Dichtematrixrenormierungsgruppe

Andy Pfister

Vortrag im Rahmen der Vorlesung
Numerische Methoden in der Festkörperphysik
(N. Blümer)
SS2008

13.07.2008

Gliederung

1. Die Theorie der Dichtematrix-Renormierungsgruppe
2. Ausblick: Weiterführende Möglichkeiten der Dichtematrix-Renormierungsgruppe
3. Die Praxis: ALPS Implementierung der Dichtematrix-Renormierungsgruppe

Überblick

Die Dichtematrix Renormierungsgruppe

ist ein numerisches Verfahren Hilberträume niedrigdimensionaler stark verschränkter Quantensysteme effizient zu stutzen, also ihre Freiheitsgrade zu reduzieren, ohne die Physik stark zu ändern.

- eingeführt 1992 von White, um Schwächen der Numerischen Renormierungsgruppe zu beseitigen
- Standardalgorithmus für eindimensionale Systeme
- Viel größere Systeme bearbeitbar als selbst mit QMC-Algorithmen
- seit diesem Jahr in den ALPS-Bibliotheken enthalten

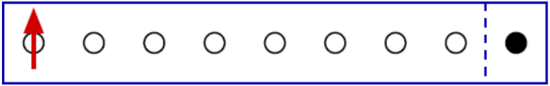
Gliederung

1. Die Theorie der Dichtematrix-Renormierungsgruppe
   - Renormierung
   - Numerische Renormierungsgruppe
   - Dichtematrix-Renormierungsgruppe
2. Ausblick: Weiterführende Möglichkeiten der Dichtematrix-Renormierungsgruppe
3. Die Praxis: ALPS Implementierung der Dichtematrix-Renormierungsgruppe

Renormierungsgruppen

- bekannt aus Quantenfeldtheorien
- Theorie nur in einem gewissen Energiebereich gültig
- durch Renormierung einrechnen nichtbeachteter Energieskalen in Parameter des beachteten Energiebereiches
- iterative Integrationen

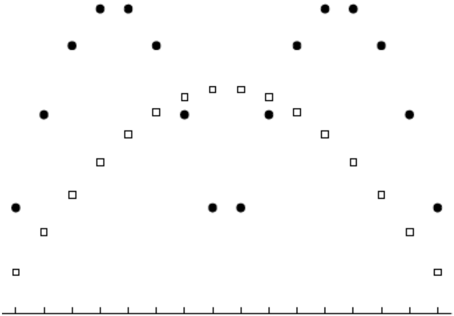
Numerische Renormierungsgruppe (NRG)



Dient der Simulation von Störstellenmodellen mit Kugelsymmetrie

1. zu sehen: Hüpfmatrixelemente eines Störstellenmodells als Gitterpunkte (siehe Tafel)
2. dazu: System zunächst in exakt lösbaren Ausmaßen ausrechnen
3. System durch hinzunehmen weiterer Zustände (z.B. verdoppeln, oder nur einen Zustand) vergrößern
4. Lanczos-Diagonalisierung für m niedrigste Eigenwerte
5. falls Matrix nicht konvergiert ist: zurück zu 3.

Grenzen der NRG

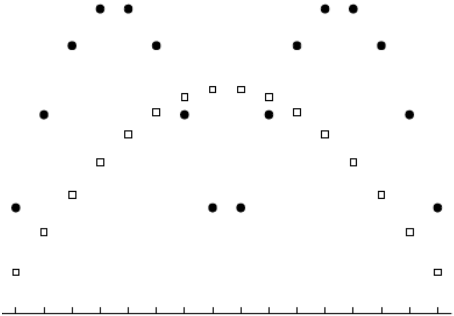


- Verallgemeinerung zu überall wechselwirkenden Gitterpunkten funktioniert nicht (**real space renormalization group**)
- Beispiel: Teilchen im Kasten: Nullpunktswellenfunktion und Nullpunktsenergie bei halbem Kasten wesentlich verschieden von ganzem Kasten

Verschränkung (*entanglement*)

Quantenmechanische Teilchen sind auf nichttriviale Weise mit ihrer Umwelt verbunden

Grenzen der NRG



- Verallgemeinerung zu überall wechselwirkenden Gitterpunkten funktioniert nicht (**real space renormalization group**)
- Beispiel: Teilchen im Kasten: Nullpunktswellenfunktion und Nullpunktsenergie bei halbem Kasten wesentlich verschieden von ganzem Kasten

Verschränkung (*entanglement*)

