

3 TEBD 算法

3.1 施密特分解及相关定理

• 奇异值分解

$$A = \Gamma_A \Lambda \Gamma_B^T \quad \Gamma_A, \Gamma_B \text{ 是酉矩阵} \quad \Lambda \text{ 是 } m \times n \text{ 对角矩阵}$$

对角元 λ 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

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

这是 A 在降秩 (秩为 l) 空间的最佳近似

• 施密特分解

$|\psi\rangle$ 是 $d_A d_B$ 维 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 中的纯态, 那么存在向量 $\{|\phi_a^A\rangle\}$ $\{|\phi_a^B\rangle\}$ 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 $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ 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

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

如果我们现在定义

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

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 (不一定标准正交)

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

得

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

我们现在为 $\mathcal{H}_A$ 选择一组 $\{|m_A\rangle\}$ 作为基 将约化密度算子 $\hat{\rho}_A$ 对角化

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{m=1}^{\chi_S} p_m |m_A\rangle\langle m_A|$$

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 $N_A - \chi_S$ 个正交于 $|m_A\rangle$ 的向量来完成这组基

显式地对B的自由度部分求迹, 得

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

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

对其规范化

$$|\mu_B\rangle = p_m^{-\frac{1}{2}} |\tilde{\mu}_B\rangle$$

(感觉写成 m 更好一点啦...)

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu} \sqrt{p_{\mu}} |m_A\rangle \otimes |\mu_B\rangle$$

这就得到了施密特分解

如果对A的指标求迹, 得

$$\hat{\rho}_B = \sum_{\mu} p_{\mu} |\mu_B\rangle\langle \mu_B|$$

(为啥不是 $\sum_{\mu} \sqrt{p_{\mu}} |\mu_B\rangle\langle \mu_B|$?)

因此, $\hat{\rho}_A$ 和 $\hat{\rho}_B$ 具有相同的(非零)本征值. 施密特秩现在表示为约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. 一个非常直观的结果是, 在由么正算子 $U_A \otimes U_B$ 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, 例如同为其他系统都在远处).

它系统都在远处.

熵和存在纠缠有何区别?

我们由此推论, 在 $\mathcal{H}_A$ 和 $\mathcal{H}_B$ 独立演化时, 熵和不能通过局部演化转变为纠缠态 (同样, 我们也不能用这种方法来解除纠缠).

当且仅当施密特秩为1时, 二体态是张量态,

反之亦然, 当施密特秩为 $\min(d_A, d_B)$ 时, 二体态达到最大纠缠

这引发了下面与施密特秩有关的纠缠度量

考虑由施密特指数 $\{n_i\}$ 描述的 n 体 qu-dits 系统 (d 级量子态), 它可由局部基 $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_n\rangle$ 表示为

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

考虑这个系统所有的二分分裂, 即考虑这个系统的所有分解

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_L=1}^{\chi_{SL}} \lambda_{i_L}^{[L]} |\phi_{i_L}^{[L]}\rangle |\phi_{i_L}^{[n-L]}\rangle$$

终于看懂了 $[L]$ 的意思

其中施密特向量 $|\phi^{[L]}\rangle$ 张成的 Hilbert 空间亦由 $|i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_L\rangle$ 张成, 施密特向量 $|\phi^{[n-L]}\rangle$ 张成的 Hilbert

空间亦由 $|i_{L+1}\rangle |i_{L+2}\rangle \dots |i_n\rangle$ 张成 为什么是 L ? 不是 n ? 噢, 是因为 $|i_{L+1}\rangle \dots |i_n\rangle$ 可被前 L 个线性表出吗? , 且 $1 \leq \chi_{SL} \leq \min(d^L, d^{L_L})$

是与二分分裂 L 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 $E_{\chi_S} \equiv \log_d(\chi_S)$ 为施密特测度, TEBD 核心

纠缠测度, 其中 $\chi_S \equiv \max_L(\chi_{SL})$. 练习中探讨了施密特测度的一些性质

练习: 证明局部么正算子 $U_A \otimes U_B$ 不改变施密特秩

是么正吗? 线性无关值经么正变换不会线性相关

练习: 你在上一个练习中证明了施密特测度是纠缠单调的, 即, 它不被么正算子改变

怎么么正以下? 不是 $\chi_S > 1$ 吗??

证明它在零以下是有界的 (何时达到?) 以及它还限制了它的纠缠度 $S = -\sum \lambda_i^2 \log \lambda_i$

最后证明它在张量积下是可加的

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

这意味着 χ_S 相乘?? 为啥? 张量积与乘积有何区别?

这些结论更严格说明了 E_{χ_S} 是施密特值的忠实度量

3.2 TEBD 的概念基础

纠缠度矩阵的物理意义是什么?

使 TEBD 高效和成功的基本事实是, 约化密度矩阵的奇异值以非递增的方式排列时, 是指指数衰减的.

