

Trotter-Suzukijev razcep, kubitne verige

Miha Čančula

25. 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.

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

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.

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

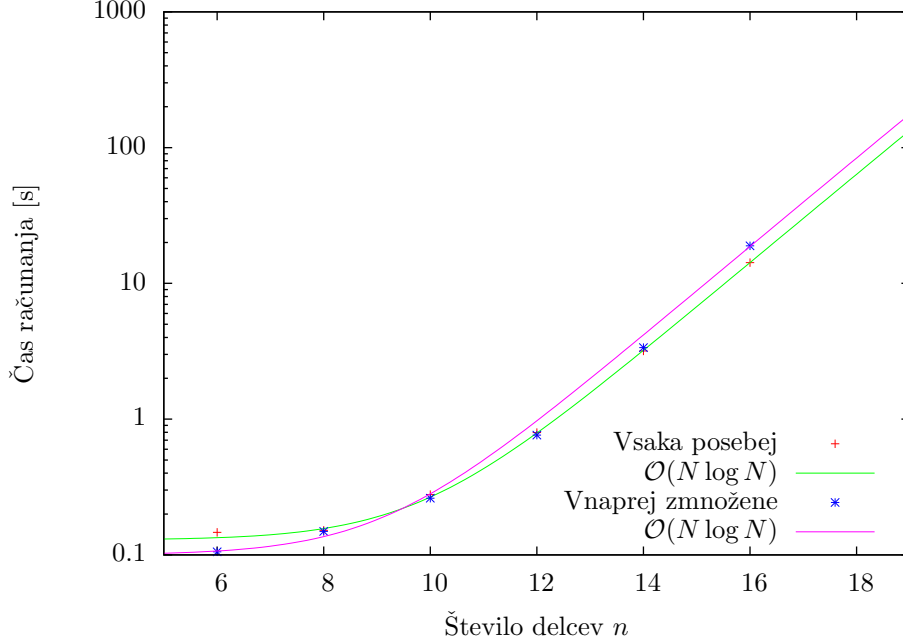
Ko enkrat izberemo velikost koraka Trotter-Suzukijev razcep, potrebujemo le majhno število različnih vrednosti z . Matrike propagatorja lahko zato izračunamo vnaprej, časovni razvoj posameznega stanja pa izračunamo kar z matričnim množenjem

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

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. Večjih n nisem mogel doseči, ker je računalniku zmanjkalo pomnilnika.



Slika 1: Trajanje računanja v odvisnosti od velikosti problema n . Podatki se dobro prilegajo krivulji $A + Bn^{2^n}$.

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”.

Na grafu vidimo tudi razliko med pristopom, ko sode in lihe napihnjene dvodelčne propagatorje vnaprej zmožimo in tistim, ko stanje množimo z vsakim posebej. Velike razlike v trajanju računa ne opazimo, je pa predhodno množenje ugodno predvsem pri majhnem številu delcev, saj imamo manj knjigovodstva. Pri večjem številu delcev pa se večkratno množenje izkaže za hitrejšo, saj pri tem bolje izkoristimo redkost matrik.

