

Grassmann 代数与张量网络

——研究强关联费米模型的崭新数值方法

娄捷[†]

(复旦大学物理系 上海 200433)

2017-06-13 收到

[†] email: loujie@fudan.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20170705

Combining the Grassmann algebra and tensor network: a new method to study strongly correlated fermionic systems

LOU Jie[†]

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China)

摘要 文章介绍了把 Grassmann 代数与张量网络/张量矩阵乘积态类数值方法相结合所发展出的崭新的处理强关联费米/电子模型的严格数值模拟方法。该类方法普适、高效、严格,是具有广阔发展前景的研究手段。文章还介绍了 GMERA(Grassmann multi-scale entanglement renormalization ansatz)方法的一些验证结果以及对 t - J 模型进行模拟的最新进展。

关键词 张量网络, 张量矩阵乘积态, Grassmann 代数, GMERA, t - J 模型, D 波超导

Abstract We introduce a new kind of numerical method to treat strongly correlated fermionic/electronic systems. By combining Grassmann algebra with tensor network/tensor product state methods, we may obtain methods that are general, unbiased, and highly effective. We will show benchmark GMERA calculations and new developments in the study of the t - J model.

Keywords tensor network, tensor product state, Grassmann algebra, GMERA, t - J model, D wave superconductivity

1 为什么我们需要新的方法?

强关联多体问题是凝聚态物理中最为困难也是最为重要的问题。这其中有强相互作用的费米子体系一直是人们关注的焦点之一,这些体系中蕴含着如高温超导、分数霍尔效应等等极为重要的物理现象。在强关联体系中,粒子(电子,自旋)间的相互作用不可忽略,传统的基于平均场思想(将关注的粒子以外的所有粒子近似为背景场)的处理方法在这类体系中不再如此有效。这其中很重要的原因就是量子纠缠的存在。双自旋组成的自旋单态就是一个简单的例子,它无法用两个

单自旋波函数的直积来描述,因为它是一个纠缠态。正是这个原因,平均场类的处理方法很难描述强关联体系中的纠缠。因此,人们迫切需要新的数值方法来处理这类问题。

将体系的哈密顿矩阵对角化,这种严格求解的方法是处理强关联问题的有效途径之一。然而众所周知的指数墙问题使得严格对角化方法的应用被局限在相对较小的体系中。几十个格点组成的体系由于有限尺寸效应,其表现出来的性质往往与人们想要的热力学极限下体系的性质有不少差距,这是严格对角化方法处理强关联体系的局限。

量子蒙特卡罗(quantum Monte Carlo)方法是

一种非常强大有效的数值模拟方法,它通过随机采样来精确模拟体系的配分函数,在对许多的强关联模型(尤其是量子自旋模型,玻色体系)的研究中取得了非常好的结果^[1]。遗憾的是量子蒙特卡罗方法受到“符号”问题的困扰,也就是说,如果随机采样过程中权重出现负数,则其误差迅速增大,结果也变得不再可信了。而费米子体系中,费米子的交换就会带来符号问题,因此量子蒙特卡罗方法在此有严重的局限性。可喜的是伴随着量子蒙特卡罗的发展,目前在许多强关联电子体系的研究中(比如半满状态下的 Hubbard 模型),人们发现了可以有效回避符号问题的方法。但是这类办法目前仍是有一定的局限性的^[2]。

如果人们对所研究体系的基态性质有一些合理的猜测,那么我们可以先构建出波函数的基本形式,然后通过能量最小化的变分方法来定出波函数的具体参数。这类变分方法历史悠久,也有各种不同的形式,在强关联体系的研究中也是一类重要的手段。但是传统变分法的缺点也非常明显,那就是它带有偏见,有人为的假设在暗含其中,失去了公正性与普适性。这样的代价是当我们研究未知的体系,或者有多种物相激烈竞争的临界现象,变分法很难给我们明确的答案(当然对这类体系的研究本身就是非常困难的问题)。

