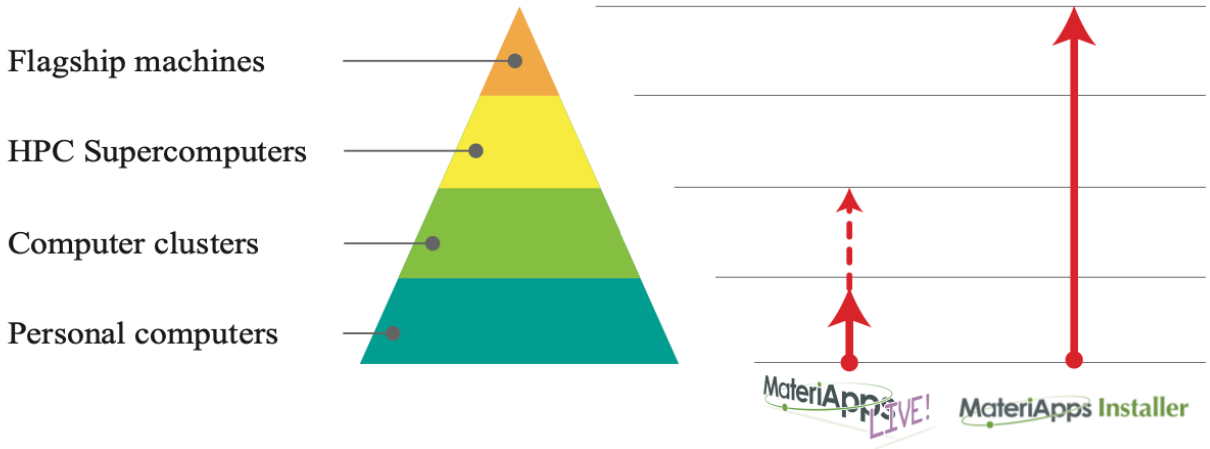
- 利用例
  - 大学などでの講義、アプリ講習会
  - 計算物質科学以外の研究者(実験家、企業の方など)
  - MateriAppsポータルサイトのレビュー記事

実演動画

アプリを使う: MateriApps Installer

- MateriApps LIVE!
  - ターゲットシステムは個人PC(~クラスタ)

- MateriApps Installer
  - 物質科学アプリをインストールできるスクリプト集
  - ターゲットシステムは個人PC~スパコン
  - 物性研スパコンへのプリインストールに使用



