

8. naloga – algoritem TEBD

Jože Zobec

1 Implementacija postopka TEBD

Valovna funkcija pri času t se zapiše lahko kot

$$|\psi(t)\rangle = e^{-itH}|\psi(t=0)\rangle$$

Če zelimo isto stanje dobiti pri neki inverzni temperaturi β , je pravilni pristop, da β obravnavamo kot negativni imaginarni čas, tj.

$$|\psi_\beta\rangle = |\psi(-i\beta)\rangle = e^{(-i\beta)(-iH)}|\psi(t=0)\rangle = e^{-\beta H}|\psi(\beta=0)\rangle.$$

Iz prejšnje naloge se spomnimo, da lahko vse ugotovimo iz dvodelčnega hamiltoniana, $h_{1,2}^{(2)}$. V soglasju s tem bomo definirali dvodelčni propagator:

$$U^{(2)}(\beta) = \exp\left(-\beta h_{1,2}^{(2)}\right) = \exp\left(-\beta \sum_{\lambda \in \{x,y,z\}} \sigma^\lambda \otimes \sigma^\lambda\right).$$

Ker matrike $\sigma^\lambda \otimes \sigma^\lambda$ med seboj komutirajo $\forall \lambda$, lahko izraz zapišemo kot produkt treh matrik (višji členi razvoja BCH so enaki nič)

$$U^{(2)}(\beta) \equiv \prod_{\lambda \in \{x,y,z\}} \exp\left(-\beta \sigma^\lambda \otimes \sigma^\lambda\right). \quad (1)$$

Razvoj lepo konvergira in velja

$$\left(\sigma^\lambda \otimes \sigma^\lambda\right)^n = \begin{cases} \mathbb{1}; & n = 2m, m \in \mathbb{N} \\ \sigma^\lambda \otimes \sigma^\lambda; & n = 2m - 1, m \in \mathbb{N} \end{cases}$$

Ko to upoštevamo, ugotovimo, da je

$$U^{(2)}(\beta) = e^{-\beta h_{1,2}^{(2)}} = e^\beta \begin{bmatrix} e^{-2\beta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \text{ch}(2\beta) & -\text{sh}(2\beta) & 0 \\ 0 & -\text{sh}(2\beta) & \text{ch}(2\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-2\beta} \end{bmatrix},$$

tj. dvodelčni temperaturni propagator za anti-feromagnet. Dvodelčni časovni propagator za *feromagnet* se napiše kot

$$U_{\text{fer}}^{(2)}(t) = e^{-it} \cos(2t) \mathbb{1}_4 + ie^{-it} \sin(2t) \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 0 & 1 & \\ & 1 & 0 & \\ & & & 1 \end{bmatrix},$$

kar je v bistvu $U^{(2)}(\beta \rightarrow -it)$.

1.1 Spinska korelacija

Spinska korelacija je definirana kot

$$C_{jk} \sim \langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle = \langle \psi | \sigma_j^z \sigma_k^z | \psi \rangle,$$

kjer je očitno

$$\sigma_j^z \equiv \mathbb{1}_{2^{j-1}} \otimes \sigma^z \otimes \mathbb{1}_{2^{n-j}}.$$

Naš načrt je, da bomo uporabili enačbe (76), (77), (78) in (79) iz skripte. Torej potrebujemo matrike $\tilde{\mathbf{A}}_{s_j}^{(j)}$, ki generirajo $\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n}^*$. Trdimo, da $\tilde{\mathbf{A}}_{s_j}^{(j)} = (\mathbf{A}_{s_j}^{(j)})^*$, kar lahko zlahka dokažemo:

$$\begin{aligned} \psi_{s_1, s_2, \dots, s_n} &= \mathbf{A}_{s_1}^{(1)} \mathbf{A}_{s_2}^{(2)} \dots \mathbf{A}_{s_n}^{(n)} \\ \psi_{s_1, s_2, \dots, s_n}^* &= \left(\mathbf{A}_{s_1}^{(1)} \dots \mathbf{A}_{s_n}^{(n)} \right)^* \end{aligned}$$

