

多体和磁性物理讲习班笔记

Q. X. Fang 

fangqixuan23@mails.ucas.ac.cn

KITS, UCAS

2025-08-08

ABSTRACT

这是在大湾区大学举办的多体和磁性物理暑期学校的第一组讲习班的笔记

1 磁性材料的第一性原理计算

群论：晶体的对称群/点群

磁有序体系：122 个磁点群、1651 个磁空间群等

局域自旋是轴矢量，因此需要引入旋转操作，因此引入自旋群

交错磁性：反铁磁净磁矩为 0，有自旋极化

反铁磁中有不是由于 SOC(自旋轨道耦合)导致的 spin splitting(能量劈裂)，可以通过自旋-轨道相互作用产生

对称性要求：

$$\begin{cases} \sum_i M_i = 0 \\ \varepsilon_{k,\sigma} \neq \varepsilon_{k,-\sigma} \end{cases} \quad (1)$$

两个条件要求对称性不同

单群和双群

轨道单重态/多重态：SOC 的一阶效应为 0/不为 0

1.1 Caculate method

Energy Mapping Method: $E_{FM} - E_{AFM}$ to get J

2 磁性和多铁性的理论计算研究

多铁性：多种铁性的混合。

铁电材料：自发的电信号（空间反演对称破缺）

可以通过自发的电场来调控磁性，因此形成多铁性材料（铁电和磁性耦合）

2.1 有效哈密顿量方法

DFT：精确；EH：高效 → 如何结合？ → 第一性原理有效哈密顿量

解决问题：热性质（有限温）、自旋轨道耦合等

自旋哈密顿：

$$H = \sum_i A_i^{\alpha\beta} S_{i\alpha} S_{i\beta} + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{\alpha\beta} S_{i\alpha} S_{j\beta} + \text{higher order terms.} \quad (2)$$

第一项是 SOC 项得到强度，第二项 J 是一个 3×3 的矩阵，表示自旋交换作用，可以进行对称化/反对称化分解。其对角部分给出类似 Heisenberg 模型的交换作用，非对角部分给出 SOC 的影响。对称部分例如 Kitaev interaction。

2.2 四态法

有效哈密顿只考虑到二阶，即：

$$H = \sum_i A_i^{\alpha\beta} S_{i\alpha} S_{i\beta} + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{\alpha\beta} S_{i\alpha} S_{j\beta} \quad (3)$$

四态法适合的计算：所有的二阶 spin 相互作用参数，及其 derivatives（原子移动造成）；unified 极化模型的参数

优势：高效同时，削减其他 lattice 的影响

基本思路：以 Heisenberg model 为例：三角格子

$$E = E_0 + \sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j \quad (4)$$

对要计算的两个格点，取四个态，其他不变，然后展开写出：

$$E = E_0 + \sum_{ij \neq 1,2} J_{ij} S_i \cdot S_j + J_{12} S_1 \cdot S_2 + S_1 \cdot \sum_{j \neq 1,2} J_{1j} S_j + S_2 \cdot \sum_{j \neq 1,2} J_{2j} S_j \quad (5)$$

例如可以带入四个态（(1,0,0)等），得到：

$$J_{12} = \frac{E_1 + E_4 - E_2 - E_3}{4J} \quad (6)$$

对原子位移 $u_{k\alpha}$ ，参数 η_α 等偏导数可以通过费曼-海尔曼定理计算

2.3 平行磁场方法

考虑到最终收敛态和初设态可能截然相反，可以假设存在一个局域的平行磁场，以解决问题

2.4 一般的有效哈密顿方法

对于部分体系，二阶的有效哈密顿可能不能较好描述其性质，又或者体系存在大量其他自由度和大量耦合相互作用，因此要有一个更一般的有效哈密顿，即哈密顿是所有自由度的函数： $H(S, u, \sigma)$ ，是满足所有自由度对应对称性约束的。

寻找最主要的相互作用： $H = \sum_i^N b_i X_i \rightarrow H' = \sum_j^p b'_j X'_j$, $p \ll N$

