

随机序列展开量子蒙特卡洛模拟中 非对角关联函数的测量^{*}

朱文静¹⁾ 郭文安^{1)†}

(1)北京师范大学物理学系, 100875, 北京)

摘要 主要介绍了在随机序列展开方法中利用圈更新计算非对角关联函数的算法. 以一维海森堡模型和易面 XXZ 模型为例, 计算了 XY 面上自旋关联函数和反铁磁磁化强度的模方, 通过与密度矩阵重整化群方法计算结果作对比, 验证了算法的正确性.

关键词 量子强关联; 随机序列展开; 非对角关联函数

中图分类号 O414.21

DOI: 10.12202/j.0476-0301.2021061

0 引言

随机序列展开 (stochastic series expansion, SSE)^[1] 方法是一种无偏差量子蒙特卡洛方法 (Monte Carlo method, MCM). 该方法通过对无符号问题量子模型的配分函数作泰勒展开, 再进行重要性抽样来解决相互作用多体系统的指数墙问题, 是模拟二维以上强关联量子自旋系统的最高效方法, 还普遍应用于相互作用玻色系统的模拟.

对于有些模型, 如易面 XXZ 模型, 非对角关联函数更能体现其物理性质. 利用非对角关联函数还可以得到更多非对角物理量. SSE 方法可以进行相关计算^[1-4], 但是在已有的研究中, 很少有对具体算法的描述. 为填补这一空白, 并为后来的研究者提供方便, 本研究将详细介绍在 SSE 方法框架下, 采用圈更新算法来计算非对角关联函数的原理和具体算法.

1 随机序列展开量子 MCM 简介

MCM 是一种根据模型服从玻尔兹曼分布、对位型抽样计算热力学量的数值方法.

对于经典模型, 如 Ising 模型, 系统热力学量可由下式计算得到^[2]:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\Gamma} A(\Gamma) e^{-\beta E(\Gamma)}, \quad (1)$$

式中:

$$Z = \sum_{\Gamma} e^{-\beta E(\Gamma)} = \sum_{\Gamma} W(\Gamma) \quad (2)$$

是配分函数; $\Gamma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ 表示模型的自旋位型, $\sigma_i = \pm 1$ 为经典自旋的取值, N 是自旋总数; $E(\Gamma)$ 为位型对应的能量; β 是温度的倒数, 即 $1/T$; $W(\Gamma) = e^{-\beta E(\Gamma)}$ 是位型的权重; $A(\Gamma)$ 是力学量在位型 Γ 的取值, 也称估值.

MCM 通过构造 Markov 随机过程, 实现以概率 $P(\Gamma) = e^{-\beta E(\Gamma)} / Z$ 对位型进行抽样, 随机过程产生大量位型 (设为 M), 称为样本. 计算样本的简单平均

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_i A(\Gamma_i) = \frac{1}{M} \sum_{\Gamma} A(\Gamma) N(\Gamma), \quad (3)$$

式中: $A(\Gamma_i)$ 是第 i 个位型的估值; $N(\Gamma)/M$ 是某个位型 Γ 出现的频率, 在样本数 M 趋于无穷时, $N(\Gamma)/M$ 逼近于 $P(\Gamma)$, 从而使得 $\bar{A}$ 逼近于 $\langle A \rangle$.

对于量子模型, 热力学量 A 的期望值计算公式为

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(A e^{-\beta \hat{H}}), \quad (4)$$

式中配分函数

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}},$$

需要对 $e^{-\beta \hat{H}}$ 求迹. 对 $\hat{H}$ 直接对角化, 计算会遇到指数墙问题, 导致 $\hat{H}$ 的本征谱不易获得, 因此无法直接将式 (4) 的计算转化为式 (1) 进行 MC 模拟.

^{*} 国家自然科学基金资助项目 (11775021, 11734002)

[†] 通信作者: 郭文安 (1968—), 男, 博士, 二级教授. 研究方向: 量子相变. E-mail: waguoguo@bnu.edu.cn

收稿日期: 2021-03-16

随机序列展开^[1]方法基于级数展开的方式,将配分函数转化为经典的统计问题,在此基础上进行 MC 模拟,解决指数墙问题.这里以 $S = 1/2$ 一维海森堡模型为例加以说明.

改写配分函数

$$Z = \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta \hat{H}} | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | \hat{H}^n | \alpha \rangle = \sum_{\{\alpha\}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha_0 | \hat{H} | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | \hat{H} | \alpha_2 \rangle \cdots \langle \alpha_{n-1} | \hat{H} | \alpha_0 \rangle, \quad (5)$$

式中 $|\alpha\rangle = |S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle$ 表示以 S^z 表象的一套完备基, N 为系统自旋总数.

系统的能量期望值为

$$\langle H \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | \hat{H}^{n+1} | \alpha \rangle / Z = -\frac{\langle n \rangle}{\beta}, \quad (6)$$

即能量期望正比于算符序列长度的期望,而序列长度期望为

$$\langle n \rangle = -\beta \langle H \rangle \propto \beta N. \quad (7)$$

同理,系统热容为

$$C = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 - \langle n \rangle. \quad (8)$$

由于热容有限,故有

$$(\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2)^{1/2} \propto \langle n \rangle^{1/2}.$$

从而序列长度分布宽度正比于 $\langle n \rangle^{1/2}$,与算符序列长度相比趋于 0. 因此,在算法实际模拟过程中,可以给定一个足够大的截断长度 L ,使选取的 $n \leq L$,同时保证数值模拟没有系统偏差.

通常将 β 前的负号吸收到哈密顿量,再将其写为棒算符求和的形式

$$-H = \sum_{a,b} H_{a,b}, \quad (9)$$

式中: $a = 1$ 表示对角算符, $a = 2$ 表示非对角算符; $b = 1, 2, \dots, N_b$, 表示棒算符的位置. 再引入 $H_{0,0}$ 表示单位算符. 设 i, j 为棒 b 连接的 2 个自旋格点, $H_{a,b}$ 作用在自旋 S_i^z, S_j^z 后的态为 S_i^z, S_j^z . 把 $S_i^z, S_j^z, S_i^z, S_j^z$ 构成的位型称为顶角位型,即自旋对应位型的顶角. 将其 4 个自旋用 (τ, ν) 标记: τ 是棒在算符序列中的位置,通常称为虚时; $\nu = 1, 2, 3, 4$, 表示顶角的 4 个位置,如图 1 所示.

