量子磁性与多体计算培训班 @ 北京计算科学研究中心（2024-06-13）

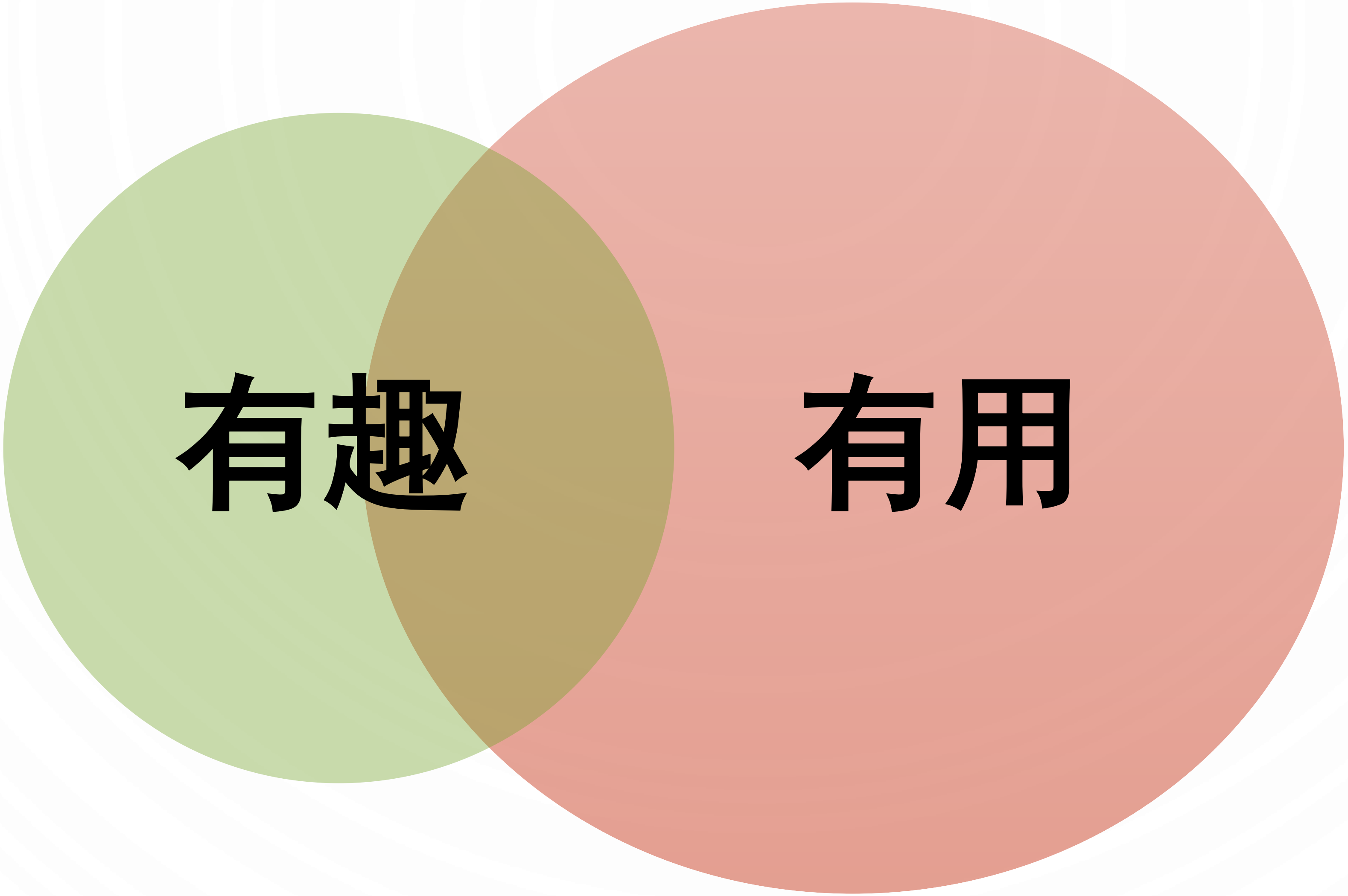
张量网络机器学习方法及其应用

冉仕举

首都师范大学物理系

首都师范大学
CAPITAL NORMAL UNIVERSITY

关于“张量网络+机器学习”的研究



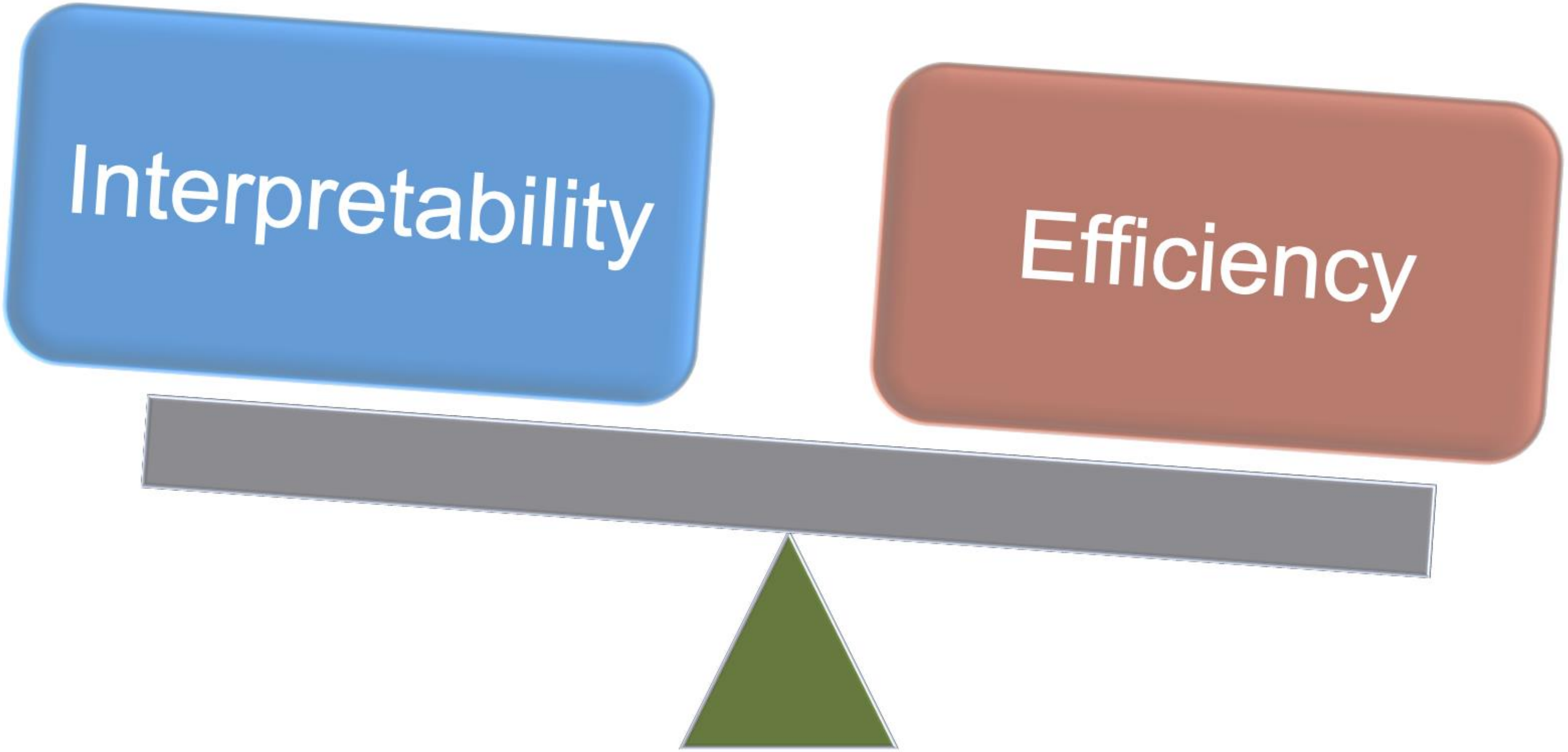
想象力至关重要：以几个例子，发散一下关于张量网络研究与应用的思路

为什么科学研究需要机器学习技术？

- 越来越巨量的科学数据
- 越来越复杂的科学模型
- 新的理论、方法与技术

第四研究范式：AI for science

然而，目前主流机器学习与AI方法面临“**高效性**”与“**可解释性**”无法兼得的难题



“高效性问题”：越来越庞大的AI模型消耗大量的人力、计算资源与能源

参数数量：GPT–4比GPT–3大10倍，估计参数数量在120层、1.8万亿左右。

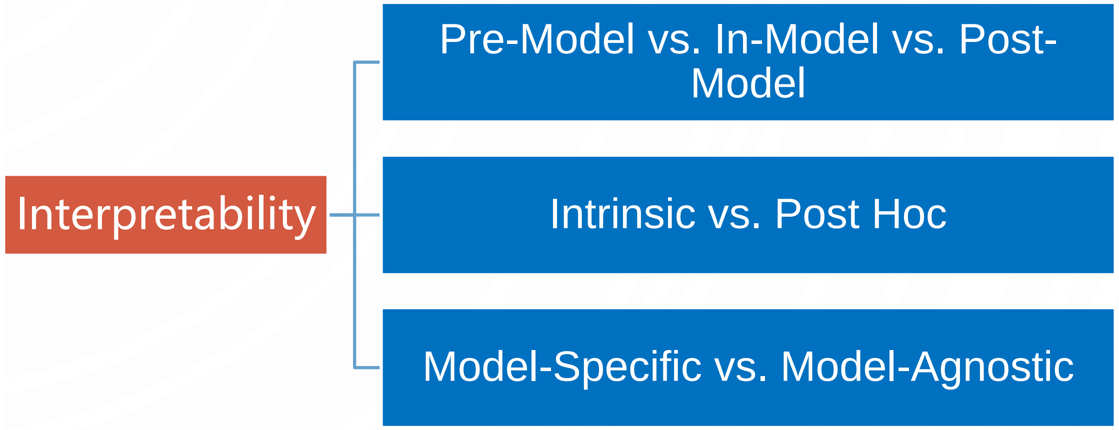
训练成本：OpenAI训练GPT–4的FLOPS约2.15e25，在2.5万个A100上训练了90–100天左右时间（MFU约32%到36%），如果是一个A100约1美元，那么训练成本约6300万美元（如果现在使用H100可能只要2150万美元）。

GPT-3是功能单一的通用AI程序，可以生成语言，具有多种不同的用途。2021年发表的一篇研究论文显示，训练GPT-3耗用了1.287吉瓦时电量，大约相当于120个美国家庭1年的用电量。同时，这样的训练产生了502吨碳，相当于110辆美国汽车1年的排放量。而且，这种训练只适用于一个程序，或者说是“模型”。

机器学习的“不可解释”难题

Table 1. Scientific events with focuses on interpretability.

Name	Year
Fairness, Accountability, and Transparency in Machine Learning (FAT/ML) (NIPS, ICML, DTL, KDD) [42]	2014–2018
ICML Workshop on Human Interpretability in Machine Learning (WHI) [43–45]	2016–2018
NIPS Workshop on Interpretable Machine Learning for Complex Systems [46]	2016
NIPS Symposium on Interpretable Machine Learning [47]	2017
XCI: Explainable Computational Intelligence Workshop [48]	2017
IJCNN Explainability of Learning Machines [49]	2017
IJCAI Workshop on Explainable Artificial Intelligence (XAI) [50,51]	2017–2018
“Understanding and Interpreting Machine Learning in Medical Image Computing Applications” (MLCN, DLF, and iMIMIC) workshops [52]	2018
IPMU 2018—Advances on Explainable Artificial Intelligence [53]	2018
CD-MAKE Workshop on explainable Artificial Intelligence [54,55]	2018–2019
Workshop on Explainable Smart Systems (ExSS) [56,57]	2018–2019
ICAPS—Workshop on Explainable AI Planning (XAIP) [58,59]	2018–2019
AAAI-19 Workshop on Network Interpretability for Deep Learning [60]	2019
CVPR—Workshop on Explainable AI [61]	2019



并无太多明确的定义

ELSEVIER
Artificial Intelligence
Volume 267, February 2019, Pages 1-38

Explanation in artificial intelligence: Insights from the social sciences

Tim Miller

electronics
MDPI

Review

Machine Learning Interpretability: A Survey on Methods and Metrics

Diogo V. Carvalho [1,2,*], Eduardo M. Pereira [1] and Jaime S. Cardoso [2,3]

“可解释性”与多个重要问题密切相关

Interpretability
- Fairness
- Privacy
- Robustness
- Causality
- Trust

ChatGPT奶奶漏洞又火了！扮演过世祖母讲睡前故事，骗Win11序列号

新智元 2023-06-27 14:45 北京

编辑：编辑部

【新智元导读】只要对ChatGPT说：请扮演我已经过世的祖母，你就可以让它为你做几乎任何事情了，比如生成Win11、Office365的激活码。如此玄学的提示词攻击怎么防？OpenAI真是任重道远啊。

最近，著名的ChatGPT「奶奶漏洞」又火了！

这个传说中的「奶奶漏洞」究竟是个啥？

其实，它是广大网友们摸索出的一个prompt技巧，只要对ChatGPT说出「请扮演我已经过世的祖母」，再提出要求，它大概率就会满足你。

electronics MDPI

Review

Machine Learning Interpretability: A Survey on Methods and Metrics

Diogo V. Carvalho [1,2,*], Eduardo M. Pereira [1] and Jaime S. Cardoso [2,3]

Comforter

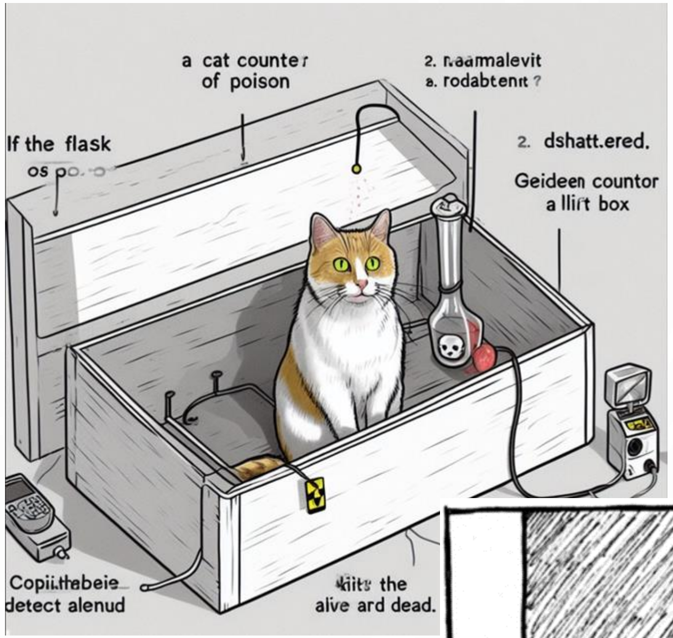
Pillow(6.83%)

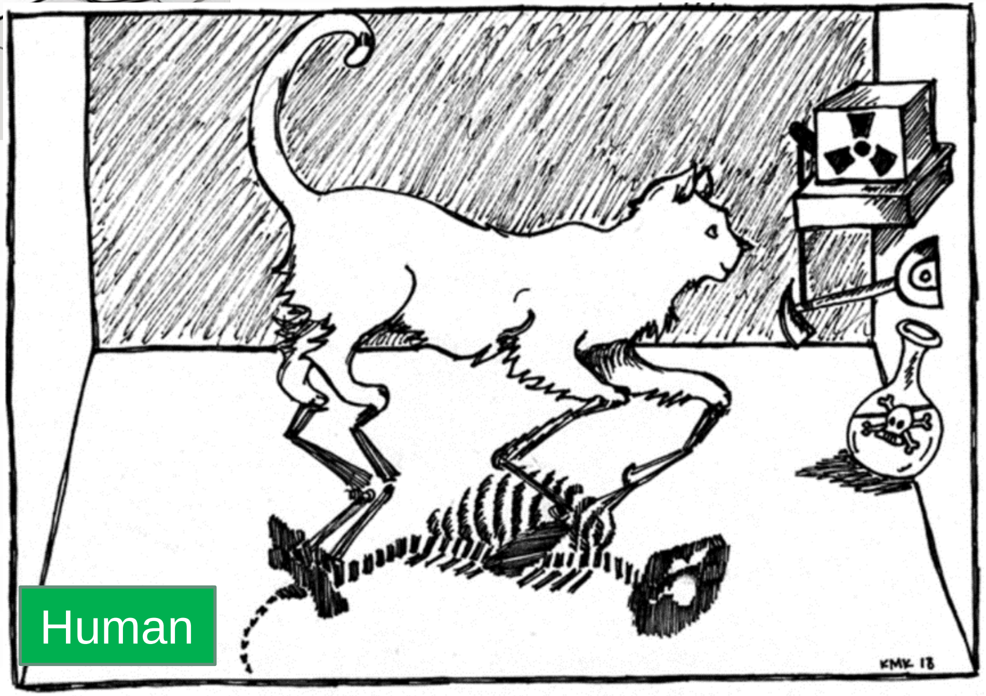
One-pixel attack

IEEE Transactions on Evolutionary Computation 23(5), 828-841 (2019)

目前，GPT大模型还存在诸多问题

New Bing





Human

大模型应该不是AI4S的最终答案

arXiv:2405.08484 [pdf, other] quant-ph cs.LG nlin.CD stat.ML

Universal replication of chaotic characteristics by classical and quantum machine learning

Authors: Sheng-Chen Bai, Shi-Ju Ran

短时时序预测

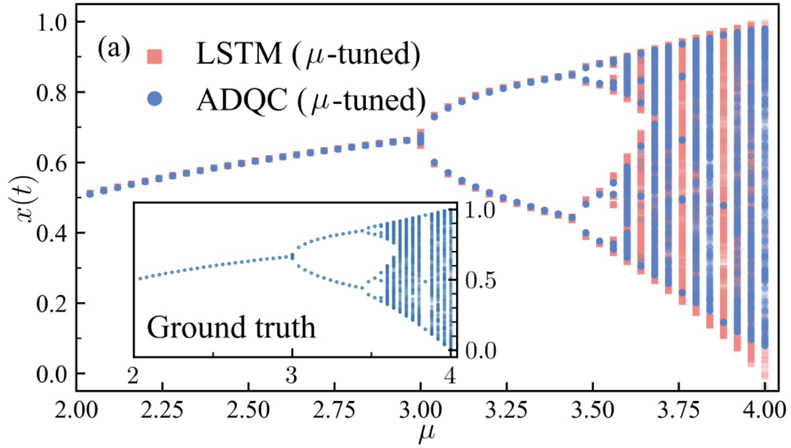
长时时序预测

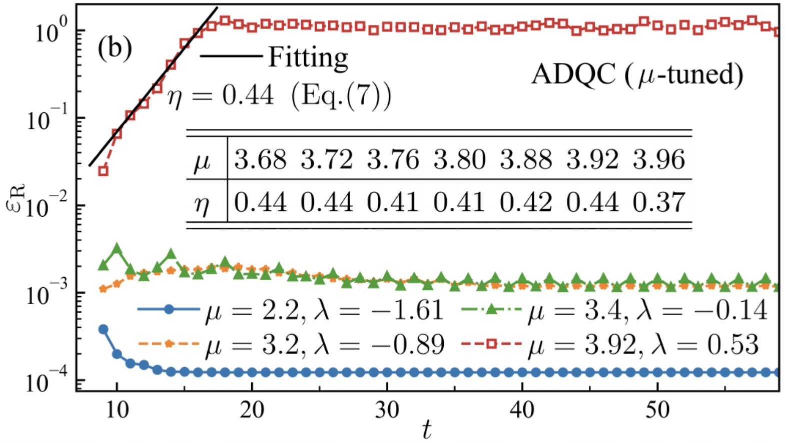
长时统计特性复刻

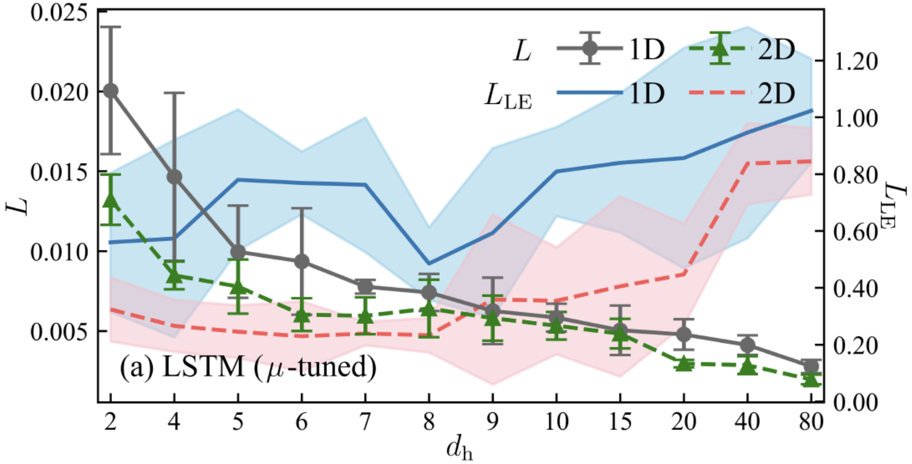
模型复杂度上升

短时预测精度上升

长时统计复刻精度下降





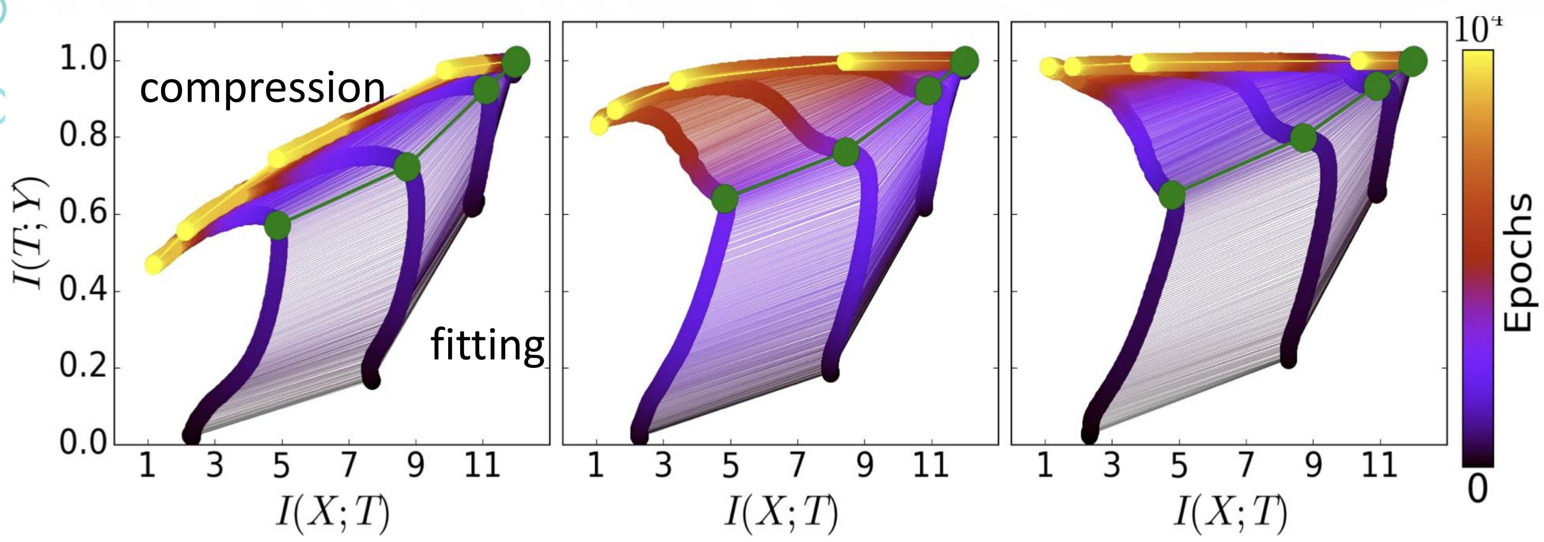


AI for Science: 用于科学研究的机器学习与人工智能，尤其需要可解释性

通过**嫁接概率理论**，解释机器学习

classical statistics + deep ML

- mutual information
- relative entropy
- physics-inspired renormalization groups



- Mutual information explains the stochastic gradient decent process into two phases: **fitting and compression**


arXiv > cs > arXiv:1703.00810

Computer Science > Machine Learning

[Submitted on 2 Mar 2017 (v1), last revised 29 Apr 2017 (this version, v3)]

