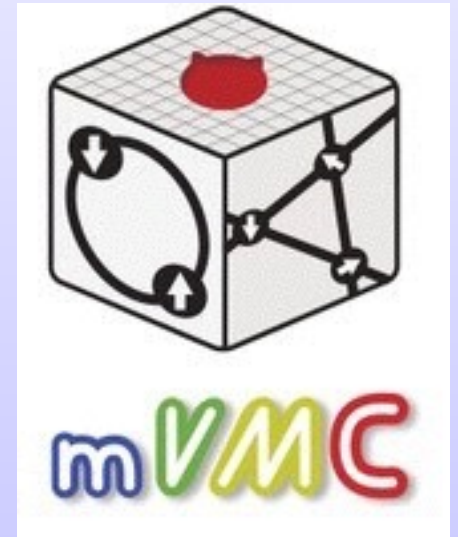


# mVMCのインストール方法

吉見 一慶

東京大学物性研究所 特任研究員 (PCoMS PI)

ソフトウェア高度化推進チーム



1. 事前準備
2. mVMCのインストール概要
3. ISSPスパコンでの利用
4. 簡易デモ

# 1. 事前準備 (VirtualBoxの利用版)

- ・ インストール作業

Virtual Boxのインストール

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

より最新版のVirtualBoxをダウンロードしてください。

# 1-1. 共有フォルダの設定

- ・ おすすめ：手元の環境とVirtual Box間でファイルのやり取りをできるように共有フォルダの設定を行います
  1. 「設定」 - 「共有フォルダー」 タブを開き、「+」をクリックします。
  2. 「フォルダーのパス」の右側の「v」をクリックし、「その他」を選択します。
  3. 「自動マウント」をチェックし「OK」を選択。
  4. 仮想マシンを起動すると、/media/sf\_…の下に2で選択したフォルダが表示されます。

# 1-2. MateriApps Live!のダウンロード

- ・ 以下のサイトから

MateriAppsLive-1.12-i386.ova

をダウンロード

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



## What's New?

2017/07/17

MateriApps LIVE! version 1.12 released [\[Release Note\]](#) [\[Download\]](#) [\[Setup\]](#)

2016/09/05

MateriApps LIVE! version 1.11 released [\[Release Note\]](#) [\[Download\]](#) [\[Setup\]](#)

2016/02/23

MateriApps LIVE! has been picked up on [Softpedia Linux software database](#)

2016/02/18

MateriApps LIVE! version 1.10 released [\[Release Note\]](#) [\[Download\]](#) [\[Setup\]](#)

2015/11/27

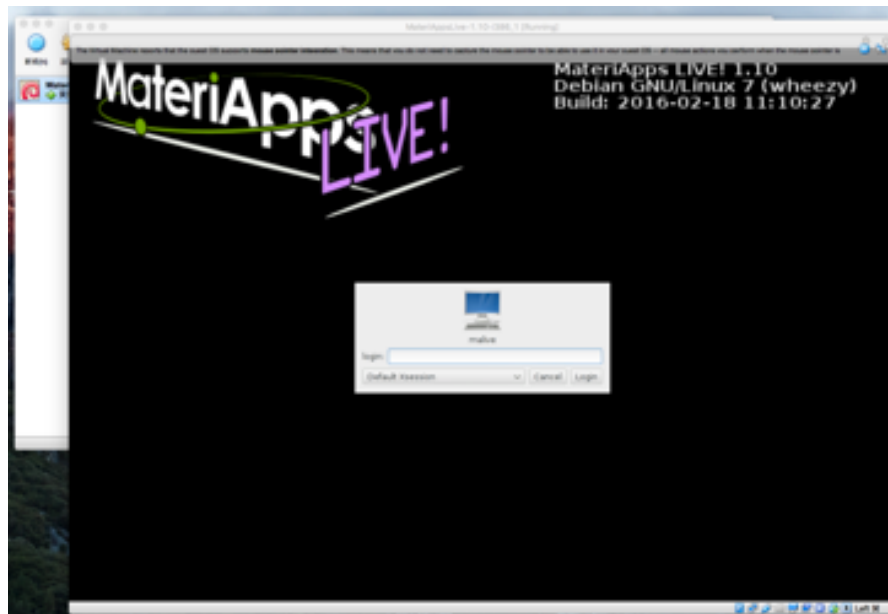
MateriApps LIVE! version 1.9 released [\[Release Note\]](#) [\[Download\]](#)

2015/08/31

MateriApps LIVE! version 1.8 released [\[Release Note\]](#) [\[Download\]](#)

# 1-3. MateriAppsのインポート

- MateriAppsLive-1.12-i386.ovaをダブルクリックし、インポートを選択した後に、VirtualBoxから起動します。



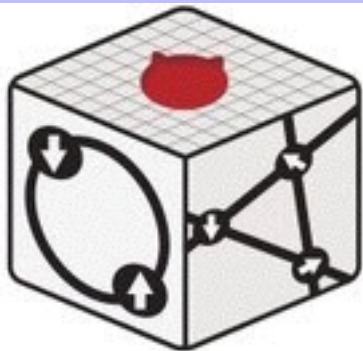
login: user、 Password: live

# 1-3. キーボードの設定

- ・ 日本語キーボード用に環境変更します。
  1. 「Accessories」 - 「LXTerminal」を選択します。
  2. 以下のコマンドを入力します。

```
$ setxkbmap -layout jp
```

事前準備は以上です。  
その他の環境での設定については、  
Hphi実行環境導入マニュアル\_v2.0  
を参考にしてください。



mVMC

## 2. mVMCインストール概要

- ・ mVMCインストールまでの 3 step

### 1. 必要環境をそろえる。

必須       : Cコンパイラ、LAPACK、MPIライブラリ  
オプション: ScaLAPACKライブラリ

### 2. mVMCをダウンロード

MateriAppsのページから公式ページへ。

### 3. mVMCをビルド

make, cmakeで簡単にインストール可能。



## 2-1. mVMCで必要な環境

- ・ mVMCのコンパイル・使用には以下の環境が必要です。
  1. Cコンパイラ  
インテル、富士通、GNUなど
  2. MPIライブラリ
  3. LAPACKライブラリ  
インテルMKL, 富士通, ATLASなど
  4. ScaLAPACKライブラリ (オプション)

## 2-2. mVMCのダウンロード (1)

- Googleで「MateriApps mVMC」で検索！

### mVMC

公開度: 3 ★★★ ドキュメント充実度: 2 ★★☆☆

広汎な多体量子系の有効模型(多軌道ハバード模型、ハイゼンベルグ模型、近藤格子模型など)の基底状態の高精度な波動関数を変分モンテカルロ法によって数値的に求める有効模型ソルバーパッケージ。グッツヴィラー・ジャストロー、ダブロン-ホロン束縛因子の相関因子を取り扱うことが可能であり、一万以上の変分パラメータを最適化することが可能である。また、量子数射影によって量子数を指定することで低エネルギー基底状態も求めることが可能である。

#### 代表的な開発者

三澤貴宏(東京大学 物性研究所), 森田恒史(東京大学 物性研究所), 大越孝洋(東京大学 工学系研究科), 井戸康太(東京大学 工学系研究科), 今田正俊(東京大学 工学系研究科), 本山裕一(東京大学物性研究所), 吉見一慶(東京大学 物性研究所), 河村光晶(東京大学 物性研究所), 加藤昌生(東京大学 物性研究所)

#### アプリケーションの最大の魅力

ハバード模型・近藤模型・ハイゼンベルグ模型などの量子格子模型に対して、変分モンテカルロ法によって高精度な基底状態の計算を行うことができます。磁気秩序・電荷秩序などの通常の秩序に加えて異方的超伝導状態なども取り扱えることが最大の魅力です。



このWebページの下の方に  
ダウンロードするための  
リンクがあります。

### ダウンロード

- ソフトウェア・ソースコード
- マニュアル([日本語版](#) / [英語版](#))

## 2-3. mVMCのダウンロード (2)

- mVMC-1.0.2.tar.gz が  
/home/user/Downloads  
にダウンロードされます。
- 以下のコマンドを打ち、ファイルを展開します。
  - mkdir ./program && cd ./program
  - cp ~/Downloads/mVMC-1.0.2.tar.gz .
  - tar xvzf ./mVMC-1.0.2.tar.gz

