arXiv:2302.00173v2 [quant-ph] 3 Feb 2023

一维量子自旋系统的神经网络态表示效率

Ruizhi Pan[1], * 和 Charles W. Clark[1], 2, †[1] *Joint Quantum Institute, NIST/University of Maryland, College Park, MD 20742, USA*
[2] *National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland 20899, USA*
（日期：2023年2月7日）

量子多体系统的神经网络态表示正受到广泛关注，因此有必要对其表达能力和复杂度进行更严格的定量分析。我们对一维（1D）量子自旋系统的受限玻尔兹曼机（RBM）态表示进行分析，为其计算复杂度带来了新的见解。我们定义了一类长程快速衰减（LRFD）受限玻尔兹曼机态，其截断误差具有可量化的上界；同时提供了数值证据，表明一大类一维量子系统可由复杂度至多为多项式级的 LRFD 受限玻尔兹曼机近似表示。这些结果使我们推测，许多量子系统的基态或许都能由 LRFD 受限玻尔兹曼机或其变体精确表示，即使在其他态表示效率降低的情况下也是如此。最后，我们给出了多个典型态流形之间的关系。我们的工作提出了一种对一般长程受限玻尔兹曼机进行复杂度分析的范式，并由此自然地对该流形作进一步分类。这一范式以及我们对其非局域结构的刻画，或将有助于理解由受限玻尔兹曼机描述的量子多体态的自然复杂度度量，并可推广至高维系统和深度神经网络量子态。

I. 引言

量子机器学习是一门新兴领域，融合了机器学习（ML）和量子物理学科中的技术 [1–7]。该领域的研究大致分为三类 [2]：将经典机器学习技术应用于量子物理系统 [4–10], ；面向经典机器学习问题的量子计算与算法 [11–14], ；以及受这两个学科交叉启发的新思路 [15, 16]。在量子系统学习领域，将机器学习技术用于识别量子相和相变 [3, 17–21], 、分子建模 [22, 23], 、量子态层析 [24, 25], 以及加速蒙特卡罗模拟 [26, 27]方面，已经取得了巨大进展。

在此，我们报告了对量子多体物理中神经网络量子态的研究结果 [5–9, 28–31], 这一主题近来备受关注。核心思想是用神经网络（NN）为波函数设定一种试探形式 [6]，旨在指数维希尔伯特空间中寻找一个低维流形来近似量子态 [32]，并运用机器学习算法找到一个具体解。受限玻尔兹曼机（RBM） [6–8, 28, 29] 是一种二分随机结构，它将热力学配分函数的概念与经典人工神经网络相结合。受限玻尔兹曼机已成功表示了多种量子态，例如量子多体局域化系统的低能本征态 [6, 33], 稳定子码的码字 [30, 34, 35]以及手性拓扑态 [8, 36, 37]。

尽管受限玻尔兹曼机已展现出其在数值模拟中的能力，我们仍有特别的理由研究一般长程受限玻尔兹曼机的表达能力与复杂度。这类机器以具有完全层间连接的稠密网络架构为特征，与所谓的短程或稀疏受限玻尔兹曼机形成对照 [7, 30, 31]。首先，机器学习算法给出的受限玻尔兹曼机解所产生的态近似器往往具有长程形式和快速的参数衰减，即使目标态的精确受限玻尔兹曼机表示未知 [30, 31] 或效率较低 [8]。增加隐节点数量可以捕捉更高阶的自旋关联 [6], ，从而提高近似精度。最优近似器通常具有与对一个含无限多个隐节点的有限截断受限玻尔兹曼机进行基于幅值的剪枝 [38, 39] 所得结果相似的形式。这些观察促使我们将受限玻尔兹曼机波函数试探形式推广至无限隐藏节点状态，并论证采用这些截断长程受限玻尔兹曼机近似器的保真性 [40]。

研究长程受限玻尔兹曼机的另一个动机，源于探索有效压缩态表示这一核心目标；这包括理解自然的复杂度度量 [7] ，以及全局物理信息如何编码在这种描述中 [32]。已有一些研究探讨受限玻尔兹曼机与其他态表示概念之间的关系，例如弦键态 [8], 、关联子乘积态 [41] 和张量网络态 [37, 42]。然而，通过将受限玻尔兹曼机转换为其他表示来分析截断的影响，可能会导致冗余和不便，而且无法充分利用受限玻尔兹曼机作为一种能够自然地以非局域方式描述量子态的架构所具备的特点 [7, 32]。因此，我们选择建立一种直接分析长程受限玻尔兹曼机

* panruizhi@gmail.com
† charles.clark@美国国家标准与技术研究院.gov

空间复杂度的范式。

本文分析了长程受限玻尔兹曼机态表示一维量子自旋系统的效率。我们的研究步骤如下：

1. 在第 IIA 节中，我们将受限玻尔兹曼机波函数试探形式推广到无限隐藏节点状态，并定义了一般 RBM 态的一个子集——长程快速衰减受限玻尔兹曼机态，其参数条件约束了自旋（可见节点）与虚粒子（隐节点）之间的非局域相互作用。

2. 在第 IIB 节中，我们推导了与截断的 LRFD RBM 态序列的两种态差异度量相关的截断误差上界。其中一种度量是态矢量差的 l_2-范数，另一种是基于厄米算符的期望值差。

3. 在第 IIC 节中，我们确定了 LRFD 受限玻尔兹曼机在态近似中的空间复杂度对非局域相互作用模式所规定的衰减率的依赖关系。

4. 在第III节中，我们提供了数值证据，支持以下猜想：广泛的一维量子自旋系统的基态——包括一些具有对数纠缠熵的临界系统——均可由 LRFD 受限玻尔兹曼机近似表示，且空间复杂度的标度至多随系统尺寸和近似误差倒数呈多项式增长。

5. 在第III节中，我们还给出了多个典型态流形之间的关系，由此彰显了 LRFD 受限玻尔兹曼机这一概念在态表示理论效率分析中的重要性。

我们的结果为受限玻尔兹曼机在其他态参数化方式（如矩阵乘积态）效率较低的情形下的实用性提供了证据。实际上，我们的工作提出了一种针对一般长程受限玻尔兹曼机进行复杂度分析的范式，而非将分析局限于短程或稀疏受限玻尔兹曼机，并自然地基于复杂度标度对这一流形作出进一步分类。

我们发现，LRFD 受限玻尔兹曼机的非局域结构可由两个条件刻画。这两个条件分别由与两个自由度相关的界限决定；这两个自由度是在 层级框架内定义的，如图1(a)所示。其中一个自由度是单层衰减因子，类似于局域化轨道，并编码自旋之间关联的信息（第 IID节）。第二个自由度是层级衰减因子，它对复杂度有显著影响受限玻尔兹曼机（第IIC节）中的。

这一范式以及我们对非局域结构的刻画，或可促进人们理解

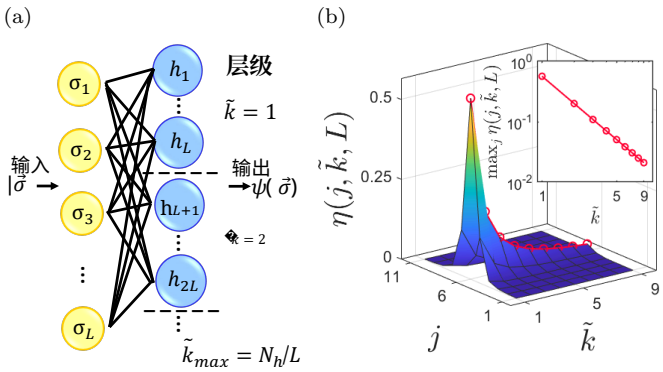

图1. (a) 受限玻尔兹曼机作为一维量子自旋系统波函数试探形式的网络结构。长程受限玻尔兹曼机通常意味着可见层与隐层之间完全连接。隐层分为 N_h/L 个层级，每层包含 L 个隐节点。(b) 具有平移对称性的 LRFD 受限玻尔兹曼机的重要性度量 $\eta(j,\tilde{k},L)$。该受限玻尔兹曼机按方程（24）–（26）所示构造，其中 $\lambda(\tilde{k})=\tilde{k}^{-\alpha_P}$，$\mu(r)=\frac{1}{2}\delta_Q r^{-\alpha_Q}$ 对于 $r\neq 0$，$\mu(0)=\delta_Q=0.5$，$\alpha_P=0.75$，$\alpha_Q=1.5$ $c_w=1+i$ $c_b=0$ $a_0=0$ $L=11$,,, 和。插图˜展示了在双对数坐标下，随着 $\tilde{k}$ 增加，各层中所有 j 之间 $\eta(j,k,L)$的最大值的衰减。曲线的线性表明三维结构中“脊线”（红色圆点）呈幂律衰减。

由受限玻尔兹曼机描述的量子多体态的自然复杂度度量，并且或可推广至高维系统和深度神经网络量子态。

II. 受限玻尔兹曼机作为波函数试探形式

我们采用受限玻尔兹曼机作为一维量子多体自旋-$\frac{1}{2}$系统 [5–7]的波函数试探形式。受限玻尔兹曼机通常用作理解和训练更深层网络的构建模块，因为它的推断结构相对简单，并且作为离散分布 [43]的通用逼近器，在参数化建模方面能力强大。作为深度神经网络的基本构造，受限玻尔兹曼机有两层。第一层（可见 层）以通常的方式表示自旋构型 $\vec{\sigma}$。这里，向量 $\vec{\sigma}=(\sigma_1,\ldots,\sigma_L)$ 表示一个含有 L 个自旋的系统，其中 $\sigma_j=\pm 1$，对于 $j=1,\ldots,L$成立。第二层是隐层，由 N_h 个节点组成，记作向量 $h=(h_1,\ldots,h_{N_h})$，其中 $h_k=\pm 1$，对于 $k=1,\ldots,N_h$ 成立。在概率模型中引入 h_k 作为辅助粒子；它们的作用类似于矩阵乘积态 [32, 44]价键图像中的虚粒子。

给定一个特定的自旋构型 $\vec{\sigma}$，受限玻尔兹曼机的输出为

相应的波函数振幅

$$\psi(\vec{\sigma}) = 2^{-N_h} \sum_{\{\vec{h}:h_k=\pm 1\}} \exp\Big(\sum_{j=1}^{L} a_j\sigma_j + \sum_{k=1}^{N_h} b_k h_k + \sum_{1\le j\le L, 1\le k\le N_h, j,k\in\mathbb{N}} W_{j,k}\sigma_j h_k\Big) \quad (1)$$

$$= \prod_{j=1}^{L} e^{a_j\sigma_j} \prod_{k=1}^{N_h} \cosh(b_k + \sum_{j=1}^{L} \sigma_j W_{j,k}). \quad (2)$$

这里， a_j 和 b_k 分别是第 j个自旋和第 k个隐节点的偏置参数，$W_{j,k}$ 是描述第 j个自旋与第 k个隐节点之间层间相互作用的权重参数，而 $\mathbb{N}$ 表示所有自然数的集合。a_j、 b_k 和$W_{j,k}$均为复数。定义在计算基上的所有此类振幅共同构成量子态矢量$|\Psi\rangle = \sum_{\vec{\sigma}} \psi(\vec{\sigma})|\vec{\sigma}\rangle$，其中求和遍历所有 2^L种自旋构型。值得注意的是，我们采用了带有因子 2^{-N_h}的受限玻尔兹曼机形式。只要 b_k 和$W_{j,k}$ 衰减得足够快，以确保当 $N_h \to \infty$ 时$\psi(\vec{\sigma})$收敛，对于固定系统尺寸 L，这一选择便允许我们使用无限多个隐节点 h_k。换言之，这确保了添加关联参数（b_k 和$W_{j,k}$）为零的隐节点不会改变波函数的值。这一选择有助于下文所示的渐近分析。

如第I节所述，通过相关机器学习算法求解、用于逼近目标态的受限玻尔兹曼机通常具有长程形式和快速的参数衰减。随着向网络中添加更多隐节点，受限玻尔兹曼机能够捕捉自旋之间的高阶关联 [6]，从而提高逼近精度。参数衰减表现为权重参数$W_{j,\ k}$随着索引间隔 $|j-k|$的增大而衰减，同时 b_k 也会随着 k的增大而衰减。

在这项工作中，我们假设 N_h 是 L 的整数倍，这将有助于进行标度分析，尤其是对于平移不变系统。当 N_h 不是 L的整数倍时，我们只需用关联着零值参数的隐节点填充最后一个片段，就不会影响波函数的取值。我们将隐层划分为多个层级，每个层级包含 L 个隐节点（图 1(a)）。因此，总共有N_h/L 个层级，而比值 N_h/L 在一些文献中称为隐单元密度 [6]。我们将通过一种对一般受限玻尔兹曼机的所有隐节点重新排序的算法，说明同一层级的隐节点能够捕捉自旋之间相同阶数的关联。如下面所示，当我们使用具有平移对称性的受限玻尔兹曼机形式来表示一维平移不变量子系统的基态时，这一点将得到进一步阐明 [6]。

可由短程受限玻尔兹曼机 [30, 31] 精确表示的量子态之一，是一维对称性保护拓扑（SPT）簇态。SPT簇系统的哈密顿量定义为在具有周期性边界条件的一维 L位点晶格上，定义为 $\hat{}$ $H_{\text{cluster}} = -\sum_{j=1}^{L} \hat{}\sigma_{j-1}^z \hat{}\sigma_j^x \hat{}\sigma_{j+1}^z$，其中 $\hat{}\sigma^x$ 和 $\hat{}\sigma^z$ 为泡利矩阵。传统的 r_0范围受限玻尔兹曼机定义为满足$W_{j,\ k} = 0$ 的受限玻尔兹曼机，其中任意 $|j-k| > r_0$均成立。短程受限玻尔兹曼机通常指 r_0范围受限玻尔兹曼机，其中r_0 是一个与系统尺寸L无关的小常数。文献 [30, 31] 表明， H_{cluster} 的基态$\hat{}$可由具有 L 个隐节点的1范围受限玻尔兹曼机精确表示，其定义如下：

$$\begin{aligned} &a_j = 0 \text{ (for any } j \in \{1,2,\ldots,L\}),\\ &b_k = i\pi/4, W_{k-1,k} = i\pi/2, W_{k,k} = 3i\pi/4,\\ &W_{k+1,k} = i\pi/4 \text{ (for any } k \in \{1,2,\ldots,L\}),\\ &W_{j,k} = 0 \text{ (for } |j-k| > 1), \end{aligned} \quad (3)$$

通过利用系统的稳定子特性，将参数约束方程的数量从指数级减少到关于 L 的线性级别。用我们的层级语言来说，这个受限玻尔兹曼机只有一个层级，并且该层级上的权重参数仅在非常短的范围内有非零支撑，这体现了其满足面积律的量子纠缠。此外，系统的平移对称性也被受限玻尔兹曼机形式继承。该受限玻尔兹曼机的参数模式同样具有平移对称性，这意味着，不同隐节点对应的参数可以通过对单个隐节点对应的参数施加平移对称变换算符而生成 [6]。

受方程组（3）随系统尺寸增大而具有可扩展性的启发，并考虑到需要捕捉自旋之间的高阶关联 [6] 以及子系统块之间更强的量子纠缠 [31]，，我们预期一般量子态的受限玻尔兹曼机表示具有多个、甚至可能无限多个层级，并且每个层级上权重参数的支撑范围可能从一个较小的常数增大到最大长度 L。这促使我们分析一般的长程受限玻尔兹曼机，其中自旋与隐节点（虚粒子）之间的非局域相互作用经过了恰当的规定。