Na tem mestu bi sicer lahko rekli, da je $\psi_{s_1, s_2, \dots, s_n}^*$ skalar in da je kompleksno konjugiranje skalarja enakovredno hermitskemu konjugiranju (tj. hermitiranju) vendar tega ne smemo, saj bi nam to obrnilo vrstni red množenja! Množimo namreč urejeno z „leve proti desni“. Tj. zgornji izraz enostavno zapišemo kot

$$\begin{aligned} \psi_{s_1, s_2, \dots, s_n}^* &= (\mathbf{A}_{s_1}^{(1)})^* (\mathbf{A}_{s_2}^{(2)})^* \dots (\mathbf{A}_{s_n}^{(n)})^* \\ &= \tilde{\mathbf{A}}_{s_1}^{(1)} \dots \tilde{\mathbf{A}}_{s_n}^{(n)}. \end{aligned}$$

Ta produkt je že urejen po spinih, vidimo da je res

$$\tilde{\mathbf{A}}_{s_j}^{(j)} \equiv (\mathbf{A}_{s_j}^{(j)})^* = \mathbf{A}_{s_j}^{(j)*}$$

Naš operator $O_{s, s'}$ je kar σ^z . Iz njega moramo dobiti operatorje $\mathbf{V}^{(j)}$ iz enačbe (77). Dobiti jih je precej enostavno. Imamo vsoto po štirih elementih. Od tega sta dva enaka nič, saj $\sigma_{\uparrow\downarrow}^z = \sigma_{\downarrow\uparrow}^z = 0$. Torej

$$\begin{aligned} \mathbf{V}^{(j)} &= \sigma_{\downarrow\downarrow}^z \mathbf{A}_{\downarrow}^{(j)*} \otimes \mathbf{A}_{\downarrow}^{(j)} + \sigma_{\uparrow\uparrow}^z \mathbf{A}_{\uparrow}^{(j)*} \otimes \mathbf{A}_{\uparrow}^{(j)} = \\ &= \mathbf{A}_{\downarrow}^{(j)*} \otimes \mathbf{A}_{\downarrow}^{(j)} - \mathbf{A}_{\uparrow}^{(j)*} \otimes \mathbf{A}_{\uparrow}^{(j)}. \end{aligned} \tag{2}$$

Analogno lahko vidimo, da $\mathbf{L} \equiv \mathbf{T}^{(1)}$ in $\mathbf{R} \equiv \mathbf{T}^{(n)}$ in

$$\mathbf{T}^{(j)} = \mathbf{A}_{\downarrow}^{(j)*} \otimes \mathbf{A}_{\downarrow}^{(j)} + \mathbf{A}_{\uparrow}^{(j)*} \otimes \mathbf{A}_{\uparrow}^{(j)}. \quad (3)$$

Torej je $\langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle$

$$\langle \psi | \sigma_j^z \sigma_k^z | \psi \rangle = \mathbf{T}^{(1)} \dots \mathbf{T}^{(j-1)} \mathbf{V}^{(j)} \mathbf{T}^{(j+1)} \dots \mathbf{T}^{(k-1)} \mathbf{V}^{(k)} \mathbf{T}^{(k+1)} \dots \mathbf{T}^{(n)},$$

pri čemer moramo biti na robne pogoje, tj. $2 \leq j < k \leq n-1$. Nimamo periodičnih robnih pogojev, torej nimamo prave translacijske simetrije tudi za naključno žrebane vektorje. Vendar pa moramo ta izraz izpovprečiti po nekem času, tj.

$$C_{ij}(\beta) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \langle \psi_{\beta}(\tau) | \sigma_j^z \sigma_k^z | \psi_{\beta}(\tau) \rangle$$

Če bomo začetno stanje dovolj ohladili ($\beta \rightarrow \infty$) bomo slej, ko prej dosegli osnovno stanje (fizikalna interpretacija je očitna, matematično pa je tudi res, saj je po absolutni vrednosti za naš hamiltonian vedno največja lastna vrednost osnovnega stanja, kar pomeni, da v bistvu iščemo osnovno stanje s potenčno metodo). Korelacijska funkcija osnovnega stanja je potem kar

$$C_{ij}^{\infty} = C_{ij}(\beta \rightarrow \infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle \psi_{\beta}(\tau) | \sigma_j^z \sigma_k^z | \psi_{\beta}(\tau) \rangle.$$

Vrstni red limitiranja je tu pomemben. Najprej moramo limitirati β , saj moramo naše naključno stanje najprej ohladiti in šele potem povprečiti po času. Stanje je treba sproti še normirati, tj. za splošni primer se izraz glasi

$$C_{ij}^{\infty} = C_{ij}(\beta \rightarrow \infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\langle \psi_{\beta}(\tau) | \sigma_j^z \sigma_k^z | \psi_{\beta}(\tau) \rangle}{\langle \psi_{\beta}(\tau) | \psi_{\beta}(\tau) \rangle} \quad (4)$$

Vendar, pa je osnovno stanje lastno stanje in se ne spreminja s časom, torej ni treba povprečiti po času.

