



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

理学博士学位论文

张量网络态算法及其应用研究

作者姓名: 赵汇海

指导教师: 向涛 研究员

中国科学院物理研究所

学位类别: 理学博士

学科专业: 凝聚态物理

研究所: 中国科学院物理研究所

2013年5月

Study of tensor network algorithms and applications

By

Hui-Hai Zhao

A Dissertation Submitted to
The University of Chinese Academy of Sciences
In partial fulfillment of the requirement
For the degree of
Doctor of Science

Institute of Physics
Chinese Academy of Sciences

May, 2013

摘 要

研究量子多体强关联系统的性质是现代凝聚态物理极具挑战性的课题。数值计算在研究这类问题中扮演了重要的角色。最近基于张量网络态的数值方法越来越受到人们的关注。随着量子信息理论的发展，张量网络态被引入作为量子多体系统的变分波函数。在这部论文中，我们致力于张量网络算法及其应用的研究。

强关联量子多体系统的希尔伯特空间随着系统尺寸指数增长，这给精确的数值计算带来了困难。即使面临这样的难题，我们也希望能够在经典计算机可以接受的计算代价之下，尽可能精确的获得量子多体系统的物理性质。绝大多数真实的物理系统并不会处于纠缠最大的状态，事实上许多量子多体系统的基态仅需要整个希尔伯特空间中的低纠缠子空间就可以比较精确的表示，这是将基态表示成张量网络形式的动机之一。接着，我们概略的介绍了矩阵乘积态和张量网络态的若干算法。我们先从矩阵乘积态的构造讲起，讨论了矩阵乘积态的纠缠熵性质和相关算法，然后简单介绍了张量网络态的纠缠熵性质和各种算法。

众所周知，一维伊辛模型的配分函数能够表示成转移矩阵的乘积，从而严格的求解。这是经典统计模型的张量网络表示的最简单实例。二维或者更高维经典统计模型的张量网络表示就是一维转移矩阵乘积的高维扩展。所有只包含局域相互作用的经典统计模型，比如伊辛模型和Pott's 模型，其配分函数都能够表示成张量网络模型。我们介绍了两种将经典统计模型配分函数表示成张量网络形式的方法。一种是采取对偶变换，将张量定义在对偶晶格的格点上。这样能将经典统计模型变换到对应的对偶晶格的张量网络模型上。局域张量的阶数为对偶晶格的配位数。第二种构造张量网络的方法是对配分函数的每一个波尔兹曼因子项采用奇异值分解，将张量定义在原始晶格上。

在得到张量网络之后，下一个问题就是如何收缩张量网络。Levin和Nave^[1]提出采用张量重正化群方法，该方法仅对于局部的两个相邻张量的截断是最优的，因为其并没有考虑环境张量的影响。为了提高截断的精度，我们提出二次重正化群方法，构造全局最优的截断方法。二次重正化群方法在计算中计入了

环境的贡献，因而相比于张量重正化群方法显著地提高了计算精度。在三角晶格伊辛模型自由能的计算中，我们在仅仅保留 $D_{cut} = 24$ 个态的情况下，在远离临界点的区域，精度相对于张量重正化群提高了超过5个数量级；在临界点，精度提高了超过2个数量级。

在采用张量网络态研究量子格点模型基态的研究中，虚时演化方法是最常用的方法。在张量网络态中，我们发现键矢量已经相当精确地描述了环境的重正化效应。基于这个认识，我们采用Bethe晶格近似虚时演化方法确定量子格点模型的基态。对于只有最近邻相互作用的系统，我们采用Trotter-Suzuki分解将虚时演化算符 $e^{-\beta H}$ 分解为一系列只与最近邻两个格点相关的两格点操作。然后，将虚时演化算符迭代的作用在初始波函数上直至收敛，可得基态。该方法显著地减小了截断误差，并且能够处理维数较大的张量网络态。我们采用Bethe晶格近似虚时演化方法对蜂窝晶格自旋1/2反铁磁海森堡模型进行了计算。我们计算了高达 $D = 20$ 的张量网络态，发现基态能量与最新的量子蒙特卡罗结果非常接近。

虽然并没有严格证明Bethe晶格近似虚时演化方法能近似最优地得到基态张量网络态，但是经验证据表明在对不少模型的计算都能得到很好的结果。然而，由于在Bethe晶格近似中并没有计入环境中长程关联，计算更倾向于得到短程关联的态。所以，在具有长程关联，比如在连续相变点附近或其他临界系统中，Bethe晶格近似很难抓住系统的物理性质。因此，为了更精确地抓住系统长程关联的性质，我们在计算代价可以接受的情况下适当增加了在虚时演化中计入的格点，采用集团更新进行计算。我们发现即使在集团尺寸不太大的情况下，波函数的计算精度也有比较明显的提高，对于长程序比如磁化强度的计算精度得到了大幅度的改进。

在寻找新奇的量子相以及量子相变的探索中，自旋1双线性双二次海森堡模型的研究吸引了广泛的关注。我们采用张量网络算法研究了蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型的基态性质。我们发现半经典理论预言基态存在的铁磁序，四极序，和反铁磁序的大部分都是稳定存在的。然而，半经典理论认为存在的交错四极序却被量子涨落压制，并且在这个区域也不存在任何形式的磁性长程序。在这个区域的稳定基态为plaquette价键固体态。这样的基态破缺了晶格的平移对称性，而保持了自旋的 $SU(2)$ 对称性。更进一步的计算发现，从反铁磁态到plaquette价键固体态的量子相变很可能是一个直接的二级相变，

或者是非常弱的一级相变。这是在自旋1系统中发现可能存在的退禁闭量子临界点。

关键词： 张量网络态，二次重正化群，自旋1双线性双二次海森堡模型

Abstract

Determining the properties of strongly correlated quantum many-body systems remains a great challenge in modern physics. Numerical calculations have played an important role in studying these problems. Recently, numerical methods based on tensor network states have drawn more and more attention. Tensor network state, which has been developed in recent years from quantum information theory, is a good variational wave function of quantum many-body systems. In this thesis, we study tensor network state algorithms and the applications to lattice spin models.

We start the thesis by illustrating some concept in quantum information theory, such as entanglement entropy and area law. The ground states of many quantum many-body systems are in the low entanglement region of the entire Hilbert space. This is the one of the motivation to represent a quantum ground state in the form of tensor network. Then, we give a brief introduction of algorithms based on matrix product states and tensor network states. We first describe the construction of matrix product state, and the entanglement properties and related algorithms of matrix product state. Then we also briefly describe the entanglement properties and related algorithms of tensor network states.

It is well known that the one-dimensional spin $1/2$ Ising model can be rigorously solved by expressing its partition function as a product of transfer matrix. This is the simplest example of tensor-network representation of classical statistical model. All statistical models with short-range interactions, such as the Ising model and the Pott's model, can be expressed as tensor-network models. We discuss in detail about two kinds of tensor network representation of partition functions of classical statistical models. One is to take a duality transformation of the model and define the tensor in the dual space. This can transform a classical statistical model to a tensor-network model in its corresponding dual lattice. The order of the local tensor is the coordinate number of the dual lattice. The

second approach is to define the tensor in the original lattice by taking singular value decompositions for the Boltzmann weight.

We give a comprehensive introduction to the renormalization group methods of contracting tensor networks. Second renormalization group method is introduced to take into account the environment contribution in the calculation of the partition function of classical tensor network models. It improves significantly the accuracy of the coarse-graining tensor renormalization group method. In the computation of the free energy for the Ising model on triangular lattice, It improves the accuracy for more than five orders of magnitude away from the critical point and for more than two orders of magnitude at the critical point by keeping only $D_{cut} = 24$ states.

In the study of the quantum tensor network states, we point out that the renormalization effect of the environment can be efficiently and accurately described by the bond vector. This, combined with the imaginary time evolution of the wave function, provides an accurate projection method to determine the ground state tensor network wave function. It reduces significantly the truncation error and enables a tensor network state with a large bond dimension to be accurately determined. We use Bethe lattice approximation imaginary time evolution to compute the spin 1/2 Heisenberg model on honeycomb lattice with bond dimension up to $D = 20$. The ground state energy agrees well with the most recent quantum Monte Carlo result.

In most cases, imaginary time evolution is a better way, because it is more stable and easier to avoid being trapped in local minima. There are several schemes to do the imaginary time evolution. In principle, full update is the most accurate way, but the time cost is too high and it becomes more and more unstable when increasing the dimension of tensors. Bethe lattice approximation is very fast and stable. However, since the long range correlation encoded in the environment are not taken into account, this update favors states with short range correlated behaviour. We are now considering to use a finite cluster of environment to optimize the truncation during evolution. It is not like in full update which considers the whole lattice as environment, so that the time cost

is lower and the environment matrix is less singular which is important to the stability of iteration. On the other hand, it considers more lattice sites than Bethe lattice approximation, so that it will be probably more accurate than Bethe lattice approximation in the system with long range order or correlation.

Another aim of this thesis is to apply the tensor network algorithms to study the problem that is not well solved by other approaches. We have precisely determined the ground state phase diagram of the quantum spin-1 bilinear biquadratic Heisenberg model on the honeycomb lattice. We find that the ferromagnetic, ferroquadrupolar, and a large part of the antiferromagnetic phases are stable against quantum fluctuations. However, around the phase where the ground state is antiferroquadrupolar ordered in the classical limit, quantum fluctuations suppress completely all magnetic orders, leading to a plaquette order phase which breaks the lattice symmetry but preserves the spin $SU(2)$ symmetry. On the evidence of our numerical results, the quantum phase transition between the antiferromagnetic phase and the plaquette phase is found to be either a direct second order or a very weak first order transition. This is a possible candidate of a deconfined quantum critical point in a quantum spin-1 system.

Keywords: tensor network state, second renormalization group, spin-1 bilinear biquadratic Heisenberg model

目 录

摘要	i
Abstract	v
目录	ix
第一章 绪论	1
1.1 量子信息理论对量子多体系统计算的启示	2
1.1.1 指数墙难题	2
1.1.2 基态纠缠和面积定律	2
1.2 矩阵乘积态	6
1.2.1 正则形式	8
1.2.2 变分方法	11
1.2.3 时间演化	12
1.3 张量网络态	15
1.3.1 收缩张量网络	16
1.3.2 计算基态波函数	19
1.4 自旋1双线性双二次海森堡模型的研究	19
1.5 退禁闭量子相变简介	22
1.6 本论文的安排	23
第二章 二维经典统计模型的张量网络表示	27
2.1 对偶晶格上的张量网络表示	27
2.2 原始晶格上的张量网络表示	32

第三章 张量网络态的重正化群方法	37
3.1 张量重正化群方法	37
3.2 二次重正化群方法	38
3.2.1 二次重正化群的总体算法流程	38
3.2.2 计算环境张量	42
3.2.3 其他二维晶格的计算方法	49
第四章 量子格点模型基态的计算	53
4.1 确定量子格点模型的基态的虚时演化方法	54
4.1.1 虚时演化方法的基本思想	54
4.1.2 Bethe晶格近似虚时演化方法	56
4.1.3 集团更新虚时演化方法	62
4.1.4 张量网络态中对称性的运用	66
4.2 期望值计算方法	69
4.3 数值结果和讨论	73
4.3.1 蜂窝晶格自旋1/2反铁磁海森堡模型	73
4.3.2 正方晶格自旋1/2反铁磁海森堡模型	77
第五章 蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型的基态研究	81
5.1 引言	81
5.2 采用张量网络态算法计算基态性质	83
5.3 数值结果和相图	92
5.4 讨论	97
第六章 总结和展望	99
参考文献	103
发表文章目录	121
会议报告	123

简历	125
----------	-----

致谢	127
----------	-----

插图

1.1	将二维系统分成两个子系统 \mathcal{A} 和 \mathcal{B} 的示意图。 L 是两个系统边界的长度。	5
1.2	开边界 (a) 和周期边界 (b) 条件下的矩阵乘积态示意图。	8
1.3	变分过程中构造 \mathcal{N}^k 和 \mathcal{H}^k 的示意图。固定除了一个张量 A^k 之外所有张量, 收缩 $\langle \psi \psi \rangle$ 和 $\langle \psi H \psi \rangle$ 中除了与 A^k 相连的指标, 分别得到 \mathcal{N}^k 和 \mathcal{H}^k 。	13
1.4	(a) 利用Trotter-Suzuki分解将演化算符 e^{-iHt} (或者 e^{-Ht}) 近似分解为一系列只和局域两个格点有关的门操作 G 的示意图; (b) 到 (g) 是iTEBD算法一次门操作的流程。首先将图 (c) 虚线椭圆中的张量收缩为图 (d) 的一个张量 Θ ; 然后对 Θ 进行奇异值分解得到图 (e) 的张量; 最后将截断后的张量按 (f) 图所示的操作还原MPS的形式 (g)。	15
1.5	将一个正方晶格量子体系波函数 (a) 表示成张量网络态 (b) 的示意图。每个格点定义的张量由一个物理指标和四个与近邻张量相连的键指标构成。	17
1.6	用蓝色虚线将张量网络分成 A 和 B 两个部分。 A 和 B 之间相连的键个数正比于边界长度。而边界键指标总维数定出了通过该张量网络态计算出的约化密度矩阵的秩的上界。	17
1.7	将张量网络态和它的自身收缩对应格点的物理指标 (a), 得到只有键指标而没有出现物理指标的张量网络 (b)。(b) 图中的张量网络由无数行张量 R 构成。收缩张量网络等价于计算 R 的最大本征态。	18
1.8	一维自旋1双线性双二次海森堡模型的基态相图。当 $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ 基态为Haldane能隙相, 当 $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$ 为二聚化相, 当 $\pi/2 < \theta < \pi$ 和 $-\pi < \theta < -3\pi/4$ 为铁磁相, 当 $\pi/4 < \theta < \pi/2$ 为具有三周期关联函数行为的临界相。	20

1.9	二维正方晶格 (a) 和三角晶格 (b) 自旋1双线性双二次海森堡模型的基态相图。(a) (b) 图中的内圈都表示经典相图, 外圈是精确对角化的结果。FM, AFM, FQ和AFM 分别表示铁磁, 反铁磁, 四极和交错四极序。AFM2表示双子格的反铁磁序, AFM3和AFQ3表示三子格的反铁磁序和交错四极序。.....	21
1.10	正方晶格自旋1/2系统基态可能存在的相。(a) 为反铁磁相, (b) 为价键固体相。.....	23
2.1	2.9式定义的三角晶格的经典系统配分函数在对偶晶格 (也即蜂窝晶格) 上张量网络表示的示意图。.....	30
2.2	正方晶格的一个原胞的自旋变量及其对应的对偶晶格的自旋变量。.....	33
3.1	在TRG迭代中蜂窝晶格张量网络通过奇异值分解重构的过程。(a) 到 (b) 是将蜂窝晶格重构成三角-蜂窝晶格; (b) 到 (c) 是将三角-蜂窝晶格张量网络中的小三角形的三个张量收缩生成缩小了的蜂窝晶格。.....	38
3.2	3.1式和3.2式的示意图。将 T^a 和 T^b 的共同指标收缩, 得到 M 矩阵。然后, 对 M 进行奇异值分解。.....	39
3.3	3.5式的示意图。将三角-蜂窝晶格张量网络中的小三角形的三个张量收缩生成在缩小了的蜂窝晶格中的新的局域张量。收缩三角形上三个张量的内部指标得到 T^a 。.....	40
3.4	TRG迭代到最后的6个张量构成的六边形张量网络。直接收缩这6个张量的所有指标求得配分函数。这里假设系统具有中心对称的边界条件。.....	41
3.5	(a): 系统包含的两个格点张量; (b): 系统 (a) 对应的环境格点张量网络。.....	43
3.6	计算 M 的奇异值 Λ 的重正化迭代过程的示意图。 \tilde{M} 根据3.8式得到, 其中的 M^e 采用平均场近似3.15式给出。.....	44
3.7	有限尺寸蜂窝晶格示意图。(a)、(b)、(c)、(d) 分别是6、10、16、24个格点的晶格, 对应的环境部分 (即两个红色格点以外的格点) 分别包含4、8、14、22个格点。.....	45

- 3.8 考虑有限尺寸环境的二次重正化效应所计算出的三角晶格伊辛模型自由能的相对误差。计算采用的有限尺寸环境分别包含4、8、14、22个格点。4种尺寸的环境构形如图3.7所示。TRG的结果也画在图中作为比较。 46
- 3.9 计算环境格点张量的向前迭代过程的其中一次循环。给定某一步的环境构形 (a)，首先通过奇异值分解重构为 (b) 所示的三角-蜂窝晶格。然后收缩每个小三角形的内部指标，可以得到 (c) 所示的缩小了的环境晶格。如此得到的更新后的环境晶格可以分解为 (d) 和 (e) 所示的两个部分。将 (d) 椭圆虚线内的张量记录下来，以备后面计算环境矩阵 M^e 所用。另一方面，将 (e) 顺时针旋转 90° ，那么该图所示的晶格除了变为 (a) 晶格尺寸的 $\frac{1}{3}$ 以外，与 (a) 所示的这次循环之前的晶格完全相同。 47
- 3.10 TRG (黑线)、平均场近似SRG (红线) 和SRG (蓝线) 计算的三角晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差。三条曲线计算中张量的截断维数 $D_{cut} = 24$ 。临界温度 $T_c = 4/\ln 3$ 。 49
- 3.11 TRG (红线) 和SRG (黑线) 计算得到的三角晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差关于截断维数 D_{cut} 的函数。 $T = 3.2$ 。 ... 50
- 3.12 把每个格点上的4阶张量沿着同一个对角线方向(红虚线方向)奇异值分解为两个3阶张量将正方晶格张量网络变换到蜂窝晶格张量网络。 51
- 3.13 采用TRG (红线) 和SRG (黑线) 计算得到的正方晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差对比图。 $D_{cut} = 24$ 。 51
- 3.14 将Kagome晶格张量网络变换到蜂窝晶格张量网络的两个步骤。首先，通过奇异值分解将Kagome晶格 (a) 重构成三角-蜂窝晶格 (b)；第二步，收缩中每个三角形的内部指标，即得到蜂窝晶格张量网络 (c)。 52
- 4.1 蜂窝晶格量子格点模型张量网络态示意图。红色和绿色圆圈代表两套子格。分别定义在两套子格上的张量 A 、 B 包含三个键指标 (黑线) 和一个物理指标 (紫线)。每个键之上定义了一个键矢量 (或者称之为对角矩阵) $\lambda_\alpha (\alpha = x, y, z)$ 。 55

4.2	虚时演化过程的迭代循环示意图。(b)到(c)示意了4.16式;(c)到(d)示意了4.17式;(e)到(f)示意了4.18和4.19式;(f)到(a)表示对晶格顺时针旋转 120° ,然后反复进行整个虚时演化过程。.....	58
4.3	上半部分:一维 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态能量随着虚时演化次数的变化曲线。 E_{can} 和 E_{MF} 分别表示对矩阵乘积波函数的虚时演化过程中采用和没有采用正则变换得到的结果。下半部分:两种虚时演化方法得到的能量差 $E_{MF} - E_{can}$ 随着虚时演化次数的变化曲线。矩阵乘积态键指标维数 $D = 10$ 。.....	61
4.4	正方晶格张量网络态的 2×2 的集团。图(a)为截断之前,图(b)为截断之后。图(b)中 P^R 和 P^L 分别与 T^1 和 T^2 缩并得到截断后的张量 A^1 和 A^2 。.....	64
4.5	图(a)和(b)分别为4.34式中 $\langle \Psi \tilde{\Psi} \rangle$ 和 $\langle \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} \rangle$ 的张量网络表示。	65
4.6	4.46式和4.47式定义的自旋守恒关系的图形表示。朝向格点方向和背离格点方向的箭头分别代表正号和负号。.....	68
4.7	把键矢量 λ 平均的吸收到格点上的张量 A 和 B 的过程的示意图。...	70
4.8	收缩同一格点张量的物理指标得到约化张量的示意图。.....	71
4.9	构造与 O_{ij} 有关的约化张量 T^{Ca} 和 T^{Cb} 的过程示意图。.....	72
4.10	SRG计算蜂窝晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态能量随着截断维数 D_{cut} 的变化关系图。 D 是张量网络波函数的键指标维数。.....	74
4.11	SRG计算蜂窝晶格自旋 $1/2$ 反铁磁海森堡模型基态能量随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系图。.....	74
4.12	蜂窝晶格自旋 $1/2$ 反铁磁海森堡模型基态交错磁化强度随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系图。.....	75
4.13	采用SRG和自旋波计算的交错磁化强度随着外场 h_s 的变化关系图。插图是两个方法计算的交错磁化强度随着 $h_s^{1/2}$ 的变化曲线。...	76
4.14	交错磁化强度关于 $1/D$ 的函数关系,以及相应的4次多项式拟合(红线)。.....	77

- 4.15 正方晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态能量随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系图。图中黑线，红线，蓝线分别代表 Bethe 晶格近似， 2×2 集团更新， 3×8 集团更新的虚时演化得到基态的计算结果。品红线为量子蒙特卡罗的结果，与 D 无关，供对比参考。 78
- 4.16 正方晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态交错磁化强度随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系图。图中黑线，红线，蓝线分别代表 Bethe 晶格近似， 2×2 集团更新， 3×8 集团更新的虚时演化得到基态的计算结果。品红线为量子蒙特卡罗的结果，与 D 无关，供对比参考。 79
- 5.1 蜂窝晶格自旋 1 双线性双二次海森堡模型的基态相图。内圈为经典极限下的相图；外圈为我们计算得到的对应量子模型的相图。FM, AFM, FQ, AFQ 和 PVBS 分别代表铁磁，反铁磁，四极，交错四极和 plaquette 价键固体相。 $\theta_d \approx 0.19\pi$ 。 84
- 5.2 蜂窝晶格 6 子格张量网络波函数示意图。6 种颜色的圆圈代表 6 套子格。 A^i 包含三个键指标（黑线）和一个物理指标（未画出）。每个键之上定义了一个键矢量（或者称之为对角矩阵） $\lambda_\alpha^i (\alpha = x, y, z)$ ，一共有 9 种不等价的键矢量。 85
- 5.3 蜂窝晶格集团更新虚时演化中计算环境格点的重正化效应的过程示意图。 86
- 5.4 构造投影矩阵 P^R 和 P^L 并对张量进行截断的示意图。 90
- 5.5 $\theta = 0$ 处取不同的 χ 值每格点基态能量随着 D 的变化曲线。 $\chi = 30$ 和 $\chi = 40$ 的两条曲线几乎重合。 92
- 5.6 每格点基态能量随着 θ 的变化曲线。 93
- 5.7 每格点基态能量对 θ 的一阶导数和二阶导数（插图）曲线。 93
- 5.8 每格点的磁化强度（红线）和交错磁化强度（蓝线）关于 θ 的函数。 95
- 5.9 每格点的四极矩（红线）和交错四极矩（蓝线）关于 θ 的函数。 .. 95

- 5.10 计算中考虑的三种可能的价键固体态的图形表示。(a)、(b) 和 (c) 分别被称为plaquette、columnar、staggered价键固体态。图中红色粗线表示较强的关联；黑色细线表示较弱的关联。..... 96
- 5.11 反铁磁序和plaquette序参量关于 θ 的函数。这两个序都在 $\theta_d \approx 0.19\pi$ 同时消失。..... 97

第一章 绪论

研究量子多体强关联系统的性质是现代凝聚态物理极具挑战性的课题。绝大多数强关联体系都无法解析求解,而且在许多强关联问题中,传统的方法例如单体近似方法即使是定性正确的结果都难以得到。所以,数值计算得到了越来越多的关注。另一方面,我们通常也无法从微观定律出发,准确计算出体系的宏观集体性质,因为这个计算的时间代价通常随着系统尺寸增加而指数增长。因此,发展有效的数值方法对理解凝聚态强关联问题具有突出的重要性。随着计算机计算能力的提高和各种数值方法的发展,越来越多强关联体系的物理性质都得到了更深入的理解。

如果要精确求解量子多体系统的基态,一个原理上普遍适用的做法是精确对角化系统的哈密顿量。然而,如果增加关联量子多体系统的尺寸,精确对角化会面临时间代价随之指数增长的问题。所以,对于较大尺寸的体系,更好的解决方案是发展和采用行之有效的近似方法,比如密度矩阵重正化群(density matrix renormalization group, DMRG) [2, 3] 或者量子蒙特卡罗(quantum Monte Carlo, QMC) [4]方法。这类方法的共同思想是,只考虑系统的部分自由度,通过在某个子空间的计算而比较精确的得到整个系统的基态性质。比如在QMC中,这个思想就是通过在整体希尔伯特空间中抽样实现的。

有一类重要的求解强关联体系的方法,是将系统的基态限域在整个希尔伯特空间中的低纠缠子空间中求解。本论文讨论的张量网络态算法,就是这类算法的其中之一。张量网络态(tensor network state)算法是最近基于重正化群理论和量子信息理论发展起来的对一维和高维强关联量子体系基态的有效计算方法。密度矩阵重正化群方法作为张量网络态算法的先驱,是一种已经完善建立的研究一维和准一维体系的强大数值方法。White在1992年提出DMRG方法用以研究一维体系基态的性质。此后,人们将其推广到研究量子格点模型的热力学[5-8]乃至动力学[9-15]。DMRG可以说是研究各种张量网络算法的出发点。

DMRG的理论基础已经很好的建立起来,然而对于高维体系的张量网络态的相关理论依然在发展过程中。本论文的重点之一就是发展张量网络态算法,

并且通过计算一些研究的比较充分的模型检验这些算法的有效性和正确性。本论文的另一个重要方面就是介绍张量网络态算法的应用，即采用张量网络态算法研究此前并未研究的很清楚的量子格点模型。

1.1 量子信息理论对量子多体系统计算的启示

1.1.1 指数墙难题

虽然人们已经发展了数不胜数的研究强关联多体系统的计算方法。然而，至今为止并没有一种数值上精确的方法可以普适的计算量子多体问题，并且计算规模随着系统尺寸幂次增长。现有的算法要么有所近似，要么只适用于个别问题，要么就是不能避免指数增长的时间代价。

如果要表示一个经典系统的状态，所需要的存储空间是随着系统尺寸线性增长的。例如考虑晶格上的经典伊辛模型，每个格点 i 上定义了一个自旋变量 $\sigma_i = \pm 1$ 。对于有 N 个格点的系统，系统可能的状态为 2^N 个，然而如果要在经典计算机上表示该系统的一个状态只需要 N 个比特的存储空间。

现在我们考虑在同样的格点中的量子伊辛模型。量子系统的的关键特征之一是体系可以处于叠加态之中，也就是说量子伊辛模型对应的一个状态可以是多个经典态的线性叠加。所以，为了完全描述一个量子态，必须存储所有 2^N 个经典态的叠加系数。该量子态空间构成一个希尔伯特空间，而经典伊辛系统的所有可能的 2^N 个状态构成该空间下的一种完备基的表示。

最直接的数值计算量子系统的方法是将哈密顿量在一组完备基下表示成矩阵形式，然后将其对角化，也即所谓的精确对角化方法。虽然原则上讲这种方法是普遍适用于任意量子系统的，然而其劣势也是显而易见的：只能处理尺寸很小的系统。因此，妄图采取精确对角化获取系统热力学极限下的性质的企图在多数情况下都极难实现。

1.1.2 基态纠缠和面积定律

即使面临指数墙的难题，我们也希望能够在经典计算机可以接受的计算代价之下，尽可能精确的获得量子多体系统的性质。对于一个真实系统的哈密顿量的基态，为了得到正确的物理图像，是不是要考虑随着尺寸指数增长的整个希尔伯特空间？换言之，真实的量子基态距离一个经典状态有多远？

在量子信息的语言里，常用纠缠熵定量描述系统的量子性，即当状态的纠缠熵越大，其越是远离经典状态。考虑将一个系统 \mathcal{C} 分成两个子系统 \mathcal{A} 和 \mathcal{B} ，也即

$$\mathcal{A} \cup \mathcal{B} = \mathcal{C}. \quad (1.1)$$

如果系统 \mathcal{C} 的状态为一个纯态 $|\Psi\rangle$ ，我们可以分别构造 \mathcal{A} 和 \mathcal{B} 子系统的约化密度矩阵

$$\rho_{\mathcal{A}} = \text{Tr}_{\mathcal{B}} |\Psi\rangle \langle \Psi| \quad (1.2)$$

$$\rho_{\mathcal{B}} = \text{Tr}_{\mathcal{A}} |\Psi\rangle \langle \Psi|. \quad (1.3)$$

我们可以利用约化密度矩阵计算只和其中一个子系统 \mathcal{A} (\mathcal{B}) 相关的算符 $O_{\mathcal{A}}$ ($O_{\mathcal{B}}$) 的期望值

$$\langle O_{\mathcal{A}} \rangle = \text{Tr} \rho_{\mathcal{A}} O_{\mathcal{A}} \quad (1.4)$$

$$\langle O_{\mathcal{B}} \rangle = \text{Tr} \rho_{\mathcal{B}} O_{\mathcal{B}}. \quad (1.5)$$

可以证明，约化密度矩阵 $\rho_{\mathcal{A}}$ 和 $\rho_{\mathcal{B}}$ 具有相同的本征谱 λ_{α} ，于是整个系统 \mathcal{C} 的状态可以写成

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |u_{\alpha}\rangle |v_{\alpha}\rangle, \quad (1.6)$$

其中 $|u_{\alpha}\rangle$ 和 $|v_{\alpha}\rangle$ 分别是 $\rho_{\mathcal{A}}$ 和 $\rho_{\mathcal{B}}$ 的本征矢。这就是所谓的Schmidt分解。

如果整个系统的状态 $|\Psi\rangle$ 是一个经典态，那么 λ_{α} 只有一个非零分量。在另一个极限下，如果 $|\Psi\rangle$ 是所有基矢的等权重叠加态，那么 λ_{α} 的非零分量个数将随着子系统的尺寸增加而指数增长。为了定量描述一个处于这两种极端情况之间的状态，可以采用下式定义的纠缠熵

$$S = - \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \ln \lambda_{\alpha}. \quad (1.7)$$

容易看出，对于经典态 $S = 0$ ；对于所有 N 个基矢的等权重叠加态 $S = \ln N$ 。由此可以看出，系统可能的最大纠缠熵随着系统体积的增加而增加，这类似于热力学熵的广延性。

下面我们将看到，绝大多数真实的物理系统并不会处于纠缠熵最大的状态，通常纠缠熵有一个常数的上界或者随着系统体积增长的速度比希尔伯特空间的生长速度慢。直观的讲，研究纠缠熵随着体系尺寸增长的行为就是要确定体系的状态处于（或者几乎处于）希尔伯特空间中的多大的一个子空间中，这也为建立有效的计算方法提供了可能。这个问题现在日益受到关注[16]。下面我们简单介绍纠缠熵的一些重要结果。

1.1.2.1 一维情形

一维系统的纠缠熵的标度行为有两类：对于无能隙的系统，纠缠熵随着系统尺寸的增大而发散；对于有能隙的系统，纠缠熵有一个常数的上界。也有些例外的情形，例如存在一种局域相互作用非平移对称的哈密顿量纠缠熵的标度行为满足体积定律[17]，与普遍的标度行为不一致。这个分类首先由Vidal数值计算得到[18]。他在一个一维系统中发现，当远离临界点，纠缠熵随着系统尺寸增加而饱和，但是当处于临界点，纠缠熵随着系统尺寸增加而发散。Hastings更严格的证明[19]，一维局域相互作用哈密顿量的基态纠缠熵的上界只和系统的关联长度有关，而和系统的尺寸无关。

纠缠熵正比于子系统边界长度的性质就是通常所说的面积定律。对于一维系统的子系统，所谓面积就是边界的点。边界的尺寸为常数，所以面积不随子系统的尺寸的增大而变化。一维DMRG计算对应的变分波函数就是满足面积定律的态。纠缠熵随着系统尺寸增加而发散的行为可以通过共形场论给出[20, 21]。共形场论的计算指出，对于一维开边界的临界自旋体系，纠缠熵的渐进标度行为是

$$S(L) = \frac{c}{6} \ln L. \quad (1.8)$$

这里， c 为共形场论中的参数中心荷。

1.1.2.2 高维情形

在高维情况下，纠缠熵的行为更复杂些。人们希望搞清楚两个子系统的纠

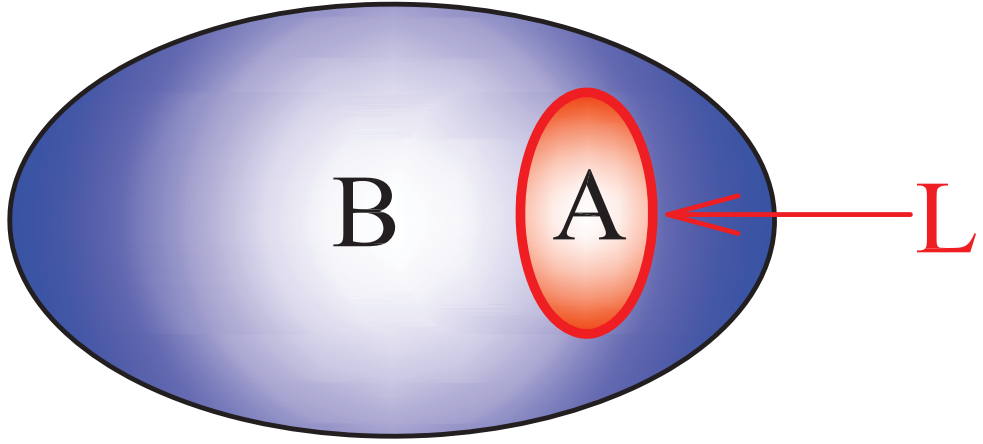


图 1.1: 将二维系统分成两个子系统 \mathcal{A} 和 \mathcal{B} 的示意图。 L 是两个系统边界的长度。

纠缠熵随着边界面积或者两个子系统体积的标度关系。如图1.1所示，将整个系统分成两个子系统 \mathcal{A} 和 \mathcal{B} ，如果纠缠熵满足面积定律，那么 \mathcal{A} 和 \mathcal{B} 子系统的纠缠熵应该满足[22]

$$S = aL. \quad (1.9)$$

对所有有能隙的二维系统，面积定律的成立只是一个假设，并没有如一维情形的普遍证明。反之，一个无能隙的系统是否会破坏面积定律也不清楚。一些研究对不同情况下纠缠熵的标度行为进行了分析。下述几种情况的纠缠熵对面积定律进行了不同的修正。

对于有能隙的自旋液体[23, 24]

$$S = aL + \gamma^{topo} + \dots, \quad (1.10)$$

其中 γ^{topo} 为常数，被称为拓扑熵。

对于有Goldstone模或者量子临界点这样的无能隙体系[21, 25–27],

$$S = aL + c \ln(L) + \dots. \quad (1.11)$$

对于有费米面的系统，情况更为复杂。如果费米面有限，那么[28]

$$S = aL \ln(L) + \dots. \quad (1.12)$$

从上述体系的纠缠熵标度行为我们可以看出，许多局域哈密顿量的基态仅需要整个希尔伯特空间中的很小一个子空间就可以很精确的描述。这个子空间中的状态具有比较小的纠缠，因此比较接近经典态。这给我们试图数值计算量子多体问题带来了一个乐观的信号：也许计算一个真实的体系并不需要完全考虑指数增大的希尔伯特空间。例如，对于有能隙的一维体系，一个很好的近似是采用矩阵乘积态表示体系的基态波函数，这样参数的个数随着系统尺寸增大而至多幂次增长。可以证明[29]，矩阵乘积态满足纠缠熵的面积定律。因此，有能隙的一维系统的基态可以在经典计算机上有效的计算。在高维情况下，矩阵乘积态的自然推广——张量网络态是否也是有能隙系统的有效表示呢？这个问题并没有如一维情形下的严格证明。不过，根据上述几种二维体系纠缠熵的标度行为可以看出，将真实体系限制在某种如张量网络态般的低纠缠态可能是一种有效的计算方法。下面将对矩阵乘积态和张量网络态的性质和算法进行介绍。

1.2 矩阵乘积态

矩阵乘积态的形式的提出由来已久[30–32]。文献[33]指出，DMRG得到的热力学极限下的量子态可以表示成矩阵乘积态的形式。下面介绍如何利用DMRG的过程构造矩阵乘积态。我们假设一个开边界的一维系统由 L 个格点构成，第 i 个格点希尔伯特空间表示为 \mathcal{H}_i 。为了简单起见，我们假设对每一个格点

$$\dim \mathcal{H}_i = d. \quad (1.13)$$

整个系统的希尔伯特空间为

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^L \mathcal{H}_i. \quad (1.14)$$

一般地讲，重正化群的思想就是构造一系列变换不断地弃掉不重要的态，从而减小整个系统的希尔伯特空间的维数。首先，我们利用一个变换 A^2 ，将这条链最左边的两个点粗粒化为一个有效格点

$$A^2 : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1^2. \quad (1.15)$$

将 A^2 写成分量形式 $A_{\alpha_2}^2 [\sigma_1, \sigma_2]$ ，满足下式

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2} A_{\alpha_2}^2 [\sigma_1, \sigma_2] A_{\alpha'_2}^2 [\sigma_1, \sigma_2] = \delta_{\alpha_2, \alpha'_2}, \quad (1.16)$$

使得基矢在变换前后保持正交归一性。那么，1.15式对应的基矢的变换为

$$|\phi_{\alpha_2}^2\rangle = \sum_{\sigma_1 \sigma_2} A_{\alpha_2}^2 [\sigma_1, \sigma_2] |\sigma_1\rangle |\sigma_2\rangle. \quad (1.17)$$

其中， $|\phi_{\alpha_2}^2\rangle \in \mathcal{H}_1^2$ ， $|\sigma_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ ， $|\sigma_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ 。形式上，可以把 $A_{\alpha_2}^2 [\sigma_1, \sigma_2]$ 写成分别定义在两个格点的张量

$$A_{\alpha_2}^2 [\sigma_1, \sigma_2] \sim \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1}^1 [\sigma_1] A_{\alpha_1 \alpha_2}^2 [\sigma_2]. \quad (1.18)$$

通过一次重正化群变换之后，整个系统的希尔伯特空间为

$$\mathcal{H}_1^2 \otimes \mathcal{H}_3 \otimes \mathcal{H}_4 \otimes \cdots. \quad (1.19)$$

重复上述过程，构造每一个变换

$$A^n : \mathcal{H}_1^{n-1} \otimes \mathcal{H}_n \rightarrow \mathcal{H}_1^n, \quad (1.20)$$

使得

$$|\phi_{\alpha_n}^n\rangle = \sum_{\alpha_{n-1} \sigma_n} A_{\alpha_{n-1} \alpha_n}^n [\sigma_n] |\phi_{\alpha_{n-1}}^{n-1}\rangle |\sigma_n\rangle. \quad (1.21)$$

最后一次变换

$$|\phi_{\alpha_L}^L\rangle = \sum_{\alpha_{L-1} \sigma_L} A_{\alpha_{L-1} \alpha_L}^L [\sigma_L] |\phi_{\alpha_{L-1}}^{L-1}\rangle |\sigma_L\rangle. \quad (1.22)$$

事实上 $|\phi_{\alpha_L}^L\rangle$ 已经包含整个系统，所以是一个纯态，波函数只需取一个分量。因此， α_L 的维数为1，指标 α_L 可以略去。于是，系统的波函数可以写成开边界的矩阵乘积态（图1.2 (a)）

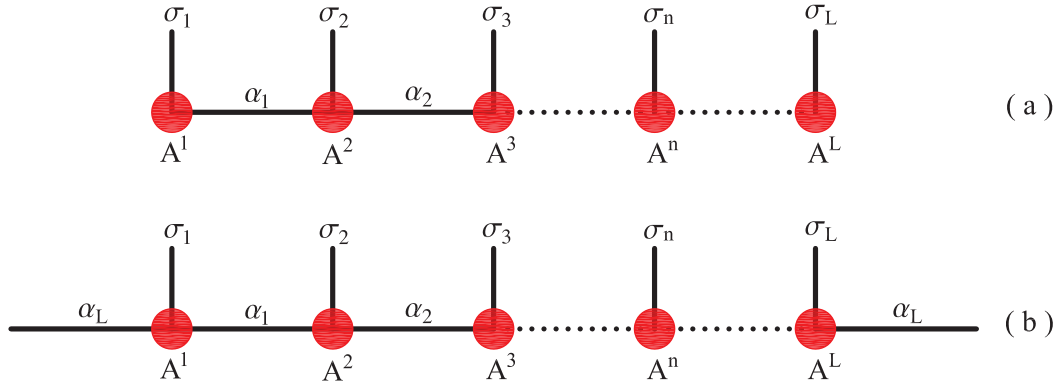


图 1.2: 开边界 (a) 和周期边界 (b) 条件下的矩阵乘积态示意图。

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{\alpha_i\}} A_{\alpha_1}^1[\sigma_1] A_{\alpha_1\alpha_2}^2[\sigma_2] \cdots A_{\alpha_{L-1}}^L[\sigma_L] |\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_L\rangle. \quad (1.23)$$

