

量子多体系统的线性张量重正化群方法^{*}

李伟 苏刚[†]

(中国科学院研究生院 北京 100049)

摘要 文章简述了数值重正化群方法的历史发展,包括威耳逊(Wilson)的数值重正化群算法,S. R. White 的密度矩阵重正化群方法,以及近期迅速发展的处理强关联量子系统的几种张量网络态与张量网络算法.在此基础上,文章重点介绍了作者最近提出的用于研究量子多体系统热力学性质的线性张量重正化群方法,以及该方法在一维和二维量子系统中的应用.

关键词 数值重正化群,密度矩阵,张量网络态,线性张量重正化群

Linearized tensor renormalization group approach for quantum many-body lattice systems

LI Wei SU Gang[†]

(Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract We review the development of numerical renormalization group methods, including Wilson's numerical renormalization group, White's density matrix renormalization group, and several recent rapidly developing tensor network state-based algorithms. Among these, particular emphasis is laid on the linearized tensor renormalization group method, which was recently proposed to accurately calculate the thermodynamic properties of quantum many-body lattice systems, and which may have broad applications in both one- and two-dimensional quantum systems.

Keywords numerical renormalization group, density matrix, tensor network state, linearized tensor renormalization group

1 引言

强关联多体问题,如相互作用费米子 Hubbard 模型,海森伯(Heisenberg)自旋模型,以及玻色子 Hubbard 模型等,无疑是凝聚态物理中引人注目的重要问题之一.由于这类问题非常复杂,一般不能用单粒子图景来描述,数值计算是通向解决问题的一条重要途径.然而,电子计算机(经典计算机)在计算这类量子多体问题时遇到的困难也十分突出.具体表现为在精确计算量子多体问题时会遇到指数墙问题,即随量子系统中格点数目的增加,描述该系统的希尔伯特空间维度是呈指数规律增长的,也就是算法的复杂度与计算规模呈指数关系.对于这一类问题,在经典计算机上做精确对角化就只能处理尺寸

非常有限的小体系(大约几十个格点),对较大系统的计算则变得非常困难.

为此,人们提出了许多有效算法来试图解决或避开上述困难.这些尝试卓有成效,通过量子蒙特卡罗方法、数值重正化群方法等,人们已经能够比较精确地计算很多强关联格点系统的物性.经验告诉我们,看上去庞大的希尔伯特空间也许只是表象,我们关心的系统基态以及低激发态性质,对于一大类系统而言,可能总是和其中一个维度相对较小的子空间有关,因此构造各种算法需要考虑如何找到这个有效子空间.

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10625419;10934008;90922033)资助项目

2011-07-28 收到

[†] 通讯联系人. Email: gsu@gucas.ac.cn

量子蒙特卡罗方法是应用十分广泛的一类算法,它采用抽样的方式来寻找有效子空间,并设置接收率来判断是否将某个量子态计入统计.量子蒙特卡罗方法没有空间维度的限制,普遍应用于计算各种强关联模型,并陆续发展出了包括随机级数展开(stochastic series expansion, SSE)^[1]、虫算法(worm algorithm)^[2]、变分量子蒙特卡罗^[3]、限制路径量子蒙特卡罗^[4]等算法.量子蒙特卡罗方法在许多方面取得了成功,感兴趣的读者可以参阅文献^[5].但是,在处理包括二维非半满填充的费米子 Hubbard 模型、自旋阻挫(frustrated)海森伯模型等人们很感兴趣的一些问题上,量子蒙特卡罗方法因遇到了负概率问题而失效.

另一类重要的数值方法是基于重正化群思想的算法,包括威耳逊数值重正化群方法(numerical renormalization group, NRG)^[6],White 的密度矩阵重正化群(density matrix renormalization group, DMRG)^[7,8],转移矩阵重正化群(transfer matrix renormalization group, TMRG)^[9]等,这些方法可以比较精确地计算几乎所有的一维强关联模型(包括杂质模型、玻色子模型、自旋模型以及费米子模型等),而不会有负符号问题.近年来,数值重正化群方法的发展十分迅速,并与量子信息和量子计算等学科交叉,涌现出一些新的算法,可以有效地处理很多系统,这些方法被统称为张量网络算法,包括计算系统含时演化的时间演化块消减算法(time evolving block decimation, TEBD)^[10]及其无穷链长的 TEBD(iTEBD)算法^[11],将重正化群方法推广到高维的纠缠对投影态算法(projected entangled pair state, PEPS)^[12],计算经典和量子二维格点模型的张量重正化群算法(tensor renormalization group, TRG)^[13-15],多尺度纠缠重正化方案(multi-scale entanglement renormalization ansatz, MERA)^[16]等.本文将简单介绍一些典型的张量网络算法,并着重介绍我们新近发展的高效计算低维量子格点模型有限温度性质的算法,即线性张量重正化群方法(linearized tensor renormalization group, LTRG)^[17].

