ユーザーマニュアル: $\mathbf{QS^3}/\mathbf{ED2}$

August 30, 2023

Contents

1	導入	2
	1.1 プログラムの目的	2
	1.2 対象読者	2
2	システム要件	2
	2.1 必要なハードウェア	2
	2.2 必要なソフトウェア	3
	2.3 推奨環境	3
3	インストール方法	3
	3.1 ダウンロード先	3
	3.2 インストール手順	3
4	基本的な使い方	4
	4.1 入力情報	4
5	出力情報	9
6	TIPS	12
	6.1 三角格子での K 点	12
7	計算原理	12
8	サポート情報	12
	8.1 問い合わせ先	12
	8.2 サポート時間	12

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=1/2XXZ 模型の解析に有用な量子スピンソルバー QS^3 (キュー・エス・キューブ) [1] の特長を引き継ぎつつ、

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

$$\tag{1}$$

で与えられたハミルトニアン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 $S = 1/2, 1, 3/2, \cdots$ 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 Fortran 90 に関する知識があることが望ましいです。

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

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。

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 。

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

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

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。

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
       = 100,
NOS
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 pl.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 \text{ 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 QS^3/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:

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 $\{|i\rangle\}$, $1 \le i \le D$ とする。ここで D は対象とする系のヒルベルト空間次元)で表現した際に、系の飽和磁化を M_s として、

$$M_{\rm s} - \text{NODmax} \le \left\langle i \left| \sum_{r} \hat{S}_{r}^{z} \right| i \right\rangle \le M_{\rm s} - \text{NODmin}$$
 (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 Sz 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): QS³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サイトの一様な $XYZ+DM+\Gamma+Zeeman$ 項のある1次元鎖を考えているため、並進操作

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

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($\hat{T}_1,\cdots,\hat{T}_6$)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,\cdots,L_6 は、 $\hat{T}_1^{L_1}=\cdots=\hat{T}_6^{L_6}=\hat{1}$ 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

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

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、運動量 $\mathbf{k}=(k_1,k_2,k_3)=(2\pi M_1/L_1,2\pi M_2/L_2,2\pi M_3/L_3)$ と単位並進ベクトルとの間には $\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_u=k_u$ $(u\in\{1,2,3\})$ という関係がある。

 $^{^5}$ XYZ+ 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。

NO_one/two (INTEGER): 1 対相互作用 (h 項) /2 体相互作用 (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 \mathcal{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 \mathcal{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>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。

 $\mathbf{wr}_{\mathbf{w}}\mathbf{w}\mathbf{f}$ (INTEGER): $\mathbf{wr}_{\mathbf{w}}\mathbf{f}=1$ 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。ファイルの中身では、

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

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, h_r) がリスト

⁶D の大きさは粒子数の範囲や量子数の指定に依存します。

 $^{^7}$ MNTE 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。

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 $r \in [1, NOS]$ 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

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

の左辺が縦ベクトルとして格納されている。

FILE NODmax (CHARACTER): QS³ 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

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

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 $(2,1,2,1,\cdots)$ 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。

 ${f cal_lm, cal_cf}$ (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_xyz.dat、OUTDIR/two_body_cf_xyz.dat、

量に関する変数は0に設定します。OUTDIR/local mag.dat には

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

が格納されます。ここで 〈·〉 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

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

$$\{(r, r', \langle S_r^z S_{r'}^z \rangle, \langle S_r^+ S_{r'}^z \rangle, \langle S_r^- S_{r'}^z \rangle, \langle S_r^z S_{r'}^+ \rangle, \cdots, \langle S_r^- S_{r'}^- \rangle)\}$$
(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
```

```
### 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=
               1.00000000000000000000E-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
                                                3.4E - 15
itr, ene, conv:
                 150
                       -1.299620173300453E+01
***************
```

```
total lanczos step:
                       150
*****************
       -1.299620173300453E+01
**************
***************
quality of eigenvector
               \langle GS | H | GS \rangle =
                              -1.299620173300453E+01
|1 - (\langle GS|H|GS \rangle)^2/\langle GS|H^2|GS \rangle| =
                             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.
       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 の値をみてみるの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 TIPS

6.1 三角格子での K 点

7 計算原理

建設中...

8 サポート情報

8.1 問い合わせ先

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

8.2 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。

References

- [1] H. Ueda, S. Yunoki, and T. Shimokawa, "Quantum spin solver near saturation: Qs³," *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 antiferromagnetic 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.