



雙正交轉移矩陣重整群於廣義馬可夫隨機場之數值模擬

Numerical Simulations of General Markov Random Fields Using Biorthonormal Transfer-Matrix Renormalization-Group Method

黃玉坤 彭志豪 楊竣欽

Yu-Kun Huang Chih-Hao Peng Chun-Chen Yang

南榮科技大學工程科技研究所

摘要

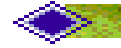
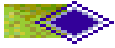
本研究使用雙正交轉移矩陣重整群(Biorthonormal Transfer-Matrix Renormalization Group; BTMRG)方法探討廣義馬可夫隨機場(Markov random field; MRF)配分函數的數值計算。BTMRG 乃是改良自傳統轉移矩陣重整群(TMRG)，而 TMRG 的基本概念則是繼承自密度矩陣重整群(Density-Matrix Renormalization Group; DMRG)並應用於 non-Hermitian 轉移矩陣問題，可在大型晶格系統中精確計算系統的配分函數，不但有自動截取(decimate) Hilbert 空間的特性，同時控制重整化的轉移矩陣維度在適度範圍。本文中，我們將應用 BTMRG 來對廣義 MRF 的基本轉移矩陣加以截取。我們選擇四個二元二階 MRF 進行 BTMRG 的數值模擬。其模擬結果皆呈現出相變(phase transition)的現象。本研究證實我們的 BTMRG 不論在精確度或運算速度上均優於傳統 TMRG，並且較傳統 TMRG 適用於大型晶格系統。

關鍵字：馬可夫隨機場、配分函數、密度矩陣重整群、轉移矩陣重整群。

一、前言

馬可夫隨機場(Markov Random Field; MRF)[1]是著名的統計力學晶格模型。它在各種領域中都有得到成功應用，比如說統計物理學，編碼理論，機器學習和影像建模。例如在統計力學上，著名的 Ising 模型和 Potts 模型乃是馬可夫隨機場中的一個特例。儘管已獲得如此廣泛而成功的應用，在 MRF 研究中，配分函數(partition function)的數值計算仍然具相當高的挑戰性。在統計力學上，MRF 配分函數的計算是極其基本而重要的。例如，MRF 的自由能(free energy)跟 MRF 配分函數的對數值有關，而一旦有了自由能，幾乎所有熱力學屬性都可以從自由能當中經由標準化的推導過程獲得。因為想要獲得廣義 MRF 配分函數的解析解形式非常困難，所以實務上大多採取數值計算來求得配分函數的近似值，而在這些數值方法中，最重要的、也是最受歡迎的就是





所謂的轉移矩陣法了。在這方法中，MRF 的自由能是由一個非負轉移矩陣之 Perron root (即最大本徵值) 的對數值所推導出來的。不幸的是，轉移矩陣的維度會隨著晶格的尺寸大小呈現出幾何級數方式成長，因此這種方法會嚴重地侷限於小型系統。在通常的情況下，我們可以利用轉移矩陣重整群(Transfer-Matrix Renormalization Group; TMRG)[2,11,12,22]來避開這個轉移矩陣維度無限大的難題。TMRG 乃是繼承密度矩陣重整群(Density-Matrix Renormalization Group; DMRG)[4,14,17,20]的基本概念，在 Hilbert 空間中作系統性的截取(truncation)，並保留在描述 Perron state (與 Perron root 對應的本徵向量)時所需重要的量子態，使得大型系統的物理性質可以透過重整化轉移矩陣精確地計算出，並使其維度維持於一個適度大小的範圍內。

不同於 DMRG，TMRG 通常需處理非 Hermitian 矩陣，因其具備非對稱的左右 Perron states 本徵向量，這將會大大增加所需的數值計算複雜度。這往往會導致在選擇密度矩陣上變得更加模糊。在文獻[6]中，作者提出了一種新型的 TMRG 演算法稱為雙正交轉移矩陣重整群(Biorthonormal TMRG; BTMRG)方法，該方法採用一對偶(dual)雙正交基底來對轉移矩陣作重整化。數值模擬結果顯示，BTMRG 所呈現出的效率和精確度比 TMRG 更加卓越。本研究主要目的即在於應用 BTMRG 來進行廣義 MRF 配分函數的數值計算。

我們所欲研究的 MRF 乃是一個定義於一個縱向無限長的扭曲圓柱面晶格系統(infinitely-long vertical twisted cylindrical lattice)上可參數化的 MRF[5,7]。其柱面週長為 N ，且其參數值為廣義的局部能量函數(local energy function; LEF)。此一模型源自影像建模(image modeling)的研究，但在統計力學上，亦可視為一個廣義的二維晶格模型。在這裡，“廣義”一詞乃是用來強調每個晶格點狀態的數目、空間交互作用的範圍，以及晶格點間之交互作用都是任意的。它允許我們將每一個空間交互作用視為一個參數，而不必給出其吉布斯勢能(Gibbs potential)的任何特定形式。我們已經證實，這個廣義 MRF 模型的自由能可以正確無誤地由其基礎轉移矩陣(fundamental transfer matrix)的 Perron root 來描述[5]。在此研究中，我們將運用 BTMRG 方法對此基礎轉移矩陣進行重整化，以精確地計算出在大型晶格系統下馬可夫隨機場的熱力學性質。