Quantenmechanische Teilchen sind auf nichttriviale Weise mit ihrer Umwelt verbunden

Dichtematrix-Renormierungsgruppe

- Beschreibe System jetzt im Zusammenhang mit Umgebung
- Gesamtsystem (*universe*, *superblock*) gegeben durch *system* und *environment*
- Wie beschreibt man die Umwelt?
- Spiegelung des Systems

Dichtematrix-Renormierungsgruppe

- Beschreibe System jetzt im Zusammenhang mit Umgebung
- Gesamtsystem (*universe*, *superblock*) gegeben durch *system* und *environment*
- Wie beschreibt man die Umwelt?
- Spiegelung des Systems

Dichtematrix

Dichtematrix: allgemeinste Beschreibung eines QM Systems, da verschränkte Zustände, also Entanglement, beschrieben werden können

$$\rho_T = \exp\left(-\beta\widehat{H}\right) = \sum_\alpha \exp\left(-\beta E_\alpha\right)|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$$

$$\rho = \sum_\alpha C_\alpha |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$$

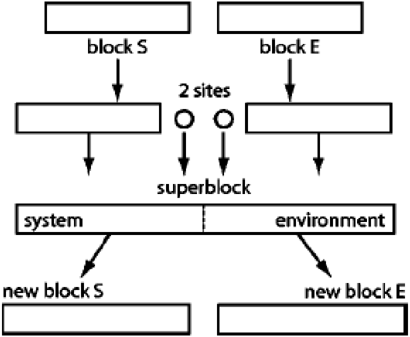
- Superblock in reinem Zustand

$$\rho^{super} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

- System alleine aber in verschränktem Zustand

$$\rho^S = Tr_E \rho = \sum_{\sigma,\epsilon,\sigma'} C_{\sigma\epsilon} C^*_{\sigma'\epsilon} |\sigma\rangle\langle\sigma'|$$

Der Algorithmus für das unbegrenzte System



1. löse exakt für kleinen Superblock
2. teile auf in System S und Umgebung E
3. errechne reduzierte Dichtematrix $\rho^S = Tr_E \rho = \sum_E |\Psi\rangle\langle\Psi|$ und deren m höchste EW mit EV
4. vergrößere System und Umgebung je um 1 Gitterpunkt
5. löse numerisch für neuen Superblock
6. bis zur gewünschten Länge des Systems bei 2 weitermachen

Detaillierterer Blick auf den Algorithmus

1. Anfangs System S auf dem Hilbertraum der Größe M_l^S, der System exakt beschreibt, mit Basis $\{|M_l^S\rangle\}$. Genauso Umwelt erstellen.
2. System S auf S' erweitern durch Hinzunahme eines Zustandes; Hilbertraum jetzt $N^S = M_l^S N_{neuerGitterplatz}$-Dimensional, Basis $\{|M_l^S\ \sigma\rangle\} = \{|M_l^S\rangle|\sigma\rangle\}$. Analog E'.
3. Superblock der Länge $2l + 2$ aus S' und E' erstellen, Hilbertraum $N^S N^E$-Dimensional. $\widehat{H}_{2l+2}$ implizit vorhanden, wird nicht explizit ausgerechnet
4. Diagonalisierung von $\widehat{H}_{2l+2}$ um Grundzustand zu errechnen;

5. Reduzierte Dichtematrix des Systems errechnen: $\rho_s = Tr_E|\Psi\rangle\langle\Psi|$, und deren Eigenvektoren nach Gewicht der Eigenwerte sortiert errechnen. Neue Basis des System durch Transformation der alten Basisvektoren mit den neuen EV, $\langle m_l^S \sigma | m_{l+1}^S \rangle | m_l^S \sigma \rangle$.
6. Transformiere das System auf die neue, unvollständige Basis

$$\hat{H}_{l+1}^{tr} = T^\dagger \widehat{H}_{l+1} T$$

   T ist hier die Matrix der Spalten-EV der m größten EW. Analog wird mit E verfahren.
7. bei 2 wieder einsteigen, bis eine gewünschte Länge erreicht ist (zB bis zur Konvergenz der Werte)

