

张量网络算法基础(五)

张量网络收缩算法

冉仕举

首都师范大学物理系

2020年春



目录

- 5.1 张量网络的基本定义
- 5.2 张量网络的低秩近似
- 5.3 张量重整化群算法
- 5.4 角转移矩阵重整化群算法
- 5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法
- 5.6 张量网络的梯度更新
- 5.7 任意有限尺寸张量网络收缩算法
- 5.8 张量网络中的有效哈密顿量思想

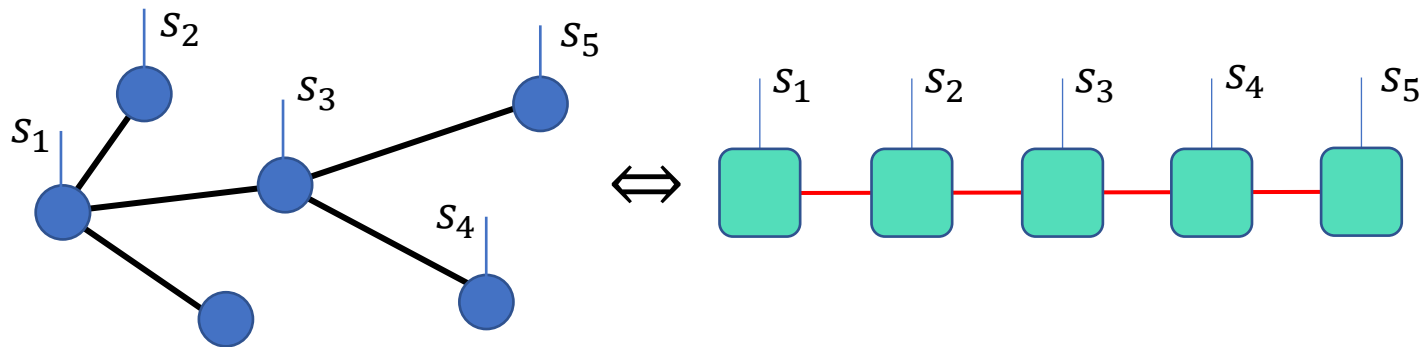
5. 张量网络收缩算法

5.1 张量网络的基本定义

- 之前我们提到，MPS中两个不同张量所共有的指标，被称为**辅助指标**（或虚拟指标、几何指标）；没有被共有的指标代表物理空间的自由度，被称为**物理指标**。
- MPS是一种特殊的张量网络，下面，我们给出**张量网络的一般定义**：由多个张量按照一定的收缩规则构成的模型，被称为张量网络。其中，收缩规则由网络图确定，即一个节点代表一个张量，与该节点连接的边代表该张量的指标，连接不同节点的边代表对应张量的共有指标，需进行求和计算。
- 仅连接一个节点的指标被称为**开放指标**；连接两个节点的指标被称为**几何指标**。
- 当张量网络被用于表示量子态时，开放指标代表物理空间的自由度，故也被称为物理指标。

5.1 张量网络的基本定义

- 从张量网络的一般定义出发，不难看出，**张量网络为张量的一种表示形式**：任意张量网络代表一个张量，该张量的指标为张量网络的开放指标。
- 张量网络可记为 $T = \text{tTr}(A, B, \dots)$ ，其中 T 代表收缩所有几何指标后得到的张量，括号中为构成张量网络的张量， tTr 代表对所有几何指标求和。
- 换言之：一个高阶张量可表示为不同的张量网络。例如，下图的两种张量网络均表示一个五阶张量张量 $T_{s_1 s_2 s_3 s_4 s_5}$ 。
- 定义一类特殊的张量网络：称**没有开放指标的张量网络为闭合张量网络**。闭合张量网络可用来表示一大类问题，例如格点模型的配分函数，量子多体态的观测量等。

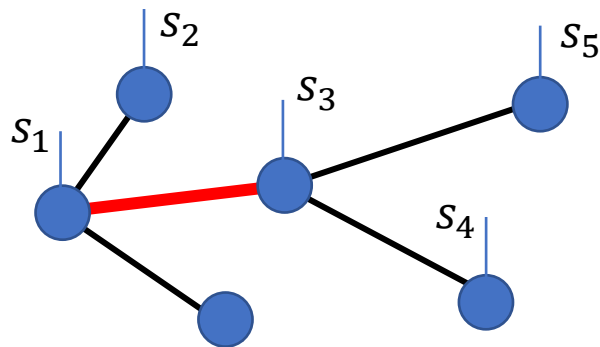


练习：设左图所有张量已知（可随机生成），编程计算 $T_{s_1 s_2 s_3 s_4 s_5}$ ，并利用TT分解算出对应的MPS表示，比较两种张量网络的参数复杂度（注：显然两种张量网络代表同一个张量）。

5.2 张量网络的低秩近似

- 考虑如下问题：在给定张量网络中，**如何裁剪某一几何指标的维数，使得裁剪前后的误差极小？**（裁剪前后张量网络几何结构不变）
- 首先考虑**无圈（loop-free）**张量网络的几何指标维数裁剪，以下图的张量网络 $T_{s_1 s_2 s_3 s_4 s_5}$ 为例，考虑对图中红色加粗的辅助指标进行维数裁。
- 可将上述问题化为**矩阵的最优低秩近似问题**：求 $T_{[s_1 s_2][s_3 s_4 s_5]}$ 的最优低秩近似，其中， $T_{[s_1 s_2][s_3 s_4 s_5]}$ 代表将张量reshape成矩阵，两个方括号中的指标被看作是矩阵的左、右指标，分别代表切断待裁剪指标后张量网络两部分中的开放指标。
- 由于目标问题仅是裁剪红色几何指标的维数，而不改变张量网络的结构等，我们并不推荐通过计算的SVD来实现维数裁剪。

练习：对于例子中的张量网络，证明矩阵 $T_{[s_1 s_2][s_3 s_4 s_5]}$ 的秩小于等于红色几何指标的维数

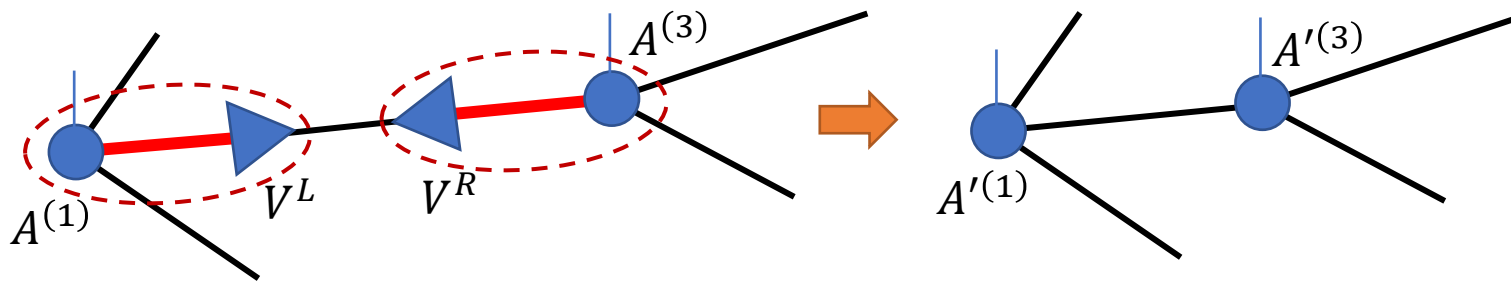


5.2 张量网络的低秩近似

- 思路：通过引入非方的**裁剪矩阵**，与连接待裁剪指标的张量进行收缩，实现该指标的维数裁剪。
- 设连接待裁剪指标的张量为 $A^{(1)}$ 与 $A^{(3)}$ ，待裁剪指标记为 a ，裁剪前后该指标的维数为 D 与 χ （有 $D \geq \chi$ ），则引入**维数为 $D \times \chi$ 的矩阵 V^L 与 V^R** ，将其第一个指标与张量中待裁剪的指标收缩

$$A'^{(1)}_{s_1 a_1 a_2 a'} = \sum_a A^{(1)}_{s_1 a_1 a_2 a} V^L_{aa'}, \quad A'^{(3)}_{s_3 a_3 a_4 a'} = \sum_a A^{(3)}_{s_3 a_3 a_4 a} V^R_{aa'}$$

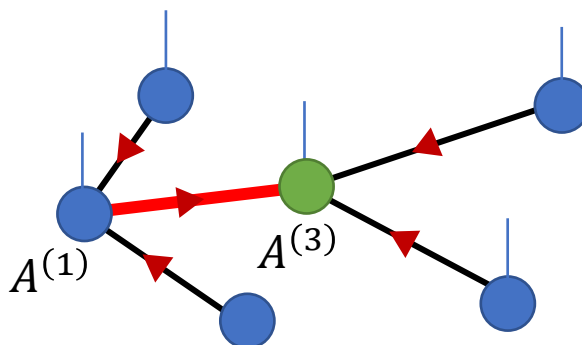
上述计算对应的图形表示如下。 V^L 与 V^R 被称为**裁剪矩阵**。



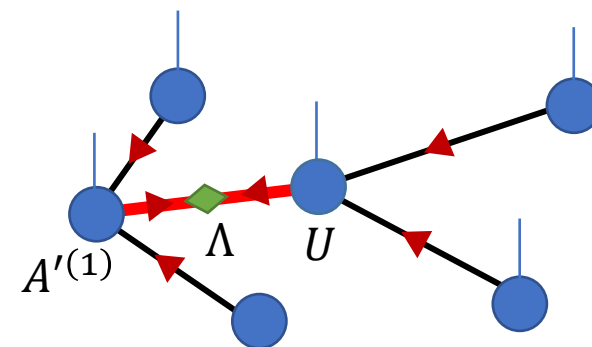
5.2 张量网络的低秩近似

- 几何指标维数裁剪问题等效为：**如何计算裁剪矩阵，使得裁剪误差极小。**
- 一种常用的算法步骤如下：

(a) 通过规范变化，将张量网络变换为中心正交形式，正交中心为连接待裁剪指标的两个张量中的其中一个（这里以 $A^{(3)}$ 为例，正交形式如图所示，其中，开放指标上的箭头默认向下；回顾小节4.1：除正交中心张量外，其它张量满足正交性，由箭头表示正交条件，即将该张量的所有内向指标对应与其共轭进行收缩，得到以外向指标为指标的单位阵）。



5.2 张量网络的低秩近似



(a) 通过规范变化，将张量网络变换为中心正交形式，正交中心为连接待裁剪指标的两个张量中的其中一个。

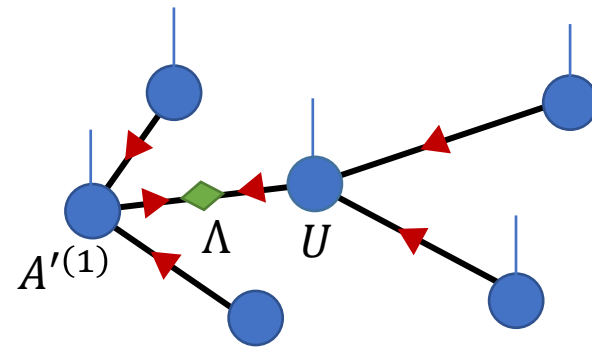
(b) 对正交中心的张量进行奇异值分解，由前 χ 个奇异向量构成 V^L ，且 $V^L = V^R$ （以 $A^{(3)}$ ，则进行奇异值分解 $A_{s_3 a_3 a_4 a}^{(3)} = \sum_{a'} U_{s_3 a_3 a_4 a'} \Lambda_{a'} V_{a a'}^*$ ，则有 V 的前 χ 个奇异向量构成裁剪矩阵，即 $V^L = V^R = V_{:,0:\chi}$ ）。

• 由于 V^L 的正交性，容易证明：

(1) 更新以后的 $A'_{s_1 a_1 a_2 a'}^{(1)} = \sum_a A_{s_1 a_1 a_2 a}^{(1)} V_{a a'}^L$ 正交性质不变；