以上就是处理强关联(费米)体系的常用数值手段。可以看到,它们都有着严重的局限性。在近十多年来迅猛发展起来的一类新的数值方法逐渐成为了数值模拟研究强关联问题的主流方法。这一大类算法有各种各样不同的变种,它们的具体操作甚至出发点都不尽相同,但其背后都有着共同的基础,那就是矩阵乘积态思想(matrix product state ansatz, MPS)。简单地说,就是用一系列矩阵的乘积态来描述体系的波函数,而矩阵的元素就是我们的参数。矩阵可以很好的描述量子纠缠,比如说前面说到的自旋单态就可以很简单的用一个 2×2 的矩阵来描述;同时这样构建的波函数带有普适性,没有输入人为的猜测,因此 MPS 类方法非常适合用来研究存在着大量量子纠缠的强关联体系。MPS 方法最成功例子就是密度

矩阵重整化群方法(density matrix renormalization group, DMRG),这类方法在对一维(以及一些二维)的强关联体系的研究中都取得了很好的结果,尤其在一维,它是目前精度最高的数值方法^[3]。

在二维或更高维体系中, MPS 类方法很自然的推广到张量矩阵乘积态(tensor product state, TPS)或称张量矩阵网络态(tensor network, TN)。与 MPS 类似,我们用矩阵为元素来构建波函数,只是在二维或高维中,每个矩阵往往需要与多个相邻矩阵连接,因此构成了一个网络,而其本身也变成了张量。由于其网络型结构,在描述二维以上体系的纠缠上, TPS 天生比 MPS 具有更大的优势,能更好的满足纠缠熵的面积定理。但是同时其相对复杂的网络也带来了计算量的提升。在相同计算量的情况下, MPS 类方法保留的虚拟维度(越大则越精确)通常要比 TPS 类方法大 1 到 2 个数量级。因此在较小体系或是准二维体系的模拟中, TPS 类方法在现有计算机能力的限定下,就优化所得的基态能量来说,对比 MPS 类方法并没有明显的优势。但是我们相信,对于真正的大尺度二维体系性质的研究, TPS 类方法是未来发展的趋势。目前已经有多种发展成熟的 TPS 类计算方法,如 PEPS(projected entanglement pair states)^[4], TERG(tensor entanglement renormalization group)^[5], MERA(multi-scale entanglement renormalization ansatz)^[6], 等等。它们的出发点,优化方式和原理,计算技巧等等都各不相同,也有各自的优缺点。笔者在这里仅对自己熟悉的 MERA 方法进行简单的介绍。

从其英文名就可知道, MERA 方法用到了重整化的思想,其网络结构也类似于一棵倒过来的树,又称树状张量矩阵网络(tree tensor network, TTN)。这与一般的 TPS 类方法很不相同,如 PEPS 方法,其所有的矩阵都在原有体系格点的位置上,因此研究二维模型的 PEPS 张量网络也是二维的;但 MERA 方法额外引进了重整化的尺度,所以形成了树状结构。在 TTN 中,每一层张量矩阵所起的作用类似于粗粒化(coarse graining)的过程,随着层数的增加,我们从张量矩阵所得

到的波函数所包含的信息就是粗粒化之后体系在更大尺度所表现出来的性质。但是 TTN 类方法在二维或更高维有很大的局限性，那就是面积定理要求 TTN 矩阵所保留的虚拟维度随着重整化尺度的增加而指数增加，否则其精度就会迅速下降。为了解决/缓解这一问题，MERA 方法的提出者 G. Vidal 与 G. Evenbly 提出了在网络中加入一种新的张量矩阵：disentangler 的想法。引入 disentangler 的目的是去

纠缠，即减少/削弱体系的在短程的纠缠，以帮助重整化的张量矩阵(isometry)能够更好的描写体系中重要的长程纠缠，以更少的代价(矩阵的虚拟尺度，等效于计算量)来更好的描写强关联体系的性质。图 1 中给出了一张一维 MERA 的简单示意图，其中方形矩阵是去纠缠子，而三角型矩阵代表的是重整化子^[7, 8]。

