

# Maximum Entropy Method 講座

1997年2月

武藤 哲也

I. 何をやるのか?

II. 逆問題の一般論

III. 最大エントロピー法の原理

IV. 最大エントロピー法の実際

V. この講座で言いたかったこと.

App. A Green 関数と一粒子励起スペクトル関数

App. B  $\alpha$  の決定

App. C 逆 Laplace 変換問題のプログラム

参考文献

# I. 何をやるのか?

- MEMは、1.与えられた(不完全な)データから
  - 2.ある情報を元にして
  - 3.元の形状("イメージ")を

再構成する手法の一つである。

- ex. (i) 1.誤差を伴った有限回の実験データから
- 2.それが「何の実験の」データであるかを元にして
  - 3.それらが従うであろう理論的関数形を再構成
- (ii) 1.露出時間内に動いてしまった被写体のブレた写真から
- 2.どのように動いたかの手がかりを元にして
  - 3.その写真に写った被写体を再構成

R.N. Silver et al. PR B41 (1970) 2380



Data

Reconstruction

例えば、ある実験で、 $G$  という量が、時刻  $t_e$  に  $G_e$  として (誤差を伴って) 求まるとする。一方で、理論的に、

$$G_e = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-t_e \omega}}{1 + e^{-\beta \omega}} \rho(\omega) \quad (1)$$

なる関係で、 $\rho(\omega)$  と結びついているとした時に、  
実験で得られた  $G_e$  を再現する  $\rho(\omega)$  を求める (推定する) 問題を考える。

この時、

- $G_e$  は誤差を伴っており、有限個 ( $l=1, \dots, L$ ) しか得られていない
- 積分核  $\frac{e^{-t_e \omega}}{1 + e^{-\beta \omega}}$  ( $0 \leq t_e \leq \beta$ ) について、

$$\frac{e^{-t_e \omega}}{1 + e^{-\beta \omega}} \rightarrow \begin{cases} e^{-t_e \omega} & (\omega \rightarrow \infty) \\ e^{-(\beta - t_e)\omega} & (\omega \rightarrow -\infty) \end{cases} \quad (2)$$

と  $\omega \rightarrow \pm\infty$  で指数関数的に小さくなるため、 $\rho(\omega)$  が、 $|\omega|$  の大きいところで様々な構造を持つたとしても積分核によってマスキされてしまう。

$\Rightarrow G_e$  を再現する  $\rho(\omega)$  として無数の候補が存在してしまい、“本当の”  $\rho(\omega)$  が探しにくくなる。

- 同様の問題として...

### 逆 Laplace 変換問題

Laplace 変換.

$$F(s) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} f(t)$$

②

に対し、 $F(s)$  が有限個の離散点  $s_e$  上で誤差  $\epsilon$  まで  
与えられるとき、 $F(s)$  を再現する  $f(t)$  を探す。

⇒ 前頁と同様の問題が生じる

- これらの、「不完全なデータから、ある関数式から  
決まる関数形を推測する」という問題において、  
課されている条件などを手がかりに、解を探す  
ための有効な方法

↓

MEM.



## II. 逆問題の一般論.

一般に、積分変換

$$g(x) = \int dy K(x,y) f(y) \quad \textcircled{4}$$

において、核  $K(x,y)$  によって「ぼやかされた」  $g(x)$  が与えられた時、元の（ぼやかされていない）関数  $f(y)$  を復元することを考える。

積分変換の逆変換問題  $\Leftrightarrow$  「逆問題」

- 完全に一対一の積分変換が定義されているのは「逆問題」の対象にはならない：

関数空間  $L_f \in f$ ,  $L_g \in g$  がきちんと指定されている場合は逆変換が定義されることになる。

$L_g$  として、 $\int dy K(x,y) f(y)$  の含まれる空間  $L_k$  に制限したものをとれば、逆変換は存在する；

$$[ \text{for } \forall g \in L_k \quad \exists f \in L_f \text{ s.t. } \textcircled{4} \text{ を満たす } ]$$

$\Rightarrow$  「逆問題」ではなく、「きちんと」逆変換できる。

・現実的な場合の話

$g(x)$  が正確にわかっているわけではなく、誤差などを伴う、

$\Rightarrow$  誤差を  $\varepsilon(x)$  で表すと、解く方程式は ④ の代わりに、

$$g(x) + \varepsilon(x) = \int dy K(x,y) f(y) \quad \textcircled{5}$$

$\Downarrow$

$\varepsilon \in L^k$  とは限らない  $\Rightarrow$  ⑤ を満たす  $f$  の存在、保証しない

$\Rightarrow$  ⑤ を満たす  $f$  の近似解を探す必要

: 「逆問題」

・逆問題の困難

$$g(x) = \int dy K(x,y) f(y) \Leftrightarrow g_i = \sum_j K_{ij} f_j \quad : \text{離散化} \quad \textcircled{6}$$

$$K_{ij} = (\vec{a}_1 \vec{a}_2 \dots \vec{a}_n) \quad ; \quad \vec{a}_j = \begin{pmatrix} \alpha_{1j} \\ \alpha_{2j} \\ \vdots \\ \alpha_{mj} \end{pmatrix} \quad \textcircled{7}$$

$\Rightarrow$  これら  $\vec{a}_j$  ベクトル達の独立性が低い  $\rightarrow$  悪条件行列

$$\text{ex. } \vec{a}_1 = t\vec{e}_1 + (1-t)\vec{e}_2, \quad \vec{a}_j = \vec{e}_j \quad (j=2, \dots, n) \quad \textcircled{8}$$

$$\begin{cases} t=1 : \text{一次独立} \\ t=0 : \text{一次従属} \end{cases} \Rightarrow t \rightarrow 0 \text{ で独立性低下}$$

$\Rightarrow$  実際、離散化を細かくすれば、 $\vec{a}_j$  と  $\vec{a}_{j+1}$  は似てきて、悪条件化進む

① 連立方程式としての困難

①式の問題を例として考える:

$$G_l = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t_l}}{1 + e^{-\beta\omega}} \rho(\omega)$$

①  
再掲

⇕ 離散化

$$G_l = \sum_{n=1}^N K_{ln} \rho_n \quad ; \quad K_{ln} = \frac{e^{-i\omega_n t_l}}{1 + e^{-\beta\omega_n}}, \quad \rho_n = \rho(\omega_n) \cdot \Delta\omega \quad \text{②}$$

$$(l=1, \dots, L; \quad n=1, \dots, N)$$

⇒  $G_l$  が誤差  $\sigma_l$  を伴って求まっているとする

⇓

「 $G_l$  を再現する  $\rho_n$  を見い出す」ために、最小自乗法を適用:

$$\chi^2 = \sum_{l=1}^L \left( \frac{G_l - \sum_{n=1}^N K_{ln} \rho_n}{\sigma_l} \right)^2 \quad \text{⑩}$$

を最小化する  $\rho_n$  を求める。

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial \rho_n} = -2 \sum_{l=1}^L \frac{1}{\sigma_l^2} (G_l - \sum_{n'=1}^N K_{ln'} \rho_{n'}) K_{ln} = 0 \quad \text{⑪}$$

∴

$$\sum_{n'=1}^N \left( \sum_{l=1}^L \frac{K_{ln} K_{ln'}}{\sigma_l^2} \right) \rho_{n'} = \sum_{l=1}^L \frac{K_{ln}}{\sigma_l^2} G_l \quad n=1, \dots, N \quad \text{⑫}$$

⇒ この連立方程式を解く。

$$A_{nn'} = \sum_{l=1}^L \frac{K_{ln} K_{ln'}}{\sigma_l^2}, \quad x_n = \rho_n, \quad b_n = \sum_{l=1}^L \frac{K_{ln} G_l}{\sigma_l^2} \quad \text{となる.}$$

⑫ 式は.

$$A x = b; \quad \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & & & \\ \vdots & & & \\ A_{N1} & & & A_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} \quad (13)$$

なる形で表わされる。つぎ、求める  $x$  は

$$x = A^{-1} b \quad (14)$$

となる。

しかし、⑫ で指摘したように、 $K_{ln} \rightarrow 0$  (as  $|w_n| \rightarrow \infty$ )

であるため、 $n$  の小さいところ、大きいところでは、 $A_{nn'}$  について、成分の

全てが、ほぼ 0 になるような列(行)が現れる。

$\Rightarrow A$  のランクが落ちてしまう



連立方程式 ⑬ が解を持たなくなる(なってしまう)。

◦ 単純な最小自乗法は非常に困難

(最小自乗法の困難は、後に議論する)

### III. 最大エントロピー法の原理

II. で扱ったような逆問題の困難を除く(おこな).

有効な方法 → 最大エントロピー法.

「確率論に基づいて、“むしろい”元の関数を“推定”する」

#### III-1. Bayes 推定

・確率論の復習

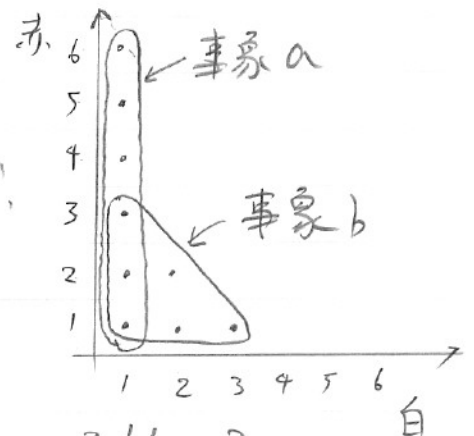
- ・事象  $a$  が起こる確率:  $P[a]$
- ・事象  $b$  が起こったもとでの事象  $a$  の起こる確率  
(条件付き確率):  $P[a|b]$
- ・事象  $a, b$  がともに起こる確率:  $P[a, b] = P[a \text{ and } b]$

定義: 
$$P[a|b] \equiv \frac{P[a, b]}{P[b]} \quad (P[b] > 0)$$

ex. 赤と白のサイコロを振って,

「2個の目の和が4以下になった(事象  $b$ )もとで、  
白の目が1である(事象  $a$ )確率」

を求めよ。



$$\begin{cases} P[b] = \frac{6}{36}, & P[a, b] = P[a \text{ and } b] = \frac{3}{36} \Rightarrow P[a|b] = \frac{3/36}{6/36} = \frac{3}{6} \\ P[a|b] = \frac{\text{事象 } a \text{ and } b \text{ の場合の数}}{\text{事象 } b \text{ の場合の数}} = \frac{3}{6} \end{cases}$$

Bayes の定理

事象  $b_1, \dots, b_N$  が互いに排反 (for  $\forall i, j; i \neq j, b_i \cap b_j = \phi$ )  
 かつ  
 $b_1 \cup b_2 \cup \dots \cup b_N = \Omega$  : 標本空間

よして,  $\forall$  事象  $a$  ( $P[a] > 0$ ) に対し,

$$P[b_i | a] = \frac{P[a | b_i] \cdot P[b_i]}{P[a]} = \frac{P[a | b_i] P[b_i]}{\sum_{j=1}^N P[a | b_j] \cdot P[b_j]} \quad (i=1, \dots, N) \quad (16)$$

: Bayes の定理

☺

条件付き確率の定義より

$$P[b_i | a] = \frac{P[a, b_i]}{P[a]} = \frac{P[a | b_i] P[b_i]}{P[a]} \quad (\text{第一等号証明}) \quad (17)$$

また,  $a = a \cap \Omega$  として

$$a = a \cap \Omega = a \cap (b_1 \cup \dots \cup b_N) \quad (18)$$

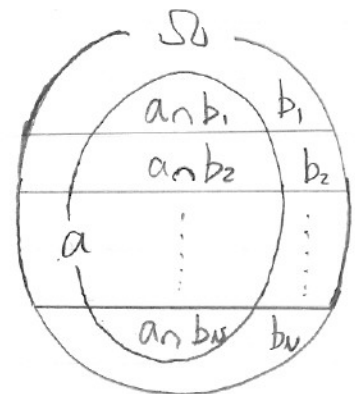
$$= (a \cap b_1) \cup (a \cap b_2) \cup \dots \cup (a \cap b_N) \quad (19)$$

$$\therefore \begin{cases} \bullet (a \cap b_i) \cap (a \cap b_j) = \phi \text{ for } \forall i, j; i \neq j & (20) \\ \bullet A \cap B = \phi \Rightarrow P[A, B] = P[A \cup B] = P[A] + P[B] & (21) \end{cases}$$

Σを用いては,

$$P[a] = P[(a \cap b_1) \cup \dots \cup (a \cap b_N)] = P[a \cap b_1] + \dots + P[a \cap b_N] \quad (22)$$

$$= P[a | b_1] P[b_1] + \dots + P[a | b_N] P[b_N] \quad (23)$$



• 特に  $N=2$  の場合について,  $b_1 = b$ ,  $b_2 = \bar{b}$  として,

$$P[b|a] = \frac{P[a|b]P[b]}{P[a|b]P[b] + P[a|\bar{b}]P[\bar{b}]} \quad \textcircled{24}$$

⇒ 例を用いて Bayes 推定を説明

• Bayes 推定の例.

OX 試験のある一問について, 学生が, 正解を知らなくて,

偶然答の合うことがある

⇒ この時, 教師には, 学生が正解を知っていたか否かという

疑問がある。果たして, 答があっていた場合, 「学生が正解を

知っていた」というのはどれだけ尤もらしいのか?

