arXiv:2304.06075v1 [cond-mat.stat-mech] 12 Apr 2023

利用树张量网络对长程开放量子多体动力学进行数值模拟

Dominik Sulz,[1] Christian Lubich,[1] Gianluca Ceruti,[2] Igor Lesanovsky,[3,4] 和 Federico Carollo[3]

[1] *Mathematisches Institut, Universität Tübingen, Auf der Morgenstelle 10, D–72076 Tübingen, Germany*

[2] *Institute of Mathematics, EPF Lausanne, 1015 Lausanne, Switzerland*[3] *Institut für Theoretische Physik, Universität Tübingen,Auf der Morgenstelle 14, 72076 Tübingen, Germany*

[4] *School of Physics and Astronomy and Centre for the Mathematics and Theoretical Physics of Quantum Non-Equilibrium Systems,The University of Nottingham, Nottingham, NG7 2RD, United Kingdom*

开放量子系统为探索集体行为提供了一个概念上简单的框架，这种集体行为源于量子效应、多体相互作用与耗散过程之间的竞争。它们可能呈现出不同于封闭量子系统的动力学，也可能发生经典情形下不可能出现的非平衡相变。然而，研究开放量子多体动力学颇具挑战，尤其是在存在临界长程关联或长程相互作用时。在此，我们在这一方向上取得进展，提出了一种基于树张量网络的开放量子系统数值方法。这种结构有望改善对多体关联的编码；我们采用了一种适用于长程相互作用及耗散动力学应用的积分方案。我们利用具有幂律衰减相互作用的耗散伊辛模型检验了该方法，并观察到幂律指数小于一时一级相变的特征。

量子系统与其周围环境的相互作用会产生耗散效应，因此需要用密度矩阵来描述其状态。在最简单的情况下，这些矩阵通过马尔可夫量子主方程演化 [1–3]。然而，求解多体系统的这些方程是一项艰巨的任务，尤其是在非相互作用理论之外 [4–8]。这是因为编码量子态所需的资源会随系统规模呈指数增长，严重限制了对开放量子系统中非平衡行为的研究 [9–20]。

为克服这一局限，人们开发了多种数值方法 [21–26], ，其中包括基于神经网络的技术 [27–31]。至少对于一维量子系统，尽管矩阵乘积态（MPS）在开放量子动力学中的表现仍存在未解问题 [23]，其期望值估计的误差界也尚不明确，矩阵乘积态（MPS）仍是当前最先进的方法[32–40], 。这些问题在接近平衡相变时尤其重要，因为矩阵乘积态方法可能变得不稳定 [14, 16]，难以捕捉临界系统中的长程关联，或具有长程相互作用的系统中的关联。

近年来，树张量网络（TTN）是一类同时具有物理层和多个隐藏层的张量网络 [（示意见图 1(a)）], ，已成功用于编码哈密顿系统中的临界长程关联 [41] [42–45]（其他应用也见参考文献 [46–49] ）。这种增强的能力源于其结构 [（参见图 1(a)）], ：两个子系统之间的张量数量仅随它们之间的距离呈对数增长 [42] ，而非线性增长，如

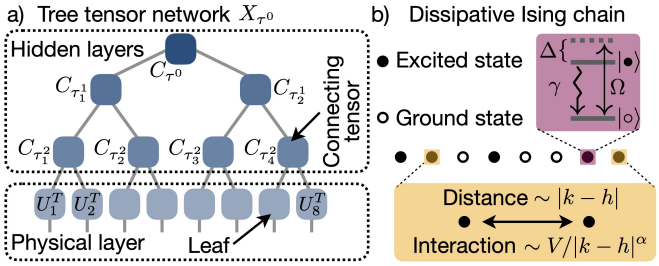


图 1。**树张量网络与耗散伊辛模型**。(a) 定义在一棵树τ^0上的二叉树张量网络 X_{τ^0} ，对应由 $D = 8$ 个粒子组成的系统。该网络由一个物理层和三个隐藏层组成；物理层包含树的叶节点（每个叶节点对应一个粒子）。隐藏层由连接张量$C_{\tau_i^j}$ 构成，它们将前一层中的元素两两连接。(b) 具有二能级子系统和单粒子态 $|\bullet\rangle$、$|\circ\rangle$的耗散伊辛模型。系统哈密顿量驱动态 $|\bullet\rangle \leftrightarrow |\circ\rangle$ 之间的相干振荡，其拉比频率为 Ω，失谐为 Δ。不可逆过程由局域衰减 $|\bullet\rangle \to |\circ\rangle$ 构成，衰减率为 γ。处于状态 $|\bullet\rangle$ 的两个子系统相互作用，其强度取决于参数 V 以及由相互作用范围指数 α决定的二者间距。

对于矩阵乘积态而言。尽管具有这一特点，树张量网络尚未用于模拟临界或长程开放量子动力学 [26]（不过，参见文献 [50–52] 中的相关思路）。

本文提出了一种利用量子多体态的 TTN 表示来模拟量子主方程的算法。我们的方法基于参考文献 [53], 提出的积分方案，通过分层“基更新与伽辽金”（BUG）方法演化 TTN。首先更新位于树的叶节点处的正交

基矩阵，叶节点然后通过变分法（即伽辽金法）演化隐层中的连接张量 [见图 1(a)], 。

为对我们的算法进行基准测试，我们考虑一个典型的开放量子系统，即图 1(b) 所示的耗散伊辛模型，其中存在按幂律衰减的相互作用。我们通过将该方法与短程和长程相互作用情况下的（数值）精确结果进行比较，验证其有效性，并研究长程情形下一级相变的特征。此外，我们还考虑一种全局“磁化率”观测量，并探究树张量网络在描述多体关联方面的表现。我们的结果表明，在存在长程相互作用时，树张量网络有望用于模拟开放量子多体系统。

开放量子动力学。—我们考虑由 D 个可区分的 d能级粒子组成的一维量子系统，这些粒子经历马尔可夫开放量子动力学。描述系统状态的密度矩阵 $\rho(t)$ 按照量子主方程 [1–3] 演化

$$\dot{\rho}(t) = \mathcal{L}[\rho(t)] := -i[H, \rho(t)] + \mathcal{D}[\rho(t)] \,. \tag{1}$$

映射 $\mathcal{L}$ 是林德布拉德动力学生成元，$H = H^\dagger$ 是多体哈密顿算符。耗散子 $\mathcal{D}$ 具有如下形式

$$\mathcal{D}[\rho] = \sum_\mu \left(J_\mu \rho J_\mu^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \rho, J_\mu^\dagger J_\mu \right\} \right) , \tag{2}$$

其中，跳跃算符 J_μ 编码了环境对系统动力学的影响。

式 (1) 中的林德布拉德生成元是一个从矩阵空间映射到其自身的线性映射。为了对开放量子动力学进行数值模拟，将 $\mathcal{L}$表示为作用于矩阵向量化表示的向量上的矩阵会很方便（例如参见 [16, 54–56]）。因此，任意矩阵 $\rho(t)$ 都变为向量 $|\rho(t)\rangle$，式 (1) 可写为

$$|\dot{\rho}(t)\rangle = \mathbb{L} \, |\rho(t)\rangle \, , \tag{3}$$

其中， $\mathbb{L}$ 是生成元 $\mathcal{L}$ 的矩阵表示（示例见补充材料 [57] ）。下文将展示如何利用树张量网络近似求解式 (3)。

