

O Método DMRG

M. H. L. de Medeiros

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

TQMC 2º semestre de 2015



Sumário

- 1 Introdução
- 2 Ideia Básica
- 3 Exemplo



Sumário

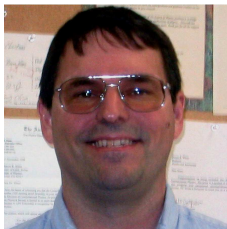
1 Introdução

2 Ideia Básica

3 Exemplo



O que significa DMRG?



DMRG é a sigla para *Density Matrix Renormalization Group*. Idealizado por **Steve R. White** [1] num trabalho que desde sua publicação, em 1992, até o momento somam mais de 2500 (duas mil e quinhentas) citações.



Visão Geral

- Trata-se de um método variacional, mas...



Visão Geral

- Trata-se de um método variacional, mas...
- ... se baseia fortemente no processo de diagonalização exata do Hamiltoniano e...



Visão Geral

- Trata-se de um método variacional, mas...
- ... se baseia fortemente no processo de diagonalização exata do Hamiltoniano e...
- ... também nas ideias de grupo de renormalização numérico (NRG), trabalho devido a K. G. Wilson [2].



Sumário

- 1 Introdução
- 2 Ideia Básica**
- 3 Exemplo



Resumo da Estratégia

Para se superar a limitação do tamanho do sistema a estratégia é usar uma base na qual o estado fundamental pode ser representado por alguns poucos estados da base.



Resumo da Estratégia

Para se superar a limitação do tamanho do sistema a estratégia é usar uma base na qual o estado fundamental pode ser representado por alguns poucos estados da base.

Assim como o método de **Lanczos** truncado, o método **DMRG** visa exatamente esse objetivo, com a diferença que no método DMRG não é mantida uma base específica mas a cada passo a base é otimizada para o cálculo do estado fundamental.



Grupo de Renormalização Numérico (NRG)



As raízes do método DMRG se encontram no trabalho pioneiro sobre Grupo de Renormalização Numérico de K. G. Wilson [2]:



Grupo de Renormalização Numérico (NRG)



As raízes do método DMRG se encontram no trabalho pioneiro sobre Grupo de Renormalização Numérico de K. G. Wilson [2]:

- A ideia básica é começar com um sistema reduzido, que pode ser resolvido de maneira exata.



Grupo de Renormalização Numérico (NRG)



As raízes do método DMRG se encontram no trabalho pioneiro sobre Grupo de Renormalização Numérico de K. G. Wilson [2]:

- A ideia básica é começar com um sistema reduzido, que pode ser resolvido de maneira exata.
- O sistema então é aumentado, conseqüentemente o espaço de Hilbert é aumentado também.



Grupo de Renormalização Numérico (NRG)

- O espaço de Hilbert, então, é truncado num tamanho limite, mantendo o tamanho do espaço de Hilbert inalterado.



Grupo de Renormalização Numérico (NRG)

- O espaço de Hilbert, então, é truncado num tamanho limite, mantendo o tamanho do espaço de Hilbert inalterado.
- Esse processo segue até que o tamanho desejado do sistema seja atingido.



Grupo de Renormalização Numérico (NRG)

- O espaço de Hilbert, então, é truncado num tamanho limite, mantendo o tamanho do espaço de Hilbert inalterado.
- Esse processo segue até que o tamanho desejado do sistema seja atingido.

Para definir tal processo de *renormalização* precisamos responder duas questões:



Grupo de Renormalização Numérico (NRG)

- O espaço de Hilbert, então, é truncado num tamanho limite, mantendo o tamanho do espaço de Hilbert inalterado.
- Esse processo segue até que o tamanho desejado do sistema seja atingido.

Para definir tal processo de *renormalização* precisamos responder duas questões:

- 1 Como é feito o "aumento" do sistema?
- 2 Qual critério utilizar para diferenciar os estados que serão mantidos daqueles que serão descartados?



Diagonalização Truncada

A ideia é, portanto, diagonalizar o Hamiltoniano num espaço de Hilbert cuja dimensão deve se limitar a um valor máximo estipulado. Vamos ver como isso ocorre num exemplo prático: uma cadeia de spins descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg:

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) \quad (1)$$



O caso de dois Spins

O espaço de Hilbert para o problema de dois spins consiste de quatro configurações de dois spins

$$\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\} \quad (2)$$



O caso de dois Spins

O espaço de Hilbert para o problema de dois spins consiste de quatro configurações de dois spins

$$\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\} \quad (2)$$

O problema é descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{S}_1^z \hat{S}_2^z + \frac{1}{2}[\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^+] \quad (3)$$



Representação Matricial

A matriz correspondente terá dimensão 4×4 . Para construir tal matriz usaremos a seguinte álgebra:

- Seja o operador O_1 que atue no sítio (no caso, spin) à esquerda, teremos a forma matricial

$$\tilde{O}_1 = O_1 \otimes \mathbb{1}_2$$

- No caso em que O_R atue no sítio à direita, teremos a forma matricial

$$\tilde{O}_2 = \mathbb{1}_2 \otimes O_2$$

- O produto de dois operadores que atuam em diferentes então será representado por

$$\tilde{O}_{12} = O_1 \otimes O_2$$



Representação Matricial

Dessa forma a matriz Hamiltoniana será dada por

$$H_{12} = S^z \otimes S^z + \frac{1}{2}[S^+ \otimes S^- + S^- \otimes S^+]. \quad (4)$$

Lembrando que

$$S^z = \frac{\sigma^z}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

e

$$S^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y) = \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \pm i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right].$$



Representação Matricial

Dadas as definições dos operadores, temos que a forma final da matriz Hamiltoniana fica

$$H_{12} = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}.$$



- O estado fundamental:

$$|s\rangle = 1/\sqrt{2}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle],$$

com energia $E_s = -3/4$.

- Os outros três autoestados

$$\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, 1/\sqrt{2}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]\}$$

formam um multiplete com energia $E_t = 1/4$.



Muitos Spins

Imagine que agora acrescenta-se um terceiro spin à direita dos dois existentes. Pode-se obter a nova matrix Hamiltoniana de dimensão 8×8 como:

$$H_3 = H_2 \otimes \mathbb{1}_2 + \tilde{S}_2^z \otimes S^z + \frac{1}{2}[\tilde{S}_2^+ \otimes S^- + \tilde{S}_2^- \otimes S^+]$$

Onde as matrizes com "til" são definidas por

$$\begin{aligned}\tilde{S}_2^z &= \mathbb{1}_2 \otimes S^z \\ \tilde{S}_2^\pm &= \mathbb{1}_2 \otimes S^\pm\end{aligned}$$



Muitos Spins

É fácil extrapolar tal construção para obter um método iterativo para a construção da matriz Hamiltoniana de dimensão $2^i \times 2^i$, onde o i -ésimo passo temos a Hamiltoniana dada por

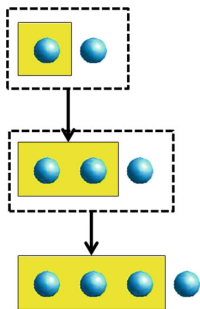
$$H_i = H_{i-1} \otimes \mathbb{1}_2 + \tilde{S}_{i-1}^z \otimes S^z + \frac{1}{2}[\tilde{S}_{i-1}^+ \otimes S^- + \tilde{S}_{i-1}^- \otimes S^+]$$

Onde as matrizes com "til", agora, são definidas por

$$\begin{aligned}\tilde{S}_{i-1}^z &= \mathbb{1}_{2^{i-2}} \otimes S^z \\ \tilde{S}_{i-1}^\pm &= \mathbb{1}_{2^{i-2}} \otimes S^\pm\end{aligned}$$



Muitos Spins



O processo descrito pode ser visto como a adição gradativa de 'sítios' (ou spins) a direita de um bloco de sítios. Nesse processo a Hamiltoniana do sistema aumentado é a soma da Hamiltoniana do bloco com o termo de interação entre o sítio mais à direita (pertencente ao bloco) com o novo sítio.

$$H_i = H_{i-1} \otimes \mathbb{1}_2 + \tilde{S}_{i-1}^z \otimes S^z + \frac{1}{2} [\tilde{S}_{i-1}^+ \otimes S^- + \tilde{S}_{i-1}^- \otimes S^+]$$



Base Truncada

Suponha que tenhamos diagonalizado a Hamiltoniana e encontrado o estado fundamental, dado por:

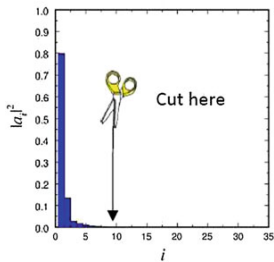
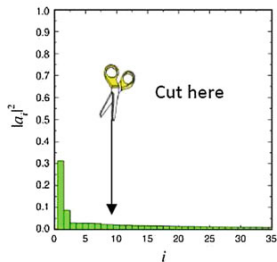
$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} a_{s_1, s_2, \dots, s_N} |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle \quad (5)$$



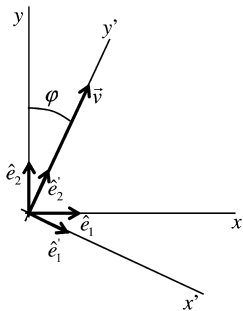
Base Truncada

Suponha que tenhamos diagonalizado a Hamiltoniana e encontrado o estado fundamental, dado por:

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} a_{s_1, s_2, \dots, s_N} |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle \quad (5)$$



Base truncada, analogia geométrica



$$\mathbf{v} = x\hat{e}_1 + y\hat{e}_2 \quad (6)$$

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\mathcal{U}' = \begin{pmatrix} \sin \phi \\ \cos \phi \end{pmatrix} \quad (8)$$



A Matriz Densidade

Usaremos agora um novo esquema, que é o paradigma central do método DMRG. Nesse esquema precisamos de dois blocos, um à esquerda e outro à direita. Ambos os blocos serão aumentados como visto anteriormente:



A Matriz Densidade

Usaremos agora um novo esquema, que é o paradigma central do método DMRG. Nesse esquema precisamos de dois blocos, um à esquerda e outro à direita. Ambos os blocos serão aumentados como visto anteriormente:

- Adiciona-se um sítio à direita no bloco da esquerda;



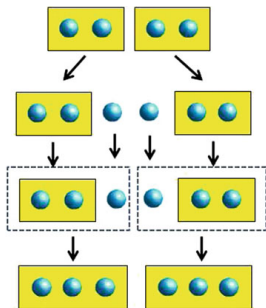
A Matriz Densidade

Usaremos agora um novo esquema, que é o paradigma central do método DMRG. Nesse esquema precisamos de dois blocos, um à esquerda e outro à direita. Ambos os blocos serão aumentados como visto anteriormente:

- Adiciona-se um sítio à direita no bloco da esquerda;
- Adiciona-se um sítio à esquerda no bloco da direita.



A Matriz Densidade



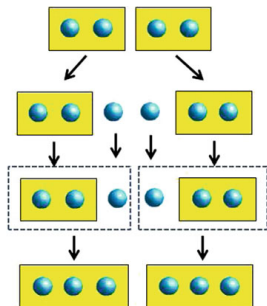
O estado fundamental agora será escrito na forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad (9)$$

onde a soma percorre todos os estados do bloco à direita $|i\rangle$ e todos os estados do bloco à esquerda $|j\rangle$, com os devidos coeficientes Ψ_{ij} .



A Matriz Densidade



Uma vez alcançado a dimensão m desejada para a base, devemos *rotacionar* o bloco à esquerda para uma nova base $|i\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$.

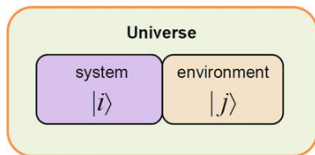
$$S = \|\Psi\rangle - |\tilde{\Psi}\rangle\|^2 \quad (10)$$

onde

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \sum_{\alpha=1}^m \sum_j \Psi_{\alpha j} |\alpha\rangle |j\rangle. \quad (11)$$



A Matriz Densidade



Definimos a matriz densidade do subsistema A como

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle \langle \Psi|.$$

Na forma matricial teremos,

$$\begin{aligned} \rho_{Aii'} &= \langle i | \hat{\rho}_A | i' \rangle \\ &= \sum_j \langle ij | \Psi \rangle \langle \Psi | i' j \rangle \\ &= \sum_j \Psi_{ij} \Psi_{i'j}^*. \end{aligned}$$



A Matriz Densidade

Denotando por $|\alpha\rangle$ os autoestados de $\hat{\rho}$ e por ω_α os autovalores correspondentes temos que

$$\sum_{\alpha} \omega_{\alpha} = 1,$$

e que ω_α é a probabilidade do sistema estar no estado $|\alpha\rangle$ dado que o universo esta no estado fundamental $|\Psi\rangle$.



O critério para escolher os estados que serão descartados será, agora, o valor do "peso estatístico" ω_α . O que se faz é ordenar os estados $|\alpha\rangle$ em ordem decrescente dos autovalores e usa-se os m primeiros estados para formar a nova base com a qual descreveremos o novo bloco acrescido de 1 (um) sítio.

Em símbolos:

$$H_{i+1} = \mathcal{U}H_e\mathcal{U}^\dagger,$$

onde \mathcal{U} é a matriz de mudança de base, ou seja, cujas linhas são formadas pelos autoestados de ρ , isto é por $|\alpha\rangle$.



