

ユーザーマニュアル: $QS^3/ED2$

2023年9月2日

目次

1	導入	3
1.1	プログラムの目的	3
1.2	対象読者	3
2	システム要件	4
2.1	必要なハードウェア	4
2.2	必要なソフトウェア	4
2.3	推奨環境	4
3	インストール方法	4
3.1	ダウンロード先	4
3.2	インストール手順	5
4	基本的な使い方	5
4.1	入力情報	5
5	出力情報	11
6	エクササイズ	14
6.1	計算時間の wk_dim 依存性	14
6.2	三角格子とその逆格子及び、高い対称性を持つ波数点と入力パラメータとの関係	17
6.3	混合スピン鎖に現れるプラトー幅の S 依存性	18
7	飽和磁場領域における弱い横磁場とその磁気応答	21

8	計算原理	22
9	サポート情報	22
9.1	問い合わせ先	22
9.2	サポート時間	22

1 導入

1.1 プログラムの目的

本プログラムは、飽和磁化近傍のスピン $S = 1/2$ XXZ 模型の解析に有用な量子スピンソルバー QS³（キュー・エス・キューブ） [1] の特長を引き継ぎつつ、

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{r>r'} \sum_{\alpha \in \{x,y,z\}} \left[J_{rr'}^{\alpha} \hat{S}_r^{\alpha} \hat{S}_{r'}^{\alpha} + D_{rr'}^{\alpha} \left(\hat{\mathbf{S}}_r \times \hat{\mathbf{S}}_{r'} \right)_{\alpha} + \Gamma_{rr'}^{\alpha} (S_r^{\beta} S_{r'}^{\gamma} + S_r^{\gamma} S_{r'}^{\beta}) \right] - \sum_r \mathbf{h}_r \cdot \hat{\mathbf{S}}_r \quad (1)$$

で与えられたハミルトニアン¹の低エネルギー状態に対応する固有エネルギー及び固有状態を、数値的厳密/近似的に得ることを目的としています。ここで $J_{rr'}^{\alpha}$ 、 $D_{rr'}^{\alpha}$ 、 $\Gamma_{rr'}^{\alpha}$ は、 (r, r') のサイトにある2体のスピン間に働く交換相互作用、ジャロシンスキー守谷（DM）相互作用¹、 Γ 項²のそれぞれ $\alpha \in \{x, y, z\}$ 成分、 $\mathbf{h}_r = (h_r^x, h_r^y, h_r^z)$ はサイト r に作用するゼーマン項、 $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ となっています。また、 $\mathbf{S}_r = (\hat{S}_r^x, \hat{S}_r^y, \hat{S}_r^z)$ はサイト r のスピン演算子であり、スピン $S = 1/2, 1, 3/2, \dots$ と任意のスピン長をサイト毎に独立に指定することができます。

典型的な応用事例として、有限サイズスケーリング [2–6]、レベルスペクトロスコピー [7–10]、アンダーソンタワーなどを組み合わせた量子スピン系に現れる量子相転移現象の解析などがあります³。

1.2 対象読者

数値対角化をベースとした手法を利用して、量子多体系のスペクトル解析を行いたい学部生・大学院生・研究者。量子力学や Fortran90 に関する知識があることが望ましいです。

¹空間反転対称性の破れに起因する項。

²スピン軌道相互作用に由来する項。

³今後、実時間発展や量子回路シミュレーションの機能を追加することにより、広い問題群に適用可能なソフトウェアを提供することも目的としています。

2 システム要件

2.1 必要なハードウェア

プロセッサやメモリに特段の指定はありません（もちろん高速なCPU、大容量のメモリを積んでいるに越したことはありません）。プログラムを走らせるのに必要なストレージは、当該ソフトウェアのセットアップ（コンパイルからサンプルプログラムの実行）完了後に8MB程度の容量を必要とするので、それよりも大きければ原理的には動作します。GPUの利用は全く無いので、関連するハードウェアについての要件は特にありません。当該プログラムをダウンロードする際にインターネットのアクセスが必要となります。

2.2 必要なソフトウェア

Fortran90で記述されたソースがコンパイルできるコンパイラ（gfortran, ifort など）、および、線形代数ライブラリ「BLAS/LAPACK」[\[11\]](#)がすでにシステムにインストールされていること⁴。OSはLINUX/Mac系を想定しています（Windows上での実行は試したことがありません）。

2.3 推奨環境

特にありません。

3 インストール方法

3.1 ダウンロード先

Git アカウントをお持ちの方は、リポジトリをローカルコンピュータにクローンできます。SSHを使用する場合は、

```
$ git clone git@github.com:QS-Cube/ED2.git
```

⁴特定のバージョンによる不具合などがあるかどうかは不明。

でダウンロード可能です。

Git アカウントを持っていない場合は、リポジトリのウェブページに移動して、「Code」というボタンをクリックし、「Download ZIP」を選択して「ED2-main.zip」をダウンロードしてください。ZIP ファイルは以下のように展開できます：

```
$ unzip ED2-main.zip
$ cd ED2-main
```

3.2 インストール手順

本ソフトウェアでは Autotools [12] を利用して作成された Makefile が提供されており、「QS3ED2.exe」という実行可能ファイルをビルドすることができます。リポジトリをクローンした場合は ED2 ディレクトリ、ZIP ファイルを展開した場合は ED2-main ディレクトリ以下で、

```
$ ./setup.sh
```

を実行して実行ファイルをビルドしてください。同時にサンプルプログラムが実行されます。setup.sh を実行する前に、同ファイルを開いてコンパイラ (ARG1=gfortran/ifort) と線形代数ライブラリ (ARG2=lapack/mkl) を所望のものに選択してください。サンプルプログラムの実行結果はすべて examples ディレクトリに保存されます。

