

§ Typicality of shell states

↳ almost all state $|\psi_{\text{shell}}\rangle$
in the energy shell E
is an eg. state.

1. Almost all mixture of $|\psi_{\text{shell}}\rangle$'s
is also the same eg. state.

- Maximal mixture in the shell
↳ equal weight.

$$\overline{|\psi_{\text{shell}}\rangle\langle\psi_{\text{shell}}|} = \hat{\rho}_{E, \text{ens}}, \text{ microcanonical ensemble}$$

⊙ $|\psi_{\text{shell}}\rangle = \sum_n' C_n |n\rangle$
↳ energy eigenstate $(\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle)$

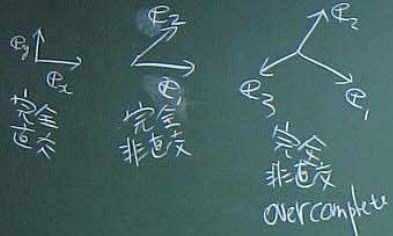
$$|\psi_{\text{shell}}\rangle\langle\psi_{\text{shell}}| = \sum_{n,m}' C_n^* C_m |n\rangle\langle m|$$

$$= \frac{1}{W} \sum_n' |n\rangle\langle n| = \hat{\rho}_{E, \text{ens}}$$

- Weighted mixture such that energy has a sharp distribution.

ex. canonical Gibbs state $e^{-\beta\hat{H}}/Z$
•他にも様々な平衡アンサンブルが作れる。

2. $\{|\psi_{shell}\rangle\}$ はその完全系.
(nonorthogonal, overcomplete)



$$\begin{aligned}
 |\psi_{shell}\rangle \langle \psi_{shell}| &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n |\psi_{shell}^m\rangle \langle \psi_{shell}^m| \\
 &= \sum_{n,m} c_n^* c_m |n\rangle \langle m| \\
 &= \frac{1}{W} \sum_n |n\rangle \langle n| \quad \leftarrow \text{orthogonal} \\
 &= \hat{1}_E
 \end{aligned}$$

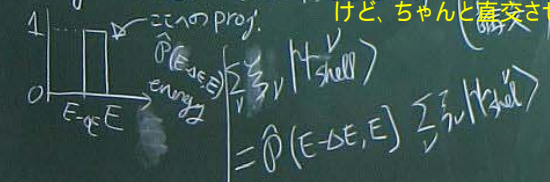
$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \hat{1}_E |\psi\rangle \\
 \text{hermite} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{W}{n} \sum_{\nu=1}^n |\psi_{shell}^\nu\rangle \langle \psi_{shell}^\nu | \psi\rangle \\
 \forall |\psi\rangle \in E, & \quad \text{--- 大きすぎる ---} \\
 \langle \psi | \hat{1}_E | \psi \rangle & \xrightarrow[\text{TDL}]{P} \langle \psi | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

n はTDLといっしょにうまく大きくする

ポット

$$\begin{aligned}
 A &= \sum_n a_n |n\rangle \langle n| \\
 \langle \psi | A | \psi \rangle &= \sum_n a_n |\langle \psi | n \rangle|^2 \\
 A &= \sum_n \frac{a_n}{n} |n\rangle \langle n| \\
 &= \hat{1}
 \end{aligned}$$

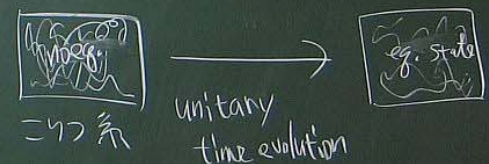
3. Almost all superposition of $\{|\psi_{shell}\rangle\}$ is also the same eg. state. (ETH) (ポット)



• ψ だけ weak ETH が成り立つ。
(eigenstate thermalization hypothesis)
almost all energy eigenstate is an eg. state.
(ポット) 直交

ほとんど自明な気はしますが...

これをallに強めると, thermalization (熱平衡化) が量子2つの系で起こる!