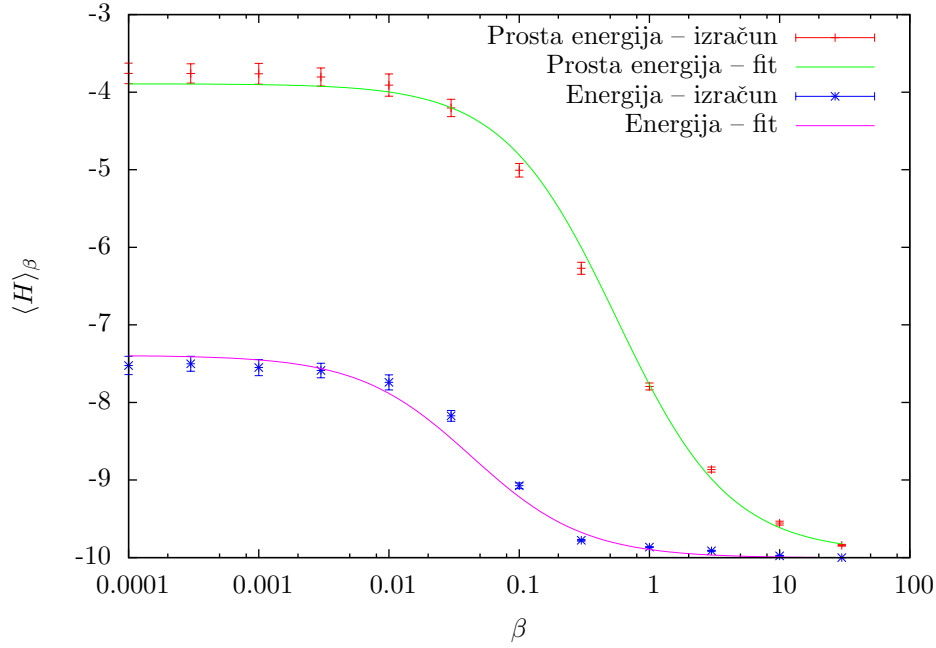
3 Termalno povprečje

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 .



Slika 2: Odvisnost proste energije F in povprečne energije $\langle H \rangle$ od inverzne temperature β

Obe termodinamski spremenljivki se s temperaturo spreminjata kot

$$\{F, \langle H \rangle\} = -A + \frac{B}{1 + C\beta} \quad (8)$$

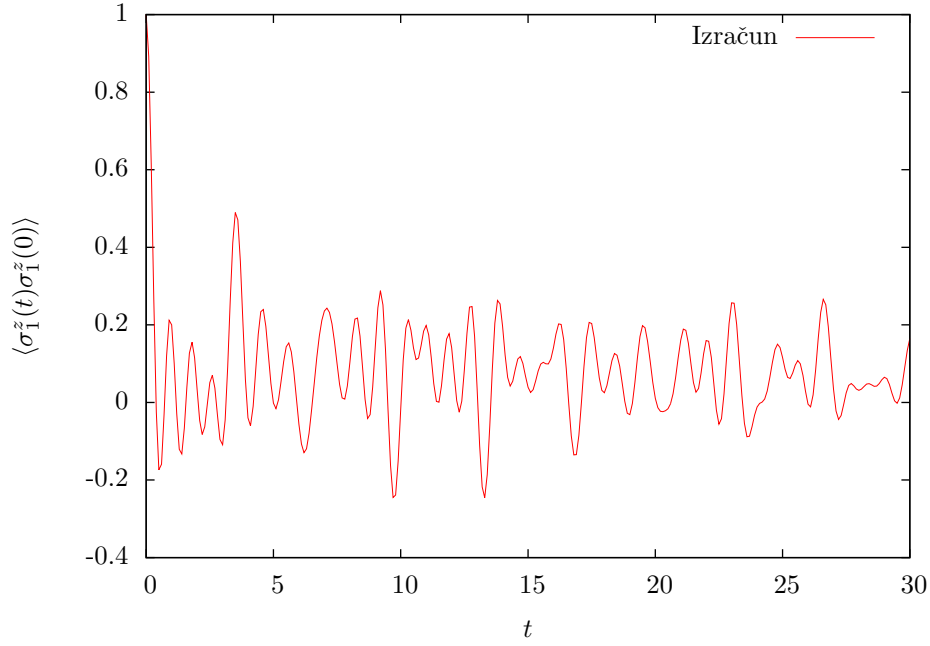
Konstanti B in C sta različni za vsako izmed spremenljivk, konstanta A pa je v obeh primerih enaka številu delcev $A = n$. To je razumljivo, saj je v nizkotemperaturni limiti, ko gre $\beta \rightarrow \infty$, sistem vedno v osnovnem stanju. Osnovno stanje anti feromagnetnega sistema s sodim številom delcev je takšno, da imata vsaka dva soseda nasprotna spina, pri izbrani normalizaciji pa ima takšno stanje energijo $-n$. Pri nizkih temperaturi gre tudi razlika $E - F = TS$, ki je sorazmerna s temperaturo, proti nič, kar vidimo tudi na zgornjem grafu.

