



量子多体计算: 多领域交叉融合的强大物理研究前沿

李伟^{1*}, 王磊², 蔡子³, 王孝群⁴, 苏刚⁵

1. 中国科学院理论物理研究所, 北京 100190;
2. 中国科学院物理研究所, 北京 100190;
3. 上海交通大学物理与天文学院, 上海 200240;
4. 浙江大学物理学院, 杭州 310027;
5. 中国科学院大学卡弗里理论科学研究所, 北京 100049

*联系人, E-mail: w.li@itp.ac.cn

收稿日期: 2024-02-07; 接受日期: 2024-02-23; 网络出版日期: 2024-03-19

摘要 量子多体计算方法, 包括精确对角化、量子蒙特卡罗、密度矩阵与张量重正化、动力学平均场等传统方法, 以及结合人工智能、量子计算等新兴计算方法, 被发展用于精确高效地计算关联多体系统的物理性质. 在非微扰的相互作用多体系统中, 粒子之间通常存在强的关联与量子纠缠, 基于平均场理论的计算方法往往不够精确、甚至缺乏可靠性, 需要不断发展新的多体计算方法, 以便准确地研究如关联费米子系统、阻挫自旋系统中的新奇物态与演化规律. 近年来, 多体计算与多体理论、机器学习、材料科学、量子模拟与量子计算等领域不断互动与融合, 呈现出越来越丰富的学科交叉特点. 本文对量子多体计算的历史脉络、主要方法及现状、未来发展的挑战进行概述.

关键词 多体计算, 精确对角化, 蒙特卡罗方法, 张量网络, 动力学平均场, 机器学习, 量子计算与量子模拟

PACS: 71.15.-m, 75.10.Jm, 71.27.+a, 71.10.Fd, 03.67.Lx

1 引言

在过去的几十年中, 量子多体计算在分数量子霍尔效应、铜氧化物高温超导体、重费米子、量子磁性等关联量子体系的研究中扮演着重要的角色. 近年来, 随着二维磁性材料、莫尔量子材料、超冷原子光晶格等新型量子材料和量子模拟体系的出现, 关联体系的研究已成为多学科的共同挑战问题, 呈现出越来越明

显的学科交叉融合特点. 关联量子体系的特点是多体相互作用导致其组成粒子之间存在着很强的量子纠缠, 涌现出超出传统固体物理框架的新奇量子多体态, 对其理解需要突破既有的朗道费米液体和相变理论范式. 通过对自旋海森堡模型和费米子哈伯德模型等量子格点模型的数值研究, 人们对量子自旋液体、金属-绝缘体相变、条纹相和超导配对等重要强关联问题的研究取得了长足的进展. 当前, 量子多体计算的研究主

引用格式: 李伟, 王磊, 蔡子, 等. 量子多体计算: 多领域交叉融合的强大物理研究前沿. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2024, 54: 247104
Li W, Wang L, Cai Z, et al. Quantum many-body computation: A frontier in interdisciplinary research on strongly correlated systems (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2024, 54: 247104, doi: [10.1360/SSPMA-2024-0055](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2024-0055)

要包括计算方法的发展、软件的开发、以及应用多体计算方法解决强关联体系的重要科学问题。

2 多体计算的主要方法

目前, 量子多体计算主要包含精确对角化、量子蒙特卡罗、重正化群数值方法和动力学平均场等4类方法(见图1). 其中, 精确对角化方法^[1]和量子蒙特卡罗方法^[2]是最早发展的两种方法. 精确对角化方法可以提供多体问题的“数值严格解”, 具有其他方法不可比拟的精度优势, 但是受到希尔伯特空间维度“指数墙”的局限, 难以开展大尺寸计算. 量子蒙特卡罗方法针对单体基矢或局部多体态, 采取某种抽样策略, 来避免“指数墙”问题. 该方法可以精确高效地计算一部分量子多体系统的基态与有限温度性质. 然而, 在处理阻挫磁性系统和一些相互作用费米子体系时, 存在“负符号”问题而难以得到可靠的数值结果. 另一类给希尔伯特空间“降维”的重要方法是重正化群数值方法, 包括针对金属中磁性杂质的近藤问题所提出的Wilson数值重正化群^[3]、精确计算一维和部分二维量子系统基