(2) $A'_{s_3 a_3 a_4 a'}^{(3)} = \sum_a A_{s_3 a_3 a_4 a}^{(3)} V_{a a'}^R = \sum_{a'=0}^{\chi-1} U_{s_3 a_3 a_4 a'} \Lambda_{a'}$ ，故变换后的 $A^{(3)}$ 可写成定义在指标 a 上的 Λ 乘上正交张量 U ，此时，张量网络的正交中心为 Λ ；

5.2 张量网络的低秩近似



(1) 更新以后的 $A'_{s_1 a_1 a_2 a'}^{(1)} = \sum_a A_{s_1 a_1 a_2 a}^{(1)} V_{aa'}^L$ 正交性质不变;

(2) 有 $A'_{s_3 a_3 a_4 a'}^{(3)} = \sum_a A_{s_3 a_3 a_4 a}^{(3)} V_{aa'}^R = \sum_{a'=0}^{\chi-1} U_{s_3 a_3 a_4 a'} \Lambda_{a'}$, 故变换后的 $A^{(3)}$ 可写成定义在指标 a 上的 Λ 乘上正交张量 U , 此时, 张量网络的正交中心为 Λ ;

(3) 由 (1) 和 (2) 可推出, 上述裁剪方式实际上是保留了 Λ 中 χ 个最大奇异值以及相关的奇异向量, 且由于 Λ 为正交中心, 整个张量网络 $T = \text{tTr}(A^{(1)}, \dots, A^{(5)})$ 对于在指标 a 二分时的前 χ 个奇异谱为 Λ (回顾小节4.3: 正交中心与奇异谱);

(4) 因此, 上述奇异值裁剪为全局最优的裁剪, 即极小化了裁剪误差

$$\epsilon = \left| \text{tTr}(A^{(1)}, A^{(2)}, A^{(3)}, A^{(4)}, A^{(5)}) - \text{tTr}(A'^{(1)}, A^{(2)}, A'^{(3)}, A^{(4)}, A^{(5)}) \right|$$

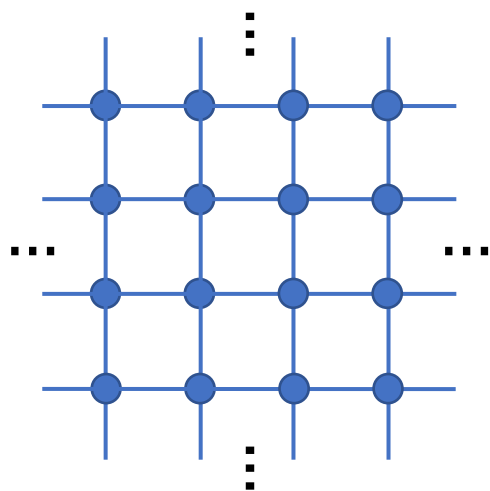
且避免了计算整个整理网络 $T_{[s_1 s_2][s_3 s_4 s_5]}$ 的奇异值分解。

* 上式中, 极小误差对应的张量构成**裁剪环境**

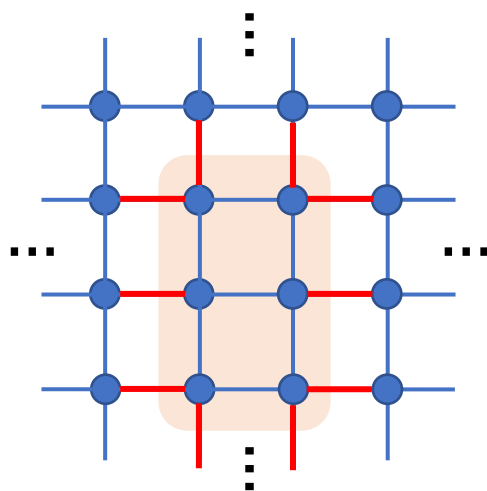
5.3 张量重整化群算法

- 下面我们考虑一种特殊的张量网络收缩计算，即由无穷多个张量构成的闭合张量网络，且所有张量都相等。记该类张量网络为 $Z = \text{tTr}([T]^\infty)$ ， T 被称为构成该张量网络的**不等价 (inequivalent) 张量**。
- 该类张量网络由两个因素完全确定：**不等价张量与网络几何结构**。
- 下面，我们以定义在无穷大正方格子上的张量网络为例，其示意图如下，显然，严格收缩该张量网络的计算复杂度会随着收缩的进行指数上升

$$\dim \sim O(D^L) \quad (L \text{ 为边界指标个数})$$



正方格子
张量网络
示意图



如果收缩一部分几何指标，例如图中黄色阴影部分内的指标，则会得到一个高阶张量，其指标为边界处的几何指标（红色）。易得，该张量的维数会随着边界处指标个数指数上升

5.3 张量重整化群算法

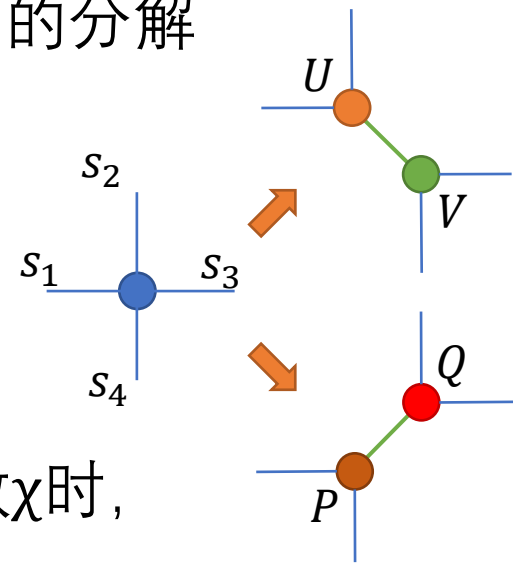
- 因此，我们需要发展算法，引入合理的近似，将计算复杂度控制到多项式级，下面，我们介绍**张量重整化群**（tensor renormalization group, TRG）算法，设第0步时 $T^{(0)} = T$ ，计算步骤如下：

步骤1： 在第t次循环中，利用SVD对不等价张量做如下两种不同的分解

$$T_{[s_1 s_2][s_3 s_4]}^{(t)} \cong \sum_{s'=0}^{\chi-1} U_{[s_1 s_2]s'} V_{[s_3 s_4]s'}$$

$$T_{[s_4 s_1][s_2 s_3]}^{(t)} \cong \sum_{s''=0}^{\chi-1} P_{[s_1 s_4]s''} Q_{[s_2 s_3]s''}$$

其中，当SVD中求和的维数（即被分解矩阵的秩）大于截断维数 χ 时，则仅保留前 χ 个最大的奇异值及对应的奇异向量（注： $T^{(t)} = T$ ）



练习： 证明当不等价张量取为 $T_{s_1 s_2 s_3 s_4} = \sum_s e^{-\beta(ss_1+ss_2+ss_3+ss_4)}$ 时（其中 s_1, s_2, s_3, s_4 为正方格子中Ising自旋 s 的四个近邻），无穷大正方格子上的张量网络 $Z = \text{tTr}([T]^\infty)$ 代表正方格子上Ising模型在倒温度为 β 时的配分函数（设玻尔兹曼常数为1）。

5.3 张量重整化群算法

经过步骤1，张量网络被变换为如有图所示的形式

步骤2： 计算如下收缩（虚框所示）

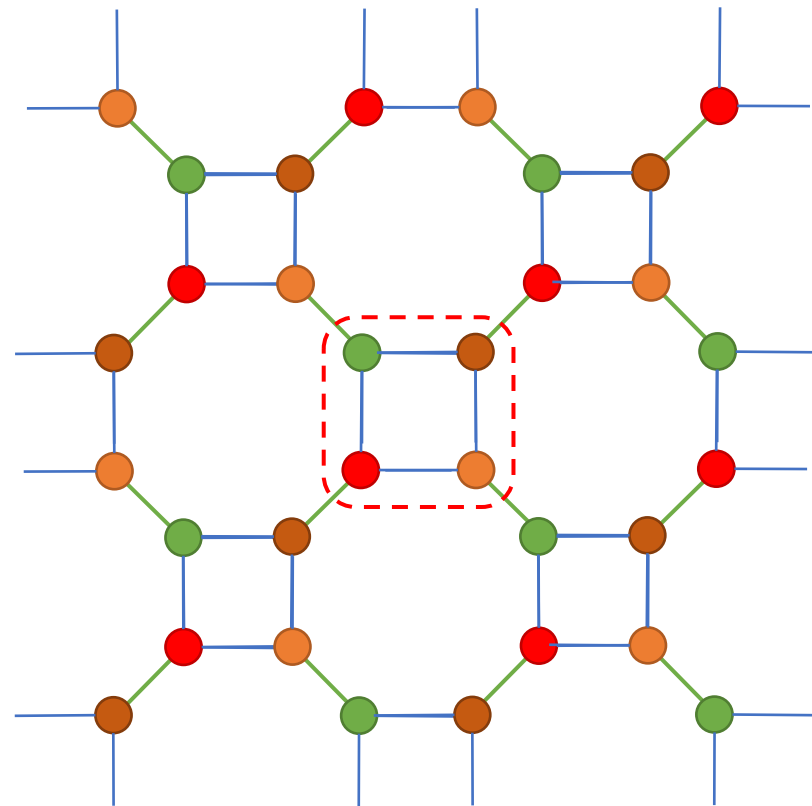
$$T'^{(t)}_{s'_1 s'_2 s'_3 s'_4} = \sum_{s_1 s_2 s_3 s_4} V_{s_3 s_4 s'_1} Q_{s_2 s_3 s'_2} U_{s_1 s_2 s'_3} P_{s_1 s_4 s'_4}$$

步骤3： 归一化张量

$$C^{(t)} = \left| T'^{(t)}_{s'_1 s'_2 s'_3 s'_4} \right|$$
$$T^{(t+1)}_{s'_1 s'_2 s'_3 s'_4} = T'^{(t)}_{s'_1 s'_2 s'_3 s'_4} / C^{(t)}$$

步骤3后，张量网络变回正方格子网络 $\text{tTr}([T^{(t+1)}]^{\infty/2^t})$,

张量总个数为最初的 $\frac{1}{2^t}$ 倍。 $C^{(t)}$ 被称为重整化因子。



5.3 张量重整化群算法

步骤4： 检查不等价张量是否收敛，如果未达到收敛阈值，则返回步骤1；如果收敛，计算张量网络收缩结果

$$Z = \prod_{t=1}^{\tilde{t}} [C^{(t)}]^{\frac{N}{2^t}} = \prod_{t=1}^{\tilde{t}} [C^{(t)}]^{2^{(\tilde{t}-t)}}$$

其中， N 为收敛时张量网络中每个张量等效代表的原张量 $T^{(0)}$ 的个数，满足 $N = 2^{\tilde{t}}$ ， \tilde{t} 为收敛时的迭代次数。这是由于每进行一步迭代，张量网络中张量的个数减小一半，相当于收缩之后的每个张量等效地代表收缩之前的两个张量。

- **注意：** 上式中 Z 是难以计算的，其取值取决于收敛次数，这显然不是一个被良好定义的量。定义**张量网络平均自由能**

$$F = -\frac{\ln Z}{N}$$

5.3 张量重整化群算法

- 定义张量网络平均自由能

$$F = -\frac{\ln Z}{N} = \ln \left[\frac{\prod_{t=1}^{\tilde{t}} [C^{(t)}]^{2^{(\tilde{t}-t)}}}{2^{\tilde{t}}} \right] = -\sum_{t=1}^{\tilde{t}} 2^{-t} \ln C^{(t)}$$

- 显然，重整化因子 $C^{(t)}$ 为有限大小的正实数，则由于因子 2^{-t} ，求和项随 t 指数减小。
- 当 t 足够大时， F 收敛，且收敛的 F 与迭代次数 \tilde{t} 无关。
- 当张量网络代表Ising模型配分函数时，根据热力学公式，在倒温度 β 下的模型的平均格点自由能满足

