

张量网络算法基础(四)

矩阵乘积态及其算法

冉仕举

首都师范大学物理系

2020年春



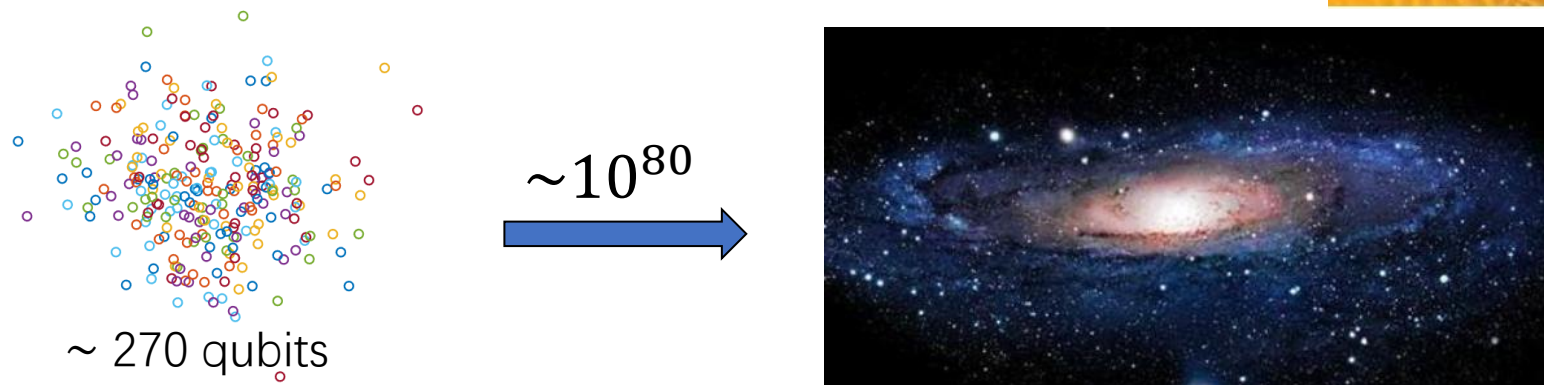
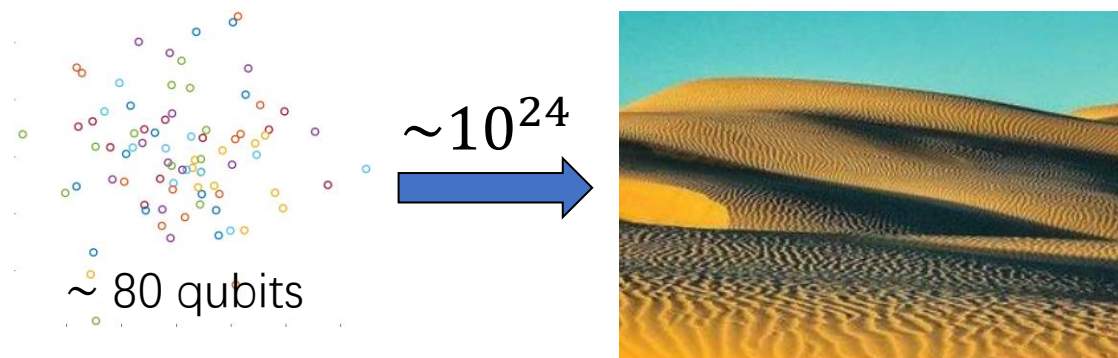
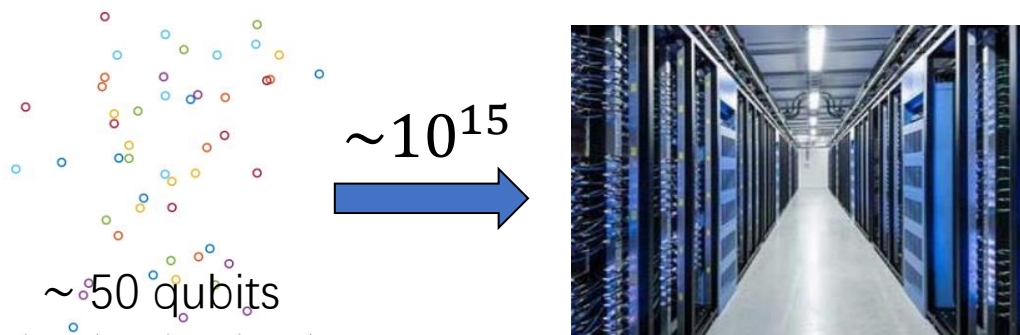
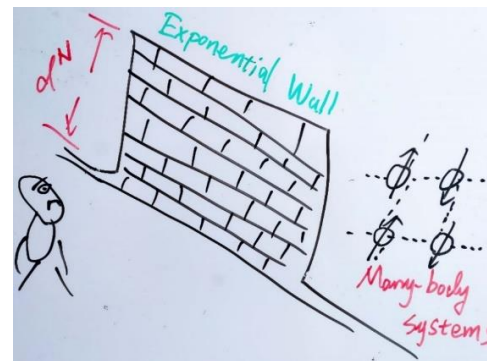
本章目录

- 4.1 Tensor-train分解
- 4.2 矩阵乘积态：定义
- 4.3 矩阵乘积态与量子纠缠
- 4.4 矩阵乘积态的规范自由度与正交形式
- 4.5 TEBD算法
- 4.6 TEBD算法的应用
- 4.7 密度矩阵重整化群
- 4.8 基于自动微分的基态变分算法
- 4.9 矩阵乘积态的涨落
- 4.10 矩阵乘积态与纠缠熵面积定律
- 4.11 MPO与一维热力学计算

4. 张量网络算法基础

4.1 Tensor-train分解

- 显然，当系统包含的自旋个数 N 增加时，量子态系数的个数随 N 指数增加，将无法使用经典计算机实现之前介绍的严格算法进行计算（“指数墙”）



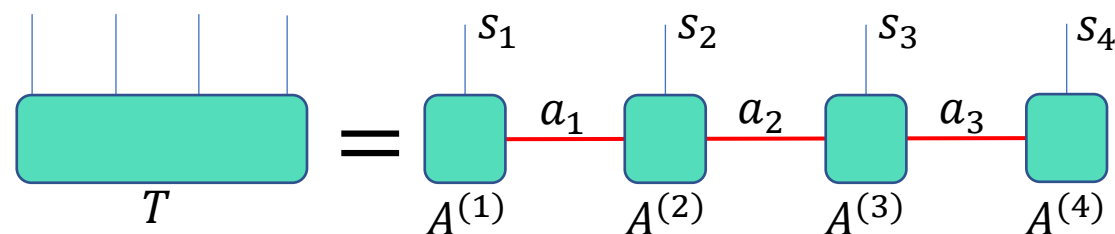
4.1 Tensor-train分解：定义

- 考虑如下问题：给定一个N阶张量，能否将其分解成N个二阶或三阶张量的缩并形式

$$T_{s_1 s_2 \dots s_N} = \sum_{a_1 a_2 \dots a_{N-1}} A_{s_1 a_1}^{(1)} A_{s_2 a_1 a_2}^{(2)} \dots A_{s_{N-1} a_{N-2} a_{N-1}}^{(N-1)} A_{s_N a_{N-1}}^{(N)} = A_{s_1:}^{(1)} A_{s_2:}^{(2)} \dots A_{s_{N-1}:}^{(N-1)} A_{s_N:}^{(N)T}$$

- 上式被称为**tensor-train (TT) 分解**或**TT形式**， $\{a_n\}$ 被称为**几何或辅助指标**。

练习：随机给定 $A^{(1)}$ 、 $A^{(2)}$ 、 $A^{(3)}$ 、 $A^{(4)}$ ，编写程序计算 T （该过程被称为TT积）



四阶张量的TT分解示意图

4.1 Tensor-train分解：分解算法

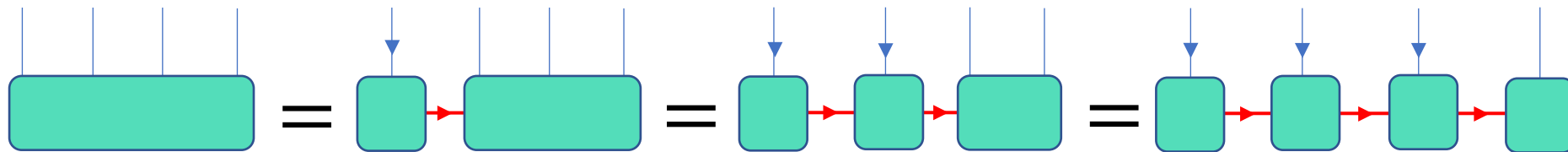
- TT分解可通过**N-1**次的奇异值分解或QR分解实现

给定 $d_1 \times d_2$ 维矩阵 M ，其**QR分解**定义为：

$$M = QR$$

其中， Q 为 $d_1 \times d_1$ 维酉矩阵，满足 $QQ^\dagger = Q^\dagger Q = I$ ， R 为 $d_1 \times d_2$ 维上三角矩阵。若采用经济的QR分解，则 Q 为 $d_1 \times \min(d_1, d_2)$ 维矩阵，满足 $QQ^\dagger = I$ （当 $d_2 > d_1$ ）或 $Q^\dagger Q = I$ （当 $d_2 < d_1$ ）， R 为 $\min(d_1, d_2) \times d_2$ 维上三角矩阵。

- 但是，不作任何近似的TT分解，在不亏秩的情况下**不能解决“指数墙”问题**（ $d_1 \times d_2$ 维矩阵**不亏秩**，意味着矩阵存在 $\min(d_1, d_2)$ 个非零奇异值）
- 例**：考虑四阶张量的TT分解，各个步骤的图形表示如下：



一般用箭头表明正交性：规定将张量的内向指标和其共轭张量收缩后得单位阵

4.1 Tensor-train分解：TT秩与低秩近似

- **TT秩**：在不引入误差得情况下对给定张量进行TT分解，存在得极小的辅助指标的维数，构成该张量的TT秩。
- N阶张量的TT秩为(N-1)维数列
- **最优TT低秩近似**：给定张量 T ，进行TT分解使得

$$\min_{\{\dim(a_n) \leq \chi\}} \left| T_{s_1 s_2 \dots s_N} - \sum_{a_1 a_1 \dots a_{N-1}} A_{s_1 a_1}^{(1)} A_{s_2 a_1 a_2}^{(2)} \dots A_{s_{N-1} a_{N-2} a_{N-1}}^{(N-1)} A_{s_N a_{N-1}}^{(N)} \right|$$

则 $\tilde{T}_{s_1 s_2 \dots s_N} = \sum_{a_1 a_1 \dots a_{N-1}} A_{s_1 a_1}^{(1)} A_{s_2 a_1 a_2}^{(2)} \dots A_{s_{N-1} a_{N-2} a_{N-1}}^{(N-1)} A_{s_N a_{N-1}}^{(N)}$ 称为 T 的最优TT低秩近似

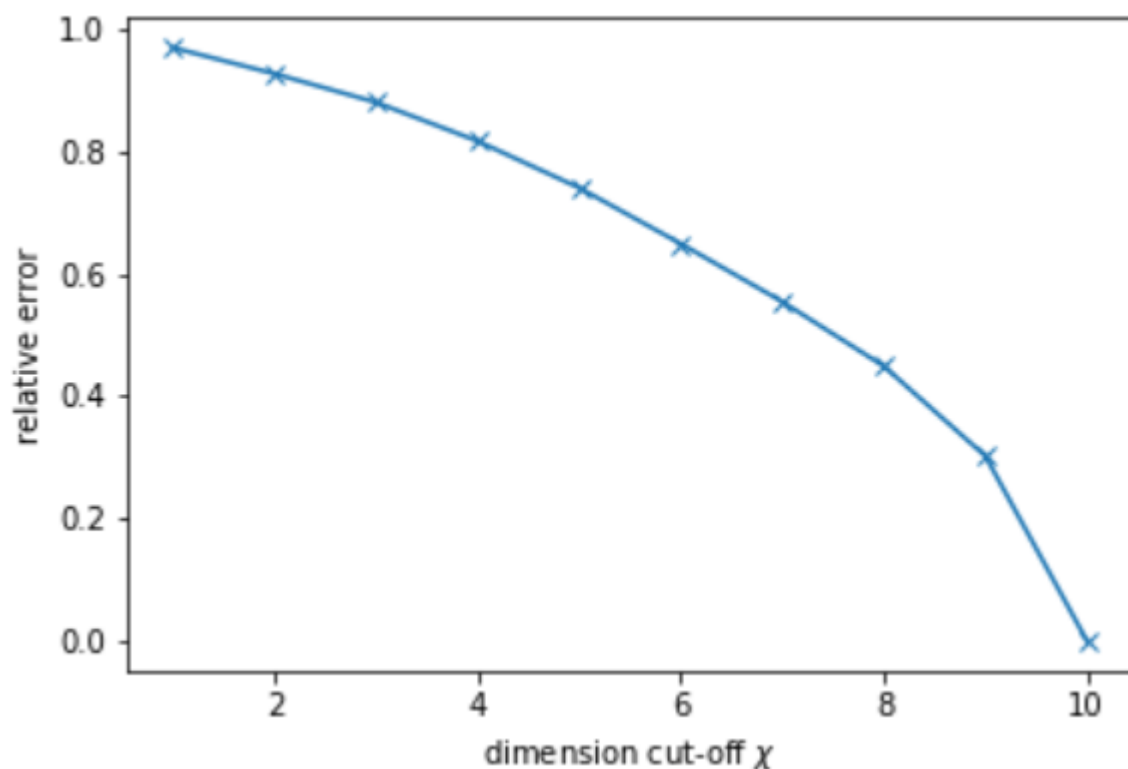
- 辅助指标维数的上限 χ 被称为**截断维数或裁剪维数**。

补充 – Isometry：对于 $d_1 \times d_2$ 维矩阵 M ，且 $MM^\dagger = I$ （当 $d_1 < d_2$ ）或 $M^\dagger M = I$ （当 $d_1 > d_2$ ），被称为isometry矩阵。

