§2. 部分空間コーディング法および各ルーチンにおけるプログラム技法

我々は, Lin[10) による 2 次元サーチ法と西森[3,4) による行列要素格納法とを組み合わせて, 以下に述べるような新しいアルゴリズムを用いた方法 (部分空間コーディング法) を開発した.

TITPACK Version 1 および Version 2 に習って, KOBEPACK/ 1 Version 1.0 においても, サイトの番号 ℓ を 1 から 系に含まれる全スピン数 NS ($2 \le$NS≤ 24) までの NS 個の整数で表し, サイト ℓ, ℓ' を占めるスピン間の相互作用定数 $J^x_{\ell,\ell'}$, $J^z_{\ell,\ell'}$, $K_{\ell,\ell'}$ のうちの少なくとも 1 つが 0 でないサイト対 $\langle \ell, \ell' \rangle$ とそれらのすべてに対する $J^x_{\ell,\ell'}$, $J^z_{\ell,\ell'}$, $K_{\ell,\ell'}$ の値を与え, 更にサイト ℓ を占めるスピンに対する 1 イオン型異方性定数 D_ℓ の値とそのスピンに働く磁場 H_ℓ の値とをすべての ℓ に対して与えることによって, 取り扱う系を決定する. 例えば, $\langle \ell, \ell' \rangle$ として

$$\langle \ell, \ell' \rangle = \langle 1,2 \rangle, \quad \langle 2,3 \rangle, \quad \langle 3,4 \rangle, \quad \langle 4,5 \rangle, \quad \langle 5,6 \rangle, \quad \langle 6,7 \rangle, \quad \langle 7,8 \rangle, \quad \langle 8,1 \rangle \tag{7}$$

を取り,

$$\begin{aligned}
&J^x_{1,2} = J^x_{2,3} = J^x_{3,4} = J^x_{4,5} = J^x_{5,6} = J^x_{6,7} = J^x_{7,8} = J^x_{8,1} = J^x \ , \\
&J^z_{1,2} = J^z_{2,3} = J^z_{3,4} = J^z_{4,5} = J^z_{5,6} = J^z_{6,7} = J^z_{7,8} = J^z_{8,1} = J^z \ , \\
&K_{1,2} = K_{2,3} = K_{3,4} = K_{4,5} = K_{5,6} = K_{6,7} = K^x_{7,8} = K^x_{8,1} = 0 \ , \\
&D_1 = D_2 = D_3 = D_4 = D_5 = D_6 = D_7 = D_8 = 0 \ , \\
&H_1 = H_2 = H_3 = H_4 = H_5 = H_6 = H_7 = H_8 = 0
\end{aligned} \tag{8}$$

とすれば, 右図に示すような 1 次元格子で, 異方的な最近接双 1 次 (bilinear) 交換相互作用 (相互作用定数 J^x, J^z) のみが存在する系 (NS $=8$) を取り扱うことになる.

部分空間コーディング法においては, 考える系を 2 つの部分系 L および H に分割し, 部分系 L には 1 から NSLMAX までの NSLMAX 個の整数で表されるサイトが, また, 部分系 H には (NSLMAX+1) から NS までの (NS−NSLMAX) 個の整数で表されるサイトが属するものとする. ここで, NSLMAX は $[\,(\mathrm{NS}+1)/2\,]$ ($[\cdots]$ はガウス記号) 以上, Min(NS, 12) 以下でなければならない.

2.1 部分空間コーディング法における 2 次元サーチ法

部分系 L でのスピン配列を 3 進法を用いて $(12\cdots002)_{3進}$ などと書き, その１０進法での値を I_{L} で表す. 3 進法表示における各桁の数字 2, 1, 0 は, それぞれ, S^z_ℓ の固有値 m_ℓ が $+1$, 0, -1 である状態を示し, 下位の桁から順番に m_1, m_2, m_3, $\cdots$ に対応しているものとする. 従って, 1 番上位の桁は m_{NSLMAX} に対応することになる. 例えば, NS$=5$ で NSLMAX$=3$ のとき, $m_1=0$, $m_2=+1$, $m_3=-1$ のスピン配列は, $I_{\mathrm{L}} = (021)_{3進} = 7$ で表される. $I_{\mathrm{L}}=0$ から $I_{\mathrm{L}} = 3^{\mathrm{NSLMAX}}-1$ までの 3^{NSLMAX} 個のこれらのスピン配列は, それぞれを 3 進法で表したときの各桁の数字の合計 μ_{L} (この値は $S^z_{\mathrm{total,L}} = \sum_{\ell=1}^{\mathrm{NSLMAX}} S^z_\ell$ の固有値 $m_{\mathrm{total,L}}$ に NSLMAX を加えたものに他ならない) と, μ_{L} の値が等しいスピン配列を区別する番

号 $k_{\rm L}$ とを与えることによって指定できる. $k_{\rm L}$ の番号付けは, $I_{\rm L}$ の値が小さいものから順に $k_{\rm L}=0, 1, \cdots, n_{\rm L}(\mu_{\rm L})-1$ の如く行う. ここで, $n_{\rm L}(\mu_{\rm L})$ は $\mu_{\rm L}$ の値が等しいスピン配列の数であり, 全スピン数が NSLMAX で, $m_{\rm total}=\mu_{\rm L}-$NSLMAX のときのスピン配列の総数 (即ち, 行列の次元) に他ならない. 下記の表に NS$=5$, NSLMAX$=3$ のときの例を示す. $\mu_{\rm L}$ と $k_{\rm L}$ とを与えて $I_{\rm L}$ の値を得る表を Storage Table という. 3.1 節 [2] でのサブルーチン副プログラム CRESZ の引数の説明に出てくる 2 次元配列 ISTAT1 がこれに相当する. 逆に, $I_{\rm L}$ を与えて, $\mu_{\rm L}$ および $k_{\rm L}$ の値を得る表を Lookup Table という. 2.2.1 節で説明する行列要素の計算方法から分かるように, 実際上は, $I_{\rm L}$ を与えて $k_{\rm L}$ の値を得る Lookup Table のみが必要となり, 3.1 節 [2] での 1 次元配列 ISTAT2 がこれに相当する. 部分系 H でのスピン配列も, 部分系 L でのものと全く同様に表され, NS$=5$, NSLMAX$=3$ の例のとき, $m_4=-1$, $m_5=0$ のスピン配列は, $I_{\rm H}=(10)_{3進}=3$ となる. 一般に, 部分系 L での $I_{\rm L}$ が 0 から $3^{\rm NS-NSLMAX}-1$ までのスピン配列が, 部分系 H でのスピン配列 $I_{\rm H}$ になる (3 進法表示では, NS$-$NSLMAX+1 以上の桁を無視する). $\mu_{\rm H}$ および $k_{\rm H}$, $n_{\rm H}(\mu_{\rm H})$ も, 部分系 L における $\mu_{\rm L}$ および $k_{\rm L}$, $n_{\rm L}(\mu_{\rm L})$ と同様に定義され, Storage Table, Lookup Table は 部分系 L に対するものを共通に用いることが出来る. 考える系を 2 つの部分系に分割して上記の方法を用いることにより, Storage Table, Lookup Table の作成に要する計算時間を, 上記の方法を用いない場合に比べて, 約 $1/3^{\rm NS-NSLMAX}$ に短縮できる.

