
Fourier Documentation

リリース *0.1*

kawamura

2017年08月25日

Contents

1	概要	1
1.1	要件	1
1.2	対応する量	1
2	チュートリアル	2
2.1	HPhi/vmc.out の実行	2
2.2	相関関数のフーリエ変換	2
2.3	相関関数のプロット	3
3	ファイルフォーマット	5
3.1	ジオメトリー	5
3.2	サイト表示の 1 体および 2 体相関関数	6
3.2.1	計算する相関関数のインデックスの指定	6
3.2.2	サイト表示の 1 体および 2 体相関関数の計算結果	6
3.3	プリミティブゾーン内の相関関数	6
3.4	corplot 用 k 点ファイル	7
3.5	gnuplot スクリプト	7
3.6	広範囲の k 点での相関関数	8
4	各ユーティリティの動作について	9
4.1	fourier ユーティリティ	9
4.1.1	HPhi-Lanczos	9
4.1.2	HPhi-TPQ	9
4.1.3	HPhi-全対角化および LOBCG	9
4.1.4	mVMC	10
4.2	corplot ユーティリティ	10
5	Contact	11

Chapter 1

概要

本資料は, mVMC および $\mathcal{H}\Phi$ で計算されたサイト表示の相関関数を Fourier 変換し, 出力するユーティリティに関するマニュアルである.

要件

本ユーティリティの使用要件は mVMC および $\mathcal{H}\Phi$ と同じである.

対応する量

本ユーティリティは以下の相関関数の Fourier 変換に対応している.

1 体相関

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \equiv \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{ij}^{N_{\text{site}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \rangle \quad (1.1)$$

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \equiv \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{ij}^{N_{\text{site}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \rangle \quad (1.2)$$

密度-密度相関

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle \equiv \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{ij}^{N_{\text{site}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \hat{\rho}_i \hat{\rho}_j \rangle \quad (1.3)$$

スピン-スピン相関

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{k}}^z \hat{S}_{\mathbf{k}}^z \rangle \equiv \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{ij}^{N_{\text{site}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \rangle \quad (1.4)$$

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{k}}^+ \hat{S}_{\mathbf{k}}^- \rangle \equiv \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{ij}^{N_{\text{site}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- \rangle \quad (1.5)$$

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{k}} \rangle \equiv \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{ij}^{N_{\text{site}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \rangle \quad (1.6)$$

Chapter 2

チュートリアル

このチュートリアルは `sample/Standard/Spin/HeisenbergSquare/` にあるインプットファイルを用いて行う。

HPhi/vmc.out の実行

- $H\Phi$ の場合

基底状態および相関関数の計算を行う。

```
$ ../../../../src/HPhi -s StdFace.def
```

- mVMC の場合

変分波動関数の最適化を行う。

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

相関関数を計算するために、`StdFace.def` に以下の行を付け加える。

```
NVMCCalMode = 1
```

相関関数を計算する。

```
$ ../../../../src/vmc.out -s StdFace.def output/zqp_opt.dat
```

これにより、カレントディレクトリの `output/` 以下に 1 体および 2 体の相関関数が出力される。

関連するファイル

- `StdFace.def` (mVMC/ $H\Phi$ のマニュアル参照)
- `zqp_opt.dat` (mVMC のマニュアル参照)
- `greenone.def` (計算する相関関数のインデックスの指定)
- `greentwo.def` (計算する相関関数のインデックスの指定)

相関関数のフーリエ変換

ユーティリティプログラム `fourier` を使って、相関関数をフーリエ変換する。

```
$ ../../../../../../tool/fourier namelist.def geometry.dat
```

これにより、カレントディレクトリの `output/` 以下にフーリエ変換された相関関数が出力される。

関連するファイル

- `output/zvo_cisajs_001.dat` (サイト表示の 1 体および 2 体相関関数の計算結果)
- `output/zvo_cisajs.dat` (サイト表示の 1 体および 2 体相関関数の計算結果)
- `output/zvo_cisajscktalt_001.dat` (サイト表示の 1 体および 2 体相関関数の計算結果)
- `output/zvo_cisajscktalt.dat` (サイト表示の 1 体および 2 体相関関数の計算結果)
- `geometry.dat` (ジオメトリー)
- `output/zvo_corr.dat` (プリミティブゾーン内の相関関数)

相関関数のプロット

ユーティリティプログラム `corplot` を使って、相関関数を k 空間でプロットする。

```
$ ../../../../../../tool/corplot output/zvo_corr.dat
```