练习：设张量维数为 $d_1 \times \dots \times d_N$ ，证明：不进行维数裁剪的TT分解且不考虑亏秩，第 n 个辅助指标维数为 $\min(d_1 \times \dots \times d_n, d_{n+1} \times \dots \times d_N)$

4.1 Tensor-train分解： TT秩与低秩近似

- 获得TT低秩近似的算法不唯一，最简单的算法之一是：每次使用SVD进行分解，如果分解得到的辅助指标维数大于截断维数，则通过最大个 χ 奇异值及对应的奇异向量，将该辅助指标的维数裁剪为 χ 。
- 上述算法反复利用了奇异值分解进行矩阵低秩近似。



Jupyter Notebook:
sec4_1_TTD

随机生成 $10 \times 10 \times 10 \times 10$ 的张量进行不同截断维数 χ 的TT低秩近似下的误差

4.2 矩阵乘积态：定义

- 回到上一小节一开始提出的问题：由于基态的参数复杂度随自旋数N指数上升，故无法在经典计算机上进行严格对角化求解基态
- **利用TT形式求解基态**：假设N自旋基态（系数）可以写成由N个二阶或三阶张量构成的TT形式，则直接通过优化这N个张量，求解基态对应的最优化问题（回顾：3.4 基态对应的最优化问题）

$$E_g = \min_{\substack{\langle g|g\rangle=1 \\ |g\rangle \text{ in TT-form}}} \langle g|\hat{H}|g\rangle$$

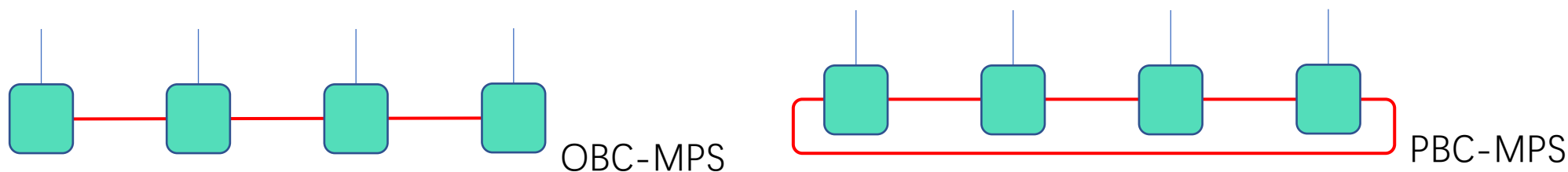
- 一般而言，**矩阵乘积态（matrix product state, MPS）** 定义为系数满足TT形式的量子态：

$$|\varphi\rangle = \sum_{s_1 s_2 \dots s_N} \varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} \prod_{n=1}^N |s_n\rangle$$

$$\varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} = \sum_{a_1 a_2 \dots a_{N-1}} A_{s_1 a_1}^{(1)} A_{s_2 a_1 a_2}^{(2)} \dots A_{s_{N-1} a_{N-2} a_{N-1}}^{(N-1)} A_{s_N a_{N-1}}^{(N)} = A_{s_1:}^{(1)} A_{s_2::}^{(2)} \dots A_{s_{N-1}::}^{(N-1)} A_{s_N:}^{(N)T}$$

4.2 矩阵乘积态：定义

- 在MPS中，开放的指标 (s_n) 代表物理希尔伯特空间，被称为**物理指标**；被两个不同张量共有的指标 (a_n) 被称为**辅助指标**（或**虚拟指标**、**几何指标**），默认进行求和计算。
- 矩阵乘积态的两种边界条件：
 - 开发边界条件** (open boundary condition, OBC)
 - 周期边界条件** (periodic boundary condition, PBC)
- 长度 $N=4$ 的MPS在OBC和PBC下的示意图如下（MPS的长度定义为所含张量的个数）：



练习：对照OBC-MPS的表达式

$$\varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} = \sum_{a_1 a_2 \dots a_{N-1}} A_{s_1 a_1}^{(1)} A_{s_2 a_1 a_2}^{(2)} \dots A_{s_{N-1} a_{N-2} a_{N-1}}^{(N-1)} A_{s_N a_{N-1}}^{(N)} = A_{s_1:}^{(1)} A_{s_2:}^{(2)} \dots A_{s_{N-1}:}^{(N-1)} A_{s_N:}^{(N)T}$$

写出PBC下MPS的表达式

4.2 矩阵乘积态：定义

- 严格对角化中，量子态参数个数随N指数增加：

$$\#(|\varphi\rangle) \sim O(d^N)$$

- MPS中，给定辅助指标截断维数为 χ ，易得，MPS包含参数的个数随N仅**线性增加**，满足

$$\#(MPS) \sim O(Nd\chi^2)$$

- MPS将表征量子多体态的参数复杂度，由**指数级降低到线性级**！
- **重要：MPS的关键在于，我们并不需要知道指数复杂的量子态系数是什么，也不需要进行TT分解，而是直接假设基态具备MPS的形式，直接处理MPS中的“局域”张量，从而绕过了“指数墙”问题**
- **问：这样做的代价是什么？ 答：误差**

4.3 矩阵乘积态与量子纠缠

- 前面说过，在求基态时，我们是在并不知道基态是什么的情况下，直接假设基态具备给定截断维数的MPS态，因此，我们并不能确定这样的MPS态可以有效地描述基态。
- 这种情况下，我们需要一个量来帮助我们判断MPS的有效性。
- 回顾：基于奇异值分解的矩阵低秩近似有裁剪误差刻画，约等于被裁减的奇异值的范数

$$\varepsilon \sim |\Lambda_{R':R-1}|$$

- 因此我们可以从奇异值谱入手定义刻画MPS有效性的量；具体而言：**量子纠缠**

[与爱因斯坦的“相对论”一样，“量子纠缠”这个词汇应该是目前最广为人所知的物理学词汇之一了。“量子纠缠”的魅力来源之一是其浪漫主义色彩、神秘主义与哲学性，但更重要的是它的**数学性与物理实证性**。我们希望通过本课地学习，能够从概率论和张量网络的角度，更为数学地、严谨地理解量子纠缠]

4.3 矩阵乘积态与量子纠缠

- **斯密特分解 (Schmidt decomposition) 与纠缠谱 (entanglement spectrum)** : 给定N自旋 (或其它自由度) 的量子态

$$|\varphi\rangle = \sum_{s_1 s_2 \dots s_N} \varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} \prod_{\otimes n=1}^N |s_n\rangle$$

将自旋二分成两部分 $\{s_n\} = (s_1, \dots, s_K) \cup (s_{K+1}, \dots, s_N)$ ($K \geq 1$, 意味着二分
的两部分不能为空集), 并对矩阵化的系数进行**奇异值分解**

$$\varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} = \sum_{\alpha=0}^{D-1} U_{s_1, \dots, s_K, \alpha} \Lambda_{\alpha} V_{s_{K+1}, \dots, s_N, \alpha}^*$$

对应于将量子态进行如下分解:

$$|\varphi\rangle = \sum_{\alpha=0}^{D-1} \Lambda_{\alpha} |U^{\alpha}\rangle |V^{\alpha}\rangle$$

4.3 矩阵乘积态与量子纠缠

量子态的斯密特对应于其
系数矩阵的奇异值分解

对应于将量子态进行如下分解：

$$|\varphi\rangle = \sum_{\alpha=0}^{D-1} \Lambda_{\alpha} |U^{\alpha}\rangle |V^{\alpha}\rangle$$

其中， $|U^{\alpha}\rangle$ 和 $|V^{\alpha}\rangle$ 为 D 个量子态，满足

$$|U^{\alpha}\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_K} U_{s_1, \dots, s_K, \alpha} \prod_{\otimes n=1}^K |s_n\rangle$$

$$|V^{\alpha}\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_K} V_{s_{K+1}, \dots, s_N, \alpha}^* \prod_{\otimes n=K+1}^N |s_n\rangle$$

该分解被称为量子态的**斯密特分解**， Λ 称为**量子态的纠缠谱**

4.3 矩阵乘积态与量子纠缠

- 由于 $|\varphi\rangle$ 归一，有 $|\Lambda| = 1$ ，也就是说

$$\sum_{\alpha=0}^{D-1} \Lambda_{\alpha}^2 = 1$$

- 考虑有 $|\varphi\rangle = \sum_{\alpha=0}^{D-1} \Lambda_{\alpha} |U^{\alpha}\rangle |V^{\alpha}\rangle$ ，定义 $|\varphi\rangle$ 被投影到 $|U^{\alpha}\rangle |V^{\alpha}\rangle$ 态的概率满足

$$P_{\alpha} = \Lambda_{\alpha}^2$$

显然，概率满足归一化条件 $\sum_{\alpha} P_{\alpha} = 1$ （请思考：该概率定义是满足Born概率诠释与量子测量的波函数坍缩假设的）

- 根据概率论**香农熵**（也称**信息熵**）的定义 $E^S = -P_{\alpha} \sum_{\alpha} \ln P_{\alpha}$ ，根据该公式，定义量子态的**纠缠熵**：

$$S = - \sum_{\alpha=0}^{D-1} \Lambda_{\alpha}^2 \ln \Lambda_{\alpha}^2$$

即：量子态的纠缠熵，就是经典信息论中香农熵的量子版本，刻画信息量大小。

练习：

1. 由 $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$ ，证明 $|\Lambda| = 1$ 。
2. 利用严格对角化方法，求解不同自旋z方向磁场下，二自旋海森堡模型的基态，并进行斯密特分解，画出纠缠熵关于磁场的曲线（磁场取0到1，间隔0.02）。

4.3 矩阵乘积态与量子纠缠

- 观察：奇异值分解中 $\varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} = \sum_{\alpha=0}^{D-1} U_{s_1, \dots, s_K, \alpha} \Lambda_{\alpha} V_{s_{K+1}, \dots, s_N, \alpha}^*$, U 和 V 为 **isometries**, 满足正交性:

$$U^{\dagger} U = \sum_{s_1, \dots, s_K} U_{s_1, \dots, s_K, \alpha}^* U_{s_1, \dots, s_K, \alpha'} = I, \quad V^{\dagger} V = \sum_{s_1, \dots, s_K} V_{s_1, \dots, s_K, \alpha}^* V_{s_1, \dots, s_K, \alpha'} = I$$

- 我们将根据上述性质来计算开放边界MPS的纠缠。设MPS态满足

$$\varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} = \sum_{a_1 a_1 \dots a_{N-1}} A_{s_1 a_1}^{(1)} \dots A_{s_K a_{K-1} a_K} \underline{\Lambda_{a_K}^{(K)}} A_{s_{K+1} a_K a_{K+1}}^{(K+1)} \dots A_{s_N a_{N-1}}^{(N)}$$

如下条件满足时, $\Lambda^{(K)}$ 为MPS给出的前K个自旋与其余自旋之间的纠缠:

- $\sum_{s_1} A_{s_1 a_1}^{(1)} A_{s_1 a'_1}^{(1)*} = I_{a_1 a'_1}$
- $\sum_{s_n a_{n-1}} A_{s_n a_{n-1} a_n}^{(n)} A_{s_n a_{n-1} a'_n}^{(n)*} = I_{a_n a'_n} \quad (1 < n < K)$
- $\sum_{s_N} A_{s_N a_{N-1}}^{(N)} A_{s_N a'_{N-1}}^{(N)*} = I_{a_{N-1} a'_{N-1}}$
- $\sum_{s_n a_{n+1}} A_{s_n a_{n-1} a_n}^{(n)} A_{s_n a_{n-1} a_n}^{(n)*} = I_{a_{n-1} a'_{n-1}} \quad (K < n < N)$
- $\Lambda_0^{(K)} \geq \Lambda_1^{(K)} \geq \dots \geq 0$

