Hubbard模型的行列式蒙特卡洛模拟

吴晋渊 18307110155

复旦大学物理学系

2021

二维正方晶格Hubbard模型

Hubbard模型

$$H = -t \sum_{\langle \boldsymbol{i},\boldsymbol{j} \rangle} c^{\dagger}_{\boldsymbol{i}\sigma} c_{\boldsymbol{j}\sigma} + U \sum_{\boldsymbol{i}} n_{\boldsymbol{i}\uparrow} n_{\boldsymbol{j}\downarrow} \tag{1}$$

- 最为著名的强关联电子模型
  - 半填充⇒海森堡模型
  - 掺杂⇒t-J模型：可能的高温超导机制，类似于铜基超导的赝能隙
- 不可能解析研究（高维无Bethe ansatz可用，微扰论失效），需要蒙特卡洛模拟
  - 量子系统，无离散场构型 ⇒ 解决方案：离散路径积分，引入N个虚时间点，做Trotter分解，d维量子系统$=d+1$维经典统计系统

$$\begin{aligned} Z = \operatorname{tr} e^{-\beta H} &= \sum_{\{\sigma_1,\ldots,\sigma_N\}} \prod_n \langle \sigma_n | e^{-\Delta\tau H} | \sigma_{n+1} \rangle \\ &= \sum_{\sigma} \prod_n e^{-\Delta\tau H[\sigma_n,\sigma_{n+1}]} . \end{aligned} \tag{2}$$

  - 费米子算符无经典对应 ⇒ 设法把费米子自由度变成玻色自由度

朴素的DQMC

离散Hubbard-Stratonovich变换

- 用玻色场取代费米场
- 物理图像：用每个格点上的总自旋（或者别的费米算符二次型）取代费米自由度

$$e^{-\Delta\tau U\sum_i (n_{i\uparrow}-1/2)(n_{j\downarrow}-1/2)} \simeq \text{const} \times \sum_{s_1,s_2,\ldots,s_n=\pm 1} e^{\alpha\sum_i s_i(n_{i\uparrow}-n_{i\downarrow})}, \quad (3)$$

$$N\Delta\tau = \beta, \quad \cosh(\alpha) = e^{\Delta\tau U/2}. \quad (4)$$

- 随后可以“积掉”电子自由度，只留下$s_{i,\tau}$
- 这个方法称为**determinant quantum Monte Carlo (DQMC)**

朴素的的DQMC

- 定义

$$\mathbf{B}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau)=\mathrm{e}^{\sigma\alpha\ \mathrm{diag}\mathbf{s}_{\tau}}\ \mathrm{e}^{-\Delta\tau\mathbf{T}},\quad \mathbf{B}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau_2,\tau_1)=\prod_{n=n_1+1}^{n_2}\mathbf{B}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau),\tag{5}$$

  其中$\sigma=\uparrow,\downarrow:=\pm1$，$\mathbf{s}_{\tau}=[s_{\boldsymbol{i},\tau}]$，$\mathbf{s}$为一个$\{s_{\boldsymbol{i},\tau}\}$构型的简写
- 可推导出配分函数（用于计算接受率，DQMC的命名由来）

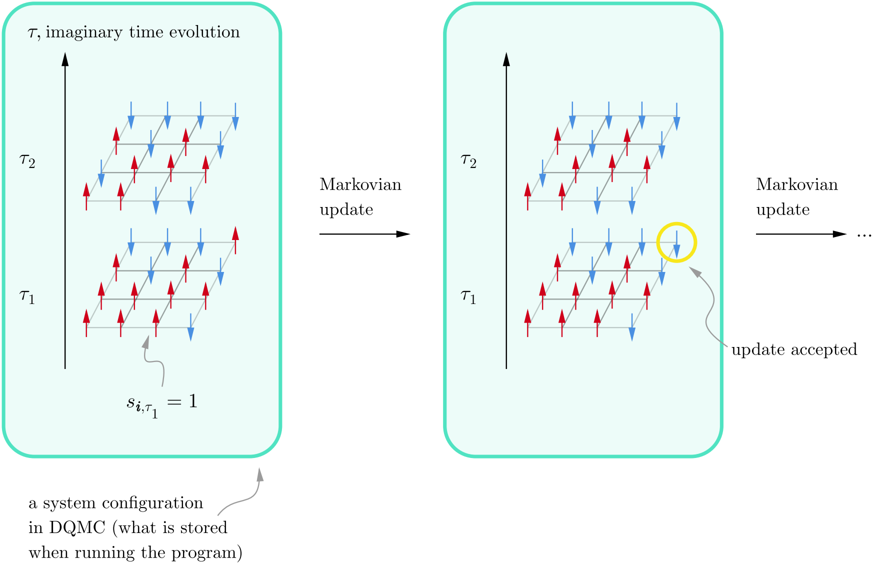
$$Z=\sum_{\mathbf{s}}Z[\mathbf{s}],\quad Z[\mathbf{s}]=\det\left(1+\prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\prod_{n=1}^{m}\mathbf{B}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau)\right),\tag{6}$$