ただし、これは十分条件であり、必要条件ではない。つまり、強すぎる。また、weak ETHでは弱すぎる。

Ch. Thermal Pure Quantum (TPQ) 形式' の Typicality については (系統) の

- PRL 108 (2012) 240401
- = 111 (2013) 010401
- PRB 90 (2014) 121110 (F)
- 加藤: 物理学雑誌 70 (2015) 368
- S. Shio, Springer thesis

- 定式化には不足
 $|k_{shell}\rangle$ が一本とえられたとき:
- mechanical variables の値は **求まる**.
 - genuine TD variables は求め **られない**!

$\therefore S_{VN}(\hat{\rho}_{\text{ons}}) = S_{TD}$
 $S_{VN}(|k_{shell}\rangle\langle k_{shell}|) = 0$
 \rightarrow 基本方程式が求まる!
 $\rightarrow S, T, M, F, G, \dots$
 が求まる!

$S_{VN}(\hat{\rho})$ von Neumann entropy
 $= -\text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$
 $\hat{\rho} = \sum_n w_n |n\rangle\langle n|$ $0 \leq w_n \leq 1$
 $= -\sum_n w_n \ln w_n$
Shannon entropy

独立変数をとりかえられるのか?

$E, V, N \rightarrow B, V, N$

$|k_{shell}\rangle: E, V, N \rightarrow ?$

(特に **一次相転移** が起こる系では原理的な問題になる)

practical ではない.

数値計算 $|k_{shell}\rangle$ を作るのはしんどい!

これらの不満を解消 \rightarrow TPQ 形式

- genuine TD variables も, 1つの TPQ state が求まる.
- 独立変数も自由にえられる
- practical には.

- 汎用化より much better

- どんな \hat{H} でも ok. \leftrightarrow QMC
何次元系でも OK DMRG
 MPS

- 結果の正しさが $1/k$ のみに保証される. (しん性加わる!)

- 系のサイズ \leq [dim のバケリ]
2本収納できる

- 並列化 **加容易**
 - プログラミングが超簡単
 - 物性研の H にも入ってる

「TPQは、どんな問題も、ちゃんと
おけ苦手」

- 他の手法が苦手な問題に
ついでに勝てる
- 他の手法のチェックにも使える。

§ Setup

N : # of sites, particles, spins, etc.

V : 体積

\mathcal{H} : Hilbert 空間

\hat{H} : Hamiltonian

仮定:

ensemble 形式が正しい結果を
与える。

↑
TD と 整合

ex) $\int \sim \ln W \sim \ln \left[\int \rho(E) \Delta E \right]$

$\rightarrow \rho(E) = e^{\mathcal{S}(E) + o(N)}$

$= e^{\frac{N \rho(E)}{E} + o(N)}$

↑
TD と整合
↑
TD と整合
↑
TD と整合

上に凸、 C^1 級

eg. is specified by E, V, N, M, \dots

$\rightarrow E, V, N$ と ~~対応~~

Order symbols

- $\Theta(N^k)$

ex. $N+1 = \Theta(N) = \Theta(N^2)$

- $\Theta(N^k)$

$f(N) = \Theta(N^k)$

$\Leftrightarrow \frac{f(N)}{N^k} \rightarrow \text{正定数}$

ex) $N+1 = \Theta(N) \neq \Theta(N^2)$

§ TPQ states

eg. state を表す pure state を
一般の記法にする

Def. $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, which has a classical random variable(s), is called a thermal pure quantum (TPQ) state if

$$\langle \hat{A} \rangle_N^{\text{th}} \equiv \frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \xrightarrow{P} \langle \hat{A} \rangle_N^{\text{ens}} \equiv \text{Tr}[\hat{\rho}^{\text{ens}} \hat{A}]$$

for \forall mechanical variable \hat{A} uniformly as $N \rightarrow \infty$.

That is, $\forall \epsilon > 0$ there exists a function $\eta_\epsilon(N)$ that vanishes as $N \rightarrow \infty$ and

$$P(|\langle \hat{A} \rangle_N^{\text{th}} - \langle \hat{A} \rangle_N^{\text{ens}}| \geq \epsilon) \leq \eta_\epsilon(N)$$

for \forall m.v. \hat{A} .
ex. $|\psi_{\text{shell}}\rangle \in \mathcal{E} \notin$
TPQ state の 1つ.

