§3. 使用法

3.1 小規模行列用ルーチン

１２頁の図に示されるような周期的境界条件をもつ NS＝8 の１次元格子で, 等方的な反強磁性的最近接双１次交換相互作用 $\big($(8) 式で $J^x = J^z = 1.0$ とする$\big)$ のみが存在する系に対して, $m_{\rm total} = 0$ の場合について, エネルギー固有値を基底状態に対するものを含めて小さい順に４個と基底状態の固有ベクトルとを求め, これらの精度のチェックを行い, 固有ベクトルのもつ並進対称性を調べ, スピン対相関関数とストリング相関関数とを計算するサンプルプログラムを２４, ２５頁に与える.

他の系などに対して同様な計算を行うには, 3.1 節 [1]～[6], 3.3 節 [1]～[12], 3.4 節 [2], [3] で述べる副プログラムの説明に従って, 上記のサンプルプログラムにおける００６０行～０１１０行の PARAMETER 文および０２９０行～０４７０行 の DATA 文を変更すればよい. (用意されている副プログラムを用いて, ダイマー相関関数などの他の物理量も計算する場合には, 勿論, 相当する書き加えをしなければならない.) その為の参考に, このサンプルプログラムにおけるいくつかのパラメータの値の決め方を説明する. NS＝8, $m_{\rm total} = 0$ の場合, 行列の次元 IDIM は 副プログラム NCONF (3.1 節 [1] を参照) を用いて計算すれば分かるように 1107 である. 従って, NDCLRV＝1106, NDCLRS＝1106 としている. また, ここでは, NSLMAX の値として NS/2＝4 を選んでいる. 全スピン数が 4 で, $m_{\rm total} = 0$ の場合の行列の次元は, やはり NCONF を用いて計算すれば分かるように 19 であり, 従って, NDCLR1＝18 としている.

このサンプルプログラムを実行させて得られた結果を２６頁に与える. この結果での４行目の４個の数値は上記の４個のエネルギー固有値を示している. ７～１０行目には, 副プログラム CHECKS からの情報が出力されている. これらより, 求められた基底状態のエネルギー固有値の有効数字が少なくとも小数以下７桁であること, などが分かる. また, １４～２１行目の結果から, 基底状態の固有ベクトルが波数 $K = 0$ の対称性をもっていることが分かる. 最後の８行には J＝1, 2, $\cdots$, 8 に対するスピン対相関関数 $\Delta\omega^z(1,{\rm J}) = \omega^x(1,{\rm J})$ (TWO-SPIN の列) およびストリング相関関数 $\sigma^z(1,{\rm J}) = \sigma^x(1,{\rm J})$ (STRING の列) に対する結果が出力されている.

２７頁以降に, 小規模行列用ルーチンを構成する各副プログラムの使用法を説明する.

[1] 1.3 節での処理 i)

IDIM＝NCONF(NS, ITSZ)

次の式によって, 行列の次元 IDIM を計算する.

$$\mathrm{IDIM} = \sum_{n=0}^{\left[\frac{\mathrm{NS}-|\mathrm{ITSZ}|}{2}\right]} \frac{\mathrm{NS}!}{n!\,(|\mathrm{ITSZ}|+n)!\,(\mathrm{NS}-|\mathrm{ITSZ}|-2n)!} \qquad \left([\cdots] \text{ はガウス記号}\right) .$$

なお, NCONF の型は 4 バイト整数である.

[引数]

NS (入力; 4 バイト整数)

全スピン数. 2≤NS≤24 を満たさなければならない.

ITSZ (入力; 4 バイト整数)

S^z_{total} の固有値 m_{total}. 0, ±1, ±2, ···, ±NS のうちのいずれかの値を与える.

[2] 1.3 節での処理 ii)

CALL CRESZ(NS, NSLMAX, ITSZ, NSB, NH, NL, IBASE,

NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2)

NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, ISTAT2 の計算を行う. 以下での引数の説明は, §2 および 2.1 節の議論を参照しながら読んでいただきたい.

[引数]

NS (入力; 4 バイト整数)

全スピン数. 2≤NS≤24 を満たさなければならない.

NSLMAX (入力; 4 バイト整数)

部分系 L に属するサイト数. [(NS+1)/2]≤NSLMAX≤Min(NS, 12) ([···] はガウス記号) を満たさなければならない.

ITSZ (入力; 4 バイト整数)

S^z_{total} の固有値 m_{total}. 0, ±1, ±2, ···, ±NS のうちのいずれかの値を与える.

NSB (出力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループ (I で指定される) の総数が返される.

NH(0:2*NSLMAX) (出力; 4 バイト整数)

NH(I) に $\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}}$ の値が返される. ここで, I=0, 1, ···, NSB−1.

NL(0:2*NSLMAX) (出力; 4 バイト整数)

NL(I) に $\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}}$ の値が返される. ここで, I=0, 1, ···, NSB−1.

IBASE(0:2*NSLMAX+1) (出力; 4 バイト整数)

IBASE(I) に J^{I}_0 の値が返される. ここで, I=0, 1, ···, NSB−1. また, IBASE(NSB) には行列の次元が返される. CRESZ の実行の直後に, あらかじめ NCONF ([1] を参照) を用いて計算してある IDIM と IBASE(NSB) とが等しくなっていることをチェックすることを勧める.

NSTAT(0:2*NSLMAX, 0:1) (出力; 4 バイト整数)

NSTAT(NL(I), 0) に $n_{\mathrm{L}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}})$ の値が返され, NSTAT(NH(I), 1) に $n_{\mathrm{H}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}})$ の値が返される. ここで, I=0, 1, ···, NSB−1.

ISTAT1(0:NDCLR1, 0:2*NSLMAX) (出力; 4 バイト整数)

Storage Table. 与えられた $\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{X}}$, k_{X} に対する I_{X} の値が ISTAT1(k_{X}, $\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{X}}$) に返される. ここで, X = L, H.

NDCLR1 (入力; 4 バイト整数)

配列 ISTAT1 の整合寸法. 全スピン数が NSLMAX で S^z_{total} の固有値 m_{total} が 0 の場合の行列の次元数から 1 を引いた値に等しいかそれより大きくなければならない.

ISTAT2(0:3NSLMAX)** (出力; 4 バイト整数)

Lookup Table. 与えられた I_{X} に対する k_{X} の値が ISTAT2(I_{X}) に返される. ここで, X = L, H.

[3] 1.3 節での処理 iii)

**CALL SMALL(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,
ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, NVEC, NE, E, VEC, NDCLRV,
MDCLRV, ELMNT, VECS, EIGN, IWK, NDCLRS)**

E, VEC, VECS, EIGN の計算を行う. 以下での引数の説明は, §2 および 2.1 節, 2.2 節の議論を参照しながら読んでいただきたい.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は CRESZ でのものと同じ. SMALL から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と SMALL との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM に等しい値が入っている. ACOS および SX 用の版を用いる場合には, IBASE(NSB) の値は 2 以上でなければならず, また, SUN 用の版を用いる場合には, その値は 3 以上 2000 以下でなければならない.

IPAIR(2*IBOND+12) (入力; 4 バイト整数)

IBOND 個のサイト対 (IBOND の項を参照) の両端のサイトの番号を, 1 から NS までの整数の 2*IBOND 個の組として IPAIR(1) から IPAIR(2*IBOND) までに与える. IPAIR(2*IBOND+1) から IPAIR(2*IBOND+12) までは使用していない (何を与えてもよいし, 何も与えなくてもよい). (7) 式の例 (IBOND=8) では, 例えば DATA 文を用いて

DATA IPAIR /1,2, 2,3, 3,4, 4,5, 5,6, 6,7, 7,8, 8,1, 12*0/

とすればよい. このように IPAIR(2*i−1) と IPAIR(2*i) とで決められるサイト対を i 番目のサイト対と呼ぶ. なお, IPAIR(2*i−1) と IPAIR(2*i) とに与えるサイトの番号の順序は問わない.

AJX(IBOND+6) (入力; 8 バイト実数)

IPAIR で決められた i 番目のサイト対に対する $J^x_{\ell,\ell'}$ の値を AJX(i) に与える. AJX(IBOND+1) から AJX(IBOND+6) までは使用していない (何を与えてもよいし, 何も与えなくてもよい). 上の IPAIR の項の例で, $J^x_{1,2}=-1.0$, $J^x_{2,3}=-1.5$, $J^x_{3,4}=0.3$, $J^x_{4,5}=-0.6$, $J^x_{5,6}=0.0$, $J^x_{6,7}=1.0$, $J^x_{7,8}=-1.0$, $J^x_{8,1}=0.5$ なら, 例えば DATA 文を用いて

DATA AJX /−1.0D0, −1.5D0, 0.3D0, −0.6D0, 0.0D0, 1.0D0, −1.0D0, 0.5D0, 6*0.0D0/

とすればよい.

AJZ(IBOND+6) (入力; 8 バイト実数)

AJX の場合と全く同じルールで, i 番目のサイト対に対する $J^z_{\ell,\ell'}$ の値を AJZ(i) に与える. AJZ(IBOND+1) から AJZ(IBOND+6) までは使用していない (何を与えてもよいし, 何も与えなくてもよい).

ABIQD(IBOND+6) (入力; 8 バイト実数)

AJX, AJZ の場合と全く同じルールで, i 番目のサイト対に対する $K_{\ell,\ell'}$ の値を ABIQD(i) に与える. ABIQD(IBOND+1) から ABIQD(IBOND+6) までは使用していない (何を与えてもよいし, 何も与えなくてもよい).

IBOND (入力; 4 バイト整数)

$J^x_{\ell,\ell'}$, $J^z_{\ell,\ell'}$, $K_{\ell,\ell'}$ のうち少なくとも 1 つが 0 でないサイト対 $\langle \ell, \ell' \rangle$ の総数. (7) 式の例では 8 を与える.