## 2-3. mVMCのビルド (1)

- mVMCではmake・cmakeでビルドができます。  
(数行コマンドを打つだけでビルド可能！)
- cmakeで選べる計算環境
  1. sekirei: ISSPシステムB “sekirei”
  2. fujitsu: 富士通コンパイラ  
(ISSPシステムC”maki”, 京コンピュータ)
  3. intel: intelコンパイラ+ Linux PC
  4. gcc: GCC + Linux PC

## 2-3. mVMCのビルド (2)

- ・ cmakeでのビルド方法

1. mVMCフォルダへ移動

```
$ cd ./mVMC-1.0.2
```

2. srcの下にbuildフォルダを作成

```
$ mkdir ./build
```

3. buildフォルダでmakefile作成

```
$ cmake -DCONFIG=gcc ../
```

4. makeコマンドの実行

```
$ make
```

build/src/mVMCにmVMCの実行ファイル vmc.outが出来ます。

## 2-4. サンプルファイルの実行

- ・ 以下では正方格子Hubbard模型のサンプルを実行します

- ・ サンプルディレクトリへ移動

```
$ cd ../sample/Standard/Hubbard/square
```

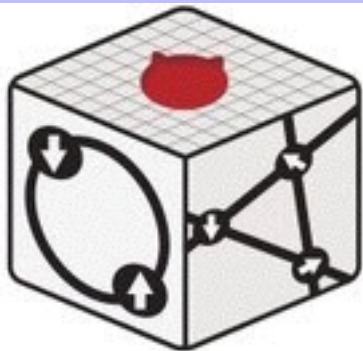
- ・ 実行ファイルのコピー

```
$ cp ~/program/mVMC-1.0.2/build/src/mVMC/  
vmc.out .
```

- ・ サンプルファイルの実行

```
$/vmc.out -s StdFace.def
```

インストール概要は以上です。  
なお、mVMCでは最新情報の取得を  
するためのMLがあります。  
登録は「[MateriApps mVMCページ](#)」  
の「[mVMC query form](#)」から。  
よろしければ登録ください



mVMC

### 3. ISSPスパコンsekireiでの利用

- ・ システムB sekireiではmVMCはプリインストール済。
- ・ 各種ファイルの置き場所
  - mVMCのインストール場所  
/home/issp/materiapps/mVMC/
  - 実行ファイルのインストール場所  
/home/issp/materiapps/mVMC/mVMC-1.0.2-0/bin/
  - サンプルスクリプトと入力ファイルの場所  
/home/issp/materiapps/mVMC/mVMC-1.0.2-0/sample/



## 3-1. sekireiの性能

- Fat ノード (2 ノードまで使用可能)

CPU: Intel Xeon 2.6 GHz (10 cores) ×4

主記憶: DDR4-2133 1 TB (2ノード使用で2TB相当)

- CPU ノード(144 ノードまで使用可能)

CPU: Intel Xeon 2.5 GHz (12 cores) ×2

主記憶: DDR4-2133 128 GB (128ノード使用で16TB相当)

## 3-2. sekireiを使用するには？(1)

以下の手順で申請すれば利用可能です。

1. 研究代表者の登録
2. 研究課題を申請 (B, C, Eクラスは6月,12月の2回)
3. 利用審査
4. 報告書の提出

利用の流れの詳細は下記URLに記載してありますので、ご参照ください。

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/visitor/overview>

## 3-2. sekireiを使用するには？(2)

小さい計算向けのクラス：Aクラス

Aクラスの概要

- 申請ポイント：100 ポイント以下

- 申請回数：半期ごとに 1 回申請が可能。

ただし、A 以外のクラスですでに利用している  
研究代表者 (グループ) の申請は不可。

- 報告書は必要なし。

その他申請クラスの詳細については <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/visitor/about-class> をご参照ください。

## 3-2. sekireiを使用するには？(3)

100ポイントでどの程度計算可能？

- Fat ノードを 1 ノード 1 日利用：4ポイント消費  
→ のべ25日間の使用が可能。

(ポイント消費のルールは ISSP スパコンのマニュアルに記載)

