

学号_____

密级_____

武汉大学本科毕业论文

张量重正化群的研究

院（系）名称：物理科学与技术学院

专业名称：物理学类

学生姓名：刘志远

指导教师：向涛 研究员

二〇一二年六月

**BACHELOR'S DEGREE THESIS
OF WUHAN UNIVERSITY**

The Study of Tensor Renormalization group

College : School of Physics and Technology
Subject : Physics
Name : Liu Zhiyuan
Directed by : Xiang Tao Researcher

June 2012

郑重声明

本人呈交的学位论文，是在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果，所有数据、图片资料真实可靠。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确的方式标明。本学位论文的知识产权归属于培养单位。

本人签名：_____

日期：_____

摘 要

本文介绍了相变理论的发展过程，张量重正化群方法的历史；详细介绍了 HOTRG 方法计算 ising 模型和 potts 模型的基本原理，计算了四角格子上铁磁 ising 模型的自由能误差，以及不同 q 取值的四角格子上铁磁 potts 模型的相关物理量，揭示了其相变特性；具体研究了四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型，证明了 $q=4$ 是二维四角格子 potts 模型的连续相变到一级相变的临界值，还讨论了 $q=4$ 的反铁磁情况，对使用 HOTRG 方法研究反铁磁系统做简单的介绍。

关键词：相变；张量重正化群；ising 模型；potts 模型；HOTRG； q ；四角格子；铁磁；一级相变；连续相变；反铁磁

ABSTRACT

this article firstly introduce us the development of the phase transition theory , and the history of tensor renormalization group method; secondly, we have just explained the basic principle of the HOTRG method in details and how to use this method to study statistic models ,such as the ferromagnetic ising model and potts model on the square lattice. Through the study of these two models ,we can know that the HOTRG method really deserves our trust for its high accuracy and the phase transition is actually happened for different values of q for the ferromagnetic potts model on the square lattice;we also calculate the ferromagnetic potts model carefully as $q=4$, the result tell us that this value of q is critical ; last we study the antiferromagnetic situation ,just as a simple introduction.

Key words: phase transition ; tensor renormalization group ; ising model ; potts model ; HOTRG ; q ; ferromagnetic ; the first-order transition ; second-order transition ; antiferromagnetic

目 录

第一章 绪论.....	6
1.1 概述.....	6
1.2 相变理论简介.....	7
1.3 经典统计模型.....	9
1.4 张量重正化群方法.....	11
第二章 HOTRG 方法在经典统计模型中的运用.....	14
2.1 HOTRG 方法对四角格子上 ising 模型的计算.....	14
2.1.1 四角格子上 ising 模型配分函数的张量网络表示.....	14
2.1.2 张量网络的粗粒化.....	19
2.2 HOTRG 方法对四角格子上 potts 模型的计算.....	25
2.2.1 四角格子上 potts 模型内能的计算.....	26
2.2.2 四角格子上铁磁 potts 模型比热的计算.....	29
2.2.3 四角格子上铁磁 potts 模型磁化强度(Magnetization)的计算.....	31
第三章 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型的计算.....	33
3.1 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型热学性质的计算.....	33
3.2 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型磁学性质的计算.....	35
3.4 四角格子上 $q=4$ 反铁磁 potts 模型的计算.....	37
第四章 总结.....	39
参考文献.....	41
致谢.....	42

第一章 绪论

1.1 概述

相变是一种很奇妙的物理现象，在大自然中很容易看到，比如水的蒸发，雪花和降雨，这些都是水发生相变的过程，还有铁磁-顺磁相变。有的相变会非常明显，很容易观察到，但是也有一些相变并不是那么明显，如 KT 相变，需要在极其苛刻的条件下才能观察到相变的发生。对于相变问题中隐藏的物理内涵，需要通过严格的理论和实验来探究。

在对相变的研究过程中，研究者们相继提出了各种基本概念和理论。物理是不断发展和进步的，相变理论也随着实验和理论发展一直在前进。从最初解释相变的猜测，到比较成熟的平均场理论，对相变的认识越来越深刻，但是因为相变点，系统是一个强关联体系，平均场理论失效，这被大量的实验所证实。于是需要新的理论来解释相变。在新一轮的探索中，对实验的总结告诉我们相变遵循标度假说，并且还有普适性，这是一个新的飞跃，也为后来引进重正化群理论来研究相变问题提供了思路。1975 年 Wilson 使用粒子物理中的重正化群理论研究相变^[1]，给相变问题研究带来了极大的进步，很好地解释了标度假说和普适性。

在研究自然中的相变系统时，会发现其往往是非常复杂的，不仅因为自然系统中存在这各种不同的相互作用，而且我们很难完全认识一个自然体系的物理机制，所以需要提出各种简化的物理模型，从简入繁，最终把复杂的相变现象解释清楚。经典统计物理模型就是很好的简化模型，通过对其研究，不仅能很好的认识了相变的基本规律，还可以作为检验平台，验证相变理论的准确性。最简单的经典统计模型是 ising 模型，通过对其一般化，还可以得到 potts 模型，XY 模型和海森堡模型，后来还提出了有许许多多其他的统计模型，对它们的研究丰富了相变的知识，为探索更复杂的系统奠定了基础。

事实上，即使是一个简单的统计模型，当体系的大小接近热力学极限时，也很难通过纯粹的解析方法完全求解，比如说三维的 ising 模型，到目前为止，依然无法解出其严格解，在这个时候需要借助于数值计算方法。数值方法虽然是一种近似，但是随着现代计算机技术的飞速发展，以及数值方法自身的改进，其精确度也越来越好，为解决很多复杂的问题提供了契机，事实上现代物理中很多非

线性，大系统的问题都是通过计算机模拟的方法来研究的。张量重正化群(TRG)方法^[2]是在 2007 年提出来用来处理张量网络态的数值方法，它是在密度重正化群方法上发展起来的，能够很好解决二维量子体系，同时还可用来研究经典的统计物理模型，但是 TRG 方法也有弊端，因为其误差会随着处理体系的张量键指标增大而增加，为了克服这样的不足，后来有了二次张量重正化群(SRG)方法^[3]，以及最近谢志远等提出来的高阶张量重正化群方法(HOTRG)和高阶二次重正化群方法(HOSRG)^[4]。

在本文中，开始会向大家介绍相变问题的研究发展情况，两种经典的统计模型：ising 模型和 potts 模型，几种张量重正化群方法；进一步会具体介绍 HOTRG 方法的基本原理，以及用来研究四角格子上的 ising 和 potts 模型的结果，全面向大家展示 HOTRG 方法的优越性；还会更加精确地计算一下四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型，证明其为连续相变，并得出其相变温度，临界指数，顺便还会把考虑一些反铁磁的情况，实际上反铁磁系统比铁磁系统更加复杂，既更有挑战性也富于乐趣，希望能够以此引起大家对反铁磁问题的兴趣。

1.2 相变理论简介

相变描述的可以是系统从一种有序的状态转变到另一种有序的状态，也可以是无序和有序之间的转变。引起相变的原因，从经典的热力学角度来看有两个：一为系统内部的相互作用，这是导致有序的根本原因，二为热激发，使得系统内部的有序被破坏，或者降低^[5]。

相变分为两类，如果体系的热力学势如自由能，在相变点的一阶导数不连续，这类相变称为一级相变，此类相变存在潜热。如果热力学势的一阶导连续，二阶导不连续，则称为二级相变，依此还可以定义三级、四级直到无穷级的相变，二级及其以上的相变都统称为连续相变。我们知道冰融化为水在室温下是一级相变，而铁磁体的铁磁顺磁转变则可以是连续相变，也可是一级相变。

为了清晰明了地描述相变，需要定义许多相关的物理量。序参量是一个能很好体现相变的量，在发生相变时，从低温到高温，序参量会下降到最小值；而且对于一级相变，序参量有一个跃变，但是对连续相变序参量则是连续下降到最小值。在临界点，许多热力学函数都表现出奇异性，为了定量的描述这些奇异性，

定义了一系列临界指数 α 、 β 、 γ 、 δ 、 ν 和 η ，在磁体系中满足如下关系式：

$$M \sim |t|^\beta \quad (1.1)$$

$$C_p \sim |t|^{-\alpha} \quad (1.2)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (1.3)$$

$$M \sim h^{\frac{1}{\delta}} \quad (1.4)$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (1.5)$$

$$G \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (1.6)$$

式中 M 表示磁化强度， C 表示比热， χ 是磁化率， h 表示外场， ξ 表示关联长度； G 表示关联函数，满足下式

$$G(\vec{r}_{ij}) = \langle \sigma_i \sigma_j - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \rangle \quad (1.7)$$

其描述了自旋取向的涨落，它和关联长度 ξ 的关系满足：

$$G \sim r^{-\tau} e^{-r/\xi} \quad (1.8)$$

最早比较成功的相变理论是平均场论，Bragg 和 William 在 1934 年最早提出了这种方法，他们对被研究系统中每个位点受到的作用取平均，于是每个位点都受到一个相同的平均势场作用，从而使得一个多体问题单体化，简化了多体系统的计算，得到的序参量与温度关系可以反应相变的发生。这种理论经历了几十年的发展，最后 Landau 提出了最完善的平均场理论。在平均场近似下计算出来的关联函数值为零，也就是说在相变点并没有涨落，这是与事实不符合的。随着温度精度控制技术的发展，实验的温度越来越靠近相变温度，得出来的结果是用平均场理论无法解释，即在近邻临界点的时候，关联函数不为零。后来人们发现，其实在四维以上，平均场论理论才是准确的近似。

平均场理论被实验所证伪，需要新的理论来代替，然而提出一种全新的具有普适性的理论并没有那么简单。在新理论提出之前，大量的实验正在进行，对其总结揭露出，系统的相变满足标度假说和普适性。标度假说认为热力学函数可以写为广义齐次函数的形式，临界指数满足标度律：

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (1.9)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (1.10)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (1.11)$$

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (1.12)$$

而普适性则说明具有相同临界性质的系统可归为同一个普适类, 具有相似的对称性, 那么所有的系统就可以按照普适性划分为几大类。这两个唯象的理论揭露了相变问题中包含的深刻物理内涵, 对相变理论的进一步发展起着铺垫作用。

1975 年, Wilson 把粒子物理中的重正化群理论应用到了相变的研究中, 很好地解释了标度假说和普适性。重正化群理论其实就是对哈密顿量在耦合常数构成的空间中变化。耦合常数定义如下, ising 模型其哈密顿量可以写为

$$-\beta H(K, \{s_i\}) = NK_0 + K_1 \sum_i s_i + K_2 \sum_{ij} s_i s_j + K_3 \sum_{ijk} s_i s_j s_k \dots \quad (1.13)$$

式中的 $K = \{K_i\}$ 就是耦合常数。对其变换如下

$$K' = R_b(K) \quad (1.14)$$

式中重正化变换 R 就构成了重正化群。重正化群理论分为关键的两步, 一为粗粒化, 即把体系分块, 然后把块内的相互作用平均掉; 第二步就是标度变换, 即把刻度放大, 相当于把每个小分块给缩小回了原来大小, 那么体系的哈密顿量形式就不变, 只有耦合常数发生了变化。对系统进行多次重正化变换以后, 耦合常数会趋向于固定点(fixed point) K_c , 最后停留在固定点上, 这时的温度取值就是相变温度, 同时通过计算重正化变换的本征值就可以求出临界指数。重正化群理论极大地推进了相变的研究, 同时也为后来许多数值方法的发展奠定了理论基础。

1.3 经典统计模型

经典统计模型是研究相变的重要平台。常见的经典统计模型有 ising 模型, potts 模型, XY 模型和海森堡模型, 还有一些几何相变模型, 如渗流模型。下面详细介绍一下 ising 模型和 potts 模型。

Ising 模型是在 Ising 的 1925 年的博士论文中提到的第一个经典统计模型, Ising 计算了一维 ising 模型的相变, 发现一维情况下并没有相变, 并且还推断二维情况也不发生相变。当时科学界对于能不能使用统计模型来研究相变存在激烈的分歧。直到 1944 年 Lars Onsager 提出了二维 ising 模型的严格解^[6], 证明二维

的情况下，ising 模型存在相变。随后对统计模型的相变研究也越来越普遍。

Ising 模型认为体系每一个位点都取单一方向上的离散自旋，而且只有两种取值，即 ± 1 ，它们之间存在交换相互作用，如果只考虑近邻格点的相互作用，系统的哈密顿量可以写为：

