

转移矩阵

任杰

1 一维经典伊辛模型

转移矩阵的概念最早是在处理经典伊辛模型中引入的，因此我们从最简单的一维经典伊辛模型为例引入转移矩阵的概念。考虑一个 N 格点周期边界系统：

$$H = -J \sum_i s_i s_{i+1}, \quad (1)$$

我们处理的是一个经典统计问题。考虑配分函数：

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \prod_i \exp(K s_i s_{i+1}), \quad (2)$$

其中 $K = J/kT$ 。注意到配分函数可以写为一个乘积形式：

$$Z = \text{Tr}(T^N), \quad (3)$$

$$T_{ss'} = e^{Kss'} = \begin{pmatrix} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{pmatrix}. \quad (4)$$

由此引入的矩阵就是我们将要介绍的转移矩阵。我们将要说明，转移的本征谱可以给出系统的统计信息。

1.1 转移矩阵谱与临界点

我们首先给出 T 的谱分解：

$$T = \lambda_0 |0\rangle \langle 0| + \lambda_1 |1\rangle \langle 1|, \quad (5)$$

其中

$$\lambda_0, \lambda_1 = 2 \cosh K, 2 \sinh K, \quad (6)$$

$$|0\rangle, |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

回到原来的问题。得到转移矩阵 T 的谱之后 (往往我们只会用到本征值), 我们可以计算配分函数:

$$\begin{aligned}
 Z &= \langle 0 | T^N | 0 \rangle + \langle 1 | T^N | 1 \rangle \\
 &= \lambda_0^N + \lambda_1^N \\
 &= \lambda_0^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^N \right] \\
 &= (2 \cosh K)^N \left[1 + \tanh^N K \right].
 \end{aligned} \tag{8}$$

从配分函数的形式中, 我们看到当我们取热力学极限: $N \rightarrow \infty$ 时, $Z \rightarrow (2 \cosh K)^N$ 。热力学极限下的平均自由能

$$f := - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = -2 \ln \lambda_0. \tag{9}$$

完全来自于转移矩阵的基态。当我们改变温度, 若转移矩阵的本征值发生交叉, 体系自由能在交叉处就会有非解析性, 该临界点就发生了热力学相变。转移矩阵谱的简并意味着相变临界点, 对于我们现在讨论的模型, 有限温度时总是有 $\lambda_0 > \lambda_1$, 即一维经典伊辛模型只有一个相。

1.2 转移矩阵谱与关联长度

在继续我们的讨论之前。考虑格点算符 O_i 关联函数 (设 $i < j$):

$$\begin{aligned}
 \langle O_i O_j \rangle &= \frac{\text{Tr} [Z O_i O_j]}{\text{Tr} [Z]} \\
 &= \frac{\text{Tr} [T^N O_i O_j]}{\text{Tr} [T^N]} \\
 &= \frac{\text{Tr} [T^i O_i T^{j-i} O_j T^{N-j}]}{\text{Tr} [T^N]}.
 \end{aligned} \tag{10}$$

此形式类似编时关联函数。实际上, 以转移矩阵作为桥梁, 我们可以将一个 d 维经典统计问题和一个 $d-1$ 维量子统计问题相互转化, 我们会在以后讨论这个问题。这里, 我们写出分母低阶表达式:

$$\text{Tr} [T^i O_i T^{j-i} O_j T^{N-j}] \approx \lambda_0^N \left[\langle 0 | O_i | 0 \rangle \langle 0 | O_j | 0 \rangle + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^{j-i} \langle 0 | O_i | 1 \rangle \langle 1 | O_j | 0 \rangle \right]. \tag{11}$$

$$\begin{aligned}
 \langle O_i O_j \rangle_c &= \langle O_i O_j \rangle - \langle O_i \rangle \langle O_j \rangle \\
 &= \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^{j-i} \langle 0 | O_i | 1 \rangle \langle 1 | O_j | 0 \rangle.
 \end{aligned} \tag{12}$$

