

POGLAVJE V: Matrično-produktni nastavki in učinkovite simulacije mnogo-delčnih problemov v eni dimenziji (aka metode DMRG)

V tem poglavju se bomo posvetili glavnim idejam učinkovite simulacije kvantne in statistične dinamike mnogodelčnih kvantnih sistemov v eni dimenziji.

Razlogov, zakaj je fizika v $1 + 1$ dimenziji bistveno bolj preprosta kot v $3 + 1$ dimenzijah je veliko. Eden glavnih je npr. obstoj renormalizacije s konformno teorijo polja, ki je mogoč samo v $1 + 1 = 2$ dimenzijah. S tem povezane so omejitve naraščanja entropije prepletenosti med dvema podsistemoma v eni dimenziji, ki so neposredno povezane s simulabilnostjo preko koncepta Matrično-produktnega nastavka. Matrično-produktni nastavek je tudi sicer eden najuporabnejših nastavkov pri računskih metodah v kvantni in statistični fiziki v eni dimenziji. Ima tudi naravne posplošitve na več dimenzij, t.i. tenzorske mreže, vendar njihova uporabnost zaenkrat še ni bila prepričljivo demonstrirana.

Glavna prednost metod, ki temeljijo na MPA (Matrix-product ansatz, angl., matrično produktni nastavek) pred Monte-Carlo metodami je zmožnost učinkovite simulacije časovno odvisnih in neravnovesnih fizikalnih pojavov, kot npr. transporta, odzivov na nenadne pulze, ipd.

Diskusija MPA v kvantnih verigah je tesno povezana z analognimi koncepti v klasičnih mnogodelčnih Markovskih (stohastičnih) procesih, t.i. asimetričnih preprostih izključitvenih procesih (ASEP, angl, asymmetric simple exclusion process). V daljšem uvodu se bomo zato sprehodili preko različnih povezanih konceptov iz kvantne in klasične fizike in jih na koncu združili v elemente kompaktnega algoritma za simulacijo časovnega razvoja.

1 Kvantne mreže in prepletenost

Naj bo Λ neka regularna mreža točk (končna ali neskončna). Če je končna, naj $|\Lambda|$ označuje število njenih točk. Običajno npr.

$$\Lambda = \mathbb{Z}, \mathbb{Z}_n, \{1, 2, \dots, n\}, \mathbb{Z}^2, \dots$$

Vsaki točki $x \in \Lambda$ priredimo d -dimenzionalen Hilbertov prostor

$$\mathcal{H}_x \simeq \mathbb{C}^d.$$

Takšen mnogodelčni sistem si lahko predstavljamo kot mrežo kvantnih spinov $j = (d-1)/2$, ali pa bolj abstraktnih končno-nivojskih razločljivih kvantnih delcev. V eni dimenziji tudi sistem nerazkočljivih fermionov lahko preslikamo na sistem razločljivih spinov $1/2$ preko znane Wigner-Jordanove transformacije.

Hilbertov prostor celotne kvantne mreže je tedaj

$$\mathcal{H}_\Lambda = \bigotimes_{x \in \Lambda} \mathcal{H}_x \simeq \mathbb{C}^{\otimes |\Lambda|}. \quad (1)$$

Mnogodelčno valovno funkcijo predstavimo v naravni ('računski') bazi kot

$$|\psi\rangle = \sum_{(s_1, s_2, \dots, s_{|\Lambda|}) \in \{0, \dots, d-1\}^{|\Lambda|}} \psi_{s_1, s_2, \dots, s_{|\Lambda|}} |s_1, s_2, \dots, s_{|\Lambda|}\rangle. \quad (2)$$

Npr. za qubitno verigo, oz. verigo n spinov $1/2$, vzamemo $d = 2$, $\Lambda = \mathbb{Z}_n$.

1.1 Reduciran gostotni operator in delna sled

Razdelimo kvantno mrežo na dva disjunktna dela, $\Lambda = A \cup B$, $A \cap B = \emptyset$. Paru (A, B) bomo rekli tudi *bi-particija* mreže Λ . Ustrezno razdelimo Hilbertov prostor kvantne mreže na teznorski produkt

$$\mathcal{H}_\Lambda = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (3)$$

Označimo z $\underline{s}_A = (s_1, s_2, \dots, s_{|A|})$ in $\underline{s}_B = (s_1, s_2, \dots, s_{|B|})$, $s_j \in \{0, \dots, d-1\}$, računski bazi v blokkih A in B . Delna sled opazljivke M nad prostorom A , ki jo označimo kot $\text{tr}_A M$, je operator nad \mathcal{H}_B

$$\text{tr}_A M = \sum_{\underline{s}_B, \underline{s}'_B} \left(\sum_{\underline{s}_A} \langle \underline{s}_A, \underline{s}_B | M | \underline{s}_A, \underline{s}'_B \rangle \right) |\underline{s}_B\rangle \langle \underline{s}'_B|. \quad (4)$$

Reduciran gostotni operator začisto mnogodelčno stanje nad Hilbertovim prostornim celotne kvantne mreže (2) definiramo kot

$$\rho_B = \text{tr}_A |\psi\rangle\langle\psi| \quad (5)$$

in podobno za komplement

$$\rho_A = \text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (6)$$

Mnogodelčno stanje pravimo, da je *prepleteno* (entangled), če stanji reduciran gostotni operator ρ_A ni čisto stanje, torej, če $\text{tr}\rho_A^2 < 1$.

V splošnem definiramo entropijo prepletenosti, kot mero za prepletenost oz. kvantne korelacije med področjema A in B , ki je kar Von Neumannova entropija reduciranega gostotnega operatorja:

$$E(|\psi\rangle) = S(\rho_A) = S(\rho_B), \quad S(\rho) := -\text{tr}\rho \log \rho. \quad (7)$$

V drugem enačaju se skriva Lieb-Arakijev izrek, ki pravi, da sta spektra reduciranih gostotnih operatorjev ρ_A in ρ_B identična, razen morda večkratnosti lastne vrednosti nič.

K dokazu tega izreka nam pomaga koncept Schmidtovega razcepa.

1.2 Schmidtov razcep

Vsako mnogodelčno stanje $|\psi\rangle$ (2) lahko razcepimo na vsoto produktov mnogodelčnih stanj iz A in iz B

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu=1}^M \lambda_{\mu} |\phi_{\mu}\rangle_A \otimes |\chi_{\mu}\rangle_B. \quad (8)$$

Celoštevilski indeks M predstavlja minimalno število členov v tej vsoti in se imenuje *Schmidtov rank* stanja $|\psi\rangle$ glede na *bi-particijo* (A, B) . Če stanje predstavimo kar v računski bazi (2), takoj vidimo, da je M omejen z dimenzijo manjšega od Hilbertovih prostorov

$$M \leq \min\{d^{|A|}, d^{|B|}\}. \quad (9)$$

Če zahtevamo, ko je običajno, da so stanja $|\phi_{\mu}\rangle_A$ in $|\chi_{\mu}\rangle_B$ ortonormirana

$$\langle\phi_{\mu}|\phi_{\nu}\rangle_A = \delta_{\mu,\nu}, \quad \langle\chi_{\mu}|\chi_{\nu}\rangle_B = \delta_{\mu,\nu}, \quad (10)$$

potem je razcep (8) enoličen, in ga dobimo kar s pomočjo standardnega SVD razcepa matrice $\Psi_{\underline{s}_A, \underline{s}_B} = \langle \underline{s}_A, \underline{s}_B | \psi \rangle$, ki jo zapišemo kot (8)

$$\Psi_{\underline{s}_A, \underline{s}_B} = \sum_{\mu=1}^M \lambda_{\mu} \phi_{\mu, \underline{s}_A} \chi_{\mu, \underline{s}_B}, \quad (11)$$