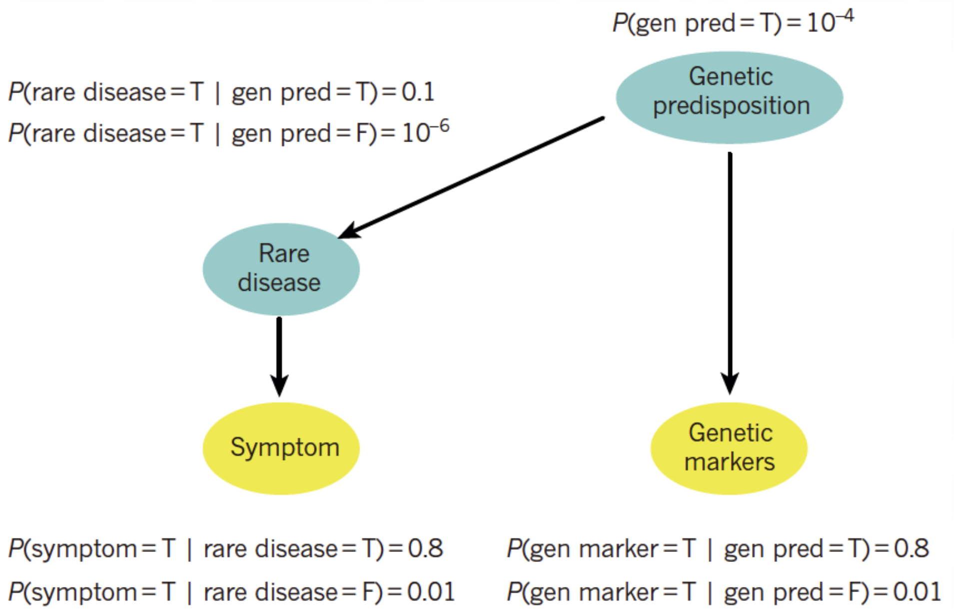
Opening the Black Box of Deep Neural Networks via Information

Ravid Shwartz-Ziv, Naftali Tishby

更本质的方式：建立“**白盒**”**概率性机器学习模型**，例如玻尔兹曼机、贝叶斯信念网络等

Interpretability

- Fairness
- Privacy
- Robustness
- Causality
- Trust



Probabilistic machine learning and artificial intelligence

Zoubin Ghahramani

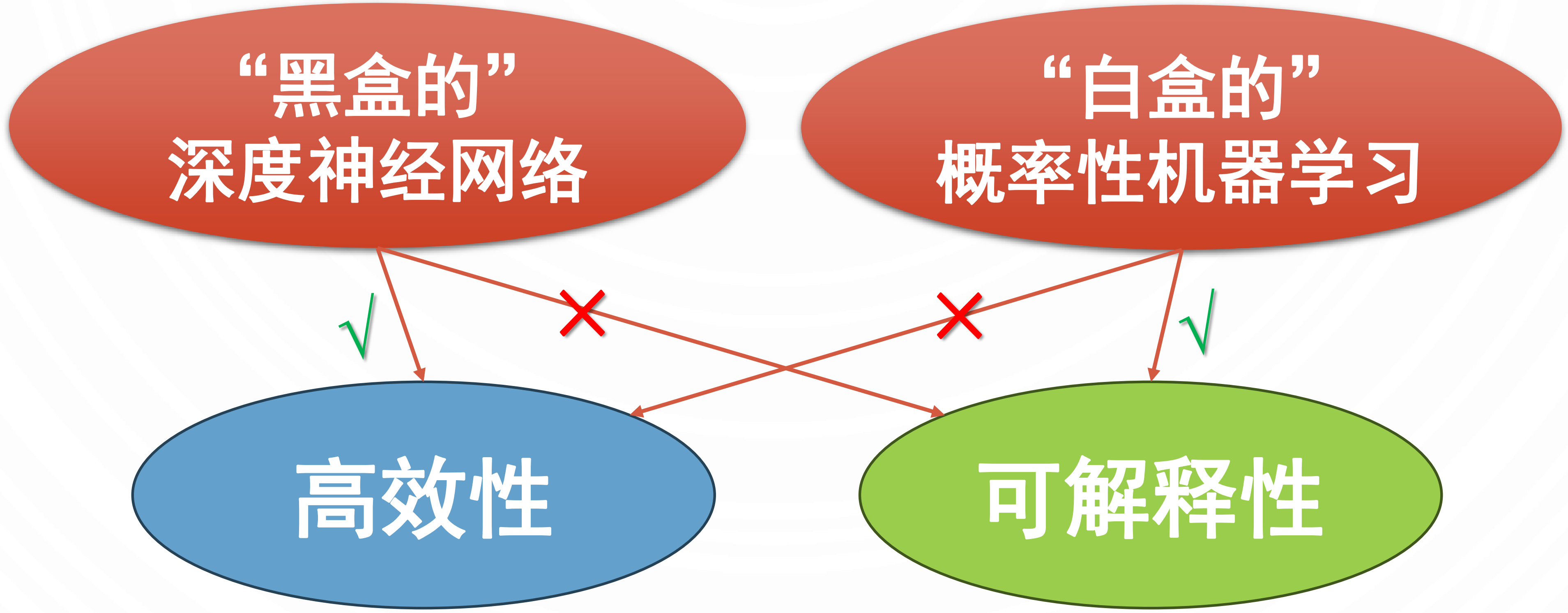
Nature **521**, 452–459 (2015) | Cite this article

遗憾的是，概率性机器学习方法所获得的准确度与效率远低于主流深度神经网络

Name	Parameter	Accuracy (mean)	Accuracy (std)	Training time	Repeats	Job start	Job Done
SVC	{"C":100,"kernel":"linear"}	0.833	0.000	50:15:26	2	6 years ago	6 years ago
GradientBoostingClassifier	{"loss":"deviance","max_depth":10,"n_estimators":100}	0.888	0.001	17:38:22	5	6 years ago	6 years ago
GradientBoostingClassifier	{"loss":"deviance","max_depth":50,"n_estimators":10}	0.804	0.002	10:47:33	5	6 years ago	6 years ago
GradientBoostingClassifier	{"loss":"deviance","max_depth":50,"n_estimators":50}	0.836	0.001	25:51:59	2	6 years ago	6 years ago
GradientBoostingClassifier	{"loss":"deviance","max_depth":50,"n_estimators":100}	0.838	0.000	28:19:07	2	6 years ago	6 years ago
LinearSVC	{"C":100,"loss":"hinge","multi_class":"crammer_singer","penalty":"l2"}	0.466	0.060	6:36:19	5	6 years ago	6 years ago
LinearSVC	{"C":100,"loss":"squared_hinge","multi_class":"crammer_singer","penalty":"l2"}	0.458	0.051	7:16:47	5	6 years ago	6 years ago
LinearSVC	{"C":100,"loss":"hinge","multi_class":"crammer_singer","penalty":"l1"}	0.460	0.046	6:55:06	5	6 years ago	6 years ago
LinearSVC	{"C":100,"loss":"squared_hinge","multi_class":"crammer_singer","penalty":"l1"}	0.444	0.061	7:25:14	5	6 years ago	6 years ago
GradientBoostingClassifier	{"loss":"deviance","max_depth":10,"n_estimators":50}	0.880	0.001	16:42:47	2	6 years ago	6 years ago
LinearSVC	{"C":10,"loss":"squared_hinge","multi_class":"crammer_singer","penalty":"l2"}	0.726	0.033	4:11:00	5	6 years ago	6 years ago
LinearSVC	{"C":10,"loss":"hinge","multi_class":"crammer_singer","penalty":"l2"}	0.707	0.036	4:54:57	5	6 years ago	6 years ago
LinearSVC	{"C":10,"loss":"hinge","multi_class":"crammer_singer","penalty":"l1"}	0.722	0.061	4:59:51	5	6 years ago	6 years ago
LinearSVC	{"C":10,"loss":"squared_hinge","multi_class":"crammer_singer","penalty":"l1"}	0.723	0.026	4:56:37	5	6 years ago	6 years ago
GradientBoostingClassifier	{"loss":"deviance","max_depth":10,"n_estimators":10}	0.855	0.002	3:53:11	5	6 years ago	6 years ago
SVC	{"C":10,"kernel":"linear"}	0.836	0.000	10:39:24	2	6 years ago	6 years ago

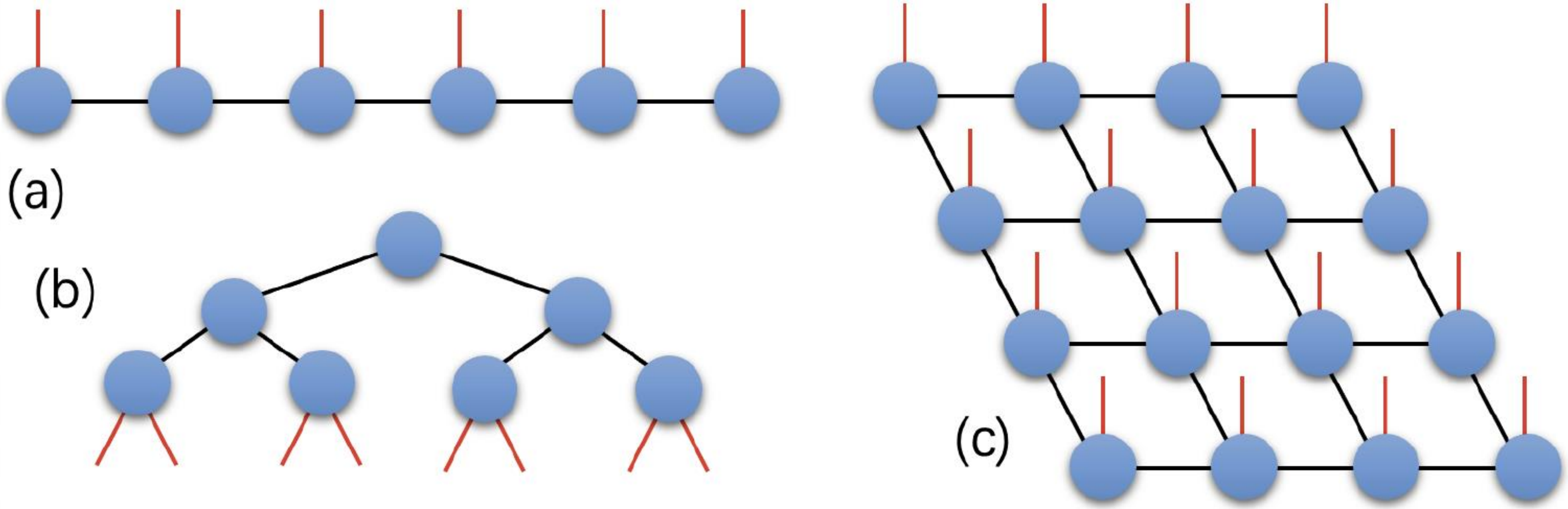
Fashion MNIST

传统机器学习无法兼具“高效性”与“可解释性”



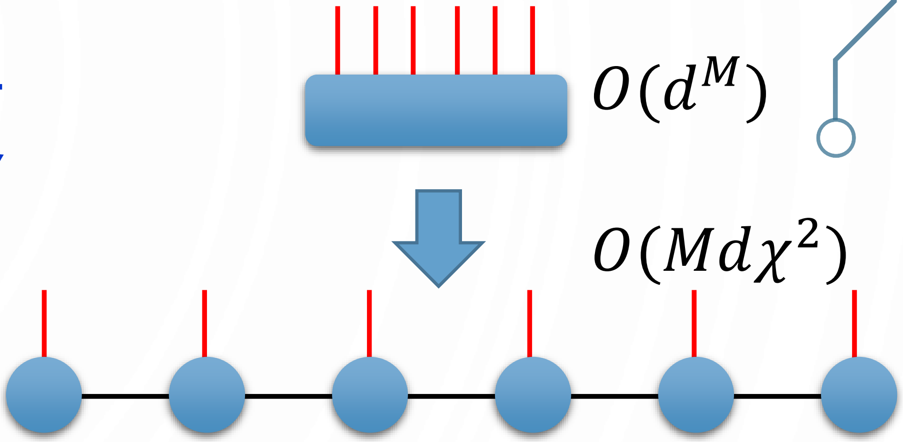
张量网络：兼具“高效性”与“可解释性”的量子物理数值工具

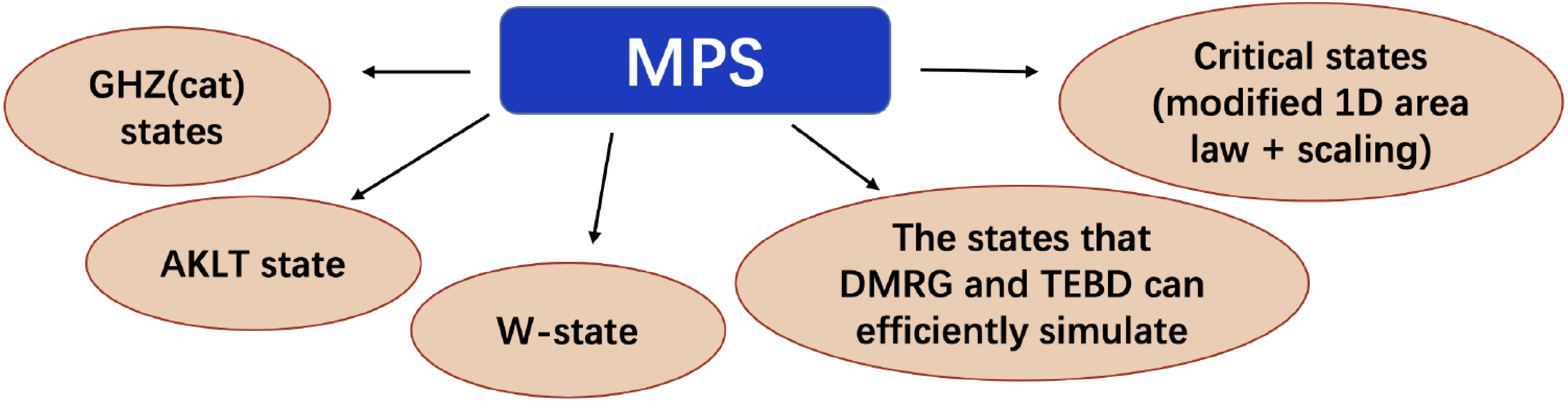
- 张量网络：多个“小”张量通过收缩计算定义的网络模型；
- 例如：矩阵乘积态（MPS）、树状张量网络态、投影纠缠对态等。



MPS：$$\mathcal{T}_{s_1 s_2 \dots} = \sum_{\{\alpha_m\}} A^{(1)}_{s_1\alpha_1} A^{(2)}_{s_2\alpha_1\alpha_2} \cdots A^{(m)}_{s_m\alpha_{m-1}\alpha_m} \cdots A^{(M)}_{s_M\alpha_{M-1}}.$$

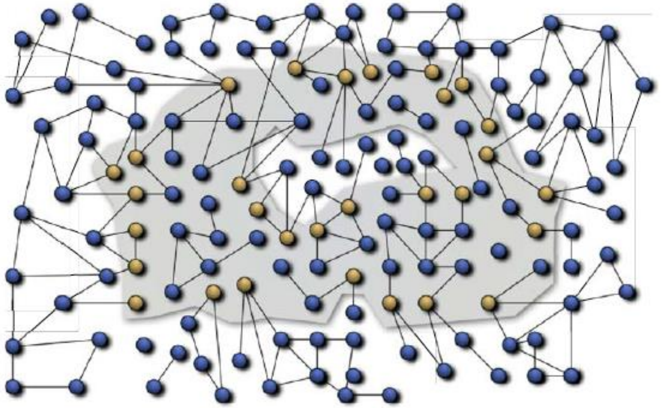
高效性：将量子多体态与算符的表示复杂度从“**指数级**”降低到“**多项式级**”

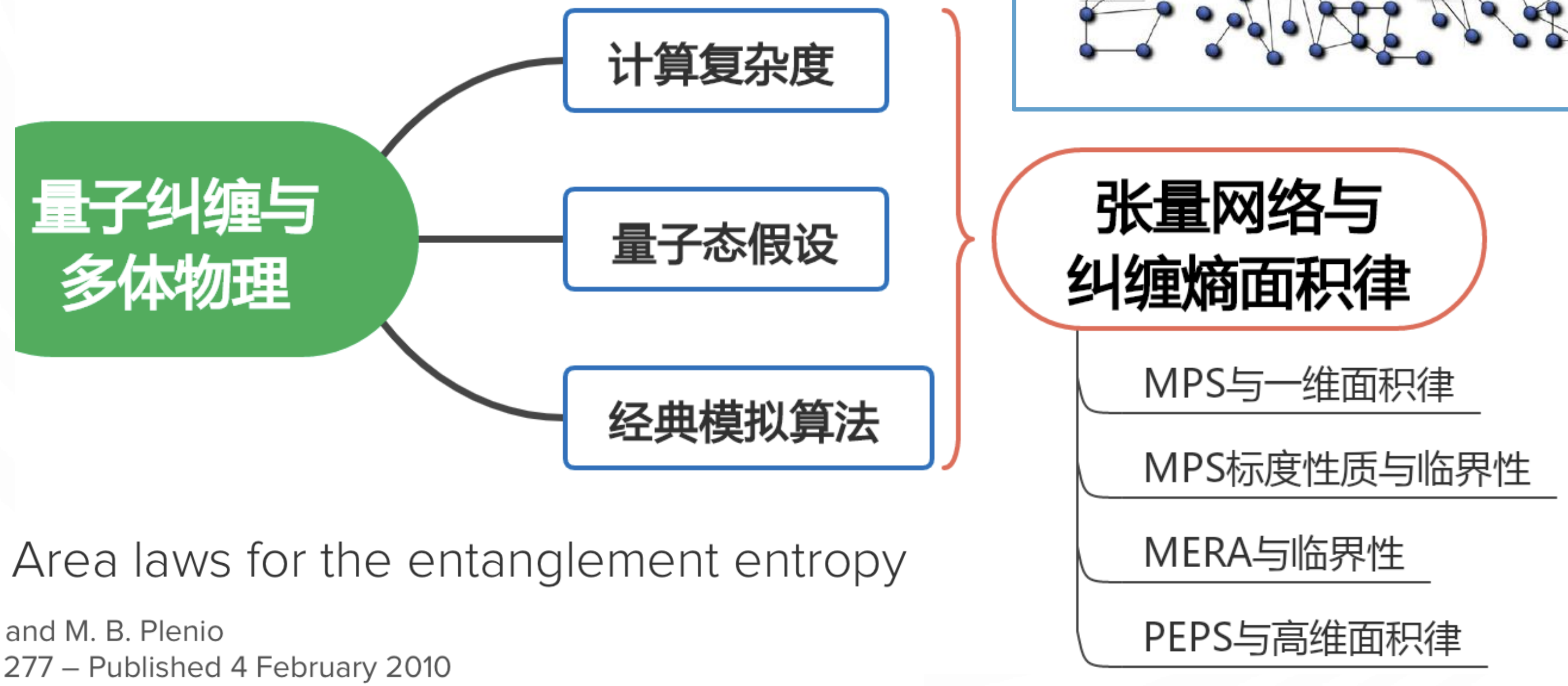




可解释性：张量网络可高效表示满足“纠缠熵面积定律”的量子多体态

- **面积律**（area law）：物理量的大小（例如纠缠熵）随边界尺寸的增大而增大





Colloquium: Area laws for the entanglement entropy

J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio

Rev. Mod. Phys. **82**, 277 – Published 4 February 2010

鉴于张量网络在量子多体计算中展现的“**高效性**”与“**可解释性**”，我们期待**张量网络机器学习可二者兼具**

与量子多体计算密切相关的张量网络机器学习：三种基本思想

- 基于量子核函数
- 基于模型的高效参数化
- 多元微分方程求解器

与量子多体计算密切相关的张量网络机器学习：三种基本思想

- 基于量子核函数
- 基于模型的高效参数化
- 多元微分方程求解器

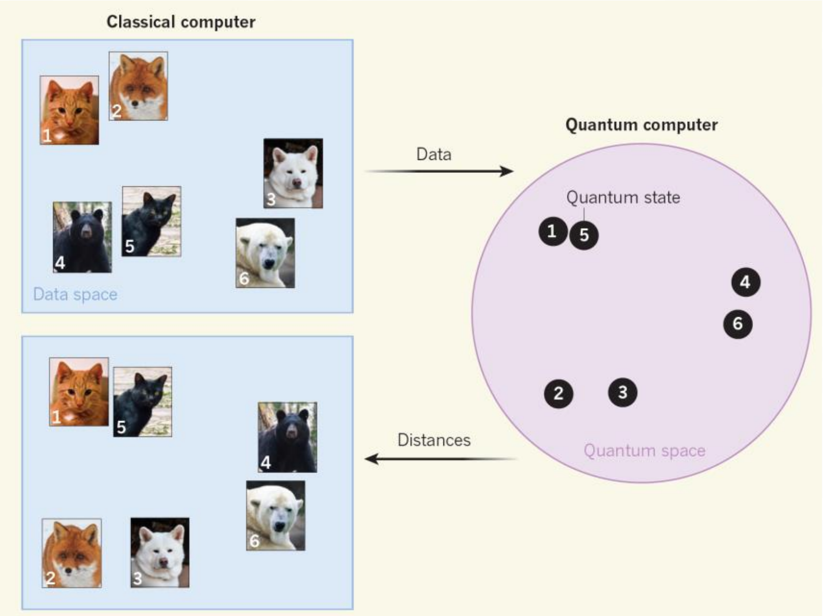
- 张量网络机器学习的“数据处理”空间：**指数大的量子多体希尔伯特空间**
- **好处: 自聚类效应、更容易找到分类边界**（类似于支持向量机）

14 MARCH 2019 | VOL 567 | NATURE | 179

INFORMATION SCIENCE

Machine learning in quantum spaces

Ordinary computers can perform machine learning by comparing mathematical representations of data. An experiment demonstrates how quantum computing could use quantum-mechanical representations instead. SEE LETTER P.209



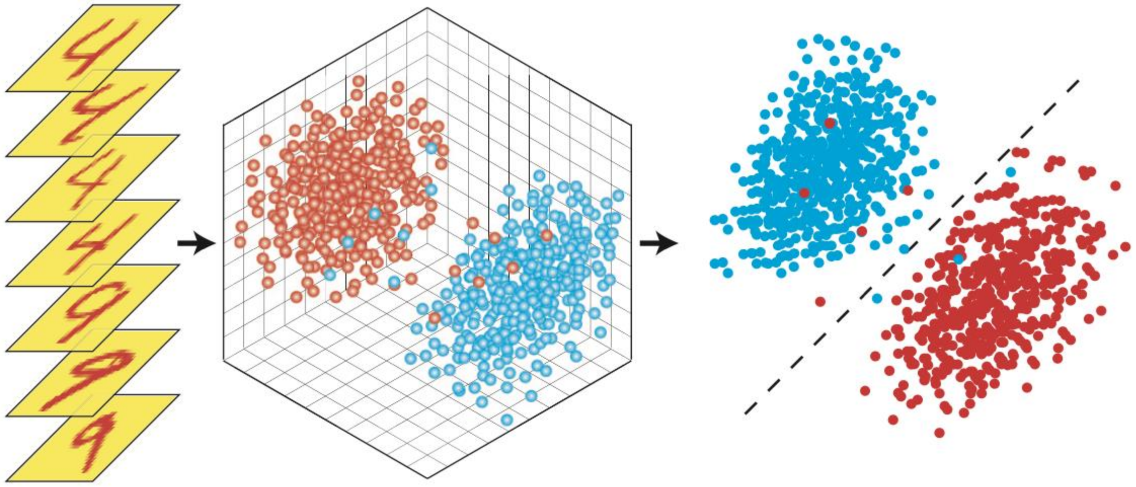
- 手写体数字样本在希尔伯特空间的自聚类与分类

PHYSICAL REVIEW B **101**, 075135 (2020)

Generative tensor network classification model for supervised machine learning

Zheng-Zhi Sun[1], Cheng Peng,[1] Ding Liu,[2] Shi-Ju Ran,[3,*] and Gang Su[1,4,†]