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{学生が正解を知っているという事象 } b \leftrightarrow B \\ \text{〃 正しく解答するという事象 } a \leftrightarrow \bar{a} \end{array} \right.$$

すなわち,

$P[a|b]$ : 正解を知っているという条件の下で正しく解答する確率

$P[a|\bar{b}]$ : 正解を知らないという条件の下で正しく解答する確率

などが定義できる。

⇒ この時, 以下を仮定する:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{正解を知っていれば, 正しく解答する} \Leftrightarrow P[a|b] = 1, P[\bar{a}|b] = 1 - P[a|b] = 0 \\ \text{正解を知らなければ, まぐれ当りは半々の確率} \\ \Leftrightarrow P[a|\bar{b}] = \frac{1}{2}, P[\bar{a}|\bar{b}] = 1 - P[a|\bar{b}] = \frac{1}{2} \end{array} \right.$$

◦ 今、ある学生 んとう君は、正しく解答していたとす。

⇒ 問題の確率 (正しく解答した時に んとう君が正解を知っていた確率)

$P[b|a]$  を Bayes の定理で計算する。(25) を用いる)

$$P[b|a] = \frac{P[a|b]P[b]}{P[a|b]P[b] + P[a|\bar{b}]P[\bar{b}]} \quad (25)$$

$$\leftarrow P[a|b] = 1, P[a|\bar{b}] = \frac{1}{2}, P[\bar{b}] = 1 - P[b] \quad (26)$$

$$= \frac{P[b]}{P[b] + \frac{1}{2}(1 - P[b])} = \frac{2P[b]}{P[b] + 1} \quad (27)$$

⇒ んとう君が正解を知っている確率  $P[b]$  から  $P[b|a]$  が求まる.:

α. (i) んとう君が正解を知っているという事前の確率  $P[b]$  が  $\frac{1}{2}$  だとすると、  
 んとう君が正しく解答したという事実 (情報) によって、事後の確率は  
 $P[b|a] = \frac{2}{3}$  と増大する。

(ii) んとう君は絶対正解を知らないハズ ( $P[b] = 0$ ) ならば、

どんなに正答しようとも  $P[b|a] = 0$  のままだ。

↓

一般に  $P[b] = p$  ( $0 \leq p \leq 1$ ) とすれば

$$P[b|a] = \frac{2p}{p+1} \geq p = P[b] \quad (\text{等号成立は } p=0,1) \quad (28)$$

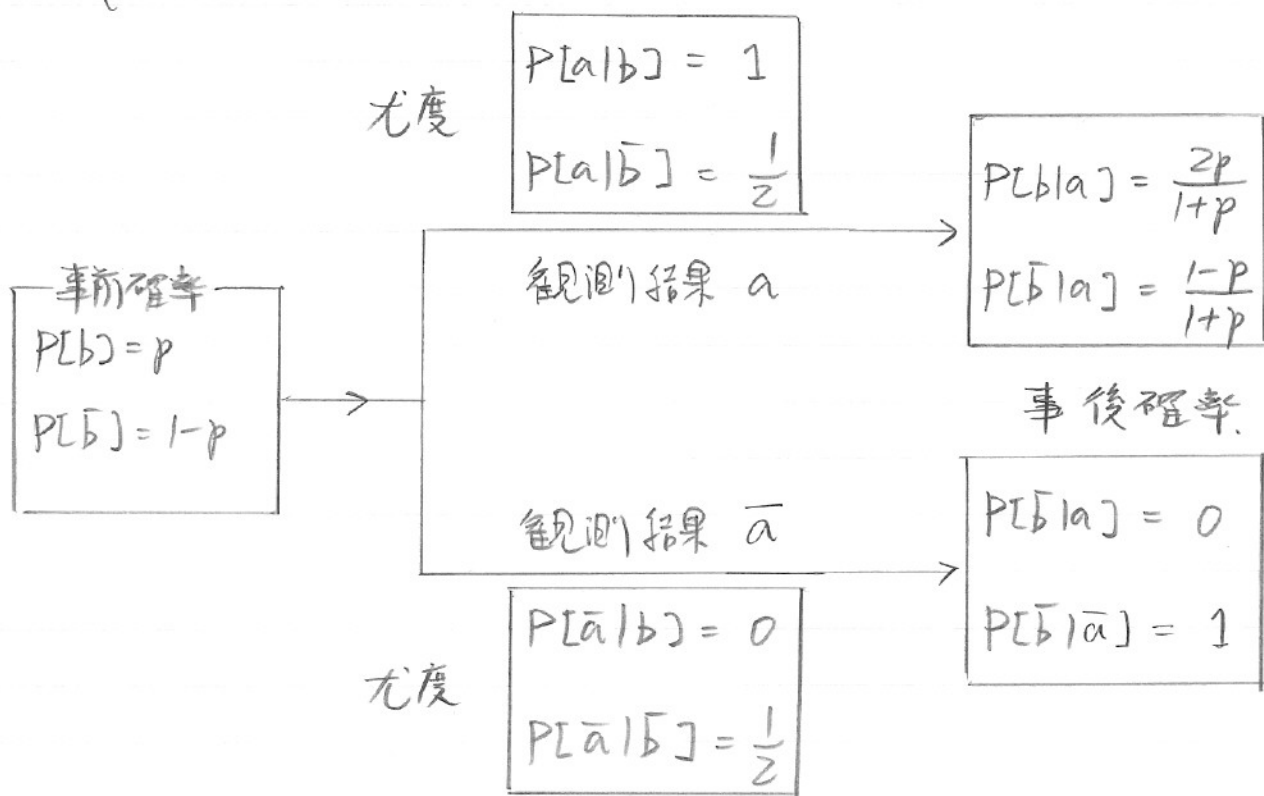
となる。



事前・事後確率

正解と  $\left\{ \begin{array}{l} \text{知っている} \\ \text{知らない} \end{array} \right.$  (原因)  $\implies$  正しく解答する (結果)

$\left\{ \begin{array}{l} P[b], P[\bar{b}] : \text{原因の確率} \implies \text{事前確率} \\ P[a|b], P[a|\bar{b}] : \text{原因の下での } a \text{ の確率 (尤度)} \\ P[b|a] : a \text{ が起こった時, その原因が } b \text{ である確率} \implies \text{事後確率} \end{array} \right.$



事後確率 : 観測された事象  $\implies$  原因 と 「推理」 の確率的表現

$\implies$  事後確率と、事前確率と、尤度から計算して原因を推定

: Bayes 推定.

## III-2. 虚時間 Green 関数と一粒子状態密度

MEM を適用する例として、虚時間 Green 関数 (有限個の離散点上で値が得られている) から、一粒子状態密度を“推定”することを考える。

◦ 虚時間 Green 関数.

$$G(\tau) = (-) \langle T_{\tau} [C_{i\sigma}(\tau) C_{i\sigma}^{\dagger}(0)] \rangle \quad \begin{array}{l} (\sigma \text{ は省略}) \\ (\text{ここでは負符号をつけて定義}) \end{array} \quad (27)$$

◦ 一粒子状態密度 (DOS)

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\omega + i\delta) \Big|_{\delta \rightarrow 0^+} \quad (28)$$

$$\Rightarrow \underline{G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} \rho(\omega)} \quad (\text{App. A 参照}) \quad (29)$$

(実験などから)

$\bar{G}(\tau_\ell)$  が離散点  $\tau_\ell$  ( $\ell = 1, \dots, L$ ) 上で、誤差  $\sigma_\ell$  を伴って、

求まっている時に、(29) から  $G(\tau_\ell)$  を再現するような  $\rho(\omega)$  を

“推定”する。

⇓

Bayes 推定の立場では、

$PL[\rho | \bar{G}, I]$ : 実験で  $\bar{G}(\tau_\ell)$  が求まった時、事前知識  $I$  の下で、

DOS が  $\rho$  となる確率密度関数 (PDF)

を最大にする。

○  $P[\rho|\bar{G}, I]$  の "計算"

我々の問題「 $P[\rho|\bar{G}, I]$  を最も大きくする  $\rho$  を見出す」

については、Bayes の定理 ② を急値において  $P[\rho|\bar{G}, I]$  と変形

$$P[\rho|\bar{G}, I] = \frac{P[\rho, \bar{G}, I]}{P[\bar{G}, I]} = \frac{P[\bar{G}, \rho, I]}{P[\bar{G}, I]} \quad (2)$$

$$\leftarrow P[\bar{G}, \rho, I] = P[\rho, I] \cdot P[\bar{G}|\rho, I] \quad (3)$$

$$\leftarrow P[\rho, I] = P[I] \cdot P[\rho|I], \quad P[\bar{G}, I] = P[I] \cdot P[\bar{G}|I] \quad (4)$$

$$\downarrow = \frac{P[\bar{G}|\rho, I] \cdot P[\rho|I]}{P[\bar{G}|I]} \quad (5)$$

$\Rightarrow$  事前知識  $I$  の下で、DOS が  $\rho$  になる PDF (事前 PDF)  $P[\rho|I]$   
 と、DOS が  $\rho$  である時に得られる  $N$  のデータが  $\bar{G}$  である PDF  
 (尤も度関数: 尤度)  $P[\bar{G}|\rho, I]$  から、事後 PDF としての  
 $P[\rho|\bar{G}, I]$  を評価することができる。

$\Downarrow$

尤度関数  $P[\bar{G}|\rho, I]$

事前 PDF  $P[\rho|I]$

を評価する。

(1) 尤度関数  $P[\bar{G}|p, I]$  の計算.

$P[\bar{G}|p, I]$ : 事前知識  $I$  の下で DOS が  $p$  である時に, テータ  $\bar{G}$  を測定したことがどれだけ尤もらしいか?

• ある  $p$  に対して, ideal data set  $G(\tau)$  を考える.

$$\left\{ \begin{array}{l} G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K(\tau, \omega) \rho(\omega) \\ K(\tau, \omega) \equiv \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} \end{array} \right. \quad (38)$$

今,  $\{G(\tau_i)\}$  が, 互いに独立で, ideal data  $G(\tau_i)$  の周りに,

分散  $\sigma_i^2$  の Gauss 分布で分布しているとする.  $P[\bar{G}|p, I]$  は,

$$P[\bar{G}|p, I] = \prod_{i=1}^L \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} e^{-\frac{(\bar{G}_i - G_i)^2}{2\sigma_i^2}} \quad (39)$$

$$\equiv \frac{1}{Z_\chi} e^{-\frac{1}{2}\chi^2} \quad (40)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi^2 \equiv \sum_{i=1}^L \left( \frac{\bar{G}_i - G_i}{\sigma_i} \right)^2 \\ Z_\chi = \prod_{i=1}^L \sqrt{2\pi\sigma_i^2} \end{array} \right. \quad (41)$$

\* 最小乗法は, いわば, 事前 PDF,  $P[p|I]$  を const. と考え,  $P[p|\bar{G}, I] \propto P[\bar{G}|p, I] \propto e^{-\frac{1}{2}\chi^2}$

$$P[p|\bar{G}, I] \propto P[\bar{G}|p, I] \propto e^{-\frac{1}{2}\chi^2} \quad (42)$$

を最大にするように  $\chi^2$  を最小にする  $p$  を探す方法と

考えることが出来る.

(ii) 事前PDF  $P[\rho|I]$ 

$P[\rho|I]$ : 事前知識  $I$  の下で: DOS が  $\rho(\omega)$  になる確率.

$\Rightarrow I$  と  $I'$  は,  $\rho(\omega) \geq 0$  と  $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho(\omega) = 1$  を考える.

• 関数部分空間  $V$  に渡り  $\rho(\omega)$  の汎関数積分を考える:

$$P[\rho \in V | I] = \int_V \mathcal{D}\rho P[\rho | I] \quad (4)$$

$\Downarrow$  離散化

$$\left\{ \begin{array}{l} P[\rho \in V | I] = \int_V \prod_i d\rho_i M(\rho_i | I) P[\rho | I] \\ (\rho_i \equiv \rho(\omega_i) \Delta\omega_i) \\ M(\rho_i | I): \text{measure} \end{array} \right. \quad (5)$$

$\Rightarrow P[\rho | I]$  は,  $\mathbb{R}^+$  の単調関数 (無次元)

$$P[\rho | I] = \frac{1}{Z_S} \Phi(\alpha S(\rho | I)) \quad ; \alpha \text{ はある定数.} \quad (6)$$

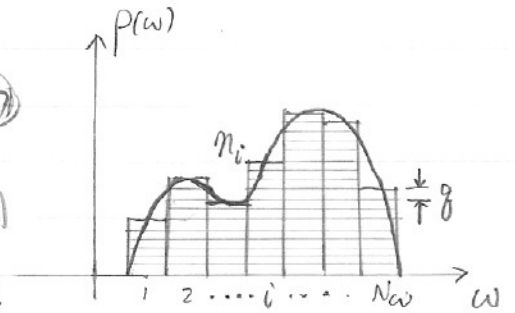
$$Z_S = \int_{\Omega} \prod_i d\rho_i M(\rho_i | I) \Phi(\alpha S(\rho | I)) \quad (\Omega: \text{全関数空間})$$

( $\because \mathbb{R}^+$  は,  $\omega_i$  での DOS が  $\rho(\omega_i)$  となる場合の数から決まり、  
場合の数が多ければ多いほど、 $P[\rho | I]$  も大くなる)

$$\therefore P[\rho \in V | I] = \int_V \prod_i d\rho_i M(\rho_i | I) \frac{1}{Z_S} \Phi(\alpha S(\rho | I)) \quad (7)$$

一方、 $P[|I|]$  について、 $p_i \equiv n_i \delta$  とする。 $\delta$  を単位として数表で考える。

$$\sum_i p_i = \delta \sum_i n_i = 1 \quad \text{より} \quad \sum_i n_i = \frac{1}{\delta} \quad (47)$$



となる総数の“クォンタ”が各番目の“箱”に  $n_i$  個ずつ入るとする。各番目の“箱”に入る平均数を  $\mu_i$  個とすると、 $n_i$  違が大きい場合に、 $n_i$  の分布は、Poisson 分布となり、事前知識として、「各箱の平均数が  $\mu_i$  個である」とした時の  $n_i$  の PDF は、

の  $n_i$  の PDF は、

$$P[n|\mu] = \prod_{i=1}^{N_w} \frac{\mu_i^{n_i} e^{-\mu_i}}{n_i!} \quad (48)$$

$$\therefore P[|I|] = \sum_{\{n_i \in V\}} P[n|\mu] = \sum_{\{n_i \in V\}} \prod_{i=1}^{N_w} \frac{\mu_i^{n_i} e^{-\mu_i}}{n_i!} \quad (49)$$

$$\rightarrow \int_V \prod_{i=1}^{N_w} \frac{d p_i}{\delta} \prod_{i=1}^{N_w} \frac{\mu_i^{n_i} e^{-\mu_i}}{n_i!} \quad (50)$$

$$\leftarrow \text{Stirling 近似 } n_i! \simeq (\sqrt{2\pi n_i})^{1/2} n_i^{n_i} e^{-n_i} \quad (51)$$

$$= \int_V \prod_{i=1}^{N_w} \frac{d p_i}{\delta} \frac{1}{\sqrt{2\pi n_i}} \left(\frac{\mu_i}{n_i}\right)^{n_i} e^{n_i - \mu_i} \quad (52)$$

$$\leftarrow n_i = \frac{p_i}{\delta}, \quad \mu_i = \frac{m_i}{\delta} \quad \text{と置く}$$

$$= \int_V \prod_{i=1}^{N_w} \frac{d p_i}{\sqrt{2\pi \delta p_i}} \left(\frac{m_i}{p_i}\right)^{\frac{p_i}{\delta}} e^{\frac{1}{\delta}(p_i - m_i)} \quad (53)$$

$$\leftarrow \prod_{i=1}^{N_w} \left(\frac{m_i}{p_i}\right)^{\frac{p_i}{\delta}} e^{\frac{1}{\delta}(p_i - m_i)} = e^{\frac{1}{\delta} \sum_i (p_i - m_i - p_i \ln \frac{p_i}{m_i})} \quad (54)$$

$$= \int_V \left( \prod_{i=1}^{N_w} \frac{d p_i}{\sqrt{p_i}} \right) \frac{1}{(\sqrt{2\pi \delta})^{N_w}} \exp\left(\frac{1}{\delta} \sum_i (p_i - m_i - p_i \ln \frac{p_i}{m_i})\right) \quad (55)$$

⇒ ⑤ ②:

$$S(p_i, m_i) \equiv \sum_i (p_i - m_i - p_i \ln \frac{p_i}{m_i}) \quad (56)$$

とおくこと:

$$P[p \in V] = P[p \in V | m] = \int \left( \prod_i \frac{d p_i}{\sqrt{p_i}} \right) \frac{e^{\frac{1}{g} S(p_i, m_i)}}{(2\pi g)^{N/2}} \quad (57)$$

と表される.



