张量网络算法基础（三）
格点模型基础

冉仕举

首都师范大学物理系

2020年春

本章目录

3. 格点模型基础

3.1 量子态与量子算符：基本定义

- **态矢**与**算符**，是量子力学及量子信息中最重要的概念之二
- **态矢**（state vector），代表量子态的状态，可标记为$|\varphi\rangle$；**算子或算符**（operator），定义为对态矢或算子的操作，可记为$\hat{O}$。
- 态矢和算子所在的空间，被称为**希尔伯特空间**
- **定义态矢和算子的是那些与基矢选择无关的性质：**
  a. 内积：$\langle\psi|\varphi\rangle$（保真度），$\langle\varphi|\hat{O}|\varphi\rangle$（均值或观测量）等
  b. 迹（trace）：trace($\hat{O}$)；**c. 对易子：**$[\hat{O},\hat{P}] = \hat{O}\hat{P} - \hat{P}\hat{O}$
  d. 本征关系 $\hat{O}|\varphi\rangle = O|\varphi\rangle$

3.1 量子态与量子算符

- 例：**泡利算符**$\hat{\sigma}^x$，$\hat{\sigma}^y$，$\hat{\sigma}^z$
- 满足如下性质：$\left[\hat{\sigma}^a, \hat{\sigma}^b\right] = 2i\varepsilon_{abc}\hat{\sigma}^c$，$(\hat{\sigma}^a)^2 = -i\hat{\sigma}^x\hat{\sigma}^y\hat{\sigma}^z = I$
- 自旋算符给出了SU(2)群的生成元

- **态矢与算子在给定基矢下的展开系数，可由向量或矩阵表示**
  基矢：定义为一组态矢$\{|i\rangle\}$，满足正交完备性

$$\langle i|i'\rangle = \delta_{ii'}, \qquad \sum_i |i\rangle\langle i| = I$$

基矢与系数

注：（a）**狄拉克矩阵**$\delta_{ii'}$ =1当$i = i'$，否则$\delta_{ii'} = 0$；
（b）在特殊情况下，基矢可以不正交，也可以不完备或过完备；
（c）$|i\rangle\langle i| = |i\rangle \otimes \langle i|$，$\otimes$ 称为直积、张量积、外积或克伦内克积。

3.1 量子态与量子算符：基矢与系数

- **例：**$\hat{\sigma}^z$的两个本征态，记为$|\uparrow\rangle$与$|\downarrow\rangle$（在量子信息与量子计算领域，常被记作为$|1\rangle$与$|0\rangle$，与经典比特的两个状态相对应），其本征值分别为1与-1。
- $|\uparrow\rangle$与$|\downarrow\rangle$构成一组正交完备基矢，满足$\langle i|i'\rangle = \delta_{ii'}$，$|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = I$
- 设定该组基矢的矢量表示为：
$\left|1\right\rangle = \sum_{s=0}^{1} \phi_s \left|s\right\rangle$，系数$\phi = [1 \quad 0]^T$；$\left|0\right\rangle = \sum_{s=0}^{1} \phi'_s \left|s\right\rangle$，系数$\phi' = [0 \quad 1]^T$

（**注：此后都标记$|\uparrow\rangle = |1\rangle$，$|\downarrow\rangle = |0\rangle$**）

- 任意单个自旋的量子态可写成基矢的线性叠加：$|\varphi\rangle = \varphi_0|0\rangle + \varphi_1|1\rangle$，可见，系数$\varphi$为一个二维向量。
- 态矢和算子的定义是独立于基矢的，因此，态并不等价于某个向量，算子也并不等价于某个矩阵；但在不引起误解的情况下，可直接可认为**态即为对应的系数向量**，**算子即为对应的系数矩阵**，如$|1\rangle = [1 \quad 0]^T$
- **规定**：左矢（bra）$\langle\varphi|$对应于行向量；右矢（ket）$|\varphi\rangle$对应于列向量；$\langle\varphi|$为$|\varphi\rangle$的转置共轭

3.1 量子态与量子算符：基矢与系数

- **例**：量子态内积对应于系数向量的内积：$\langle\varphi|\psi\rangle = [\varphi_0^* \quad \varphi_1^*][\psi_0 \quad \psi_1]^T$

  证明：$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i\,|i\rangle$，$\Big|\varphi\rangle = \sum_j \varphi_j\Big|\,j\rangle$，有$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_{ij}\varphi_j^*\psi_i\langle j|i\rangle$。

  由基矢的正交归一性$\langle j|i\rangle = \delta_{ji}$，有$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_{ij}\varphi_j^*\psi_i\delta_{ji} = \sum_i \varphi_i^*\psi_i$

