Stochastic Analytical Inference

References

Unpublished [arXiv:cond-mat/0403055]

PRE**81**, 056701 (2010) [arXiv:0912.5204]

大野浩史

文献紹介　2015年5月29日

概要

- スペクトル関数を stochastic に求める方法のひとつを提案
  - Stochastic Analytical Inference (SAI)
- SAIで導入する仮想的な物理系の平均場近似が最大エントロピー法（MEM）と同一
- MEMとSAIを比較
  - SAI は少なくとも MEM と同じくらいよい
  - 鋭い特徴を持つスペクトルには SAI の方がよいかもしれない

問題設定

- 虚時間相関関数からスペクトル関数を求めたい

$$G(\tau) = \int A(\omega)K(\tau,\omega)d\omega \rightarrow A(\omega)$$

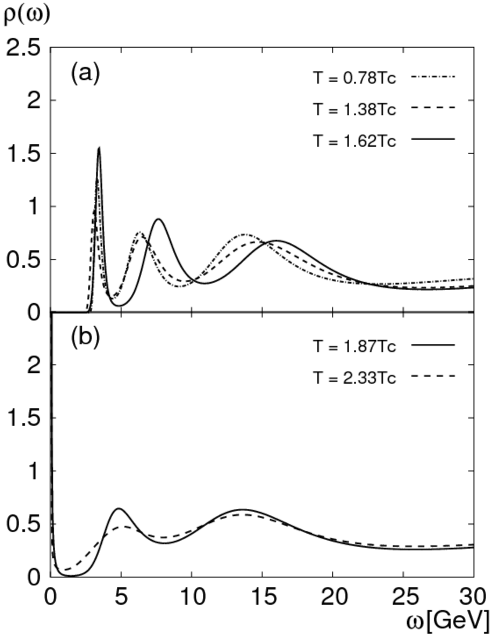
相関関数　スペクトル関数　カーネル

e.g. 有限温度QCDの場合

$$K(\tau,\omega) = \frac{\cosh(\omega(1/2T-\tau))}{\sinh(\omega 1/2T)}$$

e.g. チャーモニウムスペクトル関数

M. Asakawa and T. Hatsuda (2004)



単純な方法

- 線型方程式を解く

$$A_j = A(\Delta\omega \cdot j)\Delta\omega$$

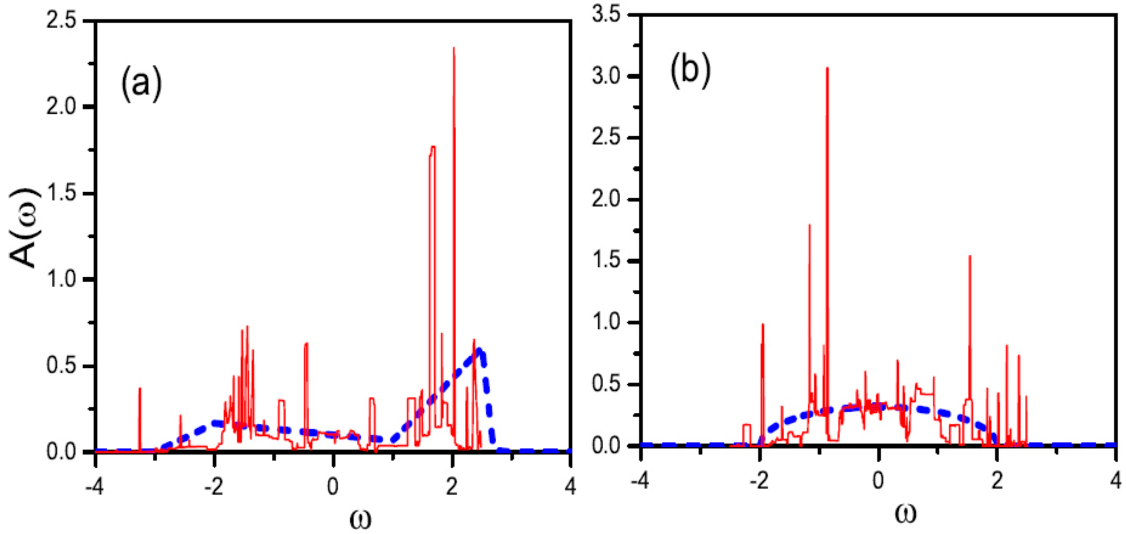
$$G_k = G(\Delta\tau \cdot k)$$

→

$$A_j = \sum_k K^{-1}_{jk} G_k$$ を解く

または、$\chi^2 = ||K\vec{A} - \vec{G}||^2$ を最小化

  - K : 悪条件
  - Ill-posed



最大エントロピー法(MEM):1

- ベイズの定理

尤度関数:証拠(データ)Gをみて前提条件がAであったと推測する尤もらしさ

事前確率:証拠(データ)Gがない場合のAが知られている確率

$$P[A|\bar{G}] = \frac{P[\bar{G}|A]P[A]}{P[G]}$$

証拠=データ

事後確率:証拠(データ)Gを考慮した場合のAが知られている確率

最大エントロピー法（MEM）：2

- エントロピー

regularization parameter

$$S[A] = -\int d\omega A(\omega) \ln\left(\frac{A(\omega)}{D(\omega)}\right) \longrightarrow Q[A] = \frac{1}{2}\chi^2[A] - \alpha S[A]$$

default model：事前に知りうる情報

$$P[\bar{G}|A] = \frac{1}{Z_1}\exp\left(-\frac{1}{2}\chi^2[A]\right) \quad Z_1 = \int \mathcal{D}\bar{G} e^{-\chi^2[A]/2}$$

