

MS Modeling 3.1 リリースノート

本リリースノートを印刷物、CD、CD からダウンロードしたローカルディスク等から入手されている場合には、アクセルリスのウェブサイトも合わせてご参照ください。最新の情報を提供しています。

リリースノート目次:

1. 新モジュール・新機能 (p1)
 2. ライセンス関連 (p3)
 3. システム要件 (p5)
 4. インストール (p6)
 5. お問い合わせ (p6)
-

1. 新モジュール・新機能

MS Modeling 3.1 のリリースにより、Materials Studio シリーズに重要なアップグレードや新機能が導入されます。とりわけ、結晶解析、高分子、シミュレーション、量子力学の分野における性能が著しく向上しました。

1-1. MS Modeling バージョン 3.1 での新モジュール

Morphology: 結晶形態を結晶の原子構造からシミュレーションします。結晶構造の予測、テーラーメイド添加剤の開発、溶媒や不純物による影響の制御に力を発揮します。

Synthia: 高分子物性を速やかに予測する定量的構造物性相関ソフトです。ホモポリマーやランダムコポリマーに対し、輸送物性から機械特性に至るまで、あらゆる物性を予測します。

Forcite Plus: 最新の古典的 MM/MD ツールであり、エネルギー計算／構造最適化／動力学シミュレーションが可能です。単純な分子から二次元表面、結晶に代表される三次元周期性構造に至るまで、広い適用性を備えています。包括的な分析ツールにより密度変化のような基本物性の分析から双極子自己相関関数のような高度な物性の計算に至るまであらゆる性能を提供します。

NMR CASTEP: NMR 化学シフトや電場勾配テンソルを第一原理の密度汎関数理論(DFT)に基づいて予測します。有機分子からセラミック、半導体に至るまでのあらゆる材料の分子／固体／界面／表面の NMR シフトの計算に適用可能です。

1-2. MS Modeling 既存モジュールの機能強化

QSAR: プロジェクト間での QSAR モデルのやりとりや回帰レポートの記述子タイプの視覚化をはじめとするあらゆる操作性を向上しました。Atom ベース物性を新たに加えたことにより、Forcite と Vamp の個々の原子電荷を記述子として使うことが可能になりました。エラーレポートにエラーソースの詳細にリンクする機能をつけました。

CASTEP: ガンマ点(Γ -point)におけるフォノン振動数が、有限差分法に基づいて、任意の電子状態設定で計算可能になりました。これにより、線形応答理論に基づいた方法では計算できなかった系(金属およびウルトラソフト擬ポテンシャルを指定した系)での振動物性の計算を実現しました。仮想的結晶近似に基づいた置換型無秩序状態の計算が可能になりました。さらに、2 つの可視化ツールが新規に導入されました。STM イメージのシミュレーション機能と電荷密度差の計算機能です。

実行時擬ポテンシャル生成機能(on the fly pseudopotential generation, OTFG)が新たに実装されました。擬ポテンシャルデータは通常ファイルに保存され、実行時に読み込まれます。OTFG は、ユーザが指定した計算条件(functional 等)で擬ポテンシャルを CASTEP 実行時に生成する機能です。ユーザはこの機能を用いることにより、擬ポテンシャルの細かなチューニング(コア半径の再定義等)が可能になります。

DMol3: バンド構造／状態密度(DOS)／部分ならびに局所状態密度(Partial DOS, Local DOS)の視覚化を実現しました。

Forcite: 2D システム上でのエネルギー計算のサポートが可能になりました。

Polymorph: Cerius² Polymorph による計算結果の分析が可能になりました。

1-3. Materials Visualizer の性能向上

原子容積: van der Waals／溶媒／接触可能表面の視覚化が可能になりました。表面上の占拠／非占拠容積や表面積を計算します。

グラフ化: 最良適合の線をチャートに表示するオプション機能を備えました。重複点の抽出機能を追加し、スタディテーブルとのやりとりを向上しました。

集合ドキュメント: 新規のドキュメントタイプを導入し、複数の構造の重ね合わせを実現しました。

元素番号: VAMP、DMol3、Discover ジョブにおいて元素に番号表示が出来るようになりました。

チュートリアル: 新しいチュートリアルを数多く取り揃え、現行チュートリアルも改定しました。

1-4. プラットフォームサポート

MS Modeling 3.1 にてサポートするプラットフォームについては、システム要件(p5)を参照ください。

Amorphous Cell、Equilibria、Powder Indexing、Powder Solve は64ビットの Intel Itanium、Itanium 2 プロセッサ環境下の Red Hat Linux 上で作動できるようになりました。