2 数值重正化群与密度矩阵重正化群方法

数值重正化群方法是威耳逊在 20 世纪 70 年代为解决近藤(Kondo)杂质问题而提出的.实空间

NRG 的主要步骤如下:(1) 将较小块(block)的哈密顿矩阵精确对角化,保留其中 M 个低能本征态,并将块哈密顿量投影到这个子空间中,写成 M 维的矩阵形式;(2) 将两块这样的小系统合在一起,命名为超块(superblock).在 2 个块的 M 维子空间的直积空间上(M^2 维)写出超块上的新哈密顿矩阵(并考虑块边界上的相互作用);(3) 超块的哈密顿矩阵将是 M^2 维的,我们可以将其对角化,只保留其中最低能级的 M 个本征态,将哈密顿矩阵投影到这个 M 维子空间中(这一过程也称为希尔伯特空间的截断或裁剪).之后,回到第(2)步,并循环,直到超块尺寸达到预定大小,将其上的哈密顿矩阵对角化,就得到系统的基态能量和基态波函数(以及若干低能激发态).整个 NRG 的过程如图 1(a) 所示. NRG 实际上是建立在一个简单的假设之上,即子块上的高能部分波函数与 2 个子块组成的超块低能部分波函数近似无关,因而可以将其分离并截断,从而有效地降低超块的空间维度,但不影响其低能部分的精确计算.

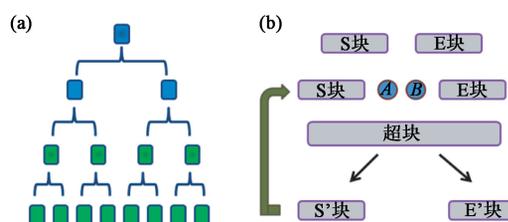


图 1 (a)数值重正化群和(b)密度矩阵重正化群的超块构造和增长过程(其中 S 块表示系统块(system),E 块表示环境块(environment),A 和 B 表示新加入系统的 2 个点)

但是,NRG 在处理除近藤杂质问题之外的强关联格点模型时都遇到了困难,其主要原因是 NRG 没有充分考虑块上的低能波函数在两块中间的边界值与超块低能波函数的中点值不匹配问题^[18].另外,NRG 采取的每次超块尺寸加倍增长的方式也不利于降低误差.在 1992—1993 年,S. R. White 提出了数值重正化群的密度矩阵方案(DMRG)^[7,8],成功地解决了这个问题.该方案不再是用块的低能本征态,而是使用子块的约化密度矩阵最大的 M 个本征态来构造超块(这个方案也被称为 White 规则).

DMRG 方法分为有限长算法和无穷长算法,其中有限长算法需要在无穷长算法的基础上加一个扫描的过程,以提高计算有限尺寸或非均匀系统的精度.我们这里简要地介绍无穷长 DMRG 算法,其流程如图 1(b) 所示. DMRG 采取将超块分为系统(S)和环境(E)两块(这里只考虑两块对称的情

况,而在更为一般的情况下以及在有限长算法的扫描过程中,两者可以不对称),超块尺寸线性增长,即每次系统块和环境块都增长一个点,具体步骤如下:(1) 首先取系统块(S)、中间的2个点(A和B)以及环境块(E)直积组成超块;(2) 精确对角化超块的哈密顿矩阵,求出超块的基态波函数,外积构成超块的零温密度矩阵,将环境块E以及B点的自由度从密度矩阵中求迹去掉,得到系统块S加A点的新系统块(S')的约化密度矩阵(此约化密度矩阵的维度应为 $M \times d$ 维, d 是新加A(B)点局域希尔伯特空间的维度, M 为原系统块S的维度);(3) 对角化约化密度矩阵,保留最大的 M 个本征态来重新构造新系统块S',并复制一份赋给新环境块E';(4) 超块增加2个点,回到第1步.如此循环,直到超块尺寸达到预定大小.对于无穷长算法来说,要求计算结果(如均格点基态能量等)达到随链长增长满足预定的收敛条件.