kjer je $\phi_{\mu, \underline{s}_A} := \langle \underline{s}_A | \phi_{\mu} \rangle_A$ in $\chi_{\mu, \underline{s}_B} := \langle \underline{s}_B | \chi_{\mu} \rangle_B$. Namreč, če vpeljemo $d^{|A|} \times d^{|A|}$ matriko U , $U_{\underline{s}_A, \mu} := \phi_{\mu, \underline{s}_A}$, ter $d^{|B|} \times d^{|B|}$ matriko V , $V_{\underline{s}_B, \mu} := \chi_{\mu, \underline{s}_B}^*$, ter diagonalno matriko $D_{\mu, \nu} = \lambda_{\mu} \delta_{\mu, \nu}$, potem je (11) natanko kanoničen SVD razcep:

$$\Psi = U D V^{\dagger}. \quad (12)$$

Normalizacija (10) pa je natanko ekvivalentna unitarnosti gornjih operatorjev

$$U^{\dagger} U = \mathbb{1}, \quad V^{\dagger} V = \mathbb{1}. \quad (13)$$

Gornji SVD razcep nam takoj diagonalizira oba reducirana gostotna operatorja:

$$\rho_A = \Psi \Psi^{\dagger} = U D V^{\dagger} V D U^{\dagger} = U D^2 U^{\dagger}, \quad (14)$$

$$\rho_B^T = \Psi^{\dagger} \Psi = V D U^{\dagger} U D V^{\dagger} = V D^2 V^{\dagger}. \quad (15)$$

Lieb-Arakijev izrek je zdaj na dlani: Spektra operatorjev ρ_A in ρ_B sta sestavljena iz kvadratov Schmidtovih koeficientov λ_j^2 , razen morda ničelne lastne vrednosti, ustrezni lastni vektorji pa so zakodirani kot stolpci ja matrik U in V .

Tudi entropijo prepletenosti lahko izračunamo iz spektra Schmidtovih koeficientov

$$E(|\psi\rangle) = - \sum_{\mu=1}^M \lambda_{\mu}^2 \log \lambda_{\mu}^2. \quad (16)$$

1.3 Kvantna medsebojna informacija in kvantne korelacije

Entropija prepletenosti je mera za kvante korelacije med deloma A in B kvantne mreže Λ . Omejena je z entropijo popolnoma mešanega reduciranega gostotnega operatorja

$$E(|\psi\rangle) \leq \log \min\{\dim \mathcal{H}_A, \dim \mathcal{H}_B\} = \min\{|A|, |B|\} \log d. \quad (17)$$

Za stanja celotne kvantne mreže ki niso čista, ampak so prav tako opisana z gostotnim operatorjem ρ , npr. termiv cna ravnovesna stabja, pa običajno

uporablamo koncept *kvantne medsebojne informacije* (KMI) med blokoma A in B :

$$I(A : B) := S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho), \quad \rho_A = \text{tr}_B \rho, \quad \rho_B = \text{tr}_A \rho. \quad (18)$$

KMI ima sledeče lepe lastnosti:

- Za čista stanja kvantne mreže $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ je KMI kar dvakratnik entropije prepletenosti in torej mera za prepletenost:

$$I(A : B) = 2S(\rho_A), \quad S(\rho) = 0. \quad (19)$$

- Za separabilna kvantna stanja $\rho = \rho_A \otimes \rho_B$ je $(A : B) = 0$, kajti tedaj je entropija aditivna

$$S(\rho_A \otimes \rho_B) = S(\rho_A) + S(\rho_B). \quad (20)$$

- KMI je zgornja meja za vse možne, normalizirane kvantne korelacije (korelacijske funkcije) lokalnih opazljivk. Naj bo npr M_A opazljivka, ki je definirana samo nad prostostnimi stopnjami bloka A in M_B podobno za B . Tedaj lahko zapišemo $\langle M_A \rangle = \text{tr} \rho M_A = \text{tr} \rho_A M_A$ in $\langle M_B \rangle = \text{tr} \rho M_B = \text{tr} \rho_B M_B$, ter definiramo korelacijsko funkcijo

$$C(M_A, M_B) = \langle M_A M_B \rangle - \langle M_A \rangle \langle M_B \rangle, \quad (21)$$

izrek pa pravi da

$$I(A : B) \geq \frac{[C(M_A, M_B)]^2}{2\|M_A\|^2\|M_B\|^2}, \quad (22)$$

kjer je $\|M\| = \sup_{|\psi\rangle} \|M|\psi\rangle\|/\|\psi\|$ operatorska norma. **Vaja:** Razmisli, kako bi dokazal gornjo trditev.

1.4 Zakon površine – Area law

Zakon površine je ena osnovnih lastnosti prepletenosti ravnovesnih stanj v kvantni fiziki. Je izjemnega pomena za simulabilnost takšnih kvantnih stanj s (klasičnimi) računalniki, kot bomo videli pozneje. Velja običajno za osnovna stanja modelov na kvantnih mrežah z lokalno interakcijo in spektralno režo. Za termalna stanja pri končni temperaturi pa velja še bolj splošno. Zakon površine v grobem pravi, da je *entropija prepletenosti* sorazmerna s površino (velikostjo) roba med ombočjema A in B . Ime izvira iz

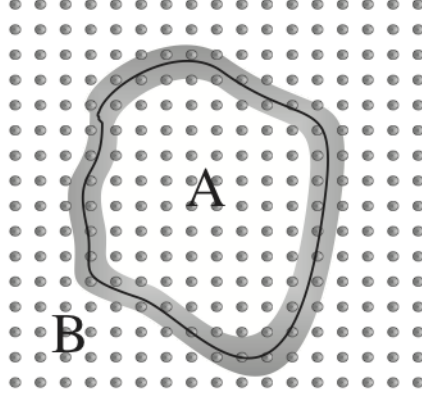


Figure 1: Biparticija kvantne mreže (A, B) . S sivo je označeno robno območje.

sorodne relacije za entropijo črnih lukenj, za katero sta Hawking in Bekenstein pokazala, da je sorazmerna površini horizonta črne luknje in ne, kot bi morda naivno prišakovali, njeni prostornini.

Za vajo pokažimo zakon površine za termična stanja spinske mreže (v \mathbb{Z}^D)

$$\rho_\beta = Z^{-1} \exp(-\beta H) \quad (23)$$

za Hamiltonko z lokalno interakcijo

$$H = \sum_{x, y \in \Lambda}^{|x-y|=1} h(x, y) \quad (24)$$

kjer je $h(x, y)$ lokalni interakcijski operator ki deluje nad tenzorskim produktom Hilbertovih prostorov dveh sosednjih spinov.

Izrek: KMI stanja ρ (23) je omejena s številom parov točk na robu $N_\partial = \#\{(x, y); |x - y| = 1, x \in A, y \in B\}$, namreč

$$I(A : B) \leq 2\beta N_\partial \|h\|, \quad (25)$$

kjer je $\|h\| = \max_{x \in A \& y \in B, x \in B \& y \in A} \|h(x, y)\|$.

Namig k dokazu: Upoštevaj, da Gibbsovo termalno stanje (23) minimizira funkcional proste energije $F(\rho) = \text{tr} \rho H - S(\rho)$, t.j. da za vsako drugo stanje, npr. $\rho = \rho_A \otimes \rho_B$, velja $F(\rho) \geq F(\rho_\beta)$.

2 Matrično-produktna stanja

V fiziki mnogodelčnih sistemov se velikokrat pokaže za koristnega nastavek za valovno funkcijo v obliki produkta matrik

$$\langle s_1, s_2, \dots, s_n | \psi \rangle = \langle L | \mathbf{A}_{s_1}^{(1)} \mathbf{A}_{s_2}^{(2)} \cdots \mathbf{A}_{s_n}^{(n)} | R \rangle. \quad (26)$$

Matrike so lahko za vsako mesto različne, zato zgornji indeks v oklepaju, še posebej imenitni pa so nastavki kadar so matrike za vsa mesta enake in jih potrebujemo vsega d . Dimenzija zahtevanih matrik, recimo ji M , je eden od ključnih parametrov nastavka. Prav tako je za učinkovito predstavitev pomemna izbira robnih vektorjev $|L\rangle$ in $|R\rangle$ iz zunanega (auxiliary) Hilbertovega prostora \mathcal{H}_a dimenzije M na katerem delujejo matrike $\mathbf{A}_{s_j}^{(j)}$. Za translacijsko invariantna stanja je npr. matrično-produktni nastavek (MPA - Matrix product ansatz) kar

$$\langle s_1, s_2, \dots, s_n | \psi \rangle = \text{tr}_a \mathbf{A}_{s_1} \mathbf{A}_{s_2} \cdots \mathbf{A}_{s_n} \quad (27)$$

kjer tr_a označuje sled po zunanjem Hilbertovem prostoru \mathcal{H}_a .

