

# 多変数変分モンテカルロ法 mVMC の概要

三澤 貴宏

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター



mVMC

<http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/mvmc>

# Outline

## 1. Introduction

- Strongly correlated electron systems

## 2. Basics of wavefunction methods

## 3. Basics of mVMC

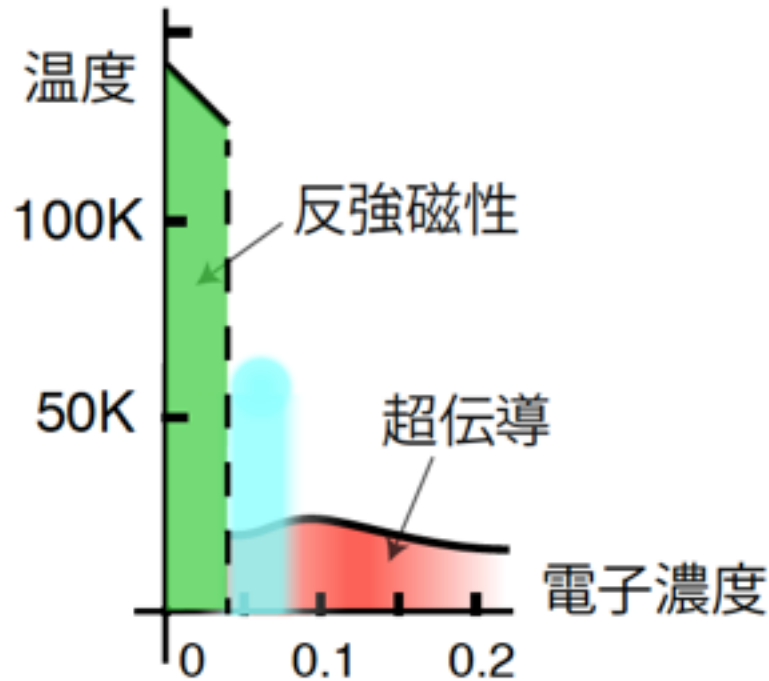
- What is **variational Monte Carlo** (VMC) ?
- Conventional VMC vs mVMC
- Optimization method (SR method) based on **time-dependent variational principle**

## 4. Open-source software of mVMC

- How to get mVMC
- How to use mVMC [Standard & Expert mode]

# Introduction: 強相関電子系

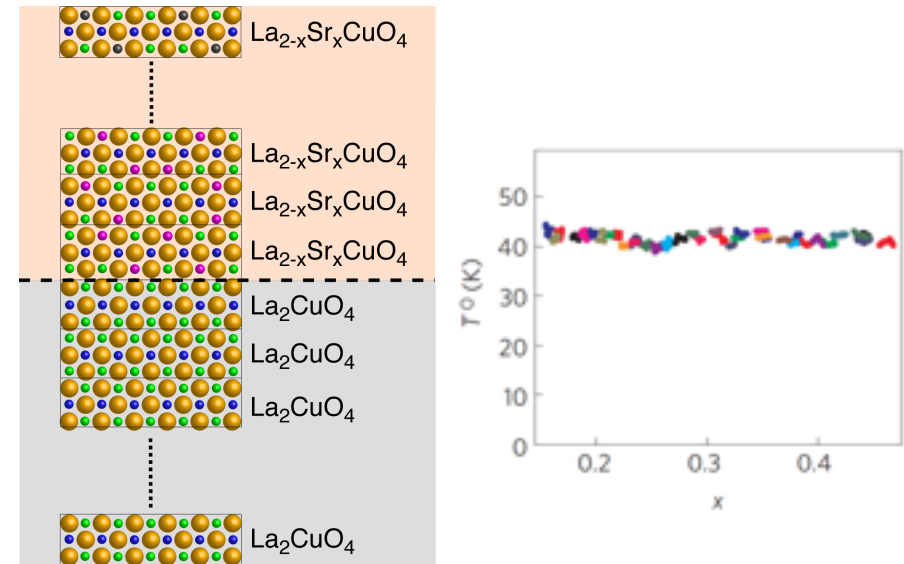
## 鉄系超伝導体



Y. Kamihara *et al.*, JACS 130 (2008) 3296

## 高温超伝導

## 銅酸化物界面



J. Wu *et al.*, Nat. Mat. (2013)

## 転移温度一定の超伝導

強い電子相関→高温超伝導を含む新奇現象の発現

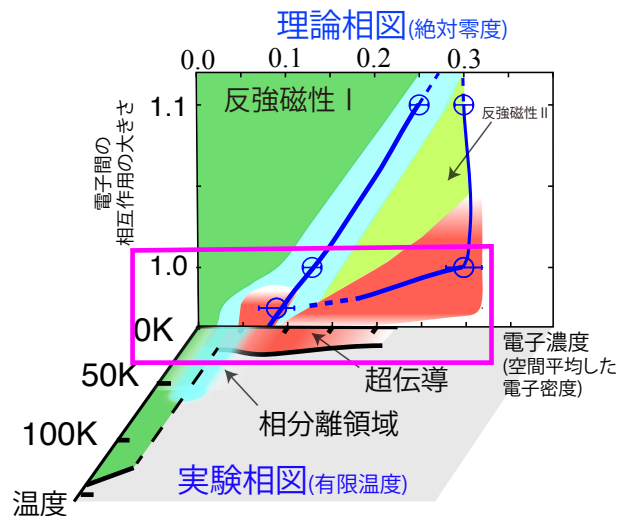
→現象の**解明**, **予測**, **制御**を行なうための理論手法の重要性

