

张量重正化群方法及其应用*

乐宏昊 谢志远[†]

(中国人民大学物理系 北京 100872)

2017-06-08 收到

[†] email: qingtaoxie@ruc.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20170703

Tensor renormalization group method and its applications

YUE Hong-Hao XIE Zhi-Yuan[†]

(Department of physics, Renmin University of China, Beijing 100872, China)

摘要 张量重正化群方法是近年来发展起来的一种新的数值计算方法, 它将经典配分函数和量子波函数的张量网络表示与重正化群方法相结合, 在强关联系统的数值研究中, 发挥着越来越重要的作用。文章以经典统计模型和量子格点模型为例, 简要介绍了张量重正化群的一些基础知识和研究给定物理模型的一般性思路, 并对张量重正化群未来可能的发展方向 and 亟待解决的问题进行了讨论。

关键词 张量网络模型, 张量网络态, 数值重正化群

Abstract The tensor renormalization group is a new class of numerical methods developed in recent years. It combines the tensor network representations of the classical partition function and quantum wave function with the renormalization group techniques, and plays a more and more important role in the numerical study of strongly correlated systems. Taking the classical statistical models and quantum lattice models as two examples, we give a brief introduction to its basics and the general routine for studying a given physical model, and discuss possible future developments as well as the problems that need to be solved in this field.

Keywords tensor network model, tensor network state, numerical renormalization group

1 引言

强关联多体系统是凝聚态物理学中一类重要的研究对象, 一直是物理学最前沿的研究领域之一, 很多深刻的物理概念和新奇的物理现象, 比如拓扑序、解禁闭的量子临界现象、量子自旋液体、高温超导等, 都出自强关联系统。然而对这类系统的理论研究, 却是非常困难的。一方面, 由于该系统本身的非微扰属性, 基于微扰的传统量子场论方法并不适用, 而由于多体系统本征的

指数墙问题, 精确对角化等方法通常只能处理非常小的系统尺寸。另一方面, 密度矩阵重正化群 (density matrix renormalization group, DMRG)^[1]和量子蒙特卡罗方法, 是广为使用的两种强关联系统的数值处理方法, 在很多问题的研究中都取得了成功, 但都存在一定的局限性: 前者只能处理(准)一维的量子系统, 后者在处理大多数费米子系统和阻挫自旋系统时, 会遇到所谓的负符号问题而失效^[2]。因此, 发展有效而精确的数值计算方法, 就成为该领域的一大挑战。

近年来, 作为DMRG的高维推广, 相对于传统数值方法, 张量重正化群(tensor renormalization

* 中国人民大学新教师启动基金(批准号: 15XNLF17)和国家重点基础研究发展计划(批准号: 2016YFA0300503)资助项目

group)方法有以下几个特点：能够满足纠缠熵的面积定律^[3]，可以处理二维量子系统或三维经典系统，结合平移不变性，原则上不需要借助有限尺寸标度就可以直接处理热力学极限；不存在负符号问题，可以有效地处理费米子交换^[4-5]和量子阻挫^[6]；结合重正化群流的不动点分析，可以比较方便地分析临界点附近的标度行为^[7]。因此，它得到了越来越多的关注，被应用到了很多系统的研究中。

张量重正化群两个应用最为广泛的研究领域，是关于经典统计模型和量子格点自旋模型的研究。对于经典统计模型，它首先通过配分函数的张量网络表示，将统计模型转化为张量网络模型(tensor network model)，然后通过重正化群的方法求解该张量网络模型，最终得到统计模型的自由能和其他统计平均量。对于量子格点模型，它首先给出量子波函数的张量网络态(tensor network state)表示，使用该表示作为变分波函数假设，然后通过重正化群的方法求解波函数表示，最后根据波函数求解各种物理量期望值。通俗来讲，这里的重正化群变换，可以理解作为一种信息压缩，对局域自由度或者相空间的压缩。下面将以这两个应用为例，简单介绍张量重正化群方法的基础知识和研究思路。

2 张量网络模型与经典统计模型

我们以 Ising 模型为例，来引入张量网络模型的概念。如图 1 所示，统计力学教科书上关于转移矩阵的章节告诉我们，一维 Ising 模型的配分函数可以表示为转移矩阵 A 的幂次，其中 A 是玻尔兹曼因子在自旋完备集下的表示矩阵。这种配分函数的表示方法就构成了一个显式的张量网络模型，只不过这里的局域张量是一个矩阵，即玻尔兹曼因子 A 。

为了更一般地推广，可以将矩阵 A 进行分解，进而重新定义矩阵 T ，这相当于在每一条键上面引入新的自由度 $\{s\}$ 来取代初始定义在格点上的自由度 $\{\sigma\}$ ，这样就得到了一个常见的定义在

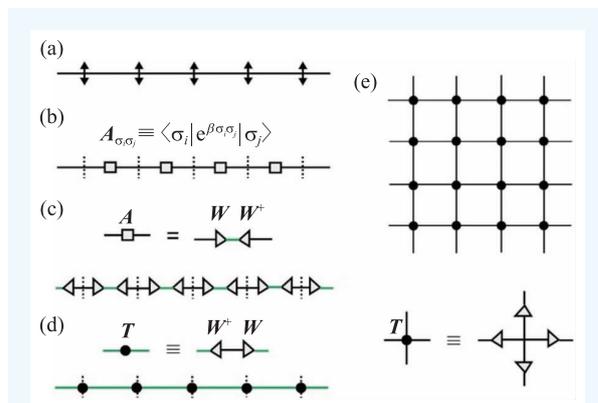


图1 张量网络模型示例 (a)一维 Ising 自旋链，其中每一个自旋都只能取 ± 1 ，用上下箭头来表示；(b)在配分函数中插入自旋完备集，则每一个玻尔兹曼因子可以表示成为 2×2 的矩阵 A ，整个配分函数就变成对矩阵 A 的一个幂次求迹。注意这里的 A 定义在键上面，用白色方框来表示。图中用黑色代表初始的自旋 $\{\sigma\}$ 指标，虚线代表格点位置；(c)将矩阵 A 进行分解，相当于引入新的键变量 $\{s\}$ ，用绿色来表示。对于铁磁 Ising 模型，可以证明 A 可以分解为： $A = W W^T$ ， W 用三角形表示；(d)对初始的自旋进行求和，定义一个新的矩阵 $T = W^T W$ ，则配分函数变为对 T 的一个幂次求迹。注意此时的 T 定义在格点上面，两个指标为定义在键上面的 $\{s\}$ ；(e)二维 Ising 模型所对应的张量网络模型。每个格点上面都有一个四阶张量 T ，构造方式与(d)类似，只不过这里需要四个 W 来求和，对所有键指标求和所得到的数值，就是对应温度下 Ising 模型的配分函数

初始晶格上的张量网络模型。更高维度的 Ising 模型可以类似地映射为一个高维的张量网络模型。图 1(e)给出了二维 Ising 模型的一种类似构造方式。要注意的是，图 1 这种映射不是唯一的，一个经典统计模型的配分函数写成多种形式的张量网络求和，这涉及到对偶变换、规范变换等一系列物理概念，有兴趣的读者可以参考文献[8]。

事实上，任何只具有局域相互作用的经典统计模型，其配分函数都可以写成张量乘积求和的形式，即都可以精确映射为一个张量网络模型。映射完成之后，对经典统计模型自由能的计算就完全转化为对张量网络模型的求解。精确求和一个一般性的高维张量网络，是一个 $\#P$ -完备问题^[9]。物理学家将重正化群的思想引进来，发展出了各种各样的近似求解方法。这些方法按照对问题的约化方式，大致可以分为两种，即转移矩阵类和

粗粒化类。转移矩阵类的思想是将二维的张量网络求和，转化为一个转移矩阵的最大本征值问题，进而结合重正化群的方法，或求解该转移矩阵的有效低维表示，如DMRG、转移矩阵重正化群^[10]，或求解该转移矩阵最大本征态的有效低维表示，如时间演化块消减算法^[11]，以及更对称的推广，即角转移矩阵重正化群算法^[12]。粗粒化类的思想，是使用局域近似来模拟Kadanoff的块自旋消减过程^[13]，从而实现对系统自由度的重正化。局域近似可以通过一些数学手段来实现，图2显示了基于矩阵奇异值分解(singular value decomposition, SVD)和张量高阶奇异值分解(higher-order SVD, HOSVD)的重正化群步骤^[14, 15]。值得一提的是，基于张量HOSVD的重正化群方法，可以很自然地推广到高维晶格系统，具有较低的计算代价和较高的计算精度。

求和一个二维张量网络，可以使用Levin等人提出的基于矩阵SVD的粗粒化方法，也可以使用我们组提出的基于张量HOSVD的粗粒化方法。如图2所示，对于正方晶格，前者首先将正方晶格分成两套子格，将格点上的张量视为一个矩阵，分别按照正反对角线方向做SVD，切断，然后将图中每一个由四个彩色点构成的小正方形求和掉，最终形成一个新的四阶张量；后者将张量沿着格矢方向进行粗粒化，切断时采用张量的HOSVD。一步重正化群之后，两者都将格点数减小一半，前者由于是沿对角线方向做晶格变形，因此所形成的晶格方向发生转动。

转移矩阵和粗粒化这两类方法都可以非常有

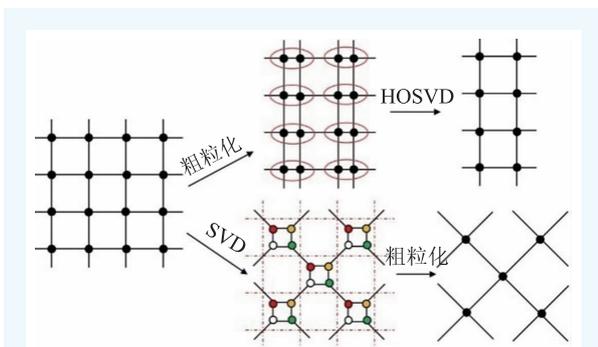


图2 常用的两种粗粒化重正化群方法

效地对张量网络模型进行近似求解，在很多经典统计模型的研究中都取得了很好的效果。一般来说，在临界点附近，由于系统关联长度发散，在相同计算代价下，粗粒化类方法的结果要比转移矩阵类差，但由于可以通过分析重正化群流不动点的性质，因此相对来讲，粗粒化类方法更加适合用于分析临界点处的标度行为。

为了提高粗粒化方法的计算效率和精度，物理学家从以下两个方面来分析了这个问题。一方面，可以使用全局近似来取代局域近似，即在对局域自由度进行重正化群变换时，将外部环境与目标系统之间的纠缠考虑进去，这类似于DMRG中约化密度矩阵概念的引入。在此基础上发展起来的方法有二次重正化群^[16]、高阶二次重正化群方法^[15]等。另一方面，以SVD和HOSVD为基础的局域近似并不能很好地区分短程纠缠和长程纠缠，而对系统物理起决定作用的主要是长程纠缠，因此，如果能够设计一种更优的局域近似，使得短程纠缠尽可能地被过滤掉，那么经过重正化群变换所筛选出的自由度表示就会更有效。在这个方向上，Wen和Vidal等小组将局域变分引入局域的重正化群变化^[17, 17, 18]，得到了近似标度不变的不动点张量和纠缠熵行为。

3 张量网络态与量子格点模型

对于只具有局域相互作用的有能隙的哈密顿系统，人们通常认为它的基态，甚至低能激发态，满足纠缠熵的面积定律，即如果将系统分成两部分，则两部分之间的纠缠熵 S 正比于边界的面积 L^{d-1} ，而要精确描述该纠缠熵，波函数表示所需要的基矢量的数目 D 要正比于 $\exp(S)$ ，即

$$S \propto L^{d-1} \sim \log D$$

这就是DMRG在一维($d=1$)取得成功的原因，也是它在二维($d=2$)只能处理有限系统尺寸的原因。满足面积定律的量子态是一类特殊的状态，它们只占整个Hilbert空间很小的一部分，但却集中了很大一部分物理上可实现的基态和低能激发态，换言之，对于大多数真实系统中的低能物理研究来

讲,人们认为Hilbert空间是可被压缩,该系统是可重正化的。

如何将DMRG推广到高维,同时又满足面积定律呢?事实上,在DMRG被提出不久,人们就发现^[19],DMRG计算过程所生成的波函数其实是一种矩阵乘积态波函数。图3给出了一种简单的视角来看待这个问题。所谓矩阵乘积态,简而言之:给定构型(单粒子基矢)在波函数中的叠加系数由一系列矩阵乘积求迹得到。这个被发现之后,人们很快从波函数的角度出发,将矩阵乘积态推广到二维,构造了许多二维的张量网络态波函数,甚至使用这种变分波函数来计算三维经典统计模型,这种推广得到的波函数是自然地满足面积定律的。2004年,Verstraete和Cirac等人以投影纠缠对态(projected entangled pair state, PEPS)的名字重新讨论了张量网络态^[20],明确给出了一般性PEPS的构造方式,以及给定哈密顿量时的系统基态的PEPS表示的变分求解方法,这引起了人们对张量网络态的极大兴趣。图3(c)给出了正方晶格上PEPS的一般形式。事实上,PEPS是张量网络态波函数家族中的一个成员,随后越来越多的波函数形式被构造出来,比如多尺度纠缠重正化假设^[21],关联乘积态^[22],投影纠缠单形态(projected entangled simplex state, PESS)^[6]等。

对于给定一个量子格点系统,与DMRG直接对哈密顿量进行重正化群变换不同,张量重正化群对基态的求解着眼于对波函数的处理。具体来说,首先要选定基态波函数的一个合适的张量网络态表示 $|\Psi\rangle$,其中的局域张量,如图3(c)中的 T ,都是待定的变分参数;然后通过虚时演化或者能量极小变分,求解出局域张量,得到具体的基态波函数表示;最后根据基本的量子力学公式,即

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \Psi | O | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle},$$

来求解各种物理量 O 的期望值。这是使用张量重正化群求解量子格点模型的一般步骤。

不同类型的张量网络态形式,通常描述不同的纠缠熵行为,适用于不同的量子体系。比如,

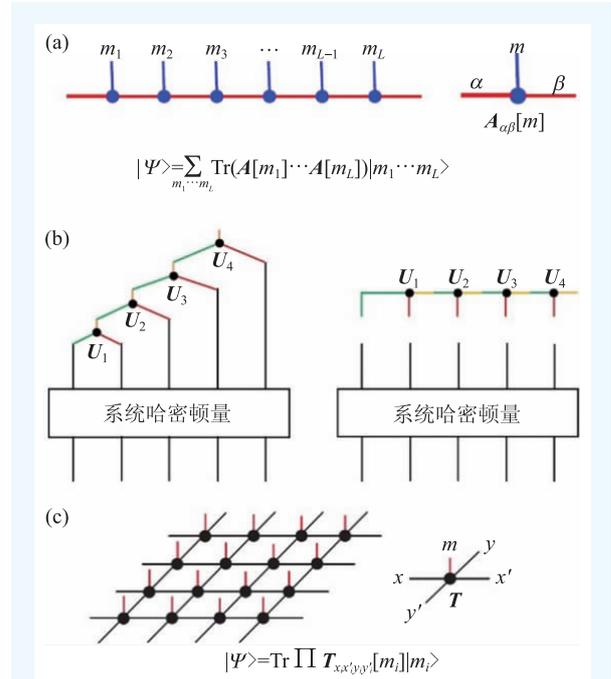


图3 张量网络态示意 (a)开边界矩阵乘积态的一般形式。给定构型 $|m_1 \cdots m_L\rangle$ 在波函数 $|\Psi\rangle$ 中的叠加系数,由对应的矩阵乘积求迹给出,即 $\text{Tr}(A[m_1] \cdots A[m_L])$; (b)DMRG计算过程中的基矢变换矩阵 U ,自然地构成了一个矩阵乘积态,右图是左图的显式画法; (c)正方晶格上PEPS波函数的一般形式,即每个格点上定义一个张量 T ,给定构型 $\{|m_i\rangle\}$ 的叠加系数,由前面的张量乘积求迹给出。这里的 Tr 代表对所有的键指标和物理构型求和

PEPS自然地满足纠缠熵的面积定律,求解方法相对简单,因此很快被广泛应用于求解量子格点模型,并且在无阻挫系统的研究中获得了巨大的成功。但对于量子阻挫系统,尤其是Kagome晶格这种强阻挫系统,由于PEPS波函数假设中主要考虑了两体纠缠,并没有显式考虑多体纠缠,而事实上人们发现在这种阻挫系统中,多体纠缠对系统的长程物理行为可能发挥更重要的作用,因此它在这类系统中的应用遇到了很多问题。作为PEPS波函数的推广,PESS波函数弥补了这个缺陷,它将系统分为很多个单形,然后在每一个单形中引入一个高阶的单形张量,来描述处于单形之中的多个自由度之间的纠缠。图4给出了分别可以用PEPS和PESS精确表示的定义在Kagome晶格上面的自旋2的两种状态,即AKLT态^[23]和单形固体态(simplex solid state, SSS)^[24],来说明

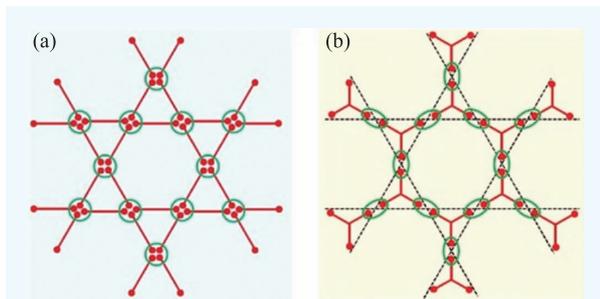


图4 (a)由PEPS所表示的自旋2-AKLT态。为了构造这个态,每个格点上的自旋2被分解为4个辅助的虚拟自旋1/2,每一条键上的两个虚拟自旋1/2构成自旋单态($S=0$),然后在每一个格点上作用一个投影算符,将 $(1/2)^{\otimes 4}$ 投影到真实的自旋2空间。可以看到,这样的PEPS的确由投影算符和“纠缠对”态所构成;(b)由PESS所表示的SSS态。为了构造这个态,每个格点上的自旋2被分解为2个辅助的虚拟自旋1,每一个单形(三角形)中的三个虚拟自旋构成自旋单态($S=0$),然后在每一个格点上作用一个投影算符将 $(1)^{\otimes 2}$ 投影到真实的自旋2。同样,这样的PESS的确由投影算符和“纠缠单形”态所构成(两图中的红色代表自旋单态,绿圈代表投影算符)

PEPS和PESS对局域纠缠的不同考虑方式。这里的单形,是指构成晶格的基本单元,比如三角形可以看做Kagome晶格的一种单形。给定一种晶格系统,可以选取不同的单形,来构造不同形式的PESS波函数,因此它也更加灵活。在最近的一系列工作中^[6, 25],我们结合PESS波函数和维度降解技术^[26],详细地研究了Kagome晶格中可能存在的量子自旋液体。

