arXiv:2611.31102v1 [cond-mat.str-el] 23 Nov 2026

Lincege.jl：一般几何上的关联簇展开

Pranav Seetharaman[1,2], Francisco Correia[1], 和 Ehsan Khatami[1]

[1]物理与天文学系，加利福尼亚州立大学圣何塞分校，美国加利福尼亚州圣何塞 95192[2]物理与天文学系，滑铁卢大学，加拿大安大略省 N2L 3G1

2026年11月24日

摘要

数值链接簇展开（NLCE）是一种强大的工具，可直接在热力学极限下研究量子晶格模型的性质。在此，我们介绍Lincege.jl，这是一款灵活、高效且易于使用的软件包，可在一般的有限或无限晶格上生成执行 NLCE 所需的簇。Lincege.jl 的输入仅包括布拉维晶格矢量、基底信息和展开单元，并使用深度优先搜索高效生成簇、其晶格常数以及子簇信息。它会输出不同阶数下的级数最终系数，这些系数以簇的广延性质表示。该软件包还包含用于可视化晶格和生成簇的工具，以及一个经典伊辛模型求解器，可作为模板，用于将 Lincege.jl 与其他格点模型的求解器对接。此软件包可通过 Julia 包管理器安装，并可使用我们 GitHub代码仓库中的示例脚本进行操作，网址为 https://github.com/rightleftspin/Lincege.jl。在线文档（含示例）可在以下网址查阅 https://rightleftspin.github.io/Lincege.jl/stable/。

目录

1 背景与动机 **2**

2 方法的构建 **3**

3 算法剖析 4 3.1 等价关系与簇哈希 5 3.1.1 平移等价 5 3.1.2 同构等价 6 3.1.3 对称等价 6 3.2 团簇生成 6 3.3 子簇系数与最终簇系数 7 3.4 簇展开 8 3.5 性能 9 3.6 主要算法瓶颈 9

4 性能 **9**

5 总结与展望 1 0

6 致谢 11

附录 11

A 示例 11
A.1 正方晶格 11A.1.1 位点展开 11A.1.2 方格扩展 12A.2 Kagome晶格 12A.3 Shastry-Sutherland晶格 12

B 针对各种晶格几何结构生成的表格 1 7

参考文献 19

1 背景与动机

数值链接簇展开（NLCE）由 Rigol、Bryant 和 Singh 在二十年前的一系列研究中首次提出 [1–3], ，是一种强大的方法，可用于求得热力学极限下量子晶格模型的有限温度性质。该方法通过对晶格上有限簇的精确贡献进行展开来实现计算。其理论表述将在第 2 节中详细讨论，与高温级数展开相似，但不具有类似逆温度这样的显式小参数。NLCE 最初应用于不同二维几何结构上的量子磁体及其热力学性质 [1,2,4,5]。不过，研究发现，它也是研究巡游电子模型的有效方法，例如 t −J 模型和哈伯德模型 [3,6,7]。NLCE 的表现可与其他用于强关联电子模型的先进无偏有限温度方法相媲美，例如行列式量子蒙特卡罗（DQMC） [8], 。此外，NLCE 能够以相对较快的速度，在任意精细的温度和化学势网格上计算精确配分函数及其他所有热力学性质，因此成为验证超冷原子在光学晶格中的实验理论的可靠方法 [9–16]。事实上，研究发现，NLCE 与 DQMC 互为补充：例如，随着哈伯德模型中的格点间相互作用增强、系统趋近原子极限，NLCE 的收敛性会提高；而 DQMC 通常在模型的弱相互作用区域表现最佳（参见例如文献 [17,18]）。此后，NLCE 还被用于研究纠缠 [19–23], 、三维系统 [24,25], 、淬火后的非平衡动力学 [26–29], 、非均匀和无序系统 [30–33], 、SU(N) Hubbard 模型 [14,16,34,35], 以及动力学性质 [13,36,37]。

迄今为止，要将这种技术应用于新的晶格几何或哈密顿量，通常都必须开发新的簇生成和分析代码，而且大多数情况下需要从头开始。一直以来，我们都缺少一个能够处理通用格点模型的统一框架。NLCE 应用的通用性问题促使我们开发了一个 Julia 软件包，称为一般几何上的关联簇展开（LINked Cluster Expansions on a GEneral GEometry），简称 *Lincege* 。

在 Lincege.jl 中，我们采用系统化的方法，不对特定几何结构甚至哈密顿量作任何假设。对于规则晶格，用户可以指定布拉维晶格矢量以及晶胞中各格点的位置；对于不规则结构，用户则可以指定足够大的晶格中的键及其他信息，以生成簇和执行 NLCE 所需的所有其他信息。此外，计算并不一定

局限于热力学极限，也可以针对有限簇进行。因此，我们认为，该软件包为这一研究量子晶格模型有限温性质的重要工具带来了重大进展，尤其是在热力学极限下。

我们设计 Lincege.jl 时，既考虑到只想获取定义明确且具有代表性的量子晶格问题中的簇的普通用户，尽可能减少其与代码的交互；也内置了相应功能，使代码扩展和泛化变得相当直接、易于使用。我们在软件包中开发并收录了若干示例，并将在下文详细讨论。所有代码均为开源且附有文档。

采用新方法并使用 Julia 开发，使我们能够利用现有的高效软件包来解决算法中的瓶颈。例如，在生成拓扑不等价簇及其子簇信息时，通常耗时占比最高的同构检验已交由 *nauty* [38], 处理；该算法能够高效地找到给定簇的典范代表元。主要改进来自序贯图哈希的使用：它将簇表示为易于比较的哈希值，这些哈希值基于底层的平移、对称性或同构。借此，我们得以重新审视 NLCE算法中传统的操作顺序，从而跳过并非必需的中间分类步骤，例如对称分类。

2 方法的表述

链接簇展开（LCE） [39, 40] 基于这样一个思想：格点模型的任何广延性质P，都可以表示为一个级数，其中包含所有可嵌入晶格的簇c的贡献：

$$P(\mathcal{L}) = \sum_c W_p(c), \tag{1}$$

其中， $\mathcal{L}$ 表示晶格，$W_p(c)$ 是簇c的权重或约化性质。该权重通过容斥原理计算：先求出簇$P(c)$的性质，再减去所有可嵌入c 中的较小簇s（即c的子簇）的权重，也就是说，

$$W(c) = P(c) - \sum_{s \subset c} W(s). \tag{2}$$

这是一个递归过程，通常从$W(c) = P(c)$ 开始，此时c 为单个位点。在数值链接簇展开（NLCE）中， [1, 41], $P(c)$ 通过精确数值方法计算，例如精确对角化、量子蒙特卡罗、密度矩阵重整化群等。

不难看出，式（1）和（2）实际上是同一个方程；将晶格本身的性质权重 $W(\mathcal{L})$ 从式（1）的求和中分离出来，即可得到式（2）。然而，式（1）中的级数通常是针对处于热力学极限的晶格，或针对规模远超精确方法处理能力的大型晶格来书写的，在这种情况下，必须在某处截断该级数。此外，在这种情况下，使用每个格点对应的性质会更加实用，即，

$$P(\mathcal{L})/N = \sum_c L(c) W_p(c), \tag{3}$$

其中 N 是格点的数量（可以是无穷大），而 $L(c)$ 是嵌入因子，或称晶格常数，定义为该簇c现可在每个格点

嵌入 $\mathcal{L}$的方式数。例如，如果晶格具有平移对称性，只需考虑那些不能通过平移操作相互关联的簇。实践中，通过其他对称操作相互关联，或具有相同权重的簇，也可以在该级数中合并，并将其晶格常数相加，以降低计算成本。在第 3节中，我们将讨论 Lincege.jl 中此类检查的实现。请注意，式（3）中的级数最终可以完全用 $P(c)$表示，不过其系数是 $L(s)$（其中 $s \subseteq c$的线性组合。

