

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 29 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：共形 Bootstrap	1
1.3 数值 bootstrap	2
1.3.1 形式理论	2
1.3.2 数值 bootstrap 的若干应用	4
1.4 关于本文	5
第 2 章 一维非简谐振子的数值 bootstrap	6
2.1 一维非简谐振子——一个 $0+1$ 维非微扰场论	6
2.2 非线性 SDP 优化	6
2.2.1 $\langle x^n \rangle$ 的非线性递推关系	7
2.2.2 可行域，基态和第一激发态	9
2.2.3 定态薛定谔方程基准测试	11
2.2.4 计算 $\langle x^m p^n \rangle$ 参考值	12
2.3 线性 SDP 优化	12
2.3.1 对易子和等式关系的符号计算	12
2.3.2 构建优化问题	13
2.3.3 使用非线性 SDP 为线性 SDP 做基准测试	14
2.3.4 计算结果与收敛性问题	14
第 3 章 Hubbard 模型的数值 bootstrap	16
3.1 一维 Hubbard 模型的数值 bootstrap	16
3.1.1 算符空间截断	16
3.1.2 等式约束和半正定约束的符号计算	16
3.1.3 DMRG 基准测试	16
3.2 二维 Hubbard 模型的数值 bootstrap	16
3.2.1 算符空间的选取和截断	16

第 4 章 总结与展望	18
参考文献	19
致 谢	23
附 录	24

摘 要

TODO

关键字： Bootstrap; Hubbard 模型; 非简谐振子

Abstract

TODO

Keywords: Bootstrap; Hubbard model; nonlinear oscillator

第 1 章 绪论

1.1 引言

凝聚态物理中的传统量子多体方法从电子在周期性势场中产生的能带结构出发，通过费曼图微扰地处理库仑相互作用；大体上说，这种范式对应于朗道费米液体理论及其修正^[1]。在强关联体系中，费米液体图像失效，在量子多体理论中体现为有相互作用格林函数和无相互作用格林函数无法建立绝热演化的关系，LW 泛函出现多值性等现象^[2]。已有多种数值方法可用于求解强关联系统。对自旋模型，可使用世界线蒙特卡洛、随机级数展开，对电子模型，可使用行列式蒙特卡洛，不过这些方法均可能存在符号问题，即在容易想到的基底下，不同系统构型的权重是复数而不是实数，从而无法通过马尔可夫链抽样^[3]。张量网络方法是近年来发展较快的一种方法，通过构造能够容纳系统基态的纠缠结构的张量网络波函数拟设，通过变分法来获得系统基态。一维有能隙系统基本上可以使用张量乘积态非常精确地处理（称为 DMRG），高维系统的张量网络方法也有很大进展（如 PEPS），不过在设计合理的波函数拟设和提高效率方面仍有挑战^[4]。

本文讨论的 bootstrap 技术是一种新兴的非微扰方法^[5-8]。与前述的常规数值方法不同，bootstrap 技术不直接处理波函数、算符、（离散）路径积分这些对象，而是通过在待求解的物理量期望值之间建立解析的等式和不等式关系，据此它们的取值范围。通过这种方法，不需要使用正则量子化或是路径积分的语言，我们即可“凭空”求解一个体系。

1.2 Bootstrap 技术示例：共形 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^[9]。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

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

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 $\{\Delta_{\mathcal{O}}, l_{\mathcal{O}}, f_{ABC}\}$ 。

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(1.5)和(1.4)，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

$$E := \langle H \rangle = \sum_i c_i \langle O_i \rangle. \quad (1.6)$$

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

约束(1.4)和(1.5)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^[13-14]，已有 SCS^[15-16]，CSDP^[17]，COSMO^[18]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，(1.4)可以加强为如下形式：

$$\langle HO \rangle = \langle n | HO | n \rangle = E \langle n | O | n \rangle = E \langle O \rangle. \quad (1.7)$$

在实际计算时，由于 E 是算符 H 的期望值，是未知的，(1.7)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(1.7)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

$$H = \sum_i c_i O_i \quad (1.8)$$

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^[7]。已报道的非线性

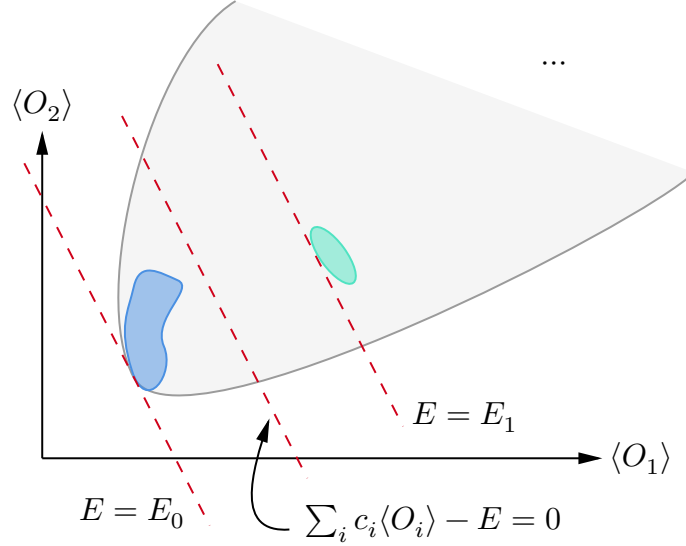


图 1.1 线性 SDP 和非线性 SDP：蓝色和绿色区域是非线性 SDP 的可行域，蓝色区域近似给出基态 E_0 上的物理量期望值，绿色区域近似给出基态 E_1 上的物理量期望值，灰色区域是线性 SDP 问题的可行域，虚线代表不同 E 对应的 $\sum_i c_i \langle O_i \rangle = E$ 超平面，其中 c_i 为哈密顿量 $H = \sum_i c_i O_i$ 的系数。