この時、ターミナルには次のように標準入力を促すメッセージが現れる。

```
##### Plot Start #####

Please specify target number from below (0 or Ctrl-C to exit):

Real Part Without ErrorBar
  [ 1] Up-Up [ 2] Down-Down [ 3] Density-Density [ 4] SzSz [ 5] S+S- [ 6] S-S+
Imaginary Part Without ErrorBar
  [11] Up-Up [12] Down-Down [13] Density-Density [14] SzSz [15] S+S- [16] S-S+
Real Part With ErrorBar
  [21] Up-Up [22] Down-Down [23] Density-Density [24] SzSz [25] S+S- [26] S-S+
Imaginary Part With ErrorBar
  [31] Up-Up [32] Down-Down [33] Density-Density [34] SzSz [35] S+S- [36] S-S+

Target :
```

プロットしたい量に対応する数字 (例えば 4) を入力し、Enter キーを押すと `gnuplot` が起動して 3D グラフが表示される (図 2.1)。

関連するファイル

- `kpoint.dat` (`corplot` 用 k 点ファイル)
- `correlation.gp` (`gnuplot` スクリプト)
- `correlation.dat` (広範囲の k 点での相関関数)

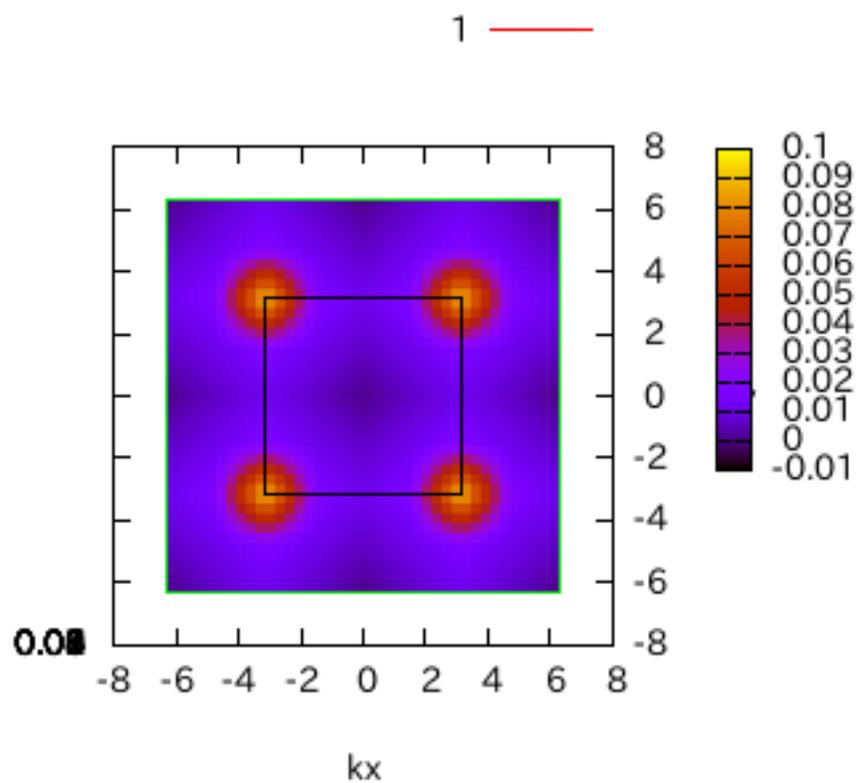


図 2.1: Target : 4 としてプロットした図. 黒線は第一ブリルアンゾーンを表す.

Chapter 3

ファイルフォーマット

ジオメトリー

チュートリアルでのファイル名は `geometry.dat` . mVMC/ℓΦ のスタンダードモードを用いた場合には上記のファイル名で自動的に生成されるので、とくに気にする必要はない。

1.000000	0.000000	0.000000	(1)
0.000000	1.000000	0.000000	(1)
0.000000	0.000000	1.000000	(1)
0.000000	0.000000	0.000000	(2)
4 0 0			(3)
0 4 0			(3)
0 0 1			(3)
0.000000	0.000000	0.000000	(4)
1.000000	0.000000	0.000000	(4)
2.000000	0.000000	0.000000	(4)
3.000000	0.000000	0.000000	(4)
0.000000	1.000000	0.000000	(4)
1.000000	1.000000	0.000000	(4)
2.000000	1.000000	0.000000	(4)
3.000000	1.000000	0.000000	(4)
0.000000	2.000000	0.000000	(4)
1.000000	2.000000	0.000000	(4)
2.000000	2.000000	0.000000	(4)
3.000000	2.000000	0.000000	(4)
0.000000	3.000000	0.000000	(4)
1.000000	3.000000	0.000000	(4)
2.000000	3.000000	0.000000	(4)
3.000000	3.000000	0.000000	(4)