3 算法剖析

Lincege.jl 是一组协同工作的算法，用于 (i) 生成簇，(ii) 根据等价关系对簇进行归类，以及 (iii) 计算它们在 LCE 中对应的系数。以正方晶格上的位点展开为例，其工作流程如图 1 所示。在该例中，展开单元是单个位点，而展开阶 是最大簇中的格点数。本节将详细介绍 Lincege.jl 用于实现这三个步骤的算法。为便于阅读，我们将先讨论簇之间的等价关系，再介绍簇生成。

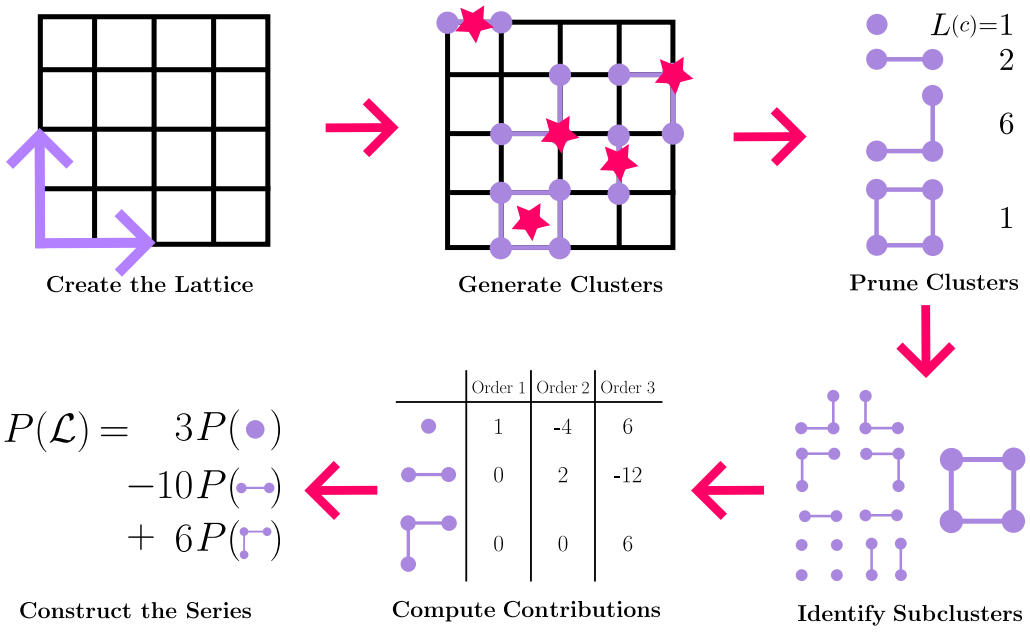

图 1：展示了 Lincege.jl 执行 LCE 的过程。第一步输入晶格信息，并生成晶格及相应的键的信息。第二步在晶格上生成簇：对于无限晶格，Lincege.jl 从中心点开始；对于有限晶格，则遍历每个格点。第三步根据某种等价关系对生成的簇进行筛选。图中示例采用图同构作为等价关系。随后，Lincege.jl 找出每个簇的子簇，并根据筛选所用的等价关系将它们归类。接着，Lincege.jl 利用这些子簇信息，计算各阶中每个簇的贡献（底行中间的表格）。请注意，这些是每阶的修正项（对应于 部分和），每一行的总系数需要在最后计算 LCE 和时求出。左下角展示了 3 阶级数。

3.1 等价关系与簇哈希

NLCE 的一个关键环节是根据簇共有的属性将它们归类。即使形式不同，若簇具有相同的哈密顿量（或其他可观测量），将它们关联起来也能显著减少精确对角化所需的计算量。为了对簇集合进行划分，Lincege.jl 使用了一组通过簇哈希函数实现的等价关系。

3.1.1 平移等价

比较簇的一种有效方法，是考察能否通过保持底层晶格不变的平移，将一个簇平移到另一个簇上。对于无限晶格，识别平移等价的簇是必要的第一步，因为其晶格常数已知为 $1/n_{\mathcal{T}}$，其中$n_{\mathcal{T}}$ 是平移集中的平移无法关联的格点数。所有保持晶格不变的平移构成的集合记为 $\mathcal{T}$，其中单个平移$T \in \mathcal{T}$作用于一个簇c，将其平移为另一个簇$c' = T \cdot c$。于是我们可以定义一个等价关系 $\sim_{\mathcal{T}}$，若存在一个晶格平移$T \in \mathcal{T}$使得$T \cdot c_1 = c_2$，则该关系将两个簇c_1 和c_2 视为等价。请注意，有些簇可能可以通过某个不属于 $\mathcal{T}$ 的平移彼此重合，但根据 $\sim_{\mathcal{T}}$，它们不被视为等价。

实际上，确定两个簇之间的平移等价是一项困难的问题。要通过某个集合中的平移将两个簇联系起来，就需要将每个平移应用于其中一个簇，并检查坐标等价性。相比之下，Lincege.jl 通过一种哈希方案对平移等价进行编码，该方案是对 Liao 等人在文献中提出的[42]最小顶点类型序列索引（MVI）的一种改进形式。MVI 是一种过程，通过该过程，底层晶格上的簇可以表示为一个整数向量，该向量对应于每个顶点处各个键的方向。图 2给出了 MVI 的可视化表示，其中展示了两个无法彼此平移重合的簇及其对应的 MVI 向量。每个顶点都根据其周围键的方向进行标记，而 MVI 向量则按照一条贯穿晶格的一致路径排序。在我们的情形中，我们始终将晶格中的顶点按照从左到右、从下到上的顺序排列，并按此顺序构成 MVI 向量。现在可以比较这两个 MVI 向量，以确保平移等价性。

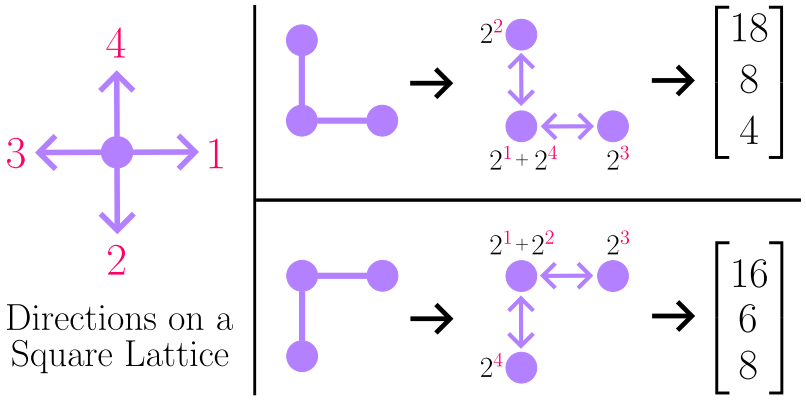

图 2：正方晶格上两个不具平移等价性的簇示例。采用最小顶点索引方案，并为每个簇生成平移不变表示。在此情况下，一致路径按从左到右、从下到上的顺序读取。

3.1.2 同构等价

对于许多物理模型，我们可以选择比平移等价更粗的划分，以减少冗余计算。例如，平移不变量子晶格模型的哈密顿量仅取决于簇的键的信息，而不一定取决于其顶点的位置或相对位移。有鉴于此，我们可以将平移不等价的代表性簇集合划分为若干组同构等价的簇。对于哈密顿量的求解，我们仍然可以选择使用划分中每个成员的代表，但此时代表的晶格常数是该划分中所有簇的晶格常数之和。这正是从晶格常数在生成步骤中就已知的簇开始处理很有用的原因。在进行同构划分后再寻找晶格常数，将不是一种高效的过程。

nauty [38], *bliss* [43], 和 SAUCY [44]都是现有算法的示例，可用于判定两个图是否同构。然而，这个问题众所周知地难以解决。此外，我们旨在确定图列表中的唯一性，因此，仅找出两个图之间的等价关系还不够，还需要进行哈希。要为一个图找到同构哈希，就必须为同构的图找到唯一标签。这种规范标记可以通过*nauty*这一图同构软件包非常高效地完成。*nauty* 会遍历给定顶点着色图的所有唯一标记，以找到规范标记 [38]。Lincege.jl 使用 *nauty* ，并借助我们采用的额外封装，使其能够处理边着色图。获得规范标记后，Lincege.jl 可以进一步划分平移意义下不同的簇，从而降低计算负载。