2.1 AKLT model

Eden od zgodovinsko prvih modelov, kjer je bil vpeljan nastavek MPA je AKLT model (Affleck-Lieb-Kennedy-Tasaki, 1987). Gospodje so študirali osnovno stanje spinskih verig s spinom 1 in ugotovili da ga lahko učinkovito zapišejo z MPA, kjer je \mathcal{H}_a kar Hilbertov prostor nekakšnega zunanjega spina $s = 1/2$. Torej v AKLT nastavku je $M = 2$. Stanje si lahko predstavjamo kot produkt singletov $2n$ spinov $1/2$, ki jih nato projeciramo na triplet spinov 1, vendar tako da v projekciji vzamemo vedno spina $1/2$ iz različnih sosednjih singletov. Na ta način dobimo stabje, ki ga lahko zapišemo s translacijsko invariantnim MPA (27) z matrikami

$$A_0 = \begin{pmatrix} -1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad A_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (28)$$

Ker smo štartali s singletnim stanjem spinov $1/2$, sosednji par spinov 1 v končnem AKLT satnju nikoli ne more imeti vrtilne količine $L = 2$. Še zapišemo projektor P na stanja $|L, M\rangle$ z $L = 2$ in $M = -2, -1, 0, 1, 2$ dveh (sposednjih) spinov $l = 1$,

$$P_{1,2} = \frac{1}{2} \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \frac{1}{6} (\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2)^2 + \frac{1}{3}, \quad (29)$$

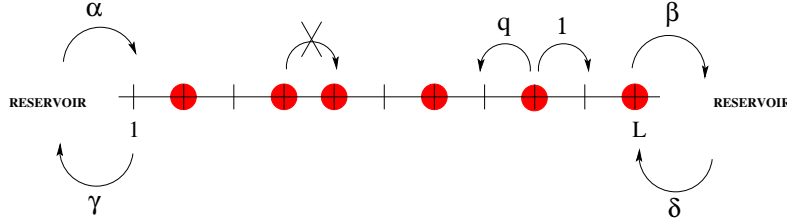


Figure 2: Shema preprostega izključitvenega procesa (SEP).

potem je očitno

$$P_{j,j+1}|\psi_{\text{AKLT}}\rangle = 0 \quad (30)$$

za vse sosednje pare spinov. AKLT stanje je torej osnovno stanje, z lannto vrednostjo nič sledečega spinskega Hamiltoniana z lokalno interakcijo

$$H_{\text{AKLT}} = \sum_{j=1}^n P_{j,j+1}. \quad (31)$$

2.2 Klasični stohastični mnogodelčni procesi, SEP modeli

MPA nastvej pride prav tudi pri obravnavi povsem drugačnih mnogodelčnih problemov v klasični statistični fiziki: t.i. preprostih izključitvenih procesov (angl. Simple Exclusion Process (SEP)). Hilbertov prostor \mathcal{H}_Λ je zdaj prostor verjetnostih porazdelitev 2^n konfiguracij sitsema n , $\Lambda = \{1, 2, \dots, n\}$, škatel, ki so bodosi zasedene, bodisi prazne

$$|p\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_n \in \{0,1\}} p_{s_1, s_2, \dots, s_n} |\underline{s}\rangle \quad (32)$$

Normalizacija stanja je zdaj klasična ohranitev verjetnost

$$\sum_{\underline{s}} p_{\underline{s}} = 1. \quad (33)$$

SSEP definiramo kot markovski proces, kjer delci skačejo s konstantnimi verjetnostmi v sosednjo škatlo (za t.i. simetrični SEP, ali SSEP sta verjetnosti za skok v levo ali desno enaki), pod pogojem, če je škatla prazna. Na koncih $j = 1$ in $j = n$ pa delci skačejo v sisem ali ven iz sistema z verjetnostmi $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ kot kaže slika.

Časovni razvoj sistema SEP zapišemo kot zvezni markovski proces

$$\frac{d}{dt}|p(t)\rangle = \mathcal{L}|p(t)\rangle \quad (34)$$

kjer je \mathcal{L} Markovski operator, oz. t.i. Markovska matrika $2^n \times 2^n$. Na Hilbertovem prostoru pravzaprav Markovski operator lahko zapišemo kot Hamiltonko Heisenbergove verige kvantnih spinov 1/2:

$$\mathcal{L} = \sum_{j=1}^{N-1} P_{j,j+1} + \text{robni členi} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} - 1) + \text{robni členi} \quad (35)$$

kjer je

$$P_{1,2} = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & -1 & 1 & \\ & 1 & -1 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}. \quad (36)$$

robne cene pa lahko zapišemo kot

$$\text{robni členi} = \begin{pmatrix} -\alpha & \gamma \\ \alpha & -\gamma \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}_{2^{n-1}} + \mathbb{1}_{2^{n-1}} \otimes \begin{pmatrix} -\delta & \beta \\ \delta & -\beta \end{pmatrix}. \quad (37)$$

\mathcal{L} je očitno prave oblike za markovsko matriko, saj ima vsoto elementov v vseh stolpcih enako 0, kar je pogoj, za ohranjanje verjetnosti. Za razliko od kvantne mehanike pa robni členi, ki delujejo samo na "spin" 1 ali n , niso "Hermitski", ampak ustrezajo nekakšnemu kompleksnemu magnetnemu polju.

Osnovni problem SEP je iskanje stacionarnega neravnovesnega stanja (NESS, angl. Nonequilibrium Steady State), ki je določeno s pogojem

$$\mathcal{L}|p_\infty\rangle = 0. \quad (38)$$

Če nastavimo NESS v obliki MPA, z dvema matrikama \mathbf{A}_0 in \mathbf{A}_1 ,

$$\underline{p}_\infty = \langle L | \begin{pmatrix} \mathbf{A}_0 \\ \mathbf{A}_1 \end{pmatrix}^{\otimes n} | R \rangle, \quad (39)$$

dobimo dva zadostna pogoja: (i) v 'bulku' dobimo:

$$P_{1,2} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_0 \\ \mathbf{A}_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \mathbf{A}_0 \\ \mathbf{A}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_0 \\ \mathbf{B}_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \mathbf{A}_0 \\ \mathbf{A}_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{A}_0 \\ \mathbf{A}_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \mathbf{B}_0 \\ \mathbf{B}_1 \end{pmatrix} \quad (40)$$

kjer sta \mathbf{B}_0 in \mathbf{B}_1 dva operatorja, ki ju lahko izberemo za skalarja, npr. $\mathbf{B}_0 = 1, \mathbf{B}_1 = -1$. Gornji pogoj je potem ekvivalenten eni enačbi:

$$\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_0 - \mathbf{A}_0 \mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_1. \quad (41)$$

(ii) Potem dobimo še robni pogoj, ki vključuje amplitude $\alpha, \beta, \gamma, \delta$:

$$\langle L | (\alpha \mathbf{A}_0 - \gamma \mathbf{A}_1) = \langle L |, \quad (\beta \mathbf{A}_1 - \delta \mathbf{A}_0) | R \rangle = | R \rangle \quad (42)$$

Enačbi (41,42) sta povsem zadosti da določita vse lastnosti NESS $|p_\infty\rangle$. Lahko izberemo sicer eksplicitno predstavitev matrik \mathbf{A}_0 in \mathbf{A}_1 in vektorjev $\langle L |, |R\rangle$, lahko pa vse račune izvedemo zgolj z uporabo algebre (41).

