arXiv:2611.28590v1 [hep-lat] 21 Nov 2026

费米子 2+1D SU(2)量子链路模型：精确对角化/密度矩阵重整化群可靠性研究

Daming Li*数学科学学院，上海交通大学，中国上海，200240

摘要

带有动力学费米子的非阿贝尔格点规范理论，是张量网络和量子模拟方法的核心研究目标，但针对小型系统的受控可靠性研究仍然十分有限。我们针对具有一个交错费米子味、定义在小型二维格点上的 2+1D SU(2)量子链路模型，对两种互补的希尔伯特空间方法进行了基准测试：稀疏精确对角化（ED）和矩阵乘积态密度矩阵重整化群（DMRG）。链路变量采用五态{5} 截断，费米子则由双颜色四态格点表示。我们通过显式的跨格点 Jordan–Wigner 串实现 ED，并采用总费米子数守恒以及由局域项构建的矩阵乘积算符（MPO）实现 DMRG。我们逐分量验证了链路代数、高斯定律对易性、厄米性、纯规范极限以及 MPO，并将其与 ED 进行对照。两种 2×2 方法的结果一致达到 10^{-13}，而 2×3–2×5 梯子的结果在 10^{-5} 水平以内受到控制。3×3 几何结构展示了颜色中性的作用：在半填充条件下，奇数费米子数使 $G^2 = 3/4$ 成为精确下界；而一个空穴或一个双占据则恢复中性，并将残差降低至 $\sim 2 \times 10^{-5}$，达到 $\chi = 2048$。独立的精确高斯律 fPEPS 为偶数填充 3×2 扇区提供了参考值。这些结果为非阿贝尔规范场-费米子基准测试确立了可复现的可靠性范围，并表明在更大规模的模拟中，需要采用更大的键维数或不同的张量网络几何结构。

1 引言

格点规范理论为量子色动力学提供了一种非微扰定义 [1, 2, 4]。哈密顿量表述天然适用于张量网络 [5, 6], 神经量子态 [8, 9], 和量子电路 [10, 11]。主要障碍包括规范约束、非阿贝尔链路希尔伯特空间，以及对于动力学费米子而言的 Jordan–Wigner（JW）串和符号问题。

2+1维 SU(2)量子链路模型（QLM）是一个很有用的测试平台。其链路变量可以截断到较小的表示 [12], ，同时模型仍保有非阿贝尔规范不变性。加入单一交错费米子味，便可引入基本的规范场-费米子耦合，而无需面对量子色动力学的全部复杂性。 2×2晶格规模足够小，可以进行精确对角化，而 2×2–2×5 梯子和小型 3×2/3×3 几何构型可通过密度矩阵重整化群进行研究。

哈密顿量晶格规范理论的张量网络研究始于 1+1 维，其中 Schwinger 模型是标准测试平台。矩阵乘积态已被用于谱计算、弦断裂、连续统极限和拓扑扇区的研究 [13, 14, 15, 16, 17]。对于非阿贝尔理论，Kühn 等人研究了 SU(2) 弦断裂 [18], Bañuls 等人为 1+1D SU(2) 谱计算引入了一种高效的物理基[19],，而 Silvi 等人模拟了有限密度下的 1+1D SU(3) [20]。

在 2+1 维 度中，U(1) 和 SU (2) 规范理论的张量网络和量子链方法已经得到发展 [21, 22, 23, 24]。Cataldi 等人 [24] 最近模拟了 (2+1)维 SU(2) 杨–米尔斯理论，达到有限 ite

*lidaming@sjtu.edu.cn

密度张量网络；这是与我们工作最接近的方法学先例。张量重整化群方法提供了一种互补的欧几里得表述 [25, 26]。

规范不变张量网络构造，包括具有规范对称性的纠缠重整化和对称张量网络，已被发展出来，以精确满足高斯定律 [27, 28, 29]。我们的工作范围不同：我们不以绘制相图或研究连续极限为目标，而是选定少量参数点，考察哪些能量和晶格面元在数值上是受控的。我们提供独立的精确对角化参考值、逐项矩阵乘积算符检验，以及对半填充 3×3 几何结构的诊断；在这种结构中，奇数费米子数会导致高斯定律无法满足。

这里的基准测试指的是数值可靠性，而非硬件表征：随机基准测试和门集层析 [32, 33]估算量子设备上的门保真度和制备与测量误差，而本工作则针对截断、高斯惩罚项和局部极小值误差，对经典张量网络计算进行验证。

本文提出一个刻意限定的问题：该模型的哪些结果在数值上可靠？我们如何确定这一点？我们不尝试进行连续极限外推或绘制相图，而是建立一套验证协议，并将其应用于少量固定参数点。我们的贡献如下：

1. 一个五 态 SU(2) 量子链模型实现，采用交错费米子和明确的 JW 约定 n;
2. 一个稀疏精确对角化参考，以及一个独立的守恒 N 的 MPO/DMRG 实现；
3. 逐分量的 MPO/ED 比较，包括对 JW 符号最敏感的跃迁项；
4. 2×2–2×5 梯子的可靠性范围，包括高斯残差、费米子数守恒和初态检验；
5. 半填充 3×3 几何结构上的填充奇偶性障碍，以及一个经精确高斯参考验证的偶数-N_f 3×2 对照组。

本文的组织结构如下。第2 节确定晶格、五态链路、交错费米子及其 Jordan–Wigner约定、哈密顿量和高斯定律。第3 节介绍稀疏精确对角化参考值和 N守恒的矩阵乘积算符/密度矩阵重整化群流程，包括晶格到链的映射及收敛规则。第4 节给出精确恒等式和逐分量基准测试。第5 节报告 2×3–2×5 梯子和 $3\times3/3\times2$ 几何构型的结果。第6 节讨论可靠性范围和两种失效模式（对称性障碍及惩罚项限制的欠收敛），并说明局限性。附录A–B汇总数值参数、逐点诊断和 MPS 标度数据；附录C 明确推导 2×2 情形。

2 模型

本节确定晶格、具有电算符和链路算符的五态链路、交错费米子及其 Jordan–Wigner约定、哈密顿量，以及高斯定律及其施加方式（图 1）。后续各节均采用这些约定，不再重新定义。

2.1 晶格、尺寸与晶格面元

我们考虑一个具有开放边界的二维方格晶格，其中有 L_x 列和 L_y 行，格点为 v =(x, y)，其中 $x = 0$、.....、$L_x - 1$ 以及 $y = 0$、.....、$L_y - 1$；链路 l =((x, y)、($x + 1$, y)) 为水平链路，或 l =((x, y)、(x, $y + 1$)) 为垂直链路。在全文中，$L_x = 2$和 $L_y \in \{2$、3、4、$5\}$，因此梯子为 2×2–2×5,

其中 L_y 表示行数和第二个标签索引。第两个 $L_x = 3$ 试验晶格将在第 6 节和附录 B中讨论：3×2 （$N_f = 6$，偶数）和半填充 （$N_f = 9$，奇数）。链路和晶格面元的数量为

$$n_L = (L_x - 1)L_y + L_x(L_y - 1), \qquad n_p = (L_x - 1)(L_y - 1). \tag{1}$$

一个元 p，其左下角位于 (x, y)，由四条链路组成

$$l_0 : (x,y) \to (x+1,y), \quad l_1 : (x+1,y) \to (x+1,y+1), \quad l_2 : (x,y+1) \to (x+1,y+1), \quad l_3 : (x,y) \to (x,y+1), \tag{2}$$

逆时针 方向；前两条沿其正方向遍历，后两条则沿相反方向遍历 .

2.2 五态链路

每条链路都带有 SU(2)量子链路模型的五态$\{5\}$ 截断 [12]。精确的链路希尔伯特空间为 $\bigoplus_j V_j \otimes V_j^*$，其中左、右瑞雄子分别位于链路的两端；$\{5\}$ 截断保留了 $j = \frac{1}{2}$ 扇区（$2 \times 2 = 4$ 个态），以及 $j = 0$ 单态，因此

$$\mathcal{H}_l = \underbrace{\mathrm{span}\{|0,0\rangle\}}_{j=0,\ 1\ \text{state}} \oplus \underbrace{\mathrm{span}\{|\alpha,\beta\rangle\}_{\alpha,\beta=0,1}}_{j=1/2,\ 4\ \text{states}}, \qquad \dim \mathcal{H}_l = 5.$$

这里， $\alpha, \beta \in \{0, 1\}$ 分别表示左侧和右侧里松的颜色； $|0, 0\rangle$ 为里松真空，而$|\alpha, \beta\rangle$ 在每一端恰好各有一个里松。我们将标准正交基写为 $|1\rangle \ldots, |5\rangle$，其中 $|5\rangle \equiv |0, 0\rangle$，其余四个态为 $|\alpha, \beta\rangle$ ，顺序如下文所定。

