arXiv:2303.02782v1 [quant-ph] 5 Mar 2023

# 通过随机矩阵的近似二局域化，从混沌中揭示秩序

Nicolas Loizeau, [1] Flaviano Morone, [1] 和 Dries Sels[1,2]
[1] *Department of Physics, New York University, New York, NY, USA*
[2] *Center for Computational Quantum Physics, Flatiron Institute, New York, NY, USA*
(日期：2023年3月7日)

量子多体系统通常具有张量积结构。这种结构源自概率论：两个独立事件同时发生的概率等于各自概率的乘积。因此，哈密顿量的张量积结构自然地将系统分解为彼此独立的较小子系统。对于给定的哈密顿量和给定的张量积结构，我们可以提出这样的问题：是否存在一个基，使该哈密顿量具有这一所需的张量积结构？具体而言，我们要问：是否存在一个基，使任意哈密顿量都具有 2-局域形式，即只包含两两相互作用？在这里，我们通过数值和解析论证表明，一般的哈密顿量（例如大型随机矩阵）可以 *approximately* 以很高的精度写成二体相互作用项的线性组合；也就是说，在经过精心选择的基中，该哈密顿量是 2-局域的。我们还表明，这些哈密顿量对微扰具有稳健性。综合来看，我们的结果表明，这或许是混沌中局域性涌现的一种可能机制。

## 引言

通常，为了获得系统动力学的量子描述，我们会经过正则量子化的过程，或者如狄拉克所描述的那样 [1]，通过经典类比。尽管这一过程已被证明极其强大，但它也令人深感不满。怎么会这样：为了描述微观的基本量子定律，我们首先需要知道支配系统行为的相应经典哈密顿量？经典力学难道不应该从量子力学中涌现出来吗？更具体地说，由于大多数经典哈密顿量的形式都相当简单，这就引出了一个问题：我们究竟在多大程度上因此约束了量子力学？

为了为我们的讨论做好铺垫，有必要阐明一些非常基本的概念。我们将重申参考文献 [2] 中较早提出的一些观点。量子力学本身独立于人们对基的选择，即它在幺正变换下保持不变。此外，时间演化是系统状态的幺正变换。这对实际能够测量的可观测量集合施加了约束。如果不存在这样的约束，便会立即得出时间旅行是可能的这一结论；例如，不测量可观测量 $O$，而只需测量 $\exp(-iHt)O\exp(iHt)$，就可以向时间 $t$ 的过去 ย้อนย้อน。因而，任何讨论都应局限于一组特定的可观测量。

实际上，我们在宇宙中能够获取的可观测量非常有限，并且受到实验约束的制约。从经验上看，哈密顿量与可获取的可观测量之间存在密切联系；例如，在量子场论中，两者通常都能用产生与湮灭算符表示为简单的代数表达式 [3]。简而言之：我们在写下哈密顿量时，心中已经有了打算测量的可观测量 [4]。正是这种默认的我们希望在本文中探究的，是系统的运动学与可获取的可观测量之间更简单的关系。

换一种说法，在他一篇关于量子力学的开创性论文中，薛定谔称纠缠为量子力学的特征性特质，它迫使人们摒弃经典思维 [5]。然而，纠缠是一个依赖于基的量。它要求人们明确那些自然地呈现为独立的、即不纠缠的对象。先验地看，并不清楚这类独立的经典对象应当是什么 [6–8]。为什么一个基会比另一个更自然？

给定一个哈密顿量，其唯一的内禀且基不变的信息就是它的谱。因此，具有相同能谱的所有系统都是等价的。它们之间唯一的差异，就隐藏在我们如何获取这些系统中的局域物理量这一点上。这引出了以下问题：给定一个哈密顿量，是否可能找到一个基，使其具有简单的（张量积）形式，例如仅由二体相互作用项的线性组合构成？Cotler、Penington 和 Ranard [9]，最近研究了这一问题，并使用简单的计数论证表明，对于大多数哈密顿量而言这是不可能的。然而，能够以多高的精度实现这一点仍是一个开放问题，也是本文的研究主题。我们通过寻找能够将随机矩阵近似写成二局域哈密顿量的基，从数值上探索这样一种观点：局域优选基源于量子混沌 [10, 11]。Freedman 和 Zini [12, 13] 最近提出了一个相关但截然不同的观点：他们认为，一种新颖的自发对称性破缺机制作用于哈密顿量的概率分布层面，而非量子态层面。

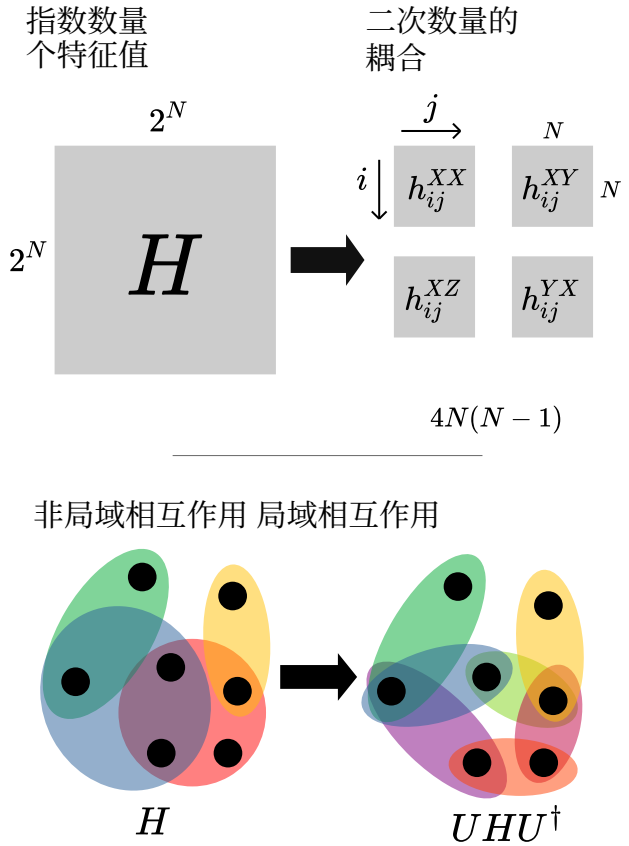



图 1. *Top*：一个 $N$ 量子比特量子哈密顿量是一个 $2^N \times 2^N$厄米矩阵，具有 $2^N$ 内禀自由度（如果指定了特定的基，即其谱）。经过 2- 局域化后，这些 $2^N$ 自由度被压缩为指定二局域哈密顿量的 $O(N^2)$ 耦合。*Bottom*：一般的哈密顿量包含许多体相互作用。经过 2-局域化后，同一个哈密顿量在新的基中表示，因此只包含二体相互作用。

### 2-局域化

考虑一个一般的哈密顿量 $H$，它作用于一个希尔伯特空间 $\mathcal{H}$。为简单起见，我们将范围限制在 $\mathcal{H} = \mathbb{C}^M$，其中 $M$ 取为 2 的幂。具体而言，可以将 $H$ 想象为从高斯正交系综中抽取的随机矩阵 [14–16]。此外，考虑泡利串集合 $\mathrm{P}_N = \{\tau\}$，它们由作用于 $N$ 个自旋或量子比特上的泡利算符 $\sigma_i^\alpha$的张量积构成，例如 $\tau = \sigma_1^x \otimes \sigma_2^z \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}_N$。泡利串集合 $\mathrm{P}_N$ 构成一个完备基，因此任意哈密顿量（在$\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^N}$上）都可以写成泡利串 $H = \sum_{\tau\in\mathrm{P}_N} h_\tau \tau$的线性组合。一般算符会支撑于所有字符串上，但泡利串集合中存在一种自然的排序方式，即按照其长度排序，也就是张量积中非恒等算符的数量。令长度不超过 $k$ 的所有字符串集合为 $\mathrm{P}_N^k$。在这项工作中，我们尤其关注局域在长度至多为二的字符串集合 $\mathrm{P}_N^2$ 上的算符。我们称一个哈密顿量是可二局域化的，如果经过某个精心选择的酉变换 $U$后，它完全支撑在 $\mathrm{P}_N^2$上，即存在一组耦合 $\{h_\tau\}$使得：

$$UHU^\dagger = \sum_{\tau\in\mathrm{P}_N^2} h_\tau \tau \equiv \sum_{ij,\alpha\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} \sigma_i^\alpha \otimes \sigma_j^\beta \,, \qquad (1)$$

其中 $\sigma_i^\alpha$是作用于第 $i$ 个量子比特上的 $\alpha$-泡利矩阵。

例如，考虑一个哈密顿量为 $H = XXX$的三量子比特问题，其中 $X$ 表示 $\sigma^x$，为简洁起见省略张量积符号。这个哈密顿量是 3-局域的，其谱中正负特征值的数量相同。但 $H' = X\mathbb{1}Z$的谱也是如此，而它却是一个 2-局域哈密顿量。因此，必定存在一个酉算符 $U$，将 $H$ 变为 $H'$，从而使该问题实现 2-局域化。事实上，容易证明 $U = \frac{\sqrt{2}}{2}(\mathbb{1}\mathbb{1} + i\mathbb{1}XY)$ 可以实现这一点，即

$$UXXXU^\dagger = X\mathbb{1}Z \qquad (2)$$

我们还可以进一步指出：哈密顿量 $H'' = X\mathbb{1}\mathbb{1}$ 是 1-局域的，并且与 $H$等谱；因此，在这个简单的例子中，$H$ 可以实现 1-局域化。一般而言，解并不唯一，因为可以对所有自旋进行置换，并施加任意的单自旋旋转。