本文的其餘部分安排如下。第二節簡述 MRF 模型的定義及其相關的函數參





數[5]。第三節則提供了 BTMRG 演算法算則(scheme)的簡短描述[6]。在第四節中，我們選擇四個二元二階 MRF 模型進行 BTMRG 的數值模擬。最後，第五節作出簡短結論。

二、廣義馬可夫隨機場

為了能有個比較簡潔具體的描述，我們將聚焦於廣義 MRF 中所謂二元二階(binary 2nd-order)MRF，亦即，隨機場中每個晶格點具有二元狀態而且具有最近鄰居(nearest-neighbor)與最近對角(nearest-diagonal)交互作用。

如圖 1，現考慮一個 $M \times N$ 矩形格點 $\Lambda = \{(i, j)\}_{1 \leq i \leq M, 1 \leq j \leq N}$ 。我們稱 $\mathbf{X} \equiv \{X_s\}_{s \in \Lambda}$ 為一個隨機場，其中每一格點 s 對應一個隨機變數 X_s ， X_s 從一個共同的離散二元值所成集合 \mathbf{E} 中取值 x_s 。整個隨機場 \mathbf{X} 的二元值組態則記為 $\mathbf{x} = \{x_s\}_{s \in \Lambda}$ ，而 $\mathbf{X}_A \equiv \{X_s\}_{s \in A}$ 則表示子晶格(sub-lattice) A 上的局部隨機場，其組態則記為 $\mathbf{x}_A = \{x_s\}_{s \in A}$ 。所謂的 MRF 即是一個具有馬可夫性質(Markov property)的隨機場。馬可夫性質意指隨機場中任一格點 $s=(i, j)$ 的局部特徵(local characteristics)(亦即，條件機率)只決定於格點 s 的鄰居(neighborhood)。本文中，我們一律使用二階對稱鄰居系統(2nd-order symmetric neighborhood system)，也就是格點 $s=(i, j)$ 的鄰居為 $\{(k, l) \in \Lambda : 0 < (k-i)^2 + (l-j)^2 \leq 2\}$ 。眾所周知，MRF 的機率分佈乃是由所謂吉布斯機率分佈(Gibbs probability measure)所給定[1] $\pi(\mathbf{x}) = Z^{-1} \exp(-Q(\mathbf{x}))$ 其中 $Z = \sum_{\mathbf{x}} \exp(-Q(\mathbf{x}))$ 稱為此 MRF 的配分函數(partition function)，而 $Q(\mathbf{x}) = \sum_c U_c(\mathbf{x}_c)$ 即是所謂的能量函數，其中 \sum_c 加總符號乃是對晶格 Λ 中所有的 clique 取加總之意。Clique c 是一格點集，其中任意兩格點互為對方之鄰居(也就是任兩點之間互有交互作用)。函數 $U_c(\mathbf{x}_c)$ 稱為吉布斯潛勢能(Gibbs potential)，它代表著在 clique c 中的總潛勢能。有關 MRFs 進一步介紹，請參考[8,21]。

對任意格點 $s=(i, j)$ ，可定義一晶格細胞 $D_s \equiv \{(i, j), (i-1, j), (i-1, j-1), (i, j-1)\}$ 。現在我們引進所謂局部能量函數(local energy function; LEF) $\varphi_{D_s}(\mathbf{x}_{D_s}) \equiv \sum_{c \subset D_s} \frac{U_c(\mathbf{x}_c)}{\xi_c}$ ，其中因子 ξ_c 是為了保證 LEFs 在晶格上加總的和恰等於能量函數。為了說明方便起見，讓我們



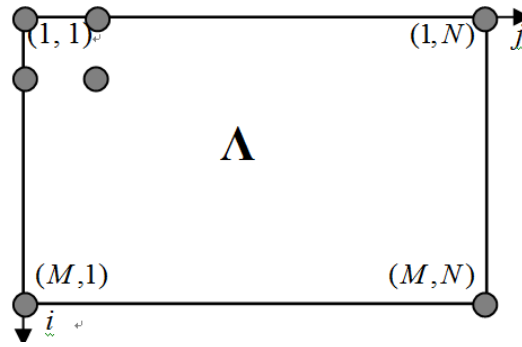
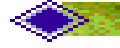
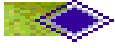


圖 1. 矩形晶格點 $\Lambda = \{(i, j)\}_{1 \leq i \leq M, 1 \leq j \leq N}$ 是由一群二維格點 (i, j) 所成的集合。

只考慮均勻的(homogeneous)局部能量函數(亦即, $\varphi_{D_s}(\cdot) \equiv \varphi(\cdot)$), 然後令 $\Omega \equiv \mathbf{E}^{D_s}$ 表示在晶格細胞 D_s 上所有二元組態所成的集合。廣義 LEF 參數 MRF 的配分函數可表為

$$Z_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{x}} \exp(\langle \mathbf{q}, \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \rangle) \quad (1)$$

