

# 费米子多体系统观测量的基于格林函数的计算

余荫铠<sup>\*†</sup>

中山大学 物理学院, 广州 510275

**摘要：**行列式量子蒙特卡罗算法 (DQMC) 通过引入辅助规范场来将费米子多体相互作用转化为单体和局域场的相互作用, 并将巨正则系综的费米子自由度积掉, 用行列式来表示配分函数。DQMC 中的观测量可以由等时格林函数直接计算, 量子蒙特卡罗的辅助场构型储存、Markov 抽样过程也可以几乎完全由格林函数控制。笔者最后提出了一个猜想, 认为 Markov 抽样时序可以不依赖于虚时演化时步, 从而 DQMC 过程完全由格林函数的演化控制。

**关键词：**格林函数, 量子蒙特卡罗, 辅助场, 观测量, 费米子多体系统

## 1 引言

最近一年来, 笔者与阴帅<sup>1</sup> (S. Yin) 老师、曾植同学一起从事费米子多体系统预热化动力学普适理论的研究, 研究所用到的工具包括一个重要的数值计算方法, 行列式量子蒙特卡罗算法 (Determinant Quantum Monte Carlo, DQMC)。

DQMC 方法通过引入额外的辅助场自由度使费米子多体相互作用形式上解耦为单体和局域场的相互作用, 从而可以使用矩阵运算结合量子蒙特卡罗 (QMC) 的 Markov 方法来求解费米子多体系统在有限温度的巨正则系综问题和零温的基态和虚时演化问题。从量子力学学习的角度而言, DQMC 方法作为一种从量子力学衍申出来的数值方法, 本身却也已经包含量子力学最重要的物理哲学思想, 即规范场 (gauge field) 的思想、一个数学上先验的过程 (定积分的逆运算) —— 引入局域的场量来构造系统的不可观测状态, 并保持可观测量的不变性。从 DQMC 这样一个简单而直观的数值手段来理解规范场, 即使对非相关领域的学习者也是很有好处的。

格林函数 (Green's function) 取代了配分函数在 DQMC 计算中的核心地位。Markov chain 的更新、观测量的计算都依赖于格林函数, DQMC 方法的高效性也来源于这种结构。DQMC 的局限性和进一步发展方向也都可以格林函数中看出。

本文以格林函数为线索梳理 DQMC 的思路。在第2节我们首先介绍 DQMC 的基础, 包括行列式量子蒙特卡罗的“行列式”变换、辅助场的引入、Markov 方法的统计思想; 作为蒙特卡罗方法最重要的两方面, 一是如何将可观测量与辅助场联系起来, 这是我们在第3节讲述的内容; 另一方面是如何具体数值模

<sup>\*</sup>学号: 20343078

<sup>†</sup>邮箱: [yuyk6@mail2.sysu.edu.cn](mailto:yuyk6@mail2.sysu.edu.cn)

<sup>1</sup>中山大学物理学院, <https://spe.sysu.edu.cn/node/3079>

拟辅助场的演化，我们将在第4节讲述；最后第5节我们分析该方法可能的发展方向，并提出笔者个人的思考。本文所用的 DQMC 框架来自 F. F. Assaad 在 2002 年的 Lecture Notes<sup>[1]</sup>，同时主要参考了国内孟子杨 (Meng, Zi Yang) 组的笔记和文章<sup>2</sup>。本文只综述算法思路，与本组的具体研究内容无关，也不涉及未发表的原创成果。本文略去了诸多推导细节，这些细节都可以在对应的参考文献中查到。

## 2 DQMC 的基础

DQMC 既可以研究有限温度的巨正则系综问题，也可以在零温下的求解基态或者动力学问题，后者可以看作前者的极限情况，因此我们下面只分析有限温度的情形。该问题的直接求解对象就是观测量的期望  $\langle \hat{O} \rangle$ ，可以用配分函数  $Z$  来定义

$$Z = \text{tr} e^{-\beta H} \quad (1)$$

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr} (e^{-\beta H} \hat{O}) \quad (2)$$

