最大エントロピー法によるスペクトル推定

愛媛大理 楠瀬博明

Abstract

最大エントロピー法 (MEM: Maximum Entropy Method) を用いた逆 Laplace 変換、解析接続についてのまとめ。計算プログラムを作成する上での注意点を中心に説明する。また、安定解を得るための Bryan アルゴリズムについても述べる。Bayes 推定を用いた MEM の基礎づけについては、付録に簡単にまとめておく。参考のため、Padé 近似についても述べる。

1. 概略

最大エントロピー法は、離散点 τ_ℓ における誤差 $\sigma(\tau_\ell)$ を含むスペクトルの Laplace 変換または Fourier 変換 $H(\tau_\ell)$ から元のスペクトル $X(\omega)$ を推定する方法である。すなわち

$$H(\tau;X) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K(\tau;\omega)X(\omega), \quad (0 < \tau < \beta) \tag{1}$$

の関係が正確に成り立つことが分かっているときに、誤差 $\sigma(\tau_\ell)$ を含む $H(\tau_\ell)$ から (1) 式の逆解 $X(\omega)$ を求めることが目的である。$K(\tau;\omega)$ は積分核。以下では、スペクトル $X(\omega)$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega X(\omega) = 1, \quad X(\omega) \geq 0 \tag{2}$$

を満たすものとする。

例えば、$h(\omega)$ から $H(\tau)$ への Laplace 変換であれば、

$$X(\omega) \equiv h(\omega)\theta(\omega), \quad K(\tau;\omega) \equiv e^{-\tau\omega} \tag{3}$$

と見なせる。$\theta(\omega)$ は階段関数。また、虚時間グリーン関数とスペクトルの関係は

$$\left.\begin{array}{l} G(\tau;A) \\ \chi(\tau;B) \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{ll} \displaystyle -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1+e^{-\beta\omega}} A(\omega) & \text{(fermion)} \\ \displaystyle \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1-e^{-\beta\omega}} B(\omega) & \text{(boson)} \end{array}\right. , \qquad (\tau > 0) \tag{4}$$

で与えられる。ここで、$A(\omega) = -(1/\pi)\mathrm{Im}\, G(\omega + i\delta)$, $B(\omega) = -B(-\omega) = \mathrm{Im}\,\chi(\omega + i\delta)$ である。これらの関係式を (2) 式を満たしながら (1) 式の形に書き換えるには

$$X(\omega) \equiv \left\{\begin{array}{l} A(\omega) \\ \coth\left(\dfrac{\beta\omega}{2}\right) \dfrac{B(\omega)/\pi}{\chi(\tau=0)}\theta(\omega) \end{array}\right. \quad H(\tau) \equiv \left\{\begin{array}{l} G(\tau) \\ \dfrac{\chi(\tau)}{\chi(\tau=0)} \end{array}\right. \quad K(\tau;\omega) \equiv \left\{\begin{array}{l} -\dfrac{e^{-\tau\omega}}{1+e^{-\beta\omega}} \\ \dfrac{e^{-\tau\omega}+e^{-(\beta-\tau)\omega}}{1+e^{-\beta\omega}}\theta(\omega) \end{array}\right. \tag{5}$$

と選べばよい。boson の場合、$\coth(\beta\omega/2) \propto 1/\omega$ は $\omega \to 0$ で発散するが、通常 $B(\omega) \propto \omega$ であり $X(\omega)$ は有限にとどまる。

最大エントロピー法では、測定データ $H(\tau_\ell)$ が (1) 式で与えられる理論値 $H(\tau_\ell; X)$ に対し、ガウス分布しているとして

$$\chi^2 \equiv \sum_\ell \frac{(H(\tau_\ell) - H(\tau_\ell; X))^2}{\sigma^2(\tau_\ell)} \tag{6}$$

なる量を定義する。また、スペクトルの満たす基本条件 (2) 式を表現するデフォルトモデル $D(\omega)$ を基準とする $X(\omega)$ のエントロピー

$$S \equiv -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[X(\omega) \ln \frac{X(\omega)}{D(\omega)} + D(\omega) - X(\omega) \right] \tag{7}$$

