

Bachelor Arbeit

Philipp Haim

7. September 2017

Zusammenfassung

Inhaltsverzeichnis

1	Matrix-Produkt Zustände	2
1.1	Konstruktion eines MPS	2
1.2	Kompression eines MPS	3
1.3	Überlapp und Erwartungswerte	5
1.4	Zeitentwicklung	6
1.5	Stochastische Matrix-Produkt Zustände	7
1.6	Gemeinsame Information und Entropie	8
2	Das ASEP-Modell	10
2.1	Mathematische Beschreibung	10
2.2	Analytische Lösung	11
3	Implementierung	14
3.1	Implementierung im MPS-Formalismus	14
3.2	Dichte-Verteilung und Fluss	15
3.2.1	MPS	15
3.2.2	sMPS	17
4	Fazit	21
5	Anhang	22
5.1	Trotter-Zerlegung	22
5.2	SVD und NMF	22
5.3	Linearer Filter	22

Kapitel 1

Matrix-Produkt Zustände

Man betrachte ein System aus L Teilchen an festen Positionen. Jedes dieser Teilchen habe einen lokalen Konfigurationsraum mit Dimension d . Es kann nun jeder Zustand geschrieben werden als

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (1.1)$$

Die Anzahl der nötigen Koeffizienten $c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$ steigt dabei mit d^L an, also exponentiell mit der Anzahl der Teilchen in dem System. Für große Systeme macht dies Rechnungen mit den Zuständen über die Koeffizienten unmöglich. Wie wir in Abschnitt 1.2 sehen werden, kann die Anzahl der benötigten Koeffizienten effizient reduziert werden, wenn man die Koeffizienten als Produkt von L Matrizen darstellt.[4]

$$c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} = A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_{L-1}} A^{\sigma_L} \quad (1.2)$$

Man spricht hierbei von einem Matrix-Produkt Zustand (MPS).¹ Es soll daher zunächst gezeigt werden, wie ein allgemeiner Zustand in die Form 1.2 gebracht werden kann.

1.1 Konstruktion eines MPS

Dafür werden, wie in Gleichung 1.3 ausgeführt, die Koeffizienten in einen $(d \times d^{L-1})$ Vektor umgeschrieben. Dieser wird anschließend mit einer Singulärwertzerlegung in das Produkt dreier Matrizen USV' aufgeteilt. Zuletzt wird die $(d \times d)$ Matrix U in d $(1 \times d)$ Matrizen A^{σ_i} aufgeteilt.

$$\begin{aligned} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} &= \Psi_{\sigma_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} = \sum_{a_1} U_{\sigma_1, a_1} S_{a_1, a_1} V_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}^\dagger \\ &\equiv \sum_{a_1} U_{\sigma_1, a_1} \tilde{c}_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} = \sum_{a_1} A_{1, a_1}^{\sigma_1} \tilde{c}_{a_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Im nächsten Schritt wird \tilde{c} zu einer $(d^2 \times d^{L-2})$ Matrix umgeformt und erneut wie im ersten Schritt zerlegt. Dies wird wiederholt, bis nur noch eine $(d \times d)$ Matrix übrig bleibt, welche in die d A^{σ_L} Matrizen zerlegt wird.

$$\begin{aligned} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} &= \sum_{a_1} \sum_{a_2} A_{1, a_1}^{\sigma_1} U_{(a_1 \sigma_2), a_2} S_{a_2, a_2} V_{a_2, (\sigma_3, \dots, \sigma_L)}^\dagger \\ &= \sum_{a_1} \sum_{a_2} A_{1, a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \Psi_{(a_2, \sigma_3), (\sigma_4, \dots, \sigma_L)} \\ &= \dots = \sum_{a_1, \dots, a_{L-1}} A_{1, a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \dots A_{a_{L-2}, a_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} A_{a_{L-1}, 1}^{\sigma_L} \end{aligned} \quad (1.4)$$

Es ist anzumerken, dass es sich bei den Matrizen A^{σ_i} und A^{σ_j} für $i \neq j$ um unterschiedliche Matrizen handelt. Um die Notation einfach zu halten, wird auf eine explizite Unterscheidung allerdings verzichtet.

¹Abkürzung der englischen Bezeichnung *Matrix-Product State*

Absatz
umschrei-
ben, um
MPS zu
motivieren

Da die in Gleichung 1.4 auftretenden Summen als Matrixmultiplikationen aufgefasst werden können, liegen die Koeffizienten nun in der Form aus Gleichung 1.2 vor.

Die Matrizen A erfüllen aufgrund ihrer Konstruktion einige spezielle Eigenschaften. Da die U Matrizen der Singulärwertzerlegung links-normalisiert sind², gilt für alle Matrizen A^{σ_i} , dass³

$$\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i \dagger} A^{\sigma_i} = \mathbb{1} \quad (1.5)$$

Mit Schollwöck klären

Weiters ist die Dimension der einzelnen Matrizen durch ihre Konstruktion fest bestimmt. Diese sind für $A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_L}$ gegeben durch $(1 \times d)(d \times d^2) \dots (d^2 \times d)(d \times 1)$. Für eine gerade Anzahl an Teilchen haben die beiden innersten Matrizen Dimension $(d^{\frac{L}{2}-1} \times d^{\frac{L}{2}})(d^{\frac{L}{2}} \times d^{\frac{L}{2}-1})$, während für eine ungerade Anzahl die innerste Matrix Dimension $(d^{\frac{L-1}{2}} \times d^{\frac{L-1}{2}})$ hat.

Es ist anzumerken, dass dies nur eine mögliche Konstruktion eines MPS ist. Alternativ kann die Zerlegung von c auch bei dem letzten Koeffizienten begonnen werden. Man spricht von einem rechts-kanonischen MPS. Wenn bis zu einer Position $l < L$ eine links-kanonische, und von da an rechts-kanonische Zerlegung vorgenommen wird, ist von einem gemischt-kanonischen MPS die Rede. In diesem Fall erhält man einen MPS der Form

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_l} S B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L} |\sigma\rangle \quad (1.6)$$

S ist dabei eine Diagonalmatrix, alle A Matrizen sind links-orthogonal und alle B Matrizen rechts-orthogonal.

Für viele Anwendungen ist es nötig, einen Zustand als eine Schmidt-Zerlegung darzustellen (vgl. 1.2, 1.6). Darunter versteht man eine Faktorisierung des Systems in zwei Untersysteme A und B . Die Basis muss dazu aufgeteilt werden in das Tensorprodukt von zwei Basen, welche den Vektorraum von A und B aufspannen, also $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle_A \otimes |\varphi_i\rangle_B$. Aus der gemischt-kanonischen Zerlegung kann einfach eine solche Schmidt-Zerlegung des Zustandes konstruiert werden. Dazu führt man folgende neue Vektoren ein:

$$\begin{aligned} |a_l\rangle_A &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} (A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_l})_{1, a_l} |\sigma_1 \dots \sigma_l\rangle \\ |a_l\rangle_B &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} (B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L})_{a_l, 1} |\sigma_{l+1} \dots \sigma_L\rangle \end{aligned} \quad (1.7)$$

Da diese Vektoren aufgrund ihrer Konstruktion eine Orthogonalbasis bilden, lässt sich der Zustand $|\psi\rangle$ schreiben als

$$|\psi\rangle = \sum_{a_l} S_{a_l, a_l} |a_l\rangle_A |a_l\rangle_B \quad (1.8)$$

1.2 Kompression eines MPS

Die Zerlegung eines Zustands in einen MPS bringt im Allgemeinen noch keinen numerischen Vorteil, da die Matrizengröße erneut exponentiell steigt. Es ist also nötig, die Dimension der Matrizen signifikant zu reduzieren, und dabei einen möglichst kleinen Fehler in den Koeffizienten c zu machen. Der einfachste Weg, dies zu machen führt erneut über die Singulärwertzerlegung.

Wir betrachten einen gemischt-kanonischen MPS mit der Diagonalmatrix S an Position l . Wie in Abschnitt 1.1 gezeigt, lässt sich aus dieser Form die Schmidt-Zerlegung $|\psi\rangle = \sum_{a_l=1}^{D'} S_{a_l, a_l} |a_l\rangle_A |a_l\rangle_B$ des Zustandes ablesen. Dabei ist D' die Dimension der Diagonalmatrix. Ziel ist es nun, diese Dimension auf $D < D'$ zu reduzieren, während die 2-Norm des Zustandes möglichst unverändert bleiben soll. Die einfachste Art dies zu erreichen ist, die Summe auf die D größten Einträge zu beschränken.

²D.h. $U^\dagger U = \mathbb{1}$

³Im weiteren Text wird auch ein Satz Matrizen A^{σ_i} der diese Eigenschaft erfüllt links-normalisiert genannt

Diese Kompression kann einfach auf den MPS Formalismus übertragen werden, indem von der Matrix A^{σ_l} nur die ersten D Spalten, von $B^{\sigma_{l+1}}$ die ersten D Zeilen und von S die ersten D Zeilen und Spalten behalten werden.⁴ Es ist zu beachten, dass dabei die Norm des Zustandes nicht erhalten bleibt.

Um diese Dimensionsreduktion für die Matrizen A^{σ_l} und $B^{\sigma_{l+1}}$ durchzuführen wurde vorausgesetzt, dass eine Schmidt-Zerlegung des System vorliegen an dem Gitterplatz l vorliegt. Um für den gesamten MPS die maximale Dimension der Matrizen auf D zu reduzieren, muss daher für jedes l diese Zerlegung 1.8 vorgenommen werden. Dafür nehme man im Folgenden an, es liegt ein links-kanonischer MPS vor.⁵ Zunächst werden die Matrizen A^{σ_L} zu einer Matrix zusammengefasst, indem der Index σ_L mit dem Spalten-Index zusammengefasst wird.

$$A_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma_i} \rightarrow A_{a_{i-1}, (\sigma_i, a_i)} \quad (1.9)$$

Diese Matrix wird nun einer Singulärwertzerlegung unterzogen, sodass $A = USV^\dagger$. V^\dagger lässt sich nun erneut in d rechts-orthogonale Matrizen B^{σ_L} aufteilen. Der Zustand hat nun die Form

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{L-1}} U S B^{\sigma_L} |\sigma\rangle \quad (1.10)$$

Es können nun die Matrizen U , S und B^{σ_L} , wie zuvor beschrieben, zu \tilde{U} , \tilde{S} und \tilde{B}^{σ_L} trunkiert werden. Anschließend wird $A^{\sigma_{L-1}} \tilde{U} \tilde{S}$ zu einer neuen Matrix $M^{\sigma_{L-1}}$ ausmultipliziert. Es kann nun derselbe Vorgang an der Position $L-1$ durchgeführt werden. Auf diese Art kann jede Matrix auf eine maximale Dimension von D reduziert werden.