关联长度由 λ_1/λ_0 确定。这从另一个角度说明相变临界点物理意义, 即无穷关联长度。对于一维情形, 取 $O_i = s_i$:

$$\langle s_i s_j \rangle = (\tanh K)^{|i-j|}. \tag{13}$$

1.3 转移矩阵联系经典与量子系统

在这一步，我们在原来体系中引入磁场：

$$H = -J \sum_i s_i s_{i+1} - h \sum_i s_i, \quad (14)$$

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \prod_i \exp(K s_i s_{i+1}) \cdot \prod_i \exp(H s_i), \quad (15)$$

其中 $K = J/kT, H = h/kT$. 利用类似的方法，定义：

$$V_{ss'}^{(1)} = \exp(K s s') \propto \exp(K^* \sigma^x)_{ss'}, \quad (16)$$

$$V^{(2)} = \exp(H \sigma^z), \quad (17)$$

其中 $\tanh K^* = e^{-2K}$. 注意这里 $V^{(1)}, V^{(2)}$ 的定义方式有所不同， $V^{(1)}$ 定义式中 s 作为脚标， $V^{(2)}$ 定义中 s 被看作算符本身 (σ^z)，两种方式得到的矩阵往往是非对易的，这是转移矩阵“量子”的来源。转移矩阵现在可以写为：

$$T = \sqrt{V^{(2)}} V^{(1)} \sqrt{V^{(2)}}, \quad (18)$$

其中我们将 $V^{(2)}$ 拆为 2 半以使转移矩阵是厄米的，这样定义的转移矩阵同样满足：

$$Z = \text{Tr} [T^N]. \quad (19)$$

若 $K^*, H \ll 1$ ，我们可以交换矩阵位置：

$$T \approx V^{(1)} V^{(2)} = \exp \left[-\frac{\beta}{N} \left(-\sigma^x - \frac{h}{K^*} \sigma^z \right) \right], \quad (20)$$

其中 $\beta = KN$ ，也就是说，转移矩阵对应一个 0 维量子系统

$$\mathcal{H} = -\sigma^x - \frac{h}{K^*} \sigma^z \quad (21)$$

的虚时演化。现在回头看上一节中伊辛模型关联函数：

$$\begin{aligned} \langle O_i O_j \rangle &= \frac{\text{Tr} [T^i O_i T^{j-i} O_j T^{N-j}]}{\text{Tr} [T^N]} \\ &= \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}} O(\tau_i) O(\tau_j)]}{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}}]}, \end{aligned} \quad (22)$$

其中我们定义：

$$O(\tau_i) = T^{-i} O T^i = e^{\frac{\beta}{N} i} O e^{-\frac{\beta}{N} i}, \quad (23)$$

这正是定义在有限温度量子体系中的松原函数。

再次总结该模型中得到的结果。我们从一维经典统计系统的配分函数出发，将配分函数分割成 N 个转移矩阵的乘积，这 N 个乘积正对应了统计系统的一个维度。这样，转移矩阵对应少一个维度的体系虚时演化，我们可以由此得到一个 1 - 1 维（量子）系统。而此量子系统的松原函数对应经典系统关联函数。同时，热力学相变临界点对应转移矩阵谱基态简并，而这正对应 1 - 1 维量子体系能隙关闭处，因此， $d - 1$ 维量子体系量子临界点对应 d 维经典体系热力学临界点。0 维量子体系不存在相变，这也佐证了 1 维经典伊辛模型只有一个相的结论。

2 二维经典伊辛模型

一维模型作为例子足够说明转移矩阵的性质。但一维经典体系没有相变，更加非平庸的结论存在于二维体系中。考虑二维经典伊辛模型 ($N \times M$):

$$H = -J_\tau \sum_{i,j} s_{i,j} s_{i,j+1} - J_x \sum_{i,j} s_{i,j} s_{i+1,j}. \quad (24)$$

配分函数为：

$$Z = \sum_{\{s_{i,j}\}} \prod_{i,j} \exp(K_\tau s_{i,j} s_{i,j+1}) \cdot \prod_{i,j} \exp(K_x s_{i,j} s_{i+1,j}). \quad (25)$$

