

# 基于投影纠缠对态算法优化的研究\*

李生好<sup>1)†</sup> 伍小兵<sup>1)</sup> 黄崇富<sup>1)</sup> 王洪雷<sup>2)</sup>

1)(重庆工程职业技术学院, 重庆 400037)

2)(重庆医科大学基础医学院, 重庆 400016)

(2014年2月11日收到; 2014年3月20日收到修改稿)

二维强关联电子量子格点系统的投影纠缠对态 (PEPS) 算法是数值计算领域中研究二维强关联电子量子格点系统最为重要的张量网络算法. 基于 PEPS 算法研究二维量子 XYX 模型与二维量子 Ising 模型, 本文对 PEPS 算法进行了一些优化和改进研究, 这些优化和改进主要体现在如何进行 PEPS 张量的更新与如何进行物理观测量的计算这两个方面, 从而可以大大提高计算资源的利用. 因而优化和改进后的 PEPS 算法可为研究热力学极限下的二维强关联电子量子格点系统的量子相变和量子临界现象提供一种更有效的强大的工具.

**关键词:** 投影纠缠对态, 张量网络算法, 强关联电子, 量子相变

**PACS:** 05.30.Rt, 02.70.-c, 75.10.Jm

**DOI:** 10.7498/aps.63.140501

## 1 引言

近半个世纪以来, 随着计算机的飞速发展和应用, 计算物理学已逐渐成为凝聚态物理研究的一个重要的组成部分, 也给量子系统的各种经典数值模拟带来了日新月异的变化. 在 20 世纪 70 年代, Wilson 等<sup>[1,2]</sup> 从数值重整化理论出发, 开创了理解量子强关联系统的一个全新的视角, 建立了数值重整化群 (NRG) 算法<sup>[3,4]</sup>. 在此基础上, White<sup>[5,6]</sup> 又提出了在数值计算领域中研究一维强关联量子格点系统最为重要的密度矩阵重整化群 (DMRG) 算法. 之后, Ostlund 和 Rommer<sup>[7]</sup> 从 DMRG 与矩阵乘积态 (MPS)<sup>[8]</sup> 之间的联系出发, 为 DMRG 算法以及日后发展的量子系统的张量网络算法奠定了坚实的理论基础. 其后, Vidal<sup>[9]</sup> 提出了与系统格点数目不相关的 infinity time evolving block decimation (iTEBD) 算法, 这个算法在系统具有平移不变性的条件下, 可以直接研究热力学极限下的量子强关联系统; Verstraete 等<sup>[10,11]</sup> 提出了二维量子系统的投

影纠缠对态 (PEPS) 理论, 成为数值计算领域中研究二维强关联量子格点系统最为重要的张量网络算法, 还在纠缠重整化的概念之上提出了多尺度纠缠重整化 (MERA) 算法<sup>[12-14]</sup>. 对于二维费米子量子系统来说, 也有二维费米子强关联量子格点系统的 Graded PEPS (gPEPS) 张量网络算法<sup>[15,16]</sup>, 以及自旋梯子量子系统的张量网络算法<sup>[17]</sup>.

MPS 算法, PEPS 算法, MERA 算法, gPEPS 算法以及自旋梯子量子系统的算法等, 统称张量网络算法. 张量网络算法是一系列基于张量网络结构的高效的数值模拟算法, 尤其是近几年, 相关算法的精度与效率都得到了很大的提高. 目前, 张量网络算法已经成为研究量子多体问题的强有力的工具. 因此, 改进和优化张量网络算法与发展张量网络算法一样, 也是必不可少的重要一环. 最近, 人们对于研究二维强关联量子格点系统极为重要的 PEPS 张量网络算法比较感兴趣. 本文基于 PEPS 算法研究二维强关联量子 XYX 模型<sup>[18]</sup> 与二维强关联量子 Ising 模型<sup>[19,20]</sup> 的量子相变与量子临界现象, 对 PEPS 算法进行优化和改进, 从而可以大

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11104362) 和重庆市教委科学技术研究项目 (批准号: KJ1403203) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: shenghaoli@cqu.edu.cn

大提高计算资源的利用.

## 2 PEPS算法

Verstraete等<sup>[10,11]</sup>于2008年发展了一种应用于二维玻色子系统的张量网络算法,即PEPS算法,以此来寻找具有某种平移不变性的二维强关联量子系统的基态波函数.经过近几年的应用和发展,这个PEPS算法已经非常成熟和有效<sup>[11,18-25]</sup>.但在处理截断维数较大时,计算资源(内存与计算时间)远远不能满足应用的需要,因此非常有必要对已成熟的PEPS算法进行一些改进和优化,以便更有效地模拟强关联量子系统的基态波函数.

首先,考虑一个有限的二维 $N \times N$ 正方格子 $R$ ,在这个正方格子 $R$ 中的格点都可以用一个矢量 $\mathbf{r}$ 来标度<sup>[11]</sup>,而在一个有限维度 $p$ 的希尔伯特空间,这个矢量用 $V^{[\mathbf{r}]} \cong C^p$ 来表示,因此这个二维正方格子的希尔伯特空间是 $V_R = \otimes_{\mathbf{r} \in R} V^{[\mathbf{r}]}$ .在这个选定的有限的二维正方格子 $R$ 中,其格点通过坐标 $\mathbf{r} = (x, y)$ 来标度,其中 $x, y = 1, 2, \dots, N$ .而这个量子系统模型可以通过一个作用在正方格子的哈密顿量 $H = \sum_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2} h^{[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2]}$ 来刻画,其中 $\mathbf{r}_1$ 与 $\mathbf{r}_2$ 表示的是正方格子 $R$ 上的两个最近邻的格点,很容易看出这个哈密顿量是一系列哈密顿量密度 $h^{[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2]}$ 的求和.这里用一套张量 $\{\mathbf{A}^{[\mathbf{r}]}\}_{\mathbf{r} \in R}$ 的PEPS表示来说明一个有限正方格子上一个纯态 $|\Psi\rangle$ ,正如图1(a)与(b)所示,每一个格点上的张量 $\mathbf{A}_{sudlr}^{[\mathbf{r}]}$  ( $\mathbf{B}_{sudlr}^{[\mathbf{r}]}$ )共同组成在一起就是一个张量网络 $\mathcal{P}$ .其中张量 $\mathbf{A}_{sudlr}^{[\mathbf{r}]}$  ( $\mathbf{B}_{sudlr}^{[\mathbf{r}]}$ )中的元素是由一些复数组成的,并且这个张量是由四个内部键指标 $u, d, l$ 和 $r$ 与一个物理指标 $s$ 共同来表示的.这里,