4 基本的な使い方

4.1 入力情報

setup.sh が正常に実行されていれば、下記の9つのディレクトリ (chain, cubic, cubic_sp_HB, honeycomb, j1j2_chain, kagome, mixed_spin_chain, square, triangular) が examples ディレクトリの以下に作成されています。プログラムに引き渡すインプットの詳細や、基本的なプログラムの実行の仕方を examples/chain にあるファイル構成を確認しながら説明します。

まず様々なインプット情報がまとめられている input.dat をみてみましょう。

Listing 1: input.dat

```

&input_parameters
NOS      = 100,
NODmax   = 3,
NODmin   = 0,
L1       = 100,
L2       = 1,
L3       = 1,
L4       = 1,
L5       = 1,
L6       = 1,
M1       = 0,
M2       = 0,
M3       = 0,
M4       = 0,
M5       = 0,
M6       = 0,
NO_one   = 100,
NO_two   = 100,
wk_dim   = -1,
MNTE     = -1,
ALG      = 1,
wr_wf    = 0,
re_wf    = 0,
FILE_xyz_dm_gamma = "list_xyz_dm_gamma.dat",
FILE_hvec = "list_hvec.dat",
FILE_wf   = "./",
OUTDIR    = "./",
FILE_S1= "list_p1.dat",
FILE_S2= "list_p2.dat",
FILE_S3= "list_p3.dat",
FILE_S4= "list_p4.dat",
FILE_S5= "list_p5.dat",
FILE_S6= "list_p6.dat",
FILE_NODmax= "list_NODmax.dat",

```

```

FILE_spin= "list_spin.dat",
cal_lm = 1,
cal_cf = 1,
NO_two_cf = 9,
FILE_two_cf= "./list_ij_cf.dat",
&end

```

```

&input_lancz
lnc_ene_conv=1.0d-14,
minitr=5,
maxitr=10000,
itrint=5,
&end

```

```

&input_TRLan
NOE = 10,
NOK = 20,
NOM = 40,
maxitr=10000,
lnc_ene_conv=1.0d-14,
i_vec_min = 1,
i_vec_max = 1,
&end

```

この一連のインプットパラメータのうち、ソフトウェア中で利用されている Lanczos 法に関連するもの (input_lancz) と Thick-Restart Lanczos 法に関連するもの (input_TRLan) は QS³/ED リポジトリで利用されているものと同じなので文献 [1] を参照してください。input_parameters の各パラメータに関しては下記のとおりです：

input_parameters

NOS (INTEGER): スピン数 N .

NODmax/min (INTEGER): 系の正規直行基底をスピン演算子の z 成分 $\{\hat{S}_r^z\}$ が対角的になるベースの直積 (この際の正規直交基底を $\{|i\rangle\}$, $1 \leq i \leq D$ とする。ここで D は対象とする系のヒルベルト空間

間次元) で表現した際に、系の飽和磁化を M_s として、

$$M_s - \text{NODmax} \leq \left\langle i \left| \sum_r \hat{S}_r^z \right| i \right\rangle \leq M_s - \text{NODmin} \quad (2)$$

となる i の集合を用意するのに必要。NODmin = 0 かつ NODmax = $2M_s$ とすると模型の詳細によらずにすべての状態空間を取り扱う。もし系が XXZ 模型のようなある種の粒子数保存則 (U(1) 対称性) を持っている場合は、NODmin = NODmax とすることで所望の全 S_z 固定の空間を対象にした厳密対角化が実行可能です。

L1, ..., L6 (INTEGER. デフォルトで 1 に設定): QS^3 では、与えられたサイトインデックス r 置換に関して、互いに可換な対称操作 (並進操作と点群操作) を最大 6 個まで同時に導入可能な仕様になっています。examples/chain ではユニットセルあたり 1 サイトの一般的な XYZ+DM+ Γ +Zeeman 項のある 1 次元鎖を考えているため、並進操作

$$\hat{T}_1 \hat{S}_r^\alpha \hat{T}_1^\dagger = \hat{S}_{r+1}^\alpha; \hat{T}_1^{L_1} = \hat{1}; L_1 = N \quad (3)$$

に対してハミルトニアンが不変となっています⁵。ユーザーが導入する対称操作 $(\hat{T}_1, \dots, \hat{T}_6)$ はそれぞれ 0 以上のあるべき乗で恒等演算子 $\hat{1}$ と等価となります。 L_1, \dots, L_6 は、 $\hat{T}_1^{L_1} = \dots = \hat{T}_6^{L_6} = \hat{1}$ を満たす正の整数として与えられます。 $L_m = 1$ ($1 \leq m \leq 6$) のときは自明に $\hat{T}_m = \hat{1}$ となるので、後述の対称操作を定義するファイルの用意は省略できます。

M1, ..., M6 (INTEGER): 対称操作 $\{\hat{T}_m\}$ に紐づいた波数 $\{M_m \in [0, L_m - 1]\}$. ターゲットにしている系が対称操作に対して不変な時、系のある固有状態 $|\Psi\rangle$ を

$$\hat{T}_m |\Psi\rangle = e^{-i2\pi M_m / L_m} |\Psi\rangle \quad (4)$$

を満たすように指数 M_m を用いて分類することができます。ここで i は虚数単位を表しています。もし $(\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3)$ が 3 次元格子系の単位並進ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ に対する並進対称操作である場合、その逆格子ベクトルを $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ として、波数ベクトル $\mathbf{k} = \sum_{u=1}^3 M_u / L_u \mathbf{b}_u$ と単位並進ベクトルとの間には $\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_u = 2\pi k_u$ という関係がある。