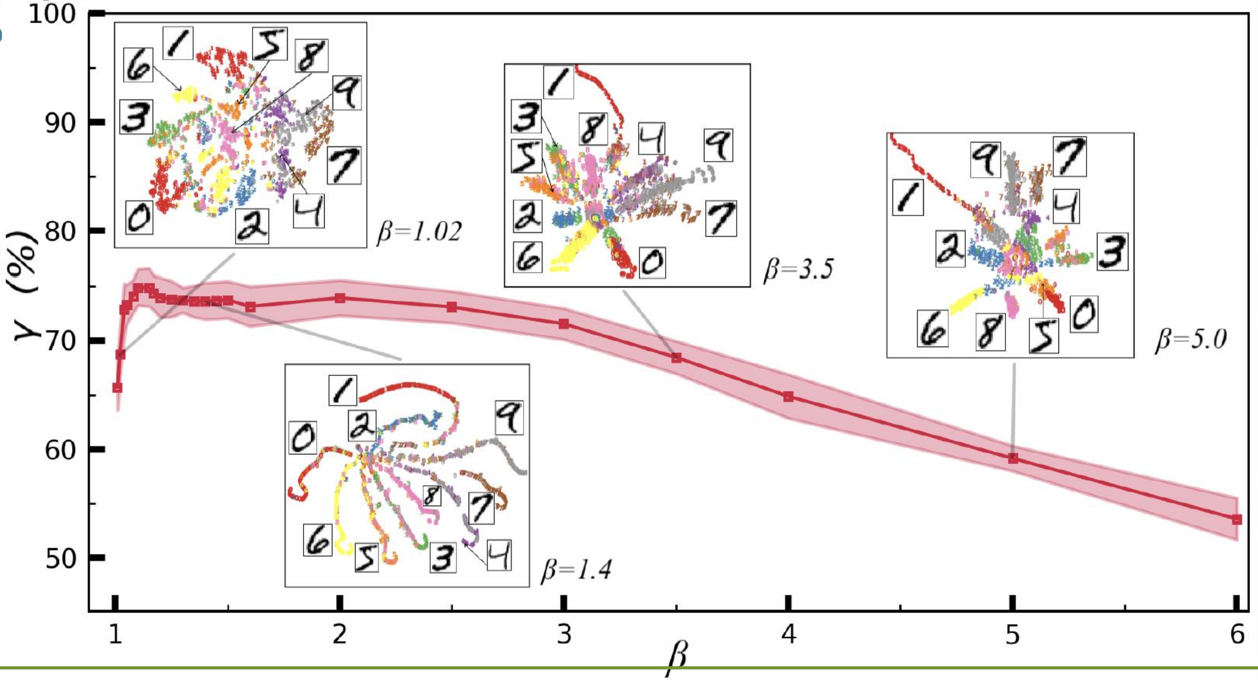
[1]*School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, P.O. Box 4588, Beijing 100049, China*
[2]*School of Computer Science and Technology, Tianjin Polytechnic University, Tianjin 300387, China*
[3]*Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China*
[4]*Kavli Institute for Theoretical Sciences, CAS Center for Excellence in Topological Quantum Computation, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*



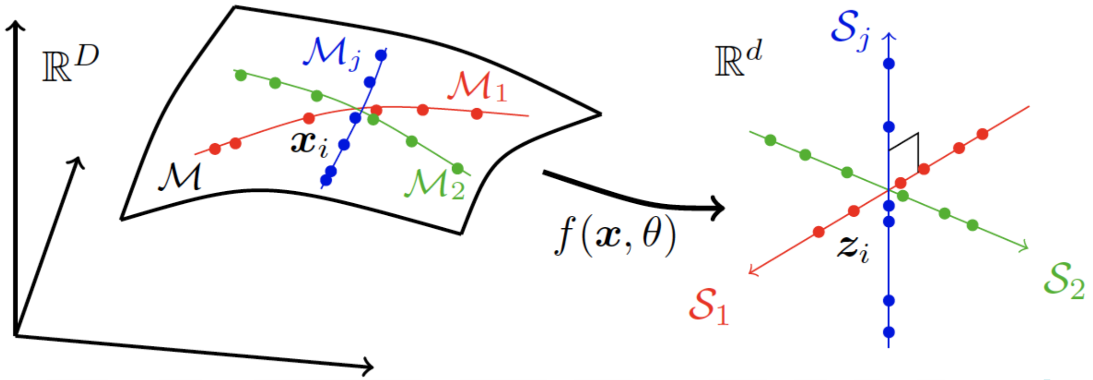
(a) (b) (c)

通过发展新的量子核函数，更好地实现聚类与分类

- **例如：重标度对数保真度** $\mathcal{F}_{\beta}(|\phi\rangle, |\varphi\rangle) = \beta^{\log|\langle\phi|\varphi\rangle|}$



- **描述聚类的信息理论：** Maximal Coding Rate Reduction（MCR^2）
  - 类内可压缩性
  - 类间可区分性
  - 整体多样性



mathematics MDPI

Article

Non-Parametric Semi-Supervised Learning in Many-Body Hilbert Space with Rescaled Logarithmic Fidelity

Wei-Ming Li and Shi-Ju Ran *

Mathematics **2022**, *10*, 940. https://doi.org/10.3390/math10060940

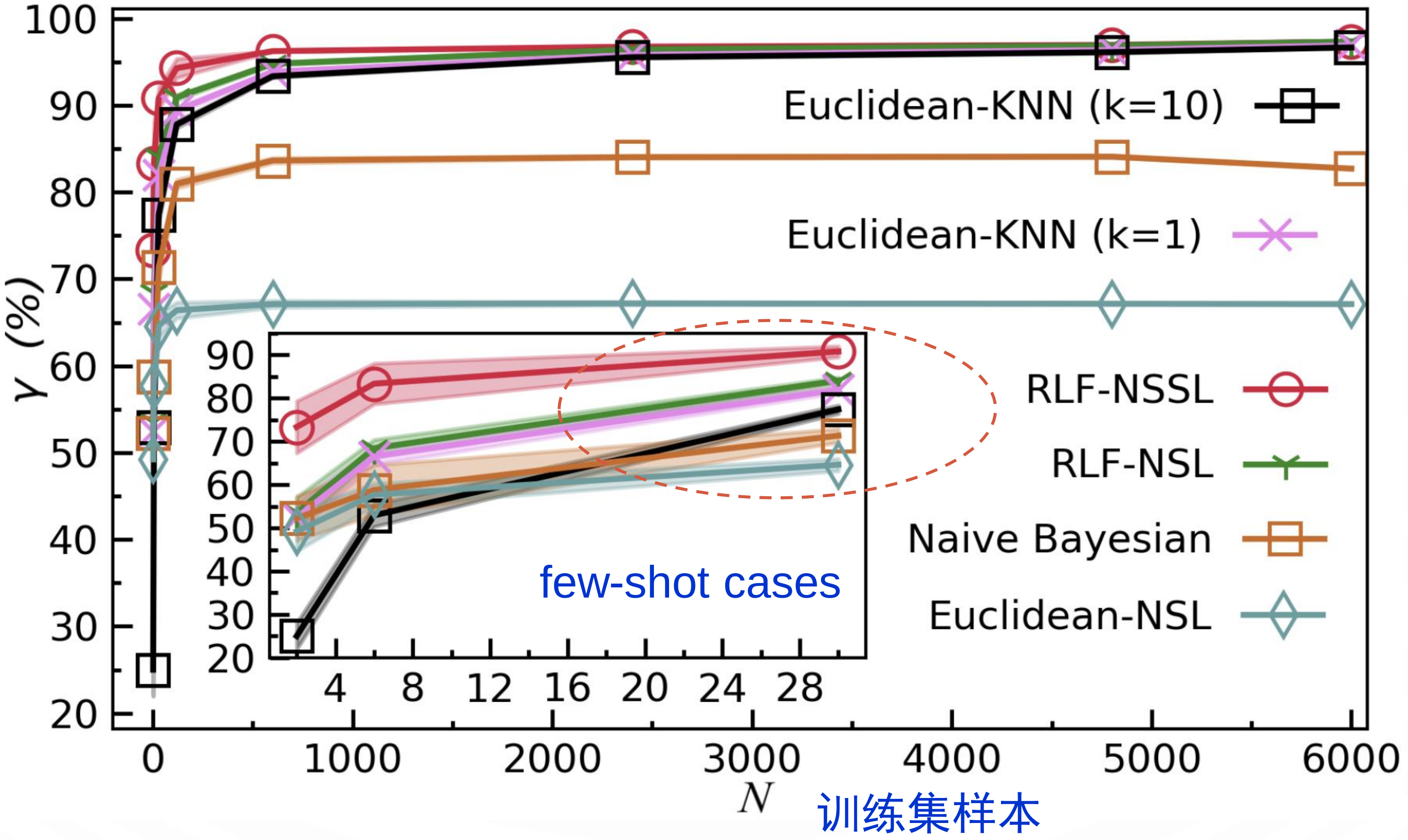
Learning Diverse and Discriminative Representations via the Principle of Maximal Coding Rate Reduction

34th Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2020), Vancouver, Canada.

Yaodong Yu, Kwan Ho Ryan Chan, Chong You, Chaobing Song, Yi Ma

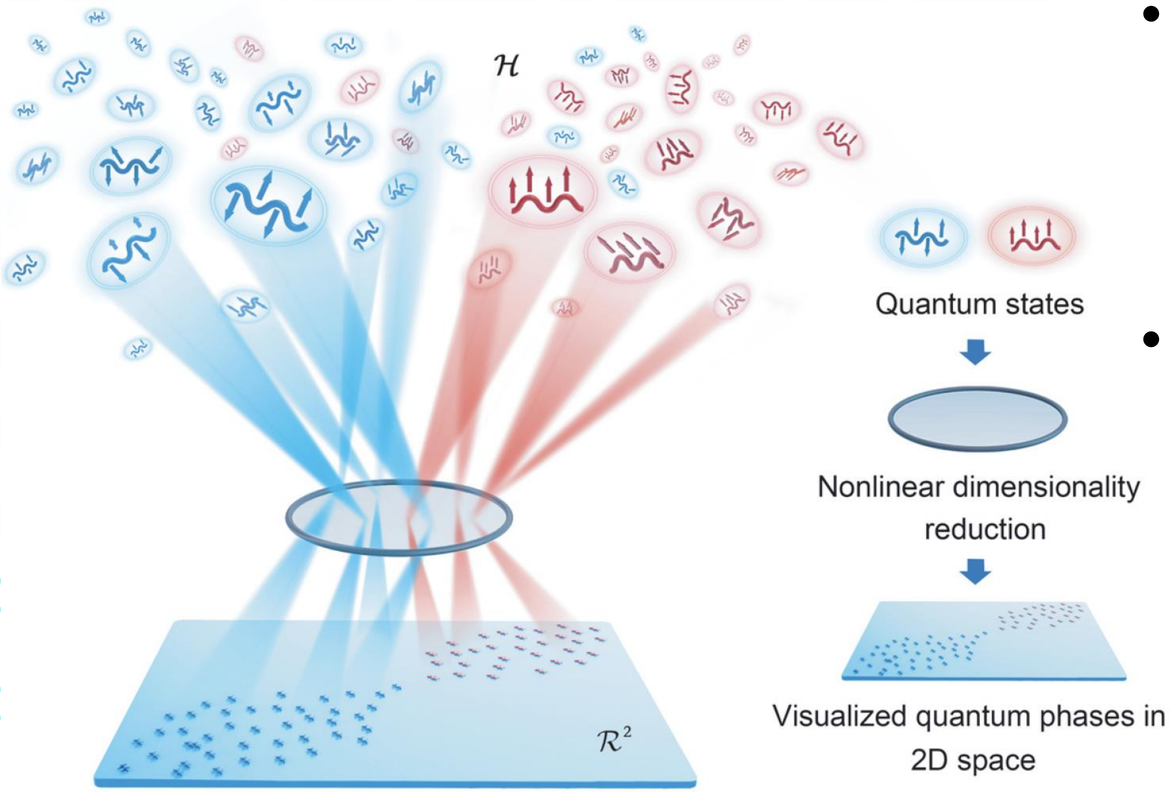
基于核函数的半监督机器学习

- **半监督机器学习**: 通过引入由机器学习模型标记的“伪标签”，扩大带标签样本数量，实现监督性机器学习；
- 在**小样本**时，重标度保真度对应的核函数给出了显著更高的准确度。



基于量子核的非线性降维，实现量子多体系统相的无监督识别

- **基本思想：基于量子核函数定义的量子态距离度量，实现不同量子相中的量子态在希尔伯特空间分布的可视化，从而达到相与相变的识别等目的**



- **降维：**寻找小数量的有效特征量，使得数据在原（高维）空间的分布与其在有效特征（低维）空间的分布尽量一致；
- 空间分布由样本间的**相对距离**描述。

PHYSICAL REVIEW B **103**, 075106 (2021)

Visualizing quantum phases and identifying quantum phase transitions by nonlinear dimensional reduction

Yuan Yang,[1,*] Zheng-Zhi Sun,[1,*] Shi-Ju Ran,[2,†] and Gang Su[3,1,‡]

[1]*School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, P.O. Box 4588, Beijing 100049, China*
[2]*Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China*
[3]*Kavli Institute for Theoretical Sciences, and CAS Center for Excellence in Topological Quantum Computation, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*

(Received 22 June 2020; revised 10 December 2020; accepted 23 January 2021; published 2 February 2021)

人类专家（物理学家）一般无法直接通过量子态获取信息，往往需要依赖先验知识，例如序参量等

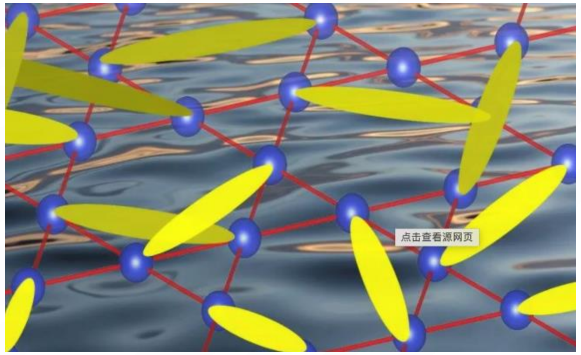
$|\varphi\rangle =$

```
[[-0.0205,  0.0264,  0.0094,  ...,  0.0093, -0.0025,  0.0031],
 [ 0.0075,  0.0175, -0.0003,  ..., -0.0236, -0.0020, -0.0094],
 [-0.0070,  0.0108,  0.0008,  ...,  0.0230,  0.0108, -0.0076],
 ...,
 [-0.0151, -0.0048,  0.0084,  ..., -0.0056, -0.0124,  0.0174],
 [-0.0167,  0.0246, -0.0043,  ...,  0.0055, -0.0108, -0.0331],
 [ 0.0061,  0.0055,  0.0006,  ...,  0.0015,  0.0049,  0.0058]]
```

朗道序参量理论

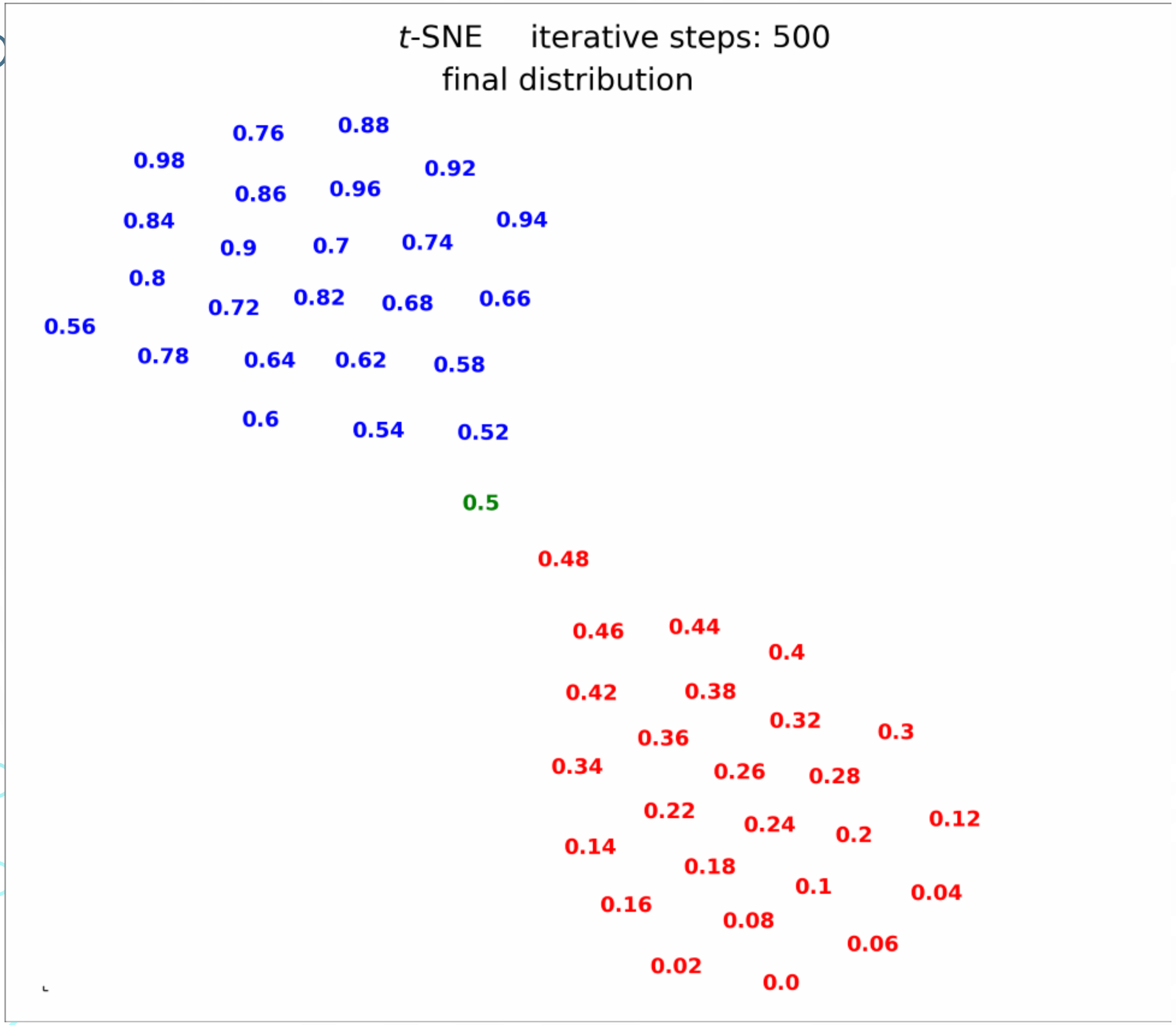
固体😄

液体😄



自旋液体 

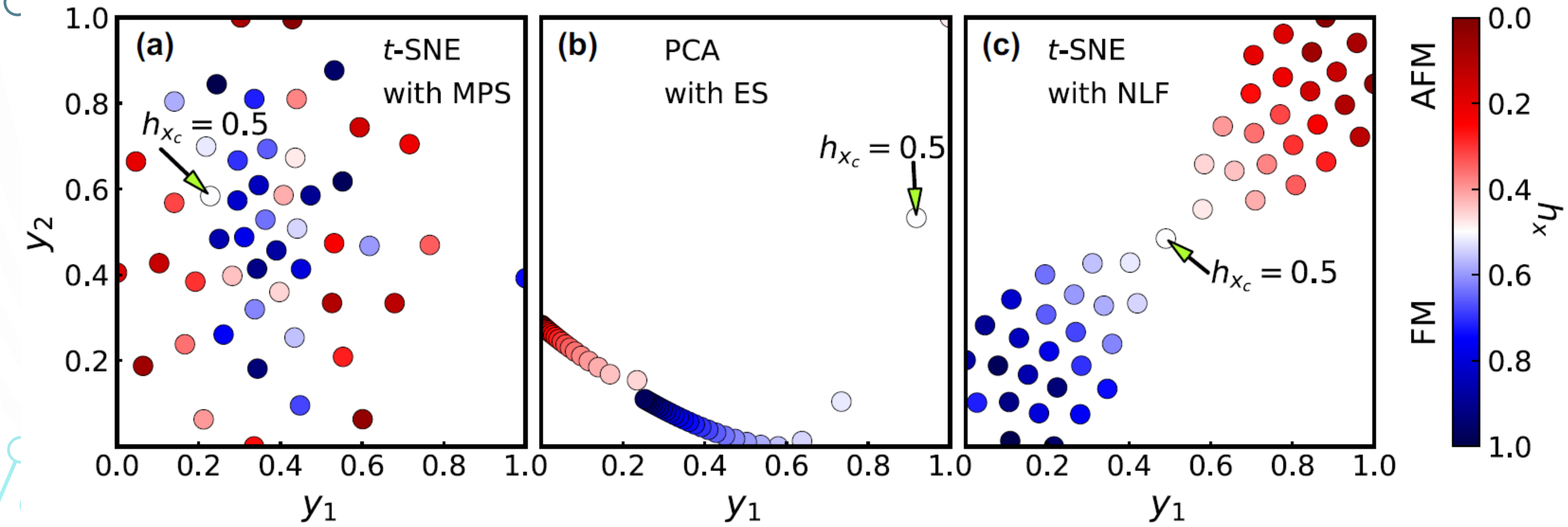
“看见”量子相



- 不同横场下的量子Ising模型；
- 每个点代表数值所示横场大小下的基态（MPS表示，DMRG获得）；
- 二维空间为降维后的有效特征空间，每个点的横纵坐标值由降维算法t-SNE优化计算获得。

