

分类号 _____

密级 _____

UDC _____

编号 _____

中国科学院研究生院

博士学位论文

基于张量网络模型(态)的重正化群方法研究

谢志远

指导教师 _____ 向涛教授

中国科学院理论物理研究所

申请学位级别 博士 学科专业名称 理论物理

论文提交日期 2012年5月 论文答辩日期 2012年5月

培养单位 _____ 中国科学院理论物理研究所

学位授予单位 _____ 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 _____

Renormalization Group Methods Based on Tensor-network Model/State

Zhiyuan Xie

Supervisor:

Prof. Tao Xiang

Institute of Theoretical Physics
Chinese Academy of Sciences

May, 2012

*Submitted in total fulfilment of the requirements for the degree of Ph.D.
in Theoretical Physics*

摘 要

在凝聚态物理学中，最大的挑战之一就是发展出精确而有效的计算方法，用以解决在强关联量子系统或者经典统计模型中经常出现却非常棘手的问题。最常用的两种传统的计算方法，密度矩阵重正化群(Density Matrix Renormalization Group, DMRG)和量子蒙特卡罗(Quantum Monte Carlo, QMC)，在处理强关联系统时各有不足：DMRG只能处理有限尺寸的二维量子系统，精度值得商榷，而QMC在处理费米子系统和带阻挫的自旋系统时，一般会遭遇负符号问题。

近些年来，量子信息领域对纠缠熵(entangled entropy)的研究，加深了人们对DMRG算法的理解。在此基础上，人们构造了一系列新的波函数类型，即张量网络态(Tensor-network State)，其中重要的一类就是所谓的投射纠缠对态(Projected Entangled-pair State, PEPS)，本文所介绍的张量网络态特指PEPS。PEPS在一维上的实现称为矩阵乘积态(Matrix Product State, MPS)，在二维上称为张量乘积态(Tensor Product State, TPS)，人们期望并假定张量网络态可以描述量子格点模型的基态波函数。基于这个假定，量子模型的各种物理学期望值均可化为求解一个张量网络的收缩。同时可以证明，一切仅具有局域相互作用的经典统计模型，都等价于一个张量网络模型(Tensor-network Model)，即其配分函数和物理量统计平均值也都可化为一个张量网络的收缩。因此，张量网络模型和张量网络态的研究得到了越来越多的关注。本文的内容就是介绍用于求解量子格点模型和经典统计模型的，基于张量网络模型（态）的一些数值重正化群算法。

本文的前两部分，简要叙述了传统计算方法所存在的缺陷和问题，着重介绍了张量网络模型(态)，以及在此基础之上产生的新的计算方法，即2007年Levin和Nave提出的张量重正化群(Tensor-network Renormalization Group, TRG)方法，并介绍了这种方法在经典统计模型和量子格点模型在二维晶格上的应用。

论文的第三部分，分析了TRG算法的不足之处，即没有考虑粗粒化过程中环境对系统的重正化效应，之后给出一种了解决方式，即2009年我们提出的二次重正化群(Second Renormalization Group, SRG)方法，并将其应用于经

典伊辛(Ising)模型和量子海森堡(Heisenberg)模型。计算结果表明，SRG明显优于TRG方法。文中指出，SRG方法和2008年姜红臣博士、翁征宇教授和向涛教授所提出的键矢量投影(Bond vector projection)方法相结合，提供了一套分析量子格点模型基态的一般性方法。

论文的第四部分，分析了TRG/SRG算法以及其它张量算法的局限性，即不能简单地应用于三维晶格。为了将张量网络算法应用在三维实际晶格中，2011年我们提出了基于高阶奇异值分解的张量重正化群(TRG based on Higher-order singular value decomposition, HOTRG)方法，简称为高阶张量重正化群方法。将HOTRG方法应用于简单立方格子上的经典Ising模型，得到了迄今为止最为精确的关于三维Ising 模型的重正化计算结果。将其应用在正方格子上的量子Ising模型，得到了基态的临界磁场，同时将它与转移矩阵方法相结合，得到该模型的热力学行为，发现有限温度相变。同样考虑到环境的重正化效应，我们提出了高阶二次重正化群算法(SRG based on Higher-order singular value decomposition, HOSRG)。

论文的第五部分，考虑到有限尺寸DMRG对无限尺寸DMRG的改善，为了进一步地提高临界点附近的计算精度，最近我们又提出了简单有限尺寸HOSRG算法，和带有扫描机制(sweep scheme)的有限尺寸HOSRG算法(finite HOSRG)，简称为有限HOSRG算法。将它们在正方格子和简单立方格子上的经典伊辛模型进行了测试，发现finite HOSRG的计算精度在整个温度区间都比HOSRG算法都更为精确。

本文的第六章对本文提出的三种方法(SRG, HOTRG/HOSRG, finite HOSRG)进行了总结，并给出了作者对张量网络算法前景的个人看法。附录里面，对文中未详细讨论，但比较重要的一些算法，做了简单介绍。

关键词： 张量网络模型(态)，张量重正化群，二次重正化群，高阶奇异值分解，有限尺寸

Abstract

One of the biggest challenges in condensed matter physics is to develop accurate and efficient numerical algorithms to solve the frequently occurring but very intricate problems in strongly correlated systems or classical statistical models. The two most widely used conventional methods, density renormalization group (DMRG) and Quantum Monte Carlo (QMC), has their drawbacks respectively: DMRG can attack only finite size system in two dimensional cases (2D), and the accuracy of the result needs deliberation, while QMC generally suffers from the notorious minus sign problem in handling with the fermionic systems or frustrated spin systems.

Recent years, the study of entangled entropy in quantum information deepens the understanding of DMRG algorithm, based on which condensed matter theorists constructed a series of wave functions, namely the tensor-network states (TNS). An important type is so-called Projected Entangled-pair State (PEPS), which is specified in this dissertation. The corresponding one-dimensional (1D) realization is matrix-product state (MPS), and tensor-product state (TPS) is for two-dimensional (2D) cases. It is assumed and respected that TNS can faithfully represent the ground state wave function of quantum lattice model. As a consequence, the expectation values of observable of quantum model can be obtained by the contraction of a complicated tensor-network. At the meanwhile, it can be proved that all the classical statistical models with only local interactions are equivalent to tensor-network models (TNM), and the partition function and expectation values of physical quantities can still be reduced to the contraction of a tensor-network. Therefore, the study of TNS and TNM are drawing more and more attention, and this dissertation will focus on the numerical renormalization group algorithms based on TNM/TNS.

In the first two parts of the thesis, the drawbacks or shortcomings of the conventional computation methods are briefly discussed, and the TNS and TNM are introduced. The novel algorithm based on TNM/TNS, the tensor renor-

malization group (TRG) method proposed by Levin and Nave in 2007, and its application on classical statistical models and quantum lattice models in 2D lattices are demonstrated.

In the third part of the thesis, we analyzed the drawbacks of TRG algorithm, i.e., the negligence of the renormalization effect from the environment in the coarse-graining process, and developed the second renormalization group (SRG) algorithm in 2009. Then we applied SRG to classical Ising model and quantum Heisenberg model, and compared the performance of TRG and SRG. It shows that SRG performs much better than TRG. We argued that the combination of SRG and the bond vector projection method proposed by Dr. H. C. Jiang, Prof. Z. Y. Weng, and Prof. Tao Xiang in 2008, provided a general method for the analysis of the ground state of quantum lattice models.

In the fourth part, the restrictions of TRG and SRG, like the straightforward application to three-dimension (3D) lattice, are illustrated. In order to apply the tensor-network algorithms to 3D real lattices, in 2011 we proposed the TRG method based on higher-order singular value decomposition, i.e, the so-called HOTRG method. The application of HOTRG to classical Ising model on cubic lattice and quantum Ising model on square lattice comes to by far the most accurate numerical renormalization result for 3D Ising model. Similarly, the consideration of the renormalization group effect of the environment leads to the HOSRG algorithm.

In the fifth part, referring to the improvement from infinite DMRG to finite DMRG, recently we proposed simple finite-size HOSRG algorithm and finite-size HOSRG algorithm with the implementation of the sweeping scheme, aiming to further improve the accuracy in the proximity of the critical point. The results show that finite-size HOSRG performs better than HOSRG in the full temperature range.

In the last part of the thesis, the author summarized the above three methods, i.e., SRG, HOTRG/HOSRG and finite-size HOSRG, and gave some personal opinion of the prospect of tensor-network algorithms. In the appendix, some other important algorithms relevant to the topic of the thesis are briefly discussed.

Keywords: tensor-network model/state, tensor renormalization group, second renormalization group, higher-order singular value decompostion, finite-size

目 录

摘要	i
Abstract	iii
目录	vii
第一章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 Wilson数值重正化群方法	3
1.3 密度矩阵重正化群方法	4
1.3.1 约化密度矩阵	4
1.3.2 密度矩阵重正化群方法	5
1.3.3 面积定理	6
1.4 蒙特卡罗方法	8
1.4.1 量子蒙特卡罗方法与负符号问题	8
1.5 本论文的安排	9
第二章 张量网络模型(态)与张量重正化群方法(TRG)	11
2.1 经典统计模型与张量网络模型	11
2.1.1 对偶关系	12
2.2 量子格点模型与张量网络态	15
2.2.1 DMRG与矩阵乘积态	15
2.2.2 二维格子的张量网络态	18
2.2.3 投射纠缠对态与张量网络态	18
2.2.4 多尺度纠缠重正化假设波函数与张量网络态	20
2.3 张量重正化群方法	21

2.3.1	粗粒化过程	22
2.3.2	力学量统计平均值的计算	24
2.4	量子格点模型的经典模拟	26
2.4.1	基态波函数与投影方法	28
2.4.2	可观测期望值的计算	30
第三章	二次重正化群方法(SRG)	33
3.1	环境的重正化效应	33
3.2	粗粒化过程中环境的计算	33
3.3	环境效应的切入	38
3.3.1	基于配分函数的奇异值分解	38
3.3.2	键密度矩阵(Bond Density Matrix)	39
3.4	TRG, SRG的结果对比	40
3.4.1	经典伊辛模型	40
3.4.2	量子海森堡模型	42
3.5	小结	44
第四章	基于高阶奇异值分解的张量重正化群方法(HOTRG)	45
4.1	引言	45
4.2	其他方法在三维晶格上的尝试与缺陷	46
4.3	基于高阶奇异值分解的张量重正化群方法	47
4.3.1	高阶奇异值分解	49
4.3.2	HOTRG	50
4.3.3	算法分析与计算复杂度	51
4.4	环境重正化效应的考虑与HOSRG	52
4.5	HOTRG在简单立方格子上的应用	54
4.6	HOTRG与HOSRG的计算结果	55
4.6.1	二维正方格子上的伊辛模型	56
4.6.2	三维简单立方格子上的伊辛模型	56

4.6.3 二维正方格子上的量子伊辛模型 ······	60
4.7 小结 ······	64
第五章 有限尺寸的二次重正化群方法(finite SRG) ······	67
5.1 引言 ······	67
5.2 有限尺寸二次重正化群方法 ······	67
5.2.1 简单有限尺寸算法 ······	67
5.2.2 扫描机制的切入 ······	68
5.3 finite HOSRG在二维正方格子上伊辛模型的表现 ······	69
5.4 小结 ······	71
第六章 总结与展望 ······	73
附录 A 基于转移矩阵思想的部分重要算法 ······	79
A.1 矩阵乘积态的正则形式与非幺正iTEBD算法 ······	79
A.1.1 矩阵乘积态的正则化条件与正则化步骤 ······	79
A.1.2 非幺正的iTEBD算法 ······	81
A.2 张量乘积态的更新与iPEPS算法 ······	82
A.2.1 最优化近似问题 ······	82
A.2.2 iPEPS算法 ······	84
A.3 角转移矩阵重正化群(CTMRG)算法 ······	85
A.3.1 方向性角转移矩阵算法 ······	85
A.3.2 CTMRG算法 ······	87
参考文献 ······	89
发表文章目录 ······	101
个人简历 ······	103
致谢 ······	105

插 图

1.1 NRG步骤: (a) 初始系统, 含有N个格点, 哈密顿维数为D。 (b) 向系统中加入n个格点, 形成一个N+n的大系统, 哈密顿维数为D _q 。 (c) 重正化步骤之后, 系统格点数目为N+n, 哈密顿维数为D。这里假设q为n格点系统的希尔伯特空间维数。	3
1.2 DMRG步骤: (a) 初始系统, 含有N个格点, 哈密顿维数为D。 (b) 由系统快、环境块、两个单格点构成一个超块, 格点数目为2N+2, 哈密顿维数为(D _q) ² 。 (c) 重正化步骤之后, 系统格点数目为N+1, 哈密顿维数为D。这里选取环境块与系统块的格点数目和希尔伯特空间维数分别相同。	5
1.3 二维量子格点模型的一种可能的DMRG算法。 (a)初始的格点构形, 5×5正方格子, 红、蓝、绿、黄8个同色格点之间是最近邻。 (b)将(a)拉形成的一维链构形, 为了使其保留初始的相互作用项, 必须在红、蓝、绿、黄8个同色格点之间加入相互作用, 这就相当于在一维链上相距为9个格矢量的两个格点之间引入了相互作用。	7
1.4 面积定理图示。将整个系统分为两部分, 分别称为系统和环境, 两者之间的边界称为entanglement link, 面积定理阐述了能够描述该边界信息的一个必要条件。	8
2.1 实空间张量网络模型的定义。 (a)配分函数的张量乘积表示。 (b)局部张量T的定义。 (c)波尔兹曼因子A的分解, 在不致引起混淆情况下, 这里及以后图示中, 矩阵与其厄米共轭并不显式区分。	12
2.2 对偶空间张量网络模型的定义。 (a)六角格子与三角格子的对偶关系。 (b)对偶变量的定义。 (c)对偶空间的张量网络表示。	13
2.3 正方格子上量子模型基态波函数的张量网络态表示。	15

2.4 AKLT与矩阵乘积态。(a)自旋的拆分与VBS态的构成，其中P表示作用在格点上面的投影算符，而 $ \phi\rangle$ 代表相邻的两个辅助自旋形成一个自旋单态。(b)VBS态的矩阵乘积态表示。	16
2.5 PEPS的一般性形式构造。(a)正方格子上的量子模型。(b)量子模型基态的PEPS表示。(c)每一个格点引入四个辅助自由度，以红黄蓝绿四个圆点表示。图中每两个相邻的辅助自由度构成一个最大纠缠态 $ \phi\rangle$ ，以键来表示，每个格点上有一个投影算符P，将辅助的自由空间投影到真实的物理自由度空间，用虚线来表示。 ...	19
2.6 定义在一维链上的二分量(binary)MERA波函数，链长为16个格点。	20
2.7 MERA的期望值计算和有限因果锥。(i) $\langle\Psi \hat{O} \Psi\rangle$ ，(ii)去掉由解纠缠算符和等距矩阵构成的单位阵之后，内积所剩余的图像。可以看到，每一个尺度上算符所涉及的格点数目都是保持不变的。 ...	22
2.8 六角格子上的粗粒化步骤。	23
2.9 六角格子的粗粒化第一步：晶格变形。	23
2.10 六角格子上的粗粒化第二步：消减操作。	23
2.11 处理量子格点模型的两类方法。(a)将一维量子格点模型映射成为二维经典模型，其中红方框中所示的一排矩阵可视为一个转移矩阵。(b)局部张量A的指标细节。	27
2.12 键矢量投影方法在六角格子上的实施。(a)初始波函数表示。(b)和(c)局部张量S的定义及分解。(d)还原回波函数形式。	29
2.13 量子模型力学量期望值的求解。(a)波函数内积表示。(b)局部算符表示。	31
3.1 最优分解的考量。(a)杂质键系统 M 。(b)外部环境 M^e 。	34
3.2 杂质键系统的有限尺寸环境。(a)(b)(c)(d)分别描述不同尺寸的环境。	34
3.3 计算环境的“穷人手段”。最初的 Λ 由 M 的奇异值分解得到。	35
3.4 环境在粗粒化过程中的演化。(a)初始杂质键系统的环境。(b)一次粗粒化之后的环境。	36
3.5 TRG过程中环境的计算和演化。	37

3.6	最后一步环境 $E^{(N)}$ 的确定。	38
3.7	键密度矩阵: 通过收缩掉系统除杂质键之外的所有连接而得到。 ..	39
3.8	三角格子上Ising模型自由能计算结果($D=24$): 考虑有限大小环境的SRG和TRG对比。	41
3.9	三角格子上Ising模型自由能计算结果($D=24$): 穷人手段计算环境, TRG计算环境, TRG, 三者结果对比。	41
3.10	正方格子上Ising模型自由能计算结果($D=24$): TRG, SRG。	42
3.11	三角格子上Ising模型自由能计算精度与保留状态数 D 之间的关系: $T = 3.2$, 高于临界温度。	43
3.12	六角格子上Heisenberg模型基态能量和自发磁化强度的计算结果对比: TRG, SRG	43
3.13	六角格子上Heisenberg模型自发磁化强度SRG结果的外插计算。 ..	44
4.1	顾正澄和文小刚教授在简单立方格子上的重正化群步骤。 (a)(b)通过连续的奇异值分解将初始六阶张量 T 分解成为4个三阶的结构张量, (c)一个重正化步骤。	47
4.2	A. Garcia-Saez和J. I. Latorre教授在简单立方格子上的重正化群步骤.....	48
4.3	HOTRG中使用过的重正化步骤: (a)正方格子沿 y 方向进行粗粒化操作, (b)局部张量的定义。	49
4.4	高阶奇异值分解的两种表达, 以四阶张量为例: (a) T 分解成核心矩阵 S 和四个幺正矩阵, (b)核心矩阵的求法。图中小红点代表四个幺正矩阵 L, R, C, G 。	50
4.5	HOTRG算法分析。 (a)初始网络格子。 (b)高阶奇异值分解之后的格子。 (c)等价格子。可以看出, 做高阶奇异值分解, 相当于在对应的键上插入一系列单位阵。	52
4.6	HOSRG算法表示。 (a)相邻两个尺度环境之间的递推关系。 (b)键密度矩阵 ρ 的求解。	53
4.7	简单立方格子上的HOTRG步骤: (a) z 方向的粗粒化步骤, (b)局部张量的定义。	54

4.8 简单立方格子上的HOSRG算法。(a)相邻两个尺度上的环境递推关系。(b)键密度矩阵的求解。图中黑色点代表重正化后的局部张量, 红色点代表重正化中所使用的幺正矩阵, 黄色点代表杂质点系统, 断开的键代表键密度矩阵所对应的杂质键。	56
4.9 正方格子上Ising模型的计算精度对比($D = 24$): TRG, SRG, HOTRG, HOSRG。	57
4.10 简单立方格子上Ising模型: 内能和比热曲线, $D=14$ 。	58
4.11 简单立方格子上Ising模型: 由内能模拟临界指数 α , $D=14$ 。 ..	58
4.12 简单立方格子上Ising模型: 由比热直接确定临界指数 α , $D=14$ 。 .	59
4.13 简单立方格子上Ising模型: 自发磁化强度曲线, 和临界指数 $\beta = 0.3295$, $D=14$ 。	60
4.14 简单立方格子上Ising模型: HOTRG计算结果随保留状态数 D 的收敛性分析。	61
4.15 正方格子上的量子Ising模型基态分析($D = 12$): 内能、 $\langle \sigma_x \rangle$ 、 $\langle \sigma_z \rangle$	61
4.16 正方格子上的量子Ising模型热力学分析($D = 24$): 不同磁场下的内能曲线。	63
4.17 正方格子上的量子Ising模型热力学分析($D = 24$): 不同磁场下的比热曲线。	63
4.18 正方格子上的量子Ising模型热力学分析($D = 24$): 不同磁场下横向磁化强度 $\langle \sigma_x \rangle$ 。	64
4.19 正方格子上的量子Ising模型热力学分析($D = 24$): 不同磁场下z向磁化强度 $\langle \sigma_z \rangle$ 。	65
5.1 有限尺寸HOSRG算法的表现($D = 24$): 正方格子上Ising模型。 ..	70
5.2 各种HOSRG算法的计算精度比较($D = 24$): 正方格子上Ising模型。	71
A.1 矩阵乘积态的内积表示。	80

A.2 非幺正iTEBD算法在二维Ising模型的应用。 (a)将配分函数写成转移矩阵形式，将问题化归为求转移矩阵的最大本征态的问题，构造一个初始MPS波函数 $ \phi\rangle = \{A\}$ 。 (b)将转移矩阵作用在初始的MPS上。 (c)对得到的高维数的MPS $\{B\}$ 做正则化操作，得到其正则化形式 $\{C\}$ 。 (d)切断正则化后的波函数，得到更新后的波函数 $\{A'\}$ 。反复进行b-d操作直至波函数收敛。	82
A.3 iPEPS算法在正方格子中的环境张量。 (a) T^{BB} 与 T^{AB} 所形成的二维张量网格。 (b) T^{BB} 的内部结构。 (c) T^{AB} 的内部结构。这里面，红色代表所考虑的单独的一个目标格点。	83
A.4 二维量子格点模型或者三维经典模型中转移矩阵表示。	84
A.5 方向性角转移矩阵算法。 (a)配分函数的表示。 (b)单格点周围环境的模拟。 (c)向下的一步重正化操作。这里蓝色代表边张量(edge tensor)，绿色代表角矩阵(corner matrix)，红色代表选取的单格点系统。	86
A.6 CTMRG算法:(a)模拟环境的8个张量，(b)独立向上向下作用，(c)独立向左向右作用，(d)4步作用之后的构形。其中粗线条代表高维键。	87
A.7 CTMRG算法:(a)键密度矩阵示意，(b)切断与更新后的环境。	88

第一章 绪论

1.1 引言

上个世纪以来，物理学的基础研究主要是沿着两个方向在发展：一是在极微观尺度研究物质的基本组成单元和作用力，在极宏观尺度研究整个宇宙的运动和演变规律，如粒子物理学和宇宙学，这些领域可视为少体领域；二是在介观尺度研究大量粒子的集体行为，如凝聚态物理学和统计物理学，这可视为多体领域。后者将量子力学与统计力学结合起来，发现了大量新奇的宏观尺度上的关联量子现象，比如超导[1]、超流[2]、量子霍尔效应[3, 4]、近藤效应[5]、玻色-爱因斯坦凝聚[6]等等，揭示了量子多体世界的多样性和复杂性。

凝聚态物理学中所谓的关联，主要来源于粒子之间的相互作用力，比如库仑相互作用，和粒子之间的交换相互作用。交换相互作用是一种纯粹由量子效应所引起的统计关联行为，没有经典对应。这种统计关联可以归结为费米-狄拉克统计或泡利不相容原理：任意两个费米子均不可能处于完全相同的量子态。固体理论中获得巨大成功的能带理论[7, 8]，就是通过考虑电子之间的交换相互作用而建立起来的，它对金属、半导体和绝缘体的分类给出了一般性描述，并因此而开启了21世纪后半叶直至今天的半导体时代。如果同时考虑两种关联，两个费米子之间可能会由于相互作用力而形成束缚态，这种束缚态很自然地具有玻色子的特征，从而在低温时可能发生凝聚现象，超导现象就是低温下电子束缚态(库珀对)[9]的凝聚所引起。关联效应的另一个重要的影响就是所谓的层展现象(emergent behavior)[10, 11]，即多体问题在每一个数量尺度上所表现出来的行为规律有可能不同，由很简单的低层系统可以组成很具有复杂性质的高层系统。这方面的研究不仅对物理科学本身，而且对人类社会自身的发展具有重要意义。

强关联物理，就是要研究量子多体系统在微观尺度上由关联效应引起的相互影响、相互竞争，探索因此所导致的宏观尺度上的新现象。其研究问题涉及相变与临界现象[12]、常规超导、高温超导[13, 14]、量子霍尔效应、低维磁性系统等多个研究领域。标志性成果之一就是由巴丁、库珀和施里弗在1957年提出的BCS超导理论[16]，该理论由于解释了常规超导体的一系列物理性质而被

授予了1972年诺贝尔物理学奖。但由于研究手段的欠缺，对于很多已经发现的关联现象，凝聚态物理学家并不能给出一个清晰的物理图像和一个完整而有效的理论解释。

强关联多出现在量子低维系统，对它的研究，除了实验和材料方法的难度要跨越之外，理论方面也有很大的困难。一个基本的原因在于，由于粒子之间的相互作用和量子涨落都很强，描述系统的哈密顿中没有明显的小参数，这使得基于微扰方法的传统量子场论不能适用；同时由于多体问题的自身特性，系统总的自由度跟粒子数成指数增长关系，这使得精确对角化哈密顿量不可能实现，这就是所谓的指数墙(exponential wall)难题[15]。在这种背景下，人们发展了两类主要的处理手段，即弱耦合和强耦合两种手段。弱耦合途径的思想是把一个多元问题近似转化为一个单体问题，进而对单体问题求精，比如平均场理论和密度泛函理论[17, 18]；强耦合途径的思想是直面多元波函数，但是只使用一小部分基矢量，扔掉大部分认为不重要的基矢量，这样就使得大规模的数值模拟和计算可以得到有效处理，比如分布相互作用(Configuration Interaction, CI)[19]，量子蒙特卡洛(Quantum Monte Carlo, QMC)[20]，Wilson数值重正化群(Numerical Renormalization Group, NRG)[21]，密度矩阵重正化群(Density Matrix Renormalization Group, DMRG)[22]等。其中，DMRG和QMC逐渐成为两种被广泛使用的两种计算方法，在研究强关联问题中发挥了重要的作用。

QMC在维度处理上没有任何要求，但是对于受普遍关注的费米子系统和具有阻挫的自旋系统，一般会出现难以克服的负符号问题[20]；DMRG被认为是处理一维量子系统最精确的计算方法，但是对于二维或更高维度，其精度受到限制。近年来，量子信息理论中量子纠缠和信息熵的引入，给量子多元系统注入了新的生命力，人们逐渐意识到一维系统DMRG计算所得到的量子波函数可以表示为所谓的矩阵乘积态[23]，已经证明[24]，矩阵乘积态满足纠缠熵的面积定理[25–27]，而DMRG在二维系统计算得到的波函数，所描述的纠缠熵不满足面积定理，换言之，在高维系统，DMRG得到的波函数不足以描述系统所具有的纠缠，这就是DMRG在一维有能系系统工作很好，但在高维系统效率很低的原因。为了克服这种困难，一系列新的概念，诸如张量网络模型(态)[28]，投射纠缠对态[29, 30]，纠缠重正化[31, 32]，和相关的算法应运而生，比如张量重正化群[33]，无限长的含时演化块消减算法[34, 35]，角转移矩阵重正化群算法[36, 37]，无限大的投射纠缠对态算法等[38]。本文的工作就是在这种背景下，沿着张量网络模型(态)这条线上所作的尝试，算法最初的思想来源于张量重正

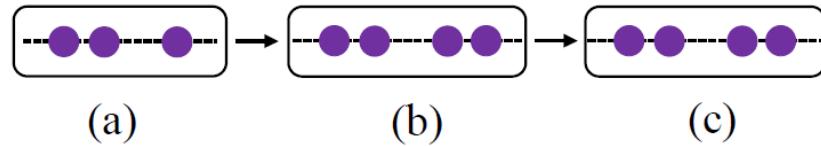


图 1.1: NRG步骤: (a) 初始系统, 含有N个格点, 哈密顿维数为D。(b) 向系统中加入n个格点, 形成一个N+n的大系统, 哈密顿维数为D_q。(c) 重正化步骤之后, 系统格点数目为N+n, 哈密顿维数为D。这里假设q为n格点系统的希尔伯特空间维数。

化群算法。

1.2 Wilson数值重正化群方法

所谓重正化群, 其核心思想就是通过重正化变换, 逐渐将系统中不重要(不相关, irrelevant)的自由度给积掉, 只保留重要(relevant)[39]的自由度, 从而得到一个可处理的低能有效理论, 这正是凝聚态物理所关心的内容。从数值计算角度来说, 将系统波函数做基矢展开, 在一次重正化变换中, 重正化群的作用就在于扔掉相对权重较小的基矢量, 只保留权重较大的基矢量, 从而缩小了希尔伯特空间的维数, 使计算得以进行。而实施重正化群变换的关键在于, 如果判定哪些基矢量是重要的, 哪些基矢量是不重要的。

1975年, K. G. Wilson将上述重正化群思想引入凝聚态数值计算中, 提出数值重正化群方法(NRG)[21]。NRG的主要思想是, 认为N格点系统的能量较低态空间在构造 $N + 1$ 个点系统的波函数时是重要的, 而能量较高的态空间是不重要的。具体来说, 以一维链为例, NRG的一般性步骤是:

1. 首先选取N个格点作为一个系统, N的大小取决于下面可以处理的可以对角化的该初始系统的哈密顿 H_{N+n} 的维数。
2. 向系统中增加n个格点, 对 H_{N+n} 做严格对角化, $H_{N+n} = U\Lambda U^\dagger$, 其中 Λ 已按照代数值从小到大顺序排列, 对于本征态按能量从低到高排列, 认为对应的基矢量的重要性以此递减。
3. 利用模式矩阵 U 对 $N + n$ 格点系统的所有算符 \hat{O} 做重正化变换, 即基矢变换: $\tilde{O} = U^\dagger \hat{O} U$ 。设预先给定的保留基矢量的最大个数为D, 如果 H_N 的维

数 $\dim(N + n)$ 大于 D , 则只保留 \tilde{O} 的左上角 $D \times D$ 部分 (正好对应于 U 中重要的基矢量), 扔掉其余部分。

4. 逐渐扩大目标系统, 每增加一个点则实施2-3步操作, 直至目标系统达到所考虑的系统总尺寸。

对于向初始添加的 n 格点系统, 有不同的方案可以实施。N. G. Wilson最初的选取使得 $n = N$, 即在1.1(b)中 $q = D$, S. R. White教授和R. M. Noack教授发现, 这种做法受系统边界条件的影响比较大[40, 41]。为了解决这个问题, 一种方法就是向涛教授和G. A. Gehring 在1992年提出的改进的NRG算法[42], 即每次向系统中加入一个格点, 这样做使边界误差减小, 同时也减小了每一步重正化操作的切断误差, 但收敛速度变慢, 精度改善有限; 另一种方法, 就是将目标系统放入更大的系统中考虑基矢的选择, 即由S. R. White教授提出的密度矩阵重整化群算法[22]。

1.3 密度矩阵重正化群方法

Wilson-NRG方法在处理诸如单杂质近藤(Kondo)问题[21, 43]时, 取得了巨大的成功, 但在处理其他强关联模型或应用到其他晶格系统时, NRG的计算并没有给出令人满意的结果[44–46]。仔细分析其算法会发现, 在判断基矢量的重要性时, 只有一个判据可用, 那就是对应目标系统较低能量基矢量在构造更大系统时具有较高的重要性。这其实是一个先验性的假设, 并不具有普适性。1975年, S. R. White考虑了这样一个问题: N 格点系统的本征空间中哪些基矢量在构造 $N + 1$ 格点系统的波函数时是重要的, 将约化密度矩阵的概念引入数值计算, 提出了密度矩阵重正化群算法。

1.3.1 约化密度矩阵

将所考虑的系统一分为二, 分别称为系统(subsystem)和环境(environment), 而考虑的系统称为一个超块(superblock)。如果将超块的基态波函数 $|\psi\rangle$ 按照系统和环境的基矢量分别展开: $|\psi\rangle = \sum_{s,e} \psi_{se} |s, e\rangle$, 则系统的约化密度矩阵(Reduced Density Matrix, RDM)为

$$\rho_{ss'} = \sum_e \psi_{se}^* \psi_{s'e} \quad (1.1)$$

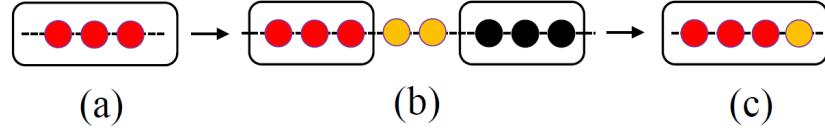


图 1.2: DMRG 步骤: (a) 初始系统, 含有 N 个格点, 哈密顿维数为 D 。(b) 由系统块、环境块、两个单格点构成一个超块, 格点数目为 $2N+2$, 哈密顿维数为 $(Dq)^2$ 。(c) 重正化步骤之后, 系统格点数目为 $N+1$, 哈密顿维数为 D 。这里选取环境块与系统块的格点数目和希尔伯特空间维数分别相同。

可以发现, ρ 是一个正定的厄米矩阵, 并且具有一个重要的性质: 对于任意一个只作用在系统上的算符 \hat{O} , 它在超块上的期望值可以表示为 $\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{O}) = \sum_i \Lambda_i O_i$, 这里 $\rho = U \Lambda U^\dagger$, $O_i = \langle U_i | \hat{O} | U_i \rangle$, 代表该算符在第 i 个本征态上的期望值。

所谓不重要, 就是说扔掉这些基矢量之后, 对基态波函数影响不大。设系统和环境的希尔伯特空间维数分别为 m, n , 现在考虑只保留系统的 α 个基矢量来近似 ψ , 具体来讲, 一个最优的遴选方式要达到这样的一个目标: 找到 $|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{i,s,e} x_{i,s,e} u_i^s |s\rangle |e\rangle$, 使得 $||\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle||$ 最小, 其中 u 是一个正交矩阵, 表示对系统基矢量的重新线性组合。这样一个问题, 可以通过一个数学变换得到答案。

将 ψ_{se} 做奇异值分解, $\psi_{se} = \sum_i V_i^s \lambda_i W_i^e$, 这个式子是对指标 i 切断的最优解。因此, 上述问题的解就是 $u = V$. 由于有一个简单的事实在, 即 ψ_{se} 的右奇异矩阵 V 就是系统的约化密度矩阵 ρ 的模式矩阵 U , 即有 $u = U$ 。这表明, 系统约化密度矩阵中权重较大的本征空间 U , 在构造超块时具有较高的重要性(由 λ 表征), 而这些空间恰好对应于系统跟环境纠缠最强的空间 V 。基于这个结论, S. R. White 提出了密度矩阵重正化群方法[22]。

1.3.2 密度矩阵重正化群方法

Wilson-NRG 方法的切断方式是根据目标系统本征空间对应能量的高低来取舍, 而 DMRG 的切断方式则是根据系统跟环境之间纠缠的强弱来取舍。仍以一维链为例, 假设初始系统含有 N 个格点, 而总的系统尺寸远大于 N , 最大保留的状态数为 D 。无限链长 DMRG 算法可通过以下步骤实施:

1. 记第 $1 \rightarrow N$ 个格点为系统，记第 $N+3 \rightarrow 2N+2$ 个格点为环境，计算出系统和环境的所有算符形式 \hat{O}_s 和 \hat{O}_e ，并构造出超块(含有格点 $1 \rightarrow 2N+2$)的哈密顿形式 H_{sup} 。对于平移不变体系，最简单的环境取法可以通过对系统做反射变换得到。

2. 求出 H_{sup} 的基态波函数 $|\psi\rangle$ ，并由其得到新系统($1 \rightarrow N+1$)的约化密度矩阵 ρ 。

3. 对 ρ 做本征值分解， $\rho = U\Lambda U^\dagger$ ，利用模式矩阵 U 对新系统的所有算符做重正化变换，即 $\tilde{O} = U^\dagger \hat{O} U$ ，然后只保留 \tilde{O} 的左上角 $D \times D$ 部分。

4. 向系统中加入一个点，同时也考虑加入一个点的环境，此时的系统含有 $1 \rightarrow N+1$ ，环境含有 $N+4 \rightarrow 2N+4$ ，超块含有 $1 \rightarrow 2N+4$ 。反复重复2-3步骤，直至超块的尺寸等于考虑系统的总尺寸。

上述做法是无限链长DMRG算法，每次的基变换总是针对系统进行，环境只是作为辅助来优化对系统的近似。如果要对环境和系统都做优化，可以加入扫描机制，即在上述第4部完成之后，保持超块尺寸不变，继续增加系统尺寸，同时缩小环境尺寸(小尺寸的环境算符已经在3-4中得到)，然后使用3-4得到更大系统的算符。反复重复这一步骤，直至环境的尺寸缩小至可处理的最小尺寸 N 。然后反方向扫描，即扩大环境尺寸，减小环境尺寸，通过环境的约化密度矩阵来更新更大的环境算符，直至系统尺寸达到最小尺寸 N 。反复这两种方向的扫描，直至超块的能量收敛到预设的精度。这种带有扫描机制的算法被称为有限链长DMRG算法[47]。

原则上来说，对于有限链长系统，有限链长算法总能得到比无限链长算法更为精确的计算结果。所以，在数值计算中，除非要求解热力学极限，多使用有限链长DMRG。

1.3.3 面积定理

DMRG在量子一维系统获得了巨大的成功，已经成为公认的求解一维量子系统最为精确的计算方法。但对于二维量子系统[48-50]，它只能处理有限尺寸系统，对较大尺寸其结果的准确度值得商榷。同时，由于二维算法多是将二维晶格拉伸成一维系统，如图1.3所示，这不可避免地人在系统中引入了长程相互作用，不符合一维上的物理图像，也不是DMRG算法的优势所在，这即是所谓的相互作用局域性的破坏(locality broken)。

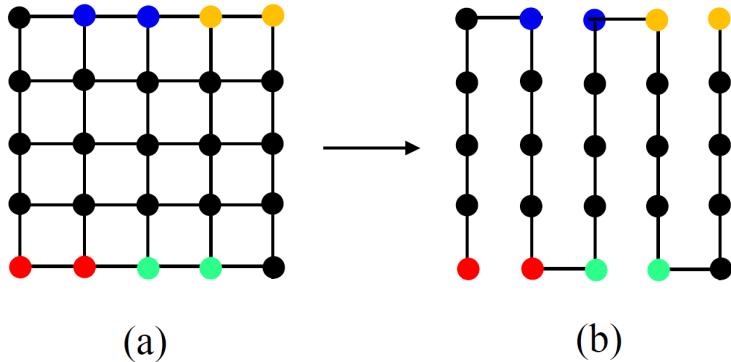


图 1.3: 二维量子格点模型的一种可能的DMRG算法。(a)初始的格点构形, 5×5 正方格子, 红、蓝、绿、黄8个同色格点之间是最近邻。(b)将(a)拉形成的一维链构形, 为了使其保留初始的相互作用项, 必须在红、蓝、绿、黄8个同色格点之间加入相互作用, 这就相当于在一维链上相距为9个格矢量的两个格点之间引入了相互作用。

近些年来, 量子信息中纠缠熵概念的引入, 使得人们意识到这种情况与纠缠熵的面积定理(Area Law)[27]密切相关。

对于一个有能系的(非临界)系统, 随着尺寸的增大, 系统和环境之间的纠缠熵 S , 与系统尺度 L 有这样指数关系, 如图1.4所示:

$$S \sim L^{d-1} \sim \log D_{min} \quad (1.2)$$

其中 d 是系统的维度, D_{min} 是要描述这种纠缠所需要的最小的基矢量数目。在一维情形, 可以发现 S 会趋于饱和, 与 L 无关, 这就是纠缠熵的面积定理[25]。对于一维系统, 它得到严格证明[26], 可以发现 D_{min} 是一个常数, 最小的可描述纠缠熵的基矢量数目是一个常数, 只要保留状态数大于 D_{min} , DMRG总是可以忠实地描述系统, 得到精确的计算结果。已经证明, DMRG计算中所得到得不动点波函数是矩阵乘积态[23], 而矩阵乘积态被证明[24]是满足面积定理的, 从而可以理解, DMRG在处理1维非临界系统时是非常有效的。

但对于二维系统, 如果面积定理是正确的(并没有严格证明), 那么

$$D_{min} \sim e^L \quad (1.3)$$

这种指数关系是DMRG所不能实现的, 因此DMRG在二维上只能处理有效的尺寸 L , 原则上不能无限大的尺寸。这就需要发展出一种新的可以克服这种面积

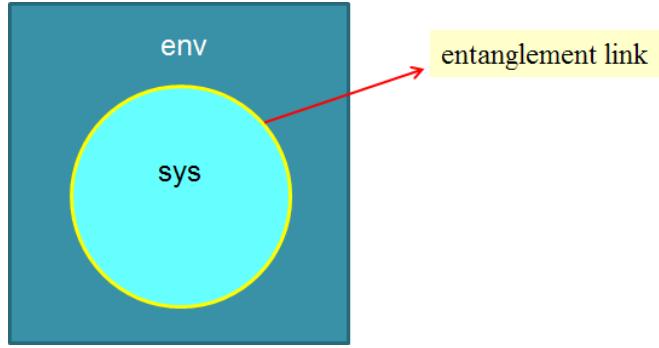


图 1.4: 面积定理图示。将整个系统分为两部分, 分别称为系统和环境, 两者之间的边界称为entanglement link, 面积定理阐述了能够描述该边界信息的一个必要条件。

定理假说的计算方法。

1.4 蒙特卡罗方法

蒙特卡洛方法(Monte Carlo)与DMRG一样, 都是强耦合手段的一种, 即不全部计入希尔伯特空间的所有构形, 只保留一部分构形来近似系统。不同于DMRG, Monte Carlo不直接处理算符, 不对基矢量的重要性进行筛选, 而是对系统构形进行随机抽样, 对抽到的构形样品进行期望平均, 得到所有可观测物理量的物理期望值。利用现代的抽样方法, 比如集团更新(cluster update), 扩展系综(extended ensemble), 并行回火(parallel tempering), 绝大多数经典系统都可以得到很好的模拟, 计算代价一般是系统尺寸的较低次幂(通常为线性)。这里面一个例外就是自旋玻璃(spin glass)系统, 已经证明[51], 该系统Monte Carlo的计算代价随着系统尺寸是非确定性多项式增长(non-deterministic polynomial, NP)的, 要找到一个按多项式增长的算法是不太可能的。

1.4.1 量子蒙特卡罗方法与负符号问题

首先看经典蒙特卡罗的实施步骤。对于任何一个经典统计模型, 其物理量 A 的期望值 $\langle A \rangle$ 都可以写成如下形式:

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{c \in \Omega} O(c)p(c)}{Z} \quad (1.4)$$

这里面, $Z = \sum_{c \in \Omega} p(c)$ 即配分函数, $p(c) = e^{-\beta E(c)}$ 即波尔兹曼因子, Ω 为该模型所可能出现的相空间, c 为指定的一种构形。实质上, $p(c)$ 给出了指定构形 c 在相空间中出现的几率(按照 Z 进行归一化)。在实际计算过程中, 不可能将所有的 c 穷举, 而是随机选取了一系列构形 c_i , 然后用在此集合中的求和来代替上式中相空间 Ω 的求和, 即:

$$\langle O \rangle \approx \bar{O} = \frac{\sum_{i=1}^N O(c_i)}{N} \quad (1.5)$$

这里 M 为所抽样的样本总数, 抽样的误差 $\epsilon \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ 。这里的随机代表两次含义: 即各态历经(ergodicity)和细致平衡(detailed balance)。简单来说, 前者是指从任意一种构形出发, 总有可能“经过有限步随机行走”到达任意另外一种构形, 后者是指对于任意一种构形, 其演化到其他构形的几率总等于由其他构形演化回来的几率。这两个条件诠释了“随机抽样”的必要条件。

对于经典统计模型, 视为构形几率 $p(c_i)$ 的波尔兹曼因子 $e^{-\beta E_i}$ 总是一个非负数, 因此抽样总是有效的。但对于量子系统来说, 上述算法中抽到的构形出现的几率 p , 由于算法的原因, 有可能会出现负数[20], 对于费米子而言, 其根源来源于波函数的反对称。这就意味着有效构形不是抽样的全部, 在极端糟糕情形下, 有效构形的数目 N_{eff} 只占抽样数目 N 的很小一部分。由于Monte Carlo的计算误差是跟 $\sqrt{N_{eff}}$ 成反比的, 负几率的出现使计算精度严重降低。要想提高精度, 必须提高 N_{eff} , 必须极大地提高整个抽样 N 的数目。这样就违背了Monte Carlo方法的初衷。已经证明, 要通过增大 N 来解决负符号问题, 所需要的计算代价也是 NP 困难的[52]。

在有些系统中, 负几率是可以通过其他手段消除的, 比如正方格子上的量子Heisenberg模型, 但对于一些系统来说, 诸如大多数费米子系统和具有阻挫的自旋系统, 负符号几率是很难消除的, 已经成为该计算领域的一个亟待解决的问题。

1.5 本论文的安排

在本论文的后续章节中, 将包括三部分的内容, 首先系统介绍张量网络模型、张量网络态, 和现有的张量网络算法, 着重叙述张量重正化群算法, 然后介绍本论文的主要研究内容, 即二次重正化方法(SRG), 基于高阶奇异值分解

的张量重正化与二次重正化方法(HOTRG/HOSRG)，和加入扫描机制的有限尺寸二次重正化方法(finite SRG/HOSRG)。

第二章，从密度矩阵重正化群方法切入，引入矩阵乘积态的概念，并陆续介绍张量网络态、张量网络模型，与张量网络算法。算法将重点介绍张量重正化群(TRG)方法。

第三章，鉴于密度矩阵重正化群(DMRG)与Wilson数值重正化群(NRG)的区别，我们提出了二次重正化(SRG)方法，并利用SRG方法研究了经典Ising模型的热力学和量子Heisenberg 模型的基态。它考虑了环境在粗粒化过程中的重正化效应，极大地提高了TRG的计算精度，与键矢量投影方法相结合，提供了一种精确分析二维量子格点模型的一般性方法。

第四章，为了使张量网络算法能够处理经典模型在三维的基态，我们提出了基于高阶奇异值分解的张量重正化群(HOTRG)方法。它使用高阶奇异值分解，对小的局部的团簇张量进行了优化分解，在二维格子上得到了比TRG更为精确的结果，并且可以直接适用于三维晶格系统。我们使用HOTRG，并考虑环境的影响发展出了HOSRG，研究了经典Ising模型在简单立方晶格上的热力学，得到了迄今为止最为精确的重正化结果。将HOTRG算法适用于正方格子上的量子Ising模型，我们不但得到了基态的临界磁场，也得到了给定磁场的热力学行为，发现了有限温度相变。

第五章，鉴于无限链长DMRG和有限链长DMRG的区别，我们提出了简单有限尺寸算法，和加入扫描机制的有限尺寸二次重正化群方法(finite SRG/HOSRG)，该方法充分考虑了每一尺度上环境的重整化效应。在正方格子上Ising模型的finite HOSRG计算结果表明，有限尺寸二次重整化群算法可以进一步提高二次重整化群算法的计算精度。

最后是对本论文的总结，并张量网络算法的未来做出展望。附录中，对基于转移矩阵思想的其他主要的一些张量网络算法做了描述。

第二章 张量网络模型(态)与张量重正化群方法(TRG)

对于经典统计模型，可以证明[33]，只要相互作用形式是局域的，都可以化为张量网络模型，即其配分函数可以写成一系列张量乘积的形式。对于量子格点模型，人们根据上一章介绍的面积定理的要求，构造出了一类满足其要求的波函数，即投射纠缠对态(Projected Entangled-pair State, PEPS)[29]，在一维和二维格子上即是矩阵乘积态(Matrix Product State, MPS)和张量乘积态(Tensor Product State, TPS)。一般来说，PEPS和另外的两类波函数，即树形张量网络态(Tree Tensor-network, TTN)[53]和多尺度纠缠重正化假设波函数(Multi-scale Entangled Renormalization Ansatz, MERA)，统称为张量网络态(Tensor-network State, TNS)[30]。在本文此处以下，除非特殊说明，清晰起见，张量网络态特指PEPS。人们假设张量网络态是量子格点模型基态波函数的忠实表示[29]。

基于张量网络模型，一系列计算方法被提出来用以计算这些模型的配分函数，比如无限时间演化块消减算法(infinite Time-evolving Block Decimation, iTEBD)，角转移矩阵重正化群方法(Corner Transfer-matrix Renormalization Group, CTMRG)，张量重正化群算法(Tensor Renormalization Group, TRG)等。对于量子格点系统，第一步是要找到基态波函数的张量网络态表示，第二步是根据波函数来求得物理量的期望值。目前已经有的确定波函数的方法有TEBD和iTEBD算法，以及其在二维的推广形式，称为键矢量投影(Bond vector projection)方法[54]，以及完全基于波函数变分的PEPS[55]和iPEPS[38]方法。而期望值的计算方法与经典模型相同。

2.1 经典统计模型与张量网络模型

如上所述，可以认为张量网络模型和相互作用是局域形式的经典统计模型是等价的。事实上，对于任何具有局域相互作用的统计模型，其配分函数均可写成张量乘积态的形式。

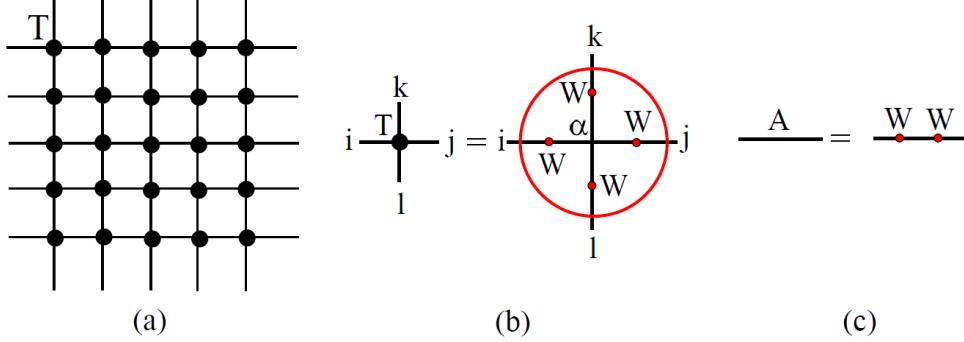


图 2.1: 实空间张量网络模型的定义。(a)配分函数的张量乘积表示。(b)局部张量 T 的定义。(c)波尔兹曼因子 A 的分解, 在不致引起混淆情况下, 这里及以后图示中, 矩阵与其厄米共轭并不显式区分。

以经典Ising模型为例, $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$. 在一维情形, 根据统计力学, 在自旋表象下, 其配分函数可以写成以下矩阵乘积的形式:

$$Z = \sum_S e^{\beta \sum_i S_i S_{i+1}} = \text{Tr}(A \dots A) \quad (2.1)$$

这里, A 是一个矩阵, 即是一个2阶(order)张量:

$$A = \begin{bmatrix} e^\beta & e^{-\beta} \\ e^{-\beta} & e^\beta \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

这里及以后, $\beta = 1/k_B T$ 。

在二维情形, 比如正方格子, 其配分函数也可以写成张量乘积形式, 即如图2.1所示:

$$Z = \sum_{ijk\dots} T T \dots T T \quad (2.3)$$

这里 T 是定义在格点上的张量: $T_{ijkl} = \sum_\alpha W_{\alpha i} W_{\alpha j} W_{\alpha k} W_{\alpha l}$, W 来源于玻尔兹曼因子 $A_{\alpha\beta} = e^{\beta S_\alpha S_\beta}$ 的分解, 即 $A = WW^\dagger$ 。

2.1.1 对偶关系

正方格子的例子中, 局部张量 T 是定义在实空间格子上的, 其张量阶数等于格点的配位数。对于三角格子, 如果也定义在实空间, 那么局部张量的阶数将会是6, 这对于计算和后续处理都是不方便的。

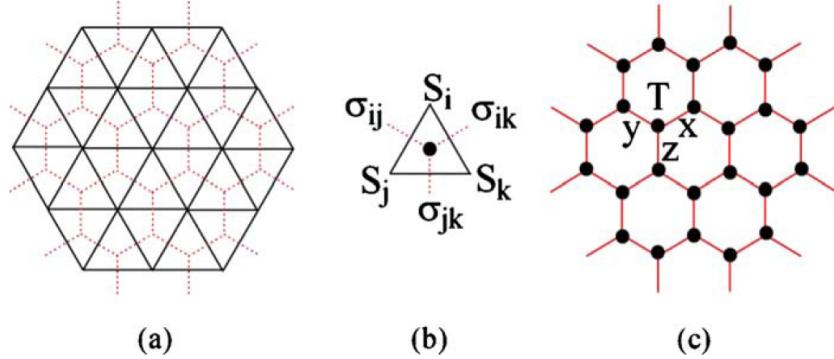


图 2.2: 对偶空间张量网络模型的定义。(a)六角格子与三角格子的对偶关系。(b)对偶变量的定义。(c)对偶空间的张量网络表示。

为了解决这个问题，也可以将张量网络模型定义在对偶空间中。三角格子的格子的对偶格子[56, 57]是蜂窝六角格子，为了实现这一定义，需要将配分函数做如下变换：

$$Z = \text{Tr}_{\text{bond}} e^{-\beta H} = \text{Tr}_\Delta e^{\beta J(S_i S_j + S_j S_k + S_i S_k)/2} \quad (2.4)$$

引入定义在键上的一个双指标变量 $\sigma_{ij} = S_i S_j$ ，则定义在一个小三角形上的玻尔兹曼因子成为 $e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{ik})/2}$. 仔细分析就会发现，由于是双指标变量，三个 σ 变量是不独立的，需要满足三角形约束条件： $\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ik} = 1$ ，否则它与原求和公式是不等价的。这样以来，配分函数可以表示为：

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\Delta} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{ik})/2} \cdot \frac{\sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{ik} + 1}{2} \\ &= \sum_{\sigma} e^{\beta J(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)/2} \cdot \frac{\sigma_x\sigma_y\sigma_z + 1}{2} \\ &= \sum_{xyz...} SSS...S \end{aligned} \quad (2.5)$$

可以看出，这就定义了一个在对偶格子（蜂窝六角格子）上的局部张量， $S_{xyz} = e^{\beta J(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)/2} \cdot \frac{\sigma_x\sigma_y\sigma_z + 1}{2}$, $\sigma = \pm 1$ ，配位数为3，如图2.2所示。

对于正方格子，其对偶格子仍是正方格子，即自对偶。对偶格子上的张量 S 定义为：

$$S_{ijkl} = e^{\beta J(\sigma_i + \sigma_j + \sigma_k + \sigma_l)/2} \cdot \frac{\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l + 1}{2} \quad (2.6)$$

如果把它写成实空间上乘积形式, 即:

$$S_{ijkl} = \sum_{\alpha} X_{\alpha i} X_{\alpha j} X_{\alpha k} X_{\alpha l} \quad (2.7)$$

其中

$$X = \frac{1}{2^{1/4}} \times \begin{bmatrix} e^{\beta/2} & e^{-\beta/2} \\ e^{\beta/2} & -e^{-\beta/2} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

这相当于每条键上的因子是 $B = XX^\dagger$ 。可以发现, 该键因子跟波尔兹曼因子 A 是对易的, 即可以同时对角化:

$$A = P\Lambda P, \quad B = P\Gamma P \quad (2.9)$$

其中

$$\begin{aligned} P &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \\ \Lambda &= \begin{bmatrix} \cosh \beta & 0 \\ 0 & \sinh \beta \end{bmatrix} \\ \Gamma &= \begin{bmatrix} e^\beta & 0 \\ 0 & e^{-\beta} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.10)$$

这样以来, 如果两个对角阵相同, 则两种张量就必定给出完全相同的热力学行为, 这就使得两者在Ising模型上建立了一个映射关系, 即实空间倒温度 β_r 的热力学, 与对偶空间倒温度 β_d 的热力学是等价的, 其中 β_r 和 β_d 之间的关系是:

$$\tanh \beta_r = e^{-2\beta_d} \quad (2.11)$$

两个温度下的自由能关系为:

$$\frac{F_r}{F_d} = \frac{2 \cosh \beta_r}{e^{\beta_d}} \quad (2.12)$$

同时由于实空间和对偶空间应该给出相同的正方格子的临界点, 所以两个临界点只能相互对应, 即临界点 $T_c = 2/\log(\sqrt{2} + 1)$ 是方程 2.11 的解。

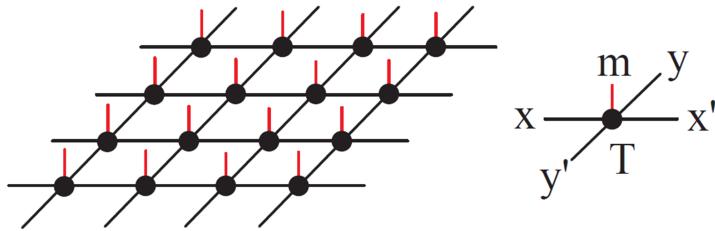


图 2.3: 正方格子上量子模型基态波函数的张量网络态表示。

2.2 量子格点模型与张量网络态

人们认为张量网络态可以忠实地表示量子格点模型的基态波函数。以正方格子为例，如图2.3所示，它上面的基态波函数可以表示为：

$$|\Psi\rangle = \text{Tr} \prod_i T_{x_i x'_i y_i y'_i} [m_i] |m_i\rangle \quad (2.13)$$

这里，由于正方格子是单子格结构，这里仅有一个局部张量 T ，Trace代表对所有的组态 m 和所有的重复指标求和，这就是所谓的张量乘积态。对于双子格结构，比如六角格子，一般需要两个局部张量。可以发现，这里的局部张量，除了具有与配位数相同个数的虚拟指标(virtual indices)外，还有一个额外的对应自旋指标的物理自由度 m 。

2.2.1 DMRG与矩阵乘积态

在一维情形，张量网络态就化为矩阵乘积态[58, 59]。已经证明[23]，DMRG在一维计算中得到的不动点(fixed point)波函数，就是一个矩阵乘积态，其基本形式是

$$|\psi\rangle = \text{Tr} \prod_m T_{ab}^i [m_i] \quad (2.14)$$

可以证明[58]，任何一个矩阵乘积态，都等价于某个只具有局部相互作用的Hamiltonian的基态波函数。矩阵乘积态在量子格点模型中有一个严格的实现形式，就是1维情形下所谓的价键固体态(Valence Bond Solid State, VBS)。它是指，将原有的物理自旋拆分成若干个半数自旋，而每个半数自旋都与其邻近格点上的半数的自旋形成自旋单态(singlet)，这样得到的类似固体的稳定状态。在1维系统中，自旋1的AKLT模型[60]，其基态就是VBS态。

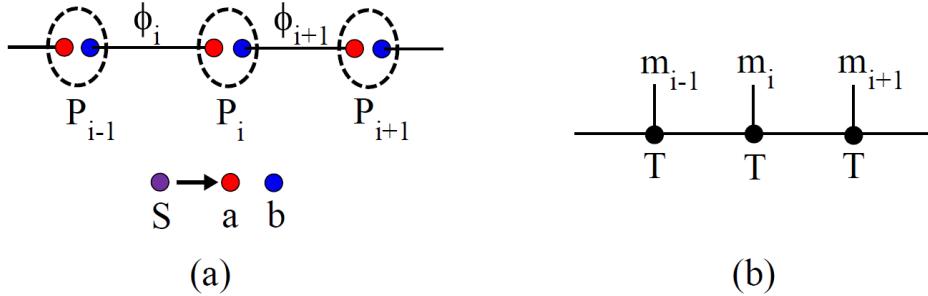


图 2.4: AKLT与矩阵乘积态。(a)自旋的拆分与VBS态的构成, 其中P表示作用在格点上面的投影算符, 而 $|\phi\rangle$ 代表相邻的两个辅助自旋形成一个自旋单态。(b)VBS态的矩阵乘积态表示。

AKLT模型是由I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb, H. Tasaki 四个人在1987年提出的, 其哈密顿量是

$$H = \sum_i S_i \cdot S_{i+1} + \frac{(S_i \cdot S_{i+1})^2}{3} \quad (2.15)$$

其中除了海森堡项之外, 还多了一项双平方项(biquadratic term)。如图2.4(a)所示, 其基态波函数可以认为由两步构成: 首先每条键所连接的两个邻近半自旋构成自旋单态, 这些自旋单态的乘积构成一个直积态, 每个格点上的两个自旋完全独立, 构成两个半自旋的四重空间; 然后每个格点上存在一个投影算法, 将对应格点上双自旋的四重空间投影到自旋1的空间(即三重态, triplet)去。

根据上面的说明, 很容易将VBS的矩阵乘积态表示写出来[61]。假设每个格点上自旋分布从左到右是 (a_i, b_i) , 自旋单态的基矢组成则应该是 (b, a) , 记连接第*i*和*i+1*格点的键为*i*, 则直积态可以表示为:

$$|\phi\rangle = \prod_i |\phi^i\rangle \quad (2.16)$$

其中, $|\phi^i\rangle = \frac{|12\rangle - |21\rangle}{\sqrt{2}}$, 这里设定 $|1\rangle \equiv |\uparrow\rangle$, $|2\rangle \equiv |\downarrow\rangle$. 如果表示为矩阵形式, 则 $|\phi^i\rangle = \sum_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta} |\alpha\beta\rangle$, $\alpha, \beta = 1, 2$,

$$B = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.17)$$

第二步，则是需要将每个格点上的四重空间映射到三重态空间，扔掉自旋单态。这样的一个投影算符可以表示为：

$$P = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| + |0\rangle\langle0| \quad (2.18)$$

这里面 $|+\rangle = |11\rangle$, $|-\rangle = |22\rangle$, $|0\rangle = \frac{|12\rangle + |21\rangle}{2}$, 如果也写成矩阵形式, $P = \sum_{\alpha\beta\sigma} A_{\alpha\beta}^\sigma |\sigma\rangle\langle\alpha\beta|$, 这里 σ 取1, 2, 3, 分别代表+, -, 0三重态,

$$\begin{aligned} A^1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ A^2 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ A^3 &= \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

注意, 因为这里是三重态, 基矢都是对称的, 所以 (a, b) 与 (b, a) 是等价的。这样以来, 便可显式写出VBS波函数:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= (\prod_i P^i)(\prod |\phi^i\rangle) \\ &= (\prod_i \sum_{\alpha_i\beta_i\sigma_i} A_{\alpha_i\beta_i}^{\sigma_i} |\sigma_i\rangle\langle\alpha_i\beta_i|)(\prod_j \sum_{\alpha_{j+1}\beta_j} B_{\beta_j\alpha_{j+1}} |\beta_j\alpha_{j+1}\rangle) \\ &= \prod_i \sum_{\alpha,\beta} A_{\alpha_i,\beta_i}^{\sigma_i} B_{\beta_i\alpha_{i+1}} |\sigma_i\rangle \\ &= Tr \prod_i T_{\alpha_i,\alpha_{i+1}}[\sigma_i] |\sigma_i\rangle \end{aligned} \quad (2.20)$$

这里面使用了基矢的正交归一性, 即 $\langle\alpha_i\beta_i|\alpha_j\beta_j\rangle = \delta_{ij}\delta_{\alpha_i\alpha_j}\delta_{\beta_i\beta_j}$, 同时定义出了矩阵乘积态的局部张量: $T_{\alpha\gamma}[\sigma] = \sum_\beta A_{\alpha,\beta}^\sigma B_{\beta\gamma}$ 。由此, 我们构造出了一维VBS的矩阵乘积态表示, 如图2.4(b)所示。其中 α, β, γ 代表引入的辅助半数自旋的指标, 是虚拟指标, 而 σ 代表每个格点上自旋1所张开的三重态空间, 是物理指标。

2.2.2 二维格子的张量网络态

如上所述，对于二维的量子格点模型，每个局部张量都具有与配位数相同个数的虚拟指标，和一个对应自旋的物理指标。基态可以由张量网络态所描述，这是一个物理假设，并没有严格的数学证明。基于此种假设，很多物理模型都可以使用张量网络的计算的方法得到非常精确的求解，因此受到人们越来越多的青睐。下面就简要介绍一下张量网络态的由来，以及其它相关的波函数假设。

2.2.3 投射纠缠对态与张量网络态

人们逐渐意识到，纠缠熵的面积定理在凝聚态的数值计算中，发挥着越来越重要的作用。在一维情形，DMRG所得到的不动点波函数，可以表示为矩阵乘积态，而矩阵乘积态是满足面积定理的，即MPS本身足以描述有能系量子系统的纠缠，所以DMRG在一维有优良的表现。而在二维系统，由于MPS不满足满足面积定理，因此DMRG只能处理有限大小的系统。为了对二维的系统纠缠做有效的描述，F. Verstraete和J. I. Cirac在2004年提出了投射纠缠对态(PEPS)[29]的概念，它是一类满足满足面积定理的波函数，在二维情形就是上述的张量乘积态。

类似于上述AKLT基态波函数的构造，如图2.5所示，PEPS的一般性构造是按照如下进行的(简单起见，考虑无穷大平移不变性正方格子系统)：在每一个格点上引入四个辅助粒子(l, r, u, d)，分别伸向上下左右四个方向，每个辅助粒子与最近邻格点上的辅助粒子之间，构成最大纠缠态 $|\phi\rangle$ (如VBS态的自旋单态)，这样构成一个直积态，

$$|\Phi\rangle = \prod_{bond} |\phi\rangle \quad (2.21)$$

这里的每个 $|\phi\rangle$ 都定义在一条键矢量上，构成 $|\phi\rangle$ 的两个辅助粒子称为纠缠对(entangled-pair)，如图2.5中的黄-红、绿-蓝两个组合。很明显， $|\Psi\rangle$ 中每个格点上的四个辅助粒子构成一个局部的直积空间，为了与真实的物理相对应，在每一个格点上面，引入一个投影算符 P ，该算符将这个局部的直积空间投影到

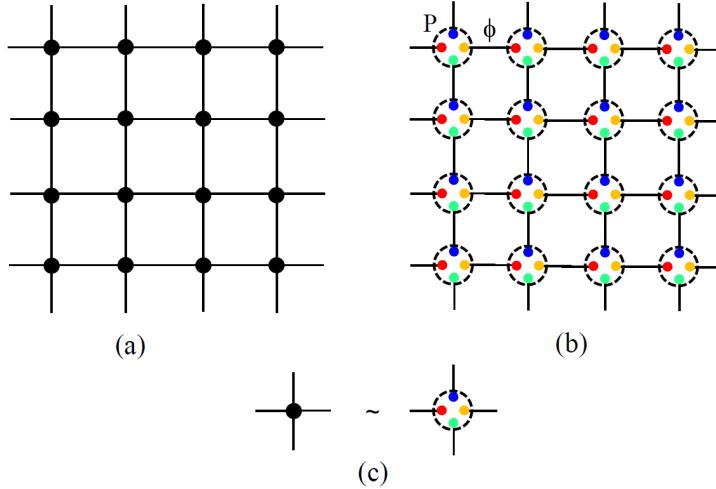


图 2.5: PEPS的一般性形式构造。(a)正方格子上的量子模型。(b)量子模型基态的PEPS表示。(c)每一个格点引入四个辅助自由度, 以红黄蓝绿四个圆点表示。图中每两个相邻的辅助自由度构成一个最大纠缠态 $|\phi\rangle$, 以键来表示, 每个格点上有一个投影算符 P , 将辅助的自由空间投影到真实的物理自由度空间, 用虚线来表示。

真实的局部物理空间中, 即

$$\begin{aligned} P &= \sum_{\alpha} |m_{\alpha}\rangle\langle m_{\alpha}| \\ &= \sum_{\alpha,lrud} A_{lrud}^{\alpha} |m_{\alpha}\rangle\langle lrud| \end{aligned} \quad (2.22)$$

这里 $A_{lrud}^{\alpha} = \langle m_{\alpha} | lrud \rangle$, 这里 $|m_{\alpha}\rangle$ 代表真实的物理自由度(如VBS态中的自旋三重态, $\alpha = +, -, 0$)。

这样以来, 所构造的PEPS形式就变为:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \prod_i P^i |\Phi\rangle \\ &= \sum_{\{m_i\}} \prod_i C_{lrud}^i [m_i] |m_i\rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

这里简便起见, 将基矢中的 α 指标省去, i 代表格点标号, 求和对所有的 $\{m_i\}$ 组态求和, C 由投影算符和最大纠缠态具体表示所构成。这就得到了由纠缠对 $|\phi\rangle$ 和投影算符 P 构成的一般性张量乘积态, 即所谓的投射纠缠对态。

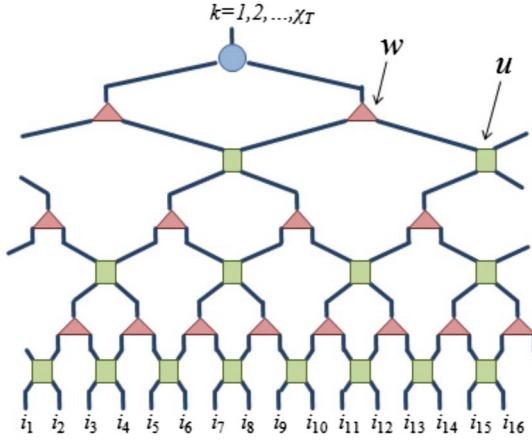


图 2.6: 定义在一维链上的二分量(binary)MERA波函数, 链长为16个格点。

可以看到, 只要辅助粒子的维数足够高, 原则上PEPS态可以表示任何量子态。同时可以看到, 系统和环境之间的entanglement link数目等于与外界相连的键的数目, 正比于系统的尺寸, 因此用于描述纠缠熵的维数 $D \sim e^L$, 与纠缠熵的形式, 式1.2, 相同, 换言之, PEPS波函数原则上满足假设中二维系统的面积定理。更进一步, 如文献[29] 中声明, 任何一个PEPS波函数, 必然对应于某个具有局域作用形式的哈密顿量的基态, 因此可以假设, 并期望确实如此: 二维量子格点模型的非临界基态波函数, 可以用PEPS忠实地描述。

2.2.4 多尺度纠缠重正化假设波函数与张量网络态

除了张量网络态之外, 还有一种特殊的波函数, 即G. Vidal在2007年提出来的多尺度纠缠重正化假设波函数(MERA)[32], 其波函数自身需要通过对不同尺度上的张量做反复变分最优化得到。

MERA波函数的形式, 与PEPS不同, 在一维情形下, 如图2.6所示。直白地说, MERA波函数与PEPS的不同体现在以下几个方面:

1. MERA波函数由一系列处于不同尺度上的幺正矩阵 $\{u^i\}$, 称为解纠缠算符(disentangler), 和等距映射矩阵(isometry) $\{w^i\}$ 交错连接构成, 这些矩阵定义在由“格点方向和重正化(RG)尺度方向”构成的高维空间中; 而PEPS波函数是由处于同一尺度上的张量 T 构成, 它们是定义由“格点方向和物理自由度方向(如自旋、实时、虚时方向)”构成的高维空间中。对于二分量MERA而言,

RG方向上的长度 $l = \log_2 N$, 其中N为系统总的格点数目, 而PEPS的物理自由度方向总是只是一个指标而已。这里等距映射矩阵的定义是: $w^\dagger w = I$, 即可认为 w 是一个切斷的幺正矩阵, 在这里它将二个指标映射成一个指标。

2.MERA波函数的重正化变换是通过一个尺度上的 $\{u^i\}$ 和一个尺度上的 $\{w^i\}$ 相继作用而完成, 这些矩阵是整个波函数的组成部分, 而PEPS的重正化是通过转移矩阵的作用, 切斷和更新波函数来完成的, 而这些操作本身不是波函数的组成部分, 只是由其得到而已。MERA重正化变换的思想在于这样一个假设: 解纠缠算符可以有效地将两个相邻块之间边界上的短程纠缠去除, 而等距算符只是将系统的长程纠缠收集起来, 也就是说MERA波函数的精髓在于去除短程纠缠, 从而建立起不同尺度上波函数的有效关联, 而这两类算符的确定都需要通过对能量进行变分而迭代得到。

3.MERA波函数的归一化是自动保持的, 同时MERA波函数中可观测算符所涉及的格点数在所有的重正化尺度上相同的, 即所谓的“有限因果锥(causal cone)”, 而PEPS波函数的归一化是手动加上的, 而可观测算符所涉及的格点数在不同尺度上可能是不同的。这在图2.7中可以清楚看到。

原则上讲, 对于非临界系统, 系统的关联尺度比较小, MERA波函数保留很小的状态数就可以描述该系统的基态; 对于临界系统, 系统的关联长度发散, 即纠缠在一切空间尺度上都存在, MERA波函数通过解纠缠算符对局部纠缠的去除, 可以比较经济地用较小的保留状态数描述出超出面积定理的量子态。由于MERA没有负符号问题, 原则上也没有类似DMRG维度的限制, 因此被用于很多问题的研究, 比如量子临界现象[62–64], 拓扑序[65, 66], 阻挫自旋系统[67], 费米子系统[68, 69]等。但是其算法的变分特性, 使得计算代价很高, 虽然有一些尝试, 比如加入对称性来降低代价[70, 71], 但这方面的工作仍然有待进一步进行。

2.3 张量重正化群方法

上面说到, 任何一个仅具有局域相互作用的经典统计模型, 都可以对应为一个张量网络模型, 该统计模型的配分函数可以表示成为张量乘积形式。但是由于张量自身的特性和二维晶格的拓扑性质, 不可能直接精确收缩掉整个网格: 矩阵的乘积是一个矩阵, 而张量的乘积是一个更大阶数的张量。为了解决这个问题, M. Levin和C. P. Nave在2007年提出了张量重正化群(TRG)[33]方

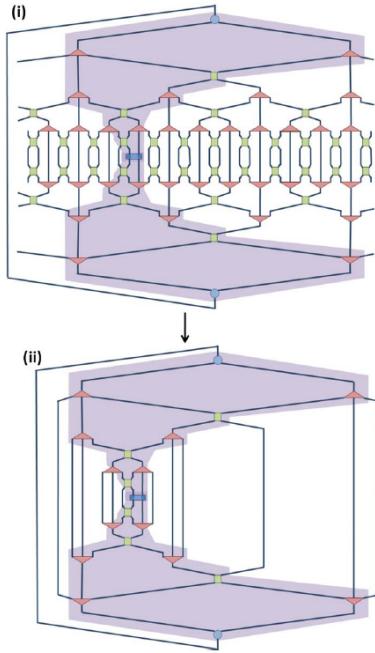


图 2.7: MERA的期望值计算和有限因果锥。 (i) $\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$, (ii)去掉由解纠缠算符和等距矩阵构成的单位阵之后, 内积所剩余的图像。可以看到, 每一个尺度上算符所涉及的格点数目都是保持不变的。

法, 用以收缩二维网格。该方法在二维经典统计模型上面具有很好的表现, Levin他们用TRG方法在三角格子上精确定出了Ising模型自发磁化的指数衰减行为。

2.3.1 粗粒化过程

以蜂窝六角格子为例, Levin和Nave提出的TRG的粗粒化过程如图2.8所示。具体说来, 可以分为以下两步操作:

1. 晶格变形。将每一个六角格子的六条边分成2组, 选定其中一组做下面所示的合分操作, 如图2.9:

$$\sum_m T_{mij}^a T_{mkl}^b = M_{li,jk} = \sum_n S_{nli}^a S_{njk}^b \quad (2.24)$$

其中, S 由 M 的分解元(U, Λ, V)得到。

2. 消减(decimation)操作。将处于一个小三角格子上的三个张量合并成一

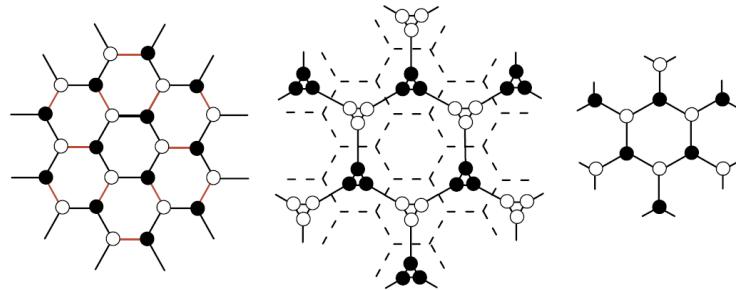


图 2.8: 六角格子上的粗粒化步骤。

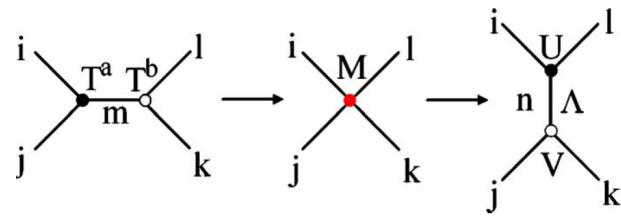


图 2.9: 六角格子的粗粒化第一步: 晶格变形。

一个新的三阶张量, 如图2.10:

$$T_{xyz}^a = \sum_{ijk} S_{jix}^a S_{kjy}^a S_{ikz}^a \quad (2.25)$$

T^b 类似得到。

经过第1步, 格点数目没有发生变化, 仅仅是格点的形状发生变化; 经过第2步, 格点数目变为初始格子的 $\frac{1}{3}$, 格子形状又变为六角格子。这两步操作构成了一个重正化步骤, 重复这个步骤, 就可以使格点数目不断减少, 直至格点数目减少到计算机可以精确处理。

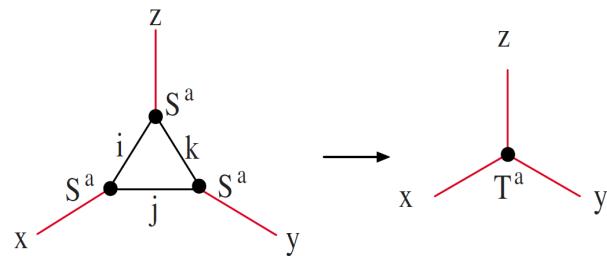


图 2.10: 六角格子上的粗粒化第二步: 消减操作。

这里面最重要的一个问题是在晶格变形这个操作里面，需要对矩阵 M 做奇异值分解，新得到的 S_a 和 S_b 其相同指标 n 具有的维数是 d^2 （假设 i, j, kl 每一条键的维数是 d ）。这样以来在消减操作所得到得的新的局部张量的每一条键的维数都是 d^2 ，即经过上述一个步骤，虽然格点数减少到原来的 $1/3$ ，但每一条键的维数变成原来的平方。假设做 n 步粗粒化，那么张量的维数将会变成 d^{2n} ，即呈指数增加，这是不可接受的。

为了解决这个问题，需要将重正化的思想引入上述粗粒化步骤，即假设张量的键维数(bond dimension) d 比较大的时候，将 n 的维数由 d^2 减小到预先设定的一个可处理维度 D 。为了实现这一点，Levin和Nave考虑局部张量 M 的最优化问题，即如何做到使

$$|M_{li,kj} - \sum_{n=1}^D S_{li,n}^a S_{jk,n}^b| \quad (2.26)$$

最小，这里 $D < d^2$ 。数学上，这个问题已经有了严格的结论，即 S_a 和 S_b 应该取自矩阵 M 的奇异值分解，即： $M = U\Lambda V^\dagger$ ，而 $S^a = U\sqrt{\Lambda}$, $S^b = V\sqrt{\Lambda}$ 。这里 Λ 是一个半正定的对角阵，并且对角元素已经按照从大到小的顺序排列，因此如果要切断到 D ，只需要保留 S_a 和 S_b 的前 D 列即可。如上的粗粒化过程加上这样一个切断步骤，构成一个完整的重正化步骤，反复这个步骤，格点的个数减少为原来的 $\frac{1}{3}$ ，而格点的维数则至多到达 D ，重正化步骤可一直进行下去，直至格点数目减少到计算机可以精确处理。

2.3.2 力学量统计平均值的计算

上述的粗粒化过程中，整个晶格只含有两个不同的局部张量，即 T^a 和 T^b ，而配分函数就是将整个网格收缩掉所得到的一个数值。给定一个温度点 t ，可以通过模型的构造对应于一对张量 $T(t)$ ，收缩掉这个网格就得到这个温度点所对应的配分函数 $Z(t)$ ，即通过上述的张量重正化群方法可以得到系统配分函数关于温度 t 的函数。利用统计力学的知识，可以得到自由能： $F = -k_B T \log Z$ ，内能 $E = -\frac{\partial \log Z}{\partial (1/T)}$ ，比热 $C_v = \frac{\partial E}{\partial T}$ 。

由于重正化过程中涉及到尺度的放大，这在数值上会造成局部张量其元素极大的数值积累，因此必须对张量进行归一化。假设归一化是在重正化的消减操作上进行，即： $T_{(n+1)}^a = T_{(n)}^a / \lambda_n$, $T_{(n+1)}^b = T_{(n+1)}^b / \lambda_n$ ，这里 n 代表由第 n 步重正化所得到，初始张量记为0，假设两套子格使用相同的归一化。设初始格点总

数为 N , 则有:

$$\begin{aligned}
 Z &= Tr(T_0^a T_0^b T_0^a T_0^b \dots) \\
 &= Tr(T_1^a T_1^b T_1^a T_1^b \dots) \cdot \lambda_1^{N/3} \\
 &= Tr(T_2^a T_2^b T_2^a T_2^b \dots) \cdot \lambda_1^{N/3} \lambda_2^{N/3^2} \\
 &= \dots \\
 &= Tr(T_n^a T_n^b) \cdot \prod_{i=1}^n \lambda_i^{N/3^i}
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

这里, 假设经过 n 步重正化群操作之后, 格点数变为2, 即初始格点数为 $N = 2 \times 3^n$ 。如果记 $R = Tr(T_n^a T_n^b)$, 则可以得到:

$$\frac{\log(Z)}{N} = \sum_i \frac{\log(\lambda_i)}{3^i} + \frac{\log(R)}{2 \times 3^n} \tag{2.28}$$

事实上, 我们有一种更直接而精确的计算统计学平均值的方法[54]。假设我们要计算算符 \hat{O} 的期望值, 简单起见, 考虑 \hat{O} 作用在一条键上。根据统计力学,

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{Tr O e^{-\beta H}}{Tr e^{-\beta H}} = \frac{Tr T_a' T_b' T_a T_b \dots}{Tr T_a T_b \dots} \tag{2.29}$$

第二个等号是来源于以下事实: 分子上的迹是含有一个特殊张量的网格收缩, 如下图所示。在重正化的过程中, 如果每次都对这一特殊键进行操作, 总可以保证在任何尺度上的格子结构, 有且只有一对特殊键(称为“杂质键”)。这样一来, 重正化照常进行, 只不过对应杂质点的构造与普通点不同: 普通点中的三个张量, 都是由普通点的分解得到, 而杂质点中的三个张量中, 有一个是由杂质点分解得到, 并且这两种的点的构造互不影响。具体操作上来说,

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{O} \rangle &= \frac{Tr(T_0^{a'} T_0^{b'} T_0^a T_0^b \dots)}{T_0^a T_0^b T_0^a T_0^b \dots} \\
 &= \frac{Tr(T_1^{a'} T_1^{b'} T_1^a T_1^b \dots)}{T_1^a T_1^b T_1^a T_1^b \dots} \cdot \frac{\lambda_1'^2}{\lambda_1^2} \\
 &= \frac{Tr(T_2^{a'} T_2^{b'} T_2^a T_2^b \dots)}{T_2^a T_2^b T_2^a T_2^b \dots} \cdot \frac{\lambda_1'^2 \lambda_2'^2}{\lambda_1^2 \lambda_2^2} \\
 &= \dots \\
 &= \frac{Tr(T_n^{a'} T_n^{b'})}{Tr(T_n^a T_n^b)} \cdot \prod_{i=1}^n \frac{\lambda_i'^2}{\lambda_i^2}
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

归一化是任意的，只是为了使计算机能够适当地处理。如果杂质点和普通点采用同样的归一化方式，即 $\lambda'_i = \lambda_i$ ，则我们会得到一个简单的公式：

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr}(T_n^{a'} T_n^{b'})}{\text{Tr}(T_n^a T_n^b)} \quad (2.31)$$

此种方法称为“杂质点方法”。

在热力学极限下，系统的物理学性质将不依赖于边界条件的选取。因此在计算上面两个剩余的迹之比时，可以选用周期性边界进行简单求解。值得注意的是，如果是求解热力学极限，使用杂质点方法时，随着重正化步数的增加(即系统尺寸的增加)，最后的结果必须收敛到给定的精度。

2.4 量子格点模型的经典模拟

对于量子格点模型，有两种方法可以处理。第一种是，利用Trotter-Suzuki分解[72]，将 d 维量子模型映射到 $d + 1$ 的经典模型，而后利用类似TRG的方法将整个网格给收缩掉得到配分函数；第二种分为两步，第一步也是基于Trotter-Suzuki分解，将量子模型的配分函数表示成为某个转移矩阵的幂次形式，然后将基态波函数的求解转化成为该转移矩阵的最大本征态的求解，第二步，是利用得到的波函数求解物理客观测量的统计平均值，这又可以转化为整个网格的收缩。两种方法的不同之处在于，前者所收缩的网格是 $d + 1$ 维，含有1个trotter维度，可称为经典模拟方法，后者所收缩的是一个 d 维网格，trotter所展出的维度在计算基态波函数时已经积掉，可称为量子演化方法。

我们以一维Heisenberg模型为例，介绍这两种的方法的实现。Heisenberg模型可以写成如下形式：

$$H = H_o + H_e \quad (2.32)$$

$$H_o = \sum_{i \in odd} H_{i,i+1} \quad (2.33)$$

$$H_e = \sum_{i \in even} H_{i,i+1} \quad (2.34)$$

由于是量子自旋， H_o 和 H_e 内部是对易的，但两者之间并不对易。

第一种方法，从系统的配分函数出发， $Z = \text{Tr}e^{-\beta H}$ 。但是由于自旋之间不对易，求解trace需要把 H_o 和 H_e 给分开。考虑到一阶Trotter-Suzuki分解：

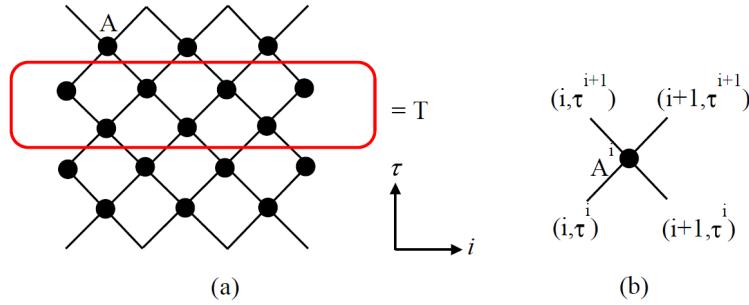


图 2.11: 处理量子格点模型的两类方法。(a)将一维量子格点模型映射成为二维经典模型, 其中红方框中所示的一排矩阵可视为一个转移矩阵。(b)局部张量A的指标细节。

$e^{x(A+B)} = e^{xA}e^{xB} + O(x^2)$, 其中x为一个小量, O 代表等价无穷小。为了减少误差, 将配分函数写成如下的形式:

$$Z = \text{Tr}e^{-\beta H} = \text{Tr}(e^{-\tau H})^M \approx \text{Tr}(e^{-\tau H_o}e^{-\tau H_e})^M \quad (2.35)$$

这里, τ 是一个小量, 满足: $\tau M = \beta$ 。一旦将 H_o 和 H_e 分开, 则可以在上式插入完备集, 即:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s^1} \langle s^1 | (e^{-\tau H_o}e^{-\tau H_e})^M | s^1 \rangle \\ &= \sum_s \langle s^1 | e^{-\tau H_o} | s^2 \rangle \langle s^2 | e^{-\tau H_e} | s^3 \rangle \dots \\ &\quad \dots \langle s^{2M-1} | e^{-\tau H_o} | s^{2M} \rangle \langle s^{2M} | e^{-\tau H_e} | s^1 \rangle \\ &= \text{Tr} \prod_i A^i \end{aligned} \quad (2.36)$$

这里面 s^i 代表着第*i*整套基矢, A^i 的定义如图2.11所示, 整个配分函数就是将这种网格收缩起来得到的一个数值。注意此时要收缩的网格, 是一个2维网格, 含有一个由于trotter分解而生成的trotter维度。

第二种方法的一个基本出发点是, 基态波函数可以通过将投影算法 $e^{-\tau H}$ 不断地作用在一个与基态非正交的任意态上面而得到, 即 $\lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-\tau H} \rightarrow |\Psi_{ground}\rangle$ 。同样的原因, 必须将 H_o 和 H_e 分开, 这也可以通过上面的分解而实现。如此一来, 这个问题就相当于是视 $e^{-\tau H_o}e^{-\tau H_e}$ 为一个转移矩阵T (如

图2.11中红线所示), 而基态正是T的最大本征态, 其求法就是矩阵理论里面求一个矩阵最大本征态的投影方法, 即反复作用在一个随机态(很难正好与基态正交)上面, 直至收敛。基于这个思想, G. Vidal等人在年发展出了求解1维量子格点模型基态波函数的iTEBD方法[34, 73], 姜红臣、翁征宇教授、和向涛教授将iTEBD方法拓展到二维, 发展出求解二维量子格点模型基态波函数的键矢量投影方法[54]。得到波函数之后, 就可以通过平均值的定义来求解物理量的期望值。

2.4.1 基态波函数与投影方法

为了说明, 2维量子格点模型客观测量的计算, 这里介绍一下2007年由姜红臣、翁征宇教授和向涛教授发展出的键矢量投影(bond vector projection)法。其基本思想就是将 $e^{-\tau H}$ 反复作用在一个与基态非正交的基态波函数上面, 并使用键矢量加权的方式对每一次波函数进行切断, 最终得到格点模型的基态波函数。

H. C. Jiang的工作是在六角格子上进行的。其步骤主要是:

1.首先将哈密顿做如下拆分:

$$H = H_x + H_y + H_z \quad (2.37)$$

$$H_\alpha = \sum_{i \in b} H_{i,i+\alpha} \quad (2.38)$$

其中 α 可取 x, y, z , 代表三个方向上的基本格矢, 而 $H_{i,i+\alpha}$ 代表 α 方向上的最近邻键形成的哈密顿量。这样以来, 使用上述Trotter分解公式, 并插入完备集, 可以得到一个张量网格结构。

2.给定一随机的波函数,

$$|\Psi\rangle = Tr \prod_{i \in b, j \in w, \langle ij \rangle} \lambda_i^x \lambda_i^y \lambda_i^z A_{x_i y_i z_i} [m_i] B_{x_j y_j z_j} [m_j] |m_i m_j\rangle \quad (2.39)$$

其中 $\lambda^x, \lambda^y, \lambda^z$ 是三个定义在键上的恒正矢量, 并按照从大到小顺序排列, 称为“键矢量”, 它们代表着对应状态的权重。如果对于一个最近邻, 有 $x_i = x_j$ 。 Tr 代表对组态 m_i 和所有的虚拟重复指标 x, y, z 求和。如果把所有的键矢量都吸收进局部张量里面, 就成为本章前部分所介绍的常见的PEPS表达形式。

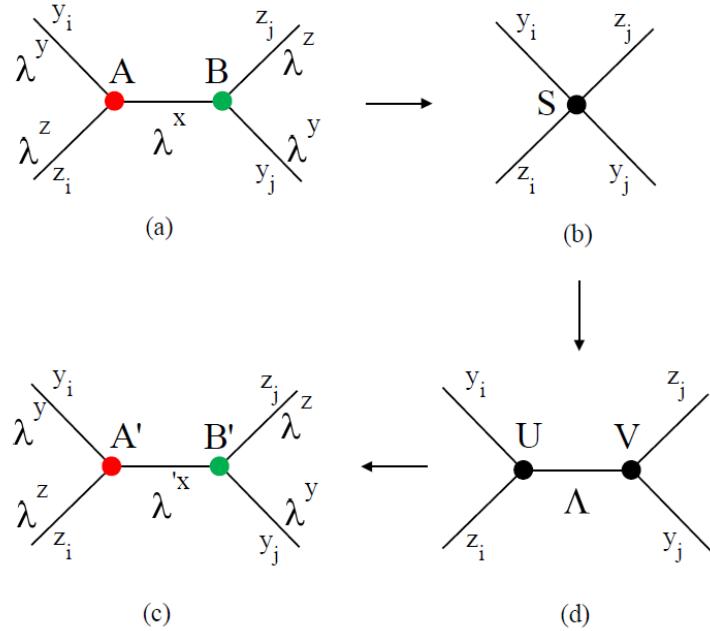


图 2.12: 键矢量投影方法在六角格子上的实施。 (a) 初始波函数表示。 (b) 和 (c) 局部张量 S 的定义及分解。 (d) 还原回波函数形式。

3. 然后将 $e^{-\tau H_x}, e^{-\tau H_y}, e^{-\tau H_z}$ 依次作用在 $|\Psi\rangle$ 上面。比如, 将 $e^{-\tau H_x}$ 作用在上面, 由于该算符是一个直积算符并且各项之间相互对易, 可以将每一项独立作用在对应的键上, 如图2.12所示。

考虑其中的一项:

$$\begin{aligned}
 & e^{-\tau H_{x_i x_j}} \sum_{m_i m_j} \left[\lambda^x \lambda_i^y \lambda_i^z A_{x_i y_i z_i} [m_i] B_{x_j y_j z_j} [m_j] \lambda_j^y \lambda_j^z \right] |m_i m_j\rangle \\
 = & \sum_{m_i m_j} \lambda_i^y \lambda_i^z \lambda_j^y \lambda_j^z A_{x_i y_i z_i} [m_i] B_{x_j y_j z_j} [m_j] \sum_{m'_i m'_j} |m'_i m'_j\rangle \langle m'_i m'_j| e^{-\tau H_{x_i x_j}} |m_i m_j\rangle \\
 = & \sum_{m'_i m'_j} \left[\sum_{m_i m_j} \lambda_i^y \lambda_i^z \lambda_j^y \lambda_j^z A_{x_i y_i z_i} [m_i] B_{x_j y_j z_j} [m_j] \langle m'_i m'_j| e^{-\tau H_{x_i x_j}} |m_i m_j\rangle \right] |m'_i m'_j\rangle
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

我们的目的是将第二个中括号中的项仍然表示成第一个中括号中的形式, 同时保持四个其他方向的 λ 不变。一旦做到这一点, 可以看到就相当于该局部算符将基矢 $|m_i m_j\rangle$ 演化成为 $|m'_i m'_j\rangle$ 。仔细分析其中的项, 将其记为 $S_{y_i z_i m'_i, y_j z_j m'_j}$, 如

果想简单地将两套指标分开，其纠缠指标就一定是 D^2d ，其中D为虚拟指标的维数，d为物理指标的维数。为了使计算持续下去，必须将维数还原成D，这就需要切断。根据数学知识，对一个矩阵的最优切断，当是上文提及的奇异值分解。即：

$$S_{y_i z_i m'_i, y_j z_j m'_j} = \sum_x U_{y_i z_i m'_i, x} \Lambda_x V_{y_j z_j m'_j, x} \quad (2.41)$$

切断就在x处进行切断即可。为了还原成初始波函数的表达形式，可以得到演化后的波函数是：

$$\begin{aligned} A'_{x,y,z}[m] &= \lambda_y^{-1} \lambda_z^{-1} \sum_{x=1}^D U_{yzm,x} \sqrt{\Lambda_x} \\ B'_{x,y,z}[m] &= \lambda_y^{-1} \lambda_z^{-1} \sum_{x=1}^D V_{yzm,x} \sqrt{\Lambda'_x} \\ \lambda'^x &= \Lambda \end{aligned} \quad (2.42)$$

而 λ^y 和 λ^z 保持不变，它们在更新对应方向的键时才得到更新。

4. 反复执行第三步骤，直至波函数完全收敛到预设的精度。认为收敛的波函数，就是给定哈密顿所对应的基态。

2.4.2 可观测期望值的计算

一旦基态波函数得到，就可以按照统计平均值的定义来求解客观测量的期望值。注意这样一个事实：对于得到的波函数，

$$|\Psi\rangle = \text{Tr} \prod_{i \in b, j \in w} A_{x_i y_i z_i}[m_i] B_{x_j y_j z_j}[m_j] |m_i m_j\rangle, \quad (2.43)$$

如图2.13(a)，可以得到：

$$\begin{aligned} &\langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \text{Tr} \prod A_{x'_i y'_i z'_i}[m'_i] B_{x'_j y'_j z'_j}[m'_j] \langle m'_i m'_j | A_{x_i y_i z_i}[m_i] B_{x_j y_j z_j}[m_j] | m_i m_j \rangle \\ &= \text{Tr} \prod T^a_{x_i x'_i, y_i y'_i, z_i z'_i} T^b_{x_j x'_j, y_j y'_j, z_j z'_j} \end{aligned} \quad (2.44)$$

其中 T^a 和 T^b 是定义在二维格子上的局部张量，定义是：

$$T^a_{x_i x'_i, y_i y'_i, z_i z'_i} = \sum_{m_i} A_{x_i y_i z_i}[m_i] A_{x'_i y'_i z'_i}[m_i] \quad (2.45)$$

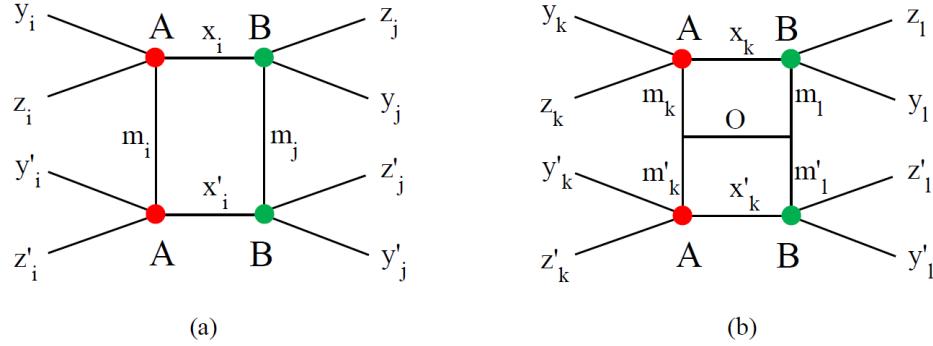


图 2.13: 量子模型力学量期望值的求解。 (a) 波函数内积表示。 (b) 局部算符表示。

而对于一个局部算符而言，也可以相应地写成一个类似的形式，只不过会出现一个大的纠缠项：

$$\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle = \text{Tr} M_{y_k y'_k, z_k z'_k, y_l y'_l, z_l z'_l} \prod T^a_{x_i x'_i, y_i y'_i, z_i z'_i} T^b_{x_j x'_j, y_j y'_j, z_j z'_j} \quad (2.46)$$

其中 M 矩阵包含有算符的信息，如图 2.13(b)：

$$\begin{aligned} & M_{y_k y'_k, z_k z'_k, y_l y'_l, z_l z'_l} \\ &= \sum_{m_k m_l} \sum_{m'_k m'_l} \sum_{x_k x_l x'_k x'_l} A_{x_k y_k z_k} [m_k] A_{x'_k y'_k z'_k} [m'_k] \\ & \quad B_{x_l y_l z_l} [m_l] B_{x'_l y'_l z'_l} [m'_l] \langle m_k m_l | \hat{O} | m'_k m'_l \rangle \delta_{x_k x_l} \delta_{x'_k x'_l} \end{aligned} \quad (2.47)$$

可以发现，期望值的分子和分母部分都是对于一个二维张量网格的收缩，这个问题又化归为张量重正化群方法的应用，这与经典统计模型的归宿是一致的。因此，对于量子格点模型，张量重正化群方法与键矢量方法相结合起来，就得到求解量子格点模型物理学量的一般性方法。

第三章 二次重正化群方法(SRG)

从第二章可以得知，不论是经典统计模型，还是量子格点模型，其热力学量的计算最终都化为一个张量网格的收缩，而张量重正化群(TRG)方法则提供了收缩这样二维张量网格的数值算法。仔细分析TRG算法的过程，可以发现，重正化群的思想进入该算法的关键一步，是对局域张量的奇异值分解，该分解是对局部分解的最优化近似，并且默认了这样一个假设：小尺度上的局部最优化分解也对应与大尺度上的局部最优化分解。从这一点来讲，TRG算法类似于NRG[21]的思路，在考虑一个小系统的近似时，并没有考虑外部环境。鉴于DMRG[22]的思想，对系统的最优化近似应该考虑环境和系统的纠缠，即考虑粗粒化过程中，环境对系统的重正化效应，我们在2009年提出了二次重正化群(Second Renormalization Group, SRG)[74]方法。该方法弥补了TRG方法的以上缺陷，极大地提高了计算精度。

3.1 环境的重正化效应

仍以六角格子为例，二次重正化群方法的出发点是基于以下事实：如图3.1所示：我们要找到对局部集团张量 M 的一种近似， $M_{li,jk} \approx \sum_{n=1}^D S_{li,n}^a S_{jk,n}^b$ ，这种近似要对计算整个配分函数的计算是最优的，即使得 $Z = \text{Tr}(MM^e)$ 在 M 取近似时对Z的影响最小。这里面， M^e 表示除了系统集团之外的所有格点所构成的环境集团。TRG方法的凑效，来源于每次的切断都使的对M的近似最优，即近似之后使得 $|M - \tilde{M}|$ 达到最小。而环境的重正化效应，考虑到系统和环境的纠缠，要使得 $|\text{Tr}(MM^e) - \text{Tr}(\tilde{M}M^e)|$ 达到最小。

3.2 粗粒化过程中环境的计算

根据上面的分析，环境集团张量 M^e 在二次重正化群里面占有重要地位。有以下三种方法可以考虑 M^e 。

1.有限尺寸环境[56]。即给定一个尺度上的张量网络，精确地计算出较小尺寸的环境，如图3.2。我们的计算最多计算有22个格点的环境。

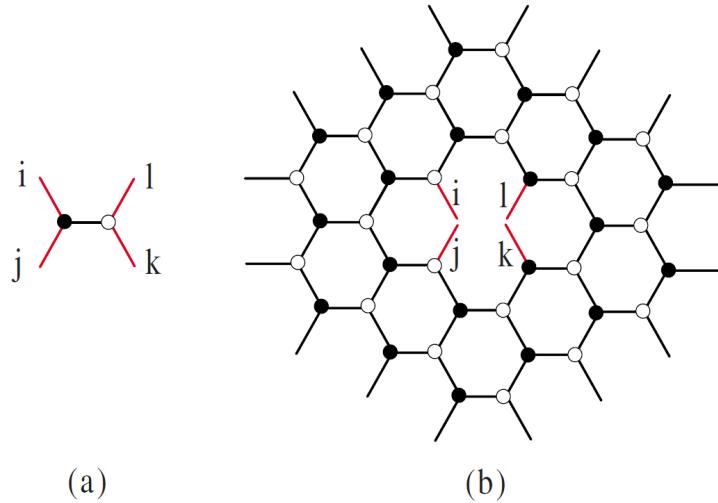


图 3.1: 最优分解的考量。 (a)杂质键系统 M 。 (b)外部环境 M^e 。

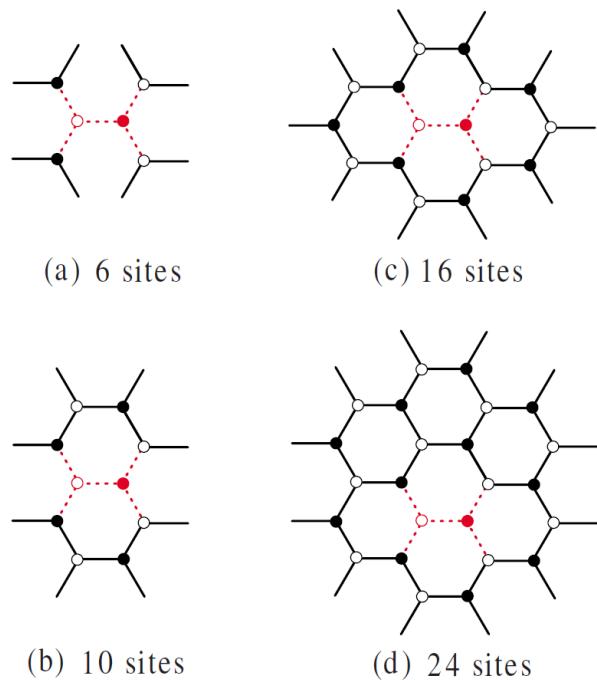


图 3.2: 杂质键系统的有限尺寸环境。 (a)(b)(c)(d) 分别描述不同尺寸的环境。

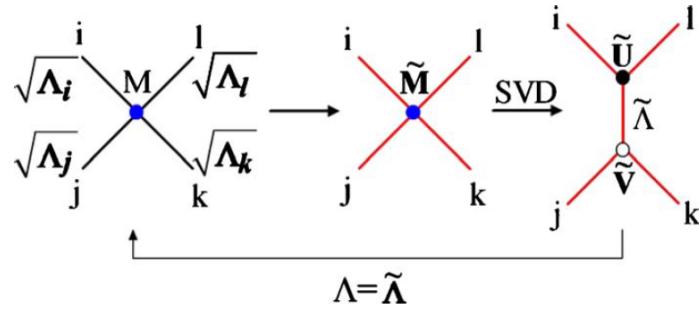


图 3.3: 计算环境的“穷人手段”。最初的 Λ 由 M 的奇异值分解得到。

2. 所谓的“穷人手段”(Poor man's method)[56]。考虑一个无限大的张量网络，断开任意一条键，就将系统分为两个部分，根据这两部分的全局纠缠可以在这条键上定义一个键矢量 Λ 。对于六角格子来言，这样的键矢量应该有3类，但因为格子具有旋转 120° 的不变量，这3类键矢量应该相同。由于每个键矢量都描述了整个系统的纠缠，任意一个系统集团 M 所感受的环境仅仅由 Λ 来描述其强度。此时，如果对系统进行近似，那最优的方式就是直接对 Λ 进行切断。但不幸的是，对于任意一个尺度上的张量网络，这样一个描述整个系统纠缠的键矢量是未知的。

我们采用了一下方式对其近似：首先不考虑环境，对 M 做局域的奇异值分解，得到描述局部纠缠的键矢量 $\tilde{\Lambda}$ 。然后将 $\tilde{\Lambda}$ 作为近似的描述全局纠缠的键矢量作用在 M 的四条外键上，再做奇异值分解，得到新的描述局部纠缠的键矢量 $\tilde{\Lambda}$ 。反复进行这种操作，直到切断误差小到预设的一个量级。此时，可以根据奇异值分解得到优化的系统近似。

具体来说，如图3.3所示，即：首先做 $M = U\Lambda V^\dagger$ ，然后

$$\tilde{M}_{li,jk} = (\Lambda_l \Lambda_i)^{1/2} M_{li,jk} (\Lambda_j \Lambda_k)^{1/2} \quad (3.1)$$

$$\approx \sum_{n=1}^D \tilde{U}_{li,n} \tilde{\Lambda}_n \tilde{V}_{jk,n} \quad (3.2)$$

如果切断误差还大，则 $\Lambda = \tilde{\Lambda}$ 重复上述步骤，否则，可以由上述分解得到所需

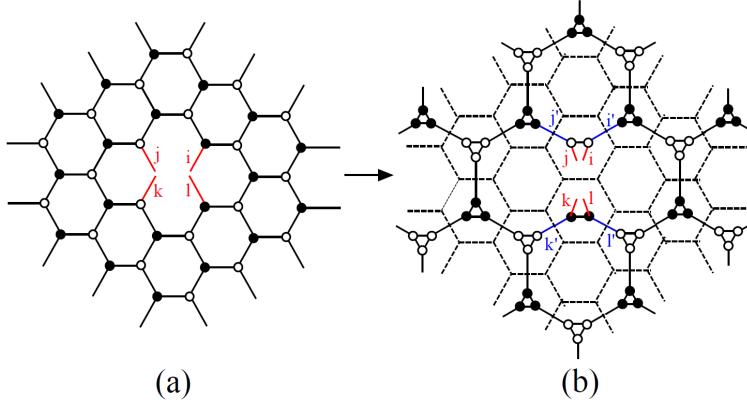


图 3.4: 环境在粗粒化过程中的演化。 (a) 初始杂质键系统的环境。 (b) 一次粗粒化之后的环境。

的局部张量:

$$\begin{aligned} S_{li,n}^a &= (\Lambda_l \Lambda_i)^{-1/2} \tilde{U}_{li,n} \sqrt{\tilde{\Lambda}} \\ S_{jk,n}^b &= (\Lambda_j \Lambda_k)^{-1/2} \tilde{V}_{jk,n} \sqrt{\tilde{\Lambda}} \end{aligned} \quad (3.3)$$

上述做法的假设是: 局部的纠缠可以逐渐传给整个系统, 而每一条键矢量都被系统和环境所平分。这是一种平均场的思路, 其实是对环境做了一个如下近似:

$$M_{lijk}^e = \sqrt{\Lambda_l \Lambda_i \Lambda_j \Lambda_k} \quad (3.4)$$

最后一步, 为了求出系统自身的分解, 保持中间辅助量的形式不变性, 必须将作为环境的四个键矢量给扣除。这样的一种求解环境的方法, 被称为平均场近似, 或者穷人手段。

3.TRG。

第一章里已经叙述, TRG是收缩张量网络的一种有效方法, 而实际上 M^e 也是一种张量网格, 因此原则上可以用TRG来求解环境集团张量。对于六角格子而言, 如果考虑一条键所构成的两点作为系统, 则剩余就是环境, 取周期性边界之后, 环境的指标与系统一样都是系统的四条外键(li, jk)。下面考虑这四条键在重正化过程中的演化步骤。

如图3.4所示, 可以发现, 一次粗粒化之后, 四条外键被包含在新的两个局部张量里面, (按照杂质点方法的称谓, 称含有这四条外键的点为杂质点, 键

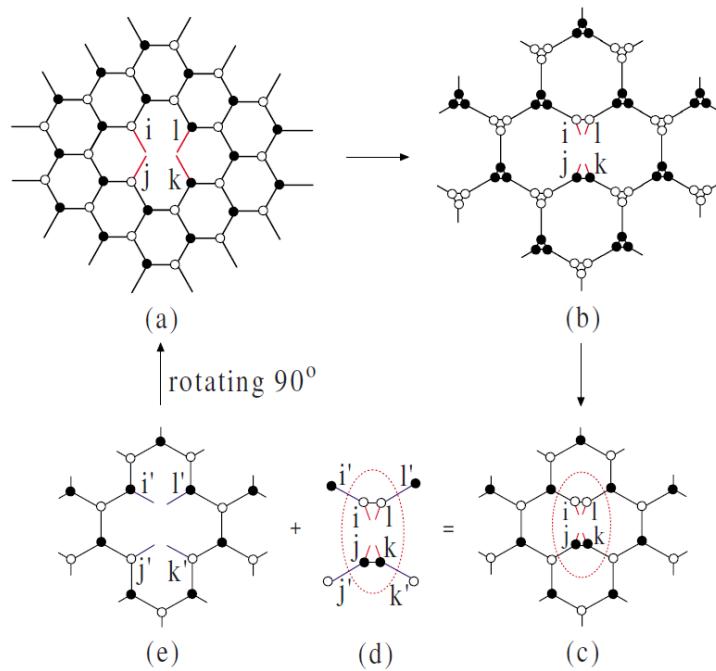


图 3.5: TRG过程中环境的计算和演化。

为杂质键), 进而言之, 一次重正化之后, 杂质键/点变成了更大尺度上的杂质键/点, 而网络结构与重正化之前完全相同, 仅仅是旋转了一个角度而已。这样一来, 如果得知大尺度上的杂质键所感受到的环境($l'i', j'k'$), 收缩掉四个结构张量(就是分解出来的中间张量 S), 就可以得到小尺度上的杂质键环境(li, jk)。依此递推, 就可以得到初始杂质键所感受到的环境 M^e 。而最大尺度上的杂质键, 可以视为整个系统, 即仅仅由两个大尺度局部张量所构成的系统(也即是TRG最后一步重正化所得到的张量网络)。

具体来说, M^e 的求解需要以下2个步骤[74], 如图3.5所示: 假设需要在某个尺度上对局部张量做切断, 用(n)来标记在此格子上通过n步重正化所得到的局部张量, 初始的局部张量标记为(0).

(1).前向迭代(forward iteration)。即在由 T^0 构成的格子上做 N 步重正化, 记录每一步所得到的结构张量 $S^{(i)}$, 并利用周期性边界得到最后一步杂质键所感受到的环境 $E^{(N)}$:

$$E_{li,jk}^{(N)} = \sum_{abcd} B_{aib}^{(N)} B_{dcj}^{(N)} A_{akb}^{(N)} A_{dkc}^{(N)} \quad (3.5)$$

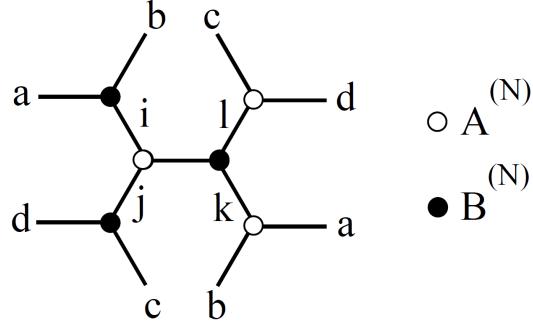


图 3.6: 最后一步环境 $E^{(N)}$ 的确定。

$E^{(N)}$ 的确定可参照图3.6。

(2).后向迭代(backward iteration)。根据杂质键环境的迭代公式,由大尺度向小尺度递推,即:

$$E_{li,jk}^{(n-1)} = \sum_{i'j'k'l'} \sum_{pq} E_{i'j'k'l'}^{(n)} S_{ip,i'}^{a\alpha,(n)} S_{pll'}^{a\beta,(n)} S_{qjj'}^{b\beta,(n)} S_{kqk'}^{b\alpha,(n)} \quad (3.6)$$

其中 α, β 代表 x, y, z 三个方向指标,具体取值与前向迭代有关。

反复利用上述迭代公式,直至求出 $E^{(0)}$,即为所需要的初始系统的环境集团张量 M^e 。

3.3 环境效应的切入

当环境集团张量 M^e 求出之后,就可以用它来影响系统张量的分解。根据配分函数的表达式 $Z = Tr(MM^e)$,可以得到 M^e 两种不同的使用方式。第一种方式是基于配分函数的奇异值分解,对应于配分矩阵的最优化分解;第二种是基于键密度矩阵的谱分解,对应于该尺度上配分函数的最优化近似。

3.3.1 基于配分函数的奇异值分解

首先对 M^e 做奇异值分解,

$$M^e = U_e \Lambda_e V_e^\dagger \quad (3.7)$$

然后将配分函数做变形: $Z = Tr(MM^e) = Tr(MU_e \Lambda_e V_e^\dagger) = Tr(Z^m)$, 这里 Z^m 为配分矩阵,定义为

$$Z^m = \Lambda_e^{1/2} V_e^\dagger M U_e \Lambda_e^{1/2} \quad (3.8)$$

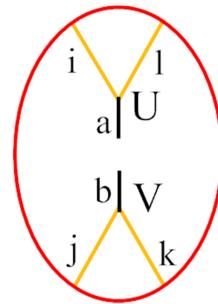


图 3.7: 键密度矩阵: 通过收缩掉系统除杂质键之外的所有连接而得到。

做配分矩阵的奇异值分解: $Z^m = U\Lambda V^\dagger$, 根据该分解可求解出 M 的分解形式:

$$\begin{aligned} M &= S^a (S^b)^\dagger \\ S^a &= V_e \Lambda_e^{-1/2} U \Lambda^{1/2} \\ S^b &= U_e \Lambda_e^{-1/2} V \Lambda^{1/2} \end{aligned} \quad (3.9)$$

对 M 的切断, 则在对应 Λ 处切断。可以发现, 这种切断是对系统和环境的同时考虑, 即对配分矩阵的最优化切断, 环境对系统的重正化效应被包含在配分矩阵里面。

3.3.2 键密度矩阵(Bond Density Matrix)

另外一种使用环境的方法, 是基于DMRG思想, 考虑如下情况: 一个系统的全局最优化分解, 应当使得系统和环境的纠缠得到最小程度的削弱, 在这里即配分函数的最精确近似。将 M 和 M^e 的相连部分全部收缩掉, 得到一个所谓的键密度矩阵 ρ [75],

$$\rho_{mm'} = \sum_{ijkl} M_{lim}^a M_{li,jk}^e M_{jkm'}^b \quad (3.10)$$

其含义相当于断开一个键, 将其余所有的相连键都求和掉, 所剩下的矩阵, 如图 3.7 所示。之所以称为密度矩阵, 是由于 $Z = \text{Tr} \rho$ 。上式中, M^a 和 M^b 来源于杂质键系统 M 分解, 即: $M = M^a (M^b)^\dagger$ (对称起见, 可由奇异值分解得到)。

由于 $Z = \text{Tr} \rho = \text{Tr}(P \Lambda P^{-1})$, 其中 (P, Λ) 为 ρ 的本征对。要想使切断之后 Z 得到最大程度地保持, 必须保证 Λ 的绝对值最大的若干部分在切断后得到

保留。因此，对键的切断，只需要在其上插入 PP^{-1} 即可，

$$\begin{aligned} S_{li,m}^a &= \sum_x P_{m,x}^{-1} M_{lix}^a \\ S_{jk,m}^b &= \sum_y M_{jky}^b P_{y,m} \end{aligned} \quad (3.11)$$

这里，并没有数值保证使得 Λ 是正定的，但是物理上来讲，总是期望它是正定的。上述切断在 $P_{y,m}$ 的m指标，对应于 Λ 的切断。这样的切断，使得配分函数本身达到最精确地近似，环境的信息完全包含在模式矩阵 P 中。

3.4 TRG, SRG的结果对比

我们将上述二次重正化群方法，用于经典Ising模型和量子Heisenberg模型，发现SRG可以极大地提高计算精度[56, 74]，计算结果更加稳定和可靠。

3.4.1 经典伊辛模型

图3.8表示不同有限大小环境所得到的SRG结果和TRG结果的对比。这里，横坐标为温度，纵坐标代表计算出的自由能 f 和严格解 f_{rig} 之间的相对误差，即： $\delta f \equiv 1 - \frac{|f-f_{rig}|}{|f_{rig}|}$ 。可以发现，随着环境尺寸的增大，自由能的计算精度对TRG的改善也相应提高，计算结果也越来越稳定。图中4个点的环境所得出的结果不是特别好，其原因在于该环境不能很好地模拟真实的环境，边界效应比较明显。

图3.9表示穷人手段SRG和无穷大环境SRG结果和TRG结果的对比。可以发现，两种SRG的方法比TRG的计算精度都有很大的提高，在临界点附近有2个量级的改善，而在远离临界点处，改善也越来越大，可以达到5~6个量级。在临界点附近，系统的关联长度比较大，因此平均场近似是一个较好的近似，而在远离临界点附近，平均场近似就逐渐偏离真实的环境。考虑无穷大环境的SRG方法，则在整个温度区间，都对TRG算法有很大改善，这说明，SRG算法可以很好地模拟系统所感受到的环境。

可以将SRG算法应用在其他格子上面。图3.10给出了正方格子上TRG和SRG计算结果对比。可以发现，与三角格子上的结果类似，SRG在整个温度区间都对TRG的计算精度有很大的提高，使用SRG计算临界点附近的物理量会更加地精确。

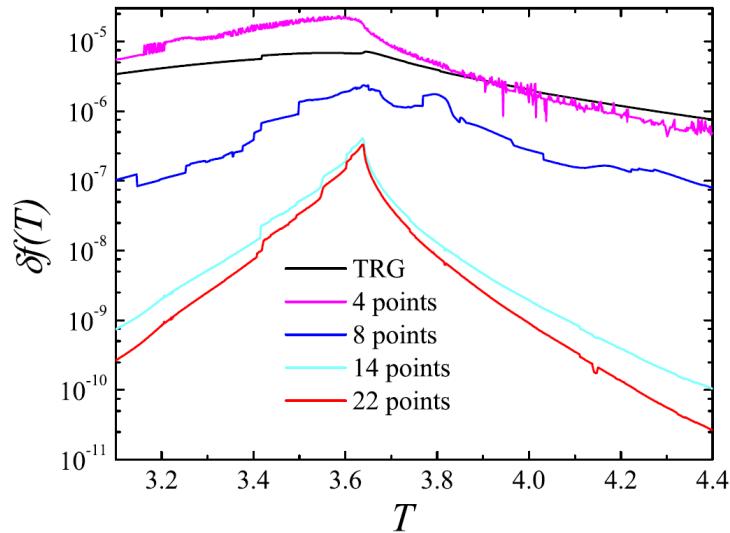


图 3.8: 三角格子上Ising模型自由能计算结果($D=24$): 考虑有限大小环境的SRG和TRG对比。

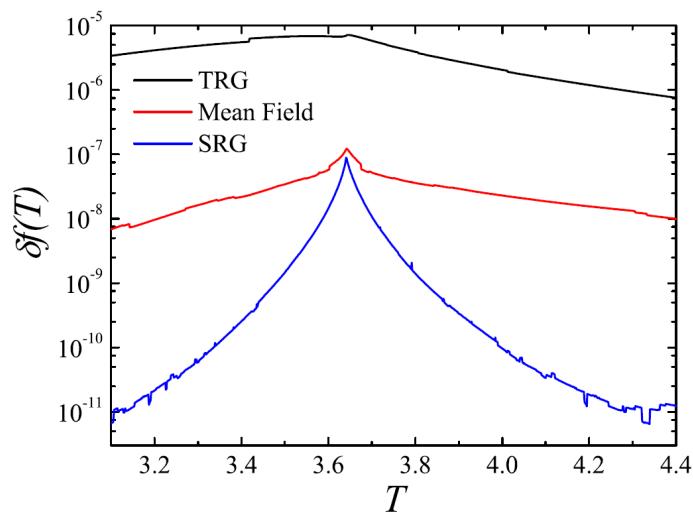


图 3.9: 三角格子上Ising模型自由能计算结果($D=24$): 穷人手段计算环境, TRG计算环境, TRG, 三者结果对比。

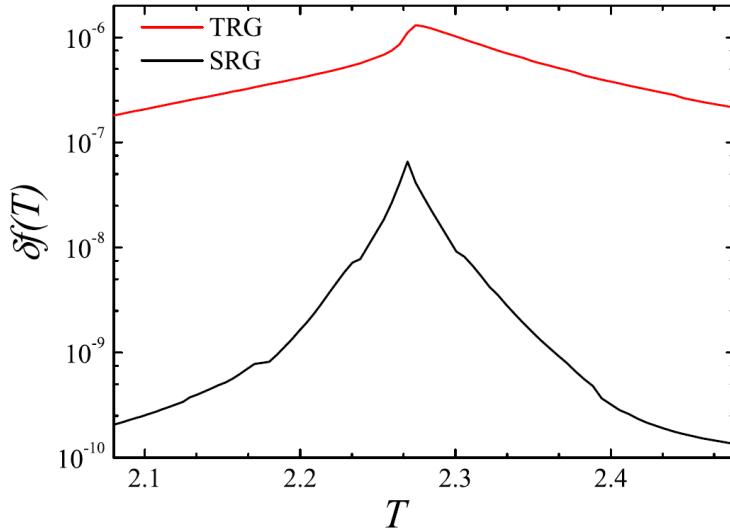


图 3.10: 正方格子上Ising模型自由能计算结果($D=24$): TRG, SRG。

图3.11给出了计算精度与保留状态数 D 之间的关系。可以看出，随着保留状态数 D 的增加，在取相同 D 时，SRG对TRG的改善也越来越明显。这说明，在保留状态数比较大但并不足够大(以描述整个系统的长程纠缠)时，环境的重正化效应会越来越明显，这时间使用SRG来计算的优势会越来越明显。

3.4.2 量子海森堡模型

同时，与键矢量投影方法相结合，可以使用TRG和SRG算法求解量子格点模型的基态性质。考虑六角格子上的Heisenberg模型。按照本章前几节的描述，我们首先用键矢量投影方法得到其基态波函数，然后分别用TRG和SRG方法计算其基态能量和自发磁化强度。

图3.12给出了随着 D 的增大，基态能量 E_0 和键上自发磁化强度 M_{stag} 的变化趋势。可以看到随着 D 的增大，TRG的计算结果并没有收敛，而SRG的计算结果逐渐收敛。对于 $D = 8$ ，SRG的计算结果是： $E_0 = -0.5445$, $M_{bs} = 0.2142$ ，这里 M_{bs} 代表每条键上的平均交错磁化强度。对于能量，Monte Carlo的计算结果[76]是-0.54455(20)，自旋波的结果[77]是-0.5489，级数展开的结果[78]是-0.5443，可以发现SRG可以很好地与之相符合。

对于 M_{stag} ，Monte Carlo的结果[76]是0.2681，自旋波的结果[77]是0.24，级

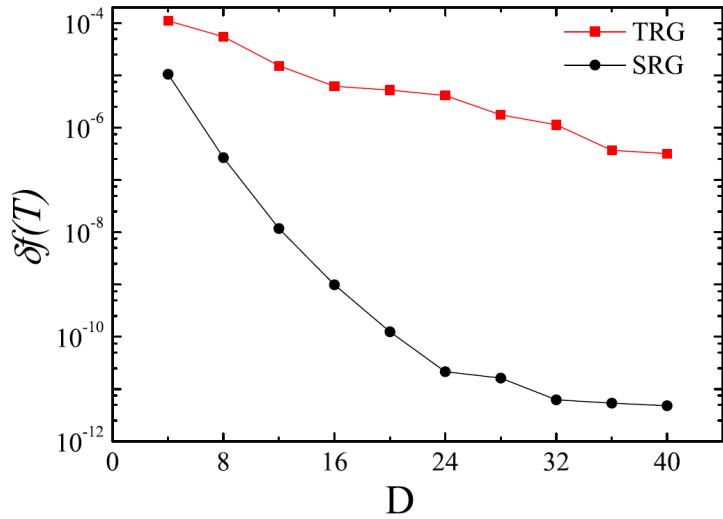


图 3.11: 三角格子上Ising模型自由能计算精度与保留状态数D之间的关系:
 $T = 3.2$, 高于临界温度。

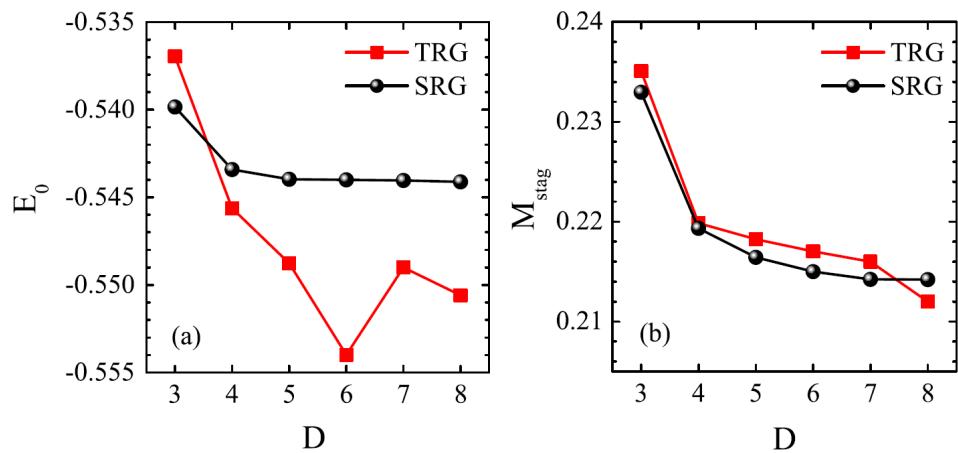


图 3.12: 六角格子上Heisenberg模型基态能量和自发磁化强度的计算结果对比:
TRG, SRG

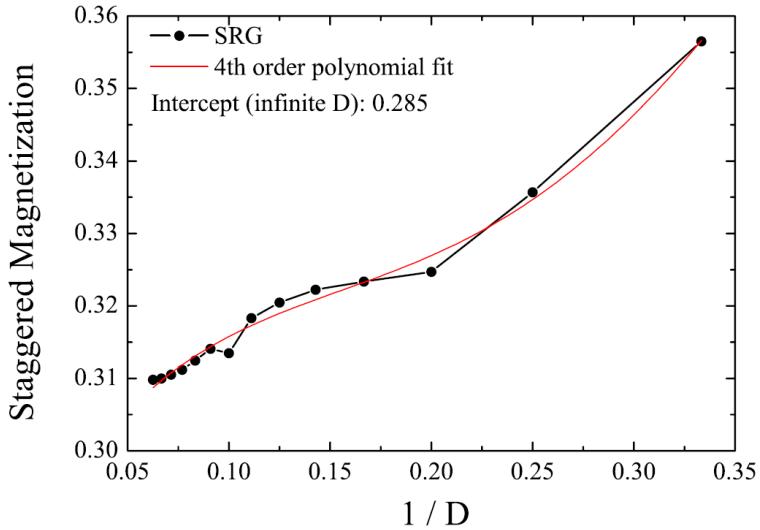


图 3.13: 六角格子上Heisenberg模型自发磁化强度SRG结果的外插计算。

数展开的结果[78]是0.27。这些都是每个格点上的平均磁化强度。为了得到更好的结果，我们在计算中加入对称性[56]，将 D 增加到16，并通过外插得到了0.285的结果。图3.13给出了SRG在无穷大 D 时的格点上自发磁化 M_{stag} 的外插结果。这些结果与上述其他方法的结果都是相符的。

3.5 小结

本章介绍了二次重正化群方法提出的背景，思路，和实施过程，详细介绍了环境集团张量的计算和使用方法，并且在Ising模型和Heisenberg上进行了计算。结果发现，环境的重正化效应，对TRG计算精度的提高是很有帮助的。从这个方面来讲，SRG对TRG的改善，相当于由NRG到DMRG的进步。SRG和键矢量投影方法的结合，给出了一种求解二维量子格点模型的一种有效而精确的计算方法。

第四章 基于高阶奇异值分解的张量重正化群方法(HOTRG)

在前面的章节中，我们提及由于量子蒙特卡洛(QMC)的负符号问题，和密度矩阵重正化群在高维格子上对面积定理的违背，新的数值计算方法亟待发展。基于张量网络模型(态)，一系列张量网络算法被提出来，其中张量重正化群(TRG)方法是处理二维张量网络的一种有效数值方法。基于DMRG算法的考虑，我们提出了二次重正化群(SRG)算法，它考虑了粗粒化过程中环境对系统的重正化效应，极大地提高了TRG的计算精度，SRG与键矢量(Bond Vector)方法，共同构成了一套处理低维量子格点模型的一般性方法。本章将进一步探讨张量重正化群算法在高维(三维甚至更高)空间的应用，这就是我们最近提出的所谓“基于高阶奇异值分解的张量重正化群方法”，简称为高阶张量重正化群方法(Tensor Renormalization Group method based on Higher-order singular value decomposition, HOTRG)[75]，及考虑环境重正化因素之后的更精确版本，高阶二次重正化群方法(HOSRG)。

4.1 引言

TRG和SRG方法在处理二维张量网格时，获得了巨大的成功，但在三维格子上却很难得到应用。以简单立方格子为例，三维网络难以处理的原因主要来源于以下两个方面：一是配位数的增加，一方面使得计算的存储和计算都遭遇极大的挑战，另一方面切断误差变得很大使得计算精度遭到严重削减；二是三维空间的复杂性，使得晶格的构型在粗粒化过程中很难保持，同时为了使构型保持不变，通常需要经过非常复杂的格点变换，这使得算法复杂并且精度受限。究其原因，可以发现，TRG和SRG的数学基础是将一个系统的分解表示成为一个矩阵的分解，这样的分解常常需要将多条键糅合在一起，并且往往会改变晶格构型。这个问题在二维网络上可以通过精细分析不难解决，但在三维甚至更高维的网络上，由于配位数变得很大，晶格的变形通常变得难以分析，或者即使分析正确，计算实施也非常困难。

如前所述，除了直接收缩网格，即经典模拟方法，还可以使用转移矩阵，即量子演化的思想，将问题化为求解一个转移矩阵的最大本征态。对于三维经典模型，这里的转移矩阵是一个层到层之间的转移矩阵，是一个带有上下两层指标的平面网格，如图A.4所示。不幸的是，除了变分(如PEPS和iPEPS算法)以外，目前还不知道如何切断才是对一个PEPS的最优近似。而变分本身则需要求解一个无穷大的二维网格，和一个线性的变分方程，所以计算量很大，并且可能会出现不稳定的问题（即很难判断初始的随机态是否演化到了真正的基态）[79]。

为了解决这个问题，我们将思路着眼于沿着格矢量方向做粗粒化，这样不仅配位数不会发生变化，而且格点数目越来越少，晶格结构也越来越简单，使问题变得越来越清晰。

4.2 其他方法在三维晶格上的尝试与缺陷

首先回顾一下以往在三维晶格上面，一部分组所做的一些尝试。

T.Nishino教授小组在三维Ising模型上曾做过一系列工作。1998年，他们将角转移矩阵重正化群(Corner Transfer-Matrix Renormalization Group method, CTMRG)方法[37]直接拓展到简单立方格子，即所谓的角转移张量重正化群(Corner Transfer-Tensor Renormalization Group method, CTTRG)方法[80]。由于计算量很大，保留状态数 D 只有2，得到的临界点 T_c 的误差大约是10%。（如果不说明，这里以及以后，精度都是相对严格解，如没有严格解，则是相对Monte Carlo的最优解）。随后，他们又发展了一系列基于转移矩阵和变分波函数的方法，比如KWA波函数近似[81]，竖向密度矩阵算法(Vertical Density Matrix Algorithm, VDMA)[82]，漩涡型(vertex-type)张量网络波函数近似[79]，含有64个变分参数的张量乘积变分假设(Tensor-product variation ansatz, TPVA)[83, 84]等。这些算法主要的问题都在于高的计算复杂度和不稳定的变分方程，所取的最大保留状态数D为5，最精确的结果是由漩涡型张量网络波函数近似得到，精度为0.6%。

顾正澄和文小刚教授也对简单立方格子上的Ising模型做了研究[85]。为了使重正化过程中晶格构型保持不变，也为了使用矩阵的奇异值分解，他们非常精细地设计了一种粗粒化方案，每一步粗粒化包含11步操作，如图4.1所示。它的主要问题在于，几乎每一步操作都需要做奇异值分解和切断，这使得每一步

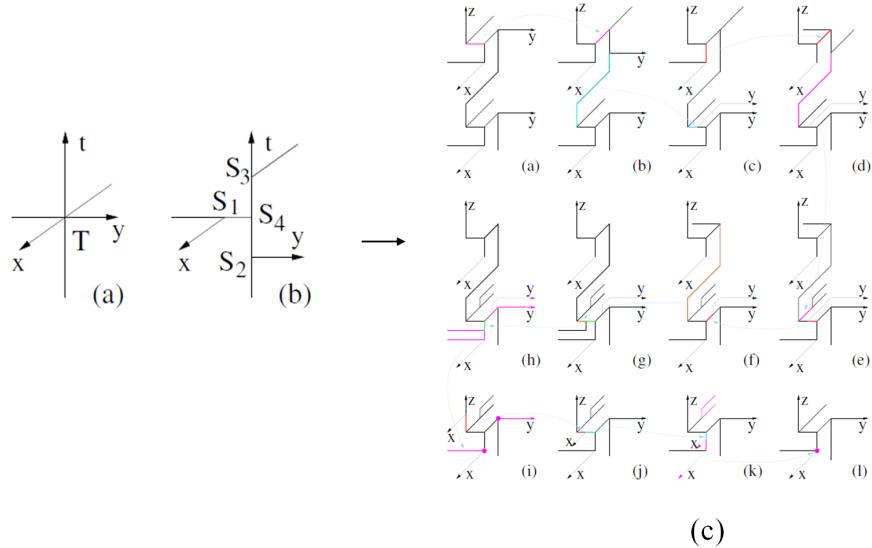


图 4.1: 顾正澄和文小刚教授在简单立方格子上的重正化群步骤。(a)(b)通过连续的奇异值分解将初始六阶张量 T 分解成为4个三阶的结构张量, (c)一个重正化步骤。

的分解都是非常局域的, 切断误差在一步重正化群操作中会得到积累, 从而造成较大的数值误差。在 D 到 50 的量级时, 所得到 T_c 的计算精度大约是 1%, 这并不足以分析临界行为。

最近, J. I. Latorre 教授小组研究了 3 维量子 Ising 模型的基态 [86], 他们首先用键矢量投影方法得到基态波函数, 然后直接收缩 3 维网格求出热力学量。他们的方法中, 一步粗粒化将 8 个格点合并为 1 个格点, 如图 4.2 所示。然后对这个格点集团的每条外键依次做连续的奇异值分解, 再后对每一条键上的结构张量做整合再分解, 最终将每一格点上的所有张量收缩掉, 得到一个 6 阶张量。切断在每一条键的整合再分解中进行。这种方法具有非常高的计算复杂度, 并且是对每条键的局部切断, 切断误差也会逐渐积累起来。在 $D = 5$ 时, 所得到的 T_c 的计算精度为 2.9%。

4.3 基于高阶奇异值分解的张量重正化群方法

上面提到, TRG, SRG, 以及上面直接收缩张量网络的其他方法, 之所以复杂, 是因为要使用矩阵的奇异值分解, 而矩阵的奇异值分解必然会涉及到晶

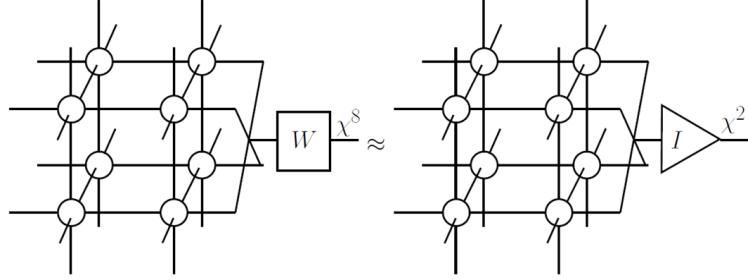


图 4.2: A. Garcia-Saez和J. I. Latorre教授在简单立方格子上的重正化群步骤

格结构的变形。现在我们换一条思路来分析：如果我们按照晶格矢量的方向来收缩网格，那么晶格结构的变化就非常容易分析，会遇到什么棘手的问题，又应当怎样解决？

为了清楚地说明HOTRG算法，我们以二维正方晶格为例来分析问题。如图4.3所示，如果沿 y 方向收缩格矢量，那么形成的格子仍然是正方格子，局部张量的定义是：

$$M_{x_1 x_2, x'_1 x'_2, y, y'} = \sum_i T_{x_1, x'_1, y, i} T_{x_2, x'_2, y, i} \quad (4.1)$$

可以发现，如果T的各阶维数均为 d ，则M的水平维数变为 d^2 ，所以为了使计算进行下去，必须对M的水平维数进行切断。那么问题就出现了： $M_{x_1 x_2, x'_1 x'_2, y, y'}$ 的水平维度有两个，即 $(x_1 x_2, x'_1 x'_2)$ ，如何对一个张量的两个指标同时切断？这个问题不能由矩阵的奇异值分解来解答。

实质上，这样的一个问题在数学上的描述是：如何找到一个张量的最优的低秩近似，即找到一个张量 \tilde{M} ，使得 $|M - \tilde{M}|$ 最小，其中 \tilde{M} 所具有的各个阶数上的非零维度比M小。如果M是一个矩阵，则这个问题由Eckart-Young定理[87]解答，即 \tilde{M} 由M切断的奇异值分解给出。

但对于张量来说，一方面张量的秩没有一个统一的定义[88, 89]，另一方面这一问题提法本身也存在争议[90]。严格来讲，这样一个问题，没有一个普适的结论可用。但庆幸的是，数学上有一种分解形式，清楚而简单地给出了上述问题的一个近似最优的解。这种分解形式，就是Lieven. de Lathauwer在2000年提出的张量的高阶奇异值分解(higher-order singular value decomposition,HOSVD)[91]。

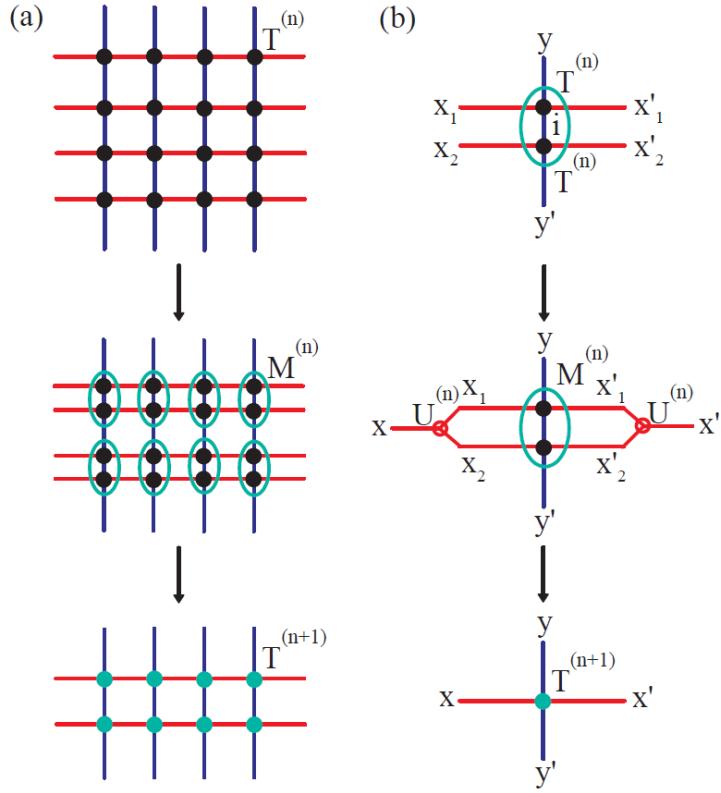


图 4.3: HOTRG中使用过的重正化步骤: (a)正方格子沿 y 方向进行粗粒化操作, (b)局部张量的定义。

4.3.1 高阶奇异值分解

任意给定一个张量, 以四阶张量 T_{ijkl} 为例, 都存在如下所谓的高阶奇异值分解形式:

$$T_{ijkl} = \sum_{i'j'k'l'} S_{i'j'k'l'} L_{ii'} R_{jj'} C_{kk'} G_{ll'} \quad (4.2)$$

其中 L, R, C, G 是四个幺正矩阵, S 是核心矩阵(core matrix), 具有下面的特征: 对于任意一个指标, 比如 j ,

1. $\langle S(:, j, :, :) | S(:, j', :, :) \rangle = 0$, 如果 $j \neq j'$.
2. $|S(:, j, :, :)| \geq |S(:, j', :, :)|$, 如果 $j < j'$.

虽然高阶奇异值分解不是严格的最优低秩近似的解, Eckart-Young 定理并不成立, 但它是最优解的很好的近似。切断就直接对核心矩阵进行即可。形象上, 上述分解形式, 可用图4.4描述。

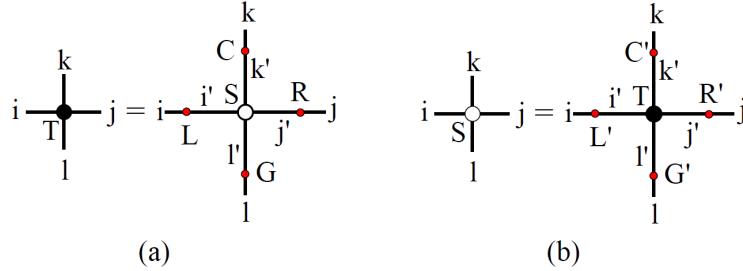


图 4.4: 高阶奇异值分解的两种表达, 以四阶张量为例: (a) T 分解成核心矩阵 S 和四个幺正矩阵, (b)核心矩阵的求法。图中小红点代表四个幺正矩阵 L, R, C, G 。

由于HOSVD的很多性质与矩阵的SVD很相似, 并且近似也非常精确, 它在很多领域, 诸如图像处理、模式识别、数据压缩等已经得到比较广泛的重视和应用[92, 93]。

4.3.2 HOTRG

将格矢方向粗粒化与高阶奇异值分解结合起来, 就构成了高阶张量重正化群算法。以二维正方格子为例, HOTRG算法包括以下步骤:

1. 将张量网络沿 y 方向收缩一次, 即将每相邻两行合并成一行, 每两个局部张量 T 形成一个胖张量 M 。

$$M_{x_1 x_2, x'_1 x'_2, y, y'} = \sum_i T_{x_1, x'_1, y, i} T_{x_2, x'_2, i, y'} \quad (4.3)$$

2. 对 M 做高阶奇异值分解,

$$M_{x, x', y, y'} = \sum_{ijkl} S_{ijkl} L_{xi} R_{x'j} C_{yk} G_{y'l} \quad (4.4)$$

其中, $x \equiv (x_1 x_2)$, $y \equiv (x'_1 x'_2)$. 考虑到只有 i, j 两个指标需要切断, 要考虑两个切断误差: $\epsilon_l = \frac{|S_{D:d^2, \dots}|}{|S|}$, $\epsilon_2 = \frac{|S_{:, D:d^2, \dots}|}{|S|}$, 如果 $\epsilon_1 < \epsilon_2$, 则记 $U = L$, 否则 $U = R$ 。

3. 将 U 作用在 M 上, 对要切断的指标进行切断, 得到重正化之后的局部张量 T^1 , 系统格点数目减少到原来 $1/2$.

$$T_{i, j, y, y'}^{(1)} = \sum_{x, x'} M_{x, x', y, y'} U_{x, i} U_{x', j} \quad (4.5)$$

切断时对 $T^{(1)}$ 的*i, j*指标直接切断即可。

4. 对新生成的张量网络(由 $T^{(1)}$ 构成)在y方向上实施1-3操作, 得到由 $T^{(2)}$ 构成的网络, 系统格点数目又减少一半。

5. 反复重复1-4的操作, 直至系统格点数目达到计算机可处理的大小。

4.3.3 算法分析与计算复杂度

在上述算法中, 有两个问题是值得分析的。第一个是高阶奇异值分解与变分求解的异同。由于可以讲上述算法理解为在局部张量 T 的四个外指标上插入四个切断的幺正矩阵(可称为isometry)进行近似, 因此可以假设式4.4这种分解形式, 然后要求切断前后的 $|M - \tilde{M}|$ 最小, 在满足isometry形式的条件下用条件变分原理求出5个变分张量, L, R, C, G, S 。因为方程的非线性, 这个求解是非常耗时的。事实上, 我们曾经使用这种变分进行求解2维Ising模型, 结果发现得到的结果与使用HOSVD切断的结果几乎是一样的, 自由能的相对误差在 10^{-8} 量级。这也验证了, HOSVD是一个很好的局域近似, 至少对于Ising模型而言。

第二个问题是步骤3的合理性。由于格子是具有平移不变性的, 将 M 分解完之后得到如图4.5(b)的构型, 图示中矩阵的指标总是从左到右, 从上到下, 然后将 S 用图4.4(b)表示, 最终得到图4.5(c)。由于 y 方向不需要切断, 所以直接将所有的 CC^\dagger 和 GG^\dagger 消去。同时, 在 x 方向上, 切断出现在R或者L上, 而只需要一个就同时切断了两个张量。 ϵ 反映了两种切断方式所付出的代价, 选择代价比较小的, 而将另外一个直接替换成单位阵 I , 就得到了步骤3的结论。

至于计算的复杂度问题, 可以通过以下事实得到答案: 算法最耗时的部分不是高阶奇异值分解, 而是步骤3, 即将幺正矩阵作用在胖张量上。首先要说明的是高阶奇异值分解可以由多种方式得到, 比如连续奇异值分解和单侧奇异值分解。所谓连续奇异值分解是指: 对于张量 $M_{xx'yy'}$, 首先做 $M_{x,x'yy'} = U\Lambda V^\dagger$, 令 $L = U$, $M_{x',iyy'}^1 = \Lambda_i V_{x'yy',i}$, 然后做 $M^1 = U\Lambda V^\dagger$, 令 $R = U$, $M_{y,ijy'}^2 = \Lambda_j V_{iyy',j}$ 。依此类推, 得到 C, G , 最终剩下的就是核心矩阵 S 。单侧奇异值分解是指: 对张量 M 每一个指标分别独立作奇异值分解, 比如 $M_{x,x'yy'} = U\Lambda V^\dagger$, 就得到 $L = U$, 同理得到其他的三个矩阵 R, C, G 。得到四个幺正矩阵之后, 根据上式就可求出核心矩阵。

根据算法的分析, 步骤3其实只需要知道水平方向的两个幺正矩阵, 而不

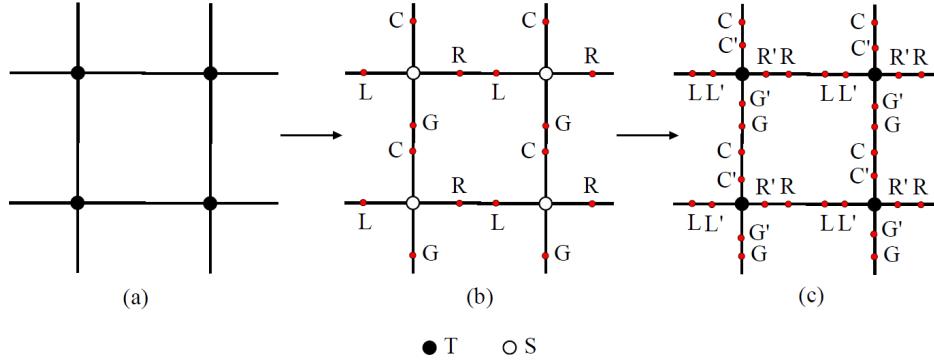


图 4.5: HOTRG 算法分析。(a) 初始网络格子。(b) 高阶奇异值分解之后的格子。(c) 等价格子。可以看出，做高阶奇异值分解，相当于在对应的键上插入一系列单位阵。

需要知道 C, G, S , 所以我们可使用单侧奇异值分解。同时，考虑到 M 自身的内部结构，如果注意到以下事实：

$$MM^\dagger = (U\Lambda V^\dagger)(V\Lambda U^\dagger) = U\Lambda^2 U^\dagger \quad (4.6)$$

就可以不计算出整个 M 矩阵，通过对 MM^\dagger 的本征值分解即可得到所需要的幺正矩阵。事实上，利用这个方法求解奇异值分解时，还有另外一个收获：

$$\Lambda_i = |S(i, :, :, :)|^2 \quad (4.7)$$

因此切断误差的判断可以通过 Λ 直接得到。

到了这里，就可以得到算法的复杂度。计算 MM' 需要的复杂度是 D^6 ，而作用两个幺正矩阵的复杂度是 D^7 。

4.4 环境重正化效应的考虑与HOSRG

在上述HOTRG的算法中，核心问题是求解出需要作用在胖张量上的两个幺正矩阵 L, R ，而这两个幺正矩阵是根据局部张量的高阶奇异值分解得到的，即现在的这种切断方式是对局部格点的一个近似最优切断，而不是整个配分函数的最优切断。考虑到SRG的思想[74]，我们仍然可以用HOTRG的方法得到局部张量的环境集团张量 E ，然后利用 E 对系统的影响，求出对配分函数影响最小的切断方式，这就是所谓的HOSRG算法。

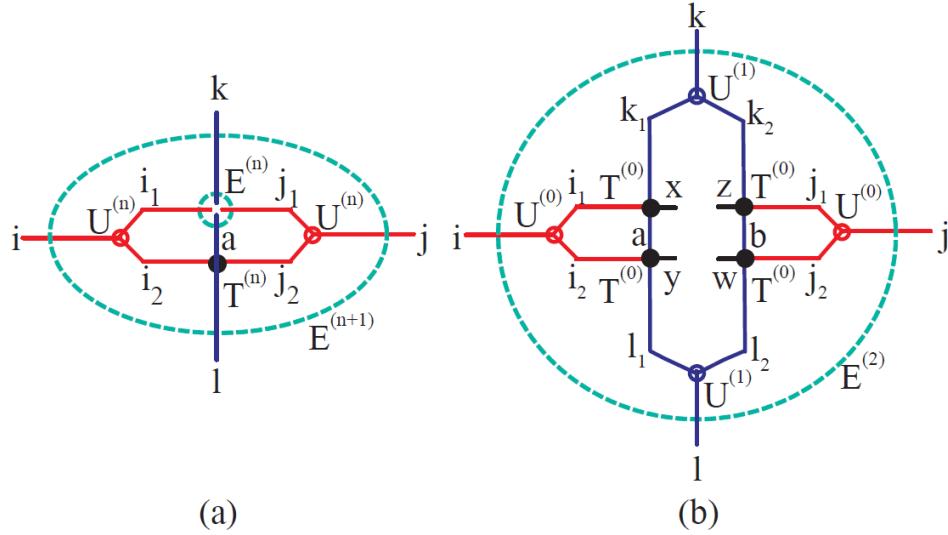


图 4.6: HOSRG 算法表示。(a) 相邻两个尺度环境之间的递推关系。(b) 键密度矩阵 ρ 的求解。

考虑环境集团张量 E 的求解。在上述粗粒化的过程中，可以清楚地得到以下递推公式，如图4.6(a)所示：

$$E_{kaj_1i_1}^{(n)} = \sum_{ijkl} E_{ijkl}^{(n+1)} T_{i_2j_2al}^{(n)} U_{i_1i_2,i}^{(n)} U_{j_1j_2,j}^{(n)} \quad (4.8)$$

其中上标 n 代表由第 n 步重正化步骤所得到和生成，环境上面的指标 n 代表 $T^{(n)}$ 所感受到的环境，初始的张量指标记为 0。因此与 SRG 方法类似，利用 HOTRG 求解系统环境需要以下两个步骤：

1. 前向迭代：在初始张量网络上做 N 步重正化操作，记录所得到每一步的 $T^{(n)}$ 和 $U^{(n)}$ ，最后一步的环境可以使用周期性边界，即

$$E_{ijkl}^{(N)} = \delta_{ij} \delta_{kl} \quad (4.9)$$

2. 后向迭代：利用上述的环境迭代公式 4.8，由较大尺度的环境集团得到较小尺度的环境集团，直至计算到 $E^{(2)}$ 。

一旦 $E^{(2)}$ 计算出来，就可以使用键密度矩阵的方法在要切断的键上面插入模式矩阵，达到切断的效果。具体说来，如图4.6(b)所示，首先定义出键密度矩阵，

$$\rho_{zw,xy} = \sum E_{ijkl}^{(2)} U_{i_1i_2,i}^{(0)} U_{j_1j_2,j}^{(0)} U_{k_1k_2,k}^{(1)} U_{l_1l_2,l}^{(1)} T_{i_1xk_1a}^{(0)} T_{i_2yal_1}^{(0)} T_{zj_1k_2b}^{(0)} T_{wj_2bl_2}^{(0)} \quad (4.10)$$

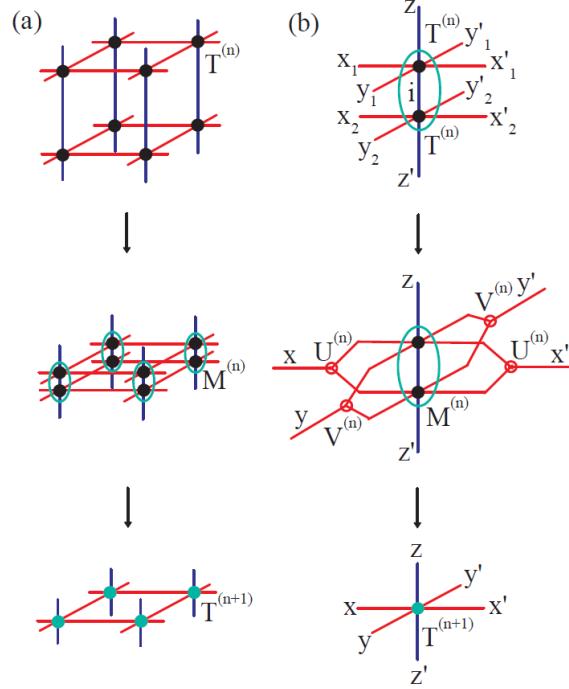


图 4.7: 简单立方格子上的HOTRG步骤: (a)z方向的粗粒化步骤, (b)局部张量的定义。

然后对角化该密度矩阵,

$$\rho = P \Lambda P^{-1} \quad (4.11)$$

最后认为所有的键感受的环境都是一样的, 从而将 PP^{-1} 每一条需要切断的键上面, 即得到近似全局最优切断的重正化张量:

$$T_{xx'yy'} = \sum_{ij} P_{xi}^{-1} M_{ijyy'}^{(0)} P_{jx'} \quad (4.12)$$

注意这里面使用的是 PP^{-1} , 切断在 x, x' 指标上, 而HOTRG使用的是 UU^\dagger : U代表的是局部系统集团的信息, 而P含有近似全局环境集团的信息。

4.5 HOTRG在简单立方格子上的应用

上述HOTRG和HOSRG方法都很容易扩展到三维格点系统, 以简单立方格子为例, 如图4.7所示, HOTRG的实施可按照如下步骤进行:

1. 沿z方向收缩一次网格，即得到一个水平方向上维数平方的胖张量：

$$M_{x_1 x_2, x'_1 x'_2, y_1 y_2, y'_1 y'_2, z, z'} = \sum_i T^0_{x_1 x'_1 y_1 y'_1 z i} T^0_{x_2 x'_2 y_2 y'_2 i z'} \quad (4.13)$$

2. 将M做高阶奇异值分解：

$$M_{x, x', y, y', z, z'} = \sum_{lrbud} S_{lrbud} L_{x, l} R_{x', r} F_{y, f} B_{y', b} C_{z, u} G_{z', d} \quad (4.14)$$

并根据切断误差的大小，选取两个合适的用于切断的幺正矩阵，记为U和V。

3. 将四个幺正矩阵作用在对应的四个方向键上，

$$T^{(1)}_{lrbuzz} = \sum_{xx'yy'} M_{x, x', y, y', z, z'} U_{x, l} U_{x', r} V_{y, f} V_{y', b} \quad (4.15)$$

切断时直接保留 $T^{(1)}$ 的靠前维度即可，相当于在对初始张量M的近似最优切断。

4. 分别沿x, y方向重复1-3步操作，这相当于一个完整的重正化步骤，完成之后，格点数目变为原来的1/8。

5. 反复进行1-4操作，直至系统的格点数目达到计算机能够处理的程度。

事实上，HOSRG的在简单立方格子上的实施完全类似，在此不再赘述，这里根据图4.8写出环境的迭代公式：

$$E_{x_1 x'_1 y_1 y'_1 u i}^{(n-1)} = \sum E_{lrbud}^{(n)} U_{x_1 x_2 l}^{(n)} U_{x'_1 x'_2 r}^{(n)} V_{y_1 y_2 f}^{(n)} V_{y'_1 y'_2 b}^{(n)} T_{x_2 x'_2 y_2 y'_2 i d}^{(n-1)} \quad (4.16)$$

键密度矩阵的计算公式可类似进行。仔细分析后可以发现，HOTRG在简单立方格子上的计算复杂度是 D^{11} ，最耗时的步骤也是步骤3，即将幺正矩阵作用在胖张量上面。注意在HOTRG的步骤中，张量M及其高阶奇异值分解，并没有实际计算出来，只是形式上的表达。

4.6 HOTRG与HOSRG的计算结果

我们首先在二维格子上测试了HOTRG和HOSRG的计算效果，然后用HOTRG计算了简单立方格子上的Ising模型，和二维正方格子上的量子Ising模型[75]。

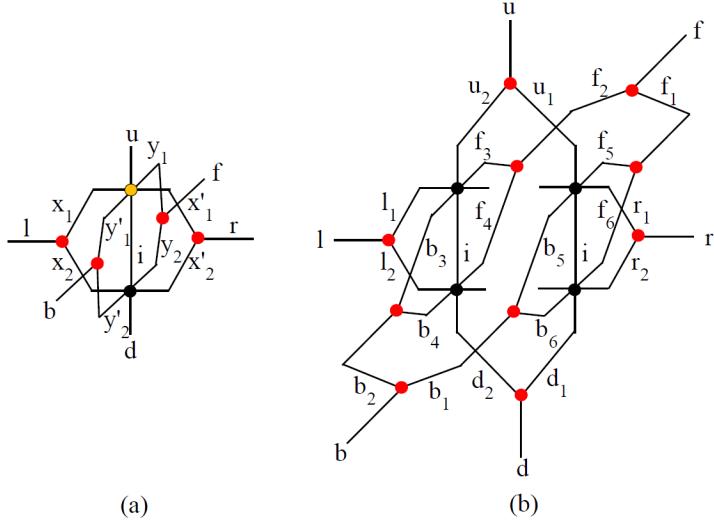


图 4.8: 简单立方格子上的HOSRG算法。 (a)相邻两个尺度上的环境递推关系。 (b)键密度矩阵的求解。图中黑色点代表重正化后的局部张量，红色点代表重正化中所使用的幺正矩阵，黄色点代表杂质点系统，断开的键代表键密度矩阵所对应的杂质键。

4.6.1 二维正方格子上的伊辛模型

图4.9比较了TRG, SRG, HOTRG, HOSRG这四种方法所得到的，关于正方格子上Ising模型的计算精度，保留状态数 $D = 24$ 。纵坐标仍然是计算出的自由能与严格解[94]的相对误差。可以发现，HOTRG在整个温度区间，都比TRG有较大的改善，在临界点附近，甚至可以和SRG、HOSRG相比拟。HOSRG的计算结果最为精确，SRG次之。在 $D = 24$ 情况下，HOTRG在临界点附近的精度已经低于 10^{-7} ，这说明使用HOSVD机制代替SVD机制，在数值结果上是可行并且有效的。

4.6.2 三维简单立方格子上的伊辛模型

考虑简单立方格子上的Ising模型。我们最多计算到 $D=16$ 的HOTRG结果，和 $D=10$ 的HOSRG结果。由于为了给出一条曲线，由于HOSRG的计算复杂度高于HOTRG，我们只给出 $D=14$ 的HOTRG的计算结果(实际上， $D=10$ 的HOSRG和 $D=10$ 的HOTRG 仅仅在临界点附件的临界行为稍有不同，得到的临界点几乎是相同的)。

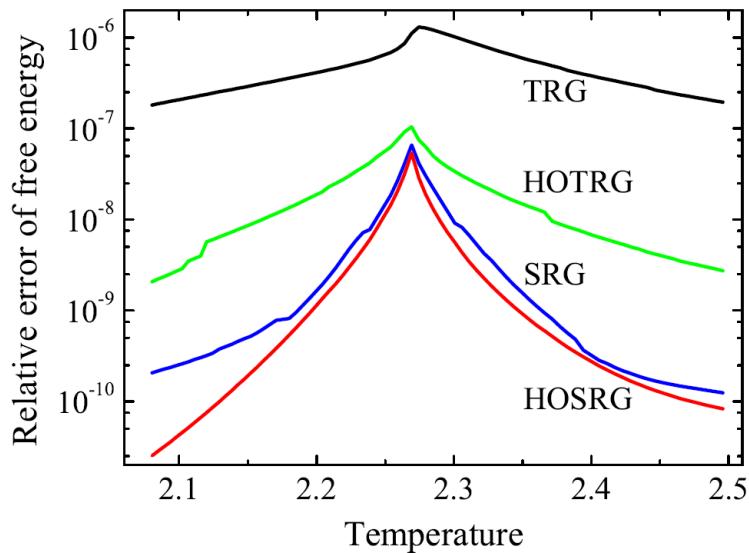


图 4.9: 正方格子上Ising模型的计算精度对比($D = 24$): TRG, SRG, HOTRG, HOSRG。

图4.10是HOTRG计算出的内能和比热曲线。其中，比热的Monte Carlo数据来自文献[95]中的拟合公式。可以发现比热曲线与Monte Carlo曲线重合得非常好。图4.11和4.12分别给出了由内能和比热计算比热临界系数 α 的图像。这里的想法是: α 的定义是

$$C_v \sim t^{-\alpha} \quad (4.17)$$

其中, $t \equiv |\frac{T-T_c}{T_c}|$, 这里的 $T_c = 4.511635(D = 14)$, 由图4.10中比热的尖峰和内能的奇异点给出。将式4.17对 t 进行积分, 得到内能 U 的渐进表达式:

$$U = a \times t^{1-\alpha} + b \times t + U_c \quad (4.18)$$

其中, a, b 为要定的参数, U_c 为临界点处的能量-0.995592。

如图显示, 由内能确定的左右临界指数($D = 14$)是: $\alpha_L = 0.1023, \alpha_R = 0.1137$, 由比热确定的左右临界指数是 $\alpha_L = 0.1148, \alpha_R = 0.1711$ 。级数展开的结果[96]是 $\alpha = 0.104$, Monte Carlo的结果[97]是 $\alpha = 0.111$ 。可以发现, 由内能得出的结果与两者完全相符。比热由于存在数值差分的误差, α_L 计算结果有所偏离。在图4.12中 α_L 的拟合中, 由于在临界点附近发现了比较明显的平均场行为, 因此在拟合临界指数时, 将非常靠近临界点的几个点排除在外。

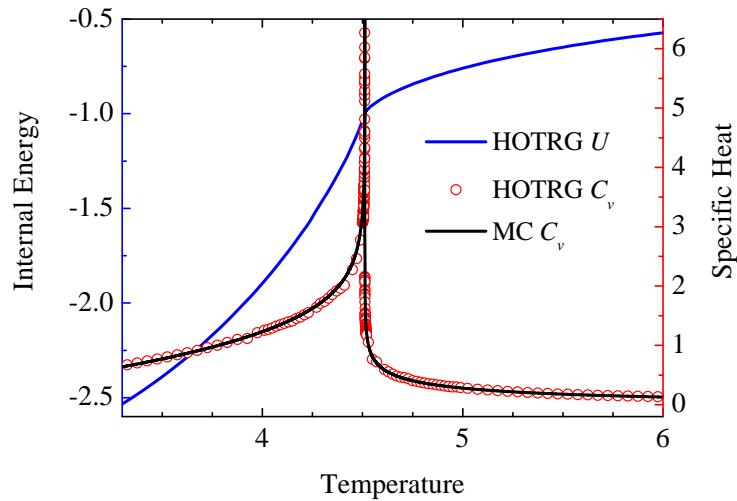


图 4.10: 简单立方格子上Ising模型: 内能和比热曲线, $D=14$ 。

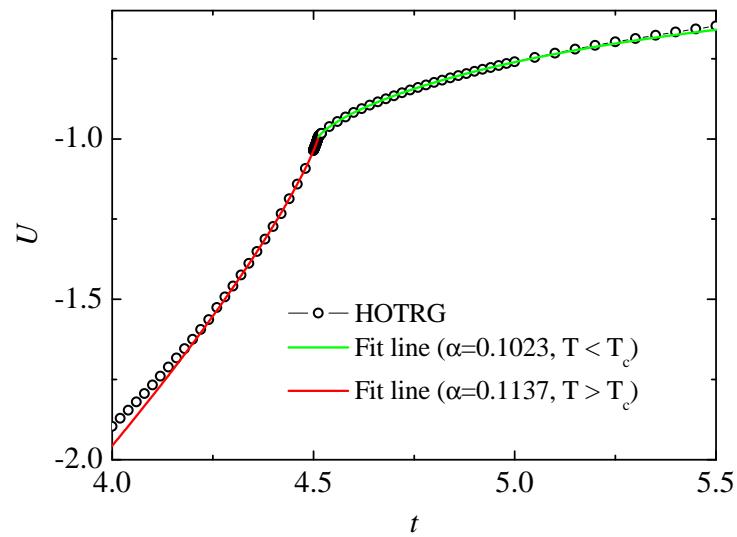


图 4.11: 简单立方格子上Ising模型: 由内能模拟临界指数 α , $D=14$ 。

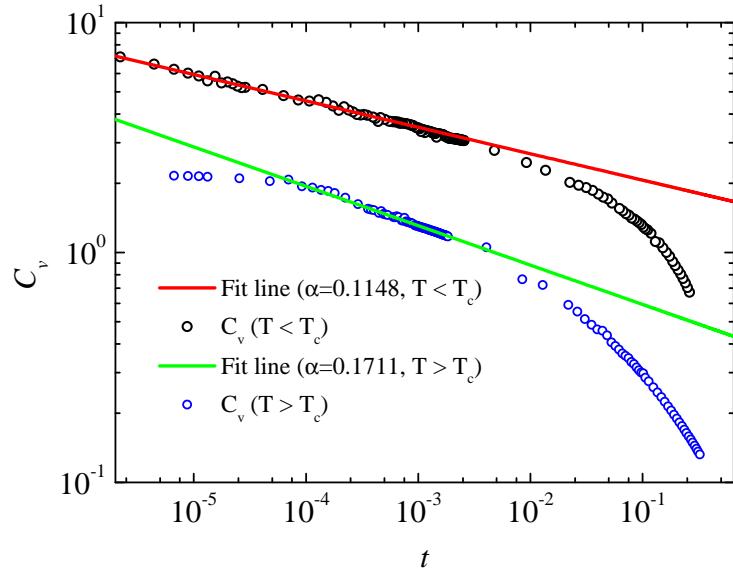


图 4.12: 简单立方格子上Ising模型: 由比热直接确定临界指数 α , $D=14$ 。

图4.13是HOTRG计算出的自发磁化强度曲线。可以看出在整个区间上, HOTRG的计算结果与Monte Carlo的经验公式[98]符合得非常好。由 M 的奇异行为定出的临界点($D = 14$)是: $T_c = 4.511615$, 根据这个临界点可以拟合出磁化强度临界指数 β ,

$$M \sim t^\beta \quad (4.19)$$

结果是 $\beta = 0.3295(D = 14)$ 。级数展开的结果[99]是0.3265, Monte Carlo的结果[97]是0.3262, 即HOTRG的结果与它们也是相符的。

图4.14是HOTRG所得到的 T_c 随着保留状态数 D 的收敛情况分析。可以发现, 对于给定的相同保留状态数, 由内能 U 和磁化强度 M 的奇异性得到的 T_c 是基本相符的。在 $D = 16$ 时, 两种方法得到的 T_c 分别是4.511544和4.511546, 两者之间的相对误差在 10^{-7} 量级。Monte Carlo拟合[100]出的 $T_c=4.511523$ 是, 级数展开[101]得到结果是 $T_c = 4.511536$, 可以发现HOTRG($D=16$)的结果与他们吻合得非常好。Monte Carlo其他文献[102, 103]中的计算结果与HOTRG的结果也是相符的。这比以前方法的数值重正化群的计算结果4.5788[81], 4.5537[83]等都有很大改善。另一方面, 可以看出, T_c 的位置并不是随着 D 的增大而单调增加的, 这一点行为上类似于第三章图3.12中的TRG行为。但随着D增加到10以

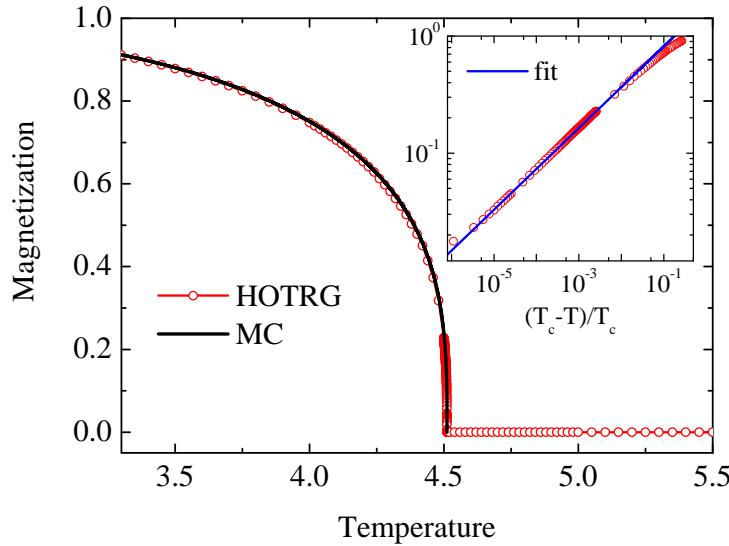


图 4.13: 简单立方格子上Ising模型: 自发磁化强度曲线, 和临界指数 $\beta = 0.3295$, $D=14$ 。

上, 临界点的行为逐渐趋于单调, 并在 $T > 12$ 时, 收敛误差达到 $10^{-6} \sim 10^{-5}$ 量级。

4.6.3 二维正方格子上的量子伊辛模型

考虑正方格子上的量子Ising模型, 其哈密顿量形式是:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_z^i \sigma_z^j - h \sum_i \sigma_x^i \quad (4.20)$$

这里, σ 为pauli矩阵。通过映射之后, 该模型可以化为三维张量网络模型, 因此可以使用HOTRG求解。

图4.15是利用HOTRG得出的该模型的基态内能 E_0 、 $M_x \equiv \langle \sigma_x \rangle$ 、 $M_z \equiv \langle \sigma_z \rangle$ 随磁场 h 的变化曲线。可以发现, M_x 和 M_z 有一个有限磁场相变, 临界磁场 $h_c = 3.039$ 。更精确的计算表明, $D = 14$ 时, $h_c = 3.044$ 。这与Monte Carlo[104]的计算结果3.044, 和级数展开[105]的计算结果3.044, 都符合得非常好。相对而言, 这比iPEPS[38] 得到的3.06, 和VDMA[82]得到的3.2, 都更加精确。

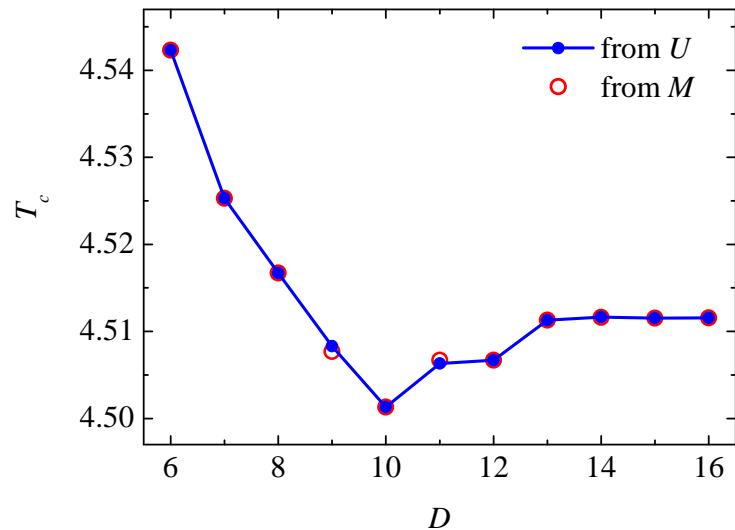


图 4.14: 简单立方格子上Ising模型: HOTRG计算结果随保留状态数 D 的收敛性分析。

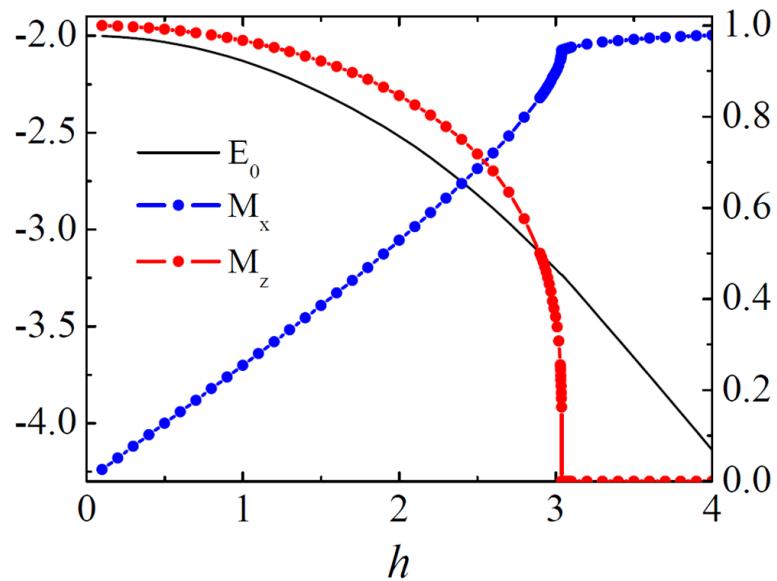


图 4.15: 正方格子上的量子Ising模型基态分析($D = 12$): 内能、 $\langle \sigma_x \rangle$ 、 $\langle \sigma_z \rangle$

对于有限温度而言，原则上仍然可以可以HOTRG收缩三维网格而得到，只不过在trotter方向上长度是有限的。由于HOTRG粗粒化的原因，这样所得得到得温度点是分布是：

$$T_i = \frac{1}{2^i \tau} \quad (4.21)$$

其中*i*为trotter方向上粗粒化的步数。可以看出，式4.21所定义的温度点是不等间距的，并且绝大部分温度点集中在极低温度，这对分析热力学行为是没有意义的。

解决这个问题有两种方式：第一种是在不同的温度区间选取不同的 τ ，但这样做不利于热力学行为的分析，并且在高温区间会使得 τ 很小，导致很大的纵向切断误差；第二种是采用量子演化的方法，类似于李伟和苏刚教授等人的做法[106]，只是波函数的更新和转移矩阵的投影不太相同，即将量子转移矩阵不断地作用在一个初始转移矩阵(是一个TPO形式，即张量乘积算符，类似于矩阵乘积算符([107]))上面，切断的方式采用HOTRG的切断机制，得到转移矩阵的累积量，计算热力学量时，采用周期性边界来将累积量化为一个二维网格，然后利用HOTRG收缩二维网格即可。为了减小横向切断误差，可以采用双侧同时进行作用的方式进行粗粒化，这种方式所得到的温度点分布是：

$$T_i = \frac{1}{2i\tau} \quad (4.22)$$

这样以来，温度点的分布从原来指数分布变成反比分布，利于分析热力学行为。

我们应用第二种方法计算了量子Ising模型的热力学行为。图4.16和4.17是给定不同磁场时，得到的内能E和比热C_v随温度的变化曲线。由于该模型基态的临界磁场h_c在大约3.044附近，可以预测在h < h_c时，基态是有序的，因此会发生一个有限温度的相变，而在h > h_c时，基态没有长程序，因此不会发生有限温度相变。两图的结果验证了这一点：在h = 1和h = 2时，内能和比热行为具有明显的奇异性，而h = 4时两者没有奇异行为。并且可以发现，随着磁场的增加，相变点T_c逐渐向低温移动，原则上h = 3的曲线应该在很低温处具有一个相变点，但由于投影算法本身trotter误差的积累和差分求解比热的误差，使得极低温时结果并不十分准确，在图4.17中并没有发现明显的相变行为。

但上述问题在图4.18和图4.19中可以得到澄清。可以发现，M_x ≡ ⟨σ_x⟩ 和 M_z ≡ ⟨σ_z⟩ 在 h < h_c，包括 h = 3 的曲线，都存在一个有限温度相变，而 h > h_c 时，该

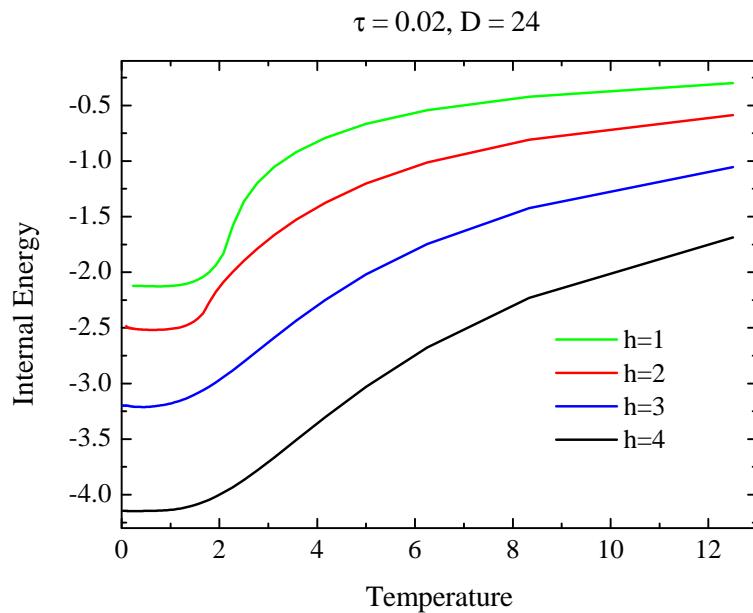


图 4.16: 正方格子上的量子Ising模型热力学分析($D = 24$): 不同磁场下的内能曲线。

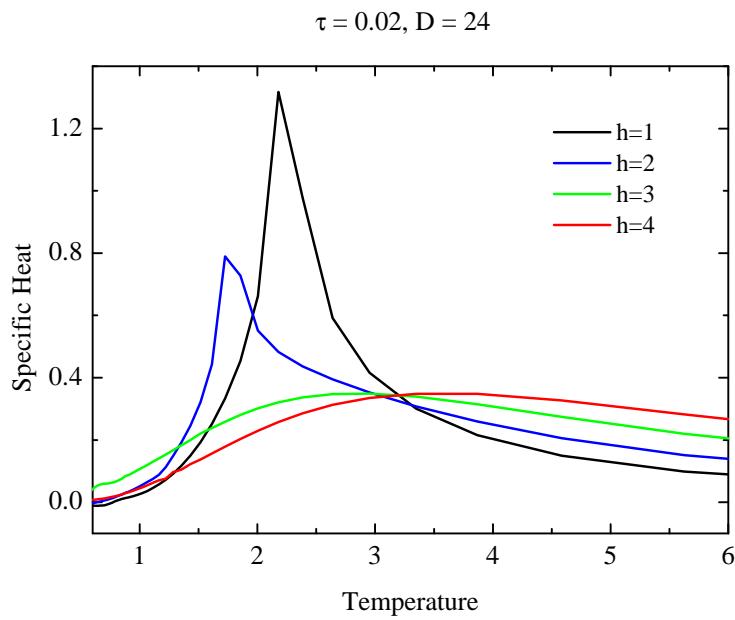


图 4.17: 正方格子上的量子Ising模型热力学分析($D = 24$): 不同磁场下的比热曲线。

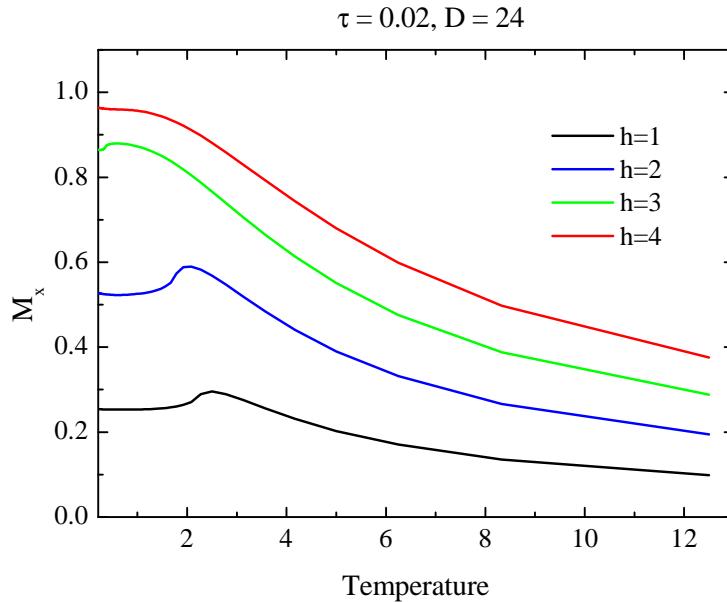


图 4.18: 正方格子上的量子Ising模型热力学分析($D = 24$): 不同磁场下横向磁化强度 $\langle \sigma_x \rangle$ 。

有限温度相变消失。这些特征符合我们的预测。这里面, 保留状态数 $D = 24$, trotter步长 $\tau = 0.02$ 。如果要进一步理清低温行为, 需要增大 D , 同时精细地选取 τ 以兼顾横向切断误差和纵向切断误差。

4.7 小结

在本章中, 我们讨论了以往重正化群方法在三维晶格上的困难, 提出了基于张量的高阶奇异值分解的张量重正化群算法, 即HOTRG。将环境的重正化效应放进去, 又提出了高阶二次重正化群算法(HOSRG)。HOTRG算法的存储量和计算量都相对较小, 在正方格子上分别为 D^4 和 D^7 , 在简单立方格子上分别为 D^6 和 D^{11} , 这些都是现代计算机可以处理的。结果显示, HOTRG在二维问题上比TRG有较大的优越性, 尤其是在临界点附近, HOTRG的结果甚至与SRG和HOSRG的结果相当。在三维Ising模型问题上, 它 $D = 16$ 的计算结果超越了以往数值重正化群算法的计算精度, 得到了迄今为止最为精确的重正化群方法得到的临界点。对于量子Ising模型, HOTRG方法可以精确地定出临界磁场, 并且与投影方法的结合使之可以给定磁场计算热力学行为, 得到的结果

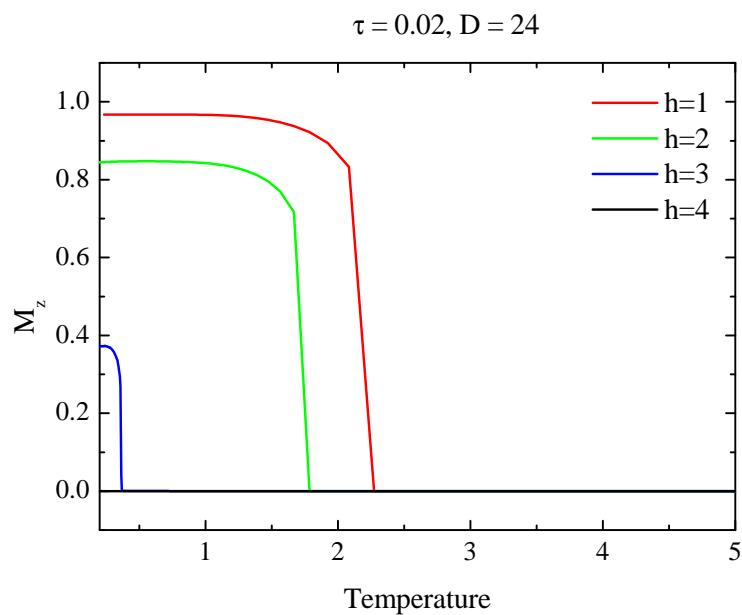


图 4.19: 正方格子上的量子Ising模型热力学分析($D = 24$): 不同磁场下z向磁化强度 $\langle \sigma_z \rangle$ 。

符合物理上的预期。

第五章 有限尺寸的二次重正化群方法(finite SRG)

在第三章介绍的二次重正化群方法(SRG)，和第四章介绍的高阶二次重正化群方法(HOSRG)，其环境总是固定尺寸的大小，即对于每一个尺度上的局部张量切断，其前向迭代都是做固定的 N 步重正化，换言之，认为每一个尺度上的杂质键都是被一个无穷大的环境所包围，整个系统是无穷大的。鉴于对于有限尺寸系统，有限尺寸DMRG[47]总是要比无限尺寸DMRG[22]更为精确，在本章，我们提出了有限尺寸的二次重正化群方法，以期进一步提高张量重正化群的计算精度。

5.1 引言

所谓有限尺寸二次重正化群方法(finite SRG/HOSRG)，是比对有限尺寸DMRG而说的。无限尺寸DMRG其环境大小总是与系统相同，即不论系统尺寸达到多大，总是有很大的环境在外面与之对应，所以称为无限尺寸。而有限尺寸DMRG算法中，系统和环境之和总是一个固定的大小，通过反复扫描对基矢进行优化更新，以弥补无限尺寸算法中所忽略的实际环境（因为总是考虑与系统相同大小的环境）。

因此，前述的SRG和HOSRG，相当于无限尺寸算法。如果考虑整个系统本身就是有限大小的，则需要有限尺寸算法。同时为了解决有限尺寸算法在系统较小时环境较小的不足，需要引入DMRG的扫描机制，即通过反复更新系统基矢和环境基矢，来求出最优的保留基矢。

5.2 有限尺寸二次重正化群方法

5.2.1 简单有限尺寸算法

如果在不同尺度上的网格，做前向迭代时取不同的步数，而保持整个系统（包括目标系统和环境）尺寸不变，这种方法就是一种简单的有限尺寸算法。具体来说，假设经过 i 步重正化操作之后，得到了需要切断的新的张量网络 $M^{(i)}$ ，此时做SRG或者HOSRG，前向迭代中的重正化步数做 $N - i$ 步，并

根据这 $N - i$ 步得到所需要的杂质键的环境集团张量 M^e , 利用 M^e 对张量网络 $M^{(i)}$ 进行切断, 得到第*i*个尺度上的重正化之后的局部张量 $T^{(i)}$ 。这里N是预设的一个常数, 对应于整个格点系统所具有的尺寸大小, 简称N为全局步数, *i*为系统步数, $(N-i)$ 为环境步数。这种算法在粗粒化的过程中, 保持全局步数为N, 是一种简单的有限尺寸算法。

5.2.2 扫描机制的切入

从DMRG的经验上考虑, 扫描机制(Sweep Scheme)对有限尺寸算法的精度提高是有很大帮助。与DMRG方法的不同之处在于, DMRG算法中一个尺度上只有一个系统和一个环境, 而张量重正化群算法中, 每一个尺度上都有无穷多个相同的系统, 并近似认为他们的环境是相同的。DMRG算法需要扫描的原因在于, 当系统比较小时, 只考虑了与系统相同大小的环境, 而真实的环境要更大一些; 张量算法中需要扫描的原因在于, 原则上切断只对一个系统有效, 而实际操作中对所有的系统均同时作了相同的切断。扫描有助于使保留的基矢量更能真实地反映全局系统, 提高计算精度。

将简单有限尺寸算法和扫描机制结合起来, 就得到了有限尺寸二次重正化群方法(finite SRG)。这里考虑finite HOSRG算法, 其步骤如下:

1.热身(warm-up)。在初始的张量网格 $T^{(0)}$ 上做N步HOTRG, 制备出所有尺度上的 $T^{(n)}$ 和 $U^{(n)}$ 。此处之后, 固定全局步数为N。

2.根据制备出的 $T^{(i)}$ 和 $U^{(i)}$, 求出 $M^{(1)}$ 中杂质键的环境, 使用键密度矩阵的方法, 得到新的张量网络 $T^{(1)}$ 。这一步与无限尺寸HOSRG相同。

3.在张量网络 $T^{(1)}$ 上面, 做(N-1)步重正化, 制备出所有尺度上的 T^n 和 $U^{(n)}$, 然后利用这些张量求出 $M^{(2)}$ 中杂质键的环境, 得到 $T^{(2)}$ 。

4.反复重复第三步, 直至求出 $T^{(N)}$, 其环境不用计算, 使用周期性边界条件(即 δ 函数)即可。

5.前4步即为简单有限尺寸算法, 结束之后得到了所有尺度上的张量 $T^{(n)}$ 和 $P^{(n)}$ 。将2,3,4中的 U 换成 P , 反复重复2,3,4步操作, 直至所有尺度上的张量网络都收敛到指定的精度。

这就是finite HOSRG的具体操作。可以发现简单有限尺寸算法需要进行的重正化步数是 $N + (N - 1) + \dots + 1 = \frac{N(N+1)}{2}$, 不同于无限尺寸算法的 NN_e , 其中, N_e 为所固定的环境步数。

在简单有限尺寸算法中，同一尺度上局部张量的更新是同时的，即杂质键系统更新之后，下一个尺度上的杂质键系统的环境也自然进行了更新。这就使得必须要重新进行HOTRG在计算下一个尺度上的各个张量。其实可以考虑一种近似，即如下图所示，认为系统和环境不是同时更新的，具体来说，更新完 $T^{(i)}$ 之后， $T^{(i+1)}$ 的环境并没有变化，只是 $T^{(i+1)}$ 内部构成发生了变化。这样以来，可以一次性在后向迭代中求出所有尺度上的 $E^{(i)}$ ，而前向迭代中直接使用反应比较迟缓并没有发生变化的环境，不用再在每一个尺度上做前向迭代。具体说来：保持第一步不变，

2. 根据制备出的张量，求出所有尺度上的环境集团张量 $E^{(i)}$ 。
3. 根据 $M^{(1)}$ 和 $E^{(2)}$ 以及相应的幺正矩阵，更新 $T^{(1)}$ 和 $M^{(2)}$ ，并记录切断所用的模式矩阵 $P^{(1)}$ 。
4. 根据 $M^{(2)}$ 和 $E^{(3)}$ 以及相应的幺正矩阵，更新 $T^{(2)}$ 和 $M^{(3)}$ ，记录 $P^{(2)}$ ，反复执行此种操作，直至更新至 $T^{(N)}$ 。
5. 使用模式矩阵代替2,3,4中的幺正矩阵，反复重复2,3,4步操作，直至所有尺度上的张量网络都收敛到指定的精度。

这种近似的算法，需要的重正化步数是系统的尺寸乘以扫描的次数。其优点在计算量一般情况下比较小(除非扫描次数要求比较多)，但需要非常精细地分析对环境和系统的匹配。两者的精度在理论上不能做出比较：在每一步的环境考虑中，精确算法（即系统和环境同时更新）更加自治和严格，但是切断方式是针对单个系统而言最优，并非是针对同时切断多个系统最优，所以同时切断有可能会造成更新过快；近似算法(即系统和环境不同时更新)的环境不太严格，但更新较慢，基矢的选择更加精细，有可能会更加稳定。

5.3 finite HOSRG在二维正方格子上伊辛模型的表现

我们利用有限尺寸HOSRG重新求解了正方格子上的Ising模型，并在图5.1中比较了HOTRG、HOSRG、finite HOSRG的计算精度。可以发现，finite HOSRG在整个温度区间都进一步提高了HOSRG的精度，包括在临界点附近。这说明，反复的扫描，有助于更精确地考虑系统和外部环境的全局纠缠。

图中可以看到一个问题，就是finite HOSRG在低温时可以对HOSRG有较大的精度提高，但在高温的一大段区间几乎没有改善。这个问题跟张量自身的

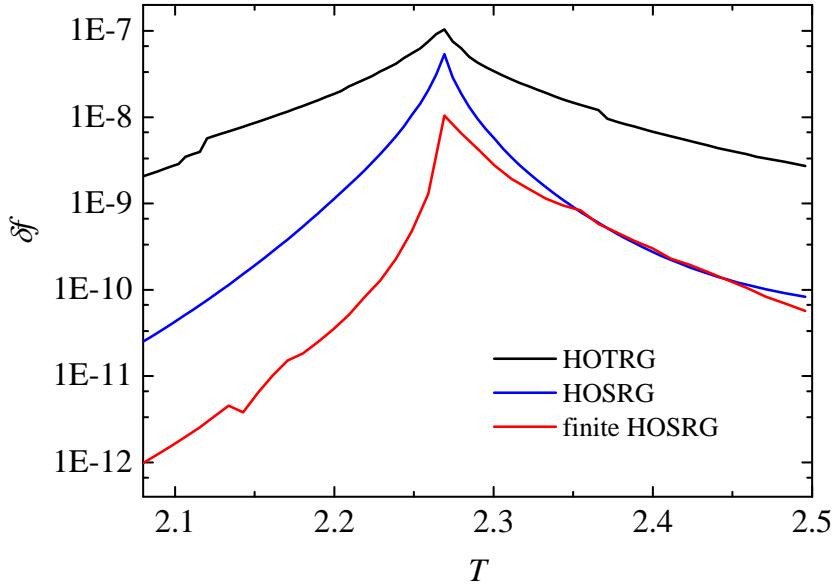


图 5.1: 有限尺寸HOSRG算法的表现($D = 24$): 正方格子上Ising模型。

对称性相关[108, 109]。考虑到对偶格子的低温对应于实空间格子的高温，在高温区间可以使用对偶格子的局部张量来进行HOTRG计算，从而实现finite HOSRG对HOSRG的改善，即：对于二维Ising模型，高温方面本身不是问题，finite HOSRG和HOSRG的计算精度都可以很简单地通过对偶格子来进一步提高。这里面为了叙述的清晰性，并考虑到三维空间对偶格子的复杂性，统统使用实空间张量网络模型，不讨论对偶格子。

图5.2详细地比较了各种HOSRG算法的表现：HOSRG(特指无限尺寸)，simple finite HOSRG(即简单有限尺寸HOSRG算法，不含扫描机制)，approximate finite HOSRG(含有扫描机制的有限尺寸HOSRG算法，系统和环境不同步更新)，finite HOSRG(含扫描机制，系统和环境同步更新)。

可以发现有限尺寸算法的表现总是优于无限算法，同时finite HOSRG通过扫描，总是可以改善simple finite HOSRG(即没有扫描)的精度。这是可以理解的：在有限尺寸中，不论含或不含，所考虑的环境总是真实的环境，而无限尺寸总是考虑一个虚拟的相同尺度大小的环境，从物理上来讲，有限尺寸算法更符合物理现实，反映在图中，即simgpel finite HOSRG也总是比HOSRG的精度高。对于approximate finite HOSRG而言，在临界点附近，系统的关联比较强，

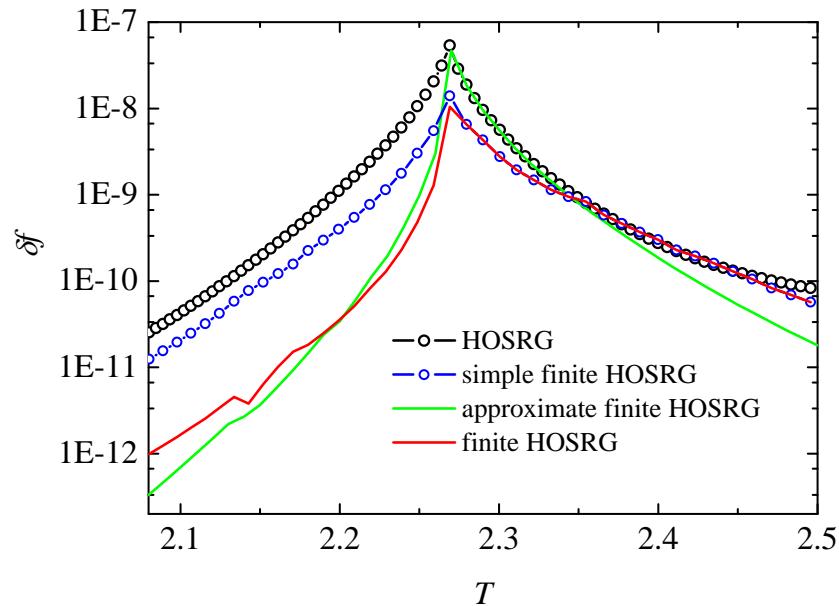


图 5.2: 各种HOSRG算法的计算精度比较($D = 24$): 正方格子上Ising模型。

系统和环境需要同时更新, 因此其精度低于精确的有限尺寸HOSRG, 但在远离临界时, 由于关联长度比较短, 系统和环境的非同步更新也是合理的, 并且从数值角度来讲, 使得全局系统的基矢量更新得更加精细, 因此其计算精度比精确的finite HOSRG表现略好。

将本章介绍的有限尺寸算法, 适用到三维经典模型中, 是下一步要完成的工作。

5.4 小结

本章在对SRG和HOSRG方法进行了剖析, 讨论了扫描机制的必要性和实施方法, 提出了finite HOSRG算法, 如果该算法将HOSRG换成SRG, 就可以成为finite SRG算法。在Ising模型上的计算结果表明, 有限尺寸HOSRG要比无限尺寸HOSRG更加精确, 而扫描机制则可以进一步提高有限尺寸HOSRG的计算精度。在远离临界点时, approximate finite HOSRG由于较小的计算代价, 和基本相当的计算精度, 因此比finite HOSRG有更大的优势。

第六章 总结与展望

强关联系统蕴含着丰富的物理图景，强关联模型的求解具有十分重要的理论意义和现实重要性。在解析求解无法实现的情况下，大规模数值模拟几乎成为求解这些强关联模型的唯一途径。然而常规的数值计算方法，以量子蒙特卡洛和密度矩阵重正化群为主要代表，对具有高于一维的无限大费米子或具有阻挫(frustration)的自旋体系，大多数情况下无能为力。在这种背景下，新的数值计算方法亟待开发。

量子信息领域对纠缠熵的研究，加深了人们对已有数值方法的认识，逐渐意识到DMRG所得到的不动点波函数恰好可以表示为所谓的矩阵乘积态(MPS)，而MPS满足一维量子系统纠缠熵的面积定理，却不能描述二维或更高维度量子系统的纠缠，这是DMRG在一维工作很好，而在高维失效的根本原因。基于这一发现，人们构造了一类满足面积定理的一般性波函数，即所谓的投射纠缠对态(PEPS)，认为量子格点模型的基态可以由其忠实地表示。基于这一假设，量子模型的物理量期望值，最终归结为收缩一个无穷大的张量网络。而对于一切具有局域相互作用的经典统计模型，总是等价于一个张量网络模型，其配分函数以及物理量的统计平均值也都归结为收缩一个无穷大的张量网络。

2007年，由Levin和Nave提出的张量重正化群方法(TRG)，其主要目的就是收缩一个无穷大的张量网络。它的主要思想是基于局域张量的最优化近似从而近似求解整个张量网络，在二维经典系统获得令人瞩目的成功。TRG方法并没有考虑粗粒化过程中环境对系统的重正化效应，为了弥补这一缺陷，提高计算精度，我们在2009年提出了二次重正化群方法(SRG)，其基本思想是利用TRG来求解环境集团张量，并利用这个环境张量来优化局域系统的近似，使得局域切断可以考虑整个体系的最优化近似。SRG方法极大地提高了TRG的计算精度，与2008年姜红臣、翁征宇教授和向涛教授提出的键矢量投影方法相结合，提供了一种求解有能系的量子格点模型的一般性方法。

TRG和SRG一个共同的问题是，很难应用于三维格点模型，其原因来源于重正化群的思想是通过一个矩阵的奇异值分解而引入的，这使得晶格在重正化群操作的过程中不可避免地发生变形。而三维晶格一个重要的特点就是配位数

较多，这在很大程度上增加了分析的难度和计算的代价。为了解决这一问题，发展出适用于三维甚至更高维度晶格的张量算法，我们于2011年提出了高阶张量重正化群算法(HOTRG)，其基本思想是沿格矢方向做粗粒化，使用张量的高阶奇异值分解做重正化群切断，这样避免了格点变形的分析，并降低了计算代价。计算结果表明，即使在二维情形，HOTRG的表现也要优于TRG，在临界点附近甚至接近于SRG的精度。同样，为了考虑环境的重正化效应，我们又将SRG的思想加入HOTRG，提出了HOSRG算法。D=16的HOTRG算法，取得了迄今为止最为精确的三维Ising模型的重正化群解，其精度与Monte Carlo相比达到了 10^{-6} 。

鉴于有限尺寸DMRG对无限尺寸DMRG的精度提高，我们又在HOSRG基础上提出了finite-HOSRG算法，它由简单有限尺寸算法和扫描机制两个部分组成，对系统的基矢量重新做了最优化遴选，得到了更为精确的结果。从这个意义上讲，TRG，HOSRG，finite-SRG分别相当于NRG，无限尺寸DMRG，和有限尺寸DMRG。这个方面的工作，需要花时间做进一步精细的研究和分析，算法仍然有改善的余地。

张量网络算法是有趣而充满生机的，有很多相关的课题有待进一步研究，而这些问题的解决必然会促进强关联模型的研究，加深我们对强关联系统物理图像的理解。我个人认为以下问题是得关注的：

1.重正化群方法中的过滤机制(filtering scheme)[108, 109]。在张量网络粗粒化的过程中，越来越多的局域自由度信息被放进局域张量里面，虽然每一次的重正化都会扔掉一些局域纠缠，但长程的纠缠和短程的纠缠混合在一起，一方面使得切断不是最优化，另一方面使得张量的维数越来越大，不利于计算的进行，而实际上除了恰好是临界点上，描述长程纠缠所需要的张量维数通常是很小的，局域的纠缠原则上可以在重正化群过程中直接积掉。顾正澄和文小刚教授在TRG算法中加入的过滤机制近似实现了这一点，在临界点两侧得到了两种分别与系统物理相匹配的张量结构，并用它来描述拓扑序，获得了很大的成功。HOTRG比TRG具有更高的精度，并可应用到高维模型中，所以HOTRG/HOSRG/finite-HOSRG算法与过滤机制的结合，将会对研究高维模型产生有着重要的影响。

2.如何判定两个两张张量网络的等价性。一切具有局域相互作用的经典统计模型都等价于一个张量网络模型，前者的一切热力学量归根结底都来源于后

者收缩所得到的一个数值，即配分函数。在局域张量归一化的条件下，数学上如果能够构造出与原网络模型等价的网络模型，而新的模型更加容易求解，则很多物理模型可能会得到更深入的理解，诸如三维Ising模型。

3.HOTRG算法与iTEBD算法的结合。HOTRG的一个核心是利用粗粒化的方法收缩整个晶格，用高阶张量奇异值分解的方法引入重正化切断，而iTEBD算法的核心是求解一个无限维数的转移矩阵的最大本征态，切断时必须用到整个波函数的正则化。如果能将HOTRG的算法和iTEBD算法结合起来，就有可能会出现比HOTRG更精确，比iTEBD更高效的数值计算算法。

4.张量乘积态的非幺正演化。PEPS的幺正演化，比如虚时演化(沿温度方向演化求基态)，近似可以用键矢量投影方法处理，而非幺正演化，比如经典统计模型的转移矩阵，对于矩阵乘积态，可以使用其正则形式(canonical form)对波函数做最优切断(比如非幺正的iTEBD算法[35])，而对于张量乘积态，除了变分方法（比如PEPS, iPEPS算法）之外，目前还没有精确的算法可以求解。变分方法，由于要求解无限大的环境集团张量，一方面会造成很高的计算代价，另一方面会造成变分方程解的不稳定性。由于在二维经典网络计算中，iTEBD算法和CTMRG算法比粗粒化的重正化群算法具有更高的计算精度，所以有理由相信，如果张量乘积态的非幺正演化问题得到处理，将会得到比HOSRG/finite-HOSRG更为精确的计算结果。

5.两个PEPS的等价性与正交性问题。等价性是说，是否有可能存在两个局域张量不相同(归一化相同)的波函数，在物理上描述同一个状态，如果有可能，那么除了一个平凡的规范自由度(trivial gauge freedom)之外，如何建立两张PEPS局域张量之间的联系。这个问题J. I. Cirac教授小组做过一部分讨论[110]，但并没有完全解决。正交性是说，如何简单地在数学上构造一个与给定 $\text{PEPS}|\psi\rangle$ 相正交的 $\text{PEPS}|\phi\rangle$ ，即两个波函数满足 $\langle\psi|\phi\rangle = 0$ 。考虑这个问题的出发点是说，在用转移矩阵思想求解最大本征态时，如果可以将两个等价PEPS之间的额外自由度给去掉，波函数会收敛地更加稳定，同时如果采用矩阵理论里面Lanczos或者共轭梯度算法(conjugate gradient)来代替幂次投影(power method)，算法将会更加高效。

6.量子格点模型的热力学问题。在一维系统中，转移矩阵重正化群(TMRG)方法[111, 112]是目前最为精确的求解有限温度的方法。对于张量算法，李伟与苏刚教授等提出了线性张量重整化群算法(Linearized Tensor Renormalization

Group, LTRG)[106], 用于求解有限温度行为。其核心思想是将配分函数展开成转移矩阵的幂次形式, 不同的温度对应于不同的幂次, 然后将trotter方向上有限层的转移矩阵收缩掉, 得到对应温度点的配分函数。这里面收缩有限层的矩阵, 是通过将转移矩阵转化为若干个局域键算符, 并将这些算符作用在底层的一个转移矩阵上, 从而不断更新这个转移矩阵。也往往将iTEBD的更新算法称为TPS算法, 而将这里的算法称为TPO(Tensor product operator)算法。LTRG在计算六角格子上的量子XY和海森堡模型的热力学行为上, 得到很高的计算精度和计算效率。但这种沿trotter方向做粗粒化, 在低温时会造成trotter误差的积累, 有可能会造成较大的数值误差。解决这个问题的一个途径, 就是类似TMRG的思想, 即选取同一排格点不同trotter温度点作为一个转移矩阵, 然后利用投影的方法在格点方向上做粗粒化, 这样任何温度点的配分函数都可以由这个配分函数的最大本征态得到, 不存在trotter误差的积累。但这样做就遇到了上述第4个问题, 即PEPS的非幺正演化问题。如果非幺正问题可以解决, 那么就有希望发展出计算量子模型热力学行为的更为精确的数值方法。

7.张量算法在费米子模型中的应用。发展张量算法的一个重要出发点, 就是要解决DMRG和QMC所不容易解决的高维费米子和阻挫自旋系统。目前大多数算法都是应用在自旋系统, 对费米子体系, 诸如Hubbard模型, 虽然已经有算法关注, 但并没有发展成熟, 其主要问题是费米子交换所带来的符号问题。在这个方面的应用, 张量算法还有很多地方需要研究。

8.DMRG算法和张量网络算法的结合。DMRG算法目前在二维虽然只能处理有限尺寸大小, 但在有限尺寸领域, 其计算结果还是得到人们的认同[113, 114]。张量网络算法最大的优势, 在于处理无限大小的系统, 但其精度仍需进一步提高。诸如Kagome Lattice上的海森堡模型的基态, G.Vidal教授利用多尺度纠缠重正化假设(MERA)方法得到其基态是价键晶体(Valance Bond Crystal,VBC)[67], S.White教授使用有限尺寸DMRG方法得到其基态是具有完全能洗的自旋液体(fully gapped spin liquid)[115]。这个问题本身就是一个非常有趣的问题, 但如果能将张量网络算法的优势与DMRG算法相结合, 就有希望得到没有争议的真正的基态物理。

张量网络算法是一个非常年轻的发展领域, 有很多问题值得考虑, 上述问题只是作者个人的一些看法, 可能会有自己的一些偏见, 但可以肯定的是, 沿

着张量网络模型(态)这个思想来发展出有效而精确的张量网络数值算法，以解决强关联系统中出现的传统计算方法所解决不了的各种有趣而复杂的问题，至少将会是凝聚态物理学家在未来十年内的一个追求。

附录 A 基于转移矩阵思想的部分重要算法

本文提及，键矢量投影方法[54]实质上是G. Vidal教授在2007年文献[34]中提出的iTEBD算法在二维量子格点模型的推广。其成功的原因在于虚时演化对应于近幺正演化，键矢量可以很大程度上模拟系统和环境之间的纠缠谱。矩阵乘积态的非幺正演化可以通过所谓的正则化(canonicalization)步骤[35, 116]来处理，而张量乘积态的非幺正演化却没有切实可行的局部变换来实施，这正是三维经典模型通过类似转移矩阵方法进行求解的困难所在。为了解决这个问题，一系列的变分方法应运而生，具有代表性的则是由J. I. Cirac教授等人所提出的iPEPS算法[38]，而这种算法最大的问题在于较高的计算复杂度与变分方程求解的稳定性。因此，对于三维经典模型，与二维量子模型的热力学行为，新算法的提出是必要的。了解这些内容，对于张量网络算法的发展方向，和理解本文所研究内容的意义，是有帮助的。

A.1 矩阵乘积态的正则形式与非幺正iTEBD算法

A.1.1 矩阵乘积态的正则化条件与正则化步骤

简单起见，只考虑具有平移不变性的无穷长链系统。给定一个矩阵乘积态，假设全为实数，

$$|\Psi\rangle = \text{Tr} \prod_i A[m_i] \Lambda^i |m_i\rangle \quad (\text{A.1})$$

其中 Λ 为定义在键上的对角矩阵，即键矢量，则 $\langle\Psi|\Psi\rangle$ 如图A.1所示，每一个格点上面有一个三阶张量 A ，每一条键上有一个键矢量 Λ 。如果把所有的键矢量都吸收进 A 里面，则式A.1成为常见的MPS形式。

如果 $|\Psi\rangle$ 满足以下性质：

$$\begin{aligned} \sum_m A[m] \Lambda^2 A^\dagger[m] &= I \\ \sum_m A^\dagger[m] \Lambda^2 A[m] &= I \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

则式A.1称为正则(canonical)形式的MPS。从图A.1可以看出，上述正则化条件

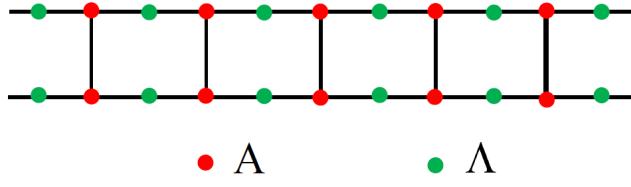


图 A.1: 矩阵乘积态的内积表示。

代表: 断开任意一条键, 左右两侧的波函数内积均给出相同的内容(在此为单位阵), 即每条键都是完全一致的, 都代表了系统与环境的全局纠缠。

如果将键矢量 Λ 归入其左面的格点张量 A , 则形式上图A.1中只剩下最左端的两个 Λ , 此时的正则化条件变为:

$$\begin{aligned} \sum_m A[m] A^\dagger[m] &= I \\ \sum_m A^\dagger[m] \Lambda^2 A[m] &= \Lambda^2 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

如果将键矢量分成两部分, 归入左右两侧的格点张量各一半, 则形式上图A.1中只剩下最左端和最右端的四个 $\sqrt{\Lambda}$, 此时的正则化条件变为:

$$\begin{aligned} \sum_m A[m] \Lambda A^\dagger[m] &= \Lambda \\ \sum_m A^\dagger[m] \Lambda A[m] &= \Lambda \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

由于正则化形式的MPS中, 每条键是完全一样的, 所代表的都是全局的纠缠, 相当于DMRG中约化密度矩阵的谱, 因此对MPS的切断, 可按照 Λ 的大小进行最优切断。然而, 一个关键的问题是: 给定一个任意的MPS波函数 $|\Phi\rangle = \text{Tr} \prod_i A[m_i] |m_i\rangle$, 如何给出与之等价的正则形式的波函数 $|\Psi\rangle = \text{Tr} \prod_i B[m_i] |m_i\rangle$?

由于其证明十分简单, 这里不加证明地给出正则化步骤:

1. 构造内积矩阵 $T_{l_1 l_2, r_1 r_2} = \sum_m A_{l_1 r_1}[m] A_{l_2 r_2}[m]$, 并求出其最大(dominant)右本征对 (λ, W) 。可以证明, 把W写成矩阵形式之后它一定是一个半正定的对称矩阵。对W做Cholesky分解, 即 $W = PP^\dagger$, 然后可定义一个中间张量:

$$\bar{A}[m] \equiv \lambda^{-1/2} \cdot P^{-1} A[m] P \quad (\text{A.5})$$

可以证明， \bar{A} 满足式A.3中的第一个方程。

2.构造内积矩阵 $T_{l_1 l_2, r_1 r_2} = \sum_m \bar{A}_{l_1 r_1}[m] \bar{A}_{l_2 r_2}[m]$ ，并求出其最大左本征对 (α, X) 。可以证明，矩阵形式的X是一个半正定的对称矩阵，而 $\alpha = 1$ 。对X做Cholesky分解，即 $W = M M^\dagger$ ，取M中的么正矩阵U，最终可定义一个张量：

$$B[m] \equiv U^\dagger \bar{A}[m] U \quad (\text{A.6})$$

可以证明， B 同时满足式A.3中的两个方程。

至此，我们最终得到了初始MPS $\{A\}$ 的正则形式 $\{B\}$ ：

$$B[m] = \lambda^{-1/2} \cdot Q^{-1} A[m] Q \quad (\text{A.7})$$

其中，Q为相似变换矩阵： $Q = PU$ ，P为第一个内积矩阵最大本征右矢的Cholesky矩阵，U为第二个内积矩阵最大本征左矢的模式矩阵。

A.1.2 非么正的iTEBD算法

有了上述正则化步骤，我们可以完成对任意MPS的最优化切断：即先通过相似变换(式A.7)将其化成与之等价的正则化形式，实质上是找到反映全局纠缠的键矢量，然后按照键矢量权重进行切断。

以二维Ising模型为例，具体说来，如图A.2，非么正iTEBD算法的一般步骤是：

- 1.将Ising模型化为张量网络模型，并将其配分函数写成转移矩阵的幂次形式，从而将配分函数的求解化成转移矩阵T的最大本征态问题。
- 2.构造一个任意的MPS波函数 $|\phi\rangle = \{A\}$ ，将T作用在上面，得到一个虚拟维数增加的波函数 $\{B\}$ 。
- 3.对新的波函数 $\{B\}$ 进行正则化操作，得到正则化后的波函数 $\{C\}$ ，并按照权重对虚拟维数进行切断，得到更新后的波函数 $\{A'\}$ 。
- 4.反复进行2-3操作，直至波函数 $|\phi\rangle$ 收敛，由此得到转移矩阵的最大本征对。

根据得到的最大本征对，可进行后续处理，得到Ising模型的自由能等物理量。在上述步骤中，经典模型的转移矩阵，一定是非么正的算符，通过正则化步骤，我们得到了初始波函数 $|\phi\rangle$ 在转移矩阵T的作用下，向热力学稳态的演化过程。

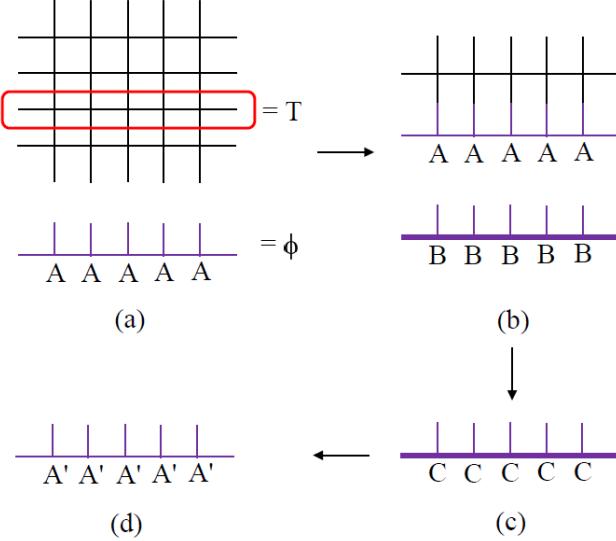


图 A.2: 非幺正iTEBD算法在二维Ising模型的应用。 (a) 将配分函数写成转移矩阵形式, 将问题化归为求转移矩阵的最大本征态的问题, 构造一个初始MPS波函数 $|\phi\rangle = \{A\}$ 。 (b) 将转移矩阵作用在初始的MPS上。 (c) 对得到的高维数的MPS $\{B\}$ 做正则化操作, 得到其正则化形式 $\{C\}$ 。 (4) 切断正则化后的波函数, 得到更新后的波函数 $\{A'\}$ 。反复进行b-d操作直至波函数收敛。

A.2 张量乘积态的更新与iPEPS算法

键矢量投影方法, 适用于张量乘积态的幺正演化(实时)或者近幺正演化(小trotter虚时), 这基于这样一个假设: 近幺正演化可以通过局部张量的更新而完成。对于MPS, 该假设已经得到证明和验证, 但对于TPS, 并没有得到验证。对于非幺正演化, 甚至连这个假设都没有。为了解决TPS的一般性演化问题, J. I. Cirac教授等人先后在文献[55]和文献[38]中提出了PEPS和iPEPS算法, 其中后者是前者的无穷大平移不变体系的扩展。这里简要介绍一下iPEPS算法。

A.2.1 最优化近似问题

首先考虑这样一个最优近似问题: 以正方格子为例, 给定其上的一个PEPS波函数 $|\Psi_A\rangle = \{A\}$, 如何找到一个最优的近似波函数 $|\Psi_B\rangle = \{B\}$, 使得 $||\Psi_A\rangle - |\Psi_B\rangle||$ 最小, 条件是 A 的虚拟维数 D 大于 B 的虚拟维数。这里 A , B 都

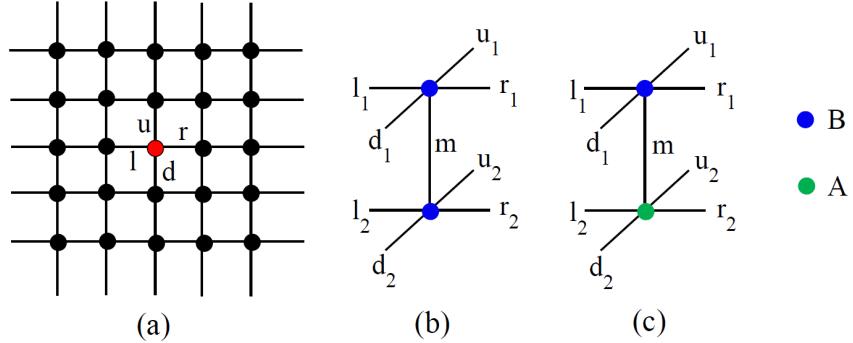


图 A.3: iPEPS 算法在正方格子中的环境张量。 (a) T^{BB} 与 T^{AB} 所形成的二维张量网格。 (b) T^{BB} 的内部结构。 (c) T^{AB} 的内部结构。这里面，红色代表所考虑的单独的一个目标格点。

是含有四个虚拟指标和一个物理指标的五阶张量。 在数学上，上述问题相当于求解一个变分问题。 定义一个变分参考量(假定在实域内求解):

$$\begin{aligned} f &= |\langle \Psi_A | - | \Psi_B \rangle|^2 \\ &= \langle \Psi_A | \Psi_A \rangle + \langle \Psi_B | \Psi_B \rangle - 2\langle \Psi_A | \Psi_B \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

对 f 做单独的 B^i 变分，就可以得到下述变分方程:

$$H^i B^i = I^i \quad (\text{A.9})$$

这里面的上标 i 代表第 i 个格点， H^i 表示在 $\langle \Psi_B | \Psi_B \rangle$ 这个网络中两个格点 B^i 所感受的外围环境，而 I^i 表示在 $\langle \Psi_A | \Psi_B \rangle$ 这个网络中单独格点 B^i 所感受的外围环境，如图A.3(a)所示，显式写出定义即：

$$\begin{aligned} \langle \Psi_B | \Psi_B \rangle &= \sum B_{l_1 r_1 u_1 d_1 m_1}^i B_{l_2 r_2 u_2 d_2 m_2}^i H_{l r u d m_1 m_2}^i \\ \langle \Psi_A | \Psi_B \rangle &= \sum B_{l_1 r_1 u_1 d_1 m}^i I_{l_1 r_1 u_1 d_1 m}^i \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

其中， H 中的 m 分量部分是 $\delta_{m_1 m_2}$ ，表示图A.3(b)中上下两个B直接相连， l, r, u, d 均为双重指标，如 $l \equiv (l_1 l_2)$ 。由于 H 和 I 中含有 B ，因此式A.9是一个高次的非线性方程，只能使用迭代方法来试探求解：

- 1.任意给定一个PEPS $\{B\}$ ，形成两张二维网络 $\{T^{BB}\} \equiv \langle \Psi_B | \Psi_B \rangle$ 和 $\{T^{AB}\} \equiv \langle \Psi_A | \Psi_B \rangle$ 。

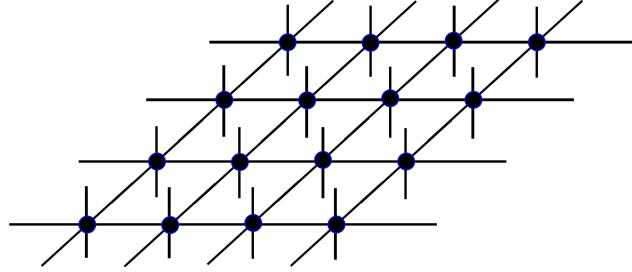


图 A.4: 二维量子格点模型或者三维经典模型中转移矩阵表示。

2. 根据上述iTEBD算法或者下面要介绍的CTMRG算法, 结合图A.3(a)分别求出 T^{BB} 和 T^{AB} 感受到的外部环境 E^{BB} 和 E^{AB} 。

3. 根据图A.3(b)(c), 求出两个环境张量:

$$\begin{aligned} H_{l_1 r_1 u_1 d_1 m_1, l_2 r_2 u_2 d_2 m_2} &= E_{l r u d}^{BB} \delta_{m_1 m_2} \\ I_{l_1 r_1 u_1 d_1 m} &= \sum_{l_2 r_2 u_2 d_2 m} E_{l r u d}^{AB} A_{l_2 r_2 u_2 d_2 m} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

容易知道, H 为厄密矩阵。

4. 求解线性方程A.9, 得到更新后的 B 。

5. 重复1-4步操作, 直至收敛到预设的精度。

A.2.2 iPEPS算法

有了以上对TPS的最优近似, 就可以将一个转移矩阵不断地作用在一个随机给定的TPS波函数上面, 不增加波函数的虚拟维度, 从而得到转移矩阵的最大本征态, 这正是iPEPS求解二维量子格点模型基态的思路, 原则上, 该算法不仅可以二维量子波函数处理实时和虚时演化, 也可以处理三维经典模型。具体说来, 对于二维量子格点模型, iPEPS的一般步骤是:

1. 将配分函数表示成为量子转移矩阵的形式, 如图A.4所示, 将模型的基态求解化为转移矩阵的最大本征态问题。 2. 将转移矩阵 T (是一个无穷大的张量网络算符)作用在任意给定的一个PEPS波函数 $|\Psi_0\rangle$ 上面, 得到一个高维的波函数 $|\Psi_1\rangle = T|\Psi_0\rangle$ 。

3. 利用上述解变分方程的方法, 得到对 $|\Psi_1\rangle$ 的一个最优低维近似: $|\Psi_2\rangle \sim |\Psi_1\rangle$ 。

4. 反复操作2-3步，直至波函数收敛到一个预设的精度。此时的收敛波函数 $|\Psi_{converged}\rangle$ 就是该量子模型的基态波函数。

A.3 角转移矩阵重正化群(CTMRG)算法

在上一节说过，对于 E^{BB} 和 E^{AB} 的求解，除了重正化群方法以外，有两种基于转移矩阵思想的方法，一种是上面所描述的iTEBD算法，另一种就是本节要介绍的角转移矩阵重正化群(Corner Transfer Matrix Renormalization Group, CTMRG)算法。简单起见，这里以二维Ising模型为例，介绍适合张量算法的变形，即文献[117]提出的方向性CTM算法(directional CTM)和文献[118]介绍的CTMRG算法，他们是基于Baxter的角转移矩阵思想[36]，和Nishino教授的CTMRG算法[37]推广而来。

A.3.1 方向性角转移矩阵算法

根据本文前几章节的介绍，二维Ising模型可以等价于一个张量网络模型，其配分函数可以化为该张量网络的收缩。方向性CTM算法给出了针对正方格子而设计的收缩网格的方法。如图A.5所示，该算法的思想在于选定一个格点 T_{lrud} 为系统，同时用4个角矩阵 $\{C_1, C_2, C_3, C_4\}$ 和4个边张量 $\{E_1, E_2, E_3, E_4\}$ 来模拟周围的环境 E_{lrud} ，算法的目的在于确定能够真正模拟环境的这8个张量，方法是类似于iTEBD的投影。

具体说来，如图A.5所示，方向性CTM算法的操作步骤如下：

1. 随机给定8个变量， $\{C_1, C_2, C_3, C_4, E_1, E_2, E_3, E_4\}$ 。
2. 将排算符(即由两个边张量， E_1 和 E_3 ，和一个 T 组成的一排矩阵)向下作用在 C_2 、 E_2 、 C_3 上，即生成三个新的张量：

$$\begin{aligned} L(l_1 l_2, i) &= \sum_a E_1(i, a, l_1) C_2(l_2, a) \\ R(r_1 r_2, j) &= \sum_c E_3(j, c, r_1) C_3(r_2, c) \\ C(l_1 l_2, r_1 r_2, k) &= \sum_b T(l_1 r_1 k b) E_2(l_2 r_2 b) \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

可以发现，水平方向的键维度比原来增大，称这些键是高维键。这里面，为了指标的清楚，将键的指标写在括号里面。

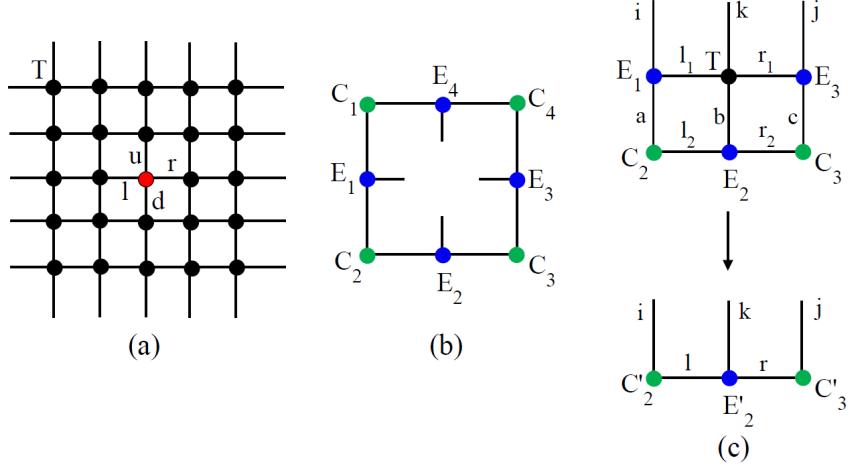


图 A.5: 方向性角转移矩阵算法。 (a)配分函数的表示。 (b)单格点周围环境的模拟。 (c)向下的一步重正化操作。这里蓝色代表边张量(edge tensor)，绿色代表角矩阵(corner matrix)，红色代表选取的单格点系统。

3.认为两组(L,R,C)倒扣起来，得到键密度矩阵的组合：

$$\rho = LL' + RR' \quad (\text{A.13})$$

将\$\rho\$做本征值分解得到模式矩阵\$U\$：

$$\rho = U\Lambda U^\dagger \quad (\text{A.14})$$

这里假设\$\Lambda\$已经按照从小到大的顺序排列好。

4.将每一条高维键上插入单位阵\$UU^\dagger\$，得到更新后的\$E_2, C_2, C_3\$：

$$\begin{aligned} C'_2(l, i) &= \sum_{l_1 l_2} L(l_1 l_2, i) U(l_1 l_2, l) \\ C'_3(r, j) &= \sum_{r_1 r_2} R(r_1 r_2, j) U(r_1 r_2, r) \\ E'_2(l, r, k) &= \sum_{l_1 l_2 r_1 r_2} C(l_1 l_2, r_1 r_2, k) U(l_1 l_2, l) U(r_1 r_2, r) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

切断则直接保留靠前的维度即可。

5.利用更新后的排矩阵(由两个更新后的边张量和一个\$T\$构成)，向上、左、右方向作用，按照2-4类似操作即可。

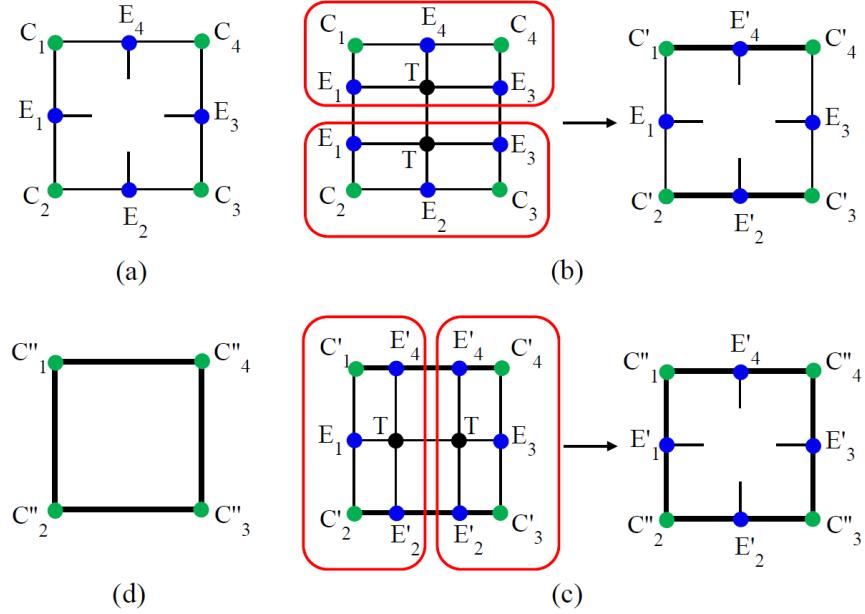


图 A.6: CTMRG 算法:(a)模拟环境的8个张量, (b)独立向上向下作用, (c)独立向左向右作用, (d)4步作用之后的构形。其中粗线条代表高维键。

6. 反复重复2-5操作, 直至八个张量所形成的环境 E_{lrud} 收敛为止。

一旦完成收敛, 配分函数和其他物理量就可以很容易得到。

A.3.2 CTMRG算法

上述CTM算法各个方向是独立更新的, CTMRG算法则是将各个方向综合在一起, 每个方向的更新都考虑其他三个方向构成的环境。

具体来说, 如图A.6和A.7所示, CTMRG步骤如下:

1. 将由 E_1, E_3, T 组成的排转移矩阵, 同时独立向上和向下作用, 得到未切断的 $\{C'_1, C'_2, C'_3, C'_4, E'_1, E'_2, E'_4\}$ 。

2. 将由 E'_2, E'_4, T 组成的排转移矩阵, 同时独立向左和向右作用, 得到未切断的 $\{C''_1, C''_2, C''_3, C''_4, E'_1, E'_2, E'_3\}$ 。

3. 其实经过四步作用之后, 形成的构形仅由4个角矩阵构成, 边张量的信息已经吸收进了角矩阵里面, 如图A.6(d)所示。

4. 分别计算由四个角转移矩阵 $\{C''_1, C''_2, C''_3, C''_4\}$ 构成系统中, 四条键的键密度矩阵, 按照类似上述方向性CTM的做法, 将4个模式矩阵分别插入相应的键

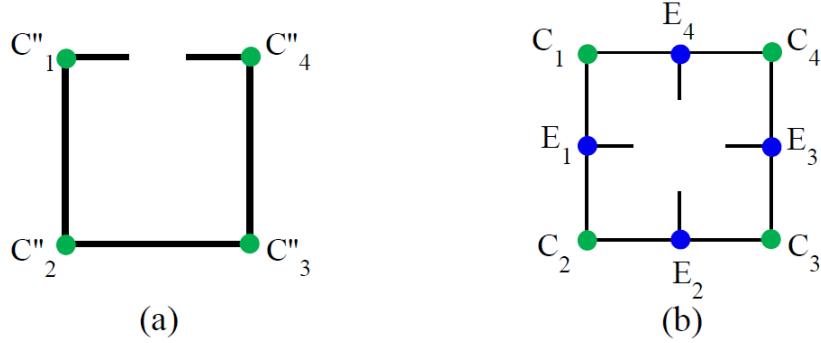


图 A.7: CTMRG算法:(a)键密度矩阵示意, (b)切断与更新后的环境。

上, 从而得到切断更新后的8个张量, 如图A.7所示。

5. 反复重复1-4步操作, 直至直至八个张量所形成的环境 E_{lrud} 收敛为止。

可以看到在CTMRG算法中, 所有的角矩阵都更新了2次, 而所有的边张量都更新了1次。一般来讲, 不论是方向性CTM算法, 还是CTMRG算法, 都与操作的方向顺序无关, 即: 先上下后左右, 还是任意的上左下右组合, 在波函数收敛后, 都不会影响最终的收敛结果。

参考文献

- [1] H. K. Onnes, *The resistance of pure mercury at helium temperatures*, Leiden Comm. **120** (1911).
- [2] P. Kapitza, *Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point*, Nature **141**, 74 (1938); J. F. Allen, and A. D. Misener, *Flow Phenomena in Liquid Helium II*, Nature **142**, 643 (1938).
- [3] K. von Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980); K. von Klitzing, *Two-Dimensional Systems: A Method for the Determination of the Fine Structure Constant*, Surf. Sci. **113**, 1 (1982).
- [4] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, *Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit*, Phys. Rev. Lett. **48**, 1559 (1982).
- [5] J. Kondo, *Resistance minimum in dilute magnetic alloys*, Prog. Theor. Phys. **40**, 435 (1968).
- [6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995); K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [7] F. Bloch, *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Z. Phys. **52**, 555 (1928).
- [8] A. H. Wilson, Proc. Roy. Soc. London, A **133**, 458 (1931); A **134**, 277 (1931).

- [9] L. N. Cooper, *Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas*, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [10] P. W. Anderson, *More is Different*, Science, New Series, **177**, N4047, 393 (1972); P. W. Anderson, *On the Nature of Physical Laws*, Phys. Today **43**, N12, 9 (1990).
- [11] L. P. Kadanoff, *Complex Structures from Simple Systems*, Phys. Today **44**, N3, 9 (1991).
- [12] 于禄, 郝柏林, 陈晓松, 边缘奇迹: 相变和临界现象, 科学出版社, 北京, 2005.
- [13] J. G. Bednorz, and K. A. Muller, *Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system*, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
- [14] T. C. Ozawa, and S. M. Kauzlarich, *Chemistry of layered d-metal pnictide oxides and their potential as candidates for new superconductors*, Sci. Technol. Adv. Mater. **9**, 033003 (2008).
- [15] W. Kohn, *Electronic structure of matter-wave functions and density functionals*, Nobel Lecture, (1999).
- [16] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [17] P. Hohenberg, and W. Kohn, *Inhomogeneous Electron Gas*, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [18] W. Kohn, and L. J. Sham, *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [19] A. Szabo, and N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, McGraw-Hill, New York, 1989.
- [20] M. Troyer, and P. Werner, Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIII, 98-173 (2009).

- [21] K. G. Wilson, *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [22] S. R. White, *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [23] S. Ostlund, and S. Rommer, *Thermodynamic Limit of Density Matrix Renormalization*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3537 (1995).
- [24] N. Schuch, M. M. Wolf, F. Verstraete, and J. I. Cirac, *Entropy Scaling and Simulability by Matrix Product States*, Phys. Rev. Lett. **100**, 030504 (2008).
- [25] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*, Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003).
- [26] M. B. Hastings, *An area law for one-dimensional quantum systems*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, **2007**, P08024 (2007).
- [27] J. Eisert, M. Cramer, and M.B. Plenio, *Colloquium: Area laws for the entanglement entropy*, Rev. Mod. Phys. **82**, 277 (2010).
- [28] Y. Shi, L. Duan, and G. Vidal, *Classical simulation of quantum many-body systems with a tree tensor network*, Phys. Rev. A **74**, 022320 (2006).
- [29] F. Verstraete, and J. I. Cirac, *Renormalization algorithms for quantum-many body systems in two and higher dimensions*, arXiv:cond-mat/0407066 (2004).
- [30] J. I. Cirac, and F. Verstraete, *Renormalization and tensor product states in spin chains and lattices*, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 504004 (2009).
- [31] G. Vidal, *Entanglement renormalization*, Phys. Rev. Lett. **99**, 220405 (2007); *Class of quantum many-body states that can be efficiently simulated*, Phys. Rev. Lett. **101**, 110501 (2008).
- [32] G. Evenbly and G. Vidal, *Algorithms for entanglement renormalization*, Phys. Rev. B **79**, 144108 (2009).

- [33] M. Levin, and C. P. Nave, *Tensor Renormalization Group Approach to Two-Dimensional Classical Lattice Models*, Phys. Rev. Lett. **99**, 120601 (2007).
- [34] G. Vidal, *Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in One Spatial Dimension*, Phys. Rev. Lett. **98**, 070201 (2007).
- [35] G. Vidal, *Infinite time-evolving block decimation algorithm beyond unitary evolution*, Phys. Rev. B **78**, 155117 (2008).
- [36] R. J. Baxter, *Dimers on a Rectangular Lattice*, Journal of Mathematical Physics **9**, 650 (1968).
- [37] T. Nishino, and K. Okunishi, *Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method*, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 891 (1996).
- [38] J. Jordan, R. Orus, 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 (2008).
- [39] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, 2nd edition, Cambridge University, Harvard, 2011.
- [40] S. R. White, and R. M. Noack, *The real-space quantum renormalization group and Anderson localization*, Phys. Rev. Lett. **68**, 3487 (1992).
- [41] S. R. White, *Strongly correlated electron systems and the density matrix renormalization group*, Phys. Rep. **301**, 187 (1998).
- [42] T. Xiang, and G. A. Gehring, *Real space renormalization group study of Heisenberg spin chain*, J. Magn. Magn. Mater. **104**, 861 (1992).
- [43] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson, *Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. Static properties for the symmetric case*, Phys. Rev. B **21**, 1003 (1980); *Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic*

- alloys. II. Static properties for the asymmetric case*, Phys. Rev. B **21**, 1044 (1980).
- [44] P. A. Lee, *Real-Space Scaling Studies of Localization*, Phys. Rev. Lett. **42**, 1492 (1979).
- [45] S. T. Chui, and J. W. Bray, *Computer renormalization-group technique applied to the Hubbard model*, **18**, 2426 (1978).
- [46] J. E. Hirsch, *Renormalization-group study of the Hubbard model*, Phys. Rev. B **22**, 5259 (1980).
- [47] S. R. White, *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [48] S. Liang, and H. Pang, *Approximate diagonalization using the density matrix renormalization-group method: A two-dimensional-systems perspective*, Phys. Rev. B **49**, 9214 (1994).
- [49] S. R. White, and D. J. Scalapino, *Density Matrix Renormalization Group Study of the Striped Phase in the 2D t-J Model*, Phys. Rev. Lett. **80**, 1272 (1998); *Energetics of Domain Walls in the 2D t-J Model*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3227 (1998).
- [50] T. Xiang, J. Z. Lou, Z. B. Su, *Two-dimensional algorithm of the density-matrix renormalization group*, Phys. Rev. B **64**, 104414 (2001).
- [51] F. Barahona, *On the computational complexity of Ising spin glass models*, J. Phys. A **15**, 3241 (1982).
- [52] M. Troyer, U.-J. Wiese, *Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **94**, 170201 (2005).
- [53] L. Tagliacozzo, G. Evenbly, and G. Vidal, *Simulation of two-dimensional quantum systems using a tree tensor network that exploits the entropic area law*, Phys. Rev. B **80**, 235127 (2009).

- [54] 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 (2008).
- [55] 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 (2007).
- [56] 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).
- [57] G. H. Wannier, *Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net*, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
- [58] M. Fannes, B. Nachtergaele and R. F. Werner, Comm. Math. Phys. **144**, 443 (1992).
- [59] H. Niggemann, A. Klumper, and J. Zittartz, Z. Phys. B, **104**, 103 (1997).
- [60] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [61] U. Schollwock, *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*, Annals of Physics, **326**, 96 (2011).
- [62] R. N. C. Pfeifer, G. Evenbly, and G. Vidal, *Entanglement renormalization, scale invariance, and quantum criticality*, Phys. Rev. A **79**, 040301 (2009).
- [63] V. Giovannetti, S. Montangero, and R. Fazio, *Quantum multiscale entanglement renormalization ansatz channels*, Phys. Rev. Lett. **101**, 180503 (2008).
- [64] R. N. C. Pfeifer, P. Corboz, O. Buerschaper, M. Aguado, M. Troyer, and G. Vidal, *Simulation of anyons with tensor network algorithms*, Phys. Rev. B **82**, 115126 (2010).

- [65] M. Aguado, and G. Vidal, *Entanglement renormalization and topological order*, Phys. Rev. Lett. **100**, 070404 (2008).
- [66] R. Koenig, B. W. Reichardt, and G. Vidal, *Exact entanglement renormalization for string-net models*, Phys. Rev. B **79**, 195123 (2009).
- [67] G. Evenbly, and G. Vidal, *Frustrated Antiferromagnets with Entanglement Renormalization: Ground State of the Spin-1/2 Heisenberg Model on a Kagome Lattice*, Phys. Rev. Lett. **104**, 187203 (2010).
- [68] G. Evenbly, and G. Vidal, *Entanglement renormalization in noninteracting fermionic systems*, Phys. Rev. B **81**, 235102 (2010).
- [69] P. Corboz, G. Evenbly, F. Verstraete, and G. Vidal, *Simulation of interacting fermions with entanglement renormalization*, Phys. Rev. A **81**, 010303 (2010).
- [70] S. Singh, R. N. C. Pfeifer, and G. Vidal, *Tensor network decompositions in the presence of a global symmetry*, Phys. Rev. A **82**, 050301 (2010).
- [71] S. Singh, R. N. C. Pfeifer, and G. Vidal, *Tensor network states and algorithms in the presence of a global U(1) symmetry*, Phys. Rev. B **83**, 115125 (2011).
- [72] H. F. Trotter, *On the Product of Semi-Groups of Operators*, Proceedings of the American Mathematical Society, **10**, N4, 545 (1959).
- [73] G. Vidal, *Efficient Classical Simulation of Slightly Entangled Quantum Computations*, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902 (2003).
- [74] 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 (2009).
- [75] Z. Y. Xie, J. Chen, J. W. Zhu, L. P. Yang, and T. Xiang, *Coarse graining tensor renormalization by the higher-order singular value decomposition*, arXiv:1201.1144 (2012).

- [76] U. Low, *Properties of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg model on a honeycomb lattice with interlayer coupling*, Condens. Matter Phys. **12**, 497 (2009).
- [77] W. H. Zheng, 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 (1991).
- [78] J. Oitmaa, C. J. Hamer, and W. H. Zheng, *Quantum magnets on the honeycomb and triangular lattices at T=0*, Phys. Rev. B **45**, 9834 (1992).
- [79] T. Nishino, Y. Hieida, K. Okunishi, N. Maeshima, Y. Akutsu, and A. Gendiar, *Two-Dimensional Tensor Product Variational Formulation*, Prog. Theo. Phys. **105**, 409 (2001).
- [80] T. Nishino and K. Okunishi, *A Density Matrix Algorithm for 3D Classical Models*, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 3066 (1998).
- [81] K. Okunishi, and T. Nishino, *Kramers-Wannier Approximation for the 3D Ising Model*, Prog. Theo. Phys. **103**, 541 (2000).
- [82] N. Maeshima, Y. Hieida, Y. Akutsu, T. Nishino, and K. Okunishi, *Vertical density matrix algorithm: A higher-dimensional numerical renormalization scheme based on the tensor product state ansatz*, Phys. Rev. E **64**, 016705 (2001).
- [83] T. Nishino, K. Okunishi, Y. Hieida, N. Maeshima, Y. Akutsu, *Self-consistent tensor product variational approximation for 3D classical models*, Nucl. Phys. B **575**, 504 (2000).
- [84] A. Gendiar, and T. Nishino, *Phase diagram of the three-dimensional axial next-nearest-neighbor Ising model*, Phys. Rev. B **71**, 024404 (2005).
- [85] Z. C. Gu, M. Levin, and X. G. Wen, unpublished.
- [86] A. G.-Saez, and J. I. Latorre, *Renormalization group contraction of tensor networks in three dimensions*, arXiv:1112.1412 (2012).

- [87] C. Eckart, and G. Young, *The approximation of one matrix by another of lower rank*, Psychometrika, **1**, 211 (1936).
- [88] P. Comon, J. M. F. ten Berge, L. De Lathauwer, and J. Castaing, *Generic and typical ranks of multiway arrays*, Linear Algebra Applicat. **430**, N11, 2997 (2009).
- [89] T. G. Kolda, and B. W. Bader, *Tensor decompositions and applications*, SIAM Rev. **51**, N3, 455 (2009).
- [90] V. de Silva, and L. H. Lim, *Tensor rank and the ill-posedness of the best low-rank approximation problem*, SIAM. J. Matrix Anal. Appl. **30**, 1084 (2008), and references there.
- [91] L. De Lathauwer, B. De Moor, and J. Vanderwalle, *A Multilinear Singular Value Decomposition*, SIAM J. Matrix Anal. Appl. **21** N4. 1253 (2000).
- [92] D. J. Luo, H. Huang, and C. Ding, *Are Tensor Decomposition Solutions Unique? On the global convergence of HOSVD and ParaFac algorithms*, arXiv:0902.4521v1 (2009).
- [93] G. Bergqvist, E. G. Larsson, *Higher-Order Singular Value Decomposition: Theory and an Application*, Signal Processing Magazine, IEEE, **27**, 151 (2010), and references there.
- [94] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [95] X. M. Feng, and H. W. J. Blote, *Specific heat of the simple-cubic Ising model*, Phys. Rev. E **81**, 031103 (2010).
- [96] H. Arisue, and T. Fujiwara, *Algorithm of the finite-lattice method for high-temperature expansion of the Ising model in three dimensions*, Phys. Rev. E **67**, 066109 (2003).
- [97] M. Hasenbusch, *Monte Carlo studies of the three-dimensional ising model in equilibrium*, Int. J. of Mod. Phys. C **12**, 911 (2001).

- [98] A. L. Talapov, and H. W. J. Blote, *The magnetization of the 3D Ising model*, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 5727 (1996).
- [99] M. Campostrini, A. Palissetto, P. Rossi, and E. Vicari, *25th-order high-temperature expansion results for three-dimensional Ising-like systems on the simple-cubic lattice*, Phys. Rev. E **65**, 066127 (2002).
- [100] M. Hasenbusch, *Finite size scaling study of lattice models in the three-dimensional Ising universality class*, Phys. Rev. B **82**, 174433 (2010).
- [101] P. Butera, and M. Comi, *Extension to order β^{23} of the high-temperature expansions for the spin-1/2 Ising model on simple cubic and body-centered cubic lattices*, Phys. Rev. B **62**, 14837 (2000).
- [102] Y. J. Deng, and H. W. J. Blote, *Simultaneous analysis of several models in the three-dimensional Ising universality class*, Phys. Rev. E **68**, 036125 (2003).
- [103] R. Gupta, and P. Tamayo, *Critical exponents of the 3D Ising model*, Int. J. Mod. Phys. C **7** 305(1996).
- [104] H.W. J. Blote and Y. Deng, *Cluster Monte Carlo simulation of the transverse Ising model*, Phys. Rev. E **66**, 066110 (2002).
- [105] H. X. He, C. J. Hamer, and J. Oitmaa, *High-temperature series expansions for the (2+1)-dimensional Ising model*, J. Phys. A **23**, 1775 (1990); J. Oitmaa, C. J. Hamer, and W. H. Zheng, *Low-temperature series expansions for the (2+1)-dimensional Ising model*, J. Phys. A **24**, 2863 (1991).
- [106] W. Li, S. J. Ran, S. S. Gong, Y. Zhao, B. Xi, F. Ye, and G. Su, *Linearized Tensor Renormalization Group Algorithm for the Calculation of Thermodynamic Properties of Quantum Lattice Models*, Phys. Rev. Lett. **106**, 127202 (2011).
- [107] B. Pirvu, V. Murg, J. I. Cirac, and F. Verstraete, *Matrix product operator representations*, New J. Phys. **12**, 025012 (2010).

- [108] Z. C. Gu, and X. G. Wen, *Tensor-entanglement-filtering renormalization approach and symmetry-protected topological order*, Phys. Rev. B **80**, 155131 (2009).
- [109] S. Sachdev, *Tensor networks—a new tool for old problems*, Physics **2**, 90 (2009).
- [110] D. P.-Garcia, M. Sanz, C. E. G.-Guillen, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, *Characterizing symmetries in a projected entangled pair state*, New Journal of Physics, **12**, 025010 (2010).
- [111] T. Xiang, R. F. Bursill, and G. A. Gehring, *The density matrix renormalization group for a quantum spin chain at non-zero temperature*, J. Phys.: Condens. Matter **8**, L583 (1996).
- [112] X. Q. Wang, and T. Xiang, *Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems*, Phys. Rev. B **56**, 5061 (1997).
- [113] H. C. Jiang, Z. Y. Weng, D. N. Sheng, *Density Matrix Renormalization Group Numerical Study of the Kagome Antiferromagnet*, Phys. Rev. Lett. **101**, 117203 (2008).
- [114] H. C. Jiang, H. Yao, and L. Balents, *Spin Liquid Ground State of the Spin-1/2 Square J_1 - J_2 Heisenberg Model*, arXiv:1112.2241 (2011).
- [115] S. Yan, D. A. Huse, and S. R. White, *Spin-Liquid Ground State of the $S=1/2$ Kagome Heisenberg Antiferromagnet*, Science **332**, 1173 (2011).
- [116] D. P.-Garcia, F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, *Matrix Product State Representations*, Quantum Inf. Comput. **7**, 401 (2007).
- [117] R. Orus, and G. Vidal, *Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited: Corner transfer matrix for tensor contraction*, Phys. Rev. B **80**, 094403 (2009).

- [118] P. Corboz, J. Jordan, and G. Vidal, *Simulation of fermionic lattice models in two dimensions with projected entangled-pair states: Next-nearest neighbor Hamiltonians*, Phys. Rev. B **82**, 245119 (2010).

发表文章目录

- [1] **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 (2009).
- [2] 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.
- [3] 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 Renormalization of Tensor Network States, *Chin. Phys. Lett.* **27**, 076402 (2010).
- [4] 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* **20**, 117501 (2011).
- [5] **Z. Y. Xie**, J. Chen, J. W. Zhu, L. P. Yang, T. Xiang, Coarse graining tensor renormalization by the higher-order singular value decomposition, *arXiv:1201.1144*, submitted to *Phys. Rev. Lett.*
- [6] L. P. Yang, **Z. Y. Xie**, The tensor renormalization group study of the general spin-S Blume-Capel model, *arXiv:1204.5027*.
- [7] 谢志远, Second Renormalization of Tensor-Network States (会议报告), 第十六届全国凝聚态理论和统计物理学学术会议, 长春, 吉林大学, 2010年8月.
- [8] 谢志远, Coarse graining tensor renormalization by the higher-order singular value decomposition (邀请报告), 清华大学高等研究院, 北京, 2012年1月.

- [9] **Z. Y. Xie**, Renormalization of Tensor-network States/Models (Invited Talk), Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo, Canada, Mar., 2012.

个人简历

谢志远，1985年4月27日出生于河南省许昌市。2003年9月考入哈尔滨工业大学航天学院电子科学与技术专业，2007年7月本科毕业并获得工学学士学位。同年9月免试推荐中国科学院理论物理研究所攻读博士学位至今。

致谢

博士生活如同细沙一样，不知不觉近五年时间已从指尖溜走。虽然如果一切顺利，从形式上我即将完成从工科学士到理学博士的转变，但我自己并不觉得自己是一个特别合格的物理学博士。我认为一个合格的博士，不但应该有较强的学术专业背景和科研能力，而且应该有勤奋踏实的学风、谨慎务实的态度、渊博的知识储备，以及对社会强烈的责任感和正义感，而在这些方面我显然还有差距。与本科相比，我甚至几乎失去了读书的习惯和写作的能力，只剩下青涛一个笔名，以至于在这个致谢里，我只能够用白话来表达我内心诚挚的感谢，而想不到任何华丽的辞藻。

衷心感谢我的导师向涛研究员在这五年内对我悉心的栽培和极富耐心的容忍。我在博士阶段的所有科研成果，悉数得益于与他无数次的讨论和他一点一滴的指导。他曾经像学长一样教我某些软件的基本操作，也曾经像同学一样帮我调试程序查找错误，曾经跟我解释一些极其简单但我却并不甚清楚的物理学基础知识，也曾经关于毕业人生选择上的问题费心跟我长聊，这些无不令我感到惊讶、钦佩和感动。他学识广博，卓尔不群，其严谨务实的治学态度，严肃但谦逊的处事风格，不论我以后从事任何职业，都将受益匪浅。

衷心感谢覃绍京研究员，他不但对我的学习十分关心，而且在生活上也十分照顾，我有很多各方面的问题都曾得到他兄长般细心的解答。衷心感谢清华大学翁征宇教授和姜红臣学长，和他们的讨论，和向他们的学习，使我能够更快地进入张量网络算法这一研究领域中。衷心感谢于禄院士，他的学术推荐信使我的简历增色不少，他的赞许也使我在未来道路上的脚步更加自信和坚定。衷心感谢兰州大学罗洪刚教授，他在我本科毕业设计过程中倾注了很多精力，没有他的指导，我不可能完成论文的课题。衷心感谢哈尔滨工业大学王雨三教授，和理论物理所的孙昌璞院士，没有他们的帮助和引荐，我不可能得到在中科院免试攻读博士学位的机会。

感谢我的师兄苏跃华、陆汉涛、昌峻、封晓勇、郭成、徐文虎，他们在科研的道路上为我做出了良好的榜样，并都在一些学术问题上给过我耐心的指导，徐文虎师兄还在很多其他问题上给了我启发和感悟。感谢我的师姐杨丽萍和陈巧妮，她们在我的生活、学习上给予了我很多照顾，并在未来规划上给我

了很多建设性意见，在工作问题上，杨丽萍师姐执着的科研态度和对物理的热爱使我深受触动。感谢向老师的博士后，刘承师、蔡建伟和徐鹰，我从与他们的讨论中受益很多，他们的很多见解都加深了我对物理图像的认识。感谢组里的师兄司铁岩、阎循旺、马峰杰、张学锋，和其他组里的师兄吴剑锋、石弢、杨刚，跟你们一起的学习和生活，使我能更快地融入理论物理所这个大家庭，生活变得更加快乐和丰富多彩，这里尤其要感谢吴剑锋师兄，没有他的帮助，我不可能完成本科毕业论文的写作。感谢组内的各位师弟师妹，秦明普、魏忠超、陈靖、睢晓红、梁龙、王宗国，以及即将进入中科院读博的刘志远、黄杰，你们的加入使得组里的讨论更活泼更有活力，为长期的办公室生活增添了很多快乐，使得我们组更像一个大家庭。

感谢物理所的赵汇海同学，王强同学，中科院研究生院的李伟同学，和清华大学的郑东同学，和你们的讨论使得问题变得更加清楚，和你们的聊天使得枯燥的科研生活变得更有幽默感，很高兴认识你们。感谢于立鑫、张庆、赵金华、刘卯鑫、吕炳楠、黄达、刘涛、聂章羽、童纯立，以及其他我们这级的其他10位同学，很荣幸能和你们一起进入理论物理所成为同窗。你们的睿智和博学，你们的幽默和执着，使我感到非常的钦佩，很高兴有你们一起陪伴我度过这五年的博士生活。

感谢我们办公室的李霄栋、刘知胜、续莺莺和孟君，跟你们一起工作的这几年我过得十分快乐，你们的勤奋和对物理的执着，将会一直鞭策着我。

最后，衷心感谢我的父母，我的妹妹亚丽，我的妻子苏翠萍及其家人。理论物理的研究是基础研究，需要大量时间和精力的投入，选择读博使我暂时不能给你们物质上的回报，也不能有太多的时间和精力来投资亲情，再次衷心感谢你们对我毫无保留的理解和支持，你们的关爱我会牢记一生。