TPS 类方法目前已经有了许多成功的应用，其中主要的研究结果是对带阻挫的量子自旋模型的研究(寻找量子自旋液体)，以及对一些有拓扑性质的模型的模拟，等等^[9-11]。这其中 MERA 方法与其他 TPS 类方法相比，有以下特点：通过多层重整化能研究较大的体系，属于严格的变分方法，没有采取做截断的近似，能够灵活处理各种边界条件，等等；其缺点是树状的网络结构会一定程度上干扰体系原有的平移对称性。关于 MERA 方法中张量矩阵的具体优化方法以及其他技术细节，笔者就不在此赘述，感兴趣的读者可以阅读参阅文献[7, 8]。

2 为什么要引进 Grassmann 代数

MPS/TPS 类方法是研究强关联体系的非常有效的新手段，但是在推广到费米子体系中时，我们仍需要克服一个小小的困难，那就是费米子与玻色子截然不同的统计性质。费米算符是反对易的，交换一对费米算符会得到额外的 -1 因子。为了正确的描述费米子的这种统计性质，常用的

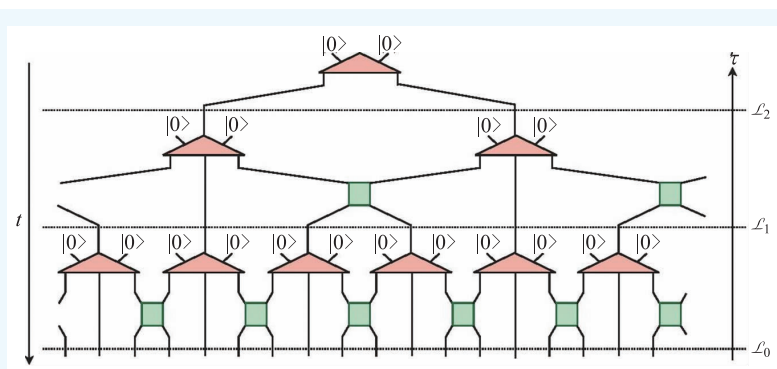


图1 一维 MERA 的张量网络的简易示意图。其中绿色方形代表去纠缠子(disentangler)，负责去纠缠化，红色三角形代表重整化子(isometry)，负责重整化/粗粒化。该图中有三种不同的尺度，从下到上不断增大，图摘自文献[6]

处理方法是 Jordan—Wigner 变换，即人为引进粒子的排序，然后利用一条由计数算符(number operator)组成的算符链将费米算符转化为玻色算符(也可反向进行)：

$$c_r = (Z_1 \cdots Z_{r-1}) \sigma_r, \quad Z_i \equiv I_i - 2c_i^\dagger c_i,$$

如此一来，我们又可以用熟悉的处理玻色/自旋体系的数值方法模拟费米体系了。这种处理方法很好的从算法层面解决了 MPS 类方法处理费米体系的问题。

但是对于 TPS 类方法，这个问题要复杂不少。因为 Jordan—Wigner 变换引入了一串算符，那么这些算符都需要和网络中的其他张量做缩并(张量矩阵的缩并是我们优化矩阵，以及求解波函数，测量物理量的必要工序)，这就大大增加了计算的复杂程度。很快 P. Corboz, G. Vidal 等人找到了一个巧妙的办法解决了这个问题^[12, 13]。他们把张量网络(双层或多层)投影到一张纸上，于是矩阵与矩阵之间的连接线不可避免的会相交，而两条连接线的交点正意味着一对费米算符的交换。这些交点可以通过类似电路简化的方法移动、重排，并最终被矩阵所吸收。这之后所得到的张量矩阵中已经包含了费米算符交换的信息，而剩下的张量网络与玻色网络并没有什么区别，又能够用我们熟悉的方法处理了。

