

非平衡量子临界性中 的符号问题研究

答辩人：余荫铠 指导教师：阴帅

✉ yuyk6@mail2.sysu.edu.cn

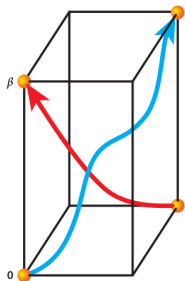
🏠 www.yyk.space.com

🏢 中山大学物理学院

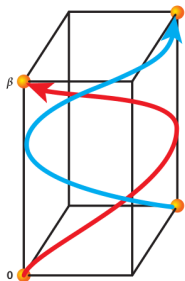
中山大学本科生毕业论文答辩

2024 年 5 月 12 日

符号问题 (sign problem)



奇数次交换费米子
sign = -1



偶数次交换费米子
sign = +1

数值无偏差地求解强关联系统

$$Z = \text{tr} \left(e^{-\beta H} \right) = \sum_c \det B_c$$

量子蒙特卡罗 (QMC): 配分函数

→ 虚时路径积分 → 虚时路径采样

符号问题: 采样概率 $\det B_c$ 非正定

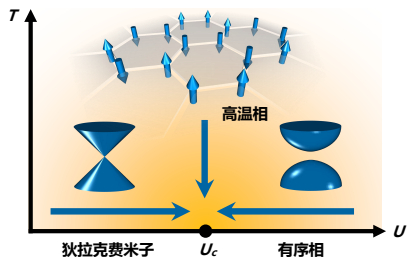
强行采样: $\det B_c = \text{sign}_c |\det B_c| \Rightarrow$ 指数级时间复杂度¹, NP-hard

$$\Delta \langle O \rangle \sim \frac{1}{\langle \text{sign}_c \rangle} \sim e^{\beta N \Delta f}$$

¹Troyer and Wiese, PRL, (2005).

理论基础：费米子非平衡临界标度理论

- 平衡态 QMC：将试探波函数演化足够长的虚时 τ ，得到基态
- 虚时弛豫动力学：在到达基态之前，量子临界性就已经出现²



$$\begin{aligned}\langle O(\tau) \rangle &= \frac{\langle \psi_0 | e^{-\frac{\tau}{2}H} O e^{-\frac{\tau}{2}H} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | e^{-\tau H} | \psi_0 \rangle} \\ &= \tau^{-\frac{\kappa}{z}} f_O \left(g\tau^{\frac{1}{\nu z}}, L^{-1}\tau^{\frac{1}{z}}, \{X\tau^{-\frac{c}{z}}\} \right)\end{aligned}$$

狄拉克系统虚时弛豫动力学中的非平衡标度理论³

²Yin, Mai, and Zhong, PRL, (2014).

³Yin-Kai Yu, Zhi Zeng, Yu-Rong Shu, Zi-Xiang Li, and Shuai Yin, arXiv: 2310.10601, (2023).

处理符号问题的普适方案：非平衡视角

人们难以精确研究强关联费米子系统的量子临界性质与动力学，是因为：

- 困难 1：计算时间 $\sim e^N$ 🤔 意味着缩短虚时可以指数级加速
- 困难 2：发散的涨落模式 🤔 基态不好算就不算呗
- 困难 3：非平衡 🤔 我们有非平衡临界标度理论

难 + 难 + 难 = 易：

🤔 可以在符号问题比较弱的时候，就把基态临界性质算清楚！



处理符号问题的普适方案：非平衡视角

人们难以精确研究强关联费米子系统的量子临界性质与动力学，是因为：

- 困难 1：计算时间 $\sim e^N$ 🤔 意味着缩短虚时可以指数级加速
- 困难 2：发散的涨落模式 🤔 基态不好算就不算呗
- 困难 3：非平衡 🤔 我们有非平衡临界标度理论