任意矩阵 $H$ 能够实现精确 2-局域化的一个必要条件是，局域子空间中有足够的自由度来编码 $H$ [9]的特征值。当 $H$ 为复数（即取自 GUE）时，允许的字符串数量为 $3N + \frac{9}{2}N(N-1)$；当 $H$ 为实数（即取自 GOE）时，允许的字符串数量为 $2N + \frac{5}{2}N(N-1)$；因此，在复数情形下，对于 $N \le 8$，在实数情形下，对于 $N \le 6$，上述条件均得到满足。这与 GOE 矩阵能够数值局域化到 $N \le 6$ 是一致的，正如我们将在下一节中展示的那样。在转入本文的主要内容之前，值得注意的是，这一论证有两种失效模式：首先，它没有说明一个算符能够被二体局域算符逼近到何种程度；其次，它并不意味着所有算符 $N \le 6$都能实现 2-局域化（它只意味着当 $N > 6$时，并非所有哈密顿量都能实现 2-局域化）。为说明后一种情况，我们将论证低秩投影算符无法实现局域化，即使在小型系统中也是如此，具体证明如下。如果一个秩为 $K$ 的投影算符能够实现 2-局域化，那么就存在一个秩为 $K$ 且为二体局域的投影算符。因此，让我们推导二体局域投影算符 $P$的秩的界。 $P$是二体局域的，当且仅当 $P = \sum_{\tau\in\mathrm{P}_N^2} h_\tau \tau$。 $P$的秩为 $K = \mathrm{Tr}(P) = \mathrm{Tr}(P^2) = \sum_{\tau\in\mathrm{P}_N^2} \mathrm{Tr}(\tau P)$。注意，$\mathrm{Tr}(\tau P) = 2^N h_\tau$，因此 $K = \frac{1}{2^N}\sum_{\tau\in\mathrm{P}_N^2} \mathrm{Tr}(\tau P)^2$。

此外， $P = \sum_q |q\rangle\langle q|$, 因此我们有

$$K = \frac{1}{2^N} \sum_{\tau \in \mathsf{P}_N^2} \left( \sum_q \langle q| \tau |q\rangle \right)^2 , \tag{3}$$

$$K \leq \frac{1}{2^N} \mathcal{N}_2 K^2 , \tag{4}$$

$$\frac{2^N}{\mathcal{N}_2} \leq K , \tag{5}$$

其中 $\mathcal{N}_2 = O(N^2)$ 是长度为 2 的泡利串的数量。因此，任何作用于 $\mathbb{C}^{2^N}$ 上的二局域可局域化投影算符，其秩都大于 $O(2^N/N^2)$。这恰恰表达了这样一种直觉：要描述低熵态 $\rho$，需要非局域信息。

## 方法

存在一个酉算符 $U$，能够将哈密顿量$H$ 局域化，当且仅当存在一个与 $H$具有相同谱的局域哈密顿量 $H'$。通过寻找具有相同谱的局域哈密顿量，就能将 $H$ 局域化。定义代价函数

$$C = \frac{1}{2^{N+1}} \sum_{i=1}^{2^N} (E_i - \mathcal{E}_i)^2 , \tag{6}$$

其中 $E_i$ 是 $H$ 的特征值，而 $\mathcal{E}_i \equiv \mathcal{E}_i(h)$ 是局域哈密顿量 $H' = \sum_{\tau \in \mathsf{P}_N^2} h_\tau \tau$ 的特征值。代价函数 $C$ 衡量平均平方局域化误差，也就是说，它衡量二局域哈密顿量 $H'$ 的谱与原始哈密顿量 $H$的谱有多接近。

局域化 $H$ 等价于找到使 $C$最小化的系数 $h_\tau$。注意，$C$ 的梯度为

$$\frac{\partial C}{\partial h_\tau} = h_\tau - \frac{1}{2^N} \sum_n E_n \langle n| \tau |n\rangle \tag{7}$$

其中， $|n\rangle \equiv |n(h)\rangle$ 是对应特征值 $\mathcal{E}_n$的 $H'$ 的特征向量，正如我们在补充材料第 3 节中明确展示的那样。在实践中，我们使用 Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno（BFGS）梯度下降法 [17–21]最小化 $C$。在一般情形下，当 $\tau$ 包含 $X$、$Y$和 $Z$时，我们可以对高斯正交系综中的随机矩阵 $H$ 进行 2-局域化，直至 $N = 14$（即最大尺寸为 $2^{14} \times 2^{14}$的矩阵）。主要瓶颈在于每一步都要对 $H'$ 进行对角化所需的时间。然而，当 $\tau$ 仅为 $Z$的乘积时（对角情形），我们可以对 GOE 矩阵进行 2-局域化，直至 $N = 20$。当 $N > 16$ 时，我们使用三对角厄米矩阵系综生成初始高斯正交系综谱 [22]。

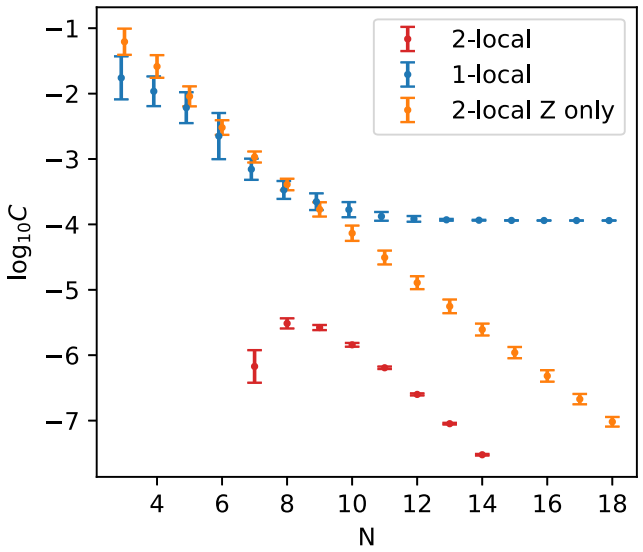



图 2. 局域化误差 $C$，定义见式（6），随系统尺寸 $N$的变化。红色数据点（标记为“2 局域”）表示使用式（1）给出的一般形式的二局域哈密顿量，对高斯正交系综谱进行局域化时的误差。对于 $N \leq 6$，误差低于机器精度，表明实现了精确的 2-局域化，这与正文中的简单计数论证一致。对于 $N > 6$，误差的衰减速度快于希尔伯特空间维数的倒数，表明可以以指数精度对高斯正交系综谱进行 2-局域化。蓝色符号（“1 局域”）表示使用一局域哈密顿量 $H' = \sum_i h_i \sigma_i^z$得到的局域化误差。后者可以取为对角形式，因为局域旋转不会改变 $k$-局域性。在这种情况下，局域化误差趋于 $N = 10$，并在系统尺寸增大时保持恒定，这意味着不可能对高斯正交系综谱进行 1-局域化。橙色数据点（“仅 2 局域 Z”）对应于二局域哈密顿量 $H' = \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$，描述的是经典伊辛模型。在这种情况下，局域化误差随系统尺寸呈指数下降，因此可以实现 2-局域化。每个数据点均取自 200 个 GOE 矩阵的平均值。

## 结果

我们从高斯正交系综（GOE）生成一组 200 $N$量子比特随机哈密顿量；随后尝试对其进行 2-局域化。对于 $N \leq 6$ 每个特定哈密顿量 $H$ 都可以达到机器精度的局域化。对于 $N > 6$，系统越大，局域化效果越好，误差随 $N$ 呈指数下降，如图2所示；也就是说，在可达范围内，误差下降速度快于希尔伯特空间维数的倒数 $2^{-N}$。由于我们以指数精度恢复了谱，因此很可能恢复的不只是关于$H$态密度的粗粒化信息，而是重现了所有重要特征。为验证这一点，我们将恢复得到的 2-局域 $H'$ 系综的谱形因子（SFF）与高斯正交系综进行比较。谱形因子可以看作

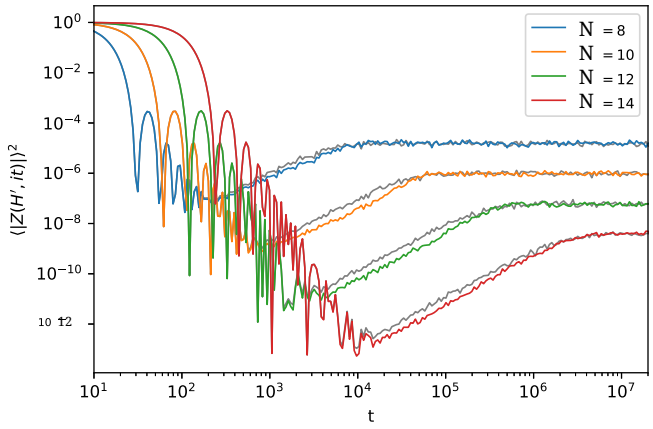



图 3. 局域化哈密顿量的谱形因子 SFF(t)（彩色），其定义见公式（8）。作为参考，灰色曲线绘出了初始高斯正交系综谱的谱形因子。结果取自 200 个高斯正交系综初始谱的实现，并进行平均。

谱的二点关联函数的傅里叶变换，也就是说，它衡量态密度的涨落之间的相关性

$$\mathrm{SFF}(t) = \left\langle |Z(H, it)|^2 \right\rangle , \tag{8}$$

其中 $Z(H, it)$ 表示生成函数

$$Z(H, it) = \mathrm{Tr}\, e^{itH}, \tag{9}$$

而 $\langle \cdot \rangle$ 指的是对 $H$的系综平均。谱形因子在晚期呈现普适斜坡结构，这是量子混沌的标志 [11, 23],见图 3。在典型的混沌系统中，初期会出现一些非普适行为，最终形成所谓的关联凹陷，其持续时间有时称为 Thouless 时间。Thouless 时间之后是普适斜坡，并在海森堡时间终止。对这种普适行为的研究为理解遍历性破缺带来了重要见解，尤其是在无序多体系统 [24, 25] 和 SYK 模型 [26, 27]的背景下。如图 3所示，我们在所有时间尺度上都恢复了二局域系综中谱形因子的所有基本特征。我们只观察到斜坡存在轻微偏差，这可以解释为 Thouless 时间略有延迟。

### 稳定性

既然已经证明存在能够以指数精度逼近 GOE 矩阵的二局域哈密顿量，理解这些解的稳定性就变得至关重要。如果耦合常数发生微小变化 $h_\tau$ ，结果却导致谱完全不同，那么这些二局域哈密顿量就相当依赖精细调参。考虑代价函数 $C(h)$在极小值 $h = h^0$ 处的海森矩阵（详情见补充材料第 3 节）：

$$g_{\tau\eta}(h_0) = \frac{\partial^2 C}{\partial h_\tau \partial h_\eta}\Big|_{h=h^0} = \frac{1}{2^N} \sum_n \langle n| \tau |n\rangle \langle n| \eta |n\rangle . \tag{10}$$