$$P[A] = \frac{1}{Z_2}\exp\left(\alpha S[A]\right) \quad Z_2 = \int \mathcal{D}A e^{\alpha S[A]}$$

$$P[A|\bar{G}] = \frac{P[\bar{G}|A]P[A]}{P[\bar{G}]} = \frac{e^{-Q[A]}}{Z_1 Z_2 P[\bar{G}]}$$

$$P[\bar{G}] = \int \mathcal{D}A P[\bar{G}|A]P[A] = \frac{\int \mathcal{D}A e^{-Q[A]}}{Z_1 Z_2}$$

Q 最小化
→ P[A|G] 最大化

最大エントロピー法（MEM）：3

- Regularization parameter α の消去

$$P[\alpha|\bar{G}] = P[\alpha]\int \mathcal{D}A P[\bar{G}|A,\alpha]P[A|\alpha]/P[\bar{G}]$$
$$= \frac{P[\alpha]}{Z_1 Z_2 P[\bar{G}]}\int \mathcal{D}A e^{-Q[A]}$$

$$P[\bar{G}] = \int d\alpha \frac{P[\alpha]\int \mathcal{D}A e^{-Q[A]}}{Z_1 Z_2} \qquad P[\alpha] \sim \mathrm{const.\ or}\ \frac{1}{\alpha}$$

(1) $\max_\alpha\{P[\alpha|\bar{G}]\} = P[\alpha^*|\bar{G}] \longrightarrow \alpha^*$

(2) $\langle A\rangle = \int d\alpha P[\alpha|\bar{G}]\hat{A}_\alpha$

Stochastic analytic continuation

- 基本的アイディア
  - スペクトル関数 → デルタ関数の重ね合わせ

$$A(\omega) = \sum_i A_i \delta(\omega - \omega_i)$$

  - A_i と ω_i を適当な確率分布に従って更新していく
  - 最後に求めたすべての解について統計平均をとる
- 問題点
  - 適切な解を選択する方針が不明確
  - 平均値が最も尤もらしい解に収束する保障がない

Beach の方法

- 次の写像 $\phi : \mathbb{R} \mapsto [0,1]$ を考える

$$\phi(\omega) = \frac{1}{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{\omega} D(\nu) d\nu$$

正定値、スペクトル関数と同じ規格化

- スペクトル関数の規格化条件（$K(0,\omega) = 1$ を仮定）

$$1 = \frac{1}{\mathcal{N}} \int d\omega A(\omega) = \int d\phi(\omega) \frac{A(\omega)}{D(\omega)} = \int_0^1 dx n(x) \qquad n(x) = \frac{A(\phi^{-1}(x))}{D(\phi^{-1}(x))}$$

