

Fa-tenzorhálózat állapotok alakjának optimalizálása rendezetlen spinrendszerekben

TDK DOLGOZAT

PENC PATRIK

TÉMAVEZETŐ: DR. WERNER MIKLÓS ANTAL

Tudományos munkatárs

BME Fizikai Intézet

Elméleti Fizika Tanszék



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2021

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
2. Tenzorszorzat-állapotok	3
2.1. Kvantumrendszerek leírása klasszikus számítógéppel	3
2.2. Schmidt-felbontás	3
2.3. Mátrixszorzat-állapotok	6
2.4. Tenzorszorzat-állapotok szemléltetése	7
2.5. Fa-tenzorhálózat állapot	9
3. Sherrington–Kirkpatrick-spinüveg modell	11
4. Optimális TNS reprezentáció meghatározása	11
4.1. Bevezetés	11
4.2. Optimális gráf keresése	12
4.3. Szimulált hűtés	13
4.4. Állapot eltárolási költségének számolása	14
4.5. Gráfváltoztatás lépései	15
5. Eredmények	17
5.1. Szimulált hűtés	17
5.2. Eltárolási költség	19
5.3. Optimális gráf	20
5.4. Kölcsönös információ	21
6. Kitekintés	22
7. Köszönetnyilvánítás	22

1. Bevezetés

Kvantummechanikai rendszerek szimulációja klasszikus számítógépen nagyon számításigényes feladat, hiszen ellentétben a klasszikus elmélettel a kvantummechanikában a rendszer bázisállapotainak tetszőleges szuperpozíciója is lehetséges kvantumállapot, ezért a bázis méretének megfelelő sokdimenziós Hilbert-tér állapotait és operátorait kell tárolnunk és velük számításokat kell végeznünk. Amennyiben kölcsönható kvantumos soktestrendszert (pl. spinláncokat, sokrészecskés szilárdtestfizikai modelleket) vizsgálunk, úgy az állapottér dimenziója a részrendszerek (rácshelyek) számának exponenciális függvénye. A számítógépek véges memóriája miatt egyszerű számítógépen ilyen modellek csak igen kis térfogatban (20-30 rácshely) vizsgálhatóak, de még modern szuperszámítógépeken sem lehetséges 50-nél több rácshely egzakt kezelése [1], ezek a rendszerméretetek pedig gyakran elégtelennek bizonyulnak. Ezen probléma megoldására a kvantummechanika születése óta számtalan különböző megközelítéssel próbálkoztak a kutatók, melyek azonban mind megegyeznek abban, hogy bennük állapotot leíró paraméterek száma drasztikusan kisebb az állapottér dimenziójánál, legyen szó akár analitikus, akár numerikus módszerről.

A kvantumos rendszerek állapotainak egyik legalapvetőbb tulajdonsága, hogy részrendszereik között úgynevezett kvantum-összefonódást találhatunk, azaz a kvantumállapot erős korrelációkat írhat le a különböző részrendszerek között. Az összefonódásnak sok meglepő következménye van, gondoljunk akár a híres EPR-paradoxonra [2], vagy a Bell-egyenlőtlenségekre [3], de mint kiderül, numerikus szimulációk hatékonyabbá tehetők, ha az állapotok összefonódási struktúráját ismerjük. Az összefonódás vizsgálata ugyanis lehetőséget biztosít arra, hogy a részrendszerek állapottereiben meghatározzuk a “fontos” állapotok alterét, miközben a kevésbé fontos állapotokat egyszerűen kidobhatjuk. Bár erősen összefont állapotok esetén a részrendszerekben gyakorlatilag minden állapot fontosnak bizonyul, gyengébb összefonódás esetén a részrendszerek állapottereiben drasztikus csonkolást végezhetünk, miközben a leírásunk továbbra is precíz marad. Az úgynevezett tenzorhálózat alapú algoritmusokban a gyenge összefonódottságot arra használjuk fel, hogy az állapotvektort ezzel a csonkolási eljárással tömörítsük [4].

A tenzorhálózat-algoritmusok alapvető ötlete, hogy a nagyméretű (sokindexes) állapotvektor helyett sok kisebb méretű tenzort tárolunk, miközben az állapotvektor elvben ezen tenzorok kontrakciójaként állítható elő. A tömörítés hatékonysága erősen függhet attól, hogy milyen a tenzorhálózat topológiája. A leggyakrabban alkalmazott mátrixszorzat- állapotok (MPS) esetén a rácspontokat egy láncra helyezzük [4, 5], azonban az irodalomban alkalmaztak már magasabb koordinációs számú fa-tenzorhálózatokat (TTNS) [6], illetve magasabb dimenziós, például négyzetrácsra helyezett úgynevezett PEPS hullámfüggvényeket is [4]. Utóbbi megközelítések magasabb dimenziós, valamint hosszútávon kölcsönható modellekben eredményesebbek lehetnek az egyszerű MPS leírásnál, ami egydimenziós, rövidtávon kölcsönható modellek vizsgálata esetén mára standard numerikus módszeré vált.

Dolgozatomban a fa-tenzorhálózat leírás hatékonyságát vizsgálom hosszútávon kölcsönható spin-modell esetén. Vizsgálatainkhoz a hosszútávú csatolásokat tartalmazó merőleges térbe helyezett Sherrington-Kirkpatrick spinűveg modellt választottuk. A modell választását az motiválta, hogy a merőleges mágneses tér nagyságának függvényében a rendszer alapállapota egy kvantumfázisátalakuláson megy keresztül, miközben zérus és végtelen erős terekben az alapállapot szorzatállapot, melyben nincs összefonódás. A két határeset között, a kritikus pontot közelítve erősen összefonott kvantumállapotok jelennek meg, melyek nemtriviális összefonódási struktúrája alapvetően befolyásolhatja, hogy milyen az optimális tenzorhálózat alakja, a modell tehát jó jelölt arra, hogy a különféle tenzorhálózatok tömörítési hatékonyságát teszteljük [7].

Dolgozatom felépítése: A 2. fejezetben áttekintem a tenzorhálózat-állapot leírás alapjait, a 3. fejezetben röviden bemutatam a vizsgált spinűveg modellt, a 4. fejezetben az részletezem általam fejlesztett fa-gráf optimalizálási eljárást, az 5. fejezetben az eredmények bemutatása következik, majd összefoglalással és kitekintéssel zárom dolgozatomat.

2. Tenzorszorzat-állapotok

2.1. Kvantumrendszerek leírása klasszikus számítógéppel

Egy kvantumrendszert a Hamilton-operátorával tudjuk jellemezni: ennek az operátornak a sajátvektorai feszítik ki a lehetséges állapotok terét, a sajátértékei pedig az állapotok energiáját adják meg. Ha van egy több részrendszerből álló rendszer, akkor a rendszer Hamilton operátorát és hullámfüggvényét fel tudjuk írni a részrendszerek által definiált szorzatbázisban. Ebben a bázisban a Hamilton-operátor egy mátrix lesz, a sajátfüggvény pedig ennek a mátrixnak a sajátvektora. A rendszer leírását az teszi nehezzé, hogy az állapottér dimenziója a részrendszerek számával exponenciálisan nő, emiatt egzaktul csak kis rendszerméretű rendszerek vizsgálhatóak. Például egy N feles spinből felépített kvantumrendszer állapotterének dimenziója 2^N , ami 20 spin esetén már meghaladja az egymilliót. A nagyobb méretű rendszerek vizsgálatához különböző módon közelíteni kell az állapotot, például az általam vizsgált tenzorszorzat állapotokkal, amiknek a leírása alább található.

2.2. Schmidt-felbontás

Vegyünk egy tetszőleges $\mathcal{H}$ Hilbert-teret, amit fel tudunk írni két al-Hilbert-tér direktszorzataként

$$\mathcal{H} = \mathcal{A} \otimes \mathcal{B}. \quad (1)$$

Ekkor egy tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ vektort fel tudunk írni a

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |i\rangle_{\mathcal{A}} |j\rangle_{\mathcal{B}} \quad (2)$$

alakban, ahol $|i\rangle_{\mathcal{A}}$ és $|j\rangle_{\mathcal{B}}$ orthonormált bázist alkotnak a saját Hilbert-terükben. A Ψ_{ij} együtthatók egy $\dim(\mathcal{A}) \times \dim(\mathcal{B})$ dimenziójú mátrixba rendezhetők. A $|\psi\rangle$ állapot hatékonyabb eltárolásához az úgynevezett szinguláris érték felbontással juthatunk el.

Tetszőleges $n \times m$ dimenziójú mátrixot fel tudunk bontani három mátrix szorzatára az úgynevezett szinguláris érték felbontás (SVD, „singular value decomposition”) segítségével

$$\mathbf{M} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^\dagger, \quad (3)$$

ahol az $\mathbf{U}, \mathbf{S}, \mathbf{V}$ mátrixokról a következőket tudjuk:

- $\mathbf{U}$ egy $n \times \min(n, m)$ dimenziójú mátrix, amire $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{I}$, és ha $n < m$, akkor $\mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{I}$ is igaz.
- $\mathbf{S}$ egy $\min(n, m) \times \min(n, m)$ dimenziójú diagonális mátrix, aminek az elemei a szinguláris értékek, melyek nem negatív valós számok. Feltehetjük, hogy az elemei csökkenő sorrendben szerepelnek a diagonálisban.
- $\mathbf{V}^\dagger$ egy $\min(n, m) \times m$ dimenziójú mátrix, amire $\mathbf{V}^\dagger \mathbf{V} = \mathbf{I}$, és ha $m < n$, akkor $\mathbf{V} \mathbf{V}^\dagger = \mathbf{I}$ is igaz.