对于张量网络结构比较简单的数值算法(如 PEPS)，这种方法非常有效，但是对于 MERA 这种多层网络结构的算法来说就要更加麻烦一些。如果将这种复杂网络投影到一张纸上，则其矩阵

连线的交点密密麻麻,想要通过手动来对其进行简化极其费时费力。实际上,如果想要研究更高维度的晶格(比如面心立方(FCC)),即使用PEPS类方法也会遇到类似的问题。更糟糕的是,如果我们改变张量网络的结构,则上述步骤又要推倒重来,从头开始。可以看到上述方法其本质还是用到了全局排序的思想,因此是一个全局性的复杂问题。那么有没有办法进一步将这个问题简化呢?

3 Grassman 代数与张量网络

顾正澄等提出的将Grassmann代数与张量网络相结合的办法很好的解决了这个问题^[6, 14, 15]。

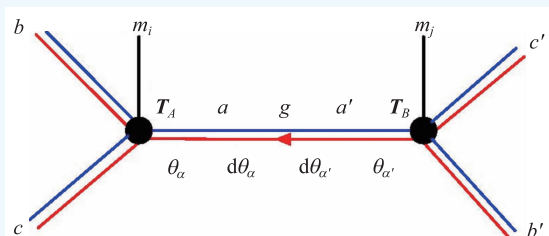


图2 GTPS原理的简易说明图。张量矩阵角标上的每一个自由度被赋予了Grassmann数 θ (以下用G代替),而两个张量角标的连接上被赋予 $d\theta$ 。在做矩阵缩并时,我们需要将两者移动至一处并配对,才可通过积分将它们消去。在这个过程中必然会发生G数顺序的交换,实现费米统计。图中 T 为张量矩阵, $a-c, a'-c'$ 为矩阵角标。红蓝两色表征角标的自由度可以是费米或玻色性质的

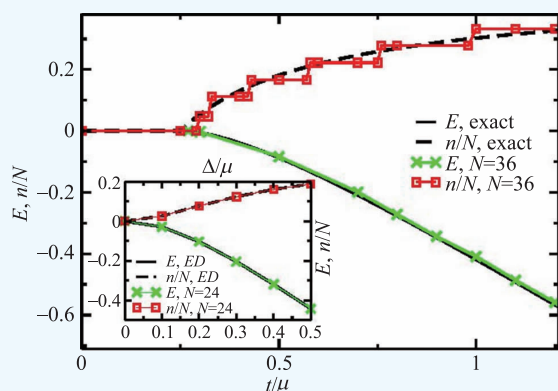


图3 (外)正方晶格的紧束缚模型与(内)六角晶格上的自由费米子模型的计算结果(绿色曲线为基态能量,红色曲线代表填充。对紧束缚模型,黑色曲线为严格解析解。对自由费米子模型,黑色曲线为严格对角化结果。图中exact为精确解/解析解,纵坐标中 E 是模型中相互作用强度 J 的单位, n/N 是载流子填充率,单位为百分比)

Grassmann代数是场论中常用的一套数学工具,能非常有效的处理费米子统计问题,其最大的特点是,通过局域的Grassmann代数(以下简称G数)操作就可以得到费米统计的性质。将Grassmann代数与张量网络方法结合后,我们只需要在两个局域矩阵做缩并时,对相关的G数进行操作,就能得到正确的费米统计,这大大简化了我们的程序,也使得计算更加简便,有效。这种思想可以运用推广到各种TPS类算法中,得到GPEPS, GTERG以及笔者主要研究的GMERA算法。