四个内部键指标 $u, d, l$ 和 $r$ 分别可以取 $D$ 个值,即 $D$ 是表示用来联系最近邻格点的张量与张量之间的内部键的维数;而物理指标 $s$ 取 $q$ 个值,即 $q$ 是表示物理指标的维数.所以在 $M$ 个格点组成的有限二维格子中,一个PEPS表示包含着 $O(MD^4q)$ 个参数.

在一个无限的二维正方格子系统中,为了研究方便,一般假设波函数 $|\Psi\rangle$ 与哈密顿量 $H$ 具有某些平移不变性,这里以平移两个格点保持不变为例,可以采用两个五指标张量 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 来表示无限二维正方格子系统的波函数 $|\Psi\rangle$ .其中,这两个五指标张量 $\mathbf{A}_{sudlr}^{[\mathbf{r}]}$ 和 $\mathbf{B}_{sudlr}^{[\mathbf{r}]}$ 表示局域的系统上的每个格点,如图1(a)所示.而整个系统的波函数的张量网络表示如图1(b)所示,考虑了在水平和竖直两个方向上分别平移两个格点不变.而两个五指标张量 $\mathbf{A}_{sudlr}^{[\mathbf{r}]}$ 和 $\mathbf{B}_{sudlr}^{[\mathbf{r}]}$ 分别与它们自身的复共轭 $(\mathbf{A}_{s'u'd'l'r'})^{*}$ 和 $(\mathbf{B}_{s'u'd'l'r'})^{*}$ 相对应的内部键指标进行捏合、物理指标 $s$ 进行求和而得到两个双张量 $\mathbf{a}_{\bar{u}\bar{d}\bar{l}\bar{r}}$ 和 $\mathbf{b}_{\bar{u}\bar{d}\bar{l}\bar{r}}$ ,如图1(c)所示,其中双张量的内部键指标 $\bar{l} \equiv (l, l')$ ,  $\bar{r} \equiv (r, r')$ ,  $\bar{u} \equiv (u, u')$ 和 $\bar{d} \equiv (d, d')$ .在得到双张量 $\mathbf{a}_{\bar{u}\bar{d}\bar{l}\bar{r}}$ 和 $\mathbf{b}_{\bar{u}\bar{d}\bar{l}\bar{r}}$ 之后,那么就得到无限二维正方格子系统波函数的norm的张量网络表示,见图1(d).

对于一个哈密顿量为 $H$ 的无限二维正方格子系统,PEPS算法就能够通过虚时间演化找到这个系统的基态波函数.现在任意给定一个态作为初态 $|\Psi_0\rangle$ ,那么通过虚时间 $\tau$ 演化后得到的态为 $|\Psi_\tau\rangle = e^{-H\tau}|\Psi_0\rangle / \|e^{-H\tau}|\Psi_0\rangle\|$ .只要初态 $|\Psi_0\rangle$ 不是正交的基态,经过无穷大的虚时间 $\tau$ 演化,就能得到系统基态波函数.