スピン配列 $I_{\rm L}$	$\mu_{\rm L}$	$k_{\rm L}$
$(000)_{3進}=0$	0	0
$(001)_{3進}=1$	1	0
$(002)_{3進}=2$	2	0
$(010)_{3進}=3$	1	1
$(011)_{3進}=4$	2	1
$(012)_{3進}=5$	3	0
$(020)_{3進}=6$	2	2
$(021)_{3進}=7$	3	1
$(022)_{3進}=8$	4	0

スピン配列 $I_{\rm L}$	$\mu_{\rm L}$	$k_{\rm L}$
$(100)_{3進}=9$	1	2
$(101)_{3進}=10$	2	3
$(102)_{3進}=11$	3	2
$(110)_{3進}=12$	2	4
$(111)_{3進}=13$	3	3
$(112)_{3進}=14$	4	1
$(120)_{3進}=15$	3	4
$(121)_{3進}=16$	4	2
$(122)_{3進}=17$	5	0

スピン配列 $I_{\rm L}$	$\mu_{\rm L}$	$k_{\rm L}$
$(200)_{3進}=18$	2	5
$(201)_{3進}=19$	3	5
$(202)_{3進}=20$	4	3
$(210)_{3進}=21$	3	6
$(211)_{3進}=22$	4	4
$(212)_{3進}=23$	5	1
$(220)_{3進}=24$	4	5
$(221)_{3進}=25$	5	2
$(222)_{3進}=26$	6	0

我々は, 全スピン数 NS と $S^z_{\rm total}=\sum_{\ell=1}^{\rm NS} S^z_\ell$ の固有値 $m_{\rm total}$ とを与えたときの全系のスピン配列を次のようにグループ分けし, また, それらのスピン配列に対して次のように番号 J を付ける. 以下では, $m_{\rm total}$ の代りに, それに NS を加えた量 μ を与える. この量 μ と上述の $\mu_{\rm L}$, $\mu_{\rm H}$ との間には $\mu=\mu_{\rm L}+\mu_{\rm H}$ なる関係がある. 一般に, この関係を満たす $\mu_{\rm L}$, $\mu_{\rm H}$ の組は複数個存在し, それらの組によって全系のスピン配列がグループ分け出来る. これらのグループを $\mu_{\rm L}$ の値が小さいものから順に I$=0, 1, \cdots,$ NSB-1 と番号付けし (NSB はグループの総数), I 番目のグループの $\mu_{\rm L}$, $\mu_{\rm H}$ を, それぞれ, $\mu^{\rm I}_{\rm L}$, $\mu^{\rm I}_{\rm H}$ と書く. I 番目のグループにおいて, 部分系 L には $k_{\rm L}=0, 1, \cdots, n_{\rm L}(\mu^{\rm I}_{\rm L})-1$ で指定される $n_{\rm L}(\mu^{\rm I}_{\rm L})$ 個のスピン配列が, また, 部分系 H には $k_{\rm H}=0, 1, \cdots, n_{\rm H}(\mu^{\rm I}_{\rm H})-1$ で指定される $n_{\rm H}(\mu^{\rm I}_{\rm H})$ 個のスピン配列が存在する. I 番目のグループに属する全系のスピン配列は $k_{\rm L}$, $k_{\rm H}$ の値を与えることによって指定され, 全部で $n_{\rm L}(\mu^{\rm I}_{\rm L})\times n_{\rm H}(\mu^{\rm I}_{\rm H})$ 個存在する. NS と μ とを与えたときの全系のすべてのスピン配列を, I の小さい順序に, かつ I 番目のグループの中では

$(k_{\rm L}, k_{\rm H})=(0,0)$, $(1,0)$, $\cdots$, $(n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})-1, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 1)$, $\cdots$, $(n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})-1, 1)$, $\cdots$, $(0, n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I})-1)$, $(1, n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I})-1)$, $\cdots$, $(n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})-1, n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I})-1)$ の順序に並べ, この順序に従って $J=0, 1, \cdots, {\rm IDIM}-1$ (IDIM は 与えられた NS, $m_{\rm total}$ に対する行列の次元) の如く番号を付ける. 下記の表に NS$=5$, $\mu=8$, NSLMAX$=3$ のときの例を示す. 一般に, J は

$$J = J_0^{\rm I} + k_{\rm H}\times n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}) + k_{\rm L}\ , \tag{9}$$

$$J_0^{\rm I} = \begin{cases} 0 & ({\rm I}=0) \\ \sum_{{\rm I}'=0}^{{\rm I}-1} n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{{\rm I}'})\times n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{{\rm I}'}) & ({\rm I}=1, 2, \cdots, {\rm NSB}-1) \end{cases} \tag{10}$$

で与えられる. ここで, $J_0^{\rm I}$ は I 番目のグループに属するスピン配列の内の最初のものの番号を与える.

I	$\mu_{\rm H}^{\rm I}$	$\mu_{\rm L}^{\rm I}$	$k_{\rm H}$	$k_{\rm L}$	J	全系のスピン配列
0	4	4	0	0	0	$(22022)_{3進}$
0	4	4	0	1	1	$(22112)_{3進}$
0	4	4	0	2	2	$(22121)_{3進}$
0	4	4	0	3	3	$(22202)_{3進}$
0	4	4	0	4	4	$(22211)_{3進}$
0	4	4	0	5	5	$(22220)_{3進}$
1	3	5	0	0	6	$(12122)_{3進}$
1	3	5	0	1	7	$(12212)_{3進}$
1	3	5	0	2	8	$(12221)_{3進}$
1	3	5	1	0	9	$(21122)_{3進}$
1	3	5	1	1	10	$(21212)_{3進}$
1	3	5	1	2	11	$(21221)_{3進}$
2	2	6	0	0	12	$(02222)_{3進}$
2	2	6	1	0	13	$(11222)_{3進}$
2	2	6	2	0	14	$(20222)_{3進}$

2.2 部分空間コーディング法における行列要素の計算方法

(1) 式のハミルトニアンを, 次のように, 対角項 $\mathcal{H}_{\rm d}$ と 非対角項 $\mathcal{H}_{\rm o}+\mathcal{H}_{\rm o}^\dagger$ とに分解する.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\rm d} + \mathcal{H}_{\rm o} + \mathcal{H}_{\rm o}^\dagger\ , \tag{11}$$

$$\mathcal{H}_{\rm d} = \sum_{\langle \ell,\ell'\rangle} h_{\rm d}(\ell,\ell') + \sum_{\ell} h_{\rm d}(\ell)\ , \tag{12}$$

$$h_{\rm d}(\ell,\ell') = J^z_{\ell,\ell'}\, S^z_\ell S^z_{\ell'} + K_{\ell,\ell'}\Big\{\frac{1}{4}\big(S^+_\ell S^-_\ell S^-_{\ell'} S^+_{\ell'} + S^-_\ell S^+_\ell S^+_{\ell'} S^-_{\ell'}\big) + \big(S^z_\ell S^z_{\ell'}\big)^2\Big\}\ , \tag{12a}$$

$$h_{\mathrm{d}}(\ell) = D_\ell \big(S_\ell^z\big)^2 - H_\ell\, S_\ell^z \ , \tag{12b}$$

$$\mathcal{H}_{\mathrm{o}} = \sum_{\langle \ell,\ell' \rangle} \Big[h_{\mathrm{o}}^{(1)}(\ell,\ell') + h_{\mathrm{o}}^{(2)}(\ell,\ell') \Big] \ , \tag{13}$$

$$h_{\mathrm{o}}^{(1)}(\ell,\ell') = \frac{1}{2}\, J_{\ell,\ell'}^x\, S_\ell^+ S_{\ell'}^- + \frac{1}{2}\, K_{\ell,\ell'} \big(S_\ell^+ S_\ell^z S_{\ell'}^- S_{\ell'}^z + S_\ell^z S_\ell^+ S_{\ell'}^z S_{\ell'}^- \big) \ , \tag{13a}$$

$$h_{\mathrm{o}}^{(2)}(\ell,\ell') = \frac{1}{4}\, K_{\ell,\ell'}\, S_\ell^+ S_\ell^+ S_{\ell'}^- S_{\ell'}^- \ . \tag{13b}$$

一方, I $\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}\big)$, k_{L} で指定される部分系 L のスピン配列に対する規格化された状態ベクトル, および I $\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}\big)$, k_{H} で指定される部分系 H のスピン配列に対する規格化された状態ベクトルを, それぞれ, $\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}\big)$, $\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}\big)$ で表すと, これらの I, k_{L}, k_{H} に対して (9) 式から決められる番号 J で指定される全系のスピン配列に対する規格化された状態ベクトル $\Phi(J)$ は

$$\Phi(J) = \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}})\, \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}) \tag{14}$$

と書ける. 容易に求められるように, この状態ベクトルによる $h_{\mathrm{d}}(\ell,\ell')$, $h_{\mathrm{d}}(\ell)$ の対角行列要素は, それぞれ,

$$\begin{aligned} &\big\langle \Phi(J) \,\big|\, h_{\mathrm{d}}(\ell,\ell') \,\big|\, \Phi(J) \big\rangle \\ &\quad = J_{\ell,\ell'}^z\, m_\ell\, m_{\ell'} + K_{\ell,\ell'} \Big\{ 1 - 2\big(m_\ell + m_{\ell'}\big)^2 + \frac{1}{2}\big(m_\ell\, m_{\ell'} + 1\big)\big(m_\ell\, m_{\ell'} + 2\big) + \big(m_\ell\, m_{\ell'}\big)^2 \Big\} \ , \end{aligned} \tag{15a}$$

$$\big\langle \Phi(J) \,\big|\, h_{\mathrm{d}}(\ell) \,\big|\, \Phi(J) \big\rangle = D_\ell \big(m_\ell\big)^2 - H_\ell\, m_\ell \tag{15b}$$

となる. ここで, $m_\ell = \big\langle \Phi(J) \,\big|\, S_\ell^z \,\big|\, \Phi(J) \big\rangle$ である.