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow \sum_{\sigma} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{L-2}} M^{\sigma_{L-1}} \tilde{B}^{\sigma_L} |\sigma\rangle = \sum_{\sigma} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{L-2}} U S V' \tilde{B}^{\sigma_L} |\sigma\rangle \\ &\rightarrow \sum_{\sigma} A^{\sigma_1} \dots (A^{\sigma_{L-2}} \tilde{U} \tilde{S}) \tilde{B}^{\sigma_{L-1}} \tilde{B}^{\sigma_L} |\sigma\rangle \rightarrow \dots \rightarrow \sum_{\sigma} \tilde{B}^{\sigma_1} \dots \tilde{B}^{\sigma_L} |\sigma\rangle \end{aligned} \quad (1.11)$$

In [6] wurde gezeigt, dass der bei dieser Kompression auftretende Fehler beschränkt ist durch

$$\| |\psi\rangle - |\psi_{\text{trunc}}\rangle \|_2^2 \leq 2 \sum_{i=1}^L \epsilon_i(D) \quad (1.12)$$

Dabei ist $\epsilon_i = \sum_{a_i=D+1}^{D'} S_{a_i, a_i}^2$ die Summe über alle bei der Näherung ignorierten Singulärwerte zum Quadrat. Diese können allerdings auch als Eigenwerte des reduzierten Dichteoperators ρ_A oder ρ_B aufgefasst werden, da gilt

$$\rho_A = \text{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_{a_l, a'_l} S_{a_l, a_l} S_{a'_l, a'_l}^* |a_l\rangle_A \langle a'_l|_A \quad (1.13)$$

Dieser Fehler ist also klein, wenn das Eigenwert-Spektrum des reduzierten Dichteoperators schnell genug abfällt, um ab dem Element D keinen signifikanten Betrag zu leisten. Auch wenn dies für allgemeine Quantenzustände nicht der Fall ist, gilt es für die Grundzustände von Systemen, die ein Flächen-Gesetz erfüllen. Damit ist gemeint, dass die Entropie des Systems nicht mit dessen Volumen, sondern Oberfläche skaliert.[?]

Dieser Algorithmus kann auch von einem rechts-kanonischen Zustand aus begonnen werden. Dafür werden die Matrizen von links nach rechts komprimiert, und die einzelnen Matrizen B^{σ_i} werden über den Zeilenindex zusammen gefasst.

$$B_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma_i} \rightarrow B_{(\sigma_i a_{i-1}), a_i} \quad (1.14)$$

Ansonsten kann analog zu 1.11 vorgegangen werden.

⁴Es wird vorausgesetzt, dass die Einträge in S nach ihrer Größe sortiert sind

⁵Dies stellt keine Einschränkung da, da jeder Zustand in einen links-kanonischen umgeschrieben werden kann [4, Seite 129]

Diese Kompression ist nicht optimal und kann für $D \ll D'$ sehr langsam werden. Weiters ist es im Allgemeinen nötig, den MPS zunächst in eine kanonische Form zu bringen. Es ist alternativ auch möglich, den MPS durch eine iterative Suche nach jener trunkeierten Matrix zu komprimieren, die den 2-Norm Abstand zu dem ursprünglichen MPS minimiert. Während diese Methode zwar optimal ist, stellt auch hier Geschwindigkeit ein Problem dar, wenn der erste Iterationsschritt zufällig gewählt wird.

1.3 Überlapp und Erwartungswerte

Um den Überlapp von zwei Zuständen $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ zu berechnen, ist es zuerst nötig, den dualen Zustand durch Matrizen darstellen zu können. Aus der Zerlegung der Koeffizienten in Matrix-Produkte folgt dann

$$\begin{aligned}\langle\phi| &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}^* \langle\sigma_1, \dots, \sigma_L| = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1*} \dots A^{\sigma_L*} \langle\sigma_1, \dots, \sigma_L| \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_L\dagger} \dots A^{\sigma_1\dagger} \langle\sigma_1, \dots, \sigma_L|\end{aligned}\quad (1.15)$$

Damit ergibt sich $\langle\phi|\psi\rangle$ zu

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \tilde{A}^{\sigma_L\dagger} \dots \tilde{A}^{\sigma_1\dagger} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_L} \quad (1.16)$$

Das direkte Berechnen dieser Summe ist für große Systeme in der Praxis nicht möglich. Allerdings kann der Rechenaufwand drastisch reduziert werden, indem die Summen umsortiert werden. Da nach dem Multiplizieren von $\tilde{A}^{\sigma_1\dagger}$ und A^{σ_1} keiner der Terme mehr von σ_1 abhängt, kann diese Summe vorgezogen werden. Dasselbe kann im Anschluss für σ_2 usw. gemacht werden, und so ergibt sich für den Überlapp von zwei Zuständen $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{\sigma_L} \tilde{A}^{\sigma_L\dagger} (\dots (\sum_{\sigma_2} \tilde{A}^{\sigma_2\dagger} (\sum_{\sigma_1} \tilde{A}^{\sigma_1\dagger} A^{\sigma_1}) A^{\sigma_2}) \dots) A^{\sigma_L} \quad (1.17)$$

Auf dies Art kann der Rechenaufwand von $O(LD^3d^L)$ auf $O(LD^3d)$ reduziert werden.

Um Erwartungswerte berechnen zu können, ist es weiters nötig, die Wirkung eines Operators auf einen MPS zu untersuchen. Dafür ist eine Beschreibung des Operators im MPS Formalismus nötig, es wird von einem Matrix-Produkt Operator (MPO) gesprochen. Da die Koeffizienten eines MPO erneut als Produkt von Matrizen geschrieben werden können, ergibt sich für den Operator

$$\hat{O} = \sum_{\sigma, \sigma'} W^{\sigma_1, \sigma'_1} \dots W^{\sigma_L, \sigma'_L} |\sigma\rangle \langle\sigma'| \quad (1.18)$$

Im Folgenden wollen wir den Effekt eines Operators auf einen MPS untersuchen. Ziel ist es, das Ergebnis erneut als MPS darstellen zu können, da dies das einfache Berechnen von Erwartungswerten ermöglicht.

$$\begin{aligned}\hat{O}|\phi\rangle &= \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{a, b} (W_{1, b_1}^{\sigma_1, \sigma'_1} \dots W_{b_L, 1}^{\sigma_L, \sigma'_L}) (A_{1, a_1}^{\sigma_1} \dots A_{a_L, 1}^{\sigma_L}) |\sigma\rangle \\ &= \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{a, b} (W_{1, b_1}^{\sigma_1, \sigma'_1} A_{1, a_1}^{\sigma'_1}) (W_{b_1, b_2}^{\sigma_2, \sigma'_2} A_{a_1, a_2}^{\sigma'_2}) \dots (W_{b_{L-1}, 1}^{\sigma_L, \sigma'_L} A_{a_{L-1}, 1}^{\sigma'_L}) |\sigma\rangle \\ &\equiv \sum_{\sigma} \sum_{a, b} N_{(1, 1), (b_1, a_1)}^{\sigma_1} N_{(b_1, a_1), (b_2, a_2)}^{\sigma_2} \dots N_{(b_{L-1}, a_{L-1}), (1, 1)}^{\sigma_L} |\sigma\rangle\end{aligned}\quad (1.19)$$

Es lässt sich im letzten Schritt erneut die MPS-Form des ursprünglichen Zustands erkennen. Die Größe der neuen Matrizen ist nun allerdings durch das Produkt der MPO- und MPS-Matrixdimension gegeben. Zusammenfassend wird aus einer Matrix A^{σ_i} unter Anwendung eines MPO eine neue Matrix N^{σ_i} wie folgt:

Quellen
aus Scholl-
wöck nach-
schlagen

$$N_{(b_{i-1}, a_{i-1}), (b_i, a_i)}^{\sigma_i} = \sum_{\sigma'_i} W_{b_{i-1}, b_i}^{\sigma_i \sigma'_i} A_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma'_i} \quad (1.20)$$

Damit ergibt sich der Erwartungswert eines Operators zu

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \sum_{\sigma} \tilde{A}^{\sigma_L \dagger} \dots \tilde{A}^{\sigma_1 \dagger} N^{\sigma_1} \dots N^{\sigma_L} \quad (1.21)$$

1.4 Zeitentwicklung

Um die Dynamik eines MPS berechnen zu können, ist eine Beschreibung des Zeitentwicklungs-Operators $e^{-it\hat{H}t}$ als MPO nötig. Dies erfordert, dass der gesamte Operator als Matrix-Produkt geschrieben wird, in dem die Wirkung auf die einzelnen Gitterplätze völlig faktorisiert ist, also eine Matrix nur auf eine Position einwirkt. Im folgenden werden nur Interaktionen zwischen benachbarten Gitterplätzen behandelt, auch wenn weiter reichende Interaktionen prinzipiell beschrieben werden können.

Führt man $\hat{h}_{i,i+1}$ als Wechselwirkungs-Hamiltonian zwischen den Teilchen an Positionen i und $i+1$ ein, ergibt sich für den Gesamt-Hamiltonian

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{L-1} \hat{h}_{i,i+1} \quad (1.22)$$

Betrachtet man nun einen kleinen Zeitschritt τ , so kann mittels einer Trotter-Zerlegung 1. Ordnung der Zeitentwicklungs-Operator über diese Wechselwirkungs-Hamiltonians zerlegt werden zu

$$e^{-i\hat{H}\tau} = e^{-i\hat{h}_{1,2}\tau} e^{-i\hat{h}_{2,3}\tau} \dots e^{-i\hat{h}_{L-1,L}\tau} + O(\tau^2) \quad (1.23)$$

Der Fehler dieser Zerlegung rührt daher, dass die einzelnen Terme im Allgemeinen nicht kommutieren. Ein größeren Zeitschritt kann nun erreicht werden, indem mehrere dieser kurzen Schritte hintereinander durchgeführt werden. Der Fehler, der bei dieser Näherung gemacht wird geht gegen 0, wenn τ gegen 0 geht.