ANISTRPY(0:NS+1) (入力; 8 バイト実数)

D_1, D_2, $\cdots$, $D_{\rm NS}$ の値を, これらの 1 部或はすべてが 0 である場合も含めて, それぞれ ANISTRPY(1), ANISTRPY(2), $\cdots$, ANISTRPY(NS) に与える. ANISTRPY(0) および ANISTRPY(NS+1) は使用していない (何を与えてもよいし, 何も与えなくてもよい).

HFIELD(0:NS+1) (入力; 8 バイト実数)

H_1, H_2, $\cdots$, $H_{\rm NS}$ の値を, これらの 1 部或はすべてが 0 である場合も含めて, それぞれ HFIELD(1), HFIELD(2), $\cdots$, HFIELD(NS) に与える. HFIELD(0) および HFIELD(NS+1) は使用していない (何を与えてもよいし, 何も与えなくてもよい).

MSGBC(2) (入力; 4 バイト文字)

SMALL では MSGBC は使用していない (MSGBC(1), MSGBC(2) に, 何を与えてもよいし, 何も与えなくてもよい).

NVEC (入力; 4 バイト整数)

求めたい固有ベクトルの個数. $0 \leq$ NVEC $\leq$ NE でなければならない. NVEC に 0 を与えると, エネルギー固有値のみが求められる.

NE (入力; 4 バイト整数)

求めたいエネルギー固有値の個数. $1 \leq$ NE $\leq$ IBASE(NSB) でなければならない.

E(NE) (出力; 8 バイト実数)

NE 個のエネルギー固有値. E(1), E(2), $\cdots$, E(NE) の順に小さい方から NE 個のエネルギー固有値が返される.

VEC(0:NDCLRV, 0:MDCLRV) (出力; 8 バイト実数)

NVEC 個の固有ベクトル. エネルギー固有値 E(i) (i=1, 2, $\cdots$, NVEC) に対応する i 番目の固有ベクトル $V_{\rm i}$ の J(=0, 1, $\cdots$, IBASE(NSB)$-$1) 成分 $\langle V_{\rm i} | \Phi(J) \rangle$ が VEC(J, i$-$1) に返される.

NDCLRV (入力; 4 バイト整数), **MDCLRV** (入力; 4 バイト整数)

いずれも VEC の整合寸法. NDCLRV $\geq$ IBASE(NSB) $-$ 1, MDCLRV $\geq$ NVEC $-$ 1 でなければならない (MDCLRV については, MDCLRV $\geq$ NVEC であることが望ましい ([5] で述べる CHECKS の引数 VEC の項を参照)). VEC は SMALL 中で, ACOS および SX 用の版では, 科学技術計算ライブラリ ASL 中のサブルーチン副プログラム DCSMSS および DCSMSN (1.5 節を参照) を呼び出す際に, また, SUN 用の版では, サブルーチン副プログラム DIAGNLZ (A.1.2 節 [2] を参照) を呼び出す際に, 作業領域としても使用されている. その為に, ACOS および SX 用の版を用いてエネルギー固有値のみを求めるときには (NDCLRV + 1)$\times$(MDCLRV + 1) $\geq$ 5$\times$IBASE(NSB) の条件も満たさねばならず, エネルギー固有値および固有ベクトルの両方を求めるときには (NDCLRV + 1)$\times$(MDCLRV + 1) $\geq$ 8$\times$IBASE(NSB) の条件も満たさねばならない (A.1.2 節 [1] を参照). ACOS および SX 用の版を他機種へ移植する際には, この条件が変わる可能性があるので注意を要する. 同様に, SUN 用の版を用いてエネルギー固有値のみを求めるときには (NDCLRV + 1)$\times$(MDCLRV + 1) $\geq$ 6$\times$IBASE(NSB) の条件も満たさねばな

らず, エネルギー固有値および固有ベクトルの両方を求めるときには (NDCLRV + 1)×(MDCLRV + 1) ≥8×IBASE(NSB) の条件も満たさねばならない (A.1.2 節 [2] を参照).

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (作業領域; 8 バイト実数)

VECS(0:NDCLRS, 0:NVEC) (出力; 8 バイト実数)

NVEC 個の固有ベクトル. VECS(J, i−1) に VEC(J, i−1) と同じ値が返される. ここで, $J = 0, 1, \cdots,$ IBASE(NSB)−1, i=1, 2, ···, NVEC.

EIGN(0:NE−1) (出力; 8 バイト実数)

NE 個のエネルギー固有値. EIGN(i−1) に E(i) と同じ値が返される. ここで, i=1, 2, ···, NE.

IWK(0:NDCLRS) (作業領域; 4 バイト整数)

NDCLRS (入力; 4 バイト整数)

配列 ELMNT, VECS, IWK の整合寸法. NDCLRS ≥ IBASE(NSB) − 1 でなければならない.

[4] 1.3 節での処理 iv)

**CALL CRELMS(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,
ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, ELMNT, NDCLRS)**

ELMNT の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は CRESZ でのものと同じ. CRELMS から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CRELMS との間でそれらの値を変えてはならない. また, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, NDCLRS は SMALL でのものと同じ. CRELMS から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CRELMS との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM に等しい値が入っている.

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (出力; 8 バイト実数)

行列要素 $\langle\Phi(J')\,|\,\mathcal{H}\,|\,\Phi(J)\rangle$ が ELMNT(J', J) に返される (2.2 節および 2.2.1 節を参照). ここで, J, J'=0, 1, $\cdots$, IBASE(NSB)$-$1.

[5] 1.3 節での処理 v)

CALL CHECKS(ID, IS, ELMNT, IDIM, NDCLRS, VEC, NDCLRV, MDCLRV, HEXPC)

VEC(J, ID) ($J=0, 1, \cdots$, IDIM-1), HEXPC の計算を行う.

[引数]

NDCLRS, NDCLRV, MDCLRV は SMALL でのものと同じ. CHECKS から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CHECKS との間でそれらの値を変えてはならない. また, ELMNT は CRELMS でのものと同じ. CHECKS から見るときこの変数は入力変数であり, CRELMS と CHECKS との間でその値を変えてはならない. (SMALL の実行後, CHECKS を引用する前に CRELMS を実行しておかねばならない.)

ID (入力; 4 バイト整数)

$0 \le$ ID $\le$ NVEC (NVEC は 配列 VEC に与えられる固有ベクトルの個数で, 1≤NVEC≤IDIM を満たす) かつ ID$\neq$IS を満たす整数を与える. 下の VEC の項を参照すること.

IS (入力; 4 バイト整数)

精度を調べるエネルギー固有値および固有ベクトルの番号から 1 を引いた値を与える. $0 \le$ IS $\le$ NVEC-1 でなければならない. IS+1 番目のエネルギー固有値 E(IS+1) と $J(=0, 1, \cdots$, IDIM-1) 成分が VEC(J, IS) に与えられている固有ベクトル (IS+1 番目の固有ベクトル) の精度が調べられる.

IDIM (入力; 4 バイト整数)

行列の次元. NCONF を用いて計算した値 ([1] を参照) を変えてはならない.

VEC(0:NDCLRV, 0:MDCLRV) (入出力; 4 バイト整数)

SMALL を用いて計算した NVEC 個の固有ベクトル. エネルギー固有値 E(i) (i=1, 2, $\cdots$, NVEC) に対応する i 番目の固有ベクトル V_{i} の $J(=0, 1, \cdots$, IDIM-1) 成分 $\langle V_{\mathrm{i}} \,|\, \Phi(J)\rangle$ が VEC(J, i$-$1) に与えられる.

また, ハミルトニアンに IS+1 番目の固有ベクトルを掛けて得られるベクトルの J 成分 を IS+1 番目の固有ベクトルの J 成分で割った量 $\left\{\sum_{J'=0}^{\mathrm{IDIM}-1}\mathrm{ELMNT}(J, J')\times\mathrm{VEC}(J', \mathrm{IS})\right\}/\,\mathrm{VEC}(J, \mathrm{IS})$ (ただし, $|\mathrm{VEC}(J, \mathrm{IS})| \le 10^{-40}$ であれば 10^{40}) が VEC(J, ID) に返され, $J=$ MIN(IDIM/3, 13) から $J=$ IDIM-1 まで の VEC(J, ID) の値が MAX(1, IDIM/8) の間隔で印字される. CHECKS の実行後に, 与えられた NVEC 個の固有ベクトルの情報をすべて残しておくためには, ID に NVEC を与えておかねばならない.

HEXPC (出力; 8 バイト実数)

IS+1 番目の固有ベクトルによるハミルトニアンの期待値が返され, その値が印字される.

[使用上の注意]

SMALL で求めたエネルギー固有値 E(IS+1) と HEXPC の値とを比較することによって E(IS+1) の精度が分かる. また, SMALL で 求めた IS+1 番目の固有ベクトルの J 成分の精度は, VEC(J, ID) の値と HEXPC の値とを比較することによって調べることが出来る. 詳細については, CHECKM (3.2 節 [6]) の [使用上の注意] の項を参照されたい.

[6] 1.3 節での処理 vi)

相関関数などの物理量の計算を行うサブルーチン副プログラムについては 3.3 節で説明する.

3.2 中規模以上行列用ルーチン

小規模行列用ルーチンの場合と同様な系 (ただし, NS = 12) に対して, $m_{\rm total}=0$ の場合について, エネルギー固有値を基底状態に対するものを含めて小さい順に 4 個と基底状態の固有ベクトルとを求め, これらの精度のチェックを行い, 固有ベクトルのもつ並進対称性を調べ, スピン対相関関数とストリング相関関数とを計算するサンプルプログラムを ３７～３９頁に与える. ここで, 基底状態の固有ベクトルは Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法を用いて求めている. 今の場合, 基底状態はいわゆる Haldane 状態 [12] であり, この状態を表す固有ベクトルは $m_1=m_2=\cdots=m_{\rm NS}=0$ であるスピン配列に対する状態ベクトルと直交していないことが分かっている.[13] 従って, 副プログラム FIND0 (3.4 節 [1] を参照) を用いて求められるこのスピン配列の番号を Lanczös 法 の初期ベクトルを決める IV(1), IV(2), $\cdots$, IV(20) (3.2 節 [4] で述べる副プログラム LNCZM の引数 IV の項を参照) のいずれかに与えておくことにより, 基底状態のエネルギー固有値および固有ベクトルを正しく求めることが出来る（サンプルプログラムでは, ０７９０行で IV(1) にこの番号を与えている）.