を導入する。エントロピーは常に負の α に関する単調関数であり、$X(\omega) = D(\omega)$ の時、最大値ゼロをとる。$D(\omega)$ は (2) 式を満たす定数とするのが自然であろう。これら二つの量から「自由エネルギー」$F = \chi^2/2 - \alpha S$ を定義する。統計力学に習って、「温度」α におけるスペクトル $X(\omega)$ の出現確率が

$$P[X(\omega), \alpha | H(\tau_\ell)] \propto \exp(-F) \tag{8}$$

で与えられるものとし、この確率が最大 (自由エネルギー F が最小) となるようなスペクトル X_i を求めるのである。温度が非常に高い場合、測定データ $H(\tau_\ell)$ は軽視され、エントロピーの大きい、より構造のないスペクトルが推定値 (熱平衡値) となる。特に、$\alpha = \infty$ で $X(\omega) = D(\omega)$。一方、低温では、測定データを重視し χ^2 を最小にするようなスペクトルが得られる。特に、$\alpha = 0$ の場合、最大エントロピー法は最小自乗法に帰着する。

温度 α を決めるには何らかの条件が必要である。これについては後ほど述べる。

2. 離散化と自由エネルギー最小条件

2.1. 離散化

実際の計算では離散データを取り扱う必要がある。十分大きな $|\omega| > \omega_c$ に対し、$X(\omega) = 0$ であるとし

$$\tau_\ell = \ell \times \Delta\tau, \ \ (\ell = [0, L), \Delta\tau = \frac{\beta}{L})$$
$$\omega_i = \frac{R^{|i-n_0|} - 1}{R^{N-1-n_0} - 1} \omega \, \mathrm{sign}(i - n_0), \quad i = [0, N), \qquad \omega_i = \frac{i - n_0}{N - 1 - n_0} \omega_c, \ \ (R \to 1)$$
$$\Delta\omega_i = \begin{cases} (\omega_1 - \omega_0)/2 & (i = 0) \\ (\omega_{N-1} - \omega_{N-2})/2 & (i = N - 1) \\ (\omega_{i+1} - \omega_{i-1})/2 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{9}$$

と離散化する。ここで、fermion の場合 $n_0 = (N-1)/2$、その他は $n_0 = 0$ とする。また、R は離散点の分布を調節するパラメータで、$R > 1$ なら原点付近が密に、$R < 1$ ならば疎になる。無次元量 $g_i \equiv g(\omega_i)\Delta\omega_i$,

$h_\ell \equiv h(\tau_\ell)$ および $K_{\ell,i} \equiv K(\tau_\ell;\omega_i)$ を導入すると式 (1), (2), (6), (7) はそれぞれ

$$H_\ell(X) = \sum_{i=0}^{N-1} K_{\ell,i} X_i, \quad \sum_{i=0}^{N-1} X_i = 1,$$
$$\chi^2 = \sum_{\ell=0}^{L-1} \frac{(H_\ell - H_\ell(X))^2}{\sigma_\ell^2}, \quad S = -\sum_{i=0}^{N-1}\left[X_i \ln\frac{X_i}{D_i} + D_i - X_i\right] \tag{10}$$

となる。デフォルトモデルは $D_i = \Delta\omega_i/(\omega_{N-1} - \omega_0)$ とすればよい。従って

$$F = \frac{1}{2}\left[\sum_{ij} X_i M_{ij} X_j - 2\sum_i B_i X_i + C\right] + \alpha\sum_i\left[X_i \ln\frac{X_i}{D_i} + D_i - X_i\right] \tag{11}$$

である。ここで

$$M_{ij} \equiv \sum_\ell \frac{K_{\ell,i}K_{\ell,j}}{\sigma_\ell^2}, \quad B_i \equiv \sum_\ell \frac{K_{\ell,i}H_\ell}{\sigma_\ell^2}, \quad C \equiv \sum_\ell \frac{H_\ell^2}{\sigma_\ell^2} \tag{12}$$

