

HMC プログラム入力ファイル説明 (src_v1.597-SF0.945)

石川健一

May 14, 2013

Contents

1	HMC 入力ファイル	1
2	ゲージ 入力ファイル	7
2.1	Wilson plaquette action	7
2.2	Wilson plaquette action with SF boundary	7
2.3	Iwasaki action	7
2.4	Iwasaki action with SF boundary	8
3	クォーク 入力ファイル	8
3.1	Standard HMC quark	8
3.2	Multiple-Mass preconditioned HMC quark	9
3.3	Polynomial HMC quark	10
3.4	Rational HMC quark	10
3.5	Blocked HMC quark	11
3.6	Truncated/Rewighted Overlap HMC quark(experimenatal)	12
3.7	Summary for Quark algorithms	12
4	測定入力ファイル	12
5	Polyakov loop 測定パラメータファイル	12
6	SF 測定入力ファイル	13

1 HMC 入力ファイル

HMC プログラムの入力ファイルのしよ式の説明をします。まず例に従い説明します。各行の ‘#’ 以降は説明のためのコメントで実際には記述しないこと。

```

1 // 1 行目コメント行。必ず 1 行書くこと。以下 作用の指定項目
2 GaugeRG                # 2 行目はゲージ作用のパラメータファイル名を記述すること。
3   1   0.100000E+00   1   # 3 行目は クォーク作用の数,Stout スメアのパラメータ,S_tout スメアのステップ数。
4 QuarkHMC_Nf2           # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 1 つ。
5   1                   # クォークファイルが終わったら クエンチ/ダイナミカルのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
```

```

6      0          # 測定プログラムを実行するかどうかのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on) 1 の時は次の行に測定パラメータファイルを指定すること。
7  // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 乱数と配位の保存先項目
8      999123      # M 系列乱数の初期値
9  ./Config      # ゲージ配位保存先ディレクトリ
10 Config      # ゲージ配位ファイル名
11 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 HMC ステップの制御項目
12      6          # HMC プログラムトータル実行回数。0 初期値。プログラム終了時に 1 増える。
13      3010       # HMC トータルトラジェクトリー数。0 初期値。プログラム終了時に次行の指定トラジェクトリ増える
14      10         # このプログラムの実行で計算する HMC トラジェクトリー数。
15      0          # 測定用ゲージ配位を保存するトラジェクトリー間隔。0 指定は保存しない。
16      1          # HMC メトロポリステストスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
17 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
18      1          # MD アルゴリズム番号 (以下参照)
19      1.000000000000 # MD トラジェクトリー長
20      1          # MD マルチタイムステップ法の深さの数。
21      25         # MD 各深さの再帰分割数

```

クォークファイルの増減

クォークファイル数は以下のように増減できます。

```

_____ HMC プログラム入力ファイル _____
1  // 1 行目コメント行。必ず 1 行書くこと。以下 作用の指定項目
2  GaugeRG      # 2 行目はゲージ作用のパラメータファイル名を記述すること。
3      3      0.100000E+00      1      # 3 行目は クォーク作用の数, Stout スメアのパラメータ, S_tout スメアのステップ数。
4  QuarkHMC_Nf2      # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
5  QuarkPHMC_Nf1      # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
6  QuarkRHMC_Nf1      # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
7      1          # クォークファイルが終わったら クエンチ/ダイナミカルのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
8      0          # 測定プログラムを実行するかどうかのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
9  // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 乱数と配位の保存先項目
10      999123      # M 系列乱数の初期値
11  ./Config      # ゲージ配位保存先ディレクトリ
12 Config      # ゲージ配位ファイル名
13 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 HMC ステップの制御項目
14      6          # HMC プログラムトータル実行回数。0 初期値。プログラム終了時に 1 増える。
15      3010       # HMC トータルトラジェクトリー数。0 初期値。プログラム終了時に次行の指定トラジェクトリ増える
16      10         # このプログラムの実行で計算する HMC トラジェクトリー数。
17      0          # 測定用ゲージ配位を保存するトラジェクトリー間隔。0 指定は保存しない。
18      1          # HMC メトロポリステストスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
19 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
20      1          # MD アルゴリズム番号 (以下参照)
21      1.000000000000 # MD トラジェクトリー長
22      1          # MD マルチタイムステップ法の深さの数。
23      25         # MD 各深さの再帰分割数

```

On the fly 測定スイッチ (HMC 中での測定)

