

MateriApps Live!の導入とHΦの使用方法

Takahiro Misawa (三澤貴宏)

ISSP Univ. of Tokyo



概要

- 1.USBの配布
- 2.USBから Virtual Box(VB), MateriAppsLive!を各自のPCへコピー
- 3.Virtual Boxのインストール(ダブルクリック)
- 4.MateriAppsLiveの立ち上げ: VBからインポート
- 5.MateriAppsを用いたHΦの使用

注意:

1. USBは持ち帰って大丈夫です。各自のPCなどにインストールして試してください。

2. VBは以下のサイトから











<https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads>

MaetriAppLive!は以下のサイトからダウンロードすることも可能です。

<http://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>

(今回,USBで配布するのはMateriAppsLive!の容量が大きいから~2GB)

配布したUSBの中身

 MateriAppsLive-2.2-amd64.ova	—昨日 9:39	2.37 GB
 MateriAppsLive-2.2-i386.ova	昨日 8:50	1.65 GB
 MD5SUM	—昨日 9:50	580 バイト
 README-en.html	—昨日 9:31	11 KB
 README.html	—昨日 9:31	12 KB
 setup-en.pdf	—昨日 9:32	1.3 MB
 setup.pdf	—昨日 9:32	1.5 MB
 vbconfig.bat	—昨日 9:32	111 バイト
 vbconfig.command	—昨日 9:32	176 バイト
 VirtualBox-5.2.26-128414-OSX.dmg	—昨日 9:31	96.1 MB
 VirtualBox-5.2.26-128414-Win.exe	—昨日 9:31	114.5 MB

1. VB, MateriAppsLive-2.2-amd64.ovaをどこかにコピー
(講習会PCにはVBはインストール済み)

2. ~~VBをダブルクリックしてインストール~~

3. ovaファイルをダブルクリックしてインポート

User: user

Password: live

日本語設定:

setxkbmap -layout jp

MateriApps LIVE!



- Use in virtual machine or boot directly from USB stick (Debian Live Linux)
 - run on Windows, Macintosh, etc
 - just boot and get ready for materials science simulations without installation
- Pre-installed applications and tools
 - abinit, AkaiKKR, ALPS, CP2K, Feram ,ERmod,
 - DSQSS, Gromacs, HΦ, LAMMPS, mVMC, OpenMX, Quantum Espresso, SMASH, xTAPP 等
 - ParaView, Tapioca, VESTA, VMD, XCrysDen...
 - GUI installer for GAMESS and VMD
- available from MateriApps LIVE! webpage
 - distributed 3000+ copies since 2013.7



/usr/share

/usr/bin

以下に様々なソフトが
プレインストール!

MateriApps LIVE! が役に立つシチュエーション

- MateriApps LIVE! を用いた講習会の実績
 - MateriApps LIVE! ハンズオン
 - HΦ、xTAPP、ALPS、バージョン管理システム
 - 今年度: DCore 7/30(月), MateriAppLive! 8/28(水), xTAPP 10/19(金), DDMRG 11/14(水), HΦ(厳密対角化) 12/12(水), RESPACK (第一原理有効模型) 3/1(金)
 - **今後の予定: [alamode \[直接法に基づく非調和格子振動のモデル化\] 5/17\(金\) \[予定\]](#)**
- 講義での利用例 (東大理、東工大、他)
 - 計算物理学
 - 計算機実験 (UNIX + C 実習環境、LaTeX、バージョン管理システム)
- 実験研究者・企業研究者による利用
- 計算機科学の研究者による利用
- **[最近ではトラブルはほぼゼロ\(VirtualBox OVA版\)、15分程度でセットアップ完了](#)**

MA Live! で困ったら..

