

汎用多変数変分モンテカルロ mVMC
入力ファイル設計書 ver. 0.1

May, 13, 2016

Contents

1	What is mVMC?	1
1.1	mVMC とは？	1
1.1.1	ライセンス	1
1.1.2	コピーライト	1
1.1.3	開発貢献者	1
1.2	動作環境	2
2	How to use mVMC?	3
2.1	要件	3
2.2	インストール方法	3
2.3	ディレクトリ構成	3
2.4	基本的な使い方	6
3	チュートリアル	7
4	ファイル仕様	8
4.1	スタンダードモード用入力ファイル	8
4.2	エキスパートモード用入力ファイル	9
4.2.1	入力ファイル指定用ファイル	11
4.2.2	ModPara ファイル	13
4.2.3	LocSpin 指定ファイル	18
4.2.4	Trans 指定ファイル	20
4.2.5	InterAll 指定ファイル	22
4.2.6	CoulombIntra 指定ファイル	25
4.2.7	CoulombInter 指定ファイル	27
4.2.8	Hund 指定ファイル	29
4.2.9	PairHop 指定ファイル	31
4.2.10	Exchange 指定ファイル	33

4.2.11	Gutzwiller 指定ファイル	35
4.2.12	Jastrow 指定ファイル	37
4.2.13	DH2 指定ファイル	39
4.2.14	DH4 指定ファイル	42
4.2.15	Orbital 指定ファイル	45
4.2.16	TransSym 指定ファイル	47
4.2.17	InGutzwiller 指定ファイル	49
4.2.18	InJastrow 指定ファイル	51
4.2.19	InDH2 指定ファイル	53
4.2.20	InDH4 指定ファイル	55
4.2.21	InOrbital 指定ファイル	57
4.2.22	OneBodyG 指定ファイル	59
4.2.23	TwoBodyG 指定ファイル	61
4.3	出力ファイル	63
4.4	エラーメッセージ一覧	64
5	アルゴリズム	65
6	謝辞	66

1

What is mVMC?

1.1 mVMC とは？

T.B.D.

1.1.1 ライセンス

本ソフトウェアのプログラムパッケージおよびソースコード一式は GNU General Public License version 3 (GPL v3) に準じて配布されています。

1.1.2 コピーライト

©2015- The University of Tokyo. All rights reserved.

本ソフトウェアは 2016 年度 東京大学物性研究所 ソフトウェア高度化プロジェクトの支援を受け開発されており、その著作権は東京大学が所持しています。

1.1.3 開発貢献者

本ソフトウェアは以下の開発貢献者により開発されています。

- ver.1.0 (xxxx リリース)

- 開発者

- * 三澤 貴宏 (東京大学 物性研究所)
- * 森田 悟史 (東京大学 物性研究所)
- * 大越 孝洋 (東京大学 大学院工学系研究科)
- * 井戸 康太 (東京大学 大学院工学系研究科)
- * 今田 正俊 (東京大学 大学院工学系研究科)
- * 河村 光晶 (東京大学 物性研究所)
- * 吉見 一慶 (東京大学 物性研究所)

- プロジェクトコーディネーター

- * 加藤 岳生 (東京大学 物性研究所)

1.2 動作環境

以下の環境で動作することを確認しています。(要確認)

- 東京大学物性研究所スーパーコンピューターシステム B 「sekirei」
- 同システム C 「maki」

2

How to use mVMC?

2.1 要件

mVMC のコンパイル・使用には次のものがが必要です (要確認)。

- C コンパイラ (インテル、富士通、GNU など)
- MPI ライブラリ
- LAPACK ライブラリ (インテル MKL, 富士通, ATLAS など)
- ScaLAPACK ライブラリ

