arXiv:2304.05149v1 [math-ph] 11 Apr 2023

使用数值矩阵分解作为随机规范的费米子相空间表示量子动力学模拟

Fran¸cois Rousse [1], [1,2], [1], ◦ [1], [1 3]
[1] School of Science and Technology Örebro University 70182 Örebro Sweden
Massimiliano Fasi Andrii Dmytryshyn Marten Gulliksson Magnus Ogren¸, , ,
[2] Department of Computer Science, Durham University, Stockton Road, DH1 3LE, UK
[3] Hellenic Mediterranean University, P.O. Box 1939, GR-71004, Heraklion, Greece(日期：2023年4月12日)

高斯相空间表示可用于对费米子粒子的量子动力学进行数值实现。为了改善数值结果，我们探索了在此类实现中使用动态扩散规范。我们通过将少体系统的量子动力学与独立的精确解进行基准比较来实现这一点。这里将扩散规范实现为所谓的噪声矩阵，该矩阵满足由相空间表示所对应的福克–普朗克方程定义的矩阵方程。对于本文所考察的含费米子粒子的物理系统，新扩散规范的数值计算使实际模拟时间得以延长一倍，相较于迄今已知的解析噪声矩阵而言。这一发展可能会对未来多体系统的量子动力学模拟产生深远影响。

I. 引言

我们对少体系统的量子动力学进行基准测试，以研究一种用于费米子高斯相空间表示（GPSR）扩散规范的新数值方法， [1, 2] 旨在拓展该方法的实际适用性。

扩散规范通过一个时变矩阵 $B \in \mathbb{C}^{n\times m}$ 表示，该矩阵满足矩阵方程

$$D = BB^T, \tag{1}$$

其中， $D \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 表示相应福克–普朗克方程（FPE）中二阶导数项的系数。通过使用玻色子的正-P [3] 算符映射以及费米子高斯相空间表示 [1, 2], ，可以推导出福克–普朗克方程

$$\frac{\partial P(\vec{z})}{\partial t} = -\sum_j \frac{\partial\{a_j(\vec{z})P(\vec{z})\}}{\partial z_j} + \frac{1}{2}\sum_{j,k}\frac{\partial^2\{D_{j,k}(\vec{z})P(\vec{z})\}}{\partial z_j \partial z_k},\ \vec{z}\in\mathbb{C}^n, \tag{2}$$

该方程适用于玻色子、费米子或玻色子–费米子混合系统的时变概率分布 $P(\vec{z})$；这些系统的二次量子化哈密顿量包含至多四个产生算符和湮灭算符的项。

我们可以将福克–普朗克方程（2）改写为伊藤解释下的随机微分方程（SDE） [4]

$$\dot{\vec{z}} = \vec{a}(\vec{z}) + \vec{b}(\vec{z},\vec{\eta}),\quad \vec{b}(\vec{z},\vec{\eta}) = B(\vec{z})\vec{\eta}, \tag{3}$$

其中， $\vec{\eta}$是一个 $m\times 1$ 高斯噪声向量，点表示对时间 d/dt求导。我们需要构造一个矩阵 $B\in\mathbb{C}^{n\times m}$ ，使其满足矩阵方程 **(1)** [4], ，其中 D 是式 **(2)** 中的矩阵。式 **(1)** 所定义的B 自由度称为扩散规范 [5, 6]。本文重点研究扩散规范的应用，以提高 GPSR 数值实现的实时持久性。请注意，原则上，矩阵 B 可以有任意数量的列；列数越多， $\vec{\eta}$中的噪声分量也越多。

对式 **(2)** 和 **(3)** 中复相空间变量 z_j 求得的随机平均，直接关联于一阶物理量子算符 $\hat{}O$ 的矩，即 $\langle z_j\rangle \leftrightarrow \langle \hat{}O_j\rangle$；并间接关联于高阶物理算符矩 [2]。

在没有边界修正 [2], 且采样误差并非大到无法实际应用的情况下，随着轨迹数量不断增加，相空间变量的随机平均将趋近于精确的量子力学期望值；每条轨迹都是随机微分方程（3）的一种特定实现。然而，经过一定的模拟时间后，可能会出现边界修正，或者个别轨迹趋于无穷大，从而导致此后数值结果变得不可靠。我们将这些问题出现前经过的时间称为实际模拟时间。

使用虚时间表示逆温度 $\sim T^{-1}$ 时，类似的边界修正会妨碍费米子基态的计算，即 $T\to 0$ 极限。该现象最早在玻色子系统中被记录 [7, 8], ，之后研究费米子系统的研究人员也观察到了这一现象 [9, 10], ，并成功借助投影方法缓解了这一问题 [9–11]。

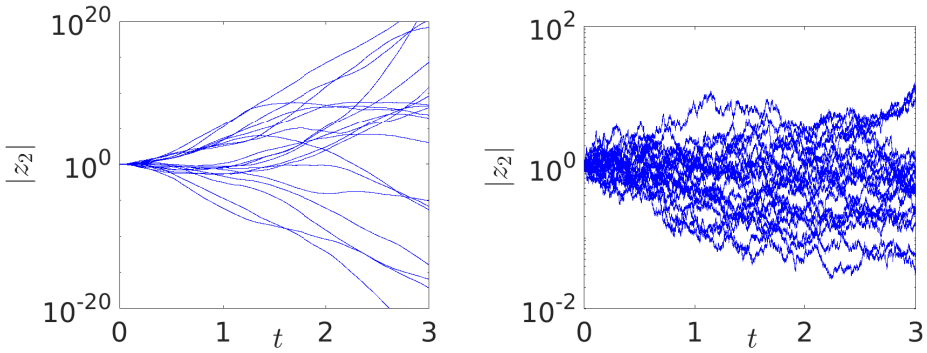

图 1：（在线彩色）采用不同扩散规范时，20 条独立轨迹的正-P 动力学。左：标准正-P，使用方程 (A4) 的噪声矩阵 B。右：“最优”噪声矩阵 B，即方程 (A5) 中满足 $\gamma \simeq 3.1985$ 的矩阵，见 [6]。注意两个对数纵轴的刻度不同。参数和初始条件分别为 $\omega = 0$、$N = 10^4$、$\chi = 10^{-2}$（即 $t_{\rm opt} = 1/(\sqrt{N}\chi) = 1$），按照方程 (6) 设定，与 [5] 相同。

然而，对于量子动力学 [12–14],，即实时间演化，人们始终观察到边界修正伴随着明显的信号，称为尖峰轨迹。

我们提出并研究了一种用于费米子高斯相空间表示 [1, 2] 中扩散规范的新数值方法。我们通过将少体系统的量子动力学与已知精确解进行基准测试，评估这项新技术。

我们还在费米子量子动力学计算中展示了这类尖峰轨迹。具体而言，我们通过数值示例表明，使用数值扩散规范可以延缓尖峰轨迹的出现，从而延长实际模拟时间。数值扩散规范由矩阵 B 表示；在实现随机微分方程的每个离散时间步长中，该矩阵都是矩阵方程 (1) 的一个数值解。