3.1.3 对称等价

另一种可选的、更粗略的划分是对称等价。如果晶格的某种对称性能够将两个簇联系起来，就认为它们等价。对于某些可观测量（例如关联函数），我们需要区分这样一些簇：它们在哈密顿量方面是同构等价的，但相对键取向不同，因此晶格上顶点之间的欧几里得距离也不同。在这种情况下，对称等价就显得十分重要。在实际操作中，确定对称等价需要将晶格的所有点群对称性应用于某个簇，然后将该簇居中，并与其他所有簇进行比较。这种方法在计算规模上难以扩展，因此我们改用一种唯一哈希方案：针对该簇的每一种对称变换形式，基于其最小顶点索引的典范代表元生成哈希。

创建晶格时，Lincege.jl 会获取对称性集合并将其转换为置换。随后将这些置换应用于每个簇（对于无限晶格，仅应用于平移不变簇），并从该簇的对称轨道中选出一个典范代表元。这个代表元即作为哈希，用于确认簇之间的对称等价。尽管这一过程经过了优化，同构哈希方案的速度仍快得多。因此，在 Lincege.jl 中，只有在用户提出要求时，我们才使用对称哈希。仅在需要时使用对称哈希，比将其作为收集同构簇过程中的一个步骤要快得多。

3.2 团簇生成

对于给定的晶格，Lincege.jl 执行的第一步是生成能够嵌入该晶格的所有簇。这种方法的优点在于，以此方式生成的每个簇的晶格常数都是 $1/N$，其中 N 是晶格中的格点数，因为每个簇都被视为独一无二的。对于有限晶格，这种方法在计算上是可行的，因为可以在有限时间内枚举晶格中的所有簇。然而，

无限晶格会使这种方法在计算上变得不可行，因为它需要生成无限多个簇。

因此，对于无限晶格上的 LCE，我们的新目标是将嵌入晶格中的无限关联簇集合 S 缩减为一个可计算的有限集合。为此，我们可以按照在保持无限晶格不变的平移 $\mathcal{T}$ 对 S 进行等价划分。接着，我们定义划分 $\mathrm{P} = \mathrm{S} / \sim_{\mathcal{T}} = \{\mathrm{m}_s : \mathrm{s} \in \mathrm{S}\}$，其中 P 是由成员集合构成的集合，记作 $\mathrm{m}_s = [\mathrm{s}] = \{\mathrm{g} \sim_{\mathcal{T}} \mathrm{s} : \mathrm{g} \in \mathrm{S}\}$。每个成员 m_s 是一个集合，其中包含与任意代表簇 s 在晶格平移下等价的所有簇。值得注意的是，P 中任一成员 $\mathrm{m}_s \in$ 的大小都等于晶格中晶胞的数量 1；在计算机中，该晶格表示为有限晶格。因此，对于代表簇 s，晶格常数可定义为 $\mathrm{L(s)} = {}^{1}\,\mathrm{n}$，其中 n 是晶胞中的格点数。随后，Lincege.jl 可以生成 P 中每个成员的代表簇，因为在给定阶下代表簇集合是有限的，且每个代表簇的晶格常数已知。

Lincege.jl 通过树图表示所有可以嵌入晶格中的簇集合。树的根节点是晶格的一个铺砌单元，每个元素向下的邻居是通过向该簇添加一个铺砌单元所能到达的所有簇。当铺砌单元为单个位点时，我们可以在图 3. 的左侧看到正方晶格上该树截至 3阶的可视化结果。为了探索有限晶格和无限晶格上的这棵树，Lincege.jl 会针对给定晶格对该树进行并行化的深度优先枚举。这棵树涵盖所有可能的连通簇，但对于无限晶格，Lincege.jl 会将其剪枝为在平移下彼此不同的簇，如图 3. 中被划掉的冗余簇所示。这是一种深度优先搜索，其中集合等价关系可根据晶格类型互换。

Lincege.jl 会收集树中相对于给定哈希函数而言唯一的所有簇。对于有限晶格，该哈希函数会将具有不同晶格点的每个簇区分为唯一簇。对于无限晶格，该哈希函数会将每个簇表示为一种在晶格平移 [42] 下保持不变的形式。Lincege.jl 支持在深度优先遍历中使用自定义哈希函数。

3.3 子簇系数与最终簇系数

任何簇展开的最后一步，都是找出每个已枚举簇的子簇，并计算其在各阶对应的系数。这个过程与处理晶格时基本相同，但需要对每个簇分别进行。与对晶格上所有簇构成的树进行深度优先遍历类似，Lincege.jl 会对给定簇的所有子簇执行深度优先遍历。该深度优先遍历会返回子簇及其簇常数，簇常数用于统计给定子簇嵌入该簇的方式数。

需要特别指出的是，在执行 NLCE 递归求和以获得权重 $W_p(c)$ （以 $p(s \subseteq c)$表示）后，Lincege.jl 会报告属性按阶的最终簇系数修正。这消除了针对每个属性分别进行数值求和的需要。表 1 展示了正方晶格位点展开截至3阶的示例计数。

我们在 Lincege.jl 中内置了一个经典伊辛模型的精确枚举求解器，用于展示在实践中如何将 Lincege.jl 的输出与提供$p(c)$的簇求解器结合使用。它可以作为研究其他哈密顿量并将其他求解器整合到工作流程中的起点。

[1]请注意，该陈述取决于所选的展开单元。对于会破坏底层晶格平移对称性的展开单元，例如正方晶格上的角共享正方形展开，需要更加谨慎。

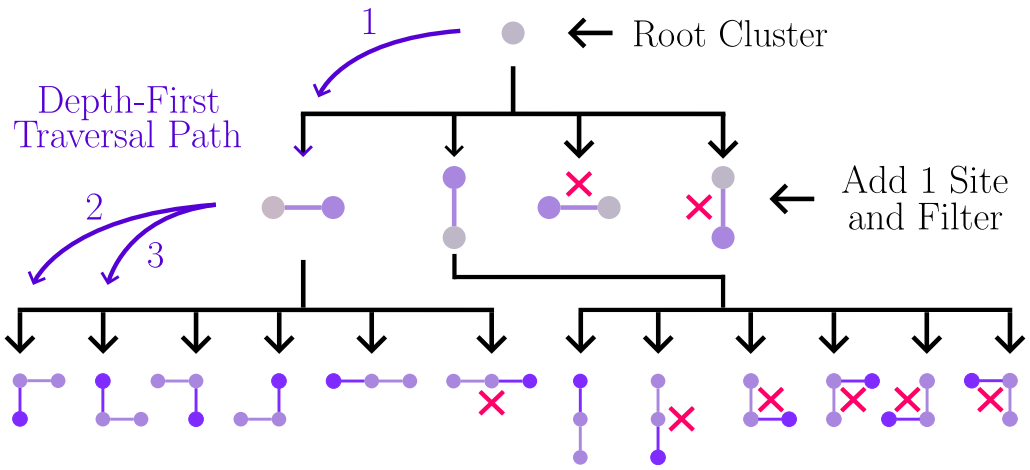

图3：对所有可能的子图树进行深度优先枚举的可视化，枚举范围截至3阶。算法执行的前三步路径已编号。这些编号与图中所示的平移方向无关。2。划掉的簇可通过晶格平移彼此等价，从而生成一组平移不等价的簇。

阶	单个位点系数	二聚体系数	三聚体系数	$P(\mathcal{L})/N$
1	1	0	0	$P(s)$
2	-4	2	0	$-3P(s)+2P(d)$
3	6	-12	6	$3P(s)-10P(d)+6P(t)$

表1：Lincege.jl 输出的各个簇性质的系数，用于每一阶的部分和（中间三列），以及在每一阶获得 NLCE 最终和时如何将这些系数结合起来，包括较低阶的贡献（最右列）。结果展示了正方晶格上位点展开至3阶的情况。这三个同构不等价簇分别是单个位点、二聚体和三聚体，其性质分别记为$P(s)$、$P(d)$和$P(t)$。