Fehler

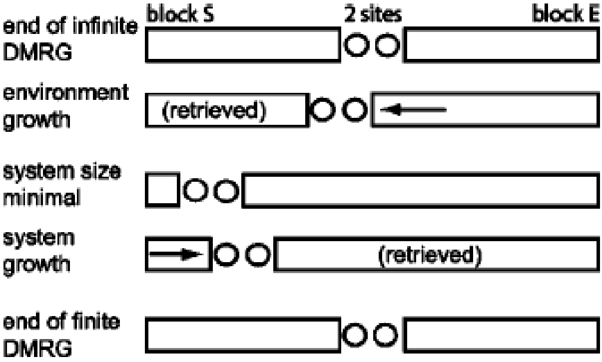
- Zwei Fehlerquellen:
  1. inkorrekte Einberechnung der Umwelt (siehe später *finite size DMRG*)
  2. Abschneiden (*truncation*) der Eigenwerte w_i der Dichtematrix
- Rundungsfehler proportional zum

truncated error

$$\epsilon = 1 - \sum_{i}^{m} w_i$$

Gliederung

Anschauung des *finite system DMRG* Algorithmus



- wenn System erwünschte Größe erreicht hat, vergrößere System auf Kosten der Umwelt
- wenn Umwelt sehr klein, kehre Prozess um
- wiederhole beliebig oft

Warum Endlichsystem-DMRG?

- im Endlossystem-Algorithmus ist der Hamilton für zukünftige Superblocks nicht bekannt
  $\Rightarrow$ schlechte Ergebnisse für zufällige WW und starke Störstellen
- Endlos-Algorithmus kann sich in metastabilen Zuständen festhängen
- bei variabler Teilchenzahl (zB Elektronenmodelle) sind hinzukommenden Teilchen nicht thermalisiert

finite system DMRG löst diese Probleme

Anwendungen der DMRG

Eindimensionale Ketten

- bis zu einigen tausend Gliedern Größe
- exponentiell schnell abfallenden Eigenwerten in der Dichtematrix
- beliebige Wechselwirkungsstärke

- fermionische Systeme leichter zu implementieren als in anderen Simulationsmethoden (kein Vorzeichenproblem)
- Heisenberg- und Hubbardketten und -Leitern: Energielücken, Strukturfaktoren, topologische Eigenschaften, Magnetisierungsplateaus und kritische Exponenten
- Systeme mit frustrierten WW, Dimerisation, Störstellen und zufälligen WW

Quanteninformation

Von-Neumann Entropie

$$S = -Tr\widehat{\rho}\log_2 \widehat{\rho} = -\sum_{\alpha} w_\alpha \log_2 w_\alpha$$

- misst Stärke der Verschränkung
- in 1-D Systemen : $S \leq L$ für $L \rightarrow \infty$, da S maximal bei Gleichverteilung $w_\alpha = 2^{-L}$
- S besitzt obere Schranke $\propto$ Korrelationslänge ξ
  $\Rightarrow$ Zahl der zu behaltenden EW M $\propto 2^S$ =const
- selbst nahe dem kritischen Punkt steigt S nur logarithmisch an:
  $S \propto k \log_2 L + const$
  $M \propto L^k$, k =const, klein

Das Problem bei höheren Dimensionen

Dichtematrix-Renormierungsgruppen prinzipiell auch in höheren Dimensionen möglich

Die Mathematik der DMRG gilt äquivalent auch in beliebig hohen Dimensionen

aber:

- in höheren Dimensionen Verschränkung viel stärker: $S \propto \left(\frac{L}{\lambda}\right)^{d-1}$
- um gute Präzision zu erhalten: exponentiell mehr EW miteinbeziehen: $M \propto 2^{L^{d-1}}$
- dabei aber das System groß ziehen (thermodynamischer Limes) $\Rightarrow$ Rechenaufwand explodiert
- eingeschränkt zweidimensionale Systeme möglich, z.B. Leitern

Erweiterungen der DMRG zu Dynamik und Zeitentwicklung

- bisherige Größen alle statische Gleichgewichtsgrößen
- zu geringe Anzahl an Eigenzuständen für Dynamik

1. Erweiterung auf Impuls als gute Quantenzahl (Dynamische DMRG, Gleichgewichtsdynamik)
2. Erweiterung auf Zeitenwicklung (also Nichtgleichgewichtsdynamik)