④ との比較より.

$$\left\{ \frac{1}{g} = \alpha, \quad Z_g = Z_g(\alpha) = \left( \frac{2\pi}{\alpha} \right)^{N/2}, \quad M(p_i, g) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{p_i}} \right. \quad (58)$$

$$\left. \left( \Phi(\alpha, p_i, g) = \Phi(\alpha, p_i, m_i) \right) = e^{\alpha S(p_i, m_i)} \right. \quad (59)$$

を得る.

\* 実際、滑目が  $n_i$  個になる場合の数  $W$  と全状態数  $Z$ .

から、滑目が  $n_i$  個になる確率  $P$  は:

$$P = \frac{W}{Z} = \frac{e^{\alpha S}}{Z}$$

と表されることを考えれば、⑤ がエンタピーとなることが

わかる.

①  $P(p|\bar{G}, I) \propto P(p|\bar{G}, m, \alpha)$  の maximization

(i) と (ii) から、結局  $P(p|\bar{G}, I)$  は、

$$P(p|\bar{G}, I) \propto P(p|\bar{G}, m, \alpha) \quad (60)$$

$$\propto \exp\left(\alpha S - \frac{1}{2}\chi^2\right) \quad (61)$$

したがって、 $P(p|\bar{G}, I)$  を最大にするためには、

$$\mathcal{F} \equiv \frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S(p_i, m_i) \quad (62)$$

を最小にする  $p_i$  に  $p_i$  を決定する必要がある。

: maximum entropy method (MEM)

( $\Leftrightarrow$  minimum free-energy !)



$\chi^2$  のみを minimize  $\rightarrow$  最小自乗法

+

$\propto$  (事前情報を含んだ"エントロピー項")

$\Rightarrow$  エントロピー項の効き方を  $\alpha$  で調節して、 $\chi^2$  項との

バランスをとる。(  $\chi^2$  を小さくして得るか、 $S$  を大きくして得るか )

\*  $\alpha$ : Lagrange の 未定係数  $\rightarrow$  決める条件が必要



(iii)  $\alpha$  の決定.

$\alpha$  について、データや事前情報の下で、尤もらしいものとして決定

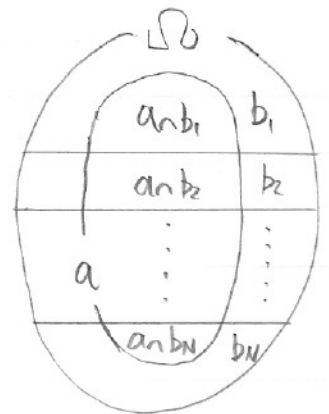
$\rightarrow P[\alpha | G, m]$  を最大にするような  $\alpha$ .

• 事象  $b_i$  が:

$$\left. \begin{array}{l} \cdot b_i \cap b_j = \phi \text{ for } \forall i, j (i \neq j) \quad : \text{互いに排反} \\ \cdot b_1 \cup b_2 \cup \dots \cup b_N = \Omega \text{ (標本空間)} \end{array} \right\} \textcircled{63}$$

を満たすと、事象  $a$  に対し

$$\left. \begin{array}{l} \cdot a = a \cap \Omega = a \cap (b_1 \cup \dots \cup b_N) = (a \cap b_1) \cup \dots \cup (a \cap b_N) \textcircled{64} \\ \cdot (a \cap b_i) \cap (a \cap b_j) = \phi \text{ for } \forall i, j (i \neq j) \textcircled{65} \end{array} \right\}$$



とすると:

$$\begin{aligned} P[a] &= P[(a \cap b_1) \cup \dots \cup (a \cap b_N)] && \textcircled{66} \\ &\leftarrow \cdot P[A \cup B] = P[A] + P[B] \text{ if } A \cap B = \phi && \textcircled{67} \\ &= P[a \cap b_1] + \dots + P[a \cap b_N] && \textcircled{68} \\ &= \sum_{i=1}^N P[a, b_i] && \textcircled{69} \end{aligned}$$

•  $P[p|\bar{G}, m, \alpha]$  における「最適な」 $\alpha$  の決定

⑥ を拡張すると

$$\begin{aligned}
 P[p|\bar{G}, m] &= \int d\alpha P[p, \alpha|\bar{G}, m] && \textcircled{10} \\
 &\leftarrow \cdot P[\alpha|b] = \frac{P[a, b]}{P[b]} : \text{条件付き確率の def.} && \textcircled{11} \\
 &= \int d\alpha P[p|\bar{G}, m, \alpha] \cdot P[\alpha|\bar{G}, m] && \textcircled{12}
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$   $\alpha$  の「分布」で、 $P[p|\bar{G}, m, \alpha]$  を「平均」して初めて  $P[p|\bar{G}, m]$  が得られる。

$\Downarrow$

$P[\alpha|\bar{G}, m]$  は、 $\alpha$  の「分布」が「大」で「最適な」 $\hat{\alpha}$  の「回」に「集中」する。

$$\text{i.e. } \int d\alpha P[p|\bar{G}, m, \alpha] \cdot P[\alpha|\bar{G}, m] \simeq P[p|\bar{G}, m, \hat{\alpha}] \quad \textcircled{13}$$

$\simeq$  と近似できる。  $\Rightarrow \hat{\alpha}$  を用いて、 $P[p|\bar{G}, m]$  を計算  $\Rightarrow$  MEM.

•  $P[\alpha|\bar{G}, m]$  の評価

$$\begin{aligned}
 P[\alpha|\bar{G}, m] &= \int dp \cdot P[p, \alpha|\bar{G}, m] && \textcircled{14} \\
 &\leftarrow \cdot P[p, \alpha|\bar{G}, m] = \frac{P[p, \alpha, \bar{G}, m]}{P[\bar{G}, m]} = \frac{P[m] P[p, \alpha, \bar{G}|m]}{P[m] \cdot P[\bar{G}|m]} = \frac{P[p, \alpha, \bar{G}|m]}{P[\bar{G}|m]} && \textcircled{15} \\
 &\propto \int dp \cdot P[p, \alpha, \bar{G}|m] && \textcircled{16} \\
 &\leftarrow \cdot P[p, \alpha, \bar{G}|m] = \frac{P[\alpha] \cdot P[m|\alpha] \cdot P[p|m, \alpha] \cdot P[\bar{G}|p, m, \alpha]}{P[m]} && \textcircled{17} \\
 &\propto \int dp \cdot P[\bar{G}|p, m, \alpha] \cdot P[p|m, \alpha] && \textcircled{18} \\
 &= \int dp P[\bar{G}|p] \cdot P[p|m, \alpha] && \textcircled{19}
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \cdot P[\bar{G}|P] = \frac{1}{Z_x} e^{-\frac{1}{2}x^2} & \textcircled{80} \\ \cdot P[\rho|m,\alpha] = \frac{1}{Z_S} e^{\alpha\rho} & \textcircled{81} \end{cases}$$

を用いて計算する:

- $e^{\alpha\rho - \frac{1}{2}x^2}$  を最大にする  $\rho$  ( $\hat{\rho}$ ) のまわりの Gaussian 近似.
- $\alpha$  についての極値を採る.



$P[\alpha|\bar{G},m]$  のピークを与える  $\alpha, \hat{\alpha}$  は.

$$-2\hat{\alpha}S = \sum_{n=1}^{N_w} \frac{\lambda_n}{\hat{\alpha} + \lambda_n} \quad ; \quad \lambda_n \text{ は } \left. \frac{1}{2} \sqrt{\hat{\rho}_i} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial \rho_i \partial \rho_j} \right|_{\hat{\rho}_i, \hat{\rho}_j} \sqrt{\hat{\rho}_j} \text{ の固有値 } \textcircled{82}$$

分子関数式から決まる (App. B 参照).

☆ MEM の手続き. (Classic MEM と呼ばれる)

• 適当な  $\alpha$  を与える

α を変えて...

↓  
•  $\textcircled{82}$  の  $\rho$  を最小にする  $\hat{\rho}_i \equiv \{\hat{\rho}_i\}$  を求める

↓  
•  $\hat{\rho}_i$  から  $\lambda_i$  を計算し、現在の  $\alpha$  が  $\textcircled{82}$  を満たすか調べる

↓  
No!  $\textcircled{82}$  を満たすか?

↓ YES!!

最終的に最も尤もらしい  $\hat{\rho}_i$  が決定!!

## IV. 最大エントピー法の実際.

実際に、「与えられたデータ」 $\Rightarrow$ 「元のイテージ」の推定  
を行ってみる.

---

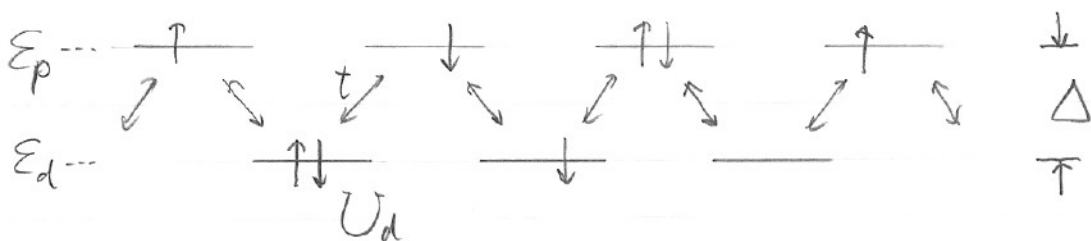
### IV-1. 2バンド Hubbard モデルの 1-粒子励起スベクトル関数.

我田引水に於るか. 武藤の D 論で扱った物理系  
の Green 関数の計算を例にとってみよう.

#### IV-1-1. Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \epsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_{i\sigma} p_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma} + t \sum_{\langle i,j \rangle} (d_{i\sigma}^\dagger p_{j\sigma} + p_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma}) + U_d \sum_i d_{i\uparrow}^\dagger d_{i\uparrow} d_{i\downarrow}^\dagger d_{i\downarrow}$$

(83)



$\Rightarrow$  このような系で、1-粒子励起スベクトル関数は  
どうなるか?

## IV-1-2. 虚時間 Green 関数.

ここでは特に d ボール 虚時間 Green 関数を考えよう:

$$G^d(\tau) \equiv \langle T_\tau [d_{i\sigma}(\tau) d_{i\sigma}^\dagger(0)] \rangle \quad (87)$$

↓

「動的平均場理論」という近似理論の枠組の中で、量子

モンテカルロ (QMC) 計算を行うことで、 $G^d(\tau)$  は

$\tau = \tau_l$  ( $l=1, \dots, L$ ) の離散点上で誤差  $\sigma_l$  を伴って、

$G_{\tau_l}^d \equiv G^d(\tau_l)$  として求まる。

$$\left( \begin{array}{l} 0 \leq \tau_l \leq \beta \rightarrow \tau_0 = 0, \tau_L = \beta \quad ; \quad \Delta\tau = \frac{\beta}{L} \\ (\beta \text{ は 温度の逆数}) \end{array} \right)$$

## • 一粒子励起 2 つの Green 関数.

$$\rho^d(\omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^d(\omega + i\delta) \quad (85)$$

$$= \frac{1}{\Xi} \sum_{mn} e^{-\beta K_m} \{ |\langle n | d_{i\sigma}^\dagger | m \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}) + |\langle n | d_{i\sigma} | m \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{mn}) \} \quad (86)$$

$$\left( \Xi \equiv \sum_m e^{-\beta K_m}, \quad (H - \mu N) |m\rangle = K_m |m\rangle, \quad \omega_{mn} \equiv K_m - K_n \right)$$

↓

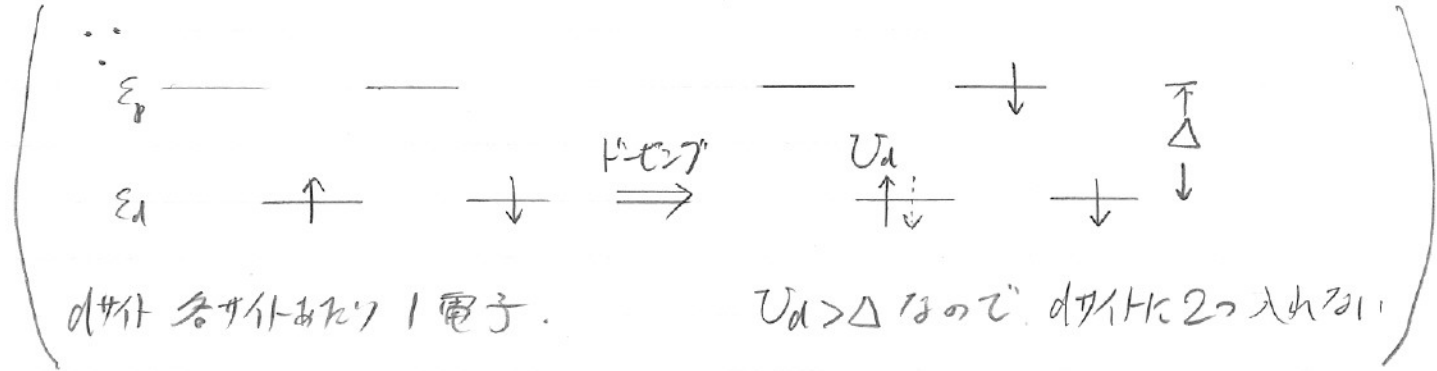
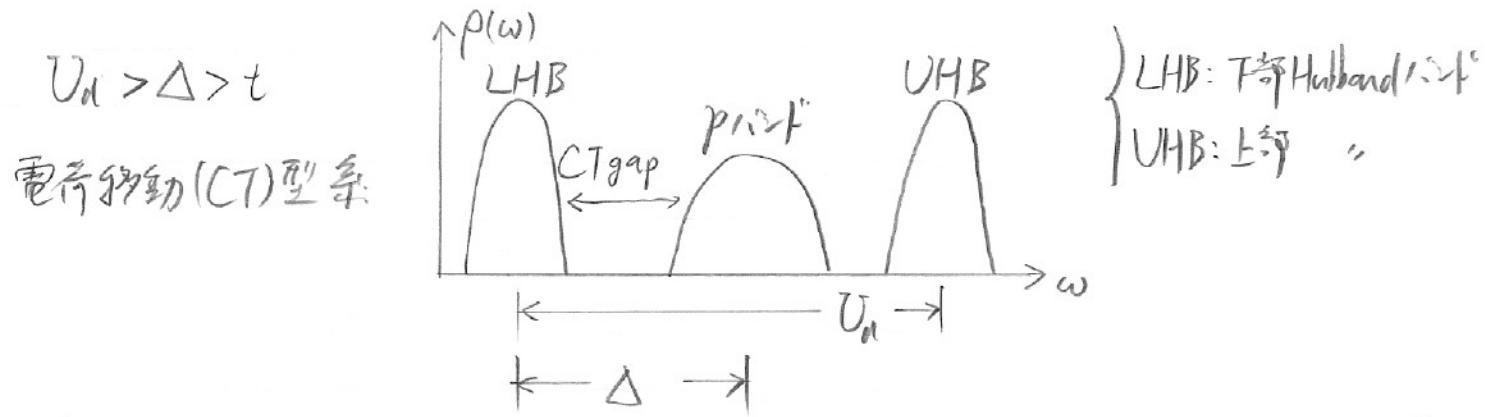
虚時間 Green 関数は

$$G^d(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} \rho^d(\omega) \quad (87)$$

である

IV-1-3. 一粒子励起スペクトル関数 (OPESF) の計算

今の物理系では OPESF は次のような形になることが期待される:



↓  
 実際の計算では、どうなるのだろう?

