

# DMRG

## 一、文件说明

- 1) Sub180221.py: 老师提供的张量运算文件;
- 2) Simple\_dmrg.py: 课件上提到的传统 DMRG 算法实现, 原文件计算 Heisenberg 模型。修改了其中的哈密顿算符, 可以计算 Ising 模型的能量;
- 3) Exact\_Diagonalization.py: 使用矩阵直积表示 Ising 模型哈密顿算符, 精确对角化求解基态能量、基态波函数, 并在此基础上计算每一格点上的  $\langle S_x \rangle$  与  $\langle S_z \rangle$ ;
- 4) MPS\_OneSite.py: 老师提供的用矩阵乘积态方式实现的 DMRG 算法, 原文件计算 Heisenberg 模型。修改了其中哈密顿量的矩阵乘积算符, 可以计算 Ising 模型基态能量、基态波函数, 并在此基础上实现了计算每一格点上  $\langle S_x \rangle$  与  $\langle S_z \rangle$  值的功能;
- 5) MPS\_TwoSite.py: 在 MPS\_OneSite.py 基础上, 将单点优化改写为两点优化。在原有的功能基础上增加了在扫描优化时求纠缠熵的功能。

纠缠熵求解:

$$T_1 * T_2 = T_{\text{mix}};$$

$$H_{\text{eff}} * T_{\text{mix}} = E * T_{\text{mix}};$$

$$\text{SVD}(T_{\text{mix}}) = T_1, s, T_2;$$

$$S = -\sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 * \ln s_{\alpha}^2;$$

## 二、结果说明

### 1、基态能量对比

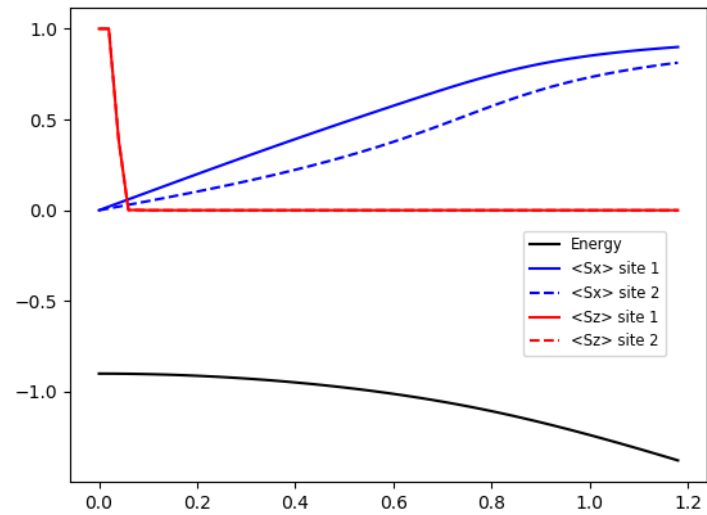
Energy (g=1)		Ns = 10	Ns = 16	Ns = 20
Simple_dmrg		-1.238149	-1.251024	-1.255390
	Dmax=3	-1.237926	-1.250530	-1.254751
MPS_OneSite	Dmax=4	-1.238148	-1.251018	-1.255379
	Dmax=3	-1.237926	-1.250530	-1.254750
MPS_TwoSite	Dmax=4	-1.238148	-1.251018	-1.255378
	Dmax=3	-1.237926	-1.250530	-1.254750
Exact_Diagonalization		-1.238149	\	\

固定  $g=1$ , 计算不同  $N_s$  情况下的基态能量。可以看出四种不同方法的结果几乎完全相同, 侧面证明了四种方法的正确性。同时, 对比  $D_{\text{max}}=3$  与  $D_{\text{max}}=4$  两种情况, 发现  $D_{\text{max}}$  增加确实能有效地增加 MPS 方法的计算精度。而 Simple\_dmrg 中的近似相当于  $D_{\text{max}}=40$ , 在  $N_s=10$  的条件下与精确对角化能量相同。对更大的两个体系, 没有使用对称性优化的精确对角化短时间无法得到结果。