HMC 実行中に各トラジェクトリー後に、以下の測定を行うことができます。

- Polyakov ループ (すべての境界条件設定で可能)
- SF coupling と PCAC mass (Schrödinger Functional (SF) 境界条件の時だけ)

```

// ----- HMC プログラム入力ファイル -----
1 // 1 行目コメント行。必ず 1 行書くこと。以下 作用の指定項目
2 GaugeRG # 2 行目はゲージ作用のパラメータファイル名を記述すること。
3 1 0.100000E+00 1 # 3 行目は クォーク作用の数, Stout スメアのパラメータ, S_tout スメアのステップ数。
4 QuarkHMC_Nf2 # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 1 つ。
5 1 # クォークファイルが終わったら クエンチ/ダイナミカルのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
6 1 # 測定プログラムを実行するかどうかのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on) 1 の時は次の行に測定パラメータファイルを指定すること。
7 ParamsMeasure # 測定プログラムのためのパラメータファイル。
8 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 乱数と配位の保存先項目
9 999123 # M 系列乱数の初期値
10 ./Config # ゲージ配位保存先ディレクトリ
11 Config # ゲージ配位ファイル名
12 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 HMC ステップの制御項目
13 6 # HMC プログラムトータル実行回数。0 初期値。プログラム終了時に 1 増える。
14 3010 # HMC トータルトラジェクトリー数。0 初期値。プログラム終了時に次行の指定トラジェクトリー増える
15 10 # このプログラムの実行で計算する HMC トラジェクトリー数。
16 0 # 測定用ゲージ配位を保存するトラジェクトリー間隔。0 指定は保存しない。
17 1 # HMC メトロポリステストスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
18 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
19 1 # MD アルゴリズム番号 (以下参照)
20 1.000000000000 # MD トラジェクトリー長
21 1 # MD マルチタイムステップ法の深さの数。
22 25 # MD 各深さの再帰分割数
```

Stout パラメータ

Stout パラメータについてはプログラムコンパイル時に Stout を有効にしておく必要があります。Stout smearing については全てのクォーク作用について同一のパラメータを適用します。クォーク作用の全てのリンク変数を単純に Stout smeared link に置き換えます。

プログラムコンパイル時に Stout を有効にしておいても、Stout パラメータを記述しないで Stout を off にすることもできます。

```

// ----- HMC プログラム入力ファイル -----
1 // 1 行目コメント行。必ず 1 行書くこと。以下 作用の指定項目
2 GaugeRG # 2 行目はゲージ作用のパラメータファイル名を記述すること。
3 3 # 3 行目は クォーク作用の数 Stout パラメータを書かない場合 Stout しない
4 QuarkHMC_Nf2 # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
5 QuarkPHMC_Nf1 # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
6 QuarkRHMC_Nf1 # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
7 1 # クォークファイルが終わったら クエンチ/ダイナミカルのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
8 0 # 測定プログラムを実行するかどうかのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
```

9
10
11

.
. .
. .

HMC 開始時の HMC ステップ項目

HMC を最初から始めるときのパラメータは HMC ステップ項目を制御します。以下の例はクエンチで 100 traj 動かすパラメータです。HMC メトロポリステストは off(=0) にします。クエンチで thermalize の後、クエンチ/ダイナミカルのスイッチを on (=1) にします。適当にトラジェクトリーを伸ばした後 HMC メトロポリステストを on (=1) にします。アクセプタンスが悪い場合は MD の項目を調整します。

```

// ----- HMC プログラム入力ファイル -----
1 // 1 行目コメント行。必ず 1 行書くこと。以下 作用の指定項目
2 GaugeRG # 2 行目はゲージ作用のパラメータファイル名を記述すること。
3 3 0.100000E+00 1 # 3 行目は クォーク作用の数,Stout スメアのパラメータ,S_tout スメアのステップ数。
4 QuarkHMC_Nf2 # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
5 QuarkPHMC_Nf1 # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
6 QuarkRHMC_Nf1 # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
7 0 # クォークファイルが終わったら クエンチ/ダイナミカルのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
8 0 # 測定プログラムを実行するかどうかのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
9 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 乱数と配位の保存先項目
10 999123 # M 系列乱数の初期値
11 ./Config # ゲージ配位保存先ディレクトリ
12 Config # ゲージ配位ファイル名
13 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 HMC ステップの制御項目
14 0 # HMC プログラムトータル実行回数。0 初期値。プログラム終了時に 1 増える。
15 0 # HMC トータルトラジェクトリー数。0 初期値。プログラム終了時に次行の指定トラジェクトリ増える
16 100 # このプログラムの実行で計算する HMC トラジェクトリー数。
17 0 # 測定用ゲージ配位を保存するトラジェクトリー間隔。0 指定は保存しない。
18 0 # HMC メトロポリステストスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
19 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
20 1 # MD アルゴリズム番号 (以下参照)
21 1.000000000000 # MD トラジェクトリー長
22 1 # MD マルチタイムステップ法の深さの数。
23 25 # MD 各深さの再帰分割数
```