FAQ

<https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/wiki/FAQ#virtualbox>

FAQ Frequently Asked Questions / よくある質問

- [VirtualBox関連](#)
- [Software update / ソフトウェアアップデート](#)
- [Login and Logout / ログイン・ログアウト](#)
- [Keyboard / キーボード](#)
- [Japanese Input / 日本語入力](#)
- [Teminal / ターミナル](#)

質問

<https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/issues>

cmsi / MateriAppsLive

Watch 15 Star 8 Fork 6

Code Issues 61 Pull requests 0 Projects 0 Wiki Insights

is:issue is:open Labels 10 Milestones 4 New issue

61 Open	180 Closed	Author	Projects	Labels	Milestones	Assignee	Sort
32bit版が正しく作れていない							3
Abinitの再追加							
The GPG key for the debian repository has expired							1
32bit 版のサポート終了							1
Debian 7 Wheezy のサポート終了							

How to use HΦ in MA Live!

1. Materi Apps上でterminalを立ち上げる

2. HPhiというコマンドがすでに存在するので

`HPhi -s stan.in`

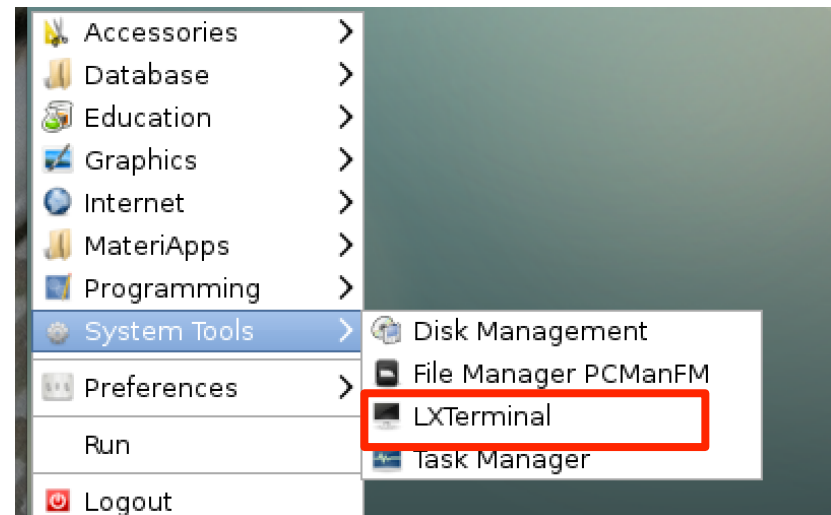
のような形で実行すればHΦの計算が行える

3. `/usr/share/hphi/samples` 以下に様々なインプットファイルがあるので参照のこと

[以下で幾つかの例について実演]

日本語設定:

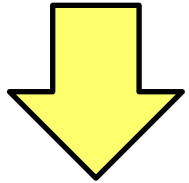
`setxkbmap -layout jp`



How to use H Φ for standard models

Only `stan.in` is necessary (< 10 lines) !

```
L      = 12
model  = "Spin"
method = "CG"
lattice = "chain"
J      = 1.0
2Sz   = 0
```



HPhi -s stan.in

`./output` : results are output

Important files

```
./output/zvo_energy.dat      → energy
./output/zvo_Lanczos_Step.dat → convergence
./output/zvo_cisajs.dat      → one-body Green func.
./output/zvo_cisajsccktalt.dat → two-body Green func.
```

ex. L=12 1d Heisenberg model,
GS by LOBCG method

Method

Lanczos - ground state

CG - LOBCG

TPQ - finite-temperature

FullDiag - full-diagonalization

Demonstrations @ laptop

1D Heisenberg model ($S=1/2$): LOBCG

kagome Heisenberg model ($S=1/2$): TPQ

You can enjoy $H\Phi$ on your laptop !

How to build HΦ in MA Live!

最新版のHΦを使いたい時はbuildし直す必要があることがあります

1. `git clone https://github.com/issp-center-dev/HPhi.git`
2. `cd ./HPhi`
3. `mkdir build`
4. `cd ./build`
5. `cmake ../`
6. `make`
7. HPhi/build/src 以下に実行体HPhiが生成

git,cmakeが入っている環境であれば、以上の手順でインストール可能

[他にc,fortranコンパイラ,lapackなども必要]