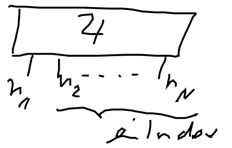
# Zerlegung in Matrix Produkt Zustände

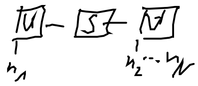
## Erster Schritt (Linkskanonische MPS)

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

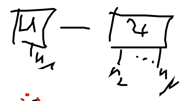



führe eine SVD durch (behalte nur wichtigste Singulärwerte)

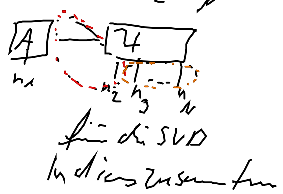
$$\Psi_{n_1\cdots n_N} = \Psi_{n_1(n_2\cdots n_N)} = \sum_{a_1}^{r_1} U_{n_1 a_1} \underbrace{S_{a_1 a_1} (V^\dagger)_{a_1 (n_2,\dots,n_N)}}$$




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



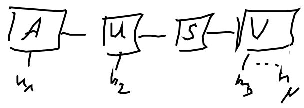

$$=: \sum_{a_1}^{r_1} A^{n_1}_{a_1} \Psi_{(a_1 n_2),(n_3\cdots n_N)}$$



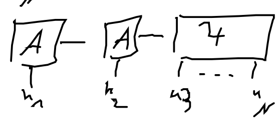

## Zweiter Schritt

Wir führen jetzt wieder eine SVD von Ψ durch

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

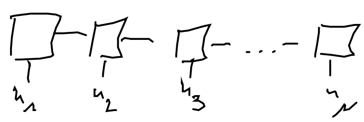



$$=: \sum_{a_1}^{n_1}\sum_{a_2}^{n_2} A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \Psi_{(a_2 n_3),(n_4,\dots,n_N)}$$




## und so weiter

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




## 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 Trunkierung 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

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

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

Links normierte A und links kanonisch.

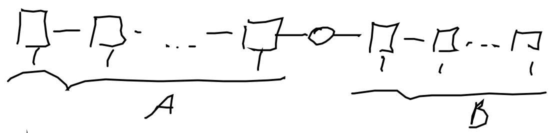
2) Das Ganze kann auch QR Zerlegung erzeugt werden.

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 kanon. Form (teilw. von links, teilw. 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 zur 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 Trunkierung

Angenommen wir schneiden die Singulärwerte an einer maximalen Linkindex Dimension ab. Dann ist der maximale Fehler

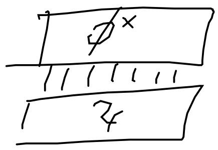
$$\| |\psi\rangle - |\psi_{trunc}\rangle \|_2^2 \le 2 \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i(D)$$

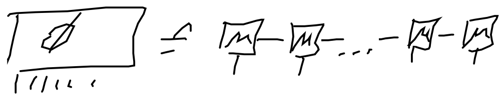
## Skalarprodukt, Erwartungswerte und andere Rechenregeln

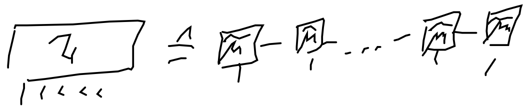
### Skalarprodukt und Norm

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

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



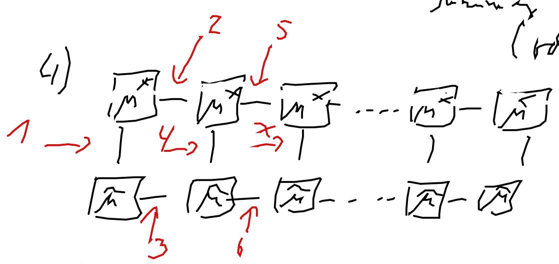




$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{n_1 \dots n_N} \underbrace{\sum_{\substack{a_1 \dots a_{N-1} \\ b_1 \dots b_{N-1}}}} M^{n_1 *}_{a_1} M^{n_2 *}_{a_1 a_2} \cdots M^{n_N *}_{a_{N-1}} \tilde{M}^{n_1}_{b_1} \tilde{M}^{n_2}_{b_1 b_2} \cdots \tilde{M}^{n_N}_{b_N}$$

← Die richtige Reihenfolge der Kontraktionen, Summierung ist hier wichtig für eine effiziente Ausführung (oder dass es möglich ist)

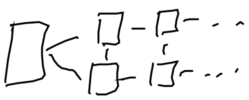
(i) (1)



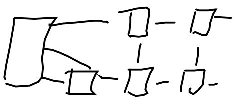
Effizientes Vorgehen ist eingezeichnet.

