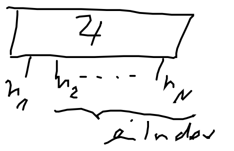
Zerlegung in Matrix Produktzustände

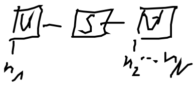
Erster Schritt (Linkskanonische MPS)

Fasse $\Psi_{n_1(n_2\cdots n_N)}$ als Matrix auf

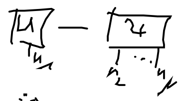


führe eine SVD durch (behalte nur wichtigste Singulärwerte)

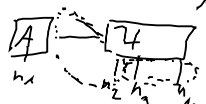
$$\Psi_{n_1\cdots n_N} = \Psi_{n_1(n_2\cdots n_N)} = \sum_{a_1}^{r_1} U_{n_1 a_1} \underbrace{S_{a_1 a_1} (V^\dagger)_{a_1(n_2,\dots,n_N)}}$$



$$=: \sum_{a_1}^{r_1} \underbrace{U_{n_1 a_1}}_{=: } \Psi_{a_1 n_2,\dots,n_N}$$



$$=: \sum_{a_1}^{r_1} A^{n_1}_{a_1} \Psi_{(a_1 n_2),(n_3-n_N)}$$

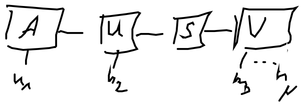


für die SVD Indices zusammenfassen

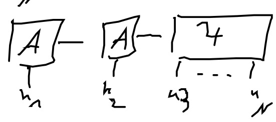
Zweiter Schritt

Wir führen jetzt wieder eine SVD von Ψ durch

$$\Psi_{n_1\cdots n_N} = \sum_{a_1}^{r_1}\sum_{a_2}^{r_2} A^{n_1}_{a_1} \underbrace{U_{(a_1 n_2),a_2}}_{A^{n_2}_{a_1 a_2}} S_{a_2 a_2} (V^\dagger)_{a_2,(n_3,\dots,n_N)}$$

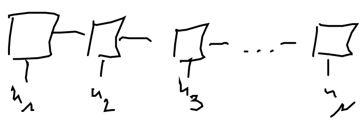


$$=: \sum_{a_1}^{n_1}\sum_{a_2}^{n_2} A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \Psi_{(a_2 n_3),(n_4,\dots,n_N)}$$



und so weiter

$$\Psi_{n_1\cdots n_N} = \sum_{a_1\dots a_{N-1}} A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots A^{n_{N-1}}_{a_{N-2}a_{N-1}} A^{n_N}_{a_{N-1}}$$



Bemerkung: (für die Zerlegung in Linkskanonische MPS)

1) Die Maximaldimension für die A (Linkdimension) während der Zerlegung ist
$(1\times d), (d\times d^2) \cdots (d^{\frac{N}{2}-1}\times d^{\frac{N}{2}})\ (d^{\frac{N}{2}}\times d^{\frac{N}{2}-1}), \cdots (d^2\times d)\ (d\times 1)$

⇒ Ohne Truncation wird diese Zerlegung nicht möglich sein!

Wegen: $U^\dagger U = Id$ gilt: $\delta_{a_\ell a_\ell'} = \sum_{a_{\ell-1}, n_\ell} (U^\dagger)_{a_\ell,(a_{\ell-1},n_\ell)} U_{(a_{\ell-1},n_\ell),a_\ell'}$

$$= \sum_{a_{\ell-1} n_\ell} (A^{n_\ell \dagger})_{a_\ell, a_{\ell-1}} A^{n_\ell}_{a_{\ell-1}, a_\ell'}$$

Id

$$= \sum_{n_\ell} (A^{n_\ell \dagger} A^{n_\ell})_{a_\ell a_\ell'}$$

$$\Rightarrow \sum_{n_\ell} A^{n_\ell \dagger} A^{n_\ell} = Id$$

Linksnormierte A und linkskanonisch.

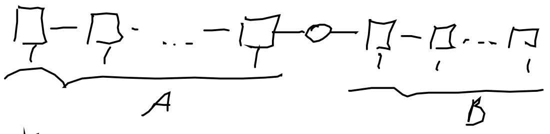
2) Das Ganze kann auch QR Zerlegung erzeugt werden.

3) Analog dazu gibt es auch eine Zerlegung, die rechtskanonisch ist

$$\Psi_{n_1 \dots n_N} = \sum_{a_1 \dots a_{N-1}} B^{n_1}_{a_1} B^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots B^{n_{N-1}}_{a_{N-2}, a_{N-1}} B^{n_N}_{a_{N-1}} \quad \text{mit} \sum_{n_\ell} B^{n_\ell} B^{n_\ell \dagger} = Id$$

4.) Es gibt auch Mischung zwischen der rechts und links kanonischen Form (teilweise von links, teilweise von rechts zerlegt

$$\Psi_{n_1 \dots n_k \dots n_N} = \sum_{a_1 \dots a_{N-1}} A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots A^{n_k}_{a_{k-1} a_k} S_{a_k a_k} B^{n_{k+1}}_{a_k a_{k+1}} \cdots B^{n_N}_{a_{N-1}}$$



Im Prinzip ist das die gute alte Schmidt Zerlegung.