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (1.15)$$

式中 J 表示自旋的交换相互作用，取正表示系统为铁磁，取负表示系统为反铁磁； Σ 表示对所有的近邻格点求和， s_i 为自旋，h 为外场，对自旋为 1 的作用能为负，对 -1 的作用为正。知道了体系的哈密顿量，就可以计算配分函数，如下式：

$$Z = \sum e^{-\beta H} \quad (1.16)$$

式中 Σ 表示对所有的自旋可能取值求和。

根据统计物理的知识，计算出了配分函数就可以求解出所有的热力学函数。对于统计模型，求解其配分函数遇到的挑战是系统的大小为热力学极限，而且随着维度的增加，计算的难度也会增加。三维情况下的 ising 模型直到今天也没有得到严格解，这是一个科学上的挑战，大家一直在努力，但是现在我们往往只能做到通过数值方法来近似计算。

Potts 模型是 Potts 在 1952 年提出来的，是 ising 模型一般化的一种。potts 模型的自旋也是单轴和离散取值的，但不同的是其可以从 1 到 q 任意取值，即有 q 中取法，因此 potts 模型也称为 q 态 potts 模型，实际上当 q=2 时，potts 模型和 ising 模型是等价的。Potts 模型中自旋之间相互作用规定为只有自旋取值相同时才有作用，其他情况下则没有作用。在仅考虑近邻相互作用时，potts 模型的哈密顿量为：

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) - h \sum_i \delta(\sigma_i, 1) \quad (1.17)$$

式中自旋 σ 取 1 到 q 任意值， δ 表示 Kronecker 函数，外场 h 只对自旋为 1 的位点作用。确定哈密顿量后，同样通过求解 potts 模型的配分函数就可以求出其热力学函数，研究其相变。但是实际上 Potts 模型可以严格求解的情况也很少。q=2 时等价与 ising 模型，一维、二维时是可以严格求解的，其他情况则需要讨论；q=4 时在二维四角格子，三角格子和六角格子上可以计算精确解^[7,8,9]；对于大多数情况，我们同样需要借助于数值计算方法来近似求解 potts 模型。还有一点需要强调，对于二维铁磁的 potts 模型， $q \leq 4$ 时，为连续相变， $q > 4$ 时，为一级相

变, $q=4$ 是一个临界值, 对于不同维度 d 下, 其临界 q 值也是不一样的。关于 potts 模型更详细的介绍, 大家可以参考文献[10]。

1.4 张量重正化群方法

面对解析方法无法解决的问题时, 数值计算方法给了我们一个很好地接近真理的机会。在使用重整群理论研究相变之后, 越来越多基于它的数值计算方法被发展了起来。1992 年提出的 DMRG 方法就是其中非常成功的一种^[11], 它可以用来很好处理一维量子系统, 但是因为其计算误差会随着边界的增加而增加, 所以对二维以上系统, 求解出来的结果精确度很差。随后大家都在尝试把 DMRG 方法拓展到二维以上的空间。

2007 年, Levin 和 Nave 提出了张量重正化群方法(TRG)^[2]。TRG 是借助于量子信息领域的理论而发展起来的一种数值重正化群理论, 能够很好地处理二维的经典晶格模型。TRG 方法处理系统的第一步, 是把系统写成张量网络模型, 所有具有局域相互作用的经典晶格模型, 都可以表示为张量网络模型, 如经典统计模型包括 ising 模型、potts 模型可以很自然地表示为张量网络模型。对于张量网络模型, 每个格点表示一个张量, 格点之间的键表示张量的分量指标, 其维度与模型的选择有关, 每个张量伸出来的键的个数就是其阶数。配分函数 Z 可以写为张量网络表示, 满足

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i, y_i, z_i, \dots} \quad (1.18)$$

式中张量 T 为 n 阶张量, Tr 表示对所有的键指标求和。把配分函数写成张量网络表示形式后, 我们可以对其进行重正化变换, 即进行张量缩并, 这样张量网络会不断缩小, 直到剩下有限个张量, 直接对所有的键指标求和就可以得到配分函数的值。事实上, 如果仅仅对系统进行缩并操作的话, 键指标的维数会平方倍地增长, 多次缩并后张量的维数会非常大, 计算的难度也会变得非常大, 直到最后根本上无法计算。为了保证能求解出配分函数来, 需要对张量的维度进行截断, 每次缩并后张量的每个键指标的维数变为截断维数 D_{cut} , 截断会带来误差, 这也是 TRG 方法的主要误差来源。关于 TRG 方法的具体原理可以参考[2,12]。

TRG 方法是一种很好的计算方法, 但是它进行缩并时只考虑了局域的相互作用, 而忽略了环境的影响。事实上, DMGR 方法告诉我们环境对局部是有作

用的，因此为了优化 TRG 方法，一种考虑了环境作用的张量重正化群方法被提了出来，即二次张量重正化群方法(SRG) [3]。SRG 方法考虑了每一次张量缩并时的环境影响，把系统分成了两个部分，一为由需要缩并的张量所组成的局域部分 M，以及除去局域部分之外所有的张量组成的环境部分 M^e ，体系的配分函数可以表示为：

$$Z = TrMM^e \quad (1.19)$$

式中 M 和 M^e 都是矩阵，对它们进行奇异值分解，把环境部分的影响算入张量缩并过程，生成一个新的张量网络，这样不断重复迭代，最后算出配分函数值。SRG 方法的详细讲解，可以参考文献[3,12]。

物理学中各种理论都是不断被发展和优化的，张量重正化群方法从 TRG 方法发展到 SRG 就是一种进步，却不是终点。最近，谢志远等人又提出了新的张量重正化群理论 HOTRG 和 HOSRG 方法[4]。HOTRG 和 HOSRG 是基于数学上的高阶奇异值分解(HOSVD)方法[13]，而前面提到的 TRG 和 SRG 方法则是基于奇异值分解(SVD)。在张量缩并过程中应用高阶奇异值分解，不仅能够简化缩并的过程，同时也在极大程度上减小了截断误差，这些充分利用了高阶奇异值分解的特点。HOSRG 方法是在 HOTRG 基础上考虑了环境影响的方法，但是不同于 SRG 方法的是，它还借助了 DMRG 中的环境密度矩阵的思想。

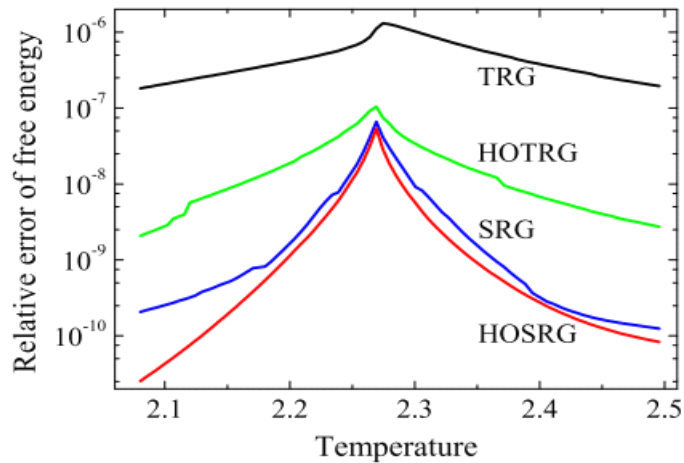


图 1.1 张量重正化群方法计算四角格子上 ising 模型的自由能误差曲线[3]

图 1.1 对比了四种张量重正化群方法计算出来的自由能误差曲线，可以看出 SRG 相对于 TRG 的精确度有很大的提高，HOSRG 相对与 HOTRG 的精确度也有很好的提高；同时使用高阶奇异值分解的重正化群方法也要优于基于奇异值分

解的重正化群方法。还有,运用高阶的重正化群方法还能使计算速率有很大提升。在下一章,我们会详细介绍 HOTRG 方法的计算原理,及用其计算四角格子上铁磁的 ising 模型和 potts 模型,那时大家会对 HOTRG 有更深地了解;关于 HOSRG 方法,大家可以参考文献[3]。

第二章 HOTRG 方法在经典统计模型中的运用

HOTRG 方法，是在 TRG 方法上发展起来的新的数值方法。它继承了 TRG 方法的优点，充分利用了高阶奇异分解(HOSVD)的特性，得到了更精确的结果，节约了计算时间和空间，达到了发展和优化 TRG 方法的目的。下面介绍如何使用 HOTRG 方法计算四角格子上的两种经典统计模型：ising 模型和 potts 模型，既是为了阐明 HOTRG 方法的计算原理，同时也验证一下 HOTRG 方法的可靠性。

2.1 HOTRG 方法对四角格子上 ising 模型的计算

Ising 模型是我们所熟悉的模型，关于二维 ising 模型的研究已经很透彻了，可以得出严格的解，蒙特卡罗方法计算结果能很好地和严格解相吻合。现在通过使用 HOTRG 方法来计算出四角格子上铁磁 ising 模型的自由能，和蒙特卡罗方法计算的结果相对比，来说明 HOTRG 方法具有很好的精确度。

2.1.1 四角格子上 ising 模型配分函数的张量网络表示

HOTRG 方法的第一步需要把四角格子上 ising 模型的配分函数写成张量网络表示。对于 ising 模型，只考虑近邻相互作用的情况下，哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (2.1)$$

式中 J 表示自旋交换相互作用，大于 0 表示铁磁体系，小于 0 则为反铁磁， $\langle ij \rangle$ 表示近邻原子对，第一个 Σ 表示对所有的近邻原子对求和， s_i 表示 i 位点上的自旋，只能取 ± 1 ， $h > 0$ 表示外场作用，对自旋为 -1 的作用能为负，对自旋为 1 的作用为正，那么根据能量最小的原理，可以知道自旋在外场下更趋向于取 1。

对哈密顿量进行变换：

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} [J s_i s_j - \frac{h}{4} (s_i + s_j)] \quad (2.2)$$

式中分数 1/4 源自于四角格子上每个位点会有四个近邻原子。体系的配分函数为

$$Z = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J s_i s_j + \beta (s_i + s_j)/4} \quad (2.3)$$

式中 Σ 表示对所有的能量可能取值求和，就是对体系所有不同的自旋取法求和。如果把 $e^{\beta J s_i s_j + \beta (s_i + s_j)/4}$ 看作是定义在连接位点 i 和 j 的相互作用键上的矩阵 M 的分

量，即有

$$M(s_i, s_j) = e^{\beta J s_i s_j + \beta (s_i + s_j)/4} \quad (2.4)$$

那么

$$M = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta h/2} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J + \beta h/2} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

于是，配分函数可以写为

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} M(s_i, s_j) \quad (2.6)$$

可以对矩阵进行本征值分解得：

$$M = UVU^\dagger \quad (2.7)$$

式中，U 为么正矩阵，V 为 2×2 对角矩阵。矩阵 M 的每一个分量满足：

$$M(s_i, s_j) = \sum_x U(s_i, x) V_x U(s_j, x) \quad (2.8)$$

式中 V_x 表示矩阵 V 的第 x 个对角元。如果令

$$\mathcal{O}(s_i, x) = U(s_i, x) V_x^{1/2} \quad (2.9)$$

则有：

$$M(s_i, s_j) = \sum_x \mathcal{O}(s_i, x) \mathcal{O}(s_j, x) \quad (2.10)$$

即

$$M = \mathcal{O} \mathcal{O}^\dagger \quad (2.11)$$

配分函数可以变为：

$$Z = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \prod_{\langle ij \rangle} \sum_x \mathcal{O}(s_i, x) \mathcal{O}(s_j, x) \quad (2.12)$$

四角格子中每个格点都有四个近邻格点，即上式中存在四个与 s_i 有关的 O 矩阵，如下所示

$$Z = \sum_{xx', yy'} \prod_{\substack{\{s_j = \pm 1\} \\ \{j, k \neq i\}}} M(s_j, s_k) \mathcal{O}(s_j, x) \mathcal{O}(s_m, x') \mathcal{O}(s_n, y) \mathcal{O}(s_d, y') \sum_{s_i} \mathcal{O}(s_i, x) \mathcal{O}(s_i, x') \mathcal{O}(s_i, y) \mathcal{O}(s_i, z) \quad (2.13)$$

式中 j 和 k 表示系统中任意不为 i 的格点，l、m、n 和 d 表示和 i 位点近邻的位点。若取

$$T_{xx', yy'}^i = \sum_{s_i} \mathcal{O}(s_i, x) \mathcal{O}(s_i, x') \mathcal{O}(s_i, y) \mathcal{O}(s_i, y') \quad (2.14)$$

表示 i 格点张量 T 的分量。张量 T 为一个四阶张量，且每一阶的维数都为 2，对与任意格点，可以取与之对应的张量 T 。于是，配分函数写成

$$Z = \sum_{\{xx',yy'\}} \prod_i T_{xx',yy'}^i = \text{Tr} \prod_i T_{xx',yy'}^i \quad (2.15)$$

