

DCoreのインストール方法

本山 裕一

東京大学物性研究所 特任研究員

ソフトウェア高度化推進チーム

1. DCoreのインストール概要
2. MateriApps LIVE!の準備

DCoreのインストール方法

本山 裕一

東京大学物性研究所 特任研究員

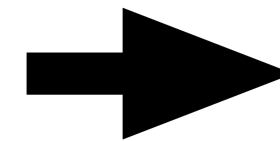
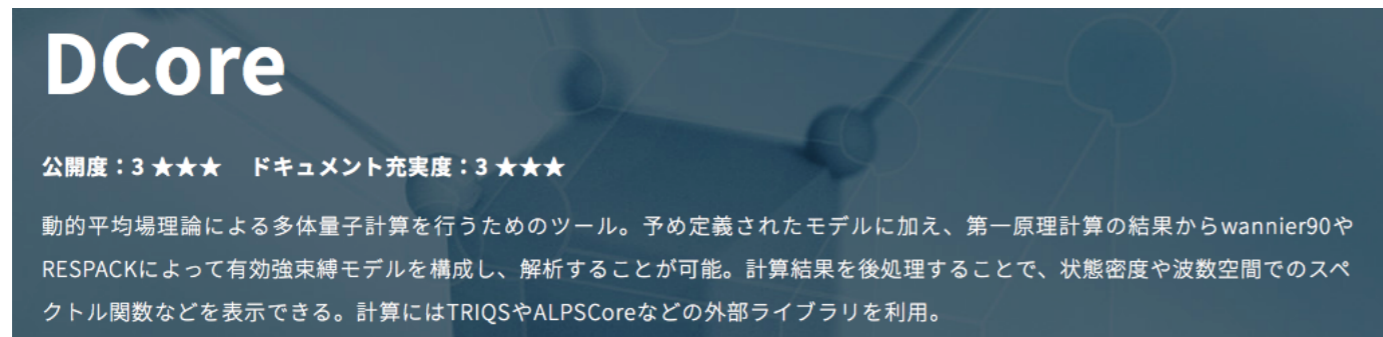
ソフトウェア高度化推進チーム

1. DCoreのインストール概要

2. MateriApps LIVE!

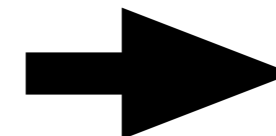
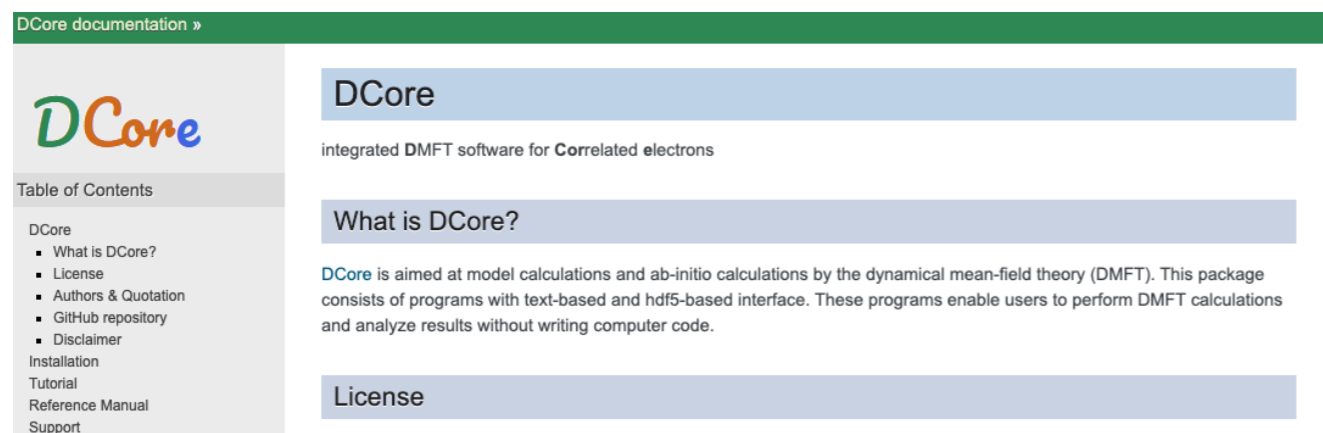
1-1. DCoreの取得方法