量子蒙卡的前提是 Trotter 分解<sup>[2]</sup>，这里是将热力学演化算符（或曰 Boltzman 因子）在虚时方向上分解成  $m$  个虚时切片

$$e^{-\beta H} = (e^{\Delta\tau H})^m + O(\Delta\tau^2) \quad (3)$$

其中  $m\Delta\tau = \beta$ ， $\Delta\tau$  具有虚数时间量纲，谓之虚时。如果体系的哈密顿量是费米子产生湮灭算符的二次型，则对于每个虚时切片，求迹的结果可以写成行列式

$$\text{tr} (e^{-\Delta\tau \sum_{ij} c_i^\dagger h_{ij} c_j}) = \det (1 + e^{-h\Delta\tau}) \quad (4)$$

上式在哈密顿量的对角化表象中容易得到证明<sup>[1]</sup>，其中需要利用到费米子的性质  $c_k^\dagger c_k + c_k c_k^\dagger = 1$  和  $c_k c_k = 0$ ，因此这个方法只是用于处理费米子系统的。这实际上是把费米子自由度积掉，用容易数值上表示（不代表一定高效）的行列式替代了数值上不容易处理的 Grassmann 数和费米子统计<sup>[3]</sup>。上式对于多个虚时切片即写为

$$\text{tr} \left( \prod_{i=1}^m e^{-\Delta\tau \sum_{ij} c_i^\dagger h_{ij} c_j} \right) = \det \left( 1 + \prod_{i=1}^m e^{-h\Delta\tau} \right) \quad (5)$$

这就是 DQMC 中的 Determinant 之所在。目前我们写出的各个虚时切片是完全一致的，还不需要 Markov 方法来作统计。

实际要求解的体系的哈密顿量往往不是费米子产生湮灭算符的二次型，这是多体相互作用的耦合 (couple) 结果。我们举强关联系统中最简单的 Hubbard 模型为例来说明如何引入辅助场来解耦合 (decouple)，将多体相互作用转化为单体和局域场的相互作用。Hubbard 模型的哈密顿量为

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.} + U \sum_i \left( n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (6)$$

其中  $\langle ij \rangle$  表示跃迁发生在最近邻格点。跃迁项中只包含二费米子算符，符合上面转换成行列式的条件；而 Hubbard 相互作用项包含四费米子算符，需要 decouple 成二费米子的形式。decouple 的方式不是唯一的，不同的 decouple 方式会导致费米子负符号问题的有无。下面我们采用最典型的 Hubbard-Stratonovich (HS)

<sup>2</sup><https://quantummc.xyz/teaching/>

变换的 Hirsch 离散形式 [4]

$$e^{-\Delta\tau U(n_{i\uparrow}-\frac{1}{2})(n_{i\downarrow}-\frac{1}{2})} = \gamma \sum_{s_i=\pm 1} e^{\alpha s_i (n_{i\uparrow}-n_{i\downarrow})} \quad (7)$$

其中  $\gamma = \frac{1}{2}e^{-\Delta\tau U/4}$ ,  $\alpha = \cosh^{-1} e^{\Delta\tau U/2}$  是常数因子, 而四费米子 Hubbard 相互作用转化为了二费米子与局域二分辅助场  $s_i = \pm 1$  的相互作用。HS 变换是高斯积分 (定积分) 的离散形式的逆运算, 这在数学上是先验的, 是一种规范变换, 引入的辅助场是规范场。HS 变换也有不同的形式上面 Hirsch 的是最简单的, 不过它破坏了自旋的 SU(2) 对称性, Assaad 在 [1] 中给出了不破坏 SU(2) 的形式, 在 [5] 中他还给出了非 Hubbard 的更一般的四费米子项的 decouple 方式, 需要引入四分量的辅助场, 这里都不作展开了。