  证毕

- 基矢的矢量表示确定之后，**可用这组基矢对算符做展开，得到算符的系数**。例如，泡利算符的展开系数为2×2的矩阵，满足

$$\hat{\sigma}^\alpha = \sum_{ij=0}^{1} \sigma_{ij}^a\,|i\rangle\langle j|$$

（再次强调：**$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^\alpha$是希尔伯特空间中的算子，$\boldsymbol{\sigma}_{ij}^a$是一个二阶张量（矩阵）**，一定要注意二者的区别和联系；**在不引起误解的情况下，算符与其系数可混用**）

Jupyter Notebook: sec3_1_spinhalf

3.1 量子态与量子算符：基矢与系数

- 由 $\hat{\sigma}^{\alpha}=\sum_{ij=0}^{1}\sigma_{ij}^{a}\,|i\rangle\langle j|$ 以及基矢的正交归一性，易得算符与其系数之间满足：

$$\sigma_{ij}^{a}=\langle i|\hat{\sigma}^{\alpha}|j\rangle$$

- **通过$\hat{\sigma}^{z}$的本征方程及三个泡利算符的对易关系，可以求得其在该组基矢下的系数矩阵**（在不引起误解的情况下，提及某张量时，可省略其下标）

$$\sigma^{x}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad \sigma^{y}=\begin{bmatrix}0 & i\\ -i & 0\end{bmatrix},\quad \sigma^{z}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

（注：自旋算符与泡利算符相差因子2，即$\hat{s}^{\alpha}=\hat{\sigma}^{\alpha}/2$）

练习：

1. 从量子态的正交归一化条件出发$\langle i|i'\rangle=\delta_{ii'}$，证明其对应的系数向量满足向量的正交归一条件；
2. 证明算子求量子态内积、迹、本征关系、观测量与所选的具体基矢无关；
3. （通过理论推导或数值计算）求以$\hat{\sigma}^{x}$本征态为基矢时，$\hat{\sigma}^{z}$的系数矩阵。

3.1 量子态与量子算符：系数运算

- 给定基矢，确定量子态与算子的向量与矩阵表示之后，相关的计算变为向量与矩阵的运算
- **例**：定义上升算符$\hat{\sigma}^+$和下降算符$\hat{\sigma}^-$，其在$\hat{\sigma}^z$的本征基矢下的矩阵表示为

$$\sigma^+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

- 有$\hat{\sigma}^+|0\rangle = |1\rangle$，$\hat{\sigma}^-|1\rangle = |0\rangle$，$\hat{\sigma}^+|1\rangle = \hat{\sigma}^-|0\rangle = 0$，分别对应于

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- 算符的连乘对应于矩阵乘，满足结合律。例如$\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}^-|1\rangle = -|0\rangle$，对应

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

注：矩阵积可写为求和的形式，例如$\boldsymbol{\sigma}^+\boldsymbol{\varphi} \Leftrightarrow \sum_j \boldsymbol{\sigma}^+_{ij}\boldsymbol{\varphi}_j$，即**进行相应的指标收缩**

3.2 多体系统量子态与量子算符：量子态系数

- **例**：两个自旋构成的基矢为四个4维向量，可定义为

$$|0\rangle|0\rangle,\ |0\rangle|1\rangle,\ |1\rangle|0\rangle,\ |1\rangle|1\rangle$$

其中，$|i\rangle|j\rangle = |ij\rangle = |i\rangle \otimes |j\rangle$（ $\otimes$ 称为直积、张量积、外积或克伦内克积，$\otimes$符号可省略），例如$|1\rangle = [1 \quad 0]^T$，$|11\rangle = [1 \quad 0]^T \otimes [1 \quad 0]^T = [1 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T$（等号代表左边态的系数等于右边的张量）

- 任意的二自旋量子态可写成基矢的线性叠加

$$|\varphi\rangle = \varphi_{00}|00\rangle + \varphi_{01}|01\rangle + \varphi_{10}|10\rangle + \varphi_{11}|11\rangle = \sum_{ij=0}^{1} \varphi_{ij}|ij\rangle$$

- 二自旋量子态$|\varphi\rangle$的系数可看作是4×1的向量$[\varphi_{00} \quad \varphi_{01} \quad \varphi_{10} \quad \varphi_{11}]^T$，或$2 \times 2$的矩阵$\begin{bmatrix} \varphi_{00} & \varphi_{01} \\ \varphi_{10} & \varphi_{11} \end{bmatrix}$，二者相差一个**reshape**操作

3.2 多体系统量子态与量子算符：单体算符的运算

- 对于N自旋体系，对应希尔伯特空间维数为2^N，即**量子态的系数为2^N维张量，算符的系数为$2^N \times 2^N$维张量**。
- 定义**单体算符**：作用到某一个自旋上的算符，例如泡利算符，系数维数为2×2
- **单体算符作用到多体量子态的规则**（以三自旋系统为例）：定义在第1个自旋空间中的算子$\hat{O}^{(1)}$（即该算子仅作用在第1个自旋上），其对应的系数维数为2×2，三自旋量子态$|\varphi\rangle$对应的系数维数为$2 \times 2 \times 2$，将$\hat{O}^{(1)}$作用到$|\varphi\rangle$上的公式可写为：

$$|\varphi'\rangle = \hat{O}^{(1)}|\varphi\rangle = \hat{O}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} \otimes \hat{I}^{(3)}|\varphi\rangle$$