Vaja: Izračunaj profil gostote v NESS. To dobiš preko normalizacijskega operatorja

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_1, \quad (43)$$

$$\rho_j = \sum_{s_1, \dots, s_{j-1}, s_{j+1}, \dots, s_n} p_{s_1, \dots, s_{j-1}, 1, s_{j+1}, \dots, s_n} = \frac{\langle L | \mathbf{C}^{j-1} \mathbf{A}_1 \mathbf{C}^{n-j} | R \rangle}{\langle L | \mathbf{C}^n | R \rangle}. \quad (44)$$

Poskusi določiti še stacionarni tok delcev?

2.3 Kanonična oblika MPA

Vzemimo poljubno mnogodelčno stanje za n , d -nivojskih sistemov, z amplitudami $\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n}$. Stanje vedno lahko predstavimo kot MPA (26) v *kanonični obliki*, tako da imamo po koncu postopka avtomatično generiran Schmidtov razcep za vse možne biparticije

$$n = k + (n - k), k = 1, 2, \dots, n - 1. \quad (45)$$

Izrek: Stanje lahko predstavimo kot MPA

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} = \mathbf{A}_{s_1}^{(1)} \mathbf{A}_{s_2}^{(2)} \dots \mathbf{A}_{s_{n-1}}^{(n-1)} \mathbf{A}_{s_n}^{(n)} \quad (46)$$

kjer so $\mathbf{A}_{s_1}^{(1)}$ matrike dimenzije $1 \times M_1$ (vrstica), $\mathbf{A}_{s_2}^{(2)}$ matrike dimenzije $M_1 \times M_2$, ..., in $\mathbf{A}_{s_n}^{(n)}$ matrika dimenzije $M_{n-1} \times 1$, za primerna naravna števila M_1, M_2, \dots, M_{n-1} . Poleg tega MPA matrike zadoščajo ortogonalnostnemu pogoju

$$\sum_{s=0}^{d-1} (\mathbf{A}_s^{(k)})^\dagger \mathbf{A}_s^{(k)} = \mathbb{1}. \quad (47)$$

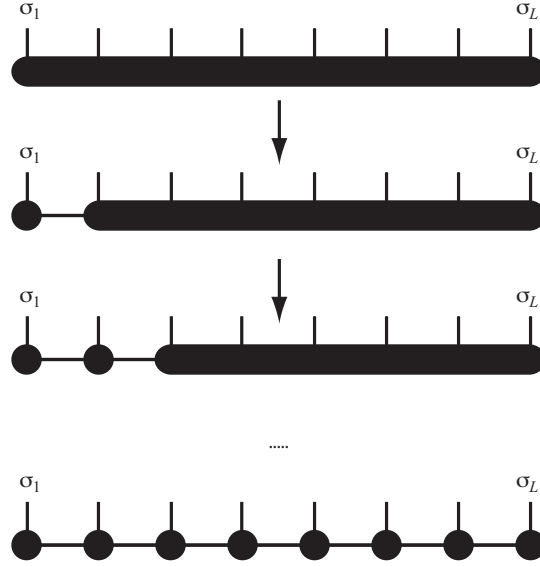


Figure 3: Diagramatična predstavitev korakov algoritma pri oblikovanju kanonične oblike MPA.

Dokaz: Zaporedje d -teric matrik $\mathbf{A}_s^{(k)}$ konstruiramo z zaporedjem SVD-razcepov $k = 1, 2, \dots$, kjer matrike $\mathbf{A}_s^{(k)}$ identificiramo z matriko $U_{(\mu,s),\mu'}^{(k)}$. Schmidtovi koeficienti pri zaporednih razcepih $\lambda_\mu^{(k)}$ so hkrati tudi Schmidtovi koeficienti bipartitije $k + (n - k)$, saj velja (47). Detajli dokaza so predstavljeni v obliki uporabnega algoritma.

Algoritem 1 (produkcija kanonične oblike MPA):

- Korak 1: Odščipni prvi fizikalni indeks na levi, s_1 in napravi SVD razcep (12)

$$\psi_{s_1,(s_2,\dots,s_n)} = \sum_{k_1=1}^{M_1} U_{s_1,k_1}^{(1)} \lambda_{k_1}^{(1)} V_{k_1,(s_2,\dots,s_n)}^{(1)\dagger} \quad (48)$$

ter priredi

$$(A_{s_1}^{(1)})_{k_1} := U_{s_1,k_1}^{(1)}, \quad \psi_{k_1,s_2,\dots,s_n}^{(2)} := \lambda_{k_1}^{(1)} V_{k_1,(s_2,\dots,s_n)}^{(1)\dagger}. \quad (49)$$

- Korak 2: Odščipni zunanji indeks k_1 ter drugi fizikalni indeks s_2 in spet napravi SVD razcep (12)

$$\psi_{(k_1, s_2), (s_3, \dots, s_n)}^{(2)} = \sum_{k_2=1}^{M_2} U_{(k_1, s_2), k_2}^{(2)} \lambda_{k_2}^{(2)} V_{k_2, (s_3, \dots, s_n)}^{(2)\dagger} \quad (50)$$

ter priredi

$$(A_{s_2}^{(2)})_{k_1, k_2} := U_{(k_1, s_2), k_2}^{(2)}, \quad \psi_{k_2, s_3, \dots, s_n}^{(3)} := \lambda_{k_2}^{(2)} V_{k_2, (s_3, \dots, s_n)}^{(2)\dagger}. \quad (51)$$

⋮

- Korak j , za $j = 2, \dots, n-1$: Odščipni zunanji indeks k_{j-1} ter j -ti fizikalni indeks s_j in spet napravi SVD razcep (12)

$$\psi_{(k_{j-1}, s_j), (s_{j+1}, \dots, s_n)}^{(j)} = \sum_{k_j=1}^{M_j} U_{(k_{j-1}, s_j), k_j}^{(j)} \lambda_{k_j}^{(j)} V_{k_j, (s_{j+1}, \dots, s_n)}^{(j)\dagger} \quad (52)$$

ter priredi

$$(A_{s_j}^{(j)})_{k_{j-1}, k_j} := U_{(k_{j-1}, s_j), k_j}^{(j)}, \quad \psi_{k_j, s_{j+1}, \dots, s_n}^{(j+1)} := \lambda_{k_j}^{(j)} V_{k_j, (s_{j+1}, \dots, s_n)}^{(j)\dagger}. \quad (53)$$

- Korak n : Priredi

$$(A_{s_n}^{(n)})_{k_{n-1}} := \psi_{k_{n-1}, s_n}^{(n)}. \quad (54)$$

2.4 Lastnosti

Preverimo, da smo tako dobili MPA s pravimi lastnostmi.

Poleg ortogonalnostnega pogoja (47), ki sledi iz kanoničnosti SVD razcepa

$$(U^{(j)})^\dagger U^{(j)} = \mathbb{1}, \quad (55)$$

imamo še več zanimivih sorodnih lastnosti:

- $\lambda_k^{(k)}$, $k = 1, \dots, M_1$ so natanko Schmidtovi koeficienti za bipartitijo (45): $\Lambda = [1, j] \cup [j+1, n]$, pri čemer kanonični Schmidtov razcep lahko zapišemo kot

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} = \sum_{k_j=1}^{M_j} \psi_{s_1, \dots, s_j}^{L(j)k_j} \lambda_{k_j}^{(j)} \psi_{s_{j+1}, \dots, s_n}^{R(j)k_j} \quad (56)$$

zato nam kanonična forma MPA omogoča takojšen izračun usrteznih entropij prepletenosti

$$S_j = - \sum_{k=1}^{M_j} |\lambda_k^{(j)}|^2 \log |\lambda_k^{(j)}|^2. \quad (57)$$

Te pa so po konstrukciji omejene z logaritmi Schmidtovih rangov

$$S_j \leq \log M_j. \quad (58)$$

Desni Schmidtovi vektorji so ortonormirani po konstrukciji (po j -tem koraku gornjega algoritma 1 so dani kar z matriko $V^{(j)}$, namreč

$$\psi_{s_{j+1}, \dots, s_n}^{\text{R}(j)k_j} = V_{k_j, (s_{j+1}, \dots, s_n)}^{(j)\dagger}. \quad (59)$$

Prav tako so levi Schmidtovi vektorji, ki jih lahko zapišemo kot

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_j}^{\text{L}(j)k_j} = (\mathbf{A}_{s_1}^{(1)} \mathbf{A}_{s_2}^{(2)} \dots \mathbf{A}_{s_j}^{(j)})_{k_j}, \quad (60)$$

tudi ortonormirani, kar sledi z zaporedno uporabo lastnosti (47) (**Vaja:** Pokaži!).