综上所述, 我们对第  $l$  ( $l = 1, 2, \dots, m$  个虚时切片的每一处格点的 Hubbard 局域相互作用项都做局域的 Hirsch 离散形式的 HS 变换, 每一个格点的辅助场都有两个可能的取值, 则第  $l$  个虚时切片上的辅助场总构型  $[s(l)]$  有  $2^N$  种,  $N$  为格点数。该虚时切片上的哈密顿量相互作用项的二次型为  $\sum_{ij} c_i^\dagger h_{ij}^{[s(l)]} c_j$ , 方括号表示该二次型是场的空间构型的泛函。对于 (7) 所示的 HS 变换, 该二次型还是对角的, 且自旋向上和自旋向下两个分块反对称, 二次型的系数矩阵可以写为

$$h^{[s(l)]} = \alpha \text{diag} \begin{pmatrix} s_{1\uparrow} & \dots & s_{N\uparrow} \end{pmatrix} \oplus \text{diag} \begin{pmatrix} s_{1\downarrow} & \dots & s_{N\downarrow} \end{pmatrix} \quad (8)$$

而 Hubbard 最近邻 hopping 项的二次型系数矩阵  $T$  则是只在次对角线上有元素  $-t$ 。总的热力学演化算符是总共  $m$  个虚时切片的连乘, 每个虚时切片上的辅助场空间构型  $[s(l)]$  可以是不同的, 由此构成了总的  $d+1$  维时空构型  $[s[l]]$ , 内侧的圆括号改为了方括号, 表示总时空构型是时间构型的泛函。根据 HS 变换, decouple 前的热力学演化算符要写为 decouple 后的所有辅助场时空构型的和, 即

$$e^{-\beta H} = \sum_{[s[l]]} \left[ \gamma^{Nm} \prod_{l=0}^m \left( e^{-\sum_{ij} c_i^\dagger h_{ij}^{[s(l)]} c_j} e^{-\Delta\tau \sum_{ij} c_i^\dagger T_{ij} c_j} \right) \right] \quad (9)$$

这里最外层的求和一共有  $2^{Nm}$  项。则配分函数为

$$Z = \text{tr} e^{-\beta H} = \sum_{[s[l]]} \left\{ \gamma^{Nm} \left[ 1 + \prod_{l=0}^m \left( e^{-h^{[s(l)]}} e^{-T\Delta\tau} \right) \right] \right\} \quad (10)$$

被求和的因子, 按照量子蒙卡的思路, 就是这种时空构型的权重, 即出现的概率

$$W[s[l]] = \frac{1}{Z} \left[ 1 + B^{[s[l]]}(\beta, 0) \right] \quad (11)$$

其中消去了每一项都有的常数因子, 并记  $B^{[s[l]]}$  为被积掉了费米子算符的传播子的系数矩阵

$$B^{[s[l]]}(l_2\Delta\tau, l_1\Delta\tau) = \prod_{l=l_1}^{l_2} \left( e^{-h^{[s(l)]}} e^{-T\Delta\tau} \right) \quad (12)$$

对于该巨正则系综求观测量  $\hat{O}$  的期望  $\langle \hat{O} \rangle$ , 即求  $\hat{O}$  在每一种构型下的期望  $\langle \hat{O} \rangle^{[s[l]]}$  再加权平均

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{tr} (e^{-\beta H} \hat{O})}{\text{tr} (e^{-\beta H})} = \sum_{[s[l]]} W[s[l]] \langle \hat{O} \rangle^{[s[l]]} + O(\Delta\tau^2) \quad (13)$$

这种按构型加权平均的统计正是 QMC 所擅长的，只需要构造 Markov chain 对构型进行时序采样，使构型之间的跃迁概率和构型出现的概率达到细致平衡条件即可，这样对 Markov chain 所历经的各构型作统计就可以无偏地估计对全部  $2^{N_m}$  种构型的统计结果。不同的 QMC 算法有不同的构型之间的跃迁概率构造方式，最典型的是 Metropolis–Hastings 算法 [6]。至此，我们已经实现了 DQMC 中 D 的变换，也将观测量的估计与 QMC 粗糙地联系起来了。如果不考虑算力限制的话，这种 DQMC 已经可以实现观测量的计算了。但是事实上这一流程的计算量是相当大的，当系统尺寸足够大时，计算行列式是一件很吃力的事情，而且计算每一个构型的权重还要计算  $m$  个矩阵的乘积，这使 Markov chain 的采样效率非常低。