Da in Gleichung 1.23 jeder zweite Term kommutiert, kann diese in folgende Form umgeschrieben werden

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{H}\tau} &= (e^{-i\hat{h}_{1,2}\tau} e^{-i\hat{h}_{3,4}\tau} \dots) (e^{-i\hat{h}_{2,3}\tau} e^{-i\hat{h}_{4,5}\tau} \dots) + O(\tau^2) \\ &\equiv e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\tau} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\tau} + O(\tau^2) \end{aligned} \quad (1.24)$$

Diese Näherung kann weiter verbessert werden, indem eine Trotter-Zerlegung 2. Ordnung durchgeführt wird. Diese nimmt folgende Form an

$$e^{-i\hat{H}\tau} = e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\tau/2} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\tau} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\tau/2} + O(\tau^3) \quad (1.25)$$

Weitere Verbesserungen sind durch Zerlegungen höherer Ordnungen oder andere, weniger symmetrische Algorithmen möglich.

Führt man nun mehrere dieser Zeitschritte hintereinander aus, kann der benötigte Rechenaufwand signifikant reduziert werden, indem ausgenutzt wird, dass \hat{H}_{odd} mit sich selbst kommutiert und daher $e^{-i\hat{H}\frac{\tau}{2}} e^{-i\hat{H}\frac{\tau}{2}} = e^{-i\hat{H}\tau}$. Dadurch können der letzte und der erste Term zweier aufeinanderfolgender Trotter-Zerlegungen 2. Ordnung zu einem zusammengefasst werden ohne an Genauigkeit zu verlieren.

In der aktuellen Form kann der Zeitentwicklungs-Operator jedoch noch nicht auf einen MPS angewandt werden. Dazu ist es zunächst nötig, diesen in einen MPO umzuformen, bei dem ein Operator nur auf eine Position wirkt. Dafür soll zunächst der Operator $e^{-i\hat{h}_{1,2}\tau} \equiv O$ betrachtet werden. Ziel ist es, diesen zu einem Produkt von 1-Teilchen Operatoren zu faktorisieren. Dafür wird zunächst die Basis des Operators O von $(\sigma_1 \sigma_2, \sigma'_1 \sigma'_2)$ zu $(\sigma_1 \sigma'_1, \sigma_2 \sigma'_2)$ umsortiert. Um dies in ein Matrix-Produkt zu zerlegen wird anschließend noch eine Singulärwert-Zerlegung durchgeführt.

Anhang
Trotter-
Zerlegung
bis 2. Ord-
nung

$$O^{\sigma_1\sigma_2,\sigma'_1\sigma'_2} = P_{(\sigma_1\sigma'_1),(\sigma_2\sigma'_2)} = \sum_k U_{(\sigma_1\sigma'_1),k} S_{k,k} V_{k,(\sigma_2\sigma'_2)}^\dagger \equiv \sum_k M_{1,k}^{\sigma_1\sigma'_1} \bar{M}_{k,1}^{\sigma_2\sigma'_2} \quad (1.26)$$

Es wurden hier die neuen Matrizen M^{σ_1,σ'_1} und $\bar{M}^{\sigma_2,\sigma'_2}$ definiert. Diese sind definiert als $M_{1,k}^{\sigma_1,\sigma'_1} = U_{(\sigma_1\sigma'_1),k} \sqrt{S_{k,k}}$ und $\bar{M}_{k,1}^{\sigma_2,\sigma'_2} = \sqrt{S_{k,k}} V_{k,(\sigma_2\sigma'_2)}^\dagger$. Führt man diese Faktorisierung nun für jeden Operator in $e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\tau}$ und $e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\tau}$ durch, erhält man⁶

$$\begin{aligned} (e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\tau})^{\sigma,\sigma'} &= \sum_{\mathbf{k}} M_{1,k_1}^{\sigma_1\sigma'_1} \bar{M}_{k_1,1}^{\sigma_2\sigma'_2} M_{1,k_2}^{\sigma_3\sigma'_3} \bar{M}_{k_2,1}^{\sigma_4\sigma'_4} \dots \\ (e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\tau})^{\sigma,\sigma'} &= \sum_{\mathbf{k}} \mathbb{1}_{1,1}^{\sigma_1\sigma'_1} M_{1,k_1}^{\sigma_2\sigma'_2} \bar{M}_{k_1,1}^{\sigma_3\sigma'_3} M_{1,k_2}^{\sigma_4\sigma'_4} \bar{M}_{k_2,1}^{\sigma_5\sigma'_5} \dots \end{aligned} \quad (1.27)$$

Dieser MPO kann nun, wie in Abschnitt 1.3 erläutert, auf den MPS angewandt werden.

1.5 Stochastische Matrix-Produkt Zustände

In in diesem Kapitel wurde bereits behandelt, wie ein quantenmechanischer Zustand in die Form eines MPS gebracht werden kann. Es ist allerdings auch möglich, eine klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\sigma_1, \dots, \sigma_L)$ derart zu zerlegen. Der zu dieser Verteilung gehörige Zustand $|p\rangle$ kann geschrieben werden als

$$|p\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} P(\sigma_1, \dots, \sigma_L) |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (1.28)$$

Da es sich um Wahrscheinlichkeiten handelt, normiert man einen solchen Zustand über die L_1 -Norm, also $\sum_{\sigma} P(\sigma) = 1$. Ziel ist es nun, $P(\sigma)$ als Produkt von Matrizen zu schreiben, sodass

$$P(\sigma) = A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_L} \quad (1.29)$$

Man spricht in diesem Fall von einem stochastischen Matrix-Produkt Zustand (sMPS). Um dieses Produkt weiterhin durch die L_1 -Norm normieren zu können, muss von den Matrizen gefordert werden, dass sie elementweise positiv sind, also $A_{a_i, a_{i+1}}^{\sigma_{i+1}} \geq 0$. Versucht man nun allerdings, die Koeffizienten analog zu 1.3 in Matrizen aufzuteilen, ist eben dies nicht der Fall, da eine Singulärwert-Zerlegung im Allgemeinen Matrizen mit gemisch positiven und negativen Einträgen erzeugt. Wird allerdings eine nicht-negative Matrix-Faktorisierung (NMF) verwendet, können die Koeffizienten analog zu Gleichung 1.3 in das Produkt von Matrizen aufgeteilt werden. Ebenso kann die Zeitentwicklung analog angewandt werden, wenn der Operator $e^{\hat{h}_{i,i+1}\tau}$ durch eine NMF zerlegt wird.

Die Kompression eines sMPS kann analog zu einem normalen MPS durchgeführt werden, wenn die Singulärwert-Zerlegung durch eine NMF ersetzt wird, welche die Matrix in das Produkt von zwei Matrizen mit reduzierter Dimension zerlegt. Es ist allerdings zu beachten, dass sich das Verhalten des Fehlers bei der Kompression eines sMPS ändert, da dieser nicht mit der L_2 , sondern der L_1 -Norm normiert wird. Um diesen zu bestimmen, muss der Zustand zunächst in die Form

$$|p\rangle = \sum_{\lambda=1}^{D'} p_{\lambda} |P_{\lambda}\rangle_A |P_{\lambda}\rangle_B \quad (1.30)$$

gebracht werden.[2] Wie die erreicht werden kann, wurde in [5] gezeigt und wird in Abschnitt 1.6 vorgestellt.

Komprimiert man nun den Zustand, indem nur über die D größten p_{λ} summiert wird, ist der Fehler nach oben beschränkt durch

$$\| |p\rangle - |p\rangle_{\text{trunc}} \|_1 \leq \sum_{\lambda=D+1}^{D'} p_{\lambda} \quad (1.31)$$

⁶Die Identität ist hierbei gegeben als $\mathbb{1}_{1,1}^{\sigma,\sigma'} = \delta_{\sigma,\sigma'}$

Diese Zerlegung muss erneut für jede Bindung im Gitter durchgeführt werden um alle Matrizen zu komprimieren. Der gesamte Fehler ist dabei durch die Summe der Fehler bei den einzelnen Schritten nach oben beschränkt.

Zur Berechnung der Norm eines sMPS ist wie für einen MPS ein Umsortieren der Indizes von großem Vorteil. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \| |p\rangle \|_1 &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} P(\sigma_1, \dots, \sigma_L) = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_L} \\ &= \sum_{\sigma_1} A^{\sigma_1} (\dots (\sum_{\sigma_L} A^{\sigma_L}) \dots) = \prod_{i=1}^L (\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i}) \end{aligned} \quad (1.32)$$

Zuletzt soll noch behandelt werden, wie der Erwartungswert eines sMPS berechnet werden kann. Dafür wird zunächst der Operator als MPO dargestellt werden. Die Anwendung dieses MPO's auf den Zustand erfolgt dann völlig analog zu Gleichung 1.19 und man erhält einen neuen Satz Matrizen N^{σ_i} . Mittels dieser kann $\langle \hat{O} \rangle$ berechnet werden wie

$$\langle \hat{O} \rangle = \| \hat{O} |p\rangle \|_1 = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} N^{\sigma_1} \dots N^{\sigma_L} = \sum_{\sigma_1} N^{\sigma_1} (\dots (\sum_{\sigma_L} N^{\sigma_L}) \dots) \quad (1.33)$$

1.6 Gemeinsame Information und Entropie

Wird ein System in zwei Untersysteme A und B aufgeteilt, so ist die gemeinsame Information $I_{A:B}$ ein Maß für die Verschränkung der beiden Untersysteme. Damit steht diese in einem direkten Zusammenhang mit der Matrixdimension, die für die Verbindung des Gitterplatzes l mit $l+1$ benötigt wird, um diese für eine gegebene Genauigkeit darstellen zu können.