- Še lepše se da zgornje zaporedje kanoničnih Schmidtovih razcepov (56) zapisati z uporabo nekoliko drugačnih MPA tenzorjev. Zapišimo

$$\mathbf{B}_{s_1}^{(1)} := \mathbf{A}_{s_n}^{(1)}, \quad \mathbf{B}_{s_j}^{(j)} = [\lambda^{(j-1)}]^{-1} \mathbf{A}_{s_j}^{(j)} \quad (61)$$

kjer so $\lambda^{(j)} = \text{diag}\{\lambda_{k_j}^{(j)}; k_j = 1, \dots, M_j\}$ *diagonalni* tenzorji, ki so po predpostavki (definciji rangov M_j) vedno obrnljivi. MPA ima zdaj obliko, ki je manifestno Schmidtova

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} = \mathbf{B}_{s_1}^{(1)} \lambda^{(1)} \mathbf{B}_{s_2}^{(2)} \lambda^{(2)} \dots \lambda^{(n-1)} \mathbf{B}_{s_n}^{(n)}, \quad (62)$$

namreč:

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_j}^{\text{L}(j)k_j} = (\mathbf{B}_{s_1}^{(1)} \lambda^{(1)} \mathbf{B}_{s_2}^{(2)} \lambda^{(2)} \dots \lambda^{(j-1)} \mathbf{B}_{s_j}^{(j)})_{k_j}, \quad (63)$$

$$\psi_{s_{j+1}, \dots, s_n}^{\text{R}(j)k_j} = (\mathbf{B}_{s_{j+1}}^{(j+1)} \lambda^{(j+1)} \dots \lambda^{(n-1)} \mathbf{B}_{s_n}^{(n)})_{k_j}. \quad (64)$$

Iz ortogonalnosti levih in desnih Schmidtovih vektorjev za vse bipartitije, sledita dve fundamentalni ortogonalnostni relaciji za B -tenzorje: že znana (47),

$$\sum_{s_j=0}^{d-1} (\mathbf{B}_{s_j}^{(j)})^\dagger (\lambda^{(j-1)})^2 \mathbf{B}_{s_j}^{(j)} = \mathbb{1}, \quad (65)$$

ter nova relacija

$$\sum_{s_j=0}^{d-1} \mathbf{B}_{s_j}^{(j)} \left(\lambda^{(j)} \right)^2 \left(\mathbf{B}_{s_j}^{(j)} \right)^\dagger = \mathbb{1}, \quad (66)$$

- Hermitsko transponiran MPA nastavek (46) s tenzorji $\mathbf{A}_{s_j}^{(j)\dagger}$ nam da mnogodelčno valovno funkcijo po operaciji CP (C : kompleksno konjugiranje in parnost, $P : j \leftrightarrow n - j + 1$), $\psi_{s_n, s_{n-1}, \dots, s_1}^*$. Kompleksno konjugirane ne vpliva na vrednosti (realnih) Schmidtovih koeficientov. Ker je oblika Schmidtovega razcepa enolična in torej neodvisna od vrstnega reda operacij, ki pripeljejo do njega, mora biti kanonična oblika MPA enaka, če jo začnemo delati z leve ali z desne.
- To pomeni, da nam druge fundamentalne ortogonalnostne relacije (66) ni potrebno posebej dokazovati, saj sledi neposredno, če začnemo “gosenici trgati členke z desne”.
- Vsota kvadratov Schmidtovih koeficientov izraža normo valovne funkcije za katerokoli bipartitcijo (sledi iz ‘sledí’ zveze (14) ali (15))

$$\|\psi\|^2 = \sum_{s_1, \dots, s_n} |\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n}|^2 = \sum_{k=1}^{M_j} |\lambda_k^{(j)}|^2, \quad (67)$$

in mora biti torej neodvisna od mesta bipartitcije j .

- V metodi DMRG je en od osnovnih korakov rezanje prostora stanj (angl. truncation) s katerimi predstavimo interni prostor na nekem mestu j , t.j. $M_j \rightarrow \tilde{M}_j$, kjer je $\tilde{M}_j < M_j$. Vzemimo MPA obliko mnogodelčne valovne funkcije (46), ter njej priredimo *prirežano valovno funkcijo* $\tilde{\psi}$, kjer vzamemo identičen MPA, le na mestu j število stanj zmanjšamo na \tilde{M}_j ,

$$\tilde{\psi}_{s_1, s_2, \dots, s_n} = \mathbf{B}_{s_1}^{(1)} \lambda^{(1)} \dots \lambda^{(j-1)} \mathbf{B}_{s_j}^{(j)} \tilde{\lambda}^{(j)} \mathbf{B}_{s_{j+1}}^{(j+1)} \lambda^{(j+1)} \dots \lambda^{(n-1)} \mathbf{B}_{s_n}^{(n)}. \quad (68)$$

Vsi MPA tenzorji so identični originalnim, le na mestu j je število stanj zmanjšano, zato $\tilde{\lambda}^{(j)} = \text{diag}\{\lambda_k^{(j)}; k = 1, \dots, \tilde{M}_j\}$. Enačba (68) spet ponuja kanonične Schmidtove razcepe, prav tako pa je razlika stanj (46) in (68) spet Schmidtov razcep

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} - \tilde{\psi}_{s_1, s_2, \dots, s_n} = \mathbf{B}_{s_1}^{(1)} \lambda^{(1)} \dots \lambda^{(j-1)} \mathbf{B}_{s_j}^{(j)} \tilde{\lambda}^{(j)} \mathbf{B}_{s_{j+1}}^{(j+1)} \lambda^{(j+1)} \dots \lambda^{(n-1)} \mathbf{B}_{s_n}^{(n)}, \quad (69)$$

kjer je $\tilde{\lambda}^{(j)} = \text{diag}\{0, \dots, 0, \lambda_{\tilde{M}_j+1}^{(j)}, \dots, \lambda_{M_j}^{(j)}\}$.

Iz lastnosti (67) tedaj sledi, da je vsota kvadratov zavrženih Schmidtovih koeficientov natanko L^2 norma napake pri aproksimaciji mnogodelčne valovne funkcije:

$$\|\psi - \tilde{\psi}\|^2 = \sum_{k=\tilde{M}_j+1}^{M_j} |\lambda_k^{(j)}|^2. \quad (70)$$

2.5 Naloga

1. Napravi Schmidtov razcep za simetrično bi-particijo osnovnega stanja Heisenbergove verige $n = n/2 + n/2$ spinov $1/2$, npr. za $n = 6, 8, 10, 12$ in morda še $n = 14$. Lastno stanje poišči s točno diagonalizacijo. Kako izgleda entropija prepletenosti v odvisnosti od dolžine verige? Vzemi odprte in periodične robne pogoje. Kako je entropija prepletenosti odvisna od velikosti blokov A in B ? Kaj pa če A ni kompakten blok, ampak ga sestavlja npr. vsak drugi spin?
2. Napravi algoritem za predstavitev poljubnega stanja verige spinov $1/2$ v MPA. Algoritem 1 preskusi na naključnem stanju (kjer so vse amplitude $\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n}$ naključna kompleksna Gaussova števila, ter na osnovnem stanju Heisenbergove verige spinov $1/2$).

