

Manual

**Quantum-number projected Variational Monte Carlo method
with Multi-variable optimization**

Daisuke TAHARA

*Department of Physics, University of Tokyo
7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033*

January, 2009
ver.20090129a

改変履歴

- ver.20090129a : 説明の追加
- ver.20090117a : 記述ミスの修正とスピン量子数の制限解除
- ver.20090116a : 配布開始

1 Introduction

1.1 計算の概要

このプログラムを利用することで以下の事項が計算可能です。

- 与えられた変分自由度の範囲でハミルトニアン の期待値が最小 (極小) 値を持つような変分波動関数を数値的に生成します。量子数で分割された部分空間に限定して計算することも可能です。
- 得られた変分波動関数における各種物理量 (相関関数など) の期待値を計算することができます。
- 特定の条件 (ハミルトニアン の相互作用項が実空間で対角的かつ全て遍歴電子で構成された模型) を持つ場合には Power Lanczos (Single Lanczos Step) 法 を適用した場合の期待値を計算することができます。

図 1 のような流れで計算を行います。太い実線で囲まれた部分はパッケージ化されています。個々の問題に応じて破線で囲まれた部分を作成することで計算を実行することができます。

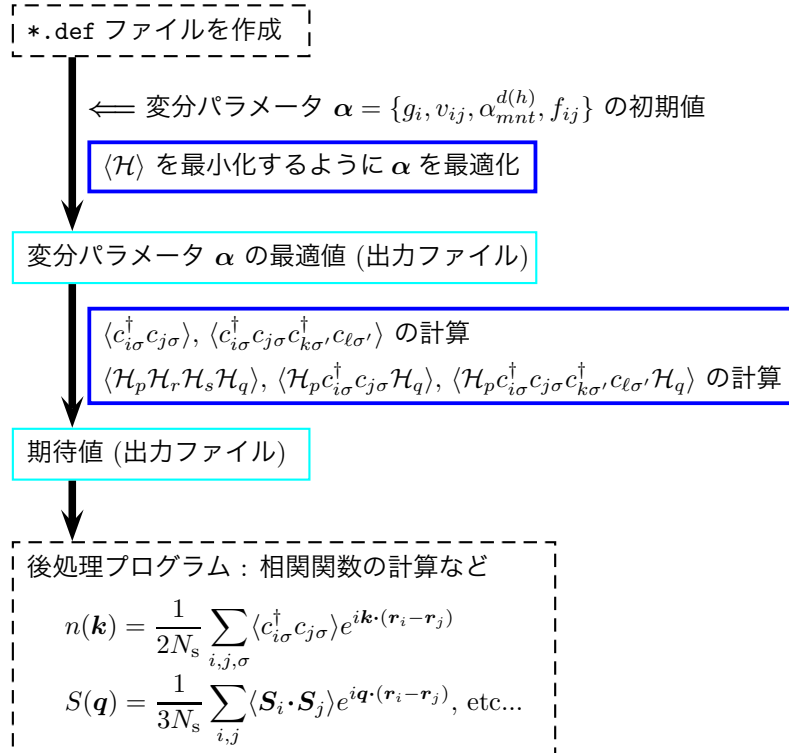


図 1 : 計算の概要

1.2 配布ファイル

配布ファイル一式は次のディレクトリ構造をとります.

```
taharaVMC
  bin
  def
  old
  manual.pdf
  readme.txt
```

bin : 各計算機クラスターごとにコンパイルされた実行ファイル `vmc.out` があります.
def : *.def ファイルの例 (16 サイト正方格子ハバード模型 $U/t = 4$, $n = 1$) があります.
old : 古い version が格納されています.
manual.pdf : この説明書です.
readme.txt : version 等の更新記録が記述されています.

【配布場所】

stella.t.u-tokyo.ac.jp の /home1/tahara の下に taharaVMC があります.
erice.t.u-tokyo.ac.jp の /home/tahara の下に taharaVMC があります.

1.3 お願い

In any scientific publication based wholly or in part on this software, the use of the software must be acknowledged.

2 Hamiltonian

以下の形で記述されるハミルトニアンを取り扱うことができます.

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \quad [\text{transfer \& chemical potential}] \quad (1)$$

$$+ \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad [\text{intra-site Coulomb}] \quad (2)$$

$$+ \sum_{i,j} V_{ij} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \quad [\text{inter-site Coulomb}] \quad (3)$$

$$- \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Hund}} (n_{i\uparrow} n_{j\uparrow} + n_{i\downarrow} n_{j\downarrow}) \quad [\text{Hund coupling}] \quad (4)$$

$$+ \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Pair}} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} \quad [\text{pair hopping}] \quad (5)$$

$$+ \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Exchange}} (c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} + c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow}^{\dagger}) \quad [\text{exchange}] \quad (6)$$

ここで, $c_{i\sigma}^{\dagger}$, $c_{i\sigma}$ はサイト i (格子と軌道の指標をまとめたもの) にスピン σ の電子を生成, 消滅させる演算子です. 各サイトは遍歴電子か局在スピンのサイトとして設定します.

