

Matrix Product Operator

Wir haben es geschafft Tensor $T_{n_1 \dots n_p}$ erfolgreich zu zerlegen
mit sehr vielen niedrigeren Tensoren!

Es wäre direkt auf den zerlegten Tensoren rechnen zu können!

Ziel: Rechnung direkt in der zerlegten Form z.B.

$$H|4\rangle = E|4\rangle \text{ Eigenwert}$$

Doch wie wird in Operatoren dargestellt?

\Rightarrow Matrix Product Operator

Im Prinzip kann man einen Tensor $T_{n_1 \dots n_p} = M^{n_1} \dots M^{n_p}$

$$\text{z.B. Quaternions } |4\rangle = \sum_{n_1 \dots n_p} T_{n_1 \dots n_p} |n_1 \dots n_p\rangle$$

$$\text{aber } \langle n_1 \dots n_p | 4 \rangle = T_{n_1 \dots n_p}$$

Das gilt auch für Operatoren

$$\langle n_1 \dots n_p | \hat{O} | n'_1 \dots n'_p \rangle = W^{n_1 n'_1} \cdot W^{n_2 n'_2} \dots W^{n_p n'_p}$$

$$\Rightarrow \hat{O} = \sum_{n'_1 \dots n'_p} W^{n_1 n'_1} W^{n_2 n'_2} \dots W^{n_p n'_p} |n'_1 \dots n'_p\rangle \langle n_1 \dots n_p|$$

$$\begin{array}{c} n_1 \dots n_p \\ | \dots | \\ \boxed{O} \\ | \dots | \\ n'_1 \dots n'_p \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} n_1 \quad n_2 \quad \dots \quad n_p \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ \boxed{W} \quad \boxed{W} \quad \dots \quad \boxed{W} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ n'_1 \quad n'_2 \quad \dots \quad n'_p \end{array}$$

Beweis: 1) Man kann jeden Operator in dieser Form bringen.

Beweis bei MPS. Man fasst n_i und n'_i als ein Index

\tilde{n}_i zusammen, und wendet das Zerlegen wieder mit SVD
wie bei MPS an.

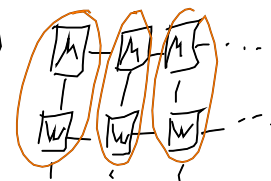
Dann \tilde{n}_i durch n_i und n'_i .

2) Wie kann die Anwendung eines Operators O auf die Trace vollzogen werden? Oder wie kann mehrere Operatoren zusammengefasst werden?

Anwendung von MPO

Formel wollen wir $\sum_{n_1' \dots n_N'} (W_{1, b_1}^{n_1 n_1'} W_{2, b_2}^{n_2 n_2'} \dots) (M_{1, a_1}^{n_1} M_{2, a_2}^{n_2} \dots)$ schreiben.

Schauen wir uns ein konkretes Implikat an.

$$\textcircled{X} = \sum_{\substack{n_1' \dots n_N' \\ a_1 \dots a_{N-1} \\ b_1 \dots b_{N-1}}} (W_{1, b_1}^{n_1 n_1'} W_{2, b_2}^{n_2 n_2'} \dots) (M_{1, a_1}^{n_1} M_{2, a_2}^{n_2} \dots)$$


$$= \sum_{\substack{n_1' \dots n_N' \\ a_1 \dots a_{N-1} \\ b_1 \dots b_{N-1}}} (W_{1, b_1}^{n_1 n_1'} M_{1, a_1}^{n_1}) (W_{2, b_2}^{n_2 n_2'} M_{2, a_2}^{n_2}) \dots$$

$$= \sum_{\substack{a_1 \dots a_{N-1} \\ b_1 \dots b_{N-1}}} N_{(1, a_1)}^{n_1} (b_1, a_1) N_{(2, a_2)}^{n_2} (b_2, a_2) \dots \boxed{M} - \boxed{M} - \boxed{M} \dots$$

- 1) Also die Anwendung des MPO (ändert die Struktur des MPS invariant, aber die Linkindizes quadratisch sind, die Matrizen sind deutlich größer!
- 2) Die exponentiell komplex Operatoren (in der Siteindizes) reduziert sich auf ein Operatoren (nur Linear in der Anzahl der Indizes)

