

3 TEBD 算法

3.1 施密特分解及相关定理

• 奇异值分解

$$A = \Gamma_A \Lambda \Gamma_B^\top$$

Γ_A, Γ_B 是酉矩阵 Λ 是 $m \times n$ 对角矩阵

对角元 λ_i 是 A 的奇异值， A 有至少一个至多 $\min(m, n)$ 个不同的奇异值，非零奇异值个数是它的秩

矩阵 $A^{(l)}$ 由如下矩阵元定义

$$A_{ij}^{(l)} = \sum_{k=1}^l [\Gamma_A]_{ik} \lambda_{kk} [\Gamma_B^\top]_{kj}$$

这是 A 在降秩（秩为 l ）空间的最近似。

• 施密特分解

$|\psi\rangle$ 是 $d_A d_B$ 维 Hilbert 空间 $H_A \otimes H_B$ 中的状态，那么存在向量 $\{|\phi_\alpha^A\rangle\}, \{|\phi_\alpha^B\rangle\}$ 和标量 $\chi_s, \{\lambda_\alpha\}$ 使得

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\chi_s} \lambda_\alpha |\phi_\alpha^A\rangle \otimes |\phi_\alpha^B\rangle$$

$$1 \leq \chi_s \leq \min(d_A, d_B)$$

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{\chi_s} \geq 0$$

$$\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 = 1$$

χ_s 是 $|\psi\rangle$ 的施密特秩， λ_α 是施密特系数

• 证明 1：

记 $\{|j_A\rangle\}, \{|n_B\rangle\}$ 分别为 H_A, H_B 的标准正交基

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{d_A} \sum_{n=1}^{d_B} c_{jn} |j_A\rangle \otimes |n_B\rangle$$

对系数矩阵 C 奇异值分解

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{d_A} \sum_{i=1}^{\min(d_A, d_B)} \sum_{n=1}^{d_B} \Gamma_{ji}^A \lambda_{ii} \Gamma_{in}^B |j_A\rangle \otimes |n_B\rangle$$

如果我们取在空

$$|\phi_i^A\rangle \equiv \sum_{j=1}^{d_A} \Gamma_{ji}^A |j_A\rangle, \quad |\phi_i^B\rangle \equiv \sum_{n=1}^{d_B} \Gamma_{in}^B |n_B\rangle, \quad \lambda_i \equiv \lambda_{ii}, \quad \chi_s \text{ 定义为非零奇异值个数}$$

得到

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\chi_s} \lambda_i |\phi_i^A\rangle \otimes |\phi_i^B\rangle \quad \text{证毕}$$

· 证明2：

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{d_A} \sum_{n=1}^{d_B} c_{jn} |j_A\rangle \otimes |n_B\rangle$$

定义一组基 (不一定正交)

$$|\tilde{\mu}_B\rangle \equiv \sum_n c_{jn} |n_B\rangle$$

得

$$|\psi\rangle = \sum_j |j_A\rangle \otimes |\tilde{\mu}_B\rangle$$

我们取在为 \mathcal{H}_A 选择一组 $\{|m_A\rangle\}$ 作为基 得到的密度算子 $\hat{\rho}_A$ 对角化

$$\hat{\rho}_A = T_{\mathcal{H}_B} |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{m=1}^{d_A} p_m |m_A\rangle \langle m_A|$$

这是通过对子系统 B 的自由度缩并得到的密度矩阵， $\chi_s \leq d_A$ 是其非零特征值 p_m 的个数

如果 $\chi_s < \min(d_A, d_B)$ ，我们用一组 $d_A - \chi_s$ 个正交于 $|m_A\rangle$ 的向量来完成这组基

呈式地对 B 的自由度部分求迹，得

$$\hat{\rho}_B = \sum_{m_p} \langle \tilde{\mu}_B | \tilde{m}_B \rangle |m_A\rangle \langle \mu_A|$$

$$\Rightarrow \langle \tilde{\mu}_B | \tilde{m}_B \rangle = p_m \delta_{m_p}$$

对其规范化

$$|\mu_B\rangle = P_m^{-\frac{1}{2}} |\tilde{\mu}_B\rangle \quad (\text{规范写成这样好一些})$$