2.2 インストール方法

T.B.D. mVMC は次の場所からダウンロードできます。

ダウンロードしたファイルを次のように展開してください。

```
$ tar xzvf mVMC-xxx.tar.gz
```

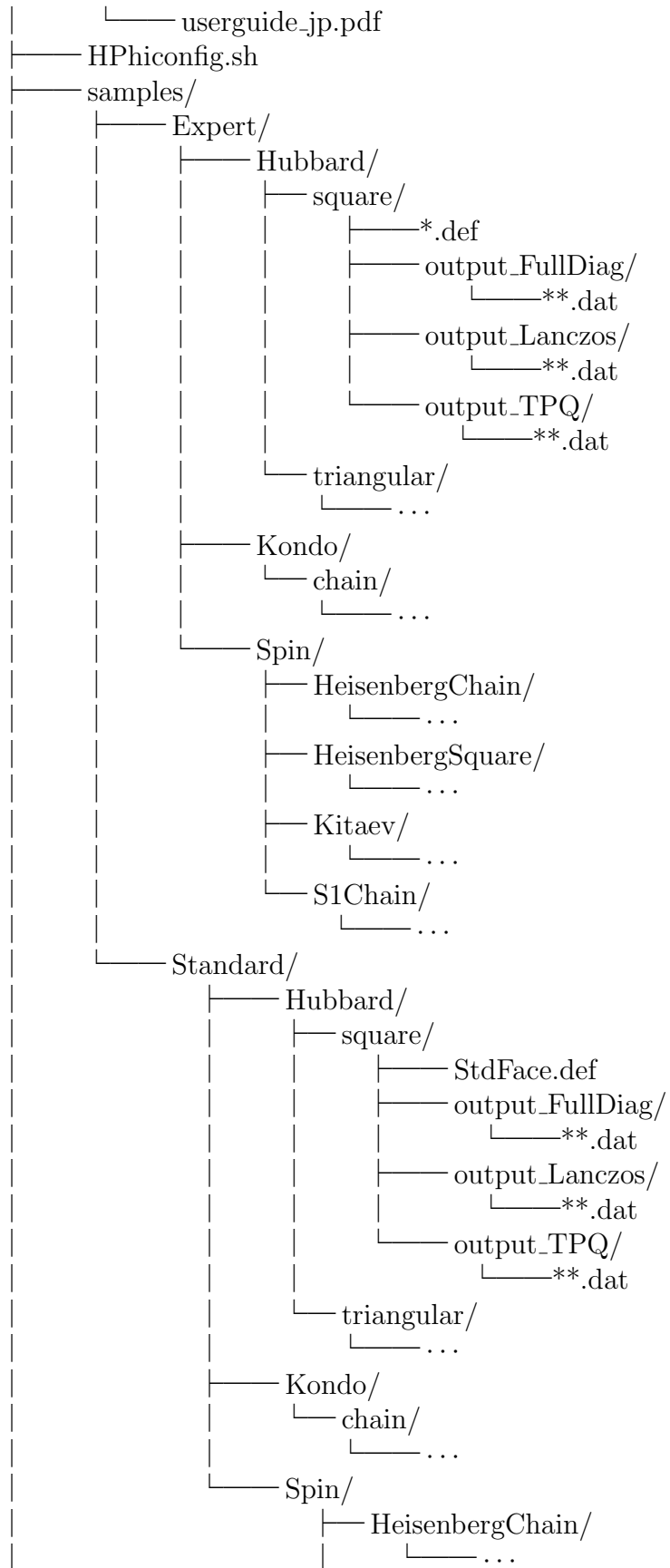
以下、make と cmake でのコンパイル方法を記載予定

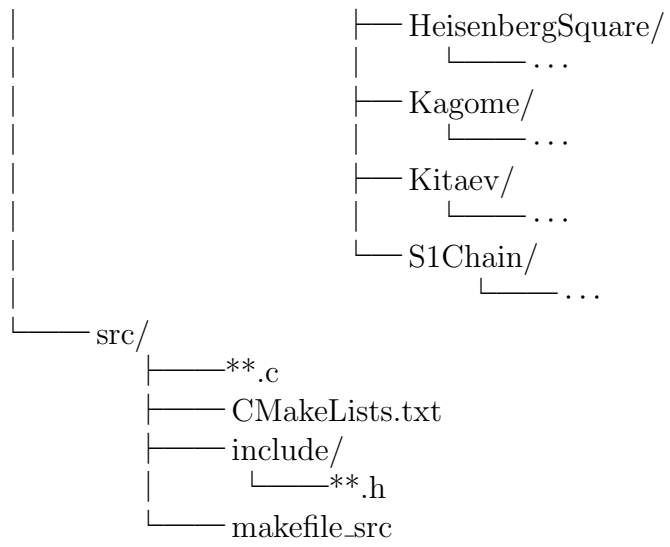
2.3 ディレクトリ構成

mVMC-xxx.gz を解凍後に構成されるディレクトリ構成を以下に示します。

以下、参考として $\mathcal{H}\Phi$ の例を記載

```
|—— CMakeLists.txt
|—— COPYING
|—— config/
|      |—— fujitsu.cmake
|      |—— gcc.cmake
|      |—— intel.cmake
|      |—— sekirei.cmake
|—— doc/
|      |—— en/
|      |—— jp/
|      |—— userguide_en.pdf
```





2.4 基本的な使い方

T.B.D.

3

チュートリアル

T.B.D

4

ファイル仕様

4.1 スタンダードモード用入力ファイル

T.B.D

4.2 エキスパートモード用入力ファイル

mVMC のエキスパートモードで使用する入力ファイル(*def) に関して説明します。入力ファイルの種別は以下の 4 つで分類されます。

(1) List:

キーワード指定なし: 使用する input file の名前のリストを書きます。なお、ファイル名は任意に指定することができます。

(2) Basic parameters:

ModPara: 計算時に必要な基本的なパラメーター(サイトの数、電子数、Lanczos ステップを何回やるかなど)を設定します。

LocSpin: 局在スピンの位置を設定します(近藤模型でのみ利用)。

(3) Set Hamiltonian:

以下のファイルを用い、Hamiltonian を電子系の表式により指定します。

Trans: $c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2}$ で表される一体項を指定します。

InterAll: $c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4}$ で表される一般二体相互作用を指定します。

なお、使用頻度の高い相互作用に関しては下記のキーワードで指定することも可能です。

CoulombIntra: $n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$ で表される相互作用を指定します ($n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$)。

CoulombInter: $n_i n_j$ で表される相互作用を指定します ($n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$)。

Hund: $n_{i\uparrow}n_{j\uparrow} + n_{i\downarrow}n_{j\downarrow}$ で表される相互作用を指定します。

PairHop: $c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}$ で表される相互作用を指定します。

Exchange: $S_i^+ S_j^-$ で表される相互作用を指定します。

(4) Set condition of variational parameters :

変分波動関数は

$$|\psi\rangle = \mathcal{P}_G \mathcal{P}_J \mathcal{P}_{d-h}^{(2)} \mathcal{P}_{d-h}^{(4)} \mathcal{L}^S \mathcal{L}^K \mathcal{L}^P |\phi_{\text{pair}}\rangle, \quad (4.1)$$

で与えられます。ここで、一体部分は実空間のペア関数

$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle, \quad (4.2)$$

を用いた波動関数で表されます。ここで N は全電子数、 N_s は全サイト数です。変分パラメータの初期値は以下のファイルを用いて指定します。

Gutzwiller: $\mathcal{P}_G = \exp[\sum_i g_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}]$ のうち、最適化の対象とする変分パラメータ g_i を指定します。

Jastrow: $\mathcal{P}_J = \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} n_{ij}\right]$ のうち、最適化の対象とする変分パラメータ v_{ij} を指定します。

DH2: $\mathcal{P}_{d-h}^{(2)} = \exp\left[\sum_t \sum_{n=0}^2 (\alpha_{2nt}^d \sum_i \xi_{i2nt}^d + \alpha_{2nt}^h \sum_i \xi_{i2nt}^h)\right]$ で表される 2 サイトの doublon-holon 相関因子を指定します。詳細は DH2 ファイルの説明を参照してください。

DH4: $\mathcal{P}_{d-h}^{(4)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^4 (\alpha_{4nt}^d \sum_i \xi_{i4nt}^d + \alpha_{4nt}^h \sum_i \xi_{i4nt}^h) \right]$ で表される 4 サイトの doublon-holon 相関因子を指定します。詳細は DH4 ファイルの説明を参照してください。

Orbital: ペア軌道 $|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle$ を設定します。

TransSym: 運動量射影 $\mathcal{L}_K = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \hat{T}_{\mathbf{R}}$ と格子対称性射影 $\mathcal{L}_P = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \hat{G}_{\alpha}$ に関する指定を行います。ここで、 \mathbf{K} は全運動量、 $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ は並進ベクトル \mathbf{R} に対応する並進演算子、 \hat{G}_{α} は格子の点群演算子、 p_{α} はパリティをそれぞれ表します。

(5) Initial variational parameters:

変分パラメータに関する初期値を与えます。キーワード指定されない場合には 0 が初期値として設定されます。

InGutzwiller: $\mathcal{P}_G = \exp \left[\sum_i g_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right]$ のうち、変分パラメータ g_i の初期値を指定します。

InJastrow: $\mathcal{P}_J = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} n_i n_j \right]$ のうち、変分パラメータ v_{ij} の初期値を指定します。

InDH2: $\mathcal{P}_{d-h}^{(2)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^2 (\alpha_{2nt}^d \sum_i \xi_{i2nt}^d + \alpha_{2nt}^h \sum_i \xi_{i2nt}^h) \right]$ で表される 2 サイトの doublon-holon 相関因子 $\alpha_{2nt}^{d(h)}$ の初期値を指定します。

InDH4: $\mathcal{P}_{d-h}^{(4)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^4 (\alpha_{4nt}^d \sum_i \xi_{i4nt}^d + \alpha_{4nt}^h \sum_i \xi_{i4nt}^h) \right]$ で表される 4 サイトの doublon-holon 相関因子 $\alpha_{4nt}^{d(h)}$ の初期値を指定します。

InOrbital: ペア軌道 $|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle$ の f_{ij} に関する初期値を設定します。