NO_one/two (INTEGER): 1 対相互作用 (h 項) / 2 体相互作用

⁵XYZ+ Γ +Zeeman 鎖であればボンド反転に対して対称なので、対称性の高い波数点では同時に 2 つの対称操作を導入することが可能です。

(XYZ + DM + Γ 項) の数 N_1/N_2 .

wk_dim/MNTE (INTEGER): ハミルトニアン の疎行列要素をどの程度覚えるかのパラメータ。プログラム内部では (wk_dim, MNTE+1) 次元の整数および倍精度複素数の 2 次元配列が 1 つずつ確保されます。wk_dim が取りうる範囲は 0 からターゲットとしている部分空間次元 D^6 、MNTE は系に依存したある値 C 以上の設定が必要です。MNTE が C よりも小さい場合はプログラムがエラーを出力して停止する仕様となっています。ハミルトニアン の疎行列の要素が全て覚えられる小・中規模の対角化計算の場合であれば、まずは wk_dim/MNTE とともに、 -1 に設定して実行することを推奨します。この時、wk_dim/MNTE はそれぞれ自動的に D と $2*NO_one+8*NO_two$ に設定されます。適切な MNTE の値は系が持っている対称性や粒子数の数に大きく左右されます。MNTE $\geq C$ であれば、プログラム実行中に最適な MNTE が出力として表示されます。これをりようして、物理メモリあまり余裕のない計算環境で規模の大きな計算を実行する際は、いくつか小さなシステムサイズ/粒子数の計算で得られた最適な MNTE のシステムサイズ/粒子数外挿で、最終的に必要な MNTE を予め推定することを推奨します⁷。疎行列要素が全て覚えられない大規模系の場合は、計算が破綻しない MNTE を設定後に wk_dim を計算機のメモリが許す限り大きく取ることで、計算の実行時間を短縮することが可能です。

ALG (INTEGER): 数値対角化の際のアルゴリズムの設定。1: Lanczos 法, 2: Thick-restart Lanczos 法, 3: LAPACK を利用した全対角化。

wr_wf (INTEGER): wr_wf=1 の場合、計算された固有ベクトルは「FILEwf」で指定されたディレクトリに出力されます。

re_wf (INTEGER): re_wf=0 の場合、数値対角化を実行します。re_wf=1 の場合、すでに「FILEwf」で指定されたディレクトリに準備されている固有ベクトルを読み込み、物理量の期待値のみを計算します。

FILE_xyz_dm_gamma (CHARACTER): 2 体相互作用の空間配位と強度を定義するファイル位置を指定します。ファイルの中身

⁶ D の大きさは粒子数の範囲や量子数の指定に依存します。

⁷MNTE はハミルトニアンを構成する各 1or2 体の演算子がある代表状態に作用した際に遷移できる別の代表状態の数の合計値なので、予めおよそ最適な MNTE を見積もることも可能です。

では、

$$(r, r', \mathbf{J}_{rr'}, \mathbf{D}_{rr'}, \mathbf{\Gamma}_{rr'})$$

がリストされており、プログラム実行時には当該ファイルの1行目から NO_two 行目までが読み込まれます。

FILE_hvec (CHARACTER): 1体相互作用の空間配位と強度を定義するファイル位置を指定します。ファイルの中身では、 (r, \mathbf{h}_r) がリストされており、プログラム実行時には当該ファイルの1行目から NO_one 行目までが読み込まれます。

FILEwf (CHARACTER): 計算された固有ベクトルの出力場所。固有ベクトルの数は、ALG=1の場合は1（基底状態のみ）、ALG=2の場合は input_TRLan の中の入力情報で指定したもの、ALG=3の場合は全ての固有ベクトルが出力対象となります。

OUTDIR (CHARACTER): 計算された局所磁化、スピン相関関数などが出力される場所の指定。

FILE_S1, ..., FILE_S6 (CHARACTER): 対称操作 $\{\hat{T}_m\}$ を $r \in [1, \text{NOS}]$ に作用させた際に出力させた際に得られる $r_m = \hat{T}_m r$ を格納しているファイル場所を指定する。例えば1次元鎖の1サイト並進であれば

$$(2, 3, 4, \dots, \text{NOS}, 1) = \hat{T}_1(1, 2, 3, \dots, \text{NOS})\hat{T}_1^\dagger \quad (5)$$

の左辺が縦ベクトルとして格納されている。

FILE_NODmax (CHARACTER): QS^3 では完全偏極状態 $|v\rangle$ をある真空状態とみなして、そこに $N_\downarrow \in [\text{NOD_min}, \text{NOD_max}]$ 個の降演算子を作用させた状態

$$|a\rangle = \prod_{o=1}^{N_\downarrow} \hat{S}_{r_o}^- |v\rangle \quad (6)$$

ではられる状態空間を取り扱いますが、その際に $\{r_o\}$ の中に含まれるサイトの重複を最大何個まで許すのかについての情報が格納されたファイルの位置を指定します。FILE_NODmax の中身は NOS 行の整数で構成されており、 r 行目にはサイト r に作用する降演算子数の最大値が記載されています。降演算子数の最大値は NOD_max を超えることはなく、またサイト r の局所スピンが S_r の場合 r 行目の整数は $2S_r$ 以下となる必要があります。examples/chain ディレクトリでは $S = 1/2$ 系なので FILE_NODmax の中身はすべて1と