1.2 Domenska stena

Naše stanje $|\psi\rangle$ lahko predstavimo kot vektor ψ v prostoru spinskih konfiguracij. Te lahko oštevilčimo tako, da npr. spin '↑' na mestu n predstavlja 1 na mestu n in 0 bi na istem mestu označili spin '↓'. Vidimo, da dobimo binarno število, ki ga lahko pretvorimo v desetiškega, kjer naši indeksi tečejo od 0 do $2^n - 1$ (veriga ima n spinov, tj. 2^n možnih konfiguracij).

V našem začetnem stanju je polovico spinov '↑', polovica pa jih je '↓' (ali obratno). V prostoru konfiguracij bomo označili to konfiguracijo z desetiškimi

številom ‘ k ’. To število lahko za verigo dolžine $n = 2m$ izračunamo vnaprej in sicer

$$k_+^{(m)} = \overbrace{11 \dots 1}^m \overbrace{00 \dots 0}^m_2 = 2^{2m-1} + 2^{2m-2} + \dots + 2^m = 2^m(1 + 2 + 4 + \dots + 2^{m-1}) = 2^m(2^m - 1). \quad (5)$$

Zgornji izraz v oklepaju bi potemtakem ustrezal

$$k_-^{(m)} = \overbrace{00 \dots 0}^m \overbrace{11 \dots 1}^m_2 = 1 + 2 + \dots + 2^{m-1} = 2^m - 1. \quad (6)$$

Naše začetno stanje, k , je torej bodisi enotski vektor v smeri k_+ , bodisi v smeri k_- . Tukaj privzeli, da indeksi tečejo od 0 do $n - 1$. Če naši indeksi tečejo od 1 do n , moramo vzeti $k \in \{k_+ + 1, k_- + 1\}$. V algoritmu sem vzel $k \equiv k_-$, tj. prvih m spinov kaže gor (štejemo jih iz desne proti levi, ker skrajno desni bit predstavlja enice v binarnem zapisu).

Moj MPA postopek je nekoliko nerodno računal matriko $[\lambda^{(j)}]^{-1}$ in sicer tako, da je vzel diagonalo in jo obrnil. Če je na diagonalni kakšno število ‘0’, potem inverz ni bil definiran, saj ne smemo deliti z ‘0’. Za reševanje domenske stene, ki ima na začetku samo eno neničelno singularno vrednost to predstavlja resen problem. Lahko bodisi popravimo izračun inverza (kar je dokaj trivialno), lahko pa za vajo računamo s polnimi vektorji in preverimo, da naš postopek res deluje tudi v teh načinih „po ovinkih“. Izbral sem postopek „po ovinkih“.

Moj začetni vektor, ψ , sem razvil po bazi spinskih konfiguracij,

$$\psi = \sum_{j=1}^n \frac{\alpha_j}{|\alpha_k|} \delta_{jk} \hat{e}_j,$$

kjer so $\alpha_j \in \mathbb{C}$ izbrane po Gaussovi porazdelitvi okrog ničle, in velja $\psi^\dagger \psi = 1$. Da se ognemo prej omenjenim nevšečnostim, definiramo naše stanje kot

$$\psi = \phi_1 - \phi_2 = \underbrace{\sum_{j=1}^n \hat{e}_j \frac{\alpha_j}{|\alpha_k|} (1 + \delta_{jk})}_{\phi_1} - \underbrace{\sum_{j=1}^n \hat{e}_j \frac{\alpha_j}{|\alpha_k|}}_{\phi_2}.$$

Tako ϕ_1 kot ϕ_2 sta polna vektorja, zato ne bomo imeli problemov z MPA. Spinski profil verige dobimo enostavno kot

$$\langle \psi | \sigma_j^z | \psi \rangle = \langle \phi_1 - \phi_2 | \sigma_j^z | \phi_1 - \phi_2 \rangle = \langle \phi_1 | \sigma_j^z | \phi_1 \rangle + \langle \phi_2 | \sigma_j^z | \phi_2 \rangle - 2 \operatorname{Re} \{ \langle \phi_1 | \sigma_j^z | \phi_2 \rangle \},$$

ki jih lahko učinkovito računamo z matrikami $\mathbf{T}^{(j)}$ in $\mathbf{V}^{(j)}$. Naše kombinirano stanje ψ je še vedno enotski vektor v smeri k , vendar ga računamo z dvema polnima vektorjema. Če algoritem res deluje pravilno, moramo tudi v tem primeru dobiti pravi rezultat.