DMRG方法在处理一维和准一维量子格点模型的基态性质上取得了巨大的成功,人们很快尝试将DMRG算法做各种推广,包括计算有限温度性质的转移矩阵重正化群方法(transfer-matrix renormalization, TMRG^[9,19]),计算二维自旋和电子格点模型的二维DMRG^[20,21],计算动力学性质的dynamical DMRG^[22]和计算含时演化问题的time-dependent DMRG^[23-25],以及动量空间DMRG^[26]等.这些有益的推广丰富了重正化群算法,使之成为研究低维强关联系统的一类强大的数值计算工具.

3 矩阵乘积态、张量乘积态及张量网络算法

DMRG算法在一维量子格点模型上取得了很大的成功,但是很快人们发现将DMRG向二维直接推广时并不像一维那样成功,计算小尺寸系统时利用二维DMRG可以获得精确的结果,但是随着系统尺寸变大,所需要的保留态数目很快增长,需要消耗庞大的计算资源和很长的计算时间.进一步的分析表明,由于DMRG的长点方式需要在二维的格点沿着一维的路径行走,这就会破坏二维格点原有的对称性,使得一些原来是近邻的相互作用变成更长程的耦合,计算的收敛性会变差.这个问题也促使人们思考DMRG算法背后更深层次的结构.

另一方面,人们很早就开始尝试用矩阵乘积态

(matrix product state, MPS)作为一种解析工具来研究一维强关联问题.一个典型的例子是AKLT模型^[27],该模型严格可解,其基态恰好是一个矩阵维数为2的矩阵乘积态.另外,人们也利用MPS来研究一些费米子模型^[28].近年来的研究表明,无论是NRG还是DMRG,所求出的基态波函数实际上正是MPS态^[29,30],这一认识可以帮助人们理解DMRG在计算一维和两维系统时的不同表现.一维的非临界(non-critical)有能隙模型,由于关联长度有限,MPS态正是这样系统的基态的一个绝佳描述.系统的纠缠熵随格点增加会趋于一个收敛的常量(根据纠缠熵的面积律,一维系统的“表面积”只有2个端点,不会随系统增长而持续扩大),这样即便是在描述热力学极限下的系统时,也只需要保留约化密度矩阵中的有限多个态,就足以抓住系统的纠缠信息了.即使对于一维的临界模型,由于纠缠熵随尺寸增长只是很弱的对数发散,DMRG保留相对多的态仍然可以获得相当好的结果.与此不同,对于二维系统,情况则变得较为复杂,纠缠熵基本是随系统的尺寸线性增长,如果仍然用MPS态来描述这样的系统,就需要DMRG保留态的数目随系统增长而变大,从而使得大尺寸二维系统的DMRG研究变得很困难.

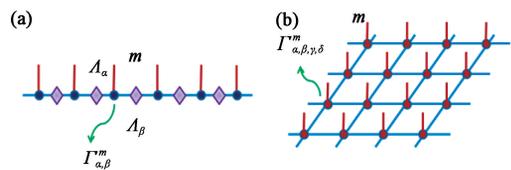


图2 (a) 矩阵乘积态;(b) 张量乘积态(图中 Γ 表示张量乘积态中的张量, A 表示对角矩阵(奇异值向量),下标 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ 表示几何(键)指标, m 表示物理指标)

人们随后构想了MPS波函数的高维推广,即张量乘积态(tensor product state, TPS),或者称之为二维纠缠对投影态(PEPS)^[12](如图2所示).这种波函数通过增加键指标(bond index)的个数,可以用有限大小的保留态数目承载住满足面积律的纠缠熵,因而比MPS能更好地描述二维量子格点模型的基态.正如张量是矩阵的高维推广,二维量子格点系统中的TPS波函数(见图2(b))也正是一维问题中MPS(见图2(a))的自然推广,二者是PEPS波函数在一维和二维时的不同具体形式.基于TPS/PEPS以及其他张量网络态(如树状张量网络, MERA等)的新算法,被统称为张量网络算法,这类算法不仅可以用于计算二维海森伯模型,而且也被推广用于计算相互作用玻色子模型^[31]和费米子模

型^[32,33]等,目前这类算法仍处于蓬勃地发展当中.