Y. Motoyama , K. Yoshimi, T. Kato, S. Todo, SoftwareX **20** 101210 (2022).

アウトライン

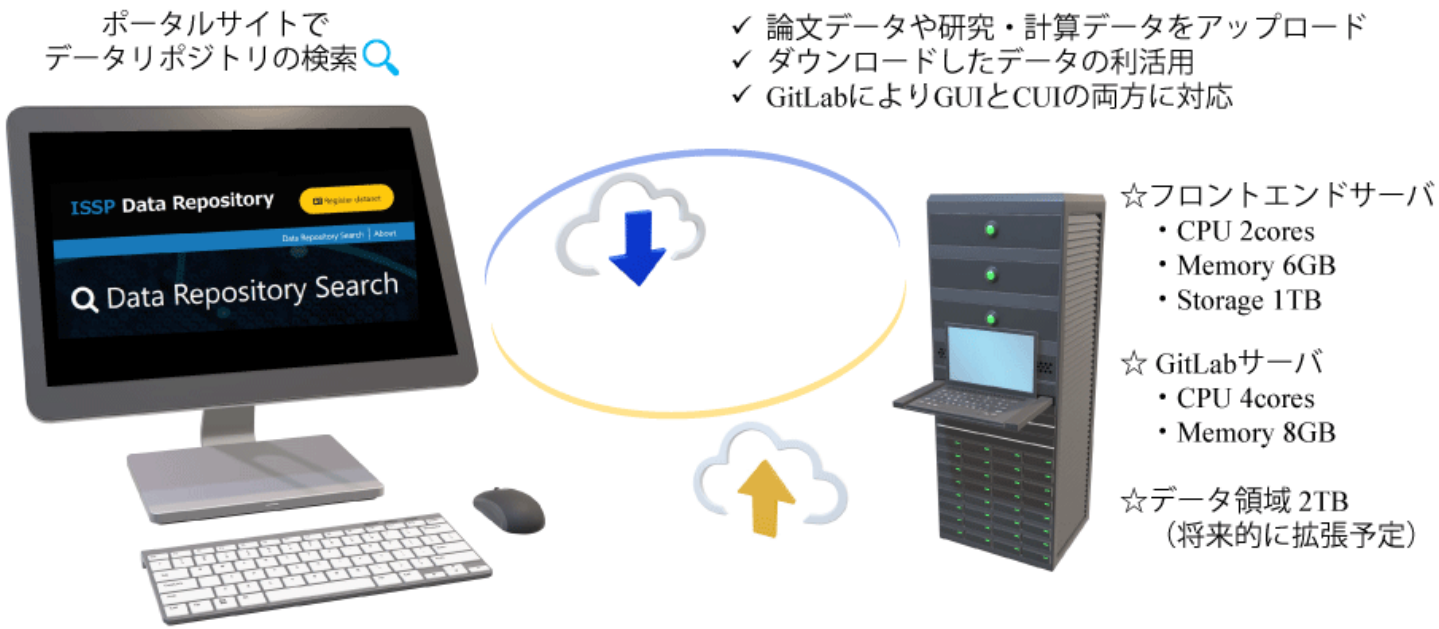
- アプリを探す: MateriApps ポータルサイト

- アプリを試す：MateriApps LIVE!, MateriApps Installer

- アプリで得られたデータを公開する：
  物性研 データリポジトリ/ポータルサイト

物性研究所データリポジトリ

- 物質科学における研究データの蓄積・利活用
  - データ管理システム： GitLab
  - データ検索：ポータルサイト



https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/guide/application_proposal/issp-datarepo

データ掲載の基本方針 (2023年2月時点)

- データの種類
  - ・物質・物性分野のデータ
  - ・論文などで公表された研究成果物
  - ・利活用が期待される未公表のデータ

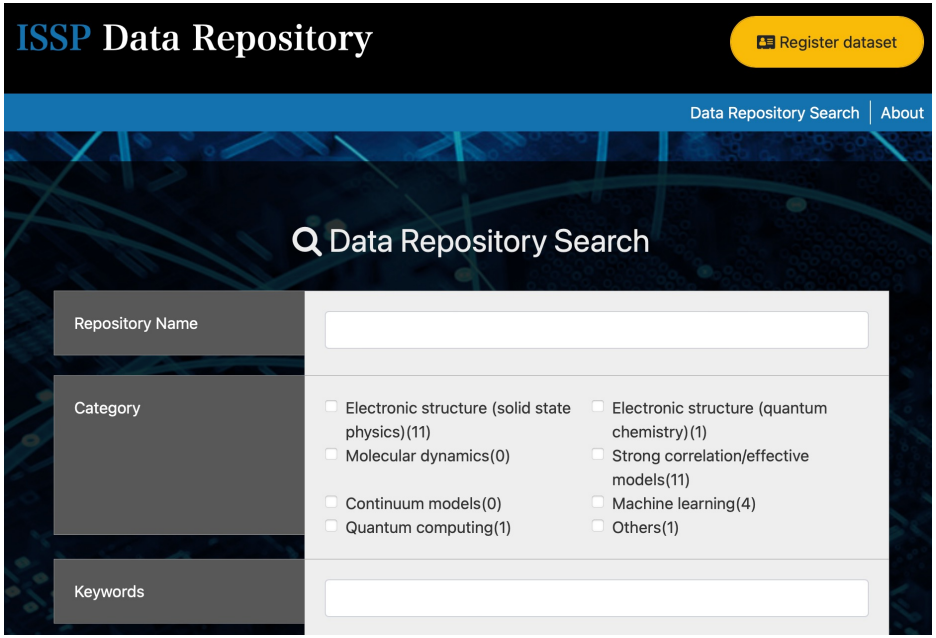
- データ容量・保管
  - ・2GBがデフォルト上限 (上限値に関しては要相談)
  - ・原則として登録データは可能な限り保管する(最低10年)