Motivation

Sei $|p\rangle$ als MPS dargestellt, so kann dieser durch eine Schmidt-Zerlegung (vgl. Gleichung 1.8) in die Form

$$|p\rangle = \sum_l \lambda_l |l\rangle_A \otimes |l\rangle_B \quad (1.34)$$

gebracht werden. Der Zustand ist hierbei in zwei Untersysteme A und B aufgeteilt worden, wobei das System aus A alle Gitterplätze bis einschließlich dem l -ten besteht, und B den restlichen. Es lassen sich für diese Systeme die Dichtematrizen

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{l, l'} \lambda_l \lambda_{l'} |l\rangle_A \langle l'|_A \otimes |l\rangle_B \langle l'|_B \\ \rho_A &= \text{Tr}_B(\rho) = \sum_l \lambda_l^2 |l\rangle_A \langle l|_A \\ \rho_B &= \text{Tr}_A(\rho) = \sum_l \lambda_l^2 |l\rangle_B \langle l|_B \end{aligned} \quad (1.35)$$

definieren. Mithilfe dieser kann die gemeinsame Information dieser beiden System berechnet werden.

$$I_{A:B} = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho) \quad (1.36)$$

Dabei bezeichnet S die Shannon-Entropie dieser Zerlegung. Diese ist definiert als

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log(\rho)) = \sum_l \lambda_l^2 \log(\lambda_l^2) \quad (1.37)$$

Da es sich bei dem Zustand $|p\rangle$ um einen normierten, reinen Zustand handelt ist $S(\rho) = 0^7$ und Gleichung 1.36 vereinfacht sich zu $I_{A:B} = 2S(\rho_A) = 2S(\rho_B)$. [?]

⁷ Dies ist der Fall, da $\rho = 1|\psi\rangle\langle\psi|$ und damit $\text{Tr}(\rho \log(\rho)) = 1 \log(1) = 0$

Da ein sMPS nicht wie ein MPS in eine Schmidt-Zerlegung gebracht werden kann, ist das direkte Berechnen der gemeinsamen Information auf diese Art nicht möglich. Wie in [5] allerdings gezeigt wurde, kann ein sMPS derart zerlegt werden, dass eine obere Schranke für $I_{A:B}$ bestimmt werden kann. Dazu muss der Zustand $|p\rangle$ in die Form

$$|p\rangle^{[l]} = \sum_{\lambda} p_{\lambda} |P_{\lambda}\rangle_A |P_{\lambda}\rangle_B \quad (1.38)$$

gebracht werden, wobei p_{λ} eine Wahrscheinlichkeitsverteilung sein muss.

Temme und Vestrup haben dafür durch die Matrizen A^{σ_i} die Verteilung

$$p_{\lambda} = \prod_{i=1}^l \left(\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i} \right) |\lambda\rangle \langle \lambda| \prod_{i=l+1}^L \left(\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i} \right) \quad (1.39)$$

definiert. Hierbei ist $|\lambda\rangle$ so gewählt, dass $\sum_{\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda| = \mathbb{1}$. Wird diese Faktorisierung der Identität nun zwischen A^{σ_l} und $A^{\sigma_{l+1}}$ eingefügt und mit p_{λ}/p_{λ} erweitert, so ergibt sich

$$|p\rangle^{[l]} = \sum_{\lambda} \sum_{\sigma} \frac{p_{\lambda}}{p_{\lambda}} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_l} |\lambda\rangle \langle \lambda| A^{\sigma_{l+1}} \dots A^{\sigma_L} |\sigma\rangle = \sum_{\lambda} p_{\lambda} |P_{\lambda}\rangle_A |P_{\lambda}\rangle_B \quad (1.40)$$

Dabei wurden die Definitionen

$$\begin{aligned} |P_{\lambda}\rangle_A &= \frac{A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_l} |\lambda\rangle}{\prod_{i=1}^l \left(\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i} \right) |\lambda\rangle} |\sigma_1 \dots \sigma_l\rangle \\ |P_{\lambda}\rangle_B &= \frac{\langle \lambda| A^{\sigma_{l+1}} \dots A^{\sigma_L}}{\langle \lambda| \prod_{i=l+1}^L \left(\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i} \right)} |\sigma_{l+1} \dots \sigma_L\rangle \end{aligned} \quad (1.41)$$

eingeführt. Mit dieser Zerlegung wurde in [5] gezeigt, dass die gemeinsame Information beschränkt ist durch

$$I_{A:B} \leq S_C = \min_{\lambda, A, B} (S(\rho_A)) \quad (1.42)$$

wobei $S(p_{\lambda}) = -\sum_{\lambda} p_{\lambda} \log(p_{\lambda})$ erneut die Shannon-Entropie ist und S_C Entropie-Kosten genannt wird. Es ist zu beachten, dass die Faktorisierung der Einheitsmatrix nicht eindeutig ist, was daher auch für die Zerlegung des Zustandes gilt. Für eine grobe Abschätzung der gemeinsamen Information reicht es allerdings aus, eine spezielle zu untersuchen.

Kapitel 2

Das ASEP-Modell

Das ASEP-Modell (Asymmetric Simple Exclusion Process) beschreibt ein eindimensionales System mit offenen Randbedingungen. Es handelt sich dabei um ein Gitter mit L Plätzen, die entweder einfach besetzt oder leer sind. Ist der erste Gitterplatz unbesetzt, so wird nach dem Zeitschritt dt mit einer Wahrscheinlichkeit αdt ein Teilchen an dieser Position eingesetzt. Weiters wird in diesem Zeitschritt mit der Wahrscheinlichkeit βdt ein Teilchen an der letzten Position aus dem Gitter entnommen, wenn diese besetzt ist. Zwischen den Gitterplätzen können sich die Teilchen nur in Richtung des letzten Gitterplatzes bewegen,¹ was sie mit der Wahrscheinlichkeit $p dt$ tun, vorausgesetzt der nächste Platz ist unbesetzt. Da der einzige Einfluss des konkreten Wertes von p eine Skalierung der Zeit ist, wird dieser üblicherweise 1 gesetzt.

Weitere
Quelle fin-
den

2.1 Mathematische Beschreibung

Die Dynamik des Systems kann zunächst durch Ratengleichungen beschrieben werden. Dafür sei $p_i(t + dt)$ die Wahrscheinlichkeit, dass die Position i zum Zeitpunkt $t + dt$ besetzt ist und τ_i die Besetzungszahl des i -ten Gitterplatzes zum Zeitpunkt t . Wir müssen hierbei drei Fälle unterscheiden:

$$p_i(t + dt) = \begin{cases} \tau_1 + [\alpha(1 - \tau_1) - \tau_1(1 - \tau_2)]dt & \text{für } i = 1 \\ \tau_i + [\tau_{i-1}(1 - \tau_i) - \tau_i(1 - \tau_{i+1})]dt & \text{für } 1 < i < L \\ \tau_L + [\tau_{L-1}(1 - \tau_L) - \beta\tau_L]dt & \text{für } i = L \end{cases} \quad (2.1)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass von dem System mit L Gitterplätzen die spezielle Konfiguration $\{\tau_1, \dots, \tau_L\}$ angenommen wird, soll im Folgenden mit $P_L(\tau_1, \dots, \tau_L)$ bezeichnet werden. Da es sich hier um kein abgeschlossenes System handelt, existiert kein Gleichgewichtszustand, es kann allerdings ein stationärer Zustand gefunden werden. Für diesen Zustand gilt

$$\frac{d}{dt}P_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = 0 \quad (2.2)$$

Um diesen stationären Zustand zu finden muss zunächst

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P_L(\tau_1, \dots, \tau_L) = & \sum_{i=1}^{L-1} ((1 - \tau_i)\tau_{i+1} - \tau_i(1 - \tau_{i+1}))P(\tau_1, \dots, \sigma_i = 1, \sigma_{i+1} = 0, \dots, \tau_L) \\ & (\alpha\tau_1 - \alpha(1 - \tau_1))P(0, \tau_2, \dots, \tau_L) + (\beta(1 - \tau_L) - \beta\tau_L)P(\tau_1, \tau_2, \dots, 1) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Gleichung 2.3 lässt sich in eine übersichtlichere Form bringen, indem die auftretenden Koeffizienten als Matrixelemente aufgefasst werden. Diese Matrizen können mittels der Übergangsraten der Zustände ineinander konstruiert werden. Geht so beispielsweise ein Zustand $|a\rangle$ mit

¹In diesem Fall wird auch von dem TASEP-Modell (totally asymmetric exclusion process) gesprochen

einer Rate p in den Zustand $|b\rangle$ über und $|b\rangle$ mit einer Rate q in $|a\rangle$, hat die zugehörige Matrix m in der Basis $(|a\rangle, |b\rangle)$ die Form

$$m = \begin{pmatrix} -p & q \\ p & -q \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Die negativen Einträge stammen daher, dass ein Zustand mit derselben Rate verlassen wird, mit der er in andere übergeht. Daher ist die Summe über alle Einträge einer Spalte einer solchen Matrix stets 0.[3]

Dieser Konstruktion folgend erhält man für das ASEP-Modell drei Matrizen. Diese stellen, der Reihe nach, die Vorgänge des Einfügens und Entnehmens eines Teilchens dar, sowie das Hüpfen eines Teilchens auf den benachbarten Platz. Die verwendete Basis ist $(|1\rangle, |0\rangle)$ sowie $(|1\rangle, |0\rangle) \otimes (|1\rangle, |0\rangle)$

$$\begin{aligned} h_1 &= \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ 0 & -\alpha \end{pmatrix} & h_L &= \begin{pmatrix} -\beta & 0 \\ \beta & 0 \end{pmatrix} \\ h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Mit diesen Matrizen kann erneut die zeitliche Änderung des Zustandes beschrieben werden. Dabei ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_L(\tau_1, \dots, \tau_L) &= \sum_{\sigma_1} (h_1)_{\tau_1, \sigma_1} P_L(\sigma_1, \tau_2, \dots, \tau_L) \\ &+ \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} h_{(\tau_i \tau_{i+1}), (\sigma_i \sigma_{i+1})} P_L(\tau_1, \dots, \sigma_i, \sigma_{i+1}, \dots, \tau_L) \\ &+ \sum_{\sigma_L} (h_L)_{\tau_L, \sigma_L} P_L(\tau_1, \dots, \tau_{L-1}, \sigma_L) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Wie man durch Einsetzen überprüfen kann, stimmen Gleichungen 2.3 und 2.6 überein. Vergleicht man Gleichung 2.6 mit Gleichung 1.19, so kann man diese als die Wirkung eines Operators $\hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_L + \sum_{i=1}^L \hat{h}_{i,i+1}$ auf P_L auffassen.² Damit vereinfacht sich das Problem weiter zu

$$\frac{d}{dt} P_L = \hat{H} P_L \quad (2.7)$$

Diese lineare Differenzialgleichung lässt sich nun einfach lösen und es ergibt sich

$$P_L(t) = e^{\hat{H}t} P_L(0) \quad (2.8)$$

2.2 Analytische Lösung

Das Studium des ASEP-Modells ist unter anderem deshalb sehr nützlich, da ein analytische Lösung existiert, mit der die Ergebnisse einer Näherung verglichen werden können. Aus diesem Grund werden hier die Lösungen für die mittlere Besetzungszahl an einer beliebigen Position i sowie dem Fluss durch das Gitter im stationären Zustand zusammengefasst, welche in [1] vorgestellt wurden.