Dynamische DMRG

Propagator für T=0

$$iG_A(t-t') = \langle 0|A^\dagger(t')A(t)|0\rangle$$

für Rechnung eher die Form:

$$G_A(\omega + i\eta) = \langle 0|A^\dagger \frac{1}{E_0 + \omega + i\eta - \widehat{H}} A|0\rangle$$

wobei $\eta > 0$ gegen 0 geschickt wird

Dynamische DMRG

- um Propagator zu berechnen, werden mehrere Zustände benötigt
- Art, Zustände auszusuchen, variiert, zB
- *Lanczos-Vektor Methode*: Krylov-Unterraum: $|\Psi_0\rangle$, $\widehat{A}|\Psi_0\rangle$, $\widehat{A}^2|\Psi_0\rangle$,...
- *Korrekturvektor Methode*: $|\Psi_0\rangle$, $\widehat{A}(\omega + i\eta - \widehat{H})^{-1}|\Psi_0\rangle$
- *Dynamische DMRG*: statt des Lösens des großen Gleichungssystems variationelle Minimierung des Funktionals

$$W_{A,\eta}(\omega, \Psi) = \langle\Psi|(E_0 + \omega - \widehat{H})^2 + \eta^2|\Psi\rangle + \eta\langle\Psi|A|\Psi_0\rangle + \eta\langle\Psi_0|A|\Psi\rangle$$

Dynamische DMRG

- um Propagator zu berechnen, werden mehrere Zustände benötigt
- Art, Zustände auszusuchen, variiert, zB
- *Lanczos-Vektor Methode*: Krylov-Unterraum: $|\Psi_0\rangle$, $\widehat{A}|\Psi_0\rangle$, $\widehat{A}^2|\Psi_0\rangle$,...
- *Korrekturvektor Methode*: $|\Psi_0\rangle$, $\widehat{A}(\omega + i\eta - \widehat{H})^{-1}|\Psi_0\rangle$
- *Dynamische DMRG*: statt des Lösens des großen Gleichungssystems variationelle Minimierung des Funktionals

$$W_{A,\eta}(\omega, \Psi) = \langle\Psi|(E_0 + \omega - \widehat{H})^2 + \eta^2|\Psi\rangle + \eta\langle\Psi|A|\Psi_0\rangle + \eta\langle\Psi_0|A|\Psi\rangle$$

Probleme der Realzeitdynamik

Problem mit Zeitentwicklung

- DMRG beschneidet Hilbertraum an einem festen Zeitpunkt
- bei schwach korrelierten Systemen: Zeitentwicklung gut bekannt,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n exp(-iE_n t)|\Psi(0)\rangle$$

- bei starker Korrelation Zeitentwicklung i.A. nicht bekannt → keine Kontrolle, ob gute Eigenwerte behalten werden

Zwei Umsetzungen der Realzeitdynamik

Grundideen von Realzeit-DMRG

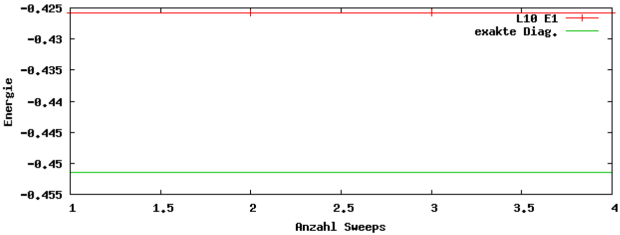
1. statischer Hilbertraum: Anzahl erhaltener EW wird so optimiert, dass sie möglichst lange Gültigkeit behalten
2. angepasster Hilbertraum: Eigenwerte werden mit fortschreitender Zeit angepasst