- おもしろいこと:
- 別の TPQ state を \uparrow 3 (mTPQ, cTPQ, gTPQ, ...)
 - 知るたし, genuine TD variables を 求める 公式 を つくる.

§ microcanonical TPQ (mTPQ) state

略記: $E, N, N, M, \dots \rightarrow E, N, N \rightarrow E, N$

仮定: $\dim \mathcal{H} < +\infty$ (for $N < +\infty$) とおく.

ex. スピン系 $\dim \mathcal{H} = 2^N$, Hubbard $\dim \mathcal{H} = 4^N$

(注) PRL 2012 とは, きか(化や) \int の公式 を update して 分 異 なる!

Take an arbitrary basis $\{|\nu\rangle\}$ of \mathcal{H} .

Take a random vector in \mathcal{H} ,

$$|0\rangle \equiv \sum_{\nu} z_{\nu} |\nu\rangle, \quad z_{\nu} = \frac{x_{\nu} + i y_{\nu}}{\sqrt{2}}$$

... unnormalized!

Let $\hat{h} \equiv \hat{H}/N$, $\hat{h} |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$

様々なTPQを相互に関係づける公式も作る

$x_{\nu}, y_{\nu} \in \mathbb{R}$: standard normal distribution ($\overline{x_{\nu}} = 0, \overline{x_{\nu}^2} = 1$) etc.

Take an arbitrary number l s.t.

$$l \geq e_{\max} (= \max\{e_n\})$$

Define

$$|k\rangle \equiv (l - \hat{h})^k |0\rangle$$

$$(k=0, 1, 2, \dots)$$

・若干の注意の元で
もっと小さく選んでも可。
・実際の計算では、
途中で値を変えたりする

このように示す:

① $|k\rangle$ は TPAQ state の u として for $\forall k$
"m TPAQ state" & bad naming!

② $|k\rangle$ が \hat{h} や T が u 求まる!
 $\frac{1}{1+u}$

① を示す。

まずは、ラフに見通しを付けよう。

$$E/N = u \equiv E/N \text{ は、}$$

$|k\rangle$ で、どうなるか?

$$\hat{h} = \sum_n e_n |n\rangle \langle n|$$

$$|0\rangle = \sum_n z_n |n\rangle$$

$$|k\rangle = \sum_n z_n (l - e_n)^k |n\rangle$$

ゆえに、

distr. function of u :

$$P_k(u) \equiv \frac{1}{\delta} \sum_n |z_n|^2 (l - e_n)^{2k}$$

↑ u の範囲 $u - \frac{\delta}{2} \leq e_n \leq u + \frac{\delta}{2}$

$$\frac{1}{\delta} \sum_n |z_n|^2 (l - e_n)^{2k} \approx \frac{1}{\delta} \int_{u-\delta/2}^{u+\delta/2} |z_n|^2 (l - e_n)^{2k} de_n = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} \right) = 1$$

$$= \frac{1}{\delta} \sum_n (l - e_n)^{2k} = e^{N\Omega(u) + o(N)}$$

$$= g(u) (l - u)^{2k}$$

many-body DOS.

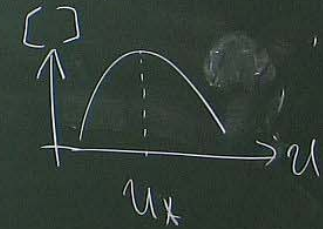
$$= (l - u)^{2k} e^{N\Omega(u)}$$

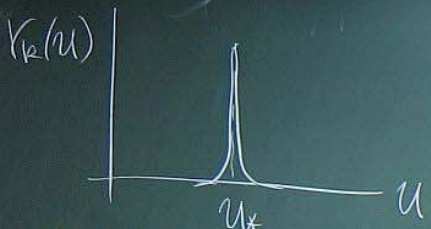
$$= \exp \left(N \left[\Omega(u) + \frac{2k}{N} \ln(l - u) \right] \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial u} [] = \beta(u) - \frac{2k}{N} \frac{1}{l - u}$$