其中 $\mathbf{q} = \{q^w \equiv -\varphi(\mathbf{w})\}_{\mathbf{w} \in \Omega}$ 就是所謂 LEF-參數向量, 它是負局部能量所有可能值所成的集合。而 $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) = \{\tau^w(\mathbf{x}) = \sum_s I(\mathbf{w} = \mathbf{x}_{D_s})\}_{\mathbf{w} \in \Omega}$ 則是充分統計(sufficient statistics)所成的向量, 其分量 $\tau^w(\mathbf{x})$ 表在晶格組態 \mathbf{x} 中所出現細胞晶格組態 \mathbf{w} 的總數。在這裡, $I(\mathbf{w} = \mathbf{x}_{D_s})$ 是所謂的指標函數(indicator function), 當其引數(argument)值為真時, 函數值為 1, 反之則為 0。我們可以輕易地驗證, 向量 \mathbf{q} 與 $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x})$ 的向量內積(inner product) $\langle \mathbf{q}, \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \rangle$ 恰等於在晶格組態 \mathbf{x} 下系統的總負能量。因此, 我們可以不必給出吉布斯潛能的任何特定形式, 而直接將所有可能細胞組態的每一交互作用(即局部函數)視為一個別參數, 然後將廣義 LEF 參數化 MRF 的機率分佈表為 $\pi(\mathbf{x}) = Z_{\mathbf{q}}^{-1} \exp(\langle \mathbf{q}, \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}) \rangle)$ 。

文獻[5]中已證明廣義 MRF 的單位格點自由能(free energy per site)可正確地由廣義 MRF 基礎轉移矩陣 $\tilde{T}_{\mathbf{q}}$ 的 Perron root 所表徵

$$f(Z; \mathbf{q}) \equiv \frac{1}{MN} \log Z_{\mathbf{q}} = \log 2 + \frac{1}{MN} \log(\text{Tr } \tilde{T}_{\mathbf{q}}^{NM}) \quad (2)$$

而此轉移矩陣與一個滿足相容性(compatibility;如圖2(a))與均勻性(uniformity)的二維馬可夫鏈(2D Markov chain; 2D MC)之轉移機率矩陣(transition probability matrix; t.p.m.)有密切關聯。將原晶格平面撓曲, 使得每一列最後一個格點左鄰接(left-adjacent)於下一列的第一個格點, 於是我們在扭曲柱面晶格(twisted cylindrical lattice)上建構了一個 2D MC, 意即, 除了第一列以外的每一晶格細胞之發生機率皆取決於其上鄰(upper-



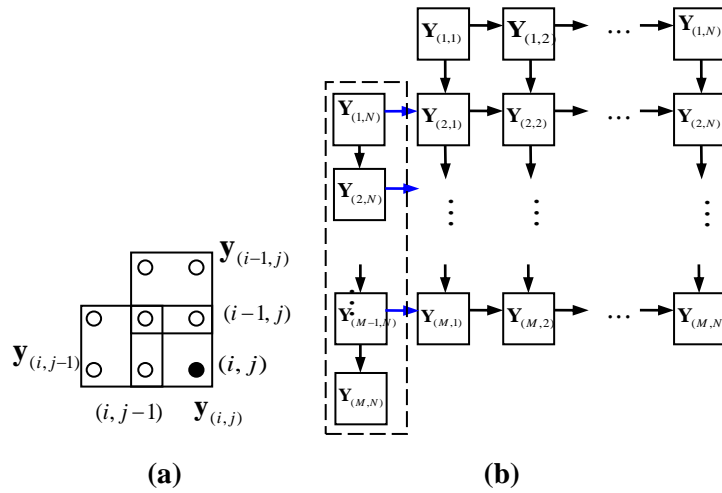


圖2. (a) 在相鄰細胞晶格 $D_{(i,j)}$, $D_{(i,j-1)}$ 和 $D_{(i-1,j)}$ 上之組態 $\mathbf{y}_{(i,j)}$, $\mathbf{y}_{(i,j-1)}$ 和 $\mathbf{y}_{(i-1,j)}$ 須滿足相容性條件。(b)在扭曲柱面晶格(twisted cylindrical lattice)上的二維馬可夫鏈(2D MC)之示意圖

adjacent)與左鄰(left-adjacent)之晶格細胞。如圖2(b)所示，此2D MC之轉移機率，記為 $\Pi(\mathbf{y}_{(i,j)} | \mathbf{y}_{(i-1,j)}, \mathbf{y}_{(i,j-1)})$ ，其值等於1/2若三相鄰之細胞彼此相容，反之則為0。但這些轉移機率無法表為一個方陣形式，然而，如圖3所示，如果我們將此2D MC重新排列成一個 N 階一維馬可夫鏈(N^{th} -order MC)，以上轉移機率將可從一高階馬可夫鏈的t.p.m.中重建回來。於是，考慮 N 個連續細胞集合起來形成一方塊(block) $\tilde{\mathbf{Y}}_s \equiv [\mathbf{Y}_{s-N+1} \dots \mathbf{Y}_{s-1} \mathbf{Y}_s]$ ，再令 $\tilde{\mathbf{y}}_s = \mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_N \in \Omega^N$ (或 $\tilde{\mathbf{y}}_{s+1} = \mathbf{y}'_1 \dots \mathbf{y}'_N$) 表方塊 $\tilde{\mathbf{Y}}_s$ (或 $\tilde{\mathbf{Y}}_{s+1}$) 之組態。則其t.p.m.之元素即可以狄拉克符號(Dirac notation)形式表為

$$\langle \mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_N | \tilde{\Pi} | \mathbf{y}'_1 \dots \mathbf{y}'_N \rangle = \Pi(\mathbf{y}'_N | \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_N) \delta_{\mathbf{y}'_1}^{\mathbf{y}_2} \dots \delta_{\mathbf{y}'_{N-1}}^{\mathbf{y}_N} \quad (3)$$

