

汎用多変数変分モンテカルロ mVMC
入力ファイル設計書 ver. 0.2.1

June, 08, 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
4.1.1	計算の種類に関する必須パラメーター	9
4.1.2	格子に関するパラメーター	9
4.1.3	副格子	13
4.1.4	保存量に関するパラメーター	13
4.1.5	ハミルトニアン各项の係数	13
4.1.6	計算条件のパラメーター	17
4.2	エキスパートモード用入力ファイル	20
4.2.1	入力ファイル指定用ファイル	22
4.2.2	ModPara ファイル	24
4.2.3	LocSpin 指定ファイル	29
4.2.4	Trans 指定ファイル	31

4.2.5	InterAll 指定ファイル	33
4.2.6	CoulombIntra 指定ファイル	36
4.2.7	CoulombInter 指定ファイル	38
4.2.8	Hund 指定ファイル	40
4.2.9	PairHop 指定ファイル	42
4.2.10	Exchange 指定ファイル	44
4.2.11	Gutzwiller 指定ファイル	46
4.2.12	Jastrow 指定ファイル	48
4.2.13	DH2 指定ファイル	50
4.2.14	DH4 指定ファイル	53
4.2.15	Orbital 指定ファイル	56
4.2.16	TransSym 指定ファイル	58
4.2.17	InGutzwiller 指定ファイル	60
4.2.18	InJastrow 指定ファイル	62
4.2.19	InDH2 指定ファイル	64
4.2.20	InDH4 指定ファイル	66
4.2.21	InOrbital 指定ファイル	68
4.2.22	OneBodyG 指定ファイル	70
4.2.23	TwoBodyG 指定ファイル	72
4.3	出力ファイル	74
4.4	エラーメッセージ一覧	75
5	アルゴリズム	76
5.1	Bogoliubov 表現	76
6	謝辞	77

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
```

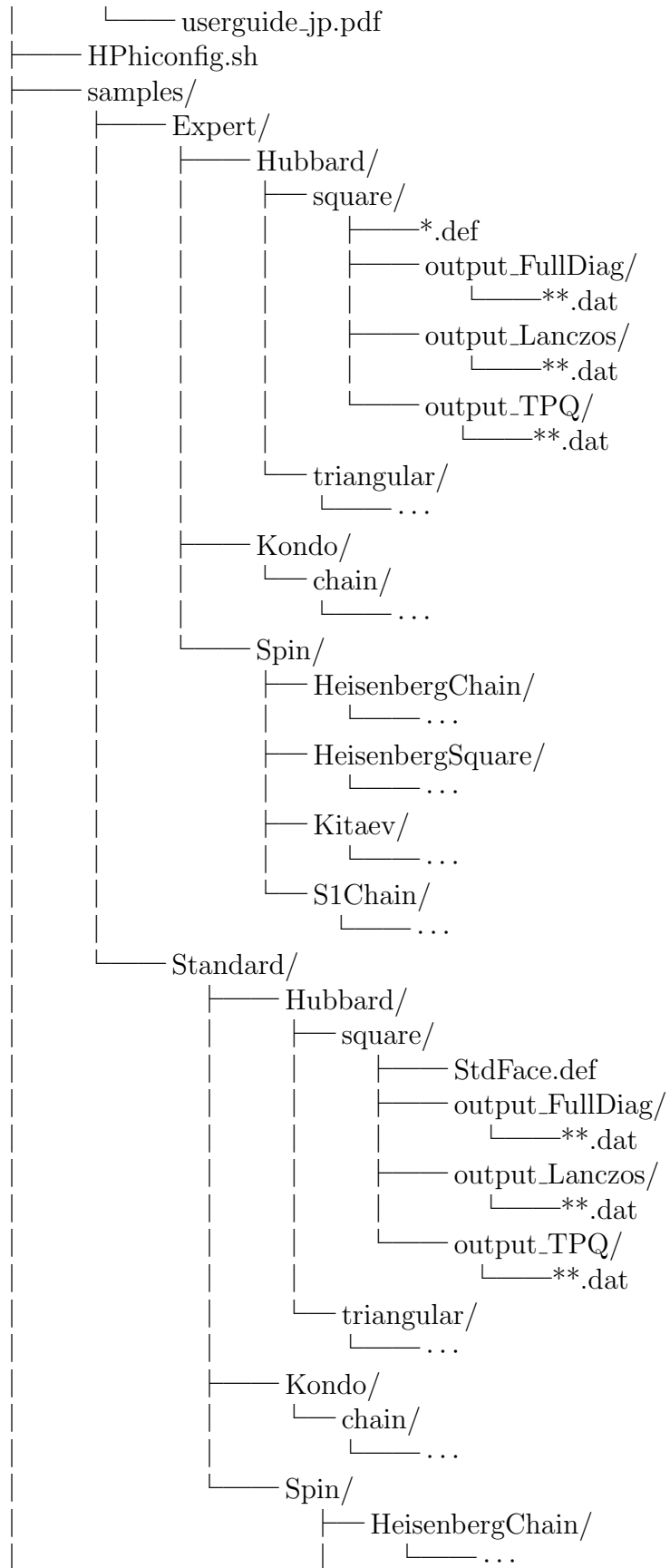
以下、make と cmake でのコンパイル方法を記載予定

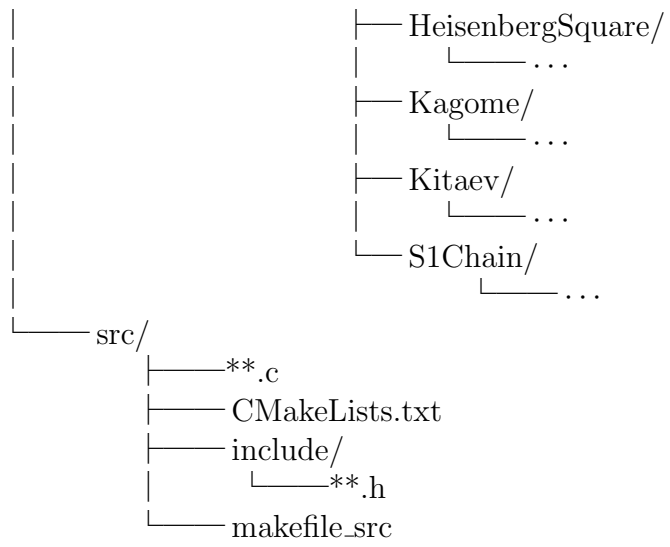
2.3 ディレクトリ構成

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 $\hat{H}\Phi$ 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