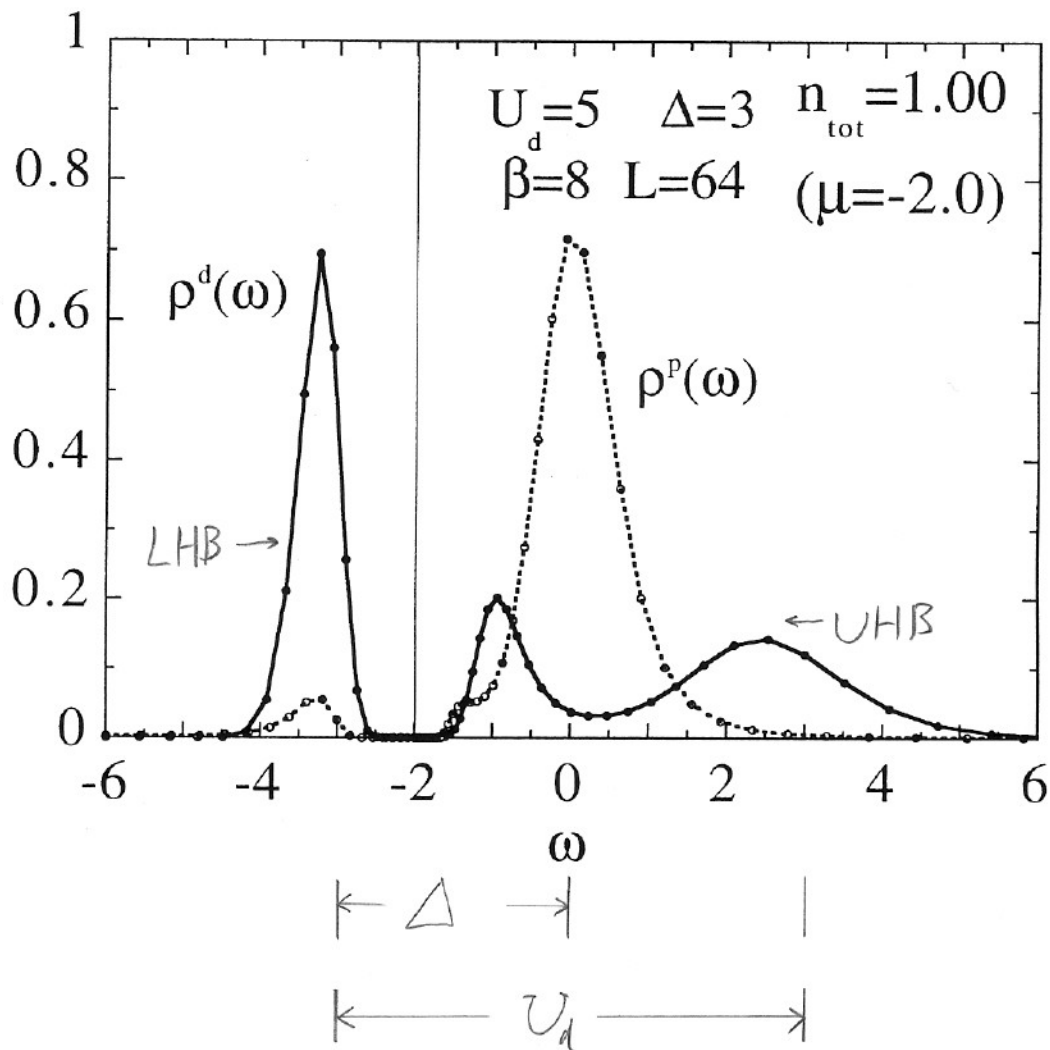
この計算では  
 $L=64, \beta=8$  ( $\Delta L=0.125$ ) で固定してある  
 手紙.  
 $U_d=5, \Delta=3, t=1, \epsilon_p=0$   
 としてある

• OPESF

$\rho^d(\omega)$  と  $\rho^p(\omega)$

(\*)  $G^p(\tau)$  についてはアルゴリズム上、誤差の評価が困難であるため、 $G^d(\tau)$  の誤差を単独に用いた

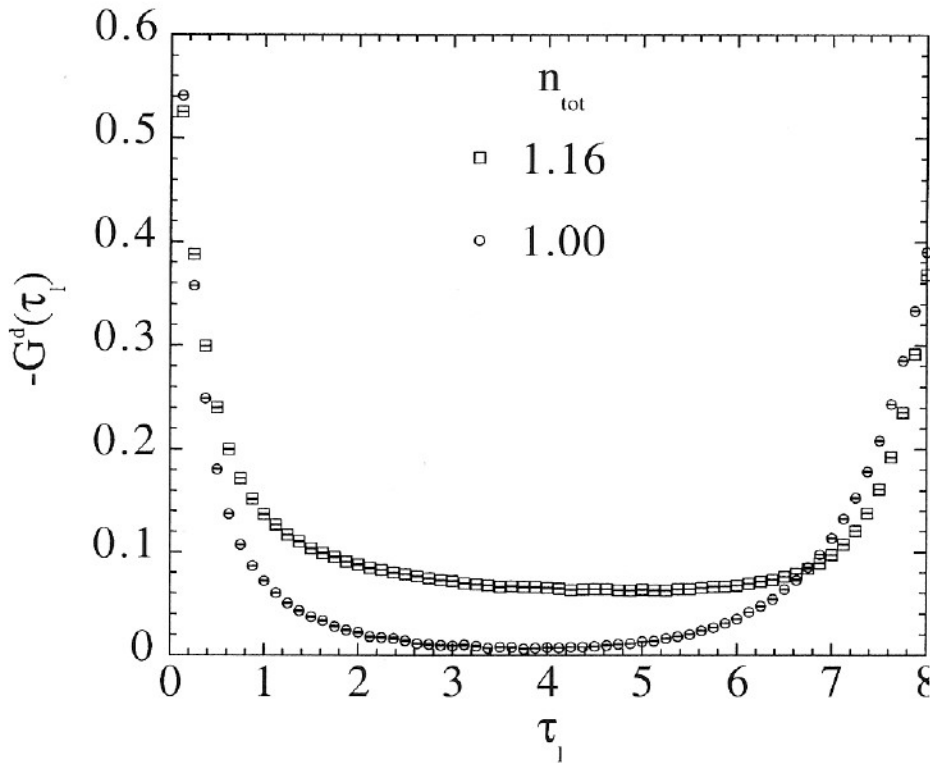
- 各 d サイトに平均電子数 ( $n_{tot}$ ) が一つの場合、  
の時のスペクトル



- UHB · LHB に対応する構造
- $\rho^p(\omega)$  は  $\epsilon_p (=0)$  に集中 ← p には肩力  $\propto L$ .
- CT gap 開く.
- (•  $\rho^d(\omega)$  に  $\omega \approx 1$  1 = peak ← d-p singlet peak)

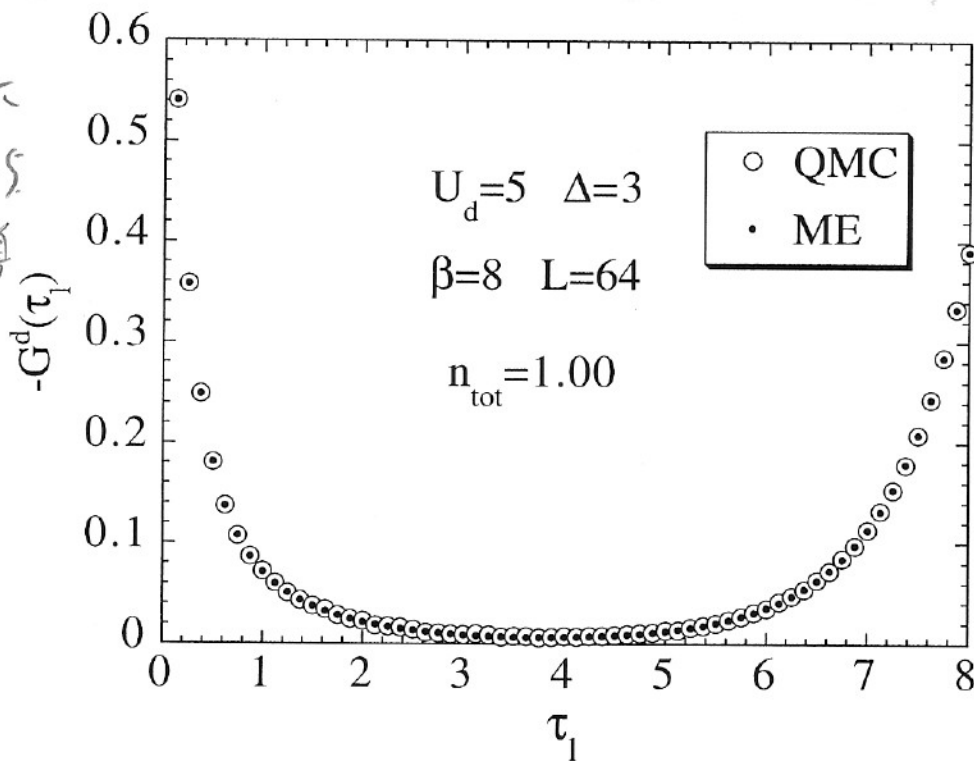
• 虚時間 Green 関数

• QMC ティーフ



ME法 ↓

• MEで得た  
スピンヒルから  
 $G^d(\tau)$ を計算



⇒ この程度の範囲で  $G^d(\tau)$ を再現



・ $\alpha$ の決定について

28.

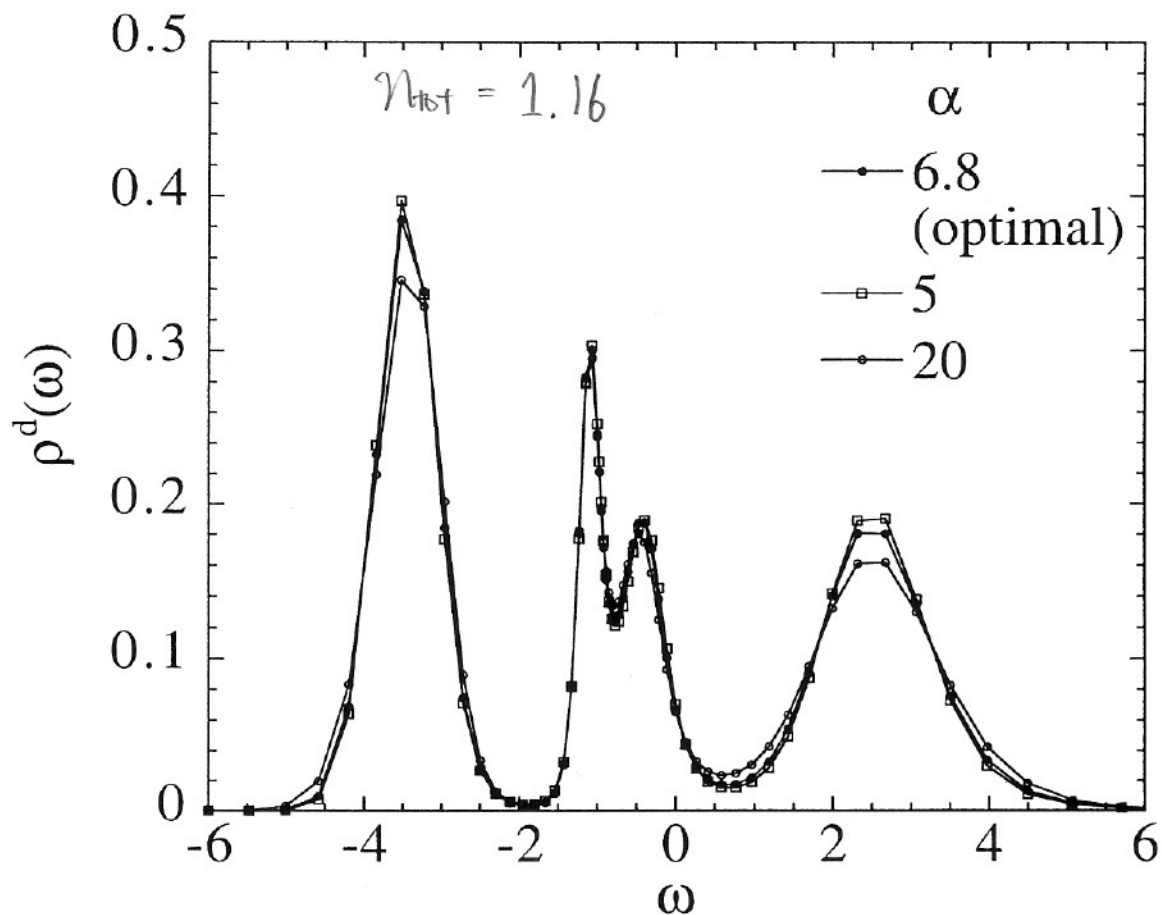
数値的には ⑧ から  $\alpha$  の最適値  $\hat{\alpha}$  が決まる

$$\begin{cases} \mathcal{F} = \frac{1}{2} \chi^2 - \alpha S \\ S = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\rho(\omega) - m(\omega) - \rho(\omega) \ln \frac{\rho(\omega)}{m(\omega)}) \end{cases}$$

$\Rightarrow$   $\alpha$  の大小が、事前情報 ( $m(\omega)$ ) の "効き方" を

左右する。  $\left\{ \begin{array}{l} \alpha \rightarrow \text{小} : \text{QMCデータ重視} \\ \alpha \rightarrow \text{大} : \text{モデル } m(\omega) \text{ 重視} \end{array} \right.$