值得注意的是,张量网络算法不仅可用于处理二维量子模型,而且对一维量子问题的研究也提供了新的思路.从 MPS 波函数出发,人们提出了一些新算法,如时间演化块消减算法 (TEBD/iTEBD),来研究一维量子格点模型的含时演化问题,该方法与 DMRG 有效结合,就会成为十分高效的含时 DMRG 方法,称为自适应含时 DMRG (adaptive time-dependent DMRG) 法^[25].该方法的要旨是随着时间的演化去自适应地选择所用的有效子空间,而不同于之前在给定的初始时刻哈密顿量低能子空间中计算含时问题的策略.由于这一改进,TEBD (或自适应含时 DMRG 方法)的计算精度有很大提高,可以在较长时间内模拟量子系统的演化.随后人们还发展出了计算无穷长链系统的 iTEBD 算法,该算法充分利用了系统的空间平移对称性,使用平移不变的 MPS 波函数,在计算么正(实时间)和近么正(如短虚时间切片)演化时,所有 MPS 的局域张量都是并行更新的,这样大大提高了计算效率,并且计算结果是热力学极限意义下的,无需进行有限尺寸外推.另一方面,iTEBD 除了计算实时间演化外,还可利用虚时间投影研究系统的变分 MPS 波函数,重写无穷长链 DMRG,并得到十分稳定和高效的基态算法^[11].这种虚时间投影的方法随后被推广到计算二维量子格点模型的 TPS 变分基态波函数上^[14],并在研究量子自旋模型方面取得了很好的结果,也有了应用^[34,35].

4 粗粒化张量重正化群方法

张量重正化群 (TRG) 是一种巧妙的张量网络算法,它最早是为了计算二维经典格点模型的配分函数而提出的^[13],通过把配分函数表示成二维张量网络,问题转化为如何精确有效地收缩该张量网络,求出其迹.同样的问题在求解二维量子格点模型基态性质时也会遇到,为求得力学量的平均值,也需要对投影得到的二维 TPS 波函数做内积,而这实质上也可视为一个张量网络求迹的问题.

张量重正化群方法利用了粗粒化重正化群的思想及其图形变换技巧,该方法针对六角形张量网络的变换,如图 3 所示.先做局域变换,将水平方向的指标收缩掉,得到一个矩阵 M ,然后用奇异值分解,再拉开变形,得到垂直方向的键.在这里,我们需要按照奇异值大小将一部分空间裁剪掉(图 3(d) 显示

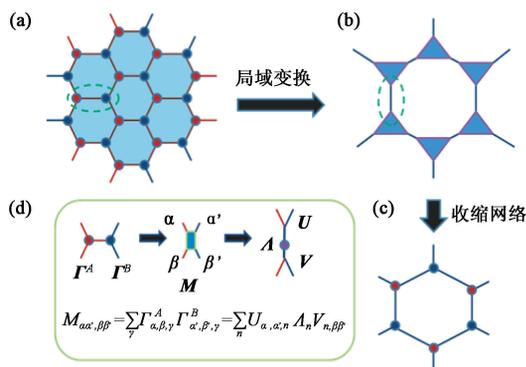


图 3 粗粒化张量重正化群的局域变换和流程 (Γ^A 和 Γ^B 表示三阶张量, M 表示收缩掉中间公共指标后的矩阵, $\alpha, \beta, \alpha', \beta'$ 是张量网络中的几何指标, U 和 V 是 M 做奇异值分解得到的矩阵, Λ 为奇异值向量)

了局域变换及奇异值分解过程).经过这步变换,六角网络变成中间的过渡网络,然后将当中的小三角形都收缩掉,从而完成张量网络的收缩.这样就回到了另一张六角网络,只是格点数目变成原来的 1/3,这正是一种粗粒化变换.经过有限步的收缩,原来的六角网络就会被收缩成一个小六边形,可以方便地对其求迹(或者收集重正化过程中的重正化因子,来计算原张量网络的迹).

粗粒化张量重正化群方法构思巧妙,非常有趣,但也有明显的局限性.由于每次粗粒化之后每个张量指标的维度都会累积,为了让计算可以维持下去需要做裁剪,从而限制其大小.上述的 TRG 方法,其裁剪依据只是局域最优的,并没有考虑环境的影响而达到全局最优.因此计算精度受到了一定的限制,特别在临界点附近,系统的关联长度发散,使得系统与环境之间的关联不能被忽略.为了改进上述 TRG 方案,人们提出了二次重正化方案^[14],很好地考虑了环境影响,从而达到了裁剪的全局最优,显著地改进了包括临界点附近在内的全温区的计算精度.