さらに、QSAR は32ビットの Intel 互換性プロセッサ上の IRIX や Red Hat Linux でも作動可能です。

【注意】 なお、以下に対する公式なサポートは終了となります

- ・ Windows NT Workstation、Server および Server Enterprise Edition 4.0-SP6a
- ・ 32ビット Intel 互換性プロセッサ上の Red Hat Linux-7.2, 7.3, 8.0
- ・ Itanium、Itanium2 プロセッサ上の Red Hat Linux 7.2
- ・ SGI IRIX 6.5.12 から 6.5.17
- ・ HP Tru 64 UNIX-v4.0F, v4.0G, v5.1, v5.1A

Windows XP SP2

リリースの時点では、Windows XP SP2 における MS Modeling 3.1 の動作確認は未完了でした。しかしながら、初期テストの結果からは、クライアントとローカルサーバーソフトウェアは正常に作動するものと予測されています。Windows XP SP2 上で作動しているリモートサーバーにアクセスするには、デフォルトの Windows ファイアウォールの設定を以下のように変更してください。

1. Windows のスタートメニューから、コントロールパネル | Windows セキュリティセンター | Windows ファイアウォールを順に選択する。
 2. Exceptions タブを選択する。
 3. Add Port...をクリックする。
 4. Add a Port ダイアログで MS Modeling Gateway をポート名とし、適切な Gateway ポート番号を指定する。MS Modeling はデフォルトで 18888 ポートを Gateway に使用しています。
 5. Add a Port ダイアログの OK をクリックする。
 6. Exceptions タブの exceptions list に MS Modeling Gateway が表示されていることを確認する。
 7. Windows ファイアウォールダイアログの OK をクリックする。
-

2. ライセンス関連

MS Modeling ソフトは最新のアクセルリスライセンスパック、バージョン 6.3 と同梱にて提供しています。インストールの最中に既存のライセンスパックを検出した場合には自動的に最新版にアップデートされます。

Windows のアクセルリスライセンスソフトウェアは FLEXlm 8.4 にアップグレードされて、FLEXlm-12 エラーを修正しました

ライセンスパック 6.3 でサポートされる製品ライセンスは Windows 上の FLEXlm 8.4 を使用するようアップグレードされています。これによりファイアウォールや他のセキュリティソフトがインストールされた Windows XP における FLEXlm 12 エラーが解決されます。

DOS Windows の制御に起動隠しファイルを使用するとウイルスチェッカーに警告される可能性があります

ウィルススキャナーには、起動隠しファイルとしての要素をもつファイルをウィルス感染の疑いがあると判断するものがあります。ライセンスパック 6.3 には run.exe というファイルが含まれ、システムコール経由でコマンドライン上のプログラムを実行している最中に起動表示される DOS ボックスを隠します。

スキャナーに検出された場合には、プログラムを消去しないでください。起動隠し属性を有するのみで、ウィルスには感染していません。万が一ファイルを消去した場合には、まずライセンスパックをアンインストールし、次にアクセルリスソフトウェア CD 上の lp630_setup.exe プログラムを実行することにより再インストールできます。ライセンスパックは以下のウェブサイトからもダウンロード可能です。

http://www.accelrys.com/support/licence_info.html

Bourne/Korn シェル環境設定サポート

UNIX の Bourne/Korn シェルユーザー向けに新規環境設定スクリプトをご用意しています。これは msi_lic_profile と呼ばれ msi_lic_cshrc スクリプトを csh 環境で使用するのと同様に使用可能です。これらのスクリプトを使用してライセンス環境を設定するシンタックスは以下の通りです

```
csh:      source  $MSI_LIC_PACK_DIR/msi_lic_cshrc
sh:      $MSI_LIC_PACK_DIR/msi_lic_profile
```