类似的可以写出周期一维系统的矩阵乘积态 (图1.2 (b))

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{\alpha_i\}} A_{\alpha_L\alpha_1}^1[\sigma_1] A_{\alpha_1\alpha_2}^2[\sigma_2] \cdots A_{\alpha_{L-1}\alpha_L}^L[\sigma_L] |\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_L\rangle. \quad (1.24)$$

1.2.1 正则形式

同一个状态对应的矩阵乘积态并不唯一。在MPS的键上插入互逆矩阵将改变局域矩阵，但是不改变物理状态。为了简单起见，我们这里考虑下式定义的无限长链平移对称单子格的矩阵乘积态

$$|\Psi\rangle = \sum \cdots \Gamma[\sigma_1] \lambda \Gamma[\sigma_2] \lambda \cdots |\cdots \sigma_1\sigma_2\cdots\rangle, \quad (1.25)$$

这里与前面定义的MPS形式上的区别在于引入了键上的矢量 (对角矩阵) λ 。这本质上与前面的定义没有区别，因为总可以把 λ 与邻近的 Γ 收缩而恢复1.24式的形式。如果1.25式的MPS处于其正则形式，那么从任意键把一维系统分成两部分， λ 正好是将 $|\Psi\rangle$ 从这一处分成两部分的Schmidt分解的系数

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha} |\Phi_{\alpha}^L\rangle \otimes |\Phi_{\alpha}^R\rangle, \quad (1.26)$$

其中 $|\Phi_\alpha^L\rangle$ 和 $|\Phi_\alpha^R\rangle$ 为正交归一基矢, 即

$$\langle \Phi_\alpha^L | \Phi_{\alpha'}^L \rangle = \langle \Phi_\alpha^R | \Phi_{\alpha'}^R \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (1.27)$$

从上式容易得到对应的MPS的正则条件

$$\sum_{\sigma} \Gamma[\sigma] \lambda \lambda^\dagger[\sigma] = \eta I \quad (1.28)$$

$$\sum_{\sigma} \Gamma^\dagger[\sigma] \lambda \lambda^\dagger[\sigma] = \eta I. \quad (1.29)$$

当且仅当 $|\Psi\rangle$ 为归一波函数时, $\eta = 1$ 。

从1.26式可以得到左边半条链和右边半条链的纠缠熵

$$S = - \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_\alpha \ln \lambda_\alpha \leq \ln \chi. \quad (1.30)$$

所以有限维的MPS表示的总是有限纠缠的系统, 即有能隙的系统。为了精确表示临界系统, 以开边界为例, 利用1.8式可知MPS的键指标维数

$$\chi \geq L^{c/6}. \quad (1.31)$$

这表明我们不能采用有限 χ 精确的表示热力学极限下的一维临界系统。然而, 通常 χ 随着系统尺寸的增长不是很快, 所以采用MPS能够精确处理的链长远远长于精确对角化能够处理的长度。

有多种等价的方法[34–36]将一个MPS变换到其正则形式。我们这里简单介绍文献[36]采用的计算过程。

首先, 定义

$$T_{(\alpha\alpha'), (\beta\beta')}^R = \sum_{\sigma} \Gamma_{\alpha\beta}[\sigma] \lambda_{\beta} \Gamma_{\alpha'\beta'}^*[\sigma] \lambda_{\beta'}. \quad (1.32)$$

计算 T^R 的最大右本征态

$$\sum_{(\beta\beta')} T_{(\alpha\alpha'), (\beta\beta')}^R V_{(\beta\beta')}^R = \eta V_{(\alpha\alpha')}^R. \quad (1.33)$$

上式等价于

$$\sum_{\sigma} \Gamma[\sigma] \lambda V^R \lambda \Gamma^{\dagger}[\sigma] = \eta V^R. \quad (1.34)$$

然后, 定义

$$T_{(\alpha\alpha'),(\beta\beta')}^L = \sum_{\sigma} \lambda_{\alpha} \Gamma_{\alpha\beta}^*[\sigma] \lambda_{\alpha'} \Gamma_{\alpha'\beta'}[\sigma]. \quad (1.35)$$

计算 T^L 的最大左本征态

$$\sum_{(\alpha\alpha')} V_{(\alpha\alpha')}^L T_{(\alpha\alpha'),(\beta\beta')}^L = \eta V_{(\beta\beta')}^L. \quad (1.36)$$

上式等价于

$$\sum_{\sigma} \Gamma^{\dagger}[\sigma] \lambda V^L \lambda \Gamma[\sigma] = \eta V^L. \quad (1.37)$$

容易证明 V^R 和 V^L 是对称正定矩阵, 对其进行本征值分解

$$V^R = W_R \sqrt{D_R} \sqrt{D_R} W_R^{\dagger} = X X^{\dagger} \quad (1.38)$$

$$V^L = W_L \sqrt{D_L} \sqrt{D_L} W_L^{\dagger} = Y Y^{\dagger}. \quad (1.39)$$

往MPS中插入下述两个单位阵的分解

$$I = X X^{-1} = (Y^{\dagger})^{-1} Y^{\dagger}, \quad (1.40)$$

可得,

$$\begin{aligned} & \cdots \Gamma[\sigma_1] \lambda \Gamma[\sigma_2] \lambda \cdots \\ = & \cdots (Y^{\dagger})^{-1} Y^{\dagger} \lambda X X^{-1} \Gamma[\sigma_1] (Y^{\dagger})^{-1} Y^{\dagger} \lambda X X^{-1} A[\sigma_2] \cdots, \end{aligned} \quad (1.41)$$

对 $Y^{\dagger} \lambda X$ 进行奇异值分解

$$Y^\dagger \lambda X = U \lambda' V. \quad (1.42)$$

最后，对 $\Gamma[\sigma]$ 做如下变换

$$\Gamma'[\sigma] = V X^{-1} \Gamma[\sigma] (Y^\dagger)^{-1} U, \quad (1.43)$$

于是得到正则化之后的MPS

$$|\Psi\rangle = \sum \cdots \Gamma'[\sigma_1] \lambda' \Gamma'[\sigma_2] \lambda' \cdots |\cdots \sigma_1 \sigma_2 \cdots\rangle. \quad (1.44)$$

对于正则形式的MPS，计算算符的期望值变得尤为简单。例如对于计算只和一个格点 i 相关的算符 O^i 的期望值，根据正则形式MPS的正交归一条件1.27式，只需按下式计算

$$\langle \Psi | O^i | \Psi \rangle = \sum_{\alpha\beta} \sum_{\sigma_i} (\lambda_\alpha)^2 \Gamma_{\alpha\beta}[\sigma_i] \langle \sigma_i | O^i | \sigma'_i \rangle \Gamma_{\alpha\beta}[\sigma'_i] (\lambda_\beta)^2. \quad (1.45)$$

将MPS变换为正则形式的另一个好处是如果按照保留最大的 χ 个Schmidt系数 λ_α 的方式对MPS进行截断，该截断方式是最优的，因为其最大化了原始MPS和截断后的MPS之间的交叠。

1.2.2 变分方法

对于矩阵乘积波函数，我们有两类方法确定其基态：变分方法和虚时演化方法。对于有限系统，通常采用变分法；对于无限系统，特别是具有平移对称性的系统，通常采用虚时演化方法。

这里我们沿用文献[37]的叙述介绍MPS的变分方法。该方法的基本思路是依次优化每一个矩阵，使得能量逐渐降低直至收敛，即得系统的基态波函数。首先，创建初始的MPS波函数

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{\alpha_i\}} A_{\alpha_1}^1[\sigma_1] A_{\alpha_1\alpha_2}^2[\sigma_2] \cdots A_{\alpha_{L-1}}^L[\sigma_L] |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_L\rangle. \quad (1.46)$$

为了求得基态MPS，我们需要固定除了一个张量 A^k 之外所有张量，然后一个接一个的扫描优化每一个 A^k ，使得每一步都极小化能量期望值

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (1.47)$$

按照图1.3所示收缩 $\langle \psi | H | \psi \rangle$ 和 $\langle \psi | \psi \rangle$ 中除了与 A^k 相连的指标。将 A^k 的所有指标并在一起看作一个矢量 \mathbf{A}^k ，则

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = (\mathbf{A}^k)^\dagger \mathcal{H}^k \mathbf{A}^k \quad (1.48)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = (\mathbf{A}^k)^\dagger \mathcal{N}^k \mathbf{A}^k. \quad (1.49)$$

优化 A^k 转化为求解下面的广义本征值方程的最小广义本征值

$$\mathcal{H}^k \mathbf{A}^k = \epsilon \mathcal{N}^k \mathbf{A}^k. \quad (1.50)$$

对于一维的问题，总可以对每个格点的矩阵采用QR分解，对MPS的局域矩阵进行变换，使得图1.3中 A^k 两侧的态分别正交归一。这样的结果是 \mathcal{N}^k 变成单位矩阵，使得计算广义本征值问题转化为计算本征值问题。这带来的好处是避免遇到 \mathcal{N}^k 出现接近于零的本征值的情况，从而减小了出现数值不稳定的可能。按照这个方法来回扫描更新各个矩阵，最终收敛得到基态的MPS波函数。

1.2.3 时间演化

文献[12]提出了一种简单计算有限长链矩阵乘积态时间演化的方法，后来文献[38]又将其推广到无限长链系统，提出无限长链时间演化块消减算法(infinite time evolving block decimation, iTEBD)。其他多种计算MPS时间演化的方法也在同时期提出[13–15]。这一部分主要介绍iTEBD算法。

所有这些时间演化方法都需要将整个时间演化算符分解为一系列很小的时间片段 $\tau = t/L_t$ 对应的演化算符的乘积形式，使得演化算符接近于单位阵。对于一个最近邻相互作用一维无限系统

$$H = \sum_l h_{l,l+1}, \quad (1.51)$$

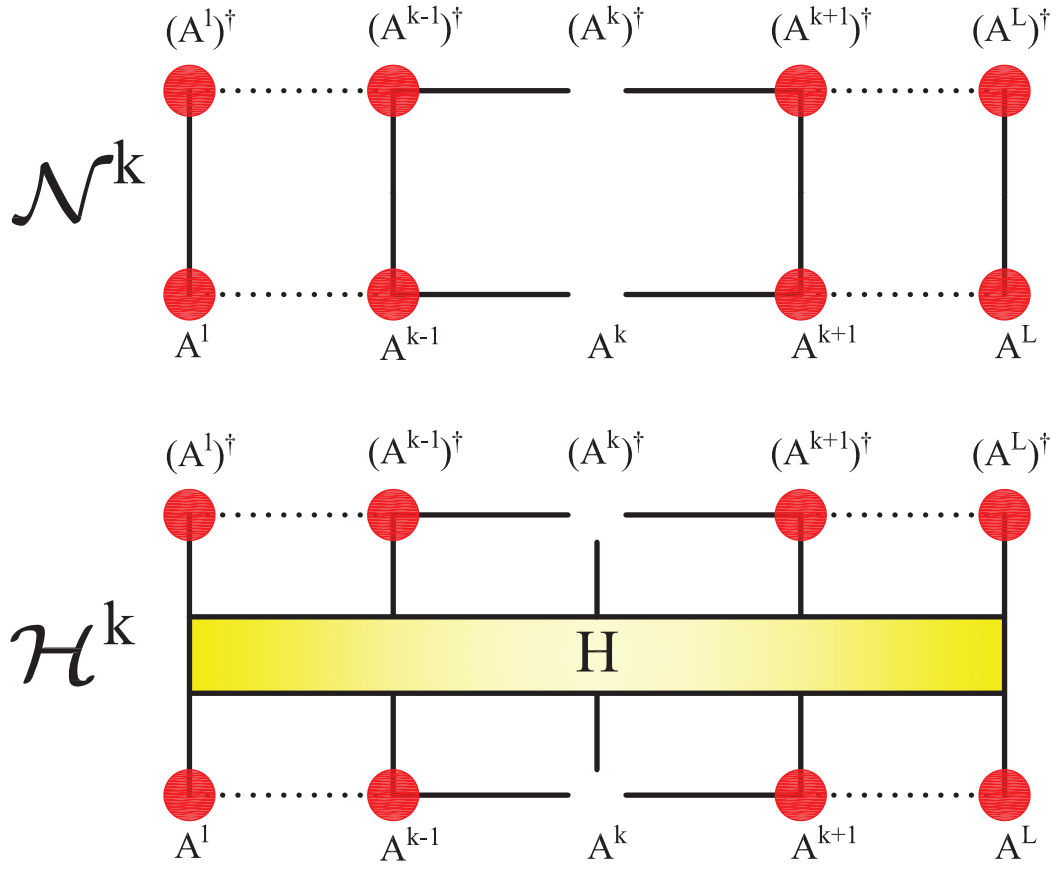


图 1.3: 变分过程中构造 \mathcal{N}^k 和 \mathcal{H}^k 的示意图。固定除了一个张量 A^k 之外所有张量, 收缩 $\langle\psi|\psi\rangle$ 和 $\langle\psi|H|\psi\rangle$ 中除了与 A^k 相连的指标, 分别得到 \mathcal{N}^k 和 \mathcal{H}^k 。

我们的目标是计算系统初态 $|\Psi\rangle$ 随着实时间的演化

$$|\Psi_t\rangle = e^{-iHt} |\Psi\rangle, \quad (1.52)$$

或者随着虚时间的演化

$$|\Psi_t\rangle = \frac{e^{-Ht} |\Psi\rangle}{\|e^{-Ht} |\Psi\rangle\|}. \quad (1.53)$$

利用Trotter-Suzuki分解将演化算符 e^{-iHt} (或者 e^{-Ht}) 近似分解为一系列只和局域两个格点有关的门操作

$$\begin{aligned}
e^{-iHt} &= \prod_{\tau=0}^{L_t} e^{-iH\tau} \\
&\approx \prod_{\tau=0}^{L_t} e^{-iH_{\text{even}}\tau} e^{-iH_{\text{odd}}\tau},
\end{aligned} \tag{1.54}$$

其中

$$e^{-iH_{\text{even}}\tau} = \otimes e^{-ih_{2l,2l+1}\tau} = \otimes G_{2l,2l+1} \tag{1.55}$$

$$e^{-iH_{\text{odd}}\tau} = \otimes e^{-ih_{2l+1,2l+2}\tau} = \otimes G_{2l+1,2l+2}. \tag{1.56}$$

利用更高阶的Trotter-Suzuki分解可以进一步减小离散化误差。在利用虚时演化得到基态的计算过程中，Trotter-Suzuki分解的误差并不累积，而且很容易通过减小虚时片段 τ 而基本上消除。

下面，我们讨论如何将上述构造的局域门操作 G 作用在一个无限大平移对称的MPS上。为了方便起见，我们选取下述形式的双子格MPS

$$|\Psi\rangle = \sum \cdots \Gamma^A[\sigma_1] \lambda^A \Gamma^B[\sigma_2] \lambda^B \cdots |\cdots \sigma_1 \sigma_2 \cdots\rangle. \tag{1.57}$$

我们首先将图1.4 (c) 的虚线椭圆中的张量收缩为图1.4 (d) 的一个张量 Θ

$$\Theta_{\alpha\sigma'_1, \gamma\sigma'_2} = \sum_{\beta\sigma_1\sigma_2} \lambda_{\alpha}^B \Gamma_{\alpha\beta}^A[\sigma_1] \lambda_{\beta}^A \Gamma_{\beta\gamma}^B[\sigma_2] \lambda_{\gamma}^B G(\sigma_1\sigma_2, \sigma'_1\sigma'_2), \tag{1.58}$$

然后对 Θ 进行奇异值分解（图1.4 (d) 到 (e)）

$$\Theta_{\alpha\sigma'_1, \gamma\sigma'_2} = \sum_{\beta} U_{\alpha\sigma'_1, \beta} \tilde{\lambda}_{\beta}^A V_{\gamma\sigma'_2, \beta}. \tag{1.59}$$

如果需要截断，则保留 $\tilde{\lambda}^A$ 的 χ 个最大的奇异值，然后还原MPS的形式（图1.4 (f) 到 (g)）

$$\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}^A[\sigma'_1] = (\lambda_{\alpha}^B)^{-1} U_{\alpha\sigma'_1, \beta}, \tag{1.60}$$

$$\tilde{\Gamma}_{\beta\gamma}^B[\sigma'_2] = (\lambda_{\gamma}^B)^{-1} V_{\gamma\sigma'_2, \beta}. \tag{1.61}$$

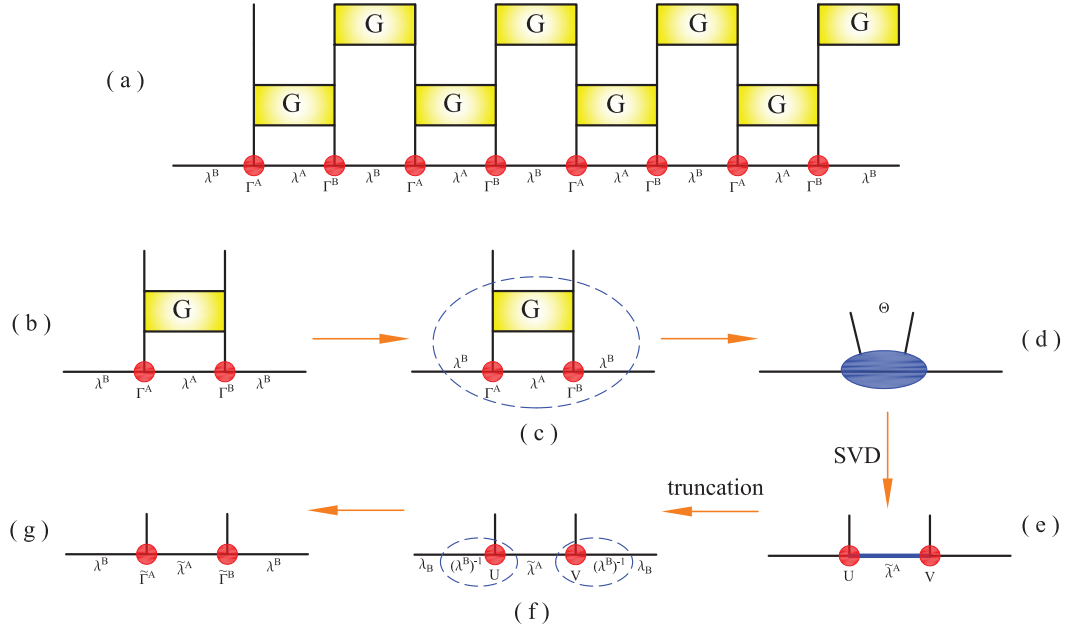


图 1.4: (a) 利用Trotter-Suzuki分解将演化算符 e^{-iHt} （或者 e^{-Ht} ）近似分解为一系列只和局域两个格点有关的门操作 G 的示意图；(b) 到 (g) 是iTEBD算法一次门操作的流程。首先将图 (c) 虚线椭圆中的张量收缩为图 (d) 的一个张量 Θ ；然后对 Θ 进行奇异值分解得到图 (e) 的张量；最后将截断后的张量按 (f) 图所示的操作还原MPS的形式 (g)。

iTEBD算法的时间复杂度为 $O(d^3\chi^3)$ ，其中 d 是单个格点物理指标维数， χ 是MPS键指标维数。另一方面，采用iTEBD 虚时演化求解一维量子格点模型的时候，每一步的截断误差和Trotter分解误差不累积。所以，这是一种非常高效而精确确定基态的方法。

1.3 张量网络态

张量网络态作为矩阵乘积态的高维推广，被不同的作者多次以不同的形式提出。G. Sierra和M. A. Martin-Delgado提出顶点矩阵乘积态（vertex matrix product ansatz）[39]，随后Nishino等人将其发展用于计算三维伊辛模型的配分函数[40, 41]。文献[42]第一次将张量网络态应用于研究无限大均匀量子系统。在2004年，Verstraete和Cirac在文献[43] 中第一次提出投影纠缠对态（projected entangled-pair state, PEPS）的概念，并将其用于研究有限非均匀系统。从此

以后，量子系统的张量网络波函数的物理图像愈发清晰的呈现出来，使得张量网络态得到越来越多关注。文献[44]对PEPS的形式进行了推广，用于研究无限大平移对称的晶格系统。

近年来人们提出了很多基于张量网络态的算法[45–56]，并且已经有不少应用于非阻挫[57–59]和阻挫[60–64]自旋系统的数值研究，以及对二维系统实时间演化的研究[65]。

张量网络态可以很直观地表示任意类型的晶格系统，这一节为了明确起见，只讨论正方晶格，并且每个格点的物理空间维度都为 d 。如果将波函数写成一组完备基下的叠加，

$$|\Psi\rangle = \sum C(\sigma_1, \sigma_1, \dots) |\sigma_1\rangle |\sigma_1\rangle \quad (1.62)$$

那么构造张量网络态的目标就是将叠加系数 $C(\sigma_1, \sigma_1, \dots)$ 近似写成若干张量乘积的形式。不考虑可能存在的边界张量，矩阵乘积态的张量阶数为3，张量网络态的张量阶数为 $z + 1$ ，其中 z 是如此构造方式下每个张量最近邻张量的个数（并不一定等于晶格配位数）。这样，每个格点定义的张量就由一个物理指标和一些与近邻张量相连的键指标构成（图1.5）。于是，叠加系数 $C(\sigma_1, \sigma_1, \dots)$ 的计算转化成收缩所有的键指标。如图1.5（b）所示，张量网络由若干5阶张量 A^i 的乘积构成，每个张量的键指标维数表示为 D 。当 $D = 1$ ，波函数为这组基下的直积态，对应于平均场理论；当 D 取足够大时，该张量网络态可以覆盖整个希尔伯特空间。

从图1.6可以比较直观地看出，张量网络态的纠缠熵是满足面积定律的。在图1.6中，我们如果通过该张量网络态计算出 A 的约化密度矩阵 ρ_A ，由于 A 和 B 之间相连的键个数正比于边界长度，所以 ρ_A 的秩的上界随着边界长度指数增长。原则上讲，张量网络态所描述的状态的纠缠熵可以正比于边界长度，即满足面积定律。

1.3.1 收缩张量网络

为了计算物理量的期望值，需要收缩张量网络。与矩阵乘积态不同，严格收缩张量网络在计算上是困难的[66]，所以人们发展出了多种近似处理的方法。文献[43]提出了收缩有限开边界张量网络的方法。该方法后来被推广到处理无限大平移对称系统[44]。为了计算期望值，我们需要将张量网络态和它

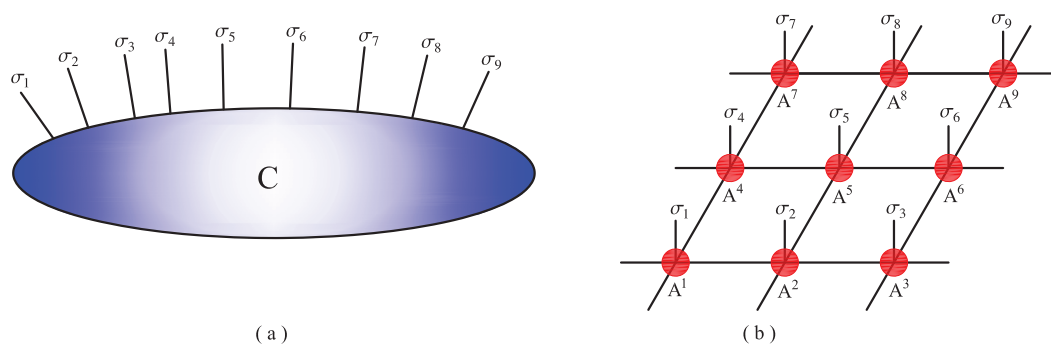


图 1.5: 将一个正方晶格量子体系波函数 (a) 表示成张量网络态 (b) 的示意图。每个格点定义的张量由一个物理指标和四个与近邻张量相连的键指标构成。

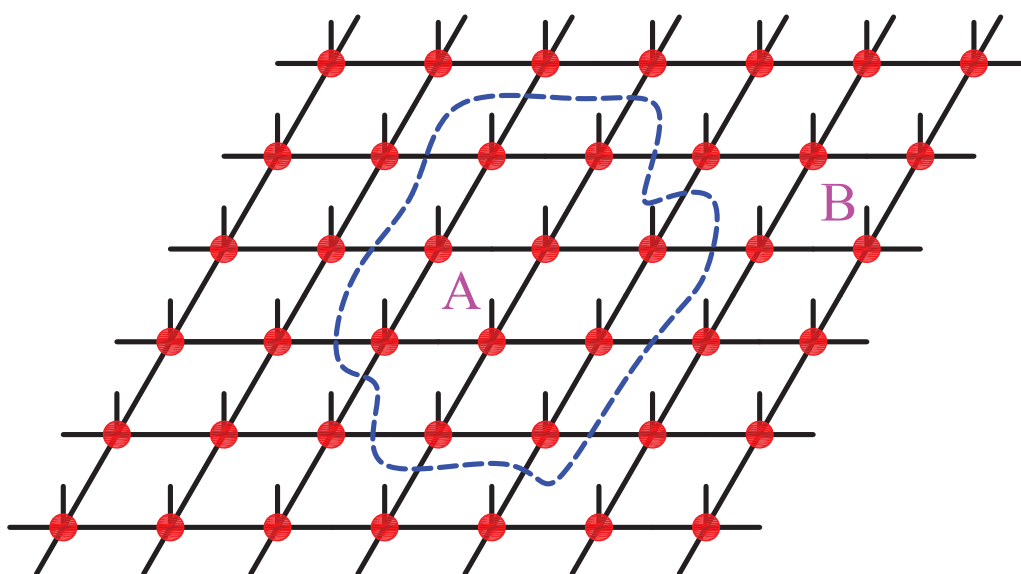


图 1.6: 用蓝色虚线将张量网络分成A和B两个部分。A和B之间相连的键个数正比于边界长度。而边界键指标总维数定出了通过该张量网络态计算出的约化密度矩阵的秩的上界。

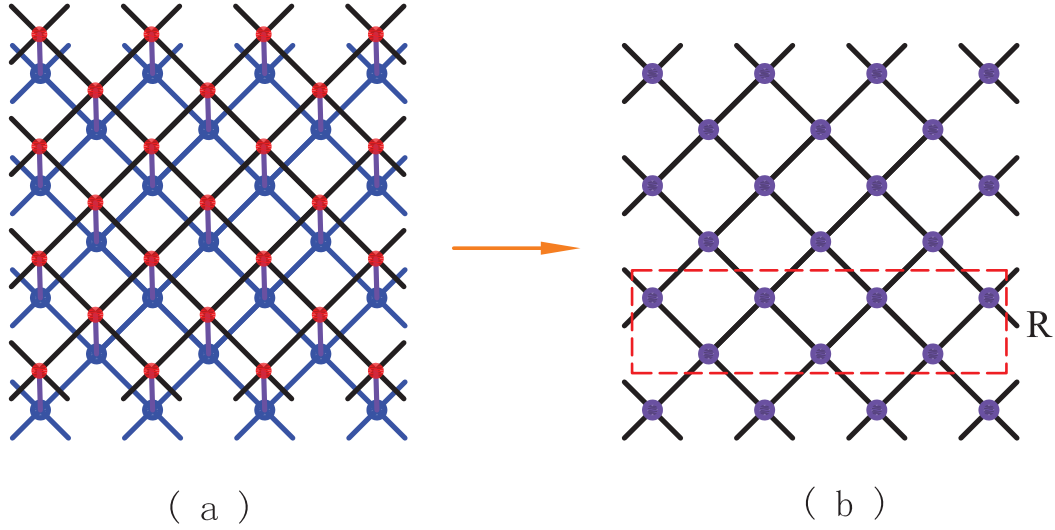


图 1.7: 将张量网络态和它的自身收缩对应格点的物理指标 (a), 得到只有键指标而没有出现物理指标的张量网络 (b)。(b) 图中的张量网络由无数行张量 R 构成。收缩张量网络等价于计算 R 的最大本征态。

的自身收缩对应格点的物理指标 (图1.7 (a)), 得到只有键指标而没有出现物理指标的张量网络 (图1.7 (b))。如图1.7 (b) 所示, 该张量网络由无数行张量 R 构成, 于是收缩张量网络就等价于计算 R 的最大本征态。计算的方法采用 iTEBD 的思想, 将 R 作为投影算符作用在一个 MPS 上, 反复投影直至收敛, 从而得到 R 的最大本征态的近似表示。

另一种收缩张量网络的算法是角转移矩阵重正化群方法 (corner transfer matrix renormalization group, CTMRG)。该方法最早由 Baxter 提出用于计算经典系统的配分函数[30]。后来又被 Nishino 等人发展为一种基于张量网络的计算方法, 用于计算二维和三维经典模型[40, 67]。文献[54, 68]采用 CTMRG 方法收缩无限大的张量网络。

上述几种方法大体思路都是找到一个边界态近似包含整个系统的信息, 从而达到收缩张量网络的目的。第三章将详细讨论另一类思路截然不同的方法, 即张量网络态的重正化群方法[1, 51, 53, 69]。这类算法基于晶格的粗粒化的过程, 将原始的张量网络通过近似变换映射到尺寸更小的张量网络。通过迭代进行粗粒化过程, 使得张量网络持续减小, 直到得到可以严格收缩的张量网络为止。

1.3.2 计算基态波函数

对于张量网络波函数，与矩阵乘积态类似，我们原则上有两类方法确定其基态：变分方法和虚时演化方法。变分方法的思路与1.2.2节类似。所不同的是张量网络态普遍不存在正则形式，所以 \mathcal{N} 矩阵不总是能变换为单位阵。如果 \mathcal{N} 存在非常接近于零的本征值，那么求解广义本征值方程1.50会出现数值不稳定。因此，通常都采用虚时演化方法计算基态张量网络波函数。

文献[43, 44]介绍了一种虚时演化的方法。首先将演化算符 $e^{-\tau H}$ 作用到张量网络态 $|\Psi\rangle$ ，得到维数增加的态 $|\tilde{\Psi}\rangle$ 。这种方法的基本思路是通过求解线性方程组，找到截断之后的 $|\Psi'\rangle$ 使得 $\| |\tilde{\Psi}\rangle - |\Psi'\rangle \|$ 极小。其计算中需要类似于计算期望值的过程，即收缩整个张量网络，所以计算的复杂度很高。

另一种虚时演化的方法是文献[51, 69]介绍的Bethe晶格近似方法。这种方法的过程与iTEBD非常类似，是将iTEBD的思路直接推广应用到高维张量网络态中。该方法提出的目的是降低虚时演化过程的计算复杂度。在虚时演化过程中每一步的截断都不一定是最优的，但是Trotter-Suzuki分解和截断的误差在迭代过程中都不累积，所以该方法仍然是非常精确的，而且可以处理更大的张量维数。本论文的第4章将详细讨论该方法的实现过程和计算结果。

1.4 自旋1双线性双二次海森堡模型的研究

为了寻找新奇的量子相以及量子相变，人们对许多不仅包含海森堡相互作用项的自旋模型进行了研究。在这些研究中，对自旋1双线性双二次海森堡模型

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [(\cos \theta) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + (\sin \theta) (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2] \quad (1.63)$$

的研究尤为广泛。在一维系统中，基态的相图已经基本上研究的比较清楚了。如图1.8所示：当 $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ 基态为Haldane能隙相[70, 71]，当 $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$ 为二聚化相[72–74]，当 $\pi/2 < \theta < \pi$ 和 $-\pi < \theta < -3\pi/4$ 为铁磁相，当 $\pi/4 < \theta < \pi/2$ 为具有三周期关联函数行为的临界相[75, 76]。当 $\theta = \pm\pi/4, -3\pi/4, \pi/2$ ，该模型可以严格求解。除了上述认识的很清晰的相和相边界，Chubukov[77, 78]认为在铁磁相和二聚化相之间可能存在有能隙的自

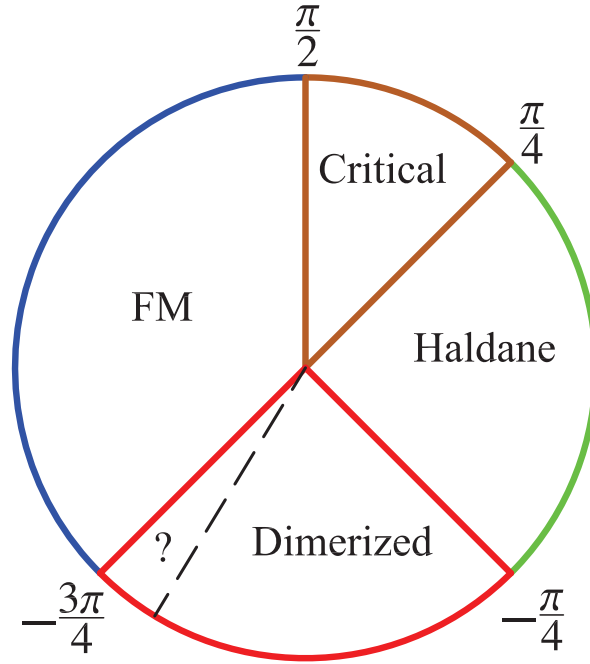


图 1.8: 一维自旋1双线性双二次海森堡模型的基态相图。当 $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ 基态为Haldane能隙相，当 $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$ 为二聚化相，当 $\pi/2 < \theta < \pi$ 和 $-\pi < \theta < -3\pi/4$ 为铁磁相，当 $\pi/4 < \theta < \pi/2$ 为具有三周期关联函数行为的临界相。

旋nematic相（图1.8中的问号所示的区域），系统没有破缺平移对称性，但这一结论一直以来都存在争议[75, 79–85]。

在二维体系中，不同的晶格类型可以有不同的基态相图。对于正方晶格，经典极限下，该模型的基态具有如图1.9(a)的内圈所示的四个相[86, 87]：当 $\pi/2 < \theta < \pi$ 和 $-\pi < \theta < -3\pi/4$ 为铁磁相；当 $-3\pi/4 < \theta < -\pi/2$ 为四极相，当 $-\pi/2 < \theta < \pi/4$ 为反铁磁相，当 $\pi/4 < \theta < \pi/2$ 为双子格交错四极矩相。在正方晶格这样可二分的晶格系统中，最近邻相互作用经典自旋模型的基态通常只需要将最小化最近邻的两个格点的态拓展到整个系统即可得到，所以得到的基态的构形是双子格或者单子格（如果两套子格相同）的。例如对于经典的伊辛模型，XY模型，海森堡模型，当耦合常数是负数时，基态是单子格的铁磁态，当耦合常数是正数时，基态是双子格的反铁磁态。对于量子模型，如果量子涨落不是十分强，那么量子基态并不完全破坏对应经典模型基态的序，因此基态也可以保持双子格或者单子格的构形。对于任意自旋的量子海森堡模型，这个

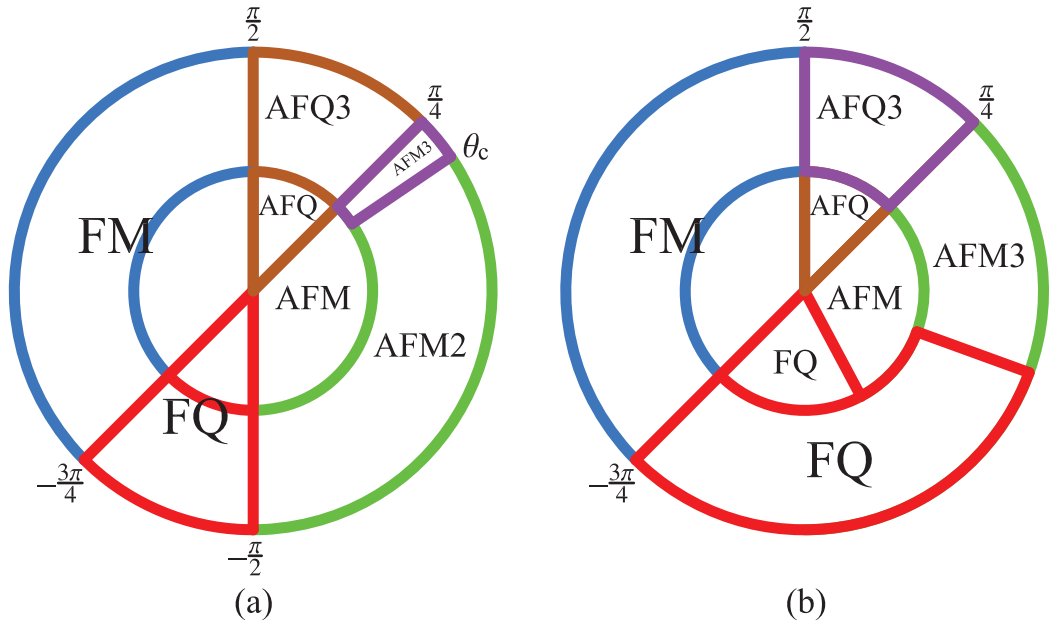


图 1.9: 二维正方晶格 (a) 和三角晶格 (b) 自旋1双线性双二次海森堡模型的基态相图。(a) (b) 图中的内圈都表示经典相图, 外圈是精确对角化的结果。FM, AFM, FQ和AFM 分别表示铁磁, 反铁磁, 四极和交错四极序。AFM2表示双子格的反铁磁序, AFM3和AFQ3表示三子格的反铁磁序和交错四极序。

结论是成立的。那么对于只包含最近邻相互作用的自旋1双线性双二次海森堡模型, 是否也具有双子格或者单子格构形的基态呢?