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^[5-6]。

相比于同样基于最优化的变分法（包括各种张量网络方法），数值 bootstrap 有一个独特的优势：只要优化能够正确完成，它能够确定系统能量的下界。这是因为体系的各个物理量期望值必定让(1.4)，(1.5)和正定性条件成立，即一定在 SDP 问题的可行域当中，而数值 bootstrap 给出的能量数值值为可行域中的 $\langle H \rangle$ 的最小值。因此，数值 bootstrap 给出的能量数值值必定小于等于能量真实值。传统的最优化方法给出的则是能量的上界。相互比较两种方法的结果，可以将系统基态能量的可能范围确定得非常小。

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^[5-7]以及强关联电子模型^[8]。

文献 [6] 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。[7] 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

$$\langle \text{Tr } M^l \text{ Tr } M^m \rangle = \langle \text{Tr } M^l \rangle \langle \text{Tr } M^m \rangle + \mathcal{O}(1/N^2) \quad (1.9)$$

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文献 [8] 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。

1.4 关于本文

本文将在第2.2节中复现 [5] 的工作。

¹ 这套方法对非线性 SDP 的作用可能有限，因为此时(1.7)和(1.6)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 一维非简谐振子的数值 bootstrap

2.1 一维非简谐振子——一个 $0+1$ 维非微扰场论

一维非简谐振子

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

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^[19]。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^[20]。¹

由于一维非简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。一维非简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。一维非简谐振子已被做大量不同的话题的例子，包括泛函重整化群^[22]、Rayleigh-Schrödinger 微扰论的高阶行为^[23]、重整化微扰论的收敛性^[21]、量子多尺度分析^[24]。

2.2 非线性 SDP 优化

本节我们复现文献 [5] 中对非简谐振子

$$H = p^2 + x^2 + gx^4 \quad (2.2)$$

的非线性 SDP 计算。由于空间反演不变性，可以确认 n 为奇数时 $\langle x^n \rangle = 0$ 。我们将正规序算符基底 $\{O_i\}$ 选取为 $\{x^{2n}\}, n \leq K$ 。为此，有必要在不同的 $\langle x^{2n} \rangle$ 期望值之间建立非线性递推关系，最终将 $n \geq 2$ 时的所有期望值都转化为能量期望值 E 和 x 的二阶矩 $\langle x^2 \rangle$ 的多项式。建立这种递推关系之后，根据矩阵

$$M_{ij} = \langle x^{i+j} \rangle \quad (2.3)$$

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，并且确实可以在非简谐振子中重复，它在非简谐振子中的收敛性确实在 [21] 中讨论过，结论是，很不幸，它仍然是发散的。

的半正定性，即可得到 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 的范围。由于此时独立的优化变量只有 E 和 $\langle x^2 \rangle$ ，可以直接通过暴力搜索完成 bootstrap。我们使用 Mathematica 的 FindMinimum 函数即可完成整个计算流程。

2.2.1 $\langle x^n \rangle$ 的非线性递推关系

本节我们展示如何导出 [5] 中的方程 (6)。根据 $\langle OH \rangle = E \langle O \rangle$ 以及 (2.2)，并取 $O = x^{t-1}$ ，我们有

$$E \langle x^{t-1} \rangle = \langle x^{t-1} p^2 \rangle + \langle x^{t+1} \rangle + g \langle x^{t+3} \rangle. \quad (2.4)$$

上式中出现了 p 的依赖，这会导致递推关系不封闭；此外， E 也包含 $\langle p^2 \rangle$ 的期望值。我们需要设法寻找一个包含 $\langle x^{t-1} p^2 \rangle$ 和 $\langle x^n \rangle$ 的递推关系。

E 的期望值中的 $\langle p^2 \rangle$ 可以通过在 $\langle [O, H] \rangle = 0$ 中取 $O = xp$ 而消去。我们有

$$\begin{aligned} [p^2, xp] &= p \underbrace{[p, xp]}_{=[p, x]p=-ip} + [p, xp]p = -ip^2 - ip^2 = -2ip^2, \\ [x^2, xp] &= x[x^2, p] = x \cdot (2ix) = 2ix^2, \\ [x^4, xp] &= x[x^4, p] = x \cdot (4ix^3) = 4ix^4, \end{aligned}$$

于是约束 $\langle [O, H] \rangle = 0$ 意味着

$$-2i \langle p^2 \rangle + 2i \langle x^2 \rangle + 4gi \langle x^4 \rangle = 0,$$

于是

$$\begin{aligned} E &= \langle p^2 \rangle + \langle x^2 \rangle + g \langle x^4 \rangle \\ &= \langle x^2 \rangle + 2g \langle x^4 \rangle + \langle x^2 \rangle + g \langle x^4 \rangle = 2 \langle x^2 \rangle + 3g \langle x^4 \rangle. \end{aligned} \quad (2.5)$$

