

復旦大學

本科毕业论文



论文题目： 数值 Bootstrap 及其在凝聚态物理中的应用

姓 名： 吴晋渊 学 号： 18307110155

院 系： 物理学系

专 业： 物理学

指导教师： 戚扬 职 称： 研究员

单 位： 物理学系

完成日期： 2022 年 4 月 24 日

论文撰写人承诺书

本毕业论文是本人在导师指导下独立完成的，内容真实、可靠。本人在撰写毕业论文过程中不存在请人代写、抄袭或者剽窃他人作品、伪造或者篡改数据以及其他学位论文作假行为。

本人清楚知道学位论文作假行为将会导致行为人受到不授予/撤销学位、开除学籍等处理（处分）决定。本人如果被查证在撰写本毕业论文过程中存在学位论文作假行为，愿意接受学校依法作出的处理（处分）决定。

承诺人签名：

日期： 20 年 月 日

目 录

摘 要	iii
Abstract	iv
第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 Bootstrap 技术示例：共性 Bootstrap	1
1.3 数值 bootstrap	1
1.3.1 形式理论	1
1.3.2 数值 bootstrap 的若干应用	3
1.4 关于本文	4
第 2 章 一维非线性谐振子的数值 bootstrap	5
2.1 一维非线性谐振子——一个 $0+1$ 维非微扰场论	5
2.2 非线性 SDP 优化	6
2.2.1 $\langle x^n \rangle$ 的非线性递推关系	6
2.2.2 可行域，基态和第一激发态	6
2.2.3 严格对角化基准测试	6
2.2.4 非线性 SDP 在大规模问题上的不可行性	6
2.3 线性 SDP 优化	6
2.3.1 对易子和等式关系的符号计算	6
2.3.2 构建优化问题	6
2.3.3 使用非线性 SDP 为线性 SDP 做基准测试	6
2.3.4 收敛性问题	6
第 3 章 Hubbard 模型的数值 bootstrap	7
3.1 一维 Hubbard 模型的数值 bootstrap	7
3.1.1 算符空间的选取和截断	7
3.1.2 等式约束和半正定约束的符号计算	7
3.1.3 DMRG 基准测试	7
3.2 二维 Hubbard 模型的数值 bootstrap	7
第 4 章 总结与展望	8

参考文献	9
致 谢	12
附 录	13

摘 要

TODO

关键字： Bootstrap; Hubbard 模型; 非线性谐振子

Abstract

TODO

Keywords: Bootstrap; Hubbard model; nonlinear oscillator

第 1 章 绪论

1.1 引言

1.2 Bootstrap 技术示例：共性 Bootstrap

最为著名的 bootstrap 方法可能是所谓的共形 bootstrap，即针对共形场论（conformal field theory, CFT）的 bootstrap。共形对称性对两点 and 三点关联函数的形式有着强烈的要求：关于标量算符 \mathcal{O} 的两点函数只能取

$$\langle \mathcal{O}(x)\mathcal{O}(y) \rangle = \frac{1}{|x-y|^{2\Delta_{\mathcal{O}}}} \quad (1.1)$$

的形式，其中 $\Delta_{\mathcal{O}}$ 是常数（实际上是算符 \mathcal{O} 的反常量纲），而三点函数只能取

$$\langle \mathcal{A}(x)\mathcal{B}(y)\mathcal{C}(z) \rangle = \frac{f_{\mathcal{ABC}}}{|x-y|^{\Delta_{\mathcal{A}}+\Delta_{\mathcal{B}}-\Delta_{\mathcal{C}}}|y-z|^{\Delta_{\mathcal{B}}+\Delta_{\mathcal{C}}-\Delta_{\mathcal{A}}}|z-x|^{\Delta_{\mathcal{C}}+\Delta_{\mathcal{A}}-\Delta_{\mathcal{B}}}} \quad (1.2)$$