而我們的基礎轉移矩陣 $\tilde{\Pi}_q$ 與此 t.p.m. $\tilde{\Pi}$ 之關係即為

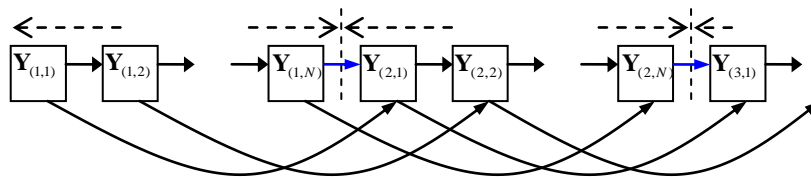
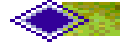
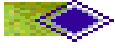


圖3. N 階一維馬可夫鏈等價於如圖二(b)中之二維馬可夫鏈。它是圖二(b)中圖形以列連接列的方式重新排列所成。





$$\langle \mathbf{y}_1 \cdots \mathbf{y}_N | \tilde{T}_{\mathbf{q}} | \mathbf{y}'_1 \cdots \mathbf{y}'_N \rangle = \langle \mathbf{y}_1 \cdots \mathbf{y}_N | \tilde{T} | \mathbf{y}'_1 \cdots \mathbf{y}'_N \rangle \exp(\langle \mathbf{q}, \boldsymbol{\tau}(\mathbf{y}'_N) \rangle) \quad (4)$$

其中 $\langle \mathbf{q}, \boldsymbol{\tau}(\mathbf{y}'_N) \rangle$ 等於關聯於細胞組態 \mathbf{y}'_N 之 LEF。其詳細的推導，可以參考文獻[5]。

三、雙正交轉移矩陣重整群

DMRG 乃是 1992 年由 White 所發明[20]，而近二十多年來，DMRG 已被證明是在一維強關聯量子系統的研究當中最強有力的數值方法之一了。DMRG 的主要想法是把系統的全維度哈密頓量(Hamiltonian)投影到一個比較小的 Hilbert 子空間，使得我們可以在此 Hilbert 子空間裡準確地描述強關聯量子系統的基態。以一維自旋 1/2 鏈 (spin-1/2 chain) 作為例子，假設整個自旋鏈是由兩個子系統所組成，我們稱整個自旋鏈為超區塊(super block)，它包含兩個部分：系統和環境區塊(system and environment block)。假設我們已獲得了與超區塊相關之哈密頓量的基態 $|\psi\rangle = \sum_i \sum_j \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$ ，其中的 $\{|i\rangle\}_{i=1, \dots, K}$ 和 $\{|j\rangle\}_{j=1, \dots, K}$ 分別代表系統和環境區塊的基底。此時整個系統的密度矩陣可表為 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ 。我們的目的是在於獲取，在描述系統基態時，關於系統區塊和環境區塊的最重要的態。對系統密度矩陣的環境區塊作局部加總形成簡約密度矩陣 $\hat{\rho} = \text{Tr}_E \rho = \text{Tr}_E |\psi\rangle\langle\psi|$ ，選擇 $m < K$ 個對應於簡約密度矩陣 $\hat{\rho}$ 之最大 m 個本徵值的本徵向量 $\{|\alpha\rangle\}_{\alpha=1, \dots, m}$ ，即可得到描述系統區塊之最重要的簡約基底。類似的過程也被應用到環境區塊中，我們亦可獲得描述環境區塊之最重要的簡約基底 $\{|\beta\rangle\}_{\alpha=1, \dots, m}$ 。那麼，將原來的 Hamiltonian 投射到新的基底 $\{|\alpha\rangle|\beta\rangle\}_{\alpha\beta}$ 上，此時所形成的重整化的哈密頓量所具有維度為 m^2 ，遠小於原系統哈密頓量的維度 K^2 ，卻仍能有效且準確的代表原系統哈密頓量。因為 d-維度量子系統可以通過使用 Trotter-Suzuki 分解[16]映射到 d+1 維度的經典系統，Nishino 是首先認識到 DMRG 的核心思想也可應用到重整化二維經典系統之轉移矩陣[11,12]上的人。由於演算法經歷了許多改變，通常這一類的 DMRG 也被稱為 TMRG。具體地說，不同於 DMRG 之獲得 Hermitian 哈密頓量的基態，在 TMRG 研究裡，常常必須計算 non-Hermitian 轉移矩陣不同的左 $|\psi\rangle$ 和右 $|\varphi\rangle$ Perron states。這將使得密度矩陣的構造變得模糊不清。文獻上大多遵循 Wang 和 Xiang [22] 所提出的方法來處理這類問題：構造密度矩陣為 $\hat{\rho} = \text{Tr}_E |\psi\rangle\langle\varphi|$ ，對角化這個矩陣，然後選擇 m 個對應 $\hat{\rho}$ 之最大本徵值的本徵向量做為系統的簡約基底。