# Introduction: 強相関電子系

## 鉄系超伝導体

### 第一原理有効模型

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\sigma} \sum_{R,R'} \sum_{i,j} t_{i,j} c_{i\sigma R}^\dagger c_{j\sigma R'} + \text{h.c.} \rightarrow \text{Hopping Term} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{R,R'} \sum_{i,j} \left\{ U_{i,j} c_{i\sigma R}^\dagger c_{i\sigma R}^\dagger c_{j\sigma R'} c_{j\sigma R'} + \text{h.c.} \right. \\ & \left. + J_{i,j} c_{i\sigma R}^\dagger c_{j\sigma R}^\dagger c_{j\sigma R'} c_{i\sigma R'} + \text{h.c.} \right\} \rightarrow \text{Coulomb Term} \\ & \rightarrow \text{Exchange Term} \end{aligned}$$



## 超伝導を含む実験の再現

TM *et al.*, Nat. Com. 5, 5738 (2014)

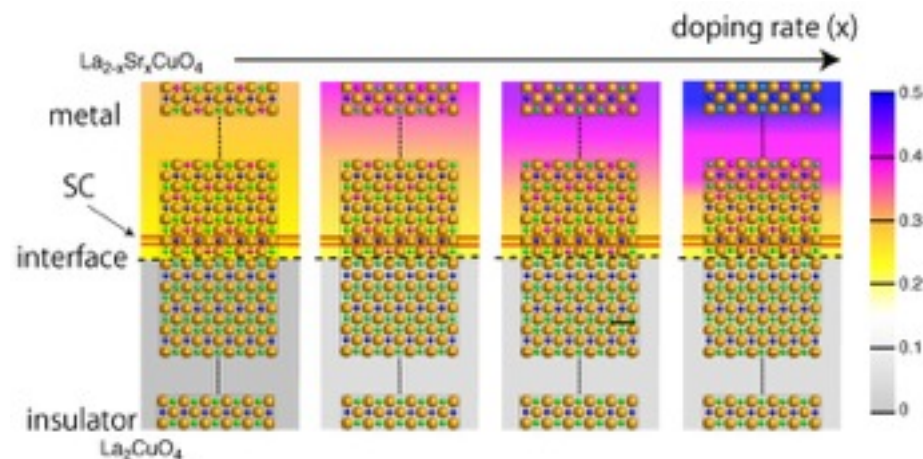
強い電子相関→高温超伝導を含む新奇現象の発現

→現象の**説明**, **予測**, **制御**を行なうための理論手法の重要性

## 銅酸化物界面

### 5層のハバード模型

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \nu} (c_{i\sigma\nu}^\dagger c_{j\sigma\nu} + \text{h.c.}) \\ & - t_z \sum_{i, \sigma, \langle \nu, \nu' \rangle} (c_{i\sigma\nu}^\dagger c_{i\sigma\nu'} + \text{h.c.}) \\ & + U \sum_i n_{i\uparrow\nu} n_{i\downarrow\nu} + \sum_i \mu_\nu n_{i\nu} \end{aligned}$$

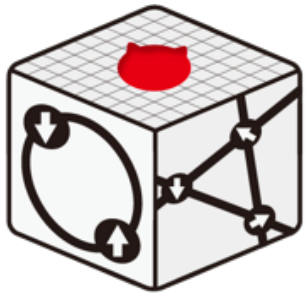


## 転移温度一定の起源解明

TM *et al.*, Sci. Adv. 2, e1600664 (2016)

# Introduction: 強相関系に対するソフトウェア開発

✓ 高精度な波動関数法: 多変数変分モンテカルロ法(mVMC)



mVMC

世界最高精度の波動関数法

今後の強相関系の標準的な計算手法へ

物性研のソフトウェア高度化プロジェクト(吉見氏、河村氏)の支援を受けて開発・公開

第一原理計算との融合による統一的パッケージへ

cf. RESPACK by K. Nakamura *et al.*

✓ 広汎な量子格子模型を厳密に取り扱えるソフトウェア(HΦ)



広汎な量子模型に対して厳密な  
基底状態・有限温度(TPQ)・  
動的構造因子の計算

# **Basics of wave function methods**

# Models for SCES

e.g. Hubbard model

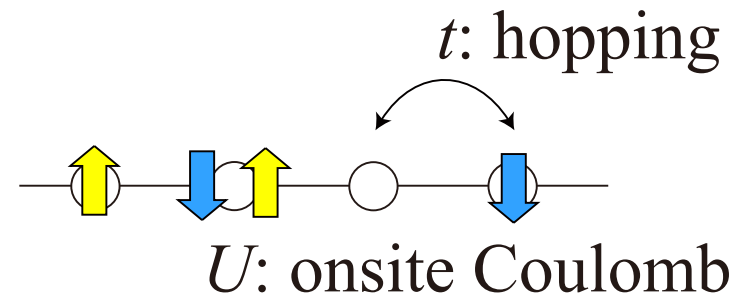
$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_t + \hat{\mathcal{H}}_U$$

Electrons as waves

$$\hat{H}_t = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma})$$

Electrons as particles

$$\hat{H}_U = \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad \hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$$



Relations between 2nd-quantized operators (these are all !)

$$\{\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j\sigma'}\} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'} + \hat{c}_{j\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'}$$

$$\{\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger\} = 0 \rightarrow \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}^\dagger = 0 \quad \text{Pauli's principle}$$

$$\{\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma'}\} = 0 \rightarrow \hat{c}_{i\sigma} \hat{c}_{i\sigma} = 0$$