的形式。如果 \mathcal{O} 有自旋 $l_{\mathcal{O}}$ ，分子上可能还会出现一些因子。在已知两点函数和三点函数之后，可以通过算符乘积展开将更高阶的关联函数递归地计算出来。于是，确定一个 CFT 需要的数据就是 $\{\Delta_{\mathcal{O}}, l_{\mathcal{O}}, f_{\mathcal{ABC}}\}$ 。我们随后可以通过一系列约束条件，获得关于这些数据的不等式，从而确定自洽的 CFT 的 $\{\Delta_{\mathcal{O}}, l_{\mathcal{O}}, f_{\mathcal{ABC}}\}$ 组合。通过这种方式，在给定一类 CFT 的基本自由度之后，我们实际上已经知道这整整一类 CFT 的行为以及理论空间的边界了^[1-2]。在凝聚态物理中，共形 bootstrap 可以为一个体系的临界行为是不是能够使用 CFT 描述提供一定提示，如通过比较三维伊辛模型和一类 CFT 的临界指数，我们有很强的信心表明三维伊辛模型的临界行为可能就是一个落在可行域边界上的 CFT^[1,3]。

1.3 数值 bootstrap

1.3.1 形式理论

实际问题中会遇到的模型大多不像 CFT 那样容易做 bootstrap：我们没有像(1.1)和(1.2)这么强的对关联函数的约束条件，一般情况下也不能解析地将高阶关联函数转化为低阶关联函数的多项式。然而，这不意味着 bootstrap 的思想和一些计算手段不能够适用于非 CFT 的体系：我们不强求像(1.1)和(1.2)这样把一个关联函数化简为几个数，但总是可以使用对称性等约束大大缩减一个关联函数所包含的数据；在仅仅由体系的哈密顿量决定的密度矩阵（如能量本征态或是热平衡态）上，我们有

$$\langle OH \rangle = \text{tr}(\rho(H)OH) = \text{tr}(H\rho(H)O) = \text{tr}(\rho(H)HO) = \langle HO \rangle, \quad (1.3)$$

于是可以根据关联函数内的算符和哈密顿量的对易关系获得关联函数之间的联系，类似的，设 C 和 H 对易，即 C 是体系的一个对称性，则也有

$$\langle OC \rangle = \langle CO \rangle, \quad (1.4)$$

于是能够得到另一些关联函数之间的联系；通过将正定性要求作用到不同的算符期望值上，我们可以缩小各个关联函数的取值范围，从而完成 bootstrap。以上思路称为数值 bootstrap，可以归结为如下步骤：

1. 输入哈密顿量 H 、系统对称性算符集合 $\{C_i\}$ 和参与 bootstrap 的关联函数涉及的算符组成的集合 $\{O_i\}$ 。
2. 根据(1.4)和(1.3)，自动确定不同的 $\langle O \rangle$ 之间的关系。
3. 构建矩阵 $M_{ij} = \langle O_i^\dagger O_j \rangle$ ，其中 $O_i^\dagger O_j$ 在经过一定的算符正规排序之后，可以使用 $\{O_i\}$ 为基底展开； $\{O_i\}$ 张成的算符空间中的形如 $O^\dagger O$ 的算符的期望值不小于零，当且仅当 M 是正定的。
4. 在第 2 步的等式约束（这个约束的地位等同于 CFT 中的算符乘积展开）、 M 必须半正定的约束下，以牵涉到的全体算符期望值为优化变量，最优化

$$E := \langle H \rangle = \sum_i c_i \langle O_i \rangle. \quad (1.5)$$

这是一个半正定规划（semidefinite programming, SDP）问题。

约束(1.3)和(1.4)在经过算符正规排序后，都是 $\{\langle O_i \rangle\}$ 的仿射变换，而 $\langle H \rangle$ 也是 $\{\langle O_i \rangle\}$ 的仿射变换。因此，相应的数值 bootstrap 问题是一个线性半正定规划问题（以下简称线性 SDP）。线性 SDP 问题属于凸优化问题^[4-5]，已有 SCS^[6-7]，CSDP^[8]，COSMO^[9]等成熟的求解器。

在 $\rho(E)$ 实际上对应 H 的某个能量本征态时，(1.3)可以加强为如下形式：

$$\langle HO \rangle = \langle n | HO | n \rangle = E \langle n | O | n \rangle = E \langle O \rangle. \quad (1.6)$$

