

# Bachelor Arbeit

Philipp Haim

8. September 2017

## **Zusammenfassung**

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Matrix-Produkt Zustände</b>	<b>2</b>
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
<b>2</b>	<b>Das ASEP-Modell</b>	<b>10</b>
2.1	Mathematische Beschreibung . . . . .	10
2.2	Analytische Lösung . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>14</b>
3.1	Implementierung im MPS-Formalismus . . . . .	14
3.2	Fehler-Analyse der MPS- und sMPS-Näherung . . . . .	15
3.2.1	MPS . . . . .	15
3.2.2	sMPS . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Fazit</b>	<b>23</b>
<b>5</b>	<b>Anhang</b>	<b>24</b>
5.1	Trotter-Zerlegung . . . . .	24
5.2	SVD und NMF . . . . .	24
5.3	Linearer Filter . . . . .	24

# Kapitel 1

## Matrix-Produkt Zustände

Man betrachte ein Gitter bestehend aus  $L$  Teilchen. 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 [5].

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

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

### 1.1 Konstruktion eines MPS

Dafür werden, wie in Gleichung 1.3 ausgeführt, die Koeffizienten in eine  $(d \times d^{L-1})$  Matrix 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  $A^{\sigma_i}$  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  $d$   $A^{\sigma_L}$  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  $A^{\sigma_i}$  und  $A^{\sigma_j}$  für  $i \neq j$  um unterschiedliche Matrizen handelt. Um die Notation einfach zu halten, wird auf eine explizite Unterscheidung allerdings verzichtet.

<sup>1</sup>Abkürzung 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  $A^{\sigma_i}$  erfüllen aufgrund ihrer Konstruktion einige spezielle Eigenschaften. Da die  $U$  Matrizen der Singulärwertzerlegung links-normalisiert sind<sup>2</sup>, gilt für alle Matrizen  $A^{\sigma_i}$ , dass<sup>3</sup>

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

Kann ich das so nennen?

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 zu beachten, 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 Matrizen  $A$  links-orthogonal und alle Matrizen  $B$  rechts-orthogonal sind.

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 in das Tensorprodukt von zwei Basen aufgeteilt werden, 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 den Fehler in den Koeffizienten  $c$  möglichst klein zu halten. Der einfachste Weg, dies zu erreichen führt erneut über die Singulärwertzerlegung.

Wir betrachten einen gemischt-kanonischen MPS mit der Diagonalmatrix  $S$  an der 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.

<sup>2</sup>D.h.  $U^\dagger U = \mathbb{1}$

<sup>3</sup>Im weiteren Text wird auch ein Satz Matrizen  $A^{\sigma_i}$ , der diese Eigenschaft erfüllt links-normalisiert genannt.

Diese Kompression kann einfach auf den MPS-Formalismus übertragen werden, indem von der Matrix  $A^{\sigma_l}$  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<sup>4</sup>. Es ist zu beachten, dass dabei die Norm des Zustandes nicht erhalten bleibt.

Um diese Dimensionsreduktion für die Matrizen  $A^{\sigma_l}$  und  $B^{\sigma_{l+1}}$  durchzuführen, wurde vorausgesetzt, dass eine Schmidt-Zerlegung des Systems 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 aus Gleichung 1.8 vorgenommen werden. Dafür gehe man im Folgenden davon aus, dass ein links-kanonischer MPS vorliegt<sup>5</sup>. Zunächst werden die Matrizen  $A^{\sigma_L}$  zu einer Matrix zusammengefasst, indem der Index  $\sigma_L$  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  $B^{\sigma_L}$  aufteilen. Der Zustand hat nun die Form

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

Es können nun die Matrizen  $U$ ,  $S$  und  $B^{\sigma_L}$ , wie zuvor beschrieben, zu  $\tilde{U}$ ,  $\tilde{S}$  und  $\tilde{B}^{\sigma_L}$  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.

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

In [8] 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  $\rho_A$  oder  $\rho_B$  aufgefasst werden, da gilt

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

$\text{Tr}_B$  bezeichnet dabei die Spur über das Teilsystem  $B$ . Dieser Fehler ist also klein, wenn das Eigenwert-Spektrum des reduzierten Dichteoperators schnell genug abfällt, um ab dem Element  $D$  keinen signifikanten Beitrag 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 [2].

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  $B^{\sigma_i}$  werden über den Zeilenindex zusammengefasst.

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

<sup>4</sup>Es wird vorausgesetzt, dass die Einträge in  $S$  nach ihrer Größe sortiert sind

<sup>5</sup>Dies stellt keine Einschränkung dar, da jeder Zustand in einen links-kanonischen Zustand umgeschrieben werden kann [5, Seite 129].

Ansonsten kann analog zu Gleichung 1.11 vorgegangen werden.

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 trunkierten Matrix zu komprimieren, die den 2-Norm Abstand zu dem ursprünglichen MPS minimiert. Während diese Methode zwar den Fehler minimiert, stellt auch hier Geschwindigkeit ein Problem dar, wenn der erste Iterationsschritt zufällig gewählt wird [5].

### 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  $A^{\sigma_1}$  keiner der Terme mehr von  $\sigma_1$  abhängt, kann diese Summe vorgezogen werden. Dasselbe kann im Anschluss für  $\sigma_2$  usw. gemacht werden, und so ergibt sich für den Überlapp von zwei Zuständen  $|\phi\rangle$  und  $|\psi\rangle$

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

Auf diese Art kann der Rechenaufwand von  $\mathcal{O}(LD^3d^L)$  auf  $\mathcal{O}(LD^3d)$  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 [5], 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.

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

Im letzten Schritt lässt sich 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  $A^{\sigma_i}$  unter Anwendung eines MPO eine neue Matrix  $N^{\sigma_i}$  wie folgt:

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

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  $e^{-i\hat{H}t}$  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 den 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  $\tau$ , so kann mittels einer Trotter-Zerlegung 1. Ordnung (vgl. Anhang 5.1) 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 größerer 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  $\tau$  gegen 0 geht.

