

# 角转移矩阵重整化群方法及其应用\*

何春山

(中山大学物理科学与工程技术学院, 广东 广州 510275)

**摘要:** 相变和临界现象在自然界普遍存在, 研究的主要手段是重整化群理论。随着计算机技术的发展, 基于重整化群思想的数值模拟也得到了广泛的应用, 它能够精确地计算系统处于临界状态时的物理参数。该文采用角转移矩阵重整化群方法计算了无外场二维伊辛模型的临界耦合常数, 得到了准确度为  $10^{-5}$  的数值计算结果。

**关键词:** 角转移矩阵重整化群, 二维伊辛模型, 临界点

**中图分类号:** O414.21 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2011) 06-0030-05

## Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method and it's Application

HE Chunshan

(School of Physics and Engineering, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510275, China)

**Abstract:** Renormalization group (RG) theory is a very important theory to research phase transition and critical phenomenon. With the development of the computing technology, numerical simulation methods based on the RG are used to compute the physical parameters. The corner transfer matrix renormalization group (CTMRG) method can get high precision results even if the physical system is in the critical status. CTMRG method is used to find the critical point of the two-dimensional Ising model. The numerical critical coupling constant is consistent with the exact result with good precision ( $10^{-5}$ ).

**Key words:** corner transfer matrix renormalization group, two-dimensional Ising model, critical point

重整化群理论的出现, 翻开了现代临界现象研究新的一页。这种思想应用到数值计算中, 业已取得了丰硕的成果。威尔逊用数值计算重整化方法成功求解了 Kondo 问题<sup>[1]</sup>, 但这种方法应用到实空间分块组成的量子格点问题上时, 由于处理不好块的边界问题而失败, 边界错误使得大多数类似问题都未能得到定量的准确结果。White 在重整化群理论的基础上提出了一种精确数值重整化群方法——密度矩阵重整化群方法 (DMRG)<sup>[2-4]</sup>。它通过相对小规模数值计算来处理大规模的系统, 这种方法被广泛应用到许多一维量子格点模型的计算中。

1968 年由 Baxter<sup>[5]</sup> 创建的角转移矩阵 (CTM) 方法是 Kramers-Wannier 近似的延伸<sup>[6-7]</sup>, 是一种

处理二维经典格点系统的变分方法。Baxter 角转移矩阵方法更适合作数值计算, 在临界点附近可以快速收敛, 因为它的本征值分布比行——行转移矩阵要稀疏。角转移矩阵重整化群 (CTMRG) 方法是这两种方法的结合<sup>[8-9]</sup>, 形式上是密度矩阵表示成角转移矩阵的乘积。CTMRG 方法的思想源于 White 的密度矩阵重整化群理论, 通过略去密度矩阵较小本征值所对应的本征态而达到减少相空间维数的目的。Okunishi 用 DMRG 方法研究过二维伊辛模型<sup>[10]</sup>, 他将二维经典模型变换为等价的相互作用环面模型 (IRF), 得到了比热尖峰图, 但没能解决临界点附近计算不收敛的问题。CTMRG 方法可以克服这个困难, 该方法误差的主要来源是有限

\* 收稿日期: 2011-01-01

基金项目: 国家重点基础研究发展计划 (2007CB935501)

作者简介: 何春山 (1971 年生), 男, 博士; E-mail: stshcs@tom.com

的重整化相空间维数  $m$ 。该方法业已得到了广泛的应用：成功得到了两层伊辛模型的临界性质<sup>[11]</sup>，计算了二维伊辛模型的关联函数<sup>[12]</sup>，及应用到二维格点自回避行走模型<sup>[13]</sup>。该方法还用于二维无限量子系统的环境模拟中<sup>[14]</sup>。NISHINO<sup>[9]</sup>提出 CTMRG 方法并应用到经典的二维格点模型的临界指数计算中，文中没有研究临界点该如何得到。

无外场二维伊辛模型有严格解，人们常用它来检测一种计算方法的优劣。蒙特卡罗和元胞自动机方法都曾用来计算二维伊辛模型的临界温度<sup>[15-17]</sup>，所得结果的准确度都不够高。本文采用的 CTMRG 方法可以将准确度提高至少二个数量级。