他の系などに対して同様な計算を行うには, 3.2 節 [1]～[6], 3.3 節 [1]～[12], 3.4 節 [2], [3] で述べる副プログラムの説明に従って, 上記のサンプルプログラムにおける００６０行～０１２０行の PARAMETER 文, ０３７０行～０６１０行 の DATA 文および ０６２０ 行の文字代入文を変更すればよい. (用意されている副プログラムを用いて, ダイマー相関関数などの他の物理量も計算する場合には, 勿論, 相当する書き加えをしなければならない.) その為の参考に, このサンプルプログラムにおけるいくつかのパラメータの値の決め方を説明する. NS = 12, $m_{\rm total}=0$ の場合, 行列の次元 IDIM は 副プログラム NCONF (3.1 節 [1] を参照) を用いて計算すれば分かるように 73789 である. 従って, NDCLRV = 73788 としている. また, 固有ベクトルについては基底状態に対するもののみを Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法を用いて求めるため, NVEC = 1, MDCLRV = 3 としている. 更に, ここでは, NSLMAX の値として NS/2 = 6 を選んでいる. 全スピン数が 6 で, $m_{\rm total}=0$ の場合の行列の次元は, やはり NCONF を用いて計算すれば分かるように 141 であり, 従って, NDCLR1 = 140 としている. NDCLRD に与えるべき値は副プログラム ELMM (3.2 節 [3] を参照) の引数 NDCLRD の項に述べられている式から計算できる. 即ち, 今の場合, NSB = 12 で, I = 0, 1, $\cdots$, 11 に対して, それぞれ, $(\mu_{\rm L}^{\rm I},\mu_{\rm H}^{\rm I})=(0,12)$, (1, 11), (2, 10), (3, 9), (4, 8), (5, 7), (6, 6), (7, 5), (8, 4), (9, 3), (10, 2), (11, 1), (12, 0) であり, 従って, NCONF を用いて計算すれば分かるように, それぞれ, $n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})=n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I})=1$, 6, 21, 50, 90, 126, 141, 126, 90, 50, 21, 6, 1 である $\big(n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})$ の値はスピン数が NSLMAX で $m_{\rm total}=\mu_{\rm L}^{\rm I}-$NSLMAX のときの行列の次元 IDIM に他ならず, また, $n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I})$ の値はスピン数が NS$-$NSLMAX で $m_{\rm total}=\mu_{\rm H}^{\rm I}-$ (NS$-$NSLMAX) のときの IDIM に他ならない$\big)$. また, $\rm n_{b,L}=n_{b,H}=2$, MSGBC(2)='SYMM' である. これらより, NDCLRD$\geq$3644 が得られ, サンプルプログラムでは余裕を見て NDCLRD = 4000 としている. 更に NDCLRM に与えるべき値は ELMM の引数 NDCLRM の項に述べられている式から計算できる. 即ち, $\underline{\rm n}_{\rm LL}=5$, $\bar{\rm n}_{\rm LL}=0$, $f=1$, MSGBC(2)='SYMM' と上記の $n_{\rm L}(\mu_{\rm L}^{\rm I})$, $n_{\rm H}(\mu_{\rm H}^{\rm I})$, $\rm n_{b,L}$, $\rm n_{b,H}$ の値より NDCLRM$\geq$6560 が得られ, サンプルプログラムでは余裕を見て NDCLRM = 7000 としている.

NSLMAX $\big($Min(NS, 12)$\geq$NSLMAX$\geq$[(NS+1)/2]. ここで, $[\cdots]$ はガウス記号$\big)$ の値として [(NS+1)/2] に近い値を選ぶ程 0 でない行列要素の位置と値を格納するために必要となる主記憶中の領域が少なくて済む. しかし一方, 最も内側の DO ループのみしかベクトル化しない計算機を用いる場合には, NSLMAX の値を [(NS+1)/2] に近く選ぶと計算に要する時間が長くなる. 我々の経験によると, ACOS や SX を用い

る場合には NSLMAX＝[(NS+1)/2] とするのが最も効率的であるが, その他の計算機を用いる場合には, どのように NSLMAX の値を選ぶのがよいかについて, いくつかの例に対して中規模以上行列用ルーチンを実行させることにより, 各自で調べていただきたい.

このサンプルプログラムを実行させて得られた結果を４０頁に与える. この結果での４行目の最初の４個の数値は上記の４個のエネルギー固有値を示しており, 括弧内の数値は Lanczös 法 の収束に要したステップ数を示している. なお, 上記の理由により E(1) には基底状態のエネルギーが正しく求められているが, E(2), E(3), E(4) に, それぞれ, 小さい方から順に２番目, ３番目, ４番目のエネルギー固有値が正しく求められているという保証はない. このことを確かめるには, 何種類かの初期ベクトルに対して計算を行って, 結果をチェックすることが必要である (3.2 節 [4] で述べる副プログラム LNCZM の引数 E の項を参照). ７～１０行目には, 副プログラム CHECKM からの情報が出力されている. これらより, 求められた基底状態のエネルギー固有値の有効数字が少なくとも小数以下７桁であること, などが分かる. また, １４～２５行目の結果から, 基底状態の固有ベクトルが波数 $K=0$ の対称性をもっていることが分かる. 最後の１２行には J=1, 2, ⋯, 12 に対するスピン対相関関数 $\Delta\omega^z(1,\mathrm{J})=\omega^x(1,\mathrm{J})$ (TWO-SPIN の列) およびストリング相関関数 $\sigma^z(1,\mathrm{J})=\sigma^x(1,\mathrm{J})$ (STRING の列) に対する結果が出力されている.

４１頁以降に, 中規模以上行列用ルーチンを構成する各副プログラムの使用法を説明する.

[1] 1.4 節での処理 i)

3.1 節 [1] と同じである.

[2] 1.4 節での処理 ii)

3.1 節 [2] と同じである.

[3] 1.4 節での処理 iii)

CALL ELMM(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,
ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, LBOND,
NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM,
IBSPAIR, IBSPIN, NBSPIN, ELMNT, LOC, NDCLRM)

DIAG, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC の計算を行う. 以下での引数の説明は, 2.2.2 節の議論を参照しながら読んでいただきたい.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. ELMM から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と ELMM との間でそれらの値を変えてはならない. また, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD は 3.1 節 [3] の SMALL で説明したものと同じである.

MSGBC(2) (入力; 4 バイト文字)

部分系 L のハミルトニアンと部分系 H のハミルトニアンとが同じ形である場合, 即ち, NS が偶数, NSLMAX = NS/2 で, かつ, $\ell, \ell' = 1, 2, \cdots,$ 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, MSGBC(2) に 'SYMM' を与え, そうでない場合には, MSGBC(2) に 'SYMM' 以外の適当な 4 バイト文字定数 (例えば, 'NSYM') を与える. MSGBC(1) は使用していない (何を与えてもよいし, 何も与えなくてもよい).

DIAG(0:NDCLRD) (出力; 8 バイト実数)

部分系 X (X = L, H) に関する対角行列要素 $\langle \phi_{\mathrm{X}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{X}}, k_{\mathrm{X}}) | \mathcal{H}_{\mathrm{d,XX}} | \phi_{\mathrm{X}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{X}}, k_{\mathrm{X}}) \rangle$ の値および '境界サイト' $\ell_{\mathrm{b,X}}$ に関する $m_{\ell_{\mathrm{b,X}}}$ の値のすべて, または, それらの 1 部が返される (詳細は 2.2.2 節を参照).

NDCLRD (入力; 4 バイト整数)

DIAG の整合寸法. MSGBC(2)='SYMM' のとき

$$\mathrm{NDCLRD} \geq \sum_{\mathrm{I}=0}^{\mathrm{NSB}-1} \left[(1 + \mathrm{n_{b,L}}) \times n_{\mathrm{L}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}}) + \mathrm{n_{b,H}} \times n_{\mathrm{H}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}}) \right] - 1$$

であれば, また, MSGBC(2)≠'SYMM' のとき

$$\mathrm{NDCLRD} \geq \sum_{\mathrm{I}=0}^{\mathrm{NSB}-1} \left[(1 + \mathrm{n_{b,L}}) \times n_{\mathrm{L}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}}) + (1 + \mathrm{n_{b,H}}) \times n_{\mathrm{H}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}}) \right] - 1$$

であれば, DIAG に必要な値がすべて格納される.

LBOND(IBOND+6, 0:5) (出力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従って, LL-対に属するサイト対の番号が若い順に LBOND(1, 1), LBOND(2, 1), $\cdots$, LBOND($\mathrm{n_{LL}}$, 1) に返される. また, 同様に, HH-対に属するサイト対の番号が LBOND(1, 2), LBOND(2, 2), $\cdots$, LBOND($\mathrm{n_{HH}}$, 2) に返され, LH-対に属するサイト対の番号が LBOND(1, 3), LBOND(2, 3), $\cdots$, LBOND($\mathrm{n_{LH}}$, 3) に返される. (7) 式の例で, IPAIR を前述の通り

DATA IPAIR /1,2, 2,3, 3,4, 4,5, 5,6, 6,7, 7,8, 8,1, 12*0/

とし, かつ NSLMAX = 5 とすれば,

LBOND(1, 1)=1,   LBOND(2, 1)=2,   LBOND(3, 1)=3,   LBOND(4, 1)=4,

LBOND(1, 2)=6,   LBOND(2, 2)=7,

LBOND(1, 3)=5,   LBOND(2, 3)=8

が返される. IPAIR と LBOND を用いると, $p_{\mathrm{XX}}(=1, 2, \cdots, \mathrm{n_{XX}})$ (X = L, H) で指定される XX-対の両端のサイトの番号 ISITE1, ISITE2 が

ISITE1=IPAIR(2*LBOND(p_{XX}, 1)−1),

ISITE2=IPAIR(2*LBOND(p_{XX} ,1))

で与えられる.