- データの公開/非公開
  - ・研究データを登録後すぐ公開するかはデータ提供者が決定
  - ・最長5年まで非公開として設定できるが、その後公開される

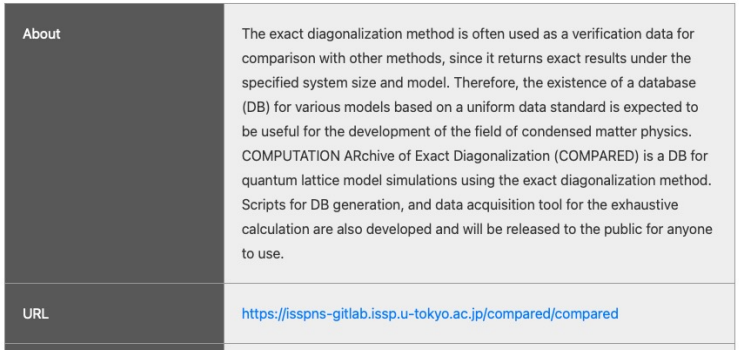
- 主な登録対象者
  - ・物性研大型計算機などのスパコン利用者

登録されたデータを検索: ポータルサイト

- リポジトリ名やカテゴリ検索が可能
  - キーワードや論文のDOI、作成者名等で絞り込める
  - 他リポジトリに掲載済でもポータルサイト登録は可能



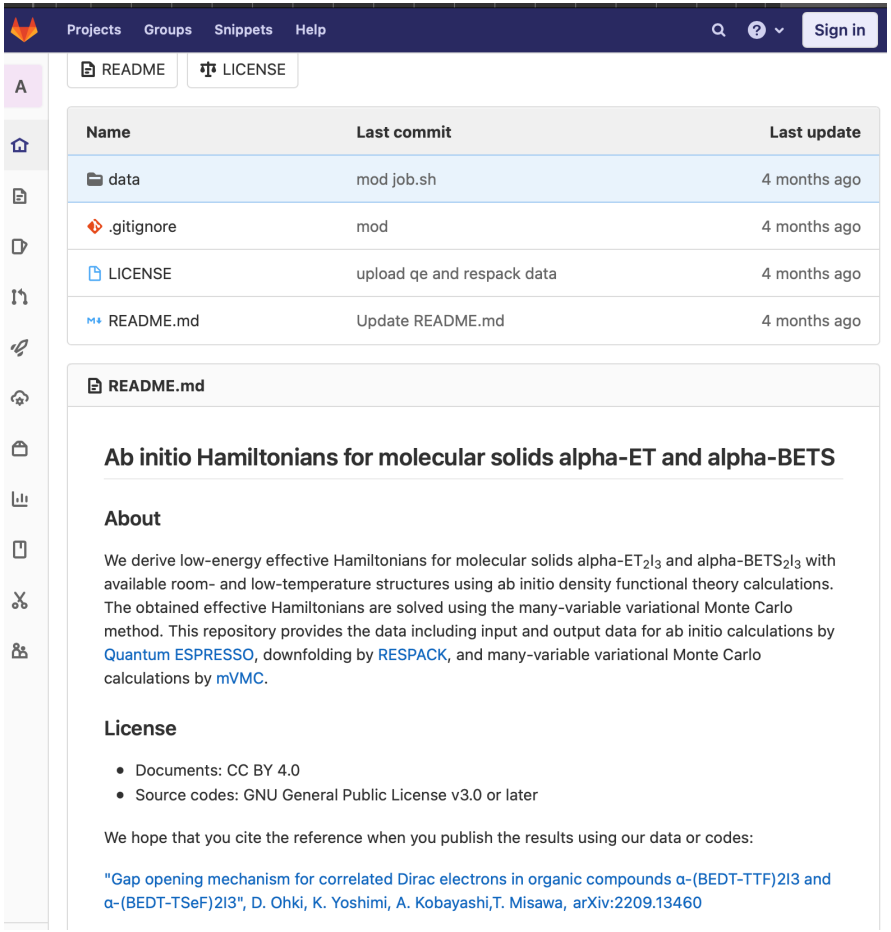
https://datarepo.mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp



https://datarepo.mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/repo/3

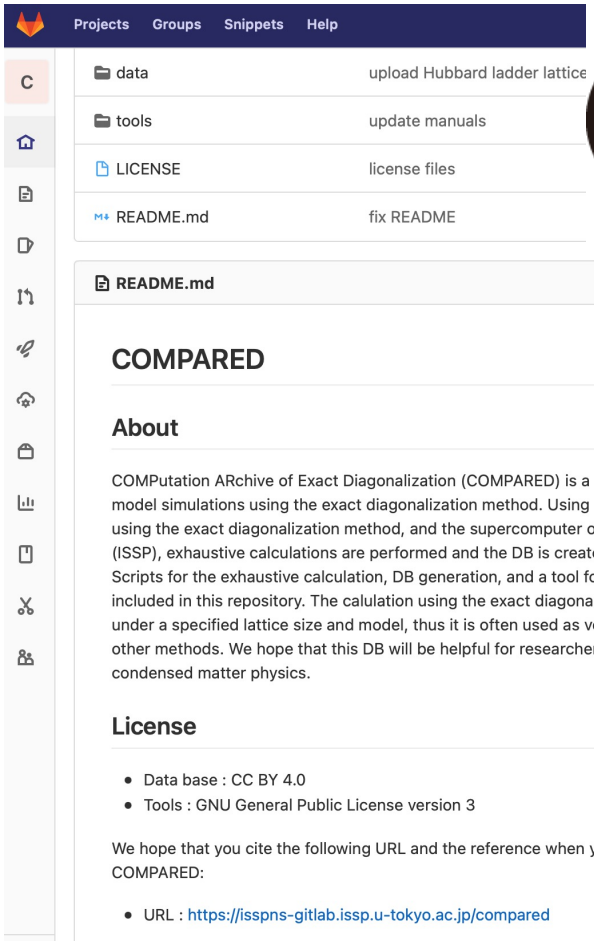
GitLab データリポジトリ

- 論文データ



https://isspns-gitlab.issp.u-tokyo.ac.jp/k-yoshimi/alpha-salts

- データベース



https://isspns-gitlab.issp.u-tokyo.ac.jp/compared/compared

まとめ

- アプリを探す: MateriApps ポータルサイト
  - 300以上のアプリ情報を掲載！
  - レビュー記事などによりアプリを試す環境の整備
  - 掲載してほしいアプリがある! → ma_at_issp.u-tokyo.ac.jpまで

- アプリを試す：MateriApps LIVE!, MateriApps Installer
  - MateriApps LIVE!: インストール作業なしにアプリを試す
  - MateriApps Installer:インストール作業をより簡便に

- アプリで得られたデータを公開する：
  物性研 データリポジトリ/ポータルサイト
  - 計算物性分野のデータリポジトリ
  - 興味のある方はdatarepo_at_issp.u-tokyo.ac.jpまで