Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta *za matematiko in fiziko*

VRM

Matrično produktni nastavki

Andrej Kolar - Požun

15. 5. 2019

.

Uvod

V tem poglavju se bomo seznanili z matrično produktnimi nastavki (MPA), ki so še posebej priročni za enodimenzionalne probleme. Recimo, da nam mnogodelčno stanje $|\psi\rangle$ predstavlja stanje za n d-nivojskih sistemov (od tu naprej obravnavamo primer spina 1/2, kjer je to kar dvonivojski sistem). Vsako tako stanje lahko razvijemo po bazi:

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1 \dots s_n} \psi_{s_1 \dots s_n} |s_1 \dots s_n\rangle.$$

Izkaže se, da lahko koeficiente zgornjega razvoja izrazimo kot MPA:

$$\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} = A^{(1)}_{s_1} A^{(2)}_{s_2} \dots A^{(n)}_{s_n}.$$

Problem smo tako prevedli na iskanje primernih matrik $A^{(j)}_{s_i}$. Matrike lahko s pomočjo SVD razcepa dobimo po naslednjem algoritmu:

- Vektor koeficientov razvoja preoblikujemo v matriko dimenzije $2 \times 2^{N-1}$ in naredimo SVD razcep:

  $$\psi_{s_1,(s_2 \dots s_n)} = \sum_{k_1} U^{(1)}_{s_1,k_1} \lambda^{(1)}_{k_1} V^{(1)\dagger}_{k_1,(s_2 \dots s_n)}$$

  Definiramo:

  $$(A^{(1)}_{s_1})_{k_1} = U^{(1)}_{s_1,k_1}$$
  $$\psi^{(2)}_{k_1, s_2 \dots s_n} = \lambda^{(1)}_{k_1} V^{(1)\dagger}_{k_1,(s_2 \dots s_n)}$$

- V drugem koraku naredimo SVD nove matrike:

  $$\psi^{(2)}_{(k_1,s_2),(s_3 \dots s_n)} = \sum_{k_2} U^{(2)}_{(k_1,s_2),k_2} \lambda^{(2)}_{k_2} V^{(2)\dagger}_{k_2,(s_3 \dots s_n)}$$
  $$(A^{(2)}_{s_2})_{k_1,k_2} = U^{(2)}_{(k_1,s_2),k_2}$$
  $$\psi^{(3)}_{k_2,s_3,\dots s_n} = \lambda^{(2)}_{k_2} V^{(2)\dagger}_{k_2,(s_3 \dots s_n)}$$

- Splošno v naslednjih korakih:

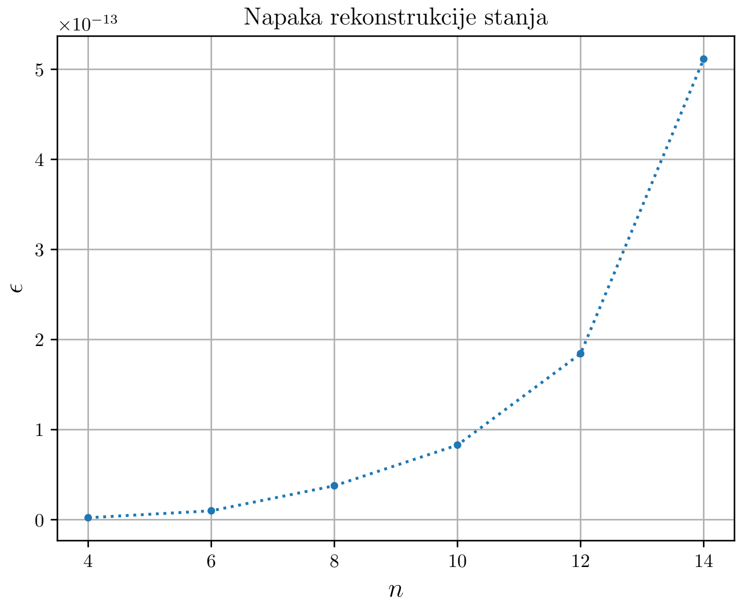
  $$\psi^{(j)}_{(k_{j-1},s_j),(s_{j+1} \dots s_n)} = \sum_{k_j} U^{(j)}_{(k_{j-1},s_j),k_j} \lambda^{(j)}_{k_j} V^{(j)\dagger}_{k_j,(s_{j+1} \dots s_n)}$$
  $$(A^{(j)}_{s_j})_{k_{j-1},k_j} = U^{(j)}_{(k_{j-1},s_j),k_j}$$
  $$\psi^{(j+1)}_{k_j,s_{j+1},\dots s_n} = \lambda^{(j)}_{k_j} V^{(j)\dagger}_{k_j,(s_{j+1} \dots s_n)}$$