数值扩散规范还具有第二个优势：在实践中，对于一般的哈密顿量，寻找方程(1)的解析解 B 可能很繁琐，尽管已有各种具体示例 [12–14]。

在以下各节中，我们讨论三种相空间表示。首先，我们介绍众所周知的玻色子非谐振子 [15], 如前所述，扩散规范的作用在文献中至少已有 20 年的记载。随后，我们描述一个由费米–哈伯德哈密顿量支配的系统。最后，我们讨论一个混合系统，该系统展示了将相空间方法应用于费米子–玻色子哈密顿量的优势。这就是所谓的费米–玻色模型 [16],，本文利用它来模拟从分子玻色–爱因斯坦凝聚体到成对费米原子的转换。

这三个分别属于玻色子系统、费米子系统和混合系统的例子，例如在量子光学、固体物理和量子原子光学中都具有重要意义。然而，我们所考虑的方法更为普适，可能适用于不同应用领域中许多其他哈密顿量的精确量子动力学。

II. 示　　例性的相空间表　　示

第一个例子 A 旨在作为扩散规范的简单介绍，选自该主题的早期文献。接下来的两个例子 B 和 C 是费米子系统的表示——我们将在第 III 节中用它们评估数值扩散规范的性能。

A. 相互作用玻色子量子场的玻色子正 P 相空间表示

为了介绍如何使用随机微分方程描述精确的量子动力学，我们先回顾单模类 Bose–Hubbard 哈密顿量（克尔振子 [15]）广为人知的时间演化

$$\widehat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\chi}{2} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}. \tag{4}$$

请注意，在本文此处及后续部分，我们选择的单位制满足 $\hbar = 1$。

我们为两个已知解析形式的 B 矩阵所对应的实现形式化方程。将附录 A 中的方程 (A1) 和 (A4) 结合，可得特定的随机微分方程组 $\dot{\vec{z}} = \vec{a}(\vec{z}) + \vec{b}(\vec{z}, \vec{\eta})$ [3],，我们可以

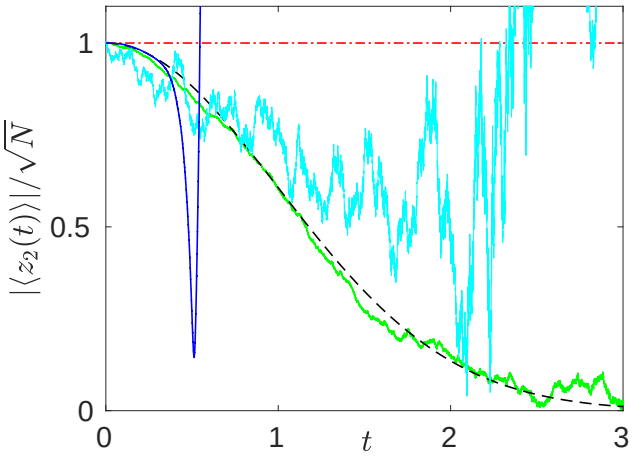

图 2：（在线彩色）时间依赖关联函数 $|\langle\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(0)\rangle|/N = |\langle z_2(t)\rangle|/\sqrt{N}$ 随无量纲时间 [5]变化的基准测试。黑色虚线表示方程（14）在 [5]中的解析结果。蓝色实线表示采用相空间方法得到的 $t \leq 0.5$ 数值结果；该时间接近使用（5）的特定实现时可用的最大模拟时间。绿色实线表示 $t \leq 3$ 的结果，这是使用方程（A5）中的 B 矩阵得到的改进规范数值结果。我们分别对 10^4, 条轨迹（绿色实线）和 10^2, 条轨迹（青色细线）进行了采样，以展示结果对轨迹数量的依赖性。红色点划水平线表示相应的 Gross-Pitaevskii平均场结果，在此情况下该结果不随时间变化。参数和初始条件与图 1 相同。

逐元素写作

$$\begin{bmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \end{bmatrix} = -i \begin{bmatrix} \omega z_1 + \chi z_2 z_1^2 \\ -\omega z_2 - \chi z_1 z_2^2 \end{bmatrix} + \sqrt{i\chi} \begin{bmatrix} -i z_1 \eta_1 \\ z_2 \eta_2 \end{bmatrix}, \tag{5}$$

其中， $\vec{\eta}^T = [\eta_1, \eta_2]$ 表示均值为零且方差为1 的不相关实高斯噪声。我们强调，在（5）中，我们遵循 [8] 和 [17], 的记号，但其他作者 [5]对复变量的定义有所不同。（5）中的具体噪声项可能源自附录 A 的（A5）中给出的一参数解析扩散规范。

如果将(5 $\eta_j \equiv 0$ $z_2 = z_1^*$ $i\dot{z}_1 =$)中的噪声项设为零（），那么我们得到确定性方程，它等价于时间依赖平均场Gross–Pitaevskii形式 。 [18]
$(\omega + \chi|z_1|^2)\, z_1$

对于初始条件

$$\vec{z}(0)^T = \sqrt{N}[1, 1], \tag{6}$$

其中， N 为玻色子数，我们计算（5）的动力学，以获得不同随机轨迹的平均值 $\langle z_2(t)\rangle$。

图 1 展示了采用两种扩散规范时动力学表现的不同：标准的正-P 形式（左图）和改进的（“最优”）形式 [5] （右图）。从图中给出的 20 条随机轨迹（它们是随机微分方程组 (5) 的实现）可以清楚看出，标准正-P形式（图 1 左图）的方差比“最优”形式 [5] （图 1 右图）大好几个数量级。这种不同的表现将极大影响从这些不同轨迹中获得的平均值在实际中的实用性。

我们指出，图 1 中使用的 B-矩阵的“最优”形式，是通过利用问题中某些关联函数存在解析解这一点找到的 [5]。Plimak、Olsen 和 Collett [5] 证明，只需改变 B-矩阵以大幅降低噪声，就足以将该方法从“原则上可计算”变为“实践中可计算”。尽管这个早期示例依赖于解析解，但它促使人们研究 B-矩阵在更复杂问题中的作用；对于这类问题，解析解并不存在，而随机模拟显然能够派上用场。

这里的随机平均 $\langle z_2(t)\rangle$ 与量子算符平均 $\langle\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(0)\rangle$相关，其解析表达式见 [5]中的公式（14）。在图 2 中，我们使用其中的解析公式，通过数值计算说明扩散规范在这个初始玻色子示例中的作用。

B. 一种用于费米–哈伯德模型的费米子高斯相空间表示，

我们研究具有最近邻 ($\langle i,j\rangle$) 跃迁和格点内相互作用的费米–哈伯德哈密顿量的时间演化，

$$\widehat{H} = -J\sum\nolimits_{\langle i,j\rangle,\sigma} \hat{c}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{c}_{j,\sigma} + U\sum\nolimits_{j} \hat{n}_{j,\uparrow}\hat{n}_{j,\downarrow}, \tag{7}$$