HMC trajectory の分岐と乱数の初期値変更 HMC を thermalize させた後に、乱数の出方の違ういくつかの分岐を作り、同じ物理パラメータの HMC を複数流して統計を稼ぎたいときがあります。その時には、分岐の種となるパラメータ、配位など 1 セットまるまるコピーして複数用意します。

乱数を新しい初期値にリセットするには、コピーした「HMC プログラム入力ファイル」の「M 系列乱数の初期値」を変更し、かつ、その時点での「HMC プログラムトータル実行回数」をマイナスにします。そのまま HMC を継続すると、「HMC プログラムトータル実行回数」は自動的にゼロにリセットされ、乱数も新しい初期値から開始します。

```

// ----- HMC プログラム入力ファイル、乱数変更分岐例 (分岐直前) -----
1 // 1 行目コメント行。必ず 1 行書くこと。以下 作用の指定項目
2 GaugeRG # 2 行目はゲージ作用のパラメータファイル名を記述すること。
3 3 0.100000E+00 1 # 3 行目は クォーク作用の数,Stout スメアのパラメータ,S_tout スメアのステップ数。
4 QuarkHMC_Nf2 # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること。この例は 3 つ。
```

```

5 QuarkPHMC_Nf1          # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること．この例は 3 つ．
6 QuarkRHMC_Nf1          # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること．この例は 3 つ．
7 0                      # クォークファイルが終わったら クエンチ/ダイナミカルのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
8 0                      # 測定プログラムを実行するかどうかのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
9 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 乱数と配位の保存先項目
10      999123            # M 系列乱数の初期値
11 ./Config              # ゲージ配位保存先ディレクトリ
12 Config               # ゲージ配位ファイル名
13 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 HMC ステップの制御項目
14      21                # HMC プログラムトータル実行回数。0 初期値。プログラム終了時に 1 増える。
15      2100              # HMC トータルトラジェクトリー数。0 初期値。プログラム終了時に次行の指定トラジェクトリ増える
16      100               # このプログラムの実行で計算する HMC トラジェクトリー数。
17      10                # 測定用ゲージ配位を保存するトラジェクトリー間隔。0 指定は保存しない。
18      1                 # HMC メトロポリステストスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
19 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
20      1                 # MD アルゴリズム番号 (以下参照)
21      1.000000000000    # MD トラジェクトリー長
22      1                 # MD マルチタイムステップ法の深さの数。
23      25                # MD 各深さの再帰分割数

```

HMC プログラム入力ファイル、乱数変更分岐例 (分岐のために変更)

```

1 // 1 行目コメント行。必ず 1 行書くこと。以下 作用の指定項目
2 GaugeRG                # 2 行目はゲージ作用のパラメータファイル名を記述すること．
3 3 0.100000E+00 1       # 3 行目は クォーク作用の数,Stout スメアのパラメータ,S_tout スメアのステップ数．
4 QuarkHMC_Nf2           # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること．この例は 3 つ．
5 QuarkPHMC_Nf1          # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること．この例は 3 つ．
6 QuarkRHMC_Nf1          # 4 行目以降は上で指定した数だけクォーク作用パラメータファイルを並べること．この例は 3 つ．
7 0                      # クォークファイルが終わったら クエンチ/ダイナミカルのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
8 0                      # 測定プログラムを実行するかどうかのスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
9 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 乱数と配位の保存先項目
10      4455669           # M 系列乱数の初期値 ({\bf 値変更})
11 ./Config              # ゲージ配位保存先ディレクトリ
12 Config               # ゲージ配位ファイル名
13 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 HMC ステップの制御項目
14      -21               # HMC プログラムトータル実行回数。0 初期値。プログラム終了時に 1 増える。 ({\bf マイナス付加})
15      2100              # HMC トータルトラジェクトリー数。0 初期値。プログラム終了時に次行の指定トラジェクトリ増える
16      100               # このプログラムの実行で計算する HMC トラジェクトリー数。
17      10                # 測定用ゲージ配位を保存するトラジェクトリー間隔。0 指定は保存しない。
18      1                 # HMC メトロポリステストスイッチ (0 か 1) (0 off/ 1 on)
19 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
20      1                 # MD アルゴリズム番号 (以下参照)
21      1.000000000000    # MD トラジェクトリー長
22      1                 # MD マルチタイムステップ法の深さの数。
23      25                # MD 各深さの再帰分割数