首先选择最主要的，然后批量筛选（随机筛选多个自由度打包测试），同时删除替换

2.5 GNN

GNN 可能有点用

3 MPS

Stabilizer Renyi Entropy:

$$M_{n(\psi)} = \frac{1}{1-n} \log \sum_{P \in P_N} \frac{\langle \psi | P | \psi \rangle^{2n}}{2^N} \quad (7)$$

涨点时的哈密顿量:

$$H_L = J \left[\frac{1}{2} \left(S_{sys}^+ \otimes S_{single}^+ + S_{sys}^- \otimes S_{single}^- + S_{sys}^z \otimes S_{single}^z \right) \right] \otimes I_{env} \quad (8)$$

截断:

$$H_{sys}(L+1) = O^\dagger H_{sysnew} O \quad (9)$$

取前 k 个态

3.1 Measurement

对于 Spin 实现一次测量:

$$S_i^z = \langle \psi | S_i^z | \psi \rangle \quad (10)$$

考虑 sweep 在倒数第一次和最后一次，我们进行测量显然是用最后截断基态空间的表示进行，比如，倒数第一次到最后一次的 spin 截断方法是:

$$O^\dagger(i+1)[S_{sys}^z(i) \otimes I_s]O_{sys}(i+1) \quad (11)$$

这就是测量倒数第一个格点的方案，依次类推，sweep 过程中离最后一次更新越远，越要多次更新。

4 Tensor Network(TRG)

4.1 张量网络态的作用

对于只有 local 相互作用的经典统计系统，其配分函数可以严格的表示为一个 TN。

TRG 的作用：配分函数：

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i, y_i, z_i} \quad (12)$$

使用 TRG，收缩这个 TN 得到配分函数。

完全收缩：#P-complete 问题

Quantum lattice model:

- make wave function as TN, make time evolution:

$$|\psi\rangle = \text{Tr} \prod_i A_{x_i, y_i, z_i} \quad (13)$$

- get expectation value of local operator:

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \psi_{\text{TN}} | O | \psi_{\text{TN}} \rangle}{\langle \psi_{\text{TN}} | \psi_{\text{TN}} \rangle} \quad (14)$$

- renormalization

4.2 TRG

4.2.1 Levin-Nave TRG

张量重整化群的核心思想是通过对不等价张量的局域变换，让不等价张量等效地代表特定子区域内所有张量的缩并。在变换过程中，不等价张量所代表的子区域面积随局域变换呈指数增大，因此，我们同时引入合理的近似，保持不等价张量指标维数不超过给定的上限（即截断维数）。当不等价张量关于变换收敛后，可近似认为，单个局域张量的收缩代表了整个张量网络的收缩，从而给出张量网络收缩的结果。

HOTRG: 两个外 bond 并在一起时用一个 HOSVD 来获得一个两边的 isometric tensor, 3-order

自动微分的方法: 直接用参数的 U, 不用 HOSVD, 一步到位 (自动微分真是太强啦!)

局域/短程纠缠: 短程纠缠可以直接把局域的 tensor 看作四个态直积, 而长程则必须存在一个仍具有关联的四阶节点

TEFR: Tensor Entanglement Filtering Renormalization 类似 TRG: 对局域纠缠的张量节点, 进行筛选, 去除多余的纠缠态来减少存储量。pair-SVD: 对一个四方局域格子, 每个点拉开时把其他边作为环境, 把拉开的那一边作为 bond, 然后循环到收敛。

也就是每个格点拉开成为一个 D^2 节点, 裁剪扔掉 D 个的收缩

4.3 TN RG

在下方插入三类 isometric tensor, 不断去掉短程纠缠

4.4 Loop-TNR

先选方格格点 loop 看作 mps, 正则化去掉短程纠缠, 随后拉开, 然后类似 TRG 收缩掉中心四个点, 获得新的方格, 新方格只有之前去掉短程纠缠的部分, 未去掉的一半格子在收缩时去掉了。