3.4 簇展开

NLCE算法的收敛性会受到基本构建单元选择的影响。到目前为止，我们主要讨论了通过单个位点逐步构建晶格，这称为位点展开。不过，也可以设想通过更大的构建单元逐步构建晶格，例如通过角共享正方形构建正方晶格。这称为弱簇展开，因为铺砌单元共享格点。同样，我们也可以进行晶胞展开，例如在 Kagome 晶格上使用朝上的三角形。由于这些晶胞彼此不相交，因此这被视为强簇展开。Lincege.jl 支持这些类型的展开：它将每个展开单元的中心视为位点展开中的一个格点。随后，它会跟踪相应的键和格点，并根据具体用途，在由各展开单元中心构成的展开晶格与由物理格点构成的物理晶格之间切换。为确保正确性，哈希和簇识别始终在物理晶格上进行。簇展开的生成表见附录B，详细的代码示例可在文档网站上找到。

3.5 性能

对于量子晶格模型，NLCE真正的时间瓶颈往往在于对级数中各个簇上的不同物理可观测量进行精确计算，这通常需要使用精确对角化。NLCE簇及其相关信息的生成对于任何模型都只需进行一次，而且应该相对快捷。尽管如此，我们仍在第3.6节指出并解决了 Lincege.jl 中簇生成流程固有的一些瓶颈。

我们注意到，随着展开阶数的增加，$p(c)$ 的系数，尤其是较低阶簇的系数，其绝对值可能变得非常大，并且会在相邻阶之间改变符号。最终的 NLCE 级数实际上归结为两个数相减，而这两个数的相对大小差异会迅速减小。因此，性质中的任何微小不确定性，例如系统误差或统计误差，尤其是低阶簇中的不确定性，都可能迅速传播，使 NLCE 失效。尽管如此，可根据具体问题采用精确对角化以外的方法求解簇 [22]。

3.6 主要算法瓶颈

我们解决了高效实现 LCE 簇生成流程中的三个瓶颈：簇生成例程中的深度优先搜索、簇唯一性判定中的簇哈希例程，以及权重生成例程中为每个簇生成子图。

最容易处理的是簇哈希例程，其中的问题很容易并行化。只需并行计算每个簇开销较大的哈希值，再按顺序收集等价簇即可。其次容易处理的是为每个簇生成子图，这一步可以直接针对各个簇并行化。此外，还会为每个线程维护一个专用缓存，以便直接根据顶点为每个子图计算哈希，而无需调用开销较大的相应哈希函数。

深度优先搜索是最难并行化的部分，但也是最重要的步骤。深度优先搜索是任何 LCE例程中最耗时的部分。团簇生成在时间和空间复杂度方面都是计算密集型任务，而且众所周知，这类问题很难实现有效并行化。Lincege.jl 通过共享的线程安全栈和多个访问并修改该栈的线程实现并行化。每个线程负责从共享栈中收集新簇，并不断添加新簇，直到达到相应的阶。这并非最高效的算法，但在实际应用中能显著提升速度。我们计划在未来改进此算法，包括为每个线程采用批量分配，并使用持久线程替代目前使用的临时线程。

4 性能

在图4中，我们展示了四种不同展开方案下 Lincege.jl 单线程和多线程的运行时间。我们发现，对于位点展开，最大加速效果出现在使用四个线程时：在正方晶格上约为两倍 [图4(a)]，在 Kagome 晶格上约为三倍 [图 4(b)]，对应阶数 16。将线程数进一步增加到八个后，速度反而变慢，这可能是通信开销所致。不过，在正方晶格上生成所有对称性不等价簇的位点展开 [图 4(c)]，或将一个 2×2 正方形用作展开单元的方案 [图 4(d)]，在线程数加倍至八个后仍能获得适度的加速，分别可达到阶数 15 和 14。以下性能结果是在时钟频率为 2.40 GHz、内存为 64 GB 的英特尔CPU 上测得，最高达到

阶数 12；之后将内存增加到 256 GB，最高达到阶数 16。

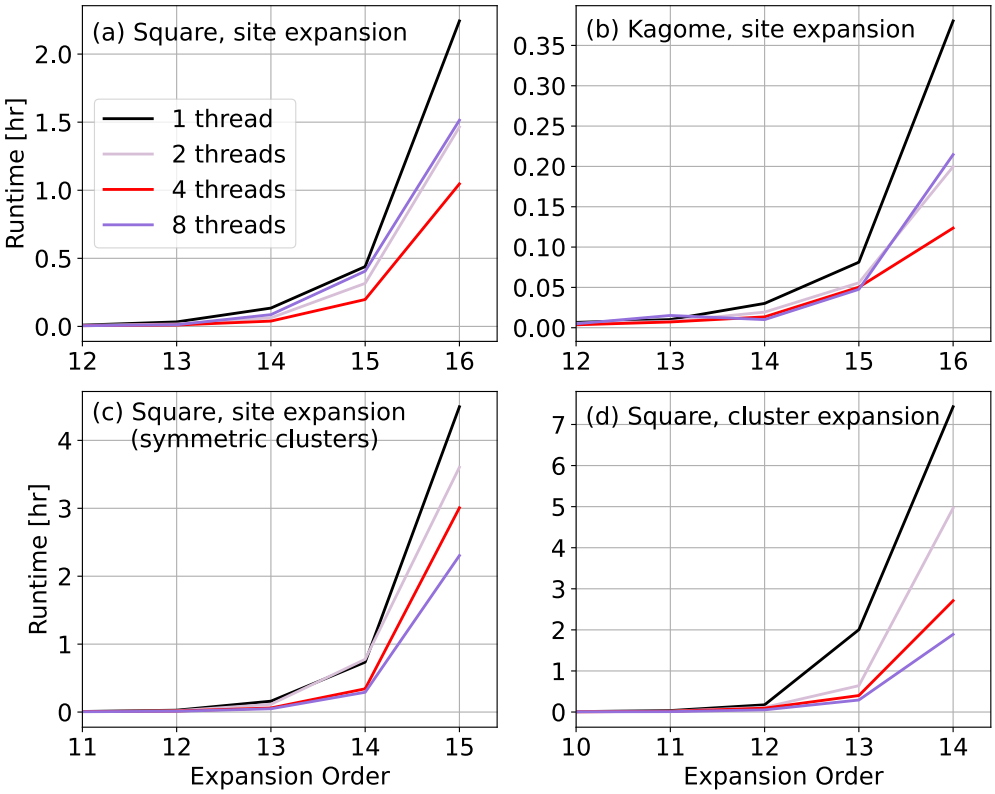

图 4：Lincege.jl 的运行时间随不同展开方案的展开阶数变化。在 (a)、(b) 和 (d) 中，仅生成同构不等价簇。在 (c) 中，生成所有对称性不等价簇。

5 总结与展望

我们在 Julia 中实现了一个高效、灵活且易于使用的“一般几何上的关联簇展开”（简称 Lincege），可用于对量子晶格模型进行 NLCE 计算。Lincege.jl 软件包通过树图表示所有可嵌入有限或无限晶格的簇，该树图的根节点是一个单独的展开单元。它通过对树进行并行化深度优先枚举来生成级数中的簇，并对每个簇重复相同的过程，以获得其子簇及其系数。随后，Lincege.jl 使用一种哈希方案来编码平移等价性；该方案是对最小顶点类型序列索引算法的改进版本。为了高效地进行实际的 NLCE 计算，软件包通过对图进行规范标记和哈希，依据同构或对称等价对图进行划分，其中也包括含有多种顶点或边类型的几何结构。Lincege.jl 还可用于生成级数中的簇，其展开单元包含多个晶格点。在附录 A中，我们展示了针对不同几何结构和展开单元使用 Lincege.jl 的若干示例输入，以及前几阶生成的簇。对于后者，我们使用了 Lincege.jl 中包含的可视化函数。更多示例、驱动代码和文档可在项目页面查阅：https://rightleftspin.github.io/Lincege.jl/stable/。