Amennyiben a Ψ_{ij} mátrixra alkalmazzuk az SVD-t úgy az alábbi kifejezésre jutunk:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |i\rangle_{\mathcal{A}} |j\rangle_{\mathcal{B}} = \sum_{i,j} \sum_{a=1}^r U_{ia} S_{aa} (V^\dagger)_{aj} |i\rangle_{\mathcal{A}} |j\rangle_{\mathcal{B}} = \sum_{a=1}^r \left(\sum_i U_{ia} |i\rangle_{\mathcal{A}} \right) \left(\sum_j V_{ja}^* |j\rangle_{\mathcal{B}} \right) S_{aa} \quad (4)$$

r jelölje a nem nulla szinguláris értékek számát. Észrevehetjük, hogy

$$|a\rangle_{\mathcal{A}} = \sum_i U_{ia} |i\rangle_{\mathcal{A}} \quad (5)$$

U unitaritása miatt egy bázistranszformációnak felel meg, és $|a\rangle_{\mathcal{A}}$ így egy orthonormált rendszert alkot $\mathcal{A}$ -n. Ez a vektorrendszer nem feltétlenül bázis, hiszen a szinguláris érték felbontás során kapott ortogonális vektorok száma legfeljebb a kisebb részrendszer dimenziójával egyezhet meg. Ugyanez igaz $\mathcal{B}$ Hilbert-téren is, legyen

$$|a\rangle_{\mathcal{B}} = \sum_j V_{ja}^* |j\rangle_{\mathcal{B}} \quad (6)$$

orthonormált vektorrendszer $\mathcal{B}$ Hilbert-téren. A kisebb dimenziójú altérben az ottani vektorrendszer bázist alkot, míg a nagyobb dimenziójú térben a vektorrendszer Gram–Schmidt-ortogonalizációval bázissá kiegészíthető. Ezzel az állapotot a

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^r S_{aa} |a\rangle_{\mathcal{A}} |a\rangle_{\mathcal{B}} \quad (7)$$

alakba tudjuk átírni, ahol együtthatóként már a szinguláris értékek jelennek meg, és r a nem nulla szinguláris értékek száma. Ezt a transzformációt hívják Schmidt-felbontásnak, a szinguláris értékeket pedig Schmidt-értékeknek. Ha $r = 1$, akkor szorzatállapotunk van a két Hilbert-tér között, ha $r > 1$,

akkor pedig a két Hilbert-tér össze van fonódva. A hullámfüggvényem eredetileg normált volt, és unitér operátorokkal hajtottunk végre bázistranszformációkat, ami megtartja a normát, tehát ebben az állapotban is igaz, hogy

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{a=1}^r |S_{aa}|^2 = 1. \quad (8)$$

Ezt az állapotot tudjuk közelíteni úgy, hogy csak az $r' < r$ legnagyobb Schmidt-értéket tartjuk meg, és így a közelített hullámfüggvény a

$$|\psi'\rangle = \sum_{a=1}^{r'} S_{aa} |a\rangle_{\mathcal{A}} |a\rangle_{\mathcal{B}} \quad (9)$$

alakot ölti. A közelítés hibájának tekinthetjük a két vektor különbségének normanégyszetét, amire a

$$\langle \psi - \psi' | \psi - \psi' \rangle = \sum_{a=r'+1}^r |S_{aa}|^2 \quad (10)$$

kifejezést kapjuk. Azaz a közelítés hibája megegyezik az elhanyagolt Schmidt-értékek abszolút értékeinek négyzetösszegével. Az r' levágás értékét csökkentve a hullámfüggvény egyre jobban tömörített közelítéseit nyerjük. A közelítés kontrollált, és r' növelésével elvben tetszőleges pontosság elérhető.

Fontos megemlíteni, hogy a Schmidt-értékeknek van a fentiekén túl fizikai tartalmuk is. A Schmidt-értékek négyzetei az állapotunk $\mathcal{A}$ és $\mathcal{B}$ részrendszerbeli redukált sűrűségoperátorának sajátértékei. Ezzel a sűrűségoperátort $\mathcal{A}$ rendszerben a

$$\rho_{\mathcal{A}} = \sum_{a=1}^r S_{aa}^2 |a\rangle_{\mathcal{A}} \langle a| \quad (11)$$

módon tudjuk felírni, és $\mathcal{A}$ -t $\mathcal{B}$ -re cserélve a $\mathcal{B}$ részrendszerbeli sűrűségoperátort kapjuk. Fontos megjegyezni, hogy mindkét részrendszerbeli sűrűségoperátornak a sajátértékei megegyeznek, hiszen mindkettőt a Schmidt-értékek négyzete adja meg.

Két részrendszer összefonódottságának erősségét a részrendszerek von Neumann-entrópiájával tudjuk jellemezni, amit a

$$S = -\text{Tr}(\rho \ln(\rho)) = -\sum_{a=1}^r S_{aa}^2 \ln(S_{aa}^2) \quad (12)$$

módon definiálunk. Ha ennek az entrópiának 0 az értéke, akkor a két részrendszer nincs összefonva, és közöttük szorzatállapotban található a hullámfüggvény. Minél nagyobb ez az entrópia, annál jobban össze van fonódva a két rendszer. Megjegyzendő, hogy r , azaz a nem nulla Schmidt-értékek száma, és S között nincs triviális kapcsolat.

Ha van két részrendszerünk, melyek együttesen sem adják ki a teljes rendszert, akkor a két részrendszer összefonódottságának vizsgálatához érdemes definiálnunk egy olyan mennyiséget, ami csak a két részrendszertől függ, és amit a rajtuk kívül eső rendszer állapota nem befolyásol. Egy gyakran használt ilyen mennyiség az úgynevezett kölcsönös információ (mutual information), amit a 1-es és

a 2-es részrendszer között a von Neumann entrópia segítségével a

$$I_{12} = S_1 + S_2 - S_{12} \quad (13)$$

képlettel számolható, ahol S_1, S_2 a két részrendszer entrópiája, S_{12} pedig a két részrendszer együttesének entrópiája. A kölcsönös információ szemléletesen azt adja meg, hogy a két részrendszer egymással hogyan van összefonódva, a rajtuk kívül eső rendszertől függetlenül.

2.3. Mátrixszorzat-állapotok

A mátrixszorzat-állapotok diszkrét rácsponthoz álló kvantumrendszerek, például spinláncok állapotának leírására alkalmazhatóak. Ahhoz hogy egy tetszőleges Hilbert-térbeli elemnek megkapjuk ezt a reprezentációját, a Schmidt dekompozíciót kell egymás után többször elvégeznünk rajta. Vegyük azt a $\mathcal{H}$ Hilbert teret, ami n darab d dimenziójú részrendszer terének szorzata. Az i -edik részrendszer Hilbert terét jelöljük σ_i -vel. A teljes Hilbert-tér felírható az al-Hilbert-terek direktszorzataként

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^n \sigma_i. \quad (14)$$

Ez alapján egy tetszőleges $\mathcal{H}$ -beli elemet ki tudunk fejteni a részrendszerek bázisaiból képzett szorzatbázison

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} |\sigma_1, \dots, \sigma_n\rangle. \quad (15)$$

Itt a $c_{\sigma_1, \dots, \sigma_n}$ együtthatók egy n -edrendű tenzort alkotnak, és mi ezt a tenzort akarjuk felbontani kisebb rendű tenzorok szorzatára. Ehhez a felbontáshoz egymás után kell lépéseket végrehajtanunk. Először alakítsuk át a d^n dimenziójú állapotvektorunkat egy $d \times d^{n-1}$ dimenziójú mátrixxá a

$$\Psi_{(\sigma_1), (\sigma_2, \dots, \sigma_n)} = c_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \quad (16)$$

módon, majd pedig ezen a mátrixon hajtsunk végre egy szinguláris érték felbontást

$$c_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} = \Psi_{(\sigma_1), (\sigma_2, \dots, \sigma_n)} = \sum_{a_1=1}^{r_1} U_{\sigma_1, a_1} S_{a_1, a_1} (V^\dagger)_{(a_1), (\sigma_2, \dots, \sigma_n)} \quad (17)$$

U mátrixról válasszuk le a fizikai lábait, és nevezzük el ezt a tenzort A tenzornak úgy, hogy $U_{\sigma_1, a_1} = A_{a_1}^{\sigma_1}$. A kapott állapotot tudjuk tömöríteni, úgy hogy csak az első r'_1 szinguláris értékre szummázunk. Miután tömörítettük az állapotot, szorozzuk össze S és $V^\dagger$ mátrixot, és alakítsuk vektorra a

$$c_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} = \sum_{a_1=1}^{r'_1} A_{a_1}^{\sigma_1} \Psi_{(a_1, \sigma_2), (\sigma_3, \dots, \sigma_n)} \quad (18)$$

egyenlet szerint. Ezután bontsuk fel szinguláris értékei szerint a Ψ vektort, és végezzük el az előző lépéseket rajta. Így a

$$c_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} = \sum_{a_1=1}^{r'_1} \sum_{a_2=1}^{r'_2} A_{a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \Psi_{(a_2, \sigma_3), (\sigma_4, \dots, \sigma_n)} \quad (19)$$

képletet kapjuk, ahol $A_{a_1, a_2}^{\sigma_2}$ egy $r'_1 \times r'_2$ dimenziójú mátrix. Ha ezeket a lépéseket minden spinre végigvisszük, az alábbi összefüggést nyerjük

$$c_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} = \sum_{a_1, \dots, a_n} A_{a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \cdot \dots \cdot A_{a_{n-2}, a_{n-1}}^{\sigma_{n-1}} A_{a_{n-1}}^{\sigma_n} = \mathbf{A}^{\sigma_1} \mathbf{A}^{\sigma_2} \cdot \dots \cdot \mathbf{A}^{\sigma_{n-1}} \mathbf{A}^{\sigma_n}. \quad (20)$$

Látszik, hogy c tenzor minden elemét megkaphatom mátrixok szorzataként, emiatt hívják mátrix szorzat állapotnak ezt az állapotreprezentációt.

Amennyiben a fenti lépések során elhagyjuk a csonkolást, azaz minden nemzérus szinguláris értéket megtartunk, úgy az átalakítás egzaktta válik, tehát beláttuk, hogy minden kvantumállapot felírható MPS alakban. Amennyiben a megtartott Schmidt-állapotok számát (az ún. bond-dimenziót) M -ben maximalizáljuk, úgy az állapot tárolásához szükséges memória $n * d * M^2$ szerint növekszik, ami a részrendszerek n számában lineáris szemben az egzakt leírás exponenciális skálázásával. Az MPS reprezentációt akkor éri meg alkalmazni, ha kvantumállapot olyan, hogy csak a láncban közeli rácspontok összefonódása erős, hiszen ekkor viszonylag kicsi M érték mellett is precíz leírást nyerhetünk. Ekkor egy-egy vágásnál sokat tudunk tömöríteni kevés információvesztés mellett.