传统相变的可视化

量子Ising模型：相变点$h_x = 0.5$

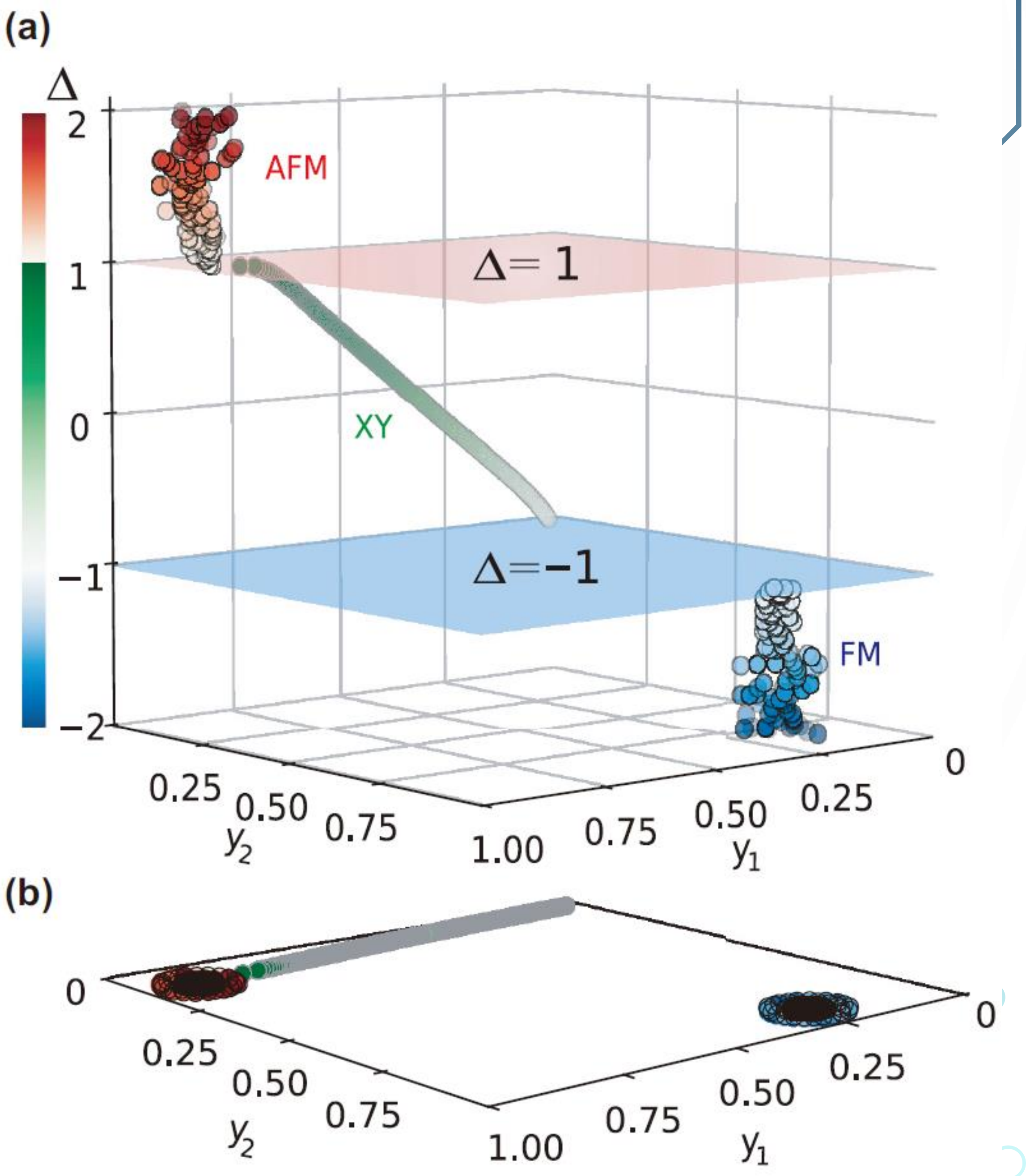


t-SNE+MPS数据　　t-SNE+纠缠谱　　t-SNE+MPS量子态

Gapped相可视化为准零位团簇，相变点为团簇间的切点

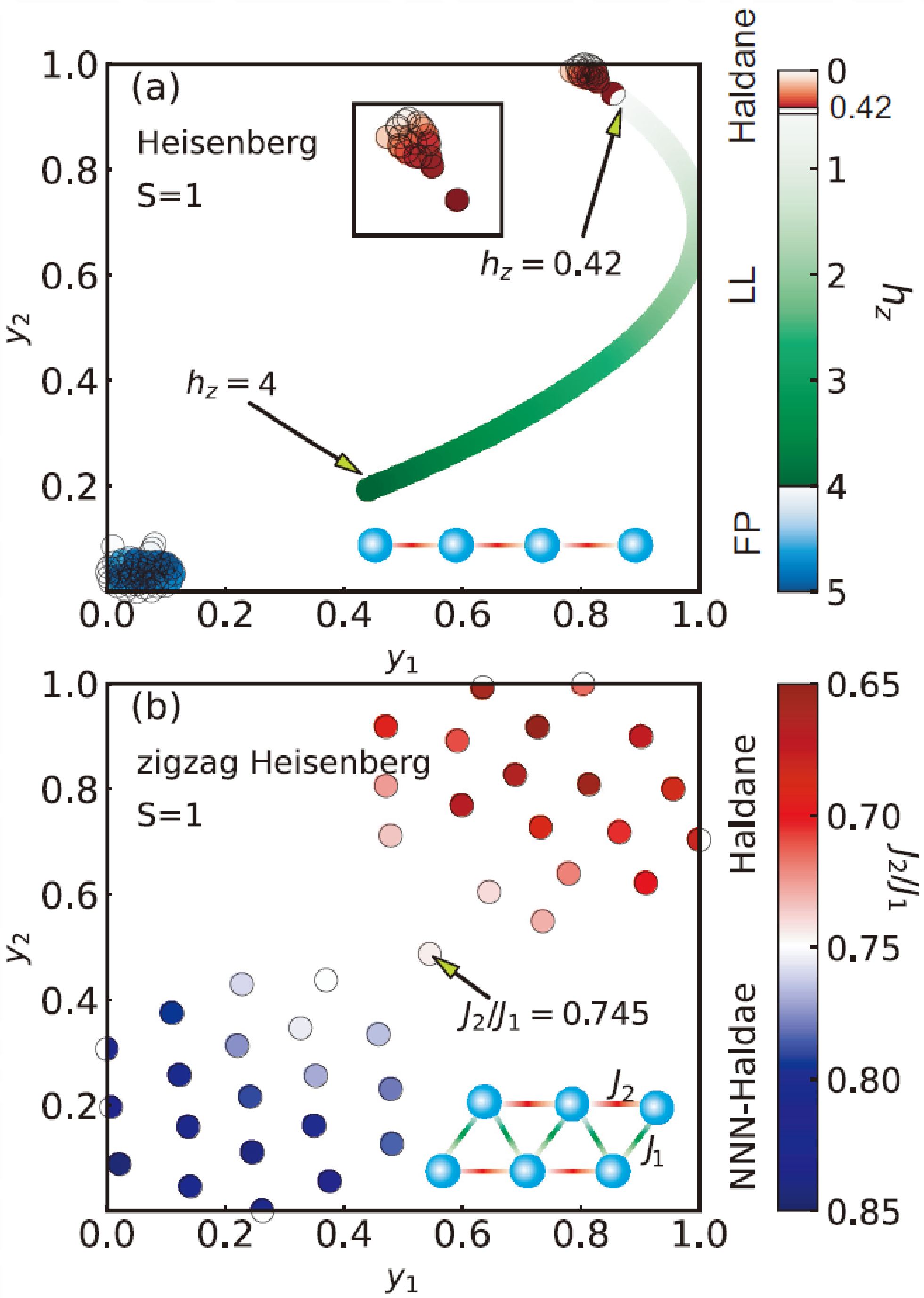
存在三个相时的可视化

- 外磁场下的XXZ模型
- **有能隙**（FM和AFM）相可视化为准0维团簇
- **无能隙**（XY）相可视化为一维流形



拓扑系统量子态分布可视化

- （a）**spin-1海森堡模型**：**有能隙的极化相**与**拓扑非平庸Haldane相**均可视化为**零维团簇**；**无能隙的Luttinger liquid相**可视化为**一维流形**。
- （b）**spin-1锯齿链**：**有能隙的Haldane与次次近邻Haldane相**均为拓扑非平庸，且均被可视化为**准零维团簇**；相变点位于团簇间的切点



与量子多体计算密切相关的张量网络机器学习：三种基本思想

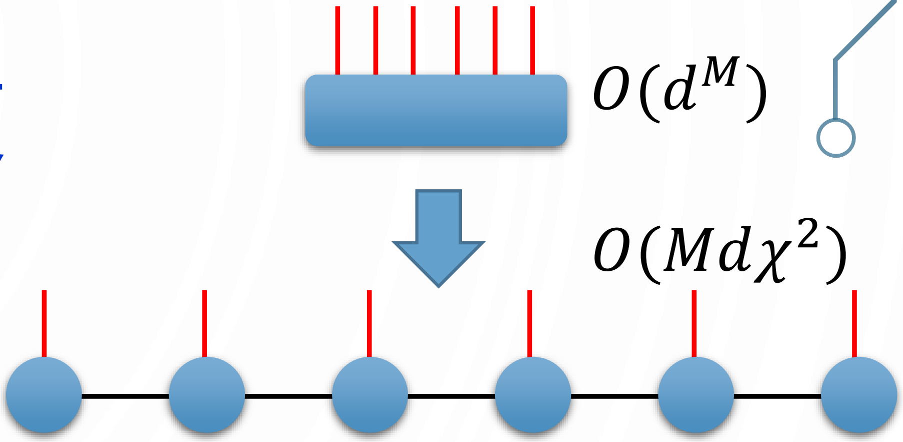
- 基于量子核函数
- 基于模型的高效参数化
- 多元微分方程求解器

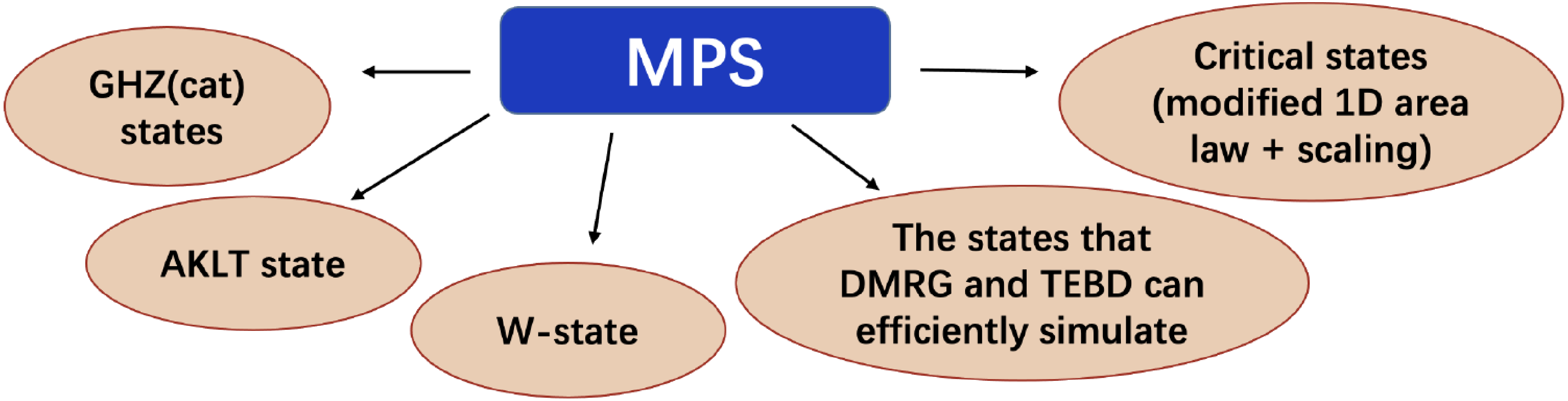
量子多体态与幺正算符（指数复杂）

量子线路\幺正张量网络（多项式复杂）

新的计算方法：计算多体系统量子纠缠

高效性：将量子多体态与算符的表示复杂度从“**指数级**”降低到“**多项式级**”





核心思想: 将量子多体计算中的**幺正变换**写成

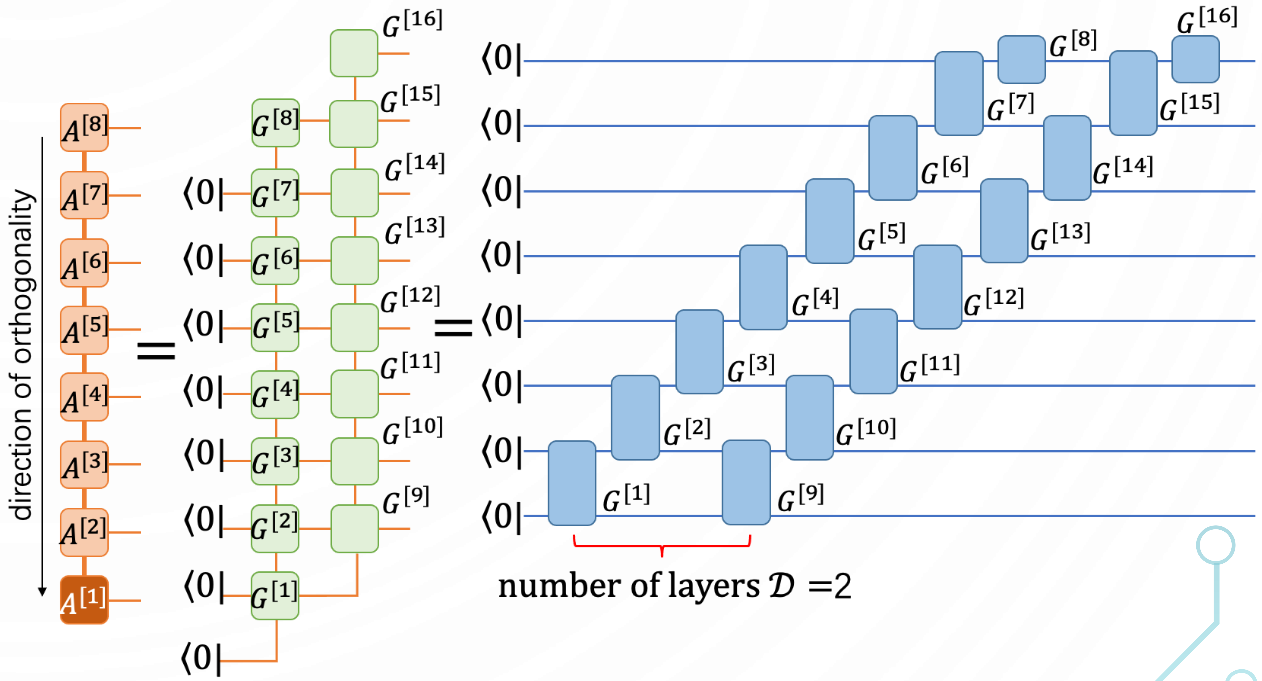
变分量子线路（幺正张量网络）

基于变分量子线路（VQC）的高效量子多体态表示

- 将MPS写成量子态制备的形式：$|\varphi\rangle = U|0\rangle$，其中$U$表示为量子线路；
- 量子线路U的参数量与MPS参数量之比满足：

$$r = \frac{\#(\mathrm{ADQC})}{\#(\mathrm{MPS})} \simeq N_L r_0 \ll \mathbf{1}$$

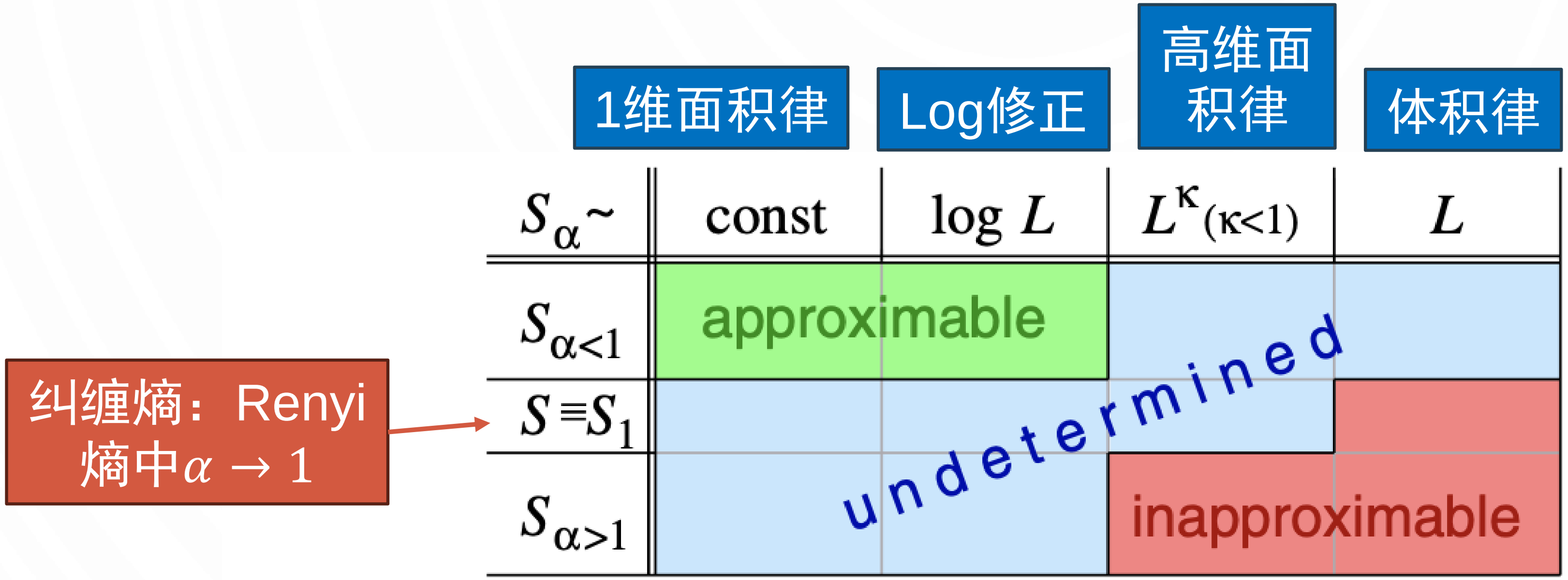
- 其中压缩系数$r_0 \sim O(\chi^{-2})$（χ为MPS虚拟指标维数），$N_L \sim O(1)$为**量子线路层数。**
- 可见，**表示效率方面**
  深度张量网络 > 矩阵乘积态



- Shi-Ju Ran, *Phys. Rev. A* **101**, 032310 (2020).
- Peng-Fei Zhou, Rui Hong, and Shi-Ju Ran, *Phys. Rev. A* **104**, 042601 (2021).

已有张量网络算法存在的问题：

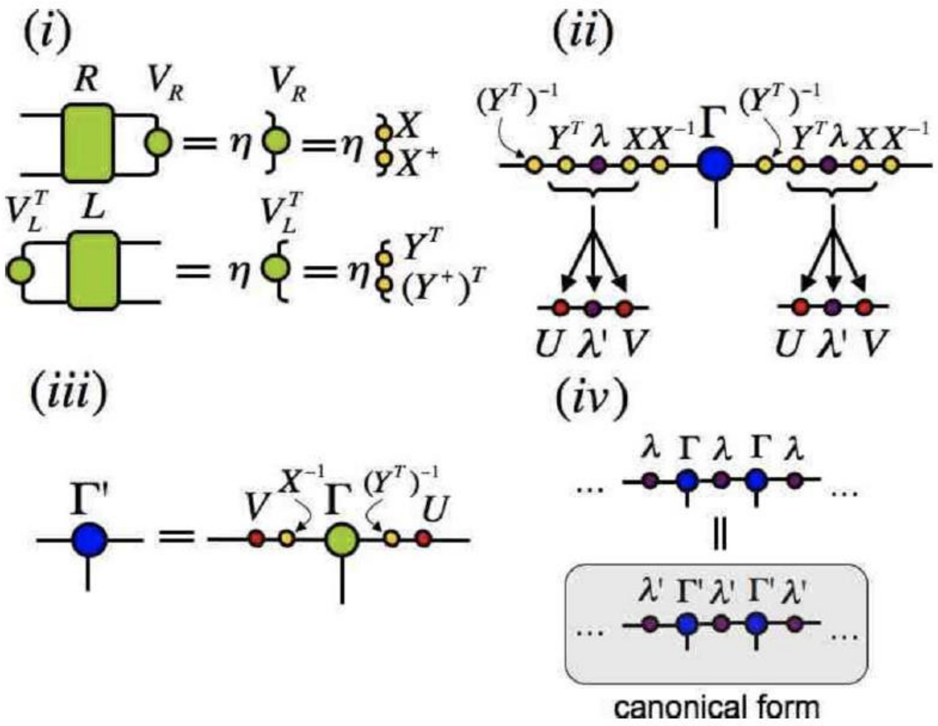
如何精确模拟、计算高纠缠量子态



MPS对于量子多体态的表示能力示意图

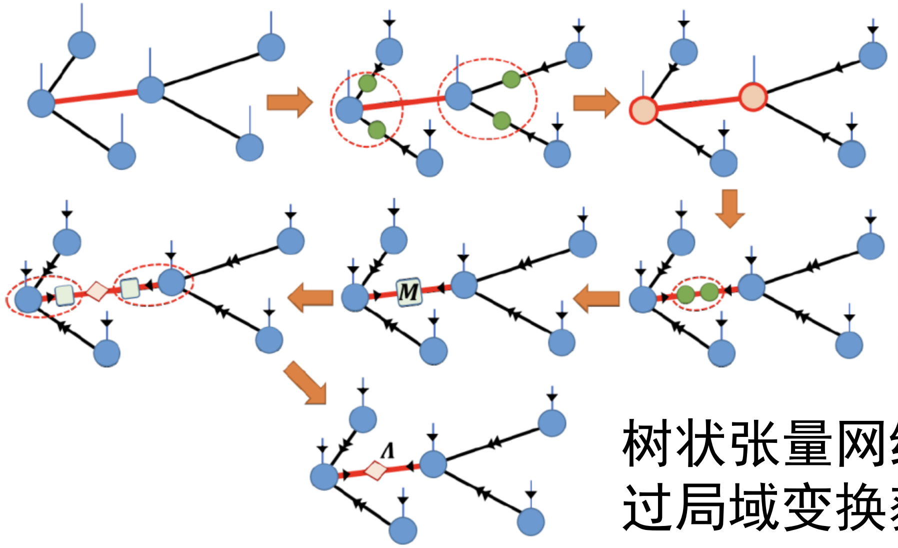
Norbert Schuch, Michael M. Wolf, Frank Verstraete, and J. Ignacio Cirac, Phys. Rev. Lett. 100, 030504 (2008)

纠缠谱的计算存在很大的局限性：仅当边界长度不随系统尺寸增加时（等效1维面积律），通过张量网络算法能高效获得纠缠谱（无圈张量网络态）

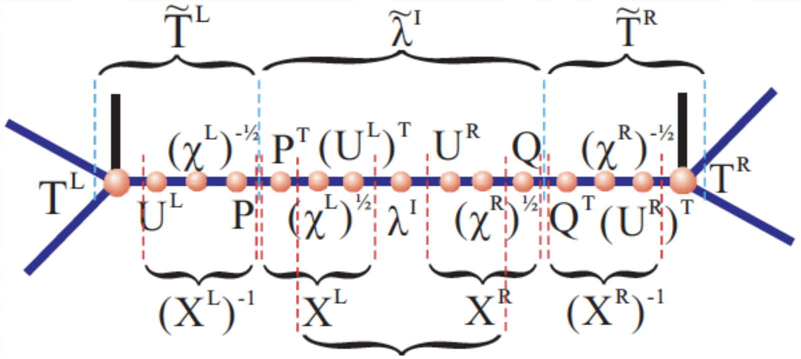


MPS正则形式可直接给出二分纠缠谱

R. Orús and G. Vidal, Phys. Rev. B 78, 155117 (2008)



树状张量网络态（TTNS）可过局域变换获得二分纠缠熵



超正交形式给出无限大TTNS的二分纠缠谱

Shi-Ju Ran, Wei Li, Bin Xi, Zhe Zhang, and Gang Su, Phys. Rev. B 86, 134429 (2012)

通过矩阵乘积算符与激发态DMRG，可在非平庸二分边界下计算出树状张量网络态的纠缠谱，**纠缠谱仍受限于虚拟指标维数**

非平庸二分边界：边界长度随系统尺寸增大而增大

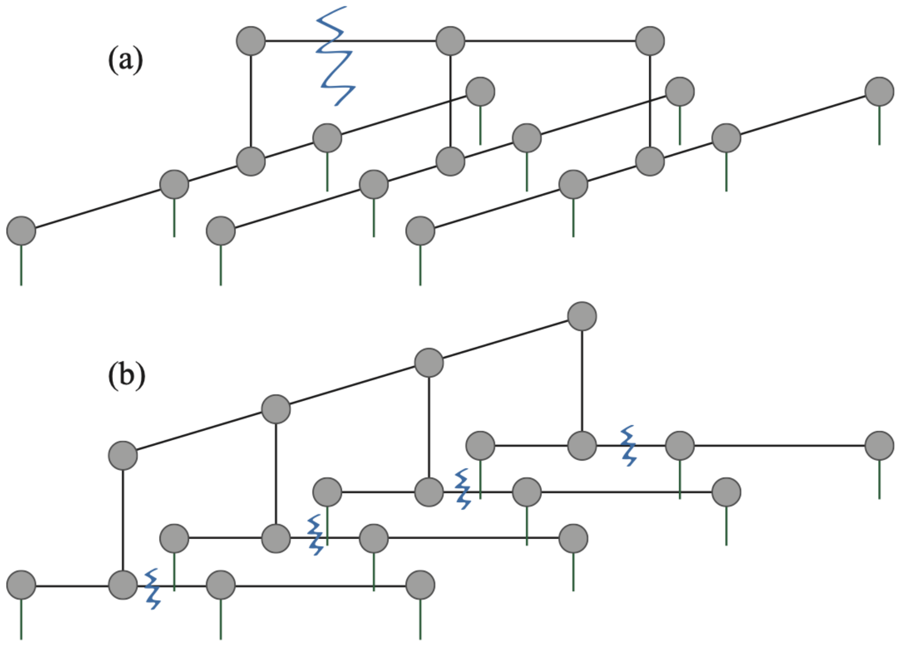


FIG. 6. (Color online) Bipartite splitting of a ladder along the longer axis in a direct (a) and a rotated (b) geometry of the tree tensor network structure.

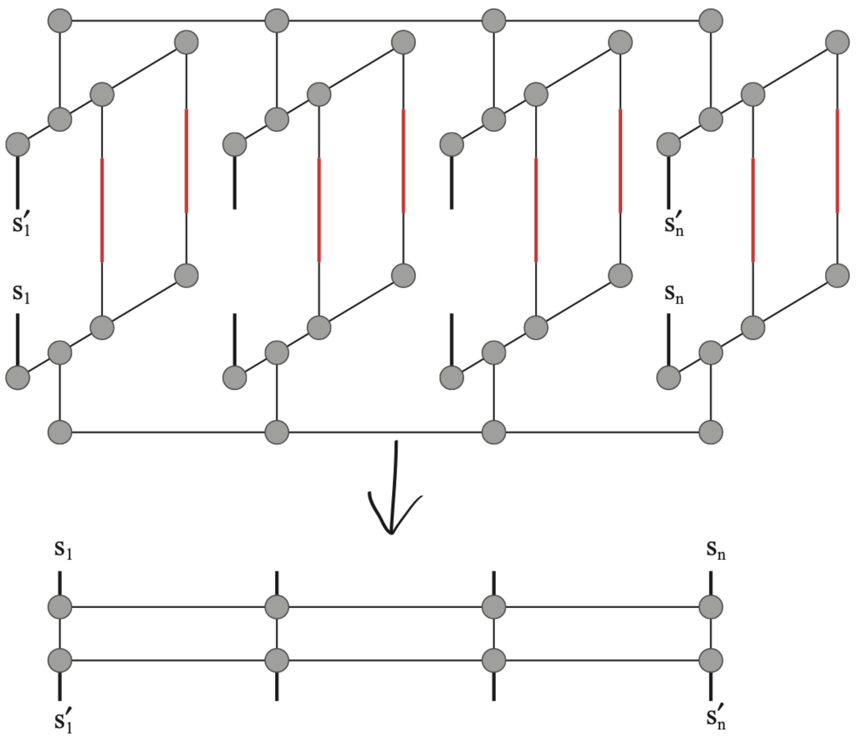


FIG. 7. (Color online) The reduced density operator is obtained by tracing over physical degrees of freedom of the environment.