とおいた。

$\{X_i\}$ について、自由エネルギーを最小にする N 個の条件は

$$f_i \equiv \frac{\partial F}{\partial X_i} = \sum_j M_{ij}X_j - B_i + \alpha\ln\frac{X_i}{D_i} = 0, \quad (i = 0, 1, \cdots N-1) \tag{13}$$

である。変数 $y_i \equiv \ln(X_i/D_i)$ を導入すると、非線形連立方程式を解くための Jacobian は

$$J_{ij} \equiv \frac{\partial f_i}{\partial y_j} = M_{ij}X_j + \alpha\delta_{ij} \tag{14}$$

となる。

実際の計算では各 α に対して $\overline{X_i}$ を求めるのが難しいので、非常に大きな α からはじめて、指数的に α を小さくしていくようにするとよい。すなわち

$$\alpha = \alpha_{\min}\gamma^k, \quad (k = p-1, p-2, \cdots, 0) \tag{15}$$

とする。α の最大値を $\alpha_{\max}$、分割数を p すると

$$\gamma = \left(\frac{\alpha_{\max}}{\alpha_{\min}}\right)^{1/(p-1)} \tag{16}$$

である。α によらず安定して $\overline{X_i}$ を求める方法として、次の Bryan アルゴリズムがある。

2.2. Bryan アルゴリズム

積分核 $K_{\ell,i}$ は大きさの極端に異なる要素を持ち特異的である。このため、非線形連立方程式の解 $\overline{X_i}$ を求めるのは困難を伴う。そこで、積分核の転置を特異値分解し、特異値の小さいものは捨てる。すなわち、

$$\left(K^T\right)_{i\ell} = \sum_{\ell'=0}^{L-1} U_{i\ell'}S_{\ell'}\left(V^T\right)_{\ell'\ell} \sim \sum_{m=0}^{s-1} U_{im}S_m\left(V^T\right)_{m\ell} \tag{17}$$

のように $S_{\ell'}$ のうち、特異値の大きい $\ell' = 0 \sim s-1$ の要素に制限された「特異空間」を対象として解を探すのである。

解として

$$X_i \sim D_i \exp\left[\sum_{m=0}^{s-1} U_{im} w_m\right], \quad y_i = \ln \frac{X_i}{D_i} \sim \sum_{m=0}^{s-1} U_{im} w_m \tag{18}$$

の形を仮定しよう。このとき

$$M_{ij} = \sum_m U_{im} M^{(s)}_{mj}, \quad M^{(s)}_{mj} \equiv \sum_{n=0}^{s-1}\sum_{\ell=0}^{L-1} \frac{S_m \left(V^T\right)_{m\ell} V_{\ell n} S_n}{\sigma_\ell^2} \left(U^T\right)_{nj} \sim \sum_{\ell=0}^{L-1} \frac{S_m \left(V^T\right)_{m\ell} K_{\ell,j}}{\sigma_\ell^2}$$

$$B_i = \sum_m U_{im} B^{(s)}_m, \quad B^{(s)}_m = \sum_{\ell=0}^{L-1} \frac{S_m \left(V^T\right)_{m\ell} H_\ell}{\sigma_\ell^2} \tag{19}$$

として、最大確率を求める条件 (13) は

$$f_m \equiv \sum_{i=0}^{N-1} \left(U^{-1}\right)_{mi} f_i = \sum_j M^{(s)}_{mj} X_j - B^{(s)}_m + \alpha w_m = 0 \tag{20}$$

と表せる。式 (14) に相当する Jacobian は

$$J_{mn} \equiv \frac{\partial f_m}{\partial w_n} = \sum_{ij} \left(U^{-1}\right)_{mi} J_{ij} U_{jn} = \sum_j M^{(s)}_{mj} X_j U_{jn} + \alpha \delta_{mn} \tag{21}$$

である。与えられた α に対して w_m を求めればよい。

3. α 決定条件

測定データ H_ℓ を与えるような温度が α である事後確率を、自由エネルギー F を最小にする $\overline{X_i}(\alpha)$ まわりのガウス近似を用いて評価すると

$$P[\alpha|H_\ell] \sim \exp\left[-\overline{F} + \frac{1}{2}\sum_i \ln \frac{\alpha}{\lambda_i + \alpha}\right] \tag{22}$$