なっています。 $S = (1, 1/2)$ 混合スピン鎖のサンプルになっている `examplex/mixed_spin_chain` のような場合は $(2, 1, 2, 1, \dots)$ のような構成になっています。 **FILE_spin** (CHARACTER): r サイト目のスピン S_r が格納されたファイルの場所を指定する。 **FILE_spin** の中身は NOS 行の実数で構成されており、 r 行目にはサイト r のスピン S_r が格納されています。局所サイトのスピンと許される降演算子数の数を独立に指定することで、 S が極めて大きなスピン系における飽和磁化近傍の状態空間を効率よく指定することに成功している。

cal_lm, cal_cf (INTEGER): 対応する変数を 1 に設定することで、局所磁化 (lm)、スピン相関関数 (cf) が計算されます。計算された結果はそれぞれ、 `OUTDIR/local_mag.dat`、 `OUTDIR/two_body_cf_xyz.dat`、 `OUTDIR/two_body_cf_z+- .dat` に出力されます。計算が不要な物理量に関する変数は 0 に設定します。 `OUTDIR/local_mag.dat` には

$$\{(r, \langle S_r^x \rangle, \langle S_r^y \rangle, \langle S_r^z \rangle)\} \quad (7)$$

が格納されます。ここで $\langle \cdot \rangle$ は基底状態に対する演算子の期待値を表しています (残りのファイルに格納される情報は後述)。

NO_two_cf (INTEGER): 計算したい 2 体のスピン相関関数のサイトペア (r, r') の個数を指定します。 **FILE_two_cf** (CHARACTER): 計算したい 2 体のスピン相関関数のサイトペア (r, r') の情報が格納されたファイルの位置を指定します。 **FILE_two_cf** の中身は (r, r') のサイトペアが **NO_two_cf** 個格納されており、 **cal_cf** = 1 のとき、 `OUTDIR/two_body_cf_xyz.dat` に基底状態に対する

$$\{(r, r', \langle S_r^x S_{r'}^x \rangle, \langle S_r^y S_{r'}^x \rangle, \langle S_r^z S_{r'}^x \rangle, \langle S_r^x S_{r'}^y \rangle, \dots, \langle S_r^z S_{r'}^z \rangle)\} \quad (8)$$

が格納されます。同様に、 `OUTDIR/two_body_cf_z+- .dat` に基底状態に対する

$$\{(r, r', \langle S_r^z S_{r'}^z \rangle, \langle S_r^+ S_{r'}^z \rangle, \langle S_r^- S_{r'}^z \rangle, \langle S_r^z S_{r'}^+ \rangle, \dots, \langle S_r^- S_{r'}^- \rangle)\} \quad (9)$$

が格納されます。

5 出力情報

次にアウトプットの情報がまとめられている `output.dat` をみてみましょう。当該ファイルは `setup.sh` 実行時に自動的に作成されるファイルであ

るが、同様の結果を得るには、examples/chain にて

```
$ ../../QS3ED2.exe < input.dat
```

を実行することでも得られます。

Listing 2: outputo.dat

```
***** Start QS^3 ED2 *****
#### Read input_parameters.
&INPUT_PARAMETERS
  NOS=100          ,
  NODMAX=3         ,
  NODMIN=0         ,
  ...
  FILE_TWO_CF="./list_ij_cf.dat" ,
  /
#### Set wavevectors.
#### Set random_seed.
#### Allocation arrays.
#### Set phase factors.
#### Read FILE_xyz_dm_gamma.
#### Read FILE_hvec.
#### Set translational operations.
#### Read FILE_NODmax.
#### Read FILE_spin.
#### Read FILE_two_cf.
#### Store cum_ltd_rep_combination numbers.
#### Set THS.
      THS      =      166751
#### Allocate and Set arrays for state_list.
*****
max_threads      4
*****
#### Count # of representative states.
#### Allocate work arrays for lists.
#### Store representative states.
#### Allocate arrays for lists.
```

```

#### Store reordered lists.
      THS(k)   =          1669
#### Make wk_loc and wk_ele array.
      Current MNTE =          1000
      Optimal MNTE =           401
#### Start the Lanczos method.
&INPUT_LANCZ
      LNC_ENE_CONV=  1.0000000000000000E-014,
      MAXITR=10000      ,
      MINITR=5          ,
      ITRINT=5          ,
      /
*****
      Eigen solver: Lanczos
itr , ene , conv:      5    -1.177427739661957E+01    1.0E+00
itr , ene , conv:     10    -1.269936198217551E+01    7.3E-02
...
itr , ene , conv:    145    -1.299620173300448E+01    2.9E-14
itr , ene , conv:    150    -1.299620173300453E+01    3.4E-15
*****
      total lanczos step:          150
*****
E_0 =      -1.299620173300453E+01
*****
*****
quality of eigenvector
               <GS| H |GS> =      -1.299620173300453E+01
|1 - (<GS|H|GS>)^2/<GS|H^2|GS>| =      2.220446049250313E-16
*****
#### Get local magnetizations.
#### write ouput/local_mag.dat.
#### Get two-point correlation functions.
#### write ouput/two_body_cf_z+- .dat.
#### write ouput/two_body_cf_xyz.dat.
Time:      0.219 [sec]

```

このプログラムは Lanczos 法を利用した基底状態計算になりますが、基本的な流れは

1. input ファイルの読み込み
2. NOD_min/max 等からきまる（対称操作による削減前の）状態空間の大きさの推定（THS = のところです）
3. 与えられた対称操作に基づく波数分解後の代表状態の選定と状態空間の再設定（THS(k) = のところです）
4. Lanczos 法による基底状態探索（固有ベクトルの精度チェック込）
5. 局所磁化、相関関数の計算