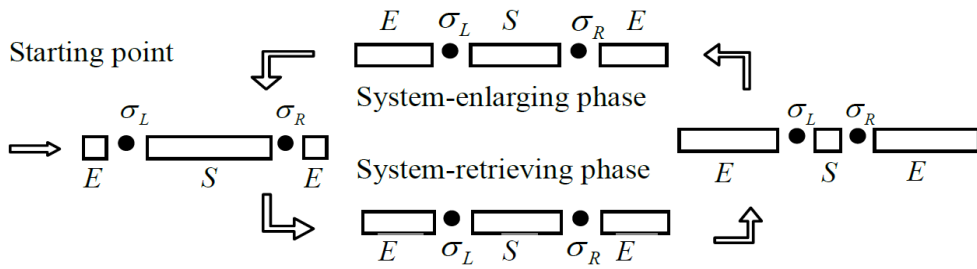
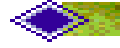
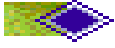


圖4. BTMRG演算法。一個完整的循環，包含了系統縮收和系統擴張階段，稱為演算法的掃射 (sweep)。

由於存在著不同的轉移矩陣左和右 Perron states，通常使得 TMRG 比 DMRG 涉及更繁雜的數值計算。尤其是，傳統 TMRG 隨興式(heuristic)地選擇密度矩陣常常導致 TMRG 不能融入最近才興起作為 DMRG 方法相當具凝聚力的理論裡，亦即所謂的矩陣乘積態(matrix-product state；MPS)的分析架構中[3,9,10,13,15,18,19]。然而，最近，在參考文獻[6]中，Huang 提出了一個新的 TMRG 演算法，稱為雙正交轉移矩陣重整群方法(BTMRG)，該方法解決了長期困擾著傳統 TMRG 該如何正確地選擇密度矩陣的問題，並且此一方法也可完美地融入矩陣乘積態 MPS 理論的架構。在這裡，我們以一維自旋 1/2 鏈為例，簡要地介紹一下在文獻[6]中所提出的基於 $E \cdot S \cdot E$ 配置的 BTMRG 算則。該 BTMRG 算則乃是建立在為 non-Hermitian 矩陣的左和右 Perron states 基態所建構的一系列對偶(dual) 簡約雙正交基底之上。這裡，所謂雙正交性(biorthonormality)指的意思是 $\langle \bar{\alpha} | \bar{\beta} \rangle = \delta_{\alpha\beta}$ ，其中 $\{|\bar{\alpha}\rangle\}_{\alpha=1,\dots,m}$ 和 $\{|\bar{\beta}\rangle\}_{\beta=1,\dots,m}$ 表兩個任意向量集(任意兩組基底)，而 $\delta_{\alpha\beta}$ 則表所謂 *Kronecker delta*，亦即 $\delta_{\alpha\beta} = 1$ ，for $\alpha = \beta$ ；且 $\delta_{\alpha\beta} = 0$ ， $\alpha \neq \beta$ 。圖 4 顯示 BTMRG 演算法之示意圖。 $E \cdot S \cdot E$ 代表了整個系統(超區塊)組態配置。整個系統可分成兩個部分：系統區塊自旋以及環境區塊自旋。我們以 S 表示系統區塊自旋並以 $\{|\bar{\alpha}\rangle\}_{\alpha=1,\dots,m}$ 表示描述此系統區塊自旋的簡約基底；同樣的，我們以 E 表示環境區塊自旋，並以 $\{|\bar{\xi}\rangle = |\bar{\xi}_L\rangle|\bar{\xi}_R\rangle\}_{\xi=1,\dots,m}$ 表示描述此環境區塊自旋的簡約基底；兩個實心黑點則表示在兩個子區塊之間的額外遠距的實體自旋(分別以 $|\sigma_L\rangle$ 和 $|\sigma_R\rangle$ 描述其自旋狀態)。假設我們目前正處於系統區塊增長的階段當中，現在我們有一對偶(dual)雙正交基底 $\{|\bar{\xi}\sigma_L\bar{\alpha}\sigma_R\rangle_L\}$ (作用於轉移矩陣的左邊)和 $\{|\bar{\xi}\sigma_L\bar{\beta}\sigma_R\rangle_R\}$ (作用於轉移矩陣的右邊)。將此轉移矩陣投射(project)至此一對偶雙正交基底即得重整





化之轉移矩陣(renormalized transfer matrix)，並由此重整化之轉移矩陣計算得它的左邊 $|\psi\rangle$ 和右邊 $|\varphi\rangle$ Perron 向量。通過對此兩個 Perron 向量執行奇異值分解(SVD)，我們就可得到增長系統區塊的簡約基底了。

$$\begin{cases} |\alpha_+\rangle_{\alpha=1,\dots,m} = \sum_{\sigma_L \bar{\alpha} \sigma_R} A_{\sigma_L \bar{\alpha} \sigma_R, \alpha_+} |\sigma_L \bar{\alpha} \sigma_R\rangle_L \\ |\beta_+\rangle_{\beta=1,\dots,m} = \sum_{\sigma_L \bar{\beta} \sigma_R} B_{\sigma_L \bar{\beta} \sigma_R, \beta_+} |\sigma_L \bar{\beta} \sigma_R\rangle_R \end{cases} \quad (5)$$