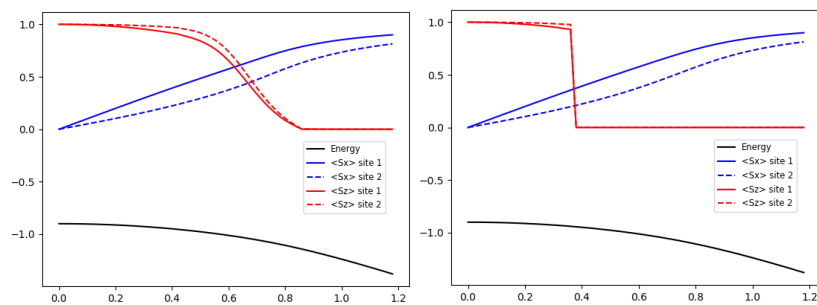
## 2、各物理量随 $g$ 的变化趋势

以下各图中 **site1** 表示一维链两端的格点，**site2** 表示其它一维链中间的格点。

### 1) 精确对角化方法的计算结果：

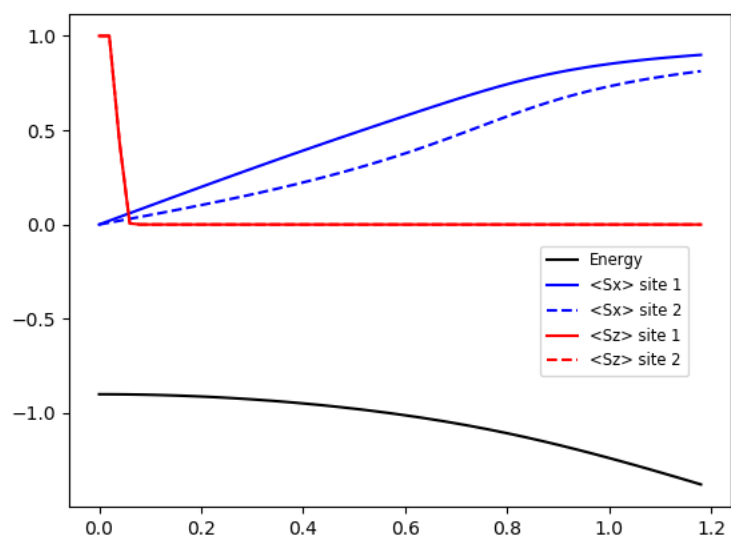


### 2) MPS\_DMRG 单点优化的结果：



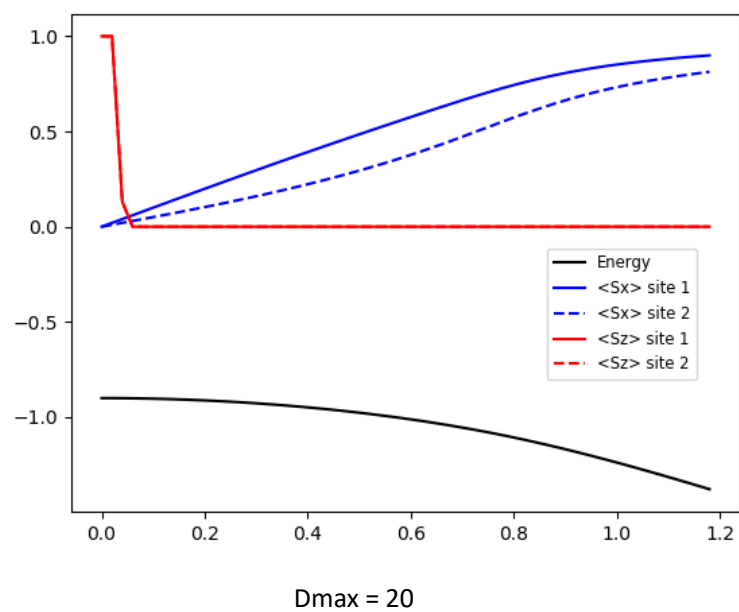
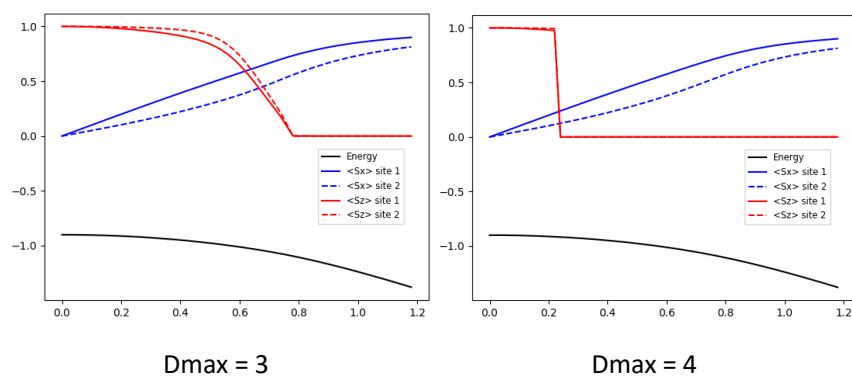
$D_{\max} = 3$

