Ch. Squeezed ensembles and squeezed TPQ states

米田 靖史

2020 年 2 月 6 日

2020/06/24, modified by AS for his lecture

Ref. Phys. Rev. B **99**, 144105 (2019).

アンサンブル
アンサンブルの非等価性
- マクロ系
- 有限サイズ系

問題点
Previous works
This work
Squeezed ensembles and TPQ states
パラメタ依存性
応用
統計力学量のアンサンブル依存性
応用
まとめ

- アンサンブル
- アンサンブルの非等価性
  - マクロ系
  - 有限サイズ系
- 問題点
- Previous works
- This work
- Squeezed ensembles and TPQ states
- パラメタ依存性
- 応用
- 統計力学量のアンサンブル依存性
- 応用
- まとめ

アンサンブル

- 平衡統計力学

$$\text{系のミクロな性質} \xrightarrow{\text{アンサンブル}} \begin{cases} \text{ミクロ状態} & \hat{\rho} \\ \text{熱力学関数} & \psi \end{cases}$$

アンサンブル

- 平衡統計力学

$$\text{系のミクロな性質} \xrightarrow{\text{アンサンブル}} \begin{cases} \text{ミクロ状態} & \hat{\rho} \\ \text{熱力学関数} & \psi \end{cases}$$

例: カノニカルアンサンブル

$$\hat{\rho}_N^{\mathsf{can}}(\beta) \propto e^{-\beta \hat{H}}, \psi_N^{\mathsf{can}}(\beta) = -\frac{1}{N} \log \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta \hat{H}}\right]$$

アンサンブル

- 平衡統計力学

$$\text{系のミクロな性質} \xrightarrow{\text{アンサンブル}} \begin{cases} \text{ミクロ状態} & \hat{\rho} \\ \text{熱力学関数} & \psi \end{cases}$$

例: カノニカルアンサンブル

$$\hat{\rho}_N^{\mathrm{can}}(\beta) \propto e^{-\beta \hat{H}}, \psi_N^{\mathrm{can}}(\beta) = -\frac{1}{N} \log \operatorname{Tr}\left[e^{-\beta \hat{H}}\right]$$

- アンサンブルの等価性

どれを使っても等価な熱力学関数が得られる

例: カノニカルとミクロカノニカル

$$s(u) = \inf_{\beta} \left\{\beta u - \psi_{\infty}^{\mathrm{can}}(\beta)\right\}$$

アンサンブル

- 平衡統計力学

$$\text{系のミクロな性質} \xrightarrow{\text{アンサンブル}} \begin{cases} \text{ミクロ状態} & \hat{\rho} \\ \text{熱力学関数} & \psi \end{cases}$$

例: カノニカルアンサンブル

$$\hat{\rho}_N^{\mathsf{can}}(\beta) \propto e^{-\beta \hat{H}}, \psi_N^{\mathsf{can}}(\beta) = -\frac{1}{N} \log \operatorname{Tr}\left[e^{-\beta \hat{H}}\right]$$

- アンサンブルの等価性

どれを使っても等価な熱力学関数が得られる

例: カノニカルとミクロカノニカル

$$s(u) = \inf_{\beta} \{\beta u - \psi_{\infty}^{\mathsf{can}}(\beta)\}$$

<u>熱力学極限</u>で<u>熱力学関数</u>について成立

アンサンブル

- 平衡統計力学

$$\text{系のミクロな性質} \xrightarrow{\text{アンサンブル}} \begin{cases} \text{ミクロ状態} & \hat{\rho} \\ \text{熱力学関数} & \psi \end{cases}$$

例: カノニカルアンサンブル

$$\hat{\rho}_N^{\mathsf{can}}(\beta) \propto e^{-\beta\hat{H}}, \psi_N^{\mathsf{can}}(\beta) = -\frac{1}{N}\log \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}}\right]$$

- アンサンブルの等価性

どれを使っても等価な熱力学関数が得られる

例: カノニカルとミクロカノニカル

$$s(u) = \inf_\beta \{\beta u - \psi_\infty^{\mathsf{can}}(\beta)\}$$

熱力学極限で熱力学関数について成立

ミクロ状態や有限サイズ系で与える
統計力学量 (温度や比熱についての予言) は?

アンサンブル
アンサンブルの非等価性
- マクロ系
- 有限サイズ系

問題点
Previous works
This work
Squeezed ensembles and TPQ states
パラメタ依存性
応用
統計力学量のアンサンブル依存性
応用
まとめ

ミクロ状態(マクロ系)

1 次相転移を示す系でミクロ状態は非等価

ミクロ状態 (マクロ系)

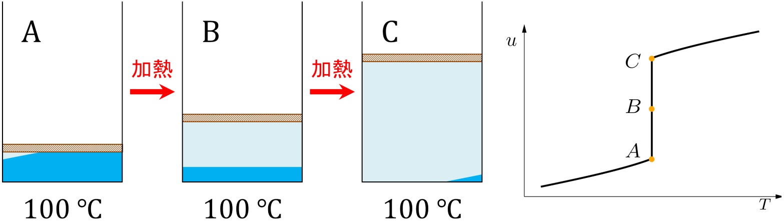
1 次相転移を示す系でミクロ状態は非等価

- 例: 水の気液転移

ミクロ状態 (マクロ系)

1 次相転移を示す系でミクロ状態は非等価

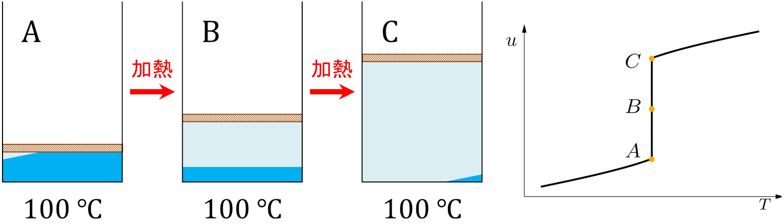
- 例: 水の気液転移



ミクロ状態 (マクロ系)

1 次相転移を示す系でミクロ状態は非等価

- 例: 水の気液転移



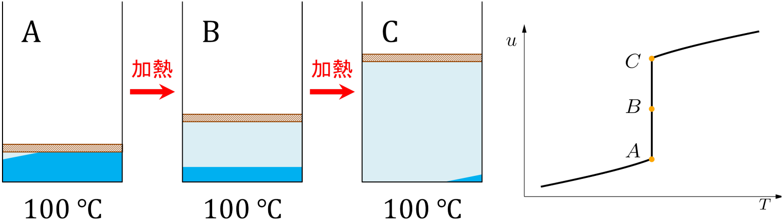
ミクロカノニカル: エネルギーで指定

転移領域の各状態と 1 対 1 で対応する

ミクロ状態 (マクロ系)

1 次相転移を示す系でミクロ状態は非等価

- 例: 水の気液転移



ミクロカノニカル: エネルギーで指定
　　転移領域の各状態と 1 対 1 で対応する

カノニカル: 温度で指定
　　転移点に対してひとつしか存在しない

アンサンブル
アンサンブルの非等価性
- マクロ系
- 有限サイズ系
問題点
Previous works
This work
Squeezed ensembles and TPQ states
パラメタ依存性
応用
統計力学量のアンサンブル依存性
応用
まとめ