# Wave function = eigenvectors of Hamiltonian

## Matrix representation of Hamiltonian (ex. 2 site Hubbard model)

Real-space configuration  $|\uparrow, \downarrow\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle$

After some *tedious* calculations,  $\langle \uparrow, \downarrow | \hat{H}_t | \uparrow, \downarrow \rangle = \langle \uparrow, \downarrow | (t \sum_{\sigma} c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma}) | \uparrow, \downarrow \rangle = -t$

$$\mathcal{H} = \begin{array}{c} \langle \uparrow, \downarrow | \\ \langle \downarrow, \uparrow | \\ \langle \uparrow\downarrow, 0 | \\ \langle 0, \uparrow\downarrow | \end{array} \begin{array}{cccc} |\uparrow, \downarrow\rangle & |\downarrow, \uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow, 0\rangle & |0, \uparrow\downarrow\rangle \\ \left( \begin{array}{cccc} 0 & 0 & -t & -t \\ 0 & 0 & t & t \\ -t & t & U & 0 \\ -t & t & 0 & U \end{array} \right) \end{array}$$

$$|\phi\rangle = a_0 |\uparrow, \downarrow\rangle + a_1 |\downarrow, \uparrow\rangle + a_2 |\uparrow\downarrow, 0\rangle + a_3 |0, \uparrow\downarrow\rangle$$

**Diagonalization  $\rightarrow$  eigenvalues, eigenvectors**  
 **$\rightarrow$  Problem is completely solved ( $H\Phi$ )**

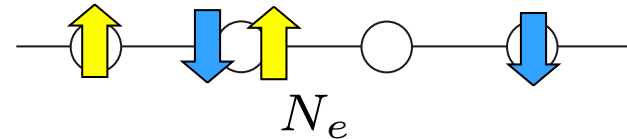


# One-body approximation

## Slater determinant

$$|\phi_{\text{one}}\rangle = \prod_{\sigma, n=1}^{N_e} \psi_{n\sigma}^\dagger |0\rangle \quad \psi_{n\sigma}^\dagger = \sum_{i=1}^{N_s} \Phi_{i\sigma n} c_{i\sigma}^\dagger$$

## Real-space configuration ( $t=0$ )



$$\Phi_{i\sigma n} = \delta_{i,n} \rightarrow \psi_{n\sigma}^\dagger = c_{n\sigma}^\dagger \rightarrow |\phi_{\text{one}}\rangle = \prod_{\sigma, n}^{N_e} c_{n\sigma}^\dagger |0\rangle$$

## Plane wave ( $U=0$ )

$$\Phi_{i\sigma n} = \frac{1}{N_s^{1/2}} e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_i} \rightarrow c_{k_n\sigma}^\dagger \equiv \sum_i \Phi_{i\sigma n} c_{i\sigma}^\dagger$$

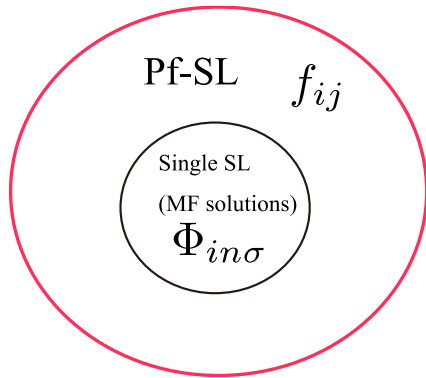
**Slater determinant can describe conventional orders;  
antiferromagnetic order, charge orders, orbital orders ...**

**[mVMC includes codes for UHF]**

# Beyond one-body approximations

## Slater determinant $\rightarrow$ Pfaffian wave function

$$|\phi_{\text{one}}\rangle = \prod_{\sigma, n=1}^{N_e} \left( \sum_{i=1}^{N_s} \Phi_{i\sigma n} c_{i\sigma}^\dagger \right) |0\rangle \rightarrow |\phi_{\text{Pf}}\rangle = \left( \sum_{i,j} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right)^{N_e} |0\rangle$$



## Pfaffian wave function

- includes Slater wave function,
- can describe singlet correlations
- $\rightarrow$  superconductivity, quantum spin liquid

## Introducing many-body correlations

$$|\Phi\rangle = \hat{\mathcal{P}}|\phi\rangle, \quad \hat{\mathcal{P}}_G = e^{-g \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}$$

Correlation factors  $\rightarrow$  Many-body correlations can be included  
 $\rightarrow$  Superconductivity by repulsive interactions can be described

Further improvement: power-Lanczos, backflow, multi-pfaffian ...

# **Basics of variational Monte Carlo**

# Variational Monte Carlo (VMC) I

review: C. Gros,  
Ann. Phys. 189, 53 (1989)

**Variational principle**      $\alpha$ : variational parameters

$$\min_{\alpha} E(\alpha) = \min_{\alpha} \frac{\langle \psi(\alpha) | \hat{H} | \psi(\alpha) \rangle}{\langle \psi(\alpha) | \psi(\alpha) \rangle}$$