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

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

Es kann die Wirkung des Hamiltonian also aufgeteilt werden in die Wirkung auf Plätze mit geradem bzw. ungeradem Gitterplatz  $i$ . 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  $\hat{H}_{\text{odd}}$  mit sich selbst kommutiert und daher  $e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\tau}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\tau}{2}} = e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\tau}$ . 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  $e^{-i\hat{h}_{1,2}\tau} \equiv \hat{O}$  betrachtet werden. Ziel ist es, diesen zu einem Produkt von 1-Teilchen Operatoren zu faktorisieren. Dafür wird zunächst die Basis des Operators  $\hat{O}$  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.

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

Es wurden hier die neuen Matrizen  $M^{\sigma_1\sigma'_1}$  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 man<sup>6</sup>

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

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 gemischt 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

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

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

gebracht werden [3]. Wie dies erreicht werden kann, wurde in [6] gezeigt und wird in Abschnitt 1.6 vorgestellt.

Komprimiert man nun den Zustand, indem nur über die  $D$  größten  $p_\lambda$  summiert wird, ist der Fehler nach oben beschränkt durch

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

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. Die Anwendung dieses MPO's auf den Zustand erfolgt dann völlig analog zu Gleichung 1.19 und man erhält einen neuen Satz Matrizen  $N^{\sigma_i}$ . Mittels dieser kann  $\langle \hat{O} \rangle$  berechnet werden wie

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

## 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. Für diese Systeme lassen sich 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].

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 [6] 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  $p_{\lambda}$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung sein muss.

Temme und Vestrup haben [6] haben dafür durch die Matrizen  $A^{\sigma_i}$  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  $A^{\sigma_l}$  und  $A^{\sigma_{l+1}}$  eingefügt und mit  $p_{\lambda}/p_{\lambda}$  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

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

eingeführt. Mit dieser Zerlegung wurde in [6] 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.

---

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

# 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  $\alpha dt$  ein Teilchen an dieser Position eingesetzt. Weiters wird in diesem Zeitschritt mit der Wahrscheinlichkeit  $\beta dt$  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<sup>1</sup>, 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  $\tau_i$  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 [1]. 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 die Zeitentwicklung von  $P$  beschrieben werden. Dieselben Überlegungen aus Gleichung 2.1 liefern so

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

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

<sup>1</sup>In 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 [4].

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  $(|1\rangle, |0\rangle) \otimes (|1\rangle, |0\rangle)$

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

$$h = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

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<sup>2</sup>. 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

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

## 2.2 Analytische Lösung

Das Studium des ASEP-Modells ist unter anderem deshalb sehr nützlich, da eine 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<sup>3</sup> 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]

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

<sup>2</sup>Dabei ist der Operator  $h_{i,i+1}$  gegeben durch

<sup>3</sup>Mit dem Fluss ist hier die Rate gemeint, mit der sich Teilchen zum benachbarten Gitterplatz bewegen.

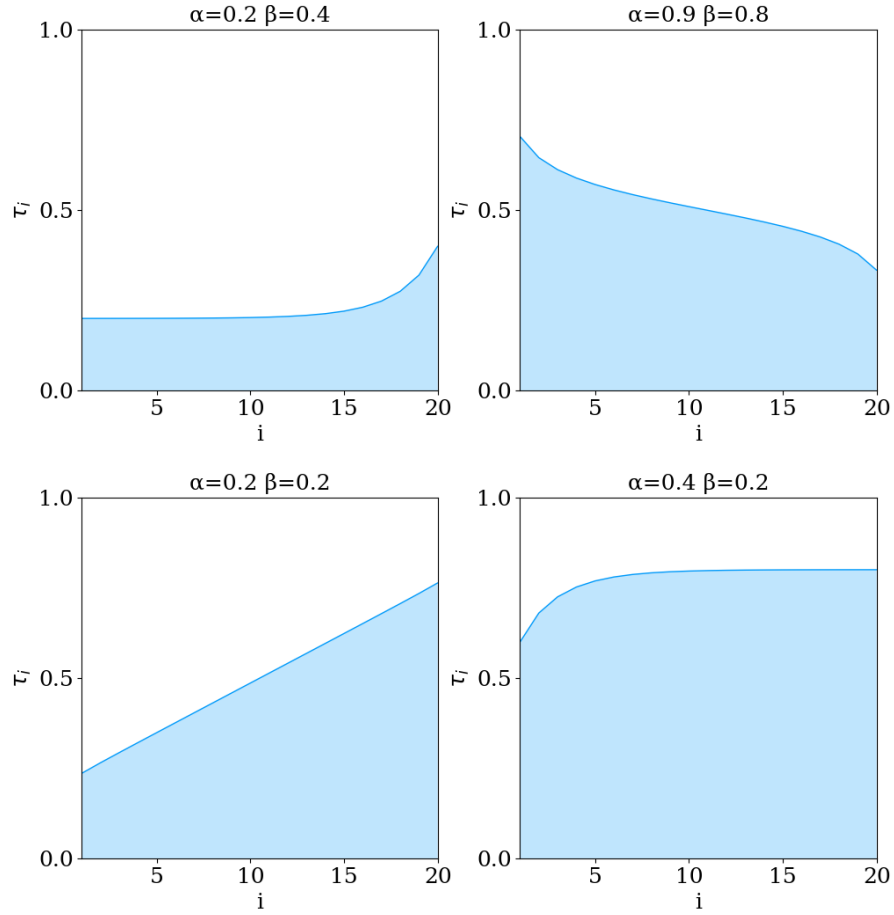


Abbildung 2.1: Dichteverteilungen für verschiedene Ein- und Ausfluss-Parameter

Die Funktion  $R(n)$  ist hierbei gegeben durch<sup>4</sup>

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

In Abbildung 2.1 sind die Dichteverteilungen eines Systems der Größe  $L = 20$  für verschiedene Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  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 diesen. Zunächst werde die Dichte weit von den Rändern betrachtet (d. h.  $1 \ll i \ll L$ ).