1.3 Napaka TEBD algoritma

Glavna moč TEBD algoritma je ta, da s pomočjo singularnega razcepa odstranimo majhne Schmidtove koeficiente in prihranimo pri računskem času in pri računalniškem spominu. Napaka pride tudi od izbire našega integratorja. Izbrali si bomo simplektičnega, ki pa še vedno nosi napako.

1.3.1 Rezanje matrik

Rezanje matrik pomeni, da za vsako bipartitijo sprejmemo kvečjemu M Schmidtovih koeficientov. To pomeni, da

$$\text{rang } \lambda^{(j)} \leq M, \quad \forall j.$$

Režemo tako, da v primeru ko se za nek $j \leq n - 1$ zgodi $\text{rang } \lambda^{(j)} > M$, sprejmemo le prvih M Schmidtovih koeficientov in ostale zavržemo. Temu primerno potem na istem mestu j popravimo $B_{s_j}^{(j)}$, tako da vzamemo le prvih M stolpcev in popravimo še $B_{s_{j+1}}^{(j+1)}$, tako da sprejmemo le prvih M vrstic. Pri tem napravimo majhno napako (proporcionalna je vsoti kvadratov zavrženih Schmidtovih koeficientov).

Pomembno je kdaj režemo. Ugotovil sem, da dobimo najboljše rezultate, če režemo sproti ko izvajamo Trotter-Suzukijevo shemo, začetni MPA pa pustimo tak, kot je. Če namreč prirežemo že začetku, bomo dobili približno pol nižjo energijo.

Režemo lahko tako, da $2^m > M > 1$, za verigo dolžine $n = 2m$.

1.3.2 Trotter-Suzuki

Za propagacijo uporabimo simplektični propagator Trotter-Suzuki. Za časovno propagacijo (domenska stena) uporabimo kar shemo ‘ S_2 ’ iz drugega poglavja. Za temperaturno propagacijo pa imamo disipativni problem (norma vektorja se burno spreminja), zaradi tega bomo na tem mestu uporabili shemo ‘ S_3 ’ s kompleksnimi koeficienti.

2 Rezultati

Uporabil sem programski paket `Octave` zaradi tega, ker sem TEBD implementiral relativno hitro in pravilno (nisem se izgubljal okrog indeksov, programski jezik `C` je glede tega dosti bolj nepregleden).

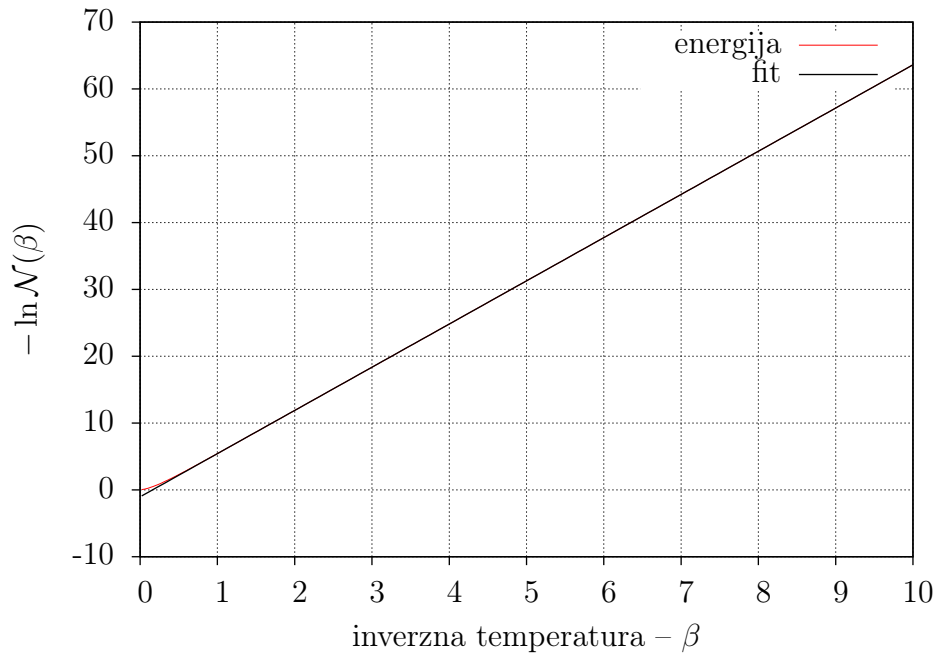
Za potrebe temperaturne propagacije sem stanje ohlajal do $\beta_{\max} = 10$ v 500 korakih.

