

Hubbard模型的行列式蒙特卡洛模拟

吴晋渊 18307110155

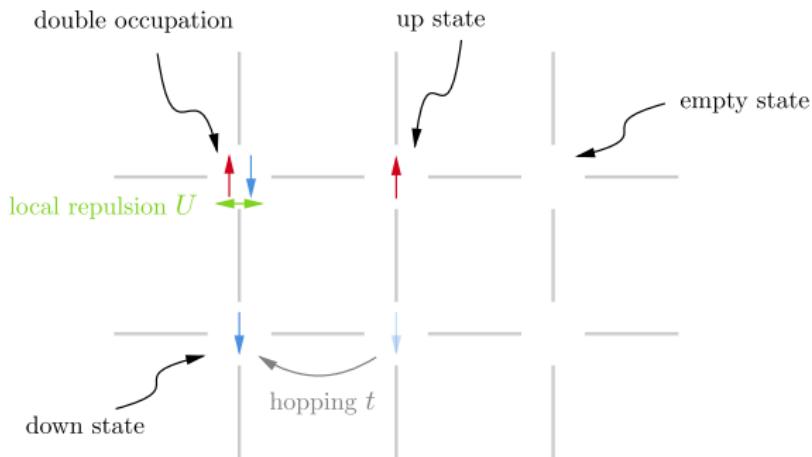
复旦大学物理学系

2022

二维正方晶格Hubbard模型

Hubbard模型

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$



二维正方晶格Hubbard模型

Hubbard模型

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2)$$

- 最为著名的强关联电子模型¹
 - 半填充 \Rightarrow 金属-海森堡模型转变 (Mott转变)
 - 掺杂 \Rightarrow t-J模型：可能的高温超导机制，类似于铜基超导的赝能隙
- 高维无Bethe ansatz解，微扰论失效，需要蒙特卡洛模拟
 - 量子系统，无离散场构型 \Rightarrow 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

$$\begin{aligned} Z = \text{tr } e^{-\beta H} &= \sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}} \prod_n \langle \sigma_n | e^{-\Delta\tau H} | \sigma_{n+1} \rangle \\ &= \sum_{\sigma} \prod_n e^{-\Delta\tau H[\sigma_n, \sigma_{n+1}]} . \end{aligned} \quad (3)$$

- 费米子算符无经典对应 \Rightarrow 设法把费米子自由度变成玻色自由度

¹其推导和意义可见Altland或李正中等凝聚态物理教科书

朴素的DQMC

离散Hubbard-Stratonovich变换²

- 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

$$e^{-\Delta\tau U \sum_i (n_{i\uparrow} - 1/2)(n_{i\downarrow} - 1/2)} \simeq \text{const} \times \sum_{s_1, s_2, \dots, s_n = \pm 1} e^{\alpha \sum_i s_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})}, \quad (4)$$

$$N\Delta\tau = \beta, \quad \cosh(\alpha) = e^{\Delta\tau U/2}. \quad (5)$$

- 随后可以“积掉”电子自由度，只留下 $s_{i,\tau}$

$$\text{tr } e^{-c_i^\dagger A_{ij} c_j} e^{-c_i^\dagger B_{ij} c_j} \dots = \det(1 + e^{-\mathbf{A}} e^{-\mathbf{B}} \dots). \quad (6)$$

- 这个方法称为**determinant quantum Monte Carlo (DQMC)**

²这里的全部理论内容均可见 F.F. Assaad and H.G. Evertz. World-line and Determinantal Quantum Monte Carlo Methods for Spins, Phonons and Electrons. In Part of the Lecture Notes in Physics book series (LNP, volume 739).