ハミルトニアン：

$$\frac{1}{2}\chi^2[A] = H[n(x)] = \int_0^\beta \frac{d\tau}{\sigma(\tau)^2} \left| \int_0^1 dx \hat{K}(\tau,x) n(x) - \bar{G}(\tau) \right|^2 \qquad \hat{K}(\tau,x) = K(\tau,\omega)$$

$$\langle n(x) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}n \; n(x) e^{-H[n]/\alpha}$$

$$\int \mathcal{D}n = \int_0^\infty \left(\prod_x dn(x) \right) \Theta(n) \delta \left(\int_0^1 dx n(x) - 1 \right)$$

$$\Rightarrow \quad \langle A(\omega) \rangle = \langle n(\phi(\omega)) \rangle D(\omega)$$

近似解

$$H[n(x)] = \int_0^1 dx\epsilon(x)n(x) + \frac{1}{2}\int_0^1 dxdyV(x,y)n(x)n(y)$$

$$\epsilon(x) = -\int_0^\beta \frac{d\tau}{\sigma(\tau)^2}\bar{G}(\tau)\hat{K}(\tau,x) \qquad V(x,y) = V(y,x) = \int_0^\beta \frac{d\tau}{\sigma(\tau)^2}\hat{K}(\tau,x)\hat{K}(\tau,y)$$

- 自由場の場合

$$\bar{n}(x) = e^{-(\epsilon(x)-\mu)/\alpha}$$:Boltzmann 分布

- 平均場近似

$$H_{\mathrm{MF}} = \int_0^1 dxE(x)n(x) + \mathrm{const.} \qquad E(x) = \epsilon(x) + \int_0^1 dyV(x,y)\bar{n}(y)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\bar{n}(x) = e^{\mu/\alpha}\exp\left[-\left(\epsilon(x) + \int_0^1 dyV(x,y)\bar{n}(y)\right)/\alpha\right]}$$

MEMとの比較：1

- MEM場合
  - 規格化条件 $\mathcal{N} = \int d\omega A(\omega)$

Lagrange multiplier

$$S[A,\Gamma] = -\int d\omega A \ln(A/D) + \Gamma \int d\omega (A - D) \qquad \Gamma = 1 + \mu/\alpha$$

  - $Q[A] = \frac{1}{2}\chi^2[A] - \alpha S[A]$ 最小化 $\qquad \psi(\tau) = \int d\omega K(\tau,\omega)A(\omega) - \bar{G}(\tau)$

$$0 = \frac{\delta Q[A,\mu]}{\delta A(\omega)} = \int_0^\beta d\tau K(\tau,\omega)\psi(\tau) - \alpha\left[-\ln\left(\frac{A(\omega)}{D(\omega)}\right) + \mu/\alpha\right]$$

$$\boxed{\bar{A}(\omega) = e^{\mu/\alpha} D(\omega) \exp\left[-\frac{1}{\alpha}\int_0^\beta \frac{d\tau}{\sigma(\tau)^2}\psi(\tau)K(\tau,\omega)\right]}$$

Stochastic アプローチの平均場解と一致！

MEMとの比較：2

- エントロピー（平均場の場合）

$$S[\bar{n}] = -\int_0^1 dx \bar{n}(x) \ln \bar{n}(x) = -\int d\omega \bar{A}(\omega) \ln\left(\frac{\bar{A}(\omega)}{D(\omega)}\right) = S[\bar{A}]$$

- 自由エネルギー

$$F\mathcal{N} = H[\bar{n}] - \alpha S[\bar{n}] - \mu\mathcal{N} = \frac{1}{\chi^2}[\bar{A}] - \alpha S[\bar{A}] - \mu\mathcal{N} = Q$$

MEMでQを最小化

⬍

Stochastic アプローチの平均場解における自由エネルギーを最小化

Regularization parameter α の消去：1

- MEMの場合と同様に、

$$P[\bar{G}|n] = \frac{1}{Z'} e^{-H[n]/\alpha} \quad Z' = \int \mathcal{D}\bar{G} e^{-H[n]/\alpha}$$

$$P[n] = \Theta(n)\delta\left(\int_0^1 dx n(x) - 1\right)$$

$$P[\bar{G}] = \int \mathcal{D}n \frac{1}{Z'} e^{-H[n]/\alpha} = \frac{Z}{Z'}$$

$$P[n|\bar{G}] = \frac{P[\bar{G}|n]P[n]}{P[\bar{G}]} = \Theta(n)\delta\left(\int_0^1 dx n(x) - 1\right) \frac{1}{Z} e^{-H[n/\alpha]}$$

