TPQ 法に関するノート

2018 年 2 月 23 日

1　$\mathcal{H}\Phi$ の mTPQ の物理量から cTPQ の物理量を計算する

$\mathcal{H}\Phi$ では熱的量子純粋 (TPQ) 状態を用いた有限温度計算を行うことができる．特に $\mathcal{H}\Phi$ で用いられているのは microcanonical TPQ(mTPQ) と呼ばれるもので,$|0\rangle$ を初期状態として,

$$|k\rangle = (l - \mathcal{H}/N)^k |0\rangle$$

によって量子力学的な期待値を計算すると有限温度の物理量を計算することができる．ただしこのとき求ま“温度”

$$\beta_k = \frac{2k}{N}\left(l - \frac{\langle\mathcal{H}\rangle_{k,N}}{N}\right)^{-1}$$

は熱力学極限で通常の温度と一致する物理量であるものの, 有限の N での mTPQ 計算結果は有限の N での canonical ensemble の計算結果と一致するわけではない.

A が Hamiltonian と交換する場合 ($[\mathcal{H}, A] = 0$) 以下の公式で mTPQ で計算した物理量から cTPQ での熱力学的期待値を計算することができる:

$$\langle\beta, N|A|\beta, N\rangle = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\langle k|A|k\rangle + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k+1}}{(2k+1)!}\langle k|A|k+1\rangle .$$

有限の N での cTPQ 計算結果は有限の N での canonical ensemble の計算結果と一致する.

ここで比熱

$$C = \frac{\langle\mathcal{H}^2\rangle - \langle\mathcal{H}\rangle^2}{k_{\mathrm{B}}T^2}$$

や磁化率

$$\chi = \frac{\langle S_z^2\rangle - \langle S_z\rangle^2}{k_{\mathrm{B}}T}$$

を $\mathcal{H}\Phi$ の出力から計算したい.$\mathcal{H}, \mathcal{H}^2$ は Hamiltonian と交換する．また S_z, S_z^2 は Hamiltonian と交換すると仮定する．よって上述の公式を用いることで比熱と磁化率が計算できることになるが, $\mathcal{H}\Phi$ が吐き出すのは $\{|k\rangle\}$ での行列表示としてみたときの対角項 (すなわち $\langle k|A|k\rangle$) のみであり非対角項 ($\langle k|A|k+1\rangle$) は出力されない．しかしながら $|k+1\rangle = (l - \mathcal{H}/N)|k\rangle$ を用いて書き直すことで非対角項を対角項で表すことができる．したがって $\mathcal{H}\Phi$ が出力する mTPQ の物理量から cTPQ の物理量を計算することは可能である.

公式に必要になる非対角項を書き直すと,

$$
\begin{aligned}
\langle k|k+1\rangle &= \langle k|\left(l-\mathcal{H}/N\right)|k\rangle \\
&= l\langle k|k\rangle - \frac{1}{N}\langle k|\mathcal{H}|k\rangle \\
\langle k|\mathcal{H}|k+1\rangle &= \langle k|\mathcal{H}\left(l-\mathcal{H}/N\right)|k\rangle \\
&= l\langle k|\mathcal{H}|k\rangle - \frac{1}{N}\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle \\
\langle k|\mathcal{H}^2|k+1\rangle &= \langle k+1|\mathcal{H}\left(lN|k\rangle - N|k+1\rangle\right) \\
&= lN\langle k+1|\mathcal{H}|k\rangle - N\langle k+1|\mathcal{H}|k+1\rangle \\
&= lN\left(l\langle k|\mathcal{H}|k\rangle - \frac{1}{N}\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle\right) - N\langle k+1|\mathcal{H}|k+1\rangle \\
&= l^2N\langle k|\mathcal{H}|k\rangle - l\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle - N\langle k+1|\mathcal{H}|k+1\rangle
\end{aligned}
$$