NBOND(5) (出力; 4 バイト整数)

NBOND(1) に LL-対の数 $\mathrm{n_{LL}}$, NBOND(2) に HH-対の数 $\mathrm{n_{HH}}$, NBOND(3) に LH-対の数 $\mathrm{n_{LH}}$ が返される.

LBASE(0:2*NSLMAX, IBOND+NS, 2) (出力; 4 バイト整数)

IFLGDELM(I, 1)=1 である I に対して, $\langle\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},0)\,|\,\mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}}\,|\,\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},0)\rangle$ 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) が LBASE(I, 1, 1) に返され, 同様に, IFLGDELM(I, 2)=1 である I に対して, $\langle\phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},0)\,|\,\mathcal{H}_{\mathrm{d,HH}}\,|\,\phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},0)\rangle$ が格納されている DIAG の配列要素番号が LBASE(I, 2, 1) に返される. 更に, IFLGDELM(I, 2+p_{LH})=1 である I, p_{LH} に対して, その p_{LH} で指定される LH-対の部分系 L 側の '境界サイト' に関する $\langle\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},0)\,|\,S^z_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\,|\,\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},0)\rangle$ ($k_{\mathrm{L}}=0$ に対する $m_{\ell_{\mathrm{b,L}}}$) が格納されている DIAG の配列要素番号が LBASE(I, 2+p_{LH}, 1) に返され, また, その LH-対の部分系 H 側の '境界サイト' に関する $\langle\phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},0)\,|\,S^z_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\,|\,\phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},0)\rangle$ ($k_{\mathrm{H}}=0$ に対する $m_{\ell_{\mathrm{b,H}}}$) が格納されている DIAG の配列要素番号が LBASE(I, 2+p_{LH}, 2) に返される.

MBASE(0:2*NSLMAX, IBOND+NS, 6) (出力; 4 バイト整数)

与えられた $p_{\mathrm{LL}}(=1, 2, \cdots, \mathrm{n_{LL}})$ で指定される LL-対 について, $J^x_{\ell,\ell'}=K_{\ell,\ell'}=0$ であれば 0, $J^x_{\ell,\ell'}\neq 0$ かつ $K_{\ell,\ell'}=0$ であれば 1, $K_{\ell,\ell'}\neq 0$ であれば 2 がすべての I (=0, 1, $\cdots$, NSB−1) に対する MBASE(I, LBOND(p_{LL}, 1), 3) に返される. IFLGOELM(I, LBOND(p_{LL}, 1))=1 である I, p_{LL} に対して, $\langle\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{L}}^{\prime(1)})\,|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o,LL}}\,|\,\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},0)\rangle$ が格納されている ELMNT の配列要素番号 (DIAG(i)=$\langle\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{L}}^{\prime(1)})\,|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o,LL}}\,|\,\phi_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},0)\rangle$ である i の値) および $k_{\mathrm{L}}=0$ に対する $k_{\mathrm{L}}^{\prime(1)}$ が格納されている LOC の配列要素番号が, それぞれ, MBASE(I, LBOND(p_{LL}, 1), 1) および MBASE(I, LBOND(p_{LL}, 1), 2) に返される.

また, 与えられた $p_{\mathrm{HH}}(=1, 2, \cdots, \mathrm{n_{HH}})$ で指定される HH-対 について, $J^x_{\ell,\ell'}=K_{\ell,\ell'}=0$ であれば 0, $J^x_{\ell,\ell'}\neq 0$ かつ $K_{\ell,\ell'}=0$ であれば 1, $K_{\ell,\ell'}\neq 0$ であれば 2 がすべての I に対する MBASE(I, LBOND(p_{HH}, 2), 3) に返される. IFLGOELM(I, LBOND(p_{HH}, 2))=1 である I, p_{HH} に対して, $\langle\phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{H}}^{\prime(1)})\,|\,\mathcal{H}_{\mathrm{o,HH}}\,|\,\phi_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},0)\rangle$ が格納されている ELMNT の配列要素番号 および $k_{\mathrm{H}}=0$ に対

する $k_{\mathrm{H}}^{\prime(1)}$ が格納されている LOC の配列要素番号が, それぞれ, MBASE(I, LBOND(p_{HH}, 2), 1) および MBASE(I, LBOND(p_{HH}, 2), 2) に返される.

更に, case (a) であればすべての I, p_{LH}(=1, 2, ⋯, n$_{\mathrm{LH}}$) に対する MBASE(I, LBOND(p_{LH}, 3), 3) および MBASE(I, LBOND(p_{LH}, 3), 6) に 1 が返され, case (b) であればすべての I, p_{LH} に対する MBASE(I, LBOND(p_{LH}, 3), 3) および MBASE(I, LBOND(p_{LH}, 3), 6) に 4 が返される. (case (a) はすべての LH-対 に対して $K_{\ell_{\mathrm{b,L}},\ell_{\mathrm{b,H}}}=0$ である場合であり, case (b) はそれ以外の場合である.) IFLGOELM(I, LBOND(p_{LH}, 3))=1 である I, p_{LH} に対して, その p_{LH} で指定される LH-対の L 側の '境界サイト' に関する $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}'},k_{\mathrm{L}}^{\prime(1),1}\big)\,\big|\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\,\big|\,\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},0\big)\big\rangle$ が格納されている ELMNT の配列要素番号およびその '境界サイト' に関する $k_{\mathrm{L}}=0$ に対する $k_{\mathrm{L}}^{\prime(1),1}$ が格納されている LOC の配列要素番号が, それぞれ, MBASE(I, LBOND(p_{LH}, 3), 1) および MBASE(I, LBOND(p_{LH}, 3), 2) に返される. IFLGOELM(I, LBOND(p_{LH}, 3))=1 である I, p_{LH} に対して, その p_{LH} で指定される LH-対の H 側の '境界サイト' に関する $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}'},k_{\mathrm{H}}^{\prime(1),1}\big)\,\big|\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\,\big|\,\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},0\big)\big\rangle$ が格納されている ELMNT の配列要素番号およびその '境界サイト' に関する $k_{\mathrm{H}}=0$ に対する $k_{\mathrm{H}}^{\prime(1),1}$ が格納されている LOC の配列要素番号が, それぞれ, MBASE(I, LBOND(p_{LH}, 3), 4) および MBASE(I, LBOND(p_{LH}, 3), 5) に返される.

IFLGDELM(0:2*NSLMAX, IBOND+NS) (出力; 4 バイト整数)

与えられた I(= 0, 1, ⋯, NSB−1) について, 部分系 L に関する対角行列要素 $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{L}}\big)\,\big|\,\mathcal{H}_{\mathrm{d,LL}}\,\big|\,\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$ $\big(k_{\mathrm{L}}=0,\,1,\,\cdots,\,n_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}})-1\big)$ がすべて DIAG に格納されているとき, IFLGDELM(I, 1) に 1 が返され, そうでないとき, IFLGDELM(I, 1) に 0 が返される. また, 与えられた I について, 部分系 H に関する対角行列要素 $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{H}}\big)\big|\mathcal{H}_{\mathrm{d,HH}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$ $\big(k_{\mathrm{H}}=0,\,1,\,\cdots,\,n_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}})-1\big)$ がすべて DIAG に格納されているとき, IFLGDELM(I, 2) に 1 が返され, そうでないとき, IFLGDELM(I, 2) に 0 が返される. 更に, 与えられた I について, p_{LH}(=1, 2, ⋯, n$_{\mathrm{LH}}$) で指定される LH-対の部分系 L および H 側の '境界サイト' に対する $m_{\ell_{\mathrm{b,X}}}$ $\big(k_{\mathrm{X}}=0,\,1,\,\cdots,\,n_{\mathrm{X}}(\mu_{\mathrm{X}}^{\mathrm{I}})-1;\ \mathrm{X}=\mathrm{L,\,H}\big)$ がすべて DIAG に格納されているとき, IFLGDELM(I, 2+p_{LH}) に 1 が返され, そうでないとき, IFLGDELM(I, 2+p_{LH}) に 0 が返される.

IFLGOELM(0:2*NSLMAX, IBOND+NS) (出力; 4 バイト整数)

MBASE(I, LBOND(p_{LL}, 1), 3)=1 or 2 である I および p_{LL} について, すべての $k_{\mathrm{L}}\big(=0,1,\cdots,n_{\mathrm{L}}(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}})-1\big)$ に対する $k_{\mathrm{L}}^{\prime(1)}$, $k_{\mathrm{L}}^{\prime(2)}$ (その p_{LL} で指定される LL-対について $J^{x}_{\ell,\ell'}\neq0$ かつ $K_{\ell,\ell'}=0$ であれば前者のみ) が LOC に格納され, かつ, すべての k_{L} に対する $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{L}}^{\prime(1)}\big)\big|h_{\mathrm{o}}^{(1)}(\ell,\ell')\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{L}}^{\prime(2)}\big)\big|h_{\mathrm{o}}^{(2)}(\ell,\ell')\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu_{\mathrm{L}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$ ($J^{x}_{\ell,\ell'}\neq0$ かつ $K_{\ell,\ell'}=0$ であれば前者のみ) が ELMNT に格納されているとき, IFLGOELM(I, LBOND(p_{LL}, 1)) に 1 が返され, そうでないとき, IFLGOELM(I, LBOND(p_{LL}, 1)) に 0 が返される.