・  $\alpha$  の違いによるスペクトルの差異

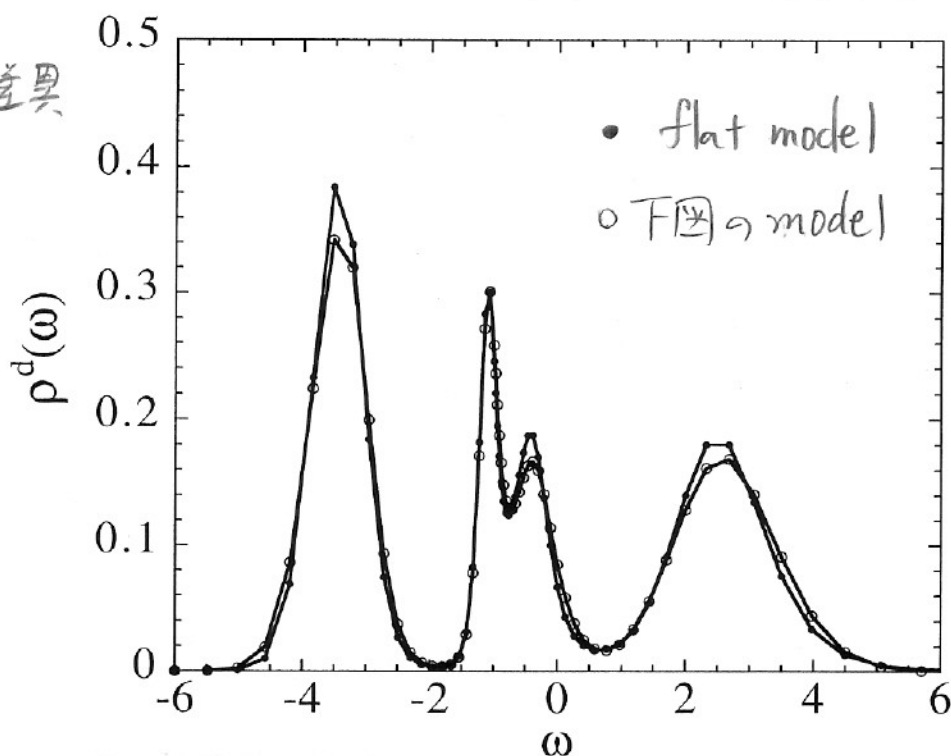


$\Rightarrow$  この程度の  $\alpha$  の差では影響は小さい

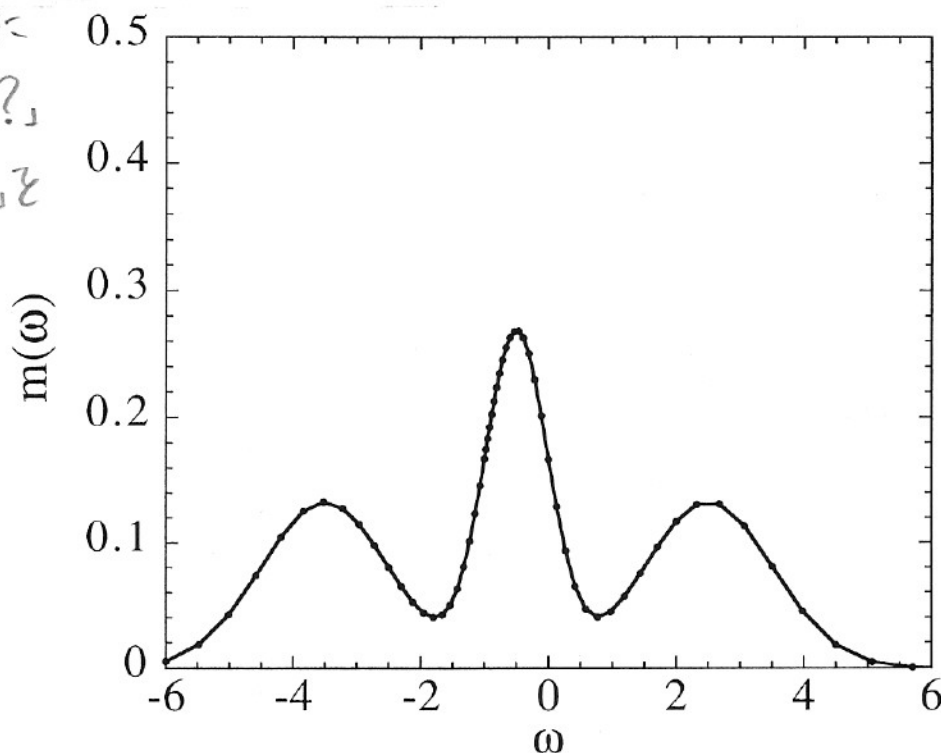
• モデル  $m(\omega)$  について.

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(\omega) \geq 0 \\ \int d\omega \rho(\omega) = 1 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{以外に } \rho(\omega) \text{ に条件を課さない} \\ \Leftrightarrow m(\omega) \text{ とは定数とする.} \end{array} \right.$$

•  $m(\omega)$  による差異



事前に「この辺に  
ピークがあるのでは？」  
といった「情報」を  
与えるモデル



⇒ こちらの「意図」によってピークが得られるので  
なく、あくまでも「完全なる無知」からの出発  
(※実は「意図」が人為的な構造を与える場合がある)

## IV-2. 逆 Laplace 変換問題

I. で挙げた (p.3) Laplace 変換の逆変換問題を  
考えてみる.

### IV-2-1. Laplace 変換

$$L(t) = \int_0^{\infty} d\omega \rho(\omega) e^{-\omega t} \quad (88)$$

において、 $L(t)$  が離散的  $t = t_e$  で誤差とともに  
与えられているとき、その  $L(t)$  を "再現" する  
 $\rho(\omega)$  を求める逆問題を考える.



ある与えられた  $\rho^0(\omega)$  を元にして (88) から  $L(t_e)$  を  
計算しておき、人為的に値を乱数的につまつかせる.

⇒ 適当な誤差  $\sigma_e$  を与えて、"実験データ" とする.

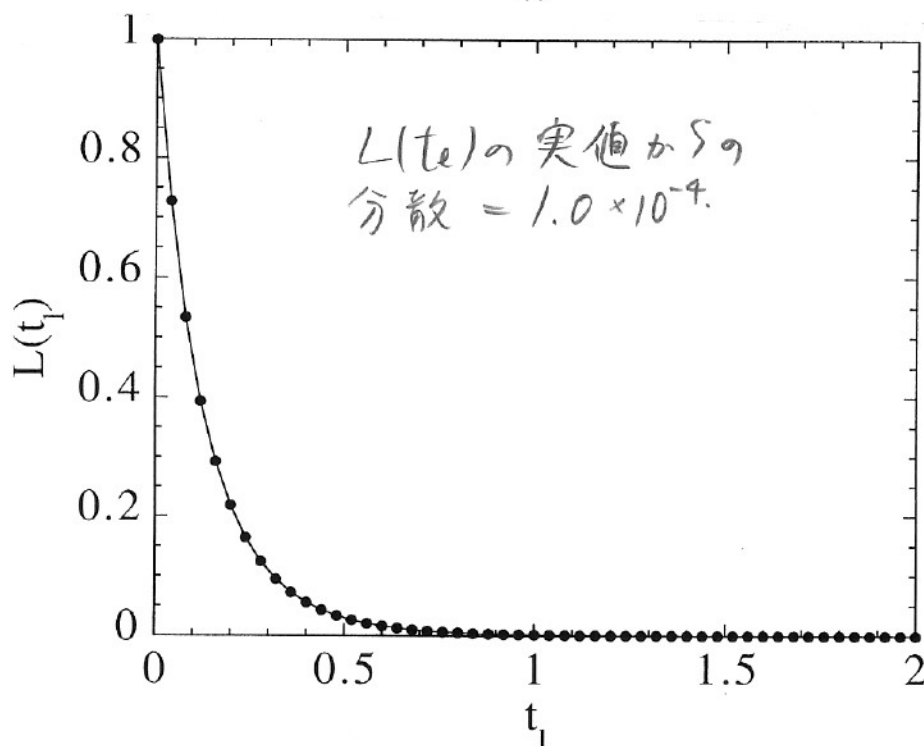
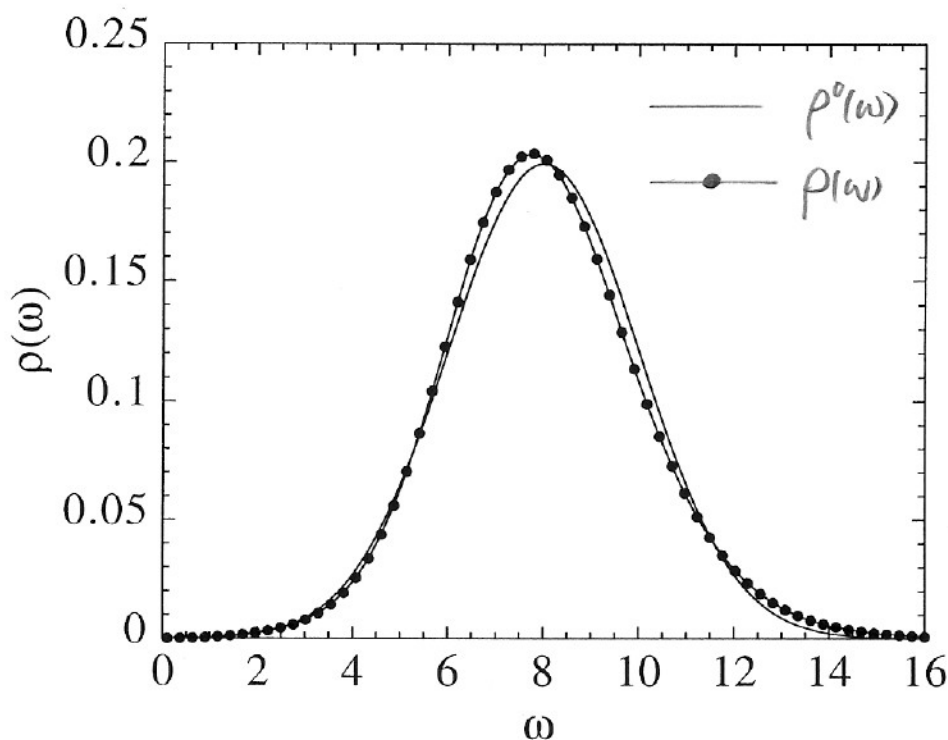
(ここでは  $\sigma_e$  を一定にとり計算した)

⇒ MF 法で、どれだけ、元のスペクトル  $\rho^0(\omega)$  を  
再現できるだろうか?

IV-2-2. Gaussian 2<sup>nd</sup> order PL.

$$\rho^0(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2}{2\sigma^2}} ; \omega_0 = 8, \sigma = 2 \text{ を仮定.}$$

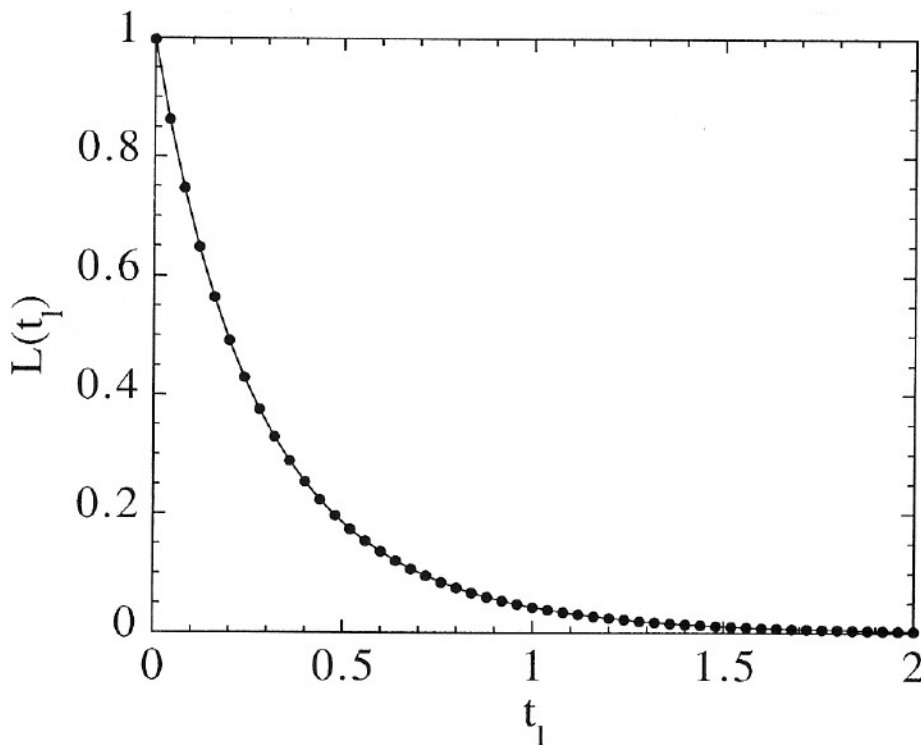
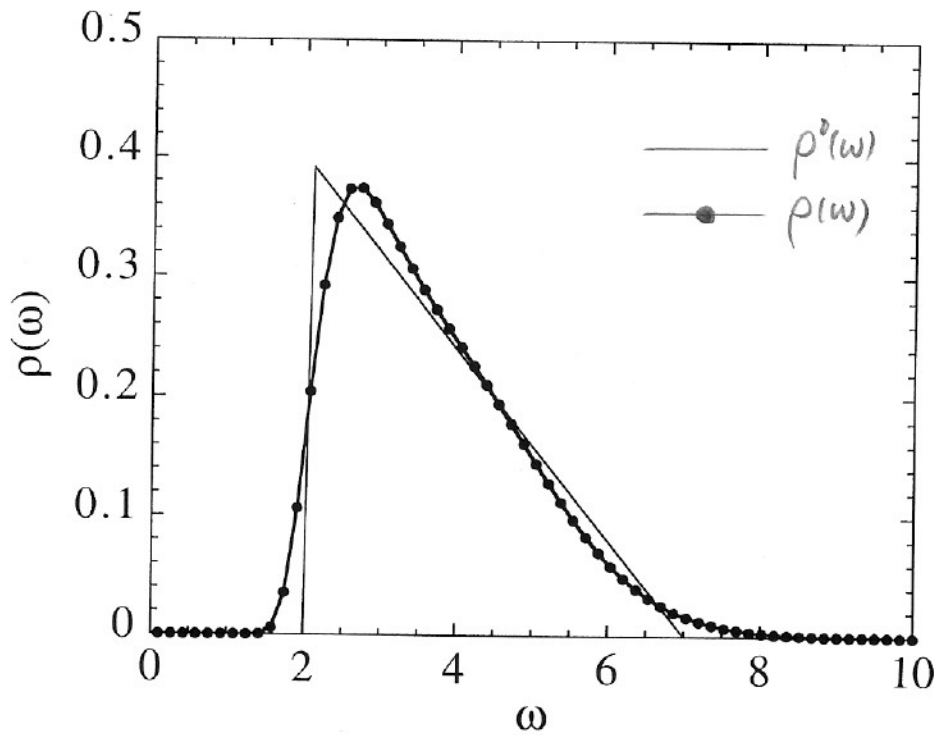
( $L(t_e) = \int_0^\infty d\omega e^{-t\omega} \rho^0(\omega)$  に対し "誤差" を示したのが下図)



⇒ Gaussian のピークの場所 ( $\omega_0 = 8$ ) や、幅 ( $\sigma = 2$ )  
 など、全体の形は、よく再現している

IV-2-3. 三角形スペクトル

$$\rho^0(\omega) = \begin{cases} 0 & (0 \leq \omega < 2) \\ 0.56 - 0.8\omega & (2 \leq \omega < 7) \\ 0 & (7 \leq \omega) \end{cases} \quad \text{を仮定}$$



⇒ 直線的なスペクトルは完全には再現されて  
いないが、 $\rho(\omega) \neq 0$  である  $\omega$  の範囲は  
評価し得る。(cf. 励起キャップ)

V. この講座で言いたかったこと.

ME法は...

