

Matrix Product Operator

Wie haben es geschafft Tensor $T_{n_1 \dots n_p}$ erfolgreich zu zerlegen
mit sehr vielen niedrigeren Tensoren!

Es wäre direkt auf den zerlegten Tensoren rechnen zu können!

Ziel: Rechnung direkt in der zerlegten Form z.B.

$$H|4\rangle = E|4\rangle \quad \text{Eigenwert}$$

Doch wie wird in Operatoren dargestellt?

\Rightarrow Matrix Product Operator

Im Prinzip kann man einen Tensor $T_{n_1 \dots n_p} = M^{n_1} \dots M^{n_p}$

$$\text{z.B. Quaternions } |4\rangle = \sum_{n_1 \dots n_p} T_{n_1 \dots n_p} |n_1 \dots n_p\rangle$$

$$\text{aber } \langle n_1 \dots n_p | 4 \rangle = T_{n_1 \dots n_p}$$

Das setzt auch für Operatoren

$$\langle n_1 \dots n_p | \hat{O} | n'_1 \dots n'_p \rangle = W^{n_1 n'_1} \cdot W^{n_2 n'_2} \dots W^{n_p n'_p}$$

$$\Rightarrow \hat{O} = \sum_{n'_1 \dots n'_p} W^{n_1 n'_1} W^{n_2 n'_2} \dots W^{n_p n'_p} |n'_1 \dots n'_p\rangle \langle n_1 \dots n_p|$$

$$\begin{array}{c} n_1 \quad n_p \\ | \dots | \\ \boxed{O} \\ | \dots | \\ n'_1 \quad n'_p \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} n_1 \quad n_2 \quad n_p \\ | \quad | \quad | \\ \boxed{W} \quad \boxed{W} \quad \dots \quad \boxed{W} \\ | \quad | \quad | \\ n'_1 \quad n'_2 \quad n'_p \end{array}$$

Beweis: 1) Man kann jeden Operator in dieser Form bringen.

Beweis bei MPS. Man fasst n_i und n'_i als ein Index

\tilde{n}_i zusammen, und wendet das Zerlegen wieder mit SVD wie bei MPS an.


Dann \tilde{n}_i durch n_i und n'_i .

2) Wie kann die Anwendung eines Operators O auf die Trace vollzogen werden? Oder wie kann mehrere Operatoren zusammengefasst werden?

Anwendung von MPO

Formel wollen wir $\sum_{n_1' \dots n_N'} (W_{n_1' n_1}^{h_1 h_1'} W_{n_2' n_2}^{h_2 h_2'} \dots) (M_{n_1, a_1}^{n_1} M_{n_2, a_2}^{n_2} \dots)$ schreiben.

Schauen wir uns ein konkretes Implément an.

$$\textcircled{x} = \sum_{\substack{n_1' \dots n_N' \\ a_1 \dots a_{N-1} \\ b_1 \dots b_{N-1}}} (W_{n_1' n_1}^{h_1 h_1'} W_{n_2' n_2}^{h_2 h_2'} \dots) (M_{n_1, a_1}^{n_1} M_{n_2, a_2}^{n_2} \dots)$$


$$= \sum_{\substack{n_1' \dots n_N' \\ a_1 \dots a_{N-1} \\ b_1 \dots b_{N-1}}} (W_{n_1' n_1}^{h_1 h_1'} M_{n_1, a_1}^{n_1}) (W_{n_2' n_2}^{h_2 h_2'} M_{n_2, a_2}^{n_2}) \dots$$

$$= \sum_{\substack{a_1 \dots a_{N-1} \\ b_1 \dots b_{N-1}}} N_{(h_1, h_1')}(b_1, a_1) N_{(h_2, h_2')}(b_2, a_2) \dots \boxed{M} - \boxed{M} - \boxed{M} \dots$$

- 1) Also die Anwendung des MPO (ändert die Struktur des MPS invariant, aber die Linkindex geändert sind, die Matrizen sind deutlich größer!
- 2) Die exponentiell komplex Operatoren (in der Siteindex) reduziert sich auf ein Operatoren (nur Linear in der Anzahl der Indizes)