对于 $|\alpha, \beta\rangle = |\alpha\rangle_L \otimes |\beta\rangle_R$,

$$E_L^a = \tfrac{\sigma^a}{2} \otimes \mathbf{1}, \qquad E_R^a = \mathbf{1} \otimes \tfrac{\sigma^a}{2} \qquad (\text{on the } j = \tfrac{1}{2} \text{ sector}), \tag{3}$$

以及 $E_L^a |5\rangle = E_R^a |5\rangle = 0$。这些就是计算代数所需的全部定义

$$[E_L^a, E_L^b] = i\epsilon^{abc} E_L^c, \qquad [E_R^a, E_R^b] = i\epsilon^{abc} E_R^c, \qquad [E_L^a, E_R^b] = 0,$$

卡西米尔算子

$$E^2 = \sum_{a=1}^{3} (E_L^a)^2 = \sum_{a=1}^{3} (E_R^a)^2 = \mathrm{diag}\left(\tfrac{3}{4}, \tfrac{3}{4}, \tfrac{3}{4}, \tfrac{3}{4}, 0\right), \tag{4}$$

以及链路场的变换性质,

$$[E_L^a, U_{\alpha\beta}] = -(T^a)_{\alpha\gamma} U_{\gamma\beta}, \qquad [E_R^a, U_{\alpha\beta}] = U_{\alpha\gamma} (T^a)_{\gamma\beta}, \qquad T^a = \tfrac{\sigma^a}{2},$$

其中 $U_{\alpha\beta}$ 在每一端都按基本表示变换。在里松表示中，U 会产生或湮灭一个里松对，因此它唯一非零的矩阵元连接四个$j = \frac{1}{2}$ 态与单态:

$$U_{00} = -\sqrt{2}\,|3\rangle\langle 5| + \sqrt{2}\,|5\rangle\langle 2|, \qquad U_{01} = -\sqrt{2}\,|4\rangle\langle 5| - \sqrt{2}\,|5\rangle\langle 1|, \tag{5}$$

$$U_{10} = \sqrt{2}\,|1\rangle\langle 5| + \sqrt{2}\,|5\rangle\langle 4|, \qquad U_{11} = \sqrt{2}\,|2\rangle\langle 5| - \sqrt{2}\,|5\rangle\langle 3|, \tag{6}$$

其中 $U_{\alpha\beta}^\dagger = (U_{\alpha\beta})^\dagger$；每个条目的模均为 $\sqrt{2}$，这是 $\{5\}$ 截断的归一化。所得基底标记总结于表1。

表1：五种链态：里松子内容、颜色标签和电荷量子数。第二列给出链路左右两端的里松子数 (r_L, r_R)：对于四种 $r_L = r_R = 1$ 态为 $j = \frac{1}{2}$，对于单态为 $r_L = r_R = 0$。第三列给出左右瑞雄子的颜色标签 (α, β)，可从 (6) 读出，使用 $U_{\alpha\beta}\,|5\rangle \propto |1-\alpha, \beta\rangle$（左侧指标取补，因为链路场的一端带有反基本表示指标）；第四列和第五列分别为由 (3) 得到的 E_L^3 和 E_R^3的本征值。

态	$(r_L,\ r_R)$	$(\alpha,\ \beta)$	E_L^3	E_R^3	E^2	由 $\lvert 5\rangle$ 产生
$\lvert 1\rangle$	(1, 1)	(0, 0)	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}$	U_{10}
$\lvert 2\rangle$	(1, 1)	(0, 1)	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}$	U_{11}
$\lvert 3\rangle$	(1, 1)	(1, 0)	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}$	U_{00}
$\lvert 4\rangle$	(1, 1)	(1,1)	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}$	U_{01}
$\lvert 5\rangle$	(0, 0)	—	0	0	0	—

2.3 费米子

每个晶格点上有一种交错费米子味，包含两个颜色分量，因此局域希尔伯特空间是四维的。我们采用以下有序基

$$|0\rangle\,, \quad |1\rangle \equiv c_0^\dagger\,|0\rangle\,, \quad |2\rangle \equiv c_1^\dagger\,|0\rangle\,, \quad |12\rangle \equiv c_0^\dagger c_1^\dagger\,|0\rangle\,,$$

即 $|n_0,\ n_1\rangle$，对应关系为 $|0\rangle \leftrightarrow |0,\ 0\rangle$、$|1\rangle \leftrightarrow |1,\ 0\rangle$、$|2\rangle \leftrightarrow |0,\ 1\rangle$以及 $|12\rangle \leftrightarrow |1,\ 1\rangle$。算符为

$$c_0 = \tau^- \otimes \mathbf{1}, \qquad c_1 = \sigma_z \otimes \tau^-, \qquad \tau^- = |0\rangle_f\langle 1|_f = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{7}$$

其中 $|0_f, |1_f$是单模态态（不同于上述四个格点态），且 $\tau^+ = |1_f 0|_f = (\tau^-)^\dagger$以及 $|0_f = (1, 0)^T$, $|1_f = (0, 1)^T$。σ_z在 c_1中的因子是同一格点上第一种颜色的 Jordan–Wigner 串：两种颜色必须反对易，而 $\sigma_z\tau^+ = -\tau^+\sigma_z$给出 $\{c_0, c_1\} = 0$，而 $\{c_0, c_0^\dagger\} = \{c_1, c_1^\dagger\} = 1$。格点的色荷和费米子数为

$$Q_v^a = c_{v,\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^a c_{v,\beta}, \qquad n_v = c_{v,\alpha}^\dagger c_{v,\alpha},$$

其中 $\alpha,\ \beta \in \{0,\ 1\}$ 和 $a = 1,\ 2,\ 3$，因此 Q_v^a是格点上颜色旋转的生成元，而 n_v统计该处的费米子数。

2.4 哈密顿量

哈密顿量为 $H = H_{\text{gauge}} + H_{\text{hop}} + H_{\text{mass}}$，其中

$$H_{\text{gauge}} = \frac{g^2}{2}\sum_l E_l^2 - \frac{1}{2g^2}\sum_p \left(P_p + P_p^\dagger\right), \tag{8}$$

$$H_{\text{hop}} = -t\sum_{\langle v,w\rangle} \eta_{v,w}\left(c_{v,\alpha}^\dagger (U_{v,w})_{\alpha\beta} c_{w,\beta} + \text{h.c.}\right), \tag{9}$$

$$H_{\text{mass}} = m\sum_v (-1)^{x_v + y_v} n_v. \tag{10}$$

我们将 $H_{\text{gauge}} = H_{\text{el}} + H_{\text{mag}}$写作 $H_{\text{el}} = \frac{g^2}{2}\sum_l E_l^2$和 $H_{\text{mag}} = -\frac{1}{2g^2}\sum_p (P_p + P_p^\dagger)$。其中 t是跃迁振幅，g是规范耦合，m是交错质量，而 $(-1)^{x_v+y_v}$ 是交错质量符号；所有

能量以 t为单位。 E_l^2是链路 上的卡西米尔算子 (4)，而 $U_{v,w}$ 是连接v 和 w 的链路算子，颜色指标按所示方式收缩。plaquette 算符是颜色迹

$$P_p = \sum_{i=0}^{1} \left(U_{l_0} U_{l_1} U_{l_2}^{\dagger} U_{l_3}^{\dagger} \right)_{ii}, \tag{11}$$

其中，左下角为 $(x,\ y)$ 的元的四条链路按（2）所示顺序排列，即逆时针方向；前两条沿正方向穿过，并带有 U，而 l_2 和 l_3 则沿与其标定方向相反的方向穿过，并带有 $U^{\dagger}$。(U_l 11) 中的每个都是一个携带 2×2 颜色指标的 5×5 链路算子，因此（11）是若干 $2^4 = 16$ 颜色单项式之和。

我们采用标准的二维 Kogut–Susskind交错方案 [3]。对于一条键 $\langle v,\ w\rangle$，我们将 v 定义为左端点/下端点，并设定

$$\eta_{v,w} = \begin{cases} 1, & w = v + \hat{x} \quad \text{(horizontal)}, \\ (-1)^{x_v}, & w = v + \hat{y} \quad \text{(vertical)}, \end{cases} \tag{12}$$

即 $\eta_x(v) = 1$ 和 $\eta_y(v) = (-1)^{x_v}$，这是通常依赖于方向的选择。

2.5 高斯定律及其施加

格点 v 处的高斯生成元为

$$G_v^a = \sum_{l \ni v} E_{l,v}^a + Q_v^a, \qquad E_{l,v}^a = \begin{cases} E_L^a, & v \text{ is the left/lower endpoint of } l, \\ E_R^a, & v \text{ is the right/upper endpoint of } l, \end{cases} \tag{13}$$