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

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.

<sup>4</sup>Die Abhängigkeit von  $\alpha$  und  $\beta$  wird hier aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht explizit angegeben.

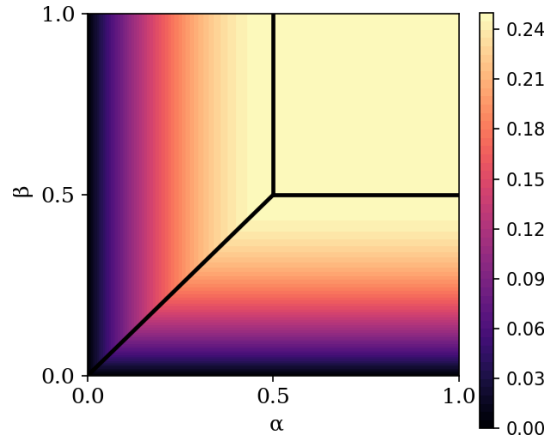


Abbildung 2.2: Der Fluss  $J$ . Die Linien zeigen die Phasengrenzen an.

Zur kompakten Beschreibung der Dichten an den Rändern wird zunächst eine neue Größe  $\kappa$  eingeführt. Diese kann als  $\kappa^{-n} \approx f(\alpha, \beta)R(n)$  genähert werden, 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  $\kappa$

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

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  $\kappa$  und damit  $J$  unterschieden werden, bilden die Phasen des ASEP-Modells. In Abbildung 2.2 sind der Fluss sowie die Phasengrenzen für den Limes  $L \rightarrow \infty$  aufgetragen. 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. Gleichung 2.11).

bessere  
Namen?

# Kapitel 3

## Ergebnisse

### 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  $(1 \times 1)$  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.

Für die Zeitentwicklung dieses Zustands ist nun analog zu dem Gleichung 2.8 beschriebenen Algorithmus. 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.



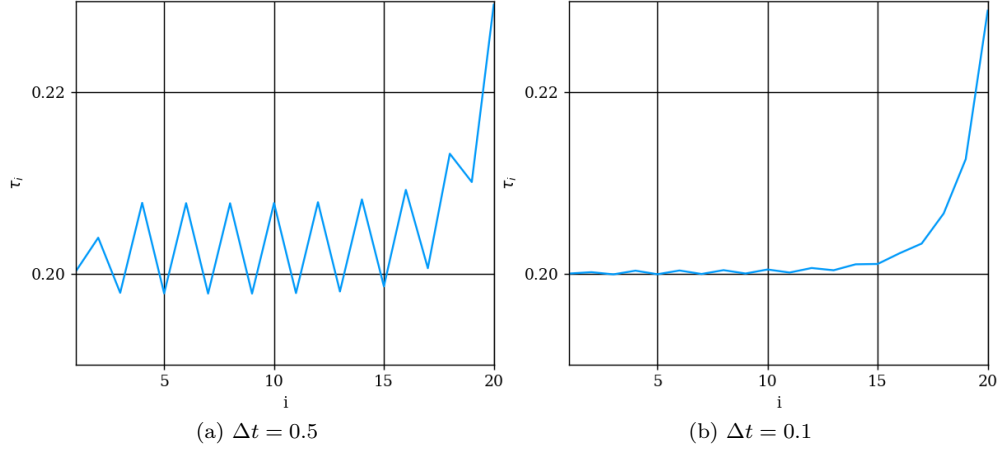


Abbildung 3.1: Dichteverteilungen für verschieden große Zeitschritte ( $L = 20, D = 12$ )

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 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 Fehler-Analyse der MPS- und sMPS-Näherung

Im Folgenden sollen die Näherungen des ASEP-Modells auf ihre Genauigkeit untersucht werden. Dafür werden im Folgenden die analytischen Ergebnisse sowohl von der Dichteverteilung als auch von dem Fluss im stationären Zustand mit den Ergebnissen der MPS- sowie sMPS-Berechnungen verglichen. Diese wurden jeweils zwei mal mit verschiedenen maximalen Matrixdimensionen durchgeführt, um den qualitativen Einfluss dieser auf die Näherung beurteilen zu können.

### 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 3.2.1). Werden weitere Schritte mit kleiner werdendem  $\Delta t$  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  $\alpha$  und  $\beta$  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 Abbildung 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<sup>1</sup>. Dies kann verstanden werden, indem die Dichteverteilung für diese Wertepaare untersucht wird. Wie in [1] auf Seite

<sup>1</sup>In der Abbildung nicht zu erkennen ist, dass dies für fast alle anderen Punkte nicht der Fall ist.