其中 J 为跃迁振幅， U 为相互作用强度。我们聚焦于一个小型的双站点（$j=1,\ 2$）链，以便对费米子量子动力学进行详细的数值比较。

首先，我们为具有不同扩散规范选择的 [14] 系统构建GPSR的实现方程。我们将结果与数态表示中的独立数值解（所谓的精确对角化）进行比较。

结合附录A中的方程(A6)和(A9) 得到以下随机微分方程组， $\dot{\vec{z}} = \vec{a}(\vec{z}) + b(\vec{z},\vec{\eta})$ [14], 或者等价地，

$$\begin{bmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \\ \dot{z}_3 \\ \dot{z}_4 \\ \dot{z}_5 \\ \dot{z}_6 \\ \dot{z}_7 \\ \dot{z}_8 \end{bmatrix} = i \begin{bmatrix} J\left(z_2 - z_3\right) \\ J\left(z_1 - z_4\right) + U\left(z_5 - z_8\right) z_2 \\ J\left(z_4 - z_1\right) + U\left(z_8 - z_5\right) z_3 \\ J\left(z_3 - z_2\right) \\ J\left(z_6 - z_7\right) \\ J\left(z_5 - z_8\right) + U\left(z_1 - z_4\right) z_6 \\ J\left(z_8 - z_5\right) + U\left(z_4 - z_1\right) z_7 \\ J\left(z_7 - z_6\right) \end{bmatrix} + \sqrt{iU} \begin{bmatrix} i(\tilde{z}_1 z_1 \xi_1 - z_2 z_3 \xi_2) + \tilde{z}_1 z_1 \xi_3 - z_2 z_3 \xi_4 \\ i(\tilde{z}_4 z_2 \xi_2 - z_1 z_2 \xi_1) + \tilde{z}_1 z_2 \xi_3 - z_2 z_4 \xi_4 \\ i(\tilde{z}_1 z_3 \xi_1 - z_3 z_4 \xi_2) + \tilde{z}_4 z_3 \xi_4 - z_1 z_3 \xi_3 \\ i(\tilde{z}_4 z_4 \xi_2 - z_2 z_3 \xi_1) + \tilde{z}_4 z_4 \xi_4 - z_2 z_3 \xi_3 \\ i(\tilde{z}_5 z_5 \xi_1^* - z_6 z_7 \xi_2^*) + \tilde{z}_5 z_5 \xi_3^* - z_6 z_7 \xi_4^* \\ i(\tilde{z}_8 z_6 \xi_2^* - z_5 z_6 \xi_1^*) + \tilde{z}_5 z_6 \xi_3^* - z_6 z_8 \xi_4^* \\ i(\tilde{z}_5 z_7 \xi_1^* - z_7 z_8 \xi_2^*) + \tilde{z}_8 z_7 \xi_4^* - z_5 z_7 \xi_3^* \\ i(\tilde{z}_8 z_8 \xi_2^* - z_6 z_7 \xi_1^*) + \tilde{z}_8 z_8 \xi_4^* - z_6 z_7 \xi_3^* \end{bmatrix}, \tag{8}$$

其中，符号 离子 $\tilde{z}_j \equiv 1 - z_j$ 用于所谓的空穴变量。在 (8) 中，我们使用复数噪 e

$$\xi_j = \frac{\eta_1^{(j)} + i\eta_2^{(j)}}{\sqrt{2}}, \quad j = 1,2,3,4, \tag{9}$$

其中， $\eta_1^{(j)}$ 和 $\eta_2^{(j)}$ 表示均值为零、方差为单位值的实高斯噪声。复高斯噪声 ξ_j满足以下关联函数

$$\langle \xi_j(t)\xi_{j'}(t)\rangle = 0, \qquad \langle \xi_j(t)\xi^*_{j'}\ (t')\rangle = \delta_{j,j'}\delta_{t,t'}.$$

如果将式（8）中的噪声项全部设为零（$\xi_j \equiv 0$），则得到一个确定性系统，它等价于哈密顿量（7）的含时哈特里–福克形式 [19] 。

C. 用于分子解离的混合费米子–玻色子相空间表示

作为玻色子–费米子系统的一个示例，我们考虑将二聚体分子玻色–爱因斯坦凝聚体解离为成对的
费米原子，其哈密顿量 哈密顿量

$$\widehat{H} = \hbar\sum\nolimits_{\mathbf{k},\sigma} \Delta_{\mathbf{k}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} - i\hbar\kappa\sum\nolimits_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}^{\dagger}\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} - \hat{c}^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow}\hat{a}\right), \tag{10}$$

其中， $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta + \hbar\mathrm{k}^2/(2m)$ 是自由原子动能的参数，该动能相对于束缚分子态 [12], 的能量进行平移；而 κ 是原子-分子耦合强度。

只有一个动量模式 $\mathrm{k} = 1$，且初始条件关于自旋变量 σ 对称，因此我们只需要一个费米子正规矩的相空间变量 $\langle \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\,\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k},\ \sigma}\rangle \leftrightarrow \langle z_1\rangle$ 以及一个反常矩的相空间变量 $\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\ \uparrow}\hat{c}_{-\mathbf{k},\ \downarrow}\rangle \leftrightarrow \langle z_2\rangle$；而玻色子仍通过正-$P$ 表示法映射（参见第 IIA 节）。

这里，我们以显式形式写出包含 5 个相空间变量（$z_1 = n_1,\ \ z_2 = m_1,\ \ z_3 = m_1^{+},\ \ z_4 = \alpha,\ z_5 = \alpha^{+}$，与 [12] 比较）的最简系统。根据附录 A 中的方程 (A10) 和 (A13)，我们得到随机微分方程组 （ $\dot{\vec{z}} = \vec{a}$） $+ b$（$\vec{z}$，$\vec{\eta}$） [12],，其中

$$\begin{bmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \\ \dot{z}_3 \\ \dot{z}_4 \\ \dot{z}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \kappa\left(z_3 z_4 + z_2 z_5\right) \\ -2i\Delta_1 z_2 + \kappa z_4\left(1 - 2z_1\right) \\ 2i\Delta_1 z_3 + \kappa z_5\left(1 - 2z_1\right) \\ -\kappa z_2 \\ -\kappa z_3 \end{bmatrix} + \sqrt{\kappa} \begin{bmatrix} z_1\left(z_2\xi_1^* + z_3\xi_2^*\right) \\ z_2^2\xi_1^* - z_1^2\xi_2^* \\ -z_1^2\xi_1^* + z_3^2\xi_2^* \\ \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix}. \tag{11}$$

如果将式 (11) 中的噪声项全部设为零（$\xi_j \equiv 0$），那么我们就得到一个确定性系统，它等价于哈密顿量 (10) 的时变配对平均场形式 [20] 。

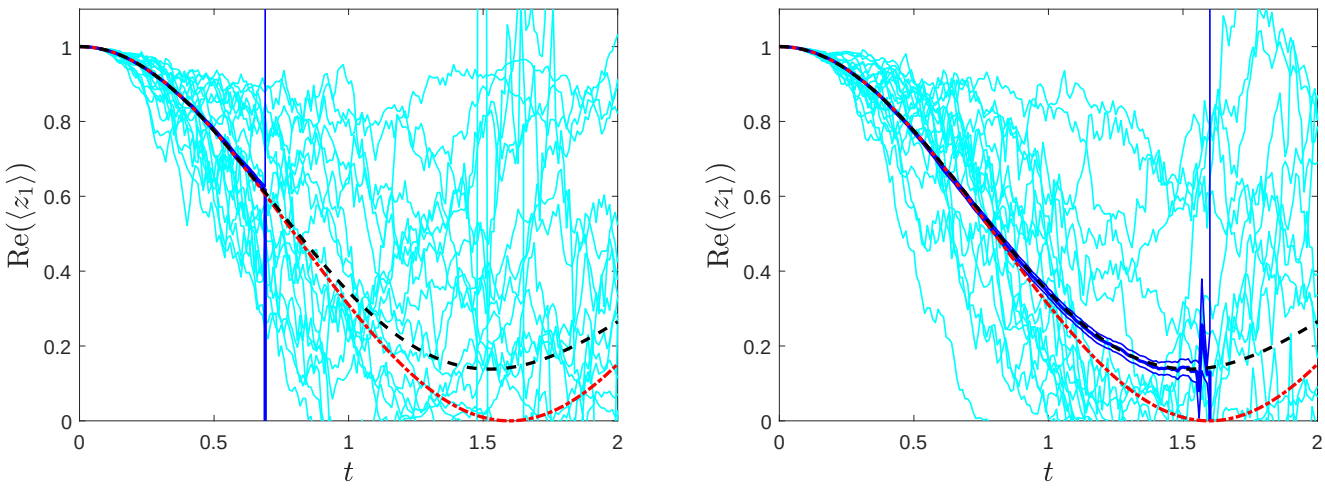

图3：（在线彩色）采用不同扩散规范时，费米–哈伯德模型随机动力学中单条轨迹出现尖峰的情况。左：文献中的标准GPSR [14], , 即采用方程(A9) 的解析噪声矩阵B 。右：采用数值噪声矩阵 B的GPSR，即动态求解方程 (1)。细（青色）曲线为单条轨迹。粗（蓝色）曲线为 10^3 条此类轨迹的平均值，其周围为 $\pm$ 随机误差。点划（红色）曲线来自相应的Hartree–Fock 平均场方法 [19], , 而虚（黑色）曲线来自数值精确对角化，以作比较。参数和初始条件分别为 $J = U = 1$，依据式 (12)。

III. 费米子系统的数值基准测试

现在，我们将介绍用于评估上述 IIB 节和 II C 节所述费子系统的数值实验，讨论所得结果，并说明我们提出的基于数值扩散规范的 GPSR 方法如何优于文献中现有的替代方法。

A. 费米–哈伯德模型的结果

作为哈密顿量 (7) 的初始条件 $\vec{z}(0)$，我们选择

$$\vec{z}(0)^T = [1, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]\,, \tag{12}$$

这对应于初始的（$t = 0$）量子算符平均值

$$\langle \hat{c}^\dagger_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle = \begin{cases} 1, & i = j = 1, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{13}$$

我们首先考察随机平均值 $\langle z_1 \rangle$的动力学。图 3 展示了 20 条独立轨迹，以及标准 GPSR（采用解析噪声矩阵，左图）和 GPSR（采用数值噪声矩阵，右图）中对 10^3 条轨迹求得的随机平均值。数值扩散规范显然优于解析扩散规范，使实际模拟时间延长了一倍。值得注意的是，该随机方法的平均值遵循精确对角化的曲线，与 Hartree–Fock 平均场方法的曲线不同。相反，在图 3 左图中，我们几乎无法区分这三条曲线。

接下来，我们研究量子关联函数，它将（$\leftrightarrow$）映射为费米–哈伯德模型中相空间变量组合的随机平均值。图 4 顶部面板展示了粒子总数

$$\langle \widehat{N}_{\text{tot}} \rangle = \sum\nolimits_{j,\sigma} \langle \hat{n}_{j,\sigma} \rangle \leftrightarrow \langle z_1 \rangle + \langle z_4 \rangle + \langle z_5 \rangle + \langle z_8 \rangle, \tag{14}$$

底部面板中则为总能量

$$\langle \widehat{H} \rangle = -J \sum\nolimits_{\langle i,j \rangle, \sigma} \langle \hat{c}^\dagger_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + U \sum\nolimits_j \langle \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} \rangle \leftrightarrow -J(\langle z_2 \rangle + \langle z_3 \rangle + \langle z_6 \rangle + \langle z_7 \rangle) + U(\langle z_1 z_5 \rangle + \langle z_4 z_8 \rangle). \tag{15}$$

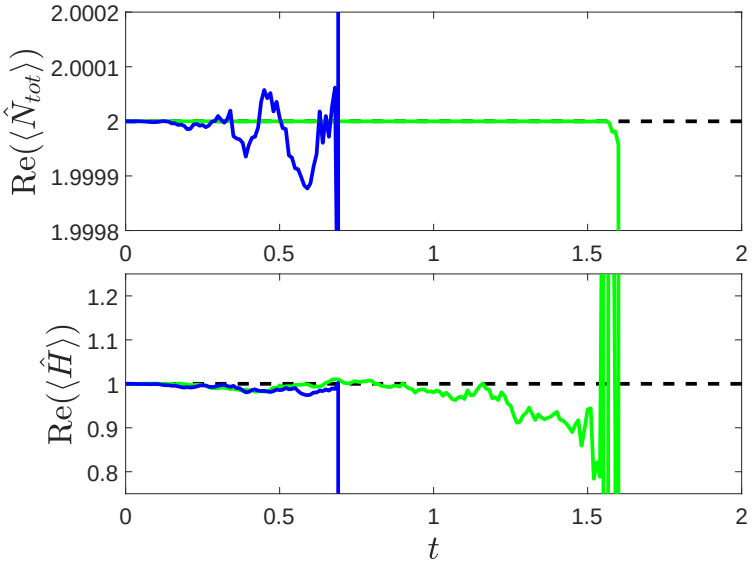

图 4：（在线彩色）采用不同扩散规范对费米–哈伯德模型的时间依赖关联函数进行基准测试。上图：根据式 (14) 得到的粒子总数。下图：根据式 (15) 得到的总能量。文献中的标准 GPSR [14], 如左侧图 3 所示，（蓝色）曲线在此处于 $t \simeq 0.7$出现尖峰。采用数值噪声矩阵 B的 GPSR，如右侧图 3 所示，（绿色）曲线在此处于 $t \simeq 1.5$出现尖峰。所有四条随机曲线均为 10^3 条轨迹的平均值。虚线（黑色）曲线来自精确对角化，按预期呈水平直线。参数和初始条件与图 3 相同。

我们仅报告（14）和（15）的实部，因为这两个运动常数等于^ ^初态（12）的期望值，分别为 $\langle N_{\mathrm{tot}}\rangle = 2$ 和 $\langle H\rangle = 1$，因此没有虚部。

Hartree–Fock 方法会得到一条水平的总能量直线（未显示），但它是两个项之和，而这两项分别与正确的动能和相互作用能相差甚远。

B. 费米–玻色模型的结果

对于哈密顿量 (10)，我们选择初始条件 $\vec{z}(0)$

$$\vec{z}(0)^T = [0, 0, 0, 1, 1]\,, \tag{16}$$

即 $\sqrt{N_m(0)} = 1$，对应于初始的（$t = 0$）量子算符平均值

$$\langle \hat{c}^\dagger_{1,\sigma}\hat{c}_{1,\sigma}\rangle = \langle \hat{c}_{1,\uparrow}\hat{c}_{-1,\downarrow}\rangle = 0, \text{ and } \langle \hat{a}^\dagger\hat{a}\rangle = N_m(0), \tag{17}$$