事实上, 这个物理图像是值得讨论的。首先, 在一维自旋1双线性双二次海森堡模型的基态中, 当 $\pi/4 < \theta < \pi/2$, 关联函数具有幂次衰减的三周期行为。这表明一维情形下, 系统的基态呈现出三子格构形, 有异于对应的经典构形。那么我们可以简单的推测, 对于弱耦合的多条链构成的正方晶格系统, 基态依然具有三子格构形。而对于均匀相互作用的正方晶格系统, 也许仍然具有三子格特性。这一推测得到了一些研究的印证[88–90]。

在 $\theta < 0$ 区域, 量子蒙特卡罗计算没有负符号问题。量子蒙特卡罗的计算表明[91, 92], $\theta < 0$ 的基态相图与经典极限下的相和相变点都一致。在 $0 < \theta < \pi/2$ 区域的一部分, 精确对角化的结果表明[89], 系统的基态可以存在三子格的反铁磁序 (AFM3) 和三子格的交错四极序 (AFQ3) (图1.9 (a) 外圈)。从双子格序到三子格序的相变发生在 $\theta_c < \pi/4$ 。

三角晶格的自旋1双线性双二次海森堡模型得到了更多的关注，因为有不少针对三角晶格自旋1的实验材料的研究[93, 94]。例如 $NiGa_2S_4$ [93]，磁性离子 Ni^{2+} 构成二维三角晶格层。不同层的 Ni^{2+} 之间的距离大于层内 Ni^{2+} 距离的三倍，所以层间耦合可以忽略。实验上观察到比热在低至 $T = 0.3K$ 仍然没有奇异性，也就是说可能没有相变；比热在低温（ $T < 10K$ ）的行为： $C \sim T^2$ ；磁化率在零温趋向于有限值。文献[81, 95]研究了三角晶格的自旋1双线性双二次海森堡模型，发现四极序或者交错四极序的存在可以解释上述实验现象。

从正方晶格和三角晶格的研究结果可以看出，在 $0 < \theta < \pi/2$ 区域，只要哈密顿量的双二次项 $(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2$ 足够大，系统可能不是经典极限的双子格相，而是三子格磁性序。然而，对于蜂窝晶格，每个原胞一定是偶数个格点，所以直观的讲很难形成奇数子格的序。另一方面，蜂窝晶格的配位数小于正方晶格和三角晶格，可以预期蜂窝晶格具有更大的量子涨落，很有可能破坏掉磁性长程序。本论文的第5章将详细讨论采用张量网络算法对蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型基态的计算。

1.5 退禁闭量子相变简介

在统计物理的相变理论中，序参量的概念居于核心地位。通过序参量的刻画，我们可以了解相变点两边的不同对称性。近年来，关联多体系统中零温相变的研究成为了热点。一般的热力学相变由热涨落驱动，而这些零温相变由量子涨落驱动，所以通常被称为量子相变。通常的量子相变可以归入Landau-Ginzburg-Wilson-Fisher (LGWF) 相变范式，即量子相变是对称性自发破缺。有序相的序参量非零，无序相的序参量为零。有序相的对称群是无序相的对称群的子群。例如从顺磁相到铁磁相的相变破缺了自旋的旋转对称性，序参量是磁化强度。

有一类相变不能归入LGWF范式，这里我们以二维自旋系统为例简要介绍。对于一个正方晶格自旋1/2系统，假如基态有如图1.10所示的两个相：反铁磁 (antiferromagnetic, AF) 相 (图1.10 (a)) 和价键固体 (valence bond solid, VBS) 相 (图1.10 (b))。在图1.10 (b) 的价键固体态中，每个红色椭圆内的一对格点形成自旋单态，即所谓的价键。价键规则排列，形成价键固体。VBS态的自旋激发通常是有能隙的。另一方面，正方晶格自旋1/2的VBS态破缺了晶格的平移对称性。我们考虑从AF相到VBS相的量子相变。AF相破缺了

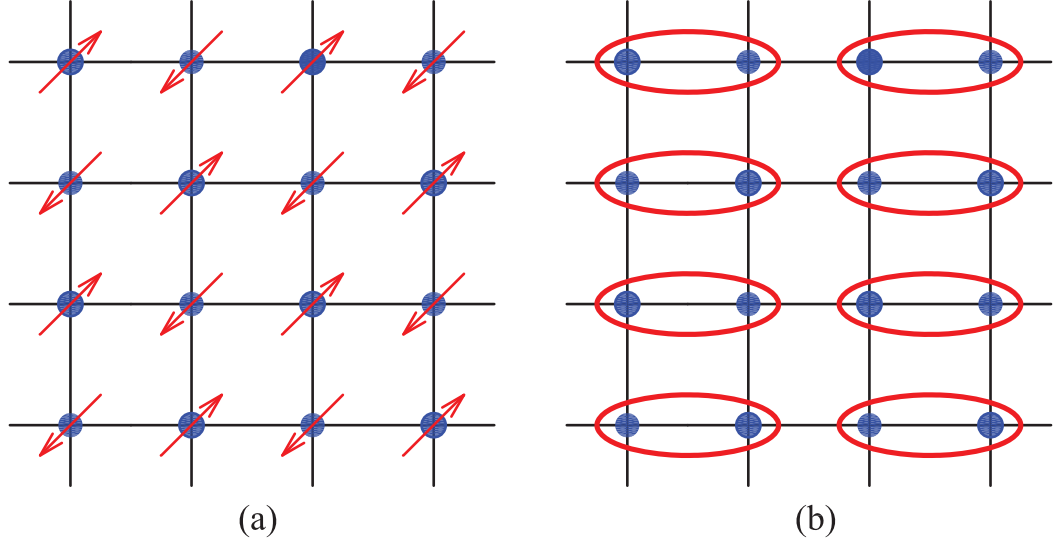


图 1.10: 正方晶格自旋 $1/2$ 系统基态可能存在的相。(a) 为反铁磁相, (b) 为价键固体相。

自旋的旋转对称性, 而VBS相破缺了晶格的平移对称性, 这两相不能用同一个序参量刻画。对于这样的相变, 两相的对称群互相不为子群。LGWF范式认为这类相变可能是一级相变, 或者两相之间有两种序同时存在或同时不存在的中间相。从AF相到VBS相的量子相变是直接的二级相变需要精细的调节模型参数, 使得相变点正好是多相临界点。LGWF相变范式并非总是正确的, 可以存在直接的二级相变连接这两个对称性不相容的相, 即所谓的退禁闭量子相变 (deconfined quantum phase transition) [96, 97]。

在退禁闭量子相变图像中, VBS态有 $S = 1$ 的元激发, 而禁闭了 $S = 1/2$ 的准粒子激发。当改变模型参数, 使得基态从VBS态向相变点靠近时, 这种禁闭势和VBS序都减弱。当达到相变点, 准粒子退禁闭, 系统开始呈现出长程序。退禁闭量子相变的理论认为这样的相变过程可以是直接的二级相变, 即使两相的对称性不相容。

1.6 本论文的安排

本论文首先介绍张量网络态及其相关算法的研究, 然后介绍了采用张量网络态算法计算蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型的基态相图。各章内容

的安排如下。

第二章，我们介绍两种将经典统计模型配分函数表示成张量网络形式的方法。一种是采取对偶变换，将张量定义在对偶晶格的格点上。这样能将经典统计模型变换到对应的对偶晶格的张量网络模型上。局域张量的阶数为对偶晶格的配位数。第二种构造张量网络的方法是对配分函数的每一个波尔兹曼因子项采用奇异值分解将张量定义在原始晶格上。选取构造张量网络的原则是使张量阶数尽可能低。

第三章，我们介绍了收缩张量网络的重正化群方法。我们首先介绍了Levin和Nave提出的张量重正化群方法（tensor renormalization group, TRG）[1]。TRG仅对于局部的两个相邻张量的截断是最优的，因为其并没有考虑环境张量的影响。为了提高截断的精度，我们提出二次重正化群方法(second renormalization group, SRG)，构造全局最优（或者近似最优）的截断方法。SRG可以有效地在计算中包含环境的重正化效应，从而显著地提高计算精度。为了展示SRG对精度的改善，我们计算了三角晶格二维伊辛模型，在同时保留 $D_{cut} = 24$ 个态的情况下，SRG相比于TRG的自由能计算精度能够在临界点附近提高2个数量级，在远离临界点提高超过5个数量级。

第四章，我们首先介绍了计算基态张量网络波函数的Bethe晶格近似虚时演化方法。对于只有最近邻相互作用的系统，采用Trotter-Suzuki分解将演化算符 $e^{-\beta H}$ 分解为一系列只与最近邻两个格点相关的两点操作。然后，将演化算符迭代的作用在初始波函数（可以是随机的波函数，也可以是某种确定状态的波函数）上直至收敛，可得基态。在得到基态张量网络波函数之后，我们采用SRG计算物理量的期望值。虽然并没有严格证明Bethe晶格近似能近似最优的得到基态张量网络态，但是经验证据表明在对不少模型的计算能得到很好的结果。然而，由于在Bethe晶格近似中并没有计入环境中长程关联，计算更倾向于得到短程关联的态。所以，在具有长程关联，比如在连续相变点附近或其他临界系统中，Bethe晶格近似很难抓住系统的物理性质。因此，为了更精确的抓住系统长程关联的性质，我们在计算代价可以接受的情况下适当增加了在虚时演化中计入的格点，采用集团更新进行计算。我们发现即使在集团尺寸不太大的情况下，波函数的计算精度也有比较明显的提高，对于长程序比如磁化强度的计算精度得到了大幅度的改进。

第五章，我们采用张量网络态的相关算法研究了蜂窝晶格自旋1双线性双

二次海森堡模型的基态性质。我们发现半经典理论预言基态存在的铁磁序，四极序，和反铁磁序的大部分都是稳定存在的。然而，半经典理论认为存在的交错四极序却被量子涨落破坏掉了，并且在这个区域也不存在任何形式的磁性长程序。在这个区域的稳定基态为plaquette价键固体态。

第六章，我们对整个论文进行了总结，并对张量网络算法的未来发展和应用进行了展望。

第二章 二维经典统计模型的张量网络表示

这章基于文献[69]，我们讨论只包含局域相互作用的经典模型的张量网络表示。众所周知，一维伊辛模型的配分函数能够表示成转移矩阵的乘积，从而严格的求解。这是经典统计模型的张量网络表示的最简单实例。矩阵也就是二阶张量。二维或者更高维经典统计模型的张量网络表示就是一维转移矩阵乘积的高维扩展。所有只包含局域相互作用的经典统计模型，比如伊辛模型和Pott's 模型，其配分函数都能够表示成张量网络模型。

本节介绍两种将经典统计模型配分函数表示成张量网络形式的方法。一种是采取对偶变换，将张量定义在对偶晶格的格点上。这样能将经典统计模型变换到对应的对偶晶格的张量网络模型上。局域张量的阶数为对偶晶格的配位数。如果对偶晶格的配位数小于原始晶格的配位数，这样的变换对减小计算量特别的有用。例如，定义在6配位的三角晶格上的经典模型可以表示成3配位的蜂窝晶格的张量网络。骰子晶格（diced lattice）的对偶晶格是Kagome晶格。正方晶格的对偶晶格还是正方晶格，即正方晶格是自对偶的。

如果考虑的经典统计模型不仅包含最近邻两点相互作用，还包含在每个原胞之内的多点相互作用，例如正方晶格中每个正方形上3点或者4点相互作用，那么依然可以定义对偶晶格上的张量网络模型，并且张量维数不必增加。这是将配分函数定义在对偶晶格上的另一个好处。

第二种构造张量网络的方法是对配分函数的每一个波尔兹曼因子项采用奇异值分解将张量定义在原始晶格上。这种方法也可以在所有晶格上实现。如果只存在最近邻两点相互作用，那么张量的阶数与晶格的配位数相同。因此，张量网络模型的原始晶格表示更适合于配位数比较小的晶格，如蜂窝晶格。

2.1 对偶晶格上的张量网络表示

这里以三角晶格自旋1/2伊辛模型为例说明如何将配分函数表示成对偶晶格上的张量网络。伊辛模型的哈密顿量定义如下

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \quad (2.1)$$

这里 S_i 有两个可能的取值 ± 1 .该模型是严格可解的[98, 99].

三角晶格伊辛模型的配分函数为

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} (e^{-\beta H}) \\ &= \text{Tr} \left(\prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J S_i S_j} \right) \\ &= \text{Tr} \left(\prod_{\triangle_{ijk}} e^{\beta J (S_i S_j + S_j S_k + S_k S_i)/2} \right). \end{aligned} \quad (2.2)$$

该式连乘符号 $\prod_{\triangle_{ijk}}$ 表示所有小三角形对应项相乘。因为每个键被两个三角形共享，导致配分函数每一项乘了两遍，所以指数上加入系数 $\frac{1}{2}$ 。 Tr 表示对所有的自旋构形求和。通过对偶变换，该配分函数可以用键变量表示成张量网络。三角晶格的对偶晶格是蜂窝晶格。

对于三角晶格的一个键,我们用这个键两端的自旋定义所谓的键自旋

$$\sigma_{ij} = S_i S_j. \quad (2.3)$$

这个键自旋的取值为 $\sigma = 1$ 或者 $\sigma = -1$, 分别对应 i, j 两个格点的伊辛自旋平行或者反平行。于是，配分函数可以重新表示为

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left(\prod_{\triangle_{ijk}} e^{\beta J (S_i S_j + S_j S_k + S_k S_i)/2} \right) \\ &= \text{Tr} \prod_{\langle ij \rangle} \delta(\sigma_{ij} - S_i S_j) \prod_{\triangle_{ijk}} e^{\beta J (\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{ki})/2}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

这里 Tr 表示对所有的 S 和 σ 的所有可能的构形求和。

在三角晶格中，键的数量 N_{bond} 和格点的数量 N_{site} 以及小三角形的数量 $N_{triangle}$ 满足如下关系

$$N_{site} = \frac{1}{3}N_{bond} \quad (2.5)$$

$$N_{triangle} = \frac{2}{3}N_{bond}, \quad (2.6)$$

所以,

$$N_{bond} = N_{site} + N_{triangle}. \quad (2.7)$$

因此, 2.4式中 N_{bond} 个 δ 函数可以等价的写成定义在所有格点上的 N_{site} 个 δ 函数与定义在所有小三角形上的 $N_{triangle}$ 个 δ 函数之乘积。在每个小三角形上, 容易证明三个键自旋的乘积恒等于1, 即

$$\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki} = S_i S_j S_j S_k S_k S_i = 1. \quad (2.8)$$

这些独立于原始自旋变量的约束条件定义在每个三角形上, 因而有 $\frac{2}{3}N_{bond}$ 个。因此, N_{site} 个格点上的 δ 函数可以被积掉。于是, 配分函数变换为

$$Z = \text{Tr}_\sigma \prod_{\triangle_{ijk}} \frac{1 + \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki}}{2} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{ki})/2}. \quad (2.9)$$

这里简单讨论一下做了变量代换之后总自由度数如何保持不变。在采用 S 作为求和变量时, S 的个数是格点数即 $\frac{1}{3}N_{bond}$, 那么自由度数为 $2^{\frac{1}{3}N_{bond}}$. 当采用 σ 作为求和变量时, σ 的个数是 N_{bond} , 那么自由度数为 $2^{N_{bond}}$. 然而, 2.9式配分函数中有 $\frac{2}{3}N_{bond}$ 个 $\frac{1 + \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ki}}{2}$ 个连乘, 其中对每个三角形会有一半的构形为0, 那么非零构形占有所有构形数的 $(\frac{1}{2})^{\frac{2}{3}N_{bond}}$. 所以, 当采用 σ 作为求和变量时, 真实的自由度数为

$$2^{N_{bond}} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}N_{bond}} = 2^{\frac{1}{3}N_{bond}}. \quad (2.10)$$

这与变量代换之前自由度数相同。

好了, 2.9式事实上已经把配分函数表示成张量网络模型。为了更明显的写出来, 我们做一些指标替换。我们用 i 标记对偶晶格的格点, 于是配分函数2.9式能够表示成下述标准张量网络模型

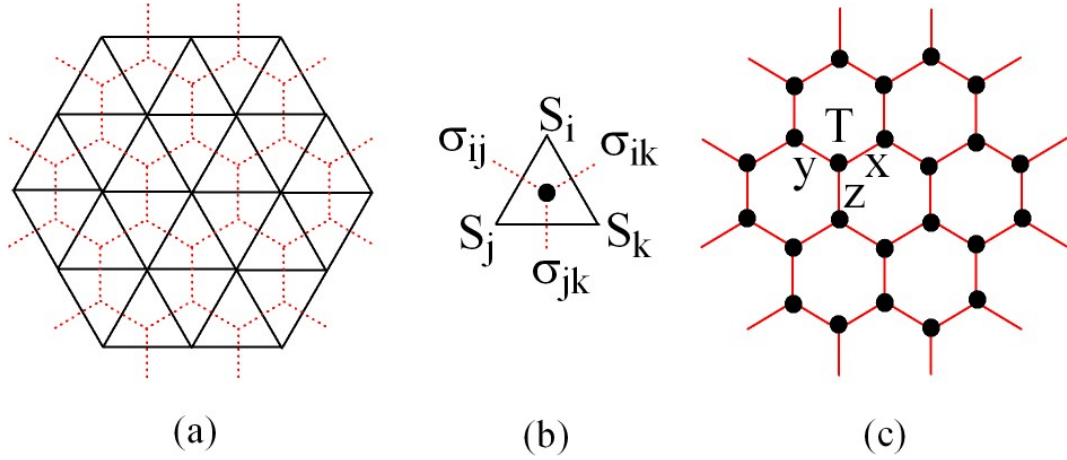


图 2.1: 2.9式定义的三角晶格的经典系统配分函数在对偶晶格（也即蜂窝晶格）上张量网络表示的示意图。

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i y_i z_i}, \quad (2.11)$$

这里 Tr 代表对所有的张量指标求和，并且

$$T_{x_i y_i z_i} = \frac{1 + \sigma_{x_i} \sigma_{y_i} \sigma_{z_i}}{2} e^{\beta J (\sigma_{x_i} + \sigma_{y_i} + \sigma_{z_i})/2} \quad (2.12)$$

是定义在蜂窝晶格格点上的三阶张量(如图2.1)。 x_i , y_i , 和 z_i 为从格点 i 分别沿着 x , y , 和 z 方向放射出的维数 $D_c = 2$ 的三个键指标。每个键连接着两个格点。两个相邻格点共有的键上对应的张量指标相同。

上面的推导过程可以推广到其它晶格。例如，正方晶格是自对偶的。对于在正方晶格上的自旋 $\frac{1}{2}$ 伊辛模型，很容易按照上面的步骤直接推出配分函数的张量网络表示为

$$Z = \text{Tr}_\sigma \prod_i T_{x_i y_i x'_i y'_i}, \quad (2.13)$$

这里，

$$T_{x_i y_i x'_i y'_i} = \frac{1 + \sigma_{x_i} \sigma_{y_i} \sigma_{x'_i} \sigma_{y'_i}}{2} e^{\beta J (\sigma_{x_i} + \sigma_{y_i} + \sigma_{x'_i} + \sigma_{y'_i})/2} \quad (2.14)$$

为定义在对偶的正方晶格的四阶张量。 x_i, y_i, x'_i 和 y'_i 为连接格点 i 的4个键指标。

对于蜂窝晶格，其对偶晶格是三角晶格。也就是说其对偶晶格每个格点有六个最近邻格点。这样构造的局域张量为六阶张量。因此，在对偶空间中计算蜂窝晶格的配分函数并无优势。

上述对偶变换能够推广到其他统计模型，而限于伊辛模型。例如，三角晶格上的 q 态 Pott's 模型哈密顿量为

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} \delta(\theta_i - \theta_j), \quad (2.15)$$

其中

$$\theta_i = 0, 1, \dots, q-1, \quad (2.16)$$

$\delta(a-b)$ 是 Kronecker δ 函数。很容易按照上面的步骤直接将配分函数写成对偶晶格的张量网络。局域张量定义如下

$$T_{xyz} = \delta(\text{mod}[x+y+z, q]) e^{-\beta J[\delta(x)+\delta(y)+\delta(z)]/2}, \quad (2.17)$$

这里键指标 x, y, z 取整数值，取值范围是

$$x, y, z = 0, 1, \dots, q-1. \quad (2.18)$$

当 $q=2$, Pott's 模型等价于自旋 $\frac{1}{2}$ 伊辛模型。

这里有必要指出的是，2.3 式并不是一一到上映射。上面的推导仅适用于无磁场的伊辛模型。如果在哈密顿量中引入 Zeeman 项或者多体相互作用项，2.3 式的变换不再适用。尽管如此，仍然可以在对偶晶格上定义张量网络模型，只不过为了区分相邻两个格点 S_i, S_j 的4个自旋构形，张量的维数需要从 $D_c = d$ (对于自旋 $\frac{1}{2}$ 伊辛模型 $d=2$) 增加到 $D_c = d^2 = 4$ 。

为了更具体的理解张量维数的变化，我们考虑外加磁场中正方晶格上一个推广的自旋 $\frac{1}{2}$ 伊辛模型

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i + J_{\square} \sum_{ijkl \in \square} S_i S_j S_k S_l, \quad (2.19)$$

其中最后一项是对所有正方形上的4自旋相互作用求和。 $ijkl \in \square$ 表示 i, j, k, l 为定义在每个小正方形的4个顶点指标, 如图2.2所示。该模型的配分函数依然可以写成2.13式定义的张量网络形式, 但是局域张量 $T_{x_i y_i x'_i y'_i}$ 现在变为如下定义

$$T_{\sigma_{il}\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{lk}} = \exp(-\beta H_{\square}) \delta_{\sigma_{il}, I_{il}} \delta_{\sigma_{ij}, I_{ij}} \delta_{\sigma_{jk}, I_{jk}} \delta_{\sigma_{lk}, I_{lk}}, \quad (2.20)$$

其中,

$$H_{\square} = -\frac{J}{2} (S_i S_l + S_i S_j + S_j S_k + S_l S_k) - \frac{h}{4} (S_i + S_j + S_l + S_k) + J_{\square} S_i S_j S_k S_l. \quad (2.21)$$

如果对自旋 $\frac{1}{2}$ 伊辛模型令 $S_i = \pm 1$, I_{ij} 定义如下

$$I_{ij} = (S_i + 1) + (S_j + 1)/2. \quad (2.22)$$

那么, I_{ij} 的取值

$$I_{ij} = 0, 1, 2, 3. \quad (2.23)$$

所以, 张量的键维数 $D_c = 4$ 。

2.2 原始晶格上的张量网络表示

任意维数, 任意晶格的局域相互作用经典统计模型总能够表示成在原始晶格上的张量网络模型。为了说明这一过程, 我们考虑一个如下哈密顿量定义的一般模型

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} K(S_i, S_j), \quad (2.24)$$

其中 $\langle \rangle$ 表示将所有最近邻对求和。 $K(S_i, S_j)$ 表示两个最近邻格点相互作用, S_i, S_j 为在局域格点上的基。该模型的配分函数可以表示为

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} W(S_i, S_j), \quad (2.25)$$

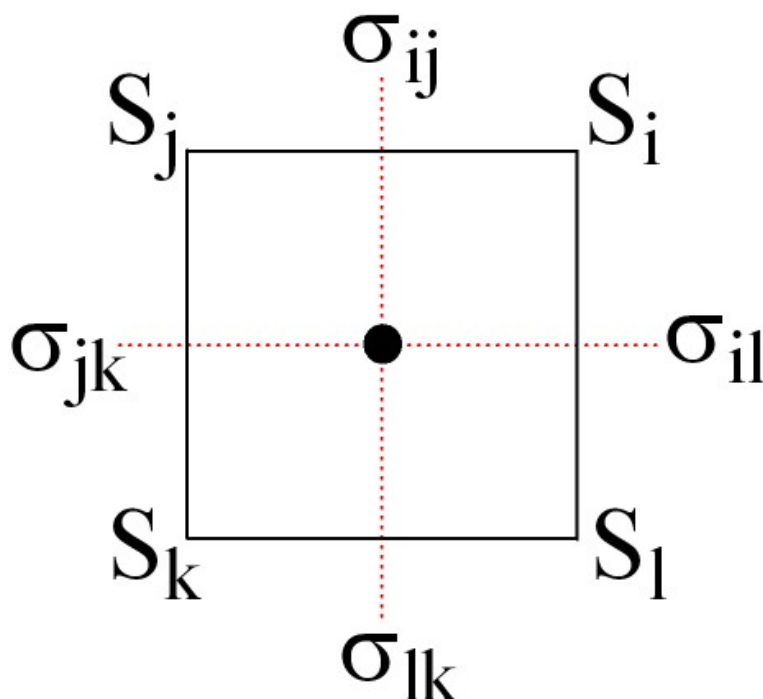


图 2.2: 正方晶格的一个原胞的自旋变量及其对应的对偶晶格的自旋变量。

其中,

$$W(S_i, S_j) = \exp[-\beta K(S_i, S_j)] \quad (2.26)$$

定义了一个矩阵, 其行指标和列指标分别为 S_i 和 S_j 。注意这里并不需要 W 是对称或者正定矩阵。

对 $W(S_i, S_j)$ 进行奇异值分解

$$W(S_i, S_j) = \sum_l U(S_i, l) \lambda_l V(S_j, l), \quad (2.27)$$

这里 U 和 V 是么正矩阵, λ 是半正定对角矩阵。如果定义

$$Q_a(S, l) = U(S, l) \lambda_l^{1/2}, \quad (2.28)$$

$$Q_b(S, l) = V(S, l) \lambda_l^{1/2}, \quad (2.29)$$

那么, W 可以重新表示成

$$W = Q_a Q_b. \quad (2.30)$$

接下来, 把所有与格点 i 相连的 Q 乘在一起。局域张量 T 可以通过将所有 Q 的 S_i 求和掉而得到

$$T_{x,y,z,\dots}^i = \sum_{S_i} Q_{\alpha_1}(S_i, x) Q_{\alpha_2}(S_i, y) Q_{\alpha_3}(S_i, z) \cdots \quad (2.31)$$

张量的阶数等于与格点 i 相连的键的数量。键指标的维数等于每个格点的物理维数 d 。于是这样就给出了张量网络表示的配分函数

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i, y_i, z_i, \dots}^i \quad (2.32)$$

两个相邻格点共有的键上对应的张量指标相同。 Tr 表示对所有的键指标求和。

在一个可分解为两套子格的晶格中, 例如蜂窝晶格, 配分函数可以简单的表示为

$$Z = \text{Tr} \prod_{i \in a, j \in b} T_{x_i, y_i, z_i}^a T_{x_j, y_j, z_j}^b, \quad (2.33)$$

其中上标 a 和 b 表示蜂窝晶格的两套子格, 并且

$$T_{x,y,z}^a = \sum_S Q_a(S, x) Q_a(S, y) Q_a(S, z), \quad (2.34)$$

$$T_{x,y,z}^b = \sum_S Q_b(S, x) Q_b(S, y) Q_b(S, z). \quad (2.35)$$

更进一步, 如果 W 是对称正定矩阵, 那么

$$V = U. \quad (2.36)$$

于是

$$Q_a = Q_b. \quad (2.37)$$

从而可得

$$T \equiv T^a = T^b. \quad (2.38)$$

因此，配分函数可以简化表示为

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i, y_i, z_i}. \quad (2.39)$$

第三章 张量网络态的重正化群方法

3.1 张量重正化群方法

在这节，我们简要介绍张量重正化群(TRG)[1]的实现方法。我们以2.33式定义的蜂窝晶格上的张量网络为例来说明TRG的实现过程。

TRG是一个迭代方法。在每一步迭代中有两个步骤。第一步是如图3.1 (a) 到 (b) 所示将蜂窝晶格重构成三角-蜂窝晶格。这一过程是通过将蜂窝晶格一对相邻的张量 T^a 和 T^b 变换成三角-蜂窝晶格的一对相邻新张量 S^a 和 S^b 实现。该变换采用如图3.2所示的奇异值分解实现。

首先，将 T^a 和 T^b 的共同指标收缩，得到 M 矩阵

$$M_{li,jk} = \sum_m T_{mij}^a T_{mkl}^b. \quad (3.1)$$

M 的维数是对应的键维数的乘积。 M 的初始维数是 D_c^2 。

然后，对 M 进行奇异值分解

$$M_{li,jk} = \sum_{n=1} U_{li,n} \Lambda_n V_{jk,n}, \quad (3.2)$$

其中， U 和 V 是两个幺正矩阵， Λ 是半正定降序排列对角矩阵，对角元被称为 M 的奇异值。 Λ 刻画了 U 和 V 之间的纠缠。 Λ 的维数与 M 的维数相等，比原来张量的维数大。为了能使计算能够迭代的进行，必须要对基矢进行截断到可以处理的维数，也就是说保留 D_{cut} 个最大奇异值及对应的矢量。截断之后（如果必要的话），我们可以得到两个新的张量

$$S_{nli}^a = U_{li,n} \sqrt{\Lambda_n}, \quad (3.3)$$

$$S_{njk}^b = V_{jk,n} \sqrt{\Lambda_n}. \quad (3.4)$$

第二步，将三角-蜂窝晶格张量网络中的小三角形的三个张量收缩生成在缩小了的蜂窝晶格中的新的局域张量（如图3.3）

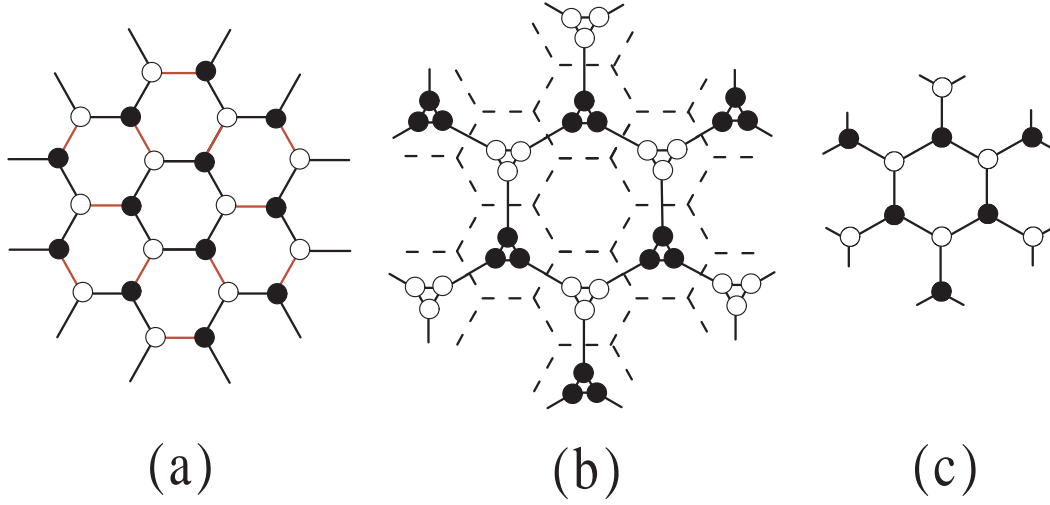


图 3.1: 在TRG迭代中蜂窝晶格张量网络通过奇异值分解重构的过程。(a) 到 (b) 是将蜂窝晶格重构为三角-蜂窝晶格；(b) 到 (c) 是将三角-蜂窝晶格张量网络中的小三角形的三个张量收缩生成缩小了的蜂窝晶格。

$$T_{xyz}^{\alpha} = \sum_{ijk} S_{xji}^{\alpha} S_{yjk}^{\alpha} S_{zik}^{\alpha}, \quad (3.5)$$

其中, $\alpha = a, b$ 。通过这两步, 晶格尺寸缩小到原来的 $\frac{1}{3}$ 。

重复上述两个步骤, 最终可以将一个足够大的晶格缩小成一个只包含6个张量的六边形张量网络 (如图3.4)。于是可以通过直接收缩这6个张量的所有指标求得配分函数。

3.2 二次重正化群方法

3.2.1 二次重正化群的总体算法流程

本节详细介绍二次重正化群方法。上一节的TRG过程最小化了对局域矩阵 M 的截断误差。然而正如文献[53]所指出的, TRG并没有考虑环境的影响。这里所谓环境, 包括除了构成 M 的两个点以外的所有格点。在实际的计算中, 应该最小化的是对配分函数截断的误差, 而不是对局域矩阵 M 的截断误差。TRG仅仅是局域最优的方法, 这意味着为了提高精度, 需要考虑构造全局最优 (或者近似最优) 的截断方法, 即考虑环境的影响。

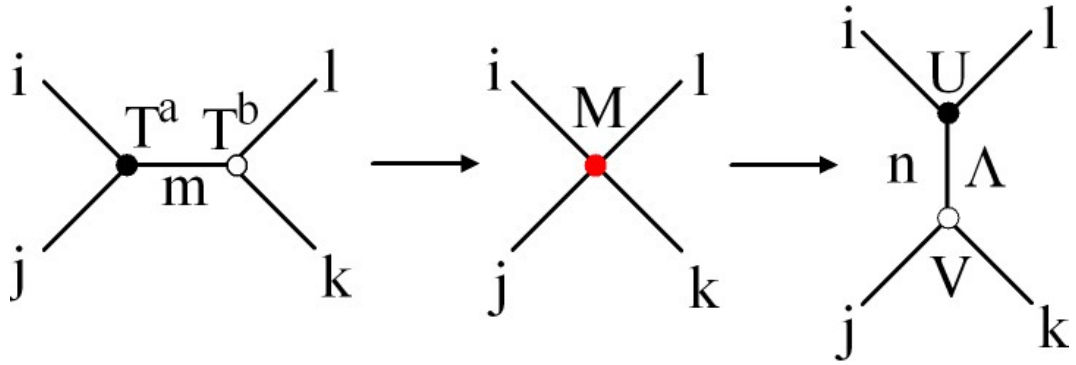


图 3.2: 3.1式和3.2式的示意图。将 T^a 和 T^b 的共同指标收缩，得到 M 矩阵。然后，对 M 进行奇异值分解。

为了全局的优化对局域矩阵 M 的截断，我们应该考虑环境对 M 的重正化效应。在文献[53]中，这个方法被称为张量网络态的二次重正化群（SRG）方法。SRG可以有效地在计算中包含环境的重正化效应，从而显著地提高TRG的计算精度。

TRG与SRG的区别类似于传统的Wilson块重正化群方法[100]和DMRG[2]的区别。在传统的块重正化群方法中，最优化截断的是每个分块的哈密顿量而不考虑不同块之间的相互作用。然而在DMRG中，系统块的基矢的截断需要在完全考虑系统和环境的相互作用之下进行优化，具体地说，就是将约化密度矩阵的本征值作为截断的基准。由于约化密度矩阵是对称正定矩阵，所以其本征值正好是对系统和环境进行Schmidt分解的系数。Schmidt系数刻画了系统块和环境块之间的纠缠。

为了更清晰的表达，我们把配分函数写成 M 和与之对应的环境矩阵 M^e 乘积的形式

$$Z = \text{Tr} M M^e, \quad (3.6)$$

其中， M^e 是把所有环境格点的张量收缩之后生成的矩阵。从这个式子可以明显的看出，为了减小计算配分函数的误差，我们应该最小化截断 $M M^e$ 的误差，而不是截断 M 的误差。

我们把如何计算出环境张量 M^e 放在下一节。这里首先考虑当得到 M^e 之后，怎样用 M^e 优化对 M 的截断。这一过程可分为下述3个步骤。

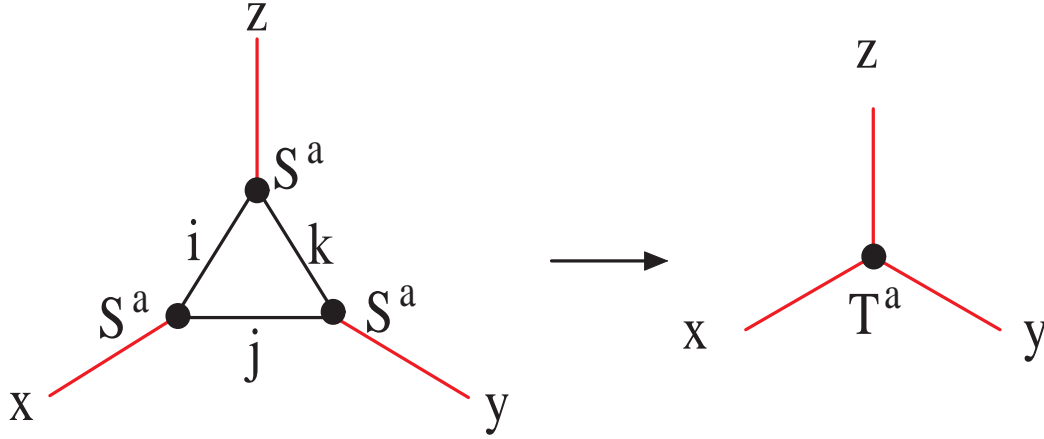


图 3.3: 3.5式的示意图。将三角-蜂窝晶格张量网络中的小三角形的三个张量收缩生成在缩小的蜂窝晶格中的新的局域张量。收缩三角形上三个张量的内部指标得到 T^a 。

1. 对 M^e 进行奇异值分解

$$M_{jk,li}^e = \sum_n U_{jk,n}^e \Lambda_n^e V_{li,n}^e, \quad (3.7)$$

这里， U^e 和 V^e 都是幺正矩阵， Λ^e 是半正定对角矩阵。这一步是为了保证 M^e 对 M 的重正化效应能够尽量对称的处理，这样配分函数的截断误差能够最小化。

2. 从上面分解得到的矩阵，我们定义一个新的矩阵

$$\tilde{M}_{n_1, n_2} = \sum_{lijk} (\Lambda_{n_1}^e)^{1/2} V_{li, n_1}^e M_{li, jk} U_{jk, n_2}^e (\Lambda_{n_2}^e)^{1/2}, \quad (3.8)$$

那么，配分函数可以重新表示为

$$Z = \text{Tr} \tilde{M}. \quad (3.9)$$

该式的形式意味着如果最小化了 \tilde{M} 的截断误差，那么也就最小化了计算配分函数的误差。

下面，我们对 \tilde{M} 进行奇异值分解

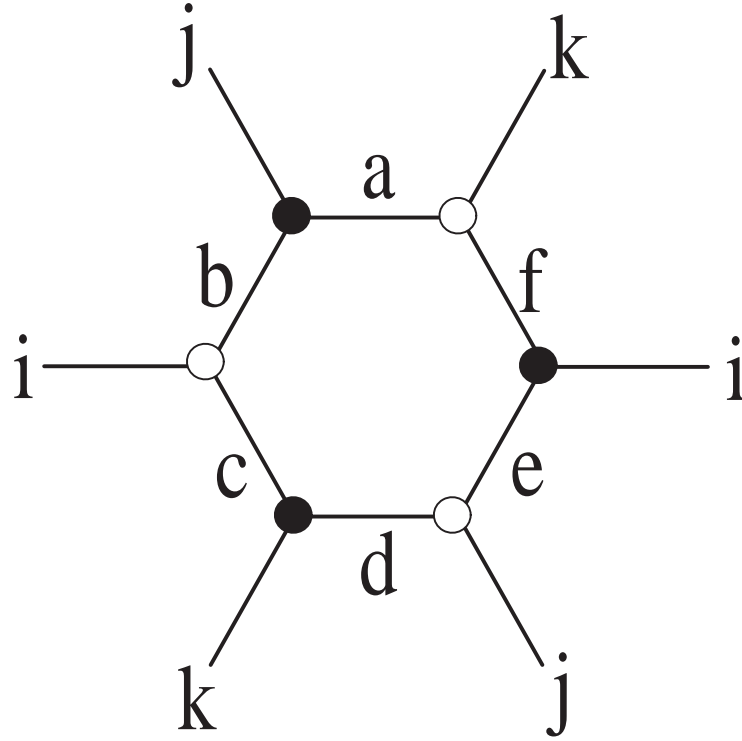


图 3.4: TRG迭代到最后的6个张量构成的六边形张量网络。直接收缩这6个张量的所有指标求得配分函数。这里假设系统具有中心对称的边界条件。

$$\tilde{M}_{n_1, n_2} = \sum_n \tilde{U}_{n_1, n} \tilde{\Lambda}_n \tilde{V}_{n_2, n}, \quad (3.10)$$

同样的， \tilde{U} 和 \tilde{V} 都是幺正矩阵， $\tilde{\Lambda}$ 是半正定对角矩阵。根据最小二乘原则，保留 $\tilde{\Lambda}$ 的 D_{cut} 个最大本征值及其对应的本征矢就是对 \tilde{M} 截断误差最小的截断方式。

3. 将截断后的 \tilde{M} 带入3.8式，反求出 M 。可以将 M 表示为

$$M_{li, jk} = \sum_{n_1 n_2} V_{li, n_1}^e (\Lambda_{n_1}^e)^{-1/2} \tilde{M}_{n_1, n_2} (\Lambda_{n_2}^e)^{-1/2} U_{jk, n_2}^e. \quad (3.11)$$

M 可以进一步表示成如下两个张量缩并的形式

$$M_{li,jk} \approx \sum_{n=1}^{D_{cut}} S_{n,li}^a S_{n,jk}^b, \quad (3.12)$$

其中

$$S_{n,li}^a = \sum_{n_1} V_{li,n_1}^e (\Lambda_{n_1}^e)^{-1/2} \tilde{U}_{n_1,n} \left(\tilde{\Lambda}_n \right)^{1/2}, \quad (3.13)$$

$$S_{n,jk}^b = \sum_{n_2} U_{jk,n_2}^e (\Lambda_{n_2}^e)^{-1/2} \tilde{V}_{n_2,n} \left(\tilde{\Lambda}_n \right)^{1/2}, \quad (3.14)$$

为定义在重构而成的三角-蜂窝晶格的两个张量。

接下来，我们就可以遵循TRG的步骤，将三角-蜂窝晶格张量网络中的小三角形的3个张量 S^a 或者 S^b 收缩生成在缩小了的蜂窝晶格中的新的局域张量 T^a 或者 T^b 。这样就完成了SRG 中一次完整的迭代。重复这个过程，我们就能够最终得到热力学极限下配分函数的值。

3.2.2 计算环境张量

在DMRG的计算中，通过切开一个键，超块能够分割成一个系统块和一个环境块。于是环境可以容易的分离和积掉。然而在TRG中，如何精确处理张量网络态的环境并非显而易见。在蜂窝晶格中，从环境中分割出系统需要切开4个键。系统只包含2个格点，环境包含其余的所有格点（如图3.5）。在这里，如果采用TRG计算环境的贡献甚至比计算配分函数本身更复杂。

SRG最关键的一步就是计算环境张量 M^e 。在这方面，我们考虑了两类方法。第一种是采用平均场近似计算环境的贡献[101]。这是一种实现简单但是精度较低的方法。该方法基于对 M 的奇异值 Λ 的一个直观的解释。第二种方法是直接从环境晶格计算 M^e ，精度更高。

我们首先讨论平均场方法[101]。如前所述，3.2式给出的 M 的奇异值 Λ 刻画了对应的正交归一基矢 U 和 V 之间的纠缠。这同样可以认为是刻画了通过共同的键相连的两个基矢矩阵 U 和 V 的相互作用。如果我们假设系统和环境之间相连的四个悬挂键 (i, j, k, l) 的每个键的纠缠都可以用该奇异值刻画，那么环境矩阵 M^e （最多相差一个无关紧要的系数）可以近似的由下式给出