4 展望

上面我们主要介绍了张量重正化群方法在经典统计模型和量子格点自旋模型基态中的应用,这是目前该方法应用最为广泛的两个领域。事实上,张量重正化群方法在其他领域也有着越来越多的应用,比如,在连续自由度模型和KT相变中的应用^[27],在格点规范理论中的应用^[28],在费米子系统中的发展和应用^[4-5],在连续空间的一维量子场论中的应用^[29],在自旋玻璃系统中的应用^[30],在一维多体局域化中的应用^[31]等。甚至在人工智能领域,它已经被应用在机器学习和图像识别中^[32],并有人试图用重正化群的思想来理解深度学习的

成功^[33]。有理由相信,这些应用领域会越来越广,结合程度也将越来越深。

但我们不仅仅要看到张量重正化群方法的巨大潜力,同时也应该看到它自身的缺陷。首先,张量网络态波函数的求解,实质上是一个多变量的非线性极值问题,如何避免解被束缚在局域极值附近,以及如何高效地计算低能激发态,这是一个值得高度关注的问题,因为对于很多大家感兴趣的系统如量子自旋液体系统,低能激发态与基态具有非常接近的能量,这里面的局域极值问题可能会非常严重。其次,在求解物理量期望值时,或者对波函数进行全局优化时,通常需要对一个张量网络进行求和,这里面会牵涉到非常高的计算代价,这几乎是所有张量重正化群算法面临的计算瓶颈。最后,对于费米子系统而言,感兴趣的物理问题主要集中在动量空间,而张量重正化群的有效性依赖于它可以有效地处理实空间的短程纠缠,由于动量空间的短程物理对应于实空间的长程物理,因此研究动量空间比如在费米面附近的物理问题时,张量重正化群面临着如何有效处理长程纠缠的问题。虽然最近有一些工作在这些问题上做出了一些努力,比如与分子动力学的结合^[34]、正切空间方法^[35]、与机器学习的结合^[36]、与蒙特卡罗的结合^[37]、嵌套张量网络方法^[26]、轨道优化^[38]等,但这些问题远没有解决,仍然需要更多不同领域学者的共同思考。

5 结束语

张量重正化群方法有着非常强大的计算潜力和优势,为年轻人开拓了一个非常广阔的施展自己才华的数值计算领域。它在强关联多体系统和统计模型的研究中发挥着越来越重要的作用,同时也与越来越多的其他领域进行着交叉和融合。一方面我们期望这些交叉和融合能够弥补它自身的缺陷,发展和完善张量重正化群,为研究强关联系统提供一套有效、精确和实用的数值研究方法,另一方面我们也希望挖掘张量重正化群的巨