2.1 Osnovno stanje

Pričnemo z naključnim kompleksnim Gaussovim vektorjem. Dobimo stolpec $\ln \mathcal{N}(\beta_i)$ in β_i , kjer $\mathcal{N}(\beta_i) \equiv \sqrt{\langle \psi_{\beta_i} | \psi_{\beta_i} \rangle}$. Veljati mora

$$-E_0 \beta_i + \delta = \ln \mathcal{N}(\beta_i),$$

tj. na koncu E_0 in δ dobimo npr. z linearno regresijo oz. v mojem primeru z minimizacijo napake prek Marqart-Levenbergovega algoritma, ki da boljše rezultate. Minimizacijo sem izvajal prek programa `gnuplot`, ki ga uporabljam tudi sicer za izris grafov. Slika 1 prikazuje primer kako se spreminja ‘ $-\ln \mathcal{N}(\beta)$ ’ z inverzno temperaturo β . Prikazal sem le en graf, saj so ostali isti, le smerni koeficient premice je drugačen.



Slika 1: Ohlajanje verige dolžine 4 brez rezanja matrik.

Tabela 1: Ta tabela prikazuje dobljeno energijo osnovnega stanja za različne izbire rezanja, M in za različne dolžine verige. Za primerjavo je poleg tudi logaritem odstopanja od vrednosti, dobljene diagonalizacijo matrike. $M = 0$ pomeni, da matrik nismo prirezali. Vidimo, da odrežemo polovico Schmidtovih koeficientov in še vedno dobimo presenetljivo dobre rezultate.

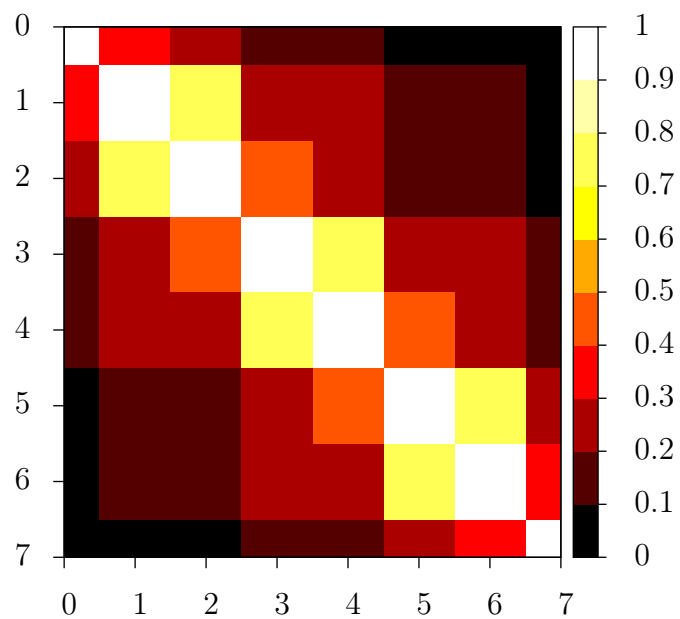
n	M	E_0	$\log_{10} E_0 - E_0^{\text{diag}} $
4	0 (4)	-6.4641	-5.79
	2	-6.1582	-0.51
6	0 (8)	-9.4743	-5.81
	7	-9.4723	-2.97
	6	-9.9720	-0.60
	2	-9.2664	-0.15
8	0 (16)	-13.4997	-4.52
	15	-13.4997	-4.52
	11	-13.4997	-4.52
	8	-13.4990	-3.14
	4	-13.4311	-1.16
	2	-12.3790	0.05
10	0 (32)	-17.0321	-4.39
	4	-16.8549	-0.75
	8	-16.9405	-1.04
	12	-17.0183	-1.86
	16	-17.0321	-4.39
12	0 (64)	-20.5684	-4.43
	4	-20.2323	-0.47
	8	-20.2677	-0.52
	12	-20.4912	-1.11
	16	-20.5150	-1.27
	24	-20.5651	-2.49
	32	-20.5684	-4.43