Addieren und Multiplizieren von MPO

Addieren: Nehmen wir an wir hätten zwei Operatoren O und P (siehe MPO). Dann muss für jedes MPS (gleiche Siteanzahl) M gelten $(O+P)M = OM + PM$

$$\text{Also } \boxed{O+P} - \boxed{O} - \dots - \boxed{P} = \boxed{O} - \boxed{O} - \dots - \boxed{O} + \boxed{P} - \boxed{P} - \dots - \boxed{P}$$

$$= \begin{pmatrix} \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \boxed{P} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{P} & \dots & \boxed{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{P} \end{pmatrix}$$

Hier ist das $0^{n_1 n_1'} \oplus P^{n_2 n_2'}$ das direkte Produkt der Lösser.

$$\sum_{\substack{h_1 \dots h_{n_1} \\ a_1 \dots a_{n_1} \\ b_1 \dots b_{n_1}}} (0^{n_1 n_1'} \quad 0^{n_2 n_2'} \quad \dots) (M_{1, a_1}^{n_1'} \quad M_{2, a_2}^{n_2'} \quad \dots)$$

$$+ \sum_{\substack{h_1 \dots h_{n_1} \\ a_1 \dots a_{n_1} \\ c_1 \dots c_{n_1}}} (P^{n_1 n_1'} \quad P^{n_2 n_2'} \quad \dots) (M_{1, a_1}^{n_1'} \quad M_{2, a_2}^{n_2'} \quad \dots)$$

$$= \sum_{\substack{h_1 \dots h_{n_1} \\ a_1 \dots a_{n_1} \\ c_1 \dots c_{n_1}}} \left(\sum_{b_1 \dots b_{n_1}} 0^{n_1 n_1'} \quad 0^{n_2 n_2'} \quad \dots + \sum_{c_1 \dots c_{n_1}} P^{n_1 n_1'} \quad P^{n_2 n_2'} \quad \dots \right) (M_{1, a_1}^{n_1'} \quad M_{2, a_2}^{n_2'} \quad \dots)$$

Direktes Produkt $\begin{pmatrix} \boxed{0} & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{P} \end{pmatrix} = 0 + P$

$$= \sum_{\substack{h_1 \dots h_{n_1} \\ a_1 \dots a_{n_1} \\ c_1 \dots c_{n_1}}} \left(\sum_{d_1 \dots d_{n_1}} (0+P)^{n_1 n_1'} \quad (0+P)^{n_2 n_2'} \quad \dots \right)$$

Multiplikation: 1) Skalar multiplikation \Rightarrow Einmal einen

der Term die die MPS bilden mit dem Faktor 1 multiplizieren.

2) Anwendung der Operatoren hinten an $\hat{P} \hat{0}$, z.B. - für MPS
 M werden wir zuerst 0 an

$$M_{(b_{i-1}, a_{i-1}), (b_i, a_i)}^{h_i} = \sum_{h_i'} 0_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} M_{a_{i-1}, a_i}^{h_i'} \quad \begin{pmatrix} \boxed{M} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \end{pmatrix} = \boxed{0} \quad \boxed{0} \quad \dots \quad \boxed{0}$$

3) Anwendung von P dann

$$K_{(b_{i-1}, b_{i-1}, a_{i-1}), (b_i, b_i, a_i)}^{h_i} = \sum_{h_i'} P_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} M_{a_{i-1}, a_i}^{h_i'} \quad \begin{pmatrix} \boxed{M} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{P} & \dots & \boxed{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{P} \end{pmatrix} = \boxed{0} \quad \boxed{P} \quad \dots \quad \boxed{0}$$

$$\Downarrow$$

$$V_{(b_{i-1}, b_{i-1}), (b_i, b_i)}^{h_i, h_i'} = \sum_{h_i'} P_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} 0_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} \quad \leftarrow \quad \begin{pmatrix} \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{0} \\ \boxed{0} & \boxed{P} & \dots & \boxed{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \boxed{0} & \boxed{0} & \dots & \boxed{P} \end{pmatrix}$$

\Rightarrow MPO links Dünn werden multipliziert

bei kombierte der MPOs

VIII. 22 Density Matrix Renormalization Group

Berechnung des Grundzustats mit DMRG

Nehmen wir an ein MPO beschreibt ein Hamilton Operator H
 und der MPS ein Wertefunktion $|\psi\rangle$ (Bsp.: z.B. Spinketten oder Abzähl-)