Lincege.jl 的未来版本计划以性能和功能为主要改进方向。如果将 Lincege.jl 中的并行化算法改用创建线程开销更低的编程语言编写，其性能便有望得到提升。这些改进既能提高运行速度，也能降低内存需求，尤其是在较高阶数时。计划增加的功能还包括报告图轨道，以便通过智能的对称性识别加速精确对角化计算 [25]。此外，未来更新的一项核心目标，是根据实际使用情况改进文档。

6 致谢

作者感谢 Robin Newby、Lorenzo Mambretti、Parthiv Seetharaman 和 Jason Pruitt 的宝贵讨论。本研究获得美国能源部科学办公室基础能源科学办公室 DE-SC0022311 号奖励的支持。F.C. 感谢由 DGE-2125906 号拨款资助的美国国家科学基金会（NSF）研究生培训（NRT）奖学金提供的支持。E.K. 部分获得 NSF PHY-2309135 号拨款的支持；该拨款授予卡弗里理论物理研究所（KITP），他们的部分工作正是在该所完成的。Lincege.jl 的源代码是本文作者（以及我们使用的另一个软件包 *nauty* 的开发者）的原创成果。NLCE 核心代码的开发和本文的撰写均未使用生成式人工智能。

附录

A 示例

使用 Lincege.jl 的一般工作流程适用于所有几何结构，包括以下步骤：(i) 定义展开单元的原始矢量和基，(ii) 指定基格点类型，(iii) 定义晶格的键；对于簇展开，还需定义用于展开的晶格键，(iv) 指定键类型，以及 (v) 指定展开阶数。为评估上述输入的准确性，我们实现了成像函数，可在计算系数和子簇信息之前，用于可视化晶格和生成的簇。具体函数和记法可能会在后续版本中有所变更，因此我们强烈建议查阅最新文档。下文将先介绍三种示例几何结构的输入，然后展示 Lincege.jl 成像工具的输出；这些示例按复杂程度递增排列： (1) 简单方格晶格上的位点展开，(2) 正方晶格上的 2×2 簇展开，(3) Kagome 晶格上的位点展开，以及 (4) 具有不同类型格点的各向异性 Shastry-Sutherland 晶格上的位点展开。

A.1 正方晶格

A.1.1 位点展开

表 2 展示了在具有一种键类型的简单方格晶格上进行位点展开时，Lincege.jl 的输入。图 5 展示了该晶格（右侧）、晶胞和原始矢量（左上），以及该几何结构上位点展开中最高达四阶的同构不等价簇。

参数	符号值	
原始矢量	p_1	[1, 0]
	p_2	[0, 1]
基矢	b_1	[0, 0]
基类型	f	[1]
晶格/膨胀键	L_1	[1, 1, [1,0], 1]
	L_2	[1, 1, [0,1], 1]

表 2：具有单原子基组和均匀键类型的正方晶格的位点展开输入。基与原始矢量共同构成底层布拉维晶格。基类型 f 是一个数字列表，用于指示基中格点的类型。每个晶格键（在位点展开中也称为扩展键，即属于展开单元的键）依次从左到右包含：晶胞中第一个格点的索引、晶胞中第二个格点的索引、从第一个格点所在晶胞到第二个格点所在晶胞所需的平移矢量p_1 和p_2 的系数，最后是键的颜色。

A.1.2 方格扩展

表 3 展示了在正方晶格上进行正方形扩展时输入 Lincege.jl 的内容，图 6展示了用于生成簇的扩展单元和晶格。

A.2 Kagome晶格

表 4 和图 7 展示了单个位点和一种键类型的 Kagome 晶格对应的 Lincege.jl 输入，以及级数中包含最多三个格点的单元胞和簇的可视化结果。

A.3 Shastry-Sutherland晶格

表 5 和图 8 展示了各向同性Shastry-Sutherland晶格的 Lincege.jl 输入，其中包含四种不同类型的格点和四种不同类型的键，并展示了晶胞以及最多包含两个格点的簇（二聚体具有不同的格点和键类型组合）。

