



兰州大学

本科生毕业论文

论文题目 (中文) _____ 矩阵乘积态与含时变分原理

论文题目 (英文) _____ Matrix Product State and
_____ Time-dependent Variational Principles

学生姓名 _____ 吴继宏

指导教师 _____ 陆汉涛

学 院 _____ 物理科学与技术学院

专 业 _____ 理论物理

年 级 _____ 2018 级

兰州大学教务处

诚信责任书

本人郑重声明：本人所呈交的毕业论文（设计），是在导师的指导下独立进行研究所取得的成果。毕业论文（设计）中凡引用他人已经发表或未发表的成果、数据、观点等，均已明确注明出处。除文中已经注明引用的内容外，不包含任何其他个人或集体已经发表或在网上发表的论文。

本声明的法律责任由本人承担。

论文作者签名：_____ 日 期：_____

关于毕业论文（设计）使用授权的声明

本人在导师指导下所完成的论文及相关的职务作品，知识产权归属兰州大学。本人完全了解兰州大学有关保存、使用毕业论文（设计）的规定，同意学校保存或向国家有关部门或机构送交论文的纸质版和电子版，允许论文被查阅和借阅；本人授权兰州大学可以将本毕业论文（设计）的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用任何复制手段保存和汇编本毕业论文（设计）。本人离校后发表、使用毕业论文（设计）或与该毕业论文（设计）直接相关的学术论文或成果时，第一署名单位仍然为兰州大学。

本毕业论文（设计）研究内容：

☒ 可以公开

☐ 不宜公开，已在学位办公室办理保密申请，解密后适用本授权书。

（请在以上选项内选择其中一项打“√”）

论文作者签名：_____

导师签名：_____ 

日 期：_____

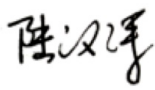
日 期：_____

毕业论文（设计）成绩表

导师评语

吴继宏同学在毕业设计中对一些典型的张量网络算法及其含时应用进行了讨论，包括矩阵乘积态（MPS）、密度矩阵重整化群（DMRG）、时间演化块消减算法（TEBD）及含时变分原理（TDVP）等。文章随后利用 DMRG-TEBD 及 DMRG+TDVP 方法对一维横场 Ising 模型和 XXZ 模型的淬火过程进行了研究，并与一些解析上的严格结果作了比较。文中数值计算所用的代码均由吴继宏同学独立完成。全文格式规范，论述清晰，显示了作者对涉及内容的理解和把握。尽管页数不多，但内容很丰富，是一篇优秀的本科毕业论文。

建议成绩 优

指导教师（签字） 

答辩小组意见

答辩委员会负责人（签字）

成绩

学院（盖章）

年 月 日

矩阵乘积态与含时变分原理

中文摘要

量子多体系统是凝聚态物理领域研究的核心问题，然而无论是解析求解还是数值模拟，这些系统都很难研究，原因是多体系统的希尔伯特空间维度随系统粒子数的增加而指数增加。最近二十年随着张量网络算法的研究，人们得以对于量子系统中最重要性质——关联和纠缠深入理解。本文首先简单讲解了张量的基础知识以及基于 SVD 分解描述一维量子系统的矩阵乘积态，然后详细地介绍了目前主要的几种基于矩阵乘积态研究的张量网络算法，最后利用这些算法对一些可解的量子系统（一维横场伊辛模型和一维 XXZ 模型）进行模拟，求解其基态相关性质以及淬火之后的动力学行为，并与解析结果比较。对于这些简单系统的研究，可以帮助我们更好地理解量子多体系统的性质，包括纠缠和热化等。

关键词：张量网络算法，矩阵乘积态，含时变分原理，一维横场伊辛模型，关联函数

MATRIX PRODUCT STATE AND TIME-DEPENDENT VARIATIONAL PRINCIPLES

Abstract

Understanding Quantum many body systems is a key problem in condensed matter theory. However, it is very hard to analyze in theoretical derivation and numerical simulation. The main reason is that the dimensions of Hilbert space are exponential to the number of particles. With the development of tensor network algorithms, researchers could get deeper understanding of correlation and entanglement, which are the most important features of quantum systems. In the organization of this paper, it first gives a simple introduction of tensor and matrix product state, then discusses several tensor network algorithms based on the MPS. At last, I use these algorithms to simulate TFIM and XXZ model, analyzing properties of ground states and quench dynamics. Research on these simple quantum systems, we can better understand features of quantum many body systems, including entanglement and thermalization.

Key Words: Tensor network algorithm; Matrix product state; Time dependent variational principle; TFIM; correlation function

目 录

中文摘要	I
英文摘要	II
第一章 引 言	1
第二章 矩阵乘积态	2
2.1 张量基础知识	2
2.2 矩阵乘积态表示	3
2.2.1 SVD 分解和 Schmidt 分解	3
2.2.2 将任意量子态分解成 MPS	4
2.3 纠缠熵	5
2.4 混合正交形式	6
第三章 张量网络算法	8
3.1 矩阵乘积算符	8
3.2 密度矩阵重整化群算法	8
3.3 时间演化块消减算法——TEBD	10
3.4 含时变分原理	12
第四章 量子淬火 (Quantum quench) 动力学研究	15
4.1 一维横场伊辛模型	15
4.1.1 基态能量及磁化	15
4.1.2 淬火后时间演化	20
4.2 一维 XXZ 自旋关联函数	23
第五章 总结与展望	26
参考文献	27
致 谢	28

第一章 引言

量子多体系统中的涨落和关联作用可以引出许多有趣的现象，著名的例子比如量子分数霍尔效应，自旋液体和高温超导等。理解这些多体系统中的涌现性质是一个非常重要且极具挑战的问题。最主要的问题是多体系统的希尔伯特空间随微观状态数呈指数增长，也就是所谓的“指数墙”问题：描述 n 体量子系统的参数是随着 n 呈指数增长，超出了如今计算机的计算性能。当然也有一些方法研究一些特定的量子多体问题，例如一些完全可解的量子系统以及量子蒙特卡罗模拟，但是量子蒙特卡罗模拟在一些系统会出现符号问题而失效。因此以张量乘积态为基础的算法在量子多体系统的模拟上显示出了极强的有效性。

1992 年 White 提出了密度矩阵重整化群算法 (Density Matrix Renormalization Group, DMRG)，成为了研究一维量子格点系统强大的数值方法。另一方面，矩阵乘积态 (Matrix Product State) 作为量子态的描述用于一维 AKLT 态的研究。随后 DMRG 和 MPS 相融合，建立了一套新的 DMRG 算法机制，通过变分优化 MPS 的方法，得到系统的基态。随后相关的算法不断涌现，迅速成为研究量子多体模型最强大的数值方法之一。DMRG 的成功之处还在于它可以用来模拟实时演化去研究系统的输运和非平衡性质，但是系统波函数的两体纠缠熵会随着时间的迅速增加，将导致巨大的计算成本。

利用这些数值方法，我们可以研究多体系统的非平衡问题。通常当我们研究一个系统的性质时，我们忽略了其微观细节简化对于复杂系统的分析，建立起重要并普遍的原理。目前普遍认为量子多体系统可以用随机矩阵理论 (Random Matrix Theory) 来描述——系统会演化到熵最大的热力学平衡态。但随着量子模拟的不断发展，研究者发现了一些不符合该理论描述的系统包括量子多体局域 (Many Body Localization) 以及量子多体疤痕 (Many Body Scar) [1]。因此张量网络相关的数值算法，能为我们对于这些系统的研究提供有效的支持和帮助。

第二章 矩阵乘积态

2.1 张量基础知识

在介绍矩阵乘积态之前，先简单介绍一下张量。常见的向量和矩阵分别对应于一阶张量和二阶张量，为了在张量网络中方便的表示出更高阶张量，我们采用如下图中的图形表示来更方便的描述张量。

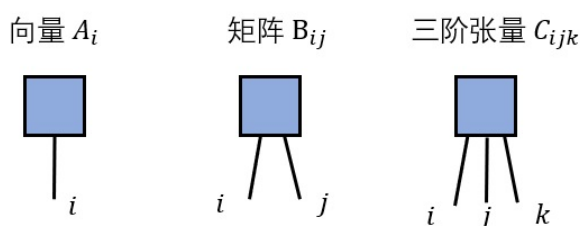


图 2.1 张量图形表示

利用该图形表示，可以方便的表示出张量网络的收缩方式，如 $D_{ijk} = \sum_{lmn} A_{ilm} B_{ijn} C_{nmk}$ 。三阶张量 D_{ijk} 由三个三阶张量缩并形成，在图形表示中，两个张量相同的指标的缩并用相应“腿”相连形成。

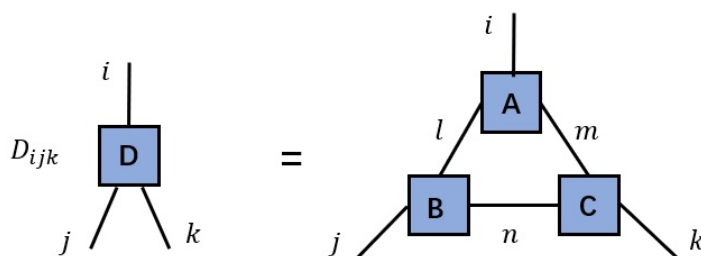


图 2.2 张量收缩

对于张量的指标还有另外两个操作：排列 (permute) 和重组 (reshape)。排列即张量的元素个数保持不变，改变张量的不同指标的顺序，如矩阵的转置，交换了行指标和列指标的顺序。重组即保持张量的元素个数不变，将其中的某些指标合并为一个指标，如我们可以将一个 $2 \times 3 \times 4$ 的三阶张量的前两个指标合并为一个维度为 6 的大指标，该张量变为一个 6×4 的矩阵。

有了上述关于张量的基本认识和相应操作，接下来就可以利用这些操作以及矩阵的正交分解 (SVD 分解, QR 分解) 得到矩阵乘积态的表示 (Matrix product state)

2.2 矩阵乘积态表示

我们考虑一个一维 N 格点的量子系统，整个系统的希尔伯特空间基矢是 N 个单粒子希尔伯特空间基矢的直积。用 $|j_n\rangle$ 表示第 n 个单粒子基矢。总系统的一个任意的量子态 $|\Psi\rangle$ 可以表示为 [2] $|\Psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} C_{j_1, \dots, j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle$ 。矩阵乘积态是将波函数系数 C_{j_1, \dots, j_N} 分解为一系列矩阵的乘积形式：

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{j_1, \dots, j_N} \sum_{\alpha_2, \dots, \alpha_N} M_{\alpha_1 \alpha_2}^{[1]j_1} \dots M_{\alpha_N \alpha_{N+1}}^{[N]j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle \\ &= \sum_{j_1, \dots, j_N} M^{[1]j_1} \dots M^{[N]j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle. \end{aligned} \quad (2.1)$$

我们将一个含有 N 指标的系数 (N 阶张量) C_{j_1, \dots, j_N} 变为了 N 个矩阵的乘积 $M^{[1]j_1} M^{[2]j_2} \dots M^{[N]j_N}$ ，其中每一个 $M^{[n]j_n}$ 的维度为 $\chi_n \times \chi_{n+1}$ ， α_n 称为虚拟指标， j_n 称为物理指标。两个边界的 $M^{[1]j_1}, M^{[N]j_N}$ 分别为行矢量和列矢量，这样整个矩阵乘积的结果就是一个数即 C_{j_1, \dots, j_N}