A. 长程快速衰减受限玻尔兹曼机

现在我们讨论 LRFD 受限玻尔兹曼机非局域结构的若干方面，这些内容已在第 I 节末尾概述。这将引出对其中提到的两个条件的具体定义。

我们首先将受限玻尔兹曼机波函数试探形式推广到无限隐藏节点状态。具有无限多个隐节点且系统尺寸为 L 的受限玻尔兹曼机状态 $|\Psi^{(L,\infty)}\rangle$ 可定义为

$$|\Psi^{(L,\infty)}\rangle = \sum_{\vec{\sigma}} \psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})|\vec{\sigma}\rangle, \quad (4)$$

其中

$$\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}) = \prod_{j=1}^{L} e^{a_j^{(L)}\sigma_j} \prod_{k=1}^{\infty} \cosh(b_k^{(L)} + \sum_{j=1}^{L} \sigma_j W_{j,k}^{(L)}). \tag{5}$$

其对应的截断 RBM 序列定义为$\{|\Psi^{(L,N_h)}\rangle\}$，其中

$$|\Psi^{(L,N_h)}\rangle = \sum_{\vec{\sigma}} \psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|\vec{\sigma}\rangle \tag{6}$$

and

$$\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}) = \prod_{j=1}^{L} e^{a_j^{(L)}\sigma_j} \prod_{k=1}^{N_h} \cosh(b_k^{(L)} + \sum_{j=1}^{L} \sigma_j W_{j,k}^{(L)}) \tag{7}$$

通过从 $\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})$中移除带有 $k \geq N_h + 1$ 的双曲余弦项来构造。

随后，我们将具有无限多个隐节点的一般 RBM 态的一个子集——长程快速衰减（LRFD）RBM 态——定义为参数满足以下两个条件的受限玻尔兹曼机。

条件 1（的有界性$_{k,}$）。存在一个 L-~无关的整数 $k_s \in \mathbb{N}$ 以及三个非负单调递减的实函数 $\lambda_R(k)$、$\lambda_I(k)$和 $\mu(r)$，使得在对所有隐节点重新排序后，对所有$k > k_s L$，

$$|\operatorname{Re}(W_{j,k}^{(L)})| \leq \lambda_R(\tilde{k})\mu(|j - j_c|_{\text{circ}}), \tag{8}$$
$$|\operatorname{Im}(W_{j,k}^{(L)})| \leq \lambda_I(\tilde{k})\mu(|j - j_c|_{\text{circ}}), \tag{9}$$

~其中，$k \in \{1, 2, \ldots, N_h/L\}$ 表示层级的数值索引；j_c是第 k个隐节点的中心自旋，表示与第 k个隐节点的相互作用在所有 $j \in \{1, 2, \ldots, L\}$中达到最大值的自旋所在位置的索引；$|m|_{\text{circ}} = \min\{m, L - m\}$ 遵循周期性边界条件；$r \in \{0, 1, \ldots, (L-1)/2\}$ 表示 j与 j_c 之间的距离，并假设 L 为奇数，这不会影响以下渐近分析的有效性。函数~ ~$\lambda_R(k)$、$\lambda_I(k)$和 $\mu(r)$满足以下条件：存在有限的 L无关的非负常数 P_0 和μ_0，使得

$$\sum_{\tilde{k}=\tilde{k}_s+1}^{\infty} \left(\lambda_R^2(\tilde{k}) + \beta_1^2\lambda_I^2(\tilde{k})\right) = P_0 < \infty, \tag{10}$$
$$\mu(r) \leq \mu_0 < \infty \quad (\text{for all } r \geq 0), \tag{11}$$

其中，$\beta_1 = 3\sqrt{2\ln 2}/\pi$ 见附录 A中给出的收敛性证明。

我们对每个新变量作如下解释。将所有隐节点重新排序后（通常依据以下数值进行排序）：

$|\operatorname{Re}(W_{(L)\ j,k})|^2 + \beta_1^2|\operatorname{Im}(W_{(L)\ j,k})|^2$，从层级~ ~ ~$k_s + 1$开始，$k = k(k)$ 和 $j_c = j_c(k)$ 都是 k 的函数，而数对 (k, j_c) 与k 之间存在一一映射。这意味着，每个满足 $k > k_s L$ 的隐节点~都与唯一的数对相关联，因此在重新排序后，可以在 RBM 网络中为其确定唯一位置（图1(a)）。捕获自旋间相同阶关联的隐节点被归入同一层级，因此由数对 (k, j_c) 表征的这些隐~节点的新索引实际上体现了关联的层级。这种表征还有助于展现具有平移对称性的量子态的对称性。重新排序这一步旨在解决这样的问题：具有随机性的机器学习算法通常无法根据层级分层自动对隐节点分组，而且这些节点的站点位置通常呈现随机性。条件 $k_s = 0$ 意味着所有隐节点都满足有界性条件，因此可以对整个隐层应用层级分层（图1(a)）。

条件 2（的有界性 b_k）。按照条件 1 中所述，对所有隐藏节点进行相同的重新排序后~ 1，对于所有 $k > k_s L$，

$$|\operatorname{Re}(b_k^{(L)})| \leq \lambda_R(\tilde{k})\mu(0), \tag{12}$$
$$|\operatorname{Im}(b_k^{(L)})| \leq \lambda_I(\tilde{k})\mu(0). \tag{13}$$

应从态流形的角度理解 LRFD 受限玻尔兹曼机的定义 [32, 45]。量子多体态的态流形通常指整个希尔伯特空间中由参数化波函数族张成的子空间 [45], ，因而是一个包含特定类型量子态的集合。因此，LRFD 受限玻尔兹曼机的流形可定义为由所有参数化波函数张成的空间，其中每个波函数都属于一个与变化的系统尺寸相关联、且满足上述条件1和2的量子态序列。一个 LRFD-RBM 态指该流形中的一个元素。因此，这一定义与具有不同标度律的矩阵乘积态的定义遵循相同思路 [32, 44]。

条件1 给出了 RBM 权重参数幅值的上界，并且实际上描述了自旋与隐节点（虚粒子）之间的非局域相互作用。它要求 $|\operatorname{Re}(W_{j\ k}^{(L)})|$和 $|\operatorname{Im}(W_{j\ k}^{(L)})|$ 分别受限于~ ~乘积 $\lambda_R(k)\mu(r)$ 和 $\lambda_I(k)\mu(r)$。单调递减函数 $\lambda_R(k)$ 和 $\lambda_I(k)$ 可视为层级衰减因子，而 $\mu(r)$ 则描述了对于第 k 个隐节点，自旋位点指标（j）与中心自旋对应的自旋位点指标（$j_c(k)$）之间的距离增大所导致的衰减。函数 $\mu(r)$ 具有局域化特征，类似于周期势物理中的单模局域轨道，例如瓦尼尔模 [46], ；其特征可体现为随 r 增大而单调递减。因此，这种描述能够有效捕捉由层级增加以及

系统尺寸增长引起的参数衰减，并为表征非局域相互作用模式提供两个自由度。对实部和虚部采用不同处理方式，源于它们在 RBM 波函数形式中的位置不同，相关形式见附录 A。

条件2意味着，在每个层级上，b_k相关项的贡献都可以由最大的$W_{j,\ k}$相关项界定，因此$W_{j,\ k}$ 权重参数在渐近分析中起主导作用（附录A）。由于 $\mu(0)$ 的取值通常有一定的自由度，因此对于范围广泛的 RBM 态，均可满足条件2 。

条件1 和2 旨在确保态矢量收敛（式（5））， 并明确量化参数衰减速率，以此为基础开展复杂度分析。当条件1 和2 满足时，态矢量收敛的严格证明见附录A。这项证明不仅通过将 RBM 推广到具有无限多个隐节点的情形定义为某些无限序列的极限，确保了该推广的合理性，还引入了分析截断效应所必需的关键数学技巧和概念。

证明的核心思想是，我们可以证明序列 $\{\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}):n\in\mathbb{N}\}$ 在复数域 $\mathbb{C}$ [47]中是一个柯西序列。这个证明的灵感来自这样一个事实：当 $b_k^{(L)}$ 和 $W_{j\ k}^{(L)}$ 足够快地衰减时，复值比值 $\psi^{(L,(n+m)L)}(\vec{\sigma})/\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})$ 会随着 n 增大而迅速落入复平面中点$z=1$ 的邻域。因此，我们推导出比值模 $|\psi^{(L,(n+m)L)}(\vec{\sigma})/\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})|$ 的上下界，这两个界收敛于 1；并推导出其辐角幅值$\arg\left(\psi^{(L,(n+m)L)}(\vec{\sigma})/\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})\right)|$ 的上界，该上界随着 n增大而收敛于 0。接着，我们证明相应的幅值序列 $\{|\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})|\}$ 和辐角序列 $\{\arg(\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}))\}$ 都是实数域 $\mathbb{R}$中的柯西序列，因此 $\{\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})\}$ 是 $\mathbb{C}$中的柯西序列。

B. 固定系统尺寸下波函数截断的影响

我们推导了截断的 LRFD RBM 态序列中两种态差异度量所对应的截断误差上界。定义 $\varepsilon(L,\ N_h)$ 为使用 $|\Psi^{(L,N_h)}\rangle$ 近似 $|\Psi^{(L,\infty)}\rangle$时的一种特定截断误差。

态差异的一种自然度量是.....的平方态矢量差的 l_2-范数 [48]， $\||\tilde{\Psi}^{(L,\infty)}\rangle-|\tilde{\Psi}^{(L,N_h)}\rangle\|_2^2$，其中波浪号用于表示归一化操作后的对应状态。值得注意的是，受限玻尔兹曼机波函数试探形式并不会自动归一化，因此归一化因子 $\langle\Psi|\Psi\rangle$ 的估计十分重要，而且往往很棘手，如附录 B所示。这种截断误

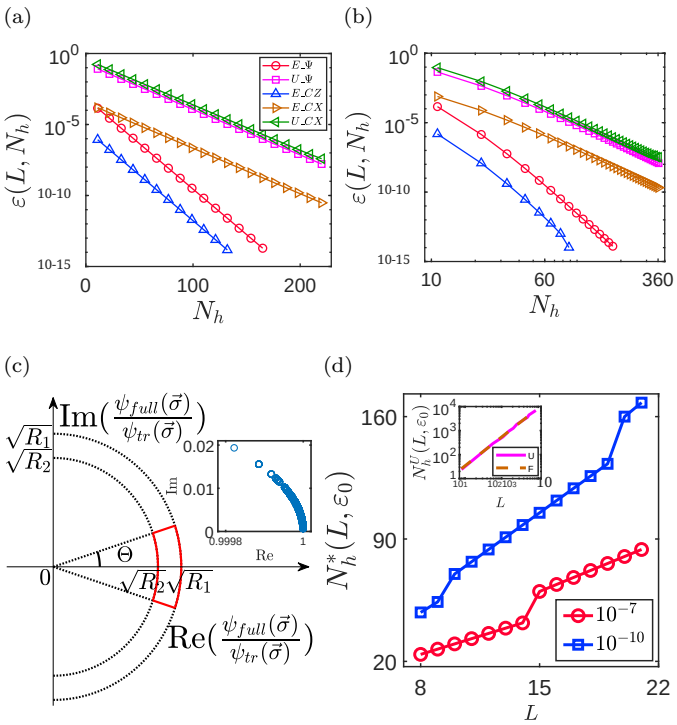

图 2. (a)(b) 比较精确截断误差与估计截断误差 $\varepsilon(L,N_h)$ 随 N_h 的变化，其中固定 L，针对含有微扰部分的一维 SPT 簇态。 $E\ \Psi$: 精确值，第一类截断误差； $U\ \Psi$: 基于上界的估计，第一类; $E\ CZ$: 精确值，第二类， $B=\hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_2^z$; $E\ CX$: 精确值，第二类， $B=\hat{\sigma}_1^x\hat{\sigma}_2^x$; $U\ CX$: 基于上界的估计，第二类， $B=\hat{\sigma}_1^x\hat{\sigma}_2^x$。微扰部分按方程（24）–（26）构造。 $\mu(r)=\frac{1}{2}\delta_Q r^{-\alpha_Q}$，其中 $r\neq 0$, $\mu(0)=\delta_Q=0.1$, $\alpha_Q=3$, $c_w=c_b=1+i$, $a_0=0$ 和 $L=11$。(a) $\lambda(\tilde{k})$ 的指数衰减（纵轴：对数坐标）。 $\lambda(\tilde{k})=0.2\delta_P^{-(k-1)}$，其中 $\delta_P=1.5$。(b) $\lambda(\tilde{k})$ 的幂律衰减（双对数坐标）。 $\lambda(\tilde{k})=\tilde{k}^{-\alpha_P}$，其中 $\alpha_P=3$。(c) 证明中所用变量的示意性解释。(c) 中的插图展示了比值 $\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})/\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})$ 的数据点分布，其中 $N_h=L$ 对应于从第二层开始移除隐节点的截断。如前所述，所有数据点均局域在 (c) 中红色实线围成的复平面区域内，并位于 $z=1$ 附近。参数设置与 (b) 相同。(d) 在 L 中，针对两个固定的第一类截断误差值 ε_0，绘制 $N_h^*(L,\varepsilon_0)$ 的标度；参数设置与 (b) 相同。红色圆圈： $\varepsilon_0=10^{-7}$; 蓝色方块： $\varepsilon_0=10^{-10}$ N_h 。(d) 中的插图展示了基于我们的上界估计得到的标度，其中 $\varepsilon_0=10^{-3}$。洋红色实线：使用上界的精确值；棕色虚线：使用主阶估计。两条曲线几乎重合。

在关于其他波函数拟设（如矩阵乘积态 [40, 49]）的保真度和效率的基础性研究中采用了.....。因此，这使我们能够直接比较受限玻尔兹曼机与其他态表示的效率。

第二种态差异度量是厄米

基于算符的期望值差，定义为

$$|\langle\hat{B}\rangle^{(L,\infty)} - \langle\hat{B}\rangle^{(L,N_h)}| = |\langle\tilde{\Psi}^{(L,\infty)}|\hat{B}|\tilde{\Psi}^{(L,\infty)}\rangle - \langle\tilde{\Psi}^{(L,N_h)}|\hat{B}|\tilde{\Psi}^{(L,N_h)}\rangle|. \quad (14)$$

这里，$\hat{B}$ 可以是任意形如 $\hat{B} = \bigotimes_{j=1}^{L}\hat{\sigma}^{(m_j)}_j$ 的厄米算符，其中 $\bigotimes$ 是张量积符号，$m_j \in \{0,1,2,3\}$，$\hat{\sigma}^{(0)}_j = I_{2\times2}$ 是 2×2 单位矩阵，而 $\{\hat{\sigma}^{(1)}_j, \hat{\sigma}^{(2)}_j, \hat{\sigma}^{(3)}_j\}$ 表示泡利矩阵。我们还将此度量用于 $\{\hat{\sigma}^{(m)}_j : \ m = 0, 1, 2, 3\}$ 是第 j 个自旋的局部希尔伯特空间的一组完备基组；而许多典型的物理可观测量，例如自旋关联和总能量，都对应于此类厄米算符或多项式数量此类算符的线性组合。

接下来，我们可以证明一个引理，为上述两类截断误差给出一系列截断后的 LRFD 受限玻尔兹曼机态的上界。

引理 3（截断误差的上界）。对于满足条件 1 和 2的 LRFD 受限玻尔兹曼机，在按照条件 ˜1 所述对所有隐节点进行相同的重新排序后，存在 $n_\Theta(L) > k_s$ 使得，对于所有$N_h > n_\Theta(L)$ L,

$$\||\tilde{\Psi}^{(L,\infty)}\rangle - |\tilde{\Psi}^{(L,N_h)}\rangle\|_2^2 \le F_1\Big(LQ(L)P(N_h/L)\Big), \quad (15)$$

$$|\langle\hat{B}\rangle^{(L,\infty)} - \langle\hat{B}\rangle^{(L,N_h)}| \le F_2\Big(LQ(L)P(N_h/L)\Big), \quad (16)$$