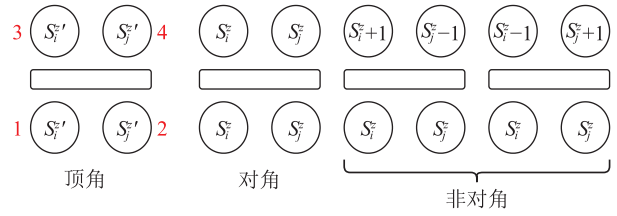


图 1 顶角位型示意

在给定截断长度的情况下,需要在原有序列中随机插入 $L-n$ 个单位算符 $H_{0,0}$, 配分函数重写为

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} \sum_S \frac{\beta^n (L-n)!}{L!} \langle \alpha_0 | H_{a_0, b_0} | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H_{a_1, b_1} | \alpha_2 \rangle \cdots \langle \alpha_{L-1} | H_{a_{L-1}, b_{L-1}} | \alpha_0 \rangle = \sum_{\alpha_0} \sum_S W(\alpha_0, S), \quad (10)$$

式中: $S = [a_0, b_0], [a_1, b_1], \dots, [a_{L-1}, b_{L-1}]$, 为长度为 L 的算符序列. 对于对角算符 $H_{1,b}$, 总可以加入一个常数,使得 $\langle S_i^z, S_j^z | H_{1,b} | S_i^z, S_j^z \rangle \geq 0$, 式中 i, j 为棒 b 连接的 2 个格点. 由于虚时方向周期性边界条件的限定,在无阻挫情况下,非对角算符成对出现,因此 $W(\alpha_0, S) \geq 0$, 即没有符号问题. 态矢 $\alpha_i, i = 1, \dots, L-1$, 由 α_0 和算符序列决定,即可以定义位型 $\Gamma = (\alpha_0, S)$. 这样,问题转化为一个类似式(2)的经典模型模拟.

通过对算符序列 S 和态矢 α 的更新,可以得到概率 $P(\alpha_0, S) = \frac{W(\alpha_0, S)}{Z}$ 分布下的位型. SSE 方法包含了对角和非对角更新 2 部分. 图 2 是一个一维 8 格点自旋 $1/2$ 一维海森堡模型的 SSE 位型更新示意.

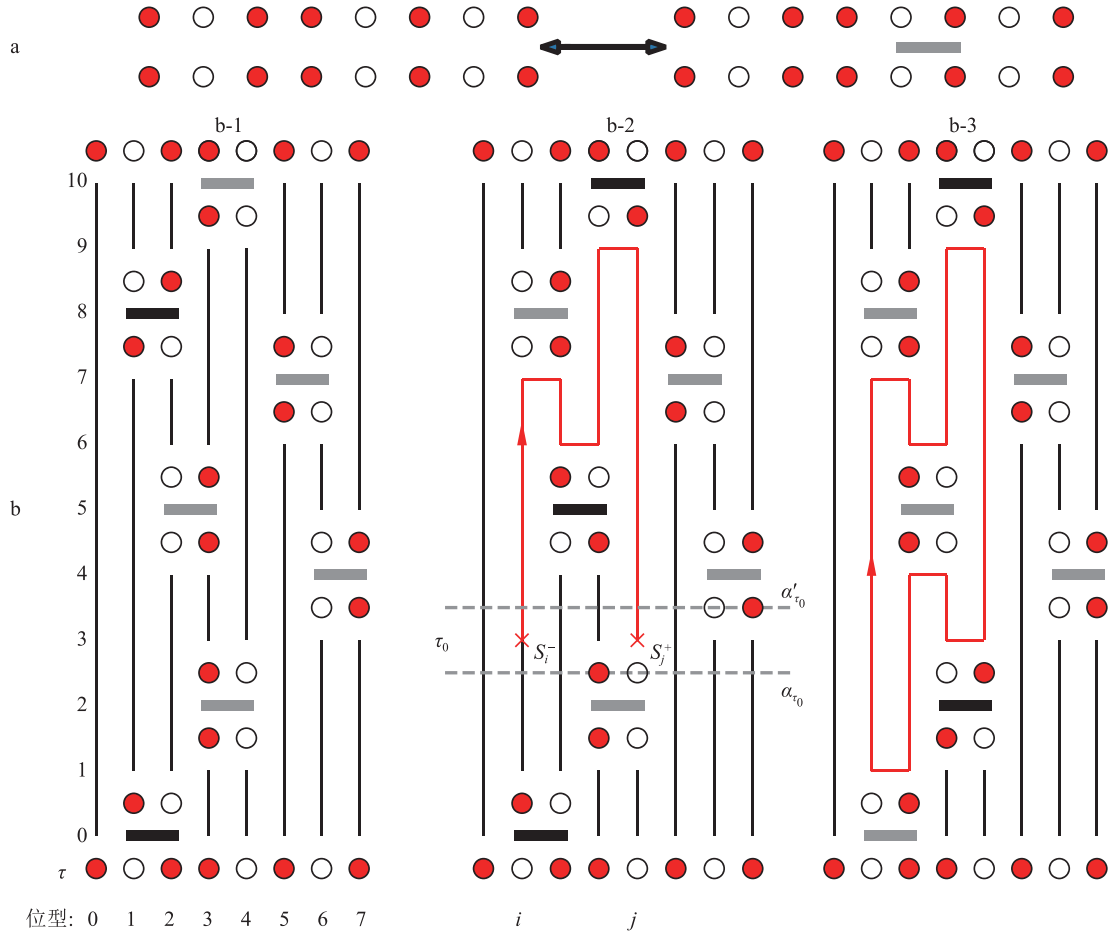
对角更新以一定的概率转化对角和单位算符,如图 2-a 所示. 根据式(10),利用 Metropolis 等^[5]算法,计算出单位和对角算符的接收概率

$$P_A([0,0] \rightarrow [1,b]) = \min \left(1, \frac{\beta N_b \langle S_{i(b)}^z, S_{j(b)}^z | H_{1,b} | S_{i(b)}^z, S_{j(b)}^z \rangle}{L-n} \right), \quad (11)$$

$$P_A([1,b] \rightarrow [0,0]) = \min \left(1, \frac{L-n+1}{\beta N_b \langle S_{i(b)}^z, S_{j(b)}^z | H_{1,b} | S_{i(b)}^z, S_{j(b)}^z \rangle} \right). \quad (12)$$