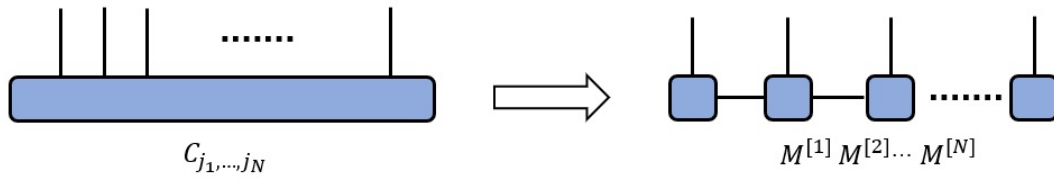


图 2.3 矩阵乘积态示意

2.2.1 SVD 分解和 Schmidt 分解

奇异值分解 (singular value decomposition) 将任意的 $N_A \times N_B$ 的矩阵 M 分解为：

$$M = USV^\dagger$$

其中 U 的维度为 $(N_A \times \min(N_A, N_B))$ ，并且是正交矩阵有 $U^\dagger U = I$ ； S 是维度为 $\min(N_A, N_B) \times \min(N_A, N_B)$ 的对角矩阵； V 的维度为 $\min(N_A, N_B) \times N_B$ ，同样为正交矩阵 $V^\dagger V = I$ 。SVD 分解有一个很重要的性质，对角矩阵 S 的元素奇异值 S_i 是迅速的减小。我们可以通过对奇异值的截断对矩阵 M 作最优化的维度截断，截断后的矩阵 M' 维度小于初始的矩阵 M 。

SVD 的一个应用是我们可以对一个量子态作施密特分解 (Schmidt decomposition)。考虑一个由 AB 两个子系统构成的纯态，

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} \Psi_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B. \quad (2.2)$$

其中 $\{|i\rangle_A\}$ 和 $\{|j\rangle_B\}$ 是 A 和 B 中的一组正交基，维度分别为 N_A 和 N_B 。对 Ψ_{ij} 作 SVD 分解得到

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{ij} \sum_{\alpha=1}^{\min(N_A, N_B)} U_{i\alpha} S_{\alpha\alpha} V_{j\alpha}^\dagger |i\rangle_A |j\rangle_B \\ &= \sum_{\alpha=1}^{\min(N_A, N_B)} \left(\sum_i U_{i\alpha} |i\rangle_A \right) S_{\alpha\alpha} \left(\sum_j V_{j\alpha}^\dagger |j\rangle_B \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^{\min(N_A, N_B)} S_{\alpha\alpha} |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B. \end{aligned} \quad (2.3)$$

由于 U 和 V^\dagger 的正交性质，新基矢 $\{|\alpha\rangle_A\}$ 和 $\{|\alpha\rangle_B\}$ 依然是正交基矢。于是我们得到施密特分解形式

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^r S_{\alpha\alpha} |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B. \quad (2.4)$$

如果 $r = 1$ 就是一个直积态，如果 $r > 1$ 就是纠缠态。

2.2.2 将任意量子态分解成 MPS

考虑有 L 个格点，每个格点维度为 d 维的系统。一个量子态表示为 $|\Psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} C_{j_1, \dots, j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle$ 。第一步，将有 d^L 个元素的 L 阶张量重组为 $d \times d^{L-1}$ 的矩阵，

$$\Phi_{j_1, (j_2, \dots, j_L)} = C_{j_1, \dots, j_N}. \quad (2.5)$$

对 Φ 进行 SVD 分解

$$\Phi_{j_1, (j_2, \dots, j_L)} = \sum_{\alpha_1} U_{j_1, \alpha_1} S_{\alpha_1, \alpha_1} V_{\alpha_1, (j_2, \dots, j_L)}^\dagger \equiv \sum_{\alpha_1} U_{j_1, \alpha_1} C_{\alpha_1 j_2, \dots, j_L}. \quad (2.6)$$

将 U_{j_1, α_1} 记为 $M_{\alpha_1}^{j_1}$ ，将 S 和 V 合并为 C ，并继续将 C 重组为 $r_1 d \times d^{L-2}$ 的矩阵

$$\Phi_{(\alpha_1 j_2), (j_3, \dots, j_L)} = C_{\alpha_1 j_2, \dots, j_L}. \quad (2.7)$$

继续对 Φ 作 SVD 分解

$$\Phi_{(\alpha_1 j_2), (j_3, \dots, j_L)} = \sum_{\alpha_2} U_{(\alpha_1 j_2), \alpha_2} S_{\alpha_2, \alpha_2} V_{\alpha_2, (j_3, \dots, j_L)}^\dagger. \quad (2.8)$$

将 $U_{(\alpha_1 j_2), \alpha_2}$ 记为 $M_{\alpha_1, \alpha_2}^{j_2}$ 。将 S 和 V 继续重组为 $r_2 d \times d^{L-3}$ 的矩阵作 SVD 分解。最终将得到

$$C_{\alpha_1 j_2, \dots, j_L} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{L-1}} M_{\alpha_1}^{j_1} M_{\alpha_1, \alpha_2}^{j_2} \dots M_{\alpha_{L-1}}^{j_L}. \quad (2.9)$$

一个任意的量子态以矩阵乘积态的形式表示了出来

$$|\Psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_L} M^{j_1} M^{j_2} \dots M^{j_L} |j_1, \dots, j_L\rangle. \quad (2.10)$$

其直观图形表示为

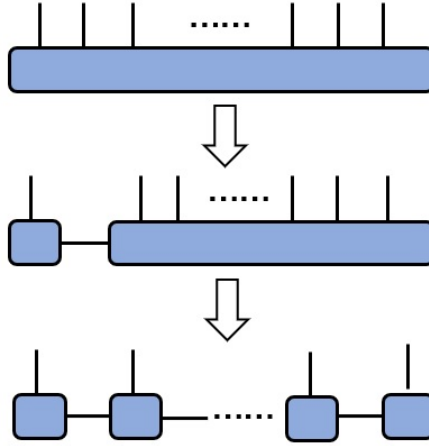


图 2.4 矩阵乘积态分解

MPS 表示一个好处是可以绕过“指数墙问题”，考虑 N 个格点，每个格点自由度为 d ，则需要 d^N 个参数完整来表示这个系统，这种指数增长远超目前计算机的计算规模。采取 MPS 表示时，我们可以在每一步 SVD 分解时规定最大的截断维度 χ 来截取奇异值，这样只需要多项式增长的数据 $Nd\chi^2$ 来描述多体系统。

还有值得注意的一点是，除了上述的 MPS 表述外，矩阵乘积态也能用小维度的矩阵精确表示一些系统的状态。下面举例说明：

考虑一维横场伊辛模型，其哈密顿量为

$$H = -\sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z + g \sigma_n^x. \quad (2.11)$$

当横场很强 $g \gg 1$ 时，系统的基态为 $|\leftarrow \dots \leftarrow\rangle \equiv (\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle) \otimes \dots \otimes (\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle)$ 。用 MPS 表示该基态为

$$M^{[n]\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad M^{[n]\downarrow} = -\frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (2.12)$$

考虑 Neel 反铁磁态 $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle$ ，我们用不同的矩阵表示奇偶格点，

$$M^{[2n-1]\uparrow} = M^{[2n]\downarrow} = 1, \quad M^{[2n-1]\downarrow} = M^{[2n]\uparrow} = 0. \quad (2.13)$$

2.3 纠缠熵

纠缠是量子力学中一个重要的现象，我们知道量子多体系统里的纠缠能帮助了解许多量子态的信息。根据上述的施密特分解，希尔伯特空间 $H = H_A \otimes H_B$ 中的任意量子态可以表示为 [3]

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_A \otimes |\alpha\rangle_B, \quad |\alpha\rangle_{A(B)} \in H_{A(B)}. \quad (2.14)$$

其中 $|\alpha\rangle_{A(B)}$ 是 $H_{A(B)}$ 中的正交基，并且 $\Lambda_\alpha \geq 0$ 。考虑 $|\Psi\rangle$ 的归一化，有 $\sum_\alpha \Lambda_\alpha^2 = 1$

纠缠的度量可以用冯诺依曼纠缠熵来描述， $S = -\text{Tr}(\rho^B \log(\rho^B))$ 。约化密度矩阵 ρ^B 可以通过对 A 子系统求迹得到，

$$\rho^B \equiv \text{Tr}_A(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \sum_\alpha \Lambda_\alpha^2 |\alpha\rangle_B \langle\alpha|_B. \quad (2.15)$$

因此纠缠熵可以用施密特分解值表示出来：

$$S \equiv -\text{Tr}(\rho^R \log(\rho^R)) = -\sum_\alpha \Lambda_\alpha^2 \log \Lambda_\alpha^2. \quad (2.16)$$

如果这个二分系统没有纠缠，则 $S=0$ ，施密特分解值只有 $\Lambda_1 = 1$ 。

2.4 混合正交形式

虽然现在我们用 MPS 将多体波函数表示了出来，但它有规范自由度。例如我们可以在两个矩阵的连接上添加一对幺正矩阵满足 $UU^\dagger = I$ ，这对整体的结果没有影响，但当把 U 和 U^\dagger 吸收到相邻的矩阵中就改变了初始矩阵乘积态的形式，因此我们需要一种规范形式来消除这种自由度。[2]

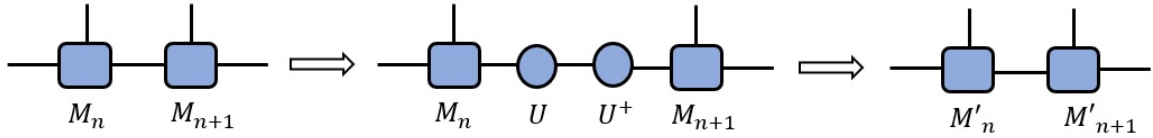


图 2.5 矩阵乘积态规范自由度

首先定义张量的左右正交形式如图

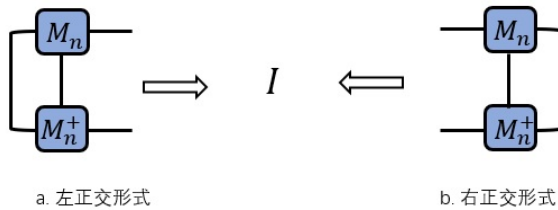


图 2.6 矩阵乘积态左右正交形式

混合正交形式即选取一个格点或者格点间的连接 (bond) 为正交中心，正交中心左侧的张量都满足左正交形式，正交中心右侧的张量都满足右正交形式。例如选取正交中心为 l 格点和 $l+1$ 格点间的连接，其构造如下 [4]：对系数 C_{j_1, \dots, j_L} 从左端开始作 SVD 分解到 l 格点得到

$$C_{j_1, \dots, j_L} = \sum_{\alpha_l} (A^{j_1} \dots A^{j_l})_{\alpha_l} S_{\alpha_l, \alpha_l} (V^\dagger)_{\alpha_l, (j_{l+1}, \dots, j_L)}. \quad (2.17)$$

其中每个 A 矩阵是每次 SVD 分解中的 U 矩阵，满足左正交条件。将 V^\dagger 从右往左作 SVD 分解，将每一次得到的 V 矩阵作为 B_i^j ，最终得到

$$(V^\dagger)_{\alpha_l, (j_{l+1}, \dots, j_L)} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{L-1}} B_{\alpha_l, \alpha_{l+1}}^{j_{l+1}} \dots B_{\alpha_{L-1}}^{j_L}. \quad (2.18)$$

所有的 B 矩阵都满足右正交条件，最终得到

$$C_{j_1, \dots, j_N} = A^{j_1} \dots A^{j_l} S B^{j_{l+1}} \dots B^{j_L}. \quad (2.19)$$

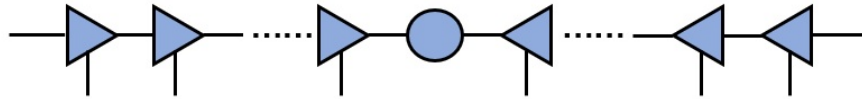


图 2.7 矩阵乘积态混合正交形式

其中正交中心为 l 格点和 $l+1$ 之间的奇异值，也可以用施密特分解的角度来理解：A 子系统是从 1 到 l 格点，B 子系统是 $l+1$ 到 L 格点。如果我们引入向量

$$\begin{aligned} |\alpha_l\rangle_A &= \sum_{j_1, \dots, j_l} (A^{j_1} \dots A^{j_l})_{1, \alpha_l} |j_1, \dots, j_l\rangle \\ |\alpha_l\rangle_B &= \sum_{j_{l+1}, \dots, j_L} (B^{j_{l+1}} \dots B^{j_L})_{\alpha_l, 1} |j_{l+1}, \dots, j_L\rangle. \end{aligned} \quad (2.20)$$