となっています。

この出力ファイルの中の重要な情報として、最適な作業領域を決定する Optimal MNTE があります。本プログラムでは MNTE = -1 を与えて実行していますが、その場合プログラムでは自動的に安全な上限値 Current MNTE = 1000 を設定します。しかしながら、実際には Optimal MNTE = 401 でよいことが分かります（逆に言えば、MNTE ≤ 400 に設定するとプログラムが途中終了します）。

setup.sh を実行した際に様々な格子でのサンプルファイルが生成されるので、それぞれ中身をみて Optimal MNTE の値をみても面白いかもしれません。特に立方格子でのハイゼンベルグ模型をターゲットにしたサンプル (cubit_sp_HB) では Optimal MNTE の値が非常に小さいことがわかります。これは U(1) 対称性を持った飽和磁化近傍のモデルの特徴の 1 つです。

6 エクササイズ

6.1 計算時間の wk_dim 依存性

先のセクションでも説明したように、この QS³/ED2 リポジトリでは、既存の QS³/ED リポジトリでは導入していない行列要素をメモリの許す範囲で覚える機能が追加されています。この効果を実際に実感するため

に、ex) 9 cubit_sp_HB の計算条件（ただし局所磁化や相関関数の計算は省く）を基準にして、wk_dim を変えながら計算時間がどの様に変化するかをみてみましょう。

cubit_sp_HB では $10 \times 10 \times 10$ の立方格子にある反強磁性的ハイゼンベルグ模型の計算で、対象となっている量子数としては、全 S_z のセクターは $M_s - 3$ （ここで M_s は系の飽和磁化）、波数は Γ 点（すなわち $\mathbf{k} = 0$ ）、XY/YZ/ZX 面に対する反転操作に関していずれも偶パリティとなっており（プログラムの input.dat 的には $M1=\dots=M6=0$ の条件）。 $M_s - 3$ のセクターの空間次元は $\binom{1000}{3} = 166,167,000$ 次元であるが、すべての対称操作で分解された後の空間は $D = 23,719$ であり約 $1/7000$ 程度の次元削減となっている。

wk_dim を設定する前に適切な MNTE を与える必要があるが、この模型ではある程度大きなシステムサイズであれば自明に $MNTE=19$ が最適であることが分かる。これは立方格子中の 3 つのダウンスピン（互いの距離が十分に離れている）がハミルトニアンを一度作用した際にどの場所にホップできるかを考察すればよくて、その内訳は「それぞれのスピンのに関して配位数 6 の飛び先 $(6 \times 3) + \hat{S}_r^z \hat{S}_{r'}^z$ のような対角項 (1)」となっている。

詳細は Sec. 8 で述べますが、ハミルトニアン行列の要素を記憶した場合と記憶しなかった場合、ある代表状態 $|a\rangle$ にハミルトニアン \hat{H} を作用させるためのコストは、 $NO_one + NO_two \sim O(N)$ として、

- 記憶あり： $O(N)$
- 記憶なし： $O(N \times (\prod_{m=1}^6 L_m) \times NODmax \times \log(NODmax))$

となっている。行列要素を記憶しない場合、ある代表状態から別の状態に遷移した際に、遷移先がどの代表状態に属するかを判定する必要があり、そこで $(\prod_{m=1}^6 L_m) \times NODmax \times \log(NODmax)$ 倍の余分なコストを掛ける必要が出てきます。そのため、メモリに余裕がある場合は、積極的に行列要素を記憶するのがオススメです。

プログラム実行時の各ステップでの計算コストのオーダーを大まかに見積もると、 $\prod_{m=1}^6 L_m \sim O(N)$ 、 $D \sim O(\binom{N}{NODmax} N^{-1})$ のため

- 代表状態の選出： $O(D \times N^2 \times NODmax \times \log(NODmax))$
- 行列要素の記憶： $O(wk_dim \times N \times NODmax \times \log(NODmax))$

- Lanczos 法 : $O(N_{\text{itr}}N\{\text{wk_dim} + (D - \text{wk_dim}) \times N \times \text{NODmax} \times \log(\text{NODmax})\})$

となっているため ($N_{\text{itr}} \sim O(10 \sim 100)$ は Lanczos 法の反復回数)、 $\text{wk_dim}=0$ と $\text{wk_dim}=D$ のときの計算のボトルネックのオーダーは

- $\text{wk_dim}=0$: $O(N_{\text{itr}} \times D \times N^2 \times \text{NODmax} \times \log(\text{NODmax}))$
- $\text{wk_dim}=D$: $O(D \times N^2 \times \text{NODmax} \times \log(\text{NODmax}) + N_{\text{itr}} \times N \times D)$

となります。この両者の比 R のオーダーは

$$R = O(N_{\text{itr}}^{-1} + (N \times \text{NODmax} \times \log(\text{NODmax}))^{-1}) \quad (10)$$

となります。QS³ の計算条件ですと主に N_{itr}^{-1} が支配的になるので、オーダーだけで見れば最高で 100 倍程度の加速が見込めることになります。実際に計算して確認した例を Fig. 1 に示します。計算時間は概ね $\text{wk_dim}/D$