式中 i 表示任意格点， x 、 x' 、 y 、 y' 表示与任意张量 T 对应的角标， Tr 表示对所有的角标求和。如此，四角格子上的 **ising** 模型的配分函数就写成了张量网络表示。

为了更形象的描述配分函数的张量网络表示，把每一个格点对应的张量 T 表示为一个格点，每个张量的角标对应为每个格点伸出来的四个键，即如下图所示

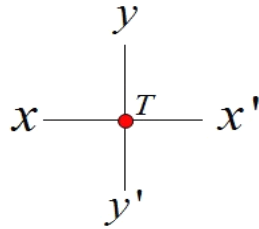


图 2.1 张量 T 的示意图

那么，配分函数中 Tr 相当于对图 2.2 中张量网络的所有键角标求和，相邻张量连接在一起的键角标是一样的。对系统取周期性边界条件，这一点在计算有限的系统时很重要。

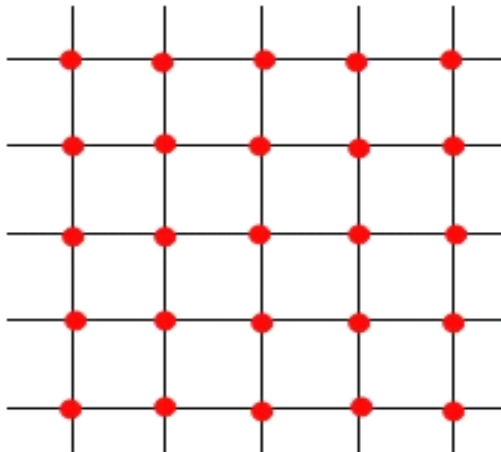


图 2.2 配分函数的张量网络表示部分示意图，图中格点表示张量 T ，格点连线表示键指标

其实除了上面讨论的方法,还可以在对偶格子上定义配分函数的张量网络表示。在没有外场时,系统的哈密顿量可以表示为

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (2.16)$$

于是,配分函数为

$$Z = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{-\beta J s_i s_j} \quad (2.17)$$

对于四角格子上的一小正方形,四个格点分别为 i、j、k 和 l,这个小正方形对应的配分函数部分为

$$Z_{\square ijkl} = \sum_{s_i s_j s_k s_l} e^{\beta J (s_i s_j + s_j s_k + s_k s_l + s_l s_i) / 2} \quad (2.18)$$

式中有 1/2 因子是因为网格中每条边为两个小正方形所共有。配分函数也可以写为:

$$Z = \prod_{\{\square ijkl\}} Z_{\square ijkl} \quad (2.19)$$

如果取 ij 边上的相互作用为

$$\sigma_{ij} = s_i s_j \quad (2.20)$$

因为 s_i 、 s_j 只能取 ± 1 , 所以 $\sigma_{ij} = \pm 1$, 故:

$$Z_{\square ijkl} = \sum_{s_i s_j s_k s_l} \delta(s_i s_j - \sigma_{ij}) \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J (\sigma_{ij} + s_j s_k + s_k s_l + s_l s_i)} \quad (2.21)$$

同样对其他边也取如(1.18)中等式,则小正方形上的配分函数可以写为

$$Z_{\square ijkl} = \sum_{s_i s_j s_k s_l} \delta(\sigma_{ij} - s_i s_j) \delta(\sigma_{jk} - s_j s_k) \delta(\sigma_{kl} - s_k s_l) \delta(\sigma_{li} - s_l s_i) e^{\beta J (\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li}) / 2} \quad (2.22)$$

又因为

$$\sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li} = s_i s_j s_j s_k s_k s_l s_l s_i = 1 \quad (2.23)$$

必须恒成立,则

$$Z_{\square ijkl} = \sum_{\sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li}} \frac{1 + \sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li}}{2} e^{\beta J (\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li}) / 2} \quad (2.24)$$

可以看到上式中,如果(2.23)式不成立,因为 σ 只能取 ± 1 , 那么

$$\sigma_{ij} \sigma_{jk} \sigma_{kl} \sigma_{li} = -1$$

那么其权重必然为零,即这些情况是不存在的。通过上面的分析,可以看出(2.18)式和(2.24)是等价的。

如果定义一个从这个小正方形中心 O 伸出四个键的张量,其中水平方向为 x, x' , 垂直方向为 y 和 y' , 满足

$$T_{xx',yy'}^O = T_{\sigma_j\sigma_{jk}\sigma_k\sigma_{li}}^O = \frac{1 + \sigma_{ij}\sigma_{jk}\sigma_{kl}\sigma_{li}}{2} e^{\beta J(\sigma_{ij} + \sigma_{jk} + \sigma_{kl} + \sigma_{li})/2} \quad (2.25)$$

如下图所示,

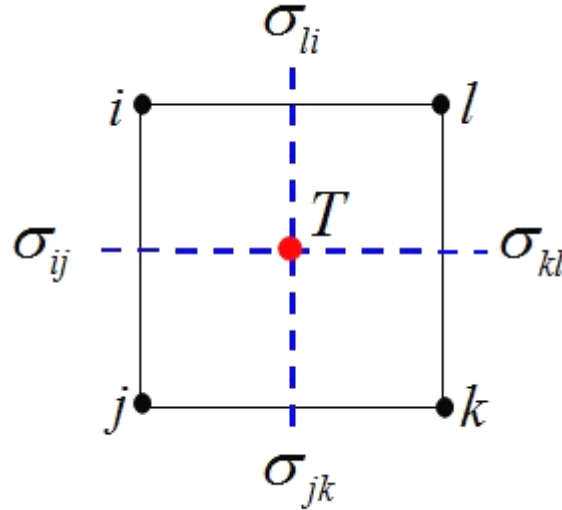


图 2.3 在对偶格子上定义系统配分函数的张量表示原理图, 图中红色中心表示张量 T

如此便得到了四角格子的对偶格子上配分函数的张量网络表示。因为四角格子的对偶格子其实也是四角格子, 所以其张量网络也如图 2 所示, 只是初始化的张量有所不同而已。配分函数最终表示为:

$$Z = \prod_{\square ijkl} \sum_{\sigma_j\sigma_{jk}\sigma_k\sigma_{li}} T_{\sigma_j\sigma_{jk}\sigma_k\sigma_{li}}^O = \sum_{\{xx',yy'\}} \prod_O T_{xx',yy'}^O = \text{Tr} \prod_O T_{xx',yy'}^O \quad (2.26)$$

式中 Tr 表示对所有张量网络中的键指标求和, 键指标 x, x' 在水平方向, y, y' 在竖直方向。我们可以很容易写出张量的具体取值如下, 其中键指标取 1 时, 表示 $\sigma=1$, 键指标取 2 时, 表示 $\sigma=-1$:

$$\begin{aligned} T^O(:, :, 1, 1) &= \begin{pmatrix} e^{2\beta J} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & T^O(:, :, 1, 2) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ T^O(:, :, 2, 1) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & T^O(:, :, 2, 2) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-2\beta J} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.27)$$

以上就是就是四角格子上 ising 模型的配分函数写成张量网络表示的方法。

一般我们使用前面介绍的通过对矩阵进行本征值分解，来得到张量网络，因为这种方法所得到的张量对称性更好一些。

2.1.2 张量网络的粗粒化

四角格子上 ising 模型的配分函数表示成张量网络后，接下来对张量进行粗粒化操作，这是 HOTRG 方法最核心的过程。取竖直方向上任意两个近邻张量 T，这里张量 T 由矩阵本征分解的方法得到，如下图所示

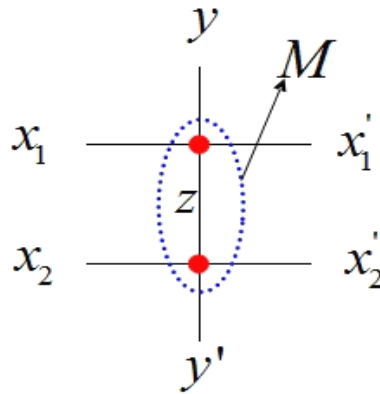


图 2.4 张量网络中任意两个张量粗粒化示意图

把这两个张量的共同指标求和掉，得到

$$M_{xx'yy'} = \sum_z T_{x_1 x_1' y z} T_{x_2 x_2' z y'} \quad (2.28)$$

式中， $x = x_1 \otimes x_2, x' = x_1' \otimes x_2'$ 。如果系统由 N 个格点组成，那么张量网络就由 N 个张量 T 组成，把所有张量按在竖直方向近邻位置两两分为一块，然后对每个块都进行如(2.28)式的操作，就可以得到由新的张量 M 所组成的张量网络，如下图所示，这相当于重正化群理论中的粗粒化过程。

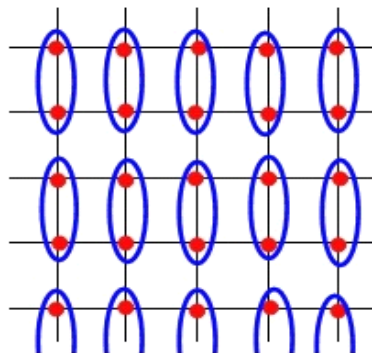


图 2.5 对张量网络进行粗粒化，每个蓝色小圈内两个张量 T 对公共键指标求和后得到新张量 M。

如果只是进行粗粒化，键指标的维数会成平方倍增长。粗粒化的次数越多，张量的元素就会越大，计算也会越困难。所以需要在竖直方向粗粒化后对水平的键指标进行截断。截断的过程如下面介绍。

根据文献[3]，我们可以对张量 M 进行高阶奇异值分解(HOSVD)，得到：

$$M_{xx'yy'} = \sum_{ijkl} S_{ijkl} U_{xi}^L U_{x'j}^R U_{yk}^U U_{y'l}^D \quad (2.29)$$

式中 U 都为么正矩阵， S 张量称为 M 的核，其性质满足两点：

(1)如果 $j \neq j'$ ，则

$$\langle S_{:,j,:} | S_{:,j',:} \rangle = 0$$

式中 $\langle S_{:,j,:} | S_{:,j',:} \rangle$ 表示 S 的子张量的内积。

(2)如果 $j < j'$ ，则

$$|S_{:,j,:}| \geq |S_{:,j',:}|$$

$|S_{:,j,:}|$ 表示子张量的规范，即其所有元素平方和的平方根。这些规范相当于矩阵奇异值的作用。这两个性质对与 HOTRG 方法的意义，之后会讨论。现在根据前面对张量网络的表示，我们可以把式(2.29)的分解转化为图示语言，如图 2.6。

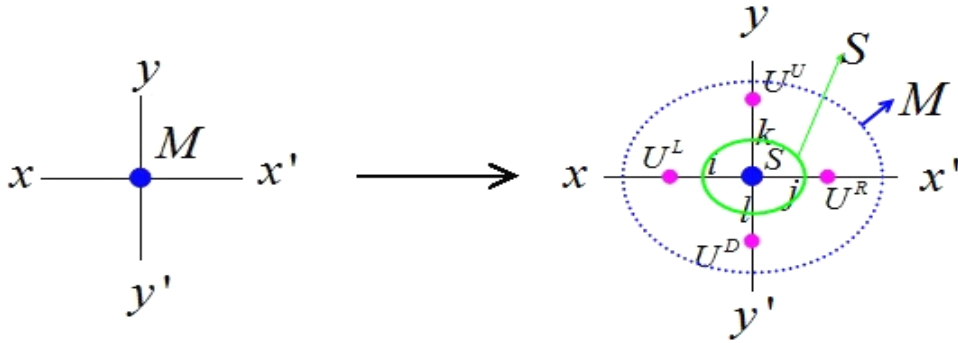


图 2.6 对张量 M 进行高阶奇异值分解示意图

现在要实现对张量 M 在水平方向上进行截断，就只需要对 U^L 或者 U^R 进行截断，为此得先求出 U^L 或者 U^R 。

设矩阵 W 的元素满足：

$$\begin{aligned} W_{xx''} &= \sum_{x'yy'} M_{xx'yy'} M_{x''x'yy'} \\ &= \sum_{x'yy'} \sum_{ijkl} \sum_{i'k'l'j'} S_{ijkl} U_{xi}^L U_{x'j}^R U_{yk}^U U_{y'l}^D S_{i'j'k'l'} U_{x''i'}^L U_{x'j'}^R U_{yk'}^U U_{y'l'}^D \\ &= \sum_{j'j} U_{xj'}^L \left(\sum_{ijkl} S_{ijkl} S_{ij'kl} \right) U_{x''j'}^L \end{aligned} \quad (2.30)$$

