



アクセリス 株式会社
〒105-0003 東京都港区西新橋 3-3-1
西新橋 TSビル 11F
Tel:03-3578-3861 Fax:03-3578-3873
<http://accelrys.co.jp/>

Materials Studio 4.2リリースノート

ご注意

本リリースノートを印刷物やCDから直接に、あるいはローカルディスクにロードしたものからお読みの場合は、より新しい情報をアクセリスのウェブサイトから入手できる場合がありますのでそちらもご参照ください。

内容

[新規事項](#) | [ライセンス](#) | [システム要件](#) | [インストール](#) | [修正バグと既知事項](#)
[ワークロード・マネージメント・システム](#) | [Accelrysへの連絡](#)

Materials Studio4.2での新機能

Materials Studio™ はバージョン4.2 のリリースにより柔軟性を大幅に強化されました。このバージョンで多くの重要な新しい機能の追加や既存機能の強化が多く実現されています。特に、4.2ではより多くの計算モジュールやビジュアライザー機能がスクリプト化 (MaterialsScript API) できるようになりました。また、Gaussianインターフェースが追加され、Forciteの解析機能が全て移行を完了、Reflexでは結晶化度を予測するツールが、DPDではメソ構造を構築するビルダーツールが加わり、さらにナノテクノロジー・コンソーシアム・ツールが一層強化されています。

4.1以降の新しいプロダクト

Gaussian Interface®. Gaussian 2003とMaterials Studio Visualizerを統合するインターフェースが使えるようになりました。インターフェースから、一点エネルギー、構造最適化やプロパティ計算が、様々な理論レベルや基底関数を用いて計算できます。解析ツールでは、原子電荷、分子軌道、振動スペクトルなど様々な表示ができます。計算結果は、そのままMaterials Studioの他モジュールで使う事ができます。例えば、Forciteで構造最適化した分子を初期構造にして精度の高いG2計算や、逆にForciteで使うCoulombパラメータに、HFで計算した電荷を使う事ができます。

Adsorption Locator. ナノテクノロジーコンソーシアムで開発されたソフトが、コンソーシアムメンバー以外の方にご提供できるようになりました。Adsorption Locatorは、表面上に物理吸着した分子の最安定構造や複数の分子の分布を計算します。例えば、吸着量によって構造やエネルギーの変化を予測したり、異なる分子がどの様に共吸着を予測するために使えます。

Nanotechnology Consortium. このリリースではナノテクノロジーコンソーシアムのメンバー限定として、以下の機能を搭載しています: ONETEP、QMERA、GULPの表面計算。ナノテクノロジーコンソーシアムに関する詳しい情報は以下から入手できます。

http://www.accelrys.com/materials/nano/nano_consortium/index.html

Materials Studio モジュールの強化点

DMol³. Dmol³の全てのタスクと解析機能がPerlスクリプティング (**MaterialsScript API**) でアクセス出来るようになりました。スクリプトを使い、繰り返しの作業を自動化したり、複数のステップからなる複雑なワークフローを作る事ができます。**MaterialsScript API**は、インターフェースからアクセスできる全てのパラメータをコントロールする事ができます。

DPD. 新しいメソ構造ビルダー (template builder) によりDPD計算の初期構造を設定できる様になりました。この機能はスラブ、ロッド、球体、チューブやシェル構造を使い、整った二重層やミセル構造を作る事ができます。

Forcite Plus. 揺動物性、散乱、空間配向、時空間相関解析、回転相関時間、速度相関関数などが解析機能に追加されました。また、角度や距離の様に関連する解析に重心を取り扱う事ができる様になりました。スクリプトから速度の設定や出力が可能になりました。**MaterialsScript API**に新しいTask based approachが追加されました。以前のスクリプトフォーマットにも対応しています。

GULP. Dreiding力場のAtom typeをインターフェースから自動あるいは手動で設定する事ができる様になりました。光学特性の解析機能とエキスパートユーザーが構造や物性で力場パラメータを計算するforcefield fitting engineが追加されました。

Polymorph. PolymorphはこのバージョンでMaterialsScript APIからアクセスする事ができる様になりました。これによって自動化、予測方法のカスタム化や他のスクリプト化できるモジュールと統合する事ができます。

Reflex. 新しくReflexに粉末X-線データから結晶化度を計算する機能が追加されました。Powder refinementの機能がMaterialsScript APIからアクセスできる様になりました。