```

MD ステップ項目の詳細

MD アルゴリズムの番号と意味は以下の通り。

- 番号 = -3 マルチタイムステップ Omelyan scheme in PQPQP ordering (momentum first, coordinate next)

- 番号 = -2 シングルタイムステップ improved leapfrog scheme in PQP ordering (momentum first, coordinate next)
- 番号 = -1 マルチタイムステップ simple leapfrog scheme in PQP ordering (momentum first, coordinate next)
- 番号 = 1 マルチタイムステップ simple leapfrog scheme in QPQ ordering (coordinate first, momentum next)
- 番号 = 2 シングルタイムステップ improved leapfrog scheme in QPQ ordering (coordinate first, momentum next)
- 番号 = 3 マルチタイムステップ Omelyan scheme in QPQPQ ordering (momentum first, coordinate next)

Omelyan スキームの λ パラメータは全ての深さについて (0.193183) 固定です。

マルチタイムステップを選択した場合、最大深さの指定と、各深さでの再帰的トラジェクトリー分割数を指定する必要があります。深さ番号はクォーク作用の部分ポテンシャルの番号と対応します。深さ番号が一番深いところが 1 番でそこから大きくなり一番浅いところの番号が最大深さの数値に対応します。ゲージ作用部分は常に 1 番にしておきたいのでこのような順番になっています。

以下は深さ 1 の場合です。

```

// MD ステップ項目
1 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
2     1          # MD アルゴリズム番号 (以下参照)
3     1.000000000000 # MD トラジェクトリー長
4     1          # MD マルチタイムステップ法の深さの数。
5     25         # MD 各深さの再帰分割数

```

以下は深さ 3 の場合です。

```

// MD ステップ項目
1 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
2     1          # MD アルゴリズム番号 (以下参照)
3     1.000000000000 # MD トラジェクトリー長
4     3          # MD マルチタイムステップ法の深さの数。
5     4 6 2      # MD 各深さの再帰分割数

```

(浅い)4 → 6 → 2(深い) の順番で深さが深くなります。深さはそれぞれ 3 → 2 → 1 の順番です。この場合各深さでの MD ステップ幅は

MD depth	3	2	1
MD step size ($\delta\tau$)	$1/4 = 0.25$	$1/4/6 = 0.0416\bar{6}$	$1/4/4/2 = 0.0208\bar{3}$

Table 1: MD depth and step size

となります。一般に

```

// MD ステップ項目
1 // 必ずコメント 1 行書くこと。以下 MD ステップの制御項目
2     1          # MD アルゴリズム番号 (以下参照)

```

3	<code>tau</code>	# MD トラジェクトリー長
4	<code>Ndepth</code>	# MD マルチタイムステップ法の深さの数。
5	<code>Nmd(Ndepth) Nmd(Ndepth-1) Nmd(Ndepth-2) .. 並べる.. Nmd(2) Nmd(1)</code>	# MD 各深さの再帰分割数

では各深さ ($i_{\text{depth}} = 1, 2, \dots, N_{\text{depth}}$) の MD step size は

$$\delta\tau_{(i_{\text{depth}})} = \tau / \prod_{j=i_{\text{depth}}}^{N_{\text{depth}}} N_{\text{md}(j)} \quad (1)$$

となります。深さ番号はクォーク作用のポテンシャルと結びつけるのに必要です (該当深さで力の計算に加わる)。

以上は Simple leapfrog の場合です。Omelyan の場合もほぼ同様ですが、MD 幅が各深さで Omelyan パラメータで決まった或式にしたがって前後します。分割の指定は共通です。

注意点として、ポテンシャルに指定した深さに該当する深さがここで指定されていない場合、単純に MD 発展中はそのポテンシャルの寄与は計算しません。Hamiltonian の計算では全てのポテンシャルの寄与を計算しますので、したがって Hamiltonian が保存しなくなります。事前チェックは行いませんので注意してください。

2 ゲージ 入力ファイル

ゲージ作用の入力ファイルの書式の説明をします。‘!’ 以降はコメントです。ファイル中に記述しても構いませんがエラーが出るときには疑ってみてください。

2.1 Wilson plaquette action

プログラムコンパイル時にゲージ作用を何も指定しないと Wilson plaquette action が使えます。 β と MD depth を指定します。通常 MD depth は一番深い 1 が良いです。