Im Folgenden bezeichne \hat{N}_i den Besetzungsoperator an dem Gitterplatz i eines L -Positionen ASEP-Modells. Für die mittlere Besetzungszahl $\langle \hat{N}_i \rangle$ gilt dann nach [1]

$$\langle \hat{N}_i \rangle_L = \sum_{k=0}^{L-i-1} \frac{2k!}{k!(k+1)!} \frac{R(L-k-1)}{R(L)} + \frac{R(i-1)}{R(L)} \sum_{k=2}^{L-i+1} \frac{(k-1)(2(L-i)-k)!}{(L-i)!(L-i-k+1)!} \beta^{-k} \quad (2.9)$$

²Dabei ist der Operator $h_{i,i+1}$ der Operator h einwirkend auf Positionen i und $i+1$

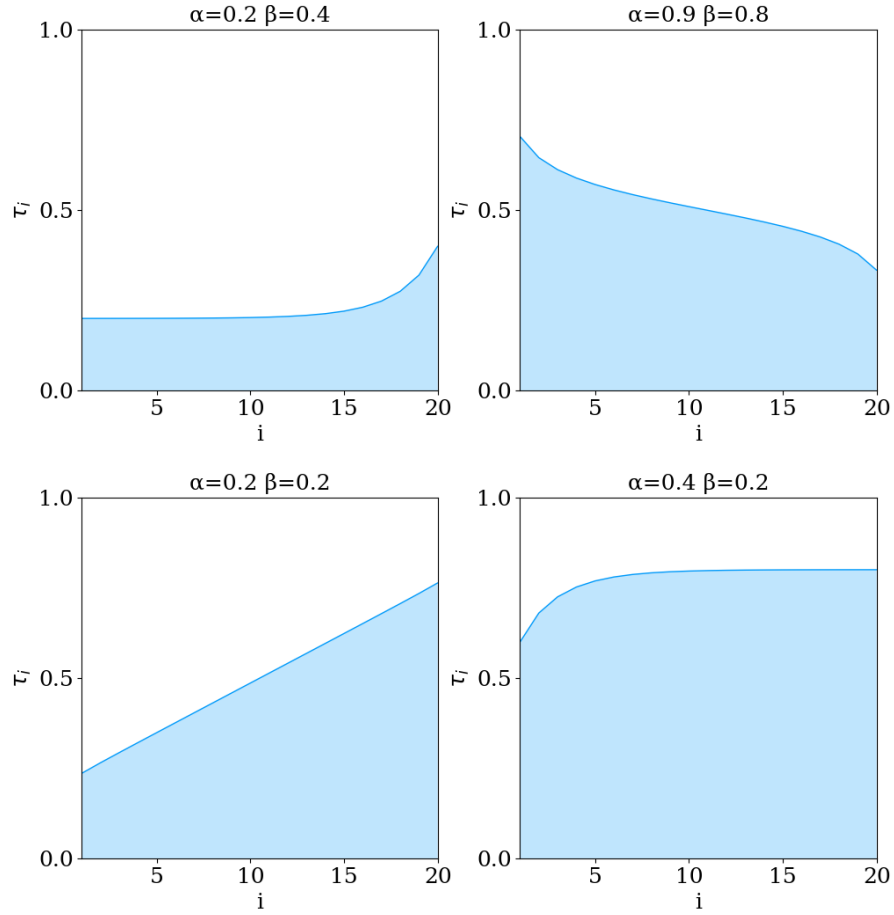


Abbildung 2.1: Dichteverteilungen für verschiedene Ein- und Ausfluss Parameter

Die Funktion $R(n)$ ist hierbei gegeben durch³

$$R(n) = \sum_{k=1}^n \frac{k(2n-1+k)!}{n!(n-k)!} \frac{\beta^{-k-1} - \alpha^{-k-1}}{\beta^{-1} - \alpha^{-1}} \quad (2.10)$$

In Abbildung 2.1 sind die Dichteverteilungen eines Systems der Größe $L = 20$ für verschieden Parameter α und β zu sehen.

Dies für große Systeme zu berechnen ist insofern problematisch, da Faktoren bis zu $(2L-2)!$ auftreten. Für große L ist es daher nützlich, auf die asymptotische Lösung $L \rightarrow \infty$ zurückzugreifen. Hierbei unterscheidet man zwischen der Lösung an den beiden Rändern des Gitters sowie für Plätze weit entfernt von jenen. Zunächst werde die Dichte weit von den Rändern betrachtet (dh. $1 \ll i \ll L$).

$$\langle \hat{N}_i \rangle_L \simeq \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{für } \alpha \geq \frac{1}{2} \text{ und } \beta \geq \frac{1}{2} \\ \alpha & \text{für } \alpha < \frac{1}{2} \text{ und } \beta \leq \alpha \\ 1 - \beta & \text{für } \beta < \frac{1}{2} \text{ und } \alpha \leq \beta \\ \alpha + \frac{i}{L}(1 - 2\alpha) & \text{für } \alpha = \beta < \frac{1}{2} \end{cases} \quad (2.11)$$

Es ist zu sehen, dass die Dichte im Zentrum des Gitters (also für $i/L \simeq 1/2$) im Fall $\alpha < \frac{1}{2}$ und $\beta \leq \alpha$ minimal und im Fall $\beta < \frac{1}{2}$ und $\alpha \leq \beta$ maximal wird, und ansonsten etwa $\frac{1}{2}$ beträgt.

³Die Abhängigkeit von α und β wird hier aus Gründen der Übersicht nicht explizit angegeben

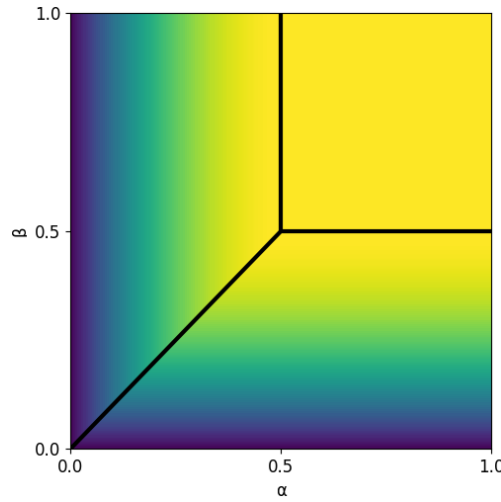


Abbildung 2.2: Der Fluss J . Die Linien zeigen die Phasengrenzen an

Zur kompakten Beschreibung der Dichten an den Rändern wird zunächst eine neue Größe κ eingeführt. Diese kann genähert werden als $\kappa^{-n} \approx f(\alpha, \beta)R(n)$, wenn n groß ist. Der Faktor $f(\alpha, \beta)$ ist hier nicht relevant, da in den Gleichungen für die Dichten nur Terme der Form $R(a)/R(b)$ vorkommen. Wie in [1] gezeigt, ergibt sich für κ

$$\kappa = \begin{cases} \frac{1}{4} & \text{für } \alpha \geq \frac{1}{2} \text{ und } \beta \geq \frac{1}{2} \\ \alpha(1-\alpha) & \text{für } \alpha \leq \frac{1}{2} \text{ und } \beta > \alpha \\ \beta(1-\beta) & \text{für } \beta \leq \frac{1}{2} \text{ und } \alpha > \beta \end{cases} \quad (2.12)$$

Die erwarteten Dichten am ersten und letzten Gitterplatz lassen sich damit schreiben als

$$\langle \hat{N}_1 \rangle_L = 1 - \frac{\kappa}{\alpha} \quad \langle \hat{N}_L \rangle_L = \frac{\kappa}{\beta} \quad (2.13)$$

Der Fluss der Teilchen durch das Gitter kann berechnet werden als der Erwartungswert, dass ein Teilchen auf den nächsten Gitterplatz springt. Die Wahrscheinlichkeit, dass dies passiert wurde in Gleichung 2.1 bereits verwendet, und ist durch $\tau_i(1 - \tau_{i+1})dt$ gegeben. Wie in [1] gezeigt wurde, kann dann der Fluss J zwischen zwei benachbarten Gitterplätzen im stationären Zustand berechnet werden durch

$$J = \langle \hat{N}_i(\hat{1} - \hat{N}_{i+1}) \rangle_L = \frac{R(L-1)}{R(L)} \quad (2.14)$$

Betrachtet man den Grenzfall $L \rightarrow \infty$, ergibt sich daher

$$J = \kappa \quad (2.15)$$

Die drei Fälle, welche für κ und damit J unterschieden werden, bilden die Phasen des ASEP-Modells. Wie leicht gesehen werden kann, ist der Fluss im Fall $\alpha \geq \frac{1}{2}$ und $\beta \geq \frac{1}{2}$ am größten, man spricht daher von der maximal-Fluss Phase. Die Fälle $\alpha \leq \frac{1}{2}$ und $\beta > \alpha$ sowie $\beta \leq \frac{1}{2}$ und $\alpha > \beta$ werden 'niedrige Dichte' und 'hohe Dichte'Phase genannt (vgl. 2.11).

bessere
Namen?