Dann stellen wir die Frage des Grundzustats über die

Minimierung von

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \text{ wir tun dies über ein Variatle in MPS-Form!}$$

Am besten mit Lagrange punkt

$$\langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle$$

Wenn λ die Trace von H sind, das entspricht es

$$\begin{array}{cccc} \boxed{A} - \boxed{B} & \dots & - & \boxed{A} \\ \downarrow & & & \downarrow \\ \boxed{A} - \boxed{A} & \dots & - & \boxed{A} \\ \downarrow & & & \downarrow \\ \boxed{A} - \boxed{A} & \dots & - & \boxed{A} \end{array} \quad \lambda \quad \begin{array}{cccc} \boxed{B} - \boxed{B} & \dots & - & \boxed{B} \\ \downarrow & & & \downarrow \\ \boxed{B} - \boxed{B} & \dots & - & \boxed{B} \\ \downarrow & & & \downarrow \\ \boxed{B} - \boxed{B} & \dots & - & \boxed{B} \end{array}$$

Idee: Um das nicht Optimierungsproblem zu vereinfachen, wird ψ

nur an ein Site i variieren!

Frage wir mit den Annahmen:

$$\begin{array}{cccc} \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array}$$

$$\psi_{a_{i-1}, a_i}^{(A) i-1} = \sum_{n_i, n_{i+1}} (\psi_{n_{i-1}, n_i}^{n_{i+1}} \dots \psi_{n_i}^{n_{i+1}} \psi_{n_{i+1}}^{n_i})_{a_{i-1}, a_i}$$

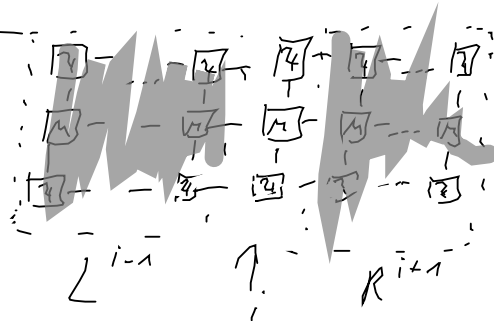
$$\psi_{a_i, a_{i+1}}^{(B) i+1} = \sum_{n_{i+1}, n_{i+2}} (\psi_{n_{i+1}}^{n_{i+2}} \dots \psi_{n_{i+2}}^{n_{i+1}} \psi_{n_{i+1}}^{n_{i+2}})_{a_i, a_{i+1}}$$

Dann ist

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n_i} \sum_{a_{i-1}, a_i} \sum_{a_{i+1}, a_i'} \psi_{a_{i-1}, a_i}^{(A)} M_{a_{i-1}, a_i}^{n_i} M_{a_{i+1}, a_i'}^{n_i} \psi_{a_i, a_{i+1}}^{(B)}$$

- Bem! 1) Die Berechnung von $Z^{A_{i-1}}$ und $Z^{B_{i+1}}$ erfordert aufwändig, kann aber sehr effizient iterativ ausgerechnet werden.
- 2) Falls Z kreuzförmig und in der Orthogonalitätsbeziehung ist, so gilt $Z_{a_{i-1}, a_{i-1}}^A = \delta_{a_{i-1}, a_{i-1}}$ $Z_{a_i, a_i}^B = \delta_{a_i, a_i}$

Zweiter Teil



Damit bekommt

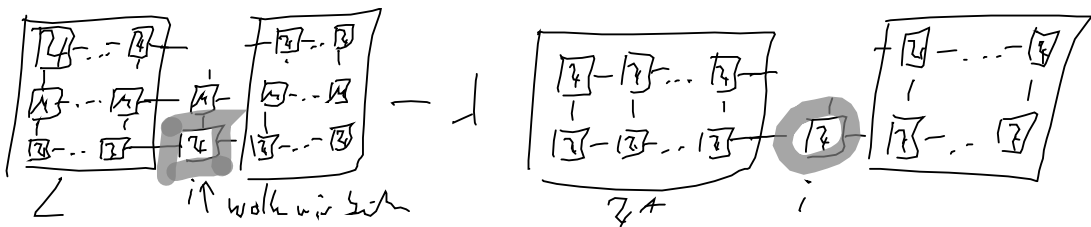
$$\langle Z | H | Z \rangle = \sum_{h_i, h_i'} \sum_{a_{i-1}, a_{i-1}'} \sum_{a_i, a_i'} \sum_{b_{i-1}, b_{i-1}'} L_{b_{i-1}}^{a_{i-1}, a_{i-1}'} M_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} R_{b_i}^{a_i, a_i'} Z_{a_{i-1}, a_i}^{h_i, h_i'}$$