**Physical properties [MC sampling]**  
 **$x$  : real space configuration**

$$\frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_x \frac{\langle \psi | \hat{A} | x \rangle \langle x | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_x \underbrace{\rho(x)}_{\text{positive weight}} \frac{\langle \psi | \hat{A} | x \rangle}{\langle \psi | x \rangle}$$

$$\sim \frac{1}{N_{\text{MC}}} \sum_{\text{sampling}} \frac{\langle \psi | \hat{A} | x \rangle}{\langle \psi | x \rangle}$$

$$\langle \psi | \hat{A} | x \rangle = \langle \psi | x' \rangle$$

Inner product

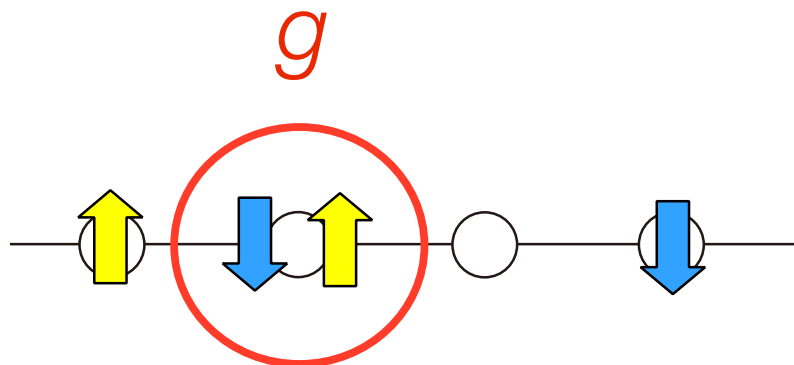
positive weight

$$\rho(x) = \frac{|\langle \psi | x \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} > 0$$

# Variational Monte Carlo (VMC) II

$$|\psi\rangle = \mathcal{P}_{\text{cor}}|\phi_0\rangle \implies \langle\psi|x\rangle = \underbrace{\langle\phi_0|x\rangle}_{\text{determinant or Pfaffian}} \underbrace{\mathcal{P}_{\text{cor}}(x)}_{\text{One-body part correlation factor}}$$

Ex. Gutzwiller factor  $\mathcal{P}_G = e^{-g \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}}$



$$\mathcal{P}_G|x\rangle = |x\rangle e^{-gD(x)}$$

**Real-space diagonal correlation factor =  
easy to calculate inner product.**

# Wave function of mVMC

D. Tahara and M. Imada, JPSJ (2008)  
T. Misawa and M. Imada, PRB (2014)

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

One-body part

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

Generalized BCS wave func.  
→ correlated metal,  
AF, CO ordered states,  
superconducting state

Correlation factors

Gutzwiller-Jastrow  $\mathcal{P}_G \mathcal{P}_J$   
doublon-holon  $\mathcal{P}_{d-h}^{(2)} \mathcal{P}_{d-h}^{(4)}$

Projections

$\mathcal{L}^S$ : Total spin,  $S=0$   
 $\mathcal{L}^K$ : Total momentum,  $K=0$

Update (SR method)

Minimizing  $E_{\vec{\alpha}} = \langle H \rangle_{\vec{\alpha}}$

$$\vec{\alpha}_{\text{new}} - \vec{\alpha}_{\text{old}} = -X^{-1} \vec{g}$$

$$g_k = \frac{\partial E_{\vec{\alpha}}}{\partial \alpha_k} \quad \text{gradient of energy (MC Sampling)}$$

**Optimization of many variational parameters ( $\geq 10000$ )**  
→ **High-accuracy wave functions for ground states**

# Conventional VMC v.s. mVMC

## Conventional VMC:

Strong constraint on wave functions [ # of parameters ~10]

ex. antiferromagnetic phase

$$|\phi_{\text{AF}}\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| < k_F, \sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0\rangle$$

$$a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \sigma v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger$$
$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{E_{\mathbf{k}}}{\sqrt{E_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\text{AF}}^2}} \right)$$

Variational parameters = AF order parameter + etc.

## Disadvantages of conventional VMC

- Accuracy is *not enough* due to the strong constraint
- *Overestimating* the stability of ordered phases
- It is difficult to treat *realistic models* (*ab initio* models)

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{nm} t_{m\mathbf{R}\sigma\mathbf{R}'\sigma} a_{n\mathbf{R}}^{\sigma\dagger} a_{m\mathbf{R}'}^{\sigma} \rightarrow \text{Hopping Term}$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{nm} \left\{ U_{m\mathbf{R}\sigma\mathbf{R}'\sigma'} a_{n\mathbf{R}}^{\sigma\dagger} a_{m\mathbf{R}'}^{\sigma'} a_{n\mathbf{R}}^{\sigma'} a_{m\mathbf{R}}^{\sigma} \rightarrow \text{Coulomb Term} \right.$$
$$\left. + J_{m\mathbf{R}\sigma\mathbf{R}'} \left( a_{n\mathbf{R}}^{\sigma\dagger} a_{m\mathbf{R}'}^{\sigma'} a_{m\mathbf{R}}^{\sigma'} a_{n\mathbf{R}}^{\sigma} + a_{n\mathbf{R}}^{\sigma\dagger} a_{m\mathbf{R}'}^{\sigma'} a_{n\mathbf{R}}^{\sigma'} a_{m\mathbf{R}}^{\sigma} \right) \right\} \rightarrow \text{Exchange Term}$$

# Conventional VMC v.s. mVMC

Conventional VMC:

Strong constraint on wave functions [ # of parameters ~ 10]

ex. antiferromagnetic phase

$$|\phi_{\text{AF}}\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| < k_F, \sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0\rangle$$

$$a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \sigma v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger$$
$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{E_{\mathbf{k}}}{\sqrt{E_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\text{AF}}^2}} \right)$$

Variational parameters = AF order parameter + etc.