となる。ここで $\overline{F} = F(\overline{X_i})$ であり、λ_i は Hessian 行列 $\Lambda_{ij} = M_{ij}\sqrt{\overline{X_i X_j}}$ の固有値である。

$P[\alpha|H_\ell]$ が $\overline{\alpha}$ で鋭い極大を持つ場合に、$\alpha = \overline{\alpha}$ を用いて X_i を評価するのが古典最大エントロピー条件である。すなわち

$$\frac{\partial \ln P}{\partial \ln \alpha} = \alpha\left(\overline{S} - S_{\mathrm{cl}}\right) = 0, \quad S_{\mathrm{cl}} \equiv -\frac{1}{2\alpha}\sum_i \frac{\lambda_i}{\lambda_i + \alpha} \tag{23}$$

を満たすように $\overline{\alpha}$ を選ぶと、$\overline{X_i}(\overline{\alpha})$ が求めるスペクトルである。

もし鋭い極大を持たないのであれば、すべての α に渡って

$$\langle X_i \rangle = \frac{\int_0^\infty d\alpha\, \overline{X_i}(\alpha)\, P[\alpha|H_\ell]}{\int_0^\infty d\alpha P[\alpha|H_\ell]} \tag{24}$$

のようにスペクトルを平均的に評価すればよい。(15) 式を使えば、(24) 式は

$$\left\langle \overline{X_i} \right\rangle \sim \sum_k \rho_k \overline{X_i}(k), \quad \rho_k \equiv \frac{\alpha_k P[\alpha_k|H_\ell]}{\sum_k \alpha_k P[\alpha_k|H_\ell]} \tag{25}$$

となる。

以上より、スペクトル $A(\omega_i), B(\omega_i)$ は X_i から

$$\left. \begin{array}{l} A(\omega_i) \\ B(\omega_i) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} X_i/\Delta\omega_i \\ X_i \tanh(\beta\omega_i/2)\pi\chi(\tau=0)\theta(\omega_i)/\Delta\omega_i \end{array} \right. \tag{26}$$

と求めることができる。また、r 次のモーメント

$$I_r \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^r X(\omega) \sim \sum_{i=0}^{N-1} \omega_i^r X_i \tag{27}$$

を定義し、得られたスペクトルの特徴を確認しておくとよい。特に、$I_0 = 1$ である。

A. Bayes 推定に基づく最大エントロピー法

A.1. Bayes 推定

ある事象 (event) a が起こる確率 (probability) を $P[a]$、事象 b が起こった場合に事象 a が起こる条件付き (conditional) 確率を $P[a|b]$、事象 a および事象 b が起こる確率 (joint prob.) を $P[a,b]$ と表す。規格化条件は

$$\sum_b P[a] = 1, \quad \sum_b P[a|b] = 1 \tag{28}$$

である。定義より

$$\sum_b P[a,b] = P[a] \tag{29}$$

および

$$P[a,b] = P[a|b]P[b] = P[b|a]P[a] \tag{30}$$

が成り立つ。最後の関係を Bayes の定理という。この関係を書き直すと

$$P[b|a] = \frac{P[a|b]P[b]}{P[a]} \tag{31}$$

となる。この関係式を用いて結果から原因を推定する方法が Bayes 推定である。

事象 b を原因 (evidence) としよう。その確率 $P[b]$ を事前確率 (prior prob.) という。また、原因 b の下で結果が a となる確率 $P[a|b]$ を尤度 (ゆうど、likelihood function) とよぶ。結果 a が分かっているときにその原因が b である確率 $P[b|a]$ を事後確率 (posterior prob.) といい、Bayes 推定では事後確率を最大にするという条件から原因を推定する。

(29) の左辺に (30) 式を代入すると

$$P[a] = \sum_b P[a|b]P[b] \tag{32}$$

を得る。これより $P[a]$ は $P[a|b], P[b]$ の定義によって決まる規格化定数にすぎないことが分かる。以下では $P[a] \equiv 1$ となるように $P[a|b], P[b]$ を選ぶ。(31) 式より、事後確率 $P[b|a]$ を求める問題は $P[a|b]$ および $P[b]$ を求める問題に帰着されることが分かる。

