

# Tensor Network

## A bit of background

量子计算中我们研究的大部分系统为量子多体系统。如何理解量子多体系统是目前量子计算中一个具有挑战性的问题。理解量子多体系统的标准方法是基于提出简化的模型，这些模型被认为可重现观测物理的相关相互作用。一旦一个模型被提出，除了一些幸运的情况，这些模型是精确可解的，不然人们需要依靠忠实的数值方法来确定它们的性质。

就数值模拟算法而言，近年来张量网络(Tensor Network, TN)方法在模拟强关联系统方面越来越流行。在这个方法中，系统的波函数由相互关联的张量网络来描述。直观上，这就像是对乐高的分解，纠缠在乐高之间起到了"胶水"的作用。TN技术提供了基于波函数纠缠量(the entanglement content of the wave function)的量子多体态的有效描述。在数学上，纠缠的数量和结构是由所选择的网络模式和张量中参数的数量决定的。

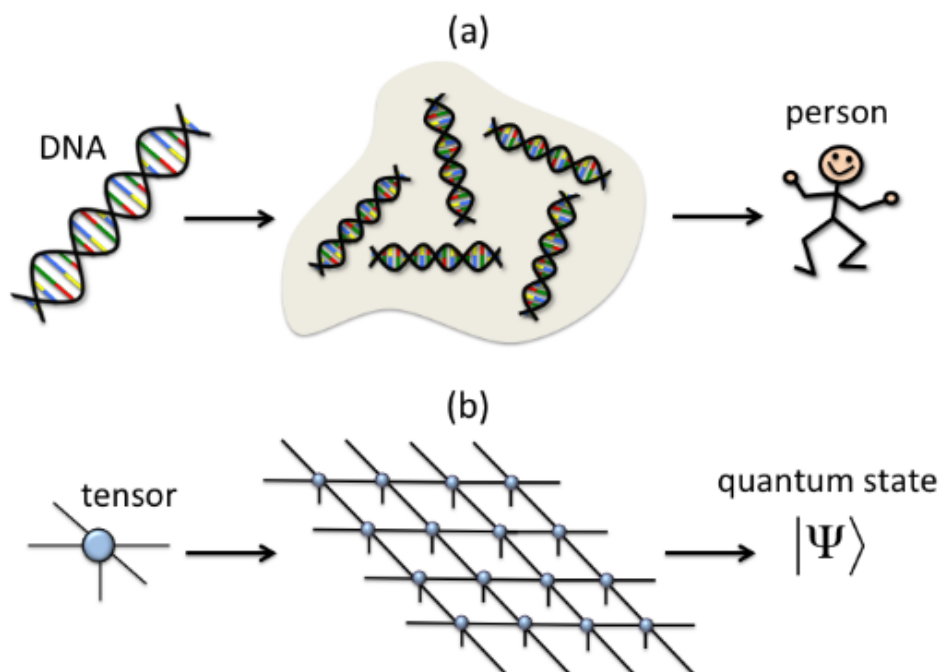


Figure 1: (color online) (a) The DNA is the fundamental building block of a person. In the same way, (b) the tensor is the fundamental building block of a quantum state (here we use a diagrammatic notation for tensors that will be made more precise later on). Therefore, we could say that the tensor is the DNA of the wave-function, in the sense that the whole wave-function can be reconstructed from it just by following some simple rules.

TN中有许多的例子，比如e.g. Time-Evolving Block Decimation (TEBD) [13, 14], Folding Algorithms [15], Projected Entangled Pair States (PEPS) [16], Tensor Renormalization Group (TRG) [18], Tensor-Entanglement Renormalization Group (TERG) [17], Tensor Product Variational Approach [19], Weighted Graph States [20], Entanglement Renormalization (ER) [21], Branching MERA [22], String-Bond States [23], Entangled-Plaquette States [24], Monte Carlo Matrix Product States [25], Tree Tensor Networks [26], Continuous Matrix Product States and Continuous Tensor Networks [27], Time-Dependent Variational Principle (TDVP) [28], Second Renormalization Group (SRG)[29], Higher Order Tensor Renormalization Group (HOTRG) [30]。但是这些都是一些例子，关键需要了解其中的核心。

TN方法中一个很好的性质是灵活性。可以用来研究不同维度的系统、不论系统是有限或无限大小、或者是具有对称性或者玻色子、费米子、受挫自旋的系统。

## Why Tensor Networks?

为什么要有张量网络的方法来模拟量子系统呢？有必要吗？

下面会给出一些张量网络之所以重要的原因。

### 1、New boundaries for classical simulations

现有的数值模拟技术都有各自的局限性。张量网络也存在局限性，但是与其他数值模拟不同，**张量网络的限制主要在于量子多体态中的纠缠的数量和结果。**

张量网络的计算方法中的这种新的限制以新的、前所未有的方向扩展了可以用经典计算机模拟的模型的范围。

### 2、New language for (condensed matter) physics

TN方法用相互连接的张量网络表示量子态，从而捕获系统的相关纠缠特性。**凝聚态物理(事实上,对于所有的量子物理)表示的新语言**，它使一切变得更加直观，带来了新的直觉、想法和结果。

这种描述量子态的方法与通常的方法截然不同，即只给出某个给定基下波函数的系数。当处理一个TN状态时，我们将看到，我们将不考虑复杂的方程，而是绘制张量网络图，如下图。