其中，$\hat{I}^{(n)}$为定义在第n个自旋空间的单位算符（单位算符的系数矩阵为单位阵）

量子态与量子算符的图形表示

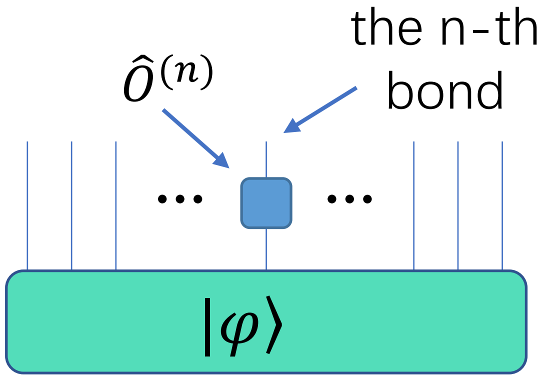
注：对于多自旋态，严格而言，无法定义对某一个自旋的单独操作，相关算符也需定义在多自旋希尔伯特空间中；$\hat{O}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} \otimes \hat{I}^{(3)}$类似的与单位阵的直积可看作是单体算符需满足的形式。

3.2 多体系统量子态与量子算符：单体算符的运算

- 在公式$|\varphi'\rangle = \hat{O}^{(1)}|\varphi\rangle = \hat{O}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} \otimes \hat{I}^{(3)}|\varphi\rangle$中，$\hat{O}^{(0)} \otimes \hat{I}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)}$的维数为$2^N \times 2^N$，可以以指标收缩的形式作用到维数为$2^N$的量子态$|\varphi\rangle$上
- 但是，**我们实际上不用按上述方式进行$2^N \times 2^N$维矩阵与2^N维向量的矩阵积计算，而是作如下计算**：设$|\varphi\rangle$与$|\varphi'\rangle$的系数分别为三阶张量φ_{ijk}和$\varphi'_{i'jk}$，设$\hat{O}^{(1)}$的系数为二阶矩阵$O^{(1)}_{ii'}$，则有如下公式：

$$\varphi'_{i'jk} = \sum_i O^{(1)}_{i'i} \varphi_{ijk}$$

- 将定义在第n个自旋的算符$\hat{O}^{(n)}$作用到自旋多体态上，仅需将算符与第n个指标进行收缩，对应的图形表示如右图



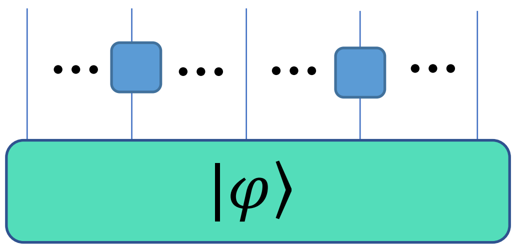
注：虽然仅进行第n个指标的收缩，但实际上，所有张量元可能被改变，并非仅有第n个指标对应的张量元发生改变，**无法定义第n个指标对应的张量元**，这与“**无法定义对某一个自旋的单独操作**”这一事实是一致的

3.2 多体系统量子态与量子算符：多体算符的运算

- 对于多体算符，当**该算符可以写成多个定义在不同空间的单体算符的直积**时，计算算符作用到多体态上时，仅需进行多次单体算符的作用即可
- 由于单体算符定义在不同空间，算符之间相互对易（即可以交换作用的顺序，$\hat{O}^{(m)}\hat{O}^{(n)} = \hat{O}^{(n)}\hat{O}^{(m)} \Leftrightarrow \left[\hat{O}^{(m)}, \hat{O}^{(n)}\right] = 0$），**故作用的顺序不影响结果**
- **例**：将定义在第1个和第2个自旋空间中的算符$\hat{O} = \hat{O}^{(1)} \otimes \hat{O}^{(2)}$作用到三自旋态上$|\varphi\rangle$，得到的量子态$|\varphi'\rangle$，相应的系数满足：