5 线性张量重正化群方法

针对每个不同网络(正方、六角、三角等)的重正化过程,我们都需要构思不同的图形变换策略来实现前述的粗粒化 TRG.特别是在计算一维量子格点模型有限温度的配分函数时,通过 Trotter-Suzuki 分解,可以将配分函数的求解也转化为一个张量网络求迹问题.但是此时,二维网络的 2 个方向是不对称的,一个是一维量子格点模型的空间指标;另一个是虚时间切片的 Trotter 指标(见图 4).此时我们往

往需要计算的是给定链长(或无穷链长极限)下不同温度的热力学性质,而粗粒化变换是在 2 个维度上同步收缩的,因而在计算该问题时就十分不便.为此,我们提出了线性化张量重正化群方法(linearized tensor renormalization group, LTRG)^[17]来计算低维量子格点模型的配分函数,其主要思路是先沿着 Trotter 方向收缩张量网络,达到某个指定的温度后,再沿着格点方向收缩,从而求解出系统的配分函数.

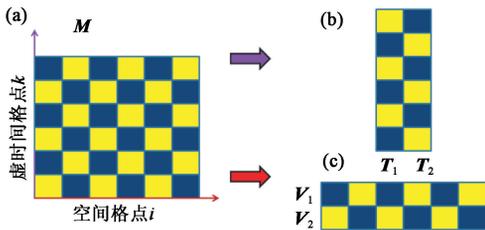


图 4 一维量子模型配分函数的张量网络及其转移矩阵(图中 M 代表完整张量网络, T_1, T_2, V_1, V_2 为其中的转移矩阵)

在详细介绍 LTRG 方法之前,我们先简要介绍一下计算一维量子格点模型热力学性质的转移矩阵重正化群(TMRG)方法.我们注意到,一维量子格点模型的有限温度性质可以通过求解图 4 中的二维张量网络 M 的迹来得到.观察图 4,不难发现它由重复的条状单元构成,这样的单元被称为转移矩阵.水平和垂直两种拆解方案可以得到系统两种转移矩阵,即图 4 (b) 所示的 T_1 和 T_2 ,或图 4 (c) 中的 V_1 和 V_2 . TMRG 的要旨就是将求解一个无穷长链量子系统的配分函数的问题转化为求解转移矩阵 $T_1 \times T_2$ 的最大本征值问题,而这恰好可以借助 DMRG 来精确求解,此时超块不再沿格点方向增长,而是沿虚时间(Trotter)方向增长.我们要求的也不再是实空间超块的基态波函数,而是转移矩阵虚时间超块的最大本征态. TMRG 方法广泛应用于计算一维和准一维量子格点模型的热力学性质^[19,36],还被推广到计算有限温度下的动力学性质^[37]等.但是,与其他基于 DMRG 的算法一样, TMRG 算法在推广到高维量子系统时会遇到难以克服的困难.

为了解决上述困难,针对图 4(a) 的转移矩阵张量网络,我们提出了一个有效算法以收缩掉所有的网络指标,做合理的近似后可将张量网络的迹精确求出,得到有限温度下的配分函数. LTRG 不仅是一个精确计算一维量子多体系统热力学性质的张量网络算法,而且更重要的是,向高维推广比较直接和有效.

在 LTRG 算法中,首先把正方形的张量网络(见

图 5(a))做一个局域变换,如图 5 (b) 所示,通过这个变换得到一个六角张量网络(见图 5 (c)).为了方便,我们把最底下的两排张量收缩掉,形成一排矩阵乘积算符(matrix product operator, MPO),然后将上面的部分画成如图 5 (d) 中所示的拓扑等价的砖墙结构.