2.2 Spinska korelacijska matrika

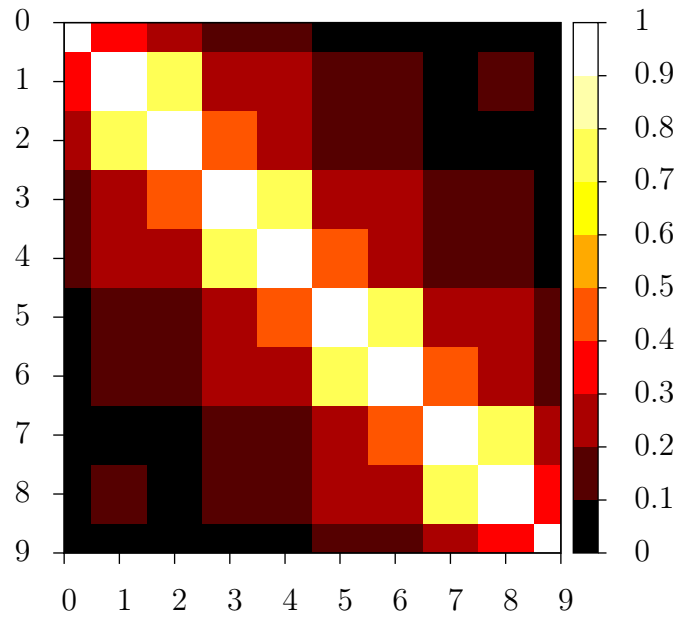
V časovno propagacijo. Korelacijska matrika za osnovno stanje verige dolžine 4 je kar

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 1/3 \\ 1/3 & 1 \end{bmatrix} \quad (7)$$

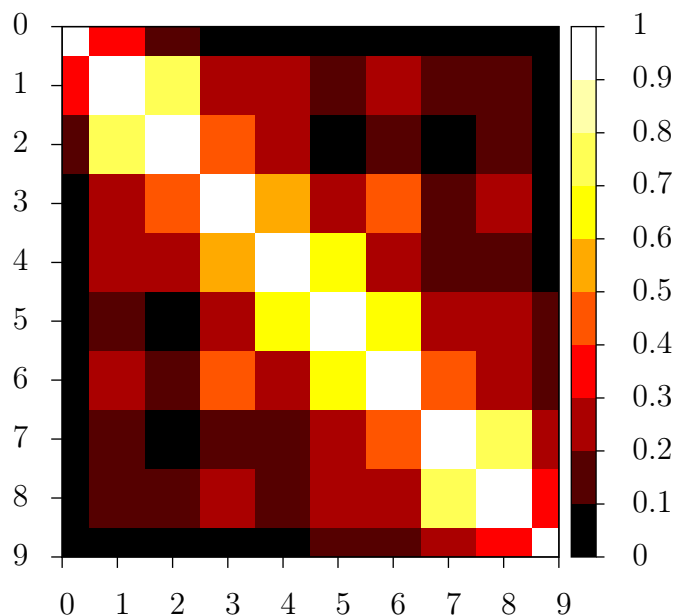
Ostale korelacijske matrike so večje (za verigo $n = 10$ in $n = 12$) na grafih 2, 3 in 4.



Slika 2: Spin-spin korelacijska matrika za verigo dolžine 10, brez rezanja. Opazimo izrazito bločno obliko, kar sicer ni nič nenavadnega.