$$\varphi'_{i'j'k} = \sum_{ij} O^{(1)}_{i'i} O^{(2)}_{j'j} \varphi_{ijk}$$

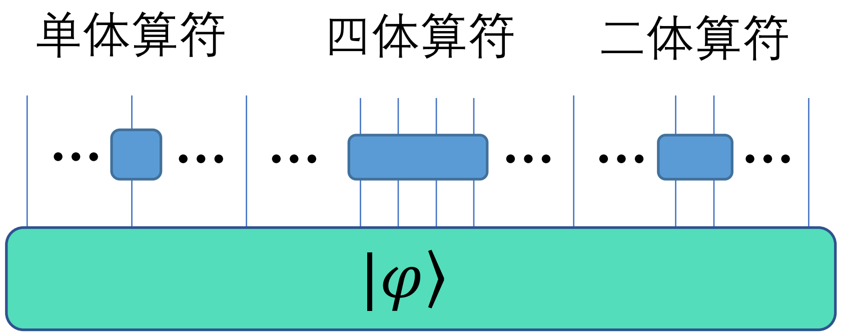
- 一般情况下的图形表示如右图

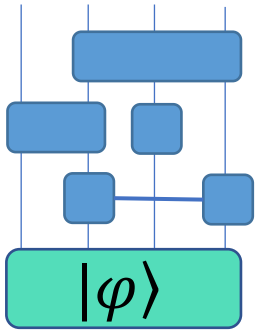


练习：以$\hat{\sigma}^z$本征态作为基矢，编写程序计算$\hat{O}|\varphi\rangle$，其中$\hat{O} = 0.1\hat{\sigma}^{z(1)}\hat{\sigma}^{z(2)} - 0.4\hat{\sigma}^{x(1)}$，$\hat{\sigma}^{\alpha(n)}$代表作用到第$n$个自旋上的$\alpha$方向上的泡利算符，$|\varphi\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$（建议先画出图形表示）

3.2 多体系统量子态与量子算符：多体算符的运算

- **如果算符不能分解成多个单体算符直积的形式**，则根据分解的情况进行收缩；
- 如果存在不同算符作用在相同自旋上，则重复上述规则，由下至上依次将各个算符所用到量子态上；
- 下图给出一个图形表示示例：

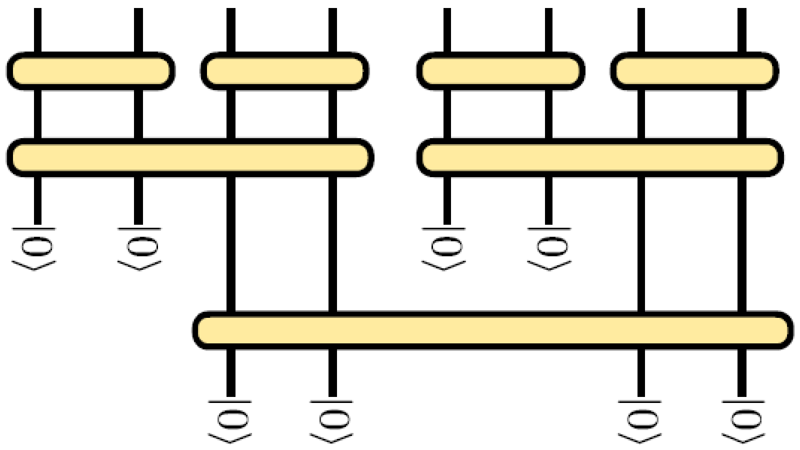




练习：
1. 对于右图，解释作用到量子态上的是什么样的算符，或写出表达式（设 $|\varphi\rangle$ 及各个算子已知）；
2. 编写程序，计算将任意多个单体算子（的直积）作用到多体量子态的指定自旋上（提示：可使用einsum）。

3.2 多体系统量子态与量子算符：多体算符

- 如果量子算符为幺正算符，则这些算符构成一个作用在多体态上的大的幺正操作，称之为**量子线路**（注：特殊情况下可不满足幺正性）
- **量子线路是可运行于量子计算机的模型**（类似于逻辑门线路与经典计算机间的关系），**张量网络为量子线路提供一个给定基底下的数学表示**



作用在$|00000000\rangle$上的量子线路，由3个四体量子门与4个二体门构成

CrossMark

PAPER

Towards quantum machine learning with tensor networks

RECEIVED
7 August 2018

REVISED
15 October 2018

ACCEPTED FOR PUBLICATION
23 October 2018

PUBLISHED
9 January 2019

William Huggins[1,3], Piyush Patil[1], Bradley Mitchell[1], K Birgitta Whaley[1,3] and E Miles Stoudenmire[2]

[1] University of California Berkeley, Berkeley, CA 94720 United States of America
[2] Center for Computational Quantum Physics, Flatiron Institute, 162 5th Avenue, New York, NY 10010, United States of America
[3] Authors to whom any correspondence should be addressed.