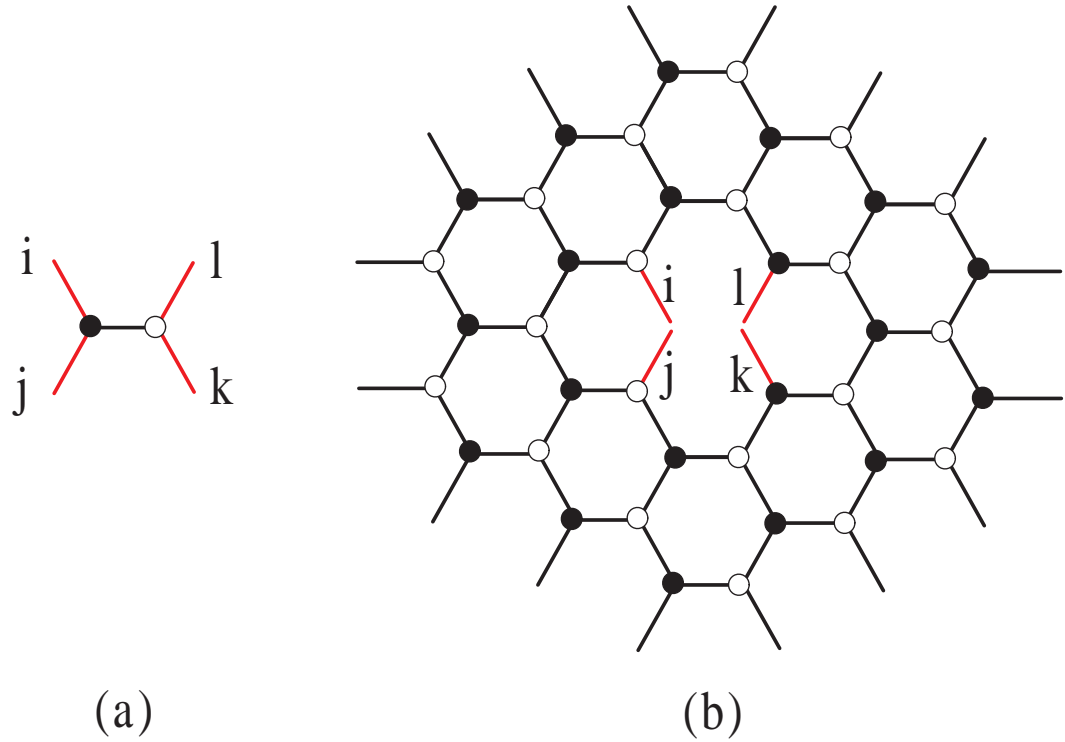


图 3.5: (a): 系统包含的两个格点张量; (b): 系统 (a) 对应的环境格点张量网络。

$$M_{li,jk}^e \approx \sqrt{\Lambda_l \Lambda_i \Lambda_j \Lambda_k}. \quad (3.15)$$

我们这里采用 $\Lambda^{1/2}$ 而没有用 Λ 的其它幂次作为环境的权重因子, 原因是可以认为一半的 Λ 与系统相关联, 另一半的 Λ 与环境关联。这是一种简单而粗糙的近似, 但是, 后面会讨论到, 这确实揭示了考虑环境的重正化效应对优化 TRG 方法的重要性。

为了应用上述近似, 需要首先计算 M 的奇异值 Λ , 然后将 Λ 代入 3.15 式算出环境矩阵 M^e 。通过 3.7 式分解 M^e , 然后从 3.8 式和 3.10 式可以得到新的奇异值矢量 $\tilde{\Lambda}$ 。这个 $\tilde{\Lambda}$ 包含了环境的部分贡献。为了更精确的处理环境的贡献, 我们可以用 $\tilde{\Lambda}$ 替换 3.15 式里的 Λ , 然后多次重复上述计算过程。图 3.6 示意的给出了如何采用平均场近似计算环境的重正化过程。

在上述重正化过程中, 配分函数的截断误差能够在迭代中减小。当截断误

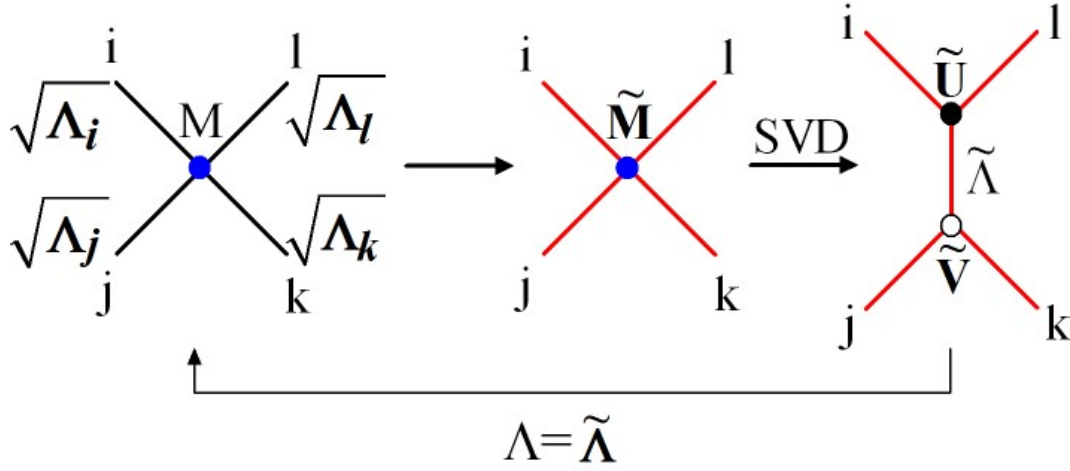


图 3.6: 计算 M 的奇异值 Λ 的重正化迭代过程的示意图。 \tilde{M} 根据 3.8 式得到，其中的 M^e 采用平均场近似 3.15 式给出。

差小于预设值，迭代即终止。在绝大多数计算中，我们发现两到三次的迭代就足够了。然而，在临界点附近，一般需要更多的迭代次数。截断的精度不必设的太高。如果迭代次数过多，某些极小奇异值可能小于机器误差。在这种情况下，更多的迭代则可能会增大而不是降低最终结果的误差。

我们也可以自洽的处理上述平均场近似，也就是说要求 3.15 式里构造 M^e 的键矢量 Λ 和 3.10 式求得的 $\tilde{\Lambda}$ 相同。这个自洽的平均场近似意味着系统具有某种标度不变性，也许在临界点附近是一个比较好的近似。

直接从环境格点张量计算出 M^e 而不采用上述平均场近似是一个更加精确可靠的方法。对于比较小的晶格系统，例如图 3.7 所示的只有 6、10、16、24 个格点的晶格，其对应的环境部分分别包含 4、8、14、22 个格点， M^e 能够通过直接收缩环境张量指标严格的求出。

图 3.8 给出了 4 种有限尺寸环境的二次重正化效应所计算出的三角晶格伊辛模型自由能的相对误差。自由能相对误差定义如下

$$\delta f(T) = 1 - \frac{f(T)}{f_{ex}(T)}, \quad (3.16)$$

其中 $f(T)$ 是数值计算得到的自由能， $f_{ex}(T)$ 是 Wannier 给出的三角晶格伊辛模型自由能的严格解 [98, 99]。顺磁到铁磁相变的临界温度为

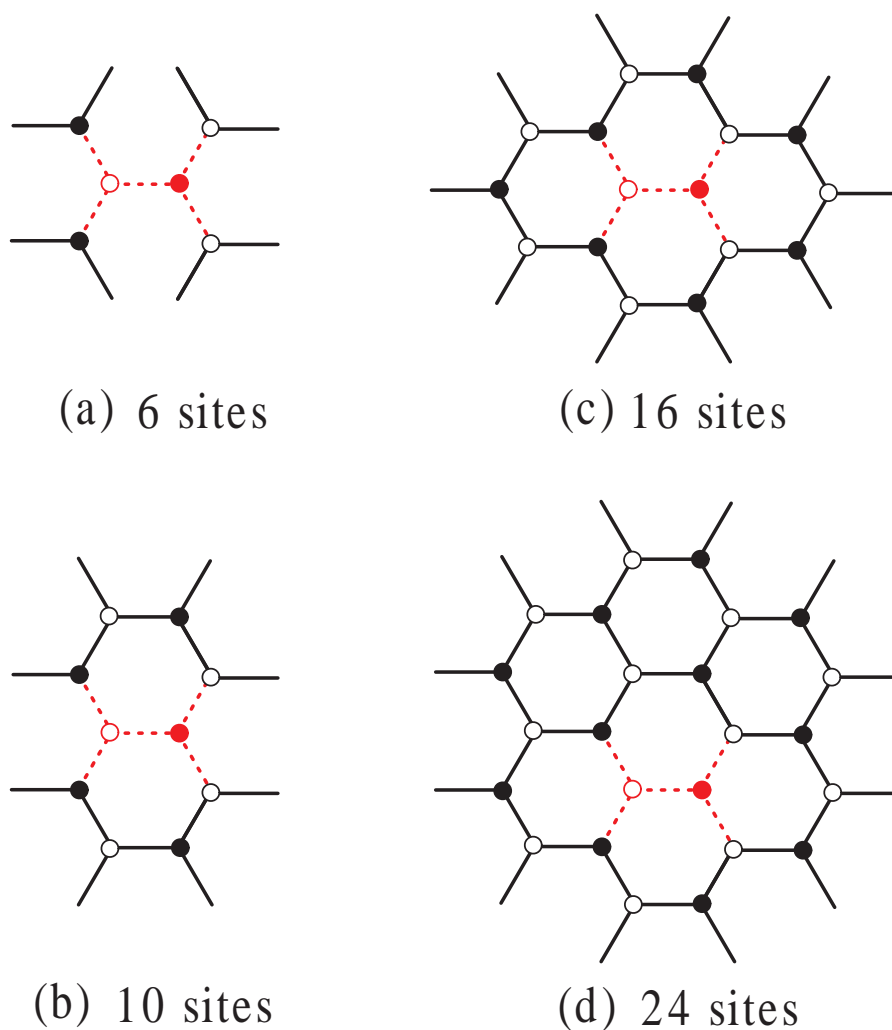


图 3.7: 有限尺寸蜂窝晶格示意图。(a)、(b)、(c)、(d) 分别是6、10、16、24个格点的晶格，对应的环境部分（即两个红色格点以外的格点）分别包含4、8、14、22个格点。

$$T_c = 4/\ln 3. \quad (3.17)$$

正如预期，自由能的相对误差随着环境晶格尺寸的增大而减小。因此，环境矩阵 M^e 对系统 M 的重正化效应能够通过考虑越来越大的环境尺寸而计算的越来越精确。

然而，直接收缩二维的张量网络是一个#P完全问题[66]，这意味着对于稍

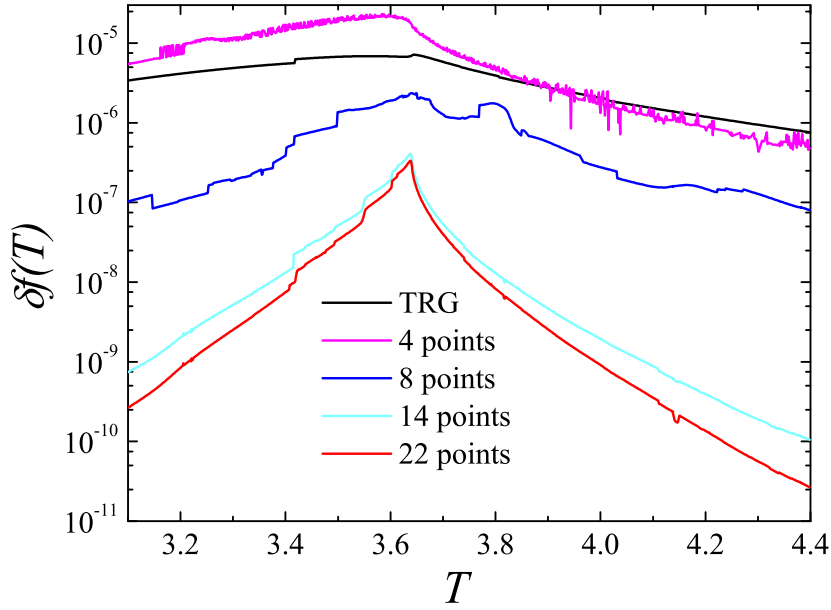


图 3.8: 考虑有限尺寸环境的二次重正化效应所计算出的三角晶格伊辛模型自由能的相对误差。计算采用的有限尺寸环境分别包含4、8、14、22个格点。4种尺寸的环境构形如图3.7所示。TRG的结果也画在图中作为比较。

微大一点的环境晶格，直接收缩环境张量指标严格的求出 M^e 是计算上难以实现的。文献[53, 69]给出了一种精确而高效的计算环境的方法，即采用TRG计算出 M^e 。该方法计算环境的过程分为两个步骤：第一步向前迭代算出和记录环境中的张量；第二步向后迭代收缩向前迭代中记录的张量从而计算出环境矩阵 M^e 。下面详细介绍这两个步骤。

向前迭代

向前迭代的过程与标准的TRG计算过程是类似的。我们采用TRG对环境进行粗粒化。在每一步，首先按照3.1式收缩相邻两点张量的共同指标得到 M 。然后对 M 进行奇异值分解，由3.3式和3.4式分别得到对应的 $S^{a,n}$ 和 $S^{b,n}$ ，这里上标出现的 n 表示第 n 次TRG迭代。

图3.9展示了环境晶格在某一步TRG迭代过程中是如何变化的。给定某一步的环境构形图3.9 (a)，首先通过奇异值分解重构为图3.9 (b) 所示的三角-蜂窝晶格。然后收缩每个小三角形的内部指标，可以得到图3.9 (c) 所示的缩小

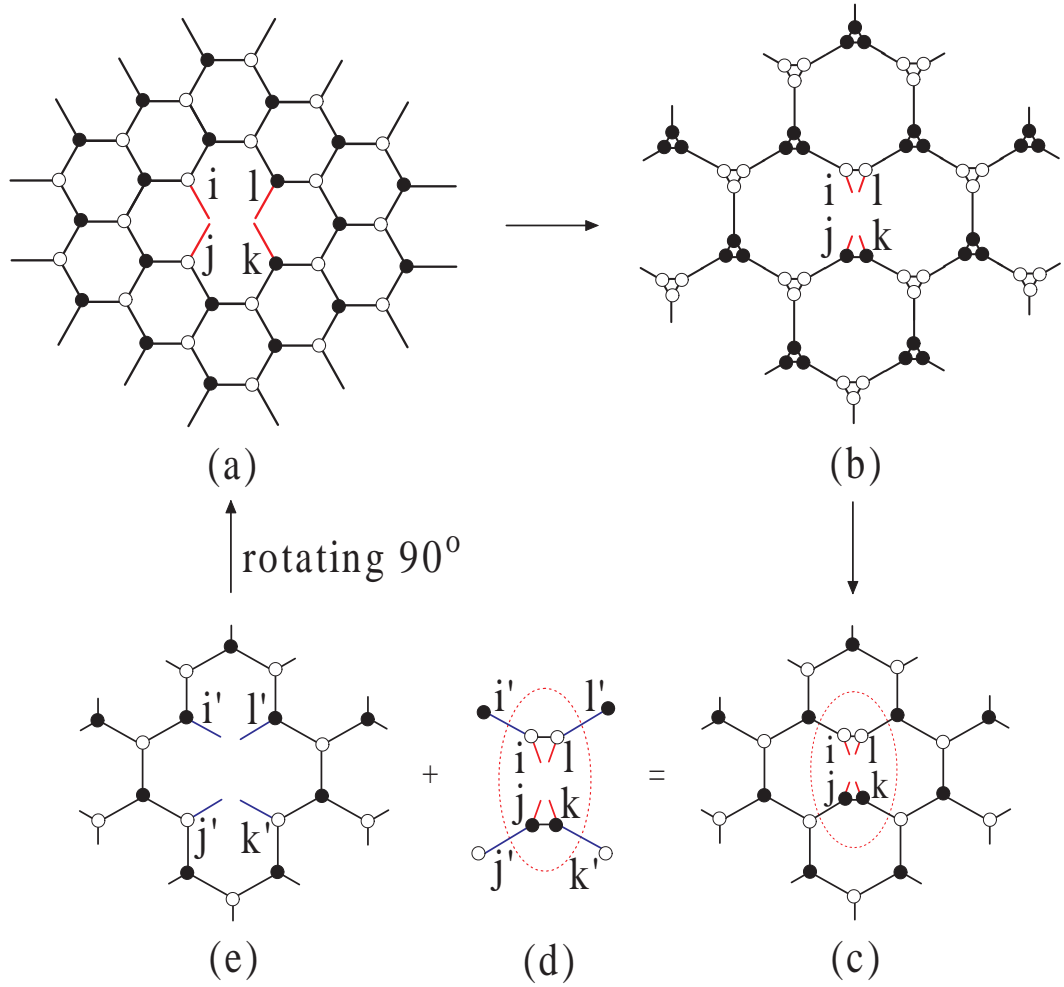


图 3.9: 计算环境格点张量的向前迭代过程的其中一次循环。给定某一步的环境构形 (a)，首先通过奇异值分解重构为 (b) 所示的三角-蜂窝晶格。然后收缩每个小三角形的内部指标，可以得到 (c) 所示的缩小了的环境晶格。如此得到的更新后的环境晶格可以分解为 (d) 和 (e) 所示的两个部分。将 (d) 椭圆虚线内的张量记录下来，以备后面计算环境矩阵 M^e 所用。另一方面，将 (e) 顺时针旋转 90° ，那么该图所示的晶格除了变为 (a) 晶格尺寸的 $\frac{1}{3}$ 以外，与 (a) 所示的这次循环之前的晶格完全相同。

了的环境晶格。如此得到的更新后的环境晶格可以分解为图3.9 (d) 和图3.9 (e) 所示的两个部分。将图3.9 (d) 椭圆虚线内的张量记录下来, 以备后面计算环境矩阵 M^e 所用。另一方面, 将图3.9 (e) 顺时针旋转 90° , 那么该图所示的晶格除了变为图3.9 (a) 晶格尺寸的 $\frac{1}{3}$ 以外, 与图3.9 (a) 所示的这次循环之前的晶格完全相同。

我们用 $M^{(n-1)}$ 表示图3.9 (a) 环境晶格对应的环境矩阵, 那么从图3.9可以直接的得出以下递推关系

$$M_{lijk}^{(n-1)} = \sum_{l'i'j'k'} \sum_{pq} M_{l'i'j'k'}^{(n)} S_{i'pi}^{a,n} S_{j'jp}^{a,n} S_{k'qk}^{b,n} S_{l'lq}^{b,n}, \quad (3.18)$$

其中

$$M^e = M^{(0)} \quad (3.19)$$

为所求的环境矩阵。

上述过程能够重复的进行直到环境晶格足够大, 使得 M^e 能够精确的确定。我们假定第 N 次迭代过程终止的时候, 约化的环境晶格只剩下4个格点, 这时的环境构形可参见图3.7 (a)。然后, $M^{(N)}$ 可以通过下式确定

$$M_{lijk}^{(N)} = \sum_{abcd} T_{abl}^a T_{dic}^b T_{abj}^b T_{dkc}^a. \quad (3.20)$$

这里假定中心对称边条件, $T^\alpha (\alpha = a, b)$ 由下式给出

$$T_{xyz}^\alpha = \sum_{ijk} S_{xji}^{\alpha,N} S_{yjk}^{\alpha,N} S_{zik}^{\alpha,N}. \quad (3.21)$$

向后迭代

在3.18式中, $M^{(n-1)}$ 是根据向前迭代的下一步计算出的环境矩阵 $M^{(n)}$ 而确定。因此, 在上述向前迭代过程中, $M^{(n-1)}$ 并不能直接的确定。然而, 我们可以利用3.18式进行向后迭代, 即从 $M^{(N)}$ 出发直到计算出环境矩阵 $M^e = M^{(0)}$ 。

利用上述向前-向后迭代流程, 我们可以精确计算环境矩阵 M^e 。在实际计算中, 我们发现没有必要采用非常大的 N , 因为环境张量 M^e 随着环境尺寸增大而很快收敛。

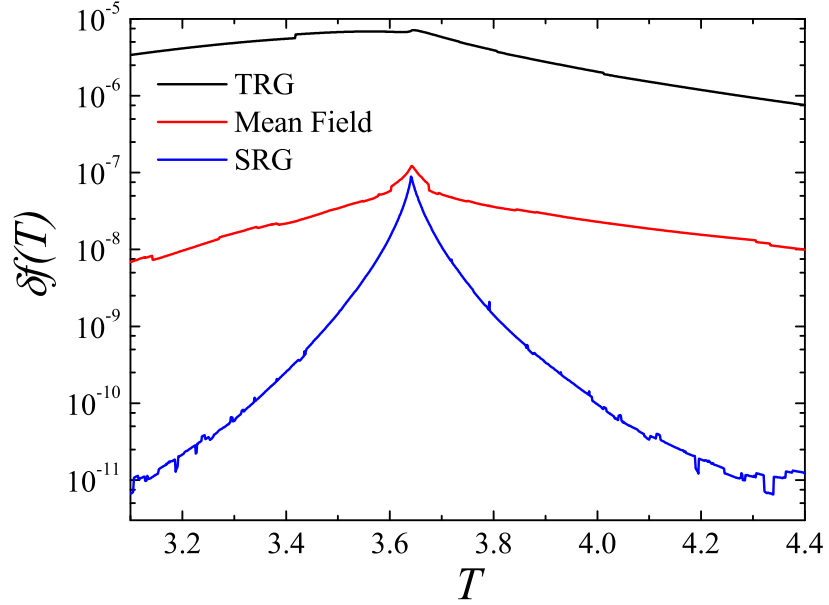


图 3.10: TRG (黑线)、平均场近似SRG (红线) 和SRG (蓝线) 计算的三角晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差。三条曲线计算中张量的截断维数 $D_{cut} = 24$ 。临界温度 $T_c = 4/\ln 3$ 。

图3.10比较了TRG、平均场近似SRG和SRG计算的三角晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差。我们发现平均场近似SRG能够显著的提高精度。这个结果表明我们直观的假设 Λ 作为环境的平均场近似已经大致抓住了系统和环境晶格之间纠缠的主要特征。当我们进一步采用SRG计算时，我们发现精度的提高更加显著。在仅仅保留 $D_{cut} = 24$ 个态的情况下，在远离临界点的区域，我们发现精度相对于TRG提高了超过5个数量级；在临界点，精度提高了超过2个数量级。如果要进一步提高精度，我们可以采用SRG自洽的计算环境，当然这不可避免的会增加时间开销。

我们发现当增大 D_{cut} 时，SRG相对于TRG的改进变得越来越显著。图3.11展示了三角晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差随着 D_{cut} 的变化关系。

3.2.3 其他二维晶格的计算方法

上述SRG方法能够推广应用到其他类型的二维晶格，比如正方晶格或者Kagome晶格。

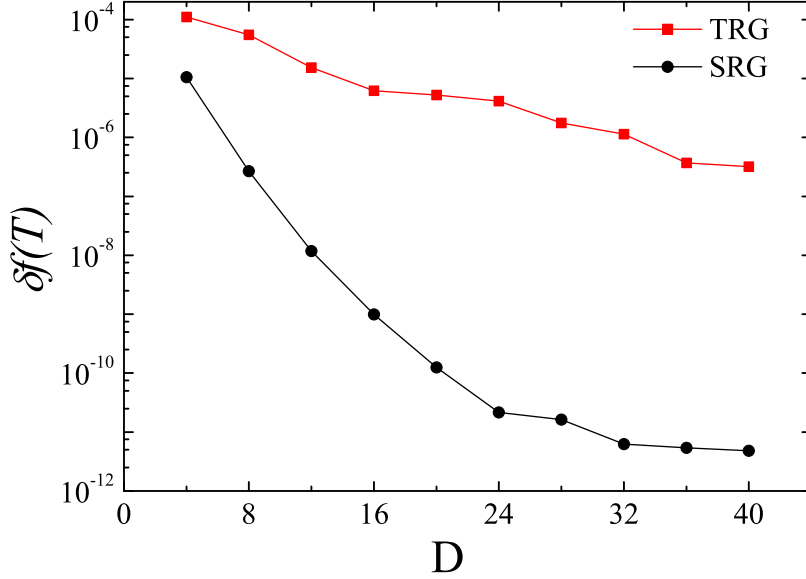


图 3.11: TRG (红线) 和SRG (黑线) 计算得到的三角晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差关于截断维数 D_{cut} 的函数。 $T = 3.2$ 。

我们首先考虑正方晶格的计算。与蜂窝晶格不同，每个格点的张量为4阶，而不是3阶。正方晶格TRG的迭代过程可以按照文献[1]介绍的方法进行。同样的，为了在TRG迭代的每一步计算环境矩阵 M^e ，我们依然可以采用在蜂窝晶格上的SRG的向前-向后迭代策略。具体的做法是，首先将正方晶格张量网络变换到蜂窝晶格张量网络。这一步可以通过将每个格点上的4阶张量沿着同一个对角线方向奇异值分解为两个3阶张量实现。图3.12示意了该步骤的过程。

如此变换之后，环境张量具有与图3.9 (a) 相同的构形。唯一的不同的是，现在图3.12中红虚线的键维数不再与其它两个键维数相等，而是更高。因此，前面介绍的SRG向前-向后迭代策略可以用来计算正方晶格张量网络的环境张量 M^e 。

图3.13比较了采用TRG和SRG计算得到的正方晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差。与三角晶格的结果相似，SRG得到的结果比TRG的精确得多。依然在保留 $D_{cut} = 24$ 个态的情况下，在远离临界点的区域，我们发现精度相对于TRG提高了超过3个数量级；在临界点，精度提高了超过1个数量级。

蜂窝晶格上的SRG过程还可以用于求解定义在Kagome晶格上的张量网络

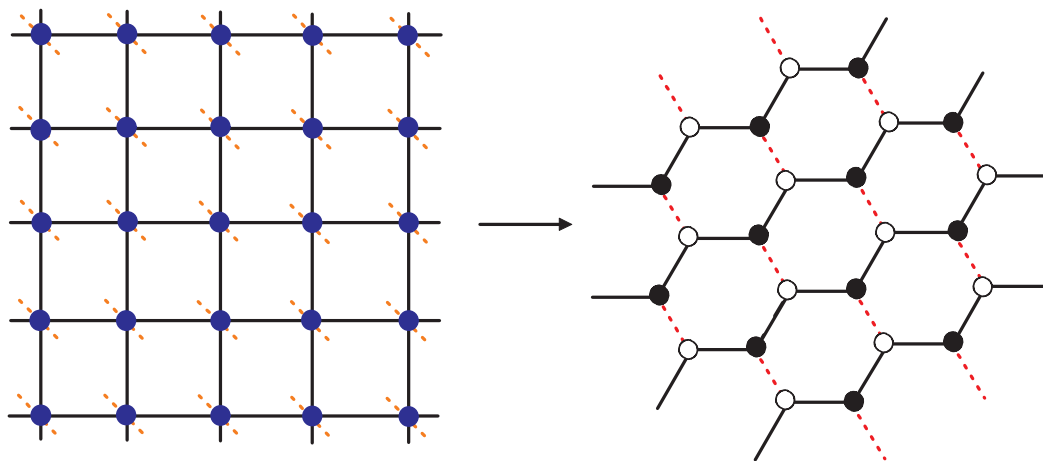


图 3.12: 把每个格点上的4阶张量沿着同一个对角线方向(红虚线方向)奇异值分解为两个3阶张量将正方晶格张量网络变换到蜂窝晶格张量网络。

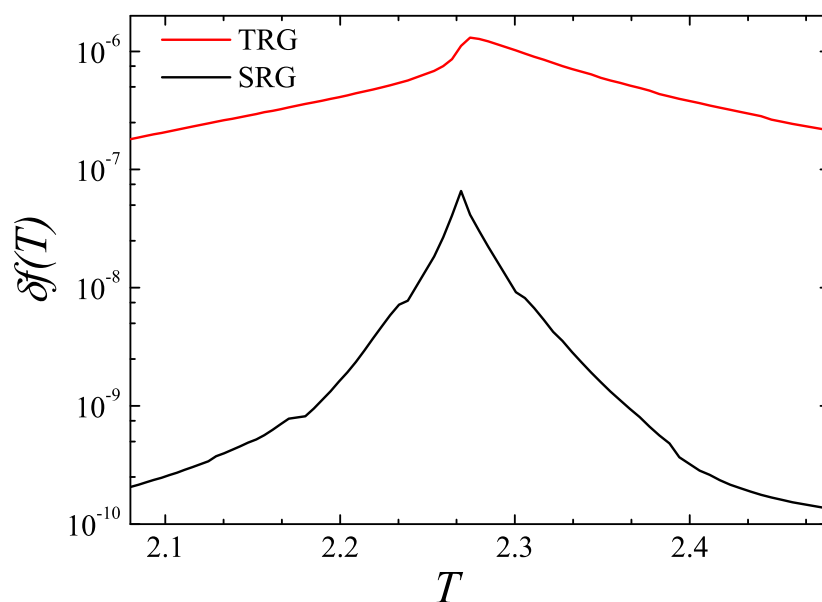


图 3.13: 采用TRG（红线）和SRG（黑线）计算得到的正方晶格伊辛模型自由能与严格解的相对误差对比图。 $D_{cut} = 24$ 。

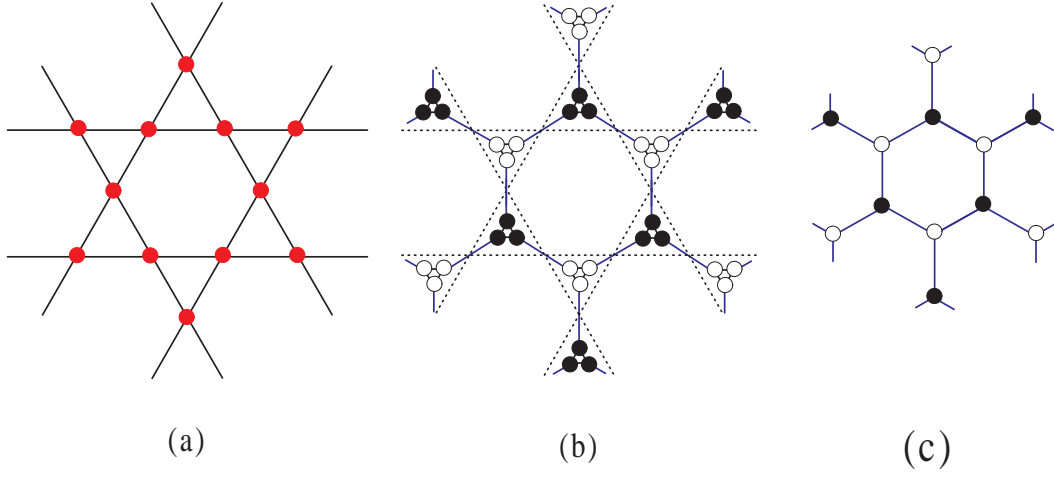


图 3.14: 将Kagome晶格张量网络变换到蜂窝晶格张量网络的两个步骤。首先, 通过奇异值分解将Kagome晶格 (a) 重构成三角-蜂窝晶格 (b); 第二步, 收缩中每个三角形的内部指标, 即得到蜂窝晶格张量网络 (c)。

模型。Kagome晶格张量网络可以通过下述两步变换到蜂窝晶格张量网络: 首先, 对每一个局域张量进行奇异值分解将Kagome晶格 (图3.14 (a)) 重构成三角-蜂窝晶格 (图3.14 (b)); 第二步, 收缩图3.14 (b) 中每个三角形的内部指标, 即得到蜂窝晶格张量网络 (图3.14 (c))。然后, 我们就可以采用上述蜂窝晶格张量网络的算法计算Kagome晶格经典模型的热力学性质。

第四章 量子格点模型基态的计算

如前所述，DMRG生成的基态波函数对应于一个矩阵乘积态。可以证明任意一维体系波函数可以准确的写成矩阵乘积形式。在二维或者更高维量子体系中，矩阵乘积波函数不再能够很好表示体系的基态，因为精确描述基态所需的最小矩阵维数随着格点尺寸增加而指数增长。

张量网络态是一维的矩阵乘积态向二维或者更高维体系的自然推广。张量网络波函数抓住了体系不同部分之间纠缠的主要特征。对于一个量子自旋体系，张量网络波函数可以表示为

$$|\psi\rangle = \text{Tr} \prod_i T_{x_i y_i z_i \dots}^i [m_i] |m_i\rangle, \quad (4.1)$$

其中 $T_{x_i y_i z_i \dots}^i [m_i]$ 是定义在格点 i 上的张量。张量的阶数可以选择等于与该格点自旋 S_i 相互作用的自旋数。如果只存在最近邻相互作用，那么一个比较好的表示是定义 $T^i [m_i]$ 的阶数等于晶格的配位数，也就是说，对于蜂窝晶格为三阶张量，对于正方或者Kagome晶格为四阶张量，对于三角晶格为六阶张量。下标 $(x_i, y_i, z_i \dots)$ 为键指标， m_i 为局域物理基矢指标。Tr代表对所有物理指标和键指标求和。一般地， T^i 是格点依赖的。然而，如果系统具有某种平移对称性，那么可以用有限个 T^i 构造的张量网络态表示整个平移对称的晶格的量子态。

为了确定基态的局域张量 $T^i [m_i]$ ，一个可行的思路是将所有张量元看做变分参数，然后采用变分法通过最小化基态能量

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (4.2)$$

从而确定变分参数[57, 102]。然而，变分方法面临两个难题：第一是计算的复杂度很高，通常能够有效通过变分法处理的变分参数个数大致为 10^2 的量级。这大大限制了可以处理的张量维数，对于正方晶格，其能够处理的张量维数通常小于5。；第二是变分方法求解基态很容易出现数值不稳定的情形，并且随着张量维数的提高而变得越来越不稳定[56]。

4.1 确定量子格点模型的基态的虚时演化方法

4.1.1 虚时演化方法的基本思想

为了确定基态波函数，除了变分以外，另一个方法是虚时演化方法。虚时演化方法类似于求矩阵最大本征值的幂法（power method），广泛用于许多计算基态波函数的问题，而不仅仅局限于张量网络态。下面我们以蜂窝晶格 $S = \frac{1}{2}$ 海森堡模型为例介绍该方法。该模型的哈密顿量定义如下

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} H_{ij}, \quad (4.3)$$

$$H_{ij} = JS_i \cdot S_j, \quad (4.4)$$

其中 $\langle ij \rangle$ 表示对所有最近邻自旋对求和。

蜂窝晶格是一个可二分的晶格，它可以分解为两套子格。图4.1示意的表示了蜂窝晶格可以分成红色和绿色格点分别组成的两套子格。

对于一个任意的波函数，假设其没有与基态正交，可以写成如下基态与激发态波函数（能量本征态）的叠加

$$|\Psi\rangle = A_0 |\Psi_0\rangle + A_1 |\Psi_1\rangle + A_2 |\Psi_2\rangle + A_3 |\Psi_3\rangle + \cdots, \quad (4.5)$$

其中 $|\Psi_0\rangle$ 为基态， $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, |\Psi_3\rangle \cdots$ 为激发态。如果将演化算符 $e^{-\beta H}$ 作用在 $|\Psi\rangle$ 上

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} |\Psi\rangle &= A_0 e^{-\beta E_0} |\Psi_0\rangle + A_1 e^{-\beta E_1} |\Psi_1\rangle \\ &+ A_2 e^{-\beta E_2} |\Psi_2\rangle + A_3 e^{-\beta E_3} |\Psi_3\rangle + \cdots, \end{aligned} \quad (4.6)$$

由于

$$E_0 < E_1 < E_2 < E_3 \cdots, \quad (4.7)$$

所以当 $\beta \rightarrow \infty$ 时

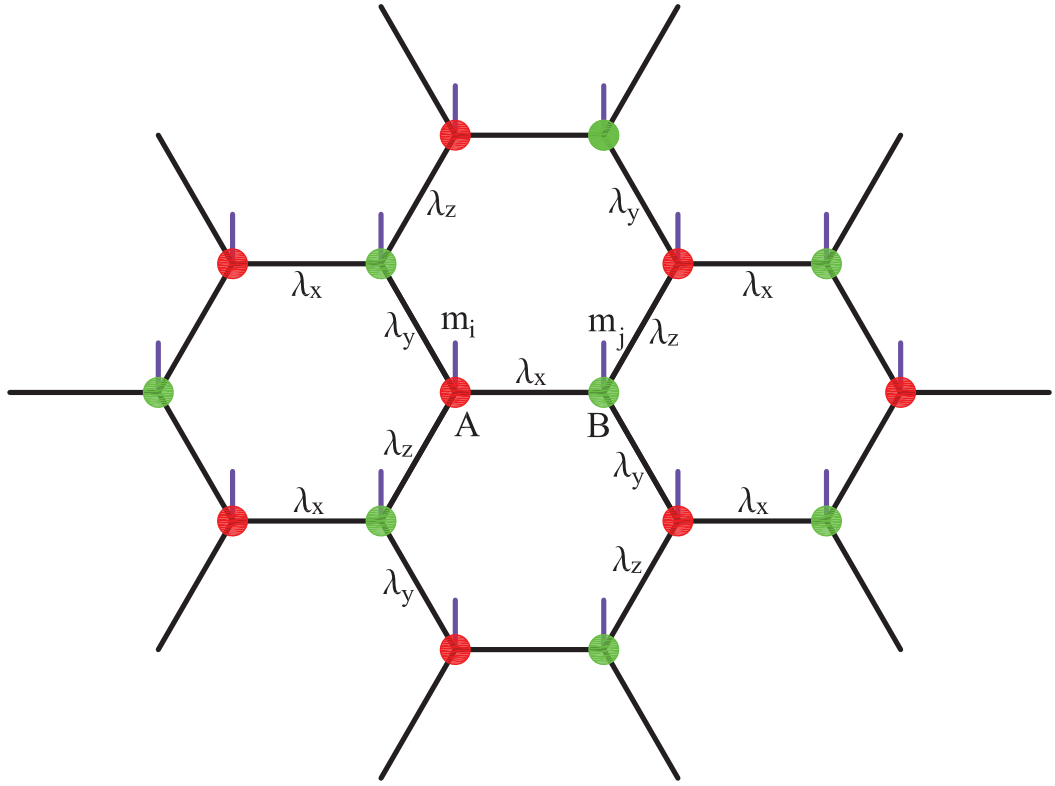


图 4.1: 蜂窝晶格量子格点模型张量网络态示意图。红色和绿色圆圈代表两套子格。分别定义在两套子格上的张量 A 、 B 包含三个键指标（黑线）和一个物理指标（紫线）。每个键之上定义了一个键矢量（或者称之为对角矩阵） λ_α ($\alpha = x, y, z$)。

$$|\Psi_0\rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{e^{-\beta H} |\Psi\rangle}{|e^{-\beta H} |\Psi\rangle|}. \quad (4.8)$$

这样波函数就收敛到该模型的基态。

然而，这样的虚时演化过程在数值计算中通常不能通过一步实现，因为4.4式给出的哈密顿量的每一项并不完全对易。所以实际的计算过程中，我们需要将 β 分成很多片段 τ ，

$$e^{-\beta H} = \prod e^{-\tau H}, \quad (4.9)$$

然后将演化算符 $e^{-\tau H}$ 迭代的多次作用到 $|\Psi\rangle$ 上直至收敛。

下面, 我们讨论如何计算每一步的演化。首先, 我们把哈密顿量分成三部分

$$H = H_x + H_y + H_z, \quad (4.10)$$

其中

$$H_\alpha = \sum_{i \in \alpha} H_{i,i+\alpha} \quad (\alpha = x, y, z). \quad (4.11)$$

这里 H_α ($\alpha = x, y, z$)包含了沿着 α 方向的所有相互作用项。这些项相互之间是对易的。如果 τ 足够小, 可以利用Trotter-Suzuki分解将 $e^{-\tau H}$ 近似分解为如下三项

$$e^{-\tau H} = e^{-\tau H_z} e^{-\tau H_y} e^{-\tau H_x} + o(\tau^2). \quad (4.12)$$

于是, 演化算符可以写成一系列只和局域两个格点有关的门操作

$$e^{-\tau H_\alpha} = \otimes e^{-\tau H_{i,i+\alpha}} = \otimes G_{i,i+\alpha} \quad (\alpha = x, y, z). \quad (4.13)$$

因此, 虚时演化过程可以通过迭代进行三个方向的门操作 $G_{i,i+\alpha}$ ($\alpha = x, y, z$)实现。

4.1.2 Bethe晶格近似虚时演化方法

文献[51]提出了一种虚时演化方法来计算基态张量网络波函数。由于该算法相当于将晶格近似为相同配位数的Bethe晶格进行截断[103], 所以也称为Bethe晶格近似虚时演化方法。下面我们介绍该方法的过程。

如图4.1所示, 一个平移对称的张量网络波函数可以一般地表示为如下形式

$$|\psi\rangle = \text{Tr} \prod_{i \in r, j \in b} \lambda_{x_i} \lambda_{y_i} \lambda_{z_i} A_{x_i y_i z_i} [m_i] B_{x_j y_j z_j} [m_j] |m_i m_j\rangle \quad (4.14)$$

其中 $A_{x_i y_i z_i} [m_i]$ 和 $B_{x_j y_j z_j} [m_j]$ 是定义在两套子格的张量。 λ_α ($\alpha = x, y, z$)是 D 维的对角正定矩阵, 定义在从一个格点沿着 α 方向放射的键之上。 m_i 为 d 维的局域自旋完备基, 这里取 S^z 表象。 Tr 代表对所有物理指标和键指标求和。

在4.14式中，我们在张量网络波函数中显式的引入了键矢量（或者称之为对角矩阵） λ 。这些 λ 近似的刻画了相邻两个格点之间的纠缠。由于每个键连接了两个张量，所以可以把每个 λ 分成两个 $\lambda^{1/2}$ 的乘积，然后将每个 $\lambda^{1/2}$ 吸收到其中一个张量中。换言之，可以认为 $\lambda^{1/2}$ 是两个张量之间纠缠的平均场近似刻画。在虚时演化计算张量网络波函数基态时，环境张量的重正化效应是应该考虑的。这个思想与SRG类似，采用的方法是用 λ 来近似引入环境的纠缠。后文将讨论，这样的近似处理是十分有效的。这就提供了一种速度很快而且精度很高的确定张量网络波函数基态的方法。第一步，我们用 $e^{-\tau H_x}$ 进行演化，整个过程如图4.2所示。由于 H_x 只包含横向键连接的两个相邻自旋之间的相互作用，所以 H_x 中包含的相互作用项彼此对易，那么虚时演化得到新的波函数

$$\begin{aligned} & e^{-\tau H_x} |\Psi\rangle \\ &= \text{Tr} \prod_{i \in a, j=i+\hat{x}} \sum_{m_i m_j} \langle m'_i m'_j | e^{-\tau H_{ij}} | m_i m_j \rangle \\ & \quad \lambda_{x_i} \lambda_{y_i} \lambda_{z_i} A_{x_i y_i z_i} [m_i] B_{x_j y_j z_j} [m_j] | m'_i m'_j \rangle, \end{aligned} \quad (4.15)$$

这里，横向键连接的两个相邻张量被一个局域演化算符 $e^{-\tau H_{ij}}$ （门操作 G_{ij} ）作用，使得两个张量结合在一起。为了使演化过程能够持续的进行下去，我们需要把这两个合并的张量重新分离开，恢复到原来晶格形式的张量网络态。

为了达到这个目的，我们定义如下由横向键两端的张量以及与这两个张量直接相连的键矢量构成的 $(D^2 d) \times (D^2 d)$ 矩阵 S （图4.2 (c)）

$$\begin{aligned} & S_{y_i z_i m'_i, y_j z_j m'_j} \\ &= \sum_{m_i m_j} \sum_x \langle m'_i m'_j | e^{-H_{ij} \tau} | m_i m_j \rangle \\ & \quad \lambda_{y_i} \lambda_{z_i} A_{x y_i z_i} [m_i] \lambda_x B_{x y_j z_j} [m_j] \lambda_{y_j} \lambda_{z_j}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

在这个定义中，与环境相连的四个键 y_i , z_i , y_j 和 z_j 通过键矢量 λ 计入权重，而不是 $\lambda^{1/2}$ 。这四个键上多计入的 $\lambda^{1/2}$ 模拟了来自环境的重正化效应。这个思路与平均场SRG类似，也是对环境的一种平均场近似处理。这是该虚时演化方法的关键步骤。如果不这样考虑环境的重正化效应，虚时演化迭代过程甚至不一定收敛。接下来，我们对 S 矩阵进行奇异值分解，将其分解为在格点 i 和 j 的两

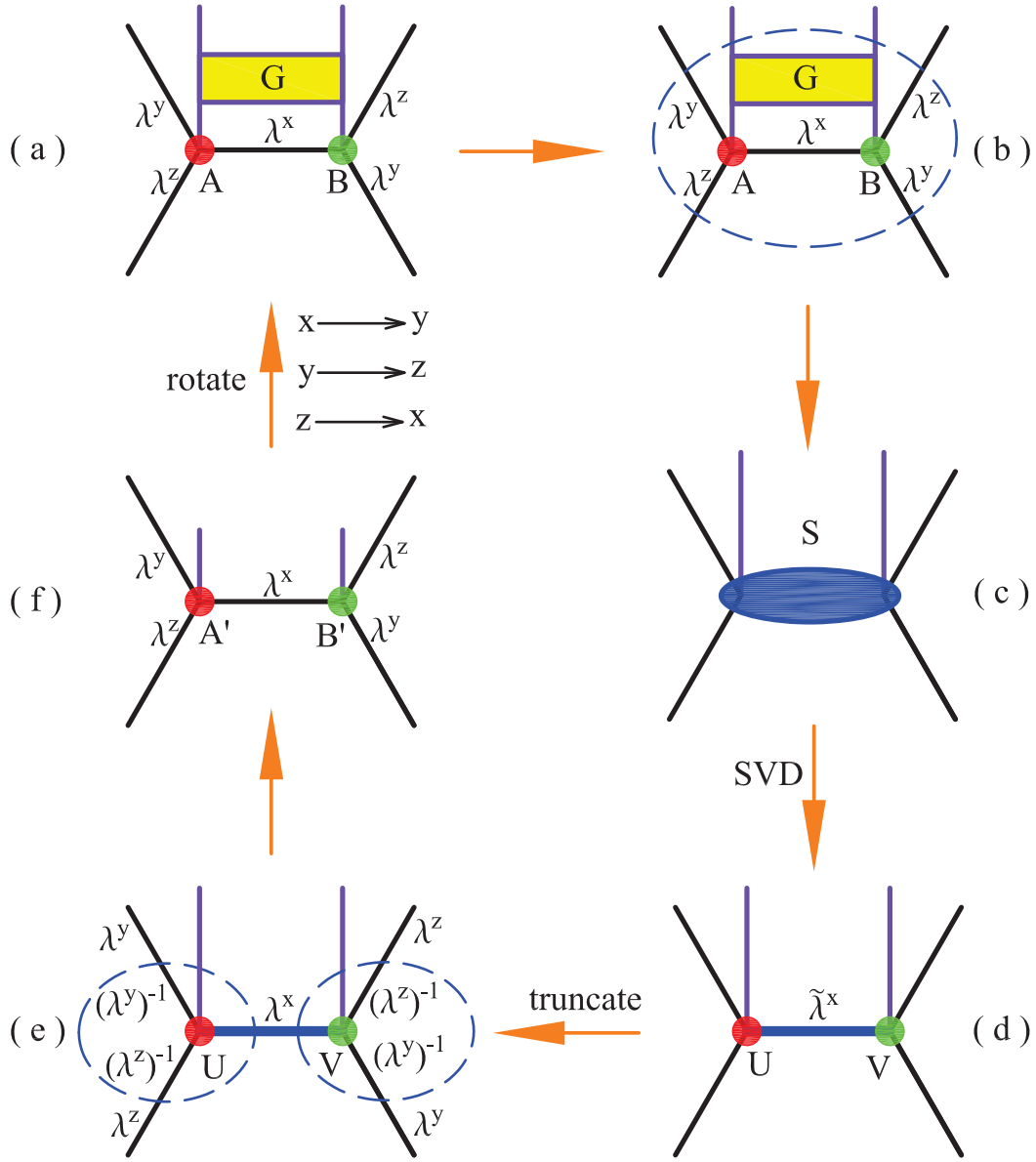


图 4.2: 虚时演化过程的迭代循环示意图。(b) 到 (c) 示意了4.16式; (c) 到 (d) 示意了4.17式; (e) 到 (f) 示意了4.18和4.19式; (f) 到 (a) 表示对晶格顺时针旋转120°, 然后反复进行整个虚时演化过程。

个张量的乘积

$$S_{y_i z_i m_i, y_j z_j m_j} = \sum_x U_{y_i z_i m_i, x} \tilde{\lambda}_x V_{y_j z_j m_j, x} \quad (4.17)$$

其中, U 和 V 是两个幺正矩阵, $\tilde{\lambda}$ 是 $D^2 d$ 维正定对角矩阵。 $\tilde{\lambda}$ 是 S 的奇异值矩阵, 它刻画了 U 和 V 两个张量之间的纠缠。

为了使迭代能够持续进行, 我们必须对维数增加到 $D^2 d$ 的张量指标进行截断, 保留 $\tilde{\lambda}$ 的 D 个最大的奇异值, 然后把截断后的 $\tilde{\lambda}$ 作为新的 λ 进行接下来的虚时演化。于是, 张量 A , B 按下式更新

$$A_{xy_i z_i}[m_i] = \lambda_{y_i}^{-1} \lambda_{z_i}^{-1} U_{y_i z_i m_i, x}, \quad (4.18)$$

$$B_{xy_j z_j}[m_j] = \lambda_{y_j}^{-1} \lambda_{z_j}^{-1} V_{y_j z_j m_j, x}. \quad (4.19)$$

上述过程完成了对所有 x 方向键的一次虚时演化, 针对 y 和 z 方向键的虚时演化过程与之完全类似。通过重复该迭代过程, 最终能够精确确定体系的基态波函数。在实际计算中, 我们发现如果我们对虚时演化算符的各个方向分量采用二阶Trotter-Suzuki分解

$$e^{-\tau H} \approx e^{-\tau \frac{H_x}{2}} e^{-\tau \frac{H_y}{2}} e^{-\tau H_z} e^{-\tau \frac{H_y}{2}} e^{-\tau \frac{H_x}{2}} + o(\tau^3), \quad (4.20)$$

虚时演化过程能够更高效的收敛。

在4.16式中, 我们通过平均场近似计入环境的重正化效应。如此近似处理并没有最小化在虚时演化的每一步的截断误差。然而, 这样看上去比较粗糙的方法并不影响波函数收敛的速度, 因为Trotter-Suzuki分解和截断的误差在迭代过程中并不累积。

上述虚时演化方法类似于一维的iTEBD算法[38]。然而, 一维的MPS和二维的张量网络态有本质的不同。一维的MPS可以变换到正则形式, 也就是说每个定义在键上的矢量恰好是对一维系统在此处进行Schmidt分解的奇异值谱。对于正则形式的MPS, 如果截断某个键, 那么这个键左边和右边的MPS波函数保持精确正交归一, 因而这个截断是最优的。所以, 原则上一维的虚时演化过程可以将MPS 变换到其正则形式再做截断。然而, 在二维情况下, 上述正交归一形式没有良好的定义, 因为无法通过断开一个键将张量网络态分成不相连连接的两部分, 因而一个键矢量也就不再是某个Schmidt分解的奇异值谱。所以,

在张量网络态上的虚时演化方法是用键矢量近似的刻画环境和系统的有效纠缠，而并不满足类似一维的正则形式。

为了检验该虚时演化方法的效果，我们这里给出虚时演化计算一维量子系统基态的结果。在一维情况下，我们可以通过正则变换将矩阵乘积波函数变换到它的正则形式。对于一个正则形式的矩阵乘积态，从任意一个键分开的左右部分波函数是严格正交归一的，而且该键对应的键矢量 λ 的平方 λ^2 正好是从此处分开的半条链的约化密度矩阵的本征值。文献[35]详细研究了正则形式矩阵乘积态的性质。如果在每次虚时演化过程中采用正则变换，那么截断误差能够最小化，因此这样得到的波函数在限定的矩阵维数下是最精确的。

这里，我们对矩阵乘积态进行虚时演化计算了一维 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型的基态。在图4.3的上半部分，我们比较了从同一个随机产生的波函数利用两种方法得到的基态能量 E_{can} 和 E_{MF} 的收敛速度。得到 E_{can} 的虚时演化过程采用了正则变换，得到 E_{MF} 的虚时演化过程只是用iTEBD，没有用正则变换。这里矩阵乘积态键指标维数 $D = 10$ 。从图上可以看出， E_{can} 和 E_{MF} 皆迅速的收敛到基态，并不能从图4.3的上半部分区分出 E_{can} 和 E_{MF} 的差别。在图4.3的下半部分，我们给出了能量差 $E_{MF} - E_{can}$ 随着虚时演化次数的变化曲线。在虚时演化开始的若干次迭代中， E_{MF} 比 E_{can} 能量稍微高一点，这意味着采用正则变换的虚时演化过程确实精度更高。然而，我们发现随着迭代次数的增加，两者的差别越来越小，最终接近于0，这表明采用平均场近似的虚时演化方法最终也能收敛得到真实的基态波函数。而采用平均场方法的虚时演化过程没有在进行正则变换，所以在很多情形下由于时间代价更小，所以比引入正则变换更为高效。一个例外的情形是如果虚时演化算符不是么正，也不是近似么正算符时，正则变换就变得尤为重要。

如果一个量子体系的基态有简并时，采用虚时演化方法得到基态波函数可能会出现不稳定的情况。可能的原因是当虚时演化过程到达接近于基态时，张量网络波函数会在几个简并态之间跳跃，导致判断收敛变得困难。面对如此情况，通常需要在哈密顿量里添加外场进行虚时演化得到极化的初态，然后撤出外场继续演化。这样处理将简并破除，以求得到稳定收敛的波函数。假如对于基态处于何种简并态并不是很清楚，就需要在哈密顿量里尝试添加各种形式的外场得到不同的极化初态。最终取基态能量最低的波函数作为真实的基态。

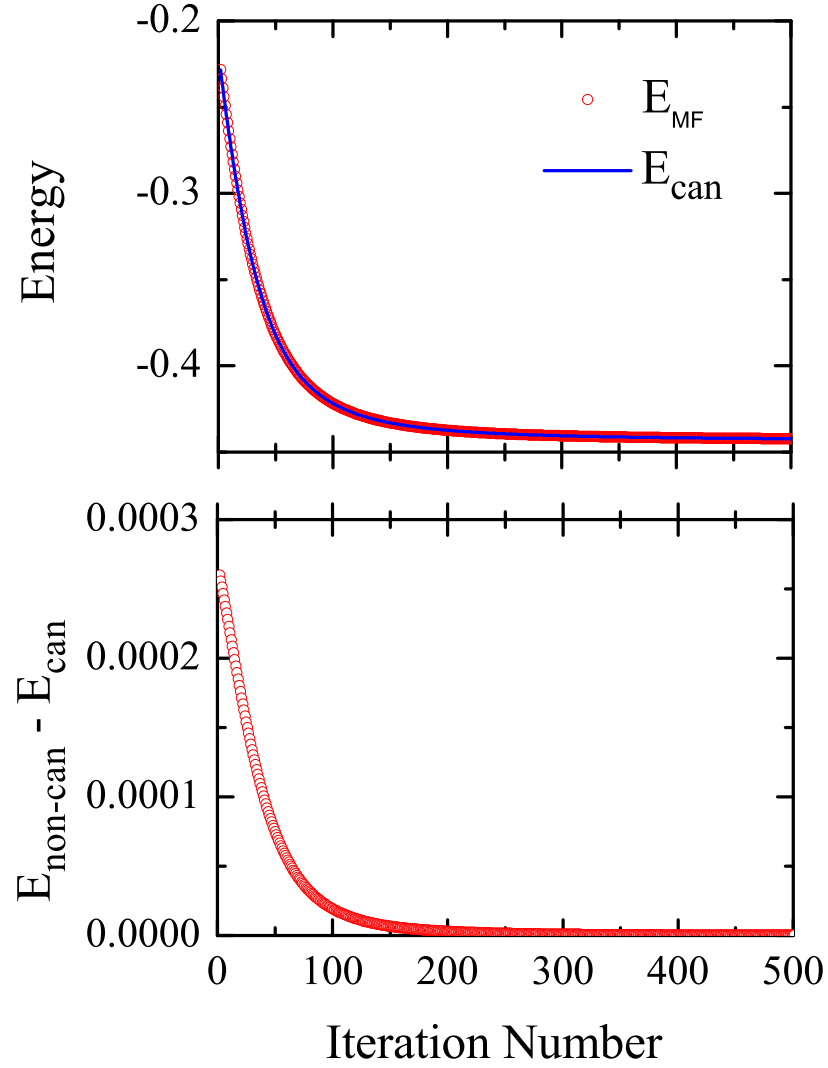


图 4.3: 上半部分: 一维 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态能量随着虚时演化次数的变化曲线。 E_{can} 和 E_{MF} 分别表示对矩阵乘积波函数的虚时演化过程中采用和没有采用正则变换得到的结果。下半部分: 两种虚时演化方法得到的能量差 $E_{MF} - E_{can}$ 随着虚时演化次数的变化曲线。矩阵乘积态键指标维数 $D = 10$ 。

4.1.3 集团更新虚时演化方法

对于张量网络态，现在还不知道能否将其变换到对应的正则形式，使得与局域演化算符无直接作用的格点（或者称为环境格点）的张量网络态正交归一。所以，原则上不可以在局域算符的虚时演化过程中不显式的计算环境格点的贡献。Bethe晶格近似虚时演化方法通过引入键矢量 λ 粗略的计入环境的影响。虽然并没有严格证明该方法能近似最优的得到基态张量网络态，但是经验证据表明在对不少模型的计算能得到很好的结果。然而，由于在Bethe晶格近似中并没有计入环境中长程关联，计算更倾向于得到短程关联的态。所以，在具有长程关联，比如在连续相变点附近的系统中，Bethe晶格近似很难抓住系统的物理性质。

文献[43, 44]介绍了一种虚时演化的方法，后来的文献将之称为整体更新（full update）。这种方法的基本思路是通过求解线性方程组，使得截断前后的态相差最小。这种方法在原理上讲是最精确的，但是计算中需要类似于计算期望值的过程，即收缩整个张量网络，所以计算的复杂度很高。而且更为严重的是，当增加张量的维数后，计算会变得不稳定。

在文献[104]的启发下，我们也考虑了采取介于Bethe晶格近似和整体更新之间的折中方案，即集团更新（cluster update）。我们的目的是既能够比Bethe晶格近似更精确的抓住长程关联的性质，又能够将计算代价控制在可以接受的范围，还能够避免虚时演化过程中的不稳定性。我们考虑比Bethe晶格近似稍微大一些的集团作为环境，以优化截断过程，实现的技术细节与文献[104]的过程不同。

这里我们以正方晶格为例，说明 2×2 的集团更新算法。更大集团的计算方法是类似的。我们首先定义虚时演化算符 $e^{-\tau H_{12}}$ 张量

$$P_{m_1 m_2, n_1 n_2} = \langle m_1 m_2 | e^{-\tau H_{12}} | n_1 n_2 \rangle. \quad (4.21)$$

重排指标

$$P_{m_1 m_2, n_1 n_2} \rightarrow P_{m_1 n_1, m_2 n_2}. \quad (4.22)$$

然后对 P 进行奇异值分解

$$P_{m_1 n_1, m_2 n_2} = \sum_l U_{m_1 n_1, l} S_l V_{m_2 n_2, l}. \quad (4.23)$$

定义两个格点的演化算符

$$P_{m_1 n_1, l}^a = U_{m_1 n_1, l} \sqrt{S_l} \quad (4.24)$$

$$P_{m_2 n_2, l}^b = V_{m_2 n_2, l} \sqrt{S_l}. \quad (4.25)$$

接下来将这两个演化算符作用到 A^1 和 A^2 上

$$T_{(x_1 l) y z_1 w_1}^1 [m_1] = \sum_{n_1} A_{x_1 y z_1 w_1}^1 [n_1] P_{m_1 n_1, l}^a \quad (4.26)$$

$$T_{(x_2 l) y_2 z_2 w}^2 [m_2] = \sum_{n_2} A_{x_2 y_2 z_2 w}^2 [n_2] P_{m_2 n_2, l}^b. \quad (4.27)$$

其中 T^1 和 T^2 的指标做如下简化

$$T_{(x_1 l) y z_1 w_1}^1 [m_1] \rightarrow T_{x_1 y z_1 w_1}^1 [m_1] \quad (4.28)$$

$$T_{(x_2 l) y_2 z_2 w}^2 [m_2] \rightarrow T_{x_2 y_2 z_2 w}^2 [m_2]. \quad (4.29)$$

上面过程的结果如图4.4 (a) 所示, 我们用 $e^{-\tau H_{12}}$ 作用在 A^1 和 A^2 两个格点张量的物理指标上, 得到键 x_1 和 x_2 的维数增加的张量 T^1 和 T^2 。

以下计算的目标是求得投影矩阵 P^R 和 P^L (图4.4 (b)), 对键 x_1 和 x_2 进行截断

$$A_{x y z_1 w_1}^1 [m_1] = \sum_{x_1} T_{x_1 y z_1 w_1}^1 [m_1] P_{x_1 x}^R \quad (4.30)$$

$$A_{x y_2 z_2 w}^2 [m_2] = \sum_{x_2} T_{x_2 y_2 z_2 w}^2 [m_2] P_{x_2 x}^L. \quad (4.31)$$

我们考虑从无限大的张量网络态中截取4个格点的开边界张量网络, 这4个点以外的环境用那些开放的键上对应的键矢量 $\lambda^{1/2}$ 近似刻画。这里 λ 依然通

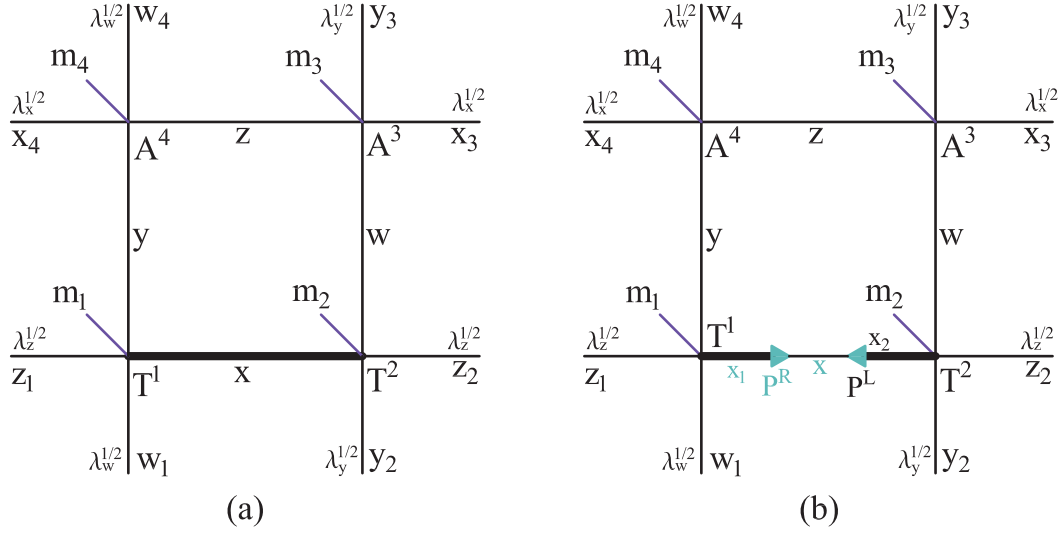


图 4.4: 正方晶格张量网络态的 2×2 的集团。图 (a) 为截断之前, 图 (b) 为截断之后。图 (b) 中 P^R 和 P^L 分别与 T^1 和 T^2 缩并得到截断后的张量 A^1 和 A^2 。

过Bethe晶格近似的方式得到。截断的标准是找到截断之后与这个 2×2 张量网络最接近的态, 其中该张量网络包含定义在边界键上的 $\lambda^{1/2}$ 。

我们定义截断之前的波函数为 $|\Psi\rangle$, 截断之后的波函数为 $|\tilde{\Psi}\rangle$, 其中 $|\Psi\rangle$ 满足归一化条件

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1, \quad (4.32)$$

而 $|\tilde{\Psi}\rangle$ 不一定满足。截断的标准是使

$$f(P^R, P^L) = \left\| |\Psi\rangle - |\tilde{\Psi}\rangle \right\| \quad (4.33)$$

最小。将上式右边展开, 得到

$$\begin{aligned} \left\| |\Psi\rangle - |\tilde{\Psi}\rangle \right\|^2 &= \langle\Psi|\Psi\rangle + \langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle - 2\langle\Psi|\tilde{\Psi}\rangle \\ &= 1 + \langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle - 2\langle\Psi|\tilde{\Psi}\rangle. \end{aligned} \quad (4.34)$$

这里假定波函数都是实数。图4.5的 (a) 和 (b) 分别表示 $\langle\Psi|\tilde{\Psi}\rangle$ 和 $\langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle$ 的张量网络。

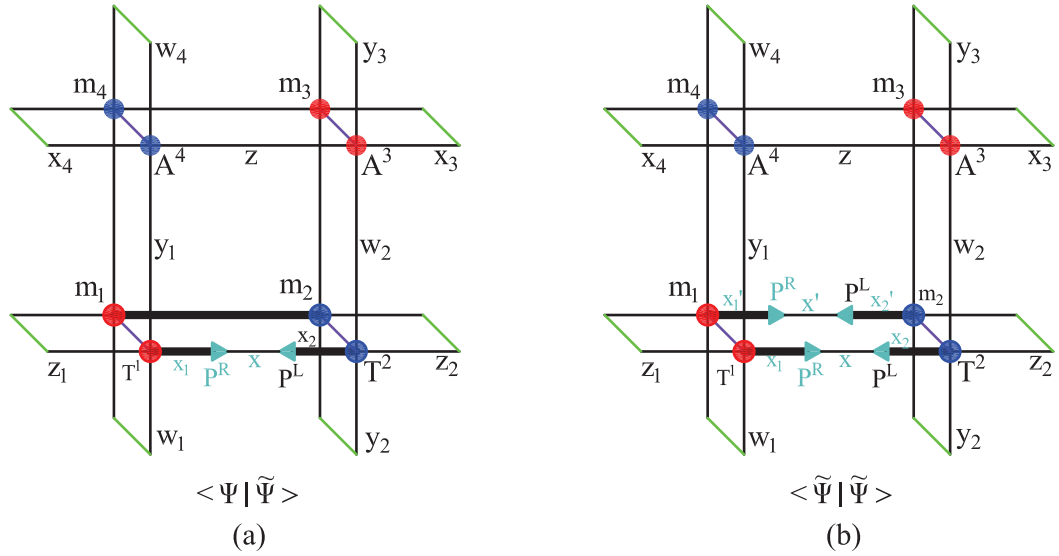


图 4.5: 图 (a) 和 (b) 分别为4.34式中 $\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle$ 和 $\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle$ 的张量网络表示。

我们定义图4.5 (b) 中除了所有的 P^R 和 P^L 之外的张量网络缩并得到的张量为 M^e ，那么

$$\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle = \sum_{xx_1x_2x'_1} M^e_{x_1x'_1x_2x'_1} P^R_{x_1x} P^L_{x_2x} \quad (4.35)$$

$$\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = \sum_{xx'x_1x_2x'_1x'_2} M^e_{x_1x'_1x_2x'_2} P^R_{x_1x} P^L_{x_2x} P^R_{x'_1x'} P^L_{x'_2x'}. \quad (4.36)$$

我们首先固定 P^L ，求出最小化 $f(P^R, P^L)$ 的 P^R ，然后固定 P^R ，求出最小化 $f(P^R, P^L)$ 的 P^L 。重复上述两个步骤，直至收敛。下面我们以求解 P^R 为例，介绍算法的具体过程。如前所述，固定 P^L ，从而定义

$$\mathcal{N}_{x_1x} = \sum_{x_2x'_1} M^e_{x_1x'_1x_2x'_1} P^L_{x_2x} \quad (4.37)$$

$$\mathcal{M}_{x_1x,x'_1x'} = \sum_{x_2x'_2} M^e_{x_1x'_1x_2x'_2} P^L_{x_2x} P^L_{x'_2x'}. \quad (4.38)$$

那么

$$\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle = \mathcal{N} \cdot P^R \quad (4.39)$$

$$\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = (P^R)^\dagger \cdot \mathcal{M} \cdot P^R. \quad (4.40)$$

所以

$$f(P^R, P^L) = 1 + (P^R)^\dagger \cdot \mathcal{M} \cdot P^R - 2\mathcal{N} \cdot P^R. \quad (4.41)$$

对 P^R 变分, 得到

$$\frac{\delta f(P^R, P^L)}{\delta P^R} = 2\mathcal{M} \cdot P^R - 2\mathcal{N}. \quad (4.42)$$

由于

$$\frac{\delta^2 f(P^R, P^L)}{(\delta P^R)^2} = \mathcal{M} > 0, \quad (4.43)$$

所以 $f(P^R, P^L)$ 为向下凸的函数, 满足

$$P^R = \mathcal{M}^{-1} \cdot \mathcal{N} \quad (4.44)$$

的 P^R 为 $f(P^R, P^L)$ 的最小值点。如此交替迭代优化 P^R 和 P^L , 直至收敛。

这里详细介绍了 2×2 集团更新的过程。更大集团的虚时演化方法是类似的, 不同集团尺寸算法的不同之处仅仅是收缩求 M^e 要针对不同的张量网络构形。

4.1.4 张量网络态中对称性的运用

在实际的计算中, 可以利用哈密顿量的对称性将 4.14 式中的张量 A 和 B 表示成块对角的形式。这样能够大大提高计算的效率, 从而能够处理更大的键指标维数。这里以自旋的 z 分量 S_z 守恒为例, 介绍如何在张量网络态中加入该对称性。我们引入定义在每个键之上的自旋量子数与张量键指标之间的映射关系。例如对于张量 $A_{x_i y_i z_i}[m_i]$, 将键指标映射到一组整数 (即键指标的自旋量子数)

$$\begin{aligned}
x_i &\leftrightarrow S[x_i] \\
y_i &\leftrightarrow S[y_i] \\
z_i &\leftrightarrow S[z_i]
\end{aligned} \tag{4.45}$$

于是，可以令A子格的张量满足以下方程的指标对应的张量元非零

$$S[x_i] + S[y_i] + S[z_i] = m_i, \tag{4.46}$$

其余张量元全为零。同样的令B子格的张量 $B_{x_j y_j z_j}[m_j]$ 满足以下方程的指标对应的张量元非零

$$-S[x_j] - S[y_j] - S[z_j] = m_j, \tag{4.47}$$

其余张量元全为零。只要键指标到键指标的自旋量子数映射关系具有任意性，只要保证在该映射关系之下，张量元不是全为零并且张量为分块对角形式即可。

上述自旋守恒规则可以形象的表示为如图4.6所示的箭头规则。在每个键上放一个箭头表示虚拟键自旋的符号。朝向格点方向和背离格点方向的箭头分别代表正号（4.46式左边）和负号（4.47式左边）。守恒关系方程定义在每一个格点上，也就是说与每个格点相连的键指标对应的虚拟自旋量子数计入箭头方向规定的符号求和等于格点的物理自旋量子数。箭头规则可以推广到任意类型的晶格，不限于二分晶格。

在每一次对一对张量进行虚时演化的过程中，比如对两个x方向键相连的两个张量 $A_{x_i y_i z_i}[m_i]$ 和 $B_{x_j y_j z_j}[m_j]$ ($x_j = x_i$)，为使总的 S_z 守恒，需满足

$$S[y_i] + S[z_i] - m_i = S[y_j] + S[z_j] + m_j. \tag{4.48}$$

由于哈密顿量任何一项

$$H_{ij} \sim \langle m'_i m'_j | H_{ij} | m_i m_j \rangle, \tag{4.49}$$

其矩阵元满足

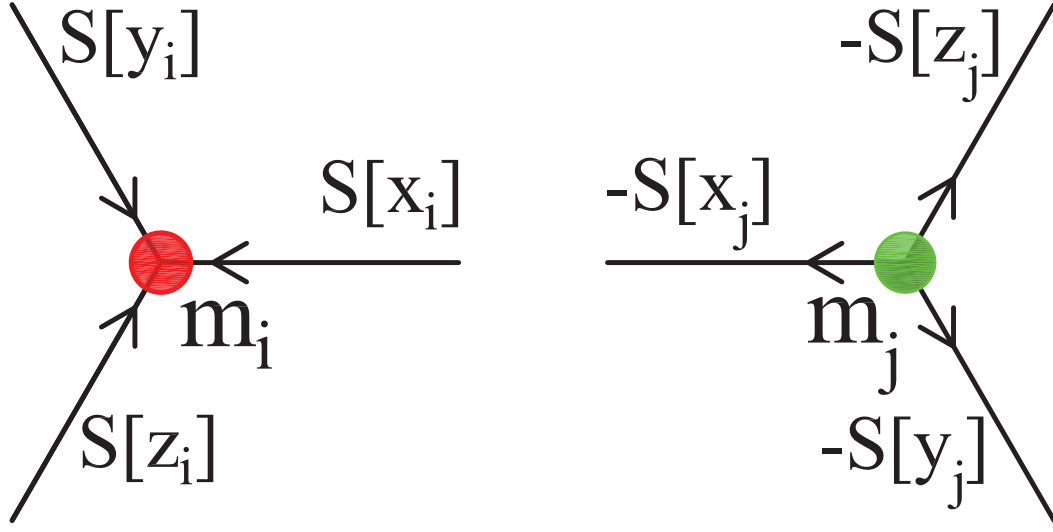


图 4.6: 4.46式和4.47式定义的自旋守恒关系的图形表示。朝向格点方向和背离格点方向的箭头分别代表正号和负号。

$$m'_i + m'_j = m_i + m_j, \quad (4.50)$$

所以在虚时演化过程中，4.48式能够始终满足。

从4.46式和4.47式可以很容易证明对所有格点的 S_z 求和为零：

$$\sum_i m_i = 0. \quad (4.51)$$

因此满足上述守恒条件的张量网络波函数总的 $S_z = 0$ 。当然我们也可以通过修改4.46式和4.47式构造一个张量网络波函数使之具有非零的总 S_z ，不过此时波函数的平移对称性会被破坏。

我们可以直接将上述虚时演化方法推广到其他具有短程相互作用的二维或者更高维晶格的量子格点模型。在每一次虚时演化中，需要对 $D^{z-1}d \times D^{z-1}d$ 的矩阵进行奇异值分解，这里 z 是晶格的配位数，跟准确的讲是与某个格点有直接相互作用的格点数。所以，最大能够处理的键指标维数 D 依赖于 z ， z 越大， D 越小。

4.2 期望值计算方法

上一节的虚时演化方法得到了基态的张量网络波函数。接下来的问题就是如何计算物理量算符 \hat{O} 的期望值

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (4.52)$$

给定一个张量网络态 $|\Psi\rangle$ ，下面介绍如何将4.52式右边的分子和分母写成张量网络。

我们以蜂窝晶格为例介绍求期望值的算法，其他晶格比如正方晶格的计算过程是类似的。首先，为了简便起见，把键矢量 λ 平均的吸收到格点上的张量 A 和 B 中（如图4.7所示）

$$\tilde{A}_{x_i y_i z_i} [m_i] = \sqrt{\lambda_{x_i} \lambda_{y_i} \lambda_{z_i}} A_{x_i y_i z_i} [m_i] \quad (4.53)$$

$$\tilde{B}_{x_j y_j z_j} [m_j] = \sqrt{\lambda_{x_j} \lambda_{y_j} \lambda_{z_j}} B_{x_j y_j z_j} [m_j]. \quad (4.54)$$

然后，如图4.8所示收缩同一格点张量的物理指标得到约化张量

$$T_{x_i x'_i, y_i y'_i, z_i z'_i}^a = \sum_{m_i} \tilde{A}_{x_i y_i z_i} [m_i] \tilde{A}_{x'_i y'_i z'_i} [m_i] \quad (4.55)$$

$$T_{x_j x'_j, y_j y'_j, z_j z'_j}^b = \sum_{m_j} \tilde{B}_{x_j y_j z_j} [m_j] \tilde{B}_{x'_j y'_j z'_j} [m_j]. \quad (4.56)$$

作如下指标代换

$$X \sim (x, x') \quad (4.57)$$

$$Y \sim (y, y') \quad (4.58)$$

$$Z \sim (z, z'), \quad (4.59)$$

得到简化的指标表示

$$T_{x_i x'_i, y_i y'_i, z_i z'_i}^a \sim T_{X_i, Y_i, Z_i}^a \quad (4.60)$$

$$T_{x_j x'_j, y_j y'_j, z_j z'_j}^b \sim T_{X_j, Y_j, Z_j}^b, \quad (4.61)$$

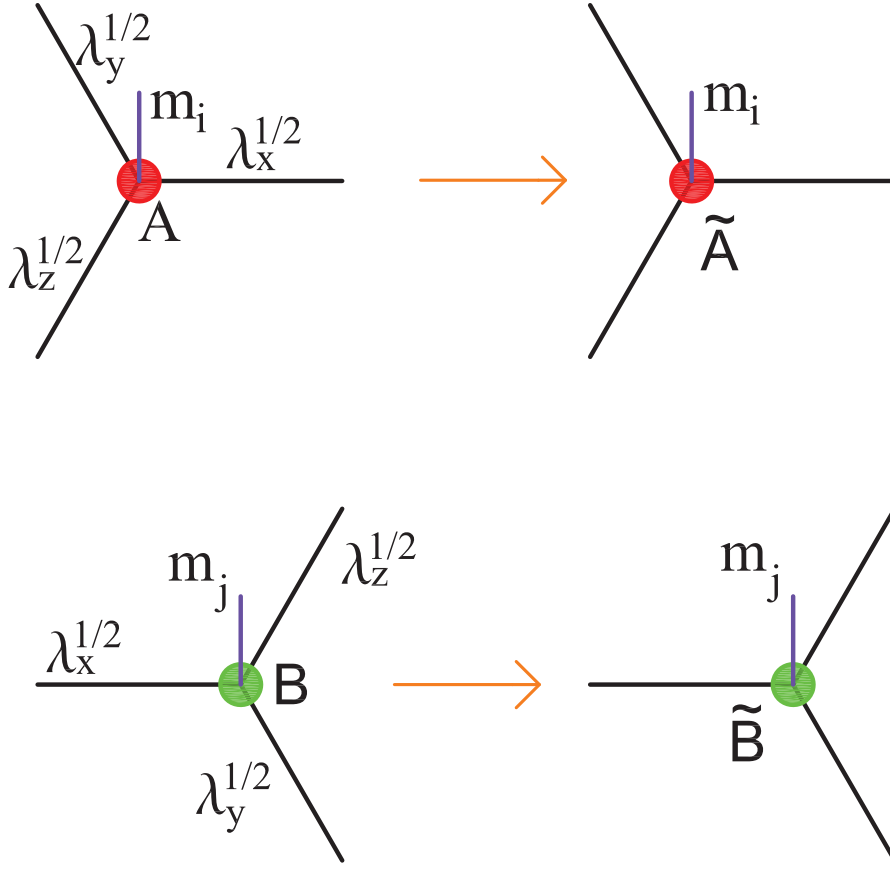


图 4.7: 把键矢量 λ 平均的吸收到格点上的张量 A 和 B 的过程的示意图。

其中 T^a 和 T^b 键指标维数为 $D_c = D^2$ 。于是，4.52式的分母 $\langle \Psi | \Psi \rangle$ 可以类似于经典模型配分函数而表示成张量网络形式：

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \text{Tr} \prod_{i \in a, j \in b} T_{X_i Y_i Z_i}^a T_{X_j Y_j Z_j}^b. \quad (4.62)$$

4.52式的分子与分母相比唯一的不同之处在于，由于存在算符使得与算符直接相关的格点约化张量定义与别处不同。这里只讨论算符 \hat{O} 只包含最近邻格点的两体项

$$\hat{O} = \sum_{\langle ij \rangle} O_{ij}. \quad (4.63)$$

如果我们进一步考虑简单的情况，即认为所有的两体算符 O_{ij} 形式相同，那么

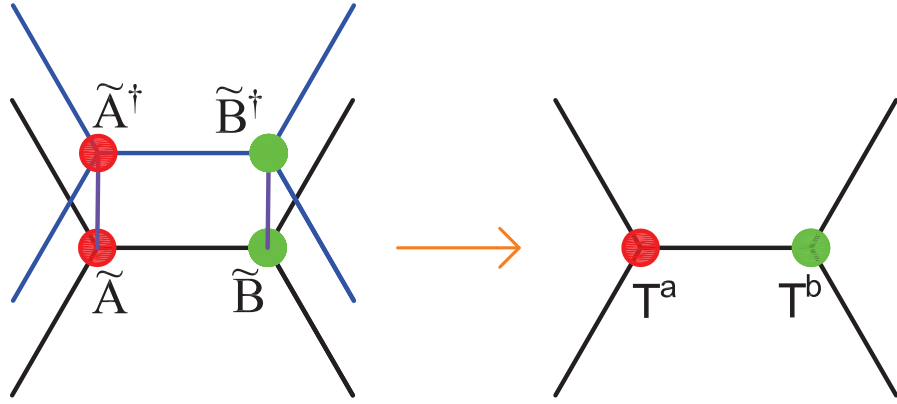


图 4.8: 收缩同一格点张量的物理指标得到约化张量的示意图。

在蜂窝晶格上每格点期望值为

$$\langle O \rangle = \frac{3}{2} \langle O_{ij} \rangle. \quad (4.64)$$

接下来就是定义与 O_{ij} 有关的张量。先对 O_{ij} 的指标重排

$$\langle m_i m_j | O_{ij} | m'_i m'_j \rangle \sim O_{ij} (m_i m'_i, m_j m'_j), \quad (4.65)$$

然后对 $O_{ij} (m_i m'_i, m_j m'_j)$ 进行奇异值分解

$$O_{ij} (m_i m'_i, m_j m'_j) = \sum_l U_{m_i m'_i, l} S_l V_{m'_j m_j, l}. \quad (4.66)$$

定义

$$\tilde{U}_{m_i m'_i, l} = U_{m_i m'_i, l} \sqrt{S_l} \quad (4.67)$$

$$\tilde{V}_{m'_j m_j, l} = V_{m'_j m_j, l} \sqrt{S_l}. \quad (4.68)$$

于是，就可以得到与 O_{ij} 有关的约化张量

$$T_{x_i x'_i l, y_i y'_i, z_i z'_i}^{Ca} = \sum_{m_i m'_i} \tilde{A}_{x_i y_i z_i} [m_i] \tilde{A}_{x'_i y'_i z'_i} [m'_i] \tilde{U}_{m_i m'_i, l} \quad (4.69)$$

$$T_{x_j x'_j l, y_j y'_j, z_j z'_j}^{Cb} = \sum_{m_j m'_j} \tilde{B}_{x_j y_j z_j} [m_j] \tilde{B}_{x'_j y'_j z'_j} [m'_j] \tilde{V}_{m'_j m_j, l}. \quad (4.70)$$

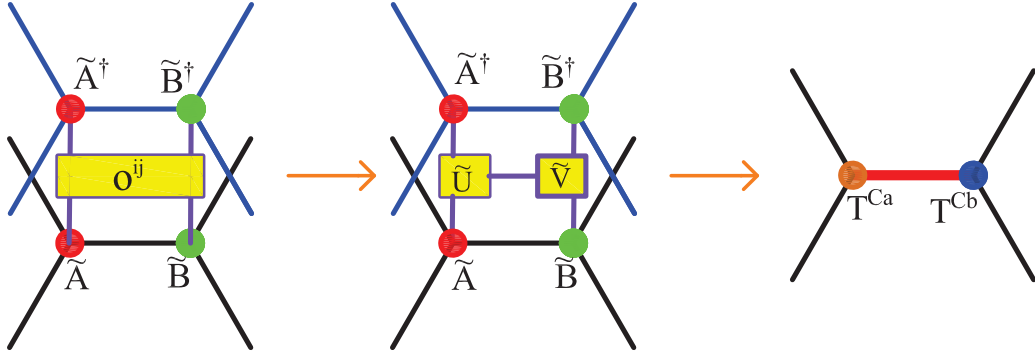


图 4.9: 构造与 O_{ij} 有关的约化张量 T^{Ca} 和 T^{Cb} 的过程示意图。

类似可得简化的指标表示

$$T^{Ca}_{x_i x'_i l, y_i y'_i, z_i z'_i} \sim T^{Ca}_{X_i, Y_i, Z_i} \quad (4.71)$$

$$T^{Cb}_{x_j x'_j l, y_j y'_j, z_j z'_j} \sim T^{Cb}_{X_j, Y_j, Z_j} \quad (4.72)$$

上述得到 T^{Ca} 和 T^{Cb} 的过程如图4.9所示。

4.46式和4.47式定义的自旋守恒关系也可以应用于张量 T^a 和 T^b 。如果我们定义

$$S[X] = S[x] - S[x'] \quad (4.73)$$

$$S[Y] = S[y] - S[y'] \quad (4.74)$$

$$S[Z] = S[z] - S[z'], \quad (4.75)$$

那么可以得到 T^a 和 T^b 指标对应的虚拟自旋量子数的守恒关系为

$$S[X_i] + S[Y_i] + S[Z_i] = 0 \quad (4.76)$$

$$S[X_j] + S[Y_j] + S[Z_j] = 0. \quad (4.77)$$

对于哈密顿量 H ，以及任何其它与 H 对易的物理算符，基态也是这些算符的共同本征态。因此，这些算符的期望值可以通过下式计算

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \Phi | \hat{O} | \Psi \rangle}{\langle \Phi | \Psi \rangle}, \quad (4.78)$$

其中 $|\Phi\rangle$ 是任意不与 $|\Psi\rangle$ 正交的波函数。这样计算期望值的好处之一是 $|\Phi\rangle$ 的键指标维数可以远远小于 $|\Psi\rangle$ 的键指标维数。于是，4.62 式中张量维数 D_c 可大为减小，从而我们能够处理更大的张量网络波函数。

我们收缩所有的物理指标，使得 $\langle \Psi | O | \Psi \rangle$ 和 $\langle \Psi | \Psi \rangle$ 均表示成张量网络的形式。接下来的任务是收缩得到的张量网络。收缩张量网络有不止一种方法，这里我们采用第3.2节介绍的二次重正化群方法进行计算。

4.3 数值结果和讨论

4.3.1 蜂窝晶格自旋1/2反铁磁海森堡模型

为了检验张量网络态计算量子格点模型的精度，我们计算了蜂窝晶格 $S = 1/2$ 反铁磁海森堡模型的基态。这里波函数通过Bethe晶格近似虚时演化得到。图4.10展示了基态能量随着截断维数 D_{cut} 的变化关系。对于图中给出的三种不同波函数键指标维数的情形，当 $D_{cut} > 80$ ，基态能量只在小数点后第五位有变化。这样的变化来源于SRG的截断误差。从图上可以看出，能量随着 D_{cut} 的变化并非单调下降，因为SRG的过程不是变分过程。

图4.11展示了SRG计算蜂窝晶格自旋1/2反铁磁海森堡模型基态能量随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系。基态能量随着 D 的增加很快收敛。这是因为基态能量由最近邻格点自旋关联函数构成，而张量网络态恰能够很精确的抓住体系的局域纠缠。对于 $D = 20$ 的张量网络态，在保留 $D_{cut} = 130$ 个态的情况下，收敛的基态能量为： $E = -0.54441$ 。这与最近的采用量子蒙特卡罗方法计算的结果 $E = -0.54455(20)$ [105]相符，也和自旋波[106]（ -0.5489 ），以及级数展开[107]的结果（ -0.5443 ）一致。

对于蜂窝晶格自旋1/2反铁磁海森堡模型，基态存在自发对称性破缺。系统具有反铁磁长程序，即存在非零的交错磁化强度。交错磁化强度与系统的自旋-自旋长程关联有关。在交错磁化外场中，自旋波激发是有能隙的，那么自旋-自旋关联函数随着自旋距离增加指数衰减。然而，在无交错磁化外场的情况下，自旋波激发为无能隙的Goldstone模。所以，体系的低能或者说长波自旋

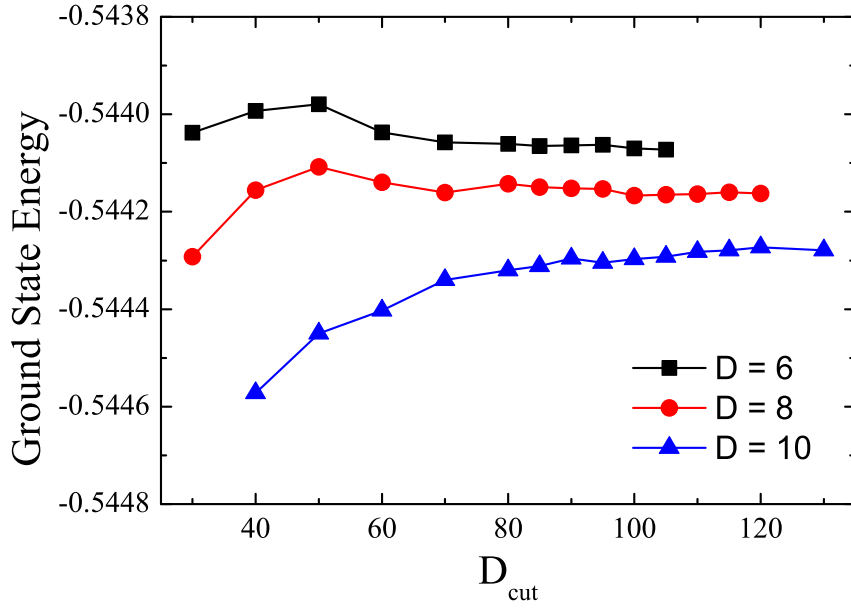


图 4.10: SRG计算蜂窝晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态能量随着截断维数 D_{cut} 的变化关系图。 D 是张量网络波函数的键指标维数。

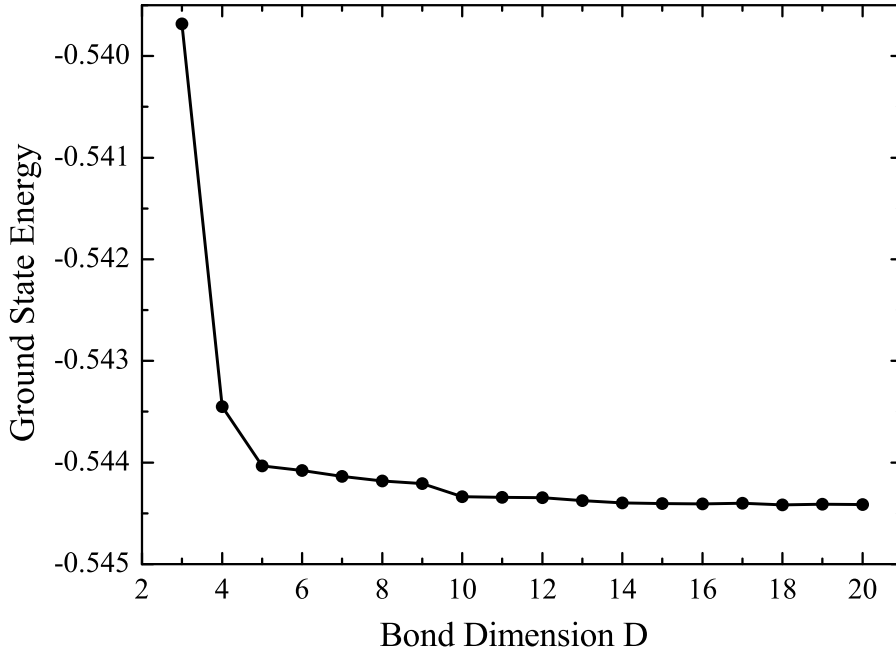


图 4.11: SRG计算蜂窝晶格自旋 $1/2$ 反铁磁海森堡模型基态能量随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系图。

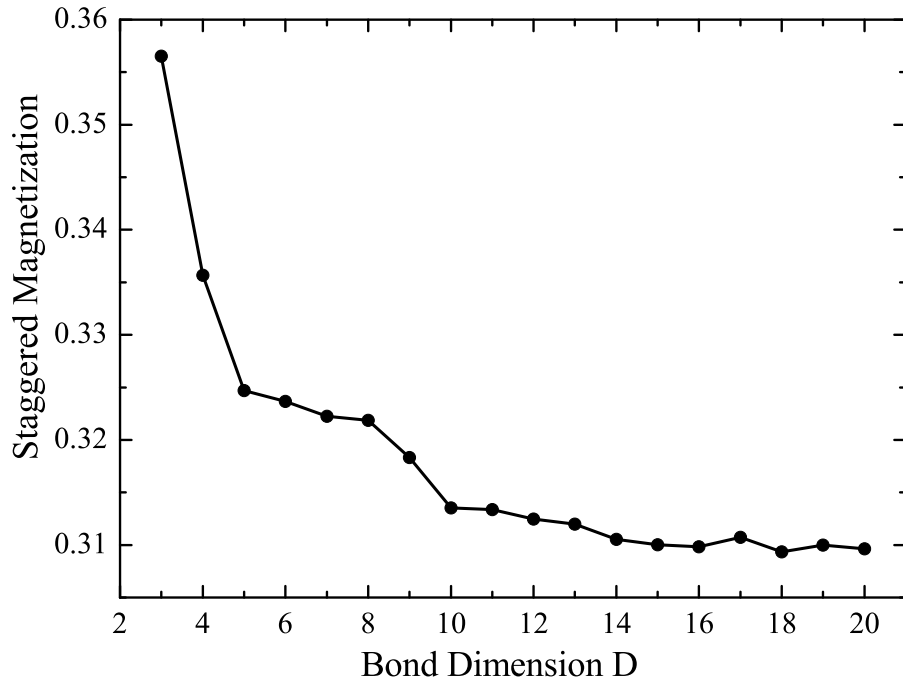


图 4.12: 蜂窝晶格自旋1/2反铁磁海森堡模型基态交错磁化强度随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系图。

涨落是很强的。在零场极限下，该低能涨落能够强烈的影响交错磁化强度的行为。

如果在加入交错磁化外场 h_s （不失一般性，这里假设外场沿着 z 轴方向）的情况下，体系基态的SU(2)自旋旋转对称性发生破缺。交错磁化强度按下式计算

$$M_s = \frac{1}{2} \langle S_i^z - S_j^z \rangle. \quad (4.79)$$

图4.12展示了SRG计算的在零场极限 $h_s \rightarrow 0$ 下基态交错磁化强度 M_s 随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系。与基态能量不同的是， M_s 随着 D 的增加较慢的收敛。当 $D = 20$ ，计算得到 $M_s = 0.3096$ ，这比最近的采用量子蒙特卡罗方法计算的结果 $M_s = 0.2681(8)$ [105]更大，也比自旋波（ $M_s = 0.24$ [106]），级数展开（ $M_s = 0.27$ [107]）的结果更大。出现这个差别的原因在于基态的量子涨落。基态的自旋激发是无能隙的，具有长程自旋-自旋关联行为。然而对于张量网络波函数，有限的键指标维数限制了刻画长程自旋-自旋关联的精度。

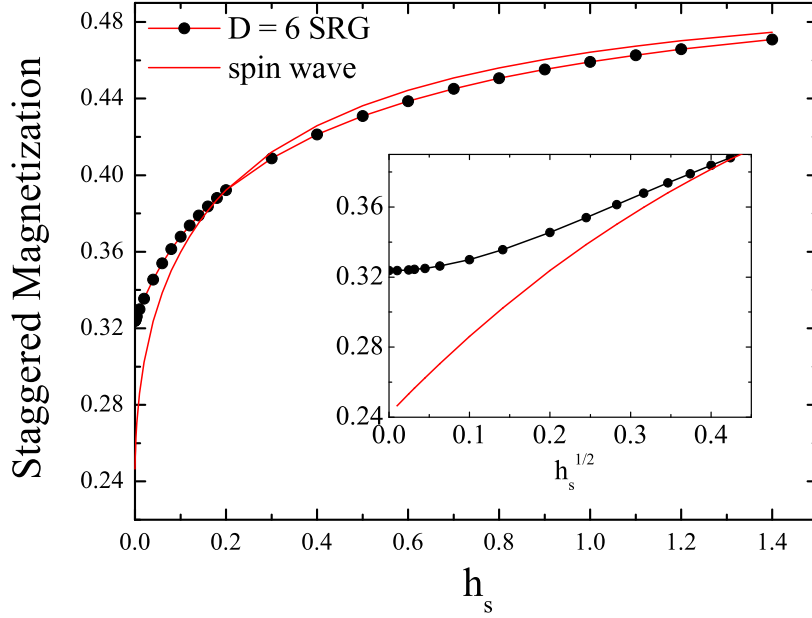


图 4.13: 采用SRG和自旋波计算的交错磁化强度随着外场 h_s 的变化关系图。插图是两个方法计算的交错磁化强度随着 $h_s^{1/2}$ 的变化曲线。

这是采用张量网络波函数研究无能隙系统的缺陷。为了减小计算误差，需要增大张量键指标的维数，或者改用其他类型的张量网络波函数使之能够超越纠缠熵的面积定理。

为了更清楚的理解这个问题，我们用SRG计算了交错磁化强度随着外场 h_s 的变化关系，并与自旋波的结果比较（图4.13）。在外场比较大的时候，两种方法计算的结果定性相符。这是因为在一个有限的外场中，自旋波激发是有能隙的，所以基态的纠缠熵满足面积定理。在这种情况下，张量网络波函数是对真实基态的一个很好的近似。然而，当 $h_s \rightarrow 0$ ，自旋波激发的能隙逐渐关闭，自旋涨落变得越来越显著。如图4.13的插图所示，自旋波得到的交错磁化强度在弱场极限下正比于 $\sqrt{h_s}$ ，这来自于自旋波的低能激发行为。由于有限 D 的张量网络态近似的基态波函数并不能很好的抓住系统的长程关联，所以SRG计算得到的零场交错磁化强度会有偏离。

尽管如此，我们可以将计算得到的结果外插到 $D \rightarrow \infty$ 极限，从而对零场交错磁化强度进行更精确的估计。图4.14给出了对SRG计算得到的零场交错磁化强度关于 $1/D$ 的函数的4次多项式拟合的结果。外插到 $1/D \rightarrow 0$ 极限，也

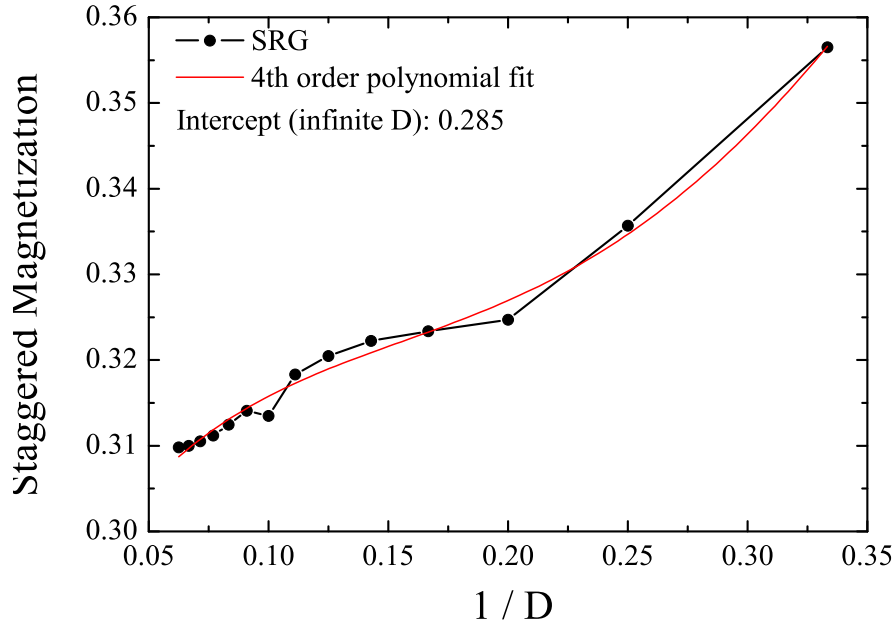


图 4.14: 交错磁化强度关于 $1/D$ 的函数关系, 以及相应的4次多项式拟合 (红线)。

就是 $D \rightarrow \infty$ 极限下的交错磁化强度约为 $M_s = 0.285$, 这与量子蒙特卡罗的结果 $M_s = 0.2681(8)$, 以及级数展开的结果 $M_s = 0.27$ 定性相符。

4.3.2 正方晶格自旋1/2反铁磁海森堡模型

为了测试集团更新相对于Bethe晶格近似对波函数的改进。我们分别采用Bethe晶格近似和集团更新计算了正方晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态的能量 (图4.15) 和交错磁化强度 (图4.16)。我们采取了 2×2 和 3×8 两种集团尺寸进行虚时演化: 前者是最小的集团, 后者是我们综合考虑了计算代价和精度所采用的比较合理的集团尺寸。

从基态能量 (图4.15) 的结果可以看出, 集团更新确实相比于Bethe晶格近似提高了计算精度。在 $D = 4$ 时, 3×8 集团更新得到的基态能量已经比Bethe晶格近似 $D = 10$ 的能量低。在 $D = 6$ 时, 3×8 集团更新已经和量子蒙特卡罗的结果[108]非常接近, 相对误差在 10^{-4} 量级。因为基态能量只包含系统的最近邻关联算符, 所以Bethe晶格近似虚时演化已经可以很精确的计算波函数, 当然集团更新依然能得到能量更低的结果。由于集团更新相比于Bethe晶格近似增加

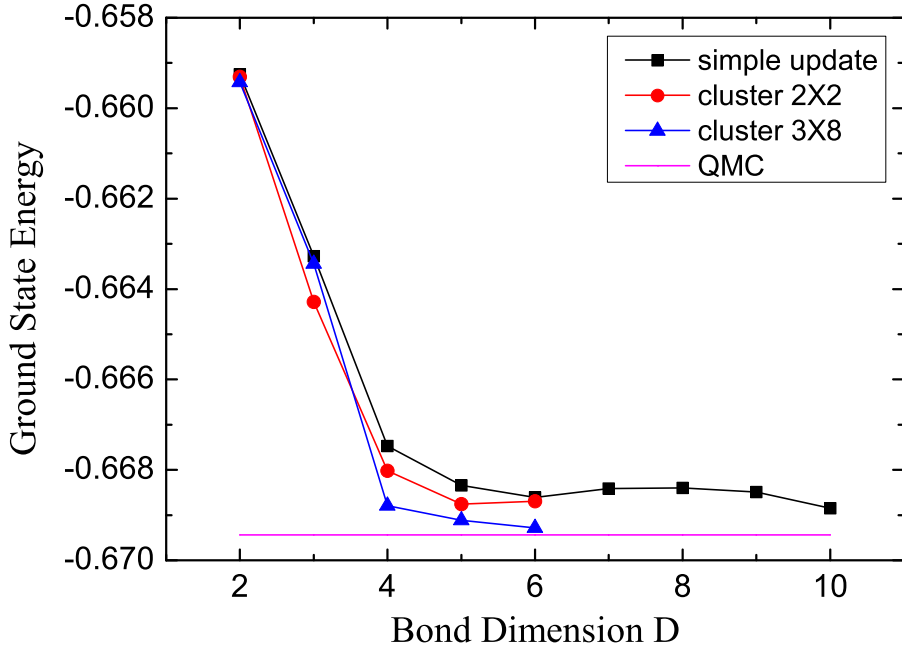


图 4.15: 正方晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态能量随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系图。图中黑线，红线，蓝线分别代表 Bethe 晶格近似， 2×2 集团更新， 3×8 集团更新的虚时演化得到基态的计算结果。品红线为量子蒙特卡罗的结果，与 D 无关，供对比参考。

了参与优化截断的格点，虚时演化过程更易于抓住系统的长程关联性质，所以当计算长程序例如磁化强度时，精度会得到大幅度的改进。从图 4.16 可以看出，随着集团尺寸的增大，磁化强度显著减小。在 $D = 6$ 时， 3×8 集团更新的磁化强度与量子蒙特卡罗的结果[108]相比，相对误差已经减小到 3% 左右。

这里采用集团更新虚时演化方法的计算只给出初步结果，可以看出集团更新的曲线随着 D 增加并未到达收敛区，继续增大 D 需要优化算法以保证数值稳定性。另一方面，从图 4.16 可以看出，磁化强度随着 D 增大并不一定单调，这是因为现在采用的 Bethe 晶格近似和集团更新得到的波函数并非为此张量网络态的最优结果。原则上可以通过逐渐增大集团尺寸以求得更精确的基态，但是这面临着时间代价太高和求解 4.44 式的稳定性降低的问题（因为涉及到矩阵求逆），这是我们未来需要设法改进的地方。

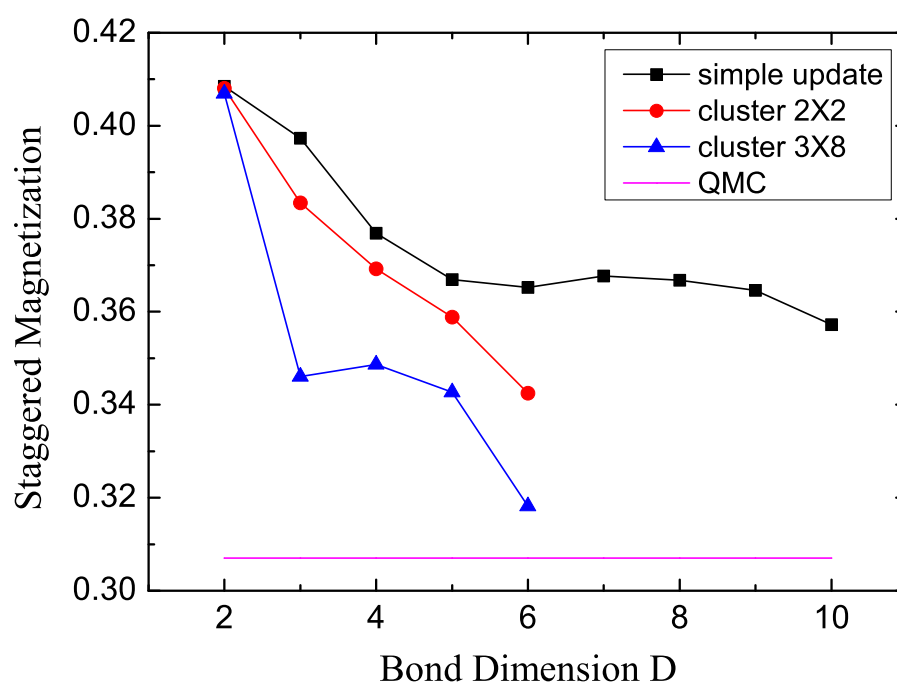


图 4.16: 正方晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型基态交错磁化强度随着张量网络波函数的键指标维数 D 的变化关系图。图中黑线，红线，蓝线分别代表 Bethe 晶格近似， 2×2 集团更新， 3×8 集团更新的虚时演化得到基态的计算结果。品红线为量子蒙特卡罗的结果，与 D 无关，供对比参考。

第五章 蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型的基态研究

这一章基于文献[109]，我们采用张量网络态的相关算法研究了蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型的基态性质。我们发现半经典理论预言基态存在的铁磁序，四极序，和反铁磁序的大部分都是稳定存在的。然而，半经典理论认为存在的交错四极序却被量子涨落破坏掉了，并且在这个区域也不存在任何形式的磁性长程序。在这个区域的稳定基态为plaquette价键固体态。这样的基态破缺了晶格的平移对称性，而保持了自旋的SU(2)对称性。更进一步的计算发现，从反铁磁态到plaquette价键固体态的量子相变很可能是一个直接的二级相变，或者是非常弱的一级相变。如果是一个直接的二级相变，那么这应该是一个退禁闭量子相变。

5.1 引言

在量子自旋系统，基态的经典自旋长程序可能被量子涨落破坏掉[110]，结果导致基态可能为自旋液体相。通常在较小的自旋，较低维的系统或者存在几何阻挫的晶格中具有较强的量子涨落。事实也是如此，迄今为止大部分可能的量子自旋液体都是在有效自旋为 $\frac{1}{2}$ （可能存在或不存在电荷涨落）的三角晶格[111–115]，Kagome晶格[116–120]或者蜂窝晶格[121–125]中发现和提出。除了上述新奇的量子自旋液体相，自旋 $\frac{1}{2}$ 系统存在的强烈量子涨落还可能导致出现非传统的量子临界点。例如，文献[96]和[97]从理论上提出，自旋 $\frac{1}{2}$ 的量子磁性体系中从有磁性序的相到破缺晶格对称性的顺磁相可以是直接的二级量子相变。该量子相变不被经典的Landau-Ginzburg-Wilson-Fisher相变范式允许，被称为退禁闭量子相变。退禁闭量子相变采用分数化激发描述，而不是通常用序参量描述。最近几年，对具有最近邻海森堡相互作用和四自旋相互作用的自旋 $\frac{1}{2}$ 模型的量子蒙特卡罗模拟对退禁闭量子相变的存在给出了较强的数值证据[126–128]。

在这里我们提出这样一个问题：如果一个高自旋的二维体系没有几何阻挫，那么量子涨落可能导致出现上面提到的新奇量子现象吗？理论上

讲，这个问题并没有明确的答案。因为在自旋1的系统中，Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki形式的价键固体态[129]只在1维体系中存在。最近对自旋1磁性材料 $\text{Ba}_3\text{NiSb}_2\text{O}_9$ 的实验研究表明二维自旋1的系统非常可能存在极其非平庸的量子无序基态[94]。

利用基于张量网络态的数值方法[38, 51, 69]，我们研究了蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型的基态性质。我们的数值结果表明，量子涨落导致出现新奇的相。一个出人意料的结果是，我们发现在经典极限下基态应该为交错四极序的相，所有可能的偶极和四极磁性序都消失了。在这个区域，系统呈现为破缺了平移对称性的plaquette价键固体态。更进一步的计算发现，从反铁磁态到plaquette价键固体态的量子相变很可能是一个直接的二级相变，或者是非常弱的一级相变。如果确实是一个直接的二级相变，那么这应该是一个退禁闭量子相变。这是第一次在自旋1的系统中提出可能的退禁闭量子临界现象。

自旋1双线性双二次海森堡模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [(\cos \theta) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + (\sin \theta) (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2]. \quad (5.1)$$

由于蜂窝晶格在二维晶格中配位数是最低的，所以在其他条件相同的情况下应该具有最强的量子涨落。该模型具有多个特殊点。当 $\theta = 0$ ，哈密顿量对应于传统的SU(2)反铁磁海森堡模型。当 $\theta = \pi/4, 5\pi/4$ ，或者 $\pm\pi/2$ ，哈密顿量具有比自旋SU(2)对称性更高的SU(3)对称性。当 $\theta_{\pm} = \pm \arctan 2$ ，哈密顿量能够用四极算符

$$\mathbf{Q}_i = \begin{pmatrix} S_{ix}^2 - S_{iy}^2 \\ \sqrt{3}S_{iz}^2 - 2/\sqrt{3} \\ S_{ix}S_{iy} + S_{iy}S_{ix} \\ S_{iy}S_{iz} + S_{iz}S_{iy} \\ S_{ix}S_{iz} + S_{iz}S_{ix} \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

表示成

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\frac{\sin \theta_{\pm}}{2} \mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{Q}_j + \frac{4}{3} \sin \theta_{\pm} \right). \quad (5.3)$$

与铁磁自旋算符类似，系统的总四极矩算符

$$\mathbf{Q} = \sum_i \mathbf{Q}_i, \quad (5.4)$$

与哈密顿量对易；然而，系统的总交错四极矩算符

$$\mathbf{Q}_s = \sum_i (-)^i \mathbf{Q}_i, \quad (5.5)$$

与哈密顿量不对易。

5.1式的两项引入了两类磁性序的竞争。第一项 $(\cos \theta) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ 倾向于形成传统的铁磁或者反铁磁序，而第二项 $(\sin \theta) (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2$ 倾向于形成四极或者交错四极序。两项的竞争导致量子涨落。特别是在 $\sin \theta > 0$ 的区域，Marshall符号定理[130, 131]并不适用于系统的基态波函数，量子蒙特卡罗的计算会面临负符号问题。

已经有一些文章对自旋1双线性双二次海森堡模型进行了研究。在一维，采用密度矩阵重正化群方法的数值计算已经比较完整而精确的给出了基态的相图。当 $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ ，基态为Haldane自旋能隙相；而当 $\pi/4 < \theta < \pi/2$ ，基态为量子临界相，自旋的偶极和四极关联函数都呈现出幂次衰减行为[75, 132]。

在二维，该模型基态的相图并没有很好的建立起来。在经典极限下，该模型在正方晶格的基态具有如图5.1的内圈所示的四个相[86, 87]。在 $\sin \theta < 0$ 的区域，在正方晶格上的量子蒙特卡罗模拟[91, 92]与经典相图的下半平面吻合。在 $\sin \theta > 0$ 的区域，没有量子蒙特卡罗的计算结果，因为其面临负符号问题。其他在三角晶格和正方晶格上采用平均场和精确对角化的计算显示在相图的上半平面存在交错四极序的区域[133, 134]。

5.2 采用张量网络态算法计算基态性质

我们采用文献[38, 51, 69, 104]介绍的张量网络态的相关算法计算了该模型的基态性质。由于这类算法不存在量子蒙特卡罗模拟所面临的负符号问题，因此可以计算全参数空间的相图。为了描述可能存在的晶格对称性破缺相，我们假定基态可以用下面的6套子格的张量网络波函数（见图5.2）表示

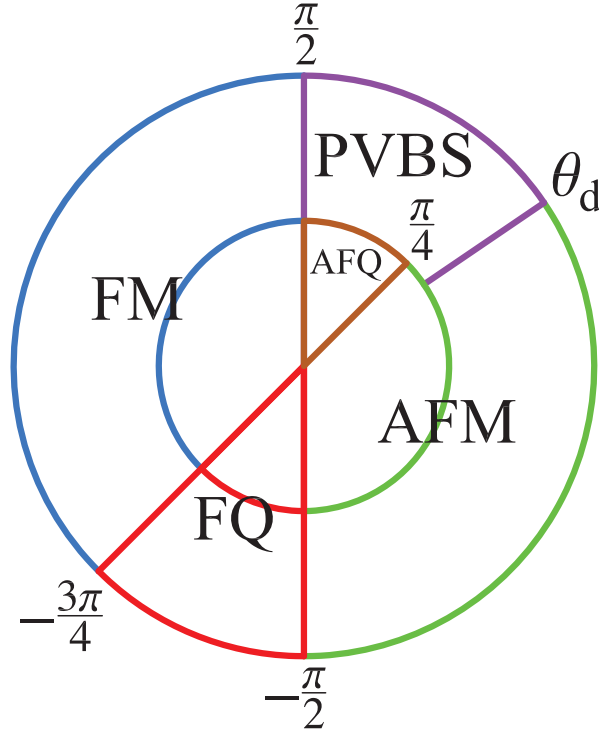


图 5.1: 蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型的基态相图。内圈为经典极限下的相图；外圈为我们计算得到的对应量子模型的相图。FM, AFM, FQ, AFQ和PVBS分别代表铁磁, 反铁磁, 四极, 交错四极和plaquette价键固体相。 $\theta_d \approx 0.19\pi$ 。

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle = & \text{Tr} \prod A_{x_1 y_4 z_7}^1 [m_1] A_{x_1 y_6 z_8}^2 [m_2] A_{x_2 y_5 z_8}^3 [m_3] \\
 & A_{x_3 y_5 z_7}^4 [m_4] A_{x_3 y_6 z_9}^5 [m_5] A_{x_2 y_4 z_9}^6 [m_6] \\
 & \lambda_{x_1}^1 \lambda_{x_2}^2 \lambda_{x_3}^3 \lambda_{y_4}^4 \lambda_{y_5}^5 \lambda_{y_6}^6 \lambda_{z_7}^7 \lambda_{z_8}^8 \lambda_{z_9}^9 |m_1 m_2 m_3 m_4 m_5 m_6\rangle, \quad (5.6)
 \end{aligned}$$

其中 A^i 分别是定义在六套子格上的格点张量, 虚拟指标(键指标)维数为 D 。 λ_α^i ($\alpha = x, y, z$)是 D 维的对角正定矩阵, 定义在从一个格点沿着 α 方向放射的键之上。对于自旋1系统, m_i 为 $d = 3$ 维的局域自旋完备基, 这里取 S^z 表象。Tr代表对所有物理指标和键指标求和。

为了确定体系的基态波函数, 我们首先采用第四章第4.1节介绍的Bethe晶格近似虚时演化方法。这里对于6子格张量网络波函数, 我们采用一阶Trotter-

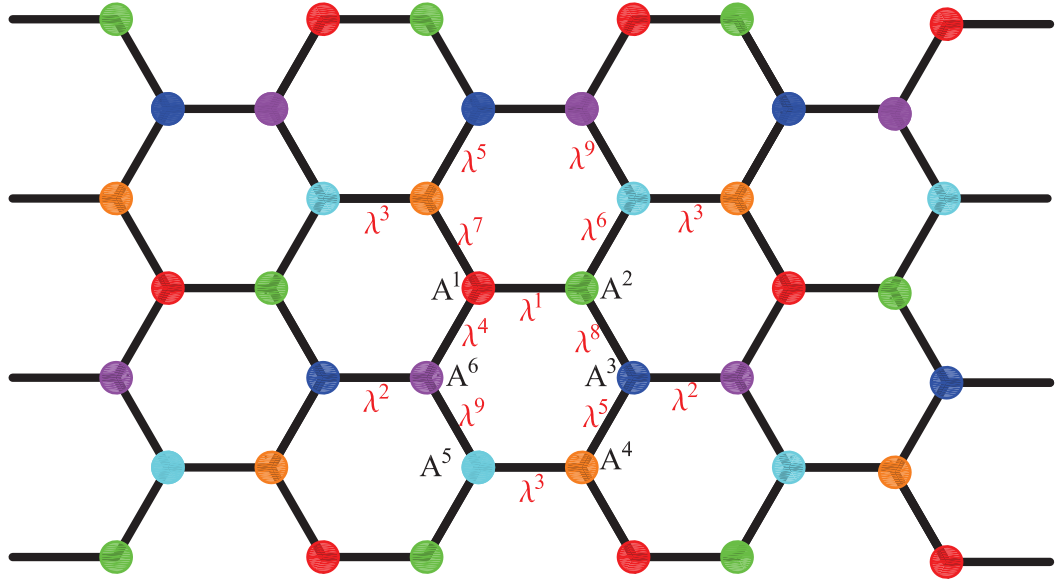


图 5.2: 蜂窝晶格6子格张量网络波函数示意图。6种颜色的圆圈代表6套子格。 A^i 包含三个键指标（黑线）和一个物理指标（未画出）。每个键之上定义了一个键矢量（或者称之为对角矩阵） $\lambda_\alpha^i (\alpha = x, y, z)$ ，一共有9种不等价的键矢量。

Suzuki 分解将演化算符 $e^{-\tau H}$ 做以下分解

$$e^{-\tau H} \approx e^{-\tau H_{56}} e^{-\tau H_{32}} e^{-\tau H_{14}} e^{-\tau H_{52}} e^{-\tau H_{34}} e^{-\tau H_{16}} e^{-\tau H_{54}} e^{-\tau H_{36}} e^{-\tau H_{12}}. \quad (5.7)$$

在计算过程中，我们开始演化的时候取比较大的 $\tau = 0.2$ ，然后逐渐减小到 10^{-4} ，直至波函数收敛。为了找到真实的基态而不是收敛到局域最小值，我们从各种可能的磁有序态或者价键固体态出发进行虚时演化，最后取能量最低的收敛态作为基态波函数。

上述虚时演化方法在许多情况下都是一个快速而精确的确定基态波函数的方法。然而，该方法每一步演化计算中都只包含两个格点，这样的考虑比较粗糙，以至于难以抓住多于双子格的序。我们在实际计算中，扩大了虚时演化过程中计入的环境。在每次演化中，参与计算的格点从2个扩大到6个，从而提高了计算多于双子格的序的稳定性。下面我们对这一过程进行介绍。

首先，把演化算符将要作用的键上的矢量 λ 平均的吸收到格点上的张

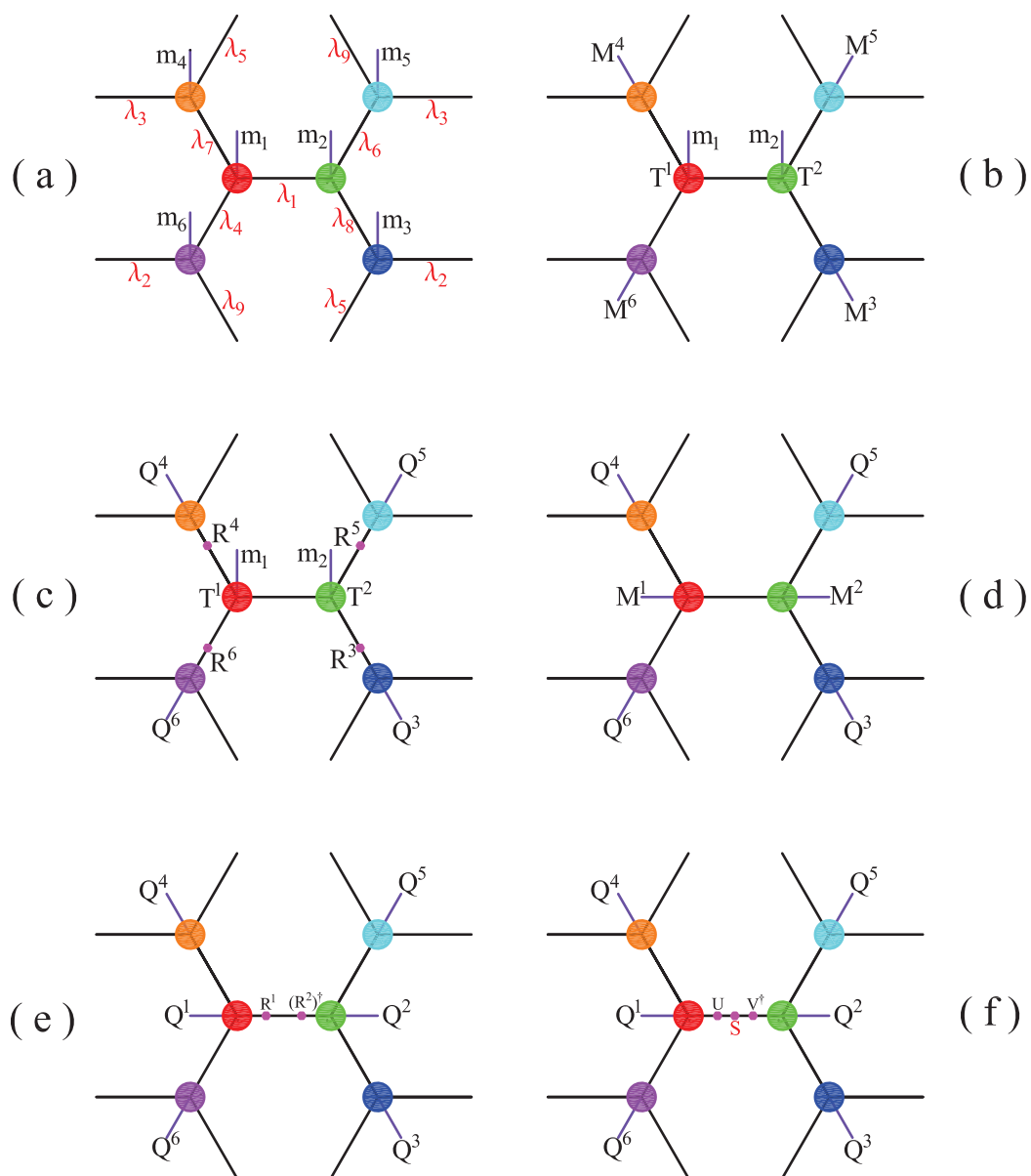


图 5.3: 蜂窝晶格集团更新虚时演化中计算环境格点的重正化效应的过程示意图。

量 A^1 和 A^2 中

$$\tilde{A}_{x_1 y_4 z_7}^1 [m_1] = A_{x_1 y_4 z_7}^1 [m_1] \sqrt{\lambda_{x_1}^1} \quad (5.8)$$

$$\tilde{A}_{x_1 y_6 z_8}^2 [m_2] = A_{x_1 y_6 z_8}^2 [m_2] \sqrt{\lambda_{x_1}^1}. \quad (5.9)$$

下面我们要把演化算符 $e^{-\tau H_{12}}$ 作用在张量网络态上。定义演化算符张量

$$P_{m_1 m_2, n_1 n_2} = \langle m_1 m_2 | e^{-\tau H_{12}} | n_1 n_2 \rangle. \quad (5.10)$$

重排指标

$$P_{m_1 m_2, n_1 n_2} \rightarrow P_{m_1 n_1, m_2 n_2}, \quad (5.11)$$

然后对 P 进行奇异值分解

$$P_{m_1 n_1, m_2 n_2} = \sum_l U_{m_1 n_1, l} S_l V_{m_2 n_2, l}. \quad (5.12)$$

定义两个格点的演化算符

$$P_{m_1 n_1, l}^a = U_{m_1 n_1, l} \sqrt{S_l} \quad (5.13)$$

$$P_{m_2 n_2, l}^b = V_{m_2 n_2, l} \sqrt{S_l}. \quad (5.14)$$

接下来将这两个演化算符作用到 \tilde{A}^1 和 \tilde{A}^2 上

$$T_{(x_1 l) y_4 z_7}^1 [m_1] = \sum_{n_1} \tilde{A}_{x_1 y_4 z_7}^1 [n_1] P_{m_1 n_1, l}^a \quad (5.15)$$

$$T_{(x_1 l) y_6 z_8}^2 [m_2] = \sum_{n_2} \tilde{A}_{x_1 y_6 z_8}^2 [n_2] P_{m_2 n_2, l}^b, \quad (5.16)$$

其中 T^1 和 T^2 的指标做如下简化

$$T_{(x_1 l) y_4 z_7}^1 [m_1] \rightarrow T_{x_1 y_4 z_7}^1 [m_1] \quad (5.17)$$

$$T_{(x_1 l) y_6 z_8}^2 [m_2] \rightarrow T_{x_1 y_6 z_8}^2 [m_2]. \quad (5.18)$$

下面过程的目标是对图5.3 (b) 所示 T^1 和 T^2 张量之间的共同指标进行截断。为了优化截断，这里我们计算4个格点构成的有限大环境的重正化效应。由于这6个点（系统2个点加上环境4个点）构成的张量网络无环，所以我们可以将其变换到正则形式进行截断。

首先，吸收键矢量 λ 到环境格点张量（图5.3 (b)）

$$M_{x_3 y_5 m_4, z_7}^4 = A_{x_3 y_5 z_7}^4 [m_4] \lambda_{x_3}^3 \lambda_{y_5}^5 \lambda_{z_7}^7 \quad (5.19)$$

$$M_{x_2 z_9 m_6, y_4}^6 = A_{x_2 y_4 z_9}^6 [m_6] \lambda_{x_2}^2 \lambda_{y_4}^4 \lambda_{z_9}^9 \quad (5.20)$$

$$M_{x_3 z_9 m_5, y_6}^5 = A_{x_3 y_6 z_9}^5 [m_5] \lambda_{x_3}^3 \lambda_{y_6}^6 \lambda_{z_9}^9 \quad (5.21)$$

$$M_{x_2 y_5 m_3, z_8}^3 = A_{x_2 y_5 z_8}^3 [m_3] \lambda_{x_2}^2 \lambda_{y_5}^5 \lambda_{z_8}^8. \quad (5.22)$$

然后对得到的环境格点张量 M 进行QR分解（图5.3 (c)）

$$M_{x_3 y_5 m_4, z_7}^4 = \sum_{z'_7} Q_{x_3 y_5 m_4, z'_7}^4 R_{z'_7, z_7}^4 \quad (5.23)$$

$$M_{x_2 z_9 m_6, y_4}^6 = \sum_{y'_4} Q_{x_2 z_9 m_6, y'_4}^6 R_{y'_4, y_4}^6 \quad (5.24)$$

$$M_{x_3 z_9 m_5, y_6}^5 = \sum_{y'_6} Q_{x_3 z_9 m_5, y'_6}^5 R_{y'_6, y_6}^5 \quad (5.25)$$

$$M_{x_2 y_5 m_3, z_8}^3 = \sum_{z'_8} Q_{x_2 y_5 m_3, z'_8}^3 R_{z'_8, z_8}^3, \quad (5.26)$$

其中 Q 为正交矩阵， R 为上三角矩阵。改变指标记号

$$R_{z'_7, z_7}^4 \rightarrow R_{z_7, z'_7}^4 \quad (5.27)$$

$$R_{y'_4, y_4}^6 \rightarrow R_{y_4, y'_4}^6 \quad (5.28)$$

$$R_{y'_6, y_6}^5 \rightarrow R_{y_6, y'_6}^5 \quad (5.29)$$

$$R_{z'_8, z_8}^3 \rightarrow R_{z_8, z'_8}^3. \quad (5.30)$$

接着将分解得到的 R 矩阵收缩到 T^1 和 T^2 上（图5.3 (d)）

$$M_{y_4 z_7 m_1, x_1}^1 = \sum_{y'_4 z'_7} R_{z_7, z'_7}^4 R_{y_4, y'_4}^6 T_{x_1 y'_4 z'_7}^1 [m_1] \quad (5.31)$$

$$M_{y_6 z_8 m_2, x_1}^2 = \sum_{y'_6 z'_8} R_{y_6, y'_6}^5 R_{z_8, z'_8}^3 T_{x_1 y'_6 z'_8}^2 [m_2]。 \quad (5.32)$$

下一步，再对 M^1 和 M^2 进行QR分解（图5.3（e））

$$M_{y_4 z_7 m_1, x_1}^1 = \sum_{x'_1} Q_{y_4 z_7 m_1, x'_1}^1 R_{x'_1, x_1}^1 \quad (5.33)$$

$$M_{y_6 z_8 m_2, x_1}^2 = \sum_{x''_1} Q_{y_6 z_8 m_2, x''_1}^2 R_{x''_1, x_1}^2, \quad (5.34)$$

其中 Q 为正交矩阵， R 为上三角矩阵。定义

$$M_{x'_1 x''_1} = \sum_{x_1} R_{x'_1, x_1}^1 R_{x''_1, x_1}^2。 \quad (5.35)$$

然后对其进行奇异值分解，按照奇异值进行截断，即保留 D 个最大的奇异值（图5.3（f））

$$M_{x'_1 x''_1} = \sum_{x_1} \bar{U}_{x'_1 x_1} \bar{S}_{x_1} \bar{V}_{x''_1 x_1} \approx \sum_{x_1} U_{x'_1 x_1} S_{x_1} V_{x''_1 x_1}。 \quad (5.36)$$

下面推导如何截断并还原张量网络态的形式。首先定义

$$R = R^1 \quad (5.37)$$

$$L = (R^2)^\dagger。 \quad (5.38)$$

在 T^1 和 T^2 之间的键上插入单位矩阵 $R^{-1} R L L^{-1}$ （图5.4（a））

$$R^{-1} R L L^{-1} \approx R^{-1} U S V^\dagger L^{-1}。 \quad (5.39)$$

定义投影矩阵

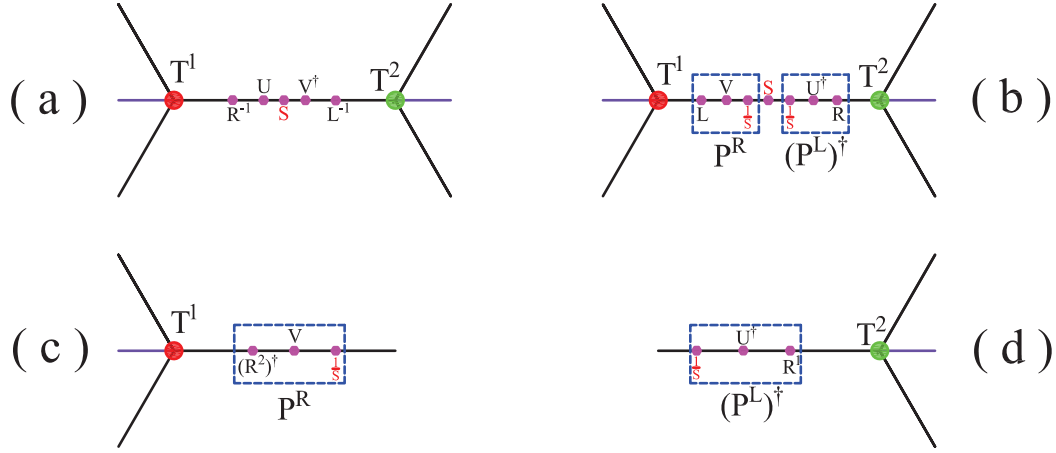


图 5.4: 构造投影矩阵 P^R 和 P^L 并对张量进行截断的示意图。

$$P^R = R^{-1}U \quad (5.40)$$

$$(P^L)^\dagger = V^\dagger L^{-1}. \quad (5.41)$$

为了避免进行矩阵求逆计算，我们利用如下关系

$$(RL)^{-1} = L^{-1}R^{-1} = V\frac{1}{S}U^\dagger, \quad (5.42)$$

那么

$$R^{-1} = LV\frac{1}{S}U^\dagger \quad (5.43)$$

$$L^{-1} = V\frac{1}{S}U^\dagger R. \quad (5.44)$$

因此，可以将 P^R 和 P^L 表示为（图5.4 (b)）

$$P^R = LV\frac{1}{S} = (R^2)^\dagger V\frac{1}{S} \quad (5.45)$$

$$P^L = R^\dagger U\frac{1}{S} = (R^1)^\dagger U\frac{1}{S}. \quad (5.46)$$

最后，按照图5.4 (c) 和 (d) 所示，生成新的 A^1 ， A^2 和 λ^1

$$\begin{aligned}
A_{x_1 y_4 z_7}^1 [m_1] &= \sum_{x'_1} T_{x'_1 y_4 z_7}^1 [m_1] P_{x'_1 x_1}^R \\
&= \sum_{x'_1 x''_1} T_{x'_1 y_4 z_7}^1 [m_1] R_{x'_1, x''_1}^2 V_{x''_1, x_1} \frac{1}{S_{x_1}}
\end{aligned} \tag{5.47}$$

$$\begin{aligned}
A_{x_1 y_6 z_8}^2 [m_2] &= \sum_{x'_1} T_{x'_1 y_6 z_8}^2 [m_2] P_{x'_1 x_1}^L \\
&= \sum_{x'_1 x''_1} T_{x'_1 y_6 z_8}^2 [m_2] R_{x'_1, x''_1}^1 U_{x''_1, x_1} \frac{1}{S_{x_1}}
\end{aligned} \tag{5.48}$$

$$\lambda^1 = S. \tag{5.49}$$

以上简单介绍了我们所采用的虚时演化方法的计算过程，该方法的优点在于虽然考虑了更大的环境，但是并不增大计算复杂度。在得到体系的基态波函数以后，我们可以计算物理量的期望值

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \Psi | O | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \tag{5.50}$$

按照第4章第4.2节的介绍，我们收缩所有的物理指标，使得 $\langle \Psi | O | \Psi \rangle$ 和 $\langle \Psi | \Psi \rangle$ 均表示成张量网络的形式。我们采用非么正演化的无限长链时间演化块消减算法（infinite time-evolving block decimation, iTEBD）[36, 38, 44]收缩这些张量网络。简单的说，该方法把收缩张量网络的过程转化为计算由约化张量构成的一维无限长链转移矩阵的最大本征态。由于iTEBD方法是迭代虚时演化方法，所以截断误差不累积。转移矩阵的最大本征态表示为矩阵乘积态。矩阵乘积态的键指标维数 χ 决定了计算期望值的精度。

在整个计算过程中，两个参数决定了计算的精度：张量网络波函数的维数 D 和矩阵乘积态的维数 χ 。在我们的计算中发现，当 $D \geq 12$ ，已经得到收敛的基态波函数；当 $\chi \geq 30$ ，对物理量期望值的计算结果趋于稳定（见图5.5）。因此，我们在这一章所有的计算中均采用 $D = 12$ 和 $\chi = 30$ 。

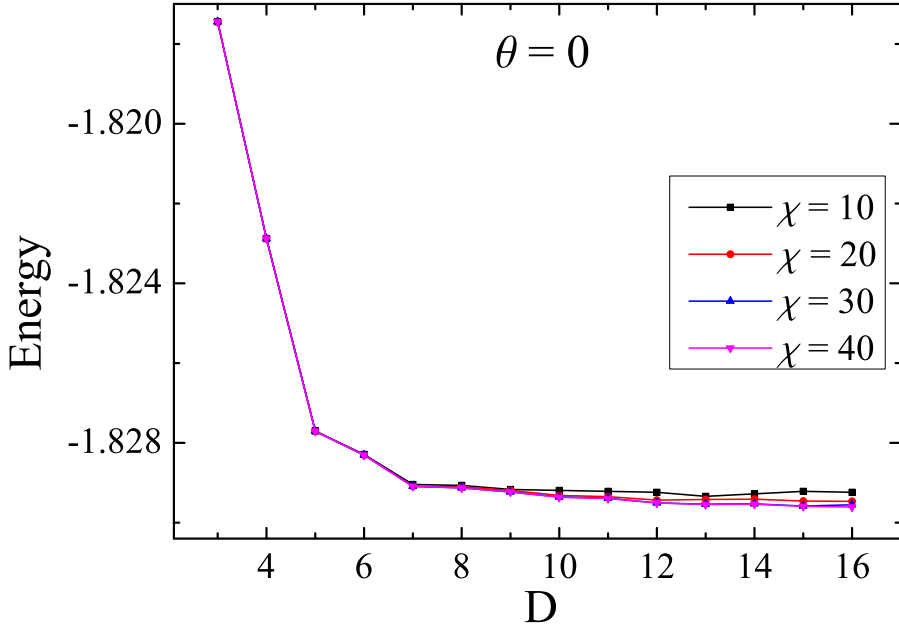


图 5.5: $\theta = 0$ 处取不同的 χ 值每格点基态能量随着 D 的变化曲线。 $\chi = 30$ 和 $\chi = 40$ 的两条曲线几乎重合。

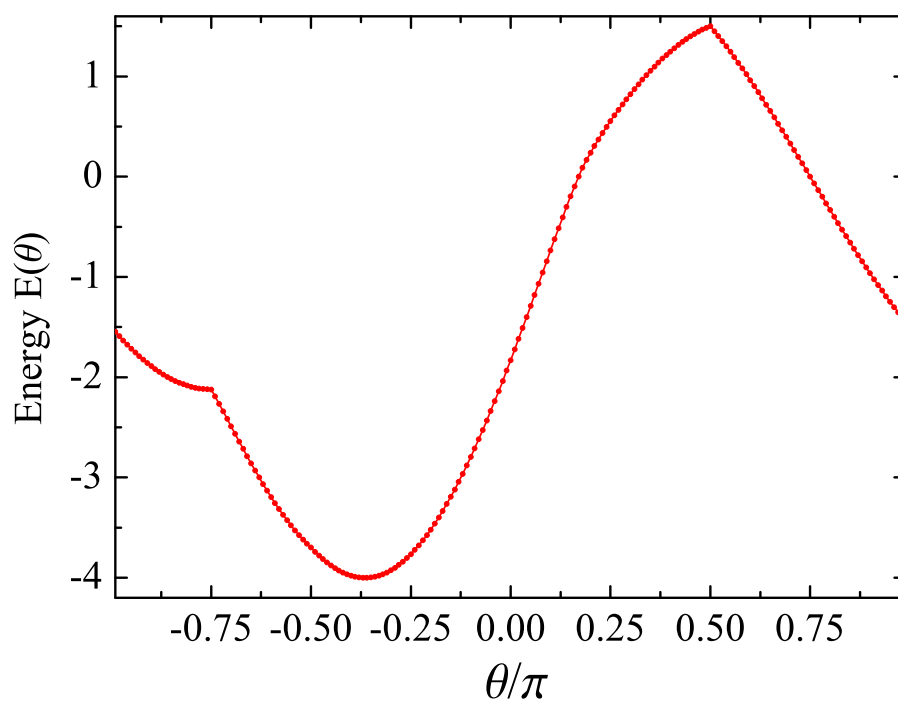
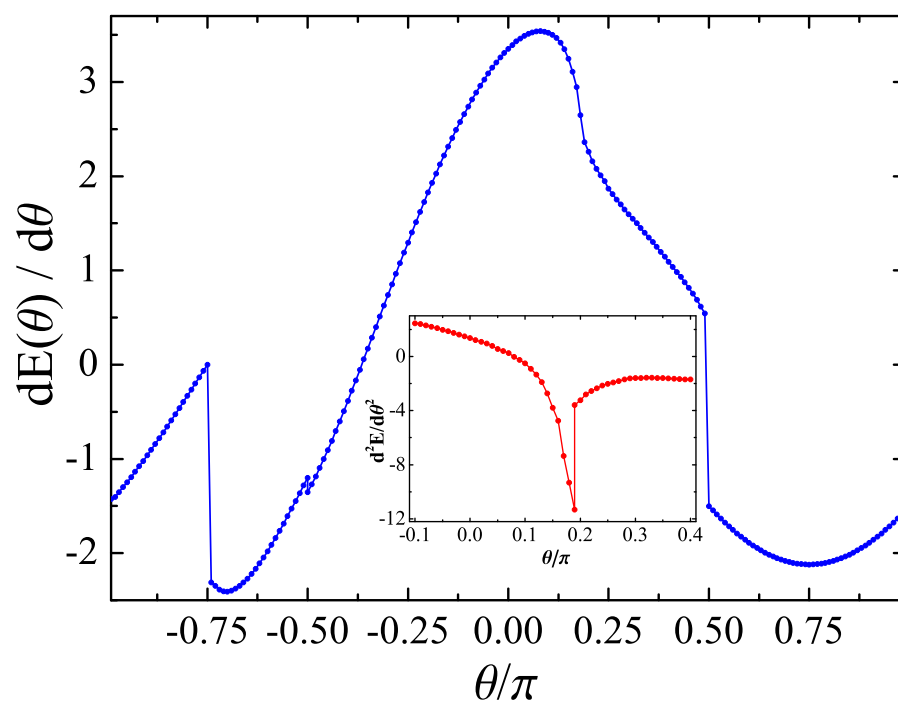
5.3 数值结果和相图

从基态能量的曲线可以看出，基态与经典极限下的相图大体一直，也具有四个相。图5.6展示了基态能量关于 θ 的函数；图5.7展示了基态能量对 θ 的一阶导数和二阶导数（插图）。一阶导数采用Hellmann-Feynman定理计算，

$$\begin{aligned} \frac{dE(\theta)}{d\theta} &= \langle \Psi | \frac{dH(\theta)}{d\theta} | \Psi \rangle \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \Psi | [-(\sin \theta) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + (\cos \theta) (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2] | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (5.51)$$

这比采用数值微分的方法精度更高。我们发现了四个相变点： $\theta = -3\pi/4$, $\pm\pi/2$ 和 $\theta_d \approx 0.19\pi$ 。在这四个相变点中， $\theta = -3\pi/4$ 和 $\pm\pi/2$ 为一级相变点；在 θ_d 处的相变为二级相变。 θ_d 这个相变点相比于经典理论的值 $\theta = \pi/4$ 有明显的偏移，我们后面将对之进行讨论。

为了进一步阐明各个参数范围的相图，我们计算了4中可能的序参量，分别是：

图 5.6: 每格点基态能量随着 θ 的变化曲线。图 5.7: 每格点基态能量对 θ 的一阶导数和二阶导数（插图）曲线。

磁化强度

$$M^z = \sum_i \langle S_{iz} \rangle; \quad (5.52)$$

交错磁化强度

$$M_s^z = \sum_i (-)^i \langle S_{iz} \rangle; \quad (5.53)$$

四极矩

$$Q^{zz} = \sum_i \langle S_{iz}^2 \rangle - 2/3; \quad (5.54)$$

以及交错四极矩

$$Q_s^{zz} = \sum_i (-)^i \langle S_{iz}^2 \rangle. \quad (5.55)$$

图5.8展示了 M^z 和 M_s^z 关于 θ 的函数。当 $\pi/2 < \theta < 5\pi/4$ ，基态为铁磁序，而当 $-\pi/2 < \theta < \theta_d$ ，基态为反铁磁序。在系统具有铁磁序和反铁磁序的区域，四极矩 Q^{zz} 非零。当 $-3\pi/4 < \theta < -\pi/2$ ， M^z 和 M_s^z 均为零，而图5.9显示，系统具有非零的四极矩 Q^{zz} 。因此当 $-3\pi/4 < \theta < -\pi/2$ ，系统对应于四极相，这与半经典[86, 87]和量子蒙特卡罗[91, 92]的结果一致。

如图5.8所示，交错磁化强度曲线在 $\theta_c = -\pi/2$ 处有一个不连续的跃变。这个行为也在正方晶格的量子蒙特卡罗模拟中观察到[91]。然而在 θ_c 处，四极矩非零并且连续变化。 $\theta_c = -\pi/2$ 处交错磁化强度和能量对 θ 的一阶导数曲线的行为是一致的，都表明此处发生的是一级相变。

在铁磁，反铁磁和四极相，交错四极矩 Q_s^{zz} 如预期的为零。但是令人吃惊的是，在经典理论认为存在交错四极矩的区域 $\pi/4 < \theta < \pi/2$ ， Q_s^{zz} 依然为零。也就是说，量子涨落完全压制了交错四极矩的产生，这与之前在三角晶格和正方晶格上的研究结果不同[133, 134]。更有趣的是，与之相关的临界点从 $\pi/4$ 偏移到了约 0.19π ，因此自旋1的SU(3)反铁磁海森堡模型不存在任何形式的磁性长程序。

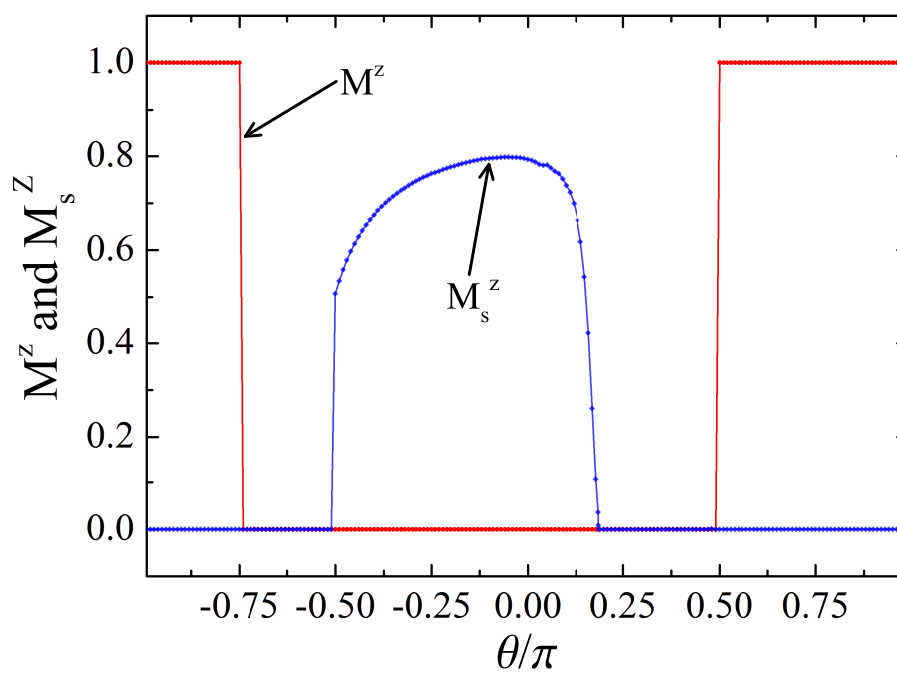


图 5.8: 每格点的磁化强度（红线）和交错磁化强度（蓝线）关于 θ 的函数。

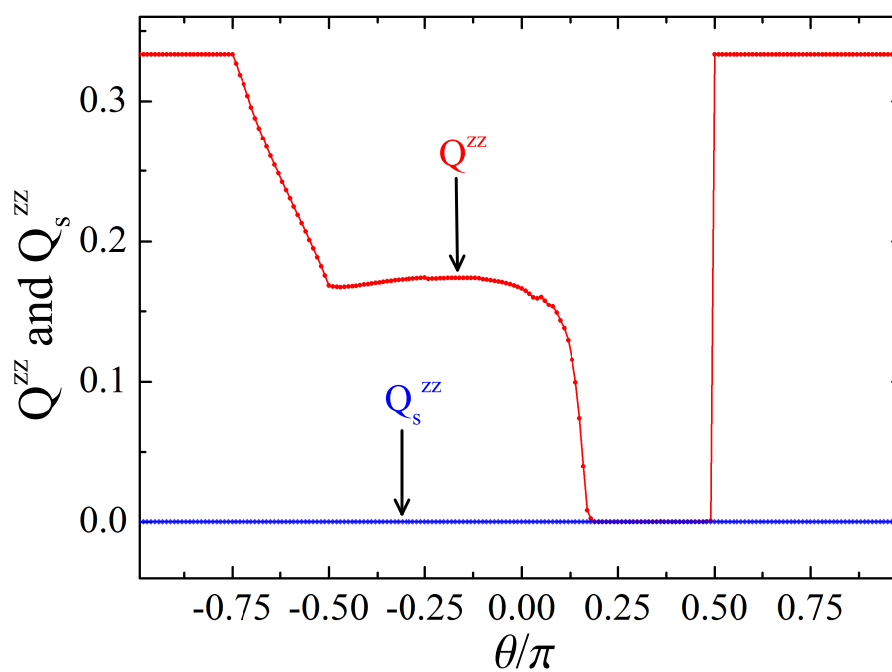


图 5.9: 每格点的四极矩（红线）和交错四极矩（蓝线）关于 θ 的函数。

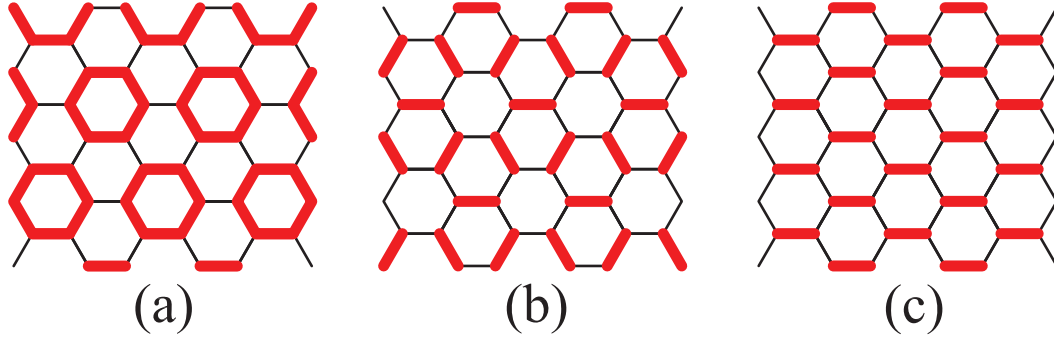


图 5.10: 计算中考虑的三种可能的价键固体态的图形表示。(a)、(b) 和 (c) 分别被称为plaquette、columnar、staggered价键固体态。图中红色粗线表示较强的关联；黑色细线表示较弱的关联。

为了更进一步表征当 $\theta_d < \theta < \pi/2$ ，基态为何种相，我们考虑了如图5.10所示蜂窝晶格三种可能的价键固体态。我们发现不管我们取哪种价键固体态作为初态波函数，最后虚时演化至收敛的基态都是plaquette价键固体态（图5.10(a)）。因此，plaquette价键固体态的基态在各种可能的状态中能量是最低的。这种plaquette价键固体态破缺了晶格的平移对称性，而保持了自旋的SU(2)对称性。这里我们给出对于系统形成plaquette价键固体态的形象理解：在晶格的1/3个最小六边形中，自旋1的6个格点为了最小化能量形成类似于在一维有能隙的Haldane相的价键固体相。

为了定量的描述plaquette价键固体态，我们定义并计算了如下plaquette序参量

$$P = \frac{\sum_{\langle i,j \rangle \in red} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle}{2 \sum_{\langle i,j \rangle \in black} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle} - 1, \quad (5.56)$$

其中 $\langle i, j \rangle \in red (black)$ 表示图5.10 (a) 中红色（黑色）键相连的两个最近邻的自旋。图5.11展示了反铁磁序和plaquette 序参量 P 关于 θ 的函数。plaquette序和反铁磁序均连续并同时临界点 θ_d 变为零。这个结果表明，从plaquette相到反铁磁相的转变应该是一个二级相变，这与图5.7中能量对 θ 的一阶导数和二阶导数的行为是一致的。然而由于采用的张量网络波函数的维数有限，所以我们不能完全排除这也可能是一个非常弱的一级相变。

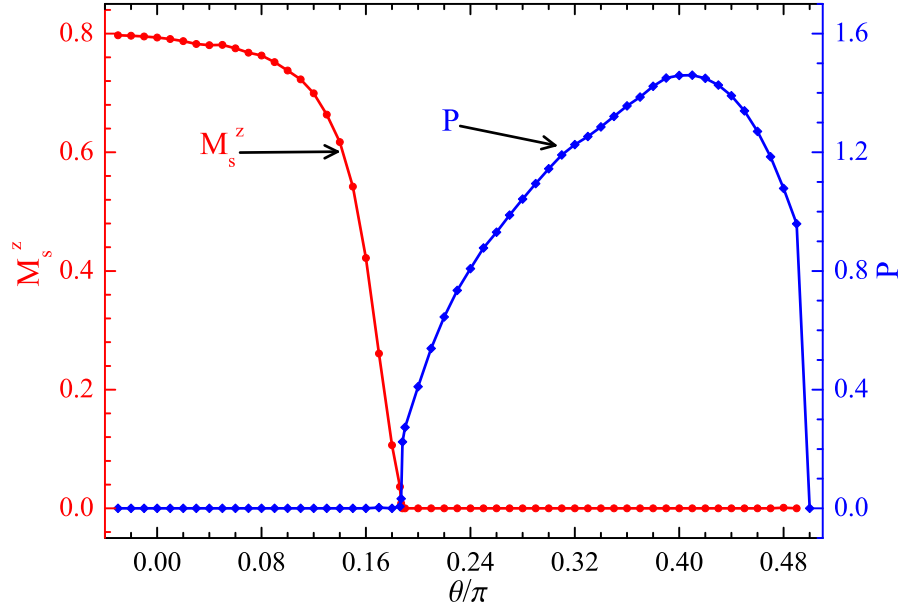


图 5.11: 反铁磁序和plaquette序参量关于 θ 的函数。这两个序都在 $\theta_d \approx 0.19\pi$ 同时消失。

5.4 讨论

理论上已经预言，从反铁磁态到破缺晶格对称性的价键固体态可以是一个直接的二级相变，这就是所谓的退禁闭量子相变。这个理论认为反铁磁序的拓扑缺陷（Skyrmion）具有有限晶格动量，因此当Skyrmion增加以至于破坏了反铁磁长程序之后，系统会自动进入价键固体相。之前对退禁闭量子相变的研究大多集中于自旋 $\frac{1}{2}$ 的体系，对正方晶格自旋 $\frac{1}{2}$ 具有两体和四体相互作用的模型的量子蒙特卡罗模拟为这一理论提供了很强的数值证据[126–128]。我们的数值结果提出在自旋1的系统中存在退禁闭量子相变的可能。

事实上，另一种columnar价键固体态（图5.10（b））具有与plaquette价键固体态相同的晶格对称性，原则上也可以是Skyrmion凝聚相。然而当 $\theta_d < \theta < \pi/2$ ，columnar价键固体态的能量比plaquette价键固体态的能量更高。我们对此的理解是，SU(3)对称点 $\theta = \pi/4$ 包含在plaquette价键固体相中，而plaquette价键固体相可以绝热的联系到SU(3)单态相，但是columnar价键固体相不能。因此在SU(3)对称点 $\theta = \pi/4$ 附近，plaquette价键固体态的形成相比于columnar价键固体态的形成在能量上更有利。

从我们的数值结果可以看出，从反铁磁相到plaquette价键固体相的转变点为 $\theta_d < \pi/4$ ，所以蜂窝晶格SU(3)反铁磁海森堡模型的基态具有plaquette价键固体序。这个结果与文献[135]对SU(N)海森堡模型的研究一致，该研究指出SU(N)自旋趋向于形成周期性的多个自旋的单态。

第六章 总结和展望

本论文首先概略的介绍了张量网络态的性质和相关算法，然后讨论了经典统计模型的张量网络表示，并且详细介绍了收缩张量网络的二次重正化群方法，以及确定量子格点模型基态的虚时演化方法。一个局域相互作用经典统计模型能够表示成在原始晶格上或者对偶晶格上的张量网络模型。每个局域张量的阶数等于该张量网络模型所定义的晶格的配位数。在实际的计算中，张量网络模型的构造原则是使得局域张量的阶数尽可能低。例如，在研究蜂窝晶格统计模型时，应该采用定义在原始晶格上的张量网络模型；而在研究三角晶格统计模型时，应该采用定义在对偶晶格上的张量网络模型。

张量网络态的虚时演化方法是一种高效而精确的计算量子格点模型基态张量网络波函数的方法。该方法能够计算相当大维数的张量网络态，例如对于蜂窝晶格，可以计算的维数 $D \sim 70$ 。在虚时演化过程中，我们通过平均场近似计算环境的重正化效应，也就是说以定义在键上的矢量近似的刻画系统与环境之间的纠缠。这样的处理显著的减小了每一步虚时演化的截断误差，使得波函数随着迭代次数能够很快的收敛。由于Trotter-Suzuki分解和截断的误差在迭代过程中并不累积，虚时演化得到的波函数精度只取决于Trotter-Suzuki分解参数 τ ，以及张量维数 D ，与迭代过程无关。

二次重正化群是计算张量网络表示的经典统计模型热力学性质，以及计算量子格点模型张量网络波函数下的期望值的精确方法。该方法在Levin和Nave[1]提出的张量重正化群方法基础上，描述了如何系统的计算环境的重正化效应。在张量重正化群过程中，需要对两个近邻张量收缩而成的矩阵 M 进行低秩近似，Levin和Nave提出的做法是对 M 进行奇异值分解，按奇异值的大小进行截断，并截断对应的正交归一基矢，得到重正化之后的张量。这种做法仅对于局部的两个相邻张量的截断是最优的，因为其并没有考虑环境张量的影响。与DMRG类似，环境张量对系统张量 M 的影响能够极大的改变 M 的奇异值谱。因此，为了全局的优化粗粒化过程中的截断，有必要考虑环境对 M 的重正化效应，从而提高收缩张量网络的精度。二次重正化群相比于张量重正化群方法极大的减小了截断误差，从而显著地提高了计算精度。二次重正化群的关

键是在截断过程中最大化系统和环境之间的纠缠，这个思想是普遍适用。它不仅能够应用于张量网络模型，也能够推广到解决其他系统可二分为相互关联的两部分的物理问题。

虚时演化方法和二次重正化群方法也能够应用于计算有限尺寸晶格，并且不必限制系统具有平移对称性或者旋转对称性。在如此情况下，我们需要独立的处理每一个张量，因此计算的时间和空间开销随着晶格尺寸增加而线性增长。

张量网络波函数为二维量子格点模型的基态提供了一个很好的描述。对于蜂窝晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型，用张量网络态计算的基态能量随着张量键指标 D 的增加很快收敛。我们通过SRG计算的 $D = 20$ 的基态能量已经基本上达到了最新的量子蒙特卡罗的计算精度。通过进一步增大 D 和减小SRG中的截断误差，我们相信可以得到更精确的基态能量。

张量网络态满足纠缠熵的面积定理。因此，张量网络态可以很精确的抓住系统的短程关联特征。另一方面，任何两个局域算符在张量网络态中求出的关联函数都是短程的。也就是说张量网络态的低能激发谱是有能隙的。因此，有限的键维数的张量网络态并不能很好的描述系统的长程关联。这导致采用张量网络态计算无能隙系统的长程序，例如计算蜂窝晶格 $S = \frac{1}{2}$ 反铁磁海森堡模型的交错磁化强度时，会出现比较大的误差。为了解决这个问题，需要增大张量键指标的维数，或者改用其他类型的张量网络波函数使之能够超越纠缠熵的面积定理。

我们采用张量网络态算法精确计算了蜂窝晶格自旋1双线性双二次海森堡模型的基态相图。我们发现半经典理论预言基态存在的铁磁序，四极序，和反铁磁序的大部分都是稳定存在的。然而，半经典理论认为存在的交错四极序却被量子涨落所压制，并且在这个区域也不存在任何形式的磁性长程序。在这个区域的稳定基态为plaquette价键固体态。这样的基态破缺了晶格的平移对称性，而保持了自旋的SU(2)对称性。更进一步的计算发现，从反铁磁态到plaquette价键固体态的量子相变很可能是一个直接的二级相变，或者是非常弱的一级相变。如果是一个直接的二级相变，那么这应该是一个退禁闭量子相变。为了确定这个相变点的性质，未来可以对该处的临界行为做进一步的研究。

近年来，张量网络算法得到了迅速的发展，使我们对强关联系统的物理图

像得到了更深入的理解。然而，张量网络算法本身依然有很大的发展空间，首当其冲的问题就是如何精确的确定量子格点模型基态张量网络波函数。对于张量网络态，现在还不知道能否将其变换到对应的正则形式。Bethe晶格近似虚时演化方法通过引入键矢量粗略的计入环境的影响。虽然并没有严格证明该方法能否近似最优的得到基态张量网络态，但是经验证据表明在对不少模型的计算能得到很好的结果。然而，由于在Bethe晶格近似中并没有计入环境中长程关联，计算更倾向于得到短程关联的态。所以，在具有长程关联，比如在连续相变点附近的系统中，Bethe晶格近似很难抓住系统的物理性质。整体更新虚时演化方法在原理上讲是最精确的，但是计算中需要类似于计算期望值的过程，即收缩整个张量网络，所以计算的复杂度很高。而且更为严重的是，当增加张量的维数后，计算会变得不稳定。集团更新虚时演化方法既能够比Bethe晶格近似更精确的抓住长程关联的性质，又能够将计算代价控制在可以接受的范围，还能够避免虚时演化过程中的不稳定性。这可能是未来改进虚时演化方法的正确思路。

本论文主要讨论了如何采用张量网络算法计算量子格点模型的基态，这也是现有的大多数基于张量网络的数值计算所着力研究的方向。为了更全面的抓住系统的性质，也为了使数值计算与实验结合的更紧密，非常需要计算系统的热力学性质。在张量网络态的算法框架下，计算系统的热力学相比于基态要困难得多。这是因为如果计算一个 N 维格点模型的热力学性质，需要收缩 $N+1$ 维的张量网络。尽管如此，还是有不少工作试图用张量网络算法计算格点模型的热力学，得到了不错的结果[136–139]。然而，发展更为精确计算量子格点模型热力学的张量网络算法依然是一个很有挑战性的课题。

对于量子化学的问题，DMRG已经被用于计算一些小分子的性质[140–142]。分子轨道的排布不像晶格的格点具有规则的几何构形，DMRG的策略是将轨道强行排布成一条链。虽然很多工作对优化轨道的排布顺序做了诸多尝试[143–146]，但是并没有找到一种可靠的方法来选择优化的排布，并且本质上讲一维排布的轨道也难以准确描述分子轨道的构形。文献[147]采用了一种张量网络，原理上可以更加无偏的描述轨道之间的相互关联。虽然该方法面临如何有效地优化变分参数的问题，但其采用张量网络计算没有晶格结构的系统的思路无疑是有启发意义的。

张量网络算法发轫于量子信息理论和密度矩阵重正化群方法，在很短的时

间取得了迅猛的进展。现在，张量网络算法已经广泛的用于求解经典统计模型的热力学，量子格点模型的基态和热力学，量子化学等诸多领域，大大拓宽了数值求解强关联系统的范围。然而张量网络算法远未成熟，仍存在巨大的发展空间。相信在不远的将来，张量网络算法有望解决以往的方法难以计算的凝聚态强关联问题，从而让人们对于诸多新奇的凝聚态现象有更深刻的认识。

参考文献

- [1] Michael Levin and Cody P. Nave. Tensor renormalization group approach to two-dimensional classical lattice models. *Phys. Rev. Lett.*, 99:120601, Sep 2007.
- [2] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2863–2866, Nov 1992.
- [3] Steven R. White. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B*, 48:10345–10356, Oct 1993.
- [4] D. M. Ceperley and B. J. Alder. Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Phys. Rev. Lett.*, 45:566–569, Aug 1980.
- [5] Tomotoshi Nishino. Density matrix renormalization group method for 2d classical models. *Journal of the Physical Society of Japan*, 64(10):3598–3601, 1995.
- [6] R J Bursill, T Xiang, and G A Gehring. The density matrix renormalization group for a quantum spin chain at non-zero temperature. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 8(40):L583, 1996.
- [7] Xiaoqun Wang and Tao Xiang. Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems. *Phys. Rev. B*, 56:5061–5064, Sep 1997.
- [8] Tao Xiang and Xiaoqun Wang. Quantum transfer-matrix and momentum-space dmrg. In Ingo Peschel, Matthias Kaulke, Xiaoqun Wang, and Karen Hallberg, editors, *Density-Matrix Renormalization*, volume 528 of *Lecture Notes in Physics*, pages 149–172. Springer Berlin Heidelberg, 1999.

- [9] Karen A. Hallberg. Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low-dimensional systems. *Phys. Rev. B*, 52:R9827–R9830, Oct 1995.
- [10] Till D. Kühner and Steven R. White. Dynamical correlation functions using the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, 60:335–343, Jul 1999.
- [11] H. G. Luo, T. Xiang, and X. Q. Wang. Comment on “time-dependent density-matrix renormalization group: A systematic method for the study of quantum many-body out-of-equilibrium systems”. *Phys. Rev. Lett.*, 91:049701, Jul 2003.
- [12] Guifré Vidal. Efficient simulation of one-dimensional quantum many-body systems. *Phys. Rev. Lett.*, 93:040502, Jul 2004.
- [13] Steven R. White and Adrian E. Feiguin. Real-time evolution using the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. Lett.*, 93:076401, Aug 2004.
- [14] A J Daley, C Kollath, U Schollwöck, and G Vidal. Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective hilbert spaces. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2004(04):P04005, 2004.
- [15] F. Verstraete, J. J. García-Ripoll, and J. I. Cirac. Matrix product density operators: Simulation of finite-temperature and dissipative systems. *Phys. Rev. Lett.*, 93:207204, Nov 2004.
- [16] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio. *Colloquium* : Area laws for the entanglement entropy. *Rev. Mod. Phys.*, 82:277–306, Feb 2010.
- [17] G Vitagliano, A Riera, and J I Latorre. Volume-law scaling for the entanglement entropy in spin-1/2 chains. *New Journal of Physics*, 12(11):113049, 2010.

- [18] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev. Entanglement in quantum critical phenomena. *Phys. Rev. Lett.*, 90:227902, Jun 2003.
- [19] M B Hastings. An area law for one-dimensional quantum systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2007(08):P08024, 2007.
- [20] Christoph Holzhey, Finn Larsen, and Frank Wilczek. Geometric and renormalized entropy in conformal field theory. *Nuclear Physics B*, 424(3):443 – 467, 1994.
- [21] Pasquale Calabrese and John Cardy. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2004(06):P06002, 2004.
- [22] Mark Srednicki. Entropy and area. *Phys. Rev. Lett.*, 71:666–669, Aug 1993.
- [23] Michael Levin and Xiao-Gang Wen. Detecting topological order in a ground state wave function. *Phys. Rev. Lett.*, 96:110405, Mar 2006.
- [24] Alexei Kitaev and John Preskill. Topological entanglement entropy. *Phys. Rev. Lett.*, 96:110404, Mar 2006.
- [25] Eduardo Fradkin and Joel E. Moore. Entanglement entropy of 2d conformal quantum critical points: Hearing the shape of a quantum drum. *Phys. Rev. Lett.*, 97:050404, Aug 2006.
- [26] H. Casini and M. Huerta. Universal terms for the entanglement entropy in dimensions. *Nuclear Physics B*, 764(3):183 – 201, 2007.
- [27] Max A. Metlitski, Carlos A. Fuertes, and Subir Sachdev. Entanglement entropy in the $o(n)$ model. *Phys. Rev. B*, 80:115122, Sep 2009.
- [28] Michael M. Wolf. Violation of the entropic area law for fermions. *Phys. Rev. Lett.*, 96:010404, Jan 2006.
- [29] Norbert Schuch, Michael M. Wolf, Frank Verstraete, and J. Ignacio Cirac. Entropy scaling and simulability by matrix product states. *Phys. Rev. Lett.*, 100:030504, Jan 2008.

- [30] R. J. Baxter. Dimers on a rectangular lattice. *Journal of Mathematical Physics*, 9(4):650–654, 1968.
- [31] M. Fannes, B. Nachtergaele, and R.F. Werner. Finitely correlated states on quantum spin chains. *Communications in Mathematical Physics*, 144(3):443–490, 1992.
- [32] H Niggemann and J Zittartz. Optimum ground states for spin-3/2 chains. *Zeitschrift für physik b-condensed matter*, 101(2):289–297, OCT 1996.
- [33] Stellan Östlund and Stefan Rommer. Thermodynamic limit of density matrix renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3537–3540, Nov 1995.
- [34] Y.-Y. Shi, L.-M. Duan, and G. Vidal. Classical simulation of quantum many-body systems with a tree tensor network. *Phys. Rev. A*, 74:022320, Aug 2006.
- [35] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac. Matrix product state representations. *Quantum Info. Comput.*, 7(5):401–430, July 2007.
- [36] R. Orús and G. Vidal. Infinite time-evolving block decimation algorithm beyond unitary evolution. *Phys. Rev. B*, 78:155117, Oct 2008.
- [37] F. Verstraete, V. Murg, and J.I. Cirac. Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems. *Advances in Physics*, 57(2):143–224, 2008.
- [38] G. Vidal. Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in one spatial dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 98:070201, Feb 2007.
- [39] G. Sierra and M. A. Martin-Delgado. The Density Matrix Renormalization Group, Quantum Groups and Conformal Field Theory. *eprint arXiv:cond-mat/9811170*, November 1998.
- [40] Tomotoshi Nishino and Kouichi Okunishi. A density matrix algorithm for 3d classical models. *Journal of the Physical Society of Japan*, 67(9):3066–3072, 1998.

- [41] T. Nishino, K. Okunishi, Y. Hieida, N. Maeshima, and Y. Akutsu. Self-consistent tensor product variational approximation for 3d classical models. *Nuclear Physics B*, 575(3):504 – 512, 2000.
- [42] Y. Nishio, N. Maeshima, A. Gendiar, and T. Nishino. Tensor Product Variational Formulation for Quantum Systems. *eprint arXiv:cond-mat/0401115*, January 2004.
- [43] F. Verstraete and J. I. Cirac. Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions. *eprint arXiv:cond-mat/0407066*, July 2004.
- [44] J. Jordan, R. Orús, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in two spatial dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 101:250602, Dec 2008.
- [45] H Niggemann, A Klumper, and J Zittartz. Quantum phase transition in spin-3/2 systems on the hexagonal lattice - optimum ground state approach. *Zeitschrift fur physik b-condensed matter*, 104(1):103–110, AUG 1997.
- [46] Yasuhiro Hieida, Kouichi Okunishi, and Yasuhiro Akutsu. Numerical renormalization approach to two-dimensional quantum antiferromagnets with valence-bond-solid type ground state. *New Journal of Physics*, 1(1):7, 1999.
- [47] Tomotoshi Nishino, Yasuhiro Hieida, Kouichi Okunishi, Nobuya Maeshima, Yasuhiro Akutsu, and Andrej Gendiar. Two-dimensional tensor product variational formulation. *Progress of Theoretical Physics*, 105(3):409–417, 2001.
- [48] Nobuya Maeshima, Yasuhiro Hieida, Yasuhiro Akutsu, Tomotoshi Nishino, and Kouichi Okunishi. Vertical density matrix algorithm: A higher-dimensional numerical renormalization scheme based on the tensor product state ansatz. *Phys. Rev. E*, 64:016705, Jun 2001.

- [49] Andrej Gendiar, Nobuya Maeshima, and Tomotoshi Nishino. Stable optimization of a tensor product variational state. *Progress of Theoretical Physics*, 110(4):691–699, 2003.
- [50] A Gendiar, T Nishino, and R Derian. Estimation of the magnetic critical exponent by tensor product variational approach. *Acta physica slovac*a, 55(2):141–148, APR 2005.
- [51] H. C. Jiang, Z. Y. Weng, and T. Xiang. Accurate determination of tensor network state of quantum lattice models in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 101:090603, Aug 2008.
- [52] Zheng-Cheng Gu, Michael Levin, and Xiao-Gang Wen. Tensor-entanglement renormalization group approach as a unified method for symmetry breaking and topological phase transitions. *Phys. Rev. B*, 78:205116, Nov 2008.
- [53] Z. Y. Xie, H. C. Jiang, Q. N. Chen, Z. Y. Weng, and T. Xiang. Second renormalization of tensor-network states. *Phys. Rev. Lett.*, 103:160601, Oct 2009.
- [54] Román Orús and Guifré Vidal. Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited: Corner transfer matrix for tensor contraction. *Phys. Rev. B*, 80:094403, Sep 2009.
- [55] Ling Wang, Iztok Pižorn, and Frank Verstraete. Monte carlo simulation with tensor network states. *Phys. Rev. B*, 83:134421, Apr 2011.
- [56] Iztok Pižorn, Ling Wang, and Frank Verstraete. Time evolution of projected entangled pair states in the single-layer picture. *Phys. Rev. A*, 83:052321, May 2011.
- [57] V. Murg, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Variational study of hard-core bosons in a two-dimensional optical lattice using projected entangled pair states. *Phys. Rev. A*, 75:033605, Mar 2007.

-
- [58] Jacob Jordan, Román Orús, and Guifré Vidal. Numerical study of the hard-core bose-hubbard model on an infinite square lattice. *Phys. Rev. B*, 79:174515, May 2009.
- [59] Pochung Chen, Chen-Yen Lai, and Min-Fong Yang. Numerical study of spin-1/2 xxz model on square lattice from tensor product states. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2009(10):P10001, 2009.
- [60] A. Isacsson and Olav F. Syljuåsen. Variational treatment of the shastry-sutherland antiferromagnet using projected entangled pair states. *Phys. Rev. E*, 74:026701, Aug 2006.
- [61] V. Murg, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Exploring frustrated spin systems using projected entangled pair states. *Phys. Rev. B*, 79:195119, May 2009.
- [62] Bo Li, Sheng-Hao Li, and Huan-Qiang Zhou. Quantum phase transitions in a two-dimensional quantum xyx model: Ground-state fidelity and entanglement. *Phys. Rev. E*, 79:060101, Jun 2009.
- [63] Pochung Chen, Chen-Yen Lai, and Min-Fong Yang. Field-induced spin supersolidity in frustrated $s = \frac{1}{2}$ spin-dimer models. *Phys. Rev. B*, 81:020409, Jan 2010.
- [64] Y.-H. Chan, Y.-J. Han, and L.-M. Duan. Supersolid and charge-density-wave states from anisotropic interaction in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, 82:053607, Nov 2010.
- [65] Michael Lubasch, Valentin Murg, Ulrich Schneider, J. Ignacio Cirac, and Mari-Carmen Bañuls. Adiabatic preparation of a heisenberg antiferromagnet using an optical superlattice. *Phys. Rev. Lett.*, 107:165301, Oct 2011.
- [66] Norbert Schuch, Michael M. Wolf, Frank Verstraete, and J. Ignacio Cirac. Computational complexity of projected entangled pair states. *Phys. Rev. Lett.*, 98:140506, Apr 2007.

- [67] Tomotoshi Nishino and Kouichi Okunishi. Corner transfer matrix renormalization group method. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65(4):891–894, 1996.
- [68] Philippe Corboz, Jacob Jordan, and Guifré Vidal. Simulation of fermionic lattice models in two dimensions with projected entangled-pair states: Next-nearest neighbor hamiltonians. *Phys. Rev. B*, 82:245119, Dec 2010.
- [69] H. H. Zhao, Z. Y. Xie, Q. N. Chen, Z. C. Wei, J. W. Cai, and T. Xiang. Renormalization of tensor-network states. *Phys. Rev. B*, 81:174411, May 2010.
- [70] F.D.M. Haldane. Continuum dynamics of the 1-d heisenberg antiferromagnet: Identification with the $o(3)$ nonlinear sigma model. *Physics Letters A*, 93(9):464 – 468, 1983.
- [71] F. D. M. Haldane. Nonlinear field theory of large-spin heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis néel state. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1153–1156, Apr 1983.
- [72] Michael N. Barber and Murray T. Batchelor. Spectrum of the biquadratic spin-1 antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. B*, 40:4621–4626, Sep 1989.
- [73] A. Klümper. New results for q -state vertex models and the pure biquadratic spin-1 hamiltonian. *EPL (Europhysics Letters)*, 9(8):815, 1989.
- [74] Y. Xian. Exact results of dimerization order parameter in $su(n)$ antiferromagnetic chains. *Physics Letters A*, 183(5-6):437 – 440, 1993.
- [75] G. Fáth and J. Sólyom. Period tripling in the bilinear-biquadratic antiferromagnetic $S = 1$ chain. *Phys. Rev. B*, 44:11836–11844, Dec 1991.
- [76] Chigak Itoi and Masa-Hide Kato. Extended massless phase and the haldane phase in a spin-1 isotropic antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. B*, 55:8295–8303, Apr 1997.

-
- [77] A. V. Chubukov. Fluctuations in spin nematics. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2(6):1593, 1990.
- [78] A. V. Chubukov. Spontaneous dimerization in quantum-spin chains. *Phys. Rev. B*, 43:3337–3344, Feb 1991.
- [79] Naoki Kawashima. Quantum monte carlo methods. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 145:138–149, 2002.
- [80] B. A. Ivanov and A. K. Kolezhuk. Effective field theory for the $s = 1$ quantum nematic. *Phys. Rev. B*, 68:052401, Aug 2003.
- [81] Andreas Läuchli, Guido Schmid, and Simon Trebst. Spin nematics correlations in bilinear-biquadratic $s = 1$ spin chains. *Phys. Rev. B*, 74:144426, Oct 2006.
- [82] D. Porras, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Renormalization algorithm for the calculation of spectra of interacting quantum systems. *Phys. Rev. B*, 73:014410, Jan 2006.
- [83] Matteo Rizzi, Davide Rossini, Gabriele De Chiara, Simone Montangero, and Rosario Fazio. Phase diagram of spin-1 bosons on one-dimensional lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 95:240404, Dec 2005.
- [84] K. Buchta, G. Fáth, Ö. Legeza, and J. Sólyom. Probable absence of a quadrupolar spin-nematic phase in the bilinear-biquadratic spin-1 chain. *Phys. Rev. B*, 72:054433, Aug 2005.
- [85] Sara Bergkvist, Ian P. McCulloch, and Anders Rosengren. Spinful bosons in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, 74:053419, Nov 2006.
- [86] H. H. Chen and Peter M. Levy. Dipole and quadrupole phase transitions in spin-1 models. *Phys. Rev. B*, 7:4267–4284, May 1973.
- [87] N. Papanicolaou. Unusual phases in quantum spin-1 systems. *Nuclear Physics B*, 305(3):367 – 395, 1988.

- [88] Tamás A. Tóth, Andreas M. Läuchli, Frédéric Mila, and Karlo Penc. Three-sublattice ordering of the $su(3)$ heisenberg model of three-flavor fermions on the square and cubic lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 105:265301, Dec 2010.
- [89] Tamás A. Tóth, Andreas M. Läuchli, Frédéric Mila, and Karlo Penc. Competition between two- and three-sublattice ordering for $s = 1$ spins on the square lattice. *Phys. Rev. B*, 85:140403, Apr 2012.
- [90] Bela Bauer, Philippe Corboz, Andreas M. Läuchli, Laura Messio, Karlo Penc, Matthias Troyer, and Frédéric Mila. Three-sublattice order in the $su(3)$ heisenberg model on the square and triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 85:125116, Mar 2012.
- [91] Kenji Harada and Naoki Kawashima. Loop algorithm for heisenberg models with biquadratic interaction and phase transitions in two dimensions. *Journal of the Physical Society of Japan*, 70(1):13–16, 2001.
- [92] Kenji Harada and Naoki Kawashima. Quadrupolar order in isotropic heisenberg models with biquadratic interaction. *Phys. Rev. B*, 65:052403, Jan 2002.
- [93] Satoru Nakatsuji, Yusuke Nambu, Hiroshi Tonomura, Osamu Sakai, Seth Jonas, Collin Broholm, Hirokazu Tsunetsugu, Yiming Qiu, and Yoshiteru Maeno. Spin disorder on a triangular lattice. *Science*, 309(5741):1697–1700, 2005.
- [94] J. G. Cheng, G. Li, L. Balicas, J. S. Zhou, J. B. Goodenough, Cenke Xu, and H. D. Zhou. High-pressure sequence of $ba_3nib_2O_9$ structural phases: New $s = 1$ quantum spin liquids based on ni^{2+} . *Phys. Rev. Lett.*, 107:197204, Nov 2011.
- [95] Hirokazu Tsunetsugu and Mitsuhiro Arikawa. Spin nematic phase in $s = 1$ triangular antiferromagnets. *Journal of the Physical Society of Japan*, 75(8):083701, 2006.

-
- [96] T. Senthil, Ashvin Vishwanath, Leon Balents, Subir Sachdev, and Matthew P. A. Fisher. Deconfined quantum critical points. *Science*, 303(5663):1490–1494, 2004.
- [97] T. Senthil, Leon Balents, Subir Sachdev, Ashvin Vishwanath, and Matthew P. A. Fisher. Quantum criticality beyond the landau-ginzburg-wilson paradigm. *Phys. Rev. B*, 70:144407, Oct 2004.
- [98] G. H. Wannier. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Phys. Rev.*, 79:357–364, Jul 1950.
- [99] G. H. Wannier. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Phys. Rev. B*, 7:5017–5017, Jun 1973.
- [100] Kenneth G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, 47:773–840, Oct 1975.
- [101] Z. Y. Xie, H. C. Jiang, Z. Y. Weng, and T. Xiang. Second Renormalization of Tensor-Network States. *eprint arXiv:0809.0182v1*, September 2008.
- [102] A. W. Sandvik and G. Vidal. Variational quantum monte carlo simulations with tensor-network states. *Phys. Rev. Lett.*, 99:220602, Nov 2007.
- [103] Wei Li, Jan von Delft, and Tao Xiang. Efficient simulation of infinite tree tensor network states on the bethe lattice. *Phys. Rev. B*, 86:195137, Nov 2012.
- [104] L. Wang and F. Verstraete. Cluster update for tensor network states. *ArXiv e-prints*, October 2011.
- [105] U. Löw. Properties of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg model on a honeycomb lattice with interlayer coupling. *Condensed matter physics*, 12(3):497–506, 2009.
- [106] Zheng Weihong, J. Oitmaa, and C. J. Hamer. Second-order spin-wave results for the quantum XXZ and XY models with anisotropy. *Phys. Rev. B*, 44:11869–11881, Dec 1991.

- [107] J. Oitmaa, C. J. Hamer, and Zheng Weihong. Quantum magnets on the honeycomb and triangular lattices at $T = 0$. *Phys. Rev. B*, 45:9834–9841, May 1992.
- [108] Anders W. Sandvik. Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional heisenberg model. *Phys. Rev. B*, 56:11678–11690, Nov 1997.
- [109] H. H. Zhao, Cenke Xu, Q. N. Chen, Z. C. Wei, M. P. Qin, G. M. Zhang, and T. Xiang. Plaquette order and deconfined quantum critical point in the spin-1 bilinear-biquadratic heisenberg model on the honeycomb lattice. *Phys. Rev. B*, 85:134416, Apr 2012.
- [110] P.W. Anderson. Resonating valence bonds: A new kind of insulator? *Materials Research Bulletin*, 8(2):153 – 160, 1973.
- [111] Satoshi Yamashita, Yasuhiro Nakazawa, Masaharu Oguni, Yugo Oshima, Hiroyuki Nojiri, Yasuhiro Shimizu, Kazuya Miyagawa, and Kazushi Kanoda. Thermodynamic properties of a spin-1/2 spin-liquid state in a kappa-type organic salt. *Nature Physics*, 4(6):459–462, JUN 2008.
- [112] Minoru Yamashita, Norihito Nakata, Yuichi Kasahara, Takahiko Sasaki, Naoki Yoneyama, Norio Kobayashi, Satoshi Fujimoto, Takasada Shibauchi, and Yuji Matsuda. Thermal-transport measurements in a quantum spin-liquid state of the frustrated triangular magnet kappa-(BEDT-TTF)(2)Cu₂(CN)(3). *Nature Physics*, 5(1):44–47, JAN 2009.
- [113] Minoru Yamashita, Norihito Nakata, Yoshinori Senshu, Masaki Nagata, Hiroshi M. Yamamoto, Reizo Kato, Takasada Shibauchi, and Yuji Matsuda. Highly mobile gapless excitations in a two-dimensional candidate quantum spin liquid. *Science*, 328(5983):1246–1248, 2010.
- [114] T. Itou, A. Oyamada, S. Maegawa, and R. Kato. Instability of a quantum spin liquid in an organic triangular-lattice antiferromagnet. *Nature Physics*, 6(9):673–676, SEP 10 2010.

- [115] G. Misguich, B. Bernu, C. Lhuillier, and C. Waldtmann. Spin liquid in the multiple-spin exchange model on the triangular lattice: ^3He on graphite. *Phys. Rev. Lett.*, 81:1098–1101, Aug 1998.
- [116] J. S. Helton, K. Matan, M. P. Shores, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, Y. Yoshida, Y. Takano, A. Suslov, Y. Qiu, J.-H. Chung, D. G. Nocera, and Y. S. Lee. Spin dynamics of the spin-1/2 kagome lattice antiferromagnet $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 98:107204, Mar 2007.
- [117] S.-H. Lee, H. Kikuchi, Y. Qiu, B. Lake, Q. Huang, K. Habicht, and K. Kiefer. Quantum-spin-liquid states in the two-dimensional kagome antiferromagnets $\text{Zn}_x\text{Cu}_{4-x}(\text{OD})_6\text{Cl}_2$. *Nature Materials*, 6(11):853–857, NOV 2007.
- [118] Yoshihiko Okamoto, Hiroyuki Yoshida, and Zenji Hiroi. Vesignieite $\text{BaCu}_3\text{V}_2\text{O}_8(\text{OH})_2$ as a candidate spin-1/2 kagome antiferromagnet. *Journal of the Physical Society of Japan*, 78(3):033701, 2009.
- [119] Zenji Hiroi, Masafumi Hanawa, Naoya Kobayashi, Minoru Nohara, Hidenori Takagi, Yoshitomo Kato, and Masashi Takigawa. Spin-1/2 *Kagomé*-like lattice in volborthite $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. *Journal of the Physical Society of Japan*, 70(11):3377–3384, 2001.
- [120] Simeng Yan, David A. Huse, and Steven R. White. Spin-liquid ground state of the $s = 1/2$ kagome heisenberg antiferromagnet. *Science*, 332(6034):1173–1176, 2011.
- [121] Fa Wang. Schwinger boson mean field theories of spin liquid states on a honeycomb lattice: Projective symmetry group analysis and critical field theory. *Phys. Rev. B*, 82:024419, Jul 2010.
- [122] B. K. Clark, D. A. Abanin, and S. L. Sondhi. Nature of the spin liquid state of the hubbard model on a honeycomb lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 107:087204, Aug 2011.

- [123] A. F. Albuquerque, D. Schwandt, B. Hetényi, S. Capponi, M. Mambrini, and A. M. Läuchli. Phase diagram of a frustrated quantum antiferromagnet on the honeycomb lattice: Magnetic order versus valence-bond crystal formation. *Phys. Rev. B*, 84:024406, Jul 2011.
- [124] Johannes Reuther, Dmitry A. Abanin, and Ronny Thomale. Magnetic order and paramagnetic phases in the quantum J_1 - J_2 - J_3 honeycomb model. *Phys. Rev. B*, 84:014417, Jul 2011.
- [125] Z. Y. Meng, T. C. Lang, S. Wessel, F. F. Assaad, and A. Muramatsu. Quantum spin liquid emerging in two-dimensional correlated Dirac fermions. *Nature*, 464(7290):847–U50, APR 8 2010.
- [126] Anders W. Sandvik. Evidence for deconfined quantum criticality in a two-dimensional heisenberg model with four-spin interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 98:227202, Jun 2007.
- [127] Jie Lou, Anders W. Sandvik, and Naoki Kawashima. Antiferromagnetic to valence-bond-solid transitions in two-dimensional $SU(n)$ heisenberg models with multispin interactions. *Phys. Rev. B*, 80:180414, Nov 2009.
- [128] Roger G. Melko and Ribhu K. Kaul. Scaling in the fan of an unconventional quantum critical point. *Phys. Rev. Lett.*, 100:017203, Jan 2008.
- [129] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 59:799–802, Aug 1987.
- [130] Assa Auerbach. *Interacting electrons and quantum magnetism*. Springer New York, 1994.
- [131] W. Marshall. Antiferromagnetism. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 232(1188):48–68, 1955.

-
- [132] T. Xiang and G. A. Gehring. Numerical solution of $S = 1$ antiferromagnetic spin chains using a truncated basis expansion. *Phys. Rev. B*, 48:303–310, Jul 1993.
- [133] Andreas Läuchli, Frédéric Mila, and Karlo Penc. Quadrupolar phases of the $s = 1$ bilinear-biquadratic heisenberg model on the triangular lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 97:087205, Aug 2006.
- [134] Tamás A. Tóth, Andreas M. Läuchli, Frédéric Mila, and Karlo Penc. Three-sublattice ordering of the $su(3)$ heisenberg model of three-flavor fermions on the square and cubic lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 105:265301, Dec 2010.
- [135] Michael Hermele, Victor Gurarie, and Ana Maria Rey. Mott insulators of ultracold fermionic alkaline earth atoms: Underconstrained magnetism and chiral spin liquid. *Phys. Rev. Lett.*, 103:135301, Sep 2009.
- [136] Z. Y. Xie, J. Chen, M. P. Qin, J. W. Zhu, L. P. Yang, and T. Xiang. Coarse-graining renormalization by higher-order singular value decomposition. *Phys. Rev. B*, 86:045139, Jul 2012.
- [137] Wei Li, Shi-Ju Ran, Shou-Shu Gong, Yang Zhao, Bin Xi, Fei Ye, and Gang Su. Linearized tensor renormalization group algorithm for the calculation of thermodynamic properties of quantum lattice models. *Phys. Rev. Lett.*, 106:127202, Mar 2011.
- [138] Shi-Ju Ran, Wei Li, Bin Xi, Zhe Zhang, and Gang Su. Optimized decimation of tensor networks with super-orthogonalization for two-dimensional quantum lattice models. *Phys. Rev. B*, 86:134429, Oct 2012.
- [139] Piotr Czarnik, Lukasz Cincio, and Jacek Dziarmaga. Projected entangled pair states at finite temperature: Imaginary time evolution with ancillas. *Phys. Rev. B*, 86:245101, Dec 2012.
- [140] Steven R. White and Richard L. Martin. Ab initio quantum chemistry using the density matrix renormalization group. *The Journal of Chemical Physics*, 110(9):4127–4130, 1999.

- [141] Garnet Kin-Lic Chan, Jonathan J. Dorando, Debashree Ghosh, Johannes Hachmann, Eric Neuscamman, Haitao Wang, and Takeshi Yanai. An introduction to the density matrix renormalization group ansatz in quantum chemistry. In Stephen Wilson, Peter J. Grout, Jean Maruani, Gerardo Delgado-Barrio, and Piotr Piecuch, editors, *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics*, volume 18 of *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, pages 49–65. Springer Netherlands, 2008.
- [142] Konrad Heinrich Marti and Markus Reiher. The Density Matrix Renormalization Group Algorithm in Quantum Chemistry. *Zeitschrift für physikalische chemie-international journal of research in physical chemistry & chemical physics*, 224(3-4, SI):583–599, 2010.
- [143] Ö. Legeza and J. Sólyom. Optimizing the density-matrix renormalization group method using quantum information entropy. *Phys. Rev. B*, 68:195116, Nov 2003.
- [144] G Moritz, BA Hess, and M Reiher. Convergence behavior of the density-matrix renormalization group algorithm for optimized orbital orderings. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 122(2), JAN 8 2005.
- [145] Debashree Ghosh, Johannes Hachmann, Takeshi Yanai, and Garnet Kin-Lic Chan. Orbital optimization in the density matrix renormalization group, with applications to polyenes and ss-carotene. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 128(14), APR 14 2008.
- [146] G. Barcza, Ö. Legeza, K. H. Marti, and M. Reiher. Quantum-information analysis of electronic states of different molecular structures. *Phys. Rev. A*, 83:012508, Jan 2011.
- [147] Konrad H Marti, Bela Bauer, Markus Reiher, Matthias Troyer, and Frank Verstraete. Complete-graph tensor network states: a new fermionic wave function ansatz for molecules. *New Journal of Physics*, 12(10):103008, 2010.

-
- [148] Wei Li, Shou-Shu Gong, Yang Zhao, and Gang Su. Quantum phase transition, $o(3)$ universality class, and phase diagram of the spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg antiferromagnet on a distorted honeycomb lattice: A tensor renormalization-group study. *Phys. Rev. B*, 81:184427, May 2010.
- [149] F. D. M. Haldane. $O(3)$ nonlinear σ model and the topological distinction between integer- and half-integer-spin antiferromagnets in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 61:1029–1032, Aug 1988.
- [150] N. Read and Subir Sachdev. Spin-peierls, valence-bond solid, and néel ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 42:4568–4589, Sep 1990.

发表文章目录

- [1] **H. H. Zhao**, Z. Y. Xie, Q. N. Chen, Z. C. Wei, J. W. Cai, and T. Xiang,
Renormalization of tensor-network states.
Phys. Rev. B **81**, 174411 (2010), *Editor's suggestion*.
- [2] **H. H. Zhao**, Cenke Xu, Q. N. Chen, Z. C. Wei, M. P. Qin, G. M. Zhang
and T. Xiang,
*Plaquette order and deconfined quantum critical point in the spin-1 bilinear-
biquadratic Heisenberg model on the honeycomb lattice.*
Phys. Rev. B **85**, 134416 (2012).
- [3] Q. N. Chen, M. P. Qin, J. Chen, Z. C. Wei, **H. H. Zhao**, B. Normand, and
T. Xiang,
*Partial Order and Finite-Temperature Phase Transitions in Potts Models
on Irregular Lattices.*
Phys. Rev. Lett. **107**, 165701 (2011).
- [4] Wang Meng-Xiong, Cai Jian-Wei, Xie Zhi-Yuan, Chen Qiao-Ni, **Zhao Hui-
Hai** and Wei Zhong-Chao,
*Investigation of the Potts Model on Triangular Lattices by the Second Renor-
malization of Tensor Network States.*
Chin. Phys. Lett. Vol. **27**, No. 7 (2010) 076402.
- [5] Cai Jian-Wei, Chen Qiao-Ni, **Zhao Hui-Hai**, Xie Zhi-yuan, Qin Ming-Pu,
Wei Zhong-Chao, Xiang Tao.
Translation invariant tensor product states in a finite lattice system.
Chin. Phys. B, Vol. **20**, No. 11 (2011) 117501.

会议报告

[1] 赵汇海,

口头报告: *Generalization of Infinite Time Evolving Block Decimation Algorithm.*

中国物理学会 (CPS) 2010秋季学术会议。中国天津, 南开大学, 2010年9月16-19日。

[2] 赵汇海,

邀请报告: *Tensor Network Study for Spin-1 Bilinear Biquadratic Heisenberg Model on a Honeycomb Lattice.*

张量网络态算法研讨会, 中国重庆, 重庆大学, 2011年4月22-24日。

[3] 赵汇海,

口头报告: *Ground state phase diagram of the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model on a honeycomb lattice.*

第十一届全国磁学理论会议, 中国河北石家庄, 河北师范大学, 2011年7月9-11日。

[4] Hui-Hai Zhao,

Oral presentation: *Ground state phase diagram of the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model on a honeycomb lattice.*

The 26th international conference on low temperature physics, Aug. 10-17, 2011, Beijing, China.

[5] Hui-Hai Zhao,

Oral presentation 1: *Renormalization of Tensor-Network States.*

Oral presentation 2: *Ground state phase diagram of the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model on the honeycomb lattice.*

APS 2012 March meeting, Feb. 27 - Mar. 2, 2012, Boston, USA.

[6] Hui-Hai Zhao,

Program Talk: *Ground state phase diagram of the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model on the honeycomb lattice.*

Program 'Critical behavior of lattice models in atomic and molecular, condensed matter and particle' Jul. 24 - Oct. 31 2012, Kavli Institute for Theoretical Physics China at the Chinese Academy of Sciences, Beijing, China.

简 历

基本情况

赵汇海，男，四川省成都市人，1984 年 10 月 21日出生，未婚，中国科学院物理研究所在读博士研究生。

教育状况

2003 年 9 月至 2007 年 7 月，北京大学元培学院（原元培计划实验班），本科，专业：物理学。

2007 年 9 月至 2013 年 5 月，中国科学院物理研究所，硕博连读研究生，专业：凝聚态物理。导师：向涛研究员。

2012 年 10 月至2013 年 2 月，加州大学圣塔芭芭拉分校物理系，访问学生。导师：许岑珂教授。

主要获奖经历

2009 年度所长奖学金表彰奖。

2010 年度所长奖学金表彰奖。

2011 年度所长奖学金优秀奖。

2010 - 2011 学年中国科学院研究生院三好学生。

2012 年博士研究生国家奖学金。

联系方式

通讯地址：北京市海淀区中关村南三街8号，中国科学院物理研究所

邮编：100190

E-mail: zhaohuihai@gmail.com

致 谢

从燕园来到凝聚园，不知不觉中，已经看着园子里的玉兰花开过了第六遍。在急速燃烧的青春中，我收获的不仅是科研成果，还有成长。曾经以为理论物理研究就是在遥荡恣睢的雕琢时光中的灵感闪现，然而灵感一次次的突如其来，又一次次的被夜以继日的汗水所融化。无数石沉大海的激情和勇气告诉我，科研的世界里，没有奇迹。对于我来说，任何一点成绩都凝聚着辛勤的耕耘和身边许多人的帮助。聊以此文，表达我对他们最诚挚的感谢。

首先，我要感谢的是我的导师，向涛研究员。向老师指导了我的所有研究工作。他教会我如何将一个看上去非常复杂的任务，一点点化整为零，并最终解决。在和向老师的讨论中，向老师几乎总能解释我心中的困惑，他清晰的物理图像，给我留下了深刻的印象。每当我在科研中遇到障碍束手无策时，向老师总能一次又一次的提出非常有启发性的想法，帮助我克服难关。向老师严谨的治学态度，忘我的工作热情，广博的学识，坚如磐石、稳如泰山的科研信念，顺不妄喜、逆不惶馁的心态，以及有始有终、滴水不漏的行事风格，是我一生学习的榜样。

衷心感谢指导我部分研究工作的张广铭教授。在张老师的建议下，我们用张量网络算法计算自旋1双线性双二次海森堡模型，得到了许多新奇的结果。张老师耐心的解答我的许多问题，使我受益匪浅。衷心感谢许岑珂教授指导了我的部分研究工作，并邀请我访问加州大学圣塔芭芭拉分校物理系。和许老师的讨论让我加深了对一些物理图像的理解，对我的科研工作的思路颇有启发。感谢两位老师在我申请博士后的时候为我写推荐信，让我能够顺利找到职位。

感谢威廉玛丽学院的张世伟教授。在和张老师合作撰写一篇科普文章的过程中，我学习到了量子蒙特卡罗的基本思想以及负符号问题产生的原因。张老师在物理所访问的一年中，举办了一个关于量子蒙特卡罗的讨论班，让我获益匪浅。

感谢理论所的学生杨丽平师姐、陈巧妮师姐、陆汉涛师兄、谢志远、梁龙、睢晓红、王宗国、陆稼书、刘卯鑫、刘志远；感谢物理所的学生秦明普、魏忠超、陈靖、王顺、孔鑫、韩兴杰、黄杰、谢海东、李欣、王强、章鹏、侯

尧楠、李超；感谢物理所的博士后蔡建伟、徐鹰、余继锋、刘瑜；感谢中国科学院大学的学生李伟师兄、冉仕举；感谢清华大学物理系的学生郑东。在和诸位的讨论中，我们相互之间取长补短，时常迸发出灵感的火花。在生活中，诸位的帮助和交流也让我倍感轻松和愉快。我感到非常幸运能在生命中认识你们并一起度过快乐而充实的时光。

最后，我要感谢父母的养育之恩。他们一直都注重培养我的大局观，危机感，和纪律性，而对我具体做什么事情并不特别介意。即使不十分了解我的科研工作的意义，但父母仍然对我的工作学习生活全面的支持。他们遇到事情保持的冷静的头脑，清晰的思路，潜移默化的对我产生了积极的影响。常年在外求学，未有尽子女之孝道，常使我深感惭愧。只有更加努力专注的工作，愿未有辜负你们的期待。

日复一日，彻夜不休的研究，因为这些失去了朋友，疏远了亲人，告别了业余爱好。牺牲这些如此重要的东西却不一定能换来成果，让科研工作者依然废寝忘食地努力工作的原因到底是什么呢？这个问题，每个科研者都在寻找自己的答案。这瑰姿艳逸，气象万千的大自然，无时无刻不在吸引着我去探索其中的规律。在探索中逐渐理解大自然奥妙的乐趣，让我愿为之散尽芳华，不枉此生。