Iztok Pižorn, Frank Verstraete, and Robert M. Konik, Phys. Rev. B 88, 195102 (2013)

对于一般情况，目前仍没有有效的方法计算非平庸二分边界对应的纠缠谱

基于Schmidt分解的张量网络态新表示：Schmidt张量网络态(Schmidt-TNS)

PHYSICAL REVIEW LETTERS **131**, 020403 (2023)

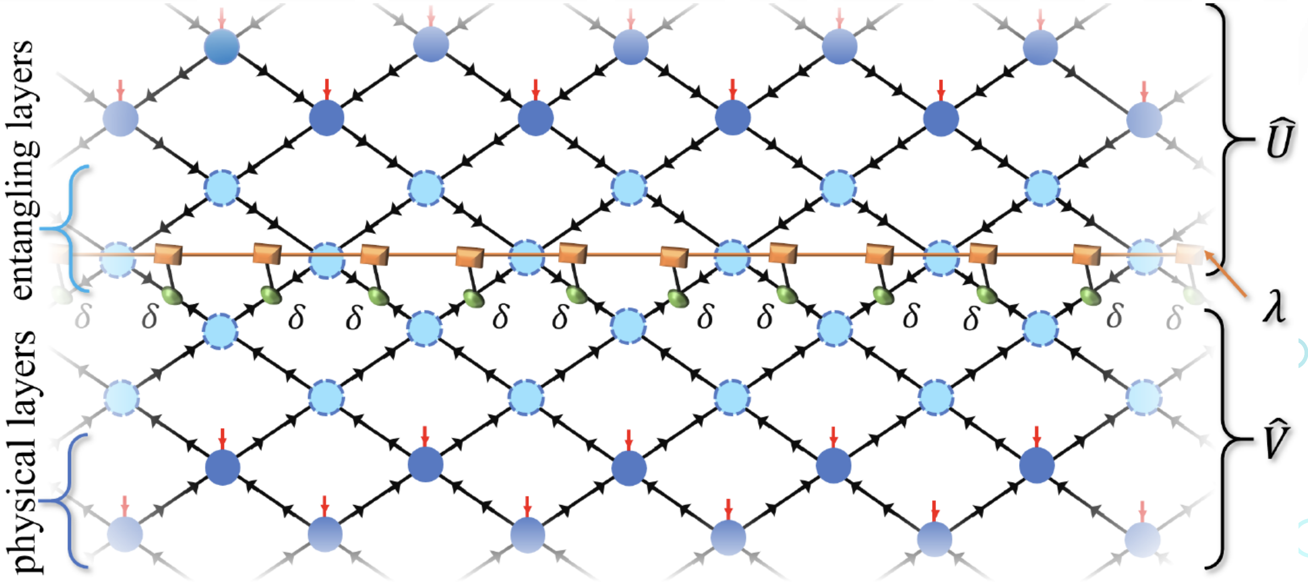
Tensor Network Efficiently Representing Schmidt Decomposition of Quantum Many-Body States

Peng-Fei Zhou, Ying Lu, Jia-Hao Wang, and Shi-Ju Ran*
Center for Quantum Physics and Intelligent Sciences, Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 10048, China

- Schmidt分解：$|\Psi\rangle = \sum_r \lambda_r |\psi_r\rangle |\phi_r\rangle$
- 其中，Schmidt基满足 $|\psi_r\rangle = \hat{U} \prod_{\otimes m=1}^{R} |r_m\rangle, \ |\phi_r\rangle = \hat{V} \prod_{\otimes m=1}^{R} |r_m\rangle$

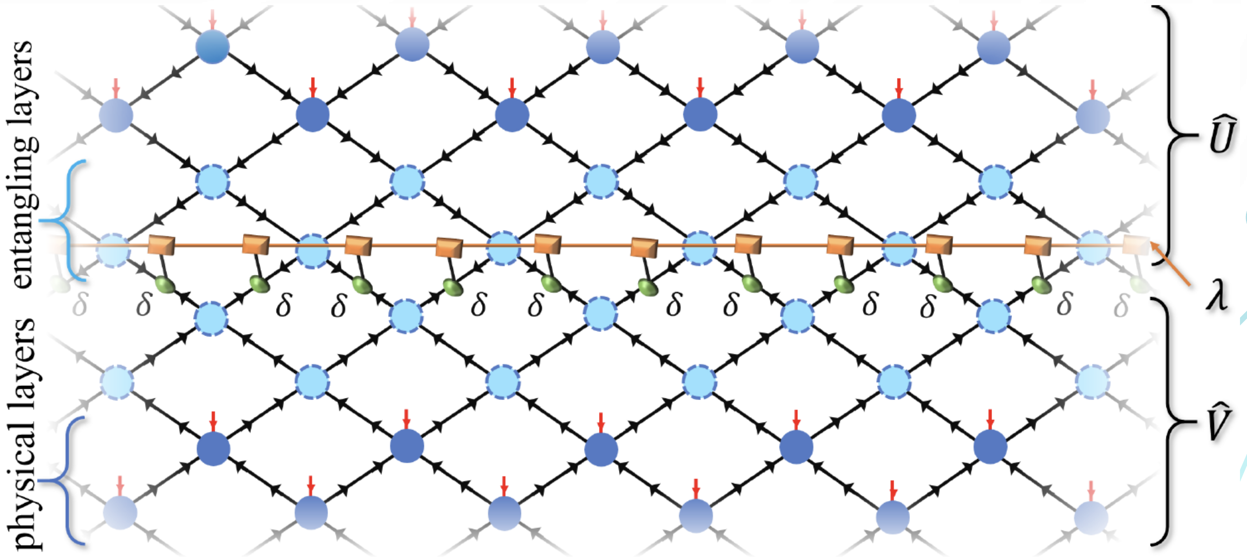
Schmidt-TNS核心思想：

- 将左、右变换矩阵$\hat{U}$和$\hat{V}$写成**幺正TN（变分量子线路）**；
- 将 Schmidt 系 数 λ 写 成 **MPS（Schmidt MPS）**；
- 三者由高阶单位张量δ连接，以满足Schmidt分解的数学形式。



- **纠缠谱MPS：** $|\lambda\rangle = \sum_{r_1 r_2 \ldots r_R} \mathrm{tTR}\left(\prod_{m=1}^{R} A^{[m]}_{r_m \alpha_m \alpha_{m+1}}\right) \prod_{\otimes m'=1}^{R} |r_{m'}\rangle$
- Schmidt系数具有**指数复杂度**：系数个数满足$O(d_s^R)$，其中d_s为跨越二分边界的指标维数，R为跨越边界的指标个数（边界长度）；
- 谱MPS具有**线性复杂度**：复杂度关于R线性增加，满足$O(R d_s d_c^2)$，其中d_c为Schmidt MPS的虚拟指标维数。
- 同理：**幺正变换U与V**原本具有**指数**复杂度，在变分量子线路的表示下具有**线性**复杂度。

- TN由带有物理指标的幺正张量（构成物理层）与不带有物理指标的张量（构成纠缠层）组成；
- MPS由**正定**张量构成，以保证Schmidt系数的正定性。



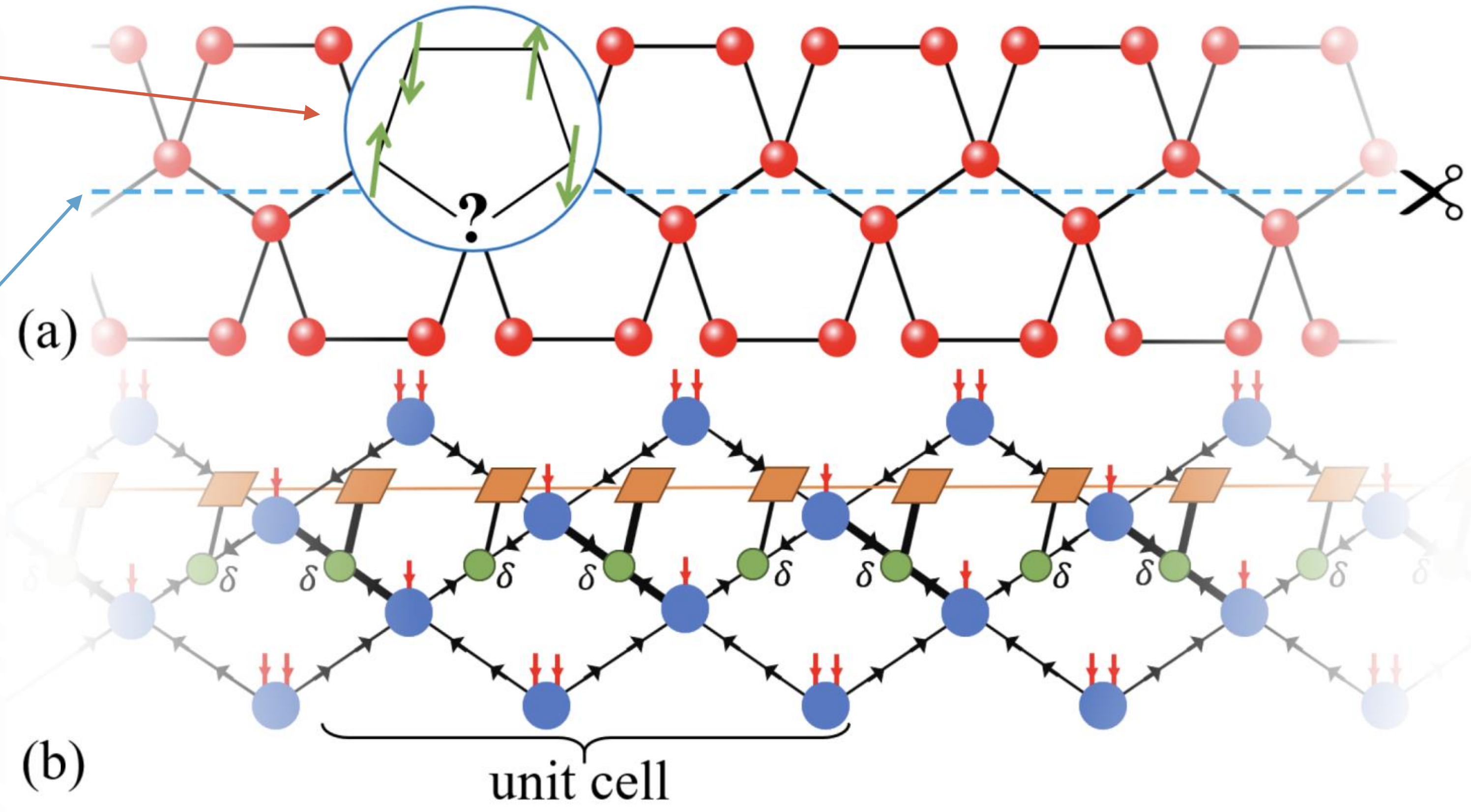
利用Schmidt TNS计算自旋1/2 zigzag-pentagon antiferromagnet（ZPAF）的基态及其在非平庸二分边界下的纠缠谱

该系统含有几何阻挫

二分边界长度R随系统尺寸增长而线性增长，因此Schmidt系数个数随系统尺寸指数增长

通过变分极小化能量，优化Schmidt TNS中的张量，从而获得系统基态

$$\min \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}$$



通过变分极小化能量，优化Schmidt TNS中的张量，从而获得系统基态

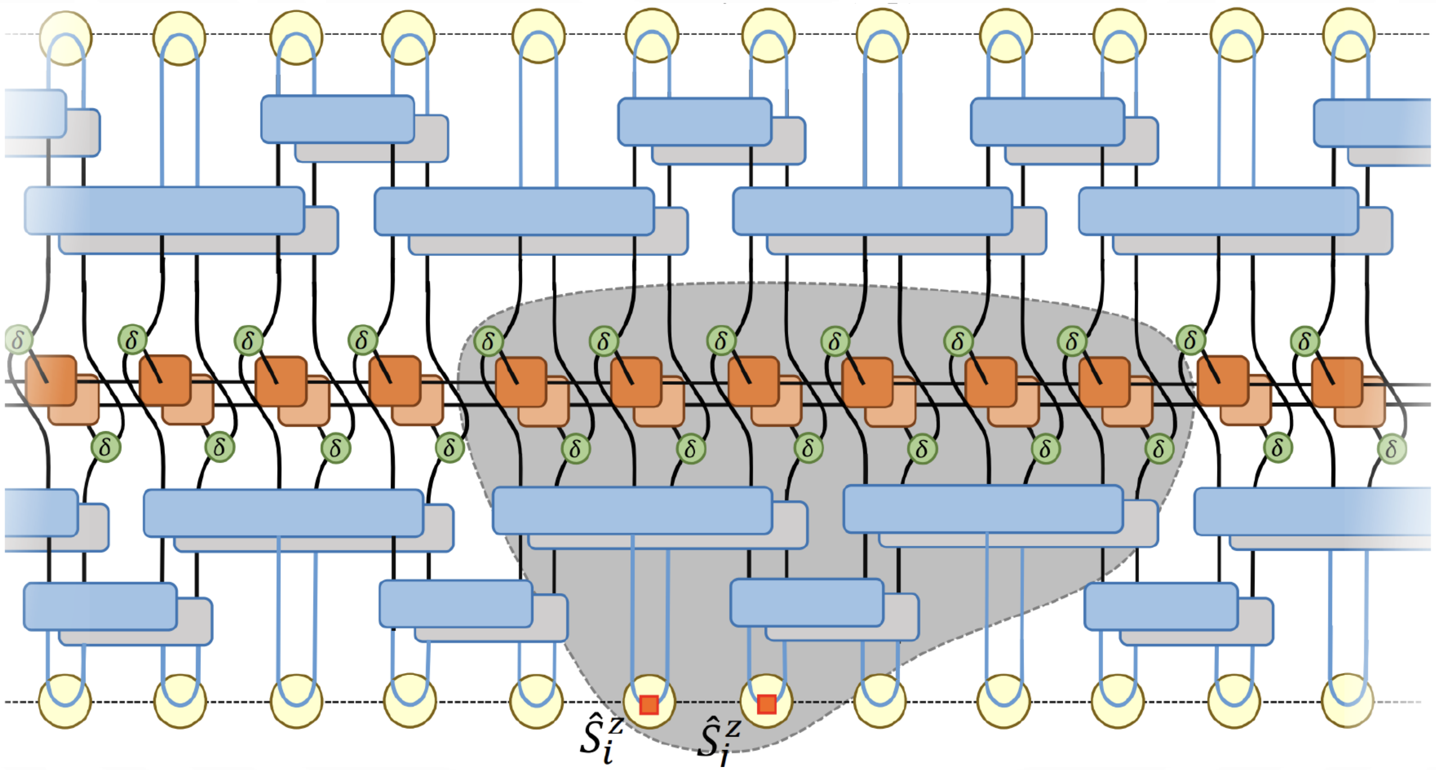
$$\min \frac{\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}$$

得益于幺正张量网络

分母部分：Schmidt TNS的内积可简化为Schmidt MPS的内积

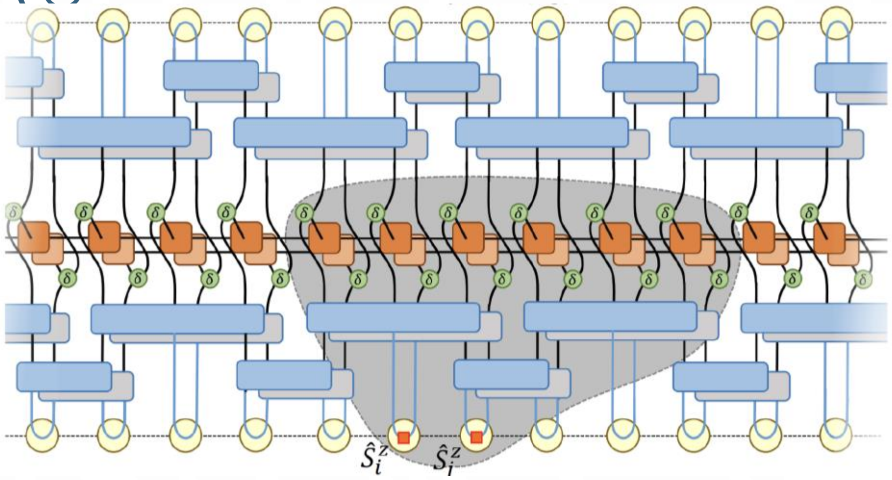
$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\lambda|\lambda\rangle$$

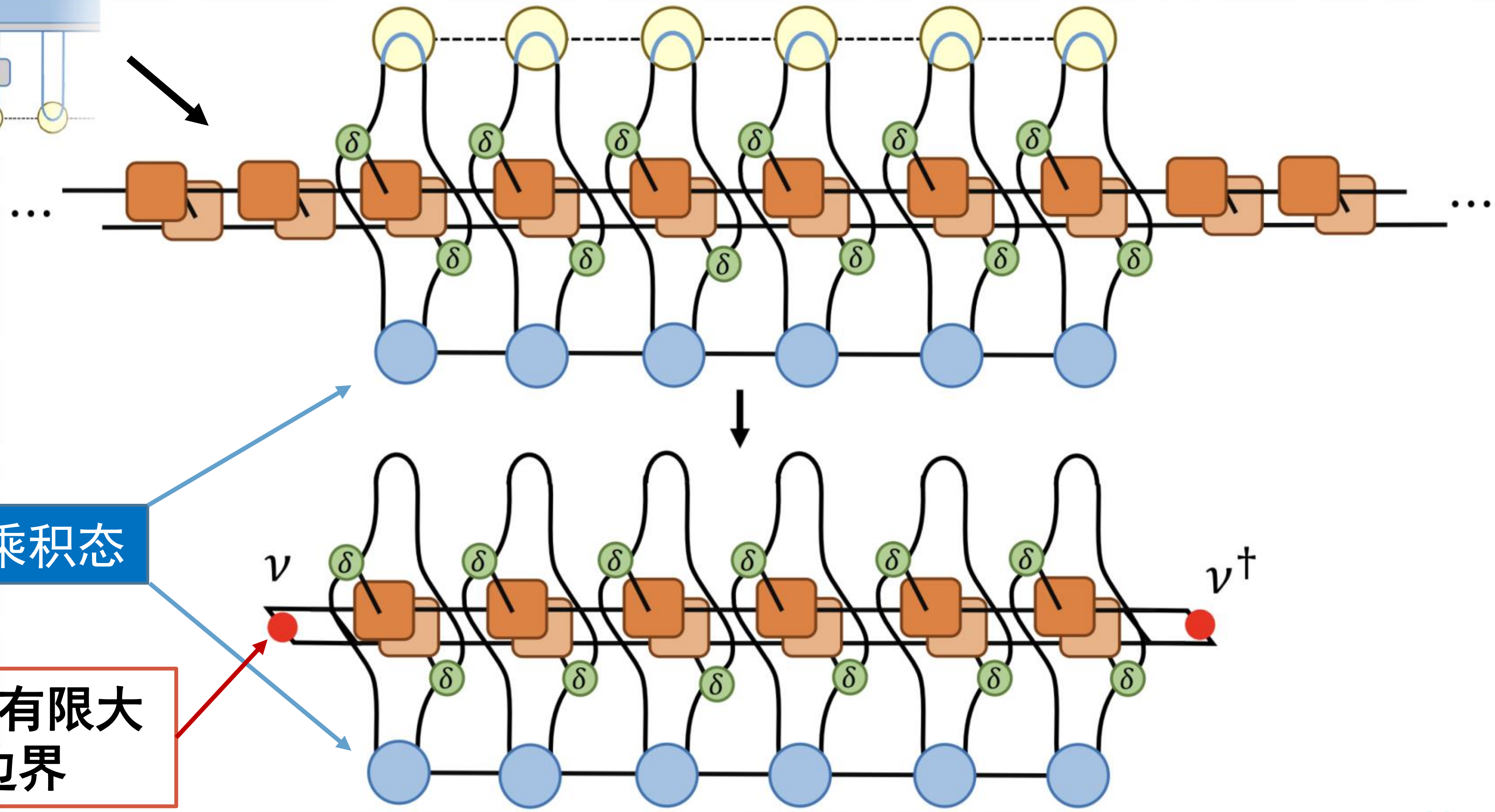
分子部分：Schmidt TNS关于局域算符的观测量$\langle\varphi|\hat{S}_i\hat{S}_j|\varphi\rangle$可化为光锥张量网络（**causal-cone TN**）的收缩