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu} \sqrt{P_m} |\mu_A\rangle \otimes |\mu_B\rangle$$

这就得到了施密特分解

如果对 A 的指标求迹，得

$$\hat{\rho}_A = \sum_{\mu} p_{\mu} |\mu_B\rangle \langle \mu_B| \quad (\text{为啥不是 } = \sum_{\mu} \sqrt{P_m} |\mu_B\rangle \langle \mu_B| ?)$$

因此， $\hat{\rho}_A$ 和 $\hat{\rho}_B$ 具有相同的(非零)本征值。施密特模现在表示为归一化密度矩阵的非零特征值个数。

施密特向量是它们的特征向量。一个非常重要的后果是，在由正算子 $U_A \otimes U_B$ 表示的局部演化下

施密特秩是不变的 (在这种情况下，局部意味着我们的系统不与其他系统相互作用，例如因为它们 (它们不在远处)。

那么它与什么有关呢？

我们由此推论，在 \mathcal{H}_A 和 \mathcal{H}_B 独立演化时， $\hat{\rho}_A$ 和 $\hat{\rho}_B$ 不能通过局部演化转变为纠缠态 (同样，我们也不能通过这

种方法来降低密度)。

当且仅当施密特秩为1时，二体态是张量。

类似地，当施密特秩为 $\min(d_A, d_B)$ 时，二体态达到最大纠缠度

这引发了下面与高密度操作有关的纠缠度量

考虑由施密特基 $|i\rangle$ 描述的 n 体 qu-dits 系统 (d 仍是子系统)，它可由局域基 $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_n\rangle$ 表示为

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^d c_{i_1, i_2, \dots, i_n} |i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_n\rangle$$

考虑这个系统所有的二分分割，即考虑所有形式的所有分解

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1=1}^{X_{S_0}} \lambda_{i_1}^{(n)} |\phi_{i_1}^{(n)}\rangle |\phi_{i_1}^{(n)}\rangle$$

终于看懂了 $[i]$ 的意思

其中施密特向量 $|\phi^{(n)}\rangle$ 张成的 Hilbert 空间亦由 $|i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_n\rangle$ 张成，施密特向量 $|\phi^{(n-1)}\rangle$ 张成的 Hilbert

空间亦由 $|i_{n+1}\rangle |i_{n+2}\rangle \dots |i_L\rangle$ 张成
为什么 L ? 不是 n ? 嘿, 因为 $|i_{n+1}\rangle \dots |i_L\rangle$ 可被前 n 个线性表示吗?

且 $1 \leq X_{S_0} \leq \min(d^L, d^{L-1})$

是与二分分割 i 相关的施密特秩

请注意这些分解是由施密特分解保证的。我们定义 $E_{X_0} = \log_d(X_0)$ 为施密特纠缠度，TEBD 标准

纠缠度，其中 $X_0 = \max_i(X_{S_i})$ 。练习中探讨了施密特纠缠度的一些性质

练习：证明局部么正算子 $U_A \otimes U_B$ 不改变施密特秩

是这样吧：

练习：你在上一个练习中证明了施密特纠缠度是纠缠单向的，即，它不被么正算子改变

怎么会变以下？不 $\geq X_0$ 吗？

证明它在零以下是否成立（何时达到？）以及它还限制了它的纠缠熵 $S = -\sum_\alpha \lambda_\alpha^2 \log_d \lambda_\alpha^2$ 。

最后证明它在张量积下是可加的

$$E_{X_0}(|\psi\rangle \otimes |\psi'\rangle) = E_{X_0}(|\psi\rangle) + E_{X_0}(|\psi'\rangle)$$