逆 Laplace 問題または解析接続の問題では、結果 a は測定データ H_ℓ、原因 b はスペクトル X_i と考える。以下、尤度 $P[H_\ell|X_i]$ および事前確率 $P[X_i]$ を求める。これらが求まると、事後確率は

$$P[X_i|H_\ell] = P[H_\ell|X_i]P[X_i] \tag{33}$$

と計算される。

A.2. 尤度

スペクトル X_i が与えられたとき、理論値 $H_\ell(X)$ に対して測定データ H_ℓ が分散 σ_ℓ でガウス分布していると仮定して、尤度は

$$P[H_\ell|X_i] = \frac{1}{Z_L}\prod_\ell \exp\left[(H_\ell - H_\ell(X))^2/2\sigma_\ell^2\right] = \frac{1}{Z_L}e^{-\chi^2/2},$$
$$\chi^2 = \sum_\ell \frac{(H_\ell - H_\ell(X))^2}{\sigma_\ell^2}, \quad Z_L = \prod_\ell (2\pi\sigma_\ell^2)^{1/2} \tag{34}$$

と与えられる。

A.3. 事前確率

測定データがない場合、スペクトルに関する情報は

$$\sum_i X_i = 1, \quad X_i \geq 0 \tag{35}$$

だけである。そこで以上の条件を満たすデフォルトモデル D_i を用いて、スペクトル X_i の平均値がデフォルトモデルに一致する $\langle X_i \rangle = D_i$ という条件を課す。$\{ X_i \}$ の分布は、適当な単位 α を用いて $X_i = x_i/\alpha$ と離散化すると、非負の整数値 $\{ x_i \}$ のあらゆる組み合わせとして表される。$x_i \gg 1$ の場合、このような条件を満たす分布は Poisson 分布で与えられる。すなわち

$$\prod_i \left(\frac{d_i^{x_i}e^{-d_i}}{x_i!}dx_i\right) \sim \prod_i \left(\frac{dX_i}{\sqrt{X_i}}\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\exp\left[\alpha(X_i - D_i - X_i\ln(X_i/D_i)\right]\right) \equiv P[X_i, \alpha|D_i]\,\mathcal{D}X,$$

$$P[X_i,\alpha|D_i]=\frac{e^{\alpha S}}{Z_S(\alpha)},\quad S=-\sum_i\left[X_i\ln\left(\frac{X_i}{D_i}\right)+D_i-X_i\right],\quad Z_S(\alpha)=\left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{N/2},$$
$$\mathcal{D}X=\left(\prod_i\frac{dX_i}{\sqrt{X_i}}\right)\tag{36}$$

である。一行目の近似で Stirling の公式

$$x_i!\sim(2\pi x_i)^{1/2}\exp\left[x_i(\ln x_i-1)\right],\quad (x_i\gg 1)\tag{37}$$

を用いた。S は D_i を基準とした情報エントロピーの意味を持ち、最大値ゼロの α について単調な関数である。

A.4. スペクトル推定

事前確率にパラメータ α が含まれることに注意すると、スペクトルの平均値は

$$\langle X_i\rangle=\frac{\int d\alpha\int\mathcal{D}XP[X_i,\alpha|H_\ell]\ X_i}{\int d\alpha\int\mathcal{D}XP[X_i,\alpha|H_\ell]}\tag{38}$$

より求められる。前節までの結果から、事後確率は

$$P[X_i,\alpha|H_\ell]=P[H_\ell|X_i,\alpha]P[X_i,\alpha]=P[H_\ell|X_i]P[X_i,\alpha|D_i]=\frac{1}{Z_LZ_S(\alpha)}e^{-F},\quad F\equiv\frac{1}{2}\chi^2-\alpha S\tag{39}$$