UNIX ライセンスパックインストーラーの制限

ディスク上に2テラバイト以上の空きがある場合、UNIX ライセンスパックの lp_setup インストーラーからディスクの空き容量が不足しているというメッセージが表示されます。このメッセージは無視して差障りありません。"y"と入力し、インストールを続行して下さい。

UNIX 上での Insight II 2000.1/2000.2 の実行時間環境の競合

Insight II 2000.1 もしくは 2000.2 を使用している場合には、インストールされる Insight II 2000.1 中に存在する以下のファイルを削除もしくは名前の変更をする必要があります。これにより、作動環境においてアクセルリスライセンスパックの全てのアプリケーションが正しいバージョンの DSO を使用していることを確認することができます。ご質問やサポートについては、アクセルリスサイエンティフィックサポートへご連絡ください。

```
$BIOSYM/irix6m3/biosymso/libls_license01.so
$BIOSYM/irix6m4/biosymso/libls_license01.so
$BIOSYM/irix6m4/biosymso/libls_license01_64.so
```

DM MCE 2.1/2.2 使用環境ではこれらのファイルによりエラーメッセージが表示されることがあります

```
ERROR: #6 Invalid Duplication Mode
```

このエラーはクライアントおよびサーバーのインストールで他のバージョンのライセンスパックを使用することでも生じます。

IA64 AS 3.0 で FLEXlm ツールが GLIBC エラーを表示

IA64 AS 3.0 上で32ビット Linux ライセンスツールを実行している際に以下のようなエラーメッセージが表示された場合には、

```
lmstat
lmstat: /lib/ld-linux.so.2: version 'GLIBC_2.1.1' not found (required by
/usr/i386-glibc22-linux/lib/libc.so.6)
lmstat: /lib/ld-linux.so.2: version 'GLIBC_2.1.3' not found (required by
/usr/i386-glibc22-linux/lib/libc.so.6)
lmstat: /lib/ld-linux.so.2: version 'GLIBC_2.2' not found (required by
/usr/i386-glibc22-linux/lib/libc.so.6)
```

ライセンスツールを実行する前に LD_LIBRARY_PATH に /lib prior を追加することにより問題が解消されます。

```
setenv LD_LIBRARY_PATH "${LD_LIBRARY_PATH}:/lib"
```

```
lmstat
lmstat - Copyright (c)1989-2003 by Macrovision Corporation. All rights
reserved.
Flexible License Manager status on Mon 10/4/2004 01:40
```

```
License server status: 1715@lic_server
License file(s) on lic_server:
/home/accelrys/License_Pack/licenses/msilicense.dat:
```

```
    lic_server: license server UP (MASTER) v8.4
```

```
Vender daemon status (on lic_server):
```

```
    msi: UP v8.4
```

その他ライセンス情報

ライセンスに関するドキュメンテーションの詳細についてはソフトウェアと同梱されているアクセルリスライセンスガイドもしくは下記ウェブサイトの最新情報をご参照ください。

http://www.accelrys.com/support/license_info.html

3. システム要件

クライアントシステム要件

クライアント PC の最低限のシステム要件は以下の通りです

- ・ サポートされているオペレーションシステム:
 - Windows 2000 Professional – SP2, SP3, SP4
 - Windows XP Home Edition – Retail and SP1
 - Windows XP Professional Edition – Retail and SP1
- ・ Intel Pentium® III もしくは 500MHz 以上で作動する互換製品
- ・ 標準の Microsoft 2つボタンマウス (3つボタンもしくはホイール付2つボタンマウスを推奨)
- ・ 800×600 の解像度のディスプレイ (1024×768 を推奨)
- ・ 128 MB RAM (256 MB RAM 推奨)
- ・ 完全にインストールするにはハードディスクに 500 MB の空き容量
- ・ 16 ビット/65536 色