### 1 二维伊辛模型的 CTMRG 方法表述

无外场二维伊辛模型的哈密顿量为

$$H[s] = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (1)$$

其中  $s_i = \pm 1$  是正方格点系统的格点自旋取值； $\langle i, j \rangle$  表示对近邻求和。考虑铁磁体的情况，取最近邻耦合常数  $J > 0$ ，配分函数  $Z$  为

$$Z = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{-H[s]} \quad (2)$$

引入一个变量  $u_{ij} = \pm 1$  作为近邻  $\langle i, j \rangle$  的链变量，可以很方便地将二维伊辛模型转变成等价的相互作用环面模型。新的哈密顿量表示为

$$H'[s, u] = -J' \sum_{\langle i,j \rangle} u_{ij} (s_i + s_j) \quad (3)$$

其中  $J'$  与原来的  $J$  有下面的对应关系

$$J' = \frac{1}{2} \ln(e^{2J} + \sqrt{e^{4J} - 1}) \quad (4)$$

配分函数也相应地变为

$$Z' = \sum_{\{u_{ij} = \pm 1\}} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{-H'[s, u]} = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \prod_{\langle i,j \rangle} \left\{ (1 + \cosh 2J') \left( 1 + \frac{\cosh 2J' - 1}{\cosh 2J' + 1} s_i s_j \right) \right\} \quad (5)$$

利用关系式

$$e^{J s_i s_j} = \cosh J (1 + \tanh J (s_i s_j))$$

并令  $\tanh J = (\cosh 2J' - 1) / (\cosh 2J' + 1)$

可得  $Z$  与  $Z'$  的关系为

$$Z = (2e^J)^{2N} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{-H[s]} = (2e^J)^{2N} Z' \quad (6)$$

这里  $N$  是格点的尺寸。显然，只要求出了  $Z'$  便知道了  $Z$ 。 $Z'$  由下面的式子导出

$$Z' = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \sum_{\{u_{ij} = \pm 1\}} e^{J' \sum_{\langle i,j \rangle} u_{ij} (s_i + s_j)} = \sum_{\{u_{ij} = \pm 1\}} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \prod_i e^{J' \sum_{j \in \delta_i} s_i u_{ij}} =$$

$$\sum_{\{u_{ij} = \pm 1\}} \prod_i \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{J' s_i \sum_{j \in \delta_i} u_{ij}} \quad (7)$$

$j \in \delta_i$  表示  $j$  只是  $i$  的上、下、左、右四个近邻。定义顶角权重

$$W(u_{i1}, u_{i2}, u_{i3}, u_{i4}) = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{J' s_i \sum_{j \in \delta_i} u_{ij}}$$

于是  $Z'$  可简写为

$$Z' = \sum_{\{u_{ij} = \pm 1\}} \prod_i W(u_{i1}, u_{i2}, u_{i3}, u_{i4}) \quad (8)$$

将顶角权重简记成

$$W(a, b, c, d) \equiv W_{abcd} = \sum_{s_i = \pm 1} \exp[J' s_i (a + b + c + d)] \quad (9)$$

其中  $a = u_{i1}$ ,  $b = u_{i2}$ ,  $c = u_{i3}$  和  $d = u_{i4}$ 。用  $u$  变量和式 (9) 定义的顶角权重所构成的相互作用环面模型等价于二维伊辛模型，如图 1 所示。其中虚线是伊辛模型，实线是等效的相互作用环面模型。

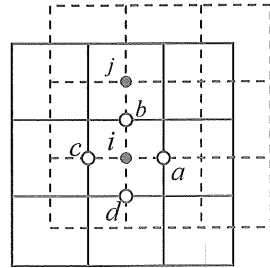


图 1 伊辛模型等效为相互作用环面模型示意图

Fig. 1 Ising model is presented by interaction round a face model

全顶角（下文中仍称为“顶角”）的图形表示见图 2 (a)。在边界上有两种特殊的顶角权重，其链变量  $u$  的数目少于 4。它们的表示形式与式 (9) 类似，只是  $s$  的取值受边界条件的影响。对于固定边界条件（边界自旋  $s = 1$ ），沿边界的顶角（下文中称为“树”）权重表示为

$$W_{abc} = \exp[J'(a + b + c)] \quad (10)$$

角上的顶角（下文中称为“角”）权重表示为

$$W_{ab} = \exp[J'(a + b)] \quad (11)$$

图 2 (b) 和 (c) 分别是树和角的示意图。

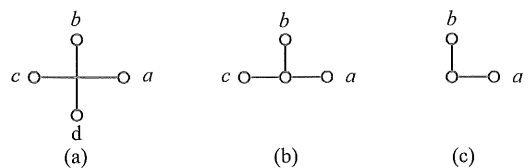


图 2 顶角、树和角的示意图

Fig. 2 The figure of cross corner, tree and corner

配分函数  $Z'$  就是对所有顶角连乘后求迹, 即

$$Z' = \sum_{\{a_i, b_i, c_i, d_i\}} \prod_i W_{a_i, b_i, c_i, d_i} = \text{Tr}(\prod_i W_i) \quad (12)$$

其中,  $\{a_i, b_i, c_i, d_i\}$  表示对所有的链变量求和。

系统格点尺寸的增大是通过将对应大小的树和顶角及角相连, 组成更大的角和更大的树, 具体的增长分为长角和长树, 其中长树是为长角做准备。在相连的过程中, 两个顶点 (图中用空心小圆圈表示) 相连意味着对  $u$  变量求和。所有的内部  $u$  变量和边界  $u$  变量求完和之后所得的方格顶角权重称为角转移矩阵 (CTM), 记为  $C_{\alpha\beta}(N)$ 。 $\alpha$  和  $\beta$  分别对应于角的两条开放边界的各自旋变量的所有可能构成的组合数,  $N$  表示对应的角的尺寸。如图 3 (a) 所示。

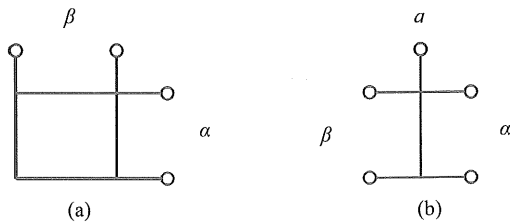


图 3 (a) 一个尺寸为 2 的角转移矩阵,  $C_{\alpha\beta}(2)$ ;  
(b) 尺寸为 2 的半行转移矩阵,  $P_{\alpha\beta,a}(2)$

Fig. 3 (a)  $C_{\alpha\beta}(2)$ , corner transfer matrix;  
(b)  $P_{\alpha\beta,a}(2)$ , half-row transfer matrix. Both are size 2

角和树的增大可以用矩阵的形式来描述。树的生长: 树所对应的矩阵称之为半行转移矩阵 (HRTM), 用  $P_{\alpha\beta,a}(N)$  表示, 如图 3 (b) 所示,  $\alpha, \beta$  和  $N$  的意义同前,  $a$  是独立的一个顶点, 用于下一步与顶角中的其中一个顶点相连求和, 从而长成更大一级的树。显然, 初始的树就是图 2 中的 (b), 其表达式为

$$P_{ac,b}(1) = W_{abc} \quad (13)$$

对于在初始树上增加一个格点的情形见图 4 (b)。让初始树与一个顶角连接起来, 即是对树矩阵的链变量  $c$  同顶角的链变量  $c$  求和, 亦即

$$P_{\alpha\beta,a}(2) = \sum_c W_{abcd} P_{\alpha'\beta',c}(1)$$

其中,  $\alpha$  和  $\beta$  为新的状态标识, 分别代表  $\alpha', b$  的组合及  $\beta', d$  的组合。

长到  $N$  个格点的树矩阵可由初始树递归得到, 递归表达式为

$$P_{\alpha\beta,a}(N) = \sum_c W_{abcd} P_{\alpha'\beta',c}(N-1) \quad (14)$$

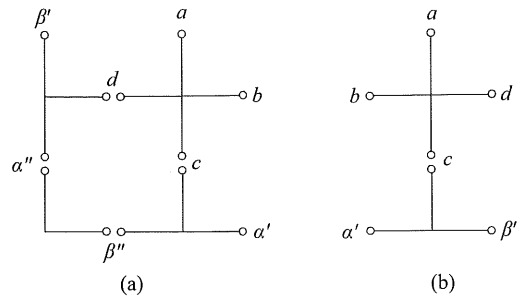


图 4 (a) 尺寸为 4 的角转移矩阵构成图;  
(b) 尺寸为 2 的半行转移矩阵构成图

Fig. 4 (a) the configuration of CTM with size 4;  
(b) the configuration of HRTM with size 2