Sumário

- 1 Introdução
- 2 Ideia Básica
- 3 Exemplo**



Exemplo da Cadeia de Spins

Tomemos como exemplo o caso em que nosso bloco inicial é simplesmente um sítio ao qual é acrescentado um sítio à direita. Lembremos que a matriz Hamiltoniana que descreve esse "bloco aumentado" é dada por:

$$H_e = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}.$$

Precisamos também dos operadores S^+ , S^- e S_z representados na base do "bloco aumentado". Isso é obtido fazendo-se

$$(S_r^+)_e = \mathbb{1}_b \otimes S_d^+ \tag{12}$$



Exemplo da Cadeia de Spins

Sendo a base para cada um dos blocos aumentados dada por

$$|b_1^e\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$|b_2^e\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$$

$$|b_3^e\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle$$

$$|b_4^e\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

A base para o "superbloco" será

$$\begin{pmatrix} |b_1^e\rangle \\ |b_2^e\rangle \\ |b_3^e\rangle \\ |b_4^e\rangle \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} |b_1'^e\rangle \\ |b_2'^e\rangle \\ |b_3'^e\rangle \\ |b_4'^e\rangle \end{pmatrix}.$$



$$\begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix} .$$



Exemplo da Cadeia de Spins

Sabendo-se que o estado fundamental estará no subespaço em que $S^z = 0$:

$$|b_1^{s(0)}\rangle \equiv |b_4^s\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$$

$$|b_2^{s(0)}\rangle \equiv |b_6^s\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$$

$$|b_3^{s(0)}\rangle \equiv |b_7^s\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$$

$$|b_4^{s(0)}\rangle \equiv |b_{10}^s\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$$

$$|b_5^{s(0)}\rangle \equiv |b_{11}^s\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$$

$$|b_6^{s(0)}\rangle \equiv |b_{13}^s\rangle = |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$$



Exemplo da Cadeia de Spins

Matriz Hamiltoniana do "superbloco" na base do subespaço $S^z = 0$:

$$H_s^{(0)} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -3 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -3 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (13)$$



Exemplo da Cadeia de Spins

$$E_0 = \frac{1}{4}(3 + 2\sqrt{3}) \quad (14)$$

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}(2 + \sqrt{3})} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 + \sqrt{3} \\ -2 - \sqrt{3} \\ -2 - \sqrt{3} \\ 1 + \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (15)$$

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |b_i^e\rangle \otimes |b_j^e\rangle \quad (16)$$



Exemplo da Cadeia de Spins

$$\rho = \frac{1}{12(2 + \sqrt{3})} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 11 + 6\sqrt{3} & -2(5 + 3\sqrt{3}) & 0 \\ 0 & -2(5 + 3\sqrt{3}) & 11 + 6\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Os autovalores dessa matriz são:

$$E_t = \frac{1}{12(2 + \sqrt{3})} \approx 0.02 \quad (18)$$

$$E_s = \frac{21 + 12\sqrt{3}}{12(2 + \sqrt{3})} \approx 0.94 \quad (19)$$



Exemplo da Cadeia de Spins

A matriz de mudança de base, truncada com $m = 2$ e ordenada:

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

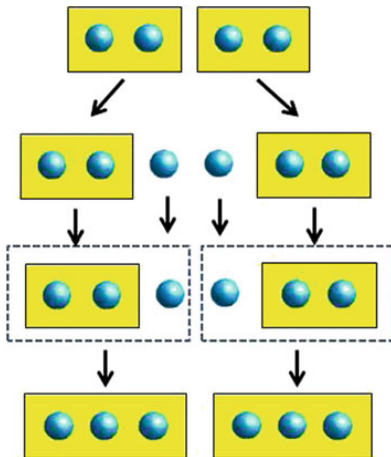
A matriz Hamiltoniana na base truncada fica

$$H_{B(2,2)} = \mathcal{U}H_e\mathcal{U}^\dagger = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

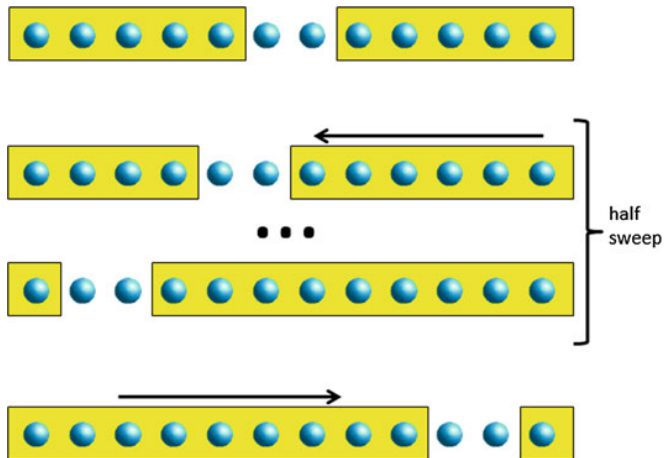
O mesmo deve ser feito com os operadores necessários para os cálculos posteriores.







DMRG de Tamanho Infinito



DMRG de Tamanho Finito



Referências

-  S. R. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).
-  K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975).
-  A. L. Malvezzi, Braz. J. Phys. vol. 33, n.1 (2003)
-  A. E. Feiguin, in *Strongly Correlated Systems* - Springer Series in Solid-State Sciences (Edited by A. Avella and F. Mancini), 176 (2013).