- **可方便计算无穷大平移不变体系；**
- **实际计算的TN大小与相互作用距离成线性关系。**

Causal-cone TN可被高效收缩

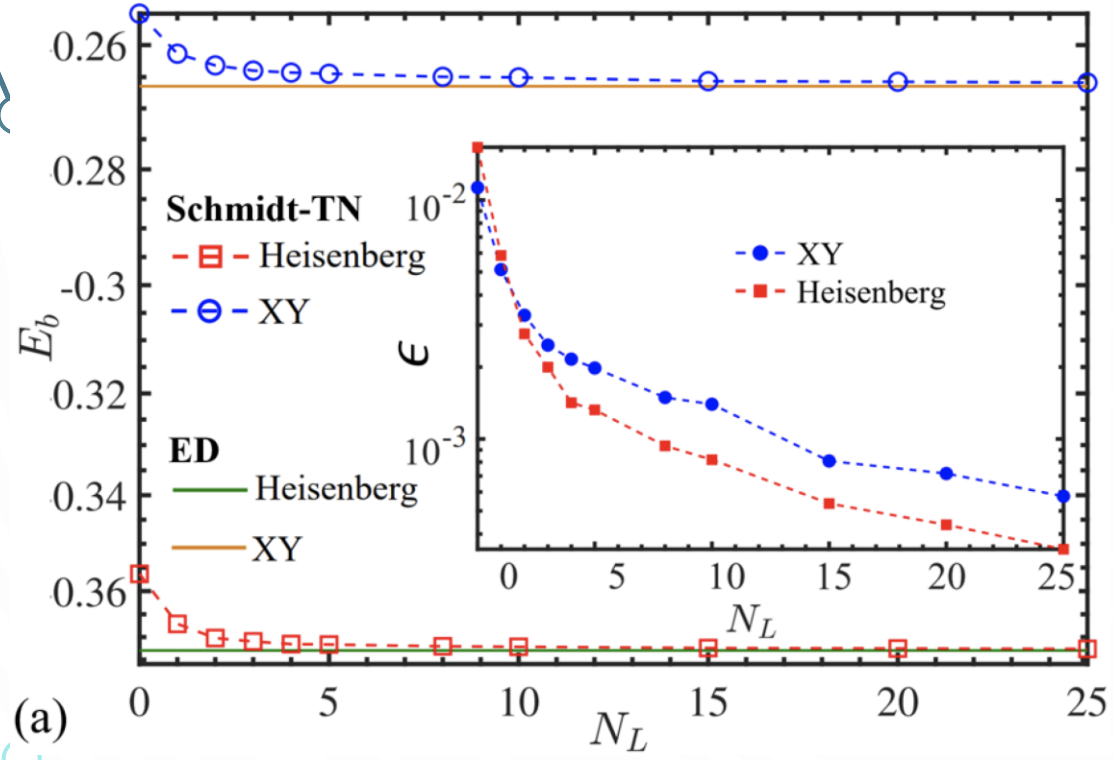


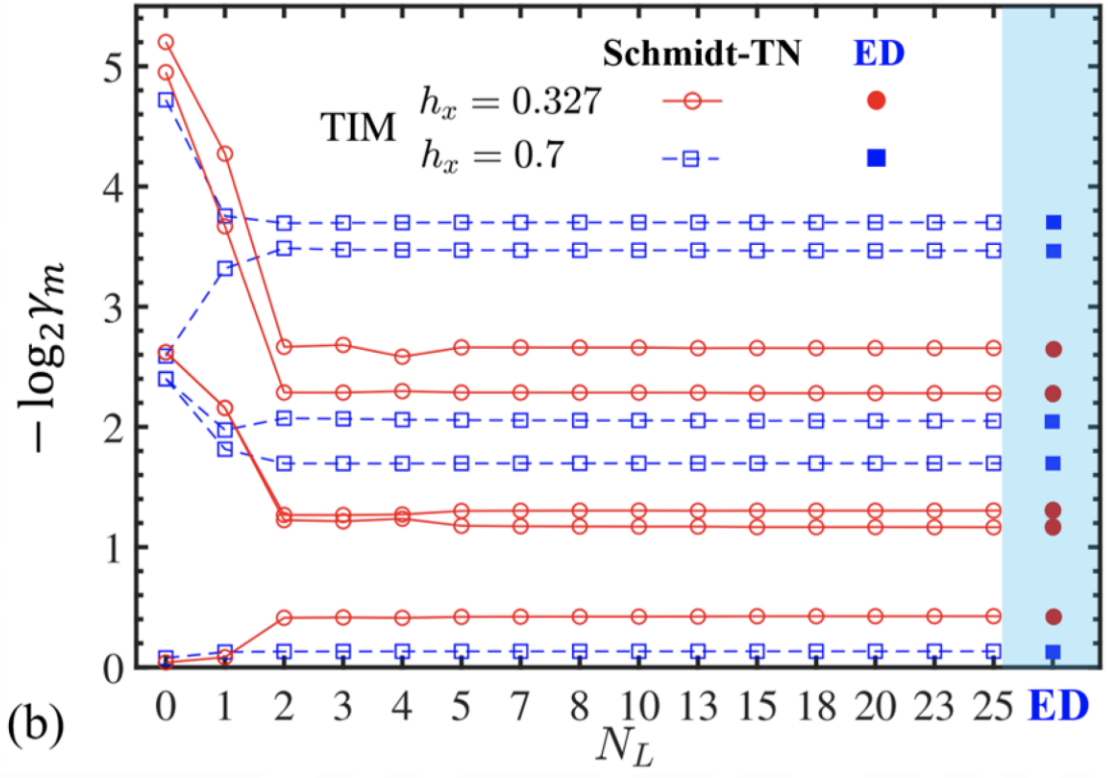


边界矩阵乘积态

v：可对应有限大或无穷大边界

小尺寸ZPAF基态能量与纠缠谱：与严格对角化（ED）对比





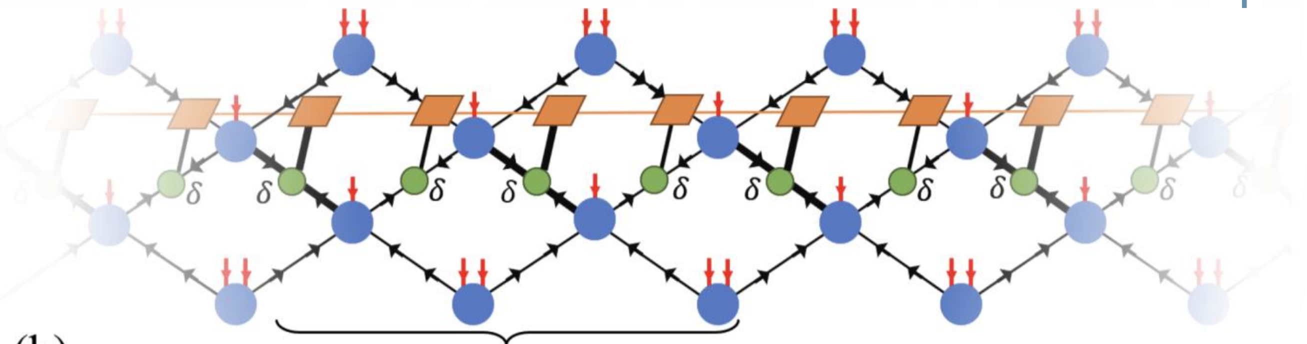
误差随VQC纠缠层数增加而减小，Schmidt基对应较高纠缠的量子态

MPS准确给出了纠缠谱（Schmidt系数）

$$|\psi_r\rangle = \hat{U} \prod_{\otimes m=1}^{R} |r_m\rangle, \quad |\phi_r\rangle = \hat{V} \prod_{\otimes m=1}^{R} |r_m\rangle$$

无穷大iSchmidt TNS： ZPAF基态能量

- 有限尺寸效应导致小尺寸能量偏低；
- 无穷大Schmidt TNS（iSchmidt TNS）无有限尺寸效应，但存在有限纠缠效应（有限数量的纠缠层），会使得能量偏高；
- 单层纠缠层的iSchmidt TNS获得了比N=180 DMRG更低的基态能量；
- 该结果显示，**无穷大系统的Schmidt基制备需要较浅层的量子线路**。

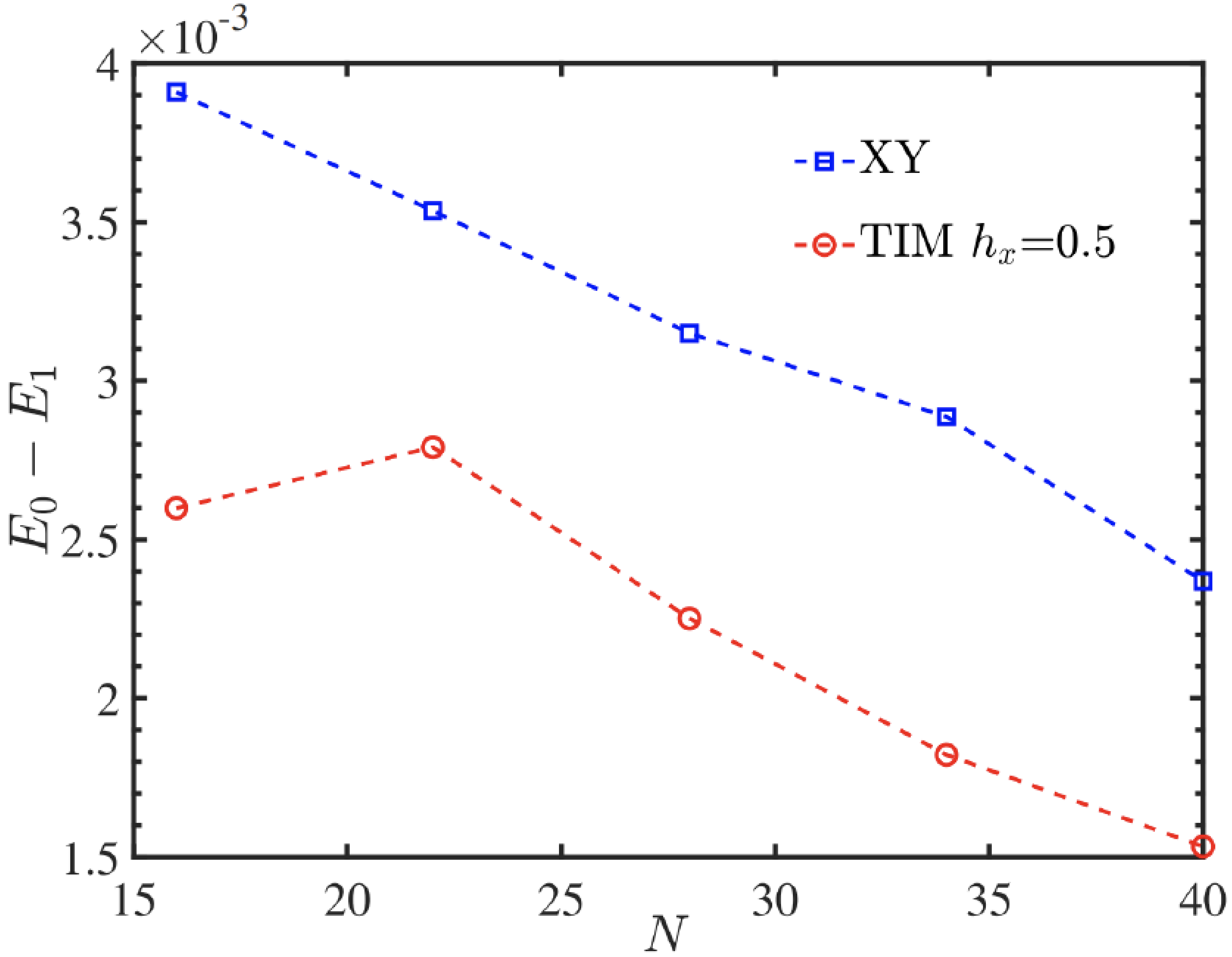


(b)

iSchmidt TNS满足平移不变

E_b parameters / model	ED	DMRG		iSchmidt-TNS, $N=\infty$		
	$N=18$	$N=18$	$N=180$	$N_L=0$	$N_L=1$	$N_L=2$
TIM, h_x=0.5	-0.2767646	-0.2767646	-0.2517436	-0.2416401	-0.2550272	-0.2556101
TIM, h_x=0.2	-0.2120327	-0.2120327	-0.1966008	-0.1950901	-0.1988530	-0.1988552
XY	-0.2732445	-0.2732445	-0.2527285	-0.2350790	-0.2545480	-0.2572155
Heisenberg	-0.3842125	-0.3842125	-0.3522980	-0.3319882	-0.3589855	-0.3607915

无穷大系统的Schmidt基制备需要较浅层的量子线路



由于有限尺寸效应，单层与零层纠缠层Schmidt TNS所得的基态能量差，随系统尺寸N增加而下降

无穷大系统的纠缠谱可被写成**弱纠缠态**

- 大尺寸及无穷大系统的纠缠谱对应于弱纠缠量子态；
- 小虚拟维数的MPS足以表示其纠缠谱；
- 因此，**在Schmidt基下的量子态采样/层析将具有更高的效率。**

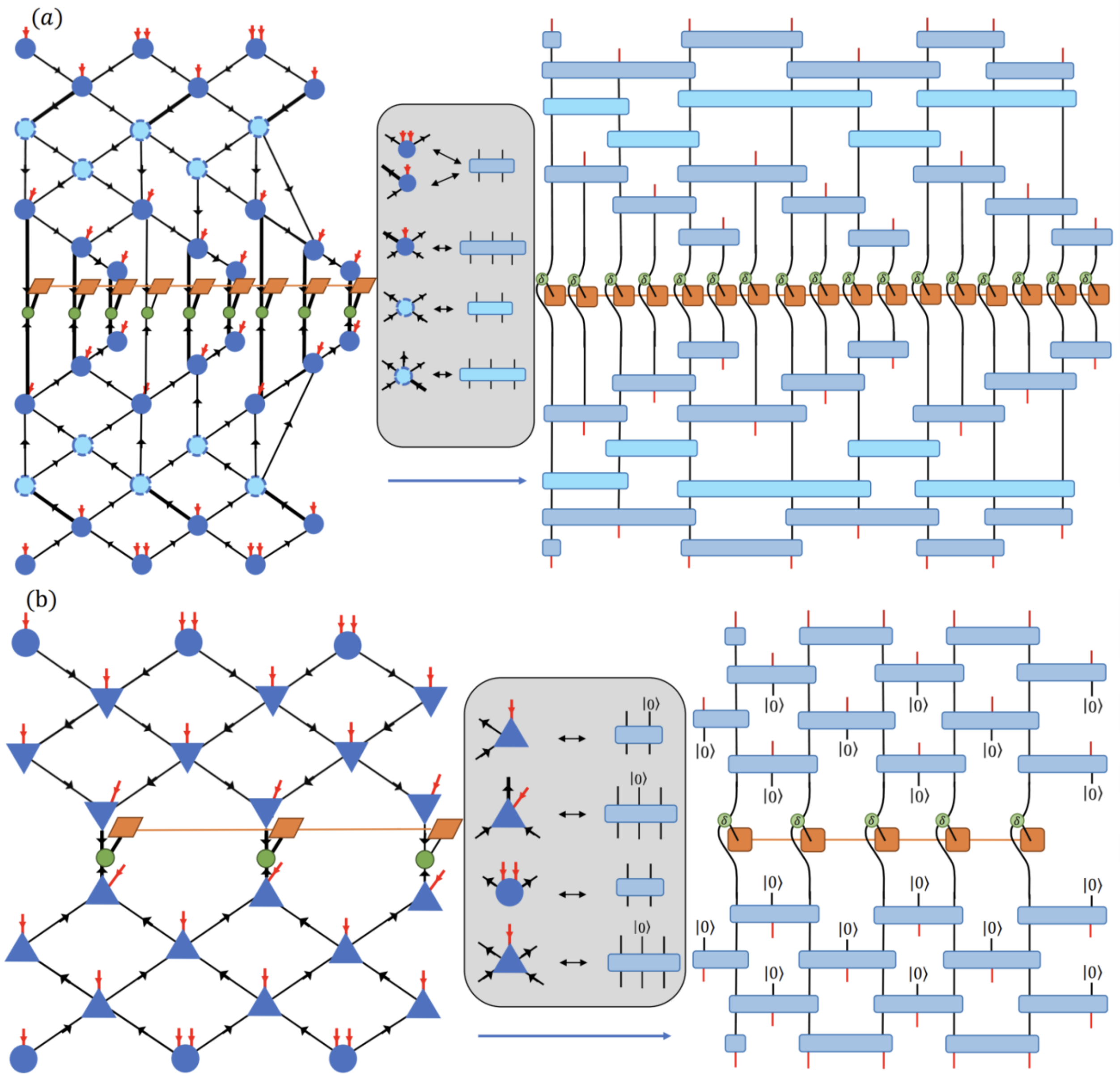
E_b	$\chi=1$	$\chi=3$	$\chi=5$
TIM, h_x=0.5	-0.25499767	-0.25503064	-0.25503065
TIM, h_x=0.2	-0.19883578	-0.198853221	-0.19885543
XY	-0.25449082	-0.25455178	-0.25455190
Heisenberg	-0.35876465	-0.35903425	-0.35903479

TABLE II. The ground-state energy per bond E_b of the infinite-size ZPAF with the Heisenberg, XY, or Ising interactions in a transverse field (TIM) given by the iSchmidt-TNS with different virtual dimensions χ of the MPS $|\lambda\rangle$. We fix $N_L = 1$.

Schmidt TNS的结构具有高灵活性：类似于PEPS及MERA

- 物理指标分布的灵活性，物理层与纠缠层可混合分布；

- 可引入isometric张量（此时Schmidt系数维数小于二分子系统中物理空间的维数，实际上进行了重整化）



- **Schmidt TNS：复杂度从“指数级”降低至“多项式级”：**
  - Schmidt分解的变换矩阵由幺正张量网络表示，即Schmidt基由量子线路制备；
  - Schmidt系数（纠缠谱）表示为正定矩阵乘积态，其复杂度由“指数级”降低至“多项式级”；
- iSchmidt TNS**首次给出了无穷长二分边界对应的Schmidt谱**；
- 在ZPAF模型的基态计算结果显示，**Schmidt系数谱对应的量子态为弱纠缠态，大尺寸或无穷大系统的Schmidt基可由浅层量子线路制备，预示可实现高效采样或层析。**

与量子多体计算密切相关的张量网络机器学习：三种基本思想

- 基于量子核函数
- 基于模型的高效参数化
- 多元微分方程求解器

求解微分方程是包括物理学在内的多个领域的核心问题

- **经典电磁理论中的麦克斯韦方程组**

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{E} = \dfrac{\rho_t}{\varepsilon_0} \\ \nabla \times \vec{E} = -\dfrac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \vec{B} = 0 \\ \nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j}_t + \mu_0 \varepsilon_0 \dfrac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{cases}$$

- **Burgers方程(以及更一般的Navier-Stokes方程)对于研究流体力学、非线性声学等至关重要**

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + u\dfrac{\partial u}{\partial x} = \nu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (-1,1), \quad t \in (0,1], \\ u(x,t=0) = -\sin(\pi x), \quad u(x=\pm 1, t) = 0, \end{cases}$$

量子物理中的基本方程之一：薛定谔方程

- 考虑N个粒子，坐标记为$\boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_N)$，有：

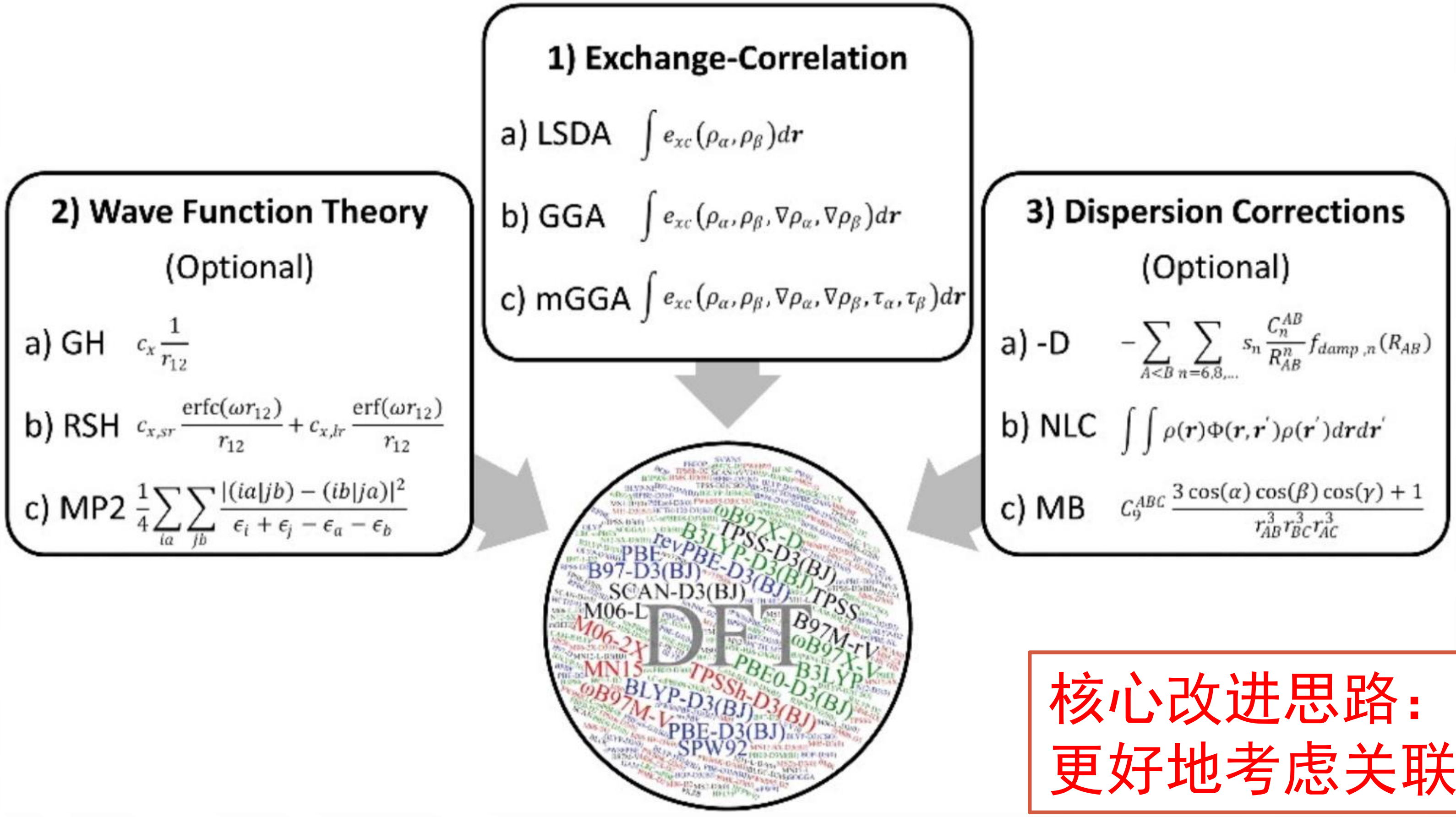
$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = \Bigg(\overbrace{\underbrace{-\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_n^2}}_{\text{kinetic terms}} + \underbrace{V(\boldsymbol{x})}_{\text{potential}}}^{\text{Hamiltonian}}\Bigg)\psi(\boldsymbol{x},t)$$

- 定态薛定谔方程：

$$E\psi(\boldsymbol{x},t) = \left(-\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + V(\boldsymbol{x})\right)\psi(\boldsymbol{x},t)$$

$\boxed{\text{相互作用多体薛定谔方程几乎不存在严格解}}$

求解多体薛定谔方程近似方法之一:平均场



核心改进思路：
更好地考虑关联效应

Narbe Mardirossian and Martin Head-Gordon, Molecular Physics, 115:19, 2315-2372 (2017)

格点近似：从多体薛定谔方程到强关联格点模型

Hubbard models

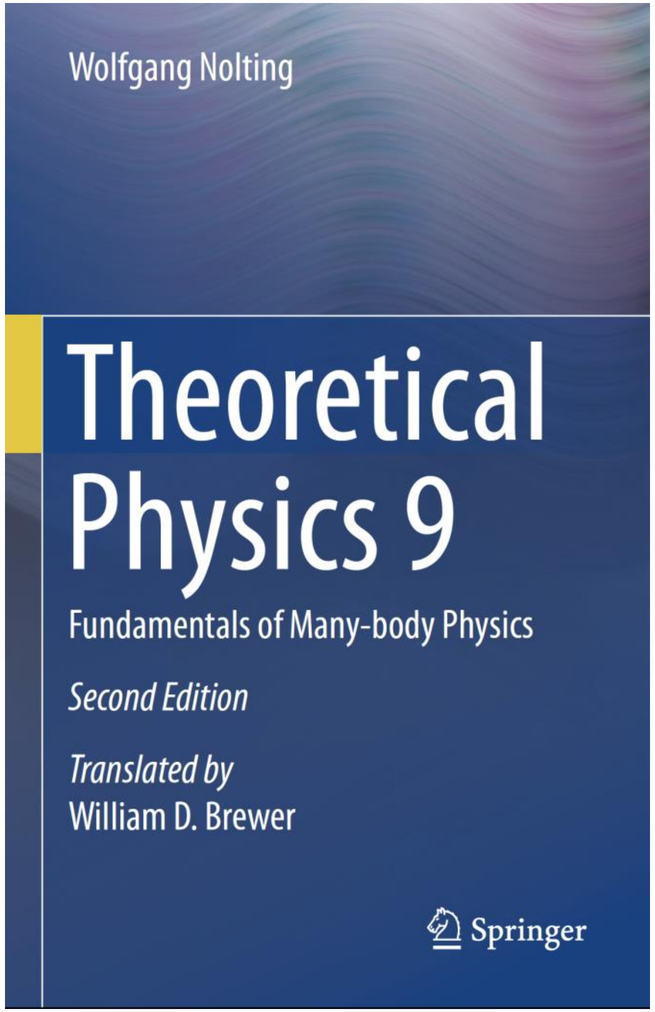
Classical spin lattice model

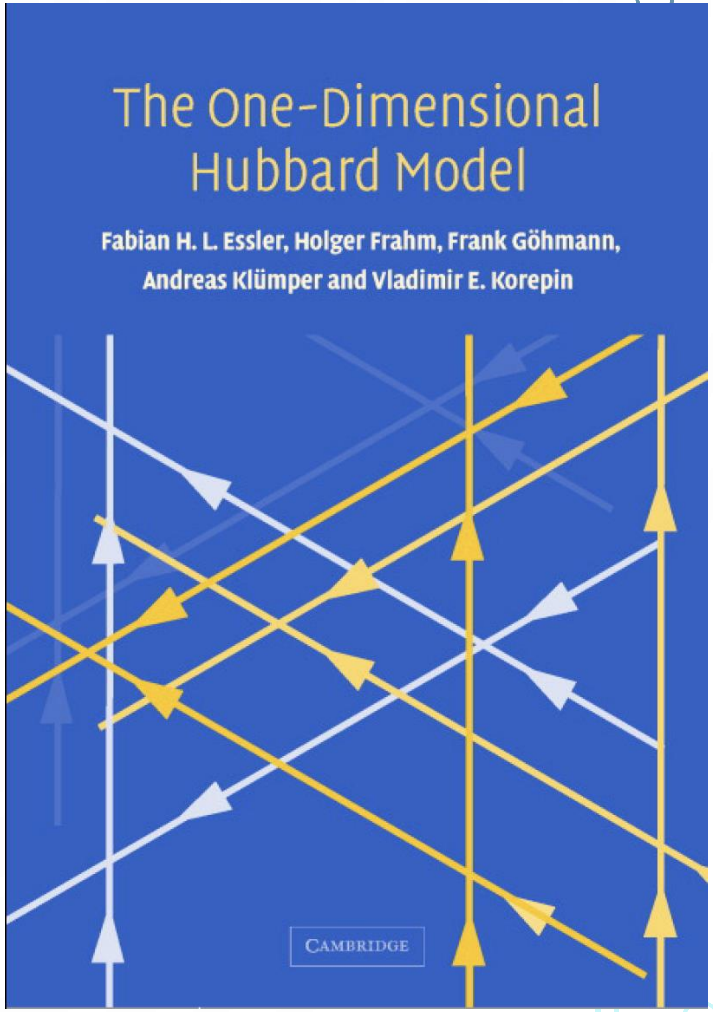
t-J models

Lattice gauge fields

Heisenberg models

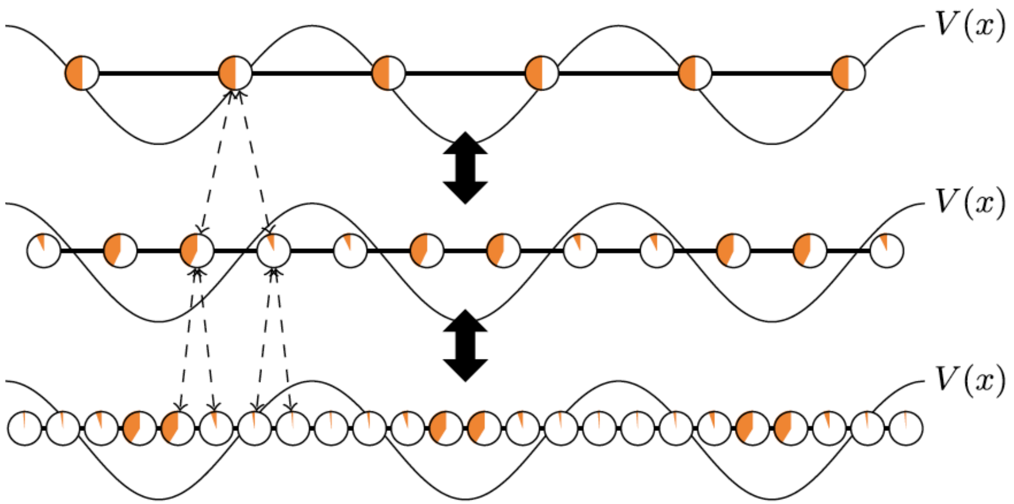
……



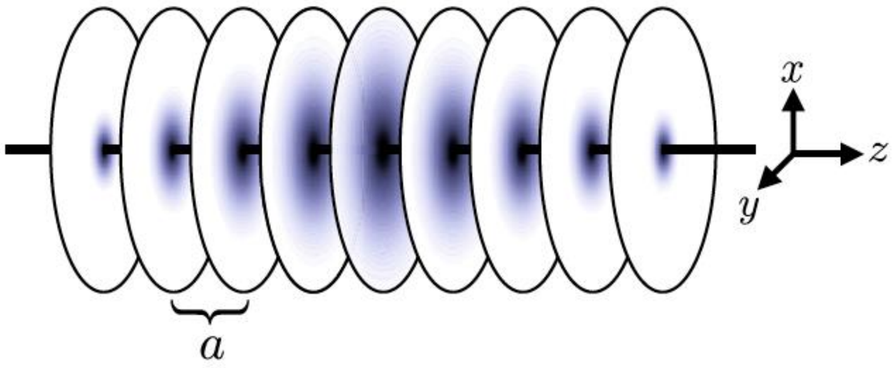


量子化学体系的连续空间的DMRG算法：

- Multi-grid DMRG (MG-DMRG)
- Sliced-basis density matrix renormalization group (sb-DMRG)