MS Modeling でより満足のいく結果を得るには、特にクライアントソフトウェアに関しては上記の最低限要件より高スペックのものを推奨します。クライアントソフトウェアと同じ PC 上でサーバーソフトウェアをローカルで実行する際には、特に顕著に表れます。

以下の事項にご配慮いただくと、ソフトウェアの操作性は格段に向上されます。

- ・ メモリーの RAM が上がるほど向上します。
- ・ CPU 速度が速いほど向上します。
- ・ OpenGL graphics カードの性能でグラフィックス性能が格段に変わります。
- ・ ディスプレイの解像度が上がるほどドキュメントやダイアログウィンドウの操作性やディスプレイが向上します。
- ・ マウスは必ずしも必要ではありませんが、3つボタンマウスもしくはホイール付2つボタンマウスを推奨します。複雑な構造の操作性を改善し、MS Modeling の利便性が向上します。

例えば、512 MB RAM、1.0 GHz CPU、1024×768 解像度のスクリーン、高性能 OpenGL graphics カードを装備した PC をご用意いただければ、高い性能を実現します。現在 PC ハードウェアの性能は目覚ましい発展を遂げているので、新製品のデスクトップ PC ならこれ以上の性能が十分に得られると考えられます。

サポートされるサーバープラットフォーム

MS Modeling でのクライアントサーバー体系は適応性があるので、UNIX および Linux サーバーも Windows 2000/XP サーバーと同様に使用できます。サポートされるプラットフォームは、

- ・ Windows サーバー
 - Windows 2000 Professional – SP2, SP3, SP4
 - Windows 2000 サーバーの全てのエディション – SP2, SP3, SP4
 - Windows 2003 サーバーの全てのエディション
 - Windows XP Home Edition – Retail and SP1
 - Windows XP Professional Edition – Retail and SP1
- ・ UNIX (Linux を含む) サーバー
 - Tru64 5.1B 上で作動する HP EG/GS AlphaServer
 - SGI IRIX – 6.5.18 – 6.5.24
 - Red Hat Linux – 9.0, Red Hat Enterprise Linux AS, ES, WS 2.1 および 3.0 (Intel IA32 互換製品)
 - Red Hat Enterprise Linux AS, WS 2.1 および 3.0 (Intel IA64 互換製品)

詳細情報

Windows 2000/XP、UNIX、Linux のシステム要件や推奨性能の詳細は MS Modeling CD-ROM 中の README_MS_Modeling.htm ファイルからリンクしている "System requirements and recommendations" トピックもしくは MS Modeling のホームページでご確認いただけます。

4. インストール

MS Modeling のクライアント・サーバー体系はフレキシブルであるため、状況に応じてインストール方法を変えることが可能です。単純なグラフィカルクライアントである Materials Visualizer を PC にインストールする場合や MS Modeling を異なる Windows 2000/XP、UNIX、Linux サーバーにいくつか特定の要素をインストールする場合など、個々に合わせたインストールが可能です。

一台の PC にインストールする場合には、MS Modeling CD-ROM の説明に従いインストールしてください。全種類のインストール手順、特により複雑なものについては MS Modeling CD-ROM の README_MS_Modeling.htm ファイルからリンクしている詳細説明をご参照ください。

【注記】:既に他のバージョンの MS Modeling がインストールされている場合には、新バージョンのインストールの前に全てのライセンスサーバーを停止し、MS Modeling のアンインストールを行なってください。MS Modeling CD-ROM 上の README_MS_Modeling.htm ファイルからリンクしているインストール説明の”Removing MS Modeling”トピックをご参照ください。

5. アクセルリスへのお問い合わせ

バグに関するお問い合わせやご意見は直接 e-mail にて support-us@accelrys.com (米国内)、support-eu@accelrys.com (欧州)、support-japan@accelrys.com (日本・アジア)までご連絡ください。

最終アップデート:2004 年 10 月4日 (日本語版作成:2004 年 11 月 8 日)
Copyright© 2004, Accelrys, Inc. All rights reserved.