令矩陣 $A \equiv [|\alpha_+\rangle_{\alpha=1,\dots,m}]$ 和矩陣 $B \equiv [|\beta_+\rangle_{\beta=1,\dots,m}]$ ，他們分別是由 m 個基底向量 $|\alpha_+\rangle_{\alpha=1,\dots,m}$ 和 $|\beta_+\rangle_{\beta=1,\dots,m}$ 作為它們的行所構成。由於 $A^H B$ 一定存在奇異值分解(SVD)： $A^H B = U \Lambda V^H$ ，其中 U 表示 $A^H B$ 之左奇異向量(left singular vector)所成之么正矩陣(unitary matrix)， V 表示 $A^H B$ 之右奇異向量(right singular vector)所成之么正矩陣，而 Λ 則是 $A^H B$ 之奇異值(singular value)所成之對角矩陣。我們隨即可以得到 $(A U)^H (B V) \Lambda$ ，這表示如果 $A^H B$ 所有的奇異值 $\{\Lambda_{\alpha_+}\}$ 為非零，我們就可以獲得一對偶簡約雙正交基底 $\bar{A} = A U \Lambda^{-1/2}$ 和 $\bar{B} = B V \Lambda^{-1/2}$ 滿足 $A^H B = 1$ ，因此，增長系統區塊中的雙正交基底就可以明確表示為

$$\begin{cases} |\bar{\alpha}_+\rangle = \sum_{\sigma_L \bar{\alpha} \sigma_R} \bar{A}_{\sigma_L \bar{\alpha} \sigma_R, \bar{\alpha}_+} |\sigma_L \bar{\alpha} \sigma_R\rangle \\ |\bar{\beta}_+\rangle = \sum_{\sigma_L \bar{\beta} \sigma_R} \bar{B}_{\sigma_L \bar{\beta} \sigma_R, \bar{\beta}_+} |\sigma_L \bar{\beta} \sigma_R\rangle \end{cases} \quad (6)$$

其中

$$\begin{cases} \bar{A}_{\sigma_L \bar{\alpha} \sigma_R, \bar{\alpha}_+} = \Lambda_{\bar{\alpha}_+}^{-1/2} \sum_{\alpha_+} A_{\sigma_L \bar{\alpha} \sigma_R, \alpha_+} U_{\alpha_+, \bar{\alpha}_+} \\ \bar{B}_{\sigma_L \bar{\beta} \sigma_R, \bar{\beta}_+} = \Lambda_{\bar{\beta}_+}^{-1/2} \sum_{\beta_+} B_{\sigma_L \bar{\beta} \sigma_R, \beta_+} V_{\beta_+, \bar{\beta}_+} \end{cases} \quad (7)$$

四、數值模擬

此節中，我們運用 BTMRG 方法於計算廣義 LEF 參數 MRFs 之配分函數。由於 Ising 模型是一個特殊的、具正確解的 MRF。因此，首先我們利用 Ising 模型來比較 BTMRG 和傳統 TMRG 的效能，繼而選用四個二元二階(binary 2nd-order)廣義 MRFs 進行 BTMRG 的數值模擬。我們將計算自由能 $f(T)$ 作為溫度 T 函數，通過數值微分，





該 MRFs 之內能 $U(T) = T^2 \frac{\partial}{\partial T} f(T)$ 和比熱 $C_v(T) = \frac{\partial}{\partial T} U(T)$ 即可一併計算出來。圖 5 顯示 BTMRG 和一般 TMRG 演算法精確度之比較。它是在溫度 $T = 2.126 < T_c$ ， $T = 2.269 \approx T_c$ 和 $T = 2.846 < T_c$ 下所繪製的 Ising 模型的自由能相對誤差與所保留簡約基底狀態數 m 之關係曲線。很顯然地，我們的 BTMRG 方法展現出的效率和精確度比傳統 non-Hermitian TMRG 算法有明顯的改善。

由於二元二階 MRF 有 generic cell $D_{(i,j)} = \{(i,j), (i-1,j), (i-1,j-1), (i,j-1)\}$ ，它總共擁有 16 個 LEF 參數 $\mathbf{q} = \{q_k\}_{k=0}^{15}$ 其中 $k = b_4 + b_3 \times 2 + b_2 \times 2^2 + b_1 \times 2^3$ ，而位元 b_1, \dots, b_4 則分別表 $D_{(i,j)}$ 中由 (i,j) 開始沿著逆時針順序排列之四個格點之二進位值。我們利用溫度 T 控制 LEF 之參數值，並計算比熱與溫度之函數關係以偵測相變現象。表 1 詳列這些以溫度 T 控制之模型參數值，它們分別被稱為 MRF1 至 MRF4。圖 6 結果顯示這四個 MRF models 在不同晶格尺寸下之自由能、內能及比熱曲線。很明顯地，當晶格尺寸越來越大時，四種模型的比熱曲線皆呈現尖銳的峰值，這意謂著當晶格尺寸趨近無窮大時，比熱峰值會趨近於無窮大，而峰值所對應的溫度也會收斂至臨界溫度(critical temperature)，此即是所謂的相變現象(phase transition)。我們所得結果與統計力學中相變理論所預測的漸進行為完全符合。文獻[7]中已經對此四個相同模型作過傳統 TMRG