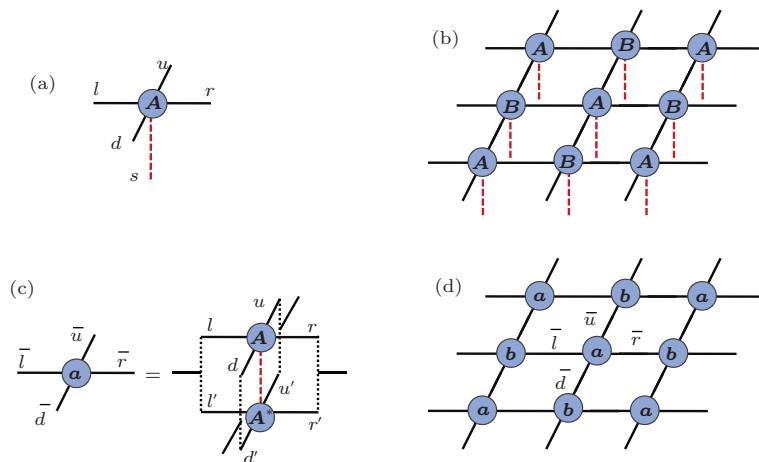


图1 无限二维正方格子系统波函数的张量网络表示

对于演化算符  $e^{-H\tau}$  中的虚时间  $\tau$ , 可以人为地分成  $L$  份比较小的平均时间  $\delta\tau$ , 即有  $\tau = L\delta\tau$ . 对于 PEPS 算法来说, 可以选取一个具有平移不变性的元胞来进行计算, 在元胞中可以选择水平方向的格点  $AB$  和  $BA$ , 或者垂直方向的格点  $AB$  和  $BA$ , 其相对应的系统哈密顿量可以分解成水平方向上的  $H_u$  和  $H_d$ , 垂直方向上的  $H_l$  和  $H_r$ , 即有  $H \equiv H_u + H_d + H_l + H_r$ . 因而可以定义两点门  $U\alpha \equiv e^{-\alpha\delta\tau}$ , 其中  $\delta\tau \ll 1$ . 由 Suzuki-Trotter 分解<sup>[26,27]</sup> 一阶展开知道,  $e^{-H\tau}$  分解为四个不同方向的两点门 ( $\alpha = H_u, H_d, H_l, H_r$ ) 的乘积, 即  $e^{-H\delta\tau} \approx e^{-H_u\delta\tau} \cdot e^{-H_d\delta\tau} \cdot e^{-H_l\delta\tau} \cdot e^{-H_r\delta\tau}$ , 这四个不同方向的两点门分别对应着两个水平方向和两个垂直方向的键. 因此把问题转化为怎样通过作用在四个不同键上的两点门  $U\alpha$  的虚时间演化, 来更新两个 PEPS 张量  $A$  和  $B$ . 因此, PEPS 张量网络算法的实现分为两步: 首先, 波函数如何通过吸收作用在一个 PEPS 表示上的两点门  $U\alpha$ , 来更新这两个 PEPS 张量  $A$  和  $B$ , 从而得到新的波函数  $|\Psi\rangle$ ; 其次, 对于作用在一个 PEPS 表示上的任何一个局域算符  $O$ , 可以得到这个局域算符的期望值  $\langle\Psi|O|\Psi\rangle$ , 如能量、两点关联函数、局域序参量等物理观测量. 下面详细地叙述这两步任务以及一些优

化和改进.

### 2.1 PEPS 张量的更新

当系统具有两点平移不变性的情况时, 选择一个具有代表性的基本元胞, 更新这个元胞中的通过某种键关联起来的两个格点的张量, 相当于同时更新通过这种相同的键关联起来的整个系统所有格点的张量, 这里以两点门  $U\alpha$  作用在一个水平方向  $AB$  键上的更新过程为例来说明.

以前对于 PEPS 张量的更新, 通常情况下 (见图 2) 由以下六步组成: (a) 两点门  $U\alpha$  是作用在水平方向  $AB$  键上; (b) 通过缩并  $A, B$  以及两点门  $U\alpha$  这三个张量而得到张量  $\Theta$ ; (c) 张量  $\Theta$  的结构重新改变, 成为一个  $D^3q \times D^3q$  的矩阵  $M$ ; (d) 对这个  $D^3q \times D^3q$  的矩阵  $M$  进行奇异值分解 (SVD), 得到矩阵  $U$ , 矩阵  $V$  以及奇异值矩阵  $S$ , 在  $D^3q \times D^3q$  的奇异值矩阵  $S$  里截断只保留  $D$  个最大奇异值的矩阵, 来作为更新后的奇异值矩阵, 并同时截断对矩阵  $U$  与矩阵  $V$  的维数进行截断操作; (e) 截断后的矩阵  $U$  和矩阵  $V$  分别各自吸收  $\sqrt{S}$ , 得到更新后的矩阵  $U$  和矩阵  $V$ ; (f) 把更新得到的矩阵  $U$  和矩阵  $V$  分别改变结构, 得到张量  $\tilde{A}$  和  $\tilde{B}$ , 即完成了对张量  $A$  和  $B$  的更新.

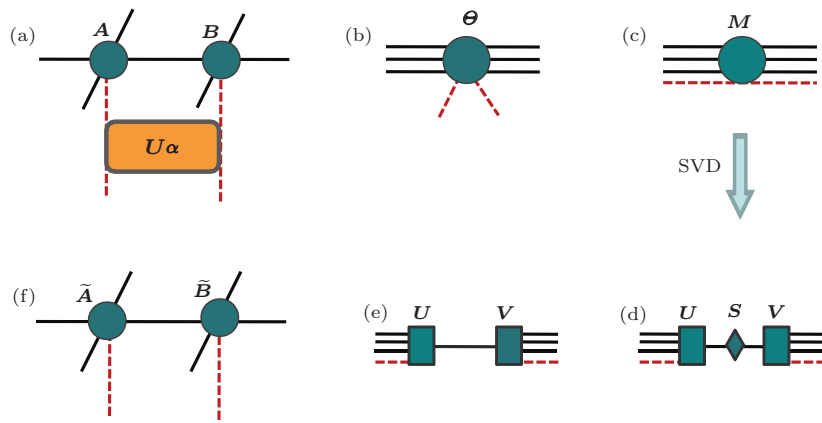


图 2 PEPS 张量  $A$  与  $B$  通过吸收一个两点门  $U\alpha$  后的更新过程

可以看出, 进行一次 SVD 的是  $D^3q \times D^3q$  的矩阵  $M$ , 当张量的有效维数  $D$  增大时, 矩阵  $M$  的维数是呈  $D$  的三次方增大的, 计算资源 (内存与计算时间) 远远不能满足需要, 在普通台式计算机上清空全部内存时只能做大约  $6000 \times 6000$  矩阵的 SVD. 因此非常有必要降低进行 SVD 的矩阵  $M$  的维数.

现在来改进和优化 PEPS 张量的更新, 如何在

不影响精度的情况下达到优化效率、节省计算资源. 同样以更新  $AB$  水平键为例, 分为两小步. 首先, 如图 3 所示, 张量  $A$  通过 SVD 成两个小张量  $\tilde{A}1$  和  $\tilde{B}2$  的过程: (a) 张量  $A$  的右键  $r$  准备更新; (b) 张量  $A$  的结构重新改变, 使张量  $A$  变成一个  $D^3 \times Dq$  的矩阵  $MA$ ; (c) 对  $D^3 \times Dq$  的矩阵  $MA$  进行 SVD, 得到矩阵  $U$ , 矩阵  $V$  以及奇异值矩阵  $S$ , 在  $Dq \times Dq$

的奇异值矩阵  $S$  里有  $Dq$  个奇异值, 作为更新的奇异值矩阵, 在这里系统维数不进行截断操作; (d) 矩阵  $U$  和矩阵  $V$  分别各自吸收  $\sqrt{S}$ , 得到新的矩阵  $U$  和矩阵  $V$ ; (e) 把更新得到的矩阵  $U$  和矩阵  $V$  分别改变结构, 而得到一个四阶张量  $\tilde{A}1$  和一个三阶张量  $\tilde{A}2$ , 即张量  $A$  通过 SVD 成张量  $\tilde{A}1$  和张量  $\tilde{A}2$ , 为吸收两点门  $U\alpha$  做好了准备. 同理, 对于张量  $B$  的左键, 通过 SVD 成一个三阶张量  $\tilde{B}2$  和一个四阶张量  $\tilde{B}1$ . 需要说明的是, 张量  $A$  和  $B$  通过 SVD 成两个张量的过程中, 没有引入任何误差.