Az állapotban megjelenő összefonódás struktúrája általában kikövetkeztethető a rendszer geometriájából, azaz pl. egy spinlánc esetén érdemes a spineket a valós térbeli sorrendben elhelyezni. Magasabb dimenziós modellekben, ill. hosszútávú kölcsönhatások esetén azonban a helyzet nem ilyen egyszerű, hiszen nem tudhatjuk előre, mely részrendszerek között lesz erős, ill. gyenge az összefonódottság. Az MPS leírás ekkor is alkalmazható, azonban ekkor a részrendszerek sorrendjének jó megválasztása komolyan befolyásolja a leírás hatékonyságát.

2.4. Tenzorszorzat-állapotok szemléltetése

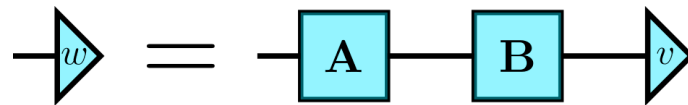
Egy tenzorszorzat-állapot kifejtési együtthatója tenzorok szorzataként állítható elő, ahol a különböző indexek alapján tudjuk hogy melyik tenzort melyik másikkal kell összeszorozni. Ha nagy méretű a rendszerünk, akkor gyorsan átláthatatlan lesz ez a szorzat, emiatt megpróbálhatjuk máshogy, grafikusan szemléltetni az állapotot. A másik előnye a grafikus jelölésnek, hogy könnyen látszik, hogy egy művelet, például a szingulárisérték-felbontás mit is csinál pontosan. Az általános tenzorokat jelöljük egy ovális alakzattal, és a diagonális tenzorokat pedig egy cúcsára állított négyzettel. Az egyindexes és a kétindexes tenzorokat, azaz a vektorokat, és a mátrixokat jelöljük speciálisan. Legyen egy háromszög a vektor, és egy négyzet a mátrix jelölése. A tenzorok alakzatához a tenzor rendjével megegyező számú lábat illesztünk, ahol egy-egy láb megfelel a tenzor egy-egy indexének. Ezeken a lábakon keresztül össze tudjuk kötni a tenzorokat, és a szabály az, hogy ha két tenzor össze

van kötve, akkor az ő megfelelő indexeikre szummázni kell. A tenzorok fizikai lábainak nevezzük azokat a lábakat, amiknek van fizikai jelentése, például ha egy index egy spint jelöl, akkor hogy ez a spin felfele, vagy lefele áll. Mivel ezekre nem szummázunk, emiatt ezek csak a tenzorokról fognak lelőgni, és nem lesznek összekötve a többi tenzorral. A tenzoroknak azokat a lábait, amik össze vannak kötve a többi tenzorral, tehát amikre szummázunk, virtuális lábainak nevezzük, hiszen ezek nem egy konkrét fizikai dolgot jelölnek, hanem csak a belső tenzorok közötti kapcsolatot.

Példának kedvéért legyen $\mathbf{A}$ egy $n \times m$ és $\mathbf{B}$ egy $m \times k$ dimenziójú mátrix és v egy k dimenziójú vektor. Ekkor a

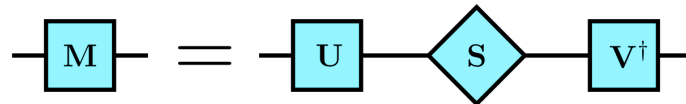
$$w = \mathbf{A}\mathbf{B}v \quad (21)$$

szorzást az alábbi módon tudjuk szemléltetni grafikusan:



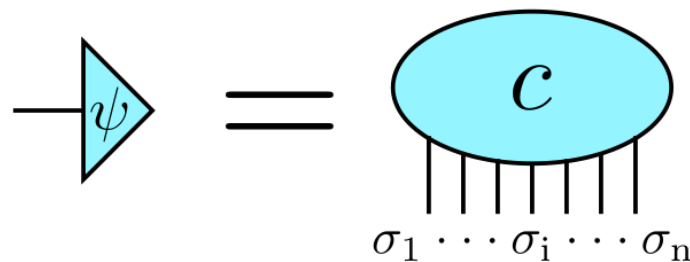
1. ábra. A $w = \mathbf{A}\mathbf{B}v$ egyenlet grafikus szemléltetése

Fontos észrevenni, hogy az előbbi mátrixszorzásban a mátrixok nem négyzetes mátrixok voltak, így különböző dimenziókon összegeztünk, az ábrán viszont ez nincs jelölve, mindkettő szummázás ugyanúgy van jelölve. Tehát a grafikus jelölésnél nem jelöljük egy láb dimenzióját, de tudjuk, hogy ha két tenzor össze van kötve, akkor az összekötött indexeik dimenzióinak meg kell egyezniük, hiszen szummázhatunk rájuk. Az SVD felbontás $\mathbf{M}$ mátrixot felbontja $\mathbf{U}$, $\mathbf{S}$ és $\mathbf{V}^\dagger$ mátrixokra. Ekkor ezt a felbontást és a 3-as egyenletet grafikusan is tudjuk szemléltetni.



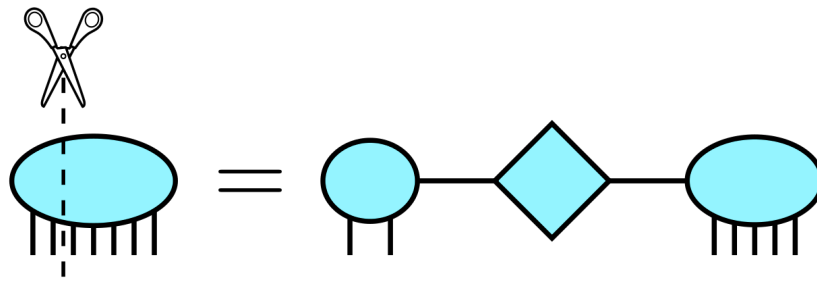
2. ábra. A szingulárisérték-felbontás grafikus jelölése

Egy hullámfüggvényt a 15-es egyenlet alapján egy n rendű tenzorral tudunk szemléltetni, aminek csak fizikai lábai vannak. Tudjuk, hogy a tenzor adott fizikai lába az adott részrendszer bázisához csatlakozik, de ezt a kapcsolatot nem jelenítjük meg fizikai lábak esetén. A részrendszereket mostantól jelöljük σ -val.



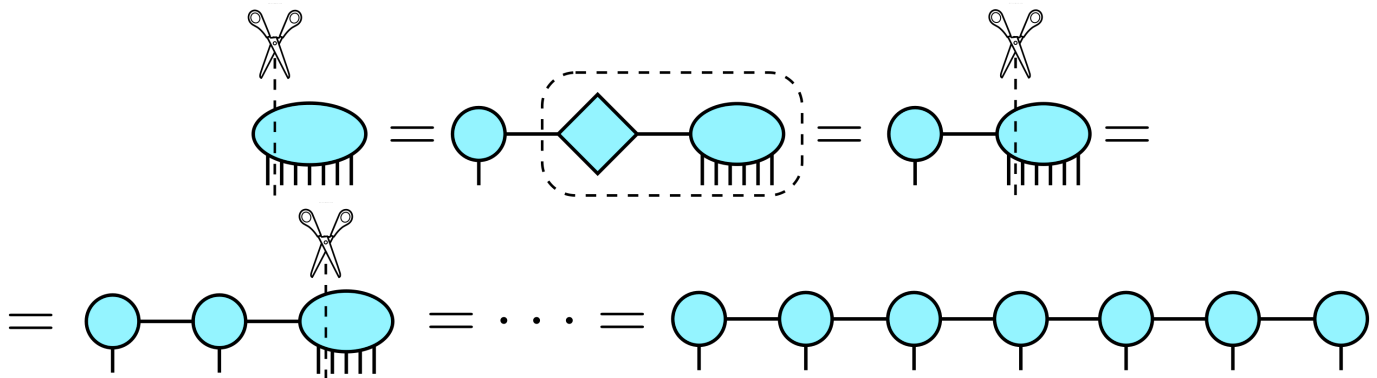
3. ábra. A hullámfüggvény tenzorrepresentációja

A Schmidt-felbontás ezt a tenzort vágja két részre.



4. ábra. A Schmidt-felbontás grafikusán

Ezen jelölésekkel könnyen láthajuk, hogy hogyan tudjuk létrehozni a hullámfüggvény mátrixszorzat-állapot reprezentációját.



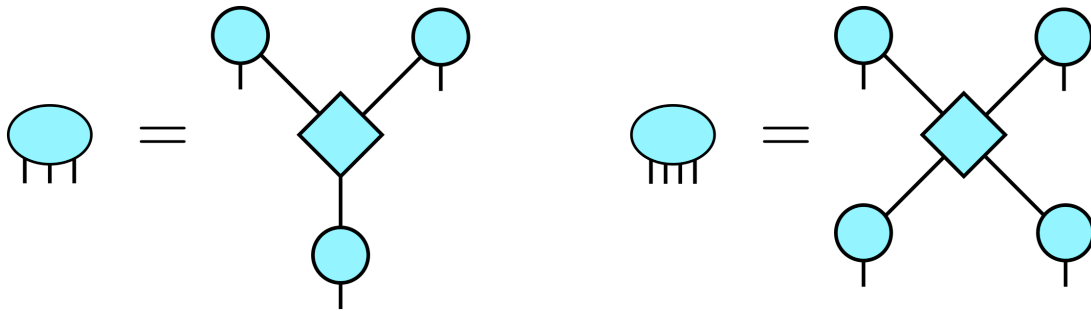
5. ábra. A mátrixszorzat-állapot elkészítése a hullámfüggvényből

2.5. Fa-tenzorhálózat állapot

A fa-tenzorhálózat állapot abban különbözik a mátrixszorzat-állapottól, hogy amíg a mátrixszorzat-állapotban minden tenzornak maximum két szomszédja volt, itt megengedjük azt is, hogy több szomszédjuk legyen, vagyis 3 rendű tenzorok helyett magasabb rendűeket is használhatunk. Ezzel a grafikus szemléltetésben a tenzorok nem egy egyenesre, hanem egy fagrafra illeszkednek, innen ered az elnevezés. A mátrixszorzat-állapot használata akkor hatékony, ha egydimenziós rendszereket vizsgálunk, például egy spinláncot. Azt várjuk, hogy a fa-tenzorhálózat állapotban való eltárolás jobb lesz a mátrixszorzat-állapotban való eltárolásnál, ha a részrendszereink magasabb dimenzióban helyezkednek el, mivel ekkor egy fagraf jobban illik a rendszerre, mint a mátrixszorzat-állapot egydimenziós lánc. Azért, hogy minél általánosabb tenzorhálózatot vizsgálhassunk, megengedjük azt is, hogy az egyes tenzoroknak egytől eltérő fizikai indexe legyen, azaz a fa-gráf csúcsaiba 1-nél több, de akár nulla fizikai spint is tehetünk. Az utóbbi, nulla fizikai lábat tartalmazó tenzorokat virtuális tenzoroknak nevezhetjük.