与树张量网络的结合。—树张量网络具有一个物理层和若干隐层[参见图 1(a)], ，我们利用它们来存储对应于量子态 $|\rho(t)\rangle$的物理数据。树的叶节点，即物理层中的张量（实际上是矩阵），对应于我们一维量子系统的各个格点，而隐层中的连接张量则编码了它们之间的关联。为近似开放量子动力学，我们采用一种算法 [53] ，将适用于树张量网络的狄拉克–弗伦克尔含时变分原理 [59–61]分解为可计算的离散时间步，并按照从叶节点到根的层级顺序对树张量网络中的每个张量进行变分演化（自底向上）。该算法的一次更新包含两个步骤，

1. 对于每个层 j中的张量，构造林德布拉德生成元的态依赖约化 $L_{\tau_i^j}$ ，
2. 通过求解由 $L_{\tau_i^j}$ 实现的微分方程组，以变分方式更新张量，

这些步骤从底层到顶层递归重复。下面简要介绍该算法，详细内容请参阅文献 [53] 。

物理层由 $D = 2^\ell$ 个叶节点构成，每个叶节点对应系统中的一个格点。每个叶节点都是最小的子树，我们称之为 τ_i^ℓ，见图 2(a)。上标 ℓ 标记叶节点所属的（物理）层，而 i（对于 $i = 1, \ 2 \ldots D$）则表示叶节点本身。与每个叶节点相关联的张量是一个复矩阵 U_i，其列向量正交归一，维数为 $d^2 \times r_{\tau_i^\ell}$，并携带一个物理基。我们用字母 r 表示树张量网络中的键维数。

沿图 1(a)所示的树向根（顶层）移动，对于每个隐层 j，我们可以递归地定义更大的子树 τ_i^j，它们由前一层的子树连接而成，即 $\tau_i^j = (\tau_{2i-1}^{j+1}, \ \tau_{2i}^{j+1})$ [，参见图 2(a)]。每棵子树都对应一个张量网络 $X_{\tau_i^j}$，其根处是连接张量 $C_{\tau_i^j}$，维数为 $r_{\tau_i^j} \times r_{\tau_{2i-1}^{j+1}} \times r_{\tau_{2i}^{j+1}}$。如图 2(b)所示，这些张量的第一个指标（键维数 $r_{\tau_i^j}$）朝上，计作第零维；第二和第三个指标（键维数 $r_{\tau_{2i-1}^{j+1}}$ 和 $r_{\tau_{2i}^{j+1}}$）则分别朝下，指向左侧和右侧的子树。

我们进一步定义张量-矩阵乘法 $A = C \times_m B$: 对于一个 n 阶张量 C 和一个矩阵 B，关于第 m 个张量指标的乘法定义为 [，参见图 2(c)]

$$A_{k_0, k_1, \ldots k_m \ldots k_{n-1}} = \sum_{\ell_m} C_{k_0, k_1 \ldots \ell_m \ldots k_{n-1}} (B^T)_{\ell_m, k_m} \, , \tag{4}$$

以及张量 Mat

$_i \ C \ = C_i \in$ ( ) 的 〈 $\mathbb{C}^{r_i \times r_i'}$ style id='1'>矩阵化，其中 $r_i' = \prod_{j \neq i} r_j$，其逆运算 Ten$_i(C_i)$ $= C$称为〈style id='8'>张量化 [参见图 2(c)]。我们使用正交归一树张量网络，其中对于每个连接张量 C，Mat$_0(C)^T$ 都具有正交归一列；根（顶部）的连接张量 C_{τ^0} 除外。对于〈style id='19'>,1,2，必须满足关系 $r_i \leq \prod_{j \neq i} r_j \ i = 0$，以确保每个连接张量 C 的每种矩阵化都可以（通常也确实）具有满秩。

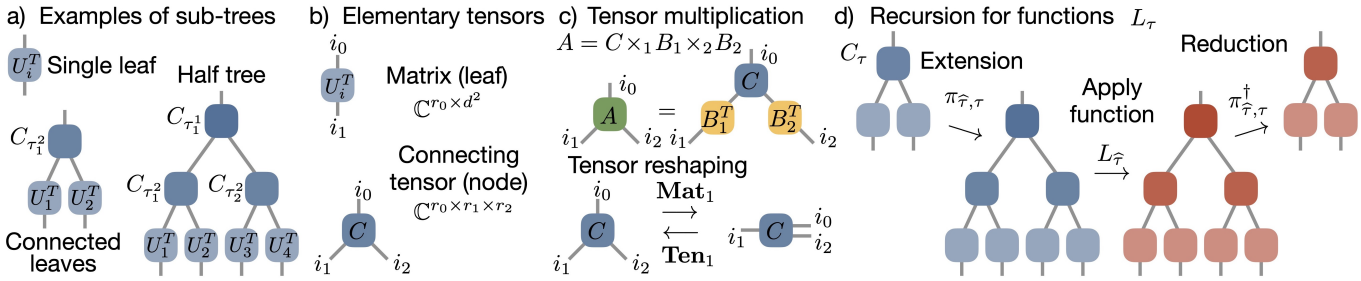


图 2。**树张量网络：子树和操作**。 (a) 图 1(a)所示树张量网络中定义在子树上的张量网络示例 X_τ。除叶节点外，每个 X_τ顶部都有一个连接张量 C_τ。(b) 叶节点是维数为 $r_0 \times d^2$的复正交矩阵，其中 d是单粒子希尔伯特空间的维数。连接张量是键维数为 $r_0 \times r_1 \times r_2$的三阶张量。张量的索引编号从 0 到 $M-1$，其中 M是张量的阶数。(c) 张量乘法 [（参见公式 (4)]）以及重塑函数 Mat_i、Ten_i的示意图，针对 $i=1$给出。(d) 用于求取 L_τ的递归算法。给定 $L_{\hat\tau}$，其中 $\hat\tau$是大于 τ且包含它的最小树，为求取 L_τ，我们通过操作$\pi_{\hat\tau,\,\tau}$将张量网络 X_τ扩展为较大树 $\hat\tau$上的张量网络。我们对扩展后的张量网络应用函数 $L_{\hat\tau}$，然后通过$\pi^\dagger_{\hat\tau,\,\tau}$将所得张量约化回 τ。

为了获得经过离散（无穷小）时间步长 δt演化后的树张量网络，我们需要求出更新后的叶节点U_i'以及更新后的连接张量 $C'_{\tau_i^j}$。在算法中，我们首先更新叶节点处的基矩阵 U_i。为此，我们取需要更新的叶节点τ_i^ℓ 上方的连接张量 $C = C_{\tau_{\lceil i/2\rceil}^{\ell-1}}$，并将其矩阵化为 $C_1 = \mathrm{Mat}_1(C)$（若 i 为奇数），或矩阵化为 $C_2 = \mathrm{Mat}_2(C)$（若 i 为偶数）。接着，我们执行 QR分解 $C_i^T = Q_i R_i$，其中 R_i 的维度为 $r_i \times r_i$，并定义矩阵 $Y_i = R_i U_i^T$。由此得到矩阵微分方程的初始条件$Y_i(0) = Y_i$

$$\dot Y_i = L_{\tau_i^\ell}[Y_i]\,. \tag{5}$$

线性算子 $L_{\tau_i^\ell}$可解释为针对林德布拉德算子的第 i个物理位点、依赖于状态的变分约化；正如我们下文所述，它是递归定义的。将微分方程求解至时间δt，得到 $Y_i(\delta t)$，并将更新后的叶矩阵 U_i' 设为 $Y_i(\delta t)$ 的 QR分解中的正交部分。

