Komprimierung von Matrix Product Zuständen

Idee wir haben einen Tensor

Diagonalmatrix ⇙   rechtsnormiert ⇓

$$\psi_{n_1\ldots n_N} = \sum_{\substack{a_1\ldots a_\ell \\ b_{\ell+1}\ldots b_{N-1}}} \underbrace{A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots A^{n_\ell}_{a_{\ell-1}}}_{\text{System } A} \Lambda^{\ell}_{a_\ell b_{\ell+1}} \underbrace{B^{n_{\ell+1}}_{b_{\ell+1} b_{\ell+2}} \cdots B^{n_{N-1}}_{b_{N-2} b_{N-1}} B^{n_N}_{b_{N-1}}}_{\text{System } B}$$

Im Prinzip können wir dies als Startpunkt zur Schmidtdekomposition verwenden:

$$|\psi\rangle = \sum_{a_\ell=1}^{D} s_{a_\ell} |a_\ell\rangle_A |a_\ell\rangle_B$$

1) Behalten die ersten D Spalten von A^{n_ℓ}
2) die ersten D Reihen von $B^{n_{\ell+1}}$
3) und die ersten D Reihen und Spalten von Λ^ℓ.

Bemerkung: Dieser Prozess setzt die Orthonormierung von A und B voraus.

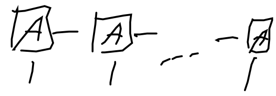
Um die gesamt zu komprimieren müssen wir das Orthogonalitätszentrum verlegen.

z.B. Vorgehen von links nach rechts

1) Trunkieren
2) Orthogonalitätszentrum verschieben
3) bis Ende

Illustration des Verfahrens

$$\psi_{n_1\ldots n_N} = \sum_{a_1\ldots a_{N-1}} A^{n_1}_{a_1} \cdots A^{N-1}_{a_{N-1}} A^{N}_{a_{N-1}}$$



↓ rechts kanonisch machen

$$\Psi_{n_1\dots n_N} = \sum_{\substack{a_1\dots a_{N-2}\\ a_{N-1} b_N}} A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots A^{n_{N-1}}_{a_{N-2} a_{N-1}} U_{a_{N-1} b_N} S_{b_N} B^{n_N}_{b_N}$$

$\Downarrow$ erzeugt dann die Schmidt Basis

$$\boxed{A} - \boxed{A} - \dots - \boxed{A} - \boxed{U} - \boxed{S} - \boxed{B}$$

$$|a_{N-1}\rangle_A = \sum_{\substack{n_1\dots n_{N-1}\\ a_1\dots a_{N-2}}} \underbrace{\left(A^{n_1}_{a_1}\cdots A^{n_{N-1}}_{a_{N-2} a_{N-1}} U_{a_{N-2} a_{N-1}}\right)}_{\parallel} |n_1 \dots n_{N-1}\rangle$$

$$\Rightarrow |\Psi^{(N-1)}\rangle = \sum_{a_{N-1}} S_{a_{N-1}} |a_{N-1}\rangle_A |a_{N-1}\rangle_B$$

- Jetzt werden die Matrizen $\tilde{U}$ S $\tilde{B}^{n_N}$ trunkiert mit D Singulärwert
- Der nächste A^{N-1} und $\tilde{U}$, S bilden M^{N-1}

$$\boxed{A} - \boxed{A} - \dots - \boxed{A} - \boxed{M} - \boxed{B}$$

mit $M^{n_j}_{ij} = M_{i,(n_j)} = \sum_{l_1} U_{il} S_{ll} B_{l(n_j)} = \sum_{l} U_{il} S_{ll} B^{n_j}_{l}$

$$-\boxed{M}- \Rightarrow -\boxed{U}-\boxed{S}-\boxed{B}-$$

Also

$$\Psi_{n_1\dots n_N} = \sum_{\substack{a_1\dots a_{N-2}\\ b_1}} A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots A^{n_{N-2}}_{a_{N-3} a_{N-2}} \left(A^{n_{N-1}}_{a_{N-2} a_{N-1}} U_{a_{N-1} b_1} S_{b_1}\right) B^{n_N}_{b_1}$$

$$\xrightarrow{\text{trunkieren}} \sum_{\substack{a_1\dots a_{N-2}\\ b_1}} A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots A^{n_{N-2}}_{a_{N-3} a_{N-2}} \left(\tilde{A}^{n_{N-1}}_{a_{N-2} a_{N-1}} \tilde{U}_{a_{N-1} b_1} S_{b_1}\right) B^{n_N}_{b_1}$$

usw

$$\boxed{A} - \boxed{A} - \dots - \boxed{A} - \boxed{M} - \boxed{B} \leftarrow \boxed{A} - \boxed{A} - \dots - \underbrace{\boxed{A} - \boxed{U} - \boxed{S}}_{M} - \boxed{B}$$

$$= \sum_{\substack{a_1\dots a_{N-2}\\ b_1}} A^{n_1}_{a_1} A^{n_2}_{a_1 a_2} \cdots A^{n-2}_{a_{N-3} a_{N-2}} M_{a_{N-2} b_1} B_{b_1}$$

$$\rightarrow \boxed{A} - \boxed{A} - \dots - \boxed{A} - \boxed{U} - \boxed{S} - \boxed{B} - \boxed{B}$$

usw

usw.