3 DMRG metode

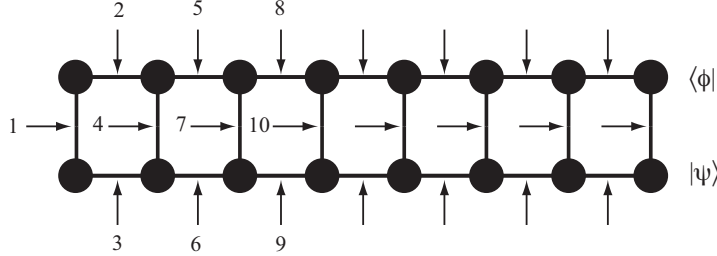
3.1 Lokalne opazljivke

Vzemimo MPA (46) ter pokažimo kako učinkovito računati lokalne opazljivke, npr. $\langle \psi | O_j | \psi \rangle$, kjer je O_j lokalni operator, ki deluje le na mestu j , ali pa na paru sosednjih mest (j, k) , npr. na sosednjih mestih $(j, j+1)$.

Skalarni operator. Najprej premislimo kako učinkovito računati skalarni produkt

$$\langle \phi | \psi \rangle \quad (71)$$

v splošnem, dveh različnih mnogodelčnih stanj, ki jih opišemo z MPA (46). Označimo zdaj tenzorje, ki generirajo $\phi_{s_1, s_2, \dots, s_n}^*$ z $\tilde{\mathbf{A}}_{s_j}$. Skalar (71) je v bistvu kontrakcija sledečega tenzorskega vezja:



kjer vrstni red puščic prikazuje optimalen vrstni red kontrakcij. Vsaka kontrakcija predstavlja matrični produkt, ki vzame $\mathcal{O}(M^3)$ operacij – če si zaradi enostavnosti predstavljamo da so vse MPA matrike enake (maksimalne) dimenzije M , kar pomeni, da je optimalen izračun (71) reda $\mathcal{O}(ndM^3)$ računskih operacij. Vsekakor bistveno manj kot pa d^n kot bi bilo, če bi računali s celotnim Hilbertovim prostorom.

Še bolj nazoren, a nekoliko manj računsko učinkovit je račun s prehodno matriko (angl. transfer matrix). Prehodno matriko definiramo tako, da si v zgornji sliki mislimo najprej kontrakcije po vseh vertikalnih prečkah. To nam definira prehodne matrike dimenzije $M^2 \times M^2$

$$T_{(k,l),(k',l')}^{(j)} = \sum_{s=0}^{d-1} (\tilde{A}_s^{(j)})_{k,k'} (A_s^{(j)})_{l,l'}, \quad (72)$$

ter dva M^2 dimenzionalna robna vektorja

$$L_{(k,l)} = \tilde{A}_k^{(1)} A_l^{(1)}, \quad R_{(k,l)} = \tilde{A}_k^{(n)} A_l^{(n)}. \quad (73)$$

Nekoliko bolj kompaktno bi lahko prehodno matriko zapisali tudi s pomočjo tenzorskega produkta

$$\mathbf{T}^{(j)} = \sum_{s=0}^{d-1} \tilde{\mathbf{A}}_s^{(j)} \otimes \mathbf{A}_s^{(j)} \quad (74)$$

Iskani skalarni produkt (71) se sedaj lepo zapiše kot matrični produkt

$$\langle \phi | \psi \rangle = \mathbf{L} \mathbf{T}^{(2)} \mathbf{T}^{(3)} \dots \mathbf{T}^{(n-1)} \mathbf{R}. \quad (75)$$

Vaja: Pokaži pravilnost gornjega izraza.

Računska zahtevnost tega izraza je očitno $\mathcal{O}(nM^4)$, kar je nekoliko slabše od optimalne, a če računanje matričnih elementov ni glaven del algoritma, lahko nazornost celo odtehta pri praktičnih aplikacijah. Še posebej pa pri teoretičnem delu.

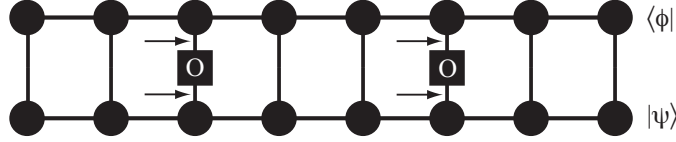


Figure 4: Tenzorsko vezje v pomoč k računu matričnih elementov lokalnih operatorjev.

Enodelčni operator. Naj bo O lokalni, enodelčni operator z matričnimi elementi $O_{s,s'} = \langle s|O|s'\rangle$. Postavimo ga na mesto j v kvanti mreži in razširimo na cel Hilbertov prostor $O_j = \mathbb{1}_{d^{j-1}} \otimes O \otimes \mathbb{1}_{d^{n-j}}$. Oglejmo si kako učinkovito izračunamo matrični element:

$$\langle \phi|O_j|\psi\rangle. \quad (76)$$

Ideja je povsem analogna oni od prej, le da moramo na mestu j uporabiti nekoliko modificirano prehodno matriko

$$V_{(k,l),(k',l')}^{(j)} = \sum_{s,s'=0}^{d-1} O_{s,s'} (\tilde{A}_s^{(j)})_{k,k'} (A_{s'}^{(j)})_{l,l'}, \quad (77)$$

torej

$$\langle \phi|O_j|\psi\rangle = \mathbf{L}\mathbf{T}^{(2)} \dots \mathbf{T}^{(j-1)} \mathbf{V}^{(j)} \mathbf{T}^{(j+1)} \dots \mathbf{T}^{(n-1)} \mathbf{R}. \quad (78)$$

Gornji izraz velja samo če je $2 \leq j \leq n-1$, sicer moramo ustrezno modificirati enega od robnih vektorjev.

Dvodelčni operator. Povsem analogno postopamo pri lokalnih večdelčnih operatorjih. Na primer, splošen dvodelčen operator vedno lahko zapišemo kot vsoto členov oblike $O_j O_k$, tako da gre očitno takole (za $2 \leq j < k \leq n-1$):

$$\langle \phi|O_j O_k|\psi\rangle = \mathbf{L}\mathbf{T}^{(2)} \dots \mathbf{T}^{(j-1)} \mathbf{V}^{(j)} \mathbf{T}^{(j+1)} \dots \mathbf{T}^{(k-1)} \mathbf{V}^{(k)} \mathbf{T}^{(k+1)} \dots \mathbf{T}^{(n-1)} \mathbf{R}. \quad (79)$$

3.2 MPA kot variacijski nastavek

Najbolj splošna formulacija metode DMRG (angl. *density matrix renormalization group*) je sledeča:

Uporabi MPA (46) kot variacijski nastavek in določi tenzorje $\mathbf{A}_{s_j}^{(j)}$ (neke vnaprej izbrane maksimalne dimenzije M) z numerično optimizacijo primerne fizikalne opazljivke. Npr. če iščeš osnovno stanje, potem optimiziraš $\langle \psi | H | \psi \rangle$, kjer je Hamiltonian H vsota lokalnih dvo-delčnih opazljivk.

V praksi pa bolj neposredna oz. enostavna možnost MPA simulacija propagatorja, bodisi v realnem ali imaginarnem času. V slednjem primeru lahko osnovno stanje iščemo kot limito $\beta \rightarrow \infty$ izraza $\frac{|\psi(\beta)\rangle}{\| |\psi(\beta)\rangle \|}$, kjer je $|\psi(\beta)\rangle = \exp(-\beta H)|\psi(0)\rangle$.

3.3 MPA simulacija propagatorja – TEBD algoritem

Zdaj smo oboroženi z vsem, kar je potrebno, da predstavimo TEBD algoritem (angl. *time-dependent-block-decimation*), ki je srce skoraj vsake moderne računalniške kode, ki implementira DMRG metodo. TEBD algoritem je leta 2003/2004 predlagal Guifre Vidal in počiva na osnovi nastavka MPA. Kmalu so pokazali, da je Vidalov algoritem sicer povsem ekvivalenten originalni formulaciji DMRG metode Stevena Whitea iz leta 1992, vendar pa je – vsaj z vidika kvantne informacije – bistveno bolj nazoren, in zato preprost.