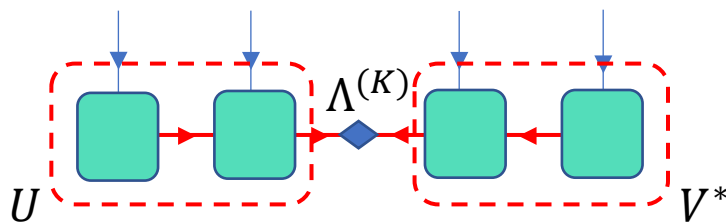
4.3 矩阵乘积态与量子纠缠

- 如下**左/右正交条件**满足时， $\Lambda^{(K)}$ 为MPS给出的前K个自旋与其余自旋之间的纠缠：

$$\begin{aligned}
 & \text{a. } \sum_{s_1} A_{s_1 a_1}^{(1)} A_{s_1 a'_1}^{(1)*} = I_{a_1 a'_1} \\
 & \text{b. } \sum_{s_n} A_{s_n a_{n-1} a_n}^{(n)} A_{s_n a_{n-1} a'_n}^{(n)*} = I_{a_n a'_n} \quad (1 < n < K) \\
 & \text{c. } \sum_{s_N} A_{s_N a_{N-1} a_N}^{(N)} A_{s_N a_{N-1} a'_{N-1}}^{(N)*} = I_{a_{N-1} a'_{N-1}} \\
 & \text{d. } \sum_{s_n} A_{s_n a_{n-1} a_n}^{(n)} A_{s_n a_{n-1} a'_n}^{(n)*} = I_{a_{n-1} a'_{n-1}} \quad (K < n < N) \\
 & \text{e. } \Lambda_0^{(K)} \geq \Lambda_1^{(K)} \geq \dots \geq 0
 \end{aligned}$$

} 左正交条件 ($n < K$)
 } 右正交条件 ($n > K$)

- 前面K个tensor的收缩构成SVD中的U，其余（除 $\Lambda^{(K)}$ 外）tensor的收缩构成SVD中的V。称之为MPS的**中心正交形式**，或**SVD形式**。
- 以长度为4的MPS为例：



练习：1. 给出SVD的MPS中，写出 U 和 V 与MPS中张量之间的表达式；
 2. 证明 U 和 V 满足正交性 $U^\dagger U = I$, $V V^\dagger = I$ 。

4.4 矩阵乘积态的规范自由度与正交形式

- 计算MPS的Schmidt分解的方法：在不改变其所表示的量子态的前提下，将MPS变换成上述SVD形式。
- 改变MPS中的tensor，但不改变其所表示的量子态，被称为**规范变换**（gauge transformation）。
- 定义MPS的**规范自由度**（gauge degrees of freedom）：对于同一个量子态，可由多组由不同的张量组成的MPS态来表示其系数
- 例如，可通过如下方式对MPS进行规范变换：已知MPS满足

$$\varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} = A_{s_1:}^{(1)} \dots A_{s_n::}^{(n)} A_{s_{n+1}::}^{(n+1)} \dots A_{s_N:}^{(N)T}$$

引入任意可逆矩阵 U 及其逆矩阵 U^{-1} ，定义

$$B_{s_n::}^{(n)} = A_{s_n::}^{(n)} U, \quad B_{s_{n+1}::}^{(n+1)} = U^{-1} A_{s_{n+1}::}^{(n+1)}$$

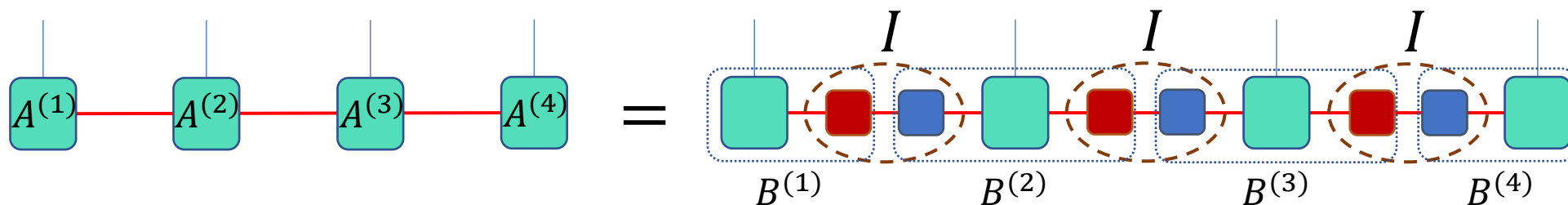
易得同一个量子态的两种MPS表示，有：

$$\varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} = A_{s_1:}^{(1)} \dots A_{s_n::}^{(n)} A_{s_{n+1}::}^{(n+1)} \dots A_{s_N:}^{(N)T} = A_{s_1:}^{(1)} \dots B_{s_n::}^{(n)} B_{s_{n+1}::}^{(n+1)} \dots A_{s_N:}^{(N)T}$$

4.4 矩阵乘积态的规范自由度与正交形式

- 一般而言，MPS规范变换如下图所示，其中，一对红蓝方块代表任意可逆矩阵及其逆矩阵（虚线框）；
- 将变换矩阵作用到各个张量 $\{A^{(n)}\}$ 上，得到新的张量 $\{B^{(n)}\}$ （点线框），有：

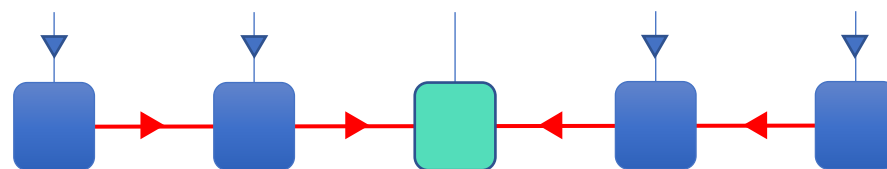
$$\varphi_{S_1 S_2 \dots S_N} = A_{S_1:}^{(1)} \dots A_{S_n:}^{(n)} A_{S_{n+1}:}^{(n+1)} \dots A_{S_N:}^{(N)T} = B_{S_1:}^{(1)} \dots B_{S_n:}^{(n)} B_{S_{n+1}:}^{(n+1)} \dots B_{S_N:}^{(N)T}$$



- 可通过引入新的**约束条件**，固定MPS的规范自由度，使得给定量子态具备唯一的MPS表示。
- 常用的约束条件为构成MPS张量的**正交条件**。

4.4 矩阵乘积态的规范自由度与正交形式

- 定义MPS的**中心正交形式**：当张量 $\{A^{(n)}\}$ ($n < K$) 满足左正交条件， $\{A^{(n)}\}$ ($n > K$) 满足右正交条件时，MPS被称为具有 **K -中心正交形式**。图形表示如下（回顾：箭头代表正交条件的方向）



- 易得：
 - (a) **正交中心的移动**。可通过多次的SVD或QR分解进行规范变换，从 K -中心正交形式变换成 K' -中心正交形式 ($K \neq K'$)；
 - (b) **通过中心正交形式计算MPS纠缠谱**。对于MPS的SVD形式可得，在 $(s_1, \dots, s_K) \cup (s_{K+1}, \dots, s_N)$ 二分下的纠缠谱 $\Lambda^{(K)}$ ，即为**中心处张量** $A_{s_K a_{K-1} a_K}^{(K)}$ 的**奇异值谱**，有奇异值分解 $A_{s_K a_{K-1} a_K}^{(K)} = \sum_{\beta} U_{s_K a_{K-1} \beta} \Lambda_{\beta}^{(K)} V_{a_K \beta}$

练习：当MPS满足 K -中心正交时，证明 $\langle \varphi | \varphi \rangle = |A^{(K)}|$ （中心处张量的二范数）

该裁剪算法的“最优性”由矩阵SVD低秩近似的最优性保证

4.4 矩阵乘积态的规范自由度与正交形式

- 基于K-中心正交形式，可对MPS辅助指标维数进行**最优裁剪**：设需要裁剪的指标为第K个辅助指标，裁剪方法为
 - (a) 进行中心正交化，将正交中心放置于第K个张量；
 - (b) 对中心张量进行奇异值分解 $A_{s_K a_{K-1} a_K}^{(K)} = \sum_{\beta=0}^{\chi-1} U_{s_K a_{K-1} \beta} \Lambda_{\beta}^{(K)} V_{a_K \beta}$ ，仅保留前 χ 个奇异值及对应的奇异向量（ χ 为截断维数）；
 - (c) 将第K个张量更新为 $U \rightarrow A^{(K)}$ ；
 - (d) 将第（K+1）个张量更新为 $\sum_{a_K} \Lambda_{\beta}^{(K)} V_{a_K \beta} A_{s_{K+1} a_K a_{K+1}}^{(K+1)} \rightarrow A_{s_{K+1} \beta a_{K+1}}^{(K+1)}$
- 上述裁剪也可通过将正交中心放置在第（K+1）个张量上来实现。
- MPS的中心正交形式对于多个张量网络算法算法极为重要，我们将在后面介绍**TEBD**与**DMRG**算法

练习：1. 画出上述第（b）和（d）步对应的图形表示；
2. 基于Jupyter notebook中给出的OBCMPS类，编写程序，实现对给定MPS的任意辅助指标进行最优裁剪的程序，并利用纠缠谱估算不同截断维数下的裁剪误差

4.4 矩阵乘积态的规范自由度与正交形式

- 扩展：MPS的另一个重要的正交形式被称为**正则形式**（**canonical form**），其定义如下：给定量子态 $|\varphi\rangle = \sum_{s_1 s_2 \dots s_N} \varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} \prod_{n=1}^N |s_n\rangle$ ，其系数满足满足

$$\varphi_{s_1 s_2 \dots s_N} = A_{s_1:}^{(1)} \Lambda^{(1)} A_{s_2:}^{(2)} \Lambda^{(2)} \dots \Lambda^{(N-2)} A_{s_{N-1}:}^{(N-1)} \Lambda^{(N-1)} A_{s_N:}^{(N)T}$$

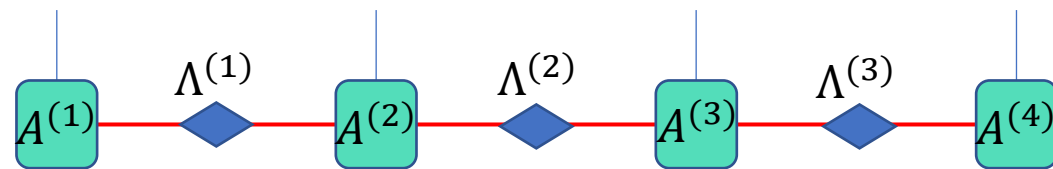
其中， $\Lambda^{(n)}$ 为正定对角正，对角元素按非升序排列，且满足

a. $\sum_{s_1} A_{s_1 a_1}^{(1)} A_{s_1 a'_1}^{(1)*} = I_{a_1 a'_1}$

b. $\sum_{s_n} \Lambda_{a_{n-1} a_{n-1}}^{(n-1)} A_{s_n a_{n-1} a_n}^{(n)} \Lambda_{a_{n-1} a_{n-1}}^{(n-1)} A_{s_n a_{n-1} a'_n}^{(n)*} = I_{a_n a'_n}$

c. $\sum_{s_n} A_{s_n a_{n-1} a_n}^{(n)} \Lambda_{a_n a_n}^{(n)} A_{s_n a'_{n-1} a_n}^{(n)*} \Lambda_{a_n a_n}^{(n)} = I_{a_{n-1} a'_{n-1}} \quad (1 < n < K)$

d. $\sum_{s_N} A_{s_N a_{N-1}}^{(N)} A_{s_N a'_{N-1}}^{(N)*} = I_{a_{N-1} a'_{N-1}}$



