目次

1. QS3について

1.1 QS3とは?

1.2ライセンス

1.3 コピーライト

1.4 開発貢献者

1.5 動作環境

1. How to use QS3

2.1 要件

2.2 インストール方法

2.3 ディレクトリ構成

3 ファイルフォーマット

3.1 必須パラメータ

3.2 格子に関するパラメータ

3.3 物理量計算に関するパラメータ

3.3.1 局所磁化

3.3.2 二点相関関数

3.3.3 動的構造因子

4 アルゴリズム

4.1 Lanczos法

4.2 Thick-restarted Lanczos法

4.3 連分数展開法

4.4 波数分解を利用した物理量計算について

第1章

QS3について

1.1 QS3とは？

厳密対角化法は有限系のハミルトニアンを一切近似することなくその固有状態および固有値を評価することが出来る最も信頼できる手法として知られています。スピン系の分野ではこれまでにもTITPACK、SPINPACK、HPhiなど様々なパッケージが開発され、幅広く利用されてきました。しかしながら厳密対角化法の計算コストは系のサイズに対して指数関数的に増えるため、S=1/2の系を大型計算機で取り扱ったとしても計算可能な系のサイズは高々40数サイトに限られてきました。

QS3はS=1/2 XXZ型模型の特に高磁場近傍の低エネルギー状態を調べることに特化した厳密対角化法パッケージとなっています。系の並進対称性とU(1)対称性を利用することで計算コストを大幅に下げることに成功しており、またビット演算を用いないため、飽和磁場直下では数100サイト以上の有限系を取り扱うことが可能となっています。またQS3では偽縮退問題に対して強力な手法であるThick-Restarted Lanczos法が実装されており、低エネルギー励起状態およびその縮退構造を正確に捉える形で、局所磁化や二点相関関数などと言った基本的な物理量を計算することが可能です。さらに求めた基底状態波動関数から連分数展開法を用いて動的構造因子を計算する機能も備わっています。飽和磁場近傍という非常に限られた条件ではあるものの、厳密なスピン構造因子を高解像度で求めることが可能であるため、実験の研究者も含めた幅広いユーザーに利用して頂ければ幸いです。

1.2 ライセンス

本ソフトウェアのソースコード一式はMITに準じて配布されています。QS3を引用する際には以下の文献を引用してください。

H. Ueda, S. Yunoki, and T. Shimokawa, arXiv.XXXX.YYYY

1.3 コピーライト

Copyright (c) 2021 QS-Cube

本ソフトウェアの著作権に関しては以下のサイトをご覧ください。

<https://github.com/QS-Cube/ED/blob/main/LICENSE>

1.4 開発貢献者

・ver. 1.0 (2021/XX/YY)

　-開発者

　・上田 宏（大阪大学）

　・下川 統久朗 （沖縄科学技術大学院大学）

1.5 動作環境

　・Linux PC / Mac + gfortran or intel fortran compiler

(Ubuntu/Fugaku/etcでテストしてみる。Makefileを作る。)

第２章

How to use QS3

* 1. 要件

QS3パッケージはFortran 90で記述されており、また外部ライブラリーとしてBLAS, LAPACKを利用しています。コンパイルには以下のものが必要です。

・gfortranコンパイラ + BLAS/LAPACKライブラリー

・intel fortran コンパイラ + MKLライブラリー

* 1. インストール方法

Git アカウントを所有している方は以下をタイプすることによりQS3を ダウンロード・展開することが可能です。

$ git clone <https://github.com/QS-Cube/ED.git>

Gitアカウントを持っていない方は次のサイトにアクセスした後に、サイト右上にある”Code”→”Download ZIP”とクリックすることで"ED-main.zip"をダウンロードすることが出来ます。

<https://github.com/QS-Cube/ED>

以下のコマンドより解凍します。

$ unzip ED-main.zip

実行ファイルを構築するためのMakefileがsourceディレクトリ以下に用意されており、ユーザは適切にBLAS/LAPACK or MKLへのパスを変更する必要があります。変更後は以下の手続きを踏むことで実行ファイルが作成され、また幾つかのサンプルプログラムが実行されます。

$ cd ED-main

$ cd script

$ ./make.sh

現時点ではサンプルプログラムとして 以下が用意されています。

1. 6×6正方格子強磁性体を取り扱い、U(1)と並進対称性を用いてTotal Sz=15, (kx, ky)=(0,0)セクターにおける低エネルギー状態と種々の物理量をThick-restarted Lanczos法を用いて求めるプログラム
2. 1)の計算を完全対角化法によって行うプログラム
3. 10×10×10立方格子反強磁性体を取り扱い、Lanczos法を用いて1)と同様の計算を行うプログラム
4. 1)の模型を取り扱い、U(1)対称性のみを用いてTotal Sz=15セクターにおける低エネルギー状態と種々の物理量の計算をLanczos法を用いて求めるプログラム
5. 6×6三角格子反強磁性体を取り扱い、U(1)と並進対称性を用いてTotal Sz=15, (kx, ky)=(0,0)セクターにおける低エネルギー状態と種々の物理量をLanczos法を用いて求めるプログラム

計算結果は対応するoutputフォルダに出力されることになります。

* 1. ディレクトリ構成

ED-main.zipを解凍後に得られるディレクトリは以下となります。”input\_exXX”には上記に記したサンプルプログラム1)-5)を走らせる上で必要なインプットファイルが用意されています。各ファイルの詳細については次節で述べます。

|-- input\_ex1/

|-- input.dat

|-- list\_cf\_ss.dat

|-- list\_local\_mag.dat

|-- list\_site\_position\_36\_type1.dat

|-- list\_xxz\_term\_36.dat

|-- input\_ex2/

|-- input.dat

|-- input\_ex3/

|-- input.dat

|-- list\_cf\_ss.dat

|-- list\_local\_mag.dat

|-- list\_site\_position\_1000\_type1.dat

|-- list\_xxz\_term\_1000.dat

|-- input\_ex4/

|-- input.dat

|-- input\_ex5/

|-- input.dat

|-- list\_xxz\_term\_36.dat

|-- script/

|-- make.sh

|-- source/

|-- Makefile

|-- eigen\_solver.f90

|-- get\_expectation\_values.f90

|-- ham2vec\_v3.f90

|-- input\_param.f90

|-- lanczos.f90

|-- main.f90

|-- state\_lists.f90

|-- source\_DSF/

|-- main.f90

|-- source\_mk\_input\_list/

|-- mk\_input\_list.f90

|-- source\_only\_u1/

|-- Makefile

|-- eigen\_solver.f90

|-- get\_expectation\_values.f90

|-- ham2vec\_v3.f90

|-- input\_param.f90

|-- lanczos.f90

|-- main.f90

|-- state\_lists.f90