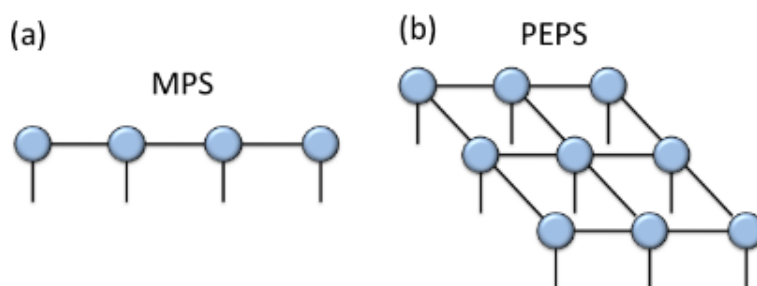


Figure 2: (color online) Two examples of tensor network diagrams: (a) Matrix Product State (MPS) for 4 sites with open boundary conditions; (b) Projected Entangled Pair State (PEPS) for a  $3 \times 3$  lattice with open boundary conditions.

### 3、Entanglement induces geometry

对于一个量子多体波函数，在给定的局部基下指定它的系数并不能给出关于它的组分之间纠缠结构的任何直觉。纠缠结构可能依赖更加微小的问题，比如量子态的临界态及其相关长度。**量子态的朴素表示并不具备关于这些性质的任何明确信息。**

**人们希望找到一种表示量子状态的方法，其中这种信息是明确的和容易获得的。**

正如我们将看到的那样，TN在其描述的量子关联网中具有直接可用的信息，关联网能够使状态实际所处的有效格的几何结构（1-d、2-d、临界）变得明确。但事实上，通过将这一想法推向极限并加以扭转，许多工作已经提出，几何和曲率(因此引力)可以从量子态中的纠缠模式中自然地浮现出来。

TN的语言显然是追求这种（纠缠与状态所处有效格的几何结构）联系的正确语言。

## 4、Hilbert space is far too large

希尔伯特空间非常大，这也许是TNs是对大自然量子多体态的关键描述的主要原因。对于一个N个粒子的系统，自旋1/2后，希尔伯特空间的维度为 $2^N$ 。量子多体系统的希尔伯特空间是一个非常大的地方，有非常多的量子基态。为了给出一个定量的想法，让我们放一些数字：如果N大约 $10^{23}$  (Avogadro数的阶数)，那么希尔伯特空间中的基态数是 $O(10^{10^{23}})$ ，这比可观测宇宙中的原子数(估计在 $10^{80}$ 左右)大得多！

幸运的是，在多体系统的希尔伯特空间中，并不是所有的量子态都是等价的：有些量子态之间比另一些量子态更相关。特别地，可以证明具有局域相互作用的间隙哈密顿量的低能本征态，服从所谓的纠缠熵的面积定律[53]，如图(3)所示。

纠缠熵的面积定律：这个定理准确来说叫纠错面积定律，是纠错态的一个性质。有些量子态满足面积定律而有些不满足。研究发现，现实中的大部分物理体系都是满足纠错面积定律的，但满足面积定律的量子态在Hilbert space中仅仅占一小部分，因此Hilbert space太大，但是包含了一些非物理的东西。在实际计算中，我们不需要对整个Hilbert space进行采样，而需要对满足面积定律的量子态进行取样，这样的话，像MPS、PEPS这样的tensor network state就非常适合用于拟设态来求解一个系统的基态。

参考资料：<https://www.zhihu.com/question/353952812>

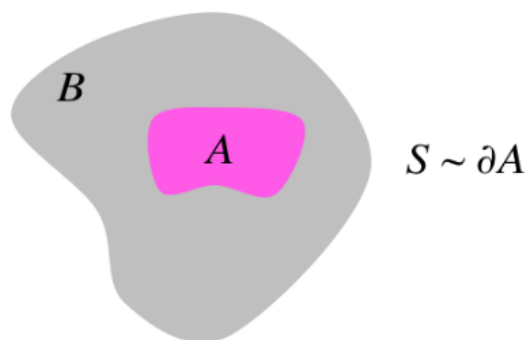


Figure 3: (color online) The entanglement entropy between  $A$  and  $B$  scales like the size of the boundary  $\partial A$  between the two regions, hence  $S \sim \partial A$ .

图中表示A与B之间的纠缠熵相当于是A的边界的长度 $\partial A$ 。这意味着，对于足够大的区域，空间某区域的纠缠熵趋向于标度，作为该区域边界的大小，而不是体积。

换句话说，现实哈密顿量的低能态不仅仅是希尔伯特空间中的“任意”态：它们受到局域性的严重限制，因此它们必须服从纠缠面积定律。类似于下图，满足面积定律的量子态在Hilbert space中仅仅占很小部分。

通过演化一个具有局域哈密顿量的量子多体态，在这个时间 $O(poly(N))$ 内可以达到的the manifold of states (量子态流形)也是指数小的。并且，希尔伯特空间的绝大部分只有经过 $O(exp(N))$ 时间的演化才是可达的。

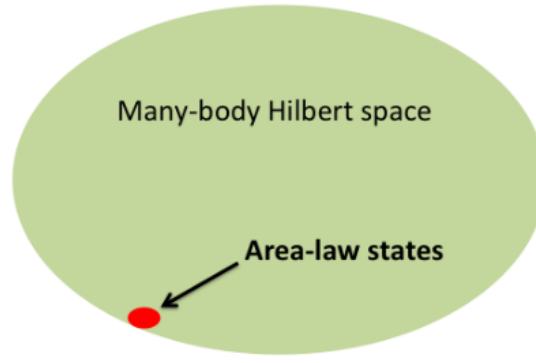


Figure 4: (color online) The manifold of quantum states in the Hilbert space that obeys the area-law scaling for the entanglement entropy corresponds to a tiny corner in the overall huge space.