在实际计算时，由于 E 是算符 H 的期望值，是未知的，(1.6)的右边将出现 $\langle O_1 \rangle \langle O_2 \rangle$ 形式的项，即会出现优化变量的乘积，因此，包含(1.6)约束的数值 bootstrap 问题将是一个非线性半正定规划问题（以下简称非线性 SDP）。由于线性 SDP 允许系统的密度矩阵不是纯态，线性 SDP 的 $\{O_i\}$ 的可行域应当比非线性 SDP 大。图1.1是一个离散能级系统

$$H = \sum_i c_i O_i \quad (1.7)$$

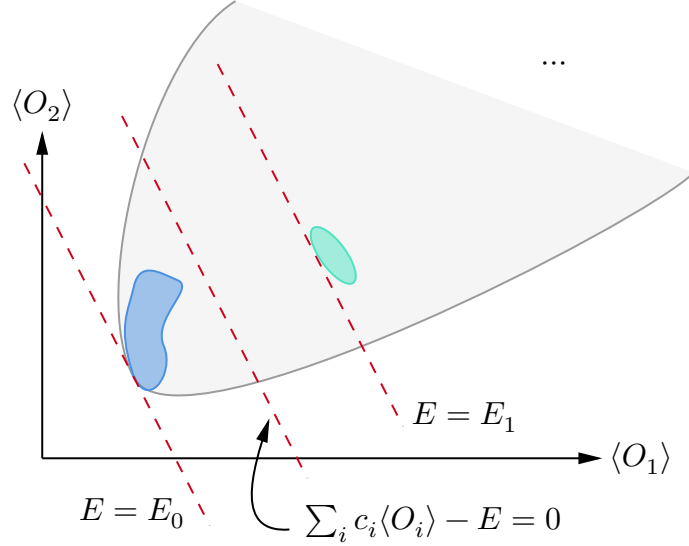


图 1.1 线性 SDP 和非线性 SDP：蓝色和绿色区域是非线性 SDP 的可行域，蓝色区域近似给出基态 E_0 上的物理量期望值，绿色区域近似给出基态 E_1 上的物理量期望值，灰色区域是线性 SDP 问题的可行域，虚线代表不同 E 对应的 $\sum_i c_i \langle O_i \rangle = E$ 超平面，其中 c_i 为哈密顿量 $H = \sum_i c_i O_i$ 的系数。

的线性 SDP 和非线性 SDP 可行域的示意图。非线性 SDP 中，可行域有若干彼此不连通的连通分支，每一个均为某个能级上的物理量期望值的范围。线性 SDP 的可行域是包含所有非线性 SDP 可行域的一个凸集。

虽然非线性 SDP 能够让我们看清楚系统的激发态结构，目前尚无足够成熟的非线性求解器能够求解物理上需要的非线性 SDP 问题^[10]。已报道的非线性 SDP 均仅限于单粒子量子力学，通过递推关系，将所有物理量约化至 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 上，然后暴力搜索^[11–12]。我们将在第 2.2 节中复现^[11]的工作。

1.3.2 数值 bootstrap 的若干应用

由于 bootstrap 不依赖于哈密顿量中各项的大小，它显然是处理非微扰问题的有力武器。已有若干关于不同体系的数值 bootstrap 研究出现，如关于难以微扰解决的单粒子量子力学问题和矩阵模型^[10–12]以及强关联电子模型^[13]。

文献^[12]使用了以 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 为优化变量、暴力搜索的单粒子量子力学非线性 SDP，捕捉到了二势阱模型中的非微扰瞬子效应，并与通过稀薄瞬子假设计算出的基态能量比较，直观展示了稀薄瞬子假设的成立条件；验证了互为对偶的超对称量子力学哈密顿量的谱的确是—致的；验证了 $O(N)$ 向量模型的低能部分在强耦合极限下，基态能量和耦合常数的分数幂次关系，并确认其与解析结果一致。^[10]开发了一套处理矩阵模型的数值 bootstrap 中的矩阵自由度在大 N 极限下满足的非线性约束

$$\langle \text{Tr } M^l \text{Tr } M^m \rangle = \langle \text{Tr } M^l \rangle \langle \text{Tr } M^m \rangle + \mathcal{O}(1/N^2) \quad (1.8)$$

的方法，验证了它在求解可以解析处理的矩阵模型时的有效性，并借此解决了无法解析处理的一类二矩阵模型。¹[13] 将线性 SDP 数值 bootstrap 技术应用在一维和二维 Hubbard 模型上，所得结果和常规的 DQMC、DMRG 等方法吻合。由于物理学中大量未解决的问题最终都归结为如何处理非微扰效应，进一步研究数值 bootstrap 方法无疑有很大意义。