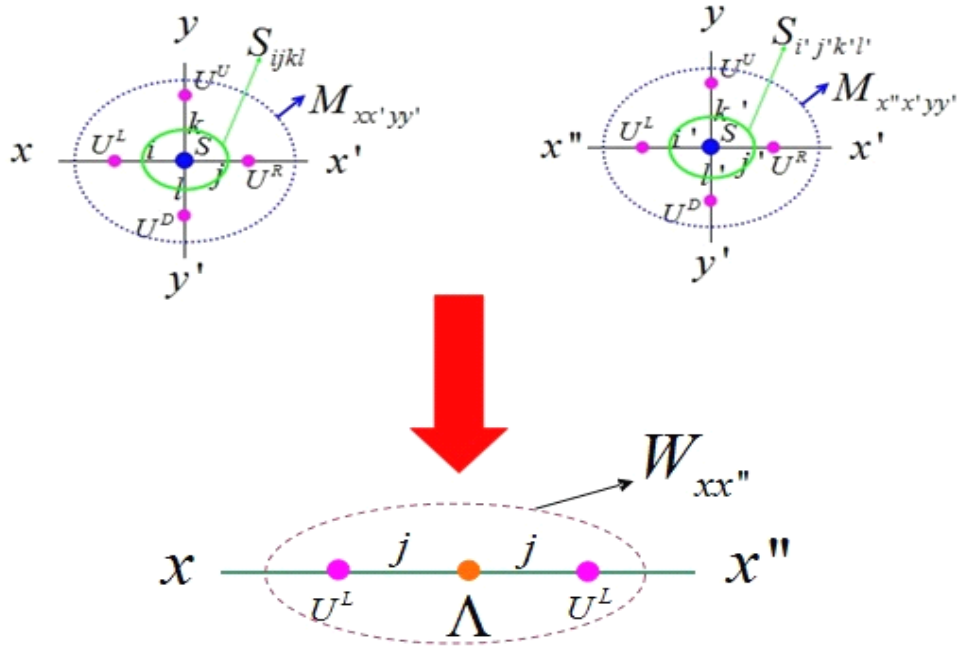


图 2.7 公式(2.30)原理示意图，把两个 M 的公共键指标求和掉就得到了 W.

式(2.30)相当于图 2.7 所示，上式利用了 U 为么正矩阵和 S 张量的性质(1)，又可以设：

$$\Lambda_j = \sum_{ikl} S_{ijkl} S_{ijkl} = |S_{\dots j \dots}|^2 \quad (2.31)$$

中 Λ 为对角矩阵，对角元满足为 Λ_j ，根据 S 张量的性质(2)，可以知道 Λ_j 按降序排列。由此(2.30)式可化简为：

$$W_{x'x''} = \sum_j U_{jx'}^L \Lambda_j U_{jx''}^L \quad (2.32)$$

则有：

$$W = U^L \Lambda U^{L\dagger} \quad (2.33)$$

那么，矩阵 U^L 可以通过对 W 矩阵进行本征值分解得到。

现在对 U^L 进行截断，即如下式

$$M_{x'x''} \approx \sum_{j=1}^{D_{cut}} U_{jx'}^L \Lambda_j U_{jx''}^L \quad (2.34)$$

只保留了 U^L 中与 Λ 中最大的 D_{cut} 个本征值对应的本征向量，产生的截断误差为：

$$\varepsilon^L = \frac{\sum_{j=D_{cut}+1}^{end} \Lambda_j}{Tr\Lambda_j} \quad (2.35)$$

至此，有必要分析一下张量维度的变化。初始张量 T 其维度为 $D \times D \times D \times D$ ；在水平方向上进行粗粒化变换后，得到的张量 M 的维度为 $D^2 \times D^2 \times D \times D$ ；进行截断前，进行高阶奇异值分解后，矩阵 U^L 的维度为 $D^2 \times D^2$ ；进行截断之后，矩阵 U^L 的维度为 $D_{cut} \times D^2$ 。使用同样的方法可以计算出截断后的 U^R ，此时产生的截断误差为 ε^R 。

得到截断后的 U^L 和 U^R 后，对张量 M 进行如下变换：

$$T'_{jj',yy'} = \sum_{xx'} U^n_{jx'} M_{xx',yy'} U^{n\dagger}_{j'x'} \quad (2.36)$$

式中 U^n 取值由截断误差 ε^L 和 ε^R 决定，其原理如图 8。如果 $\varepsilon^L \geq \varepsilon^R$ ，则 $U^n = U^L$ ，否则 $U^n = U^R$ [3]。通过上式，就得到了对 M 截断后新的张量 T'，维数为 $D_{cut} \times D_{cut} \times D \times D$ 。



图 2.8 公式(2.36)原理图

以上就是对配分函数的张量网络进行一次粗粒化变换，并且截断的过程，配分函数变为

$$Z = Tr \prod_i T'_{x_i x'_i y_i y'_i} \quad (2.37)$$

式中 i 表示张量 T' 的位置， x 、 x' 、 y 和 y' 表示张其伸出来的键指标。通过以上的变换过程，可以知道张量 T' 的每一个元素是原来张量 T 中部分元素累加起来的，也就是 T' 中元素相比于原来张量的元素是增大的。如果进行多次粗粒化变换，所得到的张量 T' 中的元素值会不断的增加，最终超过计算机的能力。所以每一次粗粒化，并截断后需要进行如下操作：

$$T = T' / \max(T') \quad (2.38)$$

得到新的张量 T，且式中 $\max(T')$ 表示张量 T' 中最大的元素。如果此时系统的大小为 N，配分函数变为

$$Z = [\max(T^n)]^N \text{Tr} \prod_i T_{x_i y_i y'_i} \quad (2.39)$$

这个过程相当于重正化群方法里的重标变换，最终得到和原来一样的张量网络，只是其大小变为原来的一半。

至此，对配分函数的张量网络进行一次 HOTRG 方法的迭代完成了，得到由新的张量网络所表示配分函数，张量的数量由原来的 N 变为 $N/2$ ，张量的维数由迭代前的 $D \times D \times D \times D$ 变为迭代后的 $D_{\text{cut}} \times D_{\text{cut}} \times D \times D$ 。为了保证对称性，对竖直方向进行一次迭代后，接着在水平方向也进行一次相同的迭代。两次迭代以后，每个键指标的维度又相等，和初始情况具有相似性，即变换后张量的维数由 $D \times D \times D \times D$ 变为了 $D_{\text{cut}} \times D_{\text{cut}} \times D_{\text{cut}} \times D_{\text{cut}}$ 。

现在取所计算四角格子上铁磁 ising 模型的大小为 2^{2N} ，其配分函数的张量网络也由 2^{2N} 个张量组成，对其进行 $2N$ 次粗粒化变换，其中一次水平变换接着一次垂直变换，最后系统配分函数的张量网络表示中仅剩下一个张量。取 $T^{(n)}$ 表示第 n 次迭代后所得张量网络上的格点，对应的中间张量为 $T^{(n)}$ ，它们的关系满足 (2.38) 式，初始时张量为 $T^{(0)}$ ，那么迭代过程中，配分函数变化如下：

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \prod_i T_{x_i y_i y'_i}^{(0)} = [\max(T^{(1)})]^{2^{2N-1}} \text{Tr} \prod_i T_{x_i y_i y'_i}^{(1)} \dots \\ &= [\max(T^{(1)})]^{2^{2N-1}} [\max(T^{(2)})]^{2^{2N-2}} \dots [\max(T^{(2N-1)})]^2 \max(T^{(2N)}) \text{Tr} T_{xx'yy'}^{(2N)} \end{aligned} \quad (2.40)$$

只要计算出了每一个 $\max(T^{(n)})$ 和最后的张量，就可以求得系统配分函数的值。

计算出了体系的配分函数，可以用它来计算体系的自由能。根据热力学与统计物理的知识，体系中单位格点的自由能为：

$$-\beta f = \frac{1}{N} \ln Z \quad (2.41)$$

式中 N 表示体系所含的格点数， $\beta=1/kT$ ， k 为玻尔兹曼常数。设所计算四角格子上 ising 模型的格点数取为 2^{2N} ，根据 (2.40) 式中配分函数表达式，有

$$\begin{aligned} -\beta f &= \frac{1}{2^{2N}} \ln \left\{ [\max(T^{(1)})]^{2^{2N-1}} [\max(T^{(2)})]^{2^{2N-2}} \dots [\max(T^{(2N-1)})]^2 \max(T^{(2N)}) \text{Tr} T_{xx'yy'}^{(2N)} \right\} \\ &= \frac{\max(T^{(1)})}{2} + \frac{\max(T^{(2)})}{2^2} + \dots + \frac{\max(T^{(2N-1)})}{2^{2N-1}} + \frac{\max(T^{(2N)})}{2^{2N}} + \frac{\ln(\text{Tr}(T_{xx'yy'}^{(2N)}))}{2^{2N}} \end{aligned} \quad (2.41)$$

式中当 N 取足够大时，等式的最后一部分可以忽略不计。以上就是使用 HOTRG 方法计算四角格子上 ising 模型自由能的原理。计算 $J>0$ 即铁磁情况下体系自由

能-温度关系，如图 2.9 所示。

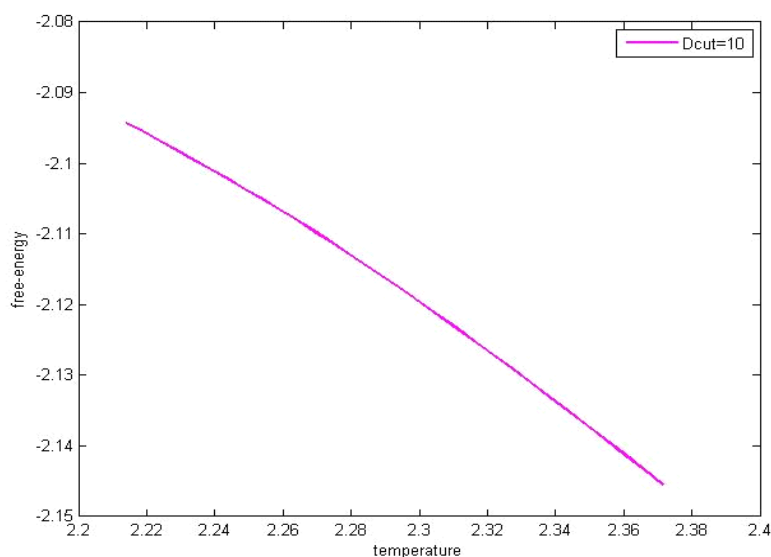


图 2.9.四角格子上铁磁 ising 模型的自由能，体系的大小为 2^{30} ，取 $J/k=1$

然后，对比一下使用 HOTRG 方法计算所得自由能相对于使用蒙特卡罗方法计算出来的自由能之间的误差大小，如图 2.10 所示，可以看到使用 HOTRG 方法，在截断维数为 10 时，其自由能的相对误差在 10^{-6} 的数量级上，这说明 HOTRG 方法的精确度已经比较好了。

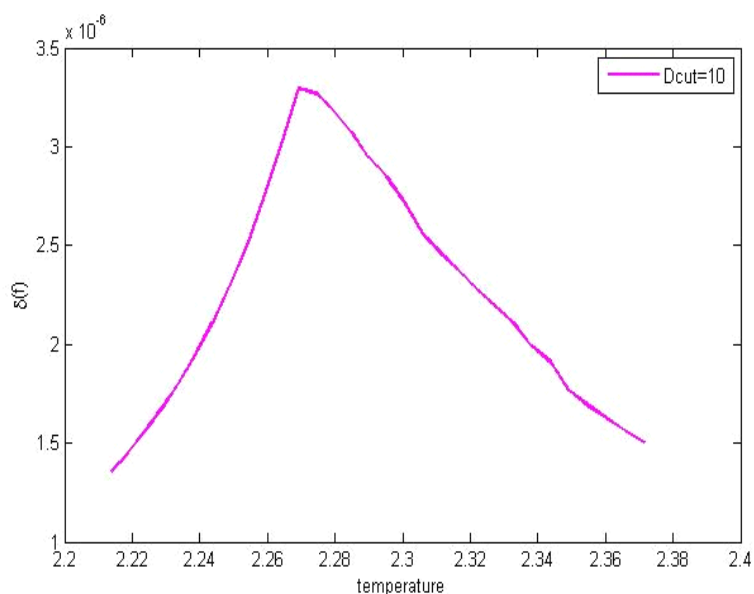


图 2.10.HOTRG 方法计算四角格子铁磁 ising 模型自由能的相对误差 $\delta(f)$ ，取 $J/k=1$ 。

根据前面的讨论，当所取系统足够大的时候，HOTRG 方法的计算误差主要是由于对张量进行截断所引起的，而截断误差会随着 D_{cut} 取值的增大而减小，所以可以通过增大 D_{cut} ，来计算出更好的结果。为了说明这一点，我们对比不同 D_{cut} 取值下，计算所得到的自由能的相对误差，如图 2.11。通过对比，当 D_{cut} 从 10 增加到 24 时，自由能的相对误差减小很明显，在临界点附近下降了一个数量级，而远离临界点的位置则下降了两个数量级，这也说明使用 HOTRG 方法来计算非临界问题，其精确度会很好。

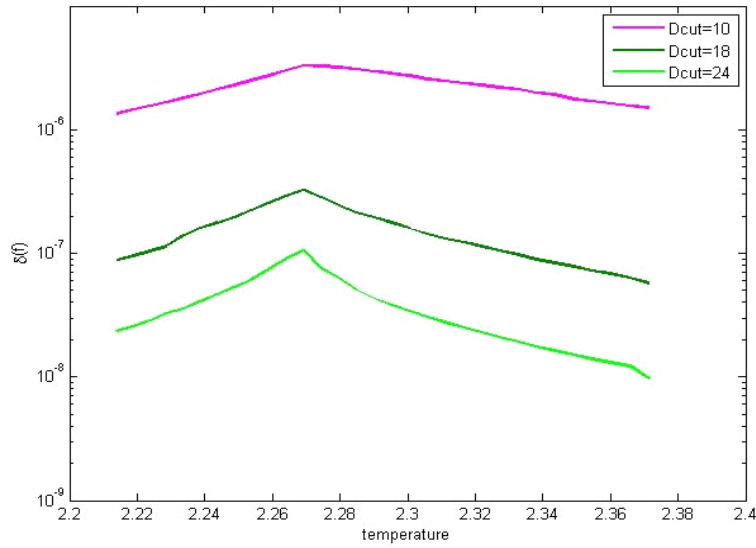


图 2.11 不同 D_{cut} 取值下，HOTRG 方法计算四角格子上铁磁 ising 模型所得的自由能相对误差

理论上 D_{cut} 取值越大越好，但是考虑到计算机的计算能力，需要把 D_{cut} 控制在合适的大小。在本文以后做定量计算时，一般取 $D_{\text{cut}}=24$ ，因为通过图 2.11，在 $D_{\text{cut}}=24$ 时自由能的相对误差已经到 10^{-7} 以下，已经可以接受了。

2.2 HOTRG 方法对四角格子上 potts 模型的计算

在只计近邻相互作用时，Potts 模型的哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) - h \sum_i \delta(\sigma_i, 1) \quad (2.42)$$

其中 J 表示自旋的交换相互作用， $J > 0$ 表示体系为铁磁， $J < 0$ 表示体系为反铁磁，第一个 Σ 只对所有的近邻格点对求和， σ_i 可以取 1、2、...到 q 中的任意值，对于

potts 模型只有取值相同的自旋间才有相互作用， h 表示外场，只对自旋为 1 的格点有作用。配分函数可以写为

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J \delta(\sigma_i, \sigma_j) + h(\delta(\sigma_i, 1) + \delta(\sigma_j, 1))/4} \quad (2.43)$$

类似于 ising 模型，也可以把 potts 模型的配分函数也写为张量网络表示。对于 potts 模型，矩阵 M 的分量表示如下

$$M(\sigma_i, \sigma_j) = e^{\beta J \delta(\sigma_i, \sigma_j) + h(\delta(\sigma_i, 1) + \delta(\sigma_j, 1))/4} \quad (2.44)$$

M 是一个 $q \times q$ 矩阵。当 $q=4$ 时， M 表示如下

$$M = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta h/2} & e^{\beta h/4} & e^{\beta h/4} & e^{\beta h/4} \\ e^{\beta h/4} & e^{\beta J} & 0 & 0 \\ e^{\beta h/4} & 0 & e^{\beta J} & 0 \\ e^{\beta h/4} & 0 & 0 & e^{\beta J} \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

根据(2.7)~(2.15)式，对 M 进行本征值分解，计算出张量 T ，进而把配分函数写成张量网络表示，然后同样使用 HOTRG 方法进行迭代，就可以计算出配分函数的值。

2.2.1 四角格子上 potts 模型内能的计算

单位格点上的内能定义为：

$$E = \frac{1}{N} \frac{\sum H e^{-\beta H}}{Z} = \frac{\sum \frac{H}{N} e^{-\beta H}}{Z} = \frac{2 \sum H_{ij} e^{-\beta H}}{Z} \quad (2.46)$$

式中 Σ 表示对所有可能的自旋取值求和，且

$$H_{ij} = \beta J \delta(\sigma_i, \sigma_j) + h(\delta(\sigma_i, 1) + \delta(\sigma_j, 1))/4 \quad (2.47)$$

表示格点 i 和 j 的相互作用能，等式(2.46)中之所以存在常数 2，是因为每个格点有四个近邻格点，就有四个相互作用能，但是每个相互作用能量又被两个格点平分，所以每个格点上的能量相当于格点相互作用能的两倍。

不妨取 i, j 格点为特定的相邻 1 和 2 两点。那么单位格点的内能可以表示为

$$E = \frac{2 \sum H_{12} e^{-\beta H}}{Z} = \frac{2 \sum H_{12} \prod_{\langle ij \rangle} e^{-\beta H_{ij}}}{\sum \prod_{\langle ij \rangle} e^{-\beta H_{ij}}} = \frac{2 \sum \prod_{\langle ij \rangle \neq \langle 12 \rangle} e^{-\beta H_{ij}} (H_{12} e^{-\beta H_{12}})}{\sum \prod_{\langle ij \rangle} e^{-\beta H_{ij}}} \quad (2.48)$$

根据前面介绍的张量网络表示，我们同样可以把内能写成张量网络表示。上式中的分母是配分函数，满足

$$Z = \text{Tr} \prod_i T_{x_i, y_i, y_i'} \quad (2.49)$$

但对于分子部分，因为在格点 1 和 2 之间存在一个能量权重，需要在格点 2 上定义一个能量杂质张量 $\mathcal{T}e$ ，下面介绍如何定义 $\mathcal{T}e$ 。

将分子中与 1 和 2 有关的部分提取出来，为

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2} H_{12} e^{-\beta H_{12}} = \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \mathcal{M}e(\sigma_1, \sigma_2) \quad (2.50)$$

式中矩阵 $\mathcal{M}e$ 的分量满足：

$$\mathcal{M}e(\sigma_1, \sigma_2) = H_{12} e^{-\beta H_{12}} \quad (2.51)$$

当 $q=4$ 时，可以得到 $\mathcal{M}e$ 表示如下

$$\mathcal{M}e = \begin{pmatrix} -(J + \frac{h}{2})e^{\beta J + \beta h/2} & -\frac{1}{h}e^{\beta h/4} & -\frac{1}{h}e^{\beta h/4} & -\frac{1}{h}e^{\beta h/4} \\ -\frac{1}{h}e^{\beta h/4} & -Je^{\beta J} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{h}e^{\beta h/4} & 0 & -Je^{\beta J} & 0 \\ -\frac{1}{h}e^{\beta h/4} & 0 & 0 & -Je^{\beta J} \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

那么分子部分可以写为

$$\sum_{\langle ij \rangle \neq \langle 12 \rangle} \prod_{\langle ij \rangle \neq \langle 12 \rangle} e^{-\beta H_{ij}} (H_{12} e^{-\beta H_{12}}) = \sum_{\langle ij \rangle \neq \langle 12 \rangle} \prod_{\langle ij \rangle \neq \langle 12 \rangle} \mathcal{M}(\sigma_i, \sigma_j) \mathcal{M}e(\sigma_1, \sigma_2) \quad (2.53)$$

通过前面对配分函数张量网络化的讨论，我们知道除去 1, 2 格点其他格点都可以写成张量形式，则有：

$$\begin{aligned} & \sum_{\langle ij \rangle \neq \langle 12 \rangle} \prod_{\langle ij \rangle \neq \langle 12 \rangle} \mathcal{M}(\sigma_i, \sigma_j) \mathcal{M}e(\sigma_1, \sigma_2) \\ &= \text{Tr} \prod_{i \neq 1, 2} T_{x_i, y_i, y_i'} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \mathcal{O}(\sigma_1, x_1) \mathcal{O}(\sigma_1, x_1') \mathcal{O}(\sigma_1, y_1) \mathcal{O}(\sigma_2, x_2) \mathcal{O}(\sigma_2, x_2') \mathcal{O}(\sigma_2, y_2') \mathcal{M}e(\sigma_1, \sigma_2) \end{aligned} \quad (2.54)$$

式中利用了等式

$$\mathcal{M}(\sigma_i, \sigma_j) = \sum_n U(\sigma_i, n) V_n U(\sigma_j, n)$$

$$\mathcal{O}(\sigma_i, x) = U(\sigma_i, n) V_x^{1/2}$$

$$\mathcal{M}(\sigma_i, \sigma_j) = \sum_x \mathcal{O}(\sigma_i, x) \mathcal{O}(\sigma_j, x)$$

如果令

$$\mathcal{T}e_{x_2, x_2', z_2} = \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \mathcal{M}e(\sigma_1, \sigma_2) \mathcal{O}(\sigma_1, z) \mathcal{O}(\sigma_2, x_2) \mathcal{O}(\sigma_2, x_2') U(\sigma_1, z) V_z^{-1/2} \quad (2.55)$$

且利用等式

$$1 = \sum_z U(\sigma_1, z) U(\sigma_1, z) V_z^{1/2} V_z^{-1/2}$$

$$O(\sigma_1, z) = U(\sigma_1, z) V_z^{1/2}$$

$$T_{x_1, x_1', y_1, z} = \sum_{\sigma_1} O(\sigma_1, x_1) O(\sigma_1, x_1') O(\sigma_1, y_1) O(\sigma_1, z)$$

则(2.54)式变为

$$\sum_{\langle ij \rangle \neq \langle 12 \rangle} \prod M(\sigma_i, \sigma_j) Me(\sigma_1, \sigma_2) = \text{Tr} \prod_{i \neq 2} T_{x_i, x_i', y_i, z_i} T e_{x_2, x_2', z_2} \quad (2.56)$$

也就是分子也可以写成张量网络表示，与配分函数唯一的不同的是，在格点 2 的位置，其张量为 Te ，表示如图 2.12。

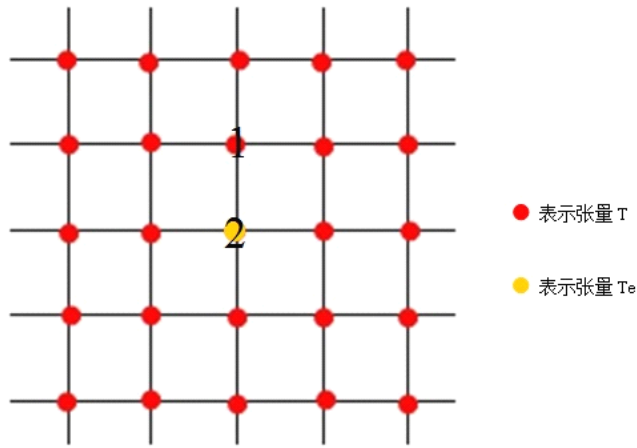


图 2.12 公式(14)网格示意图

单位格点的内能为

$$E = \frac{2 \text{Tr} \prod_{i \neq 2} T_{x_i, x_i', y_i, z_i} T e_{x_2, x_2', z_2}}{\text{Tr} \prod_i T_{x_i, x_i', y_i, z_i}} \quad (2.57)$$

式中 Tr 表示对所有的键指标求和。上式中分子、分母都可以通过 HOTRG 方法迭代得出值，只是对分子部分每迭代一次，由能量杂质张量 Te 进行粗粒化所得到的张量为新的能量杂质张量，最后可以计算出四角格子上 potts 模型的单位格点上的内能大小。

现在利用上面介绍的方法来计算不加外场时四角格子上铁磁 potts 模型的内能。取 q 分别为 2、3、4、5 和 6，得到它们的内能-温度曲线如图 2.13。根据对铁磁 potts 模型的大量研究，我们知道二维情况下， $q \leq 4$ ，其相变是连续相变，也就说内能曲线是连续的； $q > 4$ 时，其相变为一相变，在相变点内能不连续，

存在跃变。对比图 2.13 中的 q 不同取值时的内能曲线，可以发现在 $q=2、3$ 时能量曲线表现出很好的连续性， $q=5、6$ 时，内能曲线会有明显的跃变，这符合我们已知的实验和理论结果。但是 $q=4$ 时，需要进一步讨论的，从图中很难知道其是连续还是非连续的，其处在二维铁磁 potts 从连续相变到一级相变的临界点上，需要很小心地研究，这个在之后还会讨论。