(6) Output:

OneBodyG :出力する一体 Green 関数を指定します。 $\langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \rangle$ が出力されます。

TwoBodyG :出力する二体 Green 関数を指定します。 $\langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \rangle$ が出力されます。

4.2.1 入力ファイル指定用ファイル

計算で使用する入力ファイル一式を指定します。ファイル形式に関しては、以下のようなフォーマットをしています。

```
ModPara  modpara.def
LocSpin  zlocspn.def
Trans    ztransfer.def
InterAll zinterall.def
Orbital  orbitalidx.def
OneBodyG zcisajs.def
TwoBodyG zcisajscktaltdc.def
```

ファイル形式

[string01] [string02]

パラメータ

- [string01]
形式：string 型 (固定)
説明：キーワードを指定します。
- [string02]
形式：string 型
説明：キーワードにひも付けられるファイル名を指定します (任意)。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- キーワードを記載後、半角空白を開けた後にファイル名を書きます。ファイル名は自由に設定できます。
- ファイル読込用キーワードは Table4.1 により指定します。
- 必ず指定しなければいけないキーワードは ModPara, LocSpin, Orbital です。それ以外のキーワードについては、指定がない場合はデフォルト値が採用されます (変分パラメータについては最適化されず、固定する設定となります)。詳細は各ファイルの説明を参照してください。
- 各キーワードは順不同に記述できます。
- 指定したキーワード、ファイルが存在しない場合はエラー終了します。

- # で始まる行は読み飛ばされます。

Keywords	Details for corresponding files
ModPara	Parameters for calculation.
LocSpin	Configurations of the local spins for Hamiltonian.
Trans	Transfer and chemical potential for Hamiltonian.
InterAll	Two-body interactions for Hamiltonian.
CoulombIntra	CoulombIntra interactions.
CoulombInter	CoulombInter interactions.
Hund	Hund couplings.
PairHop	Pair hopping couplings.
Exchange	Exchange couplings.
Gutzwiller	Gutzwiller factors.
Jastrow	Charge Jastrow factors.
DH2	2-site doublon-holon correlation factors.
DH4	4-site doublon-holon correlation factors.
Orbital	pair orbital factors.
TransSym	translational and lattice symmetry operation.
InGutzwiller	Initial values of Gutzwiller factors.
InJastrow	Initial values of charge Jastrow factors.
InDH2	Initial values of 2-site doublon-holon correlation factors.
InDH4	Initial values of 4-site doublon-holon correlation factors.
InOrbital	Initial values of pair orbital factors.
OneBodyG	Output components for Green functions $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$
TwoBodyG	Output components for Correlation functions $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\tau}^\dagger c_{l\tau} \rangle$

Table 4.1: List of the definition files.

4.2.2 ModPara ファイル

計算で使用するパラメータを指定します。以下のようなフォーマットをしています。

```

-----
Model_Parameters    0
-----
VMC_Cal_Parameters
-----
CDataFileHead    zvo
CParaFileHead    zqp
-----
NVMCCalMode      0
NLanczosMode     0
-----
NDataIdxStart    1
NDataQtySmp      5
-----
Nsite            16
Nelectron        8
NSPGaussLeg      1
NSPStot          0
NMPTrans         1
NSROptItrStep    1200
NSROptItrSmp     100
NSROptFixSmp     1
DSROptRedCut     0.001
DSROptStaDel     0.02
DSROptStepDt     0.02
NVMCWarmUp       10
NVMCInterval     1
NVMCSample       1000
NExUpdatePath    0
RndSeed          11272
NSplitSize       1
NStore           1

```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 - 5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行: [string01] [string02]
- 7 - 8 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)

- 9 行以降: [string01] [int01]

各項目の対応関係は以下の通りです。

- [string01]
形式：string 型 (固定)
説明：キーワードの指定を行います。
- [string02]
形式：string 型 (空白不可)
説明：アウトプットファイルのヘッダを指定します。
- [int01]
形式：int 型 (空白不可)
説明：キーワードでひも付けられるパラメータを指定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 9 行目以降ではキーワードを記載後、半角空白を開けた後に整数値を書きます。
- 行数固定で読み込みを行う為、パラメータの省略はできません。

キーワード

- CDataFileHead
形式：string 型 (空白不可、必須)
説明：アウトプットファイルのヘッダ。例えば、一体の Green 関数の出力ファイル名が **xxx_cisajs.dat** として出力されます (xxx に CDataFileHead で指定した文字が記載)。
- CParaFileHead
形式：string 型 (空白不可、必須)
説明：最適化された変分パラメータの出力ファイル名のヘッダ。最適化された変分パラメータが **xxx_opt.dat** ファイルとして出力されます (xxx に CParaFileHead で指定した文字が記載)。
- NVMCCalMode
形式：int 型 (デフォルト値 = 0)
説明：[0] 変分パラメータの最適化、[1] 1 体・2 体のグリーン関数の計算。

- NLanczosMode

形式 : int 型 (デフォルト値 = 0)

説明 : [0] 何もしない、[1] Single Lanczos Step でエネルギーまで計算、[2] Single Lanczos Step で1体・2体のグリーン関数まで計算 (条件: 1, 2 は NVMCCalMode = 1 のみ使用可能。また, pair hopping 項, exchange 項がハミルトニアンに含まれる場合は使用できません)。

- NDataIdxStart

形式 : int 型 (デフォルト値 = 0)

説明 : 出力ファイルの付加番号。NVMCCalMode = 0 の場合は NDataIdxStart が出力され、NVMCCalMode = 1 の場合は、NDataIdxStart から連番で NDataQtySmp 個のファイルを出力します。

- NDataQtySmp

形式 : int 型 (デフォルト値 = 1)

説明 : 出力ファイルのセット数。NVMCCalMode = 1 の場合に使用します。

- Nsite

形式 : int 型 (1 以上、必須)

説明 : サイト数を指定する整数。

- Nelectron

形式 : int 型 (1 以上、必須)

説明 : ↑電子の個数。 $S_z = 0$ 部分空間で計算するので、↑電子と↓電子の個数は等しい。

- NSPGaussLeg

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値 = 1)

説明 : スピン量子数射影の β 積分 (S^y 回転) の Gauss-Legendre 求積法の分点数。

- NSPStot

形式 : int 型 (0 以上、デフォルト値 = 0)

説明 : スピン量子数。

- NMPTrans

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値 = 0)

説明 : 運動量・格子対称性の量子数射影の個数。TransSym ファイルで指定した重みで上から NMPTrans 個まで使用する。射影を行わない場合は1に設定する。

- NSROptItrStep

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値 = 1000)

説明 : SR 法で最適化する場合の全ステップ数。NVMCCalMode=0 の場合のみ使用されます。

- NSROptItrSmp

形式 : int 型 (1 以上数、デフォルト値 = NSROptItrStep/10)

説明 : NSROptItrStep ステップ中、最後の NSROptItrSmp ステップでの各変分パラメータの平均値を最適値とする。NVMCCalMode=0 の場合のみ使用されます。