其次, 考虑三阶张量  $\tilde{A}2$  和三阶张量  $\tilde{B}2$  通过吸收水平方向键上的两点门  $U\alpha$  后的更新过程, 见图 4: (a) 两点门  $U\alpha$  是在水平方向  $AB$  键上; (b) 通过缩并  $\tilde{A}2, \tilde{B}2$  以及两点门  $U\alpha$  这三个张量而得到张量  $\Theta$ ; (c) 张量  $\Theta$  的结构重新改变, 成为一个  $Dq \times Dq$  的矩阵  $M$ ; (d) 对  $Dq \times Dq$  的矩阵  $M$  进行 SVD, 得到矩阵  $U$ 、矩阵  $V$  以及奇异值矩阵  $S$ , 在  $Dq \times Dq$  的奇异值矩阵  $S$  里进行截断, 只保留  $D$  个最大奇异值的矩阵, 来作为更新后的奇异值矩阵, 并同时为矩阵  $U$  与矩阵  $V$  的维数进行截断操作; (e) 截断后的矩阵  $U$  和矩阵  $V$  分别各自吸收

$\sqrt{S}$ , 得到更新后的矩阵  $U$  和矩阵  $V$ ; (f) 把更新得到的矩阵  $U$  和矩阵  $V$  分别改变结构, 而得到张量  $\tilde{A}$  和  $\tilde{B}$ ; 最后分别把图 3(e) 中张量  $\tilde{A}1$  与图 4(e) 中张量  $\tilde{A}$  捏合, 图 4(e) 中张量  $\tilde{B}$  与相应的张量  $\tilde{B}1$  捏合, 即完成了对张量  $A$  和  $B$  的更新.

可以看出, 改进后最后进行一次 SVD 的是  $Dq \times Dq$  的矩阵  $M$ , 对于普通台式计算机来说, 可以大大提高奇 SVD 的矩阵  $M$  的维数. 总而言之, 当  $D$  取值较小时, 对一个  $D^3q \times D^3q$  的矩阵进行 SVD 的速度要比分别对  $D^3q \times Dq, Dq \times D^3, Dq \times Dq$  的三个矩阵进行 SVD 的速度要快, 即改进前的 PEPS 算法比改进后的 PEPS 算法有效. 但是当  $D$  取值较大时, 对一个  $D^3q \times D^3q$  的矩阵进行 SVD 时, 对内存要求非常大, 计算时间非常长, 计算资源远远不能满足需要, 在普通台式计算机上大约最多能做截断维数  $D = 4$  时的 PEPS 张量的更新. 而分别对  $D^3 \times Dq, Dq \times D^3, Dq \times Dq$  的三个矩阵进行 SVD 时, 对内存的要求只是线性增加, 计算时间的增加也不是那么明显, 在普通台式计算机上大约能做超过截断维数  $D$  为 10 的 PEPS 张量的更新, 并且计算时间还在忍受的范围之内.

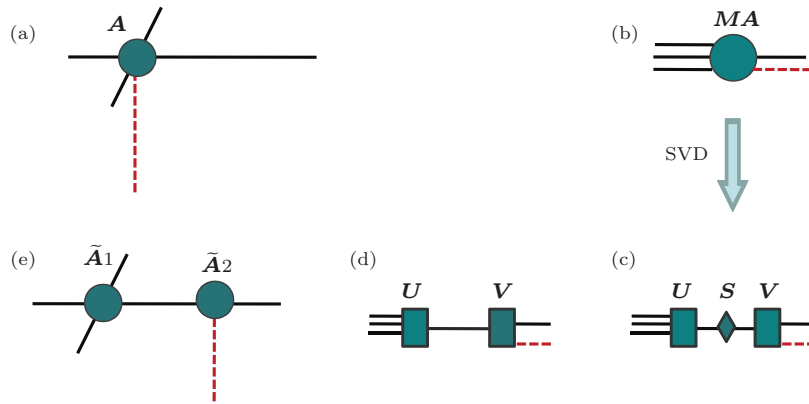


图 3 张量  $A$  通过 SVD 成两个小张量  $\tilde{A}1$  和  $\tilde{A}2$  的过程

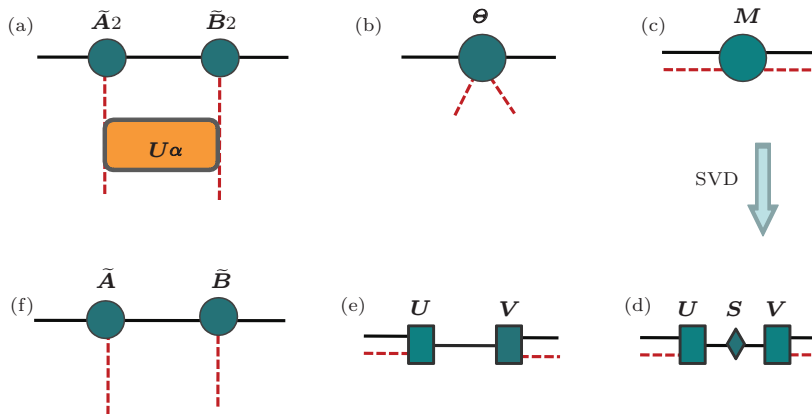


图 4 PEPS 张量  $\tilde{A}2$  和  $\tilde{B}2$  通过吸收两点门  $U\alpha$  后的更新过程



## 2.2 物理观测量的计算

PEPS与MPS算法一样,是可以从任意给定的一个初态进行虚时间演化,得到二维量子系统基态波函数,从而可以计算得到任何可能的物理观测量.