其中

$$F_1(x) = 2 - 2\exp[-2(1+\beta_1^2)x]\cos(4\beta_2 x) \quad (17)$$

$$= c_1 x + \mathcal{O}(x^2) \quad (\text{as } x \to 0), \quad (18)$$

$F_2(x)$ =最大值{| exp（4x） −1|, |1 − exp（−4β_1^2x）|}

$$+ \max\Big\{\Big[\exp(8x) - 2\exp(4x)\cos(8\beta_2 x) + 1\Big]^{1/2}, \Big[\exp(-8\beta_1^2 x) - 2\exp(-4\beta_1^2 x)\cos(8\beta_2 x) + 1\Big]^{1/2}\Big\} \quad (19)$$

$$= c_2 x + \mathcal{O}(x^{3/2}) \quad (\text{as } x \to 0). \quad (20)$$

$$P(m) = \sum_{\tilde{k}=m+1}^{\infty} \lambda^2(\tilde{k}) \quad (m \ge \tilde{k}_s, m \in \mathbb{N}), \quad (21)$$

$$Q(L) = \Big(\sum_{r=0}^{(L-1)/2} \mu(r)\Big)^2, \quad (22)$$

相关常数为 $\beta_2 = 3\sqrt{3}/\pi$、$c_1 = 4$ ¯$(1+\beta_1^2)$ 和 $c_2 = 4\beta_1^2 + 4$（$\beta_1^4 + 4\beta_2^2$）$^{1/2}$，$n_\Theta(L)$ 可以通过不等式（B11）估计，并且为简便起见，我们假设 $\lambda_R(k) =$ ˜ ˜$\lambda_I(k) = \lambda(k)$ 在以下讨论中始终成立。

证明见附录B ，其中采用了与证明 LRFD 受限玻尔兹曼机收敛时相似的论证。基于如下直觉：随着 增大，$\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})/\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})$ 将迅速收敛到 1，我们推导出该比值的模$|\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})/\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|$ 的上界$\sqrt{R_1}$ 和下界 $\sqrt{R_2}$ ，并推导出其辐角 |arg $(\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})/\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}))$|幅值的上界 Θ。两类截断误差均可用这三个变量进行上界估计，最终，两个上界可分别表示为$LQ(L)P(N_h/L)$的函数 ($F_1(x)$ 和 $F_2(x)$)；该函数随N_h 增大而趋于零，且 L 固定。证明思路示意于图 2(c)。

基于我们对自旋与虚粒子之间非局域相互作用的描述，并使用层级语言，$P(N_h/L)$ 是从 ˜ ˜ $k = N_h/L + 1$ 到 $k = \infty$各层级中隐节点的所有层级衰减因子的总和，而 $Q(L)$ 对应于每个单独层级中的局域化“轨道”，并贡献一个反映系统尺寸增长纯粹影响的因子，而与层级无关。两种不同类型的截断误差对应于函数$F(x)$ 的两种不同形式，但二者在点 $x = 0$处均为解析函数。

我们给出 N_h 中截断误差的标度如下。可以得到，若 $Q(x) = \mathcal{O}(q(x))$ 当 $x \to \infty$ 时，$P(x) = \mathcal{O}(1/p_d(x))$ 当 $x \to \infty$ 时，且 $F(x) = \mathcal{O}(f(x))$ 当 $x \to 0$ 时，则

$$\varepsilon(L, N_h) = \mathcal{O}\Big(f\Big(\frac{L\,q(L)}{p_d(N_h/L)}\Big)\Big) \quad (\text{as } N_h \to \infty). \quad (23)$$

通过数值计算的结果，可以进一步阐明我们构造 LRFD 受限玻尔兹曼机以及对截断误差的理论分析。我们可以构造具有平移对称性的 LRFD 受限玻尔兹曼机，其参数精确满足

$$W^{(L)}_{j,k} = c_w\lambda(\tilde{k})\mu(|j - j_c|_{\text{circ}}), \quad (24)$$

$$b^{(L)}_k = c_b\lambda(\tilde{k})\mu(0), \quad (25)$$

$$a^{(L)}_j = a_0 \quad (26)$$

对于任意 $1 \le j \le L, 1 \le k \le N_h$，其中 a_0, c_w 和 c_b 是复常数，且 $|c_b| \le |c_w|$ 满足条件 2，

˜ ˜ ˜ $k = k(k) = \lceil k/L \rceil$，$j_c = j_c(k) = k - (k-1)L$，$N_h$ 是 L 的整数倍，$\lceil x \rceil$ 表示上取整函数，˜和 $k_s = 0$ 在此情形下。可以证明，这种受限玻尔兹曼机形式可直接转换为一种受限玻尔兹曼机形式，该形式由文献 [6] 提出，用于表示一维平移不变系统的基态，适用于任意有限的 N_h ；但我们将其推广至无限隐藏节点状态（$N_h \to \infty$）。由于不同隐节点的参数可由平移对称变换算子作用于单个隐节点的参数而生成，因此我们只需关注每一层的一个代表性隐节点。于是，我们提出重要性 ˜ 度量 $\eta(j,k,L)$，用于衡量一组边的重要性，其定义如下：

$$\eta(j,\tilde{k},L) = \Big|\mathrm{Re}(W^{(L)}_{j,(L+1)/2+(\tilde{k}-1)L})\Big|^2 + \beta_1^2\Big|\mathrm{Im}(W^{(L)}_{j,(L+1)/2+(\tilde{k}-1)L})\Big|^2 \quad (27)$$

并将其表示为自旋位点指标 j 和˜层索引 k的函数。其三维结构可反映˜二者 $\lambda(k)$ 和 $\mu(r$的衰减，而每一层“轨道”的中心均局域在 $j=(L+1)/2$附近。因此，将每一层的峰值绘制为层索引˜ ˜(k) 的函数，可反映 $\lambda(k)$ 的衰减。图 1(b) 展示了一个具有幂律衰减 $\lambda(k)$ 的 LRFD 受限玻尔兹曼机示例。

我们展示了带有微扰部分的一维 SPT 簇态的两种截断误差 $\varepsilon(L,N_h)$ 随 N_h 的变化，其中 L 固定（图 2(a) 和 2(b)）。这意味着，受限玻尔兹曼机由方程组（3）中定义的设定与方程（24）–（26）所示的微扰部分相加构造而成。给出了具有指数衰减和幂律衰减的 $\lambda($ $k)$ 的˜数值结果。如上所述，一维 SPT 簇态可由一个短程（1-range）受限玻尔兹曼机精确表示 [30]。根据我们的描述，其受限玻尔兹曼机表示仅有一个层级，相应的 λ (k)˜和 $\mu(r)$ 会在 $k>1$ 和 $r>1$时迅速降至零。加入微扰部分后，复合受限玻尔兹曼机成为 LRFD 受限玻尔兹曼机，因此我们可以研究截断误差。我们给出了两种截断误差的结果，并令 B 表示 z 和 x 方向上自旋 1 与自旋 2 之间的自旋关联算符。

我们关于固定 N_h 下 L 中截断误差标度的数值实验表明，其结果均被我们在不等式（15）和（16）中给出的估计很好地上界，这验证了我们的理论分析。这些实验还表明，式（23）中的估计正确捕捉了 ε（L， N_h）随 N_h变化时的渐近性质。此外，精确 ε（L， N_h）曲线与对应于ˆ$B=\hat{}\sigma_1^x\hat{}\sigma_2^x$ 的估计曲线斜率完全相同，这意味着式（23）中的估计给出了渐近最优上界。这意味着，对于第二类截断误差（不等式（16））， 我们的估计中的常数前因子仍有改进空间，但无法从定性上进一步改进上界。相比之下，对于第一类截断误差（不等式（15））， 上界在定性方面和常数前因子方面都有改进空间。

C. 复杂度的标度

由于第 II A 节和第 IIB 节的结果在 L变化时仍然成立，因此我们可以研究 LRFD 受限玻尔兹曼机的空间复杂度随系统尺寸变化的标度。我们给出受限玻尔兹曼机表示复杂度的一个上界估计，该估计取决于函数 $P(x)$（式（21））和 $Q(x)$（式（22））在 $x=\infty$ 处的渐近行为，因此由˜ 所指定的衰减率决定；这些衰减率由 $\lambda(k)$ 和 $\mu(r)$ 给出。

将最小的 N_h 定义为使近似误差 ε_0 足够小的值：

$$N_h^*(L,\varepsilon_0)=\inf\{N_h:\varepsilon(L,N_h)\le\varepsilon_0\}. \tag{28}$$

利用引理3， $\varepsilon(L,\ N_h)\ \le\varepsilon_0$ 的充分条件是相应的截断误差上界不大于 ε_0。因此，这提供了一种求取 LRFD 受限玻尔兹曼机 $N_h^*(L,\ \varepsilon_0)$上界的方法。可以证明

$$N_h^*(L,\varepsilon_0)=\mathcal{O}(L\,p_d^{-1}(\frac{L\,q(L)}{f^{-1}(\varepsilon_0)}))\quad(\text{as } L\to\infty), \tag{29}$$

其中， $q(x)$、 $p_d(x)$ 和 $f(x)$ 是函数，用于指定上述定义的 $Q(x)$、 $P(x)$ 和 $F(x)$ 的渐近行为；上标“$^{-1}$”表示相应函数的反函数。这个上界估计通常渐近地更大，因此不受 $n_\Theta(L)L$ 的影响。

从式（29）中可以提取丰富的信息。首先，第一个因子 L 源于我们的假设，即 N_h 是系统尺寸 L 的整数倍；而前置于 $q(L)$ 的第二个因子 L则是利用波函数的平移对称性得到的。因此，这两个因子反映了系统尺寸的增长，其余因子则体现了不同 LRFD 受限玻尔兹曼机在复杂度上的差异。

˜其次，在我们的描述中刻画受限玻尔兹曼机非局域结构的 $P(N_h/L)$ 和 $Q(L)$（因此还有 $\mu(r)$ 和 $\lambda(k)$）对复杂度的影响在定性上有所不同。具体而言，在热力学极限下， $Q(L)$ 可以收敛到一个与 L 无关的有限常数；在 $\mu(r)$ 衰减足够快的情况下，对于局域性足够强的“轨道”，它不会影响复杂度。根据 $\mu(r)$ 的上界条件（公式（11））， $Q(L)$ 对 $N_h^*(L,\varepsilon_0)$ 的上界至多贡献一个二次因子。相比之下， $P(x)$ 的渐近性质会显著影响复杂度；如果 $\lambda(k)$ 衰减得足够慢，就可能导致受限玻尔兹曼机˜表示效率低下。这意味着自旋之间存在过多高阶关联，受限玻尔兹曼机无法捕获这些关联，因此，多项式数量的参数不足以将信息完全压缩为受限玻尔兹曼机形式。不过，只要 $p_d^{-1}(x)$ 对 x 至多呈幂律依赖，上述上界估计就意味着，在具有上述两类截断误差的情况下，复杂度关于系统尺寸 L 和 $1/\varepsilon_0$ 肯定至多呈多项式增长。此外，值得注意的是，我们的估计只给出了复杂度的上界，因此，上界的标度若快于多项式（例如表 I 中的 $S_2^{(7)}$ ），并不一定意味着这种表示效率低下。在这种情况下，上界可能并不紧，而实际复杂度至多呈多项式增长。

第三， $F(x)$ 在 $x=0$ 处的渐近行为也会影响复杂度的标度，并直接作用于 ε_0。我们已证明，对于上述两种类型的截断误差，相应的 $F(x)$（$F_1(x)$ 和 $F_2(x)$）在 $x=0$ 处均为解析的。对于可由函数 $F(LQ(L)P($ $N_h/L))$ 上界的常见类型截断误差，只要 $F(x)$ 在 F

表 I. 对 $\mu(r)$ 和 $\lambda(\tilde{k})$ 的不同典型情形的复杂度估计。在 $\mu(r)$ 列中，“–”表示使 $Q(L)$ 在 $L\to\infty$ 时收敛的所有 $\mu(r)$ 函数。在 $\lambda(\tilde{k})$ 列中，“–”表示使 $P(N_h/L)$ 在 $N_h\to\infty$ 时具有 $\mathcal{O}(1/\ln(N_h/L))$ 渐近行为的所有 $\lambda(\tilde{k})$ 函数。请注意，在这些情形中，$\delta_P>1$ 和 $\alpha_P>1/2$。

流形	$\mu(r)$	$Q(L)$	$\lambda(\tilde{k})$	$P(N_h/L)$	$N_h^*(L,\ \varepsilon)$
$S_2^{(1)}$	-	收敛	$\delta_P^{-\tilde{k}}$	$\mathcal{O}(\delta_P^{-2N_h/L}$)	$\mathcal{O}(L\ln(L/\varepsilon))$
$S_2^{(2)}$	-	收敛	$\tilde{k}^{-\alpha_P}$	$\mathcal{O}((N_h/L)^{1-2\alpha_P})$	$\mathcal{O}((L^{2\alpha_P}/\varepsilon)^{1/(2\alpha_P-1)})$
$S_2^{(3)}$	r^{-1} $(r\geq 1)$	$\mathcal{O}((\ln\ L)^2)$	$\delta_P^{-\tilde{k}}$	$\mathcal{O}(\delta_P^{-2N_h/L}$)	$\mathcal{O}(L\ln(L/\varepsilon))$
$S_2^{(4)}$	r^{-1} $(r\geq 1)$	$\mathcal{O}((\ln\ L)^2)$	$\tilde{k}^{-\alpha_P}$	$\mathcal{O}((N_h/L)^{1-2\alpha_P})$	$\mathcal{O}((L^{2\alpha_P}(\ln\ L)^2/\varepsilon)^{1/(2\alpha_P-1)})$
$S_2^{(5)}$	$\to\mu_\infty>0$ $(r\to\infty)$	$\mathcal{O}(L^2)$	$\delta_P^{-\tilde{k}}$	$\mathcal{O}(\delta_P^{-2N_h/L}$)	$\mathcal{O}(L\ln(L/\varepsilon))$
$S_2^{(6)}$	$\to\mu_\infty>0$ $(r\to\infty)$	$\mathcal{O}(L^2)$	$\tilde{k}^{-\alpha_P}$	$\mathcal{O}((N_h/L)^{1-2\alpha_P})$	$\mathcal{O}((L^{2\alpha_P+2}/\varepsilon)^{1/(2\alpha_P-1)})$
$S_2^{(7)}$	-	收敛	-	$\mathcal{O}(1/\ln(N_h/L))$	$\mathcal{O}(L\exp(L/\varepsilon))$

处解析，基于该函数的泰勒级数展开，() 就对 呈幂律依赖。

这一结果表明，各因素的影响彼此独立 $\mu(r)$˜和 $\lambda(k$。纠缠熵的标度是衡量量子˜多体态复杂度的重要指标，其受到 $\mu(r$的影响，而 $\lambda(k$则显著影响 LRFD RBM 表示的参数化空间复杂度。支持集 $\mu(r$的长度决定了受限玻尔兹曼机的“作用范围” r_0，直接影响子区域之间态的纠缠熵标度，但不会直接导致参数化复杂度出现超多项式因子。这一结果或许进一步提供了理论依据，说明受限玻尔兹曼机能够高效地表示纠缠熵标度快于面积律的态，其系统尺寸为 [31]。

我们将复杂度估算应用于表 I 中的若干典型设置，即 $\mu(r)$ 和 $\lambda(k)$。具有 $1\leq j\leq 6$ 的流形 $S_2^{(j)}$ 均对应于空间复杂度至多为关于 L 的多项式。我们还将这一分析应用于由一维 SPT 簇态并包含微扰部分构造的受限玻尔兹曼机。对于小系统尺寸，在固定 ε_0 的条件下，我们关于 $N_h^*(L,\varepsilon_0)$ 随 L 的标度的数值结果（图 2(d)）与表 I 中总结的理论分析一致。$N_h^*(L,\varepsilon_0)$ 关于 L 的分段线性关系，其斜率增长极其缓慢，这意味着其标度可能仅略快于线性，与我们根据参数设置得到的估算一致。分段线性是由于我们假设 N_h 是 L 的整数倍。因此它

对比值进行向上取整操作 N_h/L，当 L 在较小范围内变化时，该值不会改变。图2(d)中的插图显示，$N_h^U(L,\varepsilon_0)$ 是 $N_h^*(L,\varepsilon_0)$ 的上界，与我们的分析一致。$N_h^U(L,\varepsilon_0)$ 是通过使用不等式（15）右侧的精确值及其主阶估计得到的。两者几乎相同，且都随 L 呈幂律标度，如式（29）所示，这支持了我们的复杂度分析的有效性。

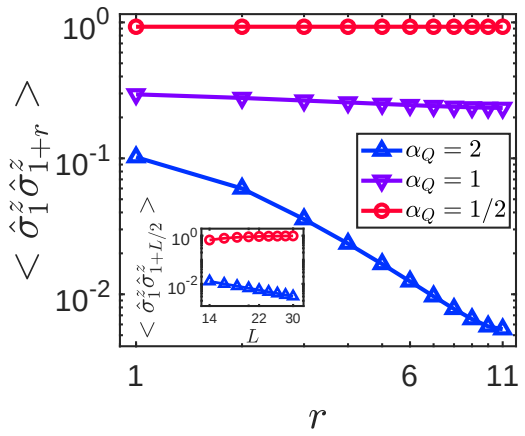

图 3. 双对数坐标下，自旋关联沿 z 方向随距离 r 的变化。LRFD 受限玻尔兹曼机按方程（24）–（26）所示构造，其中 $\mu(r)=\frac{1}{2}\delta_Q r^{-\alpha_Q}$ 对于$r\neq 0$，$\mu(0)=\delta_Q=0.2$，$\lambda(\tilde{k})=\tilde{k}^{-\alpha_P}$，$\alpha_P=3.5$，$c_w=1$，$c_b=0$ $a_0=0$ $L=22$ $N_h=5L$，以及。插图展示了自旋关联 $\langle\hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_{1+L/2}^z\rangle$ 随 L 变化的情况（双对数坐标），其中 r 为半链长度。结果表明，当 $\alpha_Q=1/2$ 时，$\langle\hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_{1+L/2}^z\rangle$ 收敛到一个与 L 无关的常数（几乎达到最大值 1）；而当 $\alpha_Q=2$ 时则会衰减。

D. 自旋关联信息

在本小节中，我们利用对非局域结构的描述，分析从 LRFD 受限玻尔兹曼机形式中可以提取出量子态物理性质的哪些信息。在这里，我们关注一个小参数区域，其中所有 $|a_j|$, $|b_k|$ 和 $|W_{j,k}|$ 均不大于 ε_1，且 $\varepsilon_1\ll 1/L$，$\varepsilon_1\ll 1/N_h$。在本小节中，我们不显式写出受限玻尔兹曼机参数的上标“$^{(L)}$”，并假设受限玻尔兹曼机仅具有有限个（N_h）隐节点。

根据附录 C中给出的证明，我们发现，对于具有 trans- 的 LRFD 受限玻尔兹曼机，距离为 z 的两个自旋之间沿 r 方向的未归一化关联

平移对称性是

$$C^z_{\text{unnorm}}(r) = \langle \Psi^{(L,N_h)} | \hat{\sigma}^z_1 \hat{\sigma}^z_{1+r} | \Psi^{(L,N_h)} \rangle \tag{30}$$

$$= 2\big(\operatorname{Re}(WW^T)\big)_{1,1+r} + 4\operatorname{Re}(a_1)\operatorname{Re}(a_{1+r}) + \mathcal{O}(\varepsilon_1^3) \quad (\text{as } \varepsilon_1 \to 0). \tag{31}$$

注意，上述结果是自旋关联中与 r相关的部分，而关联的实际值为 $C^z_{\text{unnorm}}(r)$ 除以一个与 r无关的归一化因子 $\langle \Psi^{(L,N_h)} | \Psi^{(L,N_h)} \rangle$。因此，对于按式（24）–（26）构造的受限玻尔兹曼机，为简单起见，令 $a_0 = 0$ 且 $c_w \in \mathbb{R}$，

$$C^z_{\text{unnorm}}(r) \approx 2|c_w|^2 \sum_{\tilde{k}=1}^{N_h/L} |\lambda(\tilde{k})|^2 \sum_{j_c=1}^{L} \mu(|1-j_c|_{\text{circ}})\mu(|1+r-j_c|_{\text{circ}}). \tag{32}$$

因此，如上所示，与 $\mu(r)$ 相关的因子描述了 z 方向上自旋关联随距离 $\tilde{}$ 变化的 r衰减率，$\lambda(k)$ 相关且独立于 r 的因子，在我们仅考虑式 (31) 中的主导阶项时，不会影响衰减率。

式 (31) 中的上述结果阐释了隐节点的作用。隐节点可以看作中间虚粒子，用于关联不同晶格格点上的自旋（物理粒子）。当受限玻尔兹曼机是短程的，由于不存在能够同时与相隔足够远的两个自旋具有非零连接性的虚粒子，项 $\big(\operatorname{Re}(WW^T)\big)_{1,1+r}$ 在 r 足够大时会趋于零。因此，需要更多中间隐节点来传递这种关联，这意味着我们需要考虑更高阶项。这进一步证明，长程受限玻尔兹曼机能够表示具有强量子关联的态。附录 C 表明，即使当 $\mu(r) \to 0$ 随 $r \to 0$ 增大时，我们仍能构造 LRF D 受限玻尔兹曼机，使得 z 方向上的自旋关联具有长程衰减，其下界为 $\Theta(1/r^{\alpha_Q})$（对于 $\mu(r) = \Theta(1/r^{\alpha_Q})$），其中 $\alpha_Q > 1$, $\Theta(\ln r/r)$（对于 $\mu(r) = \Theta(1/r)$），甚至可达到 $\Theta(1)$（对于 $\mu(r) = \Theta(1/r^{\alpha_Q})$ 且 $0 < \alpha_Q \leq \frac{1}{2}$）。数值计算展示了这三种自旋关联衰减率（图 3）。当 $\alpha_Q = 1/2$ 时，自旋关联 $\langle \hat{\sigma}^z_1 \hat{\sigma}^z_{1+r} \rangle$ 几乎达到最大值 1。相比之下，随着 r 增大，这些自旋关联在 $\alpha_Q = 1$ 和 $\alpha_Q = 2$ 下呈现出不同的长程衰减率。

III. 基态应用

基于 LRFD 受限玻尔兹曼机这一概念的提出及其空间复杂度的理论分析，自然可以进一步探索它们在学习与特定模型相关的量子态方面的应用。

首先，在附录 D 中，我们证明，所有自旋均沿 z 方向向上的态——它是一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统在单一磁场作用下的基态

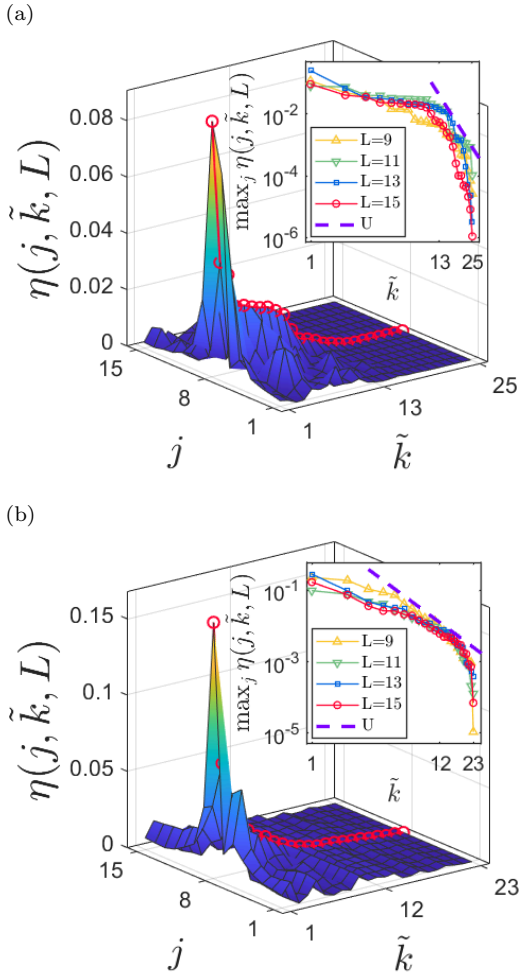

图 4. 对具有 $L = 15$ 的两个临界系统的基态进行近似的受限玻尔兹曼机的重要性度量 $\eta(j,\ \tilde{k},\ L)$。(a) $B_x = 1$ 的横场伊辛模型。(b) $J_z = -0.2$ 的 XXZ模型。各子图中的插图展示了随着层索引 k 增大，在双对数坐标下每一层的最大重要性度量 $\tilde{}$ 的衰减情况。系统尺寸 $L = 9$、11、13 和 15。紫色虚线表示这些衰减曲线可以由幂律衰减上界限定。通过数值拟合，(a) 和 (b) 插图中虚线对应的 α_P 分别为 2。957 和 1。232。

该磁场沿 z 方向，且基态具有克罗内克δ函数的形式；此态可以用 LRFD 受限玻尔兹曼机以任意精度近似。我们发现，即使固定全局相位（这意味着消除与全局规范变换相关的自由度），针对这样的目标态，受限玻尔兹曼机的构造也并非唯一；我们给出了一种构造。因此，我们展示了 LRFD 受限玻尔兹曼机在任意大系统尺寸下用于态表示的一个实例。

其次，我们尤其关注在其他态表示效率降低时受限玻尔兹曼机的表现。我们通过数值方法研究有限尺寸临界系统的基态表示；对于这类系统，矩阵乘积态表示的效率会降低——

效 [40, 49], 尽管矩阵乘积态在表示纠缠熵满足面积律的量子多体态方面已取得显著成功 [32, 44]。

为此，我们使用具有平移对称性的受限玻尔兹曼机，并采用结合随机重构优化的传统量子蒙特卡洛算法（这也是一种变分方法） [6, 50–52] 来学习两个典型量子模型的基态：一维横场伊辛模型（TFIM）（式（33））和 XXZ模型（式（34）），它们的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\sum_{j=1}^{L} \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - B_x \sum_{j=1}^{L} \hat{\sigma}_j^x, \tag{33}$$

and

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{L} (-\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x - \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y + J_z \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z) \tag{34}$$

分别采用周期性边界条件，其中B_x 表示横场的强度， J_z 表示 z 方向上的耦合强度。我们使用受限玻尔兹曼机学习横场伊辛模型的基态，其中$B_x = 1$ 这意味着该量子系统恰处于铁磁相与顺磁相之间的相变点 [53] ；此外，还学习参数为 $J_z = -0.2$ 的 XXZ模型基态，这意味着该系统处于无能隙无序XY相 [54]。这两个系统都是临界系统，其基态的纠缠熵随系统尺寸呈对数标度 [53, 55, 56]。受限玻尔兹曼机能够很好地学习这两个哈密顿量的基态（至少对于较小的系统尺寸而言），附录E中给出的自旋关联计算具有很高的精度，证明了这一点。图˜给出了 $\eta(j,k,L)$ 这两个受限玻尔兹曼机的重要性度量。4(a) 和4(b)。

数值结果表明，上述两个临界系统的两个基态的受限玻尔兹曼机表征形式与 LRFD 受限玻尔兹曼机非常相似。重要性度量 $\eta(j,k,L)$ 的整体三维结构与图1(b)所示的标准 LRFD 受限玻尔兹曼机相似。同一层级˜的隐节点权重参数高度局域化，并且随着层索引 k 增大，以及自旋位点指标 j 远离˜中心，迅速衰减。此外，对于不同系统尺寸的 $\eta(j,k,L)$，其“脊线”似乎可以由一条与 L 无关的幂律衰减曲线上界约束；据此，我们可以提取相应的 α_P ，以表征这些小系统尺寸波函数的层级衰减速率。如果随着 L 增大并趋于无穷，这些特征仍然成立，那么这些态将构成 LRFD 受限玻尔兹曼机，属于表 I 中的集合 $S_2^{(2)}$ 或 $S_2^{(6)}$ ，并且可以定义相应的$\lambda(k)$和 $\mu(r)$。

此外，上述结果呈现出一种在矩阵乘积态表示理论中也有所体现的特征。已有研究表明， [40], 尽管矩阵乘积态在表示临界系统的基态时效率会降低，但要达到近似误差 ε_0 ，所需的键维数仍可由一个关于系统尺寸 L 呈多项式标度的函数上界。矩阵乘积态的空间复杂度对L 的幂律依赖关系中的指数取决于中心荷 c; 在共形场论中，这一量大致刻画了“理论的自由度” [44]。c 越大，该估算中的指数就越高，这意味着矩阵乘积态表示的复杂度更高。虽然上述相变点处的横场伊辛模型有 $c = \frac{1}{2}$ ，而无序XY相中的XXZ模型有 $c = 1$ [57]，但我们的数值结果确实显示，XXZ模型拟合得到的 α_P 更小，这意味着与横场伊辛模型相比，XXZ模型具有更高的内在“复杂度”，因此需要更多参数来刻画这种复杂度。

IV. 态流形与复杂度分类

严格来说，对有限尺寸系统所得的数值结果只能为“这些态可能是 LRFD 受限玻尔兹曼机”这一观点提供证据，却无法证明这一点，因为受限玻尔兹曼机在趋近热力学极限的过程中会呈现何种性质，目前尚不清楚。鉴于受限玻尔兹曼机在数值模拟中表现出色，而且即使层级数为常数也往往能达到很高的精度（至少对于较小的系统尺寸而言），我们推测，广泛的一类量子系统的基态可能可以由 LRFD 受限玻尔兹曼机或其变体精确表示。这里，“变体”指的是对条件1和2中指定形式的推广，即纳入可自然融入我们复杂度分析的额外因子。例如，˜的 $\lambda(k)$ 和 $\mu(r)$ 函数形式，在我们对 LRFD 受限玻尔兹曼机的定义中与L无关，可以分别推广为˜ $\lambda(k,L)$ 和 $\mu(r,L)$，而其影响可通过我们的复杂度分析范式轻松评估。

我们总结了多个典型态流形之间的关系，以便更好地理解提出 LRFD 受限玻尔兹曼机这一概念的意义。态流形通常指由参数化波函数族 [45], 张成的整个希尔伯特空间的一个子空间 S_1， S_2因此 $S_2^{(j)}$ （对于 $1 \le j \le 6$， $j \in \mathbb{N}$）， S_3 它是包含特定范围量子态的集合。流形 S_4 以及5中所示S_5 由满足相应条件的受限玻尔兹曼机所表示的量子态张成的空间定义；而

这些流形的定义直接意味着$S_1 \subsetneq S_2^{(j)} \subsetneq S_2$ （对于 $1 \le j \le 6$）。我们对 LRFD 受限玻尔兹曼机的复杂度分析（第 IIC节）得出$S_2^{(j)} \subseteq$ （$S_2 \cap S_3$）这一结果。先前的研究表明，受限玻尔兹曼机似乎能够有效处理的一类问题与拓扑态相关，其中一维 SPT 簇态属于 $S_5 \cap S_1$ [30]。Laughlin 波函数

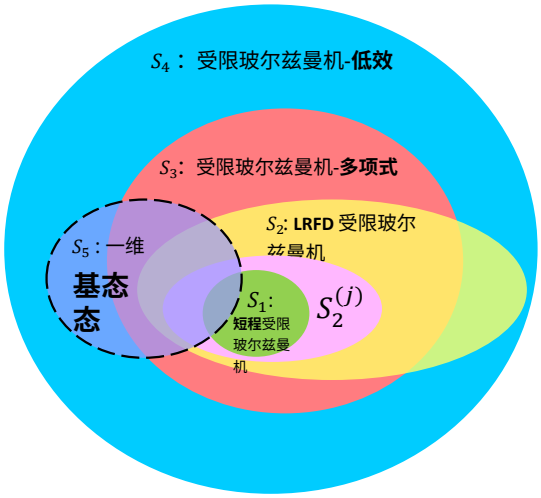

图5. 多种典型态流形之间的关系。 S_1：短程受限玻尔兹曼机；S_2：LRFD 受限玻尔兹曼机； $S_2^{(j)}$ （对于$1 \le j \le 6$， $j \in \mathbb{N}$）：具有不同参数条件的 LRFD 受限玻尔兹曼机，详见表I； S_3：空间复杂度随系统尺寸至多呈多项式标度的受限玻尔兹曼机；S_4：空间复杂度随系统尺寸呈超多项式标度的受限玻尔兹曼机，对应于表示效率低下； S_5：一维量子自旋系统的基态。虚线边界表示 S_5 与其他流形之间的关系尚未完全确定。

具有 Jastrow 波函数的结构，并与手性拓扑序相关，可由受限玻尔兹曼机在 S_3 中精确表示，其 N_h 关于 L 的缩放为二次；不过，通常会采用长程形式且复杂度较低的受限玻尔兹曼机对其进行近似 [8]。 S_4包含图5 中提到的所有其他集合，因为对隐节点数量不加限制的受限玻尔兹曼机是离散分布的通用近似器 [43]。数值结果似乎支持以下观点：“很大一部分” S_5 包含在其与 S_2的交集中。我们认为， S_2 这一概念或有助于理解 S_5 中有多大一部分属于其与 S_3的交集，从而也有助于理解量子多体态的复杂度。

值得注意的是，我们用于复杂度分析的范式以及对 RBM 在一维量子自旋系统中的非局域结构的刻画，可以推广到高维系统，例如晶格。具体做法是将单层“轨道”的描述从 $\mu(r)$推广到 $\mu(\vec{r})$，同时保留 $\lambda(k)$作为层级衰减因子。对于深度神经网络量子态，我们仍可以将每个单独的隐层视为多个层级的组合，用以捕获不同阶的关联。我们可以计算与特定节点函数相关的每个隐层的截断误差，并分析误差在各层间的传播。

V. 总结

在这项工作中，我们定义了一类通用 RBM 量子态的子集——长程快速衰减受限玻尔兹曼机态。借助层级这一概念，我们用两个函数描述 LRFD 受限玻尔兹曼机的非局域结构：其中一个函数 $\mu(r)$刻画每个单独层级中波函数空间分布的局域化，并编码自旋关联的信息；另一个函数$\lambda(k)$是层级衰减因子，用以捕获不同阶的关联，并显著影响受限玻尔兹曼机的复杂度。我们推导出截断误差的上界，据此分析 LRFD 受限玻尔兹曼机的空间复杂度随系统尺寸的标度，以及其近似误差。我们给出数值结果，支持这样一种观点：许多一维量子自旋系统（包括一些临界系统）的基态，都可以用多项式复杂度至多为多项式的 LRFD 受限玻尔兹曼机近似。最后，我们阐述不同计算复杂度的态流形之间的关系，并确定了 RBM 高效近似的层级结构。

将受限玻尔兹曼机波函数试探形式推广至无限隐藏节点状态，并提出 LRFD 受限玻尔兹曼机的概念，并不意味着要使用无限大的神经网络来表示态。这些概念用于定义一组变分态的完备性，并作为复杂度分析的工具；这得益于 LRFD 受限玻尔兹曼机形式良好的可扩展性和可分析性。这一概念或有助于普遍理解量子多体态的内在复杂度。

VI. 致谢

我们感谢 Fangli Liu 提供有益的讨论。本研究得到美国国家科学基金会联合量子研究所物理前沿中心的支持。作者感谢马里兰大学提供超级计算资源，以开展本文所报告的研究。CWC 感谢默顿学院和牛津大学原子与激光物理分系对本研究部分工作的支持。

附录 A：长程快速衰减受限玻尔兹曼机中 $|\Psi^{(L,\infty)}\rangle$ 收敛性的证明

在本节中，我们证明满足第 $|\Psi^{(L,\infty)}\rangle$（式（5））的收敛性。该式满足第 1 和2 节 IIA 中所给长程快速衰减（LRFD）受限玻尔兹曼机定义中的条件 IIA。

我们已定义 LRFD 受限玻尔兹曼机的波函数振幅 $\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})$，以及其对应的、保留前 N_h 个隐节点的截断受限玻尔兹曼机的振幅 $\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})$。

对于任意固定的 L 和任意 $\vec{\sigma}$，定义

$$A_n(\vec{\sigma}) = |\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})| \tag{A1}$$

and

$$\phi_n(\vec{\sigma}) = \arg(\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})) \tag{A2}$$

分别为 $\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})$ 的模和辐角，因为在本文中我们假设 N_h 始终是 L 的整数倍。于是

$$\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}) = A_n(\vec{\sigma})e^{i\phi_n(\vec{\sigma})}. \tag{A3}$$

在接下来的部分中，我们将证明序列 $\{\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}) : n \in \mathbb{N}\}$ 在度量 d 下是 $\mathbb{C}$ 中的柯西序列，其中 $d : \mathbb{C} \times \mathbb{C} \to \mathbb{R}$ 是两个复数之间通常使用的距离，定义为 $d(z_1, z_2) = |z_1 - z_2|$，其中 z_1、$z_2 \in \mathbb{C}$。

证明。如果存在某个有限的 $n' \in \mathbb{N}$ 使得 $\psi^{(L,n'L)}(\vec{\sigma}) = 0$，那么对于所有 $n \geq n'$，都有 $\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}) = 0$。因此，序列 $\{\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}) : n \in \mathbb{N}\}$ 必定是度量空间 $(\mathbb{C}, d)$ 中的柯西序列，因为它收敛到 0。所以接下来的部分我们只关注 $\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}) \neq 0$ 的情形，这意味着对于所有 $n \in \mathbb{N}$，都有 $A_n(\vec{\sigma}) \neq 0$。

定义有效角 $\sum_{j=1}^{L} \sigma_j W_{j,k}^{(L)}$ [6] $\theta_k \vec{\sigma} = b_k^{(L)} + ()$。。 $n > \tilde{k}_s$ $n \in \mathbb{N}$

那么，对于任意，，

$$A_n(\vec{\sigma}) = \Big| \prod_{j=1}^{L} e^{a_j^{(L)}\sigma_j} \prod_{k=1}^{nL} \cosh(b_k^{(L)} + \sum_{j=1}^{L} \sigma_j W_{j,k}^{(L)}) \Big| \tag{A4}$$

$$= \Big| \prod_{j=1}^{L} e^{a_j^{(L)}\sigma_j} \prod_{k=1}^{\tilde{k}_s L} \cosh(\theta_k(\vec{\sigma})) \Big| \Big| \prod_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} \cosh(\theta_k(\vec{\sigma})) \Big| \tag{A5}$$

$$= A_0 \Big| \prod_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} \cosh(\theta_k(\vec{\sigma})) \Big|, \tag{A6}$$

˜其中，含有 $1 \leq k \leq k_s L$的项所产生的贡献可归纳为一个 n无关的常数 $A_0 = \Big| \prod_{j=1}^{L} e^{a_j^{(L)}\sigma_j} \prod_{k=1}^{\tilde{k}_s L} \cosh(\theta_k(\vec{\sigma})) \Big|$，因为有界性条件（条件1 和2）仅适用于范围$k > k_s L$，该范围内的项将单独计算。

定义中间变量

$$u_k(\vec{\sigma}) = \mathrm{Re}(b_k^{(L)} + \sum_{j=1}^{L} \sigma_j W_{j,k}^{(L)}) \in \mathbb{R}, \tag{A7}$$

$$v_k(\vec{\sigma}) = \mathrm{Im}(b_k^{(L)} + \sum_{j=1}^{L} \sigma_j W_{j,k}^{(L)}) \in \mathbb{R}, \tag{A8}$$

$$U_k = \max_{\{\vec{\sigma}\}} \{|u_k(\vec{\sigma})|\} = |\,\mathrm{Re}(b_k^{(L)})| + \sum_{j=1}^{L} |\,\mathrm{Re}(W_{j,k}^{(L)})|, \tag{A9}$$

$$V_k = \max_{\{\vec{\sigma}\}} \{|v_k(\vec{\sigma})|\} = |\,\mathrm{Im}(b_k^{(L)})| + \sum_{j=1}^{L} |\,\mathrm{Im}(W_{j,k}^{(L)})|, \tag{A10}$$

其中，U_k 和 V_k 可视为与第 k 个隐节点相关的受限玻尔兹曼机参数的实部和虚部幅度的通用度量，而与自旋构型无关。然后

$$A_n(\vec{\sigma}) = A_0 \prod_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} \frac{1}{2}\sqrt{e^{2u_k(\vec{\sigma})} + e^{-2u_k(\vec{\sigma})} + 2\cos(2v_k(\vec{\sigma}))}. \tag{A11}$$

因此，我们可以将 $A_n(\vec{\sigma})$ 上界估计为

$$A_n(\vec{\sigma}) \leq A_0 \prod_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} \cosh(u_k(\vec{\sigma})) \tag{A12}$$

$$\leq A_0 \prod_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} \exp(\frac{1}{2}u_k^2(\vec{\sigma})) \tag{A13}$$

$$\leq A_0 \prod_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} \exp(\frac{1}{2}U_k^2) \tag{A14}$$

$$= A_0 \exp\Big(\frac{1}{2} \sum_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} (|\,\mathrm{Re}(b_k^{(L)})| + \sum_{j=1}^{L} |\,\mathrm{Re}(W_{j,k}^{(L)})|)^2\Big). \tag{A15}$$

利用条件1 和2，我们可以得到˜关于 $A_n(\vec{\sigma})$的上界，并将其表示为 $\lambda_R(k)$和 $\mu(r)$的形式，如下所示

$$A_n(\vec{\sigma}) \leq A_0 \exp\Big[\frac{1}{2} \sum_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} \Big(\lambda_R(\tilde{k}(k))\mu(0) + \sum_{j=1}^{L} \lambda_R(\tilde{k}(k))\mu(|j - j_c(k)|_{\mathrm{circ}})\Big)^2\Big] \tag{A16}$$

$$= A_0 \exp\Big[\frac{1}{2} \sum_{k=\tilde{k}_s L+1}^{nL} \Big(\lambda_R(\tilde{k}(k))\Big)^2 \times \Big(\mu(0) + \sum_{\triangle j=0,\pm1,\ldots,\pm\frac{L-1}{2}} \mu(|\triangle j|)\Big)^2\Big] \tag{A17}$$

$$= A_0 \exp\Big[2L \sum_{\tilde{k}=\tilde{k}_s+1}^{n} \lambda_R^2(\tilde{k}) \Big(\sum_{r=0}^{(L-1)/2} \mu(r)\Big)^2\Big]. \tag{A18}$$

注意，式（10）和不等式（11）作为对˜和 λ_R（k）以及 μ（r）的约束，可用于对上述表达式指数中的第一项和第二项求和进行上界估计。由于 $\sum_{\tilde{k}=\tilde{k}_s+1}^{n} \lambda_R^2 \tilde{k} \leq \sum_{\tilde{k}=\tilde{k}_s+1}^{\infty} \lambda_R^2 \tilde{k} \leq ()$ P_0 （），我们有

$$A_n(\vec{\sigma}) \leq M_0 := A_0 \exp\Big(2LQ(L)P_0\Big). \tag{A19}$$

因此，我们证明，对于任意固定的 $L > 0$，$A_n(\vec{\sigma})$ 对所有 $n > k_s$ 都有一个与 n 无关的上界常数 M_0，这是整体证明的第一步。

采用类似的数学技巧，并对 k 和 k 的取值范围进行修改，对于任意 $n > k_s$ 和 $m \in \mathbb{N}$，我们可以将 $|A_{n+m}(\vec{\sigma})/A_n(\vec{\sigma})|$ 的上界估计为

$$\left|\frac{A_{n+m}(\vec{\sigma})}{A_n(\vec{\sigma})}\right| = \prod_{k=nL+1}^{(n+m)L} \left|\cosh(\theta_k(\vec{\sigma}))\right| \tag{A20}$$

$$\leq \exp\left[2LQ(L)\sum_{\tilde{k}=n+1}^{n+m}\lambda_R^2(\tilde{k})\right]. \tag{A21}$$

我们还可以将 $|A_{n+m}(\vec{\sigma})/A_n(\vec{\sigma})|$ 下界为

$$\left|\frac{A_{n+m}(\vec{\sigma})}{A_n(\vec{\sigma})}\right| = \prod_{k=nL+1}^{(n+m)L}\frac{1}{2}\sqrt{e^{2u_k(\vec{\sigma})}+e^{-2u_k(\vec{\sigma})}+2\cos(2v_k(\vec{\sigma}))} \tag{A22}$$

$$\geq \prod_{k=nL+1}^{(n+m)L}\frac{1}{2}\sqrt{2+2\cos(2v_k(\vec{\sigma}))} \tag{A23}$$

$$= \prod_{k=nL+1}^{(n+m)L}\left|\cos(|v_k(\vec{\sigma})|)\right|. \tag{A24}$$

由于

$$V_k \leq 2\lambda_I(\tilde{k}(k))\sum_{r=0}^{(L-1)/2}\mu(r), \tag{A25}$$

且 $\lambda_I(k(k)) \to 0$ 当 $k \to \infty$ 时，我们知道 $V_k \to 0$ 当 $k \to \infty$ 时。定义 $n_I = n_I(L) = \min\{n \geq k_s, n \in \mathbb{N}: \forall k \geq n_I L+1, V_k \leq \pi/3\}$。利用如下事实：对于所有 $x \in [0, \pi/3]$，当 $n \geq n_I$ 时，$|\cos(x)| \geq \exp(-\beta_1^2 x^2/2)$，其中 $\beta_1 = 3\sqrt{2\ln 2/\pi}$，

$$\left|\frac{A_{n+m}(\vec{\sigma})}{A_n(\vec{\sigma})}\right| \geq \prod_{k=nL+1}^{(n+m)L}|\cos(V_k)| \tag{A26}$$

$$\geq \exp(-\frac{1}{2}\beta_1^2\sum_{k=nL+1}^{(n+m)L}V_k^2) \tag{A27}$$

$$\geq \exp\left[-2\beta_1^2 LQ(L)\sum_{\tilde{k}=n+1}^{n+m}\lambda_I^2(\tilde{k})\right]. \tag{A28}$$

事实上，当 $x \to 0$ 时，$\cos(x)$ 收敛到 $\exp(-x^2/2)$，并引入一个略大于 1 的常数 β_1，以确保不等式成立，同时捕捉主导阶的渐近性质。

由于 $P(\tilde{k}_s)$ 收敛到常数 $P_0/(1+\beta_1^2)$，且所有项均非负，因此当 $m' \to \infty$ 时，我们有 $P(m') \to 0$。所以，当 $m' \to \infty$ 时，$\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty}\lambda_R^2(\tilde{k})$ 和 $\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty}\lambda_I^2(\tilde{k})$ 也趋于 0。

因此，对于任意充分小的 $\varepsilon > 0$，都存在 $n_1 \geq n_I \geq k_s$ 使得，对于所有 $m' > n_1$，

$$\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty}\lambda_R^2(\tilde{k}) < \ln(1+\varepsilon/M_0)/(2LQ(L)), \tag{A29}$$

$$\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty}\lambda_I^2(\tilde{k}) < \ln(1/(1-\varepsilon/M_0))/(2\beta_1^2 LQ(L)). \tag{A30}$$