### 3 基于格林函数计算观测量

如果可以用格林函数来计算观测量，而且计算格林函数时不需要进行对  $m$  个虚时切片的全局计算，那么就有可能大大提高观测量的计算效率。这要求我们提前在解析上进行推导，而不是依赖于配分函数进行统计。

定义等时格林函数为

$$G_{ij} = \langle c_i c_j^\dagger \rangle \quad \bar{G}^{[s]} = \mathbf{1} - G^{[s]} \quad (14)$$

不同的定义有可能会相差一个负号。等时格林函数其实是一个二费米子的观测量。下面我们先计算任意二费米子不含时观测量  $\hat{O} = \sum_{ij} c_i^\dagger O_{ij} c_j$  的表达式。为表述方便，在虚时  $\tau$ ，记该时刻之后的和该时刻之前的传播子系数矩阵分别为

$$B^< = B^{[s[l]]}(\beta, \tau) \quad B^> = B^{[s[l]]}(\tau, 0) \quad (15)$$

则对于某一构型而言，二费米子算符的观测量的期望为

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle^{[s[l]]} &= \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \det (\mathbf{1} + B^< e^{\eta \hat{O}} B^>) \Big|_{\eta=0} \\ &= \frac{\partial}{\partial \eta} \text{tr} \ln (\mathbf{1} + B^< e^{\eta \hat{O}} B^>) \Big|_{\eta=0} \\ &= \text{tr} [B^> (\mathbf{1} + B^< B^>)^{-1} B^< \hat{O}] \\ &= \text{tr} \{ [\mathbf{1} - (\mathbf{1} + B^> B^<)] \hat{O} \} \end{aligned} \quad (16)$$

其中第二个等号用了量子力学中常用的技巧  $\ln \det A = \text{tr} \ln A$ ，第四个等号使用了 Sherman-Morrison 公式 [7]。结合 (15)(16) 即可得到格林函数的表达式

$$G^{[s]} = (\mathbf{1} + B^> B^<)^{-1} \quad (17)$$

那么任意二费米子的期望都可以由格林函数来计算

$$\langle \hat{O} \rangle^{[s[l]]} = \text{tr} (\bar{G}^{[s]} \hat{O}) \quad (18)$$

对于三费米子、四费米子等观测量，都可以通过 Wick 定理 [8] 转化为二费米子观测量的乘积和求和，其中一个非常常用的公式是四费米子的

$$\langle c_{x2}^\dagger c_{y2} c_{x1}^\dagger c_{y1} \rangle^{[s[l]]} = \langle c_{x2}^\dagger c_{y1} \rangle^{[s[l]]} \langle c_{y2} c_{x1}^\dagger \rangle^{[s[l]]} + \langle c_{x2}^\dagger c_{y2} \rangle^{[s[l]]} \langle c_{x1}^\dagger c_{y1} \rangle^{[s[l]]} \quad (19)$$

由此，计算观测量的核心就在于计算格林函数。而且，我们下面将看到，随着构型的改变，我们可以直接更新格林函数，而不是根据定义 (17) 重新计算格林函数。这样，等时格林函数矩阵作为一个只有  $d$  维度空间分量的矩阵，本身却起着储存辅助场的  $d+1$  维时空构型的作用，我们的 Markov chain 实际上就是时序更新等时格林函数。

#### 4 基于格林函数更新辅助场时空构形

按照经典的 Markov 抽样方法，在每个虚时随机选择一个空间位置局域试探性地改变场的分量，并根据改变前后的构型权重比值来计算接受这一改变的概率。我们把这个在第 1 个虚时切片上探性地改变之后的场记为  $[s'(l)]$ ，改变后的构型的权重为

$$W[s'[l]] = \det \left[ \mathbf{1} + B \left( \mathbf{1} + \Delta^{[s's]} \right) B \right] \quad (20)$$

其中

$$\mathbf{1} + \Delta^{[s's]} = e^{-\left(h^{[s'(l)]} - h^{[s(l)]}\right)} \quad (21)$$