GTPS类算法其实非常容易理解。我们现在给张量矩阵的每个角标(连接)的每个自由度都赋予一个G数(图2)。这个自由度可以满足费米统计(我们叫它费米通道),也可以满足玻色统计(玻色通道),它所对应的G数的指数分别为1或者0。指数为1的G数之间满足费米算符的反对易关系(0则满足玻色对易关系)。这些G数必须在矩阵缩并的过程中通过Grassmann积分消去。以图2为例,我们要对角标 i 进行缩并,相应的G数 G_a, G_b 就是我们要积去的目标。而积分的前提准备是将一系列G数重排,将 G_a 与 G_b 移动至所有角标的最前端(当我们写下一个矩阵的角标时,总是有一定顺序的,而现在就是要改变这个顺序)。这个过程当中就会发生G数的交换,这也就是实现了费米统计的关键。可以看到在张量缩并的过程中,每次我们都只需要考察两个待缩并矩阵,与其它矩阵无关;而张量网络的计算主要就是通过矩阵的缩并完成的!因此利用GTPS算法后,原来复杂的全局性费米统计问题转化为了简单的局域化问题,这使得该方法非常的简单、普适、高效。从另一个角度思考的话,我们可以认为,原来是费米统计性质的那些通道,在被配以G数以后,满足的是玻色算符的对易关系。因此此时所有的张量矩阵都可以视为满足玻色统计,因此我们在对矩阵网络进行缩并和计算的过程中,可以自由决定缩并结合的顺序,而不再担心全局性的排序问题。这就是引入Grassmann代数带来的巨大优势。

当然要在结构复杂的张量网络中引入Grassmann代数并非如此简单,一个可能遇到的问题就是在缩并的过程中,可能会出现一些有特别多

角标/连接的大型张量矩阵。此时G数的重排也会浪费大量的计算时间。对此,我们采用了预排序和存储符号矩阵的方式来解决这一困难,这里就不再展开了^[16]。由此得到的数值算法,其计算速度与玻色系统的模拟(当保留相同的虚拟维度时)是基本一样的。而且这种算法可以自由应用到各种不同结构的晶格模型或者张量网络中,无需再对程序进行针对性的修改。因此我们得到了一个非常普适、高效、严格的模拟强关联费米子体系的数值方法。

4 GMERA 方法的验证与应用

我们对 GMERA 方法进行了大量的验证,也进行了一系列的benchmark计算。以六角晶格上的自由费米子模型(只有配对相互作用)及正方晶格上的紧束缚模型(只有跃迁项,有严格解)为例(图3),我们得到的结果都与预期的相符。它们的哈密顿分别写为:

$$H = -\Delta c_i^\dagger c_j^\dagger + \text{h.c.} + \mu c_i^\dagger c_i,$$

$$H = -tc_i^\dagger c_j + \text{h.c.} + \mu c_i^\dagger c_i,$$

其中需要特别指出的是,对于GMERA方法(或者说GTPS类方法),我们所描述的体系处于巨正则系综,也就是说粒子数通过调节化学势是连续可变的。这与固定粒子填充数的DMRG算法有些不同,因此对于研究会发生配对自发对称破缺的超导模型有自己的优势。结果如图3所示,在紧束缚模型中,在调节化学势时,我们得到的是一个费米子填充的整数(偶数)平台。这是因为紧束缚模型中粒子数是守恒的,而费米子与玻色子不同之处在于其每个能级只能填充一个粒子,且满足宇称守恒(粒子成对产生湮灭),因此在有限大小的体系中,其填充数必定呈现出平台的形式。我们也模拟了类似形式的硬核玻色子模型,所得到的

填充数—化学势图就是一条连续平滑的曲线。因此整数平台的出现意味着GMERA算法正确的抓住了费米统计的性质。与之相对的,在只有配对相互作用的自由费米子模型中(图4内嵌),填充数是连续演化的。这是因为配对相互作用导致体系