(12) 式で与えられる対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\mathrm{d}}$ は, 次のように, 部分系 L のみに関係する項, $\mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}}$, 部分系 H のみに関係する項, $\mathcal{H}_{\mathrm{d,HH}}$, および両系にまたがる項, $\mathcal{H}_{\mathrm{d,LH}}$, に分けられる.

$$\mathcal{H}_{\mathrm{d}} = \mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}} + \mathcal{H}_{\mathrm{d,HH}} + \mathcal{H}_{\mathrm{d,LH}} \ , \tag{16}$$

$$\mathcal{H}_{\mathrm{d,XX}} = \sum_{\langle \ell \in \mathrm{X}, \ell' \in \mathrm{X} \rangle} h_{\mathrm{d}}(\ell,\ell') + \sum_{\ell \in \mathrm{X}} h_{\mathrm{d}}(\ell) \qquad (\mathrm{X} = \mathrm{L,\ H}) \ , \tag{16a}$$

$$\mathcal{H}_{\mathrm{d,LH}} = \sum_{\langle \ell \in \mathrm{L}, \ell' \in \mathrm{H} \rangle} h_{\mathrm{d}}(\ell,\ell') \ . \tag{16b}$$

同様に, (13) 式で与えられる非対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\mathrm{o}}$ は

$$\mathcal{H}_{\mathrm{o}} = \mathcal{H}_{\mathrm{o,LL}} + \mathcal{H}_{\mathrm{o,HH}} + \mathcal{H}_{\mathrm{o,LH}} \ , \tag{17}$$

$$\mathcal{H}_{\mathrm{o,XX}} = \sum_{\langle \ell \in \mathrm{X}, \ell' \in \mathrm{X} \rangle} \Big[h_{\mathrm{o}}^{(1)}(\ell,\ell') + h_{\mathrm{o}}^{(2)}(\ell,\ell') \Big] \qquad (\mathrm{X} = \mathrm{L,\ H}) \ , \tag{17a}$$

$$\mathcal{H}_{\mathrm{o,LH}} = \sum_{\langle \ell \in \mathrm{L}, \ell' \in \mathrm{H} \rangle} \Big[h_{\mathrm{o}}^{(1)}(\ell,\ell') + h_{\mathrm{o}}^{(2)}(\ell,\ell') \Big] \tag{17b}$$

と表せる. ここで, $\ell \in \mathrm{X}$ は ℓ 番目のサイトが部分系 X (X = L, H) に属していることを意味する. また, (16b) 式および (17b) 式において $\ell < \ell'$ を仮定した. (以後も同じ仮定を行う. ハミルトニアン中で S_ℓ^α と $S_{\ell'}^{\alpha'}$ とは可換であるから, この仮定を行っても一般性は失われない.)

(16) 式より, (14) 式で与えられる状態ベクトル $\Phi(J)$ による $\mathcal{H}_{\mathrm{d}}$ の対角行列要素が次のように書ける.

$$\begin{aligned} \big\langle \Phi(J) \,\big|\, \mathcal{H}_{\mathrm{d}} \,\big|\, \Phi(J) \big\rangle &= \big\langle \phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}} \,\big|\, \phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}\big) \big\rangle \\ &\quad + \big\langle \phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_{\mathrm{d,HH}} \,\big|\, \phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}\big) \big\rangle \\ &\quad + \big\langle \phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}\big) \phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_{\mathrm{d,LH}} \,\big|\, \phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}\big) \phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}\big) \big\rangle \ . \end{aligned} \tag{18}$$

(18) 式の右辺に現れる対角行列要素は (14) 式, (15a,b) 式, (16a,b) 式を用いて計算できる. また, I', k'_{L}, k'_{H} を与えて (9) 式から決められる番号 J' で指定される全系のスピン配列に対する規格化された状態ベクトル $\Phi(J')$ と $\Phi(J)$ との間の $\mathcal{H}_{\mathrm{o}}$ の非対角要素は

$$\begin{aligned}\big\langle \Phi(J')\,\big|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o}}\,\big|\,\Phi(J)\big\rangle &= \big\langle \phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}}, k'_{\mathrm{L}}\big)\,\big|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o,LL}}\,\big|\,\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}}, k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle\,\delta\big(\mathrm{I},\,\mathrm{I}'\big)\,\delta\big(k'_{\mathrm{H}},\,k_{\mathrm{H}}\big)\\ &\quad+\big\langle \phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}}, k'_{\mathrm{H}}\big)\,\big|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o,HH}}\,\big|\,\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}}, k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle\,\delta\big(\mathrm{I},\,\mathrm{I}'\big)\,\delta\big(k'_{\mathrm{L}},\,k_{\mathrm{L}}\big)\\ &\quad+\big\langle \phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}}, k'_{\mathrm{L}}\big)\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}}, k'_{\mathrm{H}}\big)\,\big|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o,LH}}\,\big|\,\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}}, k_{\mathrm{H}}\big)\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}}, k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle \end{aligned}\tag{19}$$

と表せる. (19) 式の右辺に現れる非対角行列要素は, (14) 式, (17a,b) 式と次の式とを用いて計算できる.

$$\begin{aligned}&\big\langle \Phi(J')\,\big|\,h^{(1)}_{\mathrm{o}}(\ell,\ell')\,\big|\,\Phi(J)\big\rangle\\ &\qquad=\Big[J^{x}_{\ell,\ell'}+K_{\ell,\ell'}\Big\{m_\ell\, m_{\ell'}+\big(m_\ell+1\big)\big(m_{\ell'}-1\big)\Big\}\Big]\times\\ &\qquad\qquad\times\,\delta\big(m'_\ell,\,m_\ell+1\big)\,\delta\big(m'_{\ell'},\,m_{\ell'}-1\big)\prod_{\ell''\neq\ell,\ell'}\delta\big(m'_{\ell''},\,m_{\ell''}\big)\ ,\end{aligned}\tag{20a}$$

$$\big\langle \Phi(J')\,\big|\,h^{(2)}_{\mathrm{o}}(\ell,\ell')\,\big|\,\Phi(J)\big\rangle = K_{\ell,\ell'}\,\delta\big(m'_\ell,\,m_\ell+2\big)\,\delta\big(m'_{\ell'},\,m_{\ell'}-2\big)\prod_{\ell''\neq\ell,\ell'}\delta\big(m'_{\ell''},\,m_{\ell''}\big)\ .\tag{20b}$$

ここで, $\delta(\cdots,\,\cdots)$ は Kronecker delta を示し, $m_\ell=\big\langle\Phi(J)\,\big|\,S^z_\ell\,\big|\,\Phi(J)\big\rangle$, $m'_\ell=\big\langle\Phi(J')\,\big|\,S^z_\ell\,\big|\,\Phi(J')\big\rangle$ である. なお, $\mathcal{H}^{\dagger}_{\mathrm{o}}$ に対する非対角行列要素は $\mathcal{H}_{\mathrm{o}}$ に対するものと次の関係にある.

$$\big\langle \Phi(J')\,\big|\,\mathcal{H}^{\dagger}_{\mathrm{o}}\,\big|\,\Phi(J)\big\rangle = \big\langle \Phi(J)\,\big|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o}}\,\big|\,\Phi(J')\big\rangle\ .\tag{21}$$

