

Trotter-Suzukijev razcep, kubitne verige

Miha Čančula

24. marec 2013

1 Označevanje stanj

Račune sem opravljal v binarni bazi, katere lastna stanja so $|\underline{b}\rangle = |b_1 b_2 \dots b_n\rangle$, $b_i \in \{0, 1\}$. Ta baza je 2^n -dimenzionalna, torej vsako stanje opišemo z $N = 2^n$ koeficienti $\psi_{\underline{b}}$.

Za numerično računanje stanja predstavimo z vektorji, operatorje pa z matrikami. Bazne vektorje je koristno urediti tako, da bo računanje z njimi čim lažje in čim bolj učinkovito. To velja predvsem za konstrukcijo matrik operatorjev. Ker so matrike velike ($2^n \times 2^n$), je že sama njihova konstrukcija zamudna, če vsak element nastavimo posebej. V tej nalogi bomo uporabljali predvsem dvodelčne operatorje, ki delujejo na dva sosednja delca j in $j + 1$. Propagator U^2 je že takšen, Hamiltonov operator pa lahko zapišemo kot vsoto dvodelčnih operatorjev.

Izbral sem “binarno” ureditev stanj, torej takšno, kjer so bazna stanja urejena po vrednosti $\overline{b_1 b_2 \dots b_n}$, če jih zapišemo v obratnem vrstnem redu in interpretiramo kot dvojiška števila. Prekomernim zankam sem se izognil tako, da sem dvodelčni operator prevedel na matriko $N \times N$. Indeks delca j je določen tako, da ima stanje, kjer ima le prvi delec spin 1, indeks stanja 1.

J	$b_4 b_3 b_2 b_1$
0	0000
1	0001
2	0010
3	0011
4	0100
\vdots	\vdots
14	1110
15	1111

Dvodelčni operator $U^{(j)}$ meša le koeficiente $\psi_{b_1 b_2 \dots b_n}$, katerih indeksi b_i se razlikujejo kvečjemu na mestih j ali $j + 1$. Ker b_j in b_{j+1} lahko zavzameta štiri različne vrednosti, so takšni koeficienti vedno v skupinah po 4. V primeru $j = 1$ in gornjega oštevilčenja je prevod na matriko enostaven: V isti skupini so vedno štirje zaporedni koeficienti, zato je celotna matrika bločno diagonalna, kjer je vsak blok 4×4 matrika U .

$$\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} \\ U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} \\ U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} \\ & & & U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ & & & U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ & & & U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} \\ & & & U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Za $j > 1$ je razmislek malo bolj zapleten. Operator $U^{(2)}$ sklaplja stanja, kjer so enaki vsi indeksi razen b_2 in b_3 . Ena izmed takšnih skupin je $(0, 2, 4, 6)$. Osnovno matriko za U moramo torej “napihniti” na dimenzijo 8×8 , brez da bi delovala na ostale koeficiente. Če upoštevamo, da na enak način sklaplja tudi stanja $(1, 3, 5, 7)$, vidimo, da mora biti “napihnjena” matrika enaka matriki za U , kjer vsak element U_{ab} nadomestimo z matriko $U_{ab} \cdot \mathbb{1}_2$. To je ekvivalentno Kroneckerjevemu direktnemu produktu $U \otimes \mathbb{1}_2$. Stanja z višjimi indeksi J upoštevamo

enako kot prej, tako da bloke $U \otimes \mathbb{1}_2$ zložimo po diagonalni matrike.

$$\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} \\ U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} U_{11} & U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} & U_{14} \\ U_{21} & U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} & U_{24} \\ U_{31} & U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} & U_{34} \\ U_{41} & U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} & U_{44} \end{bmatrix} \quad (2)$$

Dvodelčni operator na poljubnem delcu j lahko predstavimo z matriko $N \times N$, kjer najprej ustvarimo blok $U \otimes \mathbb{1}_{2^{j-1}}$ dimenzije $4 \cdot 2^{j-1} \times 4 \cdot 2^{j-1}$. Iz 2^{n-j-1} takšnih blokov nato zložimo bločno diagonalno matriko.

Na težave naletimo le pri upoštevanju periodičnih robnih pogojev. Operator $U^{(n)}$ namreč sklaplja koeficiente, kjer se lahko razlikujeta le b_n in b_1 . Primera takšnih skupin sta $(0, 1, 8, 9)$ in $(6, 7, 14, 15)$. Torakt matrike na “napihujemo” enakomerno, ampak jo razdelimo na štiri bloke 2×2 in te štiri bloke postavimo na ustrezna mesta, da sklapljajo koeficiente $(0, 1, 2^{j-1}, 2^{j-1} + 1)$. Ostale skupine štirih koeficientov dobimo tako, da vsem štirim indeksom prištejemo poljuben večkratnik 2. Celotno matriko $N \times N$ dobimo tako, da “napihnjeno” matriko direktno množimo z diagonalno matriko $2^{j-2} \times 2^{j-2}$, ki ima na diagonalni enke na lihih mestih in ničle na sodih.

$$\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} \\ U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} A & \cdots & B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C & \cdots & D \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} A & & & B & & \\ & A & & B & & \\ & & \ddots & & \ddots & \\ C & & & D & & \\ & C & & D & & \\ & & \ddots & & \ddots & \end{bmatrix} \quad (3)$$

Celotni propagator je produkt vseh dvodelčnih propagatorjev. Ker ti med seboj ne komutirajo, smo produkt razcepili na produkta sodih in lihih členov.

$$U_N^{(lih)} = \prod_{j=1}^{n-1} U_N^{(j)}, \quad U_N^{(sod)} = \prod_{j=2}^n U_N^{(j)} \quad (4)$$

Členi znotraj vsakega izmed zgornjih produktov med seboj komutirajo, zato vrstni red množenja ni pomemben.