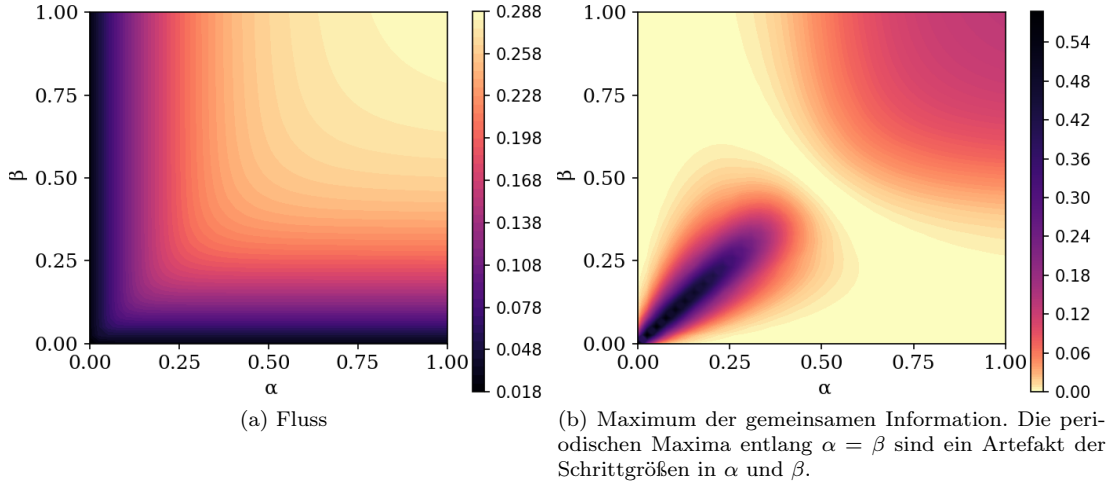


Abbildung 3.2: Fluss durch das System sowie minimale gemeinsame Information mit exponentieller Farb-Skala

1508 bemerkt, liegt diese konstant bei  $\alpha$ . 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 es in Gleichung 3.2 der Fall war.<sup>2</sup> Weiters ist zu beobachten, dass die gemeinsame Information für  $\alpha \approx \beta$  für ein festes  $\alpha$  (bzw. ein festes  $\beta$ ) maximal wird. Die Ausnahme bildet  $\alpha \approx 0.5$ , da für  $\alpha \approx \beta$  folglich  $\alpha + \beta \approx 1$  ist, was wie zuvor besprochen mit einem Minimum der Information verknüpft ist.

Es soll im weiteren die Qualität der MPS-Näherung an die exakte Lösung behandelt werden. Da für jedes Wertepaar  $(\alpha, \beta)$   $L$  Werte für die Dichte und  $L - 1$  für den Fluss vorliegen, ist für die kompakte Darstellung des Fehlers ein Maß für die mittlere Abweichung nötig. Dafür wurde für die Dichteverteilung die Funktion

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

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

Da der Fluss durch ein System 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.  $\Delta t$  nicht klein genug gewählt und der Zustand konnte noch nicht ausreichend konvergieren<sup>3</sup>, 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  $\alpha$  und  $\beta$  zu, für  $\alpha \approx \beta$  bleibt diese allerdings klein. Dieses Verhalten kann verstanden werden, wenn die Konvergenzgeschwindigkeit 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.

<sup>2</sup>Dies entspricht einem mean-field Ansatz [2].

<sup>3</sup>Für  $\alpha < 0.1, \beta < 0.1$  waren aus diesem Grund die Abweichungen so groß, dass sie für eine besser Übersicht aus den Abbildungen 3.3a und 3.3e ausgeschlossen wurden