1. 単位格子ベクトル. 任意の単位.
2. 1 体項がシミュレーションセルの境界を跨いだときに付く位相 (単位 degree)
3. シミュレーションセルの形状を指定する三本の整数ベクトル. スタンダードモードの入力パラメーター `a0W`, `a0L`, `a0H`, `a1W`... に対応する.
4. 各サイトの座標. 単位格子ベクトルに対するフラクショナル座標として入力する.

サイト表示の1体および2体相関関数

計算する相関関数のインデックスの指定

mVMC/ $\mathcal{H}\Phi$ で計算する相関関数を指定する。スタンダードモードを使った場合には自動的に生成される。総合的な説明は mVMC/ $\mathcal{H}\Phi$ のマニュアルを参照。チュートリアルでのファイル名は `greenone.def` (1体) および `greentwo.def` (2体) である。

対応する量にある相関関数を計算するためには、以下のようにインデックスを指定する必要がある。

- $\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$
 $\langle \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \rangle$ に対して、 i および j がそれぞれ全てのサイトを網羅するようにする。
- $\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle$
 $\langle \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \rangle$ に対して、 i および j がそれぞれ全てのサイトを網羅するようにする。
- $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle$ および $\langle \hat{S}_{\mathbf{k}}^z \hat{S}_{\mathbf{k}}^z \rangle$
 $\langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'} \rangle$ に対して、 i および j がそれぞれ全てのサイトを網羅し、 σ および σ' が \uparrow, \downarrow を網羅するようにする。
- $\langle \hat{S}_{\mathbf{k}}^+ \hat{S}_{\mathbf{k}}^- \rangle$ および $\langle \hat{S}_{\mathbf{k}} \cdot \hat{S}_{\mathbf{k}} \rangle$
 $\mathcal{H}\Phi$ の場合は $\langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i-\sigma} \hat{c}_{j-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle$ に対して、 i および j がそれぞれ全てのサイトを網羅し、 σ が \uparrow, \downarrow を網羅するようにする。mVMC の場合は $\langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \hat{c}_{j-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i-\sigma} \rangle$ に対して、 i および j がそれぞれ全てのサイトを網羅し、 σ が \uparrow, \downarrow を網羅するようにする。いずれの場合も演算子の順番に注意すること。

スタンダードモードのデフォルト (`outputmode="corr"`) では、自動的に上記のインデックスが指定されるため、特に気にする必要はない。

サイト表示の1体および2体相関関数の計算結果

計算する相関関数のインデックスの指定 で指定したインデックスを持つ相関関数が mVMC/ $\mathcal{H}\Phi$ によって計算され、ファイルに出力される。総合的な説明は mVMC/ $\mathcal{H}\Phi$ のマニュアルを参照。チュートリアルでのファイル名は `output/zvo_cisajs_001.dat` および `output/zvo_cisajsckalt_001.dat` (mVMC), `output/zvo_cisajs.dat` および `output/zvo_cisajsckalt.dat` ($\mathcal{H}\Phi$)。

`fourier` ユーティリティはこのファイルを読み込んで計算を行う。この時、(スタンダードモードを使わず自分でインデックスを指定するなどにより) 計算する相関関数のインデックスの指定 で挙げたインデックスの相関関数のなかで欠けているものがある場合、それを 0 として扱う。

プリミティブゾーン内の相関関数

Fourier 変換された相関関数 (波数表示) が入っている。ユーティリティ `fourier` によって生成される。チュートリアルでのファイル名は `output/zvo_corr.dat` である。

```
#HPHi          16                                     (1)
# kx[1] ky[2] kz[3] (Cart.) UpUp[4,5] (Re. Im.) DownDown[6,7] (2)
# Density[8,9] SzSz[10,11] S+S-[12,13] S-S+[14,15] (2)
#k-offset      0.0000000 0.0000000 0.0000000 (3)
0.00000E+00    0.00000E+00 0.00000E+00 0.31250E-01 .... (4)
0.15708E+01    0.00000E+00 0.00000E+00 0.31250E-01 .... (4)
:                                                       :
```