2.2.1 小規模行列用ルーチンの場合

I, k_{H}, k_{L} (即ち J) を与えたときの対角行列要素 $\big\langle\Phi(J)\,\big|\,\mathcal{H}_{\mathrm{d}}\,\big|\,\Phi(J)\big\rangle$ は, $\langle\ell,\ell'\rangle$ を変えながら (15a) 式の右辺の値, また, ℓ を変えながら (15b) 式の右辺の値を計算し, それらのすべてを加え合わせることによって求まる. その際, m_ℓ, $m_{\ell'}$ の値は, それぞれ, $\big[\big(I_{\mathrm{H}}\times 3^{\mathrm{NSLMAX}}+I_{\mathrm{L}}\big)/3^{\ell-1}\big]$, $\big[\big(I_{\mathrm{H}}\times 3^{\mathrm{NSLMAX}}+I_{\mathrm{L}}\big)/3^{\ell'-1}\big]$ ($[\ \cdots\ ]$ はガウス記号) を 3 で割ったときの余りから 1 を引いて求める. ただし, I_{L} および I_{H} は, それぞれ, 与えられた I $\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}}\big)$, k_{L} および I $\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}}\big)$, k_{H} を用いて Storage Table から求める. 以上の計算をすべての I$\big(=0,\,1,\,\cdots,$ NSB$-1\big)$, $k_{\mathrm{H}}\big(=0,\,1,\,\cdots,\,n_{\mathrm{H}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}})-1\big)$, $k_{\mathrm{L}}\big(=0,\,1,\,\cdots,\,n_{\mathrm{L}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}})-1\big)$ について行えば, すべての対角行列要素が求められる.

一方, I, k_{H}, k_{L} を与えたときの $\mathcal{H}_{\mathrm{o}}$ に関する 0 でない非対角行列要素 $\big\langle\Phi(J')\,\big|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o}}\,\big|\,\Phi(J)\big\rangle$ は, ℓ, ℓ' を変えながら (20a,b) 式の右辺の値を計算することによって求まる. この際, J' を決める I', k'_{L}, k'_{H} の値 (J' はこれらを用いて (9) 式から決められる) および m_ℓ, $m_{\ell'}$ の値は次のようにして求める. 最初に, $\ell\in\mathrm{L}$ かつ $\ell'\in\mathrm{L}$ の場合を考える. (20a,b) 式の右辺から容易に分かるように, この場合, $\mathrm{I}'=\mathrm{I}$ であり, また, 当然 $k'_{\mathrm{H}}=k_{\mathrm{H}}$ である. k'_{L} としては, (20a) 式の右辺の計算のときのもの $k'^{(1)}_{\mathrm{L}}$ と (20b) 式の右辺の計算のときのもの $k'^{(2)}_{\mathrm{L}}$ とがある. $k'^{(1)}_{\mathrm{L}}$, $k'^{(2)}_{\mathrm{L}}$ を求めるには, 先ず与えられた I $\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}}\big)$, k_{L} を用いて Storage Table から I_{L} を求める. 次に, $k'^{(1)}_{\mathrm{L}}$ の計算のときには $I'_{\mathrm{L}}=I_{\mathrm{L}}+3^{\,\ell}-3^{\,\ell'}$ より, また, $k'^{(2)}_{\mathrm{L}}$ の計算のときには $I'_{\mathrm{L}}=I_{\mathrm{L}}+2\times 3^{\,\ell}-2\times 3^{\,\ell'}$ より I'_{L} を求め, 更にこの I'_{L} を用いて Lookup Table から $k'^{(1)}_{\mathrm{L}}$, $k'^{(2)}_{\mathrm{L}}$ を得ればよい. m_ℓ, $m_{\ell'}$ の値は, それ

ぞれ, $\left[I_{\rm L}/3^{\,\ell-1}\right]$, $\left[I_{\rm L}/3^{\,\ell'-1}\right]$ を 3 で割ったときの余りから 1 を引くことによって求める. なお, 次のことに注意しなくてはならない. 即ち, (20a) 式の右辺から分かるように, $k_{\rm L}'^{(1)}$ が存在するのは $m_\ell=-1$ or 0 かつ $m_{\ell'}=0$ or 1 のときのみであり, 同様に, (20b) 式の右辺から分かるように, $k_{\rm L}'^{(2)}$ が存在するのは $m_\ell=-1$ かつ $m_{\ell'}=1$ のときのみである. 従って, 例えば, $m_\ell=1$ または $m_{\ell'}=-1$ のときには, 与えられた J に対して J' が存在しないわけである.

$\ell\in{\rm H}$ かつ $\ell'\in{\rm H}$ の場合においては, ${\rm I}'={\rm I}$, $k_{\rm L}'=k_{\rm L}$ である. 上述の場合と同様に, $k_{\rm H}'$ として, (20a) 式の右辺の計算のときのもの $k_{\rm H}'^{(1)}$ と (20b) 式の右辺の計算のときのもの $k_{\rm H}'^{(2)}$ とがある. $k_{\rm H}'^{(1)}$, $k_{\rm H}'^{(2)}$ を求めるには, 先ず与えられた I $\left(\mu_{\rm H}^{\rm I}\right)$, $k_{\rm H}$ を用いて Storage Table から $I_{\rm H}$ を求める. 次に, $k_{\rm H}'^{(1)}$ の計算のときには $I_{\rm H}'=I_{\rm H}+3^{\,\ell-{\rm NSLMAX}}-3^{\,\ell'-{\rm NSLMAX}}$ より, また, $k_{\rm H}'^{(2)}$ の計算のときには $I_{\rm H}'=I_{\rm H}+2\times3^{\,\ell-{\rm NSLMAX}}-2\times3^{\,\ell'-{\rm NSLMAX}}$ より $I_{\rm H}'$ を求め, 更にこの $I_{\rm H}'$ を用いて Lookup Table から $k_{\rm H}'^{(1)}$, $k_{\rm H}'^{(2)}$ を得ればよい. m_ℓ, $m_{\ell'}$ の値は, それぞれ, $\left[I_{\rm H}/3^{\,\ell-{\rm NSLMAX}-1}\right]$, $\left[I_{\rm H}/3^{\,\ell'-{\rm NSLMAX}-1}\right]$ を 3 で割ったときの余りから 1 を引くことによって求める. なお, $k_{\rm H}'^{(1)}$ が存在するのは $m_\ell=-1$ or 0 かつ $m_{\ell'}=0$ or 1 のときのみであり, $k_{\rm H}'^{(2)}$ が存在するのは $m_\ell=-1$ かつ $m_{\ell'}=1$ のときのみである.

最後に, $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm H}$ の場合においては, (20a) 式の右辺の計算のときと (20b) 式の右辺の計算のときとに分けて考える. 前者のときには, ${\rm I}'={\rm I}+1$ である. このときの $k_{\rm L}'$ の値 $k_{\rm L}'^{(1)}$ および $k_{\rm H}'$ の値 $k_{\rm H}'^{(1)}$ を求めるには, 先ず ${\rm I}'$ $\left(\mu_{\rm L}^{{\rm I}'}=\mu_{\rm L}^{\rm I}+1\right)$, $k_{\rm L}$ および ${\rm I}'$ $\left(\mu_{\rm H}^{{\rm I}'}=\mu_{\rm H}^{\rm I}-1\right)$, $k_{\rm H}$ を用いて Storage Table からそれぞれ $I_{\rm L}$ および $I_{\rm H}$ を求める. 次に, 上述の 2 つの場合と同様にして $I_{\rm L}'$ および $I_{\rm H}'$ を求め, 更にそれらを用いて Lookup Table からそれぞれ $k_{\rm L}'^{(1)}$ および $k_{\rm H}'^{(1)}$ を得ればよい. 後者のときの $k_{\rm L}'$ の値 $k_{\rm L}'^{(2)}$ および $k_{\rm H}'$ の値 $k_{\rm H}'^{(2)}$ も同様にして得ることが出来る. ただし, このときには, ${\rm I}'={\rm I}+2$ $\left(\text{従って}, \mu_{\rm L}^{{\rm I}'}=\mu_{\rm L}^{\rm I}+2, \mu_{\rm H}^{{\rm I}'}=\mu_{\rm H}^{\rm I}-2\right)$ である. 両者のときに共通に, m_ℓ, $m_{\ell'}$ の値は それぞれ $\left[I_{\rm L}/3^{\,\ell-1}\right]$, $\left[I_{\rm H}/3^{\,\ell'-{\rm NSLMAX}-1}\right]$ を 3 で割ったときの余りから 1 を引くことによって求める. なお, $k_{\rm L}'^{(1)}$, $k_{\rm H}'^{(1)}$ が存在するのは $m_\ell=-1$ or 0 かつ $m_{\ell'}=0$ or 1 のときのみであり, $k_{\rm L}'^{(2)}$, $k_{\rm H}'^{(2)}$ が存在するのは $m_\ell=-1$ かつ $m_{\ell'}=1$ のときのみである.

