

<p style="text-align: center;"><b>6. Übungssektion: – Computerorientierte Theoretische Physik Tensornetzwerke</b></p>
---

**Erster Übungstermin dieser Sektion: ab 23.01.2020. Die Nachbereitungsaufgaben sind in der Übung, die diese Sektion abschließt, abzugeben/zu besprechen.**

**Vorbereitungsaufgabe 1 :** *Studium und Installation der itensor-Bibliothek*

1. Zum Abschluss beschäftigen wir uns mit Tensornetzwerken. Es gibt verschiedenen geeignete Bibliotheken, zur Zeit erscheint die itensor-Bibliothek ([www.itensor.org](http://www.itensor.org)) die beste Wahl zu sein.
2. Installieren Sie sich diese Bibliothek in ihrem PC-Poolaccount. Diese gibt es leider nicht vorkompliziert, Sie müssen diese daher erst einmal selbst kompilieren und installieren. (siehe itensor Webseite). Achtung, es gibt seit kurzem die itensor Version 3, diese setzt relativ modernes C++ voraus, dass nicht auf allen Distributionen verfügbar ist. Es ist vermutlich im Moment klüger die itensor Version 2 zu verwenden.
3. Versuchen Sie auch das Makefile für ein erstes itensor-Testprogramm vorzubereiten.
4. Machen Sie sich mit dem Interface der Bibliothek und einigen Beispielen vertraut. Das Interface ist sehr modern und etwas schwierig am Anfang zu verstehen.

**Aufgabe 2 :** *MPS: Zerlegung*

1. Suchen Sie sich ein Beispiel für einen hochdimensionalen Tensor und programmieren Sie eine Zerlegung in einen MPS.

**Aufgabe 3 :** *MPS und MPO: erstes Kennenlernen*

1. Suchen Sie sich ein einfaches physikalisches System, dass durch MPS beschrieben werden kann: z.B. Spinketten (gekoppelte zwei Niveausysteme), QuBits, in einer Reihe angeordnete Moleküle etc..
2. Überlegen Sie sich auch typische Kopplungen/Hamiltonians für das System.
3. Konstruieren Sie dann MPS für Beispiel Wellenfunktionen (auch mit Verschränkung) und MPO für den Hamiltonoperator und andere Observablen.
4. Berechnen Sie Normen und Erwartungswerte und machen Sie sich mit MPS und MPO Rechenoperationen in itensor vertraut.

**Aufgabe 4 :** *DMRG und Approximation von MPS und MPO*

1. Verwenden Sie den DMRG Algorithmus um den Grundzustand des Systems zu berechnen. Für kleine Systeme vergleichen Sie ihr Ergebnis auch mit Eigenwertberechnung für Matrizen (z.B. Petsc).

2. Addieren Sie verschiedene Hamiltoniananteile, schauen Sie sich dabei den Linkindex an und verwenden Sie auch Kompressionsalgorithmen, und berechnen Sie mögliche Fehler.

**Vorstellungsaufgabe 5 : *Präsentation eines interessanten Ergebnisses***

1. Am 11.02.20 und 13.02.20 zur Zeit der Vorlesung soll jede Gruppe, ein Ergebnis der Übungen dieses Kurses vorstellen (Scheinkriterium). Die Termineinstellung erfolgt in der Übung.
2. Jedes Gruppenmitglied muss dabei einen Teil der Ergebnisse vorstellen. Die Form der Präsentation muss ordentlich und zielgerichtet sein, aber ausgefeilte Powerpoint- oder Latexfolien sind nicht notwendig. Sie können z.B. auch mit Kreide oder Ekreide ihre Ergebnisse vorstellen und nur die numerischen Ergebnisse und Quellcodes am Rechner präsentieren.
3. Die Präsentation soll zwischen 15-20 Minuten lang sein. Üben Sie vorher, insbesondere für spätere Konferenzen ist es wichtig auf keinen Fall zu überziehen.