Bem: auch in der Fall kann L^{i-1} und R^{i+1} effizient iterativ berechnet werden. (auch bei Hybrid Heuristics)

Berechnen wir nun das Erwartungswert $\langle Z | H | Z \rangle \rightarrow \langle Z | U | Z \rangle$ in der wir und die Tensorstruktur Z erhalten (das gibt $Z_{a_{i-1}, a_i}^{h_i, h_i'}$)

Dann ergibt sich

$$\sum_{h_i, h_i'} \sum_{a_{i-1}, a_{i-1}'} \sum_{a_i, a_i'} \sum_{b_{i-1}, b_{i-1}'} L_{b_{i-1}}^{a_{i-1}, a_{i-1}'} M_{b_{i-1}, b_i}^{h_i, h_i'} R_{b_i}^{a_i, a_i'} Z_{a_{i-1}, a_i}^{h_i, h_i'} - 1 \sum_{a_{i-1}, a_{i-1}'} \psi_{a_{i-1}, a_{i-1}}^A \psi_{a_i, a_i}^B Z_{a_{i-1}, a_i}^{h_i, h_i'} = 0$$



Wir können das in ein vollständiges Eigenwertproblem umschreiben.

$$H_{(n_i, a_{i-1}, a_i), (n_i, a_{i-1}, a_i)} = \sum_{b_{i-1}, b_i} L_{b_{i-1}, b_i}^{a_{i-1}, a_i} M_{b_{i-1}, b_i}^{a_i} R_{b_i}^{a_i, a_i}$$

$$N_{(n_i, a_{i-1}, a_i), (n_i, a_{i-1}, a_i)} = \Psi_{a_{i-1}, a_i}^A \Psi_{a_{i-1}, a_i}^B \delta_{n_i, n_i}$$

und der Vektor $V_{n_i, a_{i-1}, a_i} = M_{a_{i-1}, a_i}^{n_i}$

$$\Rightarrow H V - \lambda N V = 0 \quad (\text{vollständiges Eigenwertproblem})$$

Bemerkung: 1) Sowohl H , wie N sind hermitisch mit der Dimension $(d \cdot d^2 \cdot d \cdot d)$

2) Eine Matrix mit $d \cdot d^2$ erlaubt keine vollständige Diagonalisierung

\Rightarrow iterative Eigenwert (Lanczos oder Jacobi-Davidson)

Wichtig vorzutragen Struktur!

Wir haben das alte Ψ^i , das ist hochkorreliert und sehr genau!

3) Falls N schlecht konditioniert ist, kann es numerisch sehr ausprägnant sein, aber falls der Zustands $i-1$ links und $i+1$ rechts, und i ist, ist N nicht diagonalisierbar.

$$\Rightarrow \sum_{n_i} \sum_{a_{i-1}, a_i} \sum_{b_{i-1}, b_i} L_{b_{i-1}, b_i}^{a_{i-1}, a_i} M_{b_{i-1}, b_i}^{n_i, n_i} R_{b_i}^{a_i, a_i} \Psi_{a_{i-1}, a_i}^{n_i} - \lambda \Psi_{a_{i-1}, a_i}^{n_i} = 0$$

$$\Rightarrow H V - \lambda N V = 0 \quad \begin{array}{c} \boxed{\begin{array}{c} \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \end{array}} \quad \begin{array}{c} \boxed{\begin{array}{c} \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \end{array}} \\ \lambda \end{array} - \lambda \begin{array}{c} \boxed{\begin{array}{c} \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \\ \Psi_{a_{i-1}, a_i} \end{array}} \end{array} = 0$$

Damit es so stark wird die Position des Orthogonalitätsrechnens durch die Kette begrenzt.

\Rightarrow Wie sieht ein typischer Algorithmus aus?