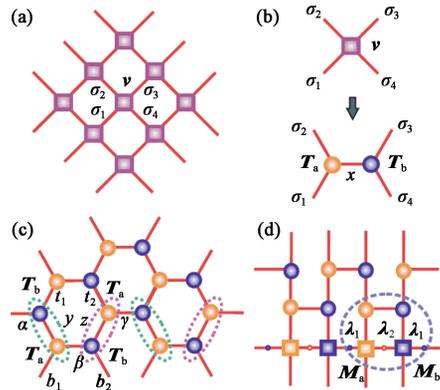


图 5 线性张量重正化群的网络变换和投影块(图中 v 代表四阶张量, $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 和 σ_4 是其张量指标; T_a 和 T_b 为三阶张量, $x, y, z, t_1, t_2, b_1, b_2$ 代表物理指标, α, β, γ 等代表张量网络中的几何(键)指标, λ_1 和 λ_2 代表键上的对角矩阵(奇异值向量), M_a 和 M_b 为底层的四阶张量)

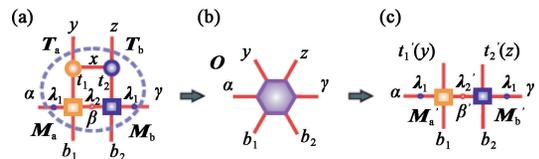


图 6 投影块的局域变换与矩阵乘积算符的更新(图中的符号说明同图 5;图 6(b)中的 O 张量为收缩掉中间指标得到的六阶张量)

这里我们假设系统是无穷长链,充分利用系统的平移对称性来减少所需保留的张量数目.将上面的张量视为演化门操作(对于充分小的 Trotter 切片 τ ,这一演化算符是接近幺正的)投影到底层的 MPO 上(见图 6 (a)),从而逐层收缩网络来达到目的.每个局域操作如图 6 (a) 所示,每两步投影完成一个完整的 Trotter 收缩,系统向低温演化(倒温度 β 增加 τ).投影将所有中间指标都先收缩掉,只保留 2 个键指标和 4 个物理指标,得到图 6 (b) 所示的 O 张量.然后将 O 张量矩阵化(即将左、右半边的 3 个指标各自视为一个“胖”指标,这样就把 O 视为一个矩阵),并做矩阵的奇异值分解,得到更新后的 MPO.如果此处不做任何裁剪近似,则密度矩阵的键指标空间维度会随着投影步数呈指数增长,为此

我们采用了 iTEBD 技术来帮助选择一个子空间,其基本裁剪策略即为 White 规则,以便有效地表达系统的密度矩阵,换句话说,就是帮助我们裁剪键指标.按照标准 iTEBD 方法,我们需要在构建 \mathbf{O} 张量时,将左右两边的对角 λ 矩阵乘进来(可等效地视为环境的影响,具体可参阅文献[11]),然后在 \mathbf{O} 做奇异值分解后,按照所得到的奇异值 λ' 的大小裁剪中间新的键空间,使 MPO 的每个张量键的维度保持在一个指定的数目(D_{cut})上.

当完成若干个完整的 Trotter 投影,系统处在倒温度 β 上(假设我们完成了 $2K-2$ 次投影,则 $\beta=K\tau$, K 为虚时间片段的个数).为了求出此温度下的配分函数,我们可以对 MPO 的物理指标求迹,接下来沿着格点方向粗粒化收缩这个一维矩阵乘积(p 次,链长为 2^p).在沿着 Trotter 方向收缩时,我们每次从 MPO 的张量中提取出一个重正化因子 n_i 以避免发散,而做格点方向收缩时,提取出 m_j 因子.一维量子格点模型的自由能 f 就由下式给出:

$$f = -\frac{1}{\beta L} \ln \left[\prod_{i=1}^{2K-2} (n_i)^{L/2} \prod_{j=1}^p (m_j)^{L/2^j} \right]$$

$$= -\frac{1}{K\tau} \left(\sum_{i=1}^{2K-2} \frac{\ln n_i}{2} + \sum_{j=1}^p \frac{\ln m_j}{2^j} \right).$$

计算出自由能后,其他热力学量原则上可以通过求导得到,当然也可以利用 LTRG 给出的 MPO 和力学量算符的乘积再求迹而得到(即力学量的热力学平均值,从这个意义上讲,LTRG 得到的 MPO 实际上是系统有限温度密度矩阵的一个很好的近似).为检验 LTRG 的计算精度,以严格可解的自旋 1/2 XY 模型为例,我们计算了该系统的自由能和能量及其与严格解之间的相对误差(见图 7 (a) 和 7(b)).我们还同时给出了 TMRG 的计算精度,以供比较.可以看到,在保留相同态的情况下,二者的精度可以比拟.此外,我们还应用 LTRG 计算了自旋为 1 的海森伯链,可以在有磁场的情况下,计算出系统的极低温($T/J \approx 0.005$)比热,在 Luttinger 液体区观察到典型的线性比热行为.而在相同条件下,用 TMRG 计算比热时会在低温下出现强烈震荡而无法确定系统低温下的 Luttinger 液体行为.