难 + 难 + 难 = 易：

🤔 可以在符号问题比较弱的时候，就把基态临界性质算清楚！



处理符号问题的普适方案：非平衡视角

人们难以精确研究强关联费米子系统的量子临界性质与动力学，是因为：

- 困难 1：计算时间 $\sim e^N$ 🤔 意味着缩短虚时可以指数级加速
- 困难 2：发散的涨落模式 🤔 基态不好算就不算呗
- 困难 3：非平衡 🤔 我们有非平衡临界标度理论

难 + 难 + 难 = 易：

🤔 可以在符号问题比较弱的时候，就把基态临界性质算清楚！



处理符号问题的普适方案：非平衡视角

人们难以精确研究强关联费米子系统的量子临界性质与动力学，是因为：

- 困难 1：计算时间 $\sim e^N$ 🤔 意味着缩短虚时可以指数级加速
- 困难 2：发散的涨落模式 🤔 基态不好算就不算呗
- 困难 3：非平衡 🤔 我们有非平衡临界标度理论

难 + 难 + 难 = 易：

🤔 可以在符号问题比较弱的时候，就把基态临界性质算清楚！



处理符号问题的普适方案：非平衡视角

人们难以精确研究强关联费米子系统的量子临界性质与动力学，是因为：

- 困难 1：计算时间 $\sim e^N$ 🤔 意味着缩短虚时可以指数级加速
- 困难 2：发散的涨落模式 🤔 基态不好算就不算呗
- 困难 3：非平衡 🤔 我们有非平衡临界标度理论

难 + 难 + 难 = 易：

🤔 可以在符号问题比较弱的时候，就把基态临界性质算清楚！



处理符号问题的普适方案：非平衡视角

人们难以精确研究强关联费米子系统的量子临界性质与动力学，是因为：

- 困难 1：计算时间 $\sim e^N$ 🤔 意味着缩短虚时可以指数级加速
- 困难 2：发散的涨落模式 🤔 基态不好算就不算呗
- 困难 3：非平衡 🤔 我们有非平衡临界标度理论

难 + 难 + 难 = 易：

🤔 可以在符号问题比较弱的时候，就把基态临界性质算清楚！

处理符号问题的普适方案：非平衡视角

人们难以精确研究强关联费米子系统的量子临界性质与动力学，是因为：

- 困难 1：计算时间 $\sim e^N$ 🤔 意味着缩短虚时可以指数级加速
- 困难 2：发散的涨落模式 🤔 基态不好算就不算呗
- 困难 3：非平衡 🤔 我们有非平衡临界标度理论

难 + 难 + 难 = 易：

🤔 可以在符号问题比较弱的时候，就把基态临界性质算清楚！

处理符号问题的普适方案：非平衡视角

人们难以精确研究强关联费米子系统的量子临界性质与动力学，是因为：

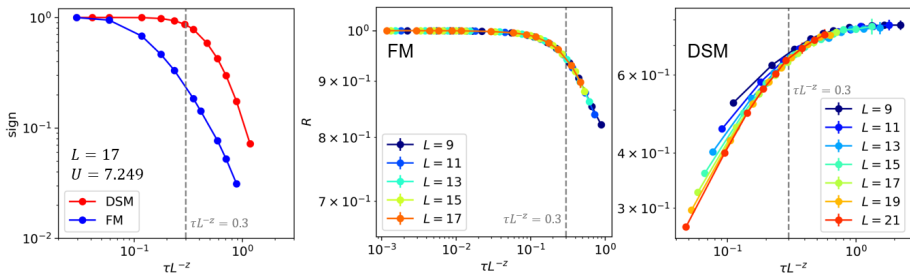
- 困难 1：计算时间 $\sim e^N$ 🤔 意味着缩短虚时可以指数级加速
- 困难 2：发散的涨落模式 🤔 基态不好算就不算呗
- 困难 3：非平衡 🤔 我们有非平衡临界标度理论

