

POGLAVJE II: Trotter-Suzukijev razcep: Simplektična integracija in kvantni mnogodelčni problemi

Operatorske eksponentne funkcije, npr $\exp(z\hat{H})$, kjer je parameter z bodisi inverzna temperatura $z = -1/T$ ali z imaginarno konstanto pomnožen čas $z = -it$, igrajo osrednjo vlogo pri teoretični obravnavi kvantnih pojavov, pa tudi v klasični analitični mehaniki ter pri študiju stohastičnih procesov.

Često se zgodi, da lahko ustrezen generator \hat{H} , ki mu v kvantni mehaniki rečemo Hamiltonov operator, razcepimo na vsoto dveh (ali več) prispevkov

$$\hat{H} = \hat{A} + \hat{B}, \quad (1)$$

tako da sta eksponentni funkciji $\exp(z\hat{A})$ in $\exp(z\hat{B})$ preprosto in eksplicitno izračunljivi v prikladni bazi.

Osnovna ideja te razprave je faktorizacijska formula, znana kot *Trotterjeva formula*

$$\exp(z(\hat{A} + \hat{B})) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \exp\left(\frac{z}{n}\hat{A}\right) \exp\left(\frac{z}{n}\hat{B}\right) \right\}^n. \quad (2)$$

Trotterjeva formula je tudi matematična osnova za izpeljavo Feynmanovega pot-integrala, ki ga dobimo, če med vsak par faktorjev na desni strani gornjega produkta vrinemo kompletan sistem, npr. pozicijskih stanj $\int d\underline{q} |q\rangle \langle q|$ kadar sta operatorja ‘standardne’ oblike $\hat{A} = \hat{p}^2/(2m)$, $\hat{B} = V(\underline{q})$. Poleg tega ima Trotterjeva formula prikladno lastnost, namreč da aproksimira unitaren operator s produktom unitarnih operatorjev¹, torej aproksimacija ne krši unitarnosti, ki je večkrat pomembna za asimptotsko stabilnost časovnega razvoja.

Kadar sta operatorja \hat{A} in \hat{B} predstavljiva s končno-dimenzionalnimi matrikami, je Trotterjeva formula (2) preprosta posledica Taylorjevega razvoja

¹Kadar imamo problem časovnega razvoja, ko sta \hat{A} in \hat{B} sebi-adjungirana in je z imaginaren.

eksponentne funkcije, namreč

$$\exp(z(\hat{A} + \hat{B})) = \exp(z\hat{A}) \exp(z\hat{B}) + \mathcal{O}(z^2), \quad (3)$$

torej, če pišemo $z \rightarrow z/n$

$$\exp(z(\hat{A} + \hat{B})) = \exp\left(\frac{z}{n}(\hat{A} + \hat{B})\right)^n = \left\{ \exp\left(\frac{z}{n}\hat{A}\right) \exp\left(\frac{z}{n}\hat{B}\right) \right\}^n + \mathcal{O}\left(\frac{z^2}{n}\right). \quad (4)$$

Formulo pa se da utemeljiti tudi kadar operatorja \hat{A}, \hat{B} delujeta nad neskončnodimenzionalnim, a *separabilnim* Hilbertovim prostorom. Običajna zahteva je sicer, da sta operatorja \hat{A} in \hat{B} *sebi-adjungirana* ter *nenegativna*, ter

$$\operatorname{Re} z \leq 0, \quad (5)$$

vendar obstajajo tudi nekatere sveže posplošitve, ki ne zahtevajo sebi-adjungiranosti (npr. v duhu generatorjev časovnega razvoja za disipativne sisteme).