- 以及等时格林函数（用于计算物理量期望值）

$$\mathbf{G}_{\boldsymbol{ij}}^{\sigma}(\tau)=\langle c_{\boldsymbol{i}\sigma}c_{\boldsymbol{j}\sigma}^{\dagger}\rangle_{\tau}=(1+\mathbf{B}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau,0)\mathbf{B}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\beta,\tau))_{\boldsymbol{i},\boldsymbol{j}}^{-1}.\tag{7}$$

- 计算$\mathbf{B}^{\sigma}(\tau_1,\tau_2)$时由于有连乘，需要做数值稳定

朴素的DQMC


τ, imaginary time evolution
τ_2
τ_1
$s_{\boldsymbol{i},\tau_1} = 1$
Markovian update
τ_2
τ_1
Markovian update
...
update accepted
a system configuration in DQMC (what is stored when running the program)

基于格林函数的DQMC

- 朴素DQMC性能开销大头：$\mathbf{B}(\tau_1, \tau_2)$矩阵连乘
- 虚时间点τ，空间格点$\boldsymbol{i}$处发生一次更新，则**B**矩阵只有如下变化：

$$\mathbf{B}_{\mathbf{s}'}^{\sigma}(\tau) = \left(1 + \boldsymbol{\Delta}^{\boldsymbol{i},\sigma}\right) \mathbf{B}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau), \tag{8}$$

其中$\boldsymbol{\Delta}^{\boldsymbol{i},\sigma}$对角，除了$\boldsymbol{i}$号元素为$e^{-2\sigma\alpha s_{i,\tau}}-1$外其余为零

- 可以手动推导出

$$R = \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \underbrace{\det\left(1 + \boldsymbol{\Delta}^{\boldsymbol{i},\sigma}(1 - \mathbf{G}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau))\right)}_{R^{\sigma}}, \tag{9}$$

$$\mathbf{G}_{\mathbf{s}'}^{\sigma}(\tau) = \mathbf{G}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau) - \frac{1}{R^{\sigma}} \mathbf{G}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau) \boldsymbol{\Delta}^{\boldsymbol{i},\sigma}(1 - \mathbf{G}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau)). \tag{10}$$

- 接受率的计算和格林函数的更新其实无需**B**矩阵！
- 可以将格林函数作为system configuration的一部分，初始化时从s计算一次，之后似乎不必再计算任何**B**矩阵连乘

物理量期望值为

$$\langle O\rangle = \sum_{\mathbf{s}} p(\mathbf{s})\,\langle O\rangle_{\mathbf{s}}\,, \tag{11}$$

$p(\mathbf{s})$通过蒙特卡洛采样，而$\langle O\rangle_{\mathbf{s}}$遵从Wick定理

- 双占据：

$$\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}\rangle_{\mathbf{s}} = (1 - \langle c_{i\uparrow} c^\dagger_{i\uparrow}\rangle_{\mathbf{s}})(1 - \langle c_{i\downarrow} c^\dagger_{i\downarrow}\rangle_{\mathbf{s}}). \tag{12}$$

- 磁化关联函数：

$$\langle s^z_i s^z_j\rangle_{\mathbf{s}} = \frac{1}{4}\langle ((c^\dagger_{i\uparrow} c_{i\uparrow} - c^\dagger_{i\downarrow} c_{i\downarrow})((c^\dagger_{j\uparrow} c_{j\uparrow} - c^\dagger_{j\downarrow} c_{j\downarrow}))\rangle_{\mathbf{s}} \tag{13}$$

$$=$$

$$\langle S_{\mathrm{AFM}}\rangle_{\mathbf{s}} \tag{14}$$

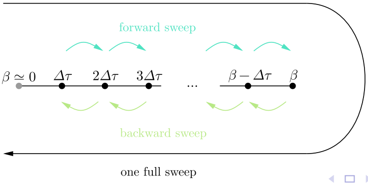
基于格林函数的DQMC

算法纲要：

- 系统构型：$\mathbf{s}$，目前所处的虚时间点τ，τ处的格林函数$\mathbf{G}^{\sigma}$
- 初始化：初始$s_{\mathbf{i},\tau}$构型，计算各虚时间点的格林函数
- 给定τ，翻转$s_{\mathbf{i},\tau}$：接受率为(9)，如果成功，将$s_{\mathbf{i},\tau}$变更正负号，并且用(10)计算新的$\mathbf{G}^{\sigma}(\tau)$，$\mathbf{G}^{\sigma} \leftarrow \mathbf{G}^{\sigma}_{\mathbf{s}'}(\tau)$
- 已经完成τ点处全部格点的翻转，使用

$$\mathbf{G}^{\sigma}(\tau+\Delta\tau) = \mathbf{B}^{\sigma}(\tau+\Delta\tau)\mathbf{G}^{\sigma}(\tau)\mathbf{B}^{\sigma}(\tau+\Delta\tau)^{-1} \tag{15}$$

  从τ点转移到$\tau \pm \Delta\tau$点，$\mathbf{G}^{\sigma} \leftarrow \mathbf{G}^{\sigma}(\tau \pm \Delta\tau)$，$\tau \leftarrow \tau \pm \Delta\tau$，然后去翻转新的$\tau$处的$s_{\mathbf{i},\tau}$
- 一个sweep：



进一步的改进: