

MateriApps LIVE!の使い方・実演

Kota Ido

ISSP Univ. of Tokyo



Contents

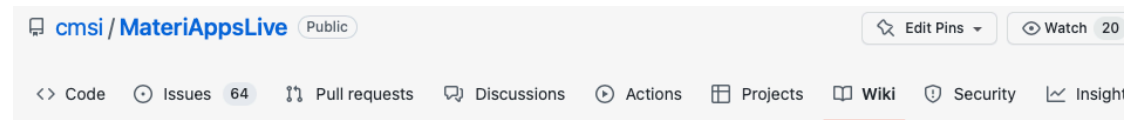
1. What is MateriApps LIVE! ?

2. Run MateriApps LIVE!

3. How to use mVMC on MateriApps LIVE!

Have you already
downloaded
MaterialApps LIVE! ?

[https://github.com/cmsi/
MateriAppsLive/wiki/
OnlineTutorial](https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/wiki/OnlineTutorial)



OnlineTutorial

Syngé Todo edited this page on Sep 19 · 30 revisions

Web講習会(オンラインチュートリアル)のための準備

通常の講習会では、VirtualBoxやMateriApps LIVE!一式の入ったUSBメモリを当日配布していますが、Web講習会(オンラインチュートリアル)では、講習会参加者の皆さんにあらかじめダウンロード・インストールの作業をお願いしています。下記の説明に従い、前日までに準備をお願いします

講習会前日までの準備

- PCの確認
 - Windows, Intel Mac, Linuxなど, VirtualBoxが動作するx86 PC
 - MateriApps LIVE! VirtualBox版を利用
 - Windowsの場合、あらかじめCPUの仮想化機能(VT-x)がオンになっているかどうかを確認する
 - Ctrl + Shift + ESCで「タスクマネージャ」を起動
 - 「パフォーマンス」タブを選択 → 「CPU」をクリック
 - 「仮想化：有効」となっていればOK
 - 仮想化機能がOFFになっている場合、<https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/wiki/FAQ#virtualbox-2> を参考にBIOSの設定を変更する(注: 32bit版のMateriApps LIVE!の配布はバージョン3.1で終了)
 - Apple Silicon (M1/M2)搭載のMac
 - VirtualBoxは動作しない。[MateriApps LIVE! Docker版](#)を利用

If you have questions about MA LIVE!..

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](#)

Forum

<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		#243 opened 7 days ago by wistaria			Version 2.3		3
Abinitの再追加		#242 opened 11 days ago by wistaria			Version 2.3		
The GPG key for the debian repository has expired	update	#241 opened 11 days ago by jochym			Version 2.3		1
32bit 版のサポート終了		#240 opened 17 days ago by wistaria			Version 2.4		1
Debian 7 Wheezy のサポート終了		#239 opened 17 days ago by wistaria			Version 2.4		

How to run “MateriAppsLive-4.0” for Docker

1. Download “MateriAppsLive-4.0”

```
curl -L -O https://sf.net/projects/materiappslive/files/docker/malive  
chmod +x malive
```