Reflex QPA. QPAの機能がMaterialsScript APIからアクセスできる様になりました。

Materials Visualizer の強化点

Scripting. Polymer builder、crystal builder、vacuum slab、surface builder、cleave surface tools、atom volumes and surfaces tools と volumetric tools が MaterialsScript APIからアクセスできる様になりました。

Usability. 容量の大きなファイルを開いたり閉じたりする時間が著しく短縮されました。

プラットフォームサポート

Materials Studio サーバーのサポートに関して以下の構成が追加されました：

- Windows Server 2003 SP2:
 - Web
 - Standard
 - Enterprise
 - Datacenter
- Red Hat Enterprise Linux WS, ES and AS 4.0 (Update 5) on x86 processors and clusters thereof.
- Red Hat Enterprise Linux WS, ES and AS 4.0 (Update 5) on x86-64 processors and clusters thereof.
- Red Hat Enterprise Linux WS and AS 4.0 (Update 5) on Itanium processors

PBS Pro - version 8.0およびLSF ver.7.0のキューイングシステムサポートが追加されました。

以下のサーバーのサポートが終了しました：

- Windows Server 2003 SP1:
 - Web
 - Standard
 - Enterprise
 - Datacenter
- SGI IRIX - 6.5.26 to 6.5.30
- HP Tru64 UNIX v5.1B
- Red Hat Enterprise Linux WS, ES and AS 4.0 (Update 3) on x86 processors and clusters thereof.
- Red Hat Enterprise Linux WS, ES and AS 4.0 (Update 3) on x86-64 processors and clusters thereof.
- Red Hat Enterprise Linux WS and AS 4.0 (Update 3) on Itanium processors.
- SuSE Linux Enterprise Server 9 SP3 on Itanium processors, for standalone execution of CASTEP, DMol3, Discover, and ONETEP only (no gateway support)

以下のキューイングシステムのサポートが終了しました：

- Generic NQS, v3.50.9
- PBS Pro 7.1
- LSF v6.2

License Pack 7.3 の新規事項

Materials Studio の本バージョンではAccelrys License Packの新バージョン、**version7.3**、が適用されます。インストール中に、既存のバージョンのライセンスパックが検出された場合、自動的に新しいものに更新されます。

Wait functionality

Materials Studio 4.1から、ゲートウェイコンソールにウェイト機能が加わりました。ウェイト機能を動作させるオプションが備わり、実行を停止しエラーを返す代わりに、ライセンスが有効になるまでサーバーコードをウェイト状態にすることが出来ます。ライセンスウェイト機能を有効にする手順のより詳しい情報は、Materials Studioのヘルプ中の"**Gateway administration**"トピックス、あるいはAccelrys License Packヘルプ中の"**Materials Studio licensing**"トピックスを参照下さい。

Multicore licensing

ゲートウェイコンソールにマルチコアハードウェアのサポートが追加されました。CPU辺りのコア数を設定することが出来、この情報はパラレル処理時のライセンス数を正しく計算するために使われます。マルチコアハードウェア向けにゲートウェイを設定する方法については、Materials Studioのヘルプ中の"**Gateway administration**"トピックスを参照下さい。

保守期間中のユーザー

ライセンスのインストールは不要：保守期間中のお客様で既にライセンス **ver.4.1** が稼動している場合、新しいライセンスは必要ありません。最新の**Materials Studio ver.4.2** をインストールしていただき、既存のライセンスを使用する様に設定していただければ起動します。アクセルリスは、ライセンスサーバーを最新のLicense Packにアップグレードした後に**FLEXlm** ライセンス・マネージャーの再起動し確実に最新のライセンス・マネージャーを起動させる事を奨励しております。ライセンス・マネージャーの再起動方法は、Accelrys License Pack help のドキュメントに操作手順があります。

テンポラリー・ライセンスのインストール：新しくリリースされた製品やお持ちでない製品にご興味があれば、テンポラリー・ライセンスをご使用していただけます。テンポラリー・ライセンスは、メディアと一緒にお送りしたパスワード使っていただくか、アクセルリス・サポートからご入手できます。テンポラリー・ライセンスの詳細なインストール方法は、**MS4.2**のオンライン・ヘルプドキュメント「**Installing a temporary license**」にあります。