在一个无限二维正方格子系统中,以前对于物理观测量的计算是考虑一个基本元胞中的两个双张量  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$ ,即对于张量  $\mathbf{A}$  和  $\mathbf{B}$ ,与自身的复共轭  $\mathbf{A}^*$  和  $\mathbf{B}^*$ ,通过缩并它们的物理指标而得到,此时双张量内部键的维数是  $D^2$ ,见图 1(c).这样就可以得到这个PEPS张量网络的norm,见图 1(d).这个norm的基本单位元胞的选择可以是水平方向的格点  $\mathbf{AB}$  和  $\mathbf{BA}$ ,或垂直方向的格点  $\mathbf{AB}$  和  $\mathbf{BA}$ .因此,在双张量  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$  构成的一个norm中,可以有多种选择方法,而得到一个一维转移矩阵  $\mathbf{E}_1$ .一个矩阵乘积算符作用在无限二维norm上的一层,而得到这个转移矩阵  $\mathbf{E}_1$  的最大本征上矢量见图 5.同样可以得到转移矩阵  $\mathbf{E}_1$  的最大本征下矢量.其中,最大本征上矢量和最大本征下矢量分别是一个iMPS,用  $\mathbf{C}$  与  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{C}'$  与  $\mathbf{D}'$  表示,从这一上一下的两个iMPS就可以得到一个零维转移矩阵  $\mathbf{E}_0$ ,见图 6(a),而这个零维转移矩阵  $\mathbf{E}_0$  也有四种包含双张量  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$  的选择方法,即水平方向的双张量  $\mathbf{ab}$  和  $\mathbf{ba}$ ,垂直方向的双张量  $\mathbf{ab}$  和  $\mathbf{ba}$ .图 6(a)中的零维转移矩阵  $\mathbf{E}_0$  是以包含水平方向的双张量  $\mathbf{ab}$  为例来说明的.所以零维转移矩阵  $\mathbf{E}_0$  的最大本征左矢量  $\mathbf{V}_L$  和最大本征右矢量  $\mathbf{V}_R$  很容易得到,见图 6(b),矢量  $\mathbf{V}_L$  与  $\mathbf{V}_R$  以及张量  $\mathbf{C}$  与  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{C}'$  与  $\mathbf{D}'$  一起构成了环境张量.对于一个局域算符  $O$ ,通过这些环境张量,计算这个算符的期望值  $\langle \Psi | O | \Psi \rangle$ ,就可以得到相应的物理观测量.这里以局域的哈密顿量密度  $h_{AB}$  为例,如图 6(c),通过缩并哈密顿量密度  $h_{AB}$  与环境张量  $\mathbf{V}_L$ ,  $\mathbf{V}_R$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{C}'$  和  $\mathbf{D}'$ ,这样就能计算水平方向  $\mathbf{AB}$  键的基态能量.同理,选择不同的零维转移矩阵  $\mathbf{E}_0$ ,也能得到水平方向  $\mathbf{BA}$  键、垂直方向  $\mathbf{AB}$  键和垂直方向  $\mathbf{BA}$  键的基态能量,这样就能得到一个基本单位元胞的基态能量,由于系统具有平移不变性,就可以得到整个系统的基态能量.诸如局域序参量、两点关联函数等物理观测量的计算亦是如此.

现在来考虑物理观测量的计算的改进,主要

是如何节省计算资源.对于以前的norm平面上的一个基本元胞中的两个双张量  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$ ,此时我们完全没有必要缩并张量  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  与其自身的复共轭  $\mathbf{A}^*$ ,  $\mathbf{B}^*$  的物理指标,即这里norm平面是由两层张量组成的:上面一层是张量  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,下面一层是张量  $\mathbf{A}^*$ ,  $\mathbf{B}^*$ .因此,可以在这个norm中,得到由没有缩并的张量  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  与  $\mathbf{A}^*$ ,  $\mathbf{B}^*$  组成的转移矩阵  $\mathbf{E}_1$ .所以,在图 5 中,一个矩阵乘积算符通过作用在两层张量组成的二维平面的一个方向上,能得到这个转移矩阵  $\mathbf{E}_1$  的最大本征上矢量  $\mathbf{C}$  与  $\mathbf{D}$ ,很明显相对于改进前  $\mathbf{C}$  与  $\mathbf{D}$  为三维张量,这里  $\mathbf{C}$  与  $\mathbf{D}$  为四维张量.相对于以前的norm平面双张量内部键的维数  $D^2$ ,这时norm上下两层平面键之间的维数都是  $D$ ,当然此时转移矩阵  $\mathbf{E}_1$  所包含的小张量也将增大一倍,随着维数  $D$  的增大,对内存的要求将是线性增加,计算资源增加得不是那么明显,这样我们就可以计算更大的维数  $D$ .同样这里可以得到转移矩阵  $\mathbf{E}_1$  的最大本征下矢量  $\mathbf{C}'$  与  $\mathbf{D}'$ .所以,在图 6 中,现在零维转移矩阵  $\mathbf{E}_0$  是由四个四维张量  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{C}'$ ,  $\mathbf{D}'$  和四个五维张量  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{A}^*$ ,  $\mathbf{B}^*$  组成,这样就可以得到零维转移矩阵  $\mathbf{E}_0$  的最大本征左矢量  $\mathbf{V}_L$  和最大本征右矢量  $\mathbf{V}_R$ .通过矢量  $\mathbf{V}_L$  与  $\mathbf{V}_R$  以及张量  $\mathbf{C}$  与  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{C}'$  与  $\mathbf{D}'$  这些环境张量,就可以得到相应的物理观测量.