- 在正则形式中，每一处的二分纠缠普显式地出现在了MPS的定义中；该定义在研究无穷长平移不变的MPS时，十分有用

4.5 TEBD算法

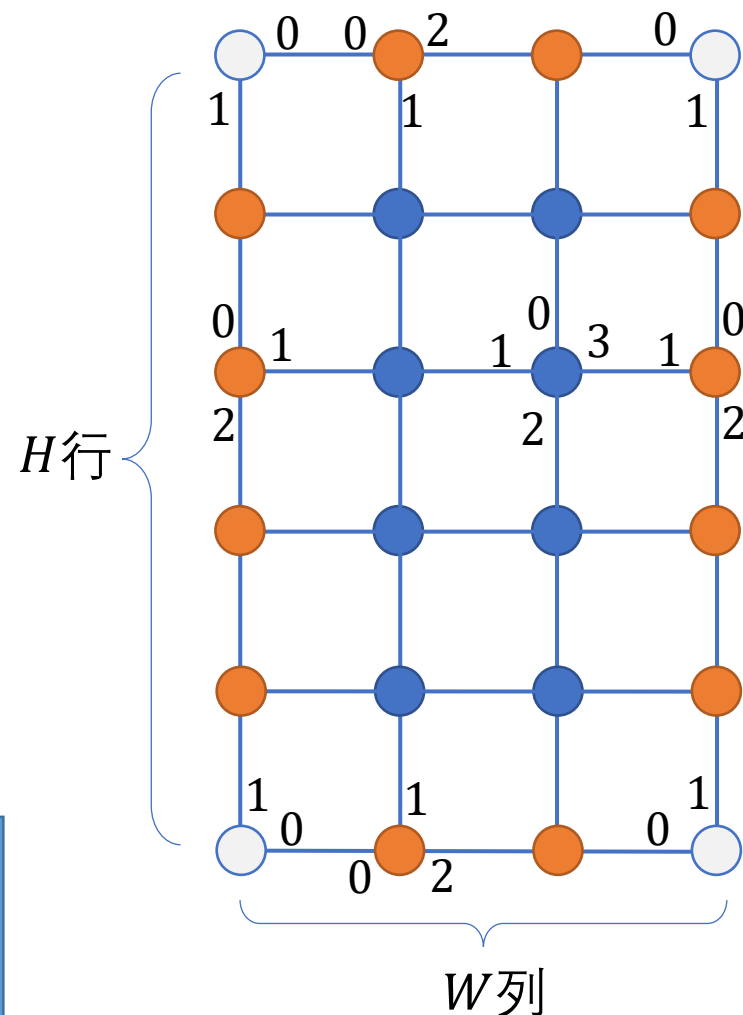
PRL 93, 040502 (2004)



G. Vidal

- 给定一个由 $(W \times H)$ 个张量组成的张量网络（设 H 为偶数），其图形表示构成一个正方格子，如图所示。
- 该张量网络由3种不等价张量构成，在四个角上的张量为二阶张量 C （蓝色空心圆圈），在边上的张量为三阶张量 B （黄色圆圈）在内部为四阶张量 T （蓝色圆圈），各个张量的指标顺序如图
- 很多物理问题可最终等价于类似的张量网络收缩计算问题，例如，**经典模型热力学配分函数的计算、量子格点模型基态和含时动力学计算等。**
- 但是，严格收缩类似张量网络的计算代价，随着 W 或 H 指数增大，属于**NP难问题**，因此，必须采取近似方法计算收缩。

练习：当 W 与 H 较小时，尝试严格收缩张量网络，并在给定收缩顺序下，估算内存消耗随 W 与 H 之间的关系

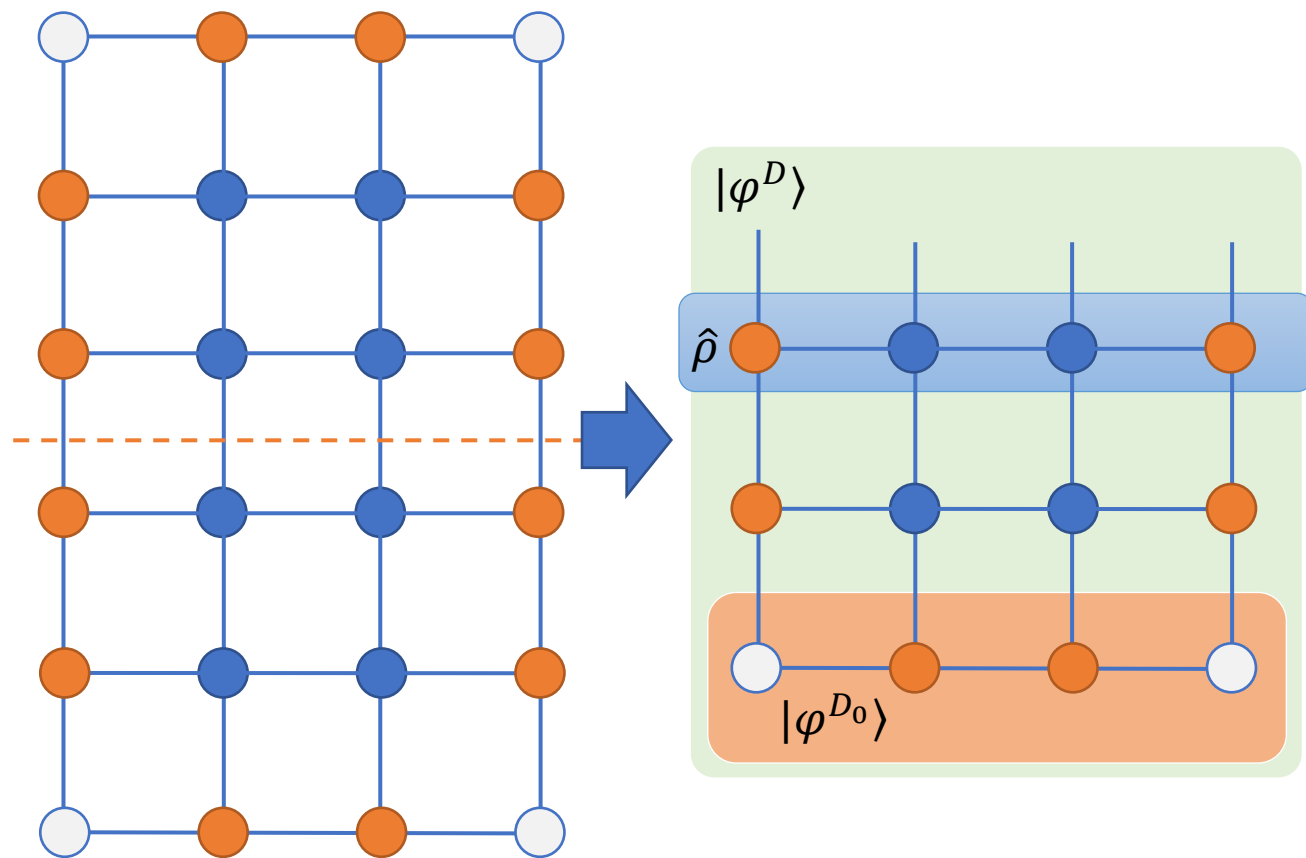


4.5 TEBD算法

PRL 93, 040502 (2004)

- **TEBD** (全称time-evolving block decimation) 为一种基于矩阵乘积态的、近似收缩张量网络的数值算法。
- **主要思路**: 从处于边界的张量构成的MPS开始, 一行一行 (或一列一列) 地收缩张量网络
- 将张量网络沿水平 (或竖直) 方向从中间分成两部分, 以下半部分为例, 下边界的张量实际上组成了一个长度为 W 的MPS态, 记为 $|\varphi^{D_0}\rangle$, 整个下半部分收缩的结果可记为另一个MPS态 $|\varphi^D\rangle$, 中间每一层张量构成一个作用在 $|\varphi^{D_0}\rangle$ 上的算符, 记为 $\hat{\rho}$, 则有

$$|\varphi^D\rangle = \hat{\rho}^{\frac{H}{2}-1} |\varphi^{D_0}\rangle$$



4.5 TEBD算法

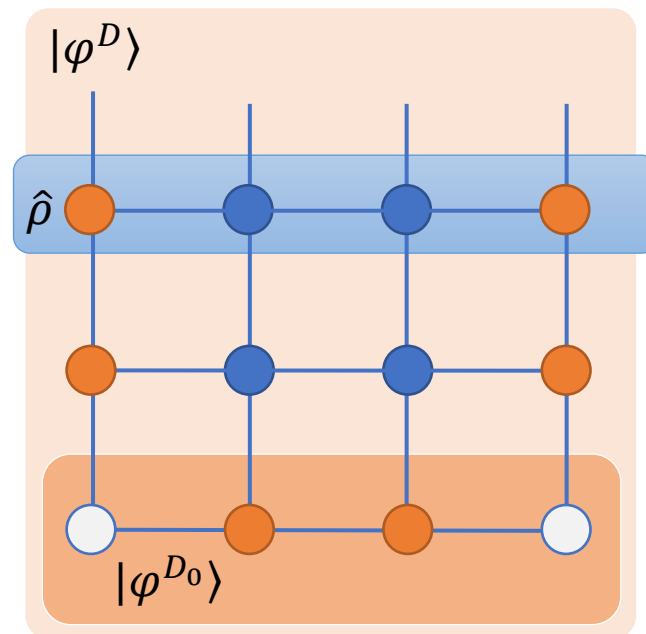
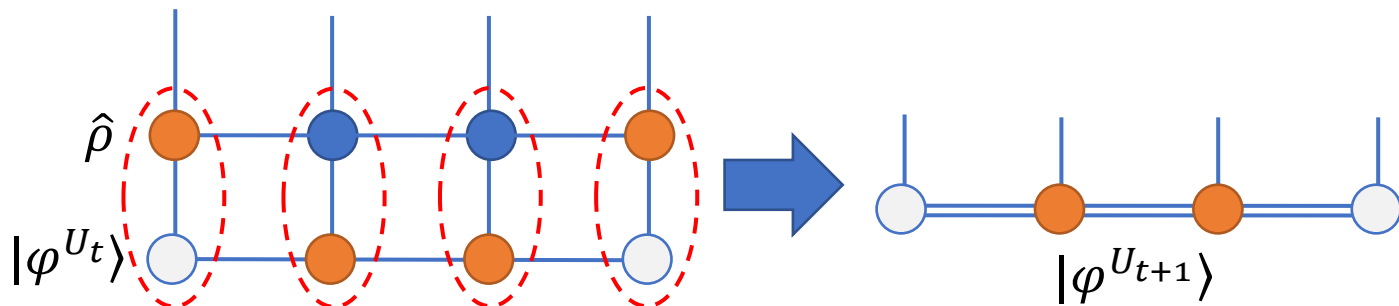
- 相应的，对于张量网络的上半部分，可以类似地定义 $|\varphi^{U_0}\rangle$ 和 $|\varphi^U\rangle$ ，显然有

$$|\varphi^U\rangle = (\hat{\rho}^T)^{\frac{H}{2}-1} |\varphi^{U_0}\rangle$$

- 整个张量网络的收缩结果满足

$$Z = \langle \varphi^U | \varphi^D \rangle = \langle \varphi^{U_0} | \hat{\rho}^{H-2} | \varphi^{D_0} \rangle$$

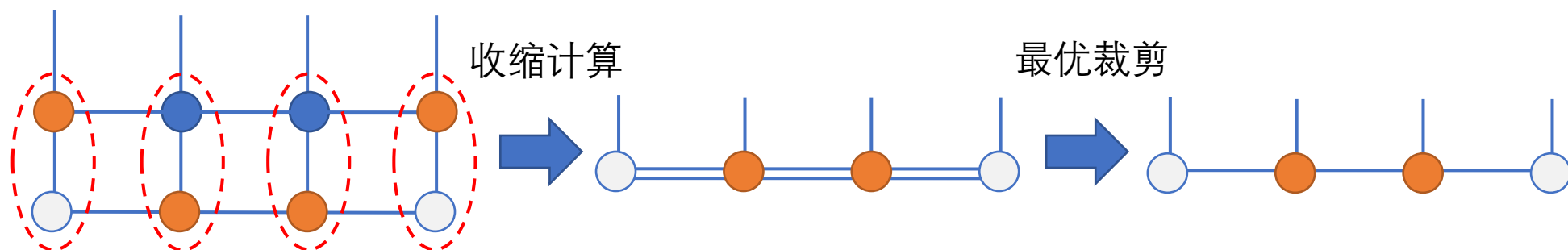
- 张量网络收缩计算变成了计算 $|\varphi^U\rangle$ 和 $|\varphi^D\rangle$ 。
- 计算思路为：通过进行如下图所示的张量网络收缩，计算 $(\frac{H}{2} - 1)$ 次 $\hat{\rho}$ 对MPS的作用。



$\hat{\rho}$ 被称为**转移矩阵**（transfer matrix），这里 $\hat{\rho}$ 具备的张量收缩的形式，被称为**矩阵乘积算符**（matrix product operator, MPO）