这意味着秩为 $\chi \ll \chi_S$ 的近似可以达到出色的近似效果.

意思是说后面太小了, 用处不大吗?
看来可以通过计算奇异值来判断是否对初始态呀!

希尔伯特空间中的物理态, 包括基态, 都有有限的纠缠, 这些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比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, 这目前还没有普适的证据, 只是观察到这一趋势.

3.3 Vidal 的态分解

TEBD的起点是将如下定义的 L 体协变张量 $C_{i_1 \dots i_L}$

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

表示为如下局部张量 $\Gamma^{[L]}$ 和局部向量 $\lambda^{[L]}$ 之和

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

$[]$ 是序号, 仍在使用
 α 是要缩并的指标
 i 是要保留的指标

或者, 对于开放边界条件, 表示为

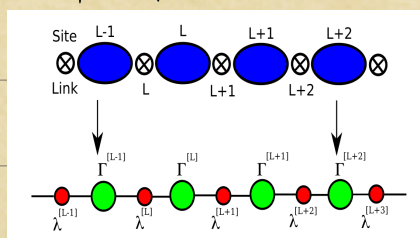
$$C_{i_1 \dots i_L} = \sum_{\alpha_0 \dots \alpha_{L-1}} \Gamma_{\alpha_1}^{[1] i_1} \lambda_{\alpha_1}^{[2]} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2] i_2} \lambda_{\alpha_2}^{[3]} \Gamma_{\alpha_2 \alpha_3}^{[3] i_3} \dots \Gamma_{\alpha_{L-1}}^{[L] i_L}$$

其中我们定义了

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

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

这样分解, 将原本所需的 d^L 个数减少到了 $d \times L + L(L+1)$ 个



分解前

分解后

分解的表达式反映了实际代码中的指标运用。Fortran 从 1 开始索引到 d , 因此其他语言中可能指标有所不同, 需注意。

上述分解恰如完成了二分型

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

意味着施密特张量

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

为啥有这个

这个不是该是 $\lambda_{\alpha_0}^{[L+1]}$ 吗?

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

分别张成密度矩阵

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

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

$(\lambda_{\alpha_0}^{[L+1]})^2$ 是它的特征值

这里是可以采用前述方法进行近似处理的，即选取前 X 个大的 $\lambda_{\alpha\alpha}^{[L]}$ 而舍弃剩下 $X-L$ 个。由于我们之前已经将 d^L 个参数替换为 $dX + X(L+1)$ 个。为使其合理， X 必须在 L 中满足近似表达式 $??$

为了通过系统 R 对 X 的近似提供物理动机，对于有限范围一维临界系统，块大小为 L 的块熵的标度关系可以表示为

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

其中 c 是基模形变理论的中心荷，如果我们认为这个块是大小为 L 的开放世界线熵的一半，则块熵的标度关系为

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

这有可能与我们想要的结果相悖，因为块有两个边界。这个结果明显比最大可能熵值（线性增长）慢。截断的 Vidal 分解可以保持的最大块熵是 $\log X$ （正如原书中证明的）。因此为了使截断结果在有限系统大小时保持一致，我们应将块熵大致设为

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

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系数张量，但还是有必要了解如何通过系数张量来构造局部张量。

考虑一个二分图

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

通过奇异值分解

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

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

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

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

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

在第一个键处使用施密特分解

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

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

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

这还不是以让我们独立地求的全部也局部张量, 故

在第二个键处分裂

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_2=1}^N \lambda_{\alpha_2}^{[3]} |\phi_{\alpha_2}^{[2]}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{[4]}\rangle = \sum_{\alpha_1, i_1, i_2, i_3, i_4} \lambda_{\alpha_2}^{[3]} \Gamma_{\alpha_2}^{[2]} |i_1 i_2\rangle \otimes (\Gamma_{\alpha_1}^{[4]} |i_3 i_4\rangle)$$

对比可得

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

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

我们又知道了 $\lambda_{\alpha_2}^{[3]}$, $\Gamma_{\alpha_2}^{[2]} i_1 i_2$, $\Gamma_{\alpha_2}^{[4]} i_3 i_4$, 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得

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

以及 $\lambda_{\alpha_3}^{[4]}$, $\Gamma_{\alpha_3}^{[23]} i_1 i_2 i_3$, $\Gamma_{\alpha_3}^{[4]} i_4$, 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

有态 (如真空态) 的局部张量可以至为规范' 忽略, 略略

3.3.2 初态选择

3.4 Vidal表示中的局部操作

3.4.1 单位点操作

考虑作用在单个位点的么正算符 $\hat{U}$

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

变换为

$$\tilde{\Gamma}_{\alpha_{l-1}\alpha_l}^{[l]i_l} = \sum_{i'_l} U_{i_l i'_l} \tilde{\Gamma}_{\alpha_{l-1}\alpha_l}^{[l]i'_l}$$

3.4.2