

HΦでの動的グリーン関数計算方法

2016/12/1 東北大学

吉見 一慶

東京大学物性研究所 特任研究員 (PCoMS PI)

ソフトウェア高度化推進チーム



1. 動的グリーン関数概要
2. HΦでの計算の流れ
3. 具体例：動的スピン感受率の計算
4. 関連キーワード一覧 (入力ファイル)

謝辞：東大物性研 加藤岳生准教授 (スピン感受率計算用スクリプトの提供)

1. 動的グリーン関数概要

① 励起状態の計算

$$|\Phi'\rangle = \hat{O}|\Phi_0\rangle$$

励起状態

初期状態

② 動的関数の計算

$$I(z) = \langle \Phi' | \left[\mathcal{H} - z\hat{I} \right]^{-1} | \Phi' \rangle$$

解法 1 : 連分数展開(Lanczos法)による解法 (HΦ ver.1.2)

ref.) E.Dagotto, Rev. Mod. Phys. 66, 763 (1994)

解法 2 : シフト型クリロフ理論による解法 (HΦ ver. 2.0)

ref.) S. Yamamoto et al., J. Phys. Soc. Jpn. 77, 114713 (2008) ₂

2. HΦでの計算の流れ (1)

1st. step

Lanczos法による初期状態（固有ベクトル）の計算・出力

2nd. step

初期状態入力ファイルの指定 (namelist.def:SpectrumVec)

励起状態用ファイルの作成 (namelist.def: %%Excitation)

各種パラメータ(計算する周波数)の指定 (modpara.def)

3rd. step

動的グリーン関数の計算

2. HΦでの計算の流れ (2)

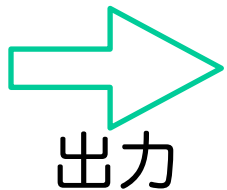
1st. step

Lanczos法による初期状態（固有ベクトル）の計算・出力

固有ベクトルの出力方法 (Expertモードのみ対応)

CalcMod (calcmmod.def)ファイルに

“OutputEigenVec 1”を追加して計算。



zvo_eigenvec_%%_rank_\$.dat

%%: 固有値の番号、\$: プロセス番号 (MPI)

2. HΦでの計算の流れ (3)

2nd. step (1)

初期状態入力ファイルの指定 (namelist.def:SpectrumVec)

固有ベクトルの入力方法 (Expertモードのみ対応)

namelist.def ファイルに

“SpectrumSpecVec zvo_eigenvec_%%” を追加。

ref.) zvo_eigenvec_%%_rank_\$\$\$.dat

%%: 固有値の番号、\$\$: プロセス番号 (MPI)

2. HΦでの計算の流れ (4)

2nd. step (2)

励起状態用ファイルの作成(namelist.def: %%Excitation)

以下の2種類の励起状態が指定可能

1) シングル励起状態 (キーワード : SingleExcitation)

$$|\Phi'\rangle \equiv \sum_{i,\sigma_1} A_{i\sigma_1} c_{i\sigma_1} (c_{i\sigma_1}^\dagger) |\Phi\rangle$$

2) ペア励起状態 (キーワード : PairExcitation)

$$|\Phi'\rangle \equiv \sum_{i,j,\sigma_1,\sigma_2} A_{i\sigma_1 j\sigma_2} c_{i\sigma_1} c_{j\sigma_2}^\dagger (c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2}) |\Phi\rangle$$

2. HΦでの計算の流れ (5)

1) シングル励起状態 (キーワード : SingleExcitation)

$$|\Phi'\rangle \equiv \sum_{i,\sigma_1} A_{i\sigma_1} c_{i\sigma_1} (c_{i\sigma_1}^\dagger) |\Phi\rangle$$

=====				
NSingle		24		
=====				
===== Single Excitation =====				
=====				
0	0	0	1.0	0.0
0	1	0	1.0	0.0
1	0	0	1.0	0.0
...				