- NSROptFixSmp

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値 = 1)

説明 : 固定サンプルの下で何回の SR 法のステップを行うか指定。

- DSROptRedCut

形式 : double 型 (デフォルト値 = 0.001)

説明 : SR 法安定化因子。手法論文の ε_{wf} に対応。

- DSROptStaDel

形式 : double 型 (デフォルト値 = 0.02)

説明 : SR 法安定化因子。手法論文の ε に対応。

- DSROptStepDt

形式 : double 型

説明 : 要確認 (マニュアルに説明なし)

- NVMCWarmUp

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値=10)

説明 : マルコフ連鎖の空回し回数。

- NVMCInterval

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値=1)

説明 : サンプル間のステップ間隔。ローカル更新が $N_{site} \times NVMCInterval$ 回行わす。

- NVMCSample

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値=1000)

説明 : 期待値計算に使用するサンプル数。

- NExUpdatePath

形式 : int 型 (1 以上)

説明 : ローカル更新で 2 電子交換を [0] 認めない、[1] 認める。デフォルト設定は局在スピンの一つでもある場合は 1、それ以外は 0 となります。

- RndSeed

形式 : int 型

説明 : 乱数の初期 seed。MPI 並列では各計算機に RndSeed+my rank+1 で初期 seed が与えられます。

- NSplitSize

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値=1)

説明 : mpi 内部並列を行う場合の並列数。

- NStore00

形式 : int 型 (1 以上、デフォルト値=1)

説明 : 期待値 $\langle O_k O_l \rangle$ を計算するとき行列-行列積にするオプション (1 で機能 On)。

4.2.3 LocSpin 指定ファイル

局在スピンを指定します。以下のようなフォーマットをしています。

```
=====
NlocalSpin      6
=====
=====i_0LocSpn_1IteElc =====
=====
      0      1
      1      0
      2      1
      3      0
      4      1
      5      0
      6      1
      7      0
      8      1
      9      0
     10      1
     11      0
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行以降: [int02] [int03]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: 局在スピンの総数を示すキーワード (任意)。
- [int01]
形式: int 型 (空白不可)
説明: 局在スピンの総数を指定する整数。
- [int02]
形式: int 型 (空白不可)
説明: サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。

- [int03]

形式：int 型 (空白不可)

説明：局在スピンのみか遍歴電子かを指定する整数。

0: 遍歴電子

$n > 0$: $2S = n$ の局在スピン
を選択することが出来ます。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- [int01] と [int03] で指定される局在電子数の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02] の総数が全サイト数と異なる場合はエラー終了します。
- [int02] が全サイト数以上もしくは負の値をとる場合はエラー終了します。

4.2.4 Trans 指定ファイル

ここではハミルトニアン

$$H+ = - \sum_{ij\sigma_1\sigma_2} t_{ij\sigma_1\sigma_2} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \quad (4.3)$$

に対する Transfer 積分 $t_{ij\sigma_1\sigma_2}$ を指定します。以下にファイル名を記載します。

```
=====
NTransfer      24
=====
=====i_j_s_tijs=====
=====
    0      0      2      0      1.000000      0.000000
    2      0      0      0      1.000000      0.000000
    0      1      2      1      1.000000      0.000000
    2      1      0      1      1.000000      0.000000
    2      0      4      0      1.000000      0.000000
    4      0      2      0      1.000000      0.000000
    2      1      4      1      1.000000      0.000000
    4      1      2      1      1.000000      0.000000
    4      0      6      0      1.000000      0.000000
    6      0      4      0      1.000000      0.000000
    4      1      6      1      1.000000      0.000000
    6      1      4      1      1.000000      0.000000
    6      0      8      0      1.000000      0.000000
    8      0      6      0      1.000000      0.000000
...

```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行以降: [int02] [int03] [int04] [int05] [double01] [double02]

パラメータ

- [string01]
形式 : string 型 (空白不可)
説明 : Transfer 総数のキーワード名を指定します (任意)。

- [int01]
形式：int 型 (空白不可)
説明：Transfer の総数を指定します。
- [int02], [int04]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。
- [int03], [int05]
形式：int 型 (空白不可)
説明：スピンを指定する整数。
0: アップスピン
1: ダウンスピン
を選択することが出来ます。
- [double01]
形式：double 型 (空白不可)
説明： $t_{ij\sigma_1\sigma_2}$ の実部を指定します。
- [double02]
形式：double 型 (空白不可)
説明： $t_{ij\sigma_1\sigma_2}$ の虚部を指定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- Hamiltonian がエルミートという制限から $t_{ij\sigma_1\sigma_2} = t_{ji\sigma_2\sigma_1}^\dagger$ の関係を満たす必要があります。上記の関係が成立しない場合にはエラー終了します。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている Transfer の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int05] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.5 InterAll 指定ファイル

ここでは一般二体相互作用をハミルトニアンに付け加えます。付け加える項は以下で与えられます。

$$H+ = \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\sigma_4} I_{ijkl\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \quad (4.4)$$

なお、スピンに関して計算する場合には、 $i = j, k = l$ となるよう設定してください。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NInterAll      36
=====
=====zInterAll=====
=====
0   0   0   1   1   1   1   0   0.50  0.0
0   1   0   0   1   0   1   1   0.50  0.0
0   0   0   0   1   0   1   0   0.25  0.0
0   0   0   0   1   1   1   1  -0.25  0.0
0   1   0   1   1   0   1   0  -0.25  0.0
0   1   0   1   1   1   1   1   0.25  0.0
2   0   2   1   3   1   3   0   0.50  0.0
2   1   2   0   3   0   3   1   0.50  0.0
2   0   2   0   3   0   3   0   0.25  0.0
2   0   2   0   3   1   3   1  -0.25  0.0
2   1   2   1   3   0   3   0  -0.25  0.0
2   1   2   1   3   1   3   1   0.25  0.0
4   0   4   1   5   1   5   0   0.50  0.0
4   1   4   0   5   0   5   1   0.50  0.0
4   0   4   0   5   0   5   0   0.25  0.0
4   0   4   0   5   1   5   1  -0.25  0.0
4   1   4   1   5   0   5   0  -0.25  0.0
4   1   4   1   5   1   5   1   0.25  0.0
...
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行以降: [int02] [int03] [int04] [int05] [int06] [int07] [int08] [int09] [double01] [double02]

パラメータ

- [string01]
形式：string 型 (空白不可)
説明：二体相互作用の総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式：int 型 (空白不可)
説明：二体相互作用の総数を指定します。
- [int02], [int04], [int06], [int08]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。
- [int03], [int05], [int07], [int09]
形式：int 型 (空白不可)
説明：スピンを指定する整数。
0: アップスピン
1: ダウンスピン
を選択することが出来ます。
- [double01]
形式：double 型 (空白不可)
説明： $I_{ijkl\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}$ の実部を指定します。
- [double02]
形式：double 型 (空白不可)
説明： $I_{ijkl\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}$ の虚部を指定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- Hamiltonian がエルミートという制限から $I_{ijkl\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} = I_{lkji\sigma_4\sigma_3\sigma_2\sigma_1}^\dagger$ の関係を満たす必要があります。上記の関係が成立しない場合にはエラー終了します。また、エルミート共役の形式は $I_{ijkl\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4}$ に対して、 $I_{lkji\sigma_4\sigma_3\sigma_2\sigma_1} c_{l\sigma_4}^\dagger c_{k\sigma_3} c_{j\sigma_2}^\dagger c_{i\sigma_1}$ を満たすように入力してください。
- スピンに関して計算する場合、 $i = j, k = l$ を満たさないペアが存在するとエラー終了します。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。

- [int01] と定義されている InterAll の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int09] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.6 CoulombIntra 指定ファイル

オンサイトクーロン相互作用をハミルトニアンに付け加えます。付け加える項は以下で与えられます。

$$H+ = \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4.5)$$

以下にファイル例を記載します。

