

## Der optimale DMRG Algorithmus

- 1) Starte von einem guten Startvektor  $|\psi\rangle$ , der rechts normalisiert ist!
  - 2) Berechne die  $R$  Tensoren iterativ von  $N-1$  bis  $1$ !
  - 3) Rechts sweep: Starte von Site  $i=1$  bis  $N-1$  und führe den Sweep durch (für jedes  $i$  im Sweep):
    - (i) Löse das Standard eigenwertproblem mit einem iterativen Solver mit dem aktuellen Wert  $\gamma^{(i)}$  als Startwert.
    - (ii) Danach führe eine Linksnormalisierung von  $\gamma^{(i)}$  durch mittels SVD oder QR um das Orthogonalitätszentrum zu verschieben!
    - (iii) Die anderen Matrizen des SVD und  $\gamma^{(i+1)}$  hier normalisiert, was der Startpunkt für die nächste Iteration ist!
    - (iv) Setze  $i \rightarrow i+1$  und wiederhole (i) usw.,  $L$  durch Iterationsschritt,  $OC \leftarrow i \rightarrow i+1$ .
  - 4) Linkssweep:  $n=N$  bis  $2$ 
    - (i) Löse das Standard eigenwertproblem mit iterativem Solver für  $\gamma^{(i)}$  (aktuelle Wert als Startwert). Dann  $\gamma^{(i)}$  rechtsnormalisieren.
    - (ii) Dann Rechtsnormalisierung von  $\gamma^{(i)}$  via SVD oder QR.
    - (iii) Die restliche Matrizen setze in  $\gamma^{(i-1)}$  und links (Startwert)
    - (iv)  $R$  durch Iteration von  $i \rightarrow i-1$  gleich als für  $OC$
  - 5) Wiederhole Rechts- und Linkssweeps bis Konvergenz erreicht ist!  
 Kriterium bzgl. Eigenwert z.B.  $\epsilon = \gamma(H^2|\psi\rangle - (\gamma|H|\psi\rangle))^2$   
 was wiederum sollte  $\epsilon$  ein Eigenwert!
- Illustration des Verfahrens  $A, B, M$  bezieht die Tensoren des linken MPS  
 und Normung,  $\Rightarrow$  Illustration:

$$\begin{aligned}
& M_0 B_0 B_0 B_0 B_0 \xrightarrow{\text{diag}} M_1 B_0 B_0 B_0 B_0 \xrightarrow{\text{SVP}} A_1 A_0 B_0 B_0 B_0 \\
& \xrightarrow{\text{diag}} A_1 A_1 B_0 B_0 B_0 \xrightarrow{\text{SVP}} A_1 A_1 M_1 B_0 B_0 \xrightarrow{\text{diag}} A_1 A_1 M_1 B_0 B_0 \\
& \xrightarrow{\text{SVP}} A_1 A_1 A_1 M_1 B_0 B_0 \dots \xrightarrow{\text{diag}} A_1 A_1 A_1 A_1 M_1 B_0 \xrightarrow{\text{SVP}} A_1 A_1 A_1 A_1 M_1 \\
& \xrightarrow{\text{diag}} A_1 A_1 A_1 A_1 A_1 M_1 \xrightarrow{\text{SVP}} A_1 A_1 A_1 A_1 M_1 B_1 \xrightarrow{\text{diag}} A_1 A_1 A_1 A_1 M_1 B_1 \\
& \xrightarrow{\text{SVP}} A_1 A_1 A_1 M_1 B_1 B_1 \dots \xrightarrow{\text{diag}} A_1 M_1 B_1 B_1 B_1 B_1 \\
& \xrightarrow{\text{SVP}} M_1 B_1 B_1 B_1 B_1 B_1
\end{aligned}$$

### Bemerk.

- 1) Die Energie kann sich nur verringern.
- 2) Typische Probleme:
  - a) Bei Start von zwei Zuständen MPS sind die Werte für  $M$  sehr schlecht  $\Rightarrow$  hohe Iterationszahl und schlechte Performance
  - b) Es ist nicht garantiert, dass das globale Minimum erreicht wird.
- 3) Um das Verfahren zu beschleunigen startet man oft mit kleinen Linkindizes und erhöht dies in der nachheren Steps. Aber zu kleinen  $D$  am Start kann verhindern, dass das globale Maximum gefunden wird.
- 4) Für die Berechnung von angeregten Zuständen:
  - (a) Entweder bestimme Bereich (Anzahl) von  $H_i$  (Besten, das System darauf misst und Grundzustand berechnen.
  - (b) Der angeregte Zustand ist im gleichen Bereich wie der Grundzustand. Dann muss als Nebenbedingung erfüllt sein, dass der Zustand orthogonal zu dem ersten Zustand ist.
- 5) Der Algorithmus kann leicht stark block (abhängig von Startzustand) meist wird das Problem durch 2 Site DMRG gelöst, das zwei Sites mehr verwendet (Stabilität gegen globale Minima).  
 Andere Möglichkeit Random Starten Dichtenmatrix über.