如前所述, LTRG 作为一种张量网络算法,具有很大的灵活性,并且易于扩展.我们可以沿着前面所描述的路线,将描述系统密度矩阵的 MPO 推广到张量乘积算符(tensor product operator, TPO),然后按照推广的 iTEBD 做虚时间投影演化,就可以

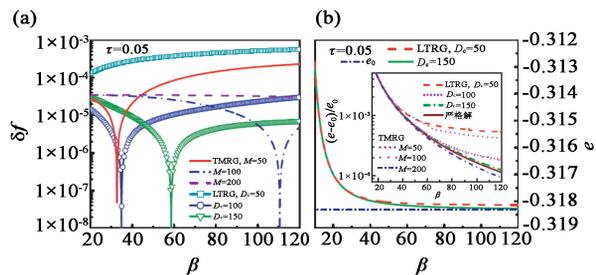


图 7 一维自旋 1/2 XY 模型的自由能相对误差 (a) 以及均格点能量 (b) 随温度的变化(图中横坐标 β 表示倒温度($1/T$),纵坐标 δf 表示均格点自由能与严格解的相对误差, D_c 和 M 分别表示 LTRG 和 TMRG 计算中保留态的数目, e 表示均格点能量, e_0 为严格基态能量, τ 为 Trotter 分解的切片宽度)

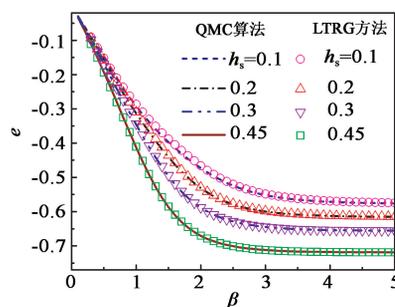


图 8 六角格子海森伯模型在交错场下能量随温度的变化(图中 h_s 表示交错外磁场, e 为均格点能量, β 为倒温度($1/T$), QMC 为量子蒙特卡罗算法, LTRG 为线性张量重正化群方法)

将 LTRG 推广到二维.我们做了一些初步的尝试,计算了六角格子上的海森伯反铁磁模型在不同交错场作用下能量随温度的变化(见图 8),可以看到, LTRG 的计算结果与量子蒙特卡罗模拟的结果吻合得很好.

最后,我们简要讨论一下 LTRG 与目前还在发展中的有限温度 DMRG (finite temperature DMRG) 算法间的联系.有限温度 DMRG 算法是基于纯化的思想,将系统在有限温度下的密度矩阵用一个在扩大了希尔伯特空间中的纯态的子系统约化密度矩阵来表述,然后利用含时 DMRG 方法来计算这个纯态的虚时间演化,最后计算该纯态的内积来得到系统的配分函数.这种算法与我们的 LTRG 方法出发点不一样,但有一些相似之处.二者的区别在于, LTRG 算法是一种张量网络算法,而有限温度 DMRG 是借助 DMRG 来实现的,所以后者推广到高维时较难.最近的一个进展是,借助量子蒙特卡罗算法抽样,人们将有限温度 DMRG 的时间代价降到与零温 DMRG 相同的量级^[38],这样为研究小尺寸二维团簇的热力学性质提供了一种可能性.

6 结束语

我们简要介绍了目前仍处于蓬勃发展之中的数值重正化群方法,包括密度矩阵重正化群、转移矩阵重正化群以及几种新兴的张量网络算法. 其中重点介绍了我们最近提出的线性张量重正化群算法,该算法可以精确计算一维量子格点模型的有限温度性质,并且可以方便地推广到求解二维关联量子系统. 由于LTRG方法简单易行,编程方便,可以预计将在研究一维、准一维和二维量子系统的热力学性质方面发挥重要作用. 此外,张量网络算法包括LTRG方法向二维自旋、玻色子乃至费米子量子系统的推广仍有许多工作要做,如何获得普遍适用、稳定和精确高效的数值方法,仍然是研究凝聚态关联量子系统面临的重大课题之一.