スタンダードモード用入力ファイルは次のような格好をしています。

```
W = 2
L = 4
model = "spin"

lattice = "triangular lattice"
//mu = 1.0
// t = -1.0
// t' = -0.5
// U = 8.0
//V = 4.0
//V'=2.0
J = -1.0
J'=-0.5
// nelec = 8
2Sz = 0
```

大まかなルールは次のとおりです。

- 各行にはひと組ずつキーワード(=の前)とパラメーター(=の後)が書かれており間は=で区切られています。
- 各キーワードは順不同に記述できます。
- 空白行、または//で始まる行(コメントアウト)は読み飛ばされます。
- 各キーワード、パラメーターの大文字・小文字は区別されません。ダブルクォート、空白は無視されます。
- 必ず指定しなければならないパラメーター、指定しない場合デフォルト値が使われるパラメーター、(他のパラメーターの組み合わせによっては)使われないパラメーターが存在します。使われないパラメーターが指定された場合にはプログラムは終了し、入力ファイルをチェックするようにというメッセージが表示されます。

次に各キーワードの説明をします。

4.1.1 計算の種類に関する必須パラメーター

- model

形式：文字列 ("Fermion Hubbard", "Spin", "Kondo Lattice", "Fermion HubbardGC", "SpinGC", "Kondo LatticeGC" のいずれか)

説明：計算対象のモデルを指定します。上記の文字列はそれぞれカノニカル集団のフェルミ粒子 Hubbard 模型

$$H = -\mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j, \quad (4.1)$$

同じくカノニカル集団のスピン模型 ($\{\sigma_1, \sigma_2\} = x, y, z$)

$$H = -h \sum_i S_{iz} - \Gamma \sum_i S_{ix} + D \sum_i S_{iz} S_{iz} + \sum_{ij, \sigma_1} J_{ij\sigma_1} S_{i\sigma_1} S_{j\sigma_1} + \sum_{ij, \sigma_1 \neq \sigma_2} J_{ij\sigma_1\sigma_2} S_{i\sigma_1} S_{j\sigma_2}, \quad (4.2)$$

カノニカル集団の近藤格子模型 (Hubbard 模型と同様に U と J を入れることも可能)