統計力学量 (有限サイズ系)

有限サイズ系で統計力学量は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

統計力学量 (有限サイズ系)

有限サイズ系で統計力学量は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 例: 比熱

統計力学量 (有限サイズ系)

有限サイズ系で統計力学量は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 例: 比熱

  相共存を示す系では
  短距離相互作用系でも
  s_N の上凸性が失われる
  [Challa et al. (1988), Yoneta et al. (2019)]

$$s_N \equiv \frac{1}{N} \log(\text{状態数密度})$$

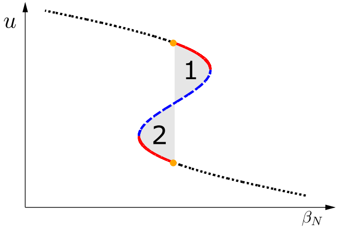
統計力学量 (有限サイズ系)

有限サイズ系で統計力学量は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 例: 比熱

  相共存を示す系では
  短距離相互作用系でも
  s_N の上凸性が失われる
  [Challa et al. (1988), Yoneta et al. (2019)]

$$s_N \equiv \frac{1}{N} \log(\text{状態数密度})$$



統計力学量 (有限サイズ系)

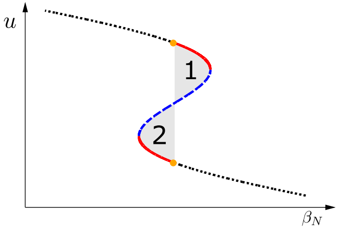
有限サイズ系で統計力学量は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 例: 比熱

  相共存を示す系では
  短距離相互作用系でも
  s_N の上凸性が失われる
  [Challa et al. (1988), Yoneta et al. (2019)]

$$s_N \equiv \frac{1}{N} \log (\text{状態数密度})$$

$\Rightarrow$ 負の比熱

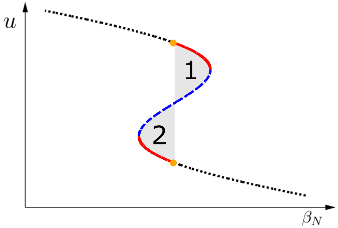


統計力学量 (有限サイズ系)

有限サイズ系で統計力学量は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 例: 比熱

  相共存を示す系では
  短距離相互作用系でも
  s_N の上凸性が失われる
  [Challa et al. (1988), Yoneta et al. (2019)]



$$s_N \equiv \frac{1}{N} \log(\text{状態数密度})$$

$\Rightarrow$ 負の比熱

⟷ カノニカルが与える比熱は常に正

統計力学量 (有限サイズ系)

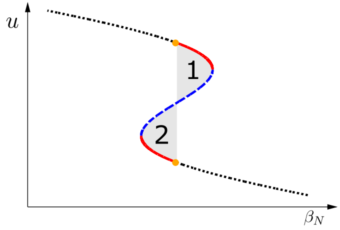
有限サイズ系で統計力学量は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 例: 比熱

  相共存を示す系では
  短距離相互作用系でも
  s_N の上凸性が失われる

  [Challa et al. (1988), Yoneta et al. (2019)]

  $$s_N \equiv \frac{1}{N} \log (\text{状態数密度})$$



$\Rightarrow$ 負の比熱

$\Longleftrightarrow$ カノニカルが与える比熱は常に正

負の比熱は実験的に実現可

[D'Agostino et al. (2000), Schmidt et al. (2001)]

アンサンブル
アンサンブルの非等価性
マクロ系
有限サイズ系
問題点
Previous works
This work
Squeezed ensembles and TPQ states
パラメタ依存性
応用
統計力学量のアンサンブル依存性
応用
まとめ

ミクロ状態 (有限サイズ系)

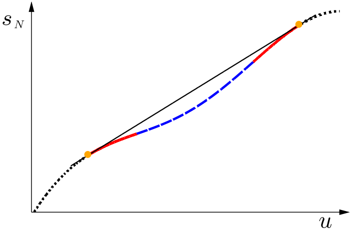
有限サイズ系でミクロ状態は非等価

1 次相転移を示す系で顕著

ミクロ状態 (有限サイズ系)

有限サイズ系でミクロ状態は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 相共存を示す系では s_N の上凸性が失われる

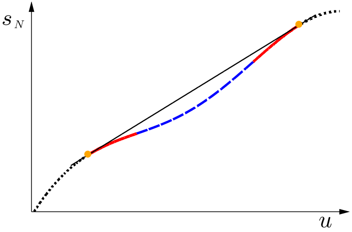


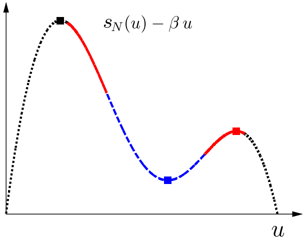
ミクロ状態 (有限サイズ系)

有限サイズ系でミクロ状態は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 相共存を示す系では s_N の上凸性が失われる

$\Rightarrow$ カノニカルアンサンブルの
エネルギー密度分布が 2 つのピークをもつ





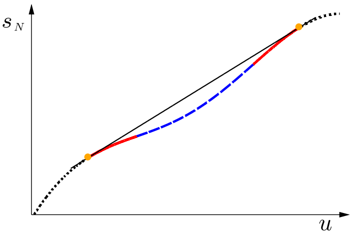
ミクロ状態 (有限サイズ系)

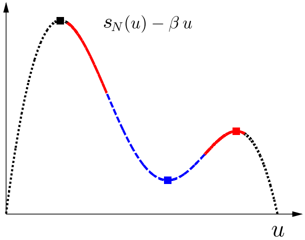
有限サイズ系でミクロ状態は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 相共存を示す系では s_N の上凸性が失われる

$\Rightarrow$ カノニカルアンサンブルの
エネルギー密度分布が 2 つのピークをもつ

$\triangleright$ マクロに異なる状態の古典混合





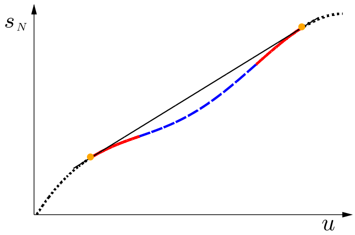
ミクロ状態 (有限サイズ系)

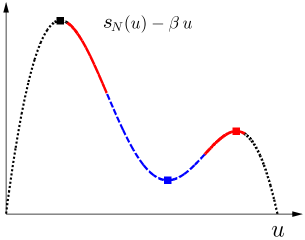
有限サイズ系でミクロ状態は非等価
1 次相転移を示す系で顕著

- 相共存を示す系では s_N の上凸性が失われる

$\Rightarrow$ カノニカルアンサンブルの
エネルギー密度分布が 2 つのピークをもつ

$\triangleright$ マクロに異なる状態の古典混合
$\triangleright$ 相共存領域の状態を与えない





- アンサンブル
- アンサンブルの非等価性
  - マクロ系
  - 有限サイズ系
- 問題点
- Previous works
- This work
- Squeezed ensembles and TPQ states
- パラメタ依存性
- 応用
- 統計力学量のアンサンブル依存性
- 応用
- まとめ