Wilson plaquette action パラメータファイル	
1	<code>5.70d0 ! beta</code>
2	<code>1 ! MD force depth 0:off, 1,2,3 on at the depth</code>

2.2 Wilson plaquette action with SF boundary

プログラムコンパイル時にゲージ作用を何も指定しないと Wilson plaquette action が使えます。Schrödinger boundary を指定すると、ゲージ作用の SF boundary パラメータの指定が必要になります。 β, c_t と MD depth を指定します。通常 MD depth は一番深い 1 が良いです。

Wilson plaquette action with SF boundary パラメータファイル	
1	<code>5.70d0 ! beta</code>
2	<code>1.0d0 ! ct</code>
3	<code>1 ! MD force depth 0:off, 1,2,3 on at the depth</code>

2.3 Iwasaki action

プログラムコンパイル時に RG ゲージ作用を指定すると 長方形を含むゲージ action が使えます。以下は Iwasaki gauge action の指定例です。ポテンシャルは分割されていませので MD depth はひとつのみ指定可能ですが、通常 MD depth は一番深い 1 が良いです。

Iwasaki RG-improved gauge action パラメータファイル	
1	<code>1.80d0 ! beta</code>
2	<code>-0.331d0 ! c1</code>
3	<code>1.0d0 ! u0</code>
4	<code>1 ! MD force depth 0:off, 1,2,3 on at the depth</code>

2.4 Iwasaki action with SF boundary

プログラムコンパイル時に RG ゲージ作用および SF boundary を指定すると長方形を含むゲージ action で SF boundary 項が付いたものが使えます。SF boundary 項は境界に接する 1×1 と 1×2 に対しての二つのパラメータが必要となります。以下は Iwasaki gauge action の指定例です。ポテンシャルは分割されていませんので MD depth はひとつのみ指定可能ですが、通常 MD depth は一番深い 1 が良いです。

Iwasaki RG-improved gauge action with SF boundary パラメータファイル

```
1 12.00d0    ! beta
2 -0.331d0   ! c1
3 1.0d0      ! u0
4 1.0d0      ! ct    SF boundary copuling for plaquette 1x1
5 1.0d0      ! ct_rg SF boundary coupling for rectangle 2x1 (space x temp)
6 1          ! MD force depth 0:off, 1,2,3 on at the depth
```

3 クォーク 入力ファイル

クォーク作用は Wilson/Clover 型が使えます。Truncated/reweighted Overlap 型が実験中/調整中です。アルゴリズムにしたがって記述が変化します。Wilson/Clover 型の切り替えはコンパイル時に何も指定しないと Wilson 型になり Clover 指定で Clover 型が使えるようになります。Wilson/Clover のコンパイル切り替えにより使用する物理パラメータが変化しますので入力ファイルの書式の物理パラメータ指定部分が変化するので注意してください。

SF boundary つきでコンパイルした場合、T 方向の境界はゼロに固定されます。SF boundary 項は一切実装されていません。

全てのクォークに対して書式は以下のような順番になっています。

Wilson quark Standard HMC algorithm パラメータファイル

```
1      1      ! Alogrithm ID, 0 for PHMC(Nf=2 or 1), 1 for HMC(Nf=2)
2  //// Physics descriptions ////
3      2      ! Nf, 2 for HMC or PHMC, 1 for PHMC
4      0.1400d0 ! kappa
5  //// Algorithmic descriptions ////
6      0.100000D-13 ! hamil stopping condition (strict one)
7      0.100000D-13 ! force stopping condition (loose one), not used for PHMC.
8      1          ! MD depth for pseudo fermion term
9      12         ! NumCron
```

1 行目はアルゴリズム番号です。作用とアルゴリズムの組み合わせで一つ番号が与えられます。2 行目はコメント行です。これは必ず書きます。次の部分は作用の物理パラメータ記述欄です。作用により変化します。再びコメント行をはさみます (いまの例では 5 行目)。次の部分はアルゴリズムパラメータ記述欄です。アルゴリズムにより変化します。

アルゴリズム番号、物理パラメータ欄、アルゴリズムパラメータ欄の 3 つの部分に分かれていてそれぞれの間に必ずコメント行を挟みます。

3.1 Standard HMC quark

Wilson/Clover 作用に対称 even/odd-site 前処理したスタンダードな HMC アルゴリズムです。2 フレーバーのみに対応しています。アルゴリズム番号は 1 番です。