难 + 难 + 难 = 易：

🤔 可以在符号问题比较弱的时候，就把基态临界性质算清楚！

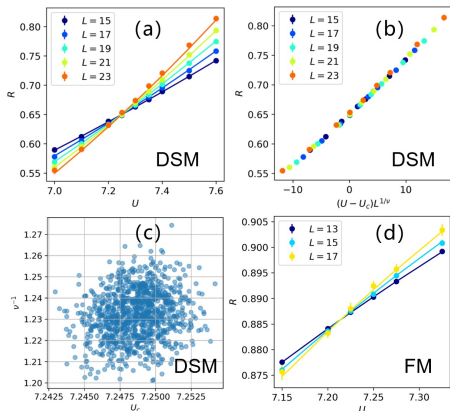
应用实例一：单狄拉克锥上的 Hubbard 模型

单狄拉克锥 Hubbard 模型: $H = \sum_p c_p^\dagger \not{p} c_p + U \sum_i (n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2})$



- $\Delta R \sim \frac{1}{\langle \text{sign} \rangle} \sim e^{\tau N \Delta f}$
- 至少 $\tau L^{-z} > 1$ 才到基态, 符号问题较严重
- 非平衡 $\tau L^{-z} = 0.3$, 符号问题不严重, 且处于非平衡标度区
- $R = f(gL^{1/\nu}, \tau L^{-z})$, 其中 $g = U - U_c$

应用实例一：单狄拉克锥上的 Hubbard 模型



- 固定 $\tau L^{-z} = 0.3$,
 $R = f(gL^{1/\nu})$
- 形式上与基态标度一致
 拟合出临界点和临界指数

method	U_c	ν^{-1}	η_ϕ	η_ψ
This work	7.249(4)	1.23(2)	0.395(17)	0.129(9)
PQMC (equilibrium) ⁴	7.275(25)	1.19(3)	0.31(1)	0.136(5)
FRG ⁵	-	1.229	0.372	0.131

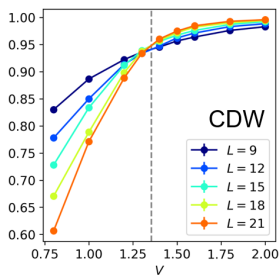
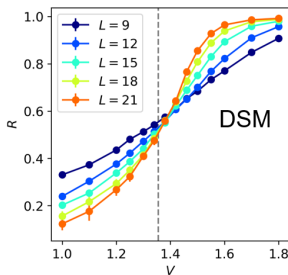
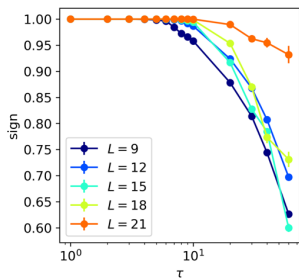
⁴Tabatabaei, Negari, Maciejko, and Vaezi, Phys. Rev. Lett., (2022).

⁵Vacca and Zambelli, Phys. Rev. D, (2015).



应用实例二：“不必要的”符号问题

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \text{h.c.} + \sum_{\langle ij \rangle} V \left(n_i - \frac{1}{2} \right) \left(n_j - \frac{1}{2} \right)$$

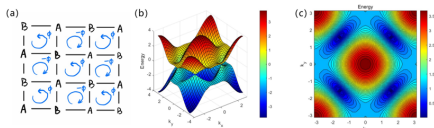


- 趁符号问题还没来得及出现..... 😊
- 无量纲量 $R = f(gL^{1/\nu})$
- Benchmark with sign-free MQMC⁶

⁶Li, Jiang, and Yao, New Journal of Physics, (2015).