```
=====
NCoulombIntra 6
=====
=====i_0LocSpn_1IteElc =====
=====
  0  4.000000
  1  4.000000
  2  4.000000
  3  4.000000
  4  4.000000
  5  4.000000
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行以降: [int02] [double01]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: オンサイトクーロン相互作用の総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式: int 型 (空白不可)
説明: オンサイトクーロン相互作用の総数を指定します。
- [int02]
形式: int 型 (空白不可)
説明: サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。

- [double01]

形式：double 型 (空白不可)

説明： U_i を指定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されているオンサイトクーロン相互作用の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.7 CoulombInter 指定ファイル

オフサイトクーロン相互作用をハミルトニアンに付け加えます。付け加える項は以下で与えられます。

$$H+ = \sum_{i,j} V_{ij} n_i n_j \quad (4.6)$$

以下にファイル例を記載します。

```
=====
NCoulombInter 6
=====
=====CoulombInter =====
=====
  0      1 -0.125000
  1      2 -0.125000
  2      3 -0.125000
  3      4 -0.125000
  4      5 -0.125000
  5      0 -0.125000
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2行: [string01] [int01]
- 3-5行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6行以降: [int02] [int03] [double01]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: オフサイトクーロン相互作用の総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式: int 型 (空白不可)
説明: オフサイトクーロン相互作用の総数を指定します。
- [int02], [int03]
形式: int 型 (空白不可)
説明: サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。

- [double01]

形式：double 型 (空白不可)

説明： V_{ij} を指定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されているオフサイトクーロン相互作用の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int03] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.8 Hund 指定ファイル

Hund カップリングをハミルトニアンに付け加えます。付け加える項は以下で与えられます。

$$H+ = - \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Hund}} (n_{i\uparrow} n_{j\uparrow} + n_{i\downarrow} n_{j\downarrow}) \quad (4.7)$$

以下にファイル例を記載します。

```
=====
NHund 6
=====
=====Hund =====
=====
  0      1 -0.250000
  1      2 -0.250000
  2      3 -0.250000
  3      4 -0.250000
  4      5 -0.250000
  5      0 -0.250000
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行以降: [int02] [int03] [double01]

パラメータ

- [string01]

形式 : string 型 (空白不可)

説明 : Hund カップリングの総数のキーワード名を指定します (任意)。

- [int01]

形式 : int 型 (空白不可)

説明 : Hund カップリングの総数を指定します。

- [int02], [int03]

形式 : int 型 (空白不可)

説明 : サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。

- [double01]

形式：double 型 (空白不可)

説明： J_{ij}^{Hund} を指定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている Hund カップリングの総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int03] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.9 PairHop 指定ファイル

PairHop カップリングをハミルトニアンに付け加えます。付け加える項は以下で与えられます。

$$H+ = \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Pair}} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} \quad (4.8)$$