Kapitel 3

Implementierung

3.1 Implementierung im MPS-Formalismus

Um das ASEP-Modell mittels des MPS-Formalismus behandeln zu können, ist zunächst eine Darstellung eines ASEP-Zustandes als MPS nötig. Dabei kann verwendet werden, dass die Wahrscheinlichkeit, einen Zustand $|\psi\rangle$ wie in Gleichung 1.1 in einer bestimmten Konfiguration $|\hat{\sigma}_1, \dots, \hat{\sigma}_L\rangle$ zu finden durch $(c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L})^2$ gegeben ist. Ein ASEP-Zustand kann also geschrieben werden als

$$|\psi\rangle = \sum_{\tau_1, \dots, \tau_L} \sqrt{P(\tau_1, \dots, \tau_L)} |\tau_1, \dots, \tau_L\rangle \quad (3.1)$$

Der Konstruktion aus Abschnitt 1.1 folgend kann daraus ein MPS konstruiert werden. Um diese so einfach wie möglich zu halten, kann der Anfangszustand so vorgegeben, dass alle Positionen mit der Wahrscheinlichkeit p besetzt sind. Der zu diesem Zustand gehörige MPS ist durch $2L$ Matrizen der Größe (1×1) gegeben, für welche gilt

$$A^{\tau_i} = \sqrt{p} \delta_{1, \tau_i} + \sqrt{1-p} \delta_{0, \tau_i} \quad (3.2)$$

Aus Symmetrie-Gründen, sowie für eine schnellere Konvergenz wurde $p = 0.5$ gewählt.

Die Zeitentwicklung dieser ist nun analog zu der aus Gleichung 2.8. Um den tMPS Algorithmus aus Abschnitt 1.4 zu verwenden, ist es allerdings nötig, den Hamiltonian als Summe von Nachbar-Wechselwirkungs Hamiltonians zu schreiben. Um dies zu erreichen, kann ausgenutzt werden, dass \hat{h}_1 und \hat{h}_L Abkürzungen für die Ausdrücke $\hat{h}_1 \otimes \hat{1} \otimes \dots \otimes \hat{1}$ sowie $\hat{1} \otimes \dots \otimes \hat{1} \otimes \hat{h}_L$ sind. Fasst man nun die Tensorprodukte $\hat{h}_1 \otimes \hat{1}$ und $\hat{1} \otimes \hat{h}_L$ zusammen, und addiert den Operator $\hat{h}_{i, i+1}$ hinzu, erhält man die Nachbar-Wechselwirkungs Hamiltonians

$$\hat{h}'_{1,2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & -\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha \end{pmatrix} \quad \hat{h}'_{L-1,L} = \begin{pmatrix} -\beta & 0 & 0 & 0 \\ \beta & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Mit $\hat{h}'_{L-1,L} = \hat{h}_{L-1,L}$ für $2 < i < (L-1)$ kann nun die Zeitentwicklung des Zustandes $|\psi\rangle$ mit dem Hamiltonian $\hat{H} = \sum_{i=1}^{L-1} \hat{h}'_{i, i+1}$ berechnet werden. Um Erwartungswerte zu berechnen ist allerdings nicht nur $|\psi(t)\rangle$, sondern auch $\langle\psi(t)|$ nötig. Löst man die Gleichung 2.8 erneut für $\langle\psi|$, so findet man

$$\langle\psi(t)| = \langle\psi| e^{\hat{H}t} = (e^{\hat{H}^\dagger t} |\psi\rangle)^\dagger \quad (3.4)$$

Für übliche quantenmechanische Systeme wäre \hat{H} hermitesch, und es würde gelten $\langle\psi(t)| = (|\psi(t)\rangle)^\dagger$. Dies ist hier aufgrund der Asymmetrie des Problems nicht der Fall! Es muss daher, um Erwartungswerte zu berechnen, sowohl $e^{\hat{H}t}|\psi\rangle$ als auch $e^{\hat{H}^\dagger t}|\psi\rangle$ berechnet werden.

Die im ASEP-Modell relevanten Größen sind die Erwartungswerte der Besetzungszahl eines Gitterplatzes sowie der Fluss von einem Platz zum nächsten. Um diese zu berechnen ist der

Zeit neu skalieren?

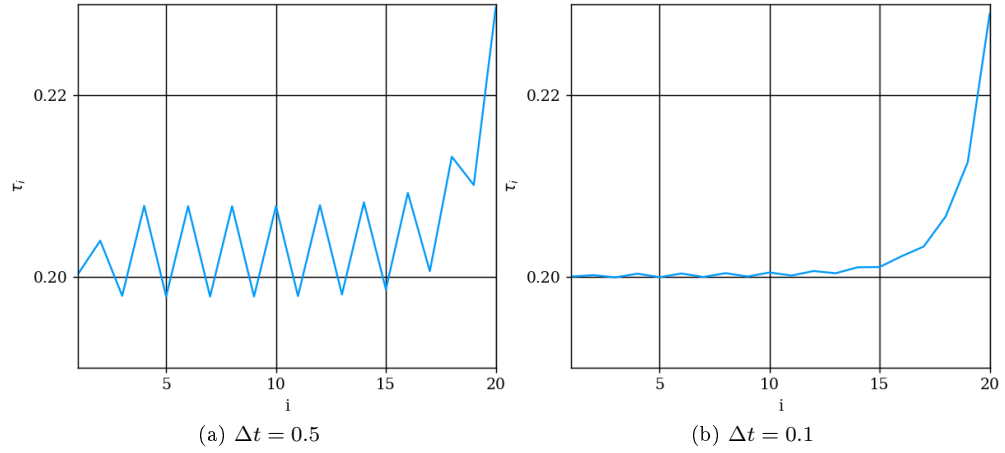


Abbildung 3.1: Dichteverteilungen für verschieden große Zeitschritte ($L = ??, D = ??$)

Besetzungs-Operator in der bisher verwendeten Basis nötig. Er ist gegeben durch

$$\hat{N}^{\tau_i, \tau'_i} = \begin{cases} 1 & \text{für } \tau_i = \tau'_i = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.5)$$

3.2 Dichte-Verteilung und Fluss

Im Folgenden werden die Näherungen des ASEP-Modells durch MPS sowie sMPS präsentiert.

3.2.1 MPS

Um eine gute Konvergenz des MPS zu erhalten, wurde die Zeitentwicklung bis $t = 40L$ in zunächst in großen Schritten von $\Delta t = 0.5$ durchgeführt. Bei Zeitschritten dieser Größe ist ein starkes Oszillieren der Erwartungswerte zu beobachten, weshalb mindestens eine weitere Zeitentwicklung mit $t = 2L$ und $\Delta t = 0.1$ durchgeführt wurde (vgl. Abbildung 3.1). Werden weitere Schritte mit kleiner werdendem Δt durchgeführt, kann die Genauigkeit solange verbessert werden, bis die Einschränkung der maximalen Matrixgröße den Fehler nach unten beschränkt. Für $L = 20$ und $D = 12$ konnte so die Dichte mit geringem Aufwand auf eine Abweichung von unter 10^{-4} genau berechnet werden.

Damit die Genauigkeit der MPS-Näherung besser untersucht werden kann, wurde ein System mit $L = 10$ für die Parameter α und β von 0 bis 1 in Schritten von 0.025 berechnet. Es wurden dabei für ca. 1700 Wertepaare die Dichteverteilung sowie der Fluss durch das System aufgezeichnet.

In Abbildung 3.2.1 sind der Fluss durch das System sowie die gemeinsame Information aufgetragen. In 3.2a ist die Struktur des Phasendiagramms aus 2.2 zu erkennen, aufgrund der Endlichkeit des Systems stimmen diese allerdings nicht überein. Für die gemeinsame Information ist zu beobachten, dass für $\alpha + \beta = 1$ diese stets 0 ist. Dies kann verstanden werden, indem die Dichteverteilung für diese Wertepaare untersucht wird. Wie in [1] auf Seite 1508 bemerkt, liegt diese konstant bei α . Da das System durch alle Besetzungszahlen vollständig beschrieben ist (vgl. Gleichung 2.1), kann dieses daher durch einen MPS mit Dimension 1 beschrieben werden, wie in Gleichung 3.2¹. Weiters ist zu beobachten, dass die gemeinsame Information für $\alpha \approx \beta$ für ein festes α (bzw. ein festes β) maximal wird, mit Ausnahme von $\alpha \approx 0.5$.

Es soll im weiteren die Qualität der MPS-Näherung an die exakte Lösung behandelt werden. Da für jedes Wertepaar (α, β) L Werte für die Dichte und $L - 1$ für den Fluss vorliegen, ist für

¹Dies entspricht einem mean-field Ansatz. [?]

Hier müssen noch 1-2 Sätze her

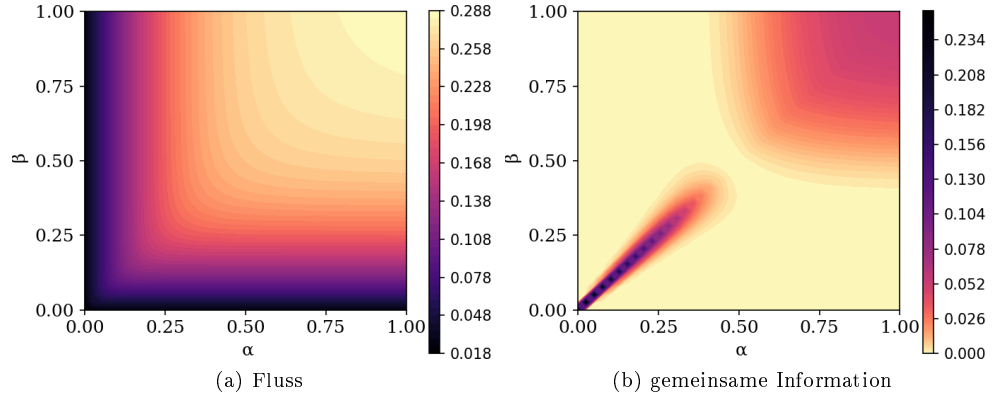


Abbildung 3.2: Fluss durch das System sowie minimale gemeinsame Information mit exponentieller Farb-Skala

die kompakte Darstellung des Fehlers ein Maß für die mittlere Abweichung nötig. Dafür wurde für die Dichteverteilung die Funktion

$$\text{Err}(\alpha, \beta) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^L (\tau_i - \tau_i^{\text{exakt}})^2}{N}} \quad (3.6)$$

definiert. Dabei ist τ_i die simulierte Dichte am Gitterplatz i , während τ_i^{exakt} für die analytisch berechnete Dichte steht. Diese Funktion kann als mittlerer Abstand zwischen der exakten und MPS Lösung verstanden werden.