Na enak način skonstruiramo tudi matriko Hamiltonovega operatorja, tako da namesto U za začetno matriko uporabimo $h = \vec{\sigma} \otimes \vec{\sigma}$. Namesto produkta pa tam nastopa vsota, zato ne potrebujemo razcepa na sode in lihe člene.

$$H_N = \sum_{j=1}^n h_N^{(j)} \quad (5)$$

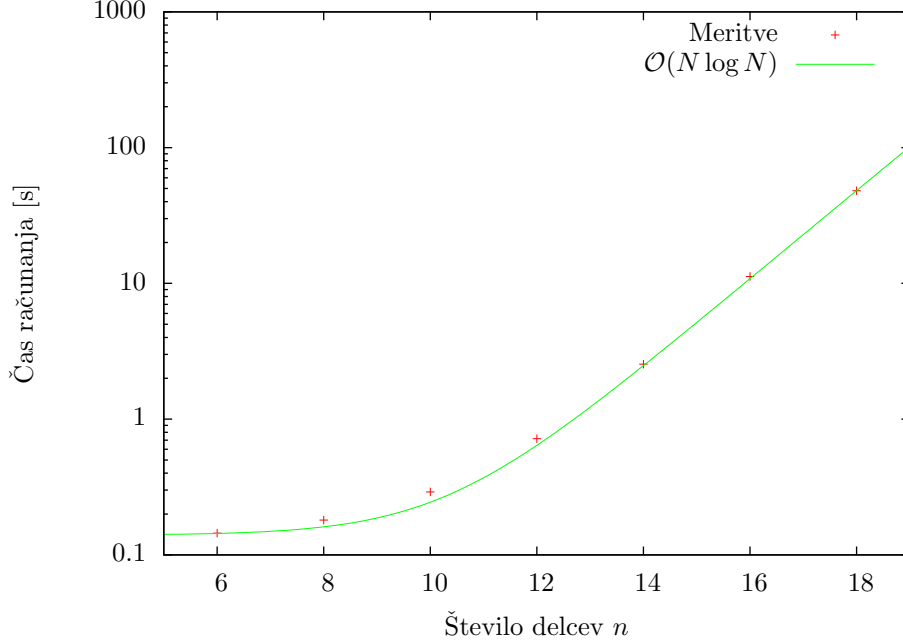
Ko enkrat izberemo velikost koraka Trotter-Suzukijev razcep, potrebujemo le majhno število različnih vrednosti z . Matrike propagatorja lahko zato izračunamo vnaprej, časovni razvoj posameznega stanja pa izračunamo kar z matričnim množenjem

$$|\psi'\rangle = U_N(z)|\psi\rangle \quad (6)$$

Matrike U_N so redke, zato celoten postopek vzame manj kot $\mathcal{O}(N^2)$ časa. V praksi se produktov iz enačbe (4) ne splača računati vnaprej, saj s tem izgubimo redkost matrik. Če namesto tega $|\psi\rangle$ množimo z vsako matriko posebej, porabimo za to ravno $\mathcal{O}(n2^n) = \mathcal{O}(N \log N)$ operacij. Vsaka matrika ima največ $4N$ neničelnih elementov, vseh matrik pa je n . V našem primeru, ko je tudi sama matrika U redka, je neničelnih elementov še manj.

2 Časovna zahtevnost

Računanje sem implementiral v programu **GNU Octave**, ki je posebej primeren za enostavno operiranje z redkimi matrikami. Matrike $N \times N$ sem skonstruiral po zgornjem postopku, tako da sem večkrat uporabil direktni produkt matrik namesto zank v programu. Pri velikosti problema $n = 16$ in $n = 18$ je program za konstrukcijo matrik porabil približno toliko časa, kot za dva koraka propagacije s shemo S_4 , torej približno 15 množenj s celotnim propagatorjem.



Slika 1: Trajanje računanja v odvisnosti od velikosti problema n . Podatki se dobro prilegajo krivulji $A + Bn2^n$.

Trajanje računanja se ujema s pričakovano odvisnostjo $\mathcal{O}(N \log N)$. Odstopanje je le pri majhnih n , kjer moramo upoštevati še majhnen konstantni člen za “overhead”.

3 Termalno povprečje

Najprej sem z zgornjo metodo računal pričakovane vrednosti proste energije in energije. Za to uporabimo realen z , ki je povezan s temperaturo prek zveze

$$z = \frac{\beta}{2} = \frac{1}{2k_B T} \quad (7)$$

Fazna vsota Z je enaka pričakovani normi vektorja $|\psi\rangle$, po tem ko smo ga propagirali z $U_N(z)$. Pričakovana energija $\langle H \rangle_\beta$ pa je enaka povprečju matričnega elementa $\langle \psi | H | \psi \rangle$, spet po propagaciji z $U_N(z)$.

Obe povprečji sem izračunal tako, da sem vzel N_ψ naključnih začetnih vektorjev, jih propagiral in nato izračunal željeno vrednost. S tem dobimo tako pričakovano vrednost kot tudi statistiko napak. Vsakič sem z razdelil na večje število manjših korakov, ki so bili v brezdimenzijskih enotah veliki največ 10^{-3} . Velikosti koraka nisem prilagajal glede na vrednosti z , saj naj zanimajo čimbolj natančne pričakovane vrednosti v nizkotemperaturni limiti, torej pri velikih β .

4 Časovna korelacija

Za simuliranje časovnega razvoja pri neskončni temperaturi uporabimo imaginaren z , ki je po kvantni mehaniki enak $z = it$.

5 Difuzija