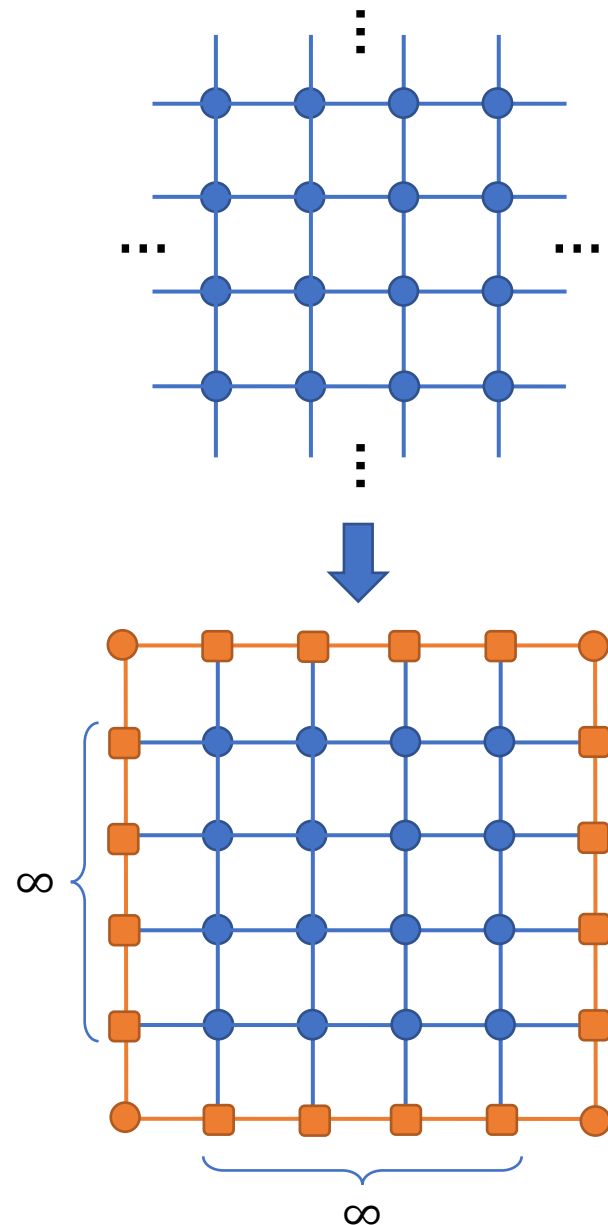
$$f(\beta) = -\frac{\ln Z}{N\beta} = \frac{F}{\beta}$$

5.3 张量重整化群算法

- TRG算法并不是严格地计算了张量网络的收缩。在步骤1中，设张量 $T^{(t)}$ 的维数为 $D \times D \times D \times D$ ，如果进行严格的奇异值分解，则分解出的新指标（奇异谱维数）为 D^2 ，即张量 $T^{(t+1)}$ 的维数为 $D^2 \times D^2 \times D^2 \times D^2$ 。
- 可以看出，如果每次迭代都进行严格的奇异值分解，则不等价张量的指标维数会随着迭代次数指数上升。
- TRG中，如果奇异值分解出的指标维数大于截断维数 χ ，则进行维数裁剪，保留前 χ 个奇异谱与对应的奇异向量。
- 该近似中的误差，对于被分解的不等价张量是极小化的（ $T_{[s_1 s_2][s_3 s_4]}^{(t)}$ 与 $T_{[s_1 s_2][s_3 s_4]}^{(t)}$ 的最优低秩近似），因此， $T^{(t)}$ 被称为裁剪环境。
- 因此，TRG的裁剪环境是局域的，即对整个张量网络而言裁剪并不是最优的，这也是限制TRG精度的主要因素。

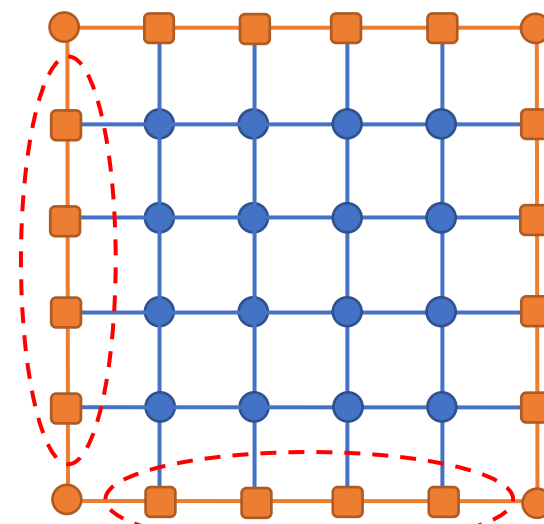
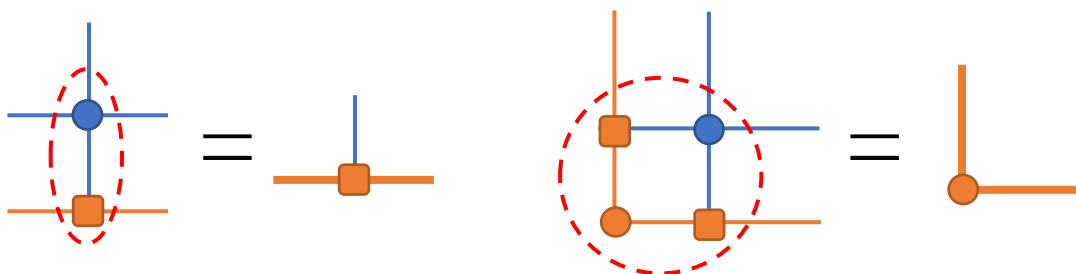
5.4 角转移矩阵重整化群算法 (CTMRG)

- 我们仍然考虑收缩由一个不等价张量构成的无穷闭合大张量网络 $Z = \text{tTr}([T]^\infty)$ 。
- 在角转移矩阵重整化群算法中，我们考虑在无穷远的“边界”处，存在变分张量，记定义在边上的三阶张量 S 为**边张量**，定义在角上的二阶张量 C 为**角矩阵**。
- 考虑到张量网络边的长度（边张量的个数）为无穷大，且由于张量网络具有**平移不变性**，我们设所有边张量相等，所有角矩阵相等。
- 解决思路是设计迭代收缩，使边张量与角矩阵达到收敛（不动点）。



5.4 角转移矩阵重整化群算法

- 边张量与角矩阵满足的**迭代收缩方程**如下：



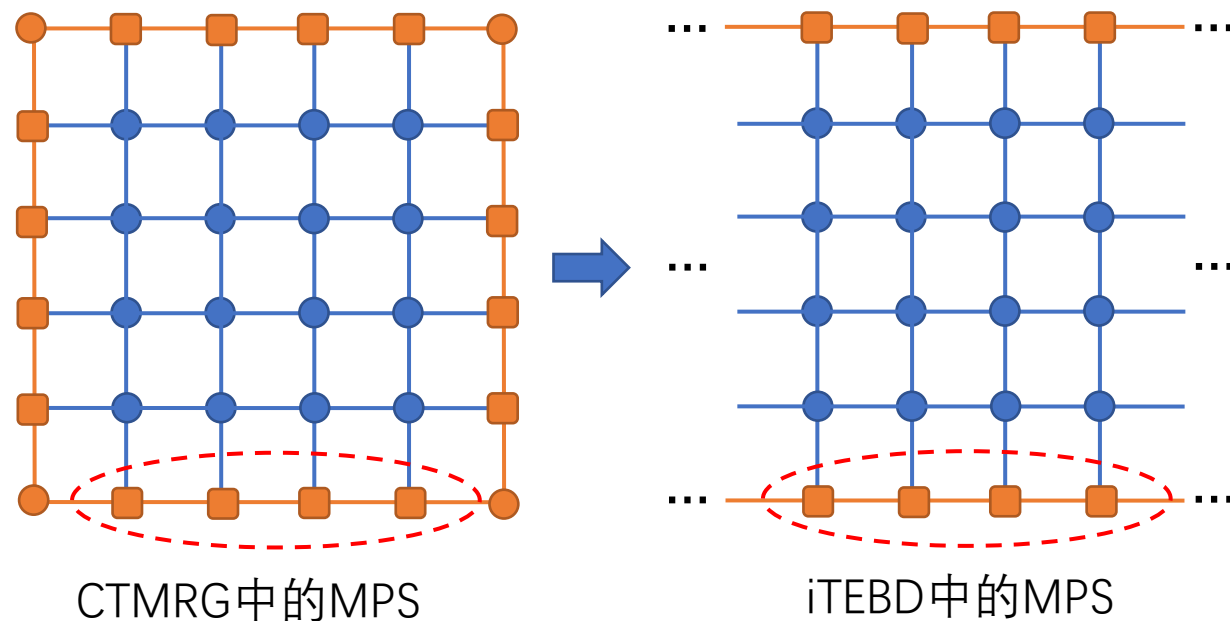
边张量构成的MPS

- 易见，每进行一次收缩，边张量与角矩阵的指标（黄色）维数扩大d倍，因此，需要利用矩阵或张量的**低秩近似**（例如2.2的**奇异值分解**或2.4的**Tucker分解**，或见5.2），**对增大的指标维数进行裁剪**，否则，指标维数会指数增大。
- 裁剪的方法并不唯一**，例如可以选择矩阵SVD对角矩阵指标进行裁剪，或Tucker分解对边张量指标维数进行裁剪，或者将边张量看成平移不变MPS，利用MPS的裁剪算法进行维数裁剪，或按CTMRG原文方法进行裁剪（所有裁剪方法本质上相同）。**不同的裁剪方法实际上对应于不同的裁剪环境。**

5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

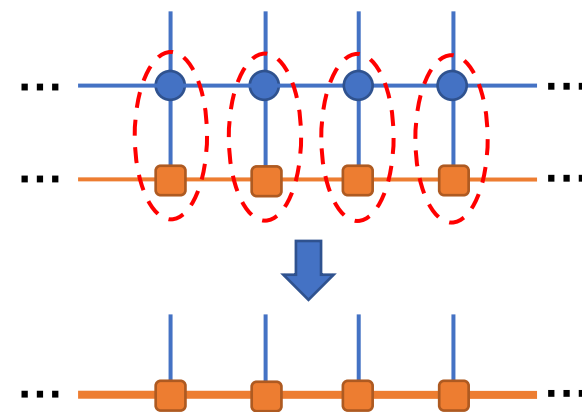
Physical Review E 93, 053310 (2016)
Physical Review B 96, 155120 (2017)

- 从5.3和5.4可以看出，不同张量网络收缩算法的关键区别在于：
(a) **收缩顺序不同**；(b) **裁剪环境不同**
- TRG是通过对张量网络进行粗粒化变换进行收缩，CTMRG是从假想的边界出发从外向内进行收缩；TRG的裁剪环境是被分解的局域张量，CTMRG的环境是角矩阵/边界张量。
- 对于CTMRG，如果仅先考虑一个方向上的MPS，并沿着其垂直方向进行收缩，便成了**infinite TEBD (iTEBD) 算法**



5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

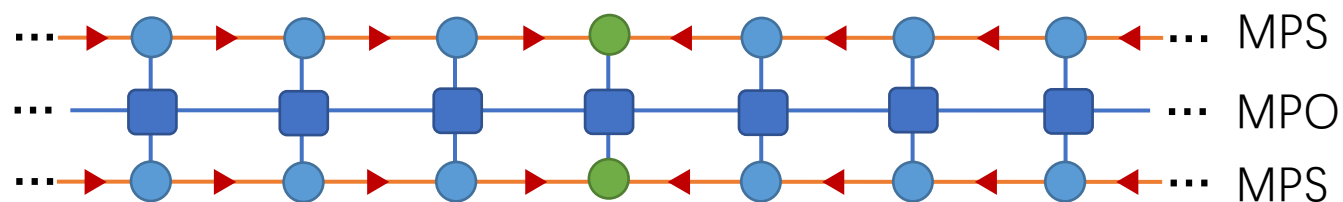
- 在iTEBD算法中，**收缩顺序**是利用MPS，首先收缩垂直方向的指标，再通过MPS辅助指标的收缩处理平行方向的指标收缩；iTEBD算法的**裁剪环境**为处于边界的MPS（回顾4.5~4.6）
- CTMRG与iTEBD属于**边界MPS算法**，类似地，Infinite DMRG (iDMRG) 实际上也属于边界MPS算法
- 下面我们介绍一种无穷大张量网络的本征自洽方法，称为**张量网络编码算法**（**TN encoding algorithm, TNE**, PRE 93, 053310 (2016)），其思想是将**无穷大TN的收缩问题**等价成为**局域自洽本征方程组求解问题**。
- TNE是收缩张量网络的一种新思路，其效率更高，且将iTEBD与iDMRG（以及“无角”CTMRG）这些看似完全不同的算法**统一到了同一个框架内**