4.5 Tensor Network State Renormalization

PEPS 在三角晶格的失败: 收缩一个三角晶格的 spin, 会出现阻挫现象, 即纠缠对的收缩 tensor, 其值基本都是极小 (大部分时间小于 10^{-6} 次方), 解释: 类似于阻挫, 两点纠缠对第三点可能被抹去, 三点无法达到最大纠缠对。

一种方法: 变成三点最大纠缠 (

好多 PEPS

交错磁体: PEPS 的可能性

PEPS 是 PEPS 的扩展, 多体纠缠、强阻挫、长程作用、复杂晶格具有好的效果。

4.5.1 基态求解

- 全局变分问题:

$$\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad \text{find min } |\Psi\rangle \quad (15)$$

比如 AD 方法（我正在用的）

- 虚时演化方法：

$$U = e^{-\beta H} \quad (16)$$

从非正交开始，T-S 分解，然后不断演化到本征态（ β 足够大，那么温度足够小，达到基态）

Cluster update：划定一个区域，外部近似，内部严格收缩

4.5.2 reduced TN：如何增大物理维度

求和收缩系数的 D^2 的 2-D 网络十分困难，开销在 D^{12} ，为此不如直接压平，然后加入一些 δ ，于是开销降到 D^9

3-D: natural nesting

3D Ising 转移矩阵拆成两部分，上下错开，于是可以直接收缩成 D 维的 2-D 网络结构

5 有限温度张量网络方法 - MPO 方法

5.1 转移矩阵重整化群 (TMRG)

5.1.1 Trotter-Suzuki 分解

Consider 1D alternative XY chain with Hamiltonian

$$H = - \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} [J_1 (S_{2i-1}^x S_{2i}^x + S_{2i-1}^y S_{2i}^y) + J_2 (S_{2i}^x S_{2i+1}^x + S_{2i}^y S_{2i+1}^y)] \quad (17)$$

$$H_1 = -J_1 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} h_{2i-1, 2i} \quad H_2 = -J_2 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} h_{2i, 2i+1} \quad (18)$$

local interactions

$$h_{i,j} \equiv S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y \quad (19)$$

Partition function:

$$Z_N = \lim_{M \rightarrow \infty} Z_{MN} \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} \text{tr} \left[e^{-\beta \frac{H_1}{M}} e^{-\beta \frac{H_2}{M}} \right]^M \quad \tau = \frac{\beta}{M} \quad (20)$$

is a small quantity

Inserting a collection σ of $2M$ complete sets of states:

$$Z_{MN} = \sum_{\sigma} \prod_{j=1}^M \left\langle \sigma_1^{2j-1} \cdot \sigma_N^{2j-1} \left| e^{-\beta \frac{H_1}{M}} \right| \sigma_1^{2j} \cdot \sigma_N^{2j} \right\rangle \quad (21)$$

[Periodic boundary conditions]

$$\sigma_i^{2M+1} \equiv \sigma_i^1, \sigma_{N+1}^j \equiv \sigma_1^j \quad (22)$$

$$\times \left\langle \sigma_1^{2j} \cdot \sigma_N^{2j} \left| e^{-\beta \frac{H_2}{M}} \right| \sigma_1^{2j+1} \cdot \sigma_N^{2j+1} \right\rangle \quad (23)$$

$$Z_{MN} = \sum_{\sigma} \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} [T_1(\sigma_{2i-1}^1 \dots \sigma_{2i-1}^{2M} \text{ mid } \sigma_{2i}^1 \dots \sigma_{2i}^{2M}) \times T_2(\sigma_{2i}^1 \dots \sigma_{2i}^{2M} \text{ mid } \sigma_{2i+1}^1 \dots \sigma_{2i+1}^{2M})]$$