Wilson 型にコンパイルした場合の入力ファイルは


```

1      1      ! Alogrithm ID, 0 for PHMC(Nf=2 or 1), 1 for HMC(Nf=2)
2  //// Physics descriptions ////
3      2      ! Nf, 2 for HMC or PHMC, 1 for PHMC
4      0.1400d0    ! kappa
5  //// Algorithmic descriptions ////
6      0.100000D-13 ! hamil stopping condition (strict one)
7      0.100000D-13 ! force stopping condition (loose one), not used for PHMC.
8      1          ! MD depth for pseudo fermion term
9      12         ! NumCron

```

となります。Nf は 2 固定です。ポテンシャルは擬フェルミオン項のみですのでひとつしかありません。MD depth は擬フェルミオン項の深さを指定します。

Clover 型にコンパイルした場合の入力ファイルは

```

1      1      ! Alogrithm ID, 0 for PHMC(Nf=2 or 1), 1 for HMC(Nf=2)
2  //// Physics descriptions ////
3      2      ! Nf, 2 for HMC or PHMC, 1 for PHMC
4      0.1400d0    ! kappa
5      1.0d0       ! csw
6  //// Algorithmic descriptions ////
7      0.100000D-13 ! hamil stopping condition (strict one)
8      0.100000D-13 ! force stopping condition (loose one), not used for PHMC.
9      1          ! MD depth for pseudo fermion term
10     1          ! MD depth for clover trlog term
11     12         ! NumCron

```

となります。 c_{sw} 指定のため 1 行ずれていますので、Wilson と Clover で入力ファイルに互換性はありません。Clover 型にコンパイルした場合、前処理のために括り出したクローバー項のポテンシャル $-2TrLog[F]$ と擬フェルミオン部分 $|\hat{D}_{oo}^{-1}\phi_o|^2$ ポテンシャルの二つに分割されています。それぞれに MD depth を指定できます。

NumCron は線形ソルバーの解を以前の MD step での解から推測する Chronological Guess のための過去のヒストリの保存数です。あまり多くしても解の推測がよくなるとは限りませんので、ソルバーヒストリファイル "wq_hmc_solver_log.??.?????" に Chronological Guess による初期残差が出力されていますのでそれを見て調整してください。

これらのアルゴリズムパラメータは Thermalization 後のアンサンブル生成中は変化させてはいけません。

3.2 Multiple-Mass preconditioned HMC quark

Wilson/Clover 作用に Hasenbusch の質量前処理を一つ導入したアルゴリズムです。対称 even/odd-site 前処理されています。アルゴリズム番号は 2 番です。クローバー型で説明します。

```

1      2      ! Alogrithm ID, 0 for PHMC(Nf=2 or 1), 1 for HMC(Nf=2), 2 for MPHMC(Nf=2), 3 for HMC_BLK(Nf=even)
2  //// Physics descriptions ////
3      2      ! Nf, 2 for HMC or PHMC, 1 for PHMC
4      0.1300000d0 ! kappa
5      1.0000000d0 ! csw
6  //// Algorithmic descriptions ////
7      0.95d0      ! mass preconditioner rho

```

```

8      0.100000D-14 ! hamil stopping condition (strict one)
9      0.100000D-14 ! force stopping condition (loose one)
10     1           ! MD depth for UV pseudo fermion term
11     1           ! MD depth for IR pseudo fermion term
12     1           ! MD depth for clover trlog term
13     8           ! NumCron

```

Nf は 2 のみです。擬フェルミオンポテンシャルが UV 部分と IR 部分に分かれます。7 行目のパラメータ rho は UV 部分の (clover 項をのぞいた) κ 比に対応します ($\kappa_{UV} = \kappa\rho$)。1 より小さい値を指定します。

Wilson 型ではポテンシャルは UV/IR の 2 つに分かれ、Clover 型ではポテンシャルは UV/IR/Trlog の 3 つに分かれます。それぞれに MD depth を対応させます。

これらのアルゴリズムパラメータは Thermalization 後のアンサンブル生成中は変化させてはいけません。

3.3 Polynomial HMC quark

多項式近似 HMC アルゴリズムです。アルゴリズム番号は 0 番です。Wilson/Clover 作用に対応しており、Nf が 2 フレーバーと Nf が 1 フレーバーに対応しています。対称 even/odd-site 前処理してあります。