Vzemimo lokalni Hamiltonian

$$H = \sum_{j=1}^{n-1} h_{j,j+1}. \quad (80)$$

Propagator v Suzuki-Trotterjevi shemi predstavimo izmenoma kot produkt sodih in lih dvodelčnih propagatorjev

$$U(z) = [U(z/m)]^m \simeq \left[\prod_{k=1}^{\lfloor n/2 \rfloor} U_{2k-1,2k}(z/m) \prod_{j=1}^{\lfloor (n-1)/2 \rfloor} U_{2j,2j+1}(z/m) \right]^m, \quad (81)$$

kjer $U(z) = \exp(zH)$, in

$$U_{j,j+1}(z) = \exp(zh_{j,j+1}) = \mathbb{1}_{d^{j-1}} \otimes U^{(2)} \otimes \mathbb{1}_{d^{n-j-1}}. \quad (82)$$

Osnovni element TEBD algoritma je implementacija dvo-kubitnih (oziroma dvo-ku-ditnih, za splošen d) vrat $U_{j,j+1}(\tau)$ (kakršna smo srečali v poglavjih II in IV), ki jih podaja $d^2 \times d^2$ matrika $U^{(2)}$, na mnogodelčni valovni funkciji v obliki MPA.

Algoritem nam nazorno predstavi shema na sliki 5.

Algoritem 2 (Lokalni TEBD):

- Vzemi MPA v kanonični Schmidtovi obliki (69):

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} = \mathbf{B}_{s_1}^{(1)} \lambda^{(1)} \mathbf{B}_{s_2}^{(2)} \lambda^{(2)} \dots \lambda^{(n-1)} \mathbf{B}_{s_n}^{(n)}. \quad (83)$$

Aplikacijo elementarnih vrat,

$$|\psi'\rangle = U_{j, j+1} |\psi\rangle, \quad (84)$$

tedaj zapišemo kot lokalno ‘pokvarjen’ MPA

$$\psi'_{s_1, s_2, \dots, s_n} = \mathbf{B}_{s_1}^{(1)} \lambda^{(1)} \dots \lambda^{(j-1)} \mathbf{B}_{s_j, s_{j+1}}^{(j, j+1)} \lambda^{(j+1)} \dots \lambda^{(n-1)} \mathbf{B}_{s_n}^{(n)}, \quad (85)$$

kjer je

$$\mathbf{B}_{s_j, s_{j+1}}^{(j, j+1)} = \sum_{s'_j, s'_{j+1}} U_{(s_j, s_{j+1}), (s'_j, s'_{j+1})}^{(2)} \mathbf{B}_{s'_j}^{(j)} \lambda^{(j)} \mathbf{B}_{s'_{j+1}}^{(j+1)}. \quad (86)$$

- Napravi kanonični SVD razcep $(M_{j-1}d) \times (M_{j+1}d)$ matrike

$$Q_{(k_{j-1}, s_j), (k_{j+1}, s_{j+1})} := \lambda_{k_{j-1}}^{(j-1)} \left(\mathbf{B}_{(s_j, s_{j+1})}^{(j, j+1)} \right)_{k_{j-1}, k_{j+1}}, \quad (87)$$

$$Q = UDV^\dagger \quad (88)$$

Naj ima takšen razcep M' neničelnih singularnih vrednosti (Schmidtov rank), ki je v principu lahko *večji* od maksimalne dimenzije MPA matrik na mestu j , recimo ji M_j .

- Definirajmo *nove* lokalne MPA matrike na mestih $j, j+1$ kot

$$(\mathbf{B}'_{s_j})_{k_{j-1}, k_j} := (\lambda_{k_{j-1}}^{(j-1)})^{-1} U_{(k_{j-1}, s_j), k_j}, \quad (89)$$

$$\lambda'_{k_j}{}^{(j)} := D_{k_j, k_j}, \quad (90)$$

$$(\mathbf{B}'_{s_{j+1}})^{(j+1)}_{k_j, k_{j+1}} := V_{k_j, (k_{j+1}, s_{j+1})}^\dagger \quad (91)$$

medtem ko na vseh ostalih mestih pišemo $\mathbf{B}'_{s_k}{}^{(k)} := \mathbf{B}_{s_k}^{(k)}$, $k \neq j, j+1$, in $\lambda'{}^{(k)} := \lambda^{(k)}$, $k \neq j$. Tako smo dobili kanonično MPA obliko propagirane mnogodelčne valovne funkcije:

$$\psi'_{s_1, s_2, \dots, s_n} = \mathbf{B}'_{s_1}{}^{(1)} \lambda'{}^{(1)} \mathbf{B}'_{s_2}{}^{(2)} \lambda'{}^{(2)} \dots \lambda'{}^{(n-1)} \mathbf{B}'_{s_n}{}^{(n)}. \quad (92)$$

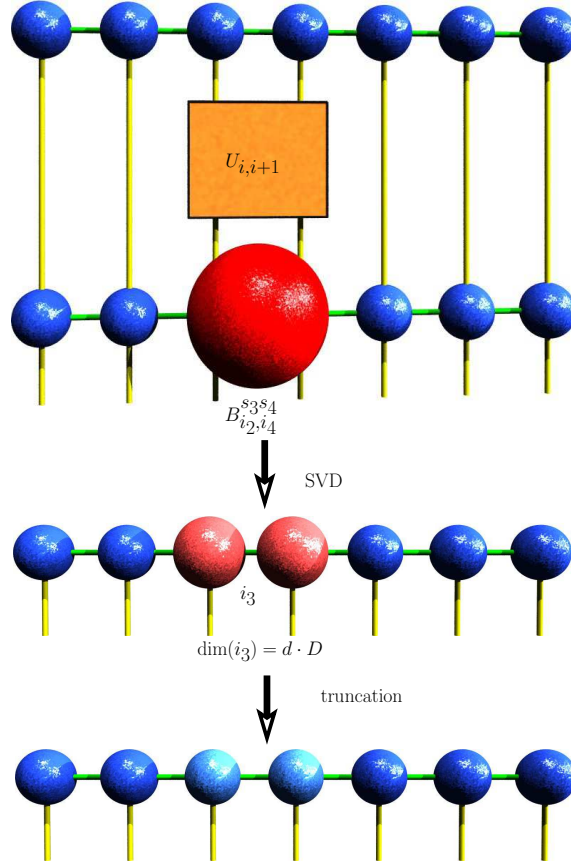


Figure 5: Shematski prikaz delovanja TEBD algoritma za eno aplikacijo dvo-delčnih vrat $U_{i,i+1}$. Slika in notacija ob sliki iz članka [2].

- Če je $M' > M_j$, potem prirežimo indeks k_j , t.j. tenzorje (89,90,91) definiramo le za $1 \leq k_j \leq M_j$, medtem ko najmanjše singularne vrednosti z $k_j > M_j$ zavržimo. S tem smo napravili celotno napako (t.i. 'truncation error') (70)

$$\| |\psi'\rangle - U_{j,j+1} |\psi\rangle \|^2 = \sum_{k=M_j+1}^{M'} |\lambda_k^{(j)}|^2. \quad (93)$$

Dva komentarja:

1. Algoritem moramo posebej premisliti na robnih parih, t.j. ko je $j = 1$ ali $j + 1 = n$. Tedaj lahko razumemo k_0 , ali k_n , kot trivialni indeks dimenzije $M_0 = 1$, ali $M_n = 1$, ter po potrebi na levo pritaknemo še trivialni diagonalni tenzor $\lambda^{(0)} := 1$.
2. Pomen množenja in deljenja z diagonalnim tenzorjem v (87) in (89) je v tem, da nam $\lambda^{(j)}$ dejansko predstavljajo prave Schmidtove koeficiente mnogodelčnega stanja *po* transformaciji, ψ' . Ekvivalentno bi lahko množili in delili z $\lambda^{(j+1)}$ z desne.