朴素的的DQMC

- 定义

$$\mathbf{B}_s^\sigma(\tau) = e^{\sigma \alpha \text{ diag} s_\tau} e^{-\Delta\tau \mathbf{T}}, \quad \mathbf{B}_s^\sigma(\tau_2, \tau_1) = \prod_{n=n_1+1}^{n_2} \mathbf{B}_s^\sigma(\tau), \quad (7)$$

其中 $\sigma = \uparrow, \downarrow := \pm 1$, $s_\tau = [s_{i,\tau}]$, s 为一个 $\{s_{i,\tau}\}$ 构型的简写, \mathbf{T} 为一次量子化动能矩阵

- 可推导出配分函数 (用于计算接受率, DQMC的命名由来)

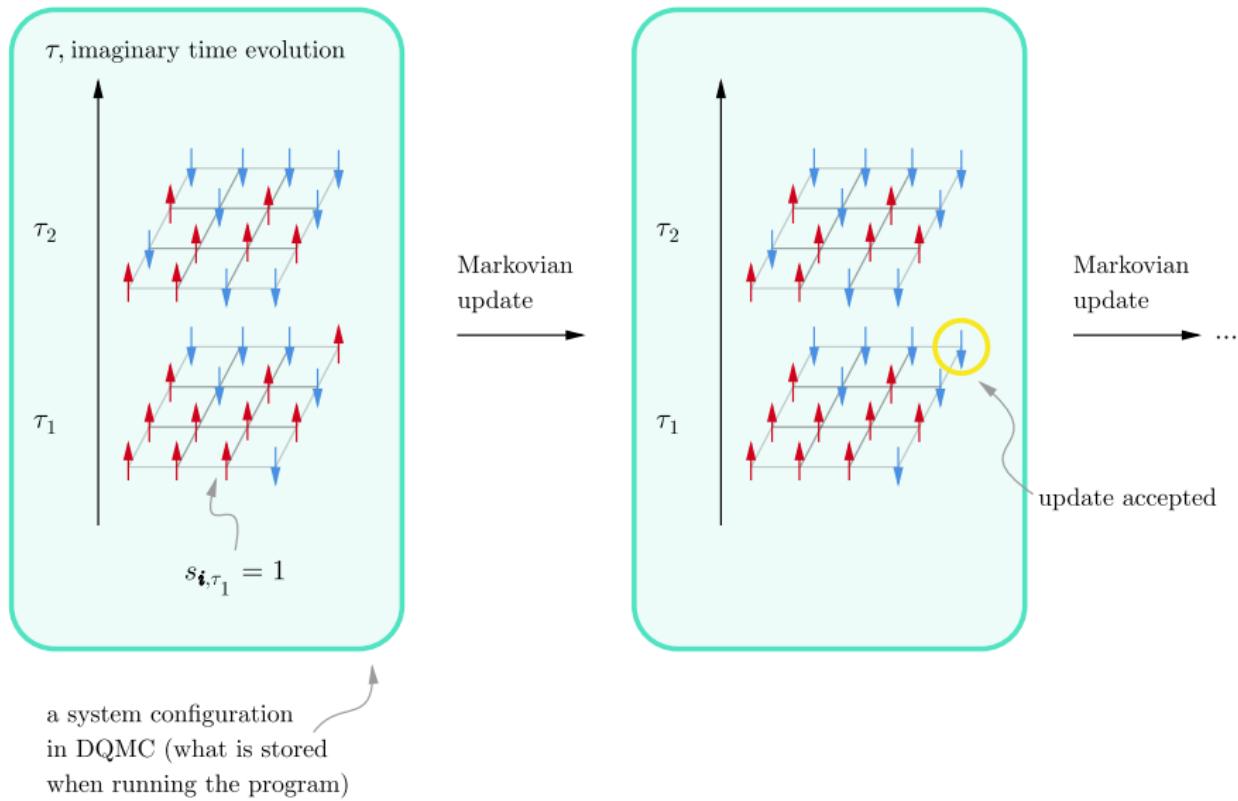
$$Z = \sum_s Z[s], \quad Z[s] = \det \left(1 + \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \prod_{n=1}^m \mathbf{B}_s^\sigma(\tau) \right), \quad (8)$$

- 以及等时格林函数 (用于计算物理量期望值)

$$\mathbf{G}_{ij}^\sigma(\tau) = \langle c_{i\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \rangle_\tau = (1 + \mathbf{B}_s^\sigma(\tau, 0) \mathbf{B}_s^\sigma(\beta, \tau))_{ij}^{-1}. \quad (9)$$

- 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



物理量期望值为

$$\langle O \rangle = \sum_{\mathbf{s}} p(\mathbf{s}) \langle O \rangle_{\mathbf{s}}, \quad (10)$$