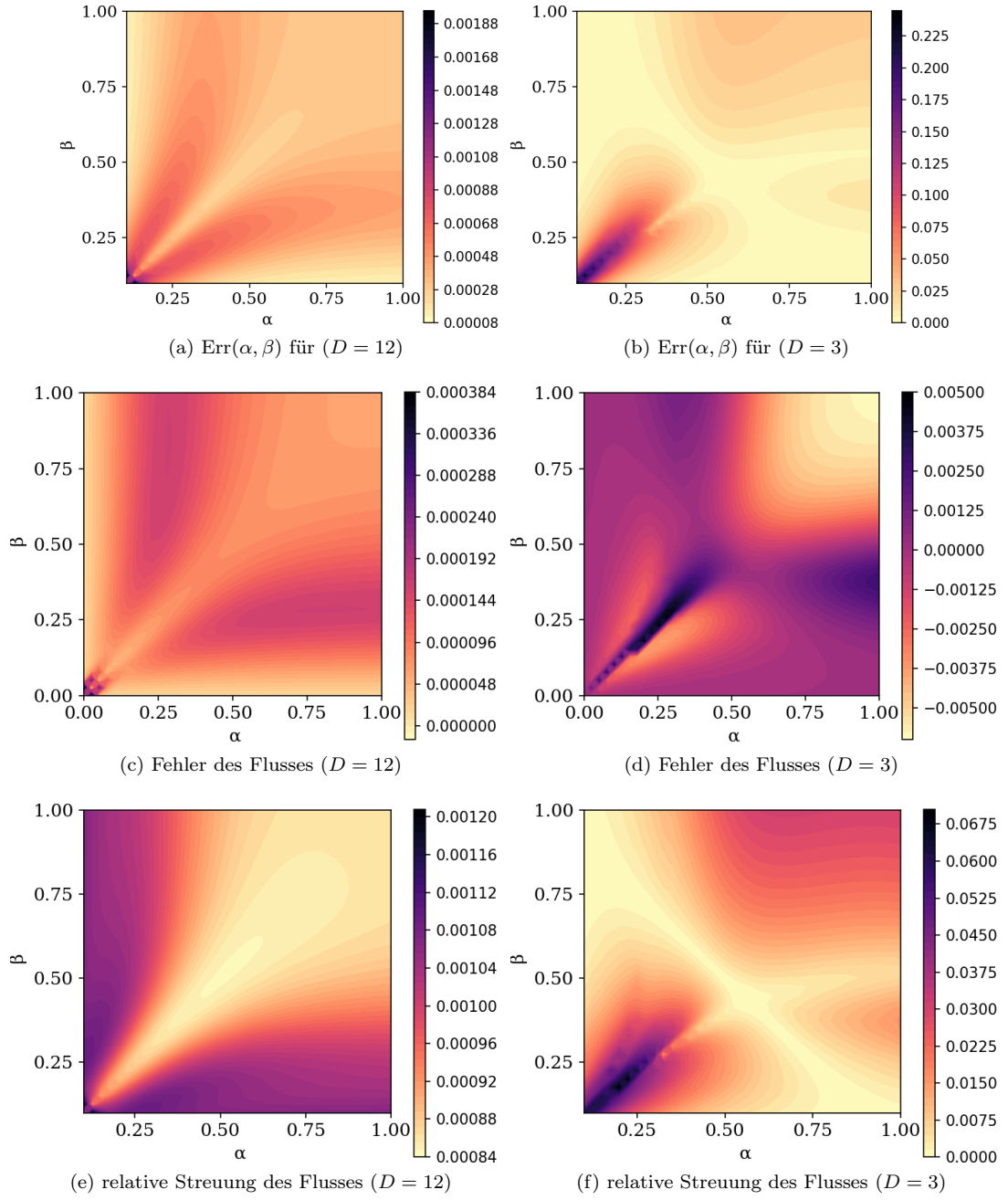


Abbildung 3.3:  $L=10$

Da diese Vorgänge mit der Rate  $\beta$  bzw.  $\alpha$  auftreten, kann das System schneller in den neuen Zustand gelangen, wenn  $\alpha$  und  $\beta$  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<sup>4</sup>.

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  $\alpha$  und  $\beta$  kann darauf geschlossen werden, dass für dieses System im Fall  $D = 12$  der Fehler hauptsächlich durch die Wahl von  $t$  bzw.  $\Delta t$  verursacht wird.

Für die Abbildungen 3.3b, 3.3d und 3.3f wurden dieselben Werte für  $D = 3$  erneut berechnet. Aufgrund der sehr geringen Matrixgröße kann zum Einen damit gerechnet werden, dass die Fehler deutlich größer sind und zum anderen eine andere Struktur aufweisen, da die Zeitschritte nicht länger der primär limitierende Faktor sind. Tatsächlich ist in den Abbildungen 3.3b und 3.3f zu beobachten, dass der Fehler der gemeinsamen Information im System (Abbildung 3.2b) ähnelt.

Der Bogen, an dem der Fehler ein lokales Minimum aufweist rührt daher, dass bei der Kompression des MPS zuerst von der ersten zu letzten Matrix und im Anschluss von der letzten zur ersten vorgegangen wird. Ändert man die Reihenfolge, spiegelt sich dieser Bogen um die Diagonale von  $(0, 0)$  zu  $(1, 1)$

Da die gemeinsame Information  $I_{A:B}$  jedoch keine Größe des gesamten Systems ist, sondern für eine Aufteilung in die Untersysteme  $A$  und  $B$  definiert ist, sollten auch die Fehler dieser Untersysteme mit  $I_{A:B}$  verglichen werden. In Abbildung 3.4 sind für zwei Fälle die Ergebnisse zu sehen. Während für die linken Abbildungen das System  $A$  nur den ersten Gitterplatz einschließt, werden in den rechten Abbildungen alle Gitterplätze bis auf den letzten eingeschlossen. Es wurde weiters die Funktion

$$\text{Err}_A(\alpha, \beta) = \sqrt{\frac{1}{|A|} \sum_{i \in A}^L (\tau_i - \tau_i^{\text{exakt}})^2} \quad (3.7)$$

eingeführt, um den Fehler in einem Untersystem bestimmen zu können. Zu beachten ist, dass Abbildung 3.4a  $\text{Err}_A(\alpha, \beta)$  darstellt, Abbildung 3.4b allerdings  $\text{Err}_B(\alpha, \beta)$ . In den Abbildungen 3.4c und 3.4d ist jeweils die Abweichung des Flusses von System  $A$  nach  $B$  im Betrag zu sehen. Es ist hierbei ein eindeutiger Zusammenhang zwischen den Fehlern der Untersysteme sowie deren gemeinsamer Information zu erkennen.

Es kann zusammenfassend also beobachtet werden, dass für Wertepaare  $(\alpha, \beta)$  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 zur exakten Beschreibung benötigten Matrixdimension zusammenhängt.

### 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.<sup>5</sup> 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,

<sup>4</sup>Da das System auch aufgefasst werden kann als Löcher, welche sich in die entgegengesetzte Richtung bewegen, die mit einer Rate  $\beta$  eingesetzt und einer Rate  $\alpha$  entfernt werden [1], muss die Dichteverteilung der Teilchen für  $\alpha = \beta$  ident sein zu der Verteilung der Löcher. Diese Symmetrie erzwingt  $\tau_{\text{ges}} = (L - \tau_{\text{ges}}) = 0.5L$ .

<sup>5</sup>Für zufällige Matrizen der Dimension  $(8 \times 8)$  ist die maximale Abweichung eines Matrixelements ca.  $3 \cdot 10^{-3}$