- Na koncu definiramo še:

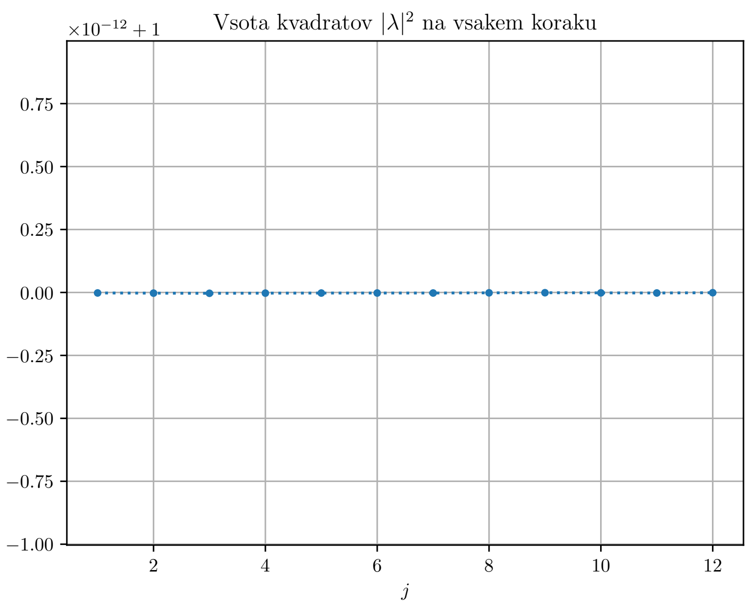
  $$(A^{(n)}_{s_n})_{k_{n-1}} = \psi^{(n)}_{k_{n-1},s_n}$$

Naloga

Za začetek preverimo metodo na naslednji način. Vzamimo naključno generirano stanje n spinov. Koeficienti razvoja so porazdeljeni po $N(0,1)$ in še normirani. Iz stanja pridobimo matrike A po zgornjem algoritmu. S pomočjo le-teh rekonstruiramo koeficiente razvoja in jih primerjamo z stanjem, s katerim smo začeli:



Na x osi je velikost verige n, na y osi pa absolutna napaka koeficientov, ki jih dobimo po rekonstrukciji z matrikami A. Opazimo, da je napaka praktično nič. Naraščanje napake z n je posledica dejstva, da stevilo koeficientov za opis stanja narašča eksponentno z n (absolutna napaka ni normirana)



Na sliki je vrednost $\sum_k |\lambda_k^{(j)}|^2$ za set lambd na vsakem koraku j. Moralo bi veljati, da je to enako normi valovne funkcije, kar je res (saj je ta normirana).

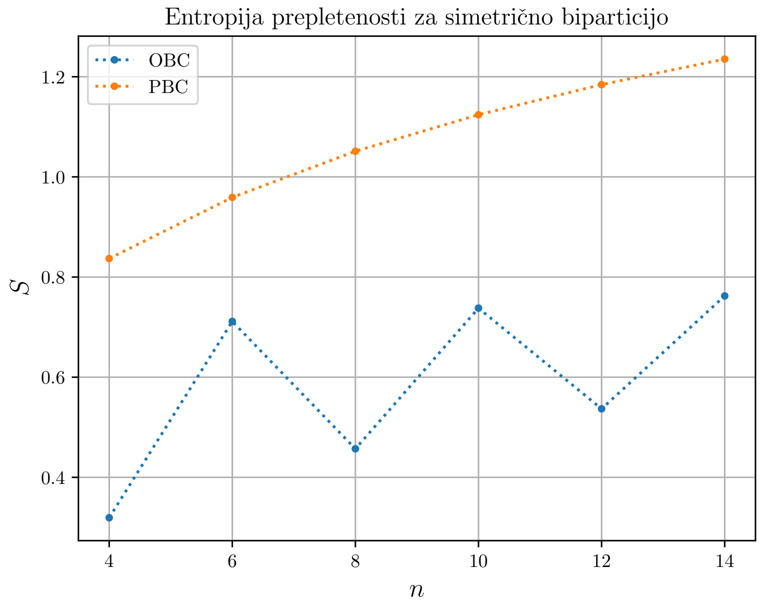
Oblika matrik A za primer $n = 14$

Za primer $n = 14$ so na sliki prikazane matrike A, s tem, da je na skrajni levi $A^{(1)}$ na skrajni desni pa $A^{(n)}$. Velikosti matrik najprej naraščajo, na $n/2$ pa se obrnejo in potem manjšajo, kot smo pričakovali