問題点

既存のアンサンブルでは不十分

問題点

既存のアンサンブルでは不十分

- カノニカル

問題点

既存のアンサンブルでは不十分

- カノニカル
    - 温度で状態が指定される
        - ▷ 1次転移点でエネルギー密度が不定

問題点

既存のアンサンブルでは不十分

- カノニカル
    - 温度で状態が指定される
        - ▷ 1 次転移点でエネルギー密度が不定
- ミクロカノニカル

問題点

既存のアンサンブルでは不十分

- カノニカル
  温度で状態が指定される
  ▷ 1次転移点でエネルギー密度が不定
- ミクロカノニカル
  技術的に取り扱いが難しい
  ▷ 量子系では構成に対角化が必要
  ▷ 温度の計算に数値微分が必要

Previous works

エネルギーで平衡状態を指定できる、
microcanonical よりも性質の良いもの

Previous works

エネルギーで平衡状態を指定できる、
microcanonical よりも性質の良いもの

- Gaussian ensemble [Hetherington, 1987]
  エネルギフィルターのスムーズ化

$$\hat{\rho} \propto \Theta(u - \Delta u < \hat{h} \leq u) \ \Rightarrow \ \exp\left[-\frac{\lambda}{2}(\hat{h} - u)^2\right]$$

Previous works

エネルギーで平衡状態を指定できる、
microcanonical よりも性質の良いもの

- Gaussian ensemble [Hetherington, 1987]
  エネルギフィルターのスムーズ化

$$\hat{\rho} \propto \Theta(u - \Delta u < \hat{h} \leq u) \ \Rightarrow \ \exp\left[-\frac{\lambda}{2}(\hat{h} - u)^2\right]$$

- mTPQ and smooth microcanonical ensemble [Sugiura and AS, 2012]
  フィルターの必要はない（結果的にフィルタリングされる）

$$\hat{\rho} \propto \left(l - \hat{h}\right)^{2k}$$

This work

これらを統一し、一般化して、

This work

これらを統一し、一般化して、

- 1. エネルギー密度のゆらぎが常に小さい
  $\Rightarrow$ 一次相転移領域も扱える
- 2. 取り扱いが容易
  $\Rightarrow$ 計算がしやすい

そんなアンサンブルの一群を導入し、

This work

これらを統一し、一般化して、

- 1. エネルギー密度のゆらぎが常に小さい
  $\Rightarrow$ 一次相転移領域も扱える
- 2. 取り扱いが容易
  $\Rightarrow$ 計算がしやすい

そんなアンサンブルの一群を導入し、

- 3. 種々の有用な公式を導く
  $\Rightarrow$ 高精度の分析が可能になる

- アンサンブル
- アンサンブルの非等価性
  - マクロ系
  - 有限サイズ系
- 問題点
- Previous works
- This work
- **Squeezed ensembles and TPQ states**
- パラメタ依存性
- 応用
- 統計力学量のアンサンブル依存性
- 応用
- まとめ

Squeezed ensembles and TPQ states

- 次の条件を満たす実関数 $\eta(u)$ を導入する:
  (A) 2階連続微分可能
  (B) 十分に強い凸性 s.t. $s_N - \eta$ が強上凸

- それを用いて定義する:

ensemble: $\hat{\rho}_N^\eta \equiv \dfrac{e^{-N\eta(\hat{h})}}{\mathrm{Tr}\left[e^{-N\eta(\hat{h})}\right]} \quad \left(\hat{h} \equiv \hat{H}/N\right)$

TPQ: $|\eta, N\rangle \equiv \sum_\nu z_\nu e^{-N\eta(\hat{h})/2}|\nu\rangle \quad \left(z_\nu \equiv \dfrac{x_\nu + iy_\nu}{\sqrt{2}}\right)$

熱力学関数: $\psi_N^\eta \equiv -\dfrac{1}{N}\log \mathrm{Tr}\left[e^{-N\eta(\hat{h})}\right]$

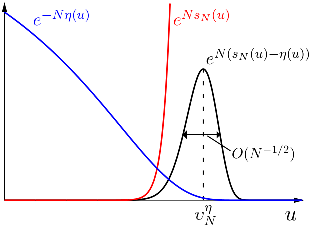
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



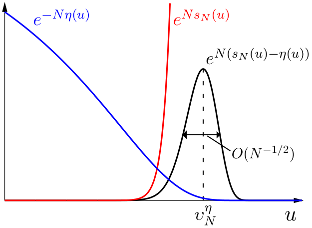
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



- エネルギー密度の分散

$$\frac{1}{N\left|s_N''(v_N^\eta)-\eta''(v_N^\eta)\right|}$$

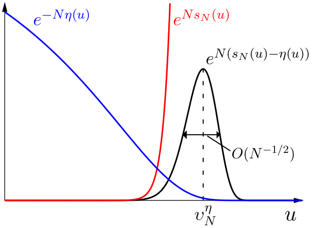
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



- エネルギー密度の分散

$$\frac{1}{N\left|s_N''(v_N^\eta) - \eta''(v_N^\eta)\right|} \xrightarrow{\text{1次相転移領域}} \frac{1}{N\left|\eta''(v_N^\eta)\right|} = O(N^{-1})$$

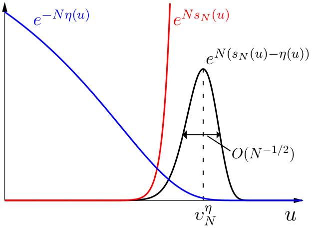
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



- エネルギー密度の分散

$$\frac{1}{N\left|s_N''(v_N^\eta)-\eta''(v_N^\eta)\right|} \xrightarrow{\text{1次相転移領域}} \frac{1}{N\left|\eta''(v_N^\eta)\right|} = O(N^{-1})$$

$\Rightarrow$ 1次相転移点領域でもゆらぎが $O(N^{-1/2})$

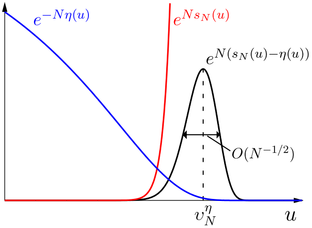
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



- 統計力学量の実用的な公式

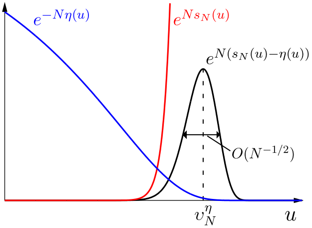
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



- 統計力学量の実用的な公式

  例: $\beta_N \equiv s_N{}'$

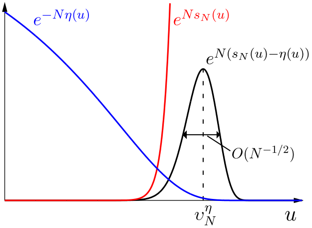
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim (\text{Gauss分布})$$