物理态满足

$$G_v^a \left|\psi\right\rangle = 0 \qquad \text{for all } v, a. \tag{14}$$

（ E_L 与 E_R 在（13）中的贡献之间的相对符号取为使得 $[H, G_v^a] = 0$。
两种方法都不会严格施加（14）。两者都会添加惩罚项

$$H_\lambda = H + \lambda \sum_{v,a} \left(G_v^a\right)^2, \qquad \lambda = 10, \tag{15}$$

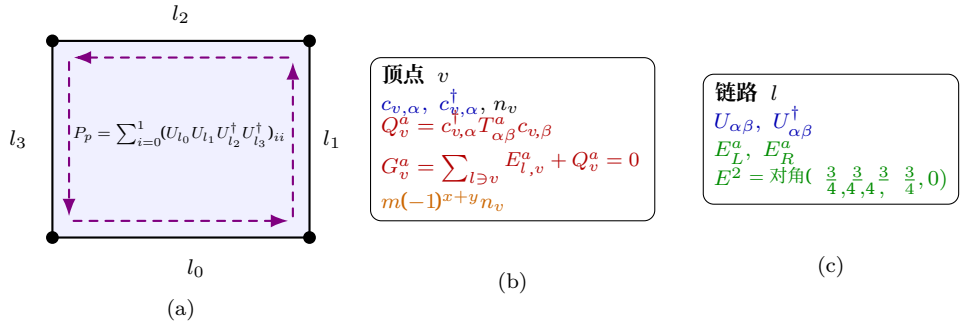

图1：模型的算符内容。(a) 晶格的单个元，其中链路 l_0、……、l_3 按逆时针方向排列，元算符 $P_p = \sum_{i=0}^{1}($ $U_{l_0} U_{l_1} U_{l_2}^{\dagger} U_{l_3}^{\dagger}$ $)_{ii}$、标准交错相位 $\eta_x = 1$（水平链路）和 $\eta_y = (-1)^x$ （垂直链路），以及四个格点。(b) 作用于顶点 v 的算符：双色费米子模 $c_{v,\ \alpha}$、 $c_{v,\ \alpha}^{\dagger}$、数算符 n_v、色荷 Q_v^a、高斯约束 $G_v^a = 0$和质量项。(c) 作用于链路 l 的算符： $U_{\alpha\beta}$、 $U_{\alpha\beta}^{\dagger}$、 E_L^a、 E_R^a和 E^2。文中使用的梯子几何结构通过重复垂直方向得到。

3 方法

采用了两种独立的希尔伯特空间方法。稀疏精确对角化仅适用于 2×2 晶格，是参考值；密度矩阵重整化群是可扩展的方法，适用于全部五种几何构型。 2×2 比较用于检验密度矩阵重整化群的实现，尤其是 Jordan–Wigner约定，以确保其可靠后再应用于更大的梯子。

这两种方法均使用 Python 实现：稀疏精确对角化使用 NumPy 和 SciPy 的 Lanczos求解器 [30]；密度矩阵重整化群使用 TeNPy 1.1。1 [31]，矩阵乘积算符是在 TeNPy 的基础上逐项构造的 `CouplingModel`。第6节的独立费米子投影纠缠对态交叉检验使用 quimb 和 symmray。每种颜色模式对应一个 `FermionSite(conserve="N")` ，每条链路则对应一个带平凡荷的五态格点，因此 Jordan–Wigner 串由 TeNPy的费米子站点提供。第4节的分量比较验证的是定制矩阵乘积算符构造，而非 TeNPy 算法本身。

3.1 稀疏精确对角化

在 2×2 晶格上，乘积基的维数为 $5^4\cdot4^4=160{,}000$。所有水平链路首先按行优先顺序枚举，接着按行优先顺序枚举所有垂直链路，而这一排序定义了乘积基。一个基态是如下元组

$$(\mathrm{link}_0,\dots,\mathrm{link}_{n_L-1},\ \mathrm{site}_0,\dots,\mathrm{site}_{n_V-1}),$$

其中，每个链路索引遍历表 1 中的五种状态，每个格点索引遍历第 2.3 节中的四种状态；$n_V=L_xL_y$ 是格点数。哈密顿量由局域算符的克罗内克积逐项组装成复数稀疏（CSR）矩阵，每次处理（8）–（10）中的一项；惩罚项（15）也以同样方式组装。

Jordan–Wigner约定。 模式按格点依次排序，并在每个格点内按颜色排序，与局域基（7）一致。令 $\sigma(v)$ 表示格点 v (y 外层、 x 内层）的行优先位置。精确对角化采用此格点排序；第 3.2 节中的 MPS 链将链路格点与其交错排列，但链路格点具有平凡宇称，因此不会改变字符串。按照此排序，Jordan–Wigner变换为

$$c_j=\Big(\prod_{k<j}Z_k\Big)\sigma_j^-,\qquad c_j^\dagger=\Big(\prod_{k<j}Z_k\Big)\sigma_j^+,$$

其中， j遍历 $2L_xL_y$颜色模式， $Z_k=(-1)^{n_k}=1-2n_k=\mathrm{diag}(1,-1)$是空态/占据态基中的宇称矩阵。 $c^\dagger$ 和 c 的字符串在两个模式之间的区间之外相互抵消，因此跃迁项包含中间模式上的 Z_k 乘积。将一个格点的两种颜色模式组合起来，可得格点宇称

$$\Pi_u=Z_{u,0}Z_{u,1}=(-1)^{n_{u,0}+n_{u,1}}=(-1)^{n_u},\qquad n_{u,\alpha}=c_{u,\alpha}^\dagger c_{u,\alpha},$$

它是 $\mathrm{diag}(1,\ -1,\ -1,\ 1)$ 在有序基 $|0\rangle$ $|1\rangle$ $|2\rangle$ $|12\rangle$中，即 $+1$当 $n_u=0$或 2且 -1当 $n_u=1$；式 (σ_z 中的在位7) 考虑了两种颜色的顺序。对于键 $\langle v,\ w\rangle$ 上的跃迁项，插入精确对角化矩阵的算符为

$$O_{v\to w}=c_{v,\alpha}^\dagger\Big(\prod_{\sigma(v)<\sigma(u)<\sigma(w)}\Pi_u\Big)(U_{v,w})_{\alpha\beta}\,c_{w,\beta}. \tag{16}$$

乘积遍历一维排序中严格位于 v 和 w 之间的所有格点，而不是遍历空间路径；字符串连接在 v 侧，即连接在产生算符上。厄米共轭通过交换 $v\leftrightarrow w$ 并将 U 替换为 $U^\dagger$得到；该字符串是厄米的。这里$(U_{v,\ w})_{\alpha\beta}$ 是键$\langle v,\ w\rangle$上的单链算符；它不是威尔逊线。链路算符的乘积仅出现在元项 P_p中。MPO（第3.3节）也采用相同约定；第 4 节的分量比较是对（16）的检验。

跃迁项逐条链路组装：对于每个颜色对$(\alpha,\ \beta)$，我们在左侧格点$c^{\dagger}_{v,\ \alpha}$处插入 v，在键上插入 $U_{\alpha\beta}$，并在右侧格点$c_{w,\ \beta}$处插入 w；在每个中间格点上插入 Π_u ；在正向项中，左端因子的排序为$c^{\dagger}_{v,\ \alpha}\Pi_v$ ，而在厄米共轭中为$\Pi_v c_{v,\ \alpha}$ ，因此这一对是厄米的。磁项是（ 2^4 11）的颜色单项式之和。

通过稀疏对角化获得 $H+H_\lambda$ 的基态，不对费米子数或（14）施加任何约束。因此，所得态仅在惩罚项作用下才是物理态，这也是为何要测量本征向量上的高斯残差，而不是将其视为理所当然。

3.2 从晶格到 MPS链

对于密度矩阵重整化群，二维晶格被映射为一维 MPS 链，由**异构**格点构成：费米子模与链路自由度交错排列。对于每一行 y ，我们从左向右依次放置每个格点的两个颜色模式，然后放置该格点右侧的水平链路；在该行之后，按递增的 x 追加该行的垂直链路，即

$$\underbrace{\left[s^{(c_0)}_{0,y}, s^{(c_1)}_{0,y}, h_{0,y}\right]\left[s^{(c_0)}_{1,y}, s^{(c_1)}_{1,y}, h_{1,y}\right]\cdots\left[s^{(c_0)}_{L_x-1,y}, s^{(c_1)}_{L_x-1,y}\right]}_{\text{row } y,\ \text{horizontal links}},\qquad \underbrace{v_{0,y},\ldots,v_{L_x-1,y}}_{\text{vertical links of row } y\ (y<L_y-1)}\quad , \tag{17}$$