5.) Die MPS Darstellung ist Eichinvariant, wenn wir die folgende Ersetzung zum benachbarten Matrix $M^{n_i} \to M^{n_i} X$ und $M^{n_{i+1}} \to X^{-1} M^{n_{i+1}}$ durchführen, so ändert der MPS nicht.

⇒ Es gibt viele gleichartige Darstellung des MPS.

6.) Abschätzung der Truncation

Angenommen wir schneiden die Singular Values an einer maximalen Linkdimension D ab. Dann ist der maximale Fehler

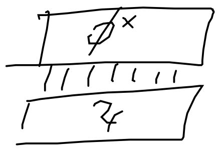
$$\| |\psi\rangle - |\psi_{trunc}\rangle \|_2^2 \le 2 \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i(D)$$

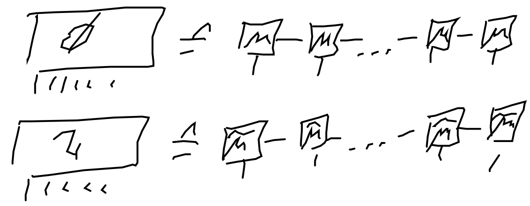
Skalarprodukt, Erwartungswerte und andere Rechenregeln

Skalarprodukt und Norm

$\phi_{n_1 \dots n_N}$ und $\psi_{n_1 \dots n_N}$

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{n_1 \dots n_N} \phi^*_{n_1 \dots n_N} \psi_{n_1 \dots n_N}$$

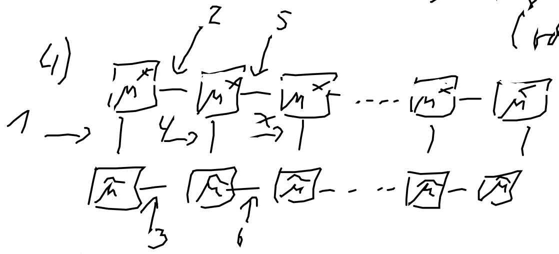




$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{n_1 \dots n_N} \underbrace{\sum_{\substack{a_1 \dots a_{N-1} \\ b_1 \dots b_{N-1}}}} M^{n_1 *}_{a_1} M^{n_2 *}_{a_1 a_2} \cdots M^{n_N}_{a_{N-1}} \tilde{M}^{n_1}_{b_1} \tilde{M}^{n_2}_{b_1 b_2} \cdots \tilde{M}^{n_N}_{b_N}$$

← Die richtige Reihenfolge der Kontraktion, Summierung ist hier wichtig für eine effiziente Auswertung (oder das es möglich ist)

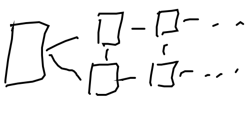
(i) 4)



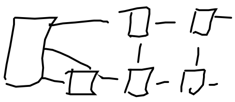
Effizientes Vorgehen ist eingezeichnet.

Illustration

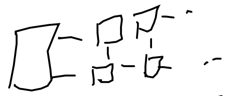
(ii)



(iii)



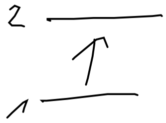
(iv)



weiter wie (ii)

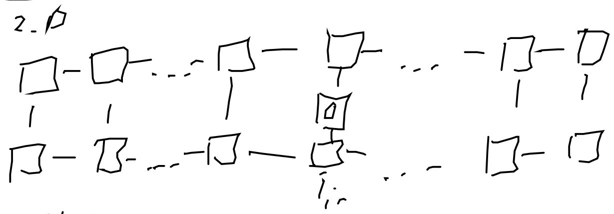
Erwartungswert

Nehmen wir an, ein Operator $O_{i_1}^{n_i, k_i}$; $O_{i_1} = \sum_{n_{i_1}, n'_{i_1}} |n_{i_1}\rangle O_{i_1}^{n_{i_1} n'_{i_1}} \langle n'_{i_1}|$ wirkt nur auf ein Qubit

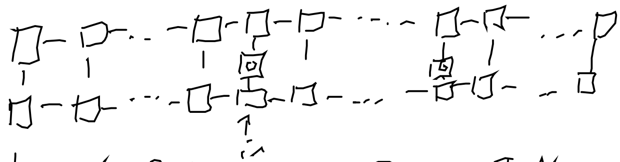


Diagramm

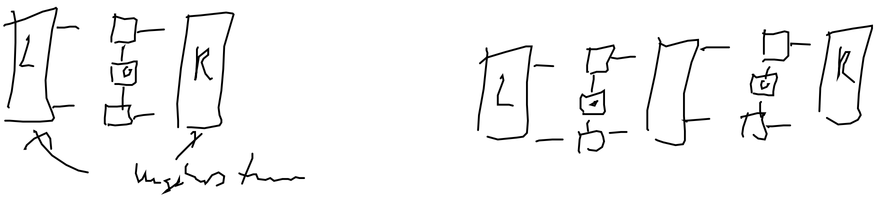
z.B.



