Analytische Fortsetzung von QMC-Daten mit Maximale-Entropie Methoden

I. Allgemeine Problemstellung

Experimentell messbare(s) Zustandsdichte / Spektrum A hängt mit lokaler retardierter Greensfunktion G zusammen über

$$A(\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\, G(\omega + i0^+)$$

Allerdings liefert QMC uns numerische Approximationen von G in Abhängigkeit von der imaginären Zeit τ. Dann besteht folgender Zusammenhang zwischen $G(\tau)$ und $A(\omega)$:

(*) $$\boxed{G(\tau)=\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, K(\tau,\omega-\mu;\beta)\, A(\omega)}$$

mit dem Kern $$K(\tau,\omega;\beta) = \frac{e^{-\tau\omega}}{1+e^{-\beta\omega}}$$

Schlecht konditioniert, da

- $G(\tau)$ berechnet für $\Lambda < \infty$ Zeitschritte
- K wird exponentiell klein für große $|\omega|$ $\Rightarrow$ Rauschen verwässert Daten

$\Rightarrow$ beliebig viele exakte Lösungen

$\Rightarrow$ unscheinbare Änderungen in G $\hat{=}$ signifikant unterschiedlichen A

$\rightarrow$ Beispielspektren

Suchen Spektrum A mit

Stabilität gegen zufällige Fehler und Ungenauigkeiten der Daten vs. Wiedergabe der aufgrund der Daten belegbaren Merkmale / Strukturen

gaps tips

Glattheit vs. Strukturen

II. Bayes' Theorem

Seien M eine Ereignismenge, weiterhin $k_i \in M \; (i=1,\dots,n)$ ein vollständiges Ereignissystem, d. h. für die Wahrscheinlichkeiten $Pr(k_i)$ gilt:

$$Pr(k_i, k_j) = \delta_{ij}\, Pr(k_i) \;\; \forall\, i,j \in (1,\dots,n) \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^{n} Pr(k_i) = 1$$

Dann gilt $\forall a, k_i \in M$: (**)
($a \in M$ beliebig)

$$\boxed{\begin{aligned} Pr(a, k_i) &= Pr(a|k_i)\, Pr(k_i) \\ &= Pr(k_i|a)\, Pr(a) \end{aligned}}$$

Beispiel: Känguru-Problem

Gegeben sind die Informationen: · Jedes dritte Känguru ist linkshändig.
· Jedes dritte Känguru hat blaue Augen.

Finde Wahrscheinlichkeitsverteilung $A(\text{Augenfarbe}, \text{Händigkeit})$

$$A =: \begin{array}{c} \text{linkshändig} \\ \begin{array}{cc} w & f \end{array} \\ \begin{pmatrix} p_{bl} & p_{b\bar{l}} \\ p_{\bar{b}l} & p_{\bar{b}\bar{l}} \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ w \\ f \end{array} \; \text{blauäugig}$$

Die gegebenen Informationen gestatten beliebig viele verschiedene Realisierungen von A

$\rightarrow$ diskutiere 3 extremale Annahmen (Tafel)

III. Anwendung von MEM zur Konstruktion von $A(\omega)$

suchen $A(\omega)$, das bei gegebenen Daten $\bar{G}(\tau)$ die Wahrscheinlichkeit $Pr(A|\bar{G})$ maximiert. Mit (**) aus Bayes' Theorem:

$$Pr(A,\bar{G}) = Pr(A|\bar{G})\,Pr(\bar{G}) = Pr(\bar{G}|A)\,Pr(A)$$

$$\Rightarrow \boxed{Pr(A|\bar{G}) = \underbrace{Pr(\bar{G}|A)}_{\text{Wahrscheinlichkeitsfunktion}}\,\underbrace{Pr(A)}_{\text{a priori Wahrscheinlichkeit}}/Pr(\bar{G}),}\; Pr(\bar{G}) = \mathrm{const}_A$$

für Maximierungsproblem ohne Bedeutung

Wahrscheinlichkeitsfunktion

Wahrscheinlichkeit, für gegebenes Modell A und das über (*) korrespondierende G die Daten $\bar{G}$ zu erhalten.

Einfachste Annahmen: a) Daten $\bar{G}_i^{(j)}$ bei hinreichend großer Zahl M von Simulationsläufen gaußförmig verteilt.
(i: Zeitschritt, (j): Simulation)

b) Die Daten für verschiedene Zeitschritte G_i sind unkorreliert

Annahme a) legt nahe $Pr(\bar{G}|A) \propto e^{-\chi^2/2}$ mit

$$\chi^2 = \sum_{i,j=0}^{L-1} (\bar{G}_i - G_i)\,[C^{-1}]_{ij}\,(\bar{G}_j - G_j), \quad C: \text{Kovarianzmatrix}$$

Mit b) hat C Diagonalgestalt und $Pr(\bar{G}|A)$ faktorisiert zu Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die einzelnen Zeitschritte

$$\text{a), b)}: \quad Pr(\bar{G},A) = e^{-\sum_i \chi_i^2/2} \quad \text{mit} \quad \chi_i^2 = \frac{(\bar{G}_i - G_i)^2}{\sigma_i^2}$$

G: Interpolation der Simulationsdaten aus M Durchläufen
$= G(A)$ → Vgl. Least-Squares-Fit

Problem: Falls viele Freiheitsgrade verglichen mit Zahl der Zeitschritte, wird Fit an die Daten exakt, welche für große $|\omega|$ nur wenig aussagekräftig sind (Rauschen dominant).
→ Vgl. Fit mit einem Polynom „zu hoher" Ordnung

Lösung: Regularisierung durch a priori Wahrscheinlichkeit

Betrachte $A(\omega) \geq 0$ und normierbar selbst als Wahrscheinlichkeitsfunktion und maximiere die Entropie S

$S = -\int d\omega\, A(\omega) \ln[A(\omega)/m(\omega)]$ bzw. diskretisiert $S = -\sum_i \Delta\omega\, A(\omega_i) \ldots$

$m(\omega)$: Ausgangsmodell für $A(\omega)$, falls physikalisches Vorwissen vorhanden

Folgerung für $Pr[A]$: $S(A)$ maximal $\Updownarrow$ $\exp[S(A)]$ max. $\Leftrightarrow$ A am wahrscheinlichsten $\Leftrightarrow$ $Pr[A]$ maximal

IV. Zusammenführung und Implementierung der Ergebnisse

$$\boxed{Pr[A|\bar{G}] = e^{\alpha S}\, e^{-\chi^2/2}}\,, \quad \alpha \geq 0$$

$e^{\alpha S}$: wirkt regularisierend

$e^{-\chi^2/2}$: fittet an die Daten

α durch wiederholtes Probieren so gewählt, dass $\chi^2 = N$ ≙ Anpassung d. Anzahl d. Freiheitsgrade + Erwartung, falls A bekannt

↳ „historic maximum entropy"

Implementierung

Durch exponentielle Berücksichtigung von S stellt sich das Problem der direkten Maximierung des gesamten Exponenten $Q = \alpha S - \chi^2/2$

Am einfachsten sind lokale Updates: Variiere diskrete $A(\omega_i)$ sweepweise, bis sich Q nicht mehr wesentlich vergrößert.

In der Praxis lässt sich der Rechenaufwand erheblich verringern durch Berücksichtigung systemspezifischer Symmetrien, z. B. $A(\omega) = A(-\omega)$