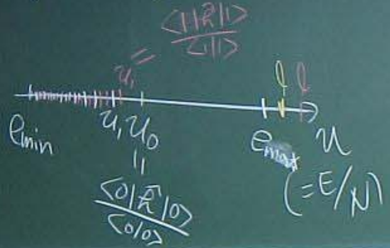
⊙ all physical relations are independent of ℓ.



⊙ iterationのと中で, ℓの値をかえてもよい.

⊙ iteration (practical)

1. take a trivial basis of $\mathcal{H}$

$\to |0\rangle = \sum_\nu z_\nu |\nu\rangle$ ← 乱数

2. multiply $\ell - \hat{h}$ iteratively

$|1\rangle = (\ell - \hat{h})|0\rangle$

$|2\rangle = (\ell - \hat{h})|1\rangle$

$\vdots$

→ all of them are mTPQ states corresponding to different values of u.

cf. べき乗法.

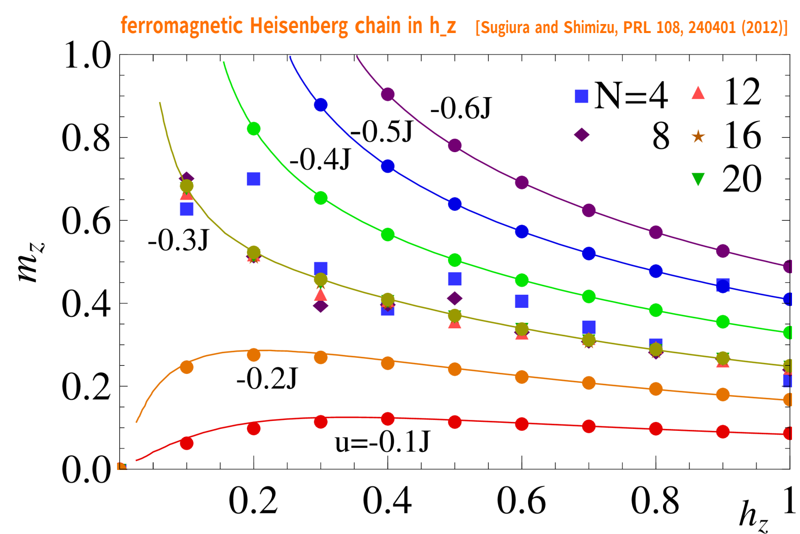
$$\lim_{k\to\infty} \frac{|k\rangle}{\sqrt{\langle k|k\rangle}} \longrightarrow |\text{ground state}\rangle$$

mTPQ: $\forall k$について $|k\rangle$は有限温度 eq. stateだ!

cf. ランチョス法.

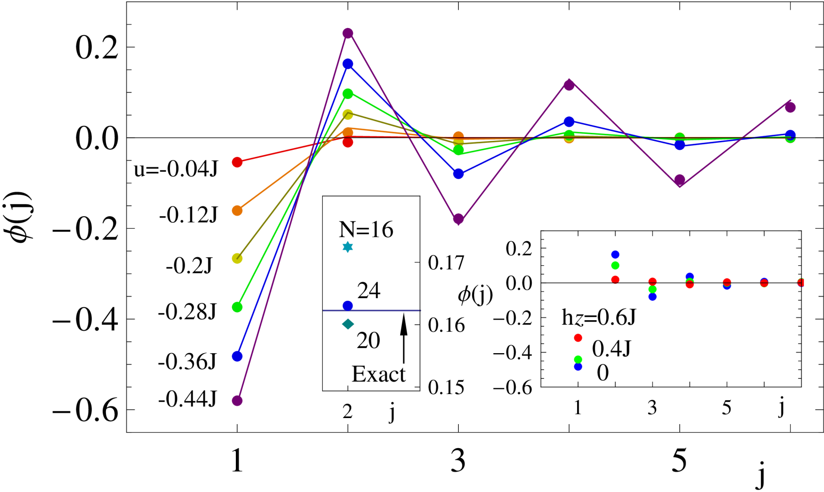
many-body system (non-integrable)

$\hat{H} \propto N$, $\dim \mathcal{H} = e^{\Theta(N)}$



ferromagnetic Heisenberg chain in h_z
[Sugiura and Shimizu, PRL 108, 240401 (2012)]
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
m_z
0.2
0.4
0.6
0.8
1
h_z
N=4
8
12
16
20
-0.6J
-0.5J
-0.4J
-0.3J
-0.2J
u=-0.1J

ferromagnetic Heisenberg chain in h_z [Sugiura and Shimizu, PRL 108, 240401 (2012)]