### VIII.23 zeitliche Entwicklung von MPS

Bis jetzt haben wir MPS und MPO zur Berechnung von Eigenwert verwendet.

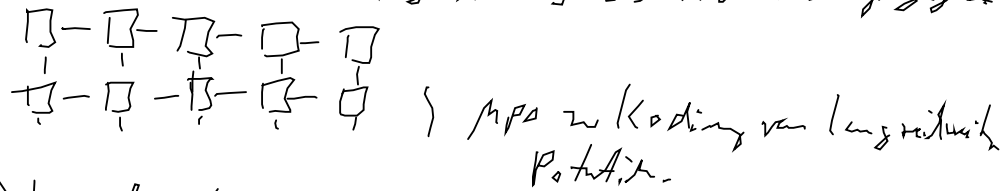
$E|\psi\rangle = H|\psi\rangle$  mit  $H$  in MPS und  $|\psi\rangle$  ist in MPS Form  
 Nach Ziel Zeitdiskret  
 $i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H|\psi\rangle$   
 Formel (EPA sind die Glieder mit  $\exp(-\frac{i}{\hbar} H t)$   $|\psi\rangle$  lösen.  
 Typischerweise wird vermutet  $\exp(-\frac{i}{\hbar} H (t+\Delta t))|\psi\rangle = \exp(-\frac{i}{\hbar} H \Delta t) \underbrace{\exp(-\frac{i}{\hbar} H t)}_{|\psi(t)\rangle}$   
 oder  $|\psi(t+\Delta t)\rangle = \exp(-\frac{i}{\hbar} H \Delta t) |\psi(t)\rangle$  anzunehmen.

(Sollte man bei linearen Gliedern, bei Nichtlinearen Gliedern muss Runge-Kutta genau werden.)

Bemerkung: Im Umfeld der MPS, MPO werden meist Spinketten oder Qubitketten benutzt, das gibt es viele Hamilton, die nur an zwei Bits (oder zwei Bit  $i, j$ ) (meist lokal benachbart) wirken. (bzw. aus solchen zusammengesetzt sind)



In anderen Anwendungsgebieten ist das nicht unbedingt gegeben



D.h. für viele Fälle werden Algorithmen benötigt ...  
 Allgemeine Bestandteile für Zeitpropagator

1) Methode, um von  $t \rightarrow t + \Delta t$  zu kommen, entweder  $\exp(-\frac{i}{\hbar} H \Delta t)$  oder in Schritten wie

Kurz Kette  $| \psi(t+\Delta t) \rangle = | \psi(t) \rangle + h \sum_{i=1}^S b_i | \psi_i \rangle$   
 mit  $| \psi_i \rangle = \underbrace{ | \psi(t+c_i h) \rangle + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} | \psi_j \rangle }_{\text{rhs der Burgst.}}$

2.) Methode um MPS auf MPS anzuwenden

z. B. Bestandteile von  $H$  (i. A. mit Simplex oder Operatoren).

Kümmern wir uns um 1)!

a) Kurz Kette ist strengt forward, wir bauen hier z. B.  $2 + | \psi \rangle \xrightarrow{H} \frac{1}{2} | \psi \rangle$

$$| \psi_i \rangle = H(t+c_i h) (| \psi \rangle) + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} | \psi_j \rangle$$

Wir benötigen, sowohl Methode zusammen (haben wird) als auch schnelle Annahme des MPS auf MPS

Bemerkung: die Methode funktioniert auf für nichtlineare Systeme.

Problem: Error pro site 2!

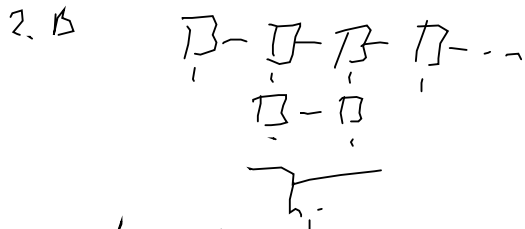
b) Betrachte die Exponentialfunkt.

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} A t H\right) \approx \underbrace{ \text{Id} + \Delta t \left(-\frac{i}{\hbar}\right) H }_{\text{Euler (Kurz-Kette) ist Ordnung 1}} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 H^2 \dots$$

Im Fall lokal wirkender Hamiltonian gibt es noch Wege das Verfahren zu verbessern bzgl. des Fehler pro Site

Häufiges Verfahren Trotter Zerlegen:

Idee: haben wir ein  $H = \sum_i H_i$  mit  $H = \sum_i H_i$  wobei  $H_i$  auf  $i$  und  $i+1$  wirkt



dam überlegen alle sind und alle ungenügend  $t_i$  unkonstant jeweils nicht!