Addieren und Multiplizieren von MPO

Addieren: Nehmen wir an wir hätten zwei Operatoren O und P (beide MPO). Dann muss für jeden MPS (gleiche Siteanzahl) M gelten $(O+P)M = OM + PM$

$$\text{Also } \boxed{O+P} - \boxed{O} - \dots - \boxed{P} = \boxed{O} - \boxed{O} - \dots - \boxed{O} + \boxed{P} - \boxed{P} - \dots - \boxed{P}$$

$$= \begin{pmatrix} \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \boxed{P} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{P} & \dots & \boxed{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{P} \end{pmatrix}$$

Hier ist das $0^{n_1 n_1'} \oplus P^{n_2 n_2'}$ das direkte Produkt der Lösser.

$$\sum_{\substack{h_1, \dots, h_{n_1} \\ a_1, \dots, a_{n_1} \\ b_1, \dots, b_{n_1}}} (0^{n_1 n_1'} \quad 0^{n_2 n_2'} \quad \dots) (M_{1, a_1}^{n_1'} \quad M_{2, a_2}^{n_2'} \quad \dots)$$

$$+ \sum_{\substack{h_1, \dots, h_{n_2} \\ a_1, \dots, a_{n_2} \\ c_1, \dots, c_{n_2}}} (P^{n_1 n_1'} \quad P^{n_2 n_2'} \quad \dots) (M_{1, a_1}^{n_1'} \quad M_{2, a_2}^{n_2'} \quad \dots)$$

$$= \sum_{\substack{h_1, \dots, h_{n_1} \\ a_1, \dots, a_{n_1} \\ b_1, \dots, b_{n_1}}} \left(\sum_{d_1, \dots, d_{n_1}} 0^{n_1 n_1'} \quad 0^{n_2 n_2'} \quad \dots + \sum_{c_1, \dots, c_{n_2}} P^{n_1 n_1'} \quad P^{n_2 n_2'} \quad \dots \right) (M_{1, a_1}^{n_1'} \quad M_{2, a_2}^{n_2'} \quad \dots)$$

Direktes Produkt $\begin{matrix} b \\ c \end{matrix} \left(\begin{array}{c|c} \boxed{0} & \boxed{0} \\ \hline \boxed{0} & \boxed{P} \end{array} \right) = 0 + P$

$$= \sum_{\substack{h_1, \dots, h_{n_1} \\ a_1, \dots, a_{n_1} \\ b_1, \dots, b_{n_1}}} \left(\sum_{d_1, \dots, d_{n_1}} (0+P)^{n_1 n_1'} \quad (0+P)^{n_2 n_2'} \quad \dots \right)$$

Multiplikation: 1) Skalar multiplikation \Rightarrow Einfach einen der Terme die die MPS bilden mit dem Faktor λ multiplizieren.

2) Anwendung der Operatoren hinterher $\hat{P} \hat{0}$, z.B. - für MPS
 M werden wir zuerst 0 an

$$M_{(b_{i-1}, a_{i-1}), (b_i, a_i)}^{h_i} = \sum_{h_i'} O_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} M_{a_{i-1}, a_i}^{h_i'} \quad \begin{matrix} \boxed{M} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \end{matrix}$$

$$= \boxed{0} \quad \boxed{0} \quad \dots \quad \boxed{0}$$

3) Anwendung von P dann

$$K_{(b_{i-1}, b_{i-1}, a_{i-1}), (b_i, b_i, a_i)}^{h_i} = \sum_{h_i'} P_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} M_{a_{i-1}, a_i}^{h_i'} \quad \begin{matrix} \boxed{M} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{P} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \end{matrix}$$

$$\Downarrow$$

$$= \boxed{0} \quad \boxed{0} \quad \dots \quad \boxed{0}$$

$$V_{(b_{i-1}, b_{i-1}), (b_i, b_i)}^{h_i, h_i'} = \sum_{h_i} P_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} O_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'}$$

\Rightarrow MPO Link Dimer werden multipliziert

bei kombierte der MPOs

VIII. 22 Density Matrix Renormalization Group

Berechnung des Grundzustats mit DMRG

Nehmen wir an ein MPO beschreibt ein Hamilton Operator H und der MPS ein Wellenfunkt $|\psi\rangle$ (Bsp.: z.B. Spinlattice oder Abzweig)