§ genuine TD variables を求める

温度

$|k\rangle$ のエネルギー分布 $\propto \exp\left(N\left[\overbrace{s(u)+\frac{2k}{N}\ln(\ell-u)}^{\equiv \xi_k(u)}\right]\right)$ は、

$u=u_k^*$ s.t. $\underbrace{\beta(u_k^*)}=\frac{2k}{N}\frac{1}{\ell-u_k^*}$ （前回は u_k^* を u_* と書いた）

で sharp な peak をもつ。 ← エネルギー u_k^* における この系の β

← unknown

他方、$|k\rangle$ のエネルギーでは、

$$u_k=\frac{\langle k|\hat{h}|k\rangle}{\langle k|k\rangle}$$ ← この式に代入すればいいので known

$$=\frac{\overline{\langle k|\hat{h}|k\rangle}}{\overline{\langle k|k\rangle}}+\underbrace{(\text{exponentially small})}$$

← 無視できる

$$\propto \int u\, e^{N\xi_k(u)}\,du$$ $\xi_k''<0$ より

$$\xi_k(u)=\underbrace{\xi_k(u_k^*)}-\underbrace{\frac{1}{2!}\left|\xi_k''(u_k^*)\right|(u-u_k^*)^2}+\underbrace{\frac{1}{3!}\xi_k'''(u_k^*)(u-u_k^*)^3+\cdots}$$

← u 積分では定数

→ Gauss 積分をもたらし、$N(u-u_k^*)^2=\Theta(1)$ まで效かく。

→ Gauss 積分の前に出すと、積分できる。

これから、

$$u_k = u_k^* + \xi_k'''(u_k^*) \Big/ 2N\,\xi_k''(u_k^*)^2 + O(1/N^2)$$

$$= u_k^* + O(1/N)$$

これを $\beta(u_k^*) = \frac{2k}{N}\frac{1}{\ell - u_k^*}$ に代入して、

$$\beta(u_k + O(1/N)) = \frac{2k}{N}\frac{1}{\ell - u_k + O(1/N)}$$

ゆえに、

$$\boxed{\beta(u_k) = \frac{2k}{N}\cdot\frac{1}{\ell - u_k} + O(1/N)}$$

··· mTPQの温度を求めるための、いちばん粗い公式。

この系の $u = u_k = \frac{\langle k|\hat{h}|k\rangle}{\langle k|k\rangle}$ における β

このサイズのsmooth microcanonicalの結果としては十分な精度

※もっと精度が高い公式も得られる。(see 論文 or 2018年の板書)

① $u_k^{\circledcirc} \equiv u_k - \xi_k''' \Big/ 2N\,\xi_k''^2$ とおいて、$\beta(u_k^{\circledcirc}) = \frac{2k}{N}\cdot\frac{1}{\ell - u_k^{\circledcirc}} + O(1/N^2)$

② アンサンブル間の有限サイズ差をよく利用して、∞系に近い結果を得る → squeezed ensembleの ch. でくわしくやる!

有限サイズ効果

$$\left| \frac{\langle A \rangle^{TPQ}_{k,N}}{N} - \frac{\langle A \rangle^{ens}_{k,N}}{N} \right| \text{ : exponentially small}$$

$$\left(O(N^{2m}) / e^{O(N)} \right)$$

$\hat{A} \propto N$

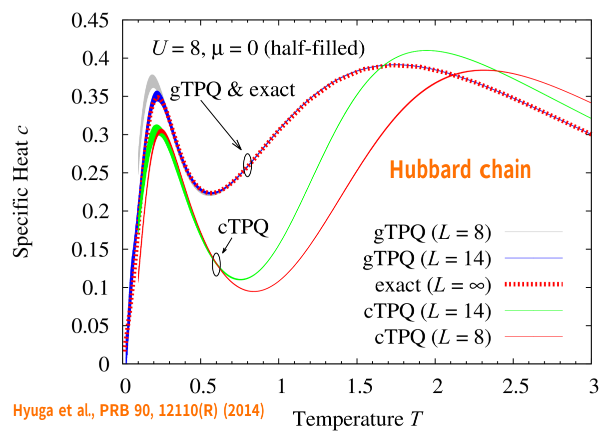
$$\left| \frac{\langle A \rangle^{TPQ}_{k,\infty}}{N} - \frac{\langle A \rangle^{TPQ}_{k,N}}{N} \right|$$