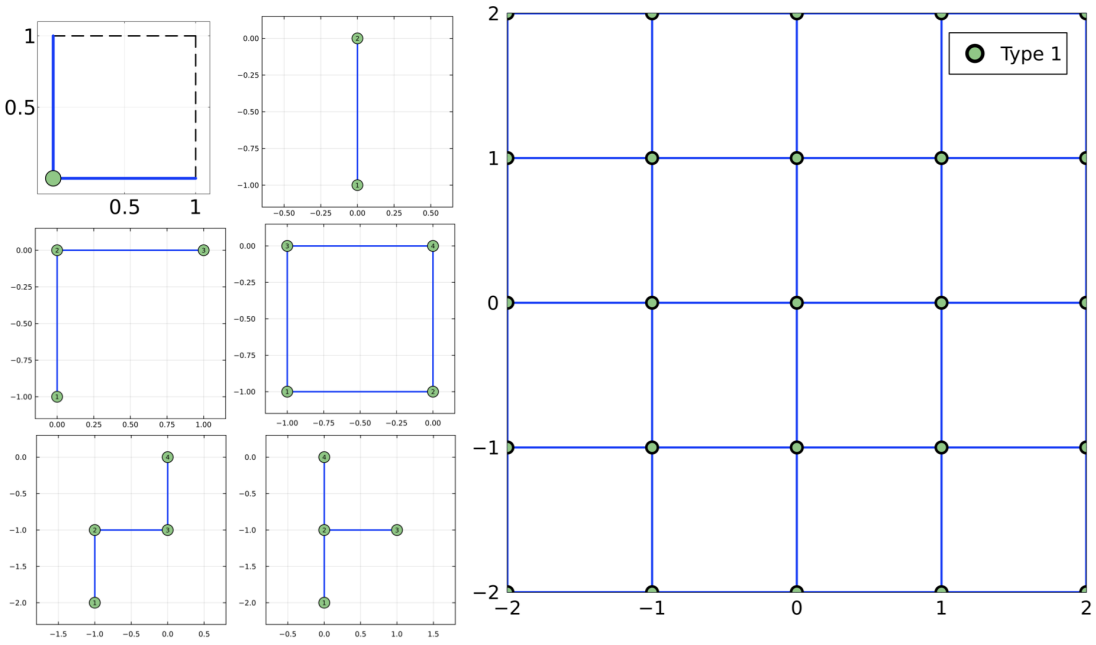

图 5：右：简单方格晶格。左上：晶胞和原始矢量。左：除单个位点外，包含最多 4 个格点的所有拓扑唯一簇。

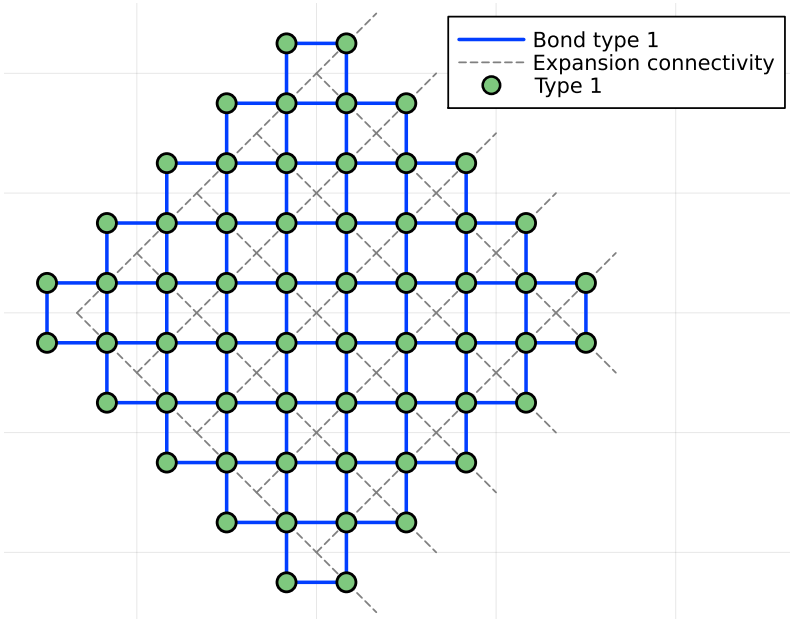

图6：方晶格上的 2×2 正方形扩展示意图。灰色虚线表示连接各扩展单元中心的底层方晶格。

参数	符号值	
原始矢量	p_1	$[1, 0]$
	p_2	$[0, 1]$
基矢量	B	$[[b_1, b_2, b_3, b_4]]$
	b_1	$[-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}]$
	b_2	$[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$
	b_3	$[\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}]$
	b_4	$[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$
基类型	f	$[1, 1, 1, 1]$
晶格键	L_1	$[[1, 1], [1, 2], [0, 0], 1]$
	L_2	$[[1, 1], [1, 3], [0, 0], 1]$
	L_3	$[[1, 2], [1, 4], [0, 0], 1]$
	L_4	$[[1, 3], [1, 4], [0, 0], 1]$
膨胀键	E_1	$[1, 1, [1, 0], 1]$
	E_2	$[1, 1, [0, 1], 1]$

表3：在具有统一键类型的正方晶格上进行 2×2 簇展开的输入。在簇展开中，可以有多个展开单元（例如 Kagome 晶格上的向上和向下三角形），因此，基矢量被组织为列表的列表（B）。B 中的每个列表代表一个不同的展开单元。此处，唯一的展开单元是一个包含四个键的 2×2 簇：$b_1 \ldots\ldots b_4$。晶格键和膨胀键现在也是彼此独立的输入，并以不同方式表示，以体现可能存在多个展开单元这一点。例如，L_1 ($[1,1]$) 的第一个元素表示第一个展开单元中的第一个格点，该格点由$b_1 = B[1,1]$标识。第二个元素（$[1,2]$）表示沿L_1，方向的第二个格点，该格点由$b_2 = B[1,2]$标识。L_1 中的第三个元素包含从第一个格点所在晶胞到第二个格点所在晶胞所需的平移矢量的整数系数（此处为$[0,0]$，这意味着 $[0,0] \cdot [p_1, p_2]$），最后一个元素表示键的颜色/类型。膨胀键是连接展开单元的键。前两个整数是展开单元的索引，此处均为 1，因为只有一个展开单元。第三个元素包含连接两个展开单元类型的平移矢量的整数系数，最后一个整数同样表示键类型为 1。

参数	符号值	
原始矢量	p_1	$[2, 0]$
	p_2	$[1, \sqrt{3}]$
基矢量	b_1	$[0, 0]$
	b_2	$[1, 0]$
	b_3	$[\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}]$
基类型	f	$[1, 1, 1]$
晶格/膨胀键	L_1	$[1, 2, [0, 0], 1]$
	L_2	$[2, 3, [0, 0], 1]$
	L_3	$[3, 1, [0, 0], 1]$
	L_4	$[1, 2, [-1, 0], 1]$
	L_5	$[1, 3, [0, -1], 1]$
	L_6	$[2, 3, [1, -1], 1]$

表4：具有三原子基底和均匀键类型的 Kagome 晶格位点展开输入。

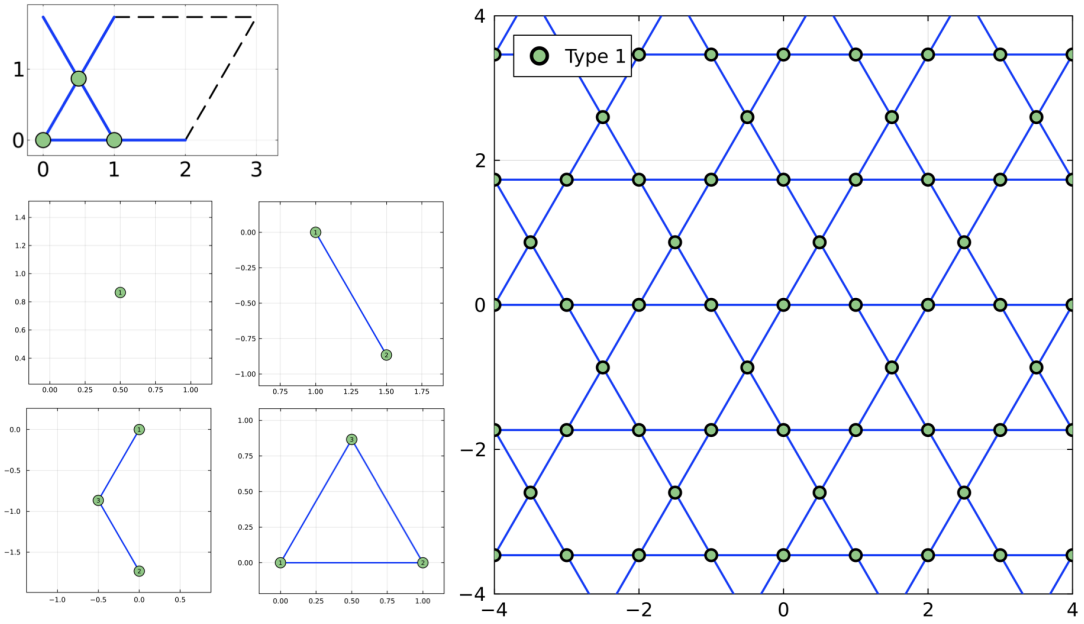

图7：Kagome 晶格晶胞、晶格图以及最多包含3个格点的所有拓扑唯一子簇。

参数	符号值	
原始矢量	p_1	$\left[\frac{\sqrt{3}+1}{\sqrt{2}}, 0\right]$
	p_2	$\left[0, \frac{\sqrt{3}+1}{\sqrt{2}}\right]$
基矢量	b_1	$[0, 0]$
	b_2	$\left[\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{2}}, \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{2}}\right]$
	b_3	$\left[\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{6}}{2}\right]$
	b_4	$\left[\frac{\sqrt{3}+3}{2\sqrt{2}}, \frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{2}}\right]$
基类型	f	$[1, 2, 3, 4]$
晶格/膨胀键	L_1	$[1, 2, [0,0], 1]$
	L_2	$[2, 3, [0,0], 1]$
	L_3	$[1, 4, [-1,0], 1]$
	L_4	$[3, 4, [-1,0], 1]$
	L_5	$[3, 4, [0,0], 2]$
	L_6	$[2, 3, [0,-1], 2]$
	L_7	$[1, 2, [-1,0], 2]$
	L_8	$[1, 4, [-1,1], 2]$
	L_9	$[2, 4, [-1,-1], 3]$
	L_{10}	$[1, 3, [-1,0], 3]$