应用实例三：SU(3) Hubbard 相互作用

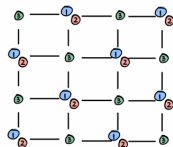
各向异性狄拉克锥



$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} t_{ij} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + U \sum_i \sum_{\alpha > \beta} \left(n_{i\alpha} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\beta} - \frac{1}{2} \right)$$

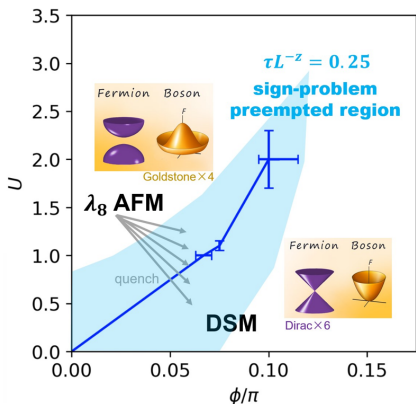
Gell-Mann λ_8 反铁磁序

$$m = \frac{1}{L^2} \sum_i (-1)^{i_x + i_y} \langle \bar{c}_i^\dagger \lambda_8 \bar{c}_i \rangle$$



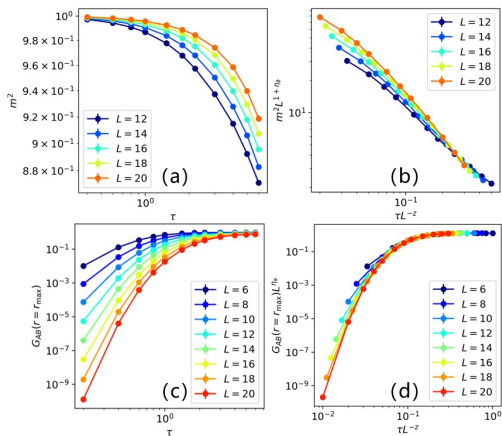
$$\mathbb{Z}_2 \times \text{SU}(3) \longrightarrow \text{SU}(2) \times \text{U}(1)$$

基态相图



各向异性狄拉克锥 + SU(3) Hubbard 相互作用 $\Rightarrow \lambda_8$ 反铁磁序

应用实例三：SU(3) Hubbard 相互作用



- $m^2 = L^{-(1+\eta_\phi)} f_{m^2}(\tau L^{-z})$
- $G = L^{-\eta_\psi} f_G(\tau L^{-z})$
- 费米子弛豫时间远远小于玻色子弛豫时间
- 费米子平衡后玻色子才进入标度区域

应用实例三：SU(3) Hubbard 相互作用

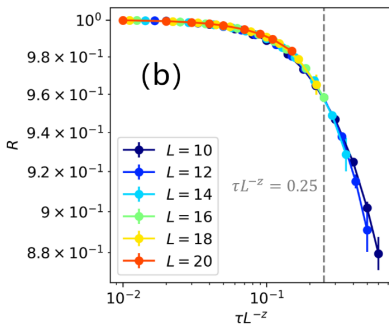
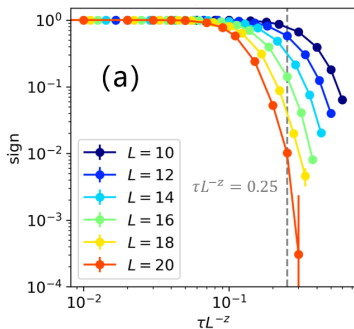
不同 Gross-Neveu 普适类对于 $d = 2 + 1, N_f = 6$ 的临界指数对比

universality class	ν^{-1}	η_ϕ	η_ψ
chiral SU(3)/[SU(2) \times U(1)] (this work)	0.68(5)	0.55(5)	0.15(3)
chiral Heisenberg ($4 - \epsilon$, 2nd order) ⁷	1.478	1.023	0.058
chiral XY ($4 - \epsilon$, 2nd order) ⁶	1.809	0.698	0.082
chiral Ising ($4 - \epsilon$, 2nd order) ⁶	0.750	0.865	0.011
chiral Ising (FRG) ⁸	0.993	0.912	0.013

⁷Rosenstein, Hoi-Lai Yu, and Kovner, Phys. Lett. B, (1993).

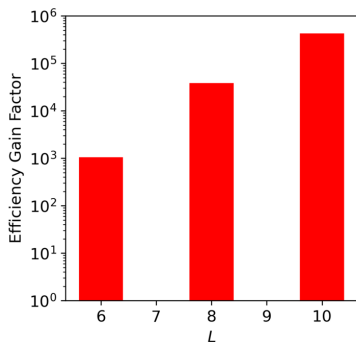
⁸Janssen and Herbut, PRL, (2014).