Illustration

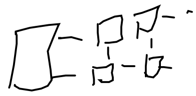
(ii)



(iii)



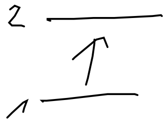
(iv)



wird schwierig (...)

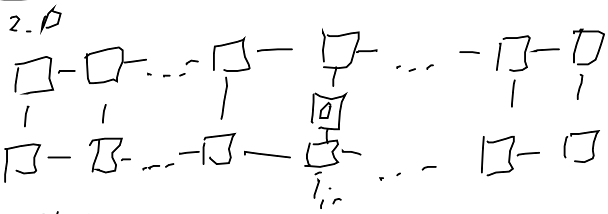
## Erwartungswert

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

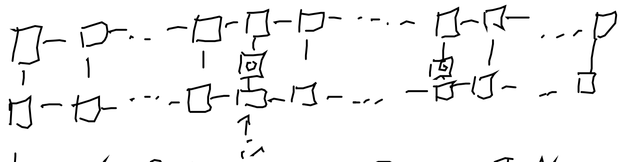



## Diagramm

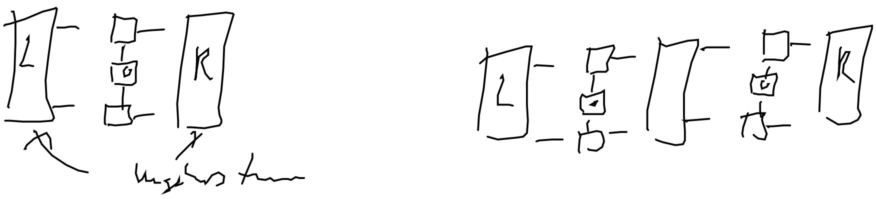
z.B.




Haben wir nun zwei gesetzte Operatoren $O = \tilde{O}_{i_1} \tilde{O}_{i_2}$, dann wird, das so aussehen




Interessante Zwischenschritte: Für den Fall mit $O_i$




Entspricht für die Größen sind nur relative kleine Tensor, die den Einfluss der Umgebung beschreibt.

## Addition zweier Matrix Produkt Operator

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

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

Abstrakt in Tensormatrixschreibung

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

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 entsprechend

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

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

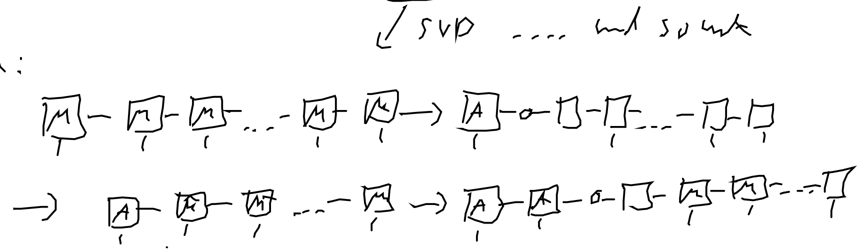
$$= \sum_{a_1\dots a_{N-1}} \sum_{s_1} A_{n_1 s_1} S_{s_1 s_1} V^\dagger_{s_1 a_1} M^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots M^{n_N}_{a_{N-1}}$$

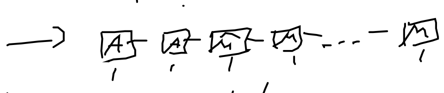
$$= \sum_{s_1} A_{n_1 s_1} \sum_{a_2\dots a_{N-1}} \left( \sum_{a_1} S_{s_1 s_1} V^\dagger_{s_1 a_1} M^{n_2}_{a_1 a_2} \right) M^{n_3}_{a_2 a_3} \cdots M^{n_N}_{a_{N-1}}$$

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

$\swarrow$ SVD .... und so weiter

Graphisch:





usw.

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!