以下では 1 フレーバーの場合を説明します。2 フレーバーの場合も指定項目は同一です。

```

----- Single-Flavor Clover quark Polynomial HMC algorithm パラメータファイル -----
1      0      ! Algorithm ID, 0 for PHMC(Nf=2 or 1), 1 for HMC(Nf=2)
2  //// Physics descriptions ////
3      1      ! Nf, 2 for HMC or PHMC, 1 for PHMC
4      0.1350d0 ! kappa
5      1.20d0  ! csw
6  //// Algorithmic descriptions ////
7      0.100000D-13 ! pseudo-fermion field HeatBath stopping condition (strict one)
8      0.100000D-13 ! Global Metropolis test stopping condition (strict one)
9      1           ! MD depth for pseudo fermion part
10     2           ! MD depth for clover trlog part
11     0           ! 0 for Chebyshev(analytic), 1 for Adopted (pcoef given here)
12     20          ! Polynomial order for PHMC
13     1           ! Global Metropolis test switch

```

11 行目の多項式のタイプを指定する部分は 0 番 (Chebyshev(analytic)) のみ実装されています。12 行目は多項式の次数を指定しています。13 行目はグローバルメトロポリステストのスイッチです (0 か 1) (0 for off/1 for on)。このメトロポリステストで多項式近似によるアンサンブル分布を厳密な式によるアンサンブル分布に補正します。HMC メトロポリステストを on にしたときに忘れずに同時にここも on にしてください。

12 行目の多項式の次数はグローバルメトロポリステストのアクセプタンスを見て調整します。グローバルメトロポリステストのアクセプタンスヒストリは "wq_phmc_gmp_log.???.?????" に出力されます。

これらのアルゴリズムパラメータは Thermalization 後のアンサンブル生成中は変化させてはいけません。

3.4 Rational HMC quark

有理関数近似 HMC アルゴリズムです。アルゴリズム番号は 4 番です。Wilson/Clover 作用 Nf=1 に対応しています。対称 even/odd-site 前処理してあります。

$\left(\hat{D}_{ee}^\dagger \hat{D}_{ee}\right)^\alpha$ ($\alpha = 1/4, -1/4, 1/2, -1/2$) に対しての近似に有理多項式近似を用います。

```

1          4      ! Alogrithm ID, 0 for PHMC(Nf=2 or 1), 1 for HMC(Nf=2), 4 for RHMC
2  //// Physics descriptions ////
3          1      ! Nf, 2 for HMC or PHMC, 1 for PHMC
4          0.1400d0 ! kappa
5          1.0d0    ! csw
6  //// Algorithmic descriptions ////
7          0.100000D-13 ! hamil stopping condition (strict one)
8          0.100000D-13 ! force stopping condition (loose one), not used for PHMC.
9          1          ! MD depth for pseudo fermion term
10         1          ! MD depth for clover trlog term
11         1.01d0     ! Hamiltonian Rational-Approx Range factor : the approx. range is extended by this factor.
12         1.0D-14    ! Hamiltonian Rational-Approx Tolerance : Rational Approximation accuracy used in Hamiltonian.
13         0.01d0     ! Force Rational Approximation Range min : R_n(x) = \sim (1/x)^(1/2), x in [min,max]
14         3.0d0      ! Force Rational Approximation Range max : R_n(x) = \sim (1/x)^(1/2), x in [min,max]
15         6          ! Force Rational Approximation order : R_n(x) = \sim (1/x)^(1/2), x in [min,max]

```

擬フェルミオン項のポテンシャル部分は分割されていません (今後実装予定)。11 行目は 1 より少し大きい値 $f_{\text{range}} > 1$ を指定します。ハミルトニアンを有理多項式近似する際に $Q_{ee} \equiv \hat{D}_{ee}^\dagger \hat{D}_{ee}$ の固有値分布 ($0 < a < Q_{ee} < b$) (a, b は約 4 桁の精度で計算しています) に対して少し広い範囲 ($a/f_{\text{range}} \sim b * f_{\text{range}}$) で次の 12 行目で指定された精度の近似を用います。12 行目の近似精度は倍精度 10^{-14} が通常ですが、Thermalization の初期では緩くしても良いでしょう。

13 行目から 15 行目は MD force の計算に用いる有理多項式近似のパラメータです。13 行目は近似範囲の最小側、14 行目は近似範囲の最大側です。15 行目は有理多項式近似の次数を指定します。13 行目、14 行目で指定される範囲は実際の固有値範囲を十分内包するように選びます。また 15 行目の次数はその近似が HMC アクセプタンスを著しく悪化させない範囲で小さく選ぶようにします。

Hamiltonian の計算中に求めた実際の固有値のヒストリが “wq_rhmc_eigen_log.???.?????” に出力されます。13 行目、14 行目に指定する範囲の目安となります。13 行目から 15 行目のパラメータでの Force 計算中の近似精度は

