Metode DMRG

Miha Čančula

13. maj 2013

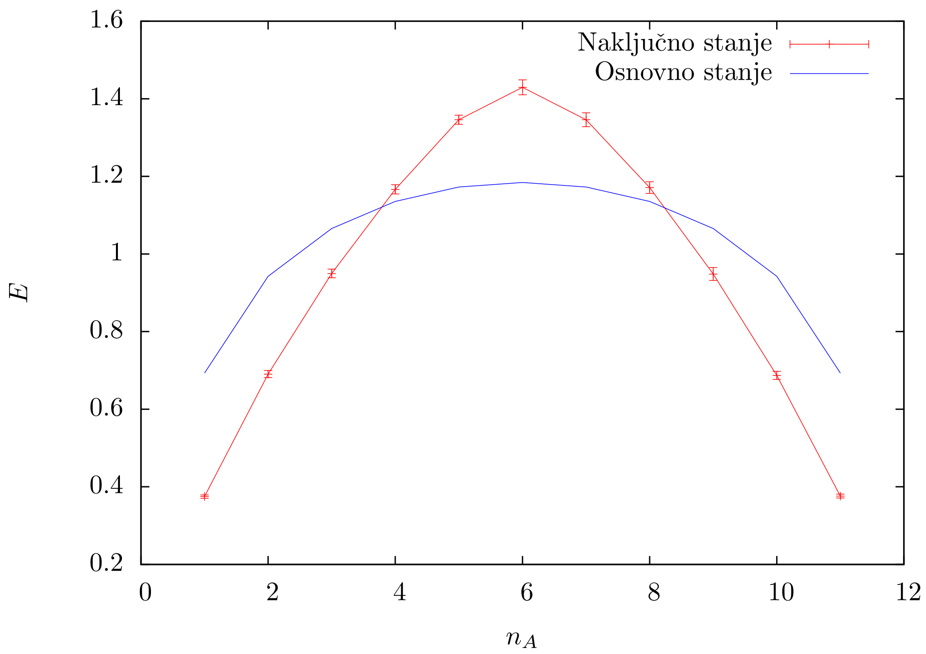
1 Entropija prepletenosti

Entropijo prepletenosti stanja Ψ izračunamo tako, da vektor Ψ pretvorimo v matriko, kjer stanje spinov v območju A indeksira stolpec matrike, stanje spinov v območju B pa vrstico. Za takšno matriko lahko z razcepom SVD izračunamo singularne vrednosti oz. Schmidtove koeficiente λ_μ. Entropija prepletenosti je tedaj enaka

$$E = -\sum_\mu \lambda_\mu^2 \log \lambda_\mu^2 \tag{1}$$

1.1 Kompaktni območji

Če je v območju A prvih n_A spinov, ostali pa v območju B, je pretvorba vektorja Ψ v matriko enostavna. Vektor razdelimo na segmente dolžine $N_A = 2^{n_A}$, nato pa ti segmenti postanejo stolpci matrike. V programu `Octave` temu ustreza funkcija `reshape`. Operacija je težavnejša, če je območje A bolj zapleteno, na primer če izberemo vsak drugi spin. Entropijo prepletenosti sem računal za različne particije, izbiral sem različne velikosti za n in n_A, nato pa izračunal entropijo prepletenosti za osnovno stanje in nekaj naključnih stanj. Za vsako izbiro n_A sem generiral 30 naključnih stanj.

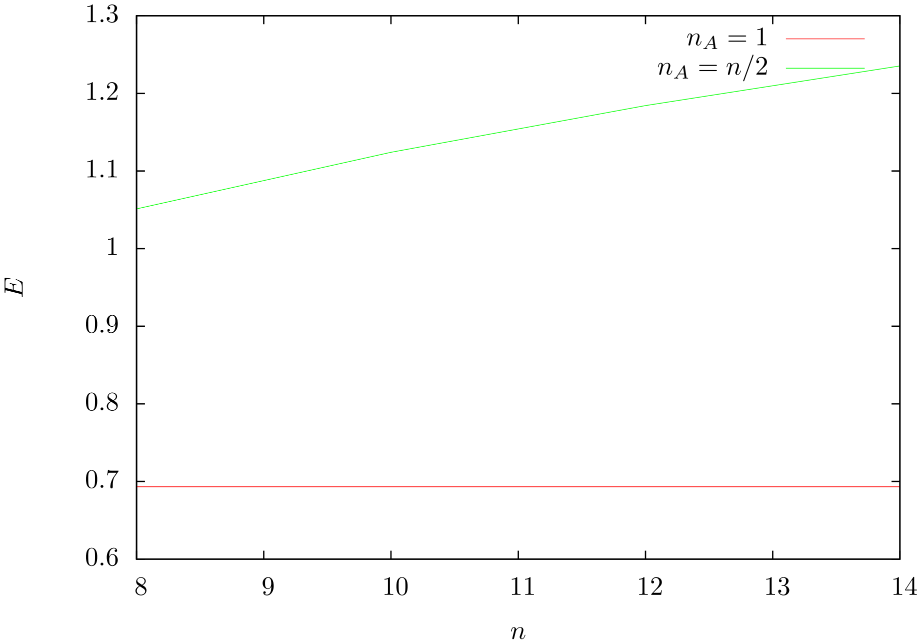


Slika 1: Entropija prepletenosti v odvisnosti od velikosti območja A. Obe območji sta kompaktni.