Celoten TEBD algoritem za generiranje transformacije

$$|\psi\rangle \longrightarrow \exp(zH)|\psi\rangle \quad (94)$$

v MPA obliki zdaj sestavimo s kombiniranjem Suzuki-Trotterjevega razcepa (81) in lokalnega TEBD koraka (84) povzetega v Algoritmu 2. Z uporabo Suzuki-Trotterjevih shem višjih redov, npr. skoraj brez dodatnega napora pridobimo red ob uporabi simetriziranega razcepa

$$U(z/m) \simeq \prod_k U_{2k-1,2k}(z/2m) \prod_k U_{2k,2k+1}(z/m) \prod_k U_{2k-1,2k}(z/2m). \quad (95)$$

V osnovi uporabljamo TEBD algoritem za (i) generiranje termalnih stanj, za $z = -\beta$, in ustrezno osnovnih stanj v limiti $z \rightarrow \infty$, v ravnovesni kvantni fiziki, ter za generiranje časovnega razvoja za $z = -it$ ter računanje časovnih korelacijskih funkcij v neravnovesni kvantni fiziki. Oba postopka morata biti zdaj očitna po vsem tem kar smo povedali zgoraj. Premislimo ju za vajo!

Zanimiva je tudi uporaba TEBD algoritma za simulacijo časovnega razvoja mnogodelčne verjetnostne porazdelitve klaičnih stohastičnih procesov, npr. SEP [3].

3.4 Napake TEBD algoritma

TEBD ima dva izvora napak: (i) Napaka Suzuki-Trotterjeve faktorizacije. Če uporabljamo faktorizacijo reda p , potem je ta napaka za celoten propagator $U(z)$ v m rezinah reda m^{-p} in jo lahko napravimo poljubno majhno ob uporabi primerno velikega števila rezin m oziroma visokega reda p . (ii) Napaka pri rezanju (truncation error). Za lažjo oceno predpostavimo, da so vsi MPA tenzorji enake dimenzije, recimo ji $M \equiv M_j$. Na vsakem koraku lokalnega TEBD postopka se indeks k_j na paru mest $(j, j + 1)$ napihne za faktor d , t.j. na maksimalno dimenzijo Md in ga moramo prirezati nazaj na

dimenzijo M . Pri tem zagrešimo napako, ki je enaka vsoti kvadratov najmanjših $M(d-1)$ Schmidtovih koeficientov. Pri kombinaciji velikega števila lokalnih TEBD korakov pa lahko konzervativno predpostavimo, da je treba napako pri rezanju enostavno seštevati.

Ta je mala, oz. poljubno majhna, le, če Schmidtovi koeficienti zadosti hitro pojemajo, t.j. če ima Schmidtov spekter zadosti hitro pojemajoče repe. To je ekvivalentno pogoju, da je entropija prepletenosti mnogodelčnega stanja glede na poljubno bipartitcijo zadosti majhna. To je v splošnem res v termalnih – oz. ravnovesnih stanjih – kot smo pokazali v začetku poglavja. Pri simulaciji časovnega razvoja v *realnem* času pa se tipično prej ali slej ‘zaplete’. Izkaže se namreč, da za tipična začetna stanja in tipične enodimenzionalne sisteme z lokalno interakcijo entropija prepletenosti narašča hitro, t.j. linearno s časom

$$E(t) \simeq ct \tag{96}$$

dokler ne doseže maksimuma, ki je dan z logaritmom dimenzije Hilbertovega prostora $E_{\max} = \log \mathcal{N} = n \log d$. Ko pridemo v režim tega t.i. prostorskega zakona (angl., volume law), postanejo časovno odvisne DMRG metode, oz. TEBD algoritem, popolnoma neuporabni.

Zaključimo lahko, da DMRG metode dobro delujejo za računanje ravnovesnih stanj velikih sistemov ter računanje časovnega razvoja do končnega časa, ki ni velik, v primerjavi s tipično inverzno interakcijsko energijo.

3.5 Translacijsko invariantni MPA in DMRG za neskončne sisteme

Velikokrat nas utegne zanimati obnašanje opazljivk in dinamike v termodinamski limiti $n \rightarrow \infty$. DMRG metode, oz. še posebej TEBD algoritem, dovoljujejo tudi neposredne implementacije za računanje propagatorja v limiti $n = \infty$, t.j. za manifestno neskončne enodimenzionalne sisteme, pod pogojem da so interakcije *translacijsko invariantne*

$$h_{j,j+1} = \mathbb{1}_{d^{j-1}} \otimes h \otimes \mathbb{1}_{d^{n-j-1}} \tag{97}$$

t.j., da je $d^2 \times d^2$ matrika h neodvisna od j , ter pod predpostavko, da so tudi vsa stanja in opazljivke v igri translacijsko invariantni. Tedaj lahko uporabljamo translacijsko invariantni MPA nastavek (69), kjer so d -terice tenzorjev $\mathbf{B}_{s_j}^{(j)}$ in $\lambda^{(j)}$, neodvisne od j .

Ker pa nam Suzuki-Trotterjeva faktorizacija (81) delno zlomi translacijsko invariantnost, namreč razlikuje sode in lihe pare mest, t.j. ustrezno, $(2k-1, 2k)$ in $(2k, 2k+1)$, se izkaže da je posledično – zaradi obeh izvorov napak –

tekom razvoja $\exp(zH)$ možno MPA za neskončen sistem ves čas vzdrževati v obliki

$$\psi_{\dots, s_{-1}, s_0, s_1, s_2, \dots} = \dots \lambda^e \mathbf{B}_{s_{-1}}^e \lambda^o \mathbf{B}_{s_0}^o \lambda^e \mathbf{B}_{s_1}^e \lambda^o \mathbf{B}_{s_2}^o \dots \quad (98)$$

Za eno časovno rezino simulacije neskončnega sistema je potrebno izvesti zgolj eno korak lokalnega TEBD (Algoritem 2) na paru mest $(j, j+1) \equiv (e, o)$. V naslednji časovni rezini (81) pa potem $(j, j+1) \equiv (o, e)$ in tako naprej, alternirajoče med lihimi in sodimi časovnimi rezinami.

3.6 Naloga

1. Implementiraj TEBD algoritem za iskanje MPA oblike osnovnega stanja izotropne antiferomagnetne Heisenbergove verige spinov $1/2$, dolžine n . Izračunaj energijo osnovnega stanja. Energijo osnovnega stanja E_0 lahko izluščiš kar iz *normalizacijskega predfaktorja* s katerim se seseda stanje

$$\exp(-\beta H)|\psi_i\rangle = e^{-\beta E_0} \left(|E_0\rangle \langle E_0|\psi_0\rangle + e^{-\beta(E_1-E_0)} |E_1\rangle \langle E_1|\psi_0\rangle + \dots \right), \quad (99)$$

ali

$$E_0 = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log \frac{\langle \underline{s} | \exp(-\beta H) | \psi_i \rangle}{\langle \underline{s} | \psi_i \rangle}, \quad (100)$$

kjer \underline{s} predstavlja poljubno mnogo-delčno komponento (dano z enim samim matričnim produktom), ki ni nič. Za krajše sisteme lahko primerjaš s točno diagonolizacijo, za daljše pa še z metodo Monte-Carlo, če si jo implementiral za ta primer.

2. * Izračunaj spin-spin korelacijsko funkcijo v osnovnem stanju $\langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle$ za prejšnji model.
3. ** Simuliraj časovni razvoj izotropne *feromagnetne* Heisenbergove verige spinov $1/2$ iz začetnega stanja, kjer je pol spinov na levi polariziranih gor, pol spinov na desni pa dol (t. i. domenska stena). Riši profil magnetizacije $\langle \sigma_j^z \rangle$ kot funkcijo časa.

References

- [1] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states”, *Annals of Physics* 326, **96** (2011)

- [2] M. Žnidarič, “Quantum transport in one-dimensional systems via a master equation approach: Numerics and an exact solution”, *Pramana J. Phys.* **77**, 781 (2011)
- [3] T. H. Johnson, S. R. Clark and D. Jaksch, Dynamical simulations of classical stochastic systems using matrix product states, *Phys. Rev. E* **82**, 036702 (2010)