其中 $|n\rangle \equiv |n(h)\rangle$ 是 $H'$ 的特征向量。注意，海森矩阵仅取决于二局域算符的对角期望值，而这些期望值在可积系统和混沌系统中的表现预计截然不同 [28]。就此而言，考虑一个 $H'$ 可交换二局域哈密顿量，其中泡利串被限制为彼此可交换，例如仅由 $Z$组成的串，它们全都是对角的。$H'$ 的所有特征向量都是 $\tau$的特征向量，因此表达式（10）中的求和变为迹。由于所有字符串彼此迹正交，可得 $g_{\tau\eta} = \delta_{\tau\eta}$。因此，对于可交换二局域哈密顿量，耦合常数 $\Delta h$ 的微小变化会导致代价函数 $\Delta C \approx \|\Delta h\|^2$发生变化。由于耦合常数本身为 $O(1/N)$，若要保持图 2 中所示的代价函数指数级下降，就需要以指数精度指定耦合常数 $h$ 。此外，由于度量 $g_{\tau\eta}$ 变为对角形式，因此不存在特别稳定的方向：系统在所有方向上对微小微扰的敏感程度相同。

对于一般的 $H'$ ，表达式（10）中的对角期望值预计会满足本征态热化假说（本征态热化假说） [28]。根据本征态热化假说，（局域）可观测量的期望值会成为能量的平滑函数，从而显著改变度量的行为$g_{\tau\eta}$。为验证这一假说，我们首先需要指出，$g_{\tau\eta}$的特征向量（记为 $v^k$）与如下定义的算符 $O_k$互为对偶：

$$O_k = \sum_{\tau \in \mathsf{P}_N^2} v_\tau^k \tau \ . \tag{11}$$

对度量进行数值对角化，确实证实算符 $O_k$ 在 $H'$的能量本征基中具有平滑的期望值。例如，图 4展示了算符 $\mathcal{E}_2 = \langle n|O_2|n\rangle$ 的期望值 $O_2$ 随能量变化的情况；该算符对应于第二个特征向量 $v^2$， $\mathcal{E}$结果表明， $\mathcal{E}_2$（$\mathcal{E}$）会随着系统尺寸 $\mathcal{E}$ 增大而成为平滑函数 $N$。

本征算符的函数行为也相当简单，这不禁让人想知道，我们能否更详细地理解 $g_{\tau\eta}$ 的谱。首先，很容易验证， $h^0$ 是 $g_{\tau\eta}$的一个特征向量

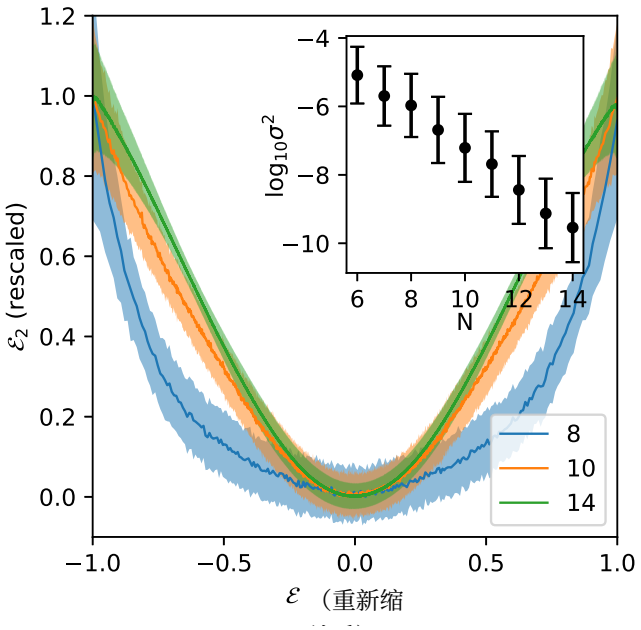



图 4. $g_{\tau\eta}$的第二特征算符的期望值，由表达式（11）定义，取自二局域哈密顿量 $H'$的本征态。图中显示了 $\langle n|O_2|n\rangle$ 随本征能量 $\mathcal{E}_n$变化的情况。曲线表示对 200 次实现取平均后的结果。阴影区域表示标准差。子图展示了对数据进行六阶多项式拟合后得到的残差，该拟合用于减去结果中的平滑部分。可以清楚地观察到，涨落随系统尺寸增大而受到指数抑制。

对应于最大特征值 $\lambda_1 = 1$:

$$\begin{aligned}\sum_\eta g_{\tau\eta} h^0_\eta &= \frac{1}{2^N}\sum_n \langle n|\,\tau\,|n\rangle \langle n|\sum_{\eta\in \mathrm{P}^2_N} h^0_\eta \eta\,|n\rangle \\ &= \frac{1}{2^N}\sum_n \langle n|\,\tau\,|n\rangle \langle n|\,H\,|n\rangle \\ &= \frac{1}{2^N}\sum_n E_n \langle n|\,\tau\,|n\rangle = h^0_\tau\ , \end{aligned} \tag{12}$$

其中，在最后一步中，我们利用了如下事实：在 $h^0$处求值时，方程 9 中的梯度为零。这意味着，沿着 $h^0$ 方向的微扰会显著增大代价函数。然而，与之对应的算符$O_1$恰好就是哈密顿量 $H'$ 本身。因此，这类微扰只会导致哈密顿量重新缩放。它为何会增大代价函数显而易见，$C$ 但由于这只需通过重新定义时间即可吸收，因此不会改变任何物理性质。更值得探究的是次主本征值的行为。

一般而言，$g_{\tau\eta}$ 的全部特征值由下式给出（见补充材料第 4 节）

$$\lambda_k = \frac{1}{2^N}\frac{\sum_{\tau\in \mathrm{P}^2_N} \mathrm{Tr}\left(F_k(H')\tau\right)^2}{\mathrm{Tr}\left(F_k(H')^2\right)}\ , \tag{13}$$

其中，$F_k(H')$ 是 2-局域 $H'$的函数。一般而言，$F_k$不一定表现良好，就像前文所述的对角情形一样。然而，假设 $H'$的本征态满足本征态热化假说，这些函数应当是光滑的。我们已经证明，$F_1(x) = x$，并且知道所有算符都必须是无迹的。此外，由公式（13）给出的特征值具有简单的解释。它们是$F_k(H')$在二局域子空间 $\mathrm{P}^2_N$上的（归一化）投影的弗罗贝尼乌斯范数平方。$H'$的幂会生成越来越多的非局域串，这表明本征算符接近于 $H'$的投影正交多项式。事实上，我们发现，$F_k$ 可以通过对 $H'$ 的 $k$ 次多项式函数进行 Gram–Schmidt 正交化来很好地近似，从 $F_0(x) = \mathbb{1}$ 开始（以确保无迹性），并且 $F_1(x) = x$。因此，例如，$F_2(x)$就是 $x^2$的无迹部分。即

$$F_2(x) = x^2 - \frac{\mathrm{Tr}(x^2)}{2^N}\ . \tag{14}$$

前几个特征值的结果$g_{\tau\eta}$ 如图5所示，并同时给出了精确特征值。最大特征值确实为 1，其他所有特征值在小型 $N$ 系统中都会迅速衰减。对于较大的系统，一些较大的特征值似乎有所恢复，或衰减变缓。值得注意的是，对于较大的 $F_k$，由 $N$构造的近似特征值与精确结果吻合得非常好。此外，这些特征值具有变分性，因此构成真实特征值的下界。

原则上，可以从表达式（13）中精确地提取特征值的闭式表达式，其中包含耦合常数 $h$；这个问题完全是代数问题。尽管如此，一般情形至少可以说相当繁琐。为了进一步推进，我们仅在模型为对角的假设下，根据方程（14）和（13）计算 $\lambda_2$，即 $H'$是一个伊辛模型，其耦合为 $J$（我们在补充材料第 5、6 节和图 S2 中验证了这一近似不会影响定性行为）。补充材料第 5 节给出了详细的图示计算，结果如下:

$$\lambda_2 = \\ = \frac{2\,\mathrm{Tr}(J^4) - \sum_i \left[(J^2)_{ii}\right]^2}{3\,\mathrm{Tr}\,J^4 + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}(J^2)^2 - 6\sum_i \left((J^2)_{ii}\right)^2 + 2\sum_{ij}(J_{ij})^4}\ , \tag{15}$$

当 $N$ 较大时，它变为

$$\lambda_2 \sim \frac{2\,\mathrm{Tr}(J^4)}{3\,\mathrm{Tr}\,J^4 + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}(J^2)^2} \le 4\frac{\mathrm{Tr}(J^4)}{\mathrm{Tr}(J^2)^2}. \tag{16}$$

后者可解释为矩阵 $J^2$ [29]的谱的逆参与比或纯度。因此，如果所有特征值 $\mu_J$ 对 $\lambda_2$ 的贡献均等，那么 $\lambda_2 = O(N^{-1})$；相反，如果只有少数 $\mu_J$ 的

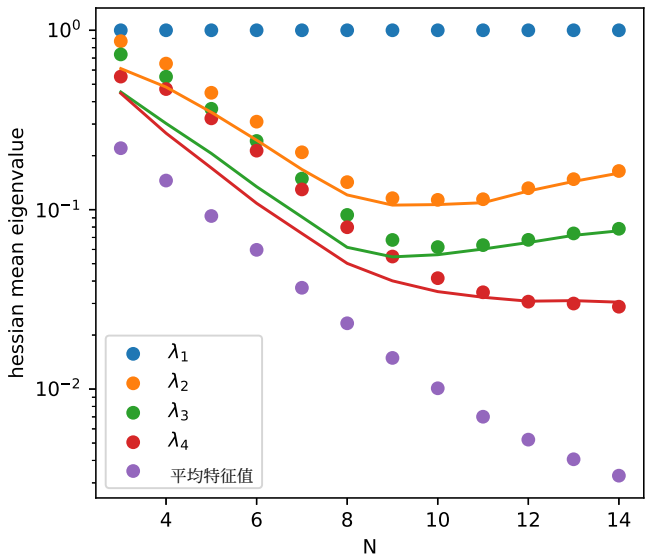



图 5. 海森矩阵 $\lambda_k$ 的四个最大特征值 $g_{\tau\eta}$ 随系统尺寸 $N$变化的情况。最大特征值 $\lambda_1 = 1$ 对应于特征向量 $v^1 \equiv h^0_\tau$（见公式（12））。其余特征值均小于 1。它们的大尺度$N$ 行为对于理解二局域哈密顿量 $J^{\alpha\beta}_{ij}$ 的耦合常数$H'$ 如何精细调谐（即二体局域宇宙的“松弛性”）尤为重要；因此，正文详细讨论了它们的渐近行为，并提出了一种合理的情形及其含义。每个点表示对 200 次实现取平均。实线是使用表达式（13）得到的估计，其中$F_k$（$H$）是按照正文中说明的步骤构造的。