新しいユーザー若しくは追加で新しい製品をこのリリースで追加するユーザー

テンポラリーライセンスのインストール：新しくリリースされた製品やお持ちでない製品にご興味があれば、テンポラリー・ライセンスをご使用していただけます。テンポラリー・ライセンスは、メディアと一緒にお送りしたパスワード使っていただくか、アクセルリス・サポートからご入手できます。テンポラリー・ライセンスの詳細なインストール方法は、**MS4.2**のオンライン・ヘルプドキュメント「**Installing a temporary license**」にあります。パスワードもしくはライセンスファイルをお持ちでない場合は、**Materials Visualizer** の **auto trial** で**30日間 Visualizer** の機能をお試しいただく事も可能です。**Visualizer**以外の**Materials Studio**の機能を使用するには、パスワード、テンポラリーライセンスか正規ライセンスが必要です。トライアルを始めるには**MS4.2**のオンライン・ヘルプドキュメント「**Materials Visualizer auto trial licensing**」をご覧ください。トライアルを始めてから**30日**後には新たなトライアルを開始できなくなります。トライアルの延長か、テンポラリー・ライセンスを入手するにはアクセルリスに直接ご連絡してください。

ライセンスファイルの発行：購入された製品の正規ライセンスを発行するには、アクセルリスに詳細なマシン情報を送っていただく必要があります。詳細は、**Accelrys License Pack** のヘルプドキュメントかアクセルリスへお問い合わせください。

ライセンスのインストール：入手されたライセンスファイルをご使用するには、正しくインストールする必要があります。詳細は、詳細は、**Accelrys License Pack** のヘルプドキュメントかアクセルリスへお問い合わせください。

リモートライセンスの使用：PC と NFSを使用していないLinuxのGatewayは、TCP/IPを使ったリモートライセンスの設定が必要です。詳細は、**Accelrys License Pack** のヘルプドキュメントかアクセルリスへお問い合わせください。

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 最小構成要件：

- Intel® Pentium® III or compatible processor running at 1 GHz or greater
- Standard Microsoft® 2-button mouse (3-button mouse or 2-button wheel mouse strongly recommended)
- 800 x 600 display resolution (1024 x 768 recommended)
- 256 MB RAM (512 MB recommended)
- 500 MB disk space for a complete installation
- 16-bit / 65536 colors

必要なハードディスクスペースは、インストールする構成により、Windows OS上で380～500 MB となります。システムの更新が必要な時はさらにディスクスペースが要求されます。より使い勝手を良くするには、特にクライアント側では上記の最小構成よりかなり十分なスペックのシステムをお使いになることを強くお勧め致します。サーバーソフトを、同じPC上でクライアントソフトと同じようにローカルで走らせる場合は特にこの点にご留意ください。

下記の点への対処で、より快適なソフトウェアのご利用が可能となります：

- Memory - RAM は多ければ多いほど。
- CPU スピード - 速ければ速いほど、快適な操作環境となります。
- 高品質 OpenGL グラフィックカードにより大きなグラフィック性能に差が出ます。
- ディスプレイの解像度が高いほど、ドキュメントやダイアログウインドウの操作性が向上します。
- 必ずしも必須ではありませんが、3 ボタンマウス、あるいは2 ボタンホイールマウスを推奨します。複雑な構造の操作が容易になり、Materials Studioでの作業効率と快適性を高めます。

一例として、1 GB RAM、2.0 GHz CPU、解像度 1024 x 768、高性能 OpenGL グラフィックカードを備えたPCで良好なパフォーマンスが得られます。PC ハードウェアの性能は日々急速に向上していますので、最近の新しい普通のデスクトップPCでもこれらより遙かに高い性能を持っているはずです。

サポートOS:

- Windows 2000 Professional - SP4 Rollup 1
- Windows XP Professional - SP2

32bit バージョン以外は、サポートしておりません。

サーバープラットフォーム

Windows

Hardware 最小構成要件：

- Intel® Pentium® III or compatible processor running at 1 GHz or greater
- 256 MB RAM (512 MB recommended)
- 256 MB disk space

上記の構成はサーバーを運用する上での最小構成です。**Materials Studio**を運用するための最適な環境を用意するためには、クライアントシステム要件とアクセルリスが奨励する構成をご覧ください。**Windows** サーバー上での**Materials Studio**の使用にはグラフィックス関連の構成要件はありません。

サポートOS

- Windows 2000 Professional - SP4 Rollup 1
- Windows 2000 Server, all editions - SP4 Rollup 1
- Windows 2003 Server, all editions - SP1 and R2
- Windows XP Professional - SP2