初始角长大成具有 4 个格点尺寸的角的情况如图 4 (a) 所示。由此可知,  $(N-1)^2$  个格点的角矩阵长到  $N^2$  个格点的角矩阵的递推公式为

$$C_{\alpha\beta}(N) = \sum_{\alpha'\beta'} \sum_{cd} W_{abcd} P_{\alpha'\beta',c}(N-1) \cdot C_{\alpha'\beta',d}(N-1) \quad (15)$$

显然, 固定边界条件的初始角的角转移矩阵的表达式为

$$C_{\alpha\beta}(1) = W_{ab} = \exp[J'(a+b)] \quad (16)$$

考虑正方形格点的情况, 当角长大到一定程度后, 将四个相同的角连到一起就构成了一个格点尺寸大小为偶数的正方形格点。而总格点的配分函数就是对角矩阵的四次方求迹, 即

$$Z_{2N} = \text{Tr}(C(N)^4) \quad (17)$$

其图示见图 5。

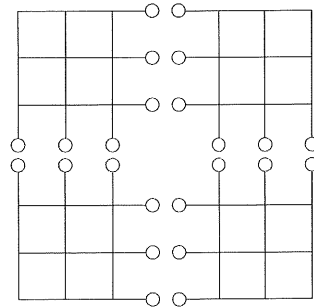


图 5 四个角组成一个正方形格点示意图

Fig. 5 A square lattice is constructed by four corners

由式 (17) 可看出, 角矩阵同密度矩阵具有共同的本征态。将矩阵  $C$  的本征值记为  $\{\omega_k | k = 0, 1, 2, \dots\}$ , 并让它们从大到小排好序,  $\omega_0 \geq \omega_1 \geq \omega_2 \geq \dots$  则密度矩阵的本征值为  $\{\omega_k^4 | k = 0, 1, 2, \dots\}$ 。按照密度矩阵重整化群的思想, 只有那些具有较大本征值的本征态才被保留。例如, 我们

保留前  $m$  个本征态，而具有较小本征值的  $\{\omega_k | k \geq m\}$  被忽略掉。 $m$  即是所谓的重整化维数。 $m$  越大越好，理论上，重整化维数  $m \rightarrow \infty$  时计算的结果最为精确。下面的具体算例将能看到重整化维数  $m$  对计算结果的影响。

由于重整化相空间的维数不会超过  $m$ ，所以在保证一定的计算精度的条件下，我们可以根据计算机的计算能力来确定合适的  $m$ 。理论上角转移矩阵重整化群叠代可以一直做下去，因此系统格点可以很容易长到足够大。

## 2 确定临界点

根据 Nishino 和 Okunishi 的思想<sup>[8-9]</sup>，求一个格点尺寸为奇数的系统的磁化  $M$ ，可以通过在两个角中间插入一棵树及在正中间插入一个顶角来实现，见图 6。

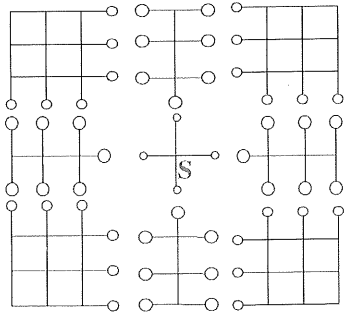


图 6 求磁化  $M$  的模型图

Fig. 6 The model which is used to get the magnetization  $M$

中间格点的自旋态为  $s$  的几率由下式给出

$$M^s = \frac{\sum_{abcd} X_{abcd}^s \text{Tr}(\tilde{P}_a \tilde{C} \tilde{P}_b \tilde{C} \tilde{P}_c \tilde{C} \tilde{P}_d \tilde{C})}{\sum_{abcd} W_{abcd} \text{Tr}(\tilde{P}_a \tilde{C} \tilde{P}_b \tilde{C} \tilde{P}_c \tilde{C} \tilde{P}_d \tilde{C})} \quad (18)$$