这就是为什么量子多体系统的希尔伯特空间有时被称为方便幻觉[58]：从数学的角度来说它是方便的，但它是幻觉，因为没有人会看到它的大部分。

## Tensor Network theory

现在让我们介绍一些数学概念。将定义什么是TN状态，以及如何用TN图来描述量子态。

### Tensors, tensor networks, and tensor network diagrams

**Tensors (张量)** 是复数的多维数组。张量的秩是索引（指标）的个数。即0秩张量为标量( $x$ )，1秩张量为向量( $v_\alpha$ )，2秩张量为矩阵( $A_{\alpha\beta}$ )。

**index contraction(索引收缩)**是一组张量的重复索引的所有可能值的总和。例如，矩阵积是指数 $\beta$ 的收缩，等于其 $D$ 个可能值之和：

$$C_{\alpha\gamma} = \sum_{\beta=1}^D A_{\alpha\beta} B_{\beta\gamma}$$

其中未收缩的指标称为open indices(开放指标)，如上的 $\alpha$ 、 $\gamma$ 。

**张量网络图**中引入张量和TN的图示表示法，图像中张量由形状表示，张量中的索引由从形状中出现的线表示。

TN由一组由线连接的形状表示。相互之间连接张量的线对应于收缩指标（收缩索引），不连接两个张量的线对应于TN中的开放指标（开放索引）。

使用TN图更容易处理带有TN的计算。

我们通过下面例子说明：

1、下面四个收缩方程可以通过下图表示。

$$C_{\alpha\gamma} = \sum_{\beta=1}^D A_{\alpha\beta} B_{\beta\gamma}$$

$$F_{\gamma\omega\rho\sigma} = \sum_{\alpha,\beta,\delta,\nu,\mu=1}^D A_{\alpha\beta\delta\sigma} B_{\beta\gamma\mu} C_{\delta\nu\mu\omega} E_{\nu\rho\alpha},$$

$$C = \sum_{\alpha=1}^D A_\alpha B_\alpha$$

$$F = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta,w,\nu,\mu=1}^D A_{\alpha\beta\delta\gamma} B_{\beta\gamma\mu} C_{\delta\nu\mu\omega} E_{\nu w\alpha},$$

张量网络图形化表示如下所示：

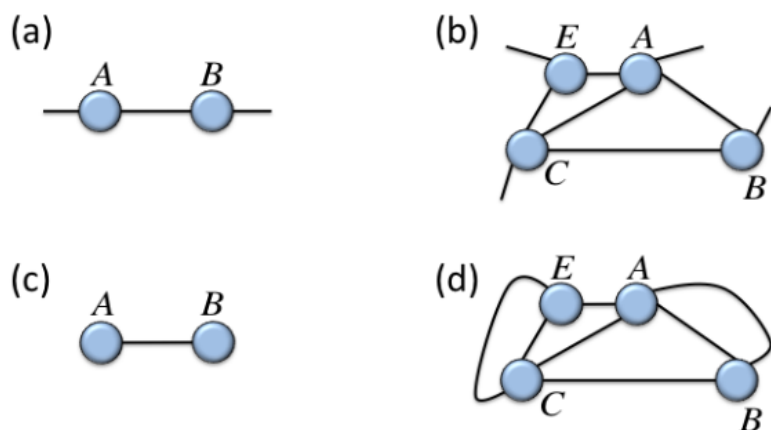


Figure 6: (color online) Tensor network diagrams for Eqs.(1, 2, 3, 4): (a) matrix product, (b) contraction of 4 tensors with 4 open indices, (c) scalar product of vectors, and (d) contraction of 4 tensors without open indices.

2、同样棘手的计算，如6个矩阵乘积的迹，可以用下图表示：

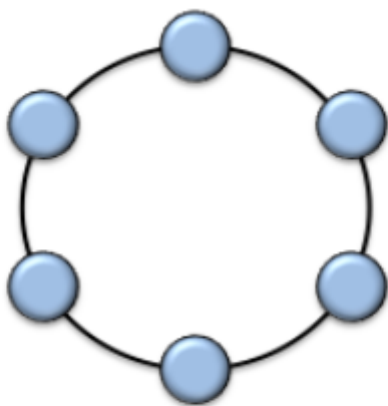


Figure 7: (color online) Trace of the product of 6 matrices.