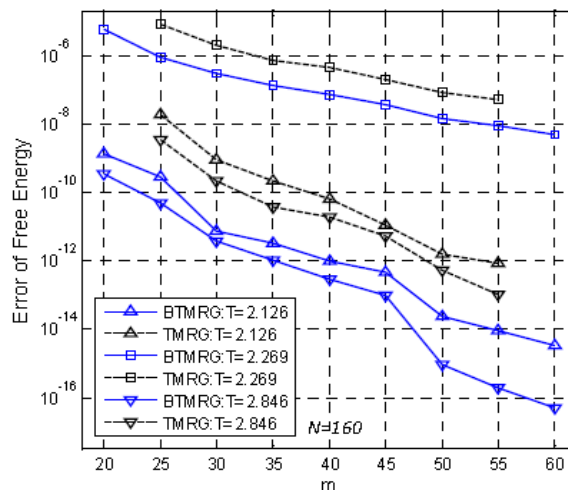


圖5. BTMRG和一般TMRG演算法精確度的比較。Ising模型大小為 $N=160$ ，在三個溫度 $T = 2.126 < T_c$ ， $T = 2.269 \approx T_c$ and $T = 2.846 < T_c$ 繪製了各個保留態數 m 的自由能誤差。



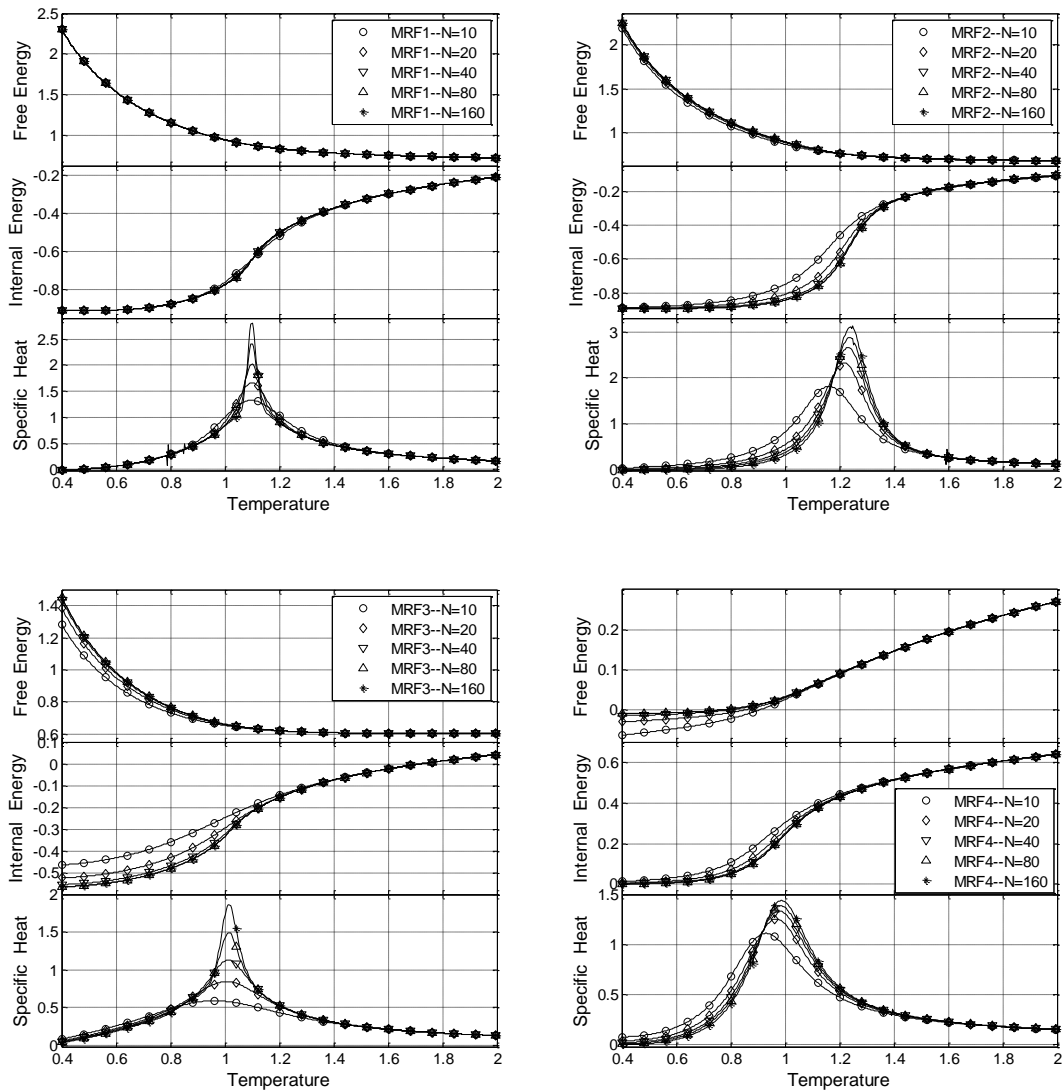
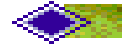
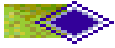


圖6. 表1中所列MRF1-MRF4之BTMRG計算結果，所得結果均符合統計力學相變理論所預測的漸進行為。在此，BTMRG所保留的簡約基底維度為 $m=40$ 。