其中，后者是二聚体分子的初始 ($t = 0$) 数量。

在图 5 中，我们展示了20条独立轨迹以及分子数的量子动力学随机平均 $N_m = \langle \hat{a}^\dagger\hat{a}\rangle \leftrightarrow \langle z_4 z_5\rangle$ 。在这种情况下，我们将使用数值噪声矩阵的GPSR（右图）与文献中的标准混合相空间表示（左图）进行了比较，后者使用解析噪声矩阵。同样，我们观察到实际模拟时间翻了一倍；此外，我们注意到，图5右图中GPSR方法的平均值遵循精确对角化的曲线，而该曲线与配对平均场方法所得的曲线不同。再次强调，在标准方法的有效模拟时间内，这三条曲线几乎无法区分，正如图 5 左图所示。

接下来，我们研究粒子总数

$$\langle \widehat{N}_{\mathrm{tot}}\rangle = \sum_k \langle \hat{n}_k\rangle + \langle \hat{a}^\dagger_0\hat{a}_0\rangle \leftrightarrow \langle z_1\rangle + \langle z_4 z_5\rangle, \tag{18}$$

以及总能量

$$\langle \widehat{H}\rangle = 2\sum_k \Delta_k\langle \hat{n}_k\rangle + i\kappa\sum_k \langle \hat{a}_0\hat{m}^\dagger_k - \hat{a}^\dagger_0\hat{m}_k\rangle \leftrightarrow 2\Delta_1\langle z_1\rangle + i\kappa(\langle z_4 z_3\rangle - \langle z_5 z_2\rangle). \tag{19}$$

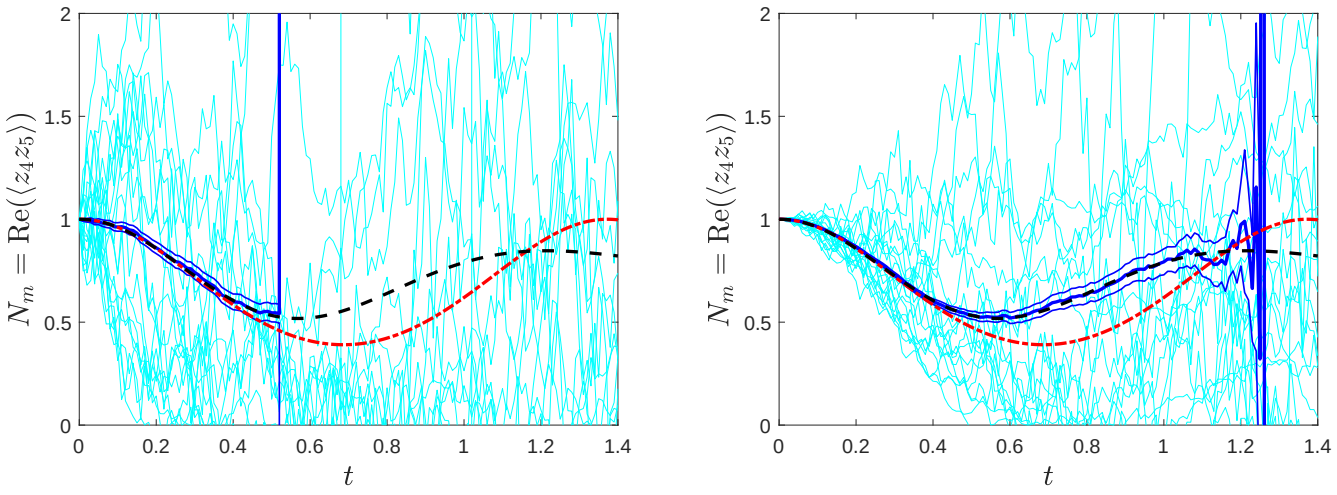

图 5：（在线彩色）采用不同扩散规范时，费米–玻色模型随机动力学中单条轨迹出现尖峰的情况。左：文献中的标准混合相空间表示 [12], ，即使用方程 (A13) 的解析噪声矩阵 B 。右：采用数值噪声矩阵 B 的 GPSR，即动态求解方程 (1)。粗（蓝色）曲线表示 10^3 条此类轨迹的平均值，周围的 $\pm$ 为随机误差。点划（红色）曲线来自相应的配对平均场方法 [20], ，而虚（黑色）曲线来自数值精确对角化，以供比较。根据式 (16)，参数和初始条件分别为 $N_m(0) = \Delta_1 = 1$ 和 $\kappa = 2$。

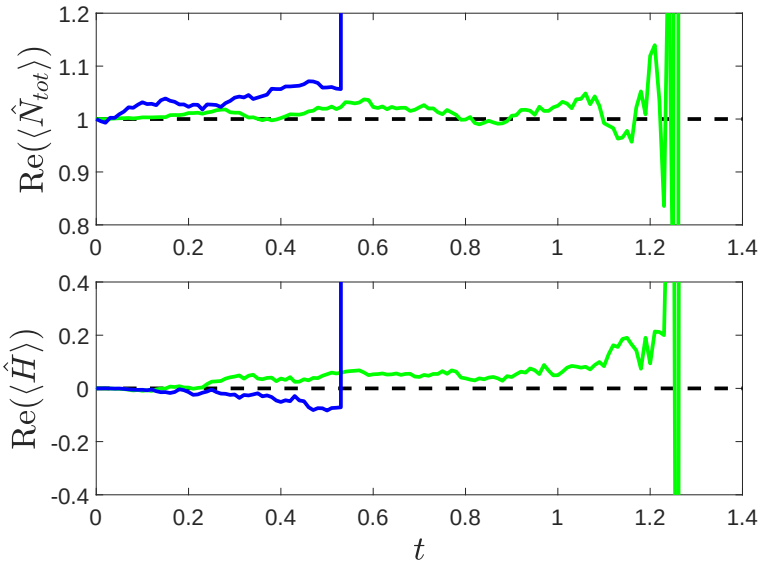

图 6：（在线彩色）采用不同扩散规范对费米–玻色模型的时间依赖关联函数进行基准测试。上图：根据式 (18) 得到的粒子总数。下图：根据式 (19) 得到的总能量。文献中的标准混合相空间表示 [12], ，如图 5 左图所示，（蓝色）曲线在此处出现尖峰 $t \simeq 0.5$。采用数值噪声矩阵 B 的 GPSR，如图 5 右图所示，（绿色）曲线在此处出现尖峰 $t \simeq 1.2$。平均值根据 10^3 条轨迹计算；参数和初始条件与图 5 相同。

运动常数等于初态(16)的期望值，分别为 $\langle N_{\mathrm{tot}} \rangle = 1$ （模型中未明确包含原子具有负动量）和 $\langle H \rangle = 0$ 此处。我们在图 6 中报告了这两个量的实部观测值，因为预计它们都没有虚部。

对于总能量，配对平均场方法会得到一条水平线（未绘出），但它实际上是两个项之和，而这两项都与动能和转换能的正确值相差甚远。

IV. 总结与展望

量子动力学的相空间表示是数值模拟中一种成熟的工具，但由于模拟时间常常受到限制，它们只能描述某些大型玻色子 [21] 和费米子 [12] 量子系统的初始动力学。为了揭示更长时间尺度上的精确量子动力学，逐步延长这些数值计算的实际模拟时间至关重要。