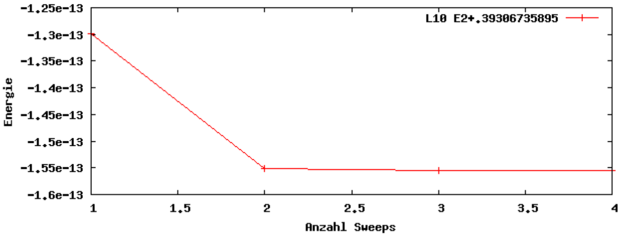
Gliederung

Parameter

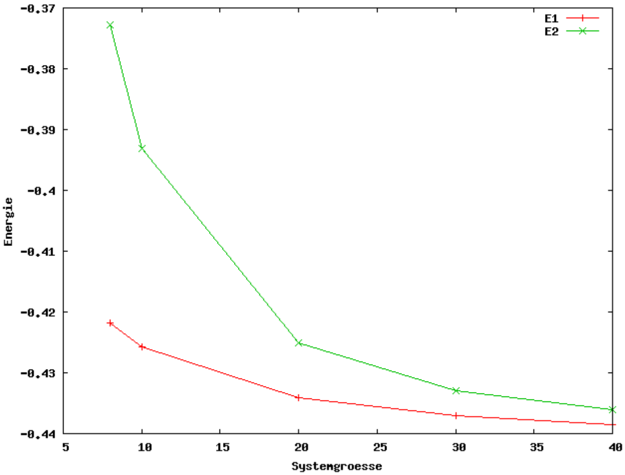
siehe Word-Dokument

Übereinstimmung mit dem echten Wert



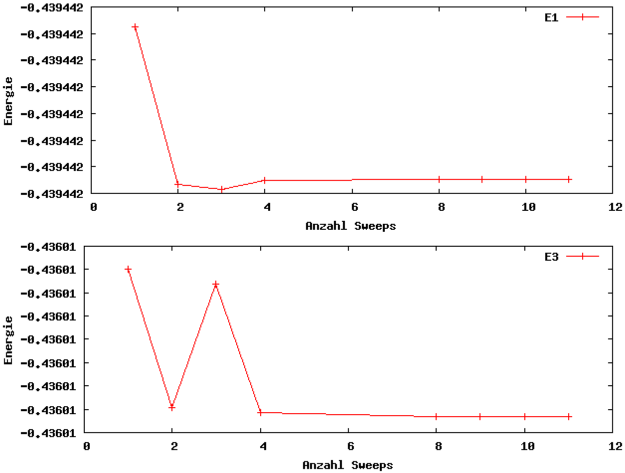


Abhängigkeit von der Systemgröße

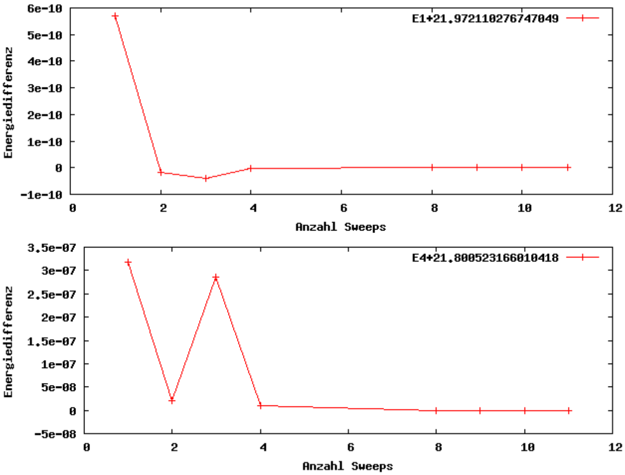


Konvergenz bei mehr Sweeps

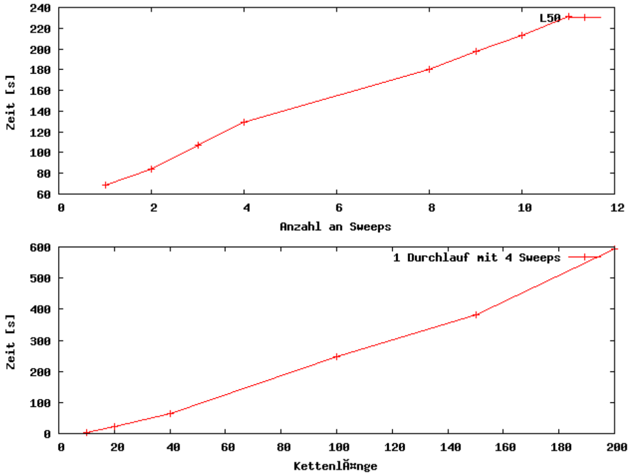
L=50; $S_z = 0$ Unterraum



Energieunterschiede bei mehr Sweeps



Ressourcenverbrauch



- bei untersuchten Einstellungen Speicherverbrauch meist $\approx 2 - 8MB$

Zusammenfassung

- DMRG stärkster Algorithmus für 1-d Systeme mit starken, aber stark abfallenden Verschränkungen:
  - stärkste WW bearbeitbar
  - Aufwand steigt vergleichsweise schwach mit Systemgröße
  - sehr schnelle Konvergenz
- in höheren Dimensionen keine überrragenden Ergebnisse
- höhere Energien verlangen stark ansteigenden Rechenaufwand
- ALPS erspart eigene Implementierung, dafür muss man Daten umständlich extrahieren

Quellenangabe

- U. Schollwöck: *The density-matrix renormalization group*, Rev.Mod.Phys 77, 259 (2005)
- R. Noack & S. Manmana: *Diagonalization- and Numerical Renormalization-Group-Based Methods for Interacting Quantum Systems*, preprint, arxiv.org (Link siehe Blümer-HP)
- J. Thijssen: *Computational Physics*, Cambridge (2007)