4.5 TEBD算法

- 显然，每次收缩，都会使MPS辅助指标维数扩大D倍（设D为 $\hat{\rho}$ 种水平方向指标的维数），也就是说，**MPS辅助指标的维数随收缩次数指数增大**，故需要引入**MPS的最优裁剪**，将维数限定为预先设定的截断维数 χ （回顾4.4）。



- 具体算法总结如下：
 - 用处于边界的对应的张量初始化 $|\varphi^{U_0}\rangle$ 与 $|\varphi^{D_0}\rangle$;
 - 计算 $|\varphi^{U_{t+1}}\rangle = \hat{\rho}^T |\varphi^{U_t}\rangle$, $|\varphi^{D_{t+1}}\rangle = \hat{\rho} |\varphi^{D_t}\rangle$, 得到新的MPS态;
 - 如果MPS辅助指标维数超过截断维数 χ , 则进行4.4节介绍了最优化裁剪, 将辅助指标维数截断到 χ ;
 - 进行 (b) - (c) 步 $\frac{H}{2} - 1$ 次后, 计算 $Z = \langle \varphi^U | \varphi^D \rangle$ 。

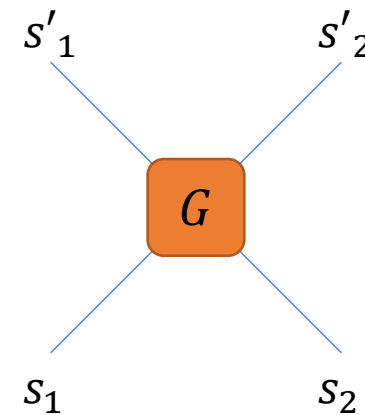
4.6 TEBD算法计算一维格点模型基态

- 考虑N个自旋构成的一维海森堡模型（回顾：3.5节）

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{H}_{ij}, \quad \hat{H}_{ij} = \sum_{\alpha=x,y,z} \hat{s}_i^\alpha \hat{s}_j^\alpha$$

- 主要思路：** 利用基于Trotter-Suzuki分解的退火方法将，随机初始化的MPS态演化到基态，将该演化过程转换为张量网络收缩问题，并使用TEBD算法求解该收缩。
- Step. 1 – 获得演化算符 $e^{-\tau \hat{H}_{ij}}$ 的系数张量（为 τ 小的正实数）：

$$G_{s'_1 s'_2 s_1 s_2} = \langle s'_1 s'_2 | e^{-\tau \hat{H}_{ij}} | s_1 s_2 \rangle$$



4.6 TEBD算法计算一维格点模型基态

- **Step. 1** – 获得演化算符 $e^{-\tau \hat{H}_{ij}}$ 的系数张量（为 τ 小的正实数）：

$$G_{s'_1 s'_2 s_1 s_2} = \langle s'_1 s'_2 | e^{-\tau \hat{H}_{ij}} | s_1 s_2 \rangle$$

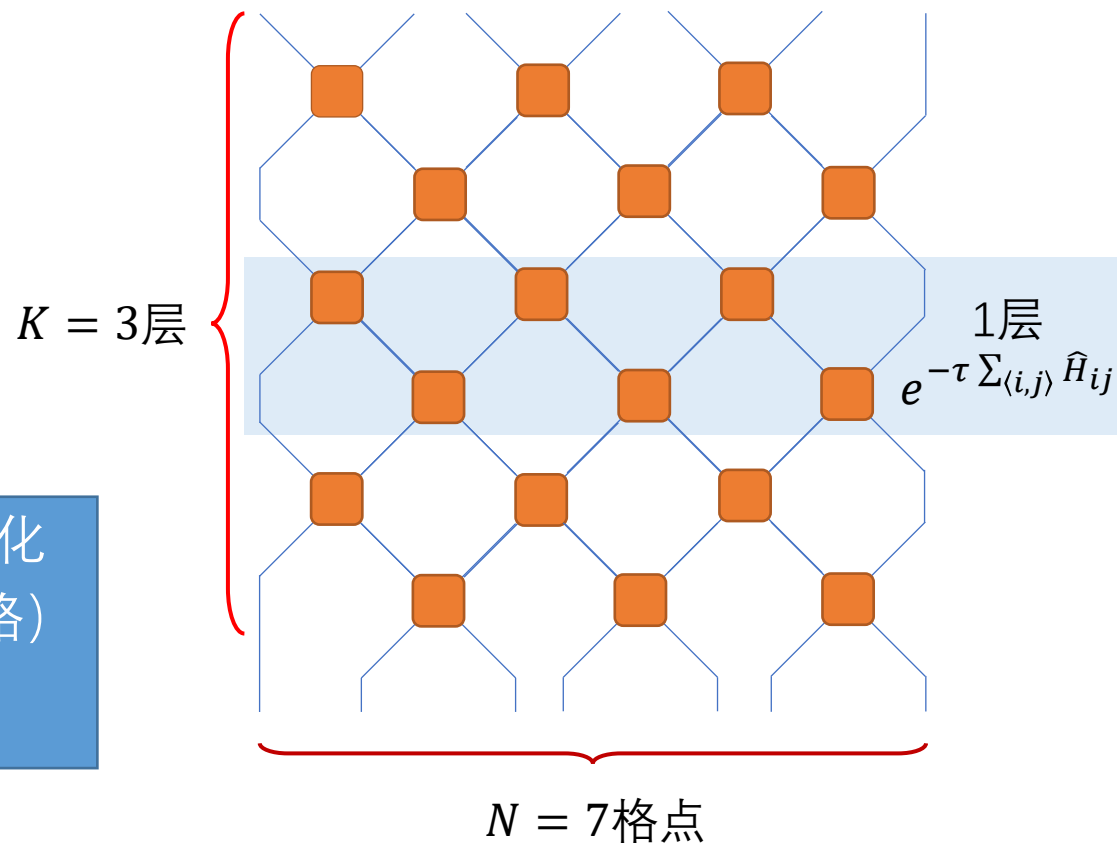
该步之后，基态演化算符

$$\hat{P} = \lim_{K \rightarrow \infty} (e^{-\tau \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{H}_{ij}})^K$$

被表示成为由四阶张量 G 构成的张量网络

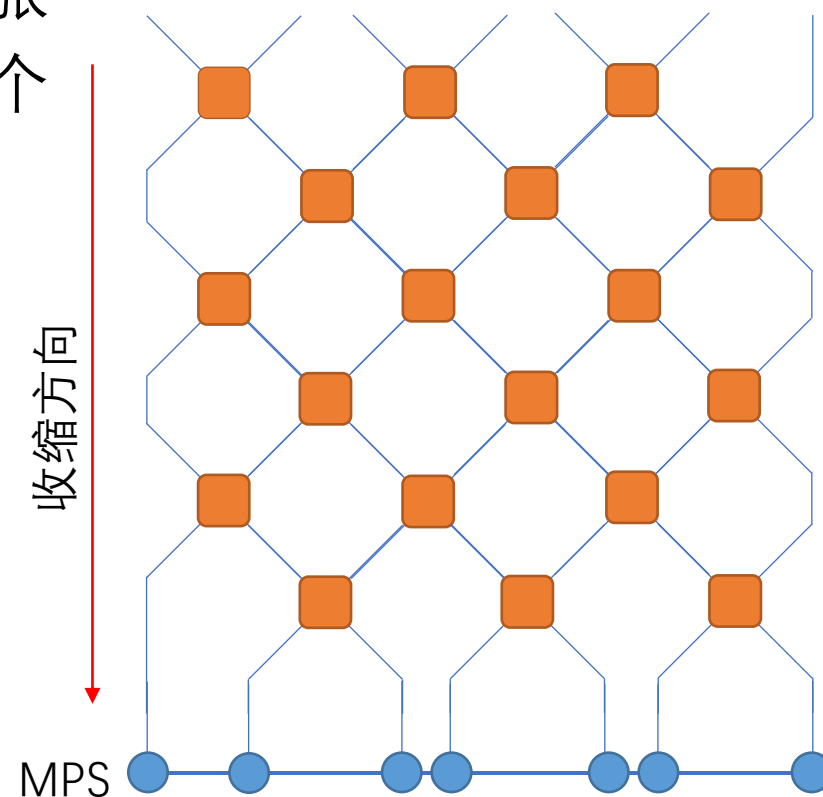
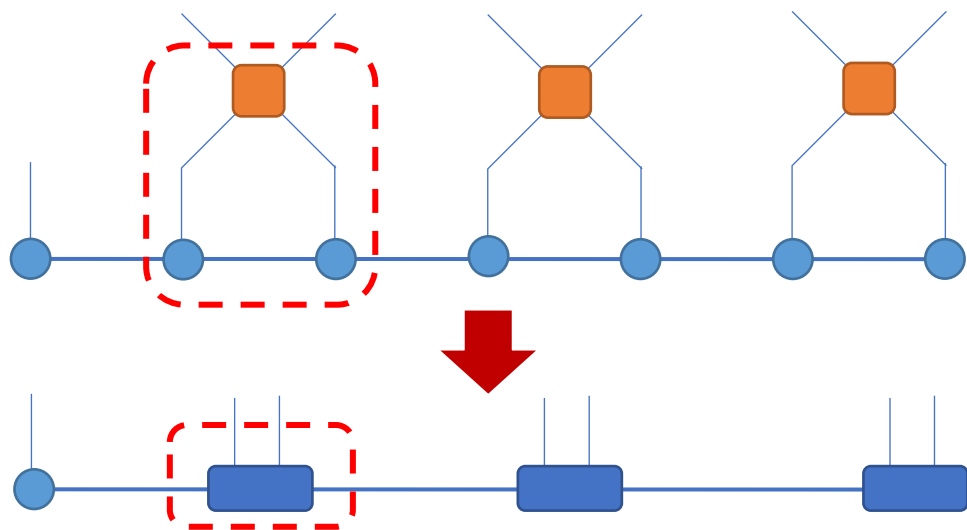
练习：对于 $N=4$ 系统，画出如下哈密顿量对应的演化算符 $e^{-\tau \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{H}_{ij}}$ 的张量网络图形表示（一层张量网络）

$$\hat{H} = \hat{H}_{12} + \hat{H}_{23} + \hat{H}_{13} + \hat{H}_{34} + \hat{H}_{24}$$



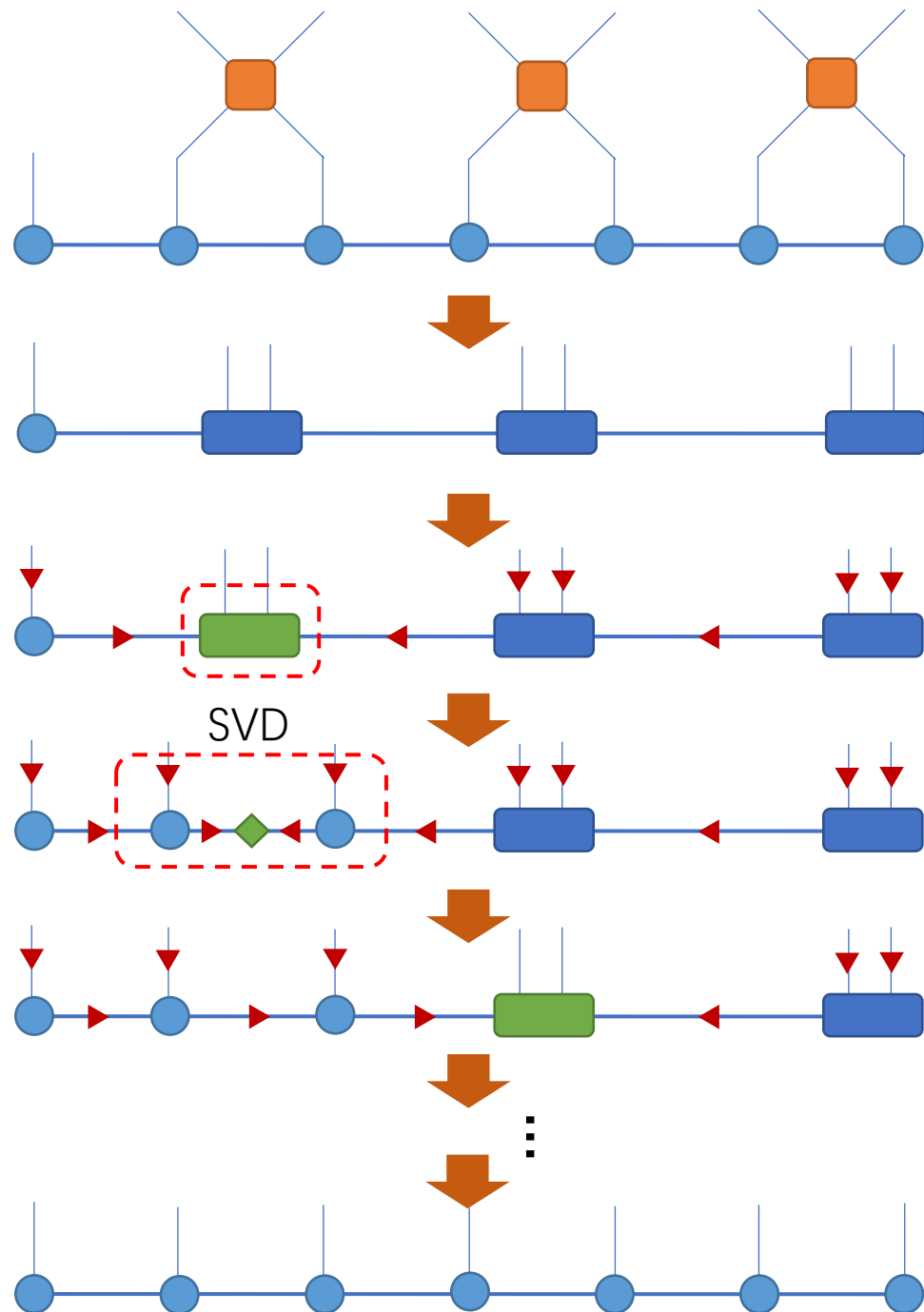
4.6 TEBD算法计算一维格点模型基态

- **Step. 2** – 随机初始化MPS态，放置于张量网络底部；
- **Step. 3** - 将靠近MPS的半层张量与MPS中相关的张量进行收缩，部分近邻的两个张量被收缩成为一个四阶张量