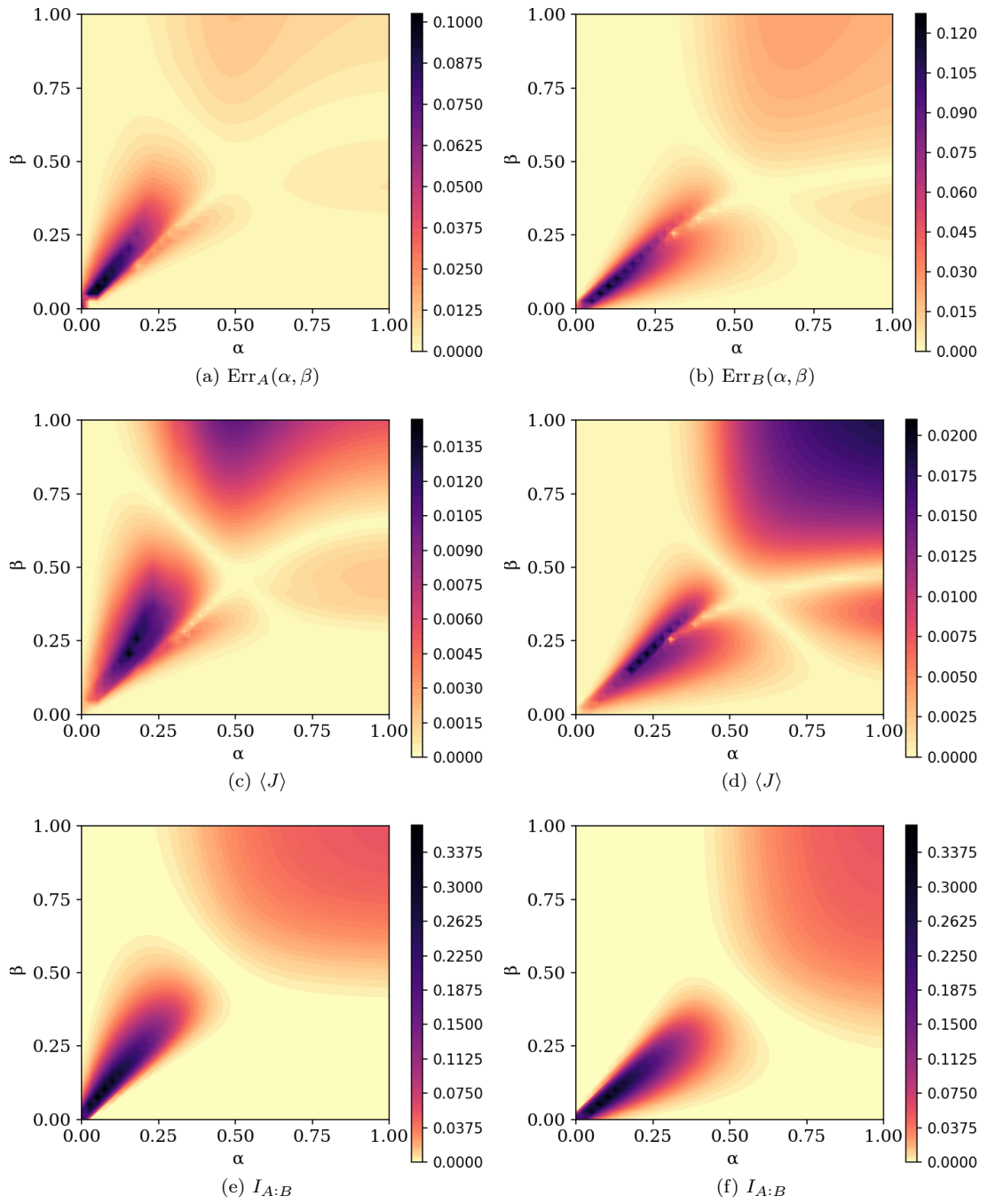


Abbildung 3.4:  $\text{Err}(\alpha, \beta)$ ,  $\langle J \rangle$  sowie  $I_{A:B}$  für zwei verschiedene Zerlegungen des Systems. Links zu sehen ist die die Werte bei Teilung nach dem ersten Gitterplatz, rechts die bei Teilung vor dem letzten.

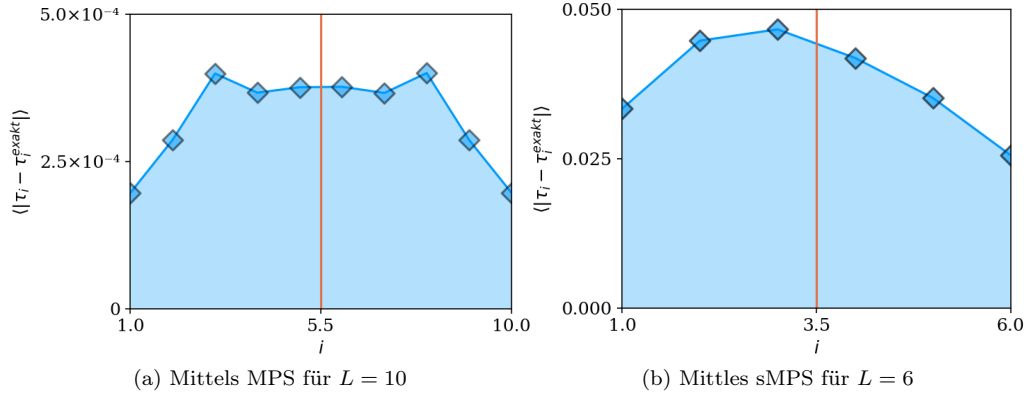


Abbildung 3.5: Mittlerer Betrag des Fehlers für die Gitterplätze. Die senkrechte Linie markiert das Zentrum der Gitters

auch nicht determiniert, was die Konvergenz zum stationären Zustand weiters erschwert. Dies führt unter anderem dazu, dass sich die berechneten Werte nicht so stetig mit  $\alpha$  und  $\beta$  ändern, wie es im MPS-Fall beobachtet wurde. Es wurde daher ein linearer Gaußfilter (vgl 5.3) mit einer symmetrischen Standardabweichung von 0.0125 auf die Bildpunkte angewandt, um die grobe Struktur dieser besser darstellen zu können.