$$H = -\mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{J}{2} \sum_i \left\{ S_i^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + S_{iz} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \right\} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j, \quad (4.3)$$

グランドカノニカル集団のフェルミ粒子 Hubbard 模型 [式 (4.1)]、グランドカノニカル集団のスピン模型 [式 (4.2)]、グランドカノニカル集団の近藤格子模型 [式 (4.3)] に対応します。

- lattice

形式：文字列 ("Chain Lattice", "Square Lattice", "Triangular Lattice", "Honeycomb Lattice", "Ladder", "Kagome" のいずれか)

説明：格子の形状を指定します。上記文字列はそれぞれ1次元鎖 (Fig. 4.1(a))、2次元正方格子 (Fig. 4.1(b))、2次元三角格子 (Fig. 4.1(c))、2次元異方的蜂の巣格子 (Fig. 4.2)、梯子格子 (Fig. 4.4)、カゴメ格子 (Fig. 4.3) に対応します。

形式：正の整数 (デフォルト値は1)

説明：スピン模型での局在スピンの大きさ S の2倍を指定します。(例/ 1/2 スピンならば1)

4.1.2 格子に関するパラメーター

1次元鎖 [Fig. 4.1(a)]

- L

形式：自然数

説明：鎖の長さを指定します。

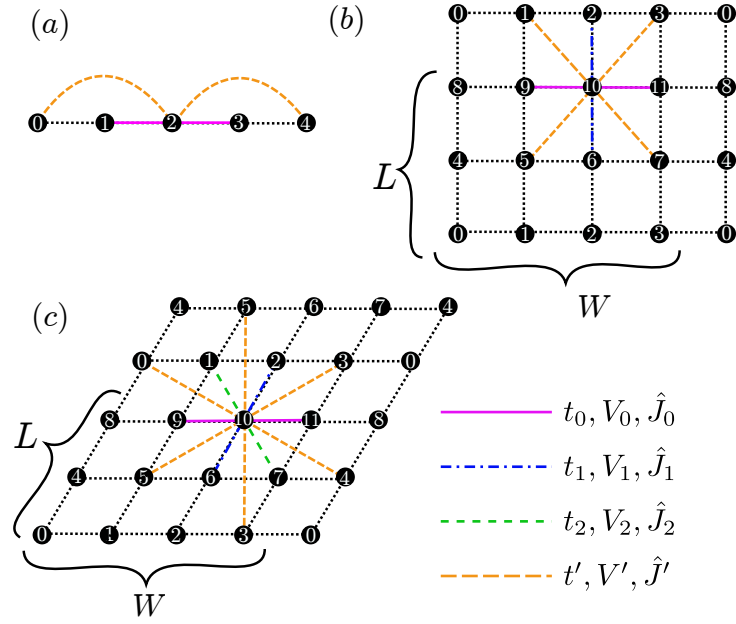


Figure 4.1: (a)1次元鎖、(b)2次元正方格子、(c)2次元三角格子の模式図。ホッピング積分、オフサイトクーロン積分、スピン結合は、再近接サイト間 (マゼンタの実線) ではそれぞれ t, V, J となり、次近接サイト間 (緑の破線) ではそれぞれ t', V', J' となります。

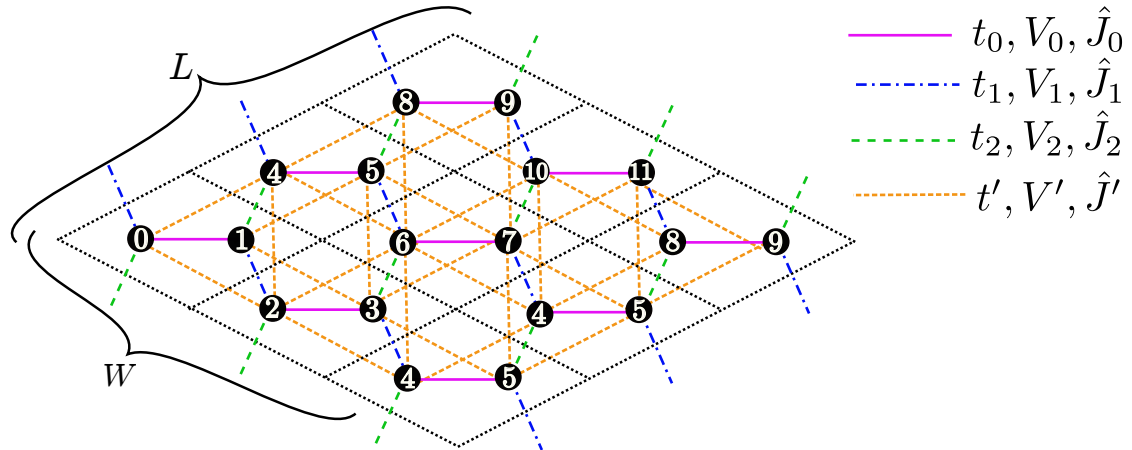


Figure 4.2: 2次元異方的蜂の巣格子の模式図。ホッピング積分、オフサイトクーロン積分、スピン結合は、ボンドの方向によって異なります。また、次近接のホッピング積分、オフサイトクーロン積分、スピン結合には対応していません。

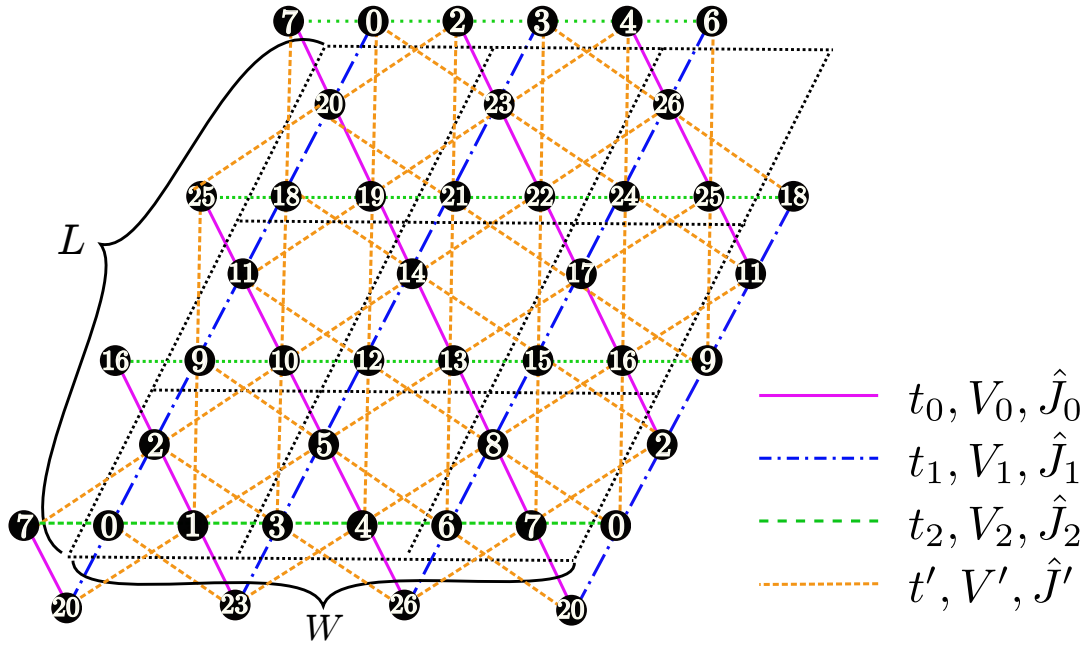


Figure 4.3: カゴメ格子の模式図.