参与其中，那么 $\lambda_2 = O(1)$。这一点尤为重要，因为它或许可以解释 2-局域性是如何整体涌现的。如果 $\lambda_2 \to 0$ 那么 任何 耦合常数的微扰 $h$ 都是边缘无关的，这意味着当$N \to \infty$时，它不会改变该理论的谱。因此，这些耦合常数绝非经过精细调谐以取某个特定值：它们只是恰好取了某个值，而在这些值的巨大范围内，物理性质都保持不变。另一种可能是 $\lambda_2$ 在热力学极限下趋于常数，这意味着 $J$ 可以用低秩矩阵近似。图 5 中的数值数据表明，这或许确实如此。两方面都有理由：一方面，除了带宽之外，似乎还需要加入一些约束，才能使态密度接近目标值。另一方面，我们还在补充材料第 6 节中（另见图 S3）明确计算了低秩 $J$ 的代价函数，这表明在秩固定时，代价函数会饱和于一个常数，这意味着当 $N$较大时，局域化会存在有限误差。无论最终结果如何，我们的研究都带来了一个引人注目的观察：我们可以对高斯正交系综随机矩阵进行 2-局域化在一个参数数量有限的模型上，或者存在显著的涌现不变性。

最后需要强调的是，即使 $\lambda_2$ 非零，二局域哈密顿量预计仍会非常松弛 [30]。也就是说，大多数参数 $h$组合并不重要。这个结论源于将表达式（16）推广到更高 $k$ 维。虽然证明完整结果相当繁琐，但其领先阶贡献的行为类似于 $\lambda_k \sim$ 迹（$J^{2k}$）/迹（$J^2$）$^k$，仔细分析表明，对分子和分母有贡献的图的重数相同。因此，度量的特征值预计会遵循几何级数，这正是“松弛性”的标志 [30]。

## 结论与讨论

我们发现，随机 GOE 矩阵可以用局域形式以极高精度表示，即剩余非局域部分的范数会随系统规模增大而呈指数衰减。这实际上相当于对数据量进行指数压缩。此外，这也是解决优选基问题的一步：对于每个随机哈密顿量，都存在一个优选基，使该哈密顿量在其中具有近似局域的描述。尽管本研究不要求几何局域性，也就是说，我们的局域哈密顿量可以描述粒子之间的全连接相互作用，但该方案的灵活性表明，即使不进行精细调参，也仍可大幅简化模型。这为仅从量子力学出发理解空间如何涌现提供了一条途径：考察耦合 $J_{ij}$ [26, 27, 31–33] 的邻接结构。另一方面，我们还证明，即使一般的随机哈密顿量可以高效地局域化，某些特定哈密顿量却无法做到。这些算符具有某些根本性的量子非局域性质，无法表示为二体算符之和。

致谢。 Flatiron研究所是西蒙斯基金会的一个部门。我们感谢美国空军科学研究办公室的支持：资助项目 FA9550-21-1-0236。

[1] P. A. M. Dirac, *The principles of quantum mechanics*, 第4版，1930年（牛津）。[2] D. Sels 和 M. Wouters, 《量子等价性、第二定律与涌现引力》, arXiv 10.48550/arXiv.1411.3901（2014年）。[3] S. Weinberg, *The Quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations* 2005（剑桥大学出版社）。[4] P. Zanardi、D. A. Lidar 和 S. Lloyd, 《量子张量积结构是由可观测量诱导的》, 《物理评论快报》**92**, 060402（2004年）。

[5]E. Schr¨odinger，《关于分离系统之间概率关系的讨论》，剑桥哲学学会数学学报 31，555–563（1935）。[6] E. Joos 和 H. D. Zeh，《通过与环境相互作用而涌现的经典性质》，Zeitschrift f¨ur Physik B Condensed Matter 59，223（1985）。[7] W. H. Zurek，《退相干、环境诱导超选择与经典世界的量子起源》，《现代物理评论》75，715（2003）。[8] M. Schlosshauer，《退相干、测量问题与量子力学诠释》，Rev. Mod. Phys. 76，1267（2005）。[9] J. S. Cotler、G. R. Penington 和 D. H. Ranard，《从谱中得出的局域性》，《数学物理通讯》368，1267（2019）。[10] M. V. Berry，《量子混沌学（贝克里安讲座）》，载于 *A Half-Century of Physical Asymptotics and Other Diversions* 3 3， 307 322 ，第 [11] 章，页码 *Quantum Signatures of Chaos*。[12] F. Haake，《量子混沌》，（施普林格·柏林·海德堡，2001）。[13] M. Freedman 和 M. S. Zini，《单粒子构成的宇宙》，《高能物理学杂志》2021，140（2021）。[14] M. Freedman 和 M. S. Zini，《单粒子构成的宇宙，第二部分》，《高能物理学杂志》2021，102（2021）。[15] E. P. Wigner，《无限维带边框矩阵的特征向量》，《数学年刊》62，548（1955）。¨T. Guhr、A. M¨uller–Groeling 和 H. A. Weidenm[16] uller，《量子物理中的随机矩阵理论：共同概念》，《物理学报告》299，189（1998）。[17] Y. Y. Atas、E. Bogomolny、O. Giraud 和 G. Roux，《随机矩阵系综中连续能级间距之比的分布》，《物理评论快报》110，84101（2013）。[18] C. G. Broyden，《一类双秩最小化算法的收敛性：一般考虑》，《IMA应用数学杂志》6，76（1970）。[19] R. Fletcher，《变度量算法的新方法》，《计算机杂志》13，317（1970）。[20] D. Goldfarb，《通过变分方法推导出的一类变度量方法》，《计算数学》24，23（1970）。[21] D. F. Shanno，《函数最小化中拟牛顿方法的条件数》，《计算数学》24，647（1970）。 *Practical Methods of Optimization* R. Fletcher，《优化方法》，（John Wiley Sons, Ltd，2000）。[22] I. Dumitriu 和 A. Edelman，《β系综的矩阵模型》，《数学物理学杂志》43，5830（2002）。[23] M. L. Mehta，《随机矩阵》，由 M. L. Mehta 编，纯粹与应用数学，第142卷（Elsevier，2004），第 xiii–xiv 页。 *Random Matrices*J. ˇ Suntajs、J. Bonˇca、T. c. v. Prosen 和 L. Vidmar，《量子混沌对多体局域化构成挑战》，《物理评论E》102，062144（2020）。[24] A. Prakash、J. H. Pixley 和 M. Kulkarni，《多体局域化的普适谱形因子》，《物理评论研究》3，L012019（2021）。[25] J. S. Cotler、G. Gur-Ari、M. Hanada、J. Polchinski、P. Saad、S. H. Shenker、D. Stanford、A. Streicher 和 M. Tezuka，《黑洞与随机矩阵》，《高能物理学杂志》2017，118（2017）。[27] J. Maldacena 和 D. Stanford，《关于 Sachdev-Ye-Kitaev 模型的评论》，《物理评论 D》94，106002（2016）。[28] L. D'Alessio、Y. Kafri、A. Polkovnikov 和 M. Rigol，《从量子混沌和本征态热化到统计力学与热力学》，《物理学进展》65，239（2016），https://doi.org/10.1080/00018732.2016.1198134。[29] R. J. Bell 和 P. Dean，《玻璃态二氧化硅中的原子振动》，《法拉第学会讨论》50，55（1970）。[30] B. B. Machta、R. Chachra、M. K. Transtrum 和 J. P. Sethna，《参数空间压缩是涌现理论和预测模型的基础》，《科学》342，604（2013），https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.1238723。[31] C. Cao、S. M. Carroll 和 S. Michalakis，《从希尔伯特空间构造空间：从整体纠缠中恢复几何》，《物理评论 D》95，24031（2017）。[32] S. M. Carroll 和 A. Singh，《量子部分学：将希尔伯特空间分解为具有准经典动力学的子系统》，《物理评论 A》103，022213（2021）。[33] J. D. Bekenstein，《黑洞与熵》，《物理评论 D》7，2333（1973）。

**补充材料：通过随机矩阵的近似二局域化从混沌中揭示秩序**

NicolasLoizeau[1], Flaviano Morone[1], Dries Sels[1,2]1纽约大学物理系，美国纽约州纽约市 *10003*2*Flatiron*研究所计算量子物理中心，美国纽约州纽约市第五大道 *162* 号，邮编 *10010*

## 第 1 节 – SCHRIEFER-WOLFF 局域化

在实践中，我们通过最小化代价函数 $C = \frac{1}{2^N}\sum_i (E_i - \mathcal{E}_i)^2$ 来对谱 $E_i$ 进行局域化，其中 $\mathcal{E}_i$ 是局域哈密顿量 $H' = \sum h_i \tau_i$ 的特征值。这里我们介绍一种值得注意的替代方法：使用 Schriefer-Wolff变换寻找酉算符 $U$，将哈密顿量 $H$ 变换为局域哈密顿量 $H' = U^\dagger H U$。

任意给定的哈密顿量都可以分解为属于目标子空间的部分和不属于该子空间的部分，即 $H = H_k + H_\perp$，其中 $H_k$ 表示哈密顿量在由 $k$-局域算符构成的子空间上的投影。一旦得到这样的分解，我们就可以尝试微扰地消除不需要的部分。设酉算符 $U = e^{-S}$ 将哈密顿量变换为 $H' = U^\dagger H U = e^{-S}(H_k + H_\perp)e^S$，假设 S 很小，我们将上述表达式展开为泰勒级数。在最低阶下，我们得到

$$H' = H_k + H_\perp - [S, H_k] - [S, H_\perp] + O(S^2) \tag{1}$$

因此，在最低阶，我们可以选择 S 使其消去 $H_\perp$，从而移除不需要的部分。这里有一个细微之处：如果 $H_\perp$ 在 $H$ 中含有对角分量，那么 $[S, H] = H_\perp$ 可能无解。对此，可以只在对易子中使用 $H_k$： $[S, H_k] = H_\perp$。这本质上等同于一种微扰 Schriefer-Wolff 变换，其中假设 $H_\perp$ 是相对于 $H_k$ 的小微扰。对后者进行对角化即可求解 $H_k = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n|$,，使得 $S$ 的矩阵元为：

$$\langle n| S |m\rangle = -\frac{\langle n| H_\perp |m\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} \tag{2}$$