Haben wir einen zweigeteilten Operator $O = \hat{O}_{i_1} \hat{O}_{i_2}$, dann wird das so aussehen



Interessante Zwischenschritte: Für den Fall mit O_i



Entsprechend für die Größen sind nur relativ kleine Tensor, die den Einfluss der Umgebung beschreiben.

Addition zweier Matrix Produkt Operatoren

$\psi + \phi \stackrel{?}{=}$ als MPS

$$\Psi_{n_1\ldots n_N} + \phi_{n_1\ldots n_N} = \sum_{a_1\ldots a_N} M^{n_1}_{a_1} M^{n_2}_{a_1 a_2}\cdots M^{n_N}_{a_{N-1}} + \sum_{b_1\ldots b_N} \tilde{M}^{n_1}_{b_1} \tilde{M}^{n_2}_{b_1 b_2}\cdots \tilde{M}^{n_N}_{b_{N-1}}$$

Abstrakt in Tensormatrixschreibung

$$\Psi_{n_1\ldots n_N} + \phi_{n_1\ldots n_N} = M^{n_1} M^{n_2}\cdots M^{n_N} + \tilde{M}^{n_1}\tilde{M}^{n_2}\cdots \tilde{M}^{n_N}$$

Die Linkdimension ist sowieso arbiträr (physikalisch)

$$= \begin{pmatrix} M^{n_1} & 0 \\ 0 & \tilde{M}^{n_1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M^{n_2} & 0 \\ 0 & \tilde{M}^{n_2} \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} M^{n_N} & 0 \\ 0 & M^{n_N} \end{pmatrix}$$

Erhöht die Dimension unkontrolliert

$\Rightarrow$ der Zustand in MPS Form muss wieder komprimiert werden. Dies kann z.B. geschehen während der MPS in kanonische Form gebracht oder Extra Kompressionsschritt.

MPS in Linkskanonische Form bringen

Angenommen: $\Psi_{n_1\ldots n_N} = \sum_{a_1\ldots a_{N-1}} \underbrace{M^{n_1}_{a_1}} M^{n_2}_{a_1 a_2}\cdots M^{n_N}_{a_{N-1}}$

$M_{n_1 a_1}$ auffassen als Matrix $\Rightarrow$ SVD

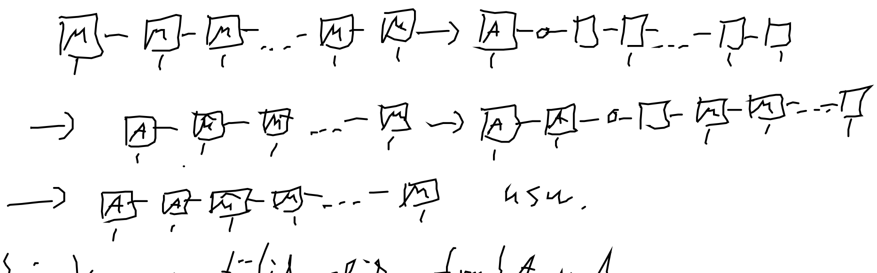
$$= \sum_{a_1\ldots a_{N-1}} \sum_{s_1} A_{n_1 s_1} S_{s_1 s_1} V^\dagger_{s_1 a_1} M^{n_2}_{a_1 a_2}\cdots M^{n_N}_{a_{N-1}}$$

$$= \sum_{s_1} A_{n_1 s_1} \sum_{a_2\ldots a_{N-1}} \left(\sum_{a_1} S_{s_1 s_1} V^\dagger_{s_1 a_1} M^{n_2}_{a_1 a_2}\right) M^{n_3}_{a_2 a_3}\cdots M^{n_N}_{a_{N-1}}$$

$$= \sum_{s_1} A_{n_1 s_1} \sum_{a_2\ldots a_{N-1}} \underbrace{\tilde{M}^{n_2}_{s_1 a_2}}_{\swarrow\,\text{SVD}} M^{n_3}_{a_2 a_3}\cdots M^{n_N}_{a_{N-1}}$$

.... und so weiter

Graphisch:



Dabei kann natürlich gleich trunkiert werden.

Beim letzten Schritt bleibt $S_{11}(V^\dagger)_{11}$ übrig, dies ist die Norm des MPS und wird mit A^{n_N} kombiniert!