1.4 关于本文

本文将探讨

¹ 这套方法对非线性 SDP 的作用可能有限，因为此时(1.6)和(1.5)联立将导致任意高幂次的非线性约束，而矩阵模型中由于矩阵自由度的非线性约束幂次最多到 2。

第 2 章 一维非线性谐振子的数值 bootstrap

2.1 一维非线性谐振子——一个 $0+1$ 维非微扰场论

一维非线性谐振子

$$H = p^2 + x^2 + gx^4 \quad (2.1)$$

可以看成是一个 $0+1$ 维的 ϕ^4 量子场论。它常常被用作量子力学中微扰论的例子，但实际上可以证明，其基态能量的微扰级数是发散的^[14]。这个发散可以看成 ϕ^4 量子场论中的发散的一个特例。大部分量子场论中，相互作用均导致的微扰级数在最好的情况下也是渐进级数^[15]。¹

由于一维非线性谐振子归根到底是一个量子力学模型，可以通过求解离散定态薛定谔方程的方法精确地处理它。它和 $3+1$ 维多体问题的相似性又意味着，用于一般的多体问题的方法也可以用在它上面。一维非线性谐振子的简单形式和它的非微扰本质意味着它是测试多体问题研究方法的一个理想的玩具模型：可以通过比较这些数值或是解析方法和求解离散定态薛定谔方程的结果来预计这些方法的有效性，并分析这些方法为何有效或无效。一维非线性谐振子已被做大量不同的话题的例子，包括泛函重整化群^[17]、Rayleigh-Schrödinger 微扰论的高阶行为^[18]、重整化微扰论的收敛性^[16]、量子多尺度分析^[19]。

之后几节将重复

¹ 此处所说的是朴素地将物理量展开成关于耦合常数 g 的幂次的级数后，会发现这个级数不收敛。在量子场论中这个级数的每一项都可能不收敛，因为动量积分时发生紫外发散。后一种不收敛和此处的讨论没有直接关系。然而，重整化微扰论——在微扰级数中引入抵消项，物理地看，是使用修饰后的耦合常数取代裸的耦合常数——可以用于消除紫外发散，而重整化微扰论的收敛性确实在^[16]中讨论过，结论是，很不幸，它仍然是发散的。