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

- 双占据：

$$\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle_{\mathbf{s}} = (1 - \langle c_{i\uparrow} c_{i\uparrow}^\dagger \rangle_{\mathbf{s}})(1 - \langle c_{i\downarrow} c_{i\downarrow}^\dagger \rangle_{\mathbf{s}}). \quad (11)$$

- 磁化关联函数：

$$\begin{aligned} \langle s_i^z s_j^z \rangle_{\mathbf{s}} &= \frac{1}{4} \langle (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow})((c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow})) \rangle_{\mathbf{s}} \\ &= \frac{1}{4} (\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle_{\mathbf{s}} \langle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle_{\mathbf{s}} + \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle_{\mathbf{s}} \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle_{\mathbf{s}} \\ &\quad + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle_{\mathbf{s}} \langle c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger \rangle_{\mathbf{s}} + \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle_{\mathbf{s}} \langle c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger \rangle_{\mathbf{s}} \\ &\quad - \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle_{\mathbf{s}} \langle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle_{\mathbf{s}} - \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle_{\mathbf{s}} \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle_{\mathbf{s}}). \end{aligned} \quad (12)$$

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*i*处发生一次更新, 则 \mathbf{B} 矩阵只有如下变化:

$$\mathbf{B}_{\mathbf{s}'}^{\sigma}(\tau) = (1 + \Delta^{i,\sigma}) \mathbf{B}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau), \quad (13)$$

其中 $\Delta^{i,\sigma}$ 对角, 除了*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

$$R = \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \underbrace{\det(1 + \Delta^{i,\sigma}(1 - \mathbf{G}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau)))}_{R^{\sigma}}, \quad (14)$$

$$\mathbf{G}_{\mathbf{s}'}^{\sigma}(\tau) = \mathbf{G}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau) - \frac{1}{R^{\sigma}} \mathbf{G}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau) \Delta^{i,\sigma} (1 - \mathbf{G}_{\mathbf{s}}^{\sigma}(\tau)). \quad (15)$$

- 接受率的计算和格林函数的更新其实无需 \mathbf{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 \mathbf{B} 矩阵连乘

基于格林函数的DQMC

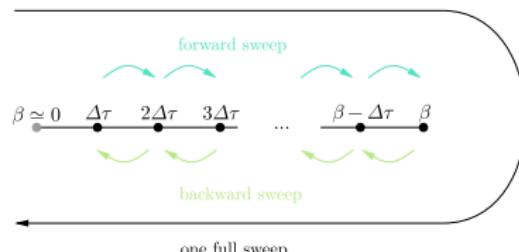
算法纲要：

- 系统构型: s , 目前所处的虚时间点 τ , τ 处的格林函数 \mathbf{G}^σ
- 初始化: 初始 $s_{i,\tau}$ 构型, 计算各虚时间点的格林函数
- 给定 τ , 翻转 $s_{i,\tau}$: 接受率为(14), 如果成功, 将 $s_{i,\tau}$ 变更正负号, 并且用(15)计算新的 $\mathbf{G}^\sigma(\tau)$, $\mathbf{G}^\sigma \leftarrow \mathbf{G}_{s'}^\sigma(\tau)$
- 已经完成 τ 点处全部格点的翻转, 使用

$$\mathbf{G}^\sigma(\tau + \Delta\tau) = \mathbf{B}^\sigma(\tau + \Delta\tau)\mathbf{G}^\sigma(\tau)\mathbf{B}^\sigma(\tau + \Delta\tau)^{-1} \quad (16)$$

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 τ 处的 $s_{i,\tau}$

- 一个sweep:



进一步的改进：

- 通过矩阵乘法更新格林函数会导致矩阵计算误差指数放大
 - 隔一定步数仍然需要重新计算格林函数（称为wrap）
- 在时间点 τ 上的更新不会影响别的虚时间点上的 $\mathbf{B}^\sigma(\tau')$
 - 将不同虚时间点的 $\mathbf{B}^\sigma(\tau)$ 保存起来，避免在wrap的时候重复计算
- 用 $\mathbf{G}^\sigma(\tau)$ 算 $\mathbf{G}^\sigma(\tau \pm \Delta\tau)$ 时需要左乘、右乘 \mathbf{B}^σ 和 $(\mathbf{B}^\sigma)^{-1}$
 - 求逆操作耗时长，直接使用

$$\mathbf{B}^\sigma(\tau)^{-1} = e^{\Delta\tau \mathbf{T}} e^{-\sigma\alpha \text{ diag} \mathbf{s}_\tau} \quad (17)$$