3 Variational wave function

変分波動関数は以下の形をとります.

$$|\psi\rangle = \mathcal{P}_G \mathcal{P}_J \mathcal{P}_{\text{d-h}}^{(2)} \mathcal{P}_{\text{d-h}}^{(4)} \mathcal{L}^S \mathcal{L}^K \mathcal{L}^P |\phi_{\text{pair}}\rangle. \quad (7)$$

3.1 One-body part

1 体部分は実空間のペア関数を用いた波動関数を用います. N は全電子数, N_s は全サイト数です.

$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} \right]^{N/2} |0\rangle \quad (8)$$

3.2 Gutzwiller-Jastrow factor

[Gutzwiller factor]

$$\mathcal{P}_G = \exp \left[\sum_i g_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right] \quad (9)$$

[Jastrow factor]

$$\mathcal{P}_J = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \right] \quad (10)$$

【Doublon-holon correlation factor】

実空間配置に対して対角的な多体演算子 $\xi_{imnt}^{d(h)}$ ($i = 1, \dots, N_s, m = 2, 4, \dots, n = 0, \dots, m, t = 1, 2, \dots$) を次のように定義します (d: doublon, h: holon).

$$\xi_{imnt}^{d(h)} = \begin{cases} 1 & \begin{bmatrix} \text{サイト } i \text{ に d(h) が存在し, 各 } (i, t) \text{ ごとに定義された} \\ \text{周囲の } m \text{ 個のサイトに h(d) が } n \text{ 個存在する場合} \end{bmatrix} \\ 0 & \text{[その他の場合]} \end{cases} \quad (11)$$

ここで変数 t は周囲のサイトの指定を複数種類だけ設定するために用います. 例えば正方格子に斜め線を入れた異方的三角格子の場合に次近接サイト (斜め方向) は 45° 方向と 135° 方向の 2 種類あり, それらを区別するために t を用います. m サイト doublon-holon 相関因子を次のように定義します.

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(m)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^m \left(\alpha_{mnt}^d \sum_i \xi_{imnt}^d + \alpha_{mnt}^h \sum_i \xi_{imnt}^h \right) \right] \quad (12)$$

3.3 Quantum-number projection

【Spin projection】

スピン量子数射影は手法論文の方法でペア関数に作用させます. オイラー角 $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$, 回転演算子 $\hat{R}(\Omega)$, S 次の Legendre 多項式 $P_S(x)$ を用いて

$$\mathcal{L}^S = \frac{2S+1}{8\pi^2} \int d\Omega P_S(\cos \beta) \hat{R}(\Omega) \quad (13)$$

【Momentum projection】

全運動量 \mathbf{K} に射影する場合, 並進ベクトル \mathbf{R} に対応する並進演算子を $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ として

$$\mathcal{L}^K = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \hat{T}_{\mathbf{R}} \quad (14)$$

【Lattice symmetry projection】

格子の点群対称性に付随した量子数 (パリティ) の射影です. 格子の点群演算を \hat{G}_α , パリティを $p_\alpha = \pm 1$ として

$$\mathcal{L}^P = \sum_{\alpha} p_\alpha \hat{G}_\alpha \quad (15)$$

【ペア関数に作用させた場合】

サイト i が並進演算・点群演算で移動した行き先をそれぞれ $T_{\mathbf{R}}(i)$, $G_\alpha(i)$ とします. スピン量子数射影は手法論文の記法に従います. 波動関数全体の位相因子 (規格化因子) の自由度を用いて実数化すると

$$\begin{aligned} \langle x | \mathcal{L}^S \mathcal{L}^K \mathcal{L}^P | \phi_{\text{pair}} \rangle &= \frac{2S+1}{2N_s} \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{R}} \int_0^\pi d\beta \sin \beta p_\alpha \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) P_S(\cos \beta) \\ &\quad \times \underbrace{\langle x | R^y(\beta) \left[\sum_{i,j} f_{G_\alpha(T_{\mathbf{R}}(i)) G_\alpha(T_{\mathbf{R}}(j))} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} | 0 \rangle}_{= \text{Pf X}} \end{aligned} \quad (16)$$

4 Variational Monte Carlo method

適当な完全系に対するマルコフ連鎖を構成して重みつきサンプリングを行います．ここでは完全系として $S^z = 0$ の実空間配置 $\{|x\rangle\}$ を使用します．

$$|x\rangle = \prod_{n=1}^{N/2} c_{r_{n\uparrow}}^\dagger \prod_{n=1}^{N/2} c_{r_{n\downarrow}}^\dagger |0\rangle \quad (n \text{ 番目の } \sigma \text{ 電子の位置を } r_{n\sigma} \text{ とする}) \quad (17)$$

4.1 Importance Sampling

マルコフ連鎖の重みを

$$\rho(x) = \frac{|\langle x|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq 0, \quad \sum_x \rho(x) = 1 \quad (18)$$

とすると演算子 A の期待値は

$$\langle A \rangle = \frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_x \frac{\langle\psi|A|x\rangle\langle x|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_x \rho(x) \frac{\langle\psi|A|x\rangle}{\langle\psi|x\rangle} \quad (19)$$

となります． x に関する和を重みつきサンプリングに置き換えます．

後のために Local Green's function $G_{ij\sigma}(x)$ を次のように定義しておきます．

$$G_{ij\sigma}(x) = \frac{\langle\psi|c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}|x\rangle}{\langle\psi|x\rangle} \quad (20)$$