表5：具有多类型四格点基底和三种不同键类型的 Shastry-Sutherland 晶格上的位点展开输入。

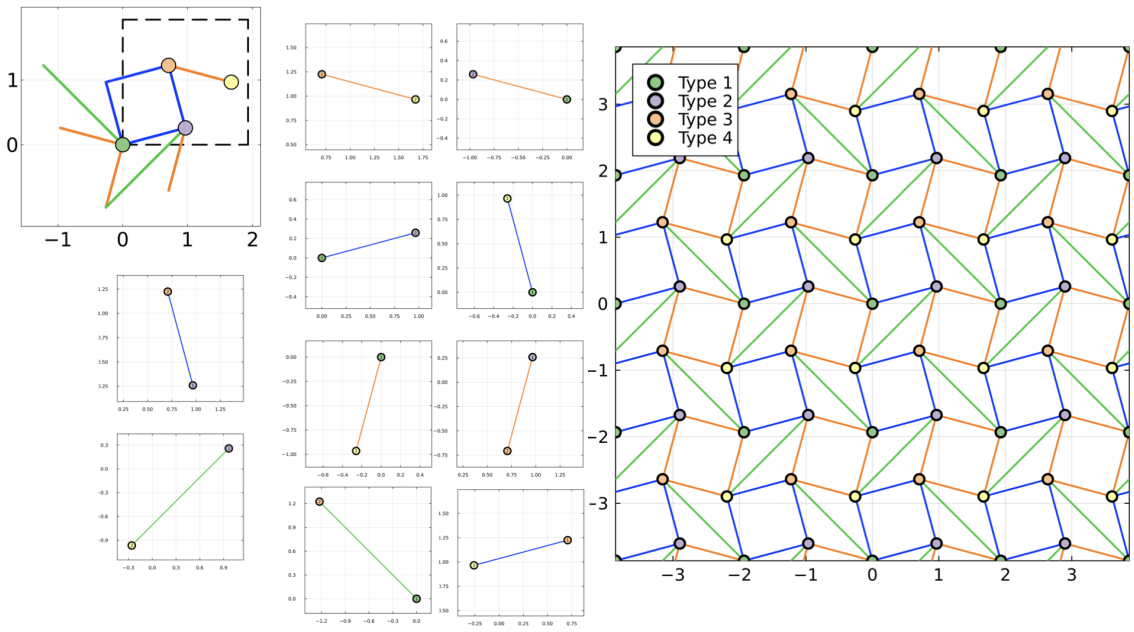

图8：Shastry-Sutherland 晶格晶胞、晶格图以及所有拓扑唯一的双位点子簇。

B 各种晶格几何结构的生成表格

阶	同构簇数量	对称簇数量	$\sum L(c)$	$\sum S(c)$	$\sum F(c)$
1	1	1	1.0	0	1.0
2	1	1	2.0	2	-2.0
3	1	2	6.0	5	0.0
4	3	5	19.0	31	1.0
5	4	12	63.0	69	0.0
6	10	35	216.0	289	0.0
7	19	108	760.0	848	0.0
8	51	369	2725.0	3577	1.0
9	112	1285	9910.0	11849	-1.0
10	300	4655	36446.0	48071	2.0
11	746	17073	135268.0	178158	-4.0
12	2042	63600	505861.0	730398	11.0

表 6：使用位点展开在无限方格晶格上自动生成的簇数量表。第一列为阶，与格点数相等。第二列和第三列分别为同构簇和对称簇的数量。最后三列为更复杂的簇数量。 $\sum L(c)$ 是给定阶中所有簇的晶格常数之和。$\sum S(c)$ 是该阶同构不等价簇的子簇总数。 $\sum F(c)$ 是对每个簇执行递归求和后，直至该阶的最终系数之和。

阶	同构簇数量	$\sum L(c)$	$\sum S(c)$	$\sum F(c)$
1	1	1.0	0	1.0
2	1	3.0	2	-3.0
3	2	11.0	11	2.0
4	4	44.0	43	0.0
5	8	186.0	154	0.0
6	22	814.0	706	1.0
7	54	3652.0	2793	-1.0
8	156	16689.0	12731	3.0
9	457	77359.0	58339	-4.0
10	1424	362671.0	282101	9.0
11	4505	1.71603e6	1377550	-15.0
12	14791	8.18221e6	6971412	30.0

表7：与表 6 相同，但适用于无限三角晶格。

阶	同构簇数量		$\sum L(c)$	$\sum S(c)$	$\sum F(c)$
1		1	1.0	0	1.0
2		1	2.0	2	-2.0
3		2	4.66667	11	0.666667
4		2	12.0	20	0.0
5		4	33.0	70	0.0
6		7	93.6667	189	0.333333
7		12	272.0	494	0.0
8		22	805.0	1369	0.0
9		45	2420.0	4117	0.0
10		88	7358.0	11759	1.0
11		183	22581.0	35210	-1.0
12		389	69850.7	108454	0.666667

表 8：与表 6相同，但适用于无限 kagome 晶格。

阶	同构簇数量		$\sum L(c)$	$\sum S(c)$	$\sum F(c)$
0		1	1.0	0	1.0
1		1	0.5	4	-1.5
2		1	1.0	9	0.0
3		2	3.0	30	0.0
4		5	9.5	113	0.5
5		11	31.5	346	0.0
6		31	108.0	1352	0.0
7		86	380.0	4979	0.0
8		272	1362.5	21217	0.5
9		850	4955.0	87278	-0.5
10		2814	18223.0	384569	1.0
11		9364	67634.0	1691315	-2.0
12		31913	2.5293e5	7673523	5.5

表 9：与表。 6 相同，但适用于无限方格晶格的角共享正方形展开。

阶	同构簇数量		$\sum L(c)$	$\sum S(c)$	$\sum F(c)$
0		1	1.0	0	1.0
1		1	0.25	4	-0.75
2		1	1.5	10	-1.5
3		3	12.5	53	2.0
4		8	118.75	222	0.25
5		25	1220.25	1030	-1.5
6		100	13208.8	6145	7.5
7		466	1.48346e5	43008	-1.0

表 10：与表 6 相同，但针对无限焦绿石晶格晶胞展开。

参考文献

[1]M. Rigol、T. Bryant 和 R. R. P. Singh，量子晶格模型的数值链接簇方法，《物理评论快报》**97**(18), 187202 (2006年), doi:10.1103/PhysRevLett.97.187202。

[2] M. Rigol、T. Bryant 和 R. R. P. Singh，数值链接簇算法 *I*：正方形、三角形和笼目晶格上的自旋系统，《物理评论E》**75**(6), 061118 (2007年), doi:10.1103/PhysRevE.75.061118。

[3] M. Rigol、T. Bryant 和 R. R. P. Singh，数值链接簇算法 *II*：一正方晶格上的 tJ 模型，《物理评论E》**75**，061119 (2007年), doi:10.1103/PhysRevE.75.061119。

[4]M. Rigol 和 R. R. P. Singh，《Kagome 反铁磁体 $ZnCu_3(OH)_6Cl_2$，的磁化率》，《物理评论快报》98，207204（2007年），doi:10.1103/PhysRevLett.98.207204.[5] M. Rigol 和 R. R. P. Singh，《Kagome 晶格反铁磁体与 Dzyaloshinsky-Moriya相互作用》，《物理评论B》76，184403（2007年），doi:10.1103/PhysRevB.76.184403.[6]E. Khatami 和 M. Rigol，《二维光晶格中强相互作用费米子的热力学》，《物理评论A》84，053611（2011），doi:10.1103/PhysRevA.84.053611.[7] E. Khatami 和 M. Rigol，《粒子统计对强关联二维哈伯德模型的影响》，《物理评论A》86，023633（2012），doi:10.1103/PhysRevA.86.023633.[8]R. Blankenbecler、D. J. Scalapino 和 R. L. Sugar，《耦合玻色子-费米子系统的蒙特卡洛计算 I》，《物理评论D》24(8)，2278（1981），doi:10.1103/PhysRevD.24.2278.[9] R. A. Hart、P. M. Duarte、T. L. Yang、X. Liu、T. Paiva、E. Khatami、R. T. Scalettar、N. Trivedi、D. A. Huse 和 R. G. Hulet，《利用超冷原子观测哈伯德模型中的反铁磁关联》，《自然》519，211（2015年）。

[10] P. M. Duarte、R. A. Hart、T.-L. Yang、X. Liu、T. Paiva、E. Khatami、R. T. Scalettar、N. Trivedi 和 R. G. Hulet，超冷原子费米子莫特绝缘体的可压缩性，《物理评论快报》**114**，070403（2015年），doi：10.1103/PhysRevLett.114.070403。

[11]L. W. Cheuk、M. A. Nichols、K. R. Lawrence、M. Okan、H. Zhang、E. Khatami、N. Trivedi、T. Paiva、M. Rigol 和 M. W. Zwierlein，二维费米-哈伯德模型中空间电荷和自旋关联的观测，《科学》**353**（6305），1260（2016年），doi：10.1126/science.aag3349，http://science.sciencemag.org/content/353/ 6305/1260.full.pdf。