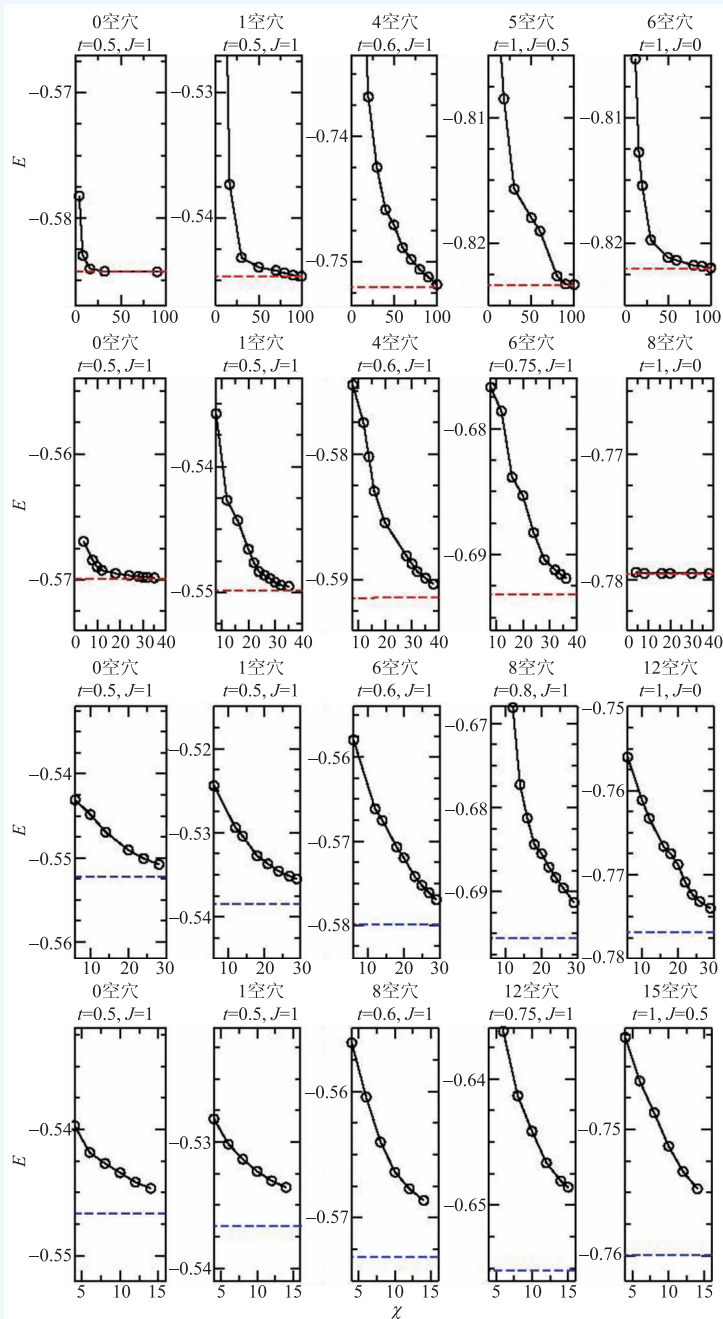


图4 对六角晶格上的 t - J 模型进行的标准测试计算。黑色曲线为MERA所得基态能量随虚拟维度 χ (控制计算精度,越大越精确,越耗时)的演化。第一,二行展示的是对 $N=12$, $N=16$ 格点的计算结果,其中红色虚线是严格对角化方法所得的能量。第三,四行是 $N=24$, $N=32$ 的晶格计算的结果,蓝色虚线是DMRG方法得到的结果

基态波函数是不同(偶数)填充数状态的叠加,因此总填充粒子数可以表现为非整数。

那么 GMERA 算法的精确度如何呢,我们对不同大小的六角晶格上的 t - J 模型进行了标准测试(benchmark)计算,并将得到的能量分别与严格对角化和 DMRG 得到的结果进行了比较。之所以选择 t - J 模型的原因是, t - J 模型被认为是能够解释高温超导原理的最简单的可能理论模型之一。它由电子跃迁项 t ,反铁磁自旋耦合项 J 以及化学势组成,其哈密顿写为:

$$H = -tc_i^\dagger c_j + \text{h.c.} + JS_i S_j + \mu c_i^\dagger c_i.$$

尽管 t - J 模型已经被提出很久,在高温超导材料发现后更是成为人们广泛研究的对象,可是到目前为止的研究并没有对其基态性质得出明确的结论,这也反映出了强关联电子模型的困难,以及发展数值模拟方法的重要性。图4为比较能量的结果。在较小的体系中($N=12, N=16$),我们可以与严格对角化(ED)的结果进行比较,可以看到,随着虚拟尺度的增加,GMERA 得到的基态能量不断优化,其收敛的结果和 ED 是完全一致的。对于更大的体系($N=24, N=36$),目前 DMRG 是能给出最佳能量的数值模拟方法。GMERA 优化得到的基态能量与 DMRG 也是基本一致的,但要略微高一些,最大差距大约在 0.5% 左右($N=32$)。需要指出的是,掺入的空穴越多,计算的复杂性就越

大,收敛所花的时间更长,相应得到的基态能量就会越差一些。

在对于基态性质的研究中,我们并没有找到超导配对序参量自发对称破缺的直接证据,体系的填充数仍旧表现为整数平台的形式。但是我们通过测量配对关联函数 $C_p(i, j) = \langle c_i^- c_{i+e}^- c_j^- c_{j+e}^- + \text{h.c.} \rangle$ 发现,其并非始终是指数衰减的,在 0.1—0.2 的掺杂区域,沿着六角晶格 zigzag 方向,体系表现出了长程的配对关联,暗示着超导序的存在。为了得到更明确的结果,需要进行更大体系尺寸的仔细计算。

我们利用 GMERA 方法进行的最新数值研究是对正方晶格上的 t - J 模型的模拟^[17]。这个模型作为描述铜氧化物高温超导体的基础模型,一直是该领域人们关注与争论的焦点之一^[18]。时至今日,对于这个模型的基态性质,依旧是众说纷纭^[19],其中也包含不少 TPS 类方法的尝试^[20]。我们通过研究发现,在较小的晶格中($N=32$),该体系在掺杂后表现出了许许多多的竞争态,这些态包含着各式各样电荷密度波与电荷自旋波的特征,而且能量都极为接近。只要改变体系的尺寸、长宽比、边界条件以及化学势,这些态原本就相差不多的能量很容易就发生交叉,导致体系的真正的基态发生改变。换句话说,由于数值方法精度有限,很难确定真正的基态,而且结果还易受各种条件的左右。

为此,我们在体系中尝试加入了配对相互作用($-\Delta c_i^\dagger c_i^\dagger + \text{共轭项}$)。我们发现,只要局部加入少许的配对作用,体系就会整体进入 D 波超导,而且非常稳定(图 5)。该相的能量会优于其他竞争态,因此成为基态。该超导态还表现出了周期为 4 的电荷密度波与周期为 8 的自旋密度波的性质。更有趣的是当研究的体系逐渐增大后($N=64, 128$),上述的许多由有限尺寸效应而呈现出的竞争态能量逐渐退化,但是 D 波超导态的能量却基本保持不变。这就导致该 D 波超导相在更大的参数区间是体系的最优解。由此我们推测,在体系进一步增大接近热力学极限时,上述 D 波超导序是体系基态的最有力竞争者。

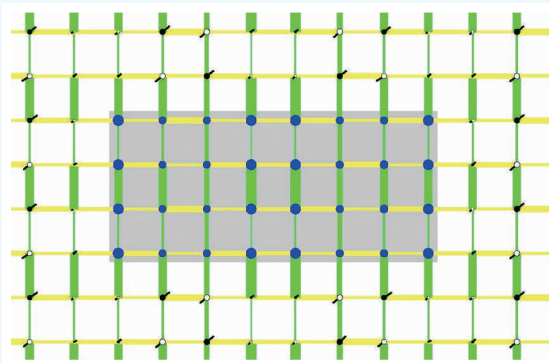


图5 用 GMERA 方法计算正方晶格上 t - J 模型得到的 D 波超导态示意图。该态在较大体系($N=64, N=128$)中,在掺杂(0.25—0.3)区间为体系的基态。图中蓝色圆圈代表填充数,可见 x 方向周期为 4 的 CDW 特征。在阴影外侧的格点上画出了自旋的朝向,可见周期为 8 的 SDW 特征。CDW 与 SDW 特征随体系增大以及填充增加而消失