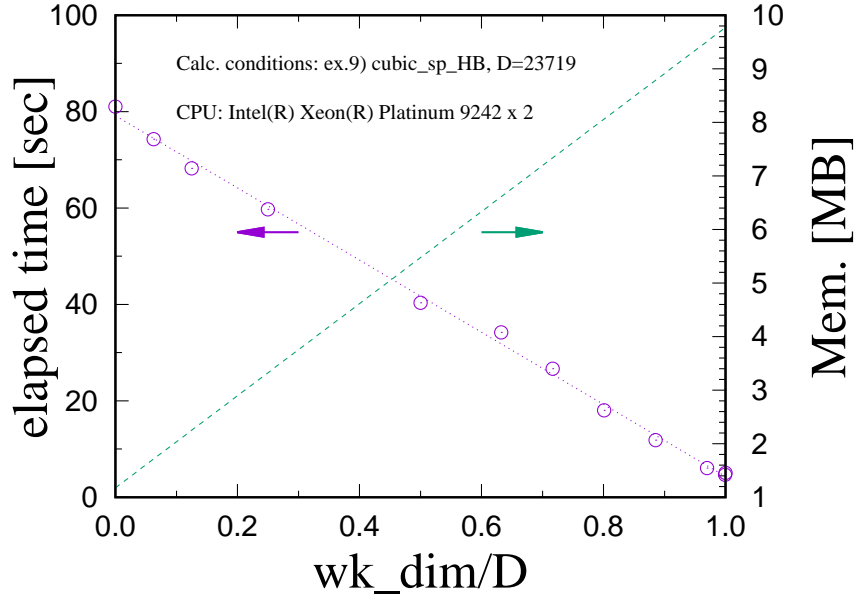
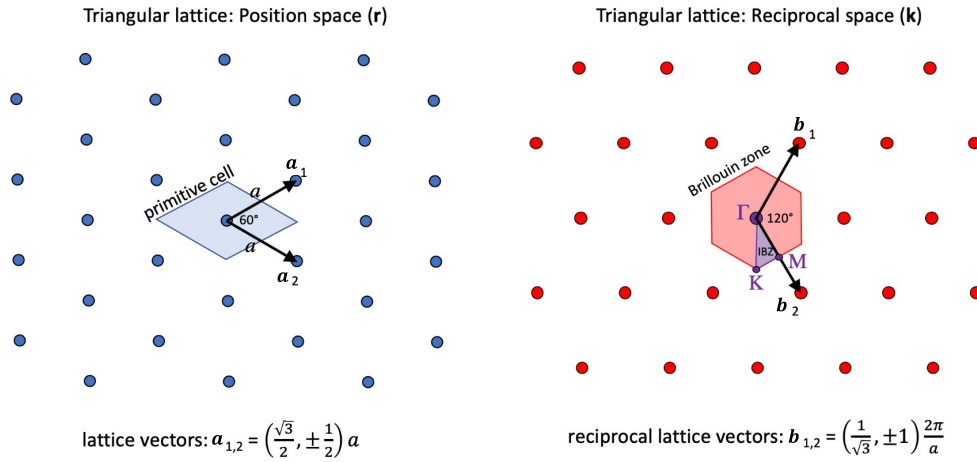


図 1: 計算時間および必要メモリ（概算）の wk_dim 依存性。

に対して線形に減少し、約 17 倍計算が加速されたことが確認できます。その代償として、プログラムが使用するメモリは約 8 倍に増大しています。U(1) の対称性がない模型の場合、一般に大きな MNTE が必要となるのに伴って、このメモリ増大も顕著になるので注意が必要です。

6.2 三角格子とその逆格子及び、高い対称性を持つ波数点と入力パラメータとの関係

ここでは、実空間格子の基本並進ベクトルと逆格子ベクトルのおさらいをしつつ、入力パラメータの変化と波数点の変化の対応について説明します。三角格子の基本並進ベクトル ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) は Fig. 2 の左側にあるように取ることができます（もちろん、他の取り方でも OK）。2 次元格子に



https://mpb.readthedocs.io/en/latest/Python_Data_Analysis_Tutorial/より一部拝借

図 2: 三角格子とその逆格子。

における基本並進ベクトルと逆格子ベクトルの関係は

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{|\mathbf{a}_2|^2 \mathbf{a}_1 - (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|^2} \quad (11)$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{|\mathbf{a}_1|^2 \mathbf{a}_2 - (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \mathbf{a}_1}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|^2} \quad (12)$$

$$(13)$$

であり、さらに

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (14)$$

という関係を満たします。

Fig. 2 右で薄赤で塗られた領域が第一ブリルアンゾーンで、その中でも対称性が高い点として $\Gamma = 0$, $M = \mathbf{b}_2/2$, K 点は $-\mathbf{b}_1$ と \mathbf{b}_2 それぞれの垂直二等分線の交点のため

$$\begin{cases} -b_{11}K_1 - b_{12}K_2 = (b_{11}^2 + b_{12}^2)/2 \\ b_{21}K_1 + b_{22}K_2 = (b_{21}^2 + b_{22}^2)/2 \end{cases} \quad (15)$$

(ここで、 $u \in 1, 2$ として $\mathbf{b}_u = (b_{u1}, b_{u2})$, $K = (K_1, K_2)$ という表記を採用している。) の連立方程式の解

$$K = (0, -2/3) \frac{2\pi}{a} = \frac{1}{3}(-\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \quad (16)$$

として得られます。システムサイズ $L_1 \times L_2$ の数値対角化で取りうる波数ベクトルは

$$\mathbf{k} = \sum_{u=1}^2 \frac{M_u}{L_u} \mathbf{b}_u \quad (17)$$

であるため、 Γ 点, M 点, K 点を与える条件は

- Γ 点: $M_1 = M_2 = 0$
- M 点: $M_1 = 0, M_2 = L_2/2$
- K 点: $M_1 = 2L_1/3, M_2 = L_2/3$

となります。ここでプログラム上は $M_1 = -L_1/3$ と $M_1 = -L_1/3 + L_1 = 2L_1/3$ が等価であることを利用しています。