Konvergenco oz. natančnost Trotterjeve formule lahko izboljšamo s simetriziranim produktom:

$$\exp(z(\hat{A} + \hat{B})) = \exp\left(\frac{z}{2}\hat{A}\right) \exp(z\hat{B}) \exp\left(\frac{z}{2}\hat{A}\right) + \mathcal{O}(z^3), \quad (6)$$

V splošnem lahko sistematično izpeljemo aproksimacijske formule sledečega tipa. Naj bodo $c_1, d_1, c_2, d_2, \dots, c_k, d_k$ primerne, praviloma realne (ne pa nujno!) uteži, vendar ne nujno vse pozitivne. M. Suzuki [1] in nekoliko kasneje Y. Yoshida [2] sta predlagala nekaj algebrajskih metod kako poiskati aproksimacijske sheme sledeče vrste:

$$\exp(z(\hat{A} + \hat{B})) = e^{c_1 z \hat{A}} e^{d_1 z \hat{B}} \dots e^{c_k z \hat{A}} e^{d_k z \hat{B}} + \mathcal{O}(z^{n+1}) \quad (7)$$

Takšni shemi recimo Suzukijev razcep *dolžine* k , *reda natančnosti* n . Seveda si želimo razcep kar največjega reda n pri ne preveliki (oziroma kar najmanjši) dolžini k .

1 Baker-Campbell-Hausdorffove formule

V teoriji Liejevih grup in posledično na mnogih področjih teoretične fizike pridejo zelo prav t.i. Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) formule, ki izražajo produkt eksponentnih operatorjev z enotnim eksponentnim operatorjem,

$$\exp(z\hat{A}) \exp(z\hat{B}) = \exp(z\hat{C}), \quad (8)$$

kjer \hat{C} lahko sistematično razvijemo po redih

$$\hat{C} = \sum_{m=0}^{\infty} \hat{C}_m z^m, \quad (9)$$

ki jih lahko formalno izrazimo

$$\hat{C}_k = \frac{1}{(k+1)!} \frac{d^{k+1}}{dz^{k+1}} \log \left(\exp(z\hat{A}) \exp(z\hat{B}) \right) \Big|_{z=0}, \quad (10)$$

ter za prvih nekaj redov dobimo

$$\begin{aligned} \hat{C}_0 &= \hat{A} + \hat{B}, \\ \hat{C}_1 &= \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}], \\ \hat{C}_2 &= \frac{1}{12} \left([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] \right), \\ \hat{C}_3 &= \frac{1}{24} [\hat{A}, [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]], \dots \end{aligned}$$

Obstaja celo ekspliciten izraz, ki ga je izpeljal Dynkin:

$$\hat{C}_k = \sum_{n=1}^k \frac{(-1)^{n-1}}{n} \sum_{\substack{r_1+s_1+\dots+r_n+s_n=k \\ r_j+s_j \geq 1}} \frac{(\sum_{j=1}^n (r_j + s_j))^{-1}}{r_1! s_1! \dots r_n! s_n!} [\hat{A}^{r_1} \hat{B}^{s_1} \dots \hat{A}^{r_n} \hat{B}^{s_n}], \quad (11)$$

kjer izraz $[\hat{A}^{r_1} \hat{B}^{s_1} \dots \hat{A}^{r_n} \hat{B}^{s_n}] = [\hat{A}, [\hat{A}, \dots, [\hat{B}, \dots, [\hat{A}, \dots], \dots]]$ predstavlja gnezdeni komutator, kjer se najprej r_1 -krat ponovi \hat{A} , potem s_1 -krat \hat{B} , nato spet r_2 -krat \hat{A} , itn. Podobno lahko generiramo razvoj za produkt več kot dveh eksponentnih operatorjev. Pozor: BCH vrsta je formalen razvoj, ki je tipično divergenten in ima lastnosti asimptotske vrste, t.j. če ga odrežemo je ostanek (napaka) reda prvega odrezanega člena.

BCH formule so splošno orodje za izpeljavo Suzukijevih ‘split-step’ aproksimacij (7). Izraz na desni strani izrazimo z BCH formulami in zahtevamo da se vsi redi operatorjev \hat{C}_k , razen prvega, $k > 1$, natančno pokrajšajo. To nam da sistem nelinearnih enačb za koeficiente c_k in d_k .