我们仍然需要计算一般的 $\langle x^{t-1} p^2 \rangle$ 。显然，通过在 $\langle [O, H] \rangle = 0$ 中取 $O = x^t p$ ，由于

$$\begin{aligned} [x^t p, p^2] &= p[x^t p, p] + [x^t p, p]p = p[x^t, p]p + [x^t, p]p^2 \\ &= pitx^{t-1}p + itx^{t-1}p^2 = it([p, x^{t-1}]p + 2x^{t-1}p^2) \\ &= it(-i(t-1)x^{t-2}p + 2x^{t-1}p^2) \\ &= t(t-1)x^{t-2}p + 2itx^{t-1}p^2, \end{aligned}$$

我们可以在得到的约束条件中看到一个 $x^{t-1}p^2$ 项，但是同样出现了 $x^{t-2}p$ 项，而这个项在 (2.4) 中是没有出现的。因此，我们需要另一个只关于 $\langle x^n p \rangle$ 和 $\langle x^m \rangle$ 的约束来消去这个项。这样的约束是容易得到的：注意到

$$\begin{aligned} [x^s, p^2] &= p[x^s, p] + [x^s, p]p = p \cdot isx^{s-1} + isx^{s-1}p \\ &= is(2x^{s-1}p + [p, x^{s-1}]) = is(2x^{s-1}p - i(s-1)x^{s-2}) \\ &= 2isx^{s-1}p + s(s-1)x^{s-2}, \end{aligned}$$

而 x^s 和 H 中关于 x 的项当然是对易的。于是 $O = x^s, x^t p$ 的 $\langle [O, H] \rangle = 0$ 约束即可得到将 $\langle x^{t-1} p^2 \rangle$ 和 $\langle x^n \rangle$ 的关系。 $O = x^s$ 的约束条件我们已经得到，它是

$$0 = \langle [x^s, H] \rangle = \langle [x^s, p^2] \rangle = 2is \langle x^{s-1} p \rangle + s(s-1) \langle x^{s-2} \rangle. \quad (2.6)$$

我们已经计算了 $O = x^t p$ 和 p^2 的对易关系，它和 x^2, x^4 的对易关系分别是

$$[x^t p, x^2] = x^t [p, x^2] = x^t \cdot (-2ix) = -2ix^{t+1},$$

以及

$$[x^t p, x^4] = x^t [p, x^4] = x^t \cdot (-4ix^3) = -4ix^{t+3}.$$

这样 $O = x^t p$ 给出的约束就是

$$t(t-1) \langle x^{t-2} p \rangle + 2it \langle x^{t-1} p^2 \rangle - 2i \langle x^{t+1} \rangle - 4ig \langle x^{t+3} \rangle = 0. \quad (2.7)$$

在(2.6)中代入 $s = t-1$ ，并联立(2.6)和(2.7)，消去 $x^{t-2} p$ ，就得到

$$-t(t-1) \cdot \frac{t-2}{2i} \langle x^{t-3} \rangle + 2it \langle x^{t-1} p^2 \rangle - 2i \langle x^{t+1} \rangle - 4ig \langle x^{t+3} \rangle = 0,$$

即

$$4t \langle x^{t-1} p^2 \rangle = 4 \langle x^{t+1} \rangle + 8g \langle x^{t+3} \rangle - t(t-1)(t-2) \langle x^{t-3} \rangle. \quad (2.8)$$

这就消去了(2.4)中的 $\langle x^{t-1} p \rangle$ 项，我们得到

$$4tE \langle x^{t-1} \rangle + t(t-1)(t-2) \langle x^{t-3} \rangle - 4(t+1) \langle x^{t+1} \rangle - 4g(t+2) \langle x^{t+3} \rangle = 0. \quad (2.9)$$

这个递推关系中的 x^n 的期望值中，如果其中一个是偶数幂次的，那么全部都是偶数幂次的。在 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 给定后，根据(2.5)可以计算出 $\langle x^4 \rangle$ ，于是即可递推出 $\langle x^6 \rangle, \langle x^8 \rangle, \dots$ ，于是就能够构造出全部 $\langle x^{2n} \rangle$ 。这样，即可将矩阵 $M_{ij} = \langle x^{i+j} \rangle$ 完全用两个变量 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 表示出来。

至此我们已经构造完成了关于非简谐振子的诸 $\langle x^n \rangle$ 的非线性 SDP 问题，它是

$$\begin{aligned} \min E, \quad \text{s.t. } \langle x^n \rangle &= 0 \quad \text{for odd } n, \\ M_{ij} &= \langle x^{i+j} \rangle, \quad M \geq 0, \\ E &= 2 \langle x^2 \rangle + 3g \langle x^4 \rangle, \\ 4tE \langle x^{t-1} \rangle + t(t-1)(t-2) \langle x^{t-3} \rangle - 4(t+1) \langle x^{t+1} \rangle - 4g(t+2) \langle x^{t+3} \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.10)$$