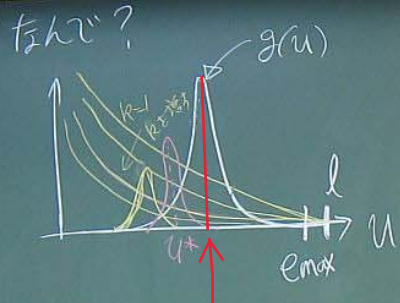
$\rightarrow u = u_*$ として peak s.t.

$$\beta(u_*) = \frac{2k}{N} \frac{1}{l - u_*}$$





→ $u = u_*$ is sharp peak
 → eg. state!



ここ $u = u_0$ が、 $T = \infty$ に相当。

米田: l は、これより大きければ多分OK.
 これより小さくすると、大きなNでは問題が出る。

sharp to be, $u_* \approx u_k \equiv \frac{\langle k | \hat{h} | k \rangle}{\langle k | k \rangle}$

$u_k \downarrow$ as $k \rightarrow \infty$

$\beta = \frac{2k}{N} \frac{1}{l - u_*}$ より、 $k = \Theta(N)$ when $u_0 - u_k = \Theta(1)$
 \uparrow
 $T = \infty$

ちゃんやる

① 異なるアンサンブルは、
 有限のNでは、ゼロ-1
 異なる結果を示す

→ $N \rightarrow \infty$ で、 $\|k\|$ と
 いちばん合う ensemble と比較しよう!

→ $\hat{\rho}_k^{ens} \equiv \frac{1}{\Omega_k} (l - \hat{h})^{2k}$
 と比較する。
 (これも eg. ensemble であることは、
 typicality よりわかる)

ミクロカノニカルのエネギー分布を滑らかにしたものだから、
 PRL2012 では、smooth microcanonical ensemble と呼んだ。

これをやる、

$$\langle \hat{A} \rangle_k^{TPQ} \equiv \frac{\langle k | \hat{A} | k \rangle}{\langle k | k \rangle}$$

$$P \rightarrow \langle \hat{A} \rangle_k^{ens} \equiv \overline{\left[\frac{\hat{\rho}_k^{ens}}{l_k} \hat{A} \right]}$$

for \forall m.v. \hat{A} uniformly.

を示そう!

まず、 $|z|^2$ の和を規格化してないので、計算が楽!

$$|0\rangle = \sum_{\nu} z_{\nu} |\nu\rangle$$

$$\overline{|z\rangle} = 1$$

$$\overline{z_{\mu}^* z_{\nu}} = \delta_{\mu\nu}$$

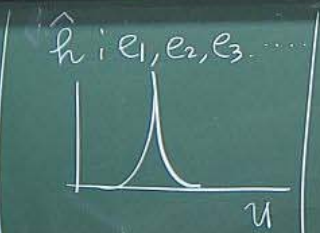
$$\overline{z_{\nu_1}^* z_{\nu_2} z_{\nu_3}^* z_{\nu_4}} = \delta_{\nu_1 \nu_2} \delta_{\nu_3 \nu_4} + \delta_{\nu_1 \nu_4} \delta_{\nu_2 \nu_3}$$

$$\begin{aligned} \langle 0|0\rangle &= \sum_{\mu, \nu} \overline{z_{\mu}^* z_{\nu}} \langle \mu|\nu\rangle \\ &= \sum_{\nu} \langle \nu|\nu\rangle = 1 \\ &= \text{dim } \mathcal{H} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{X}|0\rangle &= \sum_{\mu, \nu} \overline{z_{\mu}^* z_{\nu}} \langle \mu|\hat{X}|\nu\rangle \\ &= \sum_{\nu} \langle \nu|\hat{X}|\nu\rangle \\ &= \text{tr}(\hat{X}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{X}^2|0\rangle^2 &= \sum_{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4} \overline{z_{\nu_1}^* z_{\nu_2} z_{\nu_3}^* z_{\nu_4}} \langle \nu_1|\hat{X}|\nu_2\rangle \langle \nu_3|\hat{X}|\nu_4\rangle \\ &= \text{tr}(\hat{X}^2) + \text{tr}(\hat{X})^2 \end{aligned}$$