4 Časovna korelacija

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

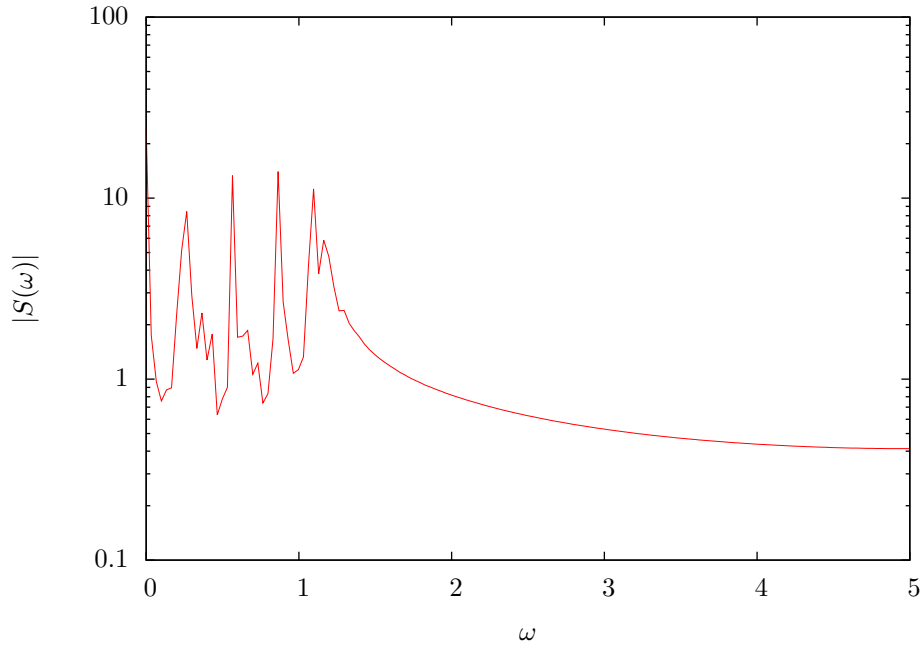
4.1 Magnetizacija

Matrika enodelčnega operatorja σ_1^z je posebej enostavna v binarni bazi, saj bazna stanja s sodim J množi z 1, stanja z lihimi J pa z -1 . Matrika X je torej diagonalna, po diagonali pa se izmenjujejo 1 in -1 .



Slika 3: Časovna korelacija enodelčne magnetizacije σ_1^z

Opazimo, da korelacija močno niha. Model je antiferomagnet, torej pričakujemo tudi negativno korelacijo. Nihanje očitno ni čisto sinusno, vseeno pa izgleda kot vsota večih sinusov. Da bi to preveril sem naredil še Fourierovo transformacijo avtokorelacijske funkcije, ki ji enaka kvadratu absolutne vrednosti Fourierove transformiranke magnetizacije.