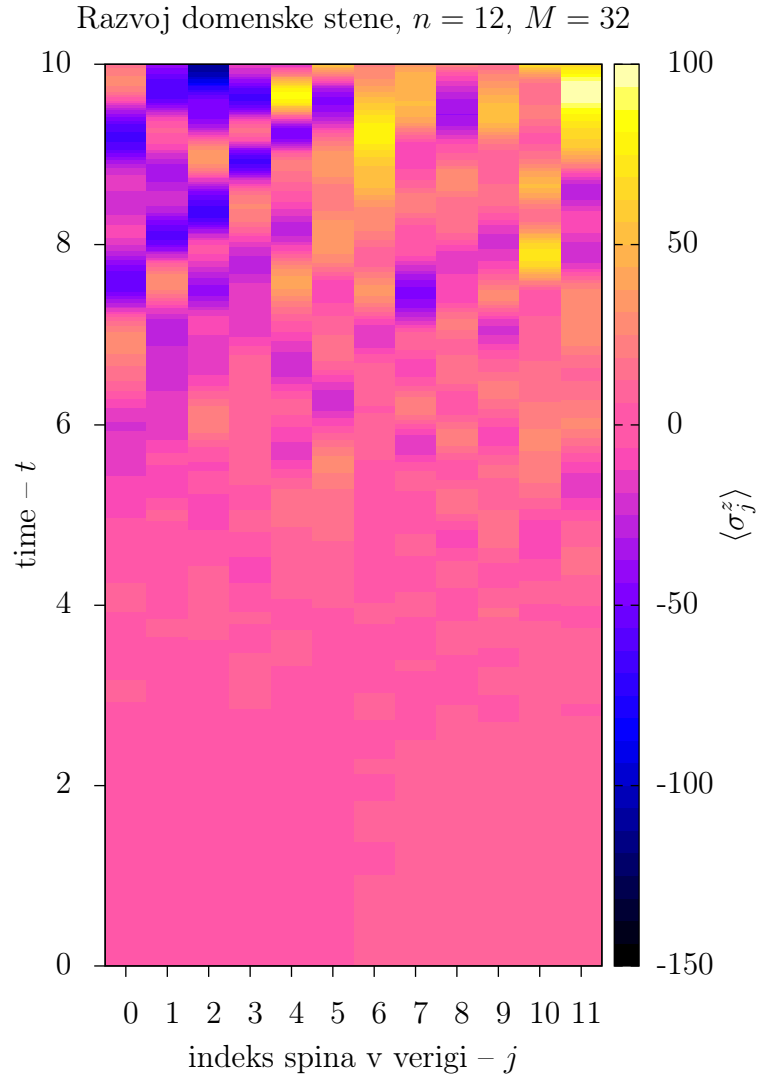
Slika 3: Spin-spin korelacijska matrika za verigo dolžine 12, brez rezanja. Opazimo zelo podobno sliko, kot prej. Spet imamo izrazito bločnatost slike. Po barvi vzorca razberemo, da so vrednosti ob diagonali podobne.



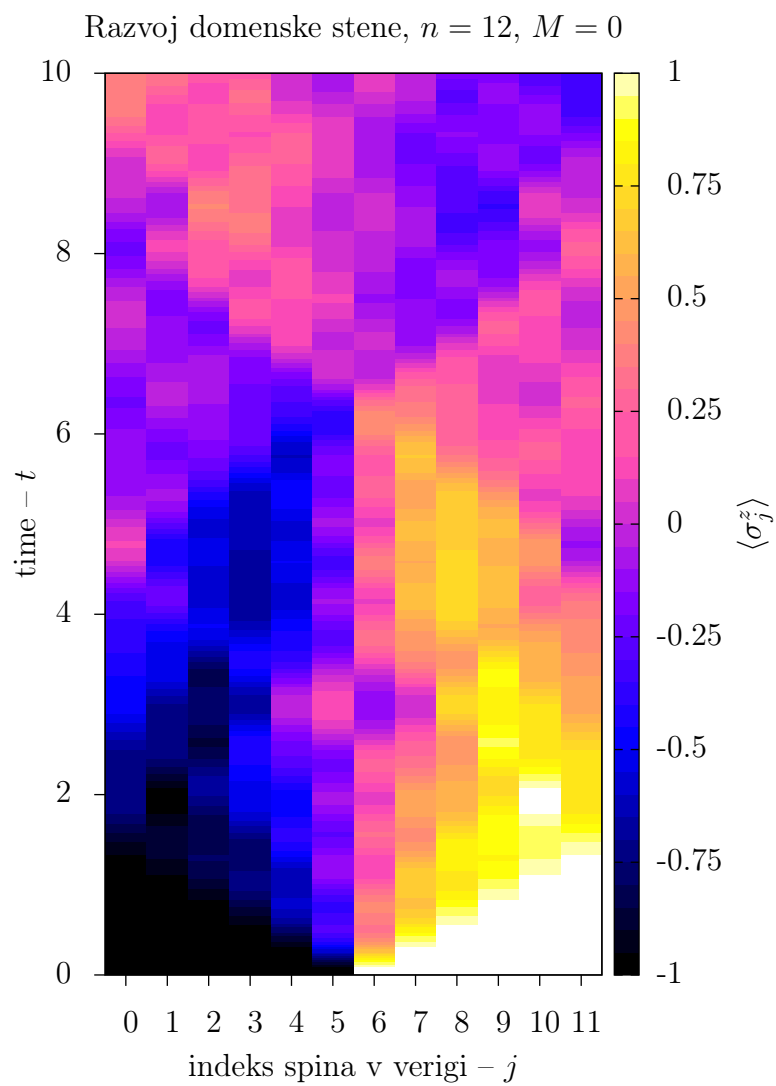
Slika 4: Spin-spin korelacijska matrika za verigo dolžine 12, pri čemer smo za vsak razcep obdržali največ $M = 8$ Schmidtovih koeficientov. Imeli smo natančnost le na eno decimalno mesto, zaradi česar je korelacijska matrika popačena.