6.3 混合スピン鎖に現れるプラトー幅の S 依存性

次に、QS³/ED2 で新しく指定できるようになった局所スピンの長さ (list_spin.dat) と各サイトで同時に作用可能な降演算子の数 (list_NODmax.dat) の自由度を活用して、Spin- $(S > 1/2, 1/2)$ 混合スピン鎖に現れる $(2S - 1)/(2S + 1)$ 磁化プラトー幅の S 依存性を調べてみましょう。ターゲットとなるハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = J \sum_{r=1}^L \left[\hat{\mathbf{s}}_{2j} \cdot (\hat{\mathbf{S}}_{2j-1} + \hat{\mathbf{S}}_{2j+1}) - h(\hat{S}_{2j-1}^z + \hat{s}_{2j}^z) \right], \quad \hat{\mathbf{S}}_{2L+1} = \hat{\mathbf{S}}_1 \quad (18)$$

であり、 $(\mathbf{S}_{2j-1}, \mathbf{s}_{2j})$ がそれぞれサイト $2j - 1, 2j$ にいるスピン $S, 1/2$ のスピン演算子です。以後、反強磁性的交換相互作用 $J > 0$ をエネルギーの単位とします。系の模式図は Fig. 3 のようになっており 2 サイトの並進対称操作とサイト反転対称操作に対してハミルトニアンが不変である事がわかります。この系では飽和磁化の $(2S - 1)/(2S + 1)$ の位置に磁化プラトーが発生することが、非線形スピン波や密度行列繰り込み群 (DMRG)

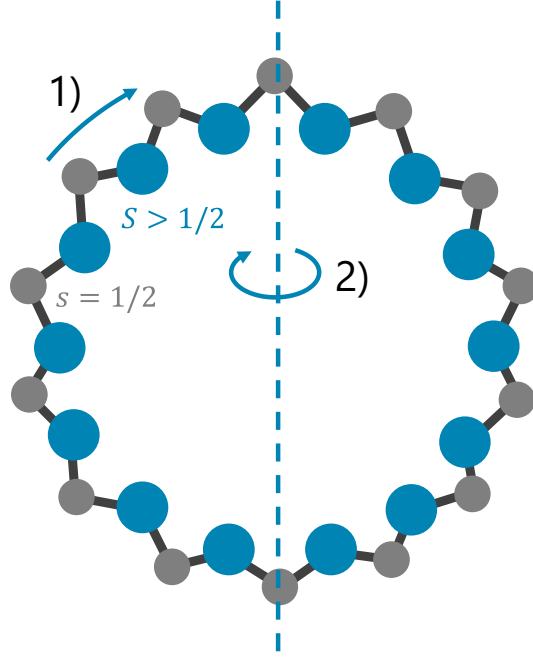


図 3: 混合スピン鎖の模式図。

法によって確かめられています [13, 14]。Fig. 4 は DMRG による $L = 64$ サイトの計算例になっています。

QS³/ED2 でこの系の計算を回す際の各インプットファイルは Table 1 のようになります。

input.dat ファイルに入力すべき非自明な事項としては

- $\text{NOS} = 2L$
- $\text{NODmax} = L \text{ or } L - 1$

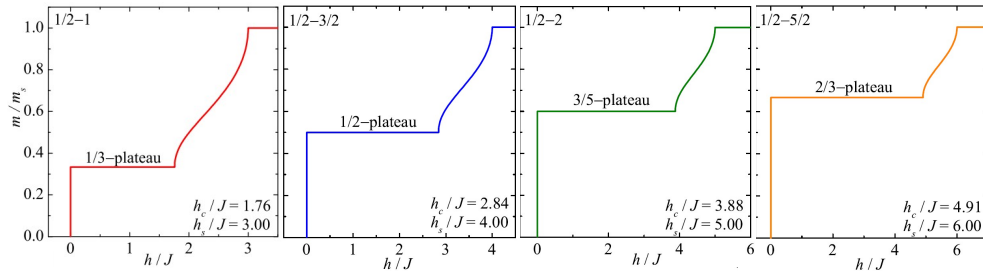


図 4: 混合スピン鎖の磁化曲線。論文 [14] から拝借。

表 1: 各インプットファイルの中身

list_spin.dat	list_NODmax	list_p1.dat	list_p2.dat
S	$\min[2S, \text{NODmax}]$	3	1
0.5	1	4	$2L$
S	$\min[2S, \text{NODmax}]$	5	$2L - 1$
0.5	1	6	$2L - 2$
S	$\min[2S, \text{NODmax}]$	7	$2L - 3$
0.5	1	8	$2L - 4$
...
S	$\min[2S, \text{NODmax}]$	1	3
0.5	1	2	2

- $L1 = L$
- $L2 = 2$
- $(M1, M2) = (0, 0)$
- $\text{NO_one} = 0$
- $\text{NO_two} = 2L$

あたりかと思います。 $(2S - 1)/(2S + 1)$ 磁化プラトー位置を指定している NODmax は

$$\text{NODmax} = m_s(1 - (2S - 1)/(2S + 1)) = L \quad (19)$$

となります。ここで $m_s = L(2S + 1)/2$ を利用しました。

プラトー幅は、 $\text{NODmax} = L$ で指定される空間の最低固有エネルギーと $\text{NODmax} = L - 1$ で指定される空間の最低固有エネルギーの差と等価になります。並進に対する波数 0 のところに最低固有エネルギーが現れるため、サイト反転操作と同時可換な点となっており、最低固有エネルギー状態はどちらもサイト反転に対して偶パリティ ($M2=0$) のセクターに現れます。