受早期针对简单玻色子系统的解析扩散规范研究启发，我们提出了一种基于数值求解扩散规范的新方法，并使用两种不同的复杂费米子系统，将这项新技术与现有方法进行了基准比较。对于费米–哈伯德模型（图 3）和费米–玻色模型（图 5），我们都观察到实际模拟时间延长了一倍。

这些数值结果非常令人鼓舞，例如，它们可能促使人们研究大型二维费米–哈伯德模型的精确量子动力学。这类模型目前超出了精确对角化的能力范围，而且已证明难以用基于矩阵乘积态的方法处理。

至于观察到模拟时间延长背后的原因，我们在此只能推测。文献中曾指出 [8, 10] ，相空间变量中出现尖峰轨迹，即 $|z_j|$趋近于无穷大，可能与分布 $P(\vec{z})$中厚尾的形成有关，因而也可能出现边界修正。由于相空间基是过完备的，其他分布 $P(\vec{z})$以及单条轨迹的其他动力学，仍可能描述正确的状态。引入的数值扩散规范在每个时间步都不同，因此与分布 $P(\vec{z})$相关的随机动力学也可能不同，尤其是不太可能在连续的时间步中沿相同方向增长。

为了进一步延长实际模拟时间，可能需要从更基础的层面开展研究。我们越深入地理解这些数值扩散规范的工作原理，就越能精确地构造用于求得它们的约束矩阵方程。

V. 致谢

我们感谢 Joel Corney 提供的宝贵讨论。

附录 A：相空间表示的随机微分方程的动机

在本附录中，我们为正文中的三个哈密顿量分别给出一个随机微分方程组的具体实例。在这三个示例中，我们都将变量数量控制在最低限度。

1. Thepositive-P 表示

现在，我们明确给出哈密顿量（4）在具有一个玻色子模的情况下的一种可能的随机微分方程组。利用玻色子正-P 表示 [4], 的算符映射，我们得到式（2）中的 a_j 和 $D_{j,k}$。当 $n=2$ 相空间变量按 $z_1=\alpha$、 $z_2=\alpha^+$ 排列时，福克–普朗克方程（2）中含一阶导数的项为 [17]

$$\begin{bmatrix} a_1(\vec{z}) \\ a_2(\vec{z}) \end{bmatrix} = -i \begin{bmatrix} \omega z_1 + \chi z_2 z_1^2 \\ -\omega z_2 - \chi z_1 z_2^2 \end{bmatrix}. \tag{A1}$$

FPE（2）中的二阶导数由对称的 $D \in \mathbb{C}^{2\times 2}$ 矩阵定义

$$D = i\chi \begin{bmatrix} d_{11} & 0 \\ 0 & d_{22} \end{bmatrix}, \tag{A2}$$

其中两个非零元素为

$$d_{11} = -z_1^2, \quad d_{22} = z_2^2. \tag{A3}$$

矩阵 $B \in \mathbb{C}^{2\times 2}$

$$B = \sqrt{i\chi} \begin{bmatrix} iz_1 & 0 \\ 0 & -z_2 \end{bmatrix}, \tag{A4}$$

随后满足（A2）中的 D （1）。因此，方程（A1）与方程（A4）一起给出随机微分方程（5）。然而，以下单参数解析 B 矩阵也满足（1）

$$B(\gamma) = -i\sqrt{i\chi}\begin{bmatrix} \cosh(\gamma)z_1 & i\sinh(\gamma)z_1 \\ -\sinh(\gamma)z_2 & -i\cosh(\gamma)z_2 \end{bmatrix}. \tag{A5}$$

(A5) 中的 $B(\gamma)$ 等价于 [6] 中给出的三角形式，且该形式曾被建议用于 [5] 中克尔振子的正-P 方法。对于合适的参数值，(A5) 中的噪声矩阵在获得可观测量方面表现出显著改进，如图2所示；长时间下方差更低，如图1所示。均值的这一改进是因为不同轨迹的振幅 $|z_1|$ 和 $|z_2|$ ，如 [5] 中的图2和图3所示。对于 $\gamma = 0$，方程 (A4) 和 (A5) 相等；而对于 $\gamma \simeq 3.1985$，对应于 $\cosh(\gamma) = \sqrt{301/2}$ （参见 [6] 的附录2），我们得到了第I节图1和图2所报告的改进结果。

2. 双位点费米–哈伯德模型

在本小节中，我们明确给出一种可能的随机微分方程组，该方程组对应于具有两个空间位点的哈密顿量 (7)。利用高斯相空间表示 [1] 中仅包含正规序算符矩的算符映射（不包含反常算符矩，即此处不使用 m 或 m^+ 变量），可以推导出时变概率分布 $P(\vec{z})$ 所满足的福克–普朗克方程，其形式如式 (2) 所示。

这里我们用记号 $z_1 = n_{11,\uparrow}$, $z_2 = n_{12,\uparrow}$, $z_3 = n_{21,\uparrow}$, $z_4 = n_{22,\uparrow}$, $z_5 = n_{11,\downarrow}$, $z_6 = n_{12,\downarrow}$, $z_7 = n_{21,\downarrow}$, $z_8 = n_{22,\downarrow}$ 表示用于双位点费米–哈伯德模型的八个复相空间变量。这些相空间变量与一阶物理矩 $\langle \hat{n}_{ij,\sigma}\rangle \leftrightarrow \langle n_{ij,\sigma}\rangle$相关；在轨迹数趋于无穷的极限下，它们的随机平均趋近于相应的量子力学期望值。

FPE（2）中带有一阶导数的各项在此情况下为 [14]

$$\begin{bmatrix} a_1(\vec{z}) \\ a_2(\vec{z}) \\ a_3(\vec{z}) \\ a_4(\vec{z}) \\ a_5(\vec{z}) \\ a_6(\vec{z}) \\ a_7(\vec{z}) \\ a_8(\vec{z}) \end{bmatrix} = i\begin{bmatrix} J(z_2 - z_3) \\ J(z_1 - z_4) + U(z_5 - z_8)z_2 \\ J(z_4 - z_1) + U(z_8 - z_5)z_3 \\ J(z_3 - z_2) \\ J(z_6 - z_7) \\ J(z_5 - z_8) + U(z_1 - z_4)z_6 \\ J(z_8 - z_5) + U(z_4 - z_1)z_7 \\ J(z_7 - z_6) \end{bmatrix}. \tag{A6}$$

(2) 中的二阶微分算符由对称的 $D \in \mathbb{C}^{8\times 8}$ 矩阵定义，其形式为

$$D = \frac{iU}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{16} & d_{17} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{25} & d_{26} & d_{27} & d_{28} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{35} & d_{36} & d_{37} & d_{38} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{46} & d_{47} & 0 \\ 0 & d_{25} & d_{35} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_{16} & d_{26} & d_{36} & d_{46} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_{17} & d_{27} & d_{37} & d_{47} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_{28} & d_{38} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{A7}$$