Vaja: Za vajo izpeljimo najpreprostejšo simetrično shemo drugega reda (6), in označimo simetrizirani produktni eksponentni operator

$$S_2(z) := \exp\left(\frac{z}{2}\hat{A}\right) \exp(z\hat{B}) \exp\left(\frac{z}{2}\hat{A}\right). \quad (12)$$

2 Split-step formule višjih redov

Z nekoliko več truda lahko hitro pridelamo zelo simetrično aproksimacijo četrtega reda dolžine štiri:

$$\exp(z(\hat{A} + \hat{B})) =: S_4(z) + \mathcal{O}(z^5) \quad (13)$$

kjer je

$$S_4(z) = S_2(x_1 z) S_2(x_0 z) S_2(x_1 z), \quad x_0 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \quad x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \quad (14)$$

oziroma eksplicitno z nastavkom (7) z $k = 4$ in

$$c_1 = c_4 = \frac{x_1}{2}, \quad c_2 = c_3 = \frac{x_0 + x_1}{2}, \quad d_1 = d_3 = x_1, \quad d_2 = x_0, \quad d_4 = 0. \quad (15)$$

Uporabne formule višjih redov lahko najdeš v klasičnih referencah [1, 2]. Vse te formule imajo lastnost, da je vsaj en od koeficientov c_k, d_k negativen, kar pomeni, da moramo vsake toliko časa narediti tudi kak primeren ‘korak nazaj’.

Včasih pa je zaradi matematične narave problema, npr. pri študiju disipativnih sistemov, pomembno, da imamo zahtevo (5), t.j. $\operatorname{Re} z c_k < 0$ in $\operatorname{Re} z d_k < 0$, ves čas izpolnjeno. Tedaj se izkaže za koristno split-step shema s kompleksnimi koeficienti [3]. Shema tretjega reda in dolžine tri (oziroma ‘dva in pol’) se glasi

$$S_3(z) = \exp(z p_1 \hat{A}) \exp(z p_2 \hat{B}) \exp(z p_3 \hat{A}) \exp(z p_4 \hat{B}) \exp(z p_5 \hat{A}), \quad (16)$$

kjer koeficienti diktirajo slalomske pot v kompleksni ravnini

$$p_1 = \bar{p}_5 = \frac{1}{8} \left(1 + \frac{i}{\sqrt{3}} \right), \quad p_2 = \bar{p}_4 = 2p_1, \quad p_3 = \frac{1}{4}. \quad (17)$$

Če pot simetriziramo in zmeščamo še desne zavoje, pridobimo še en red

$$\exp(2z(\hat{A} + \hat{B})) = S_3(z) \bar{S}_3(z) + \mathcal{O}(z^5), \quad (18)$$

kjer je $\bar{S}_3(z)$ razcep s kompleksno-konjugiranimi koeficienti

$$\bar{S}_3(z) = \exp(z \bar{p}_1 \hat{A}) \exp(z \bar{p}_2 \hat{B}) \exp(z \bar{p}_3 \hat{A}) \exp(z \bar{p}_4 \hat{B}) \exp(z \bar{p}_5 \hat{A}). \quad (19)$$

3 Simplektični integrator Hamiltonovih diferencialnih enačb

Čeprav bi naivno pomislili, da so split-step metode uporabne predvsem v kvantni in statistični fiziki, pa najdemo izjemno uspešno uporabo že pri numeričnem reševanju (nelinearnih) navadnih diferencialnih enačb, če so le te Hamiltonske oblike. Takšni so npr. standardni problemi v astronomiji oz. nebesni mehaniki.