为了获得TN收缩的最终结果，必须完成的操作的总数在很大程度上取决于TN中的索引收缩的顺序。

在TN方法中需要处理许多收缩，目的是尽可能有效地处理这些收缩。为此，特别是在编程实现方法的计算机代码时，寻找一个TN中待收缩索引的最优顺序将是至关重要的一步。从数学上讲，这是一个非常困难的问题，但在实际情况中，这通常可以通过简单的检查来完成。

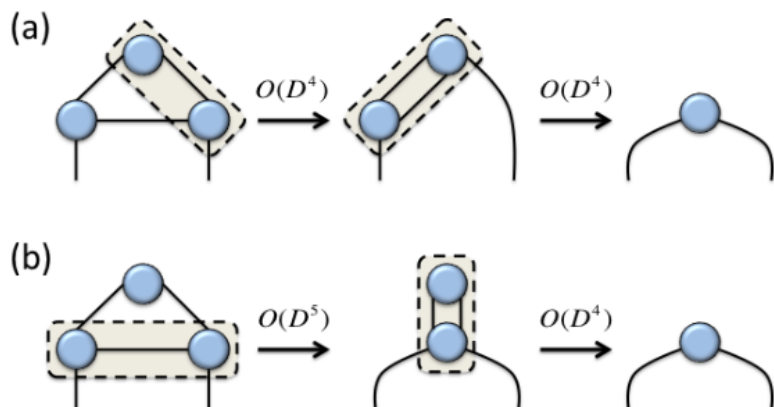


Figure 8: (color online) (a) Contraction of 3 tensors in  $O(D^4)$  time; (b) contraction of the same 3 tensors in  $O(D^5)$  time.

## Breaking the wave-function into small pieces

现在我们来解释量子多体态的TN表示，我们考虑一个N粒子的量子多体系统。每个粒子的自由度可以用p个不同的状态来描述。我们考虑这个N个p级粒子的系统，其波函数 $|\Psi\rangle$ 可以描述成：

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} C_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle$$

式中： $C_{i_1 i_2 \dots i_N}$ 为 $p^N$ 个复数(独立于一个归一化条件)，对于每个粒子r有 $i_r = 1, \dots, p$ ，符号 $\otimes$ 表示多体系统中每个粒子的量子态张量积。

其中波函数 $|\Psi\rangle$ 的 $p^N$ 个 $C_{i_1 i_2 \dots i_N}$ 可以理解为一个张量C的系数，它有N个索引 $i_1 i_2 \dots i_N$ ，其中每个索引可以取p个不同的值(因为我们考虑的是p级粒子)。这是一个秩为N的张量，其系数为 $O(p^N)$ 。

指定张量C的每一个系数 $C_{i_1 i_2 \dots i_N}$ 的值是对多体系统量子态的一种计算无效的描述。TN态的目的之一是通过提供对态的预期纠缠性质的准确描述来降低 $|\Psi\rangle$ 等态表示的复杂度，这可以通过将"大"张量C替换为"小"张量组成的TN来实现的。

在图示表示中的一些例子中，用秩较小的张量TN代替张量。这种方法相当于将"大"张量C(即状态 $|\Psi\rangle$ )分解为"基本DNA块"，即由一些较小秩的张量组成的TN，这更容易处理。

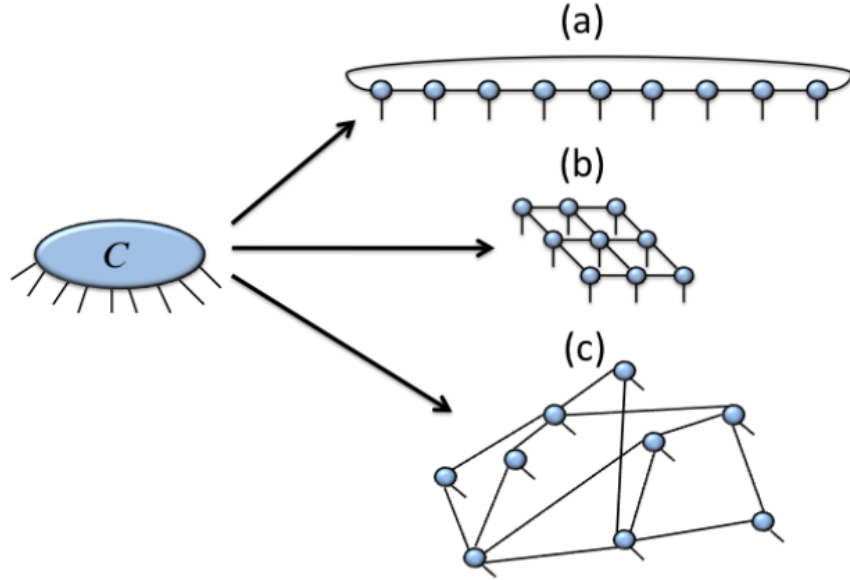


Figure 9: (color online) Tensor network decomposition of tensor  $C$  in terms of (a) an MPS with periodic boundary conditions, (b) a PEPS with open boundary condition, and (c) an arbitrary tensor network.

重要的是， $|\Psi\rangle$ 在TN上的最终表示通常依赖于多项式数量的参数，因此是多体系统量子态的计算有效描述。具体证明如下：

张量网络中参数 $m_{tot}$ 的总数为：

$$m_{tot} = \sum_{t=1}^{N_{tens}} m(t)$$

张量网络总参数量，为每个张量的参数量之和。其中 $m(t)$ 是TN中张量 $t$ 的参数个数， $N_{tens}$ 是张量的个数。对于一个TN是实际的 $N_{tens}$ 一定是低于N的指数级，可能是 $N_{tens} = O(poly(N))$ ，有时甚至 $N_{tens} = O(1)$ 。