大潜力, 为研究其他领域的科学和工程问题提供一些思考和帮助。

致谢 本文中与作者相关的工作, 是和中

国科学院物理研究所向涛教授研究组一起合作完成的; 成文得益于和赵汇海博士、刘玉志博士的讨论。

参考文献

- [1] White S R. Phys. Rev. Lett., 1992, 69: 2863
- [2] Troyer M, Wiese U J. Phys. Rev. Lett., 2005, 94: 170201
- [3] Eisert J, Cramer M, Plenio M B. Rev. Mod. Phys., 2010, 82: 277
- [4] Kraus C V, Schuch N, Verstraete F *et al.* Phys. Rev. A, 2010, 81: 052338
- [5] Gu Z C, Verstraete F, Wen X G. arXiv: 1004.2563
- [6] Xie Z Y, Chen J, Yu J F *et al.* Phys. Rev. X, 2014, 4: 011025
- [7] Gu Z C, Wen X G. Phys. Rev. B, 2009, 80: 155131
- [8] Zhao H H, Xie Z Y, Chen Q N *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 81: 174411; Chen J, Liao H J, Xie H D *et al.* Chin. Phys. Lett., 2007, 34: 050503
- [9] Schuch N, Wolf M M, Verstraete F *et al.* Phys. Rev. Lett., 2007, 98: 140506
- [10] Nishino T. J. Phys. Soc. Jpn., 1995, 64: 3598; Bursill R J, Xiang T, Gehring G A. J. Phys.: Condens. Matter, 1996, 8: 583; Wang X Q, Xiang T. Phys. Rev. B, 1997, 56: 5061
- [11] Vidal G. Phys. Rev. Lett., 2003, 91: 147902; *ibid.* 2004, 93: 040502; *ibid.* 2007, 98: 070201; Orus R, Vidal G. Phys. Rev. B, 2008, 78: 155117
- [12] Nishino T, Okunishi K. J. Phys. Soc. Jpn., 1996, 65: 891; Orus R, Vidal G. Phys. Rev. B, 2009, 80: 094403
- [13] Kadanoff L P. Physics, 1966, 2: 263; Phys. Rev. Lett., 1975, 34: 1005
- [14] Levin M, Nave C P. Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 120601
- [15] Xie Z Y, Chen J, Qin M P *et al.* Phys. Rev. B, 2012, 86: 045139
- [16] Xie Z Y, Jiang H C, Chen Q N *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 103: 160601
- [17] Evenbly G, Vidal G. Phys. Rev. Lett., 2015, 115: 180405
- [18] Yang S, Gu Z C, Wen X G. Phys. Rev. Lett., 2017, 118: 110504
- [19] Ostlund S, Rommer S. Phys. Rev. Lett., 1995, 75: 3537
- [20] Verstraete F, Cirac J I. arXiv: 0407066
- [21] Vidal G. Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 220405
- [22] Changlani H J, Kinder J M, Umrigar C J *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 80: 245116
- [23] Affleck I, Kennedy T, Lieb E H *et al.* Phys. Rev. Lett., 1987, 59: 799; Commun. Math. Phys., 1988, 115: 477
- [24] Arovas D P. Phys. Rev. B, 2008, 77: 104404
- [25] Liao H J, Xie Z Y, Chen J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2017, 118: 137202
- [26] Xie Z Y, Liao H J, Huang R Z *et al.* arXiv: 1705. 08577
- [27] Yu J F, Xie Z Y, Meurice Y *et al.* Phys. Rev. E, 2014, 89: 013308
- [28] Zou H, Liu Y, Lai C Y *et al.* Phys. Rev. A, 2014, 90: 063603; Liu Y, Meurice Y, Qin M P *et al.* Phys. Rev. D, 2013, 88: 056005
- [29] Verstraete F, Cirac J I. Phys. Rev. Lett., 2010, 104: 190405
- [30] Wang C, Qin S M, Zhou H J. Phys. Rev. B, 2014, 90: 174201
- [31] Friesdorf M, Werner A H, Brown W *et al.* Phys. Rev. Lett., 2015, 114: 170505; Khemani V, Pollmann F, Sondhi S L. Phys. Rev. Lett., 2016, 116: 247204
- [32] Stoudenmire E M, Schwab D J. Advances in NIPS, 2016, 29: 4799
- [33] Beny C. arXiv: 1301.3124; Mehta P, Schwab D J. arXiv: 1410. 3831
- [34] Liu W Y, Wang C, Li Y B *et al.* J. Phys.: Condens. Matter, 2015, 27: 085601
- [35] Haegeman J, Psoborne T J, Verstraete F. Phys. Rev. B, 2013, 88: 075133; Vanderstraeten L, Marien M, Verstraete F *et al.* Phys. Rev. B, 2015, 92: 201111(R)
- [36] Carleo G, Troyer M. Science, 2017, 355: 602
- [37] Wang L, Pizorn I, Verstraete F. Phys. Rev. B, 2011, 83: 134421; Liu W Y, Dong S J, Han Y J *et al.* arXiv: 1611. 09467; Zhao H H, Ido K, Morita S *et al.* arXiv: 1703. 03537
- [38] Krumnow C, Veis L, Legeza Ö *et al.* Phys. Rev. Lett., 2016, 117: 210402; Fishman M T, White S R. Phys. Rev. B, 2015, 92: 075132