当 $n \neq m$ 时，其他情况下为零。我们重复这一过程，直到 $H_\perp$ 足够小。每次迭代都会得到一个酉算符$U_i$，使当前的 $H$ 更接近局域形式。将初始 $H$ 局域化的最终酉算符是乘积$\prod_i U_i$。请注意，如果 $H_\perp$ 在 $|n\rangle$ 基下是对角的，即如果 $[H_k, H_\perp] = 0$，那么 $S = 0$。事实上，除非我们几乎已经收敛，否则与 $H_k$相比， $H_\perp$ 并不小。因此，我们只希望在每一步中去除一小部分 $\alpha$，并取 $U = e^{\alpha S}$。在实践中，对于规模不超过 $N = 12$的系统， $\alpha = 0.1$ 效果良好。这也保证了该过程收敛后，即 $U_i = \mathbb{1}$时， $S = 0$，剩余的非局域部分与局域部分对易。因此，当 $H$ 可局域化时，该过程不仅给出了一个使 $H$ 局域的基；当 $H$ 不可局域化时，它还将其分解为一个与非局域部分对易的局域部分。

**算法 1**基于 Schrieffer-Wolff 的局域化算法

$d \leftarrow$ H 的维数
**对于**迭代 $i$ **执行**
  $H_2 \leftarrow \mathcal{P}_{1,\ 2}(H)$
  $H_\perp \leftarrow H - H_2$
  $\{\epsilon_n\},\ V \leftarrow$ 对角化$(H_2)$
  $S \leftarrow -V^\dagger H_\perp V$
  **对于** $0 \le n < d,\ \ 0 \le m < d$ **执行**
    $S[n,m] \leftarrow \frac{S[n,m]}{\epsilon_n - \epsilon_m}$
  **结束循环**
  **对于** $0 \le n < d$ **执行**
    $S[n,n] \leftarrow 0$
  **结束循环**
  $S \leftarrow VSV^\dagger$
  $U_i \leftarrow e^{-S}$
  $H \leftarrow USU^\dagger$
  $U \leftarrow U_i U$
**结束循环**
**返回** $U$

**第 2 节 – N=3 情况下 2-局域投影算子秩的更紧界**

我们证明了，任何大小为 $2^N$ 的二局域可局域化投影算符，其秩都大于 $\frac{2^N}{M}$。通过考察量 $\langle q|\,\tau_i\,|q\rangle$，可以导出一个更紧的界。利用柯西–施瓦茨不等式，我们有

$$K = \frac{1}{2^N}\sum_i \left(\sum_q \langle q|\,\tau_i\,|q\rangle\right)^2 \le \frac{K}{2^N}\sum_i\sum_q \langle q|\,\tau_i\,|q\rangle^2 . \tag{3}$$

现在请注意，总和 $\sum_i \langle q|\,\tau_i\,|q\rangle^2$ 可以分解为两个和：一个对 1-局域字符串求和，另一个对仅含二体项的字符串求和。我们来考察 $\tau_i$ 为 1-局域时的量 $\langle q|\,\tau_i\,|q\rangle$。为简单起见，取 $N=3$。一个特定的 1-局域 $\tau$可写为 $\tau = \sigma_i^A \otimes \mathbb{1}^B \otimes \mathbb{1}^C$。定义 $\rho_q = |q\rangle\langle q|$。那么 $\langle q|\,\tau\,|q\rangle = \mathrm{Tr}(\rho_q \tau) = \mathrm{Tr}(\rho_q^A \sigma_i)$，其中 $\rho^A = \frac{\mathbb{1}+\overrightarrow{\alpha_A}\cdot\vec{\sigma}}{2}$是子系统 $A$上的约化密度矩阵。现在，已知 $\mathrm{Tr}(\rho_q^A \sigma_i) = \alpha_{Ai}$且 $|\overrightarrow{\alpha_A}| \le 1$，我们可以看出

$$\sum_{\tau_i \in 1-loc} \langle q|\,\tau_i\,|q\rangle^2 = |\overrightarrow{\alpha_A}|^2 + |\overrightarrow{\alpha_B}|^2 + |\overrightarrow{\alpha_C}|^2 \le 3 \tag{4}$$

我们可以用同样的思路为第二个求和推导一个界：令

$\tau$ $\langle q|\,\tau\,|q\rangle$ =为仅含 -local 的字符串。于是 $tr(\sigma_i^A \otimes \sigma_j^B \rho_{AB})$ 与 $\rho_{AB} = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_{AB} + \overrightarrow{\alpha_A}\cdot\vec{\sigma}\otimes\mathbb{1}_B + \mathbb{1}_A \otimes \overrightarrow{\alpha_B}\cdot\vec{\sigma} + \sum_{k,\ l}\beta_{AB\ k,\ l}\sigma_k^A \otimes \sigma_l^B)$。计算$\sigma_i^A \otimes \sigma_j^B \rho_{AB}$的迹时， $\alpha$和 $\beta$中的单体项贡献为零，并且 $\langle q|\,\tau\,|q\rangle = \frac{1}{4}tr(\sum_{k,\ l}\beta_{AB\ k,\ l}\sigma_i^A\sigma_k^A \otimes \sigma_j^B\sigma_l^B) = \beta_{AB\ i,\ j}$。最终我们得到

$$\sum_{\tau_i \in 2-loc-only} \langle q|\,\tau_i\,|q\rangle^2 = |\overrightarrow{\beta_{AB}}|^2 + |\overrightarrow{\beta_{BC}}|^2 + |\overrightarrow{\beta_{AC}}|^2 \le 3 \tag{5}$$

and

$$\sum_i \langle q|\,\tau_i\,|q\rangle^2 \le 6 \tag{6}$$

这在 N=3 情形下给出 $K \ge \frac{4}{3}$。

**第 3 节 – 梯度和海森矩阵推导**

在这里，我们推导代价函数的梯度和海森矩阵

$$C(h) = \frac{1}{2^N}\sum_n (E_n - \mathcal{E}_n)^2 \tag{7}$$

其中， $\mathcal{E}_n$ 是局域哈密顿量 $H' = \sum_i h_i\tau_i$的特征值。让我们计算 $C$ 相对于 $h$的梯度和海森矩阵。首先对 $H'|n\rangle = \mathcal{E}_n|n\rangle$ 关于 $h_i$求导：$(\partial_i H')|n\rangle + H'\partial_i|n\rangle = \partial_i(\mathcal{E}_n)|n\rangle + \mathcal{E}_n\partial_i|n\rangle$，左乘 $\langle n|$ 后得到 $\langle n|\tau_i|n\rangle + \langle n|\mathcal{E}_n\partial_i|n\rangle = \partial_i(\mathcal{E}_n) + \mathcal{E}_n\langle n|\partial_i|n\rangle \implies$

$$\partial_i\mathcal{E}_n = \langle n|\tau_i|n\rangle \tag{8}$$

现在，$C = \frac{1}{2^{N+1}}\left(\sum_n E_n^2 + \sum_n \mathcal{E}_n^2 - 2\sum_n E_n\mathcal{E}_n\right) = \frac{1}{2^{N+1}}\left(\sum_n |H|^2 + 2^N\sum_i h_i^2 - 2\sum_n E_n\mathcal{E}_n\right)$ 并且由方程 8 可得

$$\partial_i C = h_i - \frac{1}{2^N}\sum_n E_n\langle n|\tau_i|n\rangle . \tag{9}$$

要计算海森矩阵，我们先回到 $\tau_i|n\rangle + H'\partial_i|n\rangle = \partial_i(\mathcal{E}_n)|n\rangle + \mathcal{E}_n\partial_i|n\rangle$，但这次将 $\langle m|$乘在左侧。于是得到

$$\langle m|\tau_i|n\rangle = (\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m)\langle m|\partial_i|n\rangle . \tag{10}$$

现在，对梯度求导：$\partial_i\partial_j C = \delta_{ij} - \frac{1}{2^N}\sum_n E_n\ \partial_i\langle n|\ \tau_j|n\rangle + \langle n|\tau_j\partial_i|n\rangle$ $\sum_m |m\rangle\langle m|$ $\partial_i\partial_j C = \delta_{ij} - \frac{1}{2^N}\sum_n\sum_m E_n\ \partial_i\langle n|\ |m\rangle\langle m|\tau_j|n\rangle + \langle n|\tau_j|m\rangle\langle m|\partial_i|n\rangle$ $n = m$ $n \neq m$ 10 (( ))。代入：(( ))。现在将 和 分开，并在 $n \neq m$ 情形下使用方程：

$$g_{ij} = \partial_i\partial_j C = \delta_{ij} - \frac{1}{2^N}\sum_n\sum_{m\neq n} E_n\left(\frac{\langle n|\tau_i|m\rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}\langle m|\tau_j|n\rangle + \langle n|\tau_j|m\rangle\frac{\langle m|\tau_i|n\rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}\right) \tag{11}$$

$$- \frac{1}{2^N}\sum_n E_n\left((\partial_i\langle n|)|n\rangle\langle n|\tau_j|n\rangle + \langle n|\tau_j|n\rangle\langle n|\partial_i|n\rangle\right) \tag{12}$$

but 注意， $\partial_i\langle n|n\rangle = 0 \implies (\partial_i\langle n|)|n\rangle = -\langle n|\partial_i|n\rangle$，因此第二个求和项为 0，我们有 e

$$g_{ij} = \delta_{ij} - \frac{1}{2^N}\sum_n\sum_{m\neq n}\frac{E_n}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}\left(\langle n|\tau_i|m\rangle\langle m|\tau_j|n\rangle + \langle n|\tau_j|m\rangle\langle m|\tau_i|n\rangle\right) \tag{13}$$