IA32 Linux

Hardware 最小構成要件：

- Intel Pentium III or compatible (x86, x86-64) processor running at 1 GHz or greater
- 256 MB RAM (512 MB recommended)
- 520 MB disk space

上記の構成はサーバーを運用する上での最小構成です。より計算速度の速いCPUとより大きなメモリーは真剣な計算を行うには必須です。**Windows** サーバー上での**Materials Studio**の使用にはグラフィックス関連の構成要件はありません。

サポートOS

- x86 (32bit)
 - Red Hat Enterprise Linux AS, ES, and WS - 3.0 (update 9) and 4.0 (update 4 and 5)
 - SuSE™ Linux Enterprise Server - 9 (SP3) and 10 (base and SP1)
- x86-64 (64bit)
 - Red Hat Enterprise Linux AS, ES, and WS - 4.0 (update 4 and 5)
 - Red Hat Enterprise Linux 5
 - Red Hat Enterprise Linux Desktop 5
 - SuSE™ Linux Enterprise Server - 9 (SP3) and 10 (base and SP1)

Accelrysでは、**Materials Studio 4.2**の32bitアプリケーションが正常にx86-64 プロセッサ上の64bitバージョンのRed Hat Enterprise Linux4.0 (update 4 and 5)とSuSE Linux Enterprise Server - 9 (SP3) and 10で起動する事を確認しております。

追加情報

Windows 2000/XP, UNIX, および Linux 系でのシステム要件に関してのより詳しい情報は、**Materials Studio** ヘルプシステム中の"**System requirements and recommendations**" トピックスにあります。この情報はまた **Materials Studio** CD-ROM、あるいは **Materials Studio** ホームページ <http://www.accelrys.com/products/mstudio/index.html> にある **README_Materials_Studio.htm** ファイルからも入手できます。

インストール

Materials Studio の柔軟なclient/server 構成は、単にグラフィカルクライアントの**Materials Visualizer**

をPCにインストールするか、**Materials Studio** のサーバーコンポーネントを別の**Windows 2000/XP, UNIX,**あるいは **Linux** サーバー機にインストールするかによって幾つかの異なったインストールが出来るようにしています。

単一のWindowsベースのPCにインストールするには、単に**Materials Studio**のCD-ROMをCDまたはDVDドライブに入れ指示に従って操作するだけです。全てのインストール手順、特により複雑なインストールの場合には**Materials Studio** のCD-ROMのREADME_Materials_Studio.htmファイルからリンクされた詳細な手順書を参照してください。

Note. もし他のバージョンの**Materials Studio** が既にインストールされている場合は、新しいバージョンをインストールする前に実行中の全てのライセンスサーバーを停止させて**Materials Studio** を削除してください。**Materials Studio** のCD-ROMの README_Materials_Studio.htmファイルからリンクされている"Removing Materials Studio "トピックを参照してください。

Tip. **Materials Studio** クライアントはハイパースレッディング機能を有するマシンで実行するように構成されています。もしハイパースレッディング機能マシンにマニュアルで別々のサーバー構成をインストールする場合は、インストールの前にハイパースレッディングを停止しておくことを**Accelrys** は強くお進めします。

ワークロード管理システム

Accelrys は、Linux OS上の**Altair®** の**PBS Professional™** ワークロード管理システムをサポートします。**PBS Professional** の製造元である **Altair Engineering** は、**Materials Studio** インストール CD-ROM に 30 日間の試用版を搭載し、**Materials Studio** ユーザーへの大幅な割引を提供します。

PBS Professional 8.0は、**OpenPBS** にあった幾つかのバグを修正した、商用版の製品です。さらに、**PBS Professional 8.0**では下記のような幾つかの優位点が有ります。

- 進んだ柔軟なキューシステムを伴う、工業をリードするスケーラビリティ
- リソーススペースのスケジューリング – 全リソース使用可能時の**Job**実行
- サーバースフトフェイルオーバー – プライマリーサーバー停止時の、実行中やキュー上の**Job**、ユーザーなどを中断しないセカンダリーサーバーによる交代
- 自動**Job**リカバリー – ネットワーク上のどこにおける破壊**Job**もリスケジュール

PBS Professional インストーラーは、**Materials Studio** インストールCD-ROMの \PBS Pro フォルダ中にあります。また、**PBS Professional** のQuick Start, User Guide および Administrator Guid PDF ファイルもそこにあります。