其中十二种不同类型的非零元素

$$\begin{cases} d_{16} = 2z_6\left(z_2z_3 + z_1\tilde{z}_1\right), \\ d_{17} = -2z_7\left(z_2z_3 + z_1\tilde{z}_1\right), \\ d_{25} = 2z_2\left(z_6z_7 + z_5\tilde{z}_5\right), \\ d_{26} = 2z_2z_6\left(z_4 + z_8 - z_1 - z_5\right), \\ d_{27} = 2z_2z_7\left(z_1 + z_8 - z_4 - z_5\right), \\ d_{28} = -2z_2\left(z_6z_7 + z_8\tilde{z}_8\right), \\ d_{35} = -2z_3\left(z_6z_7 + z_5\tilde{z}_5\right), \\ d_{36} = 2z_3z_6\left(z_4 + z_5 - z_1 - z_8\right), \\ d_{37} = 2z_3z_7\left(z_1 + z_5 - z_4 - z_8\right), \\ d_{38} = 2z_3\left(z_6z_7 + z_8\tilde{z}_8\right), \\ d_{46} = -2z_6\left(z_2z_3 + z_4\tilde{z}_4\right), \\ d_{47} = 2z_7\left(z_2z_3 + z_4\tilde{z}_4\right). \end{cases} \tag{A8}$$

满足 (A7) 中 (1) 的一个例子是 [14]

$$B = \sqrt{\frac{iU}{2}} \begin{bmatrix} i\tilde{z}_1z_1 & -\tilde{z}_1z_1 & -iz_2z_3 & z_2z_3 & \tilde{z}_1z_1 & i\tilde{z}_1z_1 & -z_2z_3 & -iz_2z_3 \\ -iz_1z_2 & z_1z_2 & i\tilde{z}_4z_2 & -\tilde{z}_4z_2 & \tilde{z}_1z_2 & i\tilde{z}_1z_2 & -z_2z_4 & -iz_2z_4 \\ i\tilde{z}_1z_3 & -\tilde{z}_1z_3 & -iz_3z_4 & z_3z_4 & -z_1z_3 & -iz_1z_3 & \tilde{z}_4z_3 & i\tilde{z}_4z_3 \\ -iz_2z_3 & z_2z_3 & i\tilde{z}_4z_4 & -\tilde{z}_4z_4 & -z_2z_3 & -iz_2z_3 & \tilde{z}_4z_4 & i\tilde{z}_4z_4 \\ i\tilde{z}_5z_5 & \tilde{z}_5z_5 & -iz_6z_7 & -z_6z_7 & \tilde{z}_5z_5 & -i\tilde{z}_5z_5 & -z_6z_7 & iz_6z_7 \\ -iz_5z_6 & -z_5z_6 & i\tilde{z}_8z_6 & \tilde{z}_8z_6 & \tilde{z}_5z_6 & -i\tilde{z}_5z_6 & -z_6z_8 & iz_6z_8 \\ i\tilde{z}_5z_7 & \tilde{z}_5z_7 & -iz_7z_8 & -z_7z_8 & -z_5z_7 & iz_5z_7 & \tilde{z}_8z_7 & -i\tilde{z}_8z_7 \\ -iz_6z_7 & -z_6z_7 & i\tilde{z}_8z_8 & \tilde{z}_8z_8 & -z_6z_7 & iz_6z_7 & \tilde{z}_8z_8 & -i\tilde{z}_8z_8 \end{bmatrix}. \tag{A9}$$

我们提醒读者注意用于所谓空穴变量的记号 $\tilde{z}_j \equiv 1 - z_j$。 $B \in \mathbb{C}^{8\times 8}$ 矩阵（A9）只是将福克–普朗克方程（2）中的二阶导数表示为随机微分方程（3）的众多可能方式之一。

3. 用于分子解离的混合费米–玻色系统

在本小节中，我们明确给出一个适用于具有两个费米子动量模的哈密顿量 (10) 的随机微分方程组。将费米子 GPSR [1] 的算符映射与玻色子正P表示 [4], 结合后，我们得到方程 (2) 中的 a_j 和$D_{j,k}$。若将 $n = 5$ 相空间变量排列为 $z_1 = n_1$, $z_2 = m_1$ $z_4 = \alpha$, $z_3 = m_1^+$, , $z_5 = \alpha^+$, 则 (2) 化简为 [12]

$$\begin{bmatrix} a_1\left(\vec{z}\right) \\ a_2\left(\vec{z}\right) \\ a_3\left(\vec{z}\right) \\ a_4\left(\vec{z}\right) \\ a_5\left(\vec{z}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \kappa\left(z_3z_4 + z_2z_5\right) \\ -2i\Delta_1z_2 + \kappa z_4\left(1 - 2z_1\right) \\ 2i\Delta_1z_3 + \kappa z_5\left(1 - 2z_1\right) \\ -\kappa z_2 \\ -\kappa z_3 \end{bmatrix}. \tag{A10}$$

FPE（2）中的二阶微分算符由对称的 $D \in \mathbb{C}^{5\times 5}$ 矩阵定义

$$D = \kappa \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & d_{25} \\ 0 & 0 & 0 & d_{34} & d_{35} \\ d_{14} & d_{24} & d_{34} & 0 & 0 \\ d_{15} & d_{25} & d_{35} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{A11}$$

其中六种不同类型的非零元素是

$$\begin{cases} d_{14} = z_1z_2, \\ d_{15} = z_1z_3, \\ d_{24} = z_2^2, \\ d_{25} = -z_1^2, \\ d_{34} = -z_1^2, \\ d_{35} = z_3^2. \end{cases} \tag{A12}$$

使用以下 $B \in \mathbb{C}^{5\times 4}$ 矩阵

$$B = \frac{\sqrt{\kappa}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} z_1 z_2 & -iz_1 z_2 & z_1 z_3 & -iz_1 z_3 \\ z_2^2 & -iz_2^2 & -z_1^2 & iz_1^2 \\ -z_1^2 & iz_1^2 & z_3^2 & -iz_3^2 \\ 1 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & i \end{bmatrix}, \tag{A13}$$

我们有一个可能的 $n \times m$ 矩阵，可以用来求解方程 (1)。为了更紧凑地显式表示随机微分方程 (3)，我们

~ ~可以先定义一个矩阵 B，其列数减半，$B_{j,\ k} = B_{j,\ 2k-1}$。

然后与 $m/2$ 个复噪声 ξ_1、.....、$\xi_{m/2}$中的一个相乘；如果 $\mathrm{Im}[B_{j,2k}]/\mathrm{Re}[B_{j,2k-1}] = -1$，则与其复共轭相乘。根据方程（9），对于仅包含2个复噪声 ξ_1 和 ξ_2的噪声向量，我们有来自 [12], 的噪声项，即

$$\vec{b}(\vec{z}, \vec{\xi}) = \sqrt{\kappa} \begin{bmatrix} z_1 z_2 \xi_1^* + z_1 z_3 \xi_2^* \\ z_2^2 \xi_1^* - z_1^2 \xi_2^* \\ -z_1^2 \xi_1^* + z_3^2 \xi_2^* \\ \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix}. \tag{A14}$$