利用式(11)和(12),可以依次对算符序列中的单位和角算符进行更新. 这一过程可保证非单位算符的数量按式(10)实现平衡.

非对角更新是对角和非对角算符之间的转化,通常利用高效圈更新算法实现. 圈更新算法首先需要构造“圈”:通过在相邻顶角间“行走”,将一部分顶角连接成一个集团,称为一个圈. 这一过程可以是确定性的,比如对 $S=1/2$ 海森堡一类模型的模拟;也可能



注: 红圈表示自旋向上态, 白圈表示自旋向下态; 灰色棒表示对角棒, 黑色棒表示非对角棒; a 为对角更新, b 为圈更新过程 (非对角更新): b-1 表示对角更新后的位型; b-2 表示选择 $\tau_0=3$ 时, 以格点 i 作为圈头进行圈更新, 当圈头更新到 τ_0 时记录 $S_i^- S_j^+$ 的值; b-3 继续更新直到圈头回到初始位置, 形成闭合的圈, 记为一次圈更新。

图 2 尺寸 $N=8$ 的一维海森堡模型对角和非对角更新示意

是随机性的, 需要采用有向圈算法^[3]进行更新, 比如对 $S=1/2$ 的 XXZ 模型, 以及相互作用玻色系统 (等价于大自旋模型) 的模拟. 后续步骤是将被圈连接的顶角状态更新, 使得相关棒算符得以更新. 这一步骤有 2 种不同的方式: 对确定性圈构造过程, 可以将所有的圈逐一找到, 并以 1/2 概率进行“翻转”, 这类似于 Swendsen-Wang 集团方法^[6]; 对于有向圈方式, 通常是任意构造一个圈, 并 100% 进行“翻转”, 这可以理解为类 Wolff 集团方法^[7]. 这里“翻转”是针对 $S=1/2$ 而言, 对玻色系统就是产生湮灭操作. 本研究考虑后一种更新算法.

图 2-b-1 表示了一个 SSE 位型状态. 随机选取算符序列的一个顶角作为圈头 (τ_0, ν_0) , 记为初始时刻 τ_0 , 对应格点位置为 i . 对圈头经过位置的自旋进行“翻转”, 利用细致平衡条件, 圈头 (τ, ν) 以一定的概率 (对于有向圈算法) 或者确定性地从某个顶角 (τ, ν) 走出, 再通过 link (图中实线) 进入另一个顶角, 直到

圈头回到 (τ_0, ν_0) 位置, 完成一次圈更新. 图 2-b-2 表示了圈头回到最初随机选择的圈头位置, 算符序列完成一次非对角更新. 这一过程保证对角算符和非对角算符达到细致平衡.

2 非对角关联函数的测量方法

对于仅包含对角算符的物理量 $\hat{A}_{\text{diag}}$, 由于 $\hat{A}_{\text{diag}}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$, 其观测值可以直接根据抽样位型得到, 利用式(3), 可以计算其期望值. 但是对于包含非对角算符的物理量 $\hat{A}_{\text{off}}$, $\hat{A}_{\text{off}}|\alpha\rangle = a_{\alpha,\beta}|\beta\rangle$, 其估值并不能由 (α_0, S) 直接计算, 因此计算式(3)并不适用. 本研究重点介绍的非对角关联函数 (也称为等时格林函数^[4]) 的计算就属于这种情况.

等时格林函数定义为

$$G(i, j) \equiv \frac{1}{2} (\langle S_i^+ S_j^- \rangle + \langle S_i^- S_j^+ \rangle). \quad (13)$$

根据定义, 对式(13)作 SSE 展开, 得到

$$\begin{aligned} \langle S_i^+ S_j^- \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{\alpha, \alpha'_0\}} \sum_{S'} \frac{\beta^n (L-n)!}{L!} \langle \alpha_0 | H_{a_0, b_0} | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H_{a_1, b_1} | \alpha_2 \rangle \cdots \\ &\quad \langle \alpha_{n-1} | H_{a_{n-1}, b_{n-1}} | \alpha'_0 \rangle \langle \alpha'_0 | S_i^+ S_j^- | \alpha_0 \rangle = \\ &= \frac{Z'}{Z} \sum_{\alpha_0, \alpha'_0} \sum_{S'} \frac{W'(\alpha, \alpha'_0, S') \langle \alpha'_0 | S_i^+ S_j^- | \alpha_0 \rangle}{Z'}. \end{aligned} \quad (14)$$

式中

$$\begin{aligned} W'(\alpha_0, \alpha'_0, S') &= \frac{\beta^n (L-n)!}{L!} \langle \alpha_0 | H_{a_0, b_0} | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H_{a_1, b_1} | \alpha_2 \rangle \cdots \\ &\quad \langle \alpha_{L-1} | H_{a_{L-1}, b_{L-1}} | \alpha'_0 \rangle, \\ Z' &= \sum_{(\alpha, \alpha'_0, S')} W'(\alpha, \alpha'_0, S'). \end{aligned}$$

在这一表达式中引入了一个新的算符序列 S' , 将初态 $\langle \alpha_0 |$ 与末态 $|\alpha'_0\rangle = S_i^+ S_j^- |\alpha_0\rangle$ 连接起来. 将此类位型记为 $\Gamma' \equiv (\alpha_0, \alpha'_0, S')$. 该位型不满足虚时方向的周期性条件, 称其属于扩展的位型空间, 其权重为 $W'(\alpha, \alpha'_0, S') = W'(\Gamma')$. 同样, 格林函数的另一部分 $\langle S_i^- S_j^+ \rangle$ 也可以表示成类似的形式.

由推导可知, 在位型进行圈更新的时候, 实际上也可以产生 Γ' 类型的位型: 假设在 τ_0 时刻, 顶角 v_0 (对应格点 i) 放入携带上升算符的圈头, 当圈头每次回到出发的时刻 τ_0 , 就得到一个位型 Γ' , 使得 $|\alpha'_0\rangle = S_i^+ S_j^- |\alpha_0\rangle$, 如图 3 所示.

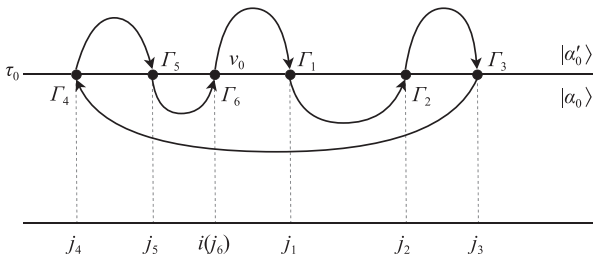


图 3 扩展位型的生成

随着圈头多次穿过 τ_0 , 经过格点 j_1 、 j_2 、 j_3 、 j_4 、 j_5 , 依次得到了扩展位型 Γ_1 、 Γ_2 、 Γ_3 、 Γ_4 、 Γ_5 , 分别对应不同的 $|\alpha'_0\rangle = S_i^+ S_j^- |\alpha_0\rangle$. 最后圈头回到出发顶角 v_0 , 得

$$E_{i,j}(\tilde{\Gamma}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{(S_i^z + 1)(S_i - S_i^z)} \sqrt{(S_j - S_j^z + 1)(S_j + S_j^z)}, & j = j', c|\alpha'_0\rangle = S_i^+ S_j^- |\alpha_0\rangle, \\ \frac{1}{2} \sqrt{(S_i - S_i^z + 1)(S_i + S_i^z)} \sqrt{(S_j + S_j^z + 1)(S_j - S_j^z)}, & j = j', c|\alpha'_0\rangle = S_i^- S_j^+ |\alpha_0\rangle, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases}$$

式中 S_i^z 和 S_j^z 分别是 $|\alpha_0\rangle$ 中 i 、 j 点 S^z 的取值. 注意: 只有当 $\tilde{\Gamma}$ 是扩展位型并且圈头连接 i 和 j 点时, 才对指定的格林函数有贡献. 而 Z/Ξ 可以理解为一个期望

$$\langle Z \rangle_{\Xi} = \frac{Z}{\Xi} = \frac{\sum_{\tilde{\Gamma}} W(\tilde{\Gamma}) E_i(\tilde{\Gamma})}{\Xi}, \quad (18)$$

式中: 如果圈头回到出发点 i , 即 $\tilde{\Gamma}$ 回到原来位型空间, $E_i(\tilde{\Gamma}) = 1$; 如果产生的位型是扩展位型 $E_i(\tilde{\Gamma}) = 0$,

到位型 Γ_0 , 是配分函数里允许的位型.

为了更好地描述计算格林函数的 MC 算法, 定义与从 i 出发的圈演化相关的 2 个位型空间: 配分函数中出现的位型 $\Gamma = (\alpha_0, \alpha_0, S)$ 构成一个空间, 称原位型空间 Ω ; 然后再定义扩展的位型空间 Ω_E , 该空间由配分函数中出现的位型 $\Gamma = (\alpha_0, \alpha_0, S)$ 与关联函数计算公式中出现的位型 $\Gamma' = (\alpha_0, \alpha'_0, S')$ (扩展位型) 一起组成. 这里 $|\alpha'_0\rangle = S_i^+ S_j^- |\alpha_0\rangle$, 或者是 $|\alpha'_0\rangle = S_i^- S_j^+ |\alpha_0\rangle$, 其中: i 是式 (14) 中指定的 i ; j 是晶格上任意一个格点, 不一定等于 j , 其权重 $W'(\Gamma')$ 由式 (14) 决定. 这一权重及位型的函数关系与配分函数中 $W(\Gamma)$ 及位型 Γ 的关系是一样的 (式 (10)).

再定义一个扩展位型空间 Ω_E 上的巨配分函数

$$\Xi = \sum_{\tilde{\Gamma}} W'(\tilde{\Gamma}), \quad (15)$$

式中 $\tilde{\Gamma} \in \Omega_E$. 从 i 格点出发的圈更新, 可以保证按 $W'(\tilde{\Gamma})/\Xi$ 的频率产生位型 $\tilde{\Gamma}$. 把等时关联函数的定义式 (13) 改写为

$$\begin{aligned} G(i, j) &= \frac{1}{2} (\langle S_i^+ S_j^- \rangle + \langle S_i^- S_j^+ \rangle) = \\ &= \frac{\sum_{\tilde{\Gamma}} W(\tilde{\Gamma}) E_{i,j}(\tilde{\Gamma})}{\Xi} \frac{\Xi}{Z}. \end{aligned} \quad (16)$$

由于 $W'(\tilde{\Gamma})/\Xi$ 是位型 $\tilde{\Gamma}$ 出现的概率

$$\frac{\sum_{\tilde{\Gamma}} W(\tilde{\Gamma}) E_{i,j}(\tilde{\Gamma})}{\Xi},$$

可理解为

$$\left\langle \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right\rangle_{\Xi}, \quad (17)$$

即 $\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$ 在系综 Ξ 的统计平均, $E_{i,j}(\tilde{\Gamma})$ 是其估值, 可以由扩展位型确定, 类似于对角算符

这样格林函数 $G(i, j)$ 可以理解为巨正则系综里 $\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$ 的期望值与 $\langle Z \rangle_{\Xi}$ 的比.

在圈更新中, 携带上升 (下降) 算符的圈头从格点 i 对应顶角出发, 每次回到出发时刻得到的位型, 就是巨配分函数中扩展位型空间中的位型. 或者说, 扩展位型空间里任意 1 个位型可以通过圈更新的中间过程得到, 其产生概率 (等于其在 Markov 过程中出现的

频率)等于 $W(\tilde{r})/\mathcal{E}$, 如图3所示. 每次圈头回到 τ_0 时, 都会产生一个新的位型, 包括扩展位型 Γ_1 、 Γ_2 、 Γ_3 、 Γ_4 、 $\Gamma_5 \in \Omega_E$, 以及最终的位型 Γ_6 , 属于原位型空间 Ω .

假设在这一过程中共产生了 M_i 个位型, 其中 N_i 是原配分函数中的位型 Γ , 当圈头回到 i 后生成; 其余位型为扩展位型, 在圈头从某个 j' 点穿过 τ_0 时产生. 可以从中得到指定 i 和 j 的 $\frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$ 的统计平均

$$\frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) = \frac{\sum_t E_{i,j}(\tilde{r}_t)}{M_i} \frac{M_i}{\sum_t E_i(\tilde{r}_t)} = \frac{\sum_t E_{i,j}(\tilde{r}_t)}{N_i},$$

式中: t 表示位型产生的“时间”或 MC 位型序列的序号; N_i 是圈头回到出发点的位型数; 当 $M_i \rightarrow \infty$, 该平均值趋于 $G(i, j) = \frac{1}{2}(\langle S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \rangle)$.

值得注意的是, 在计算过程中不会得到 $S_i^- S_j^-$ 或 $S_i^+ S_j^+$ 这样的算符形式. 假设在 τ_0 时圈头从格点 i 出发, 沿虚时方向携带上升的算符进行圈更新. 格点 i 的作用算符形式为 S_i^+ . 那么, 当圈头在格点 j 穿过 τ_0 时, 作用在格点 j 上、将 $|\alpha_0\rangle$ 态变为 $|\alpha'_0\rangle$ 态的算符形式始终为 S_j^- .

记 S_i^z 、 S_j^z 为圈头穿过 τ_0 时, $|\alpha_0\rangle$ 、 $|\alpha'_0\rangle$ 前后 2 个状态在格点 i 的 S^z 表象下的自旋态. 因为已经假设圈头携带上升算符, 因此 $S_i^z = S_i^z + 1$ 在格点 i 上表示为 S_i^+ . 在更新过程中, 如果圈头在格点 j 沿虚时方向穿过 τ_0 时, 其携带的上升算符已经作用在 $|\alpha_0\rangle$ 中的 S_j^z 自旋态上了, 更新为 $S_j^z + 1$ 态. 穿过 τ_0 时, 由于圈头还没有访问 S_j^z 自旋态, 而 S_j^z 正是 $|\alpha_0\rangle$ 中所携带的上升算符作用之前的态 S_j^z . 因此 $|\alpha_0\rangle$ 在格点 j 转变为 $|\alpha'_0\rangle$ 的过程, 可以被看作是将 $|\alpha_0\rangle$ 中格点 j 上的 $S_j^z + 1$ 态经过 S_j^- 作用, 变为 $|\alpha'_0\rangle$ 中格点 j 上的 S_j^z . 如果圈头在格点 j 沿虚时反方向穿过 τ_0 , 根据顶角位型更新性质, 圈头方向改变会导致携带的算符变号, 前圈头携带下降算符. 在穿过 τ_0 之前, 已经访问了 $|\alpha'_0\rangle$ 中的 S_j^z 态, 并更新为 $S_j^z - 1$ 态. 而 $|\alpha_0\rangle$ 保持圈头访问 $|\alpha'_0\rangle$ 前格点 j 的自旋态 S_j^z , 因此, $|\alpha_0\rangle$ 在格点 j 转变为 $|\alpha'_0\rangle$ 的过程为 $S_j^z - 1$, 依旧是 S_j^- 算符的作用效果. 同理, 对于圈头携带下降算符, 或是沿虚时反方向, 其结果是格点 i 、 j 中一个用上升算符作用, 另一个用下降算符作用.

算法 1 计算等时格林函数 $G(i, j) = \frac{1}{2}\langle S_i^+ S_j^- + \text{h.c.} \rangle$

- 1) 定义 $S_i^z(\tau)$ 为格点在虚时 τ 的自旋 S_i^z 状态, $S_i^z(\tau')$ 为圈更新后的状态.
- 2) 初始化: 数组 count(N, N), total(N).
- 3) do step = 1, MCsteps
- 4) 对角更新

5) do loop = 1, Numloops (一步非对角更新包含的圈数)

6) 随机选择圈头 i, τ_0

7) total(i) += 1

8) $j = -1, \tau_0 = -1$

9) While $j \neq i$ and $\tau \neq \tau_0$:

10) 进行圈更新, 记录当前圈头状态 j, τ

11) if $\tau = \tau_0$ then

12) count(i, j) += $\frac{\sqrt{S(S+1) - S_i^z(\tau) S_i^z(\tau')}}{\sqrt{S(S+1) - S_j^z(\tau) S_j^z(\tau')}} \times$

13) endif

14) end loop

15) end step

16) $G(i, j) = \text{count}(i, j) / \text{total}(i) / 2$

以下详细说明格林函数在程序中的实现过程.

算法 1 描述了等时格林函数程序计算的伪代码形式. 设 $S_i^z(\tau)$ 为在格点 i 上 τ 时的自旋状态. 为了计算 $\frac{1}{2}\langle S_i^+ S_j^- + \text{h.c.} \rangle$, 需要统计圈更新过程中初始圈头访问 i 格点的次数和圈头在 τ_0 时经过 j 格点时 $\langle \alpha_\tau | S_i^+ S_j^- + \text{h.c.} | \alpha'_\tau \rangle$ 的权值. 用 $T(i)$ 记录初始圈头访问 i 格点的次数, $T_c(i, j)$ 记录 $S_i^+ S_j^- + \text{h.c.}$ 对应的累计权值. $T_c(i, j) / T(i) / 2$ 表示的是 $\langle S_i^+ S_j^- + \text{h.c.} \rangle / 2$ 的统计结果. 初始化数组 $T_c(N, N)$, $T(N) = 0$.

第 1 步, 随机初始化圈头. 记录该圈头的格点位置 i 和虚时位置 τ_0 , 以及格点前后状态 $S_i^z(\tau)$ 、 $S_i^z(\tau')$. 记录 i 格点累计访问次数 $T(i) += 1$.

第 2 步, 进行圈更新. 记录当前圈头状态 j 、 τ . 当 $\tau = \tau_0$ 时, 记录格点前后状态 $S_j^z(\tau)$ 、 $S_j^z(\tau')$, 更新权值

$$T_c(i, j) += \frac{\sqrt{S(S+1) - S_i^z(\tau) S_i^z(\tau')}}{\sqrt{S(S+1) - S_j^z(\tau) S_j^z(\tau')}}.$$

第 3 步, 当 $i = j$ 、 $\tau_0 = \tau$, 圈更新结束, 回到第 1 步, 执行 P_N 次 (P_N 为随机选择圈头的次数).

经过多次对角和非对角更新, 得到等时格林函数 $T_c(i, j) / (2T(i))$.

在对角更新过程中, 对序列上的算符逐一进行更新, 因此时间复杂度为 $O(L)$. 在一次圈更新过程中, 时间复杂度正比于圈的大小. 圈的大小和系统所处的态关系很大: 如果系统处于无序态, 圈的大小是常数级的; 如果系统处于临界态或有序态, 圈的大小正比于 L (系统尺寸) $\times N$ (序列长度), 因此圈更新时间复杂度最优为 $O(1)$, 最差为 $O(L \times N)$. 在实际算法实现过程中, 为了高效计算, 对 P_N 进行了动态调整, 目的是

为了对角和非对角算符之间的更新达到平衡,同时 P_N 尽量不要太大. 为了确保所有的顶角都能被访问到,圈的大小为常数级时, P_N 应正比于 $L \times N$; 反之,圈的大小正比于 $L \times N$ 时, P_N 为常数级. 整体圈更新过程的时间复杂度为 $O(L \times N)$. 由此可知,圈更新的时间复杂度远大于对角更新. 整体上, SSE 方法 1 次更新的时间复杂度为 $O(L \times N)$. 因为格林函数计算是由圈更新计算得到的,所以时间复杂度为 $O(L \times N)$. 又因为 $\beta \propto L$, 故时间复杂度又可以写为 $O(\beta \times N)$.

在进行程序计算时,需要对算符序列进行存储,空间复杂度为 $O(L)$. 研究过程中不需要对所有时刻的自旋位型进行存储,利用算符序列,可以通过前一时刻的自旋位型得到后一时刻的自旋位型. 为此,只需要保留 0 时刻的自旋位型即可,空间复杂度为 $O(N)$,总的空间复杂度为 $O(L+N)$ 或 $O(\beta+N)$.

3 计算过程

本章以一维 $S = 1/2$ 海森堡链为例,验证上章算法. 将模型的能量写为棒求和的形式:

$$H = \sum_b S_{i(b)} \cdot S_{j(b)} = - \sum_b (H_{1,b} + H_{2,b}) + \frac{N_b}{4}, \quad (19)$$

式中

$$H_{1,b} = \frac{1}{4} - S_{i(b)}^z S_{j(b)}^z, \\ H_{2,b} = -\frac{1}{2} (S_{i(b)}^+ S_{j(b)}^- + S_{i(b)}^- S_{j(b)}^+),$$

这里 $i(b)$ 、 $j(b)$ 分别表示棒连接的 2 个格点的位置, N_b 为棒的总数. 周期性边界条件时, $N_b = N$; 当边界条件开放时,自旋 S_1 和 S_N 之间不加棒, $N_b = N - 1$. 对于矩阵元 $\langle S_{i(b)}^z S_{j(b)}^z | H_{a,b} | S_{i(b)}^z S_{j(b)}^z \rangle$, 所有的非 0 结果为

$$\langle \uparrow \downarrow | H_{1,b} | \uparrow \downarrow \rangle = \frac{1}{2}, \quad (20)$$

$$\langle \downarrow \uparrow | H_{1,b} | \downarrow \uparrow \rangle = \frac{1}{2}, \quad (21)$$

$$\langle \uparrow \downarrow | H_{2,b} | \downarrow \uparrow \rangle = \frac{1}{2}, \quad (22)$$

$$\langle \downarrow \uparrow | H_{2,b} | \uparrow \downarrow \rangle = \frac{1}{2}. \quad (23)$$

其他矩阵元均为 0. 由此可知: 常数 1/4 保证了 $H_{1,b}$ 结果的正定性.

利用 SSE 方法计算具有周期性的一维海森堡链: $S = 1/2$, 并取 $\beta = N$ 和 $L = 4n_{\max}/3$; 平衡步数设为 10^6 ; 每个 MC 步后得到一个样本,以 10^5 个样本为一个 bin, 累

计取 2×10^3 个 bin, 分别计算零温极限下 XY 平面内、Z 方向上反铁磁磁化强度的模方和关联函数:

$$C^{XY}(r) = \frac{1}{2N} \sum_i \langle (S_i^x S_{i+r}^x + S_i^y S_{i+r}^y) \rangle = \\ \frac{1}{2N} \sum_i \langle S_i^+ S_{i+r}^- + S_i^- S_{i+r}^+ \rangle, \quad (24)$$

$$C^Z(r) = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle, \quad (25)$$

$$\langle (m_s^{XY})^2 \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_i (-1)^i S_i^x \right)^2 \right\rangle + \\ \frac{1}{2} \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_i (-1)^i S_i^y \right)^2 \right\rangle, \quad (26)$$

$$\langle (m_s^z)^2 \rangle = \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_i (-1)^i S_i^z \right)^2 \right\rangle. \quad (27)$$

根据模型的 SU(2) 对称性可知,理论上 Z 分量的物理量和 XY 分量的物理测量值相同.

$$C^Z(r) = C^{XY}(r), \quad (28)$$

$$\langle (m_s^{XY})^2 \rangle = \langle (m_s^z)^2 \rangle. \quad (29)$$

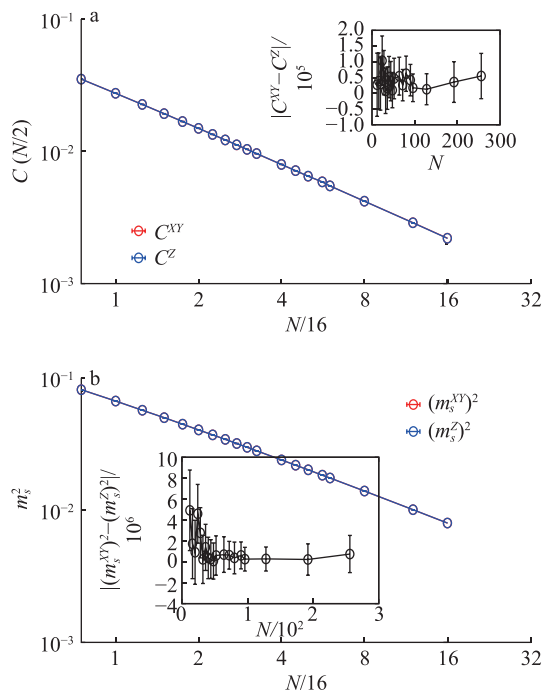
图 4-a 表示最远距离 ($N/2$, 由于周期性) 关联函数 $C(N/2)$ 随尺寸的变化; 图 4-b 表示反铁磁磁化强度模方 m_s^2 随尺寸的变化. XY 分量和 Z 分量的测量结果在不同尺寸下完全一致, 这体现了非对角关联计算的正确性. 插图表示了 2 分量结果差的绝对值, 其对应误差可根据误差传递公式计算得到. 易发现结果差的绝对值都趋于 0, 而且误差均在 2 倍的误差范围内.

为了更进一步验证非对角关联计算的正确性, 改变 Z 分量的耦合强度, 模型变为 XXZ 链, 其哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z), \quad (30)$$

式中 Δ 为各向异性参数. 在零温极限下, 如果 $\Delta > 1$, 系统处于 Ising 反铁磁序, XY 分量的物理量非常小, 因此, 只参考 $\Delta \leq 1$ 的情况. 当 $0 \leq \Delta < 1$ 时, 由于各向异性, XY 分量和 Z 分量的测量结果不再相同. 为此, 利用 DMRG 算法^[8] 计算一维 XXZ 模型, 将其结果作为基准值, 来验证非对角关联计算的正确性.

为了计算的方便性, 2 种算法都采用开放性边界条件. DMRG 算法模拟的是零温下系统的状态, 而 SSE 方法是基于有限温、无限逼近零温的一种 MC 方法. 令 $\beta = N^2$, 使得 SSE 模拟结果逼近零温. 同理, 在 SSE 方法中, 取截断长度为 $L = 4n_{\max}/3$, 平衡步数设为 10^6 , 测量步数 10^5 为一个 bin, 累计取 1×10^3 个 bin. DMRG 算法中, 取截断长度为 100, SVD 分解最小误差为 10^{-10} ,



a 最远距离关联函数; b 反铁磁磁化强度
模方随尺寸的变化.

图 4 双对数坐标

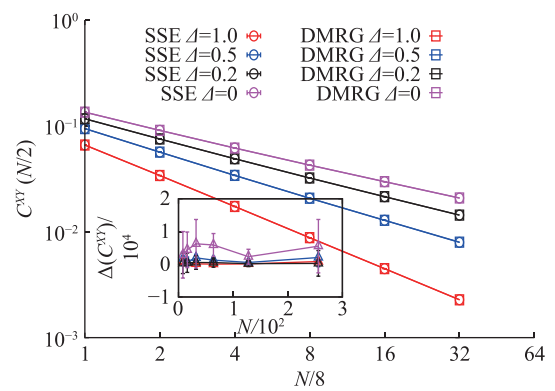
基态能扫描误差最大为 10^{-10} . 分别在 $\Delta = 0, 0.2, 0.5, 1.0$ 处取 $N = 8, 16, 32, 64, 128$, 测量 XY 分量的关联函数. 图 5 显示了 2 种算法计算得到的在不同 Δ 值的情况下, 关联函数随尺寸的变化曲线. 2 种算法计算结果得到的曲线完全重合. DMRG 无法计算系统和截断误差, 其计算结果不包含误差. 本研究默认 DMRG 计算结果即为真实结果值, 结果差的绝对值误差完全由 SSE 计算结果给定. 插图中 $\Delta(C^{xy})$ 表示 2 种方法计算 XY 分量最远距离关联函数结果差的绝对值, 不同尺寸下的结果均在 3 倍误差区间的合理范围内.

表 1 列出了 $N = 64$ 时, 2 种算法计算得到 XY 分量的关联函数值. 以 DMRG 算法计算结果作为基准值, DMRG 计算结果刚好落在 SSE 计算结果的 3 个误差棒区间范围内. 因为 SSE 模拟并非绝对零温, 所以能量在误差棒所在量级附近有细微差别, 也是可以理解的.

这里, 分别从对称性和同 DMRG 计算结果对比 2 个角度验证了非对角关联函数的计算结果.

4 结论

随机序列展开蒙特卡罗方法是一种非常高效的计算无符号问题量子模型的量子 MC 方法. 本研究详细介绍了如何在更新过程中计算非对角关联函数, 且分别利用对称性和 DMRG 计算结果作为基准值, 验证了非对角关联计算的正确性. 该方法为在 SSE 方法中计算非对角关联物理量提供了非常重要的手段^[9].



