Metode DMRG

Miha Čančula

13. maj 2013

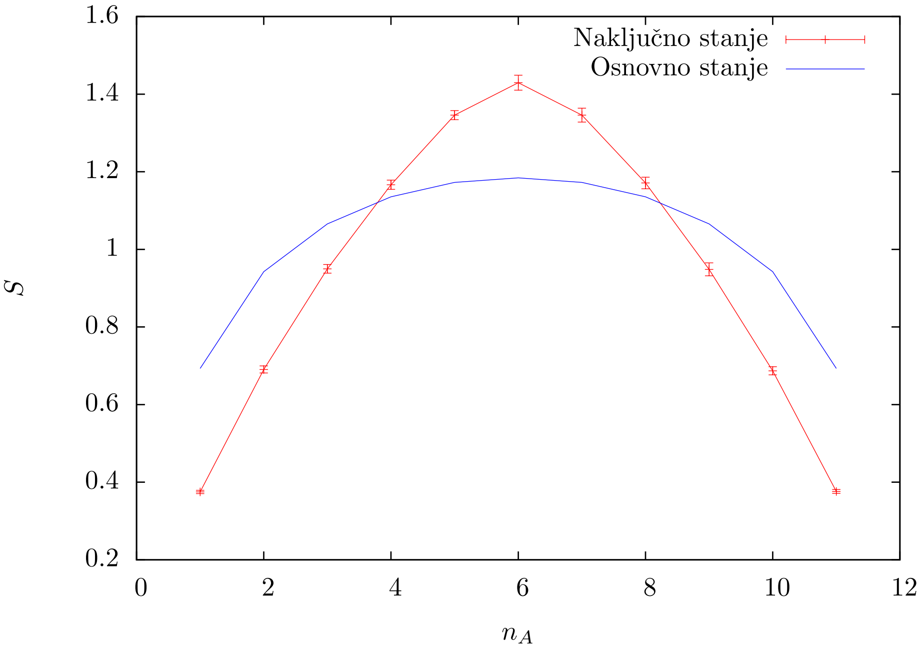
1 Entropija prepletenosti

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

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

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.

Zakon površine trdi, da je entropija prepletenosti navzgor omejena z dolžino meje med območjema. V primeru delitve na dve povezani območji je dolžina meje enaka 2. Pravilnost tega zakona sem preverjal tako, da sem izbral različne velikosti 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.

2 Razcep na produkt matrik

Implementiral sem tudi algoritem za razcep poljubnega stanja Ψ na produkt matrik.

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. Žal pa točen razcep porabi veliko računalniškega spomina, zato je bolj učinkovito odstraniti najmanjše Schmidtove koeficiente in s tem zmanjšati matrike. To sem naredil na dva načina: takoj sem zanemaril vse singularne vrednosti, manjše ε, če je velikost matrik preveč narasla pa sem upošteval le prvih M vrednosti. Beležil sem vsoto kvadratov vseh "odrezanih" singularne vrednosti, saj je ta merilo za napako.