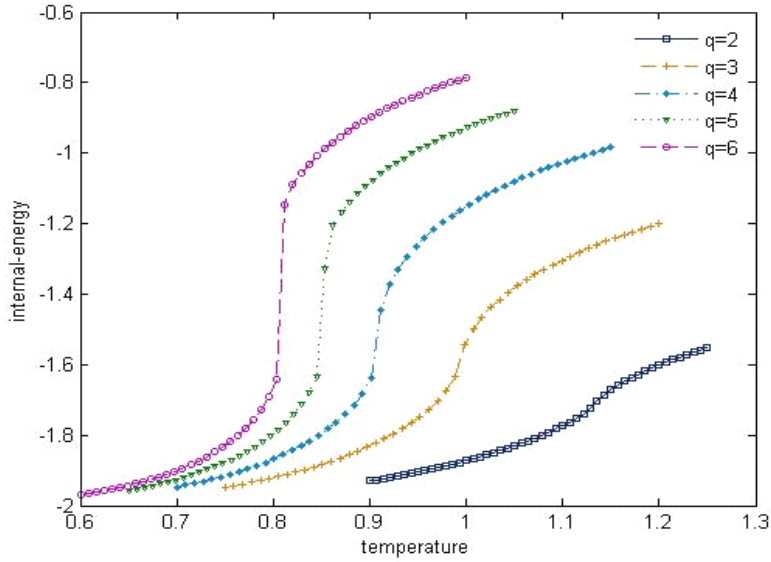


图 2.13 使用 HOTRG 方法计算所得四角格子上铁磁 potts 模型的内能-温度曲线

2.2.2 四角格子上铁磁 potts 模型比热的计算

根据热力学知识，比热满足

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} \quad (2.58)$$

所以计算出了单位格点上的内能，我们就可以用差分的方法来计算其比热。

下面我们使用 HOTRG 方法计算出不同 q 值时，四角格子上铁磁 potts 模型的比热温度曲线，如图 2.14，依旧不加外场。通过图 2.14，可以看到不同 q 值，其比热都存在一个尖锐峰。根据相变理论，无论是一级或二级相变，其比热在相变点都会趋近与无穷大，原因是比热是能量涨落的表现，在相变点时，关联长不为零，涨落存在，所以其比热也是发散的。因为 q 取 2~6，二维铁磁 potts 模型是会发生的相变，所以图 2.14 中才会出现比热峰，而且会随着温度越来越靠近相变点，发散得越厉害。同时在图 2.14 中，可以看出 q 的取值越大，其比热发散得也越厉害，这和 q 取较大时是一级相变，而取较小是连续相变是相符的。

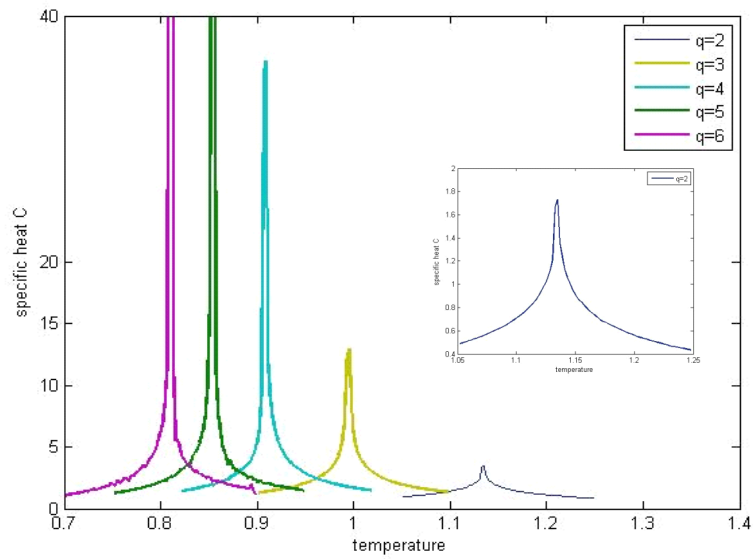


图 2.14 HOTRG 方法所得的四角格子上铁磁 potts 模型不同 q 取值的比热曲线，小图为 $q=2$ 放大

此外还可以粗略的估计一下四角格子上铁磁 potts 模型的临界温度。虽然在临界点比热是无穷大的，但可近似的认为比热曲线取最大值时的温度就临界温度。四角格子上铁磁 potts 模型临界温度的严格解为^[7]：

$$T_c = \frac{J}{k \ln(1 + q^{1/2})} \quad (2.59)$$

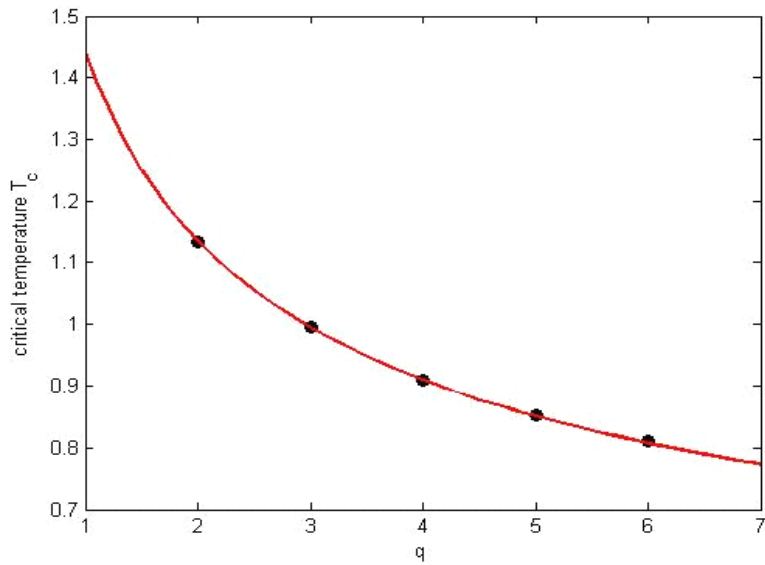


图 2.15 HOTRG 方法所得的四角格子上不同 q 值的临界温度，红色曲线为理论值

在具体计算中取 $J/k=1$ 。根据(2.59),可以作出不同 q 对应的临界温度 HOTRG 方法计算值和理论结果的对比图,如图 2.15,可以看出 HOTRG 计算的临界温度和理论值符合地比较好,这里只是定性的分析一下,后面还会具体计算 $q=4$ 时的临界温度。

2.2.3 四角格子上铁磁 potts 模型磁化强度(Magnetization)的计算

单位格点上的磁化强度 M 满足

$$M = -\frac{\partial f}{\partial h} \quad (2.60)$$

这里考虑的是存在外场的情况。事实上无外场的情况下,当温度低于临界温度时,对于热力学极限下的体系,存在自发对称性破缺,会产生自发磁化强度。为了更一般的考虑,我们不通过(2.60)式来计算磁化强度,而是通过如下式子:

$$M = \frac{\sum \delta(\sigma_2, 1) e^{-\beta H}}{Z} \quad (2.61)$$

式中是求位点 2 上的平均磁化强度,且只有当其自旋取 1 时才有磁化强度为 1,其他情况为 0。和计算内能时相似,需要定义一个磁化强度杂质张量 T_m ,把(2.61)式左边的分子部分写成张量网络表示,然后通过 HOTRG 方法迭代后算出单位格点的磁化强度。因为计算的体系并没有达到热力学极限,所以要通过加一个很小的磁场来使系统发生对称破缺,才能产生一个确定的磁化强度取值。

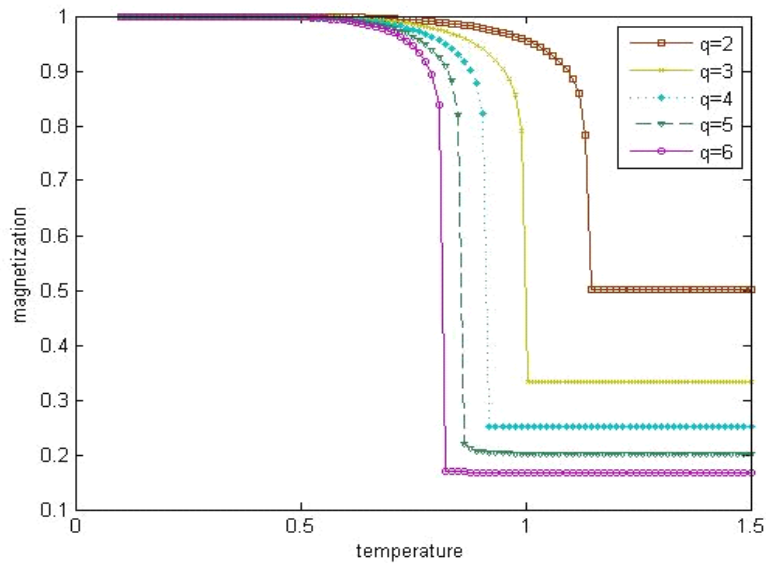


图 16.HOTRG 方法计算所得四角格子上铁磁 potts 模型的磁化强度曲线

图 2.16 是我们计算 q 取不同值时四角格子上铁磁 potts 模型的磁化强度曲线, 图中磁化强度存在一个高温和低温极限, 原因是温度趋近与 0 时, 铁磁体系会趋近与有序, 即所有的自旋都取 1, 则此时磁化强度为 1; 在高温情况下, 热无序占主导地位, 自旋取 1 的概率为 $1/q$, 所以高温时磁化强度趋近于 $1/q$ 。在这里有一点还必须说明, 对图 2.16 中所得磁化强度曲线, q 取值越大时, 提供的外场值也越大, 这是因为 q 越大, 破缺的可能方式就更多, 为了使得其破缺到自旋取 1 的难度就越大, 所以需要的外场值也越大。

在没有外场时, 磁化强度突然下降到最小值时的温度就是相变温度。因为这里取的外场很小, 也可以近似的认为, 磁化强度下降到最小值时的温度就是相变温度。图 2.17 是通过以上讨论的方法所得相变温度与无外场时的严格结果对比图, 可以看出计算值和理论吻合的没有前面通过比热峰值确定相变温度的方法好, 即偏差还是很明显, 这说明在加外场的情况下, 临界温度和没有加外场的情况是不一样的, 这是因为, 在重正化群理论中, 温度和外场 h 都是相关变量, 即固定点是由温度和外场共同决定的, 不同的外场下临界温度也是不一样的。同时在图 2.17 中, 还可以看到当 q 取值增大时, 其偏差也越大, 这可能是由计算时误差太大引起的, 但更可能是因为随着 q 增大, 外场增大, 临界温度偏离无外场的情况也越明显。

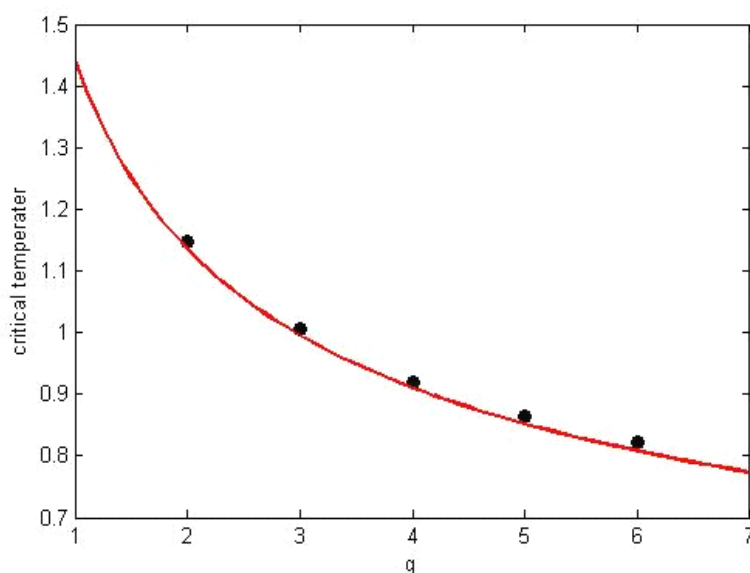


图 17.通过确定磁化强度最小值所计算出来的不同 q 值对应的临界温度, 红色曲线为无外场时的理论解

第三章 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型的计算

上一章,向大家介绍了 HOTRG 方法具体的计算原理,同时也使用了 HOTRG 方法具体计算了四角格子上铁磁 ising 模型和不同 q 值的铁磁 potts 模型。通过对 ising 模型的计算误差分析,能够知道 HOTRG 方法得出来的数值结果具有很好的精确性,而且随着截断维数 D_{cut} 的增加,其精确度也会提高。对不同 q 值的 potts 模型的定性分析,我们可以看到四角格子上的铁磁 potts 模型是存在相变的,而且在 q 比较大时,为一级相变,而当 q 较小时为连续相变,因此,能够判断必然存在一个临界的 q 值。potts 模型的理论告诉我们这个临界的 q 等于 4,下面将通过 HOTRG 方法计算四角格子上 $q=4$ 的铁磁模型来说明这一点,同时还将尝试精确计算 $q=4$ 时的临界温度和临界指数 α 。