実際に $\text{QS}^3/\text{ED2}$ を活用して、当該プラトー幅を推定してみると、有限サイズ効果が極めて小さく、 $L = 2, 3, \dots, 8$ 程度の計算で数値的に十分厳密な結果が得られるのでぜひ確認してみてください。収束したプラトー幅の S 依存性を Fig. 5 に示します。 S が小さい領域で DMRG の結果を、

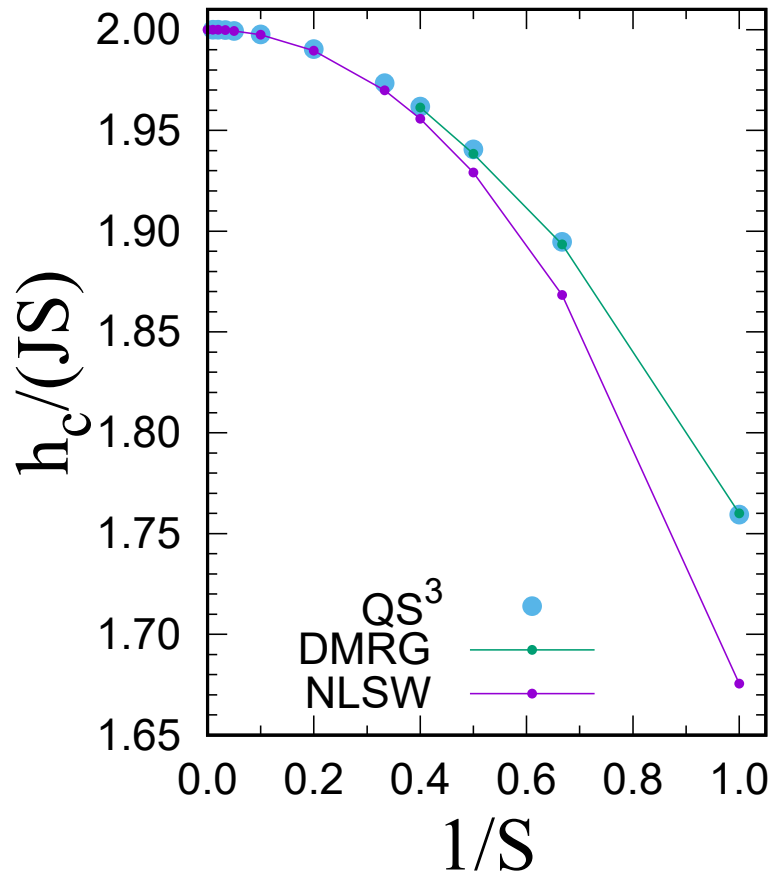


図 5: プラトー幅のスピン S 依存性。

S が大きな領域では $S \rightarrow \infty$ で厳密な非線形スピン波の結果を再現できていることがわかります⁸。

7 飽和磁場領域における弱横磁場とその磁気応答

⁸この自由度を活用してプログラムの中身を少し変更すると、ボソン系のシミュレーションに当該ソフトウェアを適用することもできます（そちらもそのうち公開予定です）。

8 計算原理

建設中...

9 サポート情報

9.1 問い合わせ先

ueda.hiroshi.qiqb@osaka-u.ac.jp

9.2 サポート時間

開発者が問い合わせ内容を確認次第、順次対応。

参考文献

- [1] H. Ueda, S. Yunoki, and T. Shimokawa, “Quantum spin solver near saturation: Qs^3 ,” *Computer Physics Communications*, vol. 277, p. 108369, 2022.
- [2] A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, “Bounded and inhomogeneous ising models. i. specific-heat anomaly of a finite lattice,” *Phys. Rev.*, vol. 185, pp. 832–846, Sep 1969.
- [3] D. P. Landau, “Finite-size behavior of the ising square lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. 13, pp. 2997–3011, Apr 1976.
- [4] K. Binder, “Critical properties from monte carlo coarse graining and renormalization,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 47, pp. 693–696, Aug 1981.
- [5] D. P. Landau and K. Binder, “Phase diagrams and critical behavior of ising square lattices with nearest-, next-nearest-, and third-nearest-neighbor couplings,” *Phys. Rev. B*, vol. 31, pp. 5946–5953, May 1985.
- [6] V. Privman, *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. WORLD SCIENTIFIC, 1990.

- [7] K. Nomura and K. Okamoto, “Critical properties of $s=1/2$ anti-ferromagnetic xxz chain with next-nearest-neighbour interactions,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 27, p. 5773, sep 1994.
- [8] K. Nomura, “Correlation functions of the 2d sine-gordon model,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 28, p. 5451, oct 1995.
- [9] A. Kitazawa, “Twisted boundary conditions of quantum spin chains near the gaussian fixed points,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 30, p. L285, may 1997.
- [10] K. Nomura and A. Kitazawa, “symmetry of the bkt transition and twisted boundary condition,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 31, p. 7341, sep 1998.
- [11] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, *et al.*, “Lapack users ’ guide (software, environments and tools),” *Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 3, 2000.
- [12] J. Calcote, *Autotools, 2nd Edition: A Practitioner’s Guide to GNU Autoconf, Automake, and Libtool*. No Starch Press, 2019.
- [13] T. Nakanishi and S. Yamamoto, “Intrinsic double-peak structure of the specific heat in low-dimensional quantum ferrimagnets,” *Phys. Rev. B*, vol. 65, p. 214418, May 2002.
- [14] J. Strečka, “Breakdown of a magnetization plateau in ferrimagnetic mixed spin-(1/2,s) heisenberg chains due to a quantum phase transition towards the luttinger spin liquid,” *Acta Physica Polonica A*, vol. 131, pp. 624–626, apr 2017.