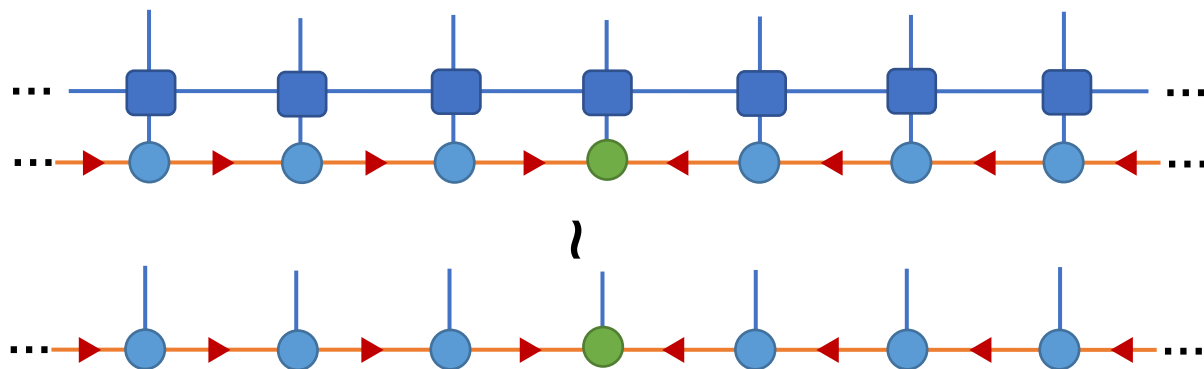
5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

- 重新审视**one-site iDMRG**（见4.7），如果将一整行张量构成的MPO当作哈密顿量，则收缩计算可表示成如下“基态”极小化问题，即

$$\min_{\langle \varphi | \varphi \rangle = 1} \langle \varphi | MPO | \varphi \rangle$$

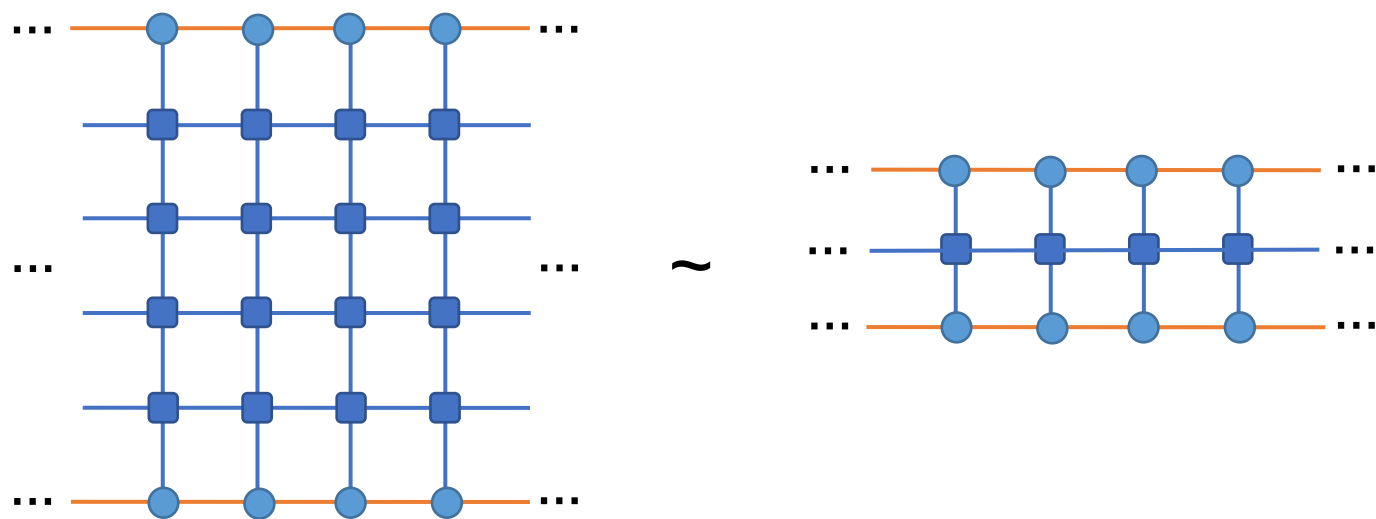


- 当变分达到极值点后，我们可近似认为，MPS为MPO本征态，于是有本征方程 $MPO|\varphi\rangle \sim |\varphi\rangle$



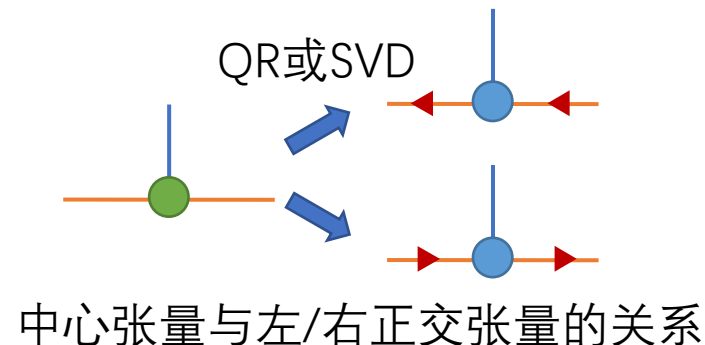
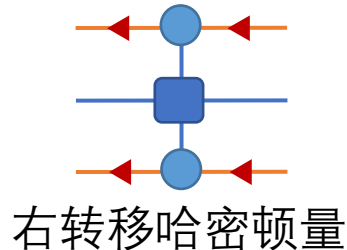
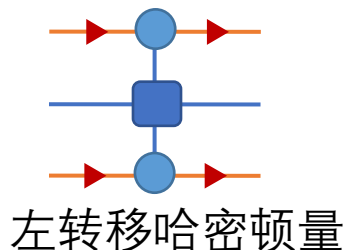
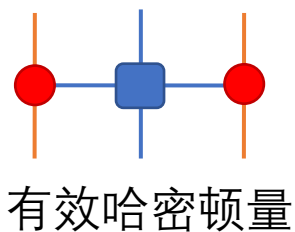
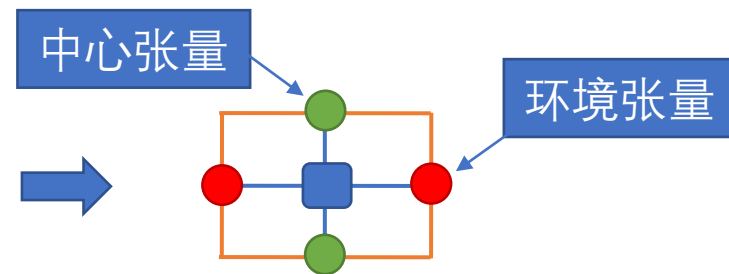
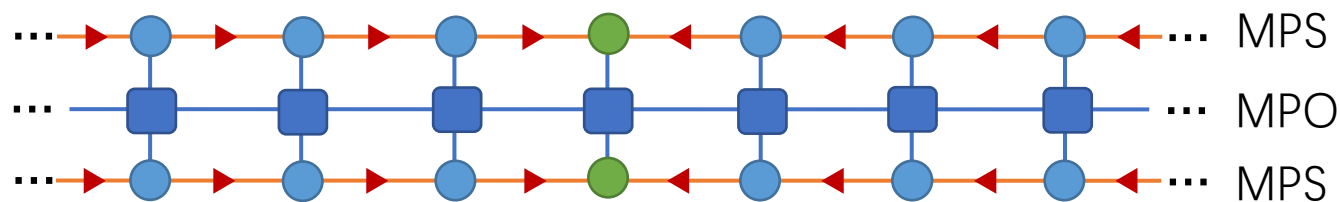
5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

- 根据上述本征方程，整个张量网络可被看成是无穷多层MPO，其收缩可以被等效为“基态”MPS与一层MPO的内积



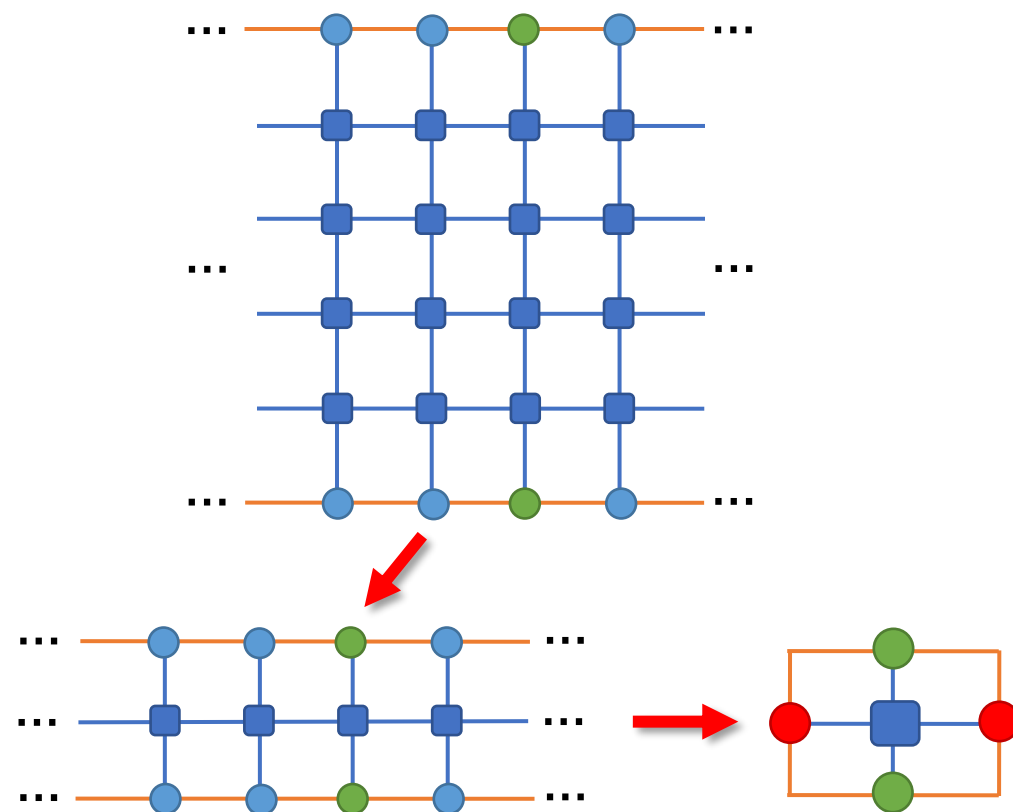
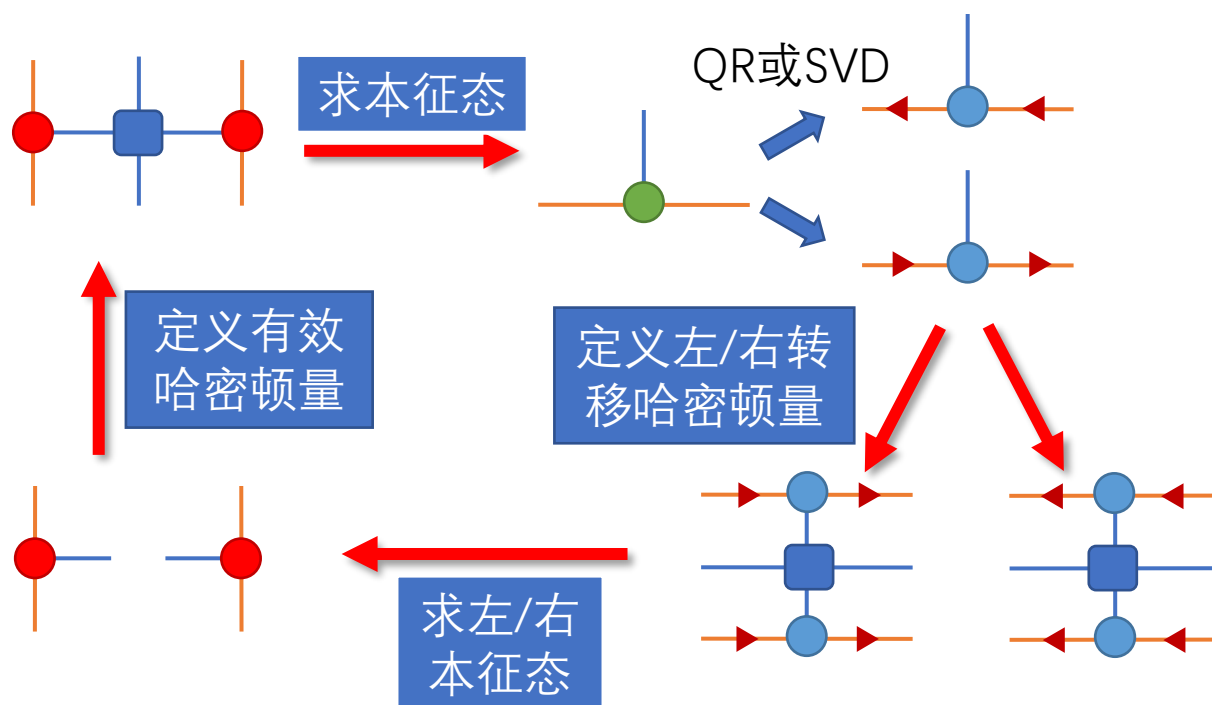
5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