Regularization parameter α の消去 :2

$$P[\alpha|\bar{G}] = P[\alpha] \int \mathcal{D}n P[\bar{G}|n,\alpha] P[n|\alpha] / P[G]$$

$$\sim P[\alpha]\alpha^{-N/2} \int \mathcal{D}n e^{-H[n]/\alpha} \propto Z$$

➡ **分配関数の計算が必要！**

$$Z = \int dE \rho(E) e^{-E/\alpha}$$

状態密度

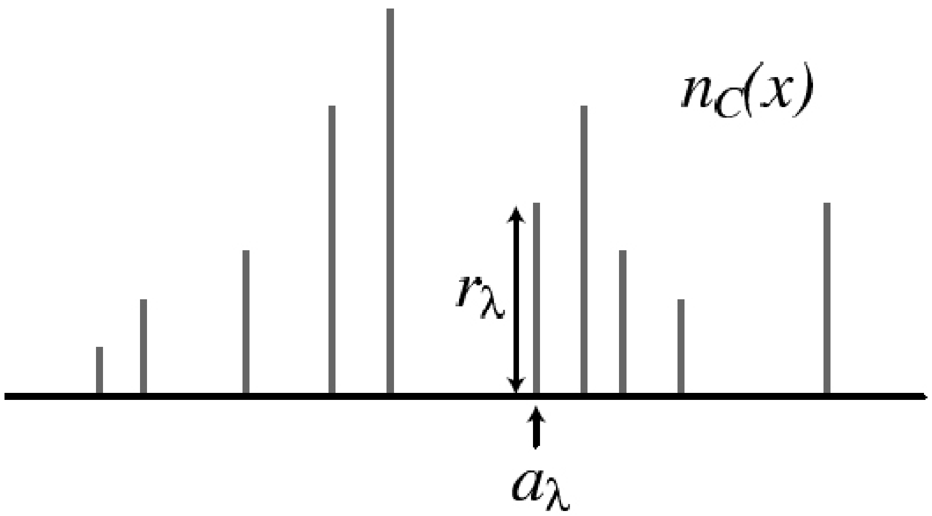
➡ **状態密度の計算が必要！**