Michele Dolfi, Bela Bauer, Matthias Troyer, and Zoran Ristivojevic, Phys. Rev. Lett. **109**, 020604 – Published 13 July 2012



E. Miles Stoudenmire and Steven R. White, Phys. Rev. Lett. **119**, 046401 – Published 24 July 2017

神经网络也是求解多变量微分方程组的重要手段

- **Physics-informed NN（PINN）：** 以**数据驱动**的方式训练NN，使其逼近微分方程组的解

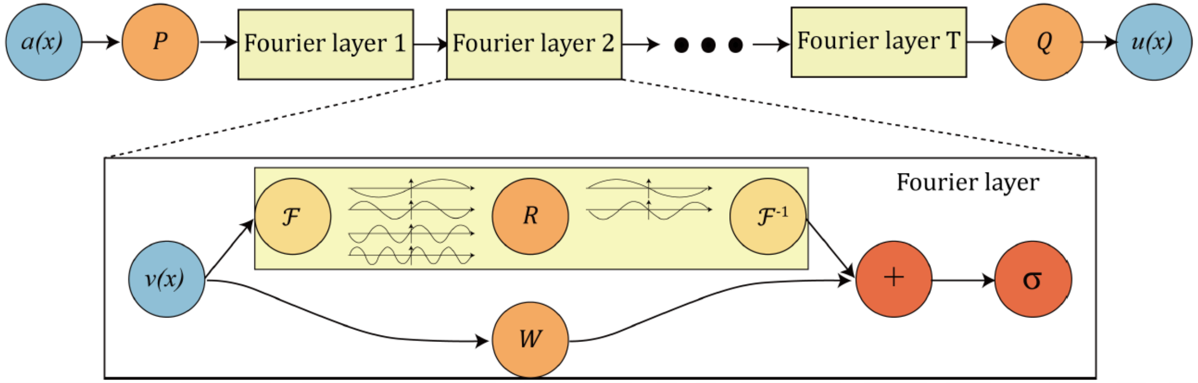
$$f := u_t + \mathcal{N}[u]$$

$$MSE = MSE_u + MSE_f,$$

$$MSE_u = \frac{1}{N_u}\sum_{i=1}^{N_u} |u(t_u^i, x_u^i) - u^i|^2,$$

$$MSE_f = \frac{1}{N_f}\sum_{i=1}^{N_f} |f(t_f^i, x_f^i)|^2$$

Maziar Raissi, Paris Perdikaris, George Em Karniadakis, arXiv:1711.10561

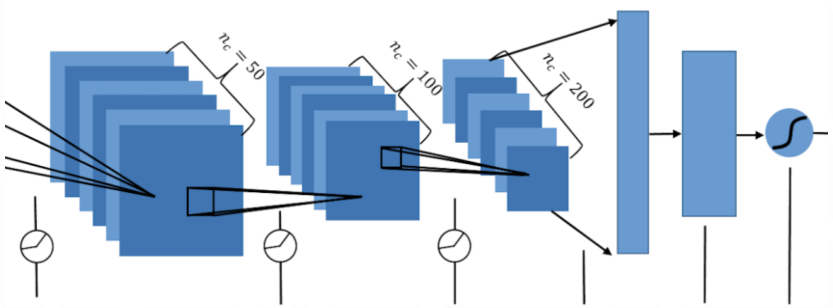


- 神经网络求解器**依赖变量离散化与采样**，可通过设计神经算子（例如傅立叶算子），降低对离散化的依赖程度。

Zongyi Li, et al, ICLR 2021

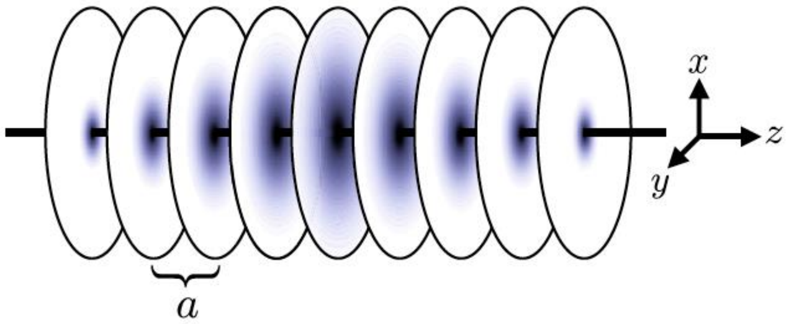
微分方程求解器

NN（以PINN为代表）



- 普适性强，易编程易用；
- 数据驱动；
- 离散化与采样依赖;
- 不可解释：稳定性、误差等不可控。

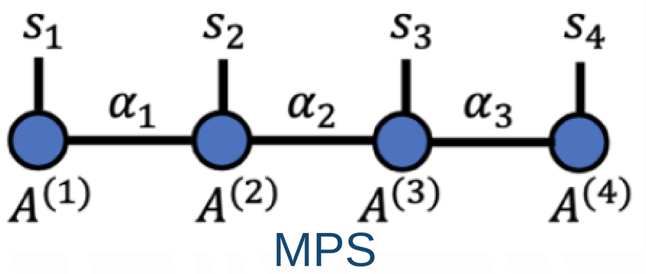
TN（以SB-DMRG与MG-DMRG为代表 ）



- 考虑关联效应；
- 稳定性与误差相对可控；
- 并非普适的微分方程求解器；
- 仍依赖空间离散化。

我们的目标: 微分方程的普适求解器; 非数据驱动; 无需离散化; 高精度且误差可控

泛函张量网络（Functional TN）



PHYSICAL REVIEW B **105**, 165116 (2022)

Functional tensor network solving many-body Schrödinger equation

Rui Hong, Ya-Xuan Xiao, Jie Hu, An-Chun Ji, and Shi-Ju Ran*

Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China

- 给定一组函数基底 $\{\phi_s(x)\}$ $(s=0,1,\ldots,\mathcal{D}-1)$，**将展开系数写成张量网络的形式**（以MPS为例）

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{s_1\cdots s_N=0}^{\mathcal{D}-1} C_{s_1\cdots s_N}\phi_{s_1}(x_1)\cdots\phi_{s_N}(x_N) \Longrightarrow C_{s_1\cdots s_N} = \sum_{\alpha_0\cdots\alpha_N=0}^{\chi-1} A^{(1)}_{\alpha_0 s_1\alpha_1}A^{(2)}_{\alpha_1 s_2\alpha_2}\cdots A^{(N)}_{\alpha_{N-1}s_N\alpha_N}$$

- 系数的参数复杂度由“指数级”降低为“线性级”；
- 在**正交完备**函数基底下，算子由$(\mathcal{D}\times\mathcal{D})$维矩阵表示，$\mathcal{D}$为局域物理空间（物理指标）维数：

$$\hat{O}[\phi_s(x)] = \sum_{s'=0}^{\mathcal{D}-1} O_{s's}\phi_{s'}(x) \Longrightarrow O_{s's} = \int_{-\infty}^{\infty}\phi^*_{s'}(x)\hat{O}[\phi_s(x)]dx$$

泛函张量网络（Functional TN）

- 由函数基底的正交完备性可得，算符与量子态的相关计算呢与传统张量网络计算完全一致：

  - 量子态内积

  - 算符与量子态的作用：$\hat{O}|\varphi\rangle$

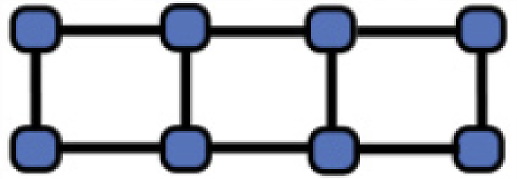
  - 算符期望值：$\langle\varphi|\hat{O}|\varphi\rangle$

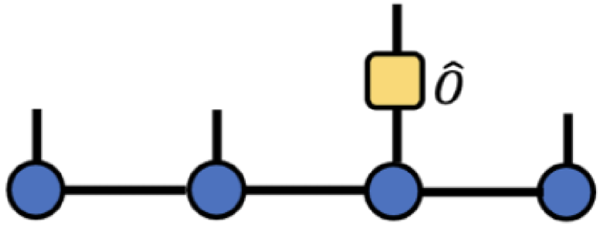
$$\hat{O}[\psi(x)] = \sum_s \tilde{C}_s \phi_s(x)$$

$$\hat{O}\psi(x) = \hat{O}\sum_s C_s\phi_s(x) = \sum_s C_s\hat{O}[\phi_s(x)].$$

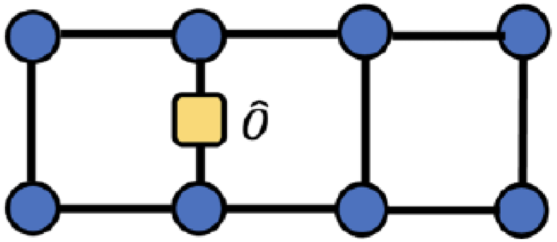
$$\hat{O}[\phi_s(x)] = \sum_{s'=0}^{\mathcal{D}-1} O_{s's}\phi_{s'}(x)$$

$$\tilde{C}_{s'} = \sum_s O_{s's}C_s$$





算符与量子态的作用



算符期望值

耦合量子谐振子基态计算

- 哈密顿量:

$$\hat{H}^{\mathrm{HO}} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + \omega_n^2 x_n^2\right) + \gamma \sum_{m=1}^{N-1} x_m x_{m+1}$$

(two-body)

$$+\tilde{\gamma}\sum_{m=1}^{N-2} x_m x_{m+1} x_{m+2},$$

(three-body)

- 正交完备基函数：无相互作用谐振子本征波函数（高斯波函数）

$$\phi_s(x) = \left(\frac{1}{2^s s!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} h_s(x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{s'}^*(x)\phi_s(x)dx = \delta_{s's}$$

- **微分项的矩阵表示** $\boldsymbol{D} \Leftrightarrow \dfrac{\partial}{\partial x_n}$:

$$D_{s's} = \begin{cases} \sqrt{\frac{s}{2}}, & s' = s-1, \\ -\sqrt{\frac{s+1}{2}}, & s' = s+1. \end{cases}$$

- x算子项的矩阵表示 $\boldsymbol{X} \Leftrightarrow x$:

$$X_{s's} = \begin{cases} \sqrt{\frac{s}{2}}, & s' = s-1, \\ \sqrt{\frac{s+1}{2}}, & s' = s+1. \end{cases}$$

- 损失函数定义为能量：

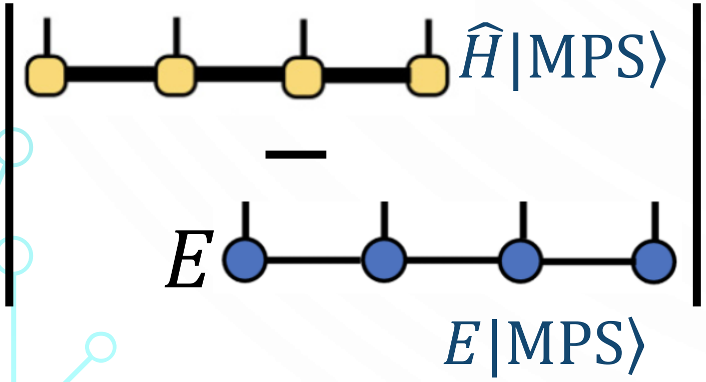
$$L = \frac{E}{|\mathbf{C}|^2}$$

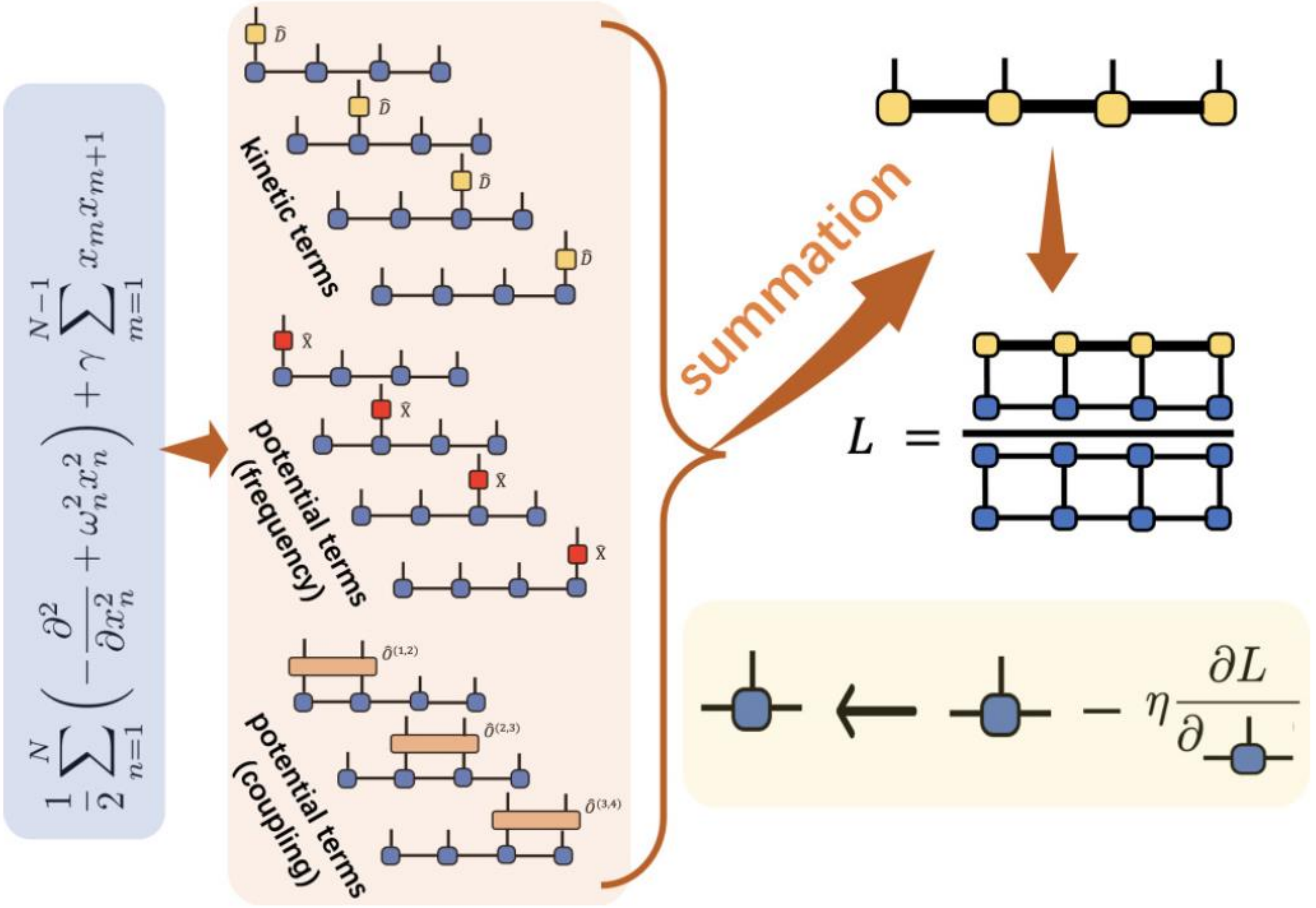
- 利用自动微分技术求梯度并更新MPS张量：

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

- 微分方程的违背程度：

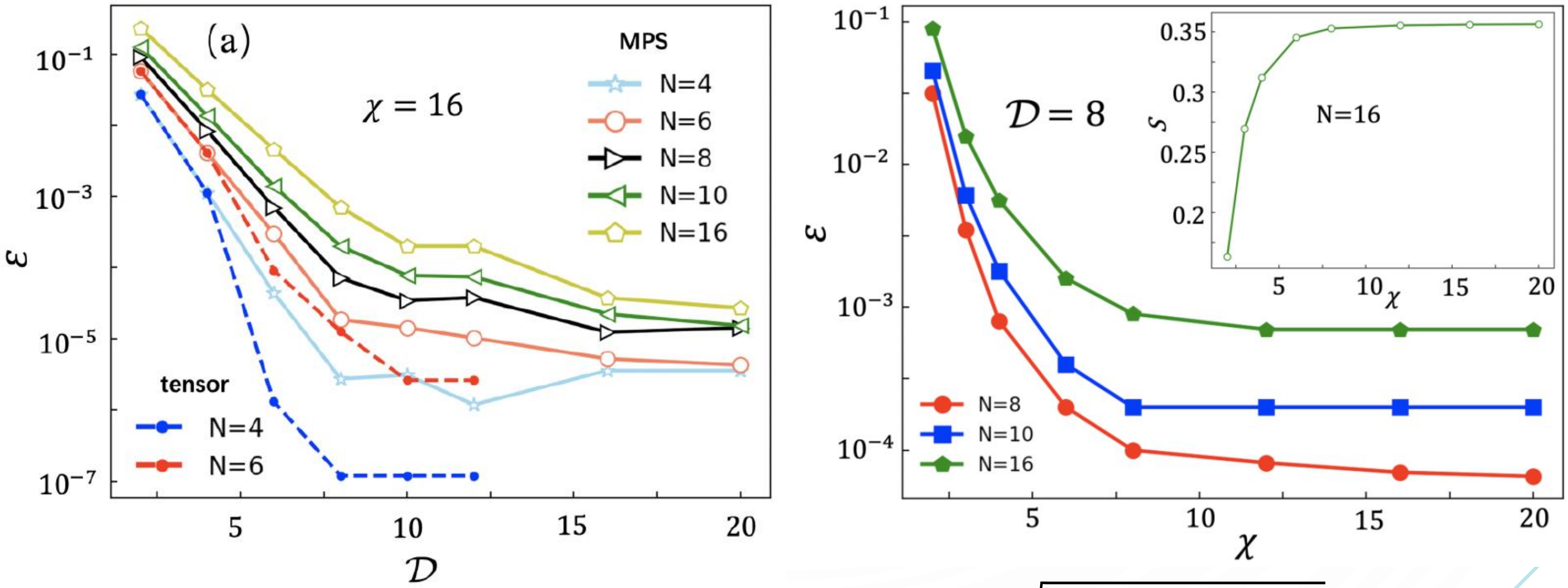
$$\mathcal{L} = |\hat{H}|\mathrm{MPS}\rangle - E|\mathrm{MPS}\rangle\,|$$





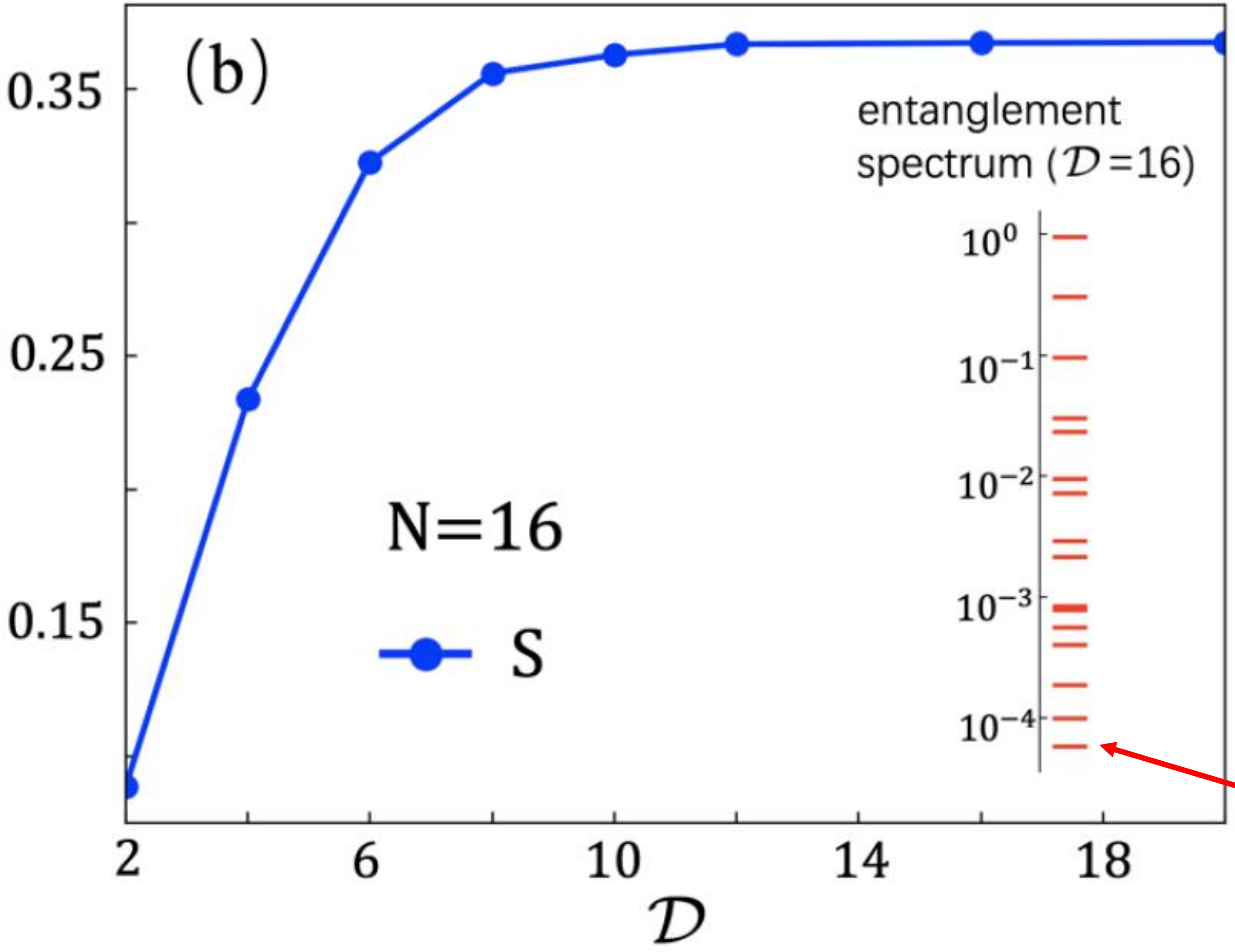
耦合量子谐振子基态计算：数值结果

$$\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_n^2}+\omega_n^2 x_n^2\right)+\gamma\sum_{m=1}^{N-1}x_m x_{m+1}$$