Vzemimo npr. klasično Hamiltonovo funkcijo relativno splošne oblike

$$H(\underline{q}, \underline{p}) = T(\underline{p}) + V(\underline{q}), \quad (20)$$

kjer so $\underline{q} = (q_1, \dots, q_d)$ generalizirane koordinate in $\underline{p} = (p_1, \dots, p_d)$ ustrezni generalizirani impulzi. Naj $\underline{x} = (\underline{q}, \underline{p})$ označuje $2d$ -dimenzionalni vektor stanja v faznem prostoru. Hamiltonove enačbe tedaj lahko prikladno zapišemo s pomočjo Poissonovega oklepaja

$$\{A, B\} := \sum_{j=1}^d \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} \right) \quad (21)$$

namreč,

$$\frac{d}{dt} \underline{x} = \{ \underline{x}, H(\underline{x}) \}, \quad (22)$$

oziroma za poljubno zadosti pohlevno funkcijo $\rho(\underline{x})$ nad faznim prostorom

$$\frac{d}{dt} \rho(\underline{x}) = \{ \rho(\underline{x}), H(\underline{x}) \}. \quad (23)$$

Če $\rho(\underline{x})$ razumemo kot gostoto ensembela stanj v faznem prostoru, potem gornjo *linearno* enačbo imenujemo Liouvillova enačba, ustrezen časovni razvoj pa lahko predstavimo z Liouvillovim propagatorjem

$$\rho(\underline{x}(t)) = \hat{U}(t) \rho(\underline{x}), \quad \hat{U}(t) = \exp(t \{ \bullet, H \}). \quad (24)$$

Vaja: Pokaži, da je Liouvillov propagator unitaren glede na skalarni produkt

$$\langle A, B \rangle = \int d\underline{x} A(\underline{x}) B(\underline{x}). \quad (25)$$

Osnovna ideja simplektične integracije je razcep Liouvillovega propagatorja

$$\hat{U}(t) = \exp \left(\frac{t}{n} \{ \bullet, T \} + \frac{t}{n} \{ \bullet, V \} \right)^n. \quad (26)$$

Da bi generirali posamične trajektorije, ki so kar karakteristike Liouvillove parcialne diferencialne enačbe (23), $\underline{x}(t) = \hat{U}(t)\underline{x}(0)$, moramo samo še pojasniti, kakšne trajektorije generirata kinetični in potencialni propagator

$$(\underline{q}', \underline{p}') = \exp(\tau\{\bullet, T\})(\underline{q}, \underline{p}) = \left(\underline{q} + \frac{\partial T(\underline{p})}{\partial \underline{p}} \tau, \underline{p} \right), \quad (27)$$

$$(\underline{q}', \underline{p}') = \exp(\tau\{\bullet, V\})(\underline{q}, \underline{p}) = \left(\underline{q}, \underline{p} - \frac{\partial V(\underline{q})}{\partial \underline{q}} \tau \right). \quad (28)$$

Vaja: Natančno izpelji zgornje zveze.

Zelo lepa in bistvena lastnost simplektičnih integratorjev je, da so posamične, razcepljene transformacije (27,28) *kanonične* transformacije, torej tudi približna simplektična integracija natanko uboga Liouvillov izrek (ohranja volumen faznega prostora).

3.1 NALOGE

1. Simuliraj dolge trajektorije anharmonskega oscilatorja v dveh dimenzijah ($d = 2$) s Hamiltonko

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}p_2^2 + \frac{1}{2}q_1^2 + \frac{1}{2}q_2^2 + \lambda q_1^2 q_2^2. \quad (29)$$

Vzemi npr. začetni pogoj $p_1(0) = 1, p_2(0) = 0, q_1 = 0, q_2 = 1/2$. Vzemi nekaj simplektičnih integratorjev, npr. (12,13), in študiraj natančnost ohranjanja energije s spreminjanjem časovnega koraka. Morda lahko primerjaš še z Runge-Kutta integratorjem četrtega reda, ki si ga spoznal pri kakem drugem kurzu.

2. * Preveri veljavnost ekviparticijskega izreka za različne vrednosti parametra, npr. $\lambda = 0, 0.1, 1.0, 10.$, t.j. primerjaj časovni povprečji

$$\langle p_j^2 \rangle(t) = \frac{1}{t} \int_0^t p_j^2(t') dt', \quad j = 1, 2, \quad (30)$$

v odvisnosti od časa.