Wang-Landau法等

シミュレーションの方法

- 配位

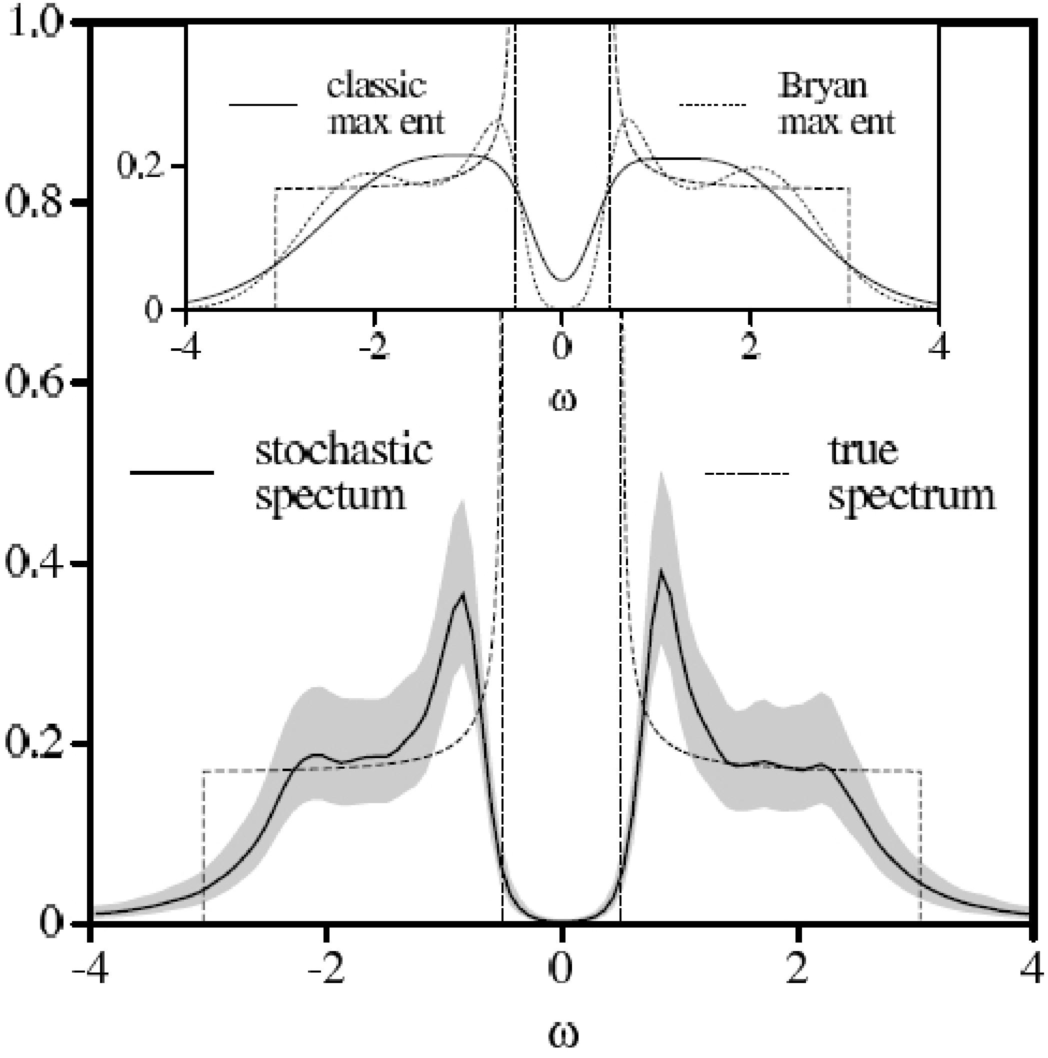
$$n_C(x) = \sum_\gamma r_\gamma \delta(x - a_\gamma)$$

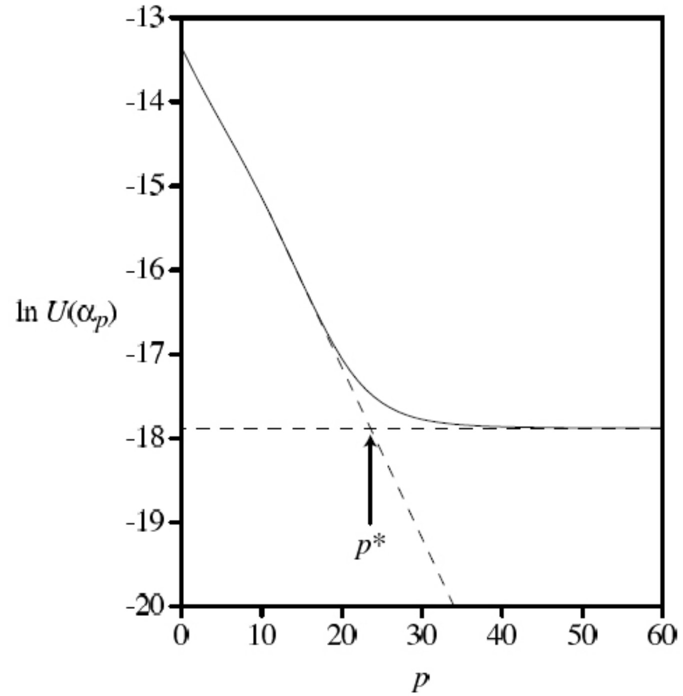


- 配位の更新方法
  - デルタ関数のシフト
  - $\sum_\gamma r_\gamma = 1$ を保ちつつ任意の2つの留数を変更
  - 上の操作をn個の留数に拡張することも可
  - $P = \min\{1, e^{-\Delta H[n]/\alpha}\}$ の確率で更新