$\because\ s_N - \eta$ が強上凸



- 統計力学量の実用的な公式

例: $\beta_N \equiv s_N{}'$

$$u_N^\eta \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{h}\hat{\rho}_N^\eta\right]$$

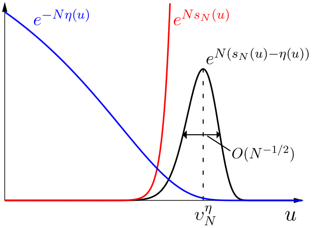
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because\ s_N - \eta$ が強上凸



- 統計力学量の実用的な公式

例: $\beta_N \equiv s_N{}'$

$$u_N^\eta \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{h}\hat{\rho}_N^\eta\right] = \underline{(\text{ピーク位置}v_N^\eta)} + O(N^{-1})$$

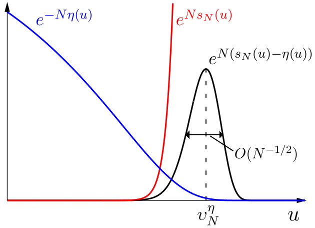
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim (\text{Gauss分布})$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



- 統計力学量の実用的な公式

例: $\beta_N \equiv s_N{}'$

$$u_N^\eta \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{h}\hat{\rho}_N^\eta\right] = \underbrace{(\text{ピーク位置}v_N^\eta)}_{s_N{}'-\eta'=0} + O(N^{-1})$$

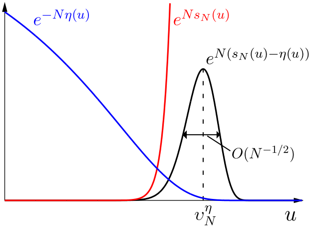
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



- 統計力学量の実用的な公式

例: $\beta_N \equiv {s_N}'$

$$u_N^\eta \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{h}\hat{\rho}_N^\eta\right] = \underbrace{(\text{ピーク位置}v_N^\eta)}_{{s_N}'-\eta'=0} + O(N^{-1})$$

$$\Rightarrow \beta_N(u_N^\eta) = \eta'(u_N^\eta) + O(N^{-1})$$

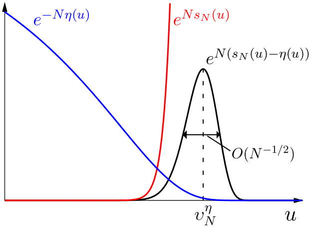
$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質

- エネルギー密度分布関数

$$\propto e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$\sim \text{(Gauss分布)}$$

$\because$ $s_N - \eta$ が強上凸



- 統計力学量の実用的な公式

例: $\beta_N \equiv s_N{}'$

$$u_N^\eta \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{h}\hat{\rho}_N^\eta\right] = \underbrace{(\text{ピーク位置}v_N^\eta)}_{s_N{}'-\eta'=0} + O(N^{-1})$$

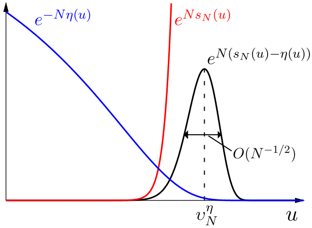
$$\Rightarrow \beta_N(u_N^\eta) = \eta'(u_N^\eta) + O(N^{-1})$$

$\Rightarrow$ u_N^η を計算するだけで β_N を得られる

ψ_N^η の性質

- 分配関数

$$= \int du \; e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

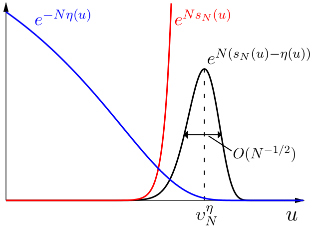


ψ_N^ηの性質

- 分配関数

$$= \int du\, e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$= e^{N(s_N(v_N^\eta)-\eta(v_N^\eta))+O(\log N)}$$

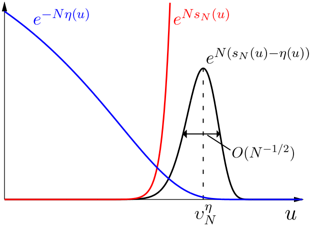


ψ_N^η の性質

- 分配関数

$$= \int du\ e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$= e^{N(s_N(v_N^\eta)-\eta(v_N^\eta))+O(\log N)}$$



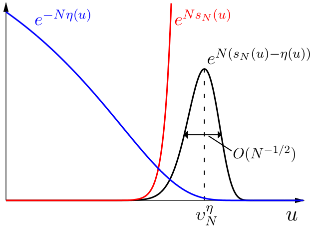
- 統計力学量の実用的な公式

ψ_N^ηの性質

- 分配関数

$$= \int du\, e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$= e^{N(s_N(v_N^\eta)-\eta(v_N^\eta))+O(\log N)}$$



- 統計力学量の実用的な公式

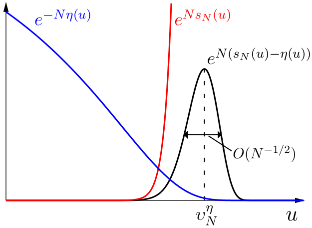
  例: s_N

ψ_N^η の性質

- 分配関数

$$= \int du\, e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$= e^{N(s_N(v_N^\eta)-\eta(v_N^\eta))+O(\log N)}$$



- 統計力学量の実用的な公式

  例: s_N

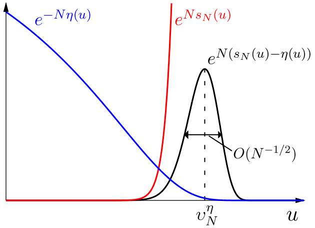
$$\psi_N^\eta = \eta(v_N^\eta) - s_N(v_N^\eta) + O(N^{-1}\log N)$$

ψ_N^η の性質

- 分配関数

$$= \int du\, e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$

$$= e^{N(s_N(v_N^\eta)-\eta(v_N^\eta))+O(\log N)}$$



- 統計力学量の実用的な公式

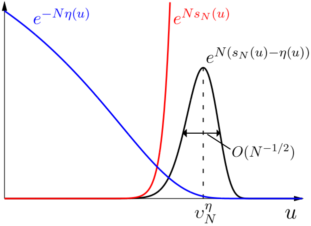
例: s_N

$$\psi_N^\eta = \eta(\underline{v_N^\eta}) - s_N(\underline{v_N^\eta}) + O(N^{-1}\log N)$$

ψ_N^η の性質

- 分配関数

$$= \int du\ e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$
$$= e^{N(s_N(v_N^\eta)-\eta(v_N^\eta))+O(\log N)}$$



- 統計力学量の実用的な公式

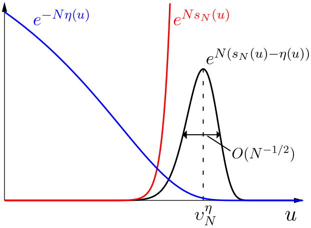
  例: s_N

$$\psi_N^\eta = \eta(\underline{v_N^\eta}) - s_N(\underline{v_N^\eta}) + O(N^{-1}\log N)$$
$$= u_N^\eta + O(N^{-1})$$