ヘッダ

演算子の総数

ヘッダ (3-5行)

type: 0 消滅演算子

type: 1 生成演算子

(注) 混合不可

i σ₁ type Re A_{iσ₁} Im A_{iσ₁}

2. HΦでの計算の流れ (6)

2) ペア励起状態 (キーワード: PairExcitation)

$$|\Phi'\rangle \equiv \sum_{i,j,\sigma_1,\sigma_2} A_{i\sigma_1 j\sigma_2} c_{i\sigma_1} c_{j\sigma_2}^\dagger (c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2}) |\Phi\rangle$$

=====						
NPair	24					
=====						
==== Pair Excitation =====						
=====						
0	0	0	0	0	1.0	0.0
0	1	0	1	0	1.0	0.0
1	0	1	0	0	1.0	0.0
...						

ヘッダ

演算子の総数

ヘッダ (3-5行)

type=0 $c_{i\sigma_1} c_{j\sigma_2}^\dagger$

type=1 $c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2}$

(注) 混合不可

i σ₁ j σ₂ type Re A_{iσ₁jσ₂} Im A_{iσ₁jσ₂}

2. HΦでの計算の流れ (7)

2nd. step (3)

各種パラメータ(計算する周波数)の指定 (modpara.def)

ModPara (modpara.def)ファイルに以下を追加

キーワード	型	備考
OmegaMin	double	周波数実部の最小値
OmegaMax	double	周波数実部の最大値
NOmega	double	周波数の分割数
Omegalm	double	周波数虚部の値

収束判定する周波数は $(\text{OmegaMax} - \text{OmegaMin})/2$

2. HΦでの計算の流れ (8)

3rd. step

動的グリーン関数の計算

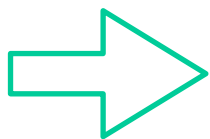
CalcMod (calcmmod.def)ファイル

消去：“OutputEigenVec 1”

追加：“CalcSpec 1”

を行った後に、Expertモードで計算実行。

出力



zvo_DynamicalGreen.dat

Re[z] Im[z] Re[l(z)] Im[l(z)] の順に出力

3. 具体例：動的スピン感受率の計算(1)

Heisenberg chain $N = 20$, $S_z^{\text{tot}} = 0$

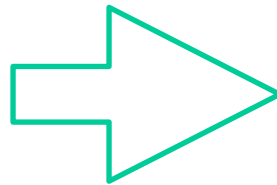
① 入力ファイル(StdFace.def)作成

```
L = 20  
model = "Spin"  
method = "Lanczos"  
lattice = "chain"  
J = 1.0  
2Sz = 0
```

StdFace.def

sdryモードで実行

HPhi -sdry ./StdFace.def



Expert用

入力ファイルー式作成

3. 具体例：動的スピン感受率の計算 (2)

② calcmode.def 編集し、計算実行

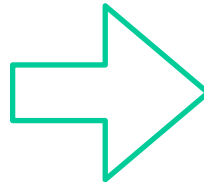
```
CalcType 0  
CalcModel 1  
OutputMode 1  
OutputEigenVec 1
```

calcmode.def

OutputEigenVec 1 を追加

実行

HPhi -e ./namelist.def



初期状態ベクトル出力

zvo_eigenvec_0_rank_0.dat

3. 具体例：動的スピン感受率の計算 (3)

③ namelist.defを編集

```
CalcMod calcmmod.def  
ModPara modpara.def  
LocSpin zlocspn.def  
Trans zTrans.def  
InterAll zInterAll.def  
OneBodyG greenone.def  
TwoBodyG greentwo.def  
SpectrumVec zvo_eigenvec_0  
PairExcitation pair.def
```

namelist.def

SpectrumVec zvo_eigenvec_0
PairExcitation pair.def
を追加

3. 具体例：動的スピン感受率の計算 (4)

④ modpara.defを編集

```
OmegaMin -20  
OmegaMax 0  
NOmega 100  
Omegalm 0.1
```

計算する周波数の情報を追加

modpara.defの一部

⑤ calcmod.defを編集

```
CalcSpec 1
```

計算モードの変更

3. 具体例：動的スピン感受率の計算 (5)