- $e^{\pm\Delta\tau \mathbf{T}}$ 计算用时长， \mathbf{T} 计算过程中不变，应该预先算好
- 左乘、右乘 $e^{\pm\sigma\alpha \text{ diag} \mathbf{s}_\tau}$ 应使用为对角矩阵优化的矩阵乘法

实现细节

目标：

- 模块化、封装：避免全局变量传参数
 - 被修改的变量、被调用的函数是非常透明的
 - 便于调试
 - 便于展示中间结果：辅助场构型等
- 代码复用
 - 可以将DQMC代码整合进更大的程序中，如研究Hubbard模型电子和Ising自旋耦合
 - 便于改动晶格类型

实现细节

将一个DQMC任务中用到的东西打包在一个结构体中，内容包括：

- 模型参数： t , U , β , `lattice`
- 问题规模：虚时间点总数 N （记作 `n_imtimes`），经过几个虚时间点做wrap（`n_wrap`）
- 预先算好的物理量： $\Delta\tau$, α , T , $e^{\Delta\tau T}$ （记作 `expT`）, $e^{-\Delta\tau T}$ （记作 `expmT`）
- 系统构型，包括 `s`（辅助场构型），以及 `B` 矩阵
- 格林函数 $G^\sigma(\tau)$ 不在其中
 - 如果要有，那么目前的虚时间点也必须放在结构体 `HubbardDQMC` 中，而 `mutable struct` 性能不佳
 - 可以给 `sweep` 函数传回调函数来访问 G^σ

```
struct HubbardDQMC{L <: AbstractLattice}
    t::Float64
    U::Float64
    β::Float64
    Δτ::Float64
    n_imtimes::Int64
    n_wrap::Int64
    α::Float64

    lattice::L

    # s[τ, i]
    s::Matrix{Int64}

    # T[i, j]
    T::Matrix{Float64}
    # exp(Δτ * T)
    expT::Matrix{Float64}
    # exp(- Δτ * T)
    expmT::Matrix{Float64}

    id::Matrix{Float64}
    B_up_storage::Array{Float64, 3}
    B_dn_storage::Array{Float64, 3}
end
```

实现细节

格点信息单独定义，让DQMC代码尽可能generic

- 从1开始给每个格点编号
- `site_list[i, :]`: 给出 i 号格点的坐标
- `inverse_list[x, y]`: 给出 (x, y) 位置处的格点的编号
- `neighbor_list[i, :]`: 给出能够称 i 号格点的近邻格点的全部格点
- `neighbor_list[ineighbor_list_indices[1]]`给出 i 号格点的最近邻格点，将1换成2给出次近邻格点，等等

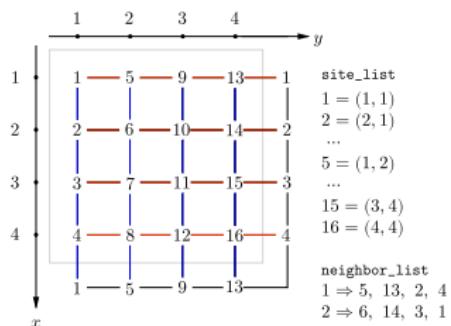
```
struct SquareLattice2D <: AbstractLattice
    n_sites::Int

    # Two dimensional, site_list[i, 1] = x, site_list[i, 2] = y
    site_list::Matrix{Int}

    # inverse_list[x, y] = i
    inverse_list::Matrix{Int}

    # neighbor_list[i, 1:4] gives the nearest neighbors, while
    neighbor_list::Matrix{Int}

    neighbor_list_indices
end
```