在实际求解时，需要将 i 和 j 约束在范围

$$0 \leq i, j \leq K \quad (2.11)$$

中， K 是对算符幂次上限的一个截断。

2.2.2 可行域，基态和第一激发态

我们在 Mathematica 中先为变量 g 赋值，然后执行以下代码：

```
expectedX[0] := 1;
expectedX[2] := x2;
expectedX[4] := 1/(3 g) (E0 - 2 x2);
expectedX[u_?EvenQ] := 1 / (4 g ((-3 + u) + 2)) * (
    4 (-3 + u) E0 expectedX[(-3 + u) - 1]
    + (-3 + u) ((-3 + u) - 1) ((-3 + u) - 2) *
        expectedX[(-3 + u) - 3]
    - 4 ((-3 + u) + 1) expectedX[(-3 + u) + 1]);

matPositive[K_] :=
    Table[expectedX[i+j], {i, 0, K}, {j, 0, K}];
```

则函数 `matPositive[K]` 就给出了表示成变量 x_2 （代表期望值 $\langle x^2 \rangle$ ）和变量 E_0 （代表 E ；这里我们没有使用 E ，因为 Mathematica 中符号 E 默认用于表示自然对数的底）的 M_{ij} 矩阵，参数 K 即为其幂次截断 K 。之后，可以通过检查一个正方形区域内，不同的 E_0 和 x_2 值给出的 `matPositive[K]` 的特征值是否大于等于零，搜索得到非简谐振子的非线性 SDP 的可行域。通过以下代码

```
RegionPlot[
    AllTrue[Eigenvalues[matPositive[9] /. g -> 1],
    # >= 0 &],
    {E0, 1.35, 1.44}, {x2, 0.294, 0.311},
    PlotPoints -> 100]
```

可以绘制 K 取为 9 时， $g = 1$ 的非简谐振子（以下均取 $g = 1$ ）的非线性 SDP 可行域的一部分。比照通过其它手段获得的结果（见下一节），可以确定此处的可行域对应非简谐振子的基态。通过以下代码

```
FindMinimum[{E0,
    AllTrue[Eigenvalues[matPositive[9] /. g -> 1], # >= 0 &]},
    {{x2, 0.307}, {E0, 1.40}}]
```

可以计算给定 K 为 9 时的 E_0 的极小值，以及此时 x_2 的值。注意，由于非线性 SDP 中，属于不同的能级的可行域经常是分散的，在使用 `FindMinimum` 寻找极小值点时需要指定初始值，初始值落在哪个能级的可行域中，`FindMinimum` 就给出哪个能级的 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 估计值。

图 2.1 是 `RegionPlot` 函数的输出，给出了非线性 SDP 问题(2.10)中不同 K 时的基态的 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 的可行域。文献 [5] 的图 1 给出了几乎一样的图形，可

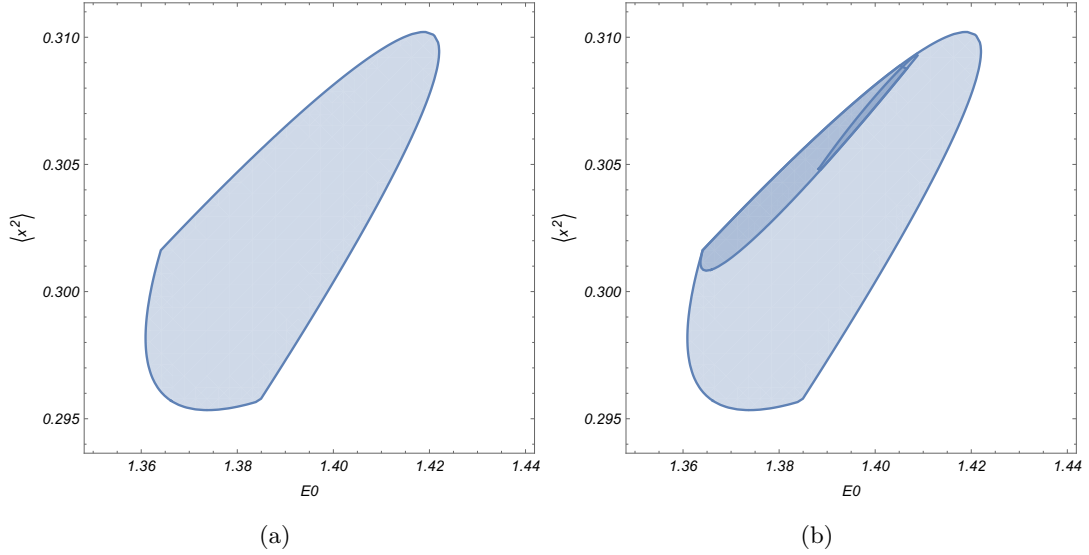


图 2.1 (a) 取 K 为 7 时的基态的 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 的范围 (b) K 为 7, 8, 9 时的基态的 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 的范围

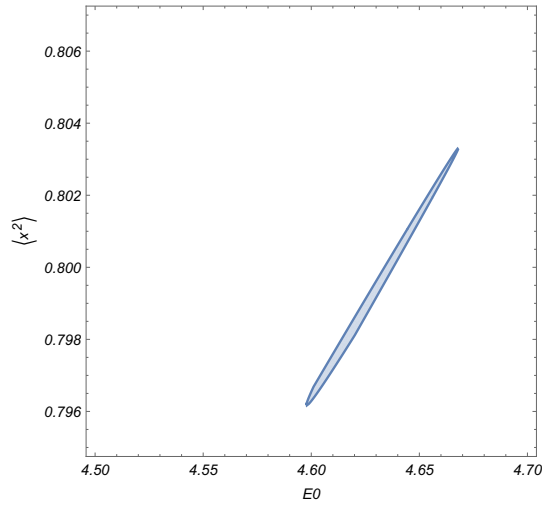


图 2.2 $K = 10$ 时的第一激发态的 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 的范围