Bemerkung: 1) Da M abhängig vom Ergebnis der Trunkierung ist
$\Rightarrow$ Trunkierungen hängen voneinander ab, daher kann die Trunkierung unbalanciert sein!

2) Insbesondere bei starker Trunkierung ein Problem

3) Numerische Effizienz schlecht, teilweise schlechter falls D' Index der nächsten Link vor Trunkierung ist sehr viel größer als D

Alternative ....

Iterative Kompression von MPS

Die Kompression mit SVD aus dem letzten Abschnitt ist relativ aufwendig. Eine effiziente Methode startet mit Ansatzwellenfunktion $|\tilde{\Psi}\rangle$, die die Original Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ beschreiben soll.

Mit $\| |\Psi\rangle - |\tilde{\Psi}\rangle \|_2^2$ kann man z.B. den Fehler abschätzen
(Auch leicht berechenbar)

Also wollen wir $\langle\Psi|\Psi\rangle - \langle\tilde{\Psi}|\Psi\rangle - \langle\Psi|\tilde{\Psi}\rangle + \langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle$
bzgl. $|\tilde{\Psi}\rangle$ minimieren.

Sei $|\Psi\rangle \triangleq \boxed{M} - \boxed{M} - \boxed{M} - \dots - \boxed{M}$

$|\tilde{\Psi}\rangle \triangleq \boxed{\tilde{M}} - \boxed{\tilde{M}} - \boxed{\tilde{M}} - \dots - \boxed{\tilde{M}}$

dies ein stark nicht lineares Optimierungsproblem.

1) Startpunkt für $|\tilde{\Psi}\rangle$ im Optimierungsproblem kann z.B. eine mit niedrigem Link in SVD Verfahren erzeugte Approximation

2) Wir sweepen von links nach rechts und rechts nach links durch die $\tilde{M}$ und variieren $\tilde{M}_i$ Site für Site
(wobei $\tilde{M}_j$ $(i \neq j)$ fest gehalten wird)
Dabei wird $\tilde{M}_i$ so variiert, dass der Fehler minimiert wird.

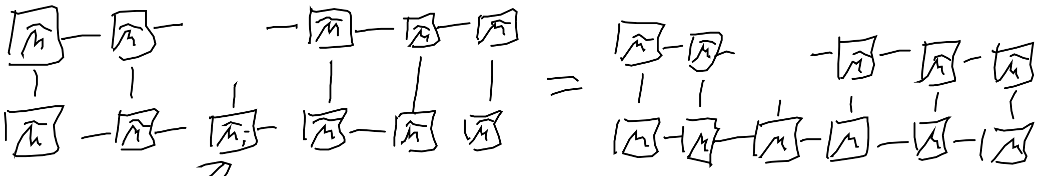
$\Rightarrow \tilde{M}$ befindet sich nur $-\langle\psi|\tilde{\Psi}\rangle + \langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{M}^{n_i *}_{a_{i-1} a_i}} \left(\langle\psi|\tilde{\Psi}\rangle - \langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle\right)$$

$$= \sum_{n_1 \dots n_N} \left(\tilde{M}^{* n_1} \dots \tilde{M}^{* n_{i-1}}\right)_{1, a_{i-1}} \left(\tilde{M}^{n_{i+1} *} \dots \tilde{M}^{n_N *}\right)_{a_i, 1} \tilde{M}^{n_1} \dots \tilde{M}^{n_i} \dots \tilde{M}^{n_N}$$

$$- \sum_{n_1 \dots n_N} \left(\tilde{M}^{n_1 *} \dots \tilde{M}^{n_{i-1} *}\right)_{1, a_{i-1}} \left(\tilde{M}^{n_{i+1} *} \dots \tilde{M}^{n_N *}\right)_{a_i, 1} M^{n_1} \dots M^{n_i} \dots M^{n_N} = 0$$

Diagrammatisch



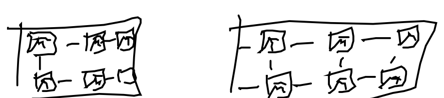
Diese Matrix wollen wir bestimmen.

