松原 Green 関数の高速フーリエ変換

永井佑紀

平成 21 年 4 月 25 日

研究で FFT（高速フーリエ変換）を使用する可能性が出てきたので、FFT について軽くまとめた。FFT に関する文献は Web 上に大量にあるので、他の文献を見た方が詳しい可能性が高い。このノートでは、松原 Green 関数のフーリエ変換を、FFT を用いて計算する方法を述べる[1]。

1　高速フーリエ変換の原理

1.1　離散フーリエ変換

高速フーリエ変換とは、離散フーリエ変換を高速に実行するアルゴリズムである。まず、計算したい離散フーリエ変換を

$$G_t = \sum_{n=0}^{N-1} g_n e^{i\frac{2\pi}{N}nt} \tag{1}$$

とする。ここで、N 個の g_n から、N 個の G_t を求めることを考える。計算機における演算には、加算、減算、乗算、除算があるが、この計算では除算がないので、乗算が一番時間のかかるプロセスである。したがって、乗算の数を計算の速さの目安とする。以後、演算と言ったときは乗算を意味することにする。

ある t での G_t を求めるためには、N 回の $g_n e^{i2\pi nt/N}$ の演算が必要である。したがって、求めたい N 個の t での G_t を求めるには、N^2 の演算が必要である。

さて、この演算回数を減らすにはどのような方法があるだろうか。演算回数を減らすには、指数関数 $e^{i2\pi nt/N}$ の周期性を用いればよい。つまり、$e^{i2\pi} = 1$ であることをうまいこと使えばよい。このノートでは、Cooley-Tukey 型 FFT アルゴリズムの説明を行う。

1.2　Cooley-Tukey 型 FFT アルゴリズム

Cooley-Tukey 型 FFT アルゴリズムとは、離散点 N が $N = 2^k$ という場合に使える方法である。以下に概要を示す。求めたい G_t のうち、t が偶数のものと t が奇数のものに分けておく。そして、$t = 2t'$（偶数）、$t = 2t' + 1$（奇数）とする。このとき、式 (1) は

$$G_{2t'} = \sum_{n=0}^{N-1} g_n e^{i\frac{2\pi}{N}n2t'} \tag{2}$$

$$G_{2t'+1} = \sum_{n=0}^{N-1} g_n e^{i\frac{2\pi}{N}n(2t'+1)} \tag{3}$$

と書ける。

[1] 気がつけば簡単な話だが、気がつかなかったので、まとめてみた。

偶数

　式 (2) のとき、$n \to n + N/2$ の場合には、

$$e^{i\frac{2\pi}{N}(n+N/2)2t'} = e^{i\frac{2\pi}{N}2nt'}e^{i2\pi nt'} = e^{i\frac{2\pi}{N}2nt'} \tag{4}$$

と書ける。よって、$n = 0$ から $n = N - 1$ までの和は、

$$G_{2t'} = \sum_{n=0}^{N/2-1}(g_n + g_{n+N/2})e^{i\frac{2\pi}{N}n2t'} \tag{5}$$

$$= \sum_{n=0}^{N^{(1)}-1} g_{n+}^{(1)} e^{i\frac{2\pi}{N^{(1)}}nt'} \tag{6}$$

と書き直すことができる。ここで、

$$g_{N+}^{(1)} \equiv g_n + g_{n+N/2} \tag{7}$$

$$N^{(1)} \equiv \frac{N}{2} \tag{8}$$

と定義した。このように書き直すと、式 (6) は式 (1) と同じ形式になっていることがわかる。

奇数

　式 (3) のとき、$n \to n + N/2$ の場合には、

$$e^{i\frac{2\pi}{N}(n+N/2)(2t'+1)} = e^{i\frac{2\pi}{N}n(2t'+1)}e^{i2\pi nt'}e^{i\pi} = -e^{i\frac{2\pi}{N}2nt'} \tag{9}$$

と書ける。よって、$n = 0$ から $n = N - 1$ までの和は、

$$G_{2t'+1} = \sum_{n=0}^{N/2-1}(g_n e^{i\frac{2\pi}{N}n} - g_{n+N/2})e^{i\frac{2\pi}{N}n2t'} \tag{10}$$

$$= \sum_{n=0}^{N^{(1)}-1} g_{n-}^{(1)} e^{i\frac{2\pi}{N^{(1)}}nt'} \tag{11}$$

と書き直すことができる。ここで、

$$g_{N-}^{(1)} \equiv g_n e^{i\frac{2\pi}{N}n} - g_{n+N/2} \tag{12}$$

と定義した。このように書き直すと、式 (11) も式 (1) と同じ形式になっていることがわかる。そして、演算回数は $N/2$ に減っている。これをどんどん繰り返していくと、演算の回数をどんどん減らしていくことができる。ただし、N が 2 の累乗でなければ、この方法は使えない。