因此波函数为

$$\Psi\rangle = \sum_{\alpha} S_{\alpha} |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B. \quad (2.21)$$

第三章 张量网络算法

3.1 矩阵乘积算符

密度矩阵重整化群算法 (DMRG) 依赖于将系统的哈密顿量表示成矩阵乘积算符 (MPO) 的形式。由 MPS 出发自然地得到 MPO 的形式, [5] [2]

$$\hat{O} = \sum_{j_1, \dots, j_N; j'_1, \dots, j'_N} W^{[1]j_1 j'_1} \dots W^{[N]j_N j'_N} |j_1, \dots, j_N\rangle \langle j'_1, \dots, j'_N|. \quad (3.1)$$

其中 $W^{[n]j_n j'_n}$ 是 $D \times D$ 的矩阵, $|j_n\rangle, |j'_n\rangle$ 是 n 格点的基矢。

MPO 直接作用到 MPS 上得到的依然是 MPS 的形式

$$\begin{aligned} \hat{O}|\Psi\rangle &= \sum_{j, j'} (W^{j_1, j'_1} \dots W^{j_N, j'_N}) (M^{j_1} \dots M^{j_N}) |j_1, \dots, j_N\rangle \\ &= \sum_{j, j'} \sum_{a, b} (W^{j_1, j'_1}_{1, b_1} \dots W^{j_N, j'_N}_{b_{N-1}, b_N}) (M^{j_1}_{1, a_1} \dots M^{j_N}_{a_{N-1}, a_N}) |j_1, \dots, j_N\rangle \\ &= \sum_{j, j'} \sum_{a, b} (W^{j_1, j'_1}_{1, b_1} M^{j_1}_{1, a_1}) \dots (W^{j_N, j'_N}_{b_{N-1}, b_N} M^{j_N}_{a_{N-1}, a_N}) |j_1, \dots, j_N\rangle \\ &= \sum_{j'} \sum_{a, b} N^{j'_1}_{(1,1), (b_1, a_1)} \dots N^{j'_N}_{b_{N-1}, a_{N-1}} |j'_1, \dots, j'_N\rangle = \sum_{j'} N^{j'_1} \dots N^{j'_N} |j'_1, \dots, j'_N\rangle. \end{aligned} \quad (3.2)$$

图形示意为

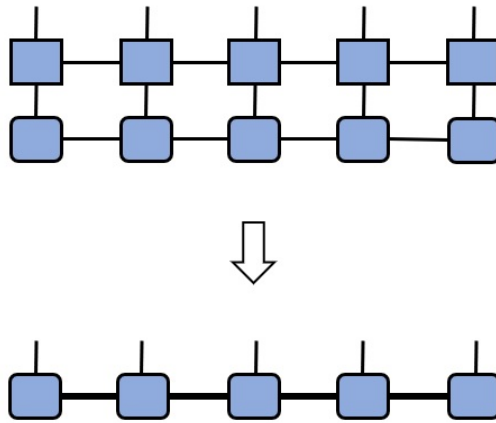


图 3.1 MPO 作用到 MPS 上

3.2 密度矩阵重整化群算法

密度矩阵重整化群 (DMRG) 算法由 Steven White 提出, 随后不断演化形成了以 MPS 和 MPO 为范式的一套算法。DMRG 是通过将 MPS 变分求出系统的基态, 同时优化相邻格点

的张量使得能量 $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ 最小。在物理和化学的应用中，DMRG 通常用来寻找多体系统哈密顿量的基态。它也可以扩展用来求解激发态，以及模拟非平衡的动力学演化。

该算法核心是每个格点依次优化，优化方式为构造一个有效哈密顿量 H_{eff} ，求解出该哈密顿量的基态。使用 SVD 分解或其它矩阵正交分解使其回到 MPS 形式，在分解过程中可以对 MPS 做维度截断。接下来具体介绍该算法如何实现。[2]

第一步——构造有效哈密顿量

以第一个格点及相邻的第二个格点的优化为例，有效哈密顿量的构造方式为：将 MPS 中表示第一和第二个格点的张量去除，记为 $|\Phi\rangle$ 。系统的哈密顿量用 MPO 表示。 $H_{eff} = \langle \Phi | H | \Phi \rangle$

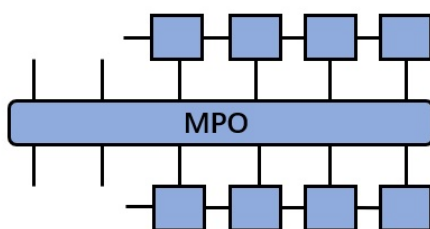


图 3.2 有效哈密顿量示意

第二步——求解有效哈密顿量基态 上述的 H_{eff} 是一个六阶张量，通过重组使其变为二阶的矩阵。由于该矩阵维度很小，我们可以直接用 Lanczos 算法求解其基态。该基态为优化过后的第一个格点和第二个格点对应的张量。

第三步——回归到 MPS 形式 在获得第一个格点和第二个格点对应张量 B_{12} 后，我们需要将其回到 MPS 的形式，这样才能移动到下一个格点继续做优化。因此我们需要对 B_{12} 作 SVD 分解。

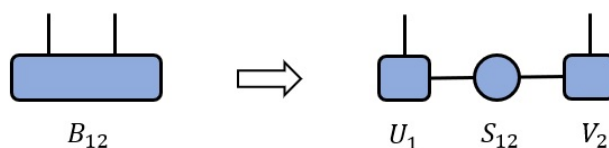


图 3.3 SVD 分解

在 SVD 分解时作维度截断，保留 U_1 的前 m 列， V_2 的前 m 行以及 m 个最大的奇异值。将截断后的 U_1 作为优化后的 MPS 第一个张量 M_1 ，优化后的第二个张量 $M_2 = S_{12}V_2$ 。

第四步——重复上述步骤依次优化其它格点 上面介绍了优化第一个和第二个格点的操作，接下来是对第二个和第三个格点进行优化。这样从左到右从 1 格点到 N 格点再从 N 个点优化回到 1 格点称为一个 sweep，重复多次 sweep 直到 MPS 收敛，我们便得到了系统的基态，这样同时优化两个格点的方法也称为 two-site DMRG。

3.3 时间演化块消减算法——TEBD

在 TEBD 算法中, 我们研究量子态的时间演化 [6]:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle. \quad (3.3)$$

时间演化算符 U 可以是实时演化算符 $U(t) = \exp(-itH)$, 也可以是虚时演化算符 $U(\tau) = \exp(-\tau H)$ 。虚时演化可以用来计算系统的基态:

$$|\Psi_{GS}\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{e^{\tau H} |\Psi_0\rangle}{\|e^{\tau H} |\Psi_0\rangle\|}. \quad (3.4)$$

TEBD 算法利用了 Suzuki-Trotter 分解, 它的一阶近似如下:

$$e^{X+Y} \delta = e^{X\delta} e^{Y\delta} + O(\delta^2). \quad (3.5)$$

其中 X 和 Y 都是算符, δ 是一个小参数。我们可以将哈密顿量分解为两格点算符的求和 $H = \sum_n h^{[n,n+1]}$, 其中 $h^{[n,n+1]}$ 是只作用到 n 和 $n+1$ 格点上:

$$H = \sum_{n \text{ odd}} h^{[n,n+1]} + \sum_{n \text{ even}} h^{[n,n+1]}. \quad (3.6)$$

现在我们将时间分割成小份 $\delta t \ll 1$, 考虑时间演化算符 $U(\delta t)$, 利用上述分解, 可以将其展开成两格点算符的直积形式

$$U(\delta t) \approx \left[\prod_{n \text{ odd}} U^{[n,n+1]}(\delta t) \right] \left[\prod_{n \text{ even}} U^{[n,n+1]}(\delta t) \right]. \quad (3.7)$$

其中 $U^{[n,n+1]}(\delta t) = e^{-i\delta t h^{[n,n+1]}}$ 。因此时间演化算符如下图所示, 相继作用到 MPS 上。

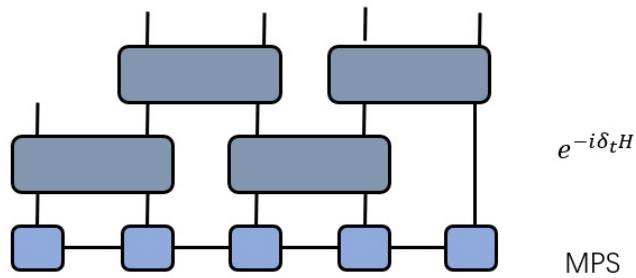


图 3.4 将演化算符分解后与 MPS 作用示意

接下来介绍 TEBD 算法 [3], 同时更新相邻的两个格点。首先将波函数用混合正交形式表示, 波函数系数 Θ 为

$$\Theta_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+1}} = \sum_{\alpha_{n+1}} \Lambda_{\alpha_n \alpha_n}^{[n]} B_{\alpha_n \alpha_{n+1}}^{[n], j_n} B_{\alpha_{n+1} \alpha_{n+2}}^{[n+1], j_{n+1}}. \quad (3.8)$$

将两点演化算符作用上去得到

$$\tilde{\Theta}_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+1}} = \sum_{j'_n j'_{n+1}} U_{j'_n j'_{n+1}}^{j_n j_{n+1}} \Theta_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j'_n j'_{n+1}}. \quad (3.9)$$

为了接下来的 SVD 分解，我们将 Θ 重组为一个矩阵 $\tilde{\Theta}_{j_n \alpha_n; j_{n+1} \alpha_{n+1}}$ ，如图所示：

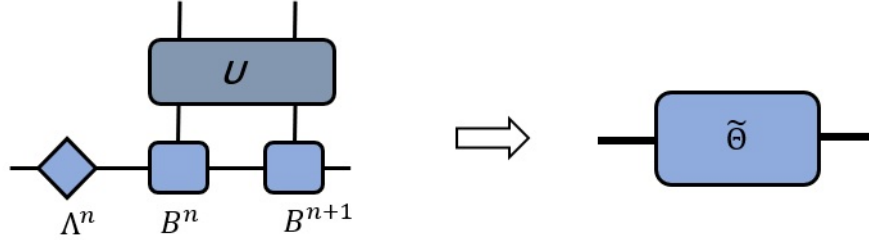


图 3.5 将时间演化算符作用到相应格点上，并合并指标重组为矩阵

对矩阵 $\tilde{\Theta}$ 作 SVD 分解，

$$\tilde{\Theta}_{j_n \alpha_n; j_{n+1} \alpha_{n+1}} = \sum_{\alpha_{n+1}} \tilde{A}_{j_n \alpha_n; \alpha_{n+1}}^{[n]} \tilde{\Lambda}_{\alpha_{n+1} \alpha_{n+1}}^{[n+1]} \tilde{B}_{\alpha_{n+1} j_{n+1} \alpha_{n+2}}^{[n+1]}. \quad (3.10)$$

SVD 后得到的张量满足混合正交形式，对角矩阵 $\tilde{\Lambda}^{[n+1]}$ 包含了施密特分解值，可以用来计算纠缠熵。最后还回到最初的右正交形式：

$$\tilde{B}^{[n]} = (\Lambda^{[n]})^{-1} \tilde{A}^{[n]} \tilde{\Lambda}^{[n+1]}, \quad \tilde{B}^{[n+1]} = \tilde{B}^{[n+1]}. \quad (3.11)$$