那么，对于所有的 $n > n_1$ 和 $m \in \mathbb{N}$，

$$\left|\frac{A_{n+m}(\vec{\sigma})}{A_n(\vec{\sigma})}\right| \leq \exp\left[2LQ(L)\sum_{\tilde{k}=n+1}^{\infty}\lambda_R^2(\tilde{k})\right] \tag{A31}$$

$$< 1+\varepsilon/M_0, \tag{A32}$$

$$\left|\frac{A_{n+m}(\vec{\sigma})}{A_n(\vec{\sigma})}\right| \geq \exp\left[-2\beta_1^2 LQ(L)\sum_{\tilde{k}=n+1}^{\infty}\lambda_I^2(\tilde{k})\right] \tag{A33}$$

$$> 1-\varepsilon/M_0, \tag{A34}$$

这意味着

$$|A_{n+m}(\vec{\sigma})/A_n(\vec{\sigma}) - 1| < \varepsilon/M_0. \tag{A35}$$

因此，结合不等式（A19）和（A35），

$$|A_{n+m}(\vec{\sigma}) - A_n(\vec{\sigma})| = A_n(\vec{\sigma})\left|\frac{A_{n+m}(\vec{\sigma})}{A_n(\vec{\sigma})} - 1\right| \tag{A36}$$

$$< M_0\frac{\varepsilon}{M_0} = \varepsilon. \tag{A37}$$

由此可证明，模序列 $\{A_n(\vec{\sigma}): n \in \mathbb{N}\}$ 在 $\mathbb{R}$ 中是柯西序列。因此，$A_n(\vec{\sigma})$ 必收敛到某个非负常数 $A_\infty(\vec{\sigma}) \in \mathbb{R}$，当 $n \to \infty$ 时。

接下来，我们分析辐角序列 $\{\phi_n(\vec{\sigma}): n \in \mathbb{N}\}$。对于 $n > k_s$ 和 $m \in \mathbb{N}$，我们有

$$|\phi_{n+m}(\vec{\sigma}) - \phi_n(\vec{\sigma})| = \left|\arg\left(\frac{\psi^{(L,(n+m)L)}(\vec{\sigma})}{\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})}\right)\right| \tag{A38}$$

$$= \left|\arg\left(\prod_{k=nL+1}^{(n+m)L}\cosh(u_k(\vec{\sigma}))\cos v_k(\vec{\sigma}) + i\sinh(u_k(\vec{\sigma}))\sin v_k(\vec{\sigma})\right)\right|. \tag{A39}$$

对于 $n \geq n_I > k_s$，$|v_k(\vec{\sigma})| \leq V_k \leq \pi/3$，因此 $\cosh(u_k(\vec{\sigma}))\cos v_k(\vec{\sigma}) > 0$，这意味着每一项的自变量都在范围 $(-\pi/2, \pi/2)$ 内。因此我们有

$$|\phi_{n+m}(\vec{\sigma}) - \phi_n(\vec{\sigma})| = \left|\sum_{k=nL+1}^{(n+m)L}\arctan\left(\tanh(u_k(\vec{\sigma}))\tan(v_k(\vec{\sigma}))\right)\right| \tag{A40}$$

$$\leq \sum_{k=nL+1}^{(n+m)L}\arctan\left(\tanh(|u_k(\vec{\sigma})|)\tan(|v_k(\vec{\sigma})|)\right). \tag{A41}$$

利用

$$\arctan(\tanh(x)\tan(y)) \le \beta_2 \tanh(x) y \le \beta_2 xy \tag{A42}$$

对于所有的 $x \geqslant 0$ 和 $0 \le y \le \pi/3$，有 $\beta_2 = 3\sqrt{3}/\pi$，我们可以得到

$$\begin{aligned}
&|\phi_{n+m}(\vec{\sigma}) - \phi_n(\vec{\sigma})| \\
&\le \beta_2 \sum_{k=nL+1}^{(n+m)L} |u_k(\vec{\sigma})||v_k(\vec{\sigma})| && \text{(A43)} \\
&\le \beta_2 \sum_{k=nL+1}^{(n+m)L} U_k V_k && \text{(A44)} \\
&= \beta_2 \sum_{k=nL+1}^{(n+m)L} \Big(|\operatorname{Re}(b_k^{(L)})| + \sum_{j=1}^{L} |\operatorname{Re}(W_{j,k}^{(L)})| \Big) \\
&\quad \times \Big(|\operatorname{Im}(b_k^{(L)})| + \sum_{j=1}^{L} |\operatorname{Im}(W_{j,k}^{(L)})| \Big) && \text{(A45)} \\
&\le \beta_2 \Big[4L \sum_{\tilde{k}=n+1}^{n+m} \lambda_R(\tilde{k}) \lambda_I(\tilde{k}) \Big(\sum_{r=0}^{(L-1)/2} \mu(r) \Big)^2 \Big] && \text{(A46)} \\
&= 4\beta_2 LQ(L) \sum_{\tilde{k}=n+1}^{n+m} \lambda_R(\tilde{k}) \lambda_I(\tilde{k}). && \text{(A47)}
\end{aligned}$$

同样，由于当 $m' \to \infty$ 时，$\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty} \lambda_R^2(\tilde{k})$ 和 $\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty} \lambda_I^2(\tilde{k})$ 都趋于 0，因此 $\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty} \lambda_R(\tilde{k})\lambda_I(\tilde{k}) \le \frac{1}{2}\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty}(\lambda_R^2(\tilde{k})+\lambda_I^2(\tilde{k}))$ 也会在 $m' \to \infty$ 时趋于 0。因此，对于任意充分小的 $\varepsilon > 0$，存在 $n_2 \ge n_I \ge k_s$，使得对所有 $m' > n_2$,

$$\sum_{\tilde{k}=m'+1}^{\infty} \lambda_R(\tilde{k})\lambda_I(\tilde{k}) < \varepsilon/(4\beta_2 LQ(L)). \tag{A48}$$

那么，对于所有的 $n > n_2$ 和 $m \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned}
&|\phi_{n+m}(\vec{\sigma}) - \phi_n(\vec{\sigma})| \\
&< 4\beta_2 LQ(L) \frac{\varepsilon}{4\beta_2 LQ(L)} = \varepsilon. && \text{(A49)}
\end{aligned}$$

因此，我们证明了辐角序列 $\{\phi_n(\vec{\sigma}) : n \in \mathbb{N}\}$ 是实数集 $\mathbb{R}$中的柯西序列。因此，$\phi_n(\vec{\sigma})$必定收敛到某个常数 $\phi_\infty(\vec{\sigma}) \in \mathbb{R}$，当 $n \to \infty$时。

结合上述两个结论可得，对于任意充分小的 $\varepsilon > 0$，存在 $n_3 \ge n_I \ge$，使得对于所有 $n > n_3$ 和 $m \in \mathbb{N}$，$|A_{n+m}(\vec{\sigma}) - A_n(\vec{\sigma})| < \varepsilon/\sqrt{2}$ 且 $|\phi_{n+m}(\vec{\sigma}) - \phi_n(\vec{\sigma})| < \arccos(1 - \frac{\varepsilon^2}{4M_0^2})$。因此

$$\begin{aligned}
&\left| \psi^{(L,(n+m)L)}(\vec{\sigma}) - \psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}) \right| \\
&= \Big[(A_{n+m}(\vec{\sigma}) - A_n(\vec{\sigma}))^2 \\
&\quad + 2A_{n+m}(\vec{\sigma}) A_n(\vec{\sigma}) \Big(1 - \cos(\phi_{n+m}(\vec{\sigma}) - \phi_n(\vec{\sigma})) \Big) \Big]^{1/2} && \text{(A50)} \\
&< \Big[\frac{1}{2}\varepsilon^2 + 2M_0^2 \frac{\varepsilon^2}{4M_0^2} \Big]^{1/2} = \varepsilon. && \text{(A51)}
\end{aligned}$$

由此，我们证明序列 $\{\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma}) : n \in \mathbb{N}\}$ 是度量空间 $(\mathbb{C}, d)$ 中的柯西序列，并且 $\psi^{(L,nL)}(\vec{\sigma})$ 实际上收敛于常数 $A_\infty(\vec{\sigma})e^{i\phi_\infty(\vec{\sigma})} \in \mathbb{C}$，当 $n \to \infty$ 时。

□

附录 B：LRFD 受限玻尔兹曼机截断误差上界的证明

本节将证明第 IIB 节中给出的 LRFD 受限玻尔兹曼机两类截断误差的上界（引理 3）。

第一类截断误差的证明如下。

证明。

$$\begin{aligned}
&\| |\tilde{\Psi}^{(L,\infty)}\rangle - |\tilde{\Psi}^{(L,N_h)}\rangle \|^2 \\
&= 2 - (\langle \tilde{\Psi}^{(L,\infty)} | \tilde{\Psi}^{(L,N_h)} \rangle + \text{c.c.}) && \text{(B1)} \\
&= 2 - \frac{(\langle \Psi^{(L,\infty)} | \Psi^{(L,N_h)} \rangle + \text{c.c.})}{\sqrt{\langle \Psi^{(L,\infty)} | \Psi^{(L,\infty)} \rangle \langle \Psi^{(L,N_h)} | \Psi^{(L,N_h)} \rangle}} && \text{(B2)} \\
&= 2 - \frac{2\sum_{\vec{\sigma}} |\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2 \operatorname{Re}\left(\frac{\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})}{\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})} \right)}{\sqrt{\sum_{\vec{\sigma}} |\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})|^2 \sum_{\vec{\sigma}} |\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2}}. && \text{(B3)}
\end{aligned}$$

定义

$$\Theta = \Theta(L, N_h) = \max_{\vec{\sigma}} \Big\{ \Big| \arg\left(\frac{\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})}{\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})} \right) \Big| \Big\} \tag{B4}$$

为比值因子 $\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})/\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})$ 的最大辐角。对于 $N_h/L \ge n_I(L) > \tilde{k}_s$,

$$\begin{aligned}
&\left| \arg\left(\frac{\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})}{\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})} \right) \right| \\
&\le 4\beta_2 LQ(L) \sum_{\tilde{k}=N_h/L+1}^{\infty} \lambda_R(\tilde{k})\lambda_I(\tilde{k}). && \text{(B5)}
\end{aligned}$$

因此，

$$\Theta \le 4\beta_2 LQ(L) \sum_{\tilde{k}=N_h/L+1}^{\infty} \lambda_R(\tilde{k})\lambda_I(\tilde{k}). \tag{B6}$$

定义

$$R_1 = R_1(L, N_h) = \max_{\vec{\sigma}} \left\{ \left| \frac{\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})}{\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})} \right|^2 \right\} \tag{B7}$$

and

$$R_2 = R_2(L, N_h) = \min_{\vec{\sigma}} \left\{ \left| \frac{\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})}{\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})} \right|^2 \right\} \tag{B8}$$

分别为比值因子平方的最大模和最小模。我们有

$$R_1 \le \exp\Big[4LQ(L) \sum_{\tilde{k}=N_h/L+1}^{\infty} \lambda_R^2(\tilde{k}) \Big], \tag{B9}$$

$$R_2 \ge \exp\Big[-4\beta_1^2 LQ(L) \sum_{\tilde{k}=N_h/L+1}^{\infty} \lambda_I^2(\tilde{k}) \Big]. \tag{B10}$$

˜我们知道，存在 $n_\Theta(L) > n_I(L) > k_s$ 使得，对于所有 $N_h > n_\Theta(L)L$,

$$4\beta_2 LQ(L)\sum_{\tilde{k}=N_h/L+1}^{\infty}\lambda_R(\tilde{k})\lambda_I(\tilde{k}) \le \frac{\pi}{4}, \tag{B11}$$

这意味着 $\Theta \le \pi/4$。考虑

$$\mathrm{Re}\left(\frac{\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})}{\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})}\right) \ge \sqrt{R_2}\cos(\Theta), \tag{B12}$$

$$\sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})|^2 \le R_1\sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2. \tag{B13}$$

我们可以得到

$$\begin{aligned}
&\||\tilde{\Psi}^{(L,\infty)}\rangle - |\tilde{\Psi}^{(L,N_h)}\rangle\|^2 \\
&\le 2 - \frac{2\sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2\sqrt{R_2}\cos(\Theta)}{\sqrt{R_1\Big(\sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2\Big)^2}} && \text{(B14)}\\
&= 2 - 2\sqrt{\frac{R_2}{R_1}}\cos(\Theta) && \text{(B15)}\\
&\le 2 - 2\exp\Big[-2LQ(L)\sum_{\tilde{k}=N_h/L+1}^{\infty}\Big(\lambda_R^2(\tilde{k}) + \beta_1^2\lambda_I^2(\tilde{k})\Big)\Big] \\
&\quad\times\cos\Big[4\beta_2 LQ(L)\sum_{\tilde{k}=N_h/L+1}^{\infty}\lambda_R(\tilde{k})\lambda_I(\tilde{k})\Big]. && \text{(B16)}
\end{aligned}$$

˜ ˜ ˜为简单起见，我们假设 $\lambda_R(k) = \lambda_I(k) = \lambda(k)$，这意味着受限玻尔兹曼机参数的实部和虚部具有相同的衰减率，并且

$$P(N_h/L) = \sum_{\tilde{k}=N_h/L+1}^{\infty}\lambda^2(\tilde{k}). \tag{B17}$$

Then

$$\begin{aligned}
&\||\tilde{\Psi}^{(L,\infty)}\rangle - |\tilde{\Psi}^{(L,N_h)}\rangle\|^2 \\
&\le 2 - 2\exp\Big[-2(1+\beta_1^2)LQ(L)P(N_h/L)\Big] \\
&\quad\times\cos\Big[4\beta_2 LQ(L)P(N_h/L)\Big] && \text{(B18)}\\
&= F_1\Big(LQ(L)P(N_h/L)\Big), && \text{(B19)}
\end{aligned}$$

其中 $F_1(x)$ 在式（17）中定义。

证明思路如图 2(c) 所示，其中 $\psi_{\mathrm{full}}(\vec{\sigma})$ 表示完整 LRFD 受限玻尔兹曼机 $\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})$ 的振幅，而 $\psi_{\mathrm{tr}}(\vec{\sigma})$ 表示截断受限玻尔兹曼机 $\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})$ 的振幅。 □

第二类截断误差的证明如下。

我们定义为一个矩阵算符 $\bigotimes_{j=1}^{L}\hat{\sigma}_j^{(m_j)}$，其中 $\bigotimes$ 是张量积符号，$m_j \in \{0,1,2,3\}$，$\hat{\sigma}_j^{(0)} = I_{2\times 2}$ 是单位矩阵，而{$\hat{\sigma}_j^{(1)}$，$\hat{\sigma}_j^{(2)}$，$\hat{\sigma}_j^{(3)}$} 表示泡利矩阵。

证明。

$$\begin{aligned}
&|\langle\hat{B}\rangle^{(L,\infty)} - \langle\hat{B}\rangle^{(L,N_h)}| \\
&= \Big|\frac{\langle\Psi^{(L,\infty)}|\hat{B}|\Psi^{(L,\infty)}\rangle}{\langle\Psi^{(L,\infty)}|\Psi^{(L,\infty)}\rangle} - \frac{\langle\Psi^{(L,N_h)}|\hat{B}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle}{\langle\Psi^{(L,N_h)}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle}\Big| && \text{(B20)}\\
&\le \Big|\frac{\langle\Psi^{(L,\infty)}|\hat{B}|\Psi^{(L,\infty)}\rangle}{\langle\Psi^{(L,\infty)}|\Psi^{(L,\infty)}\rangle} - \frac{\langle\Psi^{(L,\infty)}|\hat{B}|\Psi^{(L,\infty)}\rangle}{\langle\Psi^{(L,N_h)}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle}\Big| \\
&\quad + \Big|\frac{\langle\Psi^{(L,\infty)}|\hat{B}|\Psi^{(L,\infty)}\rangle}{\langle\Psi^{(L,N_h)}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle} - \frac{\langle\Psi^{(L,N_h)}|\hat{B}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle}{\langle\Psi^{(L,N_h)}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle}\Big| && \text{(B21)}\\
&= G_1 + G_2, && \text{(B22)}
\end{aligned}$$