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  $(\alpha, \beta)$  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 Differenz von  $\tau_i$  und  $\tau_i^{\text{exakt}}$  über alle  $\alpha$  und  $\beta$  gemittelt. Dabei konnte festgestellt werden, dass diese mittlere Abweichung für die ersten beiden Gitterplätze um 30% größer war als für die beiden letzten. Diese Asymmetrie war bei der Verwendung eines MPS nicht zu beobachten. Die Werte sind in Abbildung 3.5 zu sehen. Der Ursprung dieses Verhaltens kann ein Artefakt der NMF sein. Existiert für eine Matrix die Zerlegung  $A = WH$  in elementweise positive Matrizen, so werden  $W$  und  $H$  von einem NMF-Algorithmus iterativ gesucht.[3] Ist diese Näherung 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 3.6a ist  $S_C$  minimiert über alle Zerlegungen zu sehen, während in Abbildung 3.6b die Zerlegung zwischen den Plätzen 1 und 2 ausgeschlossen wurde. Zweiteres entspricht im Vergleich mit den Ergebnissen aus [6] den Erwartungen. Dies legt den Schluss nahe, dass die Entropie für  $|p\rangle^{[1]}$  durch den Fehler signifikant zu niedrig abgeschätzt wird. Vergleicht man nun die Entropie-Kosten aus Abbildung 3.6b mit der maximalen gemeinsamen Information aus Abbildung 3.2b, kann festgestellt werden, dass  $I_{A:B}$  von oben durch  $S_C$  beschränkt ist, was die Ergebnisse aus [6] bestätigt.

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  $J$  berechnet. Es ist zu sehen, dass die Gerade von  $(0,0)$  zu  $(1,1)$  nicht länger eine Symmetrieachse darstellt, wie es für einen MPS der Fall war. Betrachtet man in Abbildung 3.7a, 3.7c und 3.7e jeweils nur die Hälfte unter dieser Diagonalen ist eine starke Ähnlichkeit zu den Abbildungen

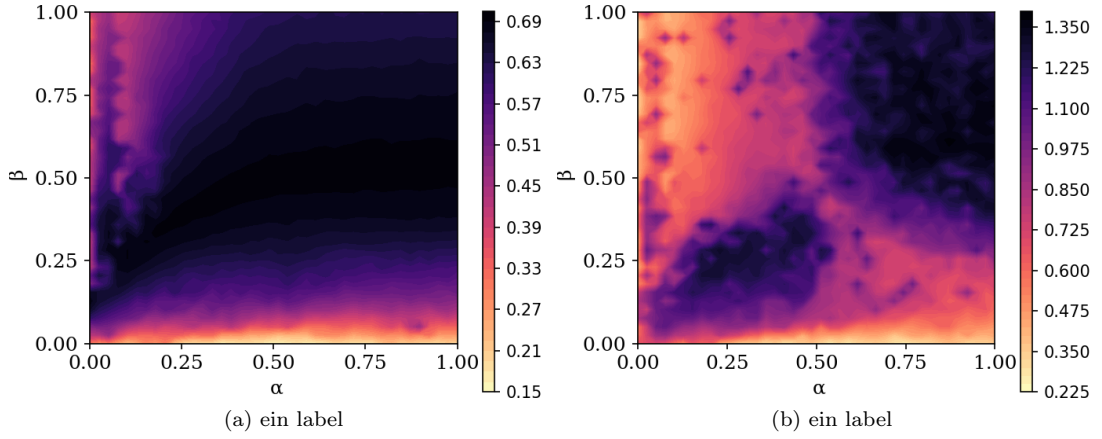


Abbildung 3.6: Entropie-Kosten  $S_C$  für ein Gitter mit  $L = 6$ . Im rechten Bild wurde die Zerlegung zwischen erstem und zweitem Platz ausgeschlossen.

3.3a, 3.3c sowie 3.3e erkennen. Besonders für die relative Streuung von  $J$  ist allerdings zu beobachten, dass für einzelne Punkte die berechneten Größen weit über bzw. unter denen ihrer nächsten Umgebung liegen. Eine wahrscheinliche Ursache dafür ist in der nicht-Konvexität der NMF zu finden. Da aufgrund dieser die Qualität der Näherung stark von den Anfangsbedingungen abhängt[3], sind Unregelmäßigkeiten wie diese zu erwarten. Weiters ist in allen Bildern zu sehen, dass für kleine Werte von  $\alpha$  der Fehler am größten wird.

Betrachtet man nun den Fall  $D = 2$ , so kann man wie für einen MPS eine andere Struktur des Fehlers feststellen. Diese Änderung ist hierbei allerdings deutlich weniger klar, da der hier der Fehler für  $D = 8$  annähernd dieselbe Größenordnung hat. Es ist also damit zu rechnen, dass die Struktur des Fehlers für  $D = 2$  der Überlagerung von diesem sowie  $S_C$  aus Abbildung 3.6b ähnelt. Im Gegensatz zu  $D = 8$  ist auch zu bemerken, dass die Werte weit weniger Unregelmäßigkeiten aufweisen. Da der durchschnittliche Fehler bei der NMF einer  $(2 \times 2)$  Matrix um einen Faktor 10 unter dem einer  $(8 \times 8)$  Matrix liegt, kann daher auch damit gerechnet werden, dass die Unregelmäßigkeiten um diesen Faktor abnehmen und daher nicht länger sichtbar sind.