$$= \left| \frac{\langle A \rangle^{ens}_{k,\infty}}{N} - \frac{\langle A \rangle^{ens}_{k,N}}{N} \right| + \text{exp. small}$$

$$\propto 1 / N^{\text{some power}}$$

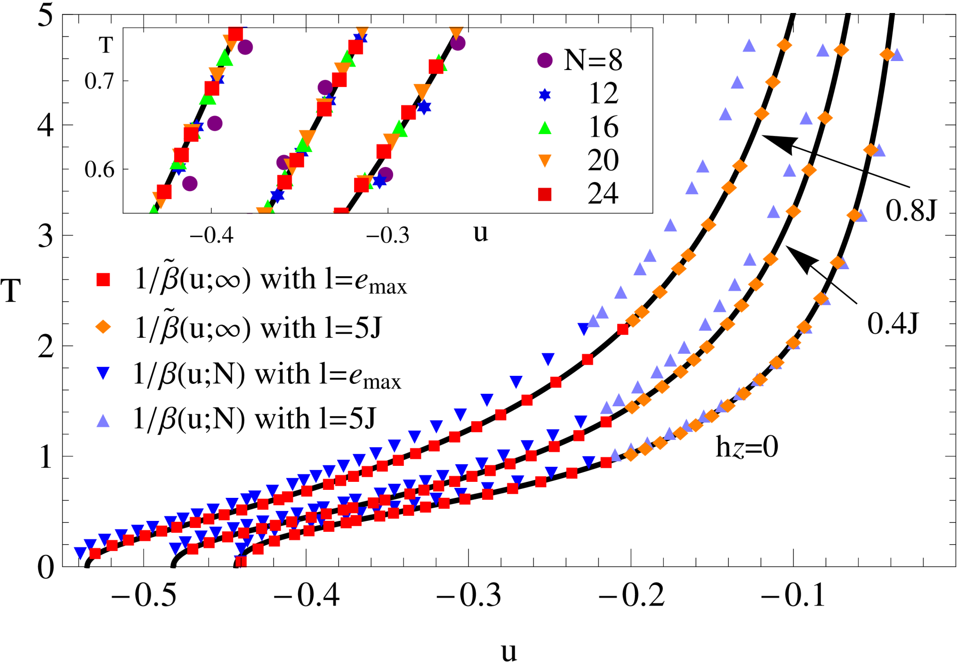
for the microcanonical and the smooth mimcrocanonical ensembles

(c.f. "maximally canonical" has an exponentailly small difference)



$U = 8$, $\mu = 0$ (half-filled)
gTPQ & exact
cTPQ
Hubbard chain
gTPQ ($L = 8$)
gTPQ ($L = 14$)
exact ($L = \infty$)
cTPQ ($L = 14$)
cTPQ ($L = 8$)
Specific Heat c
Temperature T
0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
0.3
0.35
0.4
0.45
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
Hyuga et al., PRB 90, 12110(R) (2014)

[Sugiura and Shimizu, PRL 108, 240401 (2012)]



エントロピー密度

$$\langle k|k\rangle = \overline{\langle k|k\rangle} + \underbrace{(\text{exp. small error})}_{\text{ムシできる}}$$

前回の結果から、

$$\overline{\langle k|k\rangle} = \mathrm{Tr}\,(l-\hat{h})^{2k}$$

$$= \int \exp\left[N\,\xi_k(u)\right] du$$

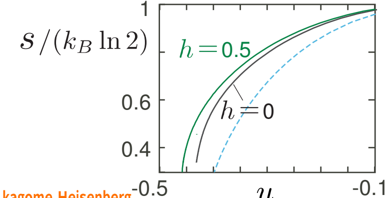
$\xi_k(u)$をu_k^*のまわりでTaylor展開して積分すると、

$$= \exp\Big[N\,\underbrace{\xi_k(u_k^*)}_{= s(u_k^*) + \frac{2k}{N}\ln(l-u_k^*)} + O(\ln N)\Big]$$

それ、$u_k = u_k^* + O(1/N)$ だったから、

$$\boxed{s(u_k) = \frac{1}{N}\ln\langle k|k\rangle - \frac{2k}{N}\ln(l-u_k) + O(1/N)}$$