3.1 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型热学性质的计算

在这里直接利用前面介绍的 HOTRG 方法对系统进行计算,且此时不加外场。为了精确地计算出 $q=4$ 时体系的热力学性质,取 $D_{\text{cut}}=24$ 。图 3.1 是体系的内能曲线,图 3.2 是比热曲线。通过图 3.1,可以定性地看到系统的内能随着温度的变化呈连续分布,这和 $q=4$ 是连续相变的事实是符合的。通过比热的计算,可以确定系统的相变温度为 $T_c=0.909988\pm 0.000122$ 。这里还有一个很有意思的现象,当我们在相变温度左右对称地取温度区间,计算出内能和比热曲线时,无论区间大小,它们的分布是相似的,这类似与物理学中的自相似现象,在重正化群理论中,随着标度的变换,系统也是自相似的,这是一类很奇妙的物理现象。

求出比热后,可以根据比热的值计算临界指数 α ,由相变知识有

$$C \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\alpha} \quad (3.1)$$

对上式两边取对数,有

$$\ln C \sim -\alpha \ln \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| \quad (3.2)$$

由式(3.2),可以看到 $\ln C$ 和 $\ln|(T-T_c)/T_c|$ 呈线性关系,通过线性拟合,如图 3.3,可以求出 $\alpha=0.6223$ 。图 3.3 中拟合的直线并没有很好的和计算值吻合,这主要是

因为在临界点附近，存在涨落，计算的误差很大，很难做到非常精确，这也是所有数值方法在计算相变问题时遇到的共同问题，在本文中，我们默认这样的误差是可以接受的，如果需要进一步提高精确度，可以尝试加大 D_{cut} 。

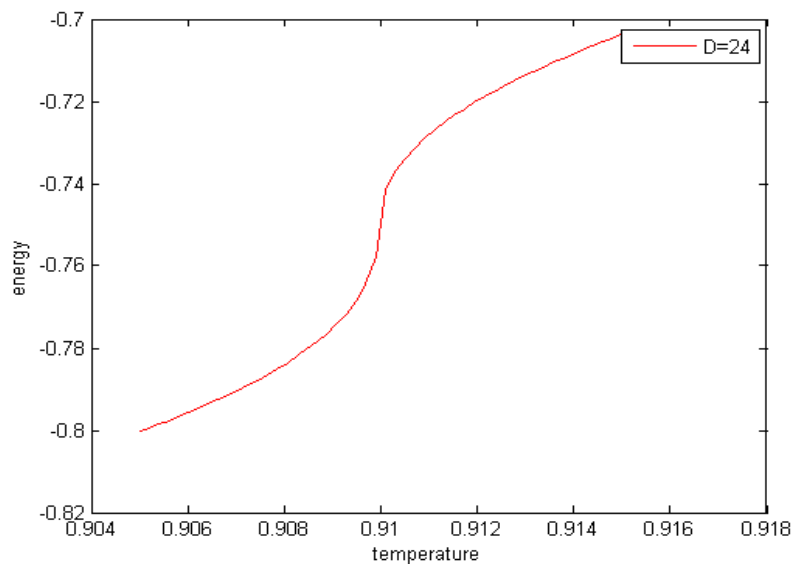


图 3.1 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型的内能

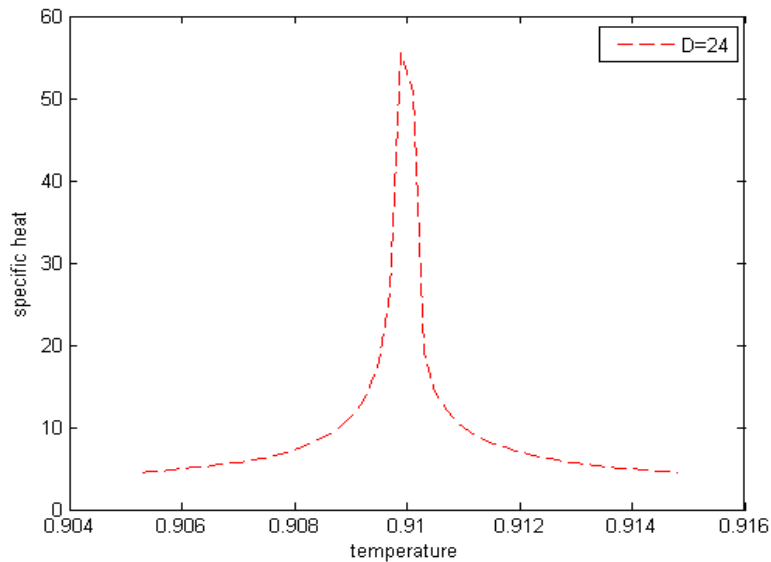


图 3.2 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型的比热

四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型相变是存在严格解的，其临界温度的理论值为 $1/\ln 3$ ，临界指数 α 的理论值为 $2/3$ ，可以得出由 HOTRG 方法计算出来的临界温度的相对误差在 10^{-4} 的数量级，而临界指数 α 的相对误差在 10^{-2} 的数量级，这样的结果还是比精确的，临界指数的误差之所以那么大，除了热涨落，还因为比

热是热力学函数的二阶导，其求导过程中误差会被放大，从而导致计算的精确度下降。

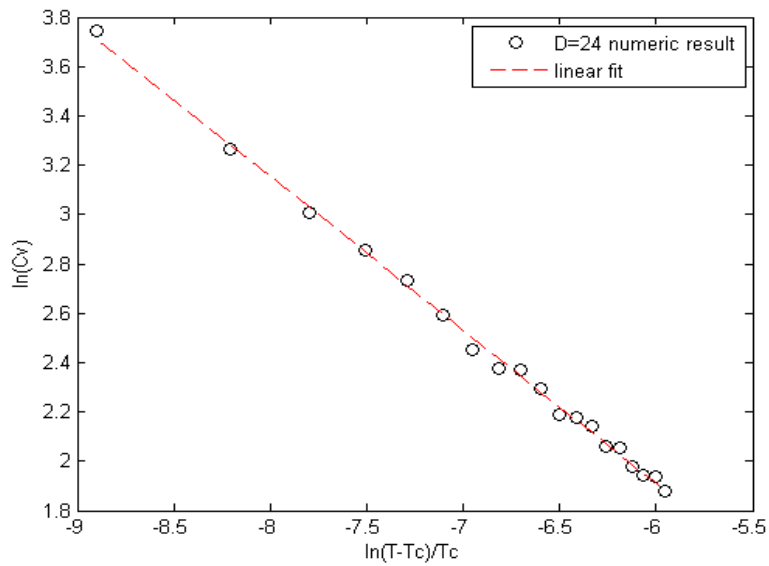


图 3.3 $\ln C_v$ 和 $\ln(T-T_c)/T_c$ 线性拟合关系图，黑色小圆圈为计算值，红色直线为拟合值

3.2 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型磁学性质的计算

磁化强度 M 在研究铁磁系统相变时，可以作为序参量，通过判断序参量的变化，可以知道铁磁系统的相变是一级相变还是连续的。上一章中，我们计算了不同 q 值的磁化强度曲线，但是根据其对比图，可以看出 q 较大时序参量趋向于在临界点有个跃变，即为一级相变，而 q 很小的时候序参量在临界点趋向于连续变化，即为连续相变，但是我们并不能判断 $q=4$ 就是其临界值。

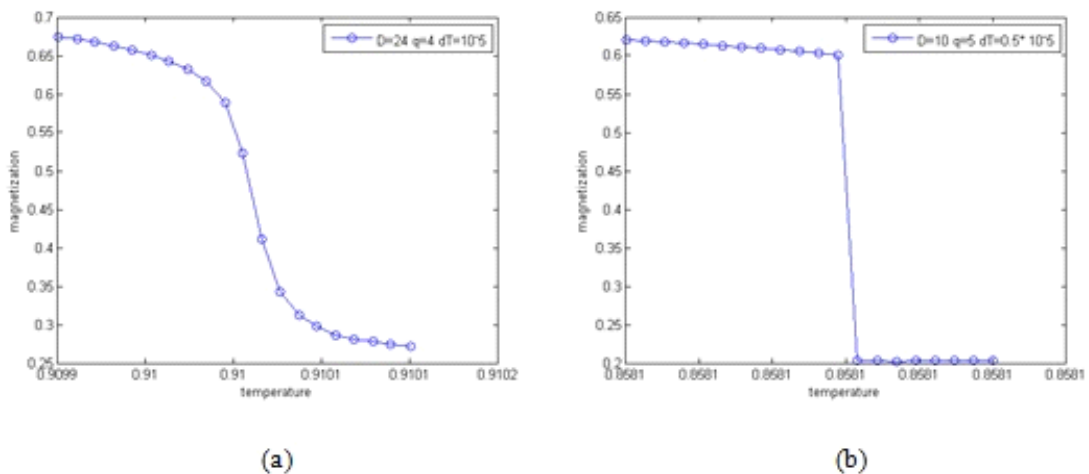


图 3.4 (a) 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型的磁化强度曲线；(b) $q=5$ 磁化强度曲线

现在重新计算一组 $q=4, 5$ 四角格子上铁磁 potts 模型的磁化强度曲线，这里主要是把温度区间缩小到了临界点附近，结果如图 3.4，可以明显的看出 $q=4$ 时磁化强度是随温度升高连续下降到最小值的，而 $q=5$ 时则有一个比较大的跃变，因此可以判断 $q=4$ 是四角格子上铁磁 potts 模型由连续相变转变为一级相变的临界 q 值。

计算出磁化强度后，接下来计算 $q=4$ 时体系的磁化率 χ 。磁化率满足：

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} \quad (3.3)$$

式中 M 为磁化强度， h 为外场。根据(3.3)，我们可以通过对不同磁场下磁化强度求差分的方法来计算出磁化率。这里需要计算两组数值，我们取初始的外场为 10^{-7} ，计算出第一组磁化强度，然后取 $\Delta h=10^{-4}$ ，计算出第二组磁化强度，对两组数据做差值，再除以 Δh ，就得到了对应的磁化率，即如下式：

$$\chi(T) = \frac{M(h + \Delta h, T) - M(h, T)}{\Delta h} \quad (3.4)$$

通过上面的讨论，我们算出磁化率的曲线如图 3.5，可以看到磁化率曲线会有一个很大的峰值，这和磁化率曲线的在相变点是发散的性质是相符的，把磁化率曲线的峰值所对应的温度近似取作临界温度，可以求得 $T_c=0.910187 \pm 0.000122$ ，这个结果和无外场时理论的临界温度 $1/\ln 3$ 是非常接近的，误差在 10^{-5} 的数量级。

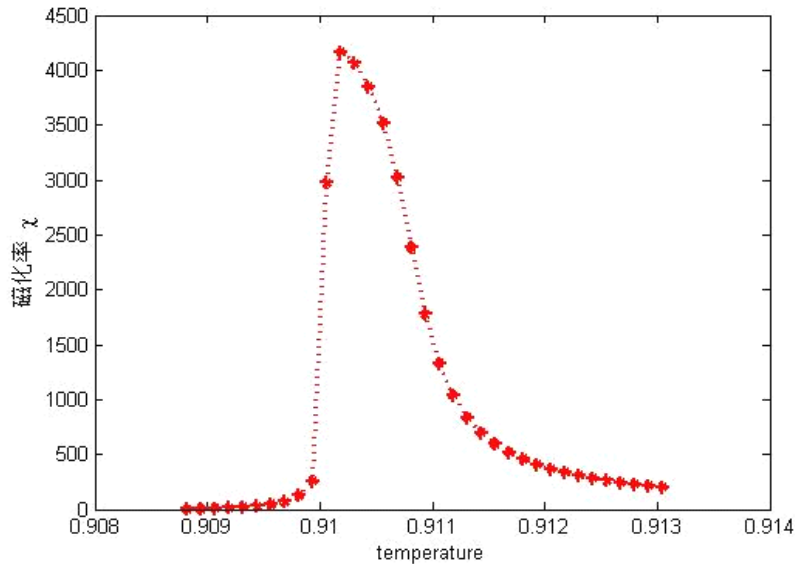


图 3.5 四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型的磁化率

3.4 四角格子上 $q=4$ 反铁磁 potts 模型的计算

最后,使用 HOTRG 方法计算一下四角格子上 $q=4$ 反铁磁 potts 模型的特性,并做定性的分析。图 3.6 是四角格子上 $q=4$ 反铁磁 potts 的内能曲线,可以看出反铁磁情况下内能随着温度连续变化;图 3.7 是其对应的比热曲线,比热会有一个峰值,但是却不发散,而是连续的变化,这可能说明了对于四角格子上的铁磁 potts 模型 $q=4$ 时不存在相变,之所会存在峰值是因为在低温情况下,会存在局域反铁磁有序。这里我们并没有计算其磁化强度,因为对于反铁磁模型要使其产生对称性破缺必须加一个交错磁场,就不考虑了。