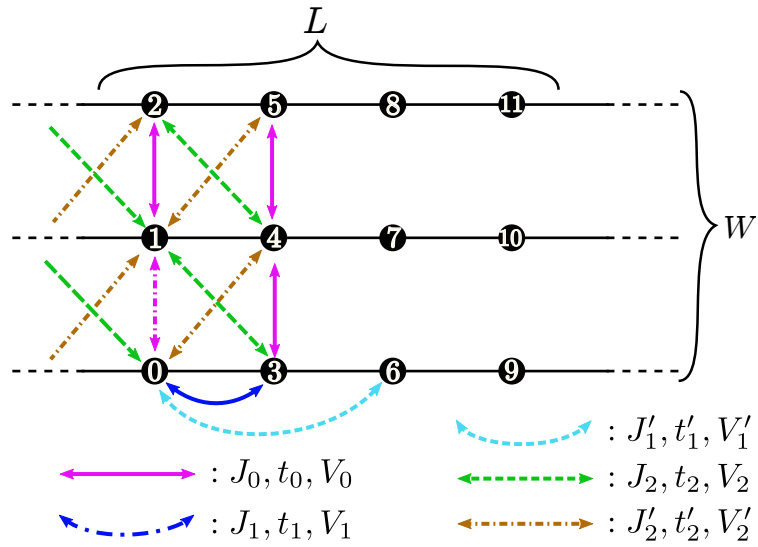


Figure 4.4: 梯子格子の模式図.

梯子格子 (Fig. 4.4)

- L
形式：自然数
説明：梯子の長さを指定します.
- W
形式：自然数
説明：梯子の本数を指定します.

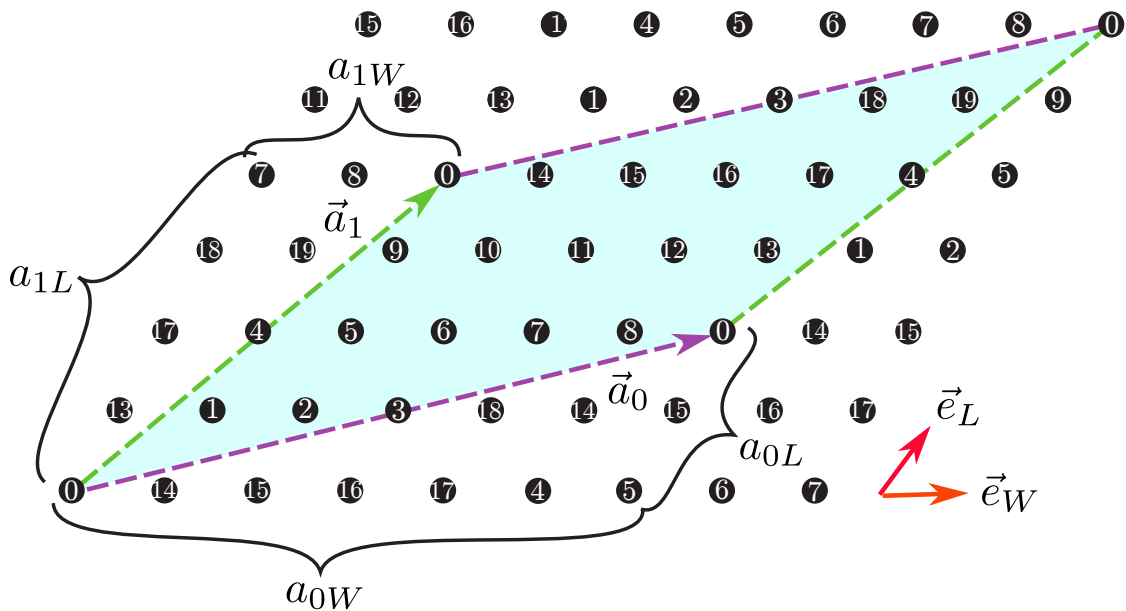


Figure 4.5: 三角格子において、 $\mathbf{a}_0 = (6, 2)$, $\mathbf{a}_1 = (2, 4)$ とした場合のセル形状。 \mathbf{a}_0 (マゼンタ) および \mathbf{a}_1 (グリーン) で囲まれた部分 (サイト数は 20) が計算するセルとなる。

矩形格子 [Fig. 4.1(b)]、三角格子 [Fig. 4.1(c)]、蜂の巣格子 (Fig. 4.2)、カゴメ格子 (Fig. 4.3)

これらの格子では、標準の単位胞 (図中の黒の破線を参照) を用いて格子形状を指定する方法と、それらとは別の方向に格子ベクトルを取る方法が選択できます。また、両方を指定した場合にはプログラムを終了します。

- W, L
形式：自然数
説明：標準の単位胞の並び方を指定します。

- a0W, a0L, a1W, a1L

形式：自然数

説明：格子を指定する2本のベクトル ($\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1$) を指定します (Fig. 4.5)。これらのベクトルは標準の並進ベクトルを基底とした座標 (Fractional coordinate) で指定されます。

スタンダードモードで出力される `lattice.gp` というファイルを使うと、自分の意図した通りの格子のとり方になっているかどうかを確認する事が出来ます。このファイルは、次のようにして `gnuplot` に読み込ませることが出来ます。

```
$ gnuplot lattice.gp
```

4.1.3 副格子

以下パラメータを用いると変分波動関数のペア軌道部分に副格子の周期性を持たせることが出来ます。

- a0Wsub, a0Lsub, a1Wsub, a1Lsub, Wsub, Lsub

形式：自然数。デフォルトでは `a0Wsub=a0W, a0Lsub=a0L, a1Wsub=a1W, a1Lsub=a1L, Wsub=W, Lsub=L` となる。

説明：これらのパラメーターの指定の仕方は `a0W, a0L, a1W, a1L, W, L` と同様です。ただし、元の計算セルが副格子に整合しない場合にはプログラムを終了します。

4.1.4 保存量に関するパラメーター

- nelec

形式：整数

説明：伝導電子数を指定します。 `model = "Fermion HubbardGC", "Spin", "SpinGC"` のときには指定しないでください。

- 2Sz

形式：整数

説明：全スピンの z 成分の2倍を指定します。 `model = "Fermion HubbardGC", "SpinGC"` のときには指定しないでください。

4.1.5 ハミルトニアン各项の係数

デフォルト値は特に記載されていないものについては0に設定してあります。型が複素数のパラメータは「実部, 虚部」(間に“,”)の形式で指定し、実数の場合には「実部」で指定が可能です。

局所項

- μ

形式 : 実数

説明 : Hubbard および近藤格子模型での化学ポテンシャルを指定します。

- U

形式 : 実数

説明 : Hubbard および近藤格子模型でのオンサイトクーロン積分を指定します。

- $J_x, J_y, J_z, J_{xy}, J_{yx}, J_{xz}, J_{zx}, J_{yz}, J_{zy}$

形式 : 実数

説明 : 近藤格子模型での、局在電子と遍歴電子のスピン結合を指定します。また対角項について、 J_x, J_y, J_z を指定する代わりに、パラメータ J を指定すると $J_x = J_y = J_z = J$ が代入されます。 J を指定した上で J_x, J_y, J_z を指定した場合はプログラムを終了します。

- h, Gamma, D

形式 : 実数

説明 : スピン模型での縦磁場、横磁場、異方性パラメータを指定します。

下記の非局所項は、梯子格子の場合とそれ以外 (1次元鎖、矩形格子、三角格子、蜂の巣格子、カゴメ格子) の場合で指定の仕方が異なります。また、各格子で指定可能なパラメーターを Table 4.1 に表します。

相互作用	1次元鎖	矩形格子	三角格子	蜂の巣格子	カゴメ格子	梯子格子
$J, t, V(\text{省略形})$	○	○	○	○	○	-
J', t', V'	○	○	○	○	○	-
J_0, t_0, V_0	○	○	○	○	○	○
J_1, t_1, V_1	-	○	○	○	○	○
J_2, t_2, V_2	-	-	○	○	○	○
J_1', t_1', V_1'	-	-	-	-	-	○
J_2', t_2', V_2'	-	-	-	-	-	○

Table 4.1: 各格子で定義可能な相互作用一覧。ただし、スピン結合については行列として与えることが可能。

非局所項 [梯子格子 (Fig. 4.4)]

- $t_0, t_1, t_1', t_2, t_2'$

形式 : 複素数

説明 : 梯子格子でのホッピング (Fig. 4.4 参照) を指定します。

- $V_0, V_1, V_1', V_2, V_2'$

形式：実数

説明：梯子格子でのオフサイトクーロン積分 (Fig. 4.4 参照) を指定します。

- $J_{0x}, J_{0y}, J_{0z}, J_{0xy}, J_{0yx}, J_{0xz}, J_{0zx}, J_{0yz}, J_{0zy}$
- $J_{1x}, J_{1y}, J_{1z}, J_{1xy}, J_{1yx}, J_{1xz}, J_{1zx}, J_{1yz}, J_{1zy}$
- $J_{1'x}, J_{1'y}, J_{1'z}, J_{1'xy}, J_{1'yx}, J_{1'xz}, J_{1'zx}, J_{1'yz}, J_{1'zy}$
- $J_{2x}, J_{2y}, J_{2z}, J_{2xy}, J_{2yx}, J_{2xz}, J_{2zx}, J_{2yz}, J_{2zy}$
- $J_{2'x}, J_{2'y}, J_{2'z}, J_{2'xy}, J_{2'yx}, J_{2'xz}, J_{2'zx}, J_{2'yz}, J_{2'zy}$

形式：実数

説明：梯子格子でのスピン相互作用 (Fig. 4.4 参照) を指定します。また対角項について、例えば J_{0x}, J_{0y}, J_{0z} を指定する代わりにパラメータ J_0 を指定すると $J_{0x} = J_{0y} = J_{0z} = J_0$ が代入されます。 J_0 を指定した上で J_{0x}, J_{0y}, J_{0z} 等も指定した場合はプログラムを終了します。 $J_1, J_{1'}, J_2, J_{2'}$ についても同様です。