Dann stellen wir die Frage des Grundzustats über die

Minimierung von

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad \text{Wir tun dies über ein Variatle im MPS-Form!$$

Am besten mit Lagrange Punkt

$$\langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle$$

Wenn λ die Tensor von H sind, dann entspricht es

$$\begin{array}{ccccccc} \boxed{A} - \boxed{B} & \dots & - \boxed{C} & & & & \\ \downarrow & \downarrow & & & & & \\ \boxed{A} - \boxed{A} & \dots & - \boxed{A} & & & & \\ \downarrow & \downarrow & & & & & \\ \boxed{A} - \boxed{A} & \dots & - \boxed{A} & & & & \end{array} \quad \lambda \quad \begin{array}{ccccccc} \boxed{A} - \boxed{A} & \dots & - \boxed{B} & & & & \\ \downarrow & \downarrow & & & & & \\ \boxed{B} - \boxed{B} & \dots & & & & & \\ \downarrow & \downarrow & & & & & \\ \boxed{B} - \boxed{B} & \dots & & & & & \end{array}$$

Idee: Um das nicht Optimierungsproblem zu vereinfachen, wird ψ nur an ein Site i variert!

Frage wie mit den Überlagerungen:

$$\begin{array}{ccccccc} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{array}$$

$$\psi_{a_{i-1}, a_i}^{(A) i-1} = \sum_{n_{i-1}, n_i} (\psi_{n_{i-1}}^{n_{i-1}} \dots \psi_{n_i}^{n_i} \psi_{n_i}^{n_i} \dots \psi_{n_{i-1}}^{n_{i-1}})$$

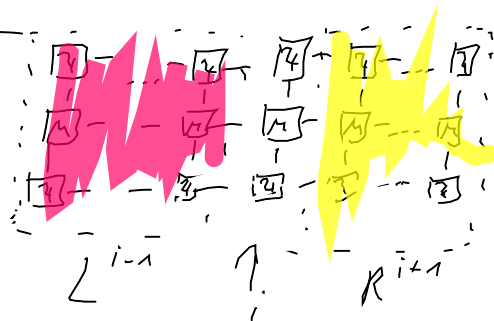
$$\psi_{a_i, a_{i+1}}^{(B) i+1} = \sum_{n_i, n_{i+1}} (\psi_{n_i}^{n_i} \dots \psi_{n_i}^{n_i} \psi_{n_{i+1}}^{n_{i+1}} \dots \psi_{n_{i+1}}^{n_{i+1}})$$

Das ist

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n_i} \sum_{a_{i-1}, a_i} \sum_{a_{i+1}, a_i} \psi_{a_{i-1}, a_i}^{(A)} M_{a_{i-1}, a_i}^{n_i} M_{a_{i+1}, a_i}^{n_i} \psi_{a_i, a_{i+1}}^{(B)}$$

- Bem! 1) Die Berechnung von $Z^{A_{i-1}}$ und $Z^{B_{i+1}}$ erfordert aufwändig, kann aber sehr effizient iterativ ausgerechnet werden.
- 2) Falls Z kreuzförmig und in der Orthogonalitätsbeziehung ist, so gilt $Z_{a_{i-1}, a_{i-1}}^A = \delta_{a_{i-1}, a_{i-1}}$ $Z_{a_i, a_i}^B = \delta_{a_i, a_i}$

Zweiter Teil



Damit bekommt

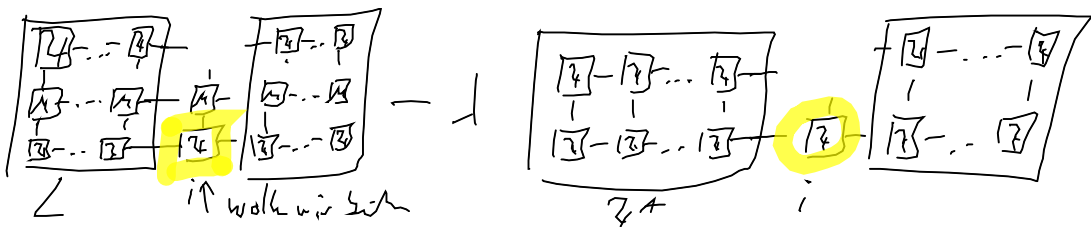
$$\langle Z | H | Z \rangle = \sum_{h_i, h_i'} \sum_{a_{i-1}, a_{i-1}'} \sum_{a_i, a_i'} \sum_{b_{i-1}, b_{i-1}'} L_{b_{i-1}}^{a_{i-1}, a_{i-1}'} M_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} R_{b_i}^{a_i, a_i'} Z_{a_{i-1}, a_i}^{h_i, h_i'}$$