表 1. 本文所選用 MRF1-MRF4 之由溫度 T 所控制的模型參數

| Model | $(q_0, q_1, q_2, \dots, q_{15})$ |
|-------|--|
| MRF1 | $(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0.015, 0.015, -0.26, -0.13, -2.26, -2.13, 1.84, 1.97, -0.145, -0.05) / T$ |
| MRF2 | $(0, 0, 0, 0, 0, 0, -1.250, -1.8496, 0.8954, 1.2299, -0.8698, -0.666, -0.9474, -0.6807, 0.9618, 0.9020) / T$ |
| MRF3 | $(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0.595, 0.595, 0, 0.595, -1.25, -0.655, -1.25, -0.655, -1.905, -1.31) / T$ |
| MRF4 | $(0, 0, -0.4, -0.72, -0.918, -0.55, -2.043, -2.855, -3.2, -4.99, -0.6426, -0.9721, -0.6, -0.24, -0.2056, -0.1151) / T$ |





之計算，但其結果僅能計算至系統尺寸 $N=60$ 。此結果顯示在同樣的計算資源下，我們的 BTMRG 方法不論在精確度、運算速度、以及處理更大系統的可能性上，均勝過傳統 TMRG 方法。

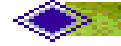
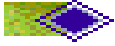
五、結論

在本文中，我們尋求廣義馬可夫隨機場(MRF)配分函式的數值計算。我們應用雙正交轉移矩陣重整群(BTMRG)方法截取廣義LEF參數化MRFs之基本轉移矩陣。四個二元二階廣義MRFs被選用於數值模擬。數值模擬結果顯示四種MRF模型皆展現出相變現象，同時證實我們的BTMRG不論在精確度、運算速度、以及處理更大型晶格系統的可能性上，均優於傳統TMRG方法。

參考文獻

- [1] Besag, J., Spatial interaction and the statistical analysis of lattice systems, *J. Roy. Stat. Soc., ser. B*, Vol. 36 (1974), 192-236.
- [2] Bursill, R. J., Xiang, T., and Gehring, G. A., The density matrix renormalization group for a quantum spin chain at non-zero temperature, *J. Phys. Condens. Matter*, Vol. 8 (1996), L583.
- [3] Cirac, J. I. and Verstraete, F., Renormalization and tensor product states in spin chains and lattices, *Phys. A: Math. Theor.* Vol. 42 (2009), 504004.
- [4] Hallberg, K., New trends in density matrix renormalization, *Adv. Phys.*, Vol. 55 (2006), 477-526.
- [5] Huang, Y.-K. and Yu, S.-N., Asymptotics of the partition function of a general Markov random field on an infinite rectangular lattice, *Physica A* Vol. 389 (2010), 736-746.
- [6] Huang, Y.-K., Biorthonormal transfer-matrix renormalization-group method for non-Hermitian matrices, *Phys. Rev. E* Vol. 83 (2011), 036702.
- [7] Huang, Y.-K. and Yu, S.-N., Transfer-matrix renormalization group method for general Markov random fields, *Physica A* Vol. 390 (2011), 801-810.





- [8] Kinderman, R. and Snell, J., Markov random fields and their applications, Amer. Math. Soc. (Providence, RI) (1980), chap. 1.
- [9] Martín-Delgado, M. A. and Sierra, G., Analytic formulations of the density matrix renormalization group, Int. J. Mod. Phys. A Vol. 11 (1996), 3145-3147.
- [10] McCulloch, I. P., From density-matrix renormalization group to matrix product states, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2007), P10014.
- [11] Nishino, T., Density matrix renormalization group method for 2D classical model, J. Phys. Soc. Jpn., Vol. 64 (1995), 3598-3601.
- [12] Nishino, T and Okunishi, K., Corner transfer matrix algorithm for classical renormalization group, J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 66 (1997), 3040-3047.
- [13] Östlund, S. and Rommer, S., Thermodynamic limit of density matrix renormalization, Phys. Rev. Lett. Vol. 75 (1995), 3537-3540.
- [14] Peschel, I., Hallberg, K., Wang, X., and Kaulke, M., Eds., Density Matrix Renormalization: a New Numerical Method, Lecture Notes in Physics No. 528 (1999), Springer, New York.
- [15] Rommer, S. and Östlund, S., Class of ansatz wave functions for one-dimensional spin systems and their relation to the density matrix renormalization group, Phys. Rev. B Vol. 55 (1997), 2164-2181.
- [16] Suzuki, M., Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d+1)-dimensional Ising system: Equivalence, critical exponents and systematic approximants of the partition function and spin correlations, Prog. Theor. Phys., Vol. 56 (1976), 1454-1469.
- [17] Schollwöck, U., The density-matrix renormalization group, Rev. Mod. Phys., Vol. 77 (2005), 259-315.
- [18] Schollwöck, U., The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states, Ann. Phys. Vol. 326 (2011), 96-192.





- [19] Verstraete, F., Murg, V., and Cirac, J. I., Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems, *Adv. Phys.* Vol. 57 (2008), 143-224
- [20] White, S. R., Density matrix formulation for quantum renormalization group, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69 (1992), 2863-2866.
- [21] Winkler, G., *Image analysis, random fields and dynamic Monte Carlo methods.* (1995) New York: Springer-Verlag.
- [22] Wang, X. and Xiang, T., Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems, *Phys. Rev. B* Vol. 56, (1997), 5061-5064.