(i) 逆問題の近似解法としては簡便で、信頼できる。

(ii) 実験データなどの解析で、物理的な「事前情報」を加味して、定性的な評価を予える。

(⇒ 実験データを「必要以上に」信用しない)

(iii) 「主観が入る」「人為的である」という主張も

あるが、むしろ、それらの要素に関係のない性質を浮き彫りの的に定性評価できる。

(⇒ 数値実験としての立場)

cf. 「MEはアートでありサイエンスでない」

⇔ 「MEは、非常にサイエンティフィックである!!」

(iv) 逆問題 (例えば逆Laplace交換問題)

に出会ったら、ME法とこの講座を

思い出して、是非アタックして下さい!!

## App. A (Green関数と一粒子の起スベツHL関数)

$$G(\tau) = -\langle T_{\tau} [C_{i\sigma}(\tau) C_{i\sigma}^{\dagger}(0)] \rangle \quad (-\beta \leq \tau \leq \beta) \quad (A1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \langle \dots \rangle &\equiv \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \dots e^{-\beta H} ; \quad \Xi = \text{Tr} e^{-\beta H} \end{aligned} \right. \quad (A2)$$

$$\left\{ \begin{aligned} C_{i\sigma}(\tau) &= e^{-\tau H} C_{i\sigma} e^{-\tau H} , \quad C_{i\sigma}^{\dagger}(\tau) = e^{-\tau H} C_{i\sigma}^{\dagger} e^{-\tau H} \end{aligned} \right. \quad (A3)$$

$$\left\{ \begin{aligned} T_{\tau} [C_{i\sigma}(\tau) C_{i\sigma}^{\dagger}(0)] &\equiv \begin{cases} C_{i\sigma}(\tau) C_{i\sigma}^{\dagger}(0) & (\tau > 0) \\ -C_{i\sigma}^{\dagger}(0) C_{i\sigma}(\tau) & (\tau < 0) \end{cases} \end{aligned} \right. \quad (A4)$$

$$\therefore G(\tau + \beta) = -\frac{1}{\Xi} \text{Tr} e^{-\beta H} e^{\tau + \beta H} C_{i\sigma} e^{-\tau + \beta H} C_{i\sigma}^{\dagger} \quad (A5)$$

$$= -\frac{1}{\Xi} \text{Tr} e^{-\beta H} C_{i\sigma}^{\dagger} e^{\tau H} C_{i\sigma} e^{-\tau H} \quad (A6)$$

$$= -G(\tau) \quad (-\beta < \tau < 0) \quad (A7)$$

$G(\tau)$  は  $-\beta \leq \tau \leq \beta$  の Fourier 級数展開:

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} G_m e^{-i \frac{m\tau}{\beta}} ; \quad G_m = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} G(\tau) e^{i \frac{m\tau}{\beta}} d\tau \quad (A8)$$

⇔ (A7) を用いると

$$G_m = \frac{1}{2} \left( \int_0^{\beta} G(\tau) e^{i \frac{m\tau}{\beta}} d\tau + \int_{-\beta}^0 G(\tau) e^{i \frac{m\tau}{\beta}} d\tau \right) \quad (A9)$$

⇐ (A7)

$$= \frac{1}{2} \left( \int_0^{\beta} G(\tau) e^{i \frac{m\tau}{\beta}} d\tau - \int_{-\beta}^0 G(\tau + \beta) e^{i \frac{m\tau}{\beta}} d\tau \right) \quad (A10)$$

$$= \frac{1}{2} \left( \int_0^{\beta} G(\tau) e^{i \frac{m\tau}{\beta}} d\tau - e^{-im\beta} \int_0^{\beta} G(\tau) e^{i \frac{m\tau}{\beta}} d\tau \right) \Rightarrow m = \text{odd} \quad (A11)$$

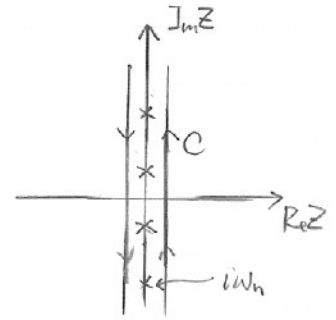
$$\therefore G_m \equiv G(i\omega_n) = \int_0^{\beta} G(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau ; \quad i\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (A12)$$

$G(\tau)$  と  $\rho(\omega)$  の関係を書く。

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G(i\omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n(\tau-\beta)} G(i\omega_n) \quad (A13)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} F(i\omega_n) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{F(z)}{e^{\beta z} + 1} dz \quad (A14)$$

$$\Downarrow = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{-i\tau\beta z} G(z)}{e^{\beta z} + 1} dz \quad (A15)$$



ここで  $G(i\omega_n)$  と  $\text{Im} G(\omega + i0)$  の関係を示す。

$$G(i\omega_n) = \int_0^\beta G(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \quad (A16)$$

$$\circ G(\tau) = -\langle C_{i\sigma}(\tau) C_{i\sigma}^\dagger(0) \rangle \quad (\tau > 0) \quad (A17)$$

$$= -\frac{1}{\Xi} \text{Tr} e^{-\beta H} e^{\tau H} C_{i\sigma} e^{-\tau H} C_{i\sigma}^\dagger \quad (A18)$$

$$\Leftrightarrow \mathcal{H}|k\rangle = K_k|k\rangle \quad (A19)$$

$$\Leftarrow = -\frac{1}{\Xi} \sum_{kl} e^{-\beta K_k} e^{(K_k - K_l)\tau} \langle k|C_{i\sigma}|l\rangle \langle l|C_{i\sigma}^\dagger|k\rangle \quad (A20)$$

$$= -\frac{1}{\Xi} \sum_{kl} e^{-\beta K_k} \langle k|C_{i\sigma}|l\rangle \langle l|C_{i\sigma}^\dagger|k\rangle \int_0^\beta e^{(i\omega_n + K_k - K_l)\tau} d\tau \quad (A21)$$

$$= -\frac{1}{\Xi} \sum_{kl} K_l \langle C_{i\sigma}^\dagger|k\rangle^2 \frac{e^{-\beta K_k} (e^{(i\omega_n + K_k - K_l)\beta} - 1)}{i\omega_n + K_k - K_l} \quad (A22)$$

$$\Leftarrow \circ e^{i\omega_n \beta} = -1 \quad (A23)$$

$$= \frac{1}{\Xi} \sum_{kl} K_l \langle C_{i\sigma}^\dagger|k\rangle^2 \frac{e^{-\beta K_l} + e^{-\beta K_k}}{i\omega_n - E_{lk}} \quad (E_{lk} \equiv K_l - K_k) \quad (A24)$$

$\Leftarrow \circ$  分子第1項で  $k \leftrightarrow l$

$$= \frac{1}{\Xi} \sum_{kl} e^{-\beta K_k} \left( \frac{K_l \langle C_{i\sigma}^\dagger|k\rangle^2}{i\omega_n - E_{lk}} + \frac{K_l \langle C_{i\sigma}|k\rangle^2}{i\omega_n - E_{kl}} \right) \quad (\because \langle k|C_{i\sigma}^\dagger|l\rangle = \langle l|C_{i\sigma}|k\rangle^*) \quad (A25)$$



今、単純に  $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$  ( $\delta \rightarrow +0$ ) と ( $k$  関数) を考えよう :

$$G(\omega + i\delta) = \frac{1}{\Xi} \sum_{\mathbf{k}l} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}} \left( \frac{|c_l \langle C_{i\mathbf{k}}^+ | \mathbf{k} \rangle|^2}{\omega + i\delta - E_{\mathbf{k}l}} + \frac{|c_l \langle C_{i\mathbf{k}} | \mathbf{k} \rangle|^2}{\omega + i\delta - E_{\mathbf{k}l}} \right) \quad (A26)$$

$$\therefore -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\omega + i\delta) = \frac{1}{\Xi} \sum_{\mathbf{k}l} e^{-\beta E_{\mathbf{k}}} \left\{ |c_l \langle C_{i\mathbf{k}}^+ | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(\omega - E_{\mathbf{k}l}) + |c_l \langle C_{i\mathbf{k}} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(\omega - E_{\mathbf{k}l}) \right\} \quad (A27)$$

この形を用いると  $z$  平面上の関数  $G(z)$  (A25) を、 $i\omega_n \rightarrow z$  と ( $k, l$ ) は、

$$G(z) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\text{Im} G(\omega + i\delta)}{z - \omega} \quad (A28)$$

と表す。

$\Rightarrow$  (A28) を (A15) に代入して  $G(z)$  を表すことにする

$$G(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{-(\tau-\beta)z} G(z)}{e^{\beta z} + 1} dz \quad (A15) \text{ 再掲}$$

$\leftarrow$  (A28)

$$= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Im} G(\omega + i\delta) \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{e^{-(\tau-\beta)z} dz}{(e^{\beta z} + 1)(z - \omega)} \quad (A29)$$

$$\leftarrow \oint_C \frac{e^{-(\tau-\beta)z} dz}{(e^{\beta z} + 1)(z - \omega)} = -2\pi i \frac{e^{-(\tau-\beta)\omega}}{e^{\beta\omega} + 1} \quad (A30)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Im} G(\omega + i\delta) \frac{e^{-(\tau-\beta)\omega}}{e^{\beta\omega} + 1} \quad (A31)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Im} G(\omega + i\delta) \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} \quad (A32)$$

一方 DOS  $\rho(\omega)$  は、

$$G(0^+) = -\langle C_{i0} C_{i0}^+ \rangle = \langle C_{i0}^+ C_{i0} \rangle - 1 \quad (A33)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho(\omega) f(\omega) - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho(\omega) \quad (A34)$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho(\omega) \frac{1}{1 + e^{-\beta\omega}} \quad \left( \because f(\omega) - 1 = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} - 1 = -\frac{e^{\beta\omega}}{e^{\beta\omega} + 1} \right) \quad (A35)$$

従,  $\tau$ . (A32)  $\tau = 0^+$  とおいた式と (A35) を比較して

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\omega + i\delta) \quad (A36)$$

$$G(\tau) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} \rho(\omega) \quad (A37)$$

\* 本文の中では  $G(\tau) \equiv \langle T_{\tau} [C_{\alpha}(\tau) C_{\alpha}^{\dagger}(0)] \rangle$  と、負符号と  
つり合い定義を採用している。

App. B ( $\alpha$  の決定)

$\hat{\alpha}$  は  $P[\alpha | \bar{G}, m]$  を最大にする  $\alpha$ .

$\Rightarrow \ln P[\alpha | \bar{G}, m]$  の  $\ln \alpha$  微分による極値を得る.

◦  $\ln P[\alpha | \bar{G}, m]$  の計算 (①を用いる)

$$\ln P[\alpha | \bar{G}, m] \propto \ln \int \mathcal{D}\rho P[\bar{G} | \rho] P[\rho | m, \alpha] \quad (B1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \leftarrow \circ P[\bar{G} | \rho] = \frac{1}{Z_G} e^{-\frac{1}{2}\chi^2} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \textcircled{20} \\ \text{再帰} \end{array}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \leftarrow \circ P[\rho | m, \alpha] = \frac{1}{Z_S} e^{\alpha S} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \textcircled{21} \\ \text{再帰} \end{array}$$

$$\downarrow \\ = \ln \left( \int \mathcal{D}\rho e^{\alpha S - \frac{1}{2}\chi^2} - \ln Z_S + \text{const.} \right) \quad (\text{const. に } \alpha \text{ は含まれない}) \quad (B2)$$

$\Rightarrow \int \mathcal{D}\rho e^{\alpha S - \frac{1}{2}\chi^2}$  において,  $\alpha S - \frac{1}{2}\chi^2$  を最大にする  $\rho$  ( $\hat{\rho}$ ) のおかげで:

Gaussian 近似として展開する. :

$$\int \mathcal{D}\rho e^{\alpha S - \frac{1}{2}\chi^2} = \int \prod_i \frac{d\rho_i}{\sqrt{\rho_i}} e^{\alpha S - \frac{1}{2}\chi^2} \quad (B3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \leftarrow \circ \varepsilon_i \equiv \sqrt{\rho_i} \quad ; \quad \frac{1}{2} \frac{d\rho_i}{\sqrt{\rho_i}} = d\varepsilon_i \end{array} \right. \quad (B4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \leftarrow \circ \ln F(\{\varepsilon_i\}) = \alpha \sum_i (\varepsilon_i^2 - m_i - 2\varepsilon_i^2 \ln \varepsilon_i + \varepsilon_i^2 \ln m_i) - \frac{\chi^2}{2} \end{array} \right. \quad (B5)$$

$$\downarrow \\ = \int \prod_i 2d\varepsilon_i F(\{\varepsilon_i\}) \quad (B6)$$

$\Rightarrow \ln F(\{\varepsilon_i\})$  を  $\hat{\varepsilon}_i$  ( $\Leftrightarrow \hat{\rho}_i$  に対応) のおかげで Taylor 展開

(7) 項まで評価する.