以上の計算をすべての I, $k_{\rm H}$, $k_{\rm L}$ について行えば, $\mathcal{H}_{\rm o}$ に関するすべての 0 でない非対角行列要素が求められる. これらの結果を用いると, $\mathcal{H}_{\rm o}^\dagger$ に関するすべての 0 でない非対角要素 $\left\langle\Phi(J')\middle|\mathcal{H}_{\rm o}^\dagger\middle|\Phi(J)\right\rangle$ が (21) 式より直ちに求められる.

2.2.2 中規模以上行列用ルーチンの場合

以下では, 与えられているサイト対 $\langle\ell,\ell'\rangle$ を分類して, それらを $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm L}$ である場合に LL-対, $\ell\in{\rm H}$ かつ $\ell'\in{\rm H}$ である場合に HH-対, $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm H}$ である場合に LH-対 と呼ぶ. 更に, それぞれを, $p_{\rm LL}(=1,\ 2,\ \cdots,\ {\rm n_{LL}})$, $p_{\rm HH}(=1,\ 2,\ \cdots,\ {\rm n_{HH}})$, $p_{\rm LH}(=1,\ 2,\ \cdots,\ {\rm n_{LH}})$ で指定する. ここで, ${\rm n_{LL}}$, ${\rm n_{HH}}$, ${\rm n_{LH}}$ は, それぞれ, LL-対, HH-対, LH-対 の数である. この分類によれば, (7) 式の例で NSLMAX$=5$ とするとき, $\langle\ell,\ell'\rangle=\langle1,2\rangle$, $\langle2,3\rangle$, $\langle3,4\rangle$, $\langle4,5\rangle$ が LL-対, $\langle\ell,\ell'\rangle=\langle6,7\rangle$, $\langle7,8\rangle$ が HH-対, $\langle\ell,\ell'\rangle=\langle5,6\rangle$, $\langle1,8\rangle$ が LH-対 であり, ${\rm n_{LL}}=4$, ${\rm n_{HH}}=2$, ${\rm n_{LH}}=2$ である. LH-対に属するサイトを '境界サイト' と呼ぶ. また, '境界サイト' の内, 部分系 L および H に属するものの番号を, それぞれ, $\ell_{\rm b,L}$ および $\ell_{\rm b,H}$ で表し, かつ, それらの数を, それぞれ, ${\rm n_{b,L}}$ および ${\rm n_{b,H}}$ で表す. 上の例では, $\ell_{\rm b,L}=1,\ 5$ および $\ell_{\rm b,H}=6,\ 8$ が '境界サイト' であり, ${\rm n_{b,L}}=2$, ${\rm n_{b,H}}=2$ である.

中規模以上行列用ルーチンで用いられる Lanczös 法 (Lanczös 法の詳細については, 参考文献 3), 11) な

どを参照されたい) では, 2 つのベクトル $V_{\mathrm{D}}, V_{\mathrm{S}}$ (V_{S} は規格化されているものとする) とハミルトニアン $\mathcal{H}$ とに関して, 'V_{D} の J 成分 $\langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle$ に V_{S} とハミルトニアン $\mathcal{H}$ との積の J 成分 $\sum_{J'}\langle V_{\mathrm{S}} | \Phi(J')\rangle\langle \Phi(J') | \mathcal{H} | \Phi(J)\rangle$ を加えたものを改めて $\langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle$ とする' という処理

$$\langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle + \sum_{J'}\langle V_{\mathrm{S}} | \Phi(J')\rangle\langle \Phi(J') | \mathcal{H} | \Phi(J)\rangle \Longrightarrow \langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle \tag{22}$$

を, すべて J について行う必要がある. (11) 式を用いると, (22) 式は次のように書ける.

$$\begin{aligned}\langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle + \langle V_{\mathrm{S}} | \Phi(J)\rangle\langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{\mathrm{d}} | \Phi(J)\rangle + \sum_{J'(\neq J)}\langle V_{\mathrm{S}} | \Phi(J')\rangle\langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{\mathrm{o}} + \mathcal{H}_{\mathrm{o}}^{\dagger} | \Phi(J)\rangle \\ \Longrightarrow \langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle\ .\end{aligned} \tag{23}$$

(23) 式で表される処理を行うには, すべての J についての

$$\langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle + \langle V_{\mathrm{S}} | \Phi(J)\rangle\langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{\mathrm{d}} | \Phi(J)\rangle \Longrightarrow \langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle \tag{24a}$$

の処理, および, 非対角要素 $\langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{\mathrm{o}} | \Phi(J)\rangle$ の値が 0 でない J, J' のすべての組についての

$$\langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle + \langle V_{\mathrm{S}} | \Phi(J')\rangle\langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{\mathrm{o}} | \Phi(J)\rangle \Longrightarrow \langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J)\rangle\ , \tag{24b}$$

$$\langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J')\rangle + \langle V_{\mathrm{S}} | \Phi(J)\rangle\langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{\mathrm{o}}^{\dagger} | \Phi(J')\rangle \Longrightarrow \langle V_{\mathrm{D}} | \Phi(J')\rangle \tag{24c}$$

の処理を連続して行えばよい. なお, (24c) 式の左辺の計算には (21) 式を用いる.

(14) 式, (18) 式を用いると, (23) 式の左辺第 2 項は次のように書換えられる.

$$\begin{aligned}&\langle V_{\mathrm{S}} | \Phi(J)\rangle\langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{\mathrm{d}} | \Phi(J)\rangle \\ &\quad = \langle V_{\mathrm{S}} | \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}})\, \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}})\rangle \times \\ &\qquad \times \Big[\langle \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}} | \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}})\rangle + \langle \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,HH}} | \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}})\rangle \\ &\qquad\quad + \langle \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}})\phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,LH}} | \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}})\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}})\rangle\Big]\ .\end{aligned} \tag{25}$$

(25) 式の右辺に現れる 3 つの対角行列要素については, 3.2 節 [3] でのサブルーチン副プログラム ELMM の引数の説明に出てくる 1 次元配列 DIAG などを参照しながら計算を行う. 最初に, NSB 個の I $(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}})$ を $n_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}})$ の値が大きい順序で変えながら, それぞれの I について, 部分系 L に関する $n_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}})$ 個の対角行列要素 $\langle \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}} | \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}})\rangle$ $(k_{\mathrm{L}} = 0,\ 1,\ \cdots,\ n_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}) - 1)$ をすべて格納する領域が DIAG に残っている場合には, それらを計算して k_{L} の順序に DIAG に格納する. その際, それぞれの I について, すべての $\langle \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}} | \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}})\rangle$ を格納したかどうかの情報と, それらを格納した場合には $\langle \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, 0) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}} | \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, 0)\rangle$ が格納されている DIAG の配列要素番号 (DIAG(i)=$\langle \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, 0) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}} | \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, 0)\rangle$ である i の値) の情報も別の配列に格納しておく. $\langle \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}} | \phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{L}})\rangle$ の計算は, 小規模行列用ルーチンでの対角行列要素 $\langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{\mathrm{d}} | \Phi(J)\rangle$ の計算と同様に行う. ただし, $\langle \ell, \ell'\rangle$ についての和は LL-対 についてのみ行い, ℓ についての和は部分系 L に属するサイトについてのみ行う. また, m_{ℓ}, $m_{\ell'}$ の値は, それぞれ, $[I_{\mathrm{L}}/3^{\ell-1}]$, $[I_{\mathrm{L}}/3^{\ell'-1}]$ を 3 で割ったときの余りから 1 を引くことによって求める.