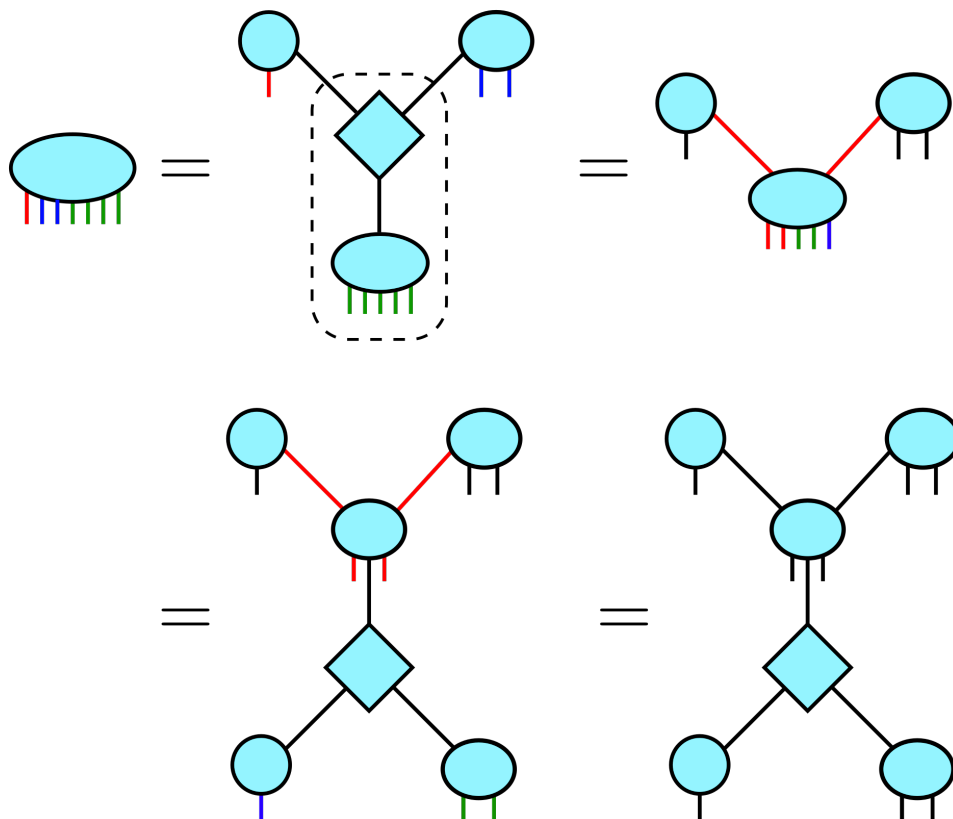
A fa-tenzorhálózat állapotot hasonló lépésekkel tudjuk létrehozni, mint a mátrixszorzat állapotot. A különbség annyi, hogy itt a tenzort, amit faktorizálni szeretnénk, nem feltétlenül úgy vágjuk szét,

hogy egy háromindexes MPS-mátrix jelenjen meg, hanem az általunk választott fa-gráf által diktált Schmidt-dekompozíciókat hajtjuk végre. [8].



6. ábra. Egy harmad és egy negyedrendű tenzor szingulárisérték felbontása

Ezzel a magasabb rendű szingulárisérték felbontással elő tudunk állítani egy fa-tenzorhálózat állapotot a mátrixszorzat állapot esetén megismert lépésekkel. Ezt az előállítást az alábbi ábra szemlélteti.



7. ábra. A fa-tenzorhálózat állapot előállításának jelölése grafikusán

Látható, hogy itt megengedjük, hogy egy tenzornak több fizikai lába is legyen, vagy egyáltalán ne legyen neki fizikai lába.

3. Sherrington–Kirkpatrick-spinüveg modell

Ahhoz hogy tudjuk vizsgálni a különböző reprezentációban történő eltárolás költségét, kell választani egy modellt, aminek az alapállapotát, vagy valamely gerjesztett állapotát akarjuk eltárolni. Ehhez mi a kvantum Sherrington–Kirkpatrick-modellt választottuk [7, 9, 10]. Ez a modell N darab véletlenszerűen csatolt spin rendszerét írja le merőleges mágneses térben. A modell Hamilton-operátora a

$$\hat{H} = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_{i=1}^N h_i \hat{\sigma}_i^z - h^T \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x, \quad (22)$$

ahol σ_i^x, σ_i^z a Pauli mátrixok, J_{ij} a spinek közötti csatolást leíró mátrix, h_i egy gyenge longitudinális mágneses tér egy-egy spin helyén, h^T pedig az összes spinre ható transzverz mágneses tér. A véletlenszerű gyenge longitudinális tér bevezetésére azért volt szükség, hogy a tükrösszimmetria (spinek z irányú átfordítása) miatti kétszeres degenerációt felhasítsuk. A csatolás értékei normális eloszlás szerinti véletlen számok, ahol

$$\text{Exp}(J_{ij}) = 0, \quad \text{Var}(J_{ij}) = 1. \quad (23)$$

A longitudinális mező, h_i , értékei 0 várható értékű, h szórású random számok, ahol a munkánk során $h = 0.01$ esetet vizsgáltunk. A transzverzális mező nagysága minden spinen megegyezik, és ennek a nagyságát a vizsgálatunk során paraméterként változtattuk.

A modellről tudjuk, hogy $h^T = 0$ és elég nagy h^T értéknél a rendszerünk szorzatállapot lesz. Előbbi esetben a spinek a z irányban állnak fel-le a csatolások tényleges értékétől függően, utóbbi esetben minden spin x irányban polarizált. Közepes erősségű transzverz mágneses tér esetén pedig egy összefonódott állapotot várunk. Kis transzverz mágneses tér értékeknél a rendszerünk spin-üveg fázisban van, nagy mágneses térben paramágneses fázisban, és a két átmenet között egy fázisátalakulás található, ahol várakozásaink szerint nagy lesz az alapállapot összefonódása. Mivel a modellünk tartalmaz kis és nagy összefonódottságú állapotokat is, és minden spin össze van egymással páronként csatolva, emiatt azt gondoljuk, hogy ebben a modellben érdekes lehet megvizsgálni a különféle tenzorhálózat reprezentációk hatékonyságát.

4. Optimális TNS reprezentáció meghatározása

4.1. Bevezetés

A munkámban egy a 22-ben definiált modellt vizsgáltam $N=20$ spin esetén. A modell alapállapotát egzakt diagonalizációval határoztam meg, aminek egzakt tárolásához $2^{20} \approx 10^6$ valós szám tárolására van szükség. A kérdés az, hogy tárolható-e ez az állapot hatékonyan kisebb helyen, ha valamilyen tenzorhálózat-reprezentációt választunk? Mivel a rendszerben minden spin kölcsönhat egymással, emiatt, a spinlánc modellel ellentétben, nem tudunk egy triviális sorrendet meghatározni a spinek között, amiben optimális lenne a mátrixszorzat-állapot eltárolás. Fa-tenzorhálózat állapotról bonyo-

lítja a dolgunkat, hogy nem csak a spinek sorrendjét nem tudjuk előre meghatározni, de az optimális gráfot sem. A dolgozatomban egyik célja megkeresni mindkét esetben az optimális spinelrendezést, ahol a lehető legkevesebb memóriában el lehet tárolni az állapotot. A mátrixszorzat-állapot esetében a spinek sorrendjét variálva az alább leírt szimulált hűtés algoritmussal kerestem az optimális állapotot, a fa-tenzorhálózat állapot keresésénél viszont bonyolultabb manipulációk is előjöhetnek, amit később kifejtek.

4.2. Optimális gráf keresése

Egy állapot fa-tenzorhálózatban való eltárolásának memóriaigényét nagyban befolyásolja a fagráf alakja, amire a tenzor hálózatot felépítjük. A célunk a lehető legolcsóbban tárolni az állapotot, emiatt fontos, hogy ismerjük az állapothoz tartozó optimális fagráfot. A Cayley formula alapján n pontra

$$n^{n-2} \tag{24}$$

különböző fagráf illik. Ez az álltalunk vizsgált 20 spin esetén

$$20^{18} \approx 2,6 \cdot 10^{23} \tag{25}$$

darab fagráfot jelent. A gráfunkon megengedjük, hogy egy csúcson több spin is legyen, ezzel a vizsgálandó fagráfok száma

$$\sum_{n=1}^{20} \left\{ \begin{matrix} 20 \\ n \end{matrix} \right\} n^{n-2} \approx 8,3 \cdot 10^{24}, \tag{26}$$

ahol $\left\{ \begin{matrix} a \\ b \end{matrix} \right\} = S(a,b)$ a másodfajú Stirling számokat jelölik [11]. Ahhoz hogy a legáltalánosabb fagráfokon tudjunk vizsgálni, megengedjük azt is, hogy speciális esetekben a fagráf tartalmazzon olyan csúcsot, amin nincsenek spinek. Ezeket fogjuk virtuális tenzoroknak nevezni. Ezzel még jobban megnő a lehetséges gráfok száma. Ekkora számosságú halmazon nem tudjuk kiszámítani az összes lehetséges gráfon való eltárolás költségét és megkeresni a legkisebb költségűt, azaz a legoptimálisabb fagráfot, emiatt Monte Carlo-módszerrel próbáljuk ezt megkeresni. Az optimalizálásra írtam egy szimulált hűtés elvén működő programot, ami véletlenszerű manipulációkat végrehajtva próbálja megkeresni a legkisebb költségű fagráfot. A programban lehetőség van arra, hogy kizárólag lánc topológiájú elrendezéseket is vizsgáljunk, ahol csak a rácshelyek sorrendje változik, így könnyen alkalmazható az optimális MPS reprezentáció megkeresésére is.