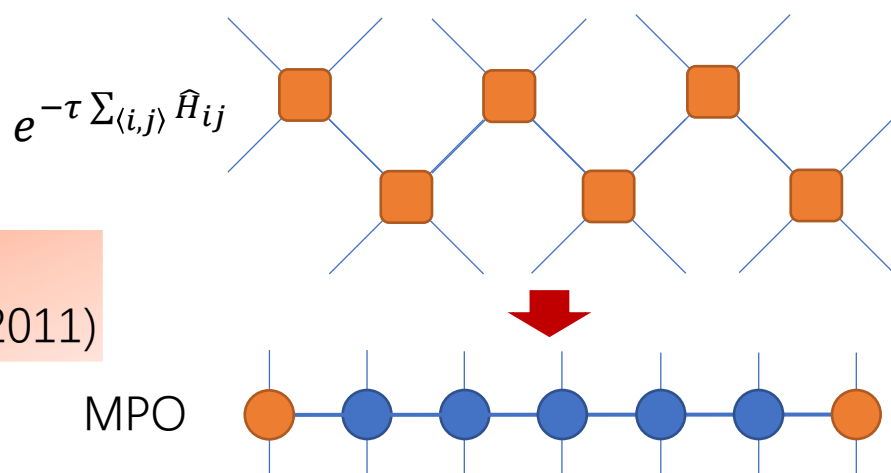
4.6 TEBD算法计算一维格点模型基态

- **Step. 4** – 利用规范变化，将MPS变换为中心正交形式，正交中心为第一个四阶张量；
- **Step. 5** – 对中心张量进行奇异值分解，如果奇异谱的维数大于预设的截断维数 χ ，则仅保留 χ 个最大的奇异值与相应的奇异向量；
- **Step. 6** – 移动正则中心到下一个四阶张量，重复步骤4-5，直到所有四阶张量被分解为三阶张量
- **Step. 7** - 进行完上述步骤后，MPS被变换称为演化前的形式（由三阶张量构成），重复步骤3-6，收缩下一个半层张量。重复收缩直到MPS收敛



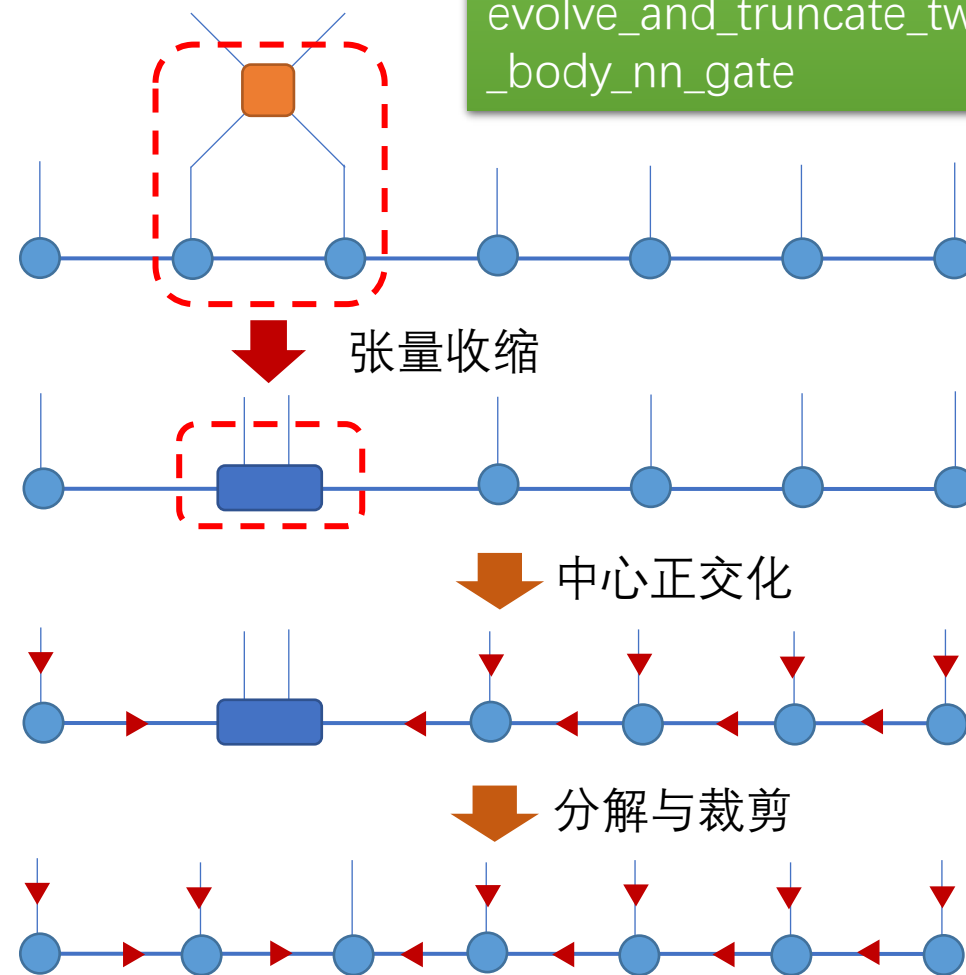
4.6 TEBD算法计算一维格点模型基态

- TEBD算法的具体实施方案并不唯一，例如，可以**每次只演化一次局域门**，如右图。
- 我们也可以将本节给出的张量网络，转换成4.5节中张量网络的形式，如下图，转换后的形式被称为 $e^{-\tau \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{H}_{ij}}$ 的**MPO表示式**。



PRL 106,
127202 (2011)

Jupyter Notebook:
MatrixProductState.py中,
OBCMPS类的成员函数
evolve_and_truncate_two
_body_nn_gate



练习：编写程序，在给定哈密顿量的情况下，获得演化算符MPO表示中的各个张量

4.7 密度矩阵重整化群

PRL 69, 2863 (1992)

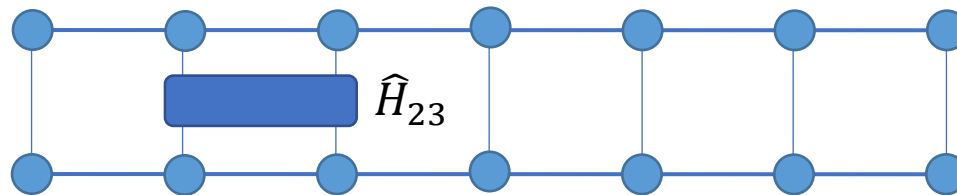
- TEBD算法计算基态的思路是退火，**密度矩阵重整化群（DMRG）**采取的是另一种思路是：基于最大本征态求解对应的最优化问题，即求解如下**极小化问题**

$$E_g = \min_{\langle \varphi | \varphi \rangle = 1} \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle$$

- 当哈密顿量为 $\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{H}_{ij}$ ，有：

$$E_g = \min_{\langle \varphi | \varphi \rangle = 1} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \varphi | \hat{H}_{ij} | \varphi \rangle$$

- 每一项对应的张量网络图形表示如下（下图以 $\langle \varphi | \hat{H}_{23} | \varphi \rangle$ 为例）：



S. R. White

4.7 密度矩阵重整化群

- DMRG的策略是更新各个张量，使能量达到极小，具体的更新策略不唯一。
- 在**单点 (one-site) DMRG**中，每次更新MPS中的一个张量，其余张量看成是给定的参数 (alternating least square, ALS)。
- 下面，我们将**单个张量的优化问题等价**为**局域矩阵最大本征问题**。
- 以更新第2个张量为例，定义**有效哈密顿量 \hat{h}_2 为如下项的求和：**

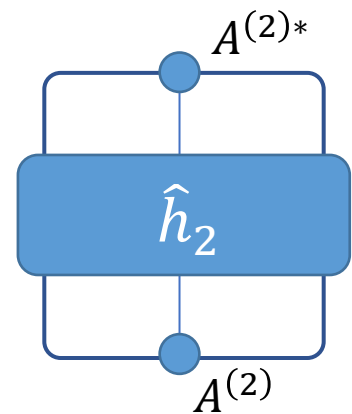
$$\hat{h}_2 =$$

The diagram illustrates the effective Hamiltonian \hat{h}_2 as a sum of four terms. Each term is represented by a 2x6 grid of blue circles (sites) connected by horizontal and vertical lines. In each term, one site is highlighted with a blue rectangle and labeled with a Hamiltonian operator: \hat{H}_{12} , \hat{H}_{23} , \hat{H}_{34} , \hat{H}_{45} , \hat{H}_{56} , and \hat{H}_{67} . The terms are separated by plus signs.

4.7 密度矩阵重整化群

$$\hat{h}_2 = \begin{array}{c} \text{Diagram 1: } \hat{H}_{12} \\ \text{Diagram 2: } \hat{H}_{23} \\ \text{Diagram 3: } \hat{H}_{34} \\ \text{Diagram 4: } \hat{H}_{45} \\ \text{Diagram 5: } \hat{H}_{56} \\ \text{Diagram 6: } \hat{H}_{67} \end{array} + \dots$$

- 易得，每一项收缩之后的结果为六阶张量， $\hat{\mathbf{h}}_2$ 为多个六阶张量的求和，故也为**六阶张量**。
- 有： $E = \langle A^{(2)} | \hat{h}_2 | A^{(2)} \rangle$



4.7 密度矩阵重整化群

- 最优化问题变成了：

$$\min_{\langle \varphi | \varphi \rangle = 1} \langle A^{(2)} | \hat{h}_2 | A^{(2)} \rangle$$

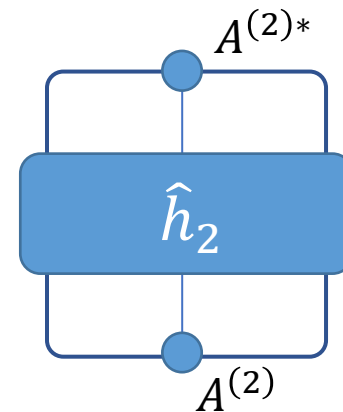
- 此时，可通过规范变换，**将正交中心移动至** $A^{(2)}$ （回顾4.4），有：

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = 1 \Leftrightarrow |A^{(2)}| = 1$$

- 最优化问题最终变成了：

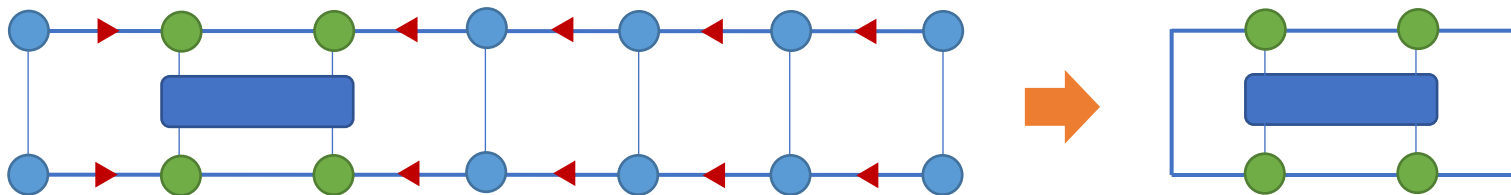
$$\min_{|A^{(2)}|=1} \langle A^{(2)} | \hat{h}_2 | A^{(2)} \rangle$$