次に, 部分系 H に関する $n_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}})$ 個の対角行列要素 $\langle \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,HH}} | \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}})\rangle$ について同様の処理を行う. ただし, I を変える順序は $n_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}})$ の値が大きい順序とし, $\langle \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,HH}} | \phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}}, k_{\mathrm{H}})\rangle$ の

DIAG への格納は上記の部分系 L に関する対角行列要素に引き続いて行う. また, 勿論, $\langle \ell, \ell' \rangle$ および ℓ についての和は, それぞれ, HH-対および部分系 H に属するサイトについてのみ行い, m_ℓ, m'_ℓ の値は, それぞれ, $\left[I_\mathrm{H}/3^{\,\ell-\mathrm{NSLMAX}-1} \right]$, $\left[I_\mathrm{H}/3^{\,\ell'-\mathrm{NSLMAX}-1} \right]$ を 3 で割ったときの余りから 1 を引くことによって求める. なお, 部分系 H のハミルトニアン $\mathcal{H}_\mathrm{d,HH}+\mathcal{H}_\mathrm{o,HH}$ が部分系 L のハミルトニアン $\mathcal{H}_\mathrm{d,LL}+\mathcal{H}_\mathrm{o,LL}$ と同じ形である場合, 即ち, NS が偶数, NSLMAX=NS/2 で, かつ, ℓ, $\ell'=1, 2, \cdots,$ NSLMAX に対して $J^x_{\ell+\mathrm{NSLMAX},\ell'+\mathrm{NSLMAX}}=J^x_{\ell,\ell'}$, $J^z_{\ell+\mathrm{NSLMAX},\ell'+\mathrm{NSLMAX}}=J^z_{\ell,\ell'}$, $K_{\ell+\mathrm{NSLMAX},\ell'+\mathrm{NSLMAX}}=K_{\ell,\ell'}$, $D_{\ell+\mathrm{NSLMAX}}=D_\ell$, $H_{\ell+\mathrm{NSLMAX}}=H_\ell$ である場合には, ここでの処理は行わず, 部分系 L に関する結果を共通に用いる.

最後に, 両部分系 L, H に関する対角行列要素 $\big\langle \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big)\phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k_\mathrm{H}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_\mathrm{d,LH} \,\big|\, \phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k_\mathrm{H}\big)\phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big)\big\rangle$ については, 主記憶中の記憶領域の節減のため,

$$\big\langle \phi_\mathrm{X}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{X}, k_\mathrm{X}\big) \,\big|\, S^z_{\ell_\mathrm{b,X}} \,\big|\, \phi_\mathrm{X}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{X}, k_\mathrm{X}\big)\big\rangle = m_{\ell_\mathrm{b,X}} \qquad (\mathrm{X} = \mathrm{L, H}) \tag{26}$$

について以下の処理を行う. ($m_{\ell_\mathrm{b,X}}$ の値が分かれば, $\big\langle \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big)\phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k_\mathrm{H}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_\mathrm{d,LH} \,\big|\, \phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k_\mathrm{H}\big)\phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big)\big\rangle$ が計算できる ((14) 式, (15a) 式, (16b) 式を参照)). 即ち, NSB 個の I $\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, \mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}\big)$ を $n_\mathrm{L}(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L})\times n_\mathrm{H}(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H})$ の値が大きい順序で変え, また, $\ell_\mathrm{b,X}$ をなるべく LH-対の両端の '境界サイト' が連続するように変えながら, それぞれの I と $\ell_\mathrm{b,X}$ の組について, $n_\mathrm{X}(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{X})$ 個の $m_{\ell_\mathrm{b,X}}$ をすべて格納する領域が DIAG に残っている場合には, それらを計算し, 上記の部分系 H に関する対角行列要素に引き続いて $k_\mathrm{X} = 0,\ 1,\ \cdots,\ n_\mathrm{X}(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{X}) - 1$ の順序に DIAG に格納する. その際, それぞれの I と $\ell_\mathrm{b,X}$ の組について, すべての $m_{\ell_\mathrm{b,X}}$ を格納したかどうかの情報と, それらを格納した場合には, $k_\mathrm{X}=0$ に対する $m_{\ell_\mathrm{b,X}}$ が格納されている DIAG の配列要素番号の情報も別の配列に格納しておく. 更に, 前者の情報をもとにして, それぞれの I について, p_LH で指定される LH-対 の両端の '境界サイト' に関する $m_{\ell_\mathrm{b,X}}$ が共にすべて DIAG に格納されているかどうかの情報を得て, この情報を別の配列に格納し, かつ, その LH-対 の両端の '境界サイト' に関する $k_\mathrm{X}=0$ に対する $m_{\ell_\mathrm{b,X}}$ が格納されている DIAG の配列要素番号の情報も別の配列に格納しておく. なお, $m_{\ell_\mathrm{b,X}}$ の値は上記のようにして求める.

一方, (14) 式, (19) 式を用いると, (23) 式の左辺第 3 項の $\mathcal{H}_\mathrm{o}$ に関する部分は次のように書換えられる.

$$\begin{aligned}
&\sum_{J'(\neq J)} \big\langle V_\mathrm{S} \,\big|\, \Phi(J') \big\rangle \big\langle \Phi(J') \,\big|\, \mathcal{H}_\mathrm{o} \,\big|\, \Phi(J) \big\rangle \\
&\qquad = \sum_{k'_\mathrm{L}(\neq k_\mathrm{L})} \big\langle V_\mathrm{S} \,\big|\, \phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k_\mathrm{H}\big)\, \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k'_\mathrm{L}\big) \big\rangle \big\langle \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k'_\mathrm{L}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_\mathrm{o,LL} \,\big|\, \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big) \big\rangle \\
&\qquad + \sum_{k'_\mathrm{H}(\neq k_\mathrm{H})} \big\langle V_\mathrm{S} \,\big|\, \phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k'_\mathrm{H}\big)\, \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big) \big\rangle \big\langle \phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k'_\mathrm{H}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_\mathrm{o,HH} \,\big|\, \phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k_\mathrm{H}\big) \big\rangle \\
&\qquad + \sum_{\mathrm{I}'(\neq \mathrm{I})} \sum_{k'_\mathrm{H}(\neq k_\mathrm{H})} \sum_{k'_\mathrm{L}(\neq k_\mathrm{L})} \big\langle V_\mathrm{S} \,\big|\, \phi_\mathrm{H}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_\mathrm{H}, k'_\mathrm{H}\big)\, \phi_\mathrm{L}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_\mathrm{L}, k'_\mathrm{L}\big) \big\rangle \times \\
&\qquad\qquad \times \big\langle \phi_\mathrm{L}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_\mathrm{L}, k'_\mathrm{L}\big)\phi_\mathrm{H}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_\mathrm{H}, k'_\mathrm{H}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_\mathrm{o,LH} \,\big|\, \phi_\mathrm{H}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{H}, k_\mathrm{H}\big)\phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big) \big\rangle \,.
\end{aligned} \tag{27}$$

(27) 式の右辺に現れる非対角行列要素については, 3.2 節 [3] での 1 次元配列 ELMNT および LOC などを参照しながら計算を行う. 最初に, 右辺第 1 項の部分系 L に関する非対角行列要素

$$\begin{aligned}
&\big\langle \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k'_\mathrm{L}\big) \,\big|\, \mathcal{H}_\mathrm{o,LL} \,\big|\, \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big) \big\rangle \\
&\quad = \sum_{\langle \ell\in\mathrm{L}, \ell'\in\mathrm{L}\rangle} \big\langle \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k'_\mathrm{L}\big) \,\big|\, h^{(1)}_\mathrm{o}(\ell, \ell') \,\big|\, \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big) \big\rangle + \sum_{\langle \ell\in\mathrm{L}, \ell'\in\mathrm{L}\rangle} \big\langle \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k'_\mathrm{L}\big) \,\big|\, h^{(2)}_\mathrm{o}(\ell, \ell') \,\big|\, \phi_\mathrm{L}\big(\mu^\mathrm{I}_\mathrm{L}, k_\mathrm{L}\big) \big\rangle
\end{aligned} \tag{28}$$