Vertical transfer matrices:

$$T_1(\mu^1 \dots \mu^{2M} \text{ mid } \sigma^1 \dots \sigma^{2M}) \equiv \prod_{j=1}^M \tau_1(\mu^{2j-1} \sigma^{2j-1} \text{ mid } \mu^{2j} \sigma^{2j}) \quad (25)$$

$$T_2(\mu^1 \dots \mu^{2M} \text{ mid } \sigma^1 \dots \sigma^{2M}) \equiv \prod_{j=1}^M \tau_2(\mu^{2j} \sigma^{2j} \text{ mid } \mu^{2j+1} \sigma^{2j+1}). \quad (26)$$

Free energy calculations:

$$Z_{MN} = \text{tr} \left(T^{\frac{N}{2}} \right)$$

$$f = -\frac{1}{N\beta} \ln(Z_{MN}) = -\frac{1}{2\beta} \ln(\lambda_m) \quad (27)$$

$$\lambda_m \text{ is the dominant eigenvalue} \quad (28)$$

5.1.2 LTRG

6 TDVP 与 tanTRG

6.1 MPS 流形

参考文献:

- PRL. 107. 070601
- PRB. 94. 165116

6.1.1 参数空间

局域张量

$$A^i \in \mathbb{C}^{D_{i-1}d_iD_i} \quad (29)$$

这样的 MPS:

$$\mathcal{T} = \text{Tr} \prod A^i \quad (30)$$

看作映射:

$$\Psi : \mathbb{A} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \mathbb{A} = \bigoplus_i^N \mathbb{C}^{D_{i-1}d_iD_i} \quad (31)$$

于是:

$$A = \{A_i\} \rightarrow |\Psi(A)\rangle \quad (32)$$

6.1.2 MPS 的规范变换

在局域张量之间可以插入一个单位矩阵:

$$I_i = g_i g_i^T \quad (33)$$

因此规范变换的矩阵属于一般线性群 $g_i \in GL(D_i, \mathbb{C})$, $G = \prod_i GL(D_i, \mathbb{C})$

我们有这样的结论, 若:

$$|\Psi(A)\rangle = |\Psi(B)\rangle \leftrightarrow \exists g \in G, B = g \cdot A \quad (34)$$

6.1.3 MPS manifold

参考文献: J. Math. Phys. 55, 021902

给定 $\{D_i\}$, 对所有 full-rank 的 A_i , MPS 流形是 \mathcal{H} 的一个嵌入子流形, 定义为 $M = \mathcal{H}/G$

6.2 切空间近似

6.2.1 几何观点下的薛定谔方程:

$$\partial|\Psi\rangle/\partial t = -iH|\Psi\rangle \quad (35)$$

有同构:

$$\mathcal{H} \simeq T_{|\Psi\rangle}(\mathcal{H}) \quad (36)$$

于是薛定谔方程可以看作 \mathcal{H} 上的一个切向量场（这很显然）。于是很容易引入 TDVP equation:

$$\Psi : dA/dt \rightarrow \partial|\Psi\rangle/\partial t \quad (37)$$

映射是否可以保证，参数空间的切向量场映射到 \mathcal{H} 上仍然是在 $T_{|\Psi\rangle}M$ 上？不能，因为有 MPS ansatz 限制。

TDVP equation:

$$\partial|\Psi\rangle/\partial t = \mathbf{P}[-iH|\Psi\rangle] \quad (38)$$

其中 \mathbf{P} 是投影算子，确保 $|\Psi\rangle$ 在 $T_{|\Psi\rangle}M$ 上。

TDVP: 在给定变分流形的条件下，无穷小时间意义下的最优演化。

目标：找到参数 $\{A_i\}$ 的演化方程

6.3 MPS 参数的 TDVP equation

一个一般的切向量方程:

$$\partial|\Psi(A)\rangle/\partial t = \text{Tr} \sum_i \prod_j A_j \frac{\partial A_i}{\partial t} = \text{Tr} \sum_i \prod_j A_j B_i \quad (39)$$

我们希望这是一个诱导的切映射 $\Psi_* : \partial_t|\Psi\rangle \rightarrow \text{Tr} \sum_i \prod_j A_j B_i$