2.2 非线性 SDP 优化

2.2.1 $\langle x^n \rangle$ 的非线性递推关系

2.2.2 可行域，基态和第一激发态

2.2.3 严格对角化基准测试

2.2.4 非线性 SDP 在大规模问题上的不可行性

2.3 线性 SDP 优化

2.3.1 对易子和等式关系的符号计算

2.3.2 构建优化问题

2.3.3 使用非线性 SDP 为线性 SDP 做基准测试

2.3.4 收敛性问题

第 3 章 Hubbard 模型的数值 bootstrap

3.1 一维 Hubbard 模型的数值 bootstrap

3.1.1 算符空间的选取和截断

3.1.2 等式约束和半正定约束的符号计算

3.1.3 DMRG 基准测试

3.2 二维 Hubbard 模型的数值 bootstrap

第 4 章 总结与展望

参考文献

- [1] POLAND D, SIMMONS-DUFFIN D. The conformal bootstrap[J/OL]. Nature Physics, 2016, 12(6): 535-539. <https://doi.org/10.1038%2Fnphys3761>. DOI: 10.1038/nphys3761.
- [2] POLAND D, RYCHKOV S, VICHI A. The conformal bootstrap: Theory, numerical techniques, and applications[J/OL]. Reviews of Modern Physics, 2019, 91(1). <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.91.015002>. DOI: 10.1103/revmodphys.91.015002.
- [3] EL-SHOWK S, PAULO S M F, POLAND D, et al. Solving the 3d ising model with the conformal bootstrap[J/OL]. Physical Review D, 2012, 86(2): 025022. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.86.025022>. DOI: 10.1103/physrevd.86.025022.
- [4] VANDENBERGHE L, BOYD S. Semidefinite programming[J]. SIAM review, 1996, 38(1): 49-95.
- [5] BOFILL W G, GÓMEZ J A. Linear and nonlinear semidefinite programming [J/OL]. Pesquisa Operacional, 2014, 34(3): 495-520. <https://doi.org/10.1590%2F0101-7438.2014.034.03.0495>. DOI: 10.1590/0101-7438.2014.034.03.0495.
- [6] O'DONOGHUE B, CHU E, PARIKH N, et al. SCS: Splitting conic solver, version 3.2.0[EB/OL]. 2021. <https://github.com/cvxgrp/scs>.
- [7] O'DONOGHUE B, CHU E, PARIKH N, et al. Conic optimization via operator splitting and homogeneous self-dual embedding[J/OL]. Journal of Optimization Theory and Applications, 2016, 169(3): 1042-1068. <http://stanford.edu/~boyd/papers/scs.html>.
- [8] BORCHERS B. Csdp, a c library for semidefinite programming[J/OL]. Optimization Methods and Software, 1999, 11(1-4): 613-623. <https://doi.org/10.1080/10556789908805765>.
- [9] GARSTKA M, CANNON M, GOULART P. COSMO: A conic operator splitting method for convex conic problems[J/OL]. Journal of Optimization

- Theory and Applications, 2021, 190(3): 779-810. <https://doi.org/10.1007/s10957-021-01896-x>.
- [10] KAZAKOV V, ZHENG Z. Analytic and numerical bootstrap for one-matrix model and “unsolvable” two-matrix model[A]. 2021. arXiv: [2108.04830](https://arxiv.org/abs/2108.04830).
- [11] HAN X, HARTNOLL S A, KRUTHOFF J. Bootstrapping matrix quantum mechanics[J/OL]. Physical Review Letters, 2020, 125(4): 041601. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.041601>. DOI: [10.1103/physrevlett.125.041601](https://doi.org/10.1103/physrevlett.125.041601).
- [12] BHATTACHARYA J, DAS D, DAS S K, et al. Numerical bootstrap in quantum mechanics[J/OL]. Physics Letters B, 2021, 823: 136785. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physletb.2021.136785>.
- [13] HAN X. Quantum many-body bootstrap[A]. 2020. arXiv: [2006.06002](https://arxiv.org/abs/2006.06002).
- [14] BENDER C M, WU T T. Anharmonic oscillator[J/OL]. Phys. Rev., 1969, 184: 1231-1260. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.184.1231>.
- [15] JACKIW R. The unreasonable effectiveness of quantum field theory[M/OL]. arXiv, 1996. <https://arxiv.org/abs/hep-th/9602122>. DOI: [10.48550/ARXIV.HEP-TH/9602122](https://doi.org/10.48550/ARXIV.HEP-TH/9602122).
- [16] BENDER C M, MANDULA J E, MCCOY B M. Does renormalized perturbation theory diverge?[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1970, 24: 681-683. DOI: [10.1103/PhysRevLett.24.681](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.24.681).
- [17] NAGY S, SAILER K. Functional renormalization group for quantized anharmonic oscillator[J/OL]. Annals Phys., 2011, 326: 1839-1876. DOI: [10.1016/j.aop.2011.04.011](https://doi.org/10.1016/j.aop.2011.04.011).
- [18] BENDER C M, WU T T. Anharmonic oscillator. ii. a study of perturbation theory in large order[M/OL]//LE GUILLOU J, ZINN-JUSTIN J. Current Physics - Sources and Comments: volume 7 Large-Order Behaviour of Perturbation Theory. Elsevier, 1990: 41-57. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444885975500144>. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-88597-5.50014-4>.

- [19] BENDER C M, BETTENCOURT L M A. Multiple-scale analysis of quantum systems[J/OL]. Physical Review D, 1996, 54(12): 7710-7723. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.54.7710>. DOI: 10.1103/physrevd.54.7710.

致 谢

附 录

指导教师对论文学术规范的审查意见：

☐ 本人经过尽职审查，未发现毕业论文有学术不端行为。

☐ 本人经过尽职审查，发现毕业论文有如下学术不端行为：

指导教师签名：

日期： 20 年 月 日

指导教师评语：

答辩委员会（小组）评语：

签名：

20 年 月 日

签名：

20 年 月 日

学分

成绩

备注：

教务处制