となる. したがって

$$
\begin{aligned}
\langle \beta,N|\beta,N\rangle &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\langle k|k\rangle + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k+1}}{(2k+1)!}\langle k|k+1\rangle \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\langle k|k\rangle + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k+1}}{(2k+1)!}(l\langle k|k\rangle - \frac{1}{N}\langle k|\mathcal{H}|k\rangle) \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\left(\left(1+\frac{l\beta N}{2k+1}\right)\langle k|k\rangle - \frac{\beta}{2k+1}\langle k|\mathcal{H}|k\rangle)\right) \\
\langle \beta,N|\mathcal{H}|\beta,N\rangle &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\langle k|\mathcal{H}|k\rangle + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k+1}}{(2k+1)!}\langle k|\mathcal{H}|k+1\rangle \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\langle k|\mathcal{H}|k\rangle + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k+1}}{(2k+1)!}\left(l\langle k|\mathcal{H}|k\rangle - \frac{1}{N}\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle\right) \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\left(\left(1+\frac{l\beta N}{2k+1}\right)\langle k|\mathcal{H}|k\rangle - \frac{\beta}{2k+1}\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle)\right) \\
\langle \beta,N|\mathcal{H}^2|\beta,N\rangle &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k+1}}{(2k+1)!}\langle k|\mathcal{H}^2|k+1\rangle \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k+1}}{(2k+1)!}(l^2N\langle k|\mathcal{H}|k\rangle - l\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle - N\langle k+1|\mathcal{H}|k+1\rangle) \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\beta N)^{2k}}{(2k)!}\left(\left(1-\frac{l\beta N}{2k+1}\right)\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle + \frac{l^2\beta N^2}{2k+1}\langle k|\mathcal{H}|k\rangle - \frac{\beta N^2}{2k+1}\langle k+1|\mathcal{H}|k+1\rangle\right)
\end{aligned}
$$

となり, 比熱が計算できる.

1.1 $\mathcal{H}\Phi$ の出力結果に関する注意

$\mathcal{H}\Phi$ は $\langle k|\mathcal{H}|k\rangle / \langle k|k\rangle$, $\langle k|\mathcal{H}^2|k\rangle / \langle k|k\rangle$ を SS_rand.dat に,norm $\sqrt{\langle\tilde{k}|\tilde{k}\rangle}$ を Norm_rand.dat に出力する. norm に関して注意が必要で, 初期状態を除いて前の状態からの相対 norm を出力している. というのは $\mathcal{H}\Phi$ は mTPQ state を

$$
|\widetilde{k+1}\rangle = \frac{(l-\mathcal{H}/N)|\tilde{k}\rangle}{\sqrt{\langle\tilde{k}|\tilde{k}\rangle}}
$$

の形で保持している. したがって cTPQ に用いる絶対 norm の値を知るには

$$\langle \tilde{k} | \tilde{k} \rangle = \frac{\langle 0 | \left(l - \mathcal{H}/N \right)^{2k} | 0 \rangle}{\langle \widetilde{k-1} | \widetilde{k-1} \rangle !}$$
$$\langle k | k \rangle = \langle \tilde{k} | \tilde{k} \rangle !.$$

を求めなければならない. ただし $\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle = \langle 0 | 0 \rangle$.

2 Bootstrap 法について

TPQ 計算では初期条件を複数回取り直して統計平均を取り誤差を評価する. その際に, 物理量の形が $\langle \mathrm{TPQ} | \mathcal{O} | \mathrm{TPQ} \rangle \,/\, \langle \mathrm{TPQ} | \mathrm{TPQ} \rangle$ という分数であるために, 通常の誤差伝播則では標準誤差が計算できない. [*1] その代わりとして Bootstrap 法を用いて標準誤差を計算する.

2.1 Bootstrap 法の algorithm

異なる初期条件で N 回計算した物理量の組 $\{\mathcal{O}_1\}, ..., \{\mathcal{O}_N\}$ があるとする.

1. N 組の物理量から重複を許して B 個 randam に選び出し,bootstrap 標本 $\{\mathcal{O}_1\}, ..., \{\mathcal{O}_B\}$ を作成する.
2. 1. で選んだ $\{\mathcal{O}_1\}, ..., \{\mathcal{O}_B\}$ から bootstrap 平均 $\{[\mathcal{O}]_{\mathrm{btstrp}}\}$ を計算する.:

$$[\mathcal{O}]_{\mathrm{btstrp}} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} \mathcal{O}_b.$$

3. 以上の操作を P 回繰り返して求めたい物理量 $f\left(\{[\mathcal{O}]_{\mathrm{btstrp}}\}\right)$ の histogram を作成する. [*2]

以上の操作で求まった $f\left(\{[\mathcal{O}]_{\mathrm{btstrp}}\}\right)$ の histogram を物理量 $f\left(\{\mathcal{O}\}\right)$ の分布函数だと近似する. したがって, 物理量 $f\left(\{\mathcal{O}\}\right)$ の平均値 $[f]_{\mathrm{ave}}$ と標準誤差 $[f]_{\mathrm{std}}$ は

$$[f]_{\mathrm{ave}} = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^{P} f\left(\{[\mathcal{O}]^{(p)}_{\mathrm{btstrp}}\} \right)$$
$$[f]_{\mathrm{std}} = \frac{1}{P-1} \sum_{p=1}^{P} \left(f^2 \left(\{[\mathcal{O}]^{(p)}_{\mathrm{btstrp}}\} \right) - [f]^2_{\mathrm{ave}} \right)$$

である.

[*1] 変数が独立でない場合誤差伝播則は適用できない.
[*2] f としては分数 $f = \mathcal{A}/\mathcal{B}$ がよく出てくる.