**many-variable VMC (mVMC):**

**flexibility of one-body part [ # of parameters > 10000]**

$$|\phi_{\text{AP}}\rangle = \left( \sum_{i,j} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right)^{N_e/2} |0\rangle$$

$$|\phi_{\text{AP+P}}\rangle = \left( \sum_{i\sigma, j\tau} F_{i\sigma, j\tau} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\tau}^\dagger \right)^{N_e/2} |0\rangle$$

**$f_{ij}, F_{IJ}$ : variational parameters**

**$f_{ij}$  [  $i, j$  real-space indices]  $\rightarrow$  correlated paramagnetic state, symmetry breaking phase (AF etc.), **SC states****



**Optimization method**

**SR method [S. Sorella PRB 2001]**

**(General) Gradient method**

**$\alpha$ : variational parameters**

$$\Delta \alpha = \alpha_{\text{new}} - \alpha_{\text{old}} = -X^{-1} \mathbf{g} \quad \left( g_k = \frac{\partial E_{\alpha}}{\partial \alpha_k} \right)$$

# Optimization method

SR method [S. Sorella PRB 2001]

(General) Gradient method

$\alpha$ : variational parameters

$$\Delta \alpha = \alpha_{\text{new}} - \alpha_{\text{old}} = -X^{-1} \mathbf{g} \quad \left( g_k = \frac{\partial E_{\alpha}}{\partial \alpha_k} \right)$$

Steepest decent method [fast but unstable]

$$X = I \text{ (identity matrix)}$$

Newton method [second derivatives are expensive]

$$X = h \text{ (Hessian : } h_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta} \text{)}$$

# Optimization method

SR method [S. Sorella PRB 2001]

## (General) Gradient method

$\alpha$ : variational parameters

$$\Delta\alpha = \alpha_{\text{new}} - \alpha_{\text{old}} = -X^{-1}g \quad \left(g_k = \frac{\partial E_\alpha}{\partial \alpha_k}\right)$$

## Steepest decent method [fast but unstable]

$$X = I \text{ (identity matrix)}$$

## Newton method [second derivatives are expensive]

$$X = h \text{ (Hessian : } h_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta})$$

## Stochastic reconfiguration (SR) method [moderately fast + stable]

$$X = S \text{ (overlap matrix : } S_{\alpha\beta} = \langle \bar{\psi}_\alpha | \bar{\psi}_\beta \rangle)$$

$$|\bar{\psi}_\alpha\rangle = \frac{\partial |\bar{\psi}\rangle}{\partial \alpha}, \quad |\bar{\psi}\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}}$$

# Time-dependent variational principle

Imaginary time evolution  $\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial\tau} = -\hat{H}|\psi\rangle$

$$\left\| \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial\tau} + \hat{H}|\psi\rangle \right\| = 0 \rightarrow \min_{\alpha} \left\| \sum_k \frac{\partial\alpha_k}{\partial\tau} \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial\alpha_k} + \hat{H}|\psi\rangle \right\|$$

(imaginary) time-dependent *variational principle*  
A. D. McLachlan, Mol. Phys. 8, 39 (1964)

SR method

= imaginary-time evolution in restricted Hilbert space

$$\min_{\alpha} \left\| \sum_k \frac{\partial\alpha_k}{\partial\tau} \frac{\partial|\bar{\psi}\rangle}{\partial\alpha_k} + (\hat{H} - \langle\hat{H}\rangle)|\bar{\psi}\rangle \right\|$$

$$\rightarrow \Delta\alpha = -\frac{\Delta\tau}{2} S^{-1} g$$

**S: overlap matrix**

SR method can be used for real-time evolution (Ido et al., PRB 2015)  
& finite-temperature calculations (Takai et al., JPSJ 2016)

# Advantages of mVMC



- No negative-sign problem  
positive weight  $\rho(x) > 0$
- Wide applicable range [strong correlations, geometrical frustration, multi orbital system, any dimensions ... ]
- Natural extensions of mean-field calculations
- Easy to include many-body correlations through correlation factors (Gutzwiller, Jastrow, Doublon-Holon..)
- Systematic improvement is possible (**power Lanczos**, **backflow**, multi Pfaffian method ...)
- Not only for ground-state calculations →  
*finite-temperature calculations, real-time evolution !*

# Applications of mVMC [2009-]

1. **Iron-based SC** : [misawa,nakamura,miyake,hirayama,imada]  
LaFeAsO,LaFePO,BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>,FeTe,FeSe
2. **Doped Hubbard model** : [misawa,imada]  
Origin of SC in doped Hubbard model
3. **Organic conductors**: [shinaoka,misawa,nakamura,imada]  
 $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu(NCS)<sub>2</sub>
4. **Kondo lattice model**: [misawa,yoshitake,motome]  
CO around 1/4 filling
5. **Frustrated Kondo model**: [nakamikawa,yamaji,udagawa,motome]  
Partial Kondo singlet phase in triangular lattice
6. **Spin liquids** : [morita, kaneko, imada]  
 $J_1$ - $J_2$  Heisenberg model, frustrated Hubbard model
7. **Topological insulators**: [yamaji, kurita, imada]  
Kane-Mele-Hubbard model, Topological Mott ins., Kitaev model
8. **Electron-phonon coupling system** [ohgoe, imada]
9. *real-time & imaginary-time evolution* [takai, ido, ohgoe, imada]

# Open software of mVMC



mVMC



# Developers of mVMC



M. Kawamura

K. Yoshimi

S. Morita



T. Kato

Y. Motoyama



T. Ohgoe



M. Imada



K. Ido



Development of mVMC is supported by  
“*Project for advancement of software usability  
in materials science*” by ISSP



# How to get mVMC

search by “mVMC” → You can find our homepage in the first page (maybe, the *fourth or fifth* candidate)