•  $\ln F(\{\varepsilon_i\})$  の展開

$$\ln F(\{\varepsilon_i\}) \approx \ln F(\{\hat{\varepsilon}_i\}) + \sum_i (\varepsilon_i - \hat{\varepsilon}_i) \left. \frac{\partial \ln F}{\partial \varepsilon_i} \right|_{\{\hat{\varepsilon}_i\}} + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} (\varepsilon_i - \hat{\varepsilon}_i)(\varepsilon_j - \hat{\varepsilon}_j) \left. \frac{\partial^2 \ln F}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right|_{\{\hat{\varepsilon}_i\}} \quad (B7)$$

$$\Rightarrow \left. \frac{\partial \ln F}{\partial \varepsilon_i} \right|_{\{\hat{\varepsilon}_i\}} = 0 \quad \because \{\hat{\varepsilon}_i\} \text{ は def. 通り.}$$

i.e.

$$\left. \frac{\partial \ln F}{\partial \varepsilon_i} \right|_{\{\hat{\varepsilon}_i\}} = \left( -2\alpha \varepsilon_i \ln \frac{\varepsilon_i^2}{m_i} - \frac{1}{2} \frac{\partial \chi^2}{\partial \varepsilon_i} \right) \Big|_{\{\hat{\varepsilon}_i\}} = 0 \quad (B8)$$

$$\therefore \left( 2\alpha \ln \frac{p_i}{m_i} + \frac{\partial \chi^2}{\partial p_i} \right) \Big|_{\{\hat{p}_i\}} = 0 \quad \left( \because \frac{\partial}{\partial \varepsilon_i} = 2\varepsilon_i \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \quad (B9)$$

→ 512.

$$\left. \frac{\partial^2 \ln F}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right|_{\{\hat{\varepsilon}_i\}} = \left\{ -\alpha (4 + 2 \ln \frac{\varepsilon_i^2}{m_i}) \delta_{ij} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right\} \Big|_{\{\hat{\varepsilon}_i\}} \quad (B10)$$

$$= \left\{ -\alpha (4 + 2 \ln \frac{p_i}{m_i}) \delta_{ij} - \frac{\partial \chi^2}{\partial p_i} \delta_{ij} - 2\sqrt{p_i p_j} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial p_i \partial p_j} \right\} \Big|_{\{\hat{p}_i\}} \quad (B11)$$

← (B9)

$$= \left( -4\alpha \delta_{ij} - 2\sqrt{p_i} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial p_i \partial p_j} \sqrt{p_j} \right) \Big|_{\{\hat{p}_i\}} \quad (B12)$$

従って,

$$\ln F(\{p_i\}) \approx \ln F(\{\hat{p}_i\}) - 2 \sum_{i,j} \left\{ \alpha (\sqrt{p_i} - \sqrt{\hat{p}_i})^2 \delta_{ij} + \frac{1}{2} \sqrt{\hat{p}_i} (\sqrt{p_i} - \sqrt{\hat{p}_i}) \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial p_i \partial p_j} \Big|_{\{\hat{p}_i\}} \sqrt{\hat{p}_j} (\sqrt{p_j} - \sqrt{\hat{p}_j}) \right\} \quad (B13)$$

• 積分 (B3) の評価 ( $S[\rho, m] = \hat{S}$ ,  $\chi^2[\hat{\rho}] = \hat{\chi}^2$ )

$$\frac{1}{e^{\alpha \hat{S} - \frac{1}{2} \hat{\chi}^2}} \prod_i \frac{d\rho_i}{\sqrt{\rho_i}} e^{\alpha \rho_i - \frac{1}{2} \chi^2} \approx \int \prod_i \frac{d\rho_i}{\sqrt{\rho_i}} \exp \left[ -2 \sum_{ij} \left\{ \alpha (\sqrt{\rho_i} - \sqrt{\hat{\rho}_i})^2 \delta_{ij} + \frac{1}{2} \sqrt{\hat{\rho}_i} (\sqrt{\rho_i} - \sqrt{\hat{\rho}_i}) \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial \rho_i \partial \rho_j} \Big|_{\rho_i = \hat{\rho}_i} \sqrt{\hat{\rho}_j} (\sqrt{\rho_j} - \sqrt{\hat{\rho}_j}) \right\} \right] \quad (B14)$$

$$\leftarrow \circ 2(\sqrt{\rho_i} - \sqrt{\hat{\rho}_i}) \equiv \mu_i \quad (B15)$$

$$= \int \prod_i d\mu_i \exp \left[ -\frac{\alpha}{2} \sum_i \mu_i^2 + \frac{1}{4} \sum_{ij} \mu_i \sqrt{\hat{\rho}_i} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial \rho_i \partial \rho_j} \Big|_{\rho_i = \hat{\rho}_i} \sqrt{\hat{\rho}_j} \mu_j \right] \quad (B16)$$

$$\leftarrow \circ \frac{1}{2} \sqrt{\hat{\rho}_i} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial \rho_i \partial \rho_j} \Big|_{\rho_i = \hat{\rho}_i} \sqrt{\hat{\rho}_j} \equiv \Lambda_{ij} \quad (B17)$$

$$= \int \prod_i d\mu_i \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{ij} \mu_i (\alpha \delta_{ij} + \Lambda_{ij}) \mu_j \right] \quad (B18)$$

$$\leftarrow \circ \Lambda_{ij} \text{ を対角化した表示 } \nu_i ; \sum_{ij} \mu_i \Lambda_{ij} \mu_j = \sum_i \lambda_i \nu_i \quad (B19)$$

$$= \prod_i \left( \int d\nu_i e^{-\frac{1}{2} (\alpha + \lambda_i) \nu_i^2} \right) \quad (B20)$$

$$= \prod_i \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha + \lambda_i}} \quad (B21)$$

⇒  $\ln P[\alpha | G, m]$  (B2) に現れた  $\rho$  積分は Gaussian 近似で

評価するのは可能!

i.e.

$$\ln \int \rho e^{\alpha \rho - \frac{1}{2} \chi^2} \approx \alpha \hat{S} - \frac{1}{2} \hat{\chi}^2 - \frac{1}{2} \sum_i \ln(\alpha + \lambda_i) + \text{const.} \quad (B22)$$

◦  $\ln P[\alpha | \bar{G}, m]$  (B2) の評価.

$$\ln P[\alpha | \bar{G}, m] = \ln \int Dp e^{\alpha S - \frac{1}{2} \chi^2} - \ln Z_S + \text{const.} \quad (\text{B2})$$

再掲

← (B22)

$$\leftarrow Z_S = \left( \frac{2\pi}{\alpha} \right)^{\frac{N_w}{2}} \text{ (58 式)}, \quad \ln Z_S = -\frac{N_w}{2} \ln \alpha + \text{const.} \quad (\text{B23})$$

$$\downarrow \simeq \alpha \hat{S} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_w} \ln \frac{\alpha}{\alpha + \lambda_i} + \text{const.} \quad (\because \hat{\chi}^2 \text{ は } \alpha \text{ に依らず}) \quad (\text{B24})$$

⇒ この  $\ln P[\alpha | \bar{G}, m]$  の極大を与える  $\alpha = \hat{\alpha}$  を決めよう :

$$\left. \frac{\partial \ln P[\alpha | \bar{G}, m]}{\partial \ln \alpha} \right|_{\hat{\alpha}} = \hat{\alpha} S[\hat{p}, m] + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_w} \frac{\lambda_i}{\hat{\alpha} + \lambda_i} = 0 \quad (\text{B25})$$

従って、「最も尤である  $\alpha, \hat{\alpha}$  は、

$$-2\hat{\alpha} S[\hat{p}, m] = \sum_{i=1}^{N_w} \frac{\lambda_i}{\hat{\alpha} + \lambda_i} = 0 \quad (\text{B26})$$

$$\left( \lambda_i \text{ は } \Lambda_{ij} = \frac{1}{2} \sqrt{\hat{p}_i} \left. \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial p_i \partial p_j} \right|_{\hat{p}} \sqrt{\hat{p}_j} \text{ の固有値} \right)$$

から決定された。

: classic ME

### App. C. (逆 Laplace 変換問題のプログラム)

Laplace 変換

$$L(t) = \int_0^{\infty} d\omega e^{-t\omega} \rho(\omega) \quad (C1)$$

において、誤差  $\sigma_e$  とともに  $L(t_e)$  ( $e=1, \dots, L$ ) が与えられた

時、(C1) を満たす  $\rho(\omega)$  を "推測" するために MEM を用いるとする。

⇒ ⑥ の数値解を探す。

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \chi^2 - \alpha \mathcal{P} \quad (C2)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{e=1}^L \left( \frac{L_e - \sum_{n=1}^{N_w} K_{en} \rho_n}{\sigma_e} \right)^2 - \alpha \sum_{n=1}^{N_w} \left( \rho_n - m_n - \rho_n \ln \frac{\rho_n}{m_n} \right) \quad (C3)$$

$$\left( L_e \equiv L(t_e), \quad \rho_n \equiv \rho(\omega_n) \Delta \omega_n \right)$$

∴

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho_n} = \sum_{n'=1}^{N_w} \left( \sum_{e=1}^L \frac{K_{en} K_{en'}}{\sigma_e^2} \right) \rho_{n'} - \sum_{e=1}^L \frac{K_{en} L_e}{\sigma_e^2} + \alpha \ln \frac{\rho_n}{m_n} = 0 \quad (C4)$$

なる  $N_w$  個の方程式 (連立) を解く

↓

プログラムの中では、次のように配列をとっている:

$$\left( \begin{array}{l} \text{KK}(M, N) \leftrightarrow \sum_{e=1}^L \frac{K_{en} K_{en'}}{\sigma_e^2} \Big|_{\substack{n=1 \\ n'=1}}^M \\ \text{KG}(M) \leftrightarrow \sum_{e=1}^L \frac{K_{en} L_e}{\sigma_e^2} \Big|_{n=1}^M \\ \text{RAT}(M) \leftrightarrow \ln \frac{\rho_n}{m_n} \Big|_{n=1}^M \end{array} \right)$$

◦ プログラムのパラメータについて

( $\omega$ )

INP : 入力データ  $L_e, \sigma_e$  を  $t_e$  にかけて与える file

OUT : 出力データ  $\rho_n$  を  $\omega_n$  にかけて与える file

OUT2 :  $\chi^2$  ( $\leftrightarrow F_{fic}$ ),  $\frac{\chi^2}{2}$  ( $\leftrightarrow L_{fic}$ ),  $S$  ( $\leftrightarrow S_{fic}$ ),  $\alpha$  ( $\leftrightarrow T_{fic}$ )  
を iteration にかけて与える file (コメントアウトしてあり)

( $\rho_n$ )

Nomega :  $\rho_n$  の離散点の数  $N_\omega$

$\left. \begin{array}{l} WMAX : \omega_n \text{ の 最大値} \\ WMIN : \quad \quad \text{最小値} \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega_{N_\omega} = WMAX \\ \omega_1 = WMIN \end{array} \right. \text{ と して あり}$

$\left. \begin{array}{l} Ifreq : \omega_n \text{ の べき 3 の 与 方} \end{array} \right\} \begin{array}{l} Ifreq = 1 : \text{等間隔 べき 3} \\ \omega_n = \omega_1 + \frac{\omega_{N_\omega} - \omega_1}{N_\omega - 1} \cdot (n - 1) \\ Ifreq = 2 : \text{等比級数 べき 3} \\ \left. \begin{array}{l} \omega_n = C_\omega \cdot \frac{R_\omega^n - 1}{R_\omega - 1} + \omega_1 \\ C_\omega = (\omega_{N_\omega} - \omega_1) \cdot \frac{R_\omega - 1}{R_\omega^{N_\omega} - 1} \end{array} \right\}
 \end{array}$

( $\alpha$ ) alpha0 : 最初に与える  $\alpha$

$\left. \begin{array}{l} ERRORO : \textcircled{82} \text{ を 満たす と する 条件;} \\ \textcircled{82} \text{ の 右 左 辺 の 差} < ERRORO \text{ で } \hat{\alpha} \text{ と 決定} \end{array} \right\}$

ITERMAX :  $\hat{\alpha}$  決定の iteration 回数の最大値

ITCONV :  $\hat{\alpha}$  決定を行ない始める最小の iteration 回数.



$A_{incr}$  :  $\alpha$  iteration で 小さく (なり) 過 また  $\alpha$  を 大きく した ため の 係数 ;  
 $(\alpha_{i+1} = \alpha_i * A_{incr})$   
 $A_{decr}$  : " 大きく " " 小さく " ;  
 $(\alpha_{i+1} = \alpha_i * A_{decr})$   
 $\Rightarrow$  これらの係数は特に制限はない。また、通常は  
 $\alpha_{i+1} = \alpha_i * 0.5$   
 で iteration を進めている

(L)  
 ISW:  $L_e$  の誤差  $\sigma_e$  を人為的に与えるかどうかのスイッチ;

$\left\{ \begin{array}{l} ISW = 1 : \sigma_e \text{ は元データのまゝ使用} \\ ISW = 2 : \sigma_e \text{ として、一定値 SIGDEF を使用} \end{array} \right.$

((C4)の解)

Broydenの方法という解法のサブルーチンを用いている。

$\Rightarrow$  サブルーチンの解説参照 (LF, EPS はその中で説明)

・プログラム中の配列、

$\left\{ \begin{array}{l} TAU(I) \leftrightarrow t_e |_{e=1} ; G(I) \leftrightarrow L_e |_{e=1} \\ OM(M) \leftrightarrow \omega_n |_{n=M} ; A(M) \leftrightarrow \rho_n |_{n=M} \\ MODEL(M) \leftrightarrow m_n |_{n=M} \end{array} \right.$

など。

• 必要なプログラム, サブルーチン

- me.f (関数最小化プログラム FUNC を含む)
- broydd.f ( " minvd.f を含む)

⇒ 講座の中では, me.f のみを考げている.

また, 入力データとして gauss DATA.dat を使いとする.

## ◎参考文献:

- ・ MEM の基礎から応用まで幅広く扱っている  
解説集的存在として.

"Maximum Entropy and Bayesian Methods"

(Kluwer Academic, Dordrecht, 1988 and 1989)

特に、 $\left\{ \begin{array}{l} \text{ed. G.J. Erickson and C.R. Smith の巻の p.53} \\ \text{ed. J. Skilling の巻の p.45, p.53} \end{array} \right.$

- ・ 主に本講座が元にした論文として

R.N. Silver et al. : Phys. Rev. B41 (1990) 2380

J.E. Gubernatis et al. : Phys. Rev. B44 (1991) 6011

Y. Nagatomo (長友) : 筑波大自然科学類 平成6年度卒業論文

本講座のために作成したプログラムについては、大阪市立大学の小栗先生の作成されたプログラムを参考にさせていただきました。また、本講座の内容は、筑波大学の平島先生（現在名古屋大学）とのセミナーが基本となりました。ここに、改めて感謝の意を表したいと思います。どうもありがとうございました。

```

C*****
C
C Maximum Entropy Method
C for
C the inversion of
C Laplace transformation
C
C by Tetsuya Mutou
C 1997. 1. 28.
C*****
C
C IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C CHARACTER*30 INP,OUT,OUT2
C PARAMETER (INP='gaussDATA.dat')
C PARAMETER (OUT='gaussDOS.dat',OUT2='gaussPARA.dat')
C PARAMETER (Nomega=61)
C PARAMETER (WMAX=16.0D00,WMIN=1.0D-1)
C PARAMETER (Ifreq=1,Rw=1.01D00)
C PARAMETER (alpha0=2.0D00**60,ERROR0=5.0D-1)
C PARAMETER (ITERMAX=100,ITCONV=40)
C PARAMETER (Aincr=1.3D00,Adecr=0.7D00)
C PARAMETER (ISW=2,SIGDEF=1.0D-3)
C
C PARAMETER (LF=5000,EPS=1.0D-4)
C
C PARAMETER (Lmax=128,Nmax=130)
C REAL*8 OM(Nmax),A(Nmax),KK(Nmax,Nmax),KG(Nmax)
C REAL*8 TAU(Lmax),G(Lmax),SIGMA(Lmax),GG(Lmax)
C REAL*8 MODEL(Nmax),RAT(Nmax),DIVW(Nmax),KER(Lmax,Nmax)
C REAL*8 UNI(Nmax,Nmax),VUNI(Nmax,Nmax)
C REAL*8 ASQ(Nmax),LAMB(Nmax,Nmax),LAM(Nmax)
C REAL*8 H(Nmax+1,Nmax)
C # Ffic(100),Tfic(100),Sfic(100),Lfic(100),
C # Ng(100),Ent(100)
C INTEGER INDX(Nmax)
C
C EXTERNAL FUNC
C COMMON /WDAT/Nw
C COMMON /alpha/alpha
C COMMON /MODEL/MODEL
C COMMON /KKD/KK,KG
C
C PI=4.0D00*DATAN(1.0D00)
C
C--- Initialization of alpha ---
C
C alpha=alpha0
C Nw=Nomega
C
C--- Initialization of the frequency ---
C
C IF(Ifreq.EQ.1) THEN
C DW=(WMAX-WMIN)/DFLOAT(Nw-1)
C DO 3900 J=1,Nw
C OM(J)=DFLOAT(J-1)*DW+WMIN
3900 CONTINUE
C ELSE
C Cw=DABS(WMAX-WMIN)*(Rw-1.0D00)/(Rw**Nw-Rw)
C DO 4000 J=1,Nw
C OM(J)=Cw*(Rw**J-Rw)/(Rw-1.0D00)+WMIN
4000 CONTINUE
C ENDIF
C
C DIVW(1) = ( OM(2) - OM(1) ) * 0.5d0
C DIVW(Nw) = ( OM(Nw) - OM(Nw-1) ) * 0.5d0