对于每个张量 $t$ 来说，参数的个数为：

$$m(t) = O\left(\prod_{a_t=1}^{rank(t)} D(a_t)\right)$$

某个张量的参数个数，由张量索引可能值数量的乘积。 $D(a_t)$ 为索引 $a_t$ 的不同的可能值， $rank(t)$ 为张量的索引个数。称 $D_t$ 为给定张量的所有数 $D(a_t)$ 中的最大值，则有

$$m(t) = O(D_t^{rank(t)})$$

把上述式子联立一起，我们就有了参数的总数量：

$$m_{tot} = \sum_{t=1}^{N_{tens}} O(D_t^{rank(t)}) = O(plog(N)plog(D))$$

式中： $D$ 为在所有张量上 $D_t$ 的最大值，这里假设每个张量的秩以一个常数为界（即 $rank(t) \leq \text{某常数}$ ）。

TN描述的部分神奇之处在于，它表明这些 $p^N$ 系数不是独立的，而是从给定TN的收缩中获得的，因此具有结构。

然而，这种量子多体态的有效表示并不是免费的。TN替换张量C涉及到系统中额外自由度的出现，这些自由度负责“粘合不同的DNA块”。这些新的自由度由TN中张量之间的连接索引（指标）表示。连接索引具有重要的物理意义：它们代表了量子态 $|\Psi\rangle$ 中**多体纠缠的结构**，每个连接索引所能取的不同值的个数是波函数中量子关联数量的定量度量。这些索引（指标）通常被称为**bond（键）**或**ancillary indices（辅助指标）**，其可能取值的个数称为**键维度**。键维度值中的最大值，我们称之为 $D$ ，也称为**张量网络的键维度**。

为了更好地理解纠缠与**键索引**的关系，让我们举一个例子。现在我们估计下图PEPS（投影纠缠对态）态的线性长度 $L$ 的块(见图)的纠缠熵。

$$|\Psi\rangle = \sum_{\bar{\alpha}=1}^{D^{4L}} |in(\bar{\alpha})\rangle \otimes |out(\bar{\alpha})\rangle.$$



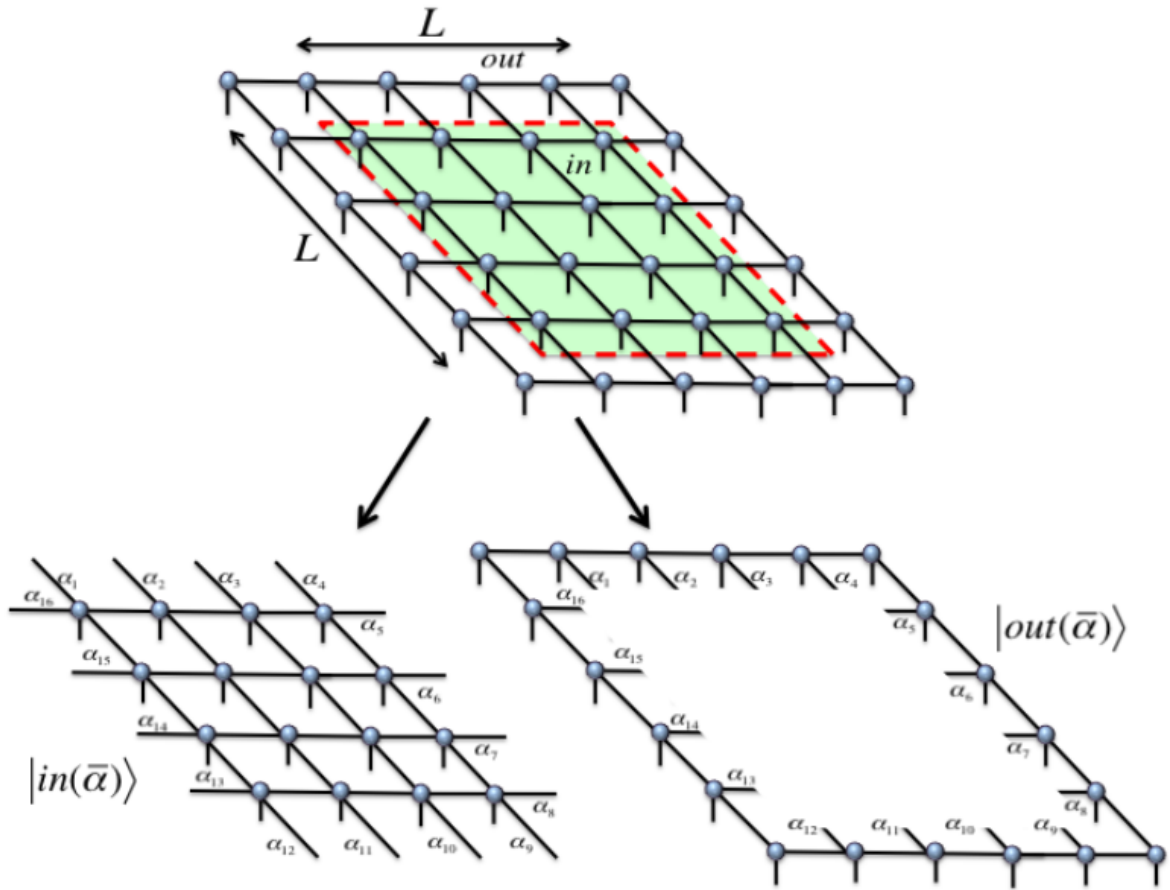


Figure 10: (color online) States  $|in(\bar{\alpha})\rangle$  and  $|out(\bar{\alpha})\rangle$  for a  $4 \times 4$  block of a  $6 \times 6$  PEPS.