- 根据2.1的内容可知： **$A^{(2)}$ 为 \hat{h}_2 最小本征态**！因此， $A^{(2)}$ 应被更新为 \hat{h}_2 的最低本征态。
- 求解 \hat{h}_2 本征态的计算复杂度可控**：即求解维数为 $d\chi^2 \times d\chi^2$ 的厄密矩阵的本征态。

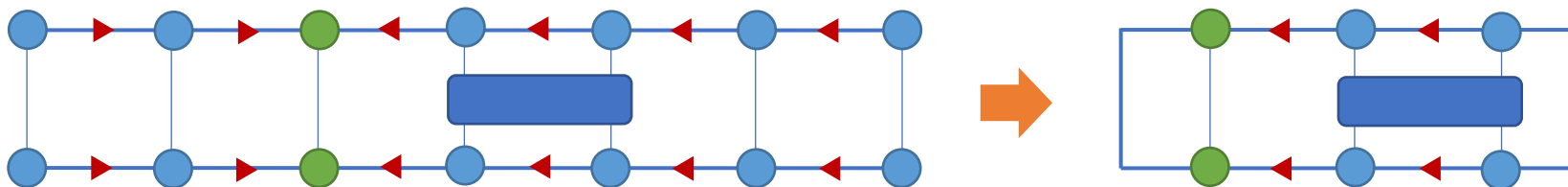


4.7 密度矩阵重整化群

- 得到基态MPS后，我们可利用**中心正交形式简化对算符观测量的计算**
(注：在部分文献里，如果对右矢的MPS或TN态取转置共轭到左矢，箭头的方向也要相应地方向。但在这里我们把转置共轭后的MPS也当作纯粹的TN看待，故不对箭头进行反向；省略物理指标上的箭头)
- 当正交中心与观测量所在格点重合时，计算可做例如下图的简化



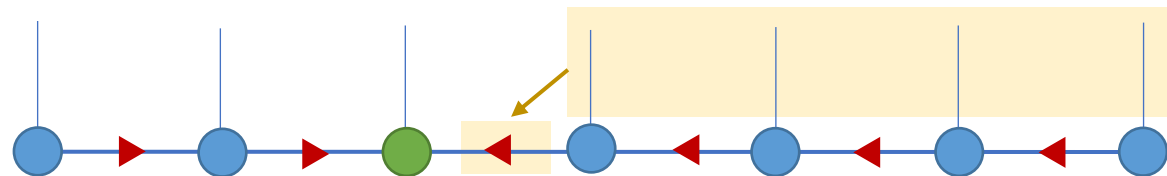
- 当正交中心不与观测量所在格点重合时，在不移动正交中心的情况下，计算可做例如下图的简化



4.7 密度矩阵重整化群

- 综上，在DMRG算法中，对第 n 个张量 $A^{(n)}$ 的更新步骤如下：
 - a) 将MPS正交中心移动到第 n 个张量；
 - b) 计算第 n 个张量对应的有效哈密顿量 \hat{h}_n ；
 - c) 将 $A^{(n)}$ 更新为 \hat{h}_n 的最低本征态。
- 整个DMRG算法的步骤如下：
 1. 随机初始化MPS态中的各个张量 $\{A^{(n)}\}$ ；
 2. 按步骤a)-c) 依次更新第1到第 N 个张量，再依次更新第 N 到第1个张量；
 3. 如果MPS收敛，计算完成；否则返回第2步。
(注：步骤2被称为一个sweep)
- **总结：** DMRG算法的关键在于将整个MPS的优化问题化成多个有效哈密顿量的最小本征问题，循环优化直至MPS收敛

4.7 密度矩阵重整化群



- 在理论物理中，“**重整化**”（**renormalization**）可被理解为，通过对系统进行某种（空间或能量等）上的尺度/标度变换，研究相应物理性质的变化。
- “**群**”（**group**）取自于群论，代指标度变换的方式。重整化群并不一定真正构成一个群，但是往往意味着某种变换不变性，并自洽的方式去掉物理系统的细节信息，提取本质属性。
- 从**低秩近似**的角度，密度矩阵重整化群中的“**重整化**”，可以理解成**对量子希尔伯特空间的最优低秩压缩**。
- 具体而言，正交条件对应的方向，可以看成是**重整化流**（RG flow）的方向，每个辅助指标，可以看作是沿重整化流反方向经过的所有物理指标的低秩近似，即在相应希尔伯特空间中提取重要的基矢，去掉不重要的基矢。
- 在DMRG中，**基矢的重要程度是由能量决定的**，这也符合热力学的原理。

4.8 基于自动微分的基态变分算法

- 对于优化问题，可以使用自动微分技术求解，该技术在机器学习中具有广泛的应用，被用于计算模型变分参数关于损失函数的梯度，称之为**反向传播算法**（back propagation, BP）。
- **例：利用自动微分求解实对称矩阵最大本征向量**，即求解如下极大值问题

$$\max_{|v|=1} |v^T M v|$$

- 定义损失函数 $f = -\frac{v^T M v}{|v|^2}$ ，则上述极大化问题被化为损失函数的极小化问题。
- 计算 v 关于的 f 梯度 $\frac{df}{dv}$ ，要使得 f 减小，需将 v 沿负梯度方向更新：

$$v \leftarrow v - \eta \frac{df}{dv}$$

其中， η 为人为给定的常数，被称为**更新步长或学习率**。

4.8 基于自动微分的基态变分算法

- 进行多次迭代更新之后，得到收敛的 v ，则最大本征向量 \tilde{v} 与最大本征值 λ 满足：

$$\tilde{v} = \frac{v}{|v|}, \quad \lambda = \tilde{v}^T M \tilde{v}$$

- 其中，梯度 $\frac{df}{dv}$ 可直接使用自动微分技术计算。
- 可使用**Pytorch**实现自动微分。
- 更新过程中，可使用**优化器**（optimizer，例如Adam），**让程序自适应地控制学习率**，以达到较好的稳定性和收敛速率。
- 上述例子太过简单，其效率显然不如传统的本征值分解算法。但在更为复杂的问题中，自动微分的优势就会被体现出来。



4.8 基于自动微分的基态变分算法

- 根据最大本征值问题与基态问题的等价性，显然，自动微分方法可用于求解多体系统基态，对应的优化问题可写为

$$E = \min_{\{A^{(n)}\}} \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}$$

- 其中，变分参数为MPS中的各个张量 $\{A^{(n)}\}$ ，梯度更新公式为：

$$A^{(n)} \leftarrow A^{(n)} - \eta \frac{\partial E}{\partial A^{(n)}}$$

- 相比于DMRG中MPS的“重整化群”解释，这里可以更加直接地将MPS看作是对基态的一种**特殊的参数化形式**，**能量即为变分的损失函数**。
- 可使用**BP算法**及各种**优化器**进行梯度更新。

4.9 无穷长平移不变矩阵乘积态

- 如果系统本身具备平移不变性，且尺寸为无穷大时（例如一维无穷大海森堡模型，其哈密顿量可写为 $\hat{H} = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{H}_{i,i+1}$ ），基态往往具备相应的对称性，例如平移对称性、空间反演对称性等。

- 定义**单张量平移不变MPS**（又称均匀MPS，uniform MPS）：

Phys. Rev. B **97**,
045145 (2018)

$$\Psi_{s_1 s_2 \dots} = \text{Tr}(A_{s_1, \dots} A_{s_2, \dots} \dots)$$

该MPS中仅包含一个张量 A ，记为**不等价张量**，整个MPS由不等价张量的无穷多个复制收缩构成，可简单记为 **$\Psi = \text{Tr}([A]^\infty)$** 。

- 上述定义可直接推广到**多张量平移不变MPS**，例如双张量平移不变的情况 **$\Psi = \text{Tr}([AB]^\infty)$** 。
- 从用什么样的平移不变性，取决于对待解决物理问题的先验知识或猜测。

4.9 无穷长平移不变矩阵乘积态

- 反应无穷大平移不变MPS性质最重要的量是其转移矩阵及转移矩阵的本征向量（见4.10）。
- 有限MPS的各个算法可推广至无穷长MPS，例如无穷密度矩阵重整化群（iDMRG）算法、无穷TEBD算法（iTEBD）等。
（可参考Physical Review Letters 101, 250602 (2008)等）
- 无穷长平移不变矩阵乘积态又称均匀矩阵乘积态（uniform MPS, uMPS），这一类态构成了量子Hilbert空间中一类特殊的流形
（可参考Physical Review B 88, 075133 (2013)等）

4.10 矩阵乘积态的涨落

- 这里我们主要探讨任意辅助指标维数为有限的MPS的关联与纠缠性质。
- 定义关联函数为，处于不同格点单体算符相乘的平均值

$$\langle \hat{O}_1, \hat{O}_2 \rangle = \langle \varphi | \hat{O}_1 \hat{O}_2 | \varphi \rangle$$

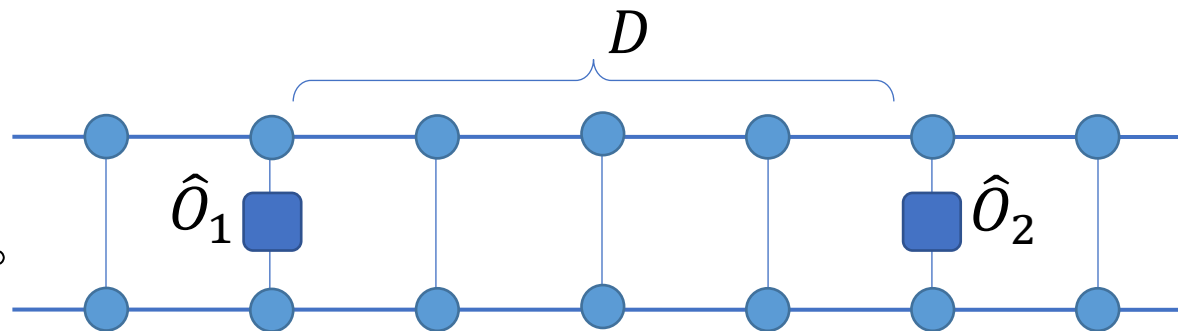
- 定义涨落为，关联函数减去各算符平均值的乘积

$$F = \langle \hat{O}_1, \hat{O}_2 \rangle - \langle \hat{O}_1 \rangle \langle \hat{O}_2 \rangle = \langle \varphi | \hat{O}_1 \hat{O}_2 | \varphi \rangle - \langle \varphi | \hat{O}_1 | \varphi \rangle \langle \varphi | \hat{O}_2 | \varphi \rangle$$

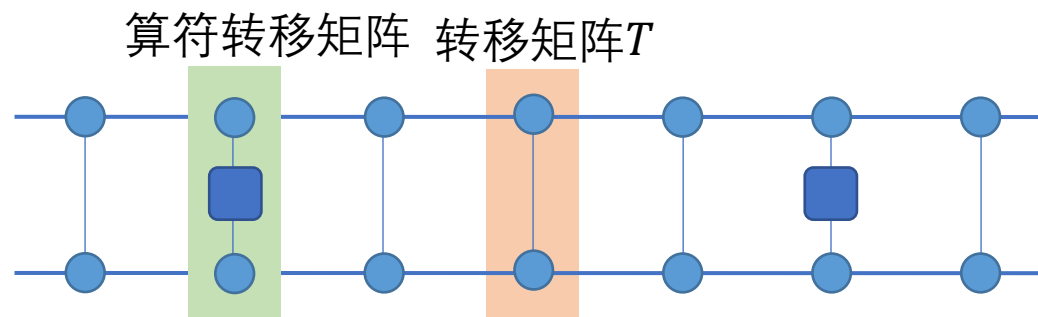
- **性质一：**考虑无穷长的实MPS，且空间反演不变与平移不变（构成MPS的所有张量都相等，即 $A^{(n)} = A \ \forall n$ ），此时当两个算符距离 $D \gg 1$ 时，涨落随 D 指数衰减，满足

$$F \sim e^{-\frac{D}{\xi}}$$

其中， ξ 为正的常数，被称为关联长度。



4.10 矩阵乘积态的涨落



- **证明：** 设算符不出现在MPS边界，定义MPS转移矩阵 $T_{aa',bb'} =$

$\sum_s A_{sa'b'}^* A_{sab}$ ，算子转移矩阵 $T_{[aa'],[bb']}(\hat{O}) = \sum_{ss'} A_{sa'b'}^* O_{ss'} A_{s'ab}$ （其中 $O_{ss'}$ 是算符 \hat{O} 的系数）（注：逗号左右隔开的括号中的指标表示矩阵的两个指标）。此时有：

$$\langle \hat{O}_1, \hat{O}_2 \rangle = \lim_{D_L, D_R \rightarrow \infty} \text{Tr}[T^{D_L} T(\hat{O}_1) T^D T(\hat{O}_2) T^{D_R}]$$