5 Definition Files

定義ファイル (デフォルトの名前)

表 1 : 定義ファイル一覧

名前	概要
xnamelist.def	Name list of *.def files
*modpara.def	Setting: Parameters for Monte Carlo calculation
*locspn.def	Setting: Local Spin specification
*transfer.def	Hamiltonian: transfer & chemical potential
*coulombintra.def	Hamiltonian: intra-site Coulomb
*coulombinter.def	Hamiltonian: inter-site Coulomb
*hund.def	Hamiltonian: Hund coupling
*pairhop.def	Hamiltonian: pair hopping
*exchange.def	Hamiltonian: exchange
*gutzwilleridx.def	Variational parameter: Gutzwiller
*jastrowidx.def	Variational parameter: charge Jastrow
*doublonholon2siteidx.def	Variational parameter: 2-site doublon-holon correlation
*doublonholon4siteidx.def	Variational parameter: 4-site doublon-holon correlation
*orbitalidx.def	Variational parameter: pair orbital
*qptransidx.def	Setting: translational and lattice symmetry operation
*cisajs.def	Output: $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$
*cisajsckalt.def	Output: $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma'} \rangle$
*cisajsckaltcdc.def	Output: $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma'} \rangle$ (direct calculation)

【以下で使用する記法の説明】

- [yyyzzz] は変数の型 yyy と番号 zzz を示します. 冒頭に “x” がついているものは読み込んだ際に使用しない変数です. (例 : [int01] 単精度整数の番号 01. [xstring] 使用しない文字列.)

5.1 ヘッダーの形式

```

1 -----
2 [xstring1]    [int1]
3 -----
4 [xstring2]
5 -----

```

【説明】

5 行のヘッダーです. [int1] が使用される場合があります.

- [xstring1] : 説明用文字列 (200 文字以内)
- [xstring2] : 説明用文字列 (200 文字以内)
- [int1] : 単精度整数

5.2 Definition File: xnamelist.def

表1の“*”を“z”とします.

1	zmodpara.def	[string]
2	zlocspn.def	[string]
3	ztransfer.def	[string]
4	zcoulombintra.def	[string]
5	zcoulombinter.def	[string]
6	zhund.def	[string]
7	zpairhop.def	[string]
8	zexchange.def	[string]
9	zgutzwilleridx.def	[string]
10	zjastrowidx.def	[string]
11	zdoublonholon2siteidx.def	[string]
12	zdoublonholon4siteidx.def	[string]
13	zorbitalidx.def	[string]
14	zqptransidx.def	[string]
15	zcisajs.def	[string]
16	zcisajsckalt.def	[string]
17	zcisajsckaltcdc.def	[string]

【説明】

17行のファイルです. 各ファイル名を変更することで, 読み込まれる*.def ファイルが変更されます. 上から読み込むので行数やファイル名の順番は固定です.

5.3 Definition File: *modpara.def

1	-----	[xstring]
2	Model_Parameters 0	[xstring] [xint]
3	-----	[xstring]
4	VMC_Cal_Parameters	[xstring]
5	-----	[xstring]
6	CDataFileHead zvo	[xstring] [string01]
7	CParaFileHead zqp	[xstring] [string02]
8	-----	[xstring]
9	NVMCCalMode 0	[xstring] [int01]
10	NLanczosMode 0	[xstring] [int02]
11	-----	[xstring]
12	NDataIdxStart 1	[xstring] [int03]
13	NDataQtySmp 5	[xstring] [int04]
14	-----	[xstring]
15	Nsite 16	[xstring] [int05]
16	Nelectron 8	[xstring] [int06]
17	NSPGaussLeg 10	[xstring] [int07]
18	NSPStot 0	[xstring] [int08]
19	NMPTrans 4	[xstring] [int09]
20	NSROptItrStep 1200	[xstring] [int10]
21	NSROptItrSmp 100	[xstring] [int11]
22	NSROptFixSmp 1	[xstring] [int12]
23	DSROptRedCut 0.0001	[xstring] [double01]
24	DSROptStaDel 0.01	[xstring] [double02]
25	DSROptStepDt 0.05	[xstring] [double03]
26	NVMCWarmUp 10	[xstring] [int13]
27	NVMCInterval 1	[xstring] [int14]
28	NVMCSample 100	[xstring] [int15]
29	NExUpdatePath 0	[xstring] [int16]
30	RndSeed 123456789	[xstring] [unsigned long int1]