GitHub → <https://github.com/issp-center-dev/mVMC>



7 件 (0.49 秒)

**mVMC — 日本語 - MateriApps**

[ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/mvmc](https://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/mvmc)

公開度: 3 ドキュメント充実度: 2 広汎な多体量子系の有効模型(多軌道ハバード模型、ハイゼンベルグ模型、近藤格子模型など)の基底状態の高精度な波動関数を変分モンテカルロ法によって数値的に求める有効模型ソルバーパッケージ。

**MateriApps(マテリアップス) 物質科学シミュレーションのポータルサイ...**

[ma.cms-initiative.jp/](https://ma.cms-initiative.jp/)

アプリ講習会情報はこちら. お知らせ. 多変数変分モンテカルロ法ソフトウェア **mVMC** のver.0.2が公開されました (2017-03-16). 2017年2月の月間アクセスランキングを掲載しました (2017-03-06).

**MateriApps** 収録アプリが200個になりました! (2017-02-07).

このページに複数回アクセスしています. 前回のアクセス: 17/02/28



**- mVMC is pre-installed in supercomputer in ISSP (sekirei)**

Let's start mVMC !



mVMC



# mVMCの計算の流れ

## スタンダードモード

### 例:1次元ハバード模型

L=16  
model = "Hubbard"  
lattice = "chain"  
U = 4  
t = 1  
nelec=16  
2Sz=0

↓ 自動的に必要な  
ファイル生成

### インプットファイル

- ハミルトニアンを指定するファイル
- 波動関数を指定するファイル
- 計算条件を指定するファイル

## エキスパートモード

以下の一体項,二体相互作用を  
持つ一般的なハミルトニアンを  
取り扱える

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_T + \mathcal{H}_I, \\ \mathcal{H}_T &= - \sum_{i,j} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} t_{ij\sigma_1\sigma_2} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2}, \\ \mathcal{H}_I &= \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} I_{ijkl\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4}\end{aligned}$$

4

↓ ハミルトニアン・波動関数を  
指定するインプットファイルを作成

### 出力

- エネルギーなどの最適化過程
- 最適化した波動関数、エネルギー

↓ 最適化した波動関数での  
相関関数計算

### 出力:熱力学物理量, 1体, 2体の相関関数

$$\langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \rangle \quad \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \rangle$$

↓ fourier tool (構造因子の計算・可視化ツール)