⑥ ペア励起演算子作成

$$\hat{S}(k_i) = \sum_j \hat{S}_j^z e^{ik_i r_j} = \sum_j \frac{1}{2} (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) e^{ik_i r_j}$$

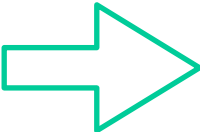
スクリプトで作成 (以下はpythonスクリプトの一部)

```
for j in range(L):  
    wr = 0.5*math.cos(2.0*math.pi*float(i)*float(j)/float(L))  
    wi = 0.5*math.sin(2.0*math.pi*float(i)*float(j)/float(L))  
    f.write('%i 0 %i 0 1 %f %f\n' % (j,j,wr,wi))  
    f.write('%i 1 %i 1 1 %f %f\n' % (j,j,-wr,-wi))
```

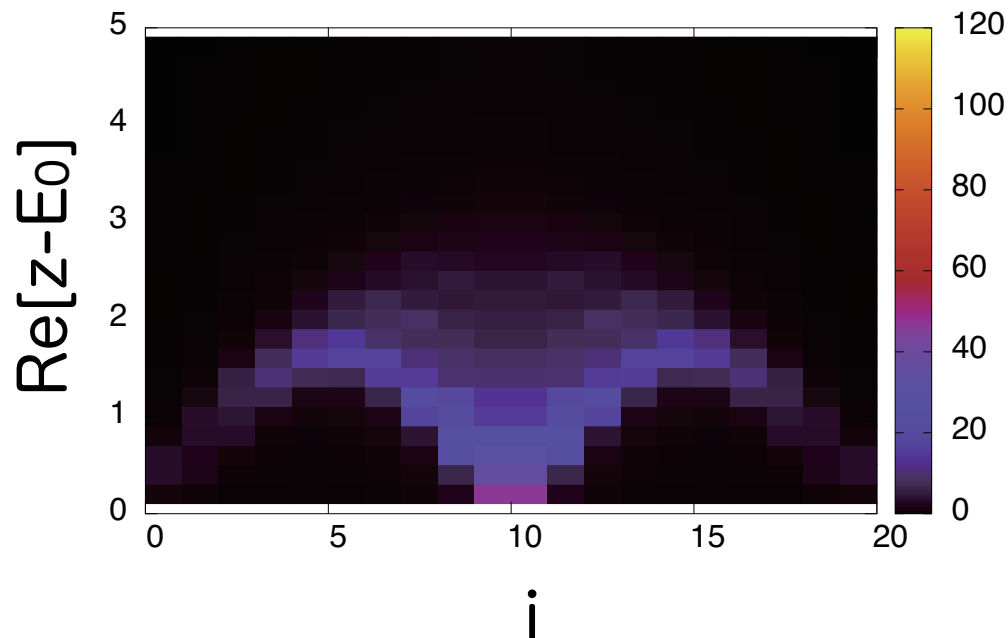
Lはサイト数, iは $k=2\pi i/L$ のラベル

3. 具体例：動的スピン感受率の計算 (6)

⑦ 計算実行

HPhi -e namelist.def  出力
zvo_DynamicalGreen.dat

各波数に対して $-\text{Im}[l(z)]$ を計算した結果



3. その他

- ・ 以下の機能があります。詳細はマニュアルをご覧ください
 - ・ 再計算機能 (CalcModファイルのCalcSpecを利用)
 - ・ 入力：三重対角行列の要素、ノルム
 - 様々な周波数の動的グリーン関数の再計算
 - ・ 入力: 三重対角行列の要素、ノルム、ベクトル
 - 連分数展開のカットオフ依存性調査

4. 関連キーワード一覧 (入力ファイル)

- namelist.def
PairExcitation, SingleExcitation, SpectrumVec
- CalcMod (calcmmod.def)
OutputEigenVec, CalcSpec
- ModPara (modpara.def)
OmegaMin, OmegaMax, NOmega, Omegalm