其中， $\tilde{P}, \tilde{C}$  分别表示已重整化过的树矩阵和角矩阵。 $X_{abcd}^s$  定义为

$$X_{abcd}^s = \exp[J's(a + b + c + d)] \quad (19)$$

因而磁化  $M = \langle s \rangle$  为

$$M = M^+ - M^- \quad (20)$$

当系统处于临界点时，磁化同系统的格点尺寸满足标度律  $M \sim L^{-(d-2+\delta)/2}$ ，两边取对数得

$$\ln M(L) = A - \frac{d-2+\delta}{2} \ln L \quad (21)$$

其中  $A$  为一常数， $d$  为系统的维度（二维伊辛模型时， $d=2$ ）， $\delta$  为临界指数。如果用不同的耦合常数  $J$  去计算磁化  $M$  同系统格点尺寸的双对数关系，那

么当处于临界点时应呈现一条直线，偏离临界点时，磁化曲线将向下、向上偏离临界点时的情况。图 7 是在固定边界条件下用重整化维数  $m=50$  计算得到的结果，曲线由下至上分别对应  $J$  的取值为 0.440 4, 0.440 5, 0.440 6, 0.440 7 和 0.440 8。

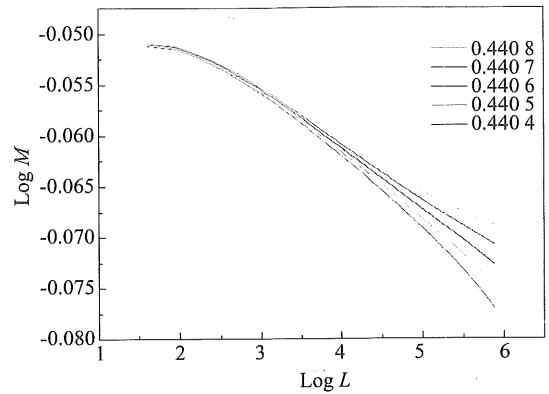


图 7 用重整化维数  $m=50$  计算得到的磁化曲线与  $J$  的关系图

Fig. 7 The Magnetization curves with different  $J$ , the renormalization size is 50

从图 7 可以看出，曲线刚开始的部分数据不合理，主要是由于那时系统的总格点尺寸不够大，还不能反映真实情况；逐渐地曲线开始呈线性趋势下降。从图中各种情况的曲线走向可以基本得出：临界点处， $J$  的取值在 0.440 6 与 0.440 7 之间。更进一步的计算见图 8。

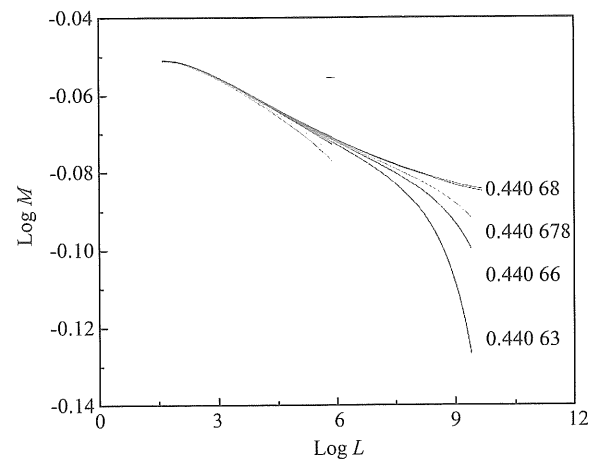


图 8 更精确的  $J$  对应的磁化曲线图

Fig. 8 The Magnetization curves with higher precision  $J$

取  $J$  值分别为 0.440 63, 0.440 66, 0.440 678, 0.440 680，从图 8 可以看出，临界点  $J_c$  处于

0.440 678 和 0.440 68 之间。二维伊辛模型精确解的临界点  $J_c = (\ln(1 + \sqrt{2}))/2 \approx 0.440 686 793 5$ , 计算结果与之相比有一定的误差, 误差主要源自于重整化维数  $m$  不够大。图 9 是用重整化维数为  $m = 100$  计算出来的结果, 图中的曲线由下至上分别对应  $J$  的取值为 0.440 683, 0.440 685, 0.440 687, 0.440 689 和 0.440 691。临界点位于  $J_c = 0.440 687$  附近。结果表明, 随着重整化维数的增加, 计算的结果越来越准确。