(注) 物理に出てくる \hat{X} は
変換もある!
 $\hat{X} = \sigma(1) \cdot \sigma(2) \cdots \sigma(N)$
 ρ depends on $\text{dim } \mathcal{H}$
物理系特有の性質が
重要!
ex) $g(u) = e^{-N\phi(u)}$



$$|k\rangle \equiv (I - \hat{R})^k |0\rangle$$

\hat{R} random vector $\in \mathcal{H}$

$$\begin{aligned} \langle k|k\rangle &= \langle 0|(I - \hat{R})^{2k}|0\rangle \\ &= \text{tr}[(I - \hat{R})^{2k}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle k|\hat{A}|k\rangle &= \langle 0|(I - \hat{R})^k \hat{A} (I - \hat{R})^k |0\rangle \\ &= \text{tr}[(I - \hat{R})^k \hat{A} (I - \hat{R})^k] \\ &= \text{tr}[(I - \hat{R})^{2k} \hat{A}] \end{aligned}$$

$$\therefore \frac{\langle k|\hat{A}|k\rangle}{\langle k|k\rangle} = \frac{\text{tr}[(I - \hat{R})^{2k} \hat{A}]}{\text{tr}[(I - \hat{R})^{2k}]}$$

$$\begin{aligned} &= \text{tr}(\hat{P}_k^{\text{end}} \hat{A}) \\ &\equiv \langle \hat{A} \rangle_k^{\text{end}} \end{aligned}$$

したがって、

$\frac{\langle k|\hat{A}|k\rangle}{\langle k|k\rangle} \equiv \langle \hat{A} \rangle_k^{\text{TPQ}}$ と $\langle \hat{A} \rangle_k^{\text{end}}$ が同じ値になる
 が、この場合、Markov type inequality で評価
 正しいけど、ほぼ最悪のケースを
 想定したことになる。

$$\left(\langle \hat{A} \rangle_k^{\text{TPQ}} - \langle \hat{A} \rangle_k^{\text{end}} \right)^2 \equiv D_A^2$$

計算方法は、

$$\left(\frac{f}{g} \right) = \frac{f + \delta f}{g + \delta g} = \frac{f}{g} + \frac{1}{g^2} \left(\frac{f}{g} \delta g^2 - \delta f \delta g \right) + \dots$$

$$\left(\frac{f}{g} - \left(\frac{f}{g} \right) \right)^2 = \frac{\delta f^2}{g^2} - 2 \frac{f \delta f \delta g}{g^3} + \frac{f^2 \delta g^2}{g^4} + \dots$$

だから、
 したがって、

$$\begin{aligned} \frac{\langle k|\hat{A}|k\rangle - \langle k|\hat{A}|k\rangle}{\langle k|\hat{A}|k\rangle - \langle k|\hat{A}|k\rangle} &= \frac{\langle k|\hat{A}|k\rangle^2 - \langle k|\hat{A}|k\rangle^2}{\langle k|\hat{A}|k\rangle^2 - \langle k|\hat{A}|k\rangle^2} \\ &= \text{tr}[(I - \hat{R})^k \hat{A} (I - \hat{R})^{2k} \hat{A} (I - \hat{R})^k] \end{aligned}$$

or $\frac{\langle 0|\hat{X}|0\rangle^2}{\langle 0|\hat{X}|0\rangle} = \text{tr}(\hat{X}^2) + [\text{tr}(\hat{X})]^2$
 $\frac{\langle 0|\hat{X}|0\rangle}{\langle 0|\hat{X}|0\rangle} = \text{tr}(\hat{X})$

ゆえに、

$$\left| \frac{\langle k|A|k \rangle}{\langle k|k \rangle} - \frac{\langle k|A|k \rangle}{\langle k|k \rangle} \right|$$

$$= |\langle \hat{A} \rangle_k^{end} - \langle \hat{A} \rangle_{2k}^{end}|$$

$$= \exp\left(N \left[2R(u_k^*) - R(u_{2k}^*) + 4k \ln \left(\frac{l - u_k^*}{l - u_{2k}^*} \right) \right] + o(N)\right)$$