参考文献

- [1] Sandvik A W, Kurkiiarvi J. *Phys. Rev. E*, 1991, 66: 046701; Syljuåsen O F, Sandvik A W. *Phys. Rev. E*, 2002, 66: 046701
- [2] Prokof'ev N V, Svistunov B V, Tupitsyn I S. *Zh. E'ksp. Teor. Fiz.*, 1998, 114: 570
- [3] Sandvik A W, Vidal G. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99: 220602; Lou J, Sandvik A W. *Phys. Rev. B*, 2007, 76: 104432
- [4] Zhang S W, Carlson J, Gubernatis J E. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, 74: 3652; Zhang S W, Carlson J, Gubernatis J E. *Phys. Rev. B*, 1997, 55: 7464
- [5] Landau D P, Binder K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005
- [6] Wilson K G. *Rev. Mod. Phys.*, 1975, 47: 773
- [7] White S R. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 69: 2863; *Phys. Rev. B*, 1993, 48: 10345
- [8] Schollwoeck U. *Rev. Mod. Phys.*, 2005, 77: 259; *Ann. Phys. (Leipzig)*, 2011, 326: 96
- [9] Bursill R J, Xiang T, Gehring G A. *J. Phys. Condens. Matter*, 1996, 8: L583
- [10] Vidal G. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 91: 147902
- [11] Vidal G. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98: 070201; Orús R, Vidal G. *Phys. Rev. B*, 2008, 78: 155117
- [12] Verstraete F, Cirac J I. *arXiv:cond-mat/0407066*
- [13] Levin M, Nave C P. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99: 120601
- [14] Jiang H C, Weng Z Y, Xiang T. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101: 090603; Xie Z Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 103: 160601; Zhao H H *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81: 174411
- [15] Gu Z C, Levin M, Wen X G. *Phys. Rev. B*, 2008, 78: 205116; Gu Z C, Wen X G. *Phys. Rev. B*, 2009, 80: 155131
- [16] Vidal G. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99: 220405; *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101: 110501
- [17] Li W, Ran S J, Gong S S *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106: 127202
- [18] White S R. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 68: 3487
- [19] Wang X Q, Xiang T. *Phys. Rev. B*, 1997, 56: 5061; Xiang T. *Phys. Rev. B*, 1998, 58: 9142
- [20] Liang S, Pang H. *Phys. Rev. B*, 1994, 49: 9214
- [21] Xiang T, Lou J Z, Su Z B. *Phys. Rev. B*, 2001, 64: 104414
- [22] Jeckelmann E. *Phys. Rev. B*, 2002, 66: 045114
- [23] Cazalilla M A, Marston J B. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, 88: 256403
- [24] Luo H G, Xiang T, Wang X Q. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 91: 049701
- [25] White S R, Feiguin A E. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93: 076401; Daley A J, Kollath C, Schollwoeck U *et al.* *J. Stat. Mech. : Theor. Exp.*, 2004, P04005
- [26] Xiang T. *Phys. Rev. B*, 1996, 53: R10445
- [27] Affleck I, Kennedy T, Lieb E H *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1987, 59: 799
- [28] Su G. *Phys. Lett. A*, 1996, 213: 93
- [29] Ostlund S, Rommer S. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, 75: 3537
- [30] Verstraete F, Weichselbaum A, Schollwoeck U *et al.* *Phys. Rev. B*, 2009, 80: 165117; Saberi H, Weichselbaum A, von Delft J. *Phys. Rev. B*, 2008, 78: 035124
- [31] Murg V, Verstraete F, Cirac J I. *Phys. Rev. A*, 2007, 75: 033605; Jordan J, Orús R, Vidal G. *Phys. Rev. B*, 2009, 79: 174515
- [32] Corboz P, Orús R, Bauer B *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81: 165104; Corboz P, Orús R, Vidal G. *Phys. Rev. B*, 2010, 82: 245119
- [33] Corboz P, Vidal G. *Phys. Rev. B*, 2009, 80: 165129
- [34] Chen P, Lai C Y, Yang M F. *J. Stat. Mech.*, 2009, P10001
- [35] Li W *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81: 184427
- [36] Gu B, Su G, Gao S. *Phys. Rev. B*, 2006, 73: 134427; Gu B, Su G. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 97: 089701; Gu B, Su G. *Phys. Rev. B*, 2007, 75: 174437; Gong S S, Gao S, Su G. *Phys. Rev. B*, 2009, 80: 014413; Gong S S *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81: 214431
- [37] Sirker J, Pereira R G, Affleck I. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 103: 216602
- [38] White S R. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102: 190601; Stoudenmire E M, White S R. *New J. Phys.*, 2010, 12: 055026