这与将费米–哈伯德模型的方程 (A9) 转化为随机微分方程 (8) 时所采用的过程相同，只是使用了 4 个复噪声。

附录 B：使用 Takagi 分解数值计算 B 矩阵

我们先回顾 Takagi 分解及其计算算法，然后说明如何利用该分解构造满足 (1) 的 B-矩阵。

定理 B.1（ *[23]* 第 4 章推论 4.4.4(c)）设 D 是一个复对称 $n \times n$ 矩阵。则存在一个酉矩阵 U和一个非负对角矩阵 $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$，使得 $D = U\Sigma U^T$。
Takagi 分解可视为 D 的奇异值分解（SVD）的对称类比。注意， $\sigma_1, \ldots, \sigma_n$ 实际上是 D [25] 的奇异值。

文献 [24, 26–28] 中介绍了多种计算 Takagi 分解的算法。本文采用 Xu 和 Qiao 开发的分治法 [27]。由于该算法要求输入矩阵为三对角矩阵，我们采用带修正部分正交化和重启的 Lanczos 三对角化，将复对称矩阵化为三对角形式 [24]。

根据定理 B.1，我们有 $D = U\Sigma U^T = \big(U\sqrt{\Sigma}\big)\big(U\sqrt{\Sigma}\big)^T$，其中 U 是酉矩阵， Σ 是非负对角矩阵。若定义 $B := U\sqrt{\Sigma}$，其中 $\sqrt{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sqrt{\sigma_1}, \ldots, \sqrt{\sigma_n})$，则很容易看出我们得到了所需的分解 $D = BB^T$。注意，此分解并不唯一：例如，对于任意正交矩阵 Q，我们有 $D = BQQ^TB^T = (BQ)(BQ)^T =: B_1\, B_1^T$。

附录 C：Itˆo 演算，以避免 Stratonovich修正

通常会将 Itˆo 随机微分方程转换为 Stratonovich形式，并使用半隐式方法 [22], 对后者进行积分，因为这类方法有时具有更好的收敛性。一般而言，这意味着漂移向量 $\vec{a}(\vec{z})$存在非零的 Stratonovich修正（SC），其形式为

$$SC_i = -\frac{1}{2} \sum_{j,k} B_{j,k} \frac{\partial B_{i,k}}{\partial z_j}, \tag{C1}$$

需要添加 [4]。这些方法已针对此处特定的解析例子 B-矩阵进行了测试，即方程 (A4)、(A9) 和 (A13)。然而，对于数值 B-矩阵，我们希望避免 (C1) 中所需的数值微分，因此我们选择的策略是在应用数值 B-矩阵时仅使用 Itˆo 微积分。

[1] Corney J F 和 Dr Drummond P D 2006 用于费米子的高斯相空间表示 *Phys. Rev.* B 73 12511

[2] 2006 269
[3] 1980 *J. Phys.*

Corney J F 和 Drummond P D 相关费米子的高斯算符基底 *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**，Drummond P D 和 Gardiner C W 量子光学 **13** 2353
中的广义 P 表示 A [4] 2008 *Springer Berlin 4th ed.*

Gardiner C W《随机方法手册》。, ,[5] Plimak L I、Olsen M K 和 Collett M J 2001 非谐振子的 positive-P 表示优化 *Phys. Rev.* A 64 **66** 033812
025801[6] Deuar P 和 Drummond P D 2002 量子动力学问题的规范 P 表示：消除边界项 *Phys. Rev.* A [7]

Smith A M 和 Gardiner C W
1989 *P* *Phys.* 使用正表示
Rev. **39** 3511
模拟非线性量子阻尼 A [8] Gilchrist A、Gardiner C W 和 Drummond P D 1997 正 P 表示：应用与有效性 *Phys. Rev.* A 55 3014[9]
Assad F F、Werner P、Corboz P、Gull E 和 Troyer M 2005 高斯蒙特卡洛方法的对称性投影方案 *Phys. Rev.* B 72 224518[10]
Corboz P、Troyer M、Kleine A、McCulloch I P 和 Schollw¨ock U 2008 高斯量子蒙特卡洛中的系统误差及对称性投影方法的系统研
究 *Phys. Rev.* B 77 085108[11] Aimi T 和 Imada M 2007 用于数值研究巡游及强关联电子系统基态的高斯基蒙特卡洛方法，
J. Phys. Soc. Jpn. **76**，084709.[12] Ogren M、Kheruntsyan K V 和 Corney J F 2010 费米子的第一性原理量子动力学：分子解离的应
用 .. *Europhys. Lett.* **92** 36003 [13] Ogren M、Kheruntsyan K V 和 Corney J F 2011 使用相空间表示对费米子动力学进行随
机模拟 *Comp. Phys. Comm.* **182** 1999.[14] Corboz P、Ogren M、Kheruntsyan K V 和 Corney J F 2013 量子气体中的费米子相空间
方法：有限温度与非平衡动力学，Imperial College Press，伦敦，第 407–416 页。https://doi.org/
10 1142 9781848168121_0027 。/ Walls D F 和 Milburn G J（第 .nd 版）《量子光学》（Springer-Verlag，柏林，
[15] 2008 2
海德堡）[16] ¨Ogren M 和 Carlsson M 2013 关于费米子-玻色子模型的动力学 *J. Phys. A:Math. Theor.* **46**，015005[17] Steel M J、
Olsen M K、Plimak L I、Drummond P D、Tan S M、Collett M J、Walls D F 和 Graham R 1998 囚禁玻色-爱因斯坦凝聚体中的量子
噪声动力学 *Phys. Rev.* A 58 4824[18] Pethick C J 和 Smith H 2008《稀薄气体中的玻色-爱因斯坦凝聚》第 2 版（剑桥：剑桥大学出版
社）[19] Rahav S 和 Mukamel S 2009 费米子动力学的高斯相空间表示：超越含时 Hartree-Fock 近似 *Phys. Rev.* B
79 165109
[20] 2005 Jack M W 和 Pu H 分子玻色-爱因斯坦凝聚体的解离动力学 *Phys. Rev.* A
72, 063625[21] W¨uster S、Corney J F、Rost J M 和 Deuar P 2017 使用 positive-P 和 gauge-P 表示研究长程相互作用系统的量子动力
学 *Phys. Rev.* E [22] 1991 **96**, 013309 Drummond P D 和 Mortimer I K 乘性随机微
分方程的计算机模拟
J.
Comput. Phys. **93** 144
[23] 2013 *Cambridge University Press*

Horn R A 和 Johnson C R《矩阵分析》，剑桥，第 2 版[24] Guo C 和 Qiao S 2003 复对称矩阵的稳定 Lanczos 三对角化，技术报告[25]
Thompson R C 1979 复对称矩阵的奇异值与对角元素 *Linear Algebra and its Appli-cations*，26:65–106[26] Wang X、Liang L 和
Che M 2018 计算复对称矩阵 Takagi 分解的迭代算法 *IAENG International Journal of Applied Mathematics*，48:297–305, 08[27] Xu
W 和 Qiao S 2008 Takagi 分解的分治法 *SIAM Journal on Matrix Analysis andApplications*，30(1):142–153[28] Bunse-Gerstner A
和 Gragg W B 1988 复对称矩阵的奇异值分解 *Journal of Com-putational and Applied Mathematics*，21(1):41–54