【説明】

VMC の計算条件・パラメータの設定を行います。上から読み込むので行数や順番は固定です。

- [string01] : 出力ファイル名指定
- [string02] : 最適化された変分パラメータの出力ファイル名指定
- [int01] = a : [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
- [int02] = b : [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 : $b = 1, 2$ は $a = 1$ 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.)
- [int03] : 出力ファイルの付加番号 ($a = 0$: [int03], $a = 1$: [int03] から連番で [int04] 個を出力)
- [int04] : 出力ファイルのセット数 ($a = 1$ の場合に使用)
- [int05] = N_s : 全サイト数
- [int06] = $N/2$: \uparrow 電子の個数 ($S^z = 0$ 部分空間で計算するので, \uparrow 電子と \downarrow 電子の個数は等しい)
- [int07] : 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 (条件 : 1 以上)
- [int08] : スピン量子数 (条件 : 0 以上の任意自然数が指定可能)
- [int09] = d : 運動量・格子対称性の量子数射影の個数 (*qptransidx.def で指定した重みで上から d 個まで使用する. 射影を行わない場合は $d = 1$.)
- [int10] = e : SR 法で最適化する場合の全ステップ数 ($a = 0$ のみ使用)
- [int11] = f : e ステップ中, 最後の f 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 ($a = 0$ のみ使用)
- [int12] : 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 (1 を推奨. “correlation sampling” への理解のある方はご自由に...)
- [double01] : SR 法安定化因子. 手法論文 §3.3.2 の ε_{wf}
- [double02] : SR 法安定化因子. 手法論文 §3.3.1 の ε
- [int13] : マルコフ連鎖の空回し回数
- [int14] : サンプル間のステップ間隔 (ローカル更新が [int05] × [int14] 回行われる)
- [int15] : 期待値計算に使用するサンプル数
- [int16] : ローカル更新で 2 電子交換を [0] 認めない. [1] 認める.
- [unsigned long int1] : 乱数の初期 seed
(MPI 並列 : 各計算機に [unsigned long int1]+my_rank+1 で初期 seed が与えられます)

5.4 Definition File: *locspn.def

```
1 ----- | [xstring]
2 NLocalSpin  0      | [xstring] [xint]
3 ----- | [xstring]
4 i_0LocSpn_1IteElc | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6   0   1          | [int1] [int2]
7   1   1          | [int1] [int2]
8   2   1          | [int1] [int2]
(continue...)
```

【説明】

局在スピンの指定. [int1] はサイト番号. [int2] は [0] 局在スピン, [1] 遍歴電子サイト. 生成される実空間配置 $|x\rangle$ は, [int2] を 0 にしたサイトの電子数が常に 1 となります.

条件: ファイル行数 = $5 + N_s$.

[int2] を 0 にしたサイトがある場合*modpara.def の NExUpdatePath を 1 にして下さい.

5.5 Definition File: *transfer.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NTransfer 128 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_j_s_tijs | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 1 0 1.0 | [int2] [int3] [int4] [double1]
7 0 3 0 1.0 | [int2] [int3] [int4] [double1]
8 0 4 0 1.0 | [int2] [int3] [int4] [double1]
9 0 12 0 1.0 | [int2] [int3] [int4] [double1]
(continue...)
```

【説明】

ホッピングと一体ポテンシャルを与えます. ハミルトニアンに次の項を付け加えます.

$$\mathcal{H} += - \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \quad (21)$$

$i = [\text{int2}], j = [\text{int3}], \sigma = [\text{int4}] ([0]\uparrow, [1]\downarrow), t_{ij\sigma} = [\text{double1}]$.

条件: ファイル行数 = $5 + [\text{int1}]$.

5.6 Definition File: *coulombintra.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NCoulombIntra 16 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_Ui | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 4.0 | [int2] [double1]
7 1 4.0 | [int2] [double1]
8 2 4.0 | [int2] [double1]
(continue...)
```

【説明】

オンサイトのクーロン相互作用を与えます. ハミルトニアンに次の項を付け加えます.

$$\mathcal{H} += \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (22)$$

$i = [\text{int2}], U_i = [\text{double1}]$.

条件: ファイル行数 = $5 + [\text{int1}]$.

5.7 Definition File: *coulombinter.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NCoulombInter 32 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
```

```

4 i_j_Vij | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 1 1.0 | [int2] [int3] [double1]
7 0 4 1.0 | [int2] [int3] [double1]
(continue...)

```

【説明】

サイト間クーロン相互作用を与えます. ハミルトニアンに次の項を付け加えます.

$$\mathcal{H} += \sum_{i,j} V_{ij} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \quad (23)$$

$i = [\text{int2}], j = [\text{int3}], V_{ij} = [\text{double1}]$.

条件: ファイル行数 = 5 + [int1].

5.8 Definition File: *hund.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NHundCoupling 32 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_j_Jij | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 1 1.0 | [int2] [int3] [double1]
7 0 4 1.0 | [int2] [int3] [double1]
(continue...)

```

【説明】

フント結合の相互作用を与えます. ハミルトニアンに次の項を付け加えます.

$$\mathcal{H} += - \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Hund}} (n_{i\uparrow} n_{j\uparrow} + n_{i\downarrow} n_{j\downarrow}) \quad (24)$$

$i = [\text{int2}], j = [\text{int3}], J_{ij}^{\text{Hund}} = [\text{double1}]$.

条件: ファイル行数 = 5 + [int1].

5.9 Definition File: *pairhop.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NPairHopping 32 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_j_Jij | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 1 1.0 | [int2] [int3] [double1]
7 0 4 1.0 | [int2] [int3] [double1]
(continue...)

```

【説明】

ペアホッピングの相互作用を与えます. ハミルトニアンに次の項を付け加えます.

$$\mathcal{H} += \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Pair}} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow} \quad (25)$$

$i = [\text{int2}], j = [\text{int3}], J_{ij}^{\text{Pair}} = [\text{double1}]$.

条件: ファイル行数 = 5 + [int1].

5.10 Definition File: *exchange.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NExchangeCoupling 32 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_j_Jij | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 1 1.0 | [int2] [int3] [double1]
7 0 4 1.0 | [int2] [int3] [double1]
(continue...)
```

【説明】

交換相互作用を与えます。ハミルトニアンに次の項を付け加えます。

$$\mathcal{H} += \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Exchange}} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}) \quad (26)$$

$i = [\text{int2}]$, $j = [\text{int3}]$, $J_{ij}^{\text{Exchange}} = [\text{double1}]$.