Bem: auch in der Fall kann L^{i-1} und R^{i+1} effizient iterativ berechnet werden. (auch bei Hybrid Heuristiken)

Berechnen wir nun das Erwartungswert $\langle Z | H | Z \rangle \rightarrow \langle Z | U | Z \rangle$ in der wir und die Tensorstruktur in i ablesen (das gibt $Z_{a_{i-1}, a_i}^{h_i, h_i'}$)

Dann ergibt sich

$$\sum_{h_i, h_i'} \sum_{a_{i-1}, a_{i-1}'} \sum_{a_i, a_i'} \sum_{b_{i-1}, b_{i-1}'} L_{b_{i-1}}^{a_{i-1}, a_{i-1}'} M_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} R_{b_i}^{a_i, a_i'} Z_{a_{i-1}, a_i}^{h_i, h_i'} - 1 \sum_{a_{i-1}, a_{i-1}'} \psi_{a_{i-1}, a_{i-1}}^A \psi_{a_i, a_i}^B Z_{a_{i-1}, a_i}^{h_i, h_i'} = 0$$



Wir können das in ein vollgestrichenes Eigenwertproblem umschreiben.

$$H_{(n_i, a_{i-1}, a_i), (n_i, a_{i-1}, a_i)} = \sum_{b_{i-1}, b_i} L_{b_{i-1}, b_i}^{a_{i-1}, a_i} M_{b_{i-1}, b_i}^{a_i} R_{b_i}^{a_i, a_i}$$

$$N_{(n_i, a_{i-1}, a_i), (n_i, a_{i-1}, a_i)} = \Psi_{a_{i-1}, a_i}^A \Psi_{a_{i-1}, a_i}^B \delta_{n_i, n_i}$$

und der Vektor $v_{n_i, a_{i-1}, a_i} = M_{a_{i-1}, a_i}^{n_i}$

$$\Rightarrow H v - \lambda N v = 0 \quad (\text{vollgestrichenes Eigenwertproblem})$$

Bemerkung: 1) Sowohl H , wie N sind hermitisch mit der Dimension $(d \cdot d^2 \cdot d \cdot d)$

2) Eine Matrix mit $d \cdot d^2$ erlaubt keine vollständige Diagonalisierung

\Rightarrow iterative Eigenwert (Lanczos oder Jacobi-Davidson)

Wichtig vorzutragen Struktur!

Wir haben das alte Ψ^i , das ist hochkorreliert und sehr genau!

3) Falls N schlecht konditioniert ist, kann es manchmal sehr ausprägnant sein, aber falls der Zustands $i-1$ links und $i+1$ rechts, dann ist N nicht diagonalisierbar.

$$\Rightarrow \sum_{n_i} \sum_{a_{i-1}, a_i} \sum_{b_{i-1}, b_i} L_{b_{i-1}, b_i}^{a_{i-1}, a_i} M_{b_{i-1}, b_i}^{n_i, a_i} R_{b_i}^{a_i, a_i} \Psi_{a_{i-1}, a_i}^{n_i} - \lambda \Psi_{a_{i-1}, a_i}^{n_i} = 0$$

$$\Rightarrow H v - \lambda v = 0 \quad \begin{array}{c} \boxed{\begin{array}{c} \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \end{array}} \quad \begin{array}{c} \boxed{\begin{array}{c} \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \end{array}} \\ \lambda \end{array} - \lambda \begin{array}{c} \boxed{\begin{array}{c} \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \end{array}} = 0 \end{array}$$

Damit es so bleibt wird die Position des Orthogonalitätsrechnens durch die Kette bewegt.

\Rightarrow Wie sieht ein typischer Algorithmus aus?