如图所示：

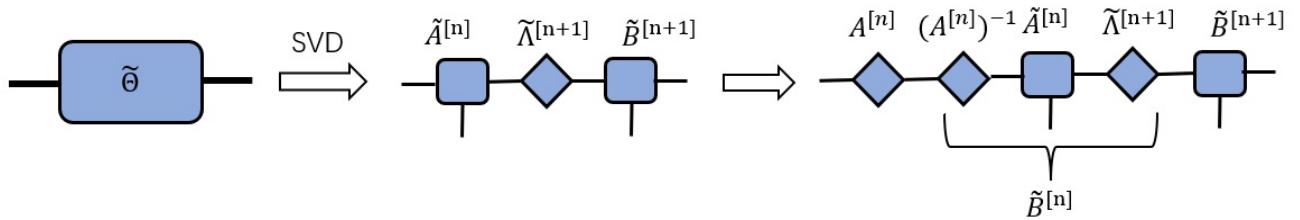


图 3.6 对 $\tilde{\Theta}$ 作 SVD 分解，并还回最初的右正交形式

完成一次上述更新后，新的 MPS 依然是正交形式。在演化过程中纠缠熵会随时间增加，因此连接维度应该指数增加。但我们选取了一个固定的维度 χ_{max} ，因此随着时间演化，截断误差带来的影响会越来越大。如果我们采用 TEBD 的虚时演化求解系统基态，算符 U 不是幺正的并且因此 TEBD 不能保证 MPS 的正交形式。但如果我们将时间步长取得非常小，施密特分解仍然能满足在长时情况下很好的近似。

3.4 含时变分原理

MPS 能够如此流行和成功的原因除了能够利用 DMRG 求解系统基态，它也能用来研究系统含时演化的动力学性质，例如时间演化块消减算法 (TEBD)。TEBD 算法中最重要的一点是对哈密顿量进行 Lie-Trotter-Suzuki 分解， $\hat{H} = \sum_i \hat{h}_i$ 。其中 \hat{h}_i 是局域格点的哈密顿量，可以有效地作用到 MPS 上。但 TEBD 有以下缺点：无法处理有长程相互作用的系统；无法避免 Trotter 分解带来的误差 [7]。

因此另一个时间演化的方法是由 Jutho Haegeman 提出的基于 MPS 的含时变分原理 (TDVP)，核心思路是将薛定谔方程 $\hat{H}|\Psi\rangle$ 投影到切空间。该方法可以处理长程相互作用。Jutho Haegeman 在 2011 年最开始提出的算法需要对格拉姆矩阵求转置，该方法稳定性并不好。于是在 2016 年他提出了一种优化算法，新算法基于对切空间投影算法进行 Trotter 分解，并且该算法和 DMRG 算法极其相似，可视为时间间隔为无穷大的 one-site DMRG 的虚时演化 [7]。

先介绍含时变分原理，引入一个时间依赖的函数 $A(t)$ 到薛定谔方程中得到

$$\dot{A}^i |\partial_i \Psi(A(t))\rangle = -i \hat{H} |\Psi(A(t))\rangle. \quad (3.12)$$

其中方程左边是切向量 $|\partial_i \Psi(A(t))\rangle$ 的线性组合，方程右边是希尔伯特空间中的某个向量，因此该方程无法得到 \dot{A}^i 的精确解。但可以通过最小化 $\|\dot{A}^i |\partial_i \Psi(A(t))\rangle + i \hat{H} |\Psi(A(t))\rangle\|$ 得到最优近似。因此需要将 $\hat{H} |\Psi\rangle$ 投影到切空间。

$$\langle \partial_j \Psi | \partial_i \Psi \rangle \dot{A}^i = -i \langle \partial_j \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle. \quad (3.13)$$

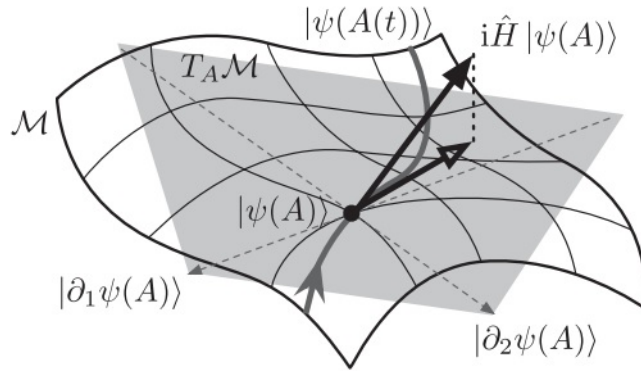


图 3.7 TDVP 示意，图片源于参考文献 [8]

在介绍该算法如何实现之前，我们继续对混合正交形式的 MPS 进一步讨论。在之前叙述中，MPS 的正交中心为仅包含奇异值的 S 矩阵， $|\Psi\rangle = \sum_{\alpha,\beta} [C(n)]_{\alpha,\beta} |\Phi_{L,\alpha}^{[1:n]}\rangle |\Phi_{R,\beta}^{[n+1:N]}\rangle$ ，它不包含格点的物理指标。同样我们可以把 S 矩阵和相邻的一个格点收缩，使得正交中心为包含格点物理指标的一个三阶张量， $|\Psi\rangle = \sum_{\alpha,j_n,\beta} [A_C^{s_n}(n)]_{\alpha,\beta} |\Phi_{L,\alpha}^{[1:n-1]}\rangle |j_n\rangle |\Phi_{R,\beta}^{[n+1:N]}\rangle$

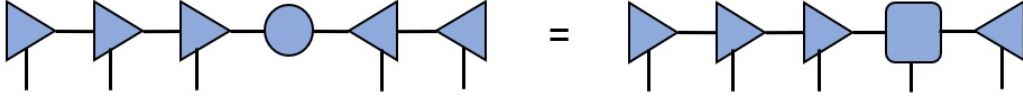


图 3.8 MPS 的两种混合正交形式

TDVP 要求我们将薛定谔方程投影到 MPS 流形的切空间 [8], $\frac{d|\Psi(A)\rangle}{dt} = -i\hat{P}_T\hat{H}|\Psi(A)\rangle$ 。因此最重要的部分是将投影算符 \hat{P}_T 表示出来, 文章推导得到

$$\hat{P}_T = \sum_{n=1}^N \hat{P}_L^{[1:n-1]} \otimes \hat{1}_n \otimes \hat{P}_R^{[n+1:N]} - \sum_{n=1}^{N-1} \hat{P}_L^{[1:n]} \otimes \hat{P}_R^{[n+1:N]}. \quad (3.14)$$

其中

$$\begin{aligned} \hat{P}_L^{[1:n]} &= \sum_{\alpha=1}^D |\Phi_{L,\alpha}^{[1:n]}\rangle \langle \Phi_{L,\alpha}^{[1:n]}| \\ \hat{P}_R^{[n:N]} &= \sum_{\beta=1}^D |\Phi_{R,\beta}^{[n:N]}\rangle \langle \Phi_{R,\beta}^{[n:N]}|. \end{aligned} \quad (3.15)$$

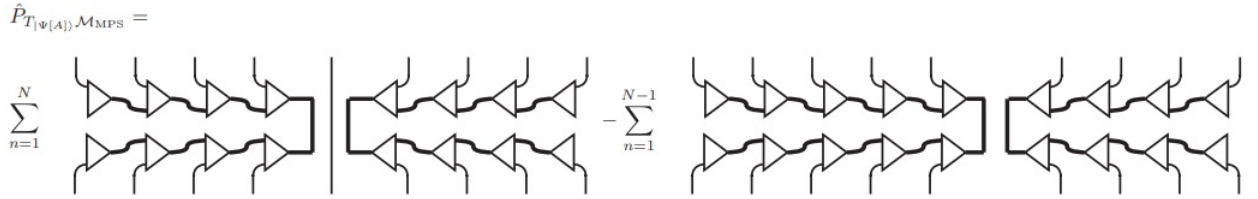


图 3.9 投影算符表示, 图片源于参考文献 [8]

于是我们可以将 $\hat{P}_T\hat{H}|\Psi(A)\rangle$ 表示出来, 利用 MPS 的两种混合正交表示形式以及 one-site 和 zero-site 有效哈密顿量。

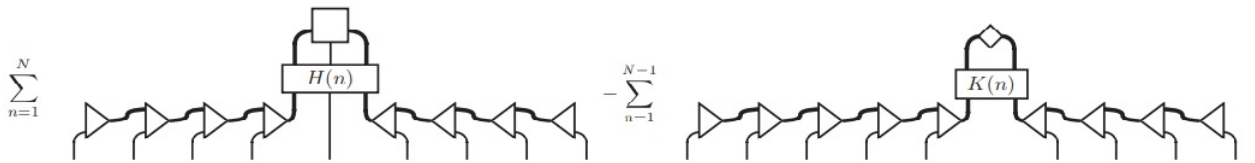


图 3.10 TDVP 方程等号右端, 图片源于参考文献 [8]

将 $|\Psi\rangle$ 分别用两种混合正交形式表示, 可以得到对应的微分方程。例如对于投影算符 $\hat{P}_L^{[1:n-1]} \otimes \hat{1}_n \otimes \hat{P}_R^{[n+1:N]}$, 并将 $|\Psi\rangle$ 用含格点 n 的正交形式表示, 可以得到 $A_C(n,t)$ 的演化方程

$$A_C(n,t) = \exp[-iH(n)t]A_C(n,0). \quad (3.16)$$

同样，对于投影算符 $\hat{P}_L^{[1:n]} \otimes \hat{P}_R^{[n+1:M]}$ ，并将 $|\Psi\rangle$ 用不含格点 n 的正交形式表示，得到 $C(n,t)$ 的演化方程

$$C(n,t) = \exp[= iK(n)t]C(n,0). \quad (3.17)$$

具体算法为：从 $n=1$ 格点开始将 $A_C(n)$ 按上述方程演化 δt 时间。演化后进行正交分解， $A_C^s(n) = A_L^s(n)C(n)$ 。将 $C(n)$ 按照上述方程时间反演，将演化后的 $C(n)$ 吸收到下一个格点， $A_C^s(n+1) = C(n)A_R^s(n+1)$ 。该算法和 one-site DMRG 算法非常相似，主要有两点不同：一是将 DMRG 中求有效哈密顿量基态变为时间演化形式；二是多了一个 $C(n)$ 的时间反演，以及将其吸收到下一个格点。

第四章 量子淬火 (Quantum quench) 动力学研究

对于孤立系统非平衡动力学研究发现对于现有的理论和实验提出了挑战, 提出了许多基本的问题以及各种应用。所谓量子淬火研究 (quantum quench) 指的是系统从一个初态开始演变, 该初态需要满足是一个平移不变哈密顿量的基态。然而控制该系统演化的哈密顿量与基态对应的哈密顿量并不相同。

在多体系统的研究中, quench 是一个重要并且具有挑战性的问题: (i) 跨相变 quench 的研究, 例如系统的初态具有某种长程关联, 如果 quench 之后的哈密顿量没有这种关联, 那么关联函数应该如何演变呢。 (ii) 非平衡系统热化研究, 将一个系统在 quench 之后进行长时演化, 它的子系统的热化形式是如何的, 会达到平衡态还是非平衡态。

4.1 一维横场伊辛模型

一维横场伊辛的哈密顿量为

$$\hat{H} = -J \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - h \sum_j \hat{\sigma}_j^x. \quad (4.1)$$

$h = 0$ 极限

当横场 $h = 0$, 耦合系数 $j > 0$ 时, 体系只剩下伊辛耦合部分, 体系的基态为全部自旋向上或者全部自旋向下的铁磁态, $|\Psi_0\rangle = \prod_j |\uparrow\rangle$ 或者 $|\Psi_0\rangle = \prod_j |\downarrow\rangle$ 。

$J = 0$ 极限

体系只有一个横场项, 体系的基态为自旋全部朝向 X 的态, $|\Psi_0\rangle = \prod_j |\rightarrow\rangle_j = \prod_j \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j + |\downarrow\rangle_j)$