E-mail: wjhuggins@berkeley.edu

Keywords: quantum computing, machine learning, tensor networks

3.3 经典热力学基础

- 对于经典平衡态，系综理论的核心是：对于一个全同粒子构成的系统，**该系统处于某一种状态（或构型，记为$(\boldsymbol{s_1}, \boldsymbol{s_2}, \dots)$）的概率$\boldsymbol{P}$，由该状态的能量$\boldsymbol{E}$决定（设玻尔兹曼常数与普朗克常数为1）**，满足

$$P(s_1, s_2, \dots; \beta) = \frac{e^{-\beta E(s_1, s_2, \dots)}}{Z}$$

其中，$\beta = 1/T$为**倒温度**，Z被称为**配分函数（partition function）**，等于所有可能构型概率之和，满足$Z = \sum_{s_1, s_2, \dots} e^{-\beta E(s_1, s_2, \dots)}$。$Z$可理解为概率的归一化因子。机器学习中的**玻尔兹曼机（Boltzmann machine）**具备同样的数学形式。

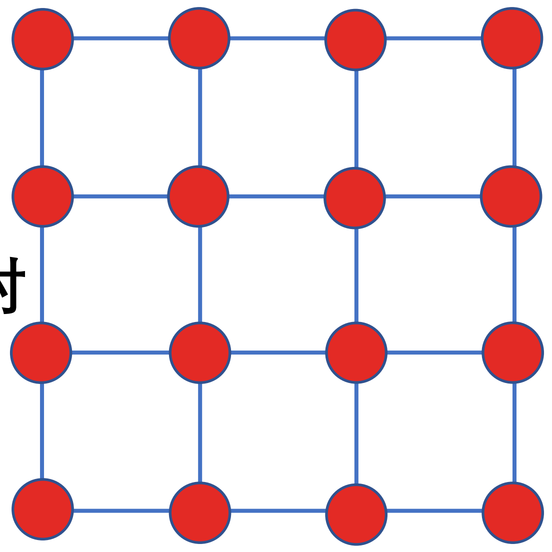
- **热力学量即对应物理量的概率平均值：**

$$O(\beta) = \sum_{s_1, s_2, \dots} P(s_1, s_2, \dots; \beta)\, O(s_1, s_2, \dots)$$

可见，**建立描述给定物理系统热力学性质的关键，在于建立能量$\boldsymbol{E}$与状态之间的函数关系**

3.3 经典热力学基础

- **定义Ising模型：由N个Ising自旋构成一个图（graph），每个Ising自旋为图中一个节点（node），其可取状态s_i为1或-1；对于给定状态，其能量满足**



4 × 4 正方格子（注：勿混淆格点与张量网络的图形表示）

$$E(s_1, s_2, \ldots) = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j$$

其中，$\langle i,j \rangle$代表图中任意一对相连的Ising自旋，J_{ij}称为对应连接的**耦合系数**

- 故，**Ising模型由图（节点与边）定义**；当每个节点可取的状态S数大于2时，模型推广为**S态Potts模型**；后面我们会介绍如何使用张量网络计算Ising或Potts模型热力学

注：这里并不建议将Ising模型当作一种物理上的存在，它应是用来近似描述一大类物理现象的一个**数学模型，**因而这里使用了**概率图**理论的术语来描述Ising模型；物理上的概念并不是物理实在自身，它们都是用来**解释已知物理实在、预言未知物理实在的数学模型而已**

3.4 量子格点模型：热力学基础

- 描述量子系统的热力学理论，应与经典热力学理论相容。
- 量子系统的热力学由**有限温密度算子**给出，定义为

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta\hat{H}}/Z$$

其中，**$\hat{H}$为系统哈密顿量，Z为量子配分函数**。

- 对于量子系统，给定状态（量子态）下的能量满足

$$E(s_1, s_2, \dots) = \langle s_1 s_2 \dots | \hat{H} | s_1 s_2 \dots \rangle$$

- 与经典热力学理论相同，定义**处于$|s_1 s_2 \dots\rangle$的概率为**

$$P(s_1, s_2, \dots; \beta) = \frac{e^{-\beta E(s_1, s_2, \dots)}}{Z}$$

- 且配分函数满足$Z = \sum_{s_1, s_2, \dots} e^{-\beta E(s_1, s_2, \dots)}$

可见：定义量子模型即定义哈密顿量

3.4 量子格点模型：热力学基础

- 将能量表达式代入得量子配分函数

$$Z=\sum_{s_1 s_2 \dots} e^{-\beta\left\langle s_1 s_2 \dots\middle|\hat{H}\middle|s_1 s_2 \dots\right\rangle}$$

- 根据基矢的正交完备性$\sum_{s_1 s_2 \dots}|s_1 s_2 \dots\rangle\langle s_1 s_2 \dots| = I$，得：

$$Z=\sum_{s_1 s_2 \dots}\langle s_1 s_2 \dots|e^{-\beta\hat{H}}|s_1 s_2 \dots\rangle = \mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{H}})$$

练习：从本页第一个式子出发证明左式

- 多个热力学量可由配分函数关于温度的导数求得，例如自由能、能量、熵等，因此，求解配分函数是求解热力学问题的关键一步
- 算符平局值可由密度矩阵计算获得。

练习：根据算符平均值 $O(\beta)=\sum_{s_1,s_2,\dots} P(s_1,s_2,\dots;\beta)\,O(s_1,s_2,\dots)$ ，$O(s_1,s_2,\dots)=\langle s_1 s_2 \dots|\hat{O}|s_1 s_2 \dots\rangle$，证明$O(\beta)=\mathrm{Tr}(\hat{O}e^{-\beta\hat{H}})/Z$