- 考虑无穷大系统且使用one-site DMRG算法, MPS满足**中心正交形式**, **中心张量为有效哈密顿量的本征态**
- 左/右正交张量**可通过对中心张量进行SVD或QR分解获得 (见4.4)
- 定义**环境张量**, 分别为左/右转移哈密顿量的本征态
- 有效哈密顿量由TN中的张量及左/右环境张量构成,



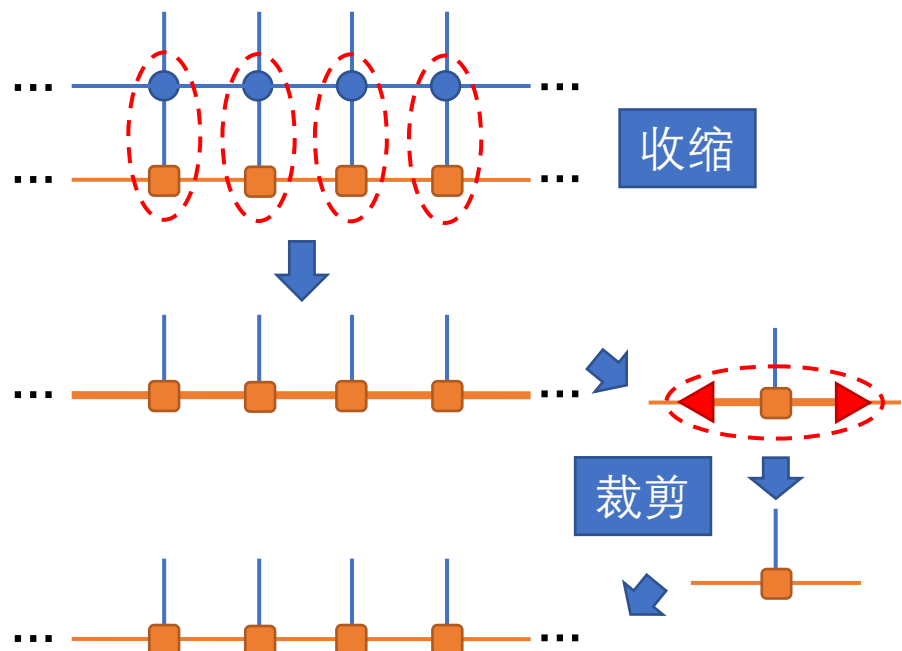
5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

- 综上，iDMRG中，需要求解的张量为**中心张量**、**左右正交张量**、**左右环境张量**
- 通过如下自洽方法，迭代求解上述张量。对应的TN收缩如右下图所示。
- **局域自洽求解**与**TN收缩**是看待iDMRG算法的两个完全不同的角度



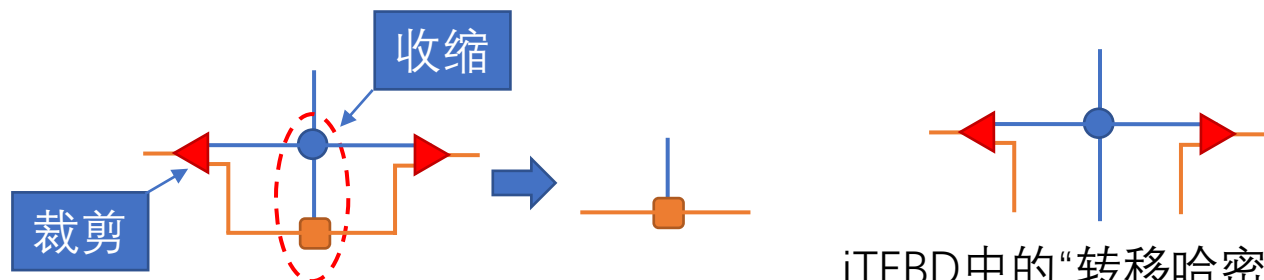
5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

- 重新审视iTEBD中对局域张量的**收缩+裁剪**操作：收缩TN中张量与MPS中张量的共有指标后，通过引入isometric张量，裁剪MPS张量辅助指标的维数



iTEBD算法TN收缩的计算过程

- 如果系统无穷大且满足平移不变性，则算法中的**所有计算都是对该不等价张量的计算**
- 当MPS收敛时，定义iTEBD中的“**转移哈密顿量**”，易得，**该张量为“转移哈密顿量”的本征态**
- 用于裁剪的isometric张量可通过定义转移矩阵的本征态，通过对本征态进行SVD获得

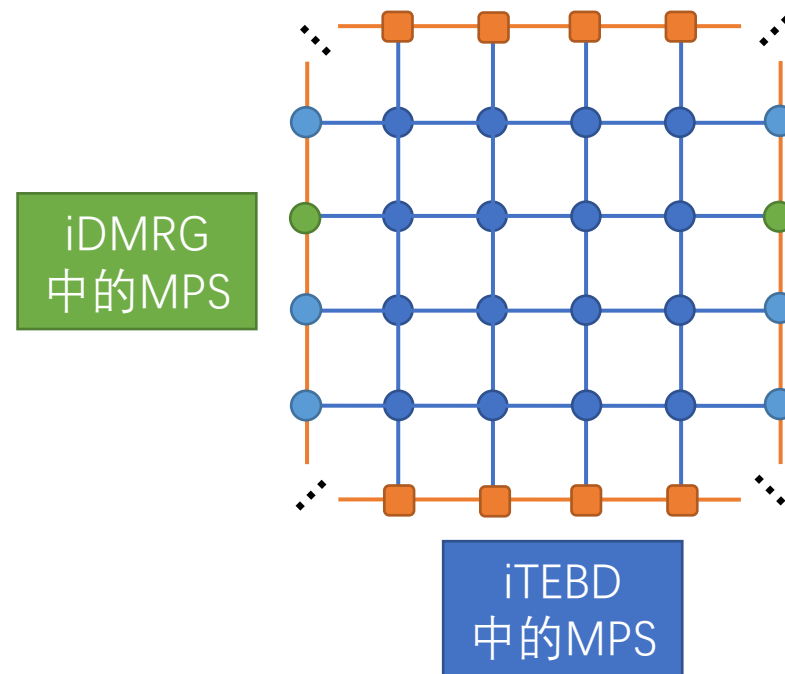


iTEBD算法的对局域张量的计算过程

iTEBD中的“转移哈密顿量”

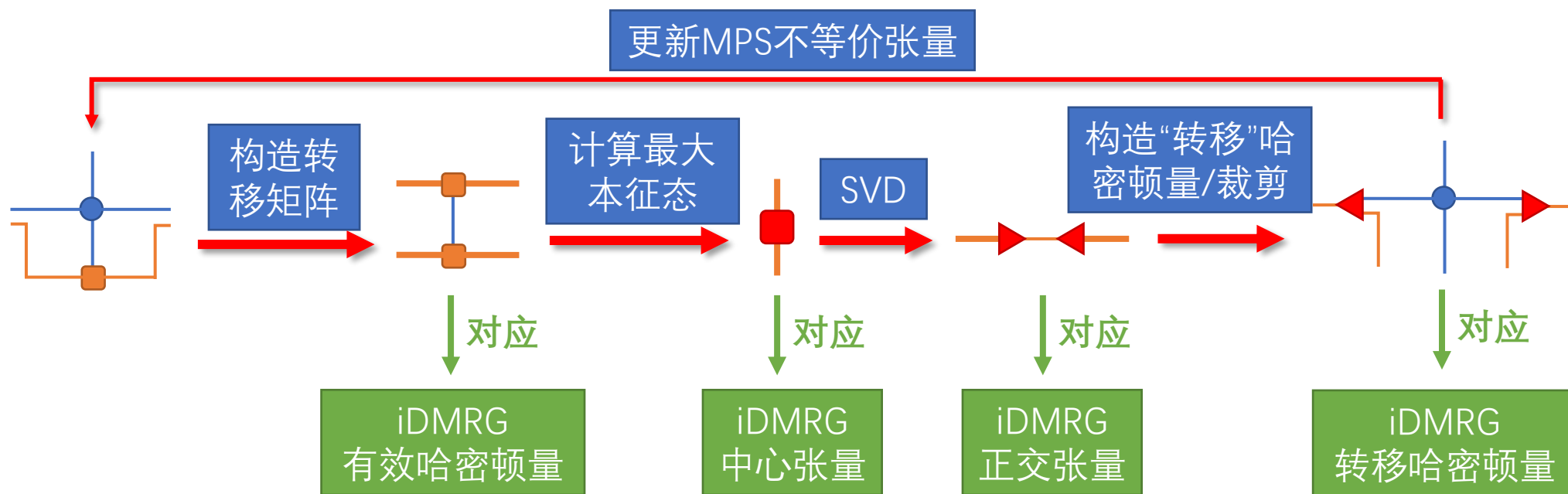
5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

- iDMRG与iTEBD可以放到同一个框架：当利用iTEBD收缩竖直方向指标来计算张量网络收缩，实际上，我们等效地同时在水平方向上进行iDMRG计算
- iTEBD计算得到的是水平方向一行张量构成的MPO的基态，iDMRG计算得到的是竖直方向一列张量构成的MPO的基态，根据本征态满足的方程，二者都解决了TN的收缩问题