非局所項 [梯子格子以外 (Figs. 4.1, 4.2, 4.3)]

- t_0, t_1, t_2

形式：複素数

説明：Hubbard および近藤格子模型での、最近接サイト間の各方向のホッピングを指定します。また、ホッピングのボンド方向依存性がない場合は t_0, t_1, t_2 を別々に指定する代わりにパラメータ t を指定すると、 $t_0 = t_1 = t_2 = t$ が代入されます。 t と t_0 等の両方が指定された場合にはプログラムを終了します。

- V_0, V_1, V_2

形式：実数

説明：Hubbard および近藤格子模型での、最近接サイト間の Coulomb 積分を指定します。また、サイト間 Coulomb 積分のボンド方向依存性がない場合は V_0, V_1, V_2 を別々に指定する代わりにパラメータ V を指定すると、 $V_0 = V_1 = V_2 = V$ が代入されます。 V と V_0 等の両方が指定された場合にはプログラムを終了します。

- $J_{0x}, J_{0y}, J_{0z}, J_{0xy}, J_{0yx}, J_{0xz}, J_{0zx}, J_{0yz}, J_{0zy}$
- $J_{1x}, J_{1y}, J_{1z}, J_{1xy}, J_{1yx}, J_{1xz}, J_{1zx}, J_{1yz}, J_{1zy}$
- $J_{2x}, J_{2y}, J_{2z}, J_{2xy}, J_{2yx}, J_{2xz}, J_{2zx}, J_{2yz}, J_{2zy}$

形式：実数

説明： スピン模型での、最近接サイト間のスピン相互作用を指定します。また対角項について、例えば $J0x$, $J0y$, $J0z$ を指定する代わりにパラメータ $J0$ を指定すると $J0x = J0y = J0z = J0$ が代入されます。 $J0$ を指定した上で $J0x$, $J0y$, $J0z$ 等も指定した場合はプログラムを終了します。 $J1$, $J2$ についても同様です。

スピン間相互作用のボンド方向依存性がない場合には、 Jx , Jy , Jz , Jxy , Jyx , Jxz , Jzx , Jyz , Jzy を指定すると、 $J0x = J1x = J2x = Jx$ のようにすべてのボンド方向のスピン間相互作用に同じ値を代入することが出来ます。 $Jx \sim Jzy$ 系列のどれかと $J0x \sim J2zy$ 系列のどれかを両方指定した場合にはプログラムを終了します。以下に最近接間スピン相互作用の指定方法の例を挙げます。

- ボンド方向依存性、スピン方向依存性、相互作用の非対角成分 (J_{xy} 等) がない場合
J を指定
- ボンド方向依存性、相互作用の非対角成分がなく、スピン方向依存性がある場合
 Jx , Jy , Jz のうち 0 でないものを指定
- ボンド方向依存性がなく、スピン方向依存性、相互作用の非対角成分がある場合
 Jx , Jy , Jz , Jxy , Jyz , Jxz , Jyx , Jzy , Jzx のうち 0 でないものを指定
- スピン方向依存性、相互作用の非対角成分がなく、ボンド方向依存性がある場合
 $J0$, $J1$, $J2$ のうち 0 でないものを指定
- スピン方向依存性がなく、ボンド方向依存性、相互作用の非対角成分がある場合
 $J0x$, $J0y$, $J0z$, $J1x$, $J1y$, $J1z$, $J2x$, $J2y$, $J2z$ のうち 0 でないものを指定
- ボンド方向依存性、スピン方向依存性、相互作用の非対角成分がある場合
 $J0x \sim J2zy$ のすべてのうち 0 でないものを指定

● t'

形式： 複素数

説明： Hubbard および近藤格子模型での、次近接サイト間の各方向のホッピングを指定します。

● V'

形式： 実数

説明： Hubbard および近藤格子模型での、次近接サイト間の Coulomb 積分を指定します。

- $J'x, J'y, J'z, J'xy, J'yx, J'xz, J'zx, J'yz, J'zy$

形式 : 実数

説明 : スピン模型での、次近接サイト間のスピン相互作用を指定します。また対角項について、 $J'x, J'y, J'z$ を指定する代わりにパラメータ J' を指定すると $J'x = J'y = J'z = J'$ が代入されます。 J' を指定した上で $J'x, J'y, J'z$ も指定した場合はプログラムを終了します。

4.1.6 計算条件のパラメーター

- OutputMode

形式 : "none", "correlation", "full"のいずれか(デフォルトはcorrelation)

説明 : 計算を行う相関関数を指定します。"none"の場合は相関関数を計算しません。"correlation"を指定した場合には、1体部分はすべての i, σ について $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$ を、2体部分はすべての i, j, σ, σ' について $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \rangle$ を計算します。"full"を指定した場合には、1体部分はすべての i, j, σ, σ' について $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'} \rangle$ を、2体部分はすべての $i_1, i_2, i_3, i_4, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ について $\langle c_{i_1\sigma_1}^\dagger c_{i_2\sigma_2} c_{i_3\sigma_3}^\dagger c_{i_4\sigma_4} \rangle$ を計算します。スピン系の演算子はBogoliubov表現により生成消滅演算子で表されています。詳しくは5.1をご覧ください。

- 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。

- nelec

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 = 8)

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、デフォルト値は副格子内部の並進ベクトルの数)

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。

- DSR0ptRedCut
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。