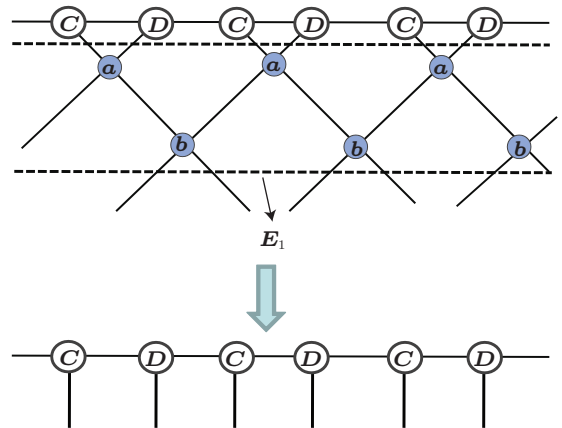


图 5 在由双张量  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$  构成的一个norm中,可以得到一个一维转移矩阵  $\mathbf{E}_1$ ,这个转移矩阵  $\mathbf{E}_1$  的最大本征上矢量是一个iMPS,用  $\mathbf{C}$  与  $\mathbf{D}$  表示

系统PEPS表示的张量在吸收四个不同的两点门后进行更新,产生了系统的波函数,为了确定此时的波函数是不是或非常接近于基态波函数,在改进以前通常是以能量作为判据的,那么就需要计算波函数的环境张量,即  $\mathbf{V}_L$ ,  $\mathbf{V}_R$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{C}'$  和  $\mathbf{D}'$ .

然而,一旦这样做,对于更新系统PEPS张量和读出系统的能量,这两项任务是相互关联的,需要多次更新环境张量  $V_L, V_R, C, D, C'$  和  $D'$ , 效率将是非常低的. 为了提高效率,我们放弃了以能量为判据,而改用由两点门  $U_a$  作用在PEPS上的变换而来的矩阵进行SVD得到的奇异值矩阵  $S$  作为判据,来判断系统的波函数是否或非常接近基态波函数. 这时,更新系统PEPS张量与读出系统的能量这两项任务是相互独立的,这就大大减少了更新环境张量的次数,计算时间减少,效率提高. 值得注意的是奇异值矩阵  $S$  作为判据时,要进行归一化处理.

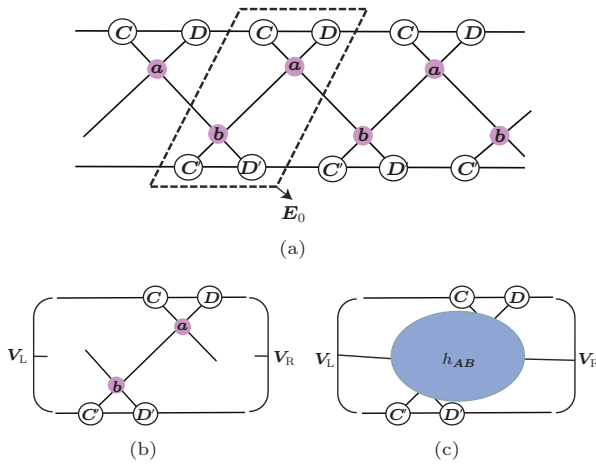


图6 以竖直  $AB$  键为例,基态能量通过缩并环境张量能够得到

### 3 数值模拟结果

现在我们应用优化和改进的PEPS算法来研究系统截断维数  $D$  较大或物理指标维数  $q$  较大时的情况. 以无限外加磁场二维正方格子量子  $q$  态 Potts 模型为例,其哈密顿量为

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \sum_{p=1}^{q-1} M_{x,p}^i M_{x,q-p}^j + h \sum_i M_z^i \right),$$

在无限大的二维正方格子平面上  $\langle i,j \rangle$  表示所有的最近邻对;  $i(j)$  是表示第  $i(j)$  个格点;  $M_\beta^i (\beta = x, z)$  是第  $i$  个格点上的  $q$  态 Potts 模型的自旋矩阵. 这里

$$M_z^i = \begin{pmatrix} q-1 & 0 \\ 0 & -I_{q-1} \end{pmatrix},$$

$$M_{x,1}^i = \begin{pmatrix} 0 & I_{q-1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

其中  $M_{x,p}^i = (M_{x,1}^i)^p$ ,  $I_{q-1}$  是  $(q-1) \times (q-1)$  的单位矩阵,  $h$  是作为系统的控制参数的外加磁场. 如果对二维正方格子平面上所有的格点同时进行  $M_{x,p}^i \rightarrow \omega^p M_{x,p}^i$  与  $M_z^i \rightarrow M_z^i$  的操作, 其中  $\omega = \exp(i2\pi/q)$ , 此时二维量子  $q$  态 Potts 模型的哈密顿量是不变的, 表明这个二维量子  $q$  态 Potts 模型的哈密顿量具有  $Z_q$  群对称不变性. 随着作为控制参数的外加磁场  $h$  的变化, 对于二维量子  $q$  态 Potts 模型来说, 当  $q = 2$  时, 毫无疑问, 此时即为 Ising 模型, 系统发生二级相变<sup>[11,19,20]</sup>; 那么当  $q \geq 3$  时, 系统发生一级相变<sup>[28,29]</sup>.