2.3 Domenska stena

Domensko steno sem računal za spinsko verigo z 12 spini. Matrike sem sprva rezal tako, da sem zavrzel polovico, tj. obdržal največ 32 Schmidtovih koeficientov, saj to sodeč po tabeli 1 zadošča. Temu žal ni tako – za propagiranje sem namreč uporabljal različni simplektski shemi in izkaže se, da S_2 ni dovolj dobra, kar se vidi na sliki 5. Odločil sem se, da bom obdržal kar vse koeficiente. Rezultat (ki je pravi) je na sliki 6

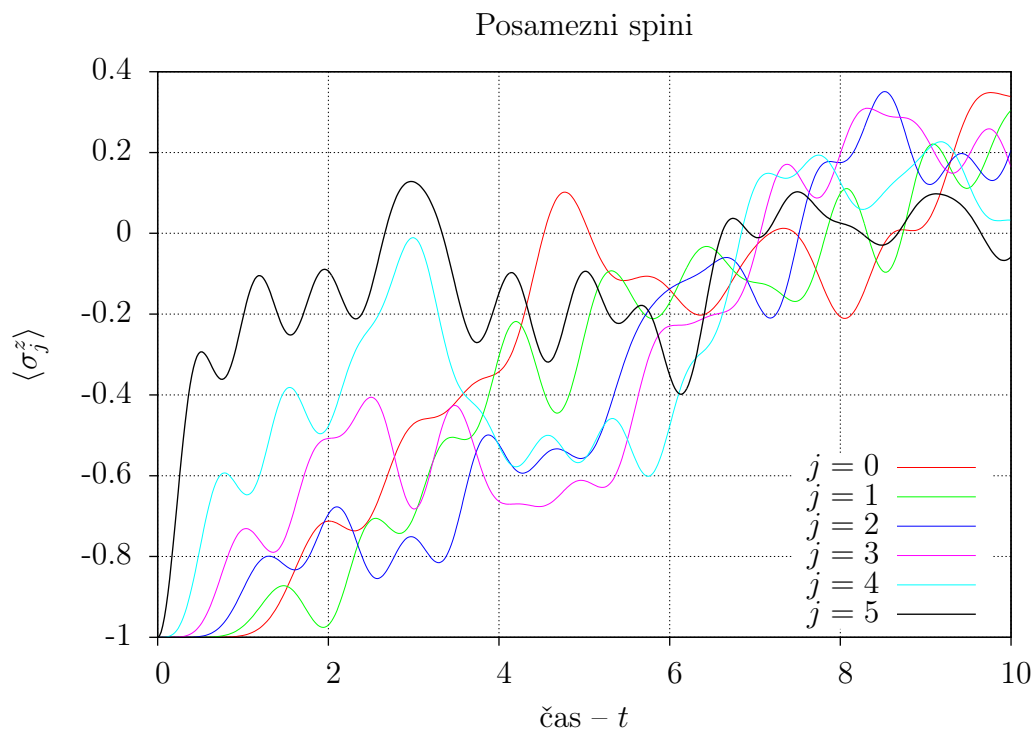


Slika 5: Kot vidimo, se vsak spin propagira čisto po svoje, ne vidimo nobene simetrije. Vidimo tudi, da so amplitude čedalje večje – spini so sprva bodisi -1 , bodisi 1 , potem pa postanejo amplitude ogromne (med 100 in -150).



Slika 6: Graf je videti dosti bolj organiziran. Takoj opazimo (anti-)simetrijo med levo in desno stranjo.

Zdaj, ko smo dobili nekakšen „tloris“ problema, pogledjmo še projekcijo na časovno os, kar kaže slika 7.



Slika 7: Čeprav je graf 6 kazal harmonijo, je ta graf na prvi pogled ne kaže. Imamo namreč kar veliko vzbujenih frekvenc. Zanimivo bi bilo videti frekvenčni spekter za posamezen spin, a pustimo tole za kdaj drugič.