たった1本の$|k\rangle$から、エントロピーが求まる!



kagome Heisenberg antiferromagnet in h Endo et al. PRL121, 220601 (2018)

Ch. Canonical TPQ state 「cTPQ」

※ applicable also to $\begin{cases} \text{unbounded } \hat{H} \to E_n\text{: 上限がない} \\ \dim \mathcal{H} = \infty \end{cases}$

c.f. PRL 2013では、$\dim \mathcal{H} < +\infty$ ($\to \hat{H}$ は bounded)

- $\{|\nu\rangle\}_\nu$: an arbitray basis of $\mathcal{H}$
- $z_\nu = \dfrac{x_\nu + i y_\nu}{\sqrt{2}}$ ($x_\nu, y_\nu \in \mathbb{R}$, standard normal distr.)

Then,

$$|\beta\rangle \equiv \sum_\nu z_\nu \exp\left[-\frac{\beta \hat{H}}{2}\right] |\nu\rangle$$

is the cTPQ state.

$$\langle \hat{A} \rangle_\beta^{TPQ} = \frac{\langle \beta | \hat{A} | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \xrightarrow{P} \langle A \rangle_\beta^{ene} = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}\right]$$

exponentially fast, for $\forall$m.v. $\hat{A}$ uniformly.

∴ Its single realization gives the eq. value of mechanical variables as $\langle \hat{A} \rangle_\beta^{TPQ}$, with exponentially small prob. of error.

(注) $\dim \mathcal{H} < +\infty$ なら、

$$|\beta\rangle = \exp\left[-\frac{\beta \hat{H}}{2}\right] \underbrace{\sum_\nu z_\nu |\nu\rangle}_{= |0\rangle \text{ of mTPQ state}}$$

これは、$\dim \mathcal{H} = \infty$ だと、ダメ！

$$\because \overline{\Big\| \underbrace{\sum_\nu z_\nu |\nu\rangle}_{\notin \mathcal{H}} \Big\|^2} = \sum_\nu \overline{|z_\nu|^2} = \sum_\nu 1 = \infty$$

…… ill-defined!

元の形なら、

$$|\beta\rangle = \sum_n z_n \underbrace{\exp\left[-\frac{\beta \hat{H}}{2}\right] |n\rangle}_{= e^{-\frac{\beta}{2} E_n} |n\rangle}$$

$$\overline{\langle \beta | \beta \rangle} \overset{\text{後で示す}}{=} Z < +\infty \text{ for } N < +\infty. \to \text{well-defined!}$$

§ genuine TD variables from cTPQ state

後で示すように、

$\langle\beta|\beta\rangle \xrightarrow{P} Z(\beta)$ ：分配関数

マシュー関数

$\therefore\ \boxed{-\beta F} = \ln\langle\beta|\beta\rangle$

with exp. small prob. of error!

→ all g. TD variables!

§ 誤差の上限

自分で

$$D_Z^2 \equiv \left|\frac{\langle\beta|\beta\rangle}{Z(\beta)} - 1\right|^2 \le \frac{1}{\exp[2\beta\{F(T/2) - F(T)\}]}$$

$$D_A^2 \equiv \left|\langle\hat{A}\rangle_\beta^{TPQ} - \langle\hat{A}\rangle_\beta^{ens}\right|^2 \le \frac{\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle_{2\beta}^{ens} + \left|\langle A\rangle_{2\beta}^{ens} - \langle A\rangle_\beta^{ens}\right|^2}{\exp[2\beta\{F(T/2) - F(T)\}]}$$

たとえばエントロピーは、(微分も精度良く求まるので) Fを微分してもいいし、U = Nu = N <h> を用いて、S = (U-F) β から求めてもいい。

ここで、TDより、

$$\left.\begin{array}{l}\dfrac{\partial F}{\partial T} = -S < 0 \\ \dfrac{\partial^2 F}{\partial T^2} < 0\end{array}\right\} \Rightarrow F(T/2) - F(T) \ge S(T/2)\cdot\frac{T}{2}$$

より、

$$2\beta\{F(T/2) - F(T)\} \ge S(T/2) = \Theta(N) \quad \text{for } {}^\forall T>0.$$

$$\therefore\ D_Z^2 \le \frac{1}{\exp[S(T/2)]} = \frac{1}{\exp[\Theta(N)]} \to 0$$

$$D_A^2 \le \frac{\langle(\ )^2\rangle_{2\beta}^{ens} + \left|\langle\ \rangle_{2\beta}^{ens} - \langle\ \rangle_\beta^{ens}\right|^2}{\exp[S(T/2)]} = \frac{O(N^{2m})}{\exp[\Theta(N)]} \to 0.$$

誤差の自己評価ができる！

D_Z^2 や D_A^2 の不等式右辺を、cTPQ で計算できる！

→ 誤差の上限が求まる！

- TPQ formulae are almost self-validating.