现在来计算当.....时的极小值处的 $\partial_i\partial_j C$ $E_i = \mathcal{E}_i$ $\partial_i\partial_j C = \delta_{ij} -$。首先注意到，其中.....在 中是对称的。此外，$\frac{1}{2^N}\sum_n\sum_{m\neq n}\frac{E_n}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}T_{ij}^{nm}$ $T_{ij}^{nm}$ $n\ m$

$$\frac{1}{2}\sum_{n,m\neq n}\frac{E_n - E_m}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}T_{ij}^{nm} = \frac{1}{2}\sum_{n,m\neq n}\frac{E_n}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}T_{ij}^{nm} - \frac{1}{2}\sum_{n,m\neq n}\frac{E_m}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}T_{ij}^{nm} \tag{14}$$

$$= \sum_{n,m\neq n}\frac{E_n}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}T_{ij}^{nm} \tag{15}$$

在极小值处，对于 ~~$n \neq m$~~， $\frac{E_n - E_m}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} = 1$，并且

$$\begin{aligned} g_{ij}^0 &= \delta_{ij} - \frac{1}{2^{N+1}}\sum_n\sum_{m\neq n}\langle n|\tau_i|m\rangle\langle m|\tau_j|n\rangle + \langle n|\tau_j|m\rangle\langle m|\tau_i|n\rangle \\ &= \delta_{ij} - \frac{1}{2^{N+1}}\sum_n\sum_m\langle n|\tau_i|m\rangle\langle m|\tau_j|n\rangle + \langle n|\tau_j|m\rangle\langle m|\tau_i|n\rangle + \frac{1}{2^{N+1}}\sum_n\langle n|\tau_i|n\rangle\langle n|\tau_j|n\rangle + \langle n|\tau_j|n\rangle\langle n|\tau_i|n\rangle \\ &= \frac{1}{2^N}\sum_n\langle n|\tau_i|n\rangle\langle n|\tau_j|n\rangle \end{aligned} \tag{16}$$

注意，在极小值处， $h^0$ 是 $g^0$ 的特征向量，对应的特征值为 1。$\sum_i g_{ij}h_i = \frac{1}{2^N}\sum_{n,\ i}\langle n|\tau_i|n\rangle\langle n|\tau_j|n\rangle h_i = \frac{1}{2^N}\sum_n\langle n|H'|n\rangle\langle n|\tau_j|n\rangle = \frac{1}{2^N}\sum_{n,\ i}\mathcal{E}_n\langle n|\tau_j|n\rangle$。在极小值处， $\partial_i C = 0$ 因此，利用方程9，我们有

$$\sum_i g_{ij}^0 h_i^0 = h_j^0. \tag{17}$$

当 $\tau_i$ 为对角矩阵时，

$$g_{ij}^0 = \frac{1}{2^N}\sum_n \tau_{i,nn}\tau_{j,nn} \tag{18}$$

$$= \frac{1}{2^N}\sum_n \mathrm{Tr}(\tau_i\tau_j) \tag{19}$$

$$= \delta_{ij}. \tag{20}$$

### 第 4 节——海森特征值

我们来推导极小值处 $g^0$ 海森矩阵特征值的一般公式。从

$$g^0_{ij} = \frac{1}{2^N}\sum_n \langle n|\,\tau_i\,|n\rangle\,\langle n|\,\tau_j\,|n\rangle\,, \tag{21}$$

定义 $Q_{ni} = \frac{1}{\sqrt{2^N}}\langle n|\,\tau_i\,|n\rangle$ 并注意到 $g^0_{ij} = Q^TQ$。考虑 $Q$的奇异向量 $v_k, f_k$和奇异值 $\mu_k$: $Qv_k = \mu_k f_k$ 和 $Q^Tf_k = \mu_k v_k$。将这些特征值方程分别乘以 $Q$ 或 $Q^T$，得到 $g^0v_k = \mu_k^2 v_k$ 和$g^0f_k = \mu_k^2 f_k$，即 $\lambda_k = \mu_k^2$ 是 $g^0$ 的一个特征值。

现在，注意到 $f_k^TQQ^Tf_k = f_k^T\mu^2 f_k$，因此我们有

$$\lambda_k = \mu_k^2 = \frac{f_k^TQQ^Tf_k}{f_k^Tf_k}. \tag{22}$$

利用 $Q$的定义，我们可以将分子改写为:

$$f_k^TQQ^Tf_k = \frac{1}{2^N}\sum_i\sum_{n,m} f_n\,\langle n|\,\tau_i\,|n\rangle\,f_m\,\langle m|\,\tau_i\,|m\rangle \tag{23}$$

$$= \frac{1}{2^N}\sum_i Tr\left(\sum_n f_n|n\rangle\langle n|\tau_i\right)Tr\left(\sum_m f_m|m\rangle\langle m|\tau_i\right) \tag{24}$$

定义 $F(H) = \sum_m f_m|m\rangle\langle m|\tau_i$，我们有 $f_k^TQQ^Tf_k = \frac{1}{2^N}Tr(F(H)\tau_i)^2$。类似地，对于分母， $f_k^Tf_k = \sum_n f_{kn}^2 = Tr\left(\sum_{n,m} f_n|n\rangle\langle n|f_m|m\rangle\langle m|\right) = Tr(F(H)^2)$，因此， $g^0$的特征值可以写为

$$\lambda_k = \frac{1}{2^N}\frac{\sum_i Tr(F(H)\tau_i)^2}{Tr(F(H)^2)}. \tag{25}$$

### 第 5 节——计算海森矩阵的第二大特征值

在此，我们推导 $\lambda_2$ 的公式，假设 $F_2(H)$ 是 $H^2$ 的无迹部分，并且 $\tau_i$ 是对角的二局部泡利串。请注意，这并不等同于在对角情形下计算 $g^0$ 的第二特征值。在对角情形下， $g^0$ 的所有特征值都为 1。相反，我们使用公式（25），并取一组对角的 $\tau_i$ ，以便估计一般情形下的 $\lambda_2$ 。从以下内容开始

$$\lambda_2 = \frac{1}{2^N}\frac{\sum_i \mathrm{Tr}\left(F_2(H)\tau_i\right)^2}{\mathrm{Tr}\left(F_2(H)^2\right)} \tag{26}$$

其中 $F_2(H)$ 是 $H^2$ 的无迹部分，即 $F_2(H) = \sum_{i\neq j} h_ih_j\tau_i\tau_j$。定义分子 $\alpha = \sum_i \mathrm{Tr}(F_2(H)\tau_i)^2$ 和分母 $\beta = \mathrm{Tr}\left(F_2(H)^2\right)$。

### 分子

首先，我们聚焦于分子

$$\alpha = \sum_k\left(\sum_{i\neq j} h_ih_j\,\mathrm{Tr}(\tau_i\tau_j\tau_k)\right)^2. \tag{27}$$

验证约束 $i\neq j$ 无关紧要:

$$\sum_{i\neq j} h_ih_j\,\mathrm{Tr}(\tau_i\tau_j\tau_k) = \sum_{i,j} h_ih_j\,\mathrm{Tr}(\tau_i\tau_j\tau_k) - \sum_i h_i^2\,\mathrm{Tr}(\tau_i\tau_i\tau_k) \tag{28}$$

$$= \sum_{i,j} h_ih_j\,\mathrm{Tr}(\tau_i\tau_j\tau_k) \tag{29}$$

因为 $\mathrm{Tr}(\tau_i\tau_i\tau_k) = \mathrm{Tr}(\tau_k) = 0$。

现在将泡利串的指标重新标记为耦合的指标：$i \to (a > b)$，$j \to (c > d)$，$k \to (e > f)$ 并定义记号 $\mathrm{Tr}(ab, cd, ef) = \mathrm{Tr}(Z_a \otimes Z_b \cdot Z_c \otimes Z_d \cdot Z_e \otimes Z_f)$ 首先考虑式（27）括号内的部分。

$$\sum_{a>b}\sum_{c>d} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef) = \sum_{a>b}\frac{1}{2}\left[\sum_{cd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef) - \sum_{c} J_{ab}J_{cc}\,\mathrm{Tr}(ab, cc, ef)\right] \tag{30}$$

因为 $J_{cc} = 0$，我们有

$$\sum_{a>b}\sum_{c>d} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef) = \sum_{a>b}\frac{1}{2}\left[\sum_{cd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef)\right] \tag{31}$$

同理

$$\sum_{a>b}\sum_{c>d} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef) = \frac{1}{4}\sum_{ab}\sum_{cd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef) \tag{32}$$

Now,

$$\alpha = \sum_{e>f}\left[\frac{1}{4}\sum_{ab}\sum_{cd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef)\right]^2 \tag{33}$$

$$= \frac{1}{16}\frac{1}{2}\left(\sum_{ef}\left[\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef)\right]^2 - \sum_{e}\left[\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ee)\right]^2\right) \tag{34}$$

并定义

$$\alpha' = \frac{1}{32}\sum_{e}\left[\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ee)\right]^2 \tag{35}$$

使得

$$\alpha = \frac{1}{32}\sum_{ef}\left[\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef)\right]^2 - \alpha' \tag{36}$$

现在将 $e, f$ 中的求和拆分到 $e \neq f$ 和 $e$ 中。这会抵消 $\alpha'$ 项：

$$\alpha = \frac{1}{32}\sum_{e\neq f}\left[\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef)\right]^2 + \frac{1}{32}\sum_{e}\left[\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ee)\right]^2 - \alpha' \tag{37}$$

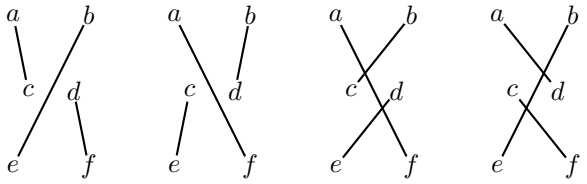
$$= \frac{1}{32}\sum_{e\neq f}\left[\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab, cd, ef)\right]^2 \tag{38}$$

迹 $\mathrm{Tr}(ab, cd, ef)$ 只有两个可能值：0 或 $2^N$。因此，计算 $\alpha$ 就是确定 $a$、$b$、$c$、$d$、$e$、$f$ 的哪些组合具有非零迹。$\mathrm{Tr}(ab, cd, ef) = \mathrm{Tr}(Z_a \otimes Z_b \cdot Z_c \otimes Z_d \cdot Z_e \otimes Z_f)$ 非零，当且仅当每个位置上的 $Z$ 数量为偶数。这启发我们采用图解方法来计算 $\mathrm{Tr}(ab, cd, ef)$：和式中每个非零迹项都用一个图表示。考虑一个图，其中节点是指标 $a$、$b$、$c$、$d$、$e$、$f$，两个节点之间有一条边表示这两个指标相等。一组简单规则可以给出非零图：