通过以上两种极端情况讨论可以发现, 当 $J/h \gg 1$ 的区域, 系统处于 (z 方向) 铁磁态, 对称性破缺。而在 $J/h \ll 1$ 的区域, 体系处于无序态, 也就是 z 方向的磁化为零 $\langle \sigma^z \rangle$ 这样当我们调节 J/h , 体系存在从铁磁态到顺磁态的相变。显然在零温时体系不存在热涨落, 这里的相变完全是由量子力学效应驱动的, 将其称为量子相变。

4.1.1 基态能量及磁化

一维的量子自旋模型可以通过 Jordan-Wigner 变换改写为费米子模型, 在这里的横场伊辛模型最后对应于自由费米子问题, 体系是可以精确求解的 [9]。为了便于求解, 我们把体系的坐标轴绕 y 轴旋转 90 度即 $x \rightarrow -z, z \rightarrow x, y \rightarrow y$, 这样体系的哈密顿量变为

$$\hat{H} = -J \sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_j^x + h \sum_j \hat{\sigma}_j^z. \quad (4.2)$$

Jordan-Wigner 变换的定义为

$$\hat{\sigma}_j^+ = \prod_{l<j} (1 - 2\hat{f}_l^+ \hat{\psi}_l) \hat{f}_j, \quad \hat{\sigma}_j^- = \prod_{l<j} (1 - 2\hat{f}_l^+ \hat{f}_l) \hat{f}_j^+. \quad (4.3)$$

利用该变换得到哈密顿量的形式

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -J \sum_j (\hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1} + \hat{f}_{j+1}^+ \hat{f}_j + \hat{f}_{j+1} \hat{f}_j) + 2h \sum_j (\hat{f}_j^+ \hat{f}_j) \\ &= -J \sum_j (\hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1}^+ + \hat{f}_j^+ \hat{f}_{j+1} + H.c.) + 2h \sum_j (\hat{f}_j^+ \hat{f}_j). \end{aligned} \quad (4.4)$$

当考虑周期边界条件，系统满足平移不变性，因此可以利用傅里叶变换来对角哈密顿量。费米子算符的傅里叶变换为：

$$\hat{f}_j = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{ikR_j} \hat{f}_k. \quad (4.5)$$

其中 N_s 是系统的格点总数， R_j 是第 j 个格点的位置，动量 k 在第一布里渊区取值 $k \in [-\pi/a, \pi/a]$ ， a 是晶格常数。这样哈密顿量可以写为：

$$\hat{H} = \sum_k [(-2J \cos(ka) + 2h) \hat{f}_k^+ \hat{f}_k - J e^{ika} \hat{f}_k^+ \hat{f}_{-k}^+ - J e^{-ika} \hat{f}_{-k} \hat{f}_k - h N_s]. \quad (4.6)$$

我们将常数项省略，定义 $\varepsilon_k = -2J \cos k + 2h$ ， $\Delta_k = 2J \sin k$ ，并且把 $k < 0$ 的求和替换为 $-k$ 得到

$$\hat{H} = \sum_{k>0} [\varepsilon_k (\hat{f}_k^+ \hat{f}_k + \hat{f}_{-k}^+ \hat{f}_{-k}) - i\Delta_k \hat{f}_k^+ \hat{f}_{-k}^+ + i\Delta_k \hat{f}_{-k} \hat{f}_k]. \quad (4.7)$$

进一步写成矩阵形式

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{f}_k^+ & \hat{f}_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_k & -i\Delta_k \\ i\Delta_k & -\varepsilon_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{f}_k \\ \hat{f}_{-k}^+ \end{pmatrix} + \sum_{k>0} \varepsilon_k. \quad (4.8)$$

我们进一步引入 Bogoliubov 变换将哈密顿量对角化。引入费米子算符 α_k 和 β_k^+ ：

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k \\ \hat{\alpha}_{-k}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_k & -i \sin \theta_k \\ -i \sin \theta_k & \cos \theta_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{f}_k \\ \hat{f}_{-k}^+ \end{pmatrix} = \hat{U} \begin{pmatrix} \hat{f}_k \\ \hat{f}_{-k}^+ \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

将其带入哈密顿量

$$\hat{H} = \sum_{k>0} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k^+ & \hat{\alpha}_{-k} \end{pmatrix} \hat{U} \hat{h}_k \hat{U}^{-1} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k^+ \\ \hat{\alpha}_{-k} \end{pmatrix}, \quad \hat{h}_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_k & -i\Delta_k \\ i\Delta_k & -\varepsilon_k \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

我们要求对角化哈密顿量，即要求 $\hat{U} \hat{h}_k \hat{U}^{-1}$ 非对角项为 0.

$$\hat{U} \hat{h}_k \hat{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \varepsilon_k \cos 2\theta_k + \Delta_k \sin 2\theta_k & \varepsilon_k \sin 2\theta_k - \Delta_k \cos 2\theta_k \\ -\varepsilon_k \sin 2\theta_k + \Delta_k \cos 2\theta_k & -\varepsilon_k \cos 2\theta_k - \Delta_k \sin 2\theta_k \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

因此要求

$$\varepsilon_k \sin 2\theta_k - \Delta_k \cos 2\theta_k = 0 \Rightarrow \frac{\Delta_k}{\varepsilon_k} = \frac{\sin 2\theta_k}{\cos 2\theta_k}. \quad (4.12)$$

此时体系的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_k \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k) + \sum_{k>0} (\varepsilon_k - \Delta_k). \quad (4.13)$$

基态能量

系统的色散关系为 $E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} = 2J\sqrt{1 + (h/J)^2 - 2(h/J)\cos k}$, 当 $h/J=1$ 时, 系统存在无能隙激发, 这种无能隙激发将会导致自由能及其他物理量的热力学奇异性, 说明 $h/J=1$ 是体系的临界点。 $T=0$ 时体系的基态是

$$E_g = \frac{1}{N_s} \sum_{k>0} (\varepsilon_k - \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2}) = \int_0^\pi (\varepsilon_k - \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2}) \frac{dk}{2\pi}. \quad (4.14)$$

利用 DMRG 算法求解一维横场伊辛模型的基态能量并与解析的结果相比较, 如图 4.1。

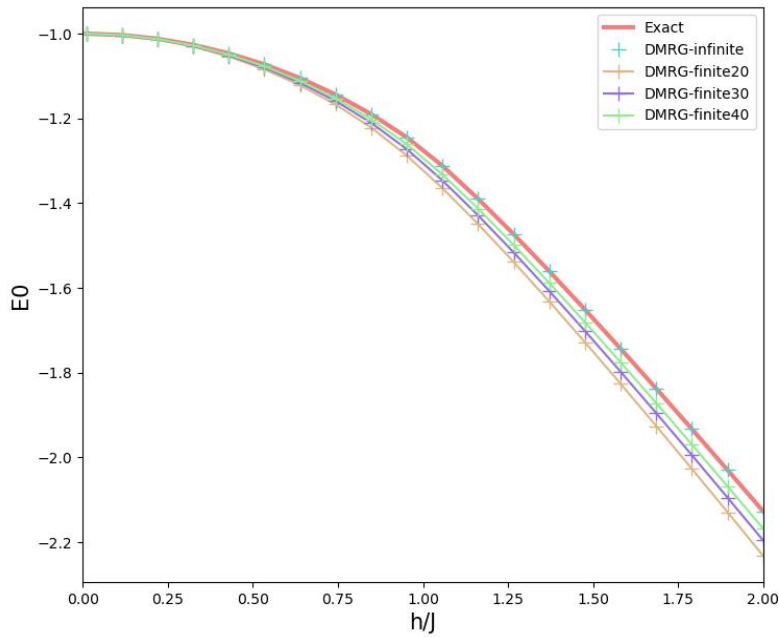
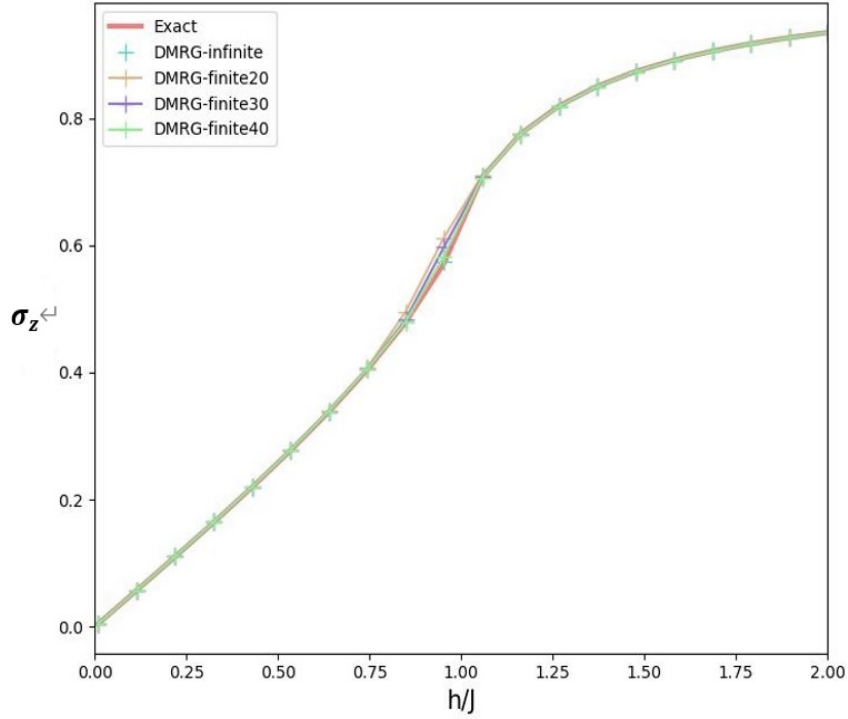


图 4.1 基态能量随 h/J 变化

图中曲线分别有解析精确值, 以及格点数为 20,30,40 和无限长的 DMRG 算法, 在上述算法中我们采取的是开放边界条件, 其中 infinite-DMRG 可以理解为两个格点的系统采取周期性边界条件。可以看出, 随着格点数量的增加, 基态能量和解析结果拟合得越好, 边界效应所带来的影响越小。

$\langle \sigma_z \rangle$ 磁化

图 4.2 基态磁化 $\langle \sigma_z \rangle$ 随 h/J 变化

$\langle \sigma_z \rangle = \frac{1}{N} \sum_j \sigma_j$ 用费米子算符 $\hat{\alpha}_k$ 和 $\hat{\alpha}_{-k}$ 表示出来：

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_z &= 1 - \frac{2}{N} \sum_k \hat{f}_k^+ \hat{f}_k \\ &= 1 - \frac{2}{N} \sum_k \cos^2 \theta_k \hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_k - \sin^2 \theta_k \hat{\alpha}_{-k}^+ \hat{\alpha}_{-k} + \sin^2 \theta_k + \cos \theta_k \sin \theta_k (\hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_{-k}^+ + \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_k). \end{aligned} \quad (4.15)$$

利用上式，可以得到基态 z 方向磁化 $\langle GS | \sigma_z | GS \rangle = 1 - \frac{2}{N} \sum_k \sin^2 \theta_k = \frac{2}{N} \sum_k \cos 2\theta_k$

