

# VirtualBoxを利用したMateriApps Live!の導入

Takahiro Misawa (三澤貴宏)

ISSP Univ. of Tokyo



# 配布した資料

## 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)**
- 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
```

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

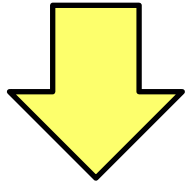
## Method

Lanczos - ground state

CG - LOBCG

TPQ - finite-temperature

FullDiag - full-diagonalization



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_cisajsktalt.dat	→ two-body Green func.

## 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 H $\Phi$ 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]