然后，我们按层级从底层向顶层更新连接张量。在递归的每一步，$\widehat{\ }$我们设定 $C_{\tau_i^j} = C_{\tau_i^j} \times_1 M_{\tau_{2i-1}^{j+1}} \times_2 M_{\tau_{2i}^{j+1}}$ [参见图 2(c)], 为 $M_\tau = U_\tau'^\dagger U_\tau$，其中 $U_\tau = \mathrm{Mat}_0(X_\tau)^T$是 X_τ的矩阵化。当 τ是叶节点时，$\tau = \tau_i^\ell$，于是$U_{\tau_i^\ell} = U_i$。矩阵 U'_τ 的定义类似，但针对已$\widehat{\ }$更新的 X'_τ [57]。张量 $C_{\tau_i^j}$ 为微分方程提供初始数据

$$\dot{\widehat{C}}_{\tau_i^j} = L_{\tau_i^j}[\widehat{C}_{\tau_i^j} \times_1 U'_{\tau_{2i-1}^{j+1}} \times_2 U'_{\tau_{2i}^{j+1}}] \times_1 U'^\dagger_{\tau_{2i-1}^{j+1}} \times_2 U'^\dagger_{\tau_{2i}^{j+1}}. \tag{6}$$

更新后的张量为 $C'_{\tau_i^j} = \mathrm{Ten}_0(Q^T)$，其中 Q是 $\mathrm{Mat}_0(\widehat{C}_{\tau_i^j}(\delta t))^T$的 QR分解所得的正交部分。请注意，矩阵 U_τ，U'_τ从不显式构造，因为涉及它们的乘积是通过收缩相应的树张量网络计算的。

最后，我们讨论如何获得约化林德布拉德算子$L_{\tau_i^j}$（详情请参阅文献 [57, 62] ）。对于任意子树 τ，可以根据与包含 τ的最小子树 $\hat\tau$ 相关联的$L_{\hat\tau}$ 求得 L_τ。通过定义一个依赖于状态的扩展算子 $\pi_{\hat\tau,\,\tau}$，它将树 τ映射到更大的树 $\hat\tau$，算子 L_τ可表示为 $L_\tau = \pi^\dagger_{\hat\tau,\,\tau} L_{\hat\tau} \pi_{\hat\tau,\,\tau}$。递归的起点为 L_{τ^0}，它与整棵树τ^0相关联，本质上是矩阵 $\mathbb{L}$的（可能经过截断的）树张量网络算子表示。

上文介绍的积分器 [53]，扩展了文献 [63, 64]，中的 BUG 矩阵积分器；与文献 [36, 37, 62] 中的积分器不同，它不进行任何反向时间传播。因此，它更适合模拟耗散动力学。

长程耗散伊辛模型。— 为了检验我们的算法，我们考虑耗散伊辛模型 [21, 67–73] 的一个长程相互作用版本。它由一个含有两能级粒子的一维模型构成，其特征态为激发态 $|\bullet\rangle$ 和基态 $|\circ\rangle$。模型哈密顿量 [（参见图 1(b)）] 为

$$H = \Omega \sum_{k=1}^{D} \sigma_x^{(k)} + \Delta \sum_{k=1}^{D} n^{(k)} + \frac{V}{2c_\alpha} \sum_{k\neq h=1}^{D} \frac{n^{(k)} n^{(h)}}{|k-h|^\alpha}\,, \tag{7}$$

其中 $n = |\bullet\rangle\langle\bullet|$ 和 $\sigma_x = |\bullet\rangle\langle\circ| + |\circ\rangle\langle\bullet|$。上述方程中的前两项描述驱动项，例如由激光产生的驱动，其拉比频率为 Ω，失谐为Δ。最后一项描述仅发生在激发态 $|\bullet\rangle$ 粒子之间的二体相互作用。参数 V 是整体耦合强度，而代数指数 α 控制相互作用的范围。当 $\alpha = 0$ 时，相互作用为全连接型；当 $\alpha \to \infty$ 时，则仅涉及最近邻。系数 $c_\alpha = \sum_{k=1}^{D} 1/k^\alpha$ 使得相互作用在任意 α [74, 75]取值下都具有广延性。耗散 [（参见方程（2））] 被编码其中。

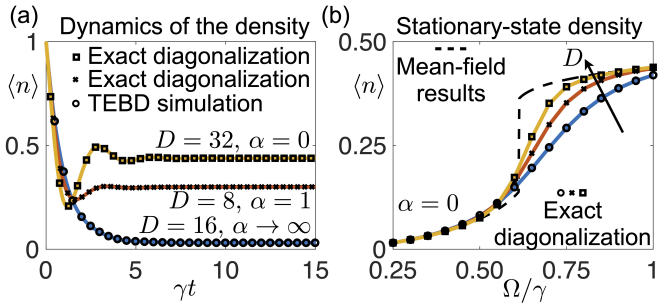


图 3. **方法基准测试。** (a) 使用我们的算法（实线）和其他方法（符号）计算得到的密度 $\langle n \rangle$的时间演化。对于最近邻相互作用情形（$D = 16$，$\alpha \to \infty$），我们将结果与采用时间演化块截断（TEBD）算法得到的收敛 MPS 模拟结果进行基准比较。对于 $D = 8$，$\alpha = 1$ 和$D = 32$，$\alpha = 0$，我们将结果与对林德布拉德生成元进行精确对角化所得的结果进行比较。对于我们的模拟，我们使用了最大键维数 $r_{\max} = 30$。对于不同曲线，我们分别取 $\Omega/\gamma = 0.3$，0。7，1。（b）通过将 $\gamma t = 15$ 树张量网络和精确对角化模拟演化至稳态，得到的密度稳态值随 Ω/γ的变化。这里展示无限程相互作用情形（$\alpha = 0$），系统大小为 $D = 8$，16，32；对于这些系统，我们分别使用了最大键维数 $r_{\max} = 10$，20，30。虚线表示平均场预测，对于 $D \to \infty$ [65, 66]该预测是精确的。图中未明确说明的参数为 $\Delta/\gamma = -2, V/\gamma = 5$。