　なお、FFT のアルゴリズムは他にもいくつかある。FFT のアルゴリズムは改良されたものが複数あるので、高速化の観点から考えると、自分でソースを書くよりも、既存の FFT アルゴリズムを使用させてもらった方がよいと思われる。

2　松原 Green 関数のフーリエ変換

　次に、物理で使われる松原 Green 関数のフーリエ変換について考える。ここでは、フェルミ系を考えることにする。

2.1　定義

まず、松原 Green 関数のフーリエ変換は

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \lim_{N\to\infty} \sum_{n=-N}^{n=N} G(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \tag{13}$$

であり、ω_n は松原周波数で

$$\omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n+1) \tag{14}$$

である。ここで、$G(\tau)$ は

$$G(\tau+\beta) = -G(\tau) \tag{15}$$

という関係を満たしている。その結果、

$$G(\tau+2\beta) = G(\tau) \tag{16}$$

となり、$G(\tau)$ は周期 2β の周期関数であることがわかる。

2.2　対応関係の導出

式 (13) を n 依存性がわかるように書き直すと、

$$\begin{aligned} G(\tau) &= \frac{1}{\beta} \lim_{N\to\infty} \sum_{n=-N}^{n=N} G(i\omega_n) e^{-i\frac{\pi}{\beta}(2n+1)\tau} && (17)\\ &= \frac{1}{\beta} \lim_{N\to\infty} \sum_{n=-N}^{n=N} G(i\omega_n) e^{-i\frac{2\pi}{2\beta}(2n+1)\tau} && (18)\\ &= \frac{1}{\beta} \lim_{N\to\infty} \sum_{n=-N}^{n=N} G(i\omega_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}(2n+1)\frac{N\tau}{2\beta}} && (19) \end{aligned}$$

となる。

N が非常に大きければ

$$G(\tau_t) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-N}^{n=N} G(i\omega_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}(2n+1)\frac{N\tau_t}{2\beta}} \tag{20}$$

となる。この式は式 (1) と似ているが少し違う。和の範囲などが異なっている。

この式 (20) を変形する為に、

$$\begin{aligned} i\omega_{-n} &= i\frac{\pi}{\beta}(-2n+1) = -i\frac{\pi}{\beta}(2n-1) = -i\frac{\pi}{\beta}(2(n-1)+1) = -i\omega_{n-1} && (21)\\ G(i\omega_{-n}) &= G^*(i\omega_{n-1}) && (22) \end{aligned}$$

という関係を用いる。この関係式を用いると、$n=-1$ の項は $n=0$ の、$n=-N$ の項は $n=N-1$ の複素共役に等しいことになる。よって、

$$\begin{aligned} G(\tau_t) &= \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{n=N-1} \left(G(i\omega_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}(2n+1)\frac{N\tau_t}{2\beta}} + G^*(i\omega_n) e^{i\frac{2\pi}{N}(2n+1)\frac{N\tau_t}{2\beta}} \right) + G(i\omega_N) e^{-i\frac{2\pi}{N}(2N+1)\frac{N\tau_t}{2\beta}} && (23)\\ &\sim \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{n=N-1} \left(G(i\omega_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}(2n+1)\frac{N\tau_t}{2\beta}} + G^*(i\omega_n) e^{i\frac{2\pi}{N}(2n+1)\frac{N\tau_t}{2\beta}} \right) && (24) \end{aligned}$$

が得られる。ここで、N が大きいとき第三項は小さいため、無視した。故に、

$$G(\tau_t) \quad = \quad \frac{2}{\beta}\mathrm{Re}\left(\sum_{n=0}^{n=N-1} G(i\omega_n) e^{-i\frac{2\pi}{N}(2n+1)\frac{N\tau_t}{2\beta}}\right) \tag{25}$$

となる。さらに、$k \equiv 2n+1$ とし、数列

$$G_k = 0 \qquad (k:\ even) \tag{26}$$

$$G_k = G(i\omega_{(k-1)/2}) \qquad (k:\ odd) \tag{27}$$

を定義すると

$$G(\tau_t) \quad = \quad \frac{2}{\beta}\mathrm{Re}\left(\sum_{k=0}^{k=2N-1} G_k e^{-i\frac{2\pi}{2N}k\frac{N\tau_t}{\beta}}\right) \tag{28}$$