配分函数和一维情形基本一致，只是扩展了一个维度。这时，转移矩阵代表一行 N 个矩阵指标：

$$V^{(1)}(s_1, \dots, s_N; s'_1, \dots, s'_N) = \prod_i \exp(K_\tau s_i s'_i) \propto \exp\left(K_\tau^* \sum_i \sigma_i^x\right), \quad (26)$$

$$V^{(2)} = \exp\left(K_x \sum_i \sigma_i^z \sigma_i^z\right), \quad (27)$$

同样 $\tanh K_\tau^* = e^{-2K_\tau}$. 重复以上的讨论，转移矩阵最终对应到一个一维量子哈密顿量：

$$\mathcal{H} = -\sum_i \sigma_i^x - \frac{K_x}{K_\tau^*} \sum_i \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad (28)$$

这正是一维量子横场伊辛模型。该模型量子临界点在

$$\frac{K_x}{K_\tau^*} = 1 \quad (29)$$

处。若 $J_x = J_\tau$:

$$K = K^*, \quad (30)$$

$$e^{-2K} = \tanh K, \quad (31)$$

$$K = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) = \frac{J}{kT}. \quad (32)$$

我们由此得到二维伊辛模型临界温度：

$$\frac{kT}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269. \quad (33)$$

3 零温转移矩阵与量子相变

对热力学系统，配分函数实际是密度矩阵

$$\rho = \sum_n e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n|, \quad (34)$$

$$Z = \text{Tr}[\rho] \quad (35)$$

对于处在零温的量子系统，密度矩阵就是基态。此时配分函数就是态内积，由此可以将转移矩阵的概念拓展到零温量子系统。这时直观的图像可以用矩阵乘积态表述：

$$\begin{aligned} \langle \psi | &= \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \cdots \text{---} \bigcirc \text{---} \\ | \psi \rangle &= \begin{array}{c} | \\ \bigcirc \\ \text{---} \end{array} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \cdots \text{---} \bigcirc \begin{array}{c} | \\ \bigcirc \\ \text{---} \end{array} \\ \langle \psi | \psi \rangle &= \begin{array}{cc} \bigcirc & \bigcirc \\ | & | \\ \bigcirc & \bigcirc \end{array} \text{---} \cdots \text{---} \begin{array}{cc} \bigcirc & \bigcirc \\ | & | \\ \bigcirc & \bigcirc \end{array} \\ T_{i'j'}^{ij} &= \begin{array}{cc} i' & j' \\ \bigcirc & \bigcirc \\ | & | \\ \bigcirc & \bigcirc \\ i & j \end{array} \end{aligned}$$

图 1: MPS 转移矩阵

关联函数也有类似形式：

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O}_i \hat{O}_j \rangle &= \text{Diagram with two operators } \hat{O}_i \text{ and } \hat{O}_j \text{ on a chain of } N \text{ sites.} \\
\text{Diagram 1: } \boxed{\hat{O}_i} &= \text{Diagram 2: } \boxed{\hat{O}_j} \\
\text{Diagram 3: } \boxed{\hat{O}_i} &= \lambda_0 \text{Diagram 4: } \boxed{\hat{O}_j} \\
\text{Diagram 5: } \boxed{\hat{O}_i} &= \lambda_1 \text{Diagram 6: } \boxed{\hat{O}_j} \\
\langle \hat{O}_i \hat{O}_j \rangle &\approx \lambda_0^i \text{Diagram 7} \lambda_0^{j-i} \text{Diagram 8} \lambda_0^{N-j} \rightarrow \langle \hat{O}_i \rangle \langle \hat{O}_j \rangle \\
&+ \lambda_0^i \text{Diagram 9} \lambda_1^{j-i} \text{Diagram 10} \lambda_0^{N-j} \propto \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^{j-i}
\end{aligned}$$

图 2: MPS 关联函数

同样，量子相变临界点对应转移矩阵基态简并。