スピン・電荷構造因子の計算・可視化  
 $N(q), S(q)$

SR法による最適化計算

# How to use mVMC: Standard model



$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

**W = 4**

**L = 4**

**Wsub = 2**

**Lsub = 2**

**model = "FermionHubbard"**

**lattice = "Tetragonal"**

**t = 1.0**

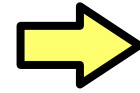
**U = 4.0**

**nelec = 16**

**Simple input files for conventional models**

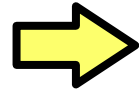
# How to use mVMC: Standard mode II

vmcdryout.out StdFace.def

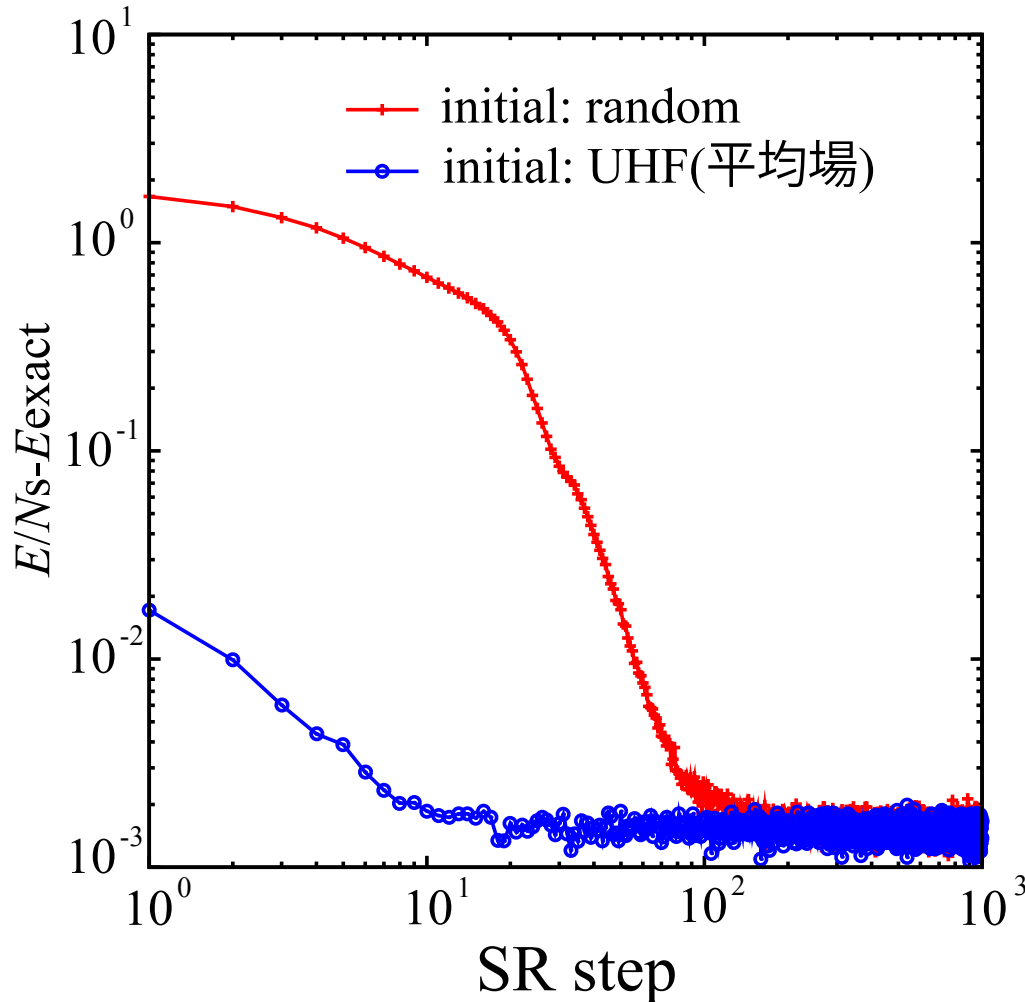


必要なファイルの生成

vmc.out namelist.def



最適化が実行される



2次元正方格子  
Hubbard模型  
 $4 \times 4, U/t=4, n=1$

system B ~ 5分程度

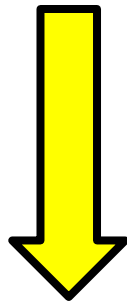
# 初期状態の生成

Slater determinant [mean-field wave func.]

$$|\phi_{\text{SL}}\rangle = \prod_{n=1, \sigma}^{N_e/2} \psi_{n\sigma}^\dagger |0\rangle$$

unitary trans.  
of one-body  
states

$$\psi_{n\sigma}^\dagger = \sum_{i=1}^{N_s} \Phi_{in\sigma} c_{i\sigma}^\dagger$$



$$f_{ij} = \sum_{n=1}^{N_e/2} \Phi_{in\uparrow} \Phi_{jn\downarrow}$$

$$\sum_{i=1}^{N_s} \Phi_{in\sigma} \Phi_{im\sigma} = \delta_{nm}$$

Pfaffian Slater determinant  
(Pairing wave function)

$$|\phi_{\text{Pf}}\rangle = \left( \sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right)^{N_e/2} |0\rangle$$

平均場解から初期状態を生成可能

平均場計算を行なうプログラムも用意 (src/UHF)

# Hubbard model

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{3N_s} \sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}$$

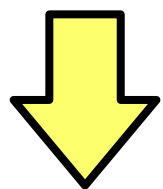


Physical Properties	mVMC( $2 \times 2$ )	ED
<hr/>		
$4 \times 4(\text{PP}), n = 1$		
Energy per site	-0.8500(1)	-0.8513
$S(\mathbf{q}_{\text{peak}})/N_s$	0.0575(2)	0.0569
$\mathbf{q}_{\text{peak}}$	$(\pi, \pi)$	$(\pi, \pi)$
$\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$	-0.2063(14)	-0.2063
<hr/>		
$4 \times 4(\text{PP}), n = 0.625$		
Energy per site	-1.2196(1)	-1.22380
$S(\mathbf{q}_{\text{peak}})/N_s$	0.0130(1)	0.01300
$\mathbf{q}_{\text{peak}}$	$(\pi/2, \pi)$	$(\pi/2, \pi)$
$\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$	-0.0704(5)	-0.0683
<hr/>		

**mVMC well reproduces results of exact diagonalization!**  
**It is possible to calculate larger system sizes (100-1000 sites)**

# How to use mVMC: What is Standard mode ?

vmcdry.out StdFace.def



Standard mode:

計算に必要なファイルを自動生成

**[H $\Phi$ ,UHF共通]** 模型を指定するパラメーターファイル

coulombintra.def, trans.def, zlocspn.def ...

計算条件を指定するパラメーターファイル

modpara.def

波動関数を指定するパラメーターファイル

orbitalidx.def, gutzwilleridx.def, jastrowidx.def...

**[H $\Phi$ ,UHF共通]** 相関関数を指定するパラメーターファイル

greenone.def, greentwo.def

+ファイル名を列挙したファイル: namelist.def

**Expert mode:** 計算に必要なファイルを自分で用意



Expert mode !



mVVC

# How to use mVMC: What is Expert mode ?

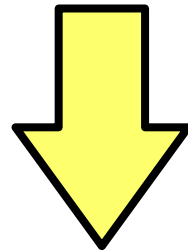
**Expert mode:** 計算に必要な以下のファイルを自分で用意

**[HPhi,UHF共通]** 模型を指定するパラメーターファイル  
coulombintra.def, trans.def, zlocspn.def ...

計算条件を指定するパラメーターファイル  
modpara.def

波動関数を指定するパラメーターファイル  
orbitalidx.def, gutzwilleridx.def, jastrowidx.def...

**[HPhi,UHF共通]** 相関関数を指定するパラメーターファイル  
greenone.def, greentwo.def



vmc.out namelist.def

# How to use mVMC: zInterall.def

## 模型を指定するパラメーターファイルの例

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

```
=====
NInterAll      96      相互作用の総数
=====
=====zInterAll=====
=====
```

									実部	虚部
0	0	0	0	1	0	1	0	0.500000	0.000000	
0	0	0	0	1	1	1	1	-0.500000	0.000000	
0	1	0	1	1	0	1	0	-0.500000	0.000000	
0	1	0	1	1	1	1	1	0.500000	0.000000	
0	0	0	1	1	1	1	0	1.000000	0.000000	
0	1	0	0	1	0	1	1	1.000000	0.000000	
...	<i>i</i>	$\sigma_1$	<i>j</i>	$\sigma_2$	<i>k</i>	$\sigma_3$	<i>l</i>	$\sigma_4$		