```

```

DO 5000 J=2, Nw-1
C DIVW(J) = ( OM(J+1) - OM(J-1) ) * 0.5d0
5000 CONTINUE
C
C--- Reading data ---
C
C OPEN(10,FILE=INP)
C READ(10,640) Ltrot,DTAU
C DO 10 I=1,Ltrot+1
C READ(10,600) B,G(I),SIGMA(I)
C TAU(I)=DTAU*DFLOAT(I-1)
10 CONTINUE
C CLOSE(10)
C
C--- Sigma switch ---
C
C IF(ISW.EQ.2) THEN
C DO 30 I=1,Ltrot+1
C SIGMA(I)=SIGDEF
30 CONTINUE
C ENDIF
C DO 35 I=1,Ltrot+1
C G(I)=G(I)/SIGMA(I)
35 CONTINUE
C
C--- Model ---
C
C DO 40 M=1,Nw
C MODEL(M)=DIVW(M)/(OM(Nw)-OM(1))
40 CONTINUE
C
C--- Calc. of kernel ---
C
C DO 50 I=1,Ltrot
C DO 50 M=1,Nw
C KER(I,M)=DEXP(-TAU(I)*OM(M))
C # /SIGMA(I)
50 CONTINUE
C
C DO 60 M=1,Nw
C DO 60 N=1,Nw
C KK(M,N)=0.0D00
C DO 60 I=1,Ltrot
C KK(M,N)=KK(M,N)+KER(I,M)*KER(I,N)
60 CONTINUE
C DO 70 M=1,Nw
C KG(M)=0.0D00
C DO 70 I=1,Ltrot
C KG(M)=KG(M)+KER(I,M)*G(I)
70 CONTINUE
C
C--- Initialization of A(omega) ---
C
C DO 80 M=1,Nw
C A(M)=MODEL(M)
80 CONTINUE
C
C----- Loop of Tfic -----
C
C DO 90 ITER=1,ITERMAX
C
C WRITE(6,*) 'ITER=',ITER
C
C DO 100 M=1,Nw
C RAT(M)=DLOG(A(M)/MODEL(M))
100 CONTINUE

```

```

C
C--- Solution by Broyden's method ---
C
      KH=Nw+1
      CALL BROYDD(RAT,Nw,H,KH,FUNC,LF,NF,EPS,FM,ILL)
      write(6,*) 'NF=',NF,'FM=',FM
      IF(ILL.EQ.1)THEN
        WRITE(6,*) 'BROYDEN is not converged'
        WRITE(6,*) 'ITER=',ITER
        ITLAST=ITER-1
        GO TO 1000
      ENDIF
C
      DO 110 M=1,Nw
        A(M)=MODEL(M)*DEXP(RAT(M))
110     CONTINUE
C
C--- Normalization ---
C
      SUM=0.0D00
      DO 170 M=1,Nw
        SUM=SUM+A(M)
170     CONTINUE
C
      WRITE(6,*) 'Norm.=' ,SUM
C
C-----Entropy-----
C
      Tfic(ITER)=alpha
C
      Sfic(ITER)=0.0D00
      DO 120 M=1,Nw
        Sfic(ITER)=Sfic(ITER)+(A(M)-MODEL(M)-A(M)*RAT(M))
120     CONTINUE
C
      DO 130 I=1,Ltrot
        CG(I)=0.0D00
        DO 130 M=1,Nw
          GG(I)=GG(I)+KER(I,M)*A(M)
130     CONTINUE
C
      Lfic(ITER)=0.0D00
      DO 140 I=1,Ltrot
        Lfic(ITER)=Lfic(ITER)+(G(I)-GG(I))*(G(I)-GG(I))
140     CONTINUE
      Lfic(ITER)=Lfic(ITER)*0.5D00
C
C--- Fictitious free energy ---
C
      Ffic(ITER)=Lfic(ITER)-alpha*Sfic(ITER)
C
C--- Determination of alpha ---
C
      DO 315 M=1,Nw
        ASQ(M)=DSQRT(A(M))
315     CONTINUE
C
      DO 405 M=1,Nw
        DO 415 N=1,Nw
          LAMB(M,N)=ASQ(M)*KK(M,N)*ASQ(N)
          UNI(M,N)=LAMB(M,N)
415     CONTINUE
405     CONTINUE
C
      CALL SVDCMP(UNI,Nw,Nw,Nmax,Nmax,LAM,VUNI)

```

```

      Ng(ITER)=0.0D00
      DO 425 M=1,Nw
        Ng(ITER)=Ng(ITER)+LAM(M)/(alpha+LAM(M))
425     CONTINUE
C
      Ent(ITER)=-2.0D00*alpha*Sfic(ITER)
C
      IF(ITER.GT.ITCONV)THEN
        DIF0=Ng(ITER-1)-Ent(ITER-1)
        DIFF=Ng(ITER)-Ent(ITER)
        IF(DABS(DIFF).LE.ERROR0)THEN
          write(*,*) 'MaxEnt converged !!!'
          ITLAST=ITER
          GO TO 1000
        ELSE
          IF(DIFF*DIF0.LT.0.0D00)THEN
            alpha=0.5D00*(Tfic(ITER)+Tfic(ITER-1))
          ELSE
            IF(DIFF.GT.0.0D00)THEN
              alpha=alpha*Aincr
            ELSE
              alpha=alpha*Adocr
            ENDIF
          ENDIF
        ENDIF
      ELSE
        alpha=alpha*0.5D00
      ENDIF
C
90     CONTINUE
C
C----- Convergence of the procedure -----
C
1000  CONTINUE
      WRITE(*,*) '-2alphas =',Ent(ITLAST),'Ng =',Ng(ITLAST)
C
C--- Indication of the final normalization ---
C
      SUM=0.0D00
      DO 190 M=1,Nw
        SUM=SUM+A(M)
190     CONTINUE
      write(*,*) 'final Norm.=' ,SUM
C
      DO 200 M=1,Nw
        A(M)=A(M)/DIVW(M)
200     CONTINUE
C
C--- Output of the results ---
C
      OPEN(20,FILE=OUT)
      WRITE(20,610) Ffic(ITLAST),Tfic(ITLAST),
        #      Lfic(ITLAST),-Sfic(ITLAST)
      WRITE(20,620) Nw
      WRITE(20,630)
      DO 150 IE=1,Nw
        WRITE(20,600) OM(IE),A(IE)
150     CONTINUE
      CLOSE(20)
C
C--- Output of the fictitious values ---
C
c     OPEN(20,FILE=OUT2)
c     WRITE(20,650)
c     DO 155 I=1,ITLAST
c       WRITE(20,660) Ffic(I),Tfic(I),Lfic(I),-Sfic(I)

```

```
c 155 CONTINUE
c      CLOSE(20)
C
600 FORMAT(E12.5,E12.5,E12.5)
610 FORMAT('# Ffic=',E12.5,' Tfic=',E12.5,' Lfic=',E12.5,
#       '-Sfic=',E12.5)
620 FORMAT('# Nw=',I8)
630 FORMAT('#',6x,'Omega',10x,'Rho',10x,'Error')
640 FORMAT('# Lmax=',I8,' Dtau=',E12.5)
650 FORMAT('#',6x,'Ffic',10x,'Tfic',10x,'Lfic',10x,'-Sfic')
660 FORMAT(E12.5,E12.5,E12.5,E12.5)
C
C      STOP
      END
C
SUBROUTINE PUNC(S,F)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (Nmax=130)
REAL*8 KK(Nmax,Nmax),KG(Nmax),S(Nmax),F(Nmax)
REAL*8 MODEL(Nmax)
COMMON /WDAT/Nw
COMMON /alpha/alpha
COMMON /MODEL/MODEL
COMMON /KKD/KK,KG
C
DO 10 M=1,Nw
  F(M)=0.0D00
  DO 20 N=1,Nw
    F(M)=F(M)+KK(M,N)*MODEL(N)*DEXP(S(N))
  20 CONTINUE
  F(M)=F(M)-KG(M)+alpha*S(M)
  10 CONTINUE
RETURN
END
```

BROYDS/D (ブロイデンの方法による非線形連立一次方程式の解法)

Solution of Systems of Nonlinear Equations by Broyden's Method

作成	二宮 市三 1977年4月
形式	サブ-ルーチン言語:FORTRAN サイズ:59,71行

(1) 概要

初期値が与えられたとき、非線形連立方程式  $f_i(x_1, \dots, x_n) = 0$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) を Broyden の反復法で解くためのサブルーチン副プログラムである。

(2) 使用法

CALL BROYDS/D (X, N, H, KH, FN, LF, NF, EPS, FM, ILL)

引数	型と種類*	属性	内容
X	実数型 1次元配列	入出力	初期ベクトルを入力すると解ベクトルが出力される。
N	整数型	入力	方程式の元数。 $0 < N \leq 1000$
H	実数型 2次元配列	作業領域	$KH \times N$ の大きさを要する。
KH	整数型	入力	Hの配列宣言における第1添字の値。 $KH \geq N$
FN	サブルーチン	入力	位置ベクトルXが与えられたとき、N個の方程式の値から成るベクトルYを計算するためのFN (X, Y) の形のサブルーチン。この引数に対する実引数は、本ルーチンを引用するプログラム単位でEXTERNAL宣言を必要とする。
LF	整数型	入力	関数サブルーチン引用回数の上限。 $LF > N + 1$
NF	整数型	出力	関数サブルーチン引用回数。
EPS	実数型	入力	収束判定常数。 $EPS > 0$
FM	実数型	出力	方程式の残差2乗平均の平方根。
ILL	整数型	出力	ILL=0 : 正常終了。 ILL=1 : NF > LF となっても収束しないとき。 ILL=30000 : 入力引数が条件を満足しないとき。

\* 倍精度用のサブルーチンの場合は、実数型をすべて倍精度実数型とする。

(3) 計算法

参考文献<sup>1)</sup>を参照のこと。

(4) 使用例

Freudenstein-Rothの問題 (解: X(1) = 5.0, X(2) = 4.0) を解くためのプログラムの主要部を示す。

```

DIMENSION H(2,2),X(2)
EXTERNAL FREUDE
KH=2
N=2
LF=1000
EPS=1.E-5
X(1)=15.0
X(2)= 3.0
CALL BROYDS(X,N,H,KH,FREUDE,LF,NF,EPS,FM,ILL)
:
END

SUBROUTINE FREUDE(X,F)
DIMENSION X(2),F(2)
F(1)=X(1)-13.+(5.-X(2))*X(2)-2.*X(2)
F(2)=X(1)-29.+(X(2)+1.)*X(2)-14.*X(2)
RETURN
END
    
```

(5) 備考

1. 非線形連立方程式は一般に多くの解を持つので、得られた解が果たして目的の解であるかどうかは検討の必要がある。目的の解に確実に収束させるためには、良い初期値が是非とも必要である。
2. 最小値 (又は最大値) が極値である場合の最小化問題は、勾配ベクトルに関して非線形連立方程式となり、逆に、非線形連立方程式  $f_i = 0$  ( $i=1, \dots, n$ ) は  $\sum f_i^2$  を考えれば最小化問題となる。これを考慮して、それぞれの場合に適する計算法及びプログラムを選択すべきである。
3. 本ルーチンは、その中で逆行列ルーチンMINVS/Dを引用している。

参考文献

1) C. G. Broyden: "A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations", Math. Comp., Vol. 19, pp. 577-593 (1965). (1987. 06. 16) (1987. 08. 07)

MINVS/D/Q/C/B/Z (行列の逆転)

Inversion of Matrices

作成	二宮 市三 1977年4月
形式	ガムチン 言語;FORTRAN サイズ:96, 97, 96, 95, 96, 96行

(1) 概要

LU-分解法によって、与えられた行列の逆行列を与えられた行列の位置に作る。この際、ピボット選択のために必要ならば、行の交換を行う。

(2) 使用法

CALL MINVS/D/Q/C/B/Z (A, KA, N, EPS, ILL)

引数	型と種類	属性	内容
A	実数型 2次元配列	入出力	与えられた行列を入れると、本ルーチンにより計算された逆行列が入る。
KA	整数型	入力	Aの配列宣言における第1添字の値。KA ≥ N
N	整数型	入力	Aの次数。2 ≤ N ≤ 1000
EPS	実数型	入力	行列の特異性の判定常数。ピボット要素の絶対値がこの常数より小さいとき特異であると判定して、計算を中断する。EPS > 0
ILL	整数型	出力	ILL=0: 正常終了。 ILL=30000: KA, N, EPSに関する制限が破られた時。 特異と判定されたときはピボット要素の番号。

\* MINVD (MINVQ, MINVC, MINVB, MINVZ) の場合、Aは倍精度実数型 (4倍精度実数型, 複素数型, 倍精度複素数型, 4倍精度複素数型) である。  
MINVD (MINVQ, MINVC, MINVB, MINVZ) の場合、EPSは倍精度実数型 (4倍精度実数型, 実数型, 倍精度実数型, 4倍精度実数型) である。

(3) 計算法

1. ピボットリングに伴う行交換に対応する置換行列  $P$  を  $A$  に施したものを、単位下三角行列  $L$  と上三角行列に分解する。  $PA=LU$
2.  $L$  の位置に  $L^{-1}$  を作る。
3.  $U$  の位置に  $U^{-1}$  を作る。
4.  $A^{-1}=U^{-1}L^{-1}P$  を  $A$  の位置に作る。

MINVSの場合、以上のすべての段階に必要な積和計算を部分的倍精度演算で行う。

(4) 備考

1. 行列の要素の絶対値の間に大きな差があるときは、MNORMS, MNORMD等によって、あらかじめ正規化することが精度を保つ上で望ましい。この際に必要な後処理については、MNORMSに関する説明の項を参照されたい。
2. EPSの標準的な値としては、行列の要素の絶対値の代表的な値を  $a$  とすると、MINVS, (MINVD, MINVQ) に対しては  $a \times 10^{-6}$  ( $a \times 10^{-16}$ ,  $a \times 10^{-30}$ ) が適当である。
3. Aの逆行列を、 $A^{-1}B$  の形の行列積の計算のために計算することは、計算時間と精度との両方の立場から見て大要損である。ぜひとも連立一次方程式ルーチンLEQLUS, LEQLUD等を使うべきである。
4. 対称正値行列の逆行列を求めるには、そのための専門ルーチンMINVSP, MINVDP等を用いる方が賢明である。

(1987.06.17) (1987.08.07)