2. Create \$HOME/share directory on host OS.

```
mkdir $HOME/share
```

3. Run malive on host OS

```
./malive
```

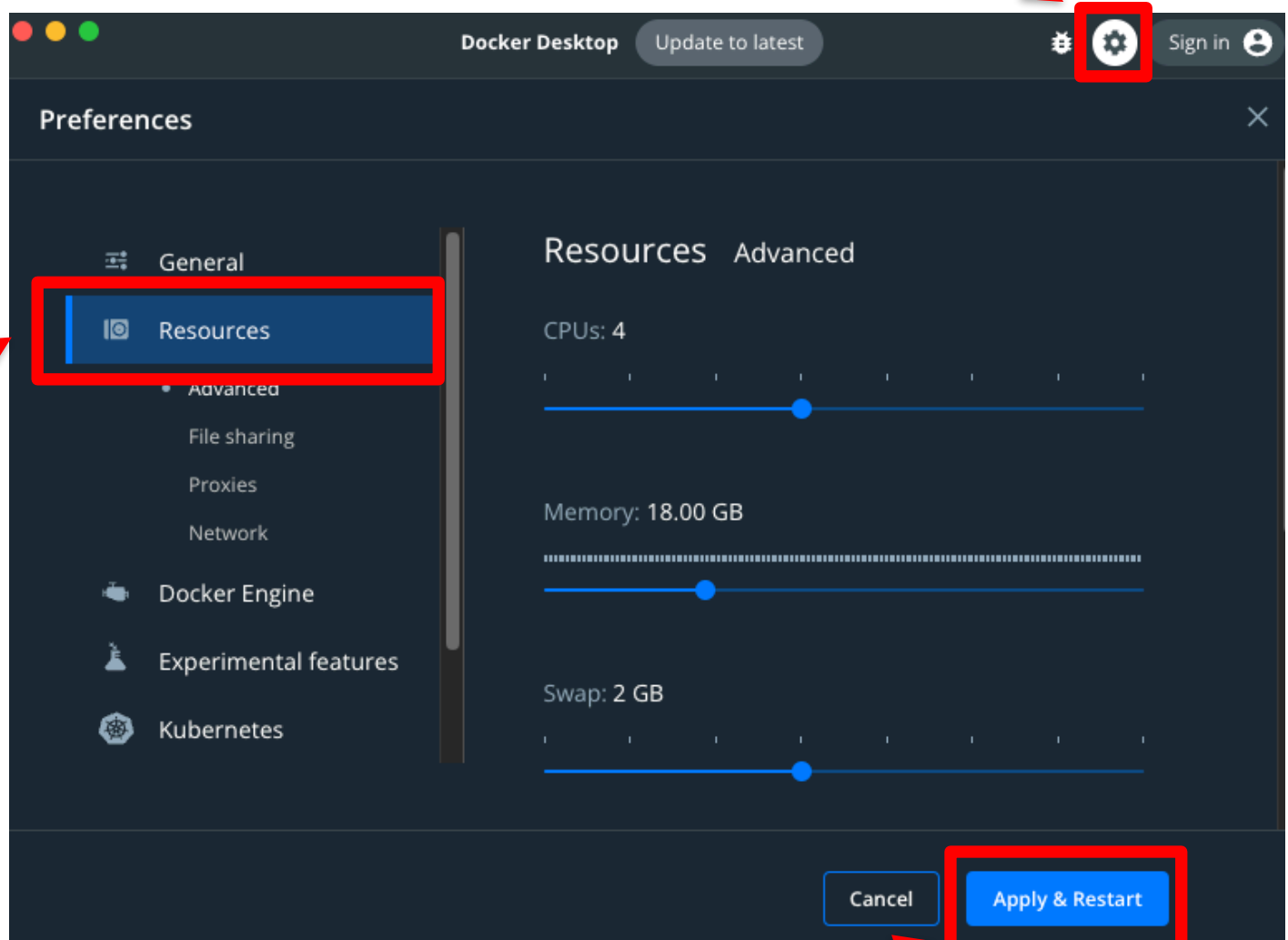
4. Exit from MateriApp Live!

```
exit
```

※<https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/wiki/GettingStartedDocker>