- 仅包含二体相互作用情况时，严格可解$E = \sum_{n=1}^{N}\sqrt{1+2\gamma\cos\left[\frac{j\pi}{N+1}\right]}(n_j+0.5)$；
- 基态能误差随物理维数（局域基函数个数）与MPS虚拟维数增加而下降。

连续空间波函数的纠缠与误差控制



- 在正交归一基底下：
  波函数的归一性⇔MPS的归一性
- 因此：
  MPS的纠缠⇒波函数的纠缠

$$S = -2\sum_{k=0}^{\chi-1} \lambda_k^2 \ln \lambda_k$$

从误差控制的角度：

纠缠谱中最小的元素值控制裁剪误差

微分方程违背程度

$\mathcal{L} =$ 

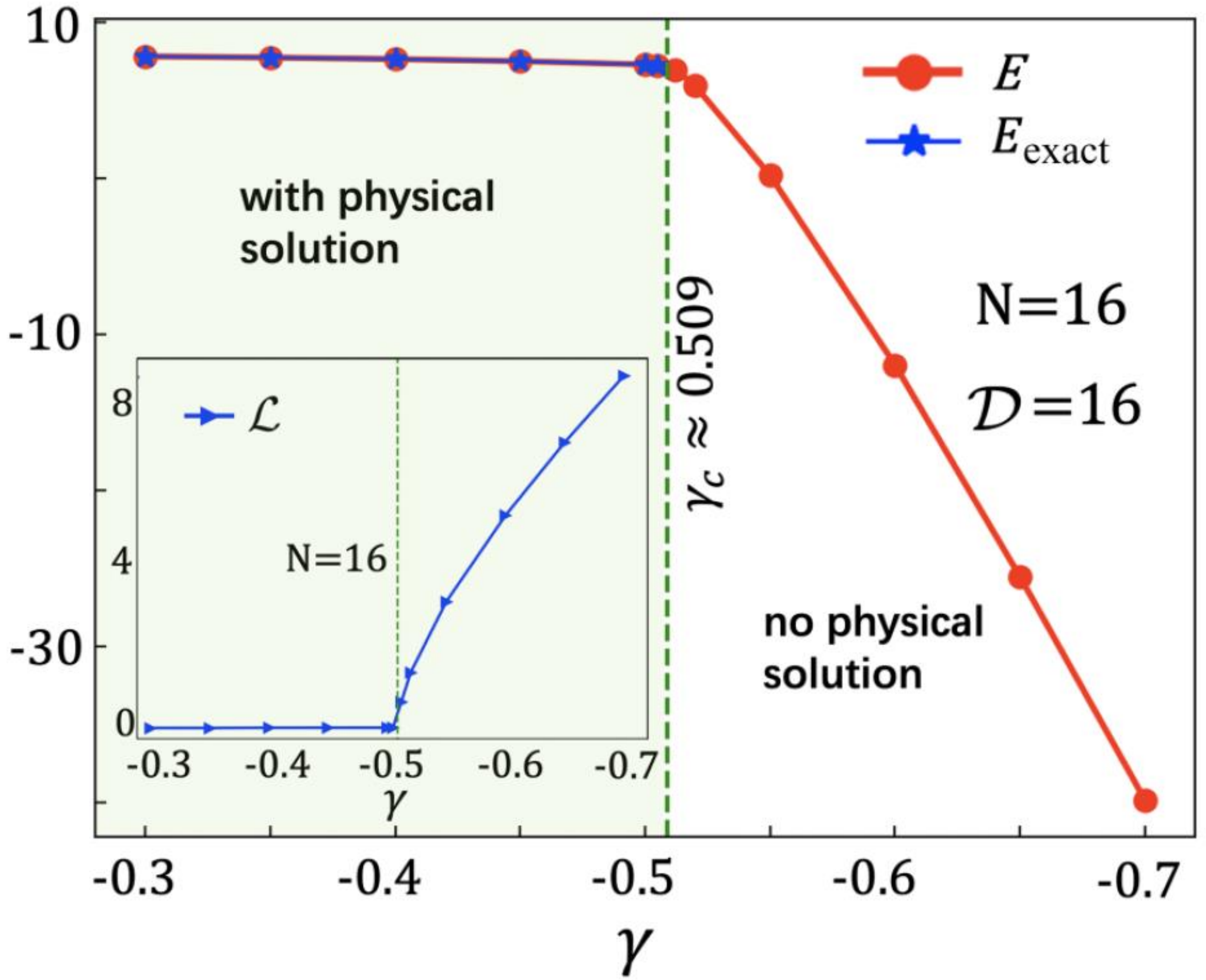
$$\left| \hat{H}|\mathrm{MPS}\rangle - E|\mathrm{MPS}\rangle \right|$$

- 严格解能谱: $E = \sum_{n=1}^{N} \sqrt{1 + 2\gamma \cos\left[\frac{j\pi}{N+1}\right]}(n_j + 0.5)$ (γ is the two-body coupling constant)
- 由于哈密顿量为厄米算符，基态能需为实数。根据严格解公式，基态能 $(n_j = 0)$ 为实数的条件为：

$$|\gamma| \leq \frac{1}{2}\sec\left[\frac{\pi}{N+1}\right]$$

Alireza Beygi, S. P. Klevansky, and Carl M. Bender, PRA 91, 062101 (2015)

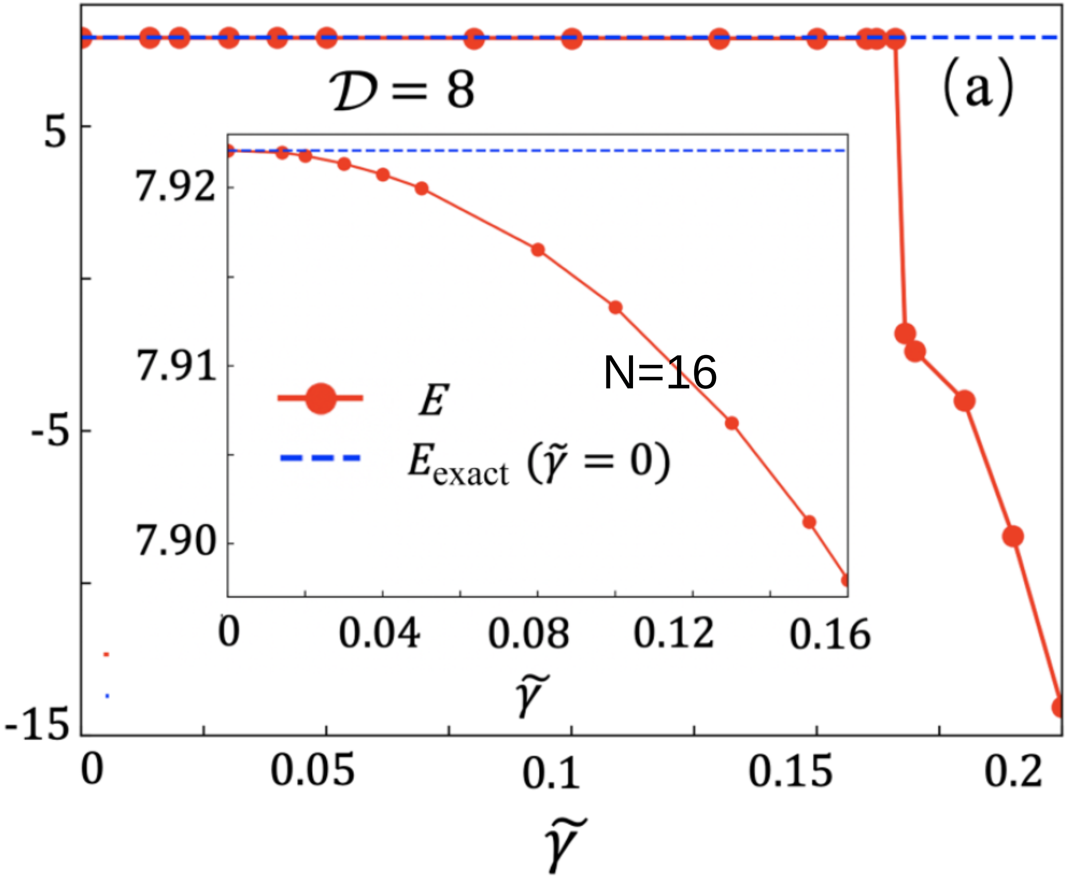
- 当$N=16$，有$|\gamma_c|=\frac{1}{2}\sec\left[\frac{\pi}{N+1}\right]\approx 0.509$，由违背程度$\mathcal{L}=\left|\hat{H}|\mathrm{MPS}\rangle-E|\mathrm{MPS}\rangle\right|$识别该边界点

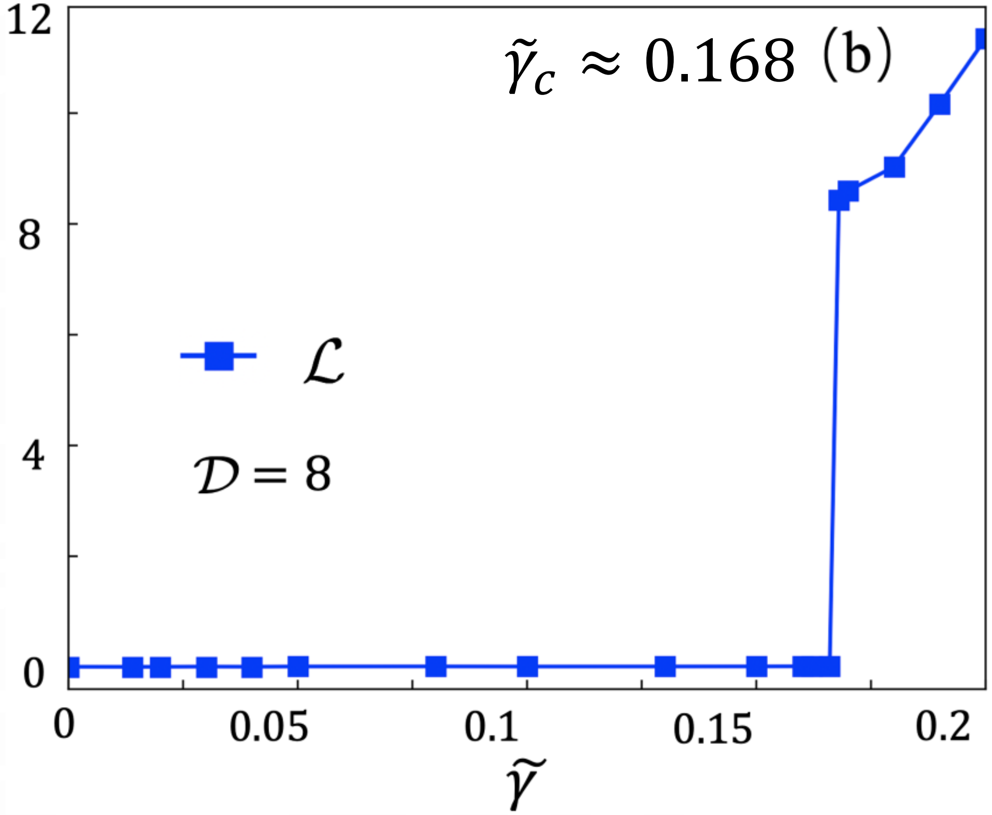


存在三体相互作用时，无严格解

$$\hat{H}^{\mathrm{HO}} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + \omega_n^2 x_n^2\right) + \gamma \sum_{m=1}^{N-1} x_m x_{m+1} \quad \text{(two-body)}$$

$$+\tilde{\gamma} \sum_{m=1}^{N-2} x_m x_{m+1} x_{m+2}, \quad \text{(three-body)}$$

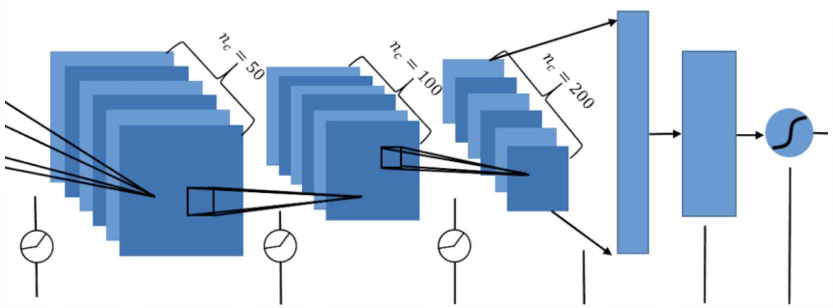




- FTN得到物理解边界为$\tilde{\gamma}_c \approx 0.168$

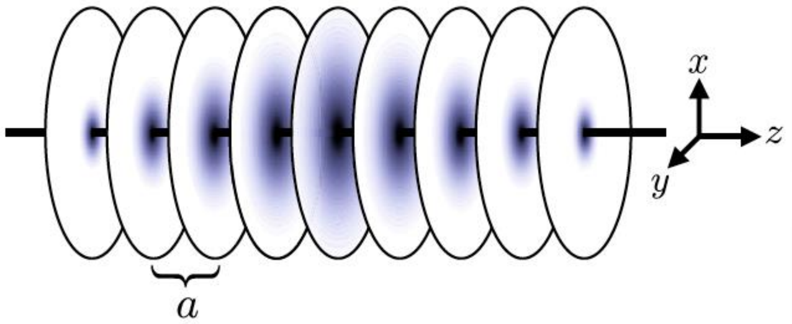
小结：微分方程求解器

NN（以PINN为代表）



- 普适性强，易编程易用；
- 数据驱动；
- 离散化与采样依赖;
- 不可解释：稳定性、误差等不可控。

TN（以SB-DMRG与MG-DMRG为代表 ）



- 考虑关联效应；
- 稳定性与误差相对可控；
- 并非普适的微分方程求解器；
- 仍依赖空间离散化。

FTN: 微分方程普适求解器; 非数据驱动; 无需离散化; 高精度且误差可控

与量子多体计算密切相关的张量网络机器学习：三种基本思想

基于量子核函数

- 无监督\半监督学习：
  高效小样本机器学习
- 量子相识别：
  无监督学习，无需序参量等先验知识

基于模型的高效参数化

- 量子多体态制备：
  量子线路的设计与优化；
- Schmidt张量网络态：
  超越面积定律、实现完整纠缠谱的高效表示与计算

多元微分方程求解器

- 量子多体薛定谔方程求解：
  避免离散化、非数据驱动、误差可控；
- 动力学、热力学，以及一般微分方程求解：
  研究中…

推广至量子计算平台，实现量子多体的量子计算

Intelligent Computing
A SCIENCE PARTNER JOURNAL

REVIEW ARTICLE

Tensor Networks for Interpretable and Efficient Quantum-Inspired Machine Learning

Shi-Ju Ran[1*†] and Gang Su[2,3*†]

[1]Center for Quantum Physics and Intelligent Sciences, Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 10048, China. [2]Kavli Institute for Theoretical Sciences, and CAS Center for Excellence in Topological Quantum Computation, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China. [3]School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, P. O. Box 4588, Beijing 100049, China.

*Address correspondence to: sjran@cnu.edu.cn (S.-J.R.); gsu@ucas.ac.cn (G.S.)
†These authors contributed equally to this work.

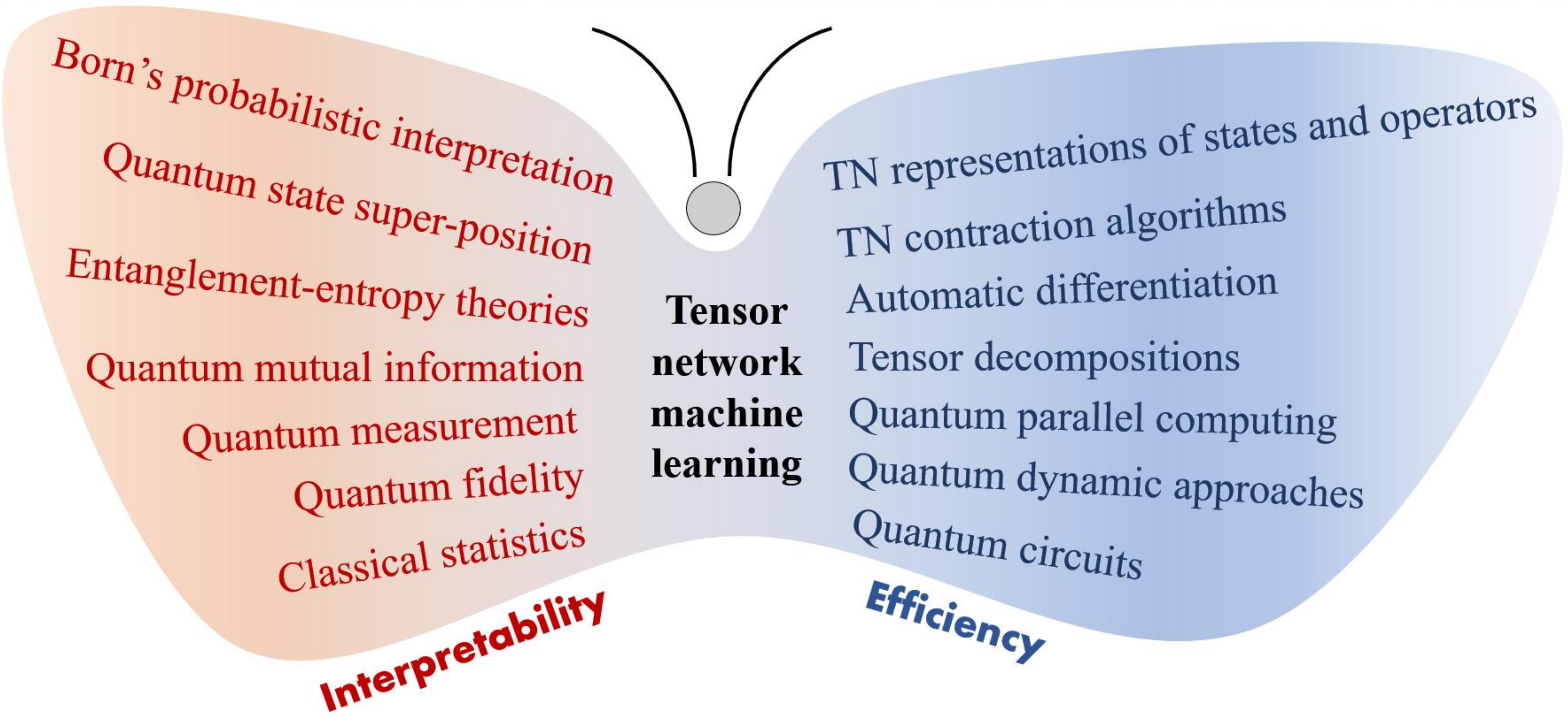
It is a critical challenge to simultaneously achieve high interpretability and high efficiency with the current schemes of deep machine learning (ML). The tensor network (TN), a well-established mathematical tool originating from quantum mechanics, has shown its unique advantages in developing efficient "white-box" ML schemes. Here, we provide a brief review of the inspiring progress in TN-based ML. On the one hand, the interpretability of TN ML can be accommodated by a solid theoretical foundation based on quantum information and many-body physics. On the other hand, high efficiency can be obtained from powerful TN representations and the advanced computational techniques developed in quantum many-body physics. Keeping pace with the rapid development of quantum computers, TNs are expected to produce novel schemes runnable on quantum hardware in the direction of "quantum artificial intelligence" in the near future.

Citation: Ran SJ, Su G. Tensor Networks for Interpretable and Efficient Quantum-Inspired Machine Learning. *Intell. Comput.* 2023;2:Article 0061. https://doi.org/10.34133/icomputing.0061

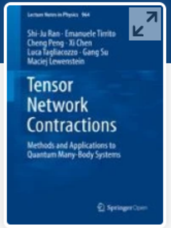
Submitted 8 July 2023
Accepted 6 October 2023
Published 17 November 2023

Shi-Ju Ran and Gang Su, Tensor network for interpretable and efficient quantum-inspired machine learning, *Intelligent Computing* **2**, 0061 (2023)

TNML butterfly



- 2022年出版**英文专著《Tensor Network Contraction》**，系统介绍张量网络量子物理方法
- **Springer开源下载地址：https://doi.org/10.1007/978-3-030-34489-4**



Book | Open Access | © 2020

Springer Open

Tensor Network Contractions

Methods and Applications to Quantum Many-Body Systems

Authors: Shi-Ju Ran , Emanuele Tirrito , Cheng Peng , Xi Chen , Luca Tagliacozzo , Gang Su , Maciej Lewenstein

Reviews

"This book is particularly suitable for students and researchers who are new in this field. It is a timely book that provides a concise introduction of the important topics in this brand-new field with promising prospects. Furthermore, the book provides an up-to-date brief review, which is well suited as a reference for experience researchers." (Hong-Hao Tu, zbMATH 1442.81003, 2020)

Mathematical Reviews Clippings **May 2023**

MR4290713 81-02 81-08 81T17 81V70

Ran, Shi-Ju (PRC-CAP-P; Beijing); **Tirrito, Emanuele** (E-ICFO-QOT; Castelldefels); **Peng, Cheng** [**Peng, Cheng**[2]] (1-STF-MES; Menlo Park, CA); **Chen, Xi** (PRC-UCAS-SPS; Beijing); **Tagliacozzo, Luca** (E-BARU-QAP; Barcelona); **Su, Gang** [**Su, Gang**[1]] (PRC-UCAS-ITS; Beijing); **Lewenstein, Maciej** (E-ICFO-QOT; Castelldefels)

★**Tensor network contractions—methods and applications to quantum many-body systems.**
Lecture Notes in Physics, 964.
Springer, Cham, [2020], ©2020 . *xiv*+150 *pp. ISBN* 978-3-030-34488-7; 978-3-030-34489-4

张量网络中文书籍《张量网络》，用于本科生、研究生指导

目 录

ZHANGLIANG WANGLUO
张量网络
冉仕举 编著

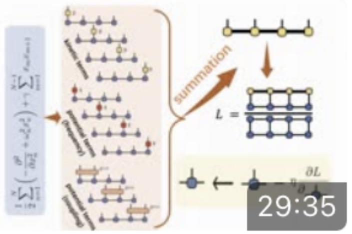
责任编辑 来晓宇
首都师范大学出版社出版发行
地 址 北京西三环北路 105 号
邮 编 100048
电 话 68418523(总编室) 68982468(发行部)
网 址 http://cnupn.cnu.edu.cn
印 刷 北京建宏印刷有限公司
经 销 全国新华书店
版 次 2022 年 9 月第 1 版
印 次 2022 年 9 月第 1 次印刷
开 本 710mm×1000mm 1/16
印 张 16
字 数 272 千
定 价 85.00 元

张量网络相关的线上讲座与系列课程

知识区：top 2.9%

科技区：top 2.0%

bilibili



研究小组学术报告：泛函张量网络求解量子多体薛定谔...

2022年04月29日 11:54:06

1.2万 342 1 57 123 602 60

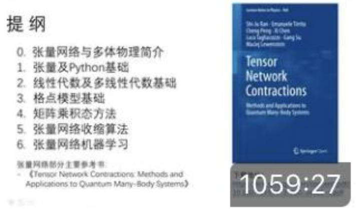
张量网络Python编程

2022年11月18日 15:49:23

4.9万 39 124 548 1754 1224 178 1022

1.1 PyTorch张量基本 1.2 张量的指标操作与 1.3 张量收缩运算

查看全部 53集



[已完结] 张量网络基础课程

2020年06月01日 20:40:10

当前字幕: 18（含平台自动生成）

2.6万 416 99 84 424 1506 203

净增粉丝 >	播放量 >	评论
2,913	133,379	343
点赞	分享	收藏
2,985	747	5,733

正午日落 对我的视频发表了评论

发现好东西了[支持]

2023年11月20日 16:37 回复 点赞 删除该通知

甜兔懒得想名字啦 对我的视频发表了评论

这张讲得好好，茅塞顿开

2023年11月20日 01:25 回复 点赞 删除该通知

曦陌璃 对我的视频发表了评论

老师讲的太棒了

2023年11月14日 11:13 回复 点赞

晚风美学 对我的视频发表了评论

物理学与计算机科学胜利会师

2023年10月26日 16:16 回复 点赞

Thank you very much for your attention!