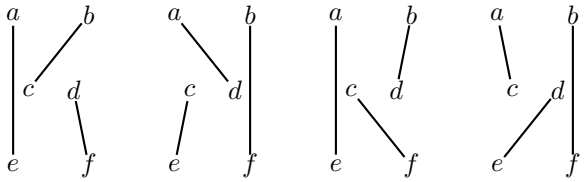
- 边 $ab$，$cd$，$ef$ 因 $J_{aa} = 0$ 和 $e \neq f$ 而被禁止
- 连通分量包含偶数个节点

- 边 $ab,\ cd,\ ef$ 因传递性而被禁止，例如这对边 $ac,\ cb$ 是被禁止的。

共有 8 个贡献图：




(39)




(40)

考虑第一个（8 个图的贡献都相同）

$$\alpha = \frac{1}{32}\sum_{e\neq f}\left[\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}\,\mathrm{Tr}(ab,cd,ef)\right]^2 \tag{41}$$

$$= \frac{1}{32}\sum_{e\neq f}\left[8\sum_{abcd} J_{ab}J_{cd}2^N\delta_{ac}\delta_{be}\delta_{df}\right]^2 \tag{42}$$

$$= \frac{64}{32}4^N\sum_{e\neq f}\left[\sum_{a} J_{ae}J_{af}\right]^2 \tag{43}$$

$$= 2\cdot 4^N\sum_{ef}\left[\sum_{a} J_{ae}J_{af}\right]^2 - 2\cdot 4^N\sum_{e}\left[\sum_{a} J_{ae}J_{ea}\right]^2 \tag{44}$$

$$= 2\cdot 4^N\sum_{efab} J_{ae}J_{af}J_{be}J_{bf} - 2\cdot 4^N\sum_{e}\left[(J^2)_{ee}\right]^2 \tag{45}$$

$$= 2\cdot 4^N\left(\mathrm{Tr}(J^4) - \sum_{e}\left[(J^2)_{ee}\right]^2\right) \tag{46}$$

**分母**

$$\beta = \text{迹} \left( \left[ \sum_{i \neq j} h_i h_j \tau_i \tau_j \right]^2 \right) \tag{47}$$

$$= \operatorname{Tr} \left( \left[ \sum_{ij} h_i h_j \tau_i \tau_j - \sum_i h_i^2 \mathbb{1} \right]^2 \right) \tag{48}$$

$$= \operatorname{Tr} \left( \sum_{ijkl} h_i h_j h_k h_l \tau_i \tau_j \tau_k \tau_l + \left[ \sum_i h_i^2 \right]^2 \mathbb{1} - 2 \left[ \sum_i h_i^2 \mathbb{1} \right] \sum_{ij} h_i h_j \tau_i \tau_j \right) \tag{49}$$

$$= \sum_{ijkl} h_i h_j h_k h_l \operatorname{Tr}(\tau_i \tau_j \tau_k \tau_l) + 2^N \left[ \sum_i h_i^2 \right]^2 - 2 \left[ \sum_i h_i^2 \right] \sum_{ij} h_i h_j \operatorname{Tr}(\tau_i \tau_j) \tag{50}$$

$$= \sum_{ijkl} h_i h_j h_k h_l \operatorname{Tr}(\tau_i \tau_j \tau_k \tau_l) + 2^N \left[ \sum_i h_i^2 \right]^2 - 2 \left[ \sum_i h_i^2 \right] \sum_{ij} h_i h_j \delta_{ij} 2^N \tag{51}$$

$$= \sum_{ijkl} h_i h_j h_k h_l \operatorname{Tr}(\tau_i \tau_j \tau_k \tau_l) - 2^N \left[ \sum_i h_i^2 \right]^2 \tag{52}$$

$$= \beta' \qquad + \quad \beta'' \tag{53}$$

第二项是

$$\beta'' = -2^N \left[ \sum_i h_i^2 \right]^2 \tag{54}$$

$$= -2^N \left[ \sum_{a>b} J_{ab}^2 \right]^2 \tag{55}$$

$$= -2^N \left[ \frac{1}{2} \sum_{ab} J_{ab}^2 \right]^2 \tag{56}$$

$$= -\frac{2^N}{4} \left[ \operatorname{Tr} J^2 \right]^2 \tag{57}$$

现在考虑 $\beta' = \sum_{ijkl} h_i h_j h_k h_l$迹$(\tau_i \tau_j \tau_k \tau_l)$，并使用格点和耦合对其重新标记。条件 $a > b$使每个求和都带有一个 $\frac{1}{2}$，因为所有对角项都为零，这是由于 $J_{aa} = 0$。

$$\beta' = \sum_{ijkl} h_i h_j h_k h_l \operatorname{Tr}(\tau_i \tau_j \tau_k \tau_l) \tag{58}$$

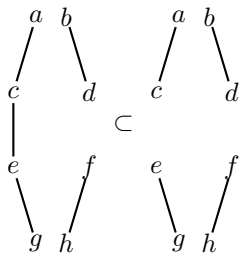
$$= \sum_{a>b} \sum_{c>d} \sum_{e>f} \sum_{g>h} J_{ab} J_{cd} J_{ef} J_{gh} \operatorname{Tr}(ab, cd, ef, gh) \tag{59}$$

$$= \frac{1}{2^4} \sum_{ab} \sum_{cd} \sum_{ef} \sum_{gh} J_{ab} J_{cd} J_{ef} J_{gh} \operatorname{Tr}(ab, cd, ef, gh) \tag{60}$$

现在我们可以使用图来计算这个和。

*Diagram inclusion*

这里使用四线图比较棘手，因为有些图包含其他图。例如

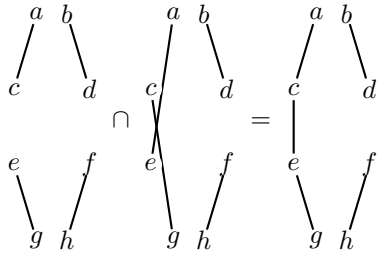



(61)

因为第二个图表示的所有约束都包含在第一个图表示的约束中，因此第一个图表示的所有项也都包含在第二个图的项中。仅考虑高阶图（约束较少的图）是不够的，因为有些图会重叠，即共享某些项。

*Diagram overlap*

有些图会重叠，例如：



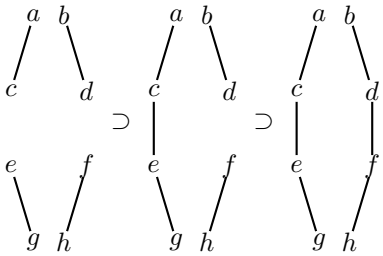

(62)

因此，即使我们只对高阶图求和，有些贡献项也会被重复计数，所以需要减去一次。在这个例子中，对前两个图的项求和时，需要减去第三个图。

*Diagram counting*

为了解决图重叠问题，我们对每个单个图进行计数（而不仅仅是高阶图），但每次计数一个图时，都减去其中包含的所有图。这样做时，我们将一个图中的两个不连通分量视为明确不同的；因此，如果在求和时允许它们相等，就需要减去它们相等时所对应的那些被包含的图。

考虑该链




(63)

在计数第一个图时，必须减去第二个图。但第三个图必须从第二个图中减去。因此，第三个图必须加到第一个图上。一般而言，可以按照以下算法，对图的包含关系图执行深度优先搜索，从而递归地为图分配权重：

**算法2**为每个图表分配权重

**过程** COUNT(图表 D，整数 v)
  D.权重 += v
  **对于** D 中包含的每个图表 E **执行**
    计数(E,-v)
  **结束循环**
**结束过程**
**对于**每个图表 D **执行**
  计数(D,1)
**结束循环**

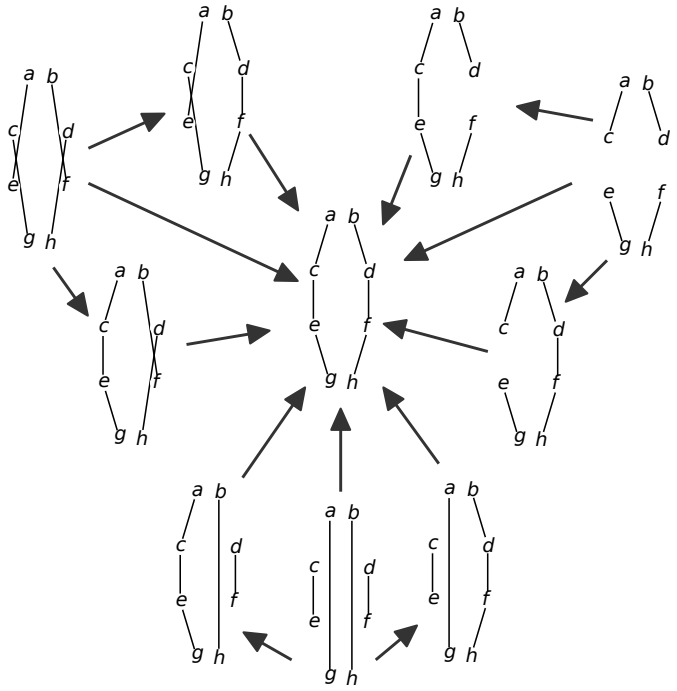
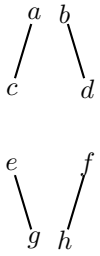


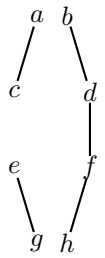
图 S1. 图表的包含关系图中的一个子图示例。边的方向指向被包含的图表。要为某个图表分配权重，需从该图表在图中对应的位置开始，并按照算法 1 所述递归地减去其邻居。

*Diagram types*

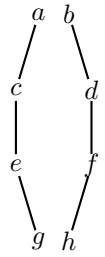
这里为每种图表类型各举一个例子



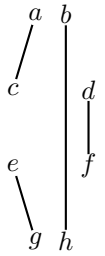
$$= J_{ab}J_{cd}J_{ef}J_{gh}\delta_{ac}\delta_{bd}\delta_{eg}\delta_{fh} = J_{ab}J_{ab}J_{ef}J_{ef} = \mathrm{Tr}(J^2)^2 \tag{64}$$




$$= J_{ab}J_{cd}J_{ef}J_{gh}\delta_{ac}\delta_{bdfh}\delta_{fh} = J_{ab}J_{ab}J_{eb}J_{eb} = \sum_b \left((J^2)_{bb}\right)^2 \tag{65}$$




$$= J_{ab}J_{cd}J_{ef}J_{gh}\delta_{aceg}\delta_{bdfh} = J_{ab}J_{ab}J_{ab}J_{ab} = \sum_{ab}(J_{ab})^4 \tag{66}$$




$$= J_{ab}J_{cd}J_{ef}J_{gh}\delta_{ac}\delta_{bh}\delta_{df}\delta_{eg} = J_{ab}J_{ad}J_{ed}J_{eb} = \operatorname{Tr} J^4 \tag{67}$$