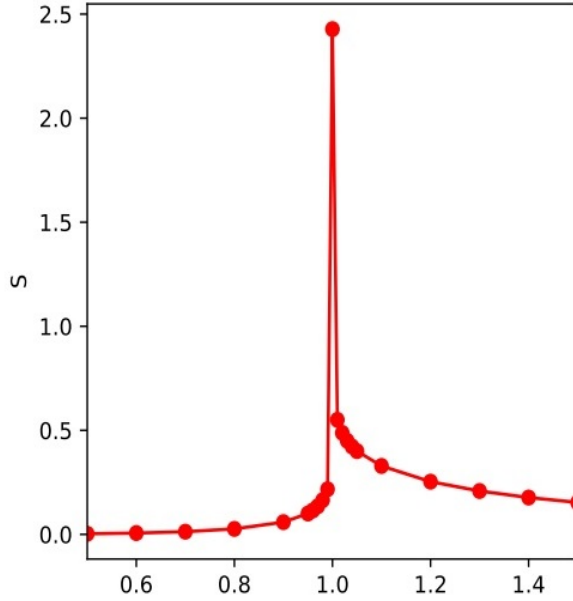
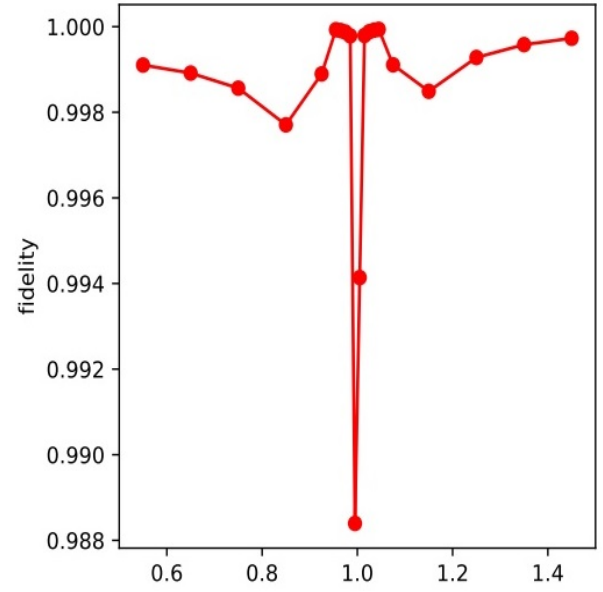
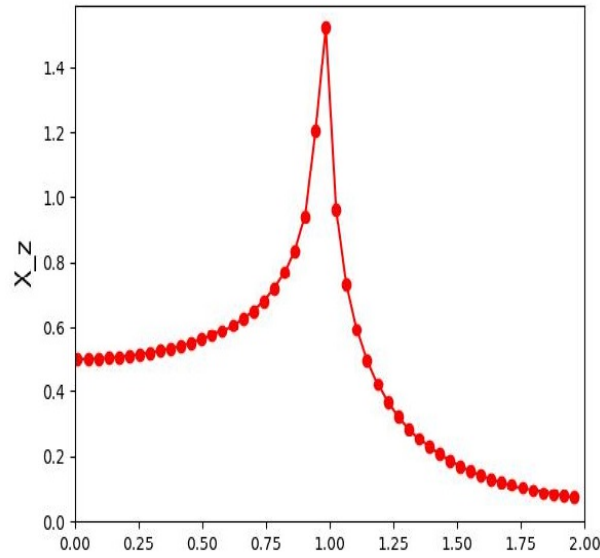
由图 4.2 可以看出，无论是有限格点还是无限格点的 DMRG 算法都能很好地拟合 $\langle \sigma_z \rangle$

寻找相变点

系统的激发能量为：

$$E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2} = 2J \sqrt{1 + g^2 - 2g \cos k}. \quad (4.16)$$

体系仅在 $g = h/J = 1$ 时存在无能隙激发，说明该点是体系的临界点，而在其他情况下激发能都是有限值，这种无能隙激发将会导致物理量的热力学奇异性。我们可以通过数值算法得到不同 g 值下的热力学量来验证一维横场伊辛的相变点 [3]。

图 4.3 (a) 纠缠熵 S 随 h/J 变化图 4.4 (b) 保真度 $\langle \Psi | \Psi \rangle$ 随 h/J 变化图 4.5 (c) 磁化率 χ_z 随 h/J 变化

上面三张图横轴都为 h/J ，可以看出在相变点附近出现奇异性，基态的纠缠熵和外场方向磁化率为极大值，保真度为极小值。可以明显地看出在相变点附近的基态与其他情况下基态的明显不同。

另外在临界点附近，各类物理量显示出显著的幂律行为，相应的幂指数称为临界指数。不同物理系统的临界指数可能完全相同，称为普适类，即虽然物理系统的微观结构和宏观物理不尽相同，但当它们接近临界点时，它们的相变行为是类似的，具有相同的临界指数。因此我们可以验证当 $J = 1$ 时，在临界点 $h = h_c = 1$ 时的临界指数。在一维横场伊辛中，横向磁化 $\langle \sigma_x \rangle$ 满足： $\langle \sigma_x \rangle \sim (h - h_c)^\beta$ ， $\beta = 1/8$ 。通过拟合得到临界指数 $\beta = 0.11997$ 。

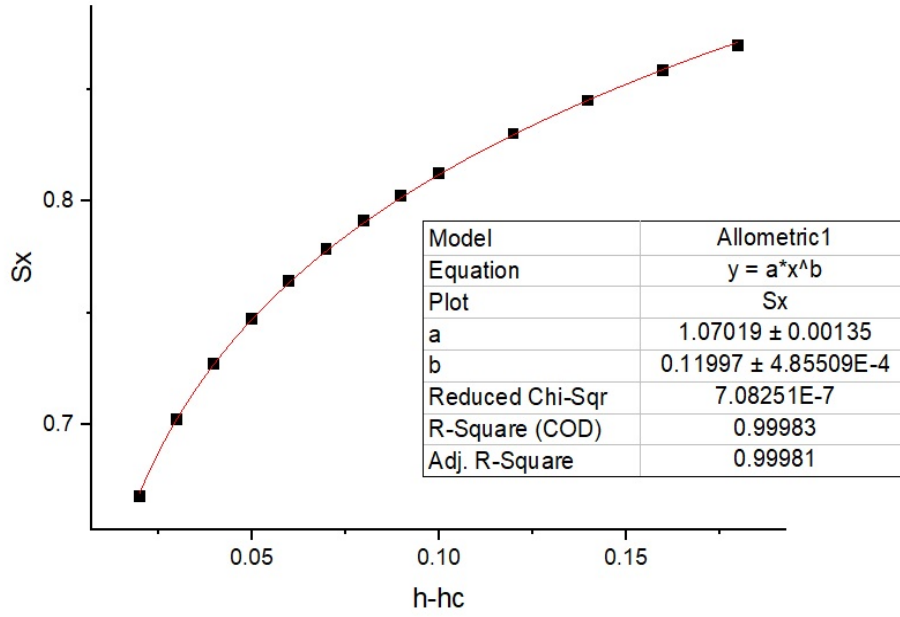


图 4.6 $\langle \sigma_x \rangle \sim (h - h_c)^\beta$, 拟合得到 β

4.1.2 淬火后时间演化

解析求解波函数时间演化形式

我们可以解析得到一维横场伊辛模型 z 方向磁化 $\langle \sigma_z \rangle$ 在淬火后时间演化形式。首先我们需要得到淬火之前的基态波函数

$$\hat{\alpha}_k |GS\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad |GS\rangle = \prod_{k>0} [\cos \theta_k + \sin \theta_k \hat{f}_k^+ \hat{f}_{-k}^+] |0\rangle. \quad (4.17)$$

量子淬火意味着伊辛模型的纵场项强度突然发生变化, 即 $h \rightarrow h'$ 。经过同样的 Jordan-Wigner 变换以及 Bogoliubov 变换, 可以得到 $H(h) \rightarrow H(h') = \sum_k \tilde{E}_k (\tilde{\alpha}_k^+ \tilde{\alpha}_{-k} - \frac{1}{2}) + const$, 因此可以得到 quench 前后费米子算符的关系

$$\begin{pmatrix} \hat{f}_q \\ \hat{f}_{-q}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_k & \sin \theta_k \\ -\sin \theta_k & \cos \theta_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k \\ \hat{\alpha}_{-k}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \tilde{\theta}_k & \sin \tilde{\theta}_k \\ -\sin \tilde{\theta}_k & \cos \tilde{\theta}_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\tilde{\alpha}}_k \\ \hat{\tilde{\alpha}}_{-k}^+ \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_k \\ \hat{\alpha}_{-k}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta_k & -\sin \beta_k \\ \sin \beta_k & \cos \beta_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_k \\ \tilde{\alpha}_{-k}^+ \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

其中 $\beta_k = \theta_k - \tilde{\theta}_k$, 因此 quench 前的基态表示为

$$|GS\rangle_h = \prod_{k>0} (\cos \beta_k + \sin \beta_k \hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_{-k}^+) |\tilde{0}\rangle. \quad (4.20)$$

其中 $\hat{\alpha} |\tilde{0}\rangle = 0$, 因此 quench($h \rightarrow h'$) 后, 波函数的含时演化为

$$\begin{aligned} |\Psi_{h \rightarrow h'}(t)\rangle &= e^{-i \int H(h') dt} |GS\rangle_h \\ &= \prod_{k>0} (\cos \beta_k + \sin \beta_k e^{-i 2 \tilde{E}_k t} \hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_{-k}^+) |\tilde{0}\rangle. \end{aligned} \quad (4.21)$$

$\langle \sigma_z \rangle$ 在 $\text{quench}(h \rightarrow h')$ 后时间演化

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi(t) | \hat{\sigma}_z | \Psi(t) \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_k \langle \Psi(t) | \hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_k | \Psi(t) \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_k \cos \tilde{\theta}_k - \frac{4}{N} \sum_{k>0} \langle \Psi(t) | \cos^2 \tilde{\theta}_k \hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_k - \sin^2 \tilde{\theta}_k \hat{\alpha}_{-k}^+ \hat{\alpha}_{-k} \\
 &\quad + \cos \tilde{\theta}_k \sin \theta_k (\hat{\alpha}_k^+ \hat{\alpha}_{-k} + \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_k) | \Psi(t) \rangle.
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

最终求解得到

$$\langle \Psi(t) | \sigma_z | \Psi(t) \rangle = \frac{2}{N} \sum_{k>0} [\cos 2\beta_k \cos \tilde{\theta}_k - \sin 2\beta_k \sin \tilde{\theta}_k \cos(2t\tilde{E}_q)]. \tag{4.23}$$