4.3. Szimulált hűtés

A szimulált hűtéshez szükség van egy költségfüggvényre (legyen ξ), aminek a minimumát akarjuk megkeresni. Az algoritmus alapelve az, hogy lépésenként kis változtatásokat hajtunk végre a rendszerben, és ezeket a változtatásokat

$$p(t) = \min(1, \exp\left(-\frac{\Delta\xi}{t}\right)) \quad (27)$$

valószínűséggel tartjuk meg, ahol $\Delta\xi = \xi(\text{új}) - \xi(\text{régi})$ a kis változtatás általi költségváltozás, t pedig egy a véletlenszerűséget szabályozó hőmérséklet-paraméter. A valószínűség képletéből látszik, hogy ha az új állapotunk költsége kisebb a réginél, akkor mindig elfogadjuk ezt az új állapotot, ha viszont rosszabb akkor valamilyen nem nulla valószínűséggel fogadjuk csak el. Ha a rosszabb állapotokat nem fogadnánk el, akkor a rendszer lokális minimumhelyekre konvergálna, és abból nem tudna kiszabadulni. A t paraméter a fizikai rendszerekben szokásos hőmérsékletnek feleltethető meg, és ezzel tudjuk szabályozni a rosszabb konfigurációk elfogadásának a valószínűségét. A $t \rightarrow \infty$ határértékben az elfogadási valószínűség egyhez tart, azaz minden új konfigurációt elfogadjuk. A $t \rightarrow 0$ határértékben pedig a valószínűség

$$p(t \rightarrow 0) = \begin{cases} 1 & \Delta\xi < 0 \\ 0 & \Delta\xi > 0 \end{cases}, \quad (28)$$

tehát csak akkor fogadjuk el a változást, ha az javít a rendszeren. Amiatt nevezik hűtésnek ezt az algoritmust, mert ennek a hőmérsékletnek az értékét a program elindításakor egy magas értékről indítjuk, majd pedig a program futása során lassan csökkentjük. Ezzel el tudjuk érni, hogy a futás elején az állapot könnyen változzon, így ne fagyjon be egy lokális minimumba, majd a hőmérséklet csökkentésével érjük el, hogy a futás végére konvergáljon a globális minimumba, vagy legalább egy majdnem optimális lokális minimumba. Tapasztalatom alapján a kezdeti hőmérsékletet a kezdő állapot költségének a felének vesszük, és a futás során ezt a

$$t_n = 0,99^n t_0 \quad (29)$$

függvény alapján változtatjuk, ahol n az aktuális lépés száma, t_0 pedig a kezdeti hőmérséklet. Ha optimalizálás közben azt tapasztaljuk, hogy a költség 300 lépésen keresztül nem változik 1%-nál többet, mivel már túl kicsi a hőmérséklet, így befagyott egy lokális minimumba, akkor eltároljuk a legjobb állapotot, majd pedig a hőmérsékletet megnöveljük a kezdeti értékre, hogy újra könnyen változhasson az állapot, és újrakezdtük a hűtést. A program 5000 lépés után leáll, és kiadja nekem a legjobb gráfot amit talált.

4.4. Állapot eltárolási költségének számolása

Az állapot eltárolásához el kell tárolni a gráfot, amire felépítjük az állapotot, és az egy-egy csúcsba kerülő tenzor elemeit. A gráf eltárolási mérete nagyjából azonos különböző gráfok esetén, és nagyságrendileg kisebb, mint a tenzorok eltárolási költsége, emiatt ezzel nem foglalkozunk, hanem a tenzorok méretét vizsgáljuk csak. A gráfon egy n fokszámú, k fizikai lábbal rendelkező csúcsra egy $(n + k)$ rendű tenzort kell helyezni, ami az

$$A_{a_1, a_2, \dots, a_n}^{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_k} \quad (30)$$

alakot fogja felvenni. Itt σ -val jelöljük a tenzor fizikai lábait, és a -val a tenzor virtuális lábait, amik megfeleltethetők a csúcshoz kötődő élekkel. A tenzorban található elemeknek a számát a tenzor lábainak dimenzióinak a szorzatával kaphatjuk meg

$$\text{Num}(A) = \dim(\sigma_1) \cdot \dim(\sigma_2) \cdot \dots \cdot \dim(\sigma_k) \cdot \dim(a_1) \cdot \dim(a_2) \cdot \dots \cdot \dim(a_n). \quad (31)$$

A fizikai lábak dimenziója 2, hiszen ezek a csúcsra illesztett spinek állapotát írják le, amik állhatnak felfelé, vagy lefelé. Ezzel a tenzor mérete a

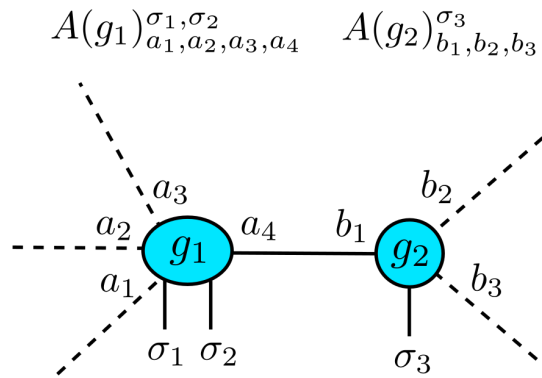
$$\text{Num}(A) = 2^k \cdot \dim(a_1) \cdot \dim(a_2) \cdot \dots \cdot \dim(a_n). \quad (32)$$

képletre egyszerűsödik. Ahhoz, hogy megkapjuk az eltárolási költséget, az összes csúcson található tenzor méretét össze kell adni. Legyen a gráf csúcsait tartalmazó halmaz neve G , ekkor az állapotnak az eltárolási költségét a

$$\text{cost} = \sum_{g \in G} \text{Num}(A_g) \quad (33)$$

képlettel tudom kiszámolni. A szimulált hűtés programnak ezt a *cost* értéket kell minimalizálnia.

A gráf eltárolási értékének (*cost*) a kiszámolásához meg kell határoznom az egy-egy csúcson található tenzorok méretét, majd pedig ezeknek a tenzoroknak az elemszámait összeadnom. A tenzorokat a virtuális lábaik szerint kell összeejteni, összeszorozni, és a gráf élei határozzák meg, hogy egy tenzort melyik másikkal kell összeejteni. Ahogy az 8-as ábrán látjuk, a gráf alapján $A(g_1)$ tenzor a_4 -es indexű lábát $A(g_2)$ tenzor b_1 -es lábával kell összeejteni. Két tenzor egy-egy lábának azonos dimenziójúnak kell lennie, hogy össze tudjuk ejteni őket e lábuk szerint. $A(g_1)$ és $A(g_2)$ tenzort össze kell tudnom ejteni, ebből következik, hogy a_4 és b_1 dimenziója megegyezik, és ezt a dimenziót hívhatom a gráf élének a dimenziójának.



8. ábra. Gráfon elhelyezett tenzor lábai, és a gráf kapcsolata

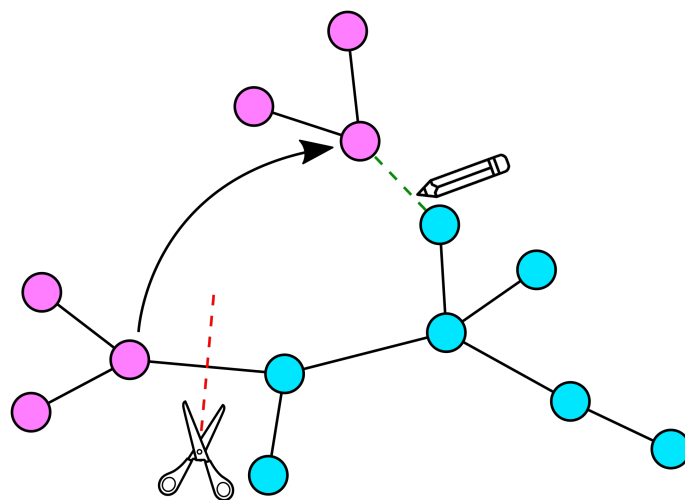
Egy adott csúcson lévő tenzor méretét megkaphatjuk a csúcshoz kötődő élek dimenzióiból és a fizikai lábainak számából. Hogy megadjuk a gráf *cost*-ját, ki kell számolnom a gráf éleinek dimenzióit. Egy adott él dimenziójának kiszámításához először a gráfot kettévágom az él mentén, és csoportosítom a spineket aszerint, hogy melyik diszjunkt részbe kerültek. Ezután e két csoport szerint Schmidt-dekompozíció segítségével felbontom az állapotvektort, és megkapom a szinguláris értékeket, amik a két alteret összekapcsolják. Egy adott pontosság (*tol*) esetén az él r dimenzióját úgy határoztam meg, hogy a kidobott Schmidt-súlyok négyzetösszege (az úgynevezett csonkolási hiba) kisebb legyen *tol*-nál. Miután minden élnek kiszámoltam a dimenzióját, kiszámoltam az összes tenzor méretét, és ezeket összeadva megkaptam az adott gráf tárolási költségét (*cost*-ját).