规范固定条件可以确定映射的维度 $D^2d - D^2$ （局域张量去掉了 g 的规范自由度）

固定条件：取左正交条件（简化 inner product 计算，度规为欧式的）

$$\langle \Psi_A(B) | \Psi_A(B) \rangle = \sum_i \langle B_i, B'_i \rangle \quad (40)$$

因此参数求解问题变为有约束的优化问题：对一个任意的切向量 $X_A \in \mathcal{H}$ ，在左正交规范条件下，求解：

$$\min_B \|\Psi_A(B) - X_A\| \quad (41)$$

范数：

$$\begin{aligned} \|\Psi_A(B) - X_A\|^2 &= \langle \Psi_A(B) - X_A | \Psi_A(B) - X_A \rangle \\ &= \sum_i \langle B_i, B_i \rangle - \langle B_i, X_i \rangle - \langle X_i, B_i \rangle \end{aligned} \quad (42)$$

拉格朗日乘子 λ ，有：

$$L = \sum_i \langle B_i, B_i \rangle - \langle B_i, X_i \rangle - \langle X_i, B_i \rangle - \lambda \langle A_i, B_i \rangle \quad (43)$$

对 B_i 共厄求导，然后与左正交的 MPS 求内积，根据左正交条件：

$$2\langle B_i, A_i \rangle - \langle X_i, A_i \rangle - \lambda \langle A_i, A_i \rangle = 0 - 0 - \lambda \langle A_i, A_i \rangle = \lambda \quad (44)$$

因此有效哈密顿量算子也很容易表示，于是最后有方程：

$$i \frac{d}{dt} A_i = H_i A_i \quad (45)$$

6.4 TDVP sweep

6.4.1 Lie-Trotter 分解

线性方程：

$$i \frac{d}{dt} A_i = -i H_i^1 \quad (46)$$

$$\frac{d}{dt} s_i = i H_i^0 \quad (47)$$

于是解：

$$A_i(t) = e^{-i H_i^0 t} A_i(0) \quad (48)$$

$$s_i(t) = e^{i H_i^1 t} s_i(0) \quad (49)$$

前者叫正向演化，后者叫反向演化。

全演化过程：正向演化是单格点演化到 bond，然后 bond 分解后与下一个合并，完成反向演化。如果这种演化记为 φ ，应该满足：

$$\varphi_L^*(\tau) = \varphi_L^{-1}(-\tau) = \varphi_R(\tau) \quad (50)$$

有定理表明这会使复杂度由 $O(\tau)$ 变为 $O(\tau^2)$

这完成了 N 次正向单点演化，N-1 次反向演化。

6.4.2 Lanczos 方法

与 1D 的 DMRG 类似，区别是 DMRG 直接收缩有效哈密顿，这里是把 $e^{-i H^1 \tau}$ 展开到有效哈密顿一阶，收缩复杂度是一致的

收缩复杂度 $O(D^3 w d) + O(D^2 d^2 w^2) + O(D^3 w d)$

6.4.3 Auto-Differentiation 方法

这好像根本就用不到 DMRG 了

6.4.4 两点 TDVP

类似于两点 DMRG，正向演化时要加入 SVD。每次先两点合并一下。

N-1 次两点正向演化, N-2 次单点反向演化。

单点和两点大约相差物理指标带来的复杂度

6.4.5 Controlled Bond Expansion(CBE)

参考文献:

- PRL. 130. 246402
- PRL. 133. 026401

6.5 tanTRG 方法

6.5.1 变分流形上的密度矩阵

考虑 ρ 是某个变分流形上的密度矩阵, 最小化自由能泛函, 其定义:

$$F[\rho] = \text{Tr } \rho H + \frac{1}{\beta} \text{Tr}(\rho \ln \rho) \quad (51)$$

在 \mathcal{H} 中, 应该有:

$$\min_{\rho} F[\rho], \quad \text{Tr } \rho = 1 \quad (52)$$

给出:

$$\mathcal{H} : \rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr } e^{-\beta H}} \quad (53)$$