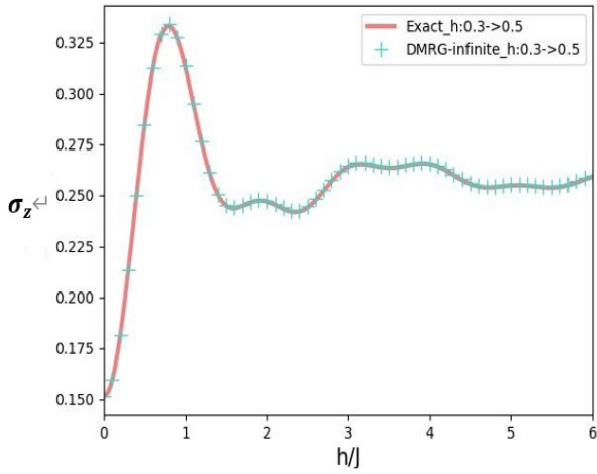


图 4.7 $J = 1, h : 0.3 \rightarrow 0.5$

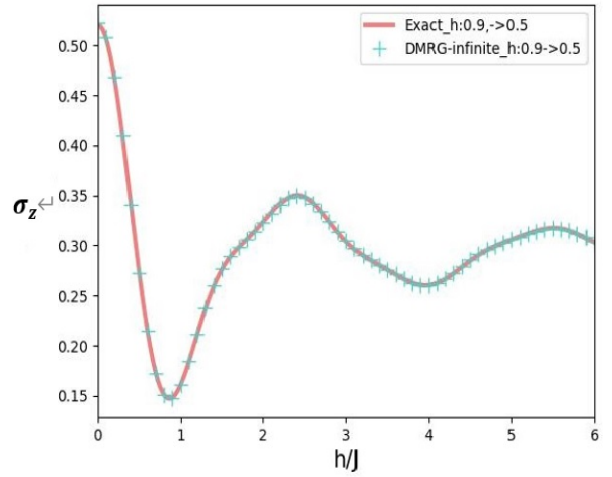


图 4.8 $J = 1, h : 0.9 \rightarrow 0.5$

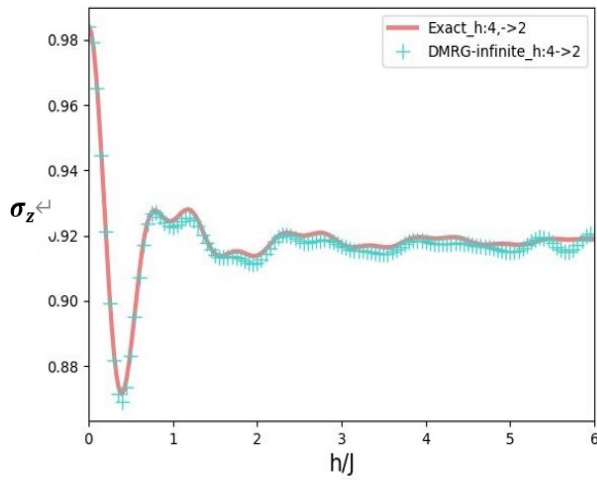


图 4.9 $J = 1, h : 4 \rightarrow 2$

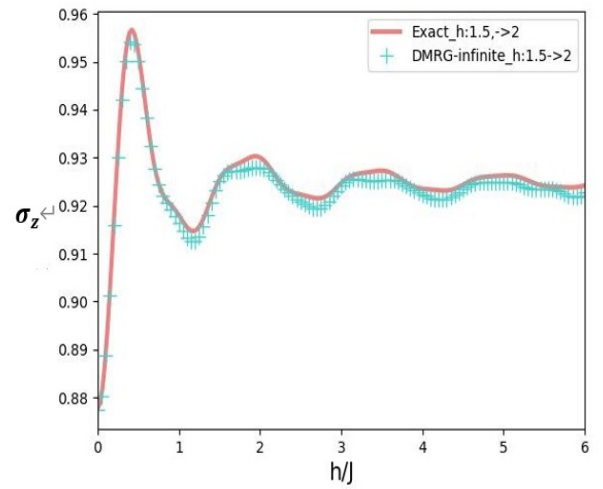


图 4.10 $J = 1, h : 1.5 \rightarrow 2$

上面四张图分别为在四种不同 quench 状态下 σ_z 的时间演化。利用 DMRG-infinite 算

法求解系统基态，再改变哈密顿量的横场项，实现量子淬火 (quantum quench)，利用 TEBD-infinite 研究淬火后 $\langle \sigma_z \rangle$ 的含时演化。

从图中可以看出我们的 DMRG+TEBD(infinite) 算法能够很好的模拟 quench 动力学行为，但是由于 TEBD 算法存在误差，包括 Trotter 分解中只采用了一阶近似以及固定维度截断带来的误差，该含时演化在 T 较大时与解析结果偏差较大。从下图 4.11 中可以看见当 $t > 5$ 左右时，误差已经比较明显，出现了振荡的情形。图 4.12 采取了和图 4.11 一样的 quench 模型 ($h: 1.5 \rightarrow 2$)，但相较于图 4.11 中 30 的截断维度，图 4.12 采取的截断维度为 200。可以保留更多的 SVD 分解时的奇异值，即保留了更多的纠缠信息，因此时间演化更精准。

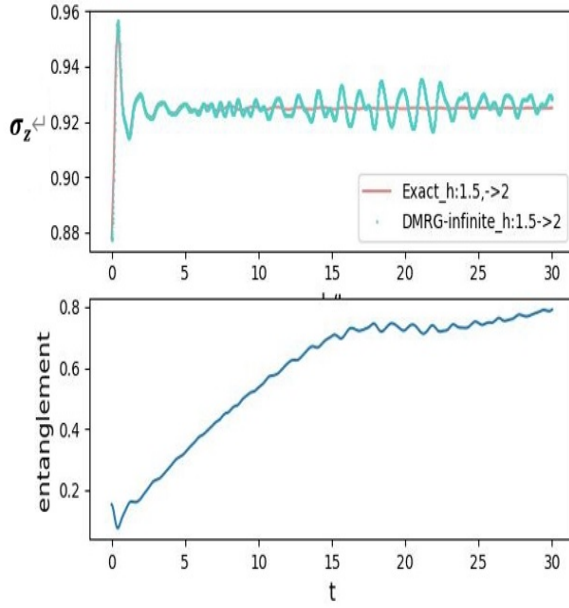


图 4.11 $h: 1.5 \rightarrow 2$ ，固定截断为 30

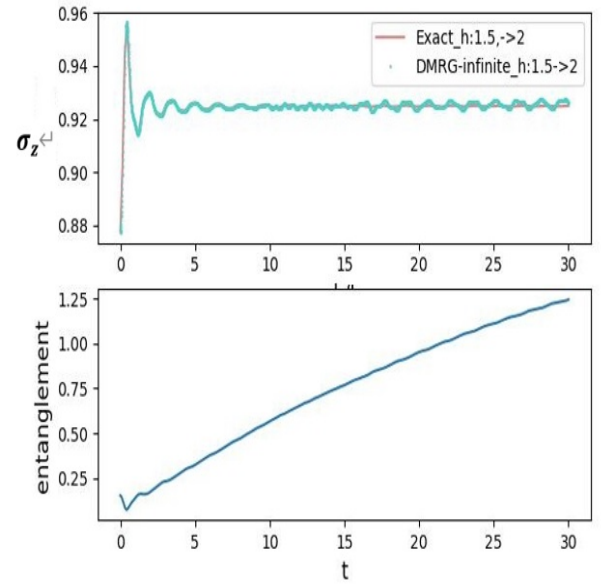


图 4.12 $h: 1.5 \rightarrow 2$ ，固定截断为 100

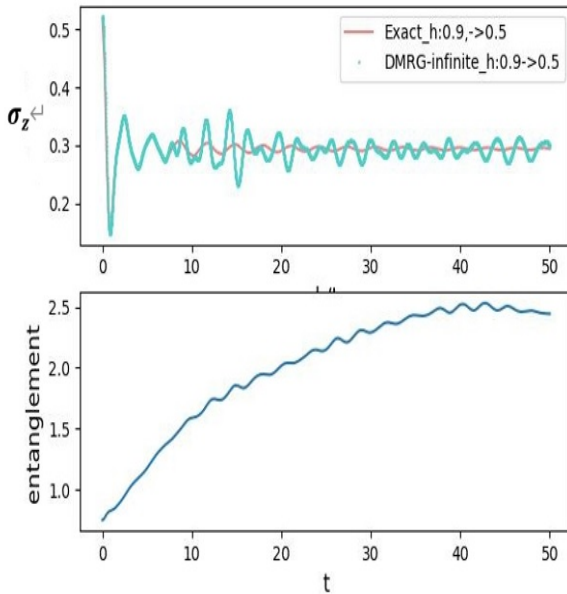


图 4.13 $h: 0.9 \rightarrow 0.5$ ，固定截断为 30

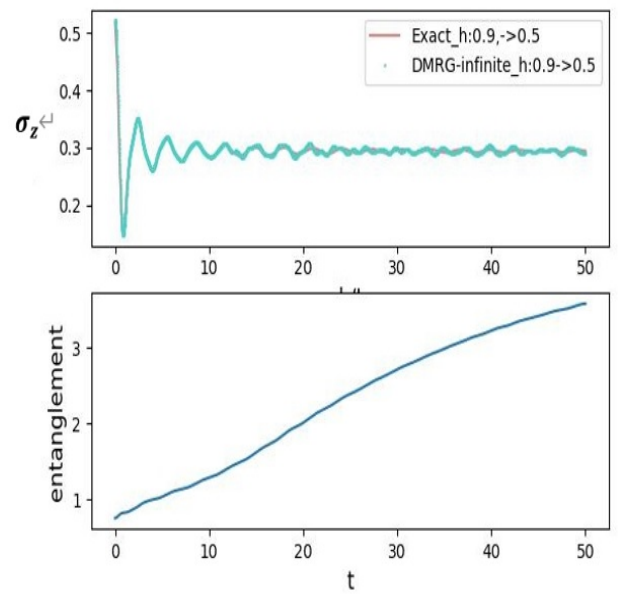


图 4.14 $h: 0.9 \rightarrow 0.5$ ，固定截断为 100

由于更大的截断维度意味着可以在 SVD 分解时保留更多的奇异值，也能得到更大的饱和纠缠熵。因此我们接下来研究纠缠熵在 quench 后随时间演化形式，下图得到了两种 quench 状态下，两种不同截断维度得到的 σ_z 随时间演化以及对于的纠缠熵随时间增加形式。可以看出，更大的截断维度下，纠缠熵的增加更快，并且能够达到的饱和纠缠熵更大。

同样我们可以采用 DMRG+TDVP 算法 [10] 做 quench 动力学演化数值模拟，如图 4.15 所示，其中蓝色实线是解析值，红色 + 线为 DMRG+TDVP 算法的数值解。其中 DMRG 和 TDVP 算法选取的总格点数为 30，固定截断维度为 30. 可以看到由于固定截断维度取值较小，在 $t > 4$ 左右出现误差。

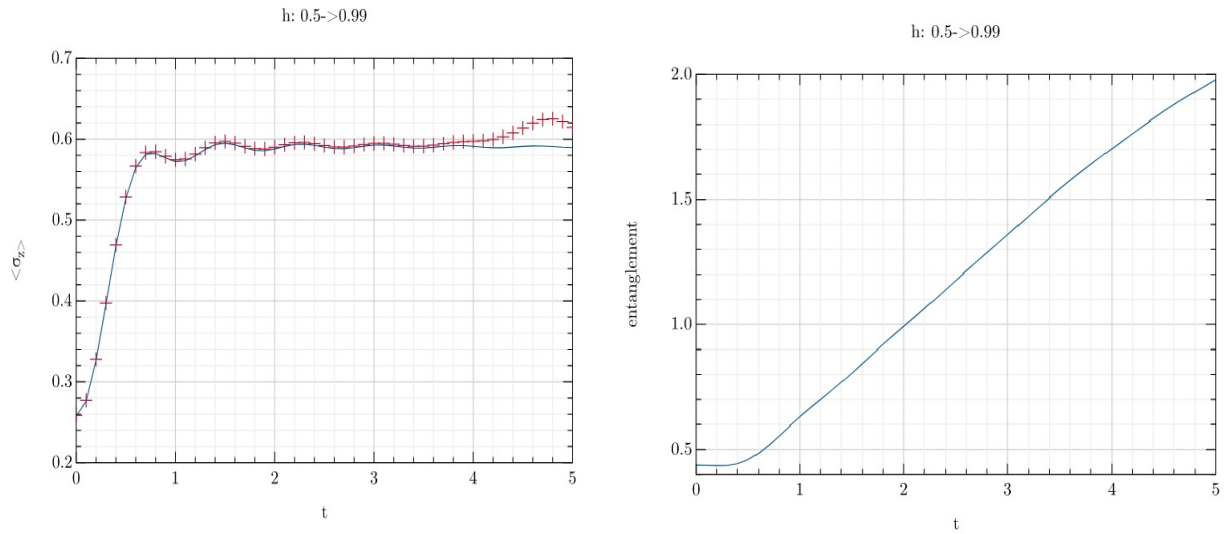


图 4.15 DMRG+TDVP，左图为 σ_z 随时间演化，其中蓝线为解析值，红线为数值解；右图为纠缠熵随时间增加

4.2 一维 XXZ 自旋关联函数

我们考虑一维自旋 $\frac{1}{2}$ 的 XXZ 链，有如下哈密顿量

$$H(\Delta) = \sum_{j=1}^L (\hat{S}_{jj+1}^{xx} + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y + \Delta \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z). \quad (4.24)$$