→ 数値計算上うれしい！

§ applications

⊙ ∞系でのげんみつ解がわかっているモデル

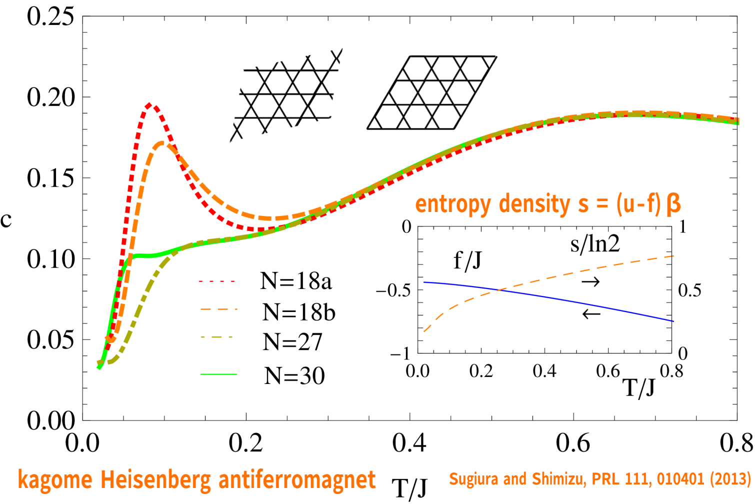
⊙ カゴメ格子上の antiferro Heisenberg model. (spin = 1/2)

※ cTPQ と mTPQ とどっちを使えばいいの？

- 一般には、cTPQ をおすすめします。

(∵ ∞系への速さ：mTPQ > cTPQ > gTPQ)

- 一次相転移では mTPQ を！



0.25
0.20
0.15
0.10
0.05
0.00
c
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
T/J
N=18a
N=18b
N=27
N=30
entropy density s = (u-f) β
f/J
s/ln2
0
−0.5
−1
1
0.5
0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
T/J
kagome Heisenberg antiferromagnet
Sugiura and Shimizu, PRL 111, 010401 (2013)

§ cTPQ と mTPQ の関係

($\dim\mathcal{H} < +\infty$ とする)

cTPQ state : $|\beta\rangle = e^{-\frac{\beta}{2}N\hat{h}}|0\rangle \leftarrow \sum_\nu z_\nu|\nu\rangle$

mTPQ : : $|k\rangle = (l-\hat{h})^k|0\rangle$

やること

$|\beta\rangle$ を $\{|k\rangle\}$ で展開する.

規格化しておく.

$$\begin{cases} |\psi(\beta)\rangle = \dfrac{1}{\| |\beta\rangle \|}|\beta\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{Q(\beta)}}e^{-\frac{\beta}{2}N\hat{h}}|\psi_0\rangle \\ |\psi_k\rangle = \dfrac{1}{\| |k\rangle \|}|k\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{Q_k}}(l-\hat{h})^k|\psi_0\rangle \end{cases}$$

$$Q_k \equiv \langle\psi_0|(l-\hat{h})^{2k}|\psi_0\rangle$$

$$Q(\beta) \equiv \langle\psi_0|e^{-\beta N\hat{h}}|\psi_0\rangle$$

$$= \langle\psi_0|\psi(2\beta)\rangle\sqrt{Q(2\beta)}$$

など.「おもしろい式」が出る.

$\to Q(\beta)/\sqrt{Q(2\beta)}$ は exp. small だろう! など.

これらを使って,

$$|\psi(\beta)\rangle = \frac{1}{\sqrt{Q(\beta)}}e^{-\frac{\beta}{2}N\hat{h}}|\psi_0\rangle$$

$$= \frac{e^{-\frac{\beta}{2}Nl}}{\sqrt{Q(\beta)}}e^{+\frac{\beta}{2}N(l-\hat{h})}|\psi_0\rangle$$

$$= \frac{e^{-\frac{\beta}{2}Nl}}{\sqrt{Q(\beta)}}\sum_{k=0}^{\infty}\overbrace{\boxed{\frac{1}{k!}\left(\frac{\beta}{2}N\right)^k\sqrt{Q_k}}}^{\equiv R_k > 0}|\psi_k\rangle$$

ここで.

$$Q_k = \sum_n |z_n|^2(l-e_n)^{2k} \Big/ \sum_n |z_n|^2$$

exp. good approx.

$$\doteq \frac{1}{\dim\mathcal{H}}\sum_n (l-e_n)^{2k}$$

$$= \frac{1}{\dim\mathcal{H}}\int (l-u)^{2k}\,\overbrace{g(u)}^{= e^{N\sigma(u)}}\,du$$

$\rho(u;N)$ なので

$$= \frac{1}{\dim\mathcal{H}}\int \exp\Big[N\underbrace{\{\sigma(u)+2\kappa\ln(l-u)\}}_{=\xi_k(u)}\Big]du$$

$$= \frac{1}{\dim\mathcal{H}}\sqrt{\frac{2\pi}{N|\xi_k''|}}\exp\Big[N\{\sigma(u_k^*) + 2\kappa\ln(l-u_k^*)\}\Big]$$

+ smaller terms

(where u_k^* is given by

$$\beta(u_k^*;N) = 2\kappa/(\ell - u_k^*)$$

$;N$ 略)

$$R_k = \frac{1}{k!}\left(\frac{\beta N}{2}\right)^k \sqrt{Q_k}$$

$$\sim \frac{e^k}{\sqrt{2\pi}\,k^{k+\frac{1}{2}}}\left(\frac{\beta N}{2}\right)^k \cdot \exp\left[\frac{N}{2}\left\{s_k(u_k^*) - \ln\lambda\right\}\right]$$

$\dim\mathcal{H} = \lambda^N$ とする

$$\underset{k=N\kappa}{=} \exp\left\{\frac{N}{2}\left[s_k(u_\kappa^*) - \ln\lambda + 2\kappa + 2\kappa\ln(\beta/2\kappa)\right]\right\}$$

これが、どの κ で最大になるか？

$$\frac{\partial}{\partial\kappa}[\ \ ] = \frac{\partial u_\kappa^*}{\partial\kappa}\underbrace{\left\{\beta(u_\kappa^*) - \frac{2\kappa}{\ell - u_\kappa^*}\right\}}_{=0} + 2\ln\left\{\beta\Big/\overset{\beta(u_\kappa^*)}{\overset{\parallel}{\frac{2\kappa}{\ell - u_\kappa^*}}}\right\}$$

$$= 2\ln\left\{\beta/\beta(u_\kappa^*)\right\}$$

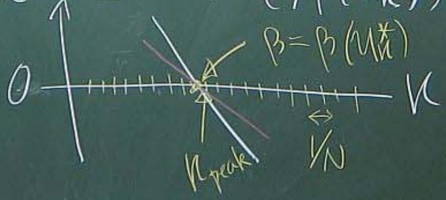
$=0$ となる κ で、R_k が max.

$\to$ CTPQ でパラメータとして与えた β と同じ逆温度をもつ、mTPQ state $|\psi_k\rangle$ の R_k が max.!

次に、そのような k から、k が $\Theta(N)$ はなれると、 κ が $\Theta(1)$

R_k は exp. small であることを示す。

$$\frac{\partial}{\partial\kappa}[\ \ ] = 2\ln\left\{\beta/\beta(u_\kappa^*)\right\}$$



ゆえに、

$$\frac{\partial}{\partial\kappa}[\ \ ] = \begin{cases} \Theta(1) > 0 & (\kappa_{peak} - \kappa = \Theta(1) > 0) \\ -\Theta(1) < 0 & (\kappa - \kappa_{peak} = \Theta(1) > 0) \end{cases}$$