当空间反演不变时，转移矩阵 T 为实对称阵，满足 $\lim_{K \rightarrow \infty} T^K = \Gamma^K v v^T$ ，其中 Γ 为 T 的最大本征值， v 为最大本征向量（回顾Sec. 2.1），上式化简为

$$\langle \hat{O}_1, \hat{O}_2 \rangle = \lim_{D_L, D_R \rightarrow \infty} \Gamma^{D_L + D_R} \text{Tr}[v T(\hat{O}_1) T^D T(\hat{O}_2) v^T]$$

4.10 矩阵乘积态的涨落

- 同理可得：

$$\langle \hat{O}_1 \rangle = \lim_{D_L, D_R \rightarrow \infty} \Gamma^{N-1} \text{Tr}[v T(\hat{O}_1) v^T]$$

$$\langle \hat{O}_2 \rangle = \lim_{D_L, D_R \rightarrow \infty} \Gamma^{N-1} \text{Tr}[v T(\hat{O}_2) v^T]$$

- 于是有：

$$F = \langle \hat{O}_1, \hat{O}_2 \rangle - \langle \hat{O}_1 \rangle \langle \hat{O}_2 \rangle$$

$$= \lim_{D_L, D_R \rightarrow \infty} \Gamma^{N-1} \left\{ \text{Tr} \left[v T(\hat{O}_1) \frac{T^D}{\Gamma^D} T(\hat{O}_2) v^T \right] - v T(\hat{O}_1) v^T v T(\hat{O}_2) v^T \right\}$$

注意，MPS总长度 $N = D_L + D + D_R + 2$ ，当 $D \gg 1$ 时有 $N - 1 \approx D_L + D + D_R$

4.10 矩阵乘积态的涨落

练习：对于无穷长且平移不变、空间反演不变的实MPS，当其满足的归一化条件 $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ 时，证明其转移矩阵最大本征值 $\Gamma = 1$ 。

- 当 $D \gg 1$ 时

$$\frac{T^D}{\Gamma^D} = v^T v + \left(\frac{\Gamma'}{\Gamma}\right)^D v'^T v' + \dots$$

其中， Γ' 与 v' 为次大本征值与本征向量，忽略更高阶本征项的贡献，有

$$F = \lim_{N \rightarrow \infty} \Gamma^{N-1} \text{Tr} \left[v T(\hat{O}_1) v'^T \left(\frac{\Gamma'}{\Gamma}\right)^D v' T(\hat{O}_2) v^T \right] \sim \Gamma^{N-1} \left(\frac{\Gamma'}{\Gamma}\right)^D$$

- 同时容易看出，对于这里考虑的MPS，有

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \Gamma^N = 1 \Rightarrow \Gamma = 1$$

- 因此有 $F \sim (\Gamma')^D = e^{-\frac{D}{\xi}}$ ，且关联长度

$$\xi = -\frac{1}{\ln \Gamma'}$$

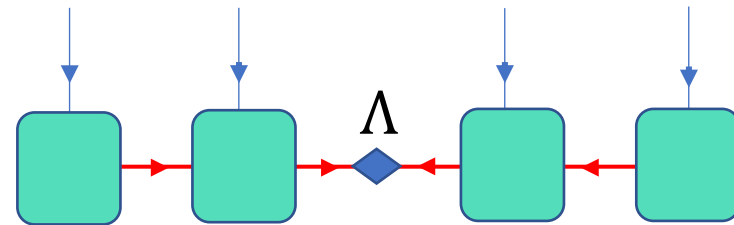
4.10 矩阵乘积态的涨落

- 因此，对于无穷长的、平移不变且空间反演对称的实MPS，**只能描述在长距离时涨落指数衰减的量子态。**

（注：平移不变是为了简化问题，使所有转移矩阵相等；空间反演对称与实数要求是为了使系统具有实的本征值和本征向量；证明过程中还用到了一个隐含条件，那就是最大本征值唯一（不简并））

- 一般情况下（例如有限长度、非平移不变等），关联长度也是有限的。
- 因此，**MPS难以用来很好地描述具备发散关联长度的系统**，例如临界系统。
- 对于临界系统，其临界性质可以通过研究相关性质的标度变化关系获得（类似于重整化群的思想）

4.11 矩阵乘积态与纠缠熵面积定律



- 由MPS的正交形式容易看出，其奇异谱 Λ 的维数等于辅助指标的维数；同时，由于MPS的归一化条件，有 $|\Lambda| = 1$ 。
- 易证，设奇异谱维数 $\dim(\Lambda) = \chi$ ，当 $\Lambda = \left[\frac{1}{\sqrt{\chi}}, \frac{1}{\sqrt{\chi}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{\chi}} \right]$ 时，纠缠熵 $S = -\sum_{k=0}^{\chi-1} \Lambda^2 \ln \Lambda^2$ 达到极大值。
- 因此，给定MPS辅助指标维数后，其能容纳的纠缠熵的上限为

$$S = -\sum_{k=0}^{\chi-1} \frac{1}{\chi} \ln \frac{1}{\chi} = \ln \chi$$

练习：证明奇异谱取 $\Lambda = \left[\frac{1}{\sqrt{\chi}}, \frac{1}{\sqrt{\chi}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{\chi}} \right]$ 时，纠缠熵达到极大值点。

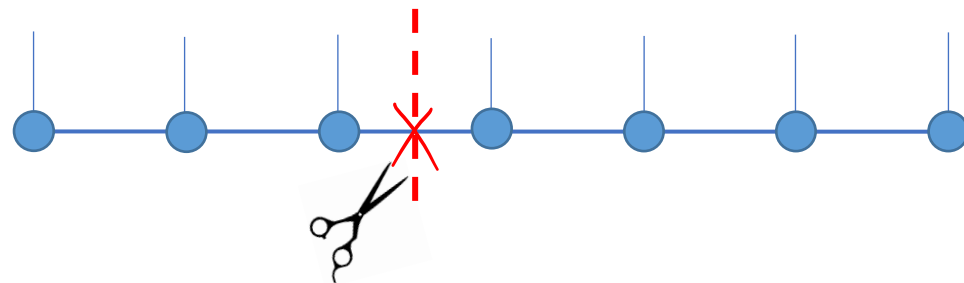
4.11 矩阵乘积态与纠缠熵面积定律

- 可见，在任意一处剪断MPS进行二分后，两部分之间的**纠缠熵大小与各部分包含的格点个数（即体积大小）无关**，仅与边界处辅助指标的维数有关。
- 定义**纠缠熵的面积定律（area law of entanglement entropy）**：对于 D 维格点系统的量子态，将体系二分后，两部分之间的纠缠熵满足

$$S \sim O(l^{D-1})$$

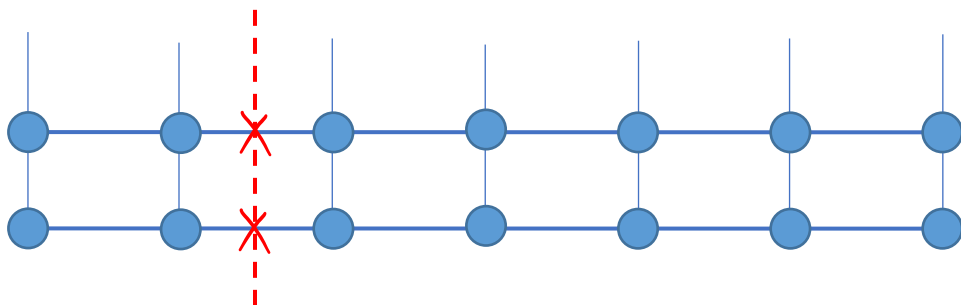
其中 l 代表空间尺度（length scale）。

- **推论**：MPS满足一维量子态的纠缠熵面积定律
证明：对于MPS态， $S = \ln \chi = \ln \chi l^0$ ，证毕

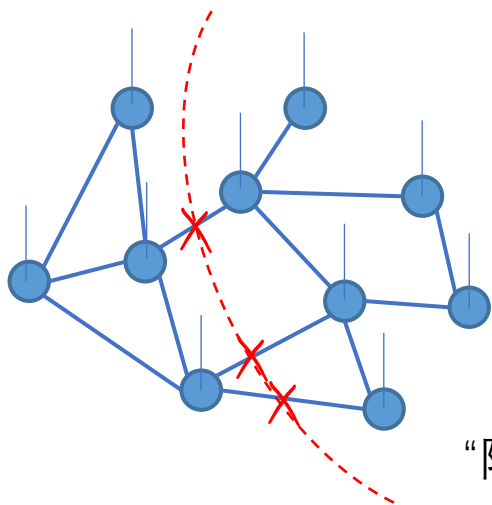


4.11 矩阵乘积态与纠缠熵面积定律

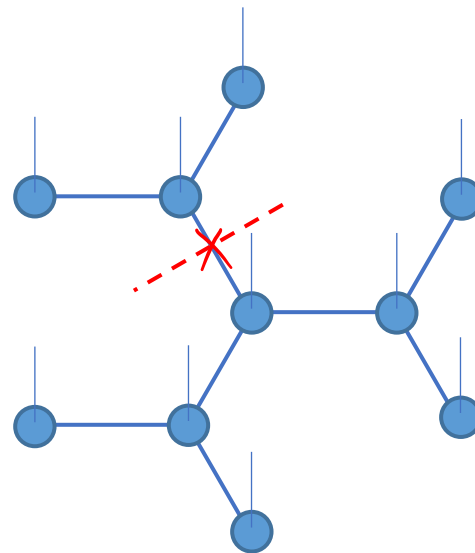
- 对于一般的张量网络态，二分纠缠熵的上限一般是由穿过边界的辅助指标总维数决定的（注：需选取穿过的辅助指标个数最小的边界进行二分）



“双层”MPS



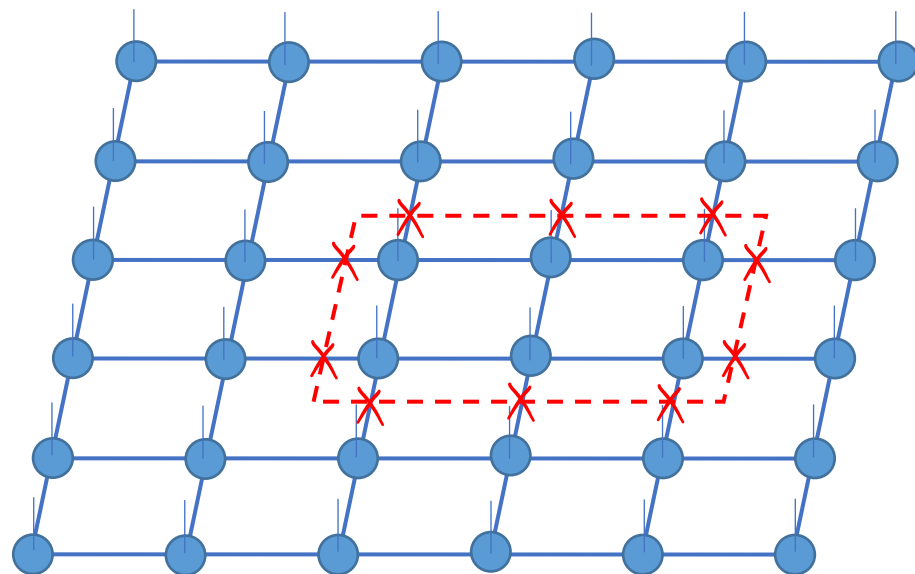
“随机图”张量网络态



树状张量网络态

4.11 矩阵乘积态与纠缠熵面积定律

- 如果要构建满足二维纠缠熵面积定律的张量网络态，需要相应地改变网络结构。
- 例：定义在二维张量网络上的**投影纠缠对态**（projected-entangled pair state, PEPS）。
- 给定PEPS的子区域，体积满足 $O(l^2)$ ，穿过边界的指标个数满足 $O(l^1)$ ，易得，**PEPS满足二维纠缠熵面积定律**。
- 但一般而言，PEPS的计算复杂度远高于MPS，主要原因是PEPS的网络结构中包含大量的“圈”（loop），我们将在之后讨论PEPS的相关算法。



4.12 MPO与一维热力学计算

PRL 106, 127202 (2011)

- 除基态外，TEBD算法可被用于计算一维格点模型的热力学性质，被称为**线性张量重整化群算法**（linearized tensor renormalization group, LTRG）。
- 算法思路：直接以MPO的形式，计算有限温度密度算符

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{H}_{ij}}$$