以下にファイル例を記載します。

```
=====
NPairhop 12
=====
=====Pairhop =====
=====
  0      1  0.50000
  1      0  0.50000
  1      2  0.50000
  2      1  0.50000
  2      3  0.50000
  3      2  0.50000
  3      4  0.50000
  4      3  0.50000
  4      5  0.50000
  5      4  0.50000
  5      0  0.50000
  0      5  0.50000
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行以降: [int02] [int03] [double01]

パラメータ

- [string01]
形式 : string 型 (空白不可)
説明 : PairHop カップリングの総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式 : int 型 (空白不可)
説明 : PairHop カップリングの総数を指定します。

- [int02], [int03]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。
- [double01]
形式：double 型 (空白不可)
説明： J_{ij}^{Pair} を指定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている PairHop カップリングの総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int03] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.10 Exchange 指定ファイル

Exchange カップリングをハミルトニアンに付け加えます。電子系の場合には

$$H+ = \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Ex}} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}) \quad (4.9)$$

が付け加えられ、スピン系の場合には

$$H+ = \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Ex}} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \quad (4.10)$$

が付け加えられます。スピン系の $(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$ を電子系の演算子で書き直すと、 $-(c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow})$ となることに注意して下さい。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NExchange 6
=====
=====Exchange =====
=====
  0      1  0.50000
  1      2  0.50000
  2      3  0.50000
  3      4  0.50000
  4      5  0.50000
  5      0  0.50000
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 行: ヘッダ (何かが書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何かが書かれても問題ありません)。
- 6 行以降: [int02] [int03] [double01]

パラメータ

- [string01]
形式 : string 型 (空白不可)
説明 : Exchange カップリングの総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式 : int 型 (空白不可)
説明 : Exchange カップリングの総数を指定します。

- [int02], [int03]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。
- [double01]
形式：double 型 (空白不可)
説明： J_{ij}^{Ex} を指定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている Exchange カップリングの総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int03] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.11 Gutzwiller 指定ファイル

Gutzwiller 因子

$$\mathcal{P}_G = \exp \left[\sum_i g_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right] \quad (4.11)$$

の設定を行います。指定するパラメータはサイト番号 i と g_i の変分パラメータの番号です。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NGutzwillerIdx 2
=====
===== Gutzwiller =====
=====
  1
  0      0
  1      0
  2      0
  3      1
(continue...)
12      1
13      0
14      0
15      0
  0      1
  1      0
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数、 N_g は変分パラメータの種類の数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行: [int02]
- 7 - 6+ N_s 行: [int03] [int04]
- 7+ N_s - 6+ N_s + N_g 行: [int05] [int06]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: g_i の変分パラメータの種類の総数のキーワード名を指定します (任意)。

- [int01]
形式：int 型 (空白不可)
説明： g_i の変分パラメータの種類の総数を指定します。
- [int02]
形式：int 型 (空白不可)
説明：変分パラメータの型を指定する整数。0 が実数、1 が複素数に対応します。
- [int03]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 `Nsite` 未満で指定します。
- [int04]
形式：int 型 (空白不可)
説明： g_i の変分パラメータの種類を表します。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int05]
形式：int 型 (空白不可)
説明： g_i の変分パラメータの種類を表します (最適化有無の設定用)。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int06]
形式：int 型 (空白不可)
説明：[int05] で指定した g_i の変分パラメータの最適化有無を設定します。最適化する場合は 1、最適化しない場合は 0 とします。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの種類の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int06] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.12 Jastrow 指定ファイル

Jastrow 因子

$$\mathcal{P}_J = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} n_i n_j \right] \quad (4.12)$$

の設定を行います。指定するパラメータはサイト番号 i, j と v_{ij} の変分パラメータの番号です。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NJastrowIdx 5
=====
== i_j_JastrowIdx ==
=====
    0
    0      1      0
    0      2      1
    0      3      0
  (continue...)
    0      1
    1      1
    2      1
    3      1
    4      1
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数、 N_j は変分パラメータの種類の数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行: [int02]
- 7 - 6 + $N_s \times (N_s - 1)$ 行: [int03] [int04] [int05]
- 7 + $N_s \times (N_s - 1) - 6 + N_s \times (N_s - 1) + N_j$ 行: [int06] [int07]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: v_{ij} の変分パラメータの種類の総数のキーワード名を指定します (任意)。

- [int01]
形式：int 型 (空白不可)
説明： v_{ij} の変分パラメータの種類の総数を指定します。
- [int02]
形式：int 型 (空白不可)
説明： v_{ij} の変分パラメータの型を指定します。0 が実数、1 が複素数に対応します。
- [int03], [int04]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 `Nsite` 未満で指定します。
- [int05]
形式：int 型 (空白不可)
説明： v_{ij} の変分パラメータの種類を表します。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int06]
形式：int 型 (空白不可)
説明： v_{ij} の変分パラメータの種類を表します (最適化有無の設定用)。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int07]
形式：int 型 (空白不可)
説明：[int06] で指定した v_{ij} の変分パラメータの最適化有無を設定します。最適化する場合は 1、最適化しない場合は 0 とします。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの種類の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int07] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.13 DH2 指定ファイル

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(2)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^2 (\alpha_{2nt}^d \sum_i \xi_{i2nt}^d + \alpha_{2nt}^h \sum_i \xi_{i2nt}^h) \right] \quad (4.13)$$

で表される 2 サイトの doublon-holon 相関因子の設定を行います。指定するパラメータはサイト番号 i とその周囲 2 サイト、 $\alpha_{2nt}^{d,h}$ の変分パラメータの番号で、変分パラメータは各サイト毎に t 種類設定します。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NDoublonHolon2siteIdx 2
=====
== i_xi_xi_DoublonHolon2siteIdx ==
=====
0
0    5    15    0
0    13    7    1
1    6    12    0
1    14    4    1
(continue...)
15    0    10    0
15    8    2    1
0    1
1    1
2    1
(continue...)
10    1
11    1
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数、 N_{dh2} は変分パラメータの種類の数)。

- 1 行: ヘッダ (何かが書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何かが書かれても問題ありません)。
- 6 行: [int02]
- 7 - $6 + N_s \times N_{dh2}$ 行: [int03] [int04] [int05] [int06]
- $7 + N_s \times N_{dh2} - 6 + (N_s + 6) \times N_{dh2}$ 行: [int07] [int08]

パラメータ

- [string01]
 形式 : string 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータのセット総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータのセット総数を指定します。
- [int02]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータの型を指定します。0 が実数、1 が複素数に対応します。
- [int03], [int04], [int05]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。
- [int06]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータの種類を表します。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int07]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータの種類を表します (最適化有無の設定用)。値は
 - n : 周囲の doublon(holon) 数 (0, 1, 2)
 - s : 中心が doublon の場合 0, 中心が holon の場合 1
 - t : 変分パラメータのセット番号 (0, \dots [int1]-1)
 として、 $(2n + s) \times [\text{int01}] + t$ を設定します。
- [int08]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : [int07] で指定した変分パラメータの最適化有無を設定します。最適化
 する場合は 1、最適化しない場合は 0 とします。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの種類の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int08] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.14 DH4 指定ファイル

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(4)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^4 (\alpha_{4nt}^d \sum_i \xi_{i4nt}^d + \alpha_{4nt}^h \sum_i \xi_{i4nt}^h) \right] \quad (4.14)$$

で表される4サイトの doublon-holon 相関因子の設定を行います。指定するパラメータはサイト番号 i とその周囲4サイト、 $\alpha_{4nt}^{d,h}$ の変分パラメータの番号で、変分パラメータは各サイト毎に t 種類設定します。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NDoublonHolon4siteIdx 1
=====
== i_xi_xi_DoublonHolon4siteIdx ==
=====
0
0      1      3      4      12      0
1      2      0      5      13      0
2      3      1      6      14      0
3      0      2      7      15      0
(continue...)
14     15     13      2      10      0
15     12     14      3      11      0
0       1
1       1
(continue...)
8       1
9       1
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数、 N_{dh4} は変分パラメータの種類の数)。

- 1行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2行: [string01] [int01]
- 3-5行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6行: [int02]
- 7 - $6 + N_s \times N_{dh4}$ 行: [int03] [int04] [int05] [int06] [int07] [int08]
- $7 + N_s \times N_{dh4} - 6 + (N_s + 10) \times N_{dh4}$ 行: [int09] [int10]

パラメータ

- [string01]
 形式 : string 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータのセット総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータのセット総数を指定します。
- [int02]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータの型を指定します。0 が実数、1 が複素数に対応します。
- [int03], [int04], [int05], [int06], [int07]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。
- [int08]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータの種類を表します。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int09]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : 変分パラメータの種類を表します (最適化有無の設定用)。値は
 - n : 周囲の doublon(holon) 数 (0, 1, 2, 3, 4)
 - s : 中心が doublon の場合 0, 中心が holon の場合 1
 - t : 変分パラメータのセット番号 (0, \dots [int1]-1)
 として、 $(2n + s) \times [\text{int01}] + t$ を設定します。
- [int10]
 形式 : int 型 (空白不可)
 説明 : [int09] で指定した変分パラメータの最適化有無を設定します。最適化
 する場合は 1、最適化しない場合は 0 とします。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの種類の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int10] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.15 Orbital 指定ファイル

$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle \quad (4.15)$$

で表されるペア軌道の設定を行います。指定するパラメータはサイト番号 i, j と変分パラメータの種類を設定します。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NOrbitalIdx 64
=====
== i_j_OrbitalIdx ==
=====
  1
  0      0      0
  0      1      1
  0      2      2
  0      3      3
  (continue...)
 15      9      62
 15     10      63
  0      1
  1      1
  (continue...)
 62      1
 63      1
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数、 N_o は変分パラメータの種類の数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 行: [int02]
- 7 - $6+N_s^2$ 行: [int03] [int04] [int05]
- $7+N_s^2 - 6+N_s^2 + N_o$ 行: [int06] [int07]

パラメータ

- [string01]
形式：string 型 (空白不可)
説明：変分パラメータのセット総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式：int 型 (空白不可)
説明：変分パラメータのセット総数を指定します。
- [int02]
形式：int 型 (空白不可)
説明：変分パラメータの型を指定します。0 が実数、1 が複素数に対応します。
- [int03], [int04]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。
- [int05]
形式：int 型 (空白不可)
説明：変分パラメータの種類を表します。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int06]
形式：int 型 (空白不可)
説明：変分パラメータの種類を表します (最適化有無の設定用)。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int07]
形式：int 型 (空白不可)
説明：[int06] で指定した変分パラメータの最適化有無を設定します。最適化する場合は 1、最適化しない場合は 0 とします。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの種類の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int07] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.16 TransSym 指定ファイル

運動量射影 $\mathcal{L}_K = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \hat{T}_{\mathbf{R}}$ と格子対称性射影 $\mathcal{L}_P = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \hat{G}_{\alpha}$ について、重みとサイト番号に関する指定を行います。射影するパターンは (α, \mathbf{R}) で指定されます。射影を行わない場合も重み 1.0 で“恒等演算”を指定してください。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NQPTrans 4
=====
== TrIdx_TrWeight_and_TrIdx_i_xi ==
=====
  0  1.000000
  1  1.000000
  2  1.000000
  3  1.000000
  0    0    0
  (continue...)
  3   12    1
  3   13    2
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数、 N_{TS} は射影演算子の種類の総数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - 5 + N_{TS} 行: [int02] [double01]
- 6 + N_{TS} - 5 + $(N_s + 1) \times N_{TS}$ 行: [int03] [int04] [int05]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: 射影パターンの総数に関するキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式: int 型 (空白不可)
説明: 射影パターンの総数を指定します。

- [int02]
形式：int 型 (空白不可)
説明：射影パターン (α, \mathbf{R}) を指定する整数。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [double01]
形式：double 型 (空白不可)
説明：射影パターン (α, \mathbf{R}) の重み $p_\alpha \cos(\mathbf{K} \cdot \alpha)$ を指定します。
- [int03]
形式：int 型 (空白不可)
説明：射影パターン (α, \mathbf{R}) を指定する整数。0 以上 [int01] 未満で指定します。
- [int04], [int05]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。[int03] で指定した並進・点群移動をサイト番号 [int04] に作用させた場合の行き先が、サイト番号 [int05] となるように設定します。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている射影パターンの総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int05] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.17 InGutzwiller 指定ファイル

$$\mathcal{P}_G = \exp \left[\sum_i g_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right] \quad (4.16)$$

の g_i について初期値を設定します。
以下にファイル例を記載します。