在这里应用PEPS算法对二维量子  $q$  态 Potts 模型进行数值模拟时, 其内部键指标的截断维数  $D$  的选取是  $q = 2$  时  $D = 4$ ,  $q = 3$  时  $D = 6$ ,  $q = 4$  时  $D = 8$ ,  $q = 5$  时  $D = 10$ ,  $q = 6$  时  $D = 6$ ,  $q = 7$  时  $D = 7$ . 在普通台式计算机上应用改进前的PEPS算法, 大约仅仅可以模拟二维量子 2 与 3 态 (即  $q \leq 3$ ) Potts 模型; 而应用改进后的PEPS算法可以模拟更多不同  $q$  值的二维量子  $q$  态 Potts 模型. 首先, 我们应用改进前的PEPS算法与改进后的PEPS算法分别对二维量子 2 与 3 态 (即  $q \leq 3$ ) Potts 模型进行模拟, 得到的物理观测量如能量与局域序参量的精度相差在  $10^{-14}$  以上, 这是由机器精度引起的. 这样也证明改进后的PEPS算法是有效的. 其次, 我们应用改进后的PEPS 算法通过模拟  $q = 2, 3, 4, 5, 6$  时的二维量子  $q$  态 Potts 模型的局域序参量, 研究了量子系统的量子相变和量子临界现象.

对于局域序参量来说, 可以用来区分系统的状态. 一般来说, 当系统经历量子相变<sup>[30,31]</sup> 时, 其没有发生对称性自发破缺的一相的局域序参量一般为零; 而发生了对称性自发破缺的这一相的局域序参量一般不为零. 可以看到, 对于相变点  $h_c$  来说, 二维量子  $q$  态 Potts 模型在外加磁场  $h > h_c$  的区域, 自发磁化强度  $\langle M_{x,p}^i \rangle$  为零; 而在外加磁场  $h < h_c$  的区域, 自发磁化强度  $\langle M_{x,p}^i \rangle$  不为零, 此时  $|\langle M_{x,1}^i \rangle| = |\langle M_{x,p}^i \rangle|$ , 但  $\langle M_{x,p}^i \rangle$  可能为复数. 这意味着外加磁场二维正方格子量子  $q$  态 Potts 模型存在着一个局域序参量  $S_x = \langle M_{x,p}^i \rangle$ , 来刻画在外加磁场  $h$  变化下量子  $q$  态 Potts 模型的相变. 对于二维量子  $q$  态 Potts 模型, 运用PEPS 算法数值模拟发现, 只需选取任意初态就很容易得到  $q$  个简

并的基态,从而可以得到自发磁化强度(局域序参量) $\mathbf{S}_x$ 有 $q$ 个取值,即 $\omega^q|\mathbf{S}_x|$ ,其中 $\omega = \exp(i2\pi/q)$ .图7给出了 $q$ 取不同值时的Potts模型的自发磁化强度的模 $|\mathbf{S}_x|$ ,说明了当 $q = 2$ 时,此时即为Ising模型,系统发生二级相变;当 $q \geq 3$ 时, $|\mathbf{S}_x|$ 会发生一个不连续的跳跃,这里是一个一级相变.这里PEPS算法得到对应的相变点为:  $q = 2$ 时 $h_c = 3.05$ ,  $q = 3$ 时 $h_c = 2.61$ ,  $q = 4$ 时 $h_c = 2.43$ ,  $q = 5$ 时 $h_c = 2.34$ ,  $q = 6$ 时 $h_c = 2.29$ ,对比二维量子( $q = 2$ ) Ising模型应用蒙特卡罗方法得到的量子相变点 $h_c = 3.044$ <sup>[32-34]</sup>,以及二维量子 $q$  ( $q \geq 3$ )态Potts模型应用平均场方法得到的量子相变点<sup>[28,29]</sup>,说明PEPS算法直接在绝对零度和热力学极限下得到的结果是可靠的.

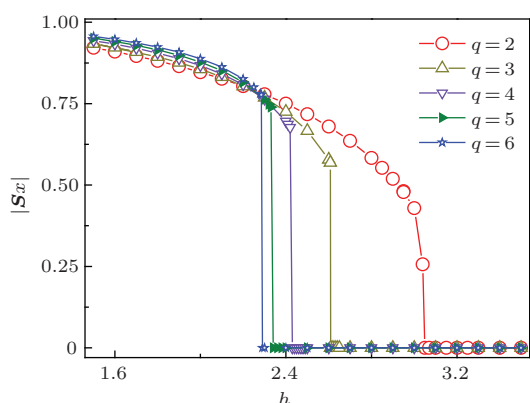


图7 二维量子 $q$ 态Potts模型中的外加磁场 $h$ 所对应的自发磁化强度的模 $|\mathbf{S}_x|$  (注意在相变点处,当 $q = 2$ 时, $|\mathbf{S}_x|$ 连续变化,是二级相变;当 $q \geq 3$ 时, $|\mathbf{S}_x|$ 发生了一个不连续的跳跃,是一级相变)

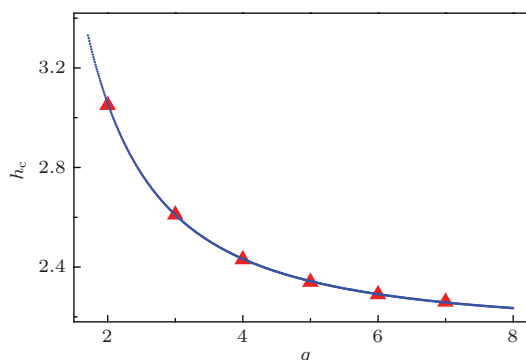


图8 外推得到当 $q$ 更大时的二维量子 $q$ 态Potts模型中的量子相变点,其量子相变点 $h_c$ 与 $q$ 的外推方程为 $h_c = a + bq^{-c}$ ,其中常数 $a = 2.143$ ,  $b = 2.854$ ,  $c = 1.653$

应用改进后的PEPS算法分别得到 $q = 2, 3, 4, 5, 6$ 时的二维量子 $q$ 态Potts模型的量子相变点,但也不能得到 $q$ 非常大时的二维量子Potts模型的

量子相变点.我们尝试通过外推得到当 $q$ 更大时的二维量子Potts模型的量子相变点,其量子相变点 $h_c$ 与 $q$ 的外推方程为 $h_c = a + bq^{-c}$ ,其中常数 $a = 2.14$ ,  $b = 2.854$ ,  $c = 1.653$ .这里对于二维量子7态Potts模型,通过 $q = 2, 3, 4, 5, 6$ 外推得到的量子相变点与应用改进后的PEPS算法得到的量子相变点基本符合,均为 $h_c = 2.26$ ,如图8这说明,本文尝试得到的外推方程可能是正确的.