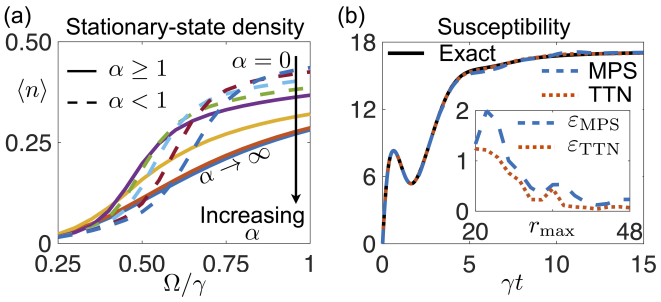


图4. **长程相互作用和“磁化率”参数。**(a)密度 $\langle n \rangle$ 随Ω/γ变化时的稳态行为，对于不同的 α和 $D = 16$，如在 $\gamma t = 15$处估计所得。我们考虑 $\alpha = 0$,0.25, 0.50, 0.75, 1, 2, 5和 $\alpha \to \infty$，其增长方式如图中所示。对于 α的所有取值，我们考虑 $r_{\max} = 30$，但对于 $\alpha = 0$，$r_{\max} = 20$ 即可满足要求。(b) 对于$\Omega/\gamma = 0.65$，在$r_{\max} = 38$ 和 $D = 32$条件下，树张量网络和矩阵乘积态模拟得到的磁化率χ 的动力学。树张量网络曲线基本上与精确解重合，而矩阵乘积态曲线仍显示出一些偏差。插图显示了将 χ 估计为键维数的函数时的最大误差 $\varepsilon_{\rm TTN/MPS}$。图中面板未明确指定的参数为 $\Delta/\gamma = -2$、$V/\gamma = 5$ 。

在跳跃算符 $J_k = \sqrt{\gamma}\sigma_-^{(k)}$ 中，其中 $\sigma_- = |\circ\rangle\langle\bullet|$ 描述从状态 $|\bullet\rangle$ 到状态 $|\circ\rangle$ 的不可逆衰减。在下文中，我们将把所有粒子均处于 $|\bullet\rangle$ 的状态作为初始状态。

为了展示我们的算法能够忠实地近似开放量子动力学，我们针对 α 的不同取值检验了结果。当 $\alpha = 0$ 时，我们将数值结果与一种适用于置换不变系统的高效生成元对角化方法进行比较[76–79]。对于 $\alpha \to \infty$，我们将数值结果与使用矩阵乘积态和时间演化块解耦（TEBD）算法得到的结果进行比较 [24, 32, 33, 38, 80]。对于 $0 < \alpha < \infty$，我们只能将结果与标准的 Lindblad 生成元精确对角化结果进行基准比较，该方法仅适用于相对较小的系统。如图 3(a-b) 所示，我们的树张量网络算法所得结果与相应的参考解一致。

相互作用范围的作用。— 现在，我们利用算法来探究系统在 α 的中间取值及较大系统尺寸下的行为。这种情形至少出于两个原因而值得关注。首先，$\alpha = 3$ 或 $\alpha = 6$ 这样的取值通常会在实验中遇到 [81]。其次，对于 $\alpha = 0$ 且在热力学极限下 $D \to \infty$，耗散伊辛模型会呈现一阶非平衡相变，从低激发密度相 $\langle n \rangle$ 转变为高激发相 [（参见图 3(b)中的虚线）]。另一方面，对于 $\alpha \to \infty$，一维模型中不会出现相变 [71]。我们的树张量网络算法能够在这两种情形之间进行插值，从而让我们探究在 $\alpha > 0$时相变的命运。图 4(a)显示，对于 $\alpha > 1$，稳态密度 $\langle n \rangle$ 的表现与情形 $\alpha \to \infty$相似，即密度 $\langle n \rangle$ 随 Ω/γ变化似乎是平滑的。另一方面，对于 $\alpha \leq 1$，若不考虑 c_α，式（7）中相互作用项的总和将呈超广延性；我们观察到一种尖锐交叉的出现，这与 $\alpha = 0$ 情形中的现象相似。

为了评估树张量网络捕捉关联的能力，我们还考察了系统中的总密度涨落 $\chi = \sum_{k,h=1}^{N} \left(\langle n^{(k)} n^{(h)} \rangle - \langle n^{(k)} \rangle \langle n^{(h)} \rangle\right)$。这一量包含所有可能的二体密度-密度关联，因此具有高度非局域性，可视为一种易感性参数。这里，我们关注 $\alpha = 0$的情形；对于该情形，我们可以获得更大系统 [76–79], 的精确结果，并比较树张量网络与矩阵乘积态的结果。我们还使用适用于最大高度树张量网络的算法进行矩阵乘积态模拟，这等价于矩阵乘积态拟设 [53]。在图4(b)中，我们展示了树张量网络和矩阵乘积态在相同且相对较大的键维数下的模拟结果。图中显示，树张量网络的结果与易感性的精确值几乎完全重合，而矩阵乘积态模拟中仍可观察到偏差。在图4(b)的插图中，我们展示了误差 $\varepsilon_{\rm TTN/MPS} = \max_{\gamma t \in [0,15]} \left|\chi_{\rm TTN/MPS} - \chi\right|$，其中 χ 为精确易感性，而 $\chi_{\rm TTN/MPS}$ 为估算值。

分别使用树张量网络和矩阵乘积态。即使对于所考虑的简单全对全（$\alpha = 0$）相互作用，树张量网络的表现也始终优于矩阵乘积态；这种相互作用在热力学极限下具有一级相变，因此不会产生临界长程关联。更具体地说，我们从图4(b)的插图中观察到，在键维数相同的情况下，树张量网络对磁化率行为的描述比矩阵乘积态更准确。

讨论——我们提出了一种利用树张量网络对长程开放量子系统进行数值模拟的方法，并以典型的耗散伊辛模型为例对其进行了基准测试。借助该方法，我们能够探索中等相互作用范围的区域，并在热力学极限下发现了相变在 $\alpha \in [0, 1]$ 时持续存在的迹象。我们还测试了树张量网络编码关联的能力。对于所研究的系统，我们发现树张量网络的表现优于矩阵乘积态模拟。我们的模拟使用标准个人计算机完成。

展望未来，比较这两种方法在具有二级非平衡相变和关联临界增长的开放量子系统中的表现，将会很有意义 [14]。探索不同的树结构也值得关注。本文主要考察了平衡二叉树和矩阵乘积态，但该算法具有普适性，适用于任意树 [53]。这为系统研究树结构在扩展开放量子系统多体关联编码中的作用开辟了可能性。

致谢。—我们感谢使用MATLAB 张量工具箱 [82] 和 Tensorlab [83] 来实现算法。我们感谢德国研究联合会（DFG）通过研究组 FOR 5413/1提供的资助，资助编号为 465199066。FC 感谢巴登-W¨urttemberg 基金会通过博士后精英计划提供的资金支持。GC 的工作得到了瑞士国家科学基金会（SNSF）研究项目“基于低秩更新的快速算法”的支持，资助编号为 200020-178806。