条件 : ファイル行数 = 5 + [int1].

5.11 Definition File: *gutzwilleridx.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NGutzwillerIdx 1 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_GutzwillerIdx | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 0 | [int2] [int3]
7 1 0 | [int2] [int3]
8 2 0 | [int2] [int3]
(continue...)
21 15 0 | [int2] [int3]
22 0 1 | [int4] [int5]
```

【説明】

Gutzwiller 因子の設定。

$$\mathcal{P}_G = \exp \left[\sum_i g_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right] \quad (27)$$

$i = [\text{int2}]$, (g_i の変分パラメータの番号) = [int3].

[int4] 番の変分パラメータを最適化する場合は [int5] = 1, 最適化せず固定する場合 [int5] = 0.

条件 : ファイル行数 = 5 + N_s + [int1].

$0 \leq ([\text{int3}], [\text{int4}]) < [\text{int1}]$.

[int2] は全てのサイト番号を走る。

[int4] は 0 から [int1] - 1 まで走る。

5.12 Definition File: *jastrowidx.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NJastrowIdx 9 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_j_JastrowIdx | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 1 0 | [int2] [int3] [int4]
7 0 2 1 | [int2] [int3] [int4]
```

```

      8      0      3      0      | [int2] [int3] [int4]
      9      0      4      2      | [int2] [int3] [int4]
(continue...)
    245     15     14      0      | [int2] [int3] [int4]
    246      0      1          | [int5] [int6]
    247      1      2          | [int5] [int6]
(continue...)

```

【説明】

Jastrow 因子の設定.

$$\mathcal{P}_J = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \right] \quad (28)$$

$i = [\text{int2}], j = [\text{int3}], (v_{ij} \text{ の変分パラメータの番号}) = [\text{int4}]$.

$[\text{int5}]$ 番の変分パラメータを最適化する場合は $[\text{int6}] = 1$, 最適化せず固定する場合 $[\text{int6}] = 0$ or 2 .
 全て $[\text{int6}] = 1$ と設定すると奈落の底に落ちます. 理由は “粒子数が保存するから” です.

条件: ファイル行数 $= 5 + N_s(N_s - 1) + [\text{int1}]$.

$[\text{int2}]$ と $[\text{int3}]$ は $[\text{int2}] \neq [\text{int3}]$ で全てのサイト番号を走る.

$0 \leq ([\text{int4}], [\text{int5}]) < [\text{int1}]$.

$[\text{int5}]$ は 0 から $[\text{int1}] - 1$ まで走る.

5.13 Definition File: *doublonholon2siteidx.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NDoublonHolon2siteIdx 2 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_xi_xi_DoublonHolon2siteIdx | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6      0      5     15      0      | [int2] [int3] [int4] [int5]
7      0     13      7      1      | [int2] [int3] [int4] [int5]
8      1      6     12      0      | [int2] [int3] [int4] [int5]
9      1     14      4      1      | [int2] [int3] [int4] [int5]
(continue...)
37     15      8      2      1      | [int2] [int3] [int4] [int5]
38      0      1          | [int6] [int7]
39      1      1          | [int6] [int7]
(continue...)

```

【説明】

2 サイトの doublon-holon 相関因子の設定.

$$\mathcal{P}_{\text{d-h}}^{(2)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^2 \left(\alpha_{2nt}^{\text{d}} \sum_i \xi_{i2nt}^{\text{d}} + \alpha_{2nt}^{\text{h}} \sum_i \xi_{i2nt}^{\text{h}} \right) \right] \quad (29)$$

サイト $i = [\text{int2}]$ とその周囲 2 サイト ($[\text{int3}], [\text{int4}]$) のセットを $[\text{int1}]$ 種類だけ設定します. セットの番号は $t = [\text{int5}]$ です.

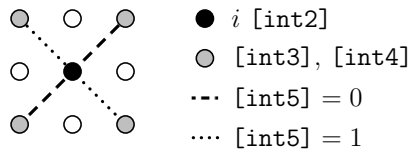


図 2: 上のファイルの場合の設定

[int6] 番の変分パラメータを最適化する場合は [int7] = 1, 最適化せず固定する場合 [int7] = 0.

[int6] の番号付けの順序は, 変数 $n = 0, 1, 2$ (周囲の d(h) 数), $s = 0(d), 1(h)$ (中心が d か h), $t = 0, \dots, [\text{int1}] - 1$ (セット番号 [int5]) を用いて

$$[\text{int6}] = (2n + s) \times [\text{int1}] + t \quad (30)$$

条件: ファイル行数 = $5 + (N_s + 6) \times [\text{int1}]$.

[int2] は全てのサイト番号を走る.

$0 \leq [\text{int5}] < [\text{int1}]$.

[int6] は 0 から $6 \times [\text{int1}] - 1$ まで走る.

5.14 Definition File: *doublonholon4siteidx.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NDoublonHolon4siteIdx 1 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_xi_xi_xi_xi_DoublonHolon4siteIdx | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 1 3 4 12 0 | [int2] [int3]...[int6] [int7]
7 1 2 0 5 13 0 | [int2] [int3]...[int6] [int7]
8 2 3 1 6 14 0 | [int2] [int3]...[int6] [int7]
9 3 0 2 7 15 0 | [int2] [int3]...[int6] [int7]
(continue...)
37 15 12 14 3 11 0 | [int2] [int3]...[int6] [int7]
38 0 1 | [int8] [int9]
39 1 1 | [int8] [int9]
(continue...)