3.4 量子格点模型：基态问题

- 当**系统温度极低时**（$\beta \to \infty$），系统密度算符由哈密顿量最低的本征态(记为$|g\rangle$）给出，称为系统的**基态（ground state）**，对应的本征值E_g称为**基态能**

$$\lim_{\beta\to\infty} e^{-\beta\hat{H}}/Z = |g\rangle\langle g|$$

$$\hat{H}|g\rangle = E_g|g\rangle$$

（注：考虑基态非简并情况；证明可参考2.1节**最大本征值的幂级数解法**）

- **基态观测量**满足：$O(\beta) = \mathrm{Tr}(\hat{O}e^{-\beta\hat{H}}/Z) = \langle g|\hat{O}|g\rangle$，与量子态观测量公式一致。
- **基态求解即求解哈密顿量对应矩阵的最低本征态及本征值**，对应于如下**最优化问题**（回顾2.1节：最大本征问题对应的最优化问题）：

$$\boxed{E_g = \min_{\langle g|g\rangle=1} \langle g|\hat{H}|g\rangle}$$

3.5 海森堡模型的基态计算：二自旋

注：$\hat{s}^{\alpha} = \hat{\sigma}^{\alpha}/2$

- 定义磁场中二自旋的**海森堡（Heisenberg）模型**：$\hat{H}(h^{\alpha}) = \sum_{\alpha=x,y,z}[\hat{s}_1^{\alpha}\hat{s}_2^{\alpha} + h^{\alpha}(\hat{s}_1^{\alpha} + \hat{s}_2^{\alpha})]$，其中，$h^{\alpha}$定义为沿自旋$\alpha$方向的外磁场。
- 下面我们考虑自旋1/2，选择$\hat{s}^z$本征态作为基矢，为简便起见，设$h^x = h^y = 0$，$h^z = h$。
- 显而易见，**$\hat{H}$不能写成多个单体算符的直积**。
- $\hat{H}$的系数可看作是$2 \times 2 \times 2 \times 2$的四阶张量或$4 \times 4$矩阵，计算步骤为：
  （a）获得各个自旋算符的矩阵；
  （b）计算$\hat{s}_1^{\alpha}\hat{s}_2^{\alpha}$，为$2 \times 2 \times 2 \times 2$张量；
  （c）计算$\hat{s}_1^{\alpha}I_2$与$I_1\hat{s}_2^{\alpha}$，为$2 \times 2 \times 2 \times 2$张量；
  （d）将各项求和，进行本征值分解获得最终结果

显然，得到哈密顿量之后，可直接调用求解最低本征态的函数计算基态及基态能

练习：编写程序，生成无外磁场的XYZ模型哈密顿量

$$\hat{H}(J_{\alpha}) = \sum_{\alpha=x,y,z} J_{\alpha}\hat{s}_1^{\alpha}\hat{s}_2^{\alpha}$$

（J_{α}为三个方向的自旋耦合系数，选择$\hat{s}^z$本征态作为基矢）

Jupyter Notebook: sec3_1_spinhalf

3.5 海森堡模型的基态计算：退火算法

- **想要计算基态，不一定要获得完整的哈密顿量**
- **例**-**海森堡格点模型**（无外场）：$\hat{H} = \sum_{\langle i,j\rangle} \hat{H}_{ij}$，求和号每一项为二自旋海森堡哈密顿量$\hat{H}_{ij} = \sum_{\alpha=x,y,z} \hat{s}_i^{\alpha} \hat{s}_j^{\alpha}$，$\langle i,j\rangle$遍历图中所有相连的格点对
- 基态计算的**退火算法**：基本原理为对任意初态$|\varphi\rangle$进行投影

$$\lim_{\beta\to\infty} e^{-\beta\hat{H}} |\varphi\rangle \to |g\rangle$$

(注：$e^{-\beta\hat{H}}$的最大本征态为$|g\rangle$；回顾：最大本征问题的幂级数求解法)

- **例**：考虑4个自旋构成的**一维海森堡链**，格子示意图如右上所示，退火算法具体步骤为：

  （a）随机初始化量子态$|g_0\rangle$；

  （b）计算$|g'_{t+1}\rangle = e^{-\tau\hat{H}_{12}} e^{-\tau\hat{H}_{34}} |g_t\rangle$并归一化结果；

  （c）计算$|g_{t+1}\rangle = e^{-\tau\hat{H}_{23}} |g'_{t+1}\rangle$并归一化结果；

  （d）检查$|g_{t+1}\rangle$是否收敛，否则返回至步骤（b）。

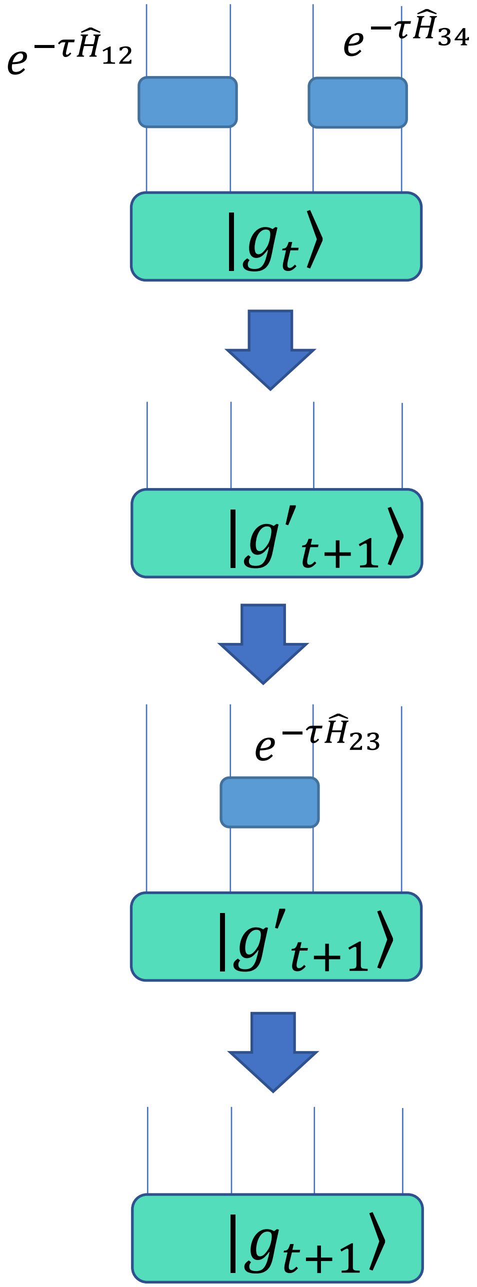
3.5 海森堡模型的基态计算：退火算法

- **例**：4个自旋构成的**一维海森堡链**退火算法具体步骤：
  （a）随机初始化量子态$|g_0\rangle$；
  （b）计算$|g'_{t+1}\rangle = e^{-\tau\hat{H}_{12}}e^{-\tau\hat{H}_{34}}|g_t\rangle$并归一化结果；
  （c）计算$|g_{t+1}\rangle = e^{-\tau\hat{H}_{23}}|g'_{t+1}\rangle$并归一化结果；
  （d）检查$|g_{t+1}\rangle$是否收敛，否则返回至步骤（b）。
- 退火算法的数学原理：**Trotter-Suzuki分解**
  对于算符$\hat{A}$和$\hat{B}$，有如下关系

$$e^{\tau(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\tau\hat{A}}e^{\tau\hat{B}} + \tau^2[\hat{A},\hat{B}] + \cdots$$

- 当$\hat{A}$和$\hat{B}$对易时，$e^{\tau(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\tau\hat{A}}e^{\tau\hat{B}}$
- 当τ为小量时，$e^{\tau(\hat{A}+\hat{B})} - e^{\tau\hat{A}}e^{\tau\hat{B}} = O(\tau^2)$
- 对于上述例子，取τ为小量，有

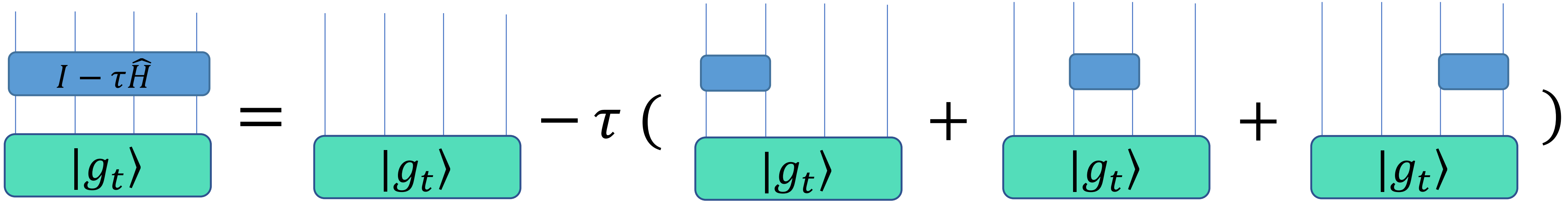
$$e^{-\tau\hat{H}} \approx e^{-\tau(\hat{H}_{12}+\hat{H}_{34})}e^{-\tau\hat{H}_{23}} = e^{-\tau\hat{H}_{12}}e^{-\tau\hat{H}_{34}}e^{-\tau\hat{H}_{23}}$$



3.5 海森堡模型的基态计算：退火算法

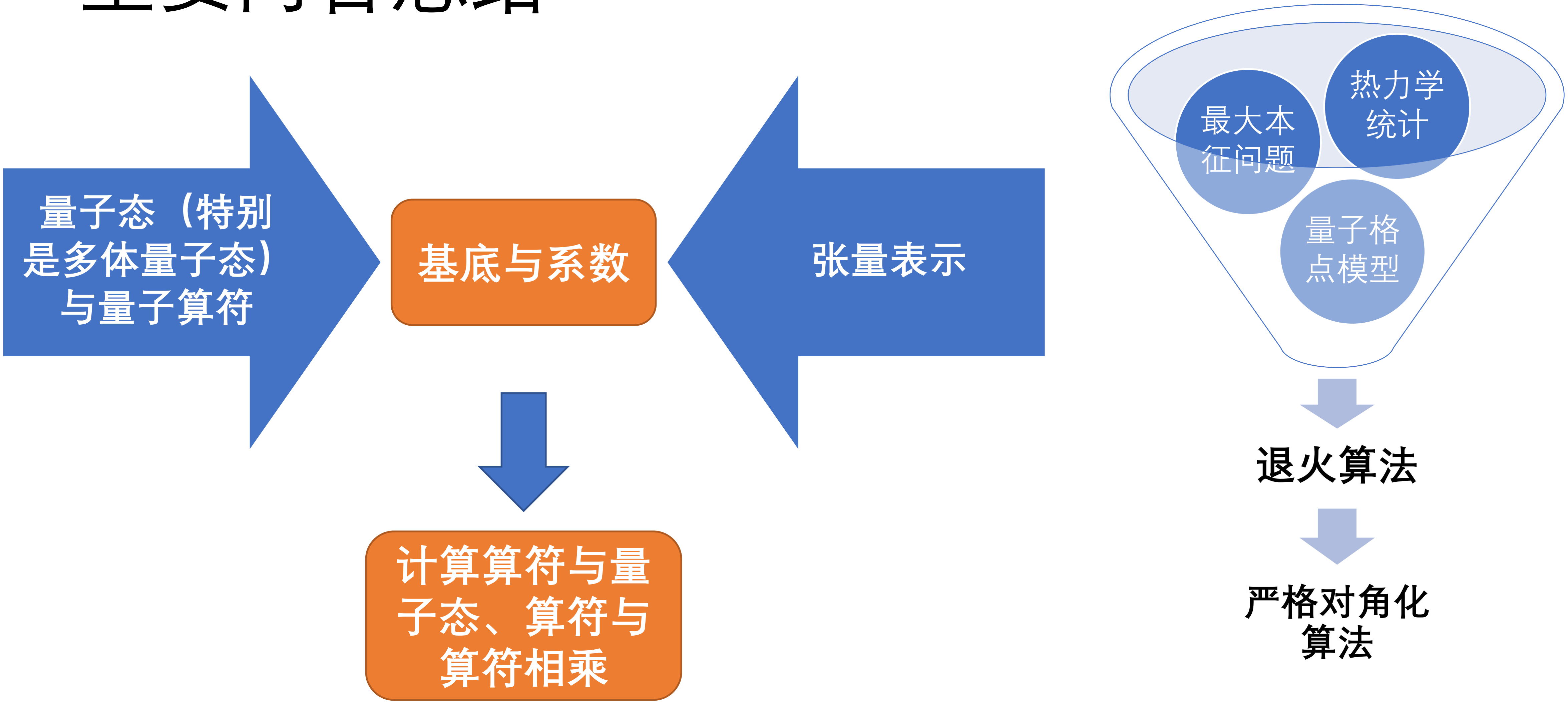
Jupyter Notebook: sec3_6_gs

- 在张量网络中，基于退火算法发展出了著名的时间演化块消减算法 [TEBD, PRL **98**, 070201 (2007)]，但是在小尺寸可严格计算的体系中，并没有必要采用退火算法，因为在进行Trotter-Suzuke分解时会**额外引入误差**
- 下面引入一种**更加直接的计算方法（通常被称为严格对角化算法）**：
  （a）定义线性映射$f(|\varphi\rangle)$: $|\varphi\rangle \to (I - \tau\hat{H})|\varphi\rangle = |\varphi\rangle - \tau\sum_{\langle i,j\rangle}\hat{H}_{ij}\,|\varphi\rangle$
  （b）求解线性映射f的最大本征值与本征态
  （其中，τ 为小量，保证绝对值最大的本征值在$I - \tau\hat{H}$中代数值最大；步骤（a）可通过多次计算局域哈密顿量与量子态的作用实现）



- 上述方法同样**避免了写出总哈密顿量，且不引入额外的误差**

重要内容总结


量子态（特别是多体量子态）与量子算符
基底与系数
张量表示
计算算符与量子态、算符与算符相乘
最大本征问题
热力学统计
量子格点模型
退火算法
严格对角化算法