```
=====
NGutzwillerIdx  16
=====
===== Gutzwiller =====
=====
    0      0.0      0.0
    1      0.1      0.0
    2      0.0      0.0
    3      0.1      0.0
  (continue...)
   15      0.1      0.0
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - 5 + N_s 行: [int02] [double01] [double02]

パラメータ

- [string01]
形式 : string 型 (空白不可)
説明 : g_i の変分パラメータ総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式 : int 型 (空白不可)
説明 : g_i の変分パラメータ総数を指定します。
- [int02]
形式 : int 型 (空白不可)
説明 : サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。

- [double01], [double02]

形式 : double 型 (空白不可)

説明 : g_i の初期値を与えます。[double01] が実部、[double02] が虚部を与えます。Gutzwiller 指定ファイルで型を実部に指定している場合は [double02] の値は破棄されます。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの総数が異なる場合はエラー終了します。
- Gutzwiller 指定ファイルで紐付けされるサイト番号とパラメータの種類と、入力ファイルで指定されるパラメータの値の整合性がとれない場合は警告を出します。その際、入力値としては平均された値が採用されます。例えば、Gutzwiller 指定ファイルで i, j サイトのパラメータの種類が共通の 0 に指定されているにも関わらず、入力ファイルで i, j サイトの値が異なる場合には警告が出されます。

4.2.18 InJastrow 指定ファイル

Jastrow 因子

$$\mathcal{P}_J = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} n_i n_j \right] \quad (4.17)$$