其中

$$G_1 = \Big|\frac{\langle\Psi^{(L,\infty)}|\Psi^{(L,\infty)}\rangle}{\langle\Psi^{(L,N_h)}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle} - 1\Big|\Big|\langle\hat{B}\rangle^{(L,\infty)}\Big| \tag{B23}$$

and

$$\begin{aligned}
G_2 &= \Big|\langle\Psi^{(L,\infty)}|\hat{B}|\Psi^{(L,\infty)}\rangle - \langle\Psi^{(L,N_h)}|\hat{B}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle\Big| \\
&\quad\times(\langle\Psi^{(L,N_h)}|\Psi^{(L,N_h)}\rangle)^{-1} && \text{(B24)}\\
&= \sum_{\vec{\sigma}_1}\sum_{\vec{\sigma}_2}\Big|B_{\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2}\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_1)^*\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_2) \\
&\quad\times\Big(\frac{\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_1)^*\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_2)}{\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_1)^*\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_2)} - 1\Big)\Big| \\
&\quad\times\Big(\sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2\Big)^{-1} && \text{(B25)}
\end{aligned}$$

分别表示归一化因子和未归一化期望值的偏差对近似误差的贡献，其中 $B_{\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2} = \langle\vec{\sigma}_1|\hat{B}|\vec{\sigma}_2\rangle$。

考虑 $R_2 \le \sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})|^2/\sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2 \le R_1$ 和 $|\langle\hat{B}\rangle^{(L,\infty)}| \le 1$，我们可以得到

$$G_1 \le \max\{|R_1 - 1|, |1 - R_2|\}. \tag{B26}$$

定义

$$\xi = \max_{(\vec{\sigma}_1,\vec{\sigma}_2)}\Big|\frac{\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_1)^*\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_2)}{\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_1)^*\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_2)} - 1\Big|. \tag{B27}$$

Then

$$\begin{aligned}
G_2 &\le \xi\sum_{\vec{\sigma}_1}\sum_{\vec{\sigma}_2}\Big|B_{\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2}\Big|\Big|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_1)^*\Big|\Big|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_2)\Big| \\
&\quad\times\Big(\sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2\Big)^{-1} && \text{(B28)}\\
&= \xi\sum_{\vec{\sigma}_2}\Big|\psi^{(L,N_h)}(\hat{B}(\vec{\sigma}_2))^*\Big|\Big|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_2)\Big| \\
&\quad\times\Big(\sum_{\vec{\sigma}}|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2\Big)^{-1}, && \text{(B29)}
\end{aligned}$$

其中，$\hat{B}(\vec{\sigma}_2)$ 是唯一使 $B_{\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2} \neq 0$ 对特定 $\vec{\sigma}_2$ 成立的自旋构型。利用柯西-施瓦茨不等式，

$$\sum_{\vec{\sigma}_2} \left|\psi^{(L,N_h)}(\hat{B}(\vec{\sigma}_2))^*\right|\left|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_2)\right|$$
$$\leq \Big(\sum_{\vec{\sigma}_2} \left|\psi^{(L,N_h)}(\hat{B}(\vec{\sigma}_2))^*\right|^2 \sum_{\vec{\sigma}_2} \left|\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma}_2)\right|^2\Big)^{1/2} \quad \text{(B30)}$$
$$= \sum_{\vec{\sigma}} |\psi^{(L,N_h)}(\vec{\sigma})|^2. \quad \text{(B31)}$$

因此，结合几何特征，我们可以得到

$$G_2 \leq \xi \quad \text{(B32)}$$
$$\leq \max\Big\{\sqrt{(R_1\cos(2\Theta)-1)^2+R_1^2\sin^2(2\Theta)},$$
$$\sqrt{(R_2\cos(2\Theta)-1)^2+R_2^2\sin^2(2\Theta)},$$
$$|R_1-1|,|1-R_2|\Big\} \quad \text{(B33)}$$
$$= \max\Big\{\sqrt{R_1^2-2R_1\cos(2\Theta)+1},$$
$$\sqrt{R_2^2-2R_2\cos(2\Theta)+1}\Big\}. \quad \text{(B34)}$$

因此，

$$|\langle\hat{B}\rangle^{(L,\infty)} - \langle\hat{B}\rangle^{(L,N_h)}|$$
$$\leq \max\{|R_1-1|,|1-R_2|\}$$
$$+\max\Big\{\sqrt{R_1^2-2R_1\cos(2\Theta)+1},$$
$$\sqrt{R_2^2-2R_2\cos(2\Theta)+1}\Big\} \quad \text{(B35)}$$
$$\leq F_2\Big(LQ(L)P(N_h/L)\Big), \quad \text{(B36)}$$

其中 $F_2(x)$ 定义于公式（19）中。

□

附录 C：自旋关联公式的证明

本节将证明第 IID 节中的相关自旋关联公式。

证明。我们假设所有受限玻尔兹曼机参数 a_j's、b_k's 和 $W_{j,k}$'s 均不大于 ε_1，且 $\varepsilon_1 \ll 1/L$, $\varepsilon_1 \ll 1/N_h$。本节中，我们不显式写出上标"$^{(L,N_h)}$"，并假设受限玻尔兹曼机只有有限个（N_h）隐节点。于是，在小参数区域内，我们可以得到 $|\psi(\vec{\sigma})|^2$ 关于 $a_j = b_k = W_{j,k} = 0$ 的泰勒级数展开：

$$|\psi(\vec{\sigma})|^2 = \exp(\sum_{j=1}^{L} 2\,\mathrm{Re}(a_j)\sigma_j)\prod_{k=1}^{N_h}|\cosh(\theta_k)|^2 \quad \text{(C1)}$$
$$= F^{(0)} + \sum_{j_1\in\{1,2,\ldots,L\}} F_{j_1}^{(1)}\sigma_{j_1} + \ldots \quad \text{(C2)}$$
$$= \sum_{n=0}^{L}\sum_{1\leq j_1<\cdots<j_n\leq L} F_{j_1,\ldots,j_n}^{(n)}\prod_{j=j_1}^{j_n}\sigma_j, \quad \text{(C3)}$$

其中 $F_{j_1\ldots,j_n}^{(n)}$ 是与自旋数组 $\prod_{j=j_1}^{j_n}\sigma_j$ 对应的系数，它仅取决于受限玻尔兹曼机参数，并且已使用收缩 $\sigma_j^2 = 1$。

于是，自旋 1 与纵向（z）方向上的自旋 $1+r$ 之间的未归一化自旋关联为

$$C_{\mathrm{unnorm}}^{z}(r)$$
$$= \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_L=\pm1}\sigma_1\sigma_{1+r}|\psi(\vec{\sigma})|^2 \quad \text{(C4)}$$
$$= \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_L=\pm1}\sigma_1\sigma_{1+r}$$
$$\times\sum_{n=0}^{L}\sum_{1\leq j_1<\cdots<j_n\leq L} F_{j_1,\ldots,j_n}^{(n)}\prod_{j=j_1}^{j_n}\sigma_j. \quad \text{(C5)}$$

通过对每一项应用泰勒级数展开，我们可以得到

$$\exp(\sum_{j=1}^{L}2\,\mathrm{Re}(a_j)\sigma_j)$$
$$= \Big(1+2\sum_{j=1}^{L}\mathrm{Re}(a_j)^2\Big) + 2\sum_{j=1}^{L}\mathrm{Re}(a_j)\sigma_j$$
$$+2\sum_{j_1=1}^{L}\sum_{1\leq j_2\leq L, j_2\neq j_1}\mathrm{Re}(a_{j_1})\,\mathrm{Re}(a_{j_2})\sigma_{j_1}\sigma_{j_2}$$
$$+\mathcal{O}(\varepsilon_1^3) \quad (\text{as } \varepsilon_1\to 0), \quad \text{(C6)}$$

$$\theta_k^2 = (b_k^2 + \sum_{j=1}^{L}W_{j,k}^2) + 2b_k\sum_{j=1}^{L}W_{j,k}\sigma_j$$
$$+\sum_{j_1=1}^{L}\sum_{1\leq j_2\leq L, j_2\neq j_1}W_{j_1,k}W_{j_2,k}\sigma_{j_1}\sigma_{j_2}, \quad \text{(C7)}$$

然后

$$|\cosh(\theta_k)|^2$$
$$= 1+\frac{1}{2}\theta_k^2+\frac{1}{2}(\theta_k^*)^2+\mathcal{O}(\varepsilon_1^4) \quad \text{(C8)}$$
$$= \Big[1+\mathrm{Re}(b_k^2+\sum_{j=1}^{L}W_{j,k}^2)\Big] + 2\,\mathrm{Re}(b_k\sum_{j=1}^{L}W_{j,k})\sigma_j$$
$$+\mathrm{Re}(\sum_{j_1=1}^{L}\sum_{1\leq j_2\leq L, j_2\neq j_1}W_{j_1,k}W_{j_2,k})\sigma_{j_1}\sigma_{j_2}$$
$$+\mathcal{O}(\varepsilon_1^4) \quad (\text{as } \varepsilon_1\to 0). \quad \text{(C9)}$$

只有与 $F_1^{(1)}{}_{,1+r}$ 相关的项在对所有 $\sigma_j = \pm 1$ 求和时不会消失，因为其对应的 $\prod_{j=j_1}^{j_n}\sigma_j$ 恰好抵消了 $\sigma_1\sigma_{1+r}$。因此，

$$C_{\mathrm{unnorm}}^{z}(r) = F_{1,1+r}^{(1)} \quad \text{(C10)}$$
$$= 2\big(\mathrm{Re}(WW^T)\big)_{1,1+r} + 4\,\mathrm{Re}(a_1)\,\mathrm{Re}(a_{1+r})$$
$$+\mathcal{O}(\varepsilon_1^3) \quad (\text{as } \varepsilon_1\to 0). \quad \text{(C11)}$$

因此，对于按方程（24）–（26）构造的受限玻尔兹曼机，取$a_0 = 0$ 和 $c_w \in \mathbb{R}$ 以简化表达，

$$C^z_{\text{unnorm}}(r) \approx 2(WW^T)_{1,1+r} \tag{C12}$$

$$= 2|c_w|^2 \sum_{\tilde{k}=1}^{N_h/L} |\lambda(\tilde{k})|^2 \sum_{j_c=1}^{L} \mu(|1-j_c|_{\text{circ}})\mu(|1+r-j_c|_{\text{circ}}). \tag{C13}$$

根据 $|\dots|_{\text{circ}}$ 的定义，并假设 L 为偶数（这不会影响渐近分析），$C^z_{\text{unnorm}}(r)$ 中与 r 相关的部分为

$$G^z(r) = \sum_{j_c=1}^{L} \mu(|1-j_c|_{\text{circ}})\mu(|1+r-j_c|_{\text{circ}}) \tag{C14}$$

$$= \sum_{j_c=1}^{r-1} \mu(j_c)\mu(r-j_c) + \sum_{j_c=L/2+1-r}^{L/2-1} \mu(j_c)\mu(L-r-j_c) + 2\sum_{j_c=r+1}^{L/2} \mu(j_c)\mu(j_c-r) + 2\mu(0)\mu(r). \tag{C15}$$

考虑环形几何中上述求和里各项随 j_c 变化的情况（该几何对应周期性边界条件），可知，当 $r \to L/2$ 时，前两个求和项的贡献主导 $G^z(r)$，且第二个求和项的贡献不大于第一个求和项。因此，在分析 $G^z(r)$ 随 $L \to \infty$ 和 $r \to L/2$ 变化时的渐近长程行为时，我们只需关注第一个求和项的贡献，它构成了 $G^z(r)$ 的下界。

对于 $\mu(r) = \delta_Q/r$,

$$\sum_{j_c=1}^{r-1} \mu(j_c)\mu(r-j_c) = \delta_Q^2 \sum_{j_c=1}^{r-1} \frac{1}{r}\left(\frac{1}{j_c} + \frac{1}{r-j_c}\right) = \frac{2\delta_Q^2}{r} \sum_{j_c=1}^{r-1} \frac{1}{j_c} \tag{C16}$$

$$= 2\delta_Q^2 \frac{\ln r}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right) \quad (\text{as } L \to \infty, r \to L/2). \tag{C17}$$

对于 $\mu(r) = \delta_Q/r^{\alpha_Q}$，其中 $\alpha_Q > 1$,

$$\sum_{j_c=1}^{r-1} \mu(j_c)\mu(r-j_c) = \delta_Q^2 \sum_{j_c=1}^{r-1} \frac{1}{r^{\alpha_Q}}\left(\frac{1}{j_c} + \frac{1}{r-j_c}\right)^{\alpha_Q} \tag{C18}$$

$$\geq \frac{\delta_Q^2}{r^{\alpha_Q}} \sum_{j_c=1}^{r-1} \left(\frac{1}{j_c^{\alpha_Q}} + \frac{1}{(r-j_c)^{\alpha_Q}}\right) = \frac{2\delta_Q^2}{r^{\alpha_Q}} \sum_{j_c=1}^{r-1} \frac{1}{j_c^{\alpha_Q}} \tag{C19}$$

$$= 2\delta_Q^2 \zeta(\alpha_Q) \frac{1}{r^{\alpha_Q}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^{2\alpha_Q}}\right) \quad (\text{as } L \to \infty, r \to L/2), \tag{C20}$$

其中，$\zeta(x)$ 表示黎曼ζ函数 [58]。

对于 $\mu(r) = \delta_Q/r^{\alpha_Q}$，其中 $0 < \alpha_Q \leq \frac{1}{2}$，

$$G^z\left(\frac{L}{2}\right) = 2\sum_{j_c=1}^{\frac{L}{2}-1} \mu(j_c)\mu\left(\frac{L}{2}-j_c\right) + 2\mu(0)\mu\left(\frac{L}{2}\right) \tag{C21}$$

$$\geq 2\delta_Q^2 \sum_{j_c=1}^{L/2-1} \frac{1}{j_c^{\alpha_Q}} \frac{1}{(L/2-j_c)^{\alpha_Q}} \tag{C22}$$

$$\geq 2\delta_Q^2 \sum_{j_c=1}^{L/2-1} \frac{1}{[(j_c+L/2-j_c)/2]^{2\alpha_Q}} \tag{C23}$$

$$\geq 2\delta_Q^2 \frac{L/2-1}{L/4} \tag{C24}$$

$$= 4\delta_Q^2 + o(1) \quad (\text{as } L \to \infty, r \to L/2). \tag{C25}$$

□

几何级数的截断误差可以直接估算，而对于各项呈幂律衰减形式的级数，我们如下推导其截断误差的阶的估计。此结果用于本文的复杂度分析。我们知道，对于任意 $s > 1$，$b \geq a \geq 1$，且 a，$b \in \mathbb{N}$，有 [58],

$$\sum_{n=a+1}^{b} \frac{1}{n^s} = \frac{a^{1-s}-b^{1-s}}{s-1} - s\int_a^b \frac{(x-\lfloor x\rfloor-\frac{1}{2})}{x^{s+1}}\mathrm{d}x + \frac{b^{-s}-a^{-s}}{2}, \tag{C26}$$

其中 $\lfloor x\rfloor$ 表示向下取整函数。考虑

$$|s\int_a^b \frac{(x-\lfloor x\rfloor-\frac{1}{2})}{x^{s+1}}\mathrm{d}x| \leq \frac{s}{2}\int_a^b \frac{1}{x^{s+1}}\mathrm{d}x \tag{C27}$$

$$= \frac{a^{-s}-b^{-s}}{2}. \tag{C28}$$

因此，

$$\sum_{n=a+1}^{b} \frac{1}{n^s} = \frac{a^{1-s}-b^{1-s}}{s-1} + \mathcal{O}(a^{-s}) \quad (\text{as } a \to \infty). \tag{C29}$$