实现细节

格点初始化示例，类似地可以定义三角格子，六角格子等：

```
function SquareLattice2D(L::Integer)
    n_sites = L^2
    inverse_list = zeros(Int64, (L, L))
    site_list = zeros(Int64, (n_sites, 2))

    for i in 1:L
        for j in 1:L
            site_list[(i-1)*L+j, :] = [i, j]
            inverse_list[i, j] = (i - 1) * L + j
        end
    end

    neighbor_list = zeros(Int64, (n_sites, 8))
    for i in 1:L
        for j in 1:L
            neighbor_list[inverse_list[i, j], 1] = inverse_list[i, back_into_range(j+1, L)]
            neighbor_list[inverse_list[i, j], 2] = inverse_list[back_into_range(i+1, L), j]
            neighbor_list[inverse_list[i, j], 3] = inverse_list[i, back_into_range(j-1, L)]
            neighbor_list[inverse_list[i, j], 4] = inverse_list[back_into_range(i-1, L), j]
            neighbor_list[inverse_list[i, j], 5] = inverse_list[back_into_range(i+1, L), back_into_range(j+1, L)]
            neighbor_list[inverse_list[i, j], 6] = inverse_list[back_into_range(i+1, L), back_into_range(j-1, L)]
            neighbor_list[inverse_list[i, j], 7] = inverse_list[back_into_range(i-1, L), back_into_range(j-1, L)]
            neighbor_list[inverse_list[i, j], 8] = inverse_list[back_into_range(i-1, L), back_into_range(j+1, L)]
        end
    end

    SquareLattice2D(n_sites, site_list, inverse_list, neighbor_list, square_lattice_2D_neighbor_list_indices)
end
```

实现细节

计算的中间步骤完全透明，通过HubbardDQMC结构体和其它变量传递数据

```
function accept_rate_up(model::HubbardDQMC, G_up::Matrix{Float64}, τ, i)
    1 + Δ_up(model, τ, i)[i, i] * (1 - G_up[i, i])
end

function accept_rate_dn(model::HubbardDQMC, G_dn::Matrix{Float64}, τ, i)
    1 + Δ_dn(model, τ, i)[i, i] * (1 - G_dn[i, i])
end

function accept_rate(model::HubbardDQMC, G_up::Matrix{Float64}, G_dn::Matrix{Float64}, τ, i)
    accept_rate_up(model, G_up, τ, i) * accept_rate_dn(model, G_dn, τ, i)
end

function G_update(model::HubbardDQMC, G_up, G_dn, τ, i)
    s_τ = model.s
    B_up_storage = model.B_up_storage
    B_dn_storage = model.B_dn_storage
    copy!(G_up, G_up - G_up * Δ_up(model, τ, i) * (I - G_up) / accept_rate_up(model, G_up, τ, i))
    copy!(G_dn, G_dn - G_dn * Δ_dn(model, τ, i) * (I - G_dn) / accept_rate_dn(model, G_dn, τ, i))
    s_τ[τ, i] *= -1
    B_up_storage[:, :, τ] = B_up(model, τ)
    B_dn_storage[:, :, τ] = B_dn(model, τ)
end
```



效果

运行界面

```
Welcome to a simple DQMC simulation of Hubbard model.

Initialization completed.
We are simulating with
t      = 1.0
U      = 8.0
beta   = 4.0
dtau   = 0.05
alpha   = 0.653732997987334
on a 4 * 4 2d lattice and with 80 time steps.

Heating up for 256 steps.
Heating up completed.

Observables:
Bin 1 completed.
E_kin     = -0.9687630355749639 ± 0.33127357236689514
double_occ = 0.05310866943682016 ± 0.022527760888213445
mag       = 0.11132605943340927 ± 0.07612943910110066

Observables:
Bin 2 completed.
E_kin     = -0.8916161993979214 ± 0.32920849296173
double_occ = 0.04991756543479846 ± 0.022149779620090345
mag       = 0.07070575529071395 ± 0.06922846274872253

Observables:
```

输出结果

```
Bin average data:
=====
E_kin      double_occ      magnetization
=====
-0.9687630356  0.0531086694  0.1113260594
-0.8916161994  0.0499175654  0.0707057553
-0.9003367259  0.0486302172  0.0410485615
-0.8389155985  0.0478881422  0.0451339080
-0.9308848780  0.0509861957  0.1028641983

Binning results:
-----
E_kin      = -0.9061032874760621 ± 0.04821225404278734
double_occ = 0.05010615800636402 ± 0.0020568849869937057
mag        = 0.07421569649323544 ± 0.03223369605369777

julia> █
```