なので、

$\exists D = \Theta(1)$ の正定数

があり、

$$[\kappa_{peak}] - [\kappa] \geq D \cdot |\kappa - \kappa_{peak}|$$

for $|\kappa - \kappa_{peak}| \geq \Theta(1)$

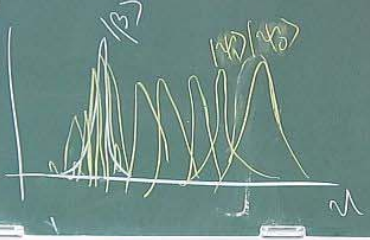
ゆえに、$|k-k_{peak}| \geq \Theta(1)$ のとき、
$(|k-k_{peak}| \geq \Theta(N))$

$$R_k \leq R_{k_{peak}} \underbrace{e^{-\frac{N}{2}D\cdot|k-k_{peak}|}}_{=e^{-\Theta(N)}}$$

∴ $|k-k_{peak}| = o(1)$ のところしか効かない!
$(|k-k_{peak}| = o(N))$

イメージ図

uの分布



同様に ← 自分で

∀に、$\beta_{max} < +\infty$ を選んだとき、
$0 < \beta \leq \beta_{max}$ において

$$|\psi(\beta)\rangle = \Phi \sum_k R_k |\psi_k\rangle \qquad \Phi = \frac{e^{-\frac{\beta}{2}N\ell}}{\sqrt{Q(\beta)}}$$

は、一様収束する。
(roughにいえば、∀β<+∞について収束)

∴ 実用的にいうと、
βを与える。
→ $|k\rangle$ の $\beta(u_k)$ を求める。
→ $\beta(u_k) - \beta = \Theta(1)$ となる
ような k までとればいい。

つまり、
$\beta(u_k) \simeq \beta$ となる k をみつけ、
$k_{max} = \xi a k + \Theta(N)$ にとれ!

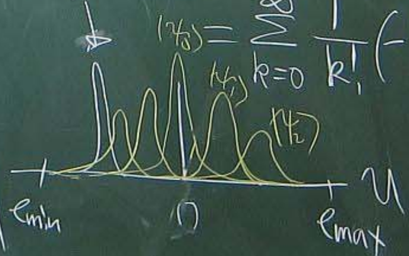
$$\Phi \sum_{k=0}^{\infty} \to \sum_{k=0}^{k_{max}}$$

おまけ

$$|\psi(\beta)\rangle \propto e^{-\frac{\beta}{2}N\hat{h}}|\psi_0\rangle$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\left(-\frac{\beta}{2}N\right)^k \underbrace{\hat{h}^k |\psi_0\rangle}_{\propto |\psi_k\rangle}$$

$\propto |\psi_k\rangle$ とすると、
これは Schrödinger cat!



しみずの直観：
なんかまずそう!
→ ほんま？

<u> < 0 なら
大丈夫そうです。
一般には、<u> < l
なら大丈夫そう。

逆: mTPQ を cTPQ で表す

いろいろあるけど、たとえば、

$$|k\rangle \propto \left(\frac{\partial^k}{\partial\beta^k}|\beta\rangle\right)_{\beta=0}$$

(∵ 一様収束してるから)

$$\{\hat{A}\}^{TPQ}_\beta \equiv \frac{\{\hat{A}\}'_\beta}{\{\hat{1}\}'_\beta}$$

が、正しい eq. value を与える!

$$-\beta F = \ln\{\hat{1}\}'_\beta$$

杉浦公式

$$\langle\beta|\hat{A}|\beta\rangle \propto \sum_{k,k'}\left(\frac{N\beta}{2}\right)^{k+k'}\frac{1}{k!k'!}\overbrace{\langle k|}^{\langle 0|(l-\hat{h})^k}\hat{A}\overbrace{|k'\rangle}^{(l-\hat{h})^{k'}|0\rangle}$$

これをまともに計算すると、計算機のメモリーが大量に要る。

仮に、$[\hat{A}, \hat{h}]=0$ なら、

$$\langle\beta|\hat{A}|\beta\rangle \propto \sum_k \frac{(N\beta)^{2k}}{(2k)!}\langle k|\hat{A}|k\rangle + \sum_k \frac{(N\beta)^{2k+1}}{(2k+1)!}\langle k|\hat{A}|k+1\rangle$$

← $k+k'$ = even の項から

$k+k'$ = odd の項から

$\times \exp(-\beta N l)$

$= \{\hat{A}\}'_\beta$

たとえ、$[\hat{A}, \hat{h}] \neq 0$ でも、これは exp. small error で正しい! ← 自分で!

上の{A}' の定義は、黄色線で囲った項の exp(- β Nl) 倍です。
同様に、cTPQ 論文のEq.(13)の下の式も、exp(- β Nl) が抜けています。