态与动力学性质的密度矩阵重正化群^[4,5]、处理高维量子多体系统的张量重正化群方法^[6]、计算有限温度性质的转移矩阵重正化群^[7]等. 重正化群数值方法不存在“负符号”问题, 在近年来强关联体系的前沿研究中发挥着重要的作用. 动力学平均场方法是一种基于强关联体系无穷维解的数值方法, 计及了局域量子涨落, 但忽略了实空间关联, 适用于高维、多轨道的格点模型^[8], 可以与密度泛函理论相结合, 应用于实际材料的复杂能带结构计算.

3 量子多体计算与交叉领域研究

3.1 多体计算与强关联理论研究

为探索高温超导和阻挫磁性等关联量子体系的关键科学问题, 人们建立了若干格点模型, 其中海森堡模型和哈伯德模型是两个重要的基本模型. 通过对这些模型及其扩展模型进行精确计算, 可以检验已有凝聚态理论, 并帮助建立新理论与新范式, 推动对非常规超导、量子自旋液体态、量子临界等凝聚态物理重要前沿问题的研究. 例如, 针对笼目晶格海森堡模型, 通过多体计算方法, 特别是密度矩阵重正化群^[9]与张量重正化群^[10]的精确计算, 确定了其基态为自旋液体态; 针对二维哈伯德模型, 综合运用辅助场蒙特卡罗、密度矩阵重正化群、张量网络态等多体方法, 揭示1/8空穴掺杂时其基态具有条纹序^[11]. 针对若干备受关注的格点模型, 综合多种技术开展大规模计算, 解决强关联领域的一些长期悬而未决的科学问题, 是多体计算研究的一个重要发展趋势. 另外, 多体计算方法, 尤其是张量网络方法, 也为理解强关联多体系统的长程纠缠结构、拓扑序、任意子激发、体边对应关系等提供了理论架构和数值验证. 多体计算与多体理论研究相辅相成, 共同发展.

3.2 多体计算与量子材料研究

多体计算在关联量子材料的研究中发挥着越来越重要的作用. 其中, 包含3d/4f电子的强关联材料是当前凝聚态物理前沿领域受到普遍关注的一类关联量子体系. 通过把动力学平均场与密度泛函理论相结合, 超越局域密度近似, 考虑局域电子关联导致的动力学效应, 人们可以计算3d/4f关联材料体系的电子结构和能带参数. 2023年实验学家发现压力下镍氧化物 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$

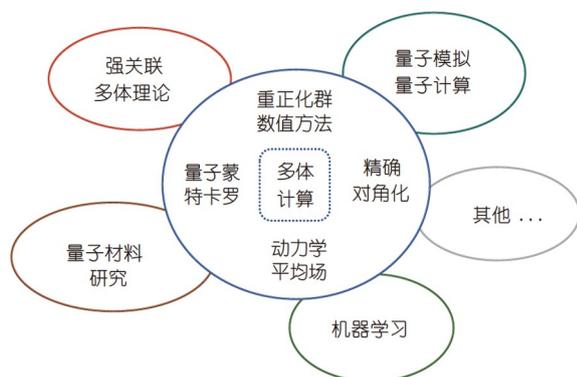


图1 (网络版彩图)多体计算的4个主要方法(精确对角化、重正化群数值方法、量子蒙特卡罗、动力学平均场)以及与之交叉融合的多体理论、量子材料、量子模拟与计算、机器学习等主要领域, 其他相关领域还包括非平衡关联量子系统、量子化学方法、格点场论计算、计算数学、计算复杂性理论等

Figure 1 (Color online) The four major methods in many-body calculations (exact diagonalization, numerical renormalization group, quantum Monte Carlo, and dynamical mean-field theory), as well as their intersecting and integrated domains in many-body theory, quantum materials, quantum simulation and computation, machine learning. Additionally, there are other related fields including non-equilibrium correlated quantum systems, quantum chemistry methods, lattice field theory calculations, computational mathematics, and computational complexity theory.