を取り扱う. I $\left(\mu_{\rm L}^{\rm I}\right)$ および $k_{\rm L}$ を与えるとき, $p_{\rm LL}$ で指定される LL-対のそれぞれについて, $J_{\ell,\ell'}^x = K_{\ell,\ell'} = 0$, 即ち, $h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell') = h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell') = 0$ である場合を除いて, 次のような処理を行う. $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'_{\rm L}\right) \mid h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell') \mid \phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$ に 0 でない値を与える $k'_{\rm L}$ の値は, それぞれ, $k'^{(1)}_{\rm L}$, $k'^{(2)}_{\rm L}$ であり, これらは小規模行列用ルーチンでの $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm L}$ の場合のものと同じである. NSB 個の I $\left(\mu_{\rm L}^{\rm I}\right)$ を $n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})$ の値が大きい順序で変え, また, $p_{\rm LL}$ を 1, 2, $\cdots$, ${\rm n_{LL}}$ の順序で変えながら, それぞれの I と $p_{\rm LL}$ の組について, $k_{\rm L}=0, 1, \cdots, n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})-1$ に対する $k'^{(1)}_{\rm L}$ および $k'^{(2)}_{\rm L}$ ($K_{\ell,\ell'}=0$, 即ち, $h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')=0$ であれば前者のみ) をすべて格納する領域が LOC に残っている場合には, それらを計算して $k_{\rm L}$ の順序に, かつ $K_{\ell,\ell'}\neq 0$ であれば与えられた $k_{\rm L}$ に対して $k'^{(1)}_{\rm L}$, $k'^{(2)}_{\rm L}$ の順序に LOC に格納し, 同時に, $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(1)}_{\rm L}\right) \mid h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell') \mid \phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$ および $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(2)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$ ($K_{\ell,\ell'}=0$ であれば前者のみ) をすべて格納する領域が ELMNT に残っている場合には, それらを計算して $k'^{(1)}_{\rm L}$, $k'^{(2)}_{\rm L}$ のときと同様の順序に ELMNT に格納する. ($k'^{(1)}_{\rm L}$, $k'^{(2)}_{\rm L}$ および $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(1)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(2)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$ の計算は, 小規模行列用ルーチンでの $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm L}$ の場合と同様に行う. なお, $k'^{(1)}_{\rm L}$, $k'^{(2)}_{\rm L}$ が存在しない場合には, 存在しない $k'^{(i)}_{\rm L}$ $(i=1, 2)$ の値は $k_{\rm L}$ であると見なし, かつ, 存在しない $k'^{(i)}_{\rm L}$ に対する $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(i)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(i)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$ の値は 0 であると見なして, それぞれを LOC, ELMNT に格納する.) その際, それぞれの I と $p_{\rm LL}$ の組について, すべての $k'^{(1)}_{\rm L}$, $k'^{(2)}_{\rm L}$ およびすべての $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(1)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(2)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$ を格納したかどうかの情報, 更に, それらを格納した場合には $k_{\rm L}=0$ に対する $k'^{(1)}_{\rm L}$ が格納されている LOC の配列要素番号の情報と $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(1)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},0\right)\rangle$ が格納されている ELMNT の配列要素番号の情報も別の配列に格納しておく. なお, それぞれの $p_{\rm LL}$ について, $J_{\ell,\ell'}^x = K_{\ell,\ell'} = 0$, $J_{\ell,\ell'}^x\neq 0$ かつ $K_{\ell,\ell'}=0$, $K_{\ell,\ell'}\neq 0$ のいずれであるかの情報も別の配列に格納しておく.

次に, (27) 式の右辺第 2 項の部分系 H に関する非対角行列要素

$$\begin{aligned}
&\langle\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k'_{\rm H}\right)\mid\mathcal{H}_{\rm o,HH}\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\rangle \\
&\quad = \sum_{\langle\ell\in{\rm H},\ell'\in{\rm H}\rangle}\langle\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k'_{\rm H}\right)\mid h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\rangle + \sum_{\langle\ell\in{\rm H},\ell'\in{\rm H}\rangle}\langle\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k'_{\rm H}\right)\mid h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\rangle
\end{aligned} \tag{29}$$

について同様の処理を行う. ただし, I を変える順序は $n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I})$ の値が大きい順序とする. また, $k'^{(1)}_{\rm H}$, $k'^{(2)}_{\rm H}$ の LOC への格納および $\langle\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k'^{(1)}_{\rm H}\right)\mid h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\rangle$, $\langle\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k'^{(2)}_{\rm H}\right)\mid h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\rangle$ の ELMNT への格納は, それぞれ, 上記の部分系 L に関する $k'^{(1)}_{\rm L}$, $k'^{(2)}_{\rm L}$ および $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(1)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k'^{(2)}_{\rm L}\right)\mid h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$ に引き続いて行う. なお, 部分系 H のハミルトニアン $\mathcal{H}_{\rm d,HH}+\mathcal{H}_{\rm o,HH}$ が 部分系 L のハミルトニアン $\mathcal{H}_{\rm d,LL}+\mathcal{H}_{\rm o,LL}$ と同じ形である場合には, ここでの処理は行わず, 部分系 L に関する結果を共通に用いる.

最後に, (27) 式の右辺第 3 項の両部分系 L, H に関する非対角行列要素 $\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L}\right)\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H}\right)\mid\mathcal{H}_{\rm o,LH}\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle$ を取り扱う. 主記憶中の記憶領域の節減を考慮した処理を行うために, (13a,b) 式, (17b) 式を用いて, この非対角行列要素を次のように表す.

$$\begin{aligned}
&\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L}\right)\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H}\right)\mid\mathcal{H}_{\rm o,LH}\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle \\
&\quad = \sum_{\langle\ell_{\rm b,L},\ell_{\rm b,H}\rangle}\Bigg[J_{\ell_{\rm b,L},\ell_{\rm b,H}}^x\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L}\right)\mid\frac{1}{\sqrt{2}}\,S_{\ell_{\rm b,L}}^+\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle\langle\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H}\right)\mid\frac{1}{\sqrt{2}}\,S_{\ell_{\rm b,H}}^-\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\rangle \\
&\qquad\qquad + K_{\ell_{\rm b,L},\ell_{\rm b,H}}\Big\{\langle\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L}\right)\mid\frac{1}{\sqrt{2}}\,S_{\ell_{\rm b,L}}^+S_{\ell_{\rm b,L}}^z\mid\phi_{\rm L}\left(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L}\right)\rangle\langle\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H}\right)\mid\frac{1}{\sqrt{2}}\,S_{\ell_{\rm b,H}}^-S_{\ell_{\rm b,H}}^z\mid\phi_{\rm H}\left(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}\right)\rangle
\end{aligned}$$

$$+\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,S^{z}_{\ell_{\rm b,L}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,S^{z}_{\ell_{\rm b,H}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$$
$$+\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L})\,|\,\frac{1}{2}\,S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H})\,|\,\frac{1}{2}\,S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle\Big\}\Big]\,. \tag{30}$$