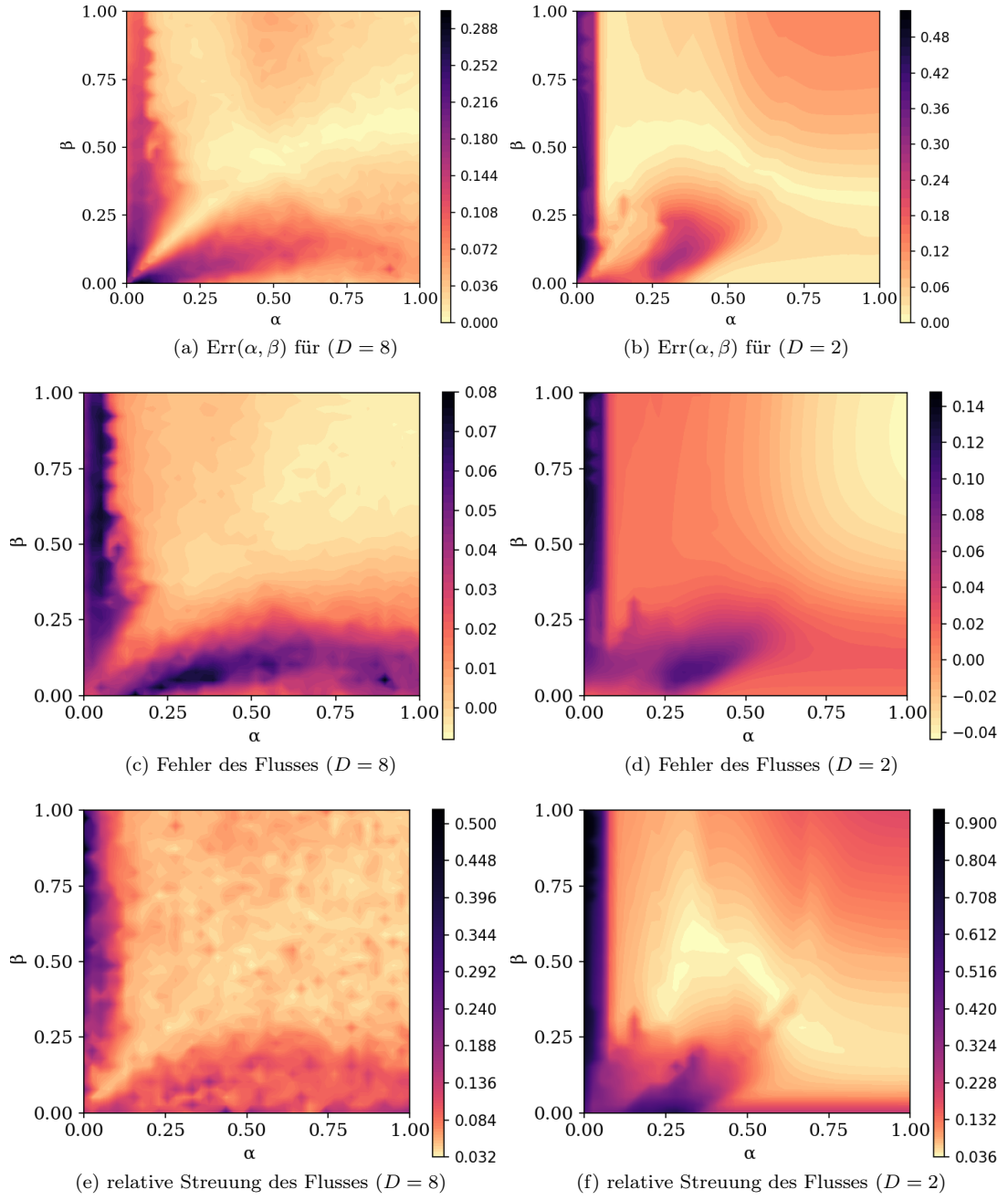


Abbildung 3.7:  $L=10$



# Kapitel 4

## Fazit

Wie in Abschnitt 3.2.1 gezeigt wurde, konnte mithilfe von Matrix-Produkt Zuständen das ASEP Modell gut genähert werden. Es konnten anhand der Struktur der Abweichung in Abhängigkeit der Ein- und Ausfluss-Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  Rückschlüsse auf die primäre Ursache des Fehlers gezogen werden. Dabei konnte beobachtet werden, dass der von der Begrenzung der Matrix-Dimension rührende Fehler dieselbe Abhängigkeit von  $\alpha$  und  $\beta$  aufweist wie die gemeinsame Information  $I_{A:B}$ .

Die Berechnung des ASEP-Modells mittels stochastischen Matrix-Produkt Zuständen konnte ebenfalls implementiert werden. Während dabei die Abweichungen von der analytischen Lösung um einen Faktor  $10^2$  größer waren, konnte das prinzipielle Verhalten des Systems reproduziert werden. Die Ursache für diese Abweichungen war der bei der nicht-negativen Matrix-Faktorisierung auftretende Fehler. Die Ergebnisse können verbessert werden, indem bei jeder Verwendung diese Faktorisierung mehrere Iterationen mit verschiedenen Anfangsbedingungen vorgenommen werden, um davon die Matrizen mit dem geringen Fehler auswählen zu können [3]. Wie bereits in [6] demonstriert wurde, konnte mit den stochastischen MPS eine obere Schranke für die gemeinsame Information gefunden werden.

Es konnte insbesondere für die MPS-Näherung, aber auch für die sMPS-Näherung, beobachtet werden, dass die Standardabweichung des mittleren Flusses dieselbe Struktur aufweist wie die Abweichung der Dichteverteilung und des mittleren Flusses. Damit ist es potentiell möglich festzustellen, ob die gewählte Matrixdimension oder die Größe der Zeitschritte die primäre Ursache für eventuelle Abweichungen sind, wenn keine analytische Lösung des Modells verfügbar ist.

Zusammenfassend waren Matrix-Produkt Zustände ihrem stochastischem Gegenstück sowohl in der erreichbaren Genauigkeit als auch dem nötigen Rechenaufwand signifikant überlegen. Während überprüft werden konnte, dass ein sMPS grundsätzlich zur Untersuchung des ASEP-Modells geeignet ist, ergaben sich dadurch keine Vorteile. Es scheint demnach ratsam, einen MPS zu verwenden, wenn dies möglich ist.

## 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] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio. Colloquium. *Rev. Mod. Phys.*, 82:277–306, Feb 2010.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] Kristan Temme and Frank Verstraete. Stochastic matrix product states. *Phys. Rev. Lett.*, 104:210502, May 2010.
- [7] Jaegon Um, Hyunggyu Park, and Haye Hinrichsen. Entanglement versus mutual information in quantum spin chains. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2012(10):P10026, 2012.
- [8] F. Verstraete and J. I. Cirac. Matrix product states represent ground states faithfully. *Phys. Rev. B*, 73:094423, Mar 2006.