「任意」の2体の相互作用を指定することができる  
→任意の模型を指定することが出来る

# How to use mVMC: Expert mode

## 模型を指定する簡易版のパラメータファイル

**- CoulombIntra**  $H+ = \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$

```
=====
NCoulombintra 2
=====
=====Exchange=====
=====
0      4.0
1      4.0
```

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

```
=====
NExchange 2
=====
=====Exchange=====
=====
0      1      0.5
1      2      0.5
```

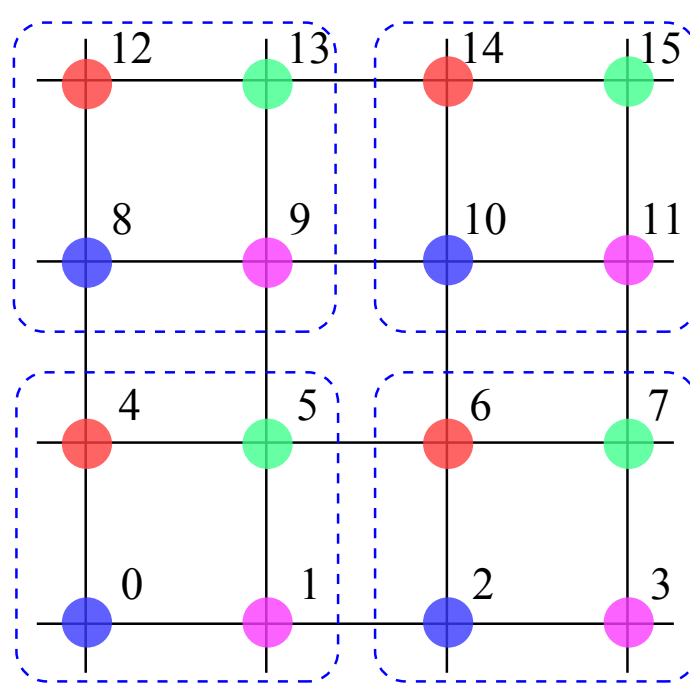
詳細はマニュアル参照

注意点！



mVMC

# 副格子



$$f_{0,9} = f_{2,11}$$

計算コストを減らすために波動関数の副格子構造を仮定  
正方格子なら $2 \times 2$ が標準的 [Lsub ,Wsub で指定]

## 注意

- 考えたい秩序に整合しているか？
- ハミルトニアンの特称性と整合しているか？
- 運動量射影との整合性は大丈夫か？

# 量子数射影について

全スピン射影: ハミルトニアンがSU(2)対称、  
Sz=0の場合のみ適用可能[modepara.def]

運動量射影: 系が並進対称性を持っているときのみ  
適用可能 [modpara.def, qptrans.def ]

$$|\psi\rangle = \mathcal{P}\mathcal{L}|\phi_{\text{pair}}\rangle$$

## 注意

- 基底状態の対称性と整合しているか？(1Dは特に注意)
- ハミルトニアンの対称性と整合しているか？

Sz保存系だがSU(2)対称でない系[Kane-Mele,BHZ model]

- 相関因子の対称性と整合しているか？

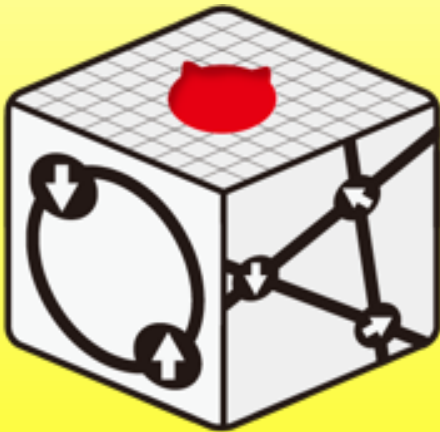
[運動量射影をする場合は相関因子は1副格子を取るのが自然]

# 計算のチェックポイント

- 相互作用が0のとき正しいエネルギーになるか？  
(fijのチェック, open shell+副格子は注意が必要)
- 小さいサイズで対角化の結果と整合しているか？
- 平均場近似よりエネルギーが下がるか？
- 平均場近似の解を再現できる副格子構造か？
- 運動量射影は運動量をいくつか変えてみる  
(とくに励起状態は全運動量は0ではないことが多いので注意)



mVMCで  
何ができるか？



mVMC

# 何が得意か？

-パフィアン波動関数=スレーター波動関数の拡張

✓平均場近似の結果の系統的な改良

-パフィアン波動関数→シングレット相関が取り込める

✓斥力系の超伝導も取り扱える

✓スピン液体(projected BCS),近藤スピン液体が取り扱える

-波動関数・インターフェースの柔軟性

✓多軌道模型なども簡単に取り扱える

✓複素ホッピング:パイエルス位相を導入してDrude weight

-量子数射影

✓低励起状態の計算、スピンギャップの計算など

-Gutzwiller因子→局在スピンも取り扱える

✓遍歴電子系,局在スピン系,近藤系まで取り扱える

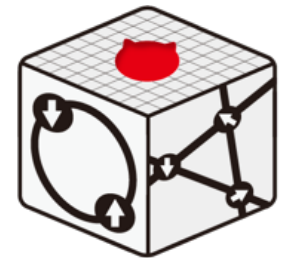
# Summary

## Basics of mVMC:

- Flexible wave functions (# of parameter  $> 10^4$ )
- *Time-dependent variational principle* → optimization of many variational parameters
- finite-temperature calculations
- real-time evolutions

## How to use mVMC:

- Simple & Flexible user interfaces
- *Very easy* to study conventional models
- *Easy* to study general models



mVMC