

# VirtualBoxを利用したMateriApps Live!の導入

Takahiro Misawa (三澤貴宏)

ISSP Univ. of Tokyo





HPhi ホームページ



すべて

ニュース

画像

地図

ショッピング

もっと見る

設定

ツール

約 46,000,000 件 (0.38 秒)

## HPhi — 東京大学物性研究所スーパーコンピュータセンター

[www.issp.u-tokyo.ac.jp](http://www.issp.u-tokyo.ac.jp) > ... > ソフトウェア用フォルダ ▼

HPhi. 並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効模型ソルバーパッケージ。広汎な多体量子系の有効模型(多軌道 ... ホームページ, GitHub: <https://github.com/issp-center-dev/HPhi>. MateriApps: <http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/hphi/hphi> ...

## HPhi HomePage

[issp-center-dev.github.io/HPhi/index.html](http://issp-center-dev.github.io/HPhi/index.html) ▼

HPhi HomePage. ... 引用につきまして、HPhiを使った研究におきまして、下記の論文を適宜引用していただければ幸いです。"Quantum lattice model solver  $H\Phi$ ", M. Kawamura, K. Yoshimi, T. Misawa, Y. Yamaji, S. Todo, and N. Kawashima, ...



日本語 [English](#)

[ホーム](#)

[ダウンロード\(最新版\)](#)

[フォーラム](#)

[リポジトリ](#)

[マニュアル](#)

[ソースブラウザ](#)

[開発者ノート](#)

[発表資料](#)

[HPhiを用いた計算事例](#)

## 発表資料

---

### 2018年

1. HPhi講習会@柏の葉キャンパスサテライト (2018/12/12)

[HPhiの概要](#)

[MateriAppsLIVE!のインストールと実演](#)

[MateriAppsLIVE!のインストールの資料](#)

[新機能の紹介\(実時間発展\)](#)

[物性研スパコンでの使用方法の解説](#)

[GPGPUによる全対角化](#)

---

### 2017年

1. HPhi講習会@物性研 (2017/6/29)

## VirtualBox を利用した MateriAppsLive!の導入

2017年7月1日

東大物性研 ソフトウェア高度化推進チーム

### 1. VirtualBox のインストール

<https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads> から最新の「VirtualBox」をダウンロード・インストールしてください。

### 2. MateriAppsLive!のインストール









<https://sourceforge.net/projects/materiappslive/>

から最新版の MateriAppsLive! (\*\*\*.ova 形式のファイル)をインストールしてください。

### 3. VirtualBox へのインストール

- ① ダウンロードした ova イメージをダブルクリックしてください。
- ② 「インポート」を選択すると、インポートが開始されます。

# 配布したUSBの中身

 MateriAppsLive-2.1-amd64.ova	2018年11月10日 8:12	2.38 GB
 README-en.html	2018年11月10日 8:13	11 KB
 README.html	2018年11月10日 8:13	12 KB
 setup-en.pdf	2018年11月10日 8:14	1.3 MB
 vbconfig.bat	2018年11月10日 8:13	111 バイト
 vbconfig.command	2018年11月10日 8:13	176 バイト
 VirtualBox-5.2.22-126460-OSX.dmg	2018年11月10日 8:27	95.7 MB
 VirtualBox-5.2.22-126460-Win.exe	2018年11月10日 8:29	113.9 MB

**1.MateriAppsLive-2.1-amd64.ovaをどこかにコピー**

**2.ovaファイルをダブルクリックしてインポート**

# 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)
  - 今後の予定: **RESPACK (第一原理有効模型) 3/1(金), HΦ講習会@九大 3/18(月)**
- 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

# How to use H $\Phi$ 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H $\Phi$ 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

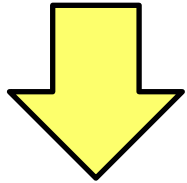
[以下で幾つかの例について実演]



# How to use H $\Phi$ 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!

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]