## 4 结 论

张量网络算法是一系列基于张量网络结构的高效的数值模拟算法,尤其是近几年人们也一直在发展和优化,以尽可能地利用有限的计算资源,直接对热力学极限下的量子强关联系统进行最大程度的数值模拟.本文主要介绍了二维强关联电子量子自旋系统的张量网络算法——PEPS算法,并通过PEPS算法的优化和改进来提高计算资源的利用.并以二维量子 $q$ 态Potts模型为例,应用优化和改进的PEPS算法这一更有效的强大的工具来研究截断维数较大或物理指标较大时的一些量子强关联电子量子系统的量子相变和量子临界现象,获得了更高效、更优的结果.

感谢重庆大学物理学院李波副教授、史倩倩博士和赵建辉博士的讨论.

## 参考文献

- [1] Wilson K G 1975 *Rev. Mod. Phys.* **47** 773
- [2] Krishnamurthy H R, Wilkins J W, Wilson K G 1980 *Phys. Rev. B* **21** 1044
- [3] Wilson K G 1971 *Phys. Rev. B* **4** 3174
- [4] Wilson K G 1971 *Phys. Rev. B* **4** 3184
- [5] White S R 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863
- [6] White S R 1992 *Phys. Rev. B* **48** 10345
- [7] Ostlund S, Rommer S 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3537
- [8] Verstraete F, Porras D, Cirac J I 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 227205
- [9] Vidal G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 070201
- [10] Murg V, Verstraete F, Cirac J I 2007 *Phys. Rev. A* **75** 033605
- [11] Jordan J, Orús R, Vidal G, Verstraete F, Cirac J I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 250602
- [12] Vidal G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 220405
- [13] Evenbly G, Vidal G 2009 *Phys. Rev. B* **79** 144108
- [14] Zhao J H, Wang H T 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 220502 (in Chinese) [赵建辉, 王海涛 2012 物理学报 **61** 220502]

- [15] Shi Q Q, Li S H, Zhao J H, Zhou H Q 2009 arXiv:0907.5520
- [16] Li S H, Shi Q Q, Zhou H Q 2010 arXiv:1001.3343
- [17] Li S H, Shi Q Q, Su Y H, Liu J H, Dai Y W, Zhou H Q 2012 *Phys. Rev. B* **86** 064401
- [18] Li B, Li S H, Zhou H Q 2009 *Phys. Rev. E* **79** 060101(R)
- [19] Li S H, Wang H L, Shi Q Q, Zhou H Q arXiv:1105.3008
- [20] Wang H L, Shi Q Q, Li S H, Zhou H Q arXiv:1106.2129
- [21] Corboz P, White S R, Vidal G, Troyer M 2011 *Phys. Rev. B* **84** 041108(R)
- [22] Murg V, Verstraete F, Cirac J I 2009 *Phys. Rev. E* **79** 195119
- [23] Orús R, Doherty A C, Vidal G 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 077203
- [24] Bauer B, Vidal G, Troyer M 2009 *J. Stat. Mech.* **2009** P09006
- [25] Zhou H Q, Orús R, Vidal G 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 080601
- [26] Suzuki M 1990 *Phys. Lett. A* **146** 319
- [27] Suzuki M 1991 *J. Math. Phys.* **32** 400
- [28] Potts R B 1952 *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **48** 106
- [29] Wu F Y 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 235
- [30] Zhao J H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 220501 (in Chinese) [赵建辉 2012 物理学报 **61** 220501]
- [31] Wang B, Huang H L, Sun Z Y, Kou S P 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 120301
- [32] Blote H W J, Deng Y 2002 *Phys. Rev. E* **66** 066110
- [33] Crawford J D 1991 *Rev. Mod. Phys.* **63** 991
- [34] Araki J, Yano T, Ueda M, Noda M T 1975 *Proc. R. Soc. Lond. A* **345** 413

## Optimization of the projected entangled pair state algorithm for quantum systems\*

Li Sheng-Hao<sup>1)†</sup> Wu Xiao-Bing<sup>1)</sup> Huang Chong-Fu<sup>1)</sup> Wang Hong-Lei<sup>2)</sup>

1) (Chongqing Institute of Engineering, Chongqing 400037, China)

2) (Faculty of Basic Medical Science, Chongqing Medical University, Chongqing 400016, China)

( Received 11 February 2014; revised manuscript received 20 March 2014 )

### Abstract

In the numerical calculation, the projected entangled pair state (PEPS) algorithm is the most important tensor network algorithm for two-dimensional strongly correlated electron quantum lattice system. In this paper, the optimization of PEPS for two-dimensional quantum system is discussed. An optimization connection between how to update the PEPS tensor and how to calculate the physical observable is investigated, for the tensor network algorithm based on the PEPS representation, which can greatly improve the utilization of computing resources. In this case, optimized PEPS algorithm, as a powerful tool, can be used to study quantum phase transitions and quantum critical phenomena in the thermodynamic limit of the two-dimensional strongly correlated electron quantum lattice system. Of course, optimization of PEPS algorithm program has many other applications, such as adding U(1) and SO(2) symmetry in PEPS algorithm, etc.

**Keywords:** projected entangled pair state, tensor network, strongly correlated electrons, quantum phase transition

**PACS:** 05.30.Rt, 02.70.-c, 75.10.Jm

**DOI:** 10.7498/aps.63.140501

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11104362) and the Scientific and Technological Research Program of Chongqing Municipal Education Commission, China (Grant No. KJ1403203).

† Corresponding author. E-mail: shenghaoli@cqu.edu.cn