最后，我们得到，此外，该块的纠缠熵  $S(L) = -\text{tr}(\rho_{in} \log \rho_{in})$  是以  $\rho_{in}$  的秩的对数为上界的。

$$S(L) \leq 4L \log D$$

这不过是纠缠熵的面积律的一个上界版本[ 53 ]。事实上，我们也可以将这个等式解释为每一个"broken (断开)"的键索引给出的熵贡献至多为  $\log D$ 。

总的来说，上面结论如下，首先，如果  $D = 1$ ，那么无论块的大小，上界都是  $S(L) = 0$ 。即波函数中不存在纠缠。其次，对于任意的  $D > 1$ ，我们有 ansatz 已经可以处理纠缠熵的面积律。改变键维  $D$  只改变面积律的乘法因子。因此，为了修改  $L$  的规模，应该改变 TN 的几何形状。这意味着 TN 中的纠缠既是  $D$  (键索引的"大小") 的结果，也是几何图案(这些键索引的连接方式)的结果。第三，注意到通过将  $D$  限制在大于 1 的固定值，我们可以实现量子多体态的 TN 表示，它既能有效的计算，又表示量子纠缠性。

TN 态也很重要，因为它们已经被证明就是上一节讨论的希尔伯特空间中满足面积定律的角落内的态。它们对应于自然界中服从面积法则的相关状态，并且上面可以使用张量语言有效地描述。

## MPS and PEPS: generalities

现在让我们呈现两个著名且有用的 TN 态家族。它们是矩阵乘积态 (MPS) 和投影纠缠对态 (PEPS)。

### Matrix Product States (MPS)

MPS 算是 TN 态最著名的例子。此外，它有一些强大的算法来模拟 1d 量子多体系统。比如：最突出的是密度矩阵重整化群 (DMRG) 算法、时间演化块抽取 (TEBD) 和功率波函数重整化群 (PWFRG)。

**MPS 是对应于一维张量阵列的 TN 态**，如图所示。在 MPS 中，多体系统中每个 site (节点) 对应一个张量。将张量粘合在一起的 bond (连接键索引) 可以取到  $D$  值，而开放索引的物理自由度可以取到  $p$  值。

下图中，第一类是具有开边界条件的 MPS，第二类是具有周期边界条件的 MPS。



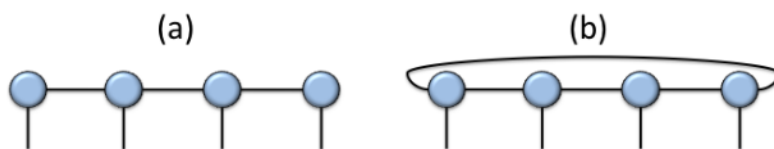


Figure 11: (color online) (a) 4-site MPS with open boundary conditions; (b) 4-site MPS with periodic boundary conditions.

1. **1d 平移不变性和热力学极限。**原则上，有限尺寸MPS中的所有张量都可能不同，这意味着**MPS本身不是平移不变的(TI)**。然而，也可以通过选择在1d晶格（点阵）上**无限多次重复的张量的一些基本单胞**来满足TI和热力学极限的性质。

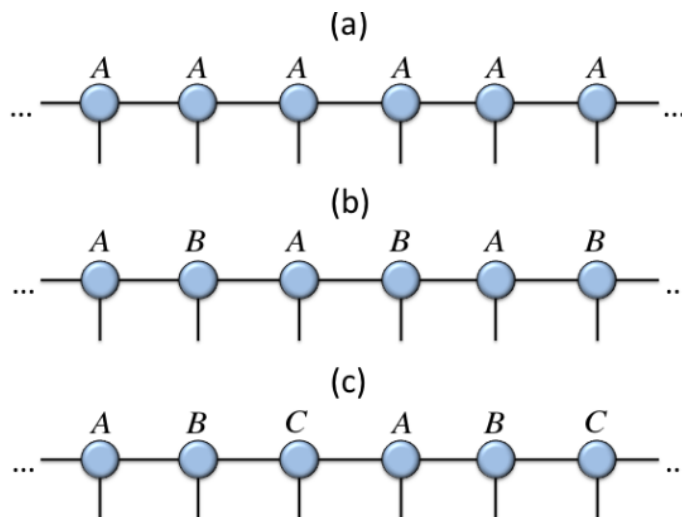


Figure 12: (color online) infinite-MPS with (a) 1-site unit cell, (b) 2-site unit cell, and (c) 3-site unit cell.