また, MBASE(I, LBOND(p_{HH}, 2), 3)=1 or 2 である I および p_{HH} について, すべての $k_{\mathrm{H}}\big(=0,\,1,\,\cdots,\,n_{\mathrm{H}}(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}})-1\big)$ に対する $k_{\mathrm{H}}^{\prime(1)}$, $k_{\mathrm{H}}^{\prime(2)}$ (その p_{HH} で指定される HH-対について $J^{x}_{\ell,\ell'}\neq0$ かつ $K_{\ell,\ell'}=0$ であれば前者のみ) が LOC に格納され, かつ, すべての k_{H} に対する $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{H}}^{\prime(1)}\big)\big|h_{\mathrm{o}}^{(1)}(\ell,\ell')\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{H}}^{\prime(2)}\big)\big|h_{\mathrm{o}}^{(2)}(\ell,\ell')\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu_{\mathrm{H}}^{\mathrm{I}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$ ($J^{x}_{\ell,\ell'}\neq0$ かつ $K_{\ell,\ell'}=0$ であれば前者のみ) が ELMNT に格納されているとき, IFLGOELM(I, LBOND(p_{HH}, 2)) に 1 が返され, そうでないとき, IFLGOELM(I, LBOND(p_{HH}, 2)) に 0 が返される.

更に, 与えられた I および p_{LH}(=1, 2, ⋯, n$_{\mathrm{LH}}$) で指定された LH-対 について, その両側の '境界サイト' $\ell_{\mathrm{b,X}}$ (X=L, H) およびすべての $k_{\mathrm{X}}\big(=0,1,\cdots,n_{\mathrm{X}}(\mu_{\mathrm{X}}^{\mathrm{I}})-1\big)$ に対する $k_{\mathrm{X}}^{\prime(1),1}$, $k_{\mathrm{X}}^{\prime(1),2}$, $k_{\mathrm{X}}^{\prime(1),3}$, $k_{\mathrm{X}}^{\prime(2),1}$ (case (a)

の場合には $k'^{(1),1}_{\mathrm{X}}$ のみ$\big)$ が LOC に格納され, かつ, 両側の '境界サイト' およびすべての k_{X} に対する $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}S^{z}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{2}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}S^{z}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{2}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$ (case (a) であれば $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$ のみ$\big)$ が ELMNT に格納されているとき, IFLGOELM(I, LBOND(p_{LH}, 3)) に 1 が返され, そうでないとき, IFLGOELM(I, LBOND(p_{LH}, 3)) に 0 が返される.

IBSPAIR(2*IBOND+12) (作業領域; 4 バイト整数)

IBSPIN(IBOND+6, 2) (作業領域; 4 バイト整数)

NBSPIN(2) (作業領域; 4 バイト整数)

ELMNT(0:NDCLRM) (出力; 8 バイト実数)

部分系 X (X = L, H) に関する $\big\langle\phi_{\mathrm{X}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{X}},k'^{(1)}_{\mathrm{X}}\big)\big|h^{(1)}_{\mathrm{o}}(\ell,\ell')\big|\phi_{\mathrm{X}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{X}},k_{\mathrm{X}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{X}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{X}},k'^{(2)}_{\mathrm{X}}\big)\big|h^{(2)}_{\mathrm{o}}(\ell,\ell')\big|\phi_{\mathrm{X}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{X}},k_{\mathrm{X}}\big)\big\rangle$ の値 $\big(k'^{(1)}_{\mathrm{X}}$, $k'^{(2)}_{\mathrm{X}}$ が存在しない場合の値は 0 と見なす$\big)$, '境界サイト' $\ell_{\mathrm{b,L}}$ に関する $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'^{(1),1}_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'^{(1),2}_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}S^{z}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'^{(1),3}_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{L}},k'^{(2),1}_{\mathrm{L}}\big)\big|\frac{1}{2}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}S^{+}_{\ell_{\mathrm{b,L}}}\big|\phi_{\mathrm{L}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}},k_{\mathrm{L}}\big)\big\rangle$ の値 $\big(k'^{(1),1}_{\mathrm{L}}$, $k'^{(1),2}_{\mathrm{L}}$, $k'^{(1),3}_{\mathrm{L}}$, $k'^{(2),1}_{\mathrm{L}}$ が存在しない場合の値は 0 と見なす$\big)$, および '境界サイト' $\ell_{\mathrm{b,H}}$ に関する $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'^{(1),1}_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'^{(1),2}_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}S^{z}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'^{(1),3}_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{\sqrt{2}}S^{z}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$, $\big\langle\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{H}},k'^{(2),1}_{\mathrm{H}}\big)\big|\frac{1}{2}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}S^{-}_{\ell_{\mathrm{b,H}}}\big|\phi_{\mathrm{H}}\big(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}},k_{\mathrm{H}}\big)\big\rangle$ の値 $\big(k'^{(1),1}_{\mathrm{H}}$, $k'^{(1),2}_{\mathrm{H}}$, $k'^{(1),3}_{\mathrm{H}}$, $k'^{(2),1}_{\mathrm{H}}$ が存在しない場合の値は 0 と見なす$\big)$ のすべて, または, それらの 1 部が返される (詳細は 2.2.2 節を参照).

LOC(0:NDCLRM) (出力; 4 バイト整数)

部分系 X (X = L, H) に関する $k'^{(1)}_{\mathrm{X}}$, $k'^{(2)}_{\mathrm{X}}$ の値 $\big(k'^{(1)}_{\mathrm{X}}$, $k'^{(2)}_{\mathrm{X}}$ が存在しない場合の値は −1 と見なす$\big)$ および '境界サイト' $\ell_{\mathrm{b,X}}$ に関する $k'^{(1),1}_{\mathrm{L}}$, $k'^{(1),2}_{\mathrm{L}}$, $k'^{(1),3}_{\mathrm{L}}$, $k'^{(2),1}_{\mathrm{L}}$ の値 $\big(k'^{(1),1}_{\mathrm{X}}$, $k'^{(1),2}_{\mathrm{X}}$, $k'^{(1),3}_{\mathrm{X}}$, $k'^{(2),1}_{\mathrm{X}}$ が存在しない場合の値は −1 と見なす$\big)$ のすべて, または, それらの 1 部が返される (詳細は 2.2.2 節を参照).

NDCLRM (入力; 4 バイト整数)

ELMNT および LOC の整合寸法. MSGBC(2)='SYMM' のとき

$$\mathrm{NDCLRM} \geq \sum_{\mathrm{I}=0}^{\mathrm{NSB}-1}\big[\big(\underline{\mathrm{n}}_{\mathrm{LL}}+2\times\bar{\mathrm{n}}_{\mathrm{LL}}+f\times\mathrm{n}_{\mathrm{b,L}}\big)\times n_{\mathrm{L}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}})+f\times\mathrm{n}_{\mathrm{b,H}}\times n_{\mathrm{H}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}})\big]-1$$

であれば, また, MSGBC(2)≠'SYMM' のとき

$$\mathrm{NDCLRM} \geq \sum_{\mathrm{I}=0}^{\mathrm{NSB}-1}\big[\big(\underline{\mathrm{n}}_{\mathrm{LL}}+2\times\bar{\mathrm{n}}_{\mathrm{LL}}+f\times\mathrm{n}_{\mathrm{b,L}}\big)\times n_{\mathrm{L}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{L}})+\big(\underline{\mathrm{n}}_{\mathrm{HH}}+2\times\bar{\mathrm{n}}_{\mathrm{HH}}+f\times\mathrm{n}_{\mathrm{b,H}}\big)\times n_{\mathrm{H}}(\mu^{\mathrm{I}}_{\mathrm{H}})\big]-1$$

であれば, ELMNT および LOC に必要な値がすべて格納される. ここで, $\underline{\mathrm{n}}_{\mathrm{XX}}$, $\bar{\mathrm{n}}_{\mathrm{XX}}$ (X = L, H) は, それぞれ, $K_{\ell,\ell'}=0$, $K_{\ell,\ell'}\neq 0$ である XX-対の数 ($\underline{\mathrm{n}}_{\mathrm{XX}}+\bar{\mathrm{n}}_{\mathrm{XX}}=\mathrm{n}_{\mathrm{XX}}$) を表し, f は case (a) の場合 1 に等しく, case (b) の場合 4 に等しい定数である.

[4] 1.4 節での処理 iv)

CALL LNCZM(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, VEC, NDCLRV, MDCLRV, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM, NVEC, IV, E, ITR)

E, ITR の計算を行う. また, 1≤NVEC≤4 の場合, 即ち, LNCZMINV で固有ベクトルの計算も行う場合には, その計算の為に必要なデータを内部で定義されているコモンブロック (common block) /VECDAT/ 中の COEF に書き込む.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は CRESZ でのものと同じ. LNCZM から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と LNCZM との間でそれらの値を変えてはならない. また, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM は ELMM でのものと同じ. LNCZM から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, ELMM と LNCZM との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM に等しい値が入っている.

VEC(0:NDCLRV, 0:MDCLRV) (作業領域; 8 バイト実数)

NDCLRV (入力; 4 バイト整数)

VEC の整合寸法. NDCLRV ≥ IBASE(NSB) − 1 でなければならない.

MDCLRV (入力; 4 バイト整数)

VEC の整合寸法. MDCLRV ≥ 1 でなければならない.

NVEC (入力; 4 バイト整数)

次の処理 v) で LNCZMINV を用いて求める固有ベクトルの個数. 0 ≤ NVEC ≤ 4 でなければならない. NVEC に 0 を与えると, エネルギー固有値のみが求められる.