ψ_N^η の性質

- 分配関数

$$= \int du\, e^{N(s_N(u)-\eta(u))}$$
$$= e^{N(s_N(v_N^\eta)-\eta(v_N^\eta))+O(\log N)}$$



- 統計力学量の実用的な公式

例: s_N

$$\psi_N^\eta = \eta(\underline{v_N^\eta}) - s_N(\underline{v_N^\eta}) + O(N^{-1}\log N)$$
$$= u_N^\eta + O(N^{-1})$$

$$\Rightarrow s_N(u_N^\eta) = \eta(u_N^\eta) - \psi_N^\eta + O(N^{-1}\log N)$$

- アンサンブル
- アンサンブルの非等価性
    - マクロ系
    - 有限サイズ系
- 問題点
- Previous works
- This work
- Squeezed ensembles and TPQ states
- パラメタ依存性
- 応用
- 統計力学量のアンサンブル依存性
- 応用
- まとめ

スクイズドアンサンブルのパラメタ

- スクイズドアンサンブルが与える平衡状態はηに依存

スクイズドアンサンブルのパラメタ

- スクイズドアンサンブルが与える
  平衡状態は η に依存

$\Rightarrow$ η がパラメタに依存していると便利

スクイズドアンサンブルのパラメタ

- スクイズドアンサンブルが与える
  平衡状態は η に依存

$\Rightarrow$ η がパラメタに依存していると便利

$\Rightarrow$ η をパラメタ κ とエネルギー密度 u の
2 階連続微分可能な 2 変数関数 $\eta(\kappa, u)$ に

スクイズドアンサンブルのパラメタ

- スクイズドアンサンブルが与える
  平衡状態は η に依存

$\Rightarrow$ η がパラメタに依存していると便利

$\Rightarrow$ η をパラメタ κ とエネルギー密度 u の
2 階連続微分可能な 2 変数関数 $\eta(\kappa, u)$ に

それぞれの κ で
$\eta(\kappa, \cdot)$ がスクイズドアンサンブルを定める

$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質 (パラメタ依存性)

- エネルギー密度分布のピーク位置 υ_N^η は
  パラメタ κ について<u>連続</u>に変化

$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質 (パラメタ依存性)

- エネルギー密度分布のピーク位置 υ_N^η はパラメタ κ について<u>連続</u>に変化

$$\frac{\partial \upsilon_N^\eta}{\partial \kappa} = \frac{\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial \kappa \partial u}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}{\dfrac{d^2 s_N}{du^2}(\upsilon_N^\eta) - \dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}$$

$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質 (パラメタ依存性)

- エネルギー密度分布のピーク位置 υ_N^η はパラメタ κ について<u>連続</u>に変化

$$\frac{\partial \upsilon_N^\eta}{\partial \kappa} = \frac{\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial \kappa \partial u}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}{\dfrac{d^2 s_N}{du^2}(\upsilon_N^\eta) - \dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}$$

$$\xrightarrow{\text{1次相転移領域}} \frac{\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial \kappa \partial u}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}{\left| \dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2}(\kappa, \upsilon_N^\eta) \right|} = (\text{有限})$$

$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質 (パラメタ依存性)

- エネルギー密度分布のピーク位置 υ_N^η は パラメタ κ について連続に変化

$$\frac{\partial \upsilon_N^\eta}{\partial \kappa} = \frac{\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial \kappa \partial u}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}{\dfrac{d^2 s_N}{du^2}(\upsilon_N^\eta) - \dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}$$

$$\xrightarrow{\text{1次相転移領域}} \frac{\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial \kappa \partial u}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}{\left|\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2}(\kappa, \upsilon_N^\eta)\right|} = (\text{有限})$$

$\Rightarrow$ 1 次相転移領域でも平衡状態が連続に変化

$\hat{\rho}_N^\eta$ の性質 (パラメタ依存性)

- エネルギー密度分布のピーク位置 υ_N^η はパラメタ κ について連続に変化

$$\frac{\partial \upsilon_N^\eta}{\partial \kappa} = \frac{\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial \kappa \partial u}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}{\dfrac{d^2 s_N}{du^2}(\upsilon_N^\eta) - \dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}$$

$$\xrightarrow{\text{1次相転移領域}} \frac{\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial \kappa \partial u}(\kappa, \upsilon_N^\eta)}{\left|\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2}(\kappa, \upsilon_N^\eta)\right|} = (\text{有限})$$

$\Rightarrow$ 1次相転移領域でも平衡状態が連続に変化

$\Rightarrow$ 相転移領域のすべての状態を得られる

ψ_N^η の性質 (パラメタ依存性)

- スクイズドアンサンブルの熱力学関数 ψ_∞^η はミクロカノニカルの熱力学関数 s と等価

$$\psi_\infty^\eta(\kappa) = \inf_u \{\eta(\kappa, u) - s(u)\}$$

$$s(u) = \inf_\kappa \{\eta(\kappa, u) - \psi_\infty^\eta(\kappa)\}$$

ψ_N^η の性質 (パラメタ依存性)

- スクイズドアンサンブルの熱力学関数 ψ_∞^η は ミクロカノニカルの熱力学関数 s と等価

$$\psi_\infty^\eta(\kappa) = \inf_u \{\eta(\kappa, u) - s(u)\}$$

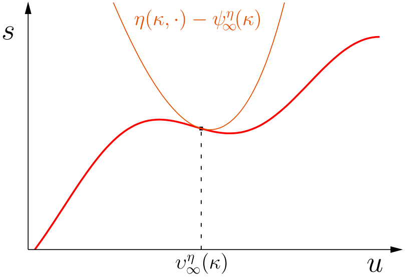
$$s(u) = \inf_\kappa \{\eta(\kappa, u) - \psi_\infty^\eta(\kappa)\}$$

ψ_N^η の性質 (パラメタ依存性)

- スクイズドアンサンブルの熱力学関数 ψ_∞^η はミクロカノニカルの熱力学関数 s と等価

$$\psi_\infty^\eta(\kappa) = \inf_u \{\eta(\kappa, u) - s(u)\}$$

$$s(u) = \inf_\kappa \{\eta(\kappa, u) - \psi_\infty^\eta(\kappa)\}$$

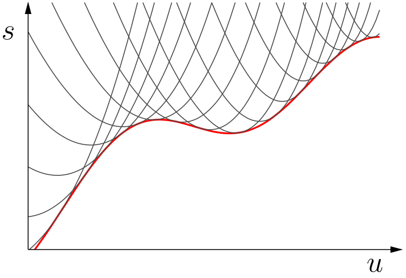


ψ_N^η の性質 (パラメタ依存性)

- スクイズドアンサンブルの熱力学関数 ψ_∞^η は ミクロカノニカルの熱力学関数 s と等価

$$\psi_\infty^\eta(\kappa) = \inf_u \{\eta(\kappa, u) - s(u)\}$$

$$s(u) = \inf_\kappa \{\eta(\kappa, u) - \psi_\infty^\eta(\kappa)\}$$

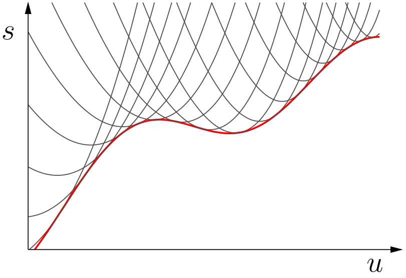


ψ_N^η の性質 (パラメタ依存性)