2. MPS是稠密的 (MPS are dense) 。只要充分增大D的值，MPS就可以表示多体希尔伯特空间中的任意量子态。但如果要覆盖希尔伯特空间中的所有态，D需要为系统规模的指数级大小。
3. 一维面积定律 (One-dimensional area-law) 。**MPS满足适应于1d系统的纠缠熵的面积律标度。**这仅仅意味着一个格点块的纠缠熵以一个常数为界，更准确地说  

$$S(L) = -\text{tr}(\rho_L \log \rho_L) = O(\log D),$$
 $\rho_L$ 为该格点块的约化密度矩阵。
4. MPS are finitely-correlated (MPS是有限相关的) 。**MPS的关联函数总是随分离距离呈指数衰减。**这意味着这些状态的关联长度是有限的，因此MPS无法重现具有临界性或尺度不变性的系统，因为系统的关联长度是已知发散的。

我们可以通过下面的例子很容易地理解这一点：假设给定一个满足TI和无限大小的MPS，用一个张量A来定义。

两体关联(相关)函数如下：

$$C(r) \equiv \langle O_i O'_{i+r} \rangle - \langle O_i \rangle \langle O'_{i+r} \rangle$$

在*i*和*i + r*处的单体算子 $O_i$ 和 $O'_{i+r}$ 可以通过下图表示，。

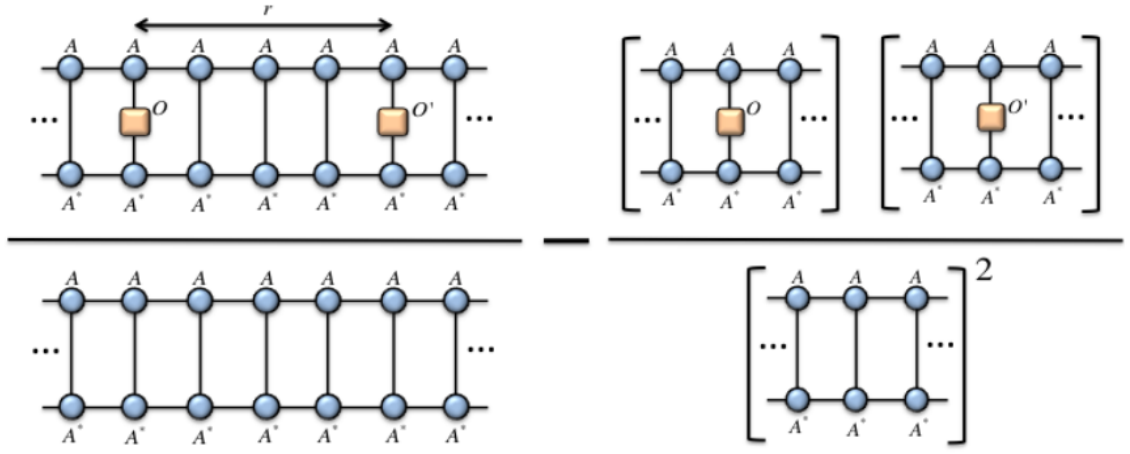


Figure 14: (color online) Diagrams for the two-body correlator  $C(r)$ .

零维传递矩阵  $E_I$  在本次计算中起着关键作用。其中有：

$$(E_I)^r = (\lambda_1)^r \sum_{\mu=1}^{D^2} \left( \frac{\lambda_\mu}{\lambda_1} \right)^r \vec{R}_\mu^T \vec{L}_\mu,$$

其中  $\lambda_i$  是  $E_I$  的第  $i = 1, 2, \dots, D^2$  个按降序排列的特征值， $\vec{R}_i$ ， $\vec{L}_i$  是相应的左、右特征向量。假设最大的特征值  $\lambda_1$  是非退化的，对于  $r \gg 1$  有

$$(E_I)^r \sim (\lambda_1)^r (\vec{R}_1^T \vec{L}_1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r \sum_{\mu=2}^{w+1} \vec{R}_\mu^T \vec{L}_\mu),$$

式中： $w$  为  $\lambda_2$  的 degeneracy (简并度)。定义矩阵  $E_O$  和  $E_{O'}$ ，如图所示，利用上式容易看出

$$\langle O_i O'_{i+r} \rangle \sim \frac{(\vec{L}_1 E_O \vec{R}_1^T)(\vec{L}_1 E_{O'} \vec{R}_1^T)}{\lambda_1^2} + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{r-1} \sum_{\mu=2}^{w+1} \frac{(\vec{L}_1 E_O \vec{R}_\mu^T)(\vec{L}_1 E_{O'} \vec{R}_\mu^T)}{\lambda_1^2}$$

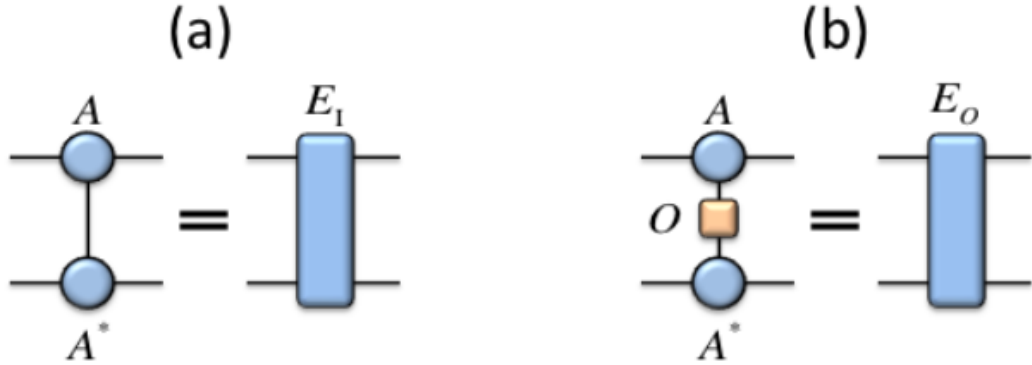


Figure 15: (color online) (a) Transfer matrix  $E_I$ ; (b) matrix  $E_O$ .