この項が $\Theta(1)$ であることを示す!

roughly

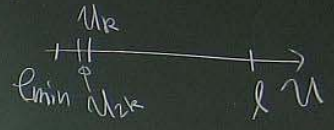
$$\underbrace{\Delta(u_k^*) + \Delta(u_k^*) - \Delta(u_{2k}^*)}_{\Theta(1) > 0} + \underbrace{4k \ln(\dots)}_{\Theta(1) < 0}$$

なので、まじやりにやろう!

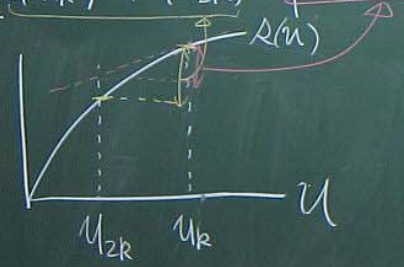
$$2\Delta(u_k^*) - \Delta(u_{2k}^*) + 4k \ln \left(\frac{l - u_k^*}{l - u_{2k}^*} \right)$$

$$= 2\Delta(u_k^*) - \Delta(u_{2k}^*) - 2\beta(u_k^*)(u_k^* - u_{2k}^*)$$

$$\ln \left(1 + \frac{u_k^* - u_{2k}^*}{l - u_k^*} \right) \approx \frac{u_k^* - u_{2k}^*}{l - u_k^*}$$



$$= 2 \left[\Delta(u_k^*) - \Delta(u_{2k}^*) - \beta(u_k^*)(u_k^* - u_{2k}^*) \right] + \Delta(u_{2k}) \geq \Delta(u_{2k}) = \Theta(1)$$



$$\therefore \left| \overline{(-)} - \overline{(-)} \right| \leq \frac{|\langle \hat{A} \rangle_k^{end} - \langle \hat{A} \rangle_{2k}^{end}|}{\exp[N\Delta(u_{2k}) + o(N)]}$$

$$\leq \frac{\Theta(N^m)}{e^{\Theta(N)}} \xrightarrow{TDL} 0$$

今のところ skip して、
→ 自分で

$$D_A^2 \equiv \left(\frac{\langle k|A|k \rangle}{\langle k|k \rangle} - \frac{\langle k|A|k \rangle}{\langle k|k \rangle} \right)^2$$

$$\leq \frac{\langle (\Delta A)^2 \rangle_{2k}^{\text{end}} + \left(\langle \hat{A} \rangle_{2k}^{\text{end}} - \langle A \rangle_k^{\text{end}} \right)^2}{\exp\left[N \left\{ 2\Delta(u_k^*) - R(u_{2k}^*) - 4K \ln \left(\frac{l - u_{2k}^*}{l - u_k^*} \right) \right\} + o(N) \right]} \stackrel{\text{同左}}{\leq} \frac{\exp\left[N R(u_{2k}) + o(N) \right]}{\exp\left[N R(u_{2k}) + o(N) \right]} \stackrel{\text{TDL}}{\leq} \frac{O(N^{2m})}{e^{\Theta(N)}} \rightarrow 0$$

∴ Markov type ineq. より

$$P\left(\left| \langle \hat{A} \rangle_k^{\text{TPQ}} - \langle A \rangle_k^{\text{end}} \right| \geq \varepsilon \right) \leq \frac{1}{\varepsilon^2} D_A^2 \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\langle (\Delta A)^2 \rangle_{2k}^{\text{end}} + \left(\langle \hat{A} \rangle_{2k}^{\text{end}} - \langle A \rangle_k^{\text{end}} \right)^2}{\exp\left[N R(u_{2k}) + o(N) \right]} \leq \frac{1}{\varepsilon^2} N^{2m}$$

つまり、

$$\langle \hat{A} \rangle_k^{\text{TPQ}} \xrightarrow{P} \langle A \rangle_k^{\text{end}}$$

つまり、

$|k\rangle$ は TPQ state!