となる。これで大分式 (1) に似てきた。あとは、

$$\tau_t \quad \equiv \quad \Delta\tau t \tag{29}$$

$$\Delta\tau \quad \equiv \quad \frac{\beta}{N} \tag{30}$$

$$N' \quad \equiv \quad 2N \tag{31}$$

と定義しておけば、

$$G(\tau_t) \quad = \quad \frac{2}{\beta}\mathrm{Re}\left(\sum_{k=0}^{k=N'-1} G_k e^{-i\frac{2\pi}{N'}kt}\right) \tag{32}$$

となり、式 (1) と同じフーリエ変換になる。ただし、i ではなく $-i$ なので、上式は元のフーリエ変換の定義式に対する逆フーリエ変換になっている。FFT のアルゴリズム上では、i を $-i$ に変えることは容易であり、この点は問題にならない。

いま、数列 G_k は k が奇数のときのみ値を持つので、全部で $N'/2 = N$ 個の値がある。これは、データセットとして N 個の $G(i\omega_n)$ を用意したことと等しい。なお、$\Delta\tau = \beta/N$ は、周期 β を N 等分した離散点が $0 < \tau < \beta$ に存在することを意味している。

2.3 $\tau = 0$ での特別な取り扱い

さて、これで松原 Green 関数を高速フーリエ変換することができるようになった。しかし、$\tau = 0$ では、このフーリエ変換は問題が生じる。なぜなら、$G(\tau)$ は $G(-\tau+\beta) = -G(-\tau)$ という関数であり、周期 2β の間に必ず一回は符号変化を起こす関数だからである。これは、$\tau \to 0$ で非常に急激な変化を起こすことを意味している。急激な変化は高い周波数成分によって構成されているので、有限の N で打ち切る離散フーリエ変換ではうまく再現できない。しかし、$\tau = 0$ の値は使うことが多いので、知っておく必要がある。

Anderson モデルなどの不純物問題の場合、離散フーリエ変換をした値 $G^{dis}(\tau = 0)$ に対して -0.5 加えると正しい結果を与えることが知られている[2]。つまり、真の値 $G(\tau \to +0)$ は

$$G(\tau \to +0) = -0.5 + G^{dis}(\tau = 0) \tag{33}$$

となる。

これは理由は分からないが、以下の議論で理解できるかもしれない。フェルミオンの温度 Green 関数は

$$G(\tau) = G^R(\tau)\theta(\tau) - G^A(\tau)\theta(-\tau) \tag{34}$$

[2] 参考文献に付属していたソースコードより。

と書ける。温度 Green 関数は

$$G(\tau) \equiv -\langle T_\tau \psi(\tau)\psi^\dagger(0)\rangle \tag{35}$$

と書けるが、$\tau = 0$ のとき、

$$\begin{aligned} G(0) = -\langle T_\tau \psi(0)\psi^\dagger(0)\rangle &= -\langle \psi(0)\psi^\dagger(0)\rangle\theta(0) + \langle \psi^\dagger(0)\psi(0)\rangle\theta(0) && (36)\\ &= -\langle(\psi(0)\psi^\dagger(0) - \psi^\dagger(0)\psi(0))\rangle && (37)\\ &= -1 && (38) \end{aligned}$$

となる[3]。ここで、松原 Green 関数のフーリエ変換したときに出てくる関数は、$0 < \tau < \beta$ の $\tau < 0$ で定義されていたことを思い出そう。このとき得られる関数は、実は G^R であるとする。一方、フーリエ変換した結果得られる $\tau = 0$ の値 G^0 は、離散フーリエ変換の性質から、

$$G^0 = \frac{G(\tau \to 0-) + G(\tau \to 0+)}{2} \tag{39}$$

となる。この $G(\tau \to 0-)$ や $G(\tau \to 0+)$ がそれぞれ G^A、G^R だとすれば、$G^A(\tau = 0) - G^R(\tau = 0) = 1$ から

$$G^R(\tau = 0) = G^0 - \frac{1}{2} \tag{40}$$

が得られる。$\tau = 0$ のときに数値的に得られる Green 関数 $G^{dis}(\tau = 0)$ が $G^{dis}(\tau = 0) = G^0$ であり、式 (13) で得られる Green 関数が $\tau > 0$ で $G^R(\tau)$ であるならば、上式は式 (33) と等しい。もしこの議論が正しければ、不純物問題に限らず、Green 関数の足がすべてそろっている状況であれば式 (33) が使える可能性がある。

以上から、$\tau = 0$ のときのみ、式 (33) を用いればよいのである。

参考文献

A. Georges *et al.*, Rev. Mod. Phys. **68** 13 (1996)

[3]フェルミオンの反交換関係より。