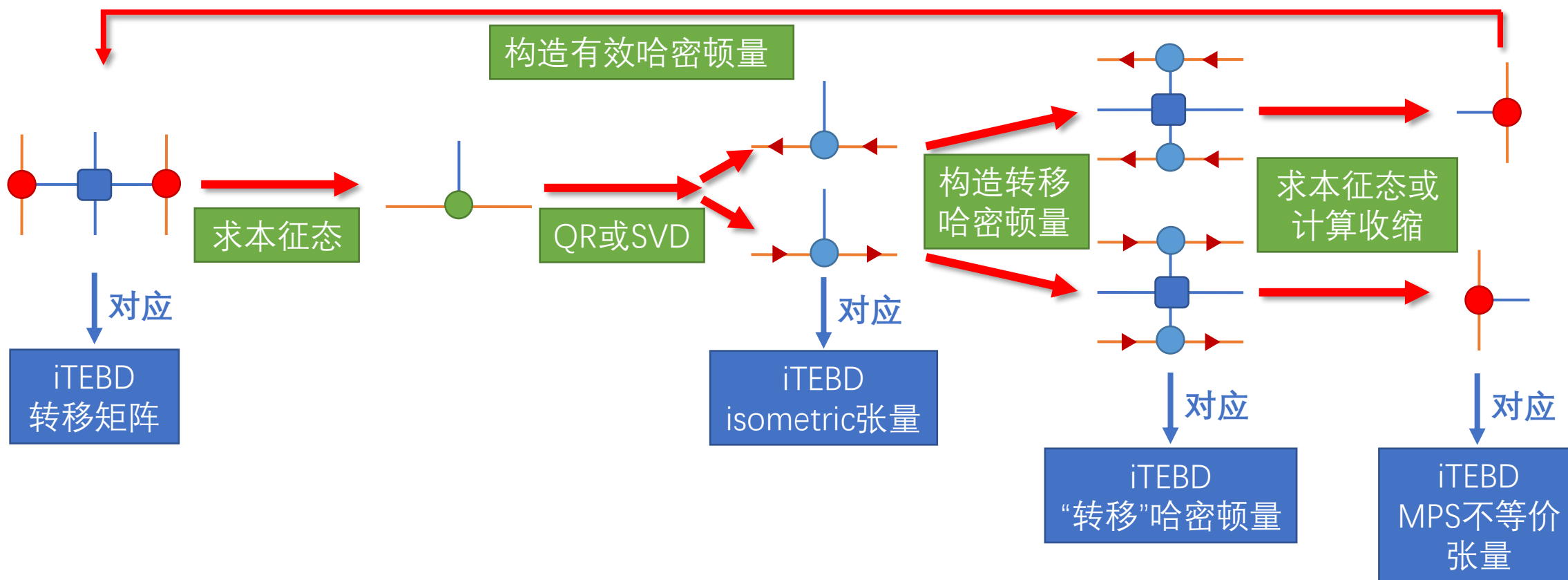
5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

- 整个iTEBD的自洽计算流程及其与iDMRG的对应关系如下：



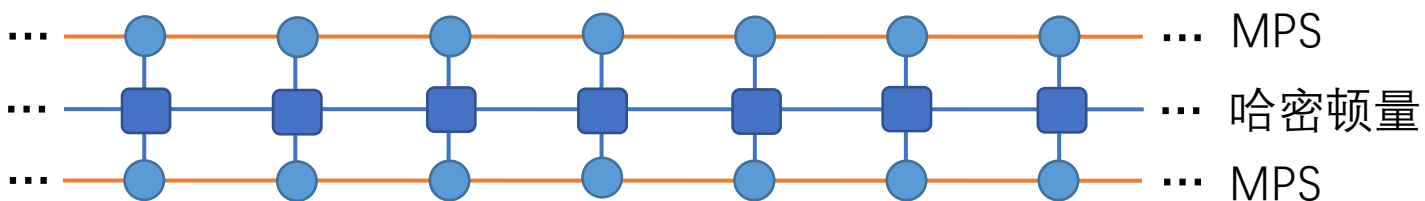
5.5 无穷大张量网络的本征自洽方法

- 整个iDMRG的自洽计算流程及其与iTEBD的对应关系如下：



5.6 张量网络的梯度更新

- 在上面介绍的方法中，我们将**想要解决的问题看成了TN的收缩**，例如iTEBD与iDMRG算法将基态的计算化成了TN的收缩计算（见4.6），而**MPS被用作为了计算TN收缩的工具**，即一行张量构成的MPO的近似本征态。
- 实际上，张量收缩问题与**变分（极值）问题**具有一定的等价性，那么梯度法求解张量网络收缩（或求基态）也是TN领域一种常用的方法，特别是**TN机器学习领域**。
- 以使用MPS求解基态为例，需要解决的极值问题为（下图对于有无平移对称性的、有限或无限大的系统均成立）：

$$E = \min_{\langle \text{MPS} | \text{MPS} \rangle = 1}$$


... MPS

... 哈密顿量

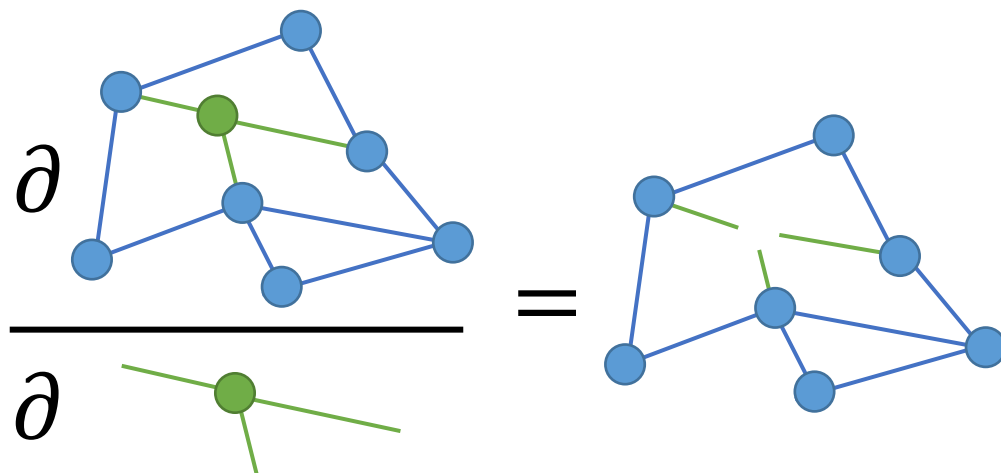
... MPS

5.6 张量网络的梯度更新

- 假设MPS中**每一个张量相互独立**（区别于uMPS），则有

Diagram illustrating the derivative of the energy with respect to a matrix element in an MPS. The diagram shows three horizontal chains: the top and bottom chains are MPS (Matrix Product States) represented by blue circles, and the middle chain is the Hamiltonian represented by blue squares. The chains are connected vertically. An arrow points to a specific square in the middle chain, labeled "空位对应于 $A^{(n)}$ ". The equation is written as $\frac{\partial E}{\partial A^{(n)}} =$ followed by the diagram.

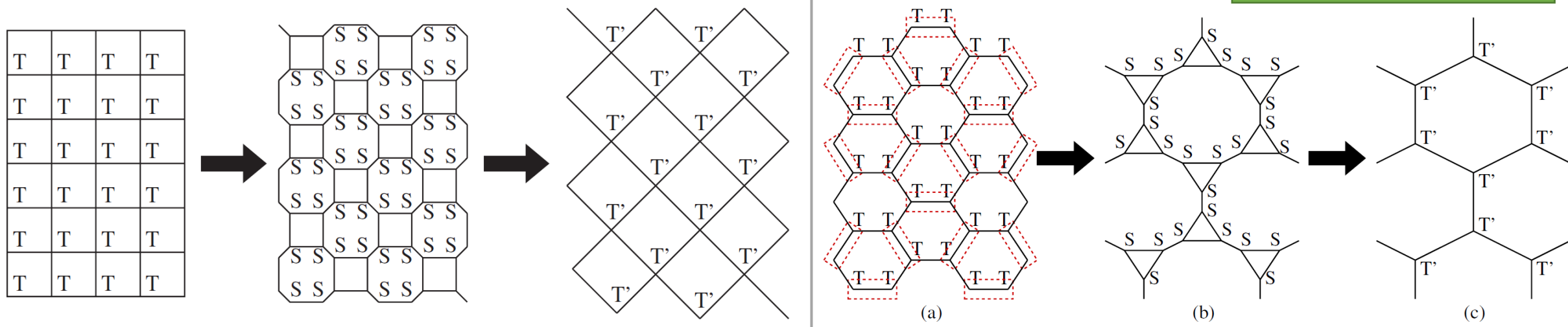
- 实际上，对于任意闭合张量网络（无开放指标），其关于某张量的导数，等于将该张量从张量网络中移除之后所得的张量网络。
- 代表导数的张量网络的开放指标即为被求导张量的指标，故计算导数张量网络的收缩后得到的张量与被求导张量同阶同维



因此，张量网络导数的计算，仍然是张量网络的收缩计算

5.7 任意有限尺寸张量网络收缩算法

- 可见，无论是张量网络重整化群算法，还是梯度算法，**其核心是计算对应张量的收缩**。
- 但是，无论是TN重整化群方法，还是encoding算法，通常都**要求张量网络的几何结构具有一定的规律**，例如一维链、正方格子、三角格子等。
- 并且，**不同几何的张量网络对应的重整化群方程（张量分解/收缩方程）往往不同**，这需要针对不同的张量网络编写相应的程序来实现张量网络收缩计算。