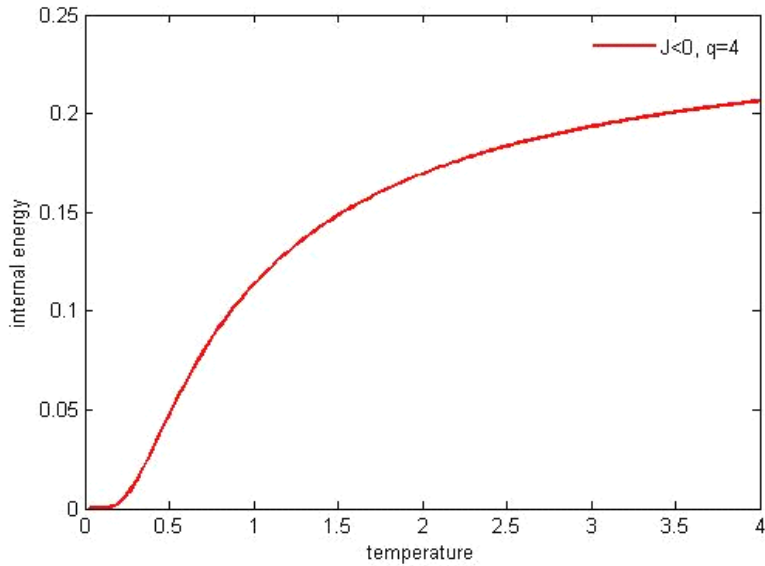


图 3.6 四角格子上 $q=4$ 反铁磁 potts 模型的内能曲线

我们还可以计算出系统的单位格点的熵,因为熵 S 满足:

$$S = \frac{-\partial f}{\partial T} \quad (3.5)$$

通过 HOTRG 方法计算出体系的自由能之后,就可以算出体系的熵,如图 3.8,高温下系统的熵会趋向与一个稳定值,我们计算得到其大概在 1.37 左右,理论上,高温时,每个格点都有 4 种可能取值,那么单位格点的熵的取值为 $\ln 4 = 1.3863$,所以我们的计算结果是准确的。低温时图 3.8 中显示熵不趋近于零,说明在零温时系统不是完全有序。通过对四角格子上 $q=4$ 反铁磁体系的计算,我们知道 HOTRG 也可以被用来研究反铁磁系统。

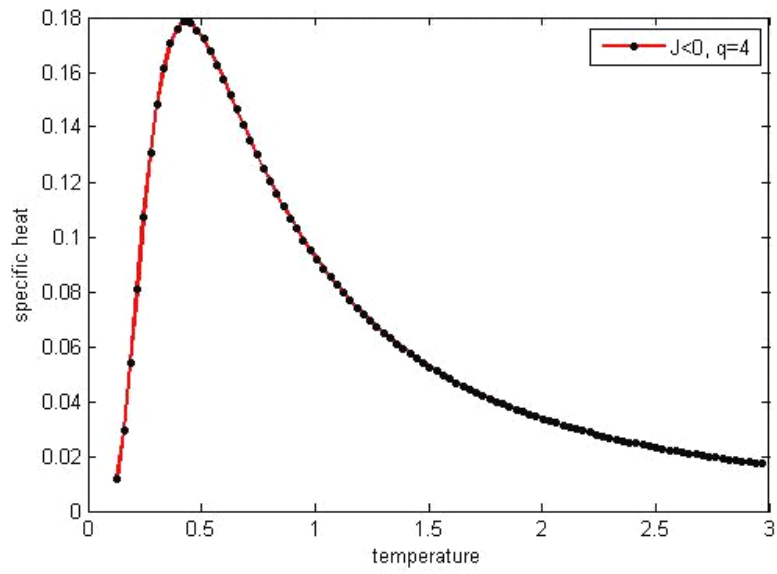


图 3.7 四角格子上 $q=4$ 反铁磁 potts 模型的比热曲线

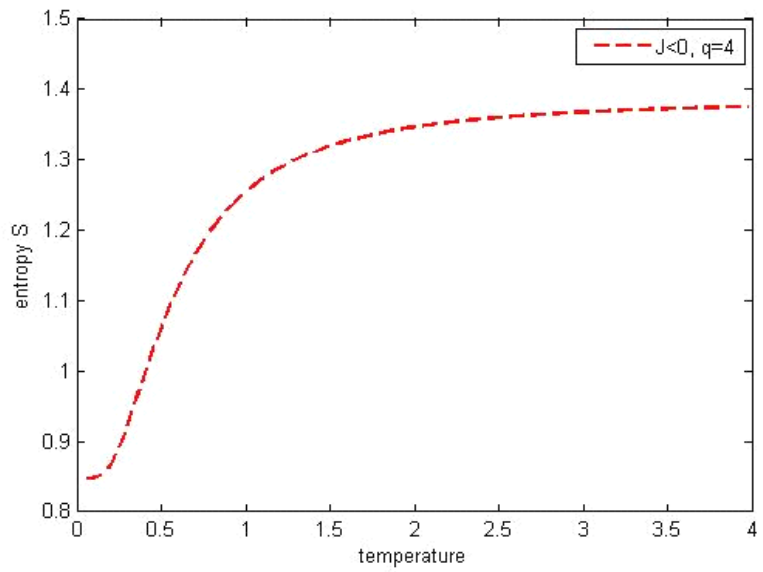


图 3.8 四角格子上 $q=4$ 反铁磁 potts 模型单位格点的熵

第四章 总结

本文开始给大家概述性地讲了相变问题研究的发展，两种经典统计模型，以及张量重正化群方法的发展。主要是为让大家看到物理是一个发展的过程，对相变的研究一直在深入；同时为了解释复杂的相变问题，需要先把简单的模型求解清楚，经典统计模型对相变的研究是有重要意义，当然其本身具有的一些奇特的性质也值得我们去探索；现在，数值方法越来越受到大家的重视，因为许多解析方法无法处理的问题，我们都可以借助与数值的方法来求解。而张量重正化群方法就是一个很好的例子，可以用来求解量子模型还有经典统计模型，在本文中最感兴趣的是如何利用其来研究经典统计模型。

接下来，以 ising 模型和 potts 模型为例，讲解如何使用 HOTRG 方法计算经典统计模型的配分函数、内能、比热以及磁化强度。HOTRG 方法分为两步，一是要把体系的配分函数写成张量网络表示，二为对张量进行缩并，而缩并的过程并不是单纯的进行粗粒化，要进行截断，截断后张量的维数保持在一个有限值，但同时也产生了截断误差，为了是优化截断的过程，HOTRG 方法使用了高阶奇异值分解的方法，这样既能提高计算效率，同时还极大地减小了截断误差。通过使用 HOTRG 方法计算 ising 模型的自由能相对误差，向大家证明了 HOTRG 方法计算的高精确性，当 D_{cut} 取到 24 时，临界点的自由能误差在 10^{-7} 以下，而远离临界点的位置则在 10^{-8} 之下，这还说明计算非临界问题时，HOTRG 方法更加优越。而对四角格子上铁磁 potts 模型，不同 q 值的计算，证明了不同 q 值下相变存在，而且 q 取较大值时，为一级相变，取较小值时为连续相变；还尝试了两种不同的确定临界温度的方法，即根据比热的峰值确定临界点，以及在外场很小时找磁化强度突然下降到最小值的点来确定临界温度，通过和严格的解对比，我们发现前一种方法更准确，同时也某种程度上说明了外场越大，临界温度偏离无外场的情况就越明显。

然后，给大家详细计算了四角格子上 $q=4$ 铁磁 potts 模型的内能、比热、临界温度、临界指数、磁化强度和磁化率，证明了 $q=4$ 是四角格子铁磁 potts 模型有一级相变过度到连续相变的临界值；计算得到了其相变温度为 $T_c=0.909988\pm 0.000122$ ，临界指数为 $\alpha=0.6223$ ；还可以看到在相变点附近，比热、磁化率有一个尖锐的峰值，而且距离相变点越近，其峰值越大，说明了相变点它

们都是发散的。最后还计算了 $q=4$ 的四角格子上的反铁磁 potts 模型，可以定性地知道，这种情况并没有相变，其比热曲线虽然会有一个峰值，但是在峰值处是连续变化的，并没有发散，这说明了低温时该系统会有局部有序；还有高温下系统完全无序，熵趋近于 $\ln 4$ ，这在我们算出来的熵曲线里可以很好地反应出来。

对相变的研究，在不断发展和进步，还有更多的奥妙等着我们去探索。除了经典的统计模型，在现在这个量子物理飞速发展的时代，量子模型更是当前我们所关心的对象。在临界点，其实是一个强关联问题，要彻底解释相变问题，其实就是要把强关联问题给解决，这是非常具有挑战性的工作。不仅仅理论方面还有很多工作需要我们去完成，对数值计算方法的进一步研究也同样具有趣味，从 DMRG 的诞生，到 TRG 的提出，以及张量重正化群方法的不断完善，都向我们展示了没有一种方法是完美的，需要不断地改进；同时可以看到，要发展出更好的方法，很有必要借鉴其他领域前沿性的知识，如在 HOTRG 方法中就是借鉴了数学上的高阶奇异值分解。这一切都告诉我们，今后的路还很漫长，还有很多科学上奥秘和乐趣，等着我们去探索和发现。

参考文献

- [1] K.G.Wilson.The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem[J]. Rev.Mod.Phys. ,1975,47: 773.
- [2] Michael Levin and Cody P.Nave.Tensor Renormalization Group Approach to Two-Dimensional Classical Lattice Models[J]. Phys.Rev.Lett.,2009,99:120601(1-4).
- [3] Z.Y.Xie,H.C.Jiang,Q.N.Chen,Z.Y.Weng,and T.Xiang .Second Renormalization of Tensor- Network States [J]. Phys.Rev.Lett.,2009,103: 160601(1-4).
- [4] Z.Y.Xie,J.Chen,J.W.Zhu,L.P.Yang,T.Xiang. Coarse Graining Tensor Renormalization by the Higher-order Singular Value Decomposition.2012, arXiv:1201.114v2.
- [5] 于渌、郝柏林.相变和临界现象[M].第二版.北京: 科学出版社, 1992: 1-113.
- [6] L.Onsager.Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition [J].Phys. Rev. ,1944,65:117 .
- [7] Rodney J.Baxter. Potts Model at the Critical Temperature [J]. J.Phys.C:Solid State Phys.,1973,6:445-447.
- [8] D.Kim and R.I.Joseph.Exact Transition Temperature of the Potts Model with q State per site for Triangular and Honeycomb Lattice[J].J.Phys.C:Solid State Phys.,1974,7:167-169.
- [9] L.Mittag and M.J.Stephen.Dual Transition in Many-Component Ising Models[J].Journal of Mathematical Physics,1970,12(3):441-450.
- [10] F.Y.Wu.The Potts Model[J].Review of Modern Physics,1982,54(1): 235-268.
- [11] S.R.White.Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Group[J]. Phys..Rev.Lett.,1992,69(19):2863.
- [12] H.H.Zhao,Z.Y.Xie,Q.N.Chen,Z.C.Wei,J.W.Cai,and T.Xiang.Renormalization of Tensor- network States [J].Phys.Rev.B,2010,81: 174411(1-17).
- [13] Lieven de Lathauwer, Bart de Moor, and Joos Vandewalls. A Multilinear Singular Value Decomposition[J]. SIAM J.Matrix Anal.Appl.,21(4):1253.

致谢

非常感谢向涛老师在完成毕设期间给予的指导和帮助；对于谢志远师兄在学习张量重正化群方法时给予耐心教导，我同样非常感谢；感谢陈靖师兄，陈巧妮师姐，在遇到问题时能够帮助细心讲解；还要感谢课题组其他师兄在学习和生活上的帮助；感谢黄杰同学在完成毕设期间和我的讨论，黄杰同学细心钻研、勤奋刻苦的精神让我受益匪浅；还要感谢中国科学院理论物理研究所为我完成毕业设计所提供的优良学习环境，以及王丽老师在生活上的一些帮助和照顾。

还要感谢武汉大学物理科学与技术学院的培养，学院老师们的辛勤教学。大学本科的四年学习，让我对物理有了更深入地学习和理解。还应该感谢大学期间所有的同学和朋友，是你们让我的生活变得丰富和快乐，让我能够在枯燥的物理学习中得到放松。最后感谢我的父母，感谢你们一直以来对我学习上的支持，生活上的关爱，是你们给了我坚持学习物理的勇气和决心。