以图的形式表示如图所示。在这个方程中，第一项只不过是  $\langle O_i \rangle \langle O'_{i+r} \rangle$ 。因此，当  $r$  很大时， $C(r)$  为：

$$C(r) \sim \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{r-1} \sum_{\mu=2}^{w+1} \frac{(\vec{L}_1 E_O \vec{R}_\mu^T)(\vec{L}_\mu E_{O'} \vec{R}_1^T)}{\lambda_1^2}$$

$$\langle O_i O'_{i+r} \rangle \approx \frac{\langle O_i \rangle \langle O'_{i+r} \rangle}{\lambda_1^2} + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{r-1} \sum_{\mu=2}^{\omega} \frac{\text{Diagram}}{\lambda_1^2}$$

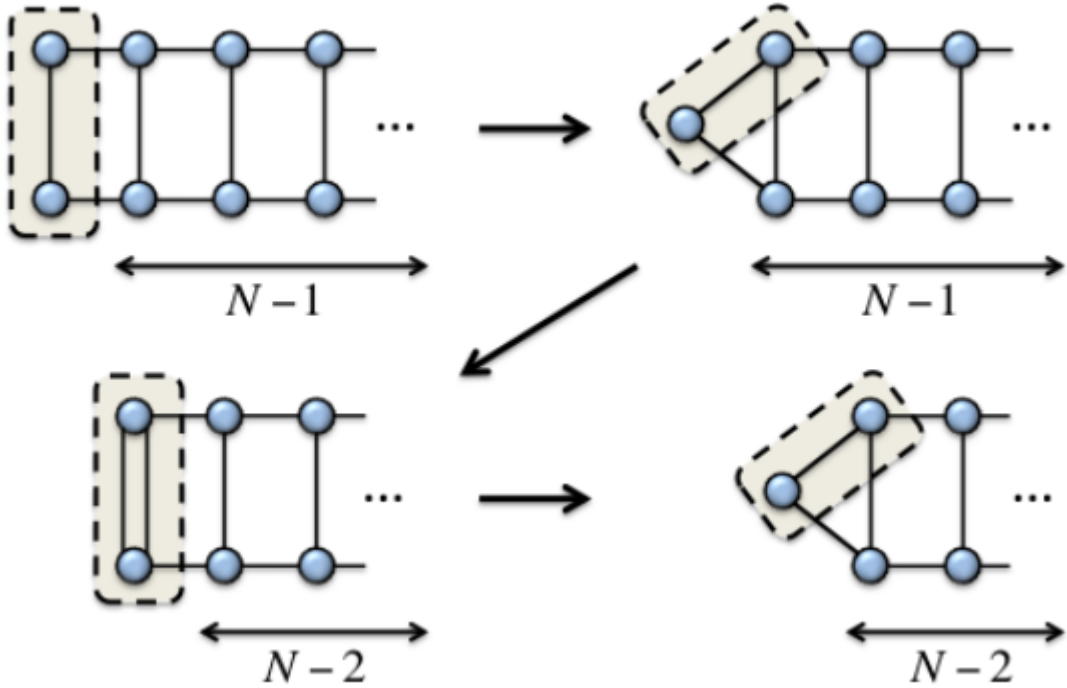
Figure 16: (color online) Diagrams for  $\langle O_i O'_{i+r} \rangle$  for large separation distance  $r$ . The first part corresponds to  $\langle O_i \rangle \langle O'_{i+r} \rangle$ .

总的来说，有：

$$C(r) \sim f(r) a e^{-r/\xi}$$

当比例常数  $a = O(\omega)$  时，如果  $O$  和  $O'$  是 hermitian 的，且关联长度  $\xi \equiv -1/\log|\lambda_2/\lambda_1|$ ，则  $f(r)$  是位置依赖的相位  $= \pm 1$ 。重要的是，对于大  $r$ ，这种类型的**两点关联函数的指数衰减是间隙、非临界 1d 系统基态的典型衰减**，这也是 MPS 能够很好地近似这类态的另一个说明。

5. **期望值的精确计算**。对于**两个  $N$  个站点的 MPS 之间的点积的精确计算**总是可以在一个时间  $O(NpD^3)$  内精确完成。我们在下图中解释了这种计算的基本思想。一般来说，**局域可观测量的期望值**，如关联函数、能量和局域序参量，也可以使用相同的张量操作来计算。



6. **Canonical form (标准形式) 和 Schmidt 分解**。对于具有开边界条件的 MPS，给定一个量子态  $|\Psi\rangle$ ，有一个非常方便的**张量表示称为 MPS [13、14] 的正规形式**。定义如下：对于给定的具有开边界条件（无论是对于有限系统还是无限系统）的 MPS，如果对于每个键索引  $\alpha$ ，**该索引对应于  $|\Psi\rangle$  在该索引上的 Schmidt 分解中的 Schmidt 基的索引号**，我们说它是其标准形式。

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^D \lambda_{\alpha} |\Phi_{\alpha}^L\rangle \otimes |\Phi_{\alpha}^R\rangle$$

式中： $\lambda_{\alpha}$  为按降阶 ( $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq 0$ ) 排序的施密特系数，施密特向量（施密特基）构成正交正态集，即  $\langle \Phi_{\alpha}^L | \Phi_{\alpha'}^L \rangle = \langle \Phi_{\alpha}^R | \Phi_{\alpha'}^R \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}$ 。