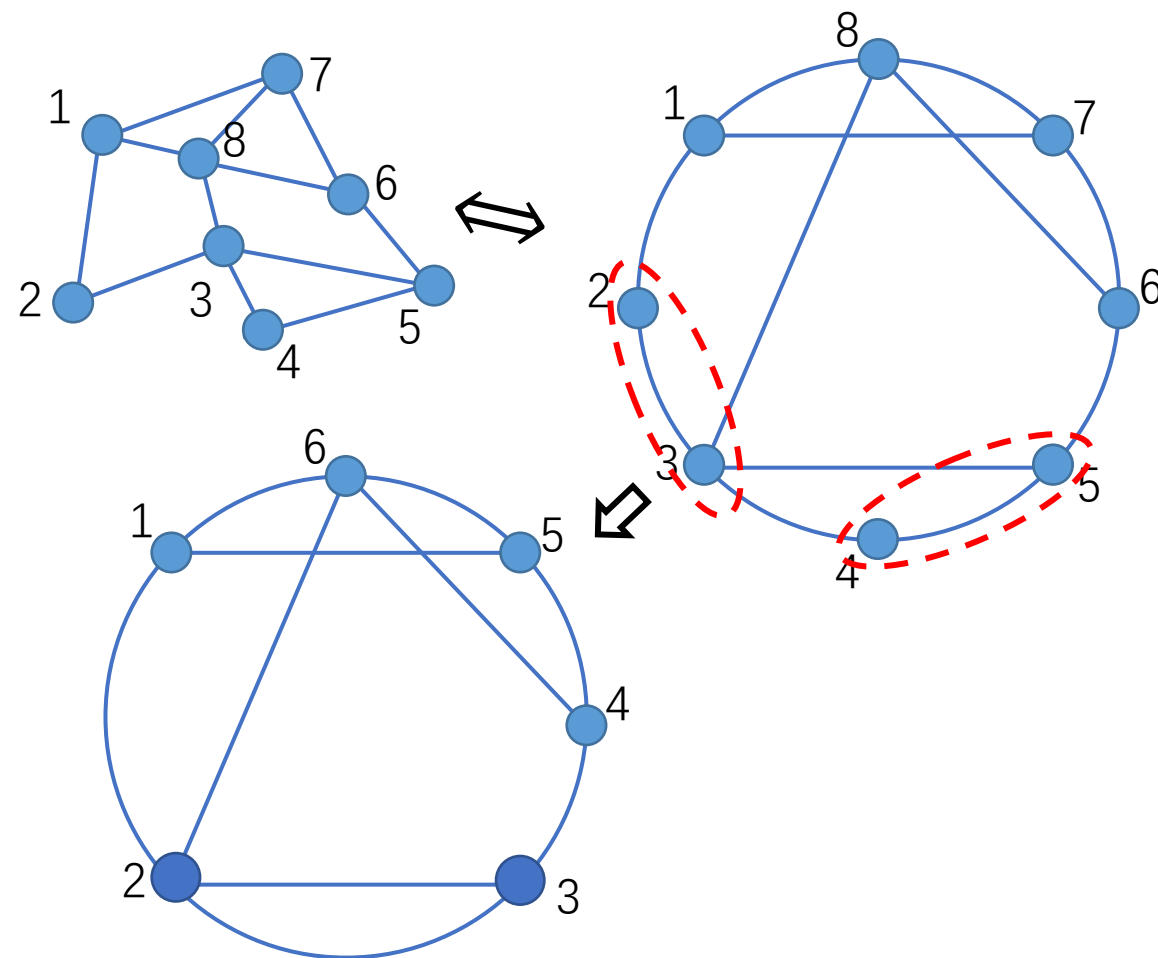
5.7 任意有限尺寸张量网络收缩算法

- 下面，我们介绍一种计算**任意张量网络收缩**的算法。

- 主要步骤：**

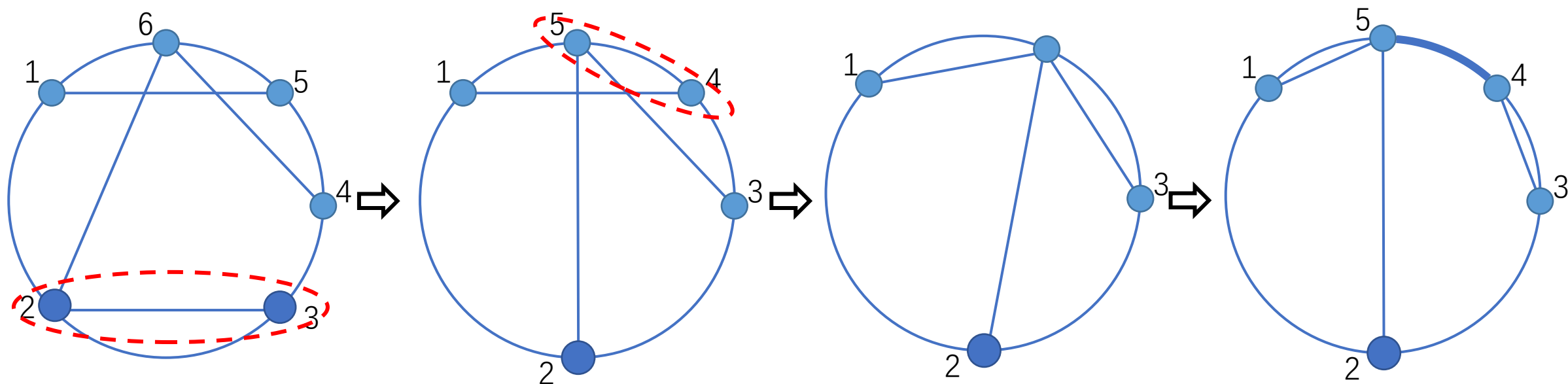
(1) 为张量编号，并重新绘制成**圈状网络**（注：张量网络由节点及其之间的连接定义，网络的具体形状不影响张量网络的定义；**右侧两种张量网络等价**）

(2) **收缩掉仅有最近邻连接的张量**，例如编号为2与4的张量。该收缩不会增加仍和指标的维数，收缩方法不唯一。收缩之后张量个数减小。



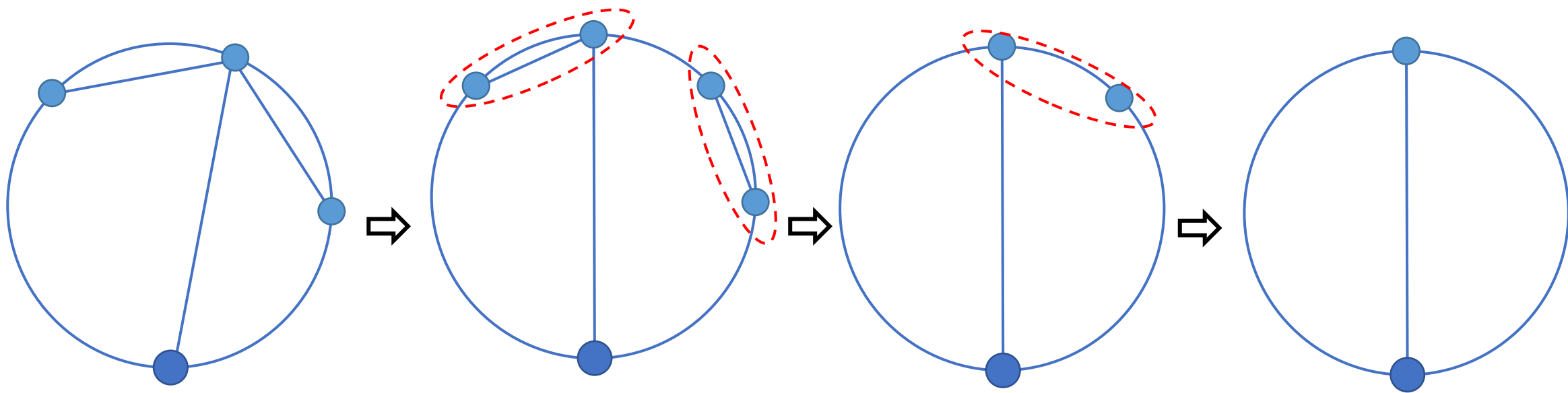
5.7 任意有限尺寸张量网络收缩算法

- (3) 再次收缩掉仅有最近邻连接的张量，例如张量2和张量3；
- (4) 若无仅有最近邻连接的张量，则进行**交换操作**，交换的目的是减小非最近邻连接的距离，例如交换张量4与张量5。交换方法为：收缩掉张量之间的最近邻连接后，使用SVD重新分解成两个张量。在SVD过程中，分解得到的新指标维数增大，如果其大于预先设置的裁剪维数，则进行维数裁剪。

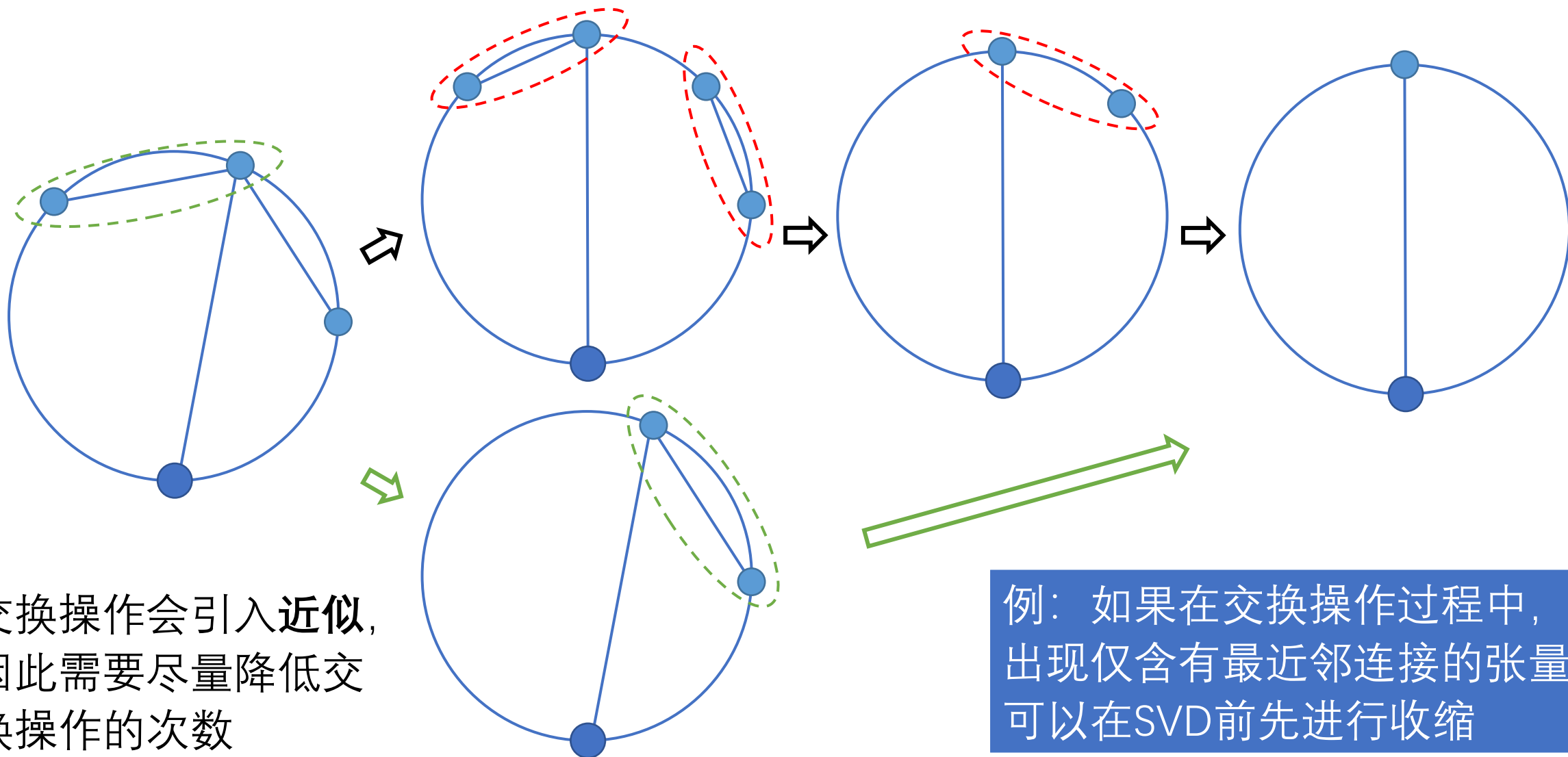


5.7 任意有限尺寸张量网络收缩算法

(4) 若交换操作后未出现仅有最近邻连接的张量，则继续进行交换操作；若出现仅有最近邻连接的张量，则回到步骤2；若只剩下两个张量，则直接进行收缩完成全部计算。

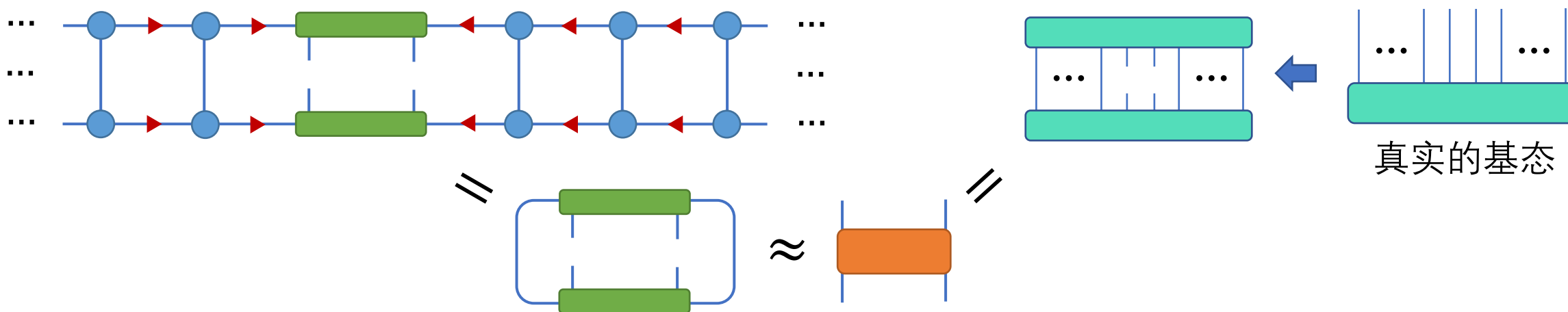


5.7 任意有限尺寸张量网络收缩算法



5.8 张量网络中的有效哈密顿量思想

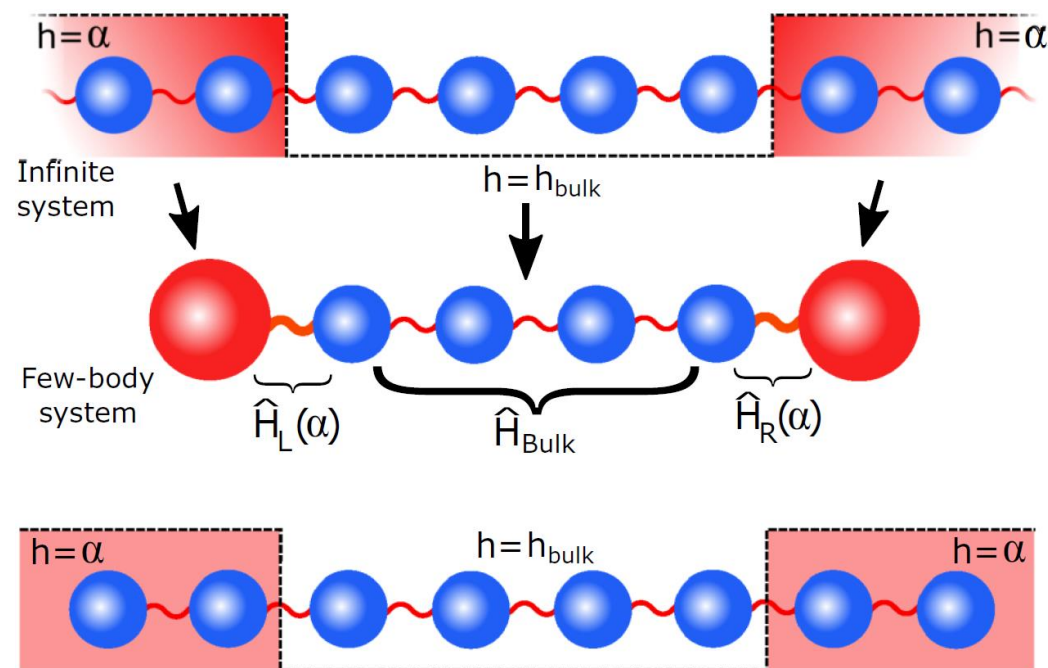
- 在DMRG和TEBD算法中，我们已经大量用到了“有效哈密顿量”的思想。以iDMRG为例，其有效哈密顿量的基态给出MPS的中心张量。
- 实际上，如果从密度矩阵的考虑，从DMRG中有效哈密顿量的基态出发，可以近似地给出原系统相应的密度矩阵。
- 具体而言，考虑two-site的iDMRG，由中心张量给出的约化密度矩阵为真实约化密度矩阵的最优近似