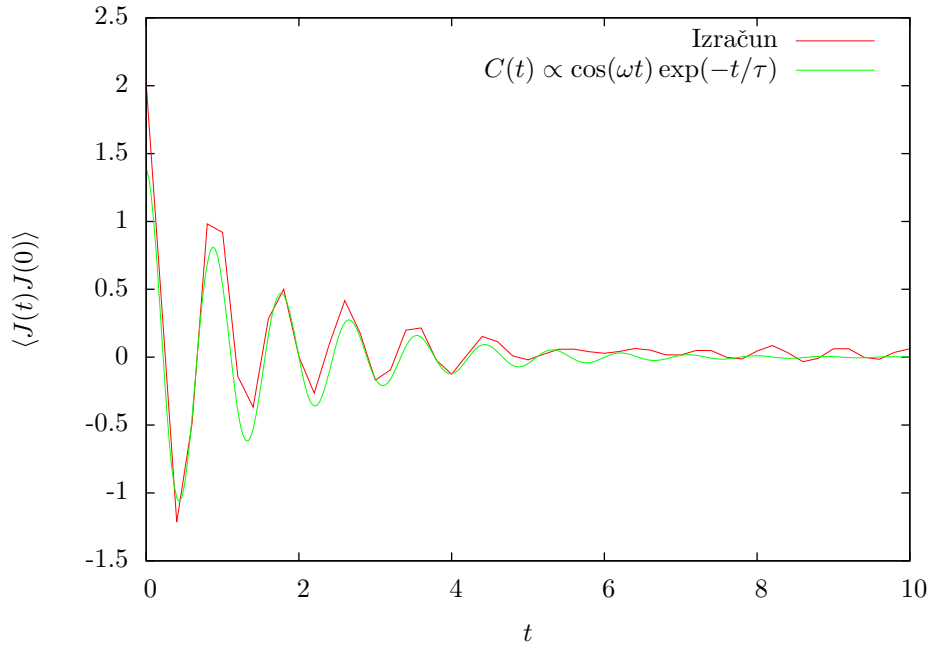


Slika 4: Fourierova transformiranika časovne korelacije enodelčne magnetizacije σ_1^z

Vidimo štiri jasno vrhove pri približno enakomerno razmaknjenih frekvencah $\omega = k\omega_0$. Ostrina vrhov nam pove, da je korelacijska funkcija v dobrem približku periodična in le počasi pada proti 0.

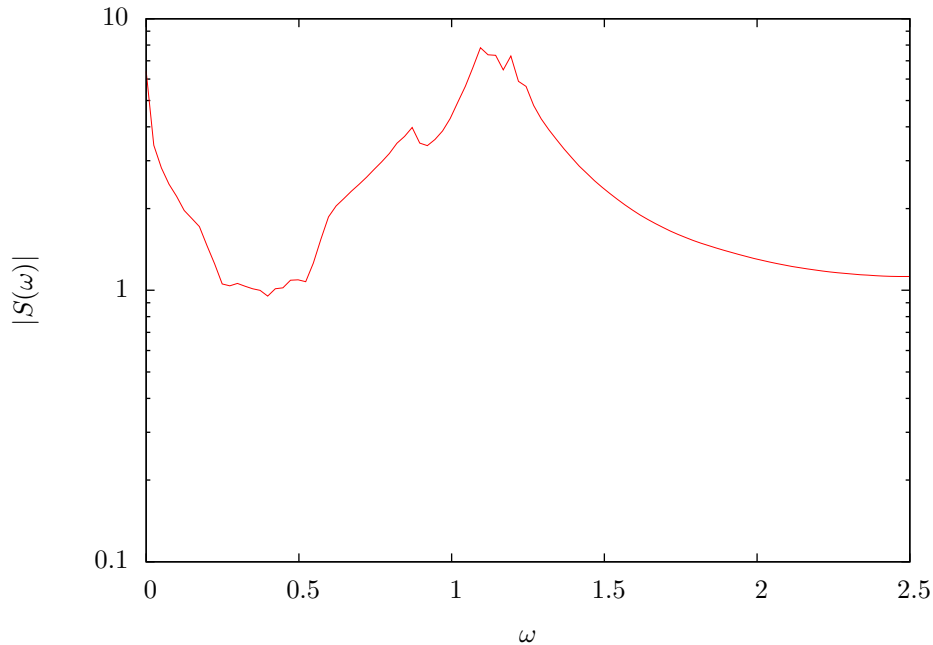
4.2 Spinski tok

Pri obravnavi spinskega toka J si pomagamo z dejstvom, da je operator J vsota dvodelčnih operatorjev $J_j = \sigma_j^x \sigma_{j+1}^y - \sigma_j^y \sigma_{j+1}^x$. Začnemo torej z matriko $J_0 = \sigma^x \otimes \sigma^y - \sigma^y \otimes \sigma^x$ dimenzije 4×4 , ki jo po zgoraj opisanem postopku “napihnemo” v matriko $N \times N$.