3. ** Napravi program, ki generira nove split-step sheme (v principu) poljubnih redov, z realnimi, ali morda celo s kompleksnimi koeficienti.

4 Kvantni mnogodelčni problemi - kubitne verige

Veriga n kubitov, ali spinov $1/2$, z lokalno, močno *lokalno* interakcijo je paradigmatični model mnogodelčnega kvantnega sistema. Hilbertov prostor je tedaj tensorski produkt $\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_1^{\otimes n} \equiv \mathbb{C}^{2^n}$, $\mathcal{H}_1 \equiv \mathbb{C}^2$, ki ga generirajo Paulijeve operatorji

$$\sigma_j^\alpha = \mathbb{1}_{2^{j-1}} \otimes \sigma^\alpha \otimes \mathbb{1}_{2^{n-j}}, \quad \alpha \in \{x, y, z, +, -, 0\} \quad (31)$$

kjer so σ^α običajne Paulijeve matrike:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma^0 = \mathbb{1}_2, \quad (32)$$

in $\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y)$.

Morda najpreprostejši, netrivialen konkreten model te vrste, ki je hkrati tudi povsem relevanten za opis magnetnih lastnosti nekaterih kvazi-enodimenzionalnih kristalov, kot npr. SrCuO₂, je (antiferomagnetni) Heisenbergov model, imenovan tudi XXX model,

$$H = \sum_{j=1}^n \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} = \sum_{j=1}^n (2\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + 2\sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z), \quad (33)$$

kjer zaradi enostavnosti vzemimo periodične robne pogoje $\vec{\sigma}_j \equiv \vec{\sigma}_{j+n}$.

Pri učinkovitem računanju propagatorja časovnega razvoja $\exp(-itH)$ pa tudi termalnega gostotnega operatorja $\rho = Z^{-1} \exp(-H/T)$ takšnih kvantnih verig (pa tudi mrež, npr. v 2D) je spet ključen Trotter-Suzukijev razcep. Brez hude izgube splošnosti tu predpostavimo, da je n sod, hkrati pa premislimo, kako bi postopali, če bi bil n lih.

Prikladen razcep Hamiltonke $H = A + B$ dobimo s preureditvijo na *lihe* in *sode* interakcijske člene:

$$A = \sum_{j=1}^{n/2} \vec{\sigma}_{2j-1} \cdot \vec{\sigma}_{2j}, \quad B = \sum_{j=1}^{n/2} \vec{\sigma}_{2j} \cdot \vec{\sigma}_{2j+1}. \quad (34)$$

Posamezna eksponentna operatorja zdaj lahko učinkovito računamo, kajti posamezni členi v A (in v B) med seboj komutirajo:

$$\exp(zA) = \prod_{j=1}^{n/2} \exp(z \vec{\sigma}_{2j-1} \cdot \vec{\sigma}_{2j}), \quad (35)$$

$$\exp(zB) = \prod_{j=1}^{n/2} \exp(z \vec{\sigma}_{2j} \cdot \vec{\sigma}_{2j+1}), \quad (36)$$

Posamezne faktorje z desne strani, t.i. dvo-kubitna vrata na paru sosednjih qubitov, npr $(j, j + 1)$, pa lahko učinkovito izvedemo, če komponente n -qubitnega stanja predstavimo v binarni bazi (lastni bazi σ_j^z):

$$|\psi\rangle = \sum_{b_1, b_2, \dots, b_n \in \{0,1\}} \psi_{b_1, b_2, \dots, b_n} |b_1, b_2, \dots, b_n\rangle, \quad \sigma_j^z |\underline{b}\rangle = (-1)^{b_j} |\underline{b}\rangle. \quad (37)$$