結果1

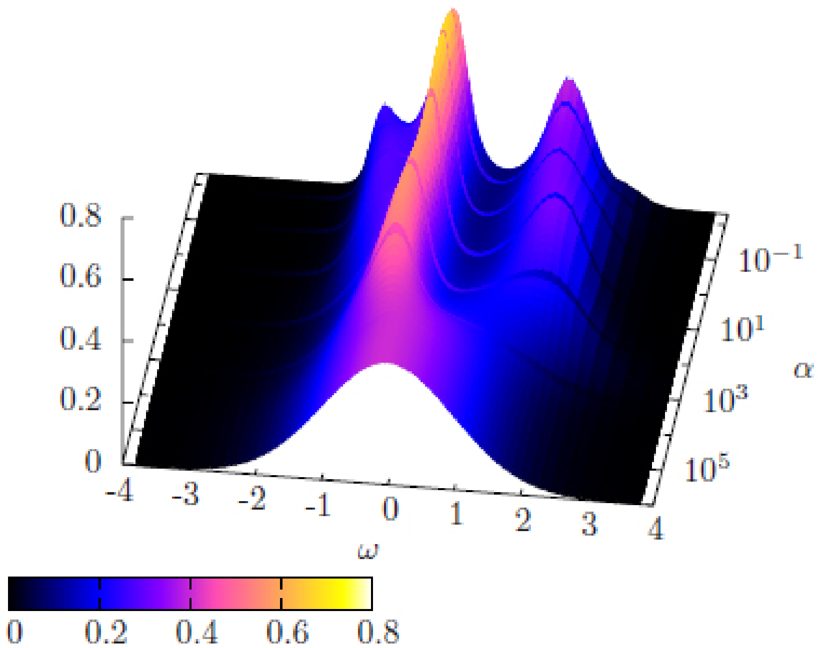
BCS superconductor

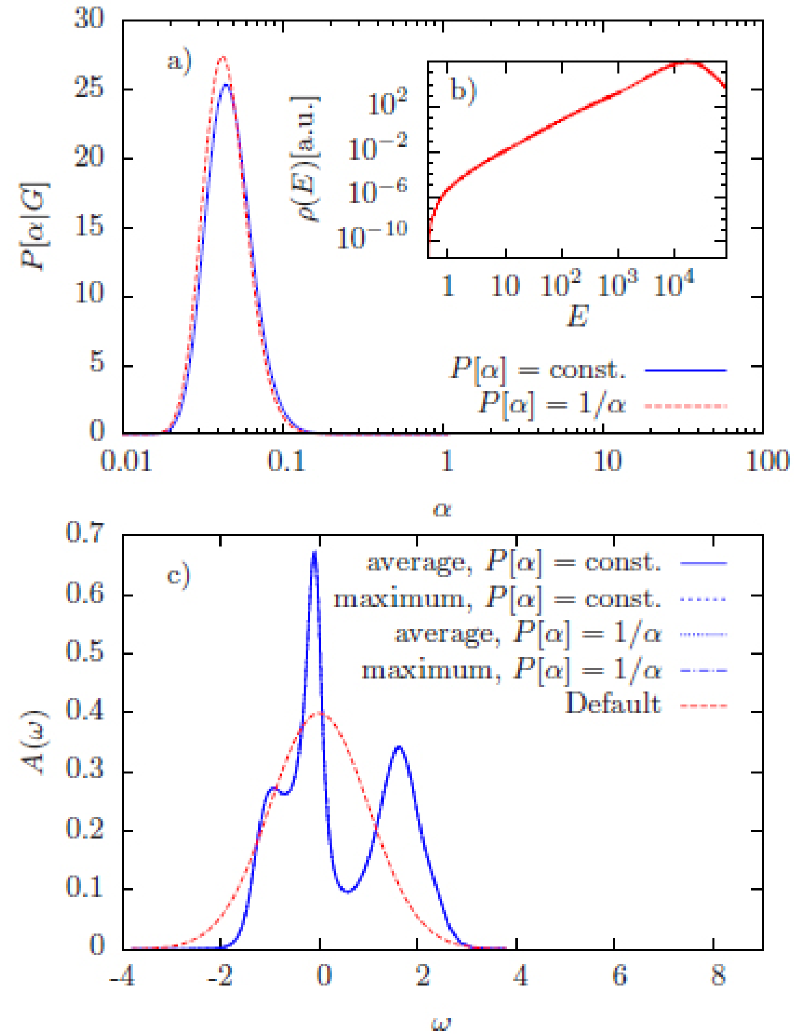




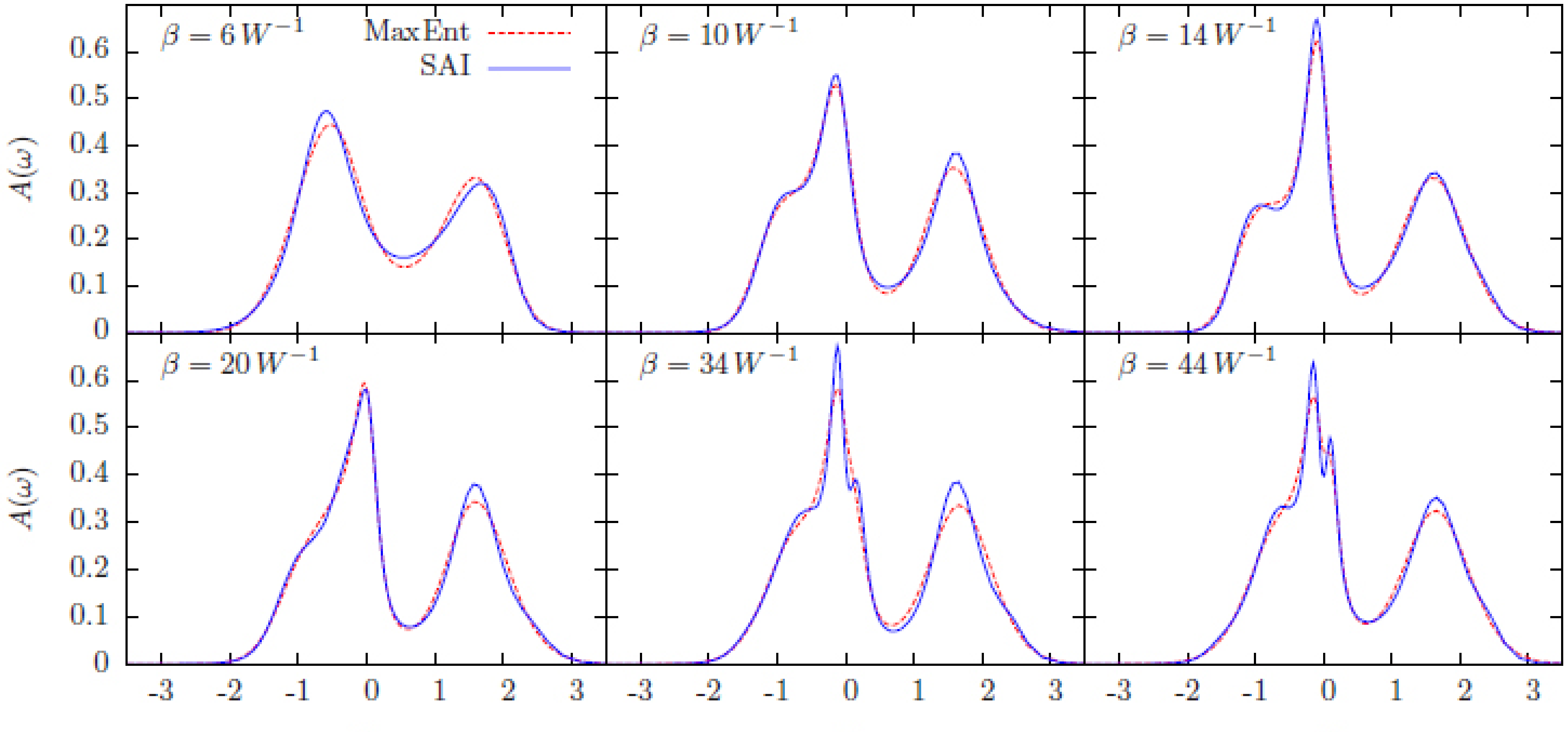
結果2

2D single-band Hubbard model