1. HPhi の出力から作成された場合には "#HPhi", vmc.out の出力から作成された場合には "#mVMC" と書かれる. それに続く整数は, プリミティブブリルアンゾーン内の k 点の数である.
2. 各カラムに出力されている量の説明.
3. シミュレーションセルの境界を跨ぐ一体項に位相が付く場合の, 一体相関関数の k 点の変位. すなわち, この後の行の 4~7 列目の一体相関関数は, 1~3 列目の k 点からこのオフセットの分だけずれた点のものである.
4. k 点 (デカルト座標) と相関関数. それぞれの相関関数の実部と虚部が書かれている.

corplot 用 k 点ファイル

fourier ユーティリティで生成され, corplot ユーティリティでプロットを行う時に読み込まれる. ファイル名は kpoint.dat である.

81	9			(1)
0.62832E+01	0.00000E+00	0.00000E+00		(2)
0.00000E+00	0.62832E+01	0.00000E+00		(2)
0.00000E+00	0.00000E+00	0.62832E+01		(2)
-0.62832E+01	-0.62832E+01	0.00000E+00	1	(3)
-0.47124E+01	-0.62832E+01	0.00000E+00	2	(3)
-0.31416E+01	-0.62832E+01	0.00000E+00	3	
-0.15708E+01	-0.62832E+01	0.00000E+00	4	
0.00000E+00	-0.62832E+01	0.00000E+00	1	
0.15708E+01	-0.62832E+01	0.00000E+00	2	
0.31416E+01	-0.62832E+01	0.00000E+00	3	
0.47124E+01	-0.62832E+01	0.00000E+00	4	

1. corplot でプロットされる k 点の総数および gnuplot の splot で表示する時の k 点の区切り.
2. 逆格子ベクトル (デカルト座標)
3. k ベクトル (デカルト座標) と, その k 点と等価なプリミティブゾーン内の k 点のインデックス. このインデックスは [プリミティブゾーン内の相関関数](#) での k 点の番号に対応している.

gnuplot スクリプト

corplot にて作成され, 内部で起動した gnuplot によって読み込まれる. corplot とは別に 直接 gnuplot を起動して, load でよみこむことも可能である. ファイル名は correlation.gp である.

```
#set terminal pdf color enhanced \      (1)
#dashed dl 1.0 size 20.0cm, 20.0cm    (1)
#set output 'correlation.pdf'         (1)
#set view 60.0, 30.0                  (1)

set view equal xy
set ticslevel 0
set hidden3d
set xlabel 'kx'
set ylabel 'ky'
set zrange [ 0.25000E-10: 0.18435E+00]

set pm3d
set pm3d interpolate 5, 5
set view 0.0, 0.0
```

```
##### Set Brillouin-Zone Boundary #####

set arrow from -0.31416E+01, -0.31416E+01, ...
set arrow from -0.31416E+01, 0.31416E+01, ...
:
##### End Set Brillouin-Zone Boundary #####

splot \
'correlation.dat' u 1:2:3 w l tit '1' (2)
pause -1
```

1. 図を PDF ファイルに出力したい時には、この行の先頭のコメントアウトを外す。論文等に貼る図を作るときには、適宜この後にフォントの設定等を書く。詳しくは `gnuplot` のマニュアル等を参照。
2. 広範囲の k 点での相関関数のファイルをプロットしている。

広範囲の k 点での相関関数

`corplot` にて作成され、内部で起動した `gnuplot` によって、`gnuplot` スクリプト を経由して読み込まれる。ファイル名は `correlation.dat`

```
-0.62832E+01 -0.62832E+01 0.18435E+00 0.00000E+00
-0.47124E+01 -0.62832E+01 0.36159E-01 0.00000E+00
-0.31416E+01 -0.62832E+01 0.20921E-01 0.00000E+00
-0.15708E+01 -0.62832E+01 0.36159E-01 0.00000E+00
0.00000E+00 -0.62832E+01 0.18435E+00 0.00000E+00
0.15708E+01 -0.62832E+01 0.36159E-01 0.00000E+00
0.31416E+01 -0.62832E+01 0.20921E-01 0.00000E+00
0.47124E+01 -0.62832E+01 0.36159E-01 0.00000E+00
0.62832E+01 -0.62832E+01 0.18435E+00 0.00000E+00

-0.62832E+01 -0.47124E+01 0.36159E-01 0.00000E+00
-0.47124E+01 -0.47124E+01 0.20921E-01 0.00000E+00
-0.31416E+01 -0.47124E+01 0.11372E-01 0.00000E+00
:
```