对 $y=0$、.....、L_y-1 重复此过程。这里 $h_{x,\ y}$ 是水平链路（$x,\ y$）$\to$（$x+1,\ y$），存在于 $x=0$、.....、L_x-2；$v_{x,\ y}$ 是垂直链路（$x,\ y$）$\to$（$x,\ y+1$），存在于 $x=0$、.....、L_x-1 和 $y=0$、.....、L_y-2。因此，MPS 格点的数量为

$$N_{\mathrm{MPS}} = 2L_xL_y + n_L.$$

这种排序不是蛇形排列：每一行都从左向右遍历。它使元的四条链路保持在一个包含 $4L_x$ 个连续 MPS 格点的窗口内（8 个格点对应于 $L_x=2$），因此矩阵乘积算符仍保持局域性；横截面更宽的几何构型（$L_x>2$）则需要采用蛇形排列或圆柱排列，正如第6节所述。

费米子模由守恒总费米子数的格点表示，因此 N 是 MPS 的一个精确量子数。链路格点的局域维数为五，并携带平凡荷。由于 N 是精确的，DMRG 运行中的费米子数由初态决定，而不是由求解器决定。在半填充下，预期值为 $N_f = L_xL_y$。

3.3 矩阵乘积算符构造

矩阵乘积算符由局域项构成。费米子算符所需的 Jordan–Wigner 串会被插入其中，从而使矩阵乘积算符约定在构造时就与（16）保持一致，并对作用于同一格点上的算符乘积进行显式处理。哈密顿量的每一项都作为局域单项式之和加入。

- 电项。 $\frac{g^2}{2}E_l^2$ 是每个链路格点上的单点算符，在表 1. 的基底中为对角形式
- 磁项。 将迹（11）加入为 2_4 个颜色单项式 $U_{ij}U_{jk}U_{\dagger\,kl}U_{\dagger\,li}$, $i,j,k,l\in\{0,1\}$，每个单项式都是四个链路算符的乘积，并加上厄米共轭及系数 $-1/(2g^2)$。每个单项式跨越一个元的四条链路。
- 跃迁项。 $-t\eta_{v,w}c_{\dagger v,\alpha}(U_{v,w})_{\alpha\beta}c_{w,\beta}$ 加上其厄米共轭，其中 $\eta_{v,w}$ 来自（12）；颜色指标在加入该项之前进行缩并，因此每个跃迁项都是四个单项式之和。
- 质量项。 按费米子数对角，每次处理一个格点。
- 高斯惩罚项。 展开为单项式后再添加，见下文。

高斯惩罚项的展开。 将（13）平方后，每个格点上会产生四类结构不同的项v:

$$\Big(\sum_{l\ni v} E^a_{l,v} + Q^a_v\Big)^2 = \underbrace{\sum_{l,l'\ni v} E^a_{l,v}E^a_{l',v}}_{\text{link–link (2 sites at most)}} + 2\underbrace{\sum_{l\ni v} E^a_{l,v}Q^a_v}_{\text{link–fermion (2 sites)}} + \underbrace{Q^a_vQ^a_v}_{\text{fermion only (1 site)}}.$$

第一类包含格点内（$l = l'$）和次近邻（$l \neq l'$）部分，第二类将一个链路格点与同一顶点处的费米子格点耦合起来，第三类是单格点双费米子算符；对 a 求和并利用 SU(2) 完备关系可得

$$\sum_{a=1}^{3} Q^a_vQ^a_v = \frac{3}{2}\,n_v - \frac{3}{4}\,n_v^2,$$

该关系用于将惩罚项的颜色部分化简为 n_v 和 n_v^2。对 a 的求和在加入单项式之前进行。这一展开步骤最容易出现实现错误，因为链路–费米子类混合了两种不同的格点类型，并且要求采用正确的格点顺序。

所得矩阵乘积算符键维数列于表 2；在 40 左右的 2×4 和 2×5 梯子上达到 71 左右的 3×3 试点，而限制梯子长度的是矩阵乘积态的键维数，而非矩阵乘积算符的键维数。矩阵乘积算符按构造是厄米的，因为每一项都会与其伴随算符一同加入。

表 2：MPO 尺寸与 MPS 尺寸的关系。MPO 键维数与 MPS 键维数无关，仅略有增长：从 2×2 上的 32 增至梯子上的约 40，以及 3×3上的 71；对于梯子而言，限制性资源是 MPS 键维数 χ，而不是 MPO。

几何结构	N_{MPS}	MPO 最大键维数
2×2	12	32
2×3	19	40
2×4	26	40
2×5	33	40
3×3	30	71

3.4 密度矩阵重整化群

的基态 H_λ 使用双格点 DMRG 算法计算 [7] 在链（17）上进行。具有有限键维数的双格点扫描会收敛到限制在秩-χ流形上的变分泛函局部极小值，而该极小值通常并不是基态的秩-χ 投影。这就是为什么下面的接受规则要求不止一个初态。对于每次运行，我们记录扫描次数、最终扫描中逐次扫描之间的能量变化以及最大截断误差；所接受的点是指其能量在进一步增大 χ后仍保持稳定的点。

初始态。 所有链路格点均处于瑞雄子真空 $|5\rangle$。费米子乘积态由被占据的 $2L_xL_y$ 颜色模式指定；每个态恰好包含 $N_f = L_xL_y$ 个费米子，即处于半填充状态。

- `color1`：所有颜色 0 模式均被占据，所有颜色 1 模式均为空；
- `color2`：所有颜色 1 模式均被占据，所有颜色 0 模式均为空；
- `mixed`：在每个格点 (x, y) 上，颜色 $c \in \{0,1\}$ 中编号为偶数的颜色被占据，另一种颜色为空；
- `double`：前 $L_xL_y/2$ 个格点上两种颜色均被占据，其余格点上两种颜色均为空（仅对偶数 n_V 定义；未用于 3×3 试点）；

- `random`：从 $2L_xL_y$ 个颜色模式中均匀随机选取恰好 N_f 个。

这些态涵盖不同的填充模式，用于检测局部极小值；这种比较并非旨在加快收敛。

可观测量。 每次运行后，我们测量能量 E_0、总费米子数 $N_f = \sum_v \langle n_v \rangle$、高斯残差 $\langle G^2 \rangle = \sum_{v,\ a} \langle (G_v^a)^2 \rangle$，以及归一化元 $\langle P_p \rangle / 16$；其归一化方式使得当 $g \to 0$ 时，纯规范场元趋近于 1。后者从在最终矩阵乘积态上计算的矩阵乘积算符的磁性部分中提取，

$$\frac{\langle P_p \rangle}{16} = -\frac{g^2}{16\, n_p} \langle H_{\mathrm{mag}} \rangle,$$

这由式（8）得出。

3.5 收敛与接受规则

精确对角化参考值在数值精度范围内是精确的，因此无需接受规则。对于密度矩阵重整化群，只有在四项条件全部满足时才接受该点。

1. 键维数稳定性： $|E(\chi) - E(\chi')| \le \epsilon_E$ 对于该几何结构下可用的两个最大键维数 $\chi' < \chi$，且 $\epsilon_E = 10^{-6}$。

2. 截断误差：最终扫描中的最大截断误差低于 $\epsilon_{\mathrm{trunc}} = 10^{-6}$。

3. 高斯定律：$\langle G^2 \rangle \le 10^{-8}$。

4. 能量景观检查：所有初始态中找到的最低能量不会因其他初始态而进一步降低。如果另一个初始态找到更低的能量，则重新对该点进行分类，并采用较低的数值。

仅满足条件 1–3 并不足够，这正是本文的方法论要点：条件 1 是在单次运行内评估的，因此无法检测局部极小值；条件 2 仅衡量该次运行的截断情况；条件 3 则可能在惩罚项足够大时由非物理态满足。只有条件 4 检验的是能量景观，而不是运行本身；它也是区分收敛点与陷入局部极小值的点的判据。任何未满足条件的点都会被明确报告为未收敛，并从可靠性范围中排除；不会被悄然丢弃。

能量误差有三个来源：键维截断，通过 $|E(\chi) - E(\chi')|$ (条件 1)估算；有限惩罚项，通过在 $\lambda = 100$ (附录 A)处重复计算 2×3 点进行检查；以及初态景观（条件 4）。对于接受的点，取值 $\lambda = 10$ 可将G^2抑制在 10^{-8} 以下，同时保持H_λ 条件良好。对于 2×2，第一项处于 10^{-13} 水平（精确对角化交叉核验）；对于 2×3，截断的贡献为 10^{-6}，惩罚项低于 10^{-5}；对于 2×4 和 2×5，截断的贡献为10^{-5}，高斯残差低于 2.3×10^{-9}。对于 3×2，这三项均未得到控制，因此将其排除在包络范围之外。

4 验证

4.1 精确恒等式

我们直接根据定义对易关系检查链路代数。对于完整哈密顿量，我们数值验证了$[H, G_v^a] = 0$和 $H = H^\dagger$。在 $t = m = 0$时，该模型退化为纯规范理论；在 $g = 1$时， 2×2基态能量为 -15.26756848，我们将其用作回归测试。