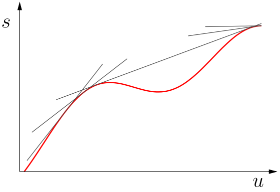
- スクイズドアンサンブルの熱力学関数 ψ_∞^η は ミクロカノニカルの熱力学関数 s と等価

$$\psi_\infty^\eta(\kappa) = \inf_u \{\eta(\kappa, u) - s(u)\}$$

$$s(u) = \inf_\kappa \{\eta(\kappa, u) - \psi_\infty^\eta(\kappa)\}$$



Legendre変換

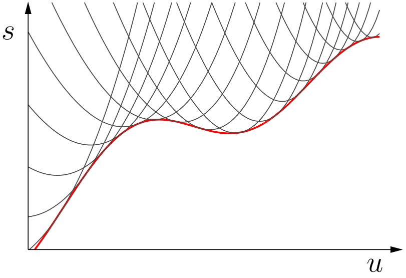


ψ_N^η の性質 (パラメタ依存性)

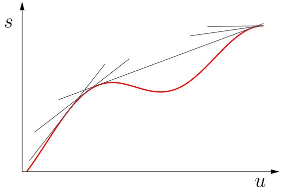
- スクイズドアンサンブルの熱力学関数 ψ_∞^η は ミクロカノニカルの熱力学関数 s と等価

$$\psi_\infty^\eta(\kappa) = \inf_u \{\eta(\kappa, u) - s(u)\}$$

$$s(u) = \inf_\kappa \{\eta(\kappa, u) - \psi_\infty^\eta(\kappa)\}$$



Legendre 変換



s の凸性に関係なく ψ_∞^η だけから s がわかる

アンサンブル
アンサンブルの非等価性
マクロ系
有限サイズ系
問題点
Previous works
This work
Squeezed ensembles and TPQ states
パラメタ依存性
応用
統計力学量のアンサンブル依存性
応用
まとめ

応用:Frustrated Ising模型

- 2次元正方格子上の古典スピン系

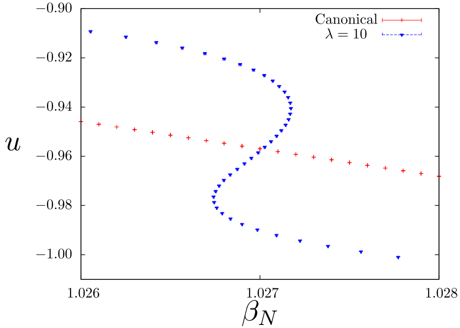
$$\hat{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z + g \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z \qquad (g = 0.6)$$

- 周期的境界条件
- $N = 64 \times 64$
- $\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2} = \lambda\ (\text{const.})$

$$\Rightarrow \eta = \frac{1}{2}\lambda(u - \kappa)^2$$

[Hetherington (1987)]

- レプリカ交換法



負の比熱の予言・転移点や潜熱の外挿・
直接的な相転移の検出や次数の決定が可能に

アンサンブル
アンサンブルの非等価性
- マクロ系
- 有限サイズ系
問題点
Previous works
This work
Squeezed ensembles and TPQ states
パラメタ依存性
応用
統計力学量のアンサンブル依存性
応用
まとめ

統計力学量のアンサンブル依存性

有限サイズ系で統計力学量は非等価
$\Rightarrow$ 目的に応じて適切な統計力学量を選択

統計力学量のアンサンブル依存性

有限サイズ系で統計力学量は非等価
$\Rightarrow$ 目的に応じて適切な統計力学量を選択

- 不十分な点:

統計力学量のアンサンブル依存性

有限サイズ系で統計力学量は非等価
$\Rightarrow$ 目的に応じて適切な統計力学量を選択

- 不十分な点:
  1. スクイズドアンサンブルの統計力学量と計算したい統計力学量の絶対的な差が不明

統計力学量のアンサンブル依存性

有限サイズ系で統計力学量は非等価
$\Rightarrow$ 目的に応じて適切な統計力学量を選択

- 不十分な点:
    1. スクイズドアンサンブルの統計力学量と計算したい統計力学量の絶対的な差が不明
        - ▷ 統計力学量間の差を精密に評価したい

統計力学量のアンサンブル依存性

有限サイズ系で統計力学量は非等価
$\Rightarrow$ 目的に応じて適切な統計力学量を選択

- 不十分な点:
  1. スクイズドアンサンブルの統計力学量と計算したい統計力学量の絶対的な差が不明
     - ▷ 統計力学量間の差を精密に評価したい
  2. 適切な統計力学量を与えるアンサンブルが実用的とは限らない

統計力学量のアンサンブル依存性

有限サイズ系で統計力学量は非等価
$\Rightarrow$ 目的に応じて適切な統計力学量を選択

- 不十分な点:
  1. スクイズドアンサンブルの統計力学量と計算したい統計力学量の絶対的な差が不明
     - ▷ 統計力学量間の差を精密に評価したい
  2. 適切な統計力学量を与えるアンサンブルが実用的とは限らない
     - ▷ 特定の統計力学量を数値計算に適した別のアンサンブルを用いて計算したい

統計力学量のアンサンブル依存性

有限サイズ系で統計力学量は非等価
$\Rightarrow$ 目的に応じて適切な統計力学量を選択

- 不十分な点:
  1. スクイズドアンサンブルの統計力学量と計算したい統計力学量の絶対的な差が不明
     - ▷ 統計力学量間の差を精密に評価したい
  2. 適切な統計力学量を与えるアンサンブルが実用的とは限らない
     - ▷ 特定の統計力学量を数値計算に適した別のアンサンブルを用いて計算したい

$\Rightarrow$ 統計力学量をより精密に評価

統計力学量のアンサンブル依存性

有限サイズ系で統計力学量は非等価
⇒ 目的に応じて適切な統計力学量を選択

- 不十分な点:
  1. スクイズドアンサンブルの統計力学量と計算したい統計力学量の絶対的な差が不明
     ▷ 統計力学量間の差を精密に評価したい
  2. 適切な統計力学量を与えるアンサンブルが実用的とは限らない
     ▷ 特定の統計力学量を数値計算に適した別のアンサンブルを用いて計算したい

⇒ 統計力学量をより精密に評価

⇒ アンサンブル依存性の評価・補正が可能に

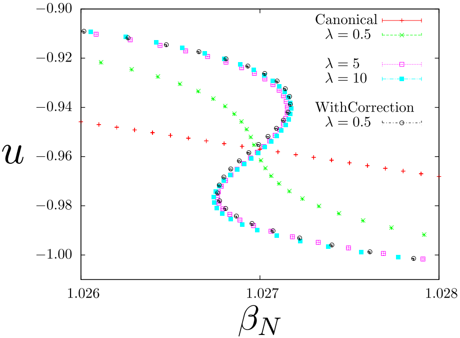
アンサンブル
アンサンブルの非等価性
- マクロ系
- 有限サイズ系
問題点
Previous works
This work
Squeezed ensembles and TPQ states
パラメタ依存性
応用
統計力学量のアンサンブル依存性
応用
まとめ

