转移矩阵

任杰

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：

$$H = -J\sum_i s_i s_{i+1}, \tag{1}$$

我们处理的是一个经典统计问题。考虑配分函数：

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

其中 $K = J/kT$. 注意到配分函数可以写为一个乘积形式：

$$Z = Tr\left(T^N\right), \tag{3}$$

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

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。

转移矩阵谱与临界点

我们首先给出 T 的谱分解：

$$T = \lambda_0 \left|0\right\rangle\left\langle 0\right| + \lambda_1\left|1\right\rangle\left\langle 1\right|, \tag{5}$$

其中

$$\lambda_0, \lambda_1 = 2\cosh K, 2\sinh K, \tag{6}$$

$$\left|0\right\rangle, \left|1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

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：

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

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

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

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。

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 $i < j$)：

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

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：

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

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

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 $O_i = s_i$：

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

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：

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

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

其中 $K = J/kT, H = h/kT$. 利用类似的方法，定义：

$$V^{(1)}_{ss'} = \exp\left(K s s'\right) \propto \exp\left(K^* \sigma^x\right)_{ss'}, \tag{16}$$

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

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:

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

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:

$$Z=Tr\left[T^{N}\right]. \tag{19}$$

若 $K^{*},H\ll1$，我们可以交换矩阵位置:

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

其中 $\beta=KN$，也就是说，转移矩阵对应一个 0 维量子系统

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

的虚时演化。现在回头看上一节中伊辛模型关联函数:

$$\begin{aligned}\langle O_iO_j\rangle &= \frac{Tr\left[T^{i}O_{i}T^{j-i}O_{j}T^{N-j}\right]}{Tr\left[T^{N}\right]}\\ &= \frac{Tr\left[e^{-\beta\mathcal{H}}O\left(\tau_{i}\right)O\left(\tau_{j}\right)\right]}{Tr\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\right]},\end{aligned} \tag{22}$$

其中我们定义:

$$O\left(\tau_{i}\right)=T^{-i}OT^{i}=e^{\frac{\beta}{N}i}Oe^{-\frac{\beta}{N}i}, \tag{23}$$

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。

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 ($N\times M$):

$$H=-J_{\tau}\sum_{i,j}s_{i,j}s_{i,j+1}-J_{x}\sum_{i,j}s_{i,j}s_{i+1,j}. \tag{24}$$

配分函数为:

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

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:

$$V^{(1)}\left(s_1,\cdots,s_N;s'_1,\cdots,s'_N\right)=\prod_i exp\left(K_\tau s_i s'_i\right)\propto\exp\left(K^*_\tau\sum_i\sigma^x_i\right), \tag{26}$$

$$V^{(2)}=\exp\left(K_x\sum_i\sigma^z_i\sigma^z_i\right), \tag{27}$$

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:

$$\mathcal{H}=-\sum_i\sigma^x_i-\frac{K_x}{K^*_\tau}\sum_i\sigma^z_i\sigma^z_j, \tag{28}$$

这正是一维量子横场伊辛模型。该模型量子临界点在

$$\frac{K_x}{K^*_\tau}=1 \tag{29}$$

处。若 $J_x=J_\tau$:

$$K=K^*, \tag{30}$$

$$e^{-2K}=\tanh K, \tag{31}$$

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

我们由此得到二维伊辛模型临界温度:

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

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

$$\rho=\sum_n e^{-\beta E_n}\left|n\right\rangle\left\langle n\right|, \tag{34}$$

$$Z=Tr\left[\rho\right] \tag{35}$$

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:

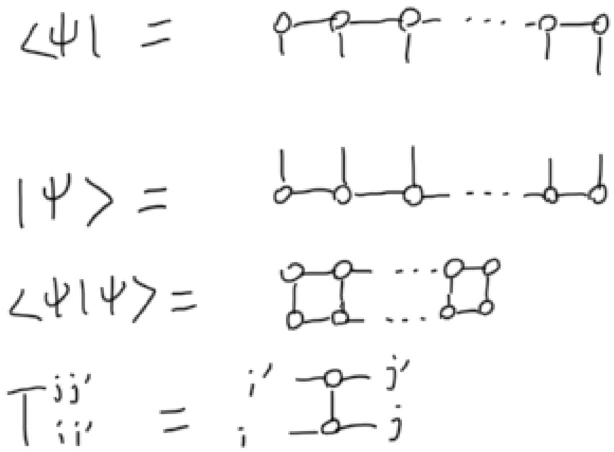

图 1: MPS 转移矩阵

关联函数也有类似形式:

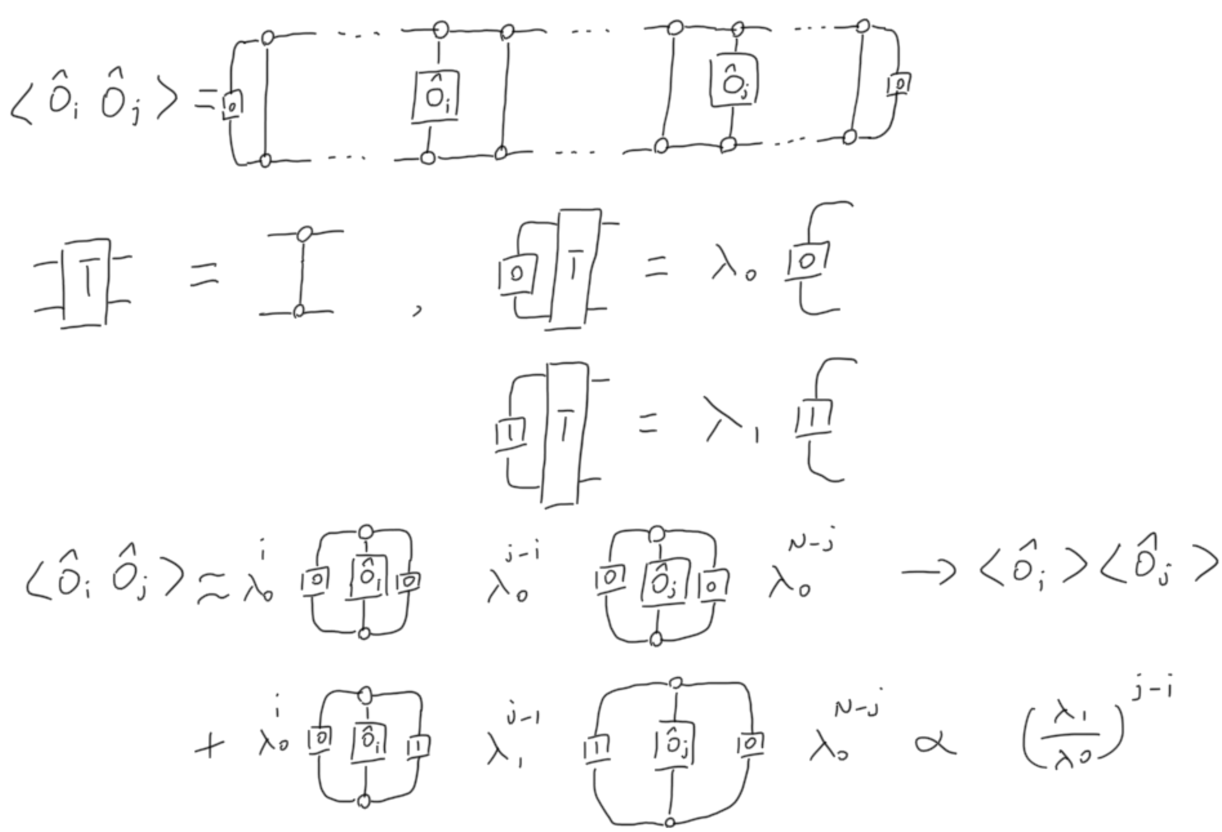

图 2: MPS 关联函数

同样，量子相变临界点对应转移矩阵基态简并。