Fontos megjegyezni, hogy az optimalizáció során gyakran kellene ugyanarra a két spin-csoportra meghatároznunk a Schmidt-dekompozíciót. Ez elkerülhető, ha a lépések során korábban meghatározott bipartíciókhoz tartozó r bond-dimenzió értékeket eltároljuk, így nem kell a numerikusan drága szinguláris érték dekompozíciót feleslegesen sokszor végrehajtani.

4.5. Gráfvaltoztatás lépései

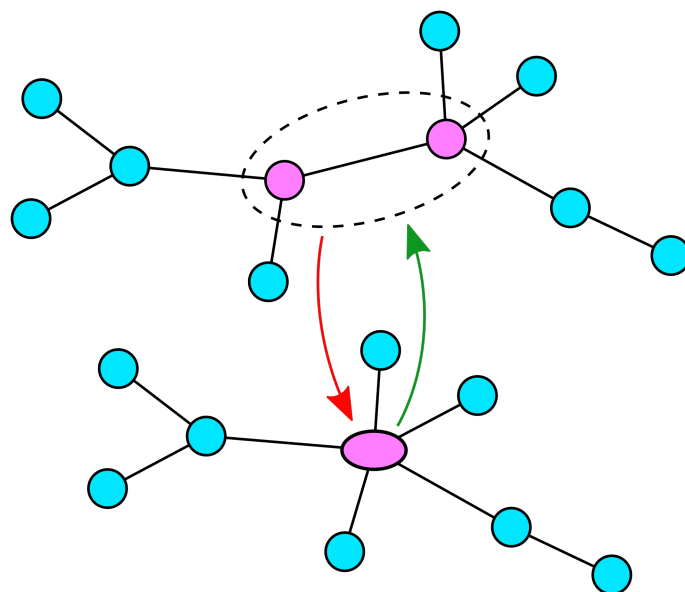
A szimulált hűtéshez szükség van arra, hogy a fagráfon kis változtatásokat tudjunk végrehajtani. Az általam megvalósított eljárásban öt különböző lépéstípust vezettem be, melyeket alább részletezek.

Az első és a második megengedett kis változtatás során a gráf egyik, véletlenszerűen választott, élét elvágjuk, majd pedig a szétesett gráf két része között behúzzunk egy új élet. Az első módszer szerint az új él egyik végpontja megegyezik a szétvágott él egyik végpontjával, ezt a 9-es ábra szemlélteti. A második módszer szerint a szétesett gráf két részében véletlenszerűen választunk egy-egy csúcsot, és ezeket összekötjük. Fontos megjegyezni, hogy az első típus tekinthető a második típus egy speciális esetének is.



9. ábra. Változtatás 1: gráf egy részének áthelyezése

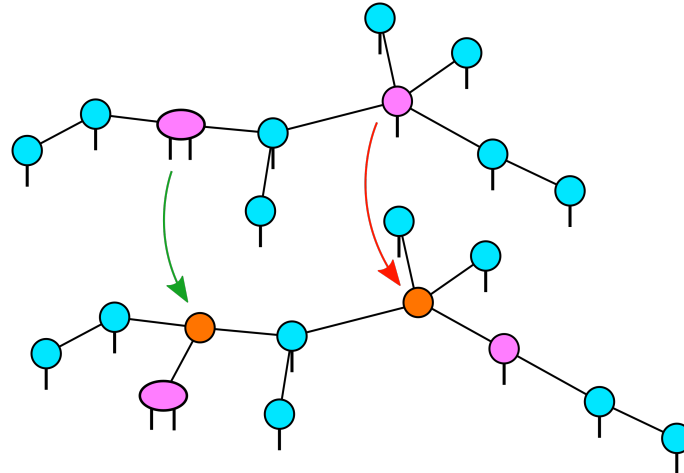
Mivel a leírás során megengedjük, hogy a fagraf rácspontjain egynél több spin is szerepelhessen, így a harmadik és negyedik típusú változás ilyen csúcsok összevonása és szétszedése. Amikor egy összevont csúcsot kettévágunk, a csúcsban található spineket véletlenszerűen két csoportba osztjuk, majd pedig a két csoportot tesszük egy-egy csúcsra. A két új csúcs egymással össze van kötve, és az eredeti összevont csúcs szomszédait véletlenszerűen az egyik, vagy a másik új csúcshoz kötjük.

10. ábra. Változtatás 3: gráf két csúcsának összevonása ($\rightarrow$).

Változtatás 4: gráf egy összevont csúcsának szétszedése ($\rightarrow$)

Az ötödik típusú változtatás, amikor létrehozunk egy csúcsot, amire nem teszünk spineket. Ennek a funkciója, hogy összeköti a rendszer különböző részeit. Nevezzük ezt a típusú csúcsot virtuális csúcsnak. Ez két esetben lehet nekünk hasznos. Az első eset, amikor egy csúcsnak kettőnél nagyobb a fokszáma. Ekkor ezt a csúcsot kicseréljük egy virtuális csúcsra, és a fizikai indexet betesszük az új csúcs, és az egyik szomszédja közé, ahogy a 11-es ábrán látható. A másik eset, amikor egy összevont

csúcsunk van, és ekkor e csúcs helyére teszünk egy virtuális csúcsot, az összevont csúcsot pedig az új csúccsal összekötjük. Amiatt lehet hasznos egy összevont csúcsot kiemelni, mivel lehet, hogy az ebben a csúcsban található spinek a többi spinnel csak gyengén vannak összefonódva, azaz ha kiemeljük őket 11-es ábra szerint, akkor a csúcsban lévő tenzor dimenziója lecsökkenhet. Az eddigi ábrákon a gráf csúcsain lévő tenzoroknak nem jelöltük a fizikai lábait amik a rajtuk lévő spinekhez kapcsolódnak, de ezen a 11. ábrán a jobb a jobb érthetőség miatt érdemes ezeket jelölni, hiszen megjelennek olyan csúcsok, amiknek nincsen spinjük, így nincs fizikai lábuk sem.



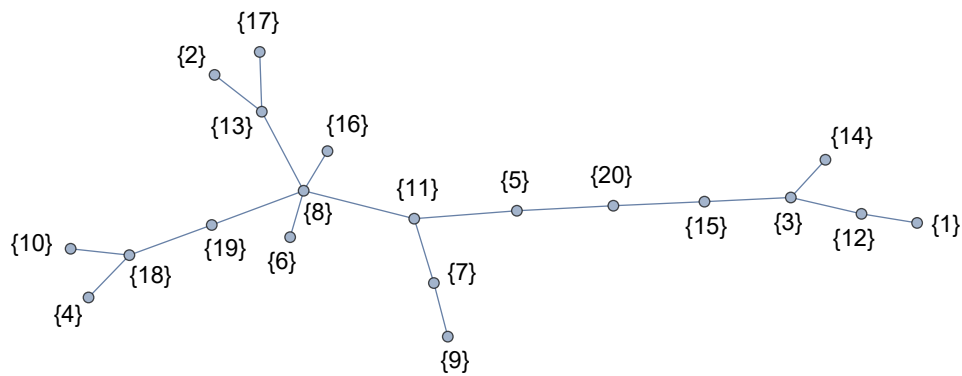
11. ábra. Változtatás 5: gráf magas fokszámú csúcsának helyettesítése virtuális csúccsal ($\rightarrow$).
gráf összevont csúcsának helyettesítése virtuális csúccsal ($\rightarrow$)

Miután a gráfot megváltoztattam leellenőrzöm, hogy a gráfban a változtatás után létrejött-e egy vagy két fokszámú virtuális csúcs, és ha igen, akkor ezeket kitörölöm, hiszen ezek feleslegesen növelik a gráf eltárolási költségét.

5. Eredmények

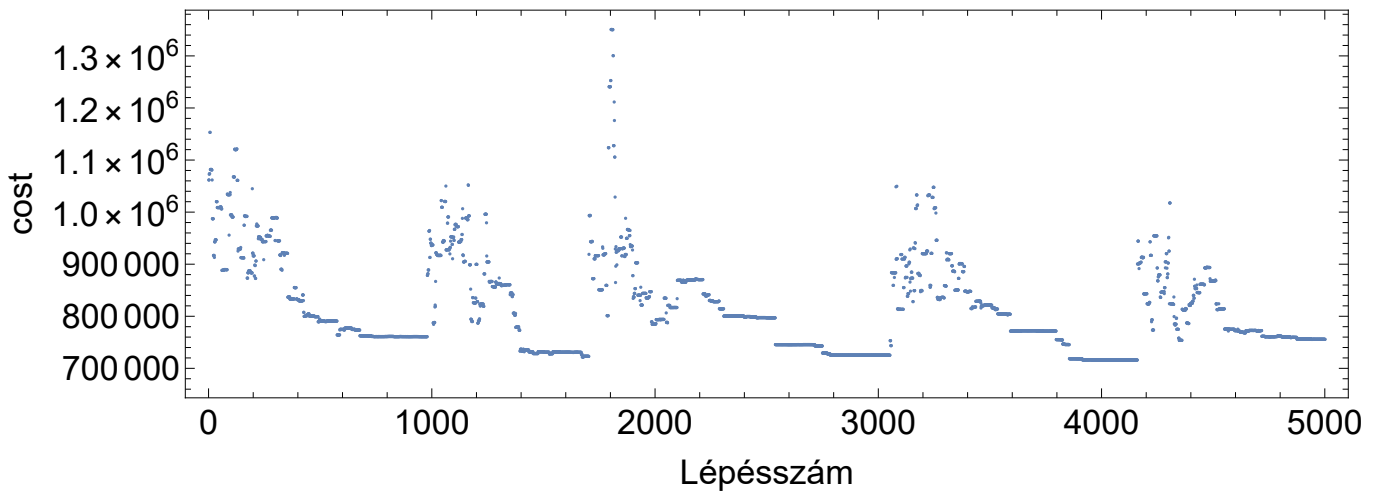
5.1. Szimulált hűtés

Az optimális tenzorhálózatok vizsgálatához először meg kell keresnem az optimális fagráfot TTNS, és az optimális spinsorrendet MPS esetén. Ezt a szimulált hűtés algoritmussal teszem meg. Egy random gráfból elindulva a program megpróbálja optimalizálni ezt, és visszaadja a futás során kapott legjobb gráfot. Példának vegyünk egy $h^T = 1,5$ transzverz mágneses tér értéknél lévő alapállapotú hullámfüggvényt. Az optimalizálásnál indulunk ki az alábbi véletlen fagráfból.