Namreč, če vpeljemo elementarni ‘dvo-delčni propagator’:

$$\begin{aligned} U^{(2)}(z) &:= \exp(z\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) = \exp(z(2 \text{SWAP} - \mathbb{1}_4)) \\ &= e^{-z} \begin{pmatrix} e^{2z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cosh 2z & \sinh 2z & 0 \\ 0 & \sinh 2z & \cosh 2z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{2z} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (38)$$

potem izračunamo

$$|\psi'\rangle = \exp(z\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1}) |\psi\rangle, \quad (39)$$

$$\psi'_{b_1, \dots, b_n} = \sum_{b, b'=0}^1 U_{(b_j, b_{j+1}), (b, b')}^{(2)} \psi_{b_1, \dots, b_{j-1}, b, b', b_{j+2}, \dots, b_n}, \quad (40)$$

v $\sim 2^{n+2}$ računskih korakih. Celotni Heisenbergov propagator za en časovni korak, npr. po osnovni Trottejevski shemi, $\exp(zA) \exp(zB)$ torej stane $\sim 4n2^n = 4N \log_2 N$ računskih operacij, če je $N = 2^n$ dimenzija Hilbertovega prostora \mathcal{H}_n , kar je, zanimivo, natanko tako učinkovito kot *hitra Fourierova transformacija*.

4.1 Časovne korelacijske funkcije kubitne verige

Zgoraj opisan pristop lahko neposredno uporabimo za računanje dinamičnih (časovnih) korelacijskih funkcij, ki so ključne npr. pri razumevanju transportnih lastnosti snovi preko teorije linearnega odziva.

Vzemimo npr. opazljivko X . Najenostavneje je izračunati avtokorelacijsko funkcijo pri neskončni temperaturi:

$$\langle X(t)X(0) \rangle = 2^{-n} \text{tr} \{ \exp(itH) X \exp(-itH) X \} \quad (41)$$

$$= \frac{1}{N_\psi} \sum_{\{|\psi\rangle\}} \langle \psi | \exp(itH) X \exp(-itH) X | \psi \rangle. \quad (42)$$

V drugi vrstici smo namignili na možnost učinkovite *Monte-Carlo* simulacije zgornjega izraza. Namreč, če za set stanj $\{|\psi\rangle\}$ vzamemo kompletno

bazo, je izraz identiteta, lahko pa vzamemo za $\{|\psi\rangle\}$ bistveno manjši vzorec *naključnih stanj*², $N_\psi \ll 2^n$, a še vedno zadosti velik $N_\psi \gg 1$, da lahko pričakujemo, da bo relativna statistična fluktuacija zadosti majhna (reda $1/\sqrt{N_\psi}$).

Kako moramo pravzaprav računsko razumeti izraz na desni strani (42)?

Algoritem:

1. Izžreбай naključno začetno stanje $|\psi\rangle$.
2. Definiraj alternativno začetno stanje $|\chi\rangle = X|\psi\rangle$.
3. Razvij obe stanji do časa t , po primerni Suzuki-Trotter spit-step shemi.
4. Izraz na desni strani (42) je potem kar matrični element

$$\langle\psi(t)|X|\chi(t)\rangle. \quad (43)$$

Postopek ponavlja N_ψ krat in izračunaj statistično povprečje izraza (43), ki da oceno za avtokorelacijsko funkcijo $\langle X(t)X(0)\rangle$, medtem ko pa statistična variacija izraza (43) deljena s $\sqrt{N_\psi}$ da dobro merilo za napako.

Postopek je še posebej primeren za opazljivke X , ki so lokalne v računski bazi $|\underline{b}\rangle$, kot npr. lokalna magnetizacija $X = \sigma_1^z$, za katero matrične elemente (43) lahko iz vrednotimo v $\mathcal{O}(N)$ računskih korakih.