Da der Fluss durch ein System in im stationären Zustand stets konstant sein muss (vgl. [1]), wurden zur Abschätzung des Fehlers im Fluss die Abweichung des Mittelwerts zum exakten Wert sowie die relative Streuung des Flusses betrachtet. Auch wenn der Mittelwert mit dem exakten übereinstimmt, ist der stationäre Zustand nur dann erreicht, wenn die Streuung gegen 0 geht. Ist dies nicht der Fall, wurde entweder t nicht groß genug bzw. Δt nicht klein genug gewählt und der Zustand konnte noch nicht ausreichend konvergieren², oder D ist zu klein um den stationären Zustand genau genug darstellen zu können.

In Abbildung 3.2.1 sind für zwei verschiedene maximale Matrixdimensionen die Abweichung der Dichten und des Flusses sowie die relative Streuung des Flusses zu sehen. Zunächst werde der Fall $D = 12$ betrachtet. Wie in Abbildung 3.3e zu sehen, nimmt die relative Streuung mit sinkendem α und β zu, für $\alpha \approx \beta$ bleibt diese allerdings klein. Dieses Verhalten kann verstanden werden, wenn die Konvergeschwindigkeit des ASEP-Modells betrachtet wird. Geht ein Zustand mit mittlerer Gesamt-Teilchenzahl $\tau_{\text{ges},0} = \sum_{i=1}^L \tau_{i,0}$ in einen anderen mit $\tau_{\text{ges},1} \leq \tau_{\text{ges},0}$ über, so muss diese Differenz an Teilchen das System verlassen oder darin eingesetzt werden. Da diese Vorgänge mit der Rate β bzw. α auftreten, kann das System schneller in den neuen Zustand gelangen, wenn α und β groß sind oder $\tau_{\text{ges},1} \approx \tau_{\text{ges},0}$. Als Anfangszustand wurde $\tau_{i,0} = 0.5$ gewählt, weshalb Zustände mit $\tau_{\text{ges},1} \approx 0.5L$ besonders schnell konvergieren. Dies ist für $\alpha \approx \beta$ der Fall.³

Es ist zu erwarten, dass sich dieses Verhalten auch in den Abweichungen der anderen Größen von den exakten Werten widerspiegelt. Berücksichtigt man, dass diese absolute anstatt relative Fehler sind, kann auch genau das beobachtet werden.

Aufgrund des Verhaltens des Fehlers in Abhängigkeit von α und β kann darauf geschlossen werden, dass für dieses System im Fall $D = 12$ der Fehler hauptsächlich durch die Wahl von t bzw. δt verursacht wird.

²Für $\alpha < 0.1, \beta < 0.1$ waren aus diesem Grund die Abweichungen so groß, dass sie für eine besser Übersicht aus den Abbildungen 3.3a und 3.3e ausgeschlossen wurden

³Da das System auch aufgefasst werden kann als Löcher, welche sich in die entgegengesetzte Richtung bewegen, mit einer Rate β eingesetzt und einer Rate α entfernt werden[1], muss die Dichteverteilung der Teilchen für $\alpha = \beta$ ident sein zu der Verteilung der Löcher. Diese Symmetrie erzwingt $\tau_{\text{ges}} = (L - \tau_{\text{ges}}) = 0.5L$

In den Abbildungen 3.3b, 3.3d und 3.3f sind dieselben Werte für $D = 3$ erneut berechnet worden. Aufgrund der sehr geringen Matrixgröße kann zum Einen damit gerechnet werden, dass die Fehler deutlich größer sind, und zum anderen diese eine andere Struktur aufweisen, da die Zeitschritte nicht länger der primär limitierende Faktor sind. Tatsächlich ist zu beobachten, dass der Fehler proportional zu der gemeinsamen Information im System (Abbildung 3.2b) ist. Es kann hier also beobachtet werden, dass für Wertepaare (α, β) mit einer niedrigen gemeinsamen Information $I_{A:B}$ eine Reduktion der Matrixdimension eine geringere Auswirkung auf den Fehler hat, als für Wertepaare mit einem höheren $I_{A:B}$. Auch dies entspricht den Erwartungen, da, wie in Abschnitt 1.6 behandelt, die gemeinsame Information direkt mit der benötigten Matrixdimension zusammenhängt.

Überprüfen,
ob Asym-
metrie von
Richtung
der Kom-
pression
kommt

3.2.2 sMPS

Das Vorgehen bei der Verwendung eines sMPS unterscheidet sich in einigen Punkten von dem mit einem MPS. Dies liegt daran, dass bei der NMF auch ohne Kompression der Matrixgröße Fehler der Ordnung 10^{-3} auftreten.⁴ Es hat sich daher als sinnvoll erwiesen, $\Delta t \geq 0.2$ zu verwenden um die Anzahl der nötigen Faktorisierungen klein zu halten. Wurde dies nicht gemacht, konnte eine wesentlich schlechtere Konvergenz sowie ein deutlich weniger glatter Verlauf in der Dichteverteilung beobachtet werden. Da die nicht-negative Matrix-Faktorisierung ein nicht-konvexes Optimierungsproblem darstellt, sind die Matrizen, die sich durch eine NMF ergeben, auch nicht determiniert, was die Konvergenz zum stationären Zustand weiters erschwert.

Da sich eine NMF um ein vielfaches Zeitaufwendiger als eine SVD erwiesen hat, wurde als Test-System ein Gitter mit $L = 6$ verwendet. Die Zeitentwicklung wurde in Schritten $\Delta t = 0.3$ bis $t = 5L$ und anschließend $\Delta t = 0.2$ bis $t = L$ durchgeführt, da für größere Zeiten t keine bessere Konvergenz beobachtet werden konnte.

Da bei der Betrachtung einzelner Wertepaare (α, β) beobachtet werden konnte, dass der Fehler der Abweichung für die ersten Gitterplätze tendenziell größer war als für die letzten, wurde dies für überprüft, ob dieses Verhalten bei einer Mittelung über alle Wertepaare weiter auftritt. Dafür wurde der Betrag der Abweichung von τ_i zu τ_i^{exakt} über alle α und β gemittelt. Dabei konnte festgestellt werden, dass diese mittlere Abweichung für die ersten beiden Gitterplätze um 30% größer war als für die beiden letzten. Die Werte sind in Abbildung ?? zu sehen. Es kann außerdem sein, dass es sich hierbei um ein Artefakt der NMF handelt. Existiert für eine Matrix die Zerlegung $A = WH$ in positive Matrizen, so werden W und H von einem NMF-Algorithmus iterativ gesucht.[2] Ist diese allerdings für W im Mittel schlechter als für H , wäre die beobachtete Asymmetrie zu erklären.

Aufgrund dieser Asymmetrie ist zu erwarten, dass die Entropie für die Zerlegung $|p\rangle^{[1]}$ des sMPS zwischen den Plätzen 1 und 2 ebenfalls einen größeren Fehler aufweist als die Zerlegung $|p\rangle^{[5]}$ zwischen den Plätzen 5 und 6. Dies kann für die Berechnung der Entropie-Kosten S_C eine größere Auswirkung haben als auf die anderen berechneten Größen, da nicht über die Entropie der einzelnen Zerlegungen gemittelt, sondern minimiert wird. In Abbildung 3.5a ist S_C minimiert über alle Zerlegungen zu sehen, während in Abbildung 3.5b die Zerlegung zwischen den Plätzen 1 und 2 ausgeschlossen wurde. Zweiteres entspricht im Vergleich mit den Ergebnissen aus [5] den Erwartungen. Dies legt den Schluss nahe, dass die Entropie für $|p\rangle^{[1]}$ durch den Fehler signifikant zu niedrig abgeschätzt wird.

In Abbildung 3.2.2 sind die Ergebnisse für $D = 8$, die volle Matrix-Dimension des sMPS, sowie $D = 2$ zu sehen. Es wurde erneut $\text{Err}(\alpha, \beta)$, $\langle J \rangle$ sowie die relative Streuung von $\langle J \rangle$ berechnet.

Stärkere Fluktuationen für großes $D \rightarrow$ Index für schlechte Matrix-Näherung

⁴Für zufällige Matrizen der Dimension (8×8) ist die maximale Abweichung eines Matrixelements ca. $3 \cdot 10^{-3}$