**结果**

通过按程序枚举所有项并运行加权算法，我们得到

$$\beta' = \frac{2^N}{16}\left(48\operatorname{Tr} J^4 + 12\operatorname{Tr}(J^2)^2 - 96\sum_a \left((J^2)_{aa}\right)^2 + 32\sum_{ab}(J_{ab})^4\right) \tag{68}$$

so

$$\beta = \beta' + \beta'' \tag{69}$$

$$= \frac{2^N}{16}\left(48\operatorname{Tr} J^4 + 12\operatorname{Tr}(J^2)^2 - 96\sum_a \left((J^2)_{aa}\right)^2 + 32\sum_{ab}(J_{ab})^4\right) - \frac{2^N}{4}\left(\operatorname{Tr} J^2\right)^2 \tag{70}$$

$$= 2^N\left(3\operatorname{Tr} J^4 + \frac{1}{2}\operatorname{Tr}(J^2)^2 - 6\sum_a \left((J^2)_{aa}\right)^2 + 2\sum_{ab}(J_{ab})^4\right) \tag{71}$$

因此，若我们仅包括对角 $\lambda_2$ 项，则由方程（26）定义的 $\tau$ 的精确公式为

$$\lambda_2 = \frac{\alpha}{2^N\beta} \tag{72}$$

$$= \frac{2\cdot\left(\operatorname{Tr}(J^4) - \sum_e \left[(J^2)_{ee}\right]^2\right)}{3\operatorname{Tr} J^4 + \frac{1}{2}\operatorname{Tr}(J^2)^2 - 6\sum_a \left((J^2)_{aa}\right)^2 + 2\sum_{ab}(J_{ab})^4} \tag{73}$$

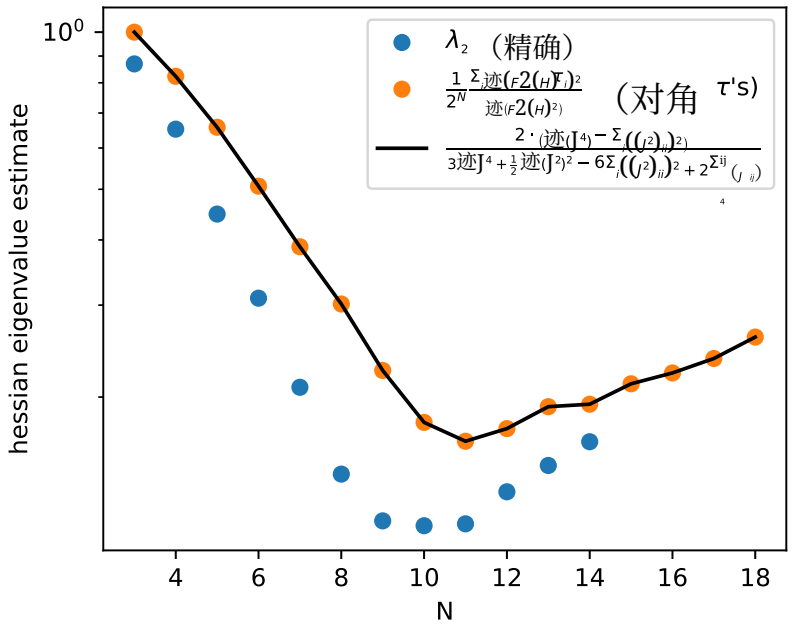



图 S2。我们通过绘制方程（26）（橙色点）和（73）（黑线）随 $N$ 变化的曲线，来检验推导。请注意，这是对精确 $\lambda_2$ 的近似，因为这两个公式仅包含对角 $\tau$。蓝色点是通过对角化海森矩阵计算得到的精确第二特征值。

### 第 6 节 – 对角情形下的低秩 $J$ 局域化

在图 S2 中，我们可以看到，$\lambda_2$ 由方程（73）和（26）定义的量在 $N = 11$ 之后增加。请注意，在大 $N$ 极限下，方程（73）变为

$$\lambda_2 \sim \frac{2\,\mathrm{Tr}(J^4)}{3\,\mathrm{Tr}\,J^4 + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}(J^2)^2} \tag{74}$$

$$\leq 4\frac{\mathrm{Tr}(J^4)}{\mathrm{Tr}(J^2)^2} \tag{75}$$

如果 $\lambda_2$ 在较大 $N$ 时不趋于零，这表明 $J$ 在较大 $N$ 时具有较低的有效秩，而且我们可以仅使用低秩 $J$ 对高斯正交系综谱进行 2-局域化。我们在图 S3 中检验这一假设。我们不再在耦合 $J$（或权重 $h_i$）下最小化代价函数，而是将 $J$ 编码为数量较少的特征向量 $J = \sum_i v_i v_i^T$，并将这些 $v_i$ 向量的元素用作问题的参数。对于 1 个特征向量，这一过程等价于 1-局域化；也就是说，无论是尝试进行 1-局域化，还是尝试使用秩 1 的 J 进行 2-局域化，优化后的最终代价都相同。

### 第 7 节 – 稀疏局域化

二局域哈密顿量这一概念中并不包含几何局域性的概念。我们可以强加某种几何结构，例如强制在一维链上实现局域化。在这里，我们探讨耦合 $h_i$ 能有多稀疏。定义一个新的代价函数

$$C_\lambda(h) = \frac{1}{2^N}\sum_n (E_n - \mathcal{E}_n)^2 + \lambda \sum |h_i| \tag{76}$$

，以此强制稀疏性 $l1$ 范数。在图S4 中，我们展示了在代价函数中引入这一 $l1$ 范数如何影响结果的稀疏性。我们发现，可以在保持代价相对较低的同时实现显著的稀疏性。

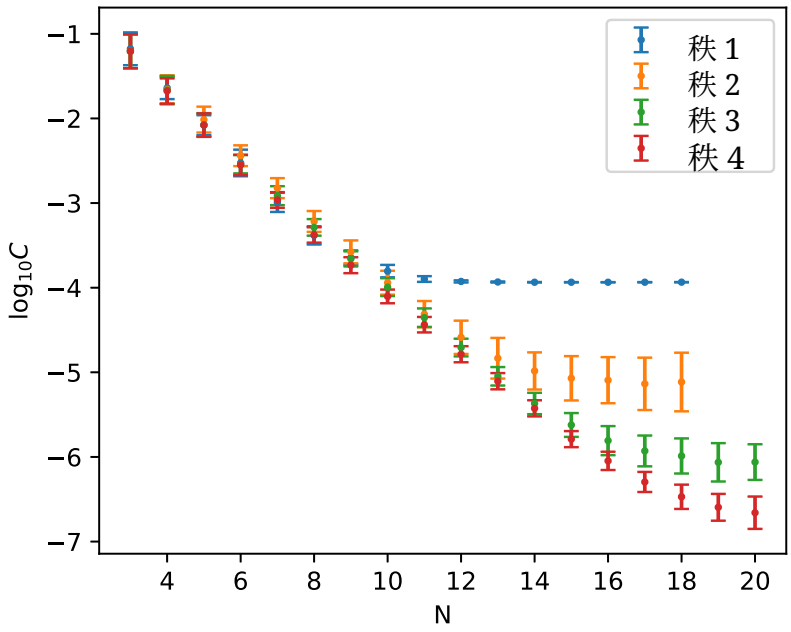



图 S3. 仅使用 $ZZ$ 个字符串进行二局域化的残差代价函数 $C$，与耦合矩阵不同截断情况下的 $N$ $J$.

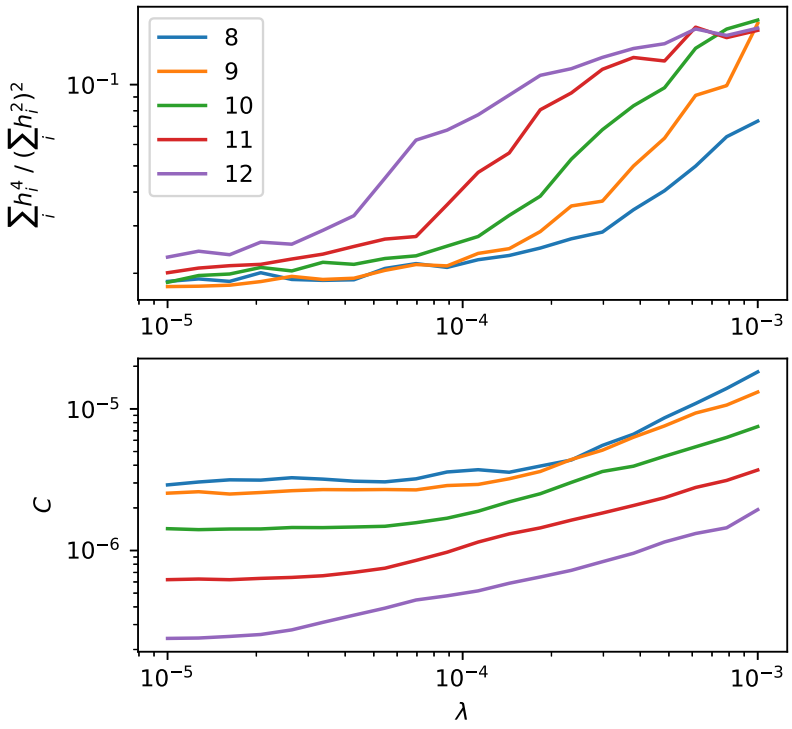



图 S4. 上：代价函数随参数 $\lambda$ 的变化。请注意，这是原始代价函数，不包括 $l1$ 范数，但优化时使用的代价函数中包含了 $l1$ 范数。下： $h$ 的稀疏性。 $\sum_i h_i^4 / (\sum_i h_i^2)^2$ 的值较大意味着 $h$ 是稀疏的。