展现高温超导电性, 人们很快利用密度泛函结合动力学平均场方法等计算了其电子结构^[12,13], 为研究其高温超导机理奠定了基础. 另外, 近年来实验进展迅速, 阻挫量子磁性材料已经成为关联体系的重要研究前沿. 量子多体计算方法既可以用来确定这些材料的有效模型, 从而精准拟合实验结果, 也可以应用于建立有效模型的相图, 作出进一步理论预言. 例如, 通过第一性原理计算和多体计算, 人们对六角晶格Kitaev自旋液体候选材料开展研究, 澄清其中微观自旋相互作用^[14-16]. 最近, 通过张量重正化群多体计算, 人们成功预言三角晶格量子反铁磁体中的自旋超固态并被实验证实^[17]. 此外, 在一些新兴二维材料, 如二维磁性材料、莫尔量子材料等的研究中, 多体计算与密度泛函计算相结合, 提供了重要的理论研究工具.

3.3 多体计算与量子模拟、量子计算研究

量子多体计算方法与量子模拟、量子计算等方面的研究也呈现越来越紧密的结合趋势. 例如, 在超冷原子气量子模拟方面, 多体计算方法可以提供量子模拟的基准^[18], 与实验数据进行精准对照, 分析并指导设计实验等^[19]. 里德堡(Rydberg)原子可实现长程的相互作用, 为多体量子模拟、发展量子计算技术提供了新的理想平台. 最近, 人们利用可编程的里德堡原子系统实现了自旋液体态等奇异量子多体态^[20], 并开展量子计算研究^[21]. 利用多体计算方法, 人们可以获得对实验结果更深入的理解, 并在此基础上提出新的实验方案. 此外, 利用量子计算的高度并行性和经典优化的高效性等, 设计量子-经典混合多体计算方法, 如变分子本征值求解(VQE)、量子计算蒙特卡罗方法等, 在含噪声量子计算机上开展应用, 解决传统计算机难以解决的挑战性问题.

3.4 多体计算与机器学习

机器学习与量子多体计算的交叉融合为这两个领域提供了新的发展路线与技术工具. 一方面, 采纳机器学习的思想、技术和方法, 可以提高量子多体计算的效率, 拓展其应用范围, 如采用神经网络表示多体波函数^[22]、基于自动微分的张量网络优化算法^[23]、利用机器学习提升蒙特卡罗更新效率、通过聚类和降维识别相与相变等. 不同于机器学习在计算物理和化学中的大多数应用, 量子多体问题具有计算模拟昂贵、

可供训练的数据稀少、更加追求定量准确和可解释性的特点. 因此, 有必要抛弃简单套用现成的机器学习框架的单纯“拿来主义”思路, 针对量子多体问题的特点, 深入探索新型的模型结构和训练方法, 解决多体计算中的“痛点”问题. 另一方面, 量子多体计算中的一些概念和方法, 例如张量网络、量子纠缠, 也为理解和进一步发展机器学习提供了新的思路.

3.5 多体计算与非平衡及开放关联量子系统

在凝聚态、原子分子物理和量子计算等学科的交叉领域涌现出一批新型人造关联量子系统, 它们往往受到外界的驱动而远离热力学平衡态^[24]. 传统量子多体物理主要关心系统的基态和热力学平衡态不同, 这类系统的研究对象往往是量子多体系的高能激发态. 基态与热力学性质计算, 经过多年的研究已经发展出系统的理论框架来处理, 例如可以通过如张量网络形式来有效表达多体系统的基态波函数和有限温度密度矩阵, 并开展精确计算. 而非平衡态量子多体物理涉及的高能激发态和开放关联量子系统中出现的非平衡稳态一般具有长程量子纠缠, 缺乏现成的有效处理方法和一般性的理论框架. 由于面临强关联和非平衡的双重困难, 发展针对这类复杂量子多体系统的有效数值方法是当前量子多体计算领域面临的一个重要挑战. 针对这一问题的研究思路, 一方面是拓展现有量子多体算法(例如密度矩阵重正化群、量子蒙特卡罗、动力学平均场等), 使之适用于非平衡量子多体系统; 另一方面, 可结合其他领域的相关进展(例如机器学习、全息对偶等), 建立新的数值方法. 将研究对象从平衡态和近平衡态拓展到远离平衡态, 此类研究将极大地拓展多体计算的研究范畴.