我们把  $\Delta^{[s's]}$  叫做 flipping 矩阵。实际上我们不需要用行列式计算每一种构型的权重，只是关心改变前后的权重比值，即

$$R(s', s) = \frac{W[s'[l]]}{W[s[l]]} = \frac{\det \left[ \mathbf{1} + B \left( \mathbf{1} + \Delta^{[s's]} \right) B \right]}{\det \left[ \mathbf{1} + B \right]} = \det \left( \mathbf{1} + \Delta^{[s's]} \bar{G}^{[s]} \right) \quad (22)$$

上式第二个等号的证明仍需要用到 Sherman-Morrison 公式，具体的推导参见 [3]。而且往往对于常用的每个虚时只改变一个分量的情况， $\Delta^{[s's]}$  只有一个不为零的矩阵元，于是上式的行列式其实只要算一项，即

$$R(s', s) = 1 + \Delta_{ii}^{[s's]} \bar{G}_{ii}^{[s]} \quad (23)$$

总之，我们知道，在 Markov 时序抽样中，是否更新辅助场的概率还是由格林函数控制的，完全不需要计算构型的权重，配分函数、权重因子不会出现在实际的计算中。

等时格林函数作为时空构型的储存器，在构型发生更新时，自然是要随着更新的。根据格林函数的定义，容易推出 [3]

$$G^{[s']} = \left[ \mathbf{1} + \left( \mathbf{1} + \Delta^{[s's]} \right) B \right]^{-1} = G^{[s]} \left( \mathbf{1} + \Delta^{[s's]} \bar{G}^{[s]} \right)^{-1} \quad (24)$$

且对于单位点 flipping 而言， $\Delta^{[s's]}$  只有一个不为零的矩阵元，上式求逆的复杂度也可被省略

$$G^{[s']} = G^{[s]} - \frac{G_{ii}^{[s]} \Delta_{ii}^{[s's]} \bar{G}_{ii}^{[s]}}{1 + \Delta_{ii}^{[s's]} \bar{G}_{ii}^{[s]}} \quad (25)$$

总之，可见该虚时切片上的新格林函数只依赖于旧格林函数和 flipping 矩阵。

而按照 Markov 抽样的步骤，下一次试探性的 flipping 在下一个虚时切片上进行，于是我们需要根据该时刻的等时格林函数计算下一个时刻的格林函数，即

$$G^{[s']}(\tau + \Delta\tau) = B(\tau + \Delta\tau, \tau) G^{[s]}(\tau) B^{-1}(\tau + \Delta\tau, \tau) \quad (26)$$



可见,在整个 DQMC 的实际计算中,只有这一步出现了单虚时切片的虚时传播子系数矩阵  $B(\tau + \Delta\tau, \tau)$ 。这意味着在虚时演化的过程中,除了格林函数是用来储存时空构型之外,还需要一个单虚时切片  $B(\tau + \Delta\tau, \tau)$  来储存空间构型,因为这是无法被已经积掉时间自由度的等时格林函数还原的。因此也要随着 Markov chain 而更新,如果 flipping 被接受,则下一时刻的虚时传播子系数矩阵为

$$B(\tau + 2\Delta\tau, \tau + \Delta\tau) = (\mathbf{1} + \Delta[s's]) B(\tau + \Delta\tau, \tau) \quad (27)$$

如果 flipping 未被接受,则保持不变。

## 5 发展方向

DQMC 基于二次型的系数矩阵的运算,自然有两个明显的局限性。一个是符号问题,另一个是数值稳定性问题。前者是指,在 Markov 抽样过程中,接受概率作为构型权重的比值,有可能出现负数或复数的情况,这时它就失去了概率的意义,也就无法类比到经典热统的细致平衡问题了,Markov 抽样就会失效。符号问题的产生与 decouple 的具体形式有关,也许计算时选取的表象有关,然而已有研究证明符号问题是一个 NP-hard 的问题,不存在符号问题的通用的解决方案,这就给 DQMC 的应用场景带来一定的限制。所幸有一大类很有用的系统,比如半满 Hubbard 模型,可以被证明构型权重是实正定的,就不会产生符号问题。另一个问题,数值稳定性问题,现在已经有许多成熟的办法解决。数值稳定性问题来源于能带较宽、耦合较强的系统其虚时演化矩阵的条件数比较大,小尺度的特征值会在矩阵的连乘中被大尺度特征值洗掉(由于计算机存在的系统误差),现有的成熟方法的思路都是,在演化的过程中同时进行正交化,使大小尺度分别演化,最后再叠加。