How to change resources on Docker Desktop

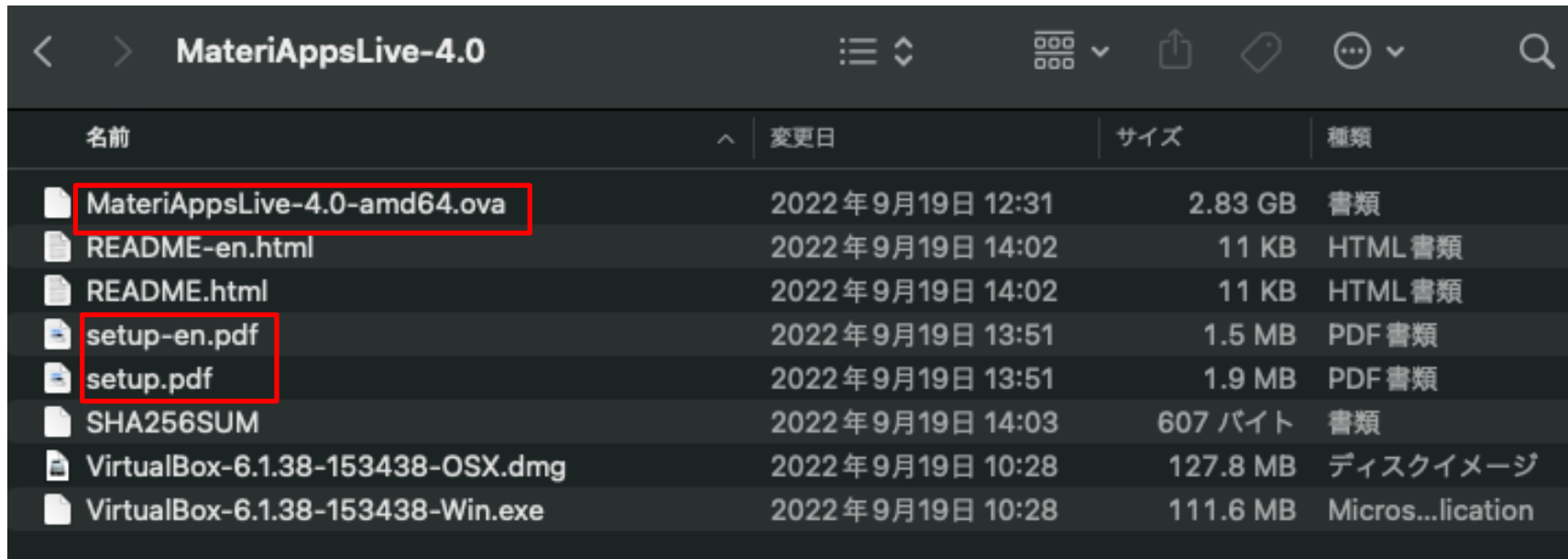
1. Click Setting



2. Click
“Resources”

3. Click “Apply & Restart”

Cf: Files in “MateriAppsLive-4.0” for VirtualBox



名前	変更日	サイズ	種類
MateriAppsLive-4.0-amd64.ova	2022年9月19日 12:31	2.83 GB	書類
README-en.html	2022年9月19日 14:02	11 KB	HTML書類
README.html	2022年9月19日 14:02	11 KB	HTML書類
setup-en.pdf	2022年9月19日 13:51	1.5 MB	PDF書類
setup.pdf	2022年9月19日 13:51	1.9 MB	PDF書類
SHA256SUM	2022年9月19日 14:03	607 バイト	書類
VirtualBox-6.1.38-153438-OSX.dmg	2022年9月19日 10:28	127.8 MB	ディスクイメージ
VirtualBox-6.1.38-153438-Win.exe	2022年9月19日 10:28	111.6 MB	Micros...lication

1. Starts VirtualBox by double clicking “MateriAppsLive-*amd64.ova”. Click "Import" button in VirtualBox import window.

User: user

Password: live

Setting for Japanese keyboard:

setxkbmap -layout jp

2. See setup.pdf to check Tips.

(ex: p15, How to transfer files on VB to Host OS)

How to use mVMC in MA LIVE!

1. Start LXTerminal on MateriApps LIVE!

Setting for Japanese keyboard:

start menu⇒System Tools

⇒Switch to Japanese Keyboard Layout

2. Make work directory

mkdir work

cd work

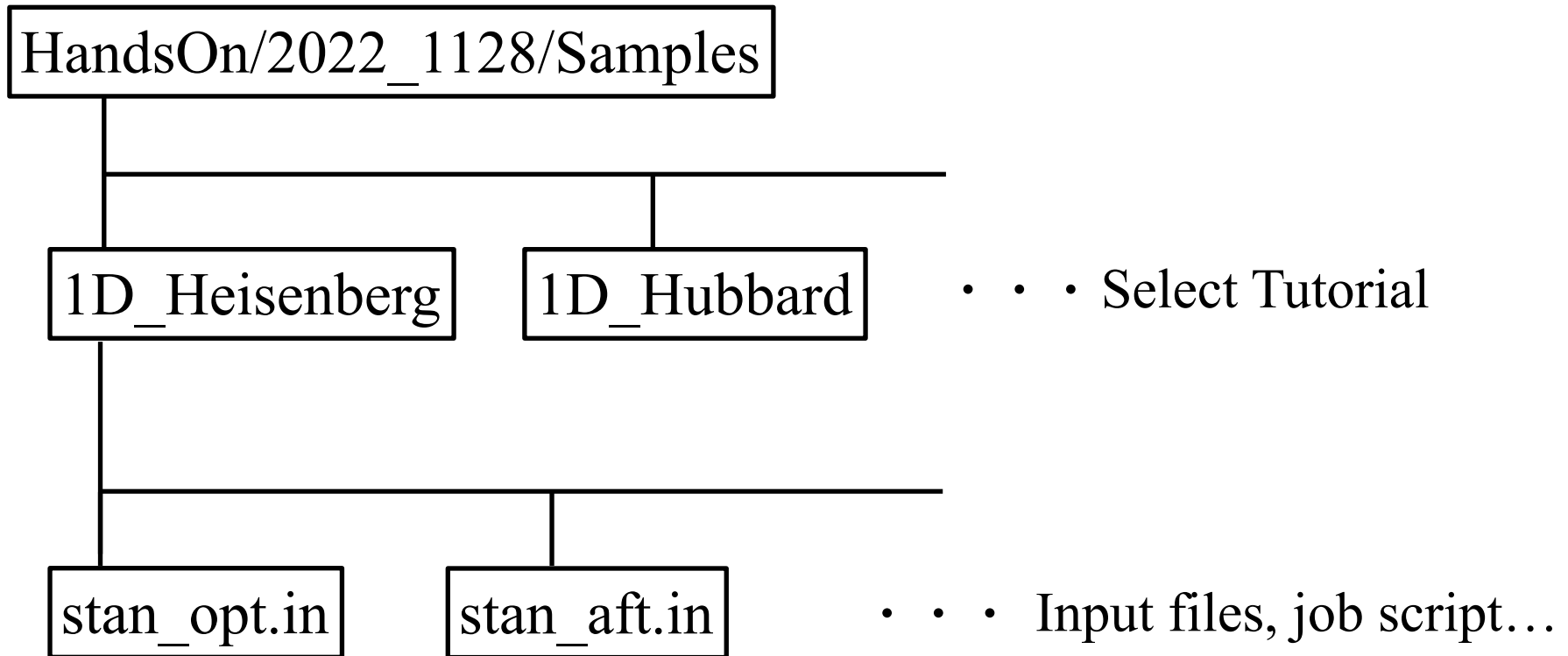
3. Download samples for this handson

git clone mVMC-tutorial

※You can perform mVMC's simulations by executing the following command.

vmc -s stan.in

Files/Directories in “Samples”

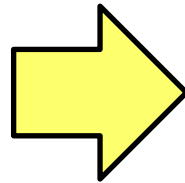


How to use mVMC for standard models

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

ex. `Samples/1D_Heisenberg/stan_opt.in`
(L=4 1d Heisenberg model, optimization process)

```
L           = 4
Lsub        = 2
lattice     = "chain"
model       = "Spin"
J           = 1.0
2Sz         = 0
NVMCSample  = 200
NSROptItrStep = 600
NMPTrans    = 1
NSPStot     = 0
```



```
./output : results are output
./*.def  : definition files
           for expert mode
```

`vmc -s stan_opt.in`

Important files

`./output/zvo_out_***.dat` → energy & variance

`./output/zqp_opt.dat` → optimized wavefunction

`./output/zvo_SRinfo.dat` → info. of optimization.

Demonstrations @ laptop

J1-J2 Heisenberg model (2D_J1J2Heisenberg)

※online manual: <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/mvmc/doc/manual/>

Enjoy mVMC on your laptop !