以推测作者也是使用 Mathematica 完成的非线性 SDP。可以看到，随着 K 的增大，可行域快速缩小。实际上，当 $K = 9$ 时，可行域已经缩得如此之小，以至于 RegionPlot 的默认采样密度下，绘制出来的可行域是一片空白；需要将 PlotPoints 设置到至少 100 才能够绘制出正确的可行域。

类似的，如图 2.2 所示，在第一激发态的能量附近做暴力搜索，同样可以发现一个可行域的连通分支。

表 2.1 给出了不同截断下的非线性 SDP 结果。观察可以发现，随着 K 的提升，基态能量计算结果呈现上升趋势，并且似乎在逐渐收敛。这 and 第 1.3.1 节中所述的基态能量计算值是真实值的下界一致，也表明，通过扩大问题规模，可以系统地提升计算精度。

表 2.1 不同 K 下的非线性 SDP 结果

K	E	$\langle x^2 \rangle$
7	1.3609004491049470	0.29816865118929264
8	1.3636216063227670	0.30113812134566936
9	1.3865039748817591	0.30434383991470115
10	1.3865039748792434	0.30434383991413540
11	1.3921989769203813	0.30578155266869480
12	1.3921989772554817	0.30578148147678430

 表 2.2 不同 Δx 下定态薛定谔方程的基态

Δx	E	$\langle x^2 \rangle$
0.1	1.3907396718070801	0.30534500159391625
0.05	1.3919487648892426	0.30569659174520486
0.02	1.3922871864425093	0.30579492589833174
0.01	1.3923355279431886	0.30580896967753670
0.005	1.3923476131451260	0.30581248046786375

2.2.3 定态薛定谔方程基准测试

为测试表 2.1 的可靠性，我们选择求解定态薛定谔方程来模拟非简谐振子。相应的薛定谔方程为

$$-\nabla^2 \psi + x^2 \psi = E \psi, \quad \psi(x \rightarrow \pm\infty) = 0. \quad (2.12)$$

为了做数值求解，采用步长为 Δx 的有限差分格式，则 ∇^2 近似为一个矩阵，其中

$$\nabla_{i,i}^2 = -2/\Delta x^2, \quad \nabla_{i,i-1}^2 = \nabla_{i,i+1}^2 = 1/\Delta x^2, \quad (2.13)$$

其余矩阵元为零， \hat{x} 算符近似为一个对角矩阵， x_{ii} 为 i 点的坐标。进一步，将求解域限制在 $-L \leq x \leq L$ 上。设求解域被离散化为 N 个点。在 L 充分大时，可以认为波函数在求解域的两端为零，于是在 $i = 1$ 和 $i = N$ 时分别有

$$\nabla_{1,1}^2 = -2, \quad \nabla_{1,2}^2 = 1, \quad \nabla_{N,N}^2 = -2, \quad \nabla_{N,N-1}^2 = 1. \quad (2.14)$$

于是， ∇^2 被截断为一个 $N \times N$ 维矩阵。求解 (2.12) 等价于对角化矩阵 $-\nabla^2 + x^2$ 。我们采用 Arpack-NG 库（用于大型矩阵对角化的 Arpack 库的一个实现）^[25] 的 Julia 封装 Arpack.jl^[26] 完成这项工作。取 $L = 10$ 以及不同的 Δx ，使用 Arpack.jl

计算 $-\nabla^2 + x^2$ 的最低本征态，即系统基态，所得结果见表2.2。表中不同的 Δx 对应的波函数均平滑。可以看到，表2.1和表2.2给出的值非常接近。取两者中计算精度最高的值（表2.1中 $K = 12$ 和表2.2中的 $\Delta x = 0.005$ ），计算相对偏差，发现 E 的相对偏差为 1.1×10^{-4} ， $\langle x^2 \rangle$ 的相对偏差为 1.0×10^{-4} ，两者符合程度较好。

2.2.4 计算 $\langle x^m p^n \rangle$ 参考值

在已经获得了精度较高的 E 和 $\langle x^2 \rangle$ 数据之后，我们可以

2.3 线性 SDP 优化

本节讨论如何使用线性 SDP 实施非简谐振子的数值 bootstrap。在第2.2节中，我们能够分析第一激发态处的物理量，而在线性 SDP 中我们只能讨论基态性质。然而，由于非线性 SDP 在大规模问题上是不可行的（见第1.3节的讨论），线性 SDP 对凝聚态体系基本上是唯一的选择。因此，本节将非简谐振子当作一个玩具模型，用它演示如何做线性 SDP，为在凝聚态体系中做数值 bootstrap 做准备。