“wq_rhmc_solver_log.???.?????” のソルバーヒストリに出力されています。通常 $10^{-4} \sim 10^{-6}$ であれば HMC アクセプタンスは悪化しないと思われますが、この値は体積に依存するかもしれません。これらは Thermalization 中に調整します。

これらのアルゴリズムパラメータは Thermalization 後のアンサンブル生成中は変化させてはいけません。

3.5 Blocked HMC quark

Clover/Wilson quark に対する 対称 even/odd-site 前処理した standard HMC algorithm をブロック化したものです。アルゴリズム番号は 3 番です。

アルゴリズムパラメータはアルゴリズム番号 1 の 2 フレーバー standard HMC algorithm と同じです。フレーバー数が偶数であればメモリの許す限り任意のフレーバー数で実行できます。ソルバーをブロック化してあります。

```

1          3      ! Alogrithm ID, 0 for PHMC(Nf=2 or 1), 1 for HMC(Nf=2), 2 for MPHMC(Nf=2), 3 for HMC_BLK(Nf=even)
2  //// Physics descriptions ////
3          10      ! Nf, 2 for HMC or PHMC, 1 for PHMC

```

```

4      0.1200d0      ! kappa
5      1.0d0        ! csw
6      //// Algorithmic descriptions ////
7      0.100000D-13 ! hamil stopping condition (strict one)
8      0.100000D-13 ! force stopping condition (loose one), not used for PHMC.
9      1             ! MD depth for pseudo fermion term
10     1             ! MD depth for clover trlog term
11     12            ! NumCron

```

3.6 Truncated/Reweighted Overlap HMC quark(experimenatal)

To be continued...

3.7 Summary for Quark algorithms

クォーク作用のアルゴリズム番号とその内容のまとめです。

アルゴリズム番号	内容	対応フレーバー数
0	Polynomial HMC	$N_f = 2$ and $N_f = 1$ only
1	Standard HMC	$N_f = 2$ only
2	Mass preconditioned HMC	$N_f = 2$ only
3	Blocked Standerd HMC	$N_f = 2m, m = 1, 2, 3, \dots$
4	Rational HMC	$N_f = 1$ only
10	Truncated/Reweighted Overlap	$N_f = 2$ only

4 測定入力ファイル

HMC の本体パラメータファイルで測定を指定する際に入力する測定パラメータファイルは以下のようになっています。いまのところ Polyakov loop を測定するかしないかのみ指定できます。

```

1      // Polyakov Loop measurement, 1st(1:on, 0:off), 2nd(Polyakov loop file name)
2      1
3      ParamsPLOOP

```

- 1 行目:必ずコメント行を入れます。
- 2 行目:0 のとき測定しません。 1 のとき測定します。
- 3 行目: Polyakov loop 測定パラメータファイル名を指定します。

5 Polyakov loop 測定パラメータファイル

Polyakov loop 測定パラメータファイルは以下のようになっています。

```

1      // Polyakov loop output dir path
2      ./
3      // Polyakov loop output filename
4      ploop
5      // traj number digits
6      6

```

- 1 行目:必ずコメント行を入れます。

- 2 行目:測定結果の出力先ディレクトリ
- 3 行目:必ずコメント行を入れます。
- 4 行目:測定結果の出力ファイル名。
- 5 行目:必ずコメント行を入れます。
- 6 行目:測定結果の出力ファイル名に付加される実行番号の桁数。6 で良い。

6 SF 測定入力ファイル

Schrödinger functional を有効にした場合 HMC と 測定を同時に行えます。HMC 入力ファイルのスイッチを on にすると各トラジェクトリー毎に測定を行います。

現在実装されている測定量は

- clover-term/fermion-boundary-term 無しの SF coupling constant。
- PCAC mass 測定用の 2 点関数 f_A, f_P, f'_A, f'_P 。

です。

SF 測定用のパラメータは”Params_SF_PCAC” という名前のファイルに記述します。書式は以下の通りです。

```

1 // SF PCAC quark parameters: 1st line: kappa or kappa csw, 2nd line: Nflavor
2 0.120d0 1.0d0
3 2
4 // solver tolerance
5 1.0d-14

```

- 1 行目は必ずコメント行です。
- 2 行目は κ, c_{sw} です。
- 3 行目はフレーバー数ですが、現在実装されている測定量に対しては無効です。
- 4 行目はコメント行です。
- 5 行目はクォークソルバーの停止条件です。