5 总结与展望

本文阐述了将 Grassmann 代数引入张量网络类算法的动机, 原理与实现方法。其中重点介绍了将 Grassmann 代数与多尺度纠缠重整化方法(MERA)相结合得到的 GMERA 算法, 以及对其进行的一些验证与计算。

GTPS 类算法有着极为丰富的应用前景, 因

为它是一种普适的、严格不带 bias 的数值模拟方法, 在一系列人们感兴趣的费米/电子体系都能够加以应用, 帮助我们研究高温超导、拓扑、分数霍尔效应等一系列有趣的物理现象。随着计算机技术与算法的不断进步, 我们相信张量网络态 Tensor Network 不仅在强关联模型的数值研究中会有更加好的表现, 而且在量子计算、人工智能等领域有创新和应用。

参考文献

- [1] Troyer M, Wiese U J. Phys. Rev. Lett., 2005, 94: 170201; Henelius P, Sandvik A. Phys. Rev. B, 2000, 62: 1102
- [2] Li Z X, Jiang Y F, Yao H. Phys. Rev. B, 2015, 91: 241117(R)
- [3] Noack R M, White S R, Scalapino D J. Europhys. Lett., 1995, 30: 163
- [4] Verstraete F, Cirac J I. Phys. Rev. A, 2004, 70: 060302; Verstraete F, Cirac J I. arXiv: cond-mat/0407066
- [5] Gu Z C. Phys. Rev. B, 2013, 88: 115139
- [6] Vidal G. Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 220405
- [7] Evenbly G, Vidal G. Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 180406
- [8] Evenbly G, Vidal G. Phys. Rev. B, 2009, 79: 144108
- [9] Evenbly G, Vidal G. Phys. Rev. Lett., 2010, 104: 187203
- [10] Harada K. Phys. Rev. B, 2012, 86: 184421
- [11] Lou J, Harada K, Kawashima N. arXiv: 1212. 1999
- [12] Barthel T, Pineda C, Eisert J. Phys. Rev. A, 2009, 80: 042333
- [13] Corboz P, Vidal G. Phys. Rev. A, 2010, 81: 010303(R); Corboz P, Vidal G. Phys. Rev. B, 2009, 80: 165129
- [14] Gu Z C, Verstraete F, Wen X G. arXiv: 1004.2563
- [15] Gu Z C, Jiang H C, Sheng D N *et al.* arXiv: 1110.1183
- [16] Lou J, Chen Y. arXiv: 1506.03716
- [17] Paper in work, will be online soon
- [18] Zhang F C, Rice T M. Phys. Rev. B, 1988, 37: 3759
- [19] White S R, Scalapino D J. Phys. Rev. Lett., 1998, 80: 1272
- [20] Corboz P, Rice T M, Troyer M. arXiv: 1402.2859V2



ILOPE - 2017 北京光电周
中国国际激光、光电子及光电显示产品展览会
China International Lasers, Optoelectronics and Photonics Exhibition

2017.10.11-13
中国国际展览中心(静安庄馆)



北京华港展览有限公司
Tel: +86-10-84600314, 84600836
84600343, 84600384
Email: zhanghaijiao@ciec.com.cn
chendeyun@ciec.com.cn
wangxinyan@ciec.com.cn
menglin@ciec.com.cn



中国光学光电子行业协会
Tel: +86-10-84321499
Email: coema@coema.org.cn

扫码关注



体验国内外光电行业
展会“一站式”服务!