2.3.1 对易子和等式关系的符号计算

非简谐振子线性 SDP 的问题可以叙述如下：设

$$O_i^\dagger O_j = \sum_k c_{ij}^k O_k, \quad (2.15)$$

$$[H, O_i] = \sum_j h_j^k O_k, \quad (2.16)$$

则我们有

$$\begin{aligned} \min E, \quad \text{s.t.} \quad E &= \langle p^2 \rangle + \langle x^2 \rangle + g \langle x^4 \rangle, \\ M_{ij} &:= \sum_k c_{ij}^k \langle O_i \rangle, \quad M \geq 0, \quad M_{ij} = M_{ji}^*, \\ \sum_j h_j^k \langle O_k \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

注意，在以上问题中， $\langle O_i \rangle$ 应该整体当成一个优化变量；线性 SDP 求解器不关心它是否是某个物理量的期望值。约束条件 $M_{ij} = M_{ji}^*$ 保证了 $\langle O^\dagger \rangle = \langle O \rangle^*$ 。

使用 $\{x^m p^n\}$ 满足 $0 \leq m, n \leq L$ 的子集，按照 $\langle O_i^\dagger O_j \rangle$ 的方法构建 M 矩阵。这可以保证 $\{x^m p^n\}$ 中的每个算符都出现在 M 矩阵中，不至于浪费优化变量。显然， M 矩阵的边长为 $(L+1)^2$ 。

此时没有类似(2.9)这样较为精简的递推公式， c_{ij}^k 和 h_j^k 的计算需要自动进行。我们取 $\{O_i\}$ 为 $\{x^m p^n\}$ ，并将其张成的空间设为 \mathcal{C} 。我们对 $\{x^m p^n\}$ 施加

如下截断：要求

$$0 \leq m, n \leq 2L, \quad (2.18)$$

其中 L 是一个正整数。我们将 $x^m p^n$ 算符编号为 $m(2L+1) + n$ ，这样，基底 $\{x^m p^n\}$ 的编号就从 0 一直连续取到 $(2L+1)^2 - 1$ ， \mathcal{C} 是一个 $(2L+1)^2$ 维的线性空间。我们有 McCoy 公式^[27]

$$[x^n, p^m] = \sum_{k=1}^{\min(m,n)} \frac{-(-i\hbar)^k n!m!}{k!(n-k)!(m-k)!} x^{n-k} p^{m-k}, \quad (2.19)$$

将这个公式代入

$$x^{m_1} p^{n_1} x^{m_2} p^{n_2} = x^{m_1+m_2} p^{n_1+n_2} - x^{m_1} [x^{m_2}, p^{n_1}] p^{n_2} \quad (2.20)$$

等式右边就已经是正规排序的了。于是，可以实现一个函数 `xpopstr_normal_ord`，输入 m_1, n_1, m_2, n_2 ，输出(2.20)右边在基底 $\{x^m p^n\}$ 下的系数。于是，我们就能够自动计算 $p^{n_1} x^{m_1} x^{m_2} p^{n_2}$ ，于是 c_{ij}^k 即可自动计算。通过将 $x^{m_1} p^{n_1} x^{m_2} p^{n_2}$ 和 $x^{m_2} p^{n_2} x^{m_1} p^{n_1}$ 的系数向量相减， $[O_1, O_2]$ 的系数向量也可以自动计算，于是 h_j^k 也可以自动计算。这就给出了基底 $\{x^m p^n\}$ 下自动计算 h_j^k 和 c_{ij}^k 的方法。注意，对一些 \mathcal{C} 中的 O ， $[O, H]$ 可能在 \mathcal{C} 外，此时我们丢弃它对应的等式约束。

2.3.2 构建优化问题

我们使用 JuMP^[28] 和 COSMO^[18] 构建并求解优化问题(2.17)。JuMP 是一个优化器前端，可以通过(2.17)这样的记号，高可读性地构建优化问题，而无需手动将(2.17)中的约束组装成系数矩阵再传给优化器。COSMO 是一个大规模凸优化问题求解器，适用于线性 SDP 问题。

由于 COSMO 不支持复数变量，在构建优化问题时需要将 $\langle x^m p^n \rangle$ 的实部和虚部声明为不同的变量。注意到在一维束缚态问题中，如果 $m+n$ 是奇数，那么 $\langle x^m p^n \rangle = 0$ ，否则，如果 m 是偶数，那么 $\langle x^m p^n \rangle$ 是纯实数，如果 n 是奇数，那么 $\langle x^m p^n \rangle$ 是纯虚数。因此，可以只对 $m+n$ 为偶数的那些 $\langle x^m p^n \rangle$ 声明优化变量，且对每个期望值只声明一个变量，代表其实部或虚部。

在声明完优化变量之后，可以使用 JuMP 提供的 `@constraint` 宏，对这些变量施加(2.17)中由 h_j^k 确定的那些约束。

由于(2.17)中的 M 矩阵包含复数，在 JuMP 中构建优化问题时，需要把它的每一个矩阵元 M_{ij} 替换为

$$\text{Re}(M_{ij}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \text{Im}(M_{ij}) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

表 2.3 不同 L 下的线性 SDP 计算结果

L	E	$\langle x^2 \rangle$	耗时
2	1.3810167562983844	0.3131420484955468	0.752s, 958 次迭代
3	1.3896818143288878	0.3054621206463042	2.501s, 1194 次迭代
4	1.3938209008603621	0.3067906104484381	172375.165s, 79461867 次迭代