[12] P. T. Brown、D. Mitra、E. Guardado-Sanchez、P. Schauß、S. S. Kondov、E. Khatami、T. Paiva、N. Trivedi、D. A. Huse 和 W. S. Bakr，二维费米-哈伯德系统中的自旋不平衡，《科学》**357**(6358)，1385（2017年），doi：10.1126/science.aam7838，http://science.sciencemag.org/content/357/6358/1385.full.pdf。

[13] M. A. Nichols、L. W. Cheuk、M. Okan、T. R. Hartke、E. Mendez、T. Senthil、E. Khatami、H. Zhang 和 M. W. Zwierlein，超冷费米子莫特绝缘体中的自旋输运，《科学》**363**(6425), 383（2019），doi：10.1126/science.aat4387，https://science.sciencemag.org/content/363/6425/383.full.pdf。

[14] G. Pasqualetti、O. Bettermann、N. Darkwah Oppong、E. Ibarra-García-Padilla、S. Das- gupta、R. T. Scalettar、K. R. A. Hazzard、I. Bloch 和 S. Fölling，二维 SU(n)费米-哈伯德模型的状态方程与温度测量，《物理评论快报》132，083401（2024），doi:10.1103/PhysRevLett.132.083401.[15] M. Lebrat、M. Xu、L. H. Kendrick、A. Kale、Y. Gang、P. Seetharaman、I. Morera、E. Khatami、E. Demler 和 M. Greiner，在费米-哈伯德量子模拟器中观测到长冈极化子，《自然》629(8011)，317（2024），doi:10.1038/s41586-024-07272-9，arXiv:2308.12269 [凝聚态物理].[16] J. Mongkolkiattichai、L. Liu、S. Dasgupta、K. R. A. Hazzard 和 P. Schauss，三味哈伯德系统的量子气体显微术（2025），2503.05687.[17] B. Tang、T. Paiva、E. Khatami 和 M. Rigol，蜂窝晶格中超冷费米子的短程关联与冷却，《物理评论快报》109，205301（2012），doi:10.1103/PhysRevLett.109.205301.[18]E. Khatami、R. T. Scalettar 和 R. R. P. Singh，哈伯德模型的有限温度超导关联，《物理评论B》91，241107(R)（2015），doi:10.1103/PhysRevB.91.241107.[19] A. B. Kallin、M. B. Hastings、R. G. Melko 和 R. R. P. Singh，方格晶格海森堡模型纠缠性质中的反常，《物理评论B》84，165134（2011），doi:10.1103/PhysRevB.84.165134.[20] R. R. P. Singh、R. G. Melko 和 J. Oitmaa，二维量子临界点纠缠熵中的热力学奇异性，《物理评论B》86，075106（2012），doi:10.1103/PhysRevB.86.075106.[21] A. B. Kallin、K. Hyatt、R. R. P. Singh 和 R. G. Melko，二维量子临界点处的纠缠：一项数值链接簇展开研究，《物理评论快报》110，135702（2013），doi:10.1103/PhysRevLett.110.135702.[22] A. B. Kallin、E. M. Stoudenmire、P. Fendley、R. R. P. Singh 和 R. G. Melko，*2 + 1* di- mensions 中 o(3) 量子临界点纠缠熵的角贡献，《统计力学杂志：理论与实验》2014(6)，P06009（2014），doi:10.1088/1742-5468/2014/06/P06009.[23] S. Sahoo、E. M. Stoudenmire、J.-M. Stéphan、T. Devakul、R. R. P. Singh 和 R. G. Melko，量子临界点处普适雷尼性质的异常标度修正与收敛，《物理评论B》93，085120（2016），doi:10.1103/PhysRevB.93.085120.[24]E. Khatami，热力学极限下的三维哈伯德模型，doi:10.48550/arXiv.1603.02681，arXiv:1603.02681 版本：2（2016）。[25] R. Schäfer、I. Hagymási、R. Moessner 和 D. J. Luitz，有限温度下的烧绿石 $S=\frac*{1}{2}*$ 海森堡反铁磁体，《物理评论B》102(5)，054408（2020），doi:10.1103/PhysRevB.102.054408.[26]K. Mallayya 和 M. Rigol，一维晶格中量子猝灭的数值链接簇展开，《物理评论E》95，033302（2017），doi:10.1103/PhysRevE.95.033302.[27] K. Mallayya 和 M. Rigol，热力学极限下的量子猝灭与弛豫动力学，《物理评论快报》120，070603（2018），doi:10.1103/PhysRevLett.120.070603.

[28] K. Mallayya、M. Rigol 和 W. De Roeck，《孤立量子系统中的预热化与热化》，《物理评论X》9，021027（2019），doi:10.1103/PhysRevX.9.021027.[29] I. G. White、B. Sundar 和 K. R. A. Hazzard，《基于数值链接簇展开的量子动力学》（2021），1710.07696.[30]B. Tang、D. Iyer 和 M. Rigol，《具有双峰随机键无序的二维自旋模型的热力学》，《物理评论B》91，174413（2015），doi:10.1103/PhysRevB.91.174413.[31] M. D. Mulanix、D. Almada 和 E. Khatami，《无序格点模型的数值链接簇展开》，《物理评论B》99，205113（2019），doi:10.1103/PhysRevB.99.205113.[32] J. Gan 和 K. R. A. Hazzard，《非均匀系统的数值链接簇展开》，《物理评论A》102，013318（2020），doi:10.1103/PhysRevA.102.013318.[33] M. Abdelshafy 和 M. Rigol，《具有连续无序分布的二维自旋模型的数值链接簇展开》，《物理评论E》109，054127（2024），doi:10.1103/PhysRevE.109.054127.[34] E. Ibarra-García-Padilla、S. Dasgupta、H.-T. Wei、S. Taie、Y. Takahashi、R. T. Scalettar 和 K. R. A. Hazzard，《SU(n) 费米-哈伯德模型的普适热力学》，《物理评论A》104，043316（2021），doi:10.1103/PhysRevA.104.043316.[35] E. Ibarra-García-Padilla、C. Feng、G. Pasqualetti、S. Fölling、R. T. Scalettar、E. Khatami 和 K. R. A. Hazzard，《正方晶格中 su(3)费米子的金属-绝缘体转变与磁性》，《物理评论A》108，053312（2023），doi:10.1103/PhysRevA.108.053312.[36]J. Richter 和 R. Steinigeweg，《结合动力学量子典型性与数值链接簇展开》，《物理评论B》99，094419（2019），doi:10.1103/PhysRevB.99.094419.[37] L. Pham 和 E. Khatami，《正方晶格费米-哈伯德模型中的自旋和电荷电导率》（2026），2602.03771.[38] B. D. McKay 和 A. Piperno，《实用图同构，第二部分》，《符号计算杂志》60，94（2014），doi:10.1016/j.jsc.2013.09.003.[39] C. Domb 和 G. M. S.，《相变与临界现象》，第3卷，Academic Press，伦敦（1974）。[40] J. Oitmaa、C. Hamer 和 W. Zhang，《强相互作用晶格模型的级数展开方法》，剑桥大学出版社，剑桥，英格兰（2006）。[41]B. Tang、E. Khatami 和 M. Rigol，《数值链接簇展开简明导论》，《计算机物理通信》184(3)，557（2013），doi:10.1016/j.cpc.2012.10.008.[42] L. Liao、Y.-J. Zhao、Z. Cao 和 X.-B. Yang，《方格晶格簇的最小顶点型序列索引》，《科学报告》7(1)，392（2017），doi:10.1038/s41598- 017-00398-z.[43]T. Junttila 和 P. Kaski，《为大型稀疏图设计高效的规范标记工具》，载于 D. Applegate、G. S. Brodal、D. Panario 和 R. Sedgewick 编，《第九届算法工程与实验研讨会论文集暨第四届解析算法与组合学研讨会》，第135–149页。美国工业与应用数学学会，doi:10.1137/1.9781611972870.13（2007）。

[44] P. T. Darga、M. H. Liffiton、K. A. Sakallah 和 I. L. Markov，利用结构进行合取范式的对称性检测，《第41届设计自动化会议论文集》，2004年，第530–534页（2004年）。