IV(20) (入力; 4 バイト整数)

Lanczös 法 の初期ベクトル V_{initial} において有限の大きさをもつ成分の番号, 即ち, $\langle V_{\mathrm{initial}} \,|\, \Phi(J)\rangle \neq 0$ である J の値 (2.1 節および 2.2 節を参照) を IV(1), IV(2), ···, IV(20) に与える (与え方の順序はどうでもよい). すべての IV(i) に, お互いに異なった 0 ≤ IV(i) ≤ IBASE(NSB) − 1 を満たす値を与えれば, 有限な大きさの成分を２０個とることになる. 有限な大きさの成分の数をより少なくするには, 余分な IV(i) に −1 以下または IBASE(NSB) 以上の値を与えればよい. なお, すべての IV(i) に −1 以下または IBASE(NSB) 以上の値を与えると, ランダムに選ばれた 0 ≤ IV(i) ≤ IBASE(NSB) − 1 を満たす値がすべての IV(i) に与え直される (A.2.3 節 [1-1] での下位ルーチン VECINI の [引数] の項を参照).

E(4) (出力; 8 バイト実数)

IV(1), IV(2), ···, IV(20) を与えて決められた初期ベクトル V_{initial} と直交していない固有ベクトルをもつ状態のエネルギー固有値が, 小さい順に 4 個, E(1), E(2), E(3), E(4) に返される. 即ち, 例えば, E(1)

に対角化しようとしている行列の最低エネルギーが返される為には, V_{initial} が最低エネルギーに対応する固有ベクトルと直交していないことが必要である. 従って, 何種類かの初期ベクトルに対して E(1), E(2), E(3), E(4) の計算を行って, 結果をチェックすることを勧める. なお, 下記の [使用上の注意] の項で述べるように, 見かけ上の縮退が生じていることがある. また, ITR の項を参照されたい.

ITR (出力; 4 バイト整数)

Lanczös 法 の収束のチェックを, ２５ステップ目から始めて５ステップごとに行い, [使用上の注意] の項で述べる収束条件が満たされるまでのチェックの回数に 4 を加えた値が ITR に返される. 即ち, 収束に要したステップ数は, 返される ITR の値の 5 倍になっている. ITR が 200 を越しても収束が完了しないときには, ITR に 200 が返され, また, １０００ステップ終了時でのエネルギー固有値の近似値が, 小さい順に 4 個, E(1), E(2), E(3), E(4) に返される. 更に, エラーメッセージ W13 (§4 を参照) が出力される.

Lanczös 法による 3 重対角化が, 副対角要素が小さくなりすぎたために失敗した場合には, ITR に負の整数値が返され, エラーメッセージ W18 (§4 を参照) が出力される. この場合に返される E(i) (i=1, 2, 3, 4) の値は意味をもたない. また, ACOS および SX 用の版においては, 3 重対角行列を対角化するための, 科学技術計算ライブラリ ASL 中のサブルーチン副プログラム DCSTSN, DCSTSS (A.2.3 節 [1-4] を参照) が異常終了した場合にも, ITR に負の整数値が返され, それぞれ, エラーメッセージ W19, W20 (§4 を参照) が出力される. この場合にも, 返される E(i) (i=1, 2, 3, 4) の値は意味をもたない.

[使用上の注意]

E(2) が 10^{-13} の相対誤差で収束したときに収束条件が満たされたとして, 処理を終了する. Lanczös 法の特性として，E(1) は安定して求まるが, E(2) 以上は丸め誤差の影響によって縮退のない場合でも見かけ上の縮退 (最低エネルギーの状態に縮退がないのに E(2)＝E(1) となることなど) を生ずることがある. 収束の判定を E(2) で行っているのは, E(3) あるいは E(4) にある程度以上の精度を要求して収束判定すると, 反復数が増し, そのために丸め誤差の影響で見かけの縮退がより多く生じてしまう場合があるためである. 従って, E(3), E(4) の値を利用するときは, CHECKM を用いてそれらの精度を確認しておくことが望ましい. E(1), E(2) の精度は, 通常少なくとも１０桁程度はあるが, それらの詳細や上記の収束条件が満たされずに処理が打ち切られたときの E(1), E(2) の精度も CHECKM を用いて調べることが出来る. なお, E(1)≠E(2) であっても最低エネルギーの状態に縮退ないとは限らないことなどもあり, 注意を要する. (この項, TITPACK Version 2 の操作説明書 [3)] による.)

[5] 1.4 節での処理 v)

CALL LNCZMINV(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, VEC, NDCLRV, MDCLRV, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM, NVEC, IV, E, ITR)

VEC の計算を行う. なお, ITR<0 のときには, LNCZMINV を引用しても意味がない.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は CRESZ でのものと同じ. LNCZMINV から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と LNCZMINV との間でそれらの値を変えてはならない. また, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM は ELMM でのものと同じ. LNCZMINV から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, ELMM と LNCZMINV との間でそれらの値を変えてはならない. NDCLRV, IV, E, ITR は LNCZM でのものと同じ. LNCZMINV から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZM と LNCZMINV との間で NDCLRV, IV, ITR の値を変えてはならない. エネルギー固有値 E については LNCZM で求めた値を変えないことを原則とするが, E(i) に対応する固有ベクトルを Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法を用いて計算する場合 (下記の引数 MDCLRV の項を参照) に限り, LNCZM で求めた値に比べて精度の良い E(i) の値を LNCZMINV に与えれば, 逆反復法の収束が速くなり, より少ない反復回数で良い精度の固有ベクトルを得ることが出来る. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM に等しい値が入っている.

VEC(0:NDCLRV, 0:MDCLRV) (出力および作業領域; 8 バイト実数)

NVEC 個の固有ベクトル. エネルギー固有値 E(i) (i=1, 2, ⋯, NVEC) に対応する i 番目の固有ベクトル $V_{\rm i}$ の J(=0, 1, ⋯, IBASE(NSB)−1) 成分 $\langle V_{\rm i} \,|\, \Phi(J) \rangle$ が VEC(J, i−1) に返される.

Lanczös 法のみを用いて固有ベクトルを計算する場合には VEC(J, NVEC), VEC(J, NVEC+1) $\big(J = 0,\ 1,\ \cdots,\ \mathrm{IBASE(NSB)}-1\big)$ が, また, Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法を用いて固有ベクトルを計算する場合には, VEC(J, NVEC), VEC(J, NVEC+1), VEC(J, NVEC+2) $\big(J = 0,\ 1,\ \cdots,\ \mathrm{IBASE(NSB)}-1\big)$ が作業領域として使用される (MDCLRV の項を参照).

MDCLRV (入力; 4 バイト整数)

VEC の整合寸法. MDCLRV ≥ NVEC + 1 でなければならない. MDCLRV = NVEC + 1 のとき Lanczös 法のみを用いて固有ベクトルが計算され, MDCLRV ≥ NVEC + 2 のとき Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法を用いて固有ベクトルが計算される.

NVEC (入力; 4 バイト整数)

求めたい固有ベクトルの個数. 1 ≤ NVEC ≤ 4 でなければならず, LNCZM で与えた値と同じでなければならない.

[使用上の注意]

与えられた NVEC に対してあらかじめ LNCZM が実行され, 固有ベクトルを計算する際に必要となるデータがコモンブロック (common block) /VECDAT/ 中の COEF に書き込まれている必要がある. MDCLRV$\geq$NVEC+2 であれば, Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法を用いて固有ベクトルを計算し, MDCLRV=NVEC+1 であれば Lanczös 法のみを用いて固有ベクトルを計算する. CHECKM を用いると得られた結果の精度を確認することが出来る. Lanczös 法のみを用いる場合, エネルギー固有値 E(1) に対応する固有ベクトルの精度は通常 6 桁程度であり, E(2), E(3), E(4) に対応する固有ベクトルの精度はそれより悪い. 一方, Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法を用いる場合は, より多くの記憶容量とより長い計算時間を必要とするが, 得られる固有ベクトルの精度は Lanczös 法のみを用いて得られるものより数桁以上良く, 典型的には, 有効数字は８ないし１０桁程度である. ただし, スピン数 NS が大きくなると, E(3), E(4) に対応する固有ベクトルの精度は悪くなる. また, 逆反復法が１５回以内で精度 0.5×10^{-11} 以内に収束しなかったときには, E(1) に対応する固有ベクトルに対しても精度の悪い結果が返され, 同時にエラーメッセージ W21 (§4 を参照) が出力される. この際の固有ベクトルの精度も, 勿論, CHECKM を用いて確認することが出来る. (この項の一部は TITPACK Version 2 の操作説明書 [3)] による.)

[6] 1.4 節での処理 vi)

CALL CHECKM(ID, IS, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,
ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, VEC,
NDCLRV, MDCLRV, LBOND, NBOND, LBASE,
MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT,
LOC, NDCLRM, HEXPC)

VEC(J, ID) ($J=0, 1, \cdots$, IBASE(NSB)-1), HEXPC の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は CRESZ でのものと同じ. CHECKM から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CHECKM との間でそれらの値を変えてはならない. また, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD,LBOND, NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM は ELMM でのものと同じ. CHECKM から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, ELMM と CHECKM との間でそれらの値を変えてはならない. NDCLRV は LNCZM でのものと同じ. CHECKM から見るときこの変数は入力変数であり, LNCZM と CHECKM との間でその値を変えてはならない. MDCLRV は LNCZMINV でのものと同じ. CHECKM から見るときこの変数は入力変数であり, LNCZMINV と CHECKM との間でその値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM に等しい値が入っている.

ID (入力; 4 バイト整数)

$0 \leq$ ID $\leq$ NVEC (NVEC は 配列 VEC に与えられる固有ベクトルの個数で, 1≤NVEC≤4 を満たす) かつ ID$\neq$IS を満たす整数を与える. 下の VEC の項を参照すること.

IS (入力; 4 バイト整数)

精度を調べるエネルギー固有値および固有ベクトルの番号から 1 を引いた値を与える. $0 \leq$ IS $\leq$ NVEC-1 でなければならない. IS+1 番目のエネルギー固有値 E(IS+1) と $J(=0, 1, \cdots$, IBASE(NSB)-1) 成分が VEC(J, IS) に与えられている固有ベクトル (IS+1 番目の固有ベクトル) の精度が調べられる.