我们可以在 JuMP 中声明一个边长为 $2(L+1)^2$ 的半正定矩阵变量，然后使用 `@constraint` 宏将 M_{ij} 和 $\{\langle O_i \rangle\}$ 联系起来。由于在大部分线性 SDP 求解器中，被声明为半正定的矩阵变量一定是对称的¹，将 M_{ij} 的每个矩阵元都和 $\{\langle O_i \rangle\}$ 联系起来之后， $\langle O^\dagger \rangle = \langle O \rangle^*$ 的约束就自动被施加了。

2.3.3 使用非线性 SDP 为线性 SDP 做基准测试

由于已经有了非线性 SDP 计算出的数据，非简谐振子线性 SDP 程序的调试将变得容易很多，因为可以直接检查非线性 SDP 的计算结果是否满足线性 SDP 程序中的各种约束，从而检查程序是否正确。

2.3.4 计算结果与收敛性问题

$L = 2, 3, 4$ 时的线性 SDP 计算结果见表 2.3。²可以看到，在 $L = 2, 3$ 时，使用非常短的时间，线性 SDP 就能够达到表 2.1 中 $K = 10$ 的精度。在联想 T480 笔记本电脑上， $L = 10$ 的非线性 SDP 需要耗费几分钟，而线性 SDP 只需要两秒，体现了 SDP 求解器相对暴力搜索的巨大优势。

然而， $L = 4$ 时，存在严重的收敛性问题。COSMO 的默认容差（线性约束被违反的程度——见 COSMO 的文档 [29]）无法达到要求的精度：程序运行至 19698 迭代后，能量达到 25.31，提示收敛。 $L = 5$ 时 COSMO 的默认容差同样无法达到要求的精度：在经过漫长的 3353517 次迭代之后，程序运行到能量约为 13.9，提示收敛。改用 CSDP 求解器，会提示 “Lack of progress”；SCS 求解器直接报告问题不可解。

将容差参数 `eps_rel` 从默认值 1×10^{-5} 缩小至 1×10^{-10} ， $L = 4$ 时的线性 SDP 能够收敛，但是耗时增长高得可观。检查优化器输出，发现与 $L = 2, 3$ 时的优化器输出相比，至少存在以下几个不同。 $L = 4$ 时，需要约 50000 迭代让能量到达 10 左右，在此之前会经历能量上百的阶段，而 $L = 2, 3$ 时没有这种情

1 可以运行几次迭代，然后用 `value.(M)` 检查此时的 M 的值。计算其本征值，会发现绝对值很小的负值，但是比较它和它的转置，会发现两者完全相同。

2 本例中使用的代码见 <https://github.com/wujinq/numerical-bootstrap/blob/main/oscillator-simple-prototype/jump-oscillator-4-small-scale.jl>。

况，能量只需要 25 迭代就到达了非简谐振子的基态能量的量级。 $L = 2, 3, 4$ 的问题中，均有出现能量振荡的现象，这本身是正常的，因为大规模求解器不会施加硬约束，半正定约束和线性约束都是通过向目标函数引入柔化的指示函数完成的^[29]，因此，一个让能量下降的优化过程很可能以轻微违反各种约束为代价，后续收紧约束的优化过程当然也可能会让能量上升。然而，在 $L = 4$ 的优化过程中，会出现非常长周期的能量振荡：可能出现几万个迭代的能量上升，然后是一段能量下降的过程，接着又是长时间的能量振荡。在能量已经接近目标时，优化过程非常慢。例如，7000000 迭代时，能量已经到达 1.54，然而还要经过比这多一个量级的迭代数目才能够最终收敛。推测这也是加细约束过程中的能量振荡导致的，只不过振荡的量级小于 1×10^{-4} ，没有在优化器输出中显示。

将容差参数 `eps_rel` 从默认值 1×10^{-5} 缩小至 1×10^{-10} 后， $L = 5$ 时的线性 SDP 未能完成。在经过了 80000000 个迭代之后，能量到达 5.3690，此时系统能量仍然在前述和收紧约束有关的缓慢振荡中。

第 3 章 Hubbard 模型的数值 bootstrap

3.1 一维 Hubbard 模型的数值 bootstrap

3.1.1 算符空间截断

我们遵从 [8] 中的做法，使用以下标准来截断算符空间：我们以正规排序的形如

$$O = c_{x_1\sigma_1}^\dagger c_{x_2\sigma_2}^\dagger \cdots c_{x_m\sigma_m}^\dagger c_{x_{m+1}\sigma_{m+1}} \cdots c_{x_n\sigma_n} \quad (3.1)$$