である。α に依存していることに注意。

与えられた α に対し、$P[X_i,\alpha|H_\ell]$ は $X_i=\overline{X_i}(\alpha)$ に鋭いピークを持つ関数である。このとき、(38) 式は

$$\langle X_i\rangle\sim\frac{\int d\alpha\overline{X_i}(\alpha)P[\alpha|H_\ell]}{\int d\alpha P[\alpha|H_\ell]},\quad P[\alpha|H_\ell]=\int\mathcal{D}XP[X_i,\alpha|H_\ell]\tag{40}$$

と近似できる。$P[\alpha|H_\ell]$ を $\overline{X_i}(\alpha)$ まわりのガウス近似で評価してみよう。$\xi_i=2\sqrt{X_i}$、$\xi_i=\overline{\xi_i}+z_i$ と変数変換し、z_i について Taylor 展開すると

$$F[X_i]\sim F[\overline{X_i}]+\sum_i\frac{\partial F}{\partial\overline{\xi}_i}z_i+\frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{\partial^2F}{\partial\overline{\xi}_i\partial\overline{\xi}_j}z_iz_j=F[\overline{X_i}]+\sum_i\frac{\partial F}{\partial\overline{X}_i}\sqrt{\overline{X}_i}z_i+\frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{\partial^2F}{\partial\overline{X}_i\partial\overline{X}_j}\sqrt{\overline{X_iX_j}}z_iz_j$$
$$=F[\overline{X_i}]+\frac{1}{2}\sum_{ij}\left(M_{ij}+\frac{\alpha}{\overline{X}_i}\delta_{ij}\right)\sqrt{\overline{X_iX_j}}z_iz_j=\overline{F}+\frac{1}{2}\sum_{ij}\left(\Lambda_{ij}+\alpha\delta_{ij}\right)z_iz_j\tag{41}$$

である。ここで Hessian 行列 $\Lambda_{ij}=M_{ij}\sqrt{\overline{X_iX_j}}$ とおいた。Λ_{ij} を対角化する変数 ζ_i を用いると ξ_i (z_i) の Gauss 積分は評価できる。すなわち、Λ_{ij} の固有値を λ_i として

$$\int\prod_i\frac{dX_i}{\sqrt{X_i}}e^{-F}=\int\prod_i d\xi_ie^{-F}\sim\int\prod_i d\zeta_ie^{-\overline{F}-\sum_i(\lambda_i+\alpha)\zeta_i^2/2}=e^{-\overline{F}}\prod_i\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_i+\alpha}}\tag{42}$$

である。よって

$$P[\alpha|H_\ell]=\int\mathcal{D}XP[X_i,\alpha|H_\ell]\sim\frac{1}{Z_LZ_S(\alpha)}e^{-\overline{F}}\prod_i\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_i+\alpha}}=\frac{1}{Z_L}\exp\left[-\overline{F}+\frac{1}{2}\sum_i\ln\left(\frac{\alpha}{\lambda_i+\alpha}\right)\right]\tag{43}$$

となる。

さらに、$P[\alpha|H_\ell]$ が $\overline{\alpha}$ に鋭いピークを持つ関数であるならば、$P[\alpha|H_\ell]$ が極大となる $\overline{\alpha}$ は、(43) 式から

$$\frac{\partial \ln P[\alpha|H_\ell]}{\partial \ln \alpha} = \alpha \left(\overline{S} - S_{\rm cl} \right) = 0, \quad S_{\rm cl} \equiv -\frac{1}{2\alpha} \sum_i \frac{\lambda_i}{\lambda_i + \alpha} \tag{44}$$

より決まる。この条件を古典最大エントロピー条件 (classic MEM condition) という。このとき、スペクトルの平均値 (40) は

$$\langle X_i \rangle \sim \frac{\int d\alpha \overline{X_i}(\alpha) P[\alpha|H_\ell]}{\int d\alpha P[\alpha|H_\ell]} \sim \overline{X_i}(\overline{\alpha}) \tag{45}$$

と近似される。もし、$P[\alpha|H_\ell]$ が鋭いピークを持たないのであれば、(40) 式に従ってすべての α にわたり平均を取ればよい。その他、$\chi^2/2 = N + 1$ を満たすように α を決める historic 条件というものもある。