PBS Professional 8.0 の試用版の利用には下記のパスワードが必要です：

T-00128-08127-1087-9t9TvQ3R7i-5IL-agt-Acdelrys

PBS Professional 8.0 の購入の場合は、下記にご連絡ください。

日本窓口：アルテアエンジニアリング株式会社
エンタープライズコンピューティング事業部 担当：中村
TEL: 03-5396-1341 FAX: 03-5396-1851
Email: pbs@altairjp.co.jp

バグ修正点 および 既知事項

DMol³の変更点

DMol³バージョン4.2のアルゴリズムには二つの変更点があります。この二つの変更は、周期境界条件モデルのトータルエネルギーに影響します。過去の計算と比較すると、マイクロハートリー (micro-Hartrees) からミリハートリー (milli-Hartrees) 程度です。この変更により旧バージョンでの結果が無効となるわけではありませんが、新しい方法での結果と直接比較することは出来ません。

トータルエネルギーを旧バージョンの計算と同一の設定で計算できる様に、DMol³ バージョン4.2には新しいキーワードが追加されました。過去に行った計算と比較する場合や過去のプロジェクトを継続するためには、旧バージョンの設定で計算する事を推奨いたしますが、新しいプロジェクトには新しいアルゴリズムを推奨しています。

旧バージョンでの互換性

アクセルリスはトータルエネルギーの数値が旧バージョンで得られた計算結果と互換性を持つ必要性を認識しております。新バージョンは、より高精度の計算結果を与えると信じておりますが、旧バージョンのエネルギー値を再現できるキーワードを追加いたしました。

DMol³ 4.1を用いて計算されたエネルギーと互換性のある計算を行うには以下のキーワードをご使用ください。

`ms41_compat on`

DMol³ 4.0で計算されたエネルギーと互換性のある計算を行うには以下のキーワードをご使用ください。

`ms40_compat on`

キーワードを使用するには、通常通りに計算をインターフェースで設定し、計算を開始するときにRunボタンではなくFiles | Save files で入力ファイルを保存してください。入力ファイルを開き上記のキーワードの何れかをファイルの任意の行に追加してください。入力ファイルを保存しFiles | Run filesで計算を開始します。

電荷を帯びた単位格子を扱うアルゴリズムの改善

電荷を帯びた単位格子を扱うアルゴリズムが改善されました。旧バージョンでは、射影計算時に僅かな電荷の誤差が蓄積されていきました。これは、原子グリッド空間における大きな半径上で生じるエイリアシングに起因したものでした。新しいアルゴリズムは、数値積分を補正するために経験的な補正関数を追加しました。単位格子の電荷は、Jelliumモデルを使い補正されます。この変更をしないと、Jelliumの電荷のため真空ポテンシャルが一定にならず、トータルエネルギーの誤差となります。この変更は、以下のコマンドで直接無効にすることができます。

`defeat_jelly_corr`

あるいは、過去の計算と互換性を持たせるキーワードで無効にできます。

`ms41_compat on`

もしくは、

`ms40_compat on`

補助電荷密度の構築の詳細は以下の論文を御参照下さい。

J. Phys. Chem. **100** (1996) 6107.

全ての単位格子を扱うアルゴリズムの改良

静電相互作用に関する総和計算アルゴリズムに欠陥があり修正が施されました。これは電荷を帯びた単位格子と中性の単位格子の両方に適用されます。この変更は上記で説明した電荷を帯びた単位格子の場合の改善にさらに追加されたものです。この変更により、トータルエネルギーの数値が以前のバージョンで得られる結果と僅かに異なる様になりました。この問題は高精度の弾性率計算テストの過程で発見されました。

この変更は、以下のコマンドで直接無効にすることができます。

Defeat_ewald_rev

あるいは、過去の計算と互換性を持たせるキーワードで無効にできます。

ms41_compat on

もしくは、

ms40_compat on

この二つのアルゴリズムの変更は、**DMol³ 4.2**で初めて提供された改善です。旧バージョンの**DMol³**では、周期境界モデルのトータルエネルギーの計算値が多少劣った結果であったといえます。現在までに行ったテストでは、構造最適化、振動モード、電荷などの物性にはほとんど影響が無いという結果が出ています。上述の通り、この変更は過去の計算を無効にするわけではありませんが、新しい方法での計算結果と直接トータルエネルギーを比較する事はできません。