这意味着 X_0 相乘？为啥？张量积与次序有无区别？

这些讨论更严格说明了 E_{X_0} 是施密特纠缠度的忠实度量。

3.2 TEBD 的概念基础

与密度矩阵的物理意义是什么？

使 TEBD 高效和成功的基本事实：向密度矩阵的奇异值以非递增方式排列时，是呈指数衰减的。

这意味着秩为 $r \ll X_0$ 附近时可以达到出色而近似的效果。

意思是说后面的太小了，用处不大吗？

希尔伯特空间中的物理态，包括基态，都有有限纠缠度，这是通过纠缠度量来量化的。这种有限纠缠度意味着物理态的奇异值满足一般态更快地指数衰减，使它们能被 TEBD 这种算法“纠缠压缩”，不过，这目前还没有普遍的证据，只是观察到这一趋势。

3.3 Vidal 的态分解

TEBD 的表达式将如下定义为 L 体协议张量 $C_{i_1 \dots i_L}$

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_L=1}^d C_{i_1 \dots i_L} |i_1\rangle \dots |i_L\rangle$$

表达式如下局部张量 $\Gamma^{[L]}$ 和局部向量 $\lambda^{[L]}$ 之积

$$C_{i_1 \dots i_L} = \sum_{\alpha_0 \dots \alpha_L} \lambda_{\alpha_0}^{[1]i_1} \Gamma_{\alpha_0 \alpha_1}^{[1]i_1} \lambda_{\alpha_1}^{[2]i_2} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2]i_2} \lambda_{\alpha_2}^{[3]i_3} \Gamma_{\alpha_2 \alpha_3}^{[3]i_3} \dots \Gamma_{\alpha_{L-1} \alpha_L}^{[L]i_L} \lambda_{\alpha_L}^{[L+1]}$$

$[]$ 是序号, 从左到右
 α 是要循序的指标
 i 是保留的指标

或者, 对于开放边界条件, 表达式为

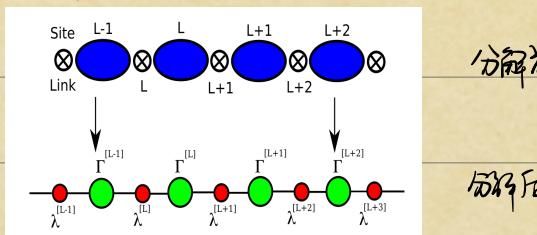
$$C_{i_1 \dots i_L} = \sum_{\alpha_0 \dots \alpha_{L-1}} \Gamma_{\alpha_0}^{[1]i_1} \lambda_{\alpha_1}^{[2]i_2} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2]i_2} \lambda_{\alpha_2}^{[3]i_3} \Gamma_{\alpha_2 \alpha_3}^{[3]i_3} \dots \Gamma_{\alpha_{L-1}}^{[L]i_L}$$

其中, 我们定义了

$$\Gamma_{\alpha_0}^{[1]i_1} \equiv \sum_{\alpha_0} \lambda_{\alpha_0}^{[1]} \Gamma_{\alpha_0 \alpha_1}^{[1]i_1} \quad \Gamma_{\alpha_{L-1}}^{[L]i_L} \equiv \sum_{\alpha_L} \Gamma_{\alpha_{L-1} \alpha_L}^{[L]i_L} \lambda_{\alpha_L}^{[L+1]}$$

对于开放边界的情况, $\lambda_{\alpha_0}^{[1]} = \delta_{\alpha_0,1}$, $\lambda_{\alpha_L}^{[L]} = \delta_{\alpha_L,1}$. 因此这两种分解是相同的. 我们将主要用后者表述,
 只有在周期性边界才采用前者.

这样分解, 将原本所需的 d^L 个系数减少到了 $d^{L+1} + L(L+1)$ 个



分解所表达式反映了实际代码中的指针运用. Fortan 从 1 开始索引而 C, 因此其他语言中可能指针
 有些不同, 需注意.