[1] G. Lindblad, 《量子动力半群的生成元》, 《数学物理通讯》**48**, 119（1976）。[2] V.Gorini、A. Kossakowski 和 E. C. G.Sudarshan, 《n 级系统的完全正动力半群》, 《数学物理杂志》**17**, 821（1976）。[3] H.-P.Breuer 和F. Petruccione, *The theory of openquantum systems*（牛津大学出版社按需出版，2002年）。[4] T. Prosen, 《第三量子化：求解二次开放费米系统主方程的一般方法》, 新《物理学杂志》10, 043026 (2008). [5] T. Prosen, 《二次开放费米子系统林德布拉德方程的谱定理》, J. Stat. Mech. 2010, P07020 (2010). [6] T. Prosen 和 T. H. Seligman, 《玻色算符空间上的量子化》, 《物理学杂志A》: Math. Theor. 43, 392004 (2010). [7] T. Heinosaari、A. S. Holevo 和 M. M. Wolf, 《高斯信道的半群结构》, Quantum Info. Comput. 10, 619–635 (2010). [8] C. Guo 和 D. Poletti, 《玻色与费米耗散二次开放系统的解》, 《物理评论 A》95, 052107 (2017). [9] G. Dagvadorj、J. M. Fellows、S. Matyja´ skiewicz、F. M. Marchetti、I. Carusotto 和 M. H. Szyma´ nska, 《二维驱动开放量子系统中的非平衡相变》, Phys. Rev. X 5, 041028 (2015). [10] D. Roscher、S. Diehl 和 M. Buchhold, 《一级暗态相变的现象学》, 《物理评论 A》98, 062117 (2018). [11] N. Dogra、M. Landini、K. Kroeger、L. Hruby、T. Donner 和 T. Esslinger, 《量子气体中耗散诱导的结构不稳定性与手性动力学》, Science 366, 1496 2019( ). [12] B. Bu˘ca 和 D. Jaksch, 《量子气体中耗散诱导的非稳态性》, 《物理评论快报》123, 260401 (2019). [13] E. I. R. Chiacchio 和 A. Nunnenkamp, 《光学腔内自旋or玻色-爱因斯坦凝聚体的耗散诱导不稳定性》, 《物理评论快报》122, 193605 (2019). [14] F. Carollo、E. Gillman、H. Weimer 和 I. Lesanovsky, 《一维量子接触过程的临界行为》, 《物理评论快报》123, 100604 (2019). [15] M. Jo、J. Lee、K. Choi 和 B. Kahng, 《量子接触过程中指数连续变化的吸收相变：一种神经网络方法》, Phys. Rev. Research 3, 013238 (2021). [16] F. Carollo 和 I. Lesanovsky, 《非平衡暗空间相变》, 《物理评论快报》128, 040603 (2022). [17] S. Helmrich、A. Arias、G. Lochead、T. M. Winterman-tel、M. Buchhold、S. Diehl 和 S. Whitlock, 《超冷原子气体中自组织临界性的迹象》, Nature 577, 481 (2020). [18] S. Diehl、A. Micheli、A. Kantian、B. Kraus、H. P. B¨uchler 和 P. Zoller, 《冷原子驱动开放量子系统中的量子态与量子相》, Nat. Phys. 4, 878 (2008). [19] F. Verstraete、M. M. Wolf 和 J. Ignacio Cirac, 《耗散驱动的量子计算与量子态工程》, Nat. Phys. 5, 633 (2009). [20] H. Weimer、M. M¨uller、I. Lesanovsky、P. Zoller 和 H. P. B¨uchler, 《里德堡量子模拟器》, Nat. Phys. **6**, 382 2010 ( ). [21] J. Cui、J. I. Cirac 和 M. C. Ba˜nuls, 《用于耗散量子系统稳态的变分矩阵乘积算符》, 《物理评论快报》114, 220601 (2015). [22] J. Jin、A. Biella、O. Viyuela、L. Mazza、J. Keeling、R. Fazio 和 D. Rossini, 《耗散自旋系统稳态相图的簇平均场方法》, Phys. Rev. X 6, 031011 (2016). [23] A. H. Werner、D. Jaschke、P. Silvi、M. Kliesch、T. Calarco、J. Eisert 和 S. Montangero, 《用于模拟开放量子多体系统的正张量网络方法》, 《物理评论快报》116, 237201 (2016).

体系统，《物理评论快报》116, 237201 (2016). [24] D. Jaschke、S. Montangero 和 L. D. Carr，《利用张量网络方法研究一维多体纠缠开放量子系统》，Quantum Sci. Technol. 4, 013001 (2018). [25] P. Silvi、F. Tschirsich、M. Gerster、J. J¨unemann、D. Jaschke、M. Rizzi 和 S. Montangero，《张量网络文集：多体量子格点系统的模拟技术》，SciPost Phys. Lect. Notes , 8 (2019). [26] H. Weimer、A. Kshetrimayum 和 R. Or´us，《开放量子多体系统的模拟方法》，《现代物理评论》93, 015008 (2021). [27] N. Yoshioka 和 R. Hamazaki，《为开放量子多体系统构造神经稳态》，《物理评论B辑》99, 214306 (2019). [28] M. J. Hartmann 和 G. Carleo，《耗散量子多体动力学的神经网络方法》，《物理评论快报》122, 250502 (2019). [29] A. Nagy 和 V. Savona，《采用神经网络试探态的开放量子系统变分量子蒙特卡洛方法》，《物理评论快报》122, 250501 (2019). [30] F. Vicentini、A. Biella、N. Regnault 和 C. Ciuti，《开放量子系统稳态的变分神经网络试探态》，《物理评论快报》122, 250503 (2019). [31] M. Reh、M. Schmitt 和 M. G¨arttner，《采用人工神经网络的开放量子系统含时变分原理》，《物理评论快报》127, 230501 (2021). [32] G. Vidal，《对轻度纠缠量子计算进行高效经典模拟》，《物理评论快报》91, 147902 (2003). [33] G. Vidal，《一维量子多体系统的高效模拟》，《物理评论快报》93, 040502 (2004). [34] U. Schollw¨ock，《矩阵乘积态时代的密度矩阵重整化群》，Ann. Phys. 326, 96 (2011), 2011年1月特刊。[35] R. Or´us，《张量网络实用入门：矩阵乘积态与投影纠缠对态》，Ann. Phys. 349, 117 (2014). [36] C. Lubich、I. V. Oseledets 和 B. Vandereycken，《张量列的时间积分》，《SIAM数值分析杂志》53, 917 (2015). [37] J. Haegeman、C. Lubich、I. Oseledets、B. Vandereycken 和 F. Verstraete，《用矩阵乘积态统一时间演化与优化》，《物理评论B辑》94, 165116 (2016). [38] S. Paeckel、T. K¨ohler、A. Swoboda、S. R. Manmana、U. Schollw¨ock 和 C. Hubig，《矩阵乘积态的时间演化方法》，Ann. Phys. 411, 167998 (2019). [39] R. Or´us，《复杂量子系统的张量网络》，Nat. Rev. Phys. 1, 538 (2019). [40] J. I. Cirac、D. P´erez-Garc´ıa、N. Schuch 和 F. Ver-straete，《矩阵乘积态与投影纠缠对态：概念、对称性及定理》，《现代物理评论》93, 045003 (2021). [41] P. Silvi、V. Giovannetti、S. Montangero、M. Rizzi、J. I. Cirac 和 R. Fazio，《作为量子临界哈密顿量基态的齐次二叉树》，《物理评论 A》81, 062335 (2010). [42] Y.-Y. Shi、L.-M. Duan 和 G. Vidal，《利用树张量网络经典模拟量子多体系统网络，《物理评论 A》74，022320（2006）。[43] N.Nakatani和 G. K.-L.Chan，《量子化学的高效树张量网络状态（ttns）：密度矩阵重整化群算法的推广》，J.Chem.Phys.138，134113（2013）。[44] F. A. Y.N. Schr¨oder、D. H. P. Turban、A. J. Musser、N.D.M.Hine 和 A.W.Chin，《通过机器学习和纠缠重整化对多环境开放量子动力学进行张量网络模拟》，Nat. Commun. 10，1062（2019）。[45] L. Arceci、P. Silvi和S.Montangero，《通过树张量算符研究混合多体量子态的形成纠缠》，《物理评论快报》128, 040501（2022年）。[46] L. Tagliacozzo、G.Evenbly和 G.Vidal，《利用满足熵面积律的树张量网络模拟二维量子系统》，《物理评论B辑》80，235127（2009）。[47] V. Murg、F. Verstraete、O.Legeza 和 R. M. Noack，《利用树张量网络模拟强关联量子系统》，《物理评论B辑》82，205105（2010年）。[48] B. Kloss、D. R. Reichman 和 Y. B. Lev，《使用树张量网络态研究二维量子晶格中的动力学》，SciPost Phys. 9，070（2020）。[49] T. Felser、S. Notarnicola 和 S. Montangero，《用于高维量子多体问题的高效张量网络试探态》，《物理评论快报》126，170603（2021年）。[50] S. Finazzi、A. Le Boit´e、F. Storme、A. Baksic 和 C. Ciuti，《驱动-耗散二维关联系统的角空间重整化方法》，《物理评论快报》115，080604（2015年）。[51] R. Rota、F. Storme、N. Bartolo、R. Fazio 和 C. Ciuti，《耗散二维自旋晶格的临界行为》，《物理评论B辑》95，134431（2017年）。[52] R. Rota、F. Minganti、C. Ciuti 和 V. Savona，《二次驱动非线性光子晶格中的量子临界区域》，《物理评论快报》122, 110405（2019）。[53] G. Ceruti、C. Lubich 和 D. Sulz，《树张量网络的秩自适应时间积分》，《SIAM数值分析杂志》61，194（2023）。[54] F. Verstraete、J. J. Garc´ıa-Ripoll 和 J. I. Cirac，《矩阵乘积密度算符：有限温度系统和耗散系统的模拟》，《物理评论快报》93，207204（2004）。[55] M. Zwolak 和 G. Vidal，《一维量子晶格系统中的混合态动力学：一种含时超算符重整化算法》，《物理评论快报》93, 207205（2004）。[56] A. Kshetrimayum、H. Weimer 和 R. Or´us，《一种用于二维稳态的简单张量网络算法》，Nat. Commun. 8，1291（2017）。[57] 参见补充材料，其中还包含参考文献 [58],的详细内容。[58] D. Kressner 和 C. Tobler，《算法941：htucker——用于分层Tucker格式张量的Matlab工具箱》，ACM Trans. Math. Software 40，第22号，22（2014）。[59] P. Kramer 和 M. Saraceno, *Geometry of the time-dependent variational principle in quantum mechanics*，《物理学讲义》第140卷（Springer-Verlag，柏林-纽约，1981年）。[60] C. Lubich, *From quantum to classical molecular dynamics: reduced models and numerical analysis*，《高等数学苏黎世讲义》（欧洲数学学会，苏黎世¨，2008)。