の v_{ij} について初期値の設定を行います。

```
=====
NJastrowIdx 240
=====
== i_j_JastrowIdx ==
=====
    0      1      0.0    0.0
    0      2      1.0    0.0
    0      3      0.0    0.0
  (continue...)
   16     14      0.0    0.0
   16     15      0.0    0.0
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - 5 + $N_s * (N_s - 1)$ 行: [int02] [int03] [double01] [double02]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: v_{ij} の変分パラメータ総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式: int 型 (空白不可)
説明: v_{ij} の変分パラメータ総数を指定します。
- [int02], [int03]
形式: int 型 (空白不可)
説明: サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。

- [double01], [double02]

形式 : double 型 (空白不可)

説明 : v_{ij} の初期値を与えます。[double01] が実部、[double02] が虚部を与えます。Jastrow 指定ファイルで型を実部に指定している場合は [double02] の値は破棄されます。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの総数が異なる場合はエラー終了します。
- Jastrow 指定ファイルで紐付けされるサイト番号とパラメータの種類と、入力ファイルで指定されるパラメータの値の整合性がとれない場合は警告を出します。その際、入力値としては平均された値が採用されます。

4.2.19 InDH2 指定ファイル

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(2)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^2 (\alpha_{2nt}^d \sum_i \xi_{i2nt}^d + \alpha_{2nt}^h \sum_i \xi_{i2nt}^h) \right] \quad (4.18)$$

で表される 2 サイトの doublon-holon 相関因子の初期値設定を行います。指定するパラメータは (n, t, s) ($s=0$ は中心が doublon、1 は中心が holon) に対応する番号と、 $\alpha_{2nt}^{d,h}$ の初期値です。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NDoublonHolon2siteIdx 32
=====
== i_xi_xi_DoublonHolon2siteIdx ==
=====
    0    0.0    0.0
    1    0.0    0.0
    2    1.0    0.0
(continue...)
   10    0.0    0.0
   11    1.0    0.0
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数、 N_{dh2} は変分パラメータの種類の数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - 5+ N_{dh2} 行: [int02] [double01] [double02]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: 変分パラメータのセット総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式: int 型 (空白不可)
説明: 変分パラメータのセット総数を指定します。

- [int02]

形式：int 型 (空白不可)

説明：DH2 指定ファイル内の変分パラメータの種類 ([int07]) を指定します。値は 0 以上 [int01] 未満です。

- [double01], [double02]

形式：double 型 (空白不可)

説明：[double01] が実部、[double02] が虚部を与えます。DH2 指定ファイルで型を実部に指定している場合は [double02] の値は破棄されます。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの種類の総数が異なる場合はエラー終了します。

4.2.20 InDH4 指定ファイル

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(4)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^4 (\alpha_{4nt}^d \sum_i \xi_{i4nt}^d + \alpha_{4nt}^h \sum_i \xi_{i4nt}^h) \right] \quad (4.19)$$

で表される 4 サイトの doublon-holon 相関因子の設定を行います。。指定するパラメータは (n, t, s) ($s=0$ は中心が doublon、1 は中心が holon) に対応する番号と、 $\alpha_{4nt}^{d,h}$ の変分パラメータの初期値です。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NDoublonHolon4siteIdx 10
=====
== i_xi_xi_DoublonHolon4siteIdx ==
=====
    0      1.0      0.0
    1      0.0      0.0
(continue...)
    8      1.0      0.0
    9      0.0      0.0
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_{dh4} は変分パラメータの総数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - 6+ N_{dh4} 行: [int02] [double01] [double02]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: 変分パラメータのセット総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式: int 型 (空白不可)
説明: 変分パラメータのセット総数を指定します。
- [int02]
形式: int 型 (空白不可)
説明: DH4 指定ファイル内の変分パラメータの種類 ([int09]) を指定します。値は 0 以上 [int01] 未満です。

- [double01], [double02]

形式：double 型 (空白不可)

説明：[double01] が実部、[double02] が虚部を与えます。DH4 指定ファイルで型を実部に指定している場合は [double02] の値は破棄されます。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの種類の総数が異なる場合はエラー終了します。

4.2.21 InOrbital 指定ファイル

$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle \quad (4.20)$$

で表されるペア軌道の設定を行います。指定するパラメータはサイト番号 i, j と変分パラメータ f_{ij} の初期値を設定します。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NOrbitalIdx 64
=====
== i_j_OrbitalIdx ==
=====
    0      0      0.1    0.0
    0      1      0.1    0.0
    0      2      0.1    0.0
    0      3      0.1    0.0
  (continue...)
   15      9      0.2    0.0
   15     10      0.2    0.0
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります (N_s はサイト数)。

- 1 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - 5+ N_s^2 行: [int02] [int03] [double01] [double02]

パラメータ

- [string01]
形式: string 型 (空白不可)
説明: 変分パラメータのセット総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式: int 型 (空白不可)
説明: 変分パラメータのセット総数を指定します。
- [int02], [int03]
形式: int 型 (空白不可)
説明: サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。

- [double01], [double02]

形式：double 型 (空白不可)

説明：[double01] が実部、[double02] が虚部を与えます。DH4 指定ファイルで型を実部に指定している場合は [double02] の値は破棄されます。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている変分パラメータの種類の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02], [int03] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。
- Orbital 指定ファイルで紐付けされるサイト番号とパラメータの種類と、入力ファイルで指定されるパラメータの値の整合性がとれない場合は警告を出します。その際、入力値としては平均された値が採用されます。

4.2.22 OneBodyG 指定ファイル

一体グリーン関数 $\langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \rangle$ を計算します。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NCisAjs          24
=====
===== Green functions =====
=====
  0      0      0      0
  0      1      0      1
  1      0      1      0
  1      1      1      1
  2      0      2      0
  2      1      2      1
  3      0      3      0
  3      1      3      1
  4      0      4      0
  4      1      4      1
  5      0      5      0
  5      1      5      1
  6      0      6      0
  6      1      6      1
  7      0      7      0
  7      1      7      1
  8      0      8      0
  8      1      8      1
  9      0      9      0
  9      1      9      1
 10      0     10      0
 10      1     10      1
 11      0     11      0
 11      1     11      1
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1 行: ヘッダ (何かが書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3-5 行: ヘッダ (何かが書かれても問題ありません)。
- 6 行以降: [int02] [int03] [int04] [int05]

パラメータ

- [string01]
形式：string 型 (空白不可)
説明：一体グリーン関数成分総数のキーワード名を指定します (任意)。
- [int01]
形式：int 型 (空白不可)
説明：一体グリーン関数成分の総数を指定します。
- [int02], [int04]
形式：int 型 (空白不可)
説明：サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します。
- [int03], [int05]
形式：int 型 (空白不可)
説明：スピンを指定する整数。
0: アップスピン
1: ダウンスピン
を選択することが出来ます。

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- [int01] と定義されている一体グリーン関数成分の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int05] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.2.23 TwoBodyG 指定ファイル

二体グリーン関数 $\langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \rangle$ を計算します。なお、スピンに関して計算する場合には、 $i = j, k = l$ となるよう設定してください。以下にファイル例を記載します。

```
=====
NCisAjsCktAltDC          576
=====
===== Green functions for Sq AND Nq =====
=====
  0      0      0      0      0      0      0      0
  0      0      0      0      0      1      0      1
  0      0      0      0      1      0      1      0
  0      0      0      0      1      1      1      1
  0      0      0      0      2      0      2      0
  0      0      0      0      2      1      2      1
  0      0      0      0      3      0      3      0
  0      0      0      0      3      1      3      1
  0      0      0      0      4      0      4      0
  0      0      0      0      4      1      4      1
  0      0      0      0      5      0      5      0
  0      0      0      0      5      1      5      1
  0      0      0      0      6      0      6      0
  0      0      0      0      6      1      6      1
  0      0      0      0      7      0      7      0
  0      0      0      0      7      1      7      1
  0      0      0      0      8      0      8      0
  0      0      0      0      8      1      8      1
  0      0      0      0      9      0      9      0
  0      0      0      0      9      1      9      1
  0      0      0      0     10      0     10      0
  0      0      0      0     10      1     10      1
  0      0      0      0     11      0     11      0
  0      0      0      0     11      1     11      1
  0      1      0      1      0      0      0      0
  ...
```

ファイル形式

以下のように行数に応じ異なる形式をとります。

- 1行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 2行: [string01] [int01]
- 3-5行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。

- 6 行以降: [int02] [int03] [int04] [int05] [int06] [int07] [int08] [int09]

パラメータ

- [string01]
形式 : string 型 (空白不可)
説明 : 二体グリーン関数成分総数のキーワード名を指定します (任意).
- [int01]
形式 : int 型 (空白不可)
説明 : 二体グリーン関数成分の総数を指定します.
- [int02], [int04], [int06], [int08]
形式 : int 型 (空白不可)
説明 : サイト番号を指定する整数。0 以上 Nsite 未満で指定します.
- [int03], [int05], [int07], [int09]
形式 : int 型 (空白不可)
説明 : スピンを指定する整数。
0: アップスピン
1: ダウンスピン
を選択することが出来ます.

使用ルール

本ファイルを使用するにあたってのルールは以下の通りです。

- 行数固定で読み込みを行う為、ヘッダの省略はできません。
- 成分が重複して指定された場合にはエラー終了します。
- スピンに関して計算する場合、 $i = j, k = l$ を満たさない場合ペアが存在するとエラー終了します。
- [int01] と定義されている二体グリーン関数成分の総数が異なる場合はエラー終了します。
- [int02]-[int09] を指定する際、範囲外の整数を指定した場合はエラー終了します。

4.3 出力ファイル

T.B.D

4.4 エラーメッセージ一覧

T.B.D

5

アルゴリズム

T.B.D

6

謝辞

T.B.D