```

【説明】

4 サイトの doublon-holon 相関因子の設定.

$$\mathcal{P}_{d-h}^{(4)} = \exp \left[\sum_t \sum_{n=0}^4 \left(\alpha_{4nt}^d \sum_i \xi_{i4nt}^d + \alpha_{4nt}^h \sum_i \xi_{i4nt}^h \right) \right] \quad (31)$$

サイト $i = [\text{int2}]$ とその周囲 4 サイト ($[\text{int3}], \dots, [\text{int6}]$) のセットを [int1] 種類だけ設定します. セットの番号は $t = [\text{int7}]$ です. 上のファイルの場合は正方格子で最近接の 4 サイトをとっています.

[int8] 番の変分パラメータを最適化する場合は [int9] = 1, 最適化せず固定する場合 [int9] = 0.

[int8] の番号付けの順序は, 変数 $n = 0, 1, 2, 3, 4$ (周囲の d(h) 数), $s = 0(d), 1(h)$ (中心が d か h), $t = 0, \dots, [\text{int1}] - 1$ (セット番号 [int7]) を用いて

$$[\text{int6}] = (2n + s) \times [\text{int1}] + t \quad (32)$$

条件: ファイル行数 = $5 + (N_s + 10) \times [\text{int1}]$.

[int2] は全てのサイト番号を走る.

$0 \leq [\text{int7}] < [\text{int1}]$.

[int8] は 0 から $10 \times [\text{int1}] - 1$ まで走る.

5.15 Definition File: *orbitalidx.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NOrbitalIdx 48 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_j_OrbitalIdx | [xstring]
5 ----- | [xstring]

```

```

6      0      0      0      | [int2] [int3] [int4]
7      0      1     39      | [int2] [int3] [int4]
8      0      2      2      | [int2] [int3] [int4]
(continue...)
261    15     15     24      | [int2] [int3] [int4]
262      0      1           | [int5] [int6]
263      1      1           | [int5] [int6]
(continue...)

```

【説明】

ペア軌道の設定.

$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right]^{N/2} |0\rangle \quad (33)$$

$i = [\text{int2}], j = [\text{int3}], (f_{ij} \text{ の変分パラメータの番号}) = [\text{int4}].$

$[\text{int5}]$ 番の変分パラメータを最適化する場合は $[\text{int6}] = 1$, 最適化せず固定する場合 $[\text{int6}] = 0$ or 2 .

全て $[\text{int6}] = 1$ と設定すると奈落の底に落ちる恐れがあります. 理由は “波動関数の規格化因子の自由度” のため.

条件: ファイル行数 $= 5 + N_s^2 + [\text{int1}].$

$[\text{int2}]$ と $[\text{int3}]$ は全てのサイト番号を走る.

$0 \leq ([\text{int4}], [\text{int5}]) < [\text{int1}].$

5.16 Definition File: *qptransidx.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NQPTrans 4 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 TrIdx_TrWeight_and_TrIdx_i_xi | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6      0      1.0 | [int2] [double1]
7      1      1.0 | [int2] [double1]
8      2      1.0 | [int2] [double1]
9      3      1.0 | [int2] [double1]
10     0      0      0 | [int3] [int4] [int5]
11     0      1      1 | [int3] [int4] [int5]
(continue...)

```

【説明】

運動量射影・格子対称性射影の重みとサイト番号の指定を行います. 射影を行わない場合も重み 1.0 で “項等演算” を指定してください. $[\text{int2}]$ と $[\text{int3}]$ は (16) 式で (α, \mathbf{R}) を指定します. $[\text{double1}]$ は重み $p_\alpha \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})$ に対応します. $[\text{int3}]$ で指定された (α, \mathbf{R}) に対応する並進・点群移動をサイト番号 $[\text{int4}]$ の作用させた行き先が $[\text{int5}]$ です.

条件: ファイル行数 $= 5 + (N_s + 1) \times [\text{int1}].$

$[\text{int2}]$ と $[\text{int3}]$ は 0 から $[\text{int1}] - 1$ まで走る.

$[\text{int4}]$ は全てのサイト番号を走る.