上述分解恰好完成了二分裂

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_0=1}^d \lambda_{\alpha_0}^{[L+1]} |\phi_{\alpha_0}^{[1\dots L]} \rangle |\phi_{\alpha_0}^{[L+1\dots n]} \rangle$$

意味着施密特度量

$$|\phi_{\alpha_0}^{[1\dots L]} \rangle = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_{L-1}} \lambda_{\alpha_0}^{[1]} \Gamma_{\alpha_0 \alpha_1}^{[1]i_1} \lambda_{\alpha_1}^{[2]} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2]i_2} \dots \Gamma_{\alpha_{L-1} \alpha_L}^{[L]i_L} |i_1\rangle \dots |i_L\rangle$$

这个不就是 $\lambda_{\alpha_0}^{[L+1]}$ 吗?

$$|\phi_{\alpha_0}^{[L+1\dots n]} \rangle = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_L} \Gamma_{\alpha_0 \alpha_1}^{[L+1]i_{L+1}} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[L+2]i_{L+2}} \dots \Gamma_{\alpha_{L-1} \alpha_L}^{[L]i_L} \lambda_{\alpha_L}^{[L+1]} |i_{L+1}\rangle \dots |i_L\rangle$$

分别组成密度矩阵

$$\rho^{(1\dots L)} = \text{Tr}_{(L+1)\dots L} |\psi\rangle \langle \psi|$$

$$\rho^{(L+1\dots L)} = \text{Tr}_{1\dots L} |\psi\rangle \langle \psi|$$

$$(\lambda_{\alpha_0}^{[L+1]})^2$$

这里可以采用前述方法进行近似处理，即选取前 X 个大的 $\lambda_{\alpha_i}^{[L]}$ 而放弃剩下 $X-L$ 个。由于我们之前已经将 L 个参数替换为 $dX^L + X(L+1)$ 个，方便起见， X 必须在 L 中满足形式标准 ??

为了通过子流程对信道的信噪比提供物理动机，对于有限范围一维临界点元，即为多维信噪比的训练数据

$$S \sim \frac{c}{3} \log L$$

其中 c 是基本模型泛函中心项，如果我们认为这个块是具有大小为 L 的开区间，那么在 L 中的一半，则熵的冗余

$$S \sim \frac{c}{6} \log L$$

这可能只是我们想要的一部分，因为块有两个边界。这个增长可能是比最大可能情况（浅水区）慢的。看 Vidal 的工作可以保持的 $\log X$ (正如李群中证明)。因此为了使我们的误差在 $\log X$ 小小时保持固定，我们之后的 S 大致为

$$X \sim L^{\frac{c}{6}}$$

3.3.1 利用奇异值分解构造局部张量

通常很少能够知道完整的奇数张量，但还是有必要了解如何通过奇数张量来构造局部张量。

考虑一个二分分层

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} C_{ij} |i_A, j_B\rangle$$

通过奇异值分解

$$C_{ij} = \sum_k \Gamma_{ik}^A \lambda_{kk} \Gamma_{kj}^B$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle = \sum_k \lambda_{kk} |\phi_k^{[A]}\rangle |\phi_k^{[B]}\rangle$$

$$|\phi_k^{[A]}\rangle \equiv \sum_i \Gamma_{ik}^A |i_A\rangle, \quad |\phi_k^{[B]}\rangle \equiv \sum_j \Gamma_{kj}^B |j_B\rangle$$

现在我们将展示如何用奇异值分解来执行 Vidal 分解。为了清楚起见，只考虑有四个位置的系统，四阶张量的 Vidal 分解

$$C_{i_1 i_2 i_3 i_4} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3=1}^X \Gamma_{\alpha_1}^{[1] i_1} \lambda_{\alpha_1}^{[2]} \Gamma_{\alpha_2}^{[2] i_2} \lambda_{\alpha_2}^{[3]} \Gamma_{\alpha_3}^{[3] i_3} \lambda_{\alpha_3}^{[4]} \Gamma_{\alpha_4}^{[4] i_4}$$