除了本文所述的利用格林函数来简化 DQMC 基本方案中进行观测量计算、行列式计算的复杂度之外,还有一些其他的减少计算量的方案。比如自适应 DQMC 方法 [9],在计算 Markov flipping 接受概率时,用放弃最近邻近的有效玻色子哈密顿量来替代费米子哈密顿量,非最近邻的有效玻色子相互作用权重通过机器学习来调控。

此外,笔者在整理思路的过程中发现,本文所述的 DQMC 方案,几乎完全是由格林函数来储存辅助场时空构型、控制 Markov 抽样过程的。最终落实的计算过程除了 (26) 之外,只需要计算格林函数和 flipping 矩阵,而 (26) 却还是需要额外的  $B$  矩阵来储存辅助场的空间构型。这是一个遗憾之处。笔者的一个猜想是,也许 (26) 不是必要的,即或许不需要在观测量的估计过程中移动所求的虚时刻,虚时演化不一定要和 Markov 抽样的时序捆绑。毕竟仅由格林函数控制的 Markov 更新过程已经足以满足细致平衡条件了。笔者目前的研究方向不在 DQMC 算法本身,因此这一猜想还有待以后验证。

## 参考文献

- [1] ASSAAD F F. Quantum monte carlo methods on lattices: The determinantal approach[J]. Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, 2002, 10: 99-147.
- [2] HATANO N, SUZUKI M. Finding exponential product formulas of higher orders[M/OL]. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2005: 37-68. [https://doi.org/10.1007/11526216\\_2](https://doi.org/10.1007/11526216_2).
- [3] LIU Z H. A brief introduction of dqmc study in itinerant quantum critical point[J]. 2018.
- [4] HIRSCH J E. Discrete hubbard-stratonovich transformation for fermion lattice models[J/OL]. Phys. Rev. B, 1983, 28: 4059-4061. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.28.4059>.

- [5] ASSAAD F F, IMADA M, SCALAPINO D J. Charge and spin structures of a  $d \times 2 - y_2$  superconductor in the proximity of an antiferromagnetic mott insulator[J]. Physical Review B, 1997, 56(23): 15001.
- [6] HASTINGS W K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications[J/OL]. Biometrika, 1970, 57(1): 97-109. <https://doi.org/10.1093/biomet/57.1.97>.
- [7] Abstracts of Papers[J/OL]. The Annals of Mathematical Statistics, 1949, 20(4): 620 - 624. <https://doi.org/10.1214/aoms/1177729959>.
- [8] WICK G C. The evaluation of the collision matrix[J/OL]. Phys. Rev., 1950, 80: 268-272. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.80.268>.
- [9] XU X Y, QI Y, LIU J, et al. Self-learning quantum monte carlo method in interacting fermion systems[J/OL]. Phys. Rev. B, 2017, 96: 041119. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.041119>.

## Calculation of observation of fermion multibody system based on Green's function

Yinkai Yu

*School of Physics, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China*

**Abstract:** The Determinant Quantum Monte Carlo algorithm (DQMC) transforms the fermion multi-body interaction into the interaction between the single-body and the local auxiliary gauge field. With the fermion degree of freedom of the giant canonical ensemble integrated, the partition function is expressed by a determinant. The observations in DQMC can be calculated directly by equal time Green's function, and the auxiliary field configuration storage and Markov sampling process of quantum Monte Carlo can be almost completely controlled by Green's function. Finally, the author puts forward a conjecture that the Markov sampling time series can be independent of the virtual time evolution step, so that the DQMC process is completely controlled by the evolution of Green's function.

**Key words:** Green's function, Quantum Monte Carlo, auxiliary field, observation, fermion multibody system.