I $(\mu_{\rm L}^{\rm I})$, $k_{\rm L}$ を与えるとき, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L})\mid\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\mid\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L})\mid\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}S^{z}_{\ell_{\rm b,L}}\mid\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L})\mid\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\rm b,L}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\mid\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k'_{\rm L})\mid\frac{1}{2}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\mid\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$ に 0 でない値を与える $k'_{\rm L}$ を, それぞれ, $k_{\rm L}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm L}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm L}^{\prime(1),3}$, $k_{\rm L}^{\prime(2),1}$ とする. $k_{\rm L}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm L}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm L}^{\prime(1),3}$ は小規模行列用ルーチンでの $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm H}$ の場合の $k_{\rm L}^{\prime(1)}$ と同様にして計算でき, すべて $k_{\rm L}^{\prime(1)}$ と同じ値をとるが, $k_{\rm L}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm L}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm L}^{\prime(1),3}$ が存在するのは, それぞれ, $m_{\rm b,L}=-1$ or 0, $m_{\rm b,L}=-1$, $m_{\rm b,L}=0$ のときのみである. また, $k_{\rm L}^{\prime(2),1}$ は小規模行列用ルーチンでの $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm H}$ の場合の $k_{\rm L}^{\prime(2)}$ と同様にして計算でき, $k_{\rm L}^{\prime(2)}$ と同じ値をとるが, $k_{\rm L}^{\prime(2),1}$ が存在するのは, $m_{\rm b,L}=-1$ のときのみである. $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(1),1})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(1),2})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}S^{z}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(1),3})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\rm b,L}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(2),1})\,|\,\frac{1}{2}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$ の値は, それぞれ, 1, −1, 1, 1 で与えられる. 同様に, I $(\mu_{\rm H}^{\rm I})$, $k_{\rm H}$ を与えるとき, $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}S^{z}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\rm b,H}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k'_{\rm H})\,|\,\frac{1}{2}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$ に 0 でない値を与える $k'_{\rm H}$ を, それぞれ, $k_{\rm H}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm H}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm H}^{\prime(1),3}$, $k_{\rm H}^{\prime(2),1}$ とする. $k_{\rm H}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm H}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm H}^{\prime(1),3}$ は小規模行列用ルーチンでの $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm H}$ の場合の $k_{\rm H}^{\prime(1)}$ と同様にして計算でき, すべて $k_{\rm H}^{\prime(1)}$ と同じ値をとるが, $k_{\rm H}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm H}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm H}^{\prime(1),3}$ が存在するのは, それぞれ, $m_{\rm b,H}=0$ or 1, $m_{\rm b,H}=1$, $m_{\rm b,H}=0$ のときのみである. また, $k_{\rm H}^{\prime(2),1}$ は小規模行列用ルーチンでの $\ell\in{\rm L}$ かつ $\ell'\in{\rm H}$ の場合の $k_{\rm H}^{\prime(2)}$ と同様にして計算でき, $k_{\rm H}^{\prime(2)}$ と同じ値ををとるが, $k_{\rm H}^{\prime(2),1}$ が存在するのは, $m_{\rm b,H}=1$ のときのみである. $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(1),1})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(1),2})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}S^{z}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(1),3})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\rm b,H}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(2),1})\,|\,\frac{1}{2}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$ の値は, それぞれ, 1, 1, −1, 1 で与えられる. なお, 以下で, すべての LH-対 $\langle\ell_{\rm b,L},\ell_{\rm b,H}\rangle$ に対して $K_{\ell_{\rm b,L},\ell_{\rm b,H}}=0$ である場合を case (a), それ以外の場合を case (b) とする.

以上の準備のもとで, 次のような処理を行う. NSB 個の I $(\mu_{\rm L}^{\rm I},\mu_{\rm H}^{\rm I})$ を $n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})\times n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I})$ の値が大きい順序で変え, また, $\ell_{\rm b,X}$ (X = L, H) をなるべく LH-対の両端の '境界サイト' が連続するように変えながら, それぞれの I と $\ell_{\rm b,X}$ の組について, $k_{\rm X}=0,\,1,\,\cdots,\,n_{\rm X}(\mu_{\rm X}^{\rm I})-1$ に対する $k_{\rm X}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),3}$, $k_{\rm X}^{\prime(2),1}$ (case (a) であれば $k_{\rm X}^{\prime(1),1}$ のみ）をすべて格納する領域が LOC に残っている場合には, それらを計算し, 上記の部分系 H に関する $k_{\rm H}^{\prime(1)}$, $k_{\rm H}^{\prime(2)}$ に引き続いて, $k_{\rm X}$ の順序に, かつ case (b) であれば与えられた $k_{\rm X}$ に対して $k_{\rm X}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),3}$, $k_{\rm X}^{\prime(2),1}$ の順序に LOC に格納し, 同時に, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(1),1})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$ または $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(1),1})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$ (X=L であれば前者, X=H であれば後者. 以下同様), $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(1),2})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}S^{z}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$ または $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(1),2})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}S^{z}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(1),3})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\rm b,L}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$ または $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(1),3})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\rm b,H}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(2),1})\,|\,\frac{1}{2}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$ または $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(2),1})\,|\,\frac{1}{2}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$ (case (a) であれば $\langle\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'},k_{\rm L}^{\prime(1),1})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\rm b,L}}\,|\,\phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I},k_{\rm L})\rangle$ または $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'},k_{\rm H}^{\prime(1),1})\,|\,\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\rm b,H}}\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$ のみ）をすべて格納する領域が ELMNT に残っている場合には, それらを計算し, 上記の部分系 H に関する $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}^{\prime(1)})\,|\,h_{\rm o}^{(1)}(\ell,\ell')\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$, $\langle\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H}^{\prime(2)})\,|\,h_{\rm o}^{(2)}(\ell,\ell')\,|\,\phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I},k_{\rm H})\rangle$ に引き続いて $k_{\rm X}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),3}$, $k_{\rm X}^{\prime(2),1}$ のときと同様の順序に ELMNT に格納する.（上で議論したように, $k_{\rm X}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),3}$, $k_{\rm X}^{\prime(2),1}$ が存在しない場合もある. これらの場合には, 存在しない $k_{\rm X}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),3}$, $k_{\rm X}^{\prime(2),1}$ の値は −1 であると見なし, かつ, 存在しない $k_{\rm X}^{\prime(1),1}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),2}$, $k_{\rm X}^{\prime(1),3}$, $k_{\rm X}^{\prime(2),1}$ に

対する $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),2}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} S_{\ell_{\rm b,L}}^{z} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),2}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} S_{\ell_{\rm b,H}}^{z} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),3}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{z} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),3}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{z} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(2),1}) \,|\, \frac{1}{2} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(2),1}) \,|\, \frac{1}{2} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$ の値は 0 であると見なして, それぞれを LOC, ELMNT に格納する.) その際, それぞれの I と $\ell_{\rm b,X}$ の組について, すべての $k_{\rm X}'^{(1),1}$, $k_{\rm X}'^{(1),2}$, $k_{\rm X}'^{(1),3}$, $k_{\rm X}'^{(2),1}$ およびすべての $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),2}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} S_{\ell_{\rm b,L}}^{z} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),2}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} S_{\ell_{\rm b,H}}^{z} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),3}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{z} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),3}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{z} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(2),1}) \,|\, \frac{1}{2} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(2),1}) \,|\, \frac{1}{2} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$ を格納したかどうかの情報と, それらを格納した場合には, $k_{\rm X}=0$ に対する $k_{\rm X}'^{(1),1}$ が格納されている LOC の配列要素番号および $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, 0) \rangle$ または $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, 0) \rangle$ が格納されている ELMNT の配列要素番号の情報も別の配列に格納しておく. 更に, 前者の情報をもとにして, それぞれの I について, $p_{\rm LH}$ で指定される LH-対の両端の '境界サイト' に関する $k_{\rm X}'^{(1),1}$, $k_{\rm X}'^{(1),2}$,$k_{\rm X}'^{(1),3}$, $k_{\rm X}'^{(2),1}$ および $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),2}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} S_{\ell_{\rm b,L}}^{z} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),3}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{z} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(2),1}) \,|\, \frac{1}{2} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, k_{\rm L}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),2}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} S_{\ell_{\rm b,H}}^{z} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),3}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{z} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$, $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(2),1}) \,|\, \frac{1}{2} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, k_{\rm H}) \rangle$ が共にすべて, それぞれ, LOC および ELMNT に格納されているかどうかの情報を得て, これらの情報を別の配列に格納し, かつ, その LH-対の両端の '境界サイト' に関する $k_{\rm X}=0$ に対する $k_{\rm X}'^{(1),1}$ が格納されている LOC の配列要素番号および $\langle \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I'}, k_{\rm L}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,L}}^{+} \,|\, \phi_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I}, 0) \rangle$, $\langle \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I'}, k_{\rm H}'^{(1),1}) \,|\, \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{\rm b,H}}^{-} \,|\, \phi_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I}, 0) \rangle$ が格納されている ELMNT の配列要素番号の情報と case (a) であるか case (b) であるかの情報も別の配列に格納しておく.

以上の議論から分かるように, 考える系を 2 つの部分系に分割して西森 [3,4] による行列格納法を用いることにより, 0 でない行列要素の位置と値を主記憶に格納するための領域が, 分割を行わない場合に比べて, 約 $1/3^{\rm NS-NSLMAX}$ に減少する. 従って, 行列の次元 IDIM がかなり大きい場合にも, 0 でないすべての行列要素の位置と値を主記憶に格納した上で, 計算を行うことが出来る. 我々の経験によれば, 0 でないすべての行列要素の位置と値を主記憶に格納して計算を行うと, それ等を格納しない場合に比べて, 計算時間が 1/5 ないし 1/10 になる.