上述结果对 $b \to \infty$ 也成立。因此，

$$\sum_{n=a+1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = \frac{a^{1-s}}{s-1} + \mathcal{O}(a^{-s}) = \mathcal{O}(a^{1-s}) \quad (\text{as } a \to \infty). \tag{C30}$$

附录 D：逼近克罗内克δ函数的 LRFD 受限玻尔兹曼机

本节中，我们构造 LRFD 受限玻尔兹曼机，使其能够近似所有自旋均指向

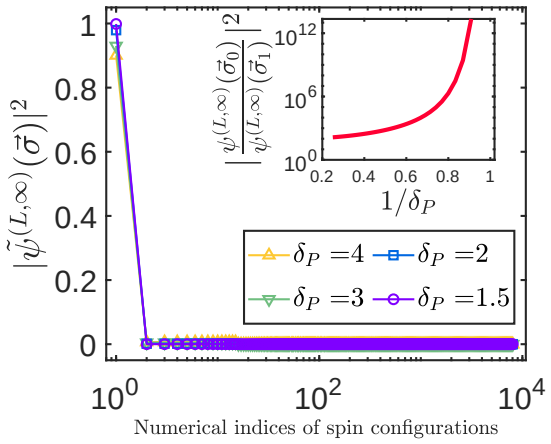

图6. 自旋构型空间中归一化波函数振幅平方的分布，该分布可以近似克罗内克δ函数。LRFD 受限玻尔兹曼机按照方程（D1）–（D3）所示构造，并且 $\mu_0 = 0.1$、$L = 13$ 以及 $\lambda(\tilde{k}) = \delta_P^{1-\tilde{k}}$ 满足 $\delta_P > 1$。横轴表示所有 2^L 自旋构型的数值索引，这些构型按照其对应振幅单调递减的顺序排列。插图显示了比值 $|\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_0)/\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_1)|^2$ 随 $1/\delta_P$ 变化的函数关系。

上方的 z 方向的量子态。该量子态具有克罗内克δ函数的形式，对于任意有限的系统大小，均可达到任意精度。根据方程（24）–（26）所示，受限玻尔兹曼机的构造如下：

$$\mu(r) = \mu_0 > 0 \quad (\text{for any } r \geq 0), \tag{D1}$$
$$c_w = c_b = 1, \tag{D2}$$
$$a_0 = 0. \tag{D3}$$

由于所有 b_k 和 $W_{j,k}$ 这些受限玻尔兹曼机的参数都是正实数，因此，自旋构型的波函数振幅在 $\vec{\sigma}_0 = (1, 1, \ldots\ldots, 1)$ 处达到最大值，该构型对应于所有自旋向上。由此可得，对于任意其他自旋构型 $\vec{\sigma}'$，

$$\begin{aligned} &|\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_0)/\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}')| \\ &\geq |\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_0)/\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_1)| \qquad \text{(D4)} \\ &= \prod_{\tilde{k}=1}^{\infty} \left[\frac{\cosh((L+1)\mu_0\lambda(\tilde{k}))}{\cosh((L-1)\mu_0\lambda(\tilde{k}))}\right]^L, \qquad \text{(D5)} \end{aligned}$$

其中，$\vec{\sigma}_1 = (1, 1, \ldots\ldots, 1, -1)$ 表示通过翻转 $\vec{\sigma}_0$ 中最后一个自旋得到的自旋构型。令 $x = (L-1)\mu_0\lambda(k)$ 和 $\triangle x = 2\mu_0\lambda(k)$。对 $\cosh(x+\triangle x)$ 在 x 处进行泰勒级数展开，并比较最低阶项，可得存在常数 $0 < \beta_3 < 1$ 和 $x_0 > 0$，使得对于任意 $0 < \triangle x < x < x_0$，

$$\frac{\cosh(x+\triangle x)}{\cosh(x)} \geq 1 + \tanh(x)\triangle x \geq e^{\beta_3 x \triangle x}. \tag{D6}$$

对于任意固定的 L 和 μ_0，都存在 $k_0 \in \mathbb{N}$ 使得 $(L-1)\mu_0\lambda(k) < x_0$ 对所有 $k > k_0$ 均成立。因此可以证明

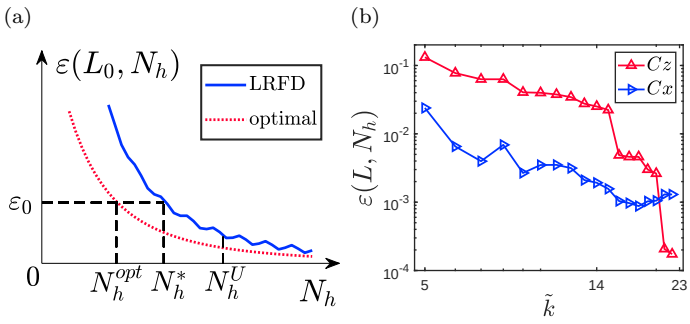

图7。(a) 截断 LRFD 受限玻尔兹曼机和最优受限玻尔兹曼机的近似误差随隐节点数量的变化。(b) 对于 XXZ模型，截断 LRFD 受限玻尔兹曼机中保留的层级数量与沿 x 和 z 方向计算自旋关联时的近似误差之间的关系，并与精确对角化方法的结果进行比较。该图采用双对数坐标绘制。

that

$$\begin{aligned} &|\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_0)/\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}')| \\ &\geq \prod_{\tilde{k}=1}^{\tilde{k}_0} \left[\frac{\cosh((L+1)\mu_0\lambda(\tilde{k}))}{\cosh((L-1)\mu_0\lambda(\tilde{k}))}\right]^L \\ &\quad \times \prod_{\tilde{k}=\tilde{k}_0+1}^{\infty} \left[\exp(2\beta_3(L-1)\mu_0^2\lambda^2(\tilde{k}))\right]^L \qquad \text{(D7)} \\ &\geq \exp\left(2\beta_3 L(L-1)\mu_0^2 \sum_{\tilde{k}=\tilde{k}_0+1}^{\infty} \lambda^2(\tilde{k})\right). \qquad \text{(D8)} \end{aligned}$$

上述下界包含无穷多项，不过每一项都有一个与 x_0 相关的表达式作为上界，并且通过降低 $\lambda(k)$ 的衰减率，可以使其达到任意高的值。因此，这些受限玻尔兹曼机的长程特性使得 $\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma})$ 在自旋构型空间中的形状能够趋近于克罗内克δ函数，因为 $\lambda(k)$ 的衰减越来越慢。我们在图6中的数值结果（其中 $\lambda(\tilde{k}) = \delta_P^{-(k-1)}$）表明，随着 $1/\delta_P$ 增大，自旋构型空间中归一化波函数振幅平方的分布能够以越来越高的精度逼近克罗内克δ函数；作为近似精度度量的比值 $|\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_0)/\psi^{(L,\infty)}(\vec{\sigma}_1)|^2$ 在 $1/\delta_P$ 趋近于1时可以达到任意高的值，从而支持了我们的论点。

附录 E：误差曲线

在本节中，我们给出截断 LRFD 受限玻尔兹曼机的近似误差随隐节点数量变化的关系（图7(a)），以及最优受限玻尔兹曼机的近似误差；此外，还给出了计算 x 和 z 方向上自旋关联时的截断误差随以下因素的变化关系：

截断 LRFD 受限玻尔兹曼机中保留的层级数（图7(b)）。在图7(a)中， $\varepsilon(L_0,\ N_h)$ 表示 LRFD 受限玻尔兹曼机的第二类截断误差，其中 B 在基态学习中被推广为量子系统的哈密顿量；该哈密顿量通常具有由多项式数量的原始 B类算符线性组合而成的形式。根据定义，使用隐节点数量不超过 N_h 的最优受限玻尔兹曼机，其近似精度必然优于（至少不逊于）使用基于 N_h 个隐节点的 LRFD 受限玻尔兹曼机有限截断所得到的受限玻尔兹曼机。因此，在我们的复杂度分析中， $N_h^U(L_0,\ \varepsilon_0$实际上还为 $N_h^{\mathrm{opt}}\left(L_0, \varepsilon_0\right)$ 提供了一个上界，其定义为达到特定近似误差所需的最少隐节点数 ε_0 ，适用于任意类型的受限玻尔兹曼机（不限于 LRFD 受限玻尔兹曼机），这对于机器学习任务中的预训练计算资源估算至关重要。随着 N_h 趋于无穷大，LRFD 受限玻尔兹曼机的截断误差将收敛至 0，但未必单调递减。图 7(b) 展示了 XXZ模型基态学习中第二类截断误差的衰减曲线；其参数设置与图4(b) 相同。结果与我们的分析一致：这些误差可由幂律衰减曲线给出的上界约束，并且随着保留层级数量增加，精度会不断提高。

[1] G. Carleo、I. Cirac、K. Cranmer、L. Daudet、M. Schuld、N. Tishby、L. Vogt-Maranto 和 L. Zdeborov´a，《Reviews of Modern Physics》91，045002（2019）。[2] J. Biamonte、P. Wittek、N. Pancotti、P. Rebentrost、N. Wiebe 和 S. Lloyd，《自然》（伦敦）549，195（2017）。[3] J. Carrasquilla 和 R. G. Melko，Nature Physics 13，431（2017）。[4] H.-Y. Huang、R. Kueng、G. Torlai、V. V. Albert 和 J. Preskill，《科学》377，eabk3333（2022）。[5] S. Das Sarma、D.-L. Deng 和 L.-M. Duan，《今日物理》72，48（2019）。[6] G. Carleo 和 M. Troyer，《科学》355，602（2017）。[7] R. G. Melko、G. Carleo、J. Carrasquilla 和 J. I. Cirac，Nature Physics 15，887（2019）。[8] I. Glasser、N. Pancotti、M. August、I. D. Rodriguez 和 J. I. Cirac，P hysical Review X 8，011006（2018）。[9] X. Gao 和 L.-M. Duan，《自然·通讯》8，662（2017）。[10] G. Torlai 和 R. G. Melko，《物理评论B》94，165134（2016）。[11] S. Lloyd、M. Mohseni 和 P. Rebentrost，arXiv:1307.0411。[12] N. Wiebe、A. Kapoor 和 K. M. Svore，《量子信息与计算》15，316（2015）。[13] N. Wiebe、A. Kapoor 和 K. M. Svore，arXiv:1412.3489。[14] P. Rebentrost、M. Mohseni 和 S. Lloyd，《物理评论快报》113，130503（2014）。[15] M. H. Amin、E. Andriyash、J. Rolfe、B. Kulchytskyy 和 R. Melko，Physical Review X 8，021050（2018）。[16] P. Mehta 和 D. J. Schwab，arXiv:1410.3831。[17] W. Hu、R. R. P. Singh 和 R. T. Scalettar，《物理评论E》95，062122（2017）。[18] K. Ch’ng、J. Carrasquilla、R. G. Melko 和 E. Khatami，Physical Review X 7，031038（2017）。[19] L. Wang，《物理评论B》94，195105（2016）。[20] R. Pan 和 C. W. Clark，Physical Review A 98，033604（2018）。[21] Y.-T. Hsu、X. Li、D.-L. Deng 和 S. Das Sarma，《物理评论快报》121，245701（2018）。[22] M. Rupp、A. Tkatchenko、K.-R. M¨uller 和 O. A. von Lilienfeld，《物理评论快报》108，058301（2012）。[23] A. P. Bart´ok、S. De、C. Poelking、N. Bernstein、J. R. Ker-mode、G. Cs´anyi 和 M. Ceriotti，《科学进展》3，e1701816（2017）。[24] G. Torlai、G. Mazzola、J. Carrasquilla、M. Troyer、R. Melko 和 G. Carleo，《Nature Physics》14，447（2018）。[25] M. Kieferov´a 和 N. Wiebe，《Physical Review A》96，062327（2017）。[26] J. Liu、Y. Qi、Z. Y. Meng 和 L. Fu，《物理评论B》95，041101 2017( )。[27] L. Huang 和 L. Wang，《物理评论B》95，035105（2017）。[28] Z. Cai 和 J. Liu，《物理评论B》97，035116（2018）。[29] Y. Nomura、A. S. Darmawan、Y. Yamaji 和 M. Imada，《物理评论B》96，205152（2017）。[30] D.-L. Deng、X. Li 和 S. Das Sarma，《物理评论B》96，195145 2017( )。[31] D.-L. Deng、X. Li 和 S. Das Sarma，《Physical Review X》7，021021 2017( )。[32] J. I. Cirac、D. P´erez-Garc´ıa、N. Schuch 和 F. Ver- straete，Reviews of Modern Physics 93，045003（2021）。[33] K. Choo、G. Carleo、N. Regnault 和 T. Neupert，《物理评论快报》121，167204（2018）。[34] Y. Zheng、H. He、N. Regnault 和 B. A. Bernevig，《物理评论B》99，155129（2019）。[35] H. He、Y. Zheng、B. A. Bernevig 和 G. Sierra，arXiv:1910.13454。[36] R. Kaubruegger、L. Pastori 和 J. C. Budich，《物理评论B》97，195136（2018）。[37] Y. Huang 和 J. E. Moore，《物理评论快报》127，170601（2021）。[38] A. Golubeva 和 R. G. Melko，《物理评论B》105，125124（2022）。[39] D. Sehayek、A. Golubeva、M. S. Albergo、B. Kulchytskyy、G. Torlai 和 R. G. Melko，《物理评论B》100，195125（2019）。[40] F. Verstraete 和 J. I. Cirac，《物理评论B》73，094423（2006）。[41] S. R. Clark，Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 51，135301（2018）。[42] J. Chen、S. Cheng、H. Xie、L. Wang 和 T. Xiang，《物理评论B》97，085104（2018）。[43] N. Le Roux 和 Y. Bengio，Neural Computation 20，1631（2008）。[44] J. Eisert、M. Cramer 和 M. B. Plenio，Reviews of Modern Physics 82，277（2010）。[45] Z. Huang 和 A. V. Balatsky，arXiv:1711.10471。[46] M. Koshino、N. F. Q. Yuan、T. Koretsune、M. Ochi、K. Kuroki 和 L. Fu，Physical Review X 8，031087（2018）。

[47] R. A. Horn 和 C. R. Johnson, *Matrix analysis* (剑桥大学出版社，2012) 第5章，第274页。[48] R. A. Horn 和 C. R. Johnson, *Matrix analysis* (剑桥大学出版社，2012) 第5章，第265页。[49] D. Perez-Garcia、F. Verstraete、M. M. Wolf 和 J. I. Cirac, 《量子信息与计算》**7**，401（2007）。[50] S. Sorella、M. Casula 和 D. Rocca, 《化学物理学杂志》**127**，014105 2007( )。[51] E. Neuscamman、C. J. Umrigar 和 G. K.-L. Chan, 《物理评论B》**85**，045103（2012）。[52] A. Harju、B. Barbiellini、S. Siljam¨aki、R. M. Nieminen 和 G. Ortiz, 《物理评论快报》**79**，1173（1997）。

[53] D. Jaschke、K. Maeda、J. D. Whalen、M. L. Wall 和 L. D. Carr, 《新物理学杂志》**19**，033032（2017）。[54] M. F. Maghrebi、Z.-X. Gong 和 A. V. Gorshkov, 《物理评论快报》**119**，023001（2017）。[55] T. Koffel、M. Lewenstein 和 L. Tagliacozzo, 《物理评论快报》**109**，267203（2012）。[56] P. Chen、Z. long Xue、I. P. McCulloch、M.-C. Chung、M. Cazalilla 和 S.-K. Yip, 《统计力学：理论与实验》**2013**，P10007（2013）。[57] F. C. Alcaraz 和 M. J. Martins, 《物理评论快报》**63**，708 1989( )。[58] E. C. Titchmarsh 和 D. R. Heath-Brown, *The theoryof the Riemann zeta-function*（牛津大学出版社，1986）第 2 章，第 14 页。