12. ábra. Kiinduló fagráf

Ennek a gráfnak az eltárolási költsége 1061704, azaz ennyi számot kell eltárolni az erre a gráfra épülő fa-tenzorhálózat állapotban. A program ezután ebből a gráfból kiindulva kis változtatásokkal keresi az optimális gráfot. Az alábbi grafikonon láthatjuk, hogy lépésenként milyen eltárolási költségű gráfokat talált.



13. ábra. Kiinduló fagráf

Az ábrán látszik, hogy körülbelül ezer lépésenként befagy egy lokális minimumba, és ezután újra felmelegítem a rendszert, hogy ebből ki tudjon jönni. Mivel eltárolom mindig a legjobb gráfot, emiatt nem baj, ha a felmelegítés után egy kevésbé optimális lokális minimumba fagy be. Ötezer lépésig hagyom futni az optimalizálást, majd pedig a program megadja nekem, hogy ez az 5000 lépés alatt melyik volt a legjobb gráf. Ebben az esetben az alábbi gráf.

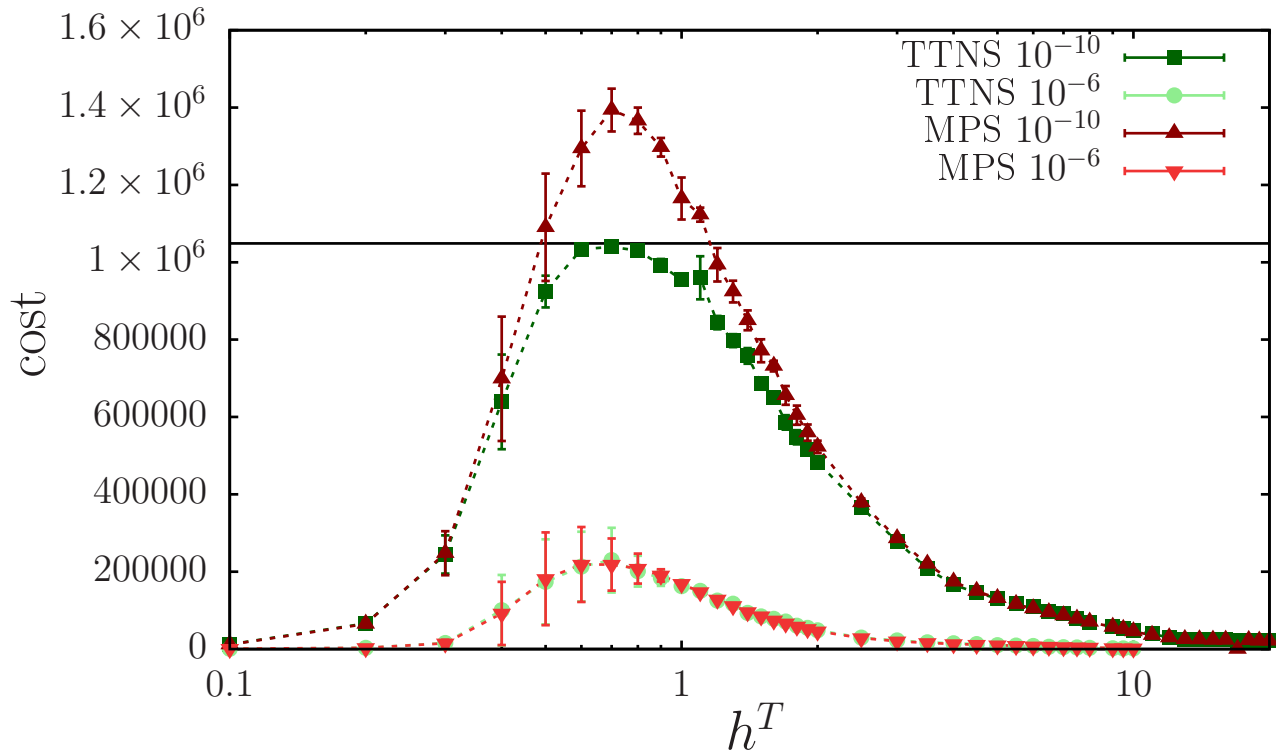


14. ábra. Legjobb fagráf

Ennek az eltárolási költsége 715872, azaz az eredeti 2^{20} értéknek csak a 70%-át kell eltárolni 10^{-10} -es pontosság megőrzése mellett.

5.2. Eltárolási költség

Az eltárolási költséget vizsgáltuk $h^T = 0-20$ transzverz mágneses tér értékekre, MPS és TTNS esetén 10^{-10} és 10^{-6} pontosság mellett. 10^{-10} pontosságnál 5 állapotot vizsgáltunk, míg 10^{-6} pontosságnál csak technikai okok miatt csak 2-t. A számolt eltárolási értékek az alábbi ábrán láthatóak.

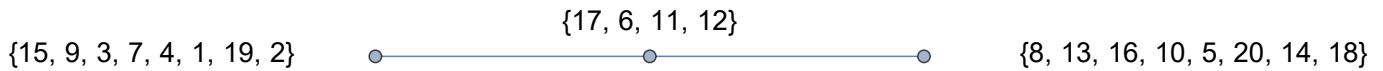


15. ábra. Eltárolási költségek különböző transzverz mágneses tér és megkövetelt pontosság esetén. A fekete vonal az egzakt hullámfüggvény eltárolási költsége.

Látszik, hogy kis és nagy mágneses térnél a szorzatállapot közelében kevés adattal el tudjuk tárolni a hullámfüggvényünket. Ezeken a helyeken éri meg igazán alkalmazni a tenzorszorzat-állapotokat, de azt is látjuk, hogy ekkor a mátrixszorzat-állapot, és a fa-tenzorhálózat állapot eltárolási költsége szinte megegyezik. Közepes mágneses térnél nagy pontosság megkövetelése esetén látjuk, hogy a fa-tenzorhálózat eltárolási mód jobb a mátrixszorzat állapotnál, és az egzakt hullámfüggvény eltárolásánál. Fontos, hogy itt sose emelkedik a költség az egzakt hullámfüggvény eltárolási értéke fölé, míg a mátrixszorzat állapot eltárolása rosszabb, mintha az egzakt hullámfüggvényt tárolnánk el. Kisebb pontosság mellett a tenzorszorzat állapot eltárolásával nagyot nyerünk, hiszen az egzakt hullámfüggvényhez képest csak 20%-nyi adatot kell eltárolni, de itt azt tapasztaljuk, hogy a mátrixszorzat-állapot és a fa-tenzorhálózat eltárolási költsége szinte egzaktul megegyezik.

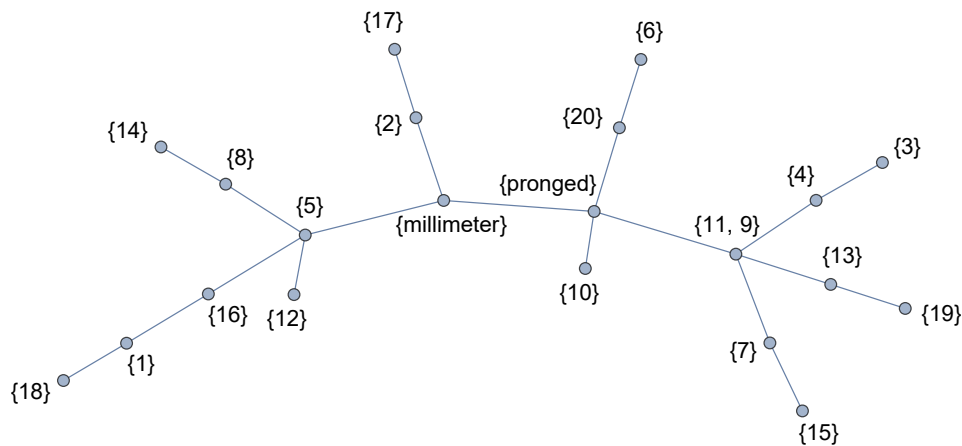
5.3. Optimális gráf

A program által talált optimális gráfokat megvizsgálva, azt látjuk, hogy kétféle gráfelrendezés az optimális. Az egyik, amikor a spineket három-négy csoportra vannak osztva, ezeken egy-egy magas rendű tenzor van felépítve, amiknek sok fizikai lábuk van, és ezek a tenzorok egy láncon vannak. Egy ilyen elrendezést mutat az alábbi ábra.



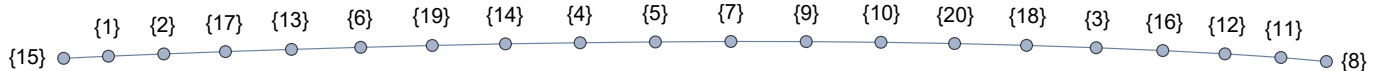
16. ábra. 1.4 transzverz mágneses tér esetén az első fajta gráf. Eltárolási költség: 780896

A másik fajta gráf, amikor kis méretű tenzorokból egy fagráf alakul ki, és középen virtuális csúcsok találhatóak, ahogy az alábbi ábrán látható.



17. ábra. 1.4 transzverz mágneses tér esetén a második fajta gráf. Eltárolási költség: 767524

A gráfban a virtuális csúcsokat egy-egy random szóval jelöljük, amiatt hogy tudjuk a csúcsot indexelni. Ezen mágneses tér értéknél az optimális spinsorrend az MPS-hez az alábbi ábrán látható.