1. 検索方法：「MateriApps DCore」で検索



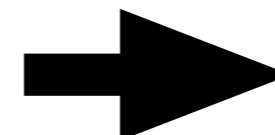
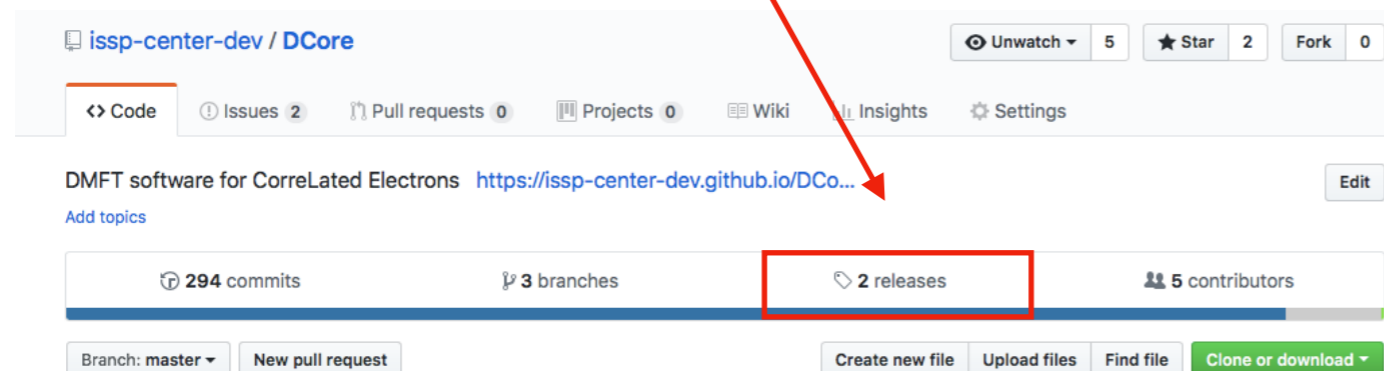
「公式サイト」をクリック

2. GitHub repository セクションにある URI をクリック



GitHubページへ

3. GitHubページのreleasesをクリック (慣れている人はclone)



Releaseページから
DCoreをダウンロード

1-2. DCoreに必要な環境

1. 必要なライブラリをインストール (全て必要)

- **TRIQS libraries** (1.4.x branch)
<https://triqs.github.io/triqs/master/index.html>
- **TRIQS/DFTTools** (commit d005756)
https://triqs.github.io/dft_tools/master

2. ソルバーをインストール (使用するものだけでOK)

- **TRIQS/Hubbard-I solver** (master branch)
<https://github.com/TRIQS/hubbardi>
- **TRIQS/cthyb**
<https://triqs.github.io/cthyb/master/index.html>
- **ALPSCore/cthyb**
<https://github.com/ALPSCore/CT-HYB>
 - triqs_interface
https://github.com/shinaoka/triqs_interface

1-3. DCoreのインストール

1. DCoreのフォルダへ移動しbuildディレクトリを作成

```
$ mkdir dcore.build && cd dcore.build
```

2. cmakeでdcore のビルド環境を作成

```
$ cmake -DTRIQS_PATH=path_to_triqs ../
```

3. dcoreのビルド、テスト、インストール

```
$ make  
$ make test  
$ make install
```

以上で基本的なインストール作業は終了！

DCoreのインストール方法

本山 裕一

東京大学物性研究所 特任研究員

ソフトウェア高度化推進チーム

1. DCoreのインストール概要

2. MateriApps LIVE!

2-1. MateriApps LIVE! on VirtualBox

- MateriApps LIVE! (MA LIVE!)
 - 様々な計算物質科学ソフトウェアをあらかじめインストールした Debian GNU/Linux
 - DCore もインストール済み!
- VirtualBox
 - 仮想マシン・ソフトウェアのひとつ
 - もともと動いているOS (ホストOS) の中で、別のOS (ゲストOS) を動かすためのソフトウェア
- VirtualBox のゲストOS として MA LIVE! を動かすことで、様々なソフトウェアをととても手軽に利用可能!

2-2. MateriApps LIVE!

See setup.pdf

or

visit

https://www.slideshare.net/cms_initiative/clipboards/how-to-setup-materiapps-live

- ユーザ名は user
- パスワードは live
- CLI端末ソフトは
 - スタートメニュー▷System Tools▷LXTerminal
- 記号入力を日本語キーボードの配列にするには

```
$ setxkbmap -layout jp
```


2-3. DCore のサンプルファイル

- DCoreのサンプルファイルー式は
/usr/share/dcore/examples
にあります
- ここではdcoreフォルダを作成してそこにコピーします

```
$ cd  
$ mkdir dcore  
$ cd dcore  
$ cp -r /usr/share/dcore/examples .
```

2-4. 動作確認

- examples 以下にある square を用いて動作確認
 - 何をやっているのかは後ほど説明があります

```
$ cd examples/square
$ dcore_pre dmft_square.ini
$ dcore dmft_square.ini --np 1
$ dcore_check dmft_square.ini
$ dcore_post dmft_square.ini --np 1
$ cd post
$ gnuplot square_akw.gp
```

- 右のようなバンド図が出たらOK 🎉