4.2 分量比较

在 $g = 1$, $m = 0.1$ 我们将电、磁、质量、跃迁、规范和惩罚项的矩阵乘积算符期望值与稀疏精确对角化进行比较。跃迁项对JW约定最为敏感。修正跨格点JW字符串后，所有分量在 10^{-14} 层面上均一致；总能量为

$$E_0^{\mathrm{MPO}} = -19.413260195978, \qquad E_0^{\mathrm{ED}} = -19.413260195978.$$

这是对两个实现表示的是同一个费米子模型，而不仅仅是同一个玻色子截断的有力检验。表 3列出了逐分量的完整比较；惩罚项矩阵乘积算符则在附录 A 中针对乘积态单独进行了检查。

表3: 在 $g = 1$、 $m = 0.1$ 上对矩阵乘积算符和精确对角化进行的逐分量比较 2×2 （能量以 t为单位）。最后一列为绝对差值。

分量	MPO	ED	|差值|
电	0.656517131993	0.656517131993	2.2×10^{-16}
磁性	−12.178640504104	−12.178640504104	1.8×10^{-15}
mass	−0.066617657029	−0.066617657029	1.1×10^{-15}
跃迁	−7.824519166839	−7.824519166839	8.9×10^{-15}
规范	−11.522123372110	−11.522123372110	5.3×10^{-15}
惩罚项	~ 0	~ 0	2.3×10^{-15}
full	−19.413260195978	−19.413260195978	0

4.3 2×2 精确对角化与密度矩阵重整化群

表 4 列出了本文使用的定点。密度矩阵重整化群与精确对角化的能量一致到 10^{-13} 或更高精度，且高斯残差低于 10^{-15}。这些定点构成了方法基准测试的精确参考值集。

表4: 2×2 可靠性 集合（$t = 1$, $\lambda = 10$）。密度矩阵重整化群的数值是从第 init ial 节的初态中找到的 3.4.

g	m	E_0 (密度矩阵重整化群)	E_0 (精确对角化)	$\lvert E_{\mathrm{DMRG}} - E_{\mathrm{ED}} \rvert$	元	G^2
0.5	0.1	-64.926475062	-64.926475062	8.5×10^{-14}	0.987283	$< 10^{-15}$
1.0	0.1	-19.413260196	-19.413260196	3.2×10^{-14}	0.761165	$< 10^{-15}$
2.0	0.1	-10.220071849	-10.220071849	4.3×10^{-14}	0.452055	$< 10^{-15}$
1.0	0.0	-19.379644646	-19.379644646	7.5×10^{-14}	0.757633	$< 10^{-15}$
1.0	0.2	-19.510627935	-19.510627935	3.9×10^{-14}	0.770680	$< 10^{-15}$

5 结果

5.1 2×3 晶格

耦合依赖性。表5 给出了收敛后的 2×3 结果，取值为 $m = 0.1$。所有情况下，高斯残差均低于10^{-11} 。随着 g 增大，元的数值减小，而能量尺度变化显著，这是因为磁项按 $1/g^2$缩放。

表 5： 2×3 在 $m = 0.1$ ($t = 1$, $\lambda = 10$)处的结果。每个 g 所列的数值均为收敛后的能量；所有采样的初始态结果一致。

g	E_0	元	G^2
0.5	-103.579704	0.773325	2.6×10^{-12}
1.0	-32.699014	0.627592	3.4×10^{-13}
2.0	-16.490333	0.437372	3.7×10^{-14}

对于 2×3 这些点，在 10^{-6} 精度下，能量在两个最大的键维数之间保持稳定；截断误差至多为 10^{-7}，高斯残差至多为 10^{-11}。因此，主要的残差不确定性来自键维数外推，而非惩罚项或截断； $\lambda = 100$附录A中的重复计算证实了这一点。

质量依赖性。 在 $g = 1$ （表6）处的质量扫描可控： $m = 0$ 在$\chi = 384$和 $\chi = 448$处均得到 -32.655703（两者一致至 10^{-10}）； $m = 0.2$得到 -32.824271，其 $G^2 = 1.3 \times 10^{-13}$。该 $m = 0.1$点与上文讨论的点相同。

表 6： 2×3 在 $g = 1$ （$t = 1$， $\lambda = 10$）处的质量扫描。 $m = 0.1$ 行对应的点与表5中的点相同。

m	E_0	元	G^2
0.0	-32.655703	0.625842	1.7×10^{-13}
0.1	-32.699014	0.627592	3.4×10^{-13}
0.2	-32.824271	0.632301	1.3×10^{-13}

初态不敏感性。 初态依赖性较弱。在 $g = 1$， $m = 0.1$处， `color1`， `mixed`和 `random` 态均收敛至 $E_0 = -32.699014$；在 $g = 0.5$ (-103.579704) 和 $g = 2(-16.490333)$处也同样如此。第3.5 节的能量景观检查仍是验收流程的一部分，且通过验收的 2×3 点均满足该检查。第 2×4 和 2×5 梯子上相应的混合/随机结果一致性见第5.2节。

5.2 2×4 和 2×5 梯子

该 2×4 矩阵乘积算符有26个矩阵乘积态格点，最大MPO键维数约为40； 2×5 梯子有33个矩阵乘积态格点。在 $\chi = 1024$ 下，两个梯子给出的结果见表7。从 $\chi = 768$ 到1024，能量变化分别为 2.8×10^{-5} （2×4）和 2.2×10^{-5} （2×5），因此我们将其报告到 10^{-5} 精度；高斯残差分别为3.5×10^{-11} 和 2.3×10^{-9}，截断误差分别为 6.7×10^{-10} 和 1.7×10^{-8}。混合初始态和随机初始态的结果分别相差 3×10^{-8} （2×4）和 10^{-7} （2×5）。这些梯子的主要残差不确定性来自键维数外推；能量在 10^{-5} 精度下稳定，截断误差和高斯残差也已低于接受阈值。图2展示了 2×4 能量和高斯残差随 χ 的收敛情况。

表7： 2×4 和 2×5 在 $g = 1$, $m = 0.1$ ($t = 1$, $\lambda = 10$, $\chi = 1024$)处的结果。引用的能量在 $\chi = 768$ 至1024之间的 10^{-5} 精度下保持稳定。

几何结构	E_0	元	G^2	ϵ_{trunc}
2×4	-46.6192026	0.616455	3.5×10^{-11}	6.7×10^{-10}
2×5	-60.3860082	0.600949	2.3×10^{-9}	1.7×10^{-8}

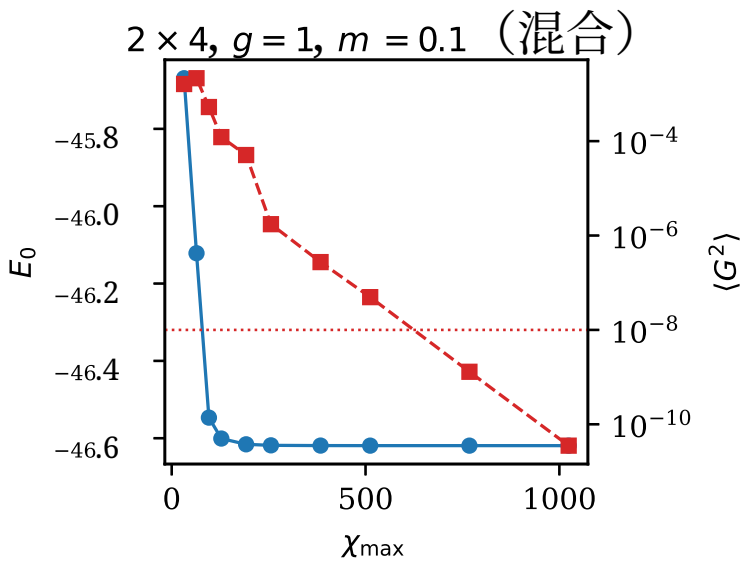

图2： 2×4 在 $g = 1$, $m = 0.1$ 下采用 `mixed` 初态时的收敛情况。能量（左轴，圆圈）在 $\chi = 768$ 到 1024 之间稳定在 10^{-5} 水平；高斯残差（右轴，方块，对数刻度）在 $\chi = 1024$达到3.5×10^{-11}，低于接受阈值 $\langle G^2 \rangle = 10^{-8}$（虚线）。

5.3 3×3 和 3×2 几何构型

两个 $L_x = 3$ 试验晶格补全了包络。半填充的 3×3 晶格有 $N_f = 9$，这是奇数，因此总色荷为半整数；链路携带整数色荷，求和后的高斯定律不可能为零。观测到的 $G^2 = 3/4$ 是精确下界，与 χ 和 λ无关。加入一个空穴或一个双占据（$N_f = 8$ 或10）后，在 $\chi = 512$时残差降至 6×10^{-4}，在 $\chi = 1024$时为1–2×10^{-4}，在 $\chi = 2048$时为1。6–2.5×10^{-5}；截断误差仍在下降，因此该残差受 χ 限制，而非受 $3/4$ 底限限制。因此，障碍来自填充奇偶性，而不是排序或惩罚项。