PRB 96, 155120 (2017)
PRB 98, 085111 (2018)
PRB 99, 205132 (2019)

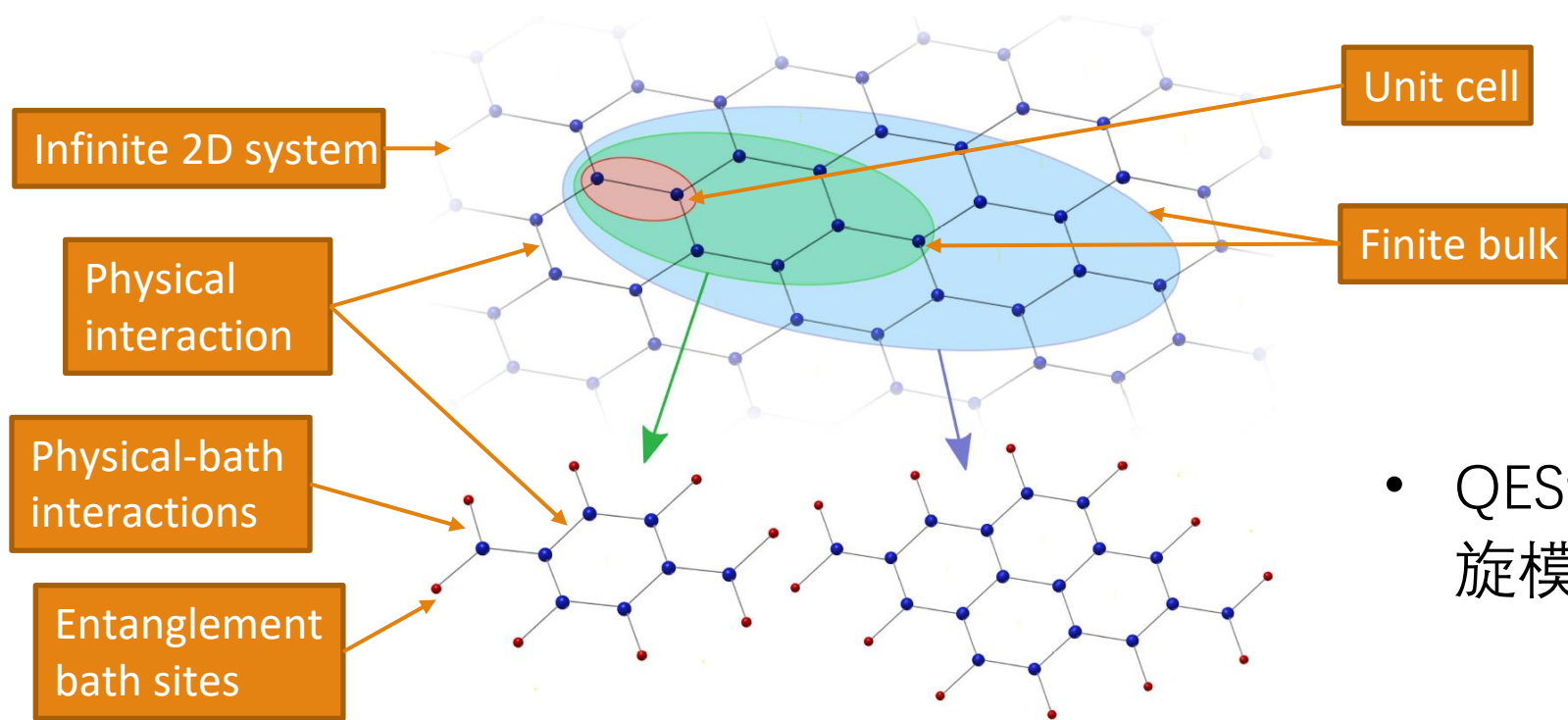
5.8 张量网络中的有效哈密顿量思想

- **量子纠缠模拟** (quantum entanglement simulation, QES) : 利用少体系最优地模拟无穷大多体系统性质
- 具体而言: 引入**纠缠库格点**, 构建包含少量物理及纠缠库格点的少体系哈密顿量, 使得将基态中纠缠库求迹后所得的物理约化密度矩阵, 为无穷大系统基态对应的约化密度矩阵的最优近似
- QES的一维版本就是DMRG (或TEBD) 算法



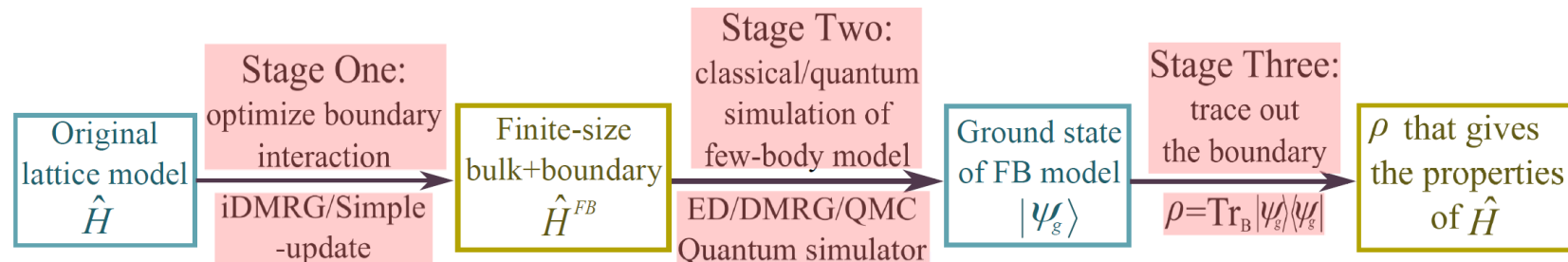
$$\hat{H}^{\text{few}} = \sum_{\langle i,j \rangle \in \text{cluster}} \hat{H}(i,j) + \sum_{\langle x \in \text{cluster}, n \in \text{bath} \rangle} \hat{H}^\partial(n,x).$$

5.8 张量网络中的有效哈密顿量思想

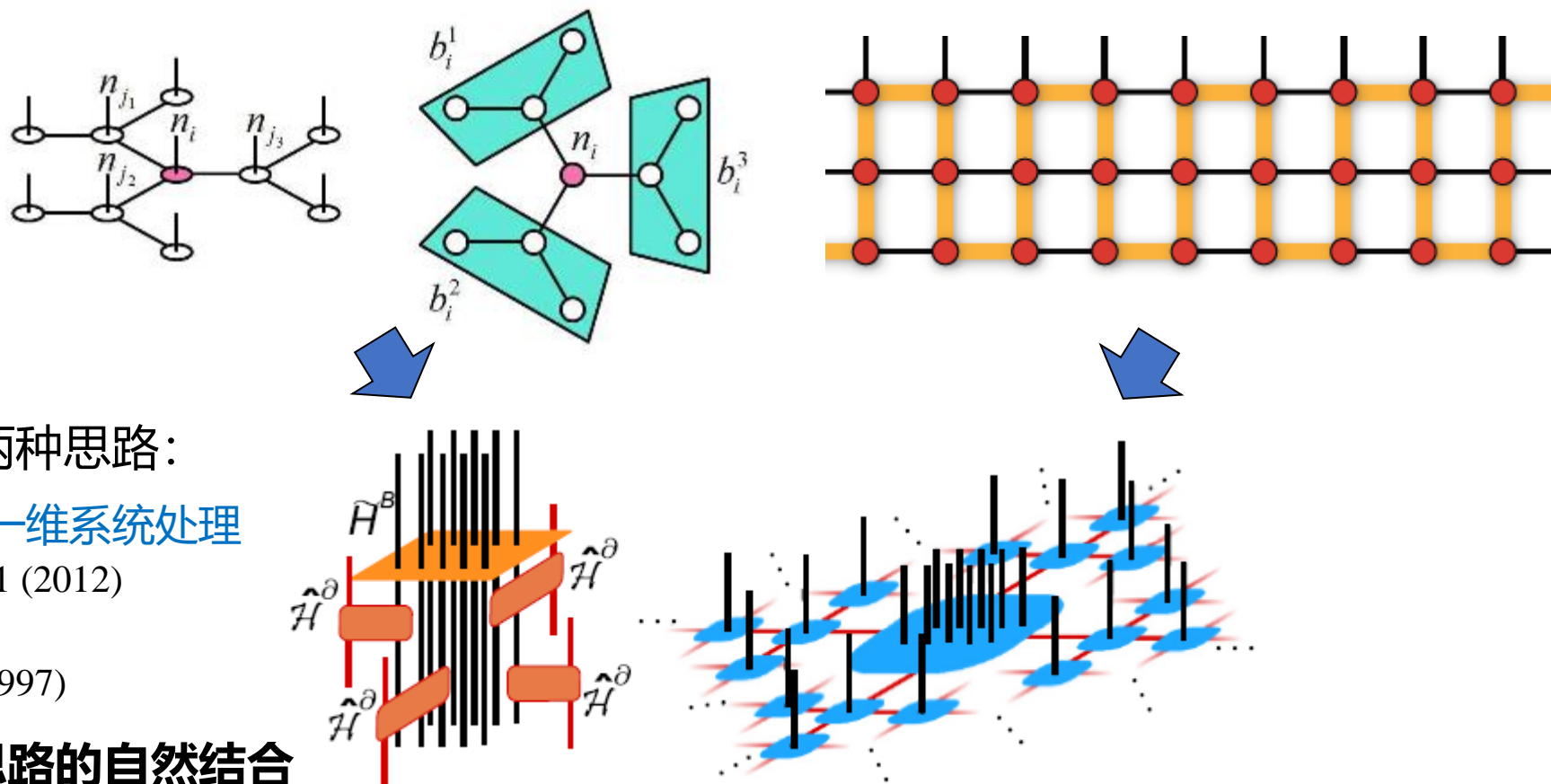


- QES计算二维六角晶格上的自旋模型的示意图如右所示

Simple few-body Hamiltonian breaks the exponential wall!!



5.8 张量网络中的有效哈密顿量思想



- DMRG扩展到高维大致有两种思路：
 - 将有限尺寸二维系统当作准一维系统处理
Ann. Rev. Cond. Matter Phys. 3, 111 (2012)
 - 计算高维tree格子上的模型
J. Phys. Condens. Matter 9, 9021 (1997)
- QES可以看作是**两种扩展思路的自然结合**
- QES所得哈密顿量可用于**构建量子模拟器**