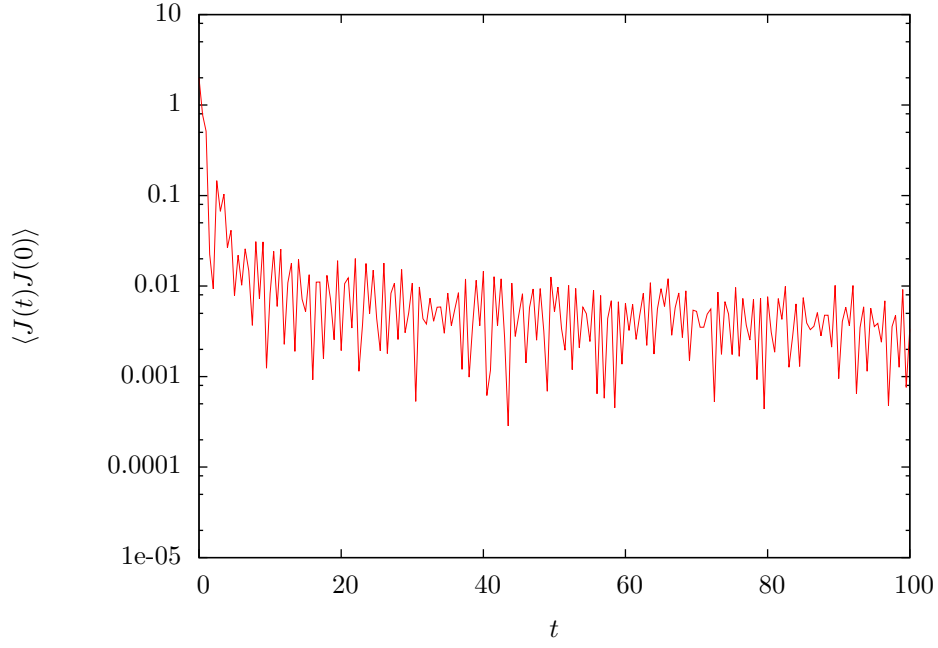
Slika 5: Časovna korelacija spinskega toka J

V primerjavi z magnetizacijo pa avtokorelacijska funkcija spinskega toka pada vidno hitreje. Za majhne čase jo lahko približamo z izrazom z dušenim nihanjem, $C(t) \propto \cos(\omega t) \exp(-t/\tau)$.



Slika 6: Fourierova transformiranka časovne korelacije spinskega toka J

Na Fourierovi transformiranki je viden en sam vrh, ki je manj oster. Po daljšem času ($t \geq 10$) pa nihanje ne zamre popolnoma, ampak utripa, kar je bolj vidno na logaritemskem grafu spodaj.



Slika 7: Logaritemski graf korelacije spinskega toka v daljšem časovnem intervalu

Tudi na logaritemskem grafu vidimo najprej hitro padanje ($\exp(-t/\tau)$ s $\tau \approx 5/3$), ki pa se ustavi pri amplitudi okrog 0.01. Če ta del zanemarimo, lahko difuzijsko konstanto izračunamo kot

$$D = \int_0^\infty A e^{-t/\tau} dt = A\tau \approx \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{3} = \frac{5}{2} \quad (9)$$

Z upoštevanjem, da korelacija ne pade čisto na nič, ampak se tudi po dolgem času ustali pri neki majhni a končni vrednosti, zgornji integral divergira in je difuzijska konstanta neskončna.