$\Delta = 0, 0.2, 0.5, 1.0$ 时的关联函数随尺寸 N 的变化;
标签 SSE 表示 SSE 方法的结果; DMRG 表示
DMRG 算法的结果(双对数坐标).

图 5 2 种算法误差的绝对值

表 1 XY 方向关联函数(尺寸 $N=64$)

Δ	SSE方法	DMRG方法
0	0.042 65(3)	0.042 709 043 152
0.2	0.032 28(1)	0.032 273 109 851
0.5	0.020 800(6)	0.020 812 314 082
1.0	0.008 8162(6)	0.008 815 704 299

5 参考文献

- [1] SANDVIK A W. Stochastic series expansion method with operator-loop update[J]. Physical Review B, 1999, 59(22): 1838
- [2] 杨展如. 量子统计物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2007: 32
- [3] SYLJUÅSEN O F, SANDVIK A W. Quantum Monte Carlo with directed loops[J]. Physical Review E, 2002, 66(4): 046701
- [4] DORNEICH A, TROYER M. Accessing the dynamics of large many-particle systems using the stochastic series expansion[J]. Physical Review E, 2001, 64(6): 066701
- [5] METROPOLIS N, ROSENBLUTH A W, ROSENBLUTH M N, et al. Equation of state calculations by fast computing machines[J]. Journal of Biochemical and Biophysical Methods, 1952, 21: 1087
- [6] SWENDSEN R, WANG J S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations[J]. Physical Review Letters, 1987, 58(2): 86
- [7] WOLFF U. Collective Monte Carlo updating for spin systems[J]. Physical Review Letters, 1989, 62(4): 361
- [8] SCHOLLWÖCK U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states[J]. Annals of Physics, 2011, 326(1): 96
- [9] ZHU W J, DING C X, ZHANG L, et al. Surface critical behavior of coupled Haldane chains[J]. Physical Review B, 2021, 103(2): 024412

Measuring off-diagonal correlation function in stochastic series expansion quantum Monte Carlo simulation

ZHU Wenjing¹⁾ GUO Wen'an^{1)†}

(1) Department of Physics, Beijing Normal University, 100875, Beijing, China)

Abstract This paper mainly introduces an algorithm for computing the off-diagonal correlation functions with directed loop update algorithm within the stochastic series expansion framework. Taking the one-dimensional Heisenberg model and the easy-plane XXZ model as examples, we calculate the spin-spin correlation function and squared staggered magnetization in the XY plane using the algorithm and validate the correction of the algorithm by comparing results with those obtained using the DMRG method.

Keywords quantum strong correlation; stochastic series expansion; off-diagonal correlation function

【责任编辑: 陆有忠】

公式不应采用多字母缩略术语书写

笔者在一篇科技论文中见到下列用缩略术语书写的公式:

“水力停留时间为

$$\text{HRT} = V_R / Q, \quad (1)$$

式中: V_R 为反应器有效容积, L; Q 为反应器进水量, L/d. 反应器有机负荷为

$$\text{OLR} = \text{COD}_{\text{in}} / \text{HRT}, \quad (2)$$

式中: COD_{in} 为进水化学需氧量浓度, g/L; HRT 为水力停留时间, d.”

其实在科技论著甚至某些标准中, 类似式(1)、(2)用缩略术语书写公式的情况十分普遍; 然而, 这些公式违反了相关标准的规定, 是错误的.

GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分: 标准化文件的结构和起草规则》指出: “公式不应使用量的名称或描述量的术语表示. 量的名称或多字母缩略术语, 不论正体或斜体, 亦不论是否含有下标, 均不应用来代替量的符号.” 例如:

“写作

$$t_i = \sqrt{S_{\text{ME},i} / S_{\text{MR},i}},$$

式中: t_i 为系统 i 的统计量; $S_{\text{ME},i}$ 为系统 i 的残差均方; $S_{\text{MR},i}$ 为系统 i 由于回归产生的均方.

而不写作

$$t_i = \sqrt{MSE_i / MSR_i},$$

式中: t_i 为系统 i 的统计量; MSE_i 为系统 i 的残差均

方; MSR_i 为系统 i 由于回归产生的均方.”

ISO 80000-1: 2009《量和单位 第1部分: 总则》也有相同的规定: “公式和方程式中的量都应使用符号, 而绝不是用量名称或缩略术语来书写.”

依据 GB/T 1.1—2020 和 ISO 80000-1: 2009, 公式和方程式都应当采用量符号书写. 式(1)、(2)中的“HRT”“OLR”“ COD_{in} ”这些可以作为量名称替代词使用的缩略术语, 无论采用正体还是斜体, 无论是否含有下标, 都不应该进入公式. 规范化的做法是按既定规则, 将它们分别改写成主符号为单个斜体字母并添加说明性下标或其他标记的量符号: “HRT”改写为“ t_{HR} ”; “OLR”改写为“ L_{OR} ”; “ COD_{in} ”改写为“ $\rho_{\text{ch}, \text{in}}(\text{O}_2)$ ”.

于是, 本文开头所列示例中的错误公式, 经过修改后的规范化表达式为:

“水力停留时间为

$$t_{\text{HR}} = V_R / Q, \quad (3)$$

式中: t_{HR} 为水力停留时间, d; V_R 为反应器有效容积, L; Q 为反应器进水量, L/d.

反应器有机负荷为

$$L_{\text{OR}} = \rho_{\text{ch}, \text{in}}(\text{O}_2) / t_{\text{HR}}, \quad (4)$$

式中: L_{OR} 为反应器有机负荷, g/(L · d); $\rho_{\text{ch}, \text{in}}(\text{O}_2)$ 为进水化学需氧量, g/L; t_{HR} 为水力停留时间, d.”

《北京师范大学学报(自然科学版)》是严格按照相关标准规定规范化地书写公式的, 恳请广大作者密切配合.

(浩元)