- DSR0ptStaDel
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。
- DSR0ptStepDt
形式 : double 型 (デフォルト値 = 0.02)
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 $N_{\text{site}} \times \text{NVMCInterval}$ 回行われます。
- 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。
- RndSeed
形式 : int 型
説明 : 乱数の初期 seed。MPI 並列では各計算機に $\text{RndSeed} + \text{my rank} + 1$ 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 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

$$|\psi\rangle = \mathcal{P}_G \mathcal{P}_J \mathcal{P}_{d-h}^{(2)} \mathcal{P}_{d-h}^{(4)} \mathcal{L}^S \mathcal{L}^K \mathcal{L}^P |\phi_{\text{pair}}\rangle, \quad (4.4)$$

で与えられます。ここで、一体部分は実空間のペア関数

$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle, \quad (4.5)$$

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 Table4.2 により指定します。
- 必ず指定しなければならないキーワードは 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 4.2: 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
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 = 1)

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。

- 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 Nsite \times NVMCInterval 回行われます。

- 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

$$H+ = - \sum_{ij\sigma_1\sigma_2} t_{ij\sigma_1\sigma_2} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \quad (4.6)$$

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。

$$H+ = \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\sigma_4} I_{ijkl\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \quad (4.7)$$

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。

$$H+ = \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4.8)$$

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。

$$H+ = \sum_{i,j} V_{ij} n_i n_j \quad (4.9)$$

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。

$$H+ = - \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Hund}} (n_{i\uparrow} n_{j\uparrow} + n_{i\downarrow} n_{j\downarrow}) \quad (4.10)$$

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。

$$H+ = \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Pair}} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} \quad (4.11)$$

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 : 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。

$$H+ = \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Ex}} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}) \quad (4.12)$$

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 : 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

$$\mathcal{P}_G = \exp \left[\sum_i g_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right] \quad (4.13)$$

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
ComplexType 0
=====
=====
    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 (何かが書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3 行: [string02] [int02]
- 4-5 行: ヘッダ (何かが書かれても問題ありません)。
- 6 - 5+ N_s 行: [int03] [int04]
- 6+ N_s - 5+ 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。
- [string02]
形式 : string 型 (空白不可)