困难: MPO 上的 $\ln \rho$ 难以计算

方法: 虚时演化方程:

$$\begin{cases} \frac{d\rho}{d\beta} = -\mathbf{P}(H - \langle H \rangle)\rho \\ \rho(0) = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}, \quad D = 1 \end{cases} \quad (54)$$

虚时演化并非变分方法, 但是 $D \rightarrow \infty$, TDVP 应该是严格的虚时演化(follow DMRG)

6.5.2 MPO 的 TDVP

MPO 和 MPS 当然很像, 可以看成是一个 d^2 的 MPS, 也就是将矩阵看成超矢量:

$$\rho \rightarrow |\rho\rangle \quad (55)$$

于是就有了 TDVP 方法的可用性。

技术细节: 在 TDVP 的有效哈密顿量时, 只有上方环境的一个 MPS 变成了 MPO, 多出一个指标, 这样在这里需要进行一个内部收缩, 处理掉这部分, 其他一致。

其他技术要点:

- SETTN 初始化:

$$\rho(\tau \ll 1) = e^{\beta H} = 1 - \tau H + \frac{1}{2}\tau^2 H^2 + \dots \quad (56)$$

高温条件下展开, 二阶 MPO 有一个变分乘法, 求和可用变分和

参考文献:

- PRB. 95. 161104

这制备一个无限高温态, 在严格的无限高温, 密度矩阵是单位阵, $D = 1$, TDVP 误差较严重 (与 D 有关), 因此需要做展开。

- 温度步长的选择: 温度需要离散选点, 如何选择?

经验上稳定的方法: 在 $\beta \sim 1$ 附近, 前面线性增加步长, 后面保持平衡。

因此, 前面可以做一个指数增长 $\delta\beta = 2^n$, 后面每次增长 1。能量单位 $t = 1, J = 1$ 。

6.6 自旋动力学计算

动力学因子:

$$S^{\alpha\beta}(k, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-ik(r_i - r_j)} \int dt e^{i\omega t} \langle e^{iHt} S_i^\alpha e^{-iHt} S_j^\beta \rangle \quad (57)$$

主要计算其中的期望值 $\langle \cdot \rangle$, 其中时间演化和波函数作用为基态, 那么可以提出, 得到:

$$e^{iE_g t} \langle \psi_g | S_i^\alpha e^{-iHt} S_j^\beta | \psi \rangle \quad (58)$$

注意到期望值, 算符分别作用到两个态上, 就是基态作用了算符, 随后含时演化算符可以作用到 ket 上, 这样就可以通过 TDVP 方法来计算, 从而换成张量网络的收缩计算。

7 量子蒙特卡罗方法

7.1 经典 Monte Carlo 的基础:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{Z} \quad (59)$$

是统计平均值。

重要性抽样：对自由能最小化贡献最大的区域抽样，而非单纯的权重大。

7.2 Metropolis 算法:

将求和部分变成随机求和，即：

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \rightarrow \frac{\sum'_{\mu} Q_{\mu}}{\sum'_{\mu}} \quad (60)$$

后者的求和抽样依概率抽取，抽取的概率正比于玻尔兹曼因子。

- 边历性假设：假设存在边历特征，因此足够长时间演化和系综采样一致
- 细致平衡方法： $P(s_i)P(s_i|s_j) = P(s_j)P(s_j|s_i)$

平衡方程：

$$M_{\mu} \sum_{\mu'} g_{\mu}(\mu \rightarrow \mu') A_{\mu}(\mu \rightarrow \mu') = \sum_{\mu'} M_{\mu'} g_{\mu'}(\mu' \rightarrow \mu) A_{\mu'}(\mu' \rightarrow \mu) \quad (61)$$