[61] J. Haegeman, J. I. Cirac, T. J. Osborne, I. Pi˘zorn, H. Ver- schelde, 和 F. Verstraete，量子晶格的含时变分原理，《物理评论快报》107，070601 2011年( )。[62] G. Ceruti, C. Lubich, 和 H. Walach，树张量网络的时间积分，《SIAM数值分析杂志》59，289 (2021)。[63] G. Ceruti 和 C. Lubich，一种用于动力学低秩近似的非传统稳健积分器，BIT Nu- mer. Math. 62，23 (2021)。[64] G. Ceruti, J. Kusch, 和 C. Lubich，一种用于动力学低秩近似的秩自适应稳健积分器，BIT Numer. Math. 62，1149 (2022)。[65] F. Benatti, F. Carollo, R. Floreanini, 和 H. Narnhofer，量子自旋链的耗散平均场动力学，《物理学杂志A》51，325001 (2018)。[66] F. Carollo 和 I. Lesanovsky，开放迪克模型平均场方程的精确性及其在模式检索动力学中的应用，《物理评论快报》126，230601 (2021)。[67] T. E. Lee, H. H¨affner, 和 M. C. Cross，里德伯原子非平衡晶格中的反铁磁相变，《物理评论 A》84，031402 (2011)。[68] H. Weimer，耗散量子多体系统稳态的变分原理，《物理评论快报》114，040402 (2015)。[69] V. R. Overbeck, M. F. Maghrebi, A. V. Gorshkov, 和 H. Weimer，耗散伊辛模型中的多临界行为，《物理评论 A》95，042133 (2017)。[70] M. Raghunandan, J. Wrachtrup, 和 H. Weimer，利用耗散一级相变实现高密度量子传感，《物理评论快报》120，150501 (2018)。[71] J. Jin, A. Biella, O. Viyuela, C. Ciuti, R. Fazio, 和 D. Rossini，正方晶格上耗散量子伊辛模型的相图，《物理评论B辑》98，241108 (2018)。[72] D. A. Paz 和 M. F. Maghrebi，驱动耗散伊辛模型：精确场论分析，《物理评论 A》104，023713 (2021)。[73] D. A. Paz 和 M. F. Maghrebi，驱动耗散伊辛模型：弱耗散下的动力学交叉，《欧洲物理快报》136，10002 (2021)。[74] M. Kac, G. E. Uhlenbeck, 和 P. C. Hemmer，关于气液平衡的范德瓦耳斯理论。I. 一维模型的讨论，《数学物理杂志》4，216 1963年( )。[75] N. Defenu，长程系统的亚稳性与离散谱，《美国国家科学院院刊》118，e2101785118 (2021)。[76] B. A. Chase 和 J. M. Geremia，自旋-1/2 粒子系综的集体过程，《物理评论 A》78，052101 (2008)。[77] B. Q. Baragiola, B. A. Chase, 和 J. Geremia，部分极化和部分退相干自旋-$\frac{1}{2}$ 系统中的集体不确定性，《物理评论 A》81，032104 (2010)。[78] P. Kirton 和 J. Keeling，通过退相位和衰减抑制并恢复迪克超辐射相变，《物理评论快报》118，123602 (2017)。[79] N. Shammah, S. Ahmed, N. Lambert, S. De Liberato, 和 F. Nori，具有局域和集体非相干过程的开放量子系统：利用置换不变性进行高效数值模拟，《物理评论 A》98，063815 2018年( )。[80]_G. Vidal，一维空间中无限尺寸量子晶格系统的经典模拟，《物理评论快报》。**98**, 070201 (2007)。[81] M. Saffman、T. G. Walker 和 K. Mølmer，利用里德堡原子实现量子信息，《现代物理评论》**82**, 2313 2010年( )。[82] B. W. Bader、T. G. Kolda， *et al.*, MATLAB 张量工具箱 2.6 版，在线提供（2015年）。[83] N. Vervliet、O. Debals、L. Sorber、M. Van Barel 和 L. De Lathauwer，Tensorlab 3.0（2016年），在线提供。