算符乘积为基底，只有满足

$$l(O) := n + \sum_{i=1}^n \|x_i\|_1 \leq K \quad (3.2)$$

的算符被纳入我们考虑的算符空间，

3.1.2 等式约束和半正定约束的符号计算

我们使用 QuantumAlgebra.jl 包 [30–31] 自动完成费米子算符的对易关系和正规排序计算。

3.1.3 DMRG 基准测试

3.2 二维 Hubbard 模型的数值 bootstrap

3.2.1 算符空间的选取和截断

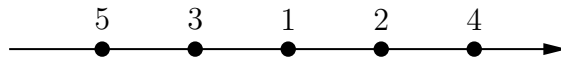


图 3.1 一维简单晶格的格点编号方案

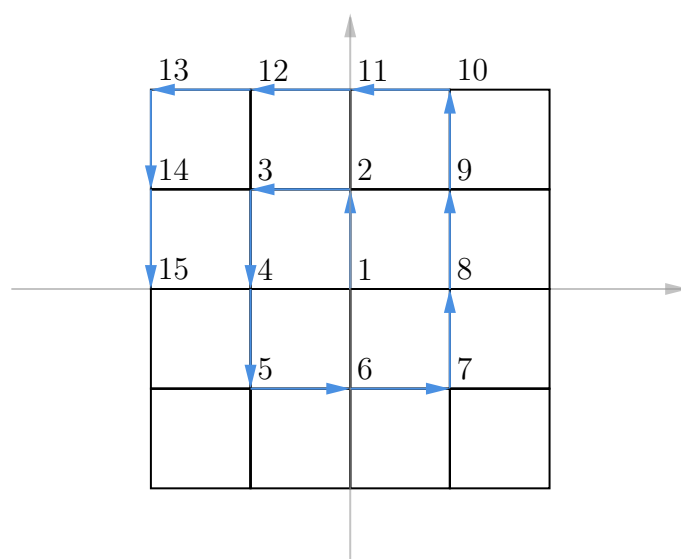


图 3.2 二维正方晶格的格点编号方案

第 4 章 总结与展望

参考文献

- [1] MAHAN G D. Many-particle physics[M]. Springer Science & Business Media, 2013.
- [2] GUNNARSSON O, ROHRINGER G, SCHÄFER T, et al. Breakdown of traditional many-body theories for correlated electrons[J/OL]. Physical Review Letters, 2017, 119(5). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.056402>. DOI: 10.1103/physrevlett.119.056402.
- [3] PAN G, MENG Z Y. Sign problem in quantum monte carlo simulation [M/OL]. arXiv, 2022. <https://arxiv.org/abs/2204.08777>. DOI: 10.48550/ARXIV.2204.08777.
- [4] ORÚS R. Tensor networks for complex quantum systems[J]. Nature Reviews Physics, 2019, 1(9): 538-550.
- [5] 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.
- [6] 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>.
- [7] KAZAKOV V, ZHENG Z. Analytic and numerical bootstrap for one-matrix model and “unsolvable” two-matrix model[A]. 2021. arXiv: 2108.04830.
- [8] HAN X. Quantum many-body bootstrap[A]. 2020. arXiv: 2006.06002.
- [9] POLAND D, SIMMONS-DUFFIN D. The conformal bootstrap[J/OL]. Nature Physics, 2016, 12(6): 535-539. <https://doi.org/10.1038/nphys3761>. DOI: 10.1038/nphys3761.
- [10] 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.

- [11] DEGIOVANNI P, MÉLIN R, CHAUBET C. Conformal field theory approach to gapless 1d fermion systems and application to the edge excitations of $\nu=1/(2p+1)$ quantum hall sequences[J/OL]. Theoretical and Mathematical Physics, 1998, 117(1): 1113-1181. <https://doi.org/10.1007%2Fbf02557158>. DOI: 10.1007/bf02557158.
- [12] 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.
- [13] VANDENBERGHE L, BOYD S. Semidefinite programming[J]. SIAM review, 1996, 38(1): 49-95.
- [14] 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.
- [15] 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>.
- [16] 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>.
- [17] 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>.
- [18] 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>.
- [19] 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>.

- [20] 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).
- [21] 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).
- [22] 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).
- [23] 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>.
- [24] 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](https://doi.org/10.1103/physrevd.54.7710).
- [25] OPENCOLLAB. arpack-ng: Collection of fortran77 subroutines designed to solve large scale eigenvalue problems[EB/OL]. Accessed: 2022-04-27. <https://github.com/JuliaLinearAlgebra/Arpack.jl>.
- [26] JULIALINEARALGEBRA. Julia wrappers for the arpack-ng fortran library [EB/OL]. Accessed: 2022-04-27. <https://github.com/JuliaLinearAlgebra/Arpack.jl>.
- [27] MCCOY N H. On commutation formulas in the algebra of quantum mechanics[J]. Transactions of the American Mathematical Society, 1929, 31: 793-806.
- [28] DUNNING I, HUCHETTE J, LUBIN M. Jump: A modeling language for mathematical optimization[J/OL]. SIAM Review, 2017, 59(2): 295-320. DOI: [10.1137/15M1020575](https://doi.org/10.1137/15M1020575).

- [29] COSMO. Cosmo.jl: Method[EB/OL]. 2022. <https://oxfordcontrol.github.io/COSMO.jl/stable/method/>.
- [30] Sánchez-Barquilla M, SILVA R E F, FEIST J. Cumulant expansion for the treatment of light-matter interactions in arbitrary material structures[J/OL]. J. Chem. Phys., 2020, 152(3): 034108. DOI: [10.1063/1.5138937](https://doi.org/10.1063/1.5138937).
- [31] <JOHANNES.FEIST@GMAIL.COM> J F, CONTRIBUTORS. Quantumalgebra.jl[EB/OL]. 2021. <https://github.com/jfeist/QuantumAlgebra.jl>. DOI: [10.5281/zenodo.5094080](https://doi.org/10.5281/zenodo.5094080).

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