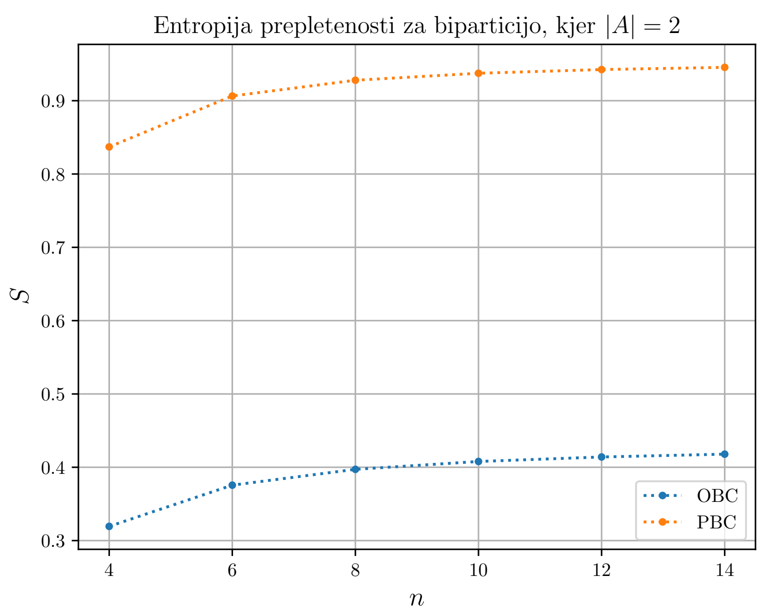
V nadaljevanju bomo verigo razdeliil na dve komponenti neke biparticije in računali entropijo prepletenosti med njima. Za particijo, kjer je prvih j spinov v komponenti A, ostali pa v B entropijo znamo izračunati:

$$S = -\sum_k |\lambda_k^{(j)}|^2 \log |\lambda_k^{(j)}|^2,$$

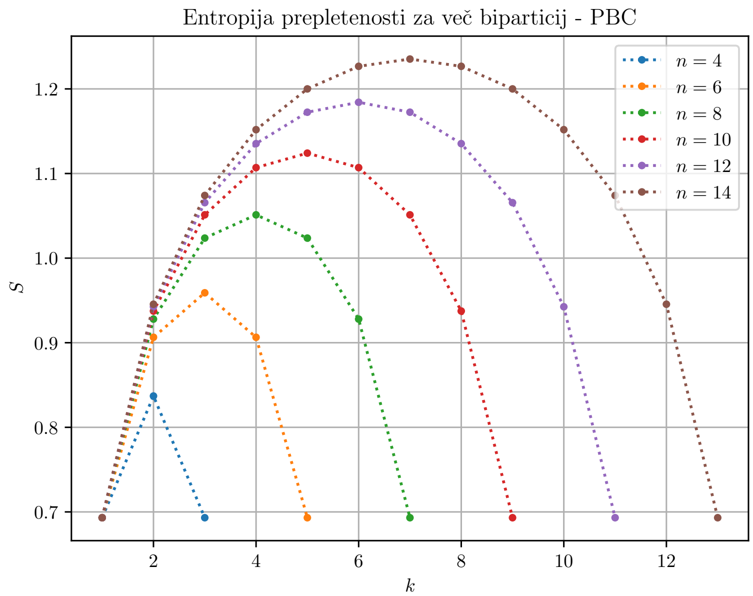
kjer so $\lambda_k^{(j)}$ Schmidtovi koeficienti, pridobljeni v j-tem koraku algoritma.