$$\underbrace{\sum_{a'_{i-1} a'_i} \tilde{O}_{a_{i-1} a_i a'_{i-1} a'_i}}_{\text{Matrix}} \; \underbrace{\tilde{M}^{n_i}_{a'_{i-1} a'_i}}_{\text{Vektor}} = \underbrace{O^{n_i}_{a_{i-1} a_i}}_{\text{Vektor}}$$

$$\underline{\underline{M}} \cdot \underline{v} = \underline{b} \Rightarrow \text{lineares Gleichungssystem}$$

Nach der Lsg. des Gleichungssystems können wir Lösungen

Da

$\tilde{O} =$ 

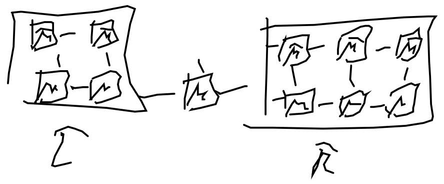
$$\underbrace{}_{L_{a_{i-1}, a'_{i-1}}} \quad \underbrace{}_{R_{a_i a'_i}} \quad \hat{=} \; \tilde{O}_{a_{i-1} a_i, a'_{i-1} a'_i}$$

z.B

$$\Rightarrow L_{a_{i-1},a'_{i-1}} = \left(\sum_{n_{i-1}} \tilde M^{n_{i-1}\dagger}\left(\dots\left(\sum_{n_1} \tilde M^{n_1\dagger} \tilde M^{n_1}\right)\dots\right)\tilde M^{n_{i-1}}\right)_{a_{i-1}a'_{i-1}}$$

$$\Rightarrow \sum_{a'_{i-1} a'_i} \tilde O_{a_{i-1} a_i, a'_{i-1} a'_i}\, \tilde M^{n_i}_{a'_{i-1} a'_i} = \sum_{a'_{i-1}} L_{a_{i-1},a'_{i-1}} \left(\sum_{a'_i} R_{a_i a'_i}\, \tilde M^{n_i}_{a'_{i-1} a'_i}\right)$$

Das geht dann nun mit

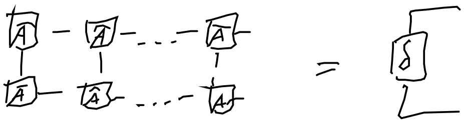


$$\sum_{a'_{i-1} a'_i} L_{a_{i-1},a'_{i-1}}\, M^{n_i}_{a'_{i-1} a'_i}\, R_{a_i a'_i}$$

3.) Vereinfachung durch kanonische Form!

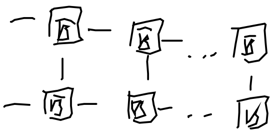
Falls $|\Psi\rangle$ in der gemischt kanonischen Form ist also

dann $L \hat=$



also $L_{a_{i-1} a'_{i-1}} = \delta_{a_{i-1},a'_{i-1}}$,

genauso $R \hat=$



mit $R_{a_i a'_i} = \delta_{a_i a'_i}$

wegen der Normierung $\Rightarrow \underline{\underline{N}} = \underline{\underline{1}} \Rightarrow \underline{v} = \underline{b}$

Gleichungssystem ist trivial.

Das wollen wir immer hier, also verschieben wir für jeden Schritt das Orthogonalitätszentrum.

So gehen wir von rechts nach links und vice versa.

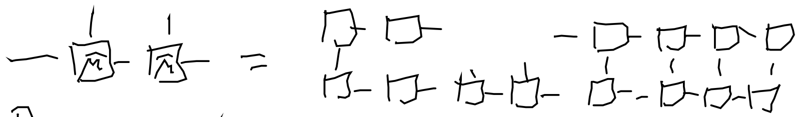
Konvergenz wird mit $\| |\Psi\rangle - |\tilde{\Psi}\rangle \|^2$ überprüft.

was in der kanonischen Form $\| |\Psi\rangle - |\tilde{\Psi}\rangle \|^2 = 1 - \sum_{n_i} \mathrm{Tr}(\tilde{M}^{n_i\dagger} M^{n_i})$

<u>Achtung</u>: Diese Art von Algorithmus kann stecken bleiben in einem nicht globalen Minimum $\Rightarrow$ Alternative?

Wir nutzen stattdessen einen Zwei Site ansatz

Dann ist folgendes zu minimieren



Dann passiert das nicht so häufig

4) Wichtiger Punkt bei einem Variationsansatz ist der initiale Wert, ist dieser nicht gut, damit die Iterations-schleife beginnt, so gibt es Startproblemen.