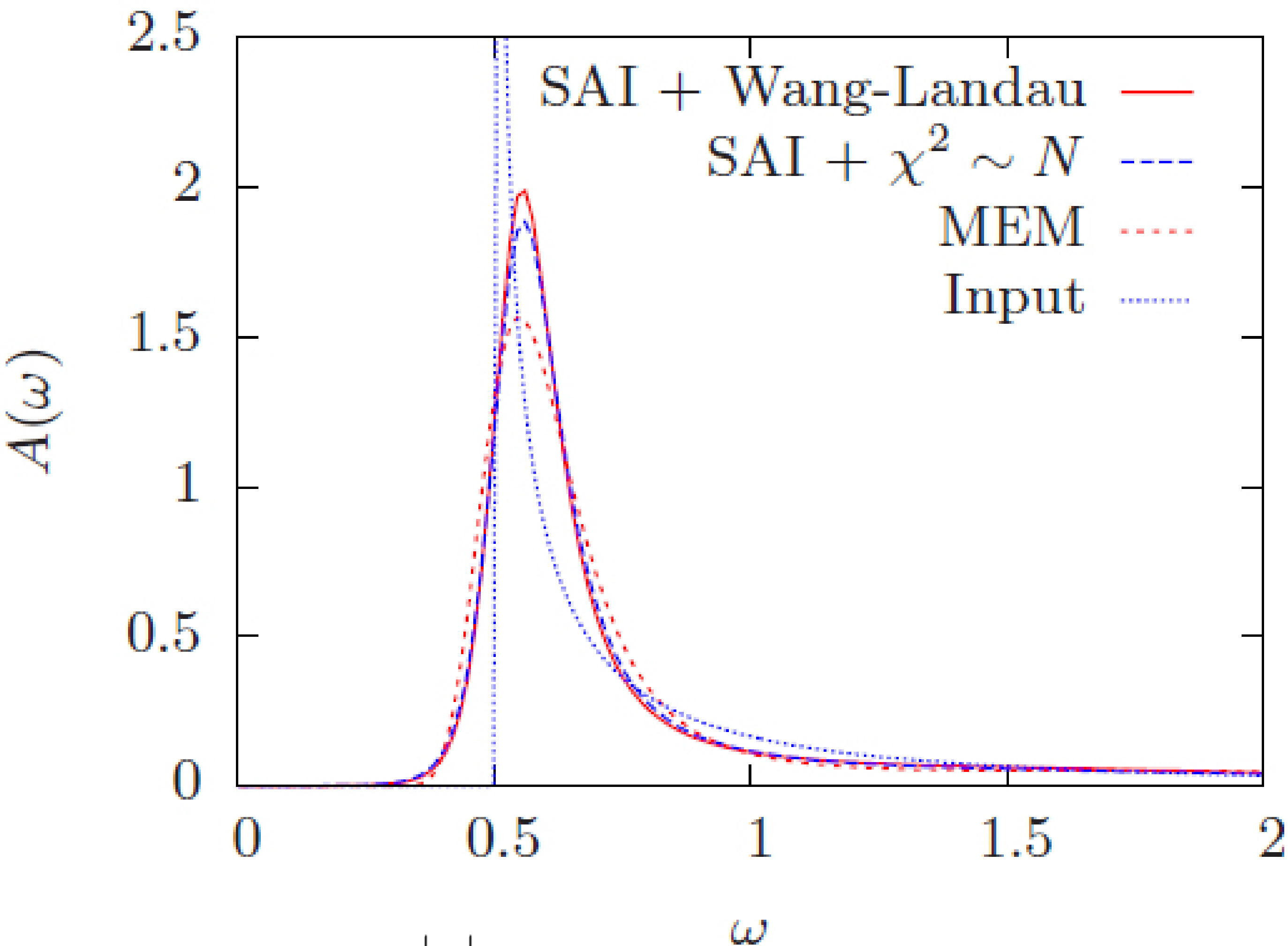




結果3


$\beta = 6\,W^{-1}$
MaxEnt
SAI
$\beta = 10\,W^{-1}$
$\beta = 14\,W^{-1}$
$\beta = 20\,W^{-1}$
$\beta = 34\,W^{-1}$
$\beta = 44\,W^{-1}$
$A(\omega)$
0.6 0.5 0.4 0.3 0.2 0.1 0
-3 -2 -1 0 1 2 3

結果4



$$A(\omega) = \frac{|x|}{\sqrt{x^2 - 1/4}} - 1 \quad \text{if } |x| > 1/2, \quad \text{otherwise } 0$$

End