Posebej zanimiv je spinski transport oz. spinska prevodnost, ki je povezana z avtokorelacijsko funkcijo spinskega toka

$$J = \sum_{j=1}^n J_j, \quad J_j = \sigma_j^x \sigma_{j+1}^y - \sigma_j^y \sigma_{j+1}^x. \quad (44)$$

Spinski tok izpeljemo npr. iz kontinuitetne enačbe, ki je posledica ohranitvenega zakona za celotno magnetizacijo, $[H, \sum_j \sigma_j^z] = 0$,

$$\frac{d}{dt} \sigma_j^z = i[H, \sigma_j^z] = J_j - J_{j-1}. \quad (45)$$

Izkaže se, da je tudi računanje avokorelacijske funkcije $\langle J(t)J(0)\rangle$ zelo učinkovito, saj jo lahko izrazimo kot prostorsko vsoto lokalnih tokovnih korelacij

$$\langle J(t)J(0)\rangle = \sum_{r=0}^{n-1} \langle J_{r+1}(t)J_1(0)\rangle. \quad (46)$$

²Te generiramo npr tako, da za komponente $\psi_{\underline{b}}$ vzamemo slučajno neodvisna, kompleksna Gaussova naključna števila z enakomerno varianco, na koncu pa stanje $|\psi\rangle$ še normiramo.

4.2 Termalna povprečja v kubitni verigi

Triotter-Suzuki razcep je prikladen tudi za računanje ravnovesnih, termalnih povprečij v spinskih in kubitnih verigah z lokalno interakcijo, kjer zasledujemo razvoj v imaginarnem času. Po *Monte-Carlo* postopku opisanem zgoraj, ga lahko najprej uporabimo za računanje particijske funkcije

$$Z(\beta) = \text{tr} \exp(-\beta H) = \frac{1}{N_\psi} \sum_{\{|\psi\rangle\}} \langle \psi \left(-i\frac{\beta}{2} \right) | \psi \left(-i\frac{\beta}{2} \right) \rangle. \quad (47)$$

Potem pa (oziroma v praksi hkrati), spet simetrizirano, za računanje ravnovesnih pričakovanih vrednosti

$$\langle X \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} \text{tr} \left\{ \exp \left(-\frac{\beta}{2} H \right) X \left(-\frac{\beta}{2} H \right) \right\} \quad (48)$$

$$= \frac{1}{Z(\beta)} \frac{1}{N_\psi} \sum_{\{|\psi\rangle\}} \langle \psi \left(-i\frac{\beta}{2} \right) | X | \psi \left(-i\frac{\beta}{2} \right) \rangle. \quad (49)$$

4.3 NALOGE

Raziščimo osnovno dinamiko in termodinamiko Heisenbergove verige, do dolžine, ki jo pač zmore tvoj računalnik. Npr. do $n = 20$ bi moralo iti brez težav. Posebej zanimivo je primerjati rezultate za nekaj velikosti, npr. $n = 12$, $n = 16$, $n = 20$ in ekstrapolirati ('špekulirati') obnašanje v termodinamski limiti $n \rightarrow \infty$. Prepričaj se lahko, da so s split-step razcepi dosegljive večje velikosti kot bi bile z 'naivnim' razvojem po lastni bazi.

1. Nariši graf proste energije $F(\beta) = -\frac{1}{\beta} \log Z(\beta)$.
2. Nariši graf povprečne energije $\langle H \rangle_\beta$ v odvisnosti od inverzne temperature β . Limita $\beta \rightarrow \infty$ ti da energijo osnovnega stanja.
3. Simuliraj časovno avtokorelacijsko funkcijo lokalne magnetizacije $X = \sigma_1^z$, $C_\sigma(t) = \langle \sigma_1^z(t) \sigma_1^z(0) \rangle$, pri neskončni temperaturi. Kako pojema k nič?
4. * Simuliraj avtokorelacijsko funkcijo spinskega toka $C_J(t) = \langle J(t) J(0) \rangle$ pri neskončni temperaturi. Kako pojema $C_J(t \rightarrow \infty)$? Ali lahko definiramo Kubo-jevo spinsko difuzijsko konstanto $D = \int_0^\infty C_J(t') dt'$?