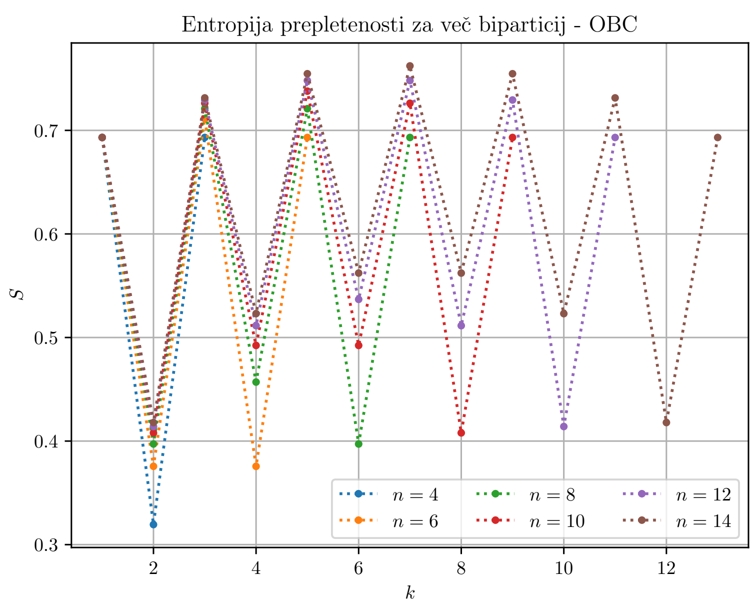
Na sliki je entropija prepletenosti v odvisnosti od dolžine verige n za primer simetrične biparticije (prva polovica spinov je v A , druga v B). Začnemo z osnovnim stanjem Heisenbergovega modela s periodičnimi oziroma odprtimi robni pogoji. Opazimo monotono naraščanje v primeru periodičnih robnih pogojev in nekakšne oscilacije v primeru odprtih.



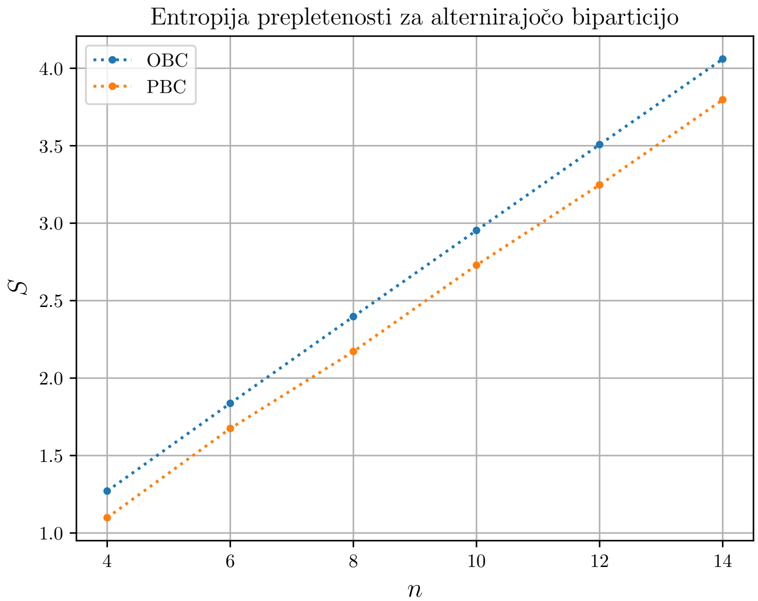
Na sliki je entropija prepletenosti v odvisnosti od dolžine verige n za primerbiparticije, kjer v A komponento damo prva dva spina, ostale pa v B. Začnemo z osnovnim stanjem Heisenbergovega modela s periodičnimi oziroma odprtimi robni pogoji. Entropija sedaj počasneje narašča. Razlika v entropiji za PBC oziroma OBC pa je zelo velika.