応用:Frustrated Ising模型

- 周期的境界条件
- $N = 64 \times 64$
- $\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2} = \lambda$ (const.)

$$\Rightarrow \eta = \frac{1}{2}\lambda(u-\kappa)^2$$

[Hetherington (1987)]



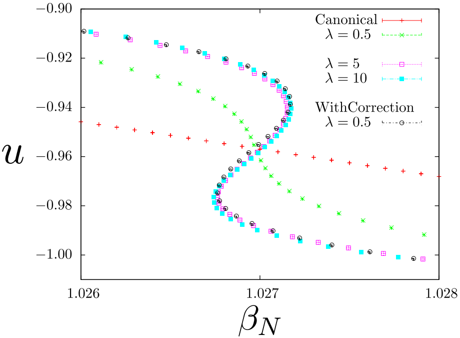
応用:Frustrated Ising模型

- β_N を精度よく計算したい

- 周期的境界条件
- $N = 64 \times 64$
- $\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2} = \lambda$ (const.)

$$\Rightarrow \eta = \frac{1}{2}\lambda(u-\kappa)^2$$

[Hetherington (1987)]



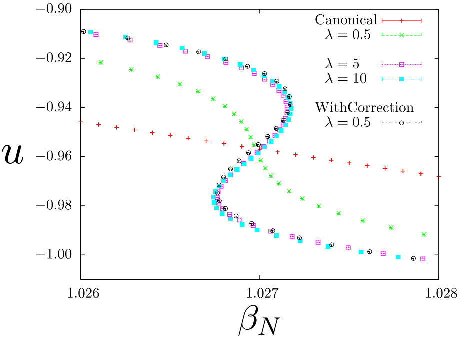
応用:Frustrated Ising模型

- β_N を精度よく計算したい
  η の凸性強: u_N^η と v_N^η が近い $\Rightarrow$ 精度のよい β_N

- 周期的境界条件
- $N = 64 \times 64$
- $\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2} = \lambda$ (const.)

$$\Rightarrow \eta = \frac{1}{2}\lambda(u-\kappa)^2$$

[Hetherington (1987)]



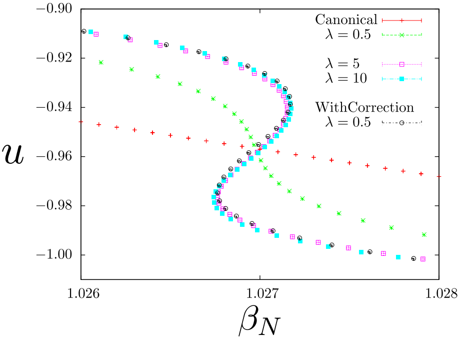
応用:Frustrated Ising模型

- β_N を精度よく計算したい
  η の凸性強: u_N^η と v_N^η が近い $\Rightarrow$ 精度のよい β_N
  η の凸性弱: モンテカルロ計算の効率がよい

- 周期的境界条件
- $N = 64 \times 64$
- $\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2} = \lambda$ (const.)

$$\Rightarrow \eta = \frac{1}{2}\lambda(u-\kappa)^2$$

[Hetherington (1987)]



応用:Frustrated Ising 模型

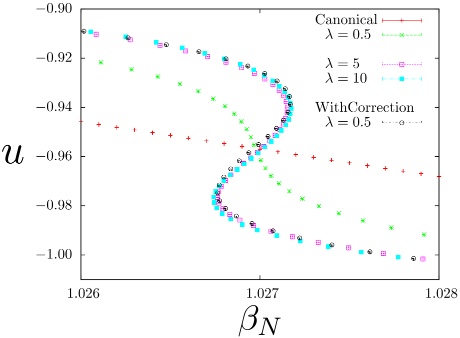
- β_N を精度よく計算したい
  η の凸性強: u_N^η と v_N^η が近い $\Rightarrow$ 精度のよい β_N
  η の凸性弱: モンテカルロ計算の効率がよい

$\Rightarrow$ 導いた補正公式を用いて
凸性が強い η のアンサンブルの統計力学量を
凸性が弱い η のアンサンブルを用いて計算

- 周期的境界条件
- $N = 64 \times 64$
- $\dfrac{\partial^2 \eta}{\partial u^2} = \lambda$ (const.)

$$\Rightarrow \eta = \frac{1}{2}\lambda(u-\kappa)^2$$

[Hetherington (1987)]



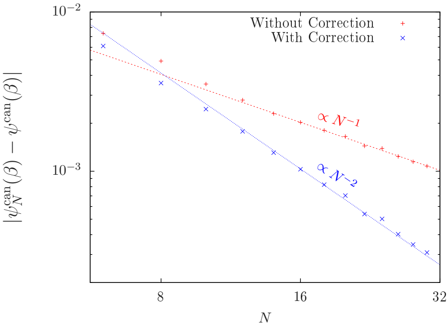
応用:Heisenberg模型

- 1次元量子スピン系

$$\hat{H} = -\sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1}$$

- 周期的境界条件
- $\eta = -2\kappa \log(l-u)$

[Sugiura et al. (2012)]



応用:Heisenberg模型

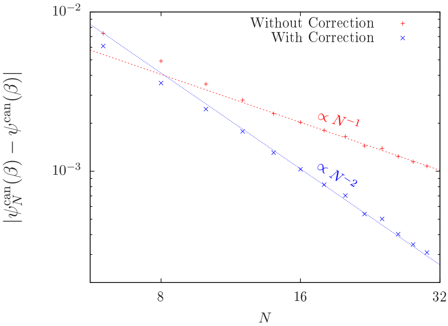
- 熱力学極限での結果を精度よく計算したい

- 1次元量子スピン系

$$\hat{H} = -\sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1}$$

- 周期的境界条件
- $\eta = -2\kappa \log(l - u)$

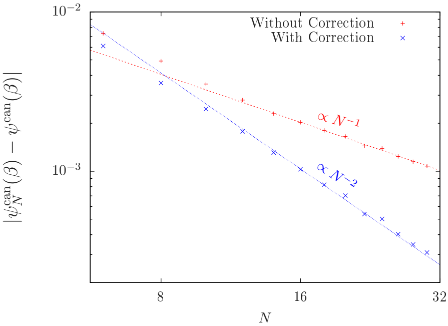
[Sugiura et al. (2012)]



応用:Heisenberg模型

- 熱力学極限での結果を精度よく計算したい
  カノニカル: 熱力学極限に速く収束 [Iyer et al. (2015)]

- 1次元量子スピン系
  $$\hat{H} = -\sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1}$$
- 周期的境界条件
- $\eta = -2\kappa \log(l-u)$
  [Sugiura et al. (2012)]