VEC(0:NDCLRV, 0:MDCLRV) (入出力; 4 バイト整数)

LNCZMINV を用いて計算した NVEC 個の固有ベクトル. エネルギー固有値 E(i) (i=1, 2, $\cdots$, NVEC) に対応する i 番目の固有ベクトル V_{i} の $J(=0, 1, \cdots$, IBASE(NSB)-1) 成分 $\langle V_{\mathrm{i}} | \Phi(J) \rangle$ が VEC(J, i-1) に与えられる.

また, ハミルトニアンに IS+1 番目の固有ベクトルを掛けて得られるベクトルの J 成分 を IS+1 番目の固有ベクトルの J 成分で割った量 $\left\{\sum_{J'=0}^{\mathrm{IBASE(NSB)}-1} \mathrm{ELMNT}(J, J') \times \mathrm{VEC}(J', \mathrm{IS})\right\} / \mathrm{VEC}(J, \mathrm{IS})$ $\big($ただし, $|\mathrm{VEC}(J, \mathrm{IS})| \leq 10^{-40}$ であれば $10^{40}\big)$ が VEC(J, ID) に返され, $J=13$ から $J=$IBASE(NSB)-1 までの VEC(J, ID) の値が IDIM/8 の間隔で印字される. CHECKM の実行後に, 与えられた NVEC 個の固有ベクトルの情報をすべて残しておくためには, ID に NVEC を与えておかなければならない.

HEXPC (出力; 8 バイト実数)

IS+1 番目の固有ベクトルによるハミルトニアンの期待値が返され, その値が印字される.

[使用上の注意]

LNCZM で求めたエネルギー固有値 E(IS+1) と HEXPC の値とを比較することによって E(IS+1) の精度が分かる. 一般的に云って, HEXPC の方が E(IS+1) より精度が高いが,[3] いずれにしろ, 少なくとも両者が一致する桁までがエネルギー固有値の有効数字であると云える. 一方, LNCZMINV で求めた IS+1 番目の固有ベクトルの J 成分の精度は, VEC(J, ID) の値と HEXPC の値とを比較することによって調べることが出来る. |VEC(J, IS)| の値が小さい成分については, 一般的に云って, その値の精度は悪いが, 物理量を求めるに当たって, このような成分からの寄与は小さく, この精度の悪さが必ずしも障害になることはない. 例えば, VEC(10, IS) = 1.23456789D−10, VEC(20, IS) = 9.0D−20 のとき, 後者の有効数字が 2 桁であっても, IS+1 番目のベクトルを使って得られる物理量の有効数字としては, VEC(20, IS) 以外が VEC(10, IS) と同じ程度の有効数字をもつ限り, VEC(10, IS) より得られる結果と同程度のものが期待できる. (この項, TITPACK Version 2 の操作説明書 [3] による.)

[7] 1.4 節での処理 vii)

相関関数などの物理量の計算を行うサブルーチン副プログラムについては 3.3 節で説明する.

[1] s_ℓ^z, $\omega^x(\ell,\ell')$, $\Delta\omega^z(\ell,\ell')$, t_ℓ, $\Delta\tau(\ell,\ell')$ $\big($(2), (3), (5) 式を参照$\big)$ の計算.

**CALL CRFNST1(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS,
ISITE, JSITE, SZIAV, SZJAV, TPIAV, TPJAV,
CFSXIJ, CFSZIJ, CFTPPIJ)**

SZIAV, SZJAV, TPIAV, TPJAV, CFSXIJ, CFSZIJ, CFTPPIJ の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. CRFNST1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CRFNST1 との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. CRFNST1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CRFNST1 との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. CRFNST1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と CRFNST1 との間でそれらの値を変えてはならない.

ISS (入力; 4 バイト整数)
期待値を計算する固有ベクトルの番号から 1 を引いた値を与える. $J(=0, 1, \cdots,$ IBASE(NSB)$-1)$ 成分が VEC(J, ISS) に与えられている固有ベクトル (ISS+1 番目の固有ベクトル) による期待値が計算される. このベクトルを, 小規模行列用ルーチンにおいては 3.1 節 [5] の CHECKS を用いて, また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては 3.2 節 [6] の CHECKM を用いて, あらかじめチェックしておくことを勧める.

ISITE (入力; 4 バイト整数)
サイトの番号 ℓ.

JSITE (入力; 4 バイト整数)
サイトの番号 ℓ'.

SZIAV (出力; 8 バイト実数)
s_ℓ^z の値が返される.

SZJAV (出力; 8 バイト実数)
$s_{\ell'}^z$ の値が返される.

TPIAV (出力; 8 バイト実数)
t_ℓ の値が返される.

TPJAV (出力; 8 バイト実数)
$t_{\ell'}$ の値が返される.

CFSXIJ (出力; 8 バイト実数)
$\omega^x(\ell,\ell')$ の値が返される.

CFSZIJ (出力; 8 バイト実数)

$\Delta\omega^z(\ell,\ell')$ の値が返される.

CFTPPIJ (出力; 8 バイト実数)

$\Delta\tau(\ell,\ell')$ の値が返される.

[2] s^z_ℓ, $\omega^x(\ell,\ell')$, $\Delta\omega^z(\ell,\ell')$ $\big($(2), (3) 式を参照$\big)$ の計算.

**CALL CRFNS1(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS,
ISITE, JSITE, SZIAV, SZJAV, CFSXIJ, CFSZIJ)**

SZIAV, SZJAV, CFSXIJ, CFSZIJ の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. CRFNS1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CRFNS1 との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. CRFNS1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CRFNS1 との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. CRFNS1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と CRFNS1 との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE, SZIAV, SZJAV, CFSXIJ, CFSZIJ は CRFNST1 でのものと同じ.

[3] t_ℓ, $\Delta\tau(\ell,\ell')$ $\big($(5) 式を参照$\big)$ の計算.

**CALL CRFNT1(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS,
ISITE, JSITE, TPIAV, TPJAV, CFTPPIJ)**

TPIAV, TPJAV, CFTPPIJ の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. CRFNT1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CRFNT1 との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. CRFNT1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CRFNT1 との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. CRFNT1 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と CRFNT1 との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE, TPIAV, TPJAV, CFTPPIJ は CRFNST1 でのものと同じ.

[4] s_ℓ^z $\bigl($(3) 式を参照$\bigr)$ の計算.

CALL AVRGSI(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS, ISITE, SZIAV)

SZIAV の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. AVRGSI から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と AVRGSI との間でそれらの値を変えてはならない. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. AVRGSI から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と AVRGSI との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. AVRGSI から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と AVRGSI との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, SZIAV は CRFNST1 でのものと同じ.

[5] t_ℓ $\bigl($(5) 式を参照$\bigr)$ の計算.

CALL AVRGTI(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS, ISITE, TPIAV)

TPIAV の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. AVRGTI から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と AVRGTI との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. AVRGTI から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と AVRGTI との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. AVRGTI から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と AVRGTI との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, TPIAV は CRFNST1 でのものと同じ.

[6] $\omega^x(\ell,\ell')$, s^z_ℓ を与えた上での $\Delta\omega^z(\ell,\ell')$, および t_ℓ を与えた上での $\Delta\tau(\ell,\ell')$ $\big($(2), (3), (5) 式を参照$\big)$ の計算.

CALL CRFNST2(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS, ISITE, JSITE, SZIAV, SZJAV, TPIAV, TPJAV, CFSXIJ, CFSZIJ, CFTPPIJ)

CFSXIJ, CFSZIJ, CFTPPIJ の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. CRFNST2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CRFNST2 との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. CRFNST2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CRFNST2 との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. CRFNST2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と CRFNST2 との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE は CRFNST1 でのものと同じ.

SZIAV (入力; 8 バイト実数)
AVRGSI などを用いて計算した s^z_ℓ の値を与える.

SZJAV (入力; 8 バイト実数)
AVRGSI などを用いて計算した $s^z_{\ell'}$ の値を与える.

TPIAV (入力; 8 バイト実数)
AVRGTI などを用いて計算した t_ℓ の値を与える.

TPJAV (入力; 8 バイト実数)
AVRGTI などを用いて計算した $t_{\ell'}$ の値を与える.

CFSXIJ (出力; 8 バイト実数)
$\omega^x(\ell,\ell')$ の値が返される.

CFSZIJ (出力; 8 バイト実数)
$\Delta\omega^z(\ell,\ell')$ の値が返される. ただし, SZIAV, SZJAV に 0.0D0 が与えられる場合には, $\omega^z(\ell,\ell')$ の値が返される.

CFTPPIJ (出力; 8 バイト実数)
$\Delta\tau(\ell,\ell')$ の値が返される. ただし, TPIAV, TPJAV に 0.0D0 が与えられる場合には, $\tau(\ell,\ell')$ の値が返される.

[7] $\omega^x(\ell,\ell')$, および s_ℓ^z を与えた上での $\Delta\omega^z(\ell,\ell')$ $\big((2)$, (3) 式を参照$\big)$ の計算.

CALL CRFNS2(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS, ISITE, JSITE, SZIAV, SZJAV, CFSXIJ, CFSZIJ)

CFSXIJ, CFSZIJ の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. CRFNS2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CRFNS2 との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. CRFNS2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CRFNS2 との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. CRFNS2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と CRFNS2 との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE は CRFNST1 でのものと同じ. SZIAV, SZJAV, CFSXIJ, CFSZIJ は CRFNST2 でのものと同じ.

[8] t_ℓ を与えた上での $\Delta\tau(\ell,\ell')$ $\big((5)$ 式を参照$\big)$ の計算.

CALL CRFNT2(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS, ISITE, JSITE, TPIAV, TPJAV, CFTPPIJ)

CFTPPIJ の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. CRFNT2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CRFNT2 との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. CRFNT2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CRFNT2 との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. CRFNT2 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と CRFNT2 との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE は CRFNST1 でのものと同じ. TPIAV, TPJAV, CFTPPIJ は CRFNST2 でのものと同じ.