5.17 Definition File: *cisajs.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NCisAjs 512 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 idx_i_j_s | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 0 0 0 | [int2] [int3] [int4] [int5]
7 1 0 0 1 | [int2] [int3] [int4] [int5]
(continue...)

```

【説明】

出力する 1 体のグリーン関数の指定. 次の関係式でサンプリングを行います.

$$\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle = \sum_x \rho(x) G_{ij\sigma}(x) \quad (34)$$

$i = [\text{int3}], j = [\text{int4}], \sigma = [\text{int5}]([0]\uparrow, [1]\downarrow)$.

$[\text{int2}]$ は 0 から $[\text{int1}] - 1$ まで走る指標です. *cisajsckalt.def で使用します.

条件: ファイル行数 = 5 + $[\text{int1}]$.

5.18 Definition File: *cisajsckalt.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NCisAjsCktAlt 64 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 idxJIS_idxKLT_i_j_s_k_l_t | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 0 0 0 0 0 0 0 | [int2]...[int9]
7 0 1 0 0 0 0 0 1 | [int2]...[int9]
8 0 34 0 0 0 1 1 0 | [int2]...[int9]
(continue...)

```

【説明】

出力する 2 体のグリーン関数の指定. 次の関係式でサンプリングを行います. 添え字の順序に注意.

$$\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma'} \rangle = \sum_x \rho(x) G_{ij\sigma}(x) G_{\ell k\sigma'}(x) \quad (35)$$

$i = [\text{int4}], j = [\text{int5}], \sigma = [\text{int6}]([0]\uparrow, [1]\downarrow), k = [\text{int7}], \ell = [\text{int8}], \sigma' = [\text{int9}]([0]\uparrow, [1]\downarrow)$.

使用する $G_{ij\sigma}(x)$ の指標を $[\text{int2}]$ ($G_{ij\sigma}(x)$) と $[\text{int3}]$ ($G_{\ell k\sigma'}(x)$) で指定します. 指標は*cisajs.def の $[\text{int2}]$ と整合している必要があります. *cisajs.def で計算しない指標を*cisajsckalt.def で指定するとプログラムが落ちます.

条件: ファイル行数 = 5 + $[\text{int1}]$.

5.19 Definition File: *cisajsckaltcdc.def

```

1 ----- | [xstring]
2 NCisAjsCktAltDC 64 | [xstring] [int1]
3 ----- | [xstring]
4 i_j_s_k_l_t | [xstring]
5 ----- | [xstring]
6 0 0 0 0 0 0 | [int2]...[int7]
7 0 0 0 0 0 1 | [int2]...[int7]
8 0 0 0 1 1 0 | [int2]...[int7]
(continue...)

```

【説明】

出力する 2 体のグリーン関数の指定. 次の関係式でサンプリングを行います.

$$\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma'} \rangle = \sum_x \rho(x) \frac{\langle \psi | c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma'} | x \rangle}{\langle \psi | x \rangle} \quad (36)$$

$i = [\text{int4}], j = [\text{int5}], \sigma = [\text{int6}]([0]\uparrow, [1]\downarrow), k = [\text{int7}], \ell = [\text{int8}], \sigma' = [\text{int9}]([0]\uparrow, [1]\downarrow).$

局在性が強くなるとこちらのサンプリングの方が精度が出ます. また, 局在スピンのサイトを含んだ相関関数の計算は必ずこちらを使用して下さい.

条件: ファイル行数 = 5 + [int1].

6 Job Submission

6.1 動作環境

LAPACK と MPI が使用可能な環境ならば基本的には実行可能. 動作確認を行った環境は以下の計算機.

- 物性研 : system B (備考 : system A は LAPACK のリンクがうまく行かない)
- 今田研 : venus, saturn, jupiter
- 求研 : nodemtm
- ローカル PC : MPICH をインストールすれば走ります.

6.2 基本操作

vmc.out は 1 つまたは 2 つの引数をとります. 表 1 の *.def ファイル一式が存在するディレクトリで実行して下さい. 実行ファイル vmc.out がカレントディレクトリに存在する必要はありません.

```
./vmc.out xnamelist.def [zqp_opt.dat]
```

第一引数は *.def の名前定義ファイルです. 第二引数は変分パラメータの初期値を与える場合に指定して下さい. 変分パラメータの指定ファイルの形式は §7.2 を参照. 第二引数が無い場合, 変分パラメータの初期値は以下のようになります.

$$g_i = v_{ij} = \alpha_{2nt}^{d(h)} = \alpha_{4nt}^{d(h)} = 0 \text{ (全て恒等演算子)} \quad (37)$$

$$f_{ij} = [0 : 1) \text{ の乱数} \quad (38)$$

6.3 並列計算について

いわゆる“バカパラ”です. 「実空間配置 $|x\rangle$ の生成からサンプリングまでを並列して行い, 期待値を計算する際に一つにまとめる」という単純な並列化 (= 並列化効率が低い) を行っています.

各計算機クラスターで所定の手続きに従って, 並列数を指定すれば MPI を用いた並列計算を勝手に行います. 裏を返すと並列を行わない場合 (single core) も MPI が呼び出されるため, MPI ジョブを禁止してる環境 (物性研 system B のフロントエンドなど) では, 全く走りません.

6.4 LSF を用いたジョブの投入方法

名前定義ファイル : xnamelist.def / 変分パラメータファイル : zqp_opt.dat

を用いる場合は以下のように投入して下さい. venus, saturn, jupiter, nodemtm は例 1 を参照, system B は例 2 を参照.