Ne glede na izbiro stanja je entropija prepletenosti najvišja, če sta območji A in B enako veliki, in je simetrična na zamenjavo območij.

1.2 Odvisnost od velikosti sistema

Za oceno termodinamske limite je uporabna zlasti odvisnost od velikosti sistem n. Pri nekaj različnih velikostih sem izračunal entropije delitve na dve enaki polovici in delitve, kjer je v območju A le en spin.

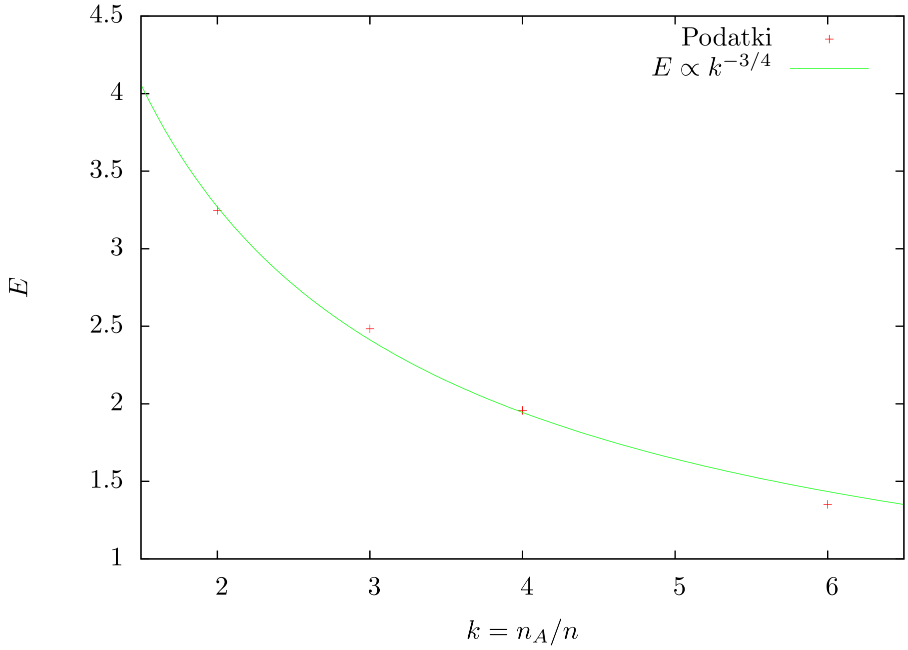


Slika 2: Entropija prepletenosti v odvisnosti od velikosti sistema n. Obe območji sta kompaktni in enako veliki.

Entropija delitve z $n_A = 1$ ni odvisna od velikosti sistema, medtem ko entropije delitve na enaki območji opazno narašča z velikostjo. V skladu s prejšnjim grafom lahko sklepamo, da je entropija prepletenosti odvisna predvsem od velikosti manjšega izmed območij.

1.3 Nekompaktni območji

Opazoval sem tudi obnašanje entropije, ko ne vzamemo kompaktnih območji, ampak k A štejemo vsak k-ti spin. S tem seveda spremenimo število vezi na meji, takšnih vezi je točno $2/k$, če je $k \geq 2$.



Slika 3: Entropija prepletenosti med dvema nekompaktnima območjema.

Uporabil sem sistem velikosti $n = 12$, ki je precej deljivo število, zato da sem lahko za območje A lahko štel vsak drugi, vsak tretji, vsak četrti ali vsak šesti spin. Entropija prepletenosti kaže lepo odvisnost od števila vezi, $E \propto k^{-3/4}$.

2 Razcep na produkt matrik

Implementiral sem tudi algoritem za razcep poljubnega stanja Ψ na produkt matrik. Uporabil sem programsko okolje `Octave`, ki je primerno za delo z matrikami. Na vsakem koraku sem za preoblikovanje "gosenice" uporabil funkcijo `reshape`, tako da se mi ni bilo treba ukvarjati s preveč zankami in indeksi.

Pravilnost razcepa na matrični produkt je enostavno preverjati. Treba je le zmnožiti matrike med seboj in rezultat primerjati z ustreznim koeficientom stanja Ψ. Za točen razcep, kjer velikost matrik ni omejena, množenje matrik vrne rezultat, ki je pravilen do strojne natančnosti računalnika.

Implementacija v `Octave` je dostopna na internetu na naslovu `https://github.com/Noughmad/Sola/blob/master/Visje%20Racunske%20Metode/05_DMRG/mpa.m`. Priložena je funkcija, ki preverja pravilno delovanje za naključno stanje Ψ.