计算结果和许霄琰老师的示例代码一致。

效果

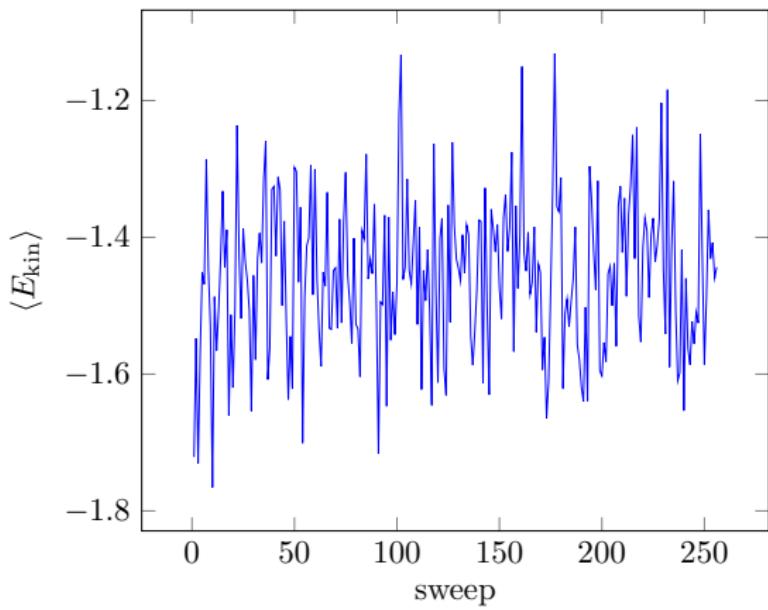
- 模型参数: $t = 1$,
 $U = 2$, $\beta = 4$,
在 6×6 正方晶格上
- 固定 $\tau = 30\Delta\tau$ 不动, 观察马尔可夫更新
- 橙色和蓝色表示向上和向下自旋

效果

- 模型参数: $t = 1$,
 $U = 2$, $\beta = 4$,
在 6×6 正方晶格上
- 不做马尔可夫更新, 检查不同 τ 处的 $s_{i\tau}$
- 橙色和蓝色表示向上和
向下自旋

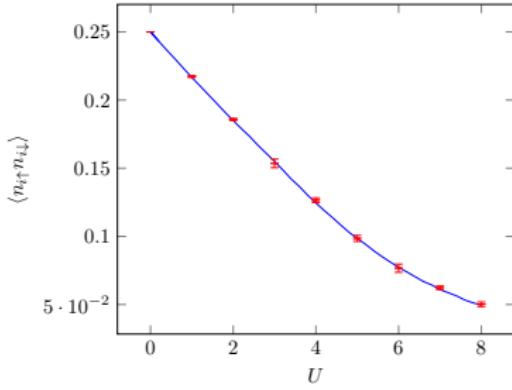
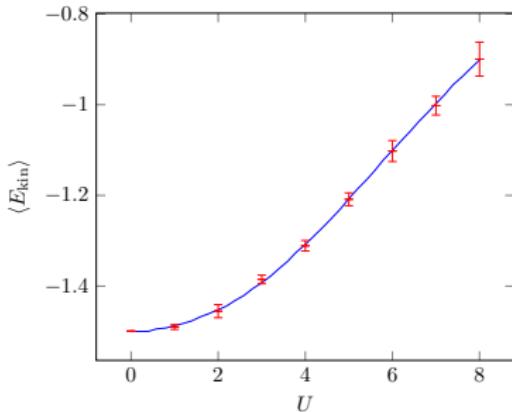
效果

- 模型参数: $t = 1$,
 $U = 2$, $\beta = 4$,
在 6×6 正方晶格上
- 右图为平摊到每个电子
上的动能大小



效果

- 参数: $t = 1.0$, $\beta = 4.0$,
 $\Delta\tau = 0.05$, 4×4 正方晶格
- 运行结果 (红色) 和许霄琰老师的示例代码的结果 (蓝色)
一致
- 随着 U 增大能量增大, 同时涨落也增大
- 随着 U 增大双占据下降



效果

增大格点数目还可以绘制费米面，但是需要的计算量较大。