其中： μ 是更新次数指标， g_{μ} 是选择概率：即选态概率， A_{μ} 是接收概率，与选择概率有关系。

到细致平衡要求：

$$W_{\mu} g_{\mu}(\mu \rightarrow \mu') A_{\mu}(\mu \rightarrow \mu') = W_{\mu'} g_{\mu'}(\mu' \rightarrow \mu) A_{\mu'}(\mu' \rightarrow \mu) \quad (62)$$

$W_{\mu} \sim M_{\mu}$ 是每个态权重。

接收比率：

$$R = \frac{A_{\mu}}{A_{\mu'}} = \frac{W_{\mu'} g_{\mu'}}{W_{\mu} g_{\mu}} \quad (63)$$

7.3 Example: 2D Ising model on square lattice

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (64)$$

现在为计算能量期望，引入自旋反转算法：随机选择一个自旋， N 格点系统的选择概率即 $\frac{1}{N}$ ，考虑对其反转。多次重复随机选择/反转，进行多次后得到足够多构型。

平衡方程：

$$\frac{P_{\text{acc}}(\sigma_k - \sigma_{k'})}{P_{\text{acc}}(\sigma_{k'} - \sigma_k)} = e^{-\beta \Delta E_k} = R \quad (65)$$

一个限制条件，两个未知量，需要设置，比如一个设为 R ，另一个为 1，还有其他设置方法。

低温条件下，效率下降。

Wolff 算法：以簇为单位来考虑，自旋翻转，不改变自旋状态的簇的概率为 $\exp(-2 * \beta \delta E)$ ，因此簇的状态是 $1 - (\exp(-2 * \beta \delta E))^N$ （每个自旋选中的概率与 δE 有关），簇可以视为一个“原胞”。

从 spin view 到 bond view，相同方向的 spin 对应的 bond 为满足键，相反是不满足。纳入到团簇的 bond 称为 occupied bond。

Steps:

- start from single site
- pick satisfy bond connected to unoccupied bonds in cluster with a specific weight
- expand to cluster by repeating step2 for new sites
- when all sites are unsatisfy bond at boundary, then filp the cluster

Wolff 算法的平衡方程：能量差实际上取决于簇的边缘的能量差 (why?)。两个边缘态的 s-bond 与 un-sbond 的数量相同，因此两个 s-bond 之和就是全部的 boundary bonds。

通常的 MC 算法，希望接收概率尽可能是 1.

$$P_{\text{add}} = 1 - e^{2J\beta}, \quad R = \left(\frac{1 - P_{\text{add}}}{e^{-2J\beta}} \right)^{K_{\nu} - K_{\nu'}} \quad (66)$$

Remark:

- 高温下接受率较低，低温下接受率较高
- critical points 附近表现较好

7.4 蠕虫算法

闭合路径问题：更新闭合路径时，lattice 上可以局域改变小点

- 无法改变整个系统的拓扑结构
- 加入全局环路

蠕虫算法的思路：更新闭合路径通过断开路径更新。断开后对所有路径采样，添加或删除更新，在足够长时间（大量采样）以后，两个断端点根据遍历性会重新连接。

构型空间扩展——闭合空间+线空间(CP_g)， g 表示格林函数

8 Clock MC for Long-Range Interactions Systems

8.1 传统的困难和问题

- 计算开销变大
- LR 会引入有限尺度效应影响，必须加大系统尺寸
- 近似的失效行为——丢失长程临界特征

8.2 Clock MC 的优势

- 局域更新
- $O(1)$ 复杂度
- 引入反转因子

反转格点相互作用的概率从求和变成相乘，即是通过联合的概率分布变成单个概率的乘积（独立性假设，类似平均场），从而每个相互作用变成了独立事件，被分别判断，但只选取其中全部因子通过的构型概率，这种方式获得接收概率。

这里仍然没有解决计算复杂度的问题（否定的情况太多）

利用相互独立特征：进一步的采用采样方式。仅采样下一个拒绝的概率，比如第一个因此开始计算，第 j 个因子是第一次出现拒绝的概率，而不是完全考虑全部因子的构型。但计算单个因子仍然需要知道全部的自旋构型，计算复杂度仍是 $O(N)$