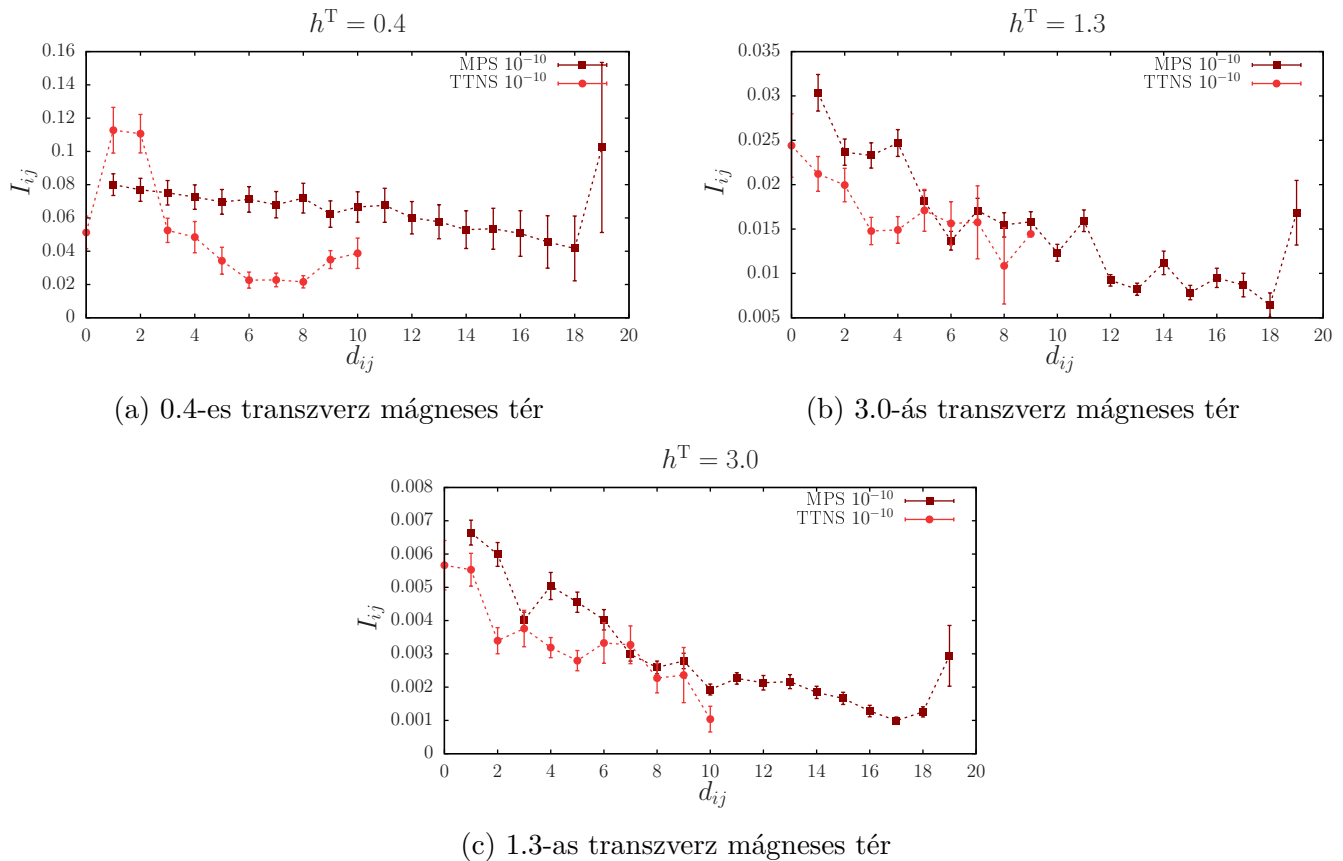


18. ábra. 1.4 transzverz mágneses tér esetén az optimális spinsorrend. Eltárolási költség: 885076

Érdekes megnézni, hogy a két TTNS gráf szignifikánsan különbözik, mágis az eltárolási költségük nagyon hasonló. Ez alapján gondolhatjuk, hogy egy-egy állapothoz több optimális gráf is tartozhat. Az MPS spinsorrendjével összevetve, annyit tudunk megállapítani, hogy amik a spinsorrenden a lánc két vége felé helyezkedtek el, azok vannak a másik két gráf szélén is.

5.4. Kölcsönös információ

Mivel a bond dimenzió annál kisebb, minél kevésbé van két részrendszer összefonódva, emiatt gondolhatjuk, hogy találhatunk az optimális gráfban korrelációt két spin összefonódottsága, és a gráfban való távolságuk között. Azt várnánk, hogy minél kisebb két spin között a kölcsönös információ, annál meszebb vannak egymástól a gráfban. Ennek a hipotézisnek az ellenőrzéséhez megvizsgáltuk a gráfokban az összes spinpárra a gráfban való távolságukat, és a kölcsönös információjukat. Különböző transzverz mágneses terek esetén az alábbi ábrákat kapjuk erre.



19. ábra. Kölcsönös információ és a gráfon való távolság közötti kapcsolat

Az ábrákról látszik, hogy a közös információ tényleg csökken a gráfon való távolsággal. Megfigyelhetjük, hogy minél nagyobb a mágneses tér, annál kisebb a spinek közötti közös információ, viszont annál jobban erőteljesebb ez a csökkenő tendencia.

6. Kitekintés

A munkánk során a Sherrington-Kirkpatrick modell egzakt diagonalizációval meghatározott alapállapot hullámfüggvényének tárolási hatékonyságát vizsgáltuk különféle tenzorhálózat-állapot reprezentációk esetén. Különféle lánc és fa-gráf elrendezésekre meghatároztuk – adott pontosság mellett – az egyes virtuális élekhez tartozó dimenziót és így a tenzorhálózat-állapot tárolásához szükséges memória nagyságát. Azt tapasztaltuk, hogy a kvantumfázisátalakulás környékén nagy pontosság megkövetelése mellett fa-tenzorhálózat állapotban valóban olcsóbb tárolni az állapotunkat, mint mátrixszorzat állapotban, és a mátrixszorzat-állapotokkal ellentétben az optimális tárolási költség sosem haladja meg az egzakt hullámfüggvény tárolási költségét. Kisebb pontosság megkövetelése mellett azonban, vagy a fázisátalakulástól messze a két leírás költsége körülbelül megegyezik. Ennek az egyezésnek az oka adódhat a kis rendszerméretből, melyet azonban az egzakt diagonalizáció számításigénye miatt nem tudunk lényegesen megnövelni.

Ahhoz, hogy nagyobb rendszereken hatékonyan alkalmazzuk a fa-tenzorhálózat állapotokat, meg kéne sejtenuünk az optimális gráfot, vagy legalább egy ahhoz közelit, amire a tenzorhálózatot felépítjük. Az optimális gráf megsejtésére perturbációszámítást, vagy egy kis pontosságú DMRG számítást lehetne használni egy ilyen megközelítésben. Az alapállapotot ezután már nem egzakt módon, hanem a DMRG algoritmus fa-tenzorhálózatra általánosított verziójával határozhatnánk meg [6]. A kezdeti gráf-topológiát az így nyert TTNS állapot ismeretében adaptív módon lehetne módosítani, bár a lehetséges optimalizációs lépések köre valószínűleg szűkebb a kis rendszereken megvalósítható manipulációkhoz képest, hiszen egy tenzorhálózat-állapoton általában csak lokális manipulációkat lehet hatékonyan végrehajtani.

7. Köszönetnyilvánítás

Elsősorban szeretnék köszönetet nyilvánítani Werner Miklós Antal témavezetőmnek, a segítségéért, amit a teljes felkészülés és a dolgozatírás alatt nyújtott.

Ezen felül szeretném megköszönni Takács Gábor Professzor Úrnak, hogy a számításaimhoz rendelkezésemre bocsátotta kutatócsoportja számítógép-clusterét.

Ezt a munkát az Innovációs és Technológiai Minisztérium és a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatta a Kvantuminformatika Nemzeti Laboratórium programon keresztül.

Hivatkozások

- [1] Andreas M. Läuchli, Julien Sudan, and Roderich Moessner. S=12 kagome Heisenberg antiferromagnet revisited. *Physical Review B*, 100(15), Oct 2019. ISSN 2469-9969. doi: 10.1103/physrevb.100.155142. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.100.155142>.

- [2] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, 47:777–780, May 1935. doi: 10.1103/PhysRev.47.777. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.47.777>.
- [3] J. S. Bell. On the Einstein Podolsky Rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, 1:195–200, Nov 1964. doi: 10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195>.
- [4] Román Orús. A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states. *Annals of Physics*, 349:117–158, Oct 2014. ISSN 0003-4916. doi: 10.1016/j.aop.2014.06.013. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.aop.2014.06.013>.
- [5] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326(1):96–192, Jan 2011. ISSN 0003-4916. doi: 10.1016/j.aop.2010.09.012. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.aop.2010.09.012>.
- [6] Klaas Gunst, Frank Verstraete, Sebastian Wouters, Örs Legeza, and Dimitri Van Neck. T3NS: Three-Legged Tree Tensor Network States. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 14(4): 2026–2033, 2018. doi: 10.1021/acs.jctc.8b00098. URL <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00098>. PMID: 29481743.
- [7] A. P. Young. Stability of the quantum Sherrington-Kirkpatrick spin glass model. *Phys. Rev. E*, 96:032112, Sep 2017. doi: 10.1103/PhysRevE.96.032112. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.96.032112>.
- [8] Lieven De Lathauwer, Bart De Moor, and Joos Vandewalle. A multilinear singular value decomposition. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 21(4):1253–1278, 2000. doi: 10.1137/S0895479896305696. URL <https://doi.org/10.1137/S0895479896305696>.
- [9] Yadin Y. Goldschmidt. Solvable model of the quantum spin glass in a transverse field. *Phys. Rev. B*, 41:4858–4861, Mar 1990. doi: 10.1103/PhysRevB.41.4858. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.4858>.
- [10] N. Read, Subir Sachdev, and J. Ye. Landau theory of quantum spin glasses of rotors and Ising spins. *Phys. Rev. B*, 52:384–410, Jul 1995. doi: 10.1103/PhysRevB.52.384. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.384>.
- [11] G. P. Jelliss. Concrete mathematics, a foundation for computer science, by Ronald L. Graham, Donald E. Knuth and Oren Patashnik. pp 625. £24 · 95. 1989. isbn 0-201-14236-8 (Addison-Wesley). *The Mathematical Gazette*, 75(471):117–119, 1991. doi: 10.2307/3619021.