

最大エントロピー法におけるラグの選択法に関する考察

○遠越 光輝, 狩野 覚, 善甫 康成

法政大学情報科学(〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

【緒言】

物質の発光波長, 吸収波長などの光学特性は外部からの摂動に対する応答として時間依存密度汎関数(Time Dependent Density Functional Theory : TDDFT) を用いることで精度良く求められるようになってきた. 特に我々は基底を使わずに実空間・実時間で電子状態を計算する方法を用いており, 物質の光学特性として発光吸収スペクトルを得る. その精度は全時間ステップ数に依存するという特徴がある[1]. 通常, この発光吸収スペクトルは上述の TDDFT より得られる動的な双極子モーメントの時間発展データを Fourier 変換(FT)することで求めるが, バンドギャップ付近の興味あるデータほど長く時間発展させる必要がある.

一方, 情報処理の分野では時系列データを効率的に取り扱う手法として, 情報理論におけるエントロピーの概念を用いる最大エントロピー法(Maximum Entropy Method : MEM)がある[2]. これまでに実空間・実時間の TDDFT による吸収スペクトルの算出において, MEM は従来の FT よりも高分解能なスペクトルが得られることを報告した[3]. さらに MEM をより効果的に取り扱う方法として, 計算した時間発展データを繰り返す効率的なデータの利用を提案した[4]. しかし[4]の手法はデータの結合箇所に位相ジャンプが生じるため, データをくり返す程に位相ジャンプの影響が図 1 のスペクトルのように大きく現れるという問題があった. 今回はこの位相ジャンプによる影響を改善する効果的な時系列データの利用法について報告する.

【方法】

MEM によるスペクトルの分解能は自己相関関数のラグの最大値 M 及びデータ数 N に依存する. 特に長波長の情報を得るには大きな M が必要である. [4]では, 有効な自己相関関数の数は N によって制限されていることから, 計算した時系列データを繰り返し繋ぎ合わせ, データ数を増加させる改良を行っている. 本研究ではこの繰り返しデータに対し, 特定の周波数について位相ジャンプによる影響を打ち消す位相を加える改良を行った(式(1)参照).

$$\mu(n) = \mu'(n) \exp(ik\phi) \quad (1)$$

$\mu(n)$ は $\mu'(n)$ に位相情報を加えた離散型の時系列データ, $\mu'(n)$ は繰り返しデータ, k は n 時点でのデータの繰り返し回数, 定数 ϕ は $\mu'(n)$ に加える位相($-\pi \leq \phi \leq \pi$)を表す.

【結果】

単純化のため, 対象は 128 点の Sin 関数の合成波(2Hz, 15Hz)を 1000 回繰り返した時系列($N = 128000$)とした. サンプル間隔は 0.01 である. 図 1 は上述の時系列に位相を加えた MEM と従来の MEM の結果を 1Hz から 3Hz の領域に注目して示している. 一般に短波長の情報を得る場合 M は小さくてよいが, 長波長の情報は M を大きくとる必要がある. 図 1 において, 過剰な M の選択($M = 100$)により従来の MEM(点線, 破線)ではピークの分割が見られる. 特に繰り返しデータの結果(破線)において顕著である. 一方, 提案手法(実線)ではピークの分割は発生せず, 適切な位置(2Hz)に鋭いピークが現れていることが分かる. 当日の報告では手法の詳細, 有機材料への解析結果なども述べる.

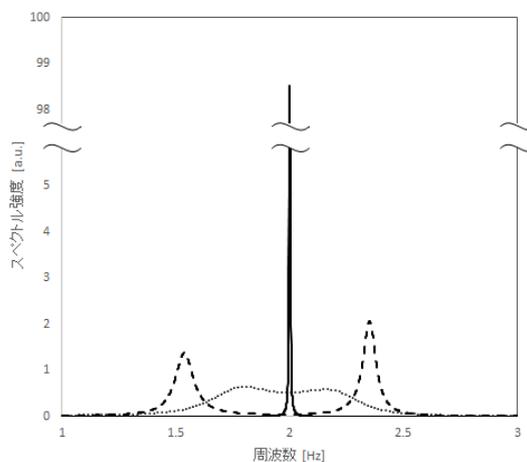


図 1 MEM によるスペクトルの比較($M = 100$).

点線: 繰り返しなし, 破線: 繰り返しデータ, 実線: 位相を加えた繰り返しデータ, による MEM の結果. 加えた位相は $\phi = -0.88\pi$ (理論値は -0.92π).

参考文献

- [1] K. Yabana, G. F. Bertsch, *Phys. Rev. B*, **54**, 4484-4487 (1996).
- [2] J. P. Burg, Advanced Study Institute on Signal Processing, NATO, Enschede, Netherlands, 1968.
- [3] M Toogoshi et al, *J. Phys.: Conf. Ser.*, **510**, 012027 (2014).
- [4] M Toogoshi et al, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **13**, 314-326 (2014)