説明 : g_i の変分パラメータの型を指定するためのキーワード名を指定します (任意)。
- [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

$$\mathcal{P}_J = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} n_i n_j \right] \quad (4.14)$$

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
ComplexType 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 行: [string02] [int02]
- 4-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - $5 + N_s \times (N_s - 1)$ 行: [int03] [int04] [int05]
- $6 + N_s \times (N_s - 1) - 5 + N_s \times (N_s - 1) + N_j$ 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数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。
- [string02]
形式 : string 型 (空白不可)
説明 : v_{ij} の変分パラメータの型を指定するためのキーワード名を指定します (任意)。
- [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

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(2)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^2 (\alpha_{2nt}^d \sum_i \xi_{i2nt}^d + \alpha_{2nt}^h \sum_i \xi_{i2nt}^h) \right] \quad (4.15)$$

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
ComplexType 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 (何が書かれても問題ありません)。
- 2 行: [string01] [int01]
- 3 行: [string02] [int02]
- 4-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - $5 + N_s \times N_{dh2}$ 行: [int03] [int04] [int05] [int06]
- $6 + N_s \times N_{dh2} - 5 + (N_s + 6) \times N_{dh2}$ 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。
- [string02]

形式 : string 型 (空白不可)

説明 : 変分パラメータの型を指定するためのキーワード名を指定します (任意)。
- [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

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(4)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^4 (\alpha_{4nt}^d \sum_i \xi_{i4nt}^d + \alpha_{4nt}^h \sum_i \xi_{i4nt}^h) \right] \quad (4.16)$$

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
ComplexType 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行: [string02] [int02]
- 4-5行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - $5 + N_s \times N_{\text{dh4}}$ 行: [int03] [int04] [int05] [int06] [int07] [int08]
- $6 + N_s \times N_{\text{dh4}}$ - $5 + (N_s + 10) \times N_{\text{dh4}}$ 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。
- [string02]
形式 : string 型 (空白不可)
説明 : 変分パラメータの型を指定するためのキーワード名を指定します (任意)。
- [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

$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle \quad (4.17)$$

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
ComplexType 0
=====
=====
  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 行: [string02] [int02]
- 4-5 行: ヘッダ (何が書かれても問題ありません)。
- 6 - $5+N_s^2$ 行: [int03] [int04] [int05]
- $6+N_s^2 - 5+N_s^2 + N_o$ 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。

- [string02]

形式：string 型 (空白不可)

説明：変分パラメータの型を指定するためのキーワード名を指定します (任意)。

- [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

$$\mathcal{P}_G = \exp \left[\sum_i g_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right] \quad (4.18)$$

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]
形式 : double 型 (空白不可)
説明 : g_i の初期値の実部を与えます。
- [double02] **形式** : double 型