[9] $\omega^x(\ell,\ell'), \omega^z(\ell,\ell')$ $\big($(2) 式を参照$\big)$ の計算.

CALL AVRGSISJ(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS, ISITE, JSITE, SXIJAV, SZIJAV)

SXIJAV, SZIJAV の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. AVRGSISJ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と AVRGSISJ との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. AVRGSISJ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と AVRGSISJ との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. AVRGSISJ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と AVRGSISJ との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE は CRFNST1 でのものと同じ.

SXIJAV (出力; 8 バイト実数)
$\omega^x(\ell,\ell')$ の値が返される.

SZIJAV (出力; 8 バイト実数)
$\omega^z(\ell,\ell')$ の値が返される.

[10] $\tau(\ell,\ell')$ $\big($(4) 式を参照$\big)$ の計算.

CALL AVRGTITJ(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS, ISITE, JSITE, TPIJAV)

TPIJAV の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. AVRGTITJ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と AVRGTITJ との間でそれらの値を変えてはならない. IBASE(NSB) には行列の次元 IDIM (3.1 節 [1] を参照) に等しい値が入っている. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. AVRGTITJ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と AVRGTITJ との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. AVRGTITJ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と AVRGTITJ との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE は CRFNST1 でのものと同じ.

TPIJAV (出力; 8 バイト実数)
$\tau(\ell,\ell')$ の値が返される.

[11] $\sigma^z(\ell,\ell')$ $\big((6)$ 式を参照$\big)$ の計算.

**CALL STRODRZ(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS,
ISITE, JSITE, OSTZIJ)**

OSTZIJ の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. STRODRZ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と STRODRZ との間でそれらの値を変えてはならない. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. STRODRZ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と STRODRZ との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. STRODRZ から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と STRODRZ との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE は CRFNST1 でのものと同じ.

OSTZIJ (出力; 8 バイト実数)
$\sigma^z(\ell,\ell')$ の値が返される.

[12] $\sigma^x(\ell,\ell')$ $\big((6)$ 式を参照$\big)$ の計算.

**CALL STRODRX(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS,
ISITE, JSITE, OSTXIJ)**

OSTXIJ の計算を行う.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. STRODRX から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と STRODRX との間でそれらの値を変えてはならない. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. STRODRX から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と STRODRX との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. STRODRX から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と STRODRX との間でそれらの値を変えてはならない. ISS, ISITE, JSITE は CRFNST1 でのものと同じ.

OSTXIJ (出力; 8 バイト実数)
$\sigma^x(\ell,\ell')$ の値が返される.

[1] $m_1 = m_2 = \cdots = m_{\rm NS} = 0$ であるスピン配列の番号の計算

CALL FIND0(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IST0, ISTN0)

IST0, ISTN0 の計算を行う. FIND0 の引用は ITSZ に 0 を与えて CRESZ を実行した後で行わなければならない. LNCZM (3.2 節 [4] を参照) を引用の際, IV(1), IV(2), $\cdots$, IV(20) のいずれかに FIND0 で計算した ISTN0 の値を与えると, $m_1 = m_2 = \cdots = m_{\rm NS} = 0$ であるスピン配列に対する状態ベクトルと直交していない状態ベクトルをもつ状態のエネルギー固有値を求めることが出来る. 以下での引数の説明は, 2.1 節の議論を参照しながら読んでいただきたい.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. FIND0 から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, ITSZ に 0 を与えて実行した CRESZ と FIND0 との間でそれらの値を変えてはならない.

IST0 (出力; 4 バイト整数)
$1 \times 3^0 + 1 \times 3^1 + \cdots + 1 \times 3^{\rm NS-1}$ の値が返される.

ISTN0 (出力; 4 バイト整数)
$m_1 = m_2 = \cdots = m_{\rm NS} = 0$ であるスピン配列 IST0 の番号 J が返される.

[2] 固有ベクトルがもつ並進対称性を調べるためのデータの作成

CALL CHKWV(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, VEC, NDCLRV, MDCLRV, ISS,
NV, ICYCLST, ICYCLNO, VCOEF, IDCLR)

ICYCLST, ICYCLNO, VCOEF の計算を行う. 系のハミルトニアン $\mathcal{H}$ が $TS_\ell^\alpha T^\dagger = S_{\ell+1}^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) で定義される並進演算子 T と交換する場合には, VCOEF に対する結果より, 固有ベクトルがもつ並進対称性が分かる. 即ち, ある j について, VCOEF(1, j), VCOEF(2, j), $\cdots$, VCOEF(NS, j) の値がすべて等しければ, 固有ベクトルは波数 $K = 0$ の対称性をもつ. また, それらの絶対値が等しく符号が交互に異なっていれば, 固有ベクトルは波数 $K = \pi$ の対称性をもつ. 更に, それらの絶対値が互いに異なっていれば, 固有ベクトルは $K \neq 0, \pi$ の対称性をもつ. 以下での引数の説明は, 2.1 節の議論を参照しながら読んでいただきたい.

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. CHKWV から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と CHKWV との間でそれらの値を変えてはならない. 小規模行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.1 節 [3] の SMALL でのものと同じ. CHKWV から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, SMALL と CHKWV との間でそれらの値を変えてはならない. また, 中規模以上行列用ルーチンにおいては, VEC, NDCLRV, MDCLRV は 3.2 節 [5] の LNCZMINV でのものと同じ. CHKWV から見るとき

これらの変数はすべて入力変数であり, LNCZMINV と CHKWV との間でそれらの値を変えてはならない.

ISS (入力; 4 バイト整数)

並進対称性を調べる固有ベクトルの番号から 1 を引いた値を与える. $J(=0, 1, \cdots,$ IBASE(NSB)$-1)$ 成分が VEC(J, ISS) に与えられている固有ベクトル (ISS+1 番目の固有ベクトル) の並進対称性を調べるためのデータが作成される.

NV (入力; 4 バイト整数)

ICYCLST, ICYCLNO, VCOEF の整合寸法. 1≤NV≤3 を満たす程度の値を与える.

ICYCLST(IDCLR, NV) (出力; 4 バイト整数), **ICYCLNO(IDCLR, NV)** (出力; 4 バイト整数)

次の手順 1)～7) に従って, ICYCLST(i, j), ICYCLNO(i, j) にそれぞれの値が返される. 1) J を 0 から順に変えて, VEC(J, ISS)$>10^{-9}$ である最初の J の値 J_1 を求め, その J_1 の値が ICYCLNO(1, 1) に返される. 2) J_1 番目のスピン配列における $m_{\rm k}$ (k=1, 2, $\cdots$ NS) の値を求め, それらから計算される $\sum_{\rm k=1}^{\rm NS}(m_{\rm k}+1)\times 3^{\rm k-1}$ の値が ICYCLST(1, 1) に返される. 3) 2) で求めた $m_{\rm k}$ から計算される $\sum_{\rm k=1}^{\rm NS}(m_{\rm k-k'}+1)\times 3^{\rm k-1}$ の値が ICYCLST(k$'$+1, 1) に返される. ここで, k$'$=1, 2, $\cdots$, NS$-$1; k$-$k$'\leq$0 のとき, $m_{\rm k-k'}\equiv m_{\rm k-k'+NS}$. 4) スピン配列 ICYCLST(k, 1) の番号 J が ICYCLNO(k, 1) に返される. ここで, k=2, 3, $\cdots$, NS. 5) J を J_1+1 から順に変えて, VEC(J, ISS)$>10^{-9}$ かつ $J\neq$ICYCLNO(k, 1) (k=1, 2, $\cdots$, NS) である次の J の値 J_2 を求め, その J_2 の値が ICYCLNO(1, 2) に返される. 6) 2)～4) に相当する手順に従って, ICYCLST(i, 2) (i=1, 2, $\cdots$, NS), ICYCLNO(i, 2) (i=2, 3, $\cdots$, NS) にそれぞれの値が返される. 7) 5), 6) に相当する手順に従って, ICYCLST(i, j), ICYCLNO(i, j) (i=1, 2, $\cdots$, NS; j=3, 4, $\cdots$, NV) にそれぞれの値が返される.

VCOEF(IDCLR, NV) (出力; 4 バイト整数)

VEC(ICYCLNO(i, j), ISS) の値が VCOEF(i, j) に返される. ここで, i=1, 2, $\cdots$, NS; j=1, 2, $\cdots$, NV.

IDCLR (入力; 4 バイト整数)

ICYCLST, ICYCLNO, VCOEF の整合寸法. IDCLR≥NS でなければならない.

[3] 整数の +, 0, − による 3 進法表示

CALL DISPNNF(NS, ITP, SP)

SP を求める. ITP に ICYCLST(i, j) の値を与えるとき, SP(k)='−', '0', '+' (k=0, 1, $\cdots$, NS$-$1) であることは, ICYCLNO(i, j) 番目のスピン配列において, それぞれ, $m_{\rm k+1}=-1, 0, 1$ であることを示す. ここで, ICYCLST(i, j), ICYCLNO(i, j) (i=1, 2, $\cdots$, NS; j=1, 2, $\cdots$, NV) は CHKWV で計算された結果である.

[引数]

NS は 3.1 節 [2] の CRESZ でのものと同じ. DISPNNF から見るときこれらの変数はすべて入力変数であり, CRESZ と DISPNNF との間でその値を変えてはならない.

ITP (入力; 4 バイト整数)

$0\leq$ITP$\leq 3^{\rm NS}-1$ を満たす整数値を与える.

SP(0: NS−1) (出力; 1 バイト文字)

$\left[\mathrm{ITP}/3^{\mathrm{k}}\right]$ ($[\cdots]$ はガウス記号) を 3 で割ったときの余りを R とする. $R=0$, 1, 2 のとき, SP(k) に, それぞれ, '−', '0', '+' が返される. 以上で, k=0, 1, ⋯, NS−1.