在第一个键处使用施密特分解

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1=1}^X \lambda_{\alpha_1}^{[2]} |\phi_{\alpha_1}\rangle |\phi_{\alpha_1}^{[234]}\rangle = \sum_{\alpha_1, i_1, i_2, i_3, i_4} \lambda_{\alpha_1}^{[2]} \Gamma_{\alpha_1}^{[1] i_1} |i_1\rangle \otimes (\Gamma_{\alpha_1}^{[234] i_2 i_3 i_4} |i_2 i_3 i_4\rangle)$$

我们得到了 $\lambda_{\alpha_1}^{[2]}$, $\Gamma_{\alpha_1}^{[1] i_1}$, $\Gamma_{\alpha_1}^{[234] i_2 i_3 i_4}$ ，与原式对比得

$$\Gamma_{\alpha_1}^{[234] i_2 i_3 i_4} = \sum_{\alpha_2, \alpha_3} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2] i_2} \lambda_{\alpha_2}^{[3]} \Gamma_{\alpha_2 \alpha_3}^{[3] i_3} \lambda_{\alpha_3}^{[4]} \Gamma_{\alpha_3}^{[4] i_4}$$

这还不足以让我们独立地求解全部的局部张量，故

在第二个键处分裂

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_2=1}^X \lambda_{\alpha_2}^{[3]} |\phi_{\alpha_2}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{[4]}\rangle = \sum_{\alpha_1; i_1, i_2, i_3, i_4} \lambda_{\alpha_2}^{[3]} \Gamma_{\alpha_2}^{[12]} |i_1 i_2\rangle \otimes (\Gamma_{\alpha_1}^{[34]} |i_3 i_4\rangle)$$

对称度

$$\Gamma_{\alpha_2}^{[34]} i_3 i_4 = \sum_{\alpha_3} \Gamma_{\alpha_2 \alpha_3}^{[3]} i_3 \lambda_{\alpha_3}^{[4]} \Gamma_{\alpha_3}^{[4]} i_4$$

$$\Gamma_{\alpha_2}^{[12]} i_1 i_2 = \sum_{\alpha_1} \Gamma_{\alpha_1}^{[1]} i_1 \lambda_{\alpha_1}^{[2]} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2]} i_2$$

我们又知道了 λ_{α_2} , $\Gamma_{\alpha_2}^{[12]} i_1 i_2$, $\Gamma_{\alpha_2}^{[34]} i_3 i_4$, 有了这些信息, 我们就可以求解 $\Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2]} i_2$

在第三个键处分裂可行

$$\Gamma_{\alpha_3}^{[34]} i_3 i_4 = \sum_{\alpha_3} \Gamma_{\alpha_2 \alpha_3}^{[3]} i_3 \lambda_{\alpha_3}^{[4]} \Gamma_{\alpha_3}^{[4]} i_4 ?$$

以及 λ_{α_3} , $\Gamma_{\alpha_3}^{[123]} i_1 i_2 i_3$, $\Gamma_{\alpha_3}^{[4]} i_4$. 有了这些, 我们便可求解 $\Gamma_{\alpha_3}^{[4]} i_4$, 唯一确定所有的局部
张量 (如重合) 和局部张量可以重新“观察”情形, 等等

3.3.2 初步选择

3.4 Vidal 表示中的局部操作

3.4.1 单位操作

表示作用在单个位置的么正算符 \hat{U}

$$\hat{U} = \sum_{i,i'} U_{i,i'} |i\rangle\langle i'|$$

卷积

$$\tilde{U}_{\alpha_{i+1}\alpha_i}^{[i]i} = \sum_{i'} U_{i,i'} \Gamma_{\alpha_{i+1}\alpha_i}^{[i]i'}$$

3.4.2