该 3×2 晶格具有 $N_f = 6$（偶数）并且存在精确满足高斯定律的物理态，因此 $L_x = 3$ 本身并不构成障碍。其在 $\chi = 512$（-32.5928，$G^2 = 6.7 \times 10^{-11}$）处的密度矩阵重整化群能量高于独立的精确高斯律 fPEPS 参考值（-32.61 至 -32.64）[1]；在 $\chi = 768$ 处，受惩罚项限制的态（$E = -32.68$，$G^2 = 1.1 \times 10^{-4}$）是不满足物理约束的。因而，该 3×2 点展示了偶数N_f扇区，但并非收敛的能量基准。表8汇总了由此得到的可靠性范围。

[1]费米子投影纠缠对态（fPEPS）采用显式的 SU(2) 单态投影算符，虚拟重数为 $n = 3$，属于独立实现；所引范围是不同初始化结果的跨度。该结果未在 n 中进行外推，仅作为独立的下限参考值；其构造将在其他地方报告。

表8：可靠性范围。精确对角化仅用于 2×2；其余所有点均采用密度矩阵重整化群。所报误差为第 t 节中通过键维数和惩罚项检查所控制的能量尺度（以 3.5 为单位）；$\langle G^2 \rangle$ 为高斯残差。

几何结构	N_f	方法	矩阵乘积态 χ	$\langle G^2 \rangle$	状态
2×2	4	精确对角化+密度矩阵重整化群	256	$< 10^{-15}$	受控（10^{-13}）
2×3	6	DMRG	384–512	$\leq 10^{-11}$	受控（10^{-6}）
2×4	8	DMRG	1024	3.5×10^{-11}	受控（10^{-5}）
2×5	10	DMRG	1024	2.3×10^{-9}	受控（10^{-5}）
3×2	6	DMRG	512/768	6.7×10^{-11} / 1.1×10^{-4}	偶数填充；尚未收敛
3×3	9	DMRG	512–2048	3/4	受阻（奇数 N_f）
3×3	8/10	DMRG	2048	1.6–2.5 $\times 10^{-5}$	χ受限

6 讨论与结论

该基准测试建立了可靠的小晶格包络： 2×2 由精确对角化和密度矩阵重整化群控制至 10^{-13}；可接受的 2×3 点在能量方面控制至 10^{-6} 水平，在高斯残差方面控制至 10^{-11} 或更优水平；而 2×4 和 2×5 梯子则控制至 10^{-5} 水平，高斯残差低于 2.3×10^{-9}。主要系统误差并非统计性的，而是结构性的：（i）精确对角化和矩阵乘积算符实现中的JW约定必须完全一致；（ii）必须单独监测高斯惩罚项，因为较小的能量可能掩盖不满足物理约束的态；（iii）仍必须改变初态以排除局部极小值，尽管可接受的2×3 点以及 $2 \times 4/2 \times 5$ 梯子对此并不敏感。

第 3×3 节和 3×2 中的试验晶格5.3 补全了评估范围，并揭示了仅凭残差无法区分的两种失效模式：精确对称性障碍（半填充 3×3， $G^2 = 3/4$）和受惩罚项限制、尚未收敛的点（3×2 在 $\chi = 768$）。因此，方法基准测试必须固定并报告填充扇区和惩罚项，才能判断残差是否归因于变分拟设。结合经交叉验证的精确对角化/密度矩阵重整化群评估范围，表8 为更大型的张量网络或量子模拟研究提供了具体基线。

主要的待解决方向包括：在偶数 N_f 下进行精确高斯投影，或采用规范不变MPS初始态；使用不同的MPS几何结构，例如蛇形排列或圆柱排列；以及将研究扩展到更大的梯子。超越 $L_x = 2$ 梯子后，采用二维张量网络（如投影纠缠对态（PEPS））或精确的规范不变构造，是扩展到更大 L_x [24]的自然途径。在解决这些问题之前，当前方法还无法探讨连续统或相图问题。

三维扩展是自然的下一步，例如将开放的 $2 \times 2 \times L$ 棱柱映射为蛇形排列或圆柱链；其二维极限（$L_y = 1$）可在正式运行前直接用于检验当前代码。

致谢

我们感谢上海交通大学高性能计算中心（思源一号，siyuan 1）提供计算资源。D. L. 获国家重点研发计划（编号：2024YFA1014104）资助。

A 数值参数与逐点诊断

表9 列出了已接受参数点和 3×3 试点的数值诊断结果。对于 2×2 组计算，密度矩阵重整化群的结果已由精确对角化参考值加以控制，因此只报告 G^2；对于 2×3、 2×4、 2×5和 3×3，我们给出键维数、最终扫描间能量变化、最大截断误差以及高斯残差。

表9：逐点DMRG诊断。 ΔE_{last} 是最终扫描间能量变化， $\epsilon_{\mathrm{trunc}}$ 是最终扫描期间的最大截断误差。对于由精确对角化控制的 2×2 点，这两列不需要填写（—）。对于 3×3 行， `mixed` 具有 $N_f = 9$，而 `hole` 和 `doublon` 具有 $N_f = 8$ 和10； 3×2行具有 $N_f = 6$。

几何结构	g	m	初始	χ	ΔE_{last}	$\epsilon_{\mathrm{trunc}}$	G^2
2×2	0.5	0.1	颜色1	256	—	—	$< 10^{-15}$
2×2	1.0	0.1	颜色1	256	—	—	$< 10^{-15}$
2×2	2.0	0.1	颜色1	256	—	—	$< 10^{-15}$
2×2	1.0	0.0	混合	256	—	—	$< 10^{-15}$
2×2	1.0	0.2	混合	256	—	—	$< 10^{-15}$
2×3	0.5	0.1	混合	384	-5.4×10^{-9}	6.8×10^{-9}	2.6×10^{-12}
2×3	1.0	0.1	随机	512	-6.9×10^{-10}	4.4×10^{-20}	3.4×10^{-13}
2×3	2.0	0.1	混合	384	-4.9×10^{-10}	2.7×10^{-21}	3.7×10^{-14}
2×3	1.0	0.2	混合	448	-2.5×10^{-9}	2.2×10^{-21}	1.3×10^{-13}
2×3	1.0	0.0	混合	448	-3.0×10^{-9}	2.5×10^{-20}	1.7×10^{-13}
2×4	1.0	0.1	混合	1024	-4.8×10^{-9}	6.7×10^{-10}	3.5×10^{-11}
2×4	1.0	0.1	随机	1024	-5.5×10^{-9}	6.6×10^{-10}	3.6×10^{-11}
2×5	1.0	0.1	混合	1024	-1.4×10^{-7}	1.7×10^{-8}	2.3×10^{-9}
2×5	1.0	0.1	随机	1024	-1.3×10^{-7}	1.8×10^{-8}	2.3×10^{-9}
3×2	1.0	0.1	混合	512	-1.3×10^{-3}	1.7×10^{-7}	1.9×10^{-8}
3×2	1.0	0.1	随机	512	-9.5×10^{-5}	1.7×10^{-7}	6.7×10^{-11}
3×2	1.0	0.1	混合	768	-1.7×10^{-2}	1.5×10^{-12}	3.8×10^{-7}
3×2	1.0	0.1	随机	768	-6.6×10^{-3}	9.4×10^{-14}	1.1×10^{-4}
3×3	1.0	0.1	混合	512	-2.6×10^{-3}	2.8×10^{-4}	0.75
3×3	1.0	0.1	hole	512	-5.9×10^{-3}	3.2×10^{-4}	6.2×10^{-4}
3×3	1.0	0.1	hole	1024	-1.6×10^{-4}	1.3×10^{-4}	1.1×10^{-4}
3×3	1.0	0.1	双占据	512	-3.1×10^{-4}	5.2×10^{-4}	6.3×10^{-4}
3×3	1.0	0.1	双占据	1024	-1.2×10^{-4}	1.7×10^{-4}	2.2×10^{-4}
3×3	1.0	0.1	hole	2048	-1.8×10^{-4}	1.4×10^{-5}	1.6×10^{-5}
3×3	1.0	0.1	双占据	2048	-8.9×10^{-5}	2.3×10^{-5}	2.5×10^{-5}

对于 3×2 晶格，独立的精确高斯律费米子投影纠缠对态（$n = 3$）给出的 $E = -32.61$ 为 -32.64，低于密度矩阵重整化群的 $\chi = 512$ 值；因此，密度矩阵重整化群的 3×2 能量尚未收敛。

乘积态惩罚检查。 当所有链路均处于单态 $|5\rangle$时，乘积态上的电项为零，惩罚项的期望值简化为 $\sum_{v,\ a}(Q_v^a)^2$。根据 $\sum_a Q_v^a Q_v^a = (3/2)n_v - (3/4)n_v^2$，单占据格点贡献 $3/4$，而空格点或双占据（颜色单态）格点的贡献为零。对于 `mixed`态，每个格点均为单占据，矩阵乘积算符在所有五种几何构型（3.0、4.5、6.0、7.5、6.75）下均复现了 $3n_V/4$ ；对于 `double` 态，一半格点为双占据，另一半为空，结果为零。 `mixed` 检查测试二次项，`double`检查则测试四次项抵消，二者与在惩罚项为零的物理态上进行的 ED比较相互补充。