分子動力学計算の変更

DMol³のMD計算アルゴリズムに改良が加えられました。この改良は、系の自由度を定義する部分の修正です。以前のバージョンでは、自由度の数を $3N$ (N は原子の数) と定義していましたが、正しい自由度は分子の場合 $3N-6$ 、二原子分子 (**diatomics**) の場合 $3N-5$ 、周期境界モデルの場合 $3N-3$ です。

このパラメータは系の温度の評価に使われるため、旧バージョンで行ったMD計算を再現する事はできません。トータルエネルギーの改善では互換性を重視しましたが、この改善は非常に重要な点であるため、旧バージョンとの互換性をとるためのオプションは用意されておりません。

モデルが大きい程、**4.2**と旧バージョンとの相違は少なくなります。水分子の場合、例えば各ステップでの温度はかなり大きく変わりますが、ナフタレンの様な大きなモデルでは、温度の差はより小さくなり、～10%程度になります。

Gaussian® UI のインストール

Windowsに **Gaussian UI**は自動的にインストールされます。しかし、Linux上の**Gaussian**に接続するには、**MS gateway** コンポーネントを **Linux** サーバーにインストールする必要があります。**Linux gateway**のインストール手順を行う前に、以下の操作を行ってください。

1. **Linux** サーバーで、**\$g03root** の環境変数が正しく設定されているか確認してください。この環境変数は、**G03**のドキュメントに書かれている通り、**Gaussian**がインストールされているディレクトリを指している必要があります。
2. **Gaussian** ログイン・スクリプト **g03.login** もしくは **g03.profile** を **Source** してください。ログイン・スクリプトは **Shell** によって異なります。
3. **Linux Gateway**を通常のインストール手順通りにインストールしてください。

Note. **Gateway**をスタート/リスタートさせる前に必ずステップ1と2を行ってください。

CASTEP Check Files

リスタートに必要な **check** ファイル (.chk) の取り扱いが 4.2 で変わりました。この変更は、クライアント側に必要なディスク容量を減らし、計算結果のダウンロードに要する時間を短縮します。大きな系の **check** ファイルは非常に大容量になる場合があり、自動ダウンロード時にはネットワークに多大な負担とクライアントに大きなディスク容量を必要としました。4.2以降では、デフォルトで **check** ファイルを自動的にダウンロードしない様に設定されています。そのため、**check** ファイルのダウンロードは、計算前に指示する必要があります。CASTEP の Calculation ダイアログボックスで **Properties** タブを選択し、**Orbitals** の計算を選択してください。Check ファイルは、**Orbitals** の計算を設定した時のみの出力になります。

もし、**check** ファイルのダウンロードを指定していない場合は、もっと容量の少ない新しい出力ファイル (.castep_bin) がダウンロードされます。このファイルには、電子波動関数以外は **check** ファイルと全く同じ情報が入っています。

このファイルがあれば、**Orbitals** と **STM (Scanning Tunneling Microscopy)** 以外の解析は通常通りデフォルトで計算できます。**Orbitals** や **STM** の解析を行うには、**Properties** タブで **Orbitals** を選択して計算してください。

CASTEPの計算をリスタートさせる時に **check** ファイルが無い場合は、今までとは異なるリスタート計算になります。CASTEP は、castep_bin ファイルを使い、基底状態の電子密度から新たに波動関数を作成します。この方法は、ディスク容量をセーブしますが、リスタート時に余計な計算が追加されます。もし、リスタートする可能性が高く、計算時間を短縮する必要がある場合は、**check** ファイルの出力を強く推薦します。

Windows上の並列計算サポート

Windows上で行う **Materials Studio** の並列計算のインフラが4.2で変更されました。4.2のリリース以降は、並列計算をHP-MPI環境下で行います。HP-MPIは、**Materials Studio**と一緒に自動的にインストールされます。しかし、MPICH環境と違い、ネットワーク接続の無いコンピューターでは正しく起動しない可能性もあります。この様な問題が発生した場合は、**Microsoft Loopback adapter** を手順に従いインストールしてください。

Accelrys への連絡

バグやコメントは詳細な情報とともにe-mailで直接 **Accelrys** サポートへご連絡ください。アジア地区は support-japan@accelrys.com へ、US 地区は support-us@accelrys.com、Eu 地区は support-eu@accelrys.com へお願いします。