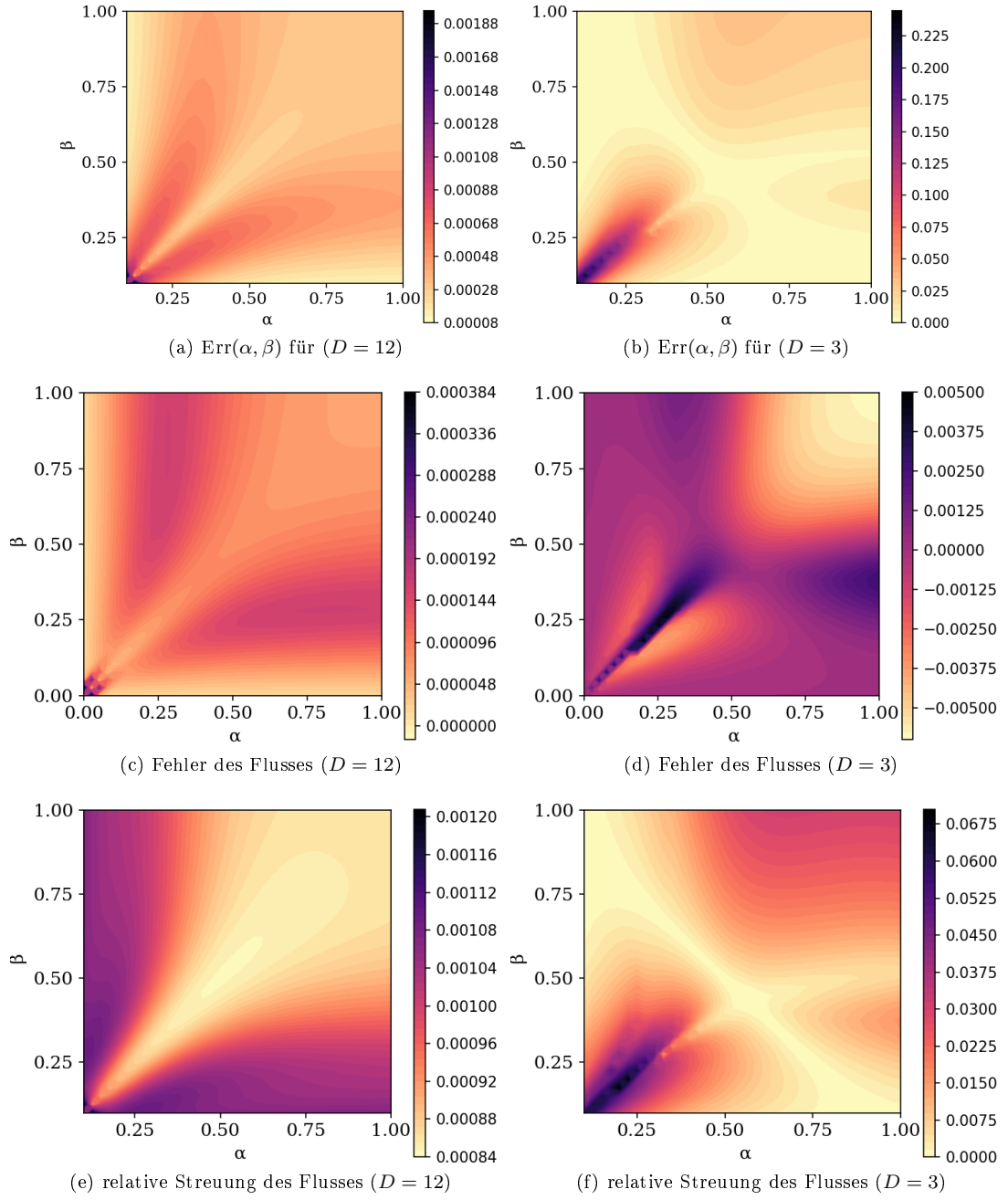


Abbildung 3.3: $L=10$

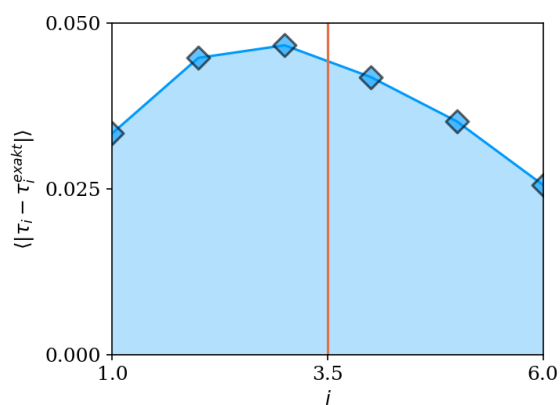


Abbildung 3.4: Mittlerer Betrag des Fehlers für die Gitterplätze. Die senkrechte Linie markiert das Zentrum der Gitters

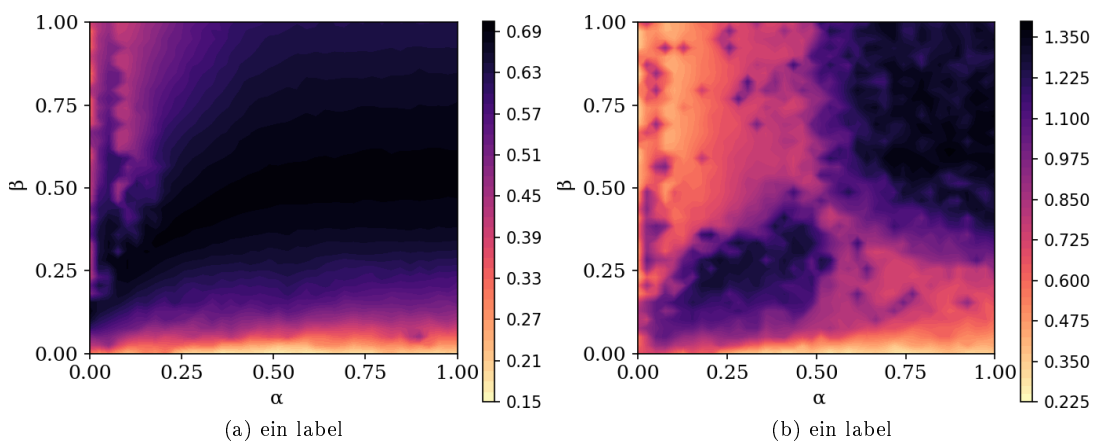


Abbildung 3.5: Entropie-Kosten S_C für ein Gitter mit $L = 6$. Im rechten Bild wurde die Zerlegung zwischen erstem und zweitem Platz ausgeschlossen.

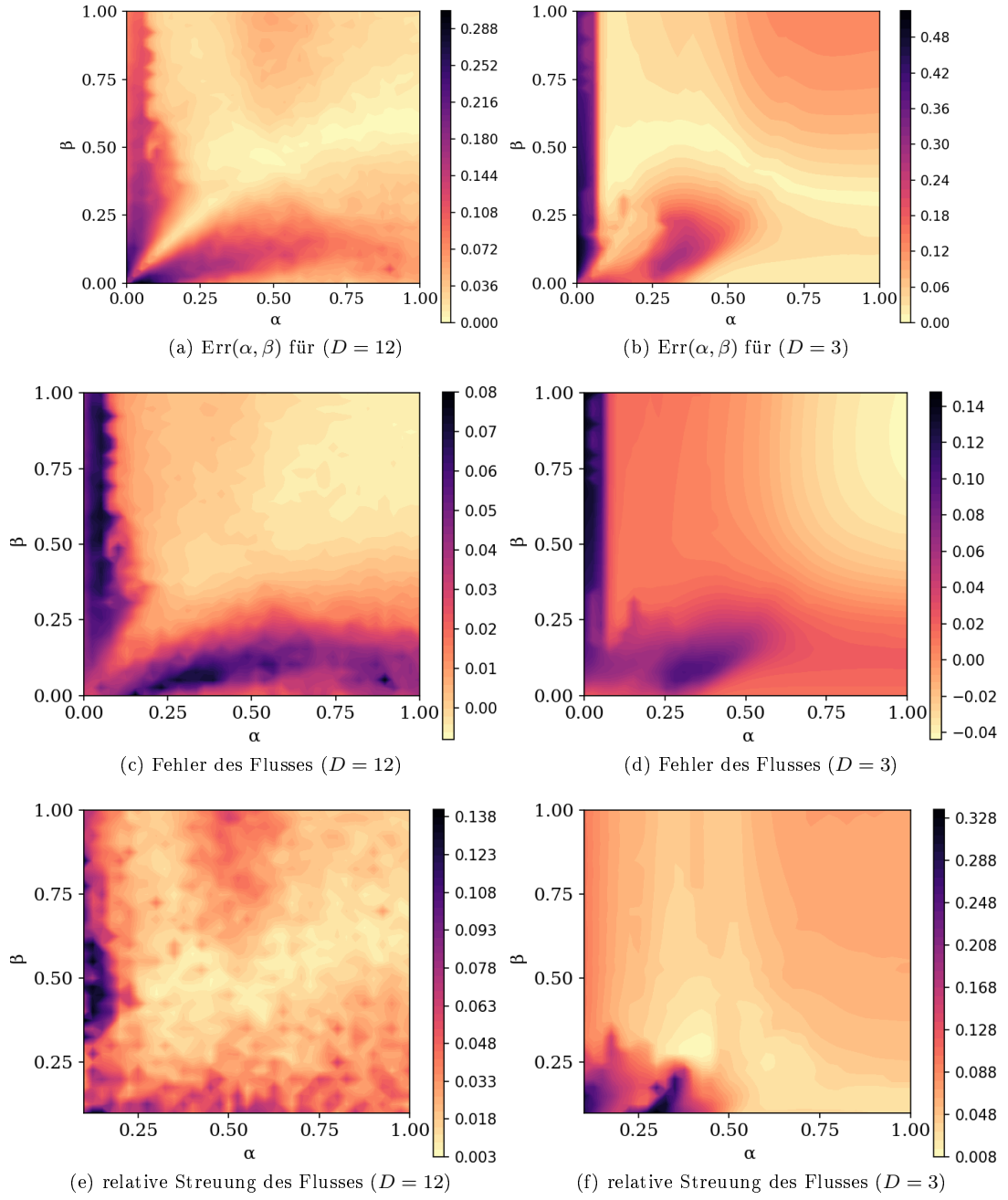


Abbildung 3.6: $L=10$

Kapitel 4

Fazit

Kapitel 5

Anhang

5.1 Trotter-Zerlegung

5.2 SVD und NMF

5.3 Linearer Filter

Literaturverzeichnis

- [1] B Derrida, M R Evans, V Hakim, and V Pasquier. Exact solution of a 1d asymmetric exclusion model using a matrix formulation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 26(7):1493, 1993.
- [2] T. H. Johnson, S. R. Clark, and D. Jaksch. Dynamical simulations of classical stochastic systems using matrix product states. *Phys. Rev. E*, 82:036702, Sep 2010.
- [3] N. Rajewsky, L. Santen, A. Schadschneider, and M. Schreckenberg. The asymmetric exclusion process: Comparison of update procedures. *Journal of Statistical Physics*, 92(1):151–194, Jul 1998.
- [4] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326(1):96 – 192, 2011. January 2011 Special Issue.
- [5] Kristan Temme and Frank Verstraete. Stochastic matrix product states. *Phys. Rev. Lett.*, 104:210502, May 2010.
- [6] F. Verstraete and J. I. Cirac. Matrix product states represent ground states faithfully. *Phys. Rev. B*, 73:094423, Mar 2006.