补充材料

利用树张量网络对长程开放量子多体动力学进行数值模拟

Dominik Sulz[1],Christian Lubich[1],Gianluca Ceruti[2], Igor Lesanovsky[3,4], 和 Federico Carollo[3]

[1]德国图宾根大学数学研究所，*Auf der Morgenstelle 10，D–72076* 图宾根[2] 瑞士洛桑联邦理工学院数学研究所，*1015* 洛桑[3]德国图宾根大学理论物理研究所，*Auf der Morgenstelle 14，72076* 图宾根[4]英国诺丁汉大学物理与天文学学院及量子非平衡系统数学与理论物理中心，诺丁汉，*NG7 2RD*

I. 林德布拉德生成元的矩阵表示

这里我们将说明，密度矩阵 $\rho(t)$ 的时间演化如何表示为一个向量微分方程。为具体起见，我们聚焦于正文中讨论的耗散伊辛模型，其密度矩阵的时间演化由林德布拉德方程给出：

$$\dot{\rho}(t) = -i[H, \rho(t)] + \sum_{k=1}^{D} \gamma \left(\sigma_-^{(k)} \rho(t) \sigma_+^{(k)} - \frac{1}{2} \left\{ \rho(t), n^{(k)} \right\} \right) .$$

对于此模型，我们有单粒子基态 $|\bullet\rangle$，$|\circ\rangle$，据此可定义 $\sigma_- = |\circ\rangle\langle\bullet|$, $\sigma_+ = \sigma_-^\dagger$ 和$n = |\bullet\rangle\langle\bullet|$。系统哈密顿量为

$$H = \Omega \sum_{k=1}^{D} \sigma_x^{(k)} + \Delta \sum_{k=1}^{D} n^{(k)} + \frac{V}{2c_\alpha} \sum_{k \neq h=1}^{D} \frac{n^{(k)} n^{(h)}}{|k-h|^\alpha} , \tag{S1}$$

其中 $\sigma_x = \sigma_- + \sigma_+$。

将上述矩阵方程映射为向量方程，首先要将密度矩阵 $\rho(t)$ 写成扩展的单粒子希尔伯特空间中的一个向量。例如，可以通过以下映射实现这一点

$$\rho(t) = \sum_{\vec{\ell},\vec{m}} r_{\vec{\ell}\vec{m}}(t) \, |\vec{\ell}\rangle\langle\vec{m}| \longrightarrow |\rho(t)\rangle = \sum_{\vec{\ell},\vec{m}} r_{\vec{\ell}\vec{m}}(t) \bigotimes_{k=1}^{D} \left[|\ell_k\rangle \otimes |m_k\rangle \right] .$$

这里，$\vec{\ell} = (\ell_1, \ \ell_2, \ \ldots \ell_D)$ 和 $\vec{m} = (m_1, \ m_2, \ \ldots m_D)$ 是多体构型态，其中 $\ell_k, \ m_k = \bullet, \circ$ 指定单粒子态。在这一表示中，林德布拉德生成元由以下矩阵给出

$$\begin{aligned} \mathbb{L} = \gamma \sum_{k=1}^{D} \left(\sigma_{-,\mathrm{I}}^{(k)} \sigma_{-,\mathrm{II}}^{(k)} - \frac{1}{2} n_{\mathrm{I}}^{(k)} - \frac{1}{2} n_{\mathrm{II}}^{(k)} \right) - i \sum_{k=1}^{D} \Omega \left(\sigma_{x,\mathrm{I}}^{(k)} - \sigma_{x,\mathrm{II}}^{(k)} \right) + \\ - i \sum_{k \neq h}^{D} \frac{V}{2c_\alpha |k-h|^\alpha} \left(n_{\mathrm{I}}^{(k)} n_{,\mathrm{I}}^{(h)} - n_{\mathrm{II}}^{(k)} n_{,\mathrm{II}}^{(h)} \right) \end{aligned} \tag{S2}$$

其中 $\sigma_{-,\mathrm{I}} = \sigma_- \otimes \mathbf{1}_2$, $\sigma_{-,\mathrm{II}} = \mathbf{1}_2 \otimes \sigma_-$ 类似地，$\sigma_{x,\mathrm{I}} = \sigma_x \otimes \mathbf{1}_2$, $\sigma_{x,\mathrm{II}} = \mathbf{1}_2 \otimes \sigma_x$ 以及 $n_{\mathrm{I}} = n \otimes \mathbf{1}_2$, $n_{\mathrm{II}} = \mathbf{1}_2 \otimes n$和 $\mathbf{1}_2$ 是 2×2 单位算符。需要注意的是，原则上，应对上述公式 (S2)中所有标记为 II 的项进行转置，但第一重求和中的第一项除外（另见例如文献 [16, 56]）。然而，在我们的情况下，所涉及的所有矩阵都已经是自转置的。因此，时间演化通过矢量化微分方程实现

$$|\dot{\rho}(t)\rangle = \mathbb{L} \, |\rho(t)\rangle .$$

最后，我们回顾一下如何在这种向量化形式体系中计算期望值。让我们考虑一个基本算符。

$$O = \bigotimes_{k=1}^{D} x_k \,,$$

其中， x_k 是 2×2 矩阵。于是，其期望值可计算为

$$\langle O \rangle_t = \langle - | \bigotimes_{k=1}^{D} x_{k,\mathrm{I}}^{(k)} \, | \rho(t) \rangle \ ,$$

其中，我们定义了 $x_{k\mathrm{I}} = x_k \otimes \mathbf{1}_2$ 以及单位算符的向量表示

$$|-\rangle = \bigotimes_{k=1}^{D} |\mathbf{1}_2\rangle \ ,$$

其中 $|\mathbf{1}_2\rangle = |\bullet\rangle \otimes |\bullet\rangle + |\circ\rangle \otimes |\circ\rangle$。在正文中，我们始终将态作为初态

$$|\rho(0)\rangle = \bigotimes_{k=1}^{D} \left(|\bullet\rangle \otimes |\bullet\rangle \right) \ .$$

II. 树张量网络算法的补充细节

A. 树张量网络（TTN）的递归定义

设给定一组基矩阵 U_j，对于 $j = 1, \ldots, D$，以及连接张量 $C_{\tau_i^j}$，对于τ^0的所有子树 τ_i^j。我们递归地定义树张量网络 X_{τ^0} 如下

(i) 对每个叶节点，我们设定

$$X_j := U_j^T \in \mathbb{C}^{r_j \times n_j}.$$

(ii) 对于最大树 τ^0 的每个子树 $\tau_i^j = (\tau_{2i-1}^{j+1}, \tau_{2i}^{j+1})$，我们设 $n_{\tau_i^j} = n_{\tau_{2i-1}^{j+1}} n_{\tau_{2i}^{j+1}}$ 并且

$$\begin{aligned} X_{\tau_i^j} &:= C_{\tau_i^j} \times_1 U_{\tau_{2i-1}^{j+1}} \times_2 U_{\tau_{2i}^{j+1}} \in \mathbb{C}^{r_{\tau_i^j} \times n_{\tau_{2i-1}^{j+1}} \times n_{\tau_{2i}^{j+1}}}, \\ U_{\tau_i^j} &:= \mathrm{Mat}_0(X_{\tau_i^j})^T \in \mathbb{C}^{n_{\tau_i^j} \times r_{\tau_i^j}}. \end{aligned}$$