【例 1: venus gr1 に 4 並列 (ジョブ名 XoX. ログファイル名 b.log) で投入する場合】

```
>bsub -J 'XoX' -o 'b.log' -m gr1 -n 4 'mpijob mpirun ./vmc.out xnamelist.def zqp_opt.dat'
```

【例 2: system B の P256 に 64 並列で投入する場合】

以下のスクリプトファイル `job.sh` を用意して、ターミナルから `bsub < job.sh` で投入して下さい。

```
1 #!/bin/bash
2
3 #BSUB -J XoX
4 #BSUB -q P256
5 #BSUB -n 64
6 #BSUB -N
7 #BSUB -u ****Your e-mail address****
8
9 mpijob "dplace -s1 ./vmc.out xnamelist.def zqp_opt.dat"
```

7 Output Files

出力ファイル (*modpara.def で CDataFileHead を zvo, CParaFileHead を zqp, NDataIdxStart を 1 とした場合) の一覧は表 2 です.

表 2 : 出力ファイル一覧 (NVMCCalMode = a , NLanczosMode = b)

名前	出力条件	概要
zqp_opt.dat	$a = 0$	最適化された変分パラメータ
zvo_cfg_001.dat	—	*.def ファイルのコピー
zvo_out_00[1-5].dat	—	エネルギーとその分散
zvo_var_00[1-5].dat	—	変分パラメータの変化の経過を出力
xopttmp.dat	—	途中のファイル (zqp_opt.dat と同形式)
zvo_cisajs_00[1-5].dat	$a = 1$	$\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$
zvo_cisajsckalt_00[1-5].dat	$a = 1$	$\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma'} \rangle$
zvo_cisajsckaltcdc_00[1-5].dat	$a = 1$	$\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma'} \rangle$ (direct calculation)
zvo_qqqq_00[1-5].dat	$a = 1, b = 1$	$\langle \mathcal{H}_p \mathcal{H}_r \mathcal{H}_s \mathcal{H}_q \rangle$
zvo_qcisajsq_00[1-5].dat	$a = 1, b = 2$	$\langle \mathcal{H}_p c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \mathcal{H}_q \rangle$
zvo_qcisajsckaltq_00[1-5].dat	$a = 1, b = 2$	$\langle \mathcal{H}_p c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma'} \mathcal{H}_q \rangle$

7.1 Output File: zvo_cfg_001.dat / zvo_out_00[1-5].dat

zvo_cfg_001.dat : 使用した*.def ファイルを全てコピーして一つのファイルに書き出します.

zvo_out_00[1-5].dat : $\langle \mathcal{H} \rangle, \langle \mathcal{H}^2 \rangle, (\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2) / \langle \mathcal{H} \rangle^2$ が出力されます.

7.2 Output File: zqp_opt.dat / zvo_var_00[1-5].dat / xopttmp.dat

zqp_opt.dat : SR 法で最適化された変分パラメータとエネルギーが出力されます. 平均値と標準偏差が

$$\langle \mathcal{H} \rangle, \langle \mathcal{H}^2 \rangle, g_i, v_{ij}, \alpha_{2nt}^{d(h)}, \alpha_{4nt}^{d(h)}, f_{ij}$$

の順番で出力されます (それぞれの変分パラメータは各*.def で指定した順序).

zvo_var_00[1-5].dat : SR 法の各ステップにおける変分パラメータとエネルギーが zqp_opt.dat と同形式で “追記しながら” 出力されます (標準偏差はゼロ).

xopttmp.dat : SR 法の各ステップにおける変分パラメータとエネルギーが zqp_opt.dat と同形式で “上書きしながら” 出力されます (標準偏差はゼロ).

7.3 Output File: zqp_cisajs_00[1-5].dat / zvo_cisajsckalt_00[1-5].dat / zvo_cisajsckaltcdc_00[1-5].dat

各*.def で指定した順序で各グリーン関数が出力されます.

7.4 Output File: zvo-qqqq-00[1-5].dat / zqp-qcisajsq-00[1-5].dat / zqp-qcisajsccktaltq-00[1-5].dat

Single Lanczos Step の計算を行うために, \mathcal{H}_p ($p = 0, 1, 2$) で挟んだ期待値が出力されます.

$$\mathcal{H}_0 = I \text{ (恒等演算子)} \quad (39)$$

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \quad (40)$$

$$\mathcal{H}_2 = \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i,j} V_{ij} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) - \sum_{i,j} J_{ij}^{\text{Hund}} (n_{i\uparrow} n_{j\uparrow} + n_{i\downarrow} n_{j\downarrow}) \quad (41)$$

順序は以下の for ループに沿って出力されています.

zvo-qqqq-00[1-5].dat :

```
for(p){for(q){for(r){for(s){  $\langle \mathcal{H}_p \mathcal{H}_r \mathcal{H}_s \mathcal{H}_q \rangle$  }}}
```

zqp-qcisajsq-00[1-5].dat :

```
for(p){for(q){for(*.def){  $\langle \mathcal{H}_p c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \mathcal{H}_q \rangle$  }}}
```

zqp-qcisajsccktaltq-00[1-5].dat :

```
for(p){for(q){for(*.def){  $\langle \mathcal{H}_p c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} c_{k\sigma'}^{\dagger} c_{\ell\sigma'} \mathcal{H}_q \rangle$  }}}
```

(for(*.def) : 各*.def で指定した順序で各グリーン関数が出力されます)