$D_{\max} = 4$

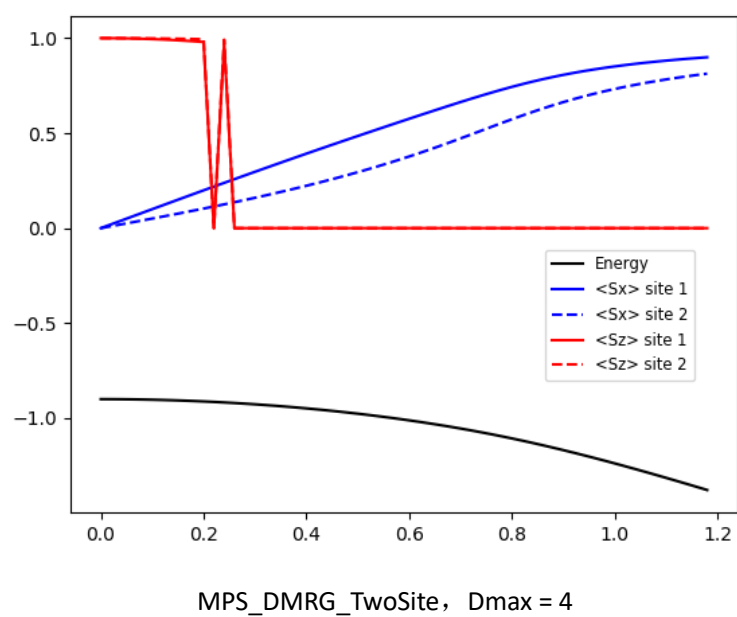


$D_{\max} = 20$

### 3) MPS\_DMRG 两点优化的结果:



### 4) 异常结果



对比各方法的计算结果，发现 $\langle Sz \rangle$ 的计算结果不容易收敛。由精确对角化结果可知， $\langle Sz \rangle$ 仅在  $g \approx 0$  时为 1，其余情况为 0。而在 DMRG 算法的结果中， $\langle Sz \rangle$ 的值需要用较大的  $D_{\max}$  值，即更高精度的近似才能接近精确对角化结果。

在 MPS\_DMRG\_TwoSite ，  $D_{\max} = 4$  的条件下计算，有时出现如图的异常情况，暂时还不清楚原因。

3、纠缠熵结果

L->R 时， $S[i]$ 是格点  $i$  与格点  $i+1$  之间的纠缠熵；

R->L 时， $S[i]$ 是格点  $i$  与格点  $i-1$  之间的纠缠熵；

S	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
L->R	0.2252	0.1858	0.3243	0.2593	0.2789	0.2277	0.3584	0.3283	0.2647	None
R->L	None	0.2648	0.3287	0.3593	0.3743	0.3787	0.3737	0.3584	0.3283	0.2647
L->R	0.2648	0.3287	0.3593	0.3744	0.3790	0.3744	0.3593	0.3287	0.2649	None
R->L	None	0.2649	0.3287	0.3593	0.3744	0.3790	0.3744	0.3593	0.3287	0.2649

上表结果为  $N_s = 10$ ， $D_{\max} = 4$ ， $g=1$  时的计算结果，可以发现在扫描过程中纠缠熵逐渐增大。