应用实例三：SU(3) Hubbard 相互作用



- 随着 τL^{-z} 增加，符号问题快速变严重
- 在临界点 $g = 0$ ，无量纲量 $R = f(\tau L^{-z})$
- $\tau L^{-z} = 0.3$ ，符号问题不太严重且非平衡临界标度有效

应用实例三：SU(3) Hubbard 相互作用



$$\text{效率提高倍数} = \frac{\langle \text{sign} \rangle_{\text{neq.}}}{\langle \text{sign} \rangle_{\text{eq.}}} \times \frac{\tau_{\text{eq.}}}{\tau_{\text{neq.}}} \sim 10^5$$



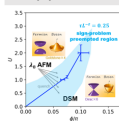
平衡态QMC
算一万年



本工作
算一星期

cpu time

SU(3) Hubbard



"Faster is different"

总结

- ① **符号问题**——“Faster is different”：
在符号问题出现或者变得严重之前，就可以把量子临界性质算清楚。
- ② **强关联**——**SU(3) Hubbard 相互作用**：
在具有交错磁通的格点模型中，发现并研究了新奇的 chiral $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 普适类。
- ③ **非平衡**——“健忘”的费米子：
揭示了强关联费米子系统发生量子临界淬火的弛豫机制。



总结

- ① **符号问题——“Faster is different”:**
在符号问题出现或者变得严重之前，就可以把量子临界性质算清楚。
- ② **强关联——SU(3) Hubbard 相互作用:**
在具有交错磁通的格点模型中，发现并研究了新奇的 chiral SU(3)/[SU(2) × U(1)] 普适类。
- ③ **非平衡——“健忘”的费米子:**
揭示了强关联费米子系统发生量子临界淬火的弛豫机制。



总结

- ① **符号问题——“Faster is different”:**
在符号问题出现或者变得严重之前，就可以把量子临界性质算清楚。
- ② **强关联——SU(3) Hubbard 相互作用:**
在具有交错磁通的格点模型中，发现并研究了新奇的 chiral $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 普适类。
- ③ **非平衡——“健忘”的费米子:**
揭示了强关联费米子系统发生量子临界淬火的弛豫机制。



在读期间发表的学术论文与取得的研究成果

- ① **Yin-Kai Yu**, Zhi Zeng, Yu-Rong Shu, Zi-Xiang Li, Shuai Yin. Nonequilibrium dynamics in Dirac quantum criticality. 2023. arXiv: 2310.10601.
- ② Zhi Zeng, **Yin-Kai Yu**, Zhi-Xuan Li, Zi-Xiang Li, Shuai Yin. Finite-time scaling beyond the Kibble-Zurek prerequisite: Driven critical dynamics in strongly interacting Dirac systems. 2024. arXiv: 2403.19258.
- ③ **Yin-Kai Yu**, Zhi-Xuan Li, Zi-Xiang Li, Shuai Yin. Preempting fermion sign problem: Unveiling quantum criticality through non-equilibrium dynamics. 2024, in preparation.

致谢

- 合作者：阴帅 (SYSU)、李自翔 (IOP, CAS)、黎智轩 (SYSU)
- 感谢潘逸文老师为本工作提供的讨论意见
- 感谢曾植同学在科研工作中的长期合作与讨论

感谢各位评委老师的指导!

关于应用

- **算法提速了这么多，作为代价，是否会带来较大的数值偏差？**
不会。因为这不是单纯的数值处理技巧，而是把原本被浪费掉的藏在非平衡中的物理信息都利用了起来。
- **为什么说这个方法是普适的？有多普适？**
因为它的有效性只依赖于非平衡临界标度，而标度行为是普适的。可以普适地用于研究量子临界问题，也可以研究基态相图。