ちなみに、事後確率は

$$P[X_i|H_\ell] = \int d\alpha P[X_i|\alpha, H_\ell] P[\alpha|H_\ell] \sim P[X_i|\overline{\alpha}, H_\ell] = \frac{1}{Z_L Z_S(\overline{\alpha})} e^{-\chi^2/2 + \overline{\alpha} S} \tag{46}$$

と評価される。ここで Bayes の定理 (30) を用いた。$P[X_i|H_\ell]$ を最大にする $\overline{X_i}$ は

$$\frac{\partial F(\overline{\alpha})}{\partial X_i} = 0 \tag{47}$$

より決定される。この条件は (40) 式または (45) 式と等価である。

B. Padé 近似による解析接続

Padé 近似は、極を含む複素関数 $f(z)$ を有限個の点 z_i $(i = 0, 1, \cdots N-1)$ での関数値 $f_i = f(z_i)$ から補間する一般的な方法である。これを用いると、温度グリーン関数 $G(i\omega_i) \equiv f_i$ $(\omega_i \geq 0)$ が得られたとき、Padé 近似によって $z = i\omega_i$ で温度グリーン関数に一致するような補間関数 $f_N(z)$ を求めることができる。補間関数 $f_N(z)$ を実軸上 $(+i\delta)$ で評価すれば、遅延グリーン関数が得られる訳である。

補間関数 $f_N(z)$ を

$$f_N(z) = \frac{a_0}{1+} \frac{a_1(z - z_0)}{1+} \cdots \frac{a_{N-1}(z - z_{N-2})}{1} \tag{48}$$

という連分数の形で求めよう。ここで、$f_N(z_i) = f_i$ となるように N 個の係数 a_i を求めればよい。a_i は次のアルゴリズムで漸化的に求めることが出来る。

$$\begin{gathered} \text{初期値：}\ g_0(z_i) = f_i, \quad (i = 0, 1, \cdots N-1) \\ g_p(z_i) = \frac{g_{p-1}(z_{p-1})/g_{p-1}(z_i) - 1}{z_i - z_{p-1}}, \quad (p \geq 1,\ i \geq p), \\ a_p = g_p(z_p) \end{gathered} \tag{49}$$

漸化式のある時点 $p = k$ で $g_k(z_i) = 0$ となった場合、$a_p = 0\ (p > k)$ である。

こうして、係数 a_p が求まると、連分数 $f_N(z)$ は任意の z に対し次の漸化式から効率よく求めることができる。

$$\begin{gathered}
\text{初期値：}\ A_{-1} = 0,\ A_0 = a_0, \quad B_{-1} = B_0 = 1 \\
A_n(z) = A_{n-1}(z) + a_n(z - z_{n-1})A_{n-2}(z), \\
B_n(z) = B_{n-1}(z) + a_n(z - z_{n-1})B_{n-2}(z), \quad (1 \le n \le N-1) \\
A_n(z) \leftarrow A_n(z)/B_n(z), \quad B_n(z) \leftarrow B_n(z)/B_n(z) = 1 \\
f_N(z) = A_{N-1}(z)/B_{N-1}(z)
\end{gathered} \tag{50}$$

漸化式のある時点 $p = k$ で $a_p = 0$ となった場合、$A_{N-1}(z) = A_{k-1}(z), B_{N-1}(z) = B_{k-1}(z)$ である。$A_n(z)$、$B_n(z)$ の計算途中でのオーバーフロー・アンダーフローを避けるため、$A_n(z)$ と $B_n(z)$ を $B_n(z)$ で毎回割っている。

References

[1] R.N. Silver, D.S. Sivia and J.E. Gubernatis: Phys. Rev. B**41** (1990) 2380

[2] J.E. Gubernatis, M. Jarrell, R.N. Silver and D.S. Sivia: Phys. Rev. B**44** (1991) 6011

[3] M. Jarrell and J.E. Gubernatis: Phys. Rep. **269** (1996) 133.

[4] H.J. Vidberg and J.W. Serene, J. Low Temp. Phys. **29** (1977) 179.