4 多体计算面临的挑战与机遇

尽管人们针对强关联问题发展了多种计算方法, 但求解这些格点模型目前并不存在普适的数值方法, 而是需要针对不同的问题选取恰当的手段来开展计算. 由于每一种量子多体计算技术都有着各自的局限性, 迄今多体计算领域还不存在一种能够“包打天下”的方法. 在计算方法方面依然存在许多亟待解决的基本问题, 在应用方面也面临着多样化的严峻挑战.

首先, 在计算方法发展方面, 张量网络态方法如何

更好地处理高维度系统, 克服其较高的计算代价并改善变分优化的稳定性; 蒙特卡罗方法如何突破“负符号”问题的限制; 如何超越现有动力学平均场理论, 发展出同时考虑动力学与大范围空间涨落, 适用于多轨道系统和更多实际强关联材料的多体计算新方法; 机器学习方法如何与不同多体计算技术有机结合, 为克服“指数墙”问题提供一个新的路径, 从而切实解决多体计算领域中的公认难题. 这些都有待于未来的研究和进一步的探索.

其次, 如何有效推动多体计算方法在量子模拟与量子计算方面的应用, 在传统的关联电子材料与量子磁性体系等研究对象之外, 涵盖更多的新型人造关联量子系统, 包括超导量子线路和超冷原子等. 多体计算可以通过澄清量子模拟实验中的关键物理问题, 提出新的设计方案, 帮助后者更好地迭代进化. 量子模拟、量子计算技术的发展, 也给多体计算提供了更先

进的计算平台. 量子计算与经典计算的结合, 有可能为多体计算与多体物理的研究提供新机遇. 再者, 量子多体计算与相关的计算量子化学、计算格点场论、计算数学、计算复杂性理论等领域的交叉融合为量子多体计算领域发展也持续带来新的思路.

最后, 相对于第一性原理及其他计算方法的软件, 目前的多体计算程序使用门槛较高, 往往较难按照“黑箱”来使用. 国外有一些相对成熟的软件包和平台, 例如张量网络程序库、量子蒙特卡罗方法程序库等, 而国内不同的多体计算的研究组都有自己特色的程序, 存在碎片化、非标准化等问题, 相关标准化的软件库建设和资源共享等方面工作亟待组织与加强. 经过几十年的历程, 多体计算方法还处在不断发展与完善的过程中, 并已经成为强关联物理前沿研究中的重要手段, 在发现新物态、揭示新规律、预言新效应等方面发挥着不可替代的作用.

致谢 感谢林海青教授在文章撰写过程中给予的帮助.

参考文献

- 1 Dagotto E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Rev Mod Phys*, 1994, 66: 763–840
- 2 Handscomb D C. The Monte Carlo method in quantum statistical mechanics. *Math Proc Camb Phil Soc*, 1962, 58: 594–598
- 3 Wilson K G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev Mod Phys*, 1975, 47: 773–840
- 4 White S R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys Rev Lett*, 1992, 69: 2863–2866
- 5 Jeckelmann E. Dynamical density-matrix renormalization-group method. *Phys Rev B*, 2002, 66: 045114
- 6 Cirac J I, Pérez-García D, Schuch N, et al. Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems. *Rev Mod Phys*, 2021, 93: 045003
- 7 Wang X, Xiang T. Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems. *Phys Rev B*, 1997, 56: 5061–5064
- 8 Georges A, Kotliar G, Krauth W, et al. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev Mod Phys*, 1996, 68: 13–125
- 9 Yan S, Huse D A, White S R. Spin-liquid ground state of the $S = 1/2$ kagome Heisenberg antiferromagnet. *Science*, 2011, 332: 1173–1176
- 10 Liao H J, Xie Z Y, Chen J, et al. Gapless spin-liquid ground state in the $S = 1/2$ kagome antiferromagnet. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 137202
- 11 Zheng B X, Chung C M, Corboz P, et al. Stripe order in the underdoped region of the two-dimensional Hubbard model. *Science*, 2017, 358: 1155–1160
- 12 Luo Z, Hu X, Wang M, et al. Bilayer two-orbital model of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure. *Phys Rev Lett*, 2023, 131: 126001
- 13 Christiansson V, Petocchi F, Werner P. Correlated electronic structure of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under pressure. *Phys Rev Lett*, 2023, 131: 206501
- 14 Hou Y S, Xiang H J, Gong X G. Unveiling magnetic interactions of ruthenium trichloride *via* constraining direction of orbital moments: Potential routes to realize a quantum spin liquid. *Phys Rev B*, 2017, 96: 054410
- 15 Wang W, Dong Z Y, Yu S L, et al. Theoretical investigation of magnetic dynamics in $\alpha\text{-RuCl}_3$. *Phys Rev B*, 2017, 96: 115103
- 16 Li H, Zhang H K, Wang J, et al. Identification of magnetic interactions and high-field quantum spin liquid in $\alpha\text{-RuCl}_3$. *Nat Commun*, 2021, 12:

4007

- 17 Xiang J, Zhang C, Gao Y, et al. Giant magnetocaloric effect in spin supersolid candidate $\text{Na}_2\text{BaCo}(\text{PO}_4)_2$. *Nature*, 2024, 625: 270–275
- 18 Mazurenko A, Chiu C S, Ji G, et al. A cold-atom Fermi-Hubbard antiferromagnet. *Nature*, 2017, 545: 462–466
- 19 Chen B B, Chen L, Chen Z, et al. Exponential thermal tensor network approach for quantum lattice models. *Phys Rev X*, 2018, 8: 031082
- 20 Semeghini G, Levine H, Keesling A, et al. Probing topological spin liquids on a programmable quantum simulator. *Science*, 2021, 374: 1242–1247
- 21 Bluvstein D, Levine H, Semeghini G, et al. A quantum processor based on coherent transport of entangled atom arrays. *Nature*, 2022, 604: 451–456
- 22 Carleo G, Troyer M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science*, 2017, 355: 602–606
- 23 Liao H J, Liu J G, Wang L, et al. Differentiable programming tensor networks. *Phys Rev X*, 2019, 9: 031041
- 24 Cai Z. $1/3$ power-law universality class out of stochastic driving in interacting systems. *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 050601

Quantum many-body computation: A frontier in interdisciplinary research on strongly correlated systems

LI Wei^{1*}, WANG Lei², CAI Zi³, WANG XiaoQun⁴ & SU Gang⁵

¹ *Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;*

² *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;*

³ *School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China;*

⁴ *School of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China;*

⁵ *Kavli Institute for Theoretical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*

*Corresponding author (email: w.li@itp.ac.cn)

Quantum many-body calculation methods, including exact diagonalization, quantum Monte Carlo, density matrix and tensor renormalization, and dynamic mean field theory, as well as emerging methods harnessing the power of artificial intelligence and quantum computing, can be used to accurately and efficiently calculate the physical properties of correlated quantum many-body systems. The quantum particles in the interacting, non-perturbative many-body system are highly entangled, and the mean field theory often lacks sufficient accuracy or may even break down for certain problems. It is thus very necessary to develop new methods for studying the exotic states and emergent phenomena in correlated systems, such as high-temperature superconductivity and frustrated quantum magnetism. Recently, the rapid progress in the field of many-body calculation has shown the characteristics of interdisciplinary cross, and there is increasingly significant interplay and integration with machine learning, materials science, quantum simulation and computation, among other fields. This paper outlines the brief history of many-body calculations, major approaches and their current status, as well as main challenges in this field.

many-body calculation, exact diagonalization, Monte Carlo method, tensor network, dynamic mean field theory, machine learning, quantum computation and simulation

PACS: 71.15.-m, 75.10.Jm, 71.27.+a, 71.10.Fd, 03.67.Lx

doi: [10.1360/SSPMA-2024-0055](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2024-0055)