5. ** Ponovi računanje spinske difuzijske konstante še za anizotropne Heisenbergove verige

$$H = \sum_{j=1}^n (2\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + 2\sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z), \quad (50)$$

pri nekaj vrednostih anizotropije, npr. $\Delta = 1/2$ in $\Delta = 2$. Kako pa bi šlo simulirati dinamične korelacije pri končni temperaturi s Trotter-Suzuki razcepom?

References

- [1] M. Suzuki, Comm. Math. Phys. **51**, 183 (1976); Phys. Lett. A **165**, 387 (1992).
- [2] H. Yoshida, Phys. Lett. A **150**, 262 (1990).
- [3] T. Prosen in I. Pizorn, J. Phys. A: Math. & Gen. **39**, 5957 (2006).

```

(*****
 Baker-Campbell-Hausdorff formula, explicit series! Tomaz Prosen 1995

The code provides an aid to work with series of noncommutative
operators such as adjoint representation of Lie algebra generators

Example: expression: E = 2 + 3 A + [A,B]/2 + [B, [A,B]]/6
is represented as: F = {{2},{3,A},{1/2,A,B},{1/6,B,A,B}}

AlgE[F]          =      E

E                ----> F
BCH2[A,B,n]      ----> ln(exp(A)exp(B))
BCH[{A...Z},n]   ----> ln(exp(A)...exp(Z))

*****

AlgE[F_] := Apply[Plus,Map[Alg1,F]]
Alg1[{c_,R___}] := c Alg2[{R}]
Alg2[{}] := 1
Alg2[{a_}] := a
Alg2[{a_,R___}] := Block[{l = Alg2[{R}]}, a.l - l.a]

BCH2[A_,B_,n_] :=
  AddE[{{1,B}},Cou1[AppG[AddE[{{-1}},MulE[ExpE[A,n],ExpE[B,n],n]],0,n],A]]

BCH[{A_,_}] := {{1,A}}
BCH[L_,n_] :=
  AddE[BCH[Rest[L],n],Cou1[AppG[AddE[{{-1}},
    Apply[(MulE[#1,#2,n])&,Map[(ExpE[#],n)&,L]]],0,n],First[L]]]

AppG[E_,n_,n_] := {{(-1)^n/(n+1)}}
AppG[E_,n_,m_] := AddE[{{(-1)^n/(n+1)},MulE[E,AppG[E,n+1,m],m]]

Cou1[{},_] := {}
Cou1[{b_,R___},A_] :=
  If[Last[b] == A,Cou1[{R},A],
    Prepend[Cou1[{R},A],MapAt[(#/(1+Count[b,A]))&,Append[b,A],{{1}}]]]

ExpE[_ ,0] := {{1}}
ExpE[S_,n_] :=
  Block[{l=ExpE[S,n-1]},Append[l,MapAt[(#/#)&,Append[Last[l],S],{{1}}]]]

AddE[{} ,X_] := X
AddE[X_,{}] := X
AddE[{{c1_,s___},R1___},{{c2_,s___},R2___}] :=
  Block[{v=c1+c2},
    If[v==0,AddE[{R1},{R2}],Prepend[AddE[{R1},{R2}],Prepend[{s},v]]]
AddE[X_,Y_] :=
  If[Order[Rest[First[X]],Rest[First[Y]]] == 1,
    Prepend[AddE[Rest[X],Y],First[X]],Prepend[AddE[X,Rest[Y]],First[Y]]]

MulE[{} ,_ ,_] := {}
MulE[{a_,R___},E_,n_] := AddE[Mul1[a,E,n],MulE[{R},E,n]]

Mul1[_ ,{} ,_] := {}
Mul1[a_,{b_,R___},n_] :=
  If[Length[a]+Length[b]-2 <= n,
    Prepend[Mul1[a,{R},n],Prepend[Join[Rest[a],Rest[b]],First[a]*First[b]]],
    Mul1[a,{R},n]]

```

V prilogi dodajmo preprost *Mathematica* program za generiranje BCH razvoja do poljubnega reda.