応用:Heisenberg模型

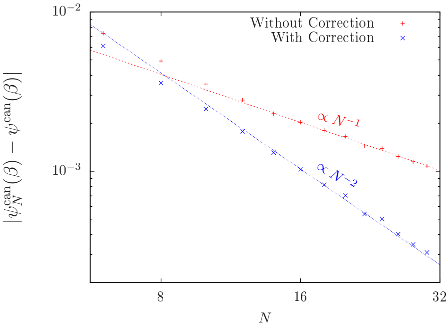
- 熱力学極限での結果を精度よく計算したい
  カノニカル: 熱力学極限に速く収束 [Iyer et al. (2015)]
  スクイズド: より少ない計算資源で構成できる

- 1次元量子スピン系

$$\hat{H} = -\sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1}$$

- 周期的境界条件
- $\eta = -2\kappa \log(l - u)$

[Sugiura et al. (2012)]



応用:Heisenberg模型

- 熱力学極限での結果を精度よく計算したい
  カノニカル: 熱力学極限に速く収束 [Iyer et al. (2015)]
  スクイズド: より少ない計算資源で構成できる

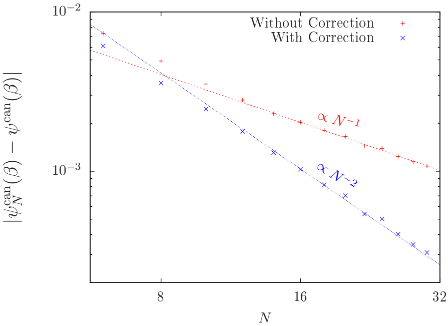
$\Rightarrow$ 導いた補正公式を用いて
カノニカルアンサンブルの統計力学量を
スクイズドアンサンブルを用いて計算

- 1次元量子スピン系

$$\hat{H} = -\sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1}$$

- 周期的境界条件
- $\eta = -2\kappa \log(l-u)$

[Sugiura et al. (2012)]



- アンサンブル
- アンサンブルの非等価性
    - マクロ系
    - 有限サイズ系
- 問題点
- Previous works
- This work
- Squeezed ensembles and TPQ states
- パラメタ依存性
- 応用
- 統計力学量のアンサンブル依存性
- 応用
- まとめ

まとめ

- 1 次相転移を示す系を扱うときは
  適切なアンサンブルの選択が重要
- スクイズドアンサンブル
  - ▷ ゆらぎは常に $O(N^{-1/2})$
  - ▷ 転移領域の平衡状態を与える
  - ▷ エントロピーと等価な熱力学関数を与える
  - ▷ 実用上も有用
    - ♢ 構成が容易
    - ♢ 統計力学量を与える実用的な公式
    - ♢ 既存のものを含む異なるアンサンブルの
      与える統計力学量を関係させる公式
    - ♢ 既存の数値計算の手法を適用可能

η の条件

- $\eta(\kappa, u)$ の条件:
  (A) 2 階連続微分可能
  (B) u について十分に強い凸性を持つ
  ($s_N - \eta(\kappa, \cdot)$ の 2 階微分が負)
  (C) $\inf_{\kappa} u_N^{\eta}(\kappa) = \lim_{\beta \to \infty} u_N^{\mathrm{can}}(\beta)$
  $\sup_{\kappa} u_N^{\eta}(\kappa) = \lim_{\beta \to 0} u_N^{\mathrm{can}}(\beta)$

統計力学量の精密な評価

$\xi_N^\eta \equiv \sigma_N - \eta$ として、

$$\psi_N^\eta = -\xi_N(v_N^\eta) - \frac{1}{2N}\log\frac{2\pi}{N|{\xi_N^\eta}''(v_N^\eta)|} + O(N^{-2})$$

$$u_N^\eta = v_N^\eta + \frac{{\xi_N^\eta}'''(v_N^\eta)}{2N\left|{\xi_N^\eta}''(v_N^\eta)\right|^2} + O(N^{-2})$$

ξ_N^η の導関数の v_N^η での値はモーメントから得る。

$$\begin{aligned}{\xi_N^\eta}''(v_N^\eta) &= -N^{-1}\mathrm{Tr}\left[\left(\hat{h} - u_N^\eta\right)^2 \hat{\rho}_N^\eta\right]^{-1} + O(N^{-1}) \\ &\vdots\end{aligned}$$

負の比熱の実験的な実現

s_N の凸性の破れに起因する負の比熱は
実験的にも実現可能

負の比熱の実験的な実現

s_N の凸性の破れに起因する負の比熱は
実験的にも実現可能

- 平衡状態の実現
  1. エネルギーを (近似的に) 保存する系
  2. エネルギーがよく定まった初期状態

  を用意し、十分に時間発展させる
  $\Rightarrow$ 初期状態と同じエネルギーの平衡状態に

初期状態のエネルギーを調整することで
負の比熱を示す領域の平衡状態を実現可能

負の比熱の実験的な実現

s_N の凸性の破れに起因する負の比熱は
実験的にも実現可能

- 統計力学量の測定
  例: β_N
  系を小さな温度計と弱く熱接触させる
  $\Rightarrow$ 温度計は $\beta = \beta_N$ の Gibbs 状態に

温度計のエネルギーを測定することで
負の比熱を示す領域でも統計力学量を測定可能

小さな温度計

温度計として用いる外部系の

自由度を M、$\dfrac{1}{M}\log$(状態数密度) を t_M として

- 小さな

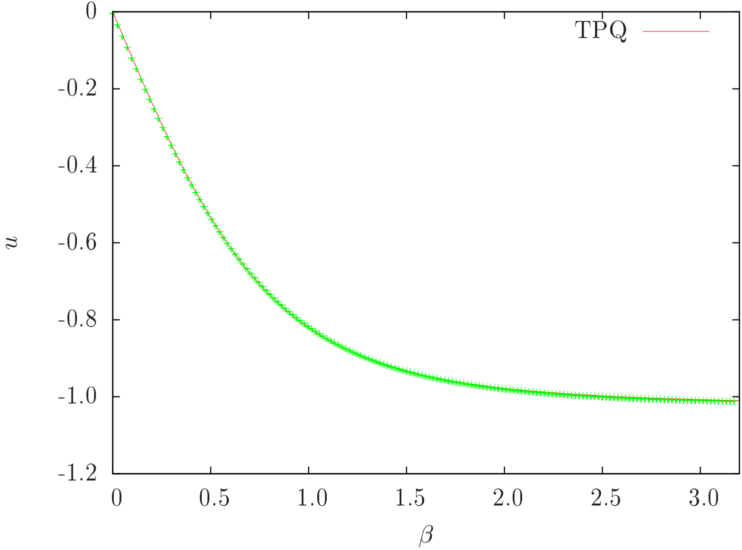
  着目系に導入するエネルギーゆらぎが小さい

$$\frac{|s_N''|}{N} \times \sqrt{\frac{M}{|t_M''|}} \ll (\text{許容する } \beta_N \text{ の測定誤差})$$

- 温度計

  β と u_M^{can} の関係がよく分かっている系

応用:横磁場Ising模型



応用:横磁場Ising模型