説明 : g_i の初期値の虚部を与えます。Gutzwiller 指定ファイルで型を実数に指定している場合は、[double02] は入力しないでください。複素数指定の場合に [double02] がいない場合には、0 が代入されます。

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 指定ファイルで型を実部に指定した状態で、[double02] が入力されるとエラー終了します。
- 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

$$\mathcal{P}_J = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} n_i n_j \right] \quad (4.19)$$

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 - 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]
形式 : double 型 (空白不可)
説明 : v_{ij} の初期値の実部を与えます。
- [double02]
形式 : double 型
説明 : v_{ij} の初期値の虚部を与えます。Jastrow 指定ファイルで型を実数に指定している場合は、[double02] は入力しないでください。複素数指定の場合に [double02] がない場合には、0 が代入されます。

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 指定ファイルで型を実数に指定した状態で、[double02] が入力されるとエラー終了します。
- 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

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(2)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^2 (\alpha_{2nt}^d \sum_i \xi_{i2nt}^d + \alpha_{2nt}^h \sum_i \xi_{i2nt}^h) \right] \quad (4.20)$$

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]
形式：double 型 (空白不可)
説明：変分パラメータの実部を与えます。
- [double02]
形式：double 型
説明：変分パラメータの虚部を与えます。DH2 指定ファイルで型を実数に指定している場合は、[double02] は入力しないでください。複素数指定の場合に [double02] がない場合には、0 が代入されます。

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。
- DH2 指定ファイルで型を実数に指定した状態で、[double02] が入力されるとエラー終了します。

4.2.20 InDH4 指定ファイル

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(4)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^4 (\alpha_{4nt}^d \sum_i \xi_{i4nt}^d + \alpha_{4nt}^h \sum_i \xi_{i4nt}^h) \right] \quad (4.21)$$

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]
形式：double 型 (空白不可)
説明：変分パラメータの実部を与えます。
- [double02]
形式：double 型
説明：変分パラメータの虚部を与えます。DH4 指定ファイルで型を実数に指定している場合は、[double02] は入力しないでください。複素数指定の場合に [double02] がない場合には、0 が代入されます。

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。
- DH4 指定ファイルで型を実数に指定した状態で、[double02] が入力されるとエラー終了します。

4.2.21 InOrbital 指定ファイル

$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle \quad (4.22)$$

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 - 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]
形式：double 型 (空白不可)
説明：変分パラメータの実部を与えます。
- [double02]
形式：double 型
説明：変分パラメータの虚部を与えます。Orbital 指定ファイルで型を実数に指定している場合は、[double02] は入力しないでください。複素数指定の場合に [double02] がない場合には、0 が代入されます。

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 指定ファイルで型を実数に指定した状態で、[double02] が入力されるとエラー終了します。
- 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]

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] [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

5.1 Bogoliubov 表現

スピン系の計算において一体項 (transfer)、InterAll 形式での相互作用、相関関数のインデックスの指定には Bogoliubov 表現が使われています。スピンの演算子は次のように生成・消滅演算子で書き換えられます。

$$S_{iz} = \sum_{\sigma=-S}^S \sigma c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \quad (5.1)$$

$$S_i^+ = \sum_{\sigma=-S}^{S-1} \sqrt{S(S+1) - \sigma(\sigma+1)} c_{i\sigma+1}^{\dagger} c_{i\sigma} \quad (5.2)$$

$$S_i^- = \sum_{\sigma=-S}^{S-1} \sqrt{S(S+1) - \sigma(\sigma+1)} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma+1} \quad (5.3)$$

6

謝辭

T.B.D