## 3-3. sekireiでの使用方法(1)

例) 正方格子Hubbard模型 ( $W=4$ ,  $L=2$ )

### 1. 計算環境の準備

mVMCのバイナリファイルへのPATHを通します  
(これでmVMCと打つだけで実行可能になります)。

```
$ source /home/issp/materiapps/mVMC/mVMCvars.sh
```

### 2. 入力ファイルの準備

サンプルファイルをコピーします。

```
$ cp -rf $MVMC_ROOT/samples/Standard/Hubbard/  
square .
```

## 3-3. sekireiでの利用方法(2)

### 3. ジョブのサブミット

/home/issp/materiapps/mVMC/sample\_jobscript/

にジョブ投入用のスクリプトのサンプルとして、

- mVMC.sh

が用意されています。 コマンドの実行例は以下の通りです。

```
$ cp /home/issp/materiapps/mVMC/sample_jobscript/mVMC.sh .
```

```
$ qsub mVMC.sh
```

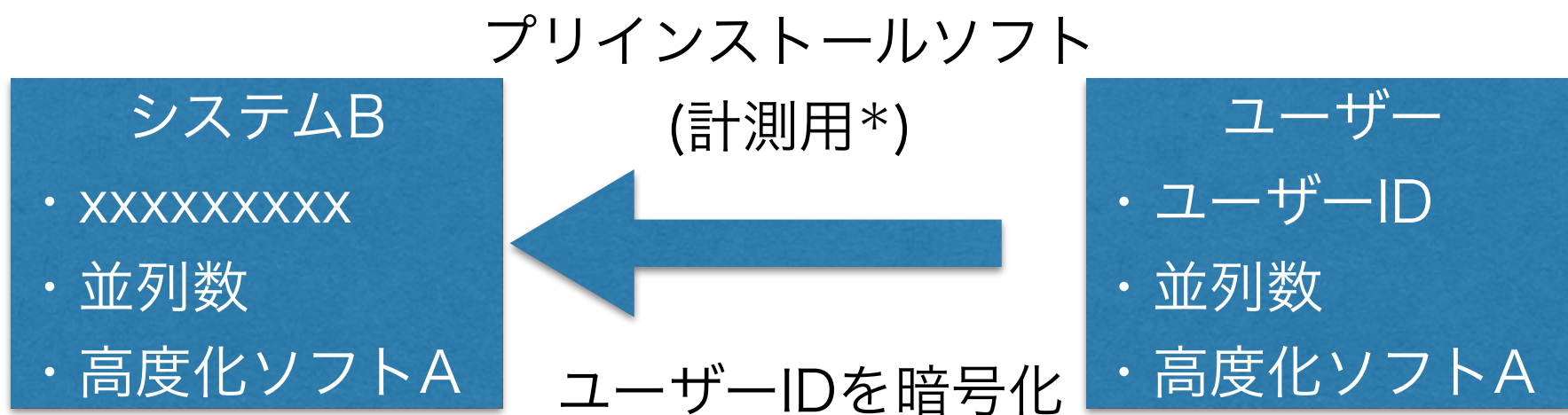
### 4. 結果の確認

output/zvo\_out\_001.dat

が出力されていることを確認します(referenceフォルダに参照データあり)。

## 3-4. (補) sekireiでの利用回数測定 (1)

対象ソフトウェア：ソフトウェア高度化対象プログラム



個人情報は見えない

(\*) 利用率を計測しないソフトの選択

## 3-4. (補) sekireiでの利用回数測定 (2)

計測・非計測の方法

① プリインストールされたソフトウェアを利用する場合  
自動で測定されます。

② オリジナルコードを改造・ビルドした場合  
ジョブ投入スクリプト内で

`/home/issp/materiapps/tool/bin/issp-ucount mVMC`

を実行命令の直前に入れることで利用率の測定が可能となります。

- 測定を希望しない場合

`mVMC_nocount` を実行ファイルとして選択してください。

プロジェクトの意義を評価するための重要な指標となりますので、  
ご協力のほどよろしくお願いいたします。