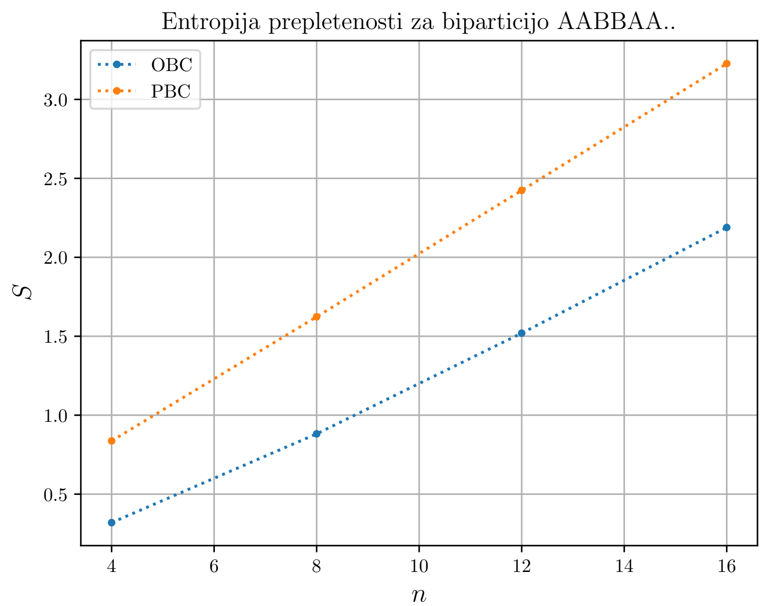
Na sliki je entropija prepletenosti v odvisnosti od velikosti particije A k za več dolžine verige n za primer particije, ko so vsi spini v A na levi strani verige, B pa na desni. Začnemo z osnovnim stanjem Heisenbergovega modela s periodičnimi robnimi pogoji. Opazimo, da je entropija maksimalna pri simetrični biparticiji.



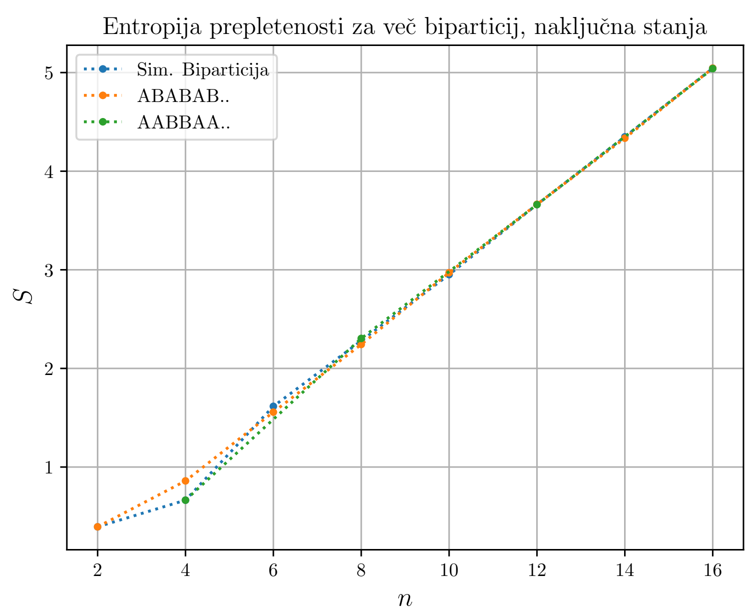
Na sliki je entropija prepletenosti v odvisnosti od velikosti particije A k za več dolžine verige n za primer particije, ko so vsi spini v A na levi strani verige, B pa na desni. Začnemo z osnovnim stanjem Heisenbergovega modela z odprtimi robnimi pogoji. Spet opazimo, nekakšne oscilacije v entropiji.



Na sliki je entropija prepletenosti v odvisnosti od n za primer alternirajoče biparticije (torej $ABAB\ldots$). Začnemo z osnovnim stanjem Heisenbergovega modela. Naraščanje entropije z n je kar linearno, razlika med odprtimi in periodičnimi robnimi pogoji pa je konstanten offset. V tem primeru entropije ne moramo izračunati iz navadnega algoritma, ampak moramo Schmidtove koeficiente izračunati iz enega samega SVD-ja primerno preoblikovane matrike.



Na sliki je entropija prepletenosti v odvisnosti od n za primer biparticije AABBAA... Začnemo z osnovnim stanjem Heisenbergovega modela. Naraščanje entropije z n je spet linearno, razlika med odprtimi in periodičnimi robnimi pogoji pa je konstanten offset. V tem primeru entropije ne moramo izračunati iz navadnega algoritma, ampak moramo Schmidtove koeficiente izračunati iz enega samega SVD-ja primerno preoblikovane matrike.



Za konec sem se spet vrnil k naključno izbranem (Gaussovsko porazdeljeni koeficienti) stanju in pogledal entropijo za nekaj biparticij. Stanje za vsak n je neodvisno žrebano. Opazimo, da so entropije pri vseh particijah približno enake.