考虑局部构型的最差情况，从而引入了接收概率下限，无关于构型空间

Steps:

- 随机概率 p_k 生成，若高于下限，则肯定接收
- 若小于下限，则在生成一次，考虑条件概率，看是否接收
- 两次全部拒绝，则拒绝

于是获得了无关构型的分布，从而可以直接采样

hubbard-stratonovich transformation

9 二维张量网络态的发展和应用

9.1 PEPS-投影纠缠对态

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha\beta\delta\rho}^D \sum_i^d A_{\alpha\beta\delta\rho}^i |i\rangle \langle\alpha\beta\delta\rho| \quad (67)$$

正方格子上的投影，每个 site 被投影到四个态，两个虚拟态构成最大纠缠对

9.2 VMC for PEPS

变分波函数直接选取 PEPS，能量计算：

$$\begin{aligned} E &= \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{1}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \sum_{ss'} \langle\Psi|s\rangle \langle s|H|s'\rangle \langle s'|\Psi\rangle \\ &= \sum_s \frac{\langle\Psi|s\rangle^2}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \sum_{s'} \frac{\langle s'|\Psi\rangle}{\langle s'|\Psi\rangle} \langle s|H|s'\rangle \\ &= \sum_s p(s) E_{\text{toc}}(s) \end{aligned} \quad (68)$$

进行重要性采样(s 态)，对变分参数进行梯度更新。

10 多电子系统的有效场理论

10.1 Background

多电子体系的哈密顿：

$$H = - \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \text{ion background} \quad (69)$$

在离子附近，电子 localize，粒子性较大，而外层电子相对活跃，存在运动存在的挑战：

- 10,000 开尔文的挑战；半经典和量子都对 10000 开尔文的 gap 无解——传统 DFT 的局限
- 关联效应的大小问题

EFT 的方法：

$$\text{实际观测量} = \text{有效理论} + \text{一阶圈图修正} + \text{高阶修正} \quad (70)$$

参考文献：arxiv: hep-th/9210046

在 10^6 以上很好使用，但在 $10^{-3} \sim 10^3$ 的适用性正在研究

10.2 EFT of Pseudopotential

关于赝势的有效场理论：以 Li 原子为例， $E_c \sim -70\text{eV}$, $E_v \sim -5\text{eV}$ ，可以看到基态是与激发态的能差非常大，因此希望通过有效场来获得一个含有2个基态电子的有效哈密顿：

$$H_{\text{AE}} = \int \psi_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger \left[-\frac{\nabla^2}{2m} - \frac{Z}{\mathbf{r}} \right] \psi_{\mathbf{r}\sigma} + \frac{1}{2} \psi \quad (71)$$

Sub-Hilbert-space method:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (72)$$

$$c_1 = \frac{1}{E - H_{11}} H_{12} c_2 \rightarrow H_{\text{eff}} c_2 = E_2 c_2 \quad (73)$$

这是一个静态的有效场模型，只关心 gover 掉的基态能量，而不能覆盖激发

11 TN 计算激发谱

11.1 MPS 单模激发

在某一个 site 替换局域张量，其余不变，然后变分优化

拐角收缩（角转移收缩？）

方法：

- 先算出基态 ansatz
- 改动 site 构建激发谱 basis(正交于基态)
- 计算该 basis 下的哈密顿量
- 对角化得到激发能谱

构造激发 basis 方法：

- 只改变一个局域 tensor: $A \rightarrow B$ ，然后收缩为 0（正交条件）
- 计算左右环境 A tensor 的收缩（局域 tensor 的收缩），求最大本征向量即可
- 计算下环境，将下环境作为 vector，于是可以构造正交的 B tensor(空间内有 dD^2-1 个 basis，每个都是正交的)

后面有无穷大求和问题！

相位因子的产生也很重要! 在不同 site 的 B 可能产生不同 phase factor (取决于中间有无 A 的收缩)

注意 AD 的使用

11.2 2D 方法