B. M_τ 矩阵的构造

矩阵 $M_\tau = U_\tau^{'\dagger} U_\tau$，其中 $\tau = (\tau_1, \ \tau_2)$ 可以递归地构造。根据树张量网络的定义，我们知道它成立

$$\begin{aligned} U_\tau^{'} &= \mathrm{Mat}_0(C_\tau^{'} \times_1 U_{\tau_1}^{'} \times_2 U_{\tau_2}^{'})^T \\ U_\tau &= \mathrm{Mat}_0(C_\tau \times_1 U_{\tau_1} \times_2 U_{\tau_2})^T, \end{aligned}$$

其中， $U_{\tau_i}^{'}$ 和 U_{τ_i} 对于 $i = 1, 2$，要么是基矩阵，要么是下一层的矩阵化树张量网络。利用树张量网络的展开公式（见 [53] 中的公式 2.2），我们得到

$$\begin{aligned} M_\tau = U_\tau^{'\dagger} U_\tau &= \left(\mathrm{Mat}_0(C_\tau^{'} \times_1 U_{\tau_1}^{'} \times_2 U_{\tau_2}^{'})^T \right)^\dagger \mathrm{Mat}_0(C_\tau \times_1 U_{\tau_1} \times_2 U_{\tau_2})^T \\ &= \overline{\mathrm{Mat}_0(C_\tau^{'})} \left(\times_1 U_{\tau_1}^{'\dagger} U_{\tau_1} \times_2 U_{\tau_2}^{'\dagger} U_{\tau_2} \right) \mathrm{Mat}_0(C_\tau)^T. \end{aligned}$$

The products $U_{\tau_i}^{'\dagger} U_{\tau_i}$, 对于 $i = 1, 2$，现在可以递归地计算，直到我们达到基矩阵 es.

C. 构造和应用树张量网络算子（TTNO） L_τ

正如我们在本补充材料的第一节中所展示的，林德布拉德算子在其矩阵表示中可以写成如下形式的线性算子。

$$\mathbb{A} = \sum_{k=1}^{s} a_k^1 \otimes \cdots \otimes a_k^D,$$

其中， a_k^j 是作用于第 j 个粒子的复矩阵。关于树张量网络算子的构造和应用的类似思路，可参见 [58]。我们将作用于树张量网络 X_{τ^0} 的树张量网络算子 $A = L_{\tau^0}$ 定义为满足以下条件的张量网络：

1. 第 j 个叶节点等于矩阵 $[\mathbf{vec}(a_1^j) \ldots, \mathbf{vec}(a_s^j)]$, 其中， $\mathbf{vec}(B)$ 表示矩阵B的向量化。

2. 所有连接张量 $C_\tau \in \mathbb{C}^{s\times s\times s}$ 的元素为 $C(k_1, k_2, k_3) = 1$ 当且仅当 $k_1 = k_2 = k_3$时成立；否则，元素为零。

3. 顶层的连接张量 $C_{\tau^0} \in \mathbb{C}^{s\times s\times 1}$ 的元素同样为 $C_{\tau^0}(k_1, k_2) = 1$ 当且仅当 $k_1 = k_2$时成立，否则为零。

随后，应对得到的树张量网络进行正交归一化，并可根据需要将其截断至合理的键~维数。我们将这个正交归一化的树张量网络称为 A。现在，我们定义 A 对树张量网络 X_{τ^0}的作用方式。叶节点和连接张量按以下方式作用：

1. 令 U_j为 X_{τ^0}的第 j个叶节点。那么， $\tilde{A}$（X_{τ^0}）的第 j个叶节点定义为矩阵 $[\tilde{a}_1^j U_j, \ldots, \tilde{a}_n^j U_j]$, 其中 $\tilde{a}_i^j$~是 TTNO 的第 j个叶节点中第 i列的矩阵化。

2. 令 $C_{\tau_i^j}$~为 X_{τ^0} 第 j层、第 i个位置处的连接张量，并令 $C_{\tau_i^j}$~为 A第 j层、第 i个位置处的连接张量~。那么，该作用对应的连接张量定义为 $C_{\tau_i^j} \otimes C_{\tau_i^j}$~，其中$\otimes$ 表示克罗内克积对张量的规范扩展。

1. Constructing $L_{\tau_i^j}$

假设已给定一个按上述方式构造的 TTNO L_{τ^0}。现在我们要构造子函数$L_{\tau_i^j}$，它们是算法所需的（见正文）。这些函数的定义同样是从根到叶节点递归地进行的。

假设对于树 $\tau = (\tau_1, \tau_2)$, 函数 L_τ 已经构造完成。设 X_τ 为一个树张量网络，其连接张量为 C_τ，矩阵为 $U_{\tau_1} = \mathrm{Mat}_0(X_{\tau_1})^T$ 和 $U_{\tau_2} = \mathrm{Mat}_0(X_{\tau_2})^T$, 即 $X_\tau = C_\tau \times_1 U_{\tau_1} \times_2 U_{\tau_2}$。我们定义空间$\mathcal{V}_\tau = \mathbb{C}^{r_\tau \times n_{\tau_1} \times n_{\tau_2}}$，其中 $n_\tau = \prod_{i=1}^{2} n_{\tau_i}$ 以递归方式定义。我们定义矩阵

$$V_{\tau_1}^0 = \mathrm{Mat}_1\left(\mathrm{Ten}_1(Q_{\tau_1}^T) \times_2 U_{\tau_2}\right)^T,$$
$$V_{\tau_2}^0 = \mathrm{Mat}_2\left(\mathrm{Ten}_2(Q_{\tau_2}^T) \times_1 U_{\tau_1}\right)^T,$$

其中，对于 $i = 1,2$, Q_{τ_i}是 $\mathrm{Mat}_0(C_{\tau_i})^T = Q_{\tau_i} R_{\tau_i}$ 的 QR分解中的酉因子，而 C_{τ_i} 是 X_{τ_i}的连接张量。此外，我们定义两个函数

$$\pi_{\tau,i}(Y_{\tau_i}) = \mathrm{Ten}_i((V_{\tau_i}^0 \mathrm{Mat}_0(Y_{\tau_i}))^T) \in \mathcal{V}_\tau, \text{ for } Y_{\tau_i} \in \mathcal{V}_{\tau_i}$$
$$\pi_{\tau,i}^\dagger(Z_\tau) = \mathrm{Ten}_0((\mathrm{Mat}_i(Z_\tau) V_{\tau_i}^0)^T) \in \mathcal{V}_{\tau_i}, \text{ for } Z_\tau \in \mathcal{V}_\tau.$$

函数 L_{τ_i} now 现在递归地定义为

$$L_{\tau_i} = \pi_{\tau,i}^\dagger \circ L_\tau \circ \pi_{\tau,i}, \quad \text{for } i = 1, 2. \tag{S3}$$