- 1, 2 列目は k ベクトル (デカルト座標) を表す。3 列目は相関関数、4 列目はその標準誤差を表す。

Chapter 4

各ユーティリティの動作について

fourier ユーティリティ

このユーティリティは、次のようにして使う。

```
$ ${PATH}/fourier ${NAMELIST} ${GEOMETRY}
```

ここで、`${PATH}` は `fourier` ユーティリティのバイナリのあるディレクトリのパス、`${NAMELIST}` は `HΦ/mVMC` の `NameList` インプットファイル名、`${GEOMETRY}` は `ジオメトリ` ファイルへのパスである。

`HΦ` の各モード (Lanczos, TPQ, 全対角化, LOBCG) および `mVMC` のどの計算で得られた相関関数の Fourier 変換を行うかによって、動作が若干異なる。以下では `ModPara` インプットファイルの `CDataFileHead` が `"zvo"` (デフォルト値) であるとする。

HPhi-Lanczos

この場合に `HPhi` が `output/` ディレクトリに出力するサイト表示の相関関数は、`zvo_cisajs.dat` (1 体)、`zvo_cisajsckalt.dat` (2 体) である。`fourier` ユーティリティは、これらを読み込み Fourier 変換を行った後、単一のファイル `zvo_corr.dat` を `output/` ディレクトリに出力する。

HPhi-TPQ

この場合に `HPhi` は、各試行/TPQ ステップ毎に `zvo_cisajs_run*step*.dat` (1 体)、`zvo_cisajsckalt_run*step*.dat` (2 体) というファイルを `output/` ディレクトリに出力する。`fourier` ユーティリティは、各試行/TPQ ステップ毎に 1 体および 2 体の相関関数を読み込み Fourier 変換を行った後、`zvo_corr_run*step*.dat` という名前のファイルとして `output/` ディレクトリに出力する。

HPhi-全対角化および LOBCG

この場合に `HPhi` は、各波動関数ごとに `zvo_cisajs_eigen*.dat` (1 体)、`zvo_cisajsckalt_eigen*.dat` (2 体) というファイルを `output/` ディレクトリに出力する。`fourier` ユーティリティは、各波動関数ごとに 1 体および 2 体の相関関数を読み込み Fourier 変換を行った後、`zvo_corr_eigen*.dat` という名前のファイルとして `output/` ディレクトリに出力する。

mVMC

この場合に `vmc.out` は, `ModPara` インプットファイルで指定された `NDataIdxStart` および `NDataQtySmp` というパラメーターに応じて試行を行いインデックスをつけられた `zvo_cisajs_???.dat` (1 体), `zvo_cisajsckalt_???.dat` (2 体) というファイルを `output/` ディレクトリに出力する. `fourier` ユーティリティーはそれらのファイルを読み込み, 各試行に対して Fourier 変換を行った後, それらの実部, 虚部ごとに平均値

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_{\text{Try}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Try}}} A_i \quad (4.1)$$

および標準誤差

$$\delta A = \frac{1}{N_{\text{Try}} - 1} \sqrt{\frac{1}{N_{\text{Try}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Try}}} (A_i - \langle A \rangle)^2} \quad (4.2)$$

を計算し, 平均値と誤差を含んだ単一のファイル `zvo_corr_eigen*.dat` を `output/` ディレクトリに出力する.

corplot ユーティリティー

このユーティリティーは, 次のようにして使う.

```
$ ${PATH}/corplot ${CORR1} ${CORR2} ${CORR3} ...
```

ここで, `${PATH}` は `corplot` ユーティリティーのバイナリのあるディレクトリのパス, `${CORR1}`, `${CORR2}`, `${CORR3}`, ... は `fourier` ルーチンによって生成されたプリミティブゾーン内の相関関数 ファイルへのパスである. すなわち, このユーティリティーでは, (TPQ 計算による温度依存性を調べる等の用途で) 複数の相関関数ファイルを読み込み, それらを同時にプロットすることができる.

Chapter 5

Contact

このユーティリティについてのご意見, ご質問, バグ報告等ありましたら下記までお問い合わせください。

河村光晶

`mkawamura_at_issp.u-tokyo.ac.jp`

at を @ に変えてください。