惩罚强度检查。 为验证所接受的 2×3 点不受有限惩罚项控制，我们使用 $\lambda = 100$ 重复了 $g = 1, m = 0.1$ 。在 $\chi = 448$ 下，混合态和随机态在 $G^2 \lesssim 10^{-8}$ 时分别给出 $E_0 = -32.699007$ 和-32.699013 ；在 $\chi = 512$ 下，混合态给出 $E_0 = -32.699010$ 和 $G^2 = 5.0\times 10^{-10}$。能量在 10^{-5} 范围内与 $\lambda = 10$ 值 -32.699014 一致，且 G^2 仍低于 10^{-8}。因此， $\lambda = 10$ 结果并非受高斯惩罚项限制。

B 矩阵乘积态方法的可扩展性

表 10 汇总了限制晶格尺寸的资源。ED维数按 $5^{n_L}4^{n_V}$增长，因此只有在 2×2时才能使用精确对角化。对于密度矩阵重整化群，MPS 链长和矩阵乘积算符键维数会随链路数增长

以及晶格面元数增长；此外，表示基态所需的键维数 χ 会随着穿过梯子的切口处的纠缠增大。采用逐点惩罚后，2×3 残差为 10^{-11}–10^{-14}。在 $\chi=1024$ 时，2×4 和 2×5 梯子的尺寸分别达到 $G^2=3.5\times10^{-11}$ 和 2.3×10^{-9}，能量受控在 10^{-5}的水平。半填充的 3×3 试点具有 $N_f=9$（奇数）。由于费米子携带半整数色荷，而链路携带整数色荷，总高斯定律不可能为零；$G^2=3/4$ 是精确下界，密度矩阵重整化群达到了该值（对于 $\lambda=10$ 和 100，在 $\chi=512$ 时均为 0.750）。有一个空穴或一个双占据（$N_f=8$或 10）时，残差在 $\chi=512$时为 6.2×10^{-4}，在 $\chi=1024$时为 1.1–2.2×10^{-4}，在 $\chi=2048$时为 1.6–2.5×10^{-5}；截断误差仍在下降，因此限制因素是 χ，而非 $3/4$ 下限。较早的蛇形运行（$G^2=2.25$）高于此下限，因此无法说明这一障碍。一个含有 $L_x=3$ 和$N_f=6$（偶数）的 3×2 试点允许存在精确满足高斯定律的物理态——一个独立的费米子投影纠缠对态在高斯定律严格成立的情况下，给出 $E=-32.61$ 至-32.64，其参数为 $n=3$ ——因此 $L_x=3$ 本身并非障碍。在 $\chi=512$时，密度矩阵重整化群的能量（随机态起始，-32.5928、$G^2=6.7\times10^{-11}$；混合态对应局部极小值，给出 1.9×10^{-8}）高于此参考值；在 $\chi=768$ 时，受惩罚项限制的态（$E=-32.68$、$G^2=1.1\times10^{-4}$）并非物理态。3×2 密度矩阵重整化群的数据点不是收敛的能量基准。

表10：MPS/DMRG方法的资源缩放。n_L 是链路数，$n_V=L_xL_y$ 是格点数，$N_{\mathrm{MPS}}=2n_V+n_L$ 是MPS链长；χ 是MPS键维数，MPO键维数则单独列出。最后一列给出了本文所报告计算的状态。

几何结构	n_L	n_V	N_{MPS}	ED维数	MPO键维数。	MPS χ	状态
2×2	4	4	12	1.6×10^{5}	32	256	精确对角化 + 密度矩阵重整化群
2×3	7	6	19	3.2×10^{8}	40	512	DMRG
2×4	10	8	26	6.4×10^{11}	40	1024	已收敛（10^{-5}）
2×5	13	10	33	1.3×10^{15}	40	1024	已收敛（10^{-5}）
3×2	7	6	19	3.2×10^{8}	71	768	偶数填充；未收敛
3×3	12	9	30	6.4×10^{13}	71	2048	半填充受阻（$G^2=3/4$）

C 在 2×2 晶格上的计算示例

我们在最小晶格上，$L_x=L_y=2$，明确说明第 2 节中的约定。该晶格的格点为 $A=(0,0)$、$B=(1,0)$、$C=(0,1)$ 和 $D=(1,1)$，链路为 $h_0=A$–B、$h_1=C$–D、$v_0=A$–C、$v_1=B$–D。该元为 $A\to B\to D\to C\to A$，因此 $P=\mathrm{Tr}(U_{h_0}U_{v_1}U_{\dagger h_1}U_{v_0}^{\dagger})$。

高斯生成元遵循以下规则：左端点/下端点贡献 E_L^a，右端点/上端点贡献 E_R^a：

表11：2×2 晶格上的高斯生成元。

格点 v	G_v^a
$A=(0,0)$	$E_L^a(h_0)+E_L^a(v_0)+Q_A^a$
$B=(1,0)$	$E_R^a(h_0)+E_L^a(v_1)+Q_B^a$
$C=(0,1)$	$E_L^a(h_1)+E_R^a(v_0)+Q_C^a$
$D=(1,1)$	$E_R^a(h_1)+E_R^a(v_1)+Q_D^a$

对于 Jordan–Wigner 串，格点排序为行优先，$\sigma(A)=0$, $\sigma(B)=1$, $\sigma(C)=2$, $\sigma(D)=3$；中间格点及由此得到的因子为：

表12： 2×2 晶格四条键的 Jordan–Wigner 因子。该字符串遍历行优先顺序中严格位于 $\sigma(v)$与 $\sigma(w)$之间的格点。

bond	$\sigma(v) \to \sigma(w)$	中间	JW 因子
h_0 : A–B	$0 \to 1$	—	1
h_1 : C–D	$2 \to 3$	—	1
v_0 : A–C	$0 \to 2$	B	$\Pi_B = (-1)^{n_B}$
v_1 : B–D	$1 \to 3$	C	$\Pi_C = (-1)^{n_C}$

MPS 链为

$$\underbrace{c_{A,0},\, c_{A,1},\, h_0,\, c_{B,0},\, c_{B,1},\, v_0,\, v_1}_{k=0,\ldots,6\ (y=0)}, \qquad \underbrace{c_{C,0},\, c_{C,1},\, h_1,\, c_{D,0},\, c_{D,1}}_{k=7,\ldots,11\ (y=1)},$$

因此 $N_{\mathrm{MPS}} = 2L_xL_y + n_L = 8 + 4 = 12$。四个链路格点的费米子宇称为平凡值，不会改变 JW 乘积。

基底与哈密顿量的作用。这条链的一个基态是

$$|m_0, \ldots, m_{11}\rangle\,, \qquad m_k \in \{0,1\}\ (\text{fermion modes}), \quad m_k \in \{1,\ldots,5\}\ (\text{links}),$$

其中， m_k 是第 k个链格点的物理指标，而非格点位置 $\sigma(v)$。希尔伯特空间维数为 $2^8 \cdot 5^4 = 4^4 \cdot 5^4 = 160,000$，即 ED维数。哈密顿量逐项作用： E_l^2在一个链路格点上是对角的（在 $|5\rangle$上的值为 0，在 $3/4$ on $|1\rangle$–$|4\rangle$ 上的值为 $3/4$ ）；质量项在一个顶点的两个颜色模式上是对角的；跃迁项在两个费米子模和键链路上是非对角的；而 plaquette 项在四条链路 $k = 2,5,6,9$上是非对角的。此处及下文中，诸如 $|B_0 = 1, h_0 = 5\rangle$ 这样的右矢仅列出非默认局域态；所有省略的费米子模均为空，所有省略的链路均处于 $|5\rangle$。例如，单独的 h_0 项作用如下

$$-t\left(c_{A,0}^\dagger U_{00} + c_{A,1}^\dagger U_{10}\right) c_{B,0}\,|B_0 = 1, h_0 = 5\rangle = t\sqrt{2}\,|A_0 = 1, h_0 = 3\rangle - t\sqrt{2}\,|A_1 = 1, h_0 = 1\rangle\,,$$

因为占据的 B_0 模式确定了 $\beta = 0$，且 $U_{00}\,|5\rangle = -\sqrt{2}\,|3\rangle$， $U_{10}\,|5\rangle = +\sqrt{2}\,|1\rangle$。其厄米共轭为零，因为 A 为空。完整的 H_{hop} 还包含 v_1 通道，该通道将费米子从 B 移至D；此处我们单独考察 h_0 项，以展示色指标缩并和链路更新。