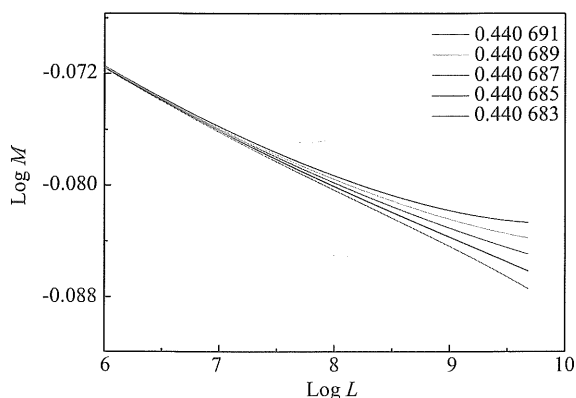


图 9 用重整化维数  $m = 100$  计算得到的磁化曲线与  $J$  的关系图

Fig. 9 The Magnetization curves with different  $J$ , the renormalization size is 100

### 3 结 论

本文采用角转移矩阵重整化群方法求解了二维伊辛模型的临界点, 计算得到的临界耦合常数  $J_c$  位于 0.440 687 附近, 与精确解的结果相符合, 达到了  $10^{-5}$  精度。说明角转移矩阵重整化群方法在数值求解的准确性方面有保证, 可用于研究二维格点系统的统计物理性质。计算的精确度还可以通过下面两种途径得到更进一步的改进: ①用更大的重整化维数  $m$ ; ②计算更大的格点系统。

致谢: 本研究得到中山大学高性能与网格计算平台资助。

#### 参考文献:

[1] WILSON K G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem [J]. Rev Mod Phys, 1975, 47: 773 - 840.  
[2] WHITE S R. Density matrix formulation for quantum

renormalization groups [J]. Phys Rev Lett, 1992, 69: 2863 - 2866.  
[3] WHITE S R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups [J]. Phys Rev B, 1993, 48: 10345 - 10356.  
[4] WHITE S R, NOACK R M. Real-space quantum renormalization groups [J]. Phys Rev Lett, 1992, 68: 3487 - 3490.  
[5] BAXTER R J. Exactly solved models in statistical mechanics [M]. New York: Academic Press, 1982.  
[6] KRAMERS H A, WANNIER G H. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part II [J]. Phys Rev, 1941, 60: 263 - 276.  
[7] KIKUCHI R. A theory of cooperative phenomena [J]. Phys Rev, 1951, 81: 988 - 1003.  
[8] NISHINO T, OKUNISHI K. Corner transfer matrix renormalization group method [J]. J Phys Soc Jpn, 1996, 65: 891 - 894.  
[9] NISHINO T, OKUNISHI K. Corner transfer matrix algorithm for classical renormalization group [J]. J Phys Soc Jpn, 1997, 66: 3040 - 3047.  
[10] NISHINO T. Density matrix renormalization group method for 2D classical models [J]. J Phys Soc Jpn, 1995, 64: 3598 - 3601.  
[11] LI Z B, SHUAI Z. Critical exponents of the two-layer Ising model [J]. J Phys A: Math Gen, 2001, 34: 6069 - 6079.  
[12] HE C S, LI Z B. Application of corner transfer matrix renormalization group method to the correlation function of two-dimensional Ising model [J]. Chin Phys Lett, 2003, 20: 2004 - 2007.  
[13] FOSTER D P, PINETTES C. Corner-transfer-matrix renormalization-group method for two-dimensional self-avoiding walks and other  $O(n)$  models [J]. Phys Rev E, 2003, 67: 045105 - 1 - 4.  
[14] ORUS R, VIDAL G. Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited: Corner transfer matrix for tensor contraction [J]. Phys Rev B, 2009, 80: 094403 - 1 - 4.  
[15] 林旭升. 二维伊辛模型相变临界点温度的模拟计算 [J]. 大学物理, 2000, 19(5): 13 - 15.  
[16] 李晓寒, 王宗笠, 宁旭. 二维 Ising 模型临界相变的 Monte-Carlo 数值模拟 [J]. 安徽大学学报, 2008, 32(3): 56 - 59.  
[17] 郑容森, 谭惠丽, 秦继民. 二维伊辛模型相变临界现象的元胞自动机模拟 [J]. 大学物理, 2005, 24(11): 10 - 13.