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

DCore

公開度:3 ★★★ ドキュメント充実度:3 ★★★

動的平均場理論による多体量子計算を行うためのツール。予め定義されたモデルに加え、第一原理計算の結果からwannier90や RESPACKによって有効強束縛モデルを構成し、解析することが可能。計算結果を後処理することで、状態密度や波数空間でのスペ クトル関数などを表示できる。計算にはTRIQSやALPSCoreなどの外部ライブラリを利用。



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

DCore documentation »		
20	DCore	
DLore	integrated DMFT software for Correlated electrons	
Table of Contents		
DCore	What is DCore?	
What is DCore? License Authors & Quotation GitHub repository Disclaimer Installation	DCore is aimed at model calculations and ab-initio calculations by the dynamical mean-field theory (DMFT). This package consists of programs with text-based and hdf5-based interface. These programs enable users to perform DMFT calculations and analyze results without writing computer code.	GitHubペーシへ
Tutorial Reference Manual	License	
Installation Tutorial Reference Manual Support	License	

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

Scode ① Issues 2 ① Pull requests 0	♥ Unwat	tch v 5 ★ Star 2 Fork 0		
DMFT software for CorreLated Electrons https:// Add topics	/issp-center-dev.github.io/DCo	Releaseページから		
© 294 commits 293	branches 🛇 2 releases	25 contributors		DCoreをタワンロート
Branch: master - New pull request	Create new file Upload	files Find file Clone or download -		

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/hubbardl
- 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一式は /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



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



・ 右のようなバンド図が出たらOK 🎉