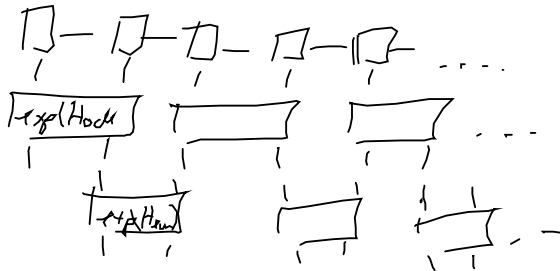
Navier Ansatz

$$e^{-iH\Delta t} = e^{-i t_1 \Delta t} e^{-i t_2 \Delta t} \dots e^{-i t_{M-1} \Delta t} + O(\Delta t^2)$$

Der Fehler entsteht wegen  $[t_i, t_{i+1}] \neq 0$ , alle diese Landt das Problem nicht ganz / ungenügend in nicht ad.

$$e^{-iH\Delta t} = e^{-iH_{\text{even}} \Delta t} e^{-iH_{\text{odd}} \Delta t}$$

↙ führt zu weiteren Fehlern



Ein mögliche Vorgehen

- 1) Wende die MPO für  $e^{-iH_{\text{odd}} \Delta t}$  auf  $| \psi(t) \rangle$  an.
- 2) Wende die MPOs für  $e^{-iH_{\text{even}} \Delta t}$  auf  $e^{-iH_{\text{odd}} \Delta t} | \psi(t) \rangle$  an.
- 3) Dann Komprimieren der MPOs, falls die Methoden zum Anbau der MPO, das nicht sehr schlecht. (Licht  $\sigma^2 D$ )

Bemerkung: 1) Die Fehler durch die Approximant haben ein großer Einfluss auf die Stabilität. Sowohl Diskretisierung  $\Delta t$ , wie auch die Approximant muss aber gewisse Punkte zusammenbrücken.

2) Wie bei RK Verfahren können!

$$e^{-iH\Delta t} = e^{-iH_{odd}\Delta t/2} e^{-iH_{even}\Delta t} e^{-iH_{odd}\Delta t/2} + O(\Delta t^3)$$

3) Sehr populär ist Suzuki-Trotter Methode

$$e^{-iH\tau} = U(\tau_1) U(\tau_2) U(\tau_3) U(\tau_4) U(\tau_1)$$

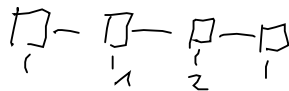
$$U(\tau_i) = e^{-iH_{odd}\tau_i/2} e^{-iH_{even}\tau_i} e^{-iH_{odd}\tau_i/2}$$

$$\text{mit } \tau_1 = \tau_2 = \frac{1}{4-8^3} \tau \quad \tau_3 = \tau - 2\tau_1 - 2\tau_2$$

4) Diese Algorithmen können auch bei sehr Anwenden verwendet werden, da die Reihenfolgen sehr flexibel sind



oder



$$\Rightarrow \square_1 - \square_{12} - \square_1 \Rightarrow \square_1 - \square_{12} - \square_1 - \square_1$$

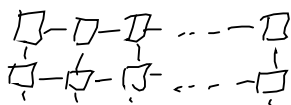
2.) Methode um MPO effizient auf MPS anzuwenden

1) Es gibt Algorithmen, die optimiert werden für die nächste Nachbarkopplung in der MPS: TEBD, tDMRG, tMPS

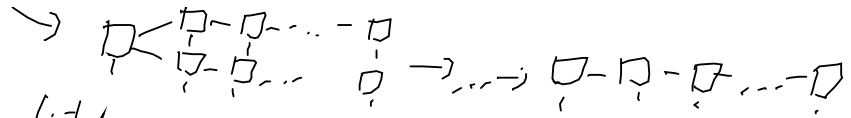
Wir kennen es als Algorithmen die für allgemeine MPS anwendbar sind: (Literatur NJP 12, 055026 (2010))

2) Allgemeine Algorithmen

(a) wie ein Ansatz



Von Links nach Rechts jeweils in SVD zerlegen, aber nicht transponieren, damit orthogonal!



Dann findet man die Entwicklung von  $\rho(t)$  mit Trennung der Variablen, da es in der lokalen Form vorliegt.

Nachteil des neuen Verfahrens (siehe wie  $Nm^3 k^3$ )  
 ist das sehr ineffizient bei hohen Dimensionen! ← Links

b) Alternative 1 ....