该系统在热力学极限下的性质为：当 $|\Delta| < 1$ ，系统是量子临界；当 $\Delta > 1$ ，系统基态为反铁磁态；当 $\Delta < -1$ ，系统基态为铁磁态，激发有能隙 [11]。

在接下来的讨论中，我们将系统处于 XX 模型 ($\Delta_0 = 0$) 的基态 $|\Psi_0\rangle$ ，在 $t=0$ 时，给系统施加一个 z 方向外场 $\Delta \in (-1, 1)$ 。接下来我们可以用数值方法来研究模型的自旋关联函数并与 Luttinger Liquid 理论得到的解析表达式相比较。

在统计力学中，关联函数可以衡量系统的有序程度。关联函数刻画了不同时间不同空间的微观变量，比如自旋和密度，是如何联系起来的。具体来说，关联函数能够量化描述

一个微观变量是如何随另一个空间和时间熵的变量而变化。

首先同样用 DMRG 模型求解得到 XX 模型的基态，其中选取的总格点数为 50，固定维度为 30. 计算出其基态能量为 $E_0 = -0.314727$ 与解析值 $E_{XX} = 1/\pi$ 相差 1.1%。如果采用 iDMRG 求解得到基态能量 $E'_0 = 0.31830074$ ，误差为 0.003%。

利用该 MPS 作为基态，我们可以进行实时演化，选取时间步长 $dt = 0.1$ ，固定截断维度为 30. 由于纠缠熵随时间演化迅速增加，我们需要不断增加截断维度来精确的描述系统演化。但由于计算机性能限制，我们选取了较小的截断维度，用来模拟短时间的含时演化。

横向自旋关联函数 $\langle S_i^x S_j^x \rangle$

利用 Luttinger Liquid 理论我们可以得到关于 $\langle S_i^x S_j^x \rangle$ 的解析表达 [11].:

$$\langle S_j^x(t) S_{j+l}^x(t) \rangle \simeq (-1)^l \frac{A^x}{\sqrt{l}} \left| \frac{1}{(2\tilde{v}t)^2} \frac{l^2 - (2\tilde{v}t)^2}{l^2} \right|^{(1/K^2-1)/8}. \quad (4.25)$$

其中

$$\tilde{v} = \frac{\pi \sqrt{1-\Delta^2}}{2 \arccos \Delta}, \quad K = \frac{\pi}{2 \pi - \arccos \Delta}. \quad (4.26)$$

将其与数值结果相比较如图 4.16-4.19:

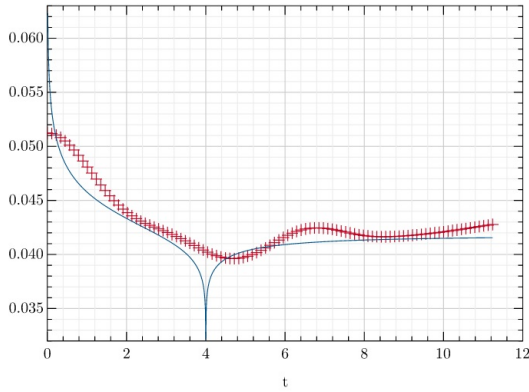


图 4.16 $\Delta = 0.2$, 关联长度 $l = 8$

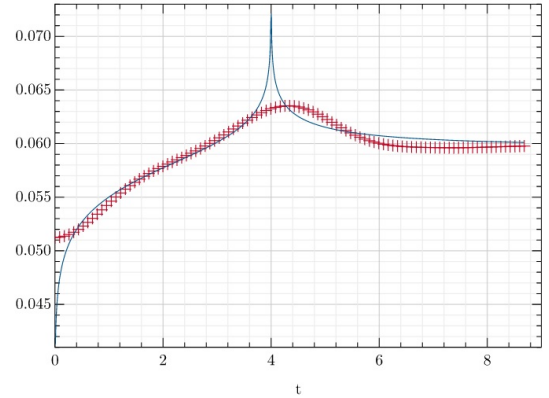


图 4.17 $\Delta = -0.2$, 关联长度 $l = 8$

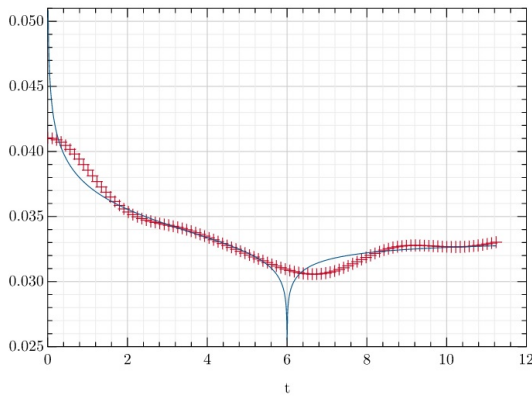


图 4.18 $\Delta = 0.2$, 关联长度 $l = 12$

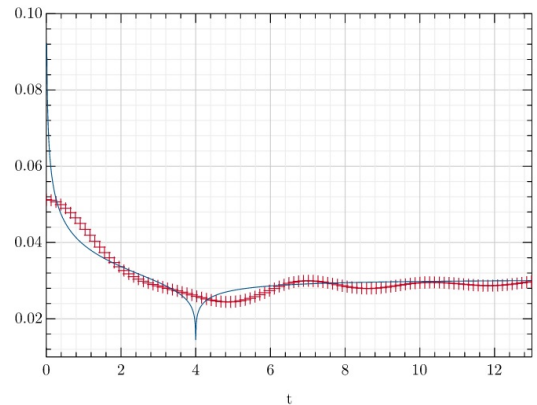


图 4.19 $\Delta = 0.5$, 关联长度 $l = 8$

上图为关联函数在 quench 后的时间演化，横轴为时间 t ，纵轴为关联函数 $\langle S_j^x S_{j+l}^x \rangle$ ，蓝色实线为 LL 理论得到的解析解，红色线为 DMRG+TDVP 的数值解。由图像可以得出：(i) 在光锥 $2vt = l$ 处，解析值是奇点，数值解是最大值；(ii) 当 $1 \ll 2vt \ll l$ 时，关联函数随时间指数形式下降 $t^{-\alpha}$ ，该指数 α 的正负性与 Δ 的正负性一致。(iii) 对于长时演化 $2vt > l$ ，关联函数达到稳定值，该值随着两点关联距离增加而下降。

第五章 总结与展望

总结

张量网络算法能够帮着我们更好地研究量子量子系统，它不仅可以得到哈密顿量的基态，也可以得到系统的时间演化。当我们有了波函数精确的数值描述，我们可以计算局域物理观测量，系统的纠缠，关联函数等等，这些性质可以帮助我们更好地理解量子多体系统。该研究方向被大家关注并不断有新的进展，自 White 在 1992 年提出 DMRG 算法，经过近 20 年的发展，张量网络算法不断丰富。从 MPS 到二维的 PEPS，从 DMRG 到 TEBD 以及 TDVP 算法，包括现在张量网络和机器学习相结合 [12]，诞生出了更有趣和高效的算法。

本文在第一章介绍了最基础的用来描述一维量子系统的张量网络——矩阵乘积态 (MPS)，介绍了如何利用 SVD 分解构造 MPS；MPS 的纠缠熵和混合正交形式。第二详细章介绍了跟 MPS 相关的三种张量网络算法：DMRG、TEBD 和 TDVP，这三种算法既可以求解哈密顿量的基态，也可以研究系统的含时演化。第三章主要利用 quantum quench 的思想具体研究了一维横场伊辛模型和一维海森堡模型。本文数值求解了横场伊辛的 z 方向磁化 $\langle \sigma_z \rangle$ 以及 XXZ 模型的自旋关联函数 $\langle S_i^x S_j^x \rangle$ ，并将其与得到的解析表达式相比较。

本论文部分代码使用了 ITensor 和 TenPy 库，文中全部代码可在 <https://github.com/Jihong-Wu/Final-Year-Project> 查看。

展望

我们利用这些算法更深入地研究伊辛模型的跨相动力学演变，分析关联函数的演化形式。量化地探讨这些算法的相关误差并可以试图寻找优化形式以及研究纠缠熵在演化过程的变化形式，探讨其与误差的关系。另外我们也可以进一步从 MPS 到二维系统的研究，学习系统纠缠投影对态 (Projected entangled-pairstate, PEPS)，二维玻色子的 MERA 算法。随着张量网络领域的不断发展，我们对于量子多体系统的理解也会越来越清晰和深入。

参考文献

- [1] Papić Z. Weak ergodicity breaking through the lens of quantum entanglement[J]. *arXiv preprint arXiv:2108.03460*, 2021.
- [2] Schollwöck U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states[J]. *Annals of physics*, 2011, 326(1):96--192.
- [3] Hauschild J, Pollmann F. Efficient numerical simulations with tensor networks: Tensor network python (tenpy)[J]. *SciPost Physics Lecture Notes*, 2018. 005.
- [4] Vanderstraeten L, Haegeman J, Verstraete F. Tangent-space methods for uniform matrix product states[J]. *SciPost Physics Lecture Notes*, 2019. 007.
- [5] Pirvu B, Murg V, Cirac J I, et al. Matrix product operator representations[J]. *New Journal of Physics*, 2010, 12(2):025012.
- [6] Vidal G. Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations[J]. *Physical review letters*, 2003, 91(14):147902.
- [7] Haegeman J, Cirac J I, Osborne T J, et al. Time-dependent variational principle for quantum lattices[J]. *Physical review letters*, 2011, 107(7):070601.
- [8] Haegeman J, Lubich C, Oseledets I, et al. Unifying time evolution and optimization with matrix product states[J]. *Physical Review B*, 2016, 94(16):165116.
- [9] Sachdev S. Quantum phase transitions[M]. Cambridge university press, 2011.
- [10] Fishman M, White S R, Stoudenmire E M. The itensor software library for tensor network calculations[J]. *arXiv preprint arXiv:2007.14822*, 2020, 28.
- [11] Collura M, Calabrese P, Essler F H. Quantum quench within the gapless phase of the spin-1/2 heisenberg xxz spin chain[J]. *Physical Review B*, 2015, 92(12):125131.
- [12] Carleo G, Troyer M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks[J]. *Science*, 2017, 355(6325):602--606.

致 谢

四年时间飞逝，如今迎来了我的毕业季。四年前我带着对大学生活的无限憧憬来到兰州，经过系统的课程学习和数不清的考试，我如今也能坦然地说步入物理殿堂的大门了。大学的学习和生活经历带给我更重要的意义是，塑造了我的思维方式和价值观念：我不再盲信于所谓权威，拥有敢于挑战和质疑的勇气；我对未来发展逐渐有了清晰认识；我认识到生命可以如此绚丽丰富；我所希望的是自己能够完善，正确地认识世界而已。

首先我想向陆汉涛老师表达感谢。本科期间有幸上过陆老师讲的线性代数和理论力学，他严谨的推导教学和颇具挑战的课后习题对我的课程学习有不小的帮助。之后我便跟着陆老师开展了科研实践训练、校创以及毕业论文。陆老师对待学生温和耐心，能够给我及时有效的指导，并且组织开展了针对本科生的科研讨论班。在这讨论班上我听过来自不同年级同学做的文献阅读以及科研报告，也曾自己上台展示过。通过这种课堂外的学习，拓展了我的知识面也促进了对学习的能动性，因此我很感谢陆老师能够开展这样的讨论班也感谢讨论班上一起进步的同学们。这四年间自己也有幸获得了来自学长学姐们的建议帮助、学弟学妹们的认可以及朋友们的陪伴鼓励，对这些点滴回忆我会牢记并充满感激，祝福大家实现自己的理想。最后我要特别感谢我的父母，感谢他们对我一直以来的支持和包容。父母给予了我无限的力量面对生活中的失落沮丧，也同我分享平淡日常生活的乐趣。

对即将到来的研究生学习，我如同四年前一般充满着期待，只是这次似乎有着更明确的追求。即将离开母校兰大，在最后衷心祝愿她在西北绽放光彩。