在竖直键 v_0 : A–C 上，相应的项为

$$\begin{aligned} &-t\,\Pi_B\left(c_{A,0}^\dagger U_{00} + c_{A,1}^\dagger U_{10}\right) c_{C,0}\,|C_0 = 1, v_0 = 5\rangle \\ &= t\sqrt{2}\,\Pi_B\,|A_0 = 1, v_0 = 3\rangle - t\sqrt{2}\,\Pi_B\,|A_1 = 1, v_0 = 1\rangle\,, \end{aligned}$$

其中 $\Pi_B = (-1)^{n_B}$ 是中间顶点 B 的 Jordan–Wigner 串（格点 A 和 C 之间隔着 B）。对于此处写出的态， B 为空且 $\Pi_B = +1$；如果 B 被占据， $\Pi_B = -1$ 以及两个振幅都会变号。其厄米共轭为零，因为 A 为空。诸如 h_0这样的水平键没有此类因子，因为其端点彼此相邻。完整的 H_{hop} 还包含 h_1 通道，该通道将费米子从 C 移至 D。

plaquette 算符为 $P = \mathrm{Tr}(U_{h_0} U_{v_1} U_{h_1}^\dagger U_{v_0}^\dagger)$。它在链路基底中是非对角的： $P\,|5,\ 5,\ 5,\ 5\rangle$ 包含分量 $4\,|3\rangle_{h_0}\,|3\rangle_{v_1}\,|2\rangle_{h_1}\,|2\rangle_{v_0}$，因此它不会湮灭全单态构型；磁项会产生和湮灭里松对。相反，电项是对角的： $E_l^2 = 0$ 作用于 $|5\rangle$ 以及 $3/4$ 作用于 $|1\rangle$–$|4\rangle$。

最后，当所有链路均处于 $|5\rangle$ 且每个格点上有一个费米子时， $\sum_a Q_v^a Q_v^a = 3/4$ 惩罚项期望值为$4 \cdot 3/4 = 3 = 3n_V/4$，与附录 A中的乘积态检验一致。

数据与代码可用性

稀疏精确对角化、矩阵乘积算符和密度矩阵重整化群的实现、费米子投影纠缠对态交叉检验、驱动脚本以及每次运行对应的 JSON 文件，可在提出合理请求后向作者索取。论文正式发表时还将提供一个带有数字对象标识符（DOI）的公开代码仓库、环境配置说明（TeNPy 1.1.1、SciPy、quimb、symmray）、各表格所用的命令行，以及每次运行诊断信息的 JSON 模式。本文表格中的数值可根据这些文件复现。

参考文献

[1] K. G. Wilson, 《夸克禁闭》, Phys. Rev. D **10**, 2445（1974）。

[2] J. B. Kogut, 《格点规范理论与自旋系统导论》, Rev. Mod. Phys. **51**, 659 (1979).[3] J. B. Kogut 和 L. Susskind, 《Wilson 格点规范理论的哈密顿量表述》, Phys. Rev. D **11**, 395 (1975).[4] H. J. Rothe, 《格点规范理论：导论》, World Scientific (2005).[5] R. Orús, 《张量网络实用导论》, Ann. Phys. **349**, 117 (2014).[6] J. I. Cirac, D. Pérez-García, N. Schuch, F. Verstraete, 《矩阵乘积态与投影纠缠对态》, Rev. Mod. Phys.**93**, 045003 (2021).[7] U. Schollwöck, 《矩阵乘积态时代的密度矩阵重整化群》, Ann. Phys.**326**, 96 (2011).[8] G. Carleo 和 M. Troyer, 《利用人工神经网络求解量子多体问题》, Science**355**, 602 (2017).[9] G. Torlai 等, 《神经网络量子态层析》, Nat. Phys. **14**, 447 (2018).[10] J. Preskill, 《含噪声中等规模量子时代及其之后的量子计算》, Quantum **2**, 79 (2018).[11] M. C. Bañuls 等, 《利用量子技术模拟格点规范理论》, Eur. Phys. J. D **74**, 165 (2020).[12] P. Ludwig, T. Jakobs 和 C. Urbach, 《非阿贝尔 ($2+1$)d SU(2)量子链路模型中的标度行为与 Lüscher 项》, Eur. Phys. J. C **86**, 764 (2026), arXiv:2602.23213.[13] M. C. Bañuls, K. Cichy, K. Jansen 和 J. I. Cirac, 《利用矩阵乘积态研究 Schwinger 模型的质量谱》, JHEP **11** (2013) 158, arXiv:1305.3765.[14] B. Buyens, J. Haegeman, K. Van Acoleyen, H. Verschelde 和 F. Verstraete, 《规范场论的矩阵乘积态》, Phys. Rev. Lett.**113**, 091601 (2014), arXiv:1312.6654.[15] B. Buyens, J. Haegeman, H. Verschelde, F. Verstraete 和 K. Van Acoleyen, 《哈密顿量表述中的 QED_2 禁闭与弦断裂》, Phys. Rev. X **6**, 041040 (2016), arXiv:1509.00246.[16] B. Buyens, S. Montangero, J. Haegeman, F. Verstraete 和 K. Van Acoleyen, 《在连续极限下利用张量网络对格点规范理论进行有限表示近似》, Phys. Rev. D **95**, 094509 (2017), arXiv:1702.08838.[17] L. Funcke, K. Jansen 和 S. Kühn, 《利用矩阵乘积态研究 Schwinger 模型的拓扑真空结构》, Phys. Rev. D**101**, 054507 (2020), arXiv:1908.00551.

[18] S. Kühn, E. Zohar, J. I. Cirac 和 M. C. Bañuls, 《利用矩阵乘积态研究非阿贝尔弦断裂现象》, JHEP **07** (2015) 130, arXiv:1505.04441.[19] M. C. Bañuls, K. Cichy, J. I. Cirac, K. Jansen 和 S. Kühn, 《1+1 维 SU(2)格点规范理论的高效基底表述：利用矩阵乘积态进行谱计算》, Phys. Rev. X **7**, 041046 (2017), arXiv:1707.06434.[20] P. Silvi, Y. Sauer, F. Tschirsich 和 S. Montangero, 《一维 SU(3)格点规范理论的张量网络模拟》, Phys. Rev. D **100**, 074512 (2019), arXiv:1901.04403.[21] E. Rico, T. Pichler, M. Dal monte, P. Zoller 和 S. Montangero, 《格点规范理论的张量网络与原子量子模拟》, Phys. Rev. Lett. **112**, 201601 (2014), arXiv:1312.3127.[22] T. Pichler, M. Dalmonte, E. Rico, P. Zoller 和 S. Montangero, 《利用张量网络研究 U(1)格点规范理论的实时动力学》, Phys. Rev. X **6**, 011023 (2016), arXiv:1505.04440.[23] T. Felser, P. Silvi, M. Collura 和 S. Montangero, 《有限密度下的二维量子链路格点量子电动力学》, Phys. Rev. X **10**, 041040 (2020), arXiv:1911.09693.[24] G. Cataldi, G. Magnifico, P. Silvi 和 S. Montangero, 《利用张量网络模拟有限密度下的 (2+1)D SU(2)杨–米尔斯格点规范理论》, Phys. Rev. Research**6**, 033057 (2024), arXiv:2307.09396.[25] Y. Meurice, R. Sakai 和 J. Unmuth-Yockey, 《用于重整化与量子计算的张量格点场论》, Rev. Mod. Phys. **94**, 025005 (2022), arXiv:2010.06539.[26] M. Fuku ma, D. Kadoh 和 N. Matsumoto, 《二维杨–米尔斯理论的张量网络方法》, PTEP**2021**, 123B03 (2021), arXiv:2107.14149.[27] L. Tagliacozzo 和 G. Vidal, 《纠缠重整化与规范对称性》, Phys. Rev. B **83**, 115127 (2011), arXiv:1007.4145.[28] P. Silvi, E. Rico, T. Calarco 和 S. Montangero, 《格点规范张量网络》, New J. Phys. **16**, 103015 (2014), arXiv:1404.7439.[29] T. V. Zache, D. González-Cuadra 和 P. Zoller, 《用于 q-变形 Kogut–Susskind 规范理论的量子与经典自旋网络算法》, Phys. Rev. Lett. **131**, 171902 (2023), arXiv:2304.02527.[30] P. Virtanen等, 《SciPy 1.0：Python科学计算基础算法》, Nat. Methods**17**, 261 (2020).[31] J. Hauschild 和 F. Pollmann, 《利用张量网络进行高效数值模拟：Tensor Network Python (TeNPy)》, SciPost Phys. Lect. Notes**5**, 010 (2018), arXiv:1805.00055.[32] E. Knill 等, 《量子门的随机基准测试》, Phys. Rev. A **77**